

Agilent G1701DA ChemStation GC/MSD

Procedimientos iniciales



Agilent Technologies

Avisos

© Agilent Technologies, Inc. 2006

Ninguna parte de este manual puede reproducirse en forma alguna o por medio alguno (incluido el almacenamiento y recuperación electrónicos o la traducción a otro idioma) sin el acuerdo previo y el consentimiento por escrito de Agilent Technologies, Inc., tal y como establecen las leyes de derechos de autor internacionales y de los Estados Unidos.

Referencia del manual

G1701-95061

Edición

Junio de 2006

Impreso en EE.UU.

Agilent Technologies, Inc.

5301 Stevens Creek Boulevard

Santa Clara, CA 95052, EE.UU.

Garantía

El material contenido en este documento se facilita "tal cual" y está sujeto a cambios sin previo aviso en ediciones futuras. Asimismo, y en la medida en que esté permitido por la legislación aplicable, Agilent rechaza todas las garantías, ya sean expresas o tácitas, relativas a este manual y a la información contenida en el mismo, incluidas a título enunciativo pero no limitativo las garantías implícitas de comerciabilidad e idoneidad para un fin determinado. Agilent no se responsabiliza de los errores contenidos en este manual ni de los daños ocasionales relativos al suministro, uso o prestaciones de este documento o de la información contenida en el mismo. En el supuesto de que Agilent y el usuario hayan firmado un contrato aparte por escrito cuyos términos de garantía que cubren el material contenido en este documento sean contrarios a los presentes términos, prevalecerán los términos de garantía del contrato firmado aparte.

Avisos de seguridad

PRECAUCIÓN

Un aviso de **PRECAUCIÓN** indica la existencia de peligro o riesgo. Llama la atención sobre una práctica, procedimiento de funcionamiento o proceso similar que, si no se realiza correctamente o no se cumple estrictamente, podría dar como resultado daños en el producto o la pérdida de datos importantes. Ante la presencia de un aviso de **PRECAUCIÓN** no debe proseguirse hasta que se hayan comprendido y cumplido todas las condiciones indicadas.

ADVERTENCIA

Un aviso de ADVERTENCIA indica la existencia de peligro o riesgo. Llama la atención sobre una práctica, procedimiento de funcionamiento o proceso similar que, si no se realiza correctamente o no se cumple estrictamente, podría dar como resultado lesiones físicas o la muerte. Ante la presencia de un aviso de tipo ADVERTENCIA no debe proseguirse hasta que se hayan comprendido y cumplido todas las condiciones indicadas.

Contenido

1 Referencia rápida de la ChemStation GC/MSD

Contenido de este manual 6

Dónde encontrar ayuda 7

Novedades de esta revisión 15

Hardware 16

Ventanas de ChemStation 19

Tareas habituales de ChemStation 29

Mensajes de error y diagnósticos 51

2 Familiarización con la cuantificación

Cuantificación 58

Base de datos de cuantificación 61

Ejercicio práctico – Utilización de AutoQuant Setup 69

3 Utilización de los informes personalizados

Informes personalizados 86

Creación de una plantilla de informe 87

Personalización de informes 91

Selección de celdas, filas y columnas 96

Impresión de informes 98

Creación de una base de datos de informes personalizados 101

Selección de varios ficheros de datos 104

Visualización e impresión de gráficos 106

Botones de la barra de herramientas de Custom Reports 107

1
Referencia rápida de la ChemStation GC/MSD

Contenido de este manual 6
Dónde encontrar ayuda 7
Novedades de esta revisión 14
Hardware 15
Ventanas de ChemStation 18
Tareas habituales de ChemStation 28
Mensajes de error y diagnósticos 50

Contenido de este manual

Este documento proporciona una descripción general sobre los elementos incluidos con el sistema. Su objetivo es ayudarle a empezar a utilizar el sistema GC/MSD.

En las páginas siguientes encontrará:

- Detalles sobre la forma de obtener ayuda adicional
- Fotos del hardware con las principales piezas indicadas
- Cada barra de herramientas del software de la ChemStation GC/MSD
- Procedimientos para las funciones habituales de la ChemStation
- Una programación del mantenimiento resumida
- Un breve apartado con consejos de uso, mensajes de errores y diagnóstico
- Un estudio sobre la forma en que la cuantificación funciona con la ChemStation GC/MSD, junto con un ejercicio didáctico para ayudarle a utilizar la función AutoQuant que le ahorrará tiempo
- Una guía rápida para aprender a usar el software Custom Reports.

Consulte la ayuda en línea y los vídeos y manuales electrónicos incluidos en el CD-ROM o el DVD-ROM suministrados para obtener información detallada.

Dónde encontrar ayuda





El sistema se suministra con una amplia biblioteca de material de referencia que incluye manuales impresos, ficheros de ayuda en línea y manuales electrónicos en el CD-ROM o el DVD-ROM.

Cada elemento de hardware se suministra con un CD-ROM o un DVD-ROM que contiene cientos de páginas de referencia, así como vídeos que describen la forma de utilizar, mantener y diagnosticar el equipo.

Este material de referencia del hardware incluye información detallada sobre:

- El uso del hardware
- El mantenimiento del hardware
- El diagnóstico del hardware



Los ficheros de ayuda en línea incluyen amplias instrucciones sobre el funcionamiento del software, así como ejercicios didácticos sobre el empleo de la ChemStation GC/MSD (Enhanced, Aromatics in Gasoline, Drug Analysis, Environmental). Se incluye información de referencia y tareas sobre:

Análisis de datos

- Análisis de datos
- Comandos y funciones
- Utilización y escritura de macros
- Glosario de términos

Configuración del sistema MSD

- Configuración del instrumento
- Configuración de una tarjeta GPIB
- Diagnóstico de la red
- Información PCS típica en MSDCHEM.INI

Control del instrumento

- Uso del control del instrumento
- Utilización de métodos
- Utilización de secuencias
- Análisis de datos
- Utilización del modo de lotes
- Sintonía (calibración) del MSD
- Diagnóstico del MSD
- Control seguro
- Gestor de informes
- Comandos y funciones
- Utilización y escritura de macros
- Glosario de términos



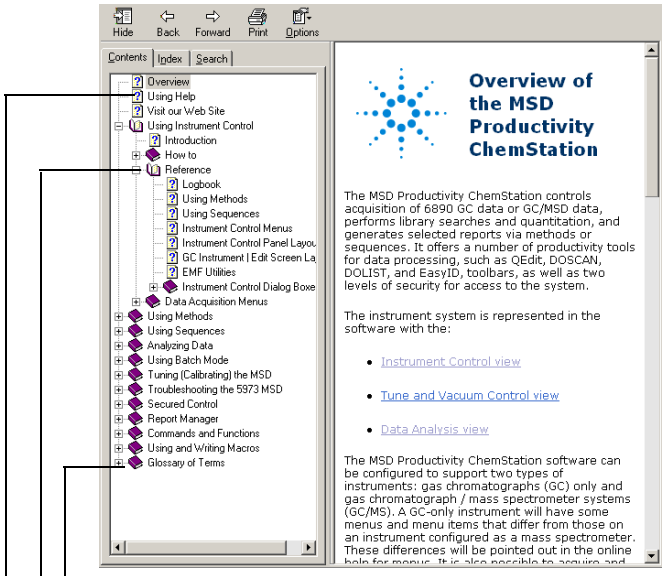
Los documentos impresos pretenden ayudarle a ponerse en marcha. Incluyen:

- Procedimientos iniciales con la ChemStation GC/MSD (este documento)
- Lista de verificación de preparación de la instalación
- Lista de verificación de instalación del hardware
- Manual de funcionamiento del hardware
- Procedimientos iniciales sobre el análisis de drogas

Utilización de los ficheros de ayuda en línea

Los ficheros de ayuda en línea incluyen amplia información y ejercicios didácticos sobre el control del instrumento, adquisición de datos, análisis de datos, métodos, secuencias, sintonización, diagnóstico y la forma de usar los comandos y variables del sistema.

Para acceder a la ayuda en línea, seleccione temas de **Help** en el menú Help de cualquier ventana o haga clic en el botón de ayuda de los cuadros de diálogo.



Elemento	Descripción
Hide/Show	Le permite mostrar y ocultar la lista de temas de ayuda.
Back	Vuelve al tema de ayuda anterior.
Print	Le permite imprimir el libro o tema de ayuda actual.
Contents	Muestra la lista de temas de ayuda (indicada más arriba).
Index	Mediante palabras clave, facilita la búsqueda de temas en el índice de la ayuda.
Search	Sirve para escribir una palabra o frase y mostrar luego todos los temas de la ayuda en línea que incluyen esas palabras.
Options	Sirve para modificar diversas opciones de ayuda, como la visualización de fichas.

Iconos de ayuda



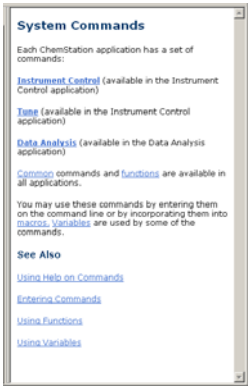
Indica un libro con más temas de ayuda. Para abrir un libro, selecciónelo y haga clic en él dos veces.



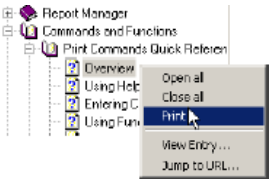
Indica un libro abierto de temas de ayuda. Para cerrar un libro, selecciónelo y haga clic en él dos veces.



Indica un tema de ayuda. Para pasar a un tema de ayuda, selecciónelo y haga clic en él dos veces.



Para imprimir un tema de ayuda:



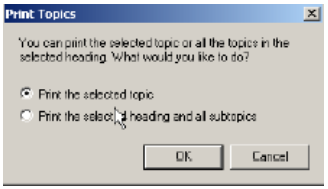
1 Resalte el tema que desea imprimir (por ejemplo, **Overview**).

2 Haga clic con el botón derecho y elija **Print**...

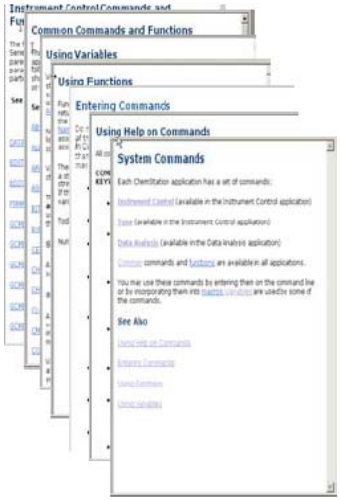
3 Seleccione **Print the selected topic** y haga clic en **OK**.

4 Verifique la impresora seleccionada y elija **Print**.

5 Se imprimirá entonces la información del tema de ayuda en cuestión. Los temas enlazados no se imprimen.



Para imprimir todos los temas secundarios al mismo tiempo:



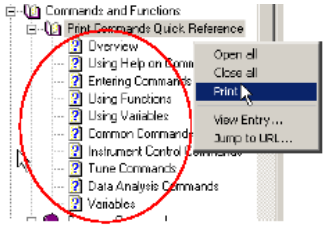
1 Resalte el tema que desea imprimir (por ejemplo, **Print Commands Quick Reference**).

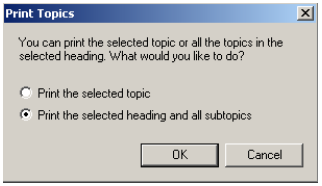
2 Haga clic con el botón derecho y elija **Print**...

3 Seleccione **Print the selected heading and all subtopics** y haga clic en **OK**.

4 Verifique la impresora seleccionada y elija **Print**.

5 Se imprimirán TODOS los temas secundarios del tema principal seleccionado. En este caso, los temas de **Print Commands Quick Reference**, unas 26 páginas de información.





NOTA

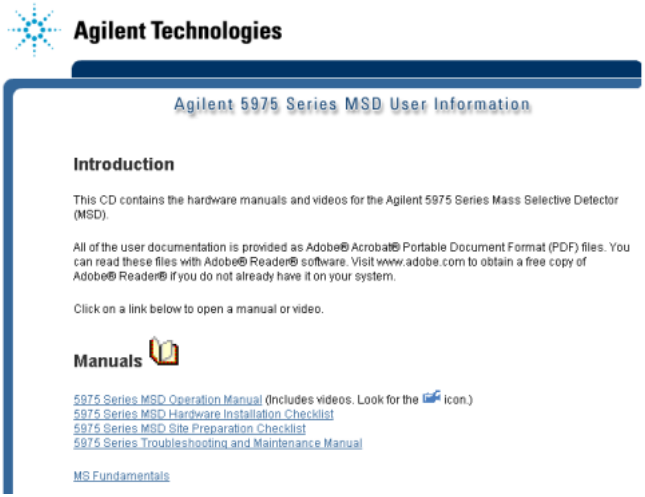
Aunque el cursor esté en un único tema del principal (p.ej., **Tune Commands**) al seleccionar **Print all topics**, se imprimirán todos los temas del tema principal y no sólo los incluidos en el marcado con el cursor.

Manuales de hardware en CD-ROM o DVD-ROM

Cada elemento de hardware se suministra con un CD-ROM o DVD-ROM con cientos de páginas de referencia, así como vídeos que describen la forma de utilizar, mantener y diagnosticar el equipo.

Utilización de los manuales del CD-ROM o el DVD-ROM

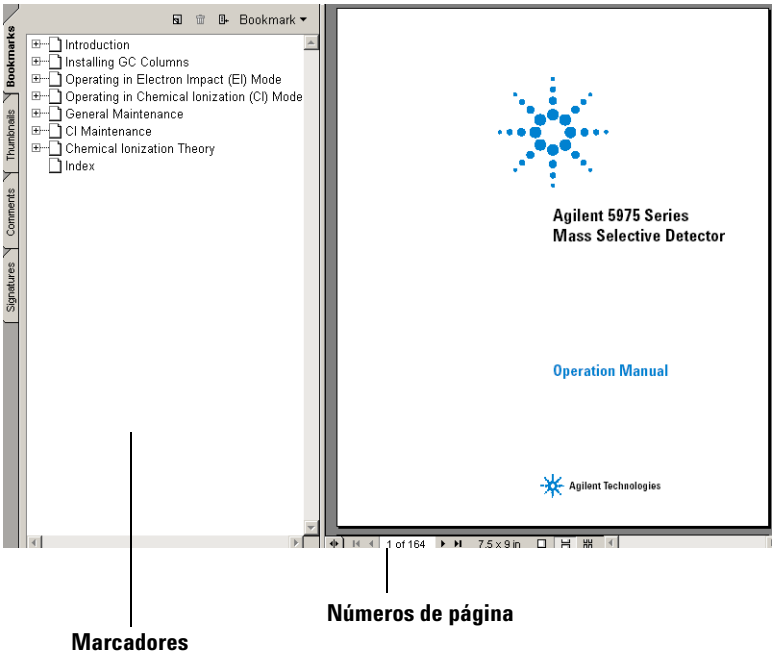
1. Los manuales del CD o el DVD-ROM están en el formato PDF de Adobe Acrobat. Los vídeos están en los manuales PDF (pueden necesitar QuickTime), y también pueden visualizarse directamente desde el CD-ROM o el DVD-ROM con Microsoft Media Player.
   - Visite Adobe.com para descargar Adobe Acrobat Reader de forma gratuita si no dispone de este programa.
   - Visite Apple.com/quicktime para descargar QuickTime gratuitamente.
2. Inserte el CD o el DVD-ROM en la unidad de disco y se abrirá automáticamente el menú con todos los libros, similar a lo siguiente:



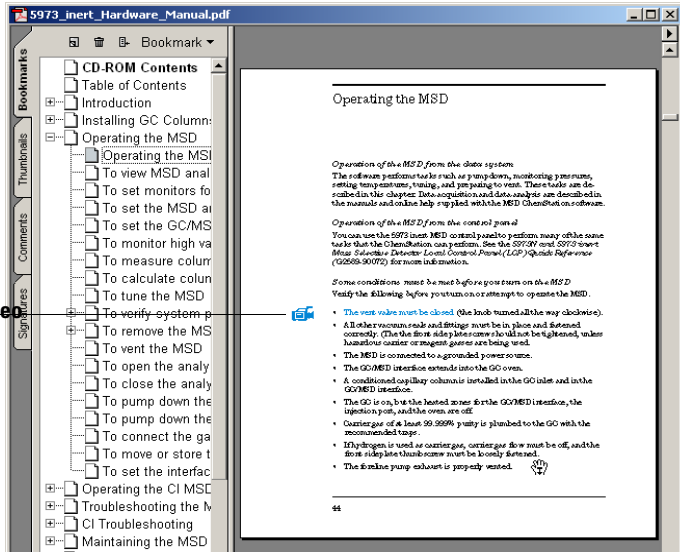
Menú de ejemplo en un CD o un DVD-ROM con información para el usuario



3 Sitúe el cursor en cualquiera de los libros de la lista. Cuando el cursor tome la forma de una **mano**, haga clic con el botón izquierdo del ratón para seleccionar el libro. Se muestra entonces la primera página del libro y los marcadores.



4 Haga clic en cualquier **marcador** en la columna izquierda (por ejemplo, **Operating the MSD**) y se mostrará la página correspondiente.



Icono de vídeo



5 El icono de **vídeo** identifica secciones que contienen vídeos. Haga clic en este icono para ver la forma de llevar a cabo el procedimiento de mantenimiento. Haga clic con el botón izquierdo para reproducir el vídeo. El vídeo se detendrá automáticamente cuando llegue al final, o puede pulsar [Escape] para pararlo siempre que quiera.

1 **Vent the MSD. See page 64.**

6 Al desplazarlo por una referencia cruzada, el cursor adopta la forma de una mano, lo que significa que el texto está enlazado electrónicamente con la página indicada. Haga clic en la referencia cruzada para pasar a la página indicada. Haga clic con el botón derecho *para volver* a la página anterior.



7 Puede imprimir una sola página o varias de ellas. Seleccione **Print** e indique las páginas que desea imprimir usando los números de página mostrados en la parte inferior de la pantalla.

Novedades de esta revisión

Existen dos formas de obtener una descripción de todas las actualizaciones hechas en esta versión del software:

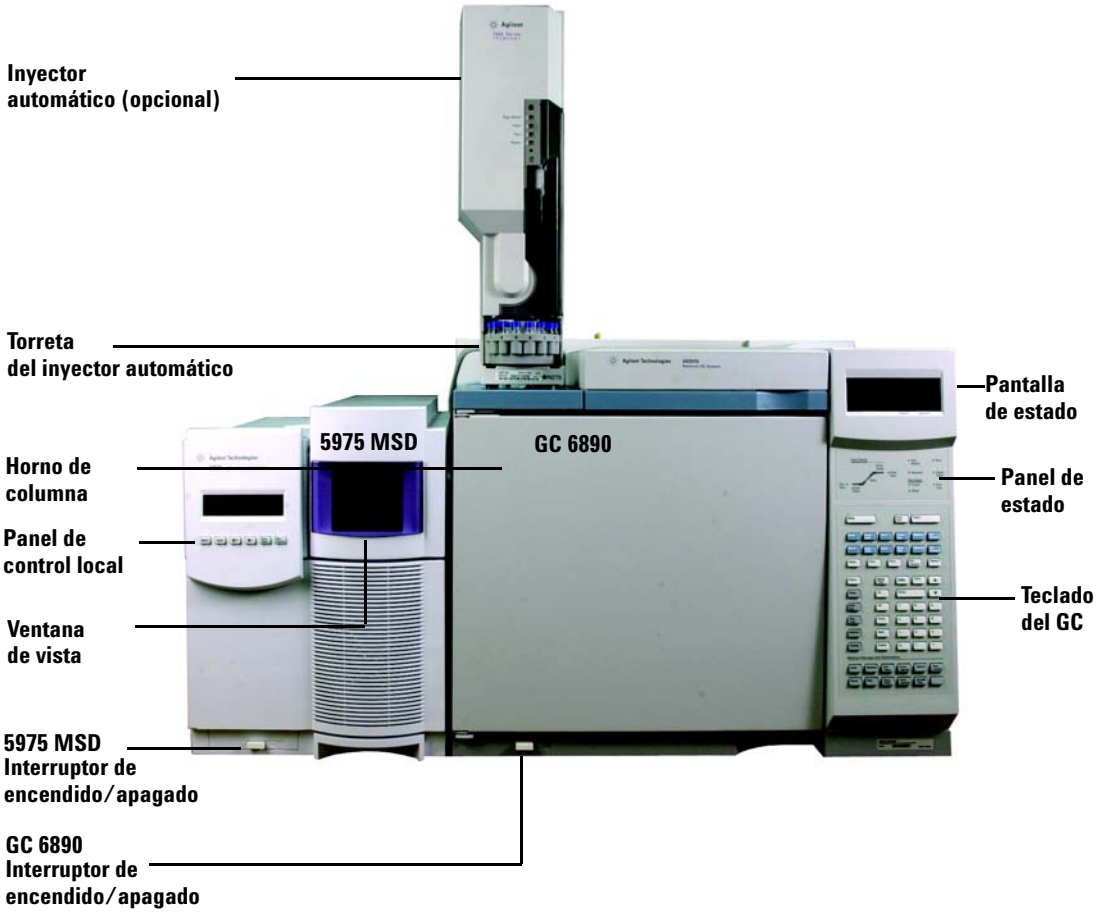
- Tras la configuración inicial, selecciona “Yes” cuando se le pregunte “Do you want to view the Readme file now”.
- En la vista Data Analysis o Instrument Control, seleccione **Help/View Revisions Readme File**.

Se abre un fichero de texto en una ventaja emergente. Puede desplazarse por el texto o leerlo en línea, buscar en él de forma electrónica o copiarlo, como desee.

Seleccione **File/Exit** para volver a la aplicación cuando esté listo.

Hardware

El MSD serie 5975 con un GC 6890

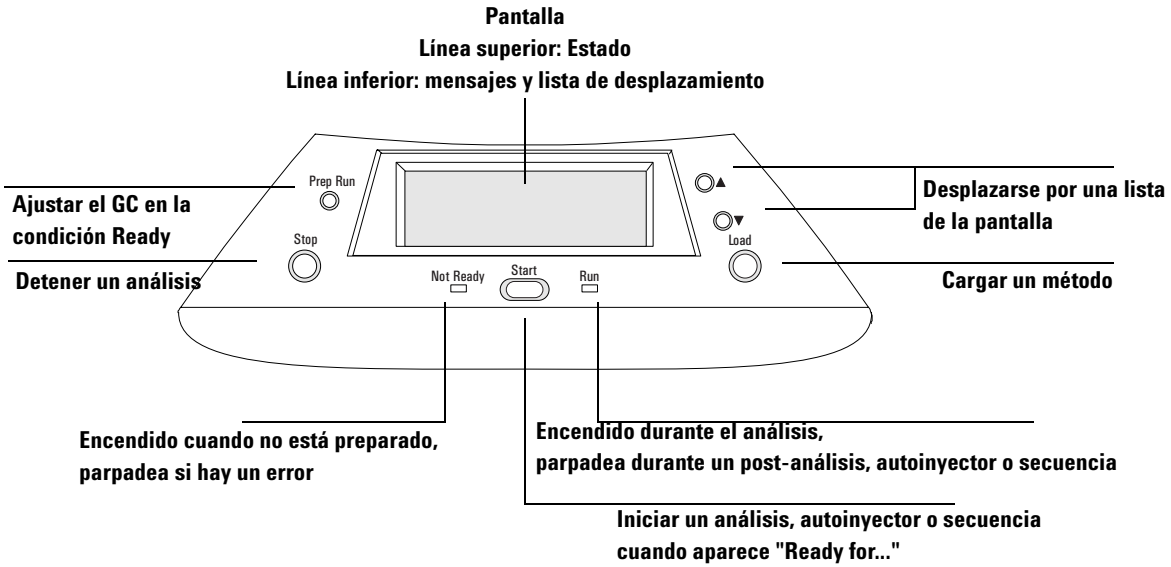


Teclado y pantalla del GC 6850

El software de la ChemStation GC/MSD proporciona control del instrumento para el GC 6850. Esto le permite utilizar el software, en lugar del teclado del GC, para programar el instrumento. Sin embargo, a veces querrá usar el teclado para llevar a cabo con rapidez una de las siguientes tareas.

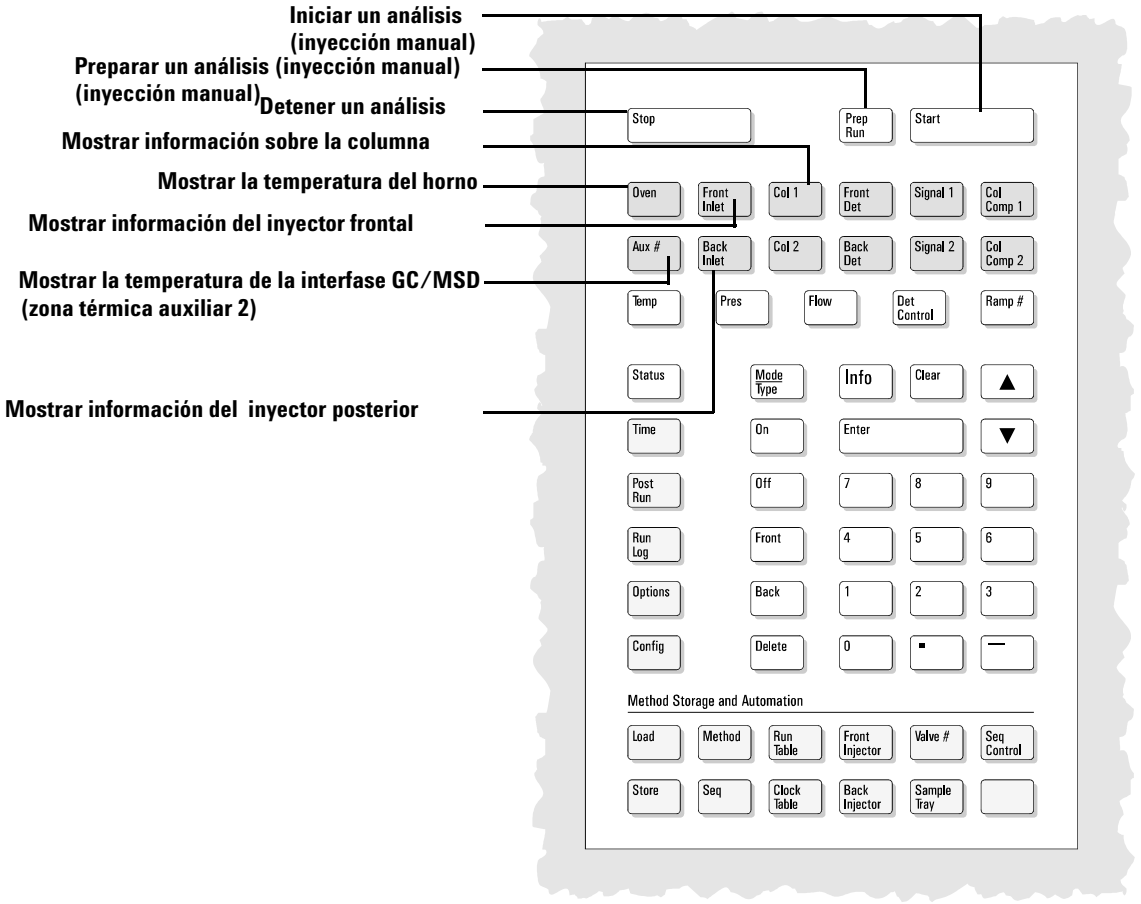
En función de la configuración ajustada con el módulo de control o con la ChemStation GC/MSD, durante un análisis la pantalla puede mostrar:

- Temperatura del horno
- Presión del inyector
- Velocidad de flujo en columna
- Señal sin procesar del detector
- Mensajes
- Información de secuencias
- Tiempo de análisis



Teclado del GC 6890

El software de la ChemStation GC/MSD proporciona control del instrumento para el GC 6890. Esto le permite utilizar el software, en lugar del teclado del GC, para programar el instrumento. Sin embargo, a veces querrá usar el teclado para llevar a cabo con rapidez una de las siguientes tareas.

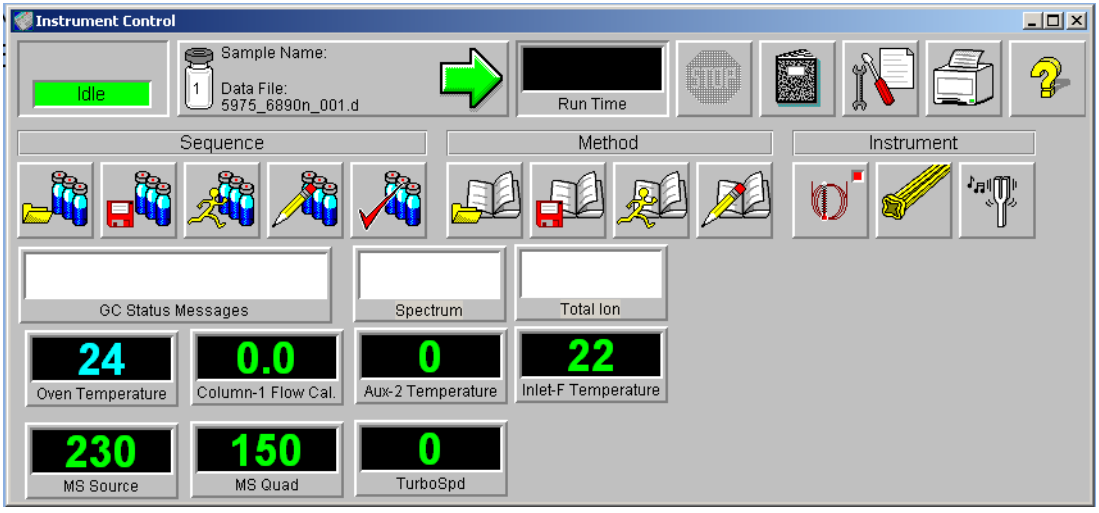


Ventanas de ChemStation

Ventana Instrument Control

La ventana Instrument Control se muestra al poner en marcha la ChemStation GC/MSD. En ella se configuran y monitorizan los parámetros del instrumento. Si está en otra ventana, seleccione **View/Instrument Control** cuando esté preparado para configurar el sistema para la adquisición de datos.

NOTA Consulte la ayuda en línea para obtener más detalles sobre los menús, botones y ventanas usados en el software.

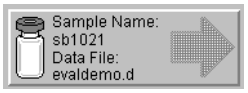




Acquisition Status Indicator
Muestra el estado del análisis actual.



Run Time
Muestra el tiempo restante de un análisis.



Start Run
Muestra el nombre de la muestra y fichero de datos listos para analizar.



Stop
El signo de stop aparece en rojo cuando hay un análisis en curso y en verde cuando no lo hay. Utilice este botón para detener el sistema cuando se encuentra en estado Preanálisis, Análisis o Postanálisis. Si el sistema se halla en estado Análisis, cambiará a Postanálisis. Si se encuentra en estado Postanálisis, cambiará a Inactivo.



Logbook
Muestra el menú emergente del historial.



Maintenance Due
Muestra el cuadro de diálogo de acción Select early maintenance feedback (EMF).



Print
Muestra un cuadro de diálogo con elementos imprimibles como el registro de secuencias, secuencia actual, parámetros del instrumento, parámetros de análisis de datos y parámetros detallados de análisis de datos.



Help
Muestra ayuda sobre la ventana Instrument Control y da acceso al resto del sistema de ayuda.



Load Sequence
Abre el cuadro de diálogo Load Sequence.



Save Sequence
Abre el cuadro de diálogo Save Sequence.



Run Sequence
Abre el cuadro de diálogo Start Sequence.



Edit sequence
Abre el cuadro de diálogo Sample Log Table.



Simulate Sequence
Comprueba una secuencia.



Load Method
Abre el cuadro de diálogo Load Method.



Save Method
Guarda el método actual.



Run Method
Abre el cuadro de diálogo Start Method.



Edit Method
Le permite editar el método actual.



GC Parameters
Le permite editar los parámetros y monitores del GC.



MS Parameters
Le permite editar los parámetros y monitores del MS.



Tune Parameters
Le permite sintonizar el MSD.

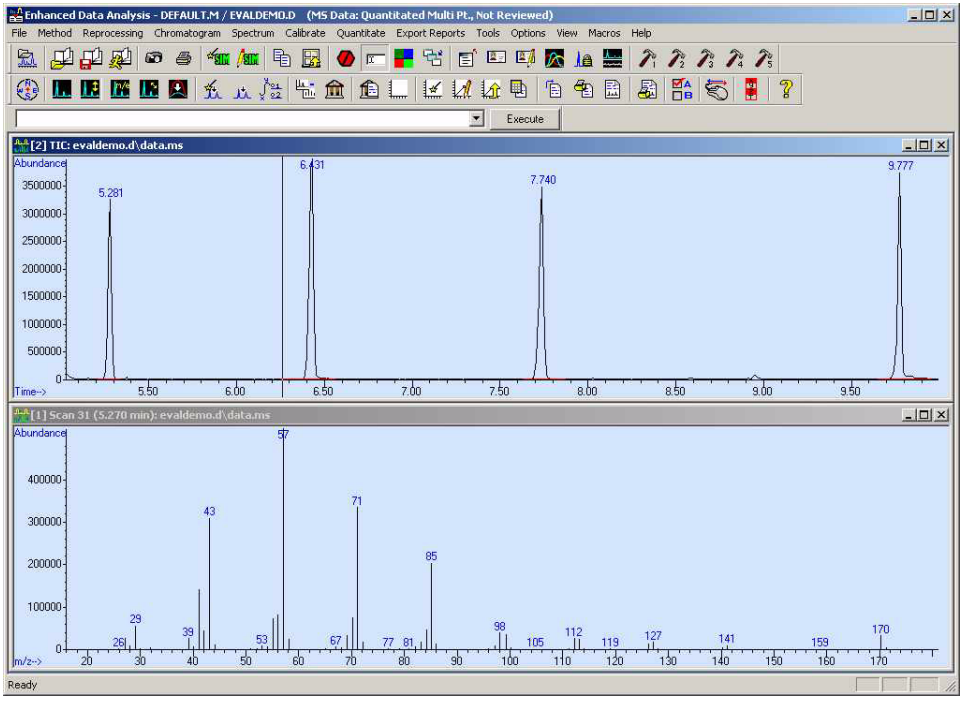
Ventana Data Analysis

La ventana Data Analysis se muestra cuando comienza una sesión del instrumento de análisis de datos o seleccionando **View/Data Analysis (offline)** en la ventana Instrument Control. Use la ventana Data Analysis para realizar tareas como:

- Definir parámetros de integración
- Calibrar un método
- Cuantificar datos
- Personalizar e imprimir informes

Data Analysis contiene también diferentes herramientas de productividad, como QEdit, DOSCAN, DOLIST, EasyID y barras de herramientas. Además, hay un tutorial para el uso de la cuantificación.

NOTA Consulte la ayuda en línea para obtener más detalles sobre los menús, botones y ventanas usados en el software.


Enhanced Data Analysis - DEFAULT.M / EVALDEMO.D (MS Data: Quantitated Multi Pt., Not Reviewed)
File Method Reprocessing Chromatogram Spectrum Calibrate Quantitate Export Reports Tools Options View Macros Help
Execute
[2] TIC: evaldemo.d\data.ms
Abundance
5.281
6.431
7.740
9.777
Time-->
[1] Scan 31 (5.270 min): evaldemo.d\data.ms
Abundance
57
43
71
85
29
39
53
67
77
81
98
105
112
119
127
141
159
170
m/z-->
Ready

Botones de la barra de tareas de Data Analysis



Load Data File
Carga el fichero de datos (.D) seleccionado y muestra el cromatograma iónico total (TIC) de ese fichero.



Load Method
Permite elegir un fichero de método (*.M) para cargarlo desde un árbol de directorios.



Save Method
Guarda todos los cambios hechos en el método actual.



Run Method
Ejecuta sólo la parte de Data Analysis del método actual. Debe elegir un nombre de fichero de salida para impresión. Este fichero de salida especificará el nombre del fichero que almacenará el documento. El documento se almacena en un formato legible por la impresora y no por el programa que usará para imprimir.



Snapshot
Muestra los datos adquiridos hasta el momento en que se activó la instantánea. Esta característica no está disponible para datos sólo del GC.



Print
Permite imprimir la ventana seleccionada, el TIC y espectro, o el método actual.



Generate AutoSIM Method
Abre el cuadro de diálogo AutoSIM Setup.



Edit SIM Parameters
Permite editar los parámetros SIM de la tabla de grupos SIM.



Copy
Permite copiar la ventana seleccionada en el portapapeles.



Reset Windows
Reorganiza las ventanas gráficas de acuerdo con sus posiciones por defecto.



Abort
Detiene un comando o una macro.



Command Line
Activa y desactiva la pantalla de la línea de comandos.



Edit Colors
Ajustar colores de los diversos elementos de pantalla de Data Analysis.



Iconize/Restore Graphics
Permite minimizar o maximizar las ventanas gráficas mostradas.



Close Screen Reports
Cierra cualquier informe de pantalla abierto.



EasyID
Permite actualizar los tiempos de retención esperados y las relaciones de iones para datos MS en una base de datos de cuantificación existente compuesto a compuesto.



QEdit
Permite revisar y editar resultados de cuantificación una vez cuantificado un fichero de datos.



Peak Purity
Ayuda a detectar picos solapados (con múltiples componentes) en el cromatograma (sólo GC/MS).



Retention Time Lock
Abre la ventana RTLock Setup que se utiliza para tareas de bloqueo del tiempo de retención.



Signal-to-Noise
Permite realizar una comprobación de señal-ruido y mostrar o imprimir un informe.



CUSTOM TOOL 1
Ejecutar una macro creada por el usuario. Primero es necesario crear esta macro y asignarle el nombre CUSTOMTOOL1. Consulte la ayuda en línea sobre el uso y escritura de macros y comandos de Data Analysis.



CUSTOM TOOL 2
Ejecutar una macro creada por el usuario. Primero es necesario crear esta macro y asignarle el nombre CUSTOMTOOL2. Consulte la ayuda en línea sobre el uso y escritura de macros y comandos de Data Analysis.



CUSTOM TOOL 3
Ejecutar una macro creada por el usuario. Primero es necesario crear esta macro y asignarle el nombre CUSTOMTOOL3. Consulte la ayuda en línea sobre el uso y escritura de macros y comandos de Data Analysis.



CUSTOM TOOL 4
Ejecutar una macro creada por el usuario. Primero es necesario crear esta macro y asignarle el nombre CUSTOMTOOL4. Consulte la ayuda en línea sobre el uso y escritura de macros y comandos de Data Analysis.



CUSTOM TOOL 5
Ejecutar una macro creada por el usuario. Primero es necesario crear esta macro y asignarle el nombre CUSTOMTOOL5. Consulte la ayuda en línea sobre el uso y escritura de macros y comandos de Data Analysis.



Hide/Show Navigation
Conmuta entre el icono que permite mostrar y ocultar el panel del explorador.



Draw Chromatogram
Redibuja el cromatograma original del fichero de datos actual sin etiquetas ni marcas de integración.



Scale Chromatogram
Realiza una escala del cromatograma seleccionado de acuerdo con los factores de escala especificados.



Ion Chromatograms
Extrae y muestra cromatogramas de ión extraído (EIC) del TIC del fichero de datos actual (sólo GC/MS).



Merged Format
Superpone los cromatogramas de ión extraído (sólo GC/MS).



Overlay Chromatograms
Seleccionar varios cromatogramas para mostrarlos superpuestos.



AutoIntegrate
Intenta encontrar los mejores parámetros de integración para el cromatograma actual y, a continuación, lo integra. Esta acción no está permitida si el integrador seleccionado en el método es RTE.



Integrate
Integra el cromatograma actual utilizando los parámetros establecidos para el integrador actual.



Integration Parameters
Abre un cuadro de diálogo para editar los parámetros o eventos del integrador actual.



Subtract
Resta un espectro de otro y muestra la diferencia.



Select Library
Muestra el cuadro de diálogo Library Search Parameters, donde puede seleccionar las librerías que se van a utilizar para búsquedas PBM del espectro actualmente seleccionado.



Library Search Report
Integra el TIC actual, busca en la librería actual coincidencias con cada pico y genera un informe.



Set Up Quant
Permite configurar una base de datos de cuantificación especificando globales de la base de datos de cuantificación e introduciendo compuestos en la base de datos.



AutoQuant
Proporciona un modo semiautomatizado de crear una base de datos de cuantificación.



Edit Compounds
Permite revisar y editar información en la base de datos de cuantificación compuesto por compuesto.



Update Calibration
Permite añadir, borrar o actualizar un nivel de calibración en la base de datos de cuantificación actual.



Calculate Quant Report
Cuantifica el fichero actual y genera un informe de cuantificación.



Generate Quant Repor
Genera un informe de cuantificación para un fichero cuantificado.



Print Quant Report
Imprime el informe de cuantificación.



Custom Reports
Inicia el software Custom Reports. Si el método no tiene una base de datos de cuantificación o no hay cargado ningún fichero de datos, puede utilizar los valores por defecto.



Print Custom Report
Imprime la plantilla de informe personalizado especificada por el método, utilizando el fichero de datos actual.



Data Analysis Options
Abre el cuadro de diálogo Select DA Options.



Switch Data Analysis Mouse Actions
Conmuta la funcionalidad de clic con el botón derecho del ratón entre las acciones tradicionales y las nuevas opciones del menú de clic derecho.



Show/Hide Stack (Variable Watch)
Permite mostrar u ocultar la ventana de registro (reloj variable).



Online Help
Muestra la ayuda en línea de la ChemStation GC/MSD.

Tareas habituales de ChemStation

Bombear (poner en marcha) el MSD

1 Asegúrese de que el sistema cumple todas las condiciones siguientes antes de bombear:

- ❒ La válvula de purga está cerrada (el botón se ha girado totalmente a la derecha).
- ❒ Todos los demás sellos de vacío y adaptadores están colocados y apretados correctamente (el tornillo de la placa frontal *no debe apretarse*).
- ❒ El MSD está conectado a una fuente de alimentación conectada a tierra.
- ❒ La interfase GC/MSD se extiende hasta el horno del GC.
- ❒ Se ha colocado una columna capilar acondicionada en el inyector del GC y la interfase GC/MSD.
- ❒ El GC está encendido pero las zonas calentadas para la interfase GC/MSD, el puerto de inyección y el horno están apagadas.
- ❒ El gas portador con una pureza de al menos el 99,999% está conectado al GC con las trampas recomendadas.
- ❒ Si se utiliza hidrógeno como gas portador, el flujo del gas está interrumpido y el tornillo de la placa frontal no está totalmente apretado.
- ❒ El escape de la bomba delantera está purgado correctamente.

ADVERTENCIA **Asegúrese de que el MSD cumple TODAS las condiciones enumeradas más arriba. En caso contrario, puede sufrir lesiones personales.**

2 Seleccione **View/Tune and Vacuum Control**.

3 Elija **Vacuum/Pump Down**.

4 Cuando se le indique, encienda el MSD.

5 Acople la placa lateral al distribuidor con la presión de la mano.

6 Cargue el menú de control del instrumento.

7 Presione ligeramente el panel lateral para asegurar un sellado correcto.

La bomba delantera emitirá un sonido de borboteo. Este sonido debería detenerse en el plazo de 1 minuto. Si continúa el sonido, significa que existe una *gran* fuga de aire en el sistema, probablemente en el sellado de la placa lateral, la tuerca de la columna de la interfase o en la válvula de purga.

8 Una vez establecida la comunicación con el PC, haga clic en **OK**. Tras 10 a 15 minutos la bomba de difusión debería estar caliente o la velocidad de la bomba turbo debería subir hasta el 80%. La bomba turbo acabará alcanzando por lo menos el 95%.

PRECAUCIÓN Si no se cumplen estas condiciones, la bomba delantera se apagará. A continuación, debe apagar el MSD y volver a encenderlo. Si el MSD no bombea correctamente, consulte la ayuda en línea para obtener información sobre diagnóstico de las fugas de aire y otros problemas con el vacío.

9 Cuando se le indique, encienda el calentador de la interfase GC/MSD y el horno del GC. Haga clic en **OK** cuando lo haya hecho. El software encenderá los calentadores de la fuente iónica y del filtro de masas (quad). Los valores de temperatura se almacenan en el fichero de autosintonía (*.u) actual.

PRECAUCIÓN No encienda ninguna de las zonas calentadas del GC hasta que se active el flujo del gas portador. La columna se dañará si se calienta sin flujo de gas portador.

10 Tras mostrarse el mensaje **Ok to run**, espere 2 horas para que el MSD alcance un equilibrio térmico.

PRECAUCIÓN Los datos adquiridos antes de que el MSD haya alcanzado el equilibrio térmico podrían no ser reproducibles.

PRECAUCIÓN Si utiliza un gas tóxico, por ejemplo amoniaco, apriete los tornillos de la placa lateral del MSD. Si los aprieta antes de alcanzar el vacío, puede deformar el sello y provocar fugas.

Purgar (apagar) el MSD

1. Si el MSD serie 5975 está equipado con un controlador de medida del vacío, en la ventana Tune and Vacuum Control seleccione **Vacuum/Turn Vacuum Gauge on/off.** Para el MSD serie 5973, asegúrese de que el controlador externo de medida iónico está apagado.
2. Apague el medidor.
3. Antes de purgar un MSD CI serie 5973, pulse [Gas Off]. De esta forma se interrumpe el flujo del gas reactivo y se cierra la válvula de aislamiento.

ADVERTENCIA **En un MSD CI 5973, el indicador luminoso Gas Off debe estar encendido cuando se está purgando el MSD.**

4. En la ventana Tune and Vacuum Control, seleccione **Vacuum Menu/Vent**. Siga las instrucciones indicadas.

ADVERTENCIA **Si está usando hidrógeno como gas portador, el flujo de este gas debe cerrarse antes de apagar la alimentación del MSD. Si la bomba delantera está cerrada, el hidrógeno se acumulará en el MSD y puede producirse una explosión. Lea el manual Medidas de seguridad para el hidrógeno (G3170-90010) antes de hacer funcionar el MSD con gas portador hidrógeno.**

PRECAUCIÓN Asegúrese de que el horno del GC y la interfase GC/MSD están fríos antes de cerrar el flujo de gas portador.

5 Cuando se le indique, apague el interruptor de alimentación del MSD.

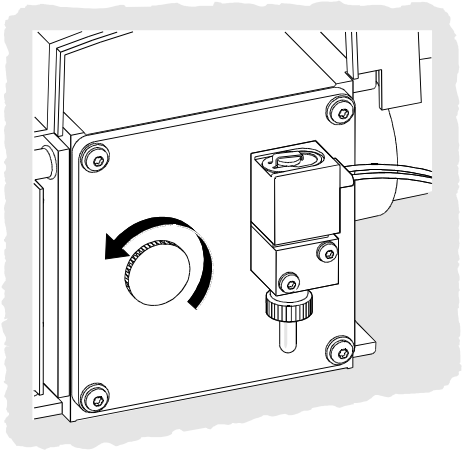
6 Desenchufe el cable de alimentación del MSD.

7 Retire la cubierta del analizador (serie 5973) o la tapa de la ventana de vista (serie 5975).

8 Gire hacia la izquierda el botón de la válvula de purga sólo tres cuartos del recorrido o hasta que oiga el sonido silbante del aire fluyendo en el interior de la cámara del analizador.



Válvula de purga 5975



Válvula de purga 5973

PRECAUCIÓN No gire demasiado el botón dado que la arandela puede salirse de la ranura. Asegúrese de volver a apretar el botón antes del bombeo.

ADVERTENCIA **Deje que el analizador se enfríe casi a temperatura ambiente antes de tocarlo.**

PRECAUCIÓN Use siempre los guantes limpios suministrados en el kit para manipular cualquier pieza que vaya dentro de la cámara del analizador.

Sintonizar el MSD

Para mantener un rendimiento óptimo, debe sintonizar el MSD de forma periódica. La sintonización es el proceso de ajuste de los parámetros del MSD para que el instrumento cumpla ciertos criterios de rendimiento. La frecuencia del ajuste viene determinada por la cantidad y tipo de muestras que analice, así como por la condición general del sistema.

NOTA Sintonice siempre el MSD con la misma temperatura del horno del GC y el mismo flujo de columna, y la misma temperatura del analizador que vaya a utilizar para la adquisición de los datos.

Guarde un registro de los informes de sintonía para poder comparar los sucesivos informes.

Sintonizar el MSD

En la ventana Instrument Control:

1 Seleccione el icono **Parámetros de sintonía** (muestra sólo los dos primeros menús del paso 2) o **View/Tune and Vacuum Control**.



2 En el menú Tune, elija una de las opciones siguientes en función del rendimiento del instrumento que necesite la aplicación.

- ❒ **Tune MSD**
  Activa la sensibilidad máxima en todo el rango de barrido.
- ❒ **QuickTune**
  Ajusta la anchura de pico, asignación de masa y abundancia sin cambiar los índices iónicos.
- ❒ **Autotune (Atune.U)**
  Logra una respuesta máxima en todo el rango de barrido.
- ❒ **Low Mass Autotune (Lomass.U)**
  Ajuste para el rango de masas bajas.
- ❒ **Standard Spectra Tune (Stune.U)**
  Genera una respuesta estándar en todo el rango de barrido. Esta opción puede reducir la sensibilidad.
- ❒ **DFTPP Tune (DFTPP.U)**
  Ajusta de forma específica para el método EPA 625.
- ❒ **BFB Tune (BFB.U)**
  Ajusta de forma específica para el método EPA 624.
- ❒ **Tune Wizard. . .**
  Muestra una serie de cuadros de diálogo que le permiten definir índices de abundancia y los criterios de sintonía. Se utiliza para la sintonización objetivo.
- ❒ **Air and Water Check**
  Genera una medida y un informe estandarizados de los niveles de aire (nitrógeno *m/z* 28) y agua (*m/z* 18) del sistema en relación a la masa 69 del PFTBA. Use este elemento para comprobar que no hay fugas. La abundancia de *m/z* 28 debería ser inferior que la de *m/z* 18, y ambas inferiores al 5% de *m/z* 69.
- ❒ **Tune Evaluation**
  Evalúa el fichero de sintonía actual.

3 Revise el informe de la sintonización.

4 Para ver el historial de los resultados de la sintonización, seleccione **File/View Tunes**.

Usar la sintonía manual

La sintonía manual le permite establecer de forma interactiva los parámetros del MSD, como los voltajes de las lentes y las masas de sintonización, en valores que satisfagan sus necesidades particulares de análisis. A menudo se puede obtener una mayor sensibilidad que con la sintonía automática.

La sintonía manual le permite establecer rampas para parámetros individuales y especificar el rango y el tamaño de paso de la rampa. Los resultados de la rampa se muestran con el valor óptimo para el parámetro claramente marcado en la representación.

Puede adquirir dos tipos de datos con la sintonía manual: barridos de perfil (representaciones de la abundancia y la forma de pico de las masas de sintonía) y barridos de espectro (la respuesta de la representación de los barridos en todo el rango de masas).

Consulte la ayuda en línea para obtener más detalles sobre la sintonía manual.

Adquirir datos

Configurar el GC para utilizarlo con el MSD.

En la ventana Instrument Control:

1. En el menú Instrument, seleccione **Inlet/Injection Types.** Elija la fuente de inyección apropiada y active la casilla de verificación **Use MS**. Haga clic en **OK**.
2. En el menú Instrument, elija **Edit GC Parameters**.
3. Haga clic en **Aux**. Verifique que está utilizando el canal auxiliar 2, que el calentador está encendido y a la temperatura deseada, y que ha seleccionado *MSD* como valor de Type.
4. Haga clic en **Columns**. Compruebe que el detector es *MSD* y que se ha seleccionado *Vacuum* como valor de Outlet psi. Haga clic en **OK**.

Inyectar una muestra con el inyector automático

En la ventana Instrument Control:

1. Coloque el vial del inyector automático con la muestra en la bandeja del inyector.
2. Haga clic en el **icono Run Method** o seleccione **Method/Run Method**.
3. Cuando se abra el cuadro Start Run, proporcione la información de la muestra:
   - ❒ Indique una ruta de datos única para la muestra.
   - ❒ Especifique un nombre de fichero único para la muestra.
   - ❒ Escriba el número de la posición del vial de la muestra en el campo **Vial**.
   - ❒ (Opcional) Rellene los campos **Operator Name**, **Sample Name** y **Misc Info** para documentar la inyección.
   - ❒ Asegúrese de que la opción *Data Acquisition* está seleccionada. Elija la opción **Data Analysis** si desea generar cualquiera de los informes especificados en el método.
4. Haga clic en **Run Method** para comenzar el análisis.

PRECAUCIÓN

No use **Start** del GC para comenzar un análisis con el inyector automático.

Inyectar una muestra manualmente

En la ventana Instrument Control:

1. En el menú Instrument, seleccione **Inlet/Injector Types**.
2. En el cuadro de diálogo Inlet and Injection Parameters, seleccione **Manual** como fuente de inyección.
3. En el teclado del GC, pulse [Prep Run]. Esto cancela el flujo de ahorro de gas, lleva el flujo de inyección a su valor establecido y cierra la válvula de purga (sólo para inyección sin división).
4. Elija **Method/Run Method**.

5 Cuando se abra el cuadro Start Run, proporcione la información de la muestra, como se indica a continuación:

- ❒ Indique una ruta de datos única para la muestra.
- ❒ Especifique un nombre de fichero único para la muestra.
- ❒ (Opcional) Rellene los campos **Operator Name**, **Sample Name** y **Misc Info** para documentar la inyección.
- ❒ Asegúrese de que la opción *Data Acquisition* está seleccionada.
- ❒ (Opcional) Elija la opción **Data Analysis** si desea generar cualquiera de los informes de análisis de datos especificados en el método.

6 Haga clic en **Run Method** para comenzar el análisis. Si las temperaturas son estables, se abre el cuadro Prepare To Inject. En caso contrario, se muestra el mensaje **Waiting for GC ready**.

7 Cuando las temperaturas del GC se hayan estabilizado (GC 6890: el indicador Pre Run permanece encendido en el GC; GC 6850: el indicador Not Ready está apagado), inyecte la muestra y pulse [Start] en el GC.

PRECAUCIÓN No inyecte antes de que el GC esté preparado. Esto provocaría resultados incoherentes.

Para editar todo el método

En la ventana Instrument Control, seleccione **Method/Edit Entire Method**. El cuadro de diálogo Edit Method se utiliza para seleccionar qué partes del método desea editar:

- Información del método
- Instrument/Acquisition. Se mostrarán todos los cuadros de diálogo del GC y MS correspondientes para su información.
- Análisis de datos

Al hacer clic en **OK**, se irán mostrando por orden los cuadros de diálogo de las secciones elegidas para que vaya editándolas.

Cuando se le pida que guarde el método, deberá especificar un nuevo nombre. Si se ha indicado una plantilla de informe personalizado para el tipo del informe, deberá especificar si desea o no guardar una copia del informes generado con el archivo de datos.

Para configurar una secuencia

La tabla Sample Log se usa para configurar una secuencia. Cada línea de la tabla contiene información sobre el análisis de una muestra (un vial, para ALS).

1. Si aún no está abierta la tabla Sample Log, seleccione **Sequence / Edit Sequence** o haga clic en el botón **Edit Sequence** de Instrument Control.
2. Haga clic en una línea vacía de la tabla. Después, haga clic en la flecha que hay en la casilla **Type** y elija el tipo de muestra que va a analizar.
3. Utilice el tabulador o el ratón para pasar a la casilla **Vial** y escriba el número de éste.
4. Pase a **Method** y escriba el nombre del método que se usará para la muestra actual (si desea consultar una lista de métodos, haga clic en el botón **?** de este campo).
5. Indique el nombre **Data File**, un nombre de **Sample** cualquier **Comment** y el **Expected Barcode**.
6. Pase a los demás campos que correspondan a su muestra.

NOTA Los campos que aparecen dependen del **Type** de muestra seleccionada.

7. Cuando termine, haga clic en **OK**.

Para añadir el contenido de otra secuencia a la actual, elija **Sequence/Additional Sequence Options...** y seleccione **Append Sequence**.

Analizar datos MS

Puede cargar un fichero de datos desde el **Navigation Panel** o seleccionando **Load Data File** en la ventana Data Analysis.

Cargar un fichero de datos

Para cargar un fichero de datos en Data Analysis:

1 Seleccione el icono **Cargar fichero de datos** o elija **Load Data File** en el menú File.



2 Seleccione un fichero de datos (haga doble clic en el nombre del fichero o escriba su nombre y haga clic en **OK**). El cromatograma del fichero de datos se carga y se muestra en la ventana [2].

PRECAUCIÓN Es necesario cargar un fichero de datos para realizar cualquiera de las tareas de esta sección.

Integrar un cromatograma

1 Si el integrador que desea usar no está actualmente seleccionado, abra el menú Chromatogram y haga clic en **Select Integrator**. Elija un integrador y haga clic en **OK**.

2 Seleccione **Chromatogram/Integrate**.

3 (Opcional) Elija **Chromatogram/Integration Results**. En la pantalla se muestra un informe con los resultados en una tabla. Cuando termine de ver los resultados, haga clic en **Close**.

Seleccionar un espectro

NOTA Si al hacer clic con el botón derecho en la ventana [1] o [2] se abre un menú, use el botón **Cambiar las acciones del ratón en Data Analysis** para conmutar entre los modos de clic con el botón derecho.

Haga doble clic con el botón *derecho* del ratón en el punto del tiempo que le interese del cromatograma. El espectro se muestra en la ventana [1].

Ampliar la imagen

1. Coloque el puntero en una esquina del área que desee ampliar en un cromatograma o espectro.
2. Mantenga pulsado el botón *izquierdo* mientras arrastra el ratón para seleccionar el área que desea ampliar.
3. Suelte el botón del ratón. El área seleccionada se amplía hasta llenar la ventana.

Reducir la imagen

1. Coloque el puntero del ratón en cualquier zona de la ventana ampliada.
2. Haga doble clic con el botón *izquierdo*.

Promediar espectros

1. Coloque el puntero en el cromatograma en el tiempo de inicio del rango que desea promediar.
2. Pulse el botón *derecho* mientras arrastra el ratón hasta el final del rango que desea promediar.
3. Suelte el botón del ratón. Los espectros del rango seleccionado se promedian y el espectro promediado se muestra en la ventana [1].

Añadir dos espectros

1 Seleccione un espectro (haga doble clic con el botón *derecho* en el cromatograma).

2 Seleccione un segundo espectro (haga doble clic con el botón *derecho* en el cromatograma).

3 Elija **Spectrum/Add**. Los dos espectros se añaden y el espectro resultante se muestra en la ventana [1].

Restar dos espectros

1 Seleccione un espectro (haga doble clic con el botón *derecho* en el cromatograma).

2 Seleccione el espectro que desea restar (haga doble clic con el botón *derecho* en el cromatograma).

3 Elija **Spectrum/Subtract**.

El espectro seleccionado en el paso 2 se resta del elegido en el paso 1 y el espectro resultante aparece en la ventana [1].

Restar dos espectros de fondo

1 Seleccione un espectro o promedie un rango de espectros para restar en el fichero de datos.

2 Elija **File/Subtract Background (BSB)**. El sistema realiza las siguientes tareas:

- El espectro seleccionado se resta de todos los barridos del fichero de datos actual.
- Los datos restados se almacenan en un subdirectorio BSB en el mismo directorio que el fichero de datos.
- El fichero con los datos restados se convierte en el fichero de datos activo y se muestra en la ventana [2].

Activar y desactivar los menús ampliados

En la pantalla Data Analysis, seleccione **Options/Show Extended Menus**. Las opciones de los menús adicionales se incluirán en las listas desplegables existentes.

Para mostrar los menús de macros

En la pantalla Data Analysis, seleccione **Options/Show Macro Menus**. En la barra de selección de menús se mostrará la opción **Macro Menus** .

Para activar la pantalla de varios ficheros de datos

En la ventana Data Analysis, seleccione **View/Analyze Multiple Data Files...**. De esta forma podrá ver hasta 9 cromatogramas a la vez. Para regresar a la pantalla Data Analysis normal, elija **View/Return to Data Analysis**.

Para activar la pantalla de varios espectros

En la ventana Data Analysis, seleccione **View/Analyze Multiple Spectra...**. De esta forma podrá ver varios espectros simultáneamente. Para regresar a la pantalla normal, elija **View/Return to Data Analysis**.

Usar librerías espectrales

Seleccionar una librería

1. En Data Analysis, seleccione **Spectrum/Select Library**.
2. En el cuadro de diálogo **Library Search Parameters** escriba el nombre de la librería en la primera línea.
   Puede especificar un máximo de dos librerías de búsqueda adicionales. La búsqueda en estas librerías adicionales depende de que el compuesto que se está buscando encaje con la calidad especificada.

Integrar y buscar picos

Utilice el procedimiento siguiente para integrar un cromatograma iónico total (TIC) y generar automáticamente un informe de la búsqueda en la librería para cada pico detectado.

1. En Data Analysis, cargue un fichero de datos. Se muestra entonces el TIC.
2. Seleccione **Spectrum/Library Search Report**.

3 Cuando se abra el cuadro de diálogo **Library Search Report Options**, elija las opciones que desee para el informe de búsqueda en librería:

- Seleccione **Summary** o **Detailed** para determinar el formato del informe.
- Elija uno o varios destinos (**Screen**, **Printer** y **File**).
- Seleccione un **Integration Parameter File** (deje en blanco el campo para integrar automáticamente usando el integrador de la ChemStation GC/MSD).
- Seleccione el espectro de cada pico que debe utilizarse (**Apex, Apex - Start of Peak, Apex - Background at time o Peak Average**).

4 Haga clic en **OK** para comenzar la búsqueda.

El cromatograma se integra y se busca un espectro de cada pico. Los resultados de la integración se muestran en la pantalla. El informe de búsqueda en librería se envía a los destinos seleccionados en el paso 3.

5 Seleccione **Chromatogram/Integration Results** para ver una tabla con los resultados de la integración.

Buscar un solo espectro

1 En Data Analysis, cargue un fichero de datos.

2 Seleccione un **espectro**.

3 Haga doble clic con el botón derecho del ratón en la ventana que contiene el espectro.

NOTA Si al hacer clic con el botón derecho en la ventana [1] o [2] se abre un menú, use el botón **Switch Data Analysis Mouse Actions** para conmutar entre los modos de clic con el botón derecho.

Cuando termina la búsqueda, se muestran los resultados en la pantalla. Se indicará el espectro del desconocido, el espectro de referencia que seleccione en la lista de coincidencias y, si está disponible, la estructura química del compuesto de referencia.

4 Para ver otros datos de los espectros:

- Haga clic en otro compuesto de la lista de coincidencias para mostrar un espectro de referencia distinto.
- Seleccione la casilla de verificación **Difference** para mostrar las diferencias entre el desconocido y los espectros de referencia.

5 Para ver otra información:

- Haga clic en **Statistics** para mostrar información sobre la calidad de cada coincidencia encontrada en la lista.
- Haga clic en **Text** para ver la información de la cabecera almacenada en la librería sobre el espectro de referencia activo.

6 Haga clic en **Print** para imprimir una copia de los espectros mostrados.

7 Haga clic en **Done** para borrar de la pantalla los resultados de la búsqueda en la librería.

Utilizar el bloqueo del tiempo de retención

El bloqueo del tiempo de retención (RTL) es un procedimiento que evalúa las características de un método concreto (columna, valores de flujo, parámetros del horno) para impedir que se produzcan cambios en la columna que normalmente influirían en los tiempos de retención. El procedimiento implica recoger datos de un compuesto (cuyo tiempo de retención deseado se conoce) a varias presiones del inyector en torno al valor del método actual (–20%, –10%, nominal, +10%, +20%). Los cinco análisis que se obtienen se evalúan a continuación y se genera una curva de presión/tiempo de retención para caracterizar ese instrumento concreto. Sobre la base de la curva, se puede calcular y almacenar una presión pronosticada que haga que el compuesto de bloqueo eluya a la hora deseada para que el método se ejecute a dicha presión.

Bloquear un método MS

1. En Instrument Control, cargue el método que desea bloquear. Modifique los parámetros del método, si es necesario.
2. Para todas las inyecciones con el inyector automático, ponga el vial en la posición 1.
3. Seleccione **Method/Acquire RTLock Calibration Data**. De esta forma se inicia la recogida de ficheros de calibración RTL.
4. Se evaluará la presión nominal para el rango de calibración de –20%, –10%, +10% y +20%, y se realizarán cinco análisis de manera automática. El sistema le indicará que va a realizar los cinco análisis y si existe algún dato previo de calibración, también se lo notificará. Los cinco ficheros de datos se almacenarán en el directorio del método en una carpeta llamada RTLOCK con los nombres de ficheros de datos RTLOCK1 - RTLOCK5.
5. Después de la recogida de datos, se iniciará una nueva sesión de análisis de datos y se cargará el análisis nominal (RTLOCK3.D). Seleccione el pico (haga clic y arrastre pulsando el botón derecho del ratón) que desea utilizar para los cálculos de calibración RTL.
6. Se mostrará el espectro del pico seleccionado. Haga clic en **Yes** para que el software localice automáticamente el pico del compuesto de bloqueo en los cuatro análisis restantes. A continuación, el software realizará comparaciones espectrales y determinaciones de ajustes de curva. Se mostrarán entonces los cinco picos seleccionados.
7. Se muestra la ecuación de la curva (basada en el tiempo de retención en relación con los valores de presión) y el sistema le pregunta si desea continuar. Haga clic en **Yes**.
8. A continuación, introduzca el tiempo de retención de bloqueo que desee utilizar y haga clic en **OK**.
9. Haga clic en **Yes** para guardar la información de presión de bloqueo en el método. Escriba el nombre del compuesto de bloqueo que desee utilizar y haga clic en **OK**.

10 A continuación, tendrá la opción de eliminar los ficheros de datos de calibración (RTLOCK1.D - RTLOCK5.D). Elija **Yes** o **No**. El método queda bloqueado.

Siempre que cargue un método bloqueado en Instrument Control, la barra de título indicará que el método está bloqueado y qué compuesto se ha utilizado para el bloqueo. La presión (solo para instrumentos en línea) se establecerá en la presión bloqueada.

NOTA Cuando se ejecuta un método bloqueado, la presión cambia al valor de presión bloqueada AUNQUE haya introducido cambios a través del teclado del GC o desde Instrument Control.

Programa de Mantenimiento

Los manuales del hardware suministrados con el sistema describen tareas detalladas de mantenimiento. La frecuencia con la que se han de efectuar dichas tareas puede variar de un sistema a otro. Lleve un registro de mantenimiento.

Diario

- ❒ Revise y, si es necesario, reemplace el septum.
- ❒ Compruebe la hermeticidad de los liners del puerto de inyección.
- ❒ Compruebe que las tuercas de la columna están correctamente apretadas.

Semanal

- ❒ Compruebe el nivel de fluido de la bomba delantera.
- ❒ Cambie los liners y las arandelas del inyector.

Cada mes

- ❒ Limpie la trampa de la línea de salida del inyector con/sin división.

- ❒ Compruebe las fugas (conexiones del inyector, columna).

Cada 3 meses

- ❒ Sustituya los cilindros de gas (cuando bajen de 500 psig).

Cada 6 meses

- ❒ Sustituya el fluido de la bomba delantera.
- ❒ Compruebe y, si es necesario, llene el vial de calibración.

Anual

- ❒ Revise y, si es necesario, cambie el fluido de la bomba de difusión.
- ❒ Reacondicione o sustituya las trampas internas y externas y los filtros químicos del GC.

Según sea necesario

- ❒ Sintonice el MSD.
- ❒ Limpie la fuente de iones.
- ❒ Cambie la trampa del gas portador.
- ❒ Cambie las piezas desgastadas (filamentos, EM, etc.).
- ❒ Sustituya la columna.
- ❒ Lubrique los sellos.

Advertencias de seguridad

ADVERTENCIA

No realice tareas de mantenimiento con el MSD encendido o conectado a la fuente de alimentación a menos que así se indique específicamente en la documentación suministrada con el MSD.

La interfase GC/MSD puede estar encendida y a una temperatura peligrosamente alta aunque el MSD esté apagado. Tras apagarla, la interfase GC/MSD tarda mucho en enfriarse. Asegúrese de que se han enfriado todas las piezas antes de tocarlas.

Tenga cuidado cuando trabaje por detrás del GC. Durante los ciclos de enfriamiento, el GC emite aire caliente causante de quemaduras.

Si analiza productos químicos tóxicos o utiliza disolventes tóxicos, emplee un tubo para dirigir el escape de la bomba delantera fuera del laboratorio. La trampa de aceite que se suministra con las bombas estándar detiene solamente el aceite de la bomba delantera, no atrapa ni filtra las sustancias químicas tóxicas.

Utilice guantes resistentes a los productos químicos y gafas de seguridad al cambiar el fluido de la bomba. Evite tocar el fluido.

El aislamiento de inyectores, detectores, caja de válvulas y las caperuzas de aislamiento es de fibras de cerámica refractaria (RCF). No inhale partículas de este material. Ventile la zona de trabajo, utilice mangas largas, guantes, gafas de seguridad y un respirador desechable. Elimine el aislamiento en una bolsa de plástico precintada. Lávese las manos con jabón y agua fría después de manipular RFC.

Consejos de uso

- ❒ Haga *regularmente* copias de seguridad de los datos y los métodos.
- ❒ Asegúrese de que el fichero de sintonía que utiliza es apropiado para las muestras.
- ❒ Guarde los informes de sintonía en un bloc como referencia para el futuro.
- ❒ Lleve a cabo el mantenimiento del sistema tal y como indica el programa de mantenimiento de la documentación del hardware del GC y MSD. Lleve un registro de todo el mantenimiento realizado.
- ❒ Cuando purgue el MSD, utilice el GC enfriado para realizar tareas de mantenimiento como la sustitución del inyector, los septa, etc.
- ❒ Después de bombear, espere *al menos 2 horas* para que el MSD alcance el equilibrio térmico antes de sintonizar o adquirir datos.
- ❒ La sensibilidad óptima se produce generalmente a velocidades del flujo de columna de 1,2 ml/minuto o menos.
- ❒ Cuando inyecte volúmenes mayores de un microlitro, use el modo de inyección a pulsos sin división y aumente la temperatura inicial del horno de 10 a 20 °C.
- ❒ Para **i**yecciones sin división, el modo a pulsos sin división proporciona una transferencia de muestra más cuantitativa a la columna. Es normal una presión de pulsos dos veces superior a la presión de inyección inicial.
- ❒ La selección del **modo Constant Flow** proporcionará en la mayoría de los casos la separación más eficaz.
- ❒ Para una columna nueva, compruebe que las tuercas de la columna siguen estando apretadas después de los primeros ciclos de temperatura del horno.

- Utilice las teclas [Config Status] del teclado del GC 6890 para establecer los tres elementos de presentación más importantes para usted (**tiempo restante, temperatura del horno**, etc.). En los sucesivo, estos elementos siempre serán visibles al margen de la ventana de la ChemStation GC/MSD que esté situada encima de las demás.
- Lave y rellene los viales de lavado del inyector automático. No agregue más disolvente a un vial medio lleno.
- Utilice la tabla siguiente como guía para usar los modos de adquisición SIM y/o Scan.

Tarea	Modo
Analizar una mezcla con componentes desconocidos.	Scan o Scan y SIM
Analizar una mezcla con componentes conocidos en cantidades desconocidas (cuantificar).	Scan o SIM o Scan y SIM
Identificar la presencia de unos cuantos componentes conocidos a bajos niveles en una mezcla.	SIM

- Cuando elija masas para SIM, use la masa exacta anotada en el informe Tabulation, en lugar de la masa nominal anotada en la presentación del espectro. Esto proporciona datos más precisos.
- Cuando haga análisis SIM, utilice el modo de baja resolución a no ser que intente determinar las relaciones de masas separadas por 1 uma. Una resolución baja proporciona sensibilidad y repetitividad máximas.
- Elija el rango de barrido más estrecho pero que siga generando buenos resultados de búsqueda en librería. Ello permite más espectros por pico y una mejor cuantificación.

Mensajes de error y diagnósticos

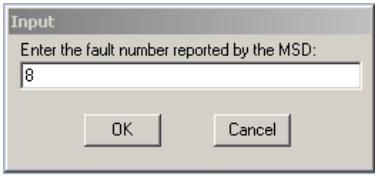
Mensajes de error

A veces, un problema en el MSD hará que aparezca un mensaje de error en el software de la ChemStation GC/MSD. Algunos mensajes de error aparecen sólo durante la sintonía. Otros mensajes aparecerán durante la sintonía o el control del instrumento.

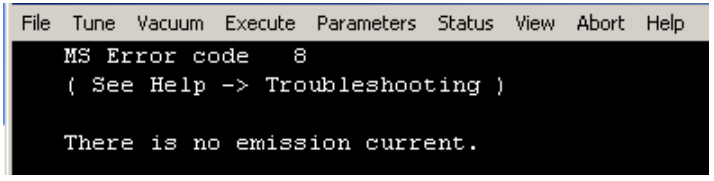
A veces, sólo aparecerá un número en vez de un mensaje. Este número puede representar uno o varios mensajes de error.

Para traducir un número a un mensaje de error:

1. Anote el número.
2. En Instrument Control, seleccione **View/Tune and Vacuum Control**.
3. Elija **Status/MS Error Codes**.
4. Escriba el número del error en el cuadro proporcionado a tal efecto y haga clic en **OK**.



Se mostrará entonces el mensaje de error correspondiente.



Consejos para el diagnóstico

Error en la LAN del MSD

El MSD está encendido pero el estado parpadea mostrando "Server not found! Check LAN connection"

Esto es normal cuando se enciende el MSD. Significa que la ChemStation GC/MSD aún no ha establecido contacto con el MSD. Si continúa el parpadeo después de iniciar el bombeo:

- Un fallo temporal de corriente ha interrumpido las comunicaciones.
- Mala conexión entre el MSD y la ChemStation GC/MSD y/o el servicio Agilent Bootp y/o el switch/hub.
- Las direcciones MAC e IP del MSD no están configuradas correctamente en el servicio Agilent Bootp para la LAN.

Línea de base creciente

- Sangrado de columna
- Otra contaminación

Presión en el medidor de vacío o delantera demasiado alta

- Excesivo flujo de columna.
- Fuga de aire
- Nivel de fluido de la bomba de difusión demasiado bajo
- Fluido de la bomba de difusión contaminado
- Nivel de aceite de la bomba delantera demasiado bajo
- Aceite de la bomba delantera contaminado
- Manguito delantero reducido (esto haría que la presión del medidor de vacío fuera demasiado alta y la presión delantera demasiado baja)

Fondo alto en los espectros de masas

- Fuga de aire
- Presión en el medidor de vacío o delantera demasiado alta
- Otra contaminación

Iones a *m/z* 18, 28, 32 y 44

- Detector purgado recientemente (aire y agua residuales)
- Fuga de aire

Faltan los isótopos o las relaciones isotópicas son incorrectas

- Sintonización incorrecta
- Fuente de iones sucia
- Fondo alto
- Voltaje del multiplicador de electrones demasiado alto
- Voltaje del repulsor demasiado alto
- Velocidad de barrido alta (modo Scan)
- Tiempo de espera bajo (modo SIM)
- Picos demasiado anchos o demasiado estrechos
- Orden invertido de los cables del repulsor y del enfoque iónico

No hay picos

- Concentración de la muestra incorrecta
- No hay analitos presentes
- Falta la jeringa o está instalada incorrectamente (sólo ALS)
- Vial de muestra vacío
- Inyección realizada en modo con división en vez de en modo sin división

Picos en cola

- Puntos activos en la ruta de la muestra
- Inyección demasiado grande
- Puerto de inyección demasiado frío
- Flujo de columna demasiado bajo
- Interfase GC/MSD o fuente iónica demasiado fría

Picos con máximos planos

- Retardo del disolvente demasiado corto
- Escala de visualización incorrecta
- Inyección demasiado grande
- Voltaje del multiplicador de electrones demasiado alto

Picos con máximos divididos

- Mala técnica de inyección
- Inyección demasiado grande

Anchuras de picos incoherentes

- Sintonización incorrecta
- No hay PFTBA en el vial de calibración
- Fallo de la válvula de calibración
- Fuente de iones sucia
- Multiplicador de electrones desgastado
- El MSD no ha tenido tiempo suficiente para alcanzar el equilibrio térmico
- Variaciones grandes en la temperatura del laboratorio

Repetitividad deficiente

- Aguja de la jeringa sucia
- Fuga en el inyector
- El liner del puerto de inyección no coincide con el tamaño de la inyección
- Conexiones de columna flojas
- Variaciones en la presión, el flujo de la columna y la temperatura
- Fuente de iones sucia
- Conexiones flojas en el analizador
- Bucle de tierra

Escasa sensibilidad

- Sintonización incorrecta
- El fichero de sintonía no coincide con el tipo de análisis
- Temperaturas incorrectas
- Concentración de la muestra incorrecta
- Fuga en el inyector
- Relación de división incorrecta
- Tiempo de purga en el modo sin división demasiado corto
- Presión excesiva en el MSD
- Fuente de iones sucia
- Fuga de aire
- El detector no está funcionando correctamente
- Operación pobre del filamento
- Polaridad del filtro de masas incorrecta

Deriva del tiempo de retención (RT)

- La columna se ha acortado (RT menor)
- Columna antigua (RT menor)

- Puntos activos en la ruta de la muestra (RT mayor)
- Flujo de columna reducido (RT mayor)
- Fuga en el puerto de inyección (RT mayor)
- Cambios en la temperatura inicial del horno (ascendente = RT menor,
  descendente = RT mayor)

Consulte la sección Troubleshooting the MSD de la ayuda en línea para obtener información más detallada.

2
Familiarización con la cuantificación

Cuantificación 58
Contenido de este capítulo 58
Introducción 58
¿Cómo funciona la cuantificación en la ChemStation GC/MSD? 58
Base de datos de cuantificación 61
Introducción 61
¿Cómo configuro manualmente una base de datos de cuantificación? 63
¿Cómo funciona AutoQuant Setup? 68
Ejercicio práctico – Utilización de AutoQuant Setup 69
Procedimiento: Uso de AutoQuant Setup para crear una base de datos de cuantificación 70

Cuantificación

Contenido de este capítulo

Este capítulo le guía por los pasos básicos de la creación de una base de datos de cuantificación. Estos pasos son el punto de partida para familiarizarse con el software.

Cuando se sienta cómodo, pruebe con el ejercicio práctico del final del capítulo y experimente luego con la creación de una base de datos de cuantificación usando sus propios ficheros de datos. Utilice la ayuda en línea para obtener más detalles sobre estas funciones y cómo funcionan.

Introducción

¿Qué hace la cuantificación?

La cuantificación identifica la cantidad de un compuesto que contiene una muestra.

¿Cuándo se realiza la cuantificación?

La cuantificación se efectúa durante la última etapa del análisis de una muestra (una vez identificado el compuesto).

¿Cómo se lleva a cabo la cuantificación?

La cuantificación se realiza comparando la respuesta de una cantidad desconocida de compuesto (los datos extraídos de un análisis) con la respuesta de una cantidad medida de dicho compuesto (que se almacena en la base de datos de cuantificación).

La base de datos de cuantificación se tratará más adelante en este documento.

¿Cómo funciona la cuantificación en la ChemStation GC/MSD?

A continuación describimos, en términos generales, la forma en la que la ChemStation determina la cantidad de un compuesto que hay en una muestra. Se trata de un proceso formado por dos etapas.

1ª Etapa -- Adquisición de datos

La primera etapa del proceso conlleva la *adquisición de datos*, brevemente descrita a continuación.

Cuando coloca una muestra desconocida en el GC/MSD, en general, la muestra se calienta, se presuriza, se separa en componentes individuales y, por último, se pasa por un detector de la ChemStation. Todo ello se lleva a cabo de acuerdo con el método que especifique.

El detector ve el patrón exclusivo de cada compuesto y la ChemStation lo compara entonces con patrones conocidos, almacenados en la librería asociada con el método. Si hay alguna coincidencia, la ChemStation informa de ello.

Así, si el patrón de uno de los compuestos encontrado en la muestra coincide con el patrón de xxx almacenado en la librería asociada con el método, la ChemStation puede informar de que ha encontrado xxx en la muestra.

La creación de la etapa de adquisición de datos del método es un proceso sumamente especializado y queda fuera del alcance de este documento. Consulte la ayuda en línea para obtener información detallada sobre la creación de métodos.

En el ejercicio práctico del final del capítulo, utilizaremos el método por defecto, un archivo de datos y una librería de espectros de ejemplo que se suministran con la ChemStation para demostrar cómo funciona AutoQuant Setup.

2ª Etapa -- Cuantificación de datos

La segunda etapa del proceso consiste en encontrar la cantidad de compuesto que contiene la muestra. Se trata de la etapa de *cuantificación de datos* del proceso, que describiremos brevemente a continuación, y se detalla en mayor medida en Ejercicio práctico – Utilización de AutoQuant Setup en la página 69.

Para determinar la cantidad de un compuesto que hay en la muestra, la ChemStation debe ser capaz de comparar lo que encuentra (la cantidad desconocida de xxx) con una cantidad conocida de xxx, de manera que pueda establecer una relación y darle una respuesta.

Éste es el punto en el que entra en juego la base de datos de cuantificación.

Mientras que la librería almacena patrones de compuestos conocidos, la base de datos de cuantificación, además de los patrones, también almacena detalles adicionales, como:

- La respuesta del compuesto a cantidades específicas (por ejemplo, 10 ppb)
- El ión objetivo del compuesto
- Los iones cualificadores del ión objetivo

De esta forma, cuando el software *identifica* el compuesto (comparándolo con la librería), puede definir la *cantidad* que hay comparando la respuesta del instrumento que encontró en la muestra desconocida con la respuesta almacenada en la base de datos de cuantificación.

Por ejemplo, si la entrada de la base de datos representa 10 ppb y la cantidad encontrada en la muestra es el doble, debe ser 20 ppb.

NOTA

Ésta es una versión muy simplificada del proceso. No obstante, esta explicación tiene como único objetivo transmitir el concepto general de adquisición y cuantificación de datos, no lo detalles específicos de cómo se hace.

Para configurar la base de datos, consulte Ejercicio práctico – Utilización de AutoQuant Setup en la página 69.

Base de datos de cuantificación

Introducción

¿Qué es una base de datos de cuantificación?

La base de datos de cuantificación enumera los detalles significativos de cada compuesto que busca.

¿Qué tipo de datos necesita la base de datos de cuantificación?

Para cada compuesto que desee cuantificar, la base de datos de cuantificación debería incluir:

- Una entrada que identifique el compuesto que busca, incluyendo detalles como:
  - Tiempo de retención
  - Parámetros de cuantificación
  - Criterio de selección de identificación
  - Método para el cálculo de las relaciones de iones cualificadores
  - Rango aceptable para la respuesta relativa
  - Tratamiento matemático aplicado a los datos de calibración para un compuesto
  - Datos usados en la curva de calibración
- Una entrada que identifique el ión objetivo (normalmente el ión pico base) del compuesto que está buscado.
- Dos o más entradas para iones que cualifiquen aún más la presencia del compuesto. (Por ejemplo, estos iones siempre aparecen en el ión pico del compuesto y siempre con la misma relación.)
- Cualquier patrón interno que vaya a usar.

Esto parece complicado pero AutoQuant Setup puede identificar estos iones automáticamente. Consulte ¿Cómo utilizo AutoQuant para configurar una base de datos de cuantificación? en la página 66 para obtener detalles sobre su funcionamiento.

¿Qué tamaño tiene la base de datos de cuantificación?

Para cuantificar un compuesto individual, la base de datos podría estar formada por tan solo tres entradas:

- El ión pico base del compuesto
- Dos iones adicionales que cualifiquen la presencia de ese ión pico

Una entrada adicional opcional por la que optan muchos usuarios es un patrón interno.

El tamaño de la base de datos de cuantificación aumentará de acuerdo con el número de compuestos objetivo que desee cuantificar y con la cantidad de datos definidos en la curva de calibración.

¿Cómo se crea una base de datos de cuantificación?

Existen dos formas de añadir compuestos a la base de datos de cuantificación:

- Manualmente
- Semiautomáticamente usando AutoQuant Setup

Ambos se resumen a continuación.

¿Cómo configuro manualmente una base de datos de cuantificación?

Esta sección ofrece una visión general de los pasos necesarios para configurar una base de datos de cuantificación de forma manual.

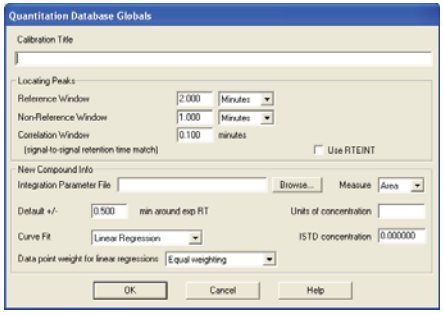
La creación manual de una base de datos de cuantificación requiere que los usuarios hagan una inspección visual del cromatograma y que seleccionen individualmente cada compuesto, ión objetivo e iones de cuantificación de interés, les asignen un nombre y los guarden luego en la base de datos de cuantificación. (Esto corresponde a los pasos 2 a 8 de Descripción general de la configuración manual de una base de datos de cuantificación en la página 64.)

Tras las explicaciones sobre la configuración manual de una base de datos de cuantificación, encontrará una sección sobre su configuración con AutoQuant Setup. AutoQuant Setup es un proceso semiautomático en el que el software revisa el cromatograma y selecciona los compuestos, iones objetivo e iones cualificadores en función de su abundancia y de la librería que haya especificado.

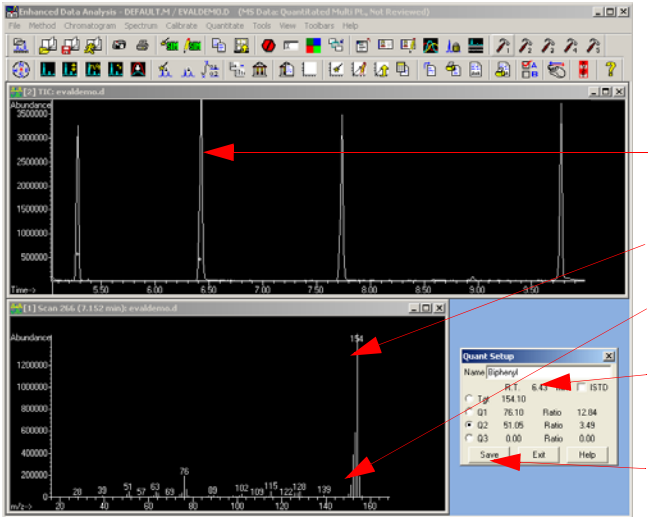
De nuevo, las dos secciones siguientes solo incluyen información general. Consulte Ejercicio práctico – Utilización de AutoQuant Setup en la página 69 para obtener instrucciones detalladas sobre la configuración de una base de datos de cuantificación usando AutoQuant Setup.

Descripción general de la configuración manual de una base de datos de cuantificación

Para configurar manualmente una base de datos de cuantificación, debe seguir este proceso general.



1 Cargue un fichero de datos que contenga un patrón medido del compuesto que desea calibrar e introduzca información común para todos los compuestos que se listarán en la página Quantitation Globals de la base de datos de cuantificación, y haga clic en **OK** cuando termine. (Seleccione **Calibrate/Set Up Quantitation...** para acceder a la página **Quantitation Database Globals**).



2 Revise manualmente el cromatograma generado por el fichero de datos de la muestra medida.

3 Seleccione cada compuesto haciendo clic en su pico en el cromatograma.

4 En el espectro mostrado, elija un ión objetivo**.**

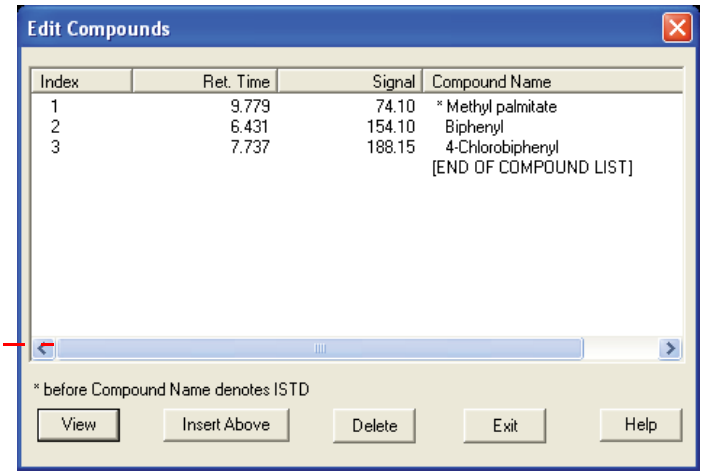
5 Seleccione iones cualificadores para este compuesto.

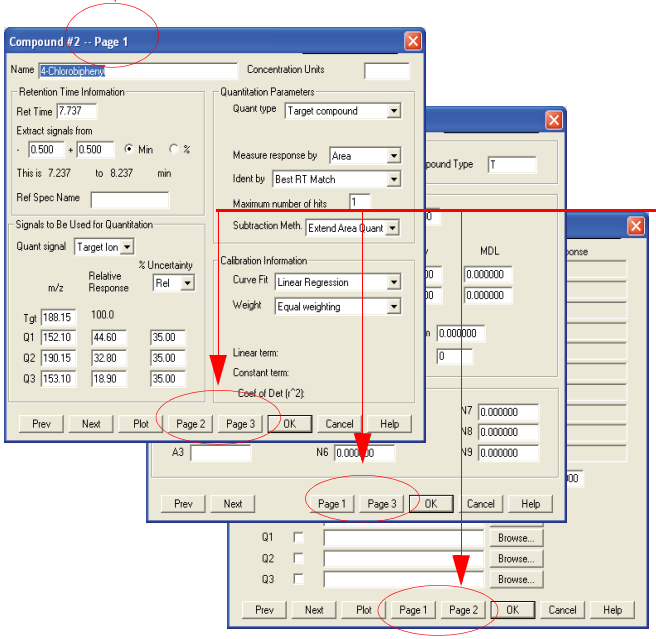
6 Asigne un nombre al compuesto y si éste es su patrón interno, marque la casilla para identificarlo como tal.

7 Guarde el perfil espectral del compuesto en la base de datos de cuantificación.

8 Repita los pasos 2 a 7 para cada compuesto que desee añadir a la base de datos de cuantificación.

9 Una vez añadidos todos los compuestos, seleccione **Calibrate/Edit Compound...** para ver una lista completa de las entradas que ha hecho en la base de datos (en la pantalla **Edit Compounds**).





10 En la pantalla **Edit Compounds**, puede seleccionar cualquier compuesto y hacer clic en **View** para abrir la primera página de datos guardada para el compuesto en cuestión. Hay tres páginas de información para cada compuesto, almacenadas como página 1, 2 y 3 en el registro de la base de datos de cuantificación.

Use los botones de las páginas para cambiar entre estas tres pantallas.

La información espectral y la que ha introducido en la pantalla Globals se transfiere a estas páginas.

Para terminar el proceso, actualice

manualmente las pantallas del compuesto (páginas 1, 2 y 3) de cada entrada de la base de datos de cuantificación.

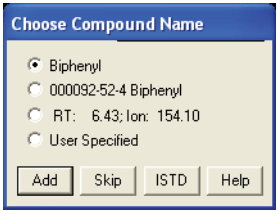
¿Cómo utilizo AutoQuant para configurar una base de datos de cuantificación?

En el proceso manual, tuvo que revisar manualmente el cromatograma y seleccionar, asignar un nombre y guardar cada compuesto e ión para incluirlos en la base de datos de cuantificación. Sin embargo, AutoQuant Setup es un proceso semiautomático en el que el software revisa el fichero de datos e identifica automáticamente los compuestos, iones objetivo e iones cualificadores en función de su abundancia y de la librería que haya especificado.

Descripción general de la configuración de una base de datos de cuantificación usando AutoQuant

Para crear una base de datos de cuantificación usando AutoQuant Setup, debe seguir este proceso general.

1. El primer paso es como el de la creación manual de la base de datos. Consulte Descripción general de la configuración manual de una base de datos de cuantificación en la página 64 para obtener detalles al respecto.
2. Los pasos 2 a 8 del proceso manual exigen la selección manual de compuestos e iones. Al usar AutoQuant, no obstante, estos pasos son automáticos, como se describe a continuación. Tras rellenar la pantalla **Database Globals** y elegir **OK** (en el paso 1), el software comienza la búsqueda de picos significativos en el fichero de datos. Para cada pico que encuentra, compara los datos con la librería especificada y muestra el compuesto en una pantalla similar a ésta.

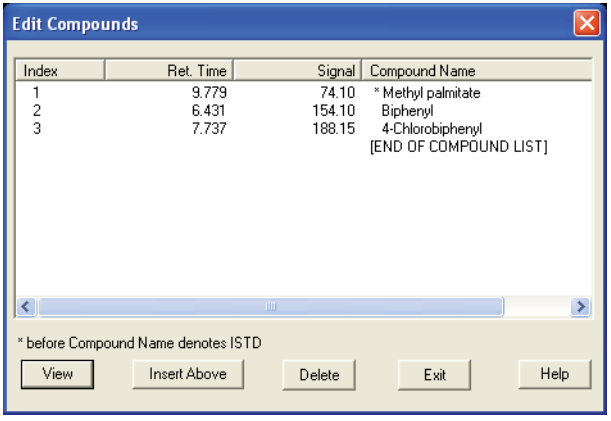


En esta pantalla:

Add	Añade este *compuesto*, su *ión objetivo* y *tres iones cualificadores* a la base de datos de cuantificación.
Skip	Obliga al software a mostrar el siguiente compuesto que encontró en el fichero de datos.
ISTD	Añade este compuesto a la base de datos de cuantificación y lo identifica como patrón interno.

NOTA ISTD debe preceder a los compuestos, etc., y se indica con un asterisco en la lista de entradas.

3 Una vez presentados todos los compuestos encontrados en el fichero de datos, verá **Do you want to Quantitate Now? Yes** abre una pantalla de calibración y luego la pantalla **Edit Compound**, en la que puede ver la base de datos de cuantificación terminada (equivale al paso 9 del proceso manual).



En la pantalla **Edit Compounds** puede seleccionar cualquier compuesto y elegir **View** para mostrar la primera página de datos guardada para el compuesto, exactamente como se describe en el paso 10 del proceso manual.

¿Cómo funciona AutoQuant Setup?

AutoQuant Setup identifica los compuestos de su fichero de datos usando la librería espectral que usted especifique y elige el ión objetivo y los iones cualificadores de cada compuesto de acuerdo con su abundancia en el compuesto en cuestión. Si muestra su acuerdo con las elecciones hechas, AutoQuant Setup completa automáticamente las entradas necesarias en la base de datos de cuantificación.

Prerrequisito: Para usar AutoQuant Setup, debe disponer de una librería que contenga los compuestos objetivo, y el patrón de calibración no puede incluir compuestos que eluyen simultáneamente.

Ejercicio práctico – Utilización de AutoQuant Setup

Este ejercicio le guiará por los pasos necesarios para crear una base de datos de cuantificación usando AutoQuant Setup. Este ejercicio pretende ilustrar la rapidez con la que puede crear y utilizar una base de datos de cuantificación con AutoQuant Setup. El proceso tardará unos 5 minutos.

Durante este ejercicio, creará un método con una base de datos de cuantificación capaz de identificar y cuantificar bifenilo, clorobifenilo y metilpalmitato.

Para ello, tendrá que hacer lo siguiente:

1. Cargar el método por defecto **DEFAULT.M** suministrado con la ChemStation.
2. Cargar el fichero de datos de ejemplo **EVALDEMO.D** suministrado con la ChemStation.
3. Usar la librería espectral de ejemplo **DEMO.L** suministrada con la ChemStation.
4. Usar AutoQuant Setup para crear una base de datos de cuantificación con los siguientes compuestos:
   - Dodecano
   - Bifenilo
   - Clorobifenilo
   - Metilpalmitato

El método y la base de datos creadas serán capaces de identificar y cuantificar bifenilo, clorobifenilo y palmitato de metilo.

Procedimiento: Uso de AutoQuant Setup para crear una base de datos de cuantificación

1. Haga una copia de **DEFAULT.M** y **EVALDEMO.D** antes de usarlos en este ejercicio.
2. En *Data Analysis,* cargue dos ficheros:

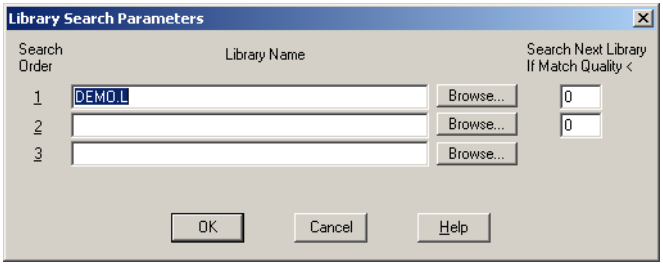
   Método de ejemplo **C:\MSDCHEM\1\METHODS\DEFAULT.M**

   Datos de ejemplo **C:\MSDCHEM\1\DATA\EVALDEMO.D**

   Al hacer esto para crear su base de datos de cuantificación, este fichero se toma del análisis de muestras calibradas.
3. En **Spectrum/Select Library** o haciendo clic en el icono:

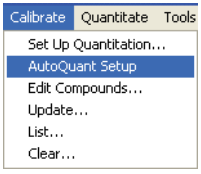
   

   Seleccione **DEMO.L** .



4. Elija **Calibrate/AutoQuant Setup** o haga clic en el icono.



5 Cuando se abra el cuadro de diálogo **Quantitation Database Globals**, compruebe la información que se muestra por defecto (a partir de lo que se visualizó previamente). Puede modificarla de acuerdo con lo que exija el método.

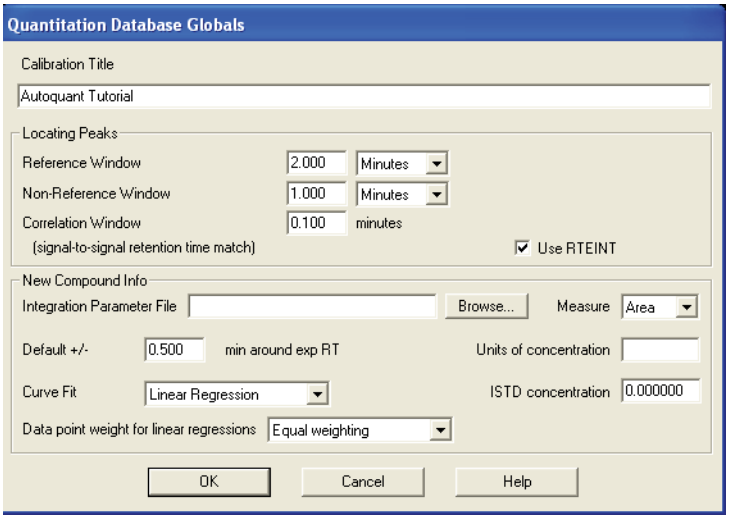
Esta pantalla se llama “globals” porque la información que muestra es común para todos los compuestos y se rellena automáticamente para cada compuesto que añada a la base de datos de cuantificación.

6 En este ejercicio, cuando se abra el cuadro de diálogo **Quantitation Database Globals**, introduzca lo siguiente:

a En el campo **Calibration Title**, escriba **AutoQuant Tutorial**. Esta línea aparece como título de cada informe cuantitativo.

b Marque la casilla **Use RTEINT** para utilizar el integrador RTE.

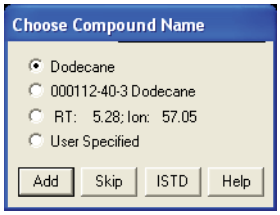
c Haga clic en **OK**.



Tras hacer clic en **OK**, el software comienza a buscar picos significativos en el fichero de datos. Cuando encuentra el primer pico, lo compara con la librería especificada (en el paso 3) y muestra el nombre del primer compuesto

encontrado en la librería. A medida que se muestra cada compuesto, usted determinará lo que desea que se haga con él.

7 En este caso, el primer compuesto que encuentra es Dodecane. Puede realizar tres acciones con este compuesto:



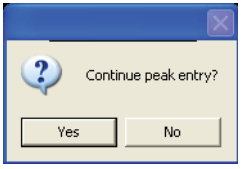
Add Añade este *compuesto*, su *ión objetivo* y *tres iones cualificadores* a la base de datos de cuantificación.

Skip Obliga al software a mostrar el siguiente compuesto que encontró en el fichero de datos.

ISTD Añade este compuesto a la base de datos de cuantificación y lo identifica como el patrón interno.

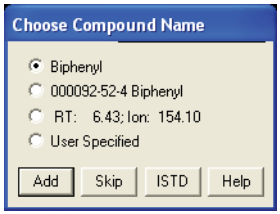
Cuando se abra el cuadro de diálogo **Choose Compound Name** para el dodecano, haga clic en **Skip**. Con fines demostrativos, saltaremos ahora este compuesto. Posteriormente volveremos a este proceso y lo añadiremos a la base de datos de cuantificación.

Cuando se abra el cuadro **Continue peak entry?**, elija **Yes.**

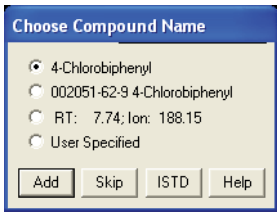


(Si hace clic en **No**, se abre el cuadro de diálogo **Quantitate now?**, como se indica en el paso 11.)

8 A continuación aparece el Biphenyl (porque eluyó después del dodecano en este ejemplo). Mantenga el nombre por defecto y haga clic en **Add** para añadir este compuesto a la base de datos de cuantificación.

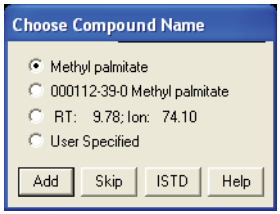


9 A continuación, aparece 4-Chlorobiphenyl. Mantenga el nombre por defecto y haga clic en **Add**.



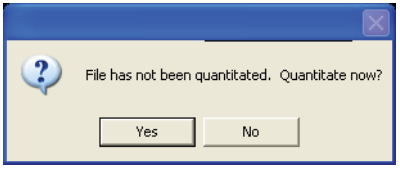
10 A continuación, aparece Methyl palmitate.

Para designarlo como patrón interno, haga clic en **ISTD**. Para esta demostración, lo identificaremos como patrón interno. El patrón interno es un compuesto que tiene la intención de inyectar en todas las muestras que compruebe para servir de factor de normalización y como base de comparación.



Al hacer clic en **ISTD** se añade este compuesto a la base de datos de cuantificación y se coloca *en el primer lugar de la lista de compuestos de la base de datos*, posición muy relevante porque los patrones internos deben preceder a todos los compuestos que se cuantificarán con respecto a ellos en la base de datos de cuantificación.

11 Cuando el software le pregunte **Quantitate now?**, elija **Yes**.



Después de cuantificar el fichero, se abre el cuadro de diálogo **Update Calibration**.

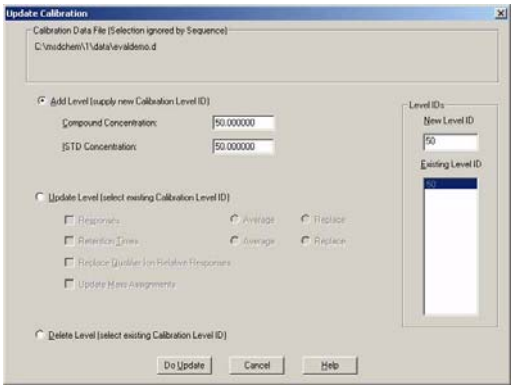
12 Seleccione **Add New Level** (indique un nuevo ID de calibración) y especifique lo siguiente:

New Level ID = 50
Se trata sólo de una etiqueta descriptiva.

Compound Concentration = 50
Concentración preparada del compuesto.

ISTD Concentration = 50
Concentración preparada del patrón interno.

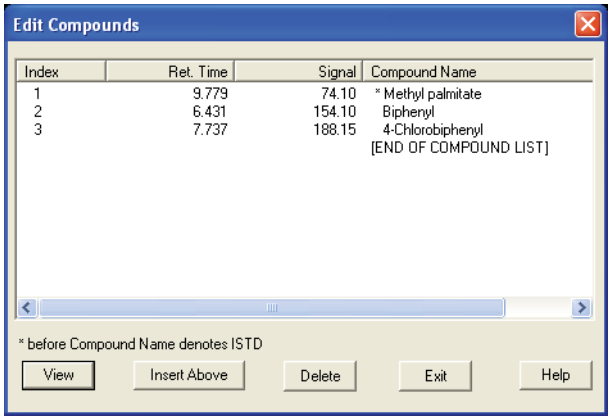
A continuación, haga clic en **Do Update**.



13 Se abre el cuadro **Edit Compounds** y se muestra la lista completa de compuestos de la base de datos de cuantificación. Observe lo siguiente:

- Methyl palmitate (el compuesto que ha identificado como patrón interno) ha pasado al primer lugar de la lista (aunque eluyó después de otros dos compuestos del grupo) y muestra un asterisco junto al nombre.
- El *asterisco* (*) indica que se trata del patrón interno.

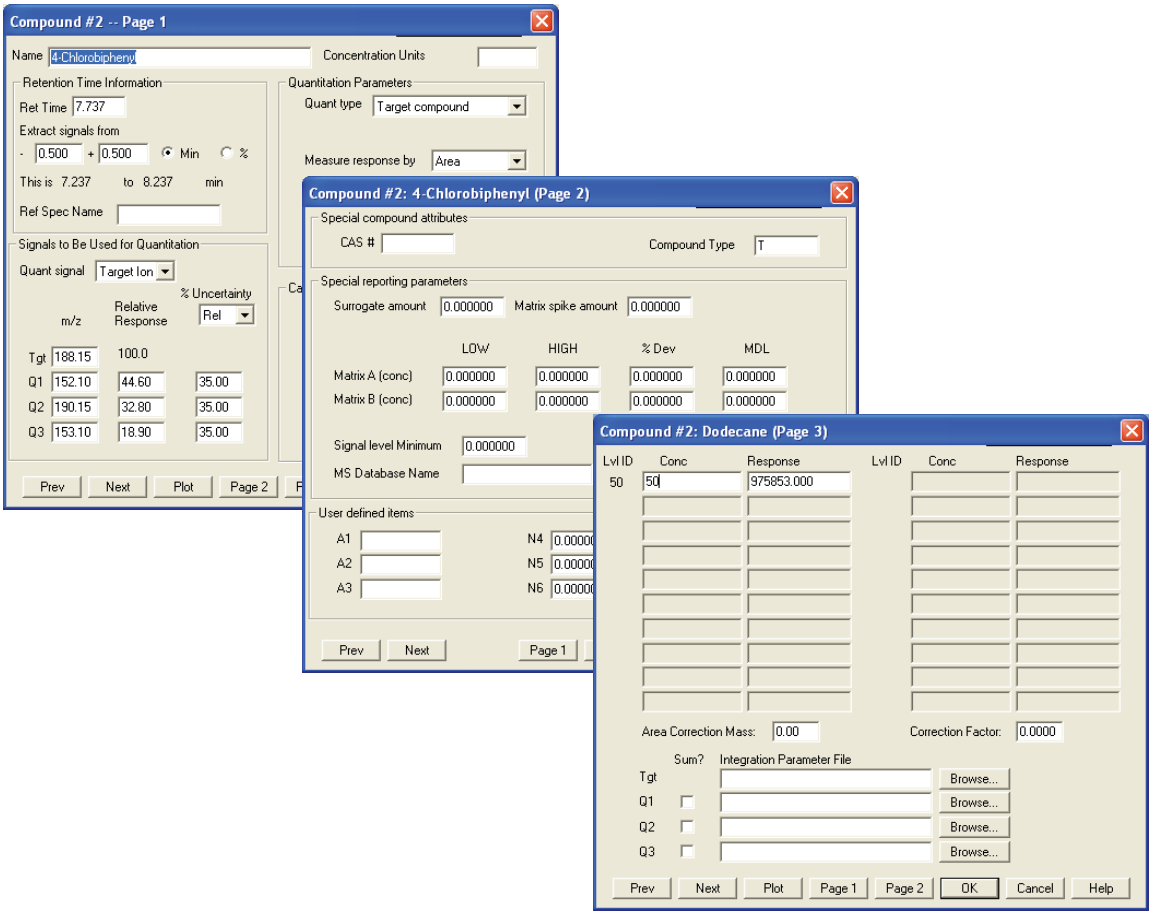
- El patrón interno *debe preceder* a los compuestos que lo tomarán como referencia; aparte de esto el orden no es relevante en la base de datos de cuantificación.



14 Las entradas de esta base de datos de un solo nivel están completas.

Seleccione cualquier compuesto de la lista y haga clic en **View** para examinar los parámetros del compuesto en las páginas 1, 2 y 3. Haga clic en **OK** o **Cancel** para volver al cuadro **Edit Compounds**.

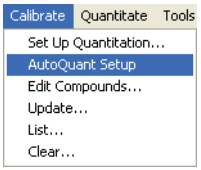
15 Haga clic en **Exit** para cerrar el cuadro de diálogo.


Compound #2 -- Page 1
Name 4-Chlorobiphenyl
Concentration Units
Retention Time Information
Ret Time 7.737
Extract signals from
0.500 0.500 Min %
This is 7.237 to 8.237 min
Ref Spec Name
Quantitation Parameters
Quant type Target compound
Measure response by Area
Signals to Be Used for Quantitation
Quant signal Target Ion
% Uncertainty
m/z
Relative Response
Rel
Tgt 188.15 100.0
Q1 152.10 44.60 35.00
Q2 190.15 32.80 35.00
Q3 153.10 18.90 35.00
Prev Next Plot Page 2
Compound #2: 4-Chlorobiphenyl (Page 2)
Special compound attributes
CAS #
Compound Type T
Special reporting parameters
Surrogate amount 0.000000
Matrix spike amount 0.000000
LOW HIGH % Dev MDL
Matrix A (conc) 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
Matrix B (conc) 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
Signal level Minimum 0.000000
MS Database Name
User defined items
A1 A2 A3
N4 N5 N6
Prev Next Page 1
Compound #2: Dodecane (Page 3)
Lvl ID Conc Response Lvl ID Conc Response
50 50 975853.000
Area Correction Mass: 0.00
Correction Factor: 0.0000
Sum? Integration Parameter File
Tgt Q1 Q2 Q3
Browse...
Prev Next Plot Page 1 Page 2 OK Cancel Help

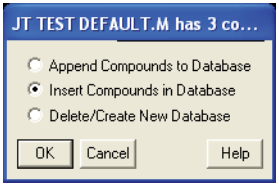
16 Ahora volveremos atrás y añadiremos el compuesto que saltamos en el paso 7.

Para empezar a introducir este compuesto en la base de datos de cuantificación, seleccione **Calibrate/AutoQuant Setup** o haga clic en el icono.

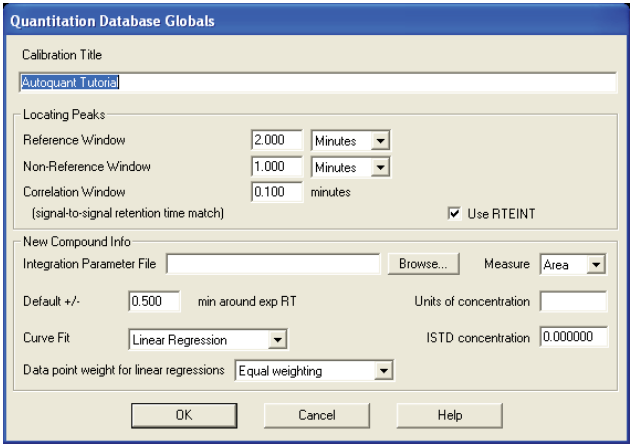




17 Seleccione **Insert Compounds in Database** y haga clic en **OK**.



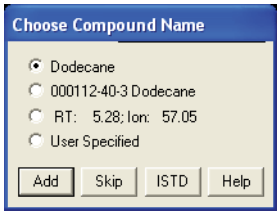
18 Cuando se abra el cuadro de diálogo **Quantitation Database Globals**, no cambie los parámetros.



Haga clic en **OK**. El software volverá a iniciar el proceso de identificación de los mismos picos.

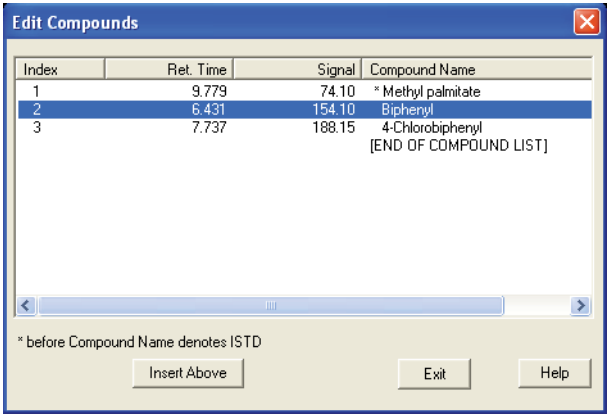
Se abre el cuadro de diálogo **Choose Compound Name**.

19 Cuando en el cuadro de diálogo se muestre Dodecane, mantenga el nombre por defecto y haga clic en **Add**.



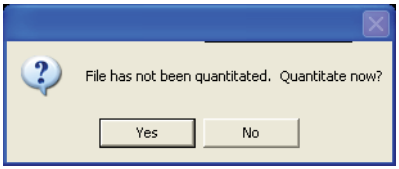
Se abre entonces el cuadro **Edit Compounds**.

20 Seleccione un punto de inserción resaltando Biphenyl y haciendo clic en **Insert Above**.



21 Se abre el cuadro **Choose Compounds** para los compuestos restantes. Para cada uno de los tres compuestos restantes en el fichero de datos, haga clic en **Skip** cuando se le pida que elija un nombre para el compuesto y haga clic en **Yes** para pasar a **Continue Peak Entry**.

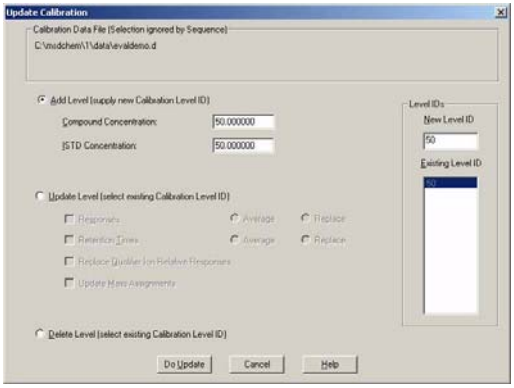
22 Cuando el sistema le pregunte si desea cuantificar la base de datos, haga clic en **Yes**.



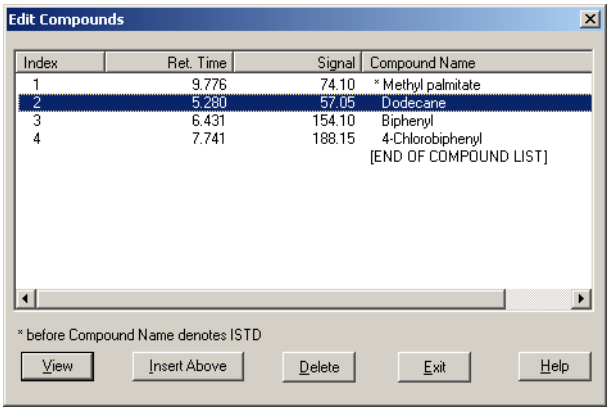
23 Cuando se abra el cuadro de diálogo **Update Calibration**, seleccione: **Recalibrate** (en la lista desplegable), **Replace** (en la lista desplegable) en los campos Responses y Retention Times.

La recalibración actualiza todos los valores de respuesta del instrumento y los tiempos de retención de la ID de nivel especificada con los valores encontrados en el fichero de datos cargado. Se recuperan todas las demás entradas que haya especificado para el compuesto.

Haga clic en **Do Update**.



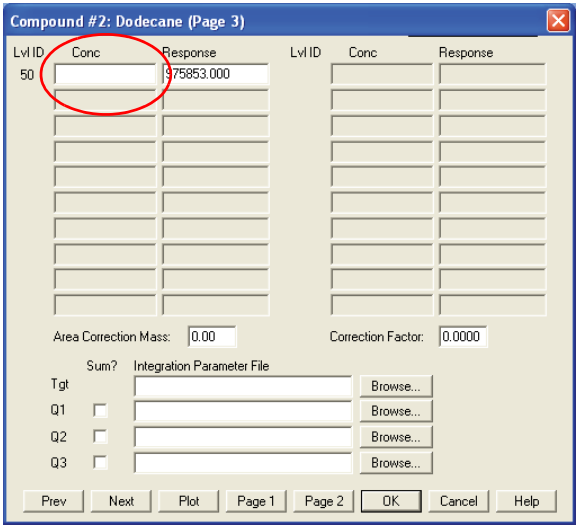
24 Cuando se abra el cuadro **Edit Compounds**, haga clic en **View** y examine la página 3 de cada uno de los cuatro compuestos de la base de datos de cuantificación.



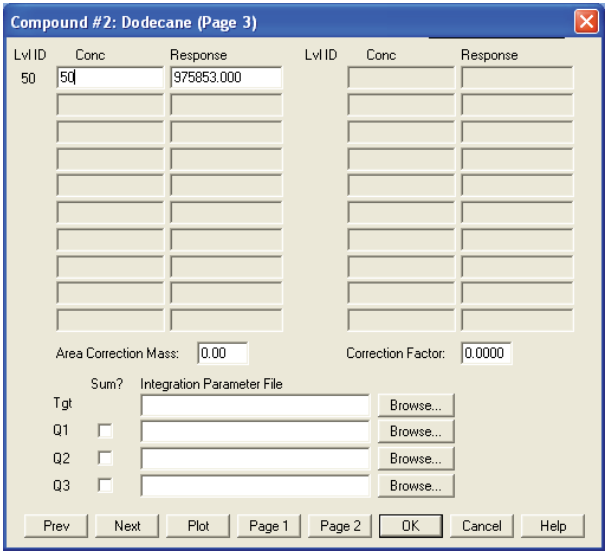
Fíjese en que Dodecane, que acaba de añadir, no tiene un valor de concentración.

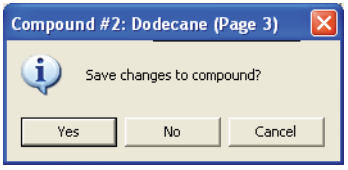
Elija **Prev** o **Next** para ver la página 3 de los otros compuestos. Los demás tienen un valor de concentración de 50.

Este valor se introdujo globalmente cuando se creó este nivel (en el paso 12).



25 Escriba **50** en el campo Concentration para el nivel 50. Haga clic en **OK** y luego en **Yes** para guardar el cambio.

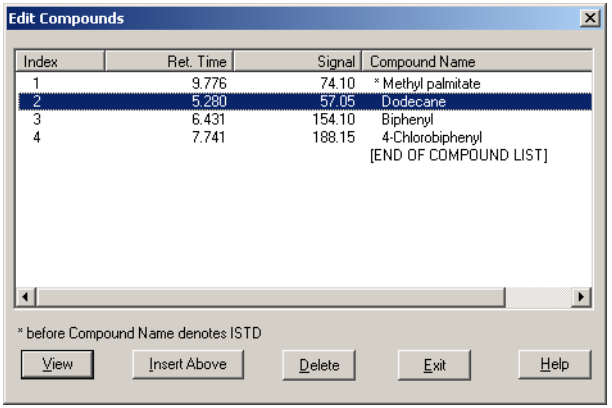




26 Volverá entonces a la ventana **Edit Compounds**. La base de datos de cuantificación se ha actualizado y está lista para su uso.

Haga en **Exit** para completar el proceso.

Ha creado un método con una base de datos de cuantificación capaz de identificar y cuantificar Biphenyl, Dodecane, Chlorobiphenyl y Methyl palmitate.



Ahora que ha terminado este ejercicio, puede crear fácilmente su propia base de datos de cuantificación usando los compuestos que le interesen.

NOTA

Si desea obtener instrucciones detalladas sobre la forma de usar la ChemStation GC/MSD, consulte la ayuda en línea.

Para conocer todos los detalles del funcionamiento, mantenimiento y diagnóstico del hardware, consulte el CD-ROM o el DVD-ROM suministrados con el instrumento.

3 Utilización de los informes personalizados

Informes personalizados 86
Creación de una plantilla de informe 87
Personalización de informes 91
Selección de celdas, filas y columnas 96
Impresión de informes 98
Creación de una base de datos de informes personalizados 101
Selección de varios ficheros de datos 104
Visualización e impresión de gráficos 106
Botones de la barra de herramientas de Custom Reports 107

Informes personalizados

Visión general

Los informes personalizados sirven para transferir resultados cuantitativos de Data Analysis a la hoja de cálculo Custom Reports, para crear sus propios informes personalizados.

También puede configurar bases de datos de informes personalizados de varias muestras y, después, ver e imprimir los gráficos de los datos.

Tras crear una plantilla o una base de datos de informes y vincularla a un método, puede imprimir el informe o actualizar la base de datos siempre que se ejecute el método.

Sólo se utilizan informes personalizados en datos cuantificados.

Procedimientos iniciales

Este capítulo explica los pasos básicos para crear plantillas o bases de datos de informes personalizados. Serán el punto de partida para familiarizarse con el software Custom Reports.

Cuando se sienta cómodo con el proceso, explore el software usted mismo. Experimente con las funciones de modificación y formateo. Utilice la ayuda en línea para obtener más detalles sobre las funciones y cómo funcionan.

Arranque del software Custom Reports

En la ventana Data Analysis, seleccione **Quantitate/Custom Reports** o haga clic en el icono de informes personalizados.



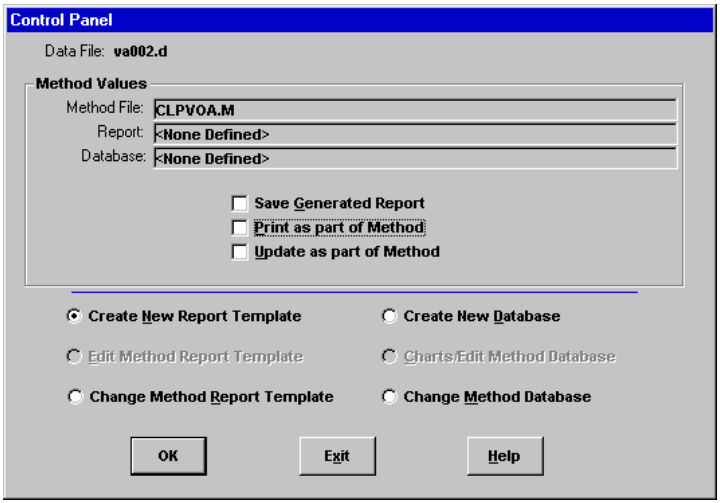
Se le preguntará si desea usar los valores por defecto, si el método actual no dispone de base de datos de cuantificación o si no se ha cargado un fichero de datos.

Elija **OK**. Se abre el cuadro **Custom Reports Paper Size**. Seleccione el tamaño de papel que desea y elija **OK**.

Creación de una plantilla de informe

Unos segundos después de arrancar el software Custom Reports, se abre el Control Panel (mostrado más abajo).

1 Seleccione **Create New Report Template** y haga clic en **OK**.



Create New Report Template	Le permite crear una plantilla de informe personalizado usando el Report Wizard.
Edit Method Report Template	Le permite modificar la plantilla de informe personalizado.
Change Method Report Template	Le permite seleccionar la plantilla de informe que va a usar con el método.
Create New Database	Le permite crear una base de datos de informes personalizados usando el Database Wizard.
Chart/Edit Method Database	Le permite ver gráficos y modificar la base de datos de informes personalizados.

Change Method Database	Le permite seleccionar la base de datos que se va a utilizar con el método.

2 Cuando se abra el Report Wizard, seleccione un elemento en la lista **Report Contents** de la derecha. En el panel izquierdo, **Possible Items for Report** enumera todas las opciones que puede seleccionar para la plantilla del informe. En el panel derecho, **Report Contents** incluye las opciones que ha seleccionado.

3 Seleccione un elemento en la lista **Possible Items for Report** de la izquierda.

4 Haga doble clic en el elemento seleccionado o haga clic en **Add**. El elemento seleccionado se añade a continuación del elemento resaltado a la derecha.

5 Repita los pasos 1–4 hasta añadir todos los elementos a la plantilla del informe. Puede usar **Remove** para borrar todos los elementos de la lista **Report Contents** de la derecha.

6 Desplácese por la lista **Possible Items for Report** de la izquierda y verá que puede añadir elementos Graphics a la plantilla del informe. Los elementos Globals dentro de Graphics se añaden a la sección **Reports Content Header** , mientras que los elementos Compound se agregan a las secciones **All Compound**.

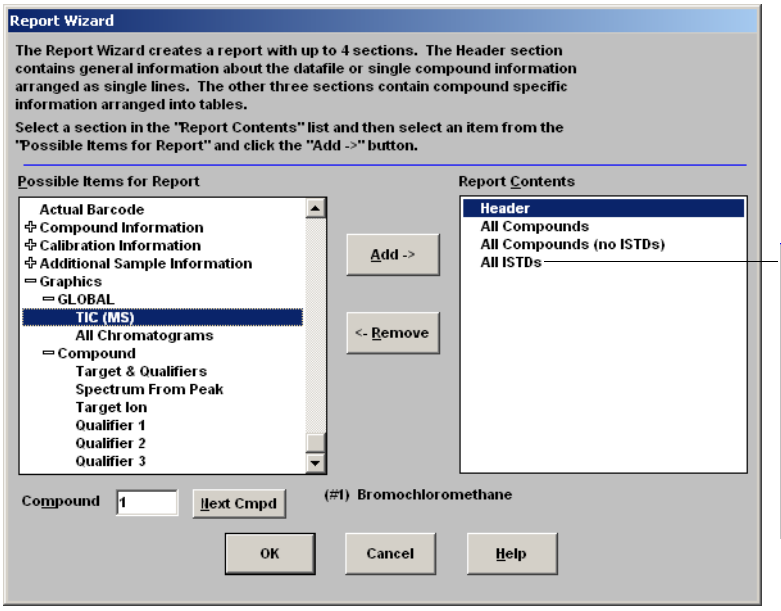
7 Haga clic en **OK** cuando termine de seleccionar elementos de informe en el Report Wizard.

   Se crea entonces una plantilla de informe basada en las selecciones que ha hecho.

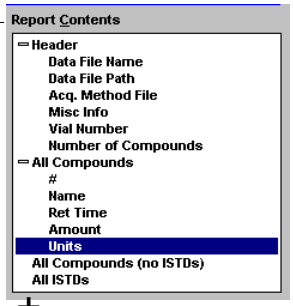
8 Se abre la hoja Custom Reports Sheet1 (mostrada más abajo). En este punto, puede optar por seleccionar **File/Save** o hacer clic en el icono **Guardar** para guardar la plantilla de informe.

9 A continuación se abre el cuadro **Link with Method**. Este cuadro de diálogo le permite seleccionar esta plantilla como plantilla por defecto para el método e imprimir automáticamente siempre que se ejecute el método.

10 Seleccione **File/Exit** para salir del programa Custom Reports.

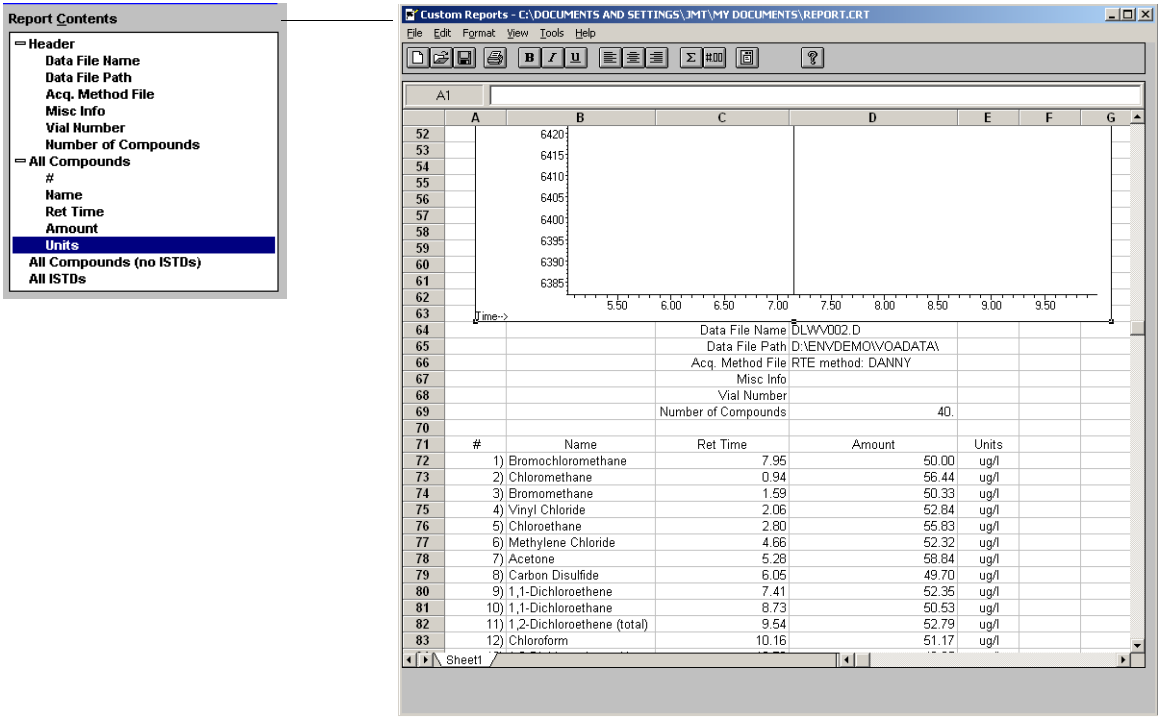


Ejemplo



+ Haga clic en el signo más para abrir la lista de elementos secundarios

- Haga clic en el signo menos para cerrar la lista de elementos secundarios


Report Contents
Header
Data File Name
Data File Path
Acq. Method File
Misc Info
Vial Number
Number of Compounds
All Compounds
#
Name
Ret Time
Amount
Units
All Compounds (no ISTDs)
All ISTDs
Custom Reports - C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\JMT\MY DOCUMENTS\REPORT.CRT
File Edit Format View Tools Help
A1
Time-->
Data File Name DLWV002.D
Data File Path D:\ENVDEMO\VOADATA\
Acq. Method File RTE method: DANNY
Misc Info
Vial Number
Number of Compounds 40.
Name Ret Time Amount Units
1) Bromochloromethane 7.95 50.00 ug/l
2) Chloromethane 0.94 56.44 ug/l
3) Bromomethane 1.59 50.33 ug/l
4) Vinyl Chloride 2.06 52.84 ug/l
5) Chloroethane 2.80 55.83 ug/l
6) Methylene Chloride 4.66 52.32 ug/l
7) Acetone 5.28 58.84 ug/l
8) Carbon Disulfide 6.05 49.70 ug/l
9) 1,1-Dichloroethene 7.41 52.35 ug/l
10) 1,1-Dichloroethane 8.73 50.53 ug/l
11) 1,2-Dichloroethene (total) 9.54 52.79 ug/l
12) Chloroform 10.16 51.17 ug/l
Sheet1

Personalización de informes

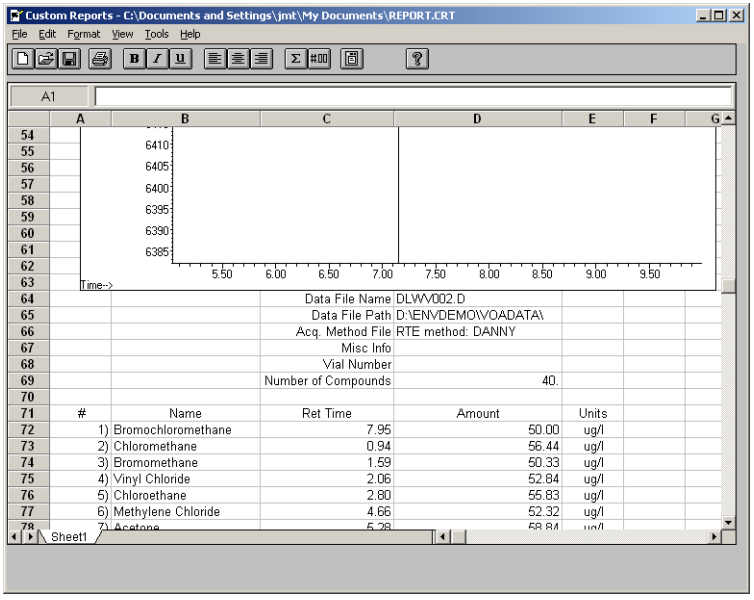
Edición de un informe

1 Seleccione **Quantitate/Custom Reports** o haga clic en el icono **Informe personalizado**. Aparecerá el Control Panel. Seleccione **Edit Method Report Template** <report.CRT> en el Control Panel. Report en Method Values muestra <*report.CRT*> (que es el nombre de la plantilla de informe que desea modificar).



Si el nombre del informe que desea no se muestra, seleccione **Change Method Report Template** en el Control Panel y elija el informe correcto. Cuando vuelva a abrirse el Control Panel, elija **Edit Method Report Template**.

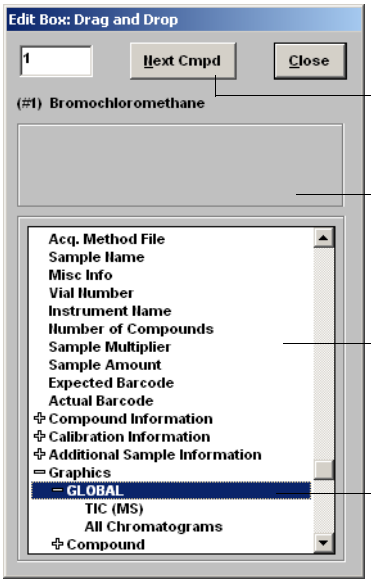
Haga clic en **OK** para mostrar la plantilla de informe <*report.CRT*> .



2 Puede realizar cambios en cualquier celda de la hoja de cálculo. Puede utilizar **Edit Box** (mostrado más abajo) para introducir modificaciones. Es conveniente guardar el informe regularmente para evitar perder cualquier cambio.

3 Para acceder a este cuadro de diálogo, seleccione **View/Edit Box** o haga clic en el icono **Edit Box** de la barra de herramientas.

4 Cuando termine con las modificaciones, guarde la plantilla de informe.



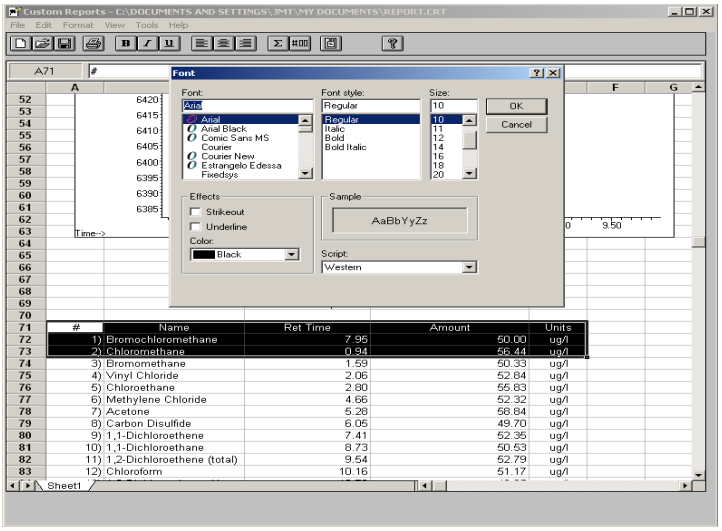
Use el botón Next Cmpd o escriba un número para ver otros compuestos

Describe el elemento resaltado y muestra su valor actual

Puede seleccionar un elemento y arrastrar su valor a cualquier celda de la hoja de cálculo

Puede añadir gráficos a un informe

Formateo de un informe



Cuando se crea una plantilla de informe, el software da formato al informe automáticamente. Puede personalizar el formato del informe mediante el menú Format, con el ratón o con la barra de herramientas. Todos los cambios del formato se guardan con la plantilla del informe.

1 Resalte las celdas que desee formatear.

2 Elija un formato de una de estas maneras:

- Seleccione un elemento en el menú Format. Haga selecciones en el cuadro de diálogo y haga clic en **OK**.
- Haga clic en un botón de formato de la barra de herramientas (por ejemplo, Negrita o Alinear izquierda).
- Ajuste el ancho de columna o el alto de fila (consulte las páginas siguientes).

3 Continúe hasta que el informe tenga el formato que desea.

4 Guarde el informe con regularidad para evitar perder cualquier cambio de formato y guarde la plantilla del informe cuando termine.

Ajuste del alto de fila o del ancho de columna

Ajuste de la altura de la fila

1. Coloque el cursor cerca de la parte inferior del cuadro de número de fila, donde el cursor cambia.
2. Haga clic y arrastre hacia arriba o abajo para ajustar la fila a la altura deseada.

Ajuste de la anchura de la columna

1. Coloque el cursor cerca de la letra de columna, donde el cursor cambia.
2. Haga clic y arrastre hacia arriba o abajo para ajustar la columna a la anchura deseada.

Varias filas con la misma altura

1. Haga clic y arrastre por los números de fila para elegirlas.
2. Ajuste la altura de una fila y el resto adoptará esa medida.

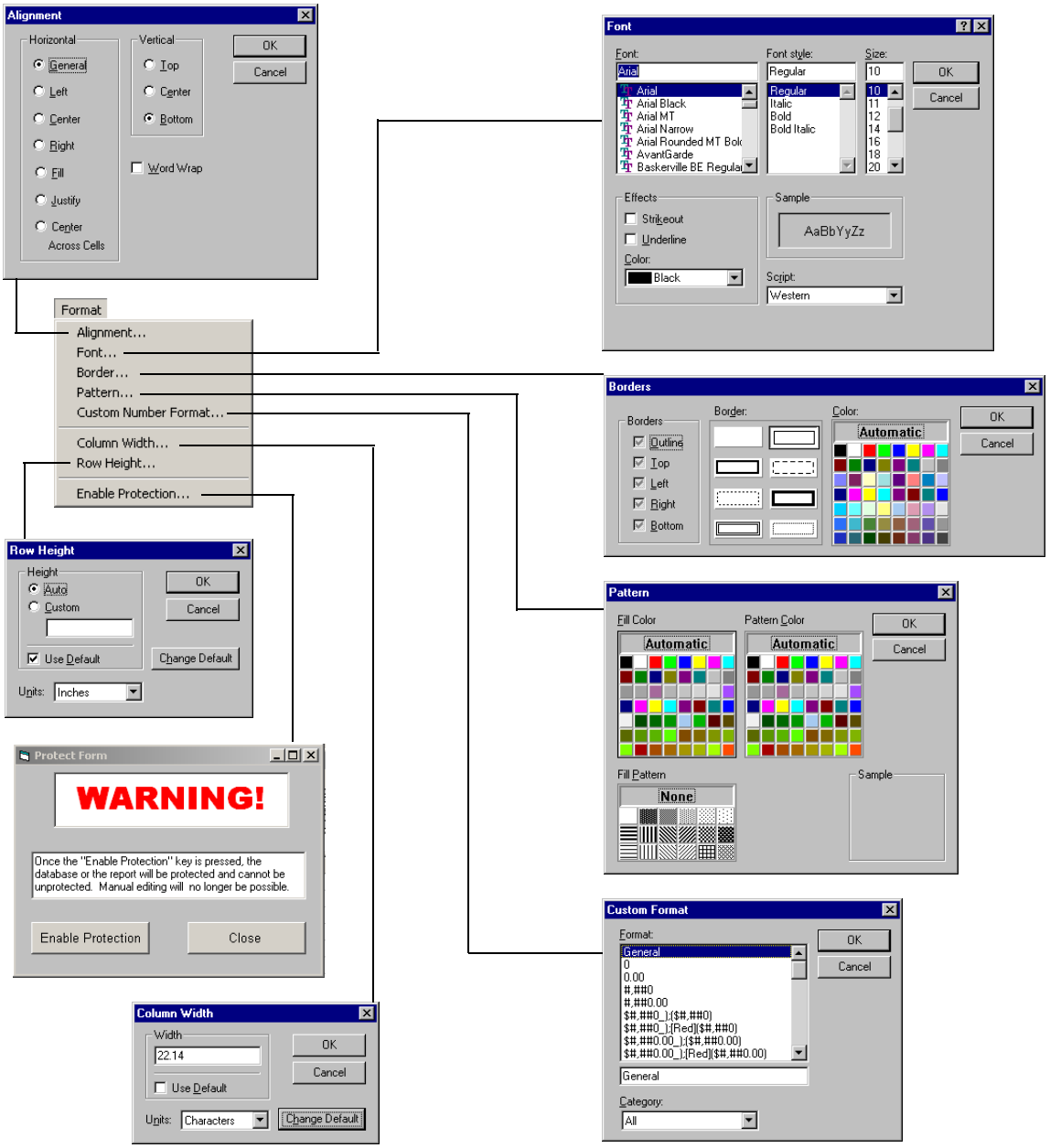
Varias columnas con la misma anchura

1. Haga clic y arrastre por las letras de columna para seleccionar las columnas.
2. Ajuste la anchura de una columna y el resto adoptará la misma anchura.

Almacenamiento de un informe

1. Seleccione **File/Save** o haga clic en **Guardar** en la barra de herramientas.
2. Escriba un nombre de fichero (*no* escriba la extensión .CRT) y haga clic en **Save**. Se abre el cuadro de diálogo **Link With Method**. Este cuadro de diálogo le permite seleccionar esta plantilla como plantilla por defecto para el método e imprimir automáticamente siempre que se ejecute el método.
3. Seleccione o deseleccione las casillas de verificación adecuadas y haga clic en **OK**.
4. Seleccione **File/Exit** o haga clic en **Close** en la barra de herramientas para salir de Custom Reports.

Menú Format


Alignment
Horizontal
General
Left
Center
Right
Fill
Justify
Center Across Cells
Vertical
Top
Center
Bottom
Word Wrap
OK
Cancel
Font
Font:
Arial
Font style:
Regular
Size:
10
Arial
Arial Black
Arial MT
Arial Narrow
Arial Rounded MT Bold
AvantGarde
Baskerville BE Regular
Regular
Italic
Bold
Bold Italic
11
12
14
16
18
20
Effects
Strikeout
Underline
Color:
Black
Sample
AaBbYyZz
Script:
Western
Format
Alignment...
Font...
Border...
Pattern...
Custom Number Format...
Column Width...
Row Height...
Enable Protection...
Borders
Borders
Outline
Top
Left
Right
Bottom
Border:
Color:
Automatic
Row Height
Height
Auto
Custom
Use Default
Change Default
Units:
Inches
Pattern
Fill Color
Pattern Color
Automatic
Fill Pattern
None
Sample
Protect Form
WARNING!
Once the "Enable Protection" key is pressed, the database or the report will be protected and cannot be unprotected. Manual editing will no longer be possible.
Enable Protection
Close
Custom Format
Format:
General
0
0.00
#,##0
#,##0.00
$#,##0_);($#,##0)
$#,##0_);[Red]($#,##0)
$#,##0.00_);($#,##0.00)
$#,##0.00_);[Red]($#,##0.00)
Category:
All
Column Width
Width
22.14
Use Default
Units:
Characters
Change Default

Selección de celdas, filas y columnas

Selección de un grupo de celdas

Haga clic y arrastre dentro de la hoja de cálculo para seleccionar el grupo de celdas que desee.

Selección de una fila o una columna

Haga clic en el número de la fila o en la letra de la columna.

Selección de varias filas o columnas

Haga clic y arrastre por los números de fila o las letras de columna.

Selección de varias celdas individuales no adyacentes

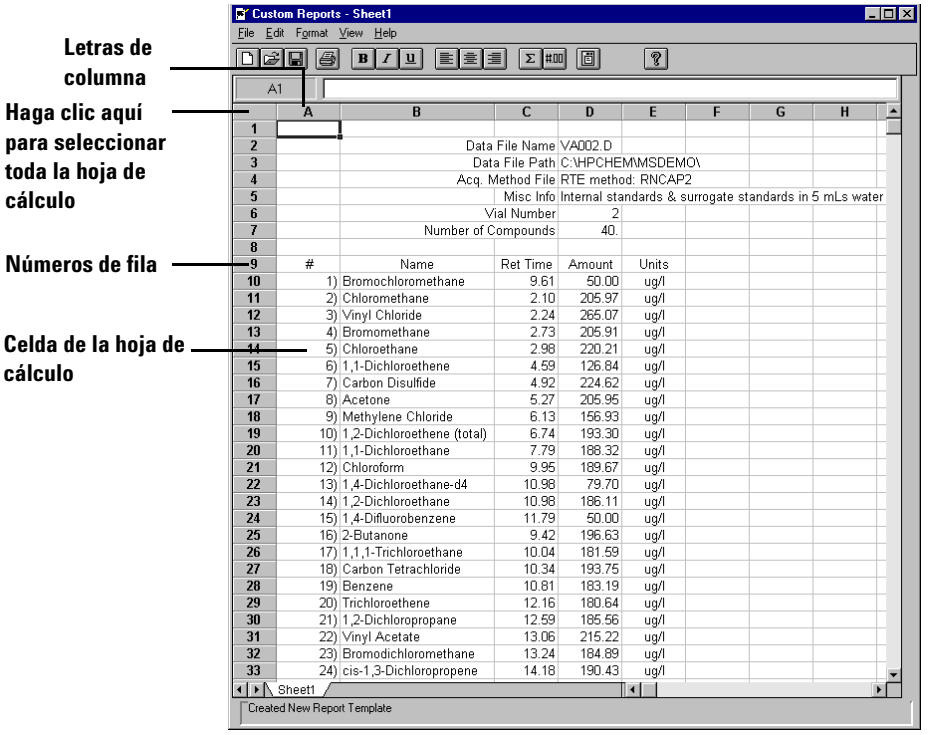
Mantenga pulsada la tecla [Ctrl] y haga clic en las celdas.

Selección de varias filas o columnas no adyacentes

Mantenga pulsada la tecla [Ctrl] y haga clic en los números de fila o las letras de columna.

Selección de varios elementos adyacentes

Haga clic en el primer elemento (celda, columna o fila) que desee seleccionar y mantenga pulsada la tecla [Mayús] mientras hace clic en el último elemento del grupo. Se seleccionan todos los elementos que haya entre el primer y último elemento.



	A	B	C	D	E	F	G	H
1								
2			Data File Name	VA002.D				
3			Data File Path	C:\HPCHEM\MSDEMO\				
4			Acq. Method File	RTE method: RNCAP2				
5			Misc Info	Internal standards & surrogate standards in 5 mLs water				
6			Vial Number	2				
7			Number of Compounds	40.				
8								
9	#	Name	Ret Time	Amount	Units			
10	1)	Bromochloromethane	9.61	50.00	ug/l			
11	2)	Chloromethane	2.10	205.97	ug/l			
12	3)	Vinyl Chloride	2.24	265.07	ug/l			
13	4)	Bromomethane	2.73	205.91	ug/l			
14	5)	Chloroethane	2.98	220.21	ug/l			
15	6)	1,1-Dichloroethene	4.59	126.84	ug/l			
16	7)	Carbon Disulfide	4.92	224.62	ug/l			
17	8)	Acetone	5.27	205.95	ug/l			
18	9)	Methylene Chloride	6.13	156.93	ug/l			
19	10)	1,2-Dichloroethene (total)	6.74	193.30	ug/l			
20	11)	1,1-Dichloroethane	7.79	188.32	ug/l			
21	12)	Chloroform	9.95	189.67	ug/l			
22	13)	1,4-Dichloroethane-d4	10.98	79.70	ug/l			
23	14)	1,2-Dichloroethane	10.98	186.11	ug/l			
24	15)	1,4-Difluorobenzene	11.79	50.00	ug/l			
25	16)	2-Butanone	9.42	196.63	ug/l			
26	17)	1,1,1-Trichloroethane	10.04	181.59	ug/l			
27	18)	Carbon Tetrachloride	10.34	193.75	ug/l			
28	19)	Benzene	10.81	183.19	ug/l			
29	20)	Trichloroethene	12.16	180.64	ug/l			
30	21)	1,2-Dichloropropane	12.59	185.56	ug/l			
31	22)	Vinyl Acetate	13.06	215.22	ug/l			
32	23)	Bromodichloromethane	13.24	184.89	ug/l			
33	24)	cis-1,3-Dichloropropene	14.18	190.43	ug/l			

Impresión de informes

Cree (o cargue) una plantilla de informe.

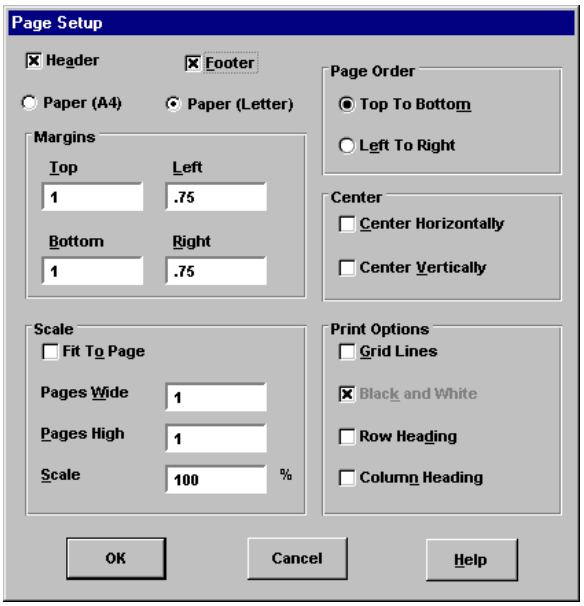
Visualización de un informe antes de imprimirlo

1. Seleccione **File/Print Preview.** El informe aparece en un panel de presentación preliminar que permite ver el aspecto que tendrá cuando se imprima.
2. Utilice **Next Page** y **Prev Page** para pasar de una página a otra.
3. Haga clic en **Print**. El panel de presentación preliminar se cierra y el informe se imprime.

Impresión de un informe

1. Seleccione **File/Print** o haga clic en **Print** en la barra de tareas. Se abre el cuadro de diálogo **Print**.
2. Seleccione opciones de impresión (rango de impresión, número de copias y calidad de impresión) y haga clic en **OK**.

Use el cuadro de diálogo **File/Page Setup** para configurar la forma en que se van a imprimir las páginas (haga clic en **Help** para ver detalles adicionales).



Impresión automática de informes

Existen dos formas de configurar informes para que se impriman automáticamente cuando se ejecute un método:

- Cree (o cargue) la plantilla de informe y seleccione **Print as part of Method** en la sección Method Values del Control Panel.
- Cuando guarda una plantilla de informe, se abre el cuadro de diálogo **Link With Method**. Elija **Print Report as part of the Run Method** y haga clic en **OK**.

Impresión automática de varios informes

1. Cree (o cargue) una plantilla de informe.
2. Seleccione **File/Multiple File Select**. Se abre el cuadro de diálogo **Multiple File Select**.
3. Seleccione el directorio en el que están ubicados los ficheros de datos (si no aparece seleccionado).
4. Seleccione los ficheros de datos que desee imprimir.
   - Seleccione un nombre de fichero de datos.
   - Haga doble clic en el fichero seleccionado (o haga clic en el botón de la flecha derecha).
   - Repita estos pasos hasta que se listen todos los ficheros de datos en la sección **Files Selected for Processing**.

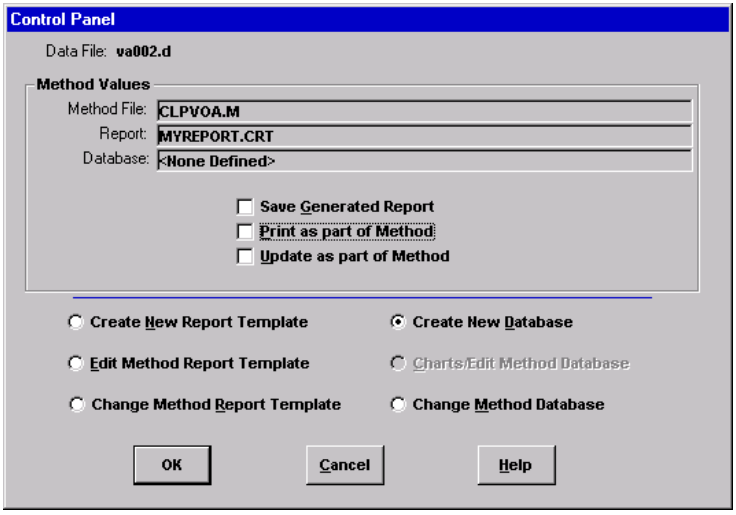
NOTA Puede seleccionar ficheros individualmente o utilizar técnicas de selección de ficheros estándares de Windows para seleccionar ficheros en grupo.

5. Haga clic en **OK**. Los ficheros de datos se imprimen en el orden en que aparecen en la lista usando la plantilla de informe actual.

Creación de una base de datos de informes personalizados

Antes de empezar

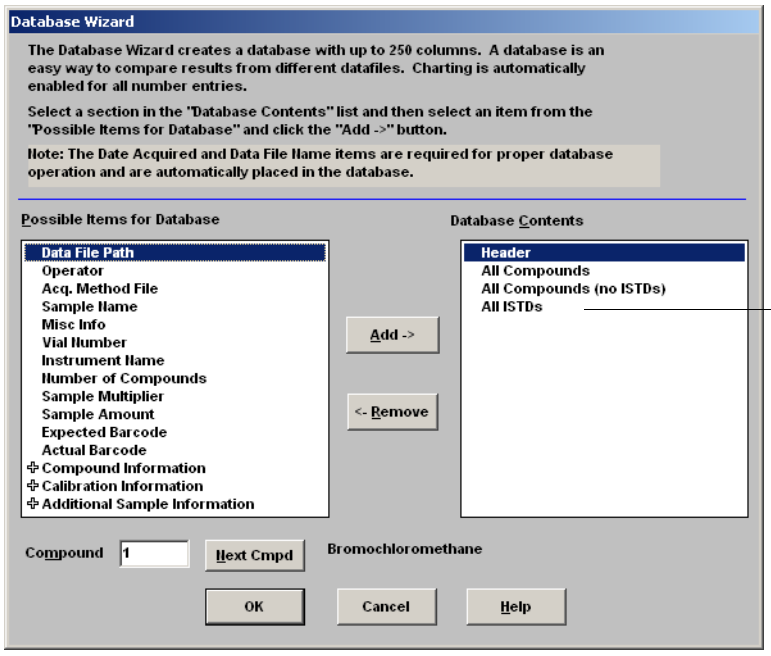
- En la ventana Data Analysis, seleccione **Quantitate/Custom Reports**.
- Se le preguntará si desea usar los valores por defecto, si el método actual no dispone de base de datos de cuantificación o si no se ha cargado un fichero de datos. Haga clic en **Yes** y se abrirá el **Control Panel** (mostrado a continuación).



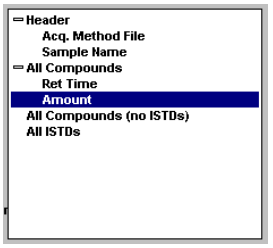
Procedimiento para la creación de una base de datos

1. Seleccione **Create New Database** en el Control Panel y haga clic en **OK**.
2. Se abre el asistente **Database Wizard**. A la izquierda, **Possible Item for Database** lista todos los elementos que puede seleccionar para incluir en la base de datos de informes

personalizados. A la derecha, **Database Contents** enumera todos los elementos que se van a incluir en la base de datos.



Ejemplo



+ Haga clic en el signo más para abrir la lista de elementos secundarios

– Haga clic en el signo menos para cerrar la lista de elementos secundarios

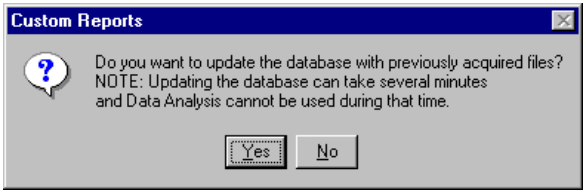
a Elija una sección **Database Contents** en la lista derecha.

b Seleccione un elemento en la lista **Possible Items for Database** situada a la izquierda.

c Haga doble clic en el elemento seleccionado o haga clic en **Add**. El elemento seleccionado se añade a continuación del elemento resaltado a la derecha.

d Cuando termine de seleccionar elementos, haga clic en **OK**.

Al elegir **OK** en el asistente Database Wizard, verá la pregunta:

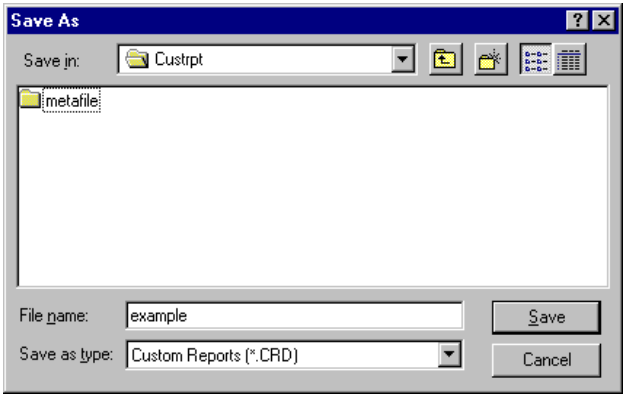


Si no desea actualizar la base de datos, haga clic en **No**. Se abre entonces el **Control Panel**.

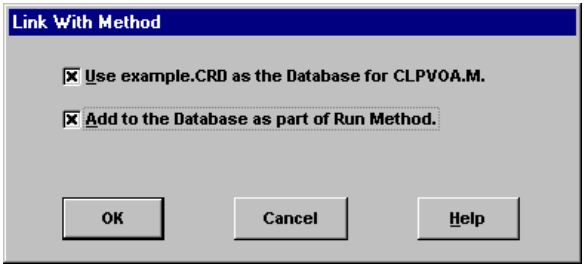
3 Para actualizar la base de datos:

- Haga clic en **Yes** y se abrirá el cuadro de diálogo **Multiple File Select**. Elija los ficheros de datos que desea añadir a la base de datos y haga clic en **OK**.

4 Escriba un nombre de fichero y haga clic en **Save** cuando se muestre el cuadro de diálogo **Save As**.



5 Cuando se abra el cuadro de diálogo **Link With Method**, seleccione o deseleccione las casillas de verificación adecuadas y haga clic en **OK**. La base de datos está ahora actualizada.

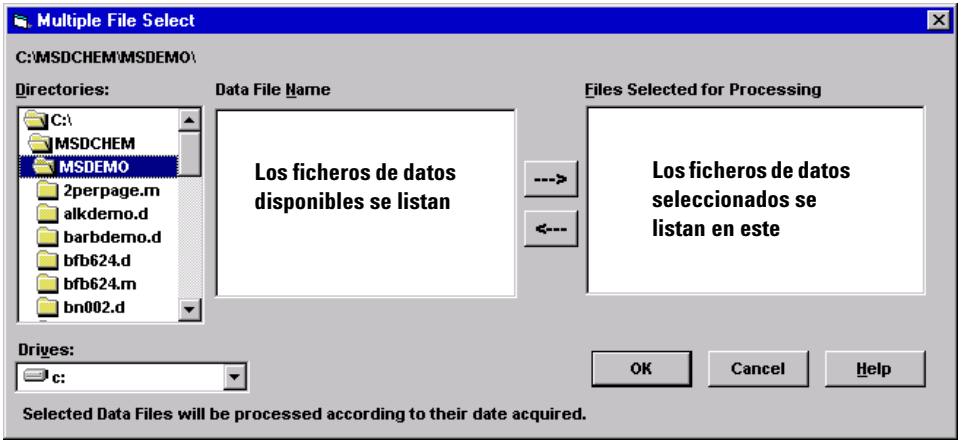


Selección de varios ficheros de datos

Utilice este cuadro de diálogo cuando desee imprimir varios informes o cargar varios ficheros de datos previamente adquiridos en una base de datos.

A este cuadro de diálogo se accede seleccionando **File/Multiple File Select**.

1. Elija el directorio en el que están almacenados los ficheros de datos.
2. Seleccione los ficheros de datos que desea usar en el cuadro **Data File Name** y haga clic en la tecla de flecha derecha (o haga doble clic en un nombre de fichero).
3. Haga clic en **OK** para procesar los ficheros seleccionados.



Selección de dos o más ficheros en sucesión

Haga clic en el primer fichero que desee seleccionar y arrastre el ratón hasta el último fichero del grupo.

O bien

Haga clic en el primer fichero que desee seleccionar. Mantenga pulsada la [Mayús] mientras hace clic en el último fichero del grupo.

Selección de dos o más elementos en cualquier orden

Mantenga pulsada la tecla [Ctrl] mientras hace clic en cada fichero.

Cancelación de una selección

Mantenga pulsada la tecla [Ctrl] mientras hace clic en el fichero resaltado.

Para informes

Los ficheros de datos seleccionados se imprimen con la plantilla de informe actual. Los informes se imprimen siguiendo el orden de los ficheros listados.

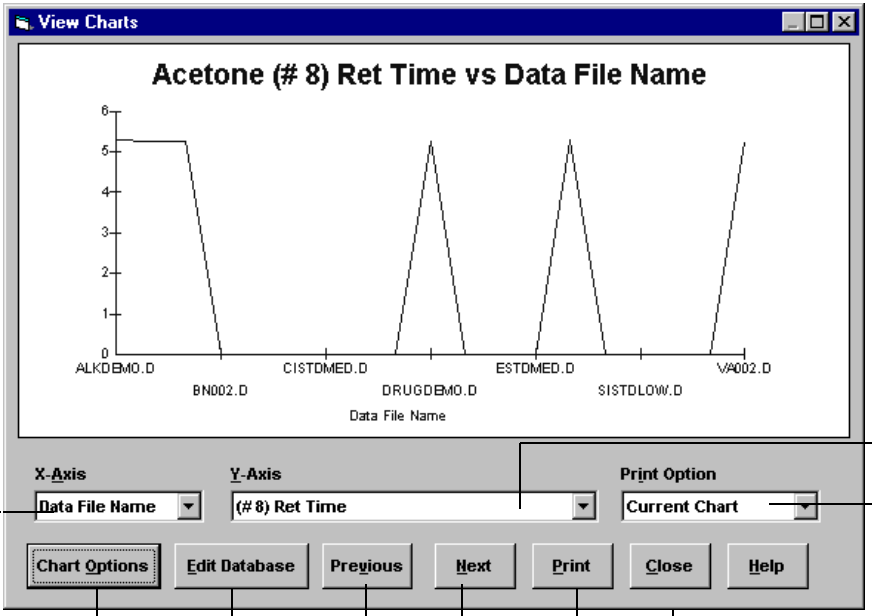
Para bases de datos

Los ficheros de datos seleccionados se cargan en la base de datos actual. Los ficheros se ordenan automáticamente por fecha de adquisición cuando se añaden a la base de datos.

Visualización e impresión de gráficos

El cuadro de diálogo que se muestra a continuación se abre cuando selecciona **Charts/Edit Method Database** en el Control Panel, hace clic en **Charts** en la barra de herramientas de informes personalizados o selecciona **Charts/View Charts**. Utilice este cuadro de diálogo para ver e imprimir gráficos de los datos de una base de datos.

NOTA Haga clic en el gráfico para abrir el cuadro de diálogo **Individual Chart Options**.



Seleccione el elemento para representar en el eje X. Los elementos por defecto son Data

Seleccione el elemento para representar en el eje Y (sólo se admiten

Le permite imprimir el gráfico actual o todos los gráficos de la base de datos.

Abre el cuadro de diálogo Chart

Sale del cuadro de diálogo View Charts y le permite editar la base de datos actual.

Pasa al gráfico anterior o siguiente listado en el cuadro de selección

Imprime el gráfico actual o todos los gráficos, tal como especifique en Print Option.

Cierra el cuadro de diálogo View Charts y muestra el Control Panel.

Botones de la barra de herramientas de Custom Reports



Muestra el Control Panel.



Abre un fichero de plantilla (.crt) o base de datos (.crd) de informes personalizados.



Guarda un informe o base de datos y abre el cuadro de diálogo Link With Method.



Imprime un informe o base de datos.



Aplica (o elimina) formato de negrita al texto seleccionado.



Aplica (o elimina) formato de cursiva al texto seleccionado.



Aplica (o elimina) formato de subrayado al texto seleccionado.



Alinea el contenido de las celdas seleccionadas en el margen de celda izquierdo.



Centra el contenido de las celdas seleccionadas entre los márgenes izquierdo y derecho de la celda.



Alinea el contenido de las celdas seleccionadas en el margen de celda derecho.



Inserta una fórmula en la celda seleccionada que es una suma de las celdas ubicadas encima de ella.



Muestra el cuadro de diálogo Custom Format.



Muestra el cuadro de diálogo Edit Box: Drag & Drop.



Muestra el cuadro de diálogo View Charts. Este botón sólo está disponible para bases de datos.



Muestra la página Contents de la ayuda en línea.



Agilent Technologies

© Agilent Technologies, Inc.

Impreso en EE.UU., junio de 2006

G1701-95061