

Guía de la función

Software SCIEX OS

Para el sistema Echo[®] MS+ con el sistema ZenoTOF 7600/7600+



Este documento se proporciona a los clientes que han adquirido un equipo SCIEX, para que lo usen durante el funcionamiento de dicho equipo SCIEX. Este documento está protegido por derechos de propiedad y queda estrictamente prohibida cualquier reproducción total o parcial, a menos que SCIEX lo autorice por escrito.

El software que se describe en este documento se proporciona bajo un acuerdo de licencia. Está legalmente prohibida la copia, modificación o distribución del software en cualquier medio, a menos que se permita específicamente en el acuerdo de licencia. Además, es posible que el acuerdo de licencia prohíba igualmente desensamblar, realizar operaciones de ingeniería inversa o descompilar el software con cualquier fin. Las garantías son las indicadas en ese documento.

Algunas partes de este documento pueden hacer referencia a otros fabricantes o sus productos, que pueden contener piezas cuyos nombres se han registrado como marcas comerciales o funcionan como marcas comerciales de sus respectivos propietarios. El uso de dichos nombres en este documento pretende únicamente designar los productos de esos fabricantes suministrados por SCIEX para la incorporación en su equipo y no supone ningún derecho o licencia de uso, ni permite a terceros el empleo de dichos nombres de productos o fabricantes como marcas comerciales.

Las garantías de SCIEX están limitadas a aquellas garantías expresas proporcionadas en el momento de la venta o licencia de sus productos, y son representaciones, garantías y obligaciones únicas y exclusivas de SCIEX. SCIEX no ofrece otras garantías de ningún tipo, expresas o implícitas, incluyendo, entre otras, garantías de comercialización o adecuación para un fin específico, ya se deriven de un estatuto, cualquier tipo de legislación, uso comercial o transcurso de negociación; SCIEX rechaza expresamente todas estas garantías y no asume ninguna responsabilidad, general o accidental, por daños indirectos o derivados del uso por parte del comprador o por cualquier circunstancia adversa derivada de este.

Para uso exclusivo en investigación. No para uso en procedimientos diagnósticos.

Las marcas comerciales o marcas registradas aquí mencionadas, incluidos sus correspondientes logotipos, son propiedad de AB Sciex Pte. Ltd. o sus respectivos propietarios, en Estados Unidos y algunos otros países (consulte sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ se usa bajo licencia.

Echo, Echo MS y Echo MS+ son marcas comerciales o marcas registradas de Labcyte, Inc. en Estados Unidos y otros países, y se utilizan bajo licencia.

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

Tabla de contenido

1 Adquisición con un sistema Echo[®] MS+	4
Método de MS.....	4
Parámetros de fuente y gas.....	4
Parámetros para los experimentos TOF MS.....	5
Parámetros para experimentos con el algoritmo MRM ^{HR}	7
Método de AE.....	8
Batch.....	10
Calibración automática (opcional).....	13
Archivo de configuración de salida (opcional).....	13
Preparación del sistema.....	14
2 Listas de destino	17
Crear una lista de destino.....	17
Establecer la Configuración predeterminada del proyecto.....	22
Crear un método de MS para usarlo como plantilla.....	23
Crear un método de procesamiento para usarlo como plantilla.....	24
3 Visualización de datos	25
Contacto	27
Direcciones.....	27
Formación del cliente.....	27
Centro de aprendizaje en línea.....	27
Asistencia técnica de SCIEX.....	27
Ciberseguridad.....	27
Documentación.....	27

Adquisición con un sistema Echo[®] MS+

1

En esta sección se proporciona información sobre el uso del software SCIEX OS para adquirir datos de espectrometría de masas de expulsión acústica (AEMS). También se describen los parámetros, los lotes, la calibración de lotes y la preparación del sistema concernientes al método de MS y al método de AE.

Método de MS

Parámetros de fuente y gas

La sonda Echo[®] MS de la fuente de iones OptiFlow Turbo V funciona con la interfaz de puerto abierto (OPI) en el sistema Echo[®] MS+ para aspirar, nebulizar e ionizar muestras y suministrarlas al espectrómetro de masas ZenoTOF 7600. Se recomienda un rango reducido de parámetros de fuente y gas para este flujo de trabajo.

Figura 1-1: Parámetros de fuente y gas

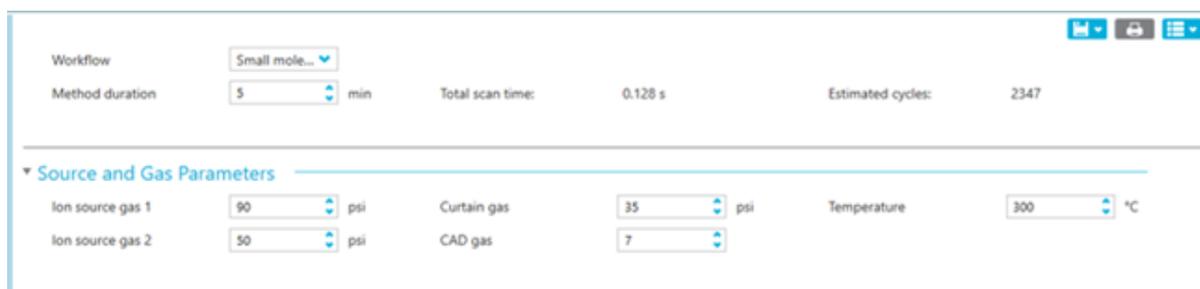


Tabla 1-1: Parámetros de fuente y gas

Parámetro	Comentarios
Gas 1 de fuente de iones (psi)	Establezca la presión para el gas 1 de fuente de iones. El gas 1 de la fuente de iones extrae el disolvente de transporte del puerto OPI hacia la fuente de iones. Establezca este valor en 90. Valores más bajos podrían provocar fugas en la OPI.
Gas 2 de fuente de iones (psi)	Establezca la presión para el gas 2 de fuente de iones. Este gas disuelve el disolvente de transporte en la fuente de iones. Optimice el valor Gas 2 de fuente de iones (psi) para la composición y el caudal del disolvente de transporte. Se recomienda un valor inicial de 50.
Curtain gas (psi)	Establezca la presión del gas de la interfaz de Curtain Gas. Este gas ayuda a evitar la contaminación de la óptica iónica. Use el valor más alto posible que no reduzca la sensibilidad. Valores más altos reducen la contaminación con una pequeña reducción en la intensidad de la señal.

Tabla 1-1: Parámetros de fuente y gas (continuación)

Parámetro	Comentarios
Gas CAD	Establezca la presión en la celda de colisión. Para los experimentos TOF MS, use el valor 7 para la refrigeración por colisión de los iones. Para los experimentos TOF MS/MS, optimice el valor de Gas CAD para la fragmentación de los iones del analito.
Temperatura (°C)	Optimice la temperatura para la composición y el caudal del disolvente de transporte. Se recomienda un valor inicial de 300. No se recomiendan valores superiores a 400 para la temperatura. Las altas temperaturas pueden reducir la vida del electrodo y también pueden provocar una menor sensibilidad para los compuestos termolábiles.

Parámetros para los experimentos TOF MS

Figura 1-2: Parámetros TOF MS

Tabla 1-2: Parámetros TOF MS

Parámetro	Comentarios
Polaridad	Indique el modo de ionización. Seleccione Positiva o Negativa . El cambio de polaridad no está disponible.
Masa de inicio de TOF (Da)	Indique la masa al inicio del rango de masa objetivo. Masa de inicio de TOF (Da) debe ser menor que Masa de detención de TOF (Da) .
Masa de detención de TOF (Da)	Indique la masa al final del rango de masa objetivo. Masa de detención de TOF (Da) debe ser mayor que Masa de inicio de TOF (Da) .
Tiempo de acumulación (s)	Indique el tiempo necesario para que el espectrómetro de masas adquiera un espectro TOF MS. Se recomienda un valor inicial de 0,08.
Tensión de pulverización (V)	Indique la tensión que se debe aplicar al electrodo de la sonda. Optimice la tensión de pulverización para la composición y el caudal del disolvente de transporte. Para maximizar la vida del electrodo, no use un valor mayor que 4500.
Potencial de desagrupación (V)	Indique la tensión que se debe aplicar al orificio para minimizar la formación de agrupaciones de iones. Distintos compuestos pueden tener diferentes valores óptimos de potencial de desagrupación (DP). El valor de DP se usa para el rango de masa completo.

Tabla 1-2: Parámetros TOF MS (continuación)

Parámetro	Comentarios
Propagación de DP (V)	Escriba un valor para la propagación de DP (DPS). Junto con el Potencial de desagrupación (V) , este parámetro controla el DP que se aplica a los iones. El DP se incrementa gradualmente de un valor bajo de DP – DPS a un valor alto de DP + DPS.
Modo ITC	<p>Seleccione Dinámico o Fijo. En el modo dinámico, el flujo de iones se supervisa continuamente y se ajusta automáticamente para evitar daños en el detector. En el modo fijo, el usuario especifica un valor en el campo ITC. El modo dinámico añade 27 ms al tiempo de ciclo para supervisar el flujo de iones antes del inicio del experimento.</p> <hr/> <p>Nota: El modo dinámico solo está disponible para experimentos TOF MS.</p> <hr/>
Energía de colisión (V)	Indique la tensión que se debe aplicar en la celda de colisión. En los experimentos TOF MS, se usa un valor bajo para mover iones a través de la celda de colisión sin fragmentación.
Propagación de CE (V)	Este parámetro no se suele usar en experimentos TOF MS.
ITC	<p>Indique el porcentaje de iones que entrará en el espectrómetro de masas.</p> <p>Cuando se está usando el modo fijo, supervise la intensidad de los iones. Empiece con un valor bajo y aumente el valor en pequeños incrementos hasta que la intensidad de la señal llegue al mínimo requerido. Si no se conoce la intensidad de los iones esperada, use el modo dinámico. Una intensidad de los iones constantemente alta o periodos cortos de una intensidad de los iones muy alta puede dañar de forma permanente el detector.</p> <hr/> <p>Nota: Este parámetro es aplicable cuando Modo ITC tiene el valor Fijo.</p> <hr/>

Parámetros para experimentos con el algoritmo MRM^{HR}

Figura 1-3: Parámetros del algoritmo MRM^{HR}

The screenshot shows the configuration interface for the MRM algorithm. It includes sections for TOF MSMS parameters (Q1 resolution, ITC, Zeno pulsing), Mass Table settings (Apply TOF start/stop mass, Sort by), and a table of parameters for a specific compound (Atrazine).

Compound ID	Group Name	Precursor Ion (Da)	TOF Start Mass (Da)	TOF Stop Mass (Da)	Accumulation Time (sec)	Declustering potential (V)	Collision energy (V)	CE Spread (V)	
1	Atrazine	Group...	216.10105	92.50000	112.50000	0.0200	80	35	0

Tabla 1-3: Parámetros del algoritmo MRM^{HR}

Parámetro	Comentarios
Resolución Q1	Indique la resolución del cuadrupolo Q1. Seleccione Unidad , Abrir , Bajo o Alto . Unidad proporciona una selección de masa Q1 de aproximadamente $\pm 0,7$ Da. Abrir y Bajo proporcionan una selección de masa Q1 más amplia. Alto proporciona una selección de masa Q1 más estrecha.
ITC	Indique el porcentaje de iones que entrará en el espectrómetro de masas. En los experimentos con el algoritmo MRM ^{HR} , este parámetro suele establecerse en 100 para maximizar la sensibilidad del analito.
Impulso de Zeno	Seleccione esta opción para activar el impulso de Zeno. El impulso de Zeno es una función exclusiva del espectrómetro de masas ZenoTOF 7600/7600+. Cuando se activa, esta función mejora el ciclo de trabajo y aumenta la intensidad de la señal.
Aplicar masa de inicio/detención de TOF	Seleccione esta opción para establecer el rango de masas TOF manualmente. Si no se selecciona esta opción, se usa un rango de masas predeterminado de 20 Da centrado en el ion de fragmentación especificado.
Masa de inicio de TOF (Da)	Indique la masa al inicio del rango de masa objetivo. Masa de inicio de TOF (Da) debe ser menor que Masa de detención de TOF (Da) .
Masa de detención de TOF (Da)	Indique la masa al final del rango de masa objetivo. Masa de detención de TOF (Da) debe ser mayor que Masa de inicio de TOF (Da) .
Tiempo de acumulación (s)	Indique el tiempo necesario para que el espectrómetro de masas adquiera un espectro TOF MS/MS. Se recomienda un valor inicial de 0,01.

Tabla 1-3: Parámetros del algoritmo MRM^{HR} (continuación)

Parámetro	Comentarios
Potencial de desagrupación (V)	Indique la tensión que se debe aplicar al orificio para minimizar la formación de agrupaciones de iones. En los experimentos con el algoritmo MRM ^{HR} , el potencial de desagrupación se identifica para cada fila en la tabla de transición.
Energía de colisión (V)	Indique la tensión que se debe aplicar en la celda de colisión. En los experimentos TOF MS/MS y MRM ^{HR} , esta tensión rompe los iones precursores en fragmentos. Optimice la energía de colisión (CE) para maximizar la intensidad de un fragmento.
Propagación de CE (V)	Indique la propagación de CE (CES). Junto con el parámetro Energía de colisión (V) , este parámetro controla la CE que se aplica al ion precursor en un análisis de ion producto. La CE se incrementa gradualmente desde un valor bajo (CE – CES en polaridad positiva) a un valor alto (CE + CES en polaridad positiva).

Método de AE

El método de expulsión acústica (AE) incluye la configuración utilizada para el funcionamiento del sistema Echo® MS+.

Figura 1-4: Método de AE: Standard

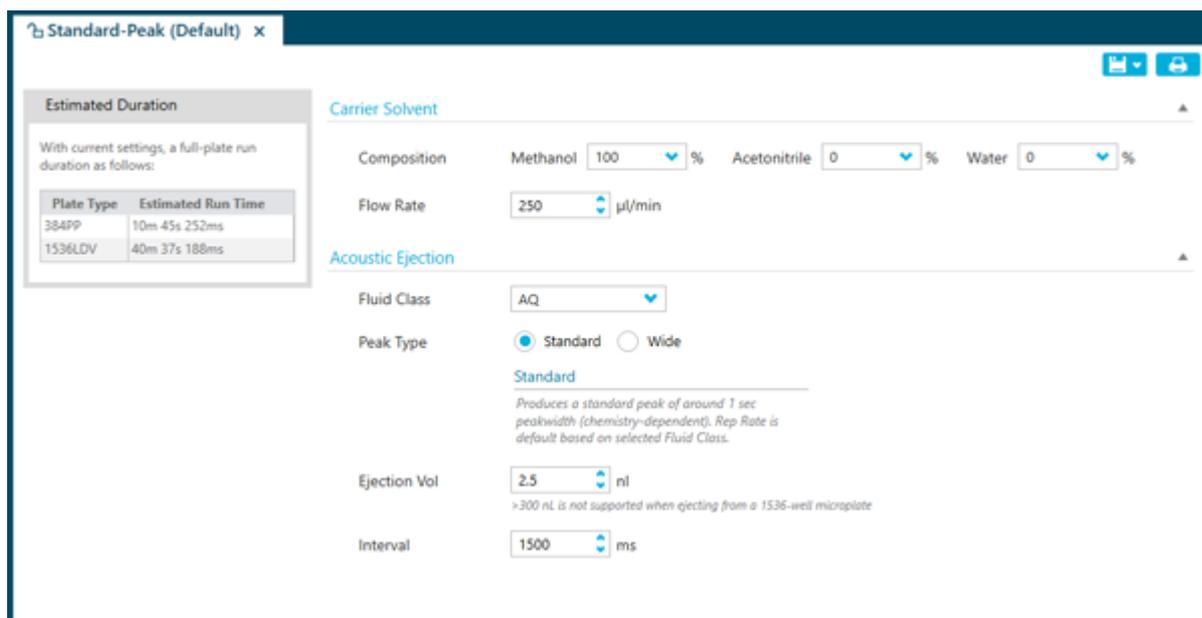


Figura 1-5: Método de AE: Wide

Tabla 1-4: Parámetros del método de AE

Parámetro	Descripción
Duración estimada	Muestra la duración esperada del tiempo de ejecución de placa, calculado con el Intervalo (ms) y otros factores que tienen un efecto en el tiempo de ejecución. La duración estimada se proporciona para las placas de 384 y de 1536 pocillos. El cálculo no incluye el tiempo de equilibrado o de calibración de lotes.
Disolvente de transporte	Para identificar la composición de un disolvente de transporte, seleccione el porcentaje de Metanol , Acetonitrilo y Agua .
Caudal (µl/min)	Optimización del caudal para el sistema. El electrodo y la composición del disolvente de transporte afectan al caudal óptimo. Si cambia el electrodo o la composición del disolvente de transporte, este valor debe volver a optimizarse.
Clase de fluido	<p>Seleccione la matriz de la muestra que está en el pocillo. Hay distintas opciones disponibles para diferentes tipos de placa. Entre las opciones se incluyen:</p> <ul style="list-style-type: none"> • AQ (acuoso): se usa para soluciones acuosas. • SP (fase surfactante): se usa para soluciones con una tensión superficial baja, como las soluciones acuosas con surfactantes, por ejemplo Triton X-100 o las mezclas orgánicas acuosas. Esta opción solo está disponible para las placas de 384 pocillos. Esta opción no se puede usar con las placas de 1536 pocillos debido a la evaporación de muestras que sucede durante el análisis. • DMSO (dimetilsulfóxido): se usa para disolventes que contienen entre el 70 % y el 100 % de DMSO.

Tabla 1-4: Parámetros del método de AE (continuación)

Parámetro	Descripción
Tipo de pico	<p>Seleccione el modo Patrón o Ancho.</p> <ul style="list-style-type: none"> Patrón: El sistema AE expulsa gotas muy rápidamente para formar un pico estrecho. Ancho: El usuario puede identificar la velocidad de expulsión de gotas para formar picos que sean más anchos que en el modo estándar. Los picos más anchos proporcionan más puntos de datos a lo largo del pico y admiten tiempos de ciclo mayores en el método de MS. El modo de pico ancho solo es aplicable a las expulsiones multigota.
Vol. de expulsión (nl)	<p>Identifique el volumen total de la muestra que debe dispensar el sistema Echo® MS+ en incrementos de 2,5 nL.</p> <hr/> <p>Nota: El sistema expulsa gotas de 2,5 nL.</p> <hr/> <p>Cuando el Tipo de pico es Ancho, el valor mínimo para Vol. de expulsión (nl) es 5.</p>
Intervalo (ms)	<p>Identifique el tiempo entre expulsiones de muestras. El software usa Tasa de repetición (Hz) y Vol. de expulsión (nl) para calcular un Intervalo (ms) mínimo.</p>
Tasa de repetición (Hz)	<p>Identifique la velocidad de repetición de expulsión en Hz. Tanto Vol. de expulsión (nl) como Tasa de repetición (Hz) controlan el ancho de los picos.</p>

Batch

Figura 1-6: Batch

The screenshot shows a software window titled 'Batch' with a menu bar (File, Open, View) and a toolbar. Below the toolbar is a table with the following columns: Sample Name, MS Method, AE Method, Plate Type, Well Position, Sample Type, Data File, Processing Method, Results File, Marker Well, and Target List. The table contains 10 rows of sample data.

Sample Name	MS Method	AE Method	Plate Type	Well Position	Sample Type	Data File	Processing Method	Results File	Marker Well	Target List
2	TOP MS Example	Example AE Method	3849F	A2	Standard	Data File Name	Example Quantitation	Results File for TOPMS		Example Target List
3	TOP MS Example	Example AE Method	3849F	A3	Standard	Data File Name	Example Quantitation	Results File for TOPMS		Example Target List
4	TOP MS Example	Example AE Method	3849F	A3	Unknown	Data File Name	Example Quantitation	Results File for TOPMS		Example Target List
5	TOP MS Example	Example AE Method	3849F	A5	Unknown	Data File Name	Example Quantitation	Results File for TOPMS		Example Target List
6	TOP MS Example	Example AE Method	3849F	A5	Unknown	Data File Name	Example Quantitation	Results File for TOPMS		Example Target List
7	TOP MS Example	Example AE Method	3849F	A7	Unknown	Data File Name	Example Quantitation	Results File for TOPMS		Example Target List
8	TOP MS Example	Example AE Method	3849F	A8	Unknown	Data File Name	Example Quantitation	Results File for TOPMS		Example Target List
9	TOP MS Example	Example AE Method	3849F	A8	Unknown	Data File Name	Example Quantitation	Results File for TOPMS		Example Target List
10	TOP MS Example	Example AE Method	3849F	A10	Unknown	Data File Name	Example Quantitation	Results File for TOPMS		Example Target List

Nota: Las siguientes columnas no son aplicables al análisis de datos adquiridos con un sistema Echo® MS+ y se pueden ocultar mediante la opción **Ver: Tipo de gradilla, Posición de la gradilla, Posición de la placa y Volumen de inyección (µL)**.

Tabla 1-5: Columnas de lotes

Nombre de la columna	Descripción	Requisitos del valor de campo
Nombre de la muestra	El nombre de la muestra	Menos de 252 caracteres. Nota: Durante la división de los datos después de la adquisición, se añade la posición del pocillo al principio del nombre de la muestra: por ejemplo, A1-Sample1.
Método de MS	El nombre del método de MS	Seleccione un método de MS de la lista para el proyecto activo. Nota: Se debe usar el mismo método de MS para todas las muestras del lote.
Método de AE	El nombre del método de AE	Seleccione un método de AE de la lista para el proyecto activo. Nota: Se debe usar el mismo método de AE para todas las muestras del lote.
Tipo de placa	384PP o 1536LDV	Solo se puede usar un Tipo de placa en un lote. Con un sistema Echo® MS+ solo se pueden usar placas de Beckman Life Sciences calificadas para su uso con el sistema Echo® MS+.
Posición del pocillo	384PP: de A1 a P24 1536LDV: de A1 a AF48	Una Posición del pocillo solo se puede muestrear una vez por cada fila.
Tipo de muestra	Blanco, Patrón, Blanco doble, ControlCalidad, Disolvente y Desconocido	La información del tipo de muestra se guarda en el archivo de datos y puede usarse durante el procesamiento.
Archivo de datos	El nombre del archivo en el que se guardan los datos adquiridos.	Todos los datos adquiridos por un lote se deben guardar en el mismo Archivo de datos . Nota: Se debe usar el mismo archivo de datos para todas las muestras del lote.

Tabla 1-5: Columnas de lotes (continuación)

Nombre de la columna	Descripción	Requisitos del valor de campo
Método de procesamiento	El nombre del método que se va a usar para el procesamiento automático después de finalizar la adquisición.	El método de procesamiento debe ser compatible con el método de MS usado para adquirir los datos. Nota: Se debe usar el mismo método de procesamiento para todas las muestras del lote.
Archivo de resultados	El nombre del archivo en el que se guardan los resultados procesados.	Los archivos de resultados se guardan en la subcarpeta <code>Results</code> del proyecto activo. Nota: Se debe usar el mismo archivo de resultados para todas las muestras del lote. Nota: Utilice un archivo de resultados diferente para cada lote. No recomendamos que se usen los archivos de resultados más de una vez. Nota: Si se usa un archivo de lista de destino, el archivo de resultados se guarda en formato <code>txt</code> . Si no se usa un archivo de lista de destino, se guardan dos archivos de resultados, en formato <code>txt</code> y <code>qsession</code> .
Pocillo marcador	Pocillo marcador: True Otros pocillos: False (predeterminado)	Seleccione un solo Pocillo marcador en cada lote. Seleccione un pocillo con contenido que proporcione una señal de MS lo suficientemente fuerte para el reconocimiento de código de barras durante la división de datos. Si la forma del pico tiene una bajada excesiva, la división de datos podría no producirse.
Lista de destino	El nombre del archivo Lista de destino , con la extensión <code>csv</code>	(Opcional) Identifique el archivo Lista de destino . Si el archivo no está en la carpeta <code>Batch</code> para el proyecto activo, incluya la ruta completa al archivo. Consulte la sección: Listas de destino .

Calibración automática (opcional)

Si se usa la calibración automática, se debe hacer al principio del lote. La calibración no se puede llevar a cabo entre muestras.

Se usa el sistema de suministro de calibrador (CDS) para calibrar el sistema ZenoTOF 7600/7600+ cuando se configura con el sistema Echo® MS+.

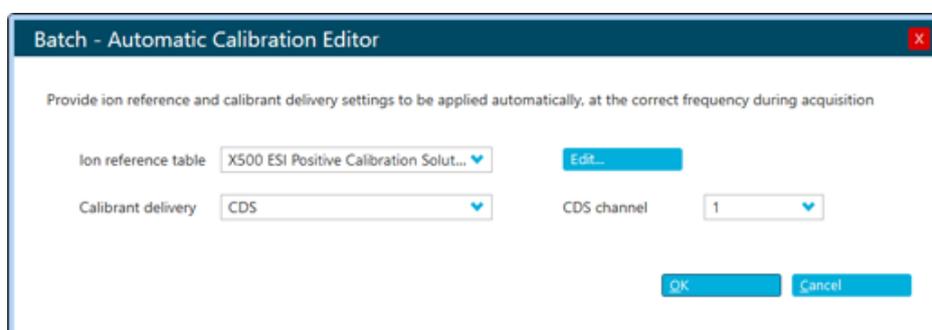
El usuario puede seleccionar la tabla de referencia de iones correspondiente y editar la tabla para el contenido del depósito del CDS y los iones de calibración concretos que desee.

Para llevar a cabo la calibración automática al principio del lote, seleccione la casilla **Calibrar automáticamente**.

La calibración se realiza en dos fases:

- Cal.: calibración inicial del CDS, con la tabla de referencia de iones seleccionada.
- Fase 2 de cal.: equilibrado, que elimina los restos de la solución de CDS.

Figura 1-7: Cuadro de diálogo Lote - Editor de calibración automática



Archivo de configuración de salida (opcional)

Use el archivo `EchoExportColumnConfig.xml` para personalizar la ruta en la que se escribirán los archivos de texto de resultados, las columnas que se van a incluir en dichos archivos y el orden de las columnas.

El archivo `EchoExportColumnConfig.xml` predeterminado está en la carpeta `SCIEX OS Data/common-project-area`. Para cambiar la configuración, edite este archivo o cree y edite una copia del archivo en la carpeta del proyecto o en la carpeta `Quantitation Results` para el proyecto.

Nota: Hay tres plantillas disponibles en la carpeta `SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Export Column Configuration`:

- `EchoExportColumnConfig-1`
- `EchoExportColumnConfig-CompoundQC`
- `EchoExportColumnConfig-Intact`

Tabla 1-6: Elementos del archivo de salida

Elemento	Descripción
Path	Indique la ruta en la que se guardará el archivo de texto de resultados. Se pueden indicar varias rutas para guardar varias copias del archivo de salida. <hr/> Nota: Se guarda una copia del archivo de texto de resultados en la carpeta <code>Quantitation Results</code> del proyecto. <hr/>
Order	Indique el orden de las columnas en el archivo de texto de resultados. Escriba un número único para cada columna. Escriba <code>0</code> para la primera columna.
Visible	Indique si la columna se incluye en el archivo de texto de resultados. Escriba <code>true</code> para incluir la columna. Escriba <code>false</code> para excluir la columna.

Preparación del sistema

Para el algoritmo MRM^{HR} y los experimentos de adquisición dependiente de información (IDA) en los que se supervisan diferentes iones para distintos pocillos, para garantizar que se supervisan los iones correctos para cada pocillo, el software requiere el tiempo entre la expulsión de gotas y la detección (tiempo de transferencia). El tiempo de transferencia se calcula y se guarda cada vez que se produce la división de datos.

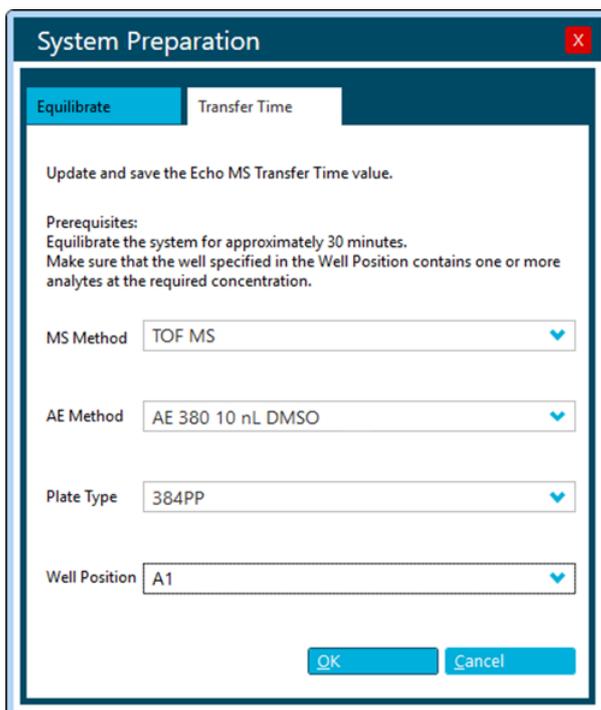
Si el sistema no ha estado en funcionamiento recientemente o si se ha cambiado el electrodo o el disolvente de transporte, el sistema ejecuta un lote corto para calcular el tiempo de transferencia. Antes de ejecutar el lote para calibrar el tiempo de transferencia, asegúrese de que el tiempo de equilibrado del sistema ha sido de 30 minutos como mínimo.

Para calibrar el tiempo de transferencia, haga lo siguiente:

1. Abra el panel de estado.
2. Haga clic en **Equilibrate**

Se abre el cuadro de diálogo System Preparation.

Figura 1-8: Cuadro de diálogo Preparación del sistema: pestaña Tiempo de transferencia



3. Abra la pestaña Tiempo de transferencia y use la siguiente tabla para rellenar los campos:

Tabla 1-7: Pestaña Tiempo de transferencia

Campo	Descripción
Método de MS	Seleccione un método de MS de la lista para el proyecto activo. Se puede usar cualquier método de MS para ajustar el tiempo de transferencia. Un método TOF MS suele dar el mejor resultado.
Método de AE	<p>Seleccione el método de AE que desee usar para el análisis de datos de espectrometría de masas de expulsión acústica (AEMS) de la lista para el proyecto activo. El método de AE garantiza que el tiempo de transferencia se calibre correctamente para las condiciones de transferencia de la muestra en el análisis AEMS. Asegúrese de que el valor para Vol. de expulsión (nl) en el método seleccionado sea suficiente para suministrar una señal fuerte que sea prácticamente igual que la intensidad del pocillo marcador.</p> <p>Nota: Ajuste el tiempo de transferencia antes de usar un método de AE diferente.</p>

Tabla 1-7: Pestaña Tiempo de transferencia (continuación)

Campo	Descripción
Tipo de placa	Seleccione una placa que sea aplicable al sistema Echo® MS. Entre las opciones se incluyen: <ul style="list-style-type: none">• 384PP• 1536LDV
Posición del pocillo	Indique la posición de un pocillo que contenga una concentración de la muestra que proporcione una señal significativa en el espectrómetro de masas. Se recomienda un pocillo marcador. Entre las opciones se incluyen: <ul style="list-style-type: none">• 384PP: de A1 a P24• 1536LDV: de A1 a AF48

4. Haga clic en **Aceptar**.

Se crea y se envía automáticamente un lote con 15 muestras. Tras completar el lote, se calcula el nuevo tiempo de transferencia y se guarda como predeterminado del sistema.

Normalmente, un lote que se use en un sistema Echo® MS+ adquiere un analito o un conjunto de analitos para todas las muestras. Si hay que especificar un analito objetivo distinto para cada fila, columna o posición de pocillo, en los flujos de trabajo del algoritmo MRM^{HR}, por ejemplo, se debe usar una lista de destino. Para los datos TOF MS, la lista de destino identifica los analitos de interés para cada pocillo y esa información se usa durante el procesamiento de los datos. Una lista de destino también sirve para identificar los analitos de interés en el algoritmo MRM^{HR} y los experimentos IDA durante la adquisición. La información del analito en la lista de destino se usa para actualizar el método de MS durante la adquisición.

La lista de destino es un archivo `csv`. El archivo contiene información sobre el analito que se puede usar en las siguientes áreas:

- Para la información del analito para la reconstrucción de masa de proteínas intactas y biomoléculas grandes
- En la lista de inclusión para experimentos IDA

Para usar una lista de destino, lleve a cabo estos procedimientos:

- [Crear una lista de destino](#)
- [Establecer la Configuración predeterminada del proyecto](#)
- [Crear un método de MS para usarlo como plantilla](#)
- [Crear un método de procesamiento para usarlo como plantilla](#)

Crear una lista de destino

Cada fila de un archivo de lista de destino contiene información de masas para un solo pocillo y compuesto. Varias filas pueden contener el mismo compuesto. Varias filas pueden contener la misma posición de pocillo.

Nota: Hay listas de destino de ejemplo disponibles para distintos flujos de trabajo en la carpeta `SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Target List`.

- Cree un archivo de lista de destino en formato `csv` y, a continuación, guárdelo en la subcarpeta `Batch` de la carpeta del proyecto donde se va a usar.

Nota: El archivo de lista de destino puede usar comas o puntos como separadores decimales. El archivo de resultados creado durante el procesamiento automático usa puntos como separadores decimales.

Nota: Asegúrese de que el texto, las mayúsculas y el espaciado de los nombres de campo coinciden con los de la tabla siguiente.

Tabla 2-1: Nombres de campo en el archivo de lista de destino

Campo	Descripción
Well	Indique una posición de pocillo en cada fila, sin espacios. Los valores disponibles incluyen los siguientes: <ul style="list-style-type: none"> • 384PP: de A1 a P24 • 1536LDV: de A1 a AF48
Transfer Time Tolerance	Indique el número de segundos que hay que sumar para ajustar el inicio y el final de la ventana de supervisión para una muestra. Este parámetro se usa en flujos de trabajo, como los siguientes, donde se supervisan distintas transiciones para diferentes posiciones de pocillos: <ul style="list-style-type: none"> • Flujos de trabajo MRM^{HR} en los que las transiciones se supervisan por pocillo • Flujos de trabajo IDA en los que las listas de inclusión se supervisan por pocillo <p>La tolerancia de tiempo de transferencia puede ser negativa, pero el valor absoluto del tiempo de transferencia no puede ser mayor que la mitad del intervalo de ejecución utilizado en el método de AE.</p>
Offset	Indique el número de segundos que la ventana de adquisición programada se moverá alrededor de una posible posición del pico. Un valor positivo mueve la ventana hacia la derecha. Un valor negativo mueve la ventana hacia la izquierda.
Group	Indique el nombre del grupo correspondiente para el compuesto.
Name	Indique el ID de compuesto del compuesto.
IS Name	Indique el nombre del patrón interno que se va a usar para los cálculos de cuantificación para el compuesto. Solo se puede usar un patrón interno para cada compuesto.
IS	Indique si el compuesto es un patrón interno. Los valores disponibles incluyen los siguientes: <ul style="list-style-type: none"> • True • False
Formula	Indique fórmula elemental para el compuesto. Los péptidos pueden tener aminoácidos de una sola letra y modificaciones. Para identificar isótopos concretos, incluya el peso del isótopo, como [2H], [18O] o [15N], entre corchetes antes del símbolo. Por ejemplo, identifique agua pesada (D2O) como [2H]2O.
Adduct/Charge	Si se especifica una fórmula, identifique el aducto y el estado de carga, como [M+H] ⁺ o [M+H] ⁻ . Todos los aductos admitidos en el espacio de trabajo Analytics del software SCIEX OS se admiten en las listas de destino.

Tabla 2-1: Nombres de campo en el archivo de lista de destino (continuación)

Campo	Descripción
Comment	Facilite más información para la entrada de la fila. Se pueden usar hasta 128 caracteres.
Precursor Mass (Da)	Indique la masa del ion precursor. El rango aplicable está entre 5 y 2250, con hasta 5 posiciones decimales.
TOF Start Mass (Da)	Indique la masa al inicio del rango de masa objetivo para un experimento TOF MS/MS. TOF Start Mass (Da) debe ser menor que TOF Stop Mass (Da) . Este parámetro se usa si se ha seleccionado Aplicar masa de inicio/detención de TOF en el método de MS que se va a utilizar como plantilla.
TOF Stop Mass (Da)	Indique la masa al final del rango de masa objetivo para un experimento TOF MS/MS. La TOF Stop Mass (Da) debe ser mayor que la TOF Start Mass (Da) . Este parámetro se usa si se ha seleccionado Aplicar masa de inicio/detención de TOF en el método de MS que se va a utilizar como plantilla.
Fragment Mass (Da)	Escriba la masa de fragmento que se va a usar en el método de procesamiento. El rango de análisis predeterminado para un método TOF MS/MS es 20 Da, ± 10 Da desde la masa de fragmento especificada. Nota: Si se ha seleccionado Aplicar masa de inicio/detención de TOF en el método de MS que se va a usar como plantilla, la TOF Start Mass (Da) y la TOF Stop Mass (Da) definidas en la lista de destino se usan como rango de análisis de TOF MS/MS.
Accumulation Time (sec)	Ajuste el tiempo de acumulación de la transición objetivo para optimizar el tiempo total de análisis. El tiempo de acumulación es el tiempo necesario para que el espectrómetro de masas adquiera un punto de datos de TOF MS/MS. El tiempo de acumulación afecta al número de puntos a lo largo del pico. El rango aplicable es de 0,005 a 50. Los valores típicos son de 0,01 a 0,100.
Declustering potential (V)	Indique la tensión que se debe aplicar al orificio para minimizar la formación de agrupaciones de iones. El potencial de desagrupación (DP) se puede especificar para cada fila de la tabla de transiciones. El rango aplicable es de 0 a 300. Nota: Propagación de DP (V) se establece en el método de MS.

Tabla 2-1: Nombres de campo en el archivo de lista de destino (continuación)

Campo	Descripción
Collision Energy (V)	Identifique la tensión que se debe aplicar a la celda de colisión. Normalmente, la energía de colisión (CE) se optimiza para maximizar la intensidad de un fragmento. El rango aplicable es de 0 a 150.
CE Spread (V)	<p>Indique el valor que se debe usar para aumentar la CE gradualmente. Junto con el parámetro Collision Energy (V), el parámetro de propagación de CE (CES) controla la CE que se aplica al ion precursor en un análisis de ion producto.</p> <p>Por ejemplo, en polaridad positiva, la CE se incrementa gradualmente de CE – CES a CE + CES.</p> <p>El rango aplicable es de 0 a 150.</p>
Fragmentation Mode	<p>Indique uno de los siguientes modos de fragmentación:</p> <ul style="list-style-type: none"> • CID: En el modo de disociación inducida por colisión (CID), los iones de fragmentación se crean mediante la excitación vibracional del ion precursor causado por las colisiones con moléculas de gas en la celda de colisión Q2. • EAD: En el modo de disociación activada por electrones (EAD), los iones precursores en la celda EAD se exponen a electrones para causar la disociación del ion precursor en iones de fragmentación. • EAD (conventional trapping): La colocación de trampa convencional es un modo EAD que es más aplicable para estudios académicos de cinética de reacción. El modo EAD proporciona mayor control de los pasos de tiempo de carga y tiempo de reacción (duración de la irradiación de electrones). En el modo EAD, estos pasos están optimizados para que se produzcan al mismo tiempo, lo que aumenta la sensibilidad aproximadamente al doble. En el modo EAD (colocación de trampa convencional), estos pasos se realizan de forma consecutiva. Los precursores seleccionados se introducen en la celda EAD durante un tiempo de carga especificado, el haz de electrones se aplica durante un tiempo de reacción especificado y, a continuación, los productos se expulsan de la celda EAD. <hr/> <p>Sugerencia: Si es necesario un control de tiempo de reacción exacto y predecible, use el modo EAD (colocación de trampa convencional).</p> <hr/>

Tabla 2-1: Nombres de campo en el archivo de lista de destino (continuación)

Campo	Descripción
Electron KE (eV)	Indique la energía cinética (KE) de los electrones del haz de electrones irradiado. El valor de KE de los electrones es el mismo que la polarización de DC entre la fuente de electrones y los electrodos de la barra activada por electrones (EA) en la celda de disociación activada por electrones (EAD). Este parámetro es aplicable cuando Fragmentation Mode se establece en EAD o EAD (conventional trapping) .
ETC (%)	Indique el coeficiente de transferencia de electrones (ETC). Este parámetro controla la fracción de electrones que entran en la celda EAD. El rango es del 0 % al 100 %. El parámetro es aplicable cuando Fragmentation Mode se establece en EAD o EAD (conventional trapping) . Sugerencia: Para usar el tipo de especies precursoras que se analizan y los iones producto que se adquieren para controlar el tipo de reacción EAD, use este parámetro.
EAD RF (Da)	Indique un valor entre 0 Da y 300 Da. Este parámetro controla el nivel de RF para mantener los iones precursoras y de fragmentación en la celda EAD. Nota: Para detectar los iones producto con un <i>m/z</i> mayor, incremente EAD RF (Da) . La detección de iones producto con un <i>m/z</i> menor podría reducirse.
Reaction time (ms)	Indique el tiempo de reacción para la irradiación de electrones. En el modo EAD, este parámetro también controla el tiempo de carga. Sugerencia: Si el consumo de precursor no es suficiente después de la optimización de la corriente del haz de electrones, incremente el tiempo de reacción.
Time Bins to Sum	Indique el número de puntos de datos que se deben sumar. El rango de moléculas pequeñas o péptidos es de 4 a 6. El valor de inicio para el análisis de proteínas intactas (>20 kDa) es 40.
Channel 1 a Channel 4	Indique los canales del convertidor analógico-digital (ADC). Cada uno de los canales cuenta iones. Si se seleccionan los cuatro canales, que es el valor predeterminado, se suman los cuatro canales para el recuento total de iones.
Expected MW (Da)	Flujo de trabajo de reconstrucción de masa: indique el peso molecular esperado del componente, en Da.
m/z Range for XIC Start (Da)	Flujo de trabajo de reconstrucción de masa: indique la masa inicial para el rango de XIC.

Tabla 2-1: Nombres de campo en el archivo de lista de destino (continuación)

Campo	Descripción
m/z Range for XIC Stop (Da)	Flujo de trabajo de reconstrucción de masa: indique la masa final para el rango de XIC.
Reconstrucción Start Mass (Da)	Flujo de trabajo de reconstrucción de masa: indique la masa en la que se iniciará la reconstrucción, en Da.
Reconstrucción Stop Mass (Da)	Flujo de trabajo de reconstrucción de masa: indique la masa en la que se detendrá la reconstrucción, en Da.

Establecer la Configuración predeterminada del proyecto

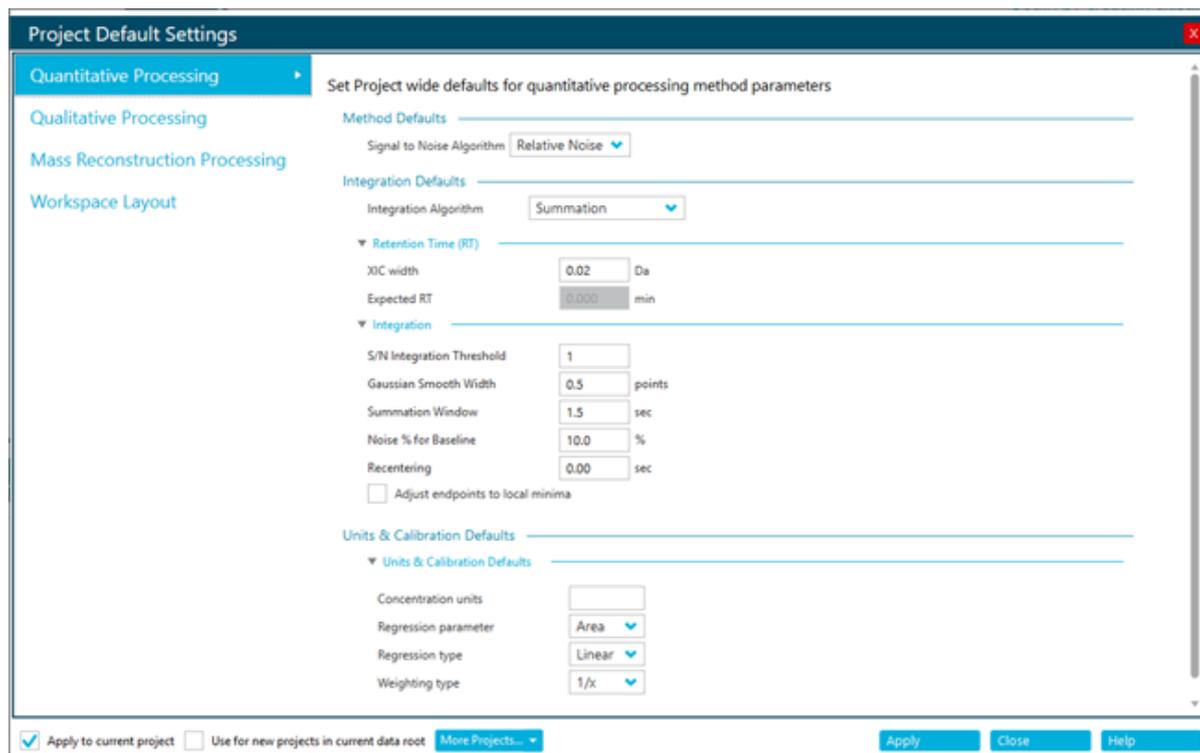
Durante un procesamiento automático, el software obtiene los parámetros del método de procesamiento, por ejemplo, **Anchura de XIC (Da)**, **Anchura de suavizado gaussiano (puntos)** y **% de ruido para punto de referencia** de la configuración predeterminada del proyecto. Si un método de procesamiento se va a usar como plantilla para el procesamiento automático, configure los ajustes predeterminados del proyecto para optimizar la integración de picos en el análisis completo. Distintos volúmenes de expulsión y anchuras de pico en el método de AE requieren diferentes valores para los parámetros de procesamiento.

La información de la configuración predeterminada del proyecto se guarda en el método de procesamiento para usarse como plantilla.

Nota: Cuando la configuración predeterminada del proyecto se cambia en el espacio de trabajo Analytics, los cambios no se usan para los métodos de procesamiento guardados. Para aplicar los cambios, actualice la configuración predeterminada del proyecto y, a continuación, cree un nuevo método de procesamiento. El nuevo método de procesamiento usará la configuración predeterminada del proyecto actualizada. Use este nuevo método de procesamiento para el procesamiento automático.

1. En el espacio de trabajo Analytics, haga clic en **Proyectos > Configuración predeterminada del proyecto**.

Figura 2-1: Ventana Procesamiento cuantitativo



2. Configure los parámetros.
Para obtener descripciones detalladas de los parámetros, consulte el documento *SCIEX OSSistema de ayuda*.
3. Haga clic en **Aplicar**.
4. Haga clic en **Cerrar**.

Crear un método de MS para usarlo como plantilla

- En el espacio de trabajo Método de MS, cree un método de MS para usarlo como plantilla. Consulte el documento: *SCIEX OSSistema de ayuda*.
- Para los experimentos TOF MS, cree un método de MS que tenga los correspondientes parámetros de la fuente y del gas y los parámetros del experimento TOF MS.
- Para experimentos MRM^{HR}, cree un método de MS que tenga los correspondientes parámetros de la fuente y del gas, los parámetros del experimento TOF MS y los parámetros del experimento TOF MS/MS, como configuración de resolución Q1, ITC e impulso de Zeno.

Nota: La información de Tabla de masas, como **ID de compuesto**, **Nombre del grupo**, **Ion precursor**, **Masa de inicio de TOF (Da)** y **Masa de detención de TOF (Da)** o **Ion de fragmentación (Da)**, **Tiempo de acumulación (s)**, **Potencial de desagrupación (V)**, **Energía de colisión (V)** y **Propagación de CE (V)**, está incluida en un archivo de lista de destino. Esta información sustituye a la información en el método de MS para usarla como plantilla y, por tanto, proporciona un método de procesamiento bien fundado para los experimentos TOF MS y los métodos de adquisición y procesamiento para experimentos TOF MS/MS.

Crear un método de procesamiento para usarlo como plantilla

La información del archivo de lista de destino y la configuración predeterminada del proyecto sustituyen la información del método de procesamiento que se usa como plantilla. Consulte la sección: [Establecer la Configuración predeterminada del proyecto](#).

- En el espacio de trabajo Analytics, cree un método de procesamiento. Consulte el documento: *SCIEX OS Sistema de ayuda*.

Use este procedimiento con el fin de utilizar mapas para visualizar los datos de expulsión acústica (AE) que se han adquirido con un sistema Echo® MS+.

1. Abra el espacio de trabajo Explorador.
2. Haga clic en **Archivo > Abrir archivo de resultados de Echo MS**.
Se abre el cuadro de diálogo Abrir. Muestra la carpeta `Quantitation Results` en el proyecto activo.
3. Busque el archivo de texto de resultados que contiene los datos de AE y, a continuación, haga clic en **Abrir**.
4. (Opcional) Para configurar las opciones de visualización para la ventana, haga clic en  (**Configuración**), personalice la configuración y, a continuación, haga clic en **Guardar y cerrar**.
5. (Opcional) Seleccione las opciones de filtrado oportunas.
6. En el campo **Columna**, seleccione la columna que desea mostrar en el archivo de texto de resultados.

La lista incluye todas las columnas del archivo de texto de resultados.

Sugerencia: Cree un archivo de configuración de salida para seleccionar los campos que desee incluir en el archivo de texto de resultados. Consulte la sección: [Archivo de configuración de salida \(opcional\)](#).

7. (Opcional) Para las columnas numéricas, establezca el rango. Están disponibles las siguientes opciones:
 - **Automático:** Seleccione esta opción para mostrar el valor más bajo de los datos con el color del lado izquierdo del mapa de colores y el valor más alto de los datos con el color del lado derecho del mapa de colores.
 - **Valor predeterminado:** si hay un rango predeterminado disponible, seleccione esta opción para usarlo. Para identificar un rango como predeterminado, primero establezca un rango manual y, a continuación, haga clic en **Guardar como predeterminado**.

Nota: Cuando el usuario establece un rango predeterminado, este se usa para todos los archivos de texto de resultados en el proyecto activo.

- **Manual:** Seleccione esta opción para establecer un rango manual. Todos los valores que sean menores que el valor del límite inferior del rango se muestran con el color del lado izquierdo del mapa de colores. Todos los valores que sean mayores que el valor del límite superior del rango se muestran con el color del lado derecho del mapa de colores.

Visualización de datos

Nota: Los valores indicados en formato de notación científica se cambian a formato decimal.

8. Para mostrar los resultados para un pocillo, haga clic en él.
9. Para abrir los datos del espacio de trabajo Analytics, haga clic en  (**Abrir en Analytics**).

Nota: Si no se encuentra la información del archivo relacionado, se abre el cuadro de diálogo Abrir en Analytics. Rellene los campos de este cuadro de diálogo y haga clic en **Abrir**.

El espacio de trabajo podría tardar hasta 1 minuto en abrirse. El tiempo necesario depende del tamaño del archivo de texto de resultados.

Contacto

Direcciones



Fabricado en Singapur
AB Sciex Pte. Ltd.
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapur 739256

Sede central de SCIEX

AB Sciex LLC
500 Old Connecticut Path
Framingham, Massachusetts 01701,
EE. UU.

Formación del cliente

- Global: sciex.com/contact-us

Centro de aprendizaje en línea

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

Asistencia técnica de SCIEX

SCIEX y sus representantes cuentan con un equipo de especialistas técnicos y de servicio totalmente cualificados en todo el mundo. Ellos sabrán resolver sus dudas sobre el sistema y cualquier problema técnico que pueda surgir. Para obtener más información, visite el sitio web de SCIEX en sciex.com o use uno de los siguientes enlaces para ponerse en contacto con nosotros.

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

Ciberseguridad

Para obtener las indicaciones sobre ciberseguridad más recientes para los productos SCIEX, visite sciex.com/productsecurity.

Documentación

Esta versión del documento sustituye a todas las versiones anteriores.

Contacto

Para buscar la documentación relacionada con el producto de software, consulte las notas de la versión o la guía de instalación del software que se suministra con el software.

Para localizar la documentación relacionada con los productos de hardware, consulte la documentación que se suministra con el sistema o componente.

Las últimas versiones del documento están disponibles en el sitio web de SCIEX, en sciex.com/customer-documents.

Nota: Para solicitar una versión impresa y gratuita de este documento, póngase en contacto con sciex.com/contact-us.
