

**Software MassHunter
Workstation de Agilent
Qualitative Analysis**

**Guía de familiarización
para GC/MS**



Agilent Technologies

Avisos

© Agilent Technologies, Inc. 2012

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

Número de referencia del manual

G3335-95147

Edición

Revisión A, Noviembre de 2012

Impreso en EE. UU.

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Blvd.
Santa Clara, CA 95051, EE.UU.

Microsoft[®], Windows 7[®], y Excel[®] son marcas registradas en EE. UU. de Microsoft Corporation en EE. UU. y/ o otros países.

Revisión de software

Esta guía es válida para las versiones B.06.00 y posteriores del programa Software MassHunter Workstation de Agilent - Qualitative Analysis, hasta que sea sustituida.

Garantía

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

Licencias de tecnología

El hardware y/o el software que se describen en este documento se ofrecen bajo licencia y pueden ser utilizados o copiados únicamente de acuerdo con los términos de esa licencia.

Leyenda sobre la restricción de derechos

Restricción de derechos del gobierno de los Estados Unidos. Los derechos sobre datos técnicos y software concedidos al gobierno federal incluyen solo aquellos derechos habitualmente proporcionados a los consumidores finales. Agilent proporciona esta licencia comercial habitual para datos técnicos y software en aplicación de la norma FAR 12.211 (Datos técnicos) y 12.212

(Software informático) y para el Departamento de Defensa, DFARS 252.227-7015 (Datos técnicos - Artículos comerciales) y DFARS 227.7202-3 (Derechos sobre software informático comercial o documentación de software informático).

Avisos de seguridad

PRECAUCIÓN

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

ADVERTENCIA

Un aviso de **ADVERTENCIA** indica un peligro. Llama la atención sobre un procedimiento operativo, una práctica o similar que, si no se realizan correctamente o no se cumplen, pueden provocar daños personales o, incluso, la muerte. No avance más allá de un aviso de **ADVERTENCIA** hasta que se entiendan y se cumplan completamente las condiciones indicadas.

En esta guía...

Esta guía contiene información para aprender a utilizar su Software MassHunter Workstation de Agilent - Qualitative Analysis con datos GC/MS.

Antes de comenzar los ejercicios, lea las instrucciones de “Antes de comenzar los ejercicios...” en la página 5.

Ejercicio 1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

En este ejercicio, explorará algunas de las potentes capacidades del programa Qualitative Analysis. Estas tareas son importantes, con independencia del tipo de datos que utilice.

Ejercicio 2 Buscar y encontrar

En los primeros dos conjuntos de tareas, encontrará e identificará fármacos de sulfamida de baja concentración dentro de una matriz compleja y generará sus fórmulas para datos TOF y Q-TOF. También podrá realizar una extracción molecular en una digestión de proteína con datos TOF y Q-TOF. Estas tareas también se pueden realizar en datos Triple Quad.

Ejercicio 3 Utilizar flujos de trabajo, exportación e impresión

En estas tareas, aprenderá a configurar y ejecutar cualquier método de análisis cualitativo. También aprenderá a editar un método para automatizar el análisis y/o la identificación del compuesto. Después, ejecutará las acciones dentro de un método automatizado cuando abra un archivo de datos. También aprenderá a crear un método para realizar acciones automatizadas con una lista de trabajo. Cada una de estas tareas se realiza usando un flujo de trabajo distinto.

Referencia

En este capítulo, aprenderá conceptos básicos sobre el programa Qualitative Analysis.

Novedades

en B.06.00

- Puede revisar los compuestos en Compound Details View. En Compound Details View hay disponibles cuatro ventanas adicionales.
- En Compound Details View, puede establecer distintas definiciones de líneas para distintos tipos de cromatogramas y espectros.
- Está disponible el algoritmo Find Compounds by Integration.
- Puede buscar en múltiples bibliotecas el algoritmo de búsqueda en bibliotecas por unidades de masa.
- En el algoritmo Generate Formulas, puede seleccionar si desea anotar picos de espectros fragmentales con fórmulas. La anotación de fragmentos selecciona los espectros que se anotan en función del algoritmo de explotación de compuestos.
- El algoritmo Generate Formulas puede ejecutarse en compuestos que se encuentren a través del algoritmo Find by Chromatogram Deconvolution.
- El algoritmo Generate Formula han sido modificados para permitirle introducir una cantidad máxima de resultados para cada portador de carga.
- En el algoritmo Generate Formulas, puede agrupar resultados con la misma fórmula, pero con distintos portadores de carga.
- Los compuestos pueden crearse a partir de cualquier espectro de usuario. El algoritmo de explotación de compuestos correspondiente a dichos compuestos es “Extracción de espectros”.
- Cuando guarde los resultados con un archivo de datos, puede seleccionar si desea guardar todos los resultados de los compuestos en un archivo de datos o un conjunto más reducido de resultados por cada compuesto. Todos los cromatogramas y espectros de usuarios se guardan siempre.
- El formato de archivo CEF ha sido modificado para incluir más información.
- La información m/z y sobre especies iónicas está disponible en el primer nivel de la tabla Spectrum Identification Results.
- Se ha modificado la tabla Spectrum Identification. Puede añadir un filtro a una columna y eliminar filas.
- Ahora puede etiquetar un pico con Formula & Ion Species.

- Ahora es mucho más rápido cambiar el espectro que ha sido etiquetado como Best en la ventana Spectrum Identification Results cuando dispone de una gran cantidad de entradas.
- Puede especificar superponer cromatogramas de compuestos en Compound Report.
- Se ha modificado la plantilla de informe por defecto Formula Confirmation para incluir la columna coloreada Flags (Tgt) y Fragment Table en la columna coloreada Flags (FIs).

Antes de comenzar los ejercicios...

- Instale el software. Consulte la Guía de instalación para obtener instrucciones.
- Copie la carpeta con el nombre **Data** del disco de instalación en un formato sin comprimir en cualquier destino de su disco duro.

Esta carpeta contiene todos los archivos de datos necesarios para los ejercicios. Es posible que necesite extraer primero los archivos de datos con formato .zip.

NOTAS

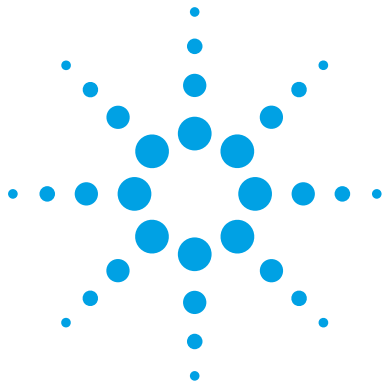
No reutilice los archivos de datos de muestra que ya tiene en su ordenador a menos que sepa que ha copiado los originales del disco y que usted es la única persona que los utiliza. Si los archivos de datos de muestra que se encuentran en el sistema no coinciden exactamente con los originales del disco, los resultados obtenidos durante los ejercicios no coincidirán con los que aparecen en la guía.

Contenidos

Ejercicio 1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo	9
Tarea 1. Abra el programa Qualitative Analysis	10
Tarea 2. Configurar la interfaz de usuario para datos GC/MS	13
Tarea 3. Acercar y alejar el zoom del cromatograma	16
Tarea 4. Anclar un cromatograma	17
Tarea 5. Cambiar el diseño de una ventana	18
Tarea 6. Extraer cromatogramas	20
Tarea 7. Integración interactiva de un cromatograma GC/MS	22
Tarea 8. Calcular valores de idoneidad del sistema	27
Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma	30
Tarea 10. Añadir anotaciones	40
Tarea 11. Añadir un calibrador de masa	44
Ejercicio 2 Buscar y encontrar	47
Tarea 12. Encontrar compuestos por desconvolución de cromatograma	48
Tarea 13. Identificar compuestos usando el algoritmo Search Library	52
Tarea 14. Encontrar compuestos por MRM (solo MRM)	56
Tarea 15. Encontrar compuestos por Integración	60
Tarea 16. Generar fórmulas y bibliotecas de búsqueda para espectros de pico	63
Tarea 17. Guardar resultados	68
Ejercicio 3 Utilizar flujos de trabajo, exportación e impresión	73
Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general	74
Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening	79
Tarea 20. Exportar un archivo CEF	83
Tarea 21. Imprimir un informe de análisis	85
Tarea 22. Imprimir un informe compuesto	88

Contenidos

Referencia	91
Trabajo con ventanas	92
Procesar los datos de resultado en Data Navigator	95
Realizar operaciones en el cromatograma	96
Realizar operaciones en un espectro MS o MS/MS	97
Trabaja con datos visuales cromatográficos	98
Trabajar con datos visuales espectrales	99
Flujos de trabajo	100
Personalizar una plantilla de informe	105



1

Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 1. Abra el programa Qualitative Analysis	10
Tarea 2. Configurar la interfaz de usuario para datos GC/MS	13
Tarea 3. Acercar y alejar el zoom del cromatograma	16
Tarea 4. Anclar un cromatograma	17
Tarea 5. Cambiar el diseño de una ventana	18
Tarea 6. Extraer cromatogramas	20
Tarea 7. Integración interactiva de un cromatograma GC/MS	22
Tarea 8. Calcular valores de idoneidad del sistema	27
Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma	30
Tarea 10. Añadir anotaciones	40
Tarea 11. Añadir un calibrador de masa	44

En este ejercicio, explorará algunas de las muchas capacidades potentes del programa Qualitative Analysis para trabajar con datos GC/Q-TOF y GC/QQQ.

Cada ejercicio se presenta en una tabla con tres columnas:

- Pasos: utilice estas instrucciones generales para avanzar a su ritmo en la exploración del programa.
- Instrucciones detalladas: recurra a ellas si necesita ayuda o prefiere usar un proceso de aprendizaje paso a paso.
- Comentarios: léalos para aprender consejos e información adicional sobre cada paso de un ejercicio.




1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 1. Abra el programa Qualitative Analysis

Tarea 1. Abra el programa Qualitative Analysis

En esta tarea, abrirá múltiples archivos de datos usando el método actual.

Tarea 1. Abra el programa Qualitative Analysis con múltiples archivos de datos

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>1 Abra el programa Qualitative Analysis.</p> <ul style="list-style-type: none">Abra los archivos de datos, Pest - 200 - Scan.d, Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d y MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d en la carpeta \\MassHunter\Data, o en la carpeta en la que los haya copiado.	<p>a Haga doble clic en el icono Agilent MassHunter Qualitative Analysis B.06.00, . El sistema muestra el cuadro de diálogo Open Data Files.</p> <p>b Vaya a la carpeta \\MassHunter\Data\GC o la carpeta en la que se ubican los archivos de ejemplo.</p>	<ul style="list-style-type: none">El archivo Pest - 200 - Scan.d contiene datos MS, y los archivos Pest - STD 200 MRM.d y Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d contienen tanto datos MS como MS/MS (todos GC/QQQ). MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d contiene datos GC/Q-TOF.Puede obtener ayuda en la mayoría de ventanas, cuadros de diálogo y pestañas pulsando la tecla F1 con la ventana activa.

- Asegúrese de que el botón **Use current method** está pulsado.
- Asegúrese de que la casilla de verificación **Load result data** no está marcada. Si la casilla de verificación **Load result data** no está disponible, no se han guardado los resultados en el archivo de datos. Aprenderá a guardar resultados en “[Tarea 17. Guardar resultados](#)” en la página 68, que contiene instrucciones sobre cómo guardar resultados.
- Asegúrese de que la casilla de verificación de **Run ‘File Open’ actions from selected method** está desmarcada.

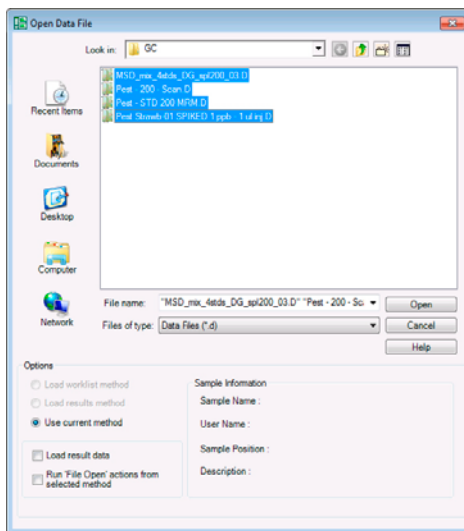



Figura 1 Abrir archivos de datos al abrir el software

Tarea 1. Abra el programa Qualitative Analysis con múltiples archivos de datos (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
	<p>c Pulse y mantenga presionada la tecla Mayúscula mientras hace clic en Pest - 200 - Scan.d, Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d y MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d.</p> <p>d Haga clic en Open. Los cuatro archivos de datos se muestran en la ventana Data Navigator, y en la ventana Chromatogram Results se muestran de 1 a 3 cromatogramas.</p> <p>e Haga clic en el icono List Mode, , de la barra de herramientas Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Si pulsa la tecla Ctrl, puede seleccionar archivos que no sean directamente contiguos en la lista. • Lo que ve en la ventana principal en este momento dependerá del método, diseño, pantalla y de la configuración de la representación que utilice antes de abrir estos archivos. • Cuando haga clic en el icono List Mode, el fondo del icono cambiará a color naranja.

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 1. Abra el programa Qualitative Analysis

Tarea 1. Abra el programa Qualitative Analysis con múltiples archivos de datos (continuación)

Pasos

Instrucciones detalladas

Comentarios

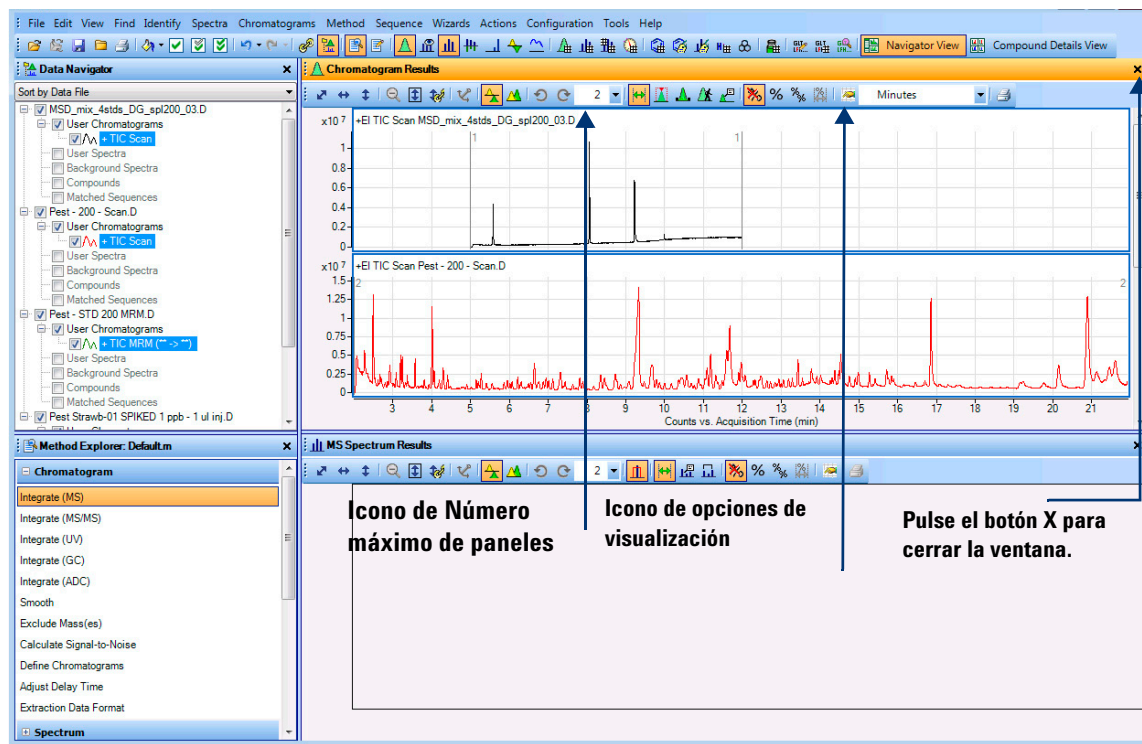




Figura 2 Ventana principal de Qualitative Analysis con el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening cargado.

Tarea 2. Configurar la interfaz de usuario para datos GC/MS

En esta tarea, cambiará al flujo de trabajo General (para clientes GC/QQQ) o al flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening (para clientes GC/Q-TOF). Estos dos flujos de trabajo son los únicos que permiten analizar datos GC/MS. Seguidamente, abra el cuadro de diálogo User Interface Configuration y marque las casillas de verificación apropiadas del sistema GC/QQQ o GC/Q-TOF.

Tarea 2. Configurar la interfaz de usuario para GC

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
1 Si es necesario, abra el programa Qualitative Analysis.	<p>a Haga doble clic en el icono Agilent MassHunter Qualitative Analysis,  . El sistema muestra el cuadro de diálogo Open Data Files.</p> <p>b Haga clic en Cancelar en el cuadro de diálogo Open Data Files.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Puede obtener ayuda en cualquier ventana, cuadro de diálogo o pestañas pulsando la tecla F1 con la ventana activa.
2 Cambie al flujo de trabajo General o al flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening.	<p>a Si dispone de un instrumento GC/QQQ, haga clic en el comando Configuration > Configure for Workflow > General. Si dispone de un instrumento GC/Q-TOF, haga clic en el comando Configuration > Configure for Workflow > GC/Q-TOF Compound Screening.</p> <p>b Haga clic en el botón Load workflow's default method y el botón Load workflow's default layout.</p> <p>c Haga clic en OK.</p> <p>d Haga clic en el icono List Mode, , de la barra de herramientas Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Si el programa Data Acquisition de GC/QQQ o GC/Q-TOF se instala en el mismo ordenador, el software configura la Interfaz de Usuario de forma automática. La sección GC/Q-TOF Compound Screening puede estar ya disponible en la ventana Method Explorer. • Por defecto, los cromatogramas se superponen. En estos ejemplos, los cromatogramas se muestran en List Mode.

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 2. Configurar la interfaz de usuario para datos GC/MS

Tarea 2. Configurar la interfaz de usuario para GC

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
3	<p>Si dispone de un GC/QQQ, configure la interfaz de usuario para mostrar solo las funciones GC/QQQ.</p> <p>a Haga clic en Configuration > User Interface Configuration.</p> <p>b En Separation types, marque solo la casilla de verificación GC.</p> <p>c Si dispone de un instrumento GC/QQQ, en Ionization type, marque la casilla de verificación EI or other "hard" ionization technique y desmarque la casilla de verificación CI, APCI, ESI, MADLDI u otra técnica de ionización "suave".</p> <p>d En Mass accuracy, desmarque la casilla de verificación Accurate mass (TOF, Q-TOF). Marque la casilla de verificación Unit mass (Q, QQQ).</p> <p>e En las funciones de software opcionales, desmarque la casilla de verificación Peptide Sequence Editor y la casilla de verificación BioConfirm Software.</p> <p>f En Non-MS detectors, desmarque las casillas de verificación UV y ADC.</p> <p>g Marque la casilla de verificación Show advanced parameters.</p> <p>h Haga clic en OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Puede cambiar los comandos que están disponibles en el cuadro de diálogo User Interface Configuration. • Si una función no aparece, probablemente ha sido ocultada al desmarcar una casilla de verificación en el cuadro de diálogo User Interface Configuration.

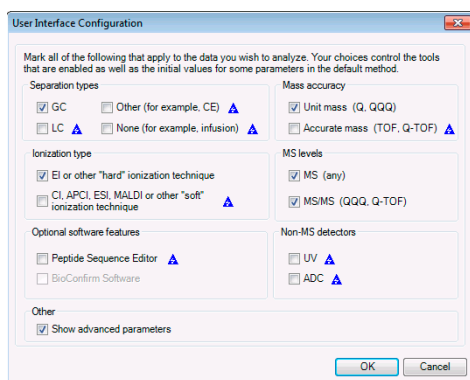


Figura 3 Configurar la interfaz del usuario para utilizarla con datos GC/QQQ

Tarea 2. Configurar la interfaz de usuario para GC

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>4 Si dispone de un GC/Q-TOF, configure la interfaz de usuario para mostrar solo las funciones GC/Q-TOF.</p>	<p>a Haga clic en Configuration > User Interface Configuration.</p> <p>b En Separation types, marque solo la casilla de verificación GC.</p> <p>c En Ionization type, marque ambas casillas de verificación.</p> <p>d En MS levels, marque ambas casillas de verificación.</p> <p>e En Mass accuracy, marque la casilla de verificación Accurate mass (TOF, Q-TOF). Desmarque la casilla de verificación Unit mass (Q, QQQ).</p> <p>f En las funciones de software opcionales, desmarque la casilla de verificación Peptide Sequence Editor y la casilla de verificación BioConfirm Software.</p> <p>g En Non-MS detectors, desmarque las casillas de verificación UV y ADC.</p> <p>h Marque la casilla de verificación Show advanced parameters.</p> <p>i Haga clic en OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Puede cambiar los comandos que están disponibles en el cuadro de diálogo User Interface Configuration. • Si una función no aparece, probablemente ha sido ocultada al desmarcar una casilla de verificación en el cuadro de diálogo User Interface Configuration.

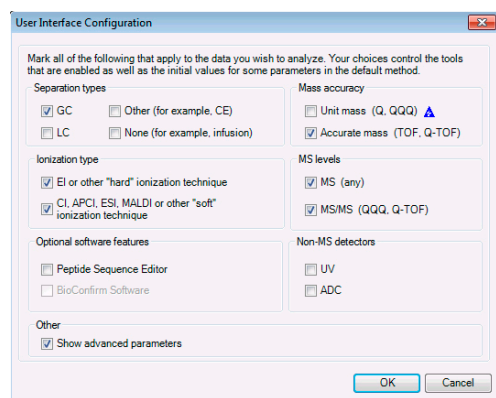


Figura 4 Configurar la interfaz del usuario para GC/Q-TOF

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 3. Acercar y alejar el zoom del cromatograma

Tarea 3. Acercar y alejar el zoom del cromatograma

En esta tarea, se familiarizará con las características de acercamiento y alejamiento del zoom del programa Qualitative Analysis.

Tarea 4. Anclar un cromatograma

En esta tarea, aprenderá a anclar un cromatograma. Cuando se ancla un cromatograma, este se visualiza de forma permanente en pantalla mientras se desplaza por los demás cromatogramas para visualizarlos.

Tarea 4. Anclar un cromatograma

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<ul style="list-style-type: none"> Anclar un cromatograma. <ul style="list-style-type: none"> Mostrar todos los cromatogramas. Asegúrese de que la lista de visualización de cromatogramas está ajustada en 1. En la ventana Chromatogram Results, seleccione el segundo TIC. Ancle este TIC. Desplácese por los cromatogramas. Desmarque el ancla. 	<ol style="list-style-type: none"> En Data Navigator, marque las casillas de verificación de los cromatogramas que ha ocultado en la tarea anterior. Asegúrese de que la cantidad máxima de paneles está ajustada en 1 en la ventana Chromatogram Results. En la ventana Chromatogram Results, seleccione el segundo TIC. Haga doble clic dentro del cromatograma y pulse Set Anchor. Utilice la barra de desplazamiento de la ventana Chromatogram Results para desplazarse por la lista de cromatogramas. El segundo TIC permanece siempre visible como el primer cromatograma. Haga clic en Chromatograms > Clear Anchor. 	<ul style="list-style-type: none"> Cuando configura un ancla para un cromatograma, aparece el icono del ancla en la ventana Data Navigator junto al nombre del cromatograma anclado. Aparecen dos cromatogramas en la ventana Chromatogram Results después de anclar uno de ellos, aunque la lista de visualización muestre 1. Esto significa que puede ver un cromatograma además del cromatograma anclado. También puede hacer doble clic en el cromatograma y pulsar Clear Anchor en el menú de acceso directo.

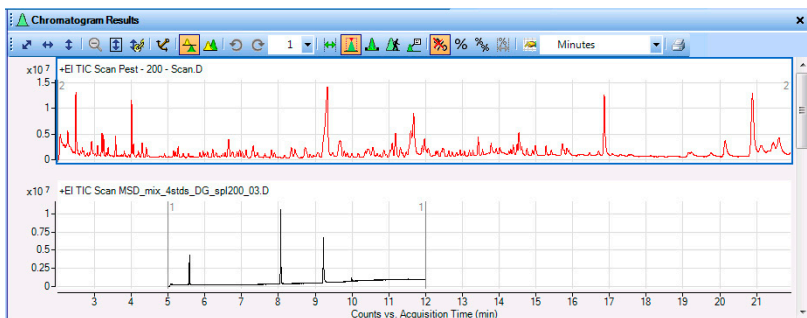


Figura 5 TIC anclados en la ventana Chromatogram Results

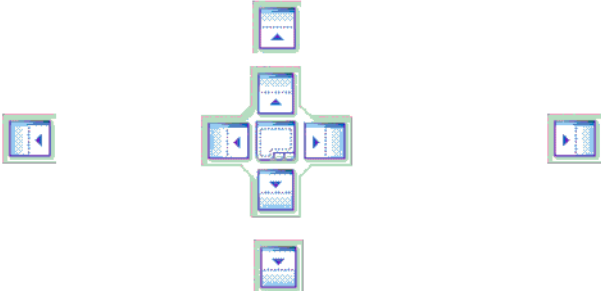
Tarea 5. Cambiar el diseño de una ventana

En esta tarea, puede desplazar las ventanas en la vista principal y crear varios diseños de ventana.

Tarea 5. Cambiar el diseño de una ventana

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>1 Cambiar el diseño de una ventana:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Cambiar el tamaño de una ventana. • Guardar el diseño de una ventana. • Desbloquear el diseño. • Cambiar la ventana Chromatogram Results para que quede flotando. • Desplazar la ventana Chromatogram Results. • Mostrar las herramientas para recolocar las ventanas. 	<ul style="list-style-type: none"> • Para cambiar el tamaño de una ventana, arrastre los bordes entre ventanas. • Parta guardar el diseño de una ventana, haga clic en Configuration > Window Layouts > Save Layout. • Parta desbloquear un diseño, haga clic en Configuration > Window Layouts > Lock Layout. • Para hacer que una ventana quede flotante, haga clic con el botón derecho en la barra de título de la ventana y pulse Floating en el menú de acceso directo. • Para desplazar una ventana, haga clic en la barra de título de la ventana y arrastre la ventana a la ubicación deseada. • Para visualizar las herramientas de reposicionamiento, arrastre la ventana sobre alguna de las demás ventanas. Cuando una ventana se superpone con otra, el programa muestra varias herramientas de diseño, como se muestra en Figura 6. 	<ul style="list-style-type: none"> • Si el diseño está desbloqueado, el sistema no muestra una marca de verificación junto al menú Lock Layout. • Solo puede usar las herramientas de recolocación cuando el diseño está desbloqueado. • También puede hacer que una ventana quede flotante haciendo doble clic en la barra de título de la ventana. • El software dispone de numerosos diseños. También puede intentar cargar diseños distintos. • El software cuenta con varios flujos de trabajo diferentes. Cada flujo de trabajo carga un diseño diferente. Al cambiar a un flujo de trabajo distinto también se cambia el diseño.

Tarea 5. Cambiar el diseño de una ventana (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>2 Recolocar la ventana Chromatogram Results.</p> <ul style="list-style-type: none"> Desplace esta ventana para que quede en la parte superior, a la izquierda, a la derecha y en la parte inferior de las demás ventanas. Desplace dos ventanas juntas para que queden la una sobre la otra y estén disponibles solo mediante las pestañas inferiores. Restaurar el diseño por defecto. 	 <p>Figura 6 Herramientas de recolocación de ventanas</p> <ul style="list-style-type: none"> Si arrastra el cursor por uno de los iconos más pequeños, la ventana que arrastra se colocará por encima, a la derecha, por debajo o a la izquierda de las demás ventanas. Arrastre el cursor por el icono de mayor tamaño. La ventana también puede colocarse por encima, a la derecha, por debajo, o a la izquierda de la otra ventana arrastrando el cursor por los bordes del icono de mayor tamaño. Para tabular dos ventanas juntas, arrastre el cursor por el centro del icono de mayor tamaño. Verá una versión sombreada de las dos ventanas tabuladas juntas. Deje de arrastrar el ratón. Las dos ventanas se tabularán juntas. Haga clic en Configuration > Window Layouts > Restore Default Layout. 	<ul style="list-style-type: none"> El cursor deberá encontrarse sobre las flechas de un cuadro para que se lleve a cabo la recolocación. Hacer clic en el comando Restore Default Layout restaura el diseño que se emplea con el flujo de trabajo General y el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening. Si está empleando un flujo de trabajo distinto, necesitará cargar el diseño que se emplea con dicho flujo de trabajo.

Tarea 6. Extraer cromatogramas

En esta tarea, se aprende a extraer y fusionar cromatogramas del TIC original.

Tarea 6. Extraer cromatogramas

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>1 Extraer y fusionar cromatogramas iónicos (EICs) extraídos de dos masas en el archivo de datos Pest - 200 Scan.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> Los valores m/z son 129.0 y 414.2. No fusionar los picos de masas individuales en un cromatograma. 	<p>a En la ventana Data Navigator, desmarque las casillas de verificación de los archivos de datos, excepto los de Pest - 200 Scan.d.</p> <p>b Abra el cuadro de diálogo Extract Chromatograms, usando la siguiente opción o una de las opciones de la derecha:</p> <ul style="list-style-type: none"> Haga clic en Chromatograms > Extract Chromatograms. <p>c En List of opened data files, haga clic en Pest - 200 - Scan.d.</p> <p>d En el cuadro de lista Type, seleccione EIC.</p> <p>e En el campo m/z value(s), escriba 129.0, 414.2</p> <p>f Si es necesario, desmarque la casilla de verificación Merge multiple masses into one chromatogram para fusionar los EIC.</p> <p>g Haga clic en OK.</p> <p>h Ajuste Maximum number of list panes a 3 en la barra de herramientas Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> También puede extraer cromatogramas de una de las siguientes formas: <ul style="list-style-type: none"> Haga doble clic dentro del cromatograma, y pulse Extract Chromatogram. Desde Data Navigator, resalte TIC Scan para sulfas_PosMS.d, y a continuación haga clic con el botón derecho en TIC Scan y pulse Extract Chromatograms. Ahora puede usar un nivel MS de All o MS. Téngase en cuenta que también puede elegir integrar automáticamente el cromatograma extraído después de la extracción. También puede extraer un cromatograma desde un espectro de masa.

Tarea 6. Extraer cromatogramas (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
-------	--------------------------	-------------

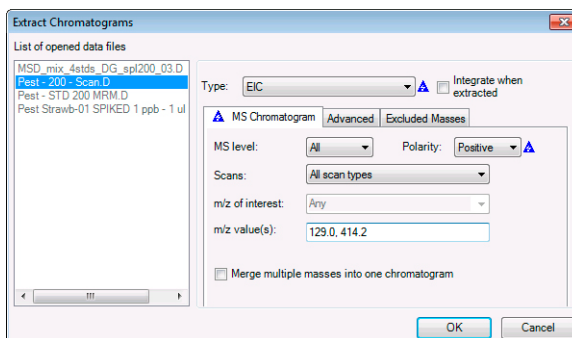


Figura 7 Cuadro de diálogo Extract Chromatograms

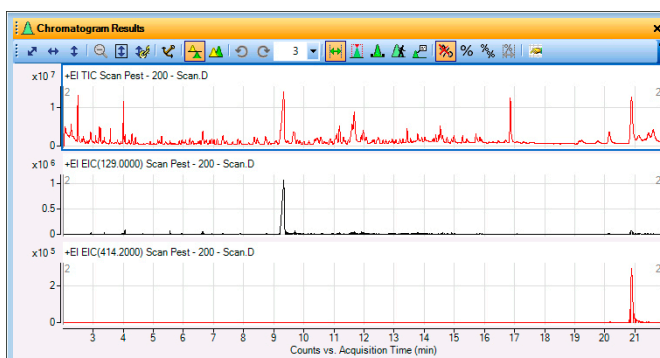


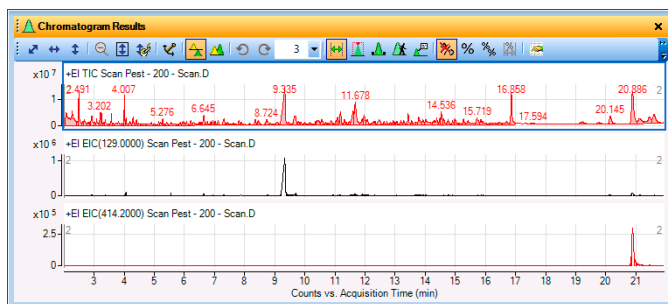
Figura 8 Cromatogramas iónicos extraídos (EICs) y fusionados comparados con el TIC original

Tarea 7. Integración interactiva de un cromatograma GC/MS

En esta tarea, aprenderá distintas formas de integrar un cromatograma, cambiar parámetros de integración para modificar los resultados y calcular la relación de señal y ruido de los picos integrados en relación con datos MS/MS.

Tarea 7. Integración interactiva de un cromatograma (GC/MS)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
1 Integrar el archivo de datos TIC Scan chromatogram for the Pest - 200 - Scan.d usando cualquiera de las opciones que aparecen a la derecha.	<p>a Archivo de datos Mark the Pest - 200 - Scan.D de la ventana Data Navigator.</p> <p>b Resalte el cromatograma TIC Scan y utilice uno de los siguientes comandos:</p> <ul style="list-style-type: none"> Desde la barra de menús, haga clic en Chromatograms > Integrate Chromatogram. Haga doble clic en cualquier lugar de la ventana de cromatogramas, y pulse Integrate Chromatogram. En la ventana Data Navigator, seleccione Pest - 200 - Scan.D > User Chromatograms > TIC Scan, y seguidamente haga clic con el botón derecho en TIC Scan y después en Integrate Chromatogram. 	<ul style="list-style-type: none"> Nótese que el programa integra prácticamente todos los picos del cromatograma. Seleccione el integrador que se usa en datos MS, datos MS/MS y datos GC en la ventana Method Editor. Este cromatograma es un cromatograma MS, de manera que los valores que se han ajustado en la sección Integrate (MS) de Method Editor se emplean en la integración de este cromatograma.
2 Mostrar solo dos cromatogramas al mismo tiempo.	<ul style="list-style-type: none"> Seleccione 2 en el recuadro Maximum number of list panes de la barra de herramientas Chromatogram Results. 	



Se integran muchos picos pequeños.

Figura 9 Cromatograma TIC Scan con muchos picos pequeños

Tarea 7. Integración interactiva de un cromatograma (GC/MS) (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>3 Cambiar el umbral para integrar menos picos.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Cambiar el umbral para conservar solo los tres picos de mayor tamaño. 	<p>a Desde la ventana Method Explorer, haga clic en Chromatogram > Integrate (MS) para visualizar la pestaña Integrate (MS).</p> <p>b Seleccione el integrador Agile.</p> <p>c Haga clic en la pestaña Peak Filters.</p> <p>d En Maximum number of peaks, marque Limit (by height) to the largest, y escriba 3.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Nótese el triángulo azul que aparece cuando cambia una configuración desde el valor guardado en el método actual. Cuando guarda el método, desaparece el triángulo.

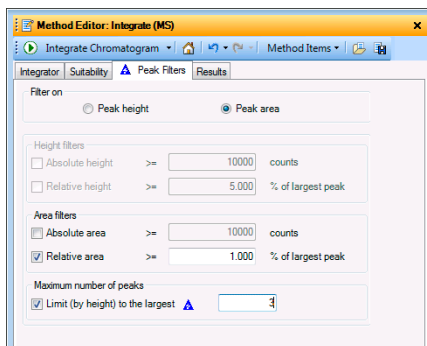


Figura 10 Pestaña Peak Filters con **Limit (by height) to the largest** marcado

<p>4 Reintegrar el cromatograma</p>	<p>e Haga clic en el botón de la barra de herramientas de Method Editor para integrar utilizando la nueva configuración.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Nótese que solo se integran los tres picos de mayor tamaño. • El pico de 2.491 tiene una altura mayor que el pico de 16.858 minutos, de manera que se selecciona como el tercer pico.
--	--	--

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 7. Integración interactiva de un cromatograma GC/MS

Tarea 7. Integración interactiva de un cromatograma (GC/MS) (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
-------	--------------------------	-------------

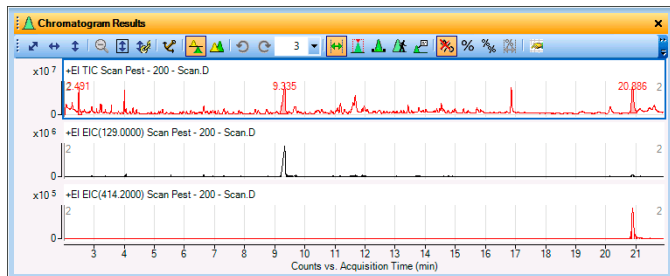


Figura 11 Cromatograma TIC Scan integrado al limitar el número de picos

5 Integrar el cromatograma TIC MRM para el archivo de datos **Pest - STD 200 MRM.D**.

- a** En la ventana Data Navigator, seleccione el archivo de datos **TIC MRM** for the **Pest - STD 200 MRM.d**.
 - b** Use uno de los siguientes comandos para integrar los cromatogramas.
 - Desde la barra de menús, haga clic en **Chromatograms > Integrate Chromatogram**.
 - Haga doble clic en cualquier lugar de la ventana de cromatogramas, y pulse **Integrate Chromatogram**.
 - En la ventana Data Navigator, haga doble clic en el cromatograma resaltado y pulse **Integrate Chromatogram**.
 - c** Amplíe la imagen de 5,8 a 8,5 minutos.
 - d** Ajuste **Maximum number of list panes** a 2.
- Pulse la tecla **Ctrl** para resaltar más de un cromatograma en la ventana Data Navigator.
 - Nótese que el programa integra prácticamente todos los picos del cromatograma.
 - Estos cromatogramas son cromatogramas MS/MS, de manera que los valores que se han ajustado en la sección Integrate (MS/MS) de la ventana Method Editor se emplean en la integración de este cromatograma. Puede seleccionar un integrador para integrar cromatogramas MS y otro integrador distinto para integrar cromatogramas MS/MS.

Tarea 7. Integración interactiva de un cromatograma (GC/MS) (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
-------	--------------------------	-------------

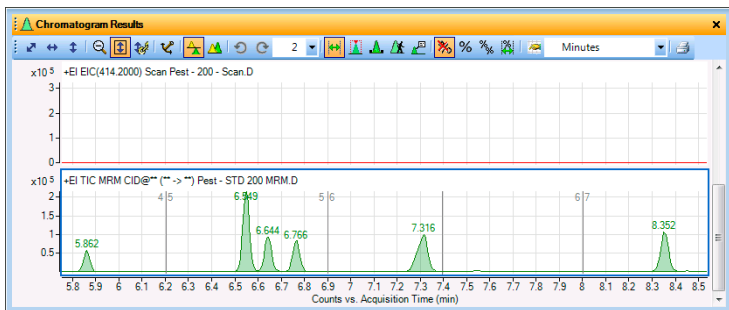


Figura 12 Cromatogramas MRM integrados

- | | | |
|---|--|---|
| <p>6 Seleccione el integrador MS/MS (GC). Cambie el filtro para aceptar únicamente picos con una altura absoluta superior o igual a 20.000.</p> | <p>a Desde la ventana Method Explorer, seleccione Chromatogram > Integrate (MS/MS).</p> <p>b Seleccione MS/MS (GC) como Integrator.</p> <p>c Haga clic en la pestaña Peak Filters.</p> <p>d En Filter on, haga clic en Peak height.</p> <p>e En Height filters, marque la casilla de verificación Absolute height.</p> <p>f Escriba 60000 como Absolute height.</p> | <ul style="list-style-type: none"> • Nótese el triángulo azul que aparece cuando cambia una configuración desde el valor guardado en el método actual. Cuando guarda el método, desaparece el triángulo. |
|---|--|---|

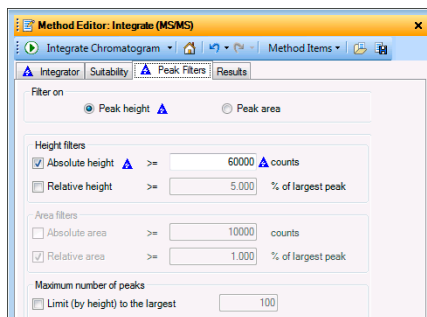






Figura 13 Pestaña Peak Filters con **Absolute height** marcado

- | | | |
|--|---|--|
| <p>7 Reintegrar el cromatograma</p> | <p>g Haga clic en el botón de la barra de herramientas Method Editor.</p> | <ul style="list-style-type: none"> • Nótese que solo se integran los picos de mayor tamaño. |
|--|---|--|

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 7. Integración interactiva de un cromatograma GC/MS

Tarea 7. Integración interactiva de un cromatograma (GC/MS) (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
	<p>El pico de menor tamaño a los 5,8 minutos ya no se incluye en los resultados de la integración porque la altura absoluta de este pico es inferior a los 60000 recuentos.</p>	
<p>Figura 14 TIC integrados y cromatogramas EIC MS/MS con un ajuste de umbral más alto</p>		
<p>8 Restaure la configuración guardada para el método actual y cierre Method Editor.</p>	<ol style="list-style-type: none"> Seleccione la sección Chromatogram > Integrate (MS/MS) en Method Explorer. Haga clic en el icono  de Method Editor. Seleccione la sección Chromatogram > Integrate (MS/MS) en Method Explorer. Haga clic en el icono  de Method Editor. Cierre la ventana Method Editor. 	<ul style="list-style-type: none"> Para cancelar sus cambios y restaurar los valores desde el método cargado, haga clic en el icono Restore to last saved values from file , en la barra de herramientas Method Editor.
<p>9 Eliminar todos los cromatogramas excepto el original. Eliminar los resultados de integración desde el cromatograma original.</p>	<ol style="list-style-type: none"> En User Chromatograms de la ventana Data Navigator, resalte todos los cromatogramas excepto el original. Haga clic con el botón derecho en los cromatogramas resaltados y pulse Delete. Seleccione todos los cromatogramas TIC. Haga clic en Chromatograms > Clear Results. 	<ul style="list-style-type: none"> Cuando utilice el comando Clear Results, los cromatogramas no se eliminarán; los resultados conectados al cromatograma se eliminarán. En ese caso, los valores de integración se eliminarán.

Tarea 8. Calcular valores de idoneidad del sistema

En esta tarea, aprenderá distintas formas de integrar interactivamente un cromatograma, cambiar parámetros de integración para modificar los resultados y ver la relación de señal y ruido de cada pico. También aprenderá a activar los cálculos de idoneidad del sistema.

Tarea 8. Integración interactiva de un cromatograma (MS)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
1 Integrar el cromatograma MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d y Pest - 200 - Scan.d usando cualquiera de las opciones que aparecen a la derecha.	<p>a Marque la casilla de verificación situada junto al archivo de datos MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d en la ventana Data Navigator.</p> <p>b Marque la casilla de verificación situada junto al archivo de datos Pest - 200 - Scan.d en la ventana Data Navigator.</p> <p>c Resalte ambos TIC.</p> <p>d Integre el TIC Scan de ambos archivos, usando una de las siguientes opciones.</p> <ul style="list-style-type: none"> Desde el menú principal, haga clic en Chromatograms > Integrate Chromatogram. Resalte el cromatograma. Haga clic con el botón derecho en el cromatograma y pulse Integrate Chromatogram. En Data Navigator, resalte TIC Scan para ambos archivos de datos. Haga clic con el botón derecho en el cromatograma, y pulse Integrate Chromatogram. 	<ul style="list-style-type: none"> Desde el flujo de trabajo General, la integración utiliza el integrador General porque se trata del integrador seleccionado en el método default.m. En el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening, la integración emplea el integrador Agile. Puede modificar este valor en la pestaña Chromatogram > Integrate (MS) > Integrator. Nótese que el integrador con parámetros por defecto detecta picos muy pequeños.

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 8. Calcular valores de idoneidad del sistema

Tarea 8. Integración interactiva de un cromatograma (MS) (continuación)

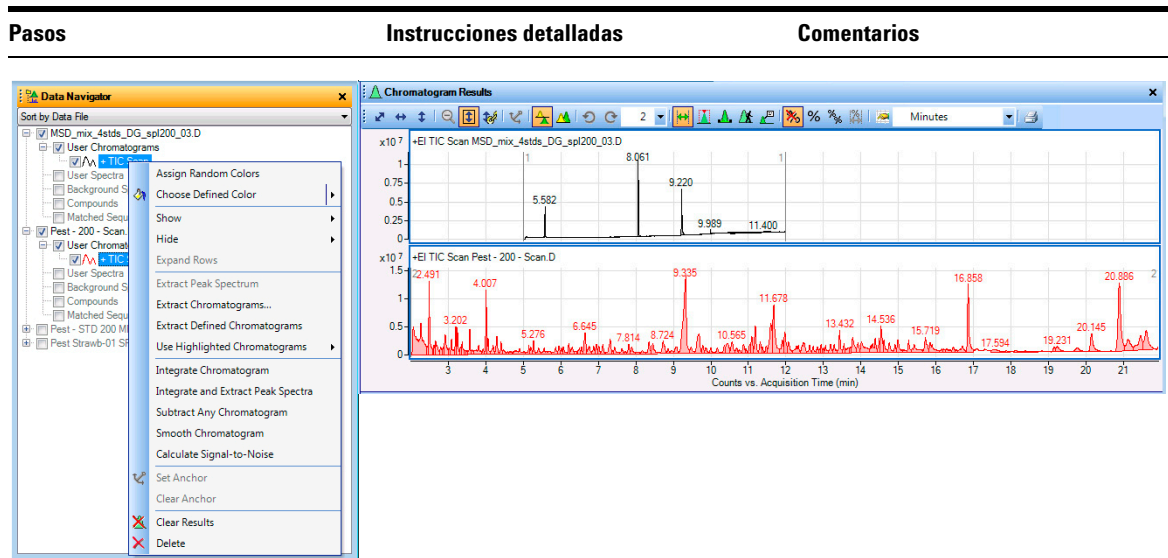
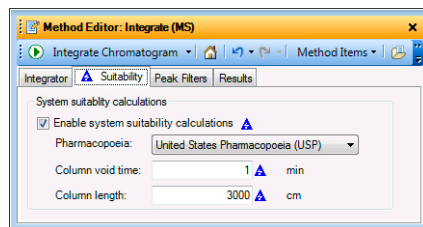


Figura 15 Uno de los menús de acceso directo de Data Navigator y los cromatogramas integrados

2 Activar cálculos de idoneidad del sistema para los cromatogramas MS.

- Desde Method Explorer, seleccione **Chromatogram > Integrate (MS)** para visualizar la pestaña Integrator.
- Haga clic en la pestaña **Suitability**.
- Marque **Enable system suitability calculations**.
- Seleccione **United States Pharmacopoeia (USP)**.
- En el recuadro **Column void time**, escriba 1.
- En el recuadro **Column length**, escriba 3000.


- Nótese el triángulo azul que aparece cuando cambia una configuración desde el valor guardado en el método actual. Cuando guarda el método, desaparece el triángulo.
- Los algoritmos empleados para configurar varias de las columnas Integration Peak List cambian en función de la farmacopea seleccionada. Consulte la ayuda en línea para obtener más información.

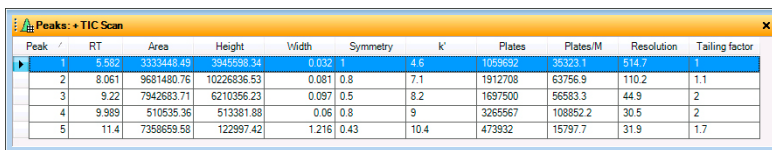


Los valores de tiempo nulo de columna y longitud de columna de estos archivos de datos son en realidad diferentes. Se proporcionan únicamente a modo de ejemplo.

Figura 16 Pestaña Chromatogram > Integrate (MS) Suitability


Tarea 8. Integración interactiva de un cromatograma (MS) (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
3 Reintegrar el cromatograma.	<ul style="list-style-type: none"> Haga clic en el icono de Integrate Chromatogram , de la barra de herramientas de Method Editor utilizando la nueva configuración. 	
4 Visualice los cálculos de idoneidad del sistema. <ul style="list-style-type: none"> Abra la ventana Integration Peak List. Revise los valores de la región del ruido y calcule la relación señal-ruido de los picos integrados. 	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en View > Integration Peak List. Haga clic con el botón derecho en la cabecera de la ventana Peaks y haga clic en Floating. Haga clic con el botón derecho en la cabecera de cualquier columna que desea visualizar y haga clic en Remove Column. Haga clic con el botón derecho en cualquier cabecera de columna y haga clic en Add/Remove Columns para cambiar las columnas visibles. 	<ul style="list-style-type: none"> Los cálculos de idoneidad del sistema se incluyen en la tabla Integration Peak List. Estos valores incluyen k', Tailing factor, Plates, Plates/M y Symmetry. También puede activar los cálculos de idoneidad del sistema para un cromatograma MS, MS/MS y GC.



Peak	RT	Area	Height	Width	Symmetry	k'	Plates	Plates/M	Resolution	Tailing factor
1	5.582	3333448.49	3949599.34	0.032	1	4.6	1059692	35323.1	514.7	1
2	8.061	9681480.76	10226836.53	0.081	0.8	7.1	1912708	63756.9	110.2	1.1
3	9.22	7942683.71	6210356.23	0.097	0.5	8.2	1697500	56583.3	44.9	2
4	9.989	510535.36	513381.88	0.06	0.8	9	3265567	108852.2	30.5	2
5	11.4	7358659.58	122997.42	1.216	0.43	10.4	473932	15797.7	31.9	1.7

Figura 17 Tabla de picos integrados con valores de idoneidad del sistema

5 Restaurar la configuración del método por defecto y cerrar la ventana Method Editor y la ventana Integration Peak List.	<ol style="list-style-type: none"> Para cancelar sus cambios y restaurar los valores desde el método cargado, haga clic en el icono de Restore to last saved values from file , en la barra de herramientas Method Editor. Cierre la ventana Method Editor. Haga clic con el botón derecho en el título de la ventana Integration Peak List y haga clic en Floating. Haga clic en View > Integration Peak List. 	<ul style="list-style-type: none"> Cuando hace clic en el comando Floating del menú de acceso directo por segunda vez, la ventana Integration Peak List se acopla en su lugar de origen.
---	---	---



1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

En esta tarea, se extraen espectros del lugar exacto que se ha especificado en el cromatograma. El programa Qualitative Analysis extrae un espectro de un punto concreto de datos, o extrae un espectro medio a partir de una media de puntos de datos o rangos múltiples.

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>1 Extraiga un cromatograma para visualizar el ion precursor de los últimos picos de Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none">• Amplie la imagen en la región entre 13 y 16 minutos.• Utilice el icono Walk Chromatogram.• Revise los espectros que comienzan a aproximadamente 13 minutos y desplace la flecha hacia la derecha.	<p>a Marque la línea Pest - 200 - MRM.D en la ventana Data Navigator.</p> <p>b Cierre la ventana Method Editor.</p> <p>c Cierre la ventana MS Spectrum Results.</p> <p>d Haga clic en el cromatograma TIC MRM de la ventana Data Navigator.</p> <p>e Haga clic en el icono de Autoscale Y-axis during Zoom, , en la barra de herramientas Chromatogram Results.</p> <p>f Seleccione 1 como Maximum number of list panes.</p> <p>g Para ampliar una imagen de unos pocos picos, haga clic con el botón derecho del ratón sobre el pico a los 13 minutos y arrástrelo a los 16 minutos y a continuación suéltelo.</p> <p>h Haga clic en el icono de Walk Chromatogram, , en la barra de herramientas Chromatogram Results.</p> <p>i Desplace el cursor Walk Chromatogram para colocarlo en una posición superior al eje X, aproximadamente a 13 minutos, y haga clic.</p> <p>j Para navegar de un espectro a otro, utilice las teclas de navegación derecha e izquierda de su teclado.</p>	<ul style="list-style-type: none">• La herramienta Walk Chromatogram es especialmente útil en datos MS/MS para identificar los iones precursor y de producto.• El espectro de cada punto en que hace clic en la ventana Chromatogram Results se muestra automáticamente en la ventana Spectrum Preview, que se abre de forma automática.• En ocasiones, dos espectros se muestran en la ventana Spectrum Preview. Por ejemplo, dos espectros se muestran en la ventana Spectrum Preview para cada punto en que hace clic cerca del pico de los 13,431 minutos.

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
-------	--------------------------	-------------

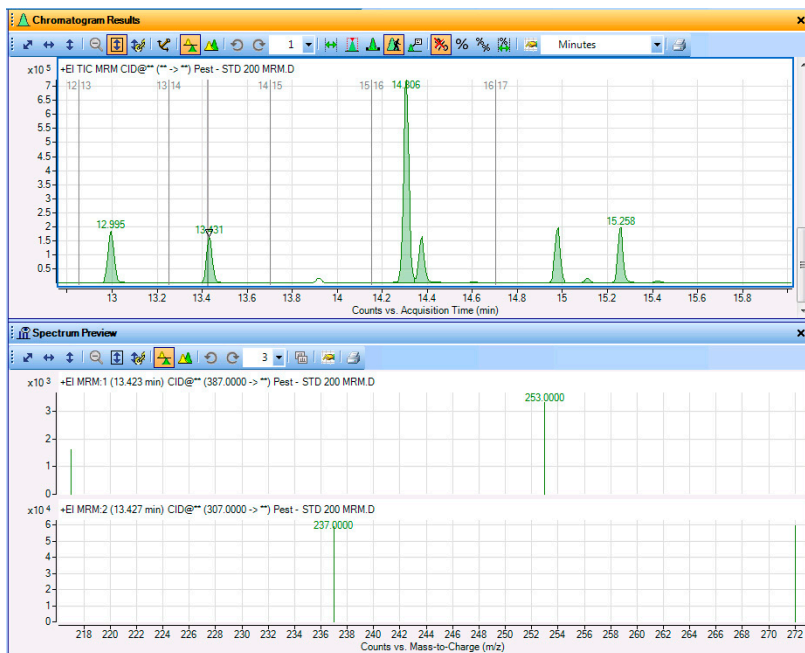






Figura 18 Extraiga un cromatograma para ver los dos espectros MRM del pico a 13,43 minutos

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>2 Extrae espectros en puntos de datos concretos para el pico a los 5,2 minutos y el pico a los 14,3 minutos del archivo de datos Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none">• Extraiga un espectro del pico a los 5,2 min., o cercano a dicho valor, y seguidamente otro de valle, usando cualquiera de las opciones descritas en Comments.• Extraiga un espectro desde el pico de los 14,3 minutos, o cercano a dicho valor. (todavía no de valle)• Cambie la pantalla para mostrar al menos tres espectros.	<p>a Haga clic en el icono de List Mode, , en la barra de herramientas Chromatogram Results.</p> <p>b Cierre la ventana Spectrum Preview.</p> <p>c Haga clic en el icono de Zoom Out, , en la barra de herramientas Chromatogram Results.</p> <p>d Para ampliar al pico de los 5,2 minutos, haga clic con el botón derecho del ratón sobre el pico de los 4,0 min. y arrástrelo a los 6,0 min., y luego suéltelo.</p> <p>e En un pico cercano a los 5,2 min. extraiga un espectro usando cualquiera de los métodos de columna Comments.</p> <p>f En un valle cercano a los 5.1 min., extraiga el espectro.</p> <p>g Haga clic en el icono de Zoom Out, , en la barra de herramientas Chromatogram Results.</p> <p>h Aumente la región entre los 14 y los 15 min.</p> <p>i En un pico cercano a los 14,3 min. extraiga un espectro usando cualquiera de los métodos de columna Comments. (Todavía no extraiga el espectro de valle.)</p> <p>j Si es necesario, seleccione 4 en el icono Maximum number of list panes de la barra de herramientas MS Spectrum Results.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Cuando use el zoom, asegúrese de que el icono AutoScale Y-axis during Zoom, , muestra "on". El fondo del icono es naranja cuando se encuentra activado.• También puede extraer un espectro de una de las siguientes formas:<ul style="list-style-type: none">• Haga doble clic en el punto de datos del cromatograma.• Haga clic en el punto de datos del cromatograma, y, seguidamente, haga clic con el botón derecho en el cromatograma. Haga clic en Extract MS Spectrum. Se abrirá el cuadro de diálogo Extract Spectrum. Asegúrese de haber seleccionado el archivo Pest - STD 200 MRM.d y haga clic en Extract en el cuadro de diálogo Extract Spectrum dialog box.• Nótese que cuando se extrae un espectro por primera vez, aparece la ventana MS Spectrum Results con el espectro y el tipo de espectro y tiempo de retención aparecen bajo User Spectra. Todos los espectros que se extraigan posteriormente aparecerán también en ambos lugares.• Cuando extrae un espectro MS desde el pico cercano a los 14,3 minutos, se extraen dos espectros porque se producen dos transiciones en dicho pico.

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
-------	--------------------------	-------------

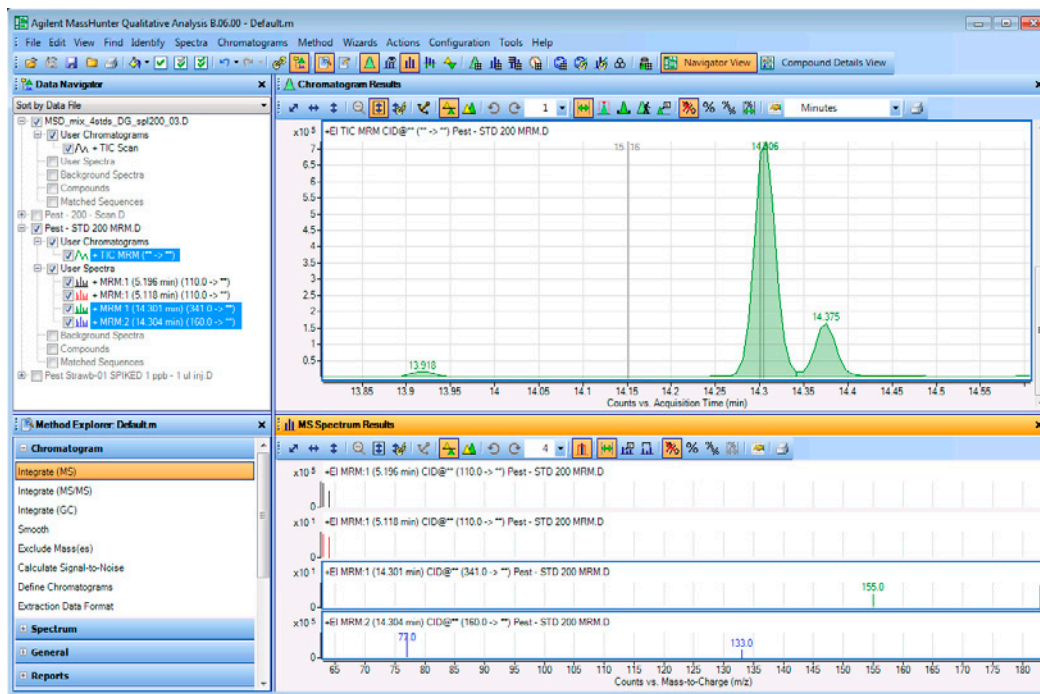



Figura 19 Ventana principal con dos espectros MRM desde el pico de los 5,2 minutos y dos espectros MRM desde el pico a los 14,3 minutos

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
3 Extraiga un espectro MS del valle a los 14,35 minutos del archivo de datos Pest - STD 200 MRM.d . <ul style="list-style-type: none">Abra Spectrum Preview.Extraiga un espectro desde el valle de los 14.3 minutos RT.Copie dicho espectro a la carpeta User Spectra.Cambie la pantalla para mostrar 6 espectros.Apague Spectrum Preview.	a Haga clic en el icono Spectrum Preview ,  . b En un valle cercano a los 14,3 minutos, extraiga un espectro. c Haga clic con el botón derecho en un espectro de la ventana Spectrum Preview, y haga clic en Copy to User Spectra . Los espectros se copian a la sección User Spectra en Data Navigator y se muestran en la ventana MS Spectrum Results. d Pulse la flecha hacia abajo junto a la lista de paneles de espectro, y seleccione 6 . e Cierre la ventana Spectrum Preview.	<ul style="list-style-type: none">• Cuando se habilita Spectrum Preview, el sistema muestra cualquier espectro seleccionado manualmente en la ventana Spectrum Preview, pero no en la sección User Spectra de Data Navigator.• Con Spectrum Preview habilitado, Qualitative Analysis sobrescribe el espectro anterior al extraer uno nuevo.• El modo Spectrum Preview es útil cuando se desea revisar rápidamente los espectros de su cromatograma y guardar solo algunos de los espectros.

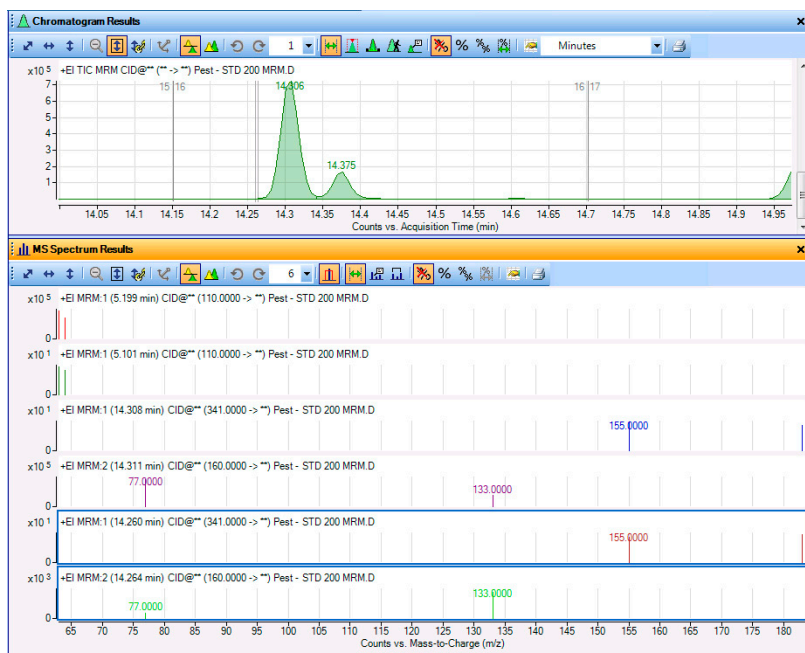



Figura 20 Ventanas Chromatogram Results y MS Spectrum Results

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>4 Extraiga un espectro que promedie todos los puntos de un rango específico para el pico de los 14,3 minutos en el archivo de datos Pest - STD 200 MRM.d:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Aleje el zoom. • Utilice el icono Range Select de la barra de herramientas Chromatogram. • Configure el rango en todo el pico. • Extraiga el espectro mediante cualquiera de las opciones disponibles. 	<p>a Utilice el icono de Range Select, , en la barra de herramientas Chromatogram.</p> <p>b Haga clic en la parte izquierda de la base del pico a los 14,3 minutos y arrastre la base del pico hacia la derecha.</p> <p>c Extraiga el espectro medio mediante una de las opciones de que dispone a la derecha.</p> <p>d Seleccione 2 en Maximum number of list panes de la ventana MS Spectrum Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Puede extraer un espectro promedio haciendo doble clic en el rango seleccionado del cromatograma. • También puede hacer clic con el botón derecho del ratón en cualquier lugar del cromatograma y pulse Extract MS Spectrum desde el menú de acceso directo. • Nótese que aparecen dos espectros MRM promediados.

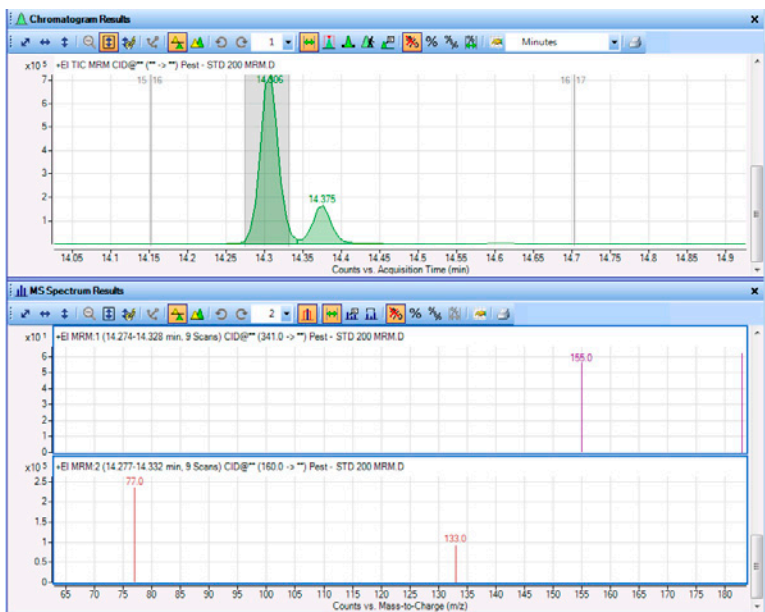


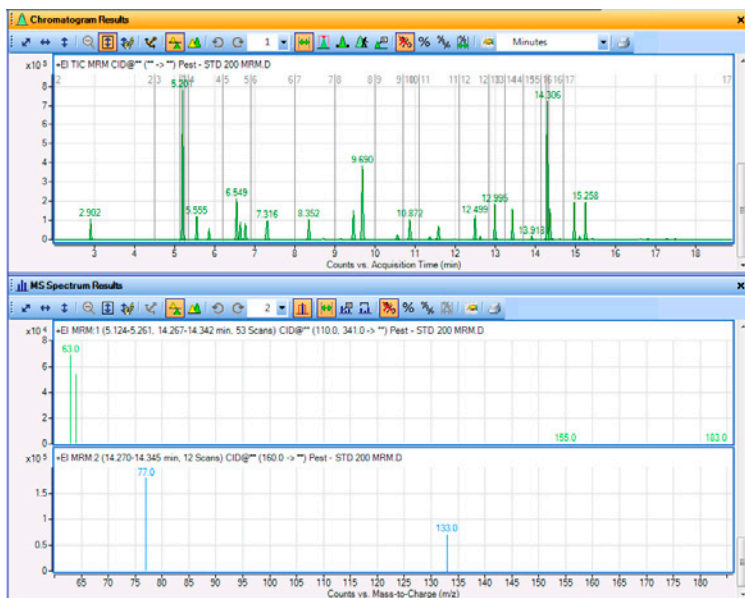
Figura 21 Chromatogram Results y MS Spectrum Results con dos espectros promediados

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma


Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>5 Extraiga espectros que promedien los rangos de picos a los 5,2 minutos y a los 14,3 minutos combinados para el archivo de datos Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none">• Sugerencia: Utilice el icono Range Select y la tecla Ctrl para seleccionar el rango de Pico 1 desde el punto medio.• Extraiga los espectros mediante cualquiera de las opciones de que dispone a la derecha.	<p>a Haga clic en el icono de Zoom Out, en la barra de herramientas Chromatogram Results.</p> <p>b Pulse la tecla Ctrl.</p> <p>c Haga clic en la parte izquierda del pico a los 5,2 minutos, arrastre el ratón hacia la derecha de dicho pico y suéltelo.</p> <p>d Suelte la tecla Ctrl.</p> <p>e Extraiga los espectros promediados usando esta opción, o alguna de las que dispone a la derecha:</p> <ul style="list-style-type: none">• Haga doble clic dentro del rango seleccionado en cualquier pico.	<ul style="list-style-type: none">• Recuerde que el segundo pico ya cuenta con un rango seleccionado desde el paso 4.• Para extraer espectros, también puede hacer clic con el botón derecho del ratón en cualquier lugar del cromatograma y hacer clic en Extract MS Spectrum. Se abrirá el cuadro de diálogo Extract Spectrum. Haga clic en Extract.



El primer espectro cuenta con transiciones desde ambos rangos temporales. El segundo espectro únicamente cuenta con un rango temporal porque la transición 160.00 -> ** no está presente en el pico de los 5,2 minutos.

Figura 22 Dos espectros promediados de dos rangos distintos en el cromatograma

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>6 Reste un espectro de fondo cada vez que extraiga un espectro de pico desde Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Elimine cualquier barrido en User Spectra de Data Navigator. • Extraiga un espectro de fondo que sea el promedio de un espectro al inicio del pico y un espectro al final del pico. • Extraiga un espectro de pico de los picos integrados. 	<p>a Haga clic en la línea User Spectra de Data Navigator. Haga clic con el botón derecho en la línea User Spectra y haga clic en Delete.</p> <p>b Haga clic en Yes.</p> <p>c En Method Explorer, seleccione Spectrum > Extract (MS/MS).</p> <p>d Haga clic en la pestaña Peak Spectrum Extraction (MS/MS), si no es visible.</p> <p>e En la casilla Peak spectrum background MS/MS, seleccione Average of spectra at peak start and end.</p> <p>f En la barra de herramientas Chromatogram Results, haga clic en el icono Peak Select, .</p> <p>g Haga clic en el comando Chromatograms > Integrate.</p> <p>h Seleccione el pico de los 5,206 minutos.</p> <p>i Haga clic con el botón derecho y pulse en Extract Peak Spectrum desde el menú de acceso directo.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Nótese que al final de este proceso, de los espectros de pico extraídos se restarán automáticamente los espectros de fondo elegidos.

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Pasos

Instrucciones detalladas

Comentarios

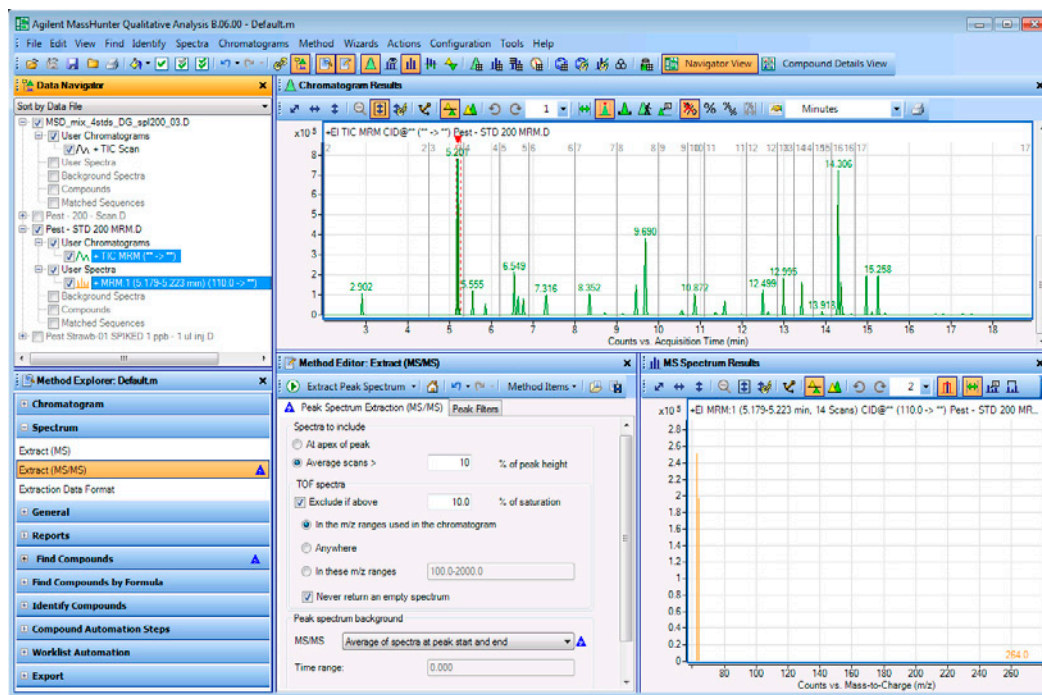


Figura 23 Espectros de pico con espectro de pico de fondo restado

Tarea 9. Extraer espectros de un cromatograma

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
7	<p>Integre y extraiga espectros de pico desde el archivo de datos Pest - STD 200 MRM.d.</p> <p>a Haga clic en el cromatograma TIC MRM de la ventana Data Navigator. b Haga clic en Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Los espectros de pico que reste manualmente en el paso anterior se borrarán automáticamente porque la casilla de verificación Clear previous peak spectra se encuentra marcada en la pestaña Chromatograms > Integrate (MS/MS) > Results.

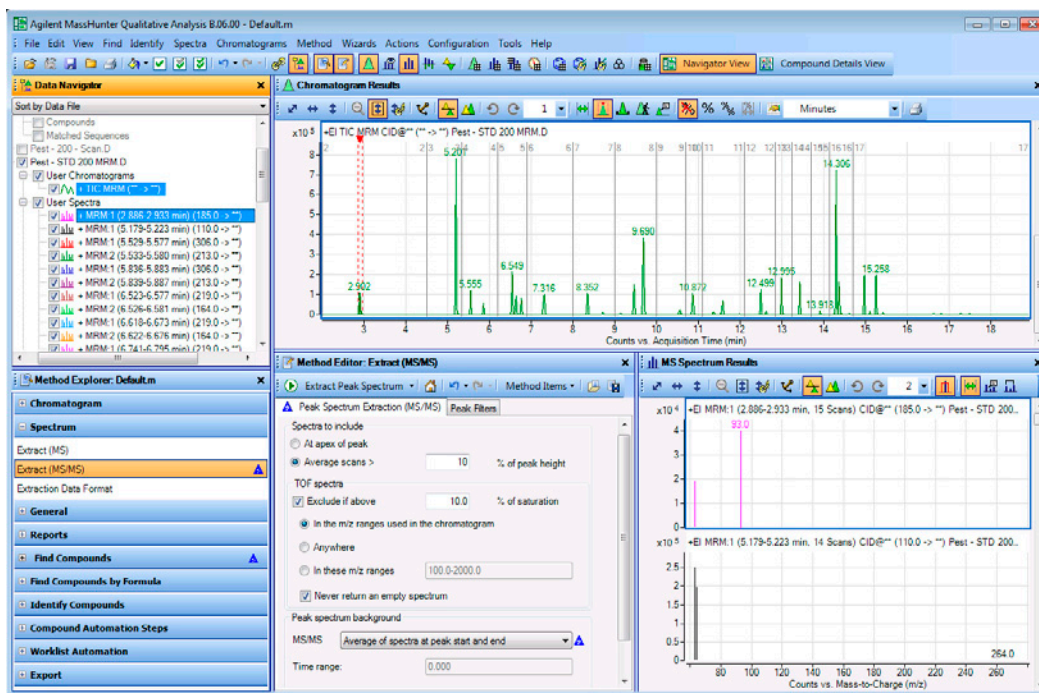


Figura 24 Integrar y extraer espectros de picos

8	<p>Eliminar los resultados de integración y los espectros de pico.</p> <p>a Seleccione el archivo de datos Pest - Std 200 MRM.d. b Haga clic en Chromatograms > Clear Results > Include Peak Spectra.</p>	<ul style="list-style-type: none"> También puede hacer clic en Chromatograms > Clear Results > Only Chromatograms si no desea borrar el espectro de pico.
---	--	---


Tarea 10. Añadir anotaciones

Puede añadir una anotación de imagen o una anotación de texto en las siguientes ventanas gráficas:

- Ventana Chromatogram Results
- Ventana MS Spectrum Results

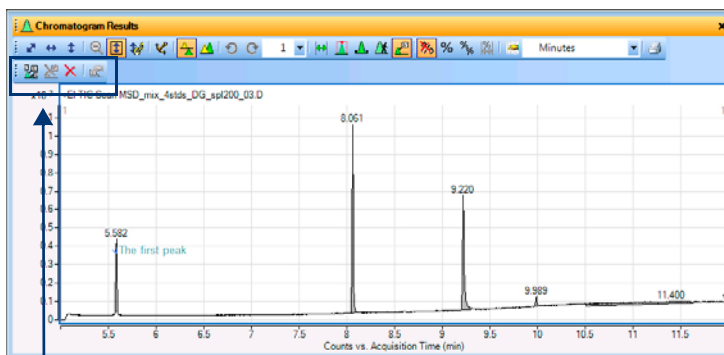
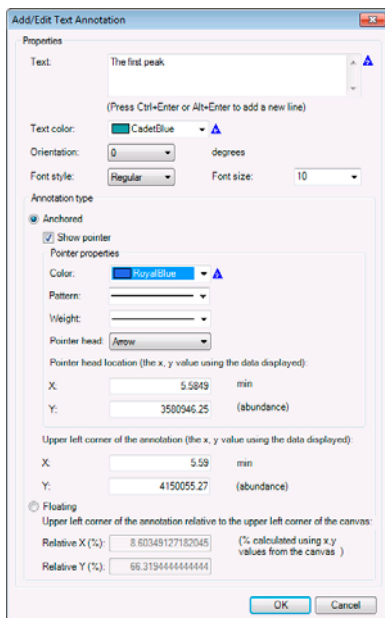
Si guarda los resultados del archivo de datos, también se guardan las anotaciones.

Tarea 10. Añadir anotaciones

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
1 Seleccione el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d. Oculte los demás cromatogramas.	<p>a Marque la casilla de verificación situada junto al archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D en la ventana Data Navigator.</p> <p>b Haga clic en Edit > Show > Only Highlighted.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Los cromatogramas de los demás archivos de datos se ocultan de manera automática.
2 Seleccione la ubicación del cromatograma en la que desea añadir una anotación de texto.	<p>a En la ventana Chromatogram Results, haga clic en la herramienta Annotation () de la barra de tareas.</p> <p>b Desplace el cursor a la ubicación del panel del cromatograma en la que desea añadir la anotación.</p> <p>c Haga clic con el botón derecho y seguidamente haga clic en Add Text Annotation.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • El cursor cambia a una cruz. Se utiliza este cursor para seleccionar la ubicación exacta en la que añadir la anotación. • La barra de herramientas Annotate está disponible en la ventana Chromatogram Results. • También puede añadir anotaciones a la ventana MS Spectrum Results.

Tarea 10. Añadir anotaciones (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
3	<p>Añada la información sobre la anotación de texto del cuadro de diálogo Add/Edit Text Annotation.</p> <p>a Escriba el Texto de la anotación. b Seleccione el Texto color. c Seleccione la Orientación. d Seleccione el Estilo de fuente y el Tamaño de fuente. e Haga clic en Anclado o Flotante. Si selecciona Anclado, seleccione las opciones con las que el puntero anotará el texto. Si hace clic en Flotante, podrá cambiar la posición relativa. Es más sencillo cambiar la posición de manera interactiva en la ventana de gráficos. f Haga clic en OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Puede añadir múltiples anotaciones en un cromatograma o espectro. • Puede utilizar los iconos de la barra de herramientas Annotate para seleccionar todas las anotaciones, borrar anotaciones y editar anotaciones.



La barra de herramientas Annotate solo está disponible cuando se selecciona la herramienta Annotate.

Figura 25 Cuadro de diálogo Add/Edit Text Annotation y ventana Chromatogram Results

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 10. Añadir anotaciones

Tarea 10. Añadir anotaciones (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
4 Seleccione la ubicación del cromatograma en la que desea añadir una anotación de imagen.	<p>a Desplace el cursor a la ubicación del panel del cromatograma en la que desea añadir la anotación.</p> <p>b Haga clic con el botón derecho y seguidamente haga clic en Add Image Annotation.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Puede añadir un archivo de imagen JPG o MOL.
5 Añada la información sobre la anotación de texto del cuadro de diálogo Add/Edit Text Annotation.	<p>a Escriba el Texto de la anotación.</p> <p>b Escriba 50 para la anchura de Scale.</p> <p>c Marque la casilla de verificación Lock aspect ratio.</p> <p>d Haga clic en Floating. Puede cambiar la posición relativa. Es más sencillo cambiar la posición de manera interactiva en la ventana de gráficos.</p> <p>e Haga clic en OK.</p> <p>f Desplace la imagen a la esquina superior derecha del cromatograma.</p>	<ul style="list-style-type: none">• El archivo Agilent_Logo.tif está incluido en la carpeta \\ MassHunter\Report Templates\Qual\B.05.00\en-1• Qual\B.05.00\en-US\Letter. Deberá convertirlo a archivo JPG.• Puede añadir múltiples anotaciones en un cromatograma o espectro.

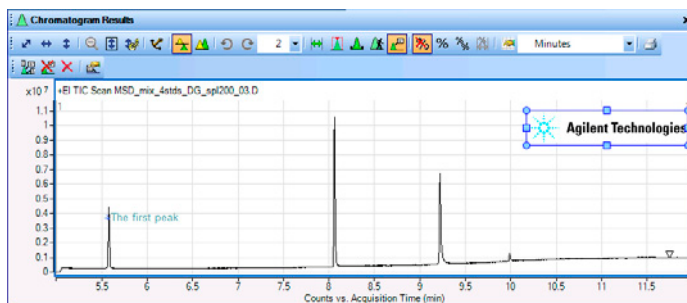
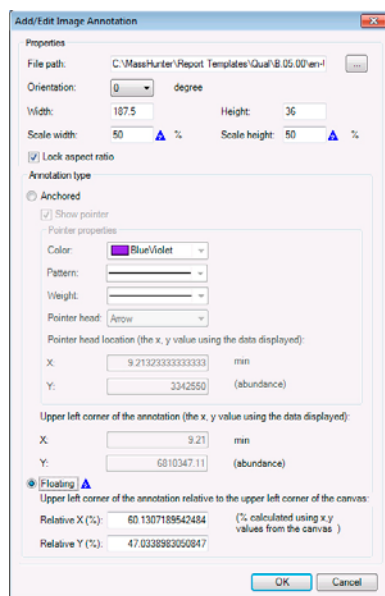
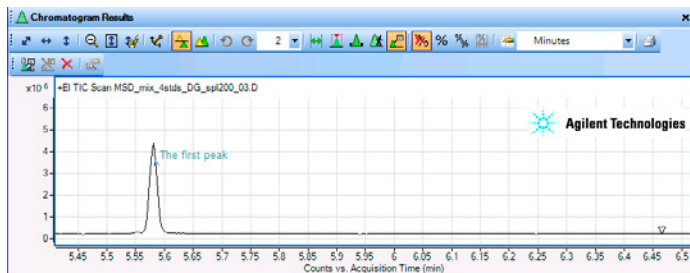


Figura 26 Cuadro de diálogo Add/Edit Image Annotation y ventana Chromatogram Results



Tarea 10. Añadir anotaciones (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
6	Amplíe la imagen al primer pico. <ul style="list-style-type: none"> Haga zoom a una zona alrededor del primer pico de los 5,5 minutos 	



Si existe una anotación anclada, permanecerá acoplada a la posición en la que está anclada. Si amplía un pico diferente, es posible que las anotaciones ancladas no sean visibles. Si las anotaciones son flotantes, dichas anotaciones se mostrarán siempre en la misma posición relativa a la esquina superior izquierda de la ventana.

Figura 27 Cuadro de diálogo Add/Edit Image Annotation y ventana Chromatogram Results

7	Vuelva a la herramienta Range Select de la ventana Chromatogram Results. Elimine primero la anotación. <ol style="list-style-type: none"> Haga clic en el icono  para eliminar todas las anotaciones. Haga clic en el icono  (Range Select) de la barra de herramientas Chromatogram Results. 	<ul style="list-style-type: none"> Si desea guardar las anotaciones con los resultados del archivo de datos, consulte “Tarea 17. Guardar resultados” en la página 68. Puede cambiar entre cinco herramientas distintas en la barra de herramientas Chromatogram Results. Consulte la ayuda en línea para obtener más información. Las cinco herramientas son: <ul style="list-style-type: none"> Range Select Peak Select Manual Integration Walk Chromatogram Annotation Mouse
---	---	---

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo


Tarea 11. Añadir un calibrador de masa

Tarea 11. Añadir un calibrador de masa


El calibrador muestra la diferencia entre dos puntos de un espectro. También puede añadir un calibrador a la ventana MS Spectrum Results.

Si guarda los resultados del archivo de datos, también se guardan los calibradores.

Tarea 11. Añadir un calibrador de masa

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
1 Integre y extraiga espectros de picos desde MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.	<p>a Marque la casilla de verificación situada junto al archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D en la ventana Data Navigator.</p> <p>b Haga clic en Edit > Show > Only Highlighted.</p> <p>c Haga clic en Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra.</p> <p>d Cierre la ventana Method Editor.</p>	
2 Añada el calibrador al espectro de picos creado en la tarea anterior.	<p>a En la ventana MS Spectrum, haga clic en la herramienta Delta Mass Caliper () de la barra de tareas.</p> <p>b (opcional) Seleccione Profile Point to Point para el tipo de calibrador en la barra de herramientas Caliper.</p> <p>c Aumente la imagen de 66 a 132 m/z.</p> <p>d Desplace el cursor a la ubicación del panel de espectros en la que desea añadir el calibrador.</p> <p>e Arrastre el cursor al punto final del calibrador en el espectro. Mientras arrastra el cursor, el valor de la masa delta cambia. Cuando suelte el botón del ratón, se añadirá el calibrador.</p>	<ul style="list-style-type: none">• El cursor cambiará a una flecha. Utilizará el cursor para seleccionar el punto inicial y final del calibrador.• No puede seleccionar el tipo de calibrador si el espectro es baricéntrico porque Profile Point to Point no tiene efecto alguno en datos baricéntricos.• El cursor "triángulo" se configura en la parte superior del pico seleccionado.

Tarea 11. Añadir un calibrador de masa (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
3	<p>Modificar el calibrador para utilizar un color distinto.</p> <p>a Haga clic en el calibrador creado en el paso anterior.</p> <p>b Haga clic en el botón Caliper Properties () de la barra de herramientas MS Spectrum Results Caliper.</p> <p>c (opcional) Escriba los valores Start X y Start Y.</p> <p>d Seleccione el Texto color.</p> <p>e Seleccione el Estilo de fuente y el Tamaño de fuente.</p> <p>f Haga clic en OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Puede añadir múltiples calibradores a un espectro. • Puede utilizar los iconos de la barra de herramientas Caliper para seleccionar todos los calibradores, y para borrar y editar calibradores.

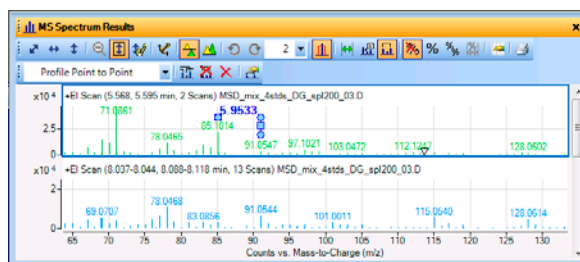
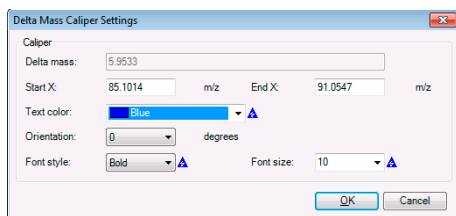
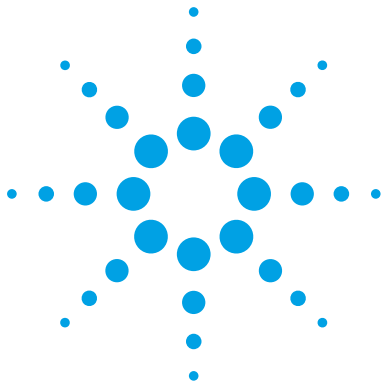


Figura 28 Cuadro de diálogo Delta Mass Caliper Settings y ventana MS Spectrum Results

4	<p>Borrar resultados de integración y espectros.</p> <p>a Haga clic en Chromatograms > Clear Results > Include Peak Spectra.</p> <p>b Haga clic en la herramienta Range Select.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Si desea guardar los calibradores con los resultados del archivo de datos, consulte “Tarea 17. Guardar resultados” en la página 68.
---	---	---

1 Aprender los conceptos básicos del análisis cualitativo

Tarea 11. Añadir un calibrador de masa



2 Buscar y encontrar

Tarea 12. Encontrar compuestos por desconvolución de cromatograma	48
Tarea 13. Identificar compuestos usando el algoritmo Search Library	52
Tarea 14. Encontrar compuestos por MRM (solo MRM)	56
Tarea 15. Encontrar compuestos por Integración	60
Tarea 16. Generar fórmulas y bibliotecas de búsqueda para espectros de pico	63
Tarea 17. Guardar resultados	68

En estas tareas, aprenderá a identificar compuestos en archivos de datos GC/MS.

Cada ejercicio se presenta en una tabla con tres columnas:

- **Pasos:** utilice estas instrucciones generales para avanzar a su ritmo en la exploración del programa.
- **Instrucciones detalladas:** recurra a ellas si necesita ayuda o prefiere usar un proceso de aprendizaje paso a paso.
- **Comentarios:** léalos para aprender consejos e información adicional sobre cada paso de un ejercicio.



2 Buscar y encontrar

Tarea 12. Encontrar compuestos por desconvolución de cromatograma

Tarea 12. Encontrar compuestos por desconvolución de cromatograma

Este algoritmo FindCompounds identifica compuestos en datos GC/y crea un espectro MS limpio de cada compuesto. Esta función es una forma sencilla de “extraer” información a partir de datos complejos. Solo se puede usar el algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution en datos GC/MS de muestra adquiridos en modo de barrido Scan, Product Ion scan o Neutral Loss.

Esta tarea muestra cómo encontrar compuestos por desconvolución de cromatograma con datos precisos de masa. También puede encontrar compuestos por desconvolución de cromatograma con datos unitarios de masa una vez que haya modificado previamente la ventana de extracción.

Tarea 12. Encontrar compuestos usando Chromatogram Deconvolution (GC/MS)

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
1	<p>Abra TIC desde el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>a Si el programa no se abre, haga doble clic en el icono MassHunter Qualitative Analysis. También puede hacer clic en File > Open Data File.</p> <p>b Haga clic en el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d en la carpeta de archivos de datos de ejemplo GC.</p> <p>c Desmarque la casilla de verificación Load result data y haga clic en Open.</p>	<ul style="list-style-type: none">El algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution funciona tanto con archivos de datos GC/QQQ como GC/Q-TOF.

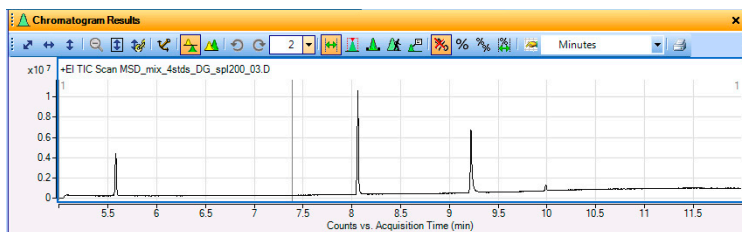


Figura 29 Cromatograma TIC de Pest - 200 - Scan.d

Tarea 12. Encontrar compuestos por desconvolución de cromatograma

Tarea 12. Encontrar compuestos usando Chromatogram Deconvolution (GC/MS)

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
2	Configurar la interfaz del usuario para utilizarla con datos GC/QQQ	Para estos ejemplos, cargue el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening.
3	<p>Encontrar compuestos usando el algoritmo de desconvolución de cromatograma.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Seleccione el integrador Agile. • Indique un umbral SNR de 20. • Introduzca 100 ppm en los valores Left m/z delta y Right m/z delta. 	<ul style="list-style-type: none"> • La sección Chromatogram Deconvolution también está disponible en la sección GC/Q-TOF Compound Screening. • Si dispone de datos unitarios de masa, indique 0.3 AMU en el valor Left m/z delta y 0.7 AMU en el valor Right m/z delta • Puede extraer el conjunto completo de resultados de un compuesto después de encontrarlo usando el elemento del menú Compounds > Extract Complete Result Set cuando un compuesto se encuentra resaltado.

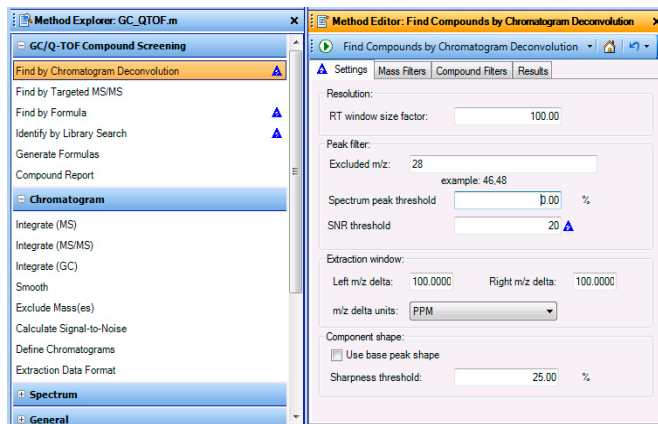



Figura 30 Pestaña de la sección Find by Chromatogram Deconvolution

2 Buscar y encontrar

Tarea 12. Encontrar compuestos por desconvolución de cromatograma

Tarea 12. Encontrar compuestos usando Chromatogram Deconvolution (GC/MS)

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
<ul style="list-style-type: none">• Selecciónela para extraer EIC, espectros MS y espectros MS/MS.	<ul style="list-style-type: none">e Haga clic en la pestaña Results.f Marque las casillas de verificación Extract EIC, Extract ECC, Extract cleaned spectrum y Extract raw spectrum.g Haga clic en  para ejecutar el algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution del archivo de datos.h Si es necesario, haga clic en el comando View > Compound List.	<ul style="list-style-type: none">• El programa Qualitative Analysis encuentra 4 compuestos en estas condiciones.• Si el archivo de datos no está indexado, puede tardar mucho tiempo cuando ejecuta este algoritmo.
<p>4 Examine los compuestos. Consulte Figura 31 en la página 51.</p>	<ul style="list-style-type: none">a Seleccione 2 en el recuadro Maximum number of list panes de la barra de herramientas MS Spectrum Results.b Haga clic en el icono Hide Empty Columns de la ventana Compound List.c Haga clic en el primer compuesto de la ventana Data Navigator.d Cuando se selecciona la ventana Data Navigator, utilice las teclas de navegación para cambiar de compuesto.	<ul style="list-style-type: none">• Mostrar ambos espectros es una forma cómoda de visualizar toda la información de un único compuesto.• Nótese que se muestran tanto el espectro limpio como el espectro sin procesar.

Tarea 12. Encontrar compuestos por desconvolución de cromatograma

Tarea 12. Encontrar compuestos usando Chromatogram Deconvolution (GC/MS)

Paso

Instrucciones detalladas

Comentarios

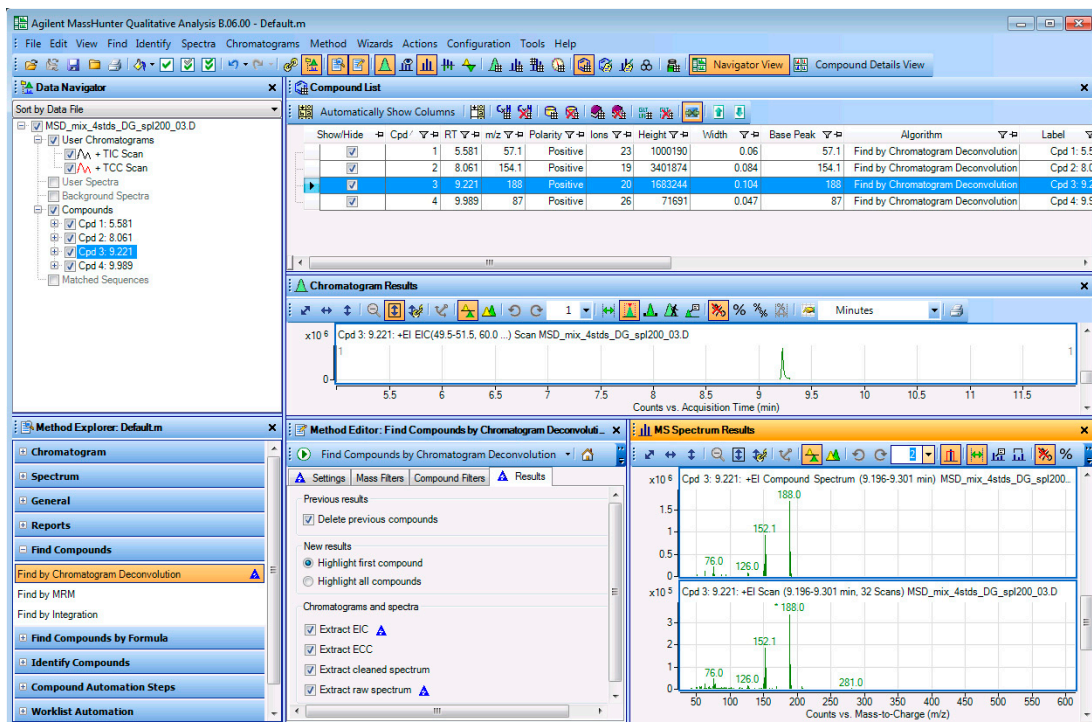


Figura 31 Resultados de Find Compounds by Chromatogram Deconvolution



2 Buscar y encontrar

Tarea 13. Identificar compuestos usando el algoritmo Search Library

Tarea 13. Identificar compuestos usando el algoritmo Search Library



En esta tarea, identificará y generará fórmulas para los compuestos que encontrará en “Tarea 12. Encontrar compuestos por desconvolución de cromatograma” en la página 48. Puede realizar esta tarea si ha adquirido la biblioteca *NIST08.l* o si utiliza la biblioteca *demo.l*. Si dispone de dos bibliotecas, puede seleccionar ambas.

Tarea 13. Identificar compuestos usando el algoritmo Search Library

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
1	<p>Realice una búsqueda de biblioteca de todos los compuestos del archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>a Resaltar los compuestos del archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D en la ventana Data Navigator.</p> <p>b En la ventana Method Explorer, haga clic en Identify Compounds > Search Unit Mass Library.</p> <p>c En la pestaña Settings, haga clic en el botón Add Library. Seleccione la biblioteca demo.l y haga clic en el botón OK.</p> <p>d (opcional) En la pestaña Settings, haga clic en el botón Add Library. Seleccione la biblioteca NIST08.l y haga clic en el botón OK.</p> <p>e Haga clic en la pestaña Search Results.</p> <p>f (opcional) Seleccione Stop When Found como Multi-Library search type.</p> <p>g Haga clic en Identify > Search Library for Compounds en el menú principal. También puede hacer clic en Search Library for Compounds, icono  para ejecutar el algoritmo.</p> <p>h Haga clic en View > Difference Results.</p> <p>i Haga clic en View > Structure Viewer.</p> <p>j Haga clic en View > Compound Identification Results si es necesario para ver esta ventana.</p> <p>k Si es necesario, haga clic en la pestaña de la ventana Compound Identification Results. Esta ventana está tabulada con la ventana Chromatogram Results.</p>	<ul style="list-style-type: none">• También puede hacer clic en GC/Q-TOF Compound Screening > Identify by Library Search en Method Explorer. También se muestra la misma sección de la ventana Method Editor.• Demo.l y Nist08 deben instalarse en la carpeta \MassHunter\Libraries.• Nótese que muchos de los compuestos se identifican después de buscar la biblioteca <i>NIST08.l</i>.• Si no dispone de la biblioteca <i>NIST08.l</i>, seleccione una segunda biblioteca si dispone de ella.• Si selecciona dos o más bibliotecas y después selecciona Stop When Found, el algoritmo de búsqueda de bibliotecas busca la primera de la lista. Si se identifica el compuesto, se detiene. Si no se identifica el compuesto, busca la siguiente biblioteca hasta identificar el compuesto o hasta terminar de buscar en la última biblioteca.• Utilice el programa Library Editor para modificar aquellas bibliotecas que utiliza con el algoritmo Search Unit Mass Library. El programa se instala junto con el programa Agilent MassHunter Quantitative Analysis. Haga clic en el icono  para iniciar este programa.

Tarea 13. Identificar compuestos usando el algoritmo Search Library

Tarea 13. Identificar compuestos usando el algoritmo Search Library

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
2	<p>Columnas Display the Spectral Library Results de la ventana Compound List window y la ventana Compound Identification Results.</p> <p>a Haga clic en el botón Show Library Search Columns () de la barra de herramientas Compound List y en la barra de herramientas Compound Identification Results.</p> <p>b Haga clic en el botón Hide Empty Columns button () de la barra de herramientas Compound List y en la ventana Compound Identification Results.</p>	

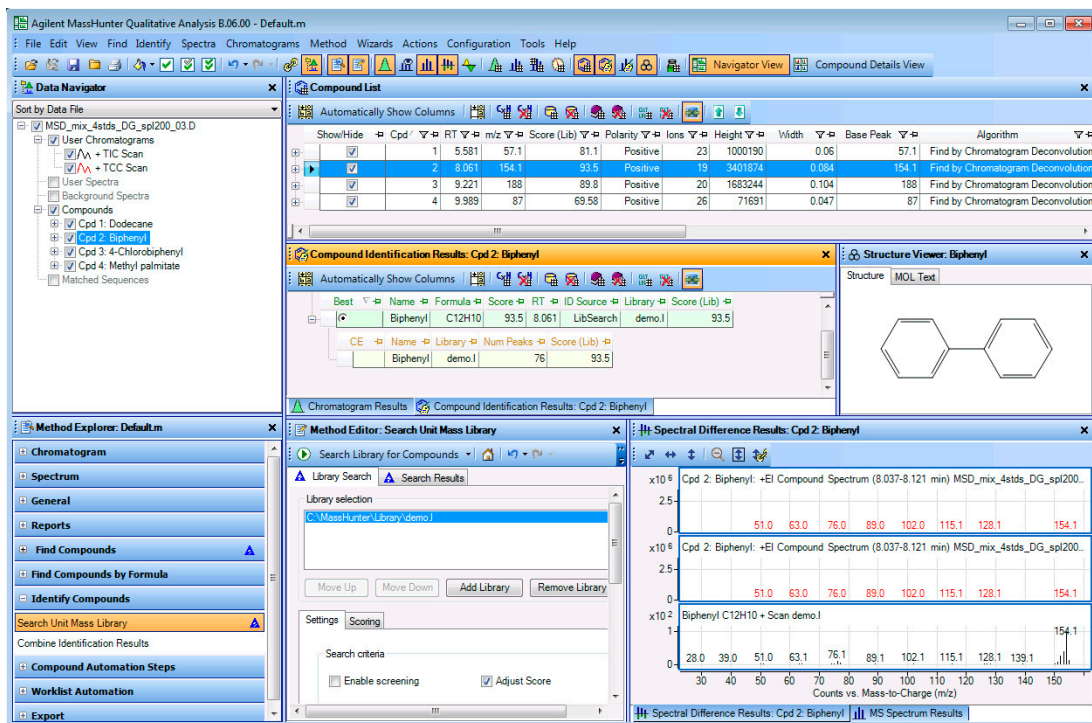


Figura 32 Compuestos del archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D y resultados de búsqueda de biblioteca

2 Buscar y encontrar

Tarea 13. Identificar compuestos usando el algoritmo Search Library

Tarea 13. Identificar compuestos usando el algoritmo Search Library

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
3	<p>Cambie a Compound Details View para revisar los compuestos.</p>	
4	<p>Revise los resultados en Compound Details View.</p>	<ul style="list-style-type: none">Puede ampliar información acerca de Compound Details View en la Ayuda en línea. Compound Details View es muy útil cuando revisa los resultados del algoritmo Find by Formula con un archivo de datos adquirido en modo All Ions.

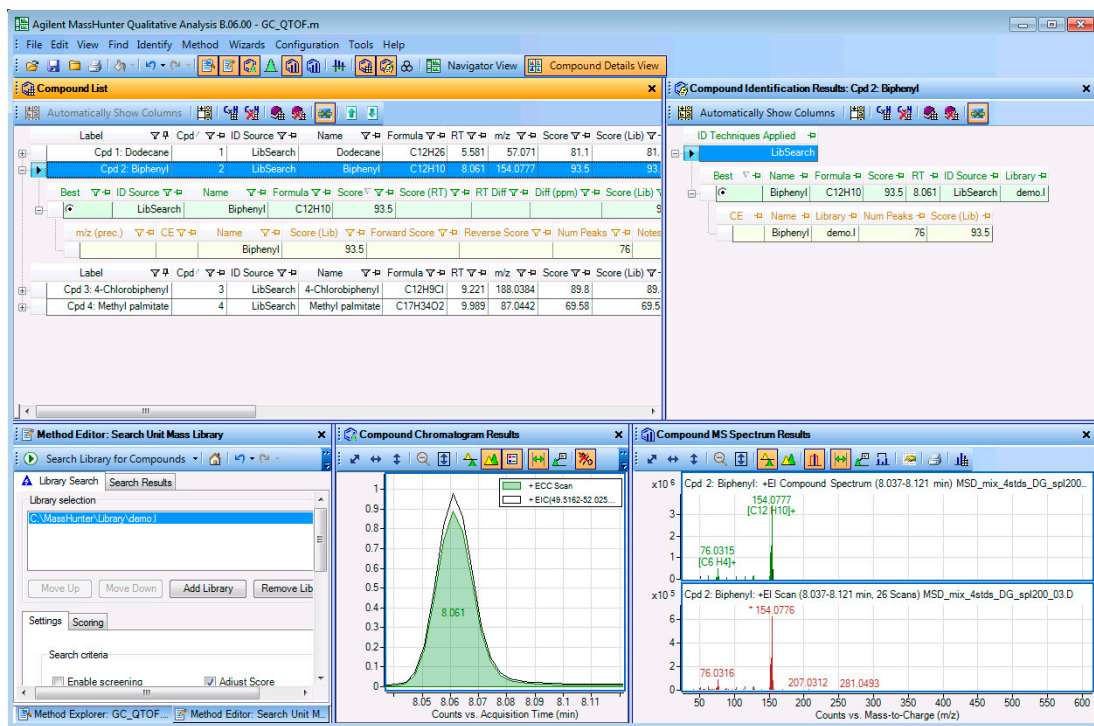



Figura 33 Compound Details View mostrando compuestos en el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D

Tarea 13. Identificar compuestos usando el algoritmo Search Library

Tarea 13. Identificar compuestos usando el algoritmo Search Library

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
5 Volver a Navigator View.	<ul style="list-style-type: none"> Haga clic en el botón  Compound Details View de la barra de herramientas principal. 	
6 Cierre el archivo de datos.	<ul style="list-style-type: none"> a Haga clic en File > Open Data File. b Haga clic en No. 	<ul style="list-style-type: none"> Si desea guardar los resultados, consulte "Tarea 17. Guardar resultados" en la página 68.

2 Buscar y encontrar

Tarea 14. Encontrar compuestos por MRM (solo MRM)

Tarea 14. Encontrar compuestos por MRM (solo MRM)

El algoritmo Find Compounds by MRM identifica compuestos en datos MRM a partir de un cuadrupolo triple. El algoritmo busca compuestos usando las transiciones MRM. Todos los compuestos del método de adquisición se extraen y muestran en Compound List. Los compuestos no se eliminan en función de los resultados de integración del cromatograma. También puede usar solo el algoritmo Find Compounds by MRM en datos adquiridos usando transiciones MRM. El algoritmo MRM utiliza información que se encuentra en el archivo de datos, cuando se trata de un archivo de datos MRM.

Tarea 14. Encontrar compuestos usando MRM (solo MRM)

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
1 Abra el TIC del archivo de datos Pest - STD 200 MRM.d .	<ol style="list-style-type: none">Si el programa no se abre, haga doble clic en el icono MassHunter Qualitative Analysis. También puede hacer clic en File > Open Data File.Haga clic en el archivo de datos Pest - STD 200 MRM.d de la carpeta de archivo de datos de ejemplo GC.Desmarque la casilla de verificación Load result data y haga clic en Open.	<ul style="list-style-type: none">• Cuando se trabaja con datos GC/QQQ se utiliza General Workflow. Puede utilizar General Workflow o el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening al trabajar con datos GC/Q-TOF.

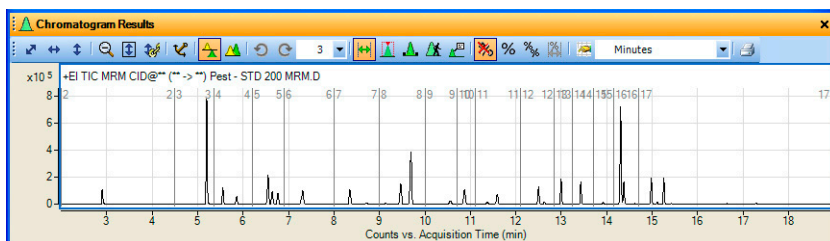


Figura 34 Cromatograma TIC de Pest - STD 200 MRM.d

- | | |
|---|--|
| 2 Configurar la interfaz del usuario para utilizarla con datos GC/QQQ | <ul style="list-style-type: none">• Siga las instrucciones indicadas en "Tarea 2. Configurar la interfaz de usuario para datos GC/MS" en la página 13. |
|---|--|

Tarea 14. Encontrar compuestos usando MRM (solo MRM)

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
3	<p>Encontrar compuestos usando el algoritmo MRM.</p> <p>a En la ventana Method Explorer, seleccione Find Compounds > Find by MRM.</p> <p>b Haga clic en el botón Group transitions by compound name.</p> <p>c Haga clic en la pestaña Integrator.</p> <p>d Seleccione el integrador Agile.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Puede elegir la región del cromatograma desde la que desea encontrar compuestos. • Puede extraer el conjunto completo de resultados de un compuesto después de encontrarlo usando el elemento del menú Compounds > Extract Complete Result Set cuando un compuesto se encuentra resaltado.

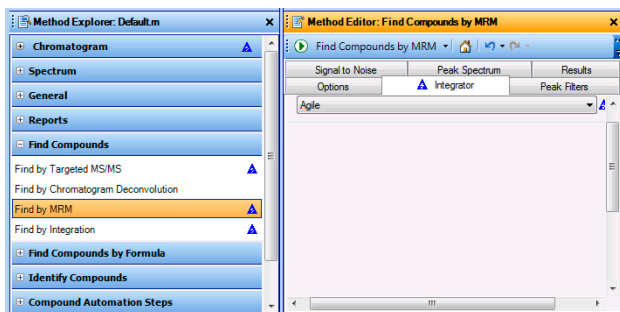



Figura 35 Pestaña Integrator en la sección Find by MRM de Method Editor

- e** Haga clic en  para ejecutar el algoritmo **Find Compounds by MRM** del archivo de datos.
 - f** Si es necesario, haga clic en el comando **View > Compound List**.
 - g** Si es necesario, haga clic en el comando **View > Compound Identification Results**.
- El programa Qualitative Analysis encuentra 28 compuestos en estas condiciones.

2 Buscar y encontrar

Tarea 14. Encontrar compuestos por MRM (solo MRM)

Tarea 14. Encontrar compuestos usando MRM (solo MRM)

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
4	<p>Examine los compuestos. Consulte Figura 36 en la página 58.</p> <p>a Seleccione 2 en el recuadro Maximum number of list panes de la barra de herramientas MS Spectrum Results.</p> <p>b Haga clic en el icono Automatically Show Columns de la ventana Compound List y en la ventana Compound Identification Results.</p> <p>c Haga clic en el primer compuesto de la ventana Data Navigator.</p> <p>d Cuando se selecciona la ventana Data Navigator, utilice las teclas de navegación para cambiar de compuesto.</p>	<ul style="list-style-type: none">El ion precursor se muestra en la columna Precursor (Acq Method) y el ion del producto se muestra en la columna Product (Acq Method) de la ventana Compound Identification Results.

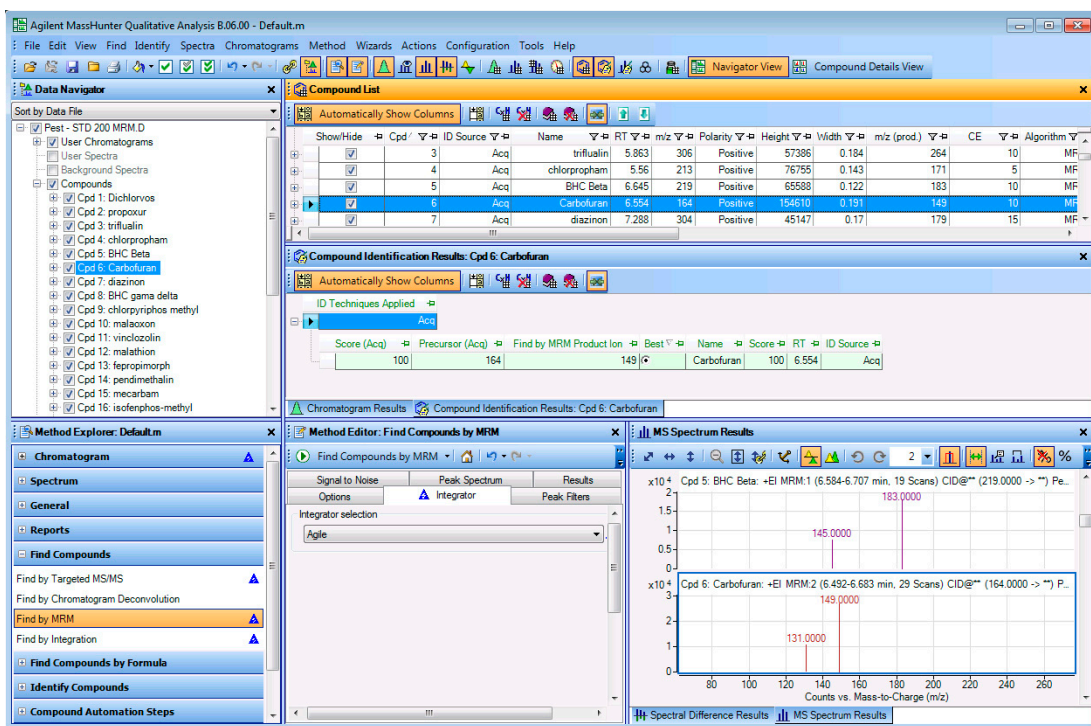


Figura 36 Encontrar por resultados MRM

Tarea 14. Encontrar compuestos por MRM (solo MRM)

Tarea 14. Encontrar compuestos usando MRM (solo MRM)

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
5 Cierre el archivo de datos.	<ul style="list-style-type: none"> a Haga clic en File > Open Data File. b Haga clic en Close. 	<ul style="list-style-type: none"> • Si desea guardar los resultados, consulte "Tarea 17. Guardar resultados" en la página 68.

2 Buscar y encontrar

Tarea 15. Encontrar compuestos por Integración

Tarea 15. Encontrar compuestos por Integración

El algoritmo Find Compounds by Integration identifica compuestos basándose en los resultados de integración. Se crea un compuesto por cada pico que identifica el integrador.

Tarea 15. Encontrar compuestos usando Integración

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
1	<p>abra TIC desde el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D.</p> <p>a Si el programa no se abre, haga doble clic en el icono MassHunter Qualitative Analysis. También puede hacer clic en File > Open Data File.</p> <p>b Haga clic en el archivo de datos Pest - STD 200 MRM.d de la carpeta de archivo de datos de ejemplo GC.</p> <p>c Desmarque la casilla de verificación Load result data y haga clic en Open.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Cuando se trabaja con datos GC/QQQ se utiliza General Workflow. Puede utilizar General Workflow o el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening al trabajar con datos GC/Q-TOF.

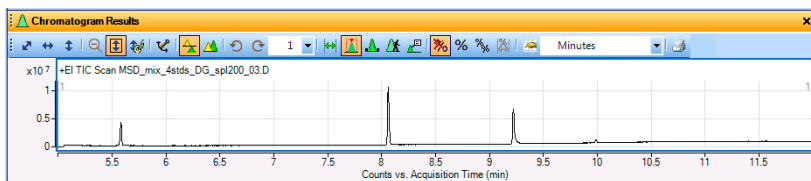


Figura 37 TIC chromatogram from MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d

2	<p>Configurar la interfaz del usuario para utilizarla con datos GC/QQQ</p> <p>a Siga las instrucciones indicadas en “Tarea 2. Configurar la interfaz de usuario para datos GC/MS” en la página 13.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Puede elegir la región del cromatograma desde la que desea encontrar compuestos.
3	<p>Encontrar compuestos usando el algoritmo de integración.</p> <p>a En la ventana Method Explorer, seleccione Find Compounds > Find by Integration.</p> <p>b Seleccione el integrador MS/MS (GC).</p>	<ul style="list-style-type: none">• Puede extraer el conjunto completo de resultados de un compuesto después de encontrarlo usando el elemento del menú Compounds > Extract Complete Result Set cuando un compuesto se encuentra resaltado.

Tarea 15. Encontrar compuestos usando Integración

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
------	--------------------------	-------------

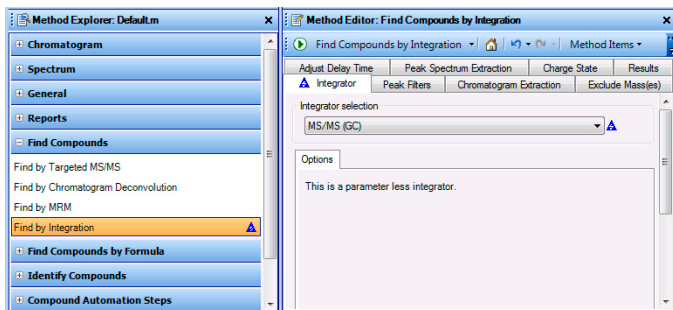



Figura 38 Pestaña Integrator en la sección Find by Integration de Method Editor

- | | |
|---|---|
| <p>c Haga clic en  para ejecutar el algoritmo Find Compounds by Integration del archivo de datos.</p> <p>d Si es necesario, haga clic en el comando View > Compound List.</p> | <ul style="list-style-type: none"> • El programa Qualitative Analysis encuentra 6 compuestos en estas condiciones. |
| <p>4 Examine los compuestos. Consulte Figura 36 en la página 58.</p> | <p>a Seleccione 2 en el recuadro Maximum number of list panes de la barra de herramientas MS Spectrum Results.</p> <p>b Haga clic en el icono Automatically Show Columns de la ventana Compound List.</p> <p>c Haga clic en el primer compuesto de la ventana Data Navigator.</p> <p>d Cuando se selecciona la ventana Data Navigator, utilice las teclas de navegación para cambiar de compuesto.</p> |

2 Buscar y encontrar

Tarea 15. Encontrar compuestos por Integración

Tarea 15. Encontrar compuestos usando Integración

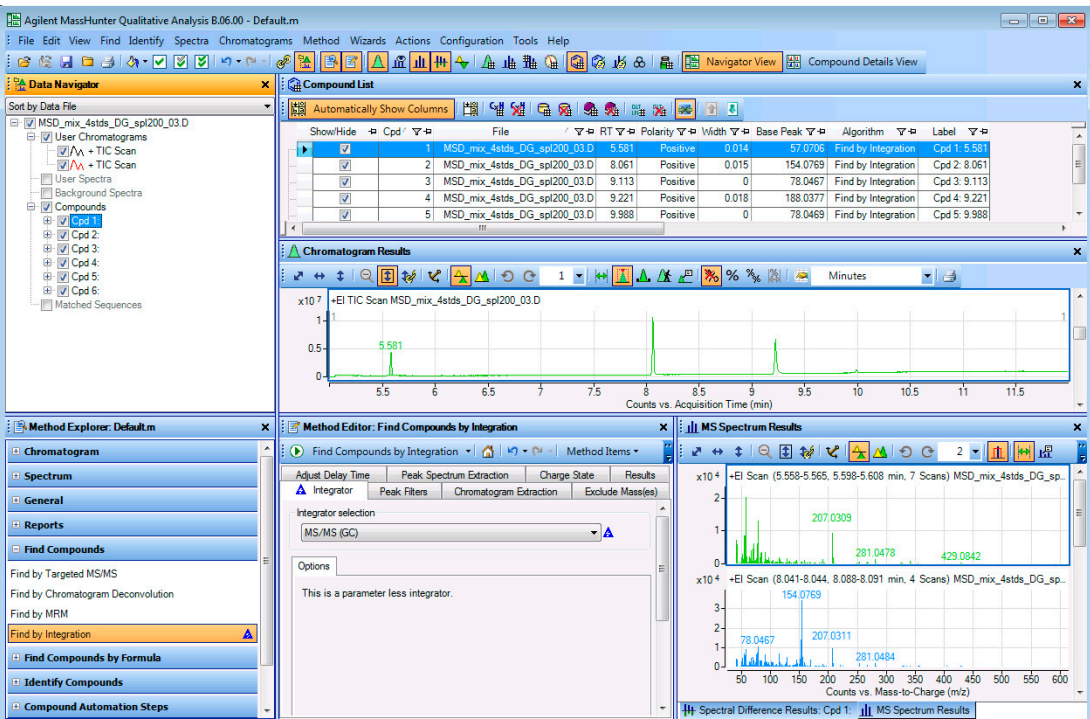
Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios																																										
	 <p>The screenshot displays the Agilent MassHunter Qualitative Analysis 8.06.00 interface. The 'Compound List' window shows five identified compounds with their retention times and base peaks. The 'Chromatogram Results' window shows a Total Ion Chromatogram (TIC) with peaks at 5.581, 8.061, 9.113, 9.221, and 9.988 minutes. The 'Method Editor' window shows the 'Find Compounds by Integration' method settings. The 'MS Spectrum Results' window shows mass spectra for the identified compounds, with peaks at 207.0309, 281.0478, and 429.0842 m/z.</p> <table border="1"><caption>Compound List</caption><thead><tr><th>File</th><th>RT</th><th>Polarity</th><th>Width</th><th>Base Peak</th><th>Algorithm</th><th>Label</th></tr></thead><tbody><tr><td>MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D</td><td>5.581</td><td>Positive</td><td>0.014</td><td>57.0706</td><td>Find by Integration</td><td>Cpd 1: 5.581</td></tr><tr><td>MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D</td><td>8.061</td><td>Positive</td><td>0.015</td><td>154.0769</td><td>Find by Integration</td><td>Cpd 2: 8.061</td></tr><tr><td>MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D</td><td>9.113</td><td>Positive</td><td>0</td><td>78.0467</td><td>Find by Integration</td><td>Cpd 3: 9.113</td></tr><tr><td>MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D</td><td>9.221</td><td>Positive</td><td>0.018</td><td>188.0377</td><td>Find by Integration</td><td>Cpd 4: 9.221</td></tr><tr><td>MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D</td><td>9.988</td><td>Positive</td><td>0</td><td>78.0469</td><td>Find by Integration</td><td>Cpd 5: 9.988</td></tr></tbody></table>	File	RT	Polarity	Width	Base Peak	Algorithm	Label	MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	5.581	Positive	0.014	57.0706	Find by Integration	Cpd 1: 5.581	MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	8.061	Positive	0.015	154.0769	Find by Integration	Cpd 2: 8.061	MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	9.113	Positive	0	78.0467	Find by Integration	Cpd 3: 9.113	MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	9.221	Positive	0.018	188.0377	Find by Integration	Cpd 4: 9.221	MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	9.988	Positive	0	78.0469	Find by Integration	Cpd 5: 9.988	
File	RT	Polarity	Width	Base Peak	Algorithm	Label																																						
MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	5.581	Positive	0.014	57.0706	Find by Integration	Cpd 1: 5.581																																						
MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	8.061	Positive	0.015	154.0769	Find by Integration	Cpd 2: 8.061																																						
MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	9.113	Positive	0	78.0467	Find by Integration	Cpd 3: 9.113																																						
MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	9.221	Positive	0.018	188.0377	Find by Integration	Cpd 4: 9.221																																						
MSD_mix_4stids_DG_spl200_03.D	9.988	Positive	0	78.0469	Find by Integration	Cpd 5: 9.988																																						

Figura 39 Resultados de Find by Integration

5 Cierre el archivo de datos.

- Haga clic en **File > Open Data File**.
- Haga clic en **Close**.

- Si desea guardar los resultados, consulte "Tarea 17. Guardar resultados" en la página 68.

Tarea 16. Generar fórmulas y bibliotecas de búsqueda para espectros de pico

En esta tarea, primero se integran y extraen los espectros de pico desde un archivo de datos GC/Q-TOF. Seguidamente, se generan posibles fórmulas para cada uno de los espectros de pico.





Tarea 16. Generar fórmulas y bibliotecas de búsqueda para espectros de pico

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
1	<p>Abra el TIC desde el archivo de datos MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d.</p> <p>a Si el programa no se abre, haga doble clic en el icono MassHunter Qualitative Analysis. También puede hacer clic en File > Open Data File.</p> <p>b Haga clic en el archivo de datos MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d en la carpeta de archivos de datos de ejemplo GC.</p> <p>c Desmarque la casilla de verificación Load result data y haga clic en Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Si la casilla de verificación Load result data no está disponible, no se han guardado los resultados en el archivo de datos. Consulte “Tarea 17. Guardar resultados” en la página 68 para obtener instrucciones sobre cómo guardar los resultados.
2	<p>Integrar y extraer espectros de picos.</p> <p>a Haga clic en la sección Chromatogram > Integrate (MS/MS) en la ventana Method Explorer.</p> <p>b Haga clic en la pestaña Peak Filters.</p> <p>c Haga clic en el botón Peak height.</p> <p>d Marque la casilla de verificación Relative height.</p> <p>e Marque la casilla de verificación Limit (by height) to the largest y escriba 4.</p> <p>f Haga clic en Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra.</p>	

2 Buscar y encontrar

Tarea 16. Generar fórmulas y bibliotecas de búsqueda para espectros de pico

Tarea 16. Generar fórmulas y bibliotecas de búsqueda para espectros de pico

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>3 Generar fórmulas para cada espectro de picos.</p> <ul style="list-style-type: none">• Visualizar la lista Spectrum Identification Results List.• Cierre la ventana MS Spectrum Results. <p>Sugerencia: Para obtener los mismos resultados que en Figura 41, asegúrese de que ha seleccionado Common organic molecules como modelo Isotope.</p>	<p>a En la ventana Method Explorer, haga clic en Identify Compounds > Generate Formulas.</p> <p>b En la ventana Method Editor, haga clic en la pestaña Charge State y seleccione Common organic molecules como modelo Isotope.</p> <p>c En la ventana Data Navigator, resalte todos los espectros de la sección User Spectra.</p> <p>d Haga clic en el comando Identify > Generate Formulas from Spectrum Peaks o el botón Generate Formulas from Spectrum Peaks  para ejecutar el algoritmo.</p> <p>e Si es necesario, haga clic en el icono Spectrum Identification Results, , o haga clic en el comando View > Spectrum Identification Results.</p> <p>f En la ventana Spectrum Identification Results, haga clic en el botón Automatically Show Columns de la barra de tareas.</p> <p>g Haga clic en el icono Hide Empty Columns, , en la ventana Spectrum Identification Results.</p> <p>h Seleccione C6 H13 como resultado Best.</p> <p>i Amplíe la tabla en dicha fila.</p> <p>j Cierre la ventana Method Editor.</p> <p>k Revise Formula e Ion Species, que aparecen sobre gran parte de los picos en la ventana MS Spectrum Results. Todas las Formula e Ion Species tienen el mismo color que el espectro.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Puede ver la predicción de índices de abundancia de isótopos en las líneas de espectro cuando amplía la imagen en el m/z apropiado. Consulte la Ayuda en línea para obtener más información.• El icono Run  de la barra de herramientas Method Editor en ocasiones le permite elegir una acción a partir de un conjunto de acciones posibles. Por ejemplo, al pulsar el icono Run de esta sección disponemos de dos acciones diferentes. Si pulsa la flecha, se muestra una lista de posibles acciones y puede elegir qué acción realizar. Si elige una acción distinta de la lista, la acción por defecto cambia. Si simplemente hace clic en el botón Run, se lleva a cabo la acción por defecto.• Puede cambiar la anchura de una columna arrastrando la línea que separa las columnas adyacentes.• Puede desplazar una columna arrastrando el encabezado de dicha columna.• Puede borrar una columna haciendo clic en Remove column en el menú de acceso directo de la tabla.

Tarea 16. Generar fórmulas y bibliotecas de búsqueda para espectros de pico

Tarea 16. Generar fórmulas y bibliotecas de búsqueda para espectros de pico

Paso

Instrucciones detalladas

Comentarios

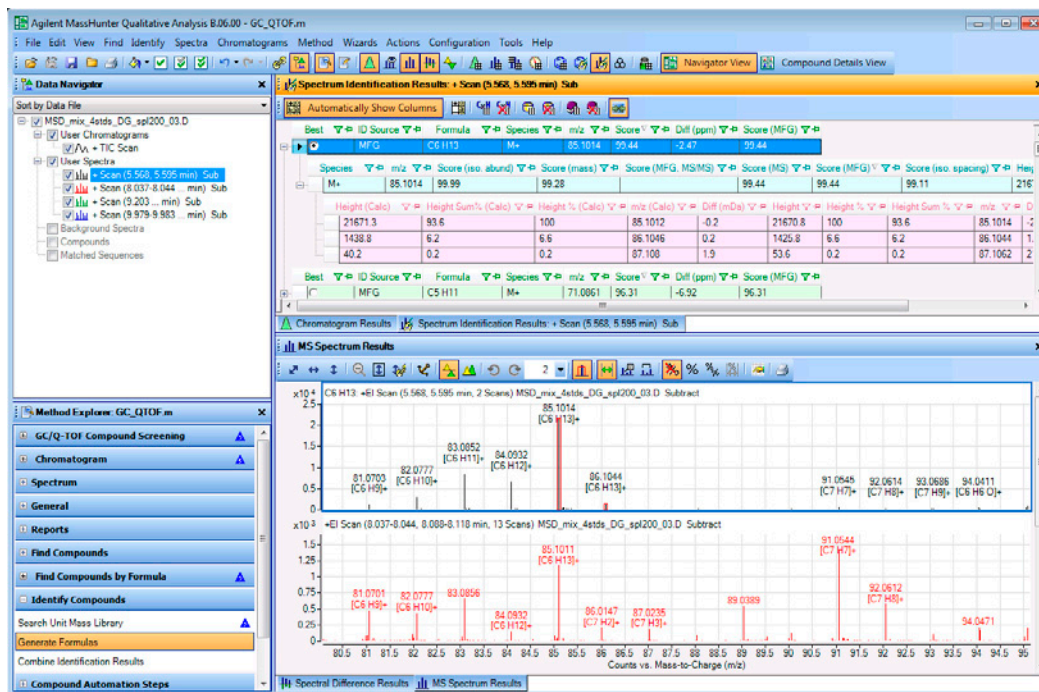



Figura 40 Generar resultados de Fórmula para los picos 1 a 4

- 4 Realizar una búsqueda de biblioteca para espectros de pico 1 a 4.
 - a En la ventana Data Navigator, haga clic en **User Spectra**.
 - b En la ventana Method Explorer, haga clic en **Identify Compounds > Search Unit Mass Library**.
 - c Compruebe que ha seleccionado una biblioteca válida.
 - d Haga clic en **Identify > Search Library for Spectra** en el menú principal.
 - e Cierre la ventana Method Editor.
- Method Editor se abre automáticamente cuando se hace clic en una sección de Method Explorer.

2 Buscar y encontrar

Tarea 16. Generar fórmulas y bibliotecas de búsqueda para espectros de pico

Tarea 16. Generar fórmulas y bibliotecas de búsqueda para espectros de pico

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
5	<p>Modifique las columnas que quedan visibles.</p> <p>a Haga clic con el botón derecho en la ventana Spectrum Identification Results y haga clic en Add/Remove Columns. En el cuadro de diálogo "(Enhanced) Add/Remove Columns", marque las columnas que desea visualizar. Haga clic en OK.</p> <p>b Cierre la ventana Method Editor</p> <p>c Haga clic en el icono Hide Empty Columns, , en la ventana Spectrum Identification Results.</p> <p>d Revise Formula & Ion Species, que aparece sobre cada pico en la ventana MS Spectrum Results.</p>	<ul style="list-style-type: none">Si visualiza el comando Remove Column y elimina una columna que contiene datos, el software vuelve a mostrar automáticamente esta columna si la función Automatically Show Columns está activada.El algoritmo LibSearch está fuertemente ponderado en la sección Combine Identification Results del método. Puede elegir manualmente el mejor resultado MFG o cambiar la manera en que se combinan los resultados de identificación.

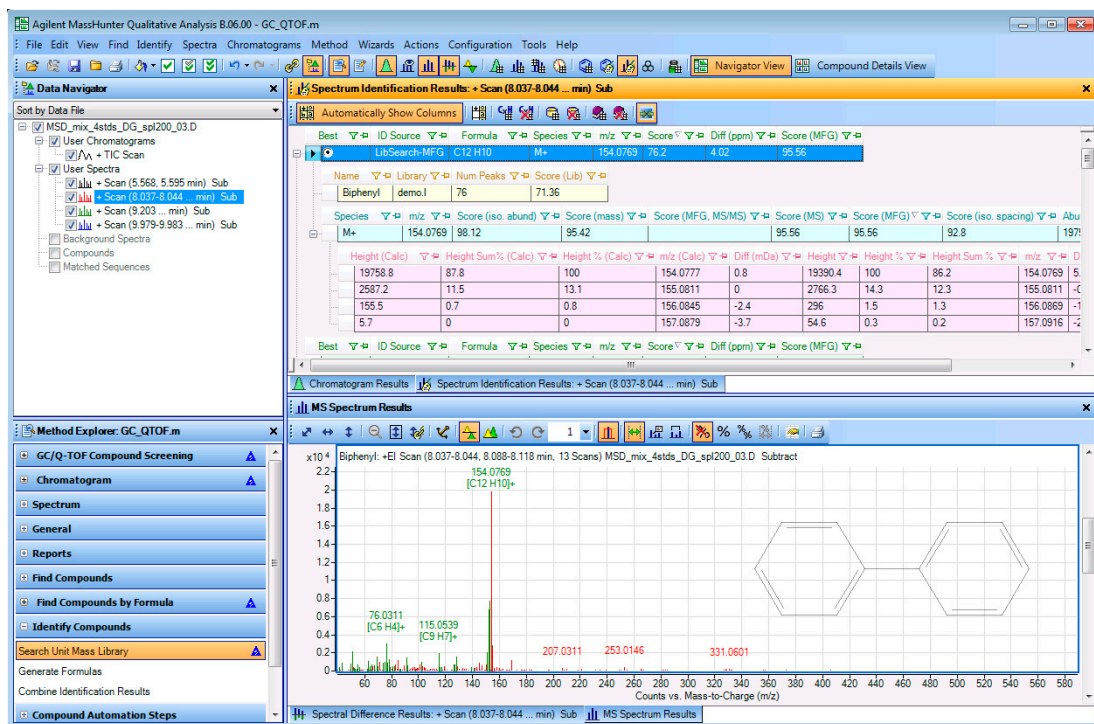


Figura 41 Resultados de Library Search and Generate Formulas para el primer espectro de picos

Tarea 16. Generar fórmulas y bibliotecas de búsqueda para espectros de pico

Tarea 16. Generar fórmulas y bibliotecas de búsqueda para espectros de pico

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
6	<p>Revise los resultados de cada espectro en la ventana MS Peaks One.</p> <p>a Haga clic en View >MS Spectrum Peak List 1.</p> <p>b Haga clic con el botón derecho y pulse Add/Remove Columns.</p> <p>c Compruebe que las columnas mostradas en Figura 42 se encuentran en la lista Show these columns.</p> <p>d Realice una clasificación por columna Ion Type.</p> <p>e Si Ion Type es Fragment Ion, Formula & Ion Species se mostrará en verde en cada pico de la ventana MS Spectrum Results.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Los iones fragmentados se muestran en verde en la ventana MS Spectrum Results. Ion Type puede ser Molecular Ion, Fragment Ion o dejarse en blanco. Si es Fragment Ion, las columnas Loss Formula y Loss Mass muestran la Formula y Masa con las que se obtiene dicho ion a partir de Molecular Ion. Formula & Ion Species muestra la fórmula y especie iónica correspondientes a dicho ion.

m/z	Species	Abund	Abund %	Z	Formula	Diff (ppm)	Formula & Ion Species	Loss Formula	Loss Mass	Ion Type
154.0769	M+	19390.38	100	1	C12 H10	5.02	[C12 H10]+			Molecular Ion
155.0811	M+	2766.28	14.27	1	C12 H10	-0.29	[C12 H10]+			Molecular Ion
156.0869	M+	295.97	1.53	1	C12 H10	-15.58	[C12 H10]+			Molecular Ion
41.0395	M+	395.46	2.04	1	C3 H5	-22.24	[C3 H5]+	C9H5	113	Fragment Ion
43.055	M+	866.15	4.47	1	C3 H7	-17.85	[C3 H7]+	C9H3	111	Fragment Ion
50.0158	M+	729.18	3.76	1	C4 H2	-14.44	[C4 H2]+	C8H8	104.1	Fragment Ion
51.0224	M+	2093.54	10.8	1	C4 H3	9.75	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion
52.0275	M+	310.44	1.6	1	C4 H3	-22.03	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion
52.0298	M+	183.35	0.95	1	C4 H4	19.09	[C4 H4]+	C8H6	102	Fragment Ion
53.0388	M+	152.17	0.78	1	C4 H5	-4.42	[C4 H5]+	C8H5	101	Fragment Ion
54.0472	M+	183.45	0.95	1	C4 H6	-14.24	[C4 H6]+	C8H4	100	Fragment Ion
55.0551	M+	631.13	3.25	1	C4 H7	-15.71	[C4 H7]+	C8H3	99	Fragment Ion
56.0626	M+	404.96	2.09	1	C4 H8	-9.63	[C4 H8]+	C8H2	98	Fragment Ion
62.0152	M+	177.71	0.92	1	C5 H2	-1.45	[C5 H2]+	C7H8	92.1	Fragment Ion
63.0234	M+	1021.98	5.27	1	C5 H3	-7.31	[C5 H3]+	C7H7	91.1	Fragment Ion
64.0309	M+	511.22	2.64	1	C5 H4	-3.01	[C5 H4]+	C7H6	90	Fragment Ion
65.039	M+	670.14	3.46	1	C5 H5	-6.86	[C5 H5]+	C7H5	89	Fragment Ion
67.0548	M+	609.95	3.15	1	C5 H7	-8.15	[C5 H7]+	C7H3	87	Fragment Ion
69.0706	M+	1411.51	7.28	1	C5 H9	-11.16	[C5 H9]+	C7H	85	Fragment Ion
70.078	M+	519.14	2.68	1	C5 H10	-3.65	[C5 H10]+	C7	84	Fragment Ion
74.0157	M+	838.29	4.32	1	C6 H2	-7.82	[C6 H2]+	C6H8	80.1	Fragment Ion
75.0223	M+	928.71	4.79	1	C6 H3	-0.85	[C6 H3]+	C6H7	79.1	Fragment Ion

Figura 42 Tabla MS Peaks One con columnas Ion Type, Loss Formula, Loss Mass, y Formula & Ion Species

7	<p>(opcional) Cierre el archivo de datos.</p> <ul style="list-style-type: none"> Puede avanzar a la siguiente tarea para aprender a guardar resultados. 	<p>a Haga clic en File > Open Data File.</p> <p>b Haga clic en Close.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Si desea guardar los resultados, consulte "Tarea 17. Guardar resultados" en la página 68.
---	--	--	---

2 Buscar y encontrar

Tarea 17. Guardar resultados

Tarea 17. Guardar resultados

En esta tarea aprenderá a guardar los resultados del archivo actual de datos.

Tarea 17. Guardar resultados

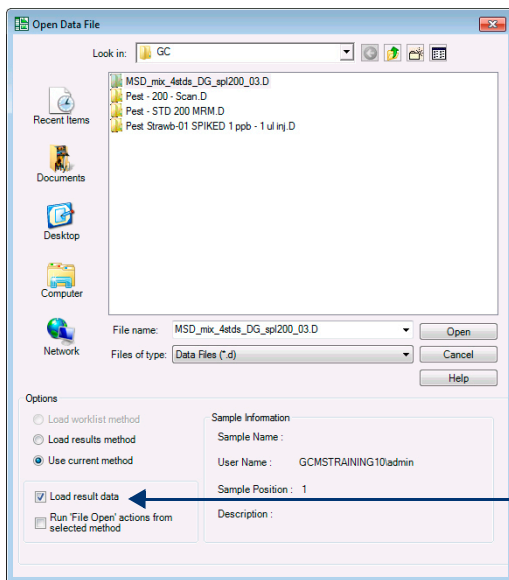
Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
1 Guarde los resultados del archivo actual de datos y cierre el archivo de datos.	<p>a Haga clic en File > Save Results.</p> <p>b Haga clic en File > Open Data File.</p>	<ul style="list-style-type: none">Solo puede guardar un conjunto de resultados en un archivo de datos. Si ya ha guardado los resultados con el archivo de datos actual, dichos resultados se sobrescribirán al hacer clic en File > Save Results.
2 Abra el archivo de datos y cargue los resultados.	<p>a Haga clic en File > Open Data File. Se abrirá el cuadro de diálogo "Open Data File".</p> <p>b Seleccione un archivo de datos. En este ejemplo, seleccione el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>c Marque la casilla de verificación Load result data.</p> <p>d Haga clic en el botón Open.</p>	

Tarea 17. Guardar resultados

Paso

Instrucciones detalladas

Comentarios



Se marcará la casilla de verificación Load result data.

Figura 43 Abra el cuadro de diálogo Data File

- 3 Examine los resultados.
 - a Haga clic en la ventana **Spectrum Identification Results**.
 - b Revise los resultados.

2 Buscar y encontrar

Tarea 17. Guardar resultados

Tarea 17. Guardar resultados

Paso

Instrucciones detalladas

Comentarios

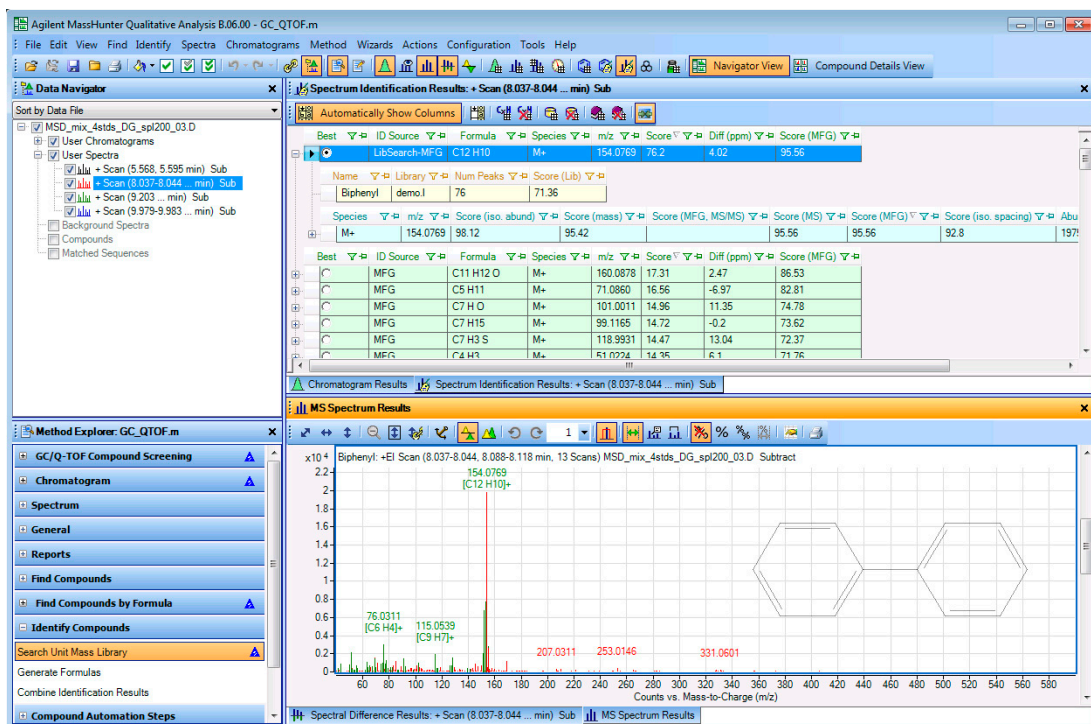


Figura 44 Resultados de Library Search and Generate Formulas para el primer espectro de picos

4 Cierre el archivo de datos.

- Haga clic en **File > Open Data File**.
- Haga clic en **Close**.

5 Vuelva a abrir el archivo de datos y no cargue los resultados.

- Haga clic en **File > Open**. Se abrirá el cuadro de diálogo "Open Data File".
 - Seleccione un archivo de datos. En este ejemplo, seleccione el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.
 - Marque la casilla de verificación **Load result data**.
 - Haga clic en el botón **Open**.
- Si no carga resultados, se abrirá por defecto un TIC al abrir un archivo de datos. Si marca las acciones Run de 'File Open' en la casilla de verificación del método seleccionado, se ejecutarán las acciones File Open. Consulte la ayuda en línea para obtener más información.

Tarea 17. Guardar resultados

Paso

Instrucciones detalladas

Comentarios

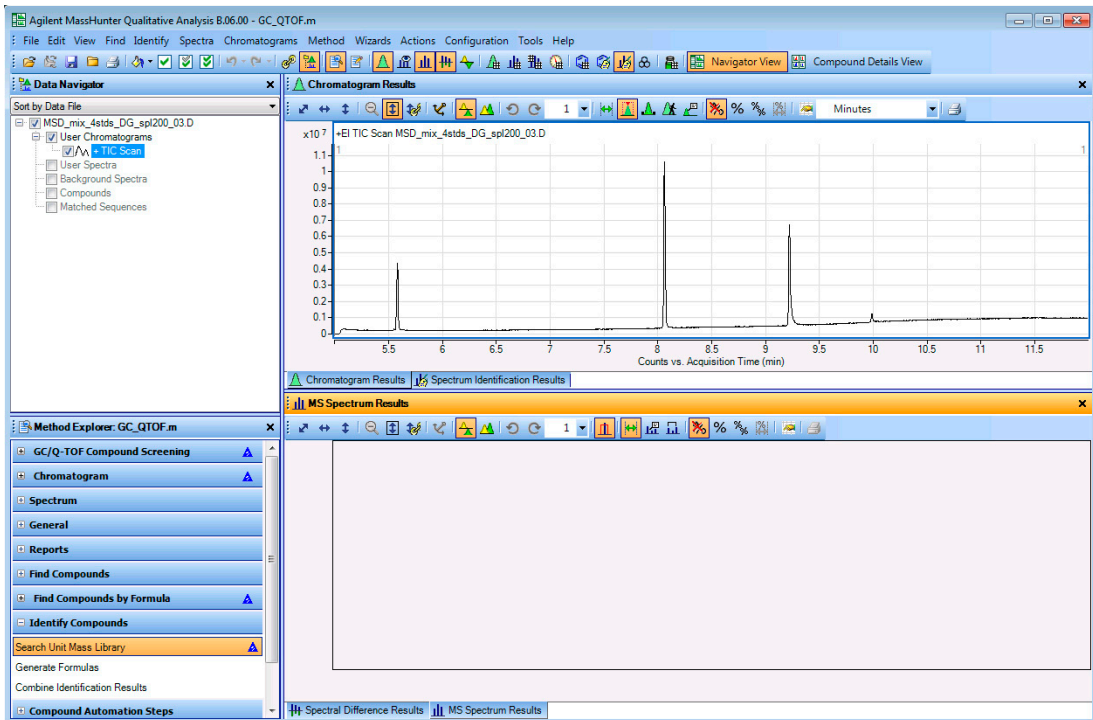


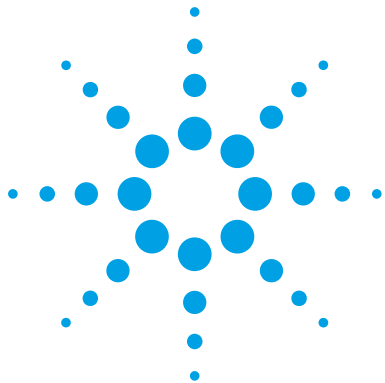
Figura 45 Resultados de Library Search and Generate Formulas para el primer espectro de picos

6 Cierre el archivo de datos.

- a** Haga clic en **File > Open Data File**.
- b** Haga clic en **Close**.

2 **Buscar y encontrar**

Tarea 17. Guardar resultados



3 Utilizar flujos de trabajo, exportación e impresión

- Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general 74
- Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening 79
- Tarea 20. Exportar un archivo CEF 83
- Tarea 21. Imprimir un informe de análisis 85
- Tarea 22. Imprimir un informe compuesto 88

En estas tareas, aprenderá a configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo. Después, podrá ejecutar las acciones de este método automatizado al abrir un archivo de datos.

En estos ejemplos se utilizan dos flujos de datos distintos. Consulte “Flujos de trabajo” en la página 100 para obtener más información.

El flujo de datos General admite datos GC/QQQ, GC/Q-TOF y LC/MS. El flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening admite datos GC/Q-TOF.

Cada ejercicio se presenta en una tabla con tres columnas:

- Pasos: utilice estas instrucciones generales para avanzar a su ritmo en la exploración del programa.
- Instrucciones detalladas: recurra a ellas si necesita ayuda o prefiere usar un proceso de aprendizaje paso a paso.
- Comentarios: léalos para aprender consejos e información adicional sobre cada paso de un ejercicio.



3 Utilizar flujos de trabajo, exportación e impresión

Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general

Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general

Cuando comienza a usar el programa Qualitative Analysis, se carga el método default.m. Puede realizar cambios en el método abierto y guardarlo, o bien abrir un nuevo método, realizar cambios y guardar dicho método. No es posible sobrescribir el método default.m.

También puede realizar una configuración para ejecutar acciones concretas en el método al abrir un archivo de datos. Al abrir un archivo de datos, también puede cargar el método que se empleó para crear los resultados que se almacenan con el archivo de datos. El método se guarda automáticamente al guardar los resultados con el archivo de datos. El flujo de trabajo General puede utilizarse con archivos de datos GC/MS o LC/MS.

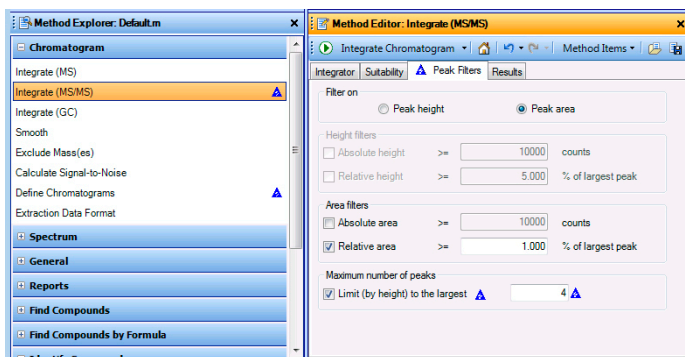
Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
1 Abra el TIC del archivo de datos Pest - STD 200 MRM.d .	<p>a Si el programa no se abre, haga doble clic en el icono MassHunter Qualitative Analysis. También puede hacer clic en File > Open Data File.</p> <p>b Haga clic en el archivo de datos Pest - STD 200 MRM.d de la carpeta de archivo de datos de ejemplo GC.</p> <p>c Desmarque la casilla de verificación Load result data y haga clic en Open.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Puede utilizar General Workflow o el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening al trabajar con datos GC/MS.
2 Configurar la interfaz del usuario para utilizarla con datos GC/QQQ	<ul style="list-style-type: none">• Siga las instrucciones indicadas en “Tarea 2. Configurar la interfaz de usuario para datos GC/MS” en la página 13.	<ul style="list-style-type: none">• En este ejemplo, seleccione el flujo de trabajo General.
3 Configure el método para extraer un cromatograma TIC. <ul style="list-style-type: none">• Defina un cromatograma TIC para datos MS.	<p>a Desde la ventana Method Explorer, seleccione Chromatogram > Define Chromatograms.</p> <p>b Elimine el cromatograma BPC.</p> <p>c Seleccione TIC como Type.</p> <p>d Asegúrese de que el nivel MS es MS/MS.</p> <p>e Haga clic en Add.</p>	

Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general


Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>4 Edite el método para integrar los datos.</p> <ul style="list-style-type: none"> Limite la integración a los cuatro picos más altos. 	<p>a Desde la ventana Method Explorer, seleccione Chromatogram > Integrate (MS/MS).</p> <p>b Haga clic en la pestaña Peak Filters.</p> <p>c En la sección Maximum number of peaks section, marque la casilla de verificación Limit (by height) to the largest.</p> <p>d Escriba 4.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Si actualiza un valor en la pestaña Peak Filters de la sección Chromatogram > Integrate (MS), también se actualizarán los valores de las demás secciones de Method Explorer. Aparecerán triángulos azules para mostrar estas otras secciones.



Puede hacer clic en el icono **Save Method** para guardar el método actual.

Figura 46 Pestaña Chromatogram > Integrate (MS/MS) > Peak Filters

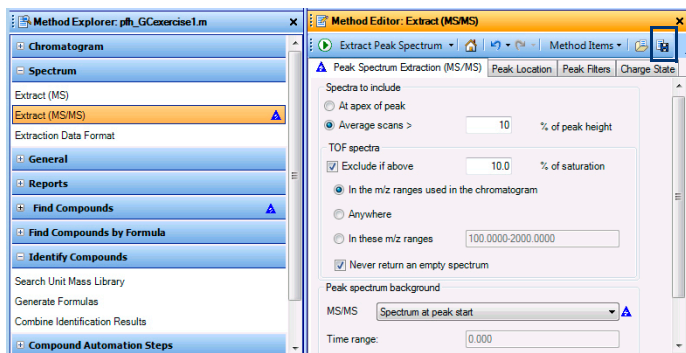
<p>5 Pruebe la integración para asegurarse de que solo aparecen 4 picos integrados.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Haga clic en el icono Integrate Chromatogram, , para integrar el archivo de datos. 	
<p>6 Guarde el método en <i>iii_GCexercise1</i>, donde "iii" son sus iniciales.</p>	<p>a Desde el menú superior, haga clic en Method > Save As.</p> <p>b Escriba <i>iii_GCexercise1</i>.</p> <p>c Haga clic en el botón Save.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Nótese que al guardar el método todos los triángulos azules que incidían cambios de valor en el método abierto desaparecen.
<p>7 Cambie el fondo del espectro de pico para utilizar el espectro al inicio del pico.</p>	<p>a Desde la ventana Method Explorer, seleccione Spectrum > Extract (MS/MS).</p> <p>b Haga clic en Peak Spectrum Extraction (MS/MS).</p> <p>c Para el fondo del espectro de pico, seleccione Spectrum at peak start.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Si realiza cualquier cambio adicional después de guardar el método, se añadirán los triángulos azules.

3 Utilizar flujos de trabajo, exportación e impresión

Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general




Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
-------	--------------------------	-------------



Puede hacer clic en el icono Save Method para guardar el método actual.

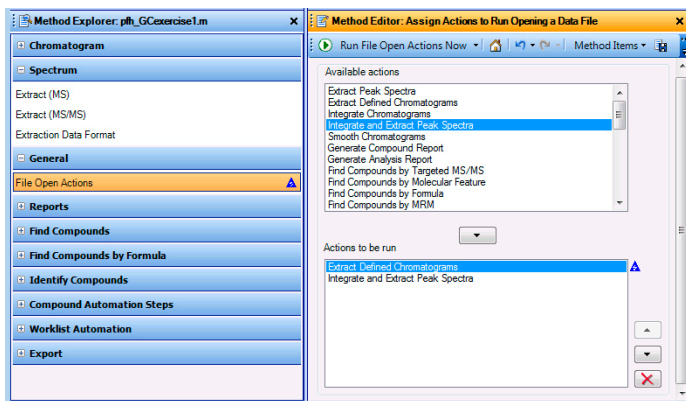
Figura 47 Pestaña The Spectrum > Extract (MS/MS) > Peak Spectrum Extraction (MS/MS)

- 8** Pruebe la extracción del espectro MS para asegurarse de restar el espectro de fondo.
 - Haga clic en el icono **Extract Peak Spectrum**, , para ejecutar la acción del pico seleccionado en el archivo de datos.
 - 9** Guarde el método.
 - Guarde el método siguiendo uno de estos tres métodos:
 - Haga clic en el icono **Save Method** de Method Editor 
 - Haga clic con el botón derecho en Method Editor, y pulse **Save Method**.
 - Desde el menú superior, haga clic en **Method > Save**.
 - Se mostrará el icono Save Method en [Figura 47](#) en la página 76
 - 10** Configure el método para automatizar las acciones cuyos parámetros acaba de modificar al abrir un archivo de datos.
 - Liste las acciones que se realizarán al abrir este u otro archivo de datos.
 - a** Desde la ventana Method Explorer, seleccione **General > File Open Actions**.
 - b** Seleccione **Integrate and Extract Peak Spectra** desde la lista **Available actions**.
 - c** Haga clic en el botón **Add**, , para mover la acción seleccionada a la lista **Actions to be run**. También puede hacer doble clic en la acción seleccionada para desplazarla a la otra lista.
- Sugerencia: mire General en Method Explorer.

Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general

Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
11 Pruebe las acciones de File Open.	<ul style="list-style-type: none"> Haga clic en el icono Run File Open Actions Now, , para ejecutar las acciones del archivo de datos. 	<ul style="list-style-type: none"> Los cromatogramas y espectros no se sobrescriben. Se añaden nuevos cromatogramas y espectros.




Dos acciones distintas forman parte de la lista **Actions to be run**. La primera acción consiste en extraer los cromatogramas definidos. Seguidamente, dicho cromatograma se integra y se extraen los picos.

Figura 48 Sección General > File Open Actions en Method Editor

12 Guarde el método.	<ul style="list-style-type: none"> Haga clic en el icono Save Method de la ventana Method Editor, 	
13 Configure el método para automatizar las acciones al ejecutar el método durante una lista de trabajo.	<ol style="list-style-type: none"> Desde la ventana Method Explorer, seleccione Worklist Automation > Worklist Actions. Elimine Generate Analysis Report de la lista Actions to be run. 	

Sugerencia: Mire Worklist Automation en la ventana Method Explorer

14 Pruebe Worklist Actions.	<ul style="list-style-type: none"> Haga clic en el icono Run Worklist Actions Now, , para ejecutar las acciones del archivo de datos. 	<ul style="list-style-type: none"> Los cromatogramas y espectros no se sobrescriben. Se añaden nuevos cromatogramas y espectros.
-----------------------------	--	---

3 Utilizar flujos de trabajo, exportación e impresión

Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general

Tarea 18. Configurar y ejecutar un método de análisis cualitativo usando el flujo de trabajo general

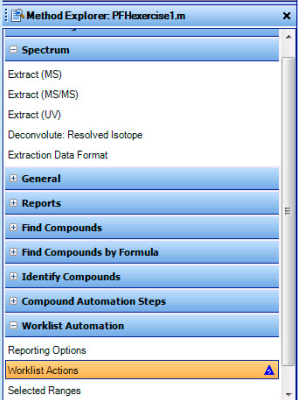
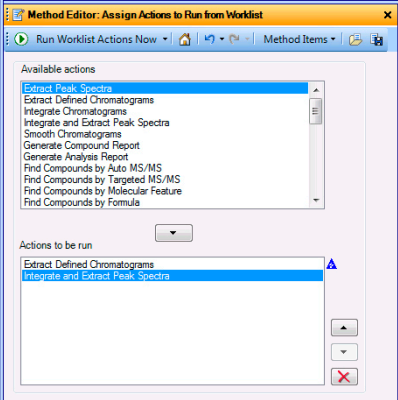
Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
		<p>En un método se incluyen dos listas distintas de acciones. La primera lista de acciones (File Open Actions) puede ejecutarse al abrir un archivo de datos. La segunda lista de acciones (Worklist Actions) se ejecuta al ejecutar el método.</p>

Figura 49 Sección Worklist Automation > Worklist Actions en Method Editor

15 Guarde el método y cierre el archivo de datos sin guardar los resultados.

- a** Haga clic en el icono **Save Method** de Method Editor,
- b** Haga clic en **File > Close Data File**, y haga clic en **No** cuando se le pida guardar los resultados.

Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening

En esta tarea se configura un método de análisis cualitativo que contiene una lista de acciones de análisis que se ejecutarán en un orden concreto. Entre otros, se incluye la extracción e integración de cromatogramas, extracción de espectros, búsqueda de espectros de pico en una biblioteca, generación de fórmulas para espectros e impresión de un informe de análisis.

Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
1	<p>Abra TIC desde el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> a Si el programa no se abre, haga doble clic en el icono MassHunter Qualitative Analysis. También puede hacer clic en File > Open Data File. b Haga clic en el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d en la carpeta de archivos de datos de ejemplo GC. c Desmarque la casilla de verificación Load result data y haga clic en Open. 	
2	<p>Configurar la interfaz del usuario para utilizarla con datos GC/QQQ.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Siga las instrucciones indicadas en "Tarea 2. Configurar la interfaz de usuario para datos GC/MS" en la página 13. 	<ul style="list-style-type: none"> • Para este ejemplo, cargue el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening.
3	<p>Asegúrese de extraer un TIC.</p> <ul style="list-style-type: none"> a Desde la ventana Method Explorer, seleccione Chromatogram. b Haga clic en la sección Define Chromatograms. c En la ventana Method Editor, compruebe que el cromatograma de la sección Defined chromatograms es un TIC. En caso contrario, seleccione TIC como Type. Haga clic en el botón Change. 	<ul style="list-style-type: none"> •

3 Utilizar flujos de trabajo, exportación e impresión


Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening

Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
4 Revise los parámetros correspondientes al algoritmo Find by Chromatogram Deconvolution.	<p>a Haga clic en la sección GC/Q-TOF Compound Screening > Find by Chromatogram Deconvolution en la ventana Method Explorer.</p> <p>b Haga clic en la pestaña Mass Filters.</p> <p>c Ajuste el valor Absolute height a 13000.</p> <p>d Haga clic en la pestaña Results.</p> <p>e Haga clic en el botón Highlight all compounds.</p> <p>f Revise los resultados en cada pestaña.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Mire las secciones del flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening.• Tenga en cuenta las seis secciones de este flujo de trabajo. Todas estas secciones son duplicados de secciones que ya forman parte del explorador de métodos.• Tenga en cuenta que aparecen triángulos azules en otras secciones de Method Explorer. Indican que los mismos valores del parámetro también se han cambiado en otros lugares.
5 Revise los parámetros correspondientes al algoritmo Identify by Library Search.	<p>a Haga clic en la sección GC/Q-TOF Compound Screening > Identify by library search en la ventana Method Explorer.</p> <p>b Haga clic en el botón Add Library. Seleccione una librería y haga clic en Open.</p> <p>c (opcional) Haga clic en el botón Remove Library para eliminar una biblioteca si no desea utilizarla.</p> <p>d Revise los parámetros de cada pestaña.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Se instala la biblioteca demo.I library o NIST08.I (u otra versión de la biblioteca NIST) en la carpeta \MassHunter\Library.
6 Guarde el método en <i>iii_GCexercise2</i> , donde "iii" son sus iniciales.	<p>a Desde el menú superior, haga clic en Method > Save As.</p> <p>b Escriba <i>iii_GCexercise2</i>.</p> <p>c Haga clic en el botón Save.</p>	

Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening

Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>7 Configure el método para automatizar las acciones al abrir un archivo de datos.</p> <ul style="list-style-type: none"> Liste las acciones que se realizarán al abrir este u otro archivo de datos. <p>Sugerencia: Mire General en la ventana Method Explorer</p>	<p>a Desde la ventana Method Explorer, seleccione General > File Open Actions.</p> <p>b Elimine Generate Analysis Report de la lista Actions to be run.</p> <p>c Elimine Integrate and Extract Peak Spectra.</p> <p>d Elimine cualquier otra acción de la lista.</p> <p>e Añada Extract Defined Chromatograms.</p> <p>f Añada Find Compounds by Chromatogram Deconvolution.</p> <p>g Añada Search Spectral Library for Compound.</p>	
<p>8 Pruebe las acciones de File Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Haga clic en el icono Run File Open Actions Now, , para ejecutar las acciones del archivo de datos. 	<ul style="list-style-type: none"> Los cromatogramas y espectros no se sobrescriben. Se añaden nuevos cromatogramas y espectros.

3 Utilizar flujos de trabajo, exportación e impresión

Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening

Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening

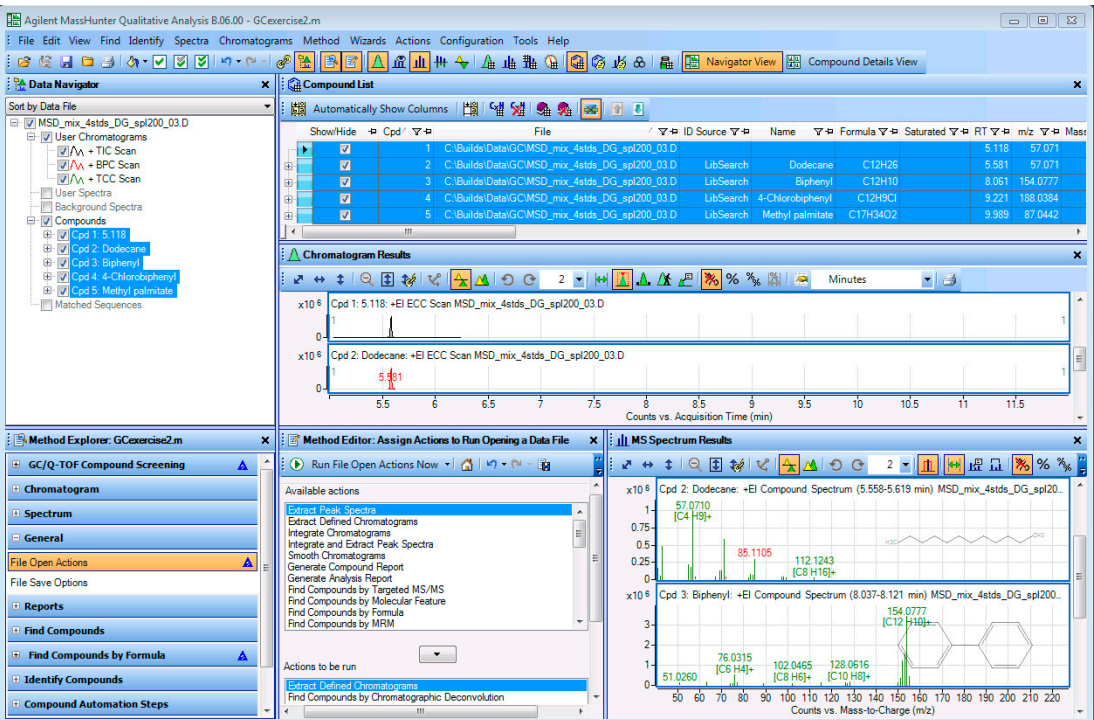
Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios																																													
	 <p>The screenshot displays the Agilent MassHunter Qualitative Analysis interface. The 'Compound List' panel shows a table of detected compounds:</p> <table border="1"><thead><tr><th>File</th><th>ID</th><th>Source</th><th>Name</th><th>Formula</th><th>Saturated</th><th>RT</th><th>m/z</th><th>Mass</th></tr></thead><tbody><tr><td>C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D</td><td>1</td><td>LibSearch</td><td>Dodecane</td><td>C12H26</td><td></td><td>5.118</td><td>57.071</td><td></td></tr><tr><td>C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D</td><td>2</td><td>LibSearch</td><td>Biphenyl</td><td>C12H10</td><td></td><td>8.061</td><td>154.077</td><td></td></tr><tr><td>C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D</td><td>4</td><td>LibSearch</td><td>4-Chlorobiphenyl</td><td>C12H9Cl</td><td></td><td>9.221</td><td>188.034</td><td></td></tr><tr><td>C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D</td><td>5</td><td>LibSearch</td><td>Methyl palmitate</td><td>C17H34O2</td><td></td><td>9.989</td><td>87.042</td><td></td></tr></tbody></table> <p>The 'Chromatogram Results' panel shows a plot of Counts vs. Acquisition Time (min) with peaks labeled for Cpd 1 (5.118 min) and Cpd 2 (5.481 min).</p> <p>The 'MS Spectrum Results' panel shows mass spectra for Cpd 2 (Dodecane) and Cpd 3 (Biphenyl) with their respective chemical structures and major peaks labeled.</p>	File	ID	Source	Name	Formula	Saturated	RT	m/z	Mass	C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	1	LibSearch	Dodecane	C12H26		5.118	57.071		C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	2	LibSearch	Biphenyl	C12H10		8.061	154.077		C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	4	LibSearch	4-Chlorobiphenyl	C12H9Cl		9.221	188.034		C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	5	LibSearch	Methyl palmitate	C17H34O2		9.989	87.042		
File	ID	Source	Name	Formula	Saturated	RT	m/z	Mass																																							
C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	1	LibSearch	Dodecane	C12H26		5.118	57.071																																								
C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	2	LibSearch	Biphenyl	C12H10		8.061	154.077																																								
C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	4	LibSearch	4-Chlorobiphenyl	C12H9Cl		9.221	188.034																																								
C:\Balds\Data\GCMSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D	5	LibSearch	Methyl palmitate	C17H34O2		9.989	87.042																																								

Figura 50 Resultados de las acciones de ejecutar una lista de trabajos en los datos GC/Q-TOF

- 9** Guarde el método en *iii_GCexercise2*, donde "*iii*" son sus iniciales.
- a** Desde el menú, haga clic en **Method > Save As**.
 - b** Escriba *iii_GCexercise2*.
 - c** Haga clic en **Save**.
- Si este método se ejecuta usando una lista de trabajo de Data Acquisition, Worklist Actions de esta pestaña se ejecutarán en el orden determinado.
- 10** Cierre el archivo de datos sin guardar los resultados.
- a** Haga clic en **File > Open Data File**.
 - b** Haga clic en **No** cuando se le pregunte si desea guardar los resultados.

Tarea 20. Exportar un archivo CEF

Puede exportar un archivo CEF que contenga información sobre compuestos. Este archivo CEF puede importarse a otros programas como MassHunter Quantitative Analysis y Mass Profiler Professional. También puede importar compuestos que haya sido importados a un archivo CEF.

Tarea 20. Exportar un archivo CEF

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
1 Abra el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d y ejecute File Open actions for the method <i>iii_GCexercise2.m</i> que fue creado en “Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening” en la página 79.	<p>a Si el programa no se abre, haga doble clic en el icono MassHunter Qualitative Analysis. También puede hacer clic en File > Open Data File.</p> <p>b Haga clic en el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d en la carpeta de archivos de datos de ejemplo GC.</p> <p>c Marque la casilla de verificación Load result data.</p> <p>d Marque la casilla de verificación Run ‘File Open’ actions from selected method.</p> <p>e Haga clic en el botón Use current method y haga clic en Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Si ha terminado “Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening” en la página 79, el método actual será <i>iii_GCexercise2.m</i>. Este método se configura para ejecutar el algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution y ejecutar después un algoritmo Search Library en cada compuesto.
2 Exportar un archivo CEF.	<p>a Para exportar el archivo de manera interactiva, haga clic en File > Export > as CEF.</p> <p>b Haga clic en el botón All results.</p> <p>c Seleccione la ubicación del archivo de exportación.</p> <p>d Haga clic en OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Se utilizará un archivo CEF para exportar compuestos.

3 Utilizar flujos de trabajo, exportación e impresión

Tarea 20. Exportar un archivo CEF

Tarea 20. Exportar un archivo CEF (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
-------	--------------------------	-------------

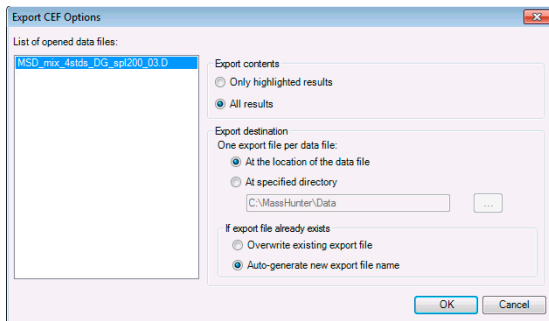


Figura 51 Cuadro de diálogo Export CEF Options

Tarea 21. Imprimir un informe de análisis

Cuando desee imprimir un informe de análisis después de realizar cualquier de las tareas de este ejercicio o del siguiente, siga estas instrucciones.

Los informes de análisis pueden contener los resultados de extraer e integrar cromatogramas, extraer espectros, encontrar compuestos, buscar en bases de datos espectros de pico o generar fórmulas a partir de espectros de pico.

Tarea 21. Imprimir un informe de análisis

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
<p>1 Si el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d no está cargado, ábralo y ejecute File Open actions for the method <i>iii_GCexercise2.m</i> que fue creado en "Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening" en la página 79.</p>	<p>a Si el programa no se abre, haga doble clic en el icono MassHunter Qualitative Analysis. También puede hacer clic en File > Open Data File.</p> <p>b Haga clic en el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d en la carpeta de archivos de datos de ejemplo GC.</p> <p>c Marque la casilla de verificación Load result data.</p> <p>d Marque la casilla de verificación Run 'File Open' actions from selected method.</p> <p>e Haga clic en el botón Use current method y haga clic en Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Si ha terminado "Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening" en la página 79, el método actual será <i>iii_GCexercise2.m</i>. Este método se configura para ejecutar el algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution y ejecutar después un algoritmo Search Library en cada compuesto.
<p>2 Cambie las selecciones del informe de análisis en el método:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Marque las casillas de verificación de los cromatogramas, espectros o tablas que desea imprimir. • Desmarque las casillas de verificación de los cromatogramas, espectros o tablas que no desea imprimir. 	<p>a En la ventana Method Explorer, haga clic en Reports > Analysis Report.</p> <p>b Marque las casillas de verificación correspondientes a cualquier selección adicional que desee imprimir.</p> <p>c Desmarque todos los cromatogramas y espectros que no desea imprimir.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • El informe Analysis solo contiene la información que marca en esta sección. • Si algún resultado no está disponible, dicho resultado no se imprimirá, aunque se encuentre marcado en esta sección. Por ejemplo, si no ha integrado el cromatograma la tabla de pico no se incluirá.

3 Utilizar flujos de trabajo, exportación e impresión



Tarea 21. Imprimir un informe de análisis

Tarea 21. Imprimir un informe de análisis (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
		<p>Por defecto, la ventana Method Editor queda flotante. Es visible como ventana separada del resto del programa Qualitative Analysis. Para anclar la ventana haga clic con el botón derecho en el título de la ventana y pulse Floating. También puede hacer doble clic en la barra de título para anclar la ventana.</p>

Figura 52 Sección Analysis Report de las ventanas Method Explorer y Method Editor

3 Imprima el informe.

- a Puede imprimir interactivamente el informe de múltiples formas:
 - Desde el menú principal, haga clic en **File > Print > Analysis Report**.
 - Desde la barra de herramientas principal, haga clic en el icono Printer.
 - Haga clic en el icono **Print Analysis Report**, , en la barra de herramientas Method Editor después de seleccionar la sección Analysis Report.
 - Haga clic con el botón derecho de la sección Analysis Report en Method Editor, y haga clic en **Print Analysis Report**.
 - Desde el menú de acceso directo del archivo de datos en Data Navigator, haga clic en **Analysis Report**.
 - b Haga clic en **Report contents**.
 - c Marque la casilla de verificación **Print report** y seleccione una impresora.
 - d Marque la casilla de verificación **Print preview**.
 - e Haga clic en el botón **OK**.
- El icono Run  de la barra de herramientas Method Editor en ocasiones le permite elegir una acción a partir de un conjunto de acciones posibles. Por ejemplo, si cambia a la sección Reports > Common Reporting Options de la ventana Method Editor, dispondrá de cuatro acciones distintas al pulsar en el icono Run. Si pulsa la flecha, se muestra una lista de posibles acciones y puede elegir qué acción realizar. Si elige una acción distinta de la lista, la acción por defecto cambia. Si simplemente hace clic en el botón Run, se lleva a cabo la acción actual por defecto.

Tarea 21. Imprimir un informe de análisis (continuación)

Pasos	Instrucciones detalladas	Comentarios
-------	--------------------------	-------------

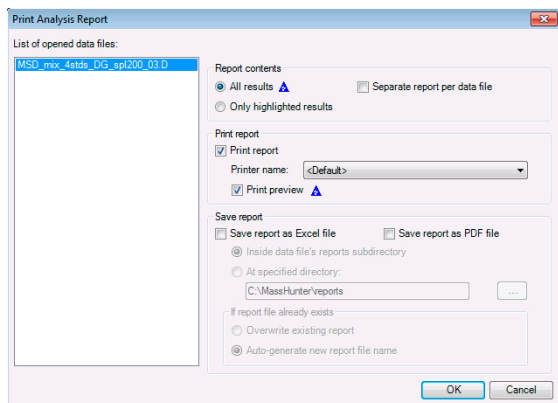


Figura 53 Cuadro de diálogo Print Analysis Report

- f Revise el informe.
- g Haga clic en el icono **Close Print Preview** de la barra de herramientas.

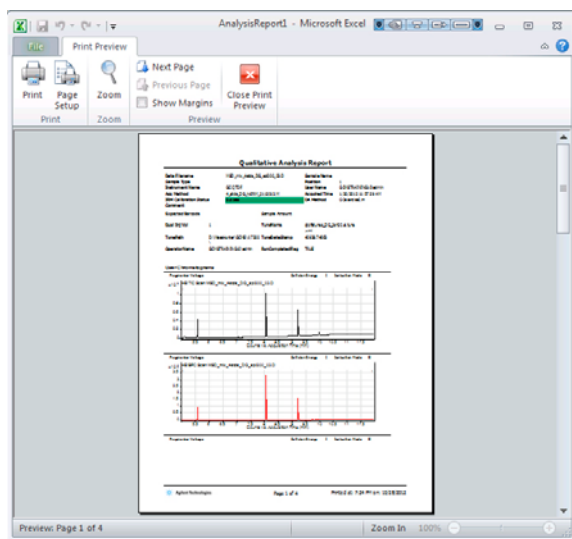


Figura 54 Ventana Print Preview con Analysis Report

3 Utilizar flujos de trabajo, exportación e impresión

Tarea 22. Imprimir un informe compuesto

Tarea 22. Imprimir un informe compuesto

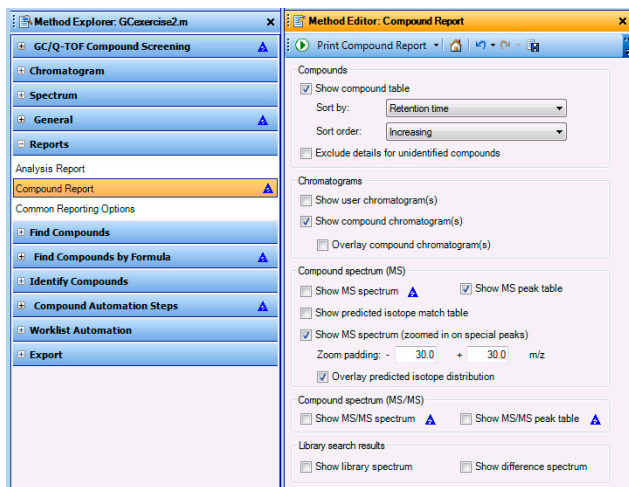
Cuando desee imprimir un informe compuesto, siga estas instrucciones.

Tarea 22. Imprimir un informe compuesto

Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
1 Si el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d no está cargado, ábralo y ejecute File Open actions for the method <i>iii_GCexercise2.m</i> que fue creado en "Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening" en la página 79.	<ul style="list-style-type: none">a Si el programa no se abre, haga doble clic en el icono MassHunter Qualitative Analysis. También puede hacer clic en File > Open Data File.b Haga clic en el archivo de datos MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d en la carpeta de archivos de datos de ejemplo GC.c Marque la casilla de verificación Load result data.d Marque la casilla de verificación Run 'File Open' actions from selected method.e Haga clic en el botón Use current method y haga clic en Open.	<ul style="list-style-type: none">• Si ha terminado "Tarea 19. Configure y ejecute un método mediante el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening" en la página 79, el método actual será <i>iii_GCexercise2.m</i>. Este método se configura para ejecutar el algoritmo Find Compounds by Chromatogram Deconvolution y ejecutar después un algoritmo Search Library en cada compuesto.
2 Cambie algunas de las selecciones del método de informes compuestos: <ul style="list-style-type: none">• Desactive la opción de visionado de espectros MS aumentados en picos especiales.• Desactive las opciones MS/MS en el informe.	<ul style="list-style-type: none">a En la ventana Method Explorer, haga clic en Reports > Compound Report.b Marque la casilla de verificación Show MS spectrum.c Marque la casilla de verificación Show MS/MS spectrum.d Marque la casilla de verificación Show MS/MS peak table.	<ul style="list-style-type: none">• Estas casillas de verificación le permiten especificar la información que desea incluir en un informe si dicha información está disponible. Si la información no está disponible, se omitirá automáticamente esta sección. Por ejemplo, los resultados MS/MS nunca se incluyen cuando el archivo de datos solo contiene datos MS.

Tarea 22. Imprimir un informe compuesto

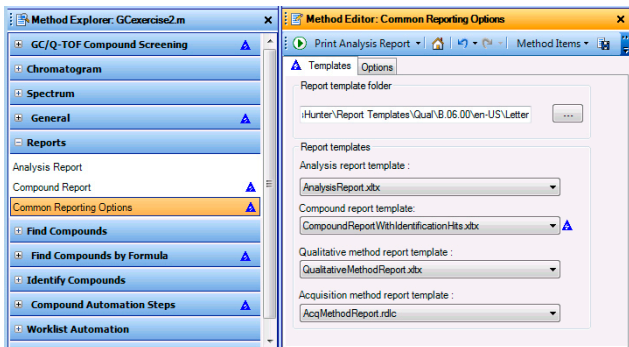
Paso	Instrucciones detalladas	Comentarios
------	--------------------------	-------------



La casilla de verificación Overlay compound chromatograms debe desmarcarse en datos GC/Q-TOF.

Figura 55 Sección Compound Report en Method Editor

- 3** (opcional) Elegir una plantilla de informe de compuestos distintos.
- a** En la ventana Method Explorer, haga clic en **Reports > Common Reporting Options**.
 - b** Seleccione **CompoundReportWithIdentificationHits.xlsx** como plantilla de informe Compound.
- El software incluye varias plantillas de informes distintas.
 - Puede personalizar una plantilla de informe usando Excel y el complemento Report Designer.



Puede utilizar Excel y el complemento Report Designer para personalizar cualquiera de las plantillas que tienen extensión XLTX. No puede personalizar el informe del método de adquisición.

Figura 56 Sección Common Reporting Options en Method Editor

3 Utilizar flujos de trabajo, exportación e impresión

Tarea 22. Imprimir un informe compuesto

Tarea 22. Imprimir un informe compuesto

Paso

4 Imprima el informe.

Instrucciones detalladas

- Marque **File > Print > Compound Report** o haga clic en la flecha del icono **Print Analysis Report**, y pulse **Print Compound Report** para imprimir el informe compuesto.
- Marque la casilla de verificación **Print preview**.
- Haga clic en **OK**. Examine el informe.
- Haga clic en el icono **Close Print Preview**.

Comentarios

- En el cuadro de diálogo Print Compound Report, puede seleccionar una impresora distinta, seleccionar guardar el informe en un archivo PDF o Excel, seleccionar si desea imprimir todos los resultados o solo aquellos que están resaltados, y si desea o no combinar distintos archivos de datos en el informe.
- Consulte la Ayuda en línea o el DVD Report Designer Training para obtener información adicional.

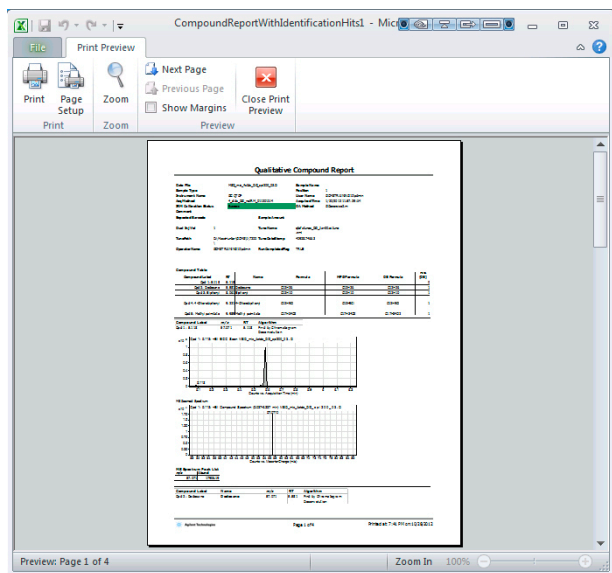
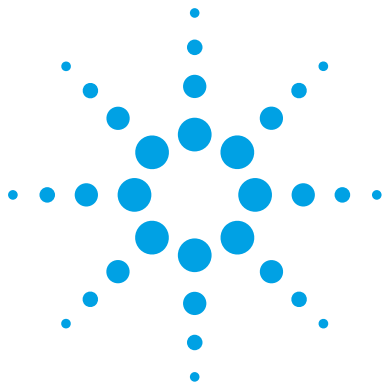


Figura 57 Ventana Print Preview con Compound Report

5 Cierre el archivo de datos sin guardar los resultados.

- Haga clic en **File > Open Data File**.
- Haga clic en **No** cuando se le pregunte si desea guardar los resultados.



Referencia

Trabajo con ventanas	92
Procesar los datos de resultado en Data Navigator	95
Realizar operaciones en el cromatograma	96
Realizar operaciones en un espectro MS o MS/MS	97
Trabaja con datos visuales cromatográficos	98
Trabajar con datos visuales espectrales	99
Flujos de trabajo	100
Personalizar una plantilla de informe	105



Trabajo con ventanas

Al abrir el programa Qualitative Analysis por primera vez, aparecen cuatro ventanas en el diseño por defecto: Data Navigator, Method Explorer, Chromatogram Results y MS Spectrum Results. Puede alternar entre Navigator View y Compound Details View.

Puede lanzar otras diecisiete ventanas en Navigator View mediante el menú View:

- Method Editor: le permite editar parámetros de método separados por distintas etiquetas
- Spectrum Preview: le permite escanear rápidamente los espectros de un archivo de datos
- MS Spectrum Results: muestra los espectros MS y MS/MS
- Difference Results: muestra los distintos resultados al efectuar una búsqueda en bibliotecas
- Deconvolution Results: muestra los espectros desconvolucionados
- Deconvolution Mirror Plot: muestra dos espectros desconvolucionados en una imagen duplicada
- UV Spectrum Results: muestra los espectros UV, solo disponible para datos LC/MS
- Integration Peak List: muestra los resultados de integración en una tabla
- MS Spectrum Peak List 1: muestra la tabla de picos del primer espectro seleccionado
- MS Spectrum Peak List 2: muestra la tabla de picos del segundo espectro seleccionado
- MS Actuals: muestra información de adquisición del espectro resaltado
- Compound List: muestra los compuestos que se han encontrado usando uno de los algoritmos de Find Compounds
- Compound Identification Results: muestra la información de identificación del compuesto seleccionado
- Spectrum Identification Results: muestra la información de identificación del espectro seleccionado
- MS/MS Formula Details: muestra una tabla que contiene fórmulas posibles calculadas para los fragmentos visualizados en un espectro MS/MS

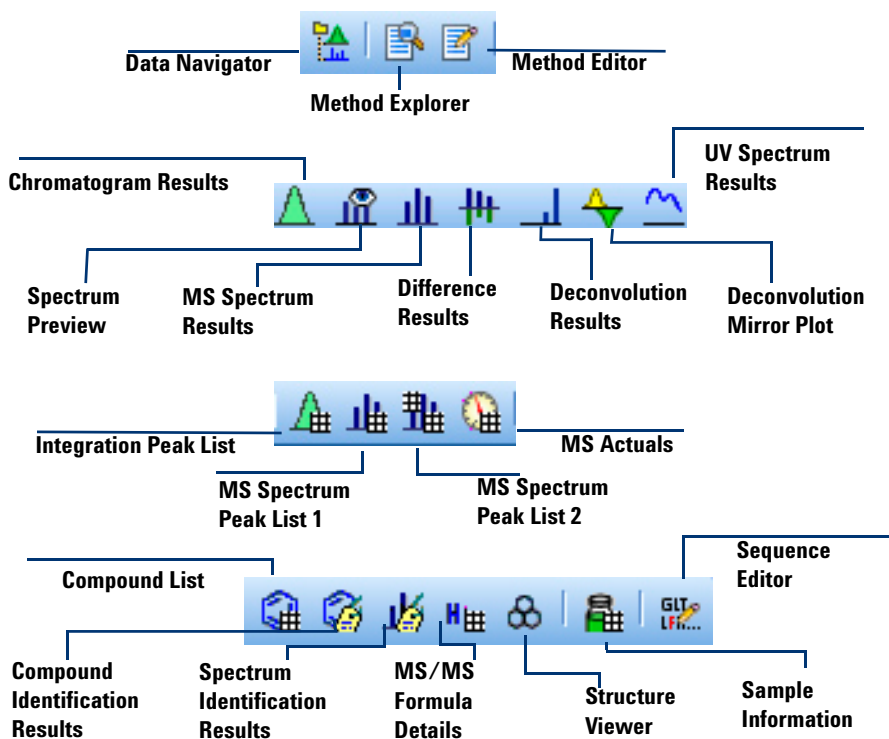
- Structure Viewer: muestra la estructura asociada con el compuesto o el espectro actuales
- Sample Information: muestra información sobre el archivo de datos resaltado
- Sequence Editor: permite editar una secuencia de métodos

También puede visualizar tres ventanas de herramientas que se mostrarán al empezar a usar la herramienta asociada:

- Formula Calculator
- Mass Calculator
- Recalibrate

Window Icons en la barra de herramientas principal

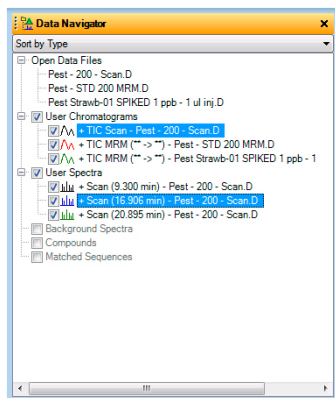
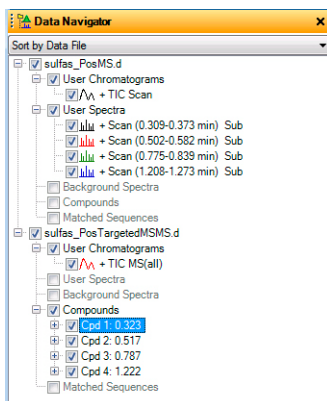
En la barra de herramientas principal, puede abrir y cerrar las ventanas usando estos iconos. Existen iconos adicionales si se instala el software MassHunter BioConfirm. Los comandos del menú View también pueden emplearse para abrir estas ventanas.



Procesar los datos de resultado en Data Navigator

Ventanas y herramientas de Data Navigator

Data Navigator organiza todos los resultados de extracción y selección de espectros por archivo de datos o tipo de datos.



Icono Linked Navigation

Al activarse (por defecto), si se resalta un cromatograma en Data Navigator también se resalta el espectro correspondiente. Los gráficos del cromatograma y espectro correspondientes también se resaltan. Linked Navigation solo funciona si ha empleado el elemento del menú Extract Peak Spectra desde el Menú Chromatograms, o si ha ejecutado alguno de los algoritmos de Compounds.



Herramientas de marcas de verificación

Marca única de verificación: marca las casillas de verificación de todos los datos resaltados.

Marcas de verificación dobles, una de ellas gris: marca las casillas de verificación de los datos resaltados y desmarca las demás casillas de verificación.

Marcas de verificación dobles: marca todas las casillas de verificación.

Los cromatogramas y espectros se visualizan cuando sus casillas de verificación están marcadas.


Realizar operaciones en el cromatograma

Puede realizar las siguientes operaciones en todo el cromatograma o en una parte seleccionada del cromatograma usando los elementos del menú:

Acción	Elemento del menú
Cambia etiquetas de picos en el cromatograma	Configuration > Chromatogram Display Options
Extrae un cromatograma	Chromatograms > Extract Chromatograms
Extrae cromatogramas definidos	Chromatograms > Extract Defined Chromatograms
Integra el cromatograma	Chromatograms > Integrate Chromatogram
Integrar y extraer espectros de picos	Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra
Integra y desconvoluciona espectros de picos	Chromatograms > Integrate and Deconvolute Peak Spectra
Suaviza el cromatograma	Chromatograms > Smooth Chromatogram
Sustraer cualquier cromatograma	Chromatograms > Subtract Any Chromatogram
Calcula la relación señal/ ruido	Chromatograms > Calculate Signal-to-Noise
Encuentra compuestos a partir de datos MS/MS automáticos	Find > Find Compounds by Auto MS/MS
Encuentra compuestos a partir de datos MS/MS objetivo	Find > Find Compounds by Targeted MS/MS
Encuentra compuestos para datos MS(1)	Find > Find Compounds by Molecular Feature
Encuentra compuestos para datos GC/MS	Find > Find Compounds by Chromatogram Deconvolution
Encuentra compuestos para datos MRM	Find > Find Compounds by MRM
Encuentra compuestos por resultados de integración	Find > Find Compounds by Integration
Encuentra compuestos que coinciden con fórmulas específicas	Find > Find Compounds by Formula

Seleccionar operaciones en rango desde el menú de acceso directo

Cuando se selecciona un rango cromatográfico, también se puede extraer un espectro y extraer un espectro al fondo, además de las operaciones mencionadas anteriormente y otras no mencionadas.

- 1 Para acceder a estas operaciones, haga clic en la herramienta Range Select () en la barra de herramientas Chromatogram Results.
- 2 Haga clic en el punto en el que desea iniciar el rango, arrastre el cursor sobre un rango y suelte el botón del ratón.
- 3 Haga clic con el botón derecho del ratón en el cromatograma y pulse en la operación desde el menú de acceso directo.

Guarde los resultados en el archivo o archivos de datos

- Haga clic en el icono **Save** () , o en **File > Save Results**.

Cuando salga del programa, también se le preguntará si desea guardar los resultados en el archivo de datos, a menos que haya desactivado esta función (la función se desactiva en el cuadro de diálogo Message Box Options)

Realizar operaciones en un espectro MS o MS/MS

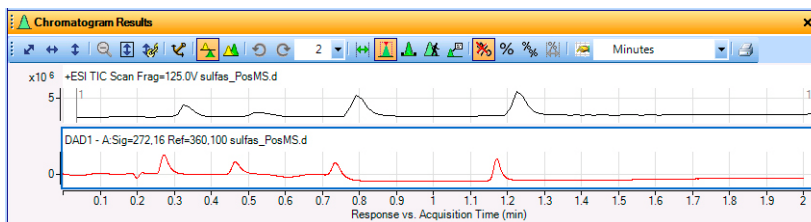
Puede realizar las siguientes operaciones en un espectro MS o MS/MS, o bien en una región determinada de un espectro MS o MS/MS usando los elementos de menú:

Acción	Elemento del menú
Ver el m/z, abundancia, estado de carga y otros datos sobre los picos de un espectro	View > MS Spectrum Peak List 1
Cambia las etiquetas de pico espectral	Configuration > MS and MS/MS Spectra Display Options
Sustrae el espectro de fondo	Spectra > Subtract Background Spectrum
Sustrae cualquier espectro	Spectra > Subtract Any Spectrum (y, seguidamente, pulsar en otro espectro)
Une dos espectros	Spectra > Add Any Spectrum (y, seguidamente, pulsar en otro espectro)

Acción	Elemento del menú
Busca en una base de datos entradas que coincidan con masas específicas de un espectro	Spectra > Search Database for Spectrum Peaks
Genera fórmulas para las masas en el rango seleccionado de un espectro	Spectra > Generate Formulas from Spectrum Peaks (cuando se selecciona un rango en el espectro MS)
Desconvolucionada mediante el algoritmo Resolved Isotope	Spectra > Deconvolute (Resolved Isotope)
Busca biblioteca	Identify > Search Library for Spectra o Spectra > Search Library for Spectra

Trabaja con datos visuales cromatográficos

Ventana Chromatogram Results



Herramientas de resultados de cronograma

Herramientas de zoom en orden



Herramientas de selección en orden



Siempre es necesario seleccionar una de estas herramientas.

Autoescalar eje X y eje Y

Autoscalar eje X

Autoscalar eje Y

Alejar zoom

Autoescalar eje Y durante el zoom

Modo eje Y enlazado

Range Select: si está en posición **On**, puede arrastrar un rango de cromatogramas para realizar acciones en ellos.

Peak Select: cuando se encuentra en posición **On**, puede seleccionar el espectro de un pico integrado en máximo.

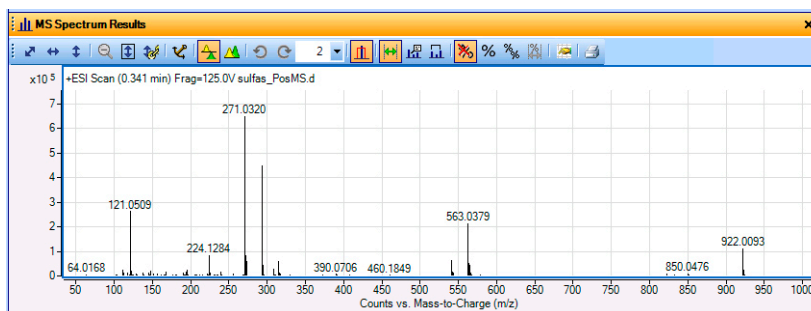
Manual Integration: cuando se encuentra **On**, puede realizar integraciones de manera interactiva.

Walk Chromatogram: cuando se encuentra en posición **On**, puede visualizar espectros individuales mientras hace clic en cada punto, o usar las flechas derecha e izquierda del teclado.

Annotation: cuando se encuentra **On**, puede añadir anotaciones de imagen y texto a los cromatogramas.

Trabajar con datos visuales espectrales

Ventana MS Spectrum Results



Herramientas de resultados de espectro MS

Herramientas de zoom en orden



Herramientas de selección en orden



Para desmarcar la selección de una herramienta, haga clic en otra herramienta o icono.

Autoescalar eje X y eje Y

Autoscalar eje X

Autoscalar eje Y

Alejar zoom

Autoescalar eje Y durante el zoom

Modo eje Y enlazado

Range Select: si está en posición **On**, puede arrastrar un rango de cromatogramas para realizar acciones en ellos.

Annotation: cuando se encuentra **On**, puede añadir anotaciones de imagen y texto a los cromatogramas.

Calipers: cuando se encuentra en posición **On**, puede añadir un calibrador Delta Mass al espectro seleccionado. En la ventana Deconvolution Results, también puede añadir un calibrador de aminoácidos o un calibrador de modificaciones. Consulte la ayuda en línea para obtener más información.

Flujos de trabajo

Los flujos de trabajo le ayudan a personalizar la interfaz de usuario de su aplicación. Cada flujo de trabajo carga un método distinto con los parámetros apropiados para dicho flujo de trabajo. Asimismo, cada flujo de trabajo carga un diseño distinto; estos diseños incluyen personalizar las columnas que se muestran en cada tabla. Por último, cuatro de los diseños también incorporan una sección especial de edición de métodos que contiene copias de las secciones del editor de métodos relevantes para el flujo de trabajo. Agrupar las funciones que se utilizan conjuntamente en un flujo de trabajo específico facilita personalizar el método.

El programa Qualitative Analysis incluye varios flujos de trabajo distintos. Ellos son:

- General

- BioConfirm: estos flujos de trabajo solo están disponibles si el software BioConfirm está instalado y marcado en el cuadro de diálogo User Interface Configuration. BioConfirm cuenta con varios flujos de trabajo posibles, dependiendo del tipo de análisis que desea realizar. BioConfirm se emplea con archivos de datos LC/MS.
- Chromatogram Peak Survey
- Formula Confirmation and Sample Purity
- MS Target Compound Screening
- GC/Q-TOF Compound Screening

Si trabaja con datos GC/MS, puede seleccionar el flujo de trabajo General o el flujo de trabajo GC/Q-TOF Compound Screening. Si trabaja con datos LC/MS, puede seleccionar cualquiera de los flujos de trabajo excepto GC/Q-TOF Compound Screening.

Método específico

Cada flujo de trabajo carga un método específico por defecto con los ajustes apropiados para dicho flujo de trabajo. Por ejemplo, si cambia a uno de los flujos de trabajo BioConfirm, el **Tipo de datos objetivo** del algoritmo Find Compounds by Molecular Feature se ajusta a **Large molecules (proteínas, oligoelementos)**. Esta configuración es apropiada para el flujo de trabajo BioConfirm pero, por defecto, no lo es para los demás flujos de trabajo.

Diseño específico

Además, cada flujo de trabajo carga un diseño específico. Los diseños consisten en lo siguiente:

- Posición y tamaño de cada ventana
- Qué ventanas se etiquetan
- Qué ventanas son flotantes
- Qué ventana etiquetada es la principal
- Qué ventana es visible por defecto
- Visibilidad de la barra de estado

En cada ventana de gráficos (ventana Chromatogram Results, ventana Spectrum Preview, ventana MS Spectrum Results, ventana Deconvolution y ventana UV Results), se guarda la siguiente información:

- Superposición o no de los gráficos
- Activación del modo Autoescalar eje Y durante el zoom
- Activación del modo Eje Y enlazado

En cada ventana de tabla, se guarda lo siguiente

- Visibilidad de cada columna
- Orden de las columnas
- Anchura de cada columna
- Filtros que se han añadido a la tabla (solo disponible para la tabla Compound List, la tabla Compound Identification Results y la ventana Spectrum Identification Results).

Sección específica de Method Explorer y Method Editor

Si utiliza Method Editor con el flujo de trabajo General, puede cambiar prácticamente todos los parámetros del Método.

Cada uno de los cuatro demás flujos de trabajo cambia las secciones disponibles en Method Explorer. Cada nueva sección contiene solo las pestañas y secciones de Method Editor que son útiles para dicho flujo de trabajo. Cambiar un parámetro en la sección de flujo de trabajo también cambia el parámetro de la sección correspondiente de las secciones Method Editor generales.

Dos pestañas no se repiten en las secciones Method Editor generales. La sección **Chromatogram Peak Survey Workflow > Spectrum Peak Identification** y la pestaña **Chromatogram Peak Survey Workflow > Chromatogram Extraction > Chromatograms** solo están incluidas en el flujo de trabajo Chromatogram Peak Survey. Estas secciones solo afectan al algoritmo Chromatogram Peak Survey. Este algoritmo solo se emplea en este flujo de trabajo y en la acción **Chromatogram Peak Survey without Report** y la acción **Chromatogram Peak Survey with Analysis Report**.

Métodos y diseño de los flujos de trabajo

Con cada flujo de trabajo se incluyen métodos y diseños adicionales por defecto.

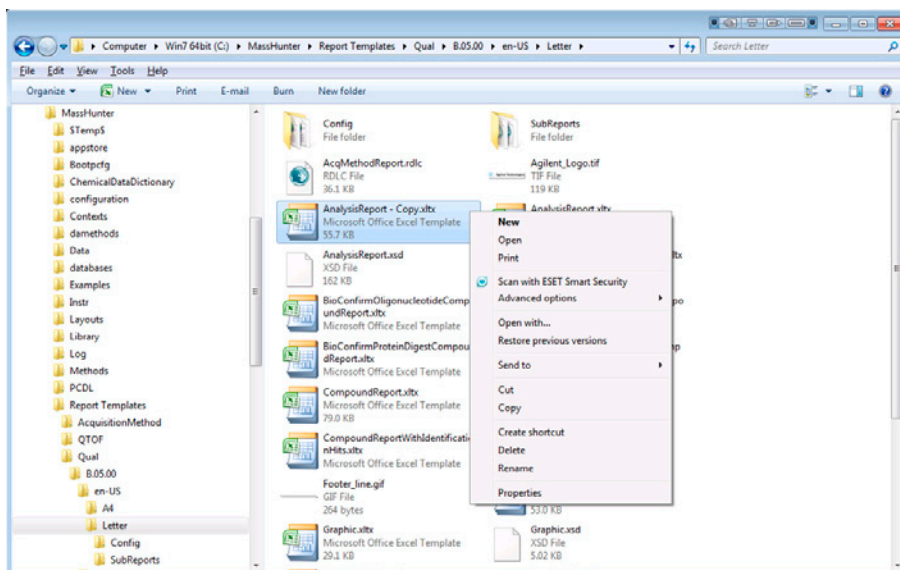
Flujo de trabajo	Método	Diseño	Sección de Method Editor
General	default.m	Default.xml	Ninguno
BioConfirm Intact Protein	BioConfirm IntactProtein-Default.m	BioConfirm-IntactProtein-MaximumEntropy-Default.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm High Mass Intact Protein	BioConfirm IntactProtein HighMass Default.m	BioConfirm IntactProtein LMFE.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm Small Oligonucleotides	BioConfirmOligo nucleotideSmall.m	BioConfirmOligo-nucleotide.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm Large Oligonucleotides	BioConfirmOligo nucleotideLarge-Default.m	BioConfirmOligo-nucleotide.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm Protein Digest	BioConfirmProtein Digest-Default.m	BioConfirm ProteinDigest.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm Synthetic Peptide	BioConfirmSynthetic Peptide-Default.m	BioConfirm SyntheticPeptide.xml	BioConfirm Workflow
Chromatogram Peak Survey	ChromPeakSurvey-Default.m	Default.xml	Chromatogram Peak Survey Workflow

Flujo de trabajo	Método	Diseño	Sección de Method Editor
Formula Confirmation and Sample Purity	SamplePurity-Default.m	SamplePurity-Default.xml	Formula Confirmation and Sample Purity Workflow
MS Target Compound Screening	Screening-Default.m	Screening-Default.xml	MS Target Compound Screening Workflow
GC Q-TOF Compound Screening	GC_Q-TOF.m	QTOFData.xml	GC/Q-TOF Compound Screening

Personalizar una plantilla de informe

En la Ayuda en línea, podrá consultar el complemento MassHunter Report Designer, la guía de familiarización de Report Designer o el DVD de formación en creación de informes para ampliar detalles sobre cómo modificar una plantilla de informe. Los siguientes pasos proporcionan una idea rápida sobre lo que significa personalizar una plantilla.

- 1 Vaya a la carpeta que contiene las plantillas de informe. Por defecto, la plantilla es **\MassHunter\Report Templates\Qual\B.05.00\en-US\Letter**. Puede seleccionar una carpeta distinta en Method Explorer en la pestaña General > Common Reporting Options > Templates.
- 2 Haga una copia de la plantilla que desea modificar. Haga clic con el botón derecho y pulse **Properties**. Si es necesario, desmarque la casilla de verificación **Read-only**. Seguidamente, haga clic con el botón derecho y pulse **Open** en el menú de acceso directo.



Al abrir una plantilla de esta forma, Excel sabrá que el archivo es una plantilla. Cuando la plantilla se encuentre abierta, podrá modificar los encabezados y pies de página y añadir, eliminar o mover columnas de parámetros. Consulte la ayuda en línea para obtener más información. Todas las plantillas de Qualitative Analysis están marcadas como Solo lectura. Cambie esta propiedad antes de editar la plantilla.

www.agilent.com

En este libro

Esta guía contiene información para aprender a utilizar su Software MassHunter Workstation de Agilent - Qualitative Analysis con datos GC/MS.

© Agilent Technologies, Inc. 2012

Revisión A, Noviembre de 2012



G3335-95147



Agilent Technologies