



Software MicroLab de Agilent

Manual de operación

Avisos

Número de parte del manual:

0020-410

10.^a edición, enero 2024

Copyright

© Agilent Technologies, Inc. 2024

No se permite la reproducción de parte alguna de este manual bajo cualquier forma ni por cualquier medio (incluyendo su almacenamiento y recuperación electrónicos y la traducción a idiomas extranjeros) sin el consentimiento previo por escrito de Agilent Technologies, Inc. según lo estipulado por las leyes de derechos de autor estadounidenses e internacionales.

Agilent Technologies Australia [M] Pty Ltd
679 Springvale Road
Mulgrave, Victoria 3170, Australia
www.agilent.com

Revisión del software

Esta guía es válida para la revisión 5.7 o superior del software MicroLab de Agilent, hasta su reemplazo.

Garantía

El material contenido en este documento se proporciona "tal como es" y está sujeto a modificaciones, sin previo aviso, en ediciones futuras. Además, hasta el máximo permitido por la ley aplicable, Agilent rechaza cualquier garantía, expresa o implícita, en relación con este manual y con cualquier información contenida en el mismo, incluyendo, pero no limitado a, las garantías implícitas de comercialización y adecuación a un fin determinado. En ningún caso Agilent será responsable de los errores o de los daños incidentales o consecuentes relacionados con el suministro, utilización o uso de este documento o de cualquier información contenida en el mismo. En el caso que Agilent y el usuario tengan un acuerdo escrito separado con condiciones de garantía que cubran el material de este documento y que estén en conflicto con estas condiciones, prevalecerán las condiciones de garantía del acuerdo separado.

Licencias sobre la tecnología

El hardware y/o software descritos en este documento se suministran bajo una licencia y pueden utilizarse o copiarse únicamente de acuerdo con las condiciones de tal licencia.

Leyenda sobre derechos restringidos

Derechos restringidos del Gobierno de los Estados Unidos. Los derechos sobre el software y los datos técnicos otorgados al gobierno federal incluyen sólo los derechos que habitualmente se otorgan a los clientes usuarios finales. Agilent proporciona esta licencia comercial habitual en software y datos técnicos de conformidad con la TFA 12.211 (Datos técnicos) y 12.212 (Software informático) y, para el Departamento de Defensa, DFARS 252.227-7015 (Datos técnicos - Artículos comerciales) y DFARS 227.7202-3 (Derechos sobre software informático comercial o documentación de software informático).

Avisos de seguridad

PRECAUCIÓN

Un aviso de **PRECAUCIÓN** indica un peligro. Llama la atención sobre un procedimiento de operación, una práctica o similar que, si no se realizan correctamente o no se ponen en práctica, pueden provocar daños en el producto o pérdida de datos importantes. No avance más allá de un aviso de **PRECAUCIÓN** hasta que se entiendan y se cumplan completamente las condiciones indicadas.

Contenido

1	Presentación	7
	Instrumentos compatibles	8
2	MicroLab Mobile	9
	Conexión de la PDA al instrumento para comunicación Bluetooth	9
	Inicio de sesión por primera vez	11
	IQ del software en el FTIR portátil 4300	12
	Administración de usuarios	13
	Aregar usuarios	13
	Definiciones de los perfiles	14
	Iconos comunes	15
	Pantalla de inicio	15
	Estado	16
	Inicio	16
	Método	16
	Método de referencia	16
	Cierre de sesión	17
	Bloqueo	17
	Menú	17
	Pantalla de método	18
	Lista de métodos	19
	Activar	19
	Edición	19
3	MicroLab PC	21
	Pantalla de inicio	21

Contenido

Estado	21
Inicio	22
Métodos	22
Métodos de referencia	22
Cerrar sesión y salir	22
Bloqueo	22
Resultados anteriores	22
Funciones avanzadas	23
Métodos	23
Página principal	23
Crear un nuevo método/Editar un método existente	24
Funciones avanzadas	37
Verificación del sistema	37
Diagnósticos	37
Direcciones MAC	38
Administración de bibliotecas	38
Administración de usuarios	40
Transferencia de métodos multivariantes de GRAMS PLS/IQ a MicroLab PC	40
Exportación del archivo PLS/IQ *.cal a ASCII	40
Generación del archivo de método	41
Modelo cuantitativo de MicroLab transferido de MicroLab Expert a MicroLab PC	42
Uso de la verificación de alineación previa a la muestra	44
Transferencia de métodos editados a MicroLab Mobile	45
Uso de la función sincronizar de MicroLab Lite	45
Copia a través de Mi PC	46

Contenido

Mover archivos en un entorno compatible con el Título 21 del CFR, Parte 11	47
Verificación del sistema	47
4 MicroLab Quant	49
Pantalla de inicio	49
Cerrar sesión	50
Bloqueo	50
Iniciar nuevo modelo	50
Importar modelos	55
Funciones del Título 21 del CFR, Parte 11	56
Título 21 del CFR, Parte 11	56
Firma electrónica	56
5 MicroLab OQ	57
Calificación Operacional (OQ)	57
Verificación de Diagnósticos del Sistema Operacional	57
Validación del desempeño	58
Realizar la OQ	58
Informe de OQ	59
6 MicroLab con Título 21 del CFR, Parte 11	61
SCM	61
SDA	62
Componentes de software del Título 21 del CFR, Parte 11 en MicroLab	63
Bloqueo	63
Firma electrónica	64
Razón para el cambio	65
Título 21 del CFR, Parte 11	65

Contenido

7	Medición de muestras	67
	Limpieza de la interfaz de muestreo	67
	Colección de una medición de blanco de fondo	68
	Colección de una medición de muestra	69
8	Revisión de resultados	71
	MicroLab Mobile	71
	Pantalla de resultados	71
	Manejo de datos (Handling data)	71
	Resultados anteriores	74
	MicroLab PC/MicroLab Lite	75
	Pantalla de resultados	76
	Importación de espectros en GRAMS	82
	Creación de informes MicroLab	84
	Asignación de una plantilla de informe a un método	84
	Creación de una nueva plantilla de informe	84
9	Actualizaciones y solución de problemas	87
	Actualización de firmware	87
	Resolución de problemas	87
	Error en la inicialización	87
	Error en la creación de la plantilla de informe	88
	No se guardaron los cambios de ganancia	88
	Problemas de acceso a la base de datos	88
	Apéndice A: Tipo de archivo de MicroLab	89

1 Presentación

Instrumentos compatibles

8

El software MicroLab de Agilent está diseñado para funcionar con los espectrómetros Agilent ExoScan 4100, FlexScan 4200, FTIR portátil 4300, serie 4500, serie 5500 y con el FTIR Cary 630. El software está disponible en dos paquetes diferentes:

Software MicroLab FTIR y software MicroLab Mobile.

El paquete de software MicroLab FTIR consta de los siguientes cuatro módulos:

- MicroLab PC: conecta y controla un instrumento
- MicroLab Quant: para el desarrollo de métodos cuantitativos
- MicroLab OQ: para calificación operacional
- MicroLab Lite: revisión de datos y desarrollo de métodos

El paquete de software MicroLab Mobile contiene lo siguiente:

- MicroLab Mobile
- Paquete de software MicroLab FTIR

NOTA

El paquete de software MicroLab Mobile solo es compatible con el FTIR portátil 4300 y con los instrumentos que solían enviarse con una PC portátil (PDA, por sus siglas en inglés): Agilent ExoScan serie 4100, FlexScan serie 4200 y serie 4500. Agilent ya no suministra PDA con estos instrumentos.

El paquete de software opcional MicroLab Pharma (número de parte: G4984-64000) y el paquete de software MicroLab Pharma Upgrade (número de parte: G4985-64000) proporcionan controles técnicos integrados que garantizan la seguridad de los datos, controlan el acceso y facilitan el cumplimiento de la normativa según lo definido por el Título 21 del CFR, Parte 11, de la FDA de los EUA., Anexo 11 de la EU y demás regulaciones nacionales similares sobre registros electrónicos.

En este documento, la referencia al software Título 21 del CFR, Parte 11, en los entornos, funciones, etc., refiere a la integridad de los datos de cualquier entorno/componente que utilice el software MicroLab Pharma.

Los paquetes de software MicroLab proporcionan una funcionalidad y estructura similar, con las siguientes excepciones:

- El software MicroLab Mobile no permite la edición de métodos
- El software MicroLab Lite no puede colectar datos

Presentación

- Se debe conectar un instrumento para ejecutar el software MicroLab PC y MicroLab Mobile con la PC.

El software está diseñado para que tanto usuarios avanzados como principiantes puedan usarlo con facilidad. Posee pantallas basadas en menús e instrucciones que guían a los usuarios al realizar los análisis.

El software incorpora un inicio de sesión de usuario. Cada usuario posee "perfiles" definidos, los cuales son asignados por el administrador. Estos perfiles permiten a los administradores limitar los métodos y las acciones permitidas para los usuarios de nivel inferior.

Instrumentos compatibles

Esta versión puede usarse con los instrumentos FTIR: Agilent Cary 630, ExoScan 4100, FlexScan 4200, 4300 portátil, 4500 portátil y 5500.

2

MicroLab Mobile

Conexión de la PDA al instrumento para comunicación Bluetooth	9
Inicio de sesión por primera vez	11
IQ del software en el FTIR portátil 4300	12
Administración de usuarios	13
Iconos comunes	15
Pantalla de inicio	15
Pantalla de método	18

Para instalar o actualizar el software, consulte las instrucciones de instalación de software de MicroLab que se proporcionan con el software.

NOTA

El paquete de software MicroLab Mobile solo es compatible con el FTIR portátil 4300 y con los instrumentos que solían enviarse con una PDA: Agilent ExoScan serie 4100, FlexScan serie 4200 y serie 4500.

Conexión de la PDA al instrumento para comunicación Bluetooth

NOTA

Esta sección se aplica únicamente a los instrumentos Agilent ExoScan serie 4100, FlexScan serie 4200 y FTIR serie 4500.

- 1 Para configurar la conexión Bluetooth entre el instrumento y la PDA, haga clic en el ícono de Bluetooth en la página de inicio. Si está habilitado el "modo de vuelo", deshabilitélo. Haga clic en la barra de Bluetooth para activar la comunicación Bluetooth si aún no está en el modo encendido "ON".
- 2 En el Menú, seleccione **Configuración Bluetooth**.
- 3 En la ficha Dispositivos, desactive cualquier dispositivo seleccionándolo con el lápiz y manténgalo en su lugar hasta que aparezca el menú. A continuación, haga clic en **Eliminar**.

- 4 Una vez que los dispositivos se desactiven, haga clic en **Agregar un dispositivo nuevo**. Espere a que aparezca la lista de dispositivos con Bluetooth y seleccione el dispositivo adecuado. Haga clic en **Siguiente** en la parte inferior de la pantalla.
- 5 La conexión a dispositivos portátiles requiere una clave de acceso universal. El código de acceso requerido es **7890**. Introduzca este valor y seleccione **Siguiente**. El sistema prueba la conexión con el dispositivo FTIR portátil y agrega el dispositivo.
- 6 Una vez que se agrega el dispositivo, seleccione **Opciones avanzadas** y asegúrese de que el cuadro de configuración del puerto en serie está marcado. La casilla está desmarcada por defecto, pero debe estar activada para que el dispositivo funcione correctamente. Haga clic en **Guardar**.
 - Las Opciones avanzadas solo aparecen después de la conexión. Si desaparece y vuelve a la pestaña del dispositivo, seleccione el dispositivo recién conectado haciendo clic sobre este con el lápiz óptico. Esto lo llevará a las Opciones avanzadas anteriores para configurar la comunicación del puerto en serie.
- 7 Una vez que el puerto en serie ha sido configurado, seleccione la pestaña **Puertos COM** en la parte inferior de la pantalla de configuración de Bluetooth.
- 8 Seleccione **Nuevo puerto de salida**. Seleccione el dispositivo que recién agregó a la configuración de la comunicación Bluetooth y haga clic en **Siguiente**.
- 9 El valor predeterminado del puerto COM para la versión 4.0 y posteriores de MicroLab Mobile es COM 1. Configure el puerto COM como COM 1 y DESACTIVE la casilla **Conexión segura**. Una vez que haya hecho esto, seleccione Finalizar en la sección inferior de la pantalla.
 - Si hay un problema de comunicación con el puerto COM seleccionado, la PDA le avisará mediante un mensaje de error. El valor predeterminado del puerto COM para la comunicación se puede cambiar a través del archivo de comunicación para el dispositivo portátil. Póngase en contacto con el personal de soporte de Agilent si necesita instrucciones de instalación adicionales para cambiar la configuración del puerto COM.
- 10 Esto lo llevará de vuelta a la pantalla de configuración de ajustes de Bluetooth inicial. Haga clic en **Aceptar** en la esquina superior derecha y cierre todos los programas abiertos hasta regresar a la pantalla principal de inicio.
- 11 Elija el menú Inicio. MicroLab Mobile debe aparecer como una selección.

Inicio de sesión por primera vez

Para iniciar sesión en MicroLab Mobile por primera vez:

- 1** Las PC portátiles o integradas que se suministran con los sistemas FTIR ExoScan 4100 y FTIR serie 4500 de Agilent cuentan con un acceso directo al software MicroLab Mobile en el menú Inicio. Para iniciar el software, haga clic en **Inicio** y a continuación, haga clic en el ícono **MicroLab Mobile**. También puede iniciar el software si va a Mi PC\Archivos de programas\MicroLab Mobile y hace clic en el ícono **MicroLabMobileEX.exe** o si selecciona Programas en el menú de inicio y luego el ícono apropiado.
El FTIR portátil 4300 de Agilent se envía con MicroLab Mobile preinstalado en la computadora integrada. MicroLab Mobile se iniciará automáticamente cuando se enciende el FTIR portátil 4300.
- 2** El software se iniciará y mostrará un mensaje indicando que se requiere una sincronización inicial. Esta sincronización cargará los perfiles creados en SCM (para el software de cumplimiento con el Título 21 CFR, Parte 11) y todos los métodos en la carpeta Public Mobile Methods a la PDA o computadora integrada. Consulte la página 47 para obtener información sobre cómo mover archivos en un entorno compatible con el Título 21 del CFR, Parte 11.
- 3** Abra MicroLab Lite en la PC e inicie sesión.
 - Para la conexión de la PDA, asegúrese de que Windows Mobile Device Center esté instalado en la PC. Instale la aplicación desde el disco de instalación del software MicroLab.
- 4** Conecte el cable de comunicaciones desde la PDA o un equipo incorporado a la PC.
- 5** Si la sincronización no se inicia automáticamente, haga clic en **Características avanzadas** y luego en **Sincronizar**.
- 6** Haga clic en **Nuevo**.
- 7** Haga clic en **Obtener nombre del dispositivo conectado**. El nombre del dispositivo aparecerá en el campo.
- 8** Haga clic en **Examinar** y vaya a la carpeta Resultados Móviles Públicos. Todos los datos colectados se guardarán en esta carpeta.
- 9** Haga clic en **Aceptar**.
- 10** Haga clic en **Sincronizar** y luego en **Sí** en el mensaje que se muestra para comenzar la sincronización.
- 11** Haga clic en **Aceptar** una vez que se complete la sincronización.

- 12** En la PDA o en el equipo incorporado, vuelva a iniciar MicroLab Mobile y luego inicie sesión cuando se visualiza la pantalla de Seguridad. Utilizará las mismas credenciales de inicio de sesión que se crearon utilizando MicroLab Lite o PC. El sistema debería mostrar la pantalla de inicio.

Para sistemas compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11: Inicie sesión con un perfil con privilegios de MicroLab Mobile. Ingrese el nombre de usuario apropiado para el perfil creado en SCM. Los campos Grupos y Proyectos se completarán automáticamente. Introduzca la contraseña y haga clic en **Iniciar sesión**.

NOTA

Tanto el nombre de usuario y la contraseña distinguen entre mayúsculas y minúsculas.

Cuando se utiliza MicroLab Mobile Título 21 del CFR, Parte 11, las contraseñas deben ser solamente alfanuméricas. No utilice caracteres especiales, como \$, @, etc.

Cuando el dispositivo portátil está conectado a la PC, se recomienda iniciar sesión en MicroLab Mobile o en MicroLab Lite, pero no al mismo tiempo con el mismo perfil.

IQ del software en el FTIR portátil 4300

NOTA

Esta sección se aplica únicamente al FTIR portátil 4300 de Agilent.

MicroLab Mobile tiene una función IQ/OQ integrada en la computadora del instrumento. Realice la prueba de calificación de la instalación (IQ) del software para garantizar que todos los archivos pertinentes estén instalados.

Para ejecutar la función IQ/OQ:

- 1** En la pantalla de inicio de sesión, haga clic en **Salir** para cerrar MicroLab Mobile.
- 2** Haga clic en **Aceptar** cuando aparezca el cuadro de diálogo Confirmación de salida.
- 3** La pantalla entra al modo de acceso directo donde pueden observarse dos iconos. El ícono superior es MicroLab Mobile y el ícono inferior corresponde a la función IQ/OQ del software.
- 4** Seleccione el ícono inferior para ejecutar IQ/OQ.
- 5** Aparece la pantalla de inicio de sesión. Introduzca su nombre de usuario y contraseña para iniciar sesión.

- 6** Haga clic en el botón de flecha **Siguiente** en la esquina inferior derecha para realizar la prueba de IQ del software.
- 7** Aparece la página de resultados. Asegúrese de que el resultado de la calificación de la instalación sea PASA.
- 8** Haga clic en el botón de flecha **Siguiente** para generar el informe de IQ.
- 9** Haga clic en **Salir** para regresar al modo de acceso directo.

Administración de usuarios

La opción Funciones avanzadas permite que el administrador administre usuarios autorizados y cambie las funciones del sistema MicroLab. El sistema se instala con varios niveles de usuario: Administrador, Servicio, Desarrollador, Técnico o Firmante electrónico. Se pueden agregar usuarios adicionales en cualquier momento. Si varios operadores utilizarán el sistema, se recomienda configurarlo con los usuarios deseados y las contraseñas la primera vez que se inicia.

NOTA

Solo los usuarios con privilegios de administrador pueden tener acceso a la Administración de usuarios.

Esta función no está disponible cuando el entorno compatible con el Título 21 del CFR, Parte 11 está habilitado. Todas las funciones de administración de usuarios se llevan a cabo en el software Spectroscopy Configuration Manager (SCM). Para obtener más información, consulte la Guía del usuario de SCM proporcionada con el software.

Agregar usuarios

Para agregar un usuario al sistema:

- 1** Toque el botón **Funciones avanzadas** en la página de Inicio de MicroLab Mobile.
- 2** Haga clic en **Administración de usuarios**.
- 3** Haga clic en **Agregar nuevo usuario**.
- 4** Introduzca un ID de usuario personalizado en el cuadro de texto.
- 5** Escriba el nombre completo del usuario.
- 6** Introduzca una nueva contraseña.
- 7** Identifique el perfil del nuevo usuario (Admin, Servicio, Desarrollador o Técnico).

- 8** Haga clic en **Aplicar cambios**.
- 9** Aparece una ventana que le avisa que se lo desconectará del sistema. Deberá volver a ingresar después de que se hayan aplicado los cambios.

NOTA

El sistema desconectará automáticamente al usuario. El ID de usuario nuevo aparecerá en el menú desplegable Nombre de usuario en la pantalla de inicio de sesión.

Definiciones de los perfiles

Servicio: El perfil de Servicio proporciona acceso a todos los parámetros del instrumento dentro de un método, incluida la tecnología de muestreo aplicable al método.

Admin: El perfil de Admin (administrador) está reservado para la(s) persona(s) responsable(s) del mantenimiento continuo y de los cambios en el software MicroLab, incluidos la edición de métodos, la creación de nuevos métodos, la definición de métodos públicos, la realización de la verificación del instrumento y el control del acceso de los usuarios.

Desarrollador: El perfil de Desarrollador permite el acceso a la validación del desempeño del sistema, además de la capacidad de editar y ejecutar métodos. Sin embargo, este perfil no tiene acceso a las funciones de administración de usuarios o a los diagnósticos del sistema.

Técnico: El perfil de Técnico es para los usuarios estándar del sistema. El técnico solo tiene acceso a los métodos de ejecución definidos por el administrador como públicos. Además, el técnico no puede revisar los datos, llevar a cabo la validación del sistema o modificar los métodos.

Firma electrónica: Designación utilizada para permitir a los usuarios firmar métodos y resultados de forma electrónica en los distintos niveles de adquisición y revisión de datos. Este nivel se utiliza normalmente solo en la versión compatible con el Título 21 del CFR, Parte 11 del software MicroLab.

NOTA

Solo los perfiles de Administrador y Desarrollador tienen acceso a las funciones avanzadas.

Pantalla Administración de usuarios

Agregar nuevo usuario: agrega un usuario al sistema. Se deben asignar un nombre de usuario, una contraseña y un nivel de acceso. También es necesario introducir el nombre completo.

Eliminar usuario: Elimina de forma permanente un perfil de usuario del sistema MicroLab Mobile.

Restablecer contraseña: Permite al administrador cambiar la contraseña del usuario seleccionado actualmente.

Restablecer seguridad: Elimina todos los usuarios personalizados y restablece los tres usuarios predefinidos (Servicio, Administrador y Usuario). Esta opción también restablecerá la seguridad si se ha desactivado con la opción Deshabilitar seguridad.

Deshabilitar seguridad: elimina todas las funciones de seguridad. Cuando la seguridad está deshabilitada, no se requiere contraseña y todos los usuarios tienen privilegios de administrador. La seguridad se puede restaurar si presiona el botón Restablecer seguridad y luego ingresa la información inicial de la cuenta de Administrador.

Iconos comunes

Estos iconos aparecen en el software:

Inicio: Regresa el software a la pantalla de inicio principal.

Menú: muestra las opciones del menú.

Siguiente: Lleva el software al siguiente paso en el proceso de adquisición de datos.

Pantalla de inicio

La pantalla de Inicio es la primera pantalla que aparece después de iniciar sesión en MicroLab. Desde la pantalla de Inicio, usted puede comenzar un método, medir una muestra de referencia, abrir el cuadro de diálogo de Selección del método, abrir el cuadro de diálogo de Resultados anteriores o abrir el cuadro de diálogo Funciones avanzadas. El módulo o interfaz de muestreo debe cambiarse en la pantalla de Inicio. Todos los procedimientos comienzan y terminan en la pantalla de Inicio.

Estado

En la esquina superior izquierda de la pantalla, aparece un pequeño círculo. Este círculo cambia de color para indicar el estado del instrumento conectado al software MicroLab. El círculo será de color verde cuando el sistema esté funcionando dentro de los parámetros definidos en la fábrica. Una luz roja o amarilla indica un parámetro fuera de las especificaciones. Cuando no se pueda resolver una condición de luz roja o amarilla, comuníquese con Agilent para obtener ayuda. Todos los parámetros utilizados para determinar la preparación del sistema se enumeran en Funciones avanzadas> Diagnósticos. Los parámetros fuera de los límites aparecerán en color rojo en la pantalla de diagnóstico.

Justo arriba de la luz que señala el estado hay un indicador de batería. El indicador de batería muestra el nivel de carga restante en las baterías del instrumento. El nivel de carga de las baterías de la PC portátil no se indica en el software MicroLab.

Inicio

El botón de Inicio comienza una medición de la muestra utilizando el método actualmente seleccionado. El método actualmente seleccionado se muestra en la esquina superior derecha de la pantalla de Inicio.

Método

El botón Método abre el cuadro de diálogo de Selección del método. Los usuarios sin privilegios de administrador solo pueden seleccionar los métodos designados por el administrador como públicos. Lea las instrucciones de Selección del método a continuación.

Método de referencia

El botón de Método de referencia permite la colección de una muestra de referencia para un método de componentes. Algunos métodos de componentes presentan concentraciones como un aumento o disminución porcentual. Para estos cálculos, es necesario una referencia de la muestra dentro de la especificación para calcular estos valores iniciales. Además, el Método de referencia guarda el espectro del material en especificación (nuevo) para su posterior comparación visual.

Cierre de sesión

El botón Cerrar sesión, cierra la sesión del usuario actual y retorna el software MicroLab Mobile a la pantalla de inicio de sesión. Desde allí, se puede tocar el botón Salir para cerrar el software.

Bloqueo

Esta opción solo está disponible en entornos compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11. Se utiliza para bloquear el software y controlar el acceso cuando no se está utilizando. Consulte la sección MicroLab Título 21 del CFR, Parte 11 en la página 61 para obtener más información.

Menú

El menú contiene:

- Resultados anteriores
- Funciones avanzadas

Resultados anteriores

Permite la visualización de los datos recopilados previamente. Solo los perfiles de Servicio, Administrador y Desarrollador tienen acceso a resultados anteriores.

Título 21 del CFR, Parte 11

Con un archivo de Resultados abierto, haga clic en el botón Título 21 del CFR, Parte 11 para visualizar un registro de auditoría con una lista de las acciones realizadas durante la creación o edición de un modelo.

Consulte la sección MicroLab Título 21 del CFR, Parte 11 en la página 61 para obtener más información sobre esta función.

Funciones avanzadas

La pantalla de Funciones avanzadas proporciona acceso a Diagnósticos, Verificación del sistema, Administración de usuarios y Administración de bibliotecas para los perfiles de Servicio, Administrador y Desarrollador.

La función Verificación del sistema incluye las siguientes pruebas del instrumento: Desempeño (señal a ruido), Prueba de estabilidad, Verificación de la calibración de la frecuencia del láser y Verificación de la resolución espectral. Consulte el manual de operación del instrumento correspondiente para obtener más información sobre Diagnósticos y Verificación del sistema.

Interfaz de muestreo

La pantalla de Funciones avanzadas también permite al usuario acceder a la selección de interfaz de muestreo para los sistemas ExoScan FTIR serie 4100. Esto es importante para los métodos que están vinculados directamente a la interfaz de muestreo, así como para vincular especificaciones de desempeño con el dispositivo de muestreo. Se debe seleccionar la interfaz de muestreo apropiada para que cualquiera de estos trabaje adecuadamente.

Pantalla de método

Los métodos definen los parámetros de colección y el análisis de datos del instrumento en el software MicroLab. Los métodos pueden ser definidos sólo para colectar datos, colectar y comparar los datos colectados respecto de una biblioteca predefinida o colectar datos y realizar un análisis cuantitativo de esos datos o un análisis de picos. Los tres tipos de métodos predefinidos son (1) método de solo colección de datos, (2) método de búsqueda cualitativa (bibliotecas) y (3) método de componentes (análisis cuantitativo o de picos) para los espectrómetros FTIR 4500t/5500t y Cary 630 de Agilent. Para preguntas e información adicional sobre las especificaciones de los métodos predefinidos, póngase en contacto con Agilent.

MicroLab Mobile sólo permite la selección de métodos predefinidos. La edición de métodos debe llevarse a cabo en un equipo independiente que usa software MicroLab PC o MicroLab Lite. Para poder ver los métodos en el cuadro de diálogo Método, los métodos desarrollados en las versiones de software PC o Lite se deben transferir al siguiente directorio en el equipo portátil o controlador integrado: @\Archivos de programa\ MicroLab Mobile\Métodos.

En un entorno compatible con el Título 21 del CFR, Parte 11, la transferencia de métodos se produce durante la sincronización.

Lista de métodos

Muestra una lista de los métodos creados para la aplicación de software MicroLab PC. Para desplazarse hacia arriba o hacia abajo en la lista de métodos, simplemente toque con el lápiz la lista y arrástrela a través de la pantalla.

NOTA

Un administrador del sistema limita la accesibilidad de los métodos. El administrador del sistema debe seleccionar las casillas de verificación a lo largo del borde izquierdo de la pantalla; esto permite el funcionamiento de los métodos para todos los usuarios de nivel técnico. Para los usuarios con el perfil de Técnico, la pantalla mostrará únicamente los métodos previamente habilitados por el administrador del sistema.

Activar

En el botón Activar selecciona el método resaltado y cierra la pantalla. El software vuelve a la pantalla de Inicio. Asegúrese de que el método correcto está activo. Si aparece el método incorrecto, vuelva a la pantalla Métodos y elija un método alternativo. Para ello, pulse el botón Seleccionar métodos, resalte el método que deseé y pulse Activar.

Edición

La edición de métodos no está disponible en el software MicroLab Mobile. Para poder editar un método, es necesario utilizar el software MicroLab Lite instalado en un equipo independiente. Una vez que el método se ha establecido, se pueden transferir al equipo portátil o a la PC integrada para su uso con MicroLab Mobile.

NOTA

Para los instrumentos con PDA, el software MicroLab Lite debe instalarse en una computadora que contenga Windows Mobile Device Center para transferir fácilmente métodos y datos. Windows Mobile Device Center puede instalarse desde el disco de instalación del software MicroLab.

Esta página se dejó en blanco intencionalmente.

3 MicroLab PC

Pantalla de inicio	21
Métodos	23
Modelo cuantitativo de MicroLab transferido de MicroLab Expert a MicroLab PC	42
Uso de la verificación de alineación previa a la muestra	44
Transferencia de métodos editados a MicroLab Mobile	45
Verificación del sistema	47

Pantalla de inicio

La pantalla de Inicio es la primera pantalla que aparece después de iniciar sesión en MicroLab PC. Todos los procedimientos comienzan y terminan en la pantalla de inicio.

Las siguientes opciones se pueden seleccionar desde la pantalla de inicio:

- Inicio
- Métodos
- Plantillas de referencia
- Cierre de sesión
- Resultados anteriores
- Funciones avanzadas

Estado

En la parte superior izquierda de la pantalla, el botón de Estado debe ser de color verde y mostrar LISTO. Si el campo es de color amarillo o rojo, haga clic en el botón de diagnóstico en la opción Funciones avanzadas para identificar el problema. Cuando no se pueda resolver una condición de luz roja o amarilla, comuníquese con Agilent para obtener ayuda.

NOTA

Para ciertas combinaciones de interfaz/instrumento, se espera que el estado se muestre en amarillo durante la adquisición de datos (esto es especialmente cierto para las interfaces de reflectancia externa).

Inicio

El botón de Inicio comienza una medición de la muestra utilizando el método activado. El método activado se muestra en la esquina superior derecha de la pantalla de Inicio.

Métodos

El botón Métodos abre el cuadro de diálogo de Selección del método. Los usuarios sin privilegios de administrador solo pueden activar los métodos designados por el administrador como públicos.

Consulte la página 23 para obtener más información sobre los Métodos.

Métodos de referencia

El botón Plantilla de referencia permite la creación de nuevas plantillas de métodos de referencia, la edición de plantillas de métodos de referencia existentes y la activación de una plantilla de método de referencia elegida.

Cerrar sesión y salir

La pantalla de cierre de sesión permite que diferentes usuarios se conecten y desconecten del sistema. El botón Salir cierra el software de MicroLab PC.

Bloqueo

Esta opción solo está disponible en entornos compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11. Se utiliza para bloquear el software y controlar el acceso cuando no se está utilizando. Consulte la sección MicroLab Título 21 del CFR, Parte 11 en la página 61 para obtener más información.

Resultados anteriores

Una vez realizado el análisis, se puede acceder a los resultados anteriores a través de la pantalla de Inicio. Tras hacer clic en Resultados anteriores, aparecerá una pantalla que enumera las muestras que se han ejecutado. Las muestras se nombran según las convenciones de nombres elegidos.

Funciones avanzadas

Desde la pantalla Funciones avanzadas, se pueden seleccionar las siguientes opciones:

- Verificación del sistema
- Diagnósticos
- Direcciones MAC
- Administración de bibliotecas
- Administración de usuarios
- Cambio de contraseña

Consulte la página 37 para obtener más información sobre las Funciones Avanzadas.

Métodos

Página principal

Lista de métodos: Muestra una lista de los métodos creados para la aplicación de software MicroLab PC. Cualquier método presente aquí también aparecerá en MicroLab Lite.

Eliminar: elimina el método seleccionado actualmente. Solo los usuarios con derechos de administrador pueden acceder a esta opción. Esta función no está disponible en entornos compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11.

Importar: esta opción solo está disponible en entornos compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11. Importa métodos compatibles y no compatibles con CFR. Los métodos CFR conservarán el registro de auditoría anterior, aunque se eliminarán todas las firmas. Una vez importados, estos métodos se pueden utilizar en un entorno CFR. Los métodos no compatibles con CFR son solo de lectura.

Nuevo: crea un nuevo método. Solo los usuarios con derechos de administrador pueden acceder a esta opción.

Imprimir: Esta característica del sistema permite al usuario imprimir una copia de la información instrumental del método seleccionado y de los detalles del método.

Editar: abre el método seleccionado actualmente para poder editarlo. Solo los usuarios con derechos de administrador pueden acceder a esta opción.

Activar: selecciona el método actualmente resaltado como el método que se utilizará. Para poder colectar datos con un método particular, primero se debe activar dicho método.

NOTA

Solo los métodos marcados en la columna de casilla Pública podrán ser vistos o activados por usuarios que no sean administradores.

Crear un nuevo método/Editar un método existente

Pestaña de información

La pestaña de información se utiliza para establecer información básica relacionada con el método elegido. Esta pestaña tiene un método simple predeterminado.

Nombre del método: este campo especifica el nombre del método. El nombre del método se mostrará en la lista de métodos. El nombre del método no se puede editar desde la pestaña de información. Se define al **Guardar** un nuevo método, o al elegir **Guardar como...** para una nueva versión de un método existente.

Desarrollador: este campo especifica el usuario que ha desarrollado el método.

Comentario: este campo está disponible para que el usuario introduzca alguna información especial sobre el método.

NOTA

El método predeterminado que se proporciona con el software MicroLab solo sirve como marcador de posición. Agilent no recomienda utilizar este método.

Pestaña Tipo

La pestaña Tipo es común a todos los tipos de métodos y se utiliza para especificar y verificar los parámetros previos a la colección de datos.

Tipo de método: se encuentran disponibles tres tipos de métodos en el software MicroLab PC:

- **Componentes:** métodos de predicción cuantitativa o análisis espectral. Se colecta un espectro infrarrojo y luego se realiza una predicción cuantitativa predefinida a partir de esos datos o del análisis de tipo de área/altura de picos. Se pueden definir varios componentes, cada uno con su propia calibración cuantitativa en un solo método. También tiene funciones para medir altura de picos/área/centro de gravedad/ruido.
- **Solo colección de datos:** Solo colecta y muestra el espectro infrarrojo. No se realiza ningún análisis adicional en los datos colectados.

- **Búsqueda cualitativa:** colecta un espectro infrarrojo y realiza una búsqueda contra una o varias bibliotecas espetrales predefinidas. Los resultados de este método serán las mejores coincidencias con la biblioteca espectral según el algoritmo de búsqueda elegido.

Verifica que el cristal esté limpio antes de colectar un blanco de fondo: esta opción activa o desactiva el sistema de control de limpieza de la celda de muestreo o cristal del ATR antes de colectar un blanco de fondo. Esta opción se recomienda solo para interfaces ATR.

- **Barridos** de verificación de limpieza: establece el número de barridos de verificación de limpieza realizados.
- **Límites:** establece el límite de absorbancia superior para los barridos de verificación de limpieza.

NOTA

El Límite de barridos de verificación de limpieza puede requerir un ajuste con el tiempo según los requisitos experimentales.

Blanco de fondo: Existen dos opciones para la colección de espectros de blanco de fondo:

- **Colectar un nuevo blanco de fondo para cada muestra:** esto requiere la colección de un espectro de blanco de fondo nuevo para cada muestra. Se recomienda utilizar esta opción para obtener la mejor calidad de los datos, ya que proporciona la mejor corrección de vapor de agua, dióxido de carbono y otras variaciones atmosféricas.
- **Límite de tiempo válido para el blanco de fondo:** si se selecciona esta opción, el blanco de fondo se colecta en intervalos de tiempo y las muestras pueden ser colectadas en secuencia sin medir el espectro de blanco de fondo entre las muestras. El límite de tiempo se puede establecer en minutos, horas y días.

NOTA

Se pueden establecer límites de tiempo válidos según los requisitos de la aplicación y los cambios esperados en las condiciones experimentales. La colección frecuente y oportuna de espectros de blanco de fondo es vital para la calidad de los datos.

Unidades del eje Y: esta función opcional especifica la escala del eje Y: Absorbancia, Transmitancia o Reflectancia.

Valor Y máximo fijo: esta opción mostrará los valores de absorbancia por arriba del valor especificado como el valor y máximo fijo. Esta es una opción útil cuando las bandas que no se utilizan analíticamente pueden quedar fuera de escala. Si se selecciona esta función, las bandas fuera de escala aparecerán con la 'parte superior plana' y no afectarán negativamente a la escala visualizada. Esta opción solo está disponible cuando se selecciona Absorbancia como Unidades del eje Y.

Límite mínimo en Y: establece el límite mínimo en el eje Y. Esta opción solo está disponible cuando se selecciona Absorbancia como Unidades del eje Y y se usa para avisar de una señal insuficiente. Cuando está habilitado, si la señal detectada está por debajo del valor especificado al comienzo de la adquisición de datos, aparecerá una alerta para sugerir el reposicionamiento de la muestra antes de continuar con la colección. Esta función solo se realiza en el escaneo espectral inicial.

NOTA

La fijación del eje Y se usa típicamente en la interfaz de transmisión para limitar la absorbancia más alta registrada y permitir un mejor modelado de picos en escala. Por lo general, se utiliza un valor 2. El valor máximo predeterminado es 5 Abs equivalente a 0,00001T (0,001 %T).

Mostrar verificación de alineación previa de la muestra: esta opción habilita e inicia la verificación de la alineación previa de la muestra. Consulte la página 44 para obtener más información sobre la verificación de la alineación previa a la muestra.

Mostrar verificación de continuidad del muestreo: esta opción habilita o deshabilita la verificación de la continuidad de la muestra. Por lo general, esta verificación se habilita en dispositivos portátiles para asegurar que la muestra se mantenga en el foco de la tecnología de muestreo durante la medición.

NOTA

Las comprobaciones **Mostrar verificación de alineación previa de la muestra** y **Mostrar verificación de continuidad del muestreo** están destinadas únicamente a interfaces/módulos de reflectancia externa. Estas comprobaciones no se aplican a las interfaces ATR.

Habilitar vista clásica: esta opción activa o desactiva la vista clásica de la ventana gráfica. Esto solo está disponible cuando el método está configurado como Solo colección de datos.

Consulte la página 79 para obtener más información sobre las opciones de la ventana de gráficos Solo colección de datos.

Pestaña Instrumento

La pestaña Instrumento es común a todos los tipos de métodos y es donde se especifican los ajustes del instrumento utilizados para procesar los datos colectados.

Rango espectral (cm⁻¹): especifica los límites superior e inferior del rango espectral en número de onda. Seleccione **Completo** para habilitar el rango del detector predeterminado para la adquisición de datos. El rango puede variar según la serie del instrumento y puede aumentar o disminuir.

Barrido de blanco de fondo: esto especifica el número de barridos que se colectarán al medir el espectro del blanco de fondo. Los barridos adicionales producirán una mayor relación señal-ruido; sin embargo, el tiempo de medición aumenta proporcional al número de barridos.

Barridos de muestras: esto especifica el número de barridos que se colectaran al medir la muestra. Al igual que con la medición de blanco de fondo, los barridos adicionales aumentan la relación señal-ruido, y también aumentan la cantidad de tiempo. Los barridos de la muestra deben ser iguales o menores que el número de barridos del blanco de fondo. Por lo general, el blanco de fondo y la muestra se colectan con el mismo número de barridos.

Resolución (cm^{-1}): especifica la resolución espectral. Para las muestras de fase condensada, la mayoría de las mediciones se pueden hacer con una resolución de 4 cm^{-1} .

NOTA

La selección de la resolución adecuada depende de los requisitos de la aplicación. Una resolución más alta (un valor de número de onda más bajo, es decir, 2 cm^{-1}) dará como resultado una velocidad de barrido ligeramente más lenta, con un aumento en la densidad de datos y el número de puntos. Un espectro típico colectado a 4 cm^{-1} sin ningún Zero-filling da como resultado un archivo de aproximadamente 32 Kb.

Factor de llenado cero (Zero-filling): especifica el factor de Zero-filling que se usa para la transformada de Fourier del interferograma en un espectro de energía.

Apodización: especifica la función de apodización que se usa para la transformada de Fourier del interferograma en un espectro de energía: Ninguno (Boxcar), Triangular o Happ-Genzel.

Corrección de Fase: El método estándar de Mertz se aplica para corregir las diferencias de fase.

Tecnología de muestreo: seleccione la tecnología de muestreo: celda de transmisión, reflectancia, ATR, celda de gas u otra. Este campo es opcional. Es posible que el método no se active si la tecnología de muestreo seleccionada por el método no coincide con la interfaz real.

Establecer Ganancia del método: esta opción se usa para guardar un valor de ganancia en el método para el análisis de rutina. Por lo general, esta opción se usa para configurar instrumentos específicos en combinación con una interfaz específica, y donde se empleó un límite de blanco de fondo apropiado.

Normalizar los resultados cuantitativos a longitudes de paso óptico (μm): esta opción solo se aplica a la tecnología de muestreo de celdas de transmisión y celdas de gas.

Subtipo de muestreo: selecciona el subtipo de muestreo en función de la tecnología de muestreo que se haya elegido.

- **Celda de transmisión:** módulo de transmisión o 630 Módulo de transmisión para FTIR 630, TumblIR o DialPath.
- **Reflectancia:** difusa, especular o de ángulo de incidencia rasante.
- **ATR:** 1 rebote, 3 rebotes, 5 rebotes, 9 rebotes, cristal de ZnSe de 5 rebotes, cristal de Ge de 1 rebote, cristal de diamante de 1 rebote y de ZnSe de 1 rebote.

Tipo de detector: selección del tipo de detector del instrumento.

Almacenar datos de GPS: esta funcionalidad es solo aplicable para el FTIR portátil 4300 de Agilent. Esta opción permite almacenar datos del GPS (sistema de posicionamiento global) mientras colecta espectros. Los datos de GPS mostrarán la longitud y la latitud del lugar donde se registra cada espectro.

Requerir datos de GPS: esta funcionalidad es solo aplicable para el FTIR portátil 4300 de Agilent. Esta opción habilita o deshabilita los datos de GPS como información obligatoria cada vez que se colecten espectros. Si el instrumento no está habilitado para proporcionar datos de GPS, es necesario desactivar esta opción. De lo contrario, se rechaza la adquisición de datos. No use esta opción cuando esté en interiores o en áreas sin cobertura satelital.

Pestaña Bibliotecas

La pestaña Bibliotecas solo está disponible cuando se selecciona el tipo de método de búsqueda cualitativa. La primera columna de la lista mostrada describe el nombre de la biblioteca y la segunda columna indica si la biblioteca contiene espectros ATR. Se pueden agregar o eliminar bibliotecas de esta pestaña.

Para obtener más información sobre las bibliotecas, consulte la sección Administración de bibliotecas en la página 37.

Pestaña Búsqueda

La pestaña Búsqueda solo está disponible cuando se selecciona el tipo de método de búsqueda cualitativa. Esta pestaña se utiliza para configurar cómo el método elegido buscará en las bibliotecas seleccionadas.

Algoritmo de búsqueda: el menú desplegable del algoritmo de búsqueda ofrece las siguientes opciones para manipular la función de búsqueda:

- Euclíadiana
- Valor absoluto
- Derivada del valor absoluto
- Mínimos cuadrados
- Derivada de mínimos cuadrados
- Correlación
- Derivada de la correlación
- Similaridad
- Derivada de la similaridad
- Correlación extendida

Algoritmo de derivada Gap: este campo solo está disponible cuando se selecciona un tipo de búsqueda con algoritmo de derivada. El campo se usa para seleccionar el tamaño del espacio bajo el cual se aplica la derivada (los espacios entre los puntos utilizados para el cálculo). Un valor de 1 es equivalente a aplicar la derivada estándar Norris Gap. El valor puede ser mayor que 1 y dependerá de la interfaz y las características espectrales para un efecto óptimo.

Alta calidad mínima: este campo se utiliza para designar los límites de valor mínimo entre 0 y 100 (%) para la calidad de los resultados de comparación con la biblioteca que se mostrarán. Cualquier resultado de valor de calidad (índice x 100) que esté por debajo del valor especificado se omitirá de los resultados de búsqueda.

Resultados máximos mostrados: Este campo se utiliza para limitar el valor mínimo de resultados de alta calidad en la biblioteca de acuerdo con la cantidad especificada. Por ejemplo, si elige 12, se mostrarán los 12 mejores resultados del índice clasificado que han superado la calidad mínima definida.

Límites críticos de calidad: este campo establece el límite superior para la función de codificación por colores dentro de los resultados de búsqueda de calidad. Si no se ha elegido la opción **Límite marginal de calidad**, cualquier resultado de búsqueda por debajo del límite crítico de calidad se mostrará en rojo (el valor debe estar entre 0 y 1, se aceptan valores decimales). Este parámetro está vinculado al valor del índice. Si no se establece un límite crítico de calidad, no se aplicará la codificación por colores.

Límite marginal de calidad: este campo opcional establece el umbral del límite inferior para los resultados de búsqueda marginales. Cualquier resultado que se encuentre entre el límite marginal y el límite crítico de calidad se mostrará en amarillo (el valor debe estar entre 0 y 1, se aceptan valores decimales).

NOTA

La dirección de la calidad del límite y la gradación del color se ajustan automáticamente para adaptarse al algoritmo seleccionado.

Mostrar metadatos: seleccione esta casilla de verificación para mostrar los metadatos correspondientes a la muestra elegida. Esto incluye información como el rango de las muestras, la descripción y el estado de riesgo. Esta opción no está disponible en entornos compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11.

Búsqueda residual automática: habilitar esta casilla de verificación aplicará automáticamente una función de búsqueda residual a los espectros colectados.

- Cuando se selecciona “Resultado principal”, la función Residual Automática restará el resultado principal inicial de los espectros de la biblioteca, volverá a buscar las bibliotecas elegidas y mostrará el resultado residual superior obtenido.

NOTA

Cuando se selecciona “Resultado principal”, solo se mostrará el resultado principal residual resultante (no se mostrará el resultado principal real).

- Cuando se selecciona “Espectro definido”, la función Residual Automática restará un espectro definido por el usuario de los espectros colectados y luego buscará en la biblioteca elegida y mostrará el resultado residual principal definido.

NOTA

El archivo de espectro definido debe ser un archivo de resultados de Agilent en formato *.a2r y debe elegirse de la carpeta de resultados.

Excluir regiones de búsqueda (cm^{-1}): este campo opcional se usa para agregar una región de exclusión de búsqueda a los espectros. Esto eliminará las regiones de número de onda no deseadas (como la de las absorciones intrínsecas del cristal) de los espectros para permitir resultados más limpios. También se puede usar para enfocar la búsqueda, por ejemplo, solo en la región de la huella digital.

Pestaña de componentes (Método de componentes)

La pestaña de componentes muestra los componentes definidos para ese método. Los componentes son calibraciones cuantitativas para los constituyentes de una muestra. Se pueden definir múltiples componentes para cada método.

Agregar: este botón agrega un nuevo componente al método. Este botón mostrará el cuadro de diálogo Agregar componente (ver más abajo).

Eliminar: este botón elimina el componente seleccionado del método.

Editar: este botón permite la edición de los parámetros utilizados para la calibración de los componentes seleccionados. Este botón mostrará el cuadro de diálogo Editar componente (ver más abajo).

Cuadro de diálogo Agregar componente: El cuadro de diálogo Agregar componente permite agregar o editar componentes. Este cuadro de diálogo proporciona los ajustes para la calibración de componentes, la configuración de la pantalla y los límites de ese componente. Los límites de los componentes permiten una visualización de código de colores de los resultados de los componentes.

Nombre del componente: esto especifica el nombre del componente que se mostrará tanto en la lista de componentes como en los resultados. Para mayor claridad, el nombre debe incluir las unidades del resultado.

Tipo de cálculo: este campo especifica el tipo de cálculo que se utilizará. Los tipos de cálculo incluyen univariante (Altura pico, Altura pico con línea de base única, Altura pico con línea de base doble, Área pico, Área pico con línea de base única, Área pico con línea de base doble), cálculo de ruido (ruido RMS), posición del pico (la posición del pico [Centro de gravedad]) y el multivariante (Modelo cuantitativo). El tipo de cálculo de Modelo cuantitativo también se utiliza con calibraciones univariantes o multivariantes de MicroLab Quant.

NOTA

El ajuste lineal para una calibración univariante utilizando el área pico, la altura pico o la relación de picos se debe llevar a cabo en software de terceros (como Microsoft Excel). El software MicroLab Quant se puede utilizar para crear calibraciones univariantes completas sin usar software de terceros.

NOTA

Las calibraciones multivariantes se llevan a cabo en el software Thermo Galactic PLS/IQ Plus y se exportan a un formato de texto que el software MicroLab PC pueda leer, o a EIGENVECTOR Solo Plus Model Exporter en formato XML o en MicroLab Expert (con módulo Quant). Vea las instrucciones a continuación para obtener información sobre cómo exportar calibraciones.

Inicio del pico, terminación del pico:

- Para los cálculos de posición de pico y univariante, estos definen el pico que se utilizará.
- Para un cálculo de la altura pico, se selecciona el valor más grande entre esta región.
- Para un área de pico, estos son los límites del cálculo del área.
- Para un centro de gravedad, estos son los límites entre los cuales se calcula el centro de gravedad.
- Para un multivariante (Quant), este será el límite del rango de la pantalla. Para un multivariado (Quant), este será el límite del rango de visualización.

Inicio de línea base 1, finalización de línea base 1: estos puntos definen la zona desde donde se calcula el primer punto de una línea de base. Para un único punto de referencia, sólo se utilizará Línea de base 1. La línea de base se toma como el valor mínimo dentro de este rango.

Inicio de línea base 2, finalización de línea base 2: estos puntos definen la zona desde donde se calcula el segundo punto de una línea de base. La línea de base se toma como el valor mínimo dentro de este rango.

Constituyente: esta función es solo aplicable cuando se selecciona "Modelo Quant" como Tipo de cálculo, y se aplica únicamente a los Modelos Quant del SW MicroLab Expert de Agilent (*.a2q). Los constituyentes utilizados en el modelo multivariante aparecerán en el menú desplegable.

NOTA

El uso de archivos de los modelos Agilent MicroLab Expert Quant (*.a2q) requiere la instalación de MicroLab Expert con funcionalidad Quant en el mismo dispositivo.

Ajuste de escala: esta sección define una calibración lineal que se aplicará a los datos. Esto puede utilizarse con cualquiera de las definiciones de pico (Altura pico, Área pico, y así sucesivamente), o para modificar el valor generado por un método multivariante (Quant). A menudo, esto se usa para cambiar el valor a la escala adecuada.

- **Escala (valor x):** la escala es la pendiente de una ecuación de calibración lineal. En la ecuación para un ajuste lineal, $y=mx+b$, la escala es "m".
- **Ordenada:** la ordenada es el desplazamiento del eje Y para una calibración lineal. En la ecuación para un ajuste lineal, $y=mx+b$, la ordenada es "b".
- **Dígitos decimales a reportar:** Esto define el número de decimales que será reportado en la respuesta.

Límites: esta sección define los límites que el software MicroLab PC utilizará para mostrar los resultados y los informes codificados por colores. Los valores que están entre los límites Alto marginal y Alto crítico, o Bajo marginal y Bajo crítico, se mostrarán en amarillo. Los valores por encima de los límites Alto marginal o debajo de los límites Bajo marginal se muestran en rojo. Todos los demás valores se muestran en verde.

Calcular valor como: Los valores se pueden calcular a partir de las siguientes opciones:

- Valor actual
- Porcentaje bajo
- Porcentaje alto

NOTA

Las opciones Porcentaje alto y Porcentaje bajo requieren un valor de referencia crítico alto. El valor de referencia es en efecto el valor de referencia del 100 %. El valor calculado se informará como un % del valor de referencia.

Pestaña de informe de componentes

El informe de componentes permite al desarrollador del método determinar cuándo un componente se muestra tanto en la pantalla de resultados como en el informe. Sólo los componentes seleccionados que se han elegido en la columna Visualización se muestran en la pantalla y en el informe.

Cuadro de diálogo Editar la condición del informe de componentes

Además, el desarrollador del método puede elegir informar un componente solo bajo ciertas condiciones. Por ejemplo, el desarrollador puede especificar que un componente se informe solo cuando su valor está dentro del rango para el cual ha sido calibrado. Esto permite que un método posea calibraciones en varios rangos (alta, media y baja). Si se especifica, el software solo informará la concentración de la calibración que está en el rango. Para los métodos multivariantes, se pueden utilizar cualquiera de las mediciones estadísticas del método (Distancia Mahalanobis, F- calculada, etc.) para determinar si un valor debe ser informado.

Informar como: esta sección permite al desarrollador elegir si el componente se informa como el valor calculado o como una cadena de texto basada en dicho valor. Se utiliza con la lógica booleana en la configuración de condiciones. Esto permite visualizar los resultados basados en texto, tales como "fuera de especificación" o "bien", en lugar de los resultados numéricos.

Componente/diagnóstico: esta lista desplegable muestra toda la información de diagnóstico que se puede utilizar para hacer una elección lógica de visualización.

Estado de la prueba: permite la especificación del estado del diagnóstico. Esto se utiliza con la opción "Valor" a continuación.

Valor: el valor del diagnóstico que se utiliza con el estado de prueba para determinar si el componente se mostrará.

Ejemplo 1: para un método univariante simple, se pueden especificar dos componentes para un analito único; uno de los componentes debería tener una calibración válida en un rango bajo y el otro una calibración válida en un rango alto. El desarrollador puede preferir que sólo se informe el rango apropiado. En este ejemplo, el componente se denominará "área" y el rango alto será válido de 1000 a 5000 ppm. En este ejemplo, se seleccionará el Área para el Componente/diagnóstico. Primero, se seleccionará el Estado de prueba de ">=", junto con un valor de 1000. Luego de agregar esto, se seleccionará el calificador „y". A continuación, se seleccionará el Estado de la prueba de "<" con un valor de 5000. En este ejemplo, el componente de área solo será reportado si el valor se encuentra entre 1000 y 5000.

Ejemplo 2: para un método multivariante (PLS), se pueden especificar varios componentes. Cada componente puede tener una calibración multivariante diferente. Es posible que sólo desee el componente cuya calibración está más estrechamente relacionada con la muestra desconocida. En este caso, el desarrollador selecciona el componente/diagnóstico MDistance (Distancia de Mahalanobis), el estado de prueba <= y el valor 3. Esto solo informará valores que tienen una Distancia Mahalanobis menor a tres, lo que indica que la muestra está estadísticamente dentro del grupo del conjunto de calibración.

Pestaña Campos personalizados

Los campos personalizados son campos definidos por el administrador que aparecen al comienzo de un método elegido. A continuación, el usuario del método completa el campo. Los campos pueden ser una fecha, un texto o un número y solo el administrador puede agregarlos o eliminarlos. Estos campos estarán visibles en la pantalla de Resultados y en el informe. Se pueden agregar muchos campos opcionales a un método, según los requisitos específicos del usuario.

Pestaña de recomendación

Las recomendaciones se mostrarán en la pantalla de Resultados tras el análisis de la muestra. Los mensajes son una característica única. Estos le dan al usuario la posibilidad de personalizar los resultados de acuerdo con sus parámetros y necesidades específicas.

Pestaña Informes

La pestaña Informes es común a todos los tipos de métodos y se utiliza para asignar una plantilla de informe disponible al método actual o eliminar una plantilla de informe seleccionada del método actual. Cuando estén disponibles, se pueden agregar o eliminar varias plantillas de informes simultáneamente.

Plantillas de informes disponibles: las plantillas de informes se proporcionan para tipos específicos de métodos.

- Solo colección de datos: puede usar la plantilla de informe de espectro.
- Los métodos de componentes pueden utilizar las plantillas de Informe de espectro o de componentes.
- Los métodos de búsqueda cualitativa pueden utilizar las plantillas Informe de aceite, Espectro, Espectro superpuesto, Espectro apilado, Espectro ampliado superpuesto y Espectro ampliado apilado.

También es posible crear sus propias plantillas de informes personalizados. Para obtener más información sobre las plantillas de informes, consulte la Sección 8 en la página 84.

- **Carpetas de resultados:** esto especifica la ubicación dentro de una de las siguientes carpetas donde se guardarán los resultados.
- Para todos los sistemas, comenzando con la versión 5.3, todos los archivos definidos por los usuarios y los de llamadas interactivas se guardan en C:\Usuarios\Público\Documentos\Agilent\MicroLab o C:\Usuarios\Público\Documentos públicos\Agilent\MicroLab.

Si se deja en blanco, los archivos se guardan directamente en la carpeta de resultados: C:\Usuarios\Público\Documentos\Agilent\MicroLab\Resultados.

Para el Título 21 del CFR, Parte 11, cuando el campo se deja en blanco, la carpeta de resultados predeterminada es VAIMDB_Public(000)\Resultados Públicos.

Se puede agregar una carpeta diferente para guardar los archivos en el directorio de resultados. Si el método se transfiere a un sistema que ejecuta MicroLab Mobile, la carpeta se actualizará automáticamente a la carpeta correspondiente en el dispositivo móvil. También hay una opción para una función de informe automático. Marque esta casilla para generar automáticamente los informes asociados con el método en cuestión, cuando se colecta una muestra con dicho método.

Adición/eliminación de plantillas de informe al/del método actual

Los informes listados en la columna “Plantillas de informes disponibles” no se activan hasta que se agregan al método. Para agregar un informe al método actual:

- 1** Resalte el informe o informes deseados de la columna Plantillas de informes disponibles.
- 2** Haga clic en **Agregar ->**.

Al finalizar el método, cualquier informe que se haya agregado a la columna “Plantillas de informe disponibles” estará disponible para que el usuario lo seleccione. Si se selecciona la opción **Informe automático de todos los informes seleccionados**, todos los informes enumerados en la columna Plantillas de informes disponibles se imprimirán automáticamente.

Para eliminar un informe del método actual:

- 1** Marque los informes deseados de la columna “Plantillas de informe seleccionadas”.
- 2** Haga clic en **<- Eliminar**.

Los informes eliminados ahora volverán a aparecer en la columna Plantillas de informes disponibles.

Carpeta de resultados: especifica la ruta del archivo donde se guardarán los informes seleccionados.

Denominación de resultados: MicroLab tiene una función de guardado automático que crea un número único de identificación, exclusivo para cada análisis. Todos los archivos están disponibles para todos los usuarios autorizados y pueden revisarse en el botón de Resultados anteriores. Un administrador tiene la opción de elegir el formato que mejor se adapte a sus necesidades.

- **ID de la muestra + incremento (requiere ID de la muestra):** El nombre de los resultados se corresponderá con la identificación de la muestra y un incremento de cuatro dígitos, es decir, Muestra_0000.
- **Fecha y hora:** el nombre de los resultados se corresponderá con la marca de fecha y hora del análisis.
- **Id. ID de la muestra + Fecha y hora:** el nombre de los resultados contendrá la identificación de la muestra, la fecha y la hora del análisis.

Exportación automática: MicroLab tiene una función de exportación automática que permite al usuario exportar automáticamente el archivo de resultados en el momento de la adquisición de datos. MicroLab puede generar tipos de archivo *.csv, *.spc y *.asp para importar a una variedad de programas de software de terceros. *.spc es un archivo de datos de espectros universal necesario para el uso de datos en GRAMS o en EIGENVECTOR. Los formatos de archivo *.asp son simplemente una salida ASCII de los datos Y con un encabezado X definido.

NOTA

El usuario introduce el ID de la muestra durante el análisis. Si el usuario no puede introducir un ID de la muestra, el sistema creará automáticamente una marca de fecha y hora. El usuario siempre debe actualizar el ID de la muestra cuando se ejecutan múltiples muestras. MicroLab PC almacenará la identificación de la muestra previamente ingresada.

Funciones avanzadas

Verificación del sistema

La función Verificación del sistema incluye las siguientes pruebas del instrumento:

- Rendimiento (señal a ruido)
- Prueba de estabilidad
- Verificación de calibración de frecuencia láser
- Verificación de la resolución espectral

Consulte el manual de operación del instrumento correspondiente para obtener más información sobre Verificación del sistema.

Diagnósticos

La pestaña de diagnósticos muestra diagnósticos importantes e información general sobre el instrumento, incluidos:

- Estado del instrumento
 - Energía (conteos)
 - Batería (corriente alterna o % de la batería)
 - Fuente (corriente/voltaje)
 - Láser (conteos)
- Temperatura de los componentes (°C)

- Información de la versión

Esta pestaña también permite:

- Restablecimiento de la validez de la limpieza y blanco de fondo
- Configuración del formato de fecha y hora

Direcciones MAC

La pestaña Direcciones MAC muestra las direcciones MAC actuales del sistema y permite copiar las direcciones en el portapapeles para exportarlas.

Administración de bibliotecas

La pestaña Administración de bibliotecas muestra información de la biblioteca, así como los nombres y contenidos de la biblioteca almacenada. Esta pestaña también permite la creación de nuevas bibliotecas, la eliminación de bibliotecas existentes y la edición de entradas de bibliotecas actuales.

NOTA

Las entradas de la biblioteca no se pueden editar ni eliminar de las bibliotecas con licencia.

Crear una nueva biblioteca

- 1 Seleccione el botón **Nueva biblioteca** ubicado en el lado derecho de la ventana de la lista de bibliotecas.

Aparecerá la ventana “Crear biblioteca”.

- 2 Escriba el **Nombre de la biblioteca**.

- 3 Escriba un **Comentario** opcional para adjuntarlo a la biblioteca, si es necesario.

- 4 Elija el tipo de **Espectros de la biblioteca**:

- Línea de base corregida
- Espectros ATR

- 5 Elija el **Tipo Y**:

- Absorbancia
- Reflectancia
- Transmitancia

- 6 Elija los **Bytes para biblioteca**. Esto designa el número de bytes utilizados para guardar cada espectro. Un valor de 2 suele ser apropiado para las bibliotecas creadas por el usuario.

- 7 Elija si desea **detectar automáticamente desde la primera entrada de la biblioteca**. Cuando está activa, esta función utiliza los primeros espectros de la biblioteca para determinar el primer X (cm^{-1}), el último X (cm^{-1}) y el número de puntos. Con esta función desactivada, el usuario puede seleccionar manualmente el rango para la coincidencia de la biblioteca y el número de puntos.
- 8 Haga clic en **Crear**.

NOTA

Agilent no recomienda aplicar la corrección ATR a datos de reflectancia especular, datos de ángulo de incidencia rasante o datos de reflectancia difusa.

Edición de una biblioteca actual

Para agregar una entrada a una biblioteca existente:

- 1 Seleccione el archivo de biblioteca existente (.lib) de las funciones avanzadas y la Administración de bibliotecas.
- 2 Haga clic en "Agregar a la biblioteca".
- 3 Seleccione el archivo de entrada de biblioteca *.a2r apropiado.
- 4 Haga clic en "Abrir".

Aparecerá el cuadro de diálogo "Importar entrada de resultados". Este cuadro permite aplicar el nombre y el n.º de CAS opcional a la entrada.

- 5 Haga clic en "**Aceptar**".

NOTA

Al editar la información personalizada de una muestra en una biblioteca, se edita automáticamente la información de todas las entradas con ese n.º de CAS en la misma biblioteca y en todas las demás bibliotecas.

Para eliminar una entrada de una biblioteca existente:

- 1 Seleccione el archivo de biblioteca existente (.lib) de la lista.
- 2 Haga clic en "**Eliminar de Lib**".
- 3 Haga clic en "**Aceptar**".

NOTA

Las entradas de la biblioteca eliminadas no se eliminan de la biblioteca. Permanecen en el índice de la biblioteca con una marca de verificación colocada en la columna "Eliminados" para identificarlos como omitidos en futuras exploraciones de la biblioteca.

NOTA

Agilent recomienda agregar solo espectros del mismo tipo de muestreo (p. ej., ATR) en una biblioteca.

Información personalizada

La ventana Información personalizada muestra información de identificación y datos relacionada con la entrada de la biblioteca elegida, cuando esté disponible. Esta página también permite que el usuario agregue información de clase, notas y manejo relacionada con esa entrada de la biblioteca.

Administración de usuarios

La pestaña de Administración de usuarios se puede utilizar para editar nombres de usuario o perfiles y para modificar la seguridad de los usuarios.

Consulte la página 13 para obtener más información sobre la administración de usuarios.

Transferencia de métodos multivariantes de GRAMS PLS/IQ a MicroLab PC

Exportación del archivo PLS/IQ *.cal a ASCII

Para exportar el archivo PLS/IQ *.cal a ASCII:

- 1** Genere un archivo PLS/IQ *.cal con el módulo PLS/IQ. Para guardar una calibración en PLS/IQ, utilice el procedimiento „Galactic GRAMS: Guardar una calibración del experimento” desde el archivo de ayuda GRAMS. En caso de surgir preguntas o necesitar información adicional sobre el archivo de ayuda GRAMS, póngase en contacto con Agilent.
- 2** Desde la pantalla principal GRAMS, haga clic en **Complementos > PLS/IQ > Exportar calibración**. Aparecerá un cuadro de diálogo "Abrir".
- 3** Elija el archivo *.cal adecuado y haga clic en **Abrir**. Aparecerá un cuadro de diálogo "Exportar".
- 4** La primera sección muestra el archivo de calibración seleccionado. La segunda sección muestra el tipo de archivo exportado. El tipo de archivo de salida debe ser **ASCII Texto (*.txt)**.
- 5** Haga clic en **Siguiente**. Aparecerá un cuadro de diálogo "Guardar como".

- 6** Vaya a C:\ Usuarios\Público\Documentos\Agilent\MicroLab\modelsos antes de guardar el archivo.
- 7** Escriba un nombre apropiado y haga clic en **Abrir**. El archivo de calibración se exportará. El software vuelve al cuadro de diálogo Exportar.
- 8** Haga clic en **Cancelar** para volver a GRAMS.

Generación del archivo de método

Para generar el archivo de método en MicroLab PC:

- 1** En MicroLab PC o MicroLab Lite, haga clic en el botón **Método**.
- 2** En el cuadro de diálogo Método, haga clic en el botón **Nuevo**.
- 3** En la pestaña **Tipo** de método, seleccione **Componentes** de la lista desplegable Tipo de método.
- 4** Haga clic en la página **Componentes**.
- 5** En la página Componentes, haga clic en el botón **Agregar**.
- 6** En el cuadro de diálogo Agregar componente, especifique un Nombre para el componente.
De manera predeterminada, el nombre del componente es el texto que aparecerá junto al valor cuando el usuario final ejecute el método. El nombre debe ser descriptivo de la propiedad que se predice.
- 7** Para un método multivariante (PLS), elija **Modelo cuantitativo** como el Tipo de cálculo. Aparecerá un cuadro de diálogo Abrir archivo.
- 8** Elija el archivo de texto de calibración apropiado (exportado de Galactic GRAMS en el paso 7: "Exportar el archivo PLS/IQ *.cal a ASCII") y haga clic en **Abrir**.
- 9** A continuación, se enumeran otras opciones disponibles en el cuadro de diálogo Agregar componentes:

A continuación, se enumeran las opciones disponibles en el cuadro de diálogo Agregar/Editar componentes:

- a Quant Iniciar y Quant Detener:** Estos establecen un rango de frecuencia que se mostrará cuando se seleccione el componente en la pantalla Resultados. Si se deja en blanco, se muestra todo el espectro.
 - b Ajuste de escala:** la sección de ajuste de escala aplicará una escala lineal a los resultados generados por el modelo Quant.
 - c Límites:** estos valores definen los colores de visualización para el resultado de los componentes. Si el valor del componente está por encima o por debajo de los valores críticos, el resultado se mostrará en rojo. Si el valor del componente se encuentra entre los valores marginales y críticos, el resultado se mostrará en amarillo. De lo contrario, el resultado se mostrará en verde.
 - d Calcular valor como:** cambia la visualización entre el valor real de componentes, un % del valor alto crítico o un % del valor bajo crítico.
- 10** Una vez que todos los valores están configurados correctamente, haga clic en **Aceptar**.
- 11** Haga clic en **Guardar como**. Introduzca el nombre del método y guárdelo en una ubicación adecuada. La ruta de archivo predeterminada se encuentra en:
C:\Usuarios\Público\Documentos\Agilent\MicroLab\Métodos.

NOTA

En el Título 21 del CFR, Parte 11, se le indicará guardar el método en la base de datos.

-
- 12** El método está ahora disponible para usarse con MicroLab PC. Asegúrese de que el método esté activo si desea utilizarlo.

Modelo cuantitativo de MicroLab transferido de MicroLab Expert a MicroLab PC

Para usar archivos de modelo de MicroLab Expert en MicroLab PC:

NOTA

En entornos compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11, es necesario importar el modelo en la base de datos utilizando MicroLab Quant antes de incluirlo en un método. Consulte Importar modelos en la página 4255 para obtener información más detallada.

MicroLab PC

- 1 En MicroLab PC o MicroLab Lite, haga clic en el botón **Método**.
- 2 En el cuadro de diálogo Método, haga clic en el botón **Nuevo**.
- 3 En la pestaña **Tipo** de método, seleccione **Componentes** de la lista desplegable Tipo de método.
- 4 Haga clic en la página **Componentes**.
- 5 En la página Componentes, haga clic en el botón **Agregar**.
- 6 En el cuadro de diálogo Agregar componentes, especifique un Nombre para el componente.
- 7 Elija **Modelo cuantitativo** como el Tipo de cálculo. Aparecerá un cuadro de diálogo Abrir archivo.
- 8 Vaya al lugar donde se localiza el archivo del modelo. Cambie el campo de tipo de archivo para filtrar el tipo de archivo. Se aceptan los siguientes tipos de archivo:
 - Modelos de Agilent (*.mqm)
 - Modelos de Thermo (*.txt)
 - Modelos de Eigen Vector (*.xml)
 - Modelos de MicroLab Expert Quant de Agilent (*.a2q)

NOTA

El uso de los archivos Quant Models del Agilent MicroLab Expert (*.a2q) requiere un código de registro separado, proporcionado como parte de un flujo de trabajo del paquete de producto, como lo es el "Paquete de medición" (G8188AA). De lo contrario, se mostrará un cuadro de diálogo de error.

- 9 Elija el archivo de modelo y haga clic en **Abrir**. El modelo ya queda incluido en el método.
- 10 Introduzca las demás opciones disponibles en el cuadro de diálogo Agregar componente. Haga clic en **Aceptar**.
- 11 Haga clic en **Guardar como**. Introduzca el nombre del método apropiado y guárdelo en C:\Usuarios\Público\Documentos\Agilent\MicroLab\Métodos.
 - En el Título 21 del CFR, Parte 11, se le indicará guardar el método en la base de datos.
- 12 El método está ahora disponible para usarse con MicroLab PC. Asegúrese de que el método esté activo si desea utilizarlo.

Uso de la verificación de alineación previa a la muestra

La verificación de alineación previa a la muestra produce una indicación visual de la intensidad de la señal de una muestra medida en una pantalla de vista previa. Esto le permite determinar si la muestra está en el foco de la interfaz del instrumento FTIR y plana contra la muestra, o si el instrumento está alineado con la muestra para obtener la máxima señal. Este procedimiento detalla la creación de un método que utiliza la verificación de alineación previa a la muestra. En el método, se especifica la medición que se hará de la muestra. Normalmente, esto debería ser una altura o área pico que corresponde a la muestra de interés.

Para verificar la alineación de la muestra:

- 1 En MicroLab PC o MicroLab Lite, haga clic en el botón **Métodos**.
- 2 En el cuadro de diálogo Método, haga clic en el botón **Nuevo**.
- 3 En la pestaña **Tipo** de método, seleccione **Componentes** de la lista desplegable **Tipo de método**.
- 4 Haga clic en la página **Componentes**.
- 5 En la página Componentes, haga clic en el botón **Agregar**.
- 6 En el cuadro de diálogo Agregar componentes, especifique un Nombre para el componente.
- 7 Seleccione un Tipo de cálculo para el componente.
Por lo general, un área de pico con línea de base doble o una altura de pico con línea de base doble, dará la mejor indicación de alineación de la muestra.
- 8 Defina el pico (área) a medir.
 - Para áreas del pico, comienzo del pico y finalización del pico definen los bordes del pico.
 - Para la Línea base 1 y la Línea base 2, la línea base se establece como el punto más bajo entre los puntos de inicio y finalización.
- 9 Establezca un factor de escala de tal manera que los puntos de medición sean mayores que 1.
Para alturas pico, un factor de escala de 1000 asegura que la mayoría de las mediciones están en escala.
- 10 Haga clic en **Aceptar**.
- 11 En la pestaña **Tipo** de método, seleccione **Mostrar verificación de alineación previa de la muestra**. En la lista desplegable, seleccione el componente definido en el paso 6.

- 12** También hay que señalar que el **Control de continuidad de la muestra** se puede usar para asegurar que el sistema se ajusta a la muestra a través de la medición.
- 13** Haga clic en **Guardar como** y guarde el método.
- 14** Para poder usarlo en la PC portátil, el método debe ser transferido a la carpeta MicroLab Mobile/Métodos en el dispositivo móvil.
- 15** En MicroLab Mobile, la verificación de alineación previa a la muestra se muestra como un gráfico de barras de color rojo/amarillo/verde en la página de alineación de la muestra. La muestra se debe rotar o alinear con el fin de alcanzar el máximo valor en el gráfico de barras.

Transferencia de métodos editados a MicroLab Mobile

Después de completar las modificaciones de un método en MicroLab PC o MicroLab Lite, si desea usar los archivos, estos se deben transferir a la PC integrada o portátil. Hay dos formas de copiar archivos, con Mi PC, o transfiriéndolos de forma automática a través de MicroLab Lite.

Uso de la función sincronizar de MicroLab Lite

Para transferir métodos a MicroLab Mobile con la función sincronizar de MicroLab Lite:

- 1** Conecte el portátil o la PC incorporada a la computadora que contiene MicroLab Lite.
 - Para un FTIR portátil 4300, salga del software MicroLab Mobile en el dispositivo para ingresar al modo de acceso directo y conéctese al equipo mediante la conexión USB. Para salir de MicroLab Mobile, seleccione **Cerrar sesión** en la pantalla de inicio, haga clic en **Salir** y haga clic en **Aceptar** cuando aparezca el cuadro de diálogo Confirmación de salida.
- 2** Abra MicroLab Lite en el equipo.
- 3** Haga clic en **Funciones avanzadas**.
- 4** Haga clic en **Sincronizar**.
- 5** Si la conexión no está en la lista, haga clic en **Nuevo**.

- 6 En el cuadro de diálogo, seleccione **Obtener nombre del dispositivo conectado**; en el cuadro de diálogo, se introducirá el número de serie de la PDA o del dispositivo FTIR portátil 4300 conectado de forma automática.
- 7 Para las configuraciones estándar, seleccione las opciones que se van a sincronizar. Se pueden sincronizar informes, resultados y métodos. Además, los informes se pueden imprimir automáticamente si se especifica la impresora deseada.
 - Para sistemas compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11, haga clic en **Examinar** y vaya a la carpeta Resultados o Métodos Móviles Públicos.
 - Para cargar los archivos de método en MicroLab Mobile compatible con el Título 21 del CFR, Parte 11, estos deben estar ubicados en la carpeta Métodos Móviles Públicos. Todos los archivos de método de esa carpeta se cargan.
- 8 Una vez que el dispositivo a sincronizar ha sido seleccionado, haga clic en **Aceptar**.
- 9 Para transferir archivos, seleccione la PC portátil que desee de la lista y haga clic en **Sincronizar** o **Sinc**; a continuación, haga clic en **Sí**.

Copia a través de Mi PC

NOTA

Para los entornos compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11, los métodos no compatibles con CFR se pueden visualizar en el entorno móvil cuando se copian a través de "Mi PC", pero no se pueden activar.

Para transferir métodos a MicroLab Mobile con la opción Mi PC:

- 1 Conecte la PC portátil o incorporada al equipo que contiene MicroLab PC.

NOTA

Este procedimiento no funcionará en el FTIR portátil 4300. Utilice la función **Sincronizar** como se especifica en la página 45.

- 2 Desde el equipo, abra **Mi PC** y vaya a la carpeta C:\ Usuarios\Público\Documentos\Agilent\MicroLab\Métodos.
- 3 Seleccione los métodos que desee y seleccione **Editar > Copiar**.
- 4 Desde el encabezado Mi PC, seleccione la unidad **Dispositivo móvil**.
- 5 Vaya a la carpeta Archivos de programa\MicroLab Mobile\Métodos\.
- 6 Haga clic en **Editar > Pegar**.
- 7 Vuelva a la unidad C:\ en el equipo y vaya a la carpeta C:\ Usuarios\Público\Documentos\Agilent\MicroLab\Modelos.
- 8 Copie todo el contenido de la carpeta Modelos.

- 9 Desde el encabezado Mi PC, seleccione la unidad **Dispositivo móvil**.
- 10 Vaya a la carpeta Archivos de programa\MicroLab Mobile\Modelos y haga clic en **Editar > Pegar**.
- 11 Haga clic en **Sí a todo** si aparece una advertencia de sobrescribir.

Mover archivos en un entorno compatible con el Título 21 del CFR, Parte 11

Este procedimiento se puede utilizar para archivos de método o resultados.

Para mover archivos de una carpeta a otra:

- 1 Si inicia sesión como usuario debe tener privilegios para "Cortar/pegar método/resultados".
- 2 En MicroLab Lite o MicroLab PC, seleccione los archivos deseados, haga clic derecho y, a continuación, seleccione "Cortar".
- 3 Navegue a la carpeta correspondiente y luego "Pegue" los archivos.

NOTA

Los archivos no se pueden copiar en diferentes carpetas.

Verificación del sistema

Para realizar una verificación del sistema:

- 1 Haga clic en **Funciones avanzadas** en la pantalla de inicio.
- 2 Seleccione **Verificación del sistema**. Se pueden realizar cuatro pruebas. Consulte el manual de operación del instrumento para obtener más información sobre cada prueba.
- 3 Seleccione las pruebas que se van a realizar.
 - Si es necesario, ajuste los parámetros de Número de pruebas, Número de usuarios o Número de ejecuciones.
 - Se pueden seleccionar varias pruebas para que se ejecuten a la vez.
- 4 Haga clic en **Siguiente** para iniciar la prueba.
- 5 Siga las instrucciones que aparecen en pantalla. Haga clic en **Siguiente** cuando haya completado el paso.
- 6 Repita el paso anterior hasta completar las pruebas.

Esta página se dejó en blanco intencionalmente.

Pantalla de inicio	49
Cerrar sesión	50
Bloqueo	50
Iniciar nuevo modelo	50
Importar modelos	55
Funciones del Título 21 del CFR, Parte 11	56

Pantalla de inicio

Cuando se instala MicroLab PC v 5.1 y versiones superiores, también se instalará el módulo MicroLab Quant. El módulo está diseñado para que el usuario pueda crear métodos y modelos que se van a utilizar en el módulo de métodos MicroLab Component de MicroLab PC.

MicroLab Quant utiliza la misma configuración de seguridad y herramientas de administración de usuarios que se aplican en MicroLab PC. Para iniciar la sesión, el usuario introduce su nombre de usuario y contraseña como si estuviera en MicroLab PC. Para entornos compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11, también se deben introducir el grupo y el proyecto.

Las siguientes opciones están disponibles:

- Iniciar nuevo modelo
- Proyecto/modelo anterior
- Evaluar modelo
- Importar modelos (disponible solo con el Título 21 del CFR, Parte 11)

Los datos para el nuevo proyecto/modelo se deben colectar antes de usar MicroLab Quant. Esto debe hacerse en MicroLab PC. Todos los datos se deben haber colectado utilizando los mismos parámetros de colección de datos.

Cerrar sesión

La pantalla de cierre de sesión permite que diferentes usuarios se conecten y desconecten del sistema. El botón Salir cierra el software de MicroLab PC.

Bloqueo

Esta opción solo está disponible en entornos compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11. Se utiliza para bloquear el software y controlar el acceso cuando no se está utilizando. Consulte la sección MicroLab Título 21 del CFR, Parte 11 en la página 61 para obtener más información.

Iniciar nuevo modelo

Para generar un nuevo modelo

- 1 Seleccione **Iniciar nuevo modelo**. El software genera un nombre para el nuevo proyecto de forma automática. Sin embargo, el usuario también tiene la posibilidad de crear e introducir un nombre.
- 2 El menú de selección de datos aparece y permite al usuario seleccionar la carpeta donde se encuentran almacenados los datos actualmente. Los datos también se agrupan conforme al método con el que se los adquirió.
 - a Seleccione los datos necesarios para usar en la generación de modelos. Esto se puede hacer haciendo clic en los datos. El usuario puede utilizar las teclas **CTRL** y **Shift** para seleccionar múltiples archivos, similar a la selección de archivos en un entorno de Windows.
 - b Una vez que los archivos se han seleccionado, haga clic en el botón **[Siguiente>>]** en la parte inferior de la pantalla para continuar.
- 3 Para cada estándar, introduzca la concentración en la columna de concentración.

- 4** Seleccione el tipo de algoritmo para aplicar a los datos del menú desplegable **[Algoritmo de cuantificación]** y luego haga clic en **[Siguiente>>]**. La selección del algoritmo consta de las siguientes opciones:
- a** **Ley de Beer simple:** generalmente caracterizada como una ecuación lineal de un solo componente. El componente se define por una serie de concentraciones conocidas y el cambio en una característica espectral específica que se muestra en unidades de absorbancia. Estos cambios pueden ser alturas, áreas o relación de pico. Una ecuación lineal se determina entonces en la forma de $[y = mx+b]$ de la construcción $A=ebc$ de la Ley de Beer. Esto es lo que se utiliza para determinar concentraciones desconocidas frente a la ecuación de calibración conocida.
 - b** **Cuadrados mínimos clásicos:** se utiliza cuando existen múltiples componentes dentro de una mezcla. Este tipo de análisis también se basa en la Ley de Beer, donde se eligen múltiples frecuencias para capturar todos los cambios que ocurren en todos los componentes. Cada uno de éstos se utiliza en combinación para determinar la mejor correlación entre la concentración que se predice y la real para el modelo de calibración.
 - 1** Las múltiples frecuencias son definidas e ilimitadas. Las concentraciones conocidas de cada constituyente se deben definir.
 - 2** CLS no es útil para las mezclas que tienen efectos de matriz en componentes que interactúan entre sí. También puede ser susceptible a los efectos de referencia.
 - 3** CLS es más eficaz para identificar un componente en una mezcla.
 - c** **Cuadrados mínimos inversos (también conocido como la Ley de Beer inversa o Regresión lineal múltiple):** se usa en mezclas de componentes múltiples, donde los efectos de matriz están presentes. Este tipo de análisis se basa en la Ley de Beer. Se utilizan múltiples frecuencias para definir la calibración de $C = P^*A + e_c$, una Ley de Beer inversa.
 - 1** Se utiliza mejor como modelo multivariante donde solo se requiere conocimiento del constituyente de interés. Adecuado para tipos de análisis complejos.
 - 2** El número de frecuencias utilizadas en la calibración no puede ser mayor que el número de estándares conocidos utilizados en la calibración. Estas frecuencias deben corresponder a los cambios en el constituyente de interés.
 - 3** ILS generalmente produce la calibración más exacta si hay disponible un número suficiente de espectros de calibración.

- 5 Una vez que el algoritmo de quant ha sido seleccionado, se requiere la definición pico. El software permite la selección de alturas, áreas o relación de pico.
- a **Definición de altura del pico:** arrastre y suelte el icono de Altura de pico en el espectro que se muestra en la ventana de datos [A]. Las flechas en la imagen espectral permiten que el usuario cambie la línea base y la posición del pico de forma interactiva.
- 1 Las **flechas rojas** que apuntan hacia arriba definen la posición de línea de base, punto inicial y final.
 - 2 Las **flechas azules** que apuntan hacia abajo indican la posición del pico.
- b **Definición de área del pico:** arrastre y suelte el icono de área del pico en el espectro que se muestra en la ventana de datos [A]. Las flechas en la imagen espectral permiten que el usuario cambie la línea base y la posición del pico de forma interactiva.
- 1 Las **flechas rojas** que apuntan hacia arriba definen la posición de línea de base, punto inicial y final.
 - 2 Las **flechas azules** que apuntan hacia abajo indican la posición del pico, punto inicial y final.
- c **Definición de relación de pico:** el software permite usar relación de pico o relación de área para fines de calibración. Es necesario definir un mínimo de dos picos, ya sea por área o altura. Una vez definidos los picos de interés, haga clic en el icono Relación de pico debajo de la ventana de datos [R]. El diálogo le pedirá al usuario que defina el numerador y el denominador de la ecuación de relación.
- d **Ajuste de escala:** el usuario puede hacer clic y zoom en los datos espectrales que se visualizan de forma interactiva. Para “deshacer el zoom”, haga clic con el botón derecho en la ventana de visualización espectral y haga clic en [Escala completa].
- e **Tabla de datos:** los datos que se muestran en la tabla son representativos de las definiciones del pico que el usuario ha agregado a través de la ventana de visualización espectral interactiva. El usuario puede elegir cambiar estos valores directamente en la tabla si se necesitan valores específicos.
- 1 **Incluir en la opción de modelo:** permite al usuario decidir qué operaciones se incluyen en el modelo que están desarrollando. Esto se basa en el conjunto de datos completo.
 - 2 **Eliminar:** permite que el usuario borre una definición de pico del modelo de forma permanente.

- f **Tabla de estándares:** permite que el usuario seleccione de forma interactiva qué estándares específicos usar en el algoritmo de calibración. Los datos espectrales individuales se pueden eliminar del gráfico o modelo si se desmarca la casilla de verificación correspondiente. A su vez, un espectro individual se puede resaltar en la ventana de visualización, si se lo resalta en la ventana de estándares.
- g **Ventana de gráfico de modelo:** el valor por defecto de la ventana de gráfico de modelo sirve para mostrar el gráfico de predicción en comparación con el gráfico actual. El usuario puede cambiar a Pico definido vs Gráficos de concentración de una de estas dos maneras:
 - 1 Haga clic derecho en la ventana de gráfico de modelo y seleccione el gráfico deseado.
 - 2 Haga clic en el botón **Seleccionar gráfico modelo** en la parte inferior de la pantalla de análisis.
- h **Evaluación del modelo:** al hacer clic en el botón Evaluación del modelo, el software ofrece al usuario dos funciones. Estas funciones se utilizan normalmente para determinar los valores atípicos y la robustez del conjunto de calibración.
 - 1 **Validación cruzada:** el software ejecuta la calibración eliminando cada estándar y luego determina qué valor se regresaría si se ejecuta ese estándar como desconocido.
 - 2 **Conjunto independiente:** permite al usuario [**Agregar archivos...**] de los estándares marcados que se hayan ejecutado de manera independiente de la calibración y predecir los valores en esas muestras. Las concentraciones de cada muestra se ingresan en la tabla y luego se hace clic en el botón [**Predecir**].
 - a Error estándar total, R^2 real en comparación con lo que se predice se muestran en la parte inferior de la pantalla. El gráfico real en comparación con lo que se predice también se muestra en la pantalla.
 - b El usuario puede **Exportar** los valores a un formato de archivo CSV al lugar de su elección.
 - c El usuario tiene ahora la opción de guardar [**Guardar**] el modelo y volver a la pantalla anterior de análisis de datos [**Volver**].

- i **Finalizar modelo:** si el usuario está satisfecho con el modelo de calibración, se elige el botón **[Finalizar modelo]**. Esto permite al usuario guardar el proyecto (*.mpq), que incluye el estándar y el modelo. El usuario también puede elegir en este momento guardar los datos en un método MicroLab. Esto incluirá el componente que el usuario acaba de definir en el modelo asociado con todos los parámetros de calibración.
 - 1 **Archivos de modelo:** si es necesario definir varios componentes, esto se hará en modelos/proyectos individuales. Cada componente se define en un modelo individual o archivo *.mqm al mismo tiempo que se guarda el archivo de proyecto.
 - 2 **Guardar método:** guarda los archivos a un archivo *.a2m con el componente de interés. El método tendrá los mismos parámetros de recopilación de datos que los archivos de calibración que se utilizaron para crear el modelo. Si se necesitan varios componentes en un archivo de métodos, se deben agregar al método de forma manual a través de MicroLab Lite o PC. Consulte la sección sobre la transferencia de método multivariado en MicroLab PC. Los modelos se agregan de la misma manera que los modelos GRAMS. Sin embargo, se definen como archivos *.mqm como se señaló anteriormente.
 - 3 **Imprimir:** seleccione para crear un PDF que incluye los estándares y la información del modelo. El archivo se guarda en la carpeta C:\Usuarios\Público\Documentos\Agilent\MicroLab\Resultados.
- 6 **Proyecto/modelo anterior:** permite al usuario seleccionar un proyecto que se inició anteriormente y editar los parámetros. Este procedimiento es similar a la sección anterior, Iniciar nuevo modelo. Sin embargo, ya se completó una cierta cantidad de trabajo. Por lo general, es posible que los estándares ya se hayan agregado, además de alguna definición de pico.
Ahora el usuario puede realizar los mismos pasos, para definir, evaluar y finalizar sus métodos.
- 7 **Modelo de evaluación** permite al usuario seleccionar un método para evaluar. La pantalla **Evaluación de conjunto independiente** se muestra y permite al usuario proceder con la carga de estándares conocidos y predecir la concentración como se hizo anteriormente en la sección de evaluación del modelo en la configuración del Nuevo modelo.

Importar modelos

Para importar archivos de modelo con MicroLab Quant:

NOTA

Esta funcionalidad solo está disponible en entornos compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11.

MicroLab Quant es la única aplicación que cuenta con la funcionalidad para importar un modelo a una base de datos para usar el modelo en un método con MicroLab PC.

Consulte la página 42 para obtener información sobre transferencia de modelos en entornos no compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11.

- 1** Inicie sesión en MicroLab Quant.
- 2** Seleccione **Importar modelos**.
- 3** Vaya al lugar donde están guardados los modelos y seleccione el modelo de interés. Filtre el tipo de modelo según sea necesario.

Se aceptan los siguientes tipos de archivo:

- Modelos de Agilent (*.mqm)
- Modelos de Thermo (*.txt)
- Modelos de Eigen Vector (*.xml)
- Modelos de MicroLab Expert Quant de Agilent (*.a2q)

NOTA

El uso de los archivos Quant Models del Agilent MicroLab Expert (*.a2q) requiere un código de registro separado, proporcionado como parte de un flujo de trabajo del paquete de producto, como lo es el "Paquete de medición" (G8188AA). De lo contrario, se mostrará un cuadro de diálogo de error.

- 4** Haga clic en **Abrir**. Aparecerá la ventana "Seleccionar base de datos/carpeta".
- 5** Seleccione una carpeta de la base de datos para importar el archivo de modelo y haga clic en **Aceptar**.
- 6** Una vez que el archivo de modelo se haya importado correctamente a la base de datos, haga clic en **Aceptar**.
- 7** Siga los pasos que se indican en la página 42 para incluir el modelo en un método utilizando MicroLab PC.

Funciones del Título 21 del CFR, Parte 11

Consulte la sección MicroLab Título 21 del CFR, Parte 11 en la página 61 para obtener más información sobre estas funciones.

Título 21 del CFR, Parte 11

Muestra una lista de las acciones realizadas durante la creación o edición de un modelo.

Firma electrónica

Haga clic en Firma electrónica para aplicar una firma electrónica y agregar comentarios al modelo.

5 MicroLab OQ

Calificación Operacional (OQ)	57
Realizar la OQ	58
Informe de OQ	59

El software MicroLab OQ proporciona pruebas de validación del desempeño y valores de diagnóstico para garantizar que el sistema funcione según lo previsto. Consulte el manual de operación del instrumento correspondiente para obtener más información sobre las pruebas de validación del desempeño y los valores de diagnóstico para cada instrumento.

Calificación Operacional (OQ)

Verificación de Diagnósticos del Sistema Operacional

La pantalla Diagnóstico muestra la siguiente información sobre el instrumento:

- Estado del instrumento: Energía, batería, fuente, láser y ganancia actual
- Temperaturas de: Detector, CPU, Placa IR, Alimentación y Bloqueo
- Información de la versión

NOTA

La función Diagnóstico también se puede visualizar en MicroLab PC y en MicroLab Mobile en la pantalla **Funciones avanzadas**.

Los resultados se representan en colores.

- Verde: el resultado está dentro del rango de valor óptimo. El instrumento funciona adecuadamente.
- Amarillo: el resultado está dentro del rango marginal. El instrumento está funcionando, pero con un nivel de desempeño más bajo.
- Rojo: el resultado está dentro del rango crítico. El instrumento no está funcionando correctamente.

Validación del desempeño

Están disponibles las siguientes pruebas:

- Prueba de la relación señal a ruido (desempeño).
- Prueba de estabilidad.
- Verificación de la calibración de la frecuencia del láser (exactitud de la frecuencia y reproducibilidad).
- Verificación de la resolución espectral.

NOTA

Estas pruebas son las mismas que las que se utilizan en la **Verificación del sistema** en MicroLab PC y en MicroLab Mobile mediante la pantalla **Funciones avanzadas**.

Realizar la OQ

Para iniciar la calificación operacional:

- 1 Haga clic en **Siguiente** para iniciar las pruebas.
- 2 Asegúrese de que esté seleccionado el instrumento correcto.
- 3 Seleccione todos los accesorios que correspondan. Haga clic en **Establecer como principal** para definir un accesorio como accesorio principal. Esto permitirá que el instrumento realice las pruebas con los distintos accesorios seleccionados.
El accesorio principal debe ser un accesorio que pueda ejecutar todas las pruebas de validación del desempeño. Esto es para garantizar que el instrumento funciona correctamente.
- 4 Haga clic en **Aceptar** para iniciar el proceso.
- 5 Aparecerá la página Diagnóstico. Si cualquiera de los resultados del diagnóstico FALLA, no podrá seguir adelante con las pruebas de desempeño.
 - Si el campo Energía en Estado del instrumento aparece como FALLA, haga clic en el botón **Ajustar ganancia** y ajuste el valor de la ganancia de manera que la señal esté dentro del rango óptimo (verde). El indicador Estado también se mostrará en color verde cuando la señal esté dentro del rango óptimo.
 - Haga clic en **Establecer ganancia predeterminada del instrumento** para guardar el valor de ganancia como valor predeterminado del instrumento.
 - Haga clic en **Atrás** para regresar a la página Diagnóstico.

- 6** Haga clic en **Siguiente**.
- 7** Seleccione las pruebas de desempeño que desea ejecutar. Haga clic en **Siguiente**.
- 8** Siga las instrucciones que aparecen en pantalla. Haga clic en **Siguiente** cuando esté listo.
- 9** Repita el paso anterior hasta completar la OQ.

Informe de OQ

Resumen de resultados

Cuando se completa la calificación operacional, aparece la pantalla Resumen de resultados donde se muestran los resultados de cada prueba.

También se genera un informe OQ en formato PDF donde se muestra:

Información del sistema como la ID de la estación de trabajo y la versión del software.

Recopilación de informes como la información del usuario y los nombres de los archivos de informes.

Información de accesorios como cualquier accesorio conectado al instrumento.

Los resultados de MicroLab OQ se encuentran en la siguiente ruta de archivo:
C:\Usuarios\Público\Documentos\Agilent\MicroLab\IQOQ.

Esta página se dejó en blanco intencionalmente.

6 MicroLab con Título 21 del CFR, Parte 11

SCM	61
SDA	62
Componentes de software del Título 21 del CFR, Parte 11 en MicroLab	63

El componente Título 21 del CFR, Parte 11 en el software MicroLab Pharma consta de dos programas:

- Spectroscopy Configuration Manager (SCM)
- Spectroscopy Database Administration (SDA)

Una vez realizadas las mediciones, no se pueden eliminar los resultados.

Una vez instalado CFR, no se puede desactivar la funcionalidad CFR. Al desinstalar el software MicroLab y SCM y, luego, volver a instalar solo el software MicroLab, las reglas CFR se conservan. Esto preserva la integridad del entorno compatible con CFR.

Para obtener instrucciones de instalación, consulte las “Instrucciones de instalación de software MicroLab para entornos compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11” que se proporcionan con el software.

NOTA

El software opcional MicroLab Expert no se puede utilizar en un entorno del Título 21 del CFR, Parte 11. Para obtener más información, consulte las Instrucciones de instalación del software MicroLab Expert, las Instrucciones de instalación de MicroLab Pharma y las Notas de la versión del software Agilent MicroLab Expert 1.1.0.1.

SCM

El Spectroscopy Configuration Manager (SCM) es una interfaz de software entre el personal de administración del sistema y el servidor y el servidor de Adquisición parte de las aplicaciones de software de espectroscopia de Agilent. SMC proporciona los medios para crear, configurar y conservar datos relativos a la seguridad del sistema, gestión de usuarios y rutas de datos.

MicroLab con Título 21 del CFR, Parte 11

Para proporcionar la seguridad necesaria para cumplir con el Título 21 del CFR, Parte 11, Agilent utiliza SMC para los derechos de seguridad y permisos. Estas funciones de seguridad proporcionan:

- Controles de acceso y verificación de autoridad mediante contraseñas y códigos de identificación de usuario.
- Seguridad de registro electrónico mediante bases de datos.
- Registros de auditoría con hora y fecha.

El uso de contraseñas y códigos de identificación de usuario permite el control sobre quién puede iniciar sesión en el sistema y quién puede llevar a cabo funciones específicas dentro de la aplicación de software de Agilent. También proporciona el mecanismo para permitir la firma electrónica de los documentos electrónicos. El uso de bases de datos, junto con SMC, evita que los usuarios no autorizados puedan cambiar o borrar archivos. Los registros de eventos SCM aumentan el registro de auditoría que reside en el software de la aplicación. El administrador de SMC debe configurar los usuarios necesarios. Es importante seguir una serie de requisitos simples al llevar a cabo este procedimiento para asegurar que se cumpla con el Título 21 del CFR, Parte 11.

Para obtener información adicional acerca de la configuración de SMC, consulte la Ayuda de SMC. Para acceder a la Ayuda SMC, con la aplicación SMC abierta, pulse F1 en el teclado o vaya a C:>Archivos de programa (x86)> Varian> Título 21 del CFR, Parte 11> Gestor de Configuración> Servidor> Ayuda de la base de datos del administrador de configuración.

SDA

El Spectroscopy Database Administrator (SDA) se ha diseñado para que los administradores de sistemas definan y conserven las bases de datos que utiliza el software de aplicación de Agilent para almacenar datos.

Se puede utilizar SDA junto con Agilent Spectroscopy Configuration Manager (SCM), el software de aplicación, y sus propios procedimientos normalizados de operación (SOP) para formar un entorno compatible con el Título 21 del CFR, Parte 11 para controlar sus instrumentos Agilent.

SDA permite que los datos obtenidos por los instrumentos de Agilent se almacenen localmente (en la misma PC que el software de aplicación de Agilent), o de forma remota, en donde disponga el cliente/servidor.

MicroLab con Título 21 del CFR, Parte 11

La configuración la debe realizar el administrador del sistema, o una persona con derechos de administración para ejecutar SDA.

Para obtener información adicional acerca de la configuración de SDA, consulte la Ayuda de SDA. Para acceder a la Ayuda de SDA, con la aplicación SDA abierta, presione F1 en el teclado o haga clic en Inicio > Todos los programas > Agilent > Utilidades de base de datos> Ayuda de SDA.

Componentes de software del Título 21 del CFR, Parte 11 en MicroLab

Con el software del Título 21 del CFR, Parte 11 instalado, podrá ver botones adicionales disponibles.

Bloqueo

Este diálogo permite al usuario bloquear el software MicroLab al usar el paquete de software Título 21 del CFR, Parte 11. Se accede desde la pantalla de inicio.

Cuando está bloqueado, aparece el cuadro de diálogo Desbloquear MicroLab PC y no se puede realizar ninguna acción hasta que un usuario validado inicia una sesión y desbloquea el software. Los usuarios que no sean el usuario que "bloqueó" originalmente el software MicroLab PC/Lite/Quant/OQ solo pueden desbloquearlo cuando se encuentran en la página de inicio. Solo el usuario que inició sesión originalmente en el software puede desbloquearlo desde cualquier página. Esto garantiza que los privilegios se apliquen correctamente, que la información de seguimiento de auditoría sea correcta en MicroLab y que el Gestor de configuración y el archivo de resultados se guarden correctamente.

Identificación de usuario: escriba su identificación de usuario.

Grupo: seleccione su grupo de la lista desplegable.

Proyecto: seleccione su proyecto de la lista desplegable.

Contraseña: introduzca su contraseña.

NOTA

Cuando se utiliza MicroLab Mobile Título 21 del CFR, Parte 11, las contraseñas deben ser solamente alfanuméricas. No utilice caracteres especiales, como \$, @, etc.

Aceptar: haga clic en Aceptar para iniciar la sesión y salir del cuadro de diálogo. El software está desbloqueado.

Cancelar: haga clic en Cancelar para salir del cuadro de diálogo sin iniciar una sesión. El software permanece bloqueado.

Firma electrónica

Haga clic en Firma electrónica para aplicar una firma electrónica. Cualquier usuario puede “firmar” el método o los resultados. Para llevar a cabo una Aprobación - 1 y la Aprobación - 2, se le debe dar al Usuario el permiso apropiado en el Spectroscopy Configuration Manager. No es necesario iniciar sesión en el software MicroLab para aprobar. Sin embargo, cuando aparece el cuadro de diálogo Firma, el usuario tendrá que introducir sus credenciales para realizar la Aprobación - 1 o Aprobación - 2. El usuario original que estaba conectado antes de la aprobación permanecerá conectado. Si la cuenta del usuario que ha iniciado sesión en el software MicroLab está desactivada o bloqueada, aparecerá el cuadro de diálogo Lock (bloqueo) al cancelar el diálogo de firma electrónica. El Administrador del Gestor de configuración debe desbloquear la cuenta del usuario original para que se pueda desbloquear el software MicroLab.

Identificación del usuario: este campo muestra el nombre del usuario actual. El operador/aprobador debe introducir su identificación de usuario en este campo antes de aplicar una firma electrónica.

Grupo: el grupo se completa automáticamente una vez que se ingresa la identificación de usuario en el campo. Si el usuario está vinculado a más de un grupo, seleccione el grupo apropiado.

Proyecto: el proyecto se completa automáticamente una vez que se ingresa la identificación de usuario en el campo. Si el usuario está vinculado a más de un proyecto, seleccione el proyecto apropiado.

Contraseña: el operador/aprobador debe introducir su contraseña en este campo para poder aplicar una firma electrónica.

Comentario: en este campo, escriba la información acerca de la acción que se está aprobando, o el significado de la firma. Es obligatorio introducir un comentario. Si se deja en blanco, cuando se hace clic en el botón “Firma”, “Aprobación-1” o “Aprobación-2”, aparece un mensaje que indica que este es un campo obligatorio.

Aprobación-1: haga clic para aplicar una firma electrónica en el nivel de aprobación-1. Aparece un mensaje que indica que un usuario que ejecutó el método no puede aprobar los datos.

Aprobación-2: haga clic para aplicar una firma electrónica en el nivel de aprobación-2. Aparece un mensaje que indica que un usuario que ejecutó la aplicación y creó los datos no puede además aprobar los datos.

MicroLab con Título 21 del CFR, Parte 11

El método o los resultados se bloquearán una vez que se realice la Aprobación - 2. Este método o los resultados se pueden abrir y visualizar, pero no se pueden realizar otras modificaciones. Se puede crear un nuevo método a partir de este método bloqueado.

El método MicroLab y los archivos de resultados no pueden bloquearse a menos que se lleve a cabo una Aprobación-2. Puede ser necesario un SOP de la compañía para garantizar que no se realicen modificaciones adicionales al documento una vez que lo haya firmado el usuario y el Aprobador-1. Cualquier modificación antes de la firma electrónica se detalla en el seguimiento de auditoría, incluidos los eventos de firma electrónica.

Razón para el cambio

Este cuadro de diálogo se abrirá en cuanto se realiza un cambio en el método. El método se guarda inmediatamente después de completar el cuadro de diálogo "Razón para el cambio".

Este cuadro de diálogo permite al usuario introducir un motivo para los cambios que se han aplicado a un método.

La información introducida aquí se ostrará en el informe MicroLab, el registro de datos y el registro de auditoría en SCM.

La parte inferior del cuadro de diálogo muestra el registro del método incluyendo cualquier cambio que se haya hecho.

Título 21 del CFR, Parte 11

Haga clic para acceder a las fichas Registros de auditoría, Parámetros de recopilación o Parámetros de análisis.

Registros de auditoría

Los registros de auditoría del método y los resultados se muestran, señalando todas las acciones registradas:

- Ubicación de almacenamiento del método y los resultados
- Método utilizado para el reanálisis
- Cambios en los parámetros del método
- Razón para el cambio
- Comenzó a ejecutarse el método
- La ejecución del método se detuvo
- Fallo del instrumento inesperado, la ejecución del método se detuvo

MicroLab con Título 21 del CFR, Parte 11

- Método o resultados autorizados
- Residual aplicado

Para cada entrada anterior, también se registra una combinación de la siguiente información:

- Servidor SDAdministrator / base de datos / nombre de archivo
- Fecha y hora local
- Fecha y hora GMT
- Nombre de estación de trabajo
- Usuario: Grupo / Proyecto / ID de usuario
- Nombre de usuario
- Descripción del usuario
- Número de serie del instrumento
- Comentario validado
- Número de versión de software
- Número de versión de firmware

7

Medición de muestras

Limpieza de la interfaz de muestreo	67
Colección de una medición de blanco de fondo	68
Colección de una medición de muestra	69

El software MicroLab PC y el MicroLab Mobile, están diseñados para guiar al usuario a través de la medición de la muestra. El software muestra las imágenes y las instrucciones de las acciones que se requieren por parte del usuario para medir la muestra. Seguir las instrucciones de la pantalla garantiza resultados consistentes de medición. Para cualquier medición de la muestra, se deben realizar los siguientes pasos:

- Limpiar la interfaz de muestreo.
- Colectar un espectro del blanco de fondo.
- Colocar la muestra que se va a medir.
- Colectar la medición de la muestra.

Limpieza de la interfaz de muestreo

El primer paso para hacer una medición de la muestra es asegurarse de que la interfaz de montaje de la muestra está limpia de cualquier residuo de muestras anteriores o por el uso y almacenamiento general. Para obtener instrucciones específicas sobre la limpieza, consulte el manual de operación del instrumento apropiado suministrado con el sistema.

PRECAUCIÓN **No rompa el sello del espectrómetro ni intente limpiar las superficies interiores.**
Si rompe el sello, se anulará la garantía.

Colección de una medición de blanco de fondo

Agilent recomienda que el sistema esté configurado para colectar un espectro de blanco de fondo antes de cada muestra.

Antes de comenzar el análisis, el software automáticamente colecta un espectro de blanco de fondo cuando el método se ha configurado como se recomienda. La medición de blanco de fondo (sin presencia de la muestra) ofrece un perfil básico de las condiciones del sistema actual y le permite compensar las anomalías que ocurren tanto en el fondo y en el espectro de la muestra.

NOTA

Antes de colectar un espectro de blanco de fondo, asegúrese de que la interfaz de la muestra esté limpia. Para la limpieza de la interfaz de la muestra, se debe utilizar un solvente adecuado tal como metanol, acetona o alcohol isopropílico. Consulte el manual de funcionamiento del instrumento para obtener información más detallada.

Para colectar una medición del espectro de blanco de fondo:

- 1** En la pantalla Principal, asegúrese de que el método apropiado esté activo, a continuación, haga clic en **INICIAR** para iniciar el análisis de blanco de fondo de la muestra.
- 2** Haga clic en **Siguiente**. Se producirá una breve verificación de la interfaz de la muestra (el cristal). Después de una prueba exitosa, el sistema reúne un "espectro de blanco de fondo". Una barra de estado indica el progreso del espectro de blanco de fondo.

NOTA

Sólo haga clic en **INICIO** para volver a la pantalla principal de inicio si desea volver a iniciar su análisis.

Colección de una medición de muestra

Para medir una muestra:

- 1 Para iniciar la medición de la muestra, haga clic en el botón **Iniciar** en la pantalla de Inicio.
- 2 Cuando el software lo indique, limpie la interfaz de muestra para una medición con ATR o de Transmisión.
 - Para una medición de reflectancia en el FTIR ExoScan serie 4100 de Agilent, el estándar de reflexión se debe colocar en la interfaz de la muestra.

NOTA

La superficie de la muestra se debe limpiar con un paño suave y un solvente apropiado tal como metanol, etanol o acetona.

- 3 Haga clic en el botón **Siguiente**. Al hacer clic en el botón Inicio se detendrá la medición y se vuelve a la pantalla de Inicio.
La verificación de limpieza del cristal se llevará a cabo si se ha seleccionado en el método. Este buscará absorbancia en una referencia almacenada. Si se encuentra alguna absorbancia, el software le indicará que limpie la interfaz de muestreo y que empiece de nuevo.

NOTA

Si la verificación de limpieza del cristal falla continuamente, la exploración (barrido) del blanco de fondo almacenado puede estar dañado. Si esto ocurre, el fondo limpio se puede restablecer haciendo clic en Funciones avanzadas > Diagnóstico y luego Restablecer verificación limpia en el cuadro de diálogo Diagnóstico. Esto limpiará el fondo almacenado.

- 4 Después de la verificación del cristal (si se especifica), el software colectará el espectro de blanco de fondo. Los espectros de blanco de fondo se obtienen ya sea en cada exploración (barrido) o después de un intervalo de tiempo especificado, según se especifique en el método.
El software le dará las instrucciones para cargar la muestra a la interfaz de muestreo. La imagen que se muestra coincide con la configuración del sistema. Una vez que la muestra esté en su lugar, haga clic en **Siguiente**.

Medición de muestras

- 5 El software mostrará un gráfico con la intensidad (absorción) de la medición de la muestra. Esta pantalla se utiliza para asegurar que la muestra ha sido colocada correctamente en la interfaz de muestreo.
 - Para aplicaciones de aceite con el FTIR serie 4500t de Agilent, el valor debe ser maximizado.
 - Para aplicaciones del FTIR ExoScan serie 4100 de Agilent que utilicen reflectancia, el valor debe estar entre 0,1 y 2 AU, las mediciones con ATR deben estar entre 0,05 y 1 AU.
- 6 Escriba un nombre de archivo en el campo ID de la muestra. Este será el nombre del archivo en el que se guardan los datos de la muestra. Ingrese más información sobre la muestra en el campo Comentario.
- 7 Haga clic en el botón **Siguiente** para comenzar a medir la muestra. El software agregará exploraciones (barrido) de muestra según se especifique en el método.
- 8 Durante la medición de la muestra, la muestra debe permanecer en el foco de la tecnología de muestreo.
 - Para el FTIR serie 4500t Agilent, la celda de muestra no debe ajustarse durante la medición.
 - Para sistemas FTIR ExoScan serie 4100 de Agilent, el instrumento no debe moverse de la superficie de la muestra durante la medición.

El software monitorea la señal de la muestra durante la medición. Si la señal cae por debajo del límite preestablecido, la colección se detendrá. Una vez que el foco de la muestra se recupera, el programa comenzará inmediatamente la colección de datos.

NOTA

La barra de progreso muestra el avance de la colección de datos. Cuando la barra de progreso se ha completado, el mensaje cambiará a Transferencia de datos. Una vez que esto ocurre, la medición se completa, y la muestra puede ser removida del instrumento.

- 9 Cuando la medición de la muestra se ha completado, el software mostrará los resultados del método en la pantalla de Resultados. El espectro de la muestra y los resultados del método calculados se guardan automáticamente. Los datos pueden recuperarse en cualquier momento desde la pantalla de Resultados anteriores.

8 Revisión de resultados

MicroLab Mobile	71
MicroLab PC/MicroLab Lite	75
Creación de informes MicroLab	84

MicroLab Mobile

Pantalla de resultados

Para los métodos de componentes, la pantalla de Resultados muestra los valores del componente calculado. Los valores de los componentes se ordenan en relación con sus límites críticos, los valores fuera del rango crítico aparecen en primer lugar seguido por los valores fuera del rango marginal. Los componentes dentro del rango aceptable se muestran al final en verde.

- Los resultados en verde indican que la muestra se encuentra dentro de límites ajustables.
- Los resultados en amarillo indican que la muestra se encuentra entre los límites marginales y críticos.
- Los resultados en rojo indican que la muestra se encuentra sobre o debajo de los límites marginales y críticos.

Inicio: al presionar este botón se regresa a la pantalla de Inicio.

Siguiente: este botón hace que el software regrese a la página de Colección de muestras para la medición de muestras adicionales.

Manejo de datos (Handling data)

El botón Menú permite seleccionar la opción Manejo de datos. Este botón permite al usuario ingresar un ID de la muestra y comentarios si no fueron ingresados previamente. La función de guardado automático del sistema guardará el campo Comentario y generará un nuevo archivo basado en la identificación de la muestra, si se ingresa una.

Revisión de resultados

NOTA

La función de almacenamiento automático guarda siempre el archivo actual con una ID de la muestra y una marca de fecha y hora. Esto evita que el usuario sobrescriba el resultado de una muestra anterior.

Inicio: hace que el software regrese a la pantalla de Inicio.

Siguiente: hace que el software vuelva a la pantalla de muestra inicial para realizar la medición de la siguiente muestra.

Analizar nuevamente: le permite realizar cálculos de un método diferente en los datos que se visualizan actualmente. Esto es útil cuando no es posible recolectar los datos de la muestra. Cada nuevo análisis generará un nuevo archivo de datos.

NOTA

La función Analizar nuevamente debe ser utilizada solo con los datos colectados en la misma resolución espectral del método elegido. Las diferencias en la resolución espectral pueden afectar a los resultados cuantitativos.

Exportar: permite exportar los datos colectados a otros paquetes de software de análisis. El archivo exportado se guardará con el mismo nombre que la muestra, con excepción de la extensión *.csv, *.asp *, o *.spc. Se guardará en el directorio de resultados.

Detección de picos: le permite al usuario definir los picos que se marcarán en el espectro bajo revisión. Esto se realiza haciendo clic derecho en el espectro y seleccionando Detección de picos (Peak Picks) del menú. Para marcar picos en el espectro, trace una línea límite. Para ello, haga clic, arrastre y haga clic de nuevo. Esto puede repetirse varias veces para definir varios picos en el espectro. Los picos se imprimirán en cualquier informe generado y se mantendrán con el archivo de datos. Una vez hecho esto, haga clic derecho de nuevo y quite la selección de Detección de pico del menú.

Las plantillas de informes incorporan una tabla de detección de picos. Para los picos seleccionados, los valores de los picos aparecen en la tabla en el orden en que fueron seleccionados.

Revisión de resultados

Importación de espectros en GRAMS

Para importar datos a un formato SPC:

- 1 Abrir GRAMS/AI en su computadora y haga clic en **Archivo > Importar/Exportar**. Seleccione el convertidor de archivos ASCII. Haga clic en el botón **Importar**.
- 2 Navegue por las unidades y directorios para localizar el o los archivos que desea importar. Al importar, recuerde que la mayoría de los convertidores de archivos esperan una extensión de nombre de archivo de entrada particular. Por ejemplo, el convertidor ASCII busca archivos con la extensión *.ASP en el nombre del archivo. (Si es necesario, cambie el tipo de archivos a Todos los archivos (*.*)).

Puede seleccionar varios archivos pulsando la tecla CONTROL mientras hace clic en cada nombre de archivo.

Haga clic en **Abrir**. El cuadro de diálogo Importación de archivos muestra el nombre del archivo que desea importar. (Si va a importar más de un archivo, se mostrará el nombre del primer archivo.)

- 3 Cambie el nombre del archivo, si lo desea. Para escribir el archivo recién creado en un directorio diferente, delante del nombre del archivo coloque la ruta de directorio completa. De lo contrario, se guardará en la misma carpeta que el archivo ASP. (Usted debe tener acceso de lectura/escritura para el directorio de salida.)
- 4 Elija una extensión clave del experimento de la lista Tipo de archivo de salida. Deje su valor por defecto **Espectros (*.spc)**.
- 5 Seleccione una opción para Cambiar el nombre de salida. Déjelo como **Manual**.
- 6 Haga clic en **Abrir automáticamente** para abrir automáticamente el archivo convertido en GRAMS/AI. (La opción Abrir automáticamente no abre varios archivos. La función Abrir automáticamente se aplicará al último archivo convertido.)
- 7 Desde el cuadro de diálogo Importar archivo, haga clic en **Aceptar**.

Cuando el archivo se convierte, la aplicación de conversión GRAMS lee en el archivo que desea importar y escribe un nuevo archivo en el disco. Una vez que el proceso de conversión se completa, se puede cargar el archivo en GRAMS/AI utilizando el comando Archivo > Abrir traza.

Revisión de resultados

A medida que avanza la conversión, se muestran los mensajes o los errores. Si se están convirtiendo muchos archivos, puede volver a GRAMS/AI o cualquier otro programa de Windows, y la conversión sigue. Tenga en cuenta que el programa Convert es una aplicación independiente denominada GRAMSC32.EXE y se puede iniciar de forma independiente desde Windows desde GRAMS/AI. El comando Archivo > Importar/Exportar ejecuta esta aplicación con un interruptor de línea de comandos especial. Esto hace que una vez que se termina la conversión, el programa se cierre de forma automática.

Informe: hacer clic en el botón Manejo de datos le permite guardar un informe. Los informes son archivos *.PDF, que detallan los resultados de los componentes de los métodos o los resultados de búsqueda de bibliotecas de los métodos de búsqueda cualitativa. Los informes se guardan en el directorio de resultados y se pueden sincronizar con MicroLab Lite.

Resultados anteriores

Los resultados anteriores de MicroLab Mobile le permiten revisar los datos después de la recopilación. Los resultados anteriores están disponibles en el ícono Menú en la pantalla de Inicio. Una lista de muestras recopiladas previamente se muestra en la pantalla de resultados anteriores. Para desplazarse por la lista, haga clic en la lista y arrastre.

Inicio: hace que el software regrese a la pantalla de Inicio.

Ver: abre el archivo de datos para su visualización. Los datos se presentarán de manera idéntica a los resultados mostrados en pantalla, en la sección Pantalla de resultados en la página 71.

Informe: desde el Menú, el botón Informe generará un informe en PDF como se especifica en la sección de la pestaña Informes, en la página 34.

MicroLab PC/MicroLab Lite

MicroLab PC/MicroLab Lite permiten analizar más datos que las funciones disponibles en MicroLab Mobile. Debido al tamaño de pantalla, los espectros no se muestran actualmente en el software MicroLab Mobile. MicroLab PC/MicroLab Lite permiten la visualización de los espectros y la revisión de las regiones espectrales que se utilizaron para el cálculo de los componentes. Una vez que los datos se han transferido a la computadora (consulte Transferencia de métodos editados a MicroLab Mobile en la página 45; la transferencia de resultados es análoga a la transferencia de métodos), esto puede ser revisado utilizando la función de Resultados anteriores de MicroLab PC o MicroLab Lite. Desde la pantalla de inicio de MicroLab PC, haga clic en el botón **Resultados anteriores** y en la pantalla aparecerá un listado con los nombres de todos los archivos de muestras.

Inicio: hace que el software regrese a la pantalla de Inicio.

Importar: le permite agregar datos a la pantalla de Resultados.

Informe: genera un informe para la muestra si una plantilla de informe es asignada en la pestaña de informes del método. Consulte la página 84 para asignar una plantilla de informe a un método.

Ver: Regresa el software a la pantalla Resultados de la muestra. Los resultados de la muestra se podrán revisar siempre con el software MicroLab.

Superposición: el botón de superposición aparece cuando se selecciona más de un archivo espectral. Permite al usuario ver hasta 5 espectros de la muestra en formato superpuestos o apilados para realizar una comparación. Los archivos deben tener el mismo tipo de abscisa para poder visualizarse juntos.

Exportar: permite exportar los datos colectados a otros paquetes de software de análisis. El archivo exportado se guardará con el mismo nombre que la muestra, con excepción de la extensión *.asp o *.spc. Se guardará en el directorio de resultados.

Información de diagnóstico: muestra información de diagnóstico para el espectrómetro conectado al software MicroLab.

NOTA

El software de la sección de resultados anteriores funcionará de la misma manera que la sección de resultados. Las pantallas son idénticas. Estas características permiten a los operadores revisar los datos.

Revisión de resultados

Pantalla de resultados

La pantalla de resultados que se muestra una vez que se completa la ejecución variará según el tipo de método elegido.

Tipo de método de componentes

Figure 1. Pantalla de resultados del método de componentes.

Los resultados de búsqueda del método de componentes están codificados por colores para mayor claridad. Los resultados fuera del rango especificado se resaltan en rojo y se mueven a la parte superior de la lista.

- Los resultados en verde indican que la muestra se encuentra dentro de los límites ajustables.
 - Los resultados en amarillo muestran que la muestra está cerca de los límites aceptables.
 - Los resultados en rojo indican que la muestra se encuentra fuera de los límites aceptables.

La tabla Resultados muestra los límites, Nombre, Valor, Bajo y Alto de la muestra.

Revisión de resultados

Tipo de método de solo colección de datos

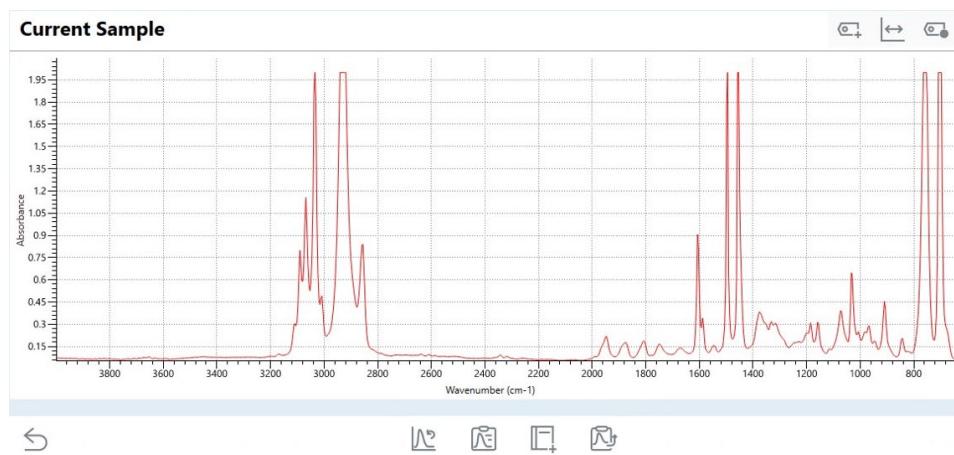


Figure 2. Pantalla de resultados del tipo de método Solo colección de datos.

La ventana del tipo de método predeterminado Solo colección de datos muestra la interfaz de resultados de MicroLab (Figura 2). La barra de herramientas ubicada sobre la ventana de resultados contiene varios iconos que se pueden usar para manipular la visualización de datos.

- Seleccione el icono para volver a la pantalla de inicio.
- Seleccione el icono para agregar y eliminar etiquetas de datos de los espectros de resultados.

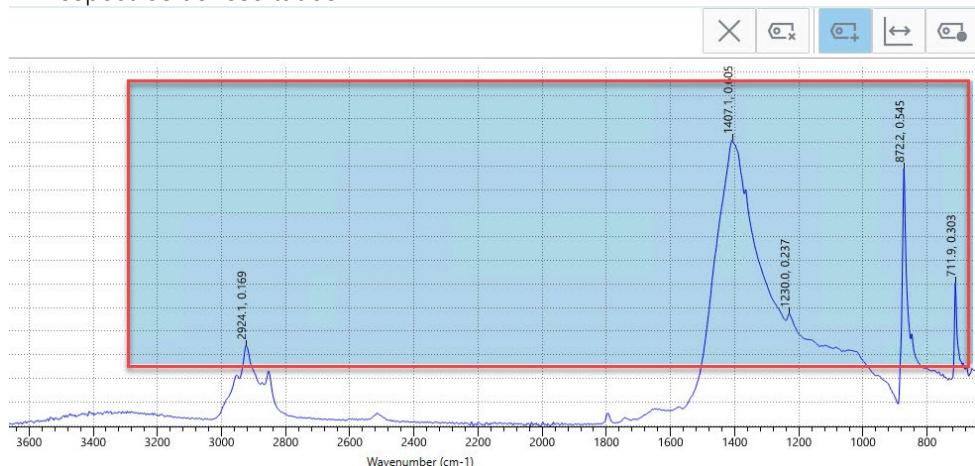


Figure 3. Funcionalidad de etiqueta de datos de Detección de picos.

Revisión de resultados

Detección de picos: Para mayor comodidad, las etiquetas de datos se pueden agregar simultáneamente a múltiples  s de los espectros seleccionando el ícono de **Etiquetas de datos**  y arrastrando la selección para incluir cualquier pico relevante. Esto también se puede activar a través del teclado con la función **Ctrl + F**.

- Seleccione el ícono  para cambiar la visualización de espectros de la vista predeterminada a la Vista comprimida. Esta función puede ser útil cuando se requiere una mayor claridad de una región particular de los espectros mostrados.

Cuando esté en la vista comprimida:

- El valor **Posición** define la posición del borde entre el número de onda comprimido y normal (eje x).
- El valor **Factor** define el factor de compresión aplicado a la región a la izquierda de la posición del número de onda elegido (eje x).
- Seleccione el ícono  para editar la visibilidad y el formato de las etiquetas de datos aplicadas.

La barra de herramientas que se encuentra debajo de la pantalla de datos contiene varios iconos que se pueden usar para procesar los datos y navegar por el software.

- Seleccione el ícono  para volver a analizar los datos (Solo disponible para resultados anteriores).
- Seleccione el ícono  para generar un informe.
- Seleccione el ícono  para agregar el resultado actual a la biblioteca.
- Seleccione el ícono  para firmar electrónicamente el informe actual. (Modo del Título 21 del CFR, Parte 11 únicamente).
- Seleccione el ícono  para exportar el archivo de resultados.
- Seleccione el ícono  para iniciar el flujo de trabajo para la siguiente muestra (solo disponible como parte de un flujo de trabajo de medición).
- Seleccione el ícono  para mostrar la identificación de la muestra y cualquier comentario adjunto antes de la colección.

Revisión de resultados

Ventana de gráficos “Vista clásica” de Solo colección de datos

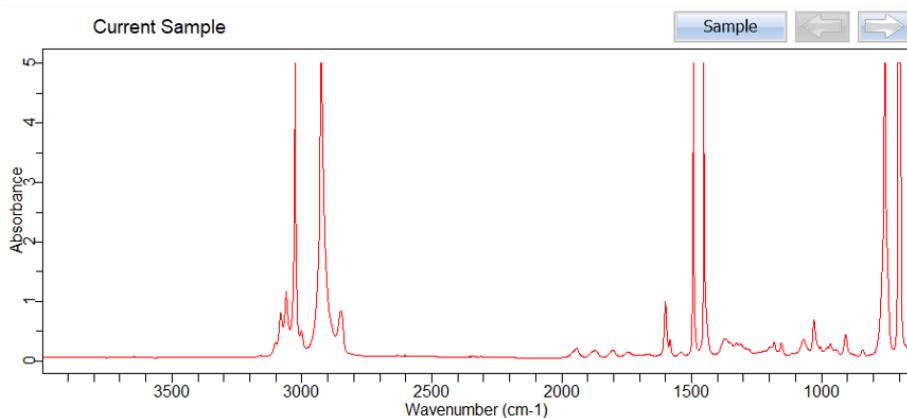


Figure 4. Pantalla de resultados de tipo de método de Vista clásica de Solo colección de datos.

La Vista clásica de la ventana de gráficos de adquisición de datos ofrece un método alternativo para ver los resultados cuando se selecciona el tipo de método “Solo colección de datos”. Para habilitar/deshabilitar esta función, seleccione la casilla de verificación “Habilitar vista clásica” en la ventana de edición de métodos.

Tipo de método de búsqueda cualitativa

Results:						
Warning	Rank	Quality	Library	CAS#	Name	
	1	0.18933	TIC TAC (523)		Table Salt	
	2	0.26196	Agilent Elastomer O-ring and Seal Handheld ATR Library (280)		Natural-Rubber - Blair Run#5	
	3	0.30146	Agilent Elastomer O-ring and Seal Handheld ATR Library (139)		Gasket-SBR 10053333 Run#4 edge	
	4	0.36079	Agilent Elastomer O-ring and Seal Handheld ATR Library (278)		Natural-Rubber - Blair Run#3	
	5	0.38287	Agilent Elastomer O-ring and Seal Handheld ATR Library (279)		Natural-Rubber - Blair Run#4	
	6	0.38513	Agilent Elastomer O-ring and Seal Handheld ATR Library (138)		Gasket-SBR 10053333 Run#3 edge	
	7	0.42246	Agilent Elastomer O-ring and Seal Handheld ATR Library (258)		Natural-PureGum-Rubber - US Flex Run#2	
	8	0.44293	Agilent Elastomer O-ring and Seal Handheld ATR Library (347)		Neoprene U S Flexible Run#3	

Figure 5. Pantalla de resultados del método de búsqueda cualitativa.

Los resultados de la búsqueda cualitativa se pueden codificar por colores para mayor claridad.

- Los resultados en verde indican visitas a la biblioteca que están por debajo del límite marginal de calidad.
- Los resultados en naranja indican visitas a la biblioteca que se encuentran entre los límites marginales y críticos de calidad.
- Los resultados en rojo indican los resultados principales de comparación con la biblioteca que están por encima del límite crítico de calidad.

Para obtener más información sobre la configuración de los límites de codificación por colores, consulte la sección Métodos en la página 23.

Revisión de resultados

Visualización de las regiones espetrales

Una característica única del software MicroLab es que le permite comparar las muestras en regiones específicas. Simplemente haga doble clic en los parámetros individuales. Los espectros de referencia aparecerán junto a los espectros de la muestra. Puede usar las flechas izquierda y derecha que se encuentran en la esquina superior derecha para moverse entre categorías. Puede optar por comparar la muestra y los espectros de referencia en una vista Superpuesta o Apilada.

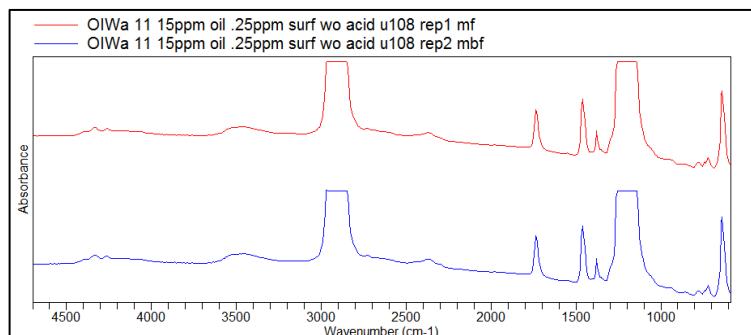


Figure 6. Ejemplo de la opción de Apilado.

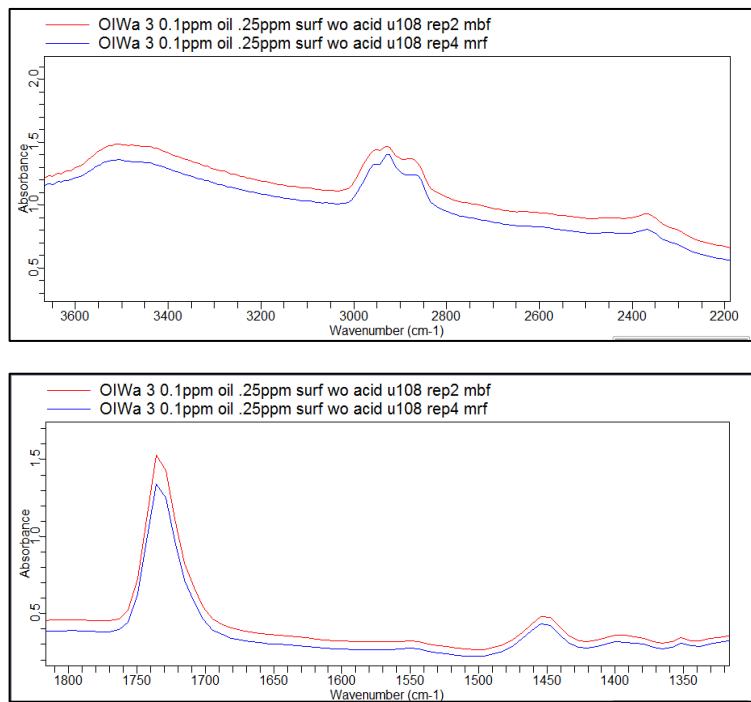


Figure 7. Ejemplo de la opción de Superposición.

Revisión de resultados

NOTA

Para cambiar entre las categorías, haga clic con el botón derecho y desplácese hasta cualquiera de las opciones. La pantalla reflejará la vista que indique.

Detalles

Haga clic en **Detalles** para ver el espectro de la muestra. El software MicroLab mostrará los espectros de la muestra en relación con los espectros de referencia.

Cuando se selecciona la búsqueda cualitativa, la tabla debajo del espectro enumera los resultados de la biblioteca clasificados por calidad.

Además, se muestran las siguientes pestañas:

- **Buscar texto:** Permite buscar una entrada de biblioteca específica por nombre o número CAS. Una vez seleccionados, los espectros de entrada de biblioteca elegidos se compararán con los espectros de muestra en la pestaña Detalles. Esta entrada también aparecerá clasificada en la parte superior de la lista de resultados de calidad de la biblioteca.
- **Residual:** Muestra la muestra analizada actual como un residual frente a una coincidencia de biblioteca seleccionada.

NOTA

Puede hacer zoom sobre cualquier parte de los espectros. Con el mouse o la almohadilla táctil, haga clic en el gráfico y resalte la parte que desee. La pantalla cambiará inmediatamente a la parte ampliada.

Para volver al espectro completo, haga clic derecho en un gráfico y elija Deshacer zoom.

Parámetros

Haga clic en **Parámetros** para ver las siguientes pestañas:

- **Colectar parámetros:** muestra un resumen de los parámetros del método.
- **Parámetros del análisis:** Muestra un resumen del análisis de los datos colectados.

Manejo de datos (Data handling)

Haga clic en **Manejo de datos** para acceder a las siguientes funciones.

Informe: genera un informe para la muestra si una plantilla de informe es asignada en la pestaña de informes del método. El informe describe los parámetros preestablecidos y muestra los resultados en unidades relevantes en comparación con el método de aceite de referencia o ASTM (American Society for Testing and Materials), según corresponda. Consulte la página 84 para asignar una plantilla de informe a un método.

Revisión de resultados

Agregar a una biblioteca: le permite agregar los espectros de la muestra a una biblioteca adecuada. Haga clic en "Examinar" para acceder a la biblioteca. Aparecerá una lista que muestra las bibliotecas a su disposición.

La opción Agregar a la biblioteca completa el proceso. Agregar nuevos espectros de la biblioteca del usuario permite que el software determine si las muestras posteriores son similares.

Exportar: permite exportar los datos colectados a otros paquetes de software de análisis.

Analizar nuevamente: le permite realizar cálculos de un método diferente en los datos que se visualizan actualmente. Esto es útil cuando no es posible recolectar los datos de la muestra.

NOTA

La función Analizar nuevamente debe ser utilizada solo con los datos colectados en la misma resolución espectral del método elegido. Las diferencias en la resolución espectral pueden afectar a los resultados cuantitativos.

Firma electrónica

Esta opción solo está disponible en entornos compatibles con el Título 21 del CFR, Parte 11. Haga clic en Firma electrónica para aplicar una firma electrónica. Consulte la página 64 para obtener más información.

Título 21 del CFR, Parte 11

Muestra una lista de las acciones realizadas durante la ejecución o edición de un método o resultados. Consulte la página 65 para obtener más información.

Importación de espectros en GRAMS

Para importar datos a un formato SPC:

- 1 Abrir GRAMS/AI en su computadora y haga clic en **Archivo > Importar/Exportar**. Seleccione el convertidor de archivos ASCII. Haga clic en el botón **Importar**.
- 2 Navegue por las unidades y directorios para localizar el o los archivos que desea importar. Al importar, recuerde que la mayoría de los convertidores de archivos esperan una extensión de nombre de archivo de entrada particular. Por ejemplo, el convertidor ASCII busca archivos con la extensión *.ASP. (Si es necesario, cambie el tipo de archivos a Todos los archivos (*.*)).

Puede seleccionar varios archivos pulsando la tecla CONTROL mientras hace clic en cada nombre de archivo.

Revisión de resultados

Haga clic en **Abrir**. El cuadro de diálogo Importación de archivos muestra el nombre del archivo que desea importar. (Si va a importar más de un archivo, se mostrará el nombre del primer archivo).

- 3 Cambie el nombre del archivo, si lo desea. Para escribir el archivo recién creado en un directorio diferente, delante del nombre del archivo coloque la ruta de directorio completa. De lo contrario, se guardará en la misma carpeta que el archivo ASP. (Usted debe tener acceso de lectura/escritura para el directorio de salida).
- 4 Elija una extensión clave del experimento de la lista Tipo de archivo de salida. Deje su valor por defecto **Espectros (*.spc)**.
- 5 Seleccione una opción para Cambiar el nombre de salida. Déjela como **Manual**.
- 6 Haga clic en **Abrir automáticamente** para abrir automáticamente el archivo convertido en GRAMS/AI. (La opción Abrir automáticamente no abre varios archivos. La función Abrir automáticamente se aplicará al último archivo convertido).
- 7 Desde el cuadro de diálogo Importar archivo, haga clic en **Aceptar**.

Cuando el archivo se convierte, la aplicación de conversión GRAMS lee en el archivo que desea importar y escribe un nuevo archivo en el disco. Una vez que el proceso de conversión se completa, se puede cargar el archivo en GRAMS/AI utilizando el comando Archivo > Abrir traza.

A medida que avanza la conversión, se muestran los mensajes o los errores. Si se están convirtiendo muchos archivos, puede volver a GRAMS/AI o cualquier otro programa de Windows, y la conversión sigue. Tenga en cuenta que el programa Convert es, en realidad, una aplicación independiente denominada GRAMSC32.EXE y se puede iniciar de forma independiente desde Windows desde GRAMS/AI. El comando Archivo > Importar/Exportar ejecuta esta aplicación con un interruptor de línea de comandos especial. Esto hace que una vez que se termina la conversión, el programa se cierre de forma automática.

Terminado: vuelve a la pantalla que le pide que limpie el área de muestreo y el dispositivo de muestreo. Esto prepara al espectrómetro para la siguiente muestra. 'Terminado' le permite ejecutar múltiples muestras sin tener que volver a la pantalla de Inicio.

NOTA

Esta opción no permite cambiar la información de la unidad. Si está ejecutando muestras de diferentes máquinas, debe volver a la pantalla de Inicio.

NOTA

Si desea detener el análisis, haga clic en el botón INICIO.

Creación de informes MicroLab

Asignación de una plantilla de informe a un método

MicroLab permite al usuario elegir entre una lista de plantillas de informes y asociarlas con sus métodos específicos. Cuando se crea cada una de las plantillas de informes se designan a un tipo de método o función específica en el software.

Para asignar una plantilla de informes a un método:

- 1 Seleccione **Métodos** de la pantalla de **Inicio** y luego seleccione el método en el que se desea una plantilla de informe. Seleccione **Editar**.
- 2 En las fichas de método, seleccione **Informes**.
- 3 En la lista de **Plantillas de informes disponibles**, seleccione una o varias plantillas para asociar al método. A continuación, haga clic en el botón **Agregar**.
- 4 Si se desea generar informes de forma automatizada, seleccione la casilla de verificación **Generar informes automáticamente de todos los informes seleccionados**. Esto generará automáticamente todos los informes asociados al final del análisis de datos.
- 5 Para eliminar un informe no deseado, solo tiene que seleccionar el informe y hacer clic en el botón **Quitar**.
- 6 Una vez que se han realizado todos los cambios, haga clic en el botón **Guardar** para guardar el método o **Guardar como** para guardar el método con un nombre de método diferente.

Creación de una nueva plantilla de informe

Cuando el software MicroLab PC es instalado, también se instalará un complemento en la plataforma de Word de Microsoft Office. El complemento permite al usuario personalizar o crear plantillas de informes para usar dentro de la plataforma del software MicroLab.

NOTA

Esta función solo es compatible con instalaciones de 32 bits de Microsoft Word 2010 o superior.

El uso de esta función requiere conocimientos de Microsoft Word que pueden no estar cubiertos en este manual.

Para crear una nueva plantilla de informe:

- 1 Abra Microsoft Word y cree un nuevo documento.
- 2 Una vez creado este documento, vaya a la pestaña/menú Ver.

Revisión de resultados

- 3 Se ha agregado una nueva característica al menú Ver - Informes de MicroLab. Incluye dos botones: Diseñador de informe y Realizar fusión.
- 4 Para empezar a crear el documento. Seleccione la función Diseñador de informe. El esquema asociado con MicroLab aparecerá como un menú a la derecha de la pantalla.
- 5 Elija el tipo de informe que se necesita y selecciónelo en el Tipo de informe. Los tipos de informes incluyen:
 - a Informe de componentes: esto solo se mostrará si el método se ha designado como un método de componentes en el editor de métodos.
 - b Búsqueda cualitativa: esta plantilla de informe solo se mostrará si el método se ha designado como un método de búsqueda cualitativa en el editor de métodos.
 - c Solo colección de datos: esta plantilla de informe solo se mostrará si el método se ha designado como un método de colección de datos en el editor de métodos.
 - d Informe del método: informe de nivel de sistema para imprimir los parámetros del método.
 - e Informe de registro: informe de nivel de sistema para imprimir el archivo de registro del sistema.
- 6 Elija un nombre para la plantilla de informe en el bloque de parámetros de Informes de MicroLab.
- 7 Los Campos de informe constan de campos de parámetros que están asociados con el software MicroLab. Los campos se pueden localizar en una variedad de categorías para el usuario, desde parámetros de métodos a resultados. El usuario debe familiarizarse con las diferentes categorías. Es importante tener en cuenta que cada tipo de método tiene su propia categoría de Método y Resultado. Por ejemplo, un método de búsqueda cualitativa tiene dos categorías que se relacionan con esta, Resultados de búsqueda y Biblioteca de métodos. Aquí encontrará información específica de este tipo de método y sus archivos resultantes. Mientras que la información más general se encontrará simplemente en las categorías de métodos o resultados.
- 8 Para agregar campos al informe, basta con hacer clic y arrastrar el campo deseado a la página de la plantilla de informe.
 - a El campo agregado solo imprime la información solicitada. Dado que está en Word, el usuario puede agregar texto en cualquier momento para identificar campos o etiquetar materiales.
 - b No se recomienda usar tablas distintas de las tablas predefinidas ya que esto provocará errores en el informe.

Revisión de resultados

- 9** Las tablas predefinidas para Informes de componentes y Resultados de búsqueda se han configurado para que el usuario haga clic y arrastre simplemente en la plantilla de informe.
- 10** En cualquier momento, para obtener una vista previa de cómo se vería el informe, seleccione el botón de Vista previa de Informe situado en la parte inferior del menú de Informes de MicroLab.
 - a** Esto también se puede lograr a través de la función de Realizar fusión.
 - b** Siempre es mejor guardar el informe y ejecutar los datos verdaderos contra el método en el que se asignan los informes para determinar si el informe muestra todos los valores necesarios.
- 11** Una vez que el informe ha sido editado de forma correcta, debe guardar el archivo en la carpeta de plantillas de informe para MicroLab. Esta carpeta se encuentra normalmente en C:\Usuarios\Público\Documentos Pùblicos\Agilent\MicroLab\rptTemplates.
 - a** Guarde el archivo con formato docx.
- 12** Hay varias plantillas de informes que se suministran cuando se instala el software. Se pueden editar. Sin embargo, se recomienda que el usuario guarde plantillas de informes editadas con un nombre de archivo diferente utilizando la función "Guardar como" de Word, de modo que las plantillas originales queden intactas.

9

Actualizaciones y solución de problemas

Actualización de firmware	87
Resolución de problemas	87

Actualización de firmware

Ocasionalmente, Agilent lanzará actualizaciones del firmware (software contenido en el espectrómetro FTIR) para corregir o ampliar las funciones que puede proporcionar el sistema. Las actualizaciones de firmware se proporcionan como archivos ejecutables de Microsoft Windows. Estos archivos pueden proporcionarse directamente al cliente o estar disponibles como parte de una actualización de la aplicación para MicroLab PC de Agilent.

Para el firmware del FTIR portátil 4300 de Agilent, las actualizaciones se proporcionan e instalan como un ejecutable independiente dentro del software MicroLab Mobile. Consulte el manual de funcionamiento del instrumento adecuado suministrado con el sistema o póngase en contacto con Agilent para obtener más información.

Resolución de problemas

Error en la inicialización

Si usted ve este mensaje de error:

Se produjo un error al inicializar el instrumento

El instrumento mostró el código de error: -2.

La aplicación se cerrará. A continuación, apague el instrumento y vuelva a encenderlo, y reinicie la aplicación.

Al abrir el software, verifique que el espectrómetro esté encendido y conectado a la PC de control mediante un cable USB o Bluetooth (si corresponde). Verifique que el instrumento esté encendido (se muestra un LED verde). Si controla el FTIR serie 4300 a través de MicroLab PC, asegúrese de que el instrumento esté en modo “Pass-Through”. Si sincroniza el FTIR serie 4300, asegúrese de que el instrumento esté conectado a la PC a través de USB, esté en modo “Pass-Through” y el software MicroLab Lite esté en uso.

Actualizaciones y solución de problemas

Error en la creación de la plantilla de informe

Consulte la página 84 para obtener más información sobre los requisitos y los pasos necesarios para crear o personalizar una plantilla de informe.

No se guardaron los cambios de ganancia

Si el valor de ganancia actualizado no se guarda y el indicador de estado del instrumento cambia de verde a amarillo al activar un método o iniciar una Colección de datos, verifique lo siguiente:

- En el software MicroLab PC/MicroLab Mobile, en **Métodos** > seleccione el método > haga clic en **Editar** > vaya a la pestaña **Instrumento** y asegúrese de que la casilla de verificación "Establecer ganancia de método" no esté seleccionada.
- En la página **Diagnósticos** (en MicroLab OQ, o en **Funciones avanzadas** si es MicroLab PC/MicroLab Mobile) > haga clic en **Ajustar ganancia** > ajuste el valor de la ganancia > haga clic en **Establecer ganancia predeterminada del instrumento** para guardar la ganancia como valor predeterminado del instrumento.

Si se selecciona "Establecer ganancia de método", la ganancia se guardará únicamente en el método que se está utilizando.

Problemas de acceso a la base de datos

Si aparece este mensaje de error al tratar de conectarse al servidor después de una instalación de SDA (en un entorno compatible con el Título 21 del CFR, Parte 11):

Error: error de conexión con el servidor

Para las instalaciones del Caso 1, reinicie el equipo y abra SDA nuevamente para establecer una conexión correcta con el servidor.

Para las instalaciones de los Casos 2 y 3, asegúrese de que los equipos están visibles en la red, desactive todos los servidores de seguridad y reinicie los equipos. Intente establecer de nuevo la conexión con el servidor de SDA.

Consulte las instrucciones de instalación del Título 21 del CFR, parte 11, para obtener más información.

Si se va a ejecutar una prueba de verificación del sistema en MicroLab PC o en MicroLab OQ, asegúrese de que el usuario esté asignado a un Grupo y a un Proyecto con acceso tanto a la base de datos de la verificación del sistema como a la base de datos pública. Consulte la Guía del usuario de SMC para obtener más información.

Apéndice A: Tipo de archivo de MicroLab

En la tabla siguiente, se describen los distintos tipos de archivos que MicroLab usa y acepta.

Tabla 1 Tipo de archivo de MicroLab

Tipo de archivo	Extensión de archivo	Comentarios
Archivos de biblioteca de Agilent	*.a2l *.a2x .lib	Los tres archivos se generan y almacenan juntos cuando se crea una biblioteca en MicroLab PC/Lite. Los tres archivos deben estar juntos cuando se exporte una biblioteca. <ul style="list-style-type: none">• El archivo *.a2l incluye el contenido real de la biblioteca.• El archivo *.a2x es el archivo asociado que contiene los resultados de blanco.• El archivo *.lib contiene el título de la biblioteca para identificación.
Archivo de métodos de Agilent	*.a2m	El archivo de métodos se usa para almacenar uno de los siguientes tipos de método: <ul style="list-style-type: none">• Solo colección de datos, o• Búsqueda cualitativa (biblioteca), o• Tipo de método de componentes.
Archivo de resultados de Agilent	*.a2r	Este es un formato de archivo espectral y genera uno de los tres subtipos posibles de archivos de resultados de acuerdo con el tipo de método seleccionado: <ul style="list-style-type: none">• Resultados espectrales• Resultados de biblioteca con espectros normalizados• Espectros y resultados de componentes
Archivo de configuración de seguridad de Agilent	*.a2s	Este archivo almacena la configuración de inicio de sesión y la contraseña. Es un archivo interno que no debe moverse ni eliminarse.

Tipos de archivos compatibles con MicroLab

Archivo de espectros	*.asp	MicroLab PC/Lite puede ver e importar este tipo de archivo de espectros y exportarlo automáticamente.
Thermo Galactic / GRAMS	*.spc	MicroLab PC/Lite puede ver e importar este tipo de archivo de espectros y exportarlo automáticamente.
Modelo de texto GRAMS PLS1	*.txt	El formato de texto de las instrucciones del modelo GRAMS se implementa en un método de componente. El software GRAMS IQ genera este archivo después de la construcción adecuada del modelo.
Modelos de Eigen Vector	*.xml	MicroLab PC/Lite utiliza el formato de archivo XML para generar un resultado cuantitativo dentro de un método de componente. Solo se aplica al tipo de modelo multivariante PLS1.
Modelo de MicroLab Quant de Agilent	*.mqm	Lo genera MicroLab Quant y puede usarlo MicroLab Quant/PC/Lite en el método de componente para generar un resultado numérico.
Proyecto MicroLab Quant	*.mqp	Se usa para guardar un flujo de trabajo MicroLab Quant y solo se aplica a MicroLab Quant.
Archivo de modelo de MicroLab Expert Quant de Agilent	*.a2q	Este archivo se usa para MicroLab PC y solo se genera con la versión 1.1 y versiones posteriores del paquete de software MicroLab Expert.

Apéndice

Esta página se dejó en blanco intencionalmente.

En este Manual

El manual describe lo siguiente:

- Presentación
- MicroLab Mobile
- MicroLab PC
- MicroLab Quant
- MicroLab OQ
- MicroLab con Título 21 del CFR, Parte 11
- Medición de muestras
- Revisión de resultados
- Actualizaciones y solución de problemas

www.agilent.com

© Agilent Technologies, Inc. 2024

10.^a edición, 1/2024



0020-410

