
Software SCIEX OS

Para sistemas X500 QTOF y ZenoTOF 7600

Guía de usuario del software



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.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.

B1k33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

Tabla de contenido

Capítulo 1: Introducción	9
Descripción general del software	9
Cómo abrir el software	9
Acerca de la página de inicio	9
Acerca de la cinta y el lanzador	12
Acerca del panel de estado	14
Panel Data Acquisition	18
Bloqueo de la pantalla	19
Desbloqueo del software	20
Soporte de notebook electrónico de laboratorio	20
Símbolos y convenciones de la documentación	20
Capítulo 2: Instrucciones de funcionamiento: configuración del dispositivo	22
Adición de dispositivos	22
Eliminación de dispositivos	22
Edición de la configuración del dispositivo	23
Capítulo 3: Instrucciones de funcionamiento: configuración del software	24
Acerca de los proyectos y directorios principales	24
Adición de un directorio raíz	24
Eliminación de un directorio raíz	25
Especificación de una cuenta de red segura	25
Adición de un proyecto	25
Adición de una subcarpeta	26
Selección de opciones de cola	26
Selección de los ajustes del sistema de gestión de la información del laboratorio (LIMS)	27
Activación del modo de pantalla completa	27
Selección de configuración regional	27
Administración de las bibliotecas de compuestos	28
Importación de un paquete del software LibraryView	28
Importación de una base de datos de compuestos	28
Importación de un paquete del software Cliquid	29
Importación de un archivo Excel	30
Importación de una instantánea de la base de datos de la biblioteca	31
Importación de un paquete de la biblioteca de un tercero	32
Instalación de un paquete de software LibraryView con licencia	32
Conflictos de compuestos	34
Adición de un compuesto	36
Adición de un espectro de masas a un compuesto	36

Tabla de contenido

Capítulo 4: Instrucciones de funcionamiento: Flujos de trabajo de usuario	38
Analistas.....	38
Desarrolladores de método.....	38
Administradores.....	39
Revisores.....	39
Capítulo 5: Instrucciones de funcionamiento: adquisición	40
Espacio de trabajo MS Method.....	40
Creación de un método de MS.....	40
Creación de un método MRM HR mediante MRM HR guiada.....	43
Experimentos de método de MS.....	44
Acerca de los Métodos de MS.....	45
Cálculo de la energía de colisión dinámica para los métodos de MS.....	47
Apertura de un método de MS.....	47
Ejecución de un método de MS manualmente.....	48
Espacio de trabajo LC Method.....	50
Creación de un método de LC.....	50
Espacio de trabajo Batch.....	51
Administración del lote.....	56
Importación de un lote de un archivo.....	60
Importación de un lote desde un LIMS.....	61
Creación de un lote manualmente.....	62
Utilización de la función Plate Layout para crear un lote.....	64
Creación de una tabla de referencia de iones.....	65
Calibración del sistema mediante CDS.....	66
Calibración del sistema mediante un método de LC.....	67
Administración de concentraciones de componentes.....	67
Administración de reglas de decisión.....	68
Equilibrado del sistema.....	70
Envío de un lote.....	70
Envío de una única muestra a la cola en el espacio de trabajo Batch.....	71
Envío de varias muestras a la cola en el espacio de trabajo Batch.....	71
Espacio de trabajo Queue.....	72
Gestión de la cola.....	74
Mostrar u ocultar columnas.....	77
Iconos de cola.....	78
Espacio de trabajo MS Tune.....	80
Realización de una comprobación rápida del estado.....	80
Optimización del detector.....	81
Ajustar Unidad Q1.....	82
Ajustar TOF.....	83
Ajuste alto Q1.....	84
Calibrar Zeno (Sistemas ZenoTOF).....	84
Realizar Optimización de EAD (Sistemas ZenoTOF).....	85
Realizar Reducción de fondo del EI de EAD (Sistemas ZenoTOF).....	86
Realizar Diagnóstico de EAD (Sistemas ZenoTOF).....	86
Realizar Inicialización ADC (Sistemas ZenoTOF).....	86

Ejecución de la solución de problemas avanzada	86
Restauración de datos del instrumento	87
Capítulo 6: Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento	89
Espacio de trabajo Explorer	89
Apertura de muestras	89
Confirmación de la presencia de un analito	89
Extracción de iones	90
Apertura de un cromatograma de iones totales	91
Apertura de un cromatograma de pico base	93
Visualización de la tabla de datos y picos	95
Visualización de la información de la muestra	97
Visualización de la información de selección de gráfico	97
Edición de parámetros en los gráficos	100
Cómo trabajar con datos en los gráficos	101
Uso de las herramientas de operación en dos paneles	106
Movimiento de paneles o ventanas	108
Realización de un suavizado gaussiano	109
Datos de umbral	110
Datos de subconjunto usando la selección de gráfico	110
Cromatograma de sustracción de punto de referencia	111
Desviación del cromatograma	112
Centroide de un espectro	113
Exportación de datos como texto	114
Exportación de la lista de picos como texto	115
Impresión de datos	116
Restablecimiento de opciones	116
Configuración de opciones	116
Espacio de trabajo Analytics	117
Defina los parámetros de procesamiento predeterminados para el proyecto	118
Trabajar con diseños de espacio de trabajo	119
Definición de la configuración de exportación segura del proyecto	121
Activación de la advertencia de pico modificado en proyecto	122
Creación de un método de procesamiento	122
Procesamiento de datos	125
Cómo trabajar con tablas de resultados	133
Revisión de picos	168
Análisis de datos usando estadísticas	181
Visualización de la curva de calibración	183
Análisis de datos utilizando gráficos de métrica	184
Edición de plantillas de informe	185
Plantillas de Reporter	187
Capítulo 7: Eventos	203
Registros de eventos	203
Visualización de registros	204
Archivado de registros	204
Visualización de registros archivados	205

Tabla de contenido

Impresión de registros	205
Archivos de registro de eventos	205
Capítulo 8: Auditoría	207
Visualización de los registros de pistas de auditoría	207
Filtrado de eventos auditados mediante una búsqueda con el teclado	207
Filtrado de eventos auditados usando un grupo de criterios definidos	207
Impresión de la pista de auditoría	209
Apéndice A: Teoría de funcionamiento: software	210
Gestión de datos	210
Técnicas de análisis	210
Vista de datos diferente	210
Cromatogramas	210
Espectros	212
Espectros de reconstrucción	212
Reglas de decisión	213
Algoritmo Dynamic Background Subtraction	213
Análisis cuantitativo	213
Adición de patrones	214
Reconstrucción de masa	215
Análisis cualitativo	216
Precisión en masa	216
Tiempo de retención	217
Patrón de isótopos	217
Búsqueda en la biblioteca	218
Búsqueda de fórmulas	218
Integración	219
Parámetros del algoritmo de integración de AutoPeak	219
Parámetros del algoritmo de integración MQ4	224
Regresión	226
Ecuaciones de regresión	227
Tipos de ponderación	227
Coeficiente de correlación	228
Tipos de regresión	228
Extracción automática de valores atípicos	231
Tablas de resultados	232
Curvas de calibración	232
Relación señal/ruido	233
Cálculos de ruido relativo y relación señal/ruido	233
Señal/ruido mediante pico a pico	237
Señal/ruido utilizando desviación estándar	237
Definición de regiones de ruido	238
Columnas calculadas	238
Navegación por la interfaz de columnas calculadas	238
Extracción simple de información no predeterminada	240
Aritmética simple	241
Funciones más complejas	241

Instrucciones IF	242
Treat Resulting Text Values As	243
Apéndice B: Calibración de un sistema configurado con cierre de contacto	245
Calibración del sistema en el modo por lotes	245
Calibración del sistema mediante CDS	245
Calibración del sistema usando el sistema de LC	248
Calibración en modo manual	251
Calibración del sistema con CDS	251
Calibración del sistema usando el método de LC	251
Apéndice C: Masas exactas y fórmulas químicas	252
Apéndice D: Tutorial de Explorer	254
Introducción	254
Organización	254
Opciones	255
Paneles	255
Graphs	261
Superposiciones	268
Open Files	269
Chromatograms and Spectra	271
Contour Plots and Heat Maps	274
Work with Chromatograms and Spectra	277
Abrir un archivo de datos	277
Show the TIC for One Experiment	279
Show an XIC for a Known Molecular Formula	281
Generate and Interact with a Spectrum	285
Use a Contour Plot	291
Resumen	294
Work with the IDA Explorer	295
Show and Merge Spectra	295
Filter IDA Data	300
Use a Reference Spectrum	302
Resumen	303
Work with Structure Tools	303
Link a Structure to an MS/MS Spectrum	304
Work with Fragments	307
Add Substructures to a Spectrum	312
Work with Related MS/MS Spectra	313
Resumen	316
Work with Multiple Samples	317
Work with Two Samples	317
Work with More than two Samples	324
Resumen	331
Work with the Bio Tool Kit Feature	332
Manual Sequence	332
Add and Remove Manual Reconstruct Highlights	342

Tabla de contenido

Digest Protein.....	345
LCMS Peptide Reconstruct.....	352
Reconstruct Protein.....	359
Resumen.....	364
Contacto.....	366
Formación del cliente.....	366
Centro de aprendizaje en línea.....	366
Soporte SCIEX.....	366
Ciberseguridad.....	366
Documentación.....	366

Descripción general del software

El software SCIEX OS incorpora el control del instrumento, la adquisición de datos, el procesamiento de datos y la funcionalidad de generación de informes, todo en un único paquete.

Cómo abrir el software

1. Seleccione el software en el menú Inicio:
 - Windows 7: **Start > All Programs > SCIEX > SCIEX OS > SCIEX OS**
 - Windows 10: **Start > SCIEX OS > SCIEX OS**

Nota: Si el servicio **LibraryViewServiceHost** no se ejecuta, se muestra el cuadro de diálogo User Account Control. Haga clic en **Yes** para iniciar el servicio.

Si el software está configurado para el modo integrado, se abre la página de inicio.

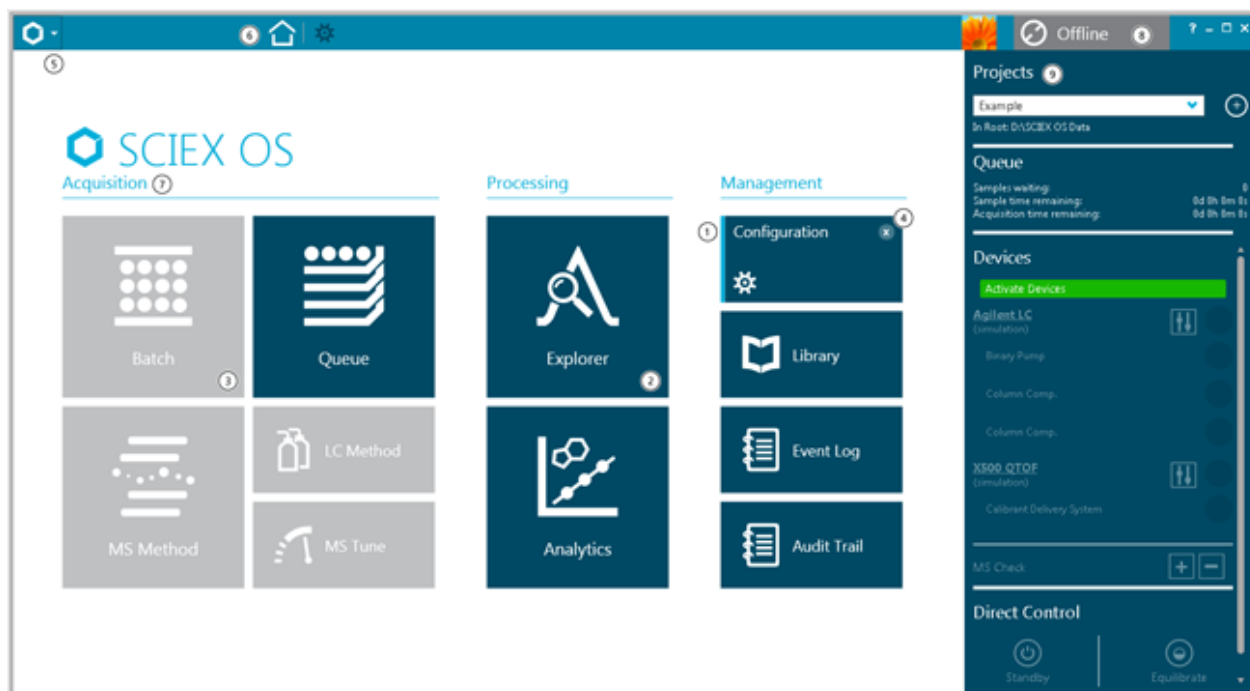
Si el software está configurado para el modo mixto, se abre el cuadro de diálogo Logon. Continúe con el paso siguiente.

2. Si se está usando el software Central Administrator Console (CAC) y SCIEX OS está configurado para la administración centralizada, seleccione el grupo de trabajo para iniciar sesión.
3. Si se abre el cuadro de diálogo Logon, escriba el nombre y la contraseña de un usuario que esté autorizado a usar el software y, a continuación, haga clic en **OK**. Se abre la página de inicio.

Acerca de la página de inicio

La página de inicio está formada por varios espacios de trabajo agrupados por función, el panel de estado, la cinta y el lanzador. El acceso a las áreas de trabajo está determinado por la función asignada al usuario y en la licencia.

Figura 1-1: Página de inicio



Elemento	Descripción
1	Una línea vertical de color azul en el lado izquierdo del mosaico de color azul oscuro indica que el espacio de trabajo está abierto, que el trabajo está en curso y que el usuario tiene acceso a la funcionalidad. El estado del espacio de trabajo abierto se muestra en el mosaico.
2	Un mosaico de color azul oscuro indica que el espacio de trabajo está cerrado.
3	Un mosaico de color gris indica que el espacio de trabajo no está activado.
4	El icono para cerrar (×) aparece en la esquina superior derecha del mosaico cuando el espacio de trabajo está abierto.
5	Acceso al lanzador. El lanzador contiene una lista de todos los espacios de trabajo. Haga clic en ▾ a la derecha del icono para abrir el lanzador.
6	La cinta. Consulte la sección: Acerca de la cinta y el lanzador . Para ir a otro espacio de trabajo, haga clic en un espacio de trabajo de la lista. El espacio de trabajo abierto permanece activo y el icono del espacio de trabajo aparece en la cinta. Para cerrar el espacio de trabajo activo, haga clic en . Para volver a la página de inicio, haga clic en .
7	Funciones: adquisición, procesamiento y gestión. El acceso depende del rol asignado al usuario y de la licencia.

Elemento	Descripción
8	Estado del sistema. Haga clic en la barra de título para mostrar u ocultar el panel de estado.
9	El panel de estado. Consulte la sección: Acerca del panel de estado .

Tabla 1-1: Funciones

Etiqueta	Descripción
Acquisition	(Adquisición) Utilice las funciones del grupo Acquisition para crear métodos y lotes y para enviar muestras para adquisición. Los usuarios también pueden ajustar el espectrómetro de masas utilizando MS Tune.
Processing	(Procesamiento) Utilice las funciones del grupo Processing para procesar los datos de forma cuantitativa o cualitativa.
Management	(Gestión) Utilice las funciones del grupo Management para configurar los dispositivos, configurar el acceso al software y ver el registro de eventos.

Tabla 1-2: Mosaicos

Etiqueta	Descripción
Batch	(Lote) Utilice el espacio de trabajo Batch para crear lotes y enviarlos a la cola. Consulte la sección: Espacio de trabajo Batch .
Queue	(Cola) Utilice el espacio de trabajo Queue para monitorizar los estados de adquisición y procesamiento y para gestionar muestras en la cola. Consulte la sección: Espacio de trabajo Queue .
MS Method	(Método de MS) Utilice el espacio de trabajo MS Method para crear y editar los métodos de MS. Consulte la sección: Espacio de trabajo MS Method .
LC Method	(Método de LC) Utilice el espacio de trabajo LC Method para crear y editar los métodos de LC. Consulte la sección: Espacio de trabajo LC Method .
MS Tune	(Ajuste de MS) Utilice el espacio de trabajo MS Tune para optimizar el espectrómetro de masas. Consulte la sección: Espacio de trabajo MS Tune .
Explorer	(Explorador) Utilice el espacio de trabajo Explorer para examinar los datos adquiridos. Consulte la sección Espacio de trabajo Explorer .

Tabla 1-2: Mosaicos (continuación)

Etiqueta	Descripción
Analytics	(Análisis) Utilice el espacio de trabajo Analytics para procesar y revisar los datos adquiridos. Consulte la sección Espacio de trabajo Analytics .
Configuration	(Configuración) Utilice el espacio de trabajo Configuration para configurar el software, agregar y activar dispositivos, asignar las funciones de los usuarios, y crear y asignar mapas de auditoría. Consulte el documento: <i>Sistema de ayuda</i> .
Library	(Biblioteca) Usa el Library espacio de trabajo para gestionar bibliotecas de compuestos.
Event Log	(Registro de eventos) Utilice el espacio de trabajo Event Log para visualizar los eventos de los sistemas, incluidos errores y advertencias. Consulte el documento <i>Guía del director de laboratorio</i> .
Audit Trail	(Pista de auditoría) Utilice el espacio de trabajo Audit Trail para visualizar los registros de eventos de software, como cambios de configuración y procesamiento de datos. Consulte el documento <i>Guía del director de laboratorio</i> .

Acerca de la cinta y el lanzador

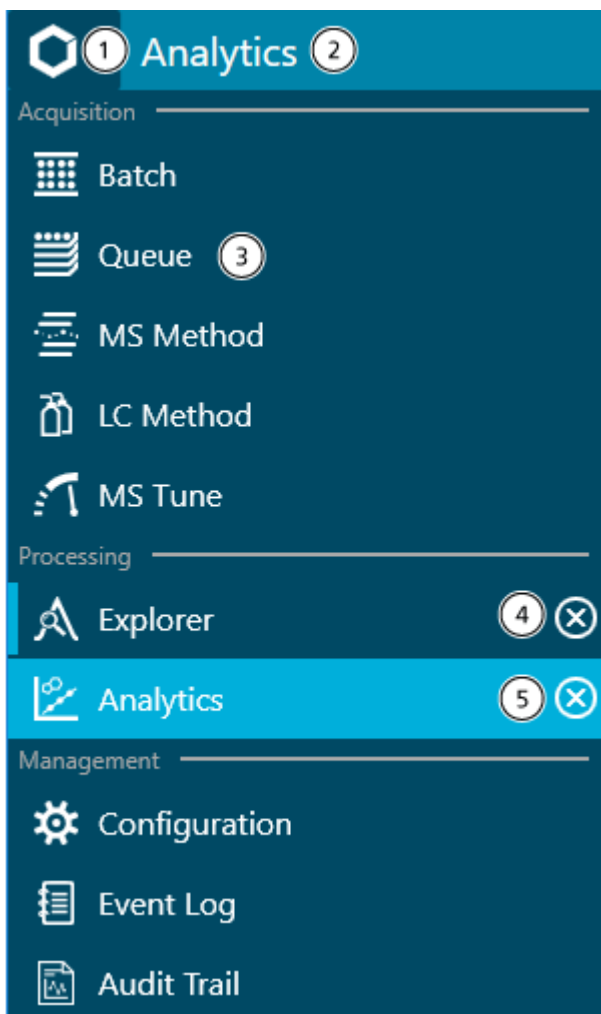
Figura 1-2: Cinta




Elemento	Descripción
1	Permite al usuario abrir otro espacio de trabajo seleccionándolo de la lista. Dicho espacio de trabajo pasa a ser el espacio de trabajo activo. El espacio de trabajo anteriormente activo permanece abierto. Consulte la Figura 1-3 .
2	Muestra el nombre del espacio de trabajo activo.
3	Abre la página de inicio.
4	Muestra los espacios de trabajo abiertos. El espacio de trabajo activo se muestra en blanco. Para abrir un espacio de trabajo activo, haga clic en el icono de espacio de trabajo.
5	Muestra el usuario que tiene una sesión abierta en ese momento.
6	Muestra el estado del sistema. Consulte la sección Acerca del panel de estado .


Elemento	Descripción
7	Abre el sistema de ayuda. Haga clic en ?.

Figura 1-3: Lanzador



Elemento	Descripción
1	Muestra la lista de espacios de trabajo. Haga clic en ▾.
2	Muestra el nombre del espacio de trabajo activo.
3	Muestra el estado de los espacios de trabajo. Un fondo azul oscuro indica que el espacio de trabajo está cerrado. Una barra azul claro vertical a la izquierda indica que el espacio de trabajo está abierto. Un fondo azul claro indica que el espacio de trabajo está activo.
4	Cierra un espacio de trabajo abierto. Haga clic en  .

Introducción

Elemento	Descripción
5	Cierra el espacio de trabajo activo. Haga clic en  .

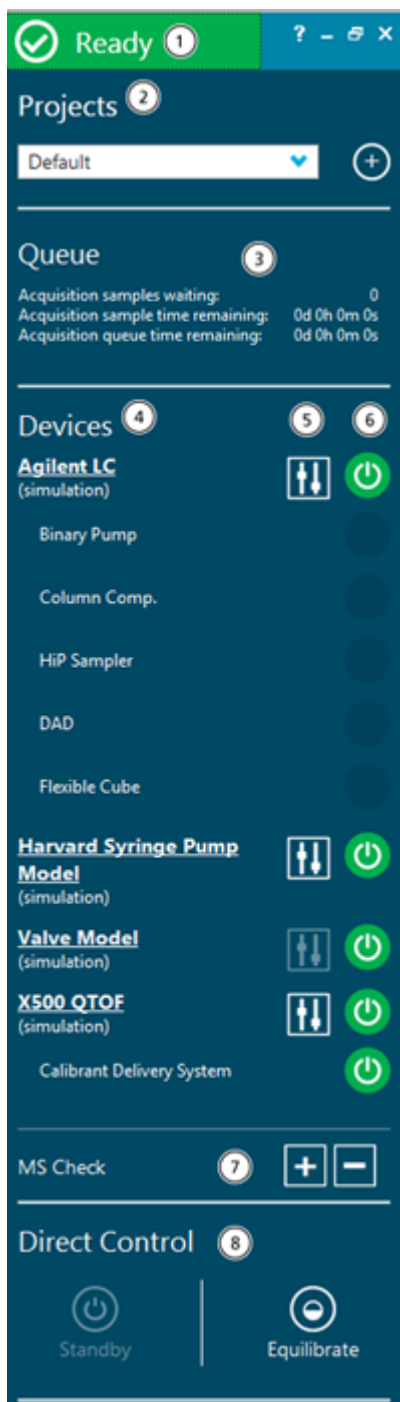
Acerca del panel de estado

Para abrir este panel, haga clic en la barra de título panel de estado. Consulte la figura: [Figura 1-2](#).

El icono, el texto y el color de la barra de título de estado cambian para indicar el estado del sistema. Utilice el panel de estado para hacer lo siguiente:

- Agregar o seleccionar un proyecto.
- Visualizar las pruebas restantes en la cola y el tiempo restante estimado para el lote que se va a adquirir.
- Visualizar el número de muestras restantes en la cola y el tiempo restante estimado para completar la cola.
- Visualizar el estado del sistema o el estado de los dispositivos individuales que se han activado en la lista Devices dentro del espacio de trabajo Configuration.
- Entrar en el control del dispositivo directo para iniciar o detener dispositivos.
- Visualizar los detalles del dispositivo.
- Poner el espectrómetro de masas o sistema de LC en estado en espera.
- Verificar y calibrar los modos TOF MS y TOF MS/MS.
- Equilibrar el sistema.

Figura 1-4: Panel SCIEX OS Status



Introducción


Elemento	Descripción
1	<p>Muestra el estado del sistema. Haga clic en la barra de título para mostrar u ocultar el panel de estado.</p> <ul style="list-style-type: none">• Verde indica que está listo.• Gris indica que está desconectado.• Azul indica que está equilibrando, ejecutando o cargando.• Amarillo indica que se ha detenido o se está deteniendo.• Rojo indica un fallo.
2	<p>Muestra el proyecto actual. Para cambiar a un proyecto existente, selecciónelo de la lista. Para agregar un proyecto, haga clic en Create</p> <p>Project (), escriba el nombre del proyecto y, a continuación, haga clic en OK.</p>
3	<p>Muestra el estado de las muestras que se encuentran en la cola.</p>
4	<p>Muestra el estado de los dispositivos. Haga clic en el título del dispositivo para abrir el cuadro de diálogo Device Details y ver los detalles. Si los dispositivos están inactivos, se muestra el botón Activate Devices en esta sección del panel de estado. Haga clic en este botón para activar los dispositivos.</p>
5	<p>Haga clic en el icono Direct Device Control para tener acceso a los controles del dispositivo. La jeringa opcional se puede iniciar o detener en el cuadro de diálogo Device Control.</p>
6	<p>Muestra el estado del dispositivo. El icono solo es un indicador visual del estado del dispositivo.</p>
7	<p>Haga clic para tener acceso a los procedimientos de MS Tune.</p>
8	<p>Haga clic en el botón adecuado para equilibrar el sistema o ponerlo en el estado en espera. Consulte la sección: Equilibrado del sistema.</p>

Tabla 1-3: Secciones del panel de estado


Etiqueta	Descripción
Projects	<p>(Proyectos) Muestra el proyecto actual. Haga clic en Create</p> <p>Project () para crear un proyecto. Consulte la sección: Adición de un proyecto.</p>

Tabla 1-3: Secciones del panel de estado (continuación)




Etiqueta	Descripción
Queue	<p>(Cola) Muestra el estado de las muestras que se encuentran en la cola. La información se proporciona para:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Samples waiting (Muestras en espera) • Sample time remaining (Tiempo de muestra restante) • Acquisition time remaining (Tiempo de adquisición restante) <p>Consulte la sección: Gestión de la cola.</p>
Devices	<p>(Dispositivos) Enumera los dispositivos en la configuración activa. Desde esta lista, se pueden gestionar los dispositivos de las siguientes maneras:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Haga clic en el nombre de dispositivo para abrir y visualizar el cuadro de diálogo Device Details. • Visualice el estado del icono o mueva el cursor sobre el icono de estado para visualizar el estado del dispositivo. • Haga clic en Direct device control () para abrir el cuadro de diálogo Device Control.
MS Check	<p>(Comprobación de MS) Realiza el procedimiento de ajuste de MS en modo positivo (+) o negativo (-).</p>
Direct Control	<p>(Control directo) Permite al usuario controlar el dispositivo manualmente. Haga clic en Standby para poner el sistema en estado en espera. Haga clic en Equilibrate para abrir el cuadro de diálogo Equilibrate. Consulte la sección: Equilibrado del sistema.</p>

Tabla 1-4: Funciones del panel de estado

Para hacer esto	Haga esto
Visualizar el panel de estado	Haga clic en la barra de título del panel de estado, situada en la parte superior del panel de estado minimizado. Consulte la figura: Figura 1-2 .
Ocultar el panel de estado	Haga clic en la barra de título del panel de estado cuando se visualice.

Tabla 1-4: Funciones del panel de estado (continuación)

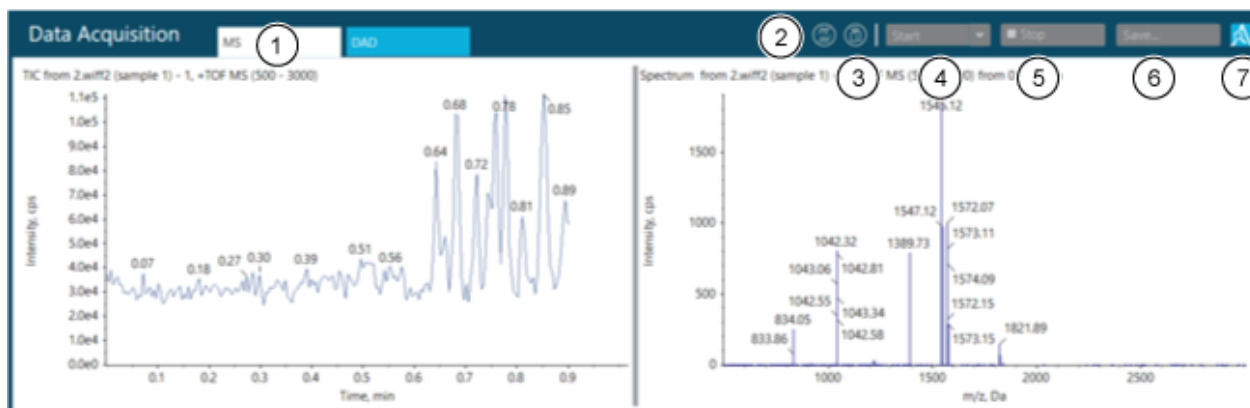
Para hacer esto	Haga esto
Cambiar el proyecto activo	<p>Seleccione un proyecto de la lista Projects en el panel de estado.</p> <hr/> <p>Sugerencia: Haga clic en Create Project () para crear un proyecto. Escriba el nombre del proyecto y, a continuación, haga clic en OK.</p> <hr/>
Controlar el estado del dispositivo	<ol style="list-style-type: none">1. En el panel de estado, haga clic en Direct device control () a la derecha del título de dispositivo. Se abre el cuadro de diálogo Device Control.2. Inicie, detenga o actualice el dispositivo, según lo que necesite.3. Haga clic en OK. <p>Utilice este procedimiento para obtener información detallada acerca del estado de un dispositivo. Por ejemplo, temperaturas, presiones y tensiones. Para supervisar el estado del dispositivo, haga clic en el icono situado en el extremo derecho del título del dispositivo.</p>

Panel Data Acquisition

Utilice el panel Data Acquisition para iniciar y supervisar la adquisición de datos en tiempo real. Los usuarios también pueden editar los parámetros del método de adquisición durante la adquisición de datos en tiempo real, así como guardar datos o abrirlos en el espacio de trabajo Explorer.

Sugerencia: Haga clic en la parte superior del panel Data Acquisition y, a continuación, arrástrelo hacia arriba o hacia abajo para cambiar el tamaño del contenido.

Figura 1-5: Panel Data Acquisition



Elemento	Descripción
1	Muestra el TIC y el espectro o XIC. Si un detector está activo, también se muestran datos de DAD o UV.
2	Método de MS. Pase el ratón por encima del método de MS que se está ejecutando.
3	Método de LC. Pase el ratón por encima del método de LC que se está ejecutando.
4	Haga clic en Start para iniciar la adquisición manual. Haga clic en Start > Start with LC para abrir el cuadro de diálogo Start with LC.
5	Haga clic para detener la adquisición manual.
6	Haga clic para guardar los datos.
7	Haga clic para explorar los datos en tiempo real.

Bloqueo de la pantalla

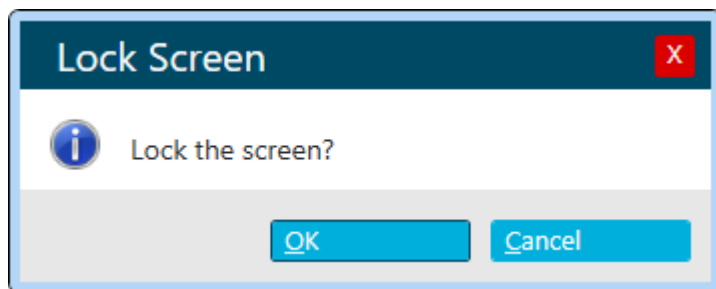
Para evitar el acceso no autorizado al software cuando la estación de trabajo está desatendida, bloquee el software. Mientras el software está bloqueado, continúa cualquier adquisición o procesamiento que esté en curso.

Cuando se cumple el tiempo de cierre de sesión automático, se cierra la sesión del usuario. La adquisición continúa.

Nota: El cierre de sesión automático no tendrá lugar si hay procesamiento en curso o si no se ha guardado la tabla de resultados.

1. Pulse **Ctrl+Q**.

Figura 1-6: Cuadro de diálogo Lock Screen



2. Haga clic en **OK**.
Se abre el cuadro de diálogo SCIEX OS is Locked.

Desbloqueo del software

Si el software está bloqueado, puede desbloquearlo el usuario que haya iniciado sesión.

Nota: Otros usuarios no pueden desbloquear el software, pero un usuario con el permiso **Force User Logoff** puede cerrar la sesión del usuario actual.

En el cuadro de diálogo SCIEX OS is Locked, escriba la contraseña del usuario actual y, a continuación, haga clic en **Unlock**.

Soporte de notebook electrónico de laboratorio

SCIEX no es compatible con ninguna solución específica de notebook electrónico de laboratorio (ELN), pero SCIEX ofrece productos, herramientas y servicios para facilitar la importación y exportación de datos para integración con sistemas ELN:

- **Creación de lotes:** SCIEX OS puede importar archivos de lotes en formato csv y txt. Consulte [Espacio de trabajo Batch](#).
- **Carga de resultados:** SCIEX OS puede exportar datos a un archivo txt para usarlos en un sistema LIMS. Consulte [Espacio de trabajo Analytics](#).

Símbolos y convenciones de la documentación

En la guía se utilizan los siguientes símbolos y convenciones:



¡PELIGRO! "Peligro" hace referencia a una acción que puede provocar lesiones graves o la muerte.



¡ADVERTENCIA! "Advertencia" hace referencia a una acción que podría causar lesiones personales en caso de no seguir las precauciones correspondientes.

PRECAUCIÓN: "Precaución" se aplica a aquellas operaciones que podrían causar daños en el sistema o los datos, o la pérdida de estos, en caso de no seguir las precauciones.

Nota: Las "Notas" resaltan información importante de un procedimiento o una descripción.

Sugerencia: Una "Sugerencia" proporciona información útil que ayuda a aplicar las técnicas y los procedimientos de la guía con un fin específico; también proporciona métodos de acceso directo. Sin embargo, las sugerencias no son esenciales para la finalización de un procedimiento.

Instrucciones de funcionamiento: configuración del dispositivo

2

Utilice el espacio de trabajo Configuration para:

- Activar y desactivar dispositivos
- Añadir y eliminar dispositivos
- Editar la configuración del dispositivo
- Probar los dispositivos

Adición de dispositivos

Nota: Para evitar problemas de activación, agregue siempre el espectrómetro de masas antes de agregar otros dispositivos.

1. Abra el espacio de trabajo Configuration.
2. Haga clic en **Devices**.
3. Si hay algún dispositivo activo, haga clic en **Deactivate**.
4. Haga clic en **Add**.
Se abre el cuadro de diálogo Device.
5. En la lista **Type**, seleccione el tipo requerido.
6. En la lista **Model**, seleccione el modelo requerido.
7. Haga clic en **Settings** para editar los ajustes o restaurar los valores predeterminados.
8. Haga clic en **Test Device** para verificar que el dispositivo está configurado correctamente y disponible para su uso.
9. Haga clic en **Save**.
10. Repita los pasos 4 a 9 según sea necesario.
11. Seleccione la casilla **Activate** junto a cada dispositivo que desea activar y, a continuación, haga clic en **Activate Devices**.
Todos los dispositivos seleccionados están activos.
12. Para editar o eliminar dispositivos, consulte el sistema de ayuda.

Eliminación de dispositivos

Nota: Si el dispositivo que se está eliminando forma parte de un sistema integrado, se eliminan todos los dispositivos del sistema integrado. Los usuarios no pueden eliminar un dispositivo en un sistema integrado.

1. Abra el espacio de trabajo Configuration.
2. Haga clic en **Devices**.
3. Haga clic en **Deactivate**.
4. Seleccione un dispositivo.
5. Haga clic en **Delete**.
6. Seleccione la casilla **Activate** junto a cada dispositivo que desea activar y, a continuación, haga clic en **Activate Devices**.
Todos los dispositivos seleccionados están activos.

Edición de la configuración del dispositivo

1. Abra el espacio de trabajo Configuration.
2. Haga clic en **Devices**.
3. Si los dispositivos están activos, haga clic en **Deactivate**.
4. Seleccione el dispositivo que se va a editar.
5. Haga clic en **Edit**.
Se abre el cuadro de diálogo Device.
6. (Opcional) Edite las propiedades del dispositivo en la sección **Device Display Names**.
Para obtener información sobre las propiedades, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
7. (Opcional) Haga clic en **Settings** para visualizar y cambiar información adicional sobre el dispositivo. Utilice el cuadro de diálogo Settings para realizar las siguientes tareas:
 - Haga clic en **Restore Defaults** para restaurar la configuración predeterminada del dispositivo.
 - Haga clic en **Test Device** para verificar que el dispositivo está configurado correctamente y disponible para su uso. Si la prueba es correcta, se cierra el diálogo Settings.
8. Haga clic en **Test Device** para verificar que el dispositivo está configurado correctamente y disponible para su uso.
Si la prueba es correcta, se mostrará un mensaje verde. En caso contrario, un mensaje informativo indicará que la configuración no es válida y requiere actualizaciones.
9. Haga clic en **Save**.
10. Seleccione la casilla **Activate** junto a cada dispositivo que desea activar y, a continuación, haga clic en **Activate Devices**.
Todos los dispositivos seleccionados están activos.

Instrucciones de funcionamiento: configuración del software

3

Para obtener información acerca de la configuración de los usuarios y las funciones, consulte el documento *Guía del director de laboratorio*.

Acerca de los proyectos y directorios principales

Un directorio principal o raíz es una carpeta que contiene uno o varios proyectos. Es la carpeta en la que el software busca los datos del proyecto. El directorio raíz predefinido es C:\SCIEX OS Data.

Para asegurarse de que la información del proyecto se guarde correctamente, cree los proyectos utilizando SCIEX OS. Consulte la sección [Adición de un proyecto](#).


Los datos del proyecto se pueden organizar en subcarpetas. Cree las subcarpetas con SCIEX OS. Consulte la sección [Adición de una subcarpeta](#).

Nota: En el caso de grupos de trabajo administrados con el software Central Administrator Console (CAC), la configuración del software CAC controla la capacidad de gestionar proyectos con SCIEX OS. Si se ha seleccionado la opción **Use central settings for projects** en el software CAC, la página Projects es de solo lectura.

Adición de un directorio raíz

Un directorio raíz es la carpeta en la que se almacenan uno o varios proyectos.

Nota: El software guarda hasta diez directorios raíz.

1. Abra el espacio de trabajo Configuration.
2. Haga clic en **Projects**.
3. En la sección **Advanced**, haga clic en **Create Root** () junto al campo **Current root directory**.
4. Escriba la ruta completa de la carpeta directo raíz.
Se crea la carpeta.

Sugerencia: En vez de escribir la ruta, haga clic en **Browse** y seleccione la carpeta en la que se creará el directorio. Escriba "\" y el nombre de la carpeta directorio raíz al final de la ruta.

Sugerencia: De forma alternativa, cree una carpeta en el Explorador de archivos y, a continuación, busque y seleccione la carpeta.


Nota: En el caso de instalaciones de SCIEX OS con una licencia de procesamiento, el directorio raíz puede ser una carpeta del software Analyst `Analyst Data\Projects`.

5. Haga clic en **OK**.
El nuevo directorio raíz pasa a ser el directorio raíz del proyecto actual.

Eliminación de un directorio raíz

El software conserva una lista de los diez últimos directorios raíz que se han usado. El usuario puede eliminar directorios raíz de esta lista.

Nota: El **Current root directory** no se puede eliminar.

1. Abra el espacio de trabajo Configuration.
2. Haga clic en **Projects**.
3. En la sección **Advanced**, haga clic en  junto al campo **Current root directory**.
Se abre el cuadro de diálogo Clear Root Directory.
4. Seleccione las carpetas a eliminar de la lista de directorios raíz y, a continuación, haga clic en **OK**.

Especificación de una cuenta de red segura

Si los proyectos se guardan en un recurso de red, se puede especificar una SNA para asegurarse de que todos los usuarios de la estación de trabajo tienen el acceso necesario al recurso de red.

1. Abra el espacio de trabajo Configuration.
2. Haga clic en **Projects**.
3. En la sección **Advanced**, haga clic en **Credentials for Secure Network Account**.
4. Escriba el nombre de usuario, la contraseña y el dominio de la cuenta de red segura definida en el recurso de red.
5. Haga clic en **OK**.

Adición de un proyecto


El proyecto almacena métodos de adquisición, datos, lotes, métodos de procesamiento, resultados de procesamiento, etc. Recomendamos el uso de carpetas de proyecto independientes para cada proyecto.

Sugerencia: Los proyectos también se pueden crear haciendo clic en **Create Project**

() en el panel de estado.


Instrucciones de funcionamiento: configuración del software

Los usuarios no deben crear proyectos ni copiar o pegar archivos fuera de SCIEX OS.

1. Abra el espacio de trabajo Configuration.
2. Haga clic en **Projects**.
3. Haga clic en **Create Project** () junto al campo **Current Project**.
Se abre el cuadro de diálogo New Project.
4. Escriba el nombre del proyecto.
5. Haga clic en **OK**.

Adición de una subcarpeta

En los proyectos, los datos se pueden organizar también en subcarpetas.

1. Abra el espacio de trabajo Configuration.
2. Haga clic en **Projects**.
3. Haga clic en **Add Data Sub-Folders to any Project**.
Se abre el cuadro de diálogo Add Data Sub-Folders.
4. En el campo **SCIEX OS Project**, seleccione el proyecto en el que se añadirá la subcarpeta.
5. Haga clic en **Add a new data sub-folder** () sobre el cuadro en la sección **Project Data Sub-Folders**.
Se abre el cuadro de diálogo Data Sub-Folder Name.
6. Escriba el nombre de la subcarpeta.
7. Haga clic en **Save**.
8. Cierre el cuadro de diálogo Add Data Sub-Folders.

Selección de opciones de cola

El software procesa las muestras enviadas en la lista secuencialmente y ejecuta cada muestra con el método de adquisición seleccionado. Después de que se hayan adquirido todas las muestras, la cola se detiene y el sistema pasa a estado Ready. Una vez que ha transcurrido el tiempo definido en el campo Instrument Idle Time, el sistema pasa a estado Standby. En el modo Standby, se apagan las bombas de LC y el horno de columna, así como algunas tensiones del espectrómetro de masas. El control de la temperatura del procesador de muestras automático permanece encendido para evitar la degradación de la muestra.

Solo un usuario a quien se hayan asignado permisos para gestionar la cola puede modificar la cantidad de tiempo que la cola funciona después de que haya terminado la última adquisición y antes de poner el instrumento en modo Standby.

1. Abra el espacio de trabajo Configuration.

2. Haga clic en **Queue**.
3. Seleccione las opciones de cola según convenga. Para obtener una descripción de las opciones, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
4. Haga clic en **Save**.

Selección de los ajustes del sistema de gestión de la información del laboratorio (LIMS)

Utilice esta función para conectar con un servidor LIMS. Los usuarios pueden importar la información por lotes de un LIMS, así como exportar los resultados al mismo.

Nota: Este procedimiento no es obligatorio en el caso de una conexión a un LIMS Watson.

1. Abra el espacio de trabajo Configuration.
2. Haga clic en **LIMS Communication**.
3. Para comunicarse con un LIMS, escriba la URL del servidor LIMS en el campo **LIMS Server** y seleccione **Enable import from the specified LIMS server**.

Nota: La configuración del servidor LIMS la debe realizar el departamento de TI del cliente o el proveedor de middleware. Póngase en contacto con ellos para conocer la URL o la ubicación del servidor.

4. Haga clic en **Save**.

Activación del modo de pantalla completa

Seleccione esta función para utilizar SCIEX OS como aplicación principal. Los usuarios no pueden cerrar el software ni tener acceso a otros programas de software.

1. Abra el espacio de trabajo Configuration.
2. Haga clic en **General**.
3. En **General**, seleccione la casilla **Enabled** para activar **Full Screen Mode**.
4. Haga clic en **Save**.

Selección de configuración regional

Esta función aplica la configuración regional y de idioma seleccionada en el Panel de control. Solo se puede utilizar un punto "." o una coma "," como separadores decimales. No se admite la agrupación de dígitos.

1. Abra el espacio de trabajo Configuration.
2. Haga clic en **General**.
3. En **Regional Settings**, haga clic en **Apply**.

La configuración regional definida en el sistema operativo Windows se aplica al software después de volver a encender el ordenador.

4. Haga clic en **Save**.
5. Vuelva a encender el ordenador.

Administración de las bibliotecas de compuestos

Importación de un paquete del software LibraryView

1. Expanda la lista **Compounds** en el panel Manage.
2. Haga clic en **All Compounds**.
3. Haga clic en el icono **Import**.
4. Haga clic en **LibraryView Package (*.lbp)** en el cuadro de diálogo Library Importer.
5. Navegue hasta el archivo adecuado en el cuadro de diálogo Open.
6. Seleccione un archivo y, a continuación, haga clic en **Open**.
7. Realice una de las siguientes acciones en el cuadro de diálogo Library Importer:
 - Haga clic en la opción **All** que verá encima de la columna **Compound** para importar todos los compuestos.
 - Haga clic en la fila correspondiente para importar los compuestos por separado.

Sugerencia: Para ayudar a localizar los compuestos, utilice el campo **Search**. A medida que se escriben los criterios de búsqueda, las columnas visibles se consultan y actualizan para mostrar solo la información que coincide con los criterios especificados.

8. Realice uno de los pasos siguientes para agregar los compuestos a una biblioteca:
 - Seleccione la biblioteca deseada en la lista **Add to Compound Library**.
 - Escriba el nombre de la biblioteca en el campo de lista **Add to Compound Library**.
9. Haga clic en **Next**.

Nota: Si el usuario cancela la importación antes de que todos los compuestos se hayan copiado a la base de datos, todos los compuestos que ya se hayan importado permanecen en la base de datos. El software no revierte la base de datos al estado previo a la importación.

10. Resuelva los conflictos si es necesario.
11. Haga clic en **Finish**.

Importación de una base de datos de compuestos

1. Expanda la lista **Compounds** en el panel Manage.

- Haga clic en **All Compounds**.
- Haga clic en el icono **Import**.
- Realice una de las siguientes acciones en el cuadro de diálogo Library Importer:
 - Haga clic en **DiscoveryQuant Compound Database (*.mdb)**.
 - Haga clic en **Analyst Compound Database (*.mdb)**.
- Navegue hasta el archivo adecuado en el cuadro de diálogo Open.
- Seleccione un archivo y, a continuación, haga clic en **Open**.
- Realice una de las siguientes acciones en el cuadro de diálogo Library Importer:
 - Haga clic en la opción **All** que verá encima de la columna **Compound** para importar todos los compuestos.
 - Haga clic en la fila correspondiente para importar los compuestos por separado.

Sugerencia: Para ayudar a localizar los compuestos, utilice el campo **Search**. A medida que se escriben los criterios de búsqueda, las columnas visibles se consultan y actualizan para mostrar solo la información que coincide con los criterios especificados.

- Realice uno de los pasos siguientes para agregar los compuestos a una biblioteca:
 - Seleccione la biblioteca deseada en la lista **Add to Compound Library**.
 - Escriba el nombre de la biblioteca en el campo de lista **Add to Compound Library**.
- Haga clic en **Next**.

Nota: Si el usuario cancela la importación antes de que todos los compuestos se hayan copiado a la base de datos, todos los compuestos que ya se hayan importado permanecen en la base de datos. El software no revierte la base de datos al estado previo a la importación.

- Resuelva los conflictos si es necesario.
- Haga clic en **Finish**.

Importación de un paquete del software Cliquid

- Expanda la lista **Compounds** en el panel Manage.
- Haga clic en **All Compounds**.
- Haga clic en el icono **Import**.
- Haga clic en **Cliquid Package (*.clq)** en el cuadro de diálogo Library Importer.
- Navegue hasta el archivo adecuado en el cuadro de diálogo Open.
- Seleccione un archivo y, a continuación, haga clic en **Open**.
- Realice una de las siguientes acciones en el cuadro de diálogo Library Importer:

Instrucciones de funcionamiento: configuración del software

- Haga clic en la opción **All** que verá encima de la columna **Compound** para importar todos los compuestos.
- Haga clic en la fila correspondiente para importar los compuestos por separado.

Sugerencia: Para ayudar a localizar los compuestos, utilice el campo **Search**. A medida que se escriben los criterios de búsqueda, las columnas visibles se consultan y actualizan para mostrar solo la información que coincide con los criterios especificados.

8. Realice uno de los pasos siguientes para agregar los compuestos a una biblioteca:
 - Seleccione la biblioteca deseada en la lista **Add to Compound Library**.
 - Escriba el nombre de la biblioteca en el campo de lista **Add to Compound Library**.
9. Haga clic en **Next**.
10. Escriba el nombre del espectrómetro de masas en el campo **Instrument Name**, si es necesario, en el cuadro de diálogo Instrument Name.
11. Haga clic en **OK**.

Nota: Si el usuario cancela la importación antes de que todos los compuestos se hayan copiado a la base de datos, todos los compuestos que ya se hayan importado permanecen en la base de datos. El software no revierte la base de datos al estado previo a la importación.

12. Resuelva los conflictos si es necesario.
13. Haga clic en **Finish**.

Importación de un archivo Excel

1. Expanda la lista **Compounds** en el panel Manage.
2. Haga clic en **All Compounds**.
3. Haga clic en el icono **Import**.
4. Haga clic en **Excel file (*.xls)** en el cuadro de diálogo Library Importer.
5. Navegue hasta el archivo adecuado en el cuadro de diálogo Open.
6. Seleccione un archivo y, a continuación, haga clic en **Open**.
7. Seleccione el valor adecuado para **Excel worksheet to import** en el cuadro de diálogo Library Importer.
8. Si la hoja de trabajo contiene encabezados de columna, marque la casilla junto a **Selected Excel Worksheet has headers**.
9. Escriba el nombre del espectrómetro de masas en el campo **Instrument Name**, si es necesario, en el cuadro de diálogo Instrument Name.
10. Seleccione el encabezado adecuado de cada columna de información.

Sugerencia: **Compound:CompoundId** y **Compound:Name** son selecciones obligatorias. Seleccione **---[not used]---** para la información que no sea necesaria.

11. Haga clic en **Next**.
12. Realice una de las siguientes acciones en el cuadro de diálogo Library Importer:
 - Haga clic en la opción **All** que verá encima de la columna **Compound** para importar todos los compuestos.
 - Haga clic en la fila correspondiente para importar los compuestos por separado.

Sugerencia: Para ayudar a localizar los compuestos, utilice el campo **Search**. A medida que se escriben los criterios de búsqueda, las columnas visibles se consultan y actualizan para mostrar solo la información que coincide con los criterios especificados.

13. Realice uno de los pasos siguientes para agregar los compuestos a una biblioteca:
 - Seleccione la biblioteca deseada en la lista **Add to Compound Library**.
 - Escriba el nombre de la biblioteca en el campo de lista **Add to Compound Library**.
14. Haga clic en **Next**.

Nota: Si el usuario cancela la importación antes de que todos los compuestos se hayan copiado a la base de datos, todos los compuestos que ya se hayan importado permanecen en la base de datos. El software no revierte la base de datos al estado previo a la importación.

15. Resuelva los conflictos si es necesario.
16. Haga clic en **Finish**.

Importación de una instantánea de la base de datos de la biblioteca

PRECAUCIÓN: Posible pérdida de datos. Antes de llevar a cabo este procedimiento, realice una copia de seguridad de la base de datos del software LibraryView. La información de este paquete sobrescribe los datos existentes en la base de datos del software LibraryView. La opción **Cancel** no está disponible después de que empiece la importación.

1. Expanda la lista **Compounds** en el panel Manage.
2. Haga clic en **All Compounds**.
3. Haga clic en el icono **Import**.
4. Haga clic en **Overwrite Database with Library Snapshot (*.lbp)** en el cuadro de diálogo Library Importer.
5. Haga clic en **Yes** en el cuadro de diálogo Warning.
6. Navegue hasta el archivo adecuado en el cuadro de diálogo Open.

7. Seleccione un archivo y, a continuación, haga clic en **Open**.
8. Haga clic en **Finish**.

Importación de un paquete de la biblioteca de un tercero

1. Expanda la lista **Compounds** en el panel Manage.
2. Haga clic en **All Compounds**.
3. Haga clic en el icono **Import**.
4. Haga clic en **Third Party Library Package (*.tulp)** en el cuadro de diálogo Library Importer.
5. Navegue hasta el archivo adecuado en el cuadro de diálogo Open.
6. Seleccione un archivo y, a continuación, haga clic en **Open**.
7. Realice una de las siguientes acciones en el cuadro de diálogo Library Importer:
 - Haga clic en la opción **All** que verá encima de la columna **Compound** para importar todos los compuestos.
 - Haga clic en la fila correspondiente para importar los compuestos por separado.

Sugerencia: Para ayudar a localizar los compuestos, utilice el campo **Search**. A medida que se escriben los criterios de búsqueda, las columnas visibles se consultan y actualizan para mostrar solo la información que coincide con los criterios especificados.

8. Realice uno de los pasos siguientes para agregar los compuestos a una biblioteca:
 - Seleccione la biblioteca deseada en la lista **Add to Compound Library**.
 - Escriba el nombre de la biblioteca en el campo de lista **Add to Compound Library**.
9. Haga clic en **Next**.

Nota: Si el usuario cancela la importación antes de que todos los compuestos se hayan copiado a la base de datos, todos los compuestos que ya se hayan importado permanecen en la base de datos. El software no revierte la base de datos al estado previo a la importación.

10. Resuelva los conflictos si es necesario.
11. Haga clic en **Finish**.

Instalación de un paquete de software LibraryView con licencia

Nota: Es necesario instalar el software LibraryView.

Instrucciones de funcionamiento: configuración del software

Nota: Se necesita una conexión a Internet para obtener la licencia del software LibraryView. Si un ordenador no tiene acceso a Internet, haga una copia del ID de equipo generado. En un ordenador con acceso a Internet, vaya a la sección de licencias del sitio web de SCIEX y siga las instrucciones para obtener la licencia.

Es posible instalar una biblioteca con licencia desde un DVD o un archivo de aplicación .zip descargado desde el sitio web de SCIEX. El archivo de aplicación puede incluir nombres de compuestos, información de transición de los compuestos y espectros de la biblioteca de compuestos.

1. Inicie sesión en el ordenador como usuario de Windows con privilegios de administrador.
2. Realice una de las siguientes acciones:
 - Si la biblioteca se va a instalar a partir de un DVD, cargue el DVD en la unidad correspondiente y continúe con el paso 5.
 - Si la biblioteca se va a instalar a partir de un archivo descargado, continúe con el paso 3.
3. Descargue el archivo .zip necesario desde el sitio web de SCIEX.

Sugerencia: Para evitar posibles problemas con la instalación, guarde el archivo en una ubicación distinta del ordenador de sobremesa.

4. Cuando la descarga se haya completado, haga clic con el botón derecho en el archivo descargado y seleccione **Extract All**.
5. Navegue hasta los archivos extraídos en el DVD y haga doble clic en **Library.exe**.

Sugerencia: Si se abre el cuadro de diálogo User Account Control, seleccione **Yes**.

Sugerencia: Si se abre el cuadro de diálogo LibraryView Setup (Not Responding), ciérrelo, haga clic con el botón derecho en el archivo **Library.exe** y seleccione la opción **Run as administrator** para iniciar la instalación de nuevo.

6. Haga clic en **Software Activation** en el cuadro de diálogo LibraryViewPackages Feature Unavailable.
Se abre el cuadro de diálogo LibraryViewPackages Activation.
7. Introduzca la clave de licencia exactamente como se muestra en el campo correspondiente.
Si no dispone de una clave de licencia, póngase en contacto con sciex.com/request-support.
8. Haga clic en **Generate Computer ID**.
Se crea un identificador único para la estación de trabajo.
9. Haga clic en **Copy ID to Clipboard**.
10. Siga las instrucciones para obtener una licencia.

Instrucciones de funcionamiento: configuración del software

Una vez enviada la información requerida, se enviará un archivo de licencia a todas las direcciones de correo electrónico proporcionadas.

11. Cierre la ventana del navegador.
12. Cuando reciba el correo electrónico que contiene el archivo de licencia, copie el archivo de licencia al escritorio de la estación de trabajo.
13. Haga clic en **Install License File** en el cuadro de diálogo LibraryViewPackages Activation.
14. Busque y seleccione el archivo de licencia en el cuadro de diálogo Select the new license file to be installed.
15. Haga clic en **Open**.
Los cuadros de diálogo Select the new license file to be installed y LibraryViewPackage Activation se cierran.
16. Realice una de las siguientes acciones:
 - Haga clic en **All** encima de la columna **Compound** en el cuadro de diálogo Library Importer para importar todos los compuestos.
 - Haga clic en la fila correspondiente del cuadro de diálogo Library Importer para importar los compuestos por separado.

Sugerencia: Para ayudar a localizar los compuestos, utilice el campo **Search**. A medida que se escriben los criterios de búsqueda, las columnas visibles se consultan y actualizan para mostrar solo la información que coincida con los criterios especificados.

17. Haga clic en **Next**.

Nota: Si el usuario cancela la importación antes de que todos los compuestos se hayan copiado a la base de datos, todos los compuestos que ya se hayan importado permanecen en la base de datos. El software no revierte la base de datos al estado previo a la importación.

18. Resuelva los conflictos si es necesario.
19. Haga clic en **Finish**.

Conflictos de compuestos

Al instalar una biblioteca que contenga un grupo de compuestos o al instalar compuestos individuales, el software busca en la base de datos compuestos con el mismo nombre o la misma fórmula que el compuesto del paquete. Si se encuentran compuestos, el software marca los compuestos correspondientes en el paquete y después espera a que el usuario realice una acción para continuar.

Los usuarios tienen la opción de:

- Fusionar la información del compuesto. Los nuevos tiempos de retención, transiciones y espectros del compuesto del paquete se añaden a la información sobre el compuesto almacenada en la base de datos.

- Sobrescribir la información del compuesto. La información sobre el compuesto del paquete sustituye a la información sobre el compuesto almacenada en la base de datos.
- Conservar la información del compuesto. La información sobre el compuesto en la base de datos se conserva y la información sobre el compuesto en el paquete se descarta.

La información del conflicto está disponible para ayudar al usuario a tomar la elección adecuada.

Visualización de conflictos de compuestos

1. Haga clic en **Resolve** junto al en el cuadro de diálogo Library Importer para ver información detallada sobre el conflicto.
2. Realice una de las siguientes acciones:
 - Haga clic en **Keep Original** para conservar la información del compuesto existente y desechar la nueva información.
 - Haga clic en **Use New** para sustituir la información del compuesto existente con la nueva información.
3. Repita los pasos 1 y 2 para cada compuesto.
4. Después de resolver todos los conflictos, haga clic en **Finish**.

Fusión de compuestos

1. En el cuadro de diálogo Library Importer, realice una de las siguientes acciones:
 - Haga clic en **Merge** para fusionar nuevos espectros, transiciones y tiempos de retención de compuestos individuales en el paquete de importación con la información del compuesto correspondiente guardado en la base de datos.
 - Haga clic en **Merge All** para fusionar nuevos espectros, transiciones y tiempos de retención de todos los compuestos en el paquete de importación con la información de los compuestos correspondientes guardados en la base de datos.
2. Después de resolver todos los conflictos, haga clic en **Finish**.

Sobrescritura de compuestos

1. Realice una de las siguientes acciones en el cuadro de diálogo Library Importer:
 - Haga clic en **Overwrite All** para sobrescribir todos los datos de compuestos almacenados en la base de datos con la información del compuesto correspondiente del paquete de importación.
 - Haga clic en **Resolve** al lado del compuesto apropiado y después haga clic en **Use New** para sobrescribir los datos de compuestos almacenados en la base de datos con la información del compuesto correspondiente del paquete de importación.
2. Haga clic en **Finish** después de resolver todos los conflictos.

Mantenimiento de los compuestos originales

1. Realice una de las siguientes acciones en el cuadro de diálogo Library Importer:

Instrucciones de funcionamiento: configuración del software

- Haga clic en **Keep All Original** para conservar toda la información del compuesto almacenada en la base de datos y desechar la información del compuesto del paquete de importación.
 - Haga clic en **Keep Original** junto al compuesto adecuado para conservar la información del compuesto individual almacenada en la base de datos y desechar la información del compuesto del paquete de importación.
2. Haga clic en **Finish** después de resolver todos los conflictos.

Adición de un compuesto

Nota: También se pueden añadir compuestos a una biblioteca mediante la opción **Edit Library**.

1. Expanda la lista **Compounds** en el panel Manage.
2. Haga clic en **All Compounds**.
3. Haga clic en el icono **Add**.

Nota: El nombre de compuesto es obligatorio. El resto de la información es opcional.

4. Escriba la información apropiada en los campos de la pestaña Details.
5. Haga clic en **Save**.

Adición de un espectro de masas a un compuesto

1. Expanda la lista **Compounds** en el panel Manage.
2. Haga clic en **All Compounds**.
3. Haga doble clic en el compuesto adecuado.
4. Haga clic en la pestaña **MS Spectra**.
5. Haga clic en el icono **Edit Mode**.
6. Haga clic en el icono **Add Spectra**.
7. Haga clic en **Open *.wiff file** en el cuadro de diálogo Add Mass Spectrum from *.wiff file to Compound.
8. Vaya hasta el archivo .wiff o .wiff2 adecuado en el cuadro de diálogo Open.
9. Haga clic en **Open**.
10. Realice uno de los pasos siguientes para agregar los compuestos a una biblioteca:
 - Para los datos IDA, despliegue la muestra y seleccione el compuesto adecuado en el panel de navegación de la izquierda.
 - Para EMS, MRM y datos en bucle, seleccione la muestra adecuada.
11. Realice uno de los pasos siguientes para añadir el espectro al compuesto:
 - Para datos IDA, seleccione **Add Spectrum** en el panel Acquired Spectrum.

- Para EMS, MRM y datos en bucle, haga doble clic en TIC y seleccione **Add Spectrum** en el panel Acquired Spectrum.
12. Repita los pasos 7 a 11 para cada espectro que desee añadir.
 13. Haga clic en **Save**.
 14. Haga clic en **Save** en la pestaña MS Spectra.

Instrucciones de funcionamiento: Flujos de trabajo de usuario

4

Analistas

Tarea	Consulte
Visualizar la pantalla completa y el panel de estado para verificar el estado del sistema.	Acerca de la página de inicio y Acerca del panel de estado .
Crear y enviar un lote utilizando una hoja de cálculo Microsoft Excel, LIMS o manualmente. Los desarrolladores de métodos deben bloquear los métodos de LC y MS antes de que los analistas creen y envíen los lotes.	Espacio de trabajo Batch .
Visualizar y gestionar las muestras en la cola.	Espacio de trabajo Queue .
Procesar y revisar los datos de las tablas de resultados.	Espacio de trabajo Analytics .
Explorar datos.	Espacio de trabajo Explorer .

Desarrolladores de método

Tarea	Consulte
Configurar el sistema.	<ul style="list-style-type: none">Instrucciones de funcionamiento: configuración del dispositivo.Defina los parámetros de procesamiento predeterminados para el proyecto.Personalizar la tabla de resultados.
Ajustar el espectrómetro de masas.	Espacio de trabajo MS Tune .
Configurar los dispositivos de cromatografía líquida (LC).	La documentación del dispositivo LC.
Crear métodos de LC.	Creación de un método de LC .
Crear métodos de espectrómetro de masas (MS).	Espacio de trabajo MS Method .

Tarea	Consulte
Desarrollar métodos de procesamiento.	Creación de un método de procesamiento.

Administradores

Tarea	Consulte
Configurar los permisos de archivo de Windows.	<i>Guía del director de laboratorio</i>
Configurar el LIMS.	Selección de los ajustes del sistema de gestión de la información del laboratorio (LIMS).
Añadir usuarios al software y asignar roles.	<i>Guía del director de laboratorio</i>
Archivar registros.	Archivado de registros.

Revisores

Tarea	Consulte
Revisar los resultados procesados.	Espacio de trabajo Analytics.
Explorar datos.	Espacio de trabajo Explorer.
Revisar registros.	Visualización de registros.

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

5

Utilice los espacios de trabajo siguientes para realizar tareas de adquisición:

- [Espacio de trabajo MS Method](#): Crear y gestionar métodos de MS
- [Espacio de trabajo LC Method](#): Crear y gestionar métodos de LC
- [Espacio de trabajo Batch](#): Crear lotes y enviarlos a la cola
- [Espacio de trabajo Queue](#): Gestionar tareas en la cola

Nota: Para evitar problemas de rendimiento o de integridad de los datos, no lleve a cabo procedimientos de mantenimiento en el ordenador, como desfragmentación, limpieza de disco, análisis de virus o actualizaciones de Windows durante la adquisición de muestras.

Espacio de trabajo MS Method

Utilice este espacio de trabajo para crear y gestionar los métodos de espectrómetro de masas (MS).

Se pueden abrir varios métodos en el espacio de trabajo MS Method. Mediante el menú **Views**, el usuario puede cambiar la disposición de las ventanas del método a las vistas con pestañas, en mosaico vertical, en mosaico horizontal o flotantes. En la vista flotante, las ventanas se pueden redimensionar, maximizar, minimizar, mover fuera de la ventana de SCIEX OS y mover a otro monitor.

La barra de título de la ventana de método contiene los nombres del método y el proyecto. En las vistas en mosaico y flotante, la barra de título del método activo es azul y las barras de título de los demás métodos son grises. En la vista con pestañas, la pestaña del método activo es blanca y las pestañas de los demás métodos son azules.

El acceso a las funciones de este espacio de trabajo está controlado por la función asignada al usuario. Consulte el documento *Guía del director de laboratorio*.

Creación de un método de MS

Consulte lo siguiente, según sea necesario

- [Experimentos de método de MS](#)
 - [Acerca de los Métodos de MS](#)
 - [Cálculo de la energía de colisión dinámica para los métodos de MS](#)
1. Abra el espacio de trabajo **MS Methods**.
 2. Haga clic en **New** y, a continuación, haga clic en un método.

3. (Opcional) Haga clic en **Options** y, a continuación, seleccione lo siguiente, según sea necesario:

Tabla 5-1: Menú Options

Parámetro	Descripción
Apply experiment scheduling	(Aplicar programación de experimento) Seleccione esta opción para aplicar la ventana de tiempo de retención cuando se vayan a ejecutar los experimentos. Para los experimentos en bucle, uno de los tiempos de ejecución de inicio debe ser 0 y uno de los tiempos de ejecución de parada debe ser igual al tiempo de duración del método.
Apply ionization scheduling	(Aplicar programación de ionización) Seleccione esta opción para mostrar el Ionization start time y Ionization stop time .
Show EAD parameters	(Mostrar parámetros de EAD) (sistemas ZenoTOF 7600) Seleccione esta opción para mostrar los parámetros de EAD. Los siguientes campos se habilitan cuando se utiliza el modo de fragmentación EAD y se selecciona esta opción: <ul style="list-style-type: none"> • Fragmentation mode: EAD • Electron KE • ETC • Electron beam current • Load time • EAD RF • Reaction time
Apply intact protein mode	(Aplicar modo de proteína intacta) (sistemas X500 QTOF) Seleccione esta opción para mostrar los campos del modo de proteína intacta.

Tabla 5-1: Menú Options (continuación)

Parámetro	Descripción
Ramp	<p>(Rampa) Seleccione esta opción para aplicar una rampa a los parámetros. Se abrirá el cuadro de diálogo Ramp Compound Parameters.</p> <p>Las rampas se pueden utilizar para optimizar el parámetro para los iones.</p> <p>La rampa de un parámetro consiste en ejecutar automáticamente un experimento mientras se aumenta o disminuye el valor de un parámetro. Solo se puede realizar la rampa de un parámetro cada vez y los incrementos deben ser en el mismo sentido: aumento o disminución entre los valores de inicio y parada. Los usuarios pueden establecer las tensiones de inicio y parada y el tamaño de los pasos intermedios.</p> <p>Para los métodos TOF MS, los usuarios pueden realizar una rampa del parámetro DP. Para los métodos TOF MSMS, los usuarios pueden realizar una rampa del parámetro DP o CE. Las rampas se pueden activar seleccionando Aplicar rampas al parámetro del compuesto.</p>
Calibrate	<p>(Calibrar) Seleccione esta opción para calibrar el espectrómetro de masas y el espectro. Se abrirá el cuadro de diálogo Calibrate. Este cuadro de diálogo permite al usuario seleccionar la tabla de referencia de iones adecuada para la calibración.</p> <p>La función de calibración se suele utilizar con el sistema de administración de calibrador (CDS). Para visualizar los resultados de calibración, los usuarios pueden ir al espacio de trabajo Queue y hacer doble clic en el icono de estado de adquisición del procedimiento de calibración. La calibración dura 1,25 minutos.</p>
Dynamic collision energy	(Energía de colisión dinámica) Haga clic para abrir el diálogo Dynamic Collision Energy.
Dynamic ETC	(Sistemas ZenoTOF 7600) (ETC Dinámico) Haga clic para abrir el cuadro de diálogo Dynamic ETC.

4. Escriba los valores en los campos, según sea necesario. Para obtener las descripciones de los parámetros, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
5. (Opcional) Haga clic en **Add Experiment**.

Sugerencia: Utilice la lista junto al campo **Experiment** para cambiar o borrar el experimento.

6. Realice una de las siguientes acciones:
 - Haga clic en **Save > Lock Method** para guardar y bloquear el método de MS.

- Haga clic en **Save > Save**.
- Haga clic en **Save > Save as**.

Creación de un método MRM HR mediante MRM HR guiada

Utilice la opción **Guided** si se requiere un control superior de las tensiones de inicio y parada.

1. Abra el espacio de trabajo MS Method.
2. Haga clic en **New > Guided MRM HR**.
Se abre la página Preparation.
3. Seleccione el modo:
 - **Guided**: para tener más control sobre las tensiones de inicio y parada.
 - **Automatic**: para que el software seleccione automáticamente los valores de tensión de inicio y parada.
4. Seleccione un ajuste de **Polarity**.
5. Para utilizar las transiciones conocidas, haga lo siguiente:
 - a. Haga clic en **Use known transitions**.
 - b. Escriba los valores de **Compound ID**, **Precursor Ion (Da)** y **Fragment to Use (Da)**.
6. Para utilizar transiciones desconocidas, haga lo siguiente:
 - a. Haga clic en **Find transitions automatically**.
 - b. Especifique los valores de **Compound Name**, **Charge**, **Precursor Ion** y **Number of Fragments to Use** que se indican en la tabla para cada compuesto.
7. Haga clic en **Continue**.
Se abre la página Initial Conditions.
8. Si es necesario, ajuste los valores de **Source and Gas Parameters**.
9. Si el proceso no ocurre automáticamente, haga clic en **Start**.
10. En la página Optimize DP, haga clic en **Ramp**.
El software aumenta automáticamente el parámetro DP y busca el valor de DP más intenso para cada transición.
11. (Modo automático) Espere hasta que se identifiquen los valores de DP óptimo y CE óptimo para cada uno de los iones producto y se muestre la página Review Report.
Luego, vaya al paso [13](#).
12. En la página Optimize DP, haga clic en **Ramp**.
El software aumenta automáticamente el parámetro DP y busca el valor de DP más intenso para cada transición.
13. (Opcional) Guarde el informe siguiendo estos pasos:
 - a. En la página Report, haga clic en **Save report as**.

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

- b. Vaya a la carpeta donde se vaya a guardar el informe, escriba un nombre de archivo en **File name** y haga clic en **Save**.
14. Haga clic en **Continue** para abrir el método optimizado en el espacio de trabajo MS Method.
15. Escriba la duración necesaria del método en el campo **Method Duration**.
16. Realice una de las siguientes acciones para guardar el método de MS:
- Haga clic en **Save > Save** para guardar el método en el mismo proyecto con el mismo nombre.
 - Haga clic en **Save > Save As** para guardar el método con otro nombre o en otro proyecto.
 - Haga clic en **Save > Lock Method** para bloquear el método si está listo para un análisis rutinario.

Nota: Bloquee el método para evitar que los usuarios lo editen sin autorización. Solo los usuarios con permiso **Lock/Unlock methods** pueden editar los métodos bloqueados. Los demás usuarios solo pueden enviarlos.

Se abre el cuadro de diálogo Save As MS Method.

17. Escriba un nombre en el campo **File Name**.
18. Haga clic en **Save**.

Experimentos de método de MS

Utilice el espacio de trabajo MS Method para crear o editar métodos de MS. Un método de MS puede contener uno o más experimentos. Por defecto, un método TOF MS contiene un experimento.

Los tipos de experimentos de MS disponibles son los siguientes:

- Tres experimentos de métodos de básicos: TOF MS, TOF MSMS y Q1
- Tres experimentos de métodos combinados: IDA, SWATH y MRM^{HR}

Además, hay disponible un procedimiento paso a paso como guía durante la creación de un experimento MRM^{HR}. Una vez que el procedimiento ha finalizado, los parámetros se usan para completar el método de MRM^{HR}.

Tabla 5-2: Experimentos de método básico

Tipo	Definición
TOF MS	Análisis de masas utilizando la zona de TOF. Los valores <i>m/z</i> de los iones se retienen en función de su tiempo de vuelo en la zona de TOF.
TOF MSMS	Se selecciona el ion precursor utilizando el filtro de masa de cuadrupolo. El valor <i>m/z</i> de los iones de fragmentación se devuelven en función de su tiempo de vuelo en las zonas de TOF. Este experimento se utiliza para determinar la estructura de los compuestos.

Tabla 5-2: Experimentos de método básico (continuación)

Tipo	Definición
Q1	Una adquisición de datos utilizando el filtro de masa de cuadrupolo. Se determina la intensidad de los iones para las masas en el rango de análisis.

Tabla 5-3: Experimentos de método combinado

Tipo	Definición
IDA	Un experimento IDA (adquisición dependiente de información) analiza datos a medida que se adquieren y cambia las condiciones del experimento según los resultados del análisis. El análisis de los resultados determina las masas en las que realizar los análisis dependientes. El usuario tiene control total sobre los criterios que activa un experimento IDA y los parámetros del experimento IDA que se activan.
SWATH	La adquisición SWATH permite el análisis de MS/MS de todos los iones precursores en un amplio rango de masa en una escala de tiempo de LC. El cuadrupolo Q1 se establece para una anchura de ventana de selección más amplia (normalmente de 10 Da a 50 Da) que la utilizada para las adquisiciones de ion producto convencionales. Al pasar por varias ventanas de selección secuenciales, se cubre rápidamente un amplio rango de masa. Los espectros de masa resultantes son un compuesto de los fragmentos de todos los iones precursores que han pasado por la ventana de selección Q1 respectiva. Esta técnica permite el análisis de MS/MS no dirigido de todas las especies de la muestra.
MRM HR	El experimento de MRM ^{HR} ayuda a adquirir datos de MS/MS de alta calidad de compuestos con masas conocidas y tiempos de retención. Esta adquisición también se puede utilizar para extraer masas de fragmentación con anchuras reducidas (0,02 Da) de espectros de TOF MSMS. La extracción estrecha proporciona una selectividad mucho mejor.
MRM HR guiado	Un procedimiento paso a paso para guiar en la creación de un método de MRM ^{HR} . Una vez que los pasos del procedimiento han finalizado, los parámetros se usan para completar el tipo de método de MRM ^{HR} .

Acerca de los Métodos de MS

Un método de MS consta de los elementos siguientes:

- Parámetros que pertenecen a todo el método, incluidos los parámetros **Source and Gas**.
- Uno o más experimentos.
 - Cada método debe contener al menos un experimento

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

- Cualquier método puede contener más de un experimento. Esto se conoce como experimentos en bucle.
- Los experimentos TOF MS y TOF MSMS pueden ejecutarse en bucle dentro de un método, hasta un máximo de 10 experimentos. Los experimentos Q1 no pueden ejecutarse en bucle.
- Los experimentos IDA, SWATH, MRM^{HR} pueden ejecutarse en bucle dentro de un experimento, hasta un máximo de 2 experimentos.

Nota: Solo se pueden utilizar combinaciones específicas de experimentos como, por ejemplo, IDA + IDA, IDA + MRM^{HR}, IDA + SWATH, y SWATH + MRM^{HR}.

- Cada experimento tiene una configuración avanzada específica.
- Análisis individuales dentro de cada experimento

Tabla 5-4: Funciones de espacio de trabajo MS Methods

Para hacer esto	Haga esto
Cree un método con más de un experimento, es decir, experimentos en bucle.	Haga clic en Add Experiment y, a continuación, haga clic en un tipo de experimento.
Cambie de experimento dentro de un método de MS existente.	Haga clic en la lista junto a Experiment y, a continuación, haga clic en un tipo de experimento.
Conversión de un experimento TOF MSMS en un experimento IDA.	Haga clic en la lista junto a Experiment y, a continuación, haga clic en Add IDA criteria .
En un experimento MRM ^{HR} , elimine el TOF MS del método.	Haga clic en la lista junto a Experiment y, a continuación, haga clic en Delete TOF MS (of MRM HR) . <hr/> Nota: Solo se aplica a los experimentos en bucle. <hr/>
Borre un experimento cuando haya varios experimentos en un método.	Haga clic en la lista junto a Experiment y, a continuación, haga clic en Delete experiment .

Tabla 5-4: Funciones de espacio de trabajo MS Methods (continuación)

Para hacer esto	Haga esto
Para ver las siguientes estructuras de métodos: <ul style="list-style-type: none"> • El número de experimentos en un método. • La duración programada de cada experimento en el método. • El número de análisis TOF MSMS para varios experimentos. 	Expanda o contraiga el panel Method Overview a la izquierda del espacio de trabajo.

Cálculo de la energía de colisión dinámica para los métodos de MS

1. Abra el espacio de trabajo MS Method.
2. Cree o abra un método de MS que contenga criterios IDA o criterios de adquisición SWATH.
3. Haga clic en **Options > Dynamic collision energy**.
4. Modifique la información de los campos, según sea necesario.
5. Realice una de las siguientes acciones:
 - Para usar valores predeterminados previamente guardados para calcular la energía de colisión dinámica, haga clic en **Load Default Settings**.
 - Para guardar los valores actuales como valores predeterminados que se usarán para calcular la energía de colisión dinámica, haga clic en **Save as Default Settings**.
 - Para aplicar los valores actuales al método actual para calcular la energía de colisión dinámica, haga clic en **Apply**.
 - Para cerrar el cuadro de diálogo y cancelar los cambios, haga clic en **Cancel**.

Apertura de un método de MS

Utilice este procedimiento para abrir un método de MS creado con SCIEX OS.

1. Abra el espacio de trabajo MS Method.
2. Haga clic en **Open**.
Se abre el cuadro de diálogo Open MS Method. Contiene la lista de métodos de MS del proyecto actual.
3. (Opcional) Si el método que se va a abrir no está en el proyecto actual, seleccione el proyecto que contiene el método que se debe abrir.

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

4. Seleccione el método de MS que desee abrir y, a continuación, haga clic en **Open**.

Sugerencia: Para seleccionar varios métodos, use la tecla **Shift** o **Ctrl**.

Ejecución de un método de MS manualmente

Procedimientos de condiciones previas

- En el espacio de trabajo MS Method, cree un método de MS o abra un método existente. Consulte la sección [Espacio de trabajo MS Method](#) o [Apertura de un método de MS](#).

Utilice este procedimiento para ejecutar el método activo en el espacio de trabajo MS Method.

1. Haga clic en la flecha hacia abajo en el botón **Start** del panel Data Acquisition y, a continuación, haga clic en una de las siguientes opciones:
 - **Start:** Esta opción ejecuta el método de MS sin una LC.
 - **Start with LC**

Consulte la sección: [Panel Data Acquisition](#).

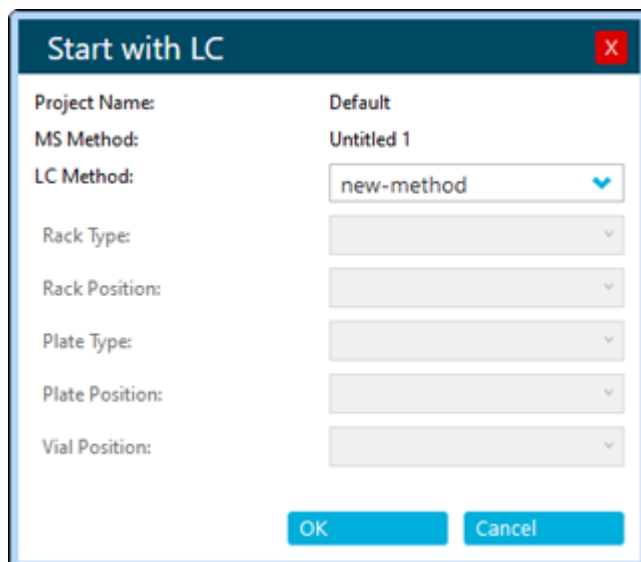


¡ADVERTENCIA! Peligro de incendio. No dirija más de 3 ml/min de disolvente a la fuente de iones. Aunque los componentes de LC pueden proporcionar un caudal de hasta 5 ml/min, si se dirigen más de 3 ml/min de disolvente, puede provocarse una acumulación en la fuente de iones. El flujo puede dividirse en forma de T para garantizar que el caudal máximo proporcionado a la fuente de iones no supere los 3 ml/min.

Si el usuario hace clic en **Start with LC**, entonces se abrirá el cuadro de diálogo Start with LC. Para obtener información sobre los campos de este cuadro de diálogo, consulte el documento *Sistema de ayuda*.

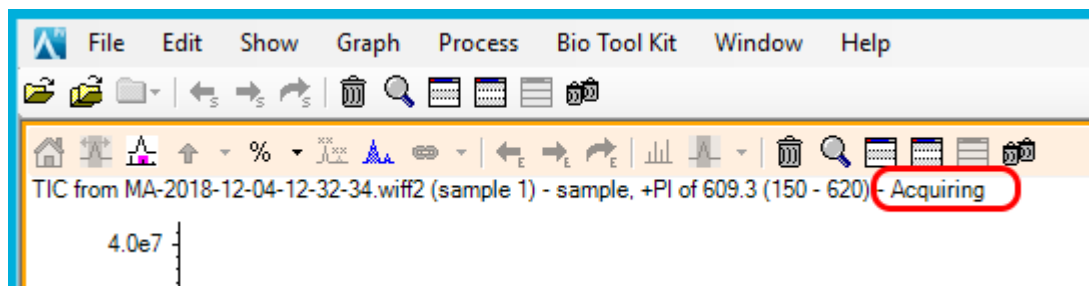
Nota: El sistema de LC ha de estar activado y el método de LC se ha de haber creado y guardado.

Figura 5-1: Cuadro de diálogo Start with LC



2. (Opcional) Para ver los datos en el espacio de trabajo Explorer, haga clic en **Open data exploration to view real-time data** (🔍) en el panel Data Acquisition. La adquisición en tiempo real se indica en el panel Explore con las palabras **Acquiring**, **Finished** o **Aborted** en el título de la muestra.

Figura 5-2: Adquisición en tiempo real: adquisición



3. (Opcional) Optimice los parámetros de MS, según sea necesario. Para obtener una descripción de los parámetros, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
4. Haga clic en **Stop** del panel Data Acquisition.
5. (Opcional) Para guardar los datos, siga estos pasos:
 - a. Haga clic en **Save** para guardar los datos. Se abre el cuadro de diálogo Save Data.
 - b. (Opcional) Seleccione el proyecto y la subcarpeta, si procede, en la que desee guardar los datos.
 - c. Escriba un nombre en el campo **File Name**.
 - d. Haga clic en **Save**.
6. Realice una de las siguientes acciones para guardar el método de MS:

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

- Haga clic en **Save** > **Save** para guardar el método en el mismo proyecto con el mismo nombre.
- Haga clic en **Save** > **Save As** para guardar el método con otro nombre o en otro proyecto.
- Haga clic en **Save** > **Lock Method** para bloquear el método si está listo para un análisis rutinario.

Nota: Bloquee el método para evitar que los usuarios lo editen sin autorización. Solo los usuarios con permiso **Lock/Unlock methods** pueden editar los métodos bloqueados. Los demás usuarios solo pueden enviarlos.

Se abre el cuadro de diálogo Save As MS Method.

7. Escriba un nombre en el campo **File Name**.
8. Haga clic en **Save**.

Espacio de trabajo LC Method

Use este espacio de trabajo para crear y gestionar métodos de LC.

Se pueden abrir varios métodos en el espacio de trabajo LC Method. Mediante el menú **Views**, el usuario puede cambiar la disposición de las ventanas del método a las vistas con pestañas, en mosaico vertical, en mosaico horizontal o flotantes. En la vista flotante, las ventanas se pueden redimensionar, maximizar, minimizar, mover fuera de la ventana de SCIEX OS y mover a otro monitor.

La barra de título de la ventana de método contiene los nombres del método y el proyecto. En las vistas en mosaico y flotante, la barra de título del método activo es azul y las barras de título de los demás métodos son grises. En la vista con pestañas, la pestaña del método activo es blanca y las pestañas de los demás métodos son azules.

El acceso a las funciones de este espacio de trabajo está controlado por la función asignada al usuario. Consulte el documento *Guía del director de laboratorio*.

Creación de un método de LC

Consulte la documentación que acompaña al dispositivo de LC.

1. Abra el área de trabajo LC Method.
2. Haga clic en **New**.
3. Haga clic en un dispositivo en el panel izquierdo y edite los campos según sea necesario.
4. Guarde y, opcionalmente, bloquee en método de LC haciendo clic en uno de los siguientes comandos:
 - **Save**: para guardar el método de LC.
 - **Save** > **Lock Method**: para guardar y bloquear el método de LC.

Se abre el diálogo Save As LC Method.

5. En el campo **File Name**, escriba un nombre para el método de LC y, a continuación, haga clic en **Save**.


Espacio de trabajo Batch

El espacio de trabajo Batch contiene información sobre un conjunto de muestras que se deben adquirir y, opcionalmente, procesar. Los lotes le indican al software el orden en el que desea adquirir y procesar las muestras.

El acceso a las funciones de este espacio de trabajo está controlado por la función asignada al usuario. Consulte el documento *Guía del director de laboratorio*.

Nota: Para el procesador de muestras automático, el tipo de gradilla, la posición de gradilla, el tipo de placa, la posición de placa y la posición del vial dependen entre sí y solo se admiten ciertos valores.

Tabla 5-5: Columnas del espacio de trabajo Batch

Nombre de la columna	Definición	Requisitos del valor de campo
Sample and method information (Información sobre muestras y métodos) 		
Sample Name	(Nombre de la muestra) Nombre de la muestra.	Menos de 252 caracteres.
Sample ID	(ID de la muestra) Un número personalizado u otro identificador para la muestra.	Menos de 252 caracteres. El campo Sample ID no puede contener ninguno de los siguientes caracteres: \ / : ; * ? " < > =
Barcode ID	(ID del código de barras) ID único de una muestra.	Menos de 250 caracteres.
MS Method	(Método de MS) Nombre del método.	El método de MS debe existir en el proyecto actual. El campo no distingue entre mayúsculas y minúsculas.
LC Method	(Método de LC) Nombre del método de cromatografía líquida.	El método de LC debe existir en el proyecto actual. El campo no distingue entre mayúsculas y minúsculas.
Rack Type	(Tipo de gradilla) El tipo de gradilla para el procesador de muestras automático.	Debe ser una de las opciones válidas para el procesador de muestras automático especificado en el método de LC.

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

Tabla 5-5: Columnas del espacio de trabajo Batch (continuación)

Nombre de la columna	Definición	Requisitos del valor de campo
Rack Position	(Posición de la gradilla) La posición de la gradilla en la bandeja.	Valor numérico.
Plate Type	(Tipo de placa) El tipo de placa de pocillos en el procesador de muestras automático. <hr/> Nota: Esta columna no está disponible si el Rack Type describe viales. <hr/>	Debe ser una de las opciones válidas para el procesador de muestras automático especificado en el método de LC.
Plate Position	(Posición de la placa) La posición de la placa en la gradilla.	Debe concordar con una de las posiciones de placa predefinidas del procesador de muestras automático.
Vial Position	(Posición del vial) (Métodos de LC) La posición del vial en una gradilla o una placa.	Valor numérico. El valor más alto no debe ser mayor que el número de viales que hay en la gradilla.

Tabla 5-5: Columnas del espacio de trabajo Batch (continuación)

Nombre de la columna	Definición	Requisitos del valor de campo
Injection Volume (µL)	<p>(Volumen de inyección (µL)) La cantidad de muestra que se debe inyectar.</p> <hr/> <p>Nota:</p> <p>Solo en el caso de métodos de LC, el volumen de inyección se toma del método de LC. El usuario puede anular ese volumen de inyección en el espacio de trabajo Batch o en el archivo de lote importado. Cuando se envía el lote, el volumen de inyección se valida en función del rango que admite el dispositivo de LC.</p> <p>Para restaurar el volumen de inyección especificado en el método de LC, borre el contenido de este campo y vuelva a seleccionar el método de LC en el campo LC Method.</p> <hr/>	Valor numérico.
Sample Type	(Tipo de muestra) El tipo de muestra.	Asegúrese de que el tipo de muestra concuerda con uno de los tipos de muestras predefinidos. Cualquier tipo que no concuerde se reemplazará automáticamente por el tipo Unknown.
Dilution Factor	(Factor de dilución) El factor de dilución para muestras individuales.	<p>Para métodos desarrollados por SCIEX, el valor debe ser 1,000000.</p> <p>Debe ser un valor superior a cero con seis decimales. El valor predeterminado es 1,000000. No deje el campo en blanco.</p>

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

Tabla 5-5: Columnas del espacio de trabajo Batch (continuación)

Nombre de la columna	Definición	Requisitos del valor de campo
Data File	(Archivo de datos) El nombre del archivo en el que se guardan los datos adquiridos. Incluya la ruta completa de acceso a la subcarpeta en la que se guardará el archivo.	<p>Ha de tener menos de 252 caracteres. El número total de caracteres incluye el número de caracteres de la ruta de acceso de la subcarpeta de datos. El archivo de datos no puede contener ninguno de los siguientes caracteres: \ / : ; * ? " < > =</p> <hr/> <p>Sugerencia: Haga clic en la flecha para seleccionar una subcarpeta de la lista o escriba el nombre de una subcarpeta nueva. Asegúrese de incluir una barra invertida (\) entre la subcarpeta y el nombre del archivo. Si la subcarpeta no existe, se creará cuando se ejecute el lote.</p>
Processing Method	<p>(Método de procesamiento) Nombre del método. Si se va a utilizar un Results File existente, deje este campo en blanco. Cuando se selecciona un Results File existente, el valor <i>*Embedded Method*</i> se muestra automáticamente en este campo.</p> <hr/> <p>Nota: El método de procesamiento debe ser compatible con el método de MS especificado para la muestra.</p>	<p>Seleccione un método de procesamiento de la lista de métodos de procesamiento del proyecto.</p>

Tabla 5-5: Columnas del espacio de trabajo Batch (continuación)


Nombre de la columna	Definición	Requisitos del valor de campo
Results File	<p>(Archivo de resultados) El nombre del archivo en el que se graban los resultados procesados. Si se especifica un Results File válido, los datos de la muestra se procesarán automáticamente después de que haya finalizado la adquisición. Si el nombre del archivo no es válido, el proceso de envío del lote no se puede completar.</p> <hr/> <p>Nota: Si se selecciona un Results File existente, el método integrado del archivo de resultados seleccionado se utiliza para el procesamiento, y el texto de la celda Processing Method se sustituye por <i>*Embedded Method*</i>.</p>	<p>El archivo de datos no puede contener ninguno de los siguientes caracteres: \ / ; : * ? " < > =</p> <p>La ruta del archivo, incluidos el nombre del archivo y las subcarpetas, debe ser inferior a 252 caracteres.</p> <hr/> <p>Sugerencia: Haga clic en la flecha para seleccionar un archivo de resultados existente de la lista. Escriba el nombre del archivo para crearlo. El archivo se creará cuando se procese la primera muestra del lote enviado.</p>
Comment	(Comentario) Texto	Ha de ser menor de 50 caracteres. El campo Comment no puede contener ninguno de los siguientes caracteres: \ / ; : * ? " < > =
Custom columns	(Columnas personalizadas) (Opcional) Columnas definidas por el usuario, en formato de texto, número entero o real.	Los requisitos dependen del formato.
Component Concentrations (Concentraciones de componentes) ()		

Tabla 5-5: Columnas del espacio de trabajo Batch (continuación)

Nombre de la columna	Definición	Requisitos del valor de campo
Component	<p>(Nombre de componente) El nombre de un componente definido en el método de MS, el método de procesamiento o la tabla de resultados.</p> <p>El lote puede contener hasta 4000 filas de componentes.</p>	<p>Los nombres de los componentes se obtienen del método de MS, para los análisis de MRM, el método de procesamiento o la tabla de resultados. El nombre se valida durante la creación del método.</p> <p>También se pueden añadir componentes a la tabla manualmente. Consulte la sección Adición de una concentración de componentes.</p> <hr/> <p>Nota: Si el archivo de importación contiene una columna de datos que no coincida con ninguna de las columnas en la cuadrícula del lote, la columna se considera una columna de nombre de Compuesto o Componente. Se añade una columna de concentración y se rellena con los valores de esta columna de datos.</p>
Component concentration	<p>Concentración del analito o patrón interno para los tipos de muestra estándar y de control de calidad. La tabla contiene una columna para cada muestra. El nombre de la muestra se utiliza como nombre de la columna.</p>	<p>Un valor numérico mayor o igual que cero.</p>

Administración del lote

Nota: Seleccione el nombre de proyecto correcto en el panel de estado.

En el espacio de trabajo Batch, utilice las siguientes funciones para gestionar el lote.

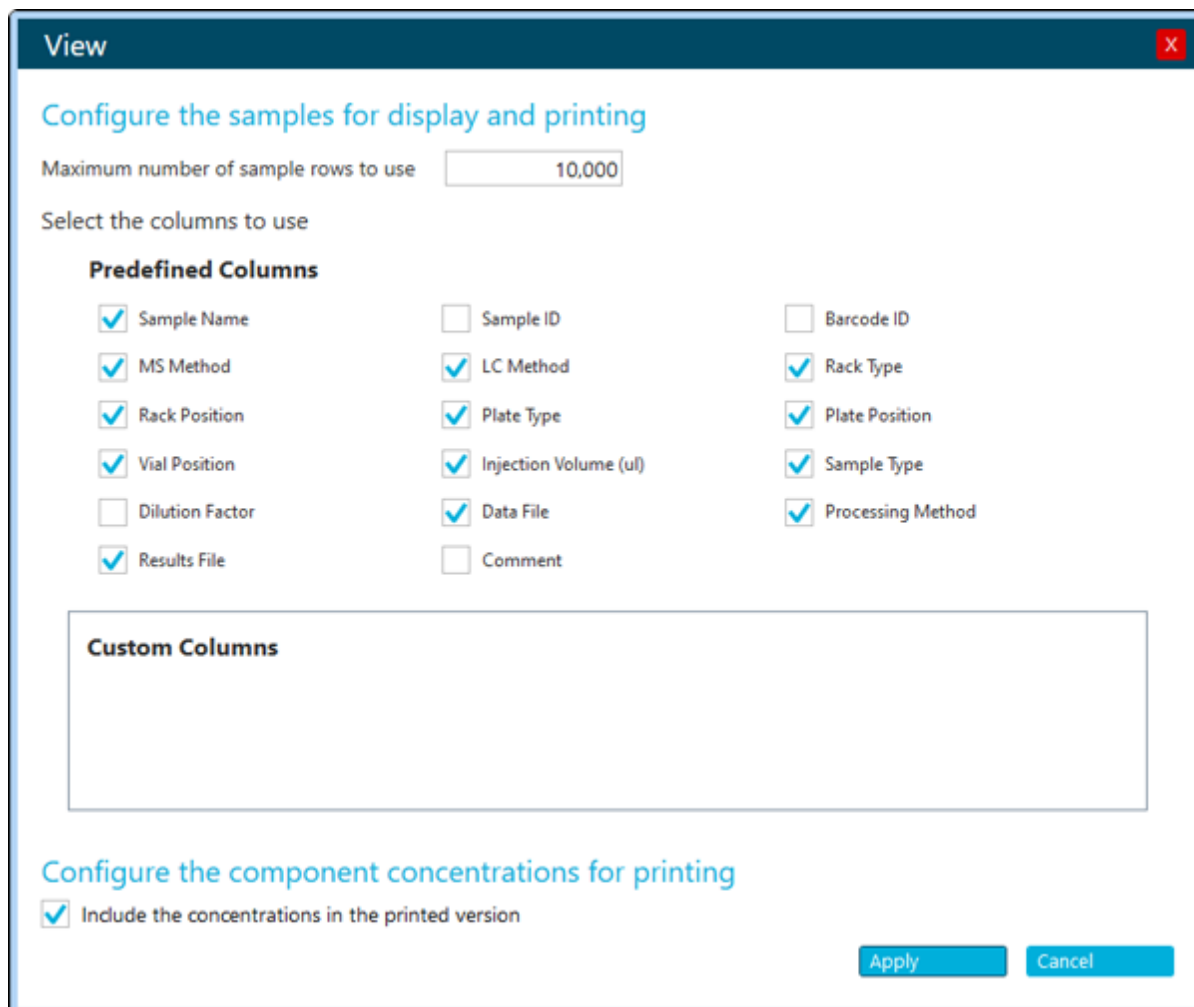
Tabla 5-6: Funciones del espacio de trabajo Batch

Para hacer esto	Haga esto
Mostrar u ocultar columnas	Haga clic en View . Consulte la sección Mostrar u ocultar columnas .
Cortar filas	Haga clic en Manage Samples > Cut .
Copiar filas	Haga clic en Manage Samples > Copy .
Pegar filas	Haga clic en Manage Samples > Paste .
Insertar una fila	Haga clic en Manage Samples > Insert sample .
Eliminar filas	Haga clic en Manage Samples > Delete sample .
Seleccionar columnas	Haga clic en View . Consulte la sección Mostrar u ocultar columnas .
Añadir subcarpetas a un proyecto	Haga clic en Manage Samples > Add data sub-folders . Consulte el documento <i>Sistema de ayuda</i> .
Imprimir el lote	Haga clic en Print .
Guardar el lote en el proyecto actual	Haga clic en Save > Save o en Save > Save As .
Exportar el lote como archivo txt o csv	Haga clic en Save > Export .

Mostrar u ocultar columnas

1. Abra el espacio de trabajo Batch.
2. Haga clic en **View**.
3. Active o desactive las casillas de la columna, según sea necesario, en el cuadro de diálogo View. Para obtener descripciones de las columnas, consulte la tabla: [Tabla 5-5](#).

Figura 5-3: Cuadro de diálogo View



4. Haga clic en **OK**.

Añadir una columna personalizada

Utilice este procedimiento para añadir columnas al lote para almacenar información adicional sobre la muestra, como el peso seco, para que se pueda utilizar en el procesamiento (por ejemplo, en fórmulas y columnas calculadas).

1. Abra el espacio de trabajo Batch.
2. Haga clic con el botón derecho del ratón en la cuadrícula de lotes y, a continuación, haga clic en **Add Custom Column**.
Se abre el cuadro de diálogo Add Custom Column.
3. En el campo **Column name**, escriba un nombre para la columna.
El nombre debe ser único. No puede coincidir con el nombre de ninguna columna predefinida.
4. En el campo **Column type**, seleccione uno de estos tipos:

- **Integer:** La columna contiene números enteros. Los valores decimales se redondearán al número entero más cercano.
 - **Real:** La columna contiene números reales, con hasta seis decimales.
 - **Text:** La columna contiene texto de hasta 128 caracteres.
5. Haga clic en **Add**.
La nueva columna se añade a la derecha del espacio de trabajo Batch.

Cambiar el nombre de una columna personalizada

Nota: El valor de **Column type** no se puede modificar.

1. Abra el espacio de trabajo Batch.
2. Haga clic con el botón derecho del ratón en la columna que desee cambiar y, a continuación, haga clic en **Edit Custom Column**.
Se abre el cuadro de diálogo Edit Custom Column.
3. En el campo **Name**, escriba el nombre nuevo para la columna.
El nombre debe ser único. No puede coincidir con el nombre de ninguna columna predefinida.
4. Haga clic en **Apply**.

Eliminar columnas personalizadas

1. Abra el espacio de trabajo Batch.
2. Haga clic con el botón derecho del ratón en la cuadrícula de lotes y, a continuación, haga clic en **Delete Custom Column**.
Se abre el cuadro de diálogo Delete Custom Column.
3. Seleccione la casilla de verificación situada junto a los nombres de las columnas que desee eliminar.
4. Haga clic en **Delete**.

Importación de un lote de un archivo

Procedimientos de condiciones previas

- Creación de un archivo de lote. Para obtener una descripción de los campos que se van a incluir en el archivo, consulte la [Tabla 5-5](#).

Nota: En el archivo de Microsoft Excel que se va a importar, las columnas predefinidas deben ser las primeras, seguidas de las columnas personalizadas. Los encabezados de las columnas predefinidas deben coincidir con los nombres de columna de SCIEX OS. Si los encabezados de las columnas predefinidas no son correctos, la información no se importará. Solo se puede utilizar la coma como separador de decimales en los archivos csv o xsl importados.

Nota: Cierre el archivo de lote antes de importarlo. No se puede importar el archivo de lote si está abierto en Microsoft Excel.

- (Opcional para la importación desde Watson LIMS) Para rellenar automáticamente el campo **LC Method**, asegúrese de que el nombre del método de LC coincida con el nombre del método de MS.

Nota: Watson LIMS no dispone de un campo de método de LC. Si el nombre del método de LC no coincide con el nombre del método de MS, la columna del método de LC se debe rellenar manualmente.

Revise los contenidos del lote antes de enviar las muestras.

Sugerencia: Haga clic en **Manage Samples** para acceder a las funciones para cortar, copiar, pegar, agregar filas y eliminar filas.

1. Abra el espacio de trabajo Batch.
2. (Opcional) Haga clic en **View** para seleccionar las columnas que aparecerán en el espacio de trabajo Batch.
3. Haga clic en **Open > Import from file**.
Se abre el cuadro de diálogo Batch Import.
4. Haga clic en **Browse**.
5. Vaya al archivo que necesite.
6. Haga clic en **Open**.
7. (Opcional) Active o desactive la casilla **Append to current batch**, según sea necesario.

Nota: Se sobrescribirá cualquier dato existente en la cuadrícula si el usuario no selecciona la opción **Append to current batch**.

8. Haga clic en **Import**.

9. (Opcional) Para usar la disposición física de la placa como referencia y seleccionar o confirmar la ubicación de una muestra, haga clic en **Plate Layout**.
La disposición física de la placa proporciona automáticamente las posiciones del pocillo y del vial para las muestras sin asignar.
10. Asegúrese de que se alcance la temperatura del horno de columna antes de enviar el lote.
11. Guarde el lote:
 - a. Haga clic en **Save As**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Save As Batch.
 - b. Escriba un nombre de archivo en **File Name** y haga clic en **Save**.
12. Envíe el lote. Consulte la sección [Envío de un lote](#).

Importación de un lote desde un LIMS

Procedimientos de condiciones previas
<ul style="list-style-type: none">• Configurar el LIMS en el espacio de trabajo Configuration. Consulte el documento <i>Sistema de ayuda</i>.

Nota: Para importar un lote de Watson LIMS, consulte la sección [Importación de un lote de un archivo](#).

1. Abra el espacio de trabajo Batch.
2. (Opcional) Haga clic en **View** para seleccionar las columnas que aparecerán en el espacio de trabajo Batch.
3. Haga clic en **Open > Import from LIMS**.
Se abre el cuadro de diálogo Import a Batch File.
4. Escriba la ubicación o el nombre del archivo.
5. Escriba el identificador de lote en el campo **Batch Identifier**.
6. (Opcional) Active o desactive la casilla **Append to current batch**, según sea necesario.

Nota: Se sobrescribirá cualquier dato existente en la cuadrícula si el usuario no selecciona la opción **Append to current batch**.

7. Haga clic en **Import**.
8. (Opcional) Para usar la disposición física de la placa como referencia y seleccionar o confirmar la ubicación de una muestra, haga clic en **Plate Layout**.
La disposición física de la placa proporciona automáticamente las posiciones del pocillo y del vial para las muestras sin asignar.
9. (Opcional) Para incluir muestras de calibración en el lote, haga lo siguiente:
 - a. Para abrir el cuadro de diálogo Batch-Automatic Calibration Editor, haga clic en **Auto-Calibrate**.

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

- b. Seleccione la referencia de iones y los ajustes de administración de calibrador que se aplicarán automáticamente en la frecuencia especificada.
 - c. Haga clic en **OK**.
 - d. Active la casilla de la izquierda del botón **Auto-Calibrate**.
10. Asegúrese de que se alcance la temperatura del horno de columna antes de enviar el lote.
11. Guarde el lote:
 - a. Haga clic en **Save As**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Save As Batch.
 - b. Escriba un nombre de archivo en **File Name** y haga clic en **Save**.
12. Envíe el lote. Consulte la sección [Envío de un lote](#).

Creación de un lote manualmente

Revise los contenidos del lote antes de enviar las muestras.

Nota: Si el espectrómetro de masas utiliza el cierre de contacto para comunicarse con un dispositivo externo, siga las directrices siguientes:

- Compruebe que la secuencia de muestra definida en el lote coincida con la del dispositivo externo.
- Compruebe que la duración del método es inferior o igual al intervalo entre inyecciones, tal y como se define en el dispositivo externo.

Sugerencia: Haga clic en **Manage Samples** para acceder a las funciones para cortar, copiar, pegar, agregar filas y eliminar filas.

1. Abra el espacio de trabajo Batch.
2. (Opcional) Haga clic en **View** para seleccionar las columnas que aparecerán en el espacio de trabajo Batch.

Sugerencia: Para utilizar un lote existente, haga clic en **Open > Open**.

3. Haga clic en **New**.
4. (Opcional) Para usar la disposición física de la placa como referencia y seleccionar o confirmar la ubicación de una muestra, haga clic en **Plate Layout**.
La disposición física de la placa proporciona automáticamente las posiciones del pocillo y del vial para las muestras sin asignar.
5. Escriba la información del lote en la cuadrícula.
Para obtener una descripción de las columnas de la cuadrícula, consulte la [Tabla 5-5](#).

Sugerencia: El espacio de trabajo Batch proporciona las siguientes funciones para facilitar la creación de lotes:

- El contenido de algunas celdas (por ejemplo, la celda **Sample Type**) puede seleccionarse de una lista en la celda. Haga clic a la derecha de la celda para mostrar la lista.
- La segunda y posteriores filas añadidas a un lote automáticamente se completan con los valores de la fila anterior.
- El usuario puede copiar una celda seleccionándola, haciendo clic en la esquina inferior derecha de la celda y arrastrando hasta la última fila en la que se va a copiar el contenido de la celda.
- El usuario puede copiar un grupo de celdas de la misma fila seleccionándolas, haciendo clic en la esquina inferior derecha de la celda más a la derecha y arrastrando hasta la última fila en la que se va a copiar el contenido de la celda.
- El usuario puede copiar una serie de valores escribiendo valores secuenciales en dos filas, seleccionando ambas celdas, haciendo clic en la esquina inferior de la celda inferior y arrastrando hasta la última fila de la serie.
- El usuario puede utilizar los comandos Copiar (**Ctrl+C**) y Pegar (**Ctrl+V**) para copiar el contenido de una celda o grupo de celdas y pegarlo en una nueva ubicación.

Nota: Las columnas LC no están disponibles hasta que se selecciona el método de LC.

Sugerencia: Para configurar el lote para que procese la muestra automáticamente tras adquirirla, utilice uno de los siguientes métodos:

- Para utilizar un método de procesamiento integrado, seleccione un **Results File** existente. Se procesará la muestra con el método integrado del archivo de resultados correspondiente.
- Para utilizar un nuevo método de procesamiento, borre el campo **Results File**. Cuando se borra el campo **Results File**, el campo **Processing Method** pasa a estar disponible. Seleccione un **Processing Method** y escriba un nuevo nombre de **Results File**. Se procesará la muestra con el método de procesamiento seleccionado.

Al procesar en el flujo de trabajo de cribado no dirigido, no se puede seleccionar una muestra de comparación para el procesamiento automático. Para métodos de procesamiento que utilizan el algoritmo AutoPeak, el software siempre crea el modelo de integración con las muestras utilizadas para crear el método.

-
6. (Opcional) Defina concentraciones de componentes. Consulte la sección [Adición de una concentración de componentes](#)
 7. (Opcional) Para aplicar reglas de decisión al lote, siga estos pasos:
 - a. Seleccione la casilla **Decision Rules**.

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

- b. Haga clic en **Decision Rules** y luego seleccione **Apply** para cada regla de decisión que tenga que aplicarse al lote. Para añadir reglas de decisión, consulte la sección [Adición de una regla de decisión](#).
- c. Haga clic en **Save**.

Nota: Si se selecciona la opción **Decision Rules** y hay como mínimo una regla de decisión activa para un lote, se muestra **Decision Rules: Active** junto al nombre del lote en el espacio de trabajo Queue. Si el proyecto activo se encuentra en la red y la red no está disponible, se muestra el texto **Decision Rules: Disabled**.

8. Guarde el lote:
 - a. Haga clic en **Save As**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Save As Batch.
 - b. Escriba un nombre de archivo en **File Name** y haga clic en **Save**.
9. Asegúrese de que se alcance la temperatura del horno de columna antes de enviar el lote.
10. Asegúrese de que el sistema se ha equilibrado con el método de MS y de LC utilizado en el lote.
11. Envíe el lote. Consulte la sección [Envío de un lote](#).

Utilización de la función Plate Layout para crear un lote

La función de disposición física de las placas proporciona una representación gráfica de la gradilla y de las estructuras de las placas y las gradillas que pueden usarse para propagar la cuadrícula en el espacio de trabajo Batch.

1. Abra el espacio de trabajo Batch.
2. Seleccione una de las opciones disponibles para **MS Method**.
3. Seleccione una de las opciones disponibles para **LC Method**.
El sistema de LC debe estar activo.
4. Escriba el nombre del **Data File** en el que se guardarán los datos adquiridos.
5. Seleccione el **Processing Method** que se utilizará para procesar los datos una vez que se hayan adquirido.
6. Escriba el nombre del **Results File** en el que se guardarán los datos procesados.
7. Haga clic en **Plate Layout**.
La ventana Plate Layout se abre y, por defecto, muestra una representación gráfica de la placa.
8. Establecer las propiedades para la placa.
La ventana se actualiza para mostrar una representación gráfica del tipo de placa seleccionado.
9. En la representación gráfica, haga clic en la posición de una muestra.
La posición de la muestra seleccionada se resalta en la representación gráfica. El espacio de trabajo Batch se actualiza, empezando por la primera fila cuya posición de

muestra no está totalmente definida, es decir, una fila que no incluye los valores de **Rack Type**, **Plate Type**, si se utilizan pocillos, y **Vial Position**. La cuadrícula muestra las posiciones de las correspondientes muestras.

10. Siga haciendo clic en las posiciones de la muestra según sea necesario en la representación gráfica para propagar la cuadrícula en el espacio de trabajo Batch. Si las posiciones de la muestra se escriben directamente en la cuadrícula del espacio de trabajo Batch, la representación gráfica se actualiza consecuentemente.

Sugerencia: Para eliminar todos los datos asociados a un tipo de gradilla específico, haga clic en **Clear All**. Si el tipo de gradilla seleccionado identifica una placa, el menú debajo de **Clear All** incluye los campos **Clear Front** y **Clear Back**.

11. Para especificar una posición de muestra seleccionada replicada, haga clic en la posición de la muestra en la representación gráfica. La representación gráfica muestra la posición de muestra replicada con un contorno coloreado y la cuadrícula en el espacio de trabajo Batch muestra los datos correspondientes.

Figura 5-4: Diseño de la placa—Posición de muestra replicada (Posición 1)



Nota: Las posiciones no seleccionadas se muestran en gris y las posiciones que se hayan seleccionado una vez que se muestran en azul con un borde gris.

12. Para ver el índice de muestras en la representación gráfica, pase el cursor por encima de la posición de la muestra resaltada. Aparece información sobre herramientas con el índice de la muestra.
13. Cuando todas las posiciones estén asignadas y revisadas, haga clic en **Close** en la ventana Plate Layout y seleccione **Save** el espacio de trabajo Batch.

Creación de una tabla de referencia de iones

1. Abra el espacio de trabajo Batch.
2. Haga clic en **Auto-Calibrate**. Se abre el cuadro de diálogo Batch - Automatic Calibration Editor.
3. Haga clic en **Edit**. Se abre el cuadro de diálogo Ion Reference Table Editor.

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

- Haga clic en **New**.

Sugerencia: Utilice la tecla de tabulador para moverse entre celdas y pulse Intro para añadir una fila.

- En la cuadrícula **Reference Ions for TOF MS Calibration**, escriba una masa precursora.
El campo **Compound Name** es opcional.
- Añada filas según sea necesario.
- En la columna **Use**, seleccione los iones que se van a utilizar.
- Seleccione el botón de opción **Use for MS/MS** para la masa precursora que se va a utilizar para MS/MS.
- Escriba valores en los campos **CE for MS/MS** y **DP for MS/MS** para la masa precursora seleccionada en el paso 8.
- En la cuadrícula **Reference Ions for MS/MS Calibration**, añada y seleccione al menos dos masas de fragmentos.
El campo **Fragment Name** es opcional.
- Haga clic en **OK**.
- Escriba un nombre en el cuadro de diálogo Save Reference Table y, a continuación, haga clic en **OK**.

Nota: Si los usuarios seleccionan un método de LC como método de administración de calibrador, el tiempo de retención y la tolerancia de tiempo de retención deben especificarse en la tabla de iones de referencia.

Calibración del sistema mediante CDS

Nota: Si el espectrómetro de masas está configurado con la opción de cierre de contacto, consulte la sección [Calibración de un sistema configurado con cierre de contacto](#).

- Abra el espacio de trabajo **Batch**.
- Haga clic en **Auto-Calibrate**.
Se abre el editor de calibración automática de lotes.
- Seleccione una tabla de referencia de iones.

Nota: Para los métodos TOF MSMS, asegúrese de que la masa precursora seleccionada en la tabla de referencia sea mayor que la masa precursora más pequeña del método.

- Indique el número de muestras que se deben adquirir entre calibraciones.
 - Seleccione **CDS** como método de administración de calibrador.
Por defecto, está seleccionado el canal CDS 1. Utilice el canal 1 para soluciones positivas y el canal 2 para soluciones negativas.
 - Haga clic en **OK** para cerrar el cuadro de diálogo.
-

7. Asegúrese de que la casilla a la izquierda del botón **Auto-Calibrate** esté seleccionada.
8. Cree y envíe un lote.

Calibración del sistema mediante un método de LC

Nota: Si el espectrómetro de masas está configurado con la opción de cierre de contacto, consulte la sección [Calibración de un sistema configurado con cierre de contacto](#).


1. Abra el espacio de trabajo **Batch**.
2. Haga clic en **Auto-Calibrate**.
Se abre el editor de calibración automática de lotes.
3. Seleccione una tabla de referencia de iones.
4. Indique el número de muestras que se deben adquirir entre calibraciones.
5. Seleccione un Método de LC como método sistema de administración de calibrador. Los campos de gradilla, placa y vial del procesador de muestras automático y los campos del método de MS se muestran a la derecha del cuadro de diálogo.
6. Seleccione un método de MS y, a continuación, seleccione la información de gradilla, placa y vial que corresponda.
7. Haga clic en **OK** para cerrar el cuadro de diálogo.
8. Asegúrese de que la casilla a la izquierda del botón **Auto-Calibrate** esté seleccionada.
9. Cree y envíe un lote.

Administración de concentraciones de componentes

Adición de una concentración de componentes


El lote contiene concentraciones de componentes definidas en el método de MS, el método de procesamiento o la tabla de resultados. Utilice este procedimiento para añadir concentraciones de componentes adicionales.

Nota: Las concentraciones de componentes añadidas con este procedimiento se pueden editar para las muestras del tipo QualityControl (ControlCalidad) y Standard (Patrón). Las concentraciones de componentes también se añaden a un lote cuando un método de procesamiento que contiene componentes se define para una muestra. Las concentraciones de componentes añadidas mediante el método de procesamiento solo son editables para muestras con métodos de procesamiento que contengan el componente.

1. En el espacio de trabajo Batch, haga clic en **Component Concentrations** (.
2. Haga clic en **Manage Components > Add Component**.
3. Escriba el nombre del **Component**.
4. Haga clic en **OK**.
La nueva concentración de componentes se añade al lote actual.

Eliminación de una concentración de componentes

Utilice este procedimiento para eliminar una concentración de componentes del lote.

1. En el espacio de trabajo Batch, haga clic en **Component Concentrations** .
2. Haga clic en **Manage Components > Remove Component**.
Se muestra una lista de componentes. Contiene todos los componentes añadidos con el comando **Add Component Concentration** o si se ha añadido un método de procesamiento o un método de MRM al lote.
3. Seleccione el componente de la lista.
4. Haga clic en **OK**.

Administración de reglas de decisión

Adición de una regla de decisión

Utilice este procedimiento para añadir una regla de decisión.

1. En el espacio de trabajo Batch, haga clic en **Decision Rules**.
Se abre el cuadro de diálogo Decision Rules.
2. Haga clic en **Add Rule**.
Se abre el cuadro de diálogo Decision Rule Configuration.
3. Escriba un nombre para la regla de decisión.
4. Defina las propiedades de la regla de decisión, incluida la regla de marcado, cuándo se evaluará la regla de decisión y la respuesta. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.
5. Haga clic en **Save** para guardar la regla de decisión.
6. Haga clic en **Save** para cerrar el cuadro de diálogo.

Nota: Si el usuario no hace clic en **Save** en el cuadro de diálogo Decision Rules, la nueva regla de decisión no se guardará.

Modificación de una regla de decisión

1. En el espacio de trabajo Batch, haga clic en **Decision Rules**.
Se abre el cuadro de diálogo Decision Rules.
2. Haga clic en el nombre indicado en **Decision Rule Name** correspondiente a la regla de decisión que desee cambiar.
Se abre el cuadro de diálogo Decision Rule Configuration.
3. Cambie el nombre indicado en **Decision rule name** y la configuración de la regla de decisión, incluida la regla de marcado, cuándo se evaluará la regla de decisión y la respuesta. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.
4. Haga clic en **Save** para guardar la regla de decisión.
5. Haga clic en **Save** para cerrar el cuadro de diálogo.

Nota: Si el usuario no hace clic en **Save** en el cuadro de diálogo Decision Rules, la nueva regla de decisión no se guardará.

Eliminación de una regla de decisión

Utilice este procedimiento para eliminar una regla de decisión.

1. En el espacio de trabajo Batch, haga clic en **Decision Rules..**
Se abre el cuadro de diálogo Decision Rules.
2. Haga clic en el enlace **Flagging Rule Used**.
3. Haga clic en **Delete Rule** para eliminar la regla de decisión.
4. Haga clic en **Save**.

Creación de una regla duplicada

Utilice este procedimiento para crear una regla duplicada.

1. En el espacio de trabajo Batch, haga clic en **Decision Rules**.
Se abre el cuadro de diálogo Decision Rules.
2. Haga clic en la regla de decisión que desee duplicar.
3. Haga clic en **Duplicate Rule**.
4. Haga clic en **Save**.

Importación de reglas de decisión

Utilice este procedimiento para importar reglas de decisión.

1. En el espacio de trabajo Batch, haga clic en **Decision Rules**.
Se abre el cuadro de diálogo Decision Rules.
2. Haga clic en **Import List**.
3. Busque el archivo de texto que se tenga que importar, selecciónelo y haga clic en **Open**.
4. Haga clic en **Save**.

Exportación de reglas de decisión

1. En el espacio de trabajo Batch, haga clic en **Decision Rules**.
Se abre el cuadro de diálogo Decision Rules.
2. Haga clic en **Export List**.
3. Acceda a la carpeta donde se vaya a guardar el archivo de texto, escriba un nombre de archivo y haga clic en **Save**.
4. Haga clic en **Cancel**.

Equilibrado del sistema

Equilibre el sistema al comienzo del día, antes de ejecutar un método nuevo o antes de enviar un lote. El equilibrado calienta y prepara el espectrómetro de masas y el sistema de LC para la siguiente muestra o lote.

1. Haga clic en **Equilibrate** en el panel de estado.
Se abre el cuadro de diálogo Equilibrate.
2. Seleccione un método de MS de la lista **MS Method**.
3. Seleccione un método de LC de la lista **LC Method**.
4. Escriba el tiempo de equilibrado en el campo **Time (min)**, en minutos.
5. Haga clic en **OK**.
Cuando finaliza el equilibrado, el estado del sistema en el panel de estado es Ready.

Sugerencia: Abra el espacio de trabajo Queue para supervisar el progreso del equilibrado. El espacio de trabajo Queue indica cuánto tiempo se necesita para que el equilibrado se complete. Para detener el equilibrado antes de que finalice, haga clic en **Stop** en el espacio de trabajo Queue.

Envío de un lote

Procedimientos de condiciones previas
<ul style="list-style-type: none">• Equilibrado del sistema.• Abra un lote en el espacio de trabajo Batch.

1. Haga clic en **Submit**.
Se abre el cuadro de diálogo Submit Samples.
2. Haga clic en **OK** para continuar.

Nota: Si se ha seleccionado la opción **Auto-Calibrate** y se ha configurado el espectrómetro de masas con la opción de cierre de contacto, el primer procedimiento de calibración se realizará de forma automática. A continuación, el sistema se mantendrá en estado de carga hasta que el usuario inicie una inyección en el dispositivo externo.

Si se muestran errores en la parte superior de la pantalla, resuélvalos y, a continuación, vuelva a hacer clic en **Submit**. El lote no se añade a la cola hasta que se hayan solventado todos los errores.

Sugerencia: Si no se inicia la cola, vaya al espacio de trabajo Queue y haga clic en **Start** en la barra de menús.

Envío de una única muestra a la cola en el espacio de trabajo Batch

Procedimientos de condiciones previas

- [Equilibrado del sistema.](#)
- Abra un lote en el espacio de trabajo Batch.

1. Seleccione el número de índice de fila de la muestra.
2. Haga clic en **Submit**.
Se abre el cuadro de diálogo Submit Samples.
3. Haga clic en **OK** para continuar.

Nota: Si se ha seleccionado la opción **Auto-Calibrate** y se ha configurado el espectrómetro de masas con la opción de cierre de contacto, el primer procedimiento de calibración se realizará de forma automática. A continuación, el sistema se mantendrá en estado de carga hasta que el usuario inicie una inyección en el dispositivo externo.

Si se muestran errores en la parte superior de la pantalla, resuélvalos y, a continuación, vuelva a hacer clic en **Submit**. El lote no se añade a la cola hasta que se hayan solventado todos los errores.

Sugerencia: Si no se inicia la cola, vaya al espacio de trabajo Queue y haga clic en **Start** en la barra de menús.

Envío de varias muestras a la cola en el espacio de trabajo Batch

Procedimientos de condiciones previas

- [Equilibrado del sistema.](#)
- Abra un lote en el espacio de trabajo Batch.

1. Realice una de las siguientes acciones:
 - Pulse **Ctrl** mientras hace clic en el número de índice de fila de muestra de cada muestra.
 - Arrastre hacia arriba o hacia abajo la lista de números de índice.

Nota: Las muestras se envían en el orden en el que se seleccionan y no en el orden en el que se muestran en el lote.

2. Haga clic en **Submit**.
Se abre el cuadro de diálogo Submit Samples.

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

3. Haga clic en **OK** para continuar.

Nota: Si se ha seleccionado la opción **Auto-Calibrate** y se ha configurado el espectrómetro de masas con la opción de cierre de contacto, el primer procedimiento de calibración se realizará de forma automática. A continuación, el sistema se mantendrá en estado de carga hasta que el usuario inicie una inyección en el dispositivo externo.

Si se muestran errores en la parte superior de la pantalla, resuélvalos y, a continuación, vuelva a hacer clic en **Submit**. El lote no se añade a la cola hasta que se hayan solventado todos los errores.

Sugerencia: Si no se inicia la cola, vaya al espacio de trabajo Queue y haga clic en **Start** en la barra de menús.

Espacio de trabajo Queue

El espacio de trabajo Queue muestra:

- Estado de la cola
- Estado del lote
- Adquisición de la muestra y estado de procesamiento

En este espacio de trabajo, el usuario puede gestionar lotes y muestras en la cola.

De manera predeterminada, las muestras no se muestran la cola. La información de la muestra se contrae debajo del nombre del lote. Se muestra el estado del lote, el nombre del lote, el número de muestras en el lote y el tiempo restante para la adquisición del lote actual. La muestra de calibración que se incluye con el lote se muestra como Cal en la cola de la columna Sample Name.

El acceso a las funciones de este espacio de trabajo está controlado por la función asignada al usuario. Consulte el documento *Guía del director de laboratorio*.

Nota: No cambie manualmente la posición de la válvula desviadora integrada durante la adquisición de la muestra.

Figura 5-5: Espacio de trabajo Queue

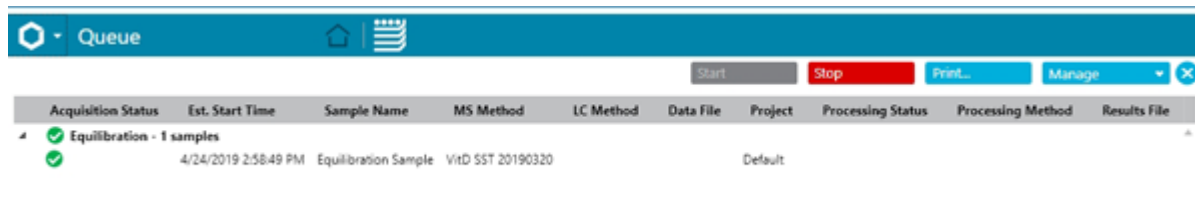


Tabla 5-7: Columnas del espacio de trabajo Queue

Etiqueta	Descripción
<i>Batch Name</i>	<p>El nombre del lote que se envió a la cola, el número de muestras del lote y el estado de procesamiento de la regla de decisión. La cola contiene una fila para cada lote. De forma predeterminada, el lote está contraído, pero se puede ampliar para mostrar todas las muestras del lote. Para cada muestra, se muestra información en las siguientes columnas.</p> <hr/> <p>Nota: Para los lotes con procesamiento de reglas de decisión, el software retrasa la adquisición de la siguiente muestra para permitir la finalización del procesamiento de la muestra actual. Si el procesamiento no finaliza dentro del tiempo permitido, las reglas de decisión se desactivan. El tiempo de demora es de 1,5 veces el tiempo de adquisición.</p> <hr/>
Acquisition Status	(Estado de adquisición) El estado de la adquisición de datos. Para obtener información sobre los iconos de estado, consulte la sección Iconos de cola .
Est. Start Time	(Hora de inicio estimada) La hora en que empezó la adquisición de la muestra.
Acquisition Time	(Tiempo de adquisición) Cuánto tiempo llevó adquirir la muestra.
Sample Name	(Nombre de la muestra) El nombre de la muestra, según lo especificado en el lote.
Sample ID	(ID de la muestra) El identificador de la muestra, según lo especificado en el lote.
Barcode	(Código de barras) El número de código de barras del vial de la muestra, según lo especificado en el lote.
Rack Code	(Código de gradilla) El identificador de la gradilla de LC, según lo especificado en el lote.
Rack Position	(Posición de gradilla) La localización instalada de la gradilla de LC, según lo especificado en el lote.
Plate Code	(Código de placa) El identificador de la placa de LC, según lo especificado en el lote.
Plate Position	(Posición de placa) La ubicación instalada de la placa de LC, según lo especificado en el lote.
Vial Position	(Posición de vial) La ubicación de la muestra en la placa o gradilla de LC.
MS Method	(Método de MS) El método de MS, según lo especificado en el lote.
LC Method	(Método de LC) El método de LC, según lo especificado en el lote.

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

Tabla 5-7: Columnas del espacio de trabajo Queue (continuación)

Etiqueta	Descripción
Injection Volume	(Volumen de inyección) La cantidad de muestra inyectada.
Data File	(Archivo de datos) El nombre del archivo de datos al que se adquirirán los datos.
Scanned Barcode	(Código de barras explorado) El identificado del vial.
User	(Usuario) El nombre del usuario que envió el lote.
Project	(Proyecto) El proyecto en el que se guardará el archivo de datos.
Data File Status	(Estado de archivo de datos) El estado del archivo de datos.
Auto Processing Status	(Estado de procesamiento automático) El estado del procesamiento de datos. Para obtener información sobre los iconos de estado, consulte la sección Iconos de cola .
Processing Method	(Método de procesamiento) El método de procesamiento que se utilizará para procesar los datos adquiridos. Si se está utilizando un archivo de resultados existente, esta columna contiene el texto *Embedded Method* .
Results File	(Archivo de resultados) El archivo en el que se escribirán los datos procesados.
Decision Rule Status	(Estado de la regla de decisión) El estado de marcado de una muestra y la acción realizada por la regla de decisión.
Decision Rule Summary	(Resumen de la regla de decisión) El nombre de la regla de decisión que se activa.

Gestión de la cola

La adquisición comienza después de enviar las muestras desde el espacio de trabajo Batch. Asegúrese de que el sistema está equilibrado antes de enviar un lote. Consulte la sección [Equilibrado del sistema](#).



Nota: Si la adquisición de muestras se interrumpe de forma inesperada, ejecute la muestra de nuevo. Si la interrupción inesperada se debe a un fallo de alimentación, entonces deja de mantenerse la temperatura de la bandeja del procesador de muestras automático y puede ponerse en peligro la integridad de la muestra.

Utilice las funciones de la siguiente tabla para gestionar muestras y lotes en la cola.

Tabla 5-8: Funciones del espacio de trabajo Queue

Para hacer esto	Haga esto
Mostrar u ocultar columnas.	Haga clic en Manage > Display Columns . Consulte la sección Mostrar u ocultar columnas .

Tabla 5-8: Funciones del espacio de trabajo Queue (continuación)

Para hacer esto	Haga esto
Visualizar todas las muestras del lote.	Haga clic en  .
Contraer todas las muestras del lote.	Haga clic en  .
Iniciar la adquisición.	Haga clic en Start . Equilibrar el sistema antes de ejecutar cualquier muestra.
Visualizar el estado de las muestras enviadas.	Haga doble clic en el encabezado del lote.
Volver a adquirir las muestras seleccionadas.	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en las muestras. Haga clic en Manage > Reacquire samples.
Eliminar las muestras seleccionadas.	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en las muestras. Haga clic en Manage > Delete samples.
Eliminar todas las muestras por debajo de la muestra seleccionada.	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en la muestra. Haga clic en Manage > Delete samples below row selection.
Borrar la cola de todos los lotes o muestras adquiridos.	Haga clic en Manage > Clear queue .
Quitar el foco de una fila seleccionada.	Haga clic en Manage > Clear all selections .
Subir el lote o la muestra seleccionada a la parte superior de la cola.	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en el encabezado del lote. Haga clic en Manage > Move row to top. <p>Nota: Solo se pueden mover lotes individuales o muestras no adquiridas.</p>
Subir la muestra seleccionada en la cola.	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en la muestra. Haga clic en Manage > Move row up. <p>Nota: Solo se pueden mover muestras individuales no adquiridas.</p>

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

Tabla 5-8: Funciones del espacio de trabajo Queue (continuación)




Para hacer esto	Haga esto
Bajar la muestra seleccionada en la cola.	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en la muestra. Haga clic en Manage > Move row down. <hr/> <p>Nota: Solo se pueden mover muestras individuales no adquiridas.</p>
Contraer todas las muestras y lotes.	Haga clic en Manage > Collapse all rows .
Mostrar todas las muestras y lotes.	Haga clic en Manage > Expand all rows .
Visualizar los datos de una muestra que están proceso de adquisición.	<p>Realice una de las siguientes acciones:</p> <ul style="list-style-type: none"> Haga doble clic en la muestra que esté en proceso de adquisición. <hr/> <p>Nota: Haga doble clic en una de las columnas de la izquierda de la columna Processing Status.</p> <ul style="list-style-type: none"> Haga clic en Open data exploration to view real time data () del panel Data Acquisition.
Visualizar los datos de una muestra adquirida.	Haga doble clic en la marca de verificación verde () en la columna Acquisition Status .
Visualizar el archivo de resultados que se ha creado.	Haga doble clic en la marca de verificación verde () en la columna Processing Status .
Ver que los viales con códigos de barras se están analizando.	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en Manage > Display Columns. Seleccione la casilla Barcode o Scanned Barcode (o ambas) en el cuadro de diálogo Select Columns. Consulte la sección Mostrar u ocultar columnas. Haga clic en OK.
Detener la cola.	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en Stop. Seleccione Stop now o Stop after the current tasks are completed. Haga clic en OK.
Detener el procesamiento de todas las muestras de la cola restantes.	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en Cancel remaining processing. Haga clic en Yes.

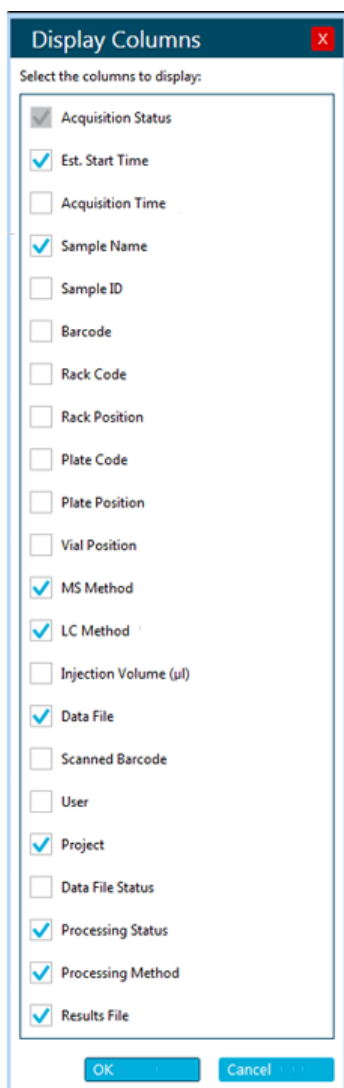
Tabla 5-8: Funciones del espacio de trabajo Queue (continuación)

Para hacer esto	Haga esto
Imprimir la cola.	Haga clic en Print en el menú de espacio de trabajo.

Mostrar u ocultar columnas

1. En el espacio de trabajo Queue, haga clic en **Manage > Display Columns**.
2. Seleccione o borre las casillas de verificación de la columna, según sea necesario, en el cuadro de diálogo Display Columns. Para obtener una descripción de las columnas, consulte la [Tabla 5-7](#).

Figura 5-6: Cuadro de diálogo Display Columns



3. Haga clic en **OK**.

Iconos de cola

Tabla 5-9: Iconos de cola










Icono	Nombre	Descripción
	Flecha de expansión	Aparecen las muestras del lote.
	Flecha de contracción	Se ocultan las muestras del lote.

Tabla 5-10: Iconos de estado de adquisición

Icono ¹	Nombre	Descripción
	Completed	La muestra o el lote completo se ha adquirido correctamente. Haga doble clic en este icono para abrir la muestra en el espacio de trabajo Explorer.
	Warning	Se ha adquirido la muestra, pero el usuario ha detenido o ampliado la adquisición.
	Failed	La muestra o cualquiera de las muestras del lote no se han adquirido correctamente.
	Failed	La muestra de calibración no ha cumplido los criterios de aceptación. Haga doble clic en el icono para ver el informe de estado.
	In Progress	Se está adquiriendo el lote o la muestra.
	Waiting	La muestra o el lote todavía no se han adquirido o están en proceso de adquisición.
	Barcode Warning	Se ha producido un error de lectura o una falta de coincidencia del código de barras y la muestra.

¹ Si se utilizan reglas de decisión, es posible que la regla de decisión afecte al estado de adquisición. Por ejemplo, puede que la regla de decisión cancele una muestra o detenga la cola. La regla de decisión tiene en cuenta todas las muestras del lote y, si las muestras se están procesando en distintos archivos de resultados, sus correspondientes archivos de resultados. Se tienen en cuenta incluso las muestras que ya no resultan visibles en la cola.

Tabla 5-11: Iconos de estado de procesamiento






Icono ²	Nombre	Descripción
	Completed	La muestra se ha procesado correctamente. Haga doble clic en este icono para abrir el archivo de resultados en el espacio de trabajo Analytics.
	Warning	El usuario ha detenido el procesamiento.
	Failed	La muestra no se ha procesado correctamente.
	In Progress	La muestra se está procesando.
	Waiting	La muestra aún no se ha procesado.

Tabla 5-12: Iconos de estado de las reglas de decisión







Icono ^{3 4}	Nombre	Descripción
	Flagging rule passed	La muestra cumple los criterios de aprobación para la regla de marcado configurada en la regla de decisión.
	Flagging rule marginal	La muestra cumple los criterios marginales para la regla de marcado configurada en la regla de decisión.
	Flagging rule failed	La muestra cumple los criterios de no aprobación para la regla de marcado configurada en la regla de decisión.
	Queue stopped	La cola se detiene de acuerdo con una regla de decisión. Este icono también se muestra cuando la cola se detiene y se adquiere el siguiente lote.
	Sample injected	La muestra se vuelve a inyectar de acuerdo con una regla de decisión o la muestra se inyecta desde un vial configurado en la regla de decisión.

Tabla 5-13: Iconos de estado del archivo de datos

Icono	Nombre	Descripción
	Transfer Complete	La muestra se ha transferido correctamente al proyecto en red.



² Si la columna **Processing Status** está vacía, no se ha seleccionado método de procesamiento o archivo de resultados para la muestra.

³ Los iconos de estado de marcado y sus descripciones emergentes se muestran cuando el usuario pasa el ratón por encima del nombre de la regla de decisión, el nombre de la regla de marcado y la acción realizada.

⁴ Si el usuario opta por evaluar la regla después de que se hayan adquirido todos los patrones, los estados de las muestras marcadas se actualizan retroactivamente.

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

Tabla 5-13: Iconos de estado del archivo de datos (continuación)

Icono	Nombre	Descripción
	Transfer in Process	Se está transfiriendo la muestra al proyecto en red.
	Transfer Failed	La transferencia de la muestra ha fallado. SCIEX OS intentará transferir la muestra otra vez.

Espacio de trabajo MS Tune

El software crea un archivo dat cuando se guardan los datos del instrumento. Utilice este archivo para restaurar estados anteriores de los parámetros. El nombre del archivo de copia de seguridad .dat indica la hora en que se creó el archivo y no la hora en que se realizó la copia de seguridad de este.

Nota: Cuando se utiliza la sonda APCI, solo están disponibles las funciones Quick Status Check y Advanced Troubleshooting. Instale la sonda ESI para llevar a cabo otros procedimientos de ajuste.

Cada vez que el usuario carga al procedimiento MS Tune, se realiza una copia de seguridad de todos los parámetros del espectrómetro de masas.

El acceso a las funciones de este espacio de trabajo está controlado por la función asignada al usuario. Consulte el documento *Guía del director de laboratorio*.

Realización de una comprobación rápida del estado

Procedimientos de condiciones previas

- Asegúrese de que se ha instalado la sonda correcta

Utilice este procedimiento para calibrar el sistema y para verificar rápidamente la resolución en los modos TOF MS y MS/MS. Si la precisión de masas de alineamiento de canal no cumple la especificación, el usuario puede repetir los pasos y calibrar el sistema. Si la resolución no cumple la especificación, el usuario puede realizar el procedimiento de TOF Tuning para optimizar el sistema.

Sugerencia: Los usuarios pueden evaluar este procedimiento haciendo clic en **MS Check** en el panel de estado.

Nota: Si el espectrómetro de masas está configurado con un CDS, el software iniciará automáticamente el CDS al principio del paso para alcanzar una pulverización estable. El software detiene el CDS cuando el usuario cierra el espacio de trabajo MS Tune.

1. Abra el espacio de trabajo MS Tune.

2. Seleccione **Positive Quick Status Check** o **Negative Quick Status Check** en la lista **Tuning Procedures**.
3. Haga clic en **Next**.
4. Siga las instrucciones que se muestran en pantalla para cada paso. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.
5. (Opcional) Revise el informe para verificar los resultados de cada paso.
6. (Opcional) Guarde el informe.
7. Haga clic en **Save Tuning Settings** si los resultados son satisfactorios. Si los resultados no son satisfactorios, realice una de las siguientes acciones:
 - Repita los pasos.
 - Ejecute el procedimiento de ajuste de TOF MS. Consulte la sección [Ajustar TOF](#).
 - Descarte los resultados cerrando el espacio de trabajo **MS Tune**.
 - Restaure los parámetros anteriores seleccionando el archivo de copia de seguridad apropiado desde el menú **Restore Instrument Data**.

Optimización del detector

Cuando la sensibilidad del sistema es baja, utilice este procedimiento para comprobar que el voltaje del detector está optimizado. Durante el procedimiento, el software puede ajustar el voltaje de detector para proporcionar la sensibilidad óptima. Una vez completada la optimización, el usuario puede guardar el valor optimizado o descartar los cambios.

Nota: Asegúrese de llevar a cabo este procedimiento tanto en el modo de masa alta como en el modo de masa baja.

Recomendamos optimizar el detector una vez al mes. El detector también debería optimizarse si hay una disminución considerable en la sensibilidad y después de la ventilación y la limpieza del instrumento.

Nota: El envejecimiento del detector se debe a la exposición de iones, por lo que la optimización frecuente puede ser necesaria cuando se utilizan muestras con una concentración alta.

Nota: Si el espectrómetro de masas está configurado con un CDS, el software iniciará automáticamente el CDS al principio del paso para alcanzar una pulverización estable. El software detiene el CDS cuando el usuario cierra el espacio de trabajo MS Tune.

1. Abra el espacio de trabajo MS Tune.
2. De la lista **Tuning Procedures**, realice una de las siguientes acciones:
 - (Sistemas ZenoTOF) Seleccione **Positive Detector Optimization** o **Negative Detector Optimization**.
 - (Sistemas X500 QTOF) Seleccione **Detector Optimization**.

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

Se muestra la página Introduction. En ella se describe el objetivo del proceso de optimización, los requisitos y las instrucciones.

3. Asegúrese de que la bomba de jeringa se haya configurado correctamente. Consulte el documento *Guía de usuario del sistema*. A continuación, haga clic en **Next**.
4. Asegúrese de que la pulverización sea estable y haga clic en **Next**.
5. Siga las instrucciones que se muestran en pantalla. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.
Se muestra el informe de optimización.
6. (Opcional) Guarde el informe siguiendo estos pasos:
 - a. En la página Report, haga clic en **Save report as**.
 - b. Vaya a la carpeta donde se vaya a guardar el informe, escriba un nombre de archivo en **File name** y haga clic en **Save**.
7. Haga clic en **Next**.
8. Haga clic en **Save Settings**.

Nota: Si el detector se optimiza a 2650 V o más, póngase en contacto con sciex.com/request-support para que sustituyan el detector.

Se muestra el mensaje siguiente: "Tuning settings were saved".

Ajustar Unidad Q1

En experimentos de MS/MS, la región Q1 se utiliza para seleccionar un ion precursor para fragmentación. El ajuste de la unidad Q1 optimiza la anchura de pico y calibra la masa Q1. La unidad Q1 representa la anchura de la ventana de selección del ion precursor a resolución unitaria. Q1 Bajo o Abierto representa la anchura de la ventana de selección del ion precursor a baja resolución (ventana más ancha) o a resolución abierta (ventana abierta). Tras ajustar la unidad Q1, los parámetros de Q1 Bajo y Abierto se calculan conforme a los valores de la unidad Q1.

Nota: Si el espectrómetro de masas está configurado con un CDS, el software iniciará automáticamente el CDS al principio del paso para alcanzar una pulverización estable. El software detiene el CDS cuando el usuario cierra el espacio de trabajo MS Tune.

1. Abra el espacio de trabajo MS Tune.
2. Seleccione **Positive Q1 Unit Tuning** o **Negative Q1 Unit Tuning** en la lista **Tuning Procedures**.
3. Haga clic en **Next**.
4. Siga las instrucciones que se muestran en pantalla para cada paso. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.
5. (Opcional) Haga clic en **Edit Method** para ajustar los parámetros.
6. Si se ha realizado la calibración, haga clic en **Confirm** para ejecutar una adquisición de confirmación.

7. Haga clic en **Next**.
8. (Opcional) Guarde el informe.
9. Haga clic en **Next**.
10. Haga clic en **Save Settings**.

Ajustar TOF

El procedimiento de ajuste TOF MS optimiza los parámetros para la resolución y la sensibilidad en modos TOF MS y MS/MS. La optimización empieza verificando el rendimiento del sistema antes del ajuste y luego eleva varios parámetros para una máxima resolución e intensidad. Tras la alineación de canal, se calibra el sistema y se determina su rendimiento. Si el rendimiento es satisfactorio, el usuario puede guardar los parámetros de ajuste en el sistema o descartarlos.

El ajuste TOF MS se puede realizar en modo automático o manual. En modo manual, los usuarios pueden seleccionar los valores de parámetros optimizados o hacer una pausa al final de los pasos de ajuste.

Nota: Si el espectrómetro de masas está configurado con un CDS, el software iniciará automáticamente el CDS al principio del paso para alcanzar una pulverización estable. El software detiene el CDS cuando el usuario cierra el espacio de trabajo MS Tune.

1. Abra el espacio de trabajo MS Tune.
2. De la lista **Tuning Procedures**, realice una de las siguientes acciones:
 - (Sistemas X500 QTOF) Seleccione **Positive TOF MS Tuning** o **Negative TOF MS Tuning**.
 - (Sistemas ZenoTOF) Seleccione **Positive TOF Tuning** o **Negative TOF Tuning**.
3. Asegúrese de que la pulverización es estable.
4. Haga clic en **Next**.
5. Siga las instrucciones que se muestran en pantalla para cada paso. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.
6. Haga clic en **Next**.
7. (Opcional) Guarde el informe.
8. Haga clic en **Save Settings** si los resultados son satisfactorios. Si los resultados no son satisfactorios, realice una de las siguientes acciones:
 - Repita los pasos.
 - Descarte los resultados cerrando el espacio de trabajo **MS Tune**.
 - Restaure los parámetros anteriores seleccionando el archivo de copia de seguridad apropiado desde el menú **Restore Instrument Data**.
 - Póngase en contacto con sciex.com/request-support.

Ajuste alto Q1

En experimentos de MS/MS, la región Q1 se utiliza para seleccionar un ion precursor para fragmentación. El ajuste alto Q1 optimiza la anchura de pico y calibra la masa Q1. El Q1 alto representa una ventana de selección del ion precursor más estrecha.

Nota: Si el espectrómetro de masas está configurado con un CDS, el software iniciará automáticamente el CDS al principio del paso para alcanzar una pulverización estable. El software detiene el CDS cuando el usuario cierra el espacio de trabajo MS Tune.

1. Abra el espacio de trabajo MS Tune.
2. Seleccione **Positive Q1 High Tuning** o **Negative Q1 High Tuning** en la lista **Tuning Procedures**.

Nota: Si no ha ejecutado el procedimiento Q1 alto positivo durante un tiempo, haga clic en **Copy** para utilizar como punto de partida los parámetros de la unidad Q1 positiva.

3. Asegúrese de que la pulverización es estable.
4. Haga clic en **Next**.
5. Siga las instrucciones que se muestran en pantalla para cada paso. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.
6. (Opcional) Haga clic en **Edit Method** para ajustar los parámetros.
7. Si se ha realizado la calibración, haga clic en **Confirm** para ejecutar una adquisición de confirmación.
8. Haga clic en **Next**.
9. (Opcional) Guarde el informe.
10. Haga clic en **Next**.
11. Haga clic en **Save Settings**.

Calibrar Zeno (Sistemas ZenoTOF)

1. Abra el espacio de trabajo MS Tune.
2. Seleccione **Positive Zeno Calibration** o **Negative Zeno Calibration** en la lista **Tuning Procedures**.
Se muestra la página Introduction. En ella se describe el objetivo y los requisitos previos para el proceso de calibración.
3. Asegúrese de que la pulverización sea estable y haga clic en **Next**.

Nota: El usuario puede ajustar manualmente los valores de **Source and Gas Parameters** en la página Achieve Stable Spray/Modify.

4. Siga las instrucciones que se muestran en pantalla para cada paso. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.
5. Haga clic en **Next**.

6. (Opcional) Guarde el informe siguiendo estos pasos:
 - a. En la página Report, haga clic en **Save report as**.
 - b. Vaya a la carpeta donde se vaya a guardar el informe, escriba un nombre de archivo en **File name** y haga clic en **Save**.
7. Haga clic en **Next**.
8. Haga clic en **Save Tuning Settings** si los resultados son satisfactorios. Si los resultados no son satisfactorios, realice una de las siguientes acciones:
 - Repita los pasos.
 - Descarte los resultados cerrando el espacio de trabajo **MS Tune**.
 - Restaure los parámetros anteriores seleccionando el archivo de copia de seguridad apropiado desde el menú **Restore Instrument Data**.

Realizar Optimización de EAD (Sistemas ZenoTOF)

1. Abra el espacio de trabajo MS Tune.
2. Seleccione **EAD Optimization Tuning Procedures** en la lista. Se muestra la página Introduction. Describe el objetivo y los requisitos previos para el proceso de optimización.
3. Seleccione el valor que corresponda en **Tuning process** y, a continuación, haga clic en **Next**.
4. En la página Filament Calibration Verification, seleccione el valor que corresponda en **Filament** y luego haga clic en **Calibrate Filament**.

Sugerencia: Para cambiar el filamento seleccionado, haga clic en la lista del campo **Filament** y luego seleccione el filamento requerido.

5. Haga clic en **Next**.
6. Asegúrese de que la pulverización sea estable y haga clic en **Next**.

Nota: El usuario puede ajustar manualmente los valores de **Source and Gas Parameters** en la página Achieve Stable Spray/Modify.

7. Siga las instrucciones que se muestran en pantalla para cada paso. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.
8. Haga clic en **Next**.
9. (Opcional) Guarde el informe siguiendo estos pasos:
 - a. En la página Report, haga clic en **Save report as**.
 - b. Vaya a la carpeta donde se vaya a guardar el informe, escriba un nombre de archivo en **File name** y haga clic en **Save**.
10. Haga clic en **Next**.
11. Haga clic en **Save Settings**.

Realizar Reducción de fondo del EI de EAD (Sistemas ZenoTOF)

1. Abra el espacio de trabajo MS Tune.
2. Seleccione **EAD EI Background Reduction Tuning Procedures** en la lista.
Se muestra la página Introduction. Describe el objetivo y los requisitos previos del procedimiento de ajuste.
3. Haga clic en **Next**.
4. Siga las instrucciones que se muestran en pantalla para cada paso. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.
5. Haga clic en **Next**.
6. (Opcional) Guarde el informe siguiendo estos pasos:
 - a. En la página Report, haga clic en **Save report as**.
 - b. Vaya a la carpeta donde se vaya a guardar el informe, escriba un nombre de archivo en **File name** y haga clic en **Save**.

Realizar Diagnóstico de EAD (Sistemas ZenoTOF)

1. Abra el espacio de trabajo MS Tune.
2. Seleccione **EAD Diagnostics Tuning Procedures** en la lista.
Se muestra la página Introduction. Describe el objetivo y los requisitos previos para el Diagnóstico de EAD.
3. Haga clic en **Next**.
4. Siga las instrucciones que se muestran en pantalla para cada paso. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.

Realizar Inicialización ADC (Sistemas ZenoTOF)

1. Abra el espacio de trabajo MS Tune.
2. Seleccione **Tuning Procedures > ADC Initialization**.
Se muestra la página Introduction. Describe el objetivo de la inicialización.
3. Haga clic en **Next**.
Se muestra la página ADC Initialization. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.

Ejecución de la solución de problemas avanzada

Procedimientos de condiciones previas
<ul style="list-style-type: none">• Asegúrese de que se ha instalado la sonda correcta

Si los resultados del procedimiento de ajuste no son satisfactorios, utilice este procedimiento de solución de problemas avanzado para optimizar los parámetros relacionados con el

espectrómetro de masas. Los usuarios también pueden visualizar las estadísticas del canal TDC y los espectros durante la adquisición.

Sugerencia: La ventana Live Method puede utilizarse para visualizar los parámetros optimizados tras el ajuste.

1. Abra el espacio de trabajo MS Tune.
2. Seleccione **Advanced Troubleshooting Tuning Procedures** en la lista.
3. Seleccione un tipo de análisis.
4. Haga clic en **Edit Method** y edite los parámetros en la ventana Live Window, según sea necesario.
5. Haga clic en **Start/Restart Method**.
6. Visualice los datos y ajuste los parámetros, según sea necesario.
7. Haga clic en **Stop** y guarde los parámetros del detector o los parámetros de TOF MS, según sea necesario.

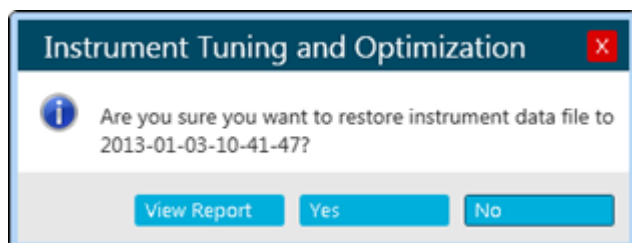
Restauración de datos del instrumento

El software genera una copia del archivo de datos del instrumento (dat) y, seguidamente, actualiza el archivo dat actual siempre que el usuario guarde la configuración de los ajustes al final de cada procedimiento de ajuste. Las configuraciones guardadas anteriormente pueden restaurarse usando la función **Restore Instrument Data**.

Cuando se lleva a cabo cada procedimiento de ajuste, se generan el informe y los archivos de datos para realizar un seguimiento de los resultados optimizados. De forma predeterminada, el informe y archivo de datos wiff2 pueden encontrarse en D:\SCIEX OS Data\Optimization.

1. Abra el espacio de trabajo MS Tune.
2. Desde el menú **Restore Instrument Data**, seleccione un archivo dat con una marca de hora anterior que se restaurará.

Figura 5-7: Cuadro de diálogo Instrument Tuning and Optimization



3. (Opcional) Ver el informe para el archivo dat que se va a restaurar siguiendo estos pasos:
 - a. Haga clic en **View Report**.

Instrucciones de funcionamiento: adquisición

- b. Si se ha generado un informe para el archivo de datos del instrumento seleccionado, vaya hasta el archivo de informe y haga doble clic en este para abrirlo.
4. Haga clic en **Yes**.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

6

Espacio de trabajo Explorer

El acceso a las funciones de este espacio de trabajo está controlado por la función asignada al usuario. Consulte el documento *Guía del director de laboratorio*.

Apertura de muestras

Antes de realizar tareas de revisión de datos, en el espacio de trabajo Explorer, abra las muestras que se van a revisar.

1. Abra el espacio de trabajo Explorer.
2. Para abrir una única muestra, siga estos pasos:
 - a. Haga clic en **File > Open Sample**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Select Sample.
 - b. Busque y seleccione la muestra que se va a abrir.
 - c. Haga clic en **OK**.
3. Para abrir varias muestras, siga estos pasos:
 - a. Haga clic en **File > Open Multiple Samples**.
 - b. En el cuadro de diálogo Select Samples, seleccione las muestras de la lista **Available** y después haga clic en la flecha para mover los archivos a la lista **Selected**.

Sugerencia: Para seleccionar una muestra, despliegue el archivo, haga clic en la muestra y, a continuación, haga clic en la flecha.

- c. Haga clic en **OK**.

Confirmación de la presencia de un analito

Procedimientos de condiciones previas

- | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none">• Apertura de muestras. |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|

1. Extracción de iones. Consulte la sección [Extracción de iones](#).
2. (Opcional) Visualización de la tabla de datos y picos. Consulte la sección [Visualización de la tabla de datos y picos](#).
3. Revise el área de pico, intensidad, masas y estados de carga de los compuestos.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

En el caso de sistemas SCIEX Triple Quad, el estado de carga solo está disponible para tipos de datos de análisis completo.

Extracción de iones

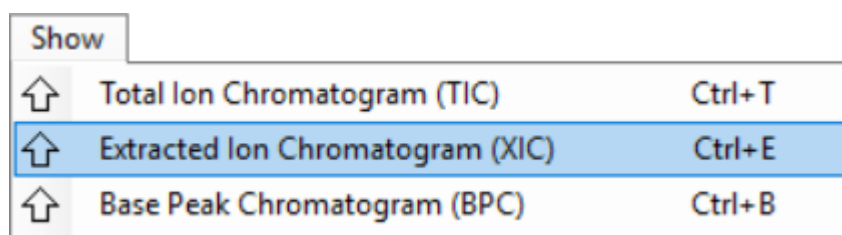
Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras.](#)

Se utiliza para calcular uno o más cromatogramas de iones extraídos (XIC) superpuestos, que es el gráfico de la suma de intensidades de un rango de masa determinado como una función del tiempo de retención.

1. Haga clic en **Show > Extract Ion Chromatogram (XIC)**.

Figura 6-1: Menú Show: Extracted Ion Chromatogram (XIC)



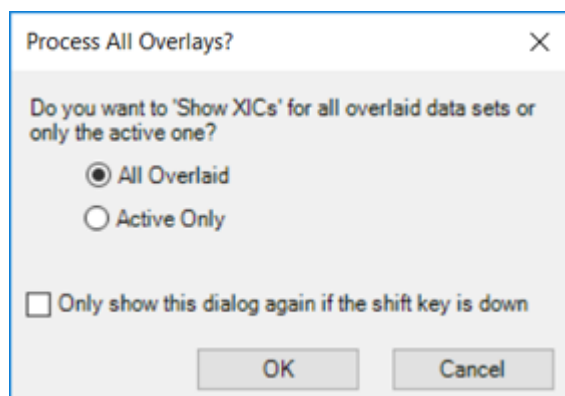
2. Si se abre el cuadro de diálogo Specify XIC Ranges, lleve a cabo estos pasos:
 - a. Escriba los valores de **Center**, **Width** y **Compound** o importe los valores.

Nota: El título predeterminado del XIC incluye los nombres de compuesto mostrados en las celdas para una fila determinada.

Sugerencia: Cuando se utiliza el modo **Center/Width**, es posible especificar una fórmula química en lugar de una masa para el valor **Center**. Si se utiliza una composición neutra, como H₂O, se suma automáticamente un protón para el modo positivo o se resta para el modo negativo. Por ejemplo, la proporción de *m/z* de H₃O⁺ se utiliza para el modo positivo. Especifique un estado de carga explícito terminando la composición con *+n* o *-n*, donde *n* es el estado de carga. Si se omite la *n*, se asume que es uno. Por ejemplo, si se especifica H₂ONa⁺, entonces la proporción de *m/z* de H₂ONa⁺ se utiliza tal cual está.

- b. (Opcional) Utilice las funciones del menú contextual para personalizar las opciones para la extracción de iones. Para obtener más información, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
- c. Haga clic en **OK**.
Si el gráfico activo contiene una serie superpuesta de varias muestras, se abre el cuadro de diálogo Process All Overlays? .

Figura 6-2: Process All Overlays? (cuadro de diálogo)



3. Si se abre el cuadro de diálogo Select MRMs, seleccione los MRM que se van a incluir en el XIC y, a continuación, haga clic en **OK**.
4. Si se abre el cuadro de diálogo Process All Overlays?, siga estos pasos:
 - a. Realice una de las siguientes acciones:
 - Seleccione **All Overlaid** para generar los XIC superpuestos de todas las muestras disponibles.
 - Seleccione **Active Only** para generar XIC solo de la muestra activa actualmente.
 - b. Haga clic en **OK**.

Si la casilla **Only show this dialog again if the shift key is down** está activada, entonces siempre se utilizará la acción seleccionada para todos los usos futuros a menos que el usuario pulse la tecla **Shift** para cambiar la opción.

Apertura de un cromatograma de iones totales

Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras.](#)

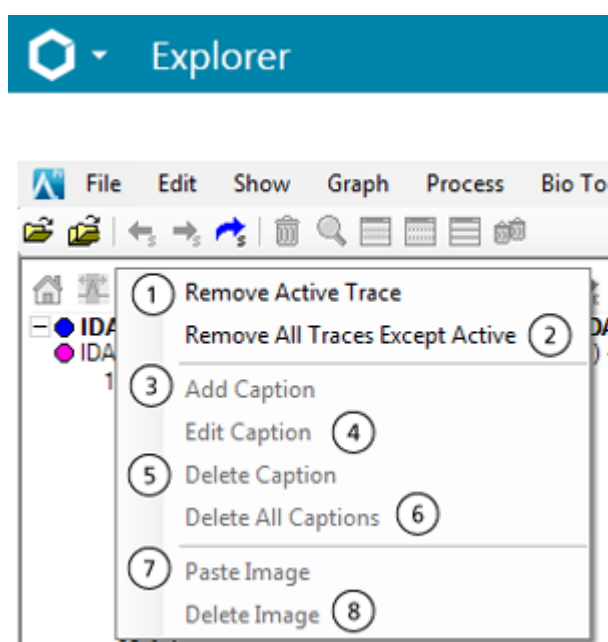
Un cromatograma de iones totales (TIC) se crea mediante la suma de las contribuciones de intensidad de todos los iones de una serie de exploraciones de masa. Utilice el TIC para ver un conjunto de datos completo en un único panel. El TIC consiste en la suma de intensidades de todos los iones de un análisis representada en función del tiempo en un panel cromatográfico.

1. Haga clic en **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**.
Si el gráfico activo contiene una serie superpuesta de varias muestras, se abre el cuadro de diálogo Process All Overlays? .
2. Si se abre el cuadro de diálogo Process All Overlays?, siga estos pasos:
 - a. Realice una de las siguientes acciones:

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

- Seleccione **All Overlaid** para generar los TIC superpuestos de todas las muestras disponibles.
 - Seleccione **Active Only** para generar TIC solo de la muestra activa actualmente.
- b. Haga clic en **OK**.
- Si la casilla **Only show this dialog again if the shift key is down** está activada, entonces siempre se utilizará la acción seleccionada para todos los usos futuros a menos que el usuario pulse la tecla **Shift** para cambiar la opción.
3. Haga clic con el botón derecho en TIC y utilice una de las funciones en el menú contextual.

Figura 6-3: Menú contextual Total Ion Chromatogram



Elemento	Descripción
1	Disponible si hay más de un trazo superpuesto. Elimina el trazo activo actualmente del gráfico. Para eliminar un trazo que no está actualmente activo, actívelo y, a continuación, seleccione la función.
2	Disponible si hay más de un trazo superpuesto. Elimina todos los trazos salvo el que está activo actualmente. Si el trazo que se quiere mantener no está actualmente activo, actívelo y, a continuación, seleccione la función.

Elemento	Descripción
3	<p>Agrega texto a un gráfico.</p> <p>Si es necesario, haga clic en Font para ajustar las propiedades de la fuente y, a continuación, haga clic en OK. Se agrega el título en la posición (x, y) donde el usuario haga clic con el botón derecho para abrir el menú.</p> <p>Después de añadir el título, el usuario puede arrastrarlo a una nueva posición. Si el usuario lo arrastra al eje X o Y, se cancela la operación de arrastre.</p> <p>La secuencia de caracteres '\d' y '\u' se tratan de manera especial. En el primer caso, el carácter inmediatamente después se inserta como un subíndice y en el último caso como un superíndice. En ambos casos, los caracteres especiales no son visibles. Esto es especialmente útil para fórmulas químicas. Por ejemplo, H\d3O\u+ se muestra como H₃O⁺.</p>
4	Modifica el título seleccionado. El usuario también puede abrir el cuadro de diálogo haciendo doble clic en un título.
5	Elimina el título seleccionado. Alternativamente, arrastre el título fuera del gráfico para eliminarlo.
6	Disponible si el gráfico contiene al menos un título. Elimina todos los títulos a la vez.
7	Pega una imagen en el gráfico
8	Elimina la imagen seleccionada del gráfico.

Apertura de un cromatograma de pico base

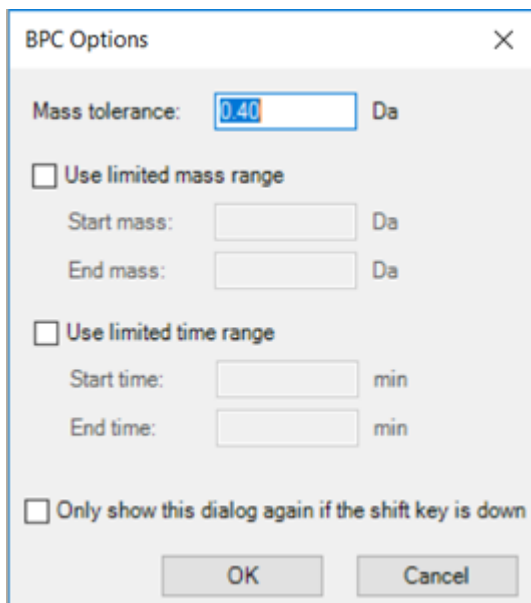
Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras.](#)

Genera un gráfico de la intensidad del pico más grande en cada espectro que varía en función del tiempo.

1. Haga clic en **Show > Base Peak Chromatogram (BPC)**.

Figura 6-4: Cuadro de diálogo BPC Options

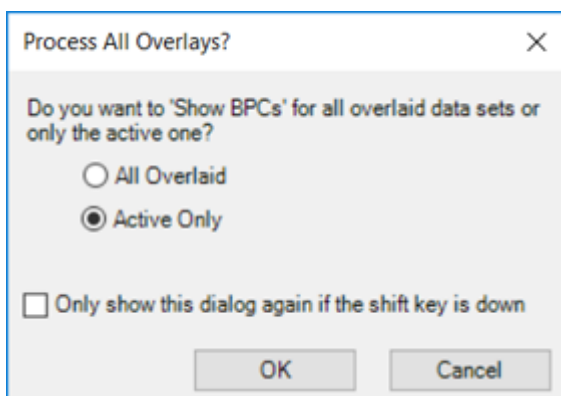


2. Complete los campos del cuadro de diálogo BPC Options. Para obtener información sobre los campos, consulte el documento *Sistema de ayuda*.

Nota: Si está activo un cromatograma con una única selección que abarca más de 1,0 minutos cuando se está generando el cromatograma de pico base, la configuración predeterminada del tiempo se aplica al rango de tiempo de la selección. De lo contrario, se utiliza el último rango de tiempo. El rango de tiempo limitado evita que el usuario tenga que escribirlo manualmente.

Si el gráfico activo contiene una serie superpuesta de varias muestras, se abre el cuadro de diálogo Process All Overlays? .

Figura 6-5: Process All Overlays? (cuadro de diálogo)



3. Si se abre el cuadro de diálogo Process All Overlays?, siga estos pasos:
 - a. Realice una de las siguientes acciones:

- Seleccione **All Overlaid** para generar los BPC superpuestos de todas las muestras disponibles.
- Seleccione **Active Only** para generar BPC solo de la muestra activa actualmente.

b. Haga clic en **OK**.

Si la casilla **Only show this dialog again if the shift key is down** está activada, entonces siempre se utilizará la acción seleccionada para todos los usos futuros a menos que el usuario pulse la tecla **Shift** para cambiar la opción.

Visualización de la tabla de datos y picos

Procedimientos de condiciones previas

- | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none">• Apertura de muestras. |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|

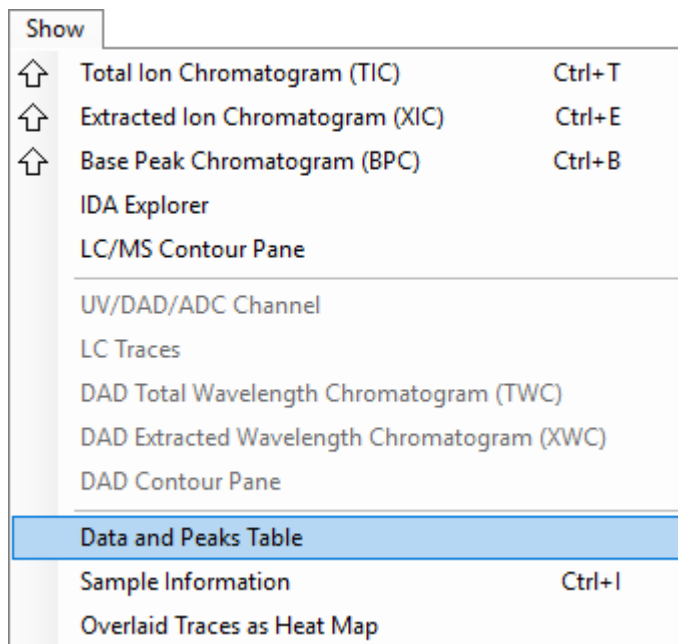
La tabla de datos y picos contiene dos tablas distintas. La tabla Data muestra los valores sin procesar (x, y) que comprenden un conjunto de datos, y la tabla Peaks muestra información sobre los propios picos. La tabla se genera cuando hay un gráfico activo.

Nota: Solo aparecen los picos que están por encima del umbral actual en el gráfico, que se han establecido con la flecha azul del eje Y del gráfico. Consulte la sección: [Cómo trabajar con datos en los gráficos](#).

Esta función se utiliza para mostrar un panel que contiene dos tablas para los datos activos actualmente: una para los valores (x, y) sin procesar y otra para la lista de picos.

1. Haga clic en **Show > Data and Peaks Table**.

Figura 6-6: Menú Show: Data and Peaks Table



2. Utilice las funciones de la siguiente tabla.

Tabla 6-1: Funciones de tabla de datos y picos

Para hacer esto	Haga esto
Ordenar la tabla por ese campo	Haga clic en el encabezado de la columna.
Copiar las celdas seleccionadas actualmente	Haga clic con el botón derecho en la tabla y, a continuación, haga clic en Copy . Si la pestaña Data está activa, se copian los valores x e y seleccionados. Si la pestaña Peaks está activa, se copia la información del pico seleccionado.
Copiar solo las filas seleccionadas	Primero seleccione las filas arrastrándolas hacia la columna de selección de filas o utilizando las teclas Shift o Ctrl para seleccionar varias filas. A continuación, haga clic con el botón derecho en la tabla y haga clic en Copy .
Seleccionar varias columnas	Pulse la tecla Ctrl y, a continuación, haga clic en los encabezados de las columnas. Si el usuario solo hace clic en el encabezado de una columna, la columna se ordenará.
Copiar la tabla completa	Haga clic en Edit > Select All y, a continuación, haga clic en Edit > Copy .

Tabla 6-1: Funciones de tabla de datos y picos (continuación)

Para hacer esto	Haga esto
Exportar los datos como texto	Haga clic con el botón derecho en el panel y, a continuación, haga clic en Export Data as Text Se guarda la lista de datos completa en el archivo especificado. Los valores de x e y se separan con un tabulador y hay un salto de línea después de cada pareja (x, y).
Exportar los datos de la lista de picos como texto.	Haga clic con el botón derecho en el panel y, a continuación, haga clic en Export Peak List as Text Se guarda la lista de picos completa en el archivo especificado. Esto no incluye los picos que están por debajo del umbral actual establecido en el eje Y del gráfico asociado. Las métricas de picos se separan con un tabulador y hay un salto de línea después de cada pico.

3. Revise el área de pico, intensidad, masas y estados de carga de los compuestos.

Visualización de la información de la muestra

Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras.](#)

En el panel Sample Information se muestra una descripción textual del experimento utilizado para adquirir los datos activos. Aquí se proporciona información específica de la muestra, incluido el nombre de la muestra e información sobre la adquisición de datos, como el número y el tipo de experimentos.

Si se visualizan dos o más paneles Sample Information, asociados a muestras diferentes del mismo archivo de datos, al hacer clic en un elemento de la vista de árbol de los paneles, los demás paneles se desplazarán a la sección correspondiente. Se supone que existen secciones con el mismo nombre en todos los paneles. Esta función es útil si el usuario compara dos paneles de información de muestra similares, aunque no idénticos.

Haga clic en **Show > Sample Information**.

Visualización de la información de selección de gráfico

Procedimientos de condiciones previas

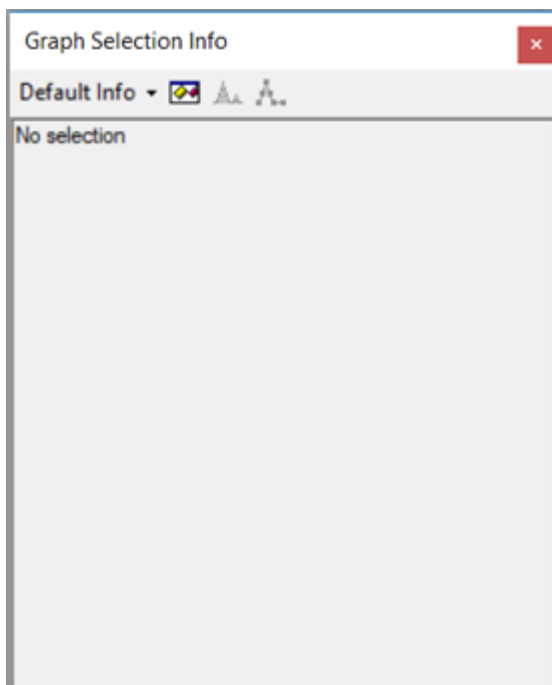
- [Apertura de muestras.](#)

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

El cuadro de diálogo Graph Selection Information muestra información acerca de la región seleccionada en un cromatograma o espectro y se genera cuando uno de dichos paneles está activo.

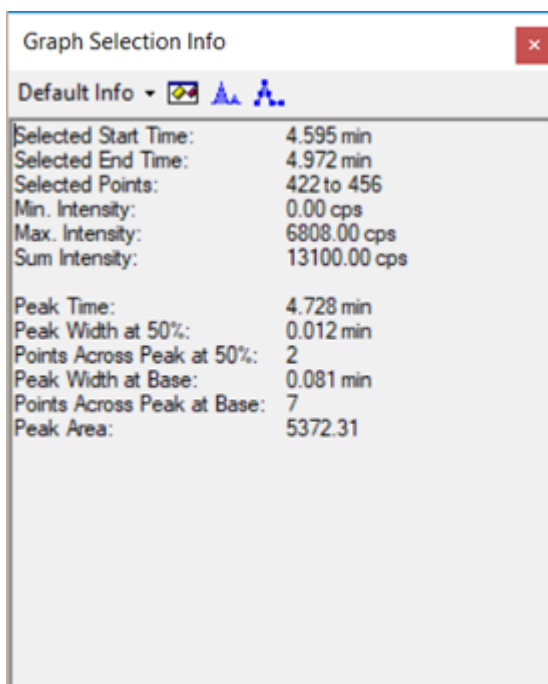
1. Haga clic en **Window > Graph Selection Window**.

Figura 6-7: Cuadro de diálogo Graph Selection Info



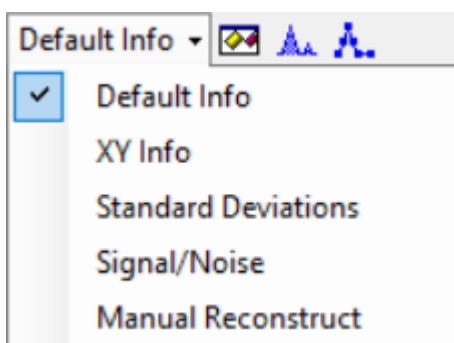
2. Haga una o más selecciones en el gráfico de cromatograma o espectro.

Figura 6-8: Cuadro de diálogo Graph Selection Info



3. Seleccione una opción de la lista: **Default Info**, **XY Info**, **Standard Deviations**, **Signal/Noise** o **Manual Reconstruct**, si procede.

Figura 6-9: Opciones de información de selección



Para obtener una descripción de los campos en el cuadro de diálogo, consulte el documento *Sistema de ayuda*.

4. (Opcional) Calcule la relación señal/ruido manualmente.
 - a. Seleccione un cromatograma o, en el flujo de trabajo de reconstrucción de masa, un gráfico de reconstrucción.
 - b. Seleccione la región de ruido y el pico objetivo pulsando la tecla **Shift** para seleccionar varios elementos.
 - c. Seleccione **Default Info** > **Signal/Noise**.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

- (Opcional) Haga clic en **Options** (🔧), establezca las opciones de información del gráfico y haga clic en **OK**. Para obtener una descripción de las opciones, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
Por ejemplo, para utilizar 3 Sigma como multiplicador de ruido, establezca **Noise multiplier for S/N** en **3**.
- (Opcional) Haga clic en **Fill Peaks** (📊).
El gráfico activo cambia entre un modo en el cual los picos se rellenan con un relleno claro/oscuro y un modo en el que no tienen relleno. Esta función es útil si el usuario desea ver el alcance de los picos que se corresponden con **Peak Width at Base**.
- (Opcional) Haga clic en **Show Point Symbols** (📍).
Todos los espectros en el panel activo cambian entre un modo en el cual los datos de puntos se indican con símbolos de puntos y un modo en el que no lo son. Esta función es útil si el usuario está examinando detenidamente un pico y desea ver cuántos puntos de datos contiene en lugar de utilizar solo la información textual mostrada en la ventana principal.

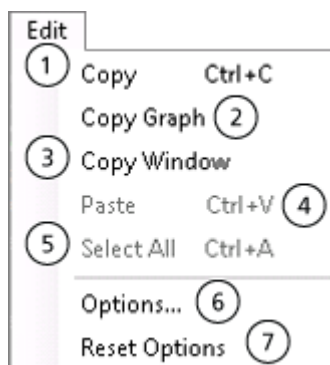
Edición de parámetros en los gráficos

Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras](#).

Haga clic en **Edit** y utilice las funciones del menú **Edit**.

Figura 6-10: Menú Edit: Opciones



Elemento	Descripción
1	Copia los datos actuales en el portapapeles. Cuando un espectro o cromatograma está activo, se copia una imagen del gráfico activo.
2	Cuando un espectro o un cromatograma está activo, copia el gráfico actual en el portapapeles como una imagen.
3	Copia una imagen de toda la ventana activa en el portapapeles. No se incluyen la barra de título ni las barras de herramientas de sus distintos paneles.

Elemento	Descripción
4	Pega los datos del portapapeles en la vista actual.
5	Cuando una tabla está activa, se seleccionan todas sus filas. Cuando un panel de texto está activo, se selecciona todo el texto.
6	Permite al usuario configurar las opciones para el aspecto de los gráficos, etiquetas y búsqueda de picos, procesamiento automático y cálculo de XIC. Consulte la sección Configuración de opciones .
7	Restaura las opciones del Explorador por defecto. Consulte la sección Restablecimiento de opciones .

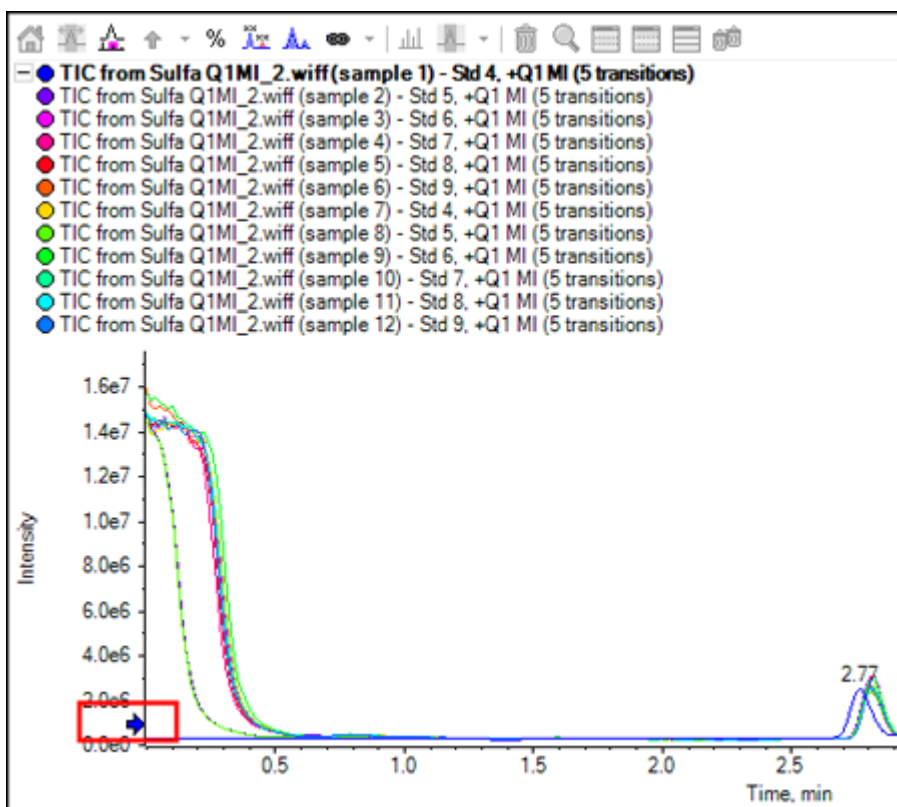
Cómo trabajar con datos en los gráficos

Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras](#).

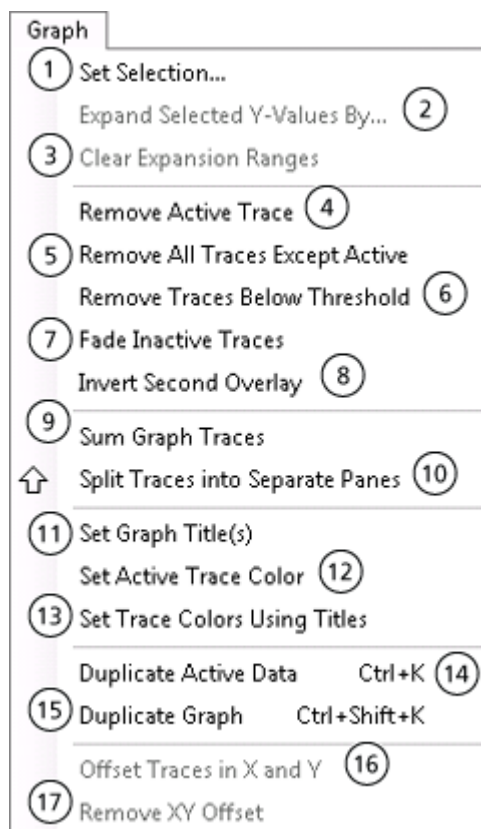
1. Para configurar el umbral para el etiquetado de los picos y las funciones posteriores, como la tabla **Data and Peaks**, arrastre la flecha azul que se muestra en el eje Y de los gráficos.

Figura 6-11: Flecha azul en el eje Y



2. Utilice las funciones que se muestran en el menú **Graph**.

Figura 6-12: Menú Graph: Opciones



Elemento	Descripción
1	<p>Selecciona las partes de los gráficos que se procesarán en operaciones posteriores. Por ejemplo, seleccione un área en un cromatograma y, a continuación, haga doble clic para obtener un promedio de espectro. Utilice la función Set Selection para escribir los rangos X específicos para que, a su vez, las selecciones puedan definirse de forma más precisa que con el cursor.</p> <ol style="list-style-type: none"> Haga clic en Graph > Set Selection. Se abre el cuadro de diálogo Set Selection. Escriba los valores Center y Width. Haga clic en OK. <p>Sugerencia: Para configurar selecciones en un gráfico manualmente, arrastre el cursor en la región del gráfico para hacer la selección. Si la tecla Shift está pulsada, se mantienen las selecciones actuales.</p>

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Elemento	Descripción
2	<p>Amplía los valores Y dentro de un rango determinado por un factor especificado para la generación de gráficos.</p> <ol style="list-style-type: none">Abra una o varias muestras.Seleccione una parte del gráfico.Haga clic en Graph > Expand Selected Y-Values by. Se abre el cuadro de diálogo Expand Selection.Escriba el factor de expansión.Haga clic en OK.
3	<p>Elimina todos los rangos de expansión.</p> <ul style="list-style-type: none">En un gráfico que tiene rangos de expansión, haga clic en Graph > Clear Expansion Ranges.
4	<p>Elimina el trazo activo actualmente del gráfico. Esta opción está disponible si hay más de un trazo superpuesto.</p> <ul style="list-style-type: none">En un gráfico que tiene más de un trazo superpuesto, haga clic en Graph > Remove Active Trace.
5	<p>Elimina todos los trazos salvo el que está activo actualmente. Esta opción está disponible si hay más de un trazo superpuesto.</p> <ul style="list-style-type: none">En un gráfico que tiene más de un trazo superpuesto, haga clic en Graph > Remove All Traces Except Active.
6	<p>Elimina los trazos superpuestos del gráfico para el que todos los puntos de datos están por debajo de la configuración del umbral actual.</p> <p>Si el usuario ha ampliado el gráfico para que solo una parte del rango X esté visible, se abre un cuadro de diálogo. El usuario puede seleccionar si desea eliminar los trazos que están por debajo del umbral o utilizar solo la parte que está visible en ese momento.</p> <ul style="list-style-type: none">En un gráfico que tiene más de un trazo superpuesto, haga clic en Graph > Remove Traces Below Threshold.
7	<p>Cuando el gráfico activo contiene más de un trazo superpuesto, dibuja todos los trazos salvo el activo actualmente utilizando un color más claro y menos intenso que el normal. Utilice esta función para centrarse en el trazo activo. Los trazos inactivos distraen menos. Para volver al estilo original, vuelva a seleccionar la función.</p> <ul style="list-style-type: none">En un gráfico que tiene más de un trazo superpuesto, haga clic en Graph > Fade Inactive Trace.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Elemento	Descripción
8	<p>Cuando el gráfico activo contiene más de un trazo superpuesto, invierte el segundo trazo. Esto puede facilitar la comparación visual de dos trazos similares. Seleccione Invert Second Overlay para volver a la vista original.</p>
9	<p>Reemplaza los gráficos con un único trazo que es la suma de todos los trazos individuales.</p> <ul style="list-style-type: none"> • En un gráfico activo que contiene más de un trazo superpuesto, haga clic en Graph > Sum Graph Traces.
10	<p>Crea un gráfico para cada capa independiente. Por ejemplo, si el usuario comienza con un gráfico que contiene tres trazos superpuestos y después selecciona esta función, el resultado final contiene cuatro paneles: el gráfico original con las capas superpuestas y un gráfico para cada uno de los conjuntos de datos individuales.</p> <ol style="list-style-type: none"> a. En un gráfico activo que contiene más de un trazo superpuesto, haga clic en Graph > Split Traces into Separate Panes. Se abre el cuadro de diálogo Number of Columns. b. Seleccione el número de columnas en la salida. El número de filas necesarias está determinado por el número de filas y el número de trazos superpuestos. c. Active la casilla para abrir los nuevos paneles en una ventana nueva. Si esta casilla no está activada, los nuevos paneles se abren dentro de la misma ventana.
11	<p>Se abre el cuadro de diálogo Set Titles. Utilice esta opción para cambiar manualmente los títulos de los trazos.</p>
12	<p>Se abre el cuadro de diálogo Color. Utilice esta opción para establecer el color del trazo de gráfico activo actualmente.</p>
13	<p>Se abre el cuadro de diálogo Set Trace Colors Using Titles. Cuando existen varios trazos de gráfico superpuestos, el software utiliza los colores predeterminados para las superposiciones. Utilice esta opción para establecer los colores específicos de los trazos cuyos títulos contienen texto específico.</p>
14	<p>Crea una copia de los datos del gráfico activo actualmente y después se lo agrega a dicho gráfico. Utilice esta función para ver el efecto de una operación de procesamiento de datos en particular. Por ejemplo, si el usuario duplica los datos con esta función, y después suaviza uno de los dos trazos, el gráfico resultante contiene las vistas antes y después de la superposición.</p> <ul style="list-style-type: none"> • En un gráfico activo, haga clic en Graph > Duplicate Active Data.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Elemento	Descripción
15	<p>Crea una copia de los datos del gráfico activo actualmente. Utilice esta función para ver el efecto de una operación de procesamiento de datos en particular. Por ejemplo, si el usuario duplica los datos con esta función, y después suaviza uno de los dos trazos, las vistas antes y después de la superposición se visualizan en dos gráficos independientes. Vincule los ejes X de manera que al ampliar un gráfico se amplíe el otro de forma automática.</p> <ul style="list-style-type: none">• En un gráfico activo, haga clic en Graph > Duplicate Graph.
16	<p>Se abre el cuadro de diálogo Offset Traces. Utilice esta opción para crear un gráfico apilado en tres dimensiones a partir de una serie de trazos de gráficos superpuestos.</p>
17	<p>Quita del TIC las desviaciones generadas.</p>

Uso de las herramientas de operación en dos paneles

Procedimientos de condiciones previas

- Abra el espacio de trabajo Explorer.

Utilice los iconos en el borde derecho de los paneles para realizar operaciones en dos paneles, el panel de origen y el panel de destino. Consulte la sección [Tabla 6-2](#). En todos los casos, haga clic en el icono del panel de origen y, a continuación, arrástrelo al panel de destino.

Tabla 6-2: Herramientas para dos paneles



Icono	Nombre	Descripción
	Mover panel	<p>Cambia las posiciones relativas de los paneles. Se muestra en la esquina superior derecha de cada panel. Haga clic en el icono de un panel y, a continuación, arrástrelo hacia la parte superior, inferior, izquierda o derecha de un segundo panel. Según donde se suelte el cursor, la posición del primer panel cambia respecto al segundo. Cuando el usuario mueve el panel, un lado del segundo panel está resaltado en rojo para indicar dónde se colocará el primer panel.</p> <p>Nota: El usuario puede también arrastrar paneles de una ventana a la otra.</p>

Tabla 6-2: Herramientas para dos paneles (continuación)

Icono	Nombre	Descripción
	Add Data	<p>Suma dos conjuntos de datos juntos, punto a punto. Los datos del panel de origen en los que se hicieron clic originalmente se agregan al panel de destino, el panel donde se suelta el icono arrastrado. El título del panel modificado se actualiza para indicar que se ha modificado.</p> <hr/> <p>Nota: Solo se pueden añadir dos conjuntos de datos del mismo tipo. Por ejemplo, el usuario no puede sumar un espectro a un cromatograma.</p> <hr/> <p>Sugerencia: Si el gráfico de destino contiene más de un trazo superpuesto, de manera predeterminada, los datos de origen se suman solo a los datos de destino activos. Mantenga pulsada la tecla Ctrl para añadir el origen a todos los conjuntos de datos del panel de destino.</p>
	Subtract Data	<p>Subtrae el fondo de un espectro de masas. Similar al icono Add Data, salvo que los datos de origen se restan de los datos de destino.</p> <hr/> <p>Sugerencia: Si el gráfico de destino contiene más de un trazo superpuesto, de manera predeterminada, los datos de origen se restan solo a los datos de destino activos. Mantenga pulsada la tecla Ctrl para añadir el origen a todos los conjuntos de datos de destino.</p> <hr/> <p>Sugerencia: Normalmente no se mantienen los puntos de datos cuya intensidad en el origen es superior que en el destino. Es decir, se descartan los valores Y negativos. Mantenga pulsada la tecla Shift para conservar los puntos con intensidad negativa.</p>

Tabla 6-2: Herramientas para dos paneles (continuación)

Icono	Nombre	Descripción
	Superponer datos	<p>Superpone los datos activos del gráfico de destino en el gráfico de destino. Una vez que la operación se ha completado, el gráfico de destino contiene una nueva serie con una copia de los datos de destino.</p> <p>Sugerencia: Si el gráfico de origen contiene más de un trazo superpuesto, de manera predeterminada, solo una copia de sus datos activos se mueve al gráfico de destino. Mantenga pulsada la tecla Ctrl para superponer una copia de todos los conjuntos de datos del gráfico de origen en el gráfico de destino.</p>

Movimiento de paneles o ventanas

Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras.](#)

Haga clic en **Window** y utilice las funciones del menú **Window**.

Figura 6-13: Menú Window: Opciones



Elemento	Descripción
1	Abre una ventana que muestra información de la región seleccionada en el gráfico activo. Por ejemplo, la selección del rango X, el rango de intensidad de los puntos seleccionados, etc. Si esta ventana ya está visible, puede cerrarse seleccionando el elemento del menú. Consulte la sección Visualización de la información de selección de gráfico .
2	Cambia la disposición física de la información de la ventana de un formato de fila a un formato de columna.
3	Elimina el panel activo actualmente de su ventana y la coloca en una nueva ventana.
4	Organiza las ventanas abiertas que no se han minimizado para que puedan estar una junto a la otra en una fila.

Elemento	Descripción
5	Organiza las ventanas abiertas que no se han minimizado para que puedan estar una encima o debajo de la otra en una columna.

Realización de un suavizado gaussiano

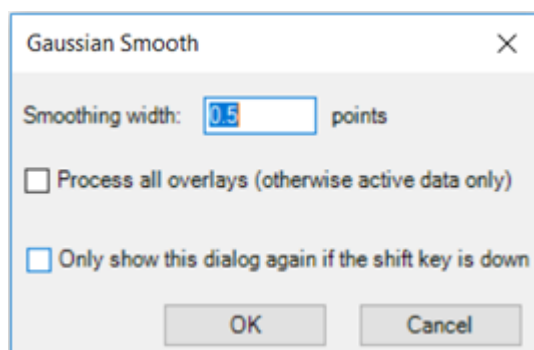
Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras.](#)

Aplica un algoritmo de suavizado gaussiano. Se trata de un filtro de una anchura especificada donde los factores de ponderación siguen una función gaussiana o normal.

1. Haga clic en **Process > Gaussian Smooth**.

Figura 6-14: Cuadro de diálogo Gaussian Smooth



2. Escriba un valor en el campo **Smoothing width**.
Realmente se trata de la anchura de la función gaussiana en la mitad de su altura máxima. La anchura total es mayor porque el cálculo se realiza en las alas del modelo gaussiano. Se permiten valores fraccionados, en cuyo caso la mitad de la anchura del modelo gaussiano es menor a un punto.
3. Si el gráfico activo contiene varios trazos, seleccione **Process all overlays (otherwise active data only)** para aplicar la operación en todos los trazos.
Si la casilla **Only show this dialog again if the shift key is down** está activada, entonces siempre se utilizará la acción seleccionada para todos los usos futuros a menos que el usuario pulse la tecla **Shift** para cambiar la opción.
4. Haga clic en **OK**.

Datos de umbral

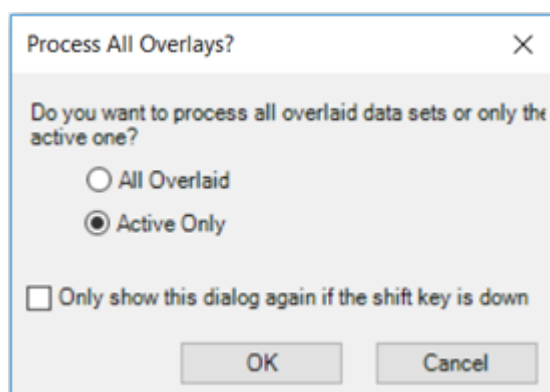
Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras.](#)

Elimina cualquier punto de datos que tenga una intensidad inferior al umbral especificado actualmente. Establece el umbral arrastrando la flecha azul que se muestra hacia los gráficos del eje y.

1. Haga clic en **Process > Threshold Data**.
Si el gráfico activo contiene una serie superpuesta de varias muestras, se abre el cuadro de diálogo Process All Overlays? .

Figura 6-15: Cuadro de diálogo Process All Overlays



2. Si se abre el cuadro de diálogo Process All Overlays?, siga estos pasos:
 - a. Realice una de las siguientes acciones:
 - Seleccione **All Overlaid** para generar los TIC superpuestos de todas las muestras disponibles.
 - Seleccione **Active Only** para generar TIC solo de la muestra activa actualmente.
 - b. Haga clic en **OK**.

Si la casilla **Only show this dialog again if the shift key is down** está activada, entonces siempre se utilizará la acción seleccionada para todos los usos futuros a menos que el usuario pulse la tecla **Shift** para cambiar la opción.

Datos de subconjunto usando la selección de gráfico

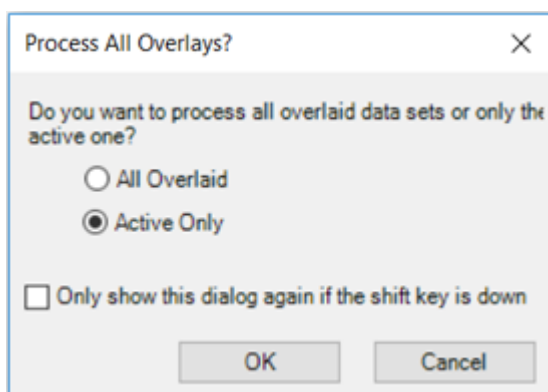
Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras.](#)

Esta función está solo disponible cuando hay activo un gráfico exactamente con una región seleccionada. Elimina los puntos de datos que están fuera de la región seleccionada. Utilice esta función para centrar el procesamiento de los datos en un subconjunto de datos completos.

1. Haga una selección en el gráfico.
2. Haga clic en **Process > Subset Data (using graph selection)**.
Si el gráfico activo contiene una serie superpuesta de varias muestras, se abre el cuadro de diálogo Process All Overlays? .

Figura 6-16: Cuadro de diálogo Process All Overlays



3. Si se abre el cuadro de diálogo Process All Overlays?, siga estos pasos:
 - a. Realice una de las siguientes acciones:
 - Seleccione **All Overlaid** para generar los XIC o TIC superpuestos de todas las muestras disponibles.
 - Seleccione **Active Only** para generar los XIC o TIC solo de la muestra activa actualmente.
 - b. Haga clic en **OK**.

Si la casilla **Only show this dialog again if the shift key is down** está activada, entonces siempre se utilizará la acción seleccionada para todos los usos futuros a menos que el usuario pulse la tecla **Shift** para cambiar la opción.

Cromatograma de sustracción de punto de referencia

Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras.](#)

Elimina un fondo variable relativamente lento de un cromatograma.

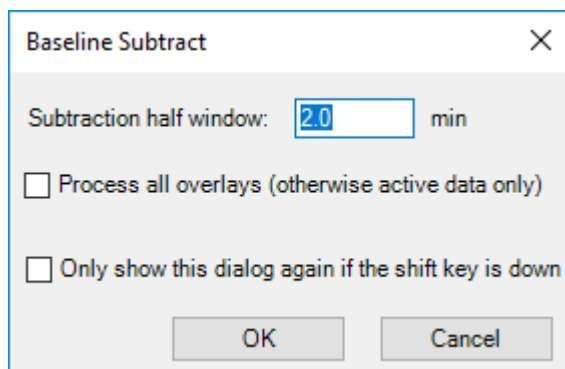
Para cada punto de datos en el cromatograma, se centra una ventana en el valor X correspondiente y se registran los puntos con una intensidad mínima dentro de la ventana a la derecha e izquierda. Se traza una línea recta entre estos dos puntos y se calcula el valor

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Y en el centro de la ventana. Este es el punto de referencia que se elimina de los datos en dicho punto.

1. Haga clic en **Process > Baseline Subtract Chromatogram**.

Figura 6-17: Cuadro de diálogo Baseline Subtract



2. Escriba un valor, en minutos, en el campo **Subtraction half window**.
3. Si el gráfico activo contiene varios trazos, seleccione **Process all overlays (otherwise active data only)** para aplicar la operación en todos los trazos. Si la casilla **Only show this dialog again if the shift key is down** está activada, entonces siempre se utilizará la acción seleccionada para todos los usos futuros a menos que el usuario pulse la tecla **Shift** para cambiar la opción.
4. Haga clic en **OK**.

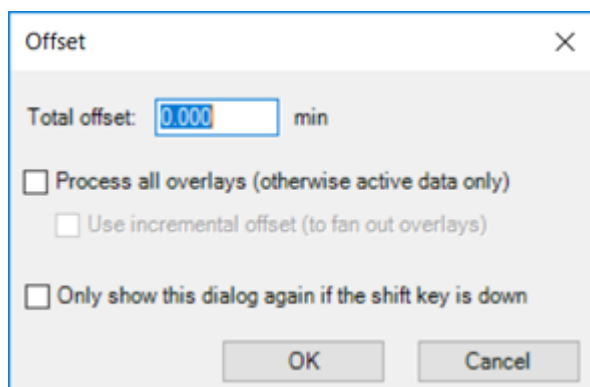
Desviación del cromatograma

Procedimientos de condiciones previas
<ul style="list-style-type: none">• Apertura de muestras.

Se utiliza para desviar los valores de tiempo de un cromatograma.

1. Haga clic en **Process > Offset Chromatogram**.

Figura 6-18: Cuadro de diálogo Offset



2. Escriba un valor, en minutos, en el campo **Total offset**.
3. Si el gráfico activo contiene varios trazos, seleccione **Process all overlays (otherwise active data only)** para aplicar la operación en todos los trazos. Si la casilla **Only show this dialog again if the shift key is down** está activada, entonces siempre se utilizará la acción seleccionada para todos los usos futuros a menos que el usuario pulse la tecla **Shift** para cambiar la opción.
4. Seleccione **Use incremental offset (to fan out overlays)** para desplegar las superposiciones en el sentido del tiempo.
5. Haga clic en **OK**.

Centroide de un espectro

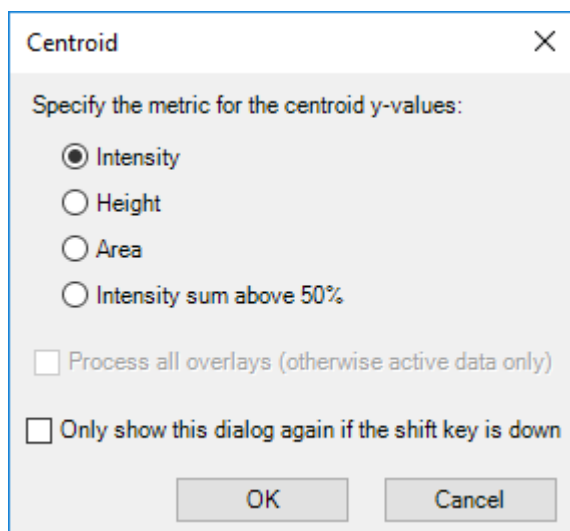
Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras](#).

Crea un centroide de un espectro de masas, es decir, reemplaza un espectro de perfil con puntos de masa e intensidad solo para los picos detectados.

1. Haga clic en **Process > Centroid Spectrum**.

Figura 6-19: Cuadro de diálogo Centroid



2. Seleccione las métricas que se van a utilizar para procesar el centroeide:
 - **Intensity**: Para cada pico, el valor Y del centroeide es la intensidad del punto de datos más alto que contiene el pico.
 - **Height** : Esta métrica es similar a la métrica Intensidad, salvo que se resta la intensidad del punto de referencia si hay una desviación del punto de referencia.
 - **Area**: Para cada pico, el valor Y del centroeide es el área total del pico. Se trata de un verdadero integral porque el valor registrado depende tanto del perfil de intensidad como de la anchura del pico.
 - **Intensity sum above 50%**: Para cada pico, el valor Y es la suma de las partes de las intensidades incluidas en el pico que son superiores al 50 % de la intensidad del ápice del pico. Este valor es útil porque no depende solo de la intensidad de un solo punto de datos, como las métricas Intensidad y Altura, y no está influido por los bordes del pico, que pueden ser ruidosos o tener interferencias.
3. Si el gráfico activo contiene varios trazos, seleccione **Process all overlays (otherwise active data only)** para aplicar la operación en todos los trazos. Si la casilla **Only show this dialog again if the shift key is down** está activada, entonces siempre se utilizará la acción seleccionada para todos los usos futuros a menos que el usuario pulse la tecla **Shift** para cambiar la opción.
4. Haga clic en **OK**.

Exportación de datos como texto

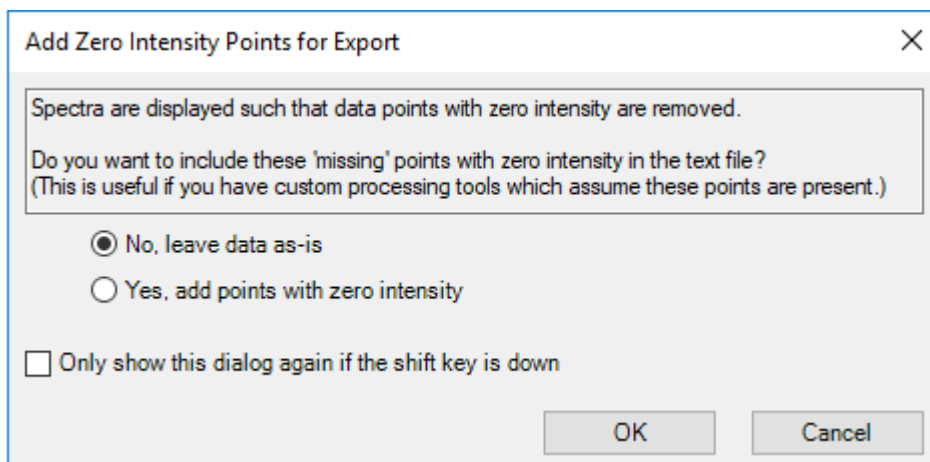
Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras.](#)

Se guarda el espectro o cromatograma activo actualmente en un archivo de texto delimitado por tabuladores.

1. Haga clic en **File > Export > Data as Text**.
Si se exportan datos del espectro, se abre el cuadro de diálogo Add Zero Intensity Points for Export.

Figura 6-20: Cuadro de diálogo Add Zero Intensity Points for Export



2. Si el cuadro de diálogo Add Zero Intensity Points for Export está abierto, realice una de las siguientes acciones:
 - Haga clic en **No, leave data as-is** para excluir puntos de intensidad cero del archivo exportado.
 - Haga clic en **Yes, add points with zero intensity** para incluir puntos de intensidad cero del archivo exportado.

A continuación, haga clic en **OK**.

3. Escriba un nombre de archivo para el archivo exportado.
4. Haga clic en **Save**.

Exportación de la lista de picos como texto

Procedimientos de condiciones previas

- [Apertura de muestras](#).

El usuario puede guardar la lista de picos para el espectro o cromatograma actualmente en un archivo de texto delimitado por tabulaciones. Este archivo contiene información como el valor X (masa o tiempo) del centroide, área de pico, altura, etc.

1. Haga clic en **File > Export > Peak List as Text**.
2. Escriba un nombre de archivo para el archivo exportado.
3. Haga clic en **Save**.

Impresión de datos

Procedimientos de condiciones previas

- | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none">• Apertura de muestras. |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|

1. Haga clic en **File > Print** y, a continuación, seleccione la opción requerida.
Se abre el cuadro de diálogo Print.
2. Seleccione una impresora y, a continuación, haga clic en **Print**.

Restablecimiento de opciones

Procedimientos de condiciones previas

- | |
|----------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none">• Abra el espacio de trabajo Explorer. |
|----------------------------------------------------------------------------------------|

El usuario puede restablecer los valores predeterminados de todas las opciones en el espacio de trabajo Explorer. En ellos se incluyen las opciones descritas en la sección anterior, así como las opciones de procesamiento. La restauración de las opciones solo afecta al usuario de Windows que ha iniciado sesión, no a los demás usuarios del mismo ordenador.

1. Haga clic en **Edit > Reset Options**.
Se muestra un cuadro de diálogo de confirmación.
2. Haga clic en **OK**.

Configuración de opciones

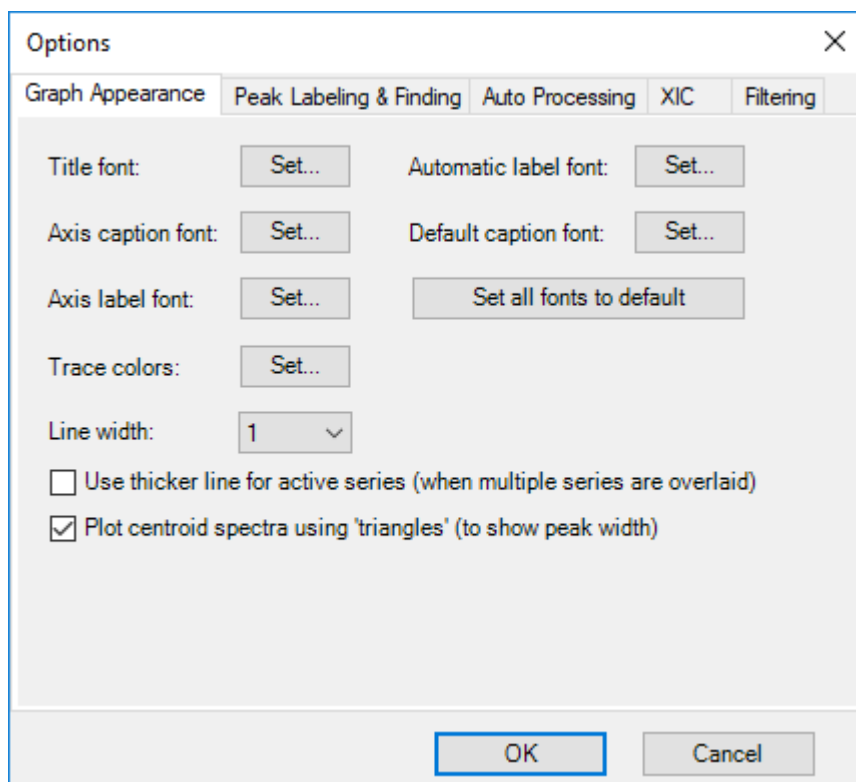
Procedimientos de condiciones previas

- | |
|----------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none">• Abra el espacio de trabajo Explorer. |
|----------------------------------------------------------------------------------------|

Utilice las funciones de cada pestaña según sea necesario.

1. Haga clic en **Edit > Options**.

Figura 6-21: Cuadro de diálogo Options: pestaña Graph Appearance



2. Establezca las opciones en cada pestaña, según proceda. Para obtener una descripción de las opciones, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
3. Haga clic en **OK**.

Espacio de trabajo Analytics

El acceso a las funciones de este espacio de trabajo está controlado por la función asignada al usuario. Consulte el documento *Guía del director de laboratorio*.

Nota: Las formas controladas de generar datos desde el espacio de trabajo Analytics son: la exportación de las tablas de resultados, la transferencia de datos a LIMS y la generación de informes. Los demás métodos de generación de datos, como copiar y pegar de las tablas de resultados, no están controlados. No utilice métodos de salida no controlados para un fin regulado.

El espacio de trabajo Analytics no admite la agrupación de números. No agrupe números en cuadros de texto; por ejemplo, en los parámetros de integración o en cuadrículas, como las tablas de resultados.

Los métodos de procesamiento incluyen un conjunto de criterios que se utilizan para cuantificar los picos seleccionados para su integración.

Los revisores deben examinar los datos de acuerdo con los criterios de integración de picos y aceptación de datos en los procedimientos operativos estándar (SOP) del laboratorio.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

SCIEX OS puede procesar datos mientras los adquiere SCIEX OS o el software Analyst. Cualquier muestra adquirida se puede añadir a la tabla de resultados. Para añadir muestras que se están adquiriendo, espere a que finalice la adquisición y, a continuación, añádalas a la tabla de resultados.

Defina los parámetros de procesamiento predeterminados para el proyecto

Esta opción establece los parámetros predeterminados de búsqueda de picos que se usan cuando se crea un método de procesamiento. Si hay más de unos pocos componentes, configure los valores predeterminados basados en la cromatografía, para que no haya necesidad de ajustarlos individualmente para cada componente. Sin embargo, no es probable que un solo conjunto de parámetros sea idóneo para todos los componentes, por lo que podría ser necesario ajustar ciertos parámetros individualmente para algunos componentes.

1. En el espacio de trabajo Analytics, haga clic en **Projects > Project default settings**.

Nota: Seleccione el nombre de proyecto correcto en el panel de estado.

Se abre el cuadro de diálogo Project Default Settings.

2. En la página Quantitative Processing, siga estos pasos:
 - a. Seleccione un algoritmo de relación señal/ruido en la lista **Signal to Noise Algorithm**.
 - b. Seleccione un algoritmo de integración en la lista **Integration Algorithm** y, a continuación, establezca los parámetros predeterminados para el procesamiento cuantitativo.

Para obtener las descripciones de los parámetros, consulte el documento *Sistema de ayuda*.

3. En la página Qualitative Processing, seleccione un algoritmo de búsqueda en biblioteca en la lista **Library Search Algorithm** y, a continuación, establezca los parámetros predeterminados para el procesamiento cualitativo.

Para obtener información sobre los algoritmos, consulte el documento *Sistema de ayuda*.

4. En la página Mass Reconstruction Processing, seleccione un algoritmo de integración en la lista **Integration Algorithm** y, a continuación, establezca los parámetros predeterminados para la reconstrucción de masa.

Para obtener las descripciones de los parámetros, consulte el documento *Sistema de ayuda*.

Nota: Solo están disponibles los algoritmos MQ4 y Summation.

5. Haga clic en **Save**.
6. Haga clic en **Close**.

Trabajar con diseños de espacio de trabajo

Use la función de diseños de espacio de trabajo para guardar diseños de espacio de trabajo personalizados en el espacio de trabajo Analytics. El diseño personalizado se guarda con el archivo de resultados y se aplica automáticamente cuando se abre el archivo. De este modo, los usuarios ahorran tiempo al analizar los resultados. Un diseño de espacio de trabajo guardado se puede aplicar a otros archivos de resultados. También se puede establecer como diseño de espacio de trabajo predeterminado de un proyecto, que se aplica siempre que se abre un archivo de resultados en ese proyecto. Los diseños de espacio de trabajo se pueden guardar en cualquier lugar, incluso en redes locales.

Los usuarios pueden cambiar entre diferentes diseños guardados para realizar distintos tipos de análisis de datos en sus archivos de resultados.

Nota: Todos los diseños de espacio de trabajo se guardan con la extensión de nombre de archivo qlayout.

Nota: En un diseño de espacio de trabajo no se conserva ninguna configuración que cambie o modifique datos directamente.

En la tabla siguiente se indican los elementos de la interfaz de usuario que se guardan con los diseños de espacio de trabajo.

Tabla 6-3: Elementos de la IU que se guardan con los diseños de espacio de trabajo

Panel	Elementos de la IU que se guardan
Results Table	<ul style="list-style-type: none"> • La casilla de verificación Qualify for Rules Filters. • Filtros de filas de calificación. • Opción de ordenación de la tabla. • Filas y columnas resaltadas. • Table display settings. • Filtros de columna. <p>Nota: Cuando el diseño del espacio de trabajo se aplica a una Tabla de resultados diferente, se aplica la configuración de los filtros de columna, si es posible. Si una columna filtrada no existe en una Tabla de resultados o si una opción de filtro no puede aplicarse, la configuración no se aplica.</p>
Menú Views	<ul style="list-style-type: none"> • La configuración de Show hidden pane. • Si la opción Tabbed view se ha seleccionado o no.

Tabla 6-3: Elementos de la IU que se guardan con los diseños de espacio de trabajo (continuación)

Panel	Elementos de la IU que se guardan
Samples o Components and Groups	<ul style="list-style-type: none"> • Si la lista Samples o Components and Groups está abierta. • Si se han seleccionado muestras o componentes específicos para que se muestren en una tabla de resultados (Results Table). • En la lista Samples, la configuración de Options > Synchronize Sample Selection. • En la lista Components and Groups, la selección de las opciones All Internal Standards, All Analytes, All Components y Groups (where applicable). • En la lista Components and Groups, la configuración de Options > Show IS
Peak Review	<ul style="list-style-type: none"> • Si el panel Peak Review está abierto y si está acoplado. • La vista (View) actual. • Cualquier opción que se haya seleccionado en Options, incluidas las opciones de Peak review display settings y la opción XIC Graph Title.
Calibration Curve	<ul style="list-style-type: none"> • Si el panel Calibration Curve está abierto. • La configuración de Show excluded standards, Show quality controls, Show legend, Use percent Y-axis y Log-log plot en el menú Options.
Metric Plot	<ul style="list-style-type: none"> • Si el panel Metric Plot está abierto. • Configuración del menú Link. • Configuración del cuadro de diálogo Regression. • La configuración de Display "N/A" as 0.0, Show sample names, Show legend, Use percent Y-axis, Start Y-axis at 0 y Connect with lines en el menú Options.
Panel Statistics	<ul style="list-style-type: none"> • Si el panel Statistics está abierto. • Selecciones activas de Sample grouping. • Selecciones activas de Metric.

Guardar el diseño del espacio de trabajo actual

1. Abra el espacio de trabajo Analytics.
2. Abra una tabla de resultados.
3. Personalice el espacio de trabajo según convenga.

4. Haga clic en **Views > Save current layout**.
Se abre el cuadro de diálogo Save Workspace Layout As.
5. Escriba un nombre para el diseño del espacio de trabajo y luego haga clic en **Save**.

Aplicar otro diseño de espacio de trabajo al proyecto actual

La aplicación de diferentes diseños de espacio de trabajo al archivo de resultados actual permite al usuario llevar a cabo rápidamente distintos tipos de análisis de resultados en los mismos datos.

1. Abra el espacio de trabajo Analytics.
2. Abra un archivo de resultados.
3. Haga clic en **Views > Apply different layout to current results**.
Se abre el cuadro de diálogo Apply a Workspace Layout.
4. Haga clic en **Browse**, seleccione un diseño y luego haga clic en **Open**.
El cuadro de diálogo Apply a Workspace Layout muestra una vista previa del diseño de espacio de trabajo seleccionado.
5. Haga clic en **OK**.

Sugerencia: Aplique los diseños de espacio de trabajo utilizados recientemente haciendo clic en **Views > Recent layouts** y seleccionando un diseño.

Definir el diseño del espacio de trabajo actual como el predeterminado del proyecto

Al definir un diseño de espacio de trabajo predeterminado del proyecto se conserva un diseño entre varias sesiones o usuarios. También hace que cualquier archivo de resultados nuevo creado dentro del proyecto se abra con el diseño de espacio de trabajo predeterminado del proyecto.

1. Abra el espacio de trabajo Analytics.
2. Abra un archivo de resultados.
3. Personalice el diseño del espacio de trabajo para adaptarlo al proyecto.
4. Haga clic en **Views > Set current layout as project default**.
Se abre el cuadro de diálogo Default Workspace Layout for the Project.
5. En el campo **Default layout name**, escriba el nombre que desee utilizar para el diseño y, a continuación, haga clic en **OK**.
6. Haga clic en **Results > Save**.

Definición de la configuración de exportación segura del proyecto

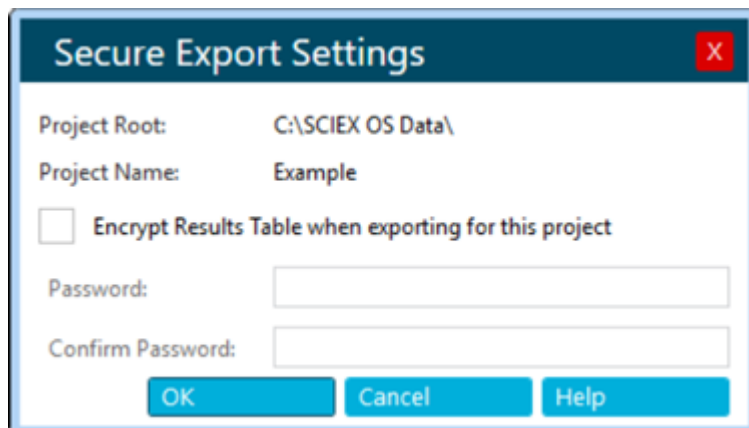
Solo un usuario a quien se haya asignado el rol de administrador puede realizar esta tarea.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Si está seleccionada esta opción, los datos del archivo de texto se cifran durante la exportación. Defina una contraseña para activar el cifrado.

1. En el espacio de trabajo Analytics, haga clic en **Projects > Project secure export settings**.

Figura 6-22: Cuadro de diálogo Secure Export Settings



2. Seleccione la casilla **Encrypt Results Table when exporting for this project**.
3. Escriba una contraseña en el campo **Password**.
4. Vuelva a escribir la contraseña en el campo **Confirm Password**.
5. Haga clic en **OK**.

Activación de la advertencia de pico modificado en proyecto

Por defecto, esta opción no está seleccionada. Cuando está seleccionada, si un usuario cambia un cromatograma de la tabla de resultados y guardar los cambios, un mensaje de advertencia indica que se ha realizado un cambio. El usuario puede escoger seguir guardando o volver la tabla de resultados.

En el espacio de trabajo Analytics, haga clic en **Projects > Enable project modified peak warning**.

Creación de un método de procesamiento

Los métodos de procesamiento contienen parámetros cuantitativos y cualitativos para el procesamiento de datos. El flujo de trabajo no dirigido se utiliza para componentes desconocidos.

Sugerencia: Para editar un método de procesamiento existente, haga clic en **Process Method > Open**.

1. Abra el espacio de trabajo Analytics.
2. Haga clic en **Process Method > New**.

Sugerencia: Para editar el método de procesamiento de la tabla de resultados actual, haga clic en **Process Method > Edit embedded method** y, a continuación, siga con el paso 3.

3. En la página Workflow, seleccione al menos un flujo de trabajo y las muestras de referencia. Para obtener descripciones de los campos de esta página, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
-

Sugerencia: Para utilizar el flujo de trabajo de reconstrucción de masa, seleccione solo **Quantitation**.

4. Seleccione la página Components y, a continuación, siga estos pasos:
 - a. Si procede, seleccione el flujo de trabajo de reconstrucción de masa haciendo clic en **Options > Mass Reconstruction** y, a continuación, haciendo clic en **Yes** en el cuadro de diálogo de confirmación.
 - b. Complete la tabla de componentes. Para obtener descripciones de los campos de esta tabla, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
-

Nota: El flujo de trabajo de reconstrucción de masa solo está disponible cuando el algoritmo de integración se establece en **MQ4** o **Summation**.

Sugerencia: Si se define un grupo en la tabla Components, el usuario puede escoger sumar los iones en el grupo, aunque el ion precursor y el índice experimental sean diferentes para las transiciones. La suma de iones no se muestra en la tabla, sino que se muestra en la página Integration y en la tabla de resultados como **group name > Sum**. Esta función es útil para la cuantificación de proteínas y péptidos.

Sugerencia: Si se desconoce el tiempo de retención de los componentes, establezca **Retention Time Mode** para una masa o fórmula química en **Find *n* peaks**, donde *n* es 1, 2, 5, 10 o todo. El software identifica el número especificado de funciones con la mayor área de pico, asigna el tiempo de retención adecuado y ejecuta un flujo de trabajo de procesamiento de picos dirigido. Cuando finaliza el procesamiento, el método integrado para la tabla de resultados puede guardarse como método dirigido.

Sugerencia: Para importar componentes o componentes y parámetros de integración de un archivo de texto, utilice el comando adecuado del menú **Import**. Si la información del componente no contiene unidades de concentración, el software utiliza el valor de **Concentration units** definido en el cuadro de diálogo Project Default Settings.

Nota: Los parámetros de integración no se pueden importar de los métodos de procesamiento que utilizan el algoritmo de integración AutoPeak.

Nota: Los parámetros de integración se pueden importar de los métodos de cuantificación del software Analyst. Los parámetros del software Analyst se asignan a los parámetros de SCIEX OS correspondientes, y se utiliza la configuración predeterminada del proyecto para los parámetros que no se puedan asignar.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Nota: Los parámetros de integración se pueden importar de métodos de cuantificación del software MultiQuant que no utilizan el algoritmo SignalFinder. En el caso de los métodos MQ4, **S/N Integration Threshold** se cambia de 0, el valor predeterminado del software MultiQuant, al valor predeterminado de proyecto. Los parámetros del software MultiQuant se asignan a los parámetros correspondientes de SCIEX OS.

5. Seleccione la página Integration y, a continuación, siga estos pasos:
 - a. Seleccione los parámetros de integración para cada componente. Para obtener descripciones de los campos de esta página, consulte el documento *Sistema de ayuda*.

Sugerencia: Para definir las reglas para la eliminación automática de valores atípicos, haga clic en **Options > Remove Outliers Automatically**. Consulte el documento: *Sistema de ayuda*.

- b. (Opcional) Para ver la región de ruido, haga clic en **Options > Show Noise Regions**. Consulte la sección [Cómo trabajar con regiones de ruido](#).

Nota: Show Noise Regions solo se muestra cuando el algoritmo de relación señal/ruido se establece en **Standard Deviation** o **Peak to Peak**.

6. (Si procede) Seleccione la página Library Search y, a continuación, defina los parámetros de búsqueda de biblioteca. Para obtener descripciones de los campos de esta página, consulte el *sistema de ayuda*.
7. Seleccione la página Calculated Columns y defina cualquier fórmula personalizada que vaya a ser utilizada en las columnas calculadas personalizadas. Para obtener descripciones de los campos de esta página, consulte el *sistema de ayuda*.

Nota: Para obtener más información sobre las columnas calculadas, consulte la sección [Columnas calculadas](#).

8. Seleccione la página Flagging Rules y, a continuación, seleccione las reglas que se utilizarán para marcar los resultados en la tabla de resultados. Para obtener descripciones de los campos de esta página, consulte el documento *Sistema de ayuda*. Opcionalmente, cree reglas de marcado personalizadas, o personalice los siguientes valores para las reglas predefinidas:
 - Criterios de aceptación para lo siguiente:
 - Precisión de los estándares y controles de calidad
 - Rango de concentración calculada para muestras desconocidas
 - Integración de picos
 - Configuración de señales cualitativas para la precisión en masa, confianza del tiempo de retención, coincidencia de isótopos, puntuación de la biblioteca y puntuación del buscador de fórmulas
 - Configuración de señales cualitativas para la aceptación de la proporción de iones.



La proporción de iones es la proporción de respuestas de pico, es decir, el área o altura del cualificador y cuantificador.

Sugerencia: Para importar las reglas de etiquetado de un archivo de texto, haga clic en **Import**.

9. Seleccione la página Formula Finder y, a continuación, seleccione la configuración del buscador de fórmulas. Para obtener descripciones de los campos de esta página, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
 10. (Si se ha seleccionado el flujo de trabajo no dirigido) Seleccione la página Non-targeted Peaks y defina los parámetros de búsqueda no dirigida. Para obtener descripciones de los campos de esta página, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
 11. Haga clic en **Save**.
-

Sugerencia: Si se crea un método no dirigido, los parámetros predeterminados del proyecto actual se usan para la integración de picos y dichos parámetros se guardan en el archivo del método de procesamiento. Si el método de procesamiento contiene los análisis dirigidos, los parámetros de integración personalizados para los componentes dirigidos no afectarán a la integración de picos no dirigidos. Si el usuario cambia los parámetros predefinidos del proyecto con posterioridad, el parámetro cambiado no afectará el método no dirigido existente, que aún contiene los parámetros del momento de creación del método. Solo el método no dirigido de nueva creación utiliza los parámetros cambiados.

Procesamiento de datos

1. Abra el espacio de trabajo Analytics.
2. Haga clic en **Results > New**.
3. En el cuadro de diálogo Process New Results, utilice las flechas ( y ) para seleccionar las muestras que se van a procesar.
4. Seleccione un método de procesamiento de una de las siguientes maneras
 - Haga clic en **Browse**, seleccione un método de procesamiento y haga clic en **Open**.
 - Haga clic en **New** y cree un nuevo método de procesamiento. Consulte la sección [Creación de un método de procesamiento](#).
5. (Opcional) Haga clic en **Edit** para editar el método de procesamiento. Consulte la sección [Creación de un método de procesamiento](#).
6. Seleccione una muestra de comparación para flujos de trabajo no dirigidos.
7. Haga clic en **Process**.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Nota: En análisis no dirigidos, se realiza una agrupación automática por aducto. El algoritmo de agrupación asigna modificadores de aductos para compuestos con el mismo tiempo de retención si la diferencia de masa entre ellos se asocia a un aducto común. Esta función ayuda a prevenir la investigación de compuestos duplicados con distintos aductos de carga.

Si los datos contienen columnas de lotes personalizadas con el mismo nombre que las columnas predefinidas de la tabla de resultados o fórmulas existentes, se muestra un mensaje de advertencia. Haga clic en **OK** para continuar. Se añade un carácter de subrayado (_) al principio de estos nombres de columna.

- Para mostrar u ocultar los tipos de muestra, haga clic en el icono de filtrar (▼) en la columna **Sample Type** y active o desactive las casillas necesarias.
- Para establecer los filtros de aceptación, haga clic en el icono de filtro (▼) en cualquiera de las columnas de aceptación, seleccione **Filter by Flag** y, a continuación, seleccione **Pass** o **Fail**.


Nota: Las columnas de aceptación incluyen **Accuracy**, **Accuracy Acceptance**, **Asymmetry Factor**, **Calculated Concentration**, **Concentration Acceptance**, **Integration Acceptance**, **Quality Retention Time Delta (min)**, **Retention Time Error (%)** y **Total Width**.

- Para seleccionar filtros cualitativos de confianza, haga clic en la señal de la puntuación **Confidence** y active o desactive las casillas necesarias.

Nota: Tras generar la tabla de resultados utilizando el algoritmo AutoPeak, si el usuario cambia la anchura del XIC y el tiempo de retención esperado, los datos se volverán a procesar utilizando el modelo de algoritmo anterior a no ser que el usuario actualice el modelo utilizando la anchura del nuevo XIC y los valores de tiempo de retención esperado.

- Para filtrar en función de valores individuales de una columna de la tabla de resultados, haga clic en el icono filtrar (▼) en la cabecera de la columna y seleccione las casillas de los valores que se mostrarán en la tabla de resultados.

Sugerencia: Para aplicar filtros personalizados adicionales, seleccione **Text Filters**.

Sugerencia: Para volver a aplicar el filtro tras un cambio en la tabla de resultados, como un cambio del área de conteo, haga clic en **Reapply Filter** ()




- Guarde archivo de resultados de una de las siguientes maneras:
 - Haga clic en **Results > Save**.
 - Para evitar cambios en la tabla de resultados, haga clic en **Results > Lock results file and save**.

Adición de muestras

Condiciones previas

- | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none">• En el espacio de trabajo Analytics, una tabla de resultados está abierta. |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Esta opción añade muestras adicionales a una Results Table actualmente activa.

1. Haga clic en **More > Add samples**.
2. En el cuadro de diálogo Select Samples, seleccione las muestras necesarias.
 - El panel Available muestra las subcarpetas, los archivos wiff2 y las muestras disponibles en la carpeta **Data** para el proyecto actual.
 - Expanda las carpetas individuales para ver todas las subcarpetas o archivos wiff2. Si se expande el archivo wiff2, se abre para ver las muestras disponibles.
 - Utilice las flechas para agregar () o quitar () muestras.
 - Seleccione muestras de las siguientes maneras:
 - Haga doble clic en una muestra individual.
 - Seleccione una muestra o archivo de datos y, a continuación, haga clic en  .
 - Arrastre una muestra o archivo de datos del panel izquierdo al derecho.

Pulse **Shift** o **Ctrl** para seleccionar varios archivos o muestras antes de moverlos.
3. Haga clic en **OK**.

Aparece una barra de progreso mientras se integran las nuevas muestras y se añaden a la tabla existente.

Personalizar la tabla de resultados

Condiciones previas

- | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none">• En el espacio de trabajo Analytics, una tabla de resultados está abierta. |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

Seleccione el formato numérico y las columnas que se mostrarán en la tabla de resultados. La configuración de columnas puede aplicarse a todas las tablas de resultados del proyecto.

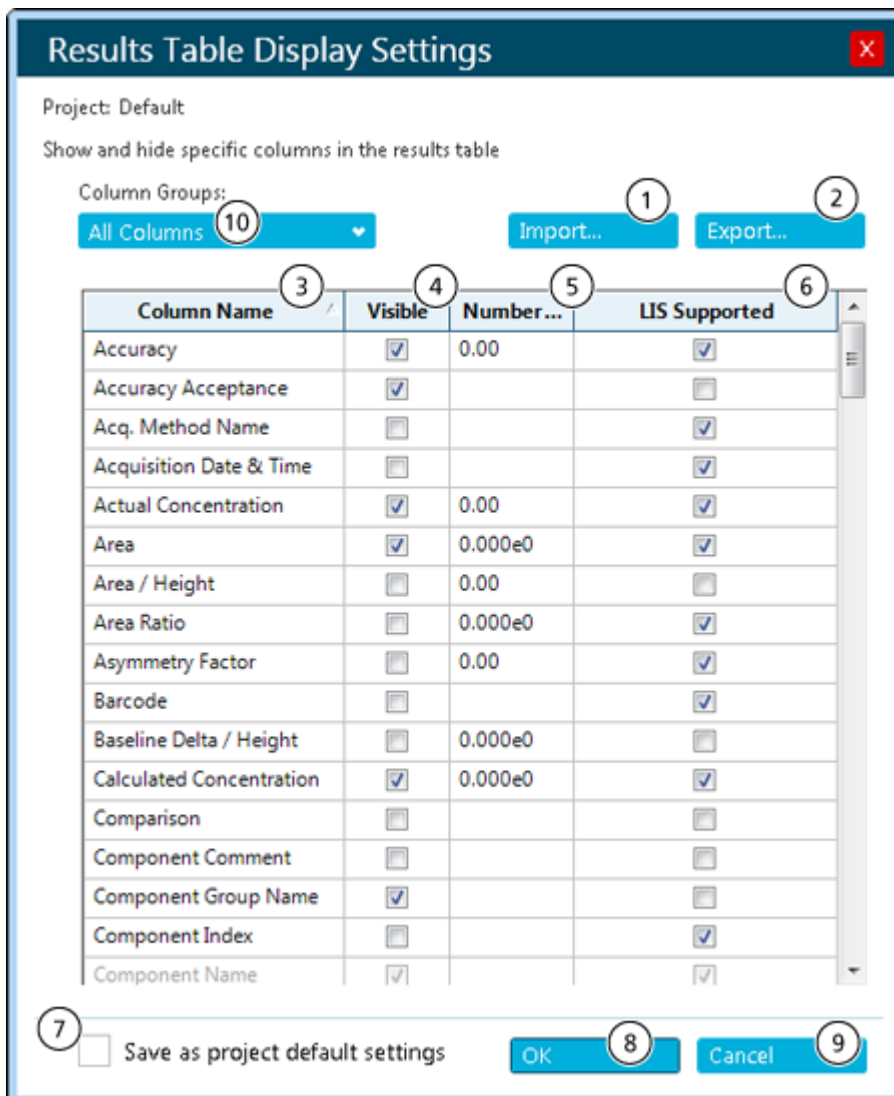
Nota: Algunas columnas críticas, como **Sample Name**, **Sample ID**, **Barcode**, entre otras, no deben ocultarse cuando el usuario personaliza la configuración de las columnas de la tabla de resultados.

Sugerencia: Si los nombres de las columnas están truncados, mueva el cursor por encima del campo para que aparezca el nombre de la columna en la información sobre herramientas.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

1. Haga clic en **More > Table display settings**.
Se abre el cuadro de diálogo Results Table Display Settings. Para obtener una descripción de las columnas de la tabla de resultados, consulte la sección [Columnas de la tabla de resultados](#).

Figura 6-23: Cuadro de diálogo configurar visualización de la tabla de resultados



Elemento	Descripción
1	Haga clic para seleccionar un archivo de configuración de columna guardado anteriormente con la función de exportación. Los campos del cuadro de diálogo se actualizan para utilizar la información del archivo seleccionado.
2	Haga clic para guardar la configuración de cuadro de diálogo actual en un archivo. Utilice el botón de importación para importar y utilizar esta configuración. Esta opción permite al usuario cambiar entre diferentes disposiciones físicas de columnas.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Elemento	Descripción
3	El nombre de las columnas, que se muestra en orden alfabético. Nota: Esta lista también incluye cualquier columna calculada definida en el método de procesamiento que se haya usado para crear la tabla de resultados.
4	Una marca de verificación indica que la columna es visible.
5	Para los campos numéricos, utilice el formato 0.00 para notaciones no científicas y el formato 0.00e0 para notaciones científicas. Cambie los puntos decimales para indicar la precisión de los números que se muestran. Solo se puede utilizar un punto (.) como separador de decimales. Nota: No se admite la agrupación de números.
6	Las filas de LIS Supported seleccionadas están predefinidas por el LIMS y las selecciones de columnas no se pueden cambiar.
7	Haga clic para utilizar la configuración de columnas en las tablas de resultados futuras.
8	Haga clic para aplicar los cambios y, a continuación, cerrar el cuadro de diálogo.
9	Haga clic para cancelar los cambios y, a continuación, cierre el cuadro de diálogo.
10	Seleccione para editar las columnas de la tabla de resultados. Los usuarios pueden filtrar las columnas mostradas en la tabla de resultados basándose en la selección. La selección de una categoría ayuda al usuario a encontrar fácilmente una columna de la tabla de resultados.

2. Active o desactive la casilla de la columna **Visible** según sea necesario.

Nota: Además de las columnas descritas en la sección [Columnas de la tabla de resultados](#), la tabla de resultados puede contener columnas de texto y calculadas personalizadas. Las columnas calculadas se identifican con un asterisco.

3. (Opcional) En la columna **Number Format**, cambie el formato a entero o notación científica.
4. (Opcional) En la columna **Number Format**, cambie el número de posiciones decimales que se mostrarán.
5. Haga clic en **OK**.
La nueva configuración se aplica a la tabla de resultados. Los ajustes también se guardan y aplican cuando se crea una nueva tabla de resultados o cuando se vuelven a abrir tablas de resultados guardadas anteriormente.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Sugerencia: Utilice la fila del encabezado de la tabla de resultados para ajustar el ancho y el orden de las columnas. Arrastre el borde del encabezado para modificar la anchura. Arrastre el encabezado de la columna hacia otro lugar de la tabla de resultados para cambiar el orden de la columna. Haga clic en el icono filtro (🔍) del encabezado de una columna para aplicarle un filtro. Cuando se utiliza el botón **Export** para exportar una tabla de resultados, los ajustes de anchura, orden y filtro de la columna se guardan en el archivo exportado.

Creación de un informe

Condiciones previas

- En el espacio de trabajo Analytics, una tabla de resultados está abierta.

Sugerencia: Para seleccionar los analitos que se van a incluir en un informe, utilice la columna **Reportable** de la tabla de resultados. Consulte la sección [Columnas de la tabla de resultados](#).

1. Haga clic en **Reporting > Create Report and Save Results Table**. Se abre el cuadro de diálogo Create Report.
2. Seleccione una plantilla de la lista **Template name**.
3. Seleccione un formato de informe.
4. Para cambiar el nombre de archivo y la ubicación, haga clic en **Browse**, vaya a una ubicación diferente, escriba un nombre de archivo en **File name** y haga clic en **Save**.

Nota: Por defecto, los informes se graban en
`ProgramData\SCIEX\Analytics\Reporter\Reports`.

5. Haga clic en la casilla **Create an individual report for each sample** si es necesario.
6. (Opcional) Seleccione un logo diferente para el informe:
 - a. Haga clic en **Replace Logo**.
 - b. Utilice las opciones del cuadro de diálogo Replace Logo para modificar el logo según sea necesario.
 - c. Haga clic en **Save**.
 - d. Haga clic en **Cancel**.
7. Haga clic en **View Pages** para ver el diseño del informe.
8. Haga clic en **Create**.

Sugerencia: Para crear un informe de los resultados seleccionados utilizando una plantilla como, por ejemplo, Per Sample Quant, Per Sample Qual, Per Sample Visible Rows Using Visible Analytes, o Positive Hits Qual, utilice filtros u oculte las columnas no deseadas de la tabla de resultados.

Sugerencia: Haga clic en el ejemplo en la **Template View** del cuadro de diálogo Create Report para ver el diseño de la plantilla de informe. Para visualizar una plantilla específica, el usuario debe tener un archivo jpg con el mismo nombre que la plantilla además del sufijo [Snapshot_X], en el que X es el número de instantánea de la secuencia. No deje espacios entre el nombre del archivo y el sufijo.

Por ejemplo, la plantilla All Peaks Qual.docx se llamaría All Peaks Qual[Snapshot_1].jpg All Peaks Qual[Snapshot_2].jpg All Peaks Qual[Snapshot_3].jpg

Exportación y almacenamiento de una tabla de resultados

Condiciones previas

- | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none">• En el espacio de trabajo Analytics, una tabla de resultados está abierta. |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
-

Sugerencia: Para seleccionar los analitos que se van a exportar, utilice la columna **Reportable** de la tabla de resultados. Consulte la sección [Columnas de la tabla de resultados](#).

1. Haga clic en **Reporting > Export results > Export and save Results Table**.
Se abre el cuadro de diálogo Export.
2. Seleccione las opciones según convenga.
Para obtener una descripción de las opciones, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
3. Haga clic en **OK**.

Exportación de la tabla de resultados (métrica)

Condiciones previas

- | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none">• En el espacio de trabajo Analytics, una tabla de resultados está abierta. |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
-

Nota: El fabricante no asume ninguna responsabilidad o eventual obligación, incluidos daños indirectos o consecuentes, una vez que los datos se hayan exportado desde el espacio de trabajo Analytics.

La exportación de la tabla de resultados es uno de los métodos controlados para la generación de datos en el espacio de trabajo Analytics.

Esta función se utiliza para crear archivos de texto delimitados por tabulaciones que contienen información de la tabla de resultados activa. La información se exporta para todas las muestras y demás componentes o solo para los componentes visibles para la métrica o campo que se ha seleccionado.

1. Haga clic en **Reporting > Export results > Results Table - Metric**.
-

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Se abre el cuadro de diálogo Export Metric.

2. Seleccione la columna que se va a exportar en el campo **Metric** y, a continuación, establezca las opciones. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.
3. Haga clic en **OK**.

Transferencia de resultados a un LIMS Watson

Condiciones previas

- Una tabla de resultados está abierta y bloqueada.
- El software del LIMS Watson está abierto.

Nota: Se transfiere un subconjunto de las columnas de la tabla de resultados, incluidas algunas columnas ocultas y algunas otras que no se han designado como **Reportable**.

1. Haga clic en **Reporting > Initiate Transfer to Watson LIMS**.
Se abre el cuadro de diálogo de transferencia.
2. En el software del LIMS Watson, importe los datos.
3. En el cuadro de diálogo de transferencia de SCIEX OS, realice una de las acciones siguientes:
 - Si la transferencia se ha realizado correctamente, haga clic en **Confirm**.
 - Si la transferencia no se ha realizado correctamente, haga clic en **Decline**.

Transferencia de resultados a otro LIMS

Procedimientos de condiciones previas

- Configurar el LIMS en el espacio de trabajo Configuration. Consulte la sección [Selección de los ajustes del sistema de gestión de la información del laboratorio \(LIMS\)](#).
- Abra una tabla de resultados bloqueada.

Sugerencia: Para seleccionar los analitos que se van a exportar, utilice la columna **Reportable** de la tabla de resultados. Consulte la sección [Columnas de la tabla de resultados](#).

1. Haga clic en **Reporting > Transfer Results to LIMS**.
Se abre el cuadro de diálogo LIMS Transfer.
2. Seleccione una plantilla de la lista **Template**.
3. Haga clic en **Transfer**.

Cómo trabajar con tablas de resultados

Las tablas de resultados resumen la concentración calculada de un analito, así como los resultados del análisis cualitativo (coincidencias de biblioteca, resultados de la búsqueda de fórmulas, etc.) en cada muestra desconocida, basándose en la curva de calibración. Las tablas de resultados también incluyen las curvas de calibración, así como estadísticas de los resultados. El usuario puede personalizar la tabla de resultados y ver las tablas de resultados en diferentes disposiciones.

Nota: Las columnas de la tabla de resultados con un asterisco (*) son columnas de texto personalizadas o columnas calculadas.

Los datos de una tabla de resultados se pueden exportar a un archivo .txt para usarlos en otras aplicaciones, como Microsoft Excel. El usuario puede exportar los datos de la tabla de resultados o solo los datos de las columnas visibles.

Sugerencia: Si se han apilado varias sesiones de la tabla de resultados vertical u horizontalmente, haga clic en **Views > Reset layout** para devolver las tablas de resultados a su disposición original.

Utilice el menú contextual para editar las filas de las tablas de resultados. Para mostrar este menú, haga clic con el botón derecho del ratón en cualquier punto de la tabla de resultados.

Figura 6-24: Menú contextual

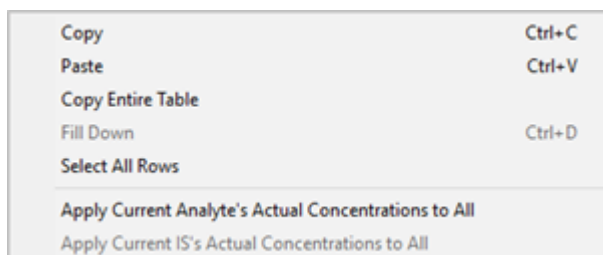


Tabla 6-4: Comandos del menú contextual

Etiqueta	Descripción
Copy	(Copiar) Utilice esta opción para copiar los datos actuales en el portapapeles.
Paste	(Pegar) Utilice esta opción para pegar los datos del portapapeles a la vista actual.
Copy Entire Table	(Copiar tabla completa) Utilice esta opción para copiar toda la tabla en el portapapeles.
Fill Down	(Rellenar hacia abajo) (Componentes) Utilice esta opción para duplicar la información de la primera fila seleccionada en todas las filas seleccionadas siguientes.

Tabla 6-4: Comandos del menú contextual (continuación)

Etiqueta	Descripción
Select All Rows	(Seleccionar todas las filas) Utilice esta opción para seleccionar todas las filas de la tabla de resultados activa. Esta función es útil si el usuario quiere después aplicar un comando, como Copy , que actúa en las filas seleccionadas.
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All	<p>(Aplicar las concentraciones reales del analito actual a todo) (Analitos) Si hay más de un analito y todos ellos están presentes en estas muestras en la misma concentración, utilice esta opción para proporcionar un atajo para establecer el campo de concentración real para todos los analitos de las muestras estándar. Para utilizar esta función:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Utilice Components and Groups List para mostrar solo un analito específico en la tabla. Consulte la sección Lista de componentes y grupos.2. (Opcional) Filtre la columna Sample Type para ver solo muestras estándar.3. Especifique las concentraciones reales del analito, bien escribiendo directamente en las celdas, bien seleccionando la columna y pegando texto en ella.4. Seleccione Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All. <p>Vuelva a la visualización de todos los componentes y todos los tipos de muestra, según sea necesario.</p>

Tabla 6-4: Comandos del menú contextual (continuación)

Etiqueta	Descripción
Apply Current IS's Actual Concentrations to All	<p>(Aplicar las concentraciones reales de los patrones internos actuales a todo) (Patrones internos) Si hay más de un patrón interno y todos ellos están presentes en estas muestras en la misma concentración, utilice esta opción para proporcionar un atajo para establecer el campo de concentración real para todos los patrones internos de las muestras estándar. Para utilizar esta función:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Utilice la lista Components and Groups List para mostrar solo un patrón interno específico en la tabla. Consulte la sección Lista de componentes y grupos. 2. (Opcional) Filtre la columna Sample Type para ver solo muestras estándar. 3. Especifique las concentraciones reales del patrón interno, bien escribiendo directamente en las celdas, bien seleccionando la columna y pegando texto en ella. 4. Seleccione Apply Current IS's Actual Concentrations to All. <p>Vuelva a la visualización de todos los componentes y todos los tipos de muestra, según sea necesario.</p>

Filtros de tabla de resultados

Utilice los campos en la parte superior de la tabla de resultados para ver y filtrar el contenido.

Figura 6-25: Controles de filtrado



Tabla 6-5: Filtros de tabla de resultados

Etiqueta	Descripción
x of y rows	(x de y filas) Muestra el número de filas visibles (x) del total de filas (y).
Filters	(Filtros) Muestra el número de columnas a las que se han aplicado filtros.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Tabla 6-5: Filtros de tabla de resultados (continuación)

Etiqueta	Descripción
Qualify for Rules Filters	(Calidad para filtros de reglas) Alterna la vista de la tabla de resultados entre las filas que cumplen los filtros de criterios de aceptación o los filtros de señales cualitativas de confianza y las que no. Se aplican criterios de aceptación y señales cualitativas de confianza en el método de procesamiento.
Reapply Filter	(Filtro volver a aplicar) Vuelve a aplicar el filtro tras un cambio en la tabla de resultados, como un cambio del área de conteo. Nota: Todos los filtros vuelven a aplicarse automáticamente cuando se añade o cambia un filtro.
Clear	(Borrar) Borra todos los filtros.

Columnas de la tabla de resultados

Nota:

- Las columnas con un asterisco (*) son columnas de texto personalizadas, columnas calculadas o columnas creadas a raíz de una regla de etiquetado combinado.
- Las columnas con nombres que comienzan con un carácter de subrayado (_) son columnas de lotes personalizadas que tienen el mismo nombre que una columna de tabla de resultados predefinida o fórmula.
- La columna **Format** indica cómo se valida el campo en las fórmulas.
- En las columnas que contienen números, los usuarios pueden cambiar el formato numérico y el número de dígitos significativos. Elija entre **Decimal**, **Significant Digits** o **Scientific Notation** en la columna **Number Format** y, a continuación, escriba el número de dígitos significativos en la columna **Number Format Precision** del cuadro de diálogo Results Table Display Settings.

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Accuracy	(Precisión) Presenta la precisión de patrones y muestras de control de calidad (QC). Para otros tipos de muestras, el valor es N/A . Para patrones de concentración conocida, la precisión de patrones y muestras de control de calidad se define como $100 \% \times \frac{(\text{Calculated Concentration})}{(\text{Actual Concentration})}$.	Número	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Accuracy Acceptance	(Aceptación de la precisión) Muestra el estado de aceptación de la precisión.	Texto	N
Acq. Method Name	(Nombre del método de adquisición) Muestra el nombre del método de adquisición utilizado para adquirir la muestra.	Texto	S
Acquisition Date & Time	(Fecha y hora de adquisición) Muestra la fecha y la hora en la que se adquirió la muestra.	Texto	S
Actual Concentration	(Concentración real) Para patrones y muestras de control de calidad, muestra la concentración conocida esperada.	Número	S
Adduct/ Charge	(Aducto/Carga) Muestra el estado de aducción o de carga del compuesto. El usuario define este valor en el flujo de trabajo dirigido. En el flujo de trabajo no dirigido, el software establece de forma automática este valor si se selecciona la agrupación por aducción.	Texto	N
Area	(Área) Muestra el área de pico detectada. Si no se detecta ningún pico, el valor se establece en N/A .	Número	S
Area / Height	(Área/Altura) Muestra el área de pico detectada dividida entre la altura. Si no se detecta ningún pico, el valor se establece en N/A .	Número	N
Area Ratio	(Relación área) Para analitos que utilizan un patrón interno, muestra la relación entre el Area del analito y el IS Area . Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Area Ratio of comparison	<p>(Proporción de comparación del área) Muestra la proporción de área de la muestra/muestra de control.</p> <ul style="list-style-type: none">• Si no se detecta ningún pico en el control, el valor es N/A.• Si no se detecta ningún pico en la muestra, el valor es 0.• Si todos los picos de la muestra están por debajo de Area Ratio Threshold, el valor es N/A.• Si no se utiliza una muestra de comparación, el valor es No control sample (Muestra sin control).• Para la muestra de control, la proporción de área para los picos detectados es siempre 1. <p>Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.</p>	Número	N
Asymmetry Factor	<p>(Factor de asimetría) Muestra la distancia desde la línea central del pico hasta la pendiente posterior, dividida entre la distancia desde la línea central del pico hasta la pendiente frontal, con todas las mediciones realizadas al 10 % de la altura máxima del pico.</p>	Número	S
AutoPeak Asymmetry	<p>(Asimetría AutoPeak) Muestra la proporción de la asimetría del pico integrado respecto a la simetría esperada a partir del modelo. Una proporción de 1 indica a un ajuste correcto. Si el valor no es 1, es posible que la fuente de iones esté saturada o que la integración no sea correcta.</p> <p>Solo aplicable a métodos de procesamiento que utilizan el algoritmo de integración AutoPeak.</p>	Número	N

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
AutoPeak Candidate Model Quality	<p>(Calidad modelo candidato AutoPeak) Muestra la idoneidad del pico para su uso en la creación de un modelo de picos. Si el valor es notablemente superior a 1, la muestra utilizada para crear el método de cuantificación no es idónea. Utilice un pico con una mayor respuesta para crear el modelo y aplíquelo a todas las muestras.</p> <p>Solo aplicable a métodos de procesamiento que utilizan el algoritmo de integración AutoPeak.</p>	Número	N
AutoPeak Group Confidence	<p>(Confianza grupo AutoPeak) Muestra la probabilidad de que el grupo de picos reales se integre y de que la integración no incluya un pico de ruido falso positivo.</p> <p>Solo aplicable a métodos de procesamiento que utilizan el algoritmo de integración AutoPeak.</p>	Número	N
AutoPeak Integration Quality	<p>(Calidad de integración AutoPeak) Muestra la calidad de los datos. La calidad se representa como un valor de 0 a 1. Si la calidad es inferior a 0,6, debe investigarse la integración más a fondo.</p> <p>Solo aplicable a métodos de procesamiento que utilizan el algoritmo de integración AutoPeak.</p>	Número	N
AutoPeak Model Source	<p>(Fuente modelo AutoPeak) Muestra los nombres de las muestras y de los componentes que se utilizaron para modelar el pico. Si el componente que se utilizó para la modelación no es el mismo que el que se integró, revise el modelo para determinar si es adecuado.</p> <p>Solo aplicable a métodos de procesamiento que utilizan el algoritmo de integración AutoPeak.</p>	Número	N

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
AutoPeak Num Peaks	<p>(Número de picos AutoPeak) Muestra el número de picos adyacentes convolucionados que ha detectado el algoritmo.</p> <p>Solo aplicable a métodos de procesamiento que utilizan el algoritmo de integración AutoPeak.</p>	Número	N
AutoPeak Peak Width Confidence	<p>(Confianza anchura pico AutoPeak) Muestra el nivel de confianza en la anchura de pico. Un valor de 1 indica que la anchura de pico real y la esperada son iguales. Un valor superior a 1 indica que la anchura de pico real es superior a la esperada. Un valor inferior a 1 indica que la anchura de pico real es inferior a la esperada, o bien que el pico es más ancho debido a un cambio en las condiciones cromatográficas.</p> <p>Solo aplicable a métodos de procesamiento que utilizan el algoritmo de integración AutoPeak.</p>	Número	N
AutoPeak Saturated acc	<p>(AutoPeak saturado) Si se usó la opción Saturation correction para permitir la corrección de saturación y el pico correspondiente se saturó, de modo que el modelo ajustado se extiende por encima del pico, este campo contiene Yes (Sí). Si no, la columna está en blanco. Si la precisión y el %CV para las muestras en concentraciones más altas no están dentro de los rangos aceptables, ajuste el valor de Saturation correction.</p> <p>Solo aplicable a métodos de procesamiento que utilizan el algoritmo de integración AutoPeak.</p>	Texto	N

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Barcode	<p>(Código de barras) Muestra el ID único para una muestra. El ID único se inicia desde el valor especificado originalmente en el lote utilizado para la adquisición de datos.</p> <p>El Barcode puede contener hasta 20 caracteres. El Barcode no puede contener ninguno de los siguientes caracteres: \ / : * ? " < > = o caracteres de 0 a 31 de la tabla ASCII.</p>	Texto	S
Baseline Delta/ Height	<p>(Punto de referencia delta/altura) Muestra el valor absoluto de la diferencia entre la altura del punto de referencia, al inicio del pico y al final del pico, y la altura real del pico. Valores superiores a 0,1 indican que el punto de referencia podría no haberse integrado correctamente y que debe revisarse el pico.</p>	Número	N
Calculated Concentration	<p>(Concentración calculada) Al utilizar patrones de una concentración conocida, muestra el análisis retrospectivo de su concentración a partir de la curva de calibración. Las ecuaciones de regresión describen cómo se realiza la regresión para los distintos tipos de regresión y ponderación.</p>	Número	S
Combined Score	<p>(Puntuación combinada) (Opcional) Muestra la puntuación de un solo número que puede utilizarse para propósitos de comparación relativa.</p> <p>Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.</p>	Número	N
Comparison	<p>(Comparación) Muestra los componentes en la muestra de comparación.</p>	Número	N
Component Comment	<p>(Comentario del componente) Muestra un comentario arbitrario del analito o patrón interno que se aplica a todas las muestras.</p>	Texto	N

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Component Group Name	(Nombre del grupo del componente) Muestra cualquier nombre de grupo asociado con el analito o patrón interno.	Texto	N
Component Index	(Índice del componente) Muestra el índice del analito o patrón interno en el método de procesamiento original.	Número	S
Component Name	<p>(Nombre del componente) Muestra el nombre del analito o patrón interno.</p> <p>Esta columna está siempre visible en la tabla de resultados. En el cuadro de diálogo Column Settings la casilla de verificación no está disponible.</p> <p>El Component Name puede contener hasta 50 caracteres.</p> <hr/> <p>Nota:</p> <ul style="list-style-type: none"> • El Component Name únicamente se puede cambiar en el método de procesamiento y no en la tabla de resultados. • Esta columna es obligatoria para una transferencia de sistema de gestión de la información del laboratorio (LIMS). 	Texto	S
Component Type	(Tipo de componente) Muestra el tipo de analito: Quantifier , Qualifier o Internal Standard .	Texto	N
Conc. Units	(Unidades de concentración) Muestra las unidades de concentración.	Texto	S
Concentration Acceptance	(Aceptación de la concentración) Muestra el estado de aceptación de la concentración calculada.	Número	N
Concentration Ratio	(Relación concentración) Para analitos que utilizan un patrón interno, muestra la relación entre el valor de Actual Concentration y el valor de IS Actual Concentration . Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Difference from Average Sample Time	(Diferencia respecto al tiempo medio de la muestra) Indica la diferencia entre el tiempo de análisis de esta muestra y el tiempo medio de análisis de todas las muestras.	Número	N
Dilution Factor	(Factor de dilución) Muestra el factor por el que se ha diluido la muestra. Este factor se utiliza en el cálculo de la curva de calibración.	Número	S
End Time	(Tiempo final) Muestra el tiempo de retención final del pico detectado, en minutos.	Número	S
End Time at 10%	(Tiempo final al 10 %) Muestra el tiempo en minutos a lo largo de la cara posterior del pico donde la intensidad es el 10 % de la altura del pico.	Número	N
End Time at 5%	(Tiempo final al 5 %) Muestra el tiempo en minutos a lo largo de la cara posterior del pico donde la intensidad es el 5 % de la altura del pico.	Número	N
Expected Ion Ratio	<p>(Proporción de iones esperada) Muestra la proporción de iones esperada para muestras desconocidas, de control de calidad y estándar.</p> <p>Para cada componente de un grupo, Expected Ion Ratio es el promedio de las proporciones de iones de sus patrones. No se incluye un patrón en el cálculo del valor de Expected Ion Ratio del componente si se aplican estas condiciones:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. El área de pico es N/A. 2. La columna Use no está seleccionada. 	Número	S
Expected RT	(Tiempo de retención esperado) Muestra en minutos el tiempo de retención esperado original del método de procesamiento.	Número	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Expected MW	(Peso molecular esperado) Muestra el peso molecular esperado, a partir del método de procesamiento, en Da. Solo es aplicable a los flujos de trabajo de reconstrucción de masa.	Número	S
Formula	(Fórmula) (Opcional) Muestra una fórmula química válida. Si la fórmula química no es válida, el software no la retiene. Si la fórmula química es válida, las columnas Mass (Da) y Isotope se completan de forma automática.	Texto	S
Formula Confidence	(Confianza fórmula) Muestra el nivel de confianza en el Formula Finder Score en porcentaje. Se calcula conforme a: <ul style="list-style-type: none"> • En qué medida se ajusta el espectro MS al espectro teórico para el compuesto, según la masa. • En qué medida el espectro MS/MS adquirido se ajusta al espectro encontrado en la base de datos del software LibraryView. <p>La puntuación del espectro MS pesa el doble que la puntuación del espectro MS/MS.</p> <p>Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.</p>	Texto	N
Formula Finder	(Buscador de fórmulas) Muestra la puntuación de un solo número que puede utilizarse para propósitos de comparación relativa. El valor puede actualizarse utilizando datos de la Peak Review Formula Finder Results Table. Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.	Número	N

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Formula Finder Results	(Resultados del buscador de fórmulas) (Opcional) Muestra la mejor coincidencia de los resultados del buscador de fórmulas. Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.	Texto	N
Formula Finder Score	(Puntuación buscador de fórmulas) (Opcional) Muestra la puntuación de un solo número que puede utilizarse para propósitos de comparación relativa.	Número	S
Found at Fragment	(Encontrado en fragmento) (Opcional) Muestra la masa de fragmentos (Da) en la que se encontraron espectros coincidentes. Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.	Número	S
Found at Mass	(Encontrado en masa) (Opcional) Muestra la masa de extracción (Da) en la que se encontraron espectros coincidentes. Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.	Número	S
Fragment Mass	(Masa de fragmentos) (Opcional) Muestra la masa de fragmentos, como se especifica en el método. El precursor del fragmento se extrae del MS/MS en la columna Extraction Mass (Da) . Cuando se proporciona, este valor debe ser numérico.	Número	S
Fragment Mass Error (ppm)	(Error de masa de fragmentos [ppm]) (Opcional) Muestra la diferencia entre encontrado en fragmento y masa de fragmentos, en ppm.	Número	S
Fragment Mass Error (mDa)	(Error de masa de fragmentos [mDa]) (Opcional) Muestra la diferencia entre encontrado en fragmento y masa de fragmentos, en mDa.	Número	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Fragment Mass Error Confidence	(Confianza error de masa de fragmentos) (Opcional) Muestra el nivel de confianza en el error de masa de fragmentos.	Texto	S
Height	(Altura) Muestra la altura de pico detectada. Si no se detecta ningún pico, el valor se establece en N/A .	Número	S
Height Ratio	(Relación altura) Para analitos que utilizan un patrón interno, muestra la relación entre el Height y el IS Height . Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	S
Index	(Índice) Muestra el índice de la fila en el orden original sin clasificar. Si la tabla se ordena en otra columna, puede restaurarse al orden original mediante esta columna.	Número	N
Injection Volume	(Volumen de inyección) Muestra el volumen de la muestra almacenado en el método e inyectado por el procesador de muestras automático.	Número	S
Integration Acceptance	(Aceptación de integración) Muestra en qué medida cumple los criterios de aceptación la integración de picos. Se calcula conforme a estos factores, según se haya configurado en las reglas de marcado: <ul style="list-style-type: none">• Calidad de integración• Factor asimétrico• Ancho total del pico en minutos• Error de tiempo de retención, medido como porcentaje o en minutos	Número	N

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Integration Type	<p>(Tipo de integración) Muestra el tipo de integración.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Baseline: Un pico autónomo que se integró del modo habitual. • Valley: Indica que había dos picos adyacentes y que la señal no volvió al valor del punto de referencia entre ellos. • N/A: Indica que un pico no se ha detectado. • Manual: Indica que el pico se integró manualmente. 	Texto	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Ion Ratio	<p>(Proporción de iones) Muestra la proporción de iones. Las proporciones de iones se determinan cuando se han registrado al menos dos transiciones MRM de un único analito en un grupo.</p> <p>Todos los analitos de un grupo constituyen un subgrupo de analito. Todos los patrones internos de un grupo constituyen un subgrupo de IS. El primer componente de un subgrupo se utiliza como ion de cuantificador. El resto de los componentes del subgrupo se utilizan como iones de calificador.</p> <p><i>Proporción de iones = (Área de pico o altura de calificador) / (Área de pico o altura de cuantificador)</i></p> <p>La proporción de iones se puede calcular para el área de pico o para la altura de pico. Si el método de procesamiento utiliza el área para la regresión del primer componente, es decir, el componente para el cual el índice de componente es 1, en la tabla de resultados, el área de pico se utiliza para calcular la proporción de iones para toda la tabla de resultados. Si la altura se utiliza en la regresión del primer componente, la altura del pico se utiliza para el cálculo.</p> <ul style="list-style-type: none">• Si un componente no es miembro de un grupo, el valor de Ion Ratio se establece en N/A.• Si no se detecta el pico, el valor de Ion Ratio se establece en N/A.• Si la proporción de iones se aplica a todos los componentes, tanto en el subgrupo de analito como en el de patrón interno, el calificador es el cuantificador.	Número	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
	<ul style="list-style-type: none"> • Si la integración cambia para los picos del cuantificador o del calificador, se vuelve a calcular la proporción de iones. <hr/> <p>Nota: El usuario puede definir reglas de etiquetado para la proporción de iones en el método de procesamiento.</p>		
Ion Ratio Acceptance	(Aceptación de proporción de iones) Muestra el estado de aceptación de la proporción de iones.	Número	N
Ion Ratio Confidence	(Confianza en la proporción de iones) Muestra el nivel de confianza en la proporción de iones. Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.	Texto	N
IS	(Patrón interno) Muestra si la fila es un patrón interno. Una casilla de verificación seleccionada indica que el componente para la fila es un patrón interno y no un analito. Nota: La casilla de verificación IS se selecciona automáticamente para los nombres de muestra que contienen .heavy o -cis porque estas muestras se definen como patrones internos en flujos de trabajo de proteómica. Para otros flujos de trabajo, no son patrones internos, por lo que la casilla de verificación IS debe estar desactivada.	Número	N
IS Actual Concentration	(Concentración real del patrón interno) Muestra la concentración real del patrón interno asociada al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
IS Area	(Área del patrón interno) Muestra el área del patrón interno asociada al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N
IS Area / Height	(Área/altura del patrón interno) Muestra la proporción del valor de IS Area con el valor del IS Height del patrón interno asociada al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N
IS Baseline Delta / Height	(Punto de referencia delta/altura del patrón interno) Muestra el valor absoluto de la diferencia entre la altura del punto de referencia, al inicio del pico y al final del pico, y la altura real del pico. Valores superiores a 0,1 indican que el punto de referencia podría no haberse integrado correctamente y que debe revisarse el pico.	Número	N
IS Comment	(Comentario del patrón interno) Muestra un comentario arbitrario del patrón interno asociado al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Texto	N
IS End Time	(Hora final del patrón interno) Muestra la hora en la que finaliza la adquisición para el patrón interno asociada al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N
IS Expected MW	(Peso molecular esperado de patrón interno) Muestra el peso molecular esperado del patrón interno asociado con el analito actual, en Da. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A . Solo es aplicable a los flujos de trabajo de reconstrucción de masa.	Número	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
IS Expected RT	(Tiempo de retención esperado del patrón interno) Muestra el tiempo de retención esperado del patrón interno asociado al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N
IS Height	(Altura del patrón interno) Muestra la altura del patrón interno asociada al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N
IS Integration Type	(Tipo de integración del patrón interno) Muestra el tipo de integración del patrón interno asociado al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Texto	N
IS Mass Info	(Info. de masa del patrón interno) Muestra la información de masa del patrón interno asociada al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Texto	N
IS MW	(Peso molecular de patrón interno) Muestra el peso molecular encontrado del patrón interno asociado con el analito actual, en Da. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A . Solo es aplicable a los flujos de trabajo de reconstrucción de masa.	Número	N
IS MW Delta (Da)	(Delta de peso molecular de patrón interno [Da]) Muestra la diferencia entre el peso molecular esperado del patrón interno y el encontrado, en Da. Solo es aplicable a los flujos de trabajo de reconstrucción de masa.	Número	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
IS MW Delta (ppm)	(Delta de peso molecular de patrón interno [ppm]) Muestra la diferencia entre el peso molecular esperado del patrón interno y el encontrado, en ppm. Solo es aplicable a los flujos de trabajo de reconstrucción de masa.	Número	S
IS Name	(Nombre del patrón interno) Muestra el nombre de componente del patrón interno asociado al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Texto	N
IS Peak Comment	(Comentario de pico del patrón interno) Muestra el comentario de pico del patrón interno asociado al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Texto	N
IS Quality	(Calidad del patrón interno) Muestra la calidad del patrón interno asociado al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N
IS Region Height	(Altura de la región del patrón interno) Muestra la altura para la región estándar interna. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N
IS Retention Time	(Tiempo de retención del patrón interno) Muestra el tiempo de retención del patrón interno asociado al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N
IS Signal / Noise	(Señal/ruido del patrón interno) Muestra la relación señal/ruido del patrón interno asociada al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
IS Start Time	(Hora inicio patrón interno) Muestra la hora de inicio del patrón interno asociado al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N
IS Total Width	(Anchura total del patrón interno) Muestra la anchura total del patrón interno asociado al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N
IS Width at 50%	(Anchura al 50 % del patrón interno) Muestra la anchura al 50 % del patrón interno asociado al analito actual. Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	N
Isotope Confidence	(Confianza de isótopos) Muestra el nivel de confianza de la proporción de isótopos. Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.	Texto	N
Isotope Ratio Difference	(Proporción de isótopos) Identifica la diferencia entre el patrón de isótopos teórico, basado en la fórmula, y el patrón de isótopos del espectro adquirido. Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.	Número	N
LC Method	(Método de LC) Muestra el nombre del método de LC utilizado para adquirir los datos.	Texto	N
Library Confidence	(Confianza biblioteca) Muestra el nivel de confianza en Library Hit basado en la puntuación de Library Score . Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.	Texto	N

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Library Hit	<p>(Coincidencia en la biblioteca) Muestra el nombre del compuesto de la mejor coincidencia en la biblioteca, es decir, el compuesto con la puntuación de pureza más alta y la fórmula que coincide con la fórmula solicitada.</p> <p>El valor puede actualizarse utilizando datos de la cuadrícula Peak Review Library Search Results. Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.</p>	Texto	N
Library Score	<p>(Puntuación biblioteca) Muestra la idoneidad del ajuste de la coincidencia de biblioteca respecto a la masa encontrada.</p> <p>Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.</p>	Número	N
Mass Error (ppm)	<p>(Error de masa [ppm]) Muestra la diferencia entre la masa encontrada y la masa de extracción, expresada en partes por millón.</p> <p>Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.</p>	Número	N
Mass Error (mDa)	<p>(Error de masa [mDa]) Muestra la diferencia entre la masa encontrada y la masa de extracción, expresada en milidaltos.</p> <p>Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.</p>	Número	N
Mass Error Confidence	<p>(Confianza en el error de masa) Muestra el nivel de confianza en el error de masa.</p> <p>Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.</p>	Texto	N

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Mass Info	<p>(Info. de masa) Muestra la información de masa asociada al componente.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Para experimentos de MRM es Q1/Q3 y para experimentos de perfil, o análisis completo, es inicio - parada. • Para experimentos de UV, ADC o DAD, es la longitud de onda (DAD) o la información de canal (UV/ADC). <p>Si existe la masa de fragmentos, se usará para la extracción de XIC.</p> <p>Si no hay masa de fragmentos, la masa precursora debe usarse para la extracción de XIC.</p>	Texto	S
Modified	<p>(Modificados) Muestra si los parámetros de búsqueda de picos se han modificado. Una casilla seleccionada indica que los parámetros de búsqueda de picos en el método de procesamiento se han modificado en el panel Peak Review.</p>	Número	S
MS Method	<p>(Método de MS) Muestra el nombre del método de MS utilizado para adquirir los datos.</p>	Texto	N
MW	<p>(Peso molecular) Muestra el peso molecular encontrado del analito, a partir del gráfico reconstruido, en Da.</p> <p>Solo es aplicable a los flujos de trabajo de reconstrucción de masa.</p>	Número	S
MW Delta (Da)	<p>(Delta de peso molecular [Da]) Muestra la diferencia entre el peso molecular esperado y el encontrado, en Da.</p> <p>Solo es aplicable a los flujos de trabajo de reconstrucción de masa.</p>	Número	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
MW Delta (ppm)	(Delta de peso molecular [ppm]) Muestra la diferencia entre el peso molecular esperado y el encontrado, en ppm. Solo es aplicable a los flujos de trabajo de reconstrucción de masa.	Número	S
Non-Targeted Peak	(Pico no dirigido) Indica si el pico ha sido encontrado por el Buscador de picos avanzado. Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.	Número	N
Operator Name	(Nombre del operador) Muestra el nombre del operador del instrumento que adquirió la muestra.	Texto	S
Original Filename	(Nombre del archivo original) Muestra el nombre del archivo.	Texto	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Outlier Reasons	<p>(Razones de valores atípicos) Cuando se ha establecido la extracción automática de los valores atípicos en el método de cuantificación, muestra qué criterio se ha encontrado fuera de los límites predeterminados del componente.</p> <p>La columna Outlier Reasons está vinculada a las reglas de extracción automática de valores atípicos en el método de cuantificación. Es una columna preestablecida de la tabla de resultados.</p> <p>Razón por la que el valor atípico está marcado con un indicador:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Exactitud • Concentración • Proporción de iones <p>Si hay un pico solo para el cuantificador o solo para el cualificador, se marcará la proporción de iones de ambos componentes. Si ninguno de dichos componentes tiene picos, no se marcará la proporción de iones para ninguno de los componentes.</p> <ul style="list-style-type: none"> • No se puede calcular la proporción de iones esperada • Ha fallado una regla de marcado personalizada creada por el usuario. 	Texto	N
Peak Comment	(Comentario de pico) Muestra un comentario arbitrario de la fila.	Texto	N
Plate Number	(Número de placa) Muestra el número de placa del procesador de muestras automático utilizado para adquirir los datos, según lo indicado en el Editor de lotes.	Texto	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Points Across Baseline	(Puntos a lo largo del punto de referencia) Muestra el número de análisis a lo largo del pico.	Número	N
Points Across Half Height	(Puntos a lo largo de media altura) Muestra el número de análisis a lo largo del pico, aproximadamente al 50 % de la altura.	Número	N
Polarity	(Polaridad) Indica la polaridad del experimento utilizado para adquirir la muestra.	Texto	N
Precursor Mass	(Masa precursora) Muestra los parámetros de entrada de procesamiento tomados del método de procesamiento. Esta columna está siempre visible en la tabla de resultados. En el cuadro de diálogo Column Settings la casilla de verificación no está disponible.	Número	N
Proc. Method Name	(Nombre del método de procesamiento) Muestra el nombre del método de procesamiento que creó la tabla de resultados.	Texto	S
Quality	(Calidad) Muestra la calidad del pico integrado. Se comparan el área de pico integrado y el área de una ventana de tiempo de retención mayor. Un valor de 0 indica que el pico presenta una integración deficiente o que no hay ningún pico. Un valor de 1,0 indica un pico bien integrado que no es necesario revisar.	Número	N
Rack Number	(Número de gradilla) Muestra el número de gradilla del procesador de muestras automático utilizado para adquirir datos, según lo especificado en el editor de lotes.	Texto	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Region Height	(Altura de región) Muestra la altura de pico del pico más grande próximo al pico real detectado. Esto es útil en conjunción con el campo Quality . Los picos con una baja calidad que también tienen una Region Height razonable, necesitan revisarse. Si la Region Height es pequeña, no hay un pico significativo.	Número	N
Relative RT	(Tiempo de retención relativo) Para analitos que utilizan un patrón interno, muestra la relación entre el valor de Retention Time y el valor de IS Retention Time . Para patrones internos o analitos sin un patrón interno, el valor se establece en N/A .	Número	S
Reportable	(Notificable) Muestra si el resultado está incluido en los informes, exportaciones y transferencias a LIMS.	Número	S
Retention Time	(Tiempo de retención) Muestra el tiempo de retención real del pico detectado, en minutos.	Número	S
Retention Time Delta (min)	(Tiempo de retención delta) Muestra la diferencia entre el tiempo de retención definido para la masa y el tiempo de retención real.	Número	N
Retention Time Error (%)	(Error tiempo de retención [%]) Muestra el porcentaje de error entre "encontrado en tiempo de retención" y "tiempo de retención esperado". Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.	Número	N
RT Confidence	(Confianza tiempo de retención) Muestra la confianza en el tiempo de retención. Solo aplicable a flujos de trabajo cualitativos.	Texto	N
Sample Comment	(Comentario muestra) Muestra un comentario de la muestra especificado por el usuario.	Texto	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Sample ID	<p>(Identificador muestra) Muestra un identificador de la muestra especificado por el usuario. El Sample ID se especifica en el editor de lotes antes de enviar la muestra para la adquisición.</p> <p>Si el flujo de trabajo de adición de patrones está habilitado en el método de procesamiento, el Sample ID se utiliza como un identificador de grupo para cada grupo de adición de patrones. SCIEX OS vincula cada muestra con una concentración desconocida de analito con muestras a las que se hayan añadido concentraciones conocidas y diversas del mismo analito.</p> <p>El Sample ID puede contener hasta 252 caracteres. El Sample ID no puede contener ninguno de los siguientes caracteres: \ / : * ? " < > = o caracteres de 0 a 31 de la tabla ASCII.</p>	Texto	S
Sample Index	<p>(Índice muestra) Muestra el índice de la muestra actual.</p> <hr/> <p>Nota: Esta columna está bloqueada y siempre se muestra a la izquierda de la tabla de resultados.</p> <hr/>	Número	S
Sample Name	<p>(Nombre muestra) Muestra un nombre de muestra especificado por el usuario. El Sample Name se especifica en el editor de lotes antes de enviar la muestra para la adquisición.</p> <p>El Sample Name debe contener entre 1 y 252 caracteres. El Sample Name no puede contener ninguno de los siguientes caracteres: \ / : * ? " < > = o caracteres de 0 a 31 de la tabla ASCII.</p> <hr/> <p>Nota: Esta columna está bloqueada y siempre se muestra a la izquierda de la tabla de resultados.</p> <hr/>	Texto	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Sample Type	(Tipo de muestra) Muestra el tipo de muestra.	Texto	S
Scanned Barcode	(Código de barras escaneado) Muestra el código de barras escaneado antes de la inyección.	Texto	S
Signal / Noise	(Señal/ruido) Muestra una estimación de la proporción de la altura del pico detectado y el ruido presente en el cromatograma. Para el algoritmo de integración AutoPeak, se estima el ruido con el ruido relativo calculado y el punto de referencia en la posición del ápice del pico. El algoritmo MQ4 utiliza un enfoque similar salvo en que el punto de referencia se estima mediante el cromatograma completo.	Número	S
Slope of Baseline	(Pendiente del punto de referencia) Muestra la pendiente del pico integrado desde el punto de referencia: $[(\textit{intensidad al final del pico}) - (\textit{intensidad al inicio del pico})] \div \textit{anchura de pico}$	Número	N
Start Time	(Tiempo inicio) Muestra el tiempo de retención de inicio del pico detectado, en minutos.	Número	S
Start Time at 10%	(Tiempo inicio al 10 %) Muestra el tiempo en minutos a lo largo de la cara frontal del pico donde la intensidad es el 10 % de la altura del pico.	Número	N
Start Time at 5%	(Tiempo inicio al 5 %) Muestra el tiempo en minutos a lo largo de la cara frontal del pico donde la intensidad es el 5 % de la altura del pico.	Número	N

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Std Addition Accuracy	<p>(Precisión adición patrones) Muestra la precisión de las muestras de concentraciones conocidas que se han cuantificado por medio de la adición de patrones de diferentes concentraciones. Cuando se activa el flujo de trabajo de adición de patrones en el método de procesamiento, el Sample Type de todas las muestras se define de forma automática como Standard. Si se cambia el Sample Type a otro tipo, o si no está habilitado el flujo de trabajo de adición de patrones, este valor se define como N/A. Para muestras de concentración conocida, como una muestra de control de calidad en un lote, el Std Addition Accuracy se define como:</p> $100 \% \times (\text{Concentración calculada adición patrones}) / (\text{Concentración real adición patrones}).$	Número	N
Std Addition Actual Concentration	<p>(Concentración real adición patrones) Muestra la concentración conocida especificada por el usuario para las muestras que se cuantifican por medio de la adición de patrones. Por ejemplo, una muestra de calidad de control en un lote. Si Sample Type no es Standard, este valor se define como N/A.</p>	Número	N

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Std Addition Calculated Concentration	<p>(Concentración calculada adición patrones) Muestra el valor del análisis retrospectivo de la concentración extrapolando la curva de adición de patrones a la abscisa en el origen con una regresión lineal y sin ponderación. Para las muestras que se cuantifican por medio de la adición de patrones, la Std Addition Calculated Concentration se define como:</p> <p>Intercept/Slope</p> <p>Si Sample Type no es Standard, si no se activa el flujo de trabajo de adición de patrones en el método de procesamiento o si no se encuentra un pico en las muestras no enriquecidas de un grupo de adición de patrones, este valor se define como N/A.</p>	Número	N
Tailing Factor	<p>(Factor de bajada) Muestra la distancia desde la pendiente frontal del pico hasta la pendiente posterior, dividida entre el doble de la distancia desde la línea central del pico hasta la pendiente frontal. Todas las mediciones se realizan al 5 % de la altura máxima del pico.</p>	Número	N
Time Since First Sample (min)	<p>(Tiempo desde la primera muestra [minutos]) Indica la cantidad de tiempo, en minutos, desde que se inició la adquisición de la primera muestra.</p>	Número	N
Time Since Last Sample (sec)	<p>(Tiempo desde la última muestra [segundos]) Indica la cantidad de tiempo, en segundos, desde que se inició la adquisición de la última muestra.</p>	Número	N
Total Width	<p>(Anchura total) Muestra la anchura de pico cromatográfico, en minutos, en el punto de referencia.</p>	Número	S

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

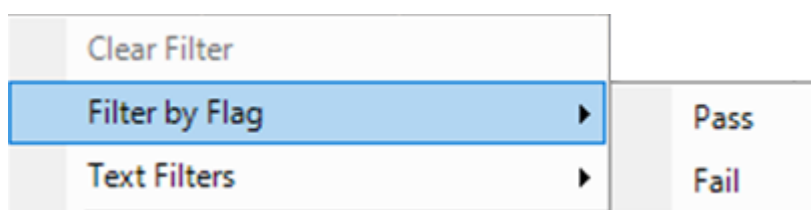
Etiqueta	Descripción	Format (Formato)	Compatible con LIS
Used	<p>(Usado) Muestra si el resultado se usa.</p> <ul style="list-style-type: none">• Para todas las muestras, la casilla seleccionada indica que el resultado se utiliza en el cálculo de valores de referencia y en la ejecución de las reglas de marcado.• Para las muestras estándar, la casilla seleccionada indica que el resultado se utiliza en la construcción de la curva de calibración, en la regresión y en los cálculos estadísticos.• Para las muestras de control de calidad, la casilla seleccionada indica que el resultado se utiliza para el cálculo de las estadísticas de control de calidad.• Para otro tipo de muestras, la casilla seleccionada indica que el resultado se utiliza en los cálculos.	Número	S
Vial Number	(Número de vial) Muestra el número de vial del procesador de muestras automático utilizado para adquirir datos, según lo especificado originalmente en el lote.	Texto	S
Width at 10%	(Anchura al 10 %) Muestra la anchura de pico medida al 10 % de la altura del pico.	Número	N
Width at 5%	(Anchura al 5 %) Muestra la anchura de pico medida al 5 % de la altura del pico.	Número	N
Width at 50%	(Anchura al 50 %) Muestra la anchura de pico cromatográfico, en minutos, del pico detectado medido en la mitad de la intensidad de su ápice.	Número	S
XIC Width (Da)	(Anchura XIC [Da]) Muestra la anchura del cromatograma de iones extraídos en daltons.	Número	S
XIC Width (ppm)	(Anchura XIC [ppm]) Muestra la anchura del cromatograma de iones extraídos en ppm (partes por millón).	Número	S

Filtros de aceptación

Utilice la opción **Filter by Flag** en el menú Filtro para obtener una columna de la tabla de resultados para escoger si filtrar la columna en función de los criterios de aceptación. La tabla de resultados puede filtrarse en función de los criterios de aceptación de la siguiente manera:

- **Pass:** Muestra las filas que coinciden con los criterios que se definieron en el método de procesamiento.
- **Fail:** Muestra las filas que no coinciden con los criterios que se definieron en el método de procesamiento.

Figura 6-26: Filtrar por indicador



Los filtros de aceptación se pueden seleccionar para cualquier columna para la que se haya aplicado una norma de marcado, así como los siguientes criterios de aceptación:

- Accuracy
- Accuracy Acceptance
- Asymmetry Factor
- Calculated Concentration
- Concentration Acceptance
- Integration Acceptance
- Quality
- Retention Time Delta (min)
- Retention Time Error (%)
- Total Width

Señales cualitativas de confianza

Utilice los criterios de aceptación para definir las filas de calificación. Una fila de calificación es una fila en la que los criterios de aceptación coinciden con los criterios definidos en el método de procesamiento.

Figura 6-27: Filas de calificación

Define a qualifying row:

Ion ratio	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Mass error	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Frag. mass error	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
RT	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
¹⁴ C Isotope	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Library	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
C _n H _n Formula	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

Las señales cualitativas muestran el estado de confianza para cada fila a la que se aplica una regla cualitativa o una regla de aceptación de la proporción de iones. Para obtener información sobre las reglas de etiquetado, consulte el documento *Sistema de ayuda*.

Sugerencia: La tabla de resultados se puede filtrar utilizando los filtros de señales cualitativas de confianza. Seleccione la casilla **Qualify for Rules Filters** para alternar la vista de la tabla de resultados entre las filas que coinciden con los filtros de confianza y las que no. Los filtros de confianza incluyen: correcto, marginal, incorrecto y N/A.

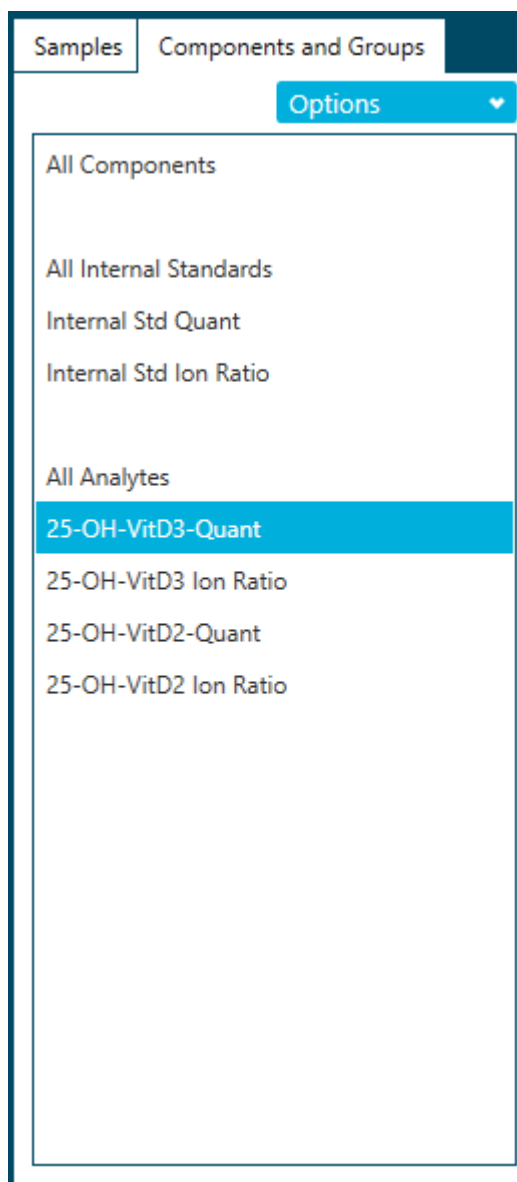
Tabla 6-6: Señales cualitativas de confianza

Icono de señal cualitativa	Descripción
	Muestra qué componentes cumplen los niveles de confianza definidos en el método de procesamiento.
	Muestra qué componentes cumplen el nivel de diferencia de porcentaje marginal definido en el método de procesamiento.
	Muestra qué componentes cumplen el nivel de diferencia de porcentaje inaceptable definido en el método de procesamiento.
	Muestra qué parámetros de confianza no son aplicables al componente.

Lista de componentes y grupos

Cuando se abre una tabla de resultados, se muestra una lista de componentes y grupos actuales a la izquierda de la ventana principal. Utilice esta lista para sustituir los componentes que se pueden ver en la tabla de resultados y en cualquier panel Peak Review o Calibration Curve vinculado. Toda la información se muestra como está definida en el método de procesamiento.

Figura 6-28: Componentes y grupos



Haga clic en una opción individual de la lista para mostrar solo los componentes de dicha opción. Use **Mayús + clic** o **Ctrl + clic** para seleccionar varios elementos (por ejemplo, dos analitos específicos).

Sugerencia: Cambie el ancho de la lista arrastrando el extremo derecho del panel hacia la derecha o la izquierda.

El orden de las filas en la tabla de resultados no se ve afectado al filtrar. La tabla está preconfigurada para quedar ordenada primero por muestra y luego por componente, en el orden indicado en el método de procesamiento.

Tabla 6-7: Opciones

Etiqueta	Descripción
Show IS	(Mostrar patrón interno) Haga clic para mostrar las filas de la tabla de resultados tanto para el analito seleccionado actualmente como para el patrón interno correspondiente. Equivale a hacer clic en el analito y luego hacer clic en el patrón interno mientras se pulsa Ctrl , con lo que se seleccionan ambos.
Find	(Buscar) Haga clic para buscar los elementos de la lista que coincidan con el texto especificado.


Revisión de picos

Procedimientos de condiciones previas

- Abra una tabla de resultados.

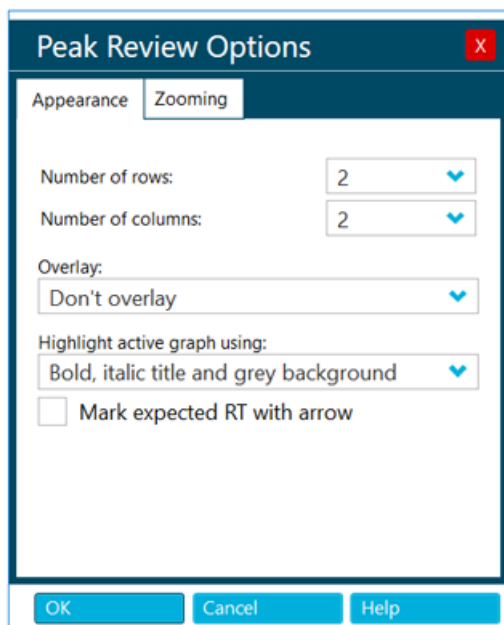
Use el panel Peak Review para:

- Inspeccionar visualmente los cromatogramas sin procesar, de forma que se pueda determinar la calidad del proceso de detección de picos.
- Corregir los cromatogramas que no se han integrado correctamente ajustando los parámetros de detección de picos o seleccionando manualmente los puntos de inicio y fin para la integración. Una vez que se ha vuelto a integrar un cromatograma, la tabla de resultados se actualiza automáticamente con la nueva área de picos y otros parámetros.
- Inspeccionar visualmente los espectros MS y MS/MS del XIC integrado.
- Revise los resultados de Formula Finding y Library Search, y actualice los resultados de la tabla de resultados, si es necesario.
- (Flujo de trabajo de reconstrucción de masa) Inspeccione visualmente el espectro promedio y el espectro de reconstrucción.
- (Flujo de trabajo de reconstrucción de masas) Corrija los cromatogramas en los que no se ha seleccionado la región de XIC correctamente ajustando los parámetros de búsqueda de picos o seleccionando manualmente la región de XIC. Tras seleccionar una nueva región de XIC, el espectro promedio y el espectro de reconstrucción se vuelven a generar.
- (Flujo de trabajo de reconstrucción de masa) Corrija los picos de masa que no se hayan seleccionado correctamente ajustando los parámetros de selección del pico de masa o seleccionado manualmente el pico de masa. Tras modificar el pico de masa, la tabla de resultados se actualiza automáticamente con el nuevo pico y otros parámetros.

1. Haga clic en **Displays the peak review** (.
2. En la lista **Components and Group** del panel de la izquierda, haga clic en un componente.

3. (Opcional) Personalice el diseño del panel de revisión de picos en el menú **View**. Para obtener una descripción de las opciones de **View**, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
4. (Opcional) Haga clic en **Options > Peak review display settings** para cambiar el aspecto del panel Peak Review. Por ejemplo, seleccione el número de cromatogramas que desea visualizar a la vez. Para obtener una descripción de las opciones, consulte el documento *Sistema de ayuda*.

Figura 6-29: Cuadro de diálogo de opciones de revisión de picos



5. (Opcional) Para ampliar un pico, utilice uno de estos métodos:
 - Haga clic en **Options > Peak review display settings** y, a continuación, haga clic en **Zooming** para cambiar los parámetros de ampliación de los picos.
 - Arrastre el cursor sobre la región que se va a ampliar en el eje X o en el eje Y.
6. (Opcional) Para expandir un pico para llenar el panel de revisión de picos entero, seleccione el pico y haga clic en **Peak magnifier** ().

Sugerencia: Cuando un icono del panel de revisión de picos está negro, la función correspondiente está habilitada. Para desactivarla, haga clic en el icono otra vez.


7. (Opcional) Para ver y ajustar la región de ruido en el gráfico, haga clic en **Options > Show Noise Regions** y, a continuación, ajuste la región de ruido, si procede. Consulte la sección [Cómo trabajar con regiones de ruido](#).


Nota: La región de ruido solo puede ajustarse si se utiliza el algoritmo de relación señal/ruido **Peak to Peak** o **Standard Deviation**.


Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

- Si un cromatograma o un gráfico de reconstrucción contiene varios picos y se ha integrado uno incorrecto, arrástrelo por encima del pico correcto para configurar un nuevo tiempo de retención previsto o peso molecular previsto. Si es necesario, ajuste los parámetros de búsqueda e integración de los picos.
- (Opcional) Para aplicar los nuevos parámetros a todas las muestras del componente o grupo de la muestra, utilice las opciones del menú contextual. Para obtener más información, consulte la sección [Cómo trabajar con picos en el panel de revisión de picos](#).


Sugerencia: Para visualizar los picos integrados, haga clic en **Displays the peak**


review (). En el panel revisión de picos, seleccione **Options > Show navigation controls**. A continuación, haga clic en los iconos de navegación. Para obtener una descripción de los iconos, consulte el documento *Sistema de ayuda*.

Sugerencia: Desactive la integración haciendo clic en **Set peak to "not found"** (). El usuario puede ver los datos sin procesar antes de integrar manualmente el pico. No se pueden editar los parámetros de integración.

- Haga clic en **Enable manual integration mode** () en el panel Peak Review para utilizar el modo de integración manual.
- Arrastre el cursor desde la base de un lado del pico de interés al otro lado. De este modo, el pico se integrará manualmente y los parámetros de integración utilizados anteriormente ya no estarán disponibles.

Sugerencia: Si el pico acaba de modificarse, puede revertirse al método original haciendo clic con el botón derecho y, a continuación, haciendo clic en **Revert Peak to Original Method**.

Sugerencia: Para eliminar la integración manual y habilitar los campos de parámetro de integración, deseccione la casilla **Manual Integration** y vuelva a hacer clic en **Enable manual integration mode** ().

- (Opcional) Para mostrar el pico actual en el espacio de trabajo explorador, haga clic en **Open data exploration** ().

Se conserva el nivel de ampliación actual.

Nota: La integración manual de un pico se mantiene hasta que el usuario cambia la integración del pico en cuestión en el panel Peak Review o edita el método integrado para cambiar el componente.

Nota: En el flujo de trabajo de reconstrucción de masa, si un pico de reconstrucción de masa se integra manualmente, la región de XIC correspondiente y el espectro promedio se mantienen hasta que el usuario cambia la integración del pico en cuestión en el panel Peak Review o edita el método integrado para cambiar el componente.

Cómo trabajar con picos en el panel de revisión de picos

Tabla 6-8: Funciones de revisión de picos

Para hacer esto	Haga esto
Copiar parámetros de integración	<p>Utilice este comando junto con Paste Integration Parameters para copiar los parámetros de búsqueda de picos de un cromatograma a otro. Este comando se puede usar si se necesita hacer el mismo ajuste a los parámetros para varios cromatogramas.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. En un gráfico que tenga un cromatograma activo abierto, haga clic con el botón derecho y, a continuación, haga clic en Copy Integration Parameters. 2. Para aplicar el cambio a todos los cromatogramas del componente, utilice el comando Update Processing Method for Component. 3. Para aplicar el cambio a todos los cromatogramas del grupo, utilice el comando Update Processing Method for Group.
Pegar los parámetros de integración	<p>Utilice este comando junto con Copy Integration Parameters para copiar los parámetros de búsqueda de picos de un cromatograma a otro.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. En un gráfico que tenga un cromatograma activo abierto, haga clic con el botón derecho y, a continuación, haga clic en Copy Integration Parameters. 2. Haga clic con el botón derecho en un cromatograma distinto y luego haga clic en Paste Integration Parameters.
Actualizar método de procesamiento para un componente	<p>Después de ajustar los parámetros de búsqueda de picos para un cromatograma específico, utilice esta función para modificar la copia del método de procesamiento guardado con la tabla de resultados con el fin de utilizar dichos parámetros para el componente.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Ajuste los parámetros de búsqueda de picos, haga clic con el botón derecho y seleccione Update Processing Method for Component. <p>Para el componente específico, se integran automáticamente todas las muestras para utilizar los nuevos parámetros y se actualizan el panel Revisión de picos y la tabla de resultados. Si algún pico se ha integrado manualmente, se le pregunta al usuario si la reintegración debe aplicarse a todos los picos o solo a aquellos que no se integraron de forma manual.</p>

Tabla 6-8: Funciones de revisión de picos (continuación)

Para hacer esto	Haga esto
<p>Actualizar método de procesamiento para un grupo</p>	<p>(No aplicable al flujo de trabajo de reconstrucción de masa) Es similar a la opción Update Processing Method for Component, salvo que la integración se aplica a todos los componentes que pertenecen al mismo grupo que el componente del cromatograma activo actualmente. Si el usuario ha asignado los diferentes componentes a grupos y se espera que los componentes asignados a un grupo cualquiera tengan el mismo tiempo de retención, este comando resulta útil porque permite al usuario restablecer los parámetros, incluido el tiempo de retención esperado, para todos los componentes del grupo a la vez. Este comando no es de utilidad si los componentes para los grupos no tienen los mismos tiempos de retención.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Ajuste los parámetros de búsqueda de picos, haga clic con el botón derecho y seleccione Update Processing Method for Group.
<p>Actualizar el método de procesamiento para un grupo, excluido Expected MW</p>	<p>(Solo flujos de reconstrucción de masa) Es similar a la opción Update Processing Method for Component, salvo que la integración se aplica a todos los componentes que pertenecen al mismo grupo que el componente del cromatograma y el gráfico de reconstrucción activos actualmente. Si el usuario ha asignado los diferentes componentes a grupos y se espera que los componentes asignados a un grupo cualquiera tengan el mismo tiempo de retención y parámetros de integración, este comando resulta útil porque permite al usuario restablecer los parámetros, incluido el tiempo de retención esperado, para todos los componentes del grupo a la vez. Este comando no es de utilidad si los componentes para los grupos no tienen los mismos tiempos de retención. Este comando no es aplicable a Expected MW.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Ajuste los parámetros de búsqueda de picos e integración, haga clic con el botón derecho y seleccione Update Processing Method for Group, Excluding Expected MW.

Tabla 6-8: Funciones de revisión de picos (continuación)

Para hacer esto	Haga esto
Aplicar los parámetros de integración a una muestra dentro del grupo	<p>(No aplicable al flujo de trabajo de reconstrucción de masa) Después de ajustar los parámetros de búsqueda de picos para un cromatograma específico, utilice este comando para aplicar los parámetros a todos los compuestos de una muestra que pertenecen al mismo grupo que el compuesto cambiado.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Ajuste los parámetros de búsqueda de picos para el cromatograma, haga clic con el botón derecho y, a continuación, seleccione Apply integration parameters to sample within a group.
Aplicar los parámetros de integración a una muestra dentro de un grupo, excluido Expected MW	<p>(Solo flujos de trabajo de reconstrucción de masa) Después de ajustar los parámetros de búsqueda de picos para un cromatograma específico y los parámetros de integración para un gráfico de reconstrucción, utilice este comando para aplicar los parámetros a todos los compuestos de una muestra que pertenecen al mismo grupo que el compuesto cambiado. Este comando no es aplicable a Expected MW.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Ajuste los parámetros de búsqueda de picos del cromatograma y de integración del pico de masa desconvolucionado, haga clic con el botón derecho del ratón y seleccione Apply integration parameters to sample within a group, excluding Expected MW.
Revertir pico al método original	<p>Después de ajustar los parámetros de búsqueda de picos para un cromatograma específico, utilice este comando para aplicar los parámetros originales de la copia del método de procesamiento guardado con la tabla de resultados en el cromatograma.</p> <ul style="list-style-type: none"> • En un gráfico que tenga un cromatograma activo abierto, haga clic con el botón derecho y, a continuación, seleccione Revert Peak to Original Method.

Tabla 6-8: Funciones de revisión de picos (continuación)

Para hacer esto	Haga esto
Revertir todos los picos del componente	<p>Después de ajustar los parámetros de búsqueda de picos para algunos cromatogramas, utilice este comando para aplicar los parámetros originales de la copia del método de procesamiento guardado con la tabla de resultados en todos los cromatogramas para el mismo componente que el cromatograma activo. Si algún pico se ha integrado manualmente, se le pregunta al usuario si la reintegración debe aplicarse a todos los picos o solo a aquellos que no se integraron de forma manual.</p> <ul style="list-style-type: none">• En un gráfico que tenga un cromatograma activo abierto, haga clic con el botón derecho y, a continuación, seleccione Revert All Peaks for Component.

Cómo trabajar con regiones de ruido

Si se utiliza el algoritmo de relación señal/ruido **Peak to Peak** o **Standard Deviation**, las regiones de ruido se pueden ajustar interactivamente en la página Integration del método de procesamiento y el panel Peak Review.

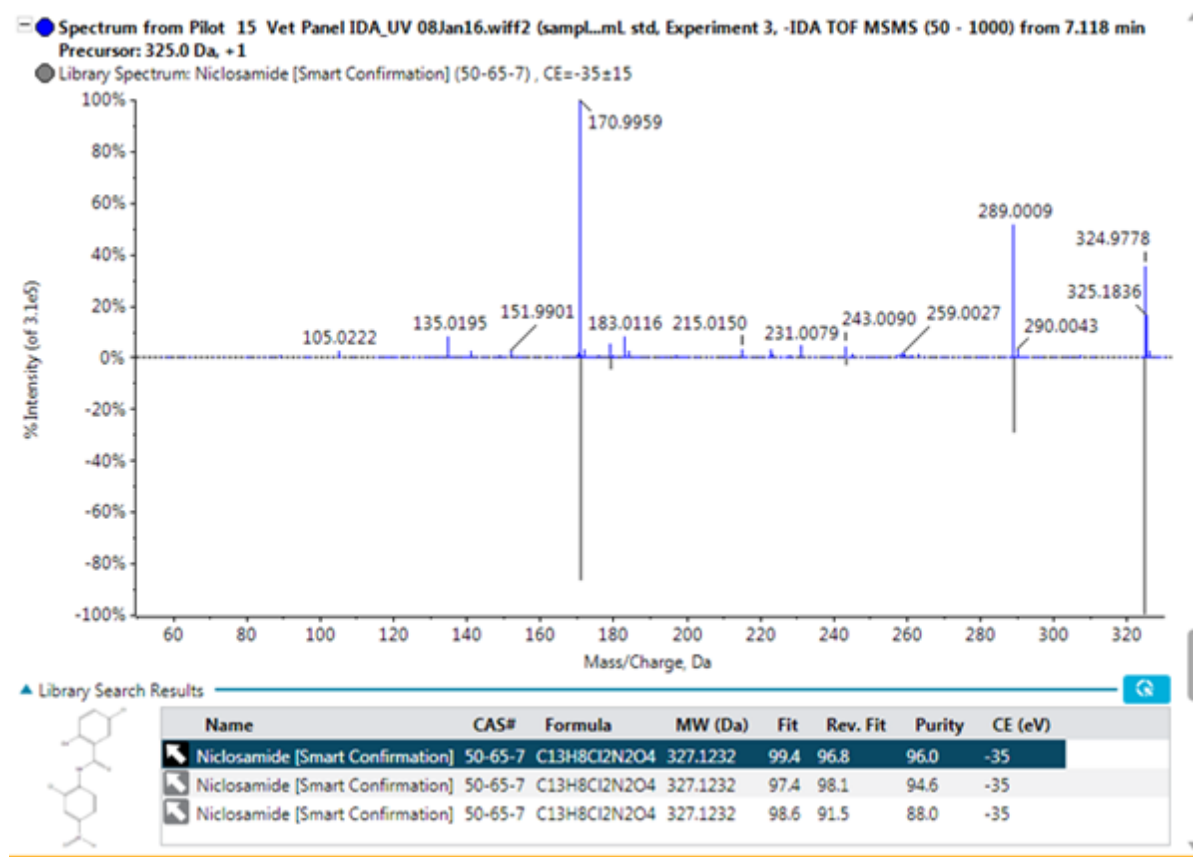
1. Haga clic en la región de ruido en el gráfico y desplácela a la ubicación pertinente.
2. Mueva el cursor sobre el borde izquierdo o derecho de la región de ruido hasta que se muestre la flecha de doble punta. Arrastre el borde a la posición pertinente para ajustar el tamaño de la región de ruido.



Análisis de los picos utilizando la búsqueda en biblioteca o en los resultados del buscador de fórmulas

Sugerencia: Haga clic en **Options > Peak review display settings** para cambiar el número de filas que se muestra en el panel. Los usuarios también pueden arrastrar hacia arriba el panel para aumentar el tamaño del panel Peak Review.

1. En un panel Peak Review, haga clic en **View** y, a continuación, haga clic en **XIC + MS**, **XIC + MS/MS** o **XIC + MS + MS/MS**.
Los resultados de la búsqueda se muestran bajo los gráficos.

Figura 6-30: Resultados de la búsqueda en biblioteca

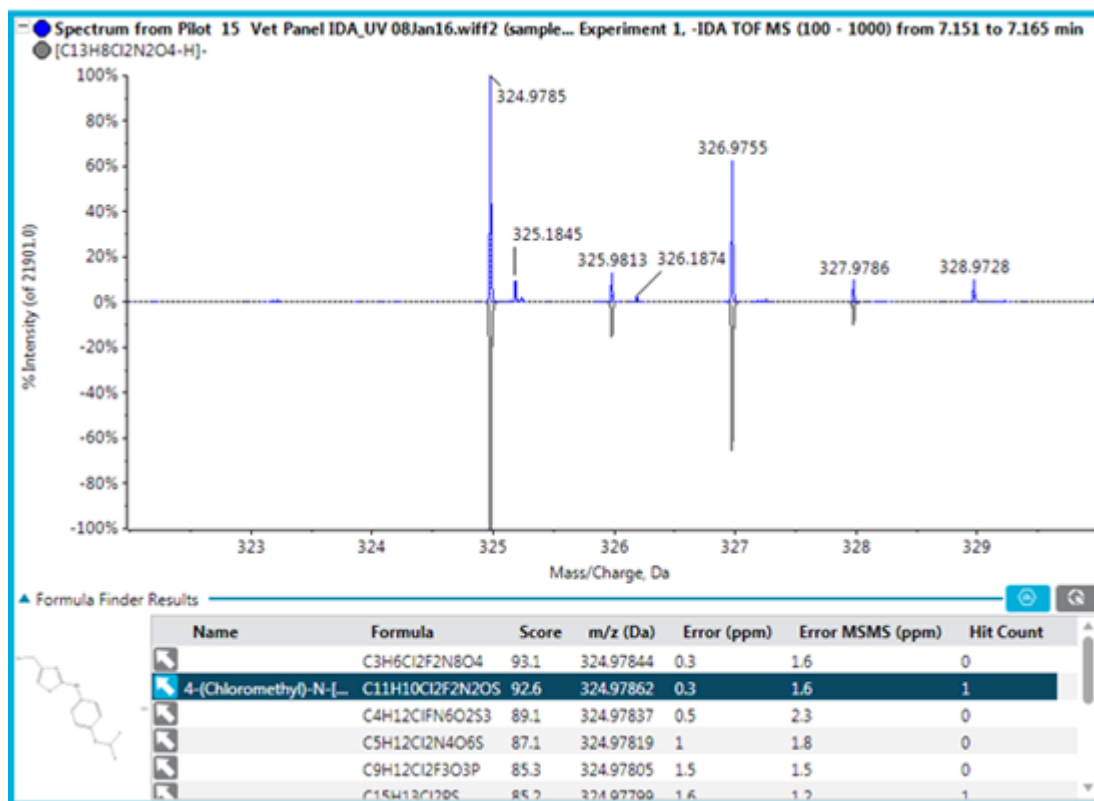


- Haga clic en la flecha azul para expandir **Library Search Results** para mostrar más resultados de biblioteca posibles.
La estructura química del resultado de biblioteca seleccionado se muestra en la tabla.
- Haga clic en la flecha para contraer la tabla.
Los resultados mostrados en la tabla contraída también se muestran en la tabla de resultados.
- (Opcional) Seleccione una fila de la tabla y, a continuación, haga clic en  para actualizar los resultados en la tabla de resultados para usar ese resultado de biblioteca concreto en el análisis.
- (Opcional) Haga clic en  para actualizar el método de procesamiento con la información para el compuesto seleccionado.
- Para añadir un espectro a la base de datos de biblioteca, siga estos pasos:
 - Haga clic con el botón derecho del ratón en el espectro y, a continuación, haga clic en **Add spectrum to library**.
Se abre el cuadro de diálogo Add spectrum to library.
 - Actualice los campos **Compound Name**, **Library** y **Precursor m/z**.
 - Haga clic en **OK**.



Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

- Haga clic en la flecha azul para expandir **Formula Finder Results** para mostrar más resultados posibles.


Figura 6-31: Formula Finder Results



La estructura química de los resultados del buscador de fórmulas seleccionado también se muestra en la tabla si el compuesto se ha actualizado desde ChemSpider.

- Haga clic en la flecha para contraer la tabla. Los resultados mostrados en la tabla contraída también se muestran en la tabla de resultados.
- Haga clic en  para actualizar la columna **Formula Finder Results** en la tabla de resultados con el compuesto seleccionado.
- Haga clic en  para actualizar el método de procesamiento con la información del compuesto seleccionado.

Sugerencia: Haga clic en **Options > Get Chemspider hit count** para mostrar la columna **ChemSpider Hit Count** en la tabla bajo el gráfico.

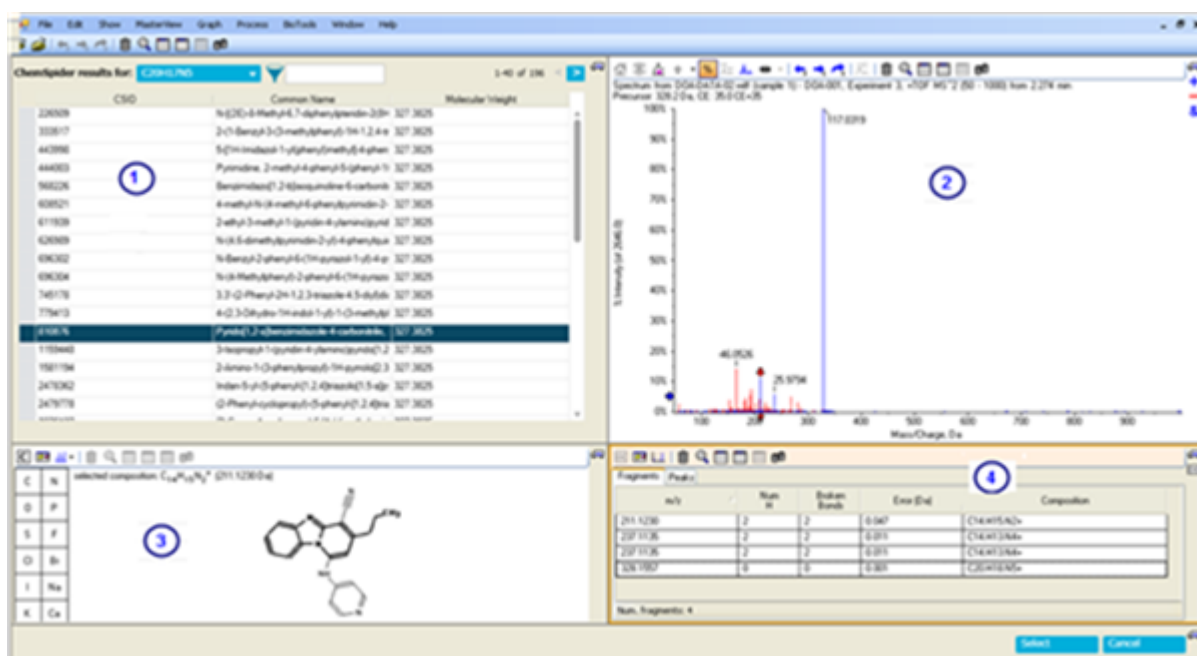
- Haga clic en  para abrir la aplicación ChemSpider. Consulte la sección [ChemSpider](#).

ChemSpider

Nota: La estación de trabajo debe contener un fichero de licencia válido para acceder a la base de datos de ChemSpider.

Nota: La información contenida en la siguiente imagen es única y exclusivamente a modo de ejemplo.

Figura 6-32: Sesión de ChemSpider



Elemento	Descripción
1	Panel de resultados: Muestra una lista de compuestos sugeridos que coinciden con la fórmula seleccionada. Los resultados se muestran en grupos de 40 compuestos. Utilice la flecha derecha para avanzar hasta el siguiente grupo de la lista. Utilice la flecha izquierda para volver al anterior grupo de la lista.
2	Panel de espectros: Muestra los espectros adquiridos (en rojo) y los fragmentos coincidentes (en azul). A más fragmentos azules, mejor coincidencia.
3	Panel de estructura: Muestra la estructura química del compuesto seleccionado en el panel de resultados.
4	Panel de tabla de fragmentos, pestaña Fragments: Muestra el número total de fragmentos coincidentes con el compuesto seleccionado.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Elemento	Descripción
4	Panel de la tabla Fragments, pestaña Peaks: Muestra el número total de picos, el número de picos coincidentes y el porcentaje de intensidad total del compuesto seleccionado. La casilla de la columna Assigned se selecciona automáticamente para los picos coincidentes.

Tabla 6-9: Funciones de ChemSpider

Si hace esto...	...sucede esto
Escribir la información en el campo junto al icono Filter XIC List .	El panel de resultados se actualiza y contiene únicamente los resultados que coincidan con los criterios introducidos.
Hacer clic en las entradas del panel de resultados	Se actualizan los paneles restantes, que muestran la información asociada a la selección.
Hacer clic en las entradas de la pestaña Fragments del panel de tabla de fragmentos	Se actualizan los paneles restantes. En el panel de espectros, aparecen flecha rojas en la parte de arriba y abajo del fragmento coincidente (en azul). En el panel de estructura, los componentes de la estructura química que coincidan con el fragmento se resaltan (negrita).
Hacer clic en las entradas Assigned de la pestaña Peaks del panel de tabla de fragmentos	Se actualizan los paneles restantes. En el panel de espectros, aparecen flecha rojas en la parte de arriba y abajo del fragmento coincidente (en azul). En el panel de estructura, los componentes de la estructura química que coincidan con el fragmento se resaltan (negrita).
Hacer clic en la flecha abajo, a la derecha del campo ChemSpider results for y seleccionar la opción ChemSpider web site	El sitio web de ChemSpider (www.chemspider.com) se abre en una ventana del navegador. Para obtener más información sobre cómo acceder a la información, consulte la ayuda de ChemSpider.
Hacer clic en la flecha abajo, a la derecha del campo ChemSpider results for y seleccionar la opción Refresh	Se descartan todos los cambios y la sesión vuelve a los resultados de búsqueda originales.
Hacer clic en Select .	La información seleccionada en la sesión de ChemSpider se copia en el panel Formula Finder Results en la sesión de software. Se cierra la sesión de ChemSpider.

Sugerencias sobre el panel Peak Review

- Ordene la tabla de resultados en una columna particular y revise únicamente aquellos cromatogramas que están ordenados en la parte superior o inferior de la tabla.

- El panel Peak Review siempre se sincroniza con la tabla de resultados correspondiente y muestra los cromatogramas para los mismos picos, en el mismo orden que se encuentran en la tabla de resultados. Cualquier cambio, como ordenar filas, filtrar tipos de muestras o seleccionar componentes, realizado en la tabla de resultados se refleja automáticamente en el panel Peak Review.
- Utilice la barra de desplazamiento situada a la derecha del panel para desplazarse por los cromatogramas disponibles. Cuando el panel Peak Review esté activo, utilice las teclas de flecha hacia arriba y abajo del teclado o la rueda de desplazamiento del ratón para desplazarse a lo largo de los cromatogramas.
- Seleccione una fila en la tabla de resultados haciendo clic en la zona azul claro a la izquierda de la primera columna para mostrar el pico correspondiente en el panel Peak Review. Si el usuario se desplaza a un cromatograma particular del panel Peak Review, se resalta la fila correspondiente en la tabla de resultados y después se visualiza.
- El espacio de trabajo Analytics no admite la agrupación de números. Los usuarios no deben agrupar números en cuadros de texto (por ejemplo, parámetros de integración) ni en cuadrículas (por ejemplo, tablas de resultados).
- En cualquier momento, se considera que un cromatograma está activo si el título está en negrita. Active un determinado cromatograma haciendo clic en cualquier punto dentro de él.

PRECAUCIÓN: Posible pérdida de datos. Evite arrastrar el cursor dentro de un cromatograma; si lo hace, se ajustará el tiempo de retención esperado y se modificará la integración.

- Si el usuario arrastra el ratón por un pico específico dentro de un cromatograma, se actualizará el parámetro de integración **Expected RT** con el tiempo de retención real del pico. El nuevo tiempo de retención se aplica automáticamente y el software vuelve a integrar el pico, actualizando la tabla de resultados.
- (Flujo de trabajo de reconstrucción de masa) Si el usuario arrastra el ratón a lo largo de un pico específico en un gráfico de reconstrucción, el parámetro **Expected MW** se actualiza con el peso molecular real del pico. El nuevo peso molecular se aplica automáticamente y el software vuelve a integrar el pico, actualizando la tabla de resultados.
- (Flujo de trabajo de reconstrucción de masa) Si **Recentered on the largest XIC Peak** no se ha seleccionado, el usuario puede seleccionar manualmente la región de XIC que desee. El tiempo y el centro de la región de XIC pasa a ser el tiempo de retención (RT) esperado, y el RT del pico más grande dentro de la región de XIC pasa a ser el RT encontrado.
- Si el usuario está revisando picos en el modo de integración manual y arrastra el cursor sobre el pico, este se integrará manualmente. Mantener pulsado **Shift** mientras se arrastra ayuda a mantener la línea recta.
- Cuando un cromatograma pasa a estar activo, los parámetros de integración mostrados a la izquierda del panel se actualizan para reflejar el cromatograma que acaba de activarse. Si el usuario ajusta los parámetros de integración de picos y posteriormente hace clic en **Apply**, el cromatograma activo se verá afectado.

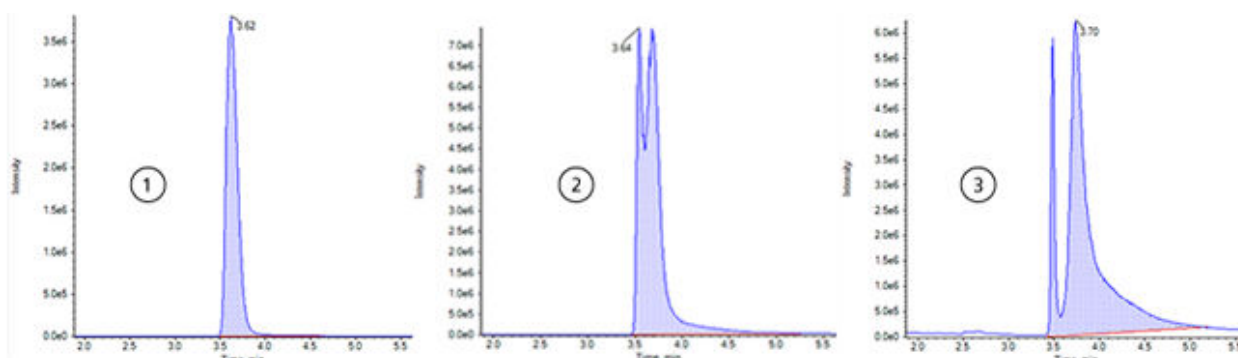
Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

- Los usuarios deben inspeccionar la forma de los picos durante la revisión de picos para identificar picos potencialmente saturados y asegurarse de que una integración parcial o incorrecta no genere por error concentraciones registradas incorrectamente.
- Los usuarios deben revisar los cromatogramas durante la revisión de picos para comprobar si hay picos de ruido excesivo que pueden indicar problemas con el sistema.
- Haga doble clic en el eje y para escalar el eje al pico más intenso dentro de todo el conjunto de datos. Amplíe arrastrando dentro del eje para seleccionar un rango de intensidad.
- Haga doble clic en el eje X para devolver el gráfico a su vista inicial en la que se ven todos los datos. Amplíe arrastrando dentro del eje para seleccionar un rango de tiempo.
- Si navega por las muestras de una en una en la tabla de resultados, haga clic en **Results > Cache all chromatograms for faster peak review** para mejorar el rendimiento.

Las muestras con concentraciones muy altas, por encima del límite superior de cuantificación, pueden generar picos cada vez más anchos y saturados con formas distorsionadas o divididas.

La siguiente figura muestra la concentración máxima que puede cuantificarse con una regresión lineal.

Figura 6-33: Ejemplos de picos no saturados y saturados



Elemento	Descripción
1	Muestra un pico aceptable que se puede utilizar para la cuantificación.
2	Muestra un pico que está saturado. La concentración de la muestra que generó este pico se encuentra muy por encima de ULOQ. A medida que se satura el pico, este se hace más ancho y la parte superior del pico aparece invertido debido a una supresión de ganancia. Un pico como este debe excluirse de la cuantificación, ya que la integración puede generar concentraciones registradas de manera incorrecta.
3	Muestra la saturación extrema que causa la separación del pico de LC en dos picos. Un pico como este debe excluirse de la cuantificación, ya que la integración puede generar concentraciones registradas de manera incorrecta.

Análisis de datos usando estadísticas

Procedimientos de condiciones previas

- Abra una tabla de resultados.

Utilice el panel de estadísticas para ver información relacionada con la reproductibilidad de un análisis. Cada fila de la tabla resume información, como el promedio y la desviación estándar, de un grupo de picos relacionados para el mismo analito que se esperaría que tuviese la misma respuesta.

Revise la integración de picos, curva de calibración y estadísticas de la muestra con un proceso iterativo. La precisión establecida para el campo **Actual Concentration** de tabla de resultados se utiliza también en la tabla de estadísticas.

Nota: Consulte los procedimientos de funcionamiento estándar del laboratorio para obtener información acerca de los valores aceptados para las estadísticas, incluidos los porcentajes del coeficiente de variación y de precisión.

Abra una tabla de resultados y haga clic en **Views > Statistics pane**.

Columnas del panel de estadísticas

Etiqueta	Descripción
Row	(Fila) Muestra el número de fila.
Component Name	(Nombre del componente) Muestra el nombre del analito.
Sample Name/ Actual Concentration	(Nombre de la muestra/Concentración real) Cuando las muestras se agrupan por concentración real, muestra la concentración. Cuando las muestras se agrupan por el nombre de muestras, muestra el nombre de la muestra.
Num. Values	(Núm. valores) Muestra m de n , donde n es el número total de muestras en la concentración real, o con el mismo nombre de muestra, y m es el número de estas muestras utilizadas para los cálculos. Las muestras no se utilizan si el pico correspondiente no se ha podido integrar o si el campo Used se ha borrado manualmente.
Mean	(Media) Muestra la media de las muestras usadas.
Standard Deviation	(Desviación estándar) Muestra la desviación estándar de las muestras usadas.
Percent CV	(CV porcentual) Muestra el coeficiente de varianza expresado como un porcentaje: $100 * \text{Standard Deviation} / \text{Mean}$.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Etiqueta	Descripción
Accuracy	(Precisión) Muestra el valor promedio dividido entre la concentración real expresada como un porcentaje: $100 * Mean / Actual Concentration$. Este campo solo aparece al agrupar por concentración real y no al hacerlo por nombre de muestra.
Values	(Valores) Muestra los valores individuales de las muestras en columnas adicionales. Si la muestra correspondiente no se ha podido integrar, aparece N/A . Si el campo Used se ha borrado manualmente, el valor se muestra con un tachado.
Group by	(Agrupar por) Especifica cómo se debe agrupar la muestra de un analito determinado para el cálculo de estadísticas. Están disponibles las siguientes opciones: <ul style="list-style-type: none">• Group by Concentration for Standards (Grupo por concentración para muestras estándar): Las muestras estándar se agrupan por concentración real.• Group by Concentration for QCs (Grupo por concentración para muestras de control de calidad): Las muestras de control de calidad se agrupan por concentración real.• Group by Sample Name for Standards (Grupo por nombre de muestra para muestras estándar): Las muestras estándar replicadas se agrupan por el campo Sample Name.• Group by Sample Name for QCs (Grupo por nombre de muestra para muestras de control de calidad): Las muestras de control de calidad replicadas se agrupan por el campo Sample Name.• Group by Sample Name for All Samples (Grupo por nombre de muestra para todas las muestras): Las muestras estándar replicadas se agrupan por el campo Sample Name.
Metric	(Métrica) Especifica la métrica real que se utiliza para el cálculo de las estadísticas. Están disponibles las siguientes opciones: <ul style="list-style-type: none">• Calculated Concentration (Concentración calculada): Se utiliza el campo Calculated Concentration de la tabla de resultados.• Area (Área): Se utiliza el campo Area de la tabla de resultados.• Height (Altura): Se utiliza el campo Height de la tabla de resultados.• Calibration Y-Value (Calibración valor y): Se utiliza el parámetro de regresión especificado para el analito. Se trata de Area o Height para un analito sin un patrón interno correspondiente, o Area Ratio o Height Ratio para un analito que utiliza un patrón interno.

Etiqueta	Descripción
Save Results and Export	(Guardar resultados y exportar) Haga clic para guardar los resultados y exportar la tabla de estadísticas. Se abre el cuadro de diálogo Export Statistics.

Sugerencias del Panel de estadísticas

- En la lista **Components and Groups**, seleccione **All Components** para visualizar las entradas de todos los analitos en la tabla de estadísticas. Seleccione un componente individual para visualizar las entradas solo para dicho analito. Si el usuario selecciona un patrón interno individual de la lista, la tabla de estadísticas estará vacía. Consulte la sección [Lista de componentes y grupos](#).
- Haga clic en una de las celdas **Value** de una fila visible en el panel Statistics para seleccionar dicha fila de la tabla de resultados para el analito y la muestra. Si el panel Peak Review está visible, este se vincula a la tabla de resultados y se actualiza al hacer clic en la celda correspondiente.
- Ordene las estadísticas haciendo clic en uno de los encabezados de las columnas.
- Copie toda la tabla de estadísticas o solo las filas de interés seleccionando las filas y pulsando **Ctrl+C**.
- Utilice la lista **Group by** para especificar cómo debe agruparse la muestra para un analito determinado en el cálculo de las estadísticas.
- Utilice la lista **Metric** para especificar la métrica que se utiliza para el cálculo de las estadísticas, la concentración calculada, el área, etc.
- Ajuste las anchuras de las columnas para optimizar la pantalla. Dichas anchuras se conservarán la próxima vez que se muestre el panel Statistics.
- Para cambiar el formato y la precisión de la tabla de estadísticas, cámbielos en la tabla de resultados. Consulte la sección [Personalizar la tabla de resultados](#).
- Para cambiar la opción **Use Peak** para un valor individual, haga clic con el botón derecho en la celda en el panel Statistics y seleccione **Use Peak**. Se actualiza la columna **Use Peak** en la tabla de resultados.

Visualización de la curva de calibración

Procedimientos de condiciones previas

- Abra una tabla de resultados.

Utilice la curva de calibración para determinar la concentración de una sustancia en una muestra desconocida comparando la muestra desconocida con un conjunto de muestras estándar de concentración conocida. Consulte la sección [Curvas de calibración](#).

1. Haga clic en **Displays the Calibration Curve** ()

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

2. Para establecer las opciones de regresión, haga clic en **Regression**. Consulte el documento *Sistema de ayuda*.

Export Calibration

Utilice Export Calibration para guardar una copia de la ecuación de calibración para todos los analitos asociados con la tabla de resultados activa a un archivo externo (mqcal). Esto permite al usuario aplicar la calibración a partir de un conjunto de muestras patrón a otras muestras que no forman parte de la misma tabla de resultados.

El flujo de trabajo típico es:

1. Cree una tabla de resultados nueva que contenga solo las muestras patrón.
2. Utilice el panel Peak Review para asegurarse de que la integración se realizó correctamente.
3. En el panel Calibration Curve, haga clic en **Options > Export calibration (and save results)** para guardar una copia de la calibración.
4. Cree una tabla de resultados nueva que contenga muestras de concentración desconocida.
5. En el panel Calibration Curve, haga clic en **Options > Assign external calibration** para aplicar la ecuación de calibración exportada a la nueva tabla de resultados.

Nota: Los usuarios también pueden especificar qué archivo de calibración (mqcal) aplicar a la nueva tabla de resultados.

Si se hacen cambios a la tabla de resultados original, con las muestras de patrón, la tabla de resultados debe ser exportada de nuevo para guardar la ecuación de calibración actualizada. Las calibraciones exportadas anteriormente no se actualizan de manera automática.

Análisis de datos utilizando gráficos de métrica

Procedimientos de condiciones previas
<ul style="list-style-type: none">• Abra una tabla de resultados.

Utilice un Metric Plot para representar los valores en una columna de la Results Table contrastados con el número de fila u otra columna. Estos gráficos son una ayuda valiosa para la revisión visual de los datos.

Si se selecciona una columna, el gráfico resultante muestra los valores de la columna como una función del número de fila de la tabla. Si se seleccionan dos columnas, se representan los valores de las columnas contrastados entre sí. La primera de las dos columnas para seleccionar contiene los valores de x y la segunda, los valores de y.

1. Seleccione una o dos columnas en la tabla de resultados.

Sugerencia: Para seleccionar una segunda columna, pulse **Ctrl** haciendo clic en la cabecera de la columna.

- Haga clic en **More > Create Metric Plot with new settings**.
- En el gráfico de métricas, haga clic en **Link** y, a continuación, haga clic en **Link to results table columns** o **Link to results table rows** para vincular el desplazamiento en la tabla de resultados al gráfico de métricas.
Para obtener más información sobre el menú **Link**, consulte el documento *Sistema de ayuda*.
- Para actualizar el gráfico de métricas, seleccione las filas de interés de la tabla de resultados y, a continuación, en el panel del gráfico de métricas, haga clic en **Link > Plot selected rows only**.

Sugerencia: Para seleccionar varias filas, pulse **Ctrl** mientras selecciona las filas.

- (Opcional) Personalizar las opciones de gráfico de métricas seleccionando opciones del menú **Options**. Para obtener una descripción de las opciones, consulte el documento *Sistema de ayuda*.

Sugerencias para los gráficos de métricas

- Si los usuarios hacen clic con el botón izquierdo en un punto de datos, se selecciona automáticamente la fila correspondiente de la tabla de resultados y se activa su visualización. Si el panel Peak Review está abierto, también se actualiza para mostrar el cromatograma correspondiente. Esto proporciona un método práctico para realizar revisión de picos para valores atípicos.
- La región de título siempre muestra el nombre del trazo activo. Si los trazos de varios componentes están superpuestos, conmute el título entre mostrar la información de todos los trazos o solo del activo haciendo clic en el signo (+) a la izquierda del título. Active un trazo específico haciendo clic en el punto de color a la izquierda del título correspondiente o seleccionando un punto de datos en el gráfico de métricas.
- El gráfico de métricas puede utilizarse para representar áreas de pico de patrón interno o muestras de control de calidad para controlar posibles desviaciones o tendencias.

Edición de plantillas de informe

PRECAUCIÓN: Posible pérdida de datos. Para evitar que los usuarios modifiquen las plantillas, asegúrese de que las plantillas de informe se guardan en carpetas de solo lectura protegidas, en las que solo los administradores del sistema tengan permisos de escritura.

El usuario es responsable de validar la plantilla personalizada.

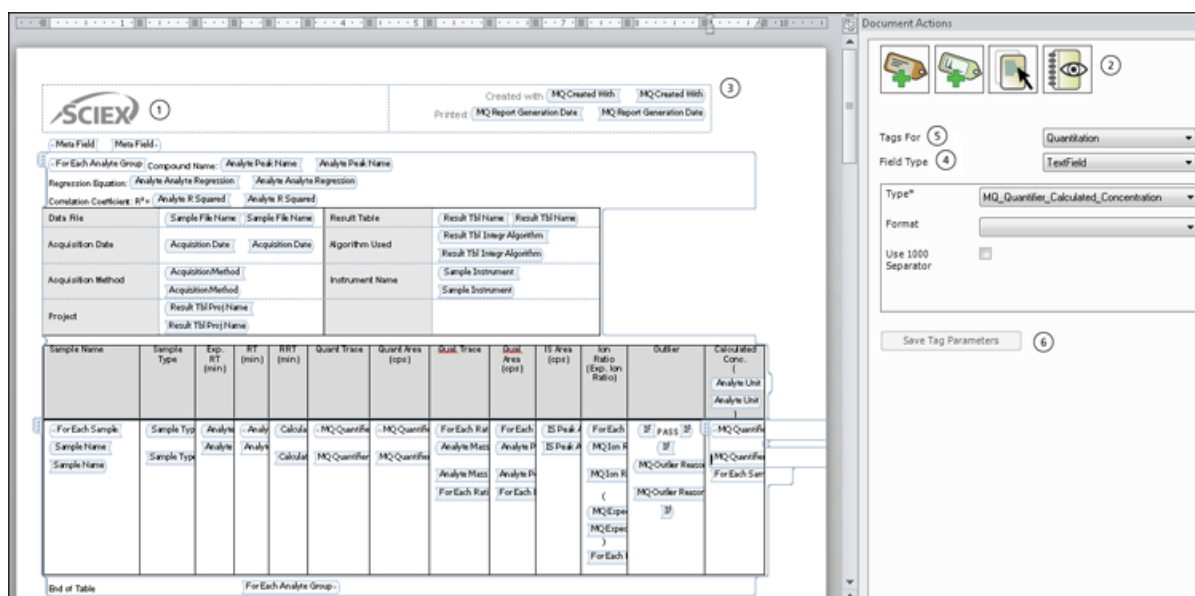
- Abra la plantilla docx.

Sugerencia: Las plantillas están ubicadas en
C:\ProgramData\SCIEX\Analytics\Reporter.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Cuando se selecciona un área, el editor de plantillas Reporter se abre a la derecha. El editor de plantillas se rellena de forma automática con la información de etiquetas.

Figura 6-34: Editor de plantilla de informe



Elemento	Descripción
1	Plantilla de informe que muestra las etiquetas actuales.
2	Iconos: <ul style="list-style-type: none"> • Agregar nueva etiqueta. • Agregar etiqueta de imagen. • Mostrar área de contenido. • Ver registro de cambios del documento.
3	Created with: muestra el nombre del software que proporciona la información de etiquetas.
4	Field Type: muestra los tipos de campos aplicables al software.
5	Muestra una lista de atributos disponibles basada en el tipo de campo seleccionado. Por ejemplo, el nombre de etiqueta y el formato de número.
6	Save Tag Parameters: haga clic para guardar los cambios. Si los cambios no se guardan, se mostrará un mensaje que indica al usuario que lo haga.

2. Utilice los procedimientos de la siguiente tabla.

Tabla 6-10: Funciones de Reporter

Para hacer esto	Haga esto
Cambiar el tipo de campo.	Haga clic dentro de la etiqueta, seleccione un nuevo tipo de campo y, a continuación, elija los atributos.
Cambiar los atributos del tipo de campo.	Haga clic dentro de la etiqueta y cambie los atributos según sea necesario.
Agregar una etiqueta.	Haga clic en el icono Add new tag , seleccione Field Type y elija los atributos.
Agregar una imagen.	Haga clic en el icono Add picture tag y, a continuación, seleccione los atributos.
Mostrar dónde comienza y finaliza una etiqueta.	Haga clic en el icono Show content area .
Mostrar el registro de auditoría del documento.	Haga clic en el icono View document change log .
Copiar y pegar las etiquetas.	Copie las etiquetas seleccionadas y péguelas en la nueva ubicación; a continuación, actualice los atributos del tipo de campo. Los atributos no se copian, por lo que deben seleccionarse.
Navegar por las etiquetas.	Utilice las flechas izquierda y derecha para desplazarse por las etiquetas.
Eliminar etiquetas.	Realice una de las siguientes acciones: <ul style="list-style-type: none"> • Si el cursor se encuentra a la izquierda de la etiqueta, pulse Delete. • Si el cursor se encuentra a la derecha de la etiqueta, pulse Backspace.

- Haga clic en **Save Tag Parameters** después de realizar cualquier cambio.

Sugerencia: La información obligatoria se indica mediante un signo de exclamación que parpadea en rojo, a la izquierda del campo.

Plantillas de Reporter

Es responsabilidad del usuario validar la plantilla de informe personalizada.

Algunas plantillas de informe utilizan consultas. Los usuarios pueden crear consultas utilizando fórmulas de Microsoft Excel para evaluar, manipular y presentar los datos de la tabla de resultados en un informe. La etiqueta MetaField de la plantilla de informe indica al informe el nombre del archivo de consulta que debe usar. Para utilizar las consultas, hay que especificar el nombre del archivo de la consulta en la etiqueta MetaField de la plantilla de informe. Las consultas también deberán tener la extensión ".query" para que se reconozcan

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

como tales. Las consultas se deberán guardar en la carpeta de Reporter en la que se guardan las plantillas de informe.

Recomendamos que el usuario valide los resultados generados cuando se haga uso de una plantilla Reporter, especialmente cuando se utilicen consultas en una plantilla. Si se realizan modificaciones en la plantilla de informe después de la validación, se deberá volver a validar la plantilla de informe. Los cambios en la plantilla de informe incluyen cualquier modificación realizada en etiquetas o consultas de Reporter.

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
All Peaks Qual	Informe que incluye, para cada muestra, una sección con información de archivo, información de muestra, tablas de resultados de analitos y cromatogramas superpuestos de todos los analitos y el patrón interno. La tabla de resultados de analitos se imprime tal como se muestra en la tabla de resultados. Todas las señales cualitativas de confianza se enumeran al principio de la tabla.	N/A
Analyte 20 percent Report	Informe que muestra, para cada analito, una sección que incluye la información del archivo y una tabla XIC de cada blanco, patrón, control de calidad y el 20 % de todas las muestras desconocidas.	Se trata de una plantilla de informe de ejemplo con una consulta adjunta: Analyte20percent.Query.
Analyte Summary	Tabla de resultados que muestra el nombre de la muestra, las concentraciones calculadas y los valores atípicos de todas las muestras del lote para el analito específico y el patrón interno asociado.	N/A

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
Calibration Curve	Informe que incluye información del archivo, tabla de estadísticas (patrones) y curva de calibración para analitos, una página por analito.	<ul style="list-style-type: none"> • Los patrones cuya casilla de verificación Reportable no se haya marcado no se indicarán en la tabla de datos. Las estadísticas no se verán afectadas por el estado Reportable. • El informe mostrará la ecuación de regresión y el gráfico, como se muestra y calcula en el panel Calibration Curve del espacio de trabajo Analytics en función del estado de la columna Used.
Intact Quant All Peaks and Graphs	Informe que muestra las entradas de la tabla de resultados para cada muestra. Todas las columnas visibles en la tabla de resultados se muestran en el informe. El informe también incluye el cromatograma XIC, el espectro promedio y el espectro de reconstrucción para cada muestra y analito.	Este informe es específico del flujo de trabajo de reconstrucción de masa.
Intact Quant Analyte Summary and Calibration Curve	Informe que muestra las entradas de la tabla de resultados, la curva de calibración y los datos estadísticos de cada analito. La tabla de resultados incluye el nombre de la muestra, el tipo de muestra, el nombre del analito, la concentración real, el área, la altura, el PM esperado, el PM, el delta de PM, la concentración calculada y la precisión.	Este informe es específico del flujo de trabajo de reconstrucción de masa.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
Intact Quant Sample Summary	Informe que muestra las entradas de la tabla de resultados de todas las muestras. La tabla de resultados incluye el nombre de la muestra, el tipo de muestra, el nombre del analito, la concentración real, el área, la altura, el PM esperado, el PM, el delta de PM, la concentración calculada y la precisión y la aceptación de la precisión.	Este informe es específico del flujo de trabajo de reconstrucción de masa.
Metric Plot	Informe que incluye, para cada analito, una sección con información del archivo y un gráfico de métricas del área de pico del patrón interno.	El estado de la casilla de verificación Reportable no afecta al contenido del informe. Se incluyen todos los puntos de datos aunque las casillas de verificación estén desmarcadas.
MQ Analyte Report 1	Informe que muestra, para cada analito, una sección que incluye la información del archivo, la tabla de resultados de la muestra y la tabla de XIC de cada muestra. POR LO GENERAL, SE IMPRIMEN 2 PÁGINAS POR ANALITO EN CASO DE MENOS DE 8 MUESTRAS.	N/A
MQ Analyte Report 2	Informe que muestra, para cada analito, una sección que incluye la información del archivo y la tabla de XIC para cada muestra desconocida. POR LO GENERAL, SE IMPRIMEN 2 PÁGINAS POR ANALITO EN CASO DE MENOS DE 8 MUESTRAS.	Solo se indican las desconocidas.
MQ Analyte Report 3	Informe que muestra, para cada analito, una sección que incluye la información del archivo y la tabla de resumen de muestras desconocidas.	Solo se indican las desconocidas.

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
MQ Analyte Report condensed table	Informe que contiene, para cada muestra desconocida, una sección que incluye la información del archivo, la información de la muestra y una tabla resumen de resultados. La tabla se muestra en dos columnas para que quepan más muestras por página.	Solo se indican las desconocidas.
MQ Analyte Report with chromatograms	Informe que muestra, para cada analito, una sección que incluye la información del archivo, la tabla de resultados de la muestra y un pequeño cromatograma para cada muestra.	Solo se indican las desconocidas.
MQ Blank Template	N/A	En el informe solo se muestra la información de encabezado, el logotipo y los números de página.
MQ Pep Quant	N/A	Para uso con el conjunto de datos de cuantificación de péptidos. Consulte el segundo ejemplo, el ejemplo de cuantificación absoluta, en la <i>Guía del usuario</i> del software MultiQuant.
MQ QC Summary 1 with flags	Informe que muestra la información del archivo, la tabla resumen de control de calidad por analito (los valores con un CV superior al 20 % están resaltados) y tabla de resultados de control de calidad detallados (los valores con una precisión fuera del rango 80-120 % están resaltados).	Los controles de calidad que tengan la casilla de verificación Reportable desmarcada no se incluirán en el informe, ni se utilizarán en los cálculos.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
MQ Sample Report 1	Informe que incluye, para cada muestra, una sección con la información del archivo, la información de la muestra, la información del IS, la tabla de resultados del analito, la tabla de XIC con el IS y cada analito. POR LO GENERAL, SE IMPRIMIRÁN 2 PÁGINAS POR MUESTRA EN EL CASO DE MENOS DE 8 MUESTRAS.	N/A
MQ Sample Report 2	Informe que incluye, para cada muestra desconocida, una sección que incluye la información del archivo, el TIC, los detalles de la muestra, el XIC del analito y los resultados en forma de tabla. POR LO GENERAL, SE IMPRIMIRÁN 2 PÁGINAS POR MUESTRA EN EL CASO DE MENOS DE 8 MUESTRAS.	Solo se indican las desconocidas.
MQ Sample Report 3	Informe que contiene, para cada muestra desconocida, una sección que incluye la información del archivo, la información de la muestra y una tabla resumen de resultados.	Solo se indican las desconocidas.
MQ Sample Report condensed table	Informe que contiene, para cada muestra desconocida, una sección que incluye la información del archivo, la información de la muestra y una tabla resumen de resultados. La tabla se muestra en dos columnas para que quepan más analitos por página.	Solo se indican las desconocidas.

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
MQ Sample Report with chromatograms	Informe que contiene, para cada muestra, una sección que incluye la información del archivo, la información de la muestra, la tabla de resultados de analito y un pequeño cromatograma para cada analito.	Solo se indican las desconocidas.

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
MQ Sample Report with Concentration Threshold	Informe que contiene, para cada muestra desconocida, una sección que incluye la información del archivo, la información de la muestra y una tabla resumen de resultados.	<ul style="list-style-type: none"> • El archivo de consulta asociado es Sample Report with Concentration Threshold.query. • Debe asignarse un nombre a los componentes con el formato "Cmpd X n.^o", donde X es cualquier carácter de la A a la F, y n.^o es un valor numérico. Ejemplo: En el informe, un componente denominado "Cmpd A 1" se mostrará bajo el encabezado Compound Group A; un componente denominado "Cmpd B 1" se mostrará bajo Compound Group B y así sucesivamente. • Si los componentes forman parte del mismo grupo, en el informe solo se incluirá el primer componente (en orden alfabético) del grupo. Ejemplo 1: Si "Cmpd B 25" y "Cmpd C 1" pertenecen los dos al grupo "Grp", "Cmpd C 1" no se indicará en el informe. Ejemplo 2: Si "Cmpd A 1", "Cmpd A 2" y "Cmpd A 3" no están asignados a grupos, "Cmpd A 2" y "Cmpd A 3" no se indicarán en el informe. Ejemplo 3: Si "Cmpd A 1", "Cmpd A 2" y "Cmpd A 3" están asignados a los grupos 1, 2 y 3 respectivamente, los tres componentes se indicarán en el informe bajo el encabezado Compound Group A.

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
MQ Sample Report with MRM ratios 2	Informe que contiene, para cada muestra desconocida, una sección que incluye la información del archivo, la información de la muestra y la tabla de resumen de los resultados, con una superposición de todos los XIC. Las proporciones de iones esperadas se calculan automáticamente con los patrones disponibles. Los valores de proporción se colocan en columnas personalizadas dentro de la tabla de resultados. Cualquier valor fuera del 20 % de lo esperado queda marcado. Los nombres de analito del cuantificador deben terminar con un espacio en blanco seguido por el número 1. Los nombres de analito de la proporción de iones deben terminar con un espacio en blanco seguido por un número entre 2 y 9.	N/A

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
MQ Sample Report with MRM ratios EU	Informe que contiene, para cada muestra desconocida, una sección que incluye la información del archivo, la información de la muestra y una tabla resumen de resultados. Las proporciones de iones esperadas se calculan automáticamente con los patrones disponibles. Los valores de proporción se colocan en columnas personalizadas dentro de la tabla de resultados. Cualquier valor fuera de lo esperado queda marcado (según las directrices de la UE para tolerancias de proporción). Los nombres de analito del cuantificador deben terminar con un espacio en blanco seguido por el número 1. Los nombres de analito de la proporción de iones deben terminar con un espacio en blanco seguido por un número entre 2 y 9.	El archivo de consulta asociado es <code>MRM ratios EU.query</code> .

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
MQ Sample Report with MRM ratios MQ EFAB 03	Informe que contiene, para cada muestra desconocida, una sección que incluye la información del archivo, la información de la muestra y una tabla resumen de resultados. Las proporciones de iones esperadas se calculan automáticamente con los patrones disponibles. Los valores de proporción se colocan en columnas personalizadas dentro de la tabla de resultados. Cualquier valor fuera del 20 % de lo esperado queda marcado. Los nombres de analito del cuantificador deben terminar con un espacio en blanco seguido por el número 1. Los nombres de analito de la proporción de iones deben terminar con un espacio en blanco seguido por un número entre 2 y 9.	N/A
MQ Sample Report with MRM ratios	Informe que contiene, para cada muestra desconocida, una sección que incluye la información del archivo, la información de la muestra y una tabla resumen de resultados. Las proporciones de iones esperadas se calculan automáticamente con los patrones disponibles. Los valores de proporción se colocan en columnas personalizadas dentro de la tabla de resultados. Cualquier valor fuera del 20 % de lo esperado queda marcado. Los nombres de analito del cuantificador deben terminar con un espacio en blanco seguido por el número 1. Los nombres de analito de la proporción de iones deben terminar con un espacio en blanco seguido por un número entre 2 y 9.	El archivo de consulta asociado es <code>MRM_ratios.query</code> .

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
MQ Sample Report with standards, QC, and blanks	Informe que contiene, para cada muestra, una sección que incluye la información del archivo, la tabla de resumen de patrones, la tabla de resumen del control de calidad, la tabla de resultados de blancos; además, para cada muestra desconocida, una sección que incluye la información del archivo, la información de la muestra, la información del IS, la tabla de resultados de analito, la tabla de XIC con el IS y cada analito. POR LO GENERAL, SE IMPRIMIRÁN 2 PÁGINAS POR MUESTRA EN CASO DE MENOS DE 8 ANALITOS.	Los patrones y controles de calidad que tengan la casilla de verificación Reportable desmarcada no se mostrarán en las tablas de resumen respectivas en el informe, ni se utilizarán en los cálculos estadísticos.
MQ Tutorial Dataset Heavy Light	N/A	Este informe está pensado para usarlo con el conjunto de datos Tutorial Dataset Heavy Light. Consulte el segundo ejemplo, el ejemplo de cuantificación relativa, en la <i>Guía del usuario</i> del software MultiQuant.
Per Sample Quant-Qual	Informe que incluye, para cada muestra seleccionada, una sección con la información del archivo, la información de la muestra y la tabla de resultados de analitos para los analitos seleccionados. La tabla de resultados de analitos se imprime tal como se muestra en la tabla de resultados. Todas las señales cualitativas de confianza se enumeran al principio de la tabla.	N/A

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
Per Sample Quant-Qual Visible Rows Using Visible Analyte	Informe que incluye, para cada muestra seleccionada, una sección con la información del archivo, la información de la muestra y la tabla de resultados de analitos para los analitos seleccionados. La tabla de resultados de analitos se imprime tal como se muestra en la tabla de resultados. Todas las señales cualitativas de confianza se enumeran al principio de la tabla.	El estado oculto de una fila tiene prioridad sobre el estado de la casilla de verificación Reportable . Si la casilla de verificación Reportable está seleccionada pero la fila está oculta, la fila no se indica en el informe.
Per sample Quant-Qual with statistics	Informe que incluye los componentes de cada muestra con una tabla WYSIWYG. Se muestran XIC, MS y MS/MS. Al final del informe se muestra una tabla de resumen de estadísticas del área.	<ul style="list-style-type: none"> • Si la tabla de componentes tiene componentes UV, el trazo de UV se indica bajo el gráfico del XIC en el informe. <hr/> <p>Nota: Si el nombre del componente UV tiene el formato [<i>compound_nameuv</i>] o [<i>uv</i>], no se indica ningún trazo de UV, porque el sufijo uv está asociado con el informe UV MS Qual.</p> <hr/> <ul style="list-style-type: none"> • Si una muestra se etiqueta como de control de calidad y hay dos o más muestras, se calculará la media, la desviación estándar y el porcentaje de coeficiente de variación y se incluirán en una tabla de resumen de control de calidad al final del informe. • Si la casilla de verificación Reportable está desmarcada para una fila de control de calidad, esa fila no se utilizará para ningún cálculo de la tabla de resumen de control de calidad.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
Per Analyte Quant-Qual	Informe que incluye, para cada analito, una sección con información de archivo, tabla de resultados, curvas de calibración para cada analito y cromatogramas, incluidos el patrón interno y cada analito. Esta plantilla es adecuada para una tabla de resultados que tiene algún grupo definido.	N/A
Positive Hits Qual	Informe que incluye, para cada muestra seleccionada, una sección con la información del archivo, la información de la muestra, la tabla de resultados de analitos para los analitos seleccionados, cromatogramas de superposiciones de todos los analitos, patrón interno y XIC, espectros de MS adquiridos/teórico y espectros de MS/MS de la biblioteca/adquiridos para cada analito seleccionado. La tabla de resultados de analitos se imprime tal como se muestra en la tabla de resultados. Todas las señales cualitativas de confianza se enumeran al principio de la tabla.	N/A
Qual CSV report	Informe en formato csv que contiene, para cada muestra, una sección que incluye la información del archivo, la información de la muestra y la tabla de resultados de analitos.	Se recomienda utilizar la opción CSV para el formato de informe.
Sample Summary	Informe que incluye, para cada muestra, una sección de la tabla de resumen de analitos. Esta plantilla de informe es adecuada para una tabla de resultados con grupos.	N/A

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
UV MS Qual report	Informe que incluye, para cada muestra, los componentes de la muestra en cuestión y su componente UV correspondiente con una tabla WYSIWYG. Se muestran XIC, MS y MS/MS junto con los datos de UV. Al final del informe se muestra una tabla de resumen de estadísticas del área.	<ul style="list-style-type: none"> • Los datos UVMS deben procesarse utilizando la convención de nomenclatura <i>compound 1</i> (cualquier cadena) para el componente de espectrómetro de masas (MS) y <i>compound 1uv</i> (cualquier cadena más uv) para el componente de UV correspondiente. • Solo se muestran las señales cualitativas de error de masa, error de masa de fragmentos, confianza de tiempo de retención, confianza de proporción de isótopos y confianza de biblioteca. • Se crea una tabla de gráficos para mostrar los componentes individuales de la tabla de resultados, incluido el XIC, el trazo de MS1, el trazo de MS/MS y la información de encabezado del compuesto 1, y el trazo de UV del compuesto 1uv. Consulte Figura 6-35. • Los gráficos de analito solo se repiten para los experimentos de MS, no para los experimentos de UV. • Si una muestra se etiqueta como de control de calidad y hay dos o más muestras, se calcula la media, la desviación estándar y el porcentaje de coeficiente de variación y se incluyen en una tabla de resumen de control de calidad al final del informe. Consulte Figura 6-36.

Instrucciones de funcionamiento: Procesamiento

Tabla 6-11: Plantillas predeterminadas (continuación)

Plantilla	Descripción de la plantilla (tal como se muestra en el cuadro de diálogo Create Report)	Notas adicionales
		<ul style="list-style-type: none"> Si la casilla de verificación Reportable está desmarcada para una fila de control de calidad, esa fila no se utiliza para ningún cálculo de la tabla de resumen de control de calidad.

Figura 6-35: Tabla de gráficos

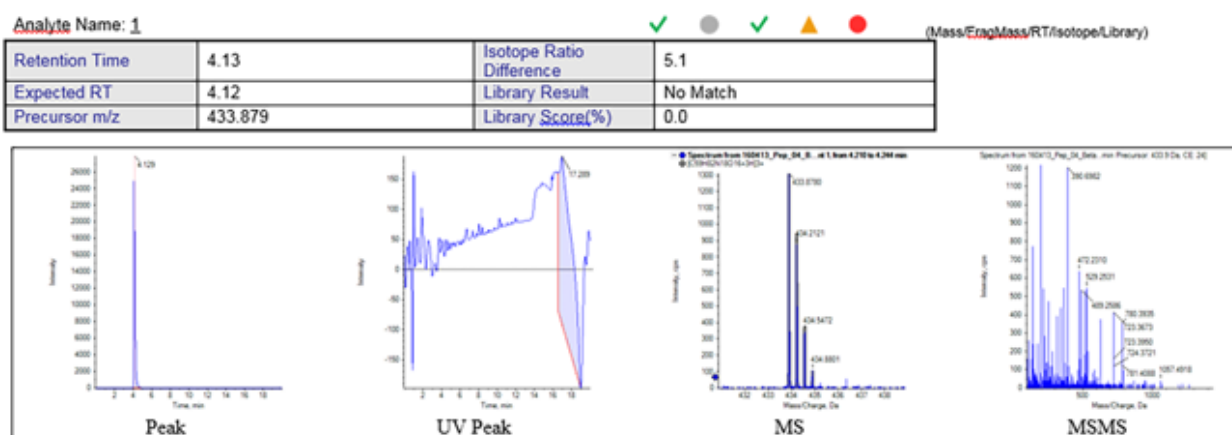


Figura 6-36: Tabla de estadísticas

Statistics (Grouped by Concentration for QCs - Area)

Analyte Peak Name (MRM Transition)	Mean	Std. Deviation	% CV	Number of Values Used
1 (723.3573 - 723.3773)	1.062e4	7.367e2	6.93	2 of 2
2 (753.3091 - 753.3291)	2.215e4	6.858e2	3.10	2 of 2
3 (760.3353 - 760.3553)	9.332e3	1.955e1	0.21	2 of 2
4 (631.3450 - 631.3650)	3.244e4	1.110e3	3.42	2 of 2
5 (636.3373 - 636.3573)	1.144e5	3.962e2	0.35	2 of 2
6 (871.4354 - 871.4554)	6.479e4	1.198e3	1.85	2 of 2
7 (932.4493 - 932.4693)	2.183e4	7.301e2	3.34	2 of 2
8 (1000.5743 - 1000.5943)	2.553e4	5.007e2	1.96	2 of 2
9 (755.4352 - 755.4552)	1.127e5	8.422e3	7.48	2 of 2
10 (1184.5929 - 1184.6129)	3.576e4	7.231e2	2.02	2 of 2
11 (884.4871 - 884.5071)	5.183e4	1.512e3	2.92	2 of 2
12 (1176.5468 - 1176.5668)	1.670e4	1.848e2	1.11	2 of 2
13 (871.9418 - 871.9618)	1.597e5	5.501e2	0.34	2 of 2
14 (879.4236 - 879.4436)	1.868e5	5.182e3	2.77	2 of 2

Cuando se produce un problema, el software Central Administrator Console (CAC) registra informes de errores y advertencias que se muestran en la pantalla. El espacio de trabajo Event Log contiene registros de eventos del sistema que incluyen errores, advertencias y mensajes.

Para abrir este espacio de trabajo, haga clic en el mosaico Event Log de la página de inicio.

Tabla 7-1: Columnas del espacio de trabajo Event Log

Etiqueta	Descripción
Current	(Actual) Una lista de los eventos actuales para cada subsistema.
Severity	(Gravedad) El tipo de evento: información, error o advertencia.
Time	(Hora) La hora a la que ocurrió el evento.
Subsystem	(Subsistema) El subsistema en el que ocurrió el evento.
Event	(Evento) Una descripción del evento. Esta información puede ser utilizada para solucionar problemas en el sistema.
User	(Usuario) El nombre del usuario y el sistema en el que ocurrió el evento. <hr/> Nota: En el caso de eventos activados por una regla de decisión, se trata del usuario que ha enviado el lote. <hr/>

Registros de eventos

Están disponibles los siguientes registros:

- **All** (Todos)
- **Device** (Dispositivo)
 - **LC** (LC)
 - **Mass Spectrometer** (Espectrómetro de masas)
- **Workspace** (Espacio de trabajo)
 - **Batch** (Lote)
 - **Explorer** (Explorador)
 - **Devices** (Dispositivos)
 - **General** (General)
 - **LC Method** (Método de LC)
 - **MS Method** (Método de MS)

Eventos

- **MS Tune** (Ajuste de MS)
- **Analytics** (Análisis)
- **Queue** (Cola)
- **Users** (Usuarios)
- **Configuration** (Configuración)

Cuando un archivo de registro de eventos contiene 20 000 registros, SCIEX OS automáticamente archiva los registros y empieza un nuevo archivo de registro de eventos. Para obtener más información, consulte la sección [Archivos de registro de eventos](#).

Visualización de registros

1. Abra el espacio de trabajo Event Log.
2. Haga clic en un elemento de la lista del panel izquierdo para visualizar los registros.

Archivado de registros

1. Abra el espacio de trabajo Event Log.
2. Haga clic en **Archive > Archive Log**.

Figura 7-1: Menú Archive: Archive Log

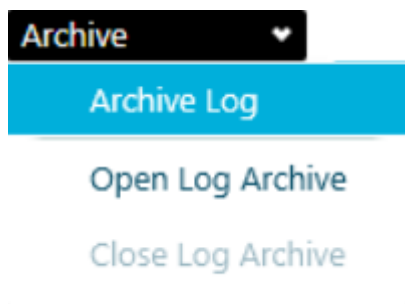
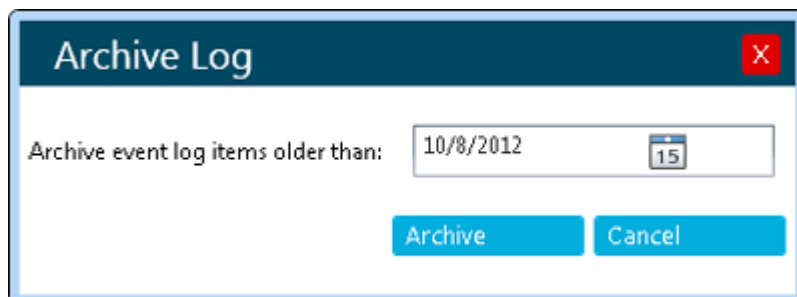


Figura 7-2: Cuadro de diálogo Archive Log

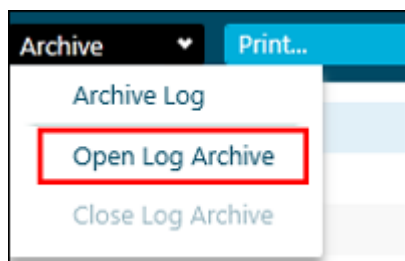


3. En el campo **Archive event log items older than**, haga clic en el icono de fecha y seleccione una fecha.
4. Haga clic en **Archive**.

Visualización de registros archivados

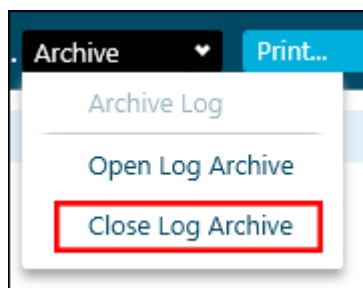
1. Abra el espacio de trabajo Event Log.
2. Haga clic en **Archive > Open Log Archive**.

Figura 7-3: Menú Archive: Open Log Archive



3. Abra el archivo requerido.
4. Haga clic en **Archive > Close Log Archive**.

Figura 7-4: Menú Archive: Close Log Archive



Impresión de registros

1. Abra el espacio de trabajo Event Log.
2. (Opcional) Abra un registro archivado. Consulte la sección [Visualización de registros archivados](#).
3. Haga clic en **Print**.
Se abre el cuadro de diálogo Print.
4. Seleccione una impresora y, a continuación, haga clic en **Print**.

Archivos de registro de eventos

Los registros de eventos se acumulan en los archivos de registros de eventos y pueden llegar a crear archivos de gran tamaño que resulten difíciles de examinar y gestionar.

Cuando un registro de eventos alcanza los 20 000 registros, se archiva. Se añade un registro de evento final al archivo de registro de eventos y este se guarda con un nombre que indique el tipo de archivo de registro de eventos, la fecha y la hora. Se crea un nuevo

Eventos

archivo de registro de eventos. El primer registro del nuevo archivo de registro de eventos indica que el registro de eventos se ha archivado.

Los archivos de registro de eventos se guardan en la carpeta

C:\ProgramData\SCIEX\Clearcore2.Acquisition. Los nombres de archivo tienen el formato `<logfile>Archive_<YYYYMMDD>_<HHMMSS>.data`. Por ejemplo, `CustomerLogArchive_20220427_172915.data`.

En esta sección se explica cómo utilizar la función de auditoría del software.

Visualización de los registros de pistas de auditoría

1. Abra el espacio de trabajo Audit Trail.
2. Para ver la pista de auditoría de la estación de trabajo, haga clic en **Workstation** en el panel izquierdo.
3. Para ver la pista de auditoría de un proyecto, seleccione el proyecto en el panel de la izquierda. A continuación, seleccione una de las siguientes opciones:
 - **Eventos generales:** Para mostrar informes de auditoría que apliquen a todo el proyecto, como cambios de mapas de auditoría y adquisición de muestras.
 - **Análisis:** Para mostrar los registros de auditoría de una tabla de resultados.
 - **Eventos de todo el proyecto:** Para mostrar los registros de auditoría tanto de eventos generales como de eventos de procesamiento.

Filtrado de eventos auditados mediante una búsqueda con el teclado

Los usuarios pueden filtrar los eventos auditados en la pista de auditoría utilizando una búsqueda de palabra clave. La búsqueda resalta cada vez que aparece el texto.

1. Abra el espacio de trabajo Audit Trail.
2. Seleccione la pista de auditoría que se va a buscar. Consulte la sección [Visualización de los registros de pistas de auditoría](#). Se muestran los registros de Pista de auditoría.
3. Escriba la palabra que desea encontrar en el archivo **Find in Page**. Todas las apariciones de la palabra en la página aparecen resaltadas.
4. Utilice los botones Siguiente (▼) y Anterior (▲) para desplazarse por las coincidencias.

Filtrado de eventos auditados usando un grupo de criterios definidos

Los usuarios pueden filtrar los eventos auditados en la pista de auditoría utilizando un conjunto de criterios especificados.

1. Abra el espacio de trabajo Audit Trail.

Auditoría



2. Seleccione la pista de auditoría que se va a filtrar. Consulte la sección [Visualización de los registros de pistas de auditoría](#). Se muestran los registros de Pista de auditoría.
3. Haga clic en **Filter** (). Se abre el cuadro de diálogo Filter Audit Trail.
4. Utilice las listas para definir los criterios de filtro deseados.

Figura 8-1: Cuadro de diálogo Filter Audit Trail

Elemento	Descripción
1	En la lista <No Filter> , seleccione el campo por el que se va a filtrar. Hay disponibles los siguientes campos para filtrar: <ul style="list-style-type: none"> • Description • Sample Name • Full User Name • E-Signature • Reason
2	Seleccione este elemento para filtrar por una palabra o frase exacta.
3	Seleccione este elemento para filtrar por una palabra o frase parcial.

Elemento	Descripción
4	Especifique el texto por el que filtrar, de la siguiente manera: <ul style="list-style-type: none">• Escriba la cadena de texto completa. Seleccione Is (elemento 2).• Escriba una cadena de texto parcial. Seleccione Contains (elemento 3).• Seleccione Yes o No.
5	Utilice este elemento para filtrar por eventos que se hayan producido durante una fecha u hora específicas.

5. Para borrar el filtro, siga estos pasos:
 - a. Haga clic en **Filter** ().
 - b. Haga clic en **Clear** para restablecer los criterios de búsqueda a **No Filter**.
 - c. Haga clic en **OK**.

Impresión de la pista de auditoría

1. Abra el espacio de trabajo Audit Trail.
2. Seleccione la pista de auditoría que se va a imprimir. Consulte la sección [Visualización de los registros de pistas de auditoría](#).
3. Haga clic en **Print**.
Se abre el cuadro de diálogo Print.
4. Seleccione una impresora y, a continuación, haga clic en **Print**.

Teoría de funcionamiento: software **A**

Esta sección describe conceptos utilizados en el software.

Gestión de datos

El software SCIEX OS requiere un ordenador con el sistema operativo Windows 7 (64 bits) o Windows 10 (64 bits). El ordenador y su software de sistema trabajan con el controlador del sistema y su firmware para controlar el sistema y la adquisición de datos. Al utilizar el sistema, los datos adquiridos se envían al software SCIEX OS, donde se pueden mostrar como espectros de masa completos, como intensidad de uno o varios iones respecto al tiempo, o como corriente de iones total respecto al tiempo.

Técnicas de análisis

Se trata de un sistema versátil y fiable para efectuar análisis de espectrometría de masas con cromatografía líquida de corrientes de muestras líquida a fin de identificar, cuantificar y examinar compuestos.

El sistema utiliza las siguientes técnicas de espectrometría de masas para analizar muestras:

- Dos modos de espectrometría de masas simple (MS):
 - Espectrometría de masas simple de cuadrupolo (solo para calibración Q1)
 - Espectrometría de masas simple por tiempo de vuelo
- Un modo de espectrometría de masas en tándem (MS/MS):
 - Espectrometría de masas de ion producto

Vista de datos diferente

Cromatogramas

Un cromatograma muestra la variación de cierta cantidad en relación al tiempo en un experimento repetitivo. Por ejemplo, si el instrumento se programa para repetir varias veces un conjunto dado de análisis de espectro de masas. Los datos cromatográficos son contiguos, incluso si la intensidad de los datos es cero. El instrumento no genera directamente los cromatogramas, sino que estos se generan a partir de espectros de masas.

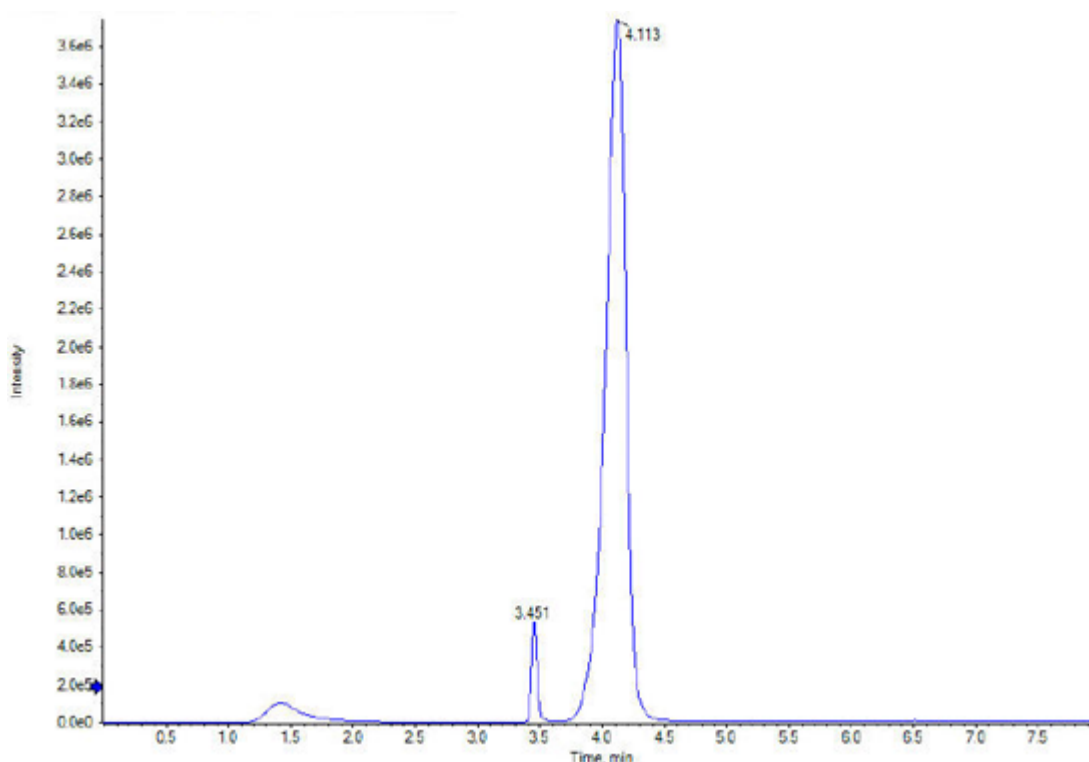
En el gráfico del cromatograma, la intensidad se representa en recuentos por segundo (cps) en el eje Y, en relación con el tiempo en el eje X. Los picos se marcan automáticamente.

Los picos cromatográficos pueden cambiar por lo que respecta al tiempo de retención y la intensidad en función de las condiciones cromatográficas de una muestra determinada.

El software muestra los siguientes tipos de cromatogramas:

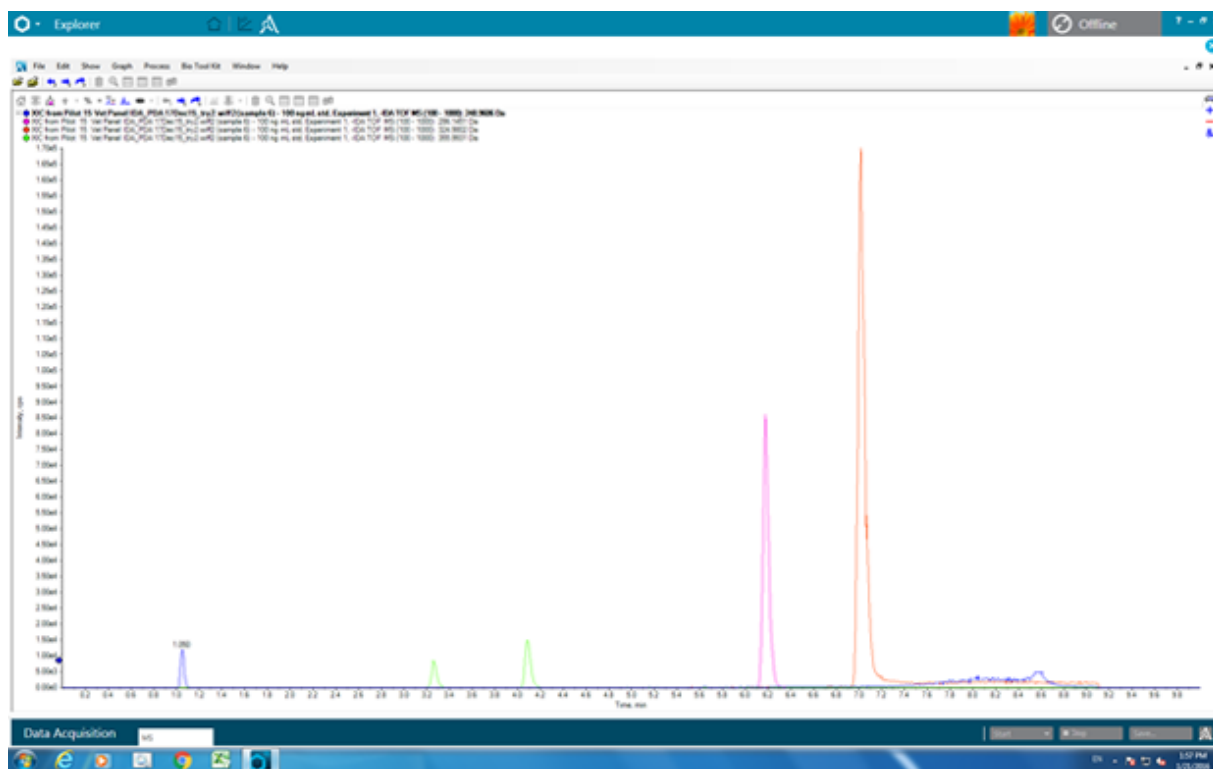
- **TIC:** el trazado de la corriente de iones total en función del tiempo.

Figura A-1: TIC de ejemplo



- **XIC:** cromatograma de iones que se crea tomando los valores de intensidad de un valor de masa discreta individual o un rango de masas, de una serie de análisis de espectro de masas. Un XIC indica el comportamiento de una masa determinada, o rango de masas, como una función de tiempo.

Figura A-2: XIC de ejemplo



Espectros

Un espectro son los datos que se obtienen directamente del espectrómetro de masas y normalmente representa el número de iones detectados en función de su relación entre masa y carga (m/z). Se muestra como un gráfico con los valores m/z representados en el eje X y la intensidad (cps) representada en el eje Y.

Cuando los datos se visualizan en un espectro, se obtiene la información específica de la masa para un compuesto. Un espectro proporciona los valores de m/z para los iones correspondientes a un pico cromatográfico específico. Estos iones se pueden utilizar para encontrar información más específica. Por ejemplo, un espectro muestra todas las masas que conforman un pico, incluida la intensidad de cada masa.

Las intensidades de espectro pueden cambiar, pero el valor de m/z es fijo porque la masa de un compuesto no cambia.

Hay dos formas de generar datos de espectro:

- Si solo se adquiere un análisis, los datos se muestran como un espectro.
- A partir de un cromatograma.

Espectros de reconstrucción

Se genera un espectro procesado aplicando un algoritmo de desconvolución a un espectro MS o MS/MS. Los espectros de reconstrucción constan de masas neutras o con carga cero con intensidad correspondiente. El espectro suele proporcionar la información del peso

molecular de un compuesto. La intensidad de espectro puede cambiar, pero la información de peso molecular no cambia.

Un espectro de reconstrucción típico se muestra con la masa (Da) en el eje X y la intensidad en el eje Y.

Reglas de decisión

Mientras se procesa un lote en el espacio de trabajo Queue, el software puede llevar a cabo acciones correctivas concretas en respuesta a resultados de análisis especificados. Por ejemplo, si una muestra no cumple los criterios de aceptación definidos en el método de procesamiento (resultado del análisis), se puede indicar al software que vuelva a inyectar la muestra (acción correctiva).

Esta función se implementa con reglas de decisión. Una regla de decisión consta de dos partes principales:

- Una regla de marcado, que define el resultado del análisis
Las reglas de marcado se definen en métodos de procesamiento.
- Una acción correctiva, que se aplica si los resultados del procesamiento no cumplen los criterios de resultado del análisis

Entre las acciones correctivas se encuentran las siguientes:

- Parar la cola
- Cancelar el lote
- Inyectar una muestra diferente
- Volver a inyectar la muestra marcada

Al crear un lote, el usuario puede activar reglas de decisión para el lote y luego seleccionar las reglas de decisión a utilizar.

Algoritmo Dynamic Background Subtraction

El algoritmo Dynamic Background Subtraction mejora la detección de iones precursores en un experimento de adquisición dependiente de información (IDA). Cuando se activa el algoritmo, IDA utiliza un espectro al que se ha sustraído el fondo para seleccionar el ion precursor de interés para el análisis MS/MS, en lugar de seleccionar el precursor en el espectro de estudio directamente. Puesto que este proceso tiene lugar durante el análisis LC, el algoritmo permite la detección de especies a medida que aumenta la intensidad de sus señales. En consecuencia, este algoritmo se centra en la detección y análisis de los iones precursores en la sección creciente del pico de LC, hasta o ligeramente por encima de la parte superior de los picos de LC.

Análisis cuantitativo

El análisis cuantitativo se utiliza para determinar la concentración de una sustancia concreta en una muestra. Al analizar una muestra desconocida y compararla con otras muestras que contengan la misma sustancia en concentraciones conocidas, el software puede calcular

la concentración de la muestra desconocida. El proceso consiste en crear una curva de calibración mediante el uso de la respuesta de señal o la proporción de respuesta de los patrones y, a continuación, calcular las concentraciones de las muestras desconocidas. Las concentraciones calculadas de todas las muestras se añaden a una tabla de resultados.

El análisis cuantitativo se lleva a cabo mayormente utilizando un análisis de monitorización de reacciones múltiples (MRM). En un análisis MRM, se utilizan un ion precursor y un ion producto característico para definir una transición de MRM muy específica del analito. La transición de MRM relacionada con el tiempo de retención asociado con el analito durante la cromatografía líquida proporciona la especificidad de cuantificación necesaria.

La cuantificación se consigue gracias al uso de métodos de adquisición de LC-MS/MS de MRM validados, curvas estándar de adquisición de calibración y posterior integración de los picos asociados con los compuestos de interés. La relación de curva de calibración entre la respuesta de señal y la concentración se utiliza para determinar la cantidad de un analito en particular en una muestra desconocida.

Adición de patrones

La adición de patrones se puede utilizar para determinar la concentración de un compuesto en una muestra en la que un efecto de matriz conocido impida el uso de una curva de calibración tradicional.

Esta función permite al usuario realizar cálculos de adición de patrones directamente en el software. Si la función de adición de patrones está activada en el flujo de cuantificación, el cálculo de adición de patrones se lleva a cabo durante la integración y los resultados se muestran en la tabla de resultados.

Si se activa esta función, estos parámetros de regresión se desactivan:

- Regression Type
- Weighting Type
- Automatic Outlier Removal

Activación de la función Standard Addition

1. Abra el espacio de trabajo Analytics.
2. Haga clic en **Process Method > New**.

Sugerencia: Para editar un método de procesamiento existente, haga clic en **Process Method > Edit embedded method** y siga estos pasos.

3. Seleccione la página Workflow y luego al menos un flujo de trabajo y las muestras de referencia.
4. Seleccione la página Components y defina los nombres de los componentes, masas, patrones internos, grupos, etc.

Sugerencia: Si el grupo se define en la tabla de componentes, el usuario puede optar por sumar los iones en el grupo, incluso si el ion precursor y el índice experimental son diferentes para las transiciones. La suma de iones no se muestra en la tabla, sino que se muestra en la página de integración y en la tabla de resultados como <nombre grupo>_Sum. Esta función es útil para la cuantificación de proteínas y péptidos.

Sugerencia: Si se desconoce el tiempo de retención de los componentes, establezca el **Retention Time Mode** para una masa o fórmula química en **Find n peaks**, donde n es 1, 2, 5, 10 o todo. El software identifica el número especificado de funciones con la mayor área de pico, asigna el tiempo de retención adecuado y ejecuta un flujo de trabajo de procesamiento de picos dirigido. Cuando finaliza el procesamiento, el método integrado para la tabla de resultados puede guardarse como método dirigido normal.

5. Seleccione la página Integration y, a continuación, seleccione los parámetros de integración para cada componente.
6. Haga clic en **Options > Quantitate by standard addition**.

Esta función tiene requisitos específicos para los campos de lote siguientes:

- **Sample ID:** Todas las muestras que pertenecen al mismo grupo de adición de patrones deben tener el mismo ID de muestra.
- **Sample Type:** Todas las muestras que se deben cuantificar con la adición de patrones deben tener el tipo de muestra **Standard**.
- **Actual Concentration:** Este campo debe contener la concentración conocida de patrón añadida a cada muestra del grupo de adición de patrones. Por ejemplo, para muestras sin patrón añadido, es **0**. Los datos de esta columna se trazan como el eje X en la curva de calibración.

Si esta función está habilitada, la tabla de resultados contiene un nuevo campo **Standard Addition Accuracy** que compara el valor de **Standard Addition Calculated Concentration** de una muestra con el valor de **Standard Addition Actual Concentration**.

En la curva de calibración se muestra una vista dinámica de la curva de calibración para una muestra específica.

Reconstrucción de masa

Para las moléculas grandes, suele observarse una dispersión del estado de la carga en un espectro de análisis completo MS. La función de reconstrucción de masa permite al usuario llevar a cabo una desconvolución de espectro directamente en el software y luego realizar la cuantificación en función de los picos de masa desconvolucionados o con carga cero. Si la función de reconstrucción de masa está habilitada en el flujo de cuantificación, la búsqueda de picos, desconvolución de espectros, la búsqueda de picos de masa y la integración se llevan a cabo durante el procesamiento y los resultados se muestran en la tabla de resultados.

Activación de la función de reconstrucción de masa

Nota: La reconstrucción de masa solo es compatible con el flujo de cuantificación.

Nota: La reconstrucción de masa solo es compatible con los algoritmos de integración MQ4 y Summation.

Nota: Si se activa la reconstrucción de masa, **Options > Sum Multiple Ion** se desactiva.

1. Abra el espacio de trabajo Analytics.
2. Haga clic en **Process Method > New..**

Sugerencia: Para editar un método de procesamiento existente, haga clic en **Process Method > Edit embedded method** y siga estos pasos.

3. Seleccione la página Workflow y luego el flujo de trabajo **Quantitation** y las muestras de referencia.
4. Seleccione la página Components.
5. Haga clic en **Options > Mass Reconstruction**.
6. Añada los componentes, introduciendo información en los campos obligatorios.

Nota: El campo **Expected MW** es opcional.

7. Haga clic en **Integration** para ver la página de integración y revisar el cromatograma XIC, el espectro promedio y el espectro de reconstrucción y seleccionar la masa objetivo.
8. Guarde el método.

Si esta función está activada, la tabla de resultados contendrá las siguientes columnas nuevas: **Expected MW**, **MW**, **MW Delta (Da)**, **MW Delta (ppm)**, **IS Expected MW**, **IS MW**, **IS MW Delta (Da)** e **IS MW Delta (ppm)**.

Análisis cualitativo

El análisis cualitativo es la identificación de un compuesto objetivo o desconocido. En espectrometría de masas, determinar qué compuesto está presente se consigue utilizando la precisión de masas, el tiempo de retención, el patrón de isótopos, la búsqueda en la biblioteca y la búsqueda de fórmulas. Utilizar todas esas herramientas a la vez puede aumentar la confianza en identificar compuestos tanto objetivo como no objetivo en muestras desconocidas.

Precisión en masa

Cuando se intenta identificar un compuesto objetivo conocido en una muestra, es útil mirar la precisión de masa de dicho compuesto y determinar si una coincidencia potencial con dicho compuesto tiene una precisión de masa dentro de una cierta tolerancia. Por ejemplo, imazalil tiene una fórmula química de $C_{14}H_{14}Cl_2N_2O$, lo que da una masa monoisotópica

de 296,0483, de cuatro decimales. Un aducto protonado es un ion con una carga positiva que normalmente se detecta utilizando un espectrómetro de masas. El aducto protonado de imazalil tiene una relación de masa y carga (m/z) de 297,0556. Si se sospecha que hay imazalil en una muestra, compare el valor de m/z del compuesto encontrado con el valor de m/z del imazalil protonado y determine qué nivel de coincidencia tienen. Cuanto menor sea la diferencia, en ppm o Da, mayor será la probabilidad de que el compuesto encontrado sea una coincidencia.

Tiempo de retención

La mayor parte de los espectrómetros de masas utilizan algún tipo de cromatografía. El tiempo de retención de un compuesto viene determinado por la inyección de un patrón conocido del compuesto. El tiempo de retención se puede utilizar para facilitar la identificación de compuestos objetivo en una muestra. Si el compuesto sospechado se halla en una muestra desconocida, cuanto más cercano sea el tiempo de retención al tiempo de retención del patrón, mayor será la probabilidad de que se identifique el compuesto desconocido. Los tiempos de retención pueden cambiar y deben confirmarse con regularidad utilizando un patrón conocido.

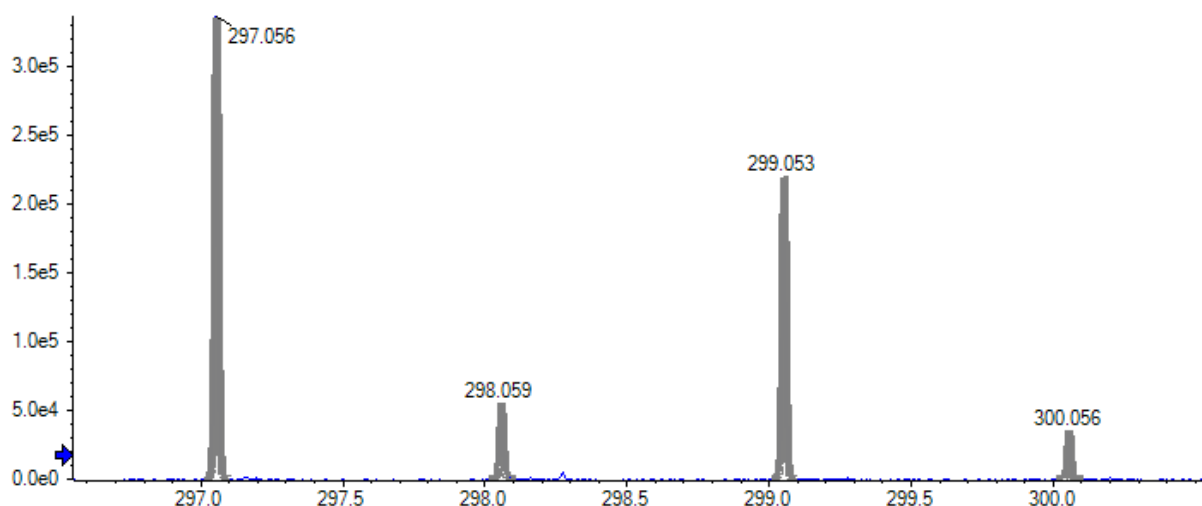
Patrón de isótopos

El espectro de masas de análisis completo de un compuesto en un espectrómetro de masas tiene un patrón de isótopos diferente basado en su fórmula molecular.

Para el patrón de isótopos para imazalil, consulte la siguiente figura.

Figura A-3: Patrón de isótopos (Imazilil)

● C₁₄H₁₄Cl₂N₂O +H



Este patrón de isótopos del imazalil consta de diferentes isótopos de masas para los elementos. El patrón de isótopos se calcula teóricamente y se compara con lo que realmente se adquirió para el compuesto en la muestra desconocida. Cuanta más coincidencia haya entre el patrón de isótopos teórico y el real, más posibilidades habrá de que se haya identificado el compuesto.

Búsqueda en la biblioteca

La comparación de espectros de MS/MS adquiridos de muestras desconocidas con una base de datos de compuestos con espectros de referencia es una de las herramientas más potentes en el análisis cualitativo. Los algoritmos de búsqueda en biblioteca comparan los espectros desconocidos de la muestra e intentan hacer coincidir los espectros de los compuestos desconocidos y los espectros de la base de datos. Cuanta más coincidencia haya y mayor sea la puntuación reportada, será más probable que se haya identificado el compuesto.

La pureza, el ajuste y el ajuste inverso se calculan de la siguiente manera:

- Si hay un pico en una masa determinada tanto en el espectro de biblioteca (reducido) como en el espectro desconocido cuya proporción de intensidad esté dentro de los límites especificados por el usuario, la intensidad del pico del espectro de biblioteca se iguala a la del espectro desconocido

- La pureza se calcula así:

$100,0 (U_{L_{total}})^2 / (U_{total} \cdot I_{total})$ donde:

$$U_{total} = \sum U_m \cdot U_m$$

$$I_{total} = \sum I_m \cdot I_m$$

$$U_{L_{total}} = \sum U_m \cdot I_m$$

Las sumas incluyen todas las masas en que las intensidades U_m y I_m son las raíces cuadradas de las entradas desconocidas y de la biblioteca ponderadas según la masa (es decir, reducidas). Se garantiza que la pureza está en el rango entre 0 y 100 y es una medida de la similitud del espectro de biblioteca y el espectro desconocido.

- El ajuste se calcula exactamente de la misma manera que la pureza, pero solo se incluyen en las sumas las masas que se producen en el espectro de biblioteca. Esto no afecta a L_{total} o $U_{L_{total}}$ porque no se borra ningún término de esas sumas. El ajuste es una medida del grado en que el espectro desconocido contiene el espectro de biblioteca. Un ajuste alto y una pureza baja indica que el espectro desconocido es probablemente puro, pero contiene el compuesto de la biblioteca.
- El ajuste inverso también se calcula de la misma manera que la pureza, pero solo se incluyen en las sumas las masas que se producen en el espectro desconocido. El ajuste inverso es una medida del grado en que el espectro de biblioteca contiene el espectro desconocido.

Búsqueda de fórmulas

Utilizando un número de masa, el algoritmo de búsqueda de fórmulas intenta predecir la fórmula química para el compuesto a partir de los espectros de MS y MS/MS generados por un espectrómetro de masas. Una puntuación de búsqueda de fórmulas alta no significa necesariamente que el compuesto de la muestra sea el identificado por el algoritmo de búsqueda de fórmulas, porque no es raro que varias fórmulas coincidan en el rango del error de masa. Debe tener cuidado y realizar otra prueba de confirmación antes de identificar un compuesto utilizando la búsqueda de fórmulas.

Nota: No se recomienda llevar a cabo una búsqueda de fórmulas con sistemas de masa nominal.

El algoritmo de búsqueda utiliza la configuración de señales cualitativas para la precisión de masa. Un error de ppm rojo obtiene una puntuación de 0 y una coincidencia perfecta obtiene una puntuación de 100.

El espectro MS contribuye en un 67 % a la puntuación de búsqueda de fórmulas final y el espectro MS/MS contribuye un 33 %. Por lo tanto, la capacidad de la fórmula para predecir la masa MS es lo que más influye en la puntuación. No obstante, la coincidencia de los fragmentos MS/MS también influye en la puntuación.

El patrón de isótopos sirve para generar la lista de fórmulas encontradas, pero no se utiliza para generar la puntuación final. Por lo tanto, una fórmula con un patrón de isótopos erróneo probablemente no se incluirá en la lista.

Se determina una lista de posibles fórmulas utilizando la precisión de masa precursora, el patrón isotópico y la fragmentación MS/MS. Las fórmulas propuestas se puntúan en función de la precisión de la masa precursora y de la precisión media de la masa MS/MS de fragmentos coincidentes.

Integración

En el análisis cuantitativo o cualitativo, la integración hace referencia a la generación de áreas o alturas de pico cromatográfico para los compuestos de interés. Un método de procesamiento contiene toda la información necesaria para procesar los datos.

La compilación de información cuantitativa o cualitativa para un conjunto de muestras determinado se denomina una tabla de resultados. Consulte [Tablas de resultados](#).

El software tiene tres algoritmos de integración que pueden utilizarse:

- MQ4: selecciona un estándar de baja concentración, pero no la menor concentración, o muestra de control de calidad de forma predeterminada como la muestra representativa para la serie analítica.
- AutoPeak: selecciona un estándar de alta concentración, pero no saturado, o muestra de control de calidad de forma predeterminada como la muestra representativa para la serie analítica.
- Summation: no realiza una búsqueda de picos normal, sino que asume que un pico está presente cerca del tiempo de retención esperado.

También se pueden integrar manualmente picos omitidos por los algoritmos.

Parámetros del algoritmo de integración de AutoPeak

Los siguientes parámetros se usan para identificar y registrar el pico de interés.

Para obtener una lista completa de los parámetros disponibles, consulte el sistema de ayuda.

Teoría de funcionamiento: software

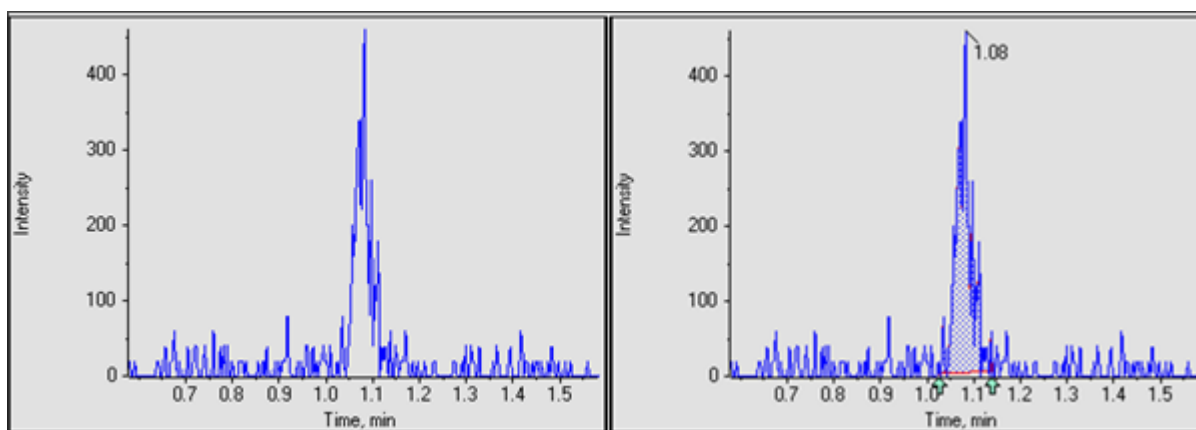
- **Local peak baseline:** el software evalúa localmente los cambios en el punto de referencia en torno al pico en oposición a calcular el punto de referencia con respecto al cromatograma entero.
- **Linear peak baseline:** el software encaja una línea entre los puntos al principio y al final de ese grupo específico de picos en oposición a la posibilidad de tener un punto de referencia no lineal debajo del pico.

Saturation correction: cuando el algoritmo detecta que un pico está saturado, utiliza el modelo para predecir cuál sería el aspecto del pico si no se hubiera saturado el detector. Esto hace que el perfil se extienda por encima del ápice del pico hasta aproximadamente la respuesta que se habría obtenido. Esto puede ampliar el rango dinámico lineal de las curvas de calibración. Esta opción está disponible solamente cuando se configuran los valores predeterminados del algoritmo general y no durante la creación del método de procesamiento o la revisión de picos individual, ya que no es útil usar esta configuración para algunos picos solamente.

Minimum Signal/Noise

Si la relación señal/ruido mínima se configura en siete, tal como se muestra en el gráfico de la izquierda en la figura siguiente, el pico no se registra. Si la relación señal/ruido mínima se configura en dos, tal como se muestra en el gráfico de la derecha, el pico se registra. Este parámetro no afecta a la integración.

Figura A-4: Umbral de señal/ruido



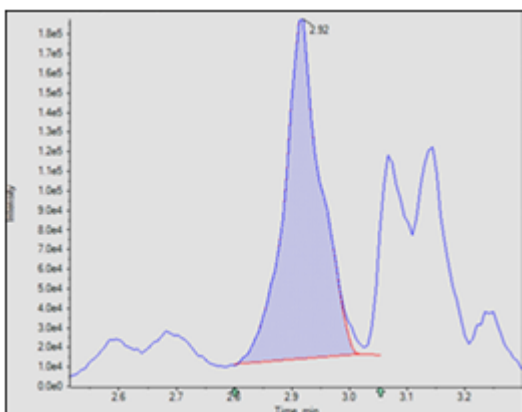
Umbral de seguridad

Este parámetro se utiliza para filtrar picos potenciales que son falsos positivos. El valor predeterminado es 50%, que es normalmente adecuado. Sin embargo, el usuario puede desear utilizar un valor más alto para datos con mucho ruido o para datos en los que el ancho del pico tiene una variación considerable de una muestra a otra.

Las dos siguientes figuras muestran cómo el **Confidence Threshold** afecta al número de picos identificados. Cuando el **Confidence Threshold** se configura en un 50 %, el pico con un pequeño saliente se identifica como un pico único. Si el **Confidence Threshold** se baja al 16 %, el algoritmo SignalFinder encuentra dos picos. Arrastre el puntero sobre las regiones de los dos picos para visualizarlos.

Para determinar qué otros picos están potencialmente presentes en este único pico, y si no se conoce el **Confidence Threshold** correcto, pulse **Ctrl** y luego arrastre el puntero sobre la región de interés del pico. Esto descende automáticamente el **Confidence Threshold** para revelar el segundo pico de interés que no está presente cuando el **Confidence Threshold** está configurado en el 50 %.

Figura A-5: 50 % de umbral de confianza



Con un umbral de confianza del 16 %, se detectan dos picos. Arrastre el puntero sobre el área de pico para identificar ambos picos.

Figura A-6: 16 % de umbral de confianza

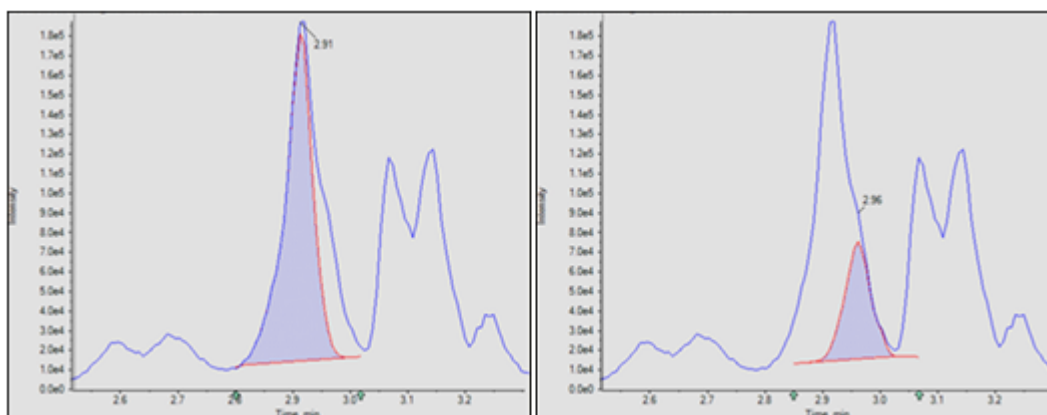
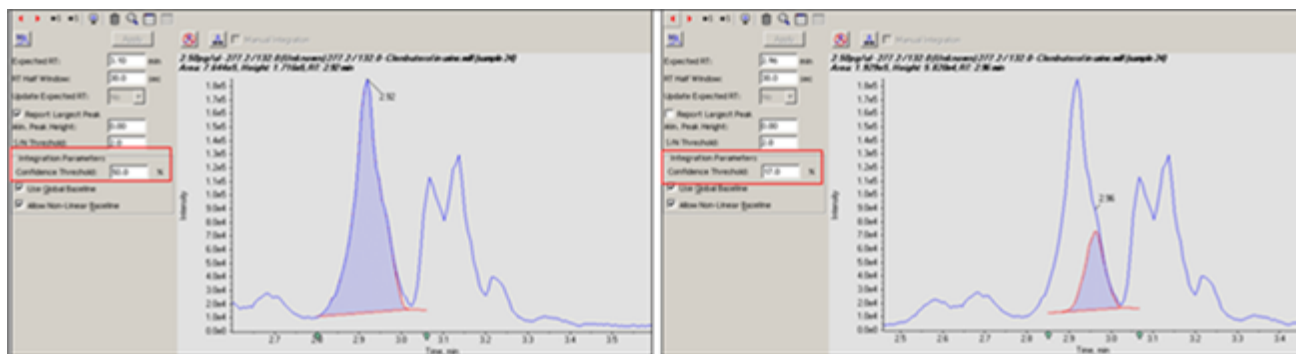


Figura A-7: Parámetro de umbral de confianza

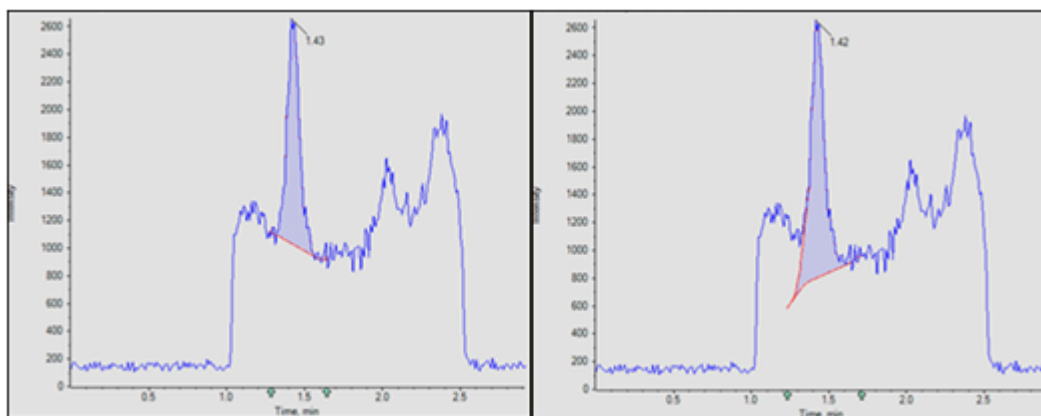


Puntos de referencia de picos locales frente a global

El punto de referencia de picos puede ser local o global. Si está seleccionada la opción local, el software de cuantificación evalúa localmente los cambios realizados en el punto de referencia. La opción global utiliza todo el cromatograma como punto de referencia.

Para ver un ejemplo de cuándo debe usarse el punto de referencia local, consulte la siguiente figura. El gráfico de la izquierda muestra un cromatograma que se integró correctamente usando el punto de referencia local. El gráfico de la derecha muestra el mismo cromatograma, integrado incorrectamente usando el punto de referencia global.

Figura A-8: Uso de punto de referencia global



Puntos de referencia de picos lineales frente a no lineales

El punto de referencia de pico puede establecerse como lineal o no lineal. La opción no lineal estima el punto de referencia debajo de cada pico. La opción lineal encaja una línea entre los puntos al principio y al final de un grupo de picos específico. Para obtener ejemplos de puntos de referencia lineales y no lineales para picos coeluidos, consulte la [Figura A-9](#) y la [Figura A-10](#). Los elementos 1 al 4 son picos convolucionados. El elemento 5 muestra el punto de referencia según se deriva con las distintas opciones.

Se recomienda un punto de referencia no lineal para varios picos. Para un único pico, la diferencia entre un punto de referencia lineal y no lineal es insignificante.

Figura A-9: Ejemplo de un punto de referencia lineal

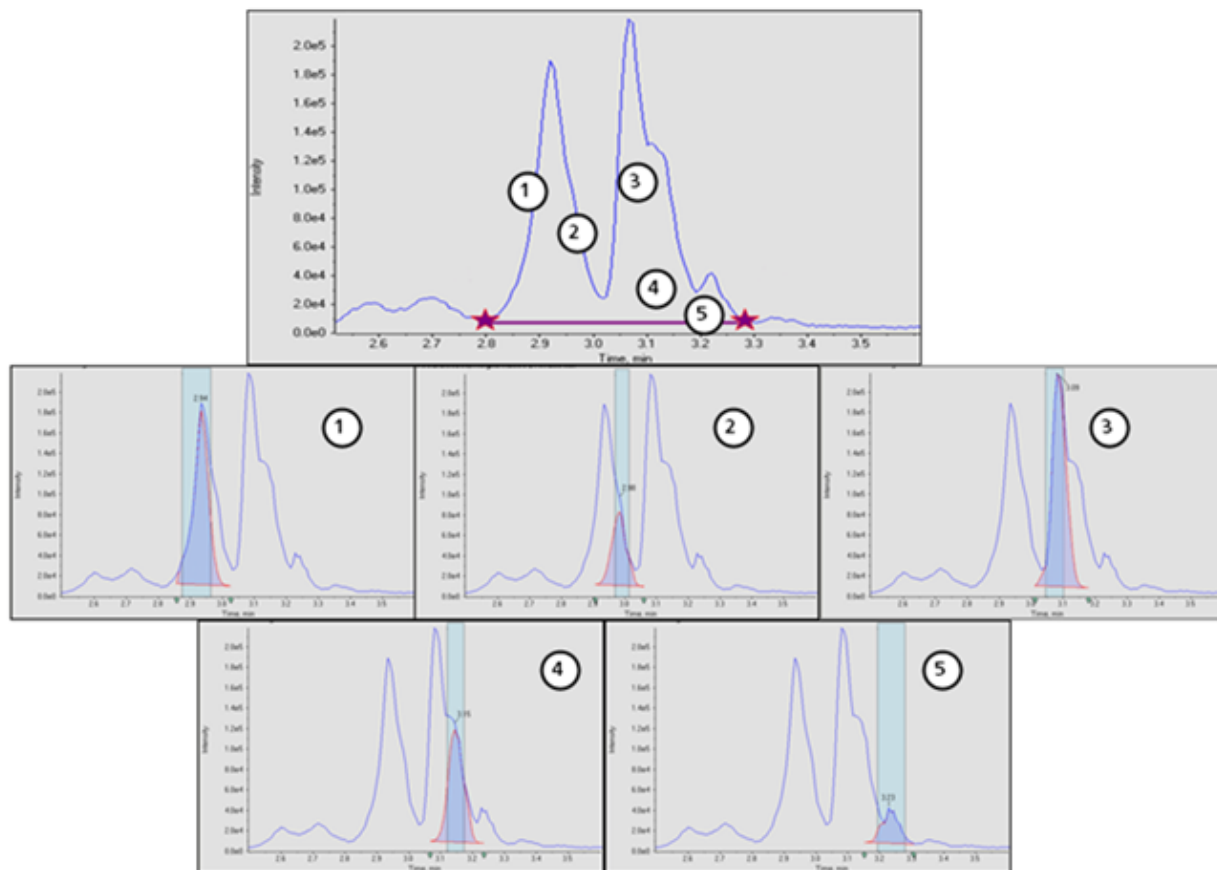
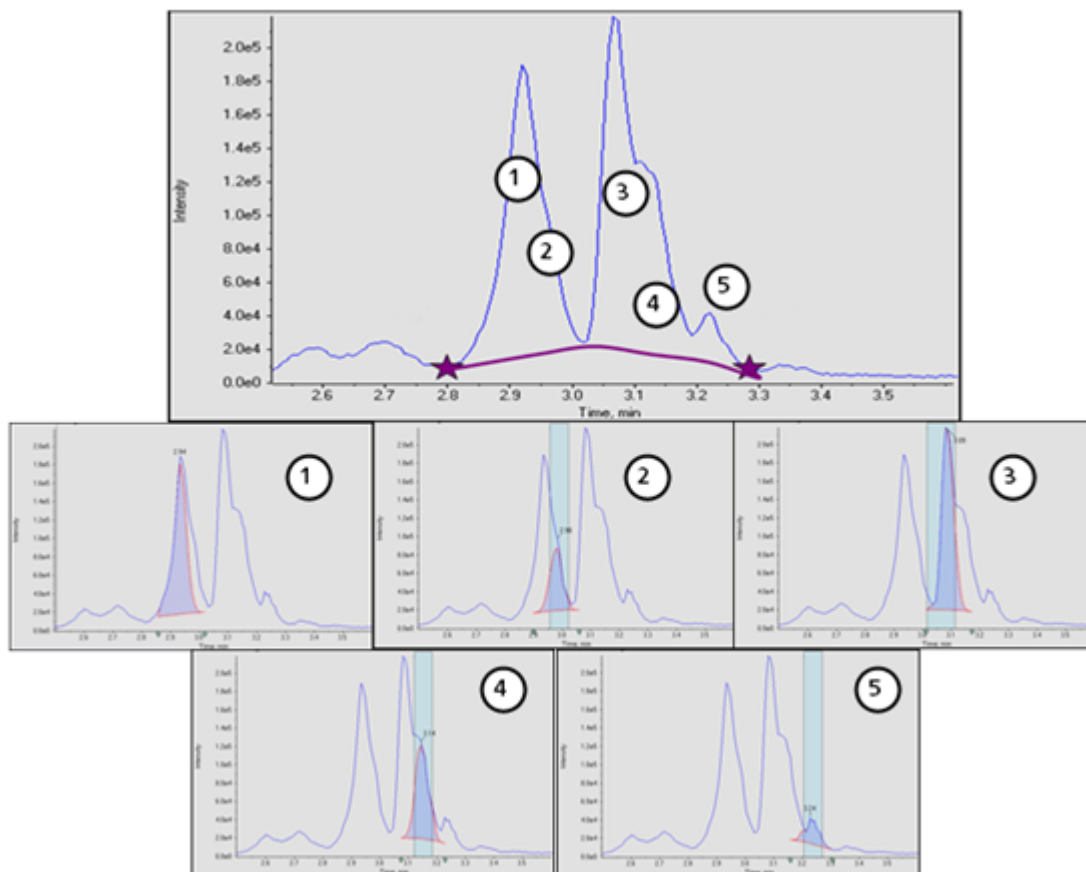


Figura A-10: Ejemplo de un punto de referencia no lineal



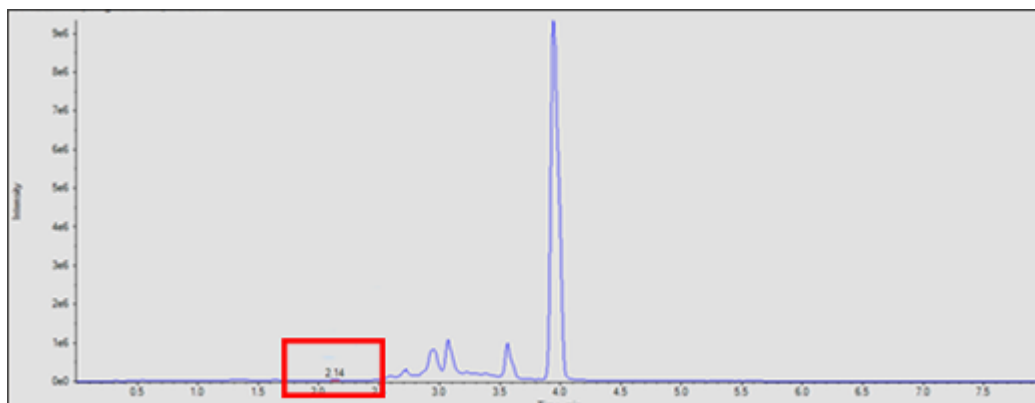
Parámetros del algoritmo de integración MQ4

Los siguientes parámetros se usan para identificar y registrar el pico de interés. Para obtener una lista completa de los parámetros disponibles, consulte el sistema de ayuda.

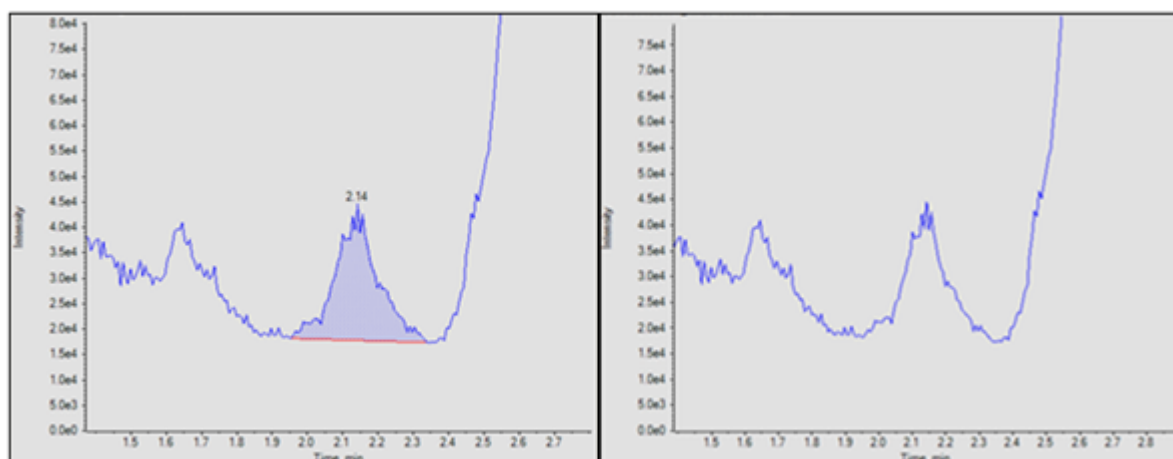
Porcentaje de ruido

Este parámetro se utiliza para estimar el nivel de ruido en los cromatogramas. El porcentaje especificado de los puntos de datos con la intensidad más baja se considera ruido.

Los valores típicos oscilan entre el 20 % y el 60 %. Si no se detectan picos pequeños en presencia de picos de mayor tamaño, debe disminuirse el porcentaje de ruido. La siguiente figura es un ejemplo de un pico pequeño en presencia de un pico extremadamente grande. Este pico no se detecta cuando el porcentaje de ruido está configurado en el 90%, pero sí cuando el porcentaje de ruido está configurado en el 40%.

Figura A-11: Pico de interés

En la siguiente figura, el gráfico de la izquierda muestra el porcentaje de ruido configurado en el 40 %. El gráfico de la derecha está configurado en el 90 %.

Figura A-12: Niveles de ruido

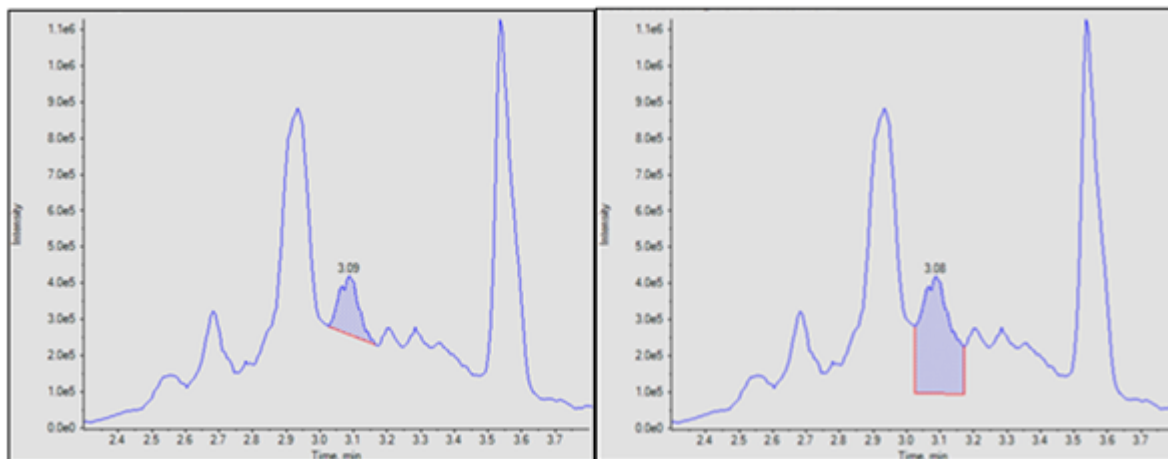
Baseline Subtract Window

Después del suavizado, pero antes de realizar otro procesamiento, se sustrae el punto de referencia de los cromatogramas para eliminar los salientes en los datos. Para cada punto de datos, el punto de referencia se calcula con los puntos de datos a la izquierda y a la derecha del punto actual con intensidad mínima, dentro de la ventana de sustracción.

El valor exacto de este parámetro no es de vital importancia, siempre que se haya establecido en un valor varias veces superior como mínimo a la anchura esperada de los picos.

En la siguiente figura, el gráfico de la izquierda muestra la ventana de sustracción del punto de referencia establecida en 0,1 minutos y el gráfico de la izquierda muestra la ventana de sustracción del punto de referencia establecida en 1 minuto.

Figura A-13: Ventana Baseline Subtraction



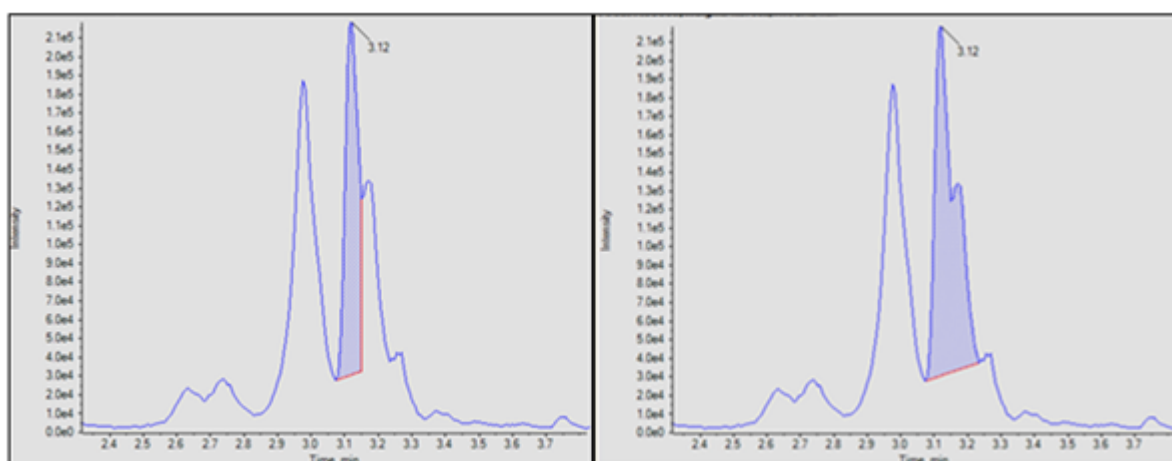
División de picos

Este parámetro controla si se detecta un pico potencialmente con ruido como un único pico o como dos o más picos independientes. Si la «caída» entre dos picos potenciales es inferior al valor especificado, se detecta un único pico. En caso contrario, se detectan dos.

Al establecer este parámetro con un valor alto, se evita que se dividan y se detecten los picos ruidosos como dos picos independientes. No obstante, debe utilizarse un valor más bajo en caso de que haya dos picos distintos de elución cercanos (solapándose).

En la siguiente figura, el gráfico de la izquierda muestra la división de picos configurada en dos puntos. El gráfico de la derecha muestra la división de picos configurada en tres puntos.

Figura A-14: División de picos



Regresión

El área o altura de los picos de analito se representa respecto a las concentraciones conocidas en la Curva de calibración y en el Gráfico de métricas. Posteriormente, se ajusta

una línea a los puntos. Esta línea de regresión se utiliza para calcular la concentración de las muestras desconocidas.

Ecuaciones de regresión

Esta sección describe las ecuaciones utilizadas para calcular las curvas de regresión. En las siguientes ecuaciones, x representa la concentración del analito para muestras Standard (Patrón), e y y representa el área o la altura del pico correspondiente. Las variables exactas utilizadas para la regresión dependen de si se está utilizando un patrón interno y de si el área o la altura del pico se utiliza como se muestra en la siguiente tabla.

Tabla A-1: Variables de regresión

¿Se ha utilizado patrón interno?	¿Se ha utilizado el área?	x	y
Sí	Sí	$C_a / C_{es} / DF$	A_a / A_{es}
Sí	No	$C_a / C_{es} / DF$	H_a / H_{es}
No	Sí	C_a / DF	A_a
No	No	C_a / DF	H_a

donde:

- C_a = concentración real del analito
- C_{es} = concentración del patrón interno
- DF = factor de dilución
- A_a = área de pico de analito
- A_{es} = área de pico del patrón interno
- H_a = altura de pico de analito
- H_{es} = altura de pico del patrón interno

Tipos de ponderación

La siguiente tabla muestra cómo se calcula el factor de ponderación (w) para cada uno de los siete tipos de ponderación.

Tabla A-2: Tipos de ponderación

Tipo de ponderación	Ponderación (w)
Ninguna	Siempre 1,0.
$1/x$	Si $ x < 10^{-5}$, entonces $w = 10^5$. De lo contrario, $w = 1 / x $.
$1 / x^2$	Si $ x < 10^{-5}$, entonces $w = 10^{10}$. De lo contrario, $w = 1 / x^2$.
$1 / y$	Si $ y < 10^{-8}$, entonces $w = 10^8$. De lo contrario, $w = 1 / y $.

Tabla A-2: Tipos de ponderación (continuación)

Tipo de ponderación	Ponderación (w)
$1 / y^2$	Si $ y < 10^{-8}$, entonces $w = 10^{16}$. De lo contrario, $w = 1 / y^2$.
$\ln(x)$	Si $x < 0$, entonces se genera un error. Si $x < 10^{-5}$ entonces $w = \ln 10^5$. De lo contrario, $w = \ln(x) $.
$\ln(y)$	Si $y < 0$, entonces se genera un error. Si $y < 10^{-8}$ entonces $w = \ln 10^8$. De lo contrario, $w = \ln(y) $.

Coeficiente de correlación

En las ecuaciones de regresión, las variables x , y y w tienen la definición especificada anteriormente. Se calculan todas las sumas para todas las muestras estándar, salvo las muestras estándar marcadas como no utilizadas.

El coeficiente de correlación se calcula de la manera siguiente:

donde:

$$D_y = \sum w \sum wy^2 - (\sum wy)^2$$

- y_c = Y-valor calculado utilizando la ecuación apropiada para el tipo de regresión

$$D_{y_c} = \sum w \sum wy_c^2 - (\sum wy_c)^2$$

Tipos de regresión

En el espacio de trabajo Analytics, hay disponibles los siguientes tipos de regresión:

- Media (solo en el panel Gráfico de métricas)
- Mediana (solo en el panel Gráfico de métricas)
- Lineal ($y = mx + b$)
- Lineal a través de cero ($y = mx$)
- Factor de respuesta promedio
- Cuadrática ($y = ax^2 + bx + c$)
- Potencia
- Wagner
- Hill

Nota: La opción **Remove outliers automatically from the calibration curve** en el cuadro de diálogo Regression Options en el panel Calibration Curve aplica automáticamente las reglas de eliminación automática de valores atípicos a los componentes de interés seleccionados. Consulte la ayuda.

Lineal

La ecuación de calibración lineal es la siguiente:

$$y = mx + b$$

La pendiente y la intersección se calculan así:

$$m = (\sum w \sum wx y - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

donde:

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

Lineal a través de cero

La ecuación de calibración lineal a cero es la siguiente:

$$y = mx$$

La pendiente se calcula así:

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

Factor de respuesta promedio

La calibración del factor de respuesta promedio es:

$$y = mx$$

Esta es la misma ecuación que la de calibración lineal a través de cero. Sin embargo, la pendiente se calcula de forma diferente:

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

y la desviación estándar del factor de respuesta como:

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1)) / \sum w}$$

donde:

$$D = \sum w^* \sum wy^2 / x^2 - (\sum wy / x)^2$$

Nota: Los puntos cuyo valor x es cero se excluyen de las sumas.

Si en la línea de puntos hay algunas rectas y algunas curvas, utilice la regresión de potencia en vez de la lineal o cuadrática para generar una línea que se encuentre entre estos ajustes.

Cuadrática

La ecuación de calibración cuadrática es la siguiente:

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

Los coeficientes polinomiales se calculan así:

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum wy - a_1\sum wx - a_2\sum wx^2) / \sum w$$

donde:

$$b_0 = \sum wx / \sum w - \sum wx^2 / \sum wx$$

$$b_1 = \sum wx^2 / \sum w - \sum wx^3 / \sum wx$$

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$

$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2y / \sum wx^2$$

Potencia

La ecuación de calibración de la función de potencia es:

$$y = ax^p$$

Las ecuaciones para la calibración lineal se utilizan como se ha descrito anteriormente para calcular la pendiente (m) y la intersección (b), excepto que en estas ecuaciones x se sustituye por ln x e y se sustituye por ln y. Una vez hecho esto, a y p se calculan así:

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Si alguno de los valores de x o y son negativos o cero, se notifica un error.

Wagner

La ecuación de calibración Wagner es la siguiente:

$$\ln y = a_2 (\ln x)^2 + a_1 (\ln x) + a_0$$

Las ecuaciones para la calibración cuadrática se utilizan como se ha descrito anteriormente para calcular $\ln y$, a_1 y a_2 excepto que en estas ecuaciones x se sustituye por $\ln x$, e y se sustituye por $\ln y$.

Si alguno de los valores de x o y son negativos o cero, se notifica un error.

Hill

La ecuación de calibración Hill es la siguiente:

$$y = (a + bx^n) / (c + x^n)$$

No es posible proporcionar una función analítica para resolver a , b , c y n . En lugar de eso, los coeficientes se determinan usando el método iterativo Levenberg-Marquardt.

Extracción automática de valores atípicos

Una función opcional permite al software extraer los valores atípicos de la curva de calibración de manera automática. Esta función, que ahorra tiempo, es útil para aplicaciones con muchos compuestos con distinta sensibilidad e intervalo lineal.

Cuando esta función está habilitada, el software analiza repetitivamente todos los puntos de datos para identificar un rango de inicio, de cuatro puntos consecutivos, que proporciona la mejor regresión lineal y satisface las reglas especificadas por el usuario para la extracción de valores atípicos. El algoritmo calcula regresiones múltiples para todas las permutaciones de los puntos de partida. Considera todas las regresiones válidas que cumplen las reglas especificadas por el usuario y las pasa por la secuencia de expansión. Para todos los rangos de inicio válidos, el éxito de cada expansión depende del número total de puntos utilizados, el rango de niveles utilizado y el punto con el peor error de exactitud absoluta en la regresión antes y después de la expansión. La regresión que abarca el máximo rango y satisface las reglas es la regresión "ganadora".

Nota: Si no hay disponibles cuatro puntos de datos, el software usará tres. El algoritmo no se aplicará si hay menos de tres puntos disponibles.

Las reglas para la extracción automática de valores atípicos se definen en el método de procesamiento e incluyen lo siguiente:

- Coeficiente de correlación mínimo (r)

Nota: Esta opción utiliza el coeficiente de correlación, no el coeficiente de determinación (r^2).

- Error de precisión máximo permitido para duplicados estándar al nivel mínimo de cuantificación (LLOQ, por sus siglas en inglés)
 - Error de precisión máximo permitido para estándares por debajo del LLOQ
-

Teoría de funcionamiento: software

- Coeficiente de variación (CV) porcentual máximo para duplicados múltiples de un estándar al LLOQ

Nota: Si %CV es mayor que el valor especificado, el algoritmo extrae los duplicados en orden decreciente de error de exactitud hasta que %CV de los duplicados restantes sea menor que dicho valor.

- CV porcentual máximo para duplicados múltiples de un estándar a todos los niveles por encima de LLOQ

Nota: Si %CV es mayor que el valor especificado, el algoritmo extrae los duplicados en orden decreciente de error de exactitud hasta que %CV de los duplicados restantes sea menor que dicho valor.

- Si el número total de valores atípicos especificado excluye valores atípicos por debajo del LLOQ y por encima del límite de cuantificación superior (ULOQ, por sus siglas en inglés)
- Número máximo de valores atípicos que pueden ser extraídos para un nivel de concentración
- Número total de valores atípicos que se pueden eliminar de una curva de calibración

Nota: Este algoritmo se aplica a todos los estándares, incluidos aquellos excluidos manualmente.

Nota: Si el número de duplicados utilizados para producir la regresión es diferente para cada nivel estándar, la función de extracción de valores atípicos automática no funciona a la perfección y solo debe usarse como punto de partida. Revise cada curva de calibración manualmente.

Sugerencia: Asegúrese de que los umbrales de tolerancia para la exactitud de los estándares en los criterios de aceptación para el método de procesamiento coincidan con los umbrales del cuadro de diálogo Rules for Automatically Removing Outliers for Calibration Standards.

Tablas de resultados

Una tabla de resultados es una compilación de la información cuantitativa y cualitativa asociada con un conjunto de muestras. Incluye los cálculos para concentración y precisión determinados como un resultado de la interpolación de la curva de calibración. Resultados de la búsqueda de la biblioteca, búsqueda de resultados y otros resultados del análisis cualitativo de la fórmula también están disponibles en la tabla de resultados. Se pueden visualizar el área, la altura y otras características numéricas. El número y el tipo de las columnas de las tablas de resultados se pueden editar para obtener una visualización simplificada.

Curvas de calibración

Una curva de calibración, también conocida como curva de concentración patrón, es un método que permite determinar la concentración de una sustancia en una muestra

desconocida comparando la muestra desconocida con un conjunto de muestras estándar de concentración desconocida. La curva de calibración es un gráfico de cómo responde el instrumento (la señal analítica) ante los cambios de concentración del analito (la sustancia que se va a medir). El operador prepara una serie de estándares en un rango de concentraciones próximas a la concentración esperada del analito en la muestra desconocida.

Los estándares de calibración se utilizan para generar curvas de calibración. Las lecturas incorrectas o ausentes en algunas de las muestras de calibración podrían indicar problemas con la serie analítica. Siga métodos aceptables encontrados en la bibliografía y directrices de agencias reguladoras para crear una curva de calibración. Entre los ejemplos de buenas prácticas en la preparación de curvas de calibración se incluyen:

- Preparación de estándares de calibración en una matriz en blanco, en los que se va a medir el analito.
- Generación de una curva de calibración para cada analito que se va a medir.
- Garantía de cobertura del rango de concentración previsto del analito, incluidas muestras típicas y atípicas.
- Uso de seis a ocho estándares para generar la curva.

Esta lista no es exhaustiva y se deben utilizar otras directrices para determinar la mejor práctica a la hora de desarrollar una curva de calibración para el laboratorio.

Nota: En algunos procedimientos analíticos, se utilizan estándares de calibración de un solo punto. Las calibraciones de un solo punto se realizan utilizando una muestra de matriz en blanco y una concentración de estándar único. La relación entre la respuesta del instrumento y la concentración del analito se determina mediante la línea creada por estos dos puntos. Tanto el método de procesamiento como el de adquisición se deben validar antes de aceptarlos para su uso previsto.

Relación señal/ruido

Cuando se lleva a cabo un procesamiento de datos de espectrometría de masas cuantitativo, es importante determinar si un pico determinado es significativo o no, entendiendo habitualmente por *significativo* que *supera el ruido de fondo*.

Cálculos de ruido relativo y relación señal/ruido

Normalmente, la altura del pico se compara con el ruido de fondo medido en una región sin picos, donde el ruido se calcula normalmente como una o tres veces la desviación estándar de los puntos de datos en este rango. Este enfoque no es ni mucho menos ideal, por las razones siguientes:

- Es subjetivo, porque la región de ruido se selecciona manualmente.
- Podría no existir una región de fondo sin pico, o la región podría ser demasiado estrecha como para calcular con precisión el ruido.
- El ruido en la posición del pico podría diferir mucho del de la región de ruido seleccionada.

Teoría de funcionamiento: software

- El factor "uno o tres" también es subjetivo, y hay distintas recomendaciones dependiendo del experto.
- El ruido aparente se puede alterar si los datos se han preprocesado. Por ejemplo, si se han suavizado o se ha establecido un umbral.

El concepto de ruido relativo (R_n) facilita el desarrollo de un método simple para calcular el ruido esperado en cualquier punto de los datos, para su comparación con la señal medida. Esta es una métrica sólida y objetiva, que se puede usar para calcular la relación señal/ruido (S/N) y para evaluar y comparar el rendimiento del instrumento y del ensayo. Existen muchas aplicaciones del concepto de ruido relativo, una de las cuales es el cálculo de la S/N.

El algoritmo básico funciona de la forma siguiente:

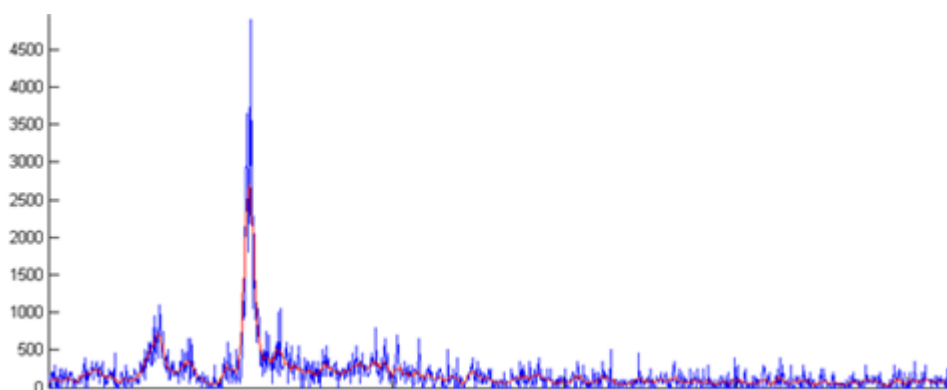
1. Se diseña un modelo de señal que permita al usuario calcular el ruido esperado en cualquier punto del registro de datos, dado el nivel de señal subyacente en ese punto.

El modelo de ruido se puede determinar a partir de consideraciones teóricas o se puede modelar a partir de mediciones reales para un sistema particular. Para detectores con pulsímetro, la desviación estándar de una señal, y por tanto del ruido esperado, es proporcional a la raíz cuadrada de la señal y por tanto varía con la señal. En otros sistemas habrá un componente de "ruido blanco" constante, posiblemente combinado con un componente dependiente de la intensidad.

2. Se calcula la señal subyacente a partir de la señal medida.

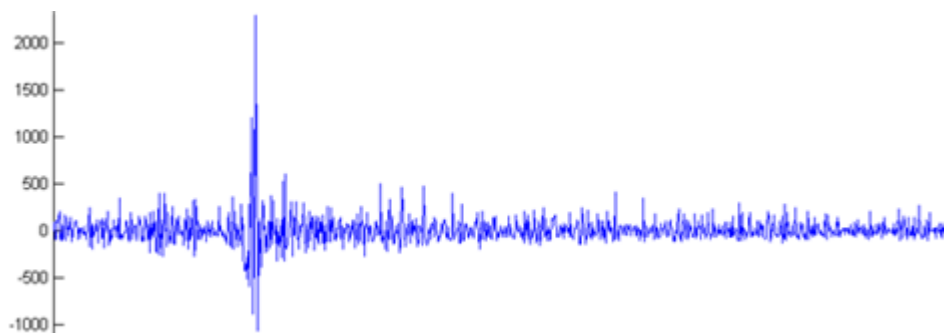
Esta tarea se puede llevar a cabo de muchas formas, pero la más sencilla es generar una versión suavizada de los datos. Consulte la [Figura A-15](#).

Figura A-15: Superposición de los datos sin procesar y suavizados



3. Se mide el ruido real a través de los datos usando todos los puntos, tanto los picos como el fondo.

Esto se consigue restando el cálculo de señal subyacente de la señal medida en cada punto de los datos en el que la señal suavizada se haya restado del original. El resultado se denomina ruido delta. El rango de ruido delta es razonablemente constante, excepto donde hay picos grandes, porque el ruido depende de la señal y, por lo tanto, es mayor donde la señal es más grande. Consulte la [Figura A-16](#).

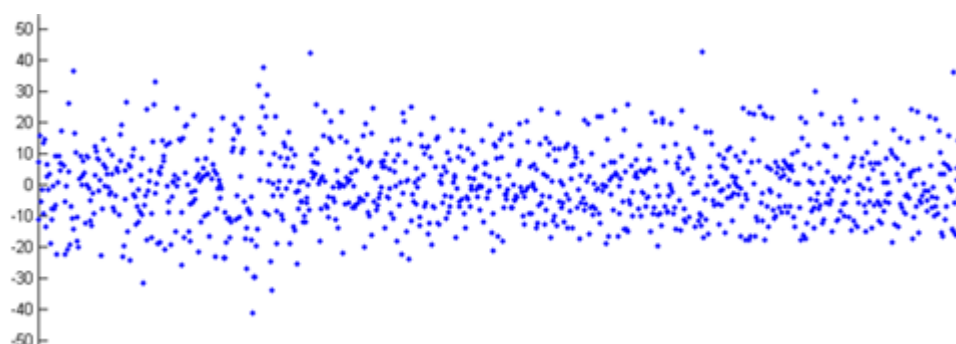
Figura A-16: Representación de los valores de ruido delta de cada punto de datos

4. En cada punto de datos, se calcula la proporción entre el ruido medido y el ruido esperado.

Esto es, en cada punto de datos dividimos el ruido medido en el paso 3 entre el valor que nuestro modelo de ruido predice, en este caso, la raíz cuadrada de la intensidad. Si el modelo de ruido es bueno, el software genera una serie de valores que en su mayor parte quedan dentro de ciertos límites. Consulte la figura siguiente. Esta figura también muestra el gráfico de

$$\Delta noise / \sqrt{intensity}$$

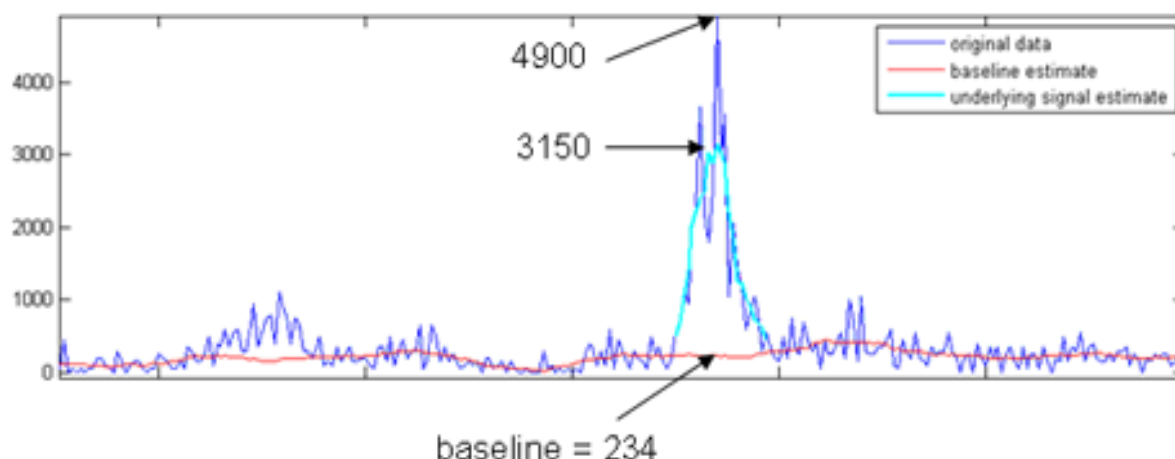
Nota: Este paso reduce la gran variación del ruido delta y se traduce en un conjunto de valores bien definido.

Figura A-17: Modelo de ruido

5. Se calcula la desviación estándar de los valores de la proporción. Este es el Rn, una estimación de la relación más probable entre el ruido delta real y el que predecía el modelo. En la figura anterior, el resultado era un valor de 9,5.

En la figura siguiente se muestra un ejemplo de cómo el ruido relativo se puede utilizar para calcular la relación señal/ruido.

Figura A-18: Superposición de los datos sin procesar, estimación de señal subyacente y estimación del punto de referencia



Como se describía anteriormente:

$$\text{noise} = R_n \times \sqrt{(\text{baseline})}$$

En este ejemplo:

$$\text{noise} = 9.5 \times \sqrt{234} = 145$$

Si el ápice del pico se usa como señal, esto nos da una relación señal/ruido (S/N) de 34 (4900/145) y, si se utiliza la altura de la señal suavizada, eso nos da una relación señal/ruido (S/N) de 22 (3150/145).

Cuando proporciona la S/N, el algoritmo de integración MQ4 utiliza el procedimiento descrito aquí y el ápice del pico como la señal. Puesto que el algoritmo de integración AutoPeak está acoplado a un modelo al pico, utiliza la altura del perfil empleado. Esto se traduce en que arroja una S/N más pequeña. Sin embargo, es un valor más preciso, porque se ve menos afectado por los posibles picos de ruido. El algoritmo de integración AutoPeak tiene también un enfoque más sofisticado para la estimación del punto de referencia, así que, por estas dos razones, los valores de S/N que arrojan estos dos algoritmos no son idénticos, aunque serán normalmente muy similares.

En resumen, si comparamos con el procedimiento habitual de calcular el ruido como la desviación estándar de una región de fondo, el procedimiento del ruido relativo para calcular la S/N tiene las ventajas siguientes:

- Es mucho menos subjetivo, ya que no es necesario seleccionar una región de fondo manualmente.
- Se puede predecir una S/N más exacta incluso si no existen regiones del cromatograma sin picos.
- Para los algoritmos de integración AutoPeak y Summation, el punto de referencia y, por lo tanto, el ruido, se calcula cerca del pico de interés. Para el algoritmo de integración

MQ4, el punto de referencia es la intensidad del punto de datos en el porcentaje de ruido especificado por el usuario. Por ejemplo, si el porcentaje de ruido especificado por el usuario es del 40 % y hay 100 puntos de datos, el algoritmo de integración MQ4 ordena los puntos de datos de la menor intensidad a la mayor y utiliza la intensidad del punto de datos con la cuadragésima intensidad más pequeña.

Esto supone una gran diferencia con el valor de S/N arrojado, porque la región de fondo seleccionada para el procedimiento habitual podría ser mucho más silenciosa que el fondo cercano al pico. Como se describía anteriormente, la S/N calculada usando el procedimiento de ruido relativo podría dar valores más pequeños que con el procedimiento habitual. Sin embargo, son valores más precisos y útiles. Consulte la [Figura A-18](#).

Para que la columna **Signal / Noise** esté visible en la tabla de resultados, consulte [Personalizar la tabla de resultados](#).

Nota sobre la relación señal/ruido cuando se usa el algoritmo de integración AutoPeak

Puesto que el algoritmo de integración AutoPeak calcula la relación señal/ruido con más precisión (y, por lo tanto, predice los CV con más exactitud), si se usa el procedimiento de señal/ruido 1-sigma, entonces hay que considerar la posibilidad disminuir el valor señal/ruido mínimo aceptable en cualquier procedimiento operativo estándar (SOP), basándose en datos empíricos del laboratorio.

Señal/ruido mediante pico a pico

Si se utiliza el algoritmo señal/ruido, el software calcula la relación señal/ruido teniendo en cuenta la desviación estándar de todos los puntos de datos cromatográficos entre el tiempo de inicio de fondo y el tiempo final de fondo especificados. El software calcula la relación señal/ruido para el cromatograma activo, resta la señal de fondo promedio del pico seleccionado y luego divide la señal restada entre el nivel de ruido pico a pico. Luego diferencia las regiones de ruido y pico en función de las intensidades máximas de cada región. Al finalizar, el cromatograma activo se etiqueta con relación señal/ruido.

Señal/ruido utilizando desviación estándar

Cuando se utiliza este algoritmo de señal/ruido, el software calcula la relación señal/ruido de los picos cromatográficos y los etiqueta. Este algoritmo requiere que se seleccionen dos regiones en el cromatograma:

- La región de ruido
- El pico de interés

Luego el software determina qué región contiene el pico y qué región contiene el ruido en función de las intensidades máximas en cada selección. Resta la intensidad de la señal de fondo promedio de la intensidad de la señal de pico y luego divide la señal restada entre un factor especificado por el usuario multiplicado por la desviación estándar de la región de ruido.

Definición de regiones de ruido

Utilice este procedimiento para definir las regiones de ruido si se utiliza el algoritmo de desviación estándar o de pico a pico.

Nota: Solo se puede utilizar un algoritmo de relación señal/ruido en una tabla de resultados. Para aplicar un algoritmo de relación señal/ruido diferente a los datos, cambie los valores predeterminados del proyecto y, a continuación, cree una nueva tabla de resultados.

1. En la configuración predeterminada del proyecto, seleccione el algoritmo de relación señal/ruido **Standard Deviation** o **Peak-to-Peak**.

Sugerencia: Para abrir la configuración predeterminada del proyecto, haga clic en **Projects > Project default settings**.

2. Cree un método de procesamiento.
3. En la página Integration, haga clic en **Options > Show Noise Regions**.
4. (Si es necesario) Utilice el ratón para ajustar la región de ruido.

Nota: La región de ruido debe establecerse para cada transición.

5. Procese los datos.
6. En el panel Peak Review, haga clic en **Options > Show Noise Regions**.
7. (Si es necesario) Utilice el ratón para ajustar la región de ruido.

Columnas calculadas

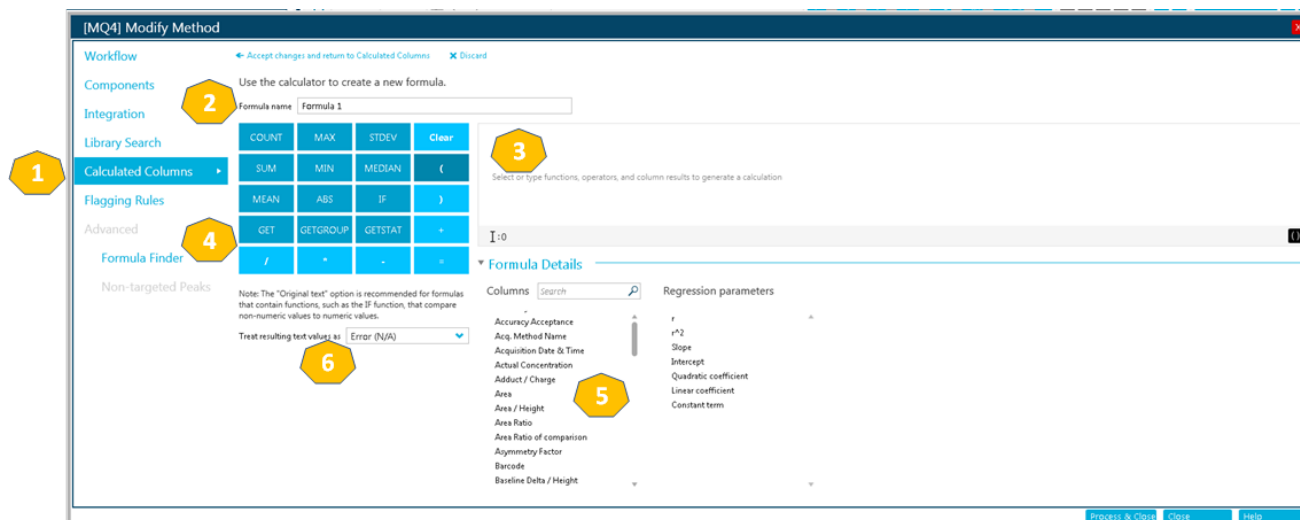
Las columnas calculadas son fórmulas que dan lugar a la adición de nuevas columnas personalizadas a una tabla de resultados. Después de crear una fórmula y de procesar (o volver a procesar) los datos, los resultados de la fórmula se muestran en una nueva columna personalizada.

Navegación por la interfaz de columnas calculadas

Las columnas calculadas se crean en un método de procesamiento. Se pueden importar y exportar como archivos `frm1` para su uso posterior o uso compartido.

La siguiente figura muestra la interfaz del editor de fórmulas.

Figura A-19: Interfaz de usuario de columnas calculadas



Elemento	Descripción
1	El paso Calculated Columns del flujo de trabajo del método de procesamiento. Haga clic para abrir la página Calculated Columns. Luego haga clic en Add Formula (no se muestra).
2	El campo Formula name . Escriba un nombre para la fórmula. Nota: El nombre de la fórmula no puede contener los nombres de funciones en la calculadora, corchetes ni paréntesis.
3	El campo Formula .
4	Calculadora que contiene funciones y operadores de uso común. Se pueden escribir los siguientes operadores adicionales en el campo de fórmula: <ul style="list-style-type: none"> • > (mayor que) • >= (mayor o igual que) • < (menor que) • <= (menor o igual que) • != (no igual a) Para obtener más información sobre estos operadores y funciones, consulte el <i>Sistema de ayuda</i> .
5	Parámetros de regresión disponibles y columnas de la tabla de resultados. Nota: Esta lista no está disponible en las tablas <code>qsession</code> .

Elemento	Descripción
6	<p>El menú Treat resulting text values as permite al usuario configurar cómo se tratan las entradas de texto. Esta opción es importante en las columnas de la tabla de resultados que pueden contener tanto salidas numéricas como de texto.</p> <p>Por ejemplo, las columnas de concentración calculada pueden contener valores numéricos junto con valores no numéricos como N/A, deteriorada e infinito.</p>

Nota: Cuando el usuario empiece a escribir una fórmula que utilice una matriz de muestras, habrá disponible un elemento de selección de muestras.

Extracción simple de información no predeterminada

La función de columnas calculadas permite a los usuarios mostrar información que no está disponible de forma predeterminada en las tablas de resultados.

Por ejemplo, para mostrar R^2 como una columna en la tabla de resultados, el usuario puede crear una fórmula igual a R^2 .

Figura A-20: Creación de una columna personalizada con columnas calculadas

← Accept changes and return to Calculated Columns ✕ Discard

Use the calculator to create a new formula.

Formula name

COUNT	MAX	STDEV	Clear
SUM	MIN	MEDIAN	(
MEAN	ABS	IF)
GET	GETGROUP	GETSTAT	+
/	*	-	=

[r^2]

I:5

Note: The "Original text" option is recommended for formulas that contain functions, such as the IF function, that compare non-numeric values to numeric values.

Treat resulting text values as

▼ Formula Details

Columns 🔍

Regression parameters

Accuracy
Accuracy Acceptance
Acq. Method Name
Acquisition Date & Time
Actual Concentration

r
r^2
Slope
Intercept
Quadratic coefficient

Aritmética simple

Se pueden crear fórmulas simples para realizar operaciones matemáticas básicas.

Ejemplo: R²

```
[r] * [r]
```

En este ejemplo, el valor R² se reproduce utilizando el operador de multiplicación (*) para multiplicar el valor R por sí mismo.

Ejemplo: Puntos por segundo recopilados

```
[Points Across Baseline]/((([End Time]-[Start Time])*60)
```

En este ejemplo, los puntos a lo largo de la línea de referencia se dividen entre los segundos desde el principio hasta el final de un pico cromatográfico integrado. Esta fórmula utiliza los operadores de división (/), multiplicación (*) y resta (-).

Funciones más complejas

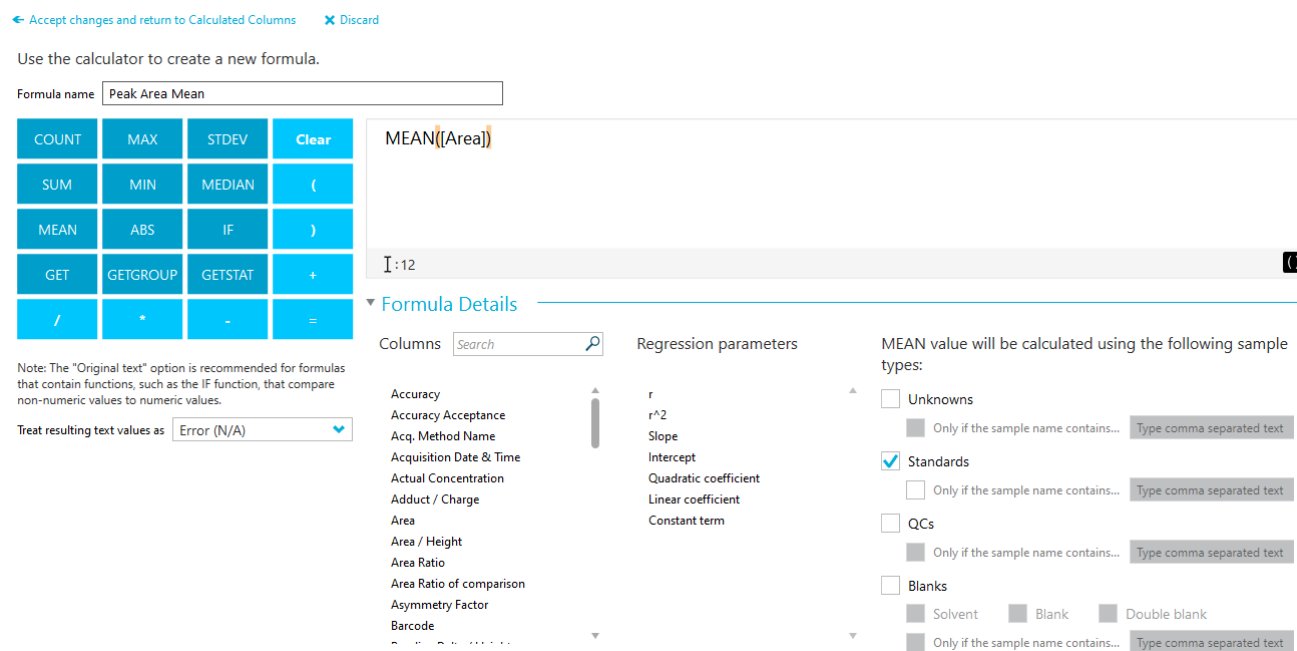
Existen muchas otras funciones y estructuras de control. Algunas de las más comunes son **MEAN()**, **MAX()** y **MIN()**, y se muestran en la calculadora bajo la barra de fórmulas.

Para obtener una lista completa de detalles de sintaxis, operadores y funciones, consulte el *Sistema de ayuda*.

Ejemplo: MEAN([Area]) para patrones

Cuando se utiliza una función que funciona con todos los valores, el usuario puede seleccionar las muestras que se incluirán en el cálculo.

Figura A-21: Obtención de la media del área de pico solo de las muestras patrón



Ejemplo: Combinación de funciones

Se pueden combinar funciones aritméticas simples y más complejas. Por ejemplo, para calcular los puntos medios por segundo recopilados, utilice la siguiente fórmula:

```
MEAN([Points Across Baseline]/(((End Time)-[Start Time])*60))
```

Instrucciones IF

La función **IF** realiza una prueba lógica y devuelve un valor para un resultado verdadero y otro para un resultado falso. Se pueden utilizar funciones anidadas **IF** para probar más de una condición. La función **IF** se puede combinar con otras funciones lógicas como **and** y **or** para ampliar una prueba lógica.

Nota: "&&" y "||" se pueden utilizar para **and** y **or**, respectivamente. Los operadores **and** y **or** deben estar incluidos entre espacios, no así los operadores && y ||.

La sintaxis básica de la instrucción **IF** es la siguiente:

```
if(<condition>;<value if true>;<value if false>)
```

- **<condition>** es un valor o una expresión lógica que se puede evaluar como verdadera o falsa.
- **<value if true>** es un valor que se debe devolver y mostrar en la columna correspondiente de la tabla de resultados cuando **<condition>** se evalúa como verdadera.
- **<value if false>** es un valor que se debe devolver y mostrar en la columna correspondiente de la tabla de resultados cuando **<condition>** se evalúa como falsa.

Nota: El símbolo de función **IF** se puede seleccionar desde la calculadora, escribir o copiar desde otra fuente. Se puede utilizar en la sintaxis de **if** o **IF**.

La función **IF** permite utilizar otras funciones numéricas, como **MEAN**, **STDEV**, etc., también dentro de la fórmula, en las expresiones *<condition>*, *<value if true>* o *<value if false>* .

Ejemplo: *<condition>*

Algunos ejemplos de una *<condition>* son:

```
[Peak Area]>5000
```

```
[Component Name]='Analyte 1'
```

```
[Retention Time]> 1 and [Retention Time]<2
```

Ejemplo: *<value if true>* y *<value if false>*

<value if true> y *<value if false>* pueden ser numéricos o de texto.

```
if([Retention Time]> 1 and [Retention Time]<2; '1-2 min RT  
window';  
'not applicable')
```

Valor medio del área del patrón interno

En este ejemplo, el valor medio del área del patrón interno (IS) se calcula entre las muestras deseadas y se compara con un valor de 1e6. El valor medio del área de IS se muestra en la columna correspondiente de la tabla de resultados si **MEAN ([IS Area])** es mayor que 1e6, es decir, si la *<condition>* es verdadera. Si **MEAN ([IS Area])** es menor que 1e6, es decir, si la *<condition>* es falsa, la columna de la tabla de resultados contiene **Review IS performance**, *<value if false>*.

```
IF(MEAN([IS Area])>=1e6;'MEAN([IS Area])';'Review IS performance')
```

Nota: Solo las funciones **IF** pueden contener varios cálculos.

Treat Resulting Text Values As

La opción **Treat resulting text values as** determina cómo se interpreta el texto en una columna de una tabla de resultados personalizada que contiene texto o una combinación de números y texto. Por ejemplo, la columna **Sample Type** solo contiene texto, la columna **Precursor Mass** contiene valores numéricos y la columna **Calculated Concentration** puede contener tanto valores numéricos como texto.

Según las funciones utilizadas en una fórmula, la opción **Treat resulting text values as** permite una interpretación específica de los valores de texto de la columna en la que se basa el cálculo. Entre las opciones disponibles se encuentran:

- **Zero**

- **Ignore (blank)**
 - **Error (N/A)**
 - **Original text**
-

Nota: Para obtener más información acerca de estas opciones, consulte el *Sistema de ayuda*.

Si los cálculos se basan en las funciones **COUNT**, **MAX**, **STDEV**, **SUM**, **MIN**, **MEDIAN**, **GET**, **GETGROUP**, **SLOPE**, **INTERCEPT**, **MAD** o **GETSTAT**, las opciones recomendadas son **Zero**, **Ignore (blank)** o **Error (N/A)**. Estas opciones también se recomiendan en las instrucciones **IF** cuando la fórmula contiene columnas que se espera que tengan valores numéricos.

Original text es la opción recomendada en las instrucciones **IF** en las que los componentes de las expresiones *<condition>*, *<value if true>*, y *<value if false>* pueden ser tanto numéricas como de texto, especialmente cuando se utilizan funciones adicionales.

Nota: En las instrucciones **IF** con más de una *<condition>*, si no se evalúa ni siquiera una *<condition>* se produce una salida *<value if false>* en la columna de la tabla de resultados personalizada.

Ejemplo

En este ejemplo, las columnas utilizadas en la fórmula pueden contener tanto texto como valores numéricos. Por lo tanto, se recomienda la opción **Original text**.

```
IF([Sample Type]='Unknown'&&(GET([Calculated Concentration];  
'Analyte 1')+GET([Calculated Concentration];'Analyte 2'))<=15;  
'Low Range';IF([Sample Type]='Unknown'&&(GET([Calculated  
Concentration  
'; 'Analyte 1')+GET([Calculated Concentration];'Analyte 2'))  
<=65;'Normal Range';'Over normal range'))
```

Esta fórmula **IF** contiene las columnas **Sample Type** y **Calculated Concentration**. Los valores de la columna **Sample Type** deben tratarse como **Original text**. Para la columna **Calculated Concentration**, puede ser necesario tratar los valores no numéricos como **<0** y **Degenerate** como **Zero**.

Dado que los valores no numéricos deben tratarse de forma diferente, recomendamos que el usuario divida la fórmula en varias fórmulas más pequeñas para obtener un control más preciso de los valores no numéricos.

Calibración de un sistema configurado con cierre de contacto **B**

Si el cierre de contacto está configurado en el sistema, se puede usar para calibrarlo tanto en el modo por lotes como en el manual:

- Modo por lotes: el sistema se puede calibrar con el CDS o con un método de LC. Consulte [Calibración del sistema en el modo por lotes](#).
- Modo manual: el sistema se puede calibrar con el CDS o con un método de LC. Inicie el método haciendo clic en **Start** o en **Start with LC** en el espacio de trabajo MS Method. Cuando el estado cambie a **Load**, inicie la inyección en el dispositivo de LC.

Nota: El espacio de trabajo MS Tune no admite la función de cierre de contacto. MS Tune no espera a la señal de cierre de contacto.

Calibración del sistema en el modo por lotes

Use un CDS o un método de LC para calibrar el sistema.

Calibración del sistema mediante CDS

Si el sistema se está comunicando con un dispositivo externo usando el cierre de contacto, entonces siga estas directrices para calibrar el sistema usando un CDS:

- Configure las propiedades de calibración automática, incluido el número de muestras entre calibraciones.
- Sincronice los métodos del sistema de LC y el espectrómetro de masas para dejar tiempo para la calibración entre muestras. En las secciones siguientes se describen dos opciones distintas para hacerlo.
- Después de enviar el lote, espere a que se complete la calibración inicial y, a continuación, cuando el sistema pase al estado de carga, inicie la inyección en el dispositivo externo.

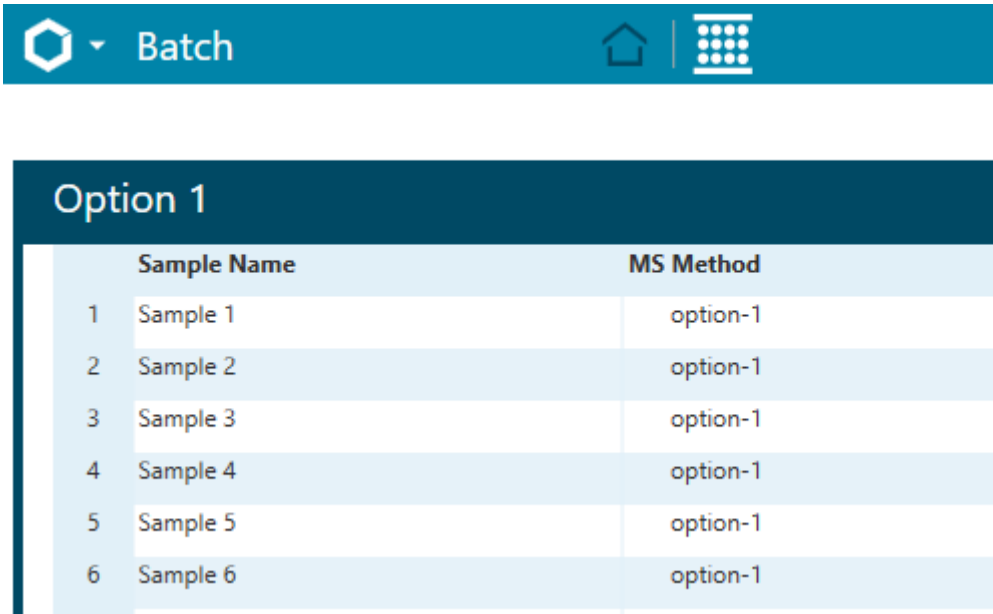
Opción 1

Para sincronizar el sistema de LC y el espectrómetro de masas, compruebe que los métodos de LC son como mínimo dos minutos más largos que los métodos del espectrómetro de masas.

En los siguientes ejemplos se muestra el lote y la cola en SCIEX OS y la programación correspondiente en el dispositivo externo para un lote en el que la calibración se realiza después de cada tercera muestra.

Calibración de un sistema configurado con cierre de contacto

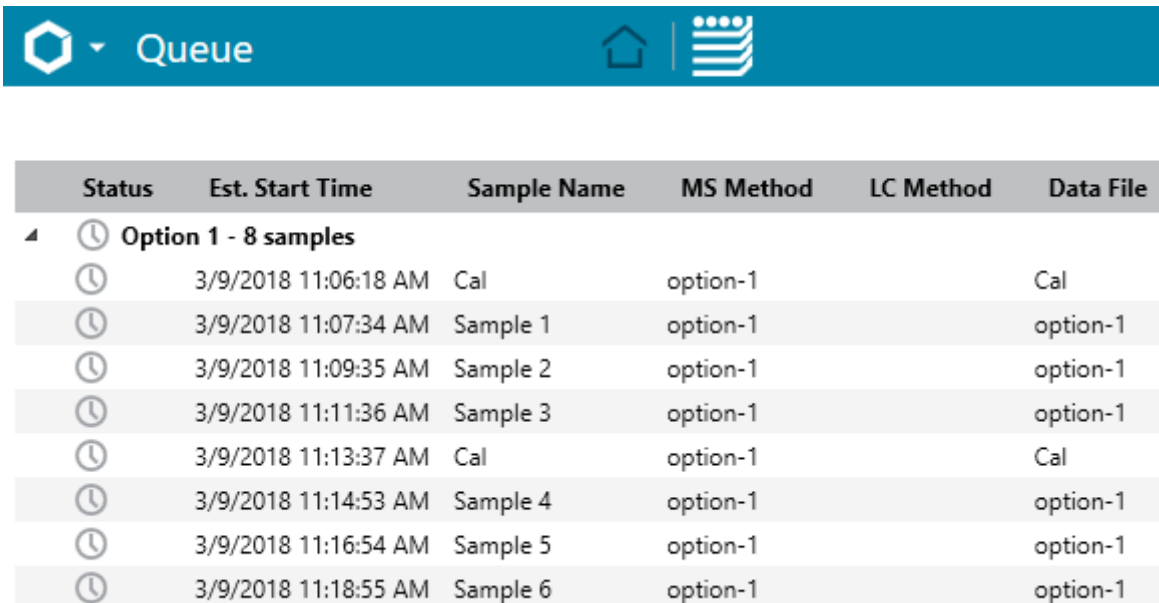
Figura B-1: Calibración de CDS: lote de ejemplo



The screenshot shows a software interface with a blue header bar containing a home icon, a dropdown menu with 'Batch', and a grid icon. Below the header, a dark blue bar displays 'Option 1'. A table with a light blue background lists six samples, each with an index, a sample name, and an MS Method.

	Sample Name	MS Method
1	Sample 1	option-1
2	Sample 2	option-1
3	Sample 3	option-1
4	Sample 4	option-1
5	Sample 5	option-1
6	Sample 6	option-1

Figura B-2: Calibración de CDS: cola de ejemplo



The screenshot shows a software interface with a blue header bar containing a home icon, a dropdown menu with 'Queue', and a list icon. Below the header, a table displays a sequence of sample runs. Each row includes a status icon, an estimated start time, a sample name, an MS Method, an LC Method, and a data file name.

Status	Est. Start Time	Sample Name	MS Method	LC Method	Data File
⌚	Option 1 - 8 samples				
⌚	3/9/2018 11:06:18 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:07:34 AM	Sample 1	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:09:35 AM	Sample 2	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:11:36 AM	Sample 3	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:13:37 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:14:53 AM	Sample 4	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:16:54 AM	Sample 5	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:18:55 AM	Sample 6	option-1		option-1

Tabla B-1: Secuencia de muestra en el dispositivo externo

Hora (mm:ss)	Inyección
00:00	Muestra 1
12:00	Muestra 2
24:00	Muestra 3
36:00	Muestra 4

Tabla B-1: Secuencia de muestra en el dispositivo externo (continuación)

Hora (mm:ss)	Inyección
48:00	Muestra 5
60:00	Muestra 6

Opción 2

Esta opción es adecuada para un flujo de trabajo con un método de LC corto.

Siga estas directrices para sincronizar el sistema de LC y el espectrómetro de masas:

- Para todas las calibraciones excepto la primera del lote, configure el dispositivo externo para inyectar una muestra en blanco cuando la calibración esté programada para producirse. Por ejemplo, si se adquieren tres muestras entre calibraciones, entonces compruebe que cada cuarta inyección es una muestra en blanco.
- Compruebe que el tiempo de ejecución de la muestra en blanco en el dispositivo externo es de 2 minutos o más. (La calibración de CDS tarda 2 minutos). Compruebe que la duración del método es inferior o igual al tiempo entre inyecciones.

En los siguientes ejemplos se muestra el lote y la cola en SCIEX OS y la programación correspondiente en el dispositivo externo para un lote en el que la calibración se realiza después de cada tercera muestra.

Figura B-3: Calibración de CDS: lote de ejemplo

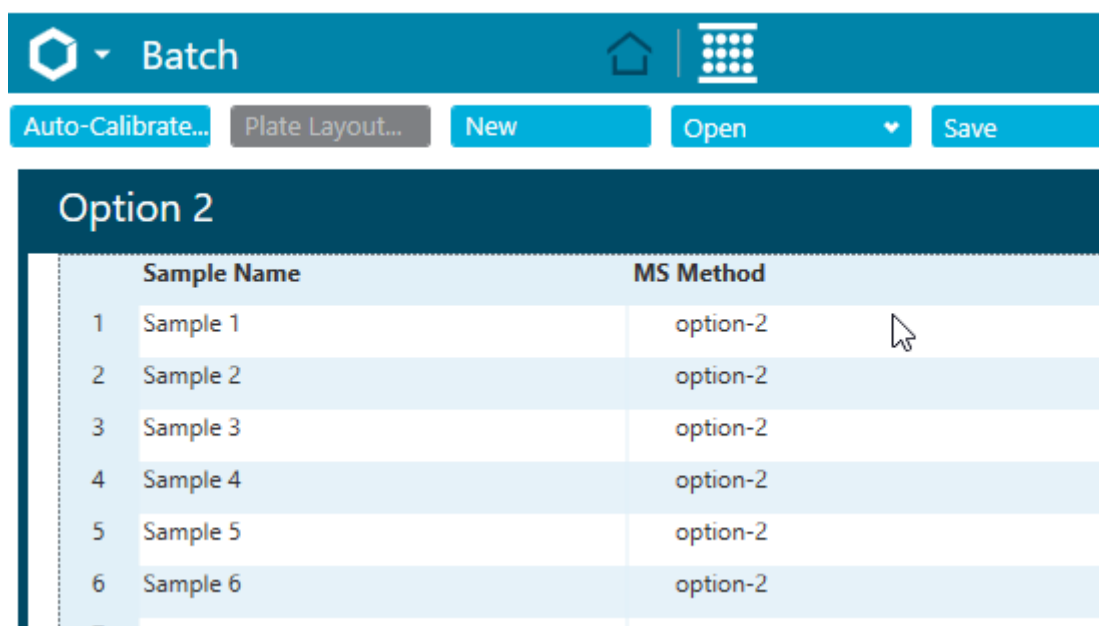



Figura B-4: Calibración de CDS: cola de ejemplo



The screenshot shows a software interface with a blue header bar containing a home icon, a 'Queue' label, and a list icon. Below the header is a table with the following columns: Status, Est. Start Time, Sample Name, MS Method, LC Method, and Data File. The table contains a group of 8 samples under the heading 'Option 2 - 8 samples'. Each row includes a clock icon in the Status column, a timestamp in the Est. Start Time column, a sample name in the Sample Name column, 'option-1' in the MS Method column, 'option-1' in the LC Method column, and 'Cal' or 'option-1' in the Data File column.

Status	Est. Start Time	Sample Name	MS Method	LC Method	Data File
🕒 Option 2 - 8 samples					
🕒	3/9/2018 11:02:41 AM	Cal	option-1		Cal
🕒	3/9/2018 11:03:57 AM	Sample 1	option-1		option-1
🕒	3/9/2018 11:05:58 AM	Sample 2	option-1		option-1
🕒	3/9/2018 11:07:59 AM	Sample 3	option-1		option-1
🕒	3/9/2018 11:10:00 AM	Cal	option-1		Cal
🕒	3/9/2018 11:11:16 AM	Sample 4	option-1		option-1
🕒	3/9/2018 11:13:17 AM	Sample 5	option-1		option-1
🕒	3/9/2018 11:15:18 AM	Sample 6	option-1		option-1

Tabla B-2: Secuencia de muestra en el dispositivo externo

Hora (mm:ss)	Inyección
00:00	Muestra 1
02:00	Muestra 2
04:00	Muestra 3
06:00	Blanco
08:00	Muestra 4
10:00	Muestra 5
12:00	Muestra 6

Calibración del sistema usando el sistema de LC

Si el sistema se está comunicando con un dispositivo externo usando el cierre de contacto, entonces siga estas directrices para calibrar el sistema usando el dispositivo externo:

- En las propiedades para el espectrómetro de masas, configure una válvula para simular el dispositivo externo.
- Cree un método de LC para la válvula.
- Compruebe que la duración del método es inferior o igual al tiempo entre inyecciones en el dispositivo externo.
- Configure las propiedades de calibración automática para el lote: seleccione la tabla de iones de referencia y defina la frecuencia de la calibración. Para **Calibrant delivery**,

seleccione el método de LC para la válvula. Para **MS method**, seleccione el método de MS que se va a usar.

Figura B-5: Calibración de LC: Automatic Calibration Editor

The screenshot shows a dialog box titled "Batch - Automatic Calibration Editor" with a close button (X) in the top right corner. Below the title bar, there is a subtitle: "Provide ion reference and calibrant delivery settings to be applied automatically, at the correct frequency during acquisition".

The settings are organized into two columns:

- Left Column:**
 - "Ion reference table" is a dropdown menu set to "Beta Galactosidase Digests" with an "Edit..." button to its right.
 - "Calibrate every" is a numeric input field set to "3" with a "samples" label to its right.
 - "Calibrant delivery" is a dropdown menu set to "valve-method".
- Right Column:**
 - "MS method" is a dropdown menu set to "lc-calibration".
 - "Rack Type" is a dropdown menu.
 - "Rack Position" is a dropdown menu.
 - "Plate Type" is a dropdown menu.
 - "Plate Position" is a dropdown menu.
 - "Vial Position" is a dropdown menu.

At the bottom right of the dialog, there are two buttons: "OK" and "Cancel".

Nota: Asegúrese de especificar un tiempo de retención para cada péptido en la tabla de referencia.

- Envíe el lote e inicie la cola. Compruebe que las entradas de la cola coincidan con las entradas de la programación en el dispositivo externo.
- Inicie la inyección en el dispositivo externo.

En los siguientes ejemplos se muestra el lote y la cola en SCIEX OS y la programación correspondiente en el dispositivo externo para un lote en el que la calibración se realiza después de cada tercera muestra. La duración del método de MS es de 1 minuto. La duración del método de calibración también es de 1 minuto.

Calibración de un sistema configurado con cierre de contacto

Figura B-6: Calibración de LC: lote

The screenshot shows a software interface with a top navigation bar labeled 'Batch'. Below the navigation bar, there are buttons for 'Auto-Calibrate...', 'Plate Layout...', 'New', and 'Open'. The main content area is titled 'LC-calibration' and contains a table with the following data:

	Sample Name	MS Method
1	Sample 1	Ic-calibration
2	Sample 2	Ic-calibration
3	Sample 3	Ic-calibration
4	Sample 1	Ic-calibration
5	Sample 2	Ic-calibration
6	Sample 3	Ic-calibration
7		

Figura B-7: Calibración de LC: cola

The screenshot shows a software interface with a top navigation bar labeled 'Queue'. A green 'Start' button is visible on the right. Below the navigation bar, there is a table with the following data:

Status	Est. Start Time	Sample Name	MS Method	LC Method	Data File	Project
LC-calibration - 8 samples						
🕒	12/18/2017 1:57:03 PM	Cal	Ic-calibration	valve-method	Cal	
🕒	12/18/2017 1:59:04 PM	Sample 1	Ic-calibration		Sample	
🕒	12/18/2017 2:00:05 PM	Sample 2	Ic-calibration		Sample	
🕒	12/18/2017 2:01:06 PM	Sample 3	Ic-calibration		Sample	
🕒	12/18/2017 2:02:07 PM	Cal	Ic-calibration	valve-method	Cal	
🕒	12/18/2017 2:04:08 PM	Sample 1	Ic-calibration		Sample	
🕒	12/18/2017 2:05:09 PM	Sample 2	Ic-calibration		Sample	
🕒	12/18/2017 2:06:10 PM	Sample 3	Ic-calibration		Sample	

Tabla B-3: Secuencia de muestra en el dispositivo externo

Hora (mm:ss)	Inyección
00:00	Calibrador
01:00	Muestra 1
02:00	Muestra 2

Tabla B-3: Secuencia de muestra en el dispositivo externo (continuación)

Hora (mm:ss)	Inyección
03:00	Muestra 3
04:00	Calibrador
05:00	Muestra 1
06:00	Muestra 2
07:00	Muestra 3

Calibración en modo manual

En esta sección se describe cómo usar el cierre de contacto para calibrar el sistema al ejecutar un método manualmente en el espacio de trabajo MS Method.

Calibración del sistema con CDS

1. En el espacio de trabajo MS Method, abra el método que se vaya a ejecutar.
2. Haga clic en **Advanced > Calibrate**.
3. En el campo **Ion Reference Table**, seleccione **X500 Positive Calibration Solution** o **X500 Negative Calibration Solution**, en función de la polaridad del método.
4. Seleccione **Apply Calibration**.
5. Haga clic en **OK**.
6. Haga clic en **Start**.

Calibración del sistema usando el método de LC

Si el sistema se está comunicando con un dispositivo externo usando el cierre de contacto, entonces siga estas directrices para calibrar el sistema usando el dispositivo externo:

- En las propiedades para el espectrómetro de masas, configure una válvula para simular el dispositivo externo.
 - Cree un método de LC que contenga una válvula y que tenga una duración inferior o igual a la duración del método de MS.
1. En el espacio de trabajo MS Method, abra el método de MS que se va a ejecutar.
 2. Haga clic en **Start with LC** y seleccione el método de LC.
 3. Cuando el estado del sistema cambie a **Loading**, inicie la inyección en el dispositivo de LC.

Masas exactas y fórmulas químicas C

Reserpina

Tabla C-1: Masas exactas de reserpina (C₃₃H₄₀N₂O₉)

Descripción	Masa
Ion molecular C ₃₃ H ₄₁ N ₂ O ₉	609,28066
Fragmento C ₂₃ H ₃₀ NO ₈	448,19659
Fragmento C ₂₃ H ₂₉ N ₂ O ₄	397,21218
Fragmento C ₂₂ H ₂₅ N ₂ O ₃	365,18597
Fragmento C ₁₃ H ₁₈ NO ₃	236,12812
Fragmento C ₁₀ H ₁₁ O ₄	195,06519
Fragmento C ₁₁ H ₁₂ NO	174,09134

Péptido ALILTLVS

Tabla C-2: Masa exacta de péptido ALILTLVS

Nombre	Secuencia	Masa	Estado de carga
Ion precursor	ALILTLVS	829,5393	1+
b8	ALILTLVS	811,5288	1+
b7	ALILTLV	724,4967	1+
b7-18	ALILTLV	706,4862	1+
b6-18	ALILTLV	607,4178	1+
y5	LTLVS	532,3341	1+
b5	ALILT	512,3443	1+
b5-18	ALILT	494,3337	1+
b4	ALIL	411,2966	1+
b3	ALI	298,2125	1+
Fragmento interno y b	IL o LI	227,1754	1+
Fragmento interno y b	LT o TL	215,139	1+
b2	AL	185,1285	1+

Tabla C-2: Masa exacta de péptido ALILTLVS (continuación)

Nombre	Secuencia	Masa	Estado de carga
a2	AL	157,1335	1+
iones imonio	I o L	86,09643	1+

Introducción

Este documento proporciona una descripción general en forma de tutorial de algunas de las herramientas y funciones disponibles en el software. No proporciona una descripción detallada de cada operación disponible, pero describe algunos de los flujos de trabajo más habituales que el software puede abordar.

Organización

Aunque algunas funciones y operaciones son específicas de determinadas aplicaciones y flujos de trabajo, la mayor parte son genéricas y se usan con frecuencia al explorar datos cualitativos. En esta sección del documento se proporciona una breve introducción a los conceptos empleados en el software y una descripción de algunas de las operaciones más habituales y esenciales. En secciones posteriores se describen estrategias para flujos de trabajo específicos y se utilizan los archivos de datos de muestra que se suministran con el software.

Los archivos de muestra están disponibles en sciex.com/software-support/software-downloads bajo el apartado **SCIEX OS resources**. Copie todo el proyecto en la carpeta D:\SCIEX OS DATA en el ordenador. En los ejemplos de este tutorial se utilizan los archivos de muestra siguientes:

- Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff
- Bromocrip_IDA-DBS in plasma_T=0.wiff
- Bromocrip_IDA-DBS in plasma_T=1.wiff
- DataSET61.wiff
- DataSET62.wiff
- DataSET63.wiff
- DataSET64.wiff
- DataSET65.wiff
- DataSET66.wiff
- RP_digests.wiff
- RP_Intact.wiff
- Bromocriptine.mol

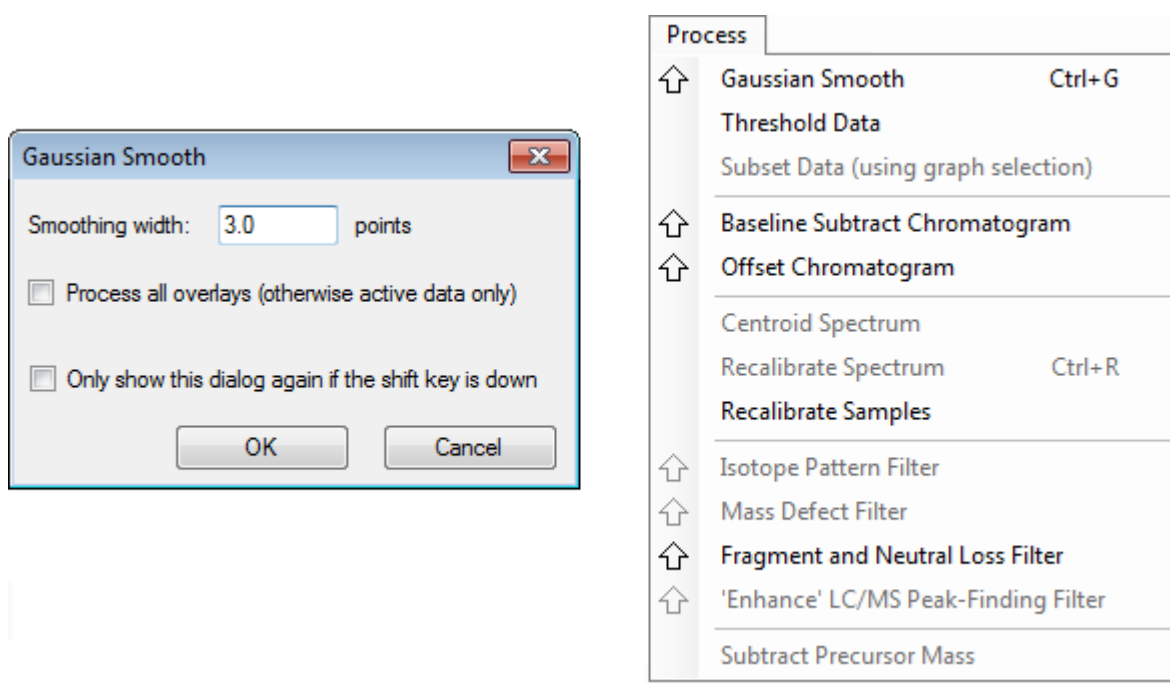
Los archivos de bromocriptina proceden de análisis IDA en modo negativo de una incubación con microsomas hepáticos de rata. Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff se ha obtenido a partir de un punto temporal de una hora, mientras que los otros dos corresponden a los puntos temporales de cero y una hora enriquecidos en plasma. El

archivo Bromocriptine.mol contiene la estructura molecular de la bromocriptina. Los archivos DataSET61 a DataSET66 proceden del análisis de la loratadina y sus impurezas. Los distintos conjuntos de datos representan diferentes niveles de concentración. El archivo RP_Intact.wiff procede de un análisis de mioglobina intacta. El archivo RP_digests.wiff procede de un análisis de mioglobina con digestión trípica.

Opciones

El software proporciona muchas opciones para ajustar el modo como funcionan los comandos. Algunas, como se muestra en [Figura D-1](#), proporcionan una casilla que permite visualizar el cuadro de diálogo solo si se pulsa la tecla **Shift**. Esto elimina la necesidad de interactuar con el cuadro de diálogo si no se requieren cambios en los parámetros. El menú de esos comandos contiene una flecha que apunta hacia arriba.

Figura D-1: Opciones



Paneles

Aunque el software utiliza ventanas para mostrar y recibir información, el componente básico de la interfaz de usuario es el panel. Una ventana puede contener uno o varios paneles, pero solo puede haber un panel activo a la vez. Los paneles reciben comandos de los menús y de las barras de herramientas. Los menús y las barras de herramientas proporcionan maneras de manipular los paneles o los datos que estos contienen.

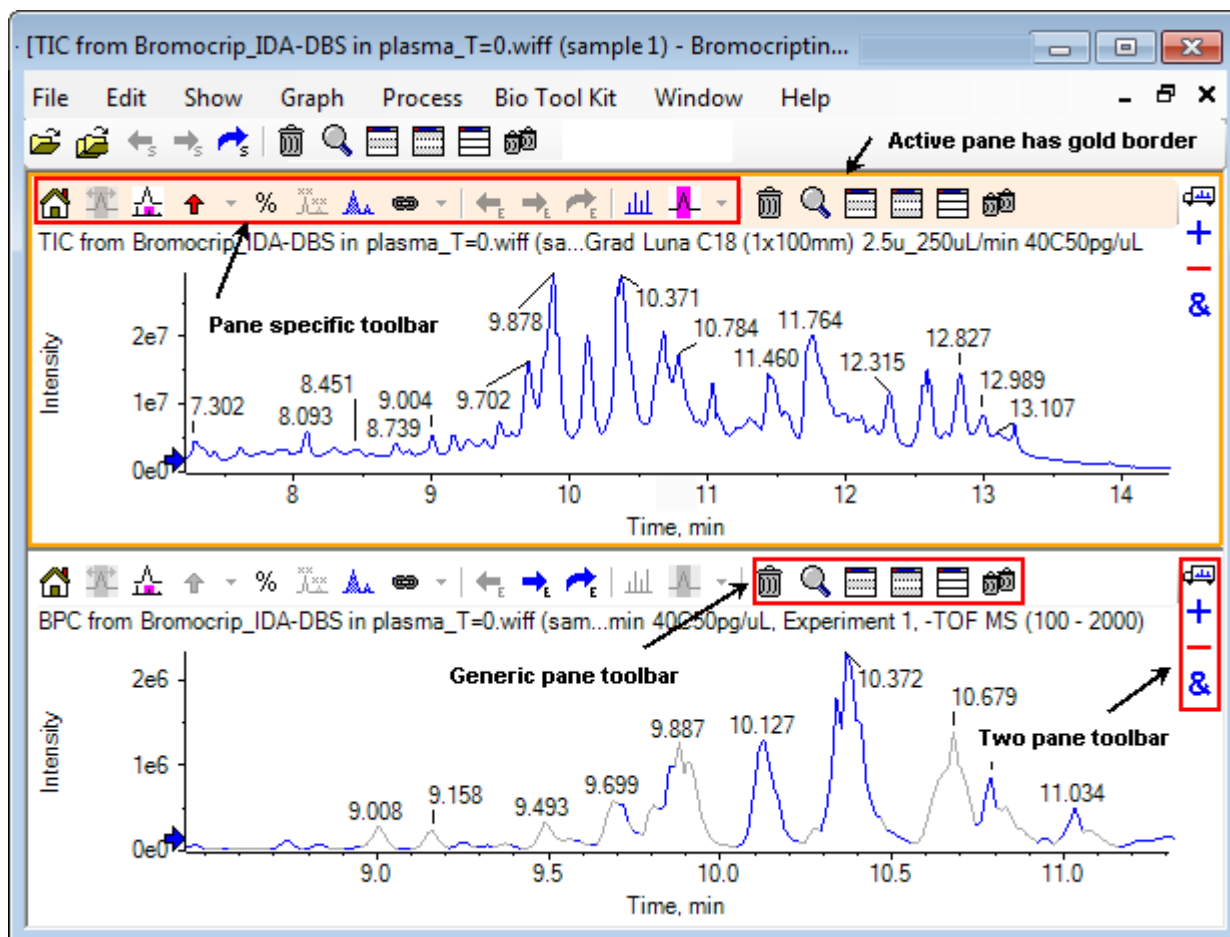
Los paneles pueden contener gráficos, como pueden ser espectros y cromatogramas, mapas de calor o tablas, así como vistas más especializadas. Las operaciones de procesamiento habituales crean paneles para mostrar información o trabajar en los datos que se muestran en un panel. Cada panel contiene herramientas genéricas de uno y dos paneles. La mayor parte de los paneles tiene herramientas adicionales que son específicas

Tutorial de Explorer

del tipo de panel. Las herramientas adicionales proporcionan acceso a los comandos más habituales.

En [Figura D-2](#) se muestra un ejemplo de ventana común. La ventana contiene dos paneles (incluido el panel activo), el cromatograma (que se distingue por el borde en color) y la barra de herramientas.

Figura D-2: Ejemplo de paneles dentro de una ventana



Las operaciones comunes de los paneles se resumen en [Barra de herramientas genéricas de paneles](#) y [Two-Pane Toolbar](#). Las operaciones específicas de los paneles se resumen en [Graphs](#).

Barra de herramientas genéricas de paneles

Haga clic en un icono para utilizar las operaciones genéricas en un único panel.

Tabla D-1: Iconos de Generic Pane Toolbar







Icono	Nombre (información sobre la herramienta)
	Deletes this pane

Tabla D-1: Iconos de Generic Pane Toolbar (continuación)

Icono	Nombre (información sobre la herramienta)
	Expande el panel activo para llenar la ventana
	Hides this pane
	Hides all other panes
	Shows all currently hidden panes
	Deletes all other panes (mantenga pulsada la tecla Ctrl para eliminar solo los paneles que aparezcan después de este)

Nota: También hay iconos similares en la barra de herramientas maestra situada justo debajo de la barra de menús. Hacer clic en uno de los iconos de la barra de herramientas maestra tiene el mismo efecto en el panel activo que hacer clic en el icono en el panel activo. Esta barra de herramientas puede ser útil si el panel activo se ha redimensionado y algunos de los iconos no están visibles.

Deletes this Pane

Si hay varios paneles abiertos, utilice este icono para suprimir el panel correspondiente. Si solo hay un panel abierto, el icono no está disponible.

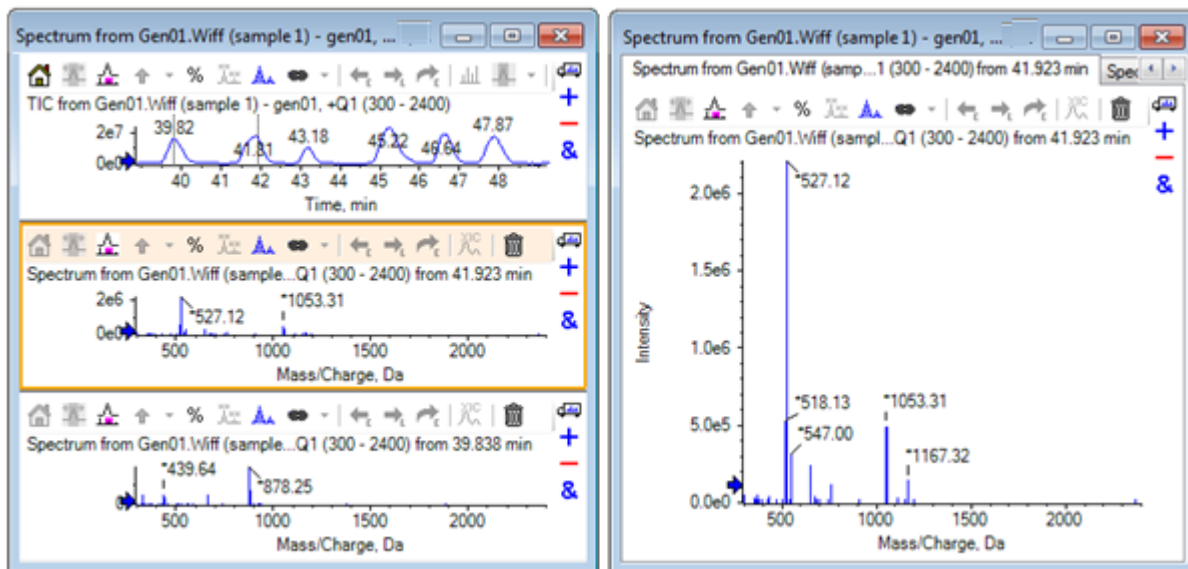
Expands Active Pane to Fill Window

Utilice este icono para expandir el panel de manera que ocupe toda la ventana, o bien para restaurar el tamaño original del panel. Si la ventana contiene varios paneles, este icono se centra temporalmente en uno de ellos.

Se muestra una pestaña independiente para cada panel en la parte superior de la ventana. Haga clic en la pestaña apropiada para cambiar de un panel a otro.

Nota: Si los títulos de los paneles son largos, es posible que no todas las pestañas estén visibles. Utilice los botones de flecha a la derecha de las pestañas para desplazarse por ellas. Vuelva a hacer clic en el icono para volver a la vista original en la que se muestran todos los paneles.

Figura D-3: Ejemplo de panel expandido



Hides this Pane

Utilice este icono para ocultar el panel correspondiente de manera que los demás paneles de la ventana ocupen el espacio disponible. Este icono es útil si el usuario desea ver un subconjunto de paneles, pero no quiere eliminar los demás paneles permanentemente.

Hides all Other Panes

Utilice este icono para ocultar todos los paneles salvo el panel que corresponda. El resultado es algo parecido a hacer clic en el icono **Expands active pane to fill window**, porque en los dos casos solo el panel que corresponda permanece y ocupa el espacio disponible. La diferencia se observa cuando se crea otro panel posteriormente. En el caso de un panel expandido, el nuevo panel se activa y ocupa el espacio disponible. En el caso de paneles ocultos, los dos paneles (el panel activo original y el nuevo panel) están visibles.

Shows all Currently Hidden Panes

Utilice este icono para que se muestren todos los paneles que se han ocultado.

Deletes all Other Panes





Si no se pulsa la tecla Ctrl, este icono elimina todos los paneles de la ventana, excepto el panel correspondiente. Esta opción es útil para limpiar y volver a procesar la muestra. También se eliminan los paneles que están ocultos.

Si se pulsa la tecla Ctrl, solo se eliminan los paneles que aparecen después del panel correspondiente. Esta opción es útil si hay muchos paneles y solo se necesitan varios de los iniciales. En este caso, los paneles ocultos no se eliminan.

Two-Pane Toolbar

Arrastre el icono para utilizar las operaciones de dos paneles (la disponibilidad depende del tipo de panel). El panel de origen es el que contiene el icono seleccionado y el de destino es el segundo panel.

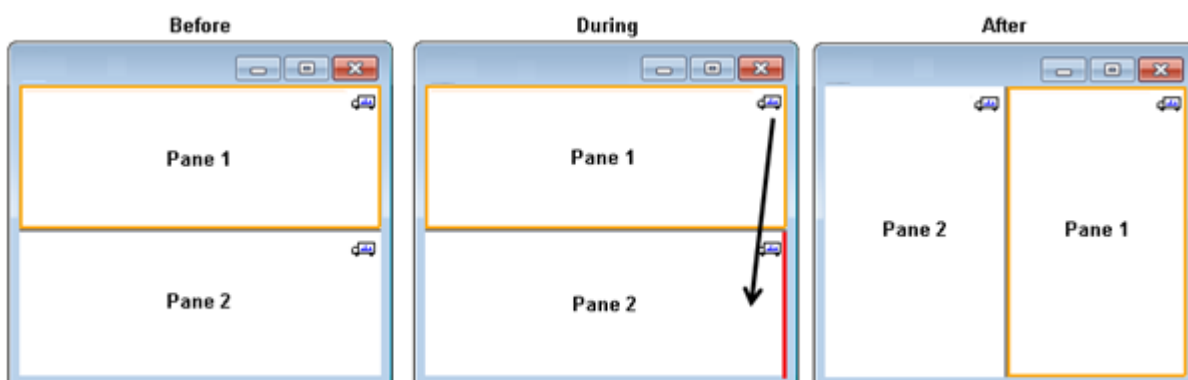
Tabla D-2: Iconos de Two Pane Toolbar

Icono	Nombre (información sobre la herramienta)
	Drag and drop to rearrange the panes.
	Drag to another graph to add the active data to the active data of the other graph. (Hold the Ctrl key to add the active data to all data sets in the other graph). (Arrastre a otro gráfico para agregar los datos activos a los datos activos del otro gráfico. [Mantenga pulsada la tecla Ctrl para agregar los datos activos a todos los conjuntos de datos del otro gráfico]).
	Drag to another graph to subtract the active data from the active data of the target graph. (Hold the Ctrl key to subtract from all data sets of the target. Hold the Shift key to keep negative values). (Arrastre a otro gráfico para sustraer los datos activos de los datos activos del destino. [Mantenga pulsada la tecla Control para sustraer de todos los conjuntos de datos del destino. Mantenga pulsada la tecla Mayús para mantener los valores negativos]).
	Drag to another graph to overlay the active data in the target graph. (Hold the Control key to overlay all data sets, not just the active one). (Arrastre a otro gráfico para superponer los datos activos a los datos activos del gráfico de destino. [Mantenga pulsada la tecla Control para superponer todos los conjuntos de datos, no solo el activo]).

Drag and Drop to Rearrange the Panes

Este icono se muestra en la esquina superior derecha de cada panel y sirve para cambiar las posiciones relativas de los paneles. Haga clic en el icono de un panel y, a continuación, arrástrelo hacia la parte superior, inferior, izquierda o derecha de un segundo panel. Según donde se suelte el ratón, la posición del primer panel cambia con respecto a la del segundo. Mientras se arrastra el cursor, un lado del segundo panel se resalta en rojo para indicar dónde se colocará el primer panel. [Figura D-4](#) muestra el resultado de arrastrar este icono del panel superior a la parte derecha del panel inferior.

Figura D-4: Resultado de arrastrar el icono del panel superior a la parte derecha del panel inferior



Nota: Los paneles se pueden arrastrar de una ventana a otra.

Drag to Another Graph to Add the Active Data to the Other Graph's Active Data

Utilice este icono para sumar dos conjuntos de datos, punto a punto. Los datos de origen (del panel en el que se ha hecho clic originalmente) se agregan a los datos de destino (el panel en el que se suelta el icono). El título de los datos en proceso de modificación se actualiza para indicar que se han modificado.

Nota: Solo se pueden agregar dos conjuntos de datos del mismo tipo. Por ejemplo, un espectro no puede agregarse a un cromatograma.

Nota: Si el gráfico de destino contiene más de un trazo superpuesto, de manera predeterminada los datos de origen se agregan solo a los datos de destino activos. Si se pulsa la tecla Ctrl, los datos de origen se agregan a todos los conjuntos de datos del destino.

Drag to Another Graph to Subtract the Active Data from the Target's Active Data

Utilice este icono para sustraer los datos de origen de los datos de destino. Este icono está indicado especialmente para sustraer el fondo de un espectro de masas.

Nota: Si el gráfico de destino contiene más de un trazo superpuesto, de manera predeterminada los datos de origen solo se sustraen de los datos de destino activos. Si se pulsa la tecla Ctrl, los datos de origen se sustraen de todos los conjuntos de datos del destino.

Sugerencia: Normalmente no se conservan los puntos de datos cuya intensidad en el origen es superior a la del destino. Eso significa que se descartan los valores y negativos. Si se pulsa la tecla Mayús, se conservan los puntos con intensidad negativa.

Drag to Another Graph to Overlay the Active Data in the Target Graph

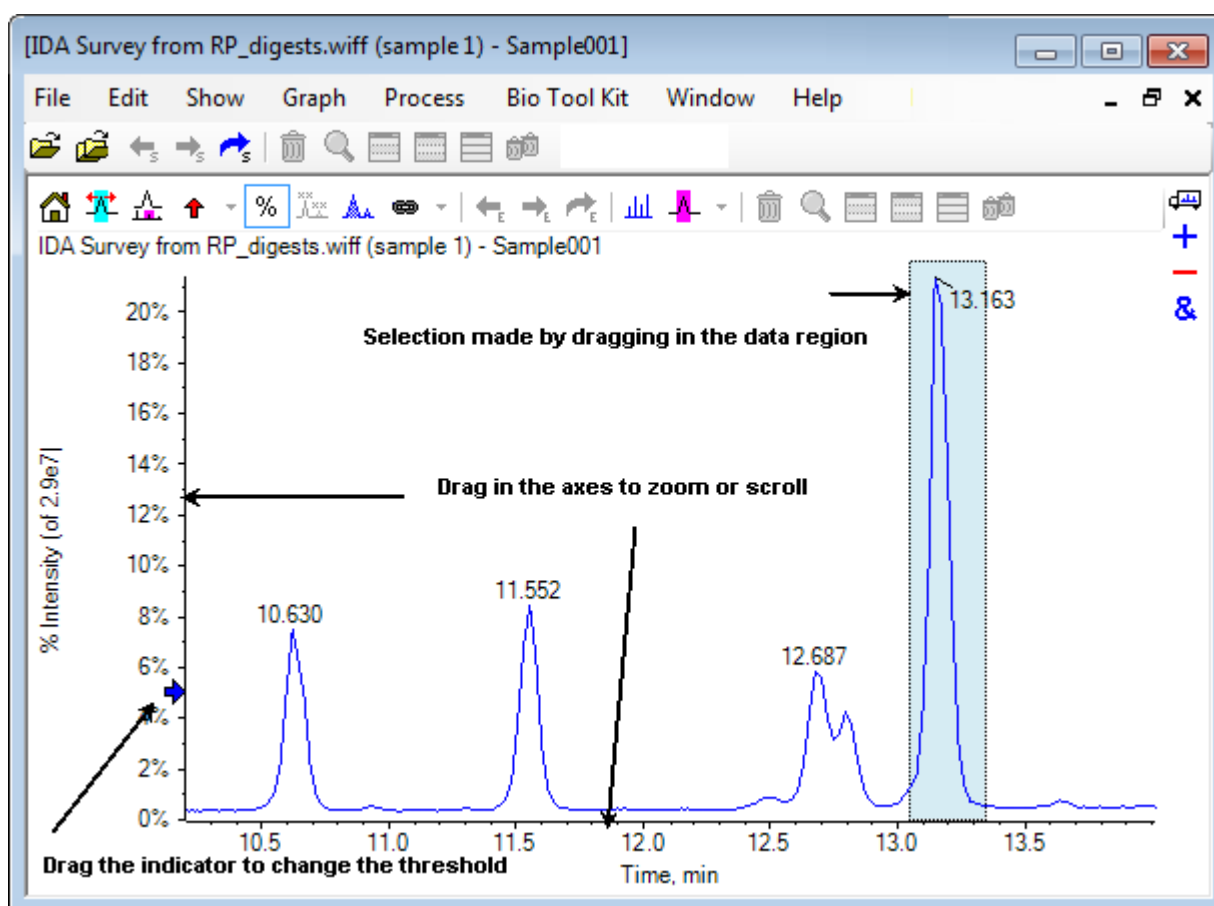
Utilice este icono para superponer los datos activos del gráfico de origen en el gráfico de destino. Una vez que la operación se ha completado, el gráfico de destino contiene una nueva serie con una copia de los datos de destino.

Nota: Si el gráfico de origen contiene más de un trazo superpuesto, de manera predeterminada, solo una copia de sus datos activos se mueve al gráfico de destino. Si se pulsa la tecla Ctrl, una copia de todos los conjuntos de datos del gráfico de origen se superpone sobre el gráfico de destino.

Graphs

Los gráficos son paneles que permiten la visualización e interacción de datos. Existen varias operaciones comunes para todos los gráficos, mientras que otras operaciones dependen del tipo de datos que se muestren.

Figura D-5: Graphs



Los comandos genéricos se resumen a continuación:














- Para aplicar zoom y desplazarse es necesario arrastrar el cursor en la región del eje x o y del gráfico. Al hacer doble clic se restablece el eje en el rango original y al hacer clic en el eje mientras se pulsa la tecla **Shift** se restaura la vista anterior del gráfico (se deshace la acción de zoom y desplazamiento).
- Arrastrando se puede posicionar un indicador de umbral. El umbral suele determinar los picos que se etiquetan y en ocasiones se utiliza para determinar los picos que se procesan.

Tutorial de Explorer

- Las selecciones se efectúan arrastrando en la región de datos. Las selecciones se utilizan para definir una parte de los datos que se puede utilizar o procesar. Puede seleccionar varias regiones pulsando la tecla **Shift** mientras arrastra. Pulse la tecla **Ctrl** para hacer selecciones tanto en el eje x como en el eje y.

Graph-Specific Toolbar

Tabla D-3: Iconos de Graph-Specific Toolbar

Icono	Nombre (información sobre la herramienta)
	Returns zoomed graph to home view
	Zooms selection to full view
	Show 'Zoom' graph (for tracking current zoom). Consulte Figura D-6 .
	Adds arrow markers for selected peaks
	Use percent y-axis.
	Label all overlaid traces
	Fill peaks
	Links graph's x-axis to others (with same units) in the window (mantenga pulsada la tecla Ctrl para que la acción se aplique a todos los gráficos actuales)
	Switches data to use previous experiment
	Switches data to use next experiment
	Switches data to use a selected experiment
	Displays a spectrum for selection
	Set background subtraction range

Nota: Los seis iconos finales de esta barra de herramientas, a partir del icono Deletes this pane, se describen en [Barra de herramientas genéricas de paneles](#).

Returns Zoomed Graph to Home View

Si se ha ampliado el gráfico, utilice este icono para volver a la vista inicial, es decir, la vista en la que tanto el eje x como el eje y muestran sus rangos predeterminados y todos los datos disponibles están visibles. Al hacer doble clic en el eje x, el gráfico vuelve a la vista inicial. Al hacer doble clic en el eje y, solo ese eje vuelve a su rango completo.

Zooms Selection to Full View

Utilice este icono para ampliar el gráfico de manera que la región seleccionada ocupe todo el espacio disponible. Antes de seleccionar este icono, arrastre el ratón dentro del gráfico para

hacer una selección. El usuario también puede ampliar arrastrando el ratón directamente en el eje x (o el eje y) del gráfico.

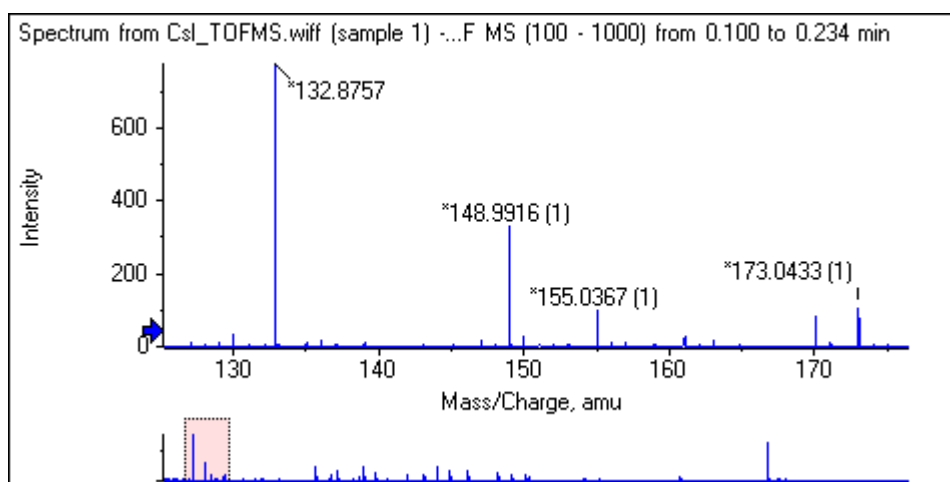
Show 'Zoom' Graph (for Tracking Current Zoom)

Utilice este icono para mostrar una copia pequeña del gráfico debajo del gráfico principal tal como se muestra en [Figura D-6](#). Esta vista global del gráfico muestra siempre el rango completo disponible e indica la región de ampliación del gráfico principal utilizando una selección rosa. A medida que se amplía el gráfico principal, esta selección se actualiza en consecuencia.

El gráfico principal se va desplazando según sea necesario a medida que se arrastra la selección de pico a una nueva ubicación. Arrastre cerca del extremo izquierdo o derecho de la selección para ajustar su anchura. En este caso, el gráfico principal se amplía según convenga.

Esta función es útil para espectros de masa de alta resolución porque con frecuencia es necesario ampliar muy de cerca para ver el detalle seleccionado. El gráfico de vista general permite al usuario realizar un seguimiento de la ubicación de la región ampliada con relación al rango de masas completo.

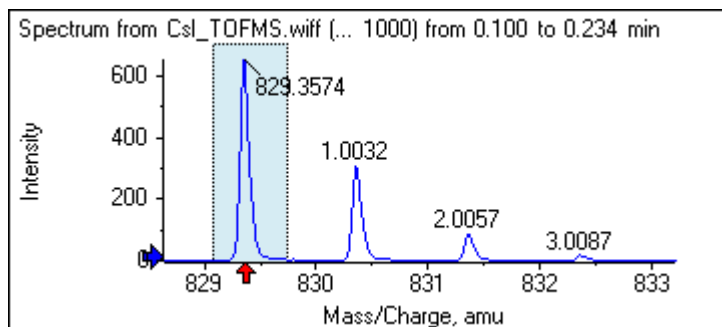
Figura D-6: Visualización del gráfico de vista general



Adds Arrow Markers for Selected Peaks

Utilice este icono para agregar un marcador de flecha al pico más grande en la región del gráfico seleccionada actualmente. [Figura D-7](#) muestra el resultado de hacer clic en este icono cuando se selecciona el pico 829 (aproximadamente) tal como se muestra.

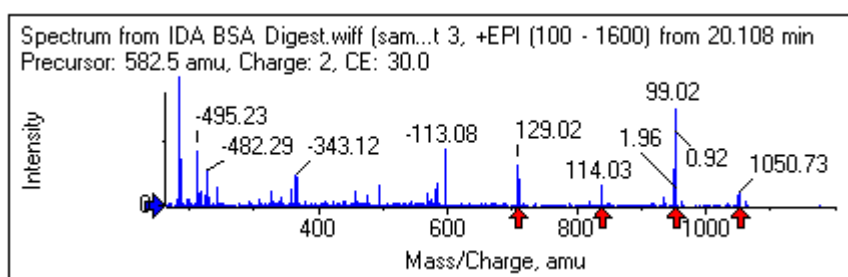
Figura D-7: Agregar un marcador de flecha



Las flechas actúan como puntos de referencia de los datos. De forma predeterminada, los picos que no están cerca de una flecha están marcados con su distancia respecto a la flecha más cercana. El pico situado cerca de la flecha con el mayor valor de x está marcado con su valor de x real. Los picos situados cerca de una flecha que no sea la última se etiquetan con relación a la flecha que tenga un valor x más alto. En [Figura D-7](#), el pico a 829 Da aproximadamente se etiqueta con su valor de m/z real y los picos de isótopo se etiquetan con su distancia a partir de ese pico. Los picos a la izquierda de la flecha (no se muestran) tendrían valores de etiqueta negativos.

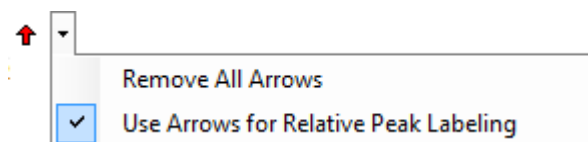
Las flechas se utilizan de forma más frecuente con espectros y proporcionan una forma cómoda de buscar diferencias de masa previstas, como isótopos, pérdidas neutras en espectros MS/MS, etc. [Figura D-8](#) muestra un espectro MS/MS de un péptido en el que se han agregado flechas en valores correspondientes a pérdidas neutras de residuos de aminoácidos. Por ejemplo, el pico con la etiqueta 99,02 podría ser una pérdida de valina del pico a 1050,73 Da; el siguiente pico con la etiqueta 114,03 podría ser una pérdida adicional de asparagina, etc. El pico con la etiqueta -113,08 puede ser una pérdida de leucina o isoleucina del pico con la etiqueta 129,02 (con una relación m/z real cercana a los 709 Da).

Figura D-8: Agregar varios marcadores de flecha



Si no utiliza ese etiquetado de picos relativo, desmarque el elemento de menú **Use Arrows for Relative Peak Labeling** que se muestra en [Figura D-9](#). En este caso, las flechas se utilizan para marcar picos que tienen un interés particular.

Figura D-9: Menú Add Arrow Marker



Los usuarios pueden arrastrar una flecha a una nueva ubicación. Si se arrastra la flecha al área del gráfico, se cancela la operación de arrastrar. Si el usuario arrastra la flecha fuera del gráfico, se elimina la flecha. Las flechas también se pueden eliminar seleccionando **Remove All Arrows** en el menú que se muestra en [Figura D-9](#).

Use Percent Y-axis

Este icono determina la escala del eje y. Cuando está seleccionado, los trazos superpuestos se escalan de manera que el valor máximo de cada trazo está al 100%. Conviene utilizar el eje y como porcentaje si las magnitudes absolutas de los trazos superpuestos son muy distintas.

Label all Overlaid Traces

De forma predeterminada, cuando se superponen varios trazos, solo se marca el trazo activo. Haga clic en este icono para etiquetar todos los trazos. Vuelva a hacer clic en el icono para eliminar todas las etiquetas y restaurar la vista original.

Fill Peaks

Haga clic en este icono para rellenar los picos de los datos activos utilizando patrones de relleno oscuros y claros alternativamente. Esta función es útil para ver el inicio y el final exacto de los picos. Vuelva a hacer clic en el icono para eliminar el patrón de relleno y restaurar la vista original.

Links Graph's X-axis to Others (With Same Units) in the Window

Los ejes de dos o más gráficos se pueden vincular de manera que, cuando se amplíe un eje en un gráfico, los demás se ajusten automáticamente para mostrar el mismo rango. Esta función puede resultar útil para comparar los datos de esos gráficos. Una alternativa es superponer los conjuntos de datos en el mismo gráfico. Sin embargo, esto no es siempre lo deseable.

Haga clic en el icono **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** en cada uno de los gráficos que tengan que vincularse. Si se pulsa la tecla **Ctrl** mientras se hace clic en el icono, se vinculan todos los gráficos actuales con las mismas unidades de eje x en la misma ventana que el gráfico activo. Por ejemplo, si hay visibles tres espectros y se hace clic en **Ctrl +** en el icono **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** en uno de ellos, los tres espectros se vinculan entre sí.

Nota: En este ejemplo, si posteriormente se genera un nuevo espectro, no se vincula con los demás. Para vincular el nuevo espectro, haga clic en el icono **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** asociado.

Tutorial de Explorer

De forma predeterminada, solo se vinculan los ejes x de gráficos. En este caso, cuando se amplía manualmente un gráfico, los demás amplían el eje y automáticamente de manera que los picos situados dentro de la vista ocupen el espacio disponible.

Para desvincular un gráfico vinculado, haga clic en el icono **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** en el gráfico adecuado. Pulse la tecla **Ctrl** mientras lo hace para desvincular todos los gráficos con las mismas unidades de eje x en la misma ventana.

Switches Data to Use Next Experiment

Si los datos activos del gráfico están asociados con un experimento específico distinto del último, este icono sustituye los datos por datos del mismo tipo pero del experimento siguiente.

Por ejemplo, si el TIC del experimento 2 está activo, haga clic en este icono para cambiar al TIC del experimento 3. Si un espectro de un tiempo concreto está activo para el experimento 2, haga clic en este icono para cambiar a un espectro del mismo tiempo del experimento 3.

Switches Data to Use Previous Experiment

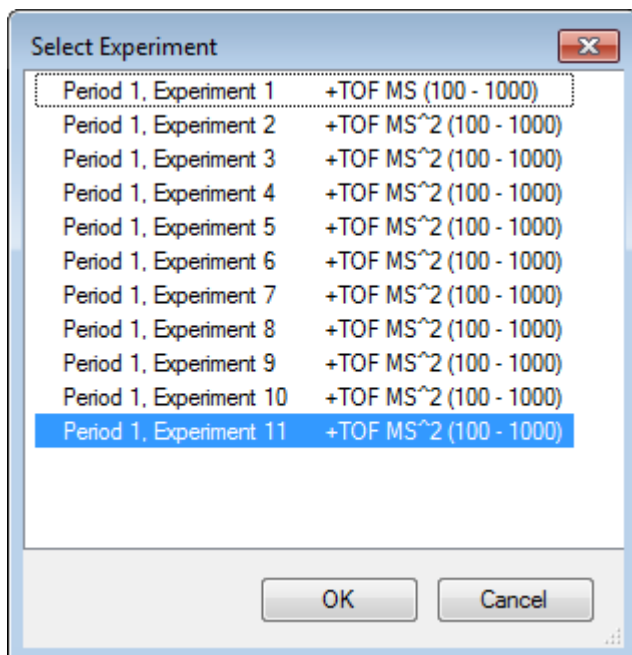
Si los datos activos del gráfico están asociados con un experimento específico distinto del primero, este icono sustituye los datos por datos del mismo tipo pero del experimento anterior.

Por ejemplo, si el TIC del experimento 3 está activo, haga clic en este icono para cambiar al TIC del experimento 2. Si un espectro de un tiempo concreto está activo para el experimento 3, haga clic en este icono para cambiar a un espectro del mismo tiempo del experimento 2.

Switches Data to Use a Selected Experiment

Utilice este icono para seleccionar un experimento específico a utilizar en lugar de tener que desplazarse por los experimentos uno a uno. Haga clic en el icono para abrir un cuadro de diálogo que enumera todos los experimentos disponibles. Se resalta la muestra activa. Haga clic en un experimento de la lista para seleccionarlo y, a continuación, haga clic en **OK**. Consulte [Figura D-10](#).

Figura D-10: Cuadro de diálogo Select Experiment



Displays a Spectrum for Selection


Utilice este icono para generar un promedio de espectro de masas a lo largo del intervalo de tiempo de la selección actual en el gráfico. Se puede obtener el mismo resultado haciendo doble clic dentro de la selección.

Set Background Subtraction Range

Utilice este icono para efectuar una sustracción automática del fondo en los espectros generados a partir del cromatograma.

Spectrum-Specific Toolbar

Tabla D-4: Iconos de Spectrum-Specific Toolbar

Icono	Nombre (información sobre la herramienta)
	Displays an XIC for selection

Nota: Los primeros once iconos de esta barra de herramientas, a partir del icono Returns zoomed graph to home view, se describen en [Graph-Specific Toolbar](#).

Nota: Los seis iconos finales de esta barra de herramientas, a partir del icono Deletes this pane, se describen en [Barra de herramientas genéricas de paneles](#).

Displays an XIC for Selection

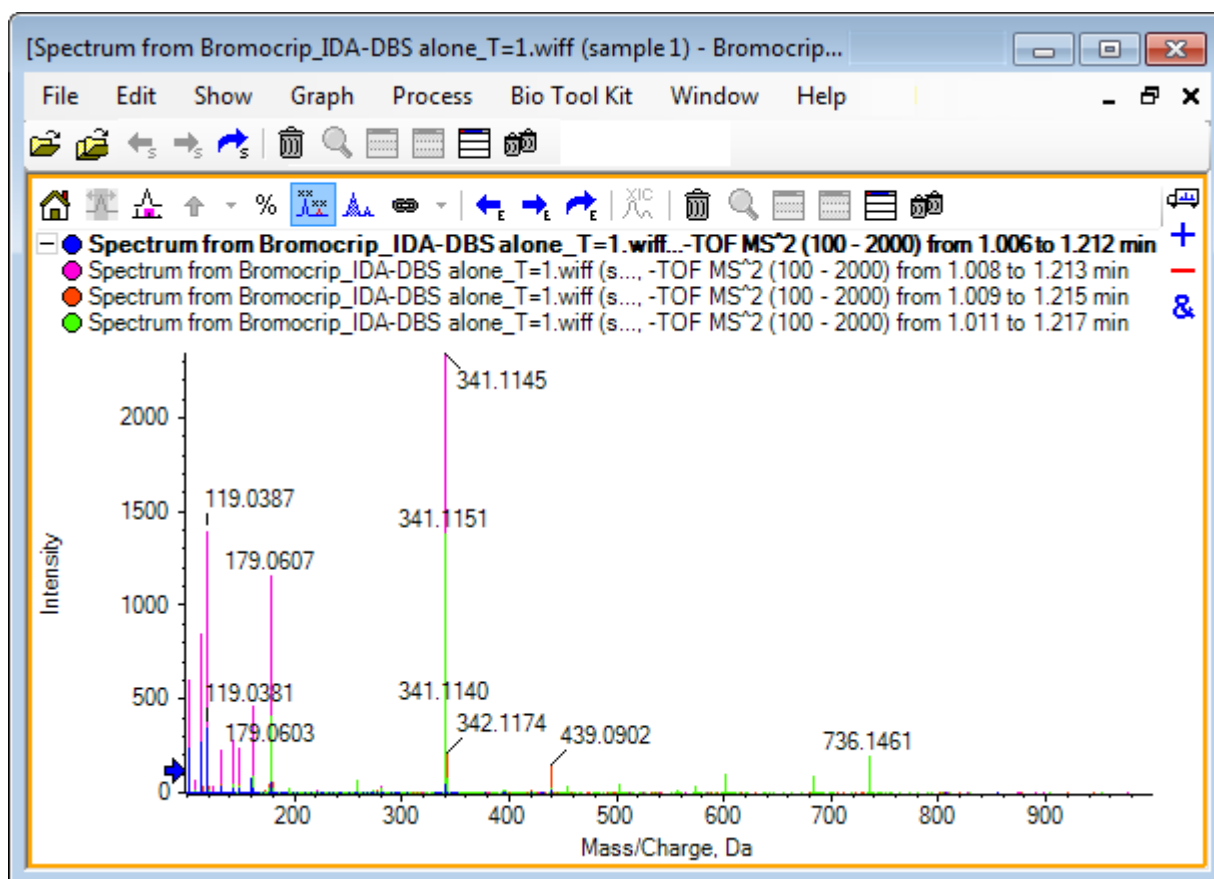
Utilice este icono para generar un cromatograma de iones extraídos (XIC) sumado al rango de masa de la selección actual en el gráfico.

Superposiciones

Los gráficos pueden contener distintos trazos, denominados superposiciones, que comparten los mismos ejes para poderlos comparar con facilidad. Se pueden generar arrastrando el icono de dos paneles adecuado (el icono **Drag to another graph to overlay the active data in the target graph**) y se crean automáticamente con algunos comandos de creación de panel. Consulte [Chromatograms and Spectra](#).

En [Figura D-11](#), el gráfico contiene cuatro espectros con el icono **Label all overlaid traces** seleccionado. La región de encabezado del gráfico muestra los títulos de los dos espectros y círculos de color que indican el color del trazo. El trazo activo se muestra en negrita. Este trazo es el objetivo de las operaciones de procesamiento, como pueden ser datos de umbral, suavizado, etc., y suele ser el único etiquetado. Al hacer clic en el icono situado a la izquierda del título, el icono cambia y solo se representa el título del trazo activo. Esta función es útil cuando hay muchas superposiciones. Vuelva a hacer clic en el icono para revertir el proceso. Si hay muchos trazos y se mueve el cursor sobre los títulos, el cursor pasa a tener forma de flecha de doble punta que funciona como una barra de desplazamiento cuando se arrastra para poder acceder a todos los títulos.

Figura D-11: Gráfico que contiene cuatro espectros con el icono Label all Overlaid Traces seleccionado



Existen varias maneras de cambiar de trazo activo:

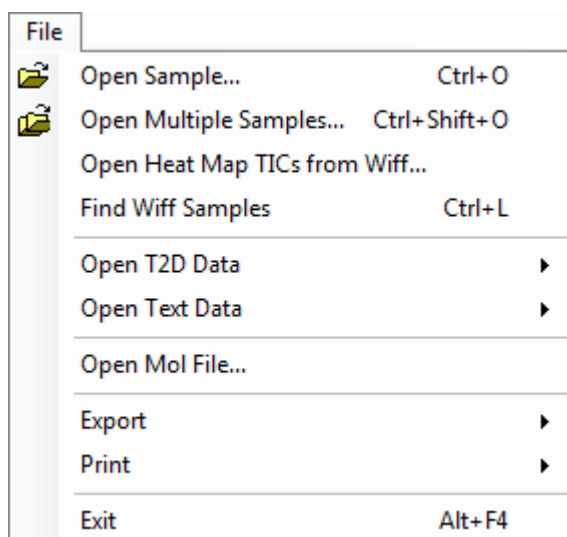
- Hacer clic en el círculo de color situado junto al título.
- Hacer clic en el propio título.
- Hacer clic en un punto de datos del trazo (no en el propio trazo).

Al hacer clic con el botón derecho del ratón en un gráfico con superposiciones, se muestra un menú contextual que contiene comandos que se pueden usar para editar visualmente los trazos mostrados. Las opciones **Remove Active Trace** y **Remove All Traces Except Active** funcionan de la manera esperada.

Open Files

Como se muestra en [Figura D-12](#), el software puede abrir distintos tipos de archivos de datos y dispone de comandos para abrir una o varias muestras.

Figura D-12: Menú File

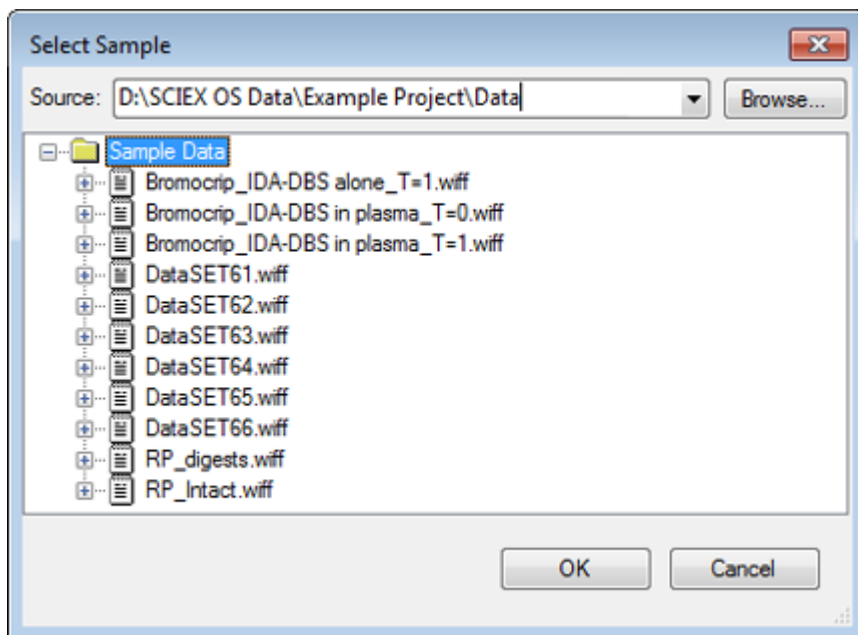


Abrir un solo archivo de muestra

La opción **Open Sample** abre el cuadro de diálogo **Select Sample**. Consulte [Figura D-13](#).

Este cuadro de diálogo permite seleccionar un solo archivo. La vista resultante depende del comando seleccionado, con un archivo .scan que muestra un espectro o un cromatograma de iones totales (TIC), y varios archivos .wiff de análisis que muestran un TIC (la suma de todos los experimentos si hay más de uno).

Figura D-13: Cuadro de diálogo Select Sample



Haga clic en el icono situado a la izquierda del archivo .wiff para que se visualicen todas las muestras en el archivo y, a continuación, seleccione el nombre de archivo que corresponda. Si hay más de una muestra en el archivo, seleccione el nombre del archivo y haga clic en **OK**.

Open Multiple Sample Files

Las opciones **Open Multiple Samples** y **Open Heat Map TICs from Wiff** abren el cuadro de diálogo **Select Samples**. Consulte [Figura D-14](#).

El panel izquierdo corresponde al cuadro de diálogo **Open** que permite navegar por las carpetas y especificar archivos, y el panel derecho indica los archivos que se abrirán al hacer clic en **OK**. Las muestras se pueden transferir de izquierda a derecha como se indica a continuación:

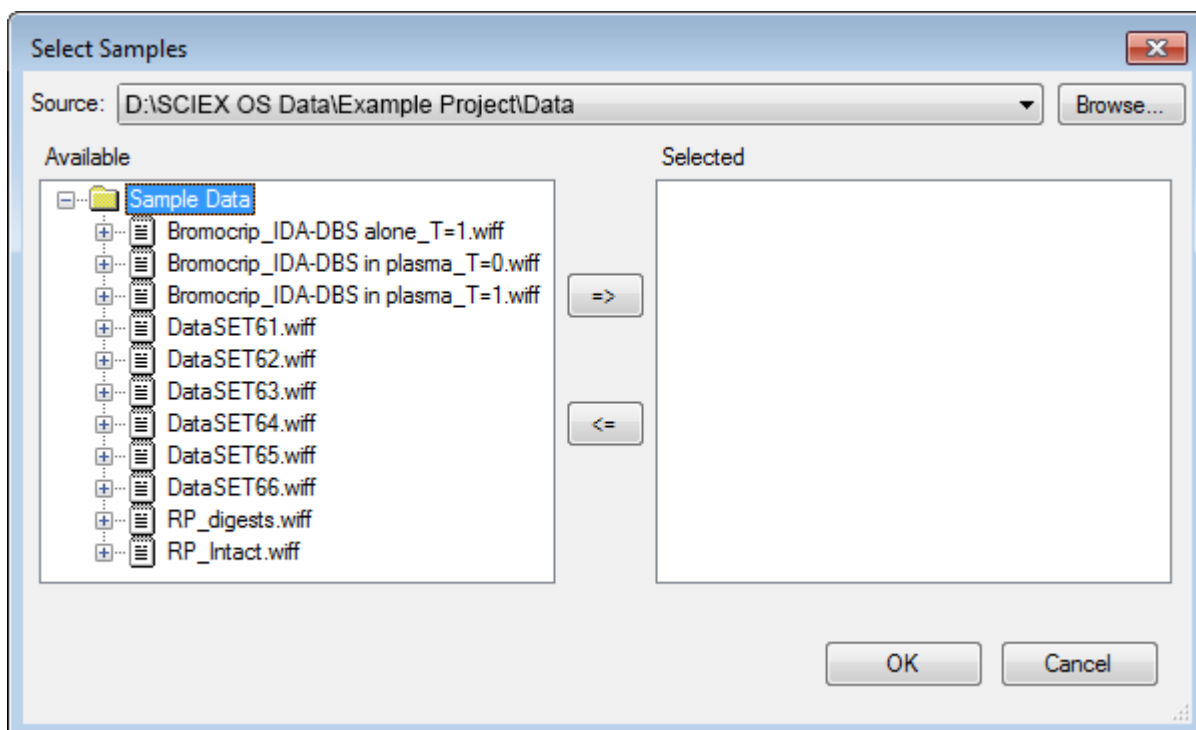
- Expanda el archivo wiff, seleccione la muestra y, a continuación, haga clic en la flecha que apunta a la derecha.
- Expanda el archivo wiff, seleccione la muestra y, a continuación, arrástrela al panel derecho.
- Expanda el archivo wiff y, a continuación, haga doble clic en la muestra.

Si el archivo contiene varias muestras, se pueden transferir todas seleccionando el archivo wiff y haciendo clic en la flecha que apunta a la derecha, o bien seleccionando el archivo .wiff y, a continuación, arrastrándolo al panel derecho.

Las muestras se pueden transferir de derecha a izquierda como se indica a continuación:

- Expanda el archivo wiff, seleccione la muestra y, a continuación, haga clic en la flecha que apunta a la izquierda.

- Expanda el archivo wiff, seleccione la muestra y, a continuación, arrástrela al panel izquierdo.
- Haga doble clic en la muestra.

Figura D-14: Cuadro de diálogo Select Sample

Chromatograms and Spectra

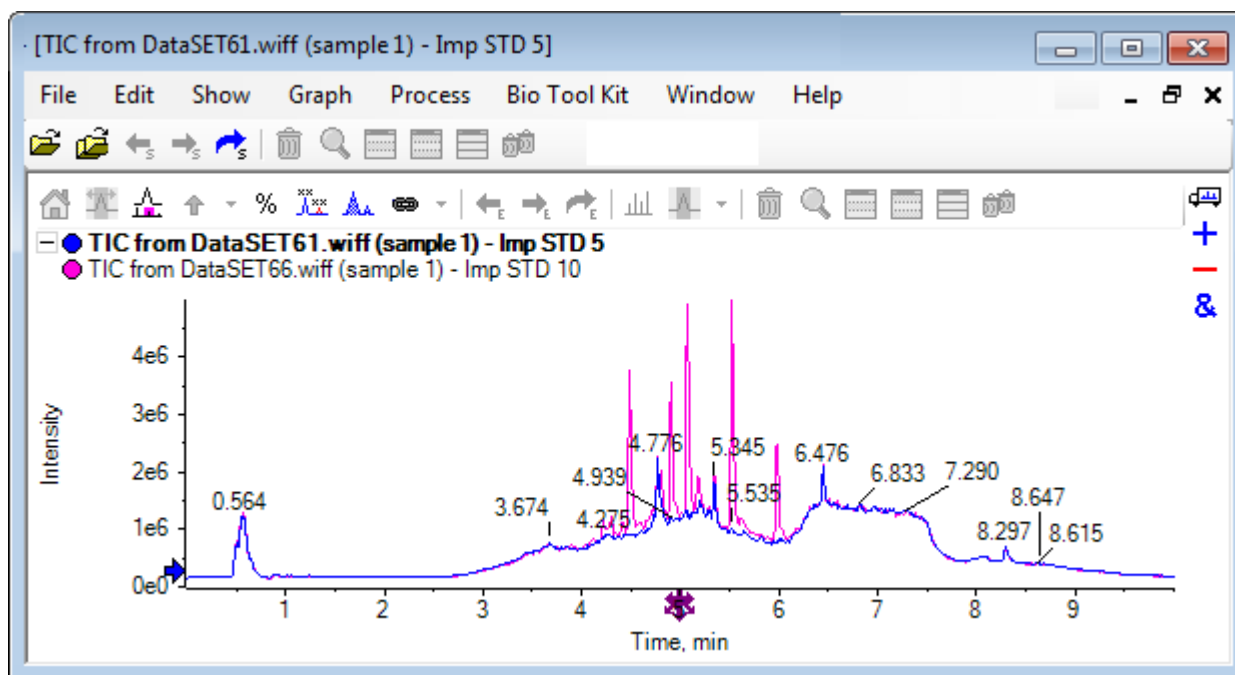
El cromatograma de iones totales (TIC), los espectros y el cromatograma de iones extraídos (XIC) son las vistas de datos que más se usan para explorar y revisar datos. El software proporciona enlaces entre esas vistas de datos para que los usuarios puedan generar con rapidez espectros y, a continuación, XIC con el fin de determinar si los picos de los espectros proceden de uno o varios picos cromatográficos.

Total Ion Chromatogram (TIC)

Se trata de la vista predeterminada que se muestra cuando se abre un archivo wiff de uno o varios análisis. El TIC mostrado corresponde a un cromatograma generado sumando las intensidades de todos los iones de cada espectro y, a continuación, representando la suma como función de tiempo de retención.

Si la muestra se ha adquirido utilizando experimentos en bucle, el TIC mostrado corresponde a las sumas de intensidad de los dos experimentos, y se dibuja un indicador especial en forma de flecha en el eje x para indicarlo. Consulte [Figura D-15](#). Si se hace doble clic en el indicador, aparece un nuevo panel que muestra los TIC individuales superpuestos para cada experimento.

Figura D-15: TIC



Si la muestra contiene datos IDA, seleccione el explorador de IDA, que es una manera gráfica de visualizar la masa y los tiempos de retención de los precursores seleccionados, o un TIC convencional. Si selecciona la opción de TIC convencional, se mostrarán TIC independientes para el estudio de IDA y la suma dependiente de IDA.

Puede visualizar el TIC en cualquier momento haciendo clic en **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)** para abrir un cuadro de diálogo que permite la selección de cualquier experimento. Si se selecciona Period 1, se muestra el TIC de todos los experimentos, mientras que las otras entradas corresponden a TIC individuales. Utilice **Shift+** o haga clic mientras pulsa **Ctrl+** para seleccionar más de uno.

Espectros

Si un archivo solo contiene un espectro, ese espectro se muestra al abrir el archivo.

En el caso de datos con varios análisis, debe obtener los espectros de los cromatogramas haciendo una selección en el cromatograma y haciendo doble clic dentro de este, o haciendo clic en el icono **Displays a spectrum for selection**. Arrastre el rectángulo de selección en el cromatograma para actualizar el espectro a fin de que se muestre la nueva región.

Puede seleccionar varias regiones pulsando la tecla **Shift** después de completar la primera selección. Haga doble clic en cualquiera de esas selecciones o haga clic en el icono **Displays a spectrum for selection** para generar un nuevo panel de espectro con los espectros superpuestos.

En el caso de IDA, aparece una solicitud para superponer todos los espectros dependientes o mostrar solo el primer espectro. En este último caso, utilice las teclas de flecha izquierda y derecha para visualizar los demás espectros.

Nota: Este cuadro de diálogo presenta una casilla Only show again if the shift key is down.

Los espectros con fondo sustraído se generan de dos maneras:

- Se pueden generar espectros independientes para las regiones de pico y fondo y, a continuación, arrastrar el icono de sustracción de dos paneles del espectro de fondo al espectro de pico.
- Defina una región de fondo haciendo una o dos selecciones en el cromatograma y, a continuación, haciendo clic en el icono **Set background subtraction range**. De los espectros generados al definir una región de fondo se sustrae automáticamente el fondo. La región de fondo se muestra en el cromatograma como rectángulo de selección de color rojo claro y tanto esta como las selecciones de espectro se pueden mover para cambiar los datos que se muestran. Cuando se define una región de fondo, esta se puede eliminar haciendo clic en la flecha situada junto al icono y seleccionando **Clear Subtraction Range**.

Nota: Los marcadores de flecha son útiles en los espectros porque las etiquetas de pico pueden ser relativas al pico más cercano marcado con una flecha, lo cual permite determinar con rapidez las masas de las pérdidas o los aductos. Si hay varias superposiciones y se selecciona el icono Label all overlaid traces, cada superposición se etiqueta con relación a la flecha.

Extracted Ion Chromatogram (XIC)

Los XIC se pueden generar de dos maneras:

- Haciendo clic en **Show > Extracted Ion Chromatogram (XIC)**.

Esta acción abre un cuadro de diálogo donde se pueden escribir masas de inicio y de parada o valores de centro y anchura, en función del modo. Esto se puede cambiar en el menú contextual que se abre haciendo clic con el botón derecho del ratón en el cuadro de diálogo. El menú contextual también proporciona acceso a comandos útiles, como el de establecer una anchura predeterminada e importar o exportar la lista de masas. Los usuarios también pueden convertir los valores de masa en persistentes para que se usen automáticamente hasta que se eliminen.

- Haciendo una o varias selecciones en un espectro y, a continuación, haciendo doble clic en una de ellas o haciendo clic en el icono **Displays an XIC for selection**.

Estas acciones generan un XIC correspondiente a cada selección. De manera predeterminada, el programa determina el pico más grande en cada rango de selección y establece automáticamente el XIC para que se corresponda con los valores de masa baja y alta a media altura del pico. Si se pulsa la tecla **Ctrl**, se utiliza toda anchura de la selección.

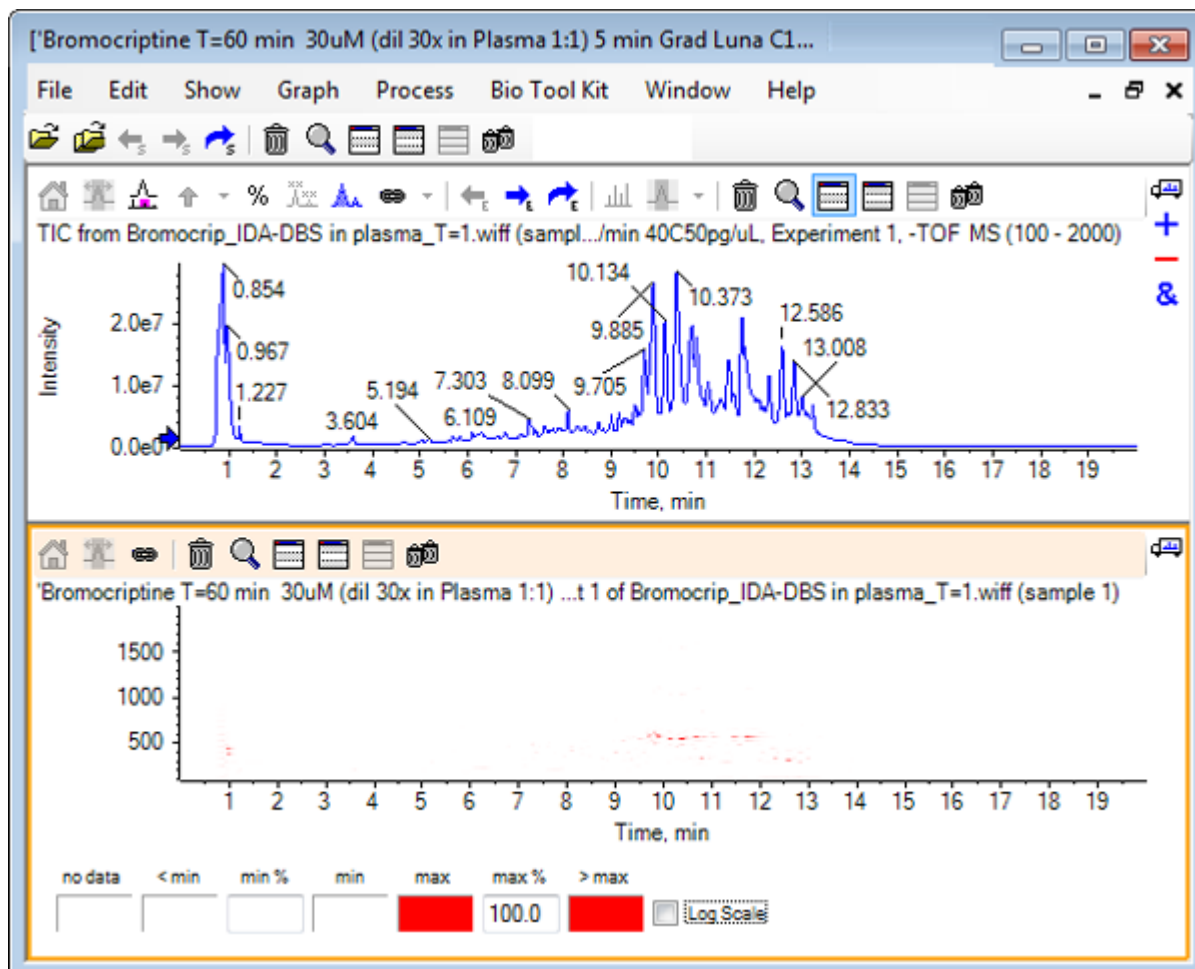
En ambos casos, se muestra un gráfico que contiene una superposición para cada selección. Las selecciones se convierten en vínculos. Al arrastrar los vínculos se actualizan los XIC.

Nota: Los XIC, por lo general, se calculan y se muestran para todo el rango cromatográfico, una acción que puede resultar lenta sobre todo si hay varias selecciones y los datos proceden de un instrumento de alta resolución y contienen muchos análisis. Una función útil es limitar los rangos de XIC a una ventana más pequeña alrededor del tiempo de retención del espectro utilizado para generarlos. Esto puede establecerse desde la pestaña XIC del cuadro de diálogo que se muestra después de hacer clic en la pestaña **Edit > Options > XIC**.

Contour Plots and Heat Maps

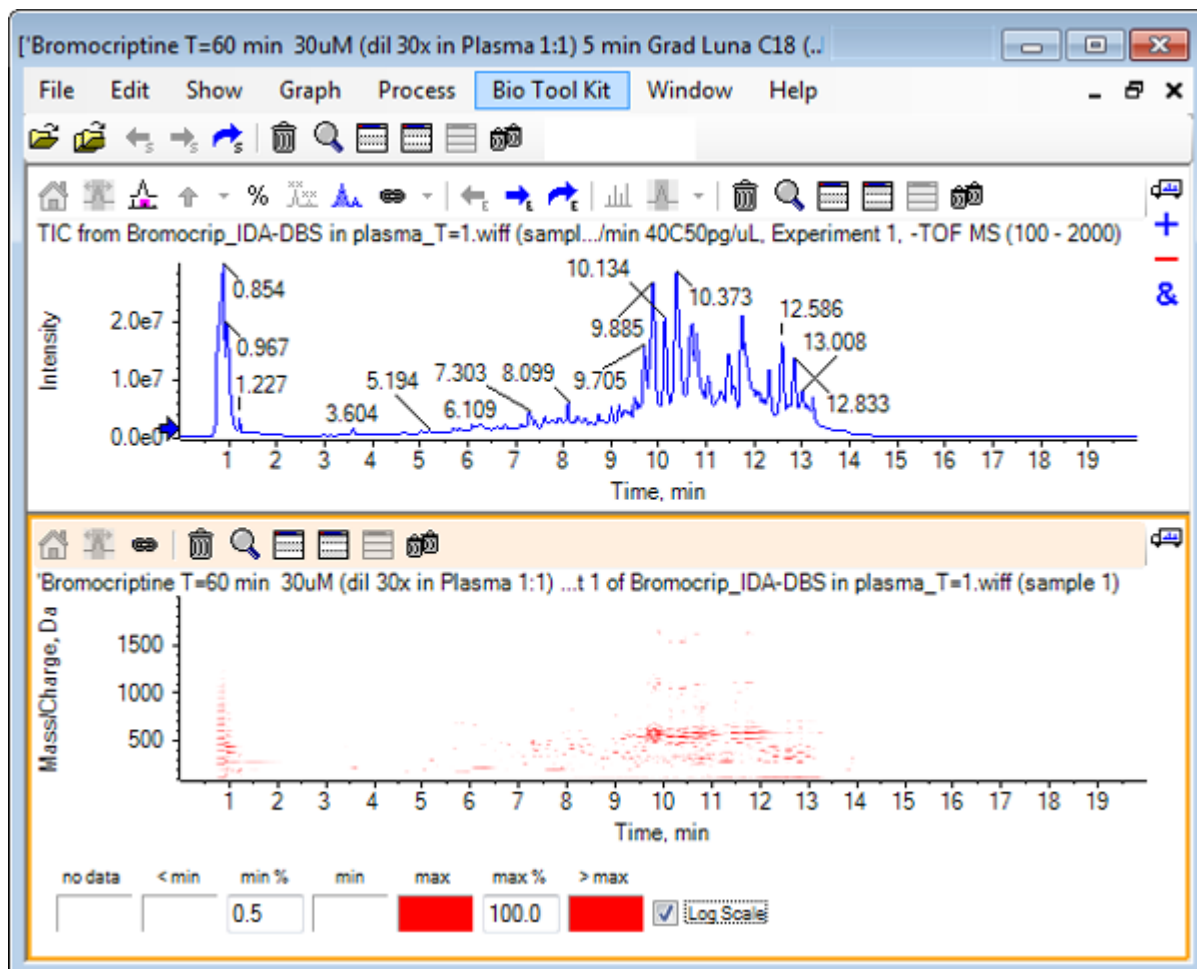
Un gráfico de contorno de LC/MS (**Show > LC/MS Contour Pane**) muestra todos los datos de una muestra de LC/MS en un solo panel. El ejemplo en [Figura D-16](#) muestra un TIC y el mapa de contorno correspondiente, que muestra los datos como mapa de la relación m/z con respecto al tiempo de retención con la intensidad codificada por colores. En este caso, los controles de los colores también se muestran, pero se pueden ocultar haciendo clic con el botón derecho del ratón en la vista y desmarcando la opción **Show Appearance Controls**. Puesto que los gráficos de contorno y los cromatogramas tienen el mismo eje x, pueden vincularse entre sí para que, al ampliar la imagen y al desplazarse, las dos vistas se representen de manera similar a fin de poder compararlas.

Figura D-16: TIC y mapa de contorno correspondiente



El control de colores utiliza una paleta de 256 colores para mostrar las intensidades en el rango definido por **min %** y **max %**. Las intensidades por debajo de **min %** se dibujan utilizando **< min** y las que están por encima de **max %** se dibujan utilizando **> max**. Si los colores usados para **< min** y para indicar la ausencia de datos son los mismos (como sucede aquí), los puntos de datos por debajo de **min %** desaparecen. De esta manera se fijan umbrales visuales que pueden simplificar el gráfico, como se muestra en la [Figura 1-11](#), donde el valor de **min %** se ha incrementado a un 0,5%. Para obtener más información sobre los controles de los colores, consulte la *Guía del usuario del sistema*.

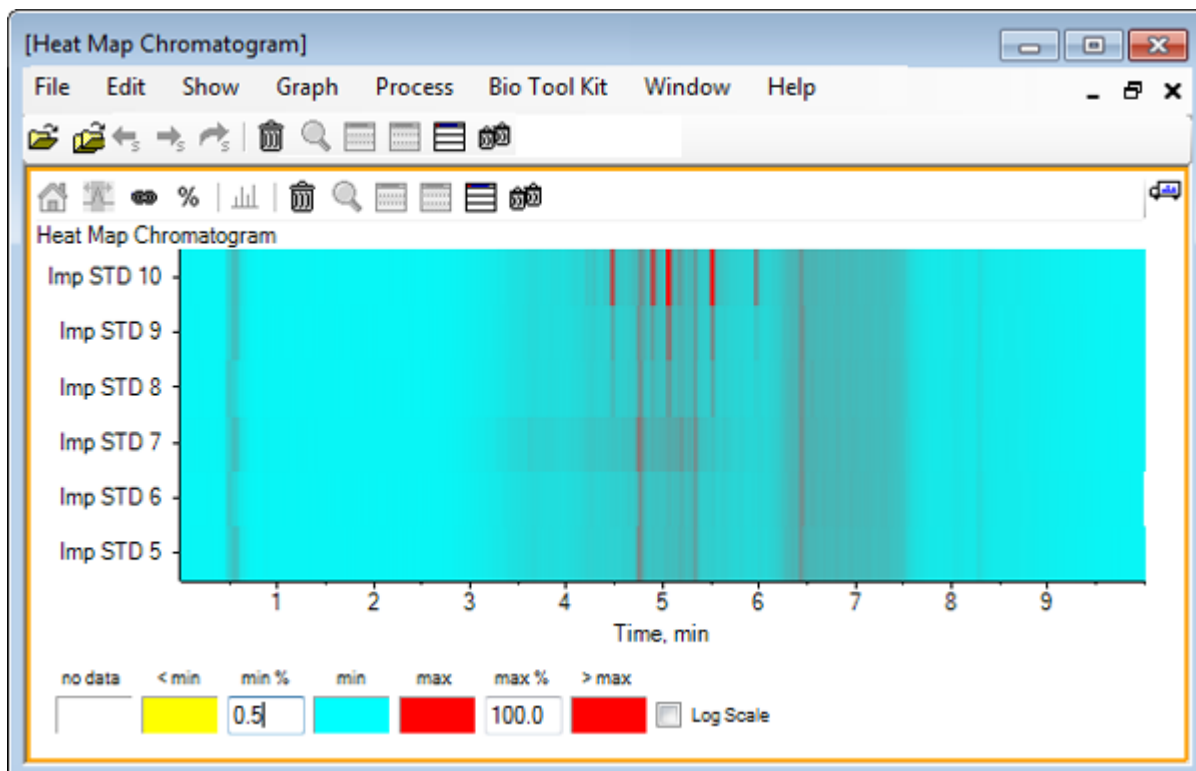
Figura D-17: Mapa de contorno con valor de % mín. incrementado al 0,5%



Los picos de baja intensidad se pueden enfatizar reduciendo **max %** para que la paleta de colores cubra un rango de intensidad más pequeño, pero todos los picos que superen ese valor tengan el mismo color. Eso también se puede enfatizar seleccionando la casilla **Log Scale**. La activación de **Log Scale** requiere un valor para **min %** que no sea cero (por ejemplo, 1 o 0,1) y, a continuación, se asignan los colores al logaritmo de la intensidad porcentual.

Las herramientas de visualización de varias muestras en el software ofrecen la capacidad de mostrar los TIC, los XIC y los espectros de varias muestras como una serie de mapas de calor individuales, lo cual puede resultar de ayuda en la comparación de las muestras. [Figura D-18](#) corresponde a una serie de cromatogramas TOF de seis analitos. Consulte [Work with Multiple Samples](#).

Figura D-18: Cromatograma de mapa de calor



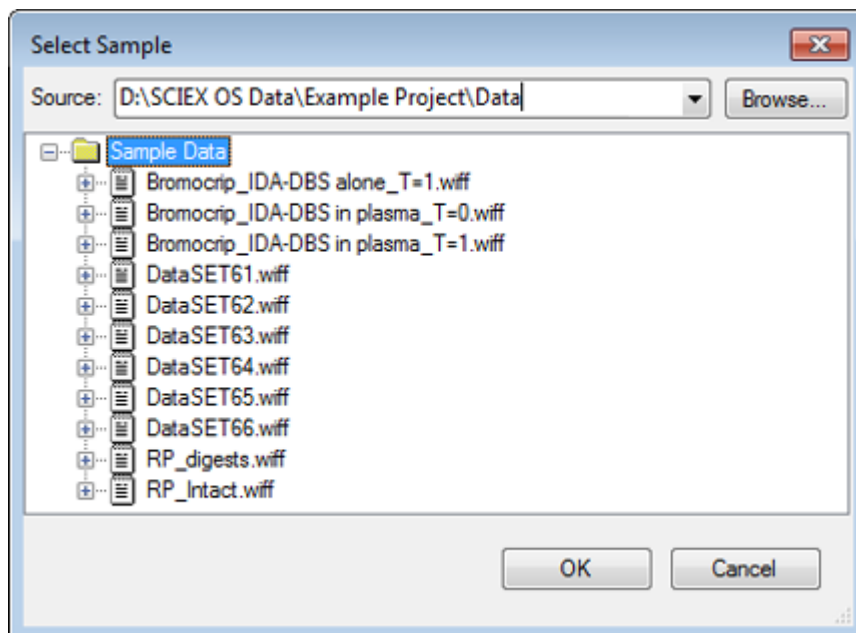
Work with Chromatograms and Spectra

En esta sección se describen algunas de las opciones de procesamiento más habituales. El archivo utilizado es un archivo IDA con varios experimentos en bucle, pero en este ejemplo se utiliza el primer experimento de estudio, que simula un análisis LC/MS simple. En la sección siguiente se analizan las funciones IDA.

Abrir un archivo de datos

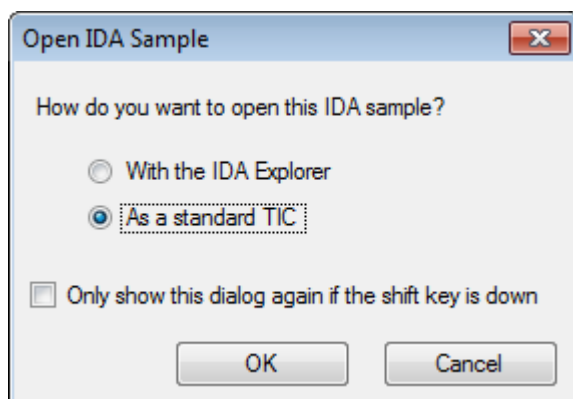
1. Haga clic en el icono **Open Sample** en la barra de herramientas principal. Se abre el cuadro de diálogo **Select Sample**.

Figura D-19: Cuadro de diálogo Select Sample



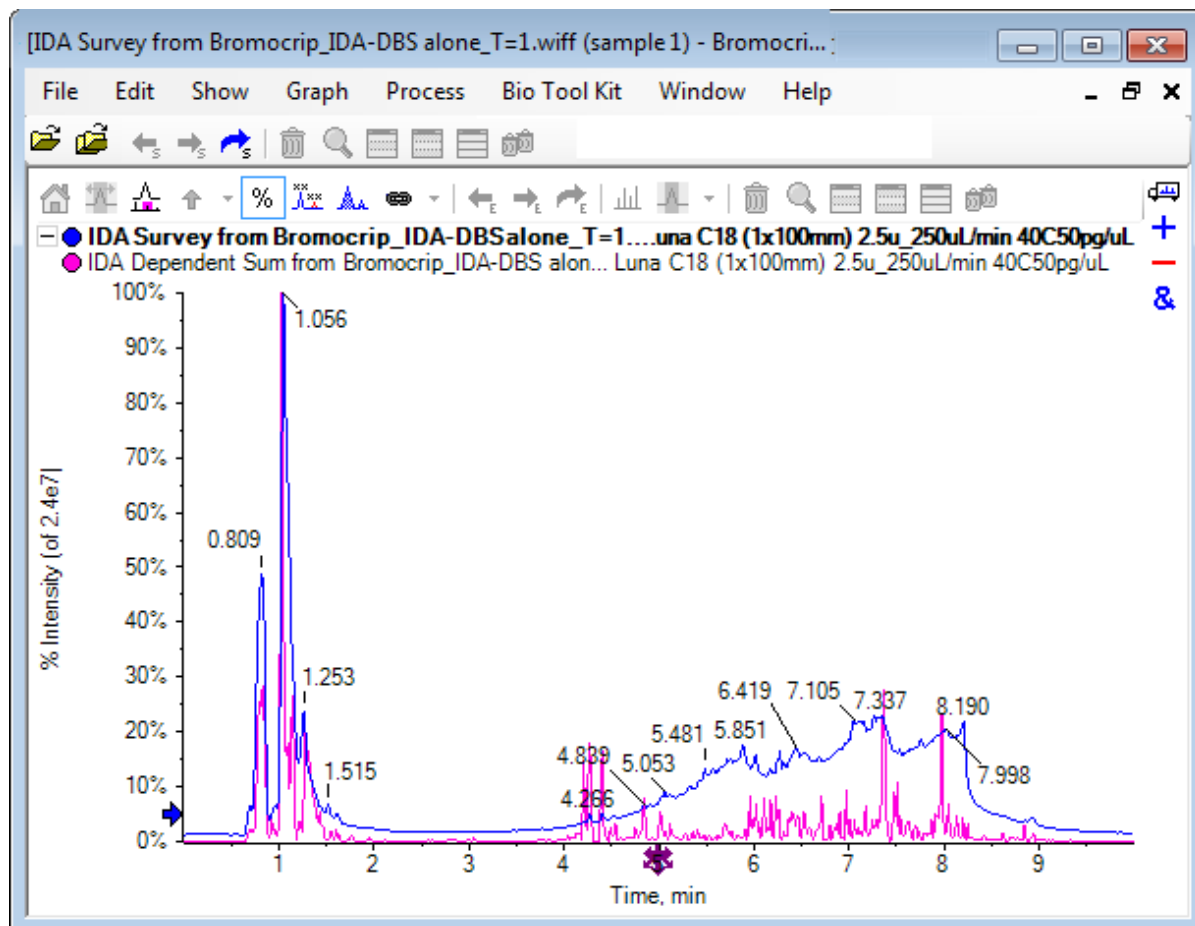
2. Si la carpeta **Sample Data** no está ya seleccionada, haga clic en **Browse** y acceda a la carpeta **Sample Data**. Para obtener información sobre las ubicaciones de instalación de los archivos de datos, consulte [Organización](#).
3. Para ver todas las muestras del archivo, haga clic en el icono situado a la izquierda del archivo **Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff**. Solo hay una muestra en el archivo **Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff**.
4. Seleccione el nombre de la muestra y, a continuación, haga clic en **OK**. Puesto que se trata de un archivo IDA, el software le solicita que especifique cómo abrir la muestra seleccionada.

Figura D-20: Abrir una muestra IDA



5. Haga clic en **As a standard TIC** si no se ha seleccionado aún y, a continuación, haga clic en **OK** para generar el TIC que se muestra en [Figura D-21](#).

Figura D-21: TIC



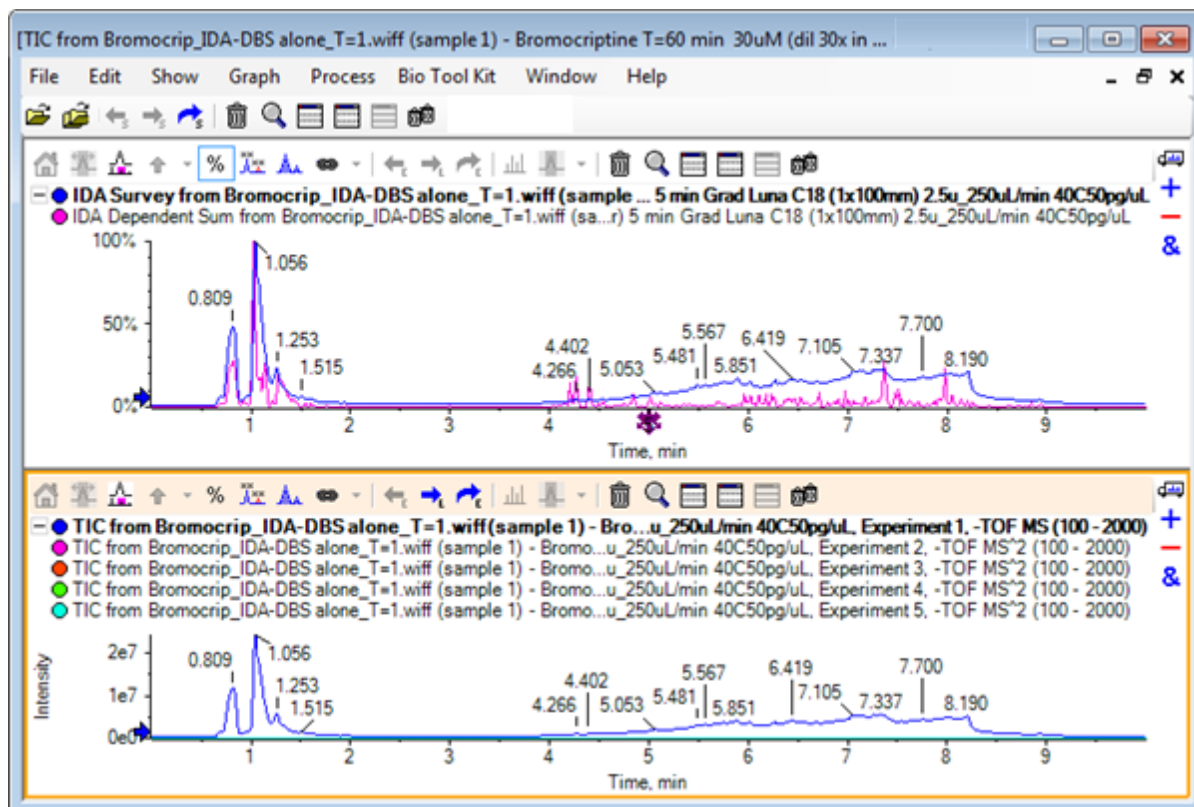
El panel tiene una superposición para el TIC de análisis de estudio (azul) y otra para los análisis dependientes (ion producto) sumados. En este caso, deseamos procesar los datos de estudio para mostrar el TIC de estudio solo.

Show the TIC for One Experiment

1. Haga doble clic en el icono **Double-click to overlay individual TICs for all experiments** en el centro del eje x para generar TIC superpuestos para todos los experimentos.

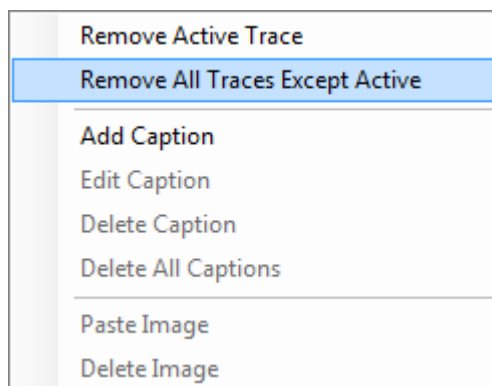
El nuevo cromatograma se convierte en el panel activo. Además, puesto que el estudio es el primer experimento, es el trazo activo, como indica el título en negrita en el encabezado.

Figura D-22: TIC superpuestos



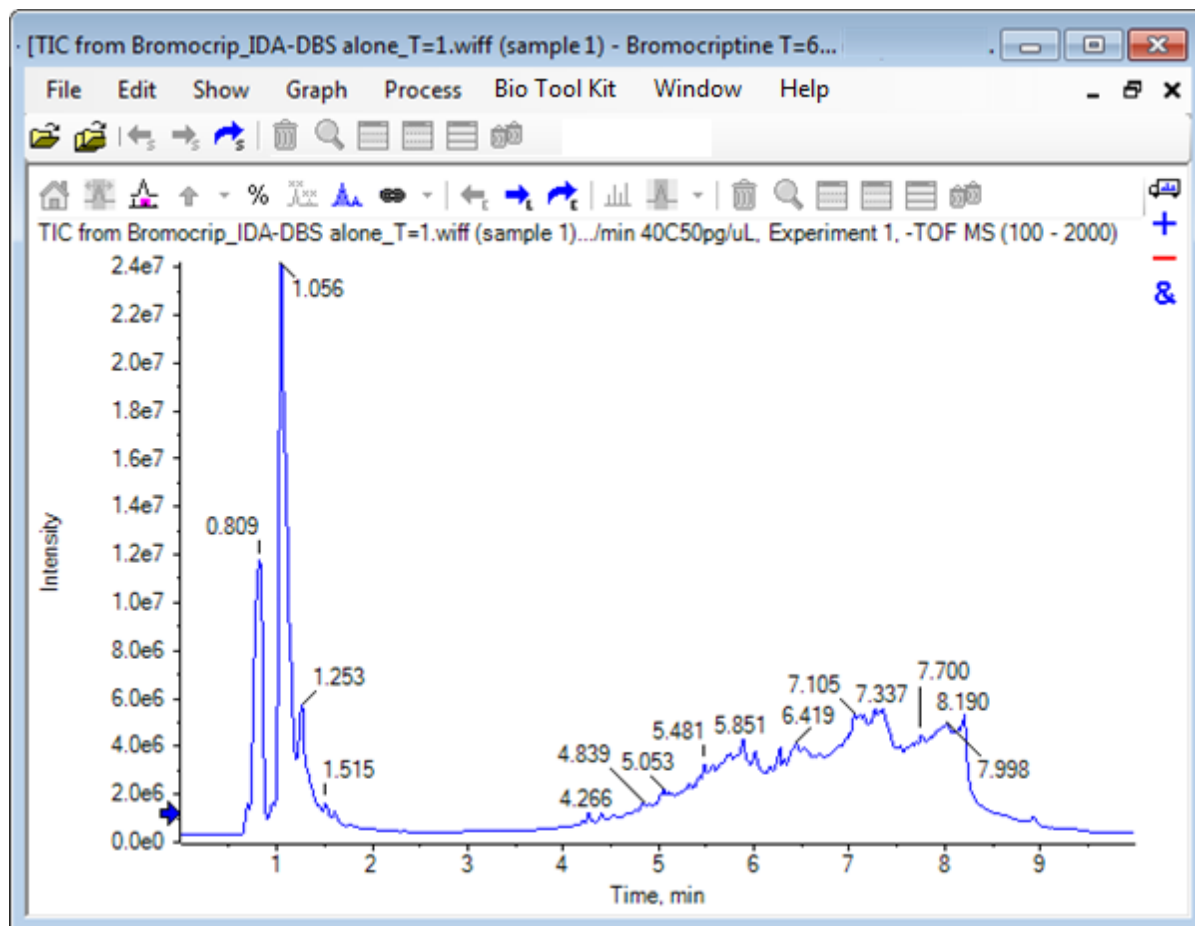
- Haga clic con el botón derecho del ratón dentro del panel de cromatograma activo y, a continuación, haga clic en **Remove All Traces Except Active** para que solo permanezca el TIC de estudio.

Figura D-23: Menú contextual



- En el mismo panel, haga clic en el icono **Deletes all other panes** para dejar solo el TIC de estudio.

Figura D-24: TIC de estudio



Show an XIC for a Known Molecular Formula

Aunque aparentemente los picos pequeños son patentes en el rango de 4 a 7 min, es posible que muchos queden oscurecidos por la señal de fondo, que es bastante intensa en esos datos. Puesto que esta muestra corresponde a una incubación microsomal de bromocriptina, utilice la relación m/z del ion molecular esperado como guía inicial para la ubicación del pico. La fórmula molecular de la bromocriptina es $C_{32}H_{40}N_5O_5Br$ y, puesto que se trata de datos de modo negativo, se espera ver un ion $(M - H)^-$.

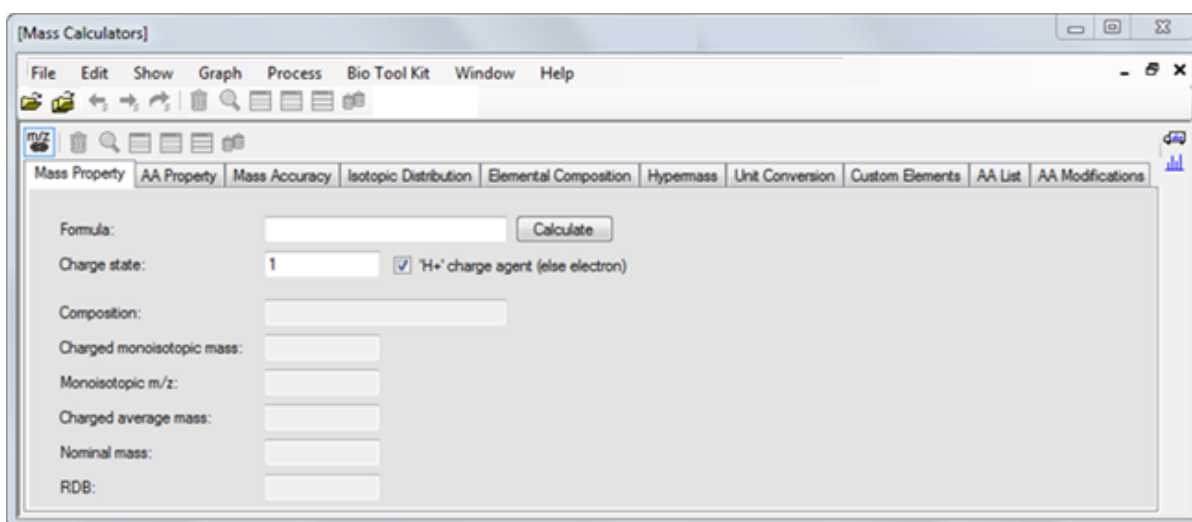
1. Haga clic en **Show > Mass Calculators..**
2. Haga clic en la pestaña **Mass Property** en el panel **Mass Calculators**.
3. Escriba la fórmula molecular en el campo **Formula**.
4. Escriba **-1** en el campo **Charge state**.
5. Seleccione **'H+' charge agent (else electron)**.
6. Haga clic en **Calculate**.

Tutorial de Explorer

Nota: También es posible quitar manualmente un hidrógeno de la fórmula molecular y no seleccionar la casilla "H+" charge agent (else electron).

El cuadro de diálogo se actualiza para mostrar varios valores de masa: monoisotópico, promedio, etc.

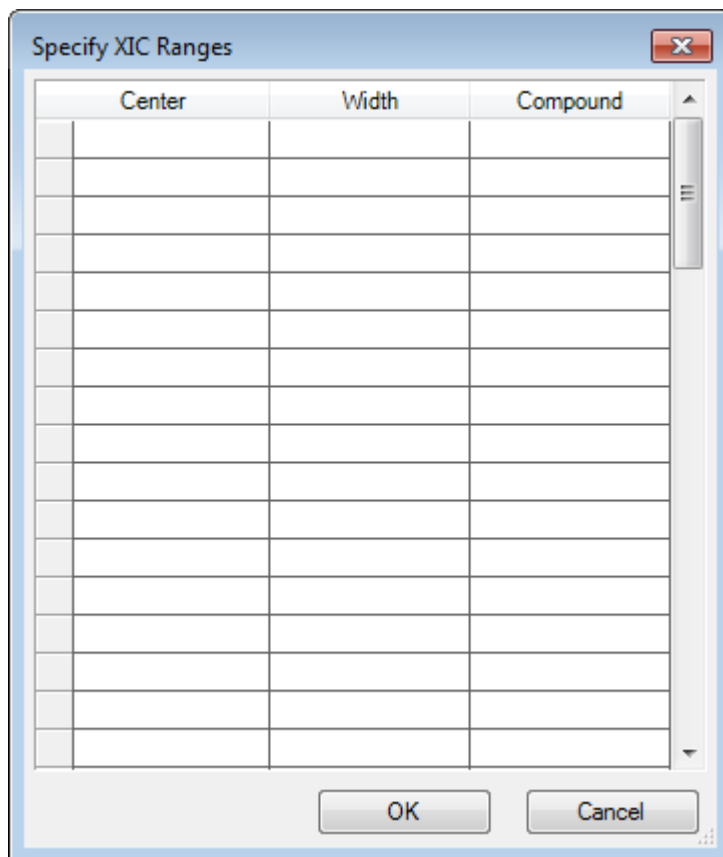
Figura D-25: Panel Mass Calculators



Nota: Con estos valores de masa, los isótopos se resuelven con facilidad. Por lo tanto, el valor de m/z monoisotópico es el valor más apropiado.

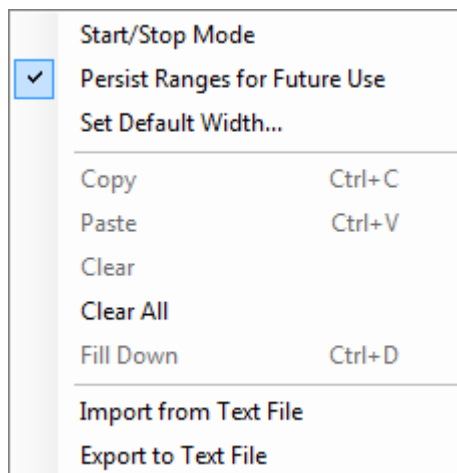
7. Seleccione el valor **Monoisotopic m/z** y, a continuación, pulse **Ctrl+C** para copiar el valor en el portapapeles.
8. Haga clic en el icono **Deletes this pane** para eliminar el panel **Mass Calculators** o haga clic en el icono **Hides this pane** para ocultar el panel.
9. Haga clic en **Show > Extracted Ion Chromatogram (XIC)** para abrir el cuadro de diálogo **Specify XIC Ranges**.

Figura D-26: Cuadro de diálogo Specify XIC Ranges



10. Haga clic con el botón derecho del ratón en el cuadro de diálogo **Specify XIC Ranges** para abrir el menú contextual.
11. En el menú contextual, haga lo siguiente:
 - a. Asegúrese de que la opción **Start/Stop Mode** no se haya seleccionado para que, de esta manera, los valores XIC se introduzcan como valor de centro y anchura.
 - b. Haga clic en **Set Default Width**, escriba **0.05** y, a continuación, haga clic en **OK**.
 - c. Haga clic en **Persist Ranges for Future Use** para que los valores se recuerden la próxima vez que se utilice el cuadro de diálogo.

Figura D-27: Menú contextual

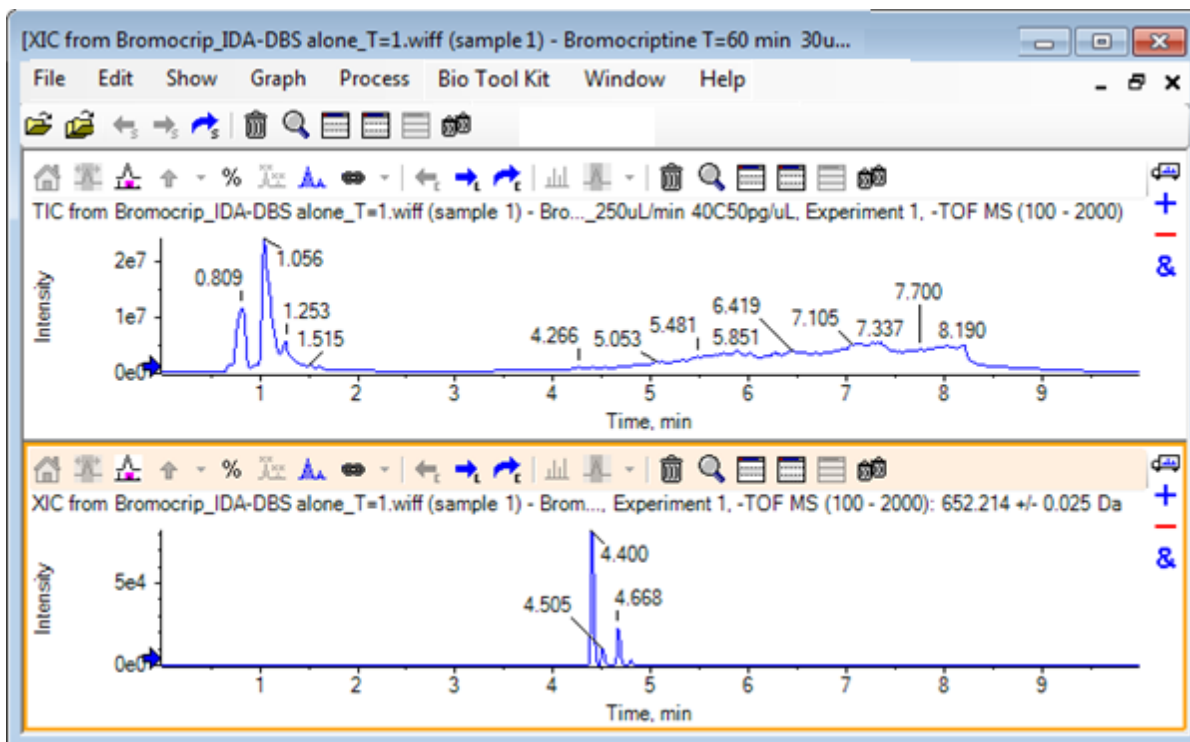


12. Vuelva al cuadro de diálogo **Specify XIC Ranges**.
El cuadro de diálogo ahora está establecido de manera que solo se debe escribir una masa para cada XIC de interés y se utiliza una anchura predeterminada.
13. Seleccione la primera celda en **Center** y, a continuación, pulse **Ctrl+V** para pegar el valor de masa del paso 7.
14. Haga clic en **OK**.

Nota: Puesto que se ha establecido una anchura predeterminada, no es necesario escribir un valor individual.

El panel contiene ahora el TIC y el XIC del ion molecular esperado de bromocriptina, que muestra varios picos.

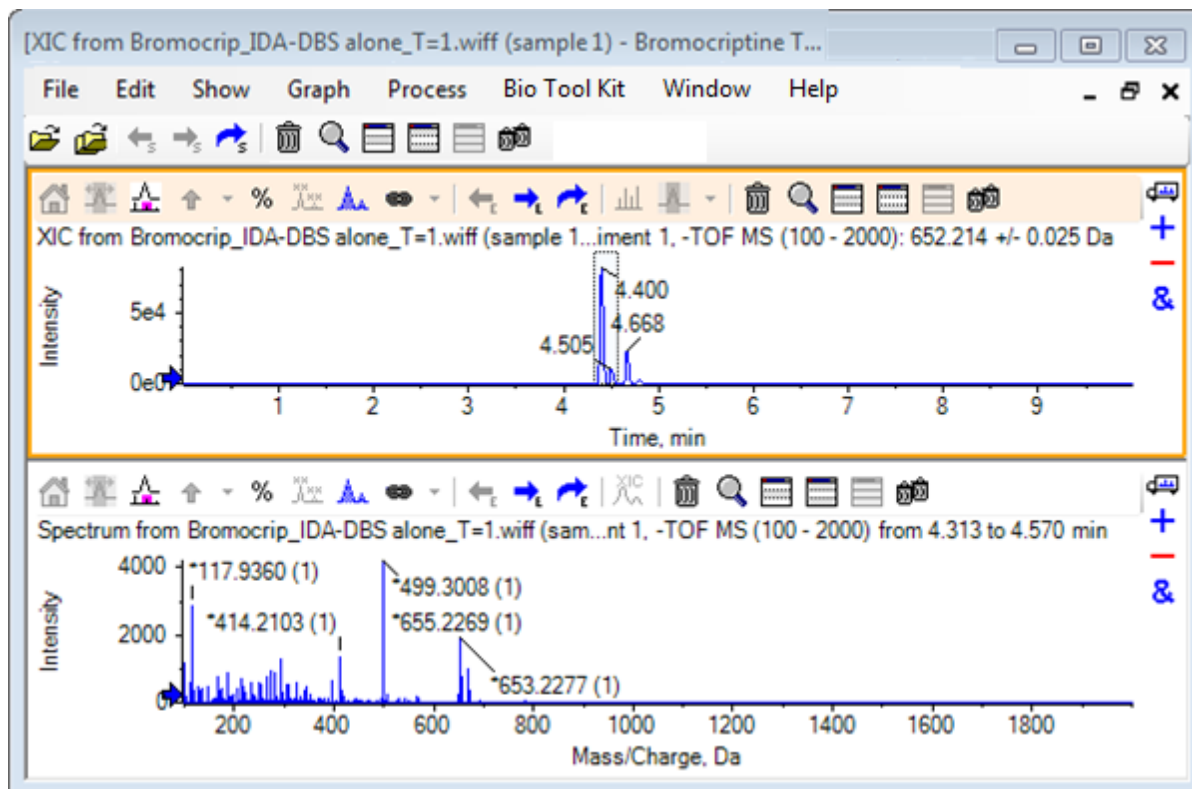
Figura D-28: TIC y XIC del ion molecular esperado de bromocriptina



Generate and Interact with a Spectrum

1. Oculte el panel del TIC, haga una selección alrededor del pico más grande del XIC y, a continuación, haga clic en el icono **Displays a spectrum for selection** para generar el promedio de espectro para esta región.

Figura D-29: Espectro del pico más grande del XIC



Nota: En [Figura D-29](#), el campo **Label** en la pestaña **Peak Labeling & Finding** del cuadro de diálogo **Options** (disponible a través de **Edit > Options**) está establecido en **Mass (Charge)**.

2. Arrastre el eje x desde aproximadamente 630 Da hasta 700 Da para ampliar el espectro en esta región.

Nota: Es posible que tenga que hacerlo en dos pasos.

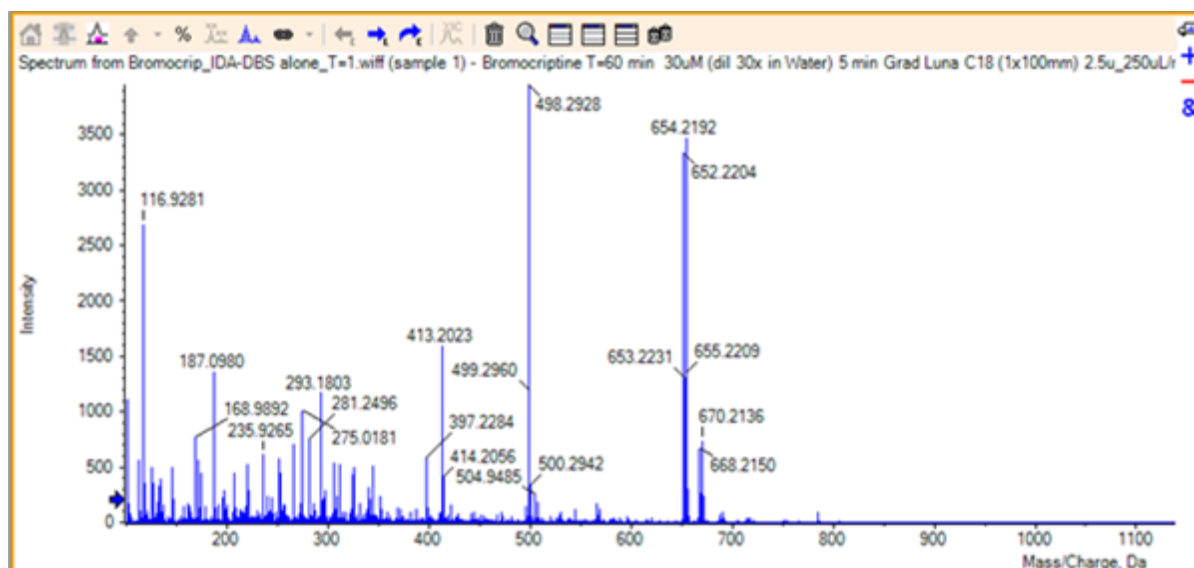
Hay un pico a 652,2199, muy cerca del valor esperado de 652,2140, que también muestra un patrón de isótopos de bromo, pero hay una segunda agrupación de isótopos de bromo a 668,2158. Los valores exactos de relación m/z varían en función de la ventana de tiempo de retención exacta seleccionada en el XIC.

Nota: El estilo de etiquetado que se utiliza aquí muestra una relación m/z y una estimación del estado de carga entre paréntesis (a partir del espacio existente entre los picos). Los picos que parecen ser monoisotópicos también están marcados con un asterisco. El algoritmo de etiquetado no tiene constancia de ningún otro isótopo aparte del ^{13}C , por lo que etiqueta el isótopo ^{81}Br como de carga única y lo marca incorrectamente como monoisotópico.

3. Cambie el estilo de etiquetado al estilo predeterminado haciendo clic en **Edit > Options**, accediendo a la pestaña **Peak Labeling & Finding** y, a continuación, cambiando el valor a **Mass / Charge** en el campo **Label**.

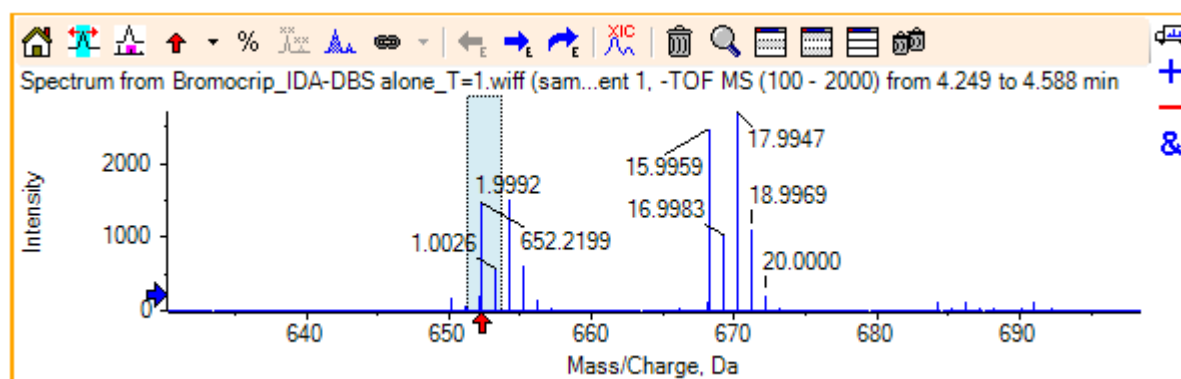
- Haga clic en **OK**.

Figura D-30: Espectro con otro estilo de etiquetado



- En el espectro expandido, haga una selección alrededor del pico a 652,2199 y, a continuación, haga clic en el icono **Adds arrow markers for selected peaks**.

Figura D-31: Espectro que muestra ↑ en el pico seleccionado



El etiquetado de masa ahora se establece con respecto al pico seleccionado, de manera que se muestren las diferencias entre los picos de masa. La etiqueta del pico a 668,2158 ahora muestra 15,9959, que corresponde a la masa de oxígeno y sugiere que este pico es un metabolito de hidroxibromocriptina.

Sugerencia: Las flechas se pueden mover arrastrándolas a otro pico y eliminar seleccionando **Remove All Arrows** en la lista adyacente al icono de flecha.

- Haga una selección alrededor del pico etiquetado como 15,9959 y, a continuación, haga clic en el icono **Displays an XIC for selection**.
- En el cuadro de diálogo **XIC Selection Ranges**, haga clic en **OK**.

Figura D-32: Cuadro de diálogo XIC Selection Ranges

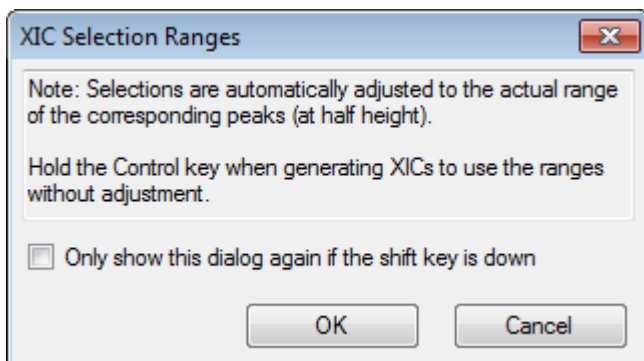
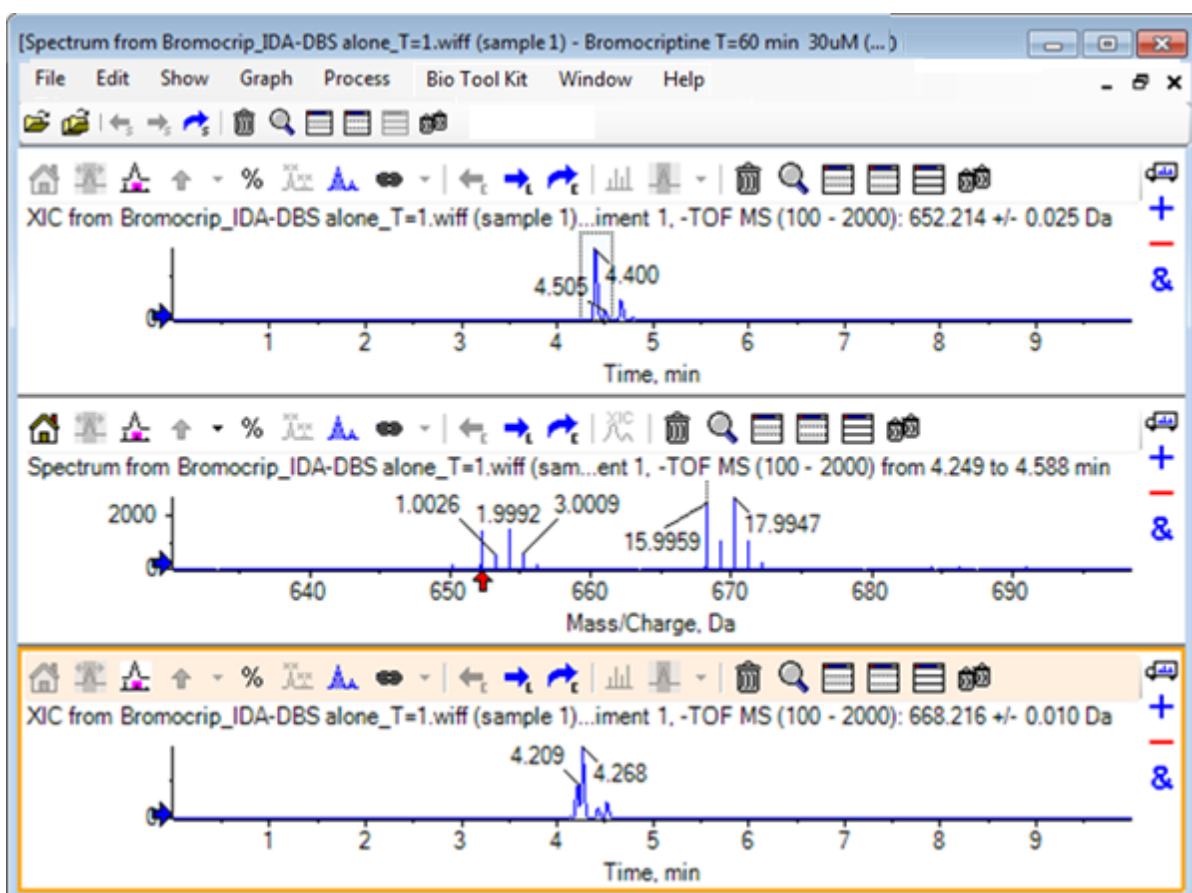


Figura D-33: XIC

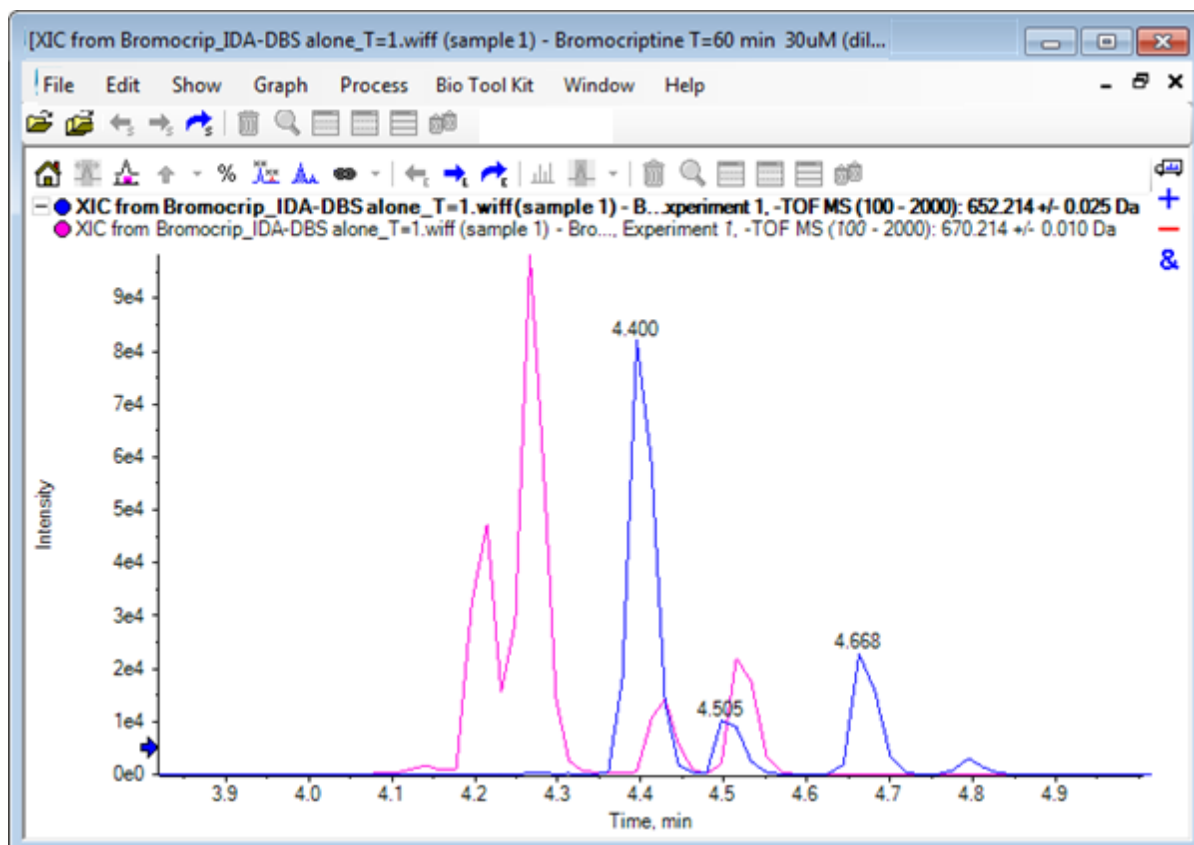


Es útil para generar XIC interactivamente. De manera predeterminada, la anchura utilizada para el XIC es la anchura de pico de masa a media altura y se muestra un vínculo de selección en el espectro.

8. Arrastre el vínculo de selección para actualizar el XIC que se muestra y agregar más repitiendo el paso.

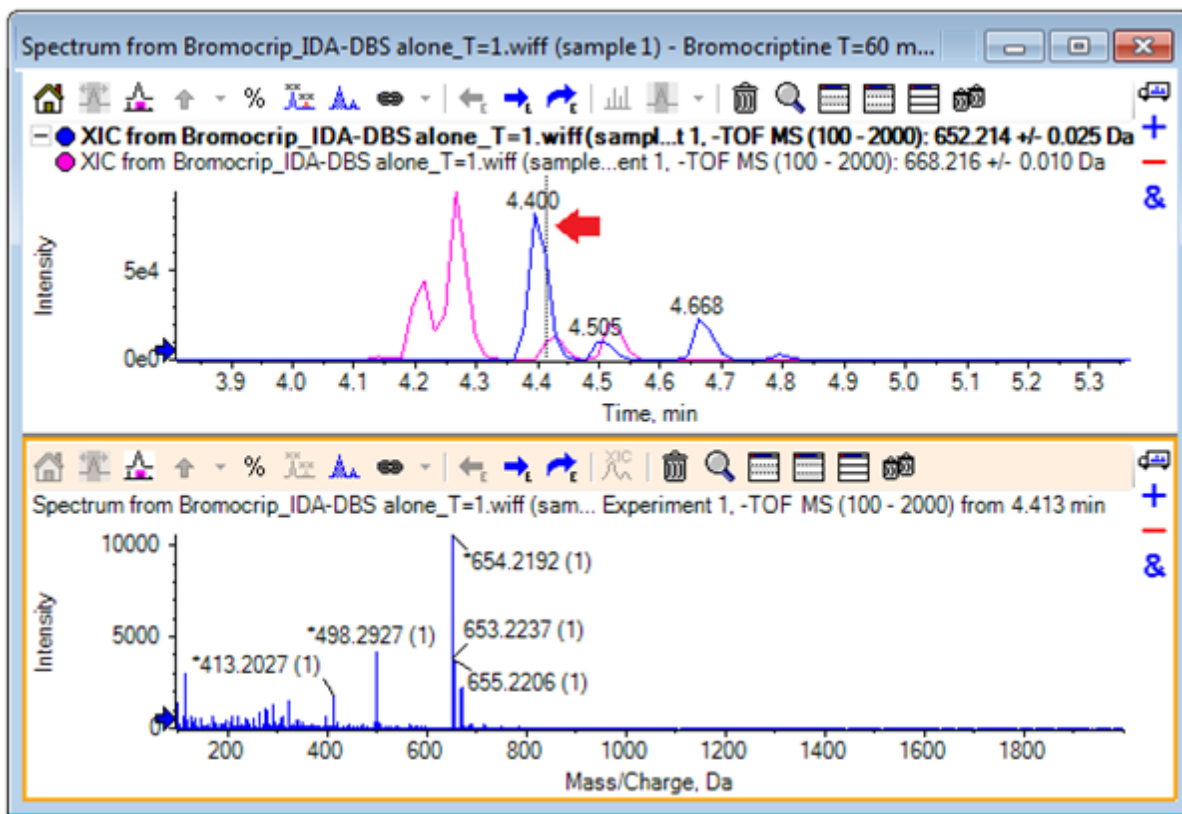
- Haga clic en el icono **Drag to another graph to overlay the active data in the target graph** en este nuevo cromatograma y, a continuación, arrastre el cromatograma al panel de XIC original para que se superpongan.

Figura D-34: XIC superpuestos



- Oculte o elimine el segundo panel de cromatograma y el espectro y, a continuación, amplíe los cromatogramas superpuestos para que se muestre la región que se encuentra alrededor de 4 a 5 min.
Hay dos picos alrededor de los 4,4 min, uno de cada XIC, que se eluyen cerca pero no exactamente en el mismo tiempo de retención. También hay varios picos en el cromatograma 668,216, que aparentemente indican la presencia de otros hidroximetabolitos.
- Haga doble clic en el panel de cromatograma a los 4,40 min para generar el espectro a partir de un solo análisis.

Figura D-35: Espectro a partir de un solo análisis



Una línea discontinua en el XIC indica el análisis mostrado (marcado con una flecha en Figura D-35). Si se arrastra la línea, el espectro se actualiza para poder explorar la región alrededor de los 4,40 min. Utilice las teclas de flecha adelante y atrás para mover los análisis de uno en uno. Puede obtenerse un espectro limpio del pico de la relación m/z de 652,214 moviendo la línea a una región donde la señal del ion 668,215 sea cero (aunque incluso aquí el fondo es bastante alto), aunque así no se pueda obtener un espectro limpio para este último.

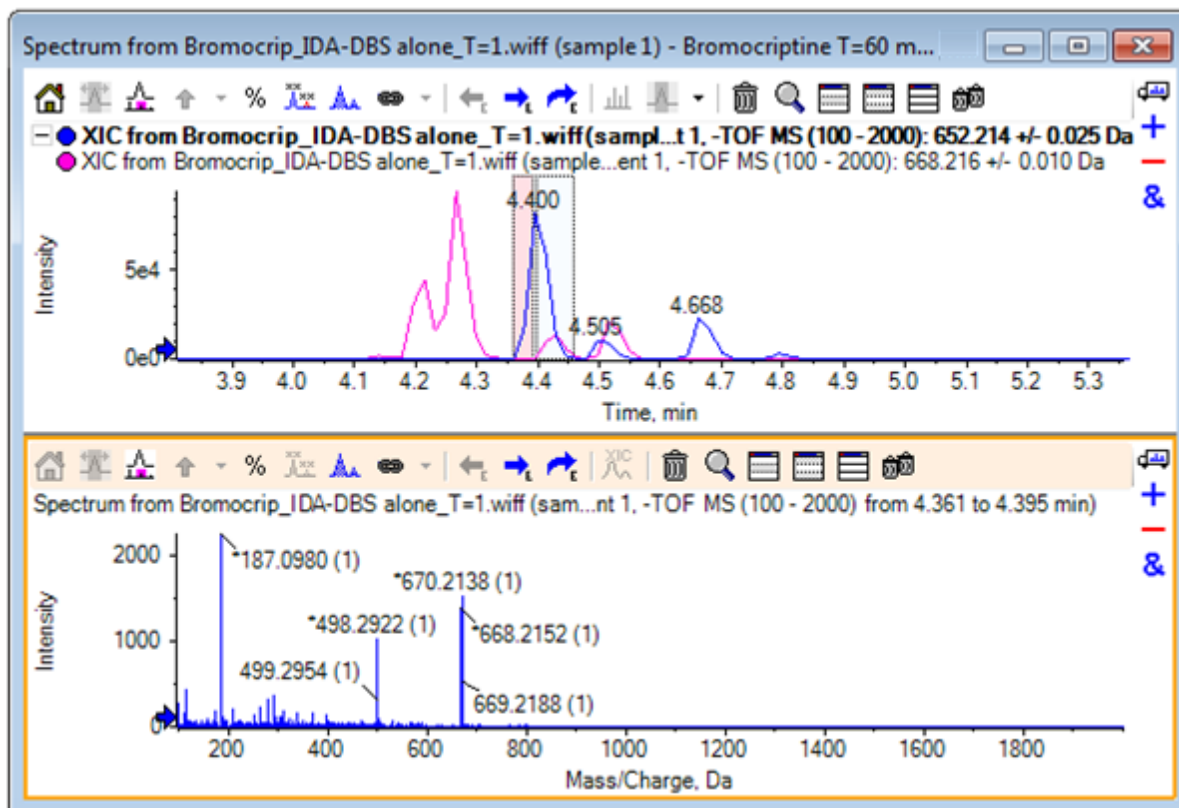
12. Elimine el panel de espectro.
13. En el panel de cromatograma, haga una selección estrecha que incluya el lado izquierdo del pico 652, pero que evite el pico 668 y, a continuación, haga clic en el icono **Set background subtraction range**.

La selección cambia a rosa.

Si se ha definido un rango de sustracción, se sustrae automáticamente de cualquier espectro generado posteriormente. El rango se puede borrar seleccionando **Clear Subtraction Range** en la lista a la que se accede a través de la pequeña flecha situada a la derecha del icono **Set Subtraction Range**.

14. Haga otra selección en el cromatograma que incluya el ápice del pico 668, pero la menor cantidad posible del pico 652 y, a continuación, haga clic en el icono **Displays a spectrum for selection**.

Figura D-36: Espectro con fondo sustraído para el pico 668



El resultado es un espectro con fondo sustraído para el pico 668 que contiene un poco del pico 652. Las dos selecciones del cromatograma permanecen vinculadas a sus espectros respectivos, aunque el fondo no está visible, y se pueden mover a otras partes del cromatograma. Al mover la selección de espectro se actualiza automáticamente el espectro mostrado, pero, si la región de fondo cambia, solo se aplica a los espectros generados posteriormente.

15. Haga clic en el icono **Hides all other panes**, haga clic en el TIC de espectro individual y, a continuación, haga clic en el icono **Deletes all other panes** para mostrar solo el TIC.
16. Si el panel de TIC se ha eliminado, haga clic en **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**, seleccione **Period 1, Experiment 1** y, a continuación, haga clic en **OK**.

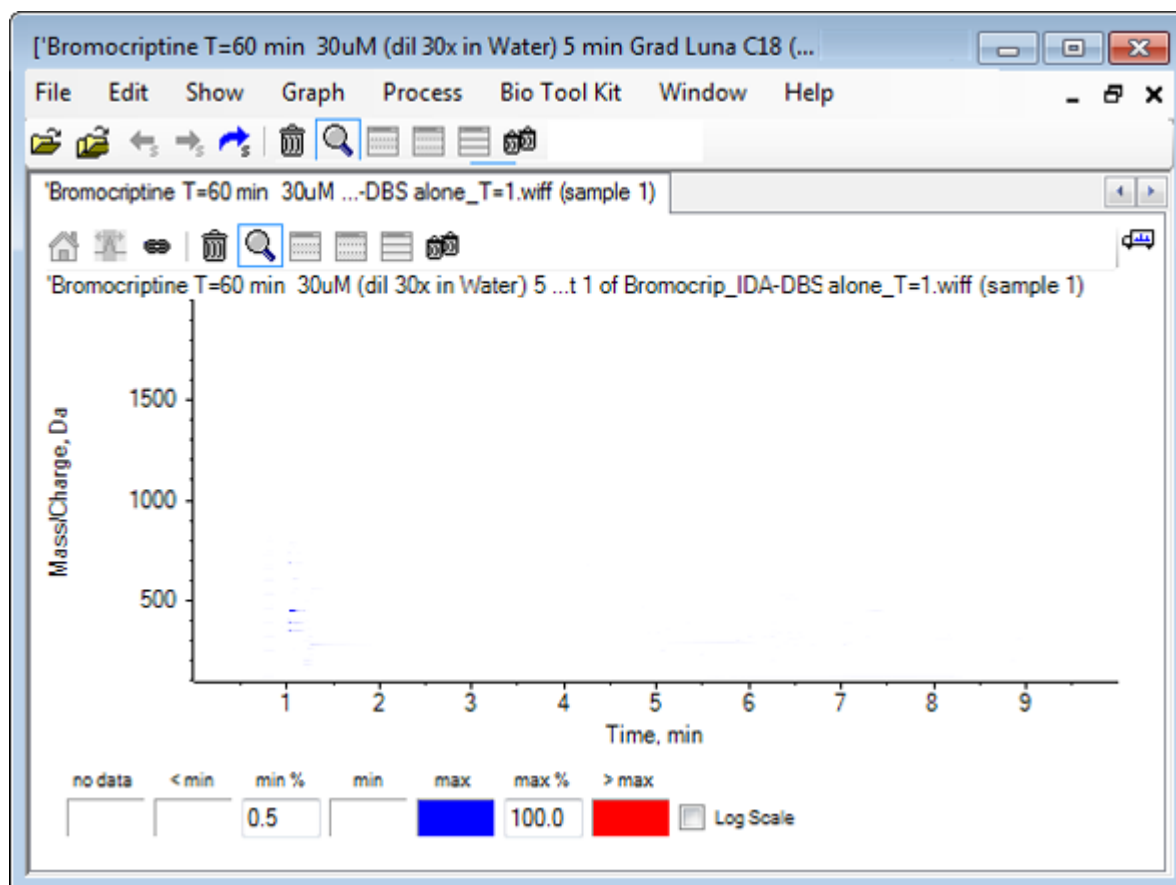
Use a Contour Plot

Una alternativa a la visualización de partes de un conjunto de datos (cromatogramas o espectros) es utilizar un gráfico de contorno para obtener una vista general completa de un experimento. Los gráficos de contorno suelen aportar mucha información, pero, por lo general, es necesario ajustar los parámetros de visualización para obtener los mejores resultados. En ese caso, el compuesto precursor es bromado y el gráfico de contorno proporciona una manera de localizar los picos con el patrón de isótopos de bromo.

Tutorial de Explorer

1. Con el TIC de un solo experimento activo, haga clic en **Show > LC/MS Contour Pane**, y, a continuación, haga clic en el icono **Expands active pane to fill window** en la barra de herramientas del gráfico de contorno resultante para que sea el único panel visible.
2. Si los controles de aspecto (cuadros de color en la esquina inferior izquierda) no están visibles, haga clic con el botón derecho del ratón en el panel y haga clic en **Show Appearance Control**. Consulte [Contour Plots and Heat Maps](#) y la *Guía de referencia*.

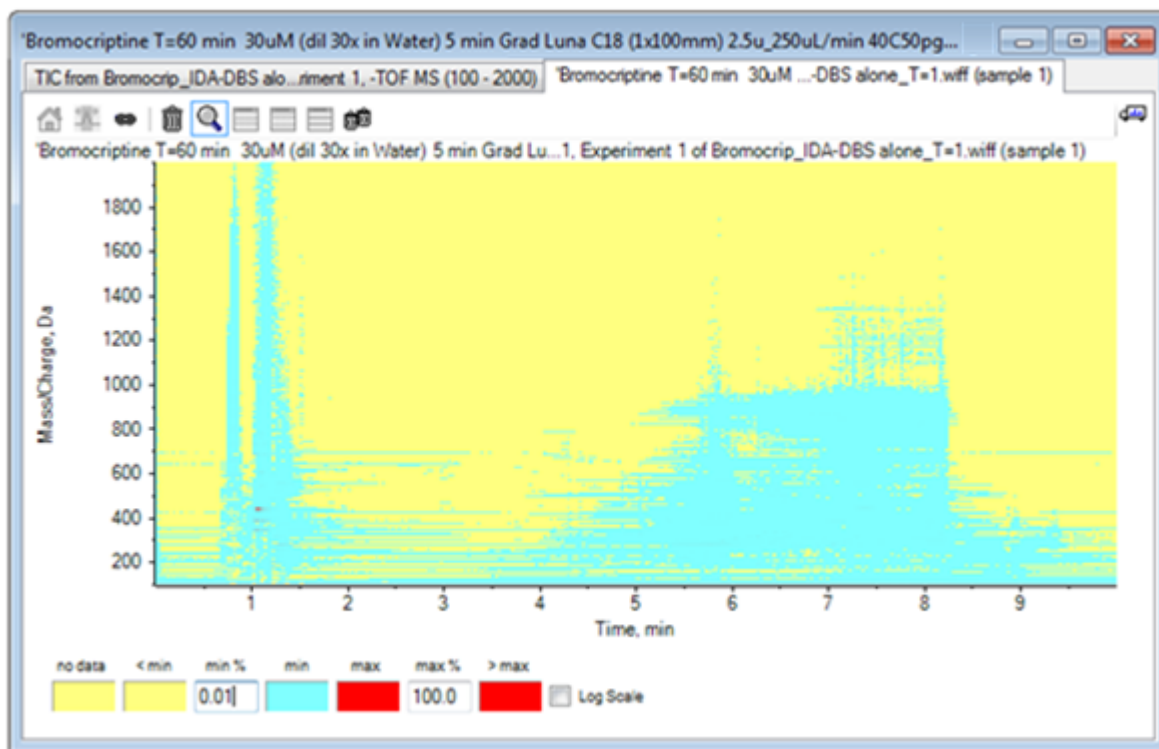
Figura D-37: Gráfico de contorno



Sugerencia: Con los parámetros predeterminados, la vista no es muy útil porque predominan los picos de bajo nivel y el ruido que oscurecen los picos reales. Puede generar una vista mejor de los modos siguientes:

- Cambiando la intensidad mínima que se debe mostrar. Esto cambia todos los puntos de datos por debajo de ese nivel para que se dibujen con el mismo color que los puntos donde no hay datos, es decir, que se conviertan en invisibles.
 - Cambiando la asignación de colores para que los colores disponibles cubran un rango de intensidad más estrecho que mejore la visibilidad de los picos pequeños.
3. Cambie el valor de **min %** a **0.01**. Esto hace que todos los puntos de datos con intensidades inferiores al 0,01% del pico base desaparezcan.

Figura D-38: Gráfico de contorno

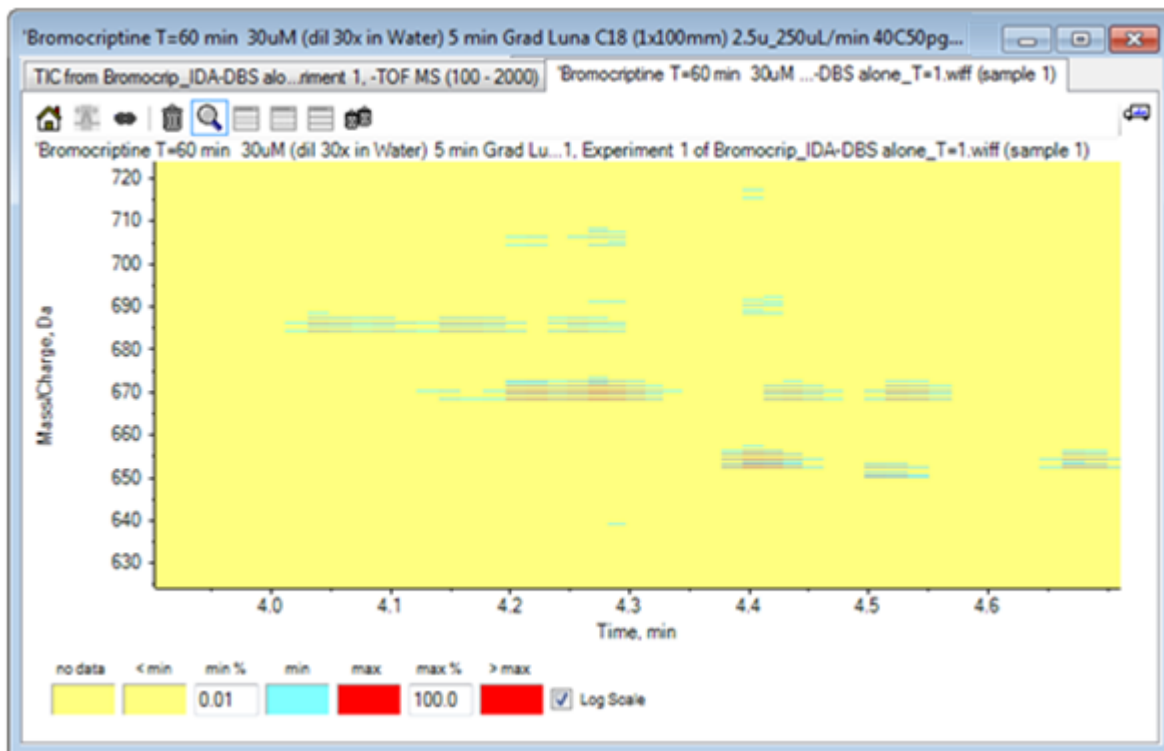


Se muestra mucho más la estructura de los datos. El volumen nulo y el área de lavado de la columna están despejados, y hay varios picos de fondo presentes en todos los tiempos de retención que se muestran como líneas horizontales.

4. Seleccione la casilla **Log scale**.
Los colores seleccionados se asignan al logaritmo de la intensidad (como porcentaje de la intensidad de pico base), lo cual mejora los picos de intensidad inferior, por ejemplo, la agrupación alrededor de 4 a 4,5 min con masas del rango de 600 a 700.
5. Seleccione esta región y, a continuación, haga clic en el icono **Zooms selection to full view**.

Sugerencia: También es posible ampliar los ejes x e y por separado de la manera habitual.

Figura D-39: Gráfico de contorno



La vista muestra ahora que hay varios picos bromados en esta área que se pueden distinguir por los conjuntos de cuatro líneas paralelas que corresponden a los isótopos ^{79}Br y ^{81}Br y sus isótopos ^{13}C .

6. Experimente con la configuración de los controles de los colores y observe los efectos en la vista.
7. Cuando acabe, cierre la ventana.
Se cerrará también el archivo de datos.

Resumen

En esta sección se han tratado las tareas siguientes:

- Buscar y abrir un archivo de datos para mostrar un TIC.
- Cambiar la vista para que solo se use un experimento.
- Utilizar la calculadora de masas para determinar la masa de un ion a partir de una composición elemental y utilizar la masa para generar un XIC.
- Generar interactivamente espectros y cromatogramas y utilizar marcadores de flecha en los espectros para mostrar la diferencia de masa entre picos.
- Generar espectros con fondo sustraído.
- Utilizar un gráfico de contorno para generar una vista general de un conjunto de datos.

Estas operaciones son la base de todo el procesamiento de datos interactivo, independientemente del tipo de datos que se muestre.

Work with the IDA Explorer

En un experimento IDA, los datos de los espectros MS/MS (y posiblemente MS3) se recopilan automáticamente cuando los datos de uno o varios espectros de estudio cumplen determinados criterios. Es habitual establecer parámetros para evitar la recopilación de varios espectros del mismo pico de LC excluyendo la masa precursora (al no permitirle que actúe como disparador) durante un periodo de tiempo determinado. En ocasiones, se pueden recopilar espectros redundantes. Además, puesto que la IDA se dispara en el momento en el que el pico cumple los criterios, suele generar un espectro al principio del pico de LC y ello puede dar lugar a que la calidad no sea óptima.

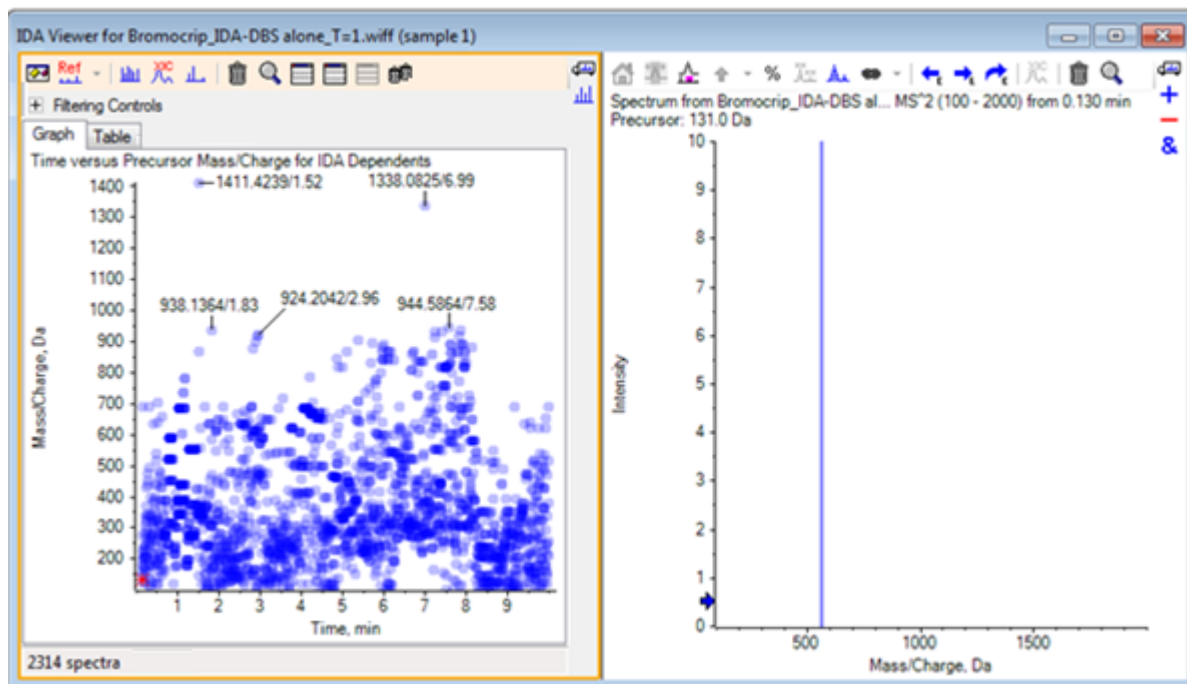
El software contiene herramientas para mostrar, filtrar y procesar datos IDA. Algunas de ellas se tratan en esta sección.

Cierre las ventanas que estén abiertas antes de empezar.

Show and Merge Spectra

1. Haga clic en el icono **Open Sample** en la barra de herramientas principal. Se abre el cuadro de diálogo **Select Sample**.
2. Si la carpeta **Sample Data** no está ya seleccionada, haga clic en **Browse** y acceda a la carpeta **Sample Data**.
3. Seleccione el archivo **Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff** y, a continuación, haga clic en **OK**.
4. En el cuadro de diálogo **Open IDA Sample**, haga clic en **With the IDA Explorer** y, a continuación, haga clic en **OK**.
El programa examina todos los espectros en el archivo de datos y, a continuación, genera el gráfico siguiente.

Figura D-40: Visor IDA



El panel izquierdo contiene una pestaña **Graph** y una pestaña **Table**. La pestaña **Graph** muestra un gráfico de contorno virtual donde cada punto de datos representa el tiempo de retención y la relación m/z de un ion que se ha seleccionado como ion precursor. La pestaña **Table** muestra una vista en forma de tabla de los puntos de datos en el gráfico de contorno virtual. El panel derecho muestra el espectro de los puntos de datos seleccionados. Inicialmente se muestra el primer espectro MS/MS.

El gráfico de contorno utiliza la intensidad del color para reflejar la intensidad de pico. Los colores más oscuros indican picos más intensos. Se dibujan etiquetas allí donde es posible, garantizando que no se solapen con puntos de datos ni entre sí. Amplíe el gráfico de contorno para examinar un área más detalladamente y que se visualicen más etiquetas.

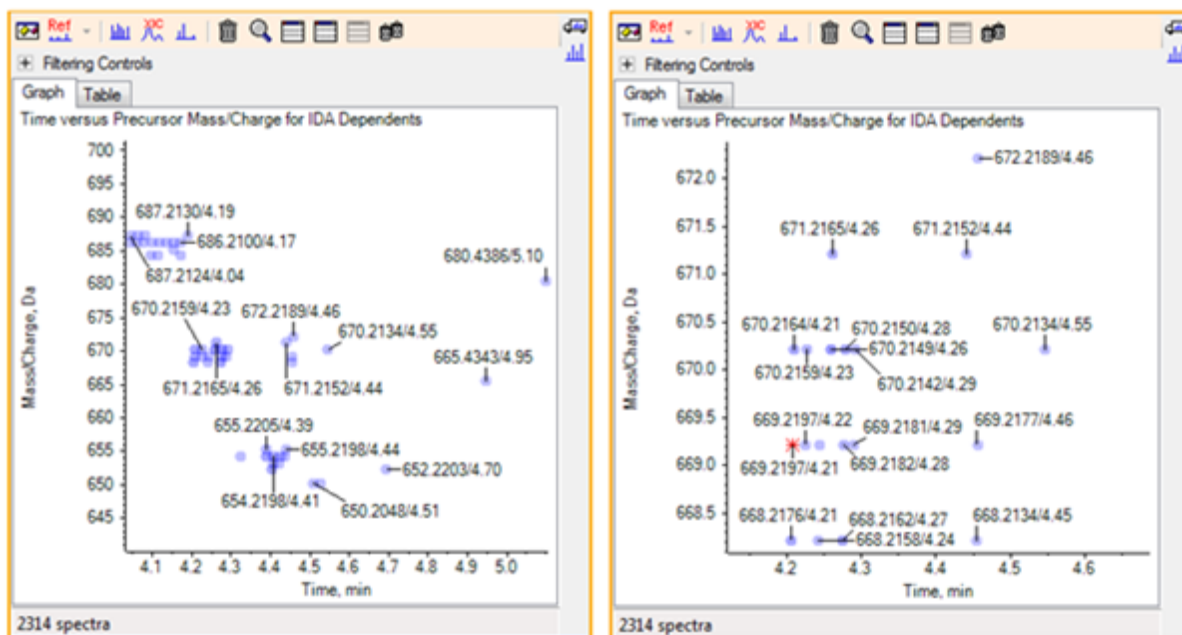
5. En el panel izquierdo, amplíe la región de 4 a 5 min y de 640 a 700 Da donde se hayan encontrado anteriormente picos relacionados con la bromocriptina.

La figura de la izquierda (Figura D-41) muestra solo el panel izquierdo. Si la vista actual es distinta, haga clic en el icono **Show Options** y desmarque la casilla **Merge spectra with similar precursor masses** en la pestaña **General** del cuadro de diálogo **Options**.

Se han recogido muchos espectros MS/MS en esta área y, aunque los picos cromatográficos son estrechos, varios de ellos proceden probablemente de los mismos picos. Además, se han recogido espectros MS/MS para cada pico en la agrupación de isótopos.

6. Amplíe más el gráfico para centrar su atención en la agrupación de los picos con una relación m/z de 668 a 672 Da. Consulte el panel derecho en Figura D-41.

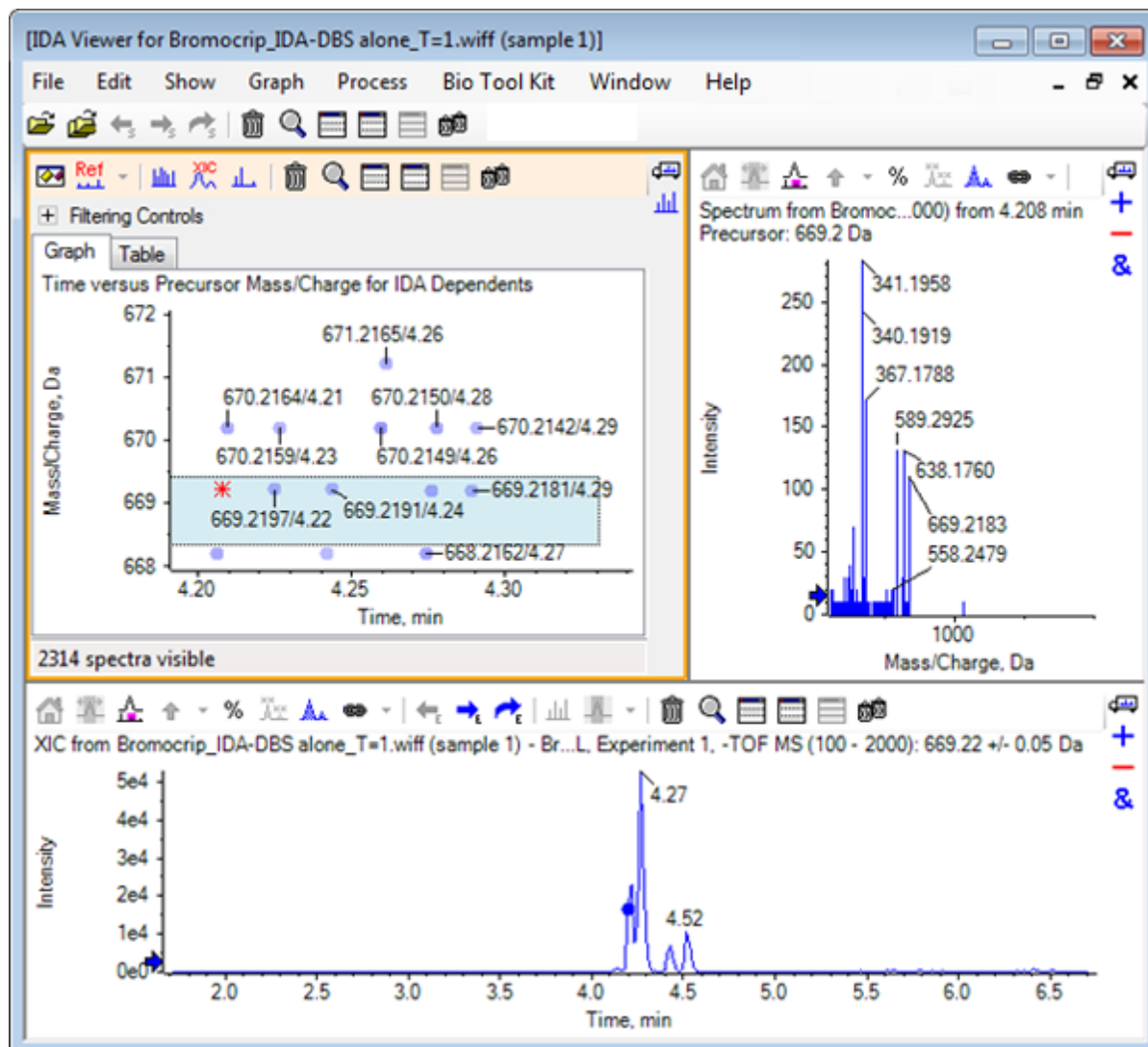
Figura D-41: Visor IDA



7. Seleccione el primero de los picos 669,2197 (se muestran con un asterisco en el panel derecho anterior) y, a continuación, haga clic en el icono **Displays an XIC for selection** para mostrar el XIC de esta masa precursora en el análisis de estudio.

La selección inicial del pico hace que se muestre el espectro MS/MS correspondiente.

Figura D-42: XIC para masa precursora en análisis de estudio



Si hay un punto de datos sin etiquetar en el gráfico de contorno, mueva el cursor sobre este para mostrar la etiqueta de relación m/z y tiempo de retención de manera que los tiempos de los análisis de ion producto sean relativos al cromatograma de estudio.

En el caso del pico 669,2, los tres primeros análisis son relativos al primer pico de XIC a 4,21 min, que es también donde se ha generado el análisis de 668,2; los dos segundos análisis son relativos al pico a 4,27 min; y el último análisis procede del pico a 4,42 min (669,2177/4,46). No se ha realizado ningún análisis para el pico 669,2 a 4,52 min, pero se ha obtenido un análisis para el pico 670,2.

Nota: Los tiempos de análisis son ligeramente distintos porque se obtienen secuencialmente, aunque se detecten en el mismo análisis de estudio. Es posible que se tarde más en detectar los picos de isótopo más pequeños que los más grandes.

8. Dibuje un rectángulo de selección alrededor de los cinco primeros análisis del pico 669,2, haga clic con el botón derecho del ratón y, a continuación, seleccione **Select Points in Graph Selection**.

Con esta acción el panel de espectro se superpone sobre todos los espectros MS/MS.

El sistema ha adquirido más análisis de los necesarios. Si reducimos el número de espectros por procesar y fusionamos los que son demasiado cercanos para convertirlos en compuestos distintos, podemos obtener resultados de mejor calidad. Para la fusión se utiliza tanto la masa como el tiempo de retención a fin de determinar dichos análisis.

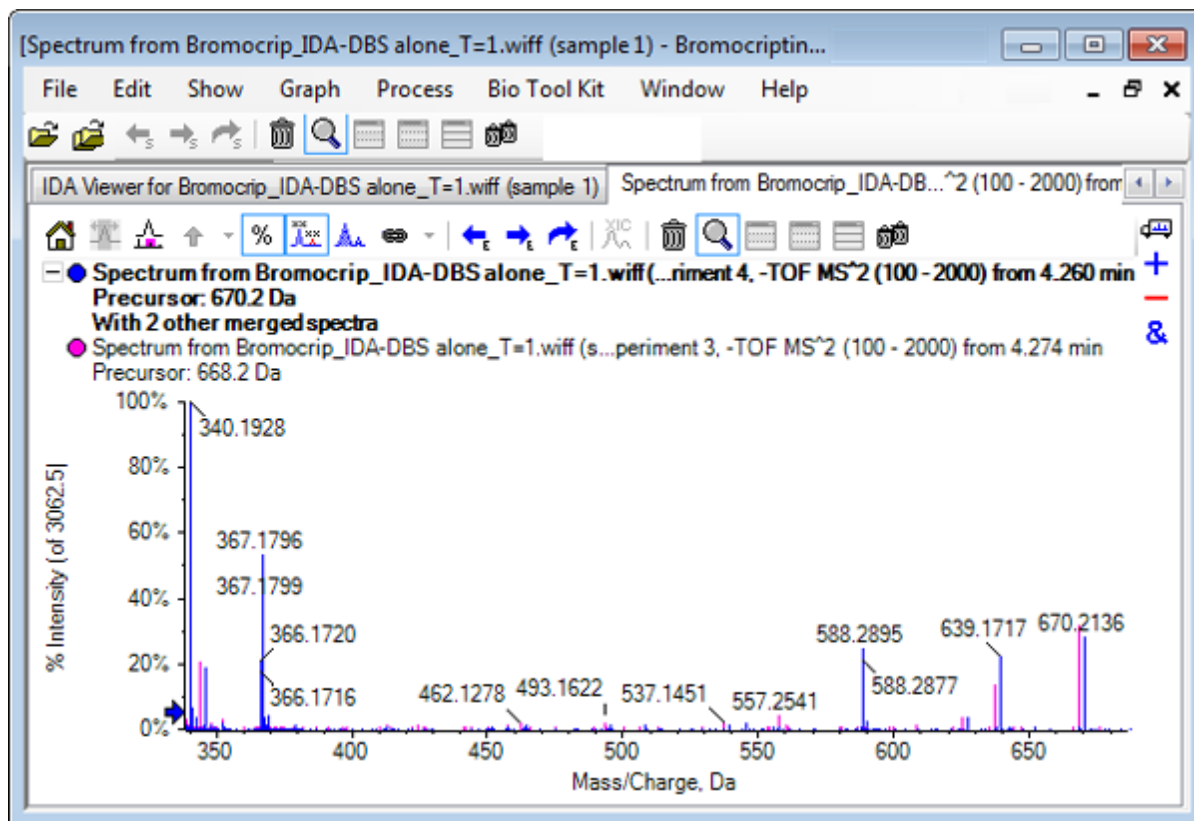
9. Haga clic en el icono **Show Options**, seleccione la casilla **Merge spectra with similar precursor masses** y, a continuación, establezca el valor de **Mass tolerance** en **10** ppm y el valor de **RT gap tolerance** en **0.03** min (los picos de este análisis tienen una anchura aproximada de 2 seg).
10. Haga clic en **OK**.

Nota: Esta parte del cuadro de diálogo permite a los usuarios definir cómo se tienen que extraer los XIC. La anchura de la masa debe coincidir con la resolución o la anchura del pico del instrumento y es útil para limitar el rango de tiempo utilizado porque así se acelera el procesamiento.

Esta manera de fusionar los datos genera tres picos para 669,2 a 4,21 min, 4,28 min y 4,46 min. La barra de estado en la parte inferior del panel IDA Viewer muestra el progreso a medida que los datos se fusionan y, luego, muestra el número total de espectros dependientes una vez finalizada la fusión.

11. Haga clic en el punto de datos a 670,2149/4,26 y, a continuación, pulse la tecla **Ctrl** y haga clic en el punto a 668,2162/4,27.
12. En el panel de espectro MS/MS, haga clic en el icono **Expands active pane to fill window**, el icono **Use percent y-axis** y el icono **Label all overlaid traces** y, a continuación, amplíe el eje x para que se muestre la región de 340 a 680.

Figura D-43: Espectro: región de m/z 340 a 680 ampliada



Puesto que estos dos precursores corresponden a los isótopos de Br, los espectros deben ser idénticos, salvo para los iones que retienen el átomo de Br, los cuales se muestran como un par de picos separados por dos Da. En este ejemplo, los fragmentos (trazo 668,2) a 344,0441, 625,1765 y 637,1712 han retenido el átomo de Br, mientras que los situados a 340,1925, 367,1796 y 588,2877 no lo han hecho.

Coloque una flecha en el pico 588,2877 y, a continuación, observe que los picos 668 y 670 ahora aparecen etiquetados con la masa de los isótopos de Br más 1, lo cual indica que el pico 588,2877 corresponde a la pérdida de HBr.

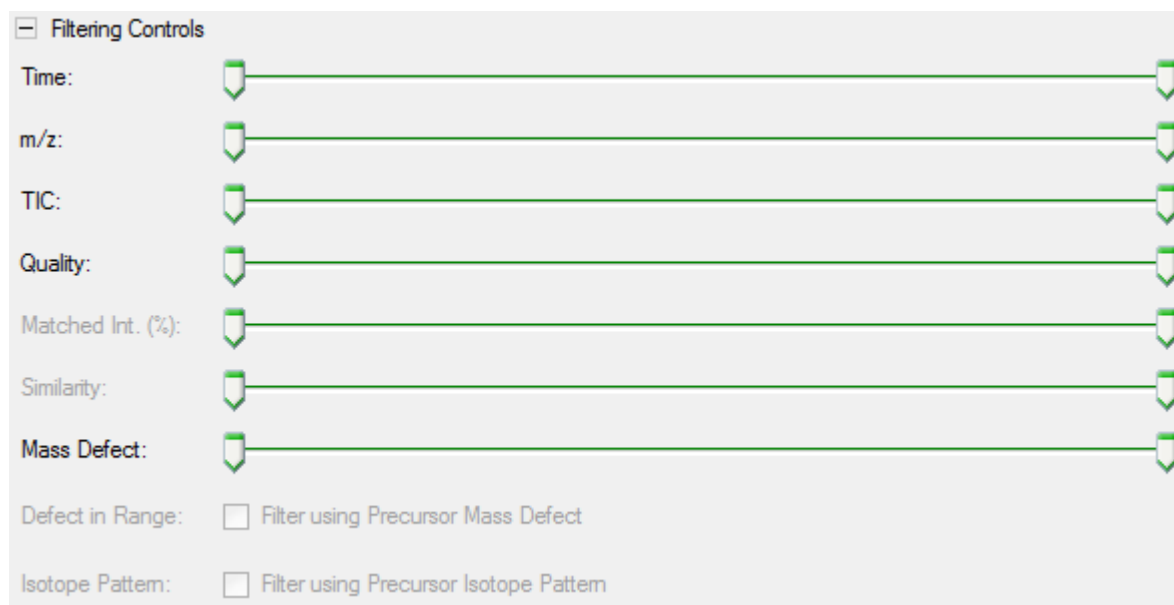
13. Elimine la flecha del espectro, haga clic en el icono **Expands active pane to fill window** y, a continuación, reduzca el gráfico de contorno para ver todos los puntos de datos.

Filter IDA Data

El explorador de IDA contiene varios filtros que se pueden utilizar para reducir la cantidad de datos que van a visualizar o procesar. Dichos filtros se describen en esta sección.

1. En el gráfico de contorno, haga clic en el icono **Expands active pane to fill window** y, a continuación, haga clic en el icono situado junto a **Filtering Controls** justo debajo de la barra de herramientas.

Figura D-44: Filtrado de datos IDA



Esta ventana muestra varios controles deslizantes y casillas que corresponden cada uno a un criterio de filtrado que se puede utilizar para ajustar la cantidad de datos mostrados. El tiempo de retención (**Time**) y la relación m/z (**m/z**) se pueden seleccionar aquí o ampliando la vista.

Los demás filtros son los siguientes:

- **TIC**: establece los límites para la intensidad sumada de los picos en el espectro MS/MS. Esto se utiliza normalmente para eliminar análisis pequeños con ruido.
- **Quality**: corresponde a la fracción de la intensidad sumada que es superior al equivalente de 1 cuenta, es decir, es menos probable que se deba a ruido y es una estimación de la calidad espectral.
- **Matched Int. (%)**: evalúa la fracción de la intensidad sumada que se explica por los fragmentos conocidos y las pérdidas neutras cuando se utiliza **Fragment Matching**.
- **Similarity**: está disponible cuando se ha establecido un espectro de referencia. Esta función mide la fracción de la intensidad sumada que corresponde a fragmentos comunes y pérdidas neutras en el espectro de referencia. Consulte [Use a Reference Spectrum](#).
- **Mass Defect**: establece un solo rango para la parte fraccional de una masa. Esta función es útil para buscar metabolitos porque las transformaciones metabólicas comunes (O, O₂, etc.) no cambian significativamente el defecto de la molécula precursora, por lo que el uso de un rango cercano a su defecto puede revelar posibles metabolitos.
- **Defect in Range**: además del rango de defecto de masa individual, el software también permite a los usuarios definir varios defectos que se aplican a distintos rangos de masas. Si se definen tales rangos, esta casilla permite a los usuarios

determinar si se debe aplicar o no el filtro. Los rangos se establecen en la pestaña **Mass Defect** del cuadro de diálogo **Options**.

- **Isotope pattern**: esta casilla permite a los usuarios aplicar uno o varios filtros de patrón de isótopos a los datos de estudio de MS. Es decir, solo se muestra un punto de datos si el ion precursor seleccionado tiene el patrón deseado. Dichos patrones se definen en la pestaña **Isotope Pattern** del cuadro de diálogo **Options**.

Cada uno de los filtros simples tiene dos controles deslizantes para poder definir un rango. Haga doble clic en cualquiera de los controles deslizantes y, a continuación, escriba directamente un valor.

2. Experimente con la configuración de los controles deslizantes y observe, en particular, que incluso un ajuste bajo mínimo para los valores de **TIC** (por ejemplo, 1e3) o **Quality** (1) tiene un efecto importante. Establezca el filtro de **TIC** inferior en 2e3 y todos los demás en 0.

El defecto de masa de la bromocriptina es aproximadamente de 0,22, por lo que no es probable que metabolitos simples tengan valores superiores o muy inferiores a este.

3. Establezca los filtros de **Mass Defect** en 0,18 y 0,23 y observe que entre los picos restantes se encuentran los que están cerca de 4,5 min y 650 Da y que solo hay un punto de datos de una relación m/z de 652,2211 en esa región (4,40 min).
4. Puede ocultar los controles de filtro haciendo clic en el icono situado junto a **Filtering Controls**.

Sugerencia: Puede cambiar los filtros que están visibles haciendo clic con el botón derecho del ratón en el área de filtro, seleccionando **Filters** y, a continuación, seleccionando los filtros adecuados.

Use a Reference Spectrum

1. En el gráfico de contorno, haga clic en el punto de datos a 652,2211/4,40 (la propia bromocriptina) y, a continuación, haga clic en el icono **Set Reference Spectrum (for Similarity Scoring)**.

Nota: Puede que primero tenga que ampliar el gráfico.

2. Haga clic en la flecha situada junto al icono **Set Reference Spectrum (for Similarity Scoring)** y, a continuación, asegúrese de que **Overlay Reference Spectrum** esté seleccionado.
3. Haga clic en el punto de datos a 654,2185/4,39.

Con un espectro de referencia definido y **Overlay Reference Spectrum** seleccionado, los espectros que se muestran tienen el espectro de referencia superpuesto para poderlos comparar fácilmente. Esto es útil cuando se trabaja con metabolitos, porque proporciona una manera rápida de determinar qué picos se desvían y cuáles no.

Hemos establecido el espectro MS/MS del ion precursor del isótopo de bromo de masa inferior como referencia y hemos superpuesto el espectro del isótopo de masa superior, por lo que tenemos una vista similar a la generada anteriormente para el pico 668,2.

Dicho de otro modo, los iones con bromo se pueden identificar por la presencia de picos alejados entre sí dos Da.

4. Haga clic en el icono **Expands active pane to fill window** y, a continuación, en el gráfico de contorno haga clic en **Table** (justo debajo de **Filtering Controls**).

Nota: Si es necesario, mueva el panel de espectro para colocarlo bajo la tabla (utilizando el icono Drag and drop to rearrange the panes) para que todas las columnas estén visibles.

La tabla muestra la misma información que el explorador gráfico, pero proporciona más detalles. También responde a los controles de filtrado para que las dos vistas contengan los mismos espectros. La tabla está vinculada a la vista de espectro para que, al seleccionar filas, el espectro se actualice, y las filas puedan ordenarse haciendo clic en los encabezados de columna.

Cuando se define un espectro de referencia, se muestran dos columnas adicionales: **Delta m/z** muestra la diferencia entre la masa precursora de la referencia y el espectro correspondiente a la fila. **Similarity** muestra la similitud de los dos espectros.

5. Haga clic en **Delta m/z** para ordenar la tabla y observe que contiene varios picos que difieren aproximadamente en 15,995 (la masa de oxígeno) y uno a 31,990 (O₂) que es probable que sean metabolitos de hidroxibromocriptina.
6. Haga clic en una fila en la tabla para mostrar los espectros asociados.

Nota: Estos espectros tienen valores de similitud elevados al igual que los análisis con masas precursoras dos Da superiores, que se obtienen de los iones que contienen ⁸¹Br.

Resumen

En esta sección se han tratado las tareas siguientes:

- Examinar un archivo IDA con las vistas del explorador de IDA gráfica y de tabla.
- Fusionar espectros relacionados tras determinar que ello era necesario.
- Filtrar el número de espectros que se muestran con filtros de TIC y defecto de masa.
- Superponer espectros para que se puedan comparar.
- Definir un espectro de referencia y utilizar la tabla para buscar metabolitos probables.

Estas operaciones son fundamentales para procesar los datos IDA.

En la sección siguiente se describe cómo utilizar las herramientas de estructura utilizando el espectro MS/MS de bromocriptina.

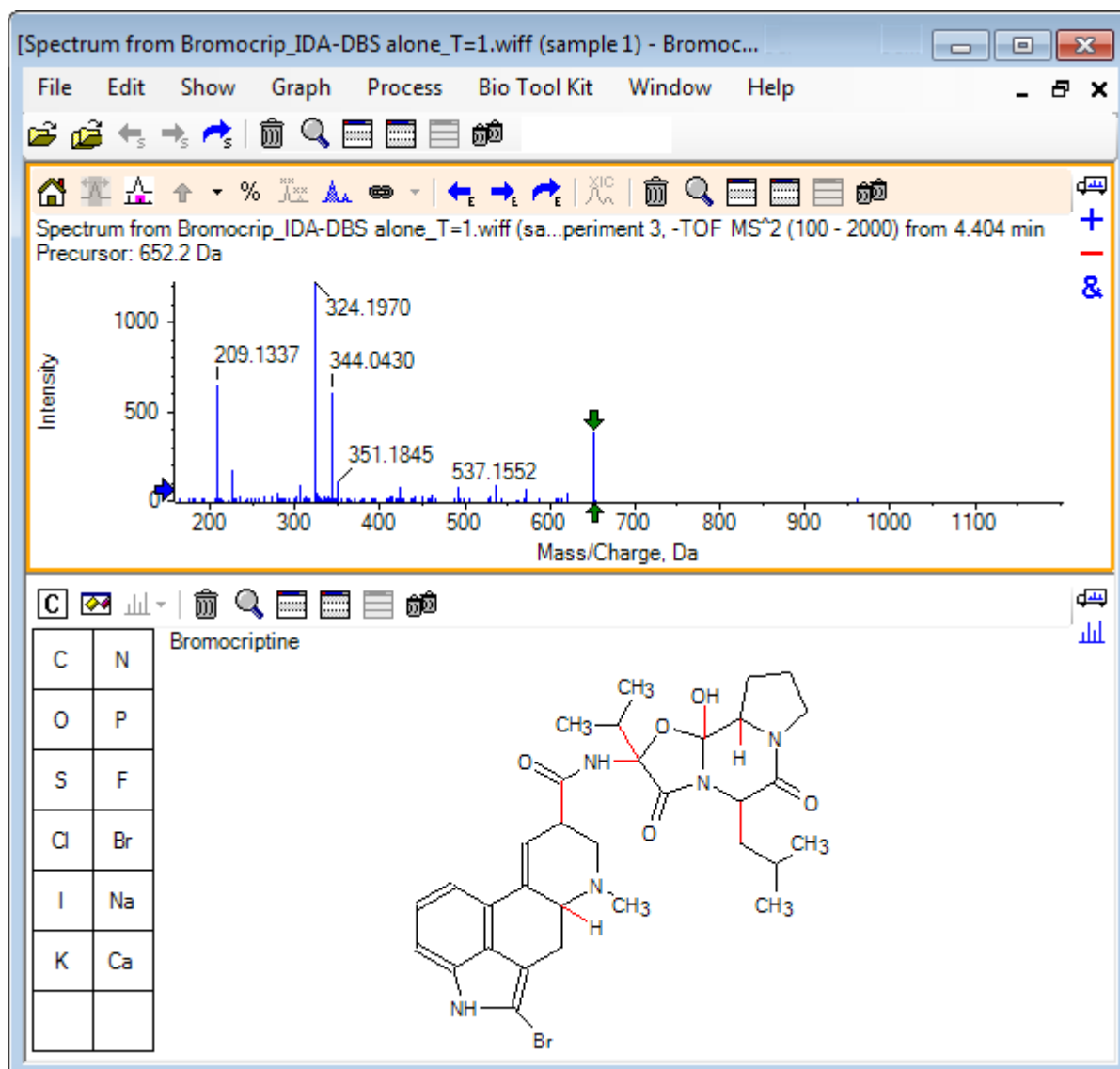
Work with Structure Tools

El software contiene herramientas que facilitan vincular las masas de iones a estructuras (guardadas como archivos .mol) y explorar posibles ubicaciones en búsqueda de biotransformaciones.

Link a Structure to an MS/MS Spectrum

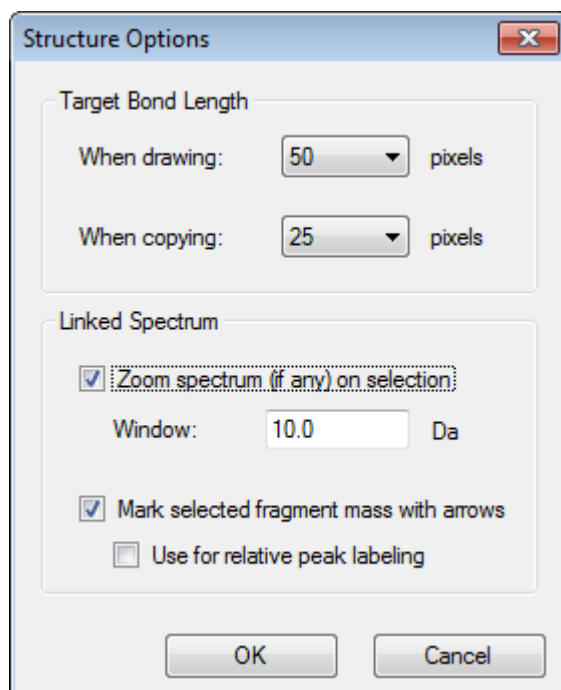
1. Localice el espectro MS/MS de bromocriptina, 652,2211/4,40. Consulte [Work with the IDA Explorer](#).
2. Haga clic en el icono **Hides all other panes** en el gráfico de contorno para que solo esté visible el espectro.
3. Haga clic en **File > Open Mol File..**
4. En el cuadro de diálogo **Select Mol File**, seleccione el archivo **Bromocriptine.mol** y, a continuación, haga clic en **Open**. Para obtener información sobre las ubicaciones de instalación de los archivos de datos, consulte [Organización](#).
Se abre un panel nuevo bajo el espectro para mostrar la estructura y las herramientas.

Figura D-45: Estructura de la bromocriptina



5. Haga clic en **Show options dialog** en el panel de estructura, asegúrese de que las casillas **Zoom spectrum (if any) on selection** y **Mark selected fragment mass with arrows** estén seleccionadas y, a continuación, haga clic en **OK**. Los demás parámetros se pueden dejar tal cual, sin cambios.

Figura D-46: Cuadro de diálogo Structure Options



El espectro y la estructura se vinculan automáticamente porque el espectro estaba activo cuando se creó el panel de estructura. Vincule manualmente una estructura a un espectro arrastrando el icono **Displays a spectrum for selection** al espectro apropiado.

Al arrastrar en el panel de estructura se genera una línea (un lazo) que sigue al cursor, lo que permite a los usuarios seleccionar total o parcialmente la estructura, que, a continuación, se dibuja en negrita. Al haber un espectro vinculado, este se amplía y se desplaza para mostrar la región alrededor de la masa de la subestructura seleccionada.

6. Dibuje un lazo alrededor de toda la molécula y la vista cambia para mostrar el pico con una relación m/z de 652,2177, que corresponde al ion $(M - H)^-$.

Como la casilla de selección **Mark selected fragment mass with arrows** está seleccionada, se dibuja una flecha roja encima y debajo del pico, lo cual indica que es la masa esperada de un ion correspondiente a la región seleccionada, es decir, $(M - H)^-$, porque estos datos están en modo negativo.

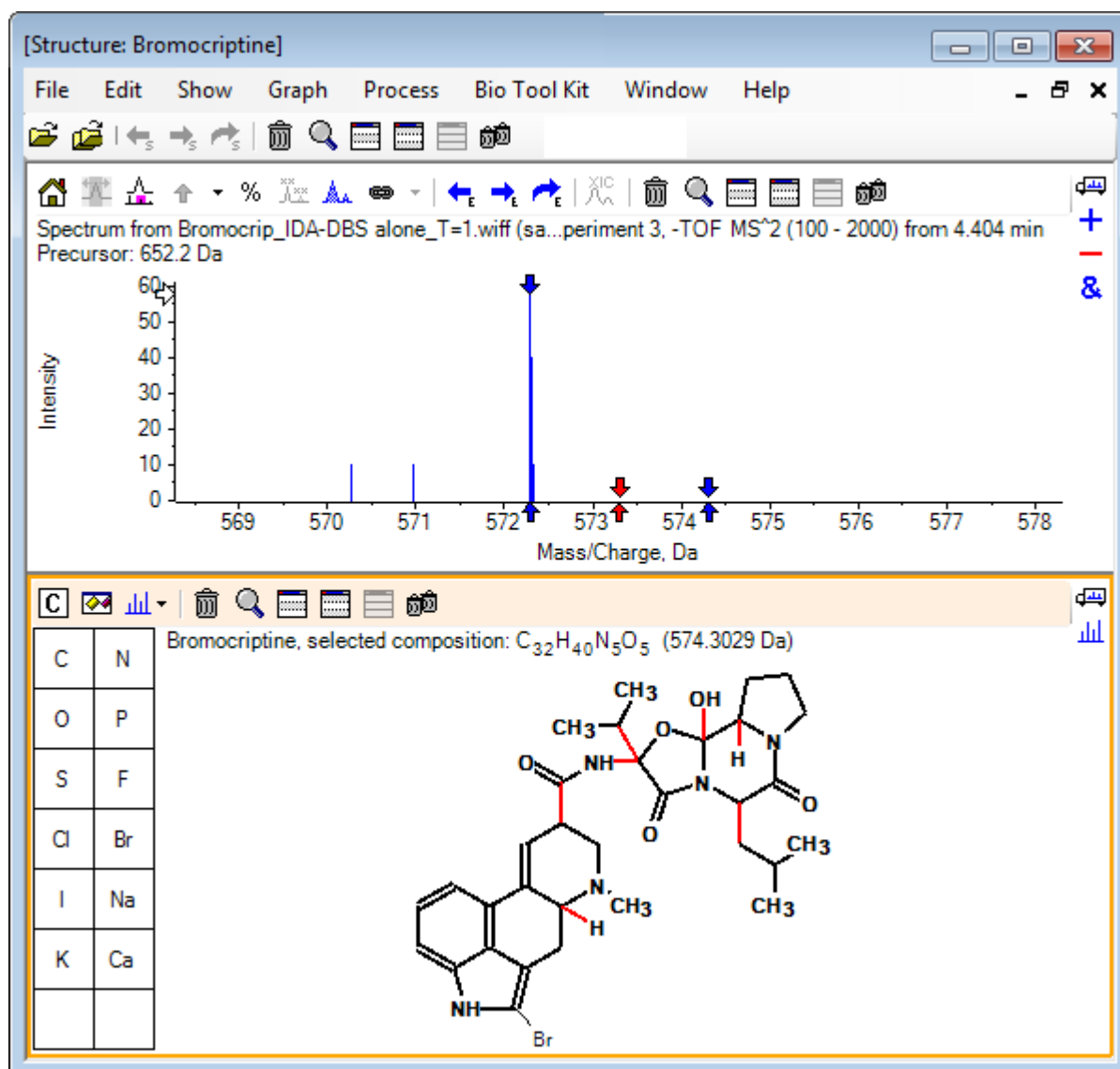
Nota: El título del panel de estructura indica la composición elemental y la masa del compuesto neutro correspondiente a la selección, es decir, $C_{32}H_{40}N_5O_5Br$ con una masa de 653,2213 Da.

Tutorial de Explorer

Si se selecciona **Mark selected fragment mass with arrows**, se dibuja una flecha verde sobre el pico 652,2177 cuando no se selecciona ningún elemento en el panel de estructura. Esto se debe a que la flecha verde marca el complemento de la selección actual y sin selección el complemento es toda la molécula.

7. Seleccione toda la molécula, salvo el átomo de bromo. Consulte [Figura D-47](#).

Figura D-47: Estructura de la bromocriptina



Nota: El átomo de bromo es el único que se muestra con fuente normal y el título del panel de estructura muestra la composición $C_{32}H_{40}N_5O_5$ con una masa de 574,3029 Da. En el espectro, la flecha roja indica la masa esperada de la selección, es decir, la masa del ion molecular $(M - H)^-$ menos la masa de bromo, y hay flechas alejadas 1 Da en los dos lados. Es habitual ganar o perder átomos de hidrógeno adicionales durante la fragmentación y el software indica esa posibilidad dibujando un par de flechas azules a +1 y -1 para cada enlace roto. En este caso, solo hay un enlace roto, por lo que solo se muestran dos flechas adicionales.

El pico real del espectro corresponde a una de esas flechas, lo cual indica que se ha perdido un átomo de hidrógeno adicional, es decir, HBr, por lo que la masa del ion corresponde a $(M - H - HBr)^-$.

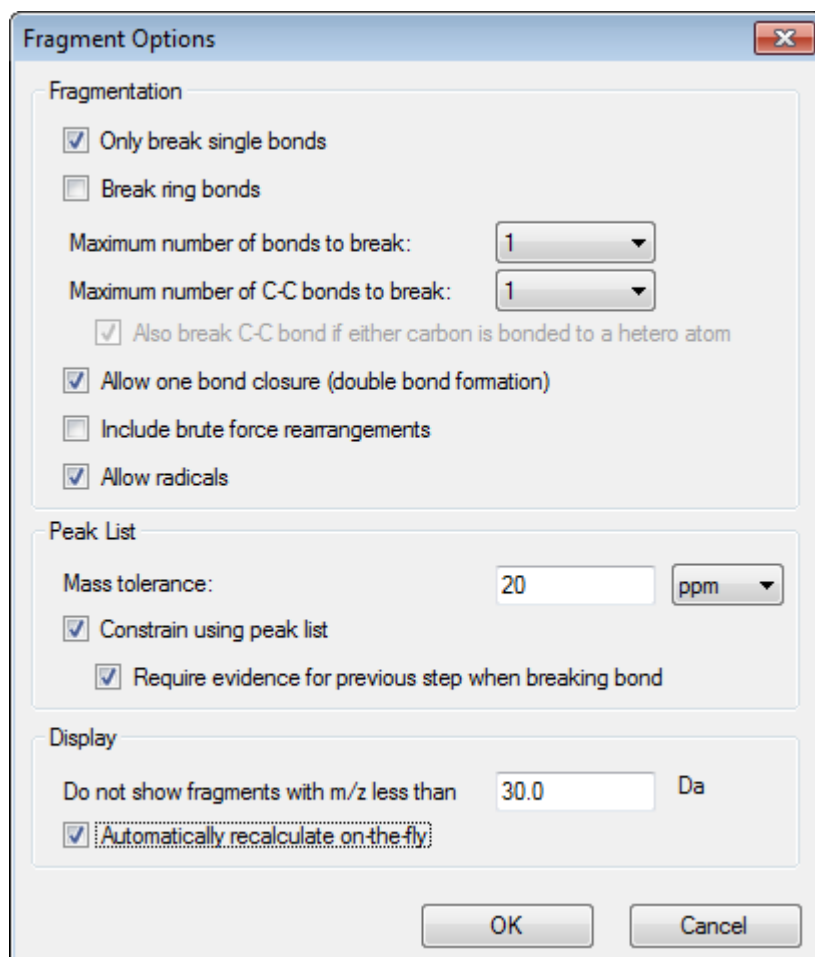
Work with Fragments

El software contiene un predictor de iones fragmentarios que puede generar la masa de especies que se forman rompiendo enlaces y agregando o quitando átomos de hidrógeno.

Nota: Esta predicción es simplemente aritmética, no sigue una lógica química y tiende a sobrestimar los fragmentos producidos, pero es una herramienta útil para analizar los fragmentos.

1. Con el panel de estructura activo, haga clic en **Show > Fragments Pane.** Aparecerá una barra de progreso en función de la configuración del cuadro diálogo **Fragment Options**. Consulte [Figura D-48](#).
2. Haga clic en el icono **Show options dialog**, establezca los parámetros como se muestra en [Figura D-48](#) y, a continuación, haga clic en **OK**.

Figura D-48: Cuadro de diálogo Fragment Options



Establezca las opciones de modo que se genere un pequeño conjunto de fragmentos simples y, a continuación, incremente el número y el tipo de los enlaces rotos según sea necesario a fin de explicar los iones observados. Si se permite que se rompan muchos enlaces, se ralentizará el programa y se generarán muchos fragmentos improbables.

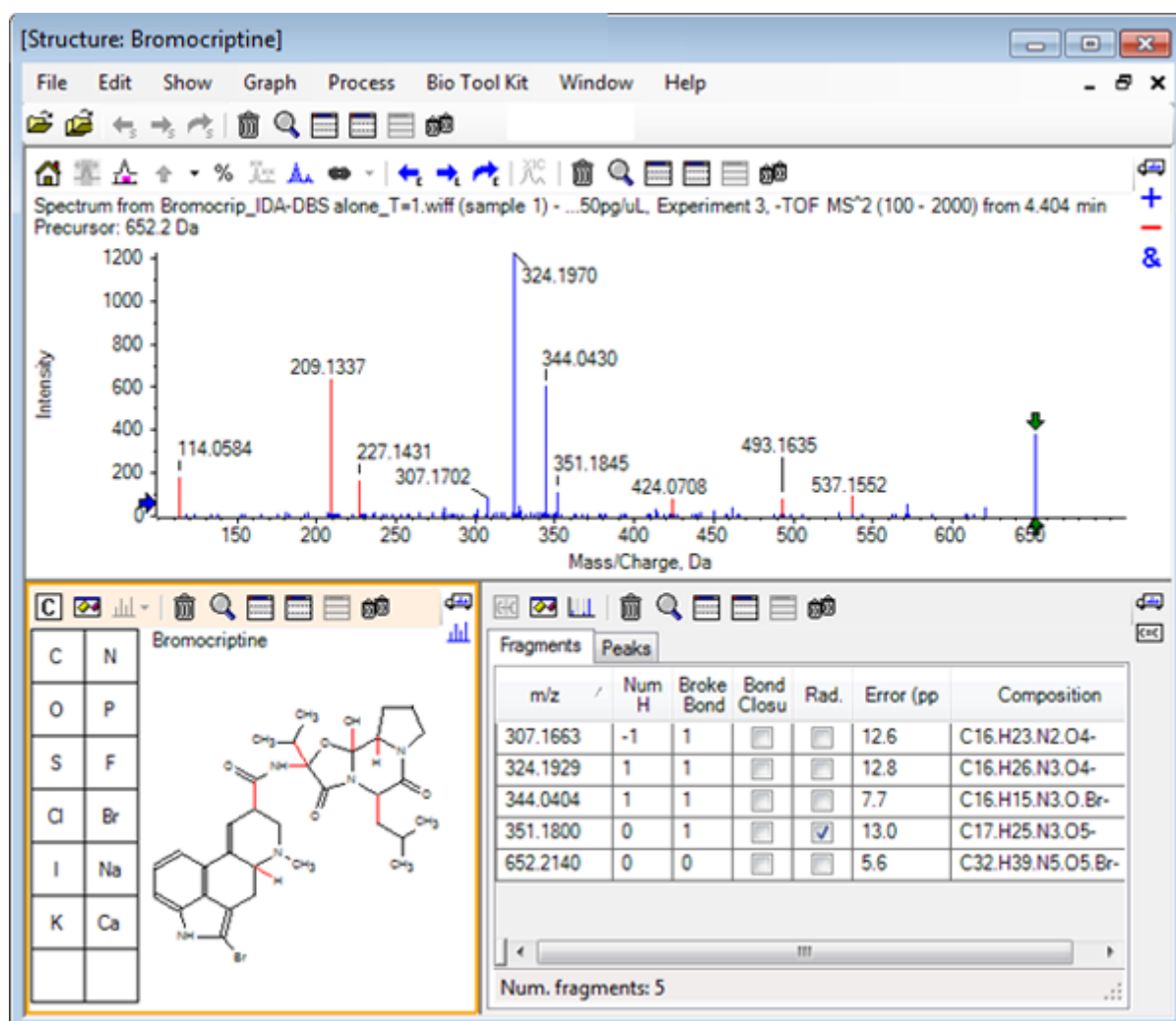
La mayor parte de los parámetros del cuadro diálogo **Fragment Options** se describen en la *Guía de referencia*, pero debe tenerse en cuenta lo siguiente:

- Si se selecciona la casilla **Automatically recalculate on-the-fly**, los cambios en el espectro (el cambio a otro espectro, el ajuste de los parámetros) o la selección hacen que se vuelvan a calcular los fragmentos. Este suele ser el comportamiento deseado, pero puede afectar a la velocidad del análisis si se establecen las opciones para producir muchos fragmentos. Si no se utiliza esta opción, haga clic en el icono **Fragment**.
- **Constrain using peak list** significa que el software solo muestra fragmentos que coinciden con picos del espectro con la tolerancia adecuada.
- **Require evidence for previous step when breaking bond** solo es efectivo cuando se rompe más de un enlace. El programa primero rompe un enlace y, a continuación, considera la posibilidad de romper enlaces en los fragmentos resultantes. Si se

selecciona esta opción, debe haber iones correspondientes a los fragmentos antes de que estos se rompan más.

Con estos parámetros, la vista tendrá un aspecto parecido al de [Figura D-49](#), pero puede variar ligeramente porque solo se tienen en cuenta los picos que superan el valor de umbral (también etiquetado).

Figura D-49: Estructura de la bromocriptina



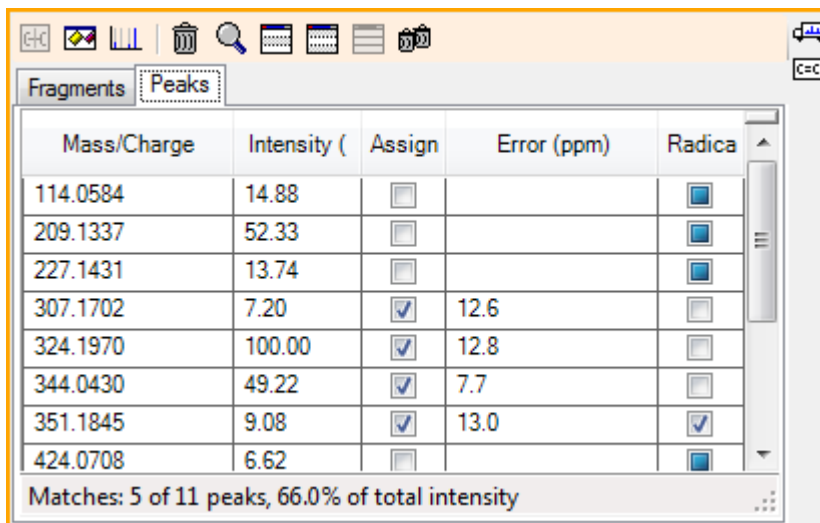
Nota: Los picos del espectro se muestran en colores para indicar los asignados (azules) y los no asignados (rojos) que coinciden con los picos de la pestaña Fragments.

El panel de fragmentos contiene dos pestañas:

- **Fragments:** en este ejemplo, la lista es corta porque se generan muchos fragmentos en estas condiciones y solo unos cuantos de ellos coinciden con los picos del espectro, según convenga, porque se ha seleccionado la casilla **Constrain using peak list**.

- **Peaks:** muestra una tabla que enumera los picos del espectro que superan el umbral, sus intensidades y si están asignados a un fragmento. En el caso de los picos asignados, también se muestra el error de masa.

Figura D-50: Panel Fragments

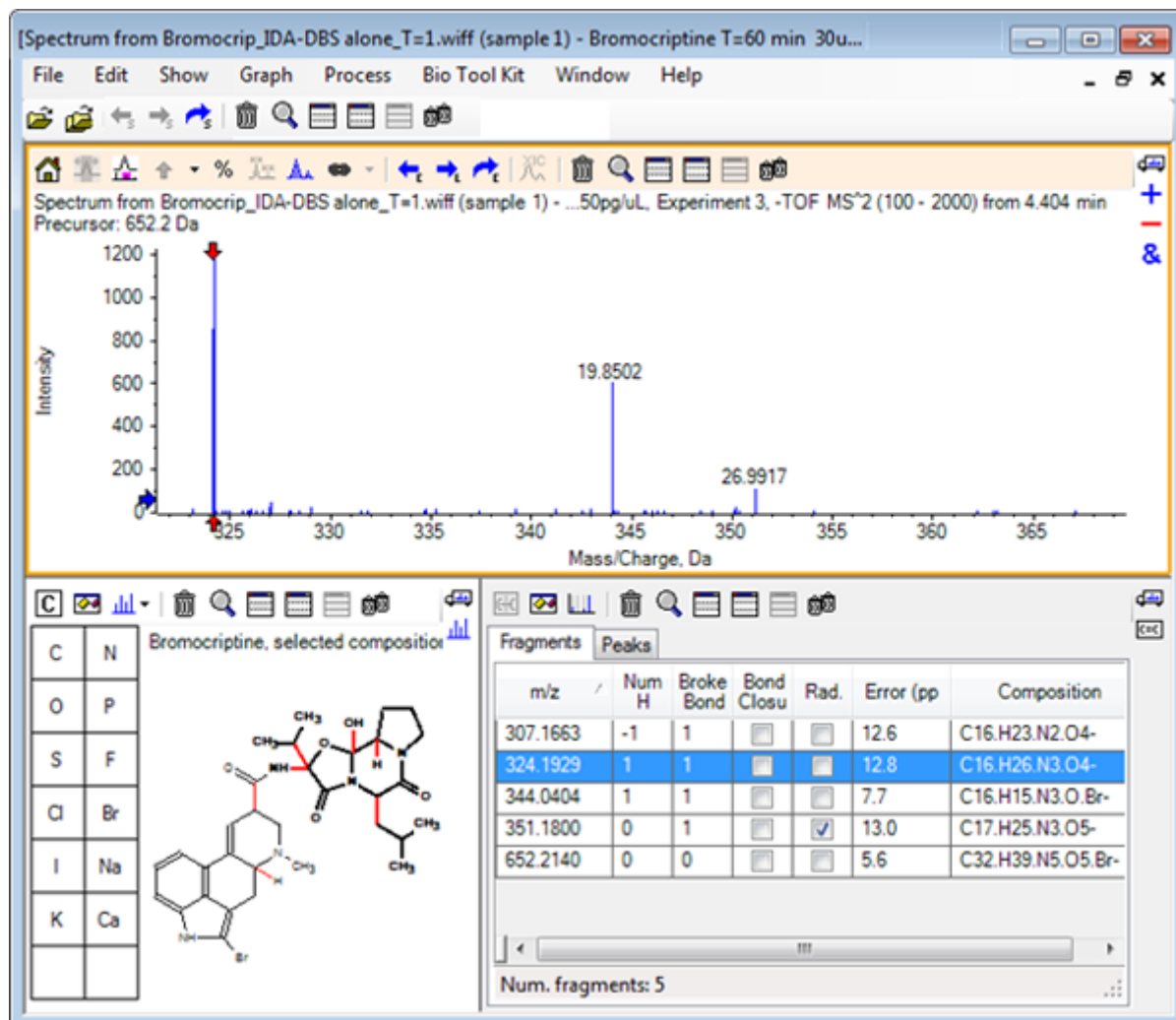


Mass/Charge	Intensity (Assign	Error (ppm)	Radica
114.0584	14.88	<input type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
209.1337	52.33	<input type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
227.1431	13.74	<input type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
307.1702	7.20	<input checked="" type="checkbox"/>	12.6	<input type="checkbox"/>
324.1970	100.00	<input checked="" type="checkbox"/>	12.8	<input type="checkbox"/>
344.0430	49.22	<input checked="" type="checkbox"/>	7.7	<input type="checkbox"/>
351.1845	9.08	<input checked="" type="checkbox"/>	13.0	<input checked="" type="checkbox"/>
424.0708	6.62	<input type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>

Matches: 5 of 11 peaks, 66.0% of total intensity

3. En la pestaña **Fragments**, seleccione la fila correspondiente a una relación m/z de 324,1929. El pico se marca con una flecha roja para mostrar que es la masa esperada, y la subestructura correspondiente se dibuja en negrita en el panel de estructura.

Figura D-51: Cuadro de diálogo Fragmentation



Nota: La composición y la masa en el título del panel de estructura reflejan ahora la masa del ion, y no la neutra.

- Examine las estructuras asignadas de los demás fragmentos.

Todas son relativas al enlace de amida central que separa las dos partes cíclicas de la molécula y parecen posibles.

Nota: Las composiciones elementales asignadas son coherentes con los espectros superpuestos generados en [Use a Reference Spectrum](#), donde la presencia de Br en los fragmentos se ha deducido comparando los espectros de los iones moleculares que contienen ⁷⁹Br y ⁸¹Br.

- Amplíe el espectro para que se vea todo el rango de masa.
Dos de los picos principales están asignados, una m/z de 324,1970 y una m/z de 344,0430, lo que corresponde a los dos lados de la molécula, y se dibujan en azul. No obstante, varios picos están aún sin asignar.

6. Abra el cuadro de diálogo **Options** y cambie el valor de **Maximum number of bonds to break** a **2**.

Nota: En función del valor de umbral, esta opción puede dar lugar a que se asignen picos pequeños, aunque no los más abundantes (relación m/z de 114,0584, 209,1337 y 227,1431, por ejemplo). Si el espectro está etiquetado con respecto a una flecha roja, haga clic en el panel de estructura para borrar cualquier selección a fin de mostrar los valores de masa absoluta.

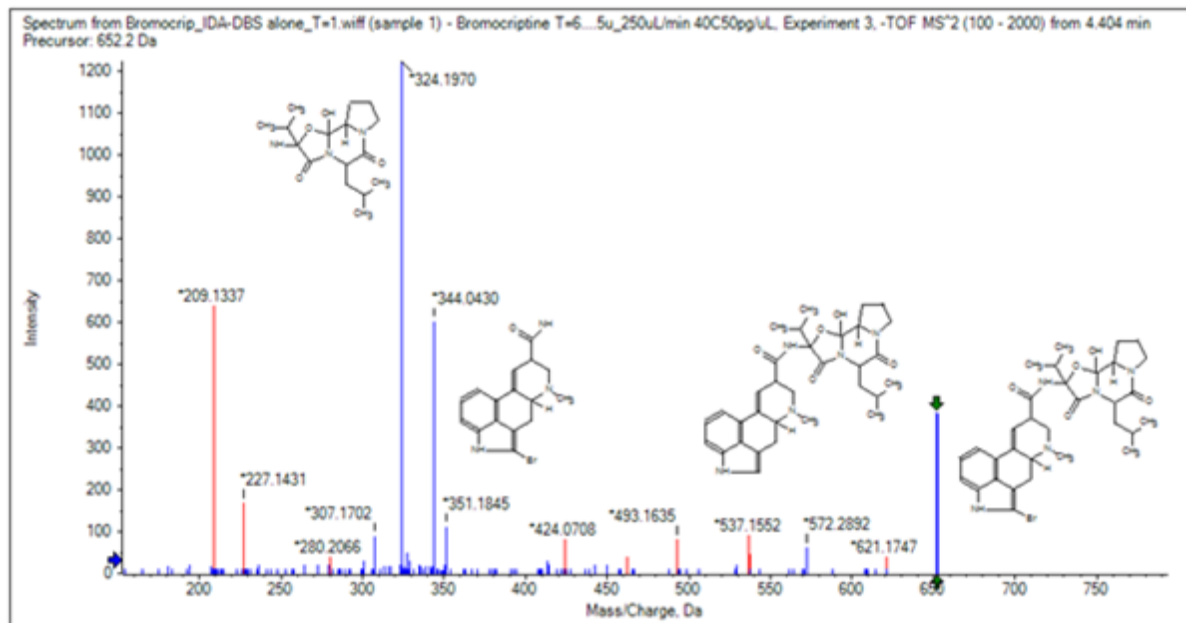
7. Seleccione la casilla **Break ring bonds** y, a continuación, haga clic en **OK**. Ahora varios iones adicionales coinciden, incluidos aquellos con una m/z de 209,1337 y 227,1431. Si se seleccionan nuevas masas en el panel **Fragments** para resaltar las subestructuras, se muestra que estas son relativas a escisiones de anillo en el péptido cíclico que forma parte de la molécula. Es probable que esos iones sean útiles para determinar las ubicaciones de transformación metabólica de esta región.

Add Substructures to a Spectrum

Seleccione las partes de la estructura y, a continuación, utilícelas para anotar el espectro para consultas posteriores. En función del tamaño del panel de espectro, utilice el cuadro de diálogo **Options** en el panel de estructura para ajustar **Target Bond Length** para la copia.

1. En el cuadro de diálogo **Fragment Options**, desmarque **Break ring bonds** para simplificar el número de fragmentos.
2. En el panel de fragmentos, seleccione una fila que corresponda a uno de los iones más abundantes para resaltar la subestructura correspondiente.
3. Haga clic dentro del panel de estructura.
4. Haga clic en **Edit > Copy**.
5. Haga clic con el botón derecho del ratón en un panel de espectro activo y, a continuación, haga clic en **Paste Image**. Se copiará una imagen de la subestructura en el panel de espectro.
6. Desplace la imagen arrastrándola a la ubicación deseada. Se puede eliminar una imagen por completo haciendo clic con el botón derecho del ratón y, a continuación, seleccionando **Delete Image**. Las imágenes se vinculan al espectro, es decir, a las posiciones de intensidad de masa, de manera que se mueven cuando los usuarios se desplazan y amplían la imagen.
7. Repita los pasos del 2 al 6 para los demás iones de fragmento a fin de generar una imagen final similar a [Figura D-52](#).

Figura D-52: Espectro con subestructuras agregadas



- Haga clic en **File > Print > Print Preview Window** para verificar las posiciones de las subestructuras.
Como los iones coincidentes se dibujan en color azul, se pueden asociar fácilmente con las estructuras correspondientes.
- Copie la imagen y, a continuación, péguela en un programa de dibujo para agregar líneas u otras características.

Work with Related MS/MS Spectra

En algunas aplicaciones, es útil poder comparar el espectro de un compuesto modificado, un metabolito, por ejemplo, con el espectro y la estructura del compuesto precursor.

- Utilice el explorador de IDA para que se vuelva a mostrar el gráfico de contorno.
Seleccione el pico a 668,2176/4,21 y, a continuación, oculte el gráfico de contorno.

Puesto que los paneles de estructura y fragmentos están vinculados al espectro, se han actualizado para reflejar el nuevo espectro, pero la estructura sigue siendo la del compuesto precursor, mientras que el espectro se ha obtenido de un compuesto con un átomo de oxígeno adicional (con 16 Da más de masa). En muchos casos, sigue habiendo algunas coincidencias, que indica las partes de la molécula que permanecen intactas, pero, en este caso, ninguno de los iones significativos coinciden y se dibujan en rojo.

El panel de estructura contiene algunas herramientas de dibujo sencillas que permiten realizar modificaciones en la estructura para comprobar si se pueden encontrar coincidencias.

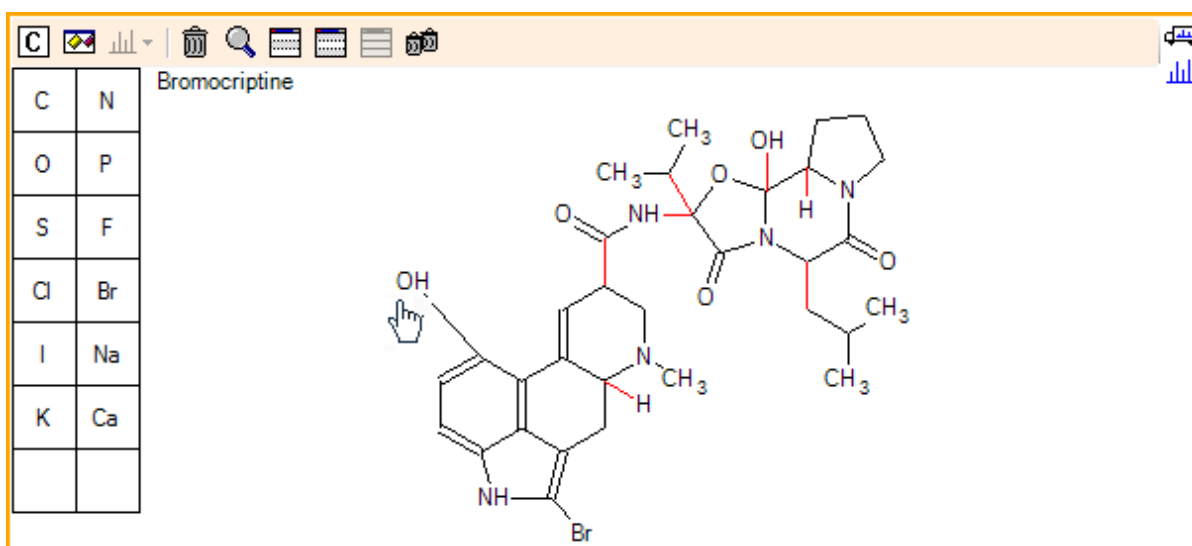
- El lado izquierdo del panel de estructura contiene una cuadrícula con símbolos de elementos. Haga clic en **O** y, a continuación, arrástrelo a la estructura principal.

Tutorial de Explorer

Cuando el átomo está cerca de la estructura, se une con un enlace que sigue al cursor mientras este se arrastra hasta cerca de la estructura.

3. Arrastre el símbolo **O** para que se dibuje un enlace hasta la parte inferior de la estructura (ergolina) y, a continuación, suelte el ratón (por ejemplo, coloque el nuevo átomo en el anillo de fenilo). En [Figura D-53](#) se muestra el proceso.

Figura D-53: Panel de estructura

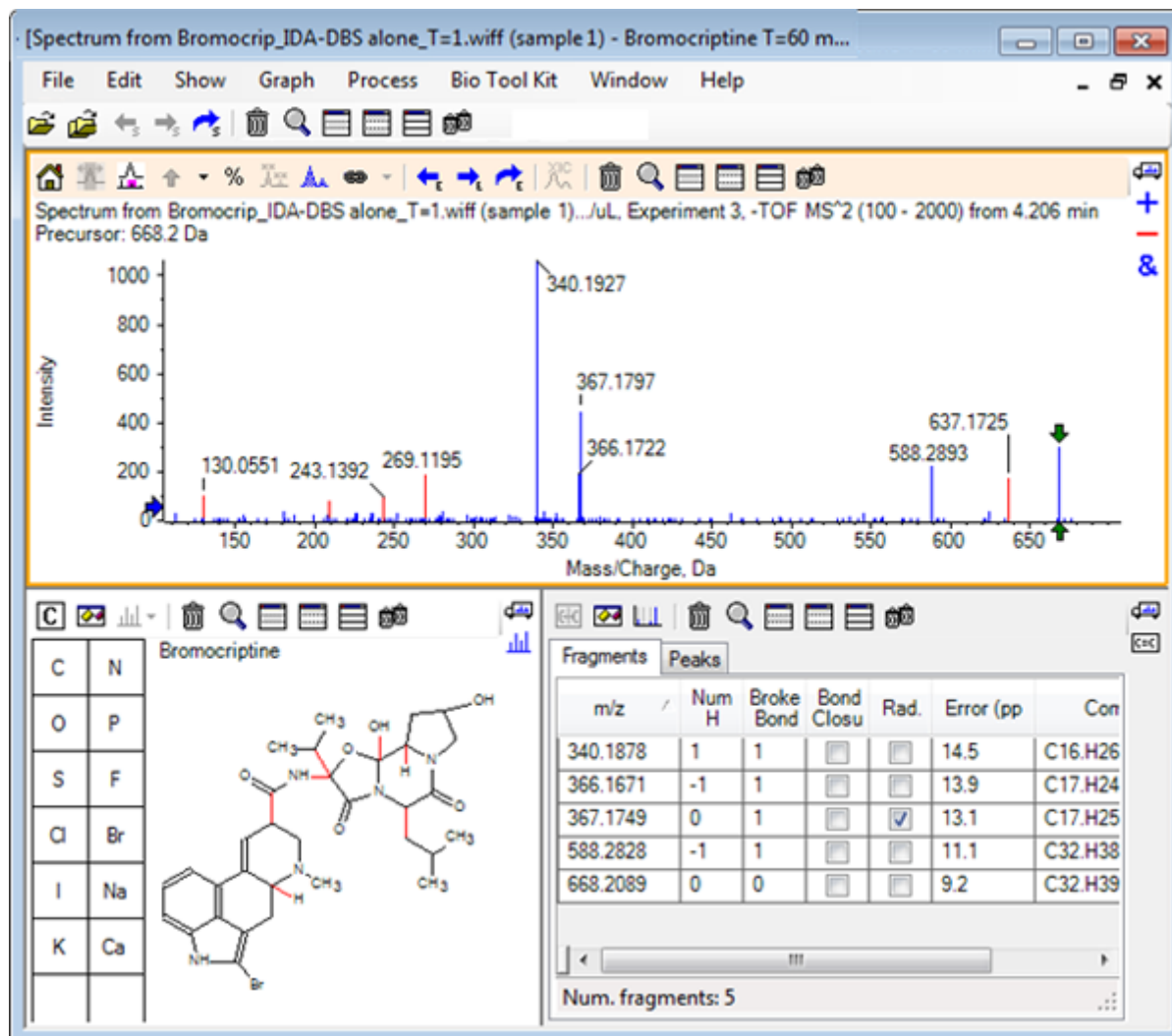


El espectro se vuelve a actualizar y muestra dos coincidencias: el ion molecular a 668,2089 y el ion correspondiente a la pérdida de HBr a 588,2828. Eso sugiere que la composición elemental global ahora es correcta, pero el hecho de que los fragmentos más importantes no coincidan sugiere que el átomo no se ha agregado a la parte correcta de la molécula.

4. Haga clic en el grupo **OH** recién agregado y arrástrelo al anillo de pirrolidina en la parte superior de la estructura. Asegúrese de que solo el átomo que se esté moviendo se dibuje en negrita. De lo contrario, se moverá toda la subestructura resaltada.

Como se muestra en [Figura D-54](#), esto hace que los iones a 340,1927, 366,1722 y 367,1797 coincidan y que las subestructuras correspondientes sean formas hidroxiladas de iones que coinciden en el espectro del compuesto precursor.

Figura D-54: Espectro de bromocriptina



Muchos de los picos de masa baja sin coincidencia estaban presentes en el espectro precursor, o son equivalentes hidroxilados, que han coincidido cuando se ha permitido al algoritmo romper enlaces de anillo, pero hay un ion de masa alta a 637,1725 que es probable que se deba a una fragmentación simple y para el que aún no hay coincidencia.

- En la pestaña **Fragments**, seleccione la fila de 668,2089 para que se etiquete y que los demás iones se etiqueten con respecto a ella. Esto muestra que el pico a 637,1725 corresponde a la pérdida de 31,0364 de la molécula precursora que podría ser CH_3NH_2 o CH_3O . Puesto que este ion no se ha observado en el espectro de la molécula precursora, lo más probable, es que se obtenga de la hidroxilación que tiene lugar en uno de los grupos metilo en la parte de péptido cíclico de la estructura.
- Haga clic dos veces en el panel de estructura para deseleccionar la estructura y, a continuación, arrastre el nuevo grupo de **OH** a uno de los grupos metilo a la derecha de la estructura.

7. Abra el cuadro de diálogo **Fragment Options**, establezca **Mass tolerance** en 30 ppm y, a continuación, haga clic en **OK**.

El ion 637 ahora presenta una coincidencia y, al seleccionar esta fila en el panel de fragmentos, se muestra que el ion puede corresponder a la pérdida de una fracción metoxilo.

8. Abra el cuadro de diálogo **Fragment Options**, seleccione la casilla **Break ring bonds** y, a continuación, haga clic en **OK**.

Ahora se puede encontrar coincidencia para la mayor parte de los fragmentos, aunque para el ion a 209 solo se puede encontrar coincidencia si se permite que tres enlaces se rompan (los dos necesarios para la molécula precursora, más la pérdida del átomo de oxígeno adicional).

Nota: El panel Fragments ahora contiene varias filas correspondientes a algunas de las masas, como 637, 1905. Cada una de esas filas corresponde a un posible fragmento distinto (y aún se generan más si se permite que tres enlaces se rompan). La pestaña Peaks del panel Fragments solo muestra la coincidencia que se considera la mejor según una combinación de precisión de masa, número de enlaces rotos, si el fragmento es un radical, etc. En este caso, la mejor coincidencia corresponde a un fragmento que se ha podido generar para el compuesto precursor, pero que no se ha observado, por lo que las opciones adicionales mostradas en la pestaña Fragments pueden ser útiles para sugerir posibles vías que no son evidentes.

Resumen

En esta sección se han tratado las tareas siguientes:

- Introducir una estructura como archivo .mol y vincularla a un espectro.
- Seleccionar partes de la estructura y, a continuación, determinar si hay un pico de masa correspondiente.
- Generar un panel de fragmentos y establecer los parámetros para observar fragmentos simples.
- Trabajar con las pestañas **Fragments** y **Peaks** para mostrar las composiciones coincidentes, las subestructuras y los picos de masa.
- Modificar **Fragment Options** para permitir vías de fragmentación más complejas.
- Agregar subestructuras a un panel de espectro.
- Modificar la estructura para explorar la fragmentación de las moléculas relacionadas, como pueden ser los metabolitos.

En general, es recomendable empezar permitiendo los procesos de fragmentación simple y las opciones de fragmentación adicionales (enlaces adicionales, enlaces de anillo) que sean necesarios para explicar los iones observados. De esta manera, se mantiene la coherencia con el hecho de que los iones suelen fragmentarse en una serie de pasos en que los fragmentos más simples se forman antes, en lugar de en un paso conjunto que rompe varios enlaces. Evidentemente, un fragmento simple puede ser inestable y, de inmediato, fragmentarse aún más hasta que no se observe. Además, permitir muchos pasos

de fragmentación implica más tiempo de procesamiento y que se necesite más tiempo para que dichos pasos se completen.

Cuando se comparan moléculas relacionadas, puede resultar útil superponer el espectro de referencia (molécula precursora) y la forma modificada y, a continuación, vincular la vista a una estructura o panel de fragmentos, que se actualiza al cambiar de espectro activo. Sin embargo, el color que se aplica a los iones emparejados y no emparejados puede resultar difícil de distinguir si hay superposiciones, por lo que se recomienda trabajar con espectros individuales hasta que se familiarice con el programa y las vistas.

Work with Multiple Samples

Aunque lo habitual es trabajar con una sola muestra, en ocasiones se puede obtener más información comparando o visualizando varias muestras a la vez. En esta sección se describen algunas de las herramientas disponibles en el software, primero para dos muestras y, después, para más de dos muestras.

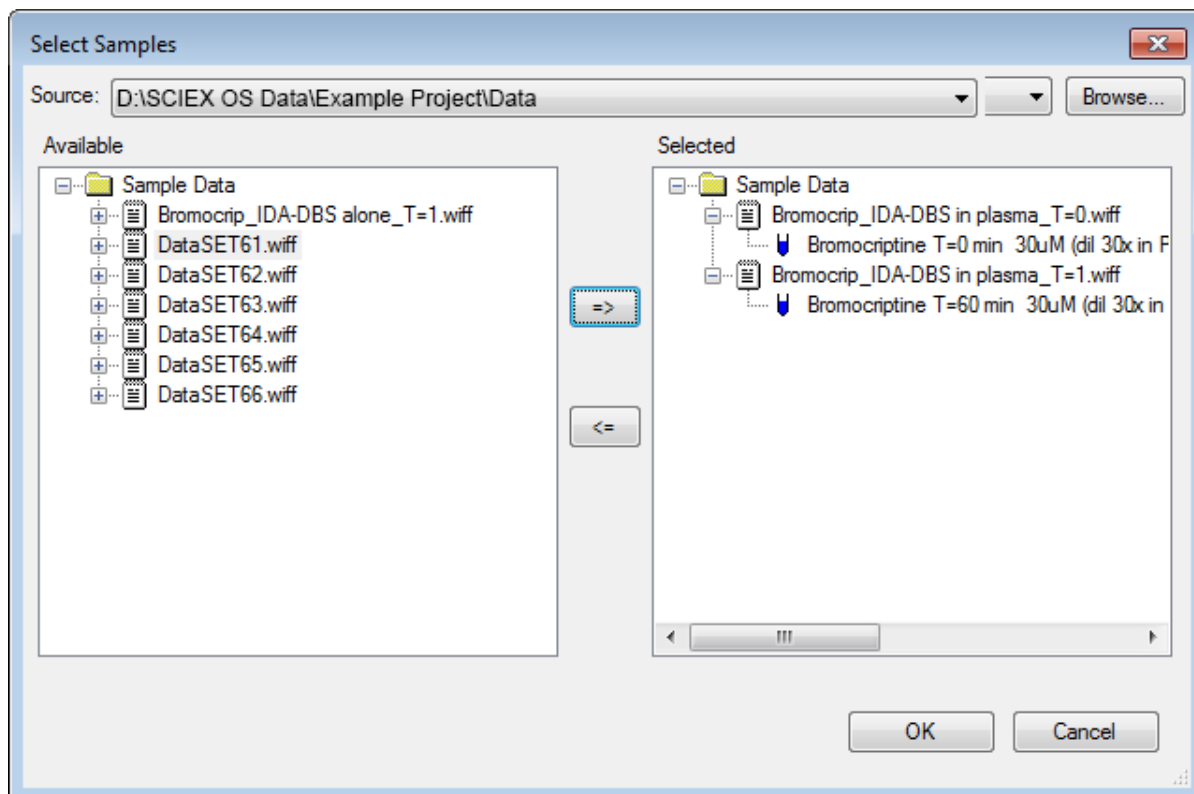
Work with Two Samples

Un flujo de trabajo común es comparar dos muestras obtenidas en condiciones distintas para determinar los cambios. Por ejemplo, dos puntos temporales distintos tras la administración de un fármaco. Los datos que se comparan para este ejercicio (T = 0 horas y T = 1 hora) proceden de una incubación de bromocriptina con microsomas hepáticos de rata enriquecidos en plasma.

Cierre todas las ventanas que estén abiertas antes de empezar.

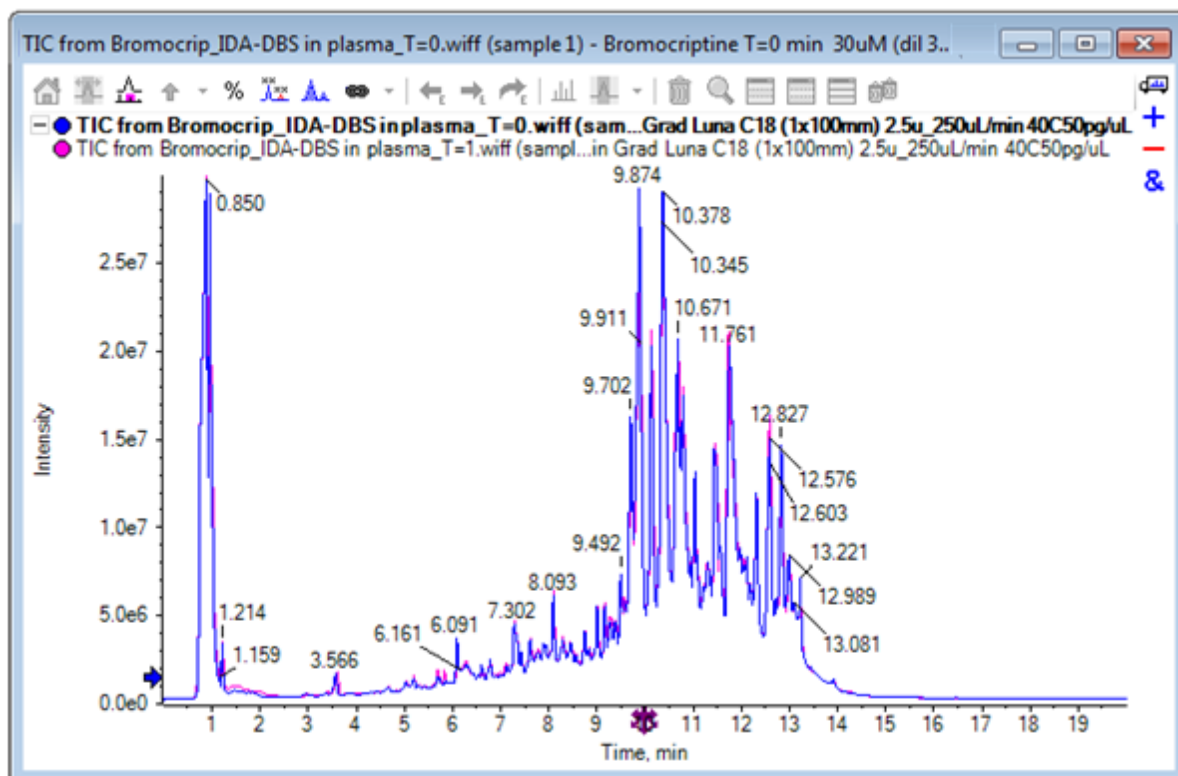
1. Haga clic en **File > Open Multiple Samples**, y vaya a la carpeta que contiene los datos de muestra.
2. Seleccione los archivos **Bromocrip_IDA-DBS in plasma_T=0.wiff** y **Bromocrip_IDA-DBS in plasma_T=1.wiff** y arrástrelos al lado derecho de la ventana.
3. Haga clic en **OK**.

Figura D-55: Seleccionar varias muestras



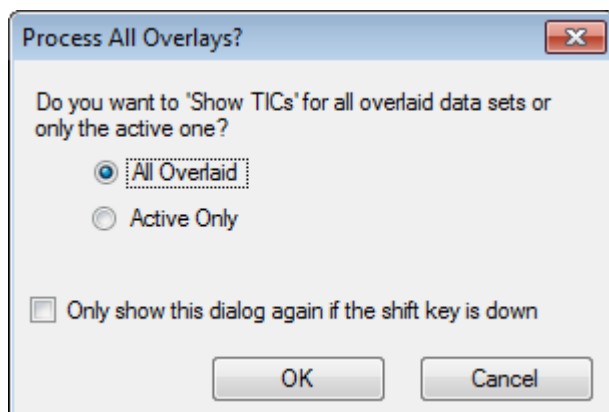
Al contrario de lo que sucede al abrir un solo archivo IDA, donde se muestran los diversos TIC del estudio y los análisis dependientes, con varios archivos IDA se muestra un solo TIC de todos los datos para todas las muestras. En este caso, se muestran dos TIC en [Figura D-56](#).

Figura D-56: TIC



4. Haga clic en **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**. para abrir el cuadro de diálogo **Select Experiment**.
5. Seleccione **Period 1, Experiment 1 - TOF MS (100 - 2000)** y haga clic en **OK**.

Figura D-57: Cuadro de diálogo Process All Overlays



El cuadro de diálogo **Process All Overlays**, que se muestra siempre que se procesan trazos superpuestos, permite al usuario elegir si se deben procesar todos los trazos o solo el activo. Procesar todos los trazos es útil porque las operaciones posteriores afectan a todos los trazos (muestras).

6. Seleccione **All Overlaid**.

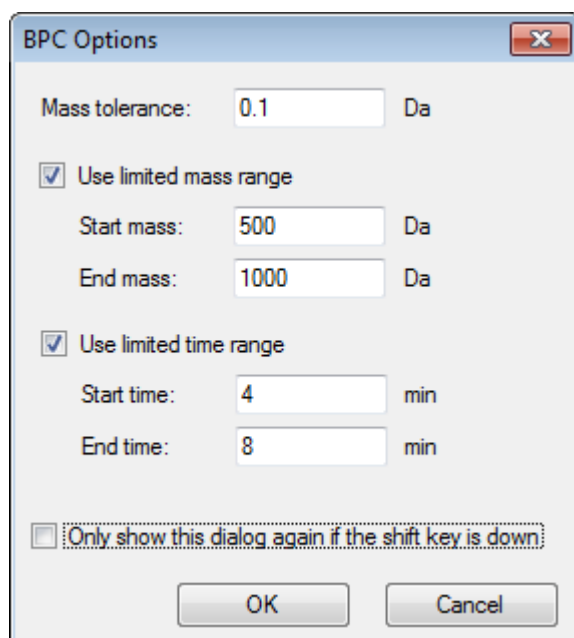
Tutorial de Explorer

7. Seleccione la casilla **Only show the dialog again if the shift key is down** para que esta opción sea la acción predeterminada.
8. Haga clic en **OK**.
Se genera un panel con las superposiciones de los TIC de estudio. La cromatografía es muy reproducible y los picos de metabolito se intensifican para que puedan localizarse algunos de ellos al ampliar y comparar los cromatogramas (examine la región a alrededor de 6 min), pero habitualmente se requiere más trabajo. Se pueden generar vistas más fáciles de comparar de varias maneras. En este ejemplo, se utiliza un cromatograma de pico base.

Nota: Si se hace clic en **File > Open Heat Map TICs from Wiff**, se pueden generar las vistas de tira directamente sin tener que mostrar primero los cromatogramas superpuestos.

9. Oculte el panel de TIC original y, a continuación, haga clic en **Show > Base Peak Chromatogram (BPC)**..
10. En el cuadro de diálogo **BPC Options**, modifique los valores según sea necesario para que coincidan con los valores de [Figura D-58](#) y, a continuación, haga clic en **OK**.

Figura D-58: Cuadro de diálogo BPC Options



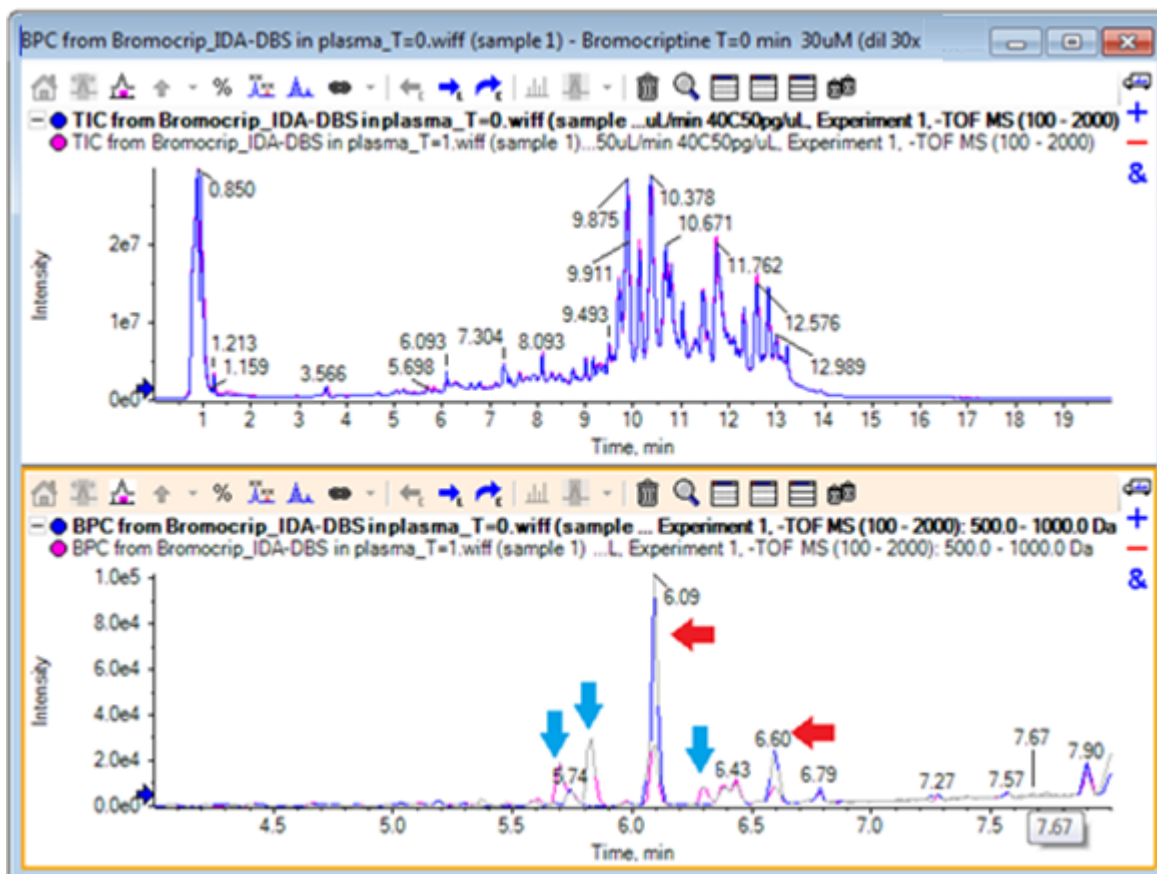
Un cromatograma de pico base se crea mediante la representación de la intensidad del pico más grande en cada análisis como función del tiempo de retención. Para proporcionar información adicional, cada trazo cambia de su color normal a gris cuando la masa del pico base cambia en un valor superior al de la tolerancia de masa especificada en este cuadro de diálogo.

Opcionalmente, puede limitar el rango de masas considerado, lo cual puede evitar artefactos ocasionados por los picos de fondo con ruido, por ejemplo, y establecer el rango de tiempo de retención para acelerar el procesamiento. Como sabemos que la

masa de la bromocriptina es aproximadamente 652, los metabolitos simples no tienen una relación m/z inferior a 500.

- En el cuadro de diálogo **Process All Overlays**, asegúrese de que la opción **All Overlaid** esté seleccionada y, a continuación, haga clic en **OK**.
Un nuevo panel muestra el BPC (cromograma de pico base), que es mucho más sencillo y fácil de comparar que los TIC originales.

Figura D-59: BPC



Hay dos picos (marcados con flechas rojas) que parecen reducirse en la muestra de 1 hora (rosa) si se comparan con la muestra T = 0 (azul). Esos picos corresponden a la bromocriptina (6,09 min) y a un isómero. También hay tres picos (flechas azules) que están presentes en la muestra T = 1, pero no en la muestra T = 0. Esos picos son potenciales metabolitos.

Nota: El BPC puede ser muy útil, pero solo refleja el comportamiento del ion más intenso (en el rango de masas elegido). Los picos de masa que nunca se convierten en pico base jamás pueden mostrarse, por lo que se deben utilizar otras herramientas cuando se busquen diferencias entre las muestras.

- Oculte el panel de TIC.
- Haga doble clic en el panel BPC a 6,09 min.

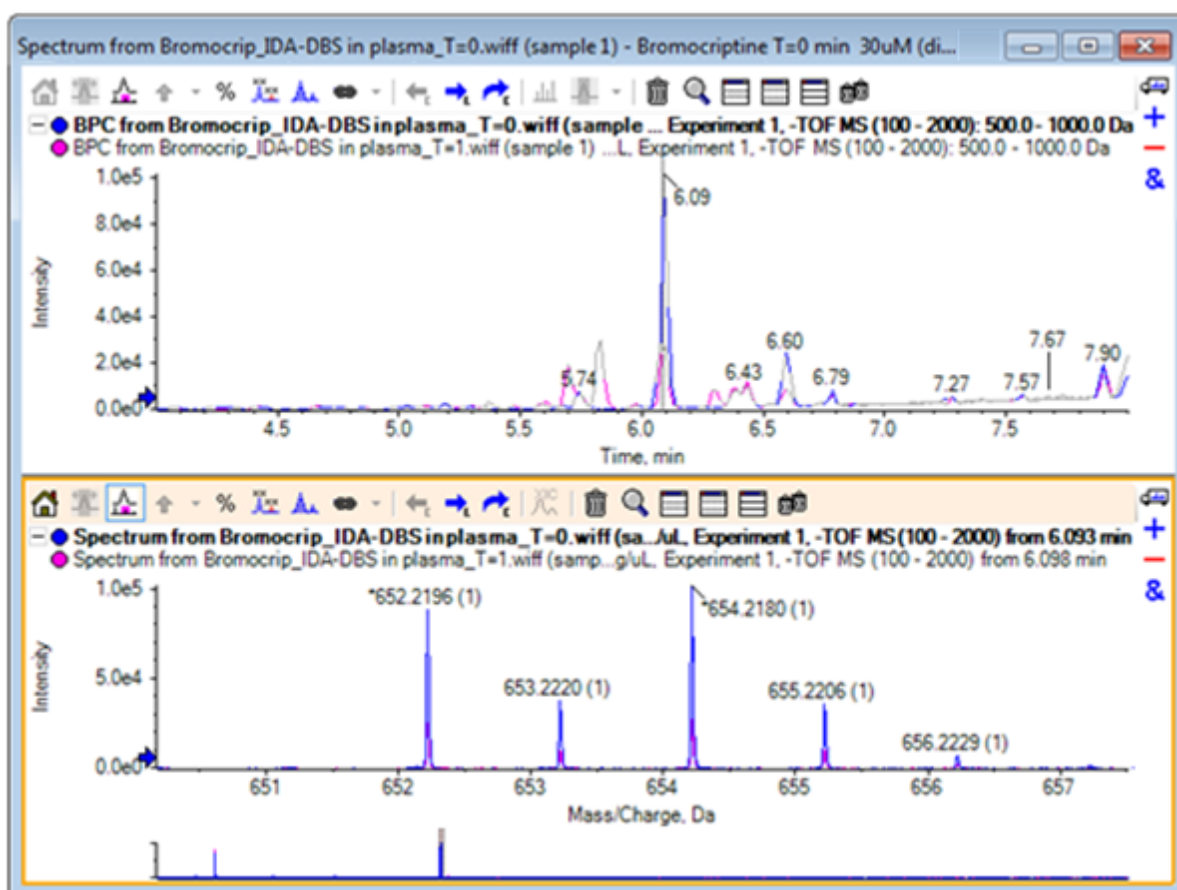
Tutorial de Explorer

14. Seleccione **All Overlaid** en el cuadro de diálogo **Process All Overlays** y, a continuación, haga clic en **OK**.
Esta acción genera dos espectros superpuestos.
15. En el panel de espectro, haga clic y, a continuación, amplíelo para mostrar la agrupación de isótopos con una relación m/z aproximada de 652. Consulte [Figura D-60](#).

El panel de espectro contiene espectros superpuestos de las dos muestras, de manera que estas se puedan comparar con facilidad. En este ejemplo, es obvio que la intensidad en la muestra T = 1 h (rosa) es inferior a la de la muestra T = 0 h.

El gráfico de vista general es muy útil al examinar datos de alta resolución como estos, porque permite examinar los detalles y, a la vez, mantener visible todo el espectro.

Figura D-60: Agrupación de isótopos con una relación m/z aproximada de 652



16. En el panel Chromatogram, mueva el cursor sobre la línea que muestra el tiempo de espectro (en la que ha hecho doble clic anteriormente).
17. Cuando el cursor cambie a una flecha con dos puntas, arrástrelo al pico situado aproximadamente a 5,8 min.

El espectro sigue mostrando el rango de masas expandido, que ahora solo presenta ruido y pequeños picos. Para mostrar los picos rosas grandes en la ventana principal,

arrastre el rectángulo rosa en el gráfico de vista general que se indica con una flecha negra a continuación. La vista vuelve a su estado normal cuando se suelta el ratón.

Para [Figura D-62](#), se ha seleccionado el icono **Label all overlaid traces**.

Figura D-61: BPC y espectro

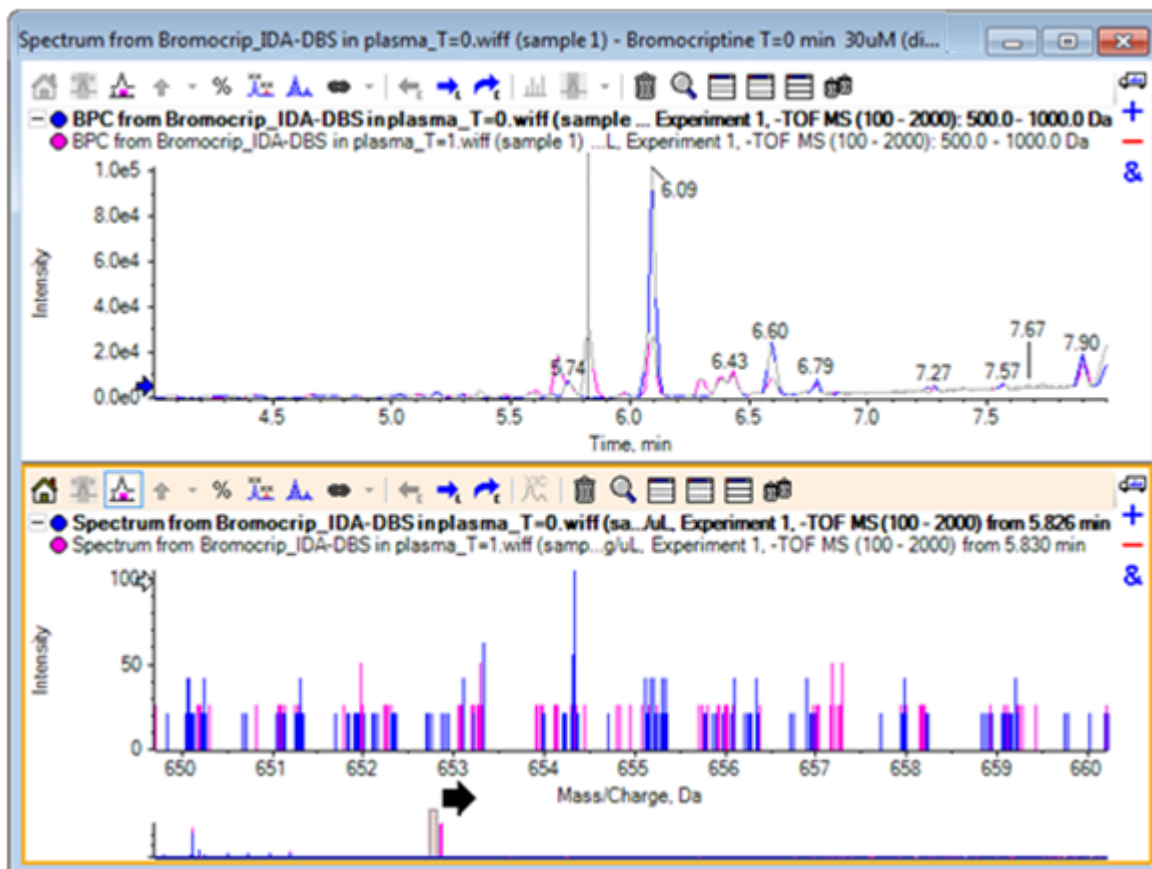
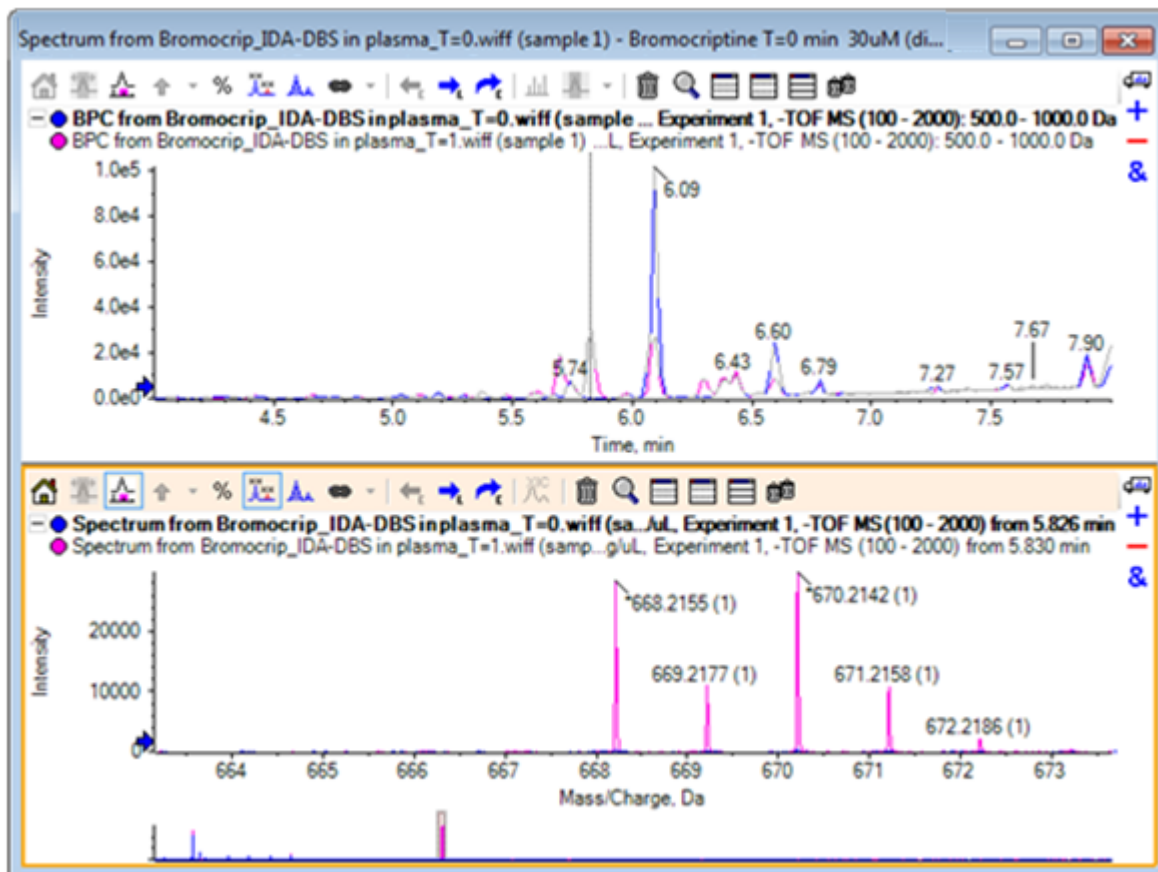


Figura D-62: BPC y espectro con la opción Label All Overlaid Traces aplicada



Estos picos no están presentes en la muestra T = 0.

18. Cierre todas las ventanas antes de continuar.

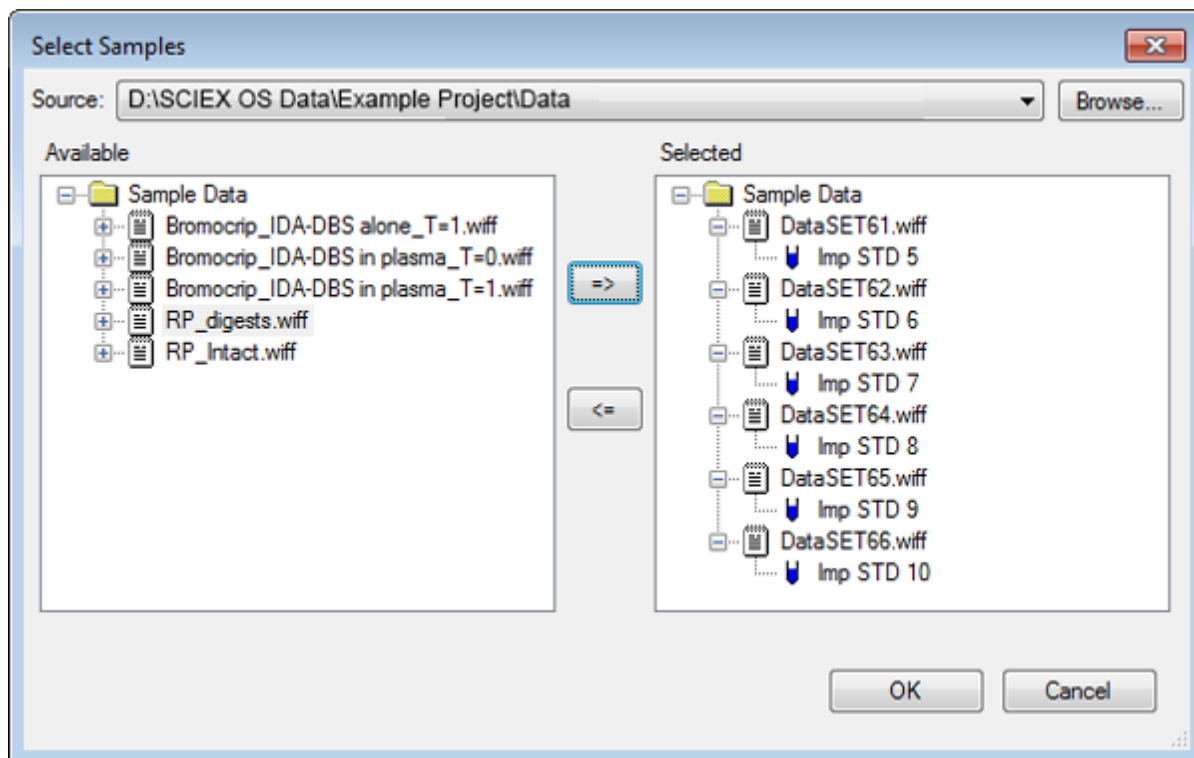
Work with More than two Samples

Con más de dos muestras superpuestas, las ventanas pueden dar lugar a confusión y puede resultar más difícil asociar las diferencias con la muestra correcta. El software contiene otras herramientas que ayudan a mostrar los datos de muchas muestras.

El conjunto de datos utilizado para el ejemplo procede de un análisis de perfil de impurezas de seis conjuntos de datos distintos.

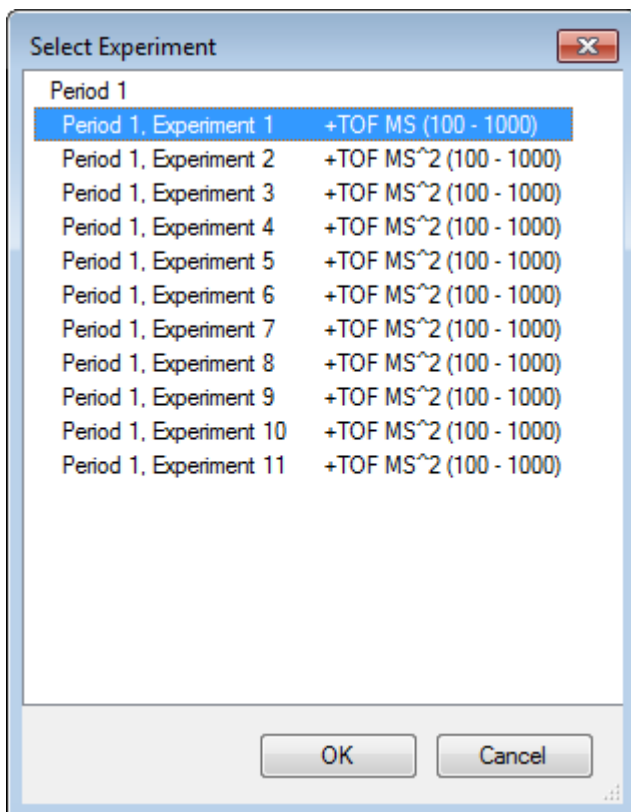
1. Haga clic en **File > Open Multiple Samples..**
2. Seleccione los archivos de **DataSet61.wiff to DataSet66.wiff** y, a continuación, muévalos al panel **Selected**.

Figura D-63: Varias muestras seleccionadas



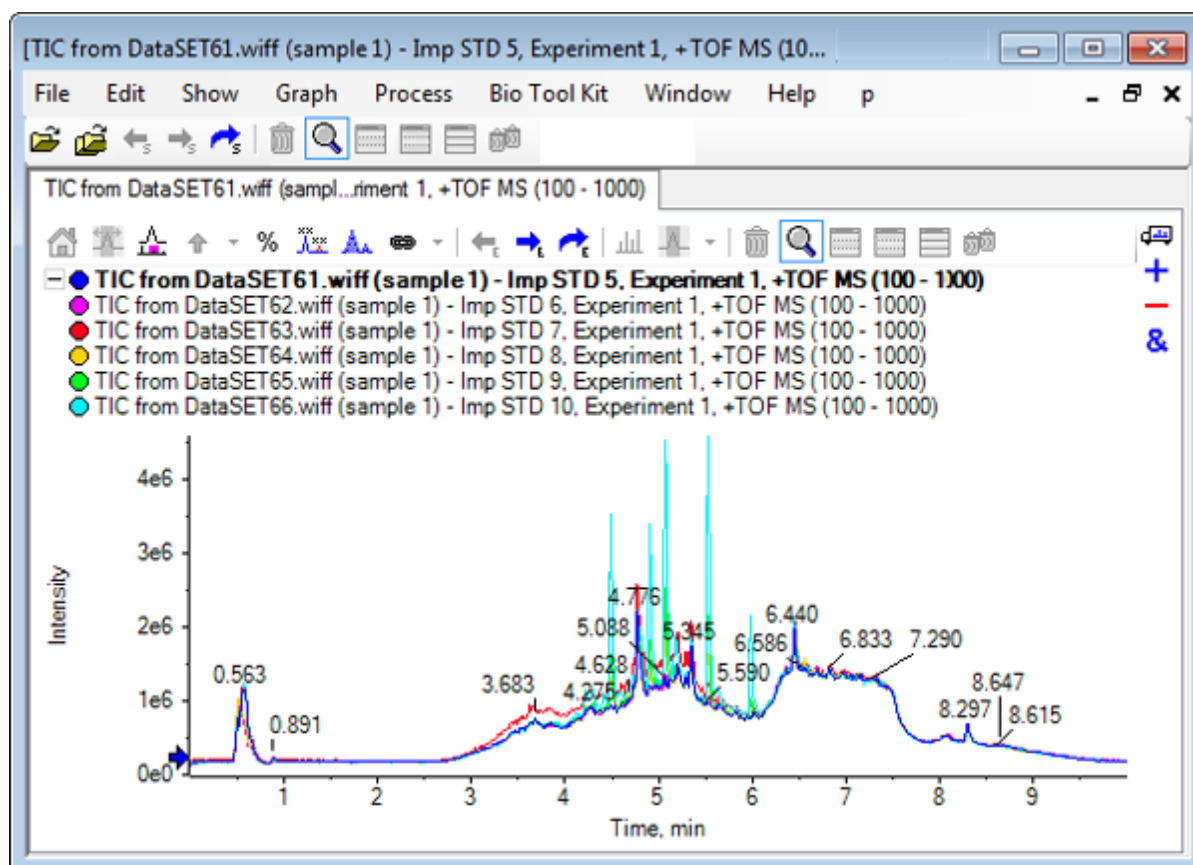
3. Haga clic en **OK**.
4. Haga clic en **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)**.
5. Seleccione **Period 1, Experiment 1** en el cuadro de diálogo **Select Experiment**.

Figura D-64: Cuadro de diálogo Select Experiment



6. Haga clic en **OK**.
7. En el cuadro de diálogo **Process All Overlays**, seleccione **All Overlaid** y, a continuación, haga clic en **OK**. El gráfico muestra la superposición de un cromatograma TIC para cada muestra del archivo.

Figura D-65: TIC superpuestos del experimento 1 de DataSet61.wiff a DataSet66.wiff



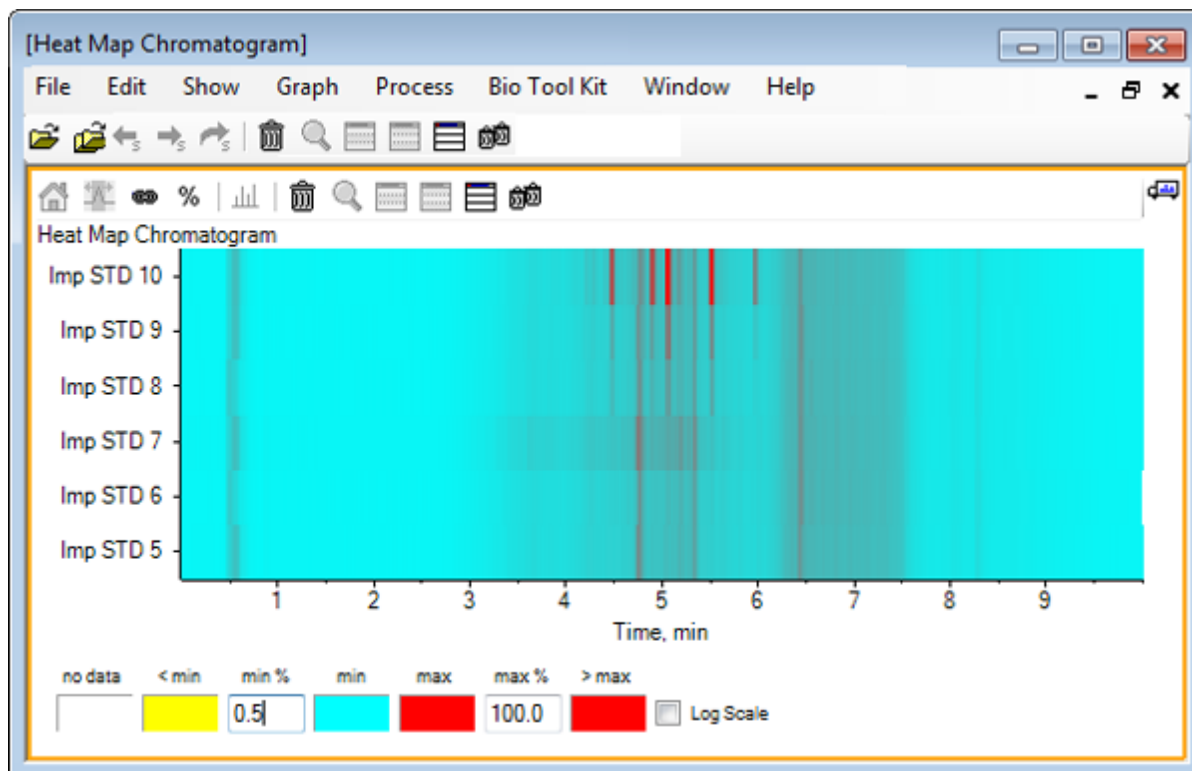
El título del trazo activo se muestra en negrita. Al hacer clic en el icono a la izquierda de este título se contraen los encabezados en una sola línea, con lo cual se dispone de más espacio para la información.

- Haga clic en **Show > Overlaid Traces as Heat Map** y, a continuación, en el panel resultante, establezca los controles de colores para que **min%** sea **0.5** y **max%** sea **100**.

Sugerencia: Haga clic con el botón derecho del ratón y seleccione **Show Appearance Control** si los controles no están visibles.

- Haga clic dentro del panel de cromatograma y, a continuación, haga clic en el icono **Hides all other panes**.

Figura D-66: Cromatograma de mapa de calor



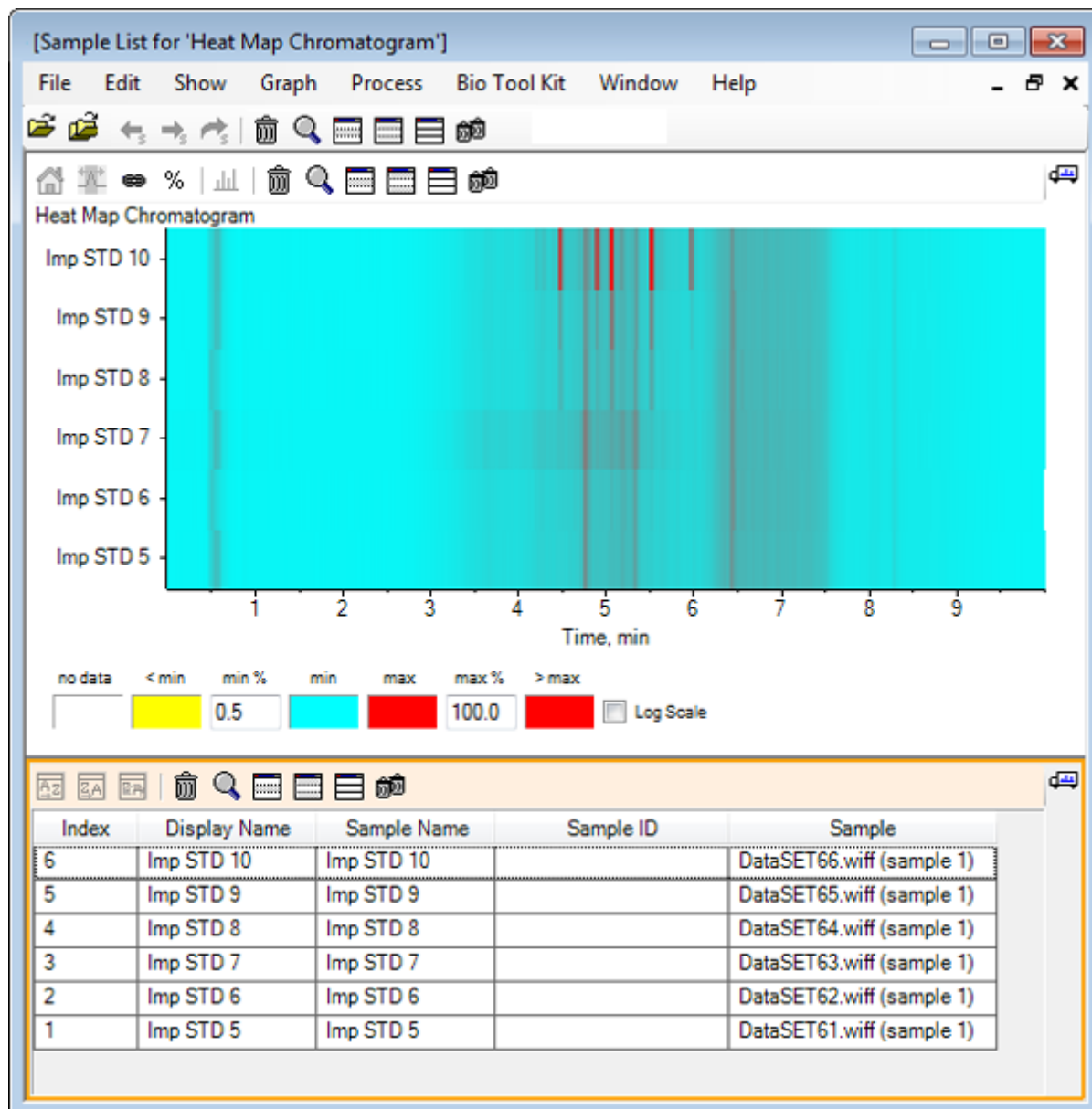
Cada muestra se representa con una tira horizontal que muestra su TIC, con la codificación por colores correspondiente a su intensidad. Utilizando el esquema de colores anterior, el amarillo representa puntos donde no se han adquirido datos o donde la intensidad es inferior al 0,5% de la intensidad más alta en cualquier muestra, el azul representa el 0,5%, y el rojo representa la señal más intensa.

La ventana muestra seis o siete picos (entre 4,5 y 6,5 min) y que las respuestas varían salvo para el pico a 6,5 min.

El orden de los picos es el mismo que el orden en el que las muestras se han adquirido y es posible que no sea el idóneo. En este ejemplo, el orden es adecuado.

10. Haga clic con el botón derecho en el panel y, a continuación, haga clic en **Show Samples Table**. Inicialmente la tabla de muestras aparece a la derecha del mapa de calor. El icono **Drag and drop to rearrange the panes** de la esquina superior derecha del panel se puede utilizar para arrastrar el panel a la parte inferior del mapa de calor para desplazar la tabla hasta debajo del panel original.

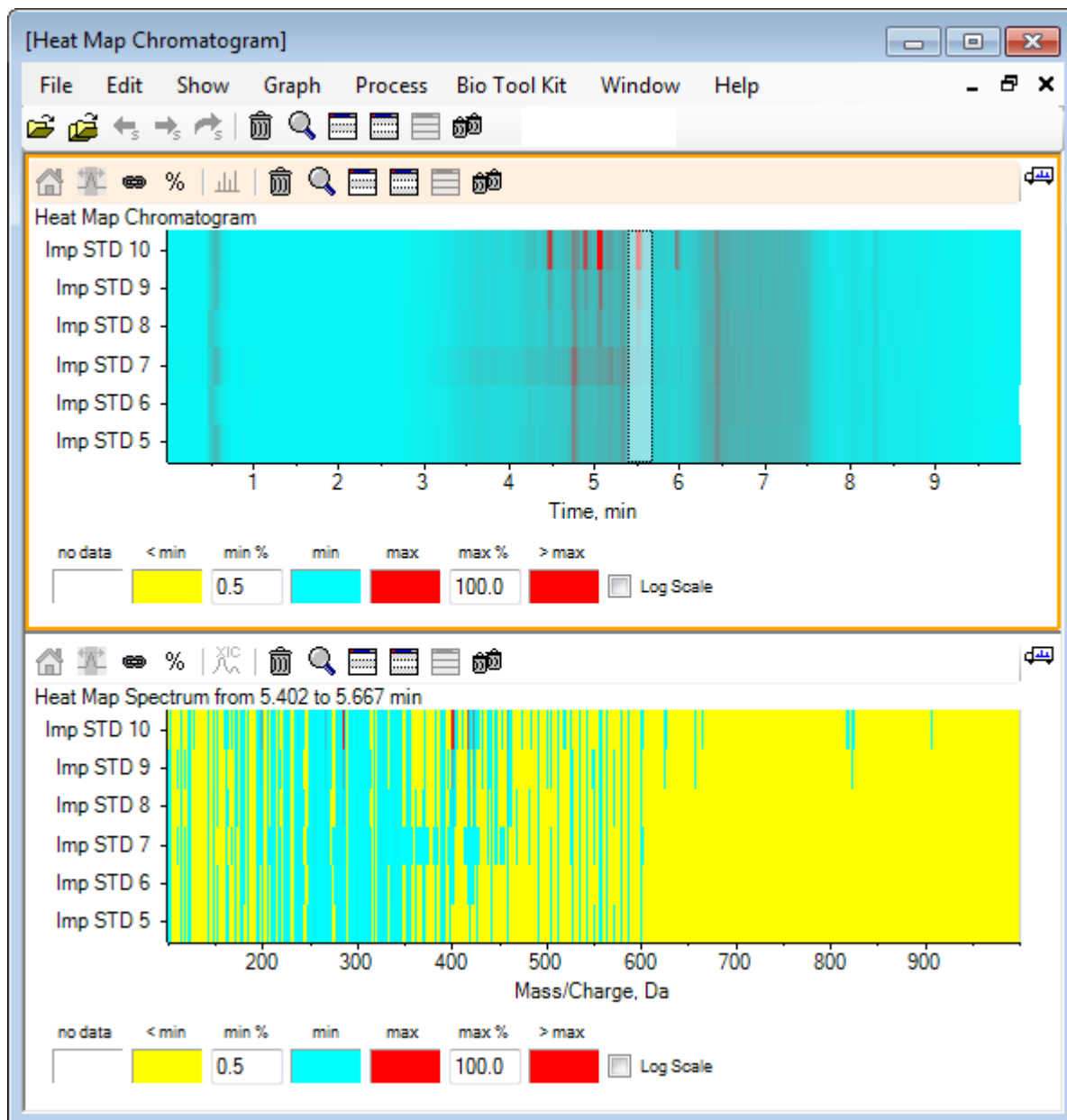
Figura D-67: Lista de muestras para el cromatograma de mapa de calor



La tabla contiene columnas para los diversos campos de texto asociados con cada muestra. La columna **Display Name** es editable; las demás son de solo lectura. Todas las columnas se pueden utilizar para ordenar la tabla y la vista de muestra.

- Haga una selección en Imp STD 10 alrededor de 5,5 min y, a continuación, haga doble clic dentro de dicha selección.
Se genera un nuevo panel de espectro de mapa de calor y el rango de masa completo se muestra en el eje x.

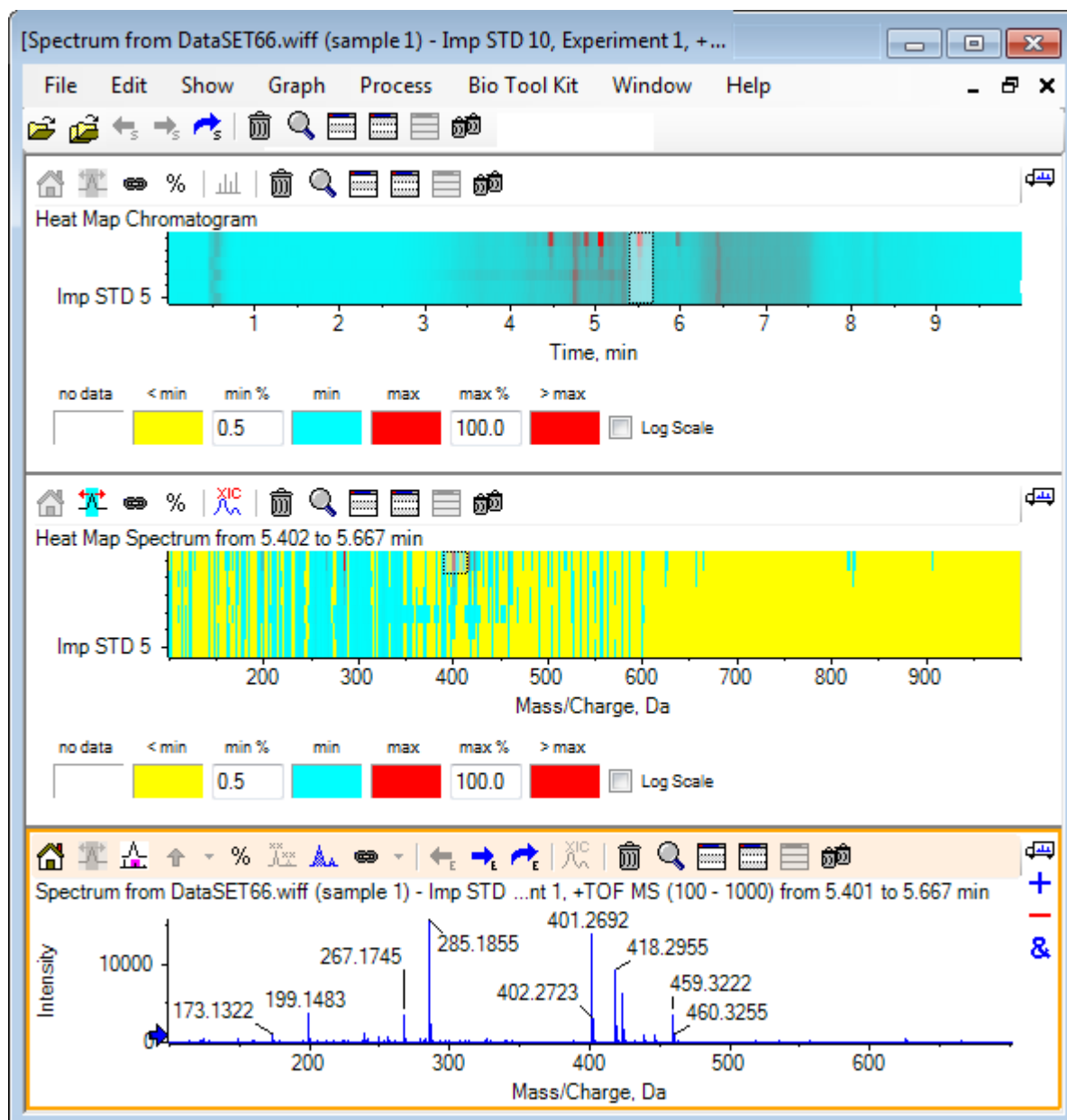
Figura D-68: Espectro de mapa de calor



Desde el espectro, se puede determinar que un par de masas (entre una m/z de 400 y una m/z de 460) contribuyen a la elevada intensidad en la región de tiempo seleccionada.

12. Seleccione la masa alrededor de Mass/Charge Da 401 para la muestra Imp STD 10 y, a continuación, haga clic con el botón derecho del ratón para seleccionar **Show Spectra for Selected Samples..**
Se genera un espectro para la muestra seleccionada. Se muestra el espectro en el punto temporal. Consulte [Figura D-69](#).
13. Haga doble clic en la masa alrededor de Mass/Charge Da 401 en el espectro de mapa de calor para generar un XIC de mapa de calor.

Figura D-69: Espectro



Resumen

En esta sección se han tratado las tareas siguientes:

- Trabajar con varias herramientas de muestra disponibles en el software.
- Comparar dos muestras con cromatogramas superpuestos y espectros interactivos.
- Comparar varias muestras con vistas de mapa de calor.

Work with the Bio Tool Kit Feature

En esta sección se describen algunas de las opciones disponibles en el elemento de menú **Bio Tool Kit** del software.

Nota: Bio Tool Kit MicroApp debe estar activado para acceder a esta funcionalidad. Hasta que se complete la activación, las únicas opciones disponibles son Peptide Fragments, Add Manual Reconstruct Highlights y Remove Manual Reconstruct Highlights. Consulte la sección sobre activación de Bio Tool Kit MicroApp en el documento *Notas de la versión*.

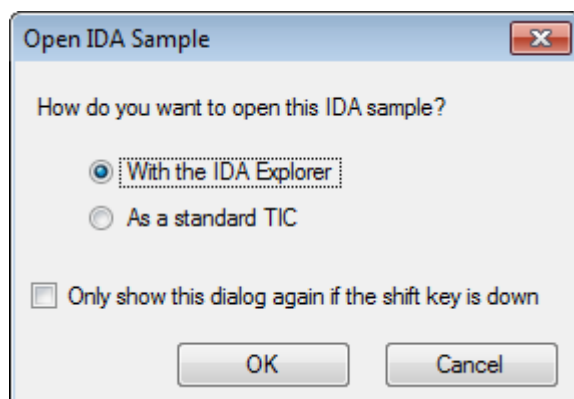
Manual Sequence

Utilice esta opción para secuenciar manualmente los datos espectrales MS/MS a partir de una muestra de proteína digerida.

1. Haga clic en el icono **Open Sample** en la barra de herramientas principal.
Se abre el cuadro de diálogo **Select Sample**.
2. Si la carpeta **Sample Data** no está ya seleccionada, haga clic en **Browse** y acceda a la carpeta **Sample Data**.
3. Seleccione el archivo **RP_digests.wiff** y, a continuación, haga clic en **OK**.

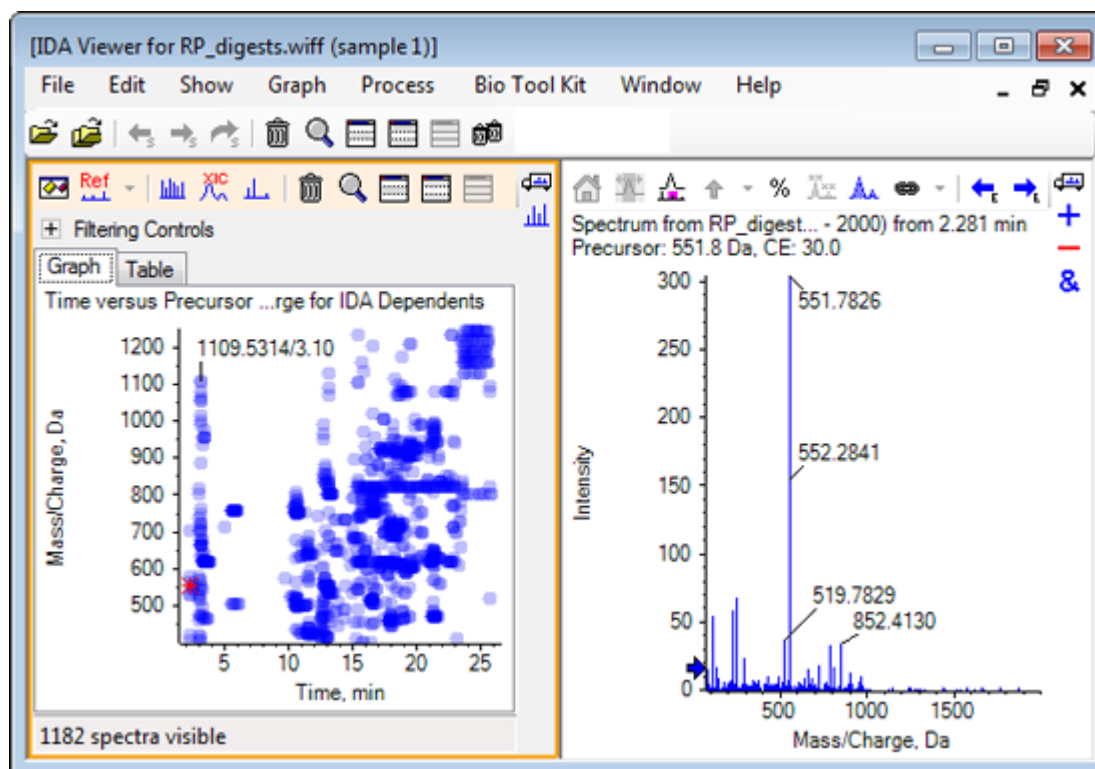
Se abre el cuadro de diálogo **Open IDA Sample**.

Figura D-70: Cuadro de diálogo Open IDA Sample



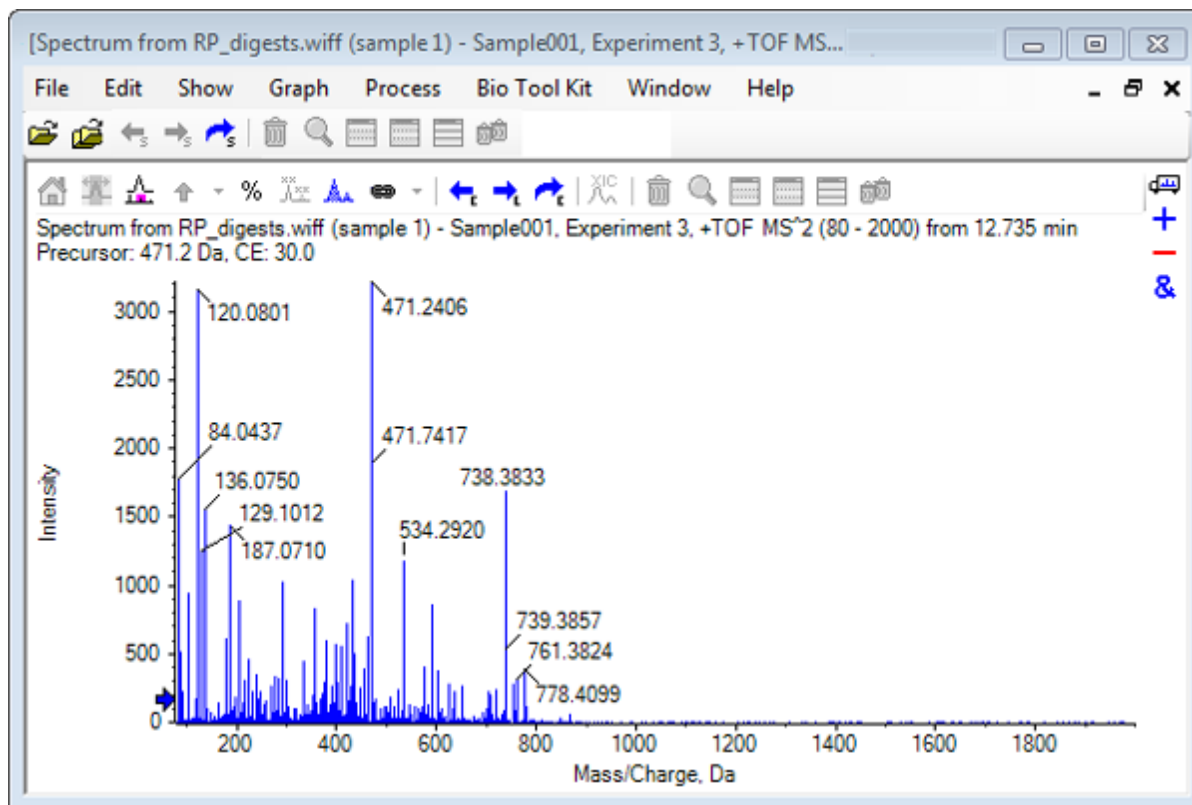
4. Asegúrese de que la opción **With the IDA Explorer** esté seleccionada y, a continuación, haga clic en **OK**.

Figura D-71: Espectro del archivo RP_digests.wiff



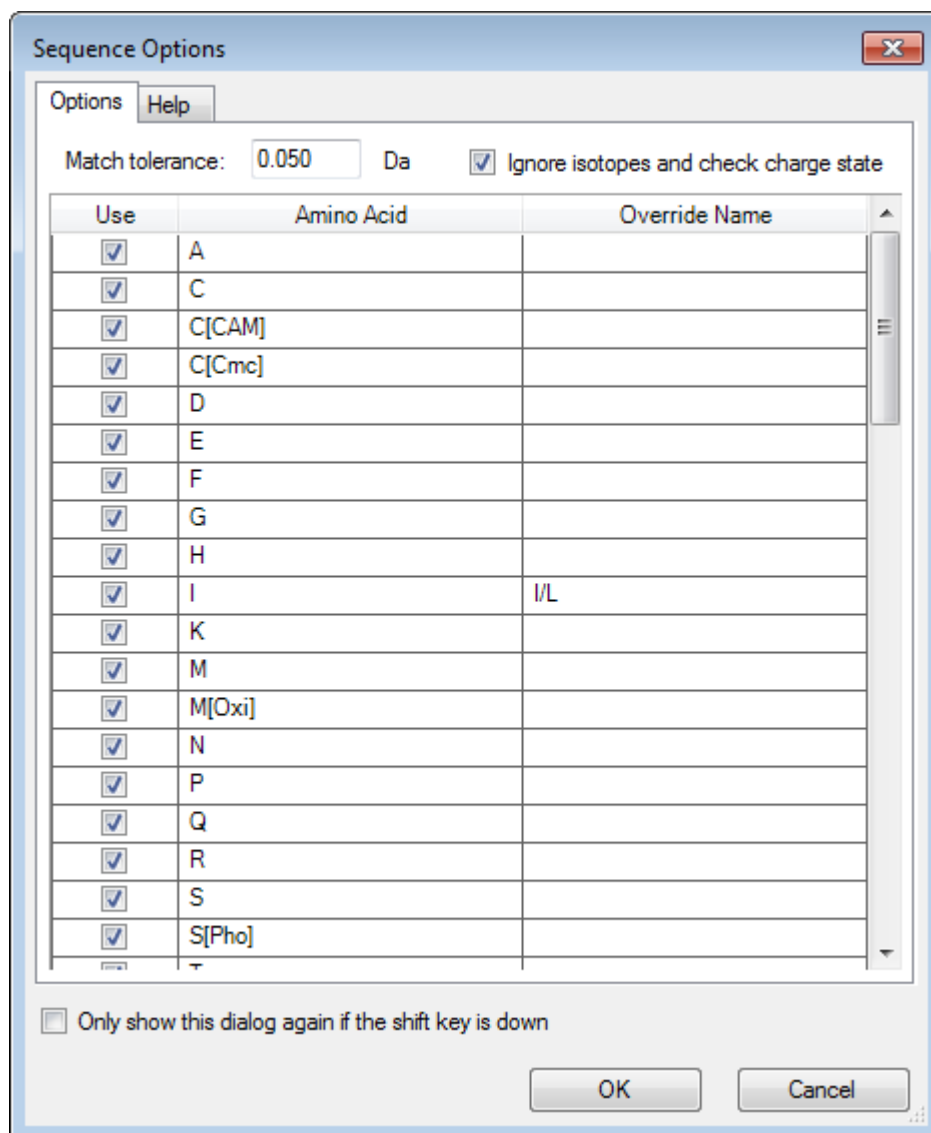
5. Haga clic en la pestaña **Table**.
6. Seleccione **m/z** 471,2398 a **Time** 12,73.
7. Con el panel de espectro activo, haga clic en **Graph > Duplicate Graph..**
Se abre un nuevo panel de espectro para el precursor seleccionado (471,2). El panel de explorador de IDA y su panel de espectro asociado se pueden eliminar.

Figura D-72: Espectro del precursor 471,2398 en el tiempo de retención 12,73



8. Seleccione el pico con la etiqueta **738.3833**.
9. Haga clic en **Bio Tool Kit > Manual Sequence..**
Se abre el cuadro de diálogo **Sequence Options**.

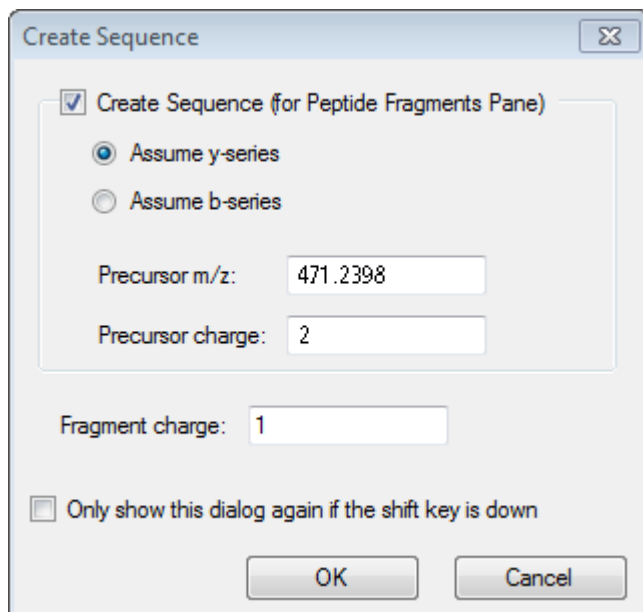
Figura D-73: Cuadro de diálogo Sequence Options



Nota: Cuando se selecciona la casilla Ignore isotopes and check charge state, el software no tiene en cuenta los isótopos ni los picos con un estado de carga incorrecto al proponer el aminoácido posterior.

10. Haga clic en **OK**.
Se abre el cuadro de diálogo **Create Sequence**.

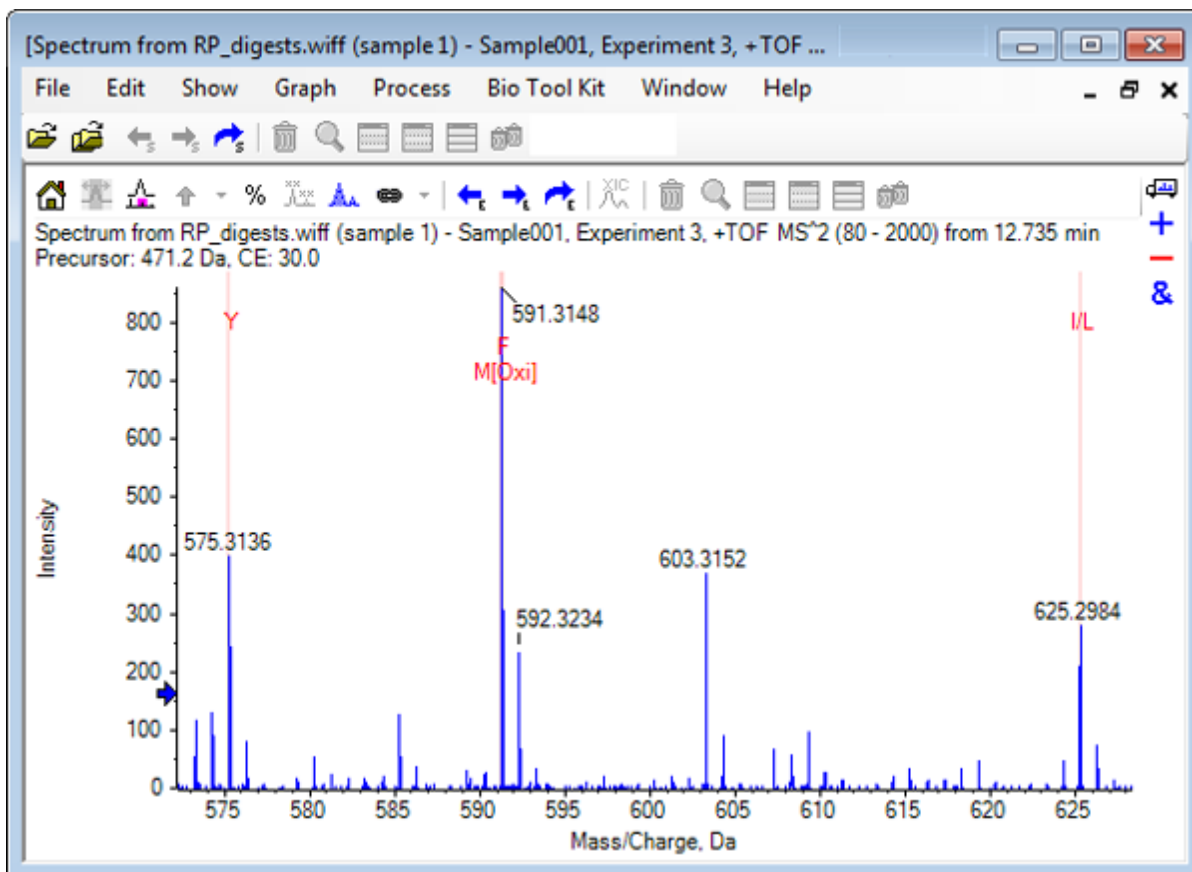
Figura D-74: Cuadro de diálogo Create Sequence



Nota: Este cuadro de diálogo permite cambiar los supuestos para los iones de serie b e y, y el estado de carga después de que el archivo se secuencie manualmente, así como ver qué supuesto proporciona la mejor coincidencia para los datos.

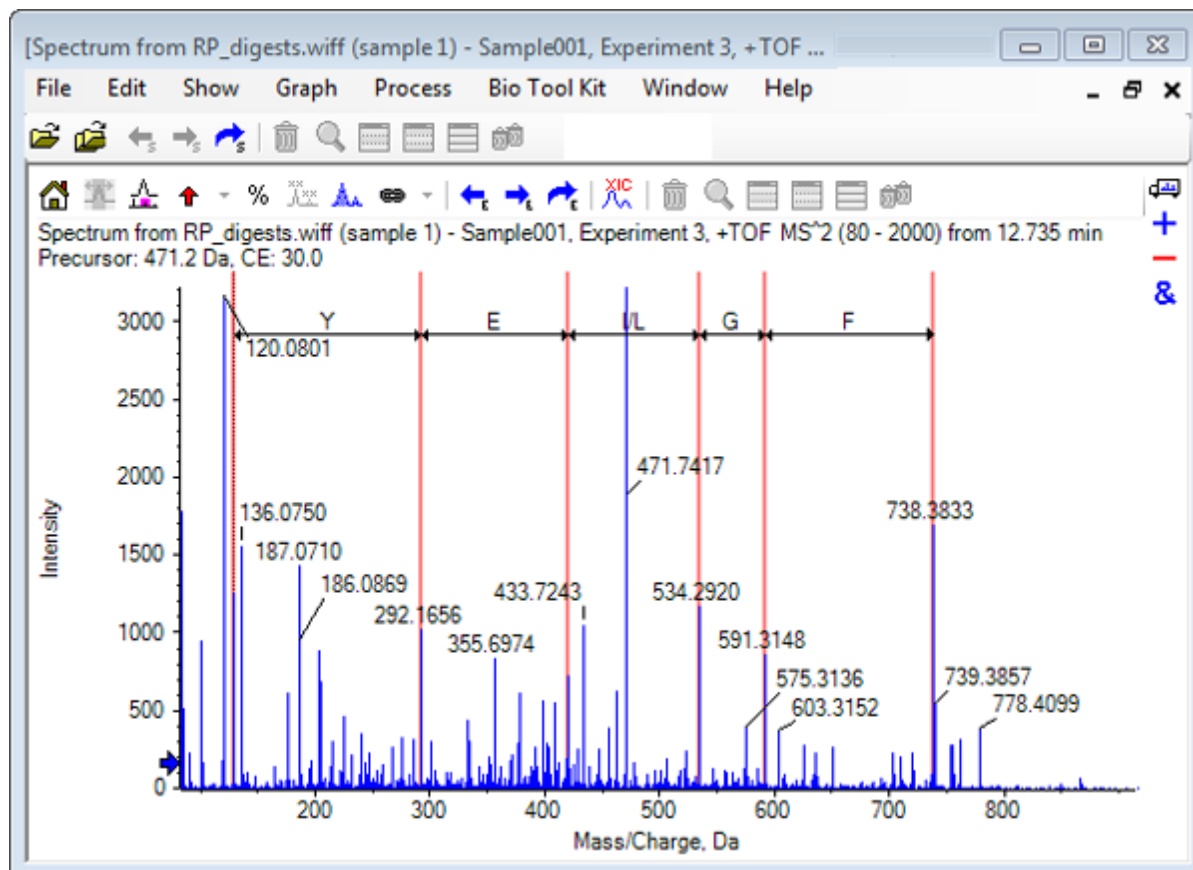
11. Asegúrese de que la casilla **Create Sequence (for Peptide Fragments Pane)** esté seleccionada.
12. Escriba **2** en el campo **Precursor charge**.
13. Escriba el valor de carga del pico seleccionado que se deba seguir en el árbol de secuencia manual en el campo **Fragment charge**.
14. Haga clic en **OK**.
El software se actualiza y muestra un panel de espectro actualizado con líneas rojas verticales que indican el primer conjunto de posibles aminoácidos ganados o perdidos en los datos espectrales.

Figura D-75: Espectro secuenciado manualmente: posibilidades iniciales



- Haga doble clic en el título de la línea vertical roja que se deba secuenciar más. El software se actualiza e indica el siguiente conjunto de aminoácidos en los datos espectrales.
- Repita el paso 15 hasta que se hayan sugerido todos los aminoácidos posibles.

Figura D-76: Espectro secuenciado manualmente



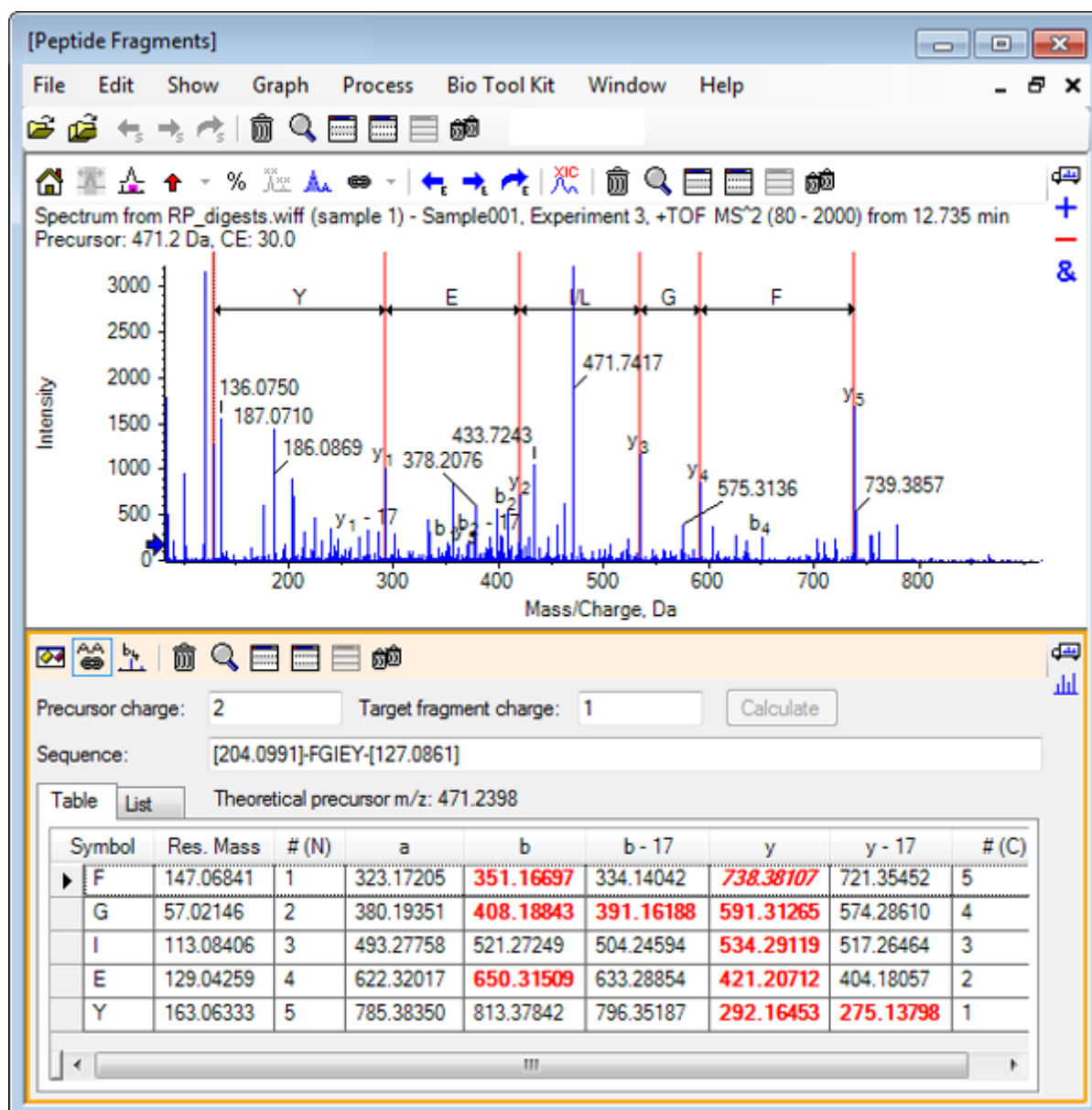
Nota: En [Figura D-76](#), se ha hecho clic en los títulos en el orden siguiente: **F > G > I/L > E > Y**.

Sugerencia: Si el software sugiere más de una posibilidad y desea seguir una rama distinta a la sugerida inicialmente, vuelva a la vista inicial del gráfico y repita este procedimiento seleccionando una etiqueta de aminoácido alternativa.

Manual Sequencing Linked with Peptide Fragments

1. Haga clic en **Bio Tool Kit > Peptide Fragments**..
Se abre el panel Peptide Fragments, vinculado al espectro secuenciado manualmente.

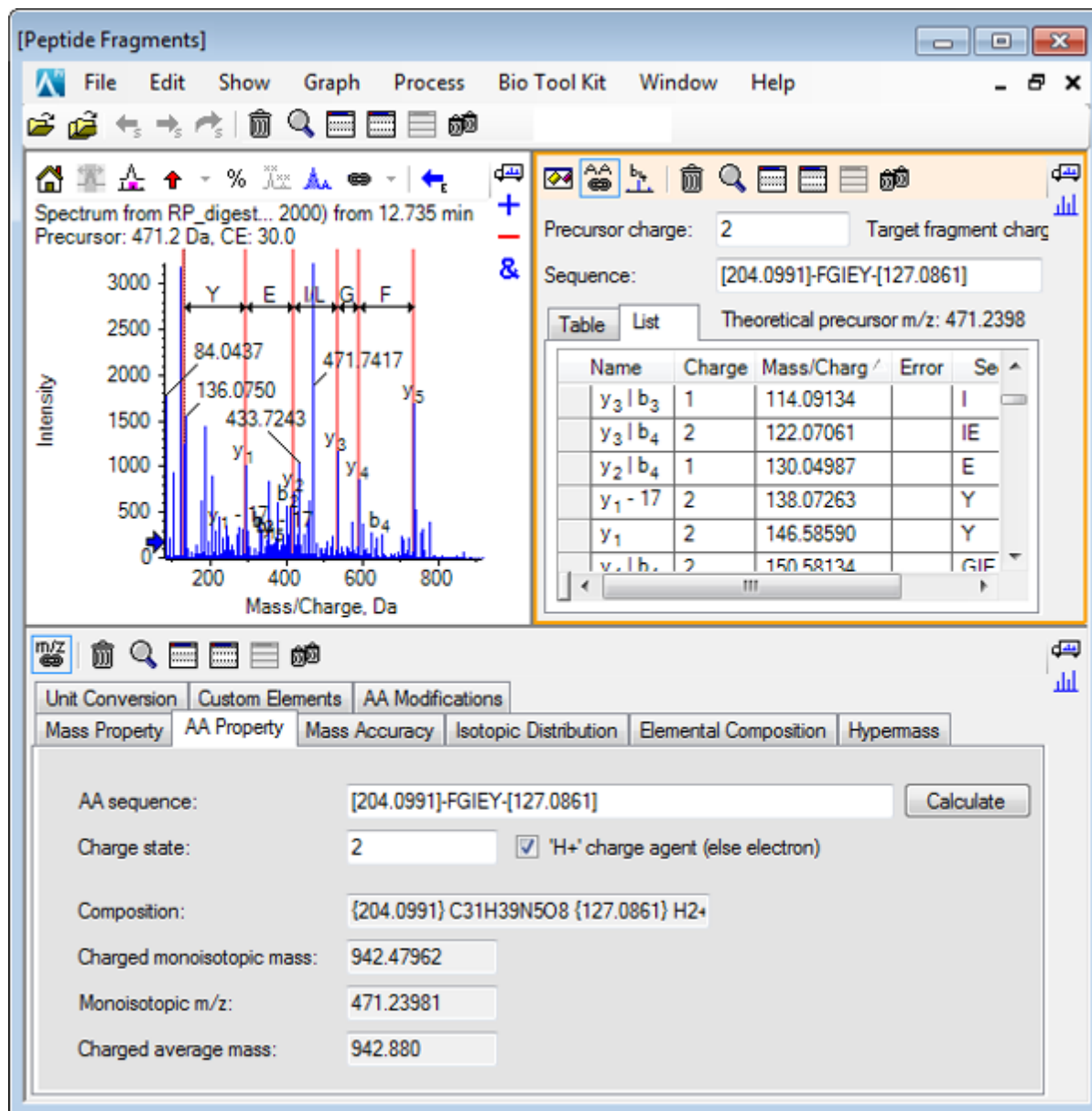
Figura D-77: Panel Peptide Fragments vinculado a un espectro secuenciado manualmente



Nota: Los aminoácidos que coinciden con los datos experimentales se muestran en una fuente roja en negrita en las columnas de la pestaña Table. Los aminoácidos que coinciden con los datos experimentales pero tienen otra carga de fragmento de destino se muestran en una fuente roja cursiva en las columnas de la pestaña Table.

2. Haga clic en la pestaña **List**.
3. Haga clic en **Show > Mass Calculators..**
4. Haga clic en la pestaña **AA Property**.

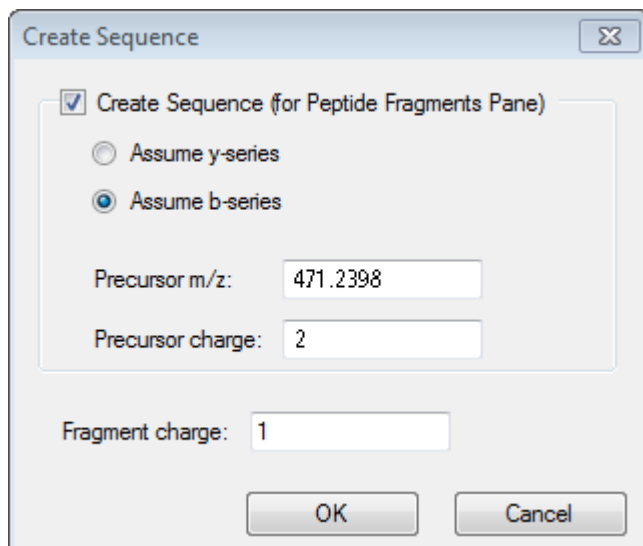
Figura D-78: Pestaña Mass Calculators — AA Property



Nota: De manera predeterminada, las calculadoras de masas se vinculan automáticamente al espectro secuenciado manualmente. La secuencia de aminoácido del espectro se muestra en el campo **AA sequence**.

5. Con el panel de espectro activo, haga clic en **Bio Tool Kit > Set Sequence Creation Parameters**.
Se abre el cuadro de diálogo **Create Sequence**.

Figura D-79: Cuadro de diálogo Create Sequence



Create Sequence

Create Sequence (for Peptide Fragments Pane)

Assume y-series

Assume b-series

Precursor m/z: 471.2398

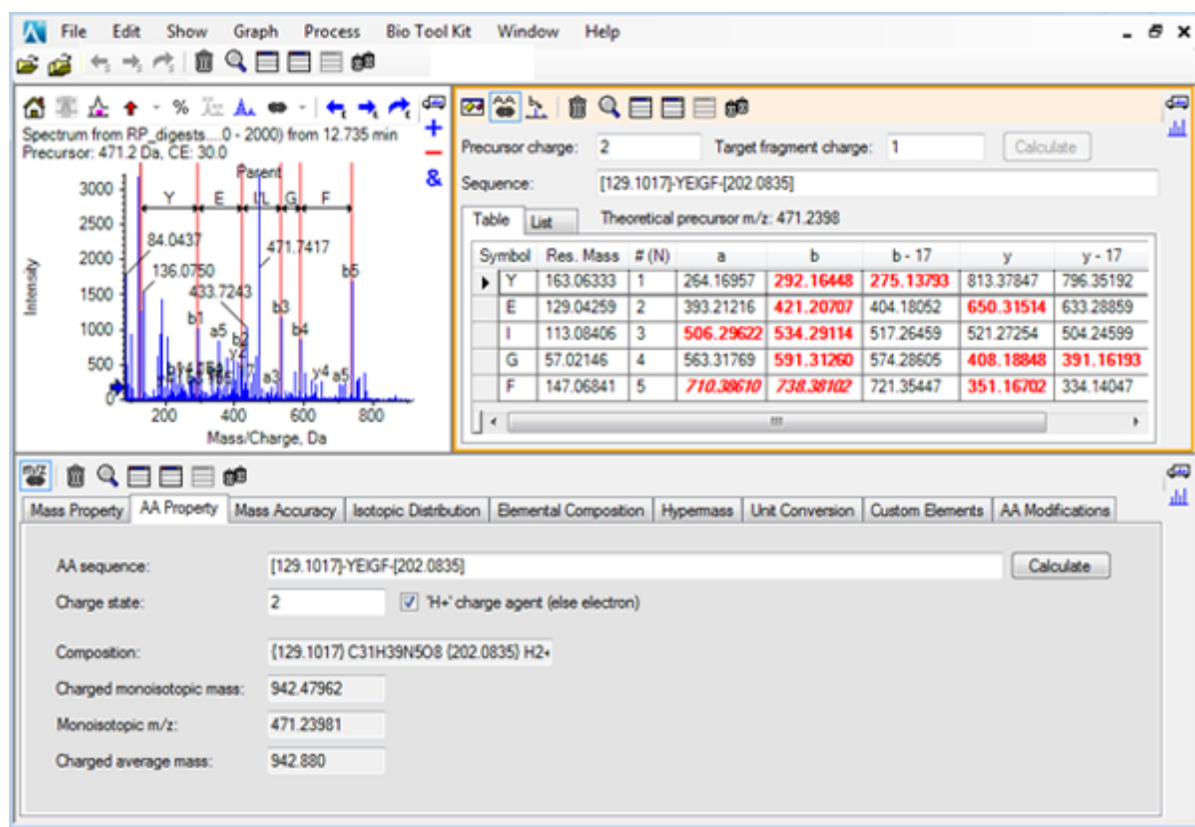
Precursor charge: 2

Fragment charge: 1

OK Cancel

6. Cumplimente el cuadro de diálogo **Create Sequence** como se indica a continuación:
 - Asegúrese de que la casilla **Create Sequence (for Peptide Fragments Pane)** esté seleccionada.
 - Seleccione la opción **Assume b-series**.
 - Escriba **471.2398** en el campo **Precursor m/z**.
 - Escriba **2** en el campo **Precursor charge**.
 - Escriba **1** en el campo **Fragment charge**.
7. Haga clic en **OK**.
El panel Peptide Fragments y el panel Mass Calculators se actualizan con los datos de secuencia actualizados.
8. Haga clic en la pestaña **Table** en el panel **Peptide Fragments**.

Figura D-80: Panel Peptide Fragments actualizado vinculado a un espectro secuenciado manualmente



- Con el panel de espectro activo, haga clic en **Bio Tool Kit > Clear Manual Sequencing..**
Se eliminan todas las marcas de secuencia manual.

Add and Remove Manual Reconstruct Highlights

Utilice la opción **Add Manual Reconstruct Highlights** para agregar a un espectro marcadores que indiquen las posiciones de m/z teóricas de una masa determinada. Esta característica es útil para confirmar si picos concretos de un espectro corresponden al mismo componente cuando los espectros contienen componentes con carga múltiple. Utilice la opción **Remove Manual Reconstruct Highlights** para eliminar los marcadores.

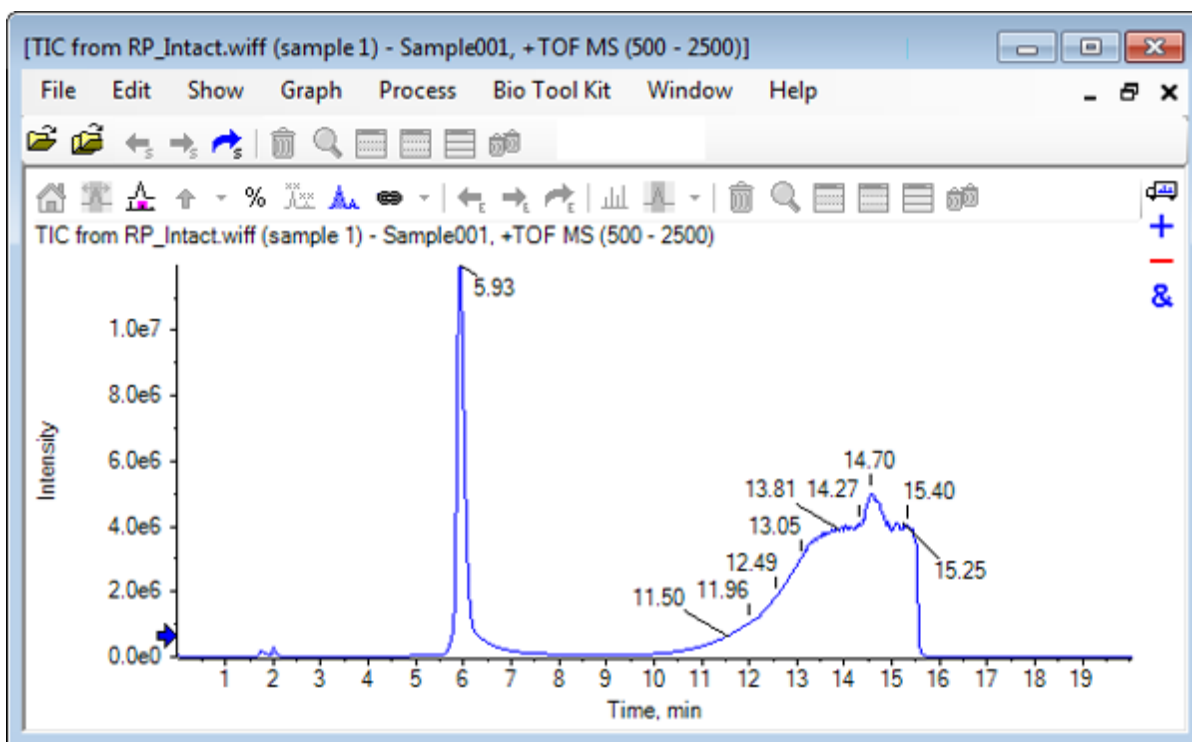
Sugerencia: Arrastre la línea vertical del marcador a un nuevo valor de m/z a fin de desplazar el marcador a una nueva ubicación.

Sugerencia: Haga clic en la línea vertical del marcador o la etiqueta de estado de carga correspondiente para activar el marcador. El marcador activo muestra la ubicación m/z .

- Haga clic en el icono **Open Sample** en la barra de herramientas principal.
Se abrirá el cuadro de diálogo Select Sample.
- Si la carpeta **Sample Data** no está ya seleccionada, haga clic en **Browse** y acceda a la carpeta **Sample Data**.

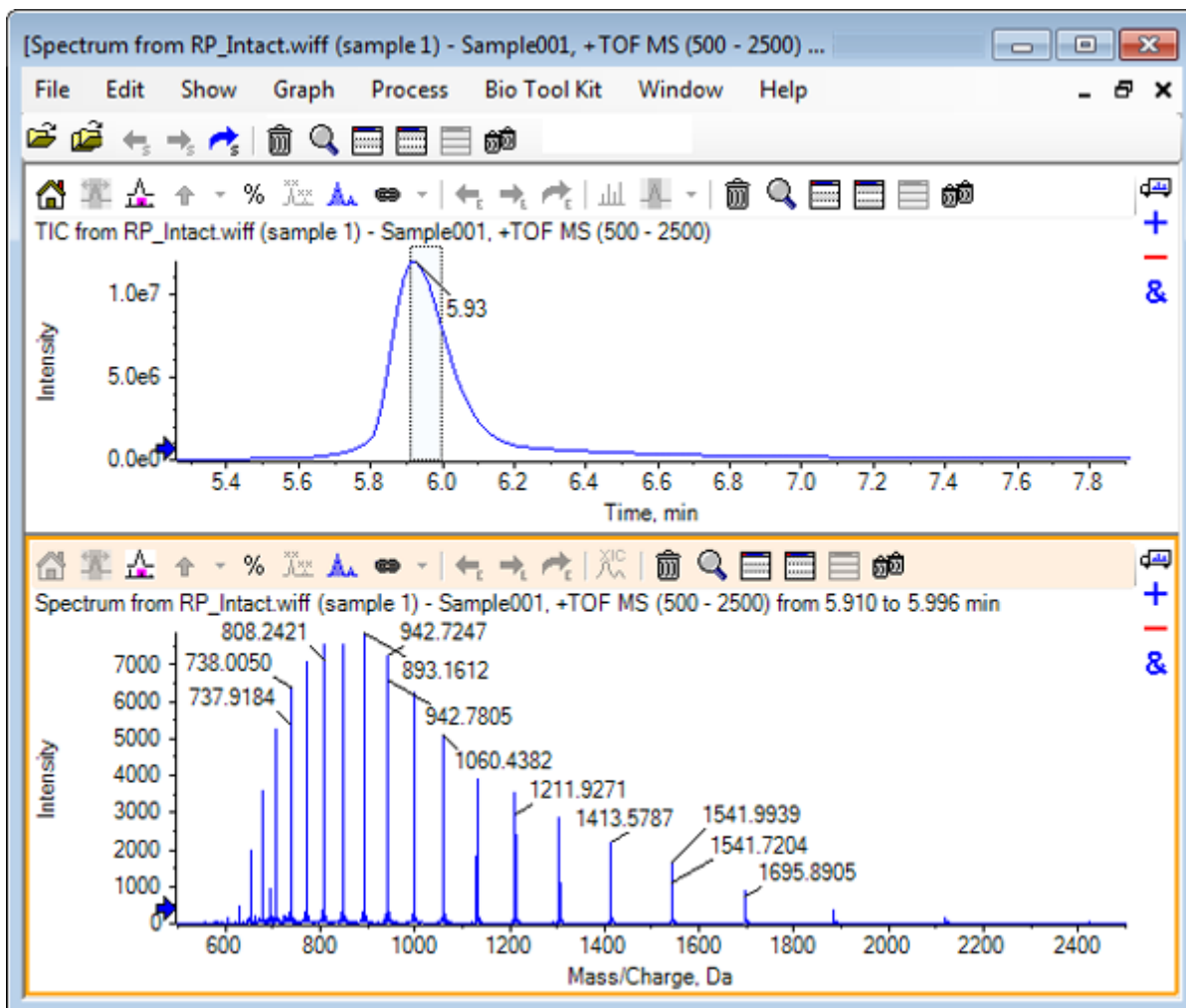
3. Seleccione el archivo **RP_Intact.wiff** y, a continuación, haga clic en **OK**.

Figura D-81: TIC del archivo RP_Intact.wiff



4. Cree un promedio de espectro utilizando la región superior (de 5,91 a 6,00 min) del pico para mioglobina.

Figura D-82: Promedio de espectro

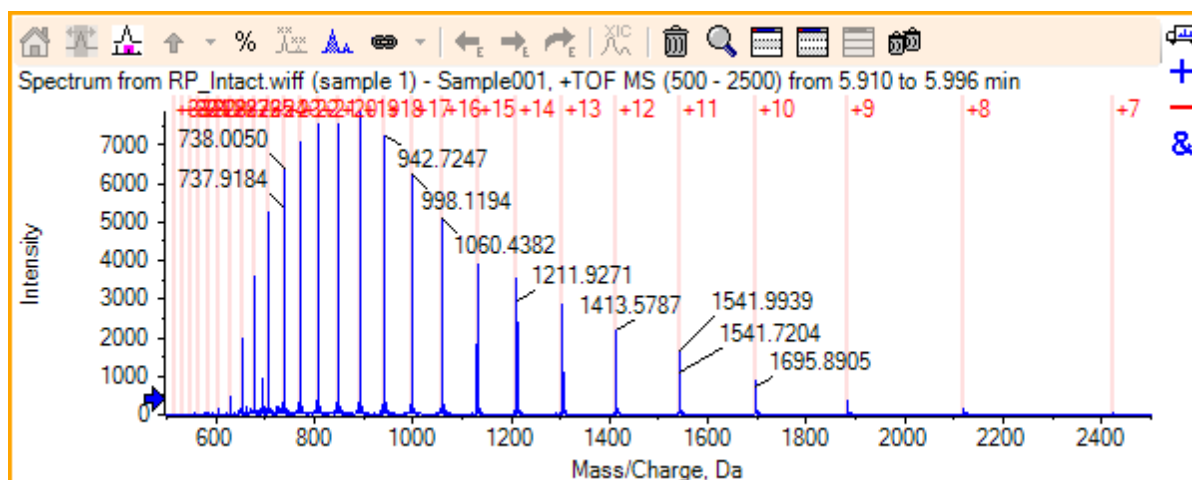


5. Con el panel de espectro activo, haga clic en **Bio Tool Kit > Add Manual Reconstruct Highlights..**
Se abre el cuadro de diálogo **Add Manual Reconstruct Highlights to Graph.**

Figura D-83: Add Manual Reconstruct Highlights to Graph

6. Escriba **16950** en el campo **Value**.
7. Seleccione **H+** como **Charge agent** y, a continuación, haga clic en **OK**. El gráfico se actualiza con los resaltados.

Figura D-84: Espectro con resaltados agregados



8. Haga clic en **Bio Tool Kit > Remove Manual Reconstruct Highlights** para eliminar los marcadores. El gráfico se actualiza con los resaltados eliminados.




Digest Protein

Utilice esta opción para obtener información sobre las secuencias de péptidos teóricas que se generan a partir de una escisión enzimática definida por el usuario de una proteína específica.

Toolbar

Utilice los iconos de la barra de herramientas para ajustar la vista según sea necesario.

Tabla D-5: Iconos de la barra de herramientas

Icono	Nombre (información sobre la herramienta)
	Find and replace in sequence
	Convert selection to uppercase
	Find sequence

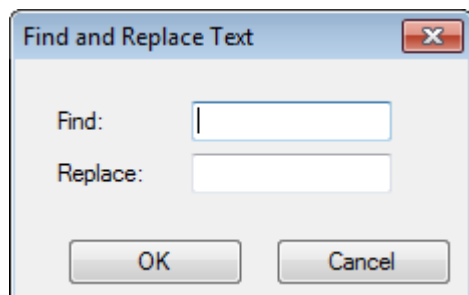
Nota: Los seis iconos finales de esta barra de herramientas, a partir del icono Deletes this pane, se describen en [Barra de herramientas genéricas de paneles](#).

Find and Replace in Sequence

Utilice esta opción para buscar texto existente en el campo **Sequence** y sustituirlo por otro texto.

1. Haga clic en el icono **Find and replace in sequence**.
Se abre el cuadro de diálogo **Find and Replace Text**.

Figura D-85: Cuadro de diálogo Find and Replace Text



2. Escriba la información que se tenga que sustituir en el campo **Find**.
3. Escriba la información que corresponda en el campo **Replace**.
4. Haga clic en **OK**.
El software sustituye el texto existente por el texto de sustitución que haya especificado el usuario.

Convert Selection to Uppercase

Utilice esta opción para convertir el texto escrito en minúsculas en el campo **Sequence** a mayúsculas.

1. Seleccione el texto apropiado.
2. Haga clic en el icono **Convert selection to uppercase**.

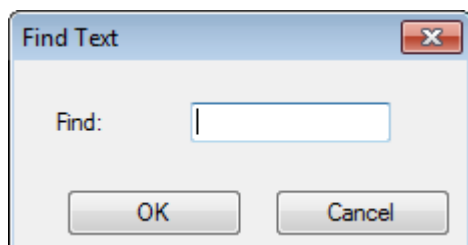
El software sustituye el texto en minúsculas por el mismo texto en mayúsculas.

Find Sequence

Utilice esta opción para buscar texto en el campo **Sequence**.

1. Haga clic en el icono **Find sequence**.
Se abre el cuadro de diálogo **Find Text**.

Figura D-86: Cuadro de diálogo Find Text

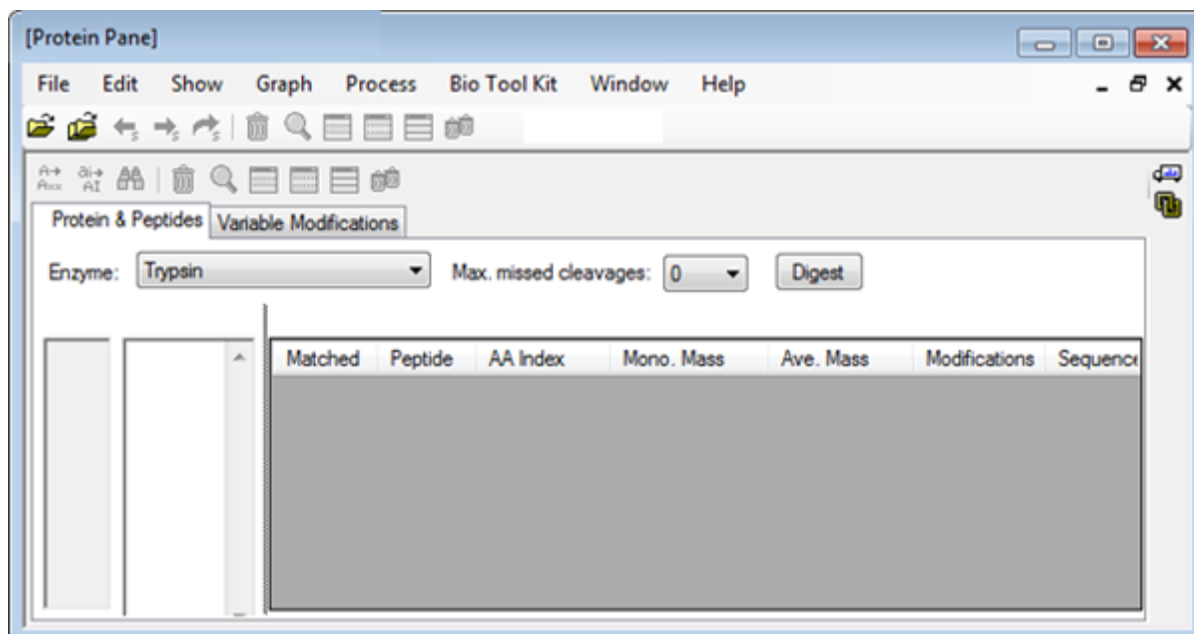


2. Escriba la información que corresponda en el campo **Find**.
3. Haga clic en **OK**.
El software resalta el texto coincidente.

Theoretical Protein Digestion

1. Haga clic en **Bio Tool Kit > Digest Protein..**
Se abre el panel **Protein**.

Figura D-87: Panel Protein - Pestaña Protein & Peptides



2. Escriba una secuencia de proteína o péptico en el campo que se proporciona.

Tutorial de Explorer

Nota: Para este tutorial, se ha utilizado GLSDGEWQQV LNVWGKVEAD IAGHGQEVLI RLFTGHPETL EKFDKFKHLK TEAEMKASED LKKHGTVVLT ALGGILKKKG HHEAELKPLA QSHATKHKIP IKYLEFISDA IIHVLHSKHP GDFGADAQGA MTKALELFRN DIAAKYKELG FQG (secuencia de mioglobina).

3. Seleccione una de las opciones disponibles para **Enzyme**.

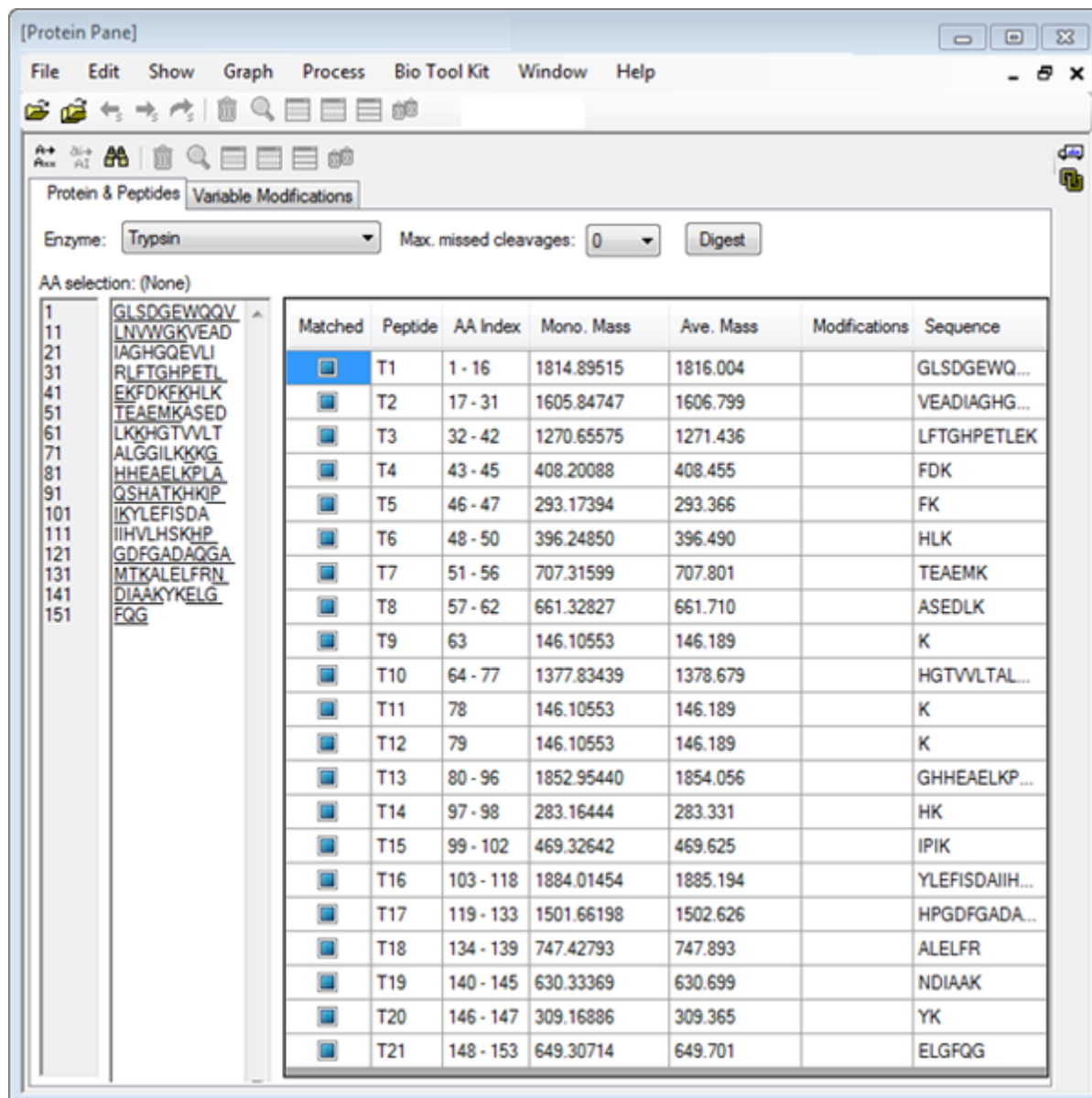
Nota: Para este tutorial, se ha seleccionado Tripsina.

4. Seleccione el valor de **Max. missed cleavages**.

Nota: Para este tutorial, se ha seleccionado 0.

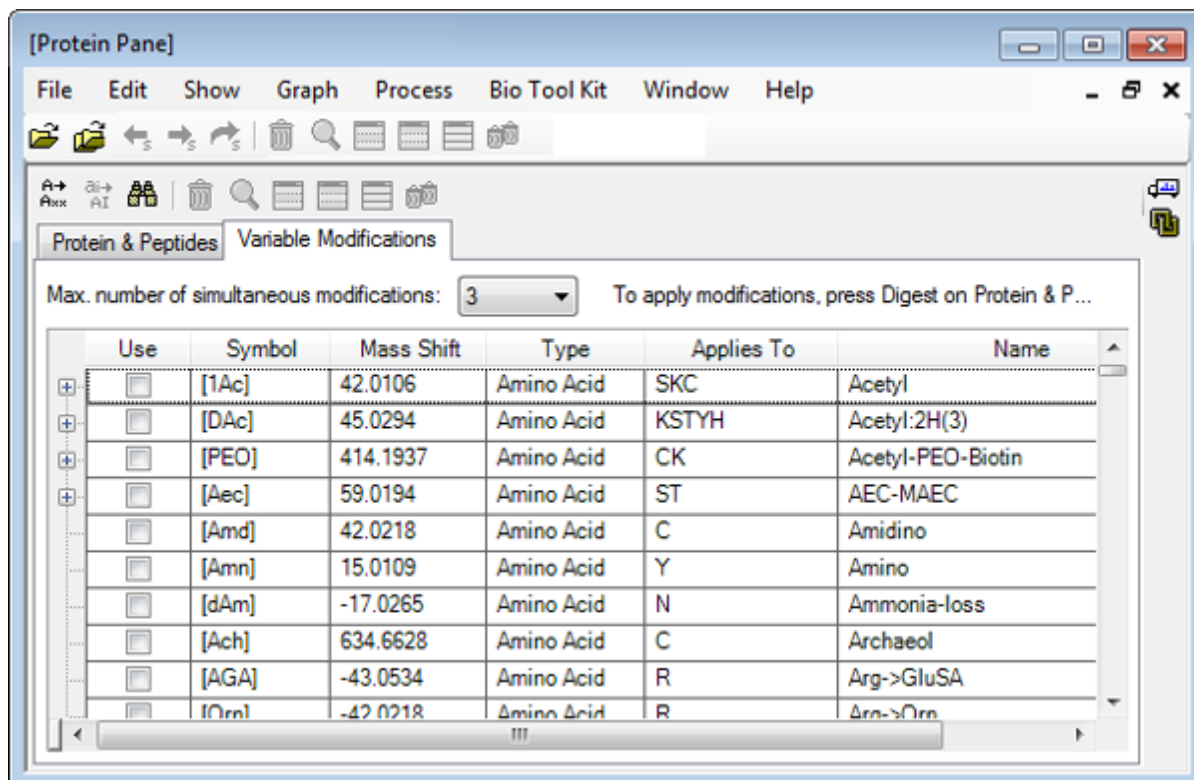
5. Haga clic en **Digest**.
El software llena la tabla con la información teórica de los péptidos digeridos y sus secuencias.

Figura D-88: Panel Protein rellenado con la información teórica



6. Haga clic en la pestaña **Variable Modifications**.

Figura D-89: Panel Protein - Pestaña Variable Modifications



7. Seleccione un **Max. number of simultaneous modifications**.

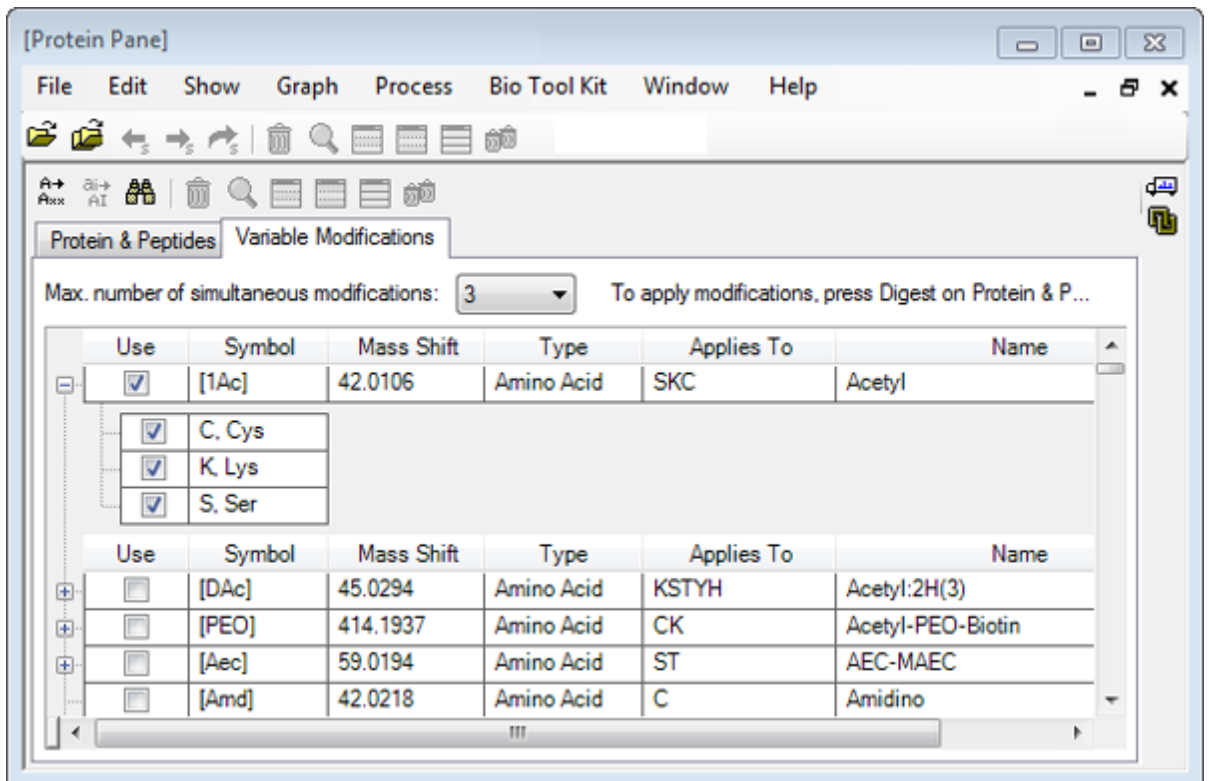
Nota: Para este tutorial, se ha seleccionado 3.

8. Seleccione la casilla de la columna **Use** correspondiente a las modificaciones adecuadas.

Sugerencia: Si se muestra un icono a la izquierda de la casilla, se podrá seleccionar toda la lista de aminoácidos, o bien solo los que sean aplicables.

Nota: Para este tutorial, se ha seleccionado la casilla correspondiente a [1Ac].

Figura D-90: Ejemplo de modificaciones seleccionadas

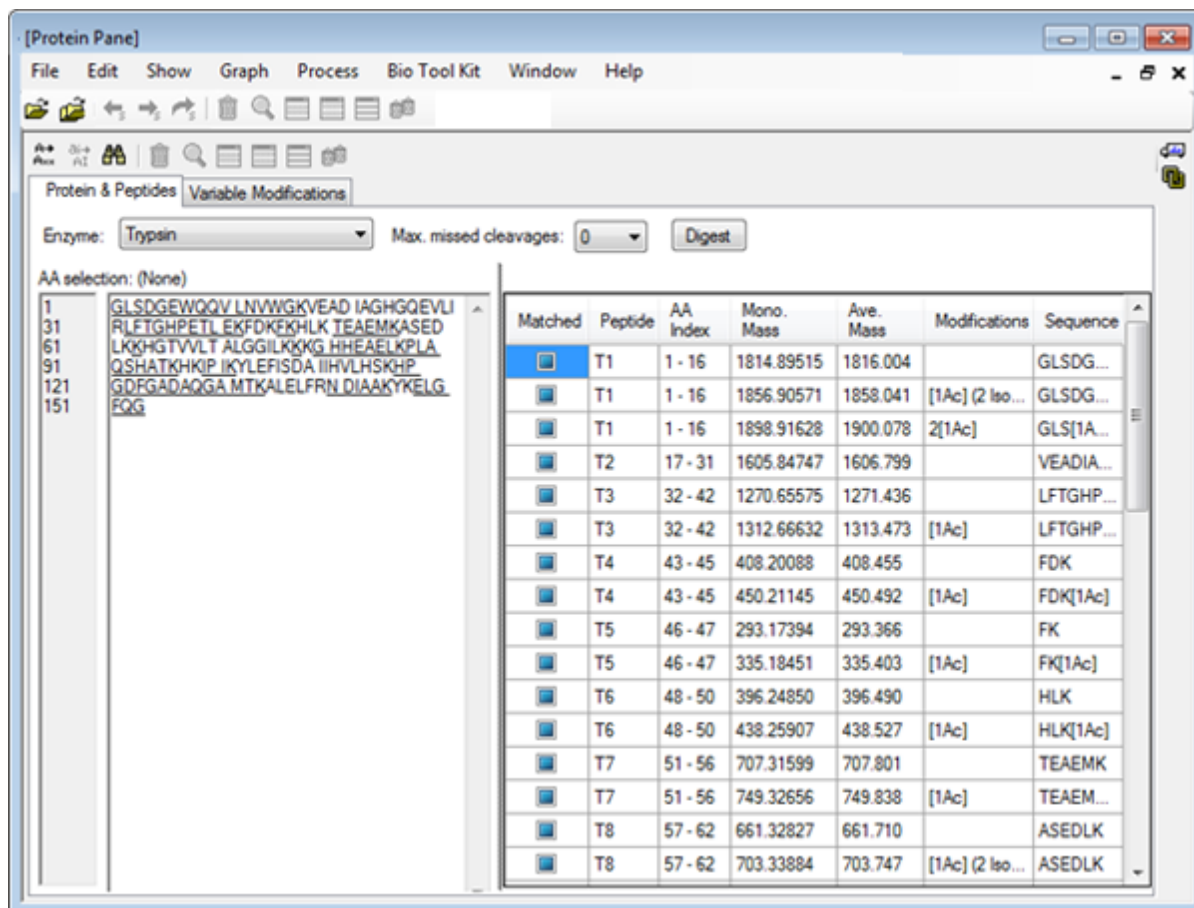


9. Haga clic en la pestaña **Protein & Peptides**.

10. Haga clic en **Digest**.

Los resultados de la tabla se modifican para reflejar las selecciones efectuadas por el usuario.

Figura D-91: Panel Protein relleno con la información modificada

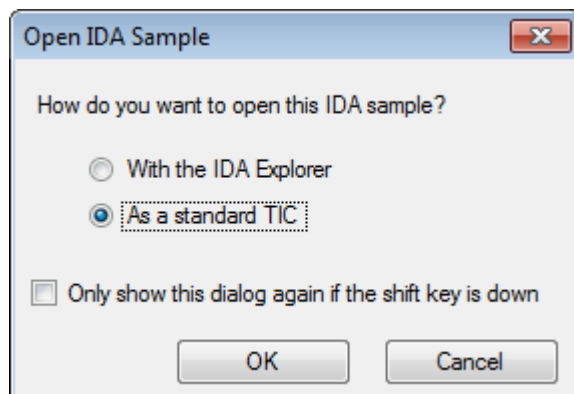


LCMS Peptide Reconstruct

La reconstrucción de péptidos LCMS identifica los picos espectrales y lleva a cabo una desconvolución a partir de los picos espectrales identificados. El funcionamiento de la herramienta LCMS Peptide Reconstruct consta de dos pasos. En primer lugar, los picos se buscan utilizando el algoritmo de búsqueda de picos "Enhance". En segundo lugar, la herramienta busca los grupos de picos que forman la serie de isótopos y la serie de cargas y notifica la masa neutra de todos los componentes encontrados.

1. Haga clic en el icono **Open Sample** en la barra de herramientas principal. Se abre el cuadro de diálogo **Select Sample**.
2. Si la carpeta Sample Data no está ya seleccionada, haga clic en **Browse** y acceda a la carpeta **Sample Data**.
3. Seleccione el archivo **RP_digests.wiff** y, a continuación, haga clic en **OK**. Se abre el cuadro de diálogo **Open IDA Sample**.

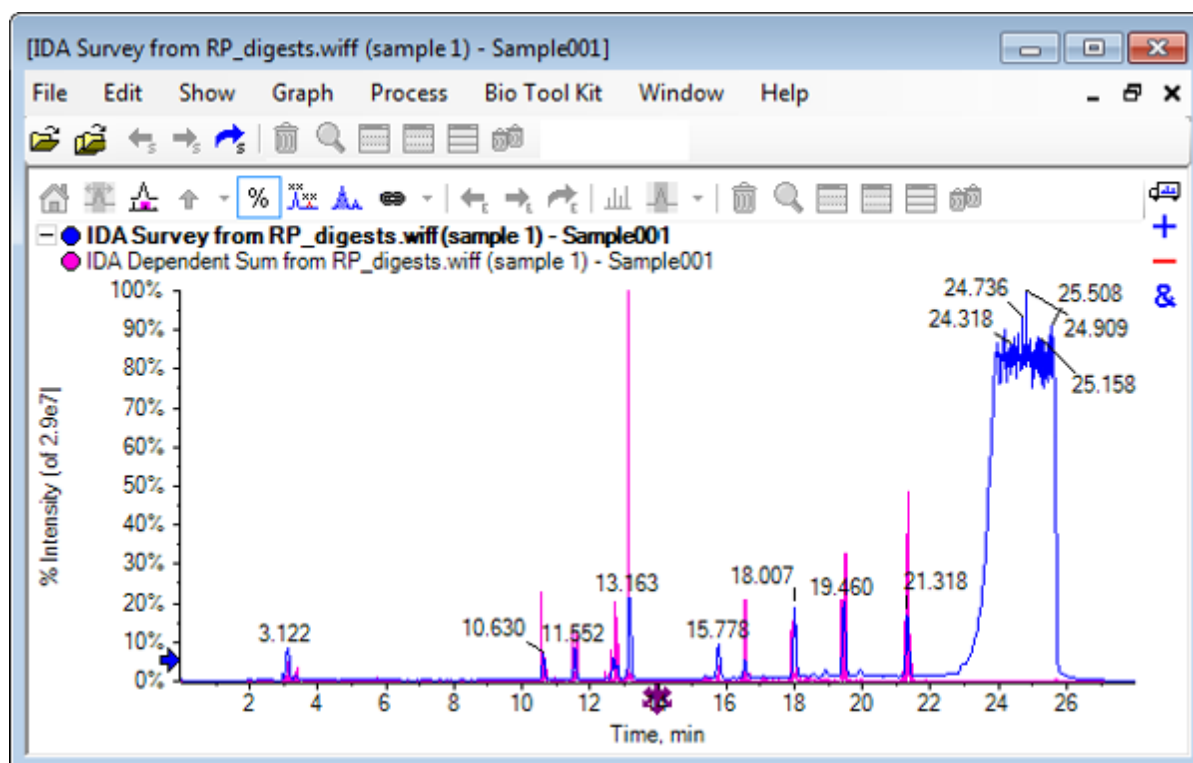
Figura D-92: Cuadro de diálogo Open IDA Sample



4. Asegúrese de que la opción **As a standard TIC** esté seleccionada y, a continuación, haga clic en **OK**.

Asegúrese de que el primer trazo, **IDA Survey from RP_digests.wiff (sample 1) - Sample001**, se muestre en negrita. Si es necesario, seleccione ese trazo.

Figura D-93: Estudio de IDA de RP_digests.wiff



5. Haga clic en **Bio Tool Kit > LCMS Peptide Reconstruct (with peak finding)**.. Se abre el cuadro de diálogo **LCMS Peptide Reconstruct Options**.

Figura D-94: Cuadro de diálogo LCMS Peptide Reconstruct Options

LCMS Peptide Reconstruct Options

Time Range
Minimum retention time: 0.00 min Maximum retention time: 0.00 min

'Enhance' Peak Finding
Approximate LC peak width: [] sec Minimum intensity in counts: 5 counts
 Perform background subtraction Chemical noise intensity multiplier: 1.5

Charge Deconvolution
Mass tolerance: 0.100 Da Maximum charge: 5

OK Cancel

6. Escriba los valores siguientes en los campos que se proporcionan:

- **9.00** min en el campo **Minimum retention time**
- Seleccione la casilla **Maximum retention time** y, a continuación, escriba **16.00** en el campo
- **6.0** seg en el campo **Approximate LC peak width**

Nota: La anchura de pico aproximada se utiliza para determinar la desviación durante la sustracción del fondo.

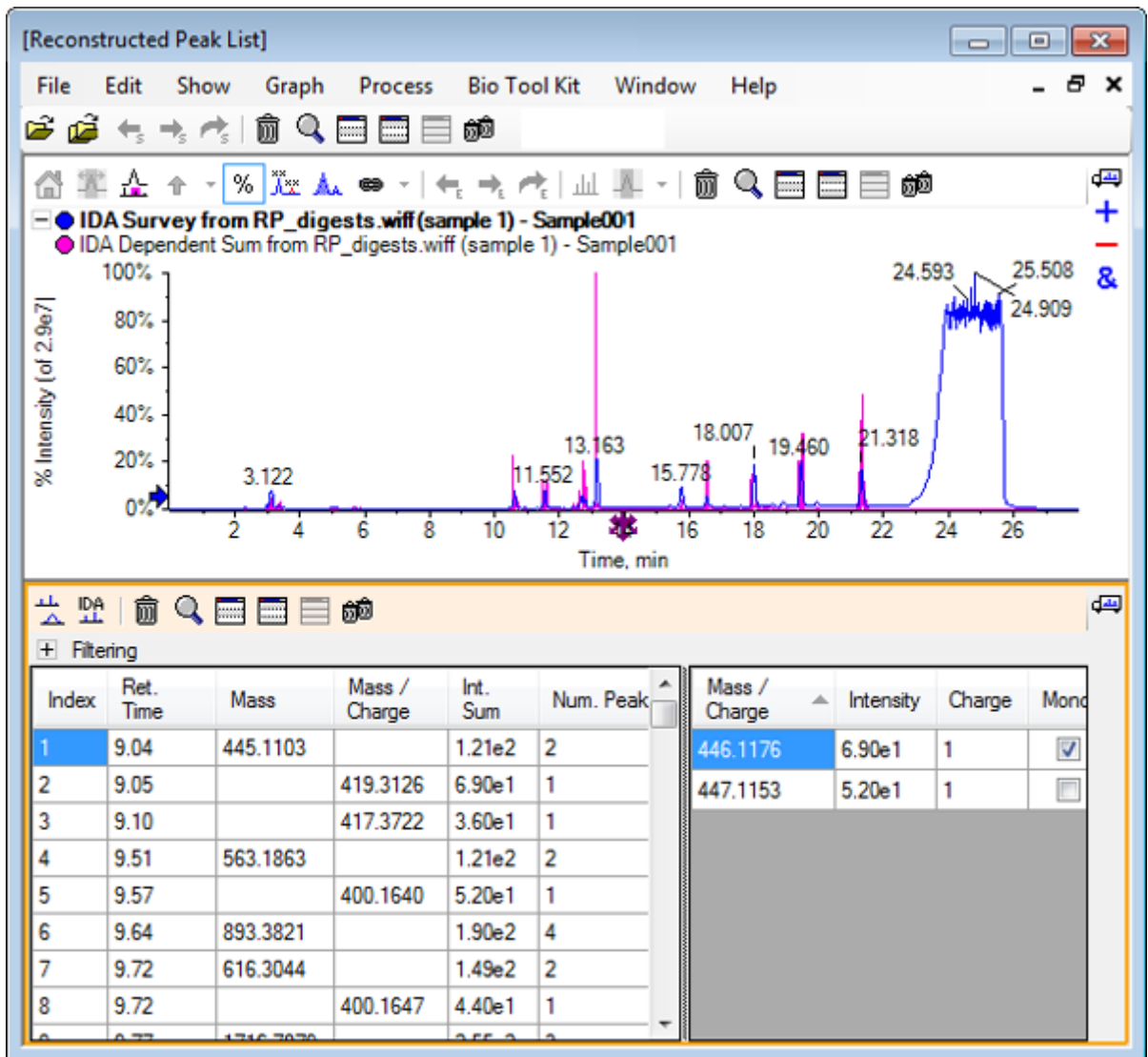
- **5** cuentas en el campo **Minimum intensity in counts**
- **1.5** en el campo **Chemical noise intensity multiplier**
- **0.100** Da en el campo **Mass tolerance**
- **5** en el campo **Maximum charge**

Nota: La tolerancia de masa en la sección Charge Deconvolution se asegura de que el pico reconstruido se haga coincidir con la proteína digerida teóricamente y que los distintos valores de m/z pertenecientes al mismo péptido se agrupen.

7. Haga clic en **OK**.

El software muestra una tabla de péptidos, separados por tiempo de retención. Se proporciona la información siguiente para cada péptido enumerado: **Index, Ret. Time, Mass, Mass / Charge, Int. Sum y Num. Peaks**.

Figura D-95: Lista de picos reconstruidos



8. Expanda **Filtering** para mostrar las opciones de filtrado disponibles.

Las opciones de filtrado disponibles son: **Intensity threshold**, **Min. Num. Peaks** y **Show matched peaks only**.

Figura D-96: Opciones de filtrado

Filtering

Intensity threshold:

Min. Num. Peaks: Show matched peaks only

Index	Ret. Time	Mass	Mass / Charge	Int. Sum	Num. Peaks	Mass / Charge	Intensity	Charge	Mono
1	9.04	445.1103		1.21e2	2	446.1176	6.90e1	1	<input checked="" type="checkbox"/>
2	9.05		419.3126	6.90e1	1	447.1153	5.20e1	1	<input type="checkbox"/>
3	9.10		417.3722	3.60e1	1				
4	9.51	563.1863		1.21e2	2				
5	9.57		400.1640	5.20e1	1				
6	9.64	893.3821		1.90e2	4				

9. Seleccione uno o varios filtros para ajustar la vista según sea necesario.

Nota: En este tutorial, el umbral de intensidad se ha establecido en 2.39e4 y Min. Num. Peaks se ha establecido en 4.

Figura D-97: Lista de picos reconstruidos filtrados

Filtering

Intensity threshold:



Min. Num. Peaks: Show matched peaks only

Index	Ret. Time	Mass	Mass / Charge	Int. Sum	Num. Peaks	Mass / Charge	Intensity	Charge	Mono.
1	10.62	1501.6620		2.39e5	17	501.5605	2.98e4	3	<input checked="" type="checkbox"/>
2	11.55	1270.6542		2.98e5	16	501.8947	3.22e4	3	<input type="checkbox"/>
3	12.68	940.4651		1.93e5	9	502.2281	1.41e4	3	<input type="checkbox"/>
4	13.15	1605.8489		8.62e5	18	502.5619	5.46e3	3	<input type="checkbox"/>
5	15.76	563.3048		1.53e5	4	502.8962	2.39e3	3	<input type="checkbox"/>
6	15.78	747.4268		1.96e5	4	503.2294	3.95e2	3	<input type="checkbox"/>
						751.8383	3.89e4	2	<input checked="" type="checkbox"/>

Toolbar

Utilice los iconos de la barra de herramientas para ajustar la vista según sea necesario.

Tabla D-6: Iconos de la barra de herramientas

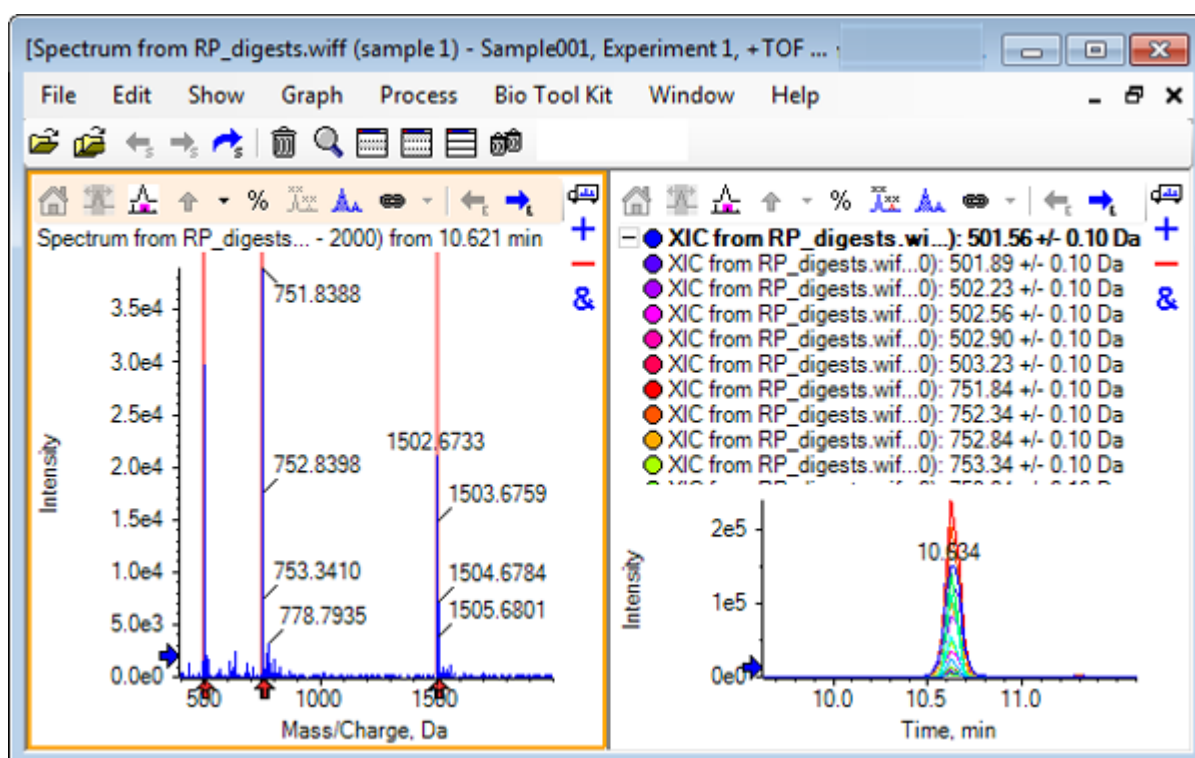
Icono	Nombre (información sobre la herramienta)
	Visualización del espectro y el XIC
	Show IDA MS/MS Spectra

Nota: Los seis iconos finales de esta barra de herramientas, a partir del icono Deletes this pane, se describen en [Barra de herramientas genéricas de paneles](#).

Visualización del espectro y el XIC

Cuando se selecciona el icono **Show spectrum and XIC**, se abren los paneles de espectro y XIC siguientes:

Figura D-98: Visualización del espectro y los resultados del XIC



Para el espectro de MS generado se muestra una flecha bajo cada pico que ha contribuido a la masa del péptido. El XIC de cada pico de m/z que ha contribuido a la masa del péptido se muestra en forma de superposiciones en el panel de la derecha.

Show IDA MS/MS Spectra

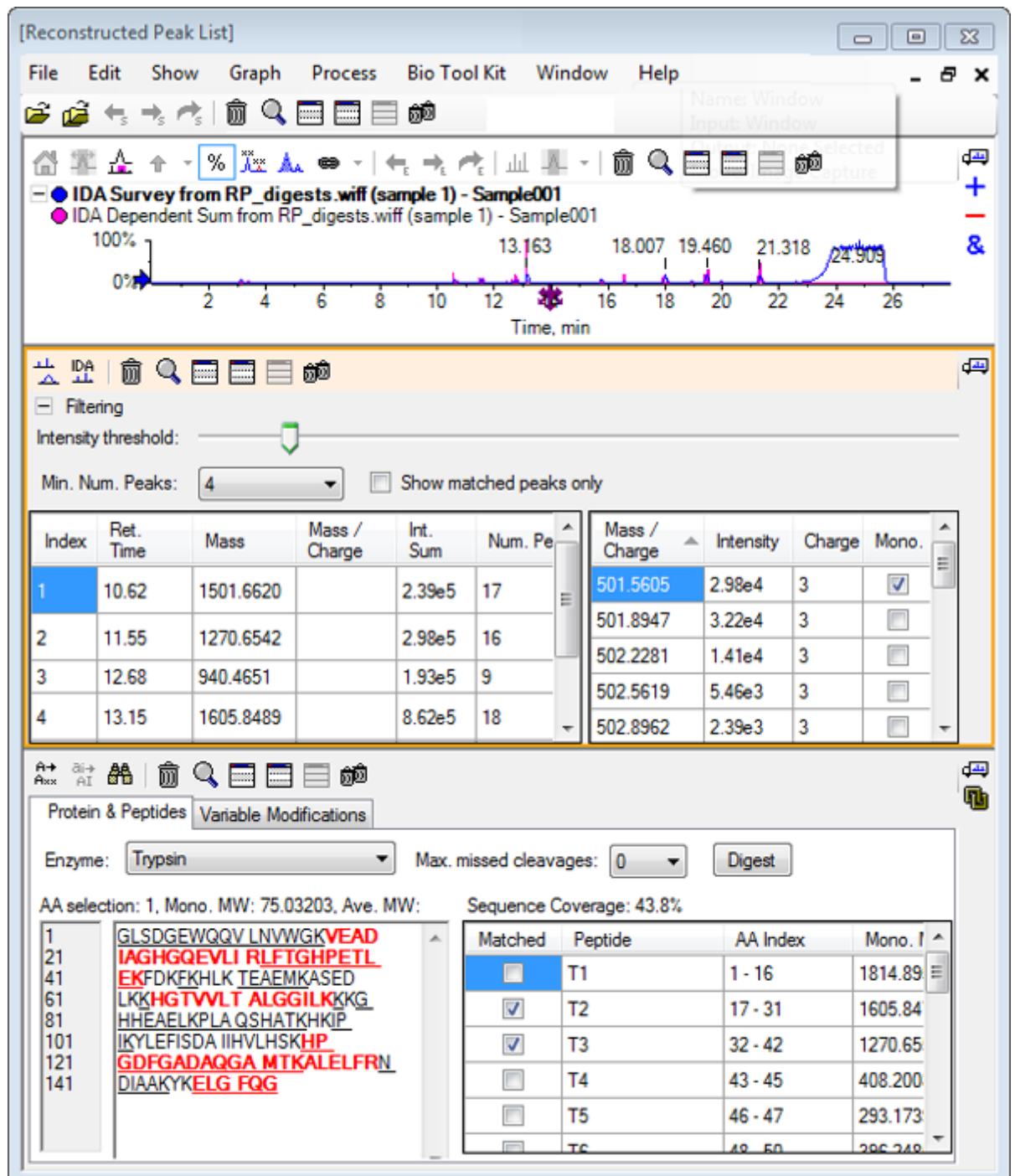
Si se selecciona el icono **Show IDA MS/MS Spectra**, se abre el panel de espectros siguiente:

LCMS Peptide Reconstruct with Digest Protein

1. Haga clic en **Bio Tool Kit > Digest Protein..**
Se abre el panel **Protein**.
2. Arrastre el icono **Drag to a protein pane to set its peak list** del panel **Protein** al panel **Reconstructed Peak List**.

El panel **Protein** se actualiza y muestra las secuencias de péptidos del panel Protein que coinciden con la lista de picos reconstruidos. Los fragmentos del panel **Protein** que se muestran en rojo y en negrita son los fragmentos con coincidencias exactas en el panel **Reconstructed Peak List**. Los fragmentos que se muestran en rojo con fuente normal son fragmentos que habrían coincidido con los fragmentos del panel **Reconstructed Peak List** si se les hubiera asignado el estado de carga indicado entre paréntesis en la columna **Match** del panel **Reconstructed Peak List**. Los fragmentos que se muestran con fuente negra son fragmentos que no coinciden con ninguno de los fragmentos del panel **Reconstructed Peak List**.

Figura D-99: Información teórica sobre el panel Protein vinculada a la lista de picos reconstruidos



Reconstruct Protein

Utilice esta opción para obtener la masa promedio (peso molecular) de una proteína intacta.

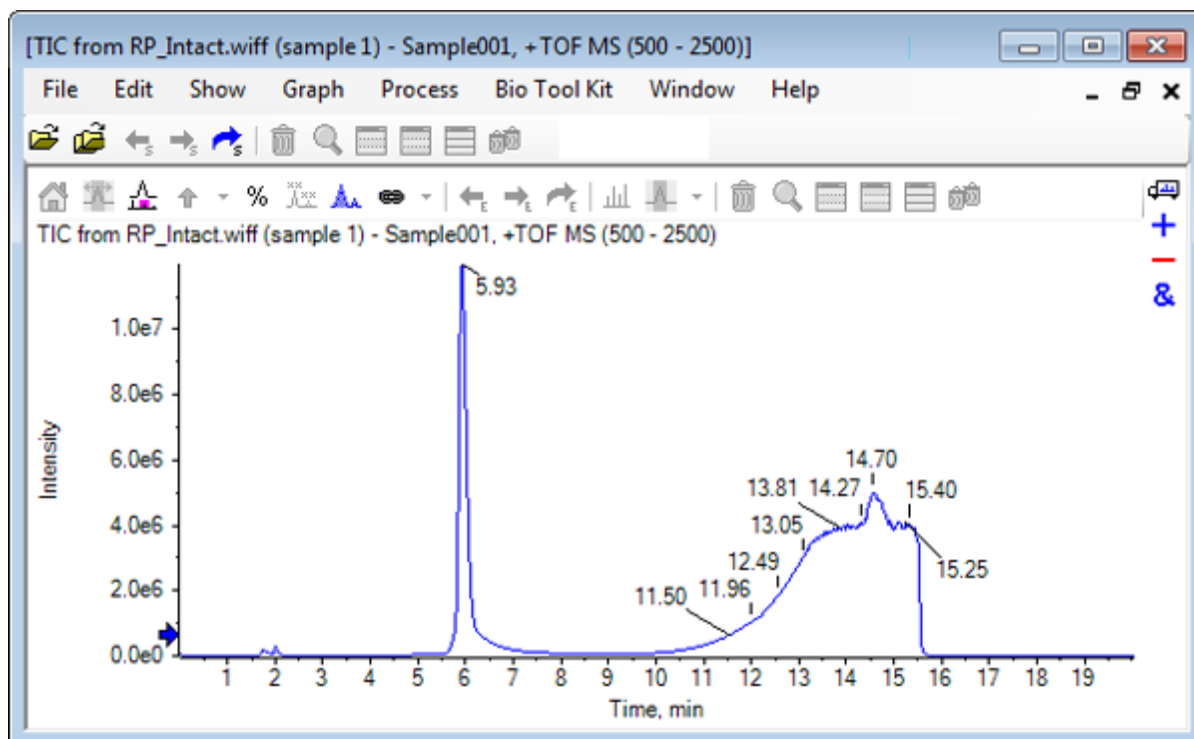
1. Haga clic en el icono **Open Sample** en la barra de herramientas principal.

Tutorial de Explorer

Se abre el cuadro de diálogo **Select Sample**.

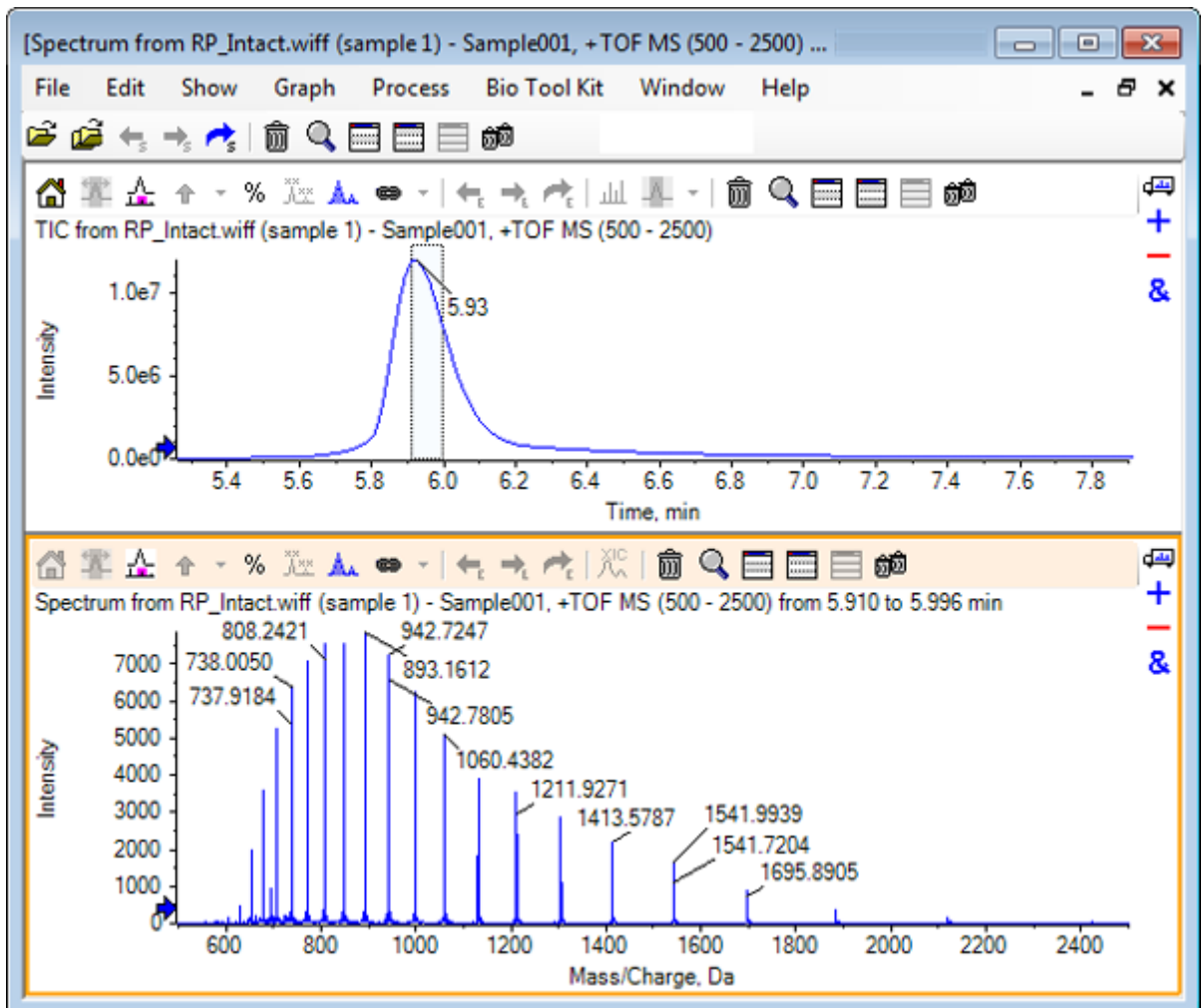
2. Si la carpeta **Sample Data** no está ya seleccionada, haga clic en **Browse** y acceda a la carpeta **Sample Data**.
3. Seleccione el archivo **RP_Intact.wiff** y, a continuación, haga clic en **OK**.

Figura D-100: TIC del archivo RP_Intact.wiff



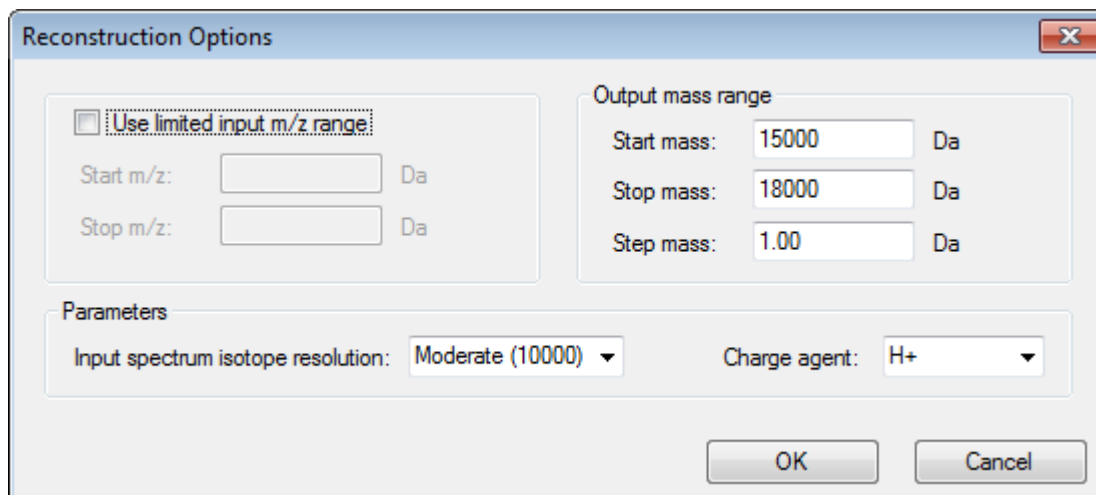
4. Cree un promedio de espectro utilizando una región del pico a 5,93 min. Consulte [Figura D-101](#).

Figura D-101: Promedio de espectro



5. Con el panel de espectro activo, haga clic en **Bio Tool Kit > Reconstruct Protein..** Se abre el cuadro de diálogo **Reconstruction Options**.

Figura D-102: Opciones de reconstrucción

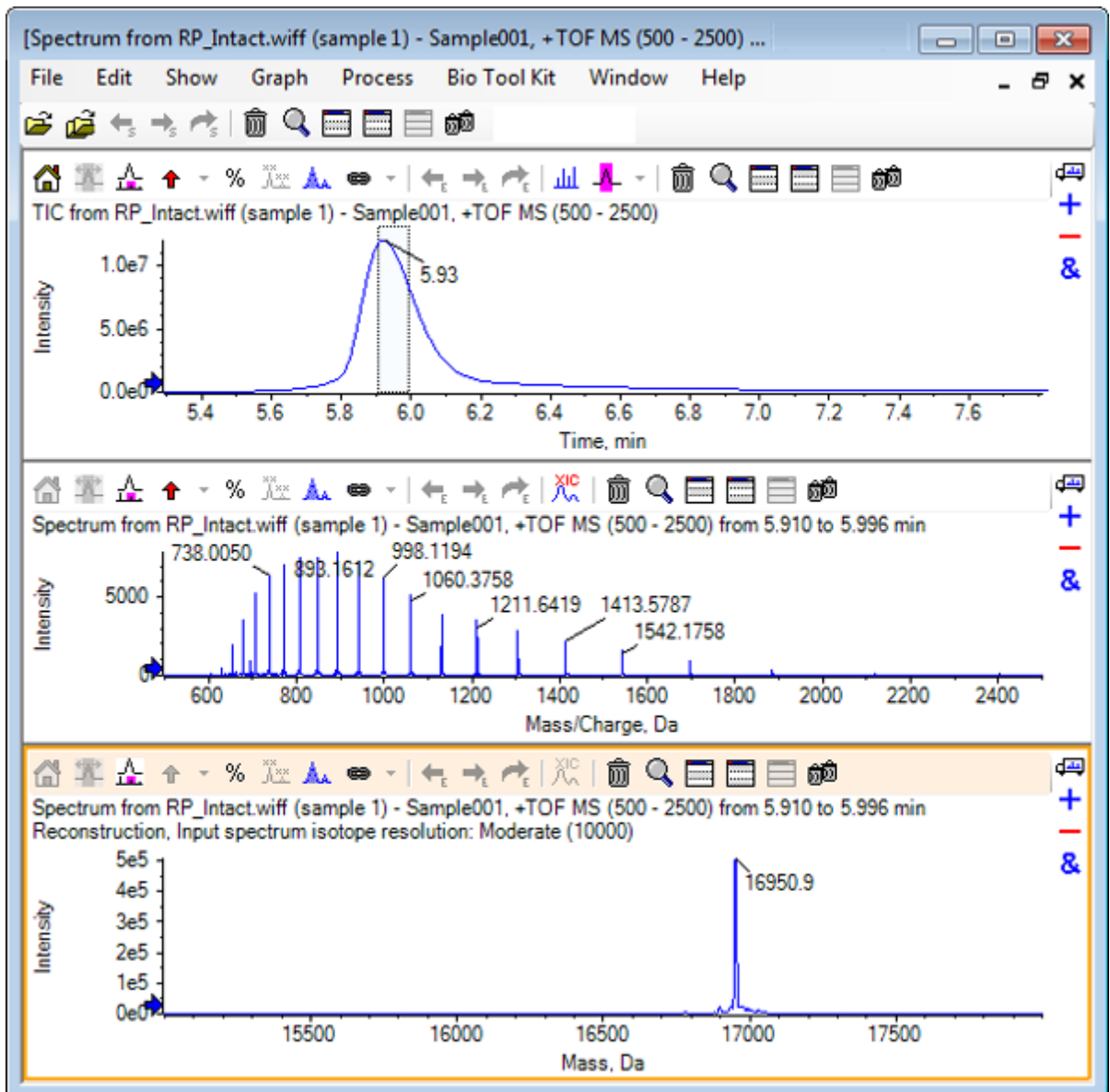


6. Escriba los valores adecuados para las opciones siguientes:
 - **Start mass:** 15000 Da
 - **Stop mass:** 18000 Da
 - **Step mass:** 1,0 Da
7. Seleccione el valor apropiado para **Input spectrum isotope resolution:** Moderate (10000).

Nota: En el caso de datos adquiridos con un sistema cuadrupolo, se muestra el parámetro Peak width en lugar del parámetro Input spectrum isotope resolution.

8. Seleccione el valor apropiado para **Charge agent:** H+.
9. Haga clic en **OK**.
El software genera un espectro de la proteína reconstruida en un panel independiente con el título: **Reconstruction, Input spectrum isotope resolution [user selection]**.

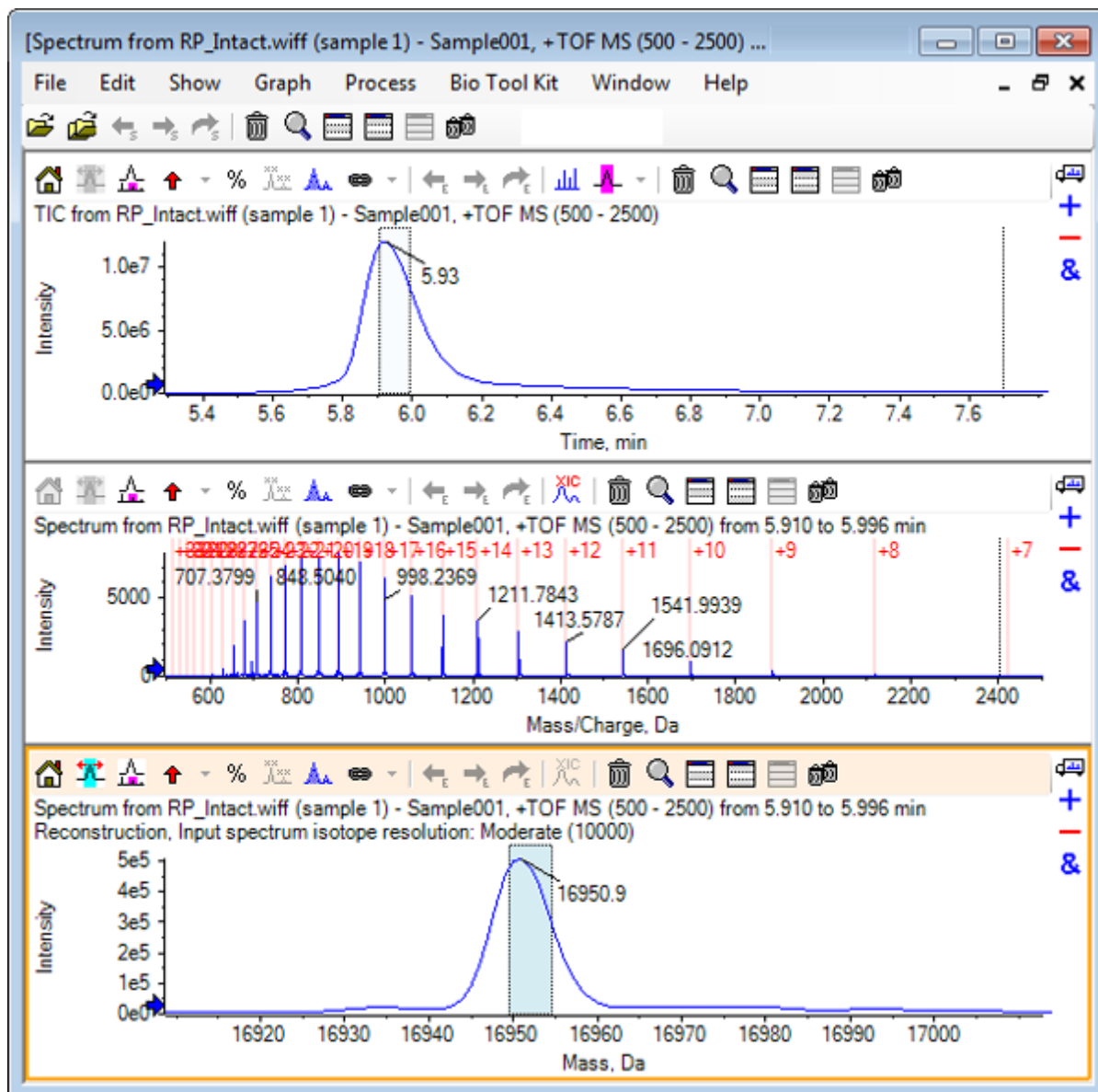
Figura D-103: Panel de reconstrucción



Nota: En el caso de datos adquiridos con un sistema cuadrupolo, el título del panel es: Reconstruction, Peak width [valor].

10. Seleccione el pico de proteína reconstruida.
 Se agregan resaltados de reconstrucción manual al espectro seleccionado para generar la proteína reconstruida.

Figura D-104: Espectro con resultados de reconstrucción manual



Resumen

En esta sección se han tratado las tareas siguientes:

- Secuenciar manualmente datos espectrales MS/MS a partir de una muestra de proteína digerida.
- Vincular un espectro secuenciado manualmente a fragmentos de péptido.
- Agregar a un espectro marcadores (resaltados de reconstrucción manual) que indican las posiciones de relación m/z teóricas de una masa determinada.
- Eliminar marcadores de un espectro.

- Obtener información sobre las secuencias de péptidos teóricas que se generan a partir de una escisión enzimática definida por el usuario de una proteína específica.
- Utilizar la reconstrucción de péptidos LCMS para identificar los picos espectrales y llevar a cabo una desconvolución a partir de los picos espectrales identificados.
- Vincular información teórica de un panel de proteína a una lista de picos reconstruidos.
- Obtener la masa promedio (peso molecular) de una proteína intacta.

Contacto

Formación del cliente

- En América del Norte: NA.CustomerTraining@sciex.com
- En Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Fuera de la UE y América del Norte, visite sciex.com/education para obtener información de contacto.

Centro de aprendizaje en línea

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

Soporte 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 y preguntas sobre el sistema y cualquier problema técnico que pueda surgir. Para obtener más información, visite el sitio web de SCIEX en sciex.com o póngase en contacto con nosotros de una de las siguientes formas:

- 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 de este documento.

Para ver este documento electrónicamente se necesita Adobe Acrobat Reader. Para descargar la última versión, vaya a <https://get.adobe.com/reader>.

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 acceder a la documentación del producto de hardware, consulte el DVD de documentación del sistema o el 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.
