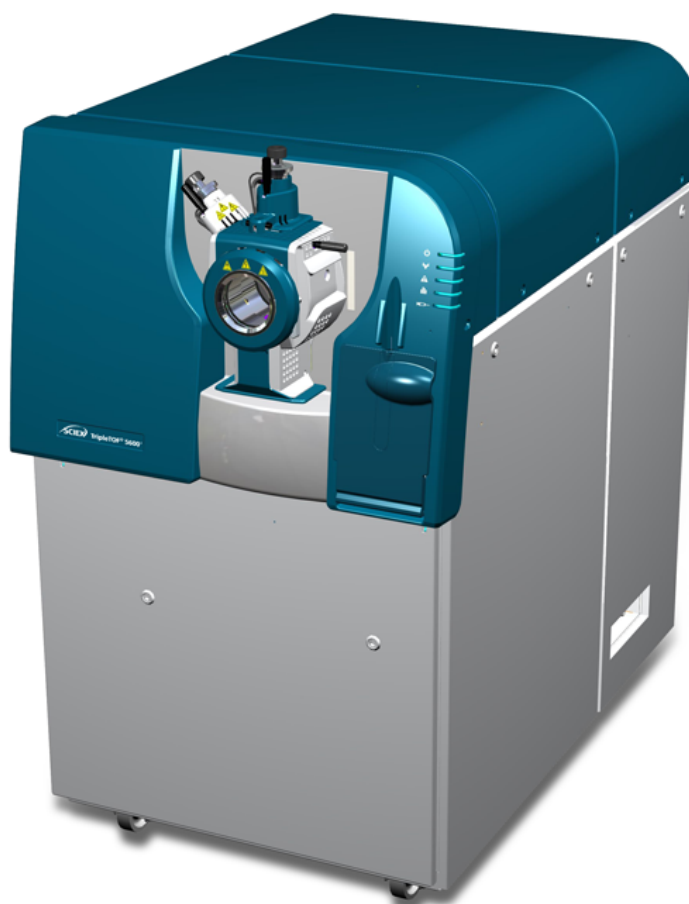


Sistema TripleTOF[®] 5600/5600+

Guía del usuario del sistema



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

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

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

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

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

AB Sciex está haciendo negocios como SCIEX.

Las marcas comerciales aquí mencionadas son propiedad de AB Sciex Pte. Ltd. o sus respectivos propietarios.

AB SCIEX™ se está usando bajo licencia.

© 2018 AB Sciex



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk 33, #04-06
Marsiling Ind Estate Road 3
Woodlands Central Indus. Estate.
SINGAPUR 739256

Contenido

1 Precauciones y limitaciones de funcionamiento.....	6
Información general de seguridad.....	6
Cumplimiento normativo.....	6
Australia y Nueva Zelanda.....	6
Canadá.....	7
Unión Europea.....	7
Estados Unidos.....	7
Internacional.....	8
Precauciones eléctricas.....	8
Sobrecargas, suministro de CA.....	8
Conductor de protección de tierra.....	9
Precauciones químicas.....	9
Precauciones de ventilación.....	10
Precauciones medioambientales.....	11
Entorno electromagnético.....	12
Desmantelamiento y eliminación.....	13
Personal cualificado.....	13
Condiciones de laboratorio.....	13
Condiciones de funcionamiento.....	13
Especificaciones de rendimiento.....	14
Uso y modificación del equipo.....	14
Contacto.....	15
Asistencia técnica.....	15
Símbolos y convenciones de la documentación.....	15
Documentación relacionada.....	16
2 Principios de funcionamiento.....	17
Descripción general del sistema.....	17
Descripción general del hardware.....	17
Símbolos del panel.....	20
Teoría de funcionamiento.....	21
Manipulación de los datos.....	22
3 Instrucciones de funcionamiento: Hardware.....	23
Inicio del sistema.....	23
Apagado del sistema.....	24
Ajuste de la posición de la bomba de jeringa integrada.....	25
Restablecimiento de la bomba de jeringa.....	28
4 Instrucciones de funcionamiento: flujos de trabajo para la muestra.....	30
5 Instrucciones de funcionamiento: perfiles de hardware y proyectos.....	33
Perfiles de hardware.....	33
Creación de un perfil de hardware.....	33

Contenido

Adición de dispositivos a un perfil de hardware.....	38
Solución de problemas de activación del perfil de hardware.....	40
Proyectos y subproyectos.....	40
Creación de proyectos y subproyectos.....	40
Crear subproyectos.....	42
Copiar subproyectos.....	42
Cambio entre proyectos y subproyectos.....	42
Carpetas de proyecto instaladas.....	43
Copia de seguridad de la carpeta API Instrument.....	43
Recuperación de la carpeta API Instrument.....	44
6 Ajuste y calibración.....	45
Optimización del espectrómetro de masas.....	46
Acerca del cuadro de diálogo Verifying or Adjusting Performance.....	46
Resumen de resultados.....	47
7 Instrucciones de funcionamiento: métodos de adquisición.....	48
Creación de un método de adquisición utilizando el Acquisition Method Editor.....	48
Adición de un experimento.....	49
Creación de un período.....	49
Copia de un experimento en un período.....	50
Copia de un experimento dentro de un período.....	50
Creación de un método de adquisición mediante el asistente de método.....	50
Técnicas de análisis.....	51
Espectrometría de masas simple.....	51
Espectrometría de masas simple de cuadrupolo.....	52
Espectrometría de masas simple con tiempo de vuelo.....	52
Espectrómetro de masas en tándem.....	52
Espectrometría de masas de ión producto.....	52
Espectrometría de masas de ión precursor.....	52
Acerca de la adquisición de datos de espectro.....	52
Parámetros.....	53
8 Instrucciones de funcionamiento: lotes.....	58
Configuración de las opciones de cola.....	58
Adición de conjuntos y muestras a un lote.....	60
Enviar una muestra o conjunto de muestras.....	63
Configuración de la calibración de muestras.....	63
Cambiar el orden de las muestras.....	64
Adquisición de datos.....	64
Definición de la ubicación de las muestras en el editor Batch Editor.....	65
Selección de la posición de los viales mediante la pestaña Locations (opcional).....	65
Detención de la adquisición de muestras.....	66
Menú contextual del Batch Editor.....	67
Estados de cola y de dispositivo.....	68
Estados de cola.....	68
Visualización de los iconos de estado de instrumento y dispositivo.....	69
Menú contextual de Queue.....	70
9 Instrucciones de funcionamiento: análisis y exploración de datos.....	72
Apertura de archivos de datos.....	72
Navegación por las muestras de un archivo de datos.....	73

Visualización de las condiciones experimentales.....	73
Mostrar datos en tablas.....	74
Mostrar datos de ADC.....	76
Mostrar los datos cuantitativos básicos.....	76
Cromatogramas.....	77
Visualización de TIC desde un espectro.....	78
Visualización de un espectro desde un TIC.....	79
Acerca de la generación de los XIC.....	79
Generación de un XIC mediante el método de rango seleccionado.....	80
Generación de un XIC mediante el método de pico máximo.....	81
Generación de un XIC mediante el método de masas de pico base.....	81
Extracción de iones mediante el método de selección de masas.....	81
Generación de BPC.....	82
Generación de XWC.....	84
Datos de DAD.....	84
Generación de TWC.....	85
Ajuste del umbral.....	85
Paneles de cromatograma.....	86
Paneles de espectro.....	87
Procesamiento de datos gráficos.....	88
Gráficos.....	88
Administrar datos.....	88
Ampliar el eje Y.....	90
Ampliar el eje X.....	90
10 Información de servicio técnico y mantenimiento.....	91
Calendario de mantenimiento recomendado.....	91
Limpieza de las superficies.....	94
Limpieza de la parte delantera.....	94
Síntomas de la contaminación.....	94
Materiales necesarios	95
Prácticas correctas de limpieza.....	96
Preparación del espectrómetro de masas.....	97
Limpieza de la placa de chapa.....	98
Limpieza de la parte delantera de la placa del orificio.....	99
Puesta en servicio del espectrómetro de masas.....	100
Vaciado de la botella de drenaje de escape de la fuente.....	100
Inspección del nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar.....	102
Sustitución del filtro del ventilador de refrigeración del espectrómetro de masas.....	103
Requisitos ambientales para la manipulación y el almacenamiento del espectrómetro de masas.....	105
11 Solución de problemas del espectrómetro de masas.....	106
A Iones de calibración recomendados.....	109
B Masas exactas y fórmulas químicas.....	112
C Iconos de la barra de herramientas.....	115
D Glosario de símbolos.....	124
E Glosario de advertencias.....	129

Precauciones y limitaciones de funcionamiento

1

Nota: Lea cuidadosamente todas las secciones de esta guía antes de manejar el sistema.

Esta sección contiene información general relacionada con la seguridad y proporciona información sobre el cumplimiento de las normativas. También describe los posibles riesgos para el sistema y las advertencias, así como las precauciones que se deben tener en cuenta para reducir al mínimo los peligros.

Además de esta sección, consulte [Glosario de símbolos en la página 124](#) para obtener información sobre los símbolos y convenciones utilizados en el entorno del laboratorio, en el sistema y en esta documentación. Consulte la *Guía de planificación del centro* para ver los requisitos del centro, entre los que se incluyen los requisitos de alimentación de CA, escape de la fuente, ventilación, aire comprimido, nitrógeno y bomba de vacío preliminar.

Información general de seguridad

Para evitar lesiones personales o daños en el sistema, debe leer, comprender y seguir todas las advertencias y precauciones de seguridad de este documento, de la ficha técnica de seguridad química del fabricante y de la información de la etiqueta del producto. Las etiquetas del espectrómetro de masas se muestran con símbolos reconocidos internacionalmente. En caso de no atender estas advertencias, podrían provocarse lesiones graves.

El objetivo de la información de seguridad es complementar las normativas y leyes sobre medioambiente, higiene y seguridad (EHS) federales, estatales, provinciales y locales. La información proporcionada incluye la información de seguridad relacionada con el sistema aplicable al funcionamiento del sistema. No describe todos los procedimientos de seguridad que deben aplicarse. El usuario y su organización son los responsables últimos del cumplimiento de las normativas federales, estatales, provinciales y locales de EHS, así como del mantenimiento de un entorno seguro en el laboratorio.

Consulte el material de referencia de laboratorio adecuado y los procedimientos de funcionamiento estándar.

Cumplimiento normativo

Este sistema cumple con las normativas y normas indicadas en esta sección. Para obtener referencias con fechas, consulte la Declaración de conformidad incluida con el sistema y sus componentes individuales. Este sistema está marcado con las etiquetas correspondientes.

Australia y Nueva Zelanda

- **Compatibilidad electromagnética (EMC):** Ley de Comunicaciones por Radio de 1992 según lo establecido en estas normas:
 - Interferencia electromagnética: AS/NZS CISPR 11/ EN 55011/ CISPR 11 (Clase A). Consulte [Interferencias electromagnéticas en la página 12](#).

- **Seguridad:** AS/NZ 61010-1 y IEC 61010-2-061

Canadá

- **Interferencias electromagnéticas (EMI):** CAN/CSA CISPR11. Este dispositivo ISM cumple con la norma Canadiense ICES-001. Consulte [Interferencias electromagnéticas en la página 12](#).
- **Seguridad:**
 - CAN/CSA C22.2 N.º 61010-1
 - CAN/CSA C22.2 N.º 61010-2-061

Unión Europea

- **Compatibilidad Electromagnética (CEM):** Directiva sobre Compatibilidad Electromagnética 2014/30/UE según lo establecido en las siguientes normas:
 - CISPR 61326-1
 - EN 55011 (Clase A)Consulte [Compatibilidad electromagnética en la página 12](#).
- **Seguridad:** Directivas de Baja Tensión 2014/35/UE según lo establecido en los siguientes estándares:
 - CISPR 61010-1
 - EN 61010-2-061
- **Residuos de aparatos eléctricos y electrónicos (RAEE):** directiva sobre Residuos de aparatos eléctricos y electrónicos 2012/96/CEE según lo establecido en la norma EN 40519. Consulte [Residuos de aparatos eléctricos y electrónicos en la página 13](#).
- **Envases y residuos de envases (PPW):** Directiva 94/62/CE relativa a los envases y residuos de envases
- **Restricción de sustancias peligrosas (RoHS):** Directiva RoHS 2011/65/UE

Estados Unidos

- **Normativas de emisiones de radio:** 47 CFR 15, según lo establecido en FCC Parte 15 (Clase A)
- **Seguridad:** Normativa de higiene y seguridad en el trabajo 29 CFR 1910 según lo establecido en los siguientes estándares:
 - CISPR 61010-1
 - IEC 61010-2-061

Internacional

- **Compatibilidad electromagnética (ECM):**
 - IEC 61326-1
 - IEC CISPR 11 (Clase A)
 - IEC 61000-3-2
 - IEC 61000-3-3Consulte [Compatibilidad electromagnética en la página 12](#).
- **Seguridad:**
 - IEC 61010-1
 - IEC 61010-2-061

Precauciones eléctricas



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. No retire las cubiertas. Si lo hace, puede provocar lesiones o un funcionamiento incorrecto del sistema. Las cubiertas no tienen que retirarse para las tareas de mantenimiento rutinario, inspección o ajuste. Póngase en contacto con un representante del servicio técnico de SCIEX cuando haya que hacer reparaciones en las que sea necesario quitar las cubiertas.

- Siga las prácticas de trabajo seguro con electricidad.
- Utilice las prácticas de administración de cables para controlar los cables eléctricos. Esto reducirá el riesgo de tropezar.

Para obtener información sobre las especificaciones eléctricas del sistema, consulte la *Guía de planificación del centro*.

Sobrecargas, suministro de CA

Conecte el sistema a una toma de alimentación de CA compatible indicada en esta guía.



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Emplee únicamente personal cualificado para la instalación de todos los elementos y suministros eléctricos, y asegúrese de que todas las instalaciones cumplen las normativas y los estándares de seguridad locales.



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Asegúrese de que el sistema puede desconectarse de la toma de alimentación en caso de emergencia. No bloquee la toma de alimentación.



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Utilice únicamente los cables de alimentación suministrados con el sistema. No utilice cables de alimentación que no estén clasificados correctamente para el funcionamiento de este sistema.

No se necesita un transformador de línea externo para el espectrómetro de masas o bomba de vacío preliminar.

Conductor de protección de tierra

La alimentación debe incluir un conductor de protección de tierra correctamente instalado. El conductor de protección de tierra debe ser instalado o comprobado por un electricista cualificado antes de conectar el sistema.



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. No interrumpa intencionadamente el conductor de protección de tierra. Cualquier interrupción del conductor de protección de tierra crea un peligro de descarga eléctrica.



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Verifique que se ha conectado un conductor de protección de tierra (cable de puesta a tierra) entre el bucle de la muestra y un punto de conexión a tierra adecuado en la fuente de iones. Esta conexión a tierra adicional reforzará la configuración de seguridad especificada por SCIEX.

Precauciones químicas



¡ADVERTENCIA! Riesgo de radiación ionizante, material biológico o sustancias químicas tóxicas. Determine si se precisa descontaminación antes de proceder a la limpieza o el mantenimiento. El cliente debe descontaminar el sistema antes de limpiarlo o realizar tareas de mantenimiento si se han utilizado materiales radiactivos, agentes biológicos o sustancias químicas tóxicas con el sistema.



¡ADVERTENCIA! Peligro medioambiental. No elimine los componentes del sistema como residuos urbanos sin clasificar. Siga las normas locales de eliminación de componentes.



¡ADVERTENCIA! Peligro de material biológico o sustancias químicas tóxicas. Conecte correctamente los tubos de drenaje al espectrómetro de masas y a la botella de drenaje de escape de la fuente para evitar fugas.

Precauciones y limitaciones de funcionamiento

- Determine qué productos químicos se han utilizado en el sistema antes de su reparación y mantenimiento habituales. Consulte las *fichas de datos de seguridad* para conocer las precauciones de higiene y seguridad que deben seguirse con respecto a los productos químicos. Las fichas de datos de seguridad de SCIEX se encuentran en sciex.com/tech-regulatory.
- Trabaje en zonas bien ventiladas o en las que se disponga de una campana extractora.
- Utilice siempre el equipo de protección individual adecuado, lo que incluye guantes de neopreno o nitrilo sin talco, gafas de seguridad y una bata de laboratorio.
- Siempre que trabaje con materiales inflamables, evite cualquier fuente de ignición, como el isopropanol, el metanol y otros disolventes inflamables.
- Adopte las precauciones pertinentes al utilizar y desechar productos químicos. Posible riesgo de sufrir lesiones personales si los productos químicos no se manipulan ni desechan como es debido.
- Evite que los productos químicos entren en contacto con la piel durante los procedimientos de limpieza y lávese las manos después de utilizarlos.
- Asegúrese de que todas las mangueras de escape están conectadas correctamente y de que todas las conexiones funcionan según el modo en que fueron diseñadas.
- Recoja todo el líquido que se haya derramado y deséchelo como residuo peligroso.
- Debe cumplir las normativas locales de manipulación, almacenamiento y eliminación de materiales de riesgo biológico, tóxicos o radioactivos.
- (Recomendado) Utilice las cubetas secundarias de recogida debajo de las bombas de vacío preliminar, las botellas de disolvente y el contenedor de recogida de residuos para recoger los derrames de sustancias químicas que puedan producirse.

Precauciones de ventilación

La ventilación de los gases y el desecho de los residuos se deben llevar a cabo de acuerdo con las normas de higiene y seguridad estatales, provinciales y locales. Es responsabilidad del cliente asegurarse de que la calidad del aire se mantiene en cumplimiento con las normas de higiene y seguridad locales.

El sistema de escape de la fuente y la bomba de vacío preliminar deben tener una ventilación hacia un sistema de escape externo o una campana extractora específicos del laboratorio.



¡ADVERTENCIA! Peligro de incendio. Asegúrese de que el sistema de escape de la fuente esté conectado y funcionando para evitar que se acumulen vapores inflamables en la fuente de iones.



¡ADVERTENCIA! Riesgo de radiación ionizante, material biológico o sustancias químicas tóxicas. Tome las precauciones necesarias para ventilar los gases de escape a una campana extractora o un sistema de escape específicos del laboratorio, y asegúrese de que los tubos de ventilación estén asegurados con pinzas. Asegúrese de que el laboratorio tiene una tasa de intercambio de aire adecuada para el trabajo realizado.



¡ADVERTENCIA! Riesgo de radiación ionizante, material biológico o sustancias químicas tóxicas. No ponga en funcionamiento el espectrómetro de masas si las mangueras de escape de la fuente y de la bomba de vacío preliminar no están correctamente conectadas al sistema de ventilación del laboratorio. Revise periódicamente los tubos de escape para asegurarse de que no presentan fugas. El uso de espectrómetros de masas sin el sistema de ventilación adecuado puede suponer un peligro para la salud y podría provocar lesiones graves.



¡ADVERTENCIA! Riesgo de radiación ionizante, material biológico o sustancias químicas tóxicas. Utilice la fuente de iones solo si dispone de los conocimientos y la formación adecuados para utilizar, contener y evacuar los materiales tóxicos o nocivos que se emplean con la fuente de iones.



¡ADVERTENCIA! Riesgo de perforación, riesgo de radiación ionizante, riesgo biológico o riesgo por sustancias químicas tóxicas. Deje de usar la fuente de iones si la ventana de la misma está agrietada o rota y póngase en contacto con un representante del servicio técnico de SCIEX. Cualquier material tóxico o nocivo introducido en el equipo estará presente en la salida de escape de la fuente. Deseche los objetos con filo siguiendo los procedimientos de seguridad establecidos del laboratorio.

Precauciones medioambientales

La instalación de los suministros y elementos de alimentación eléctrica, calefacción, ventilación y fontanería debe llevarla a cabo personal cualificado. Asegúrese de que todas las instalaciones cumplan los reglamentos y normativas de riesgo biológico locales. Para obtener más información sobre las condiciones medioambientales del sistema, consulte la *Guía de planificación del centro*.

Permita espacio de acceso alrededor del equipo cuando configure el sistema.



¡PELIGRO! Peligro de explosión. No utilice el sistema en un entorno en el que existan gases explosivos. El sistema no está diseñado para utilizarse en un entorno explosivo.



¡ADVERTENCIA! Peligro de material biológico. Para el uso de materiales de riesgo biológico, deben cumplirse en todo momento las correspondientes normativas locales de evaluación de riesgos, control y manipulación. Este sistema o cualquier otra pieza no están previstos para actuar como un contenedor de residuos biológicos.

PRECAUCIÓN: Posible cambio de masa. Mantenga una temperatura ambiente estable. Si la temperatura varía en más de 2 °C por hora, la resolución y la calibración de masas pueden verse afectadas.

Entorno electromagnético

Compatibilidad electromagnética

Entorno electromagnético básico: entorno existente en los lugares caracterizados por recibir un suministro de baja tensión directamente de la red eléctrica pública.

Criterios de rendimiento B (Criterios A): el equipo debe funcionar según lo previsto sin degradación del rendimiento ni pérdida de su funcionamiento durante o después de la prueba.

Criterios de rendimiento B (Criterios B): el equipo puede sufrir una pérdida de sus funciones (una o más) durante la prueba, pero debe funcionar según lo previsto con alguna degradación del rendimiento y de sus funciones, que deben recuperarse automáticamente después de la prueba.

Criterios de rendimiento C (Criterios C): el equipo puede sufrir una pérdida de sus funciones (una o más) durante la prueba, pero debe funcionar según lo previsto con alguna degradación del rendimiento y de sus funciones, que debe poder recuperar el operador después de la prueba.

El equipo está destinado a su uso en un entorno electromagnético básico.

La pérdida de rendimiento esperada en las condiciones de inmunidad electromagnética es un cambio menor al 20 % en el recuento total de iones (TIC).

Asegúrese de mantener un entorno electromagnético compatible para que el equipo se mantenga adecuadamente y que el dispositivo funcione de la forma prevista. Si la línea de alimentación eléctrica está sometida a alto ruido eléctrico, instale un protector de sobretensión.

Interferencias electromagnéticas

Equipo de clase A: equipo que es adecuado para su uso en todos los establecimientos que no sean domésticos y los conectados directamente a una red de suministro de energía de baja tensión que abastezca a edificios destinados a viviendas. [Derivada de CISPR 11:2009, 5.3] El equipo clase A debe respetar los límites de la clase A.

Este equipo se ha sometido a pruebas y se ha comprobado que cumple los límites para dispositivos digitales de clase A, de conformidad con la Parte 15 de las normativas de la FCC (Comisión Federal de Comunicaciones).

Estos límites se han establecido para proporcionar una protección adecuada contra posibles interferencias perjudiciales cuando el equipo se utiliza en un entorno comercial. Este equipo genera, utiliza y puede radiar energía de radiofrecuencia y, en caso de no instalarse de acuerdo con el manual del operador, puede causar interferencias perjudiciales para las comunicaciones por radio.

El uso de este equipo en una zona residencial puede causar interferencias perjudiciales, en cuyo caso deberá corregir los problemas de interferencias asumiendo los costos. Los cambios o las modificaciones que el fabricante no haya aprobado explícitamente pueden anular su autorización para operar el equipo.

Desmantelamiento y eliminación



¡ADVERTENCIA! Peligro medioambiental. No elimine los componentes del sistema como residuos urbanos sin clasificar. Siga las normas locales de eliminación de componentes.

Antes de desmantelarlo, descontamine el sistema completo de acuerdo con las normas locales.

Cuando el sistema vaya a retirarse del servicio, será preciso separar los distintos materiales y reciclarlos de acuerdo con las normativas medioambientales nacionales y locales. Consulte [Requisitos ambientales para la manipulación y el almacenamiento del espectrómetro de masas en la página 105](#).

Nota: SCIEX no aceptará ninguna devolución del sistema si no se ha rellenado un formulario de descontaminación. Póngase en contacto con un representante del servicio técnico para obtener una copia del formulario.

No elimine los componentes o subconjuntos del sistema, incluidas las piezas de ordenador, como residuos urbanos sin clasificar.

Residuos de aparatos eléctricos y electrónicos

Siga las normas de las ordenanzas locales sobre residuos urbanos para su adecuada eliminación con el fin de reducir el impacto medioambiental de los residuos de aparatos eléctricos y electrónicos (RAEE). Para desechar de forma segura este equipo, póngase en contacto con una oficina local del Servicio de atención al cliente para solicitar la recogida y reciclaje gratuitos del equipo.

Personal cualificado

Solo el personal cualificado de SCIEX puede instalar y realizar el mantenimiento del equipo. Una vez instalado el sistema, el representante del servicio técnico (FSE) utiliza la *Lista de comprobación de familiarización del cliente* para enseñar al cliente a utilizar, limpiar y realizar un mantenimiento básico del sistema.

Únicamente personal cualificado por el fabricante debe realizar el mantenimiento del equipo. La persona designada por el laboratorio se familiarizará con los procedimientos del personal de mantenimiento cualificado durante la instalación. La persona de mantenimiento cualificada es la que conoce debidamente los riesgos eléctricos y químicos asociados al mantenimiento de equipos de laboratorio.

Condiciones de laboratorio

Condiciones de funcionamiento

El sistema está diseñado para funcionar con seguridad en estas condiciones:

- Interiores
- Altitud: hasta 2000 m (6400 pies) sobre el nivel del mar
- Temperatura ambiente: de 5 °C (41 °F) a 40 °C (104 °F)

Precauciones y limitaciones de funcionamiento

- Humedad relativa: del 80 % para temperaturas de hasta 31 °C (88 °F), linealmente decreciente hasta el 50 % a 40 °C (104 °F)
- Fluctuaciones de tensión del suministro eléctrico: ± 10 % de la tensión nominal.
- Sobretensiones transitorias: hasta los niveles de categoría de sobretensión II
- Sobretensiones temporales del suministro eléctrico
- Grado de contaminación: grado de contaminación 2

Especificaciones de rendimiento

El sistema está diseñado para cumplir las especificaciones en estas condiciones:

- Una temperatura ambiente de 18 °C a 25 °C (de 64 °F a 77 °F).
Con el tiempo, la temperatura debe mantenerse dentro de un rango de 2 °C (3,6 °F) respecto a la temperatura en el momento de la última calibración, con una velocidad de cambio de temperatura no superior a 2 °C (3,6 °F) por hora. Las fluctuaciones de temperatura ambiental que excedan estos límites pueden provocar cambios de masa en los espectros.
- Humedad relativa de 20 % a 80 %, sin condensación

Uso y modificación del equipo



¡ADVERTENCIA! Peligro de lesiones personales. Póngase en contacto con el representante de SCIEX si se requiere la instalación, el ajuste o la reubicación del producto.



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. No retire las cubiertas. Si lo hace, puede provocar lesiones o un funcionamiento incorrecto del sistema. Las cubiertas no tienen que retirarse para las tareas de mantenimiento rutinario, inspección o ajuste. Póngase en contacto con un representante del servicio técnico de SCIEX cuando haya que hacer reparaciones en las que sea necesario quitar las cubiertas.



¡ADVERTENCIA! Peligro de lesiones personales. Use las piezas recomendadas por SCIEX. El uso de las piezas no recomendadas por SCIEX o el uso de piezas para un propósito que no sea el previsto puede poner al usuario en riesgo de sufrir lesiones o afectar negativamente al rendimiento del sistema.

Utilice el espectrómetro de masas y la fuente de iones en el interior de un laboratorio que cumpla con las condiciones medioambientales recomendadas en la *Guía de planificación y suministros de instalación*.

Si el espectrómetro de masas y la fuente de iones se utilizan en un entorno o en un modo diferentes a los indicados por el fabricante, esto podría afectar al grado de protección que ofrece el equipo.

La modificación o uso no autorizados del espectrómetro de masas y de la fuente de iones podría causar lesiones personales o daños en el equipo y puede anular la garantía. Se pueden generar datos erróneos si el

espectrómetro de masas y la fuente de iones se utilizan sobrepasando o no llegando a las condiciones medioambientales recomendadas o con modificaciones no autorizadas. Póngase en contacto con un representante del servicio técnico (FSE) para obtener información sobre el mantenimiento del sistema.

Contacto

Soporte SCIEX

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

Formación del cliente

- En América del Norte: NA.CustomerTraining@sciex.com
- En Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Fuera de la UE y América del Norte, visite sciex.com/education para obtener información de contacto.

Centro de aprendizaje en línea

- [SCIEXUniversity](https://sciex.com/education)

Ciberseguridad

Para obtener las directrices más recientes sobre ciberseguridad para los productos de SCIEX, visite sciex.com/Documents/brochures/win7-SecurityGuidance.pdf.

Asistencia técnica

SCIEX y sus representantes cuentan con un equipo de especialistas técnicos y de servicio totalmente cualificados en todo el mundo. Ellos sabrán resolver sus dudas y preguntas sobre el sistema y cualquier problema técnico que pueda surgir. Para obtener más información, visite el sitio web de SCIEX en sciex.com.

Símbolos y convenciones de la documentación

En la guía se utilizan los siguientes símbolos y convenciones:



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



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

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

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

¡Sugerencia! Las sugerencias proporcionan información útil que ayuda a aplicar las técnicas y los procedimientos de la guía con un fin específico. También proporcionan métodos de acceso directo, pero no son esenciales para la finalización de un procedimiento.

Documentación relacionada

Para buscar la documentación relacionada con el producto de software, consulte las notas de la versión o la guía de instalación del software que se suministra con el software. La documentación relacionada con los productos de hardware se encuentra en el DVD *de referencia del cliente* que se suministra con el sistema o componente.

Para obtener las versiones más recientes de la documentación, visite el sitio web de SCIEX [sciex.com](https://www.sciex.com).

Principios de funcionamiento

2

El sistema TripleTOF® 5600⁺ está destinado al análisis cualitativo y cuantitativo de sustancias químicas.

En esta sección se incluye información sobre el espectrómetro de masas y el software Analyst® TF. Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener una descripción general de esta última.

Para obtener información acerca del ordenador y el software, consulte la *Guía de instalación del software* para el software Analyst® TF.



¡ADVERTENCIA! Peligro de carga: No mover el sistema. Riesgo de lesiones personales o daños al sistema. Si se debe mover el sistema, póngase en contacto con un representante del servicio técnico.

Descripción general del sistema



¡ADVERTENCIA! Peligro de carga. Siga los procedimientos establecidos para la elevación segura de cargas. Consulte los pesos de los componentes del sistema en la *Guía de planificación del centro*.

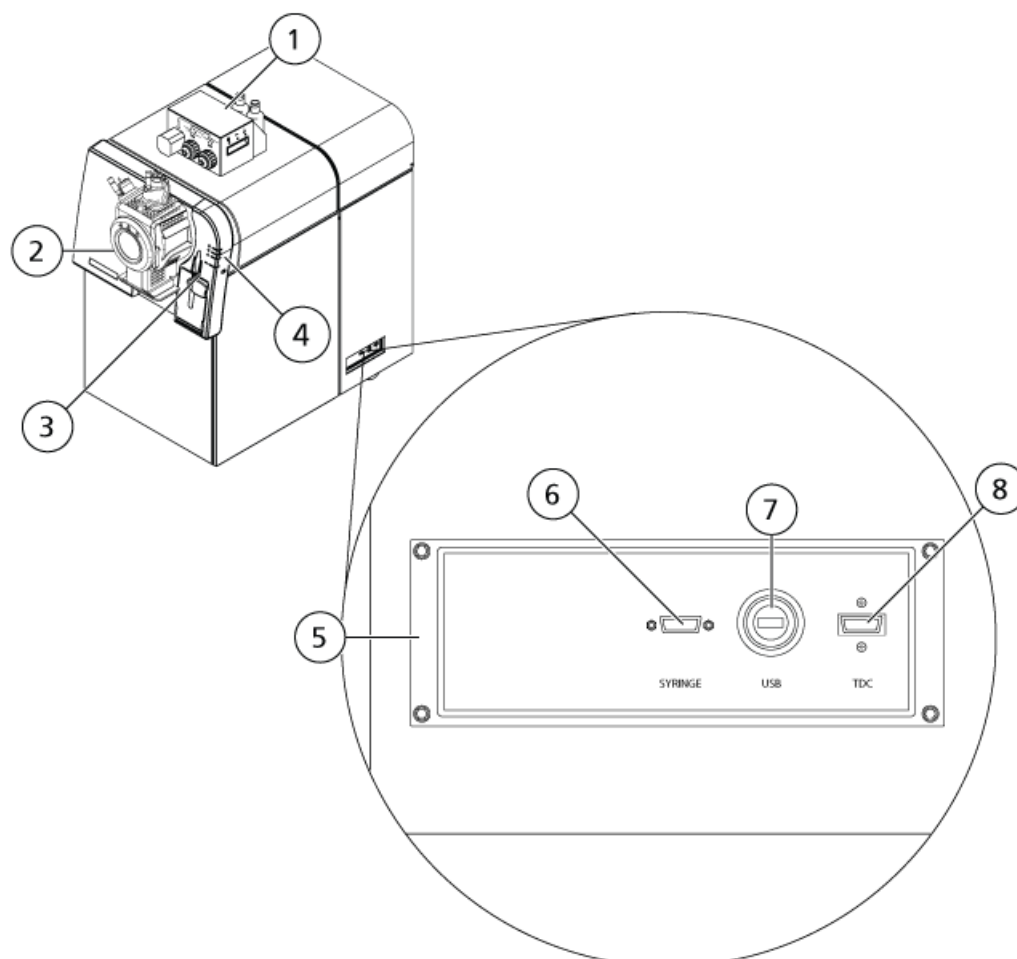
El sistema TripleTOF® 5600⁺ incluye los componentes siguientes:

- Un espectrómetro de masas TripleTOF® 5600⁺ con una bomba de vacío preliminar.
- Una fuente de iones DuoSpray™. Consulte la *Guía del operador de la fuente de iones DuoSpray™*.
- Ordenador y monitor suministrados por SCIEX con el software Analyst® TF para la optimización de instrumentos, el desarrollo de métodos de adquisición y la adquisición de datos. Para conocer las especificaciones y los requisitos del ordenador, consulte la *Guía de instalación del software* para Analyst® TF.
- Sistema de administración de calibrador opcional (CDS)

Descripción general del hardware

La [Figura 2-1](#) y la [Figura 2-2](#) muestran los componentes y conexiones del espectrómetro de masas.

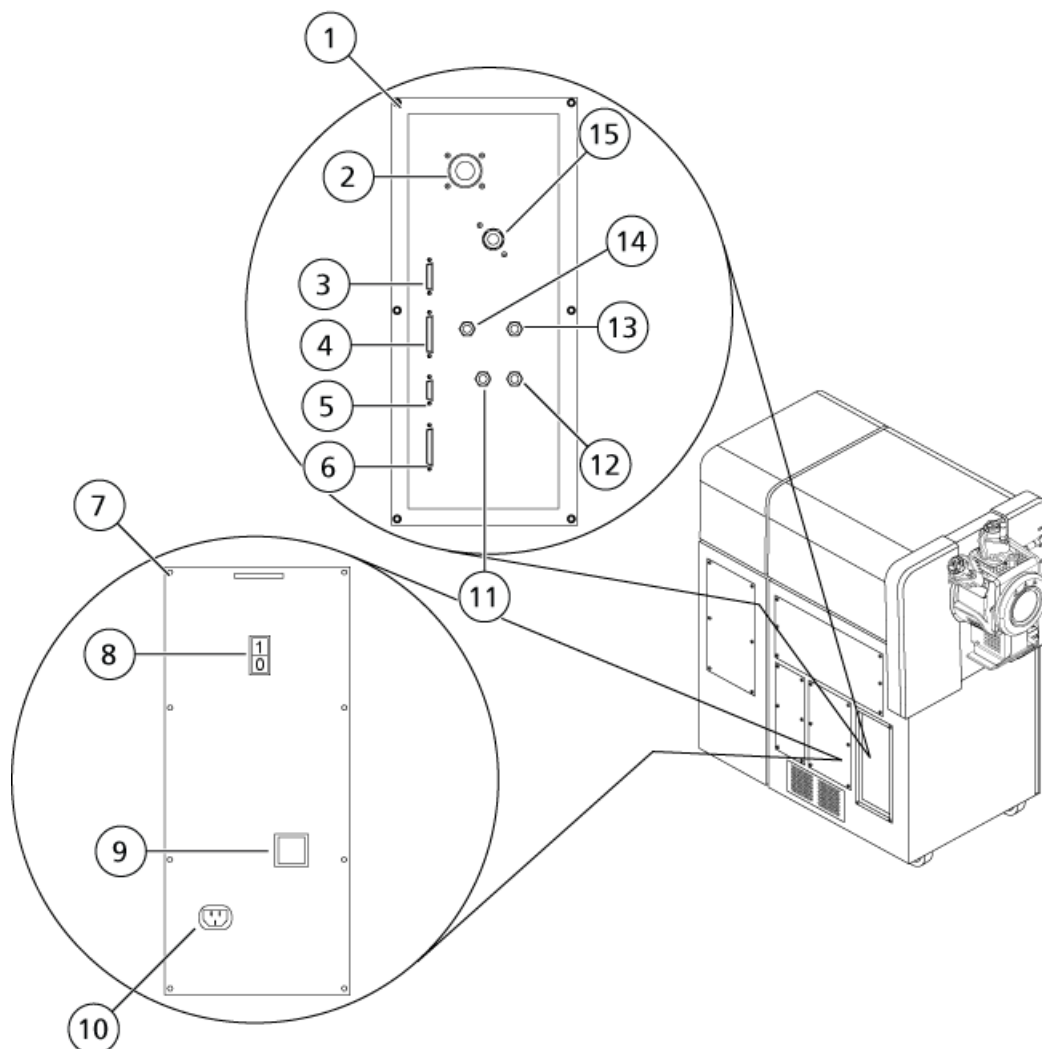
Figura 2-1 Vista frontal y lateral derecha



Elemento	Descripción	Para obtener más información...
1	CDS opcional	Consulte la <i>Guía del operador de CDS</i> .
2	DuoSpray™	Consulte la Guía del operador de la fuente de iones <i>DuoSpray™ para sistemas TripleTOF®</i> .
3	Bomba de jeringa	Consulte la Ajuste de la posición de la bomba de jeringa integrada en la página 25 .
4	LED de estado del espectrómetro de masas	Consulte la Símbolos del panel .
5	Compartimento de comunicaciones	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico de SCIEX.
6	Conexión por cable en serie (RS-232) para la bomba de jeringa	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.

Elemento	Descripción	Para obtener más información...
7	Conexión por cable USB para la tarjeta USB-GPIB	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.
8	Conexión del cable InfiniBand para la tarjeta TDC	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.

Figura 2-2 Vista lateral izquierda



Elemento	Descripción	Para obtener más información...
1	Compartimento para gases y vacío	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.
2	Conexión de vacío de la bomba de vacío preliminar	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.





Principios de funcionamiento

Elemento	Descripción	Para obtener más información...
3	Conexión para el control de calibración	Consulte la <i>Guía del operador de CDS</i> .
4	Conexión E/S auxiliar. La señal de inicio del sistema opcional LC se conecta a este puerto.	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.
5	Conexión de control externo. Este puerto está previsto para uso futuro.	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.
6	Conexión de fuentes. Algunas fuentes de iones se conectan a este puerto.	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.
7	Tablero de conexiones CA	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.
8	Interruptor de encendido del instrumento	Consulte la Inicio del sistema en la página 23 .
9	Cubierta sobre disyuntor	Consulte la Inicio del sistema en la página 23 . Utilice el interruptor de encendido y no el disyuntor para apagar el sistema.
10	Conexión de alimentación	Consulte la Inicio del sistema en la página 23 .
11	Curtain Gas™ (nitrógeno)	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.
12	Conexión del suministro de Gas 1 y Gas 2 (cero)	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.
13	Conexión del suministro de gas de escape de la fuente (aire cero o nitrógeno)	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.
14	Conexión del suministro de gas CAD (nitrógeno)	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.
15	Conexión de residuos de escape de la fuente	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.

Símbolos del panel

La [Tabla 2-1](#) describe los LED de estado del espectrómetro de masas.

Tabla 2-1 Símbolos del panel

LED	Color	Nombre	Descripción
	Verde	Power	Se ilumina cuando se enciende el sistema.
	Verde	Vacuum	Se ilumina cuando se ha alcanzado el nivel de vacío correcto. Parpadea cuando el vacío no se encuentra en el nivel correcto (durante la evacuación y ventilación).
	Verde	Ready	Se ilumina cuando el sistema se encuentra en estado Ready. El sistema debe estar en estado Ready para funcionar.
	Rojo	Fault	Se ilumina cuando el sistema encuentra un fallo del sistema.

Al encender el sistema, se iluminan todos los LED. El LED de alimentación permanece encendido. Los otros parpadean durante dos segundos y se apagan. El LED de vacío comienza a parpadear. Una vez que se ha alcanzado el nivel de vacío correcto, este LED permanece iluminado.

Teoría de funcionamiento

La espectrometría de masas mide la relación masa/carga de los iones para identificar compuestos desconocidos, cuantificar compuestos conocidos y proporcionar información sobre las propiedades estructurales y químicas de las moléculas.

El sistema TripleTOF® 5600+ cuenta con una serie de filtros mediante cuadrupolos que transfieren los iones en función de la relación masa/carga (m/z) de estos. El primer cuadrupolo de esta serie es la guía de iones QJet® situada entre la placa del orificio y la zona Q0. La guía de iones QJet® no filtra los iones, sino que los concentra antes de que entren en la zona Q0. Al preconcentrar el flujo de iones más grande creado por el orificio más ancho, la guía de iones QJet® aumenta la sensibilidad del instrumento y mejora la relación señal/ruido. En la zona Q0, los iones se vuelven a concentrar antes de pasar al cuadrupolo Q1.

El cuadrupolo Q1 clasifica los iones antes de que entren en la celda de colisión Q2. El cuadrupolo Q1 tiene dos modos de funcionamiento:

- Trasferir todos los iones de un rango de m/z específico a la celda de colisión Q2. Se trata de un análisis de MS de TOF. Todos los iones se analizan mediante el sistema de TOF.
- Trasferir un ión con una relación de m/z específica a la celda de colisión Q2. Se trata de un análisis de MS/MS de TOF. Solo se analiza el ión seleccionado.

En la celda de colisión Q2, la energía interna de los iones se aumenta mediante colisiones con moléculas de gas hasta el punto en que los enlaces moleculares se rompen, creando iones producto. Esta técnica permite a los usuarios diseñar experimentos que miden la relación m/z de los iones producto para determinar la composición de los iones primarios y proporcionar información sobre las propiedades químicas y estructurales de las moléculas.

Después de transferir la celda de colisión Q2, los iones pasan a la zona de TOF para someterse a más análisis de masas. Alcanzan el detector en diferentes momentos en función de su relación m/z . En el detector, los iones crean una corriente que se convierte en un impulso de tensión. Se cuentan estos impulsos de tensión y el número de impulsos es directamente proporcional a la cantidad de iones que llegan al detector. El espectrómetro de masas convierte los impulsos de tensión en una señal y, a continuación, relaciona la señal con el tiempo que tarda cada ión en alcanzar el detector. La señal representa la intensidad del ión y el tiempo que tarda en alcanzar el detector representa un valor m/z específico. El espectrómetro de masas muestra estos datos como un espectro de masas.

Manipulación de los datos

El software Analyst[®] TF necesita un ordenador con el sistema operativo Windows 7 (32 o 64 bits) o Windows 10 (64 bits). El ordenador y su software de sistema trabajan con el controlador del sistema y su firmware para controlar el sistema y la adquisición de datos. Al utilizar el sistema, los datos adquiridos se envían al software Analyst[®] TF, donde se pueden mostrar como espectros de masa completos, intensidad de uno o varios iones en el tiempo o corriente total de iones en el tiempo.

Instrucciones de funcionamiento: Hardware

3



¡ADVERTENCIA! Peligro de lesiones personales. Siga las instrucciones contenidas en la documentación al utilizar el sistema. La protección que proporciona el equipo puede verse negativamente afectada si se utiliza de una forma que no sea la indicada por SCIEX.

Inicio del sistema



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Asegúrese de que el sistema puede desconectarse de la toma de alimentación en caso de emergencia. No bloquee la toma de alimentación.



¡ADVERTENCIA! Peligro de carga: No mover el sistema. Riesgo de lesiones personales o daños al sistema. Si se debe mover el sistema, póngase en contacto con un representante del servicio técnico.

Nota: Antes de utilizar el instrumento, lea la información de seguridad en [Precauciones y limitaciones de funcionamiento en la página 6](#).

Requisitos previos

- Los requisitos de la instalación especificados en la *Guía de planificación y suministros de instalación* se han cumplido. La *Guía de planificación del centro* incluye información sobre el suministro eléctrico y las conexiones, el aire comprimido, el nitrógeno, la bomba de vacío preliminar, la ventilación, el escape y los requisitos del espacio libre en torno al instrumento. Póngase en contacto con nosotros para obtener una copia de la *Guía de planificación del centro*, si es necesario. Para obtener los datos de contacto, vaya a sciex.com/contact-us.
- Los gases de escape de la fuente de iones, el aire comprimido y los gases del nitrógeno están conectados con el espectrómetro de masas.
- La botella de drenaje de escape de la fuente de 4 l está conectada a la conexión de residuos de escape en la parte posterior del espectrómetro de masas y al sistema de ventilación del laboratorio.
- Las mangueras de escape de la fuente de iones instalada están bien fijadas al espectrómetro de masas, la botella de drenaje y las conexiones de ventilación.
- El interruptor de alimentación del instrumento está apagado y el cable de alimentación está enchufado al espectrómetro de masas.
- Los cables de alimentación del espectrómetro de masas y de la bomba de vacío preliminar están enchufados a la alimentación eléctrica de 200 VCA a 240 VCA.

1. Conecte la bomba de vacío preliminar.
2. Retire la cubierta del interruptor del disyuntor en el lado izquierdo del espectrómetro de masas, si se mira desde la parte delantera, y encienda el disyuntor. Consulte [Figura 2-2](#).
3. Vuelva a colocar la cubierta sobre el interruptor del disyuntor y después apriete a mano el tornillo que sujeta la cubierta hasta que quede bien apretado.
4. Encienda el interruptor de alimentación del instrumento. Consulte [Figura 2-2](#).
5. Encienda el ordenador.
6. Abra el software Analyst[®] TF.

Apagado del sistema

Algunos procedimientos requieren que el sistema se apague. Otros requieren que también se ventile. Siga estos pasos para apagarlo y, si es necesario, ventile el sistema.

Nota: Si se deben desconectar los tubos de gas, libere la presión de las líneas de gas antes de desconectarlos.

¡Sugerencia! Si el espectrómetro de masas no se va a utilizar durante un periodo de tiempo prolongado, déjelo en modo Standby con la fuente de iones colocada. Si es necesario apagar el espectrómetro de masas, siga estas instrucciones. No apague la bomba de vacío preliminar hasta que las bombas turbo hayan dejado de girar.

1. Finalice o detenga todos los análisis en curso.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. Detenga el flujo de muestra antes de apagar el sistema.

2. Detenga el flujo de muestra hacia el sistema.
3. En el software Analyst® TF, desactive el perfil de hardware si está activado.
4. Cierre el software.
5. Apague el interruptor de alimentación del instrumento en el lado izquierdo del instrumento. Consulte [Descripción general del hardware](#).
6. (En caso necesario) Siga los siguientes pasos para ventilar el sistema:

Nota: Ventile el sistema antes de realizar una limpieza completa de la interfaz de vacío, antes de limpiar la zona Q0 y antes de sustituir el aceite de la bomba de vacío preliminar. Para obtener más información, póngase en contacto con personal de mantenimiento cualificado o un representante del servicio técnico.

Nota: Deje la fuente de iones instalada para que la ventilación se realice correctamente.

- a. Apague la bomba de vacío preliminar. Deje ventilar el sistema durante 20 minutos.
7. Retire la cubierta del interruptor del disyuntor en el lado izquierdo del espectrómetro de masas y apague el disyuntor. Consulte [Figura 2-2](#).
8. Vuelva a colocar la cubierta sobre el interruptor del disyuntor y después apriete a mano el tornillo que sujeta la cubierta hasta que quede bien apretado.
9. (Si ventila el sistema) Desconecte el cable de alimentación de la bomba de vacío preliminar de la toma de electricidad.

Ajuste de la posición de la bomba de jeringa integrada



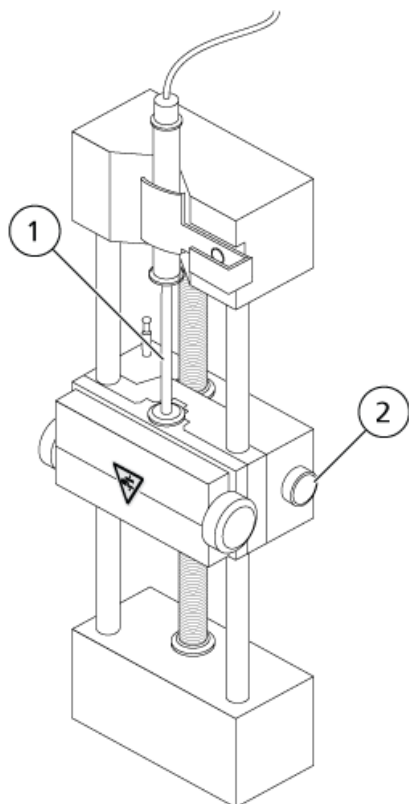
¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Tenga cuidado al manipular la jeringa. La punta de la jeringa es muy afilada.



¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Asegúrese de que la jeringa esté correctamente asentada en la bomba de jeringa y de que el tope automático de la bomba de la jeringa esté ajustado correctamente para no dañar ni romper la jeringa de cristal. En caso de que se rompa la jeringa, siga los procedimientos de seguridad establecidos para desechar objetos afilados.

1. Pulse el botón **Release** en el lado derecho de la bomba de la jeringa para bajar la base y después inserte la jeringa. Consulte la [Figura 3-1](#).

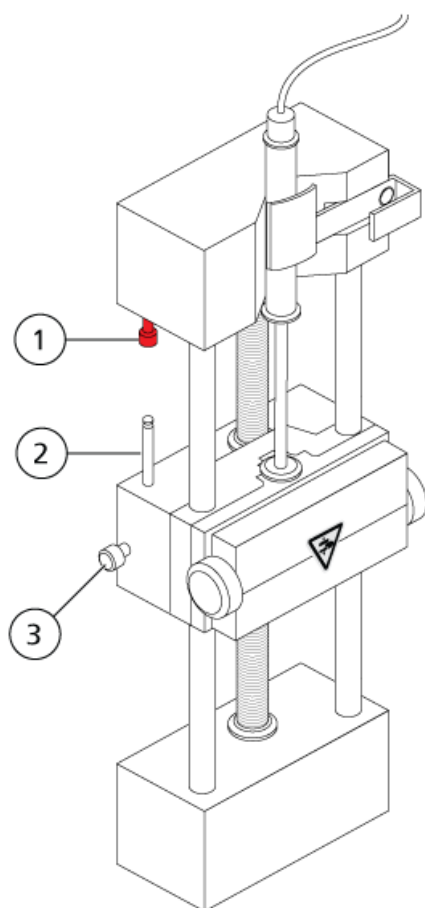
Figura 3-1 Bajada de la jeringa



Artículo	Descripción
1	Émbolo de la jeringa
2	Botón de liberación. Pulse para levantar o bajar la base.

2. Asegúrese de que el extremo de la jeringa quede nivelada contra la base y de que el eje de la jeringa esté apoyado en el corte.
3. Ajuste el poste de modo que accione el tope automático de jeringa antes de que el émbolo de la jeringa golpee la parte inferior de la jeringa de cristal. Consulte la [Figura 3-2](#).

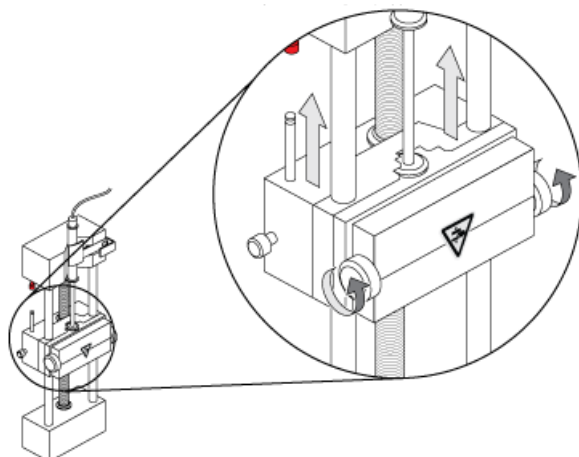
Figura 3-2 Tope automático de la jeringa



Artículo	Descripción
1	Tope automático de la jeringa. Después de que el poste golpee el tope automático de la jeringa, la bomba de la jeringa se detiene.
2	Poste. Ajuste la altura para evitar que el émbolo de la jeringa golpee la jeringa durante la infusión de la muestra.
3	Tornillo de bloqueo del poste. Apriete el tornillo después de ajustar la altura del poste.

4. Gire los tornillos laterales para fijar la jeringa tal como se muestra en la [Figura 3-3](#).

Figura 3-3 Tornillos de la bomba de jeringa



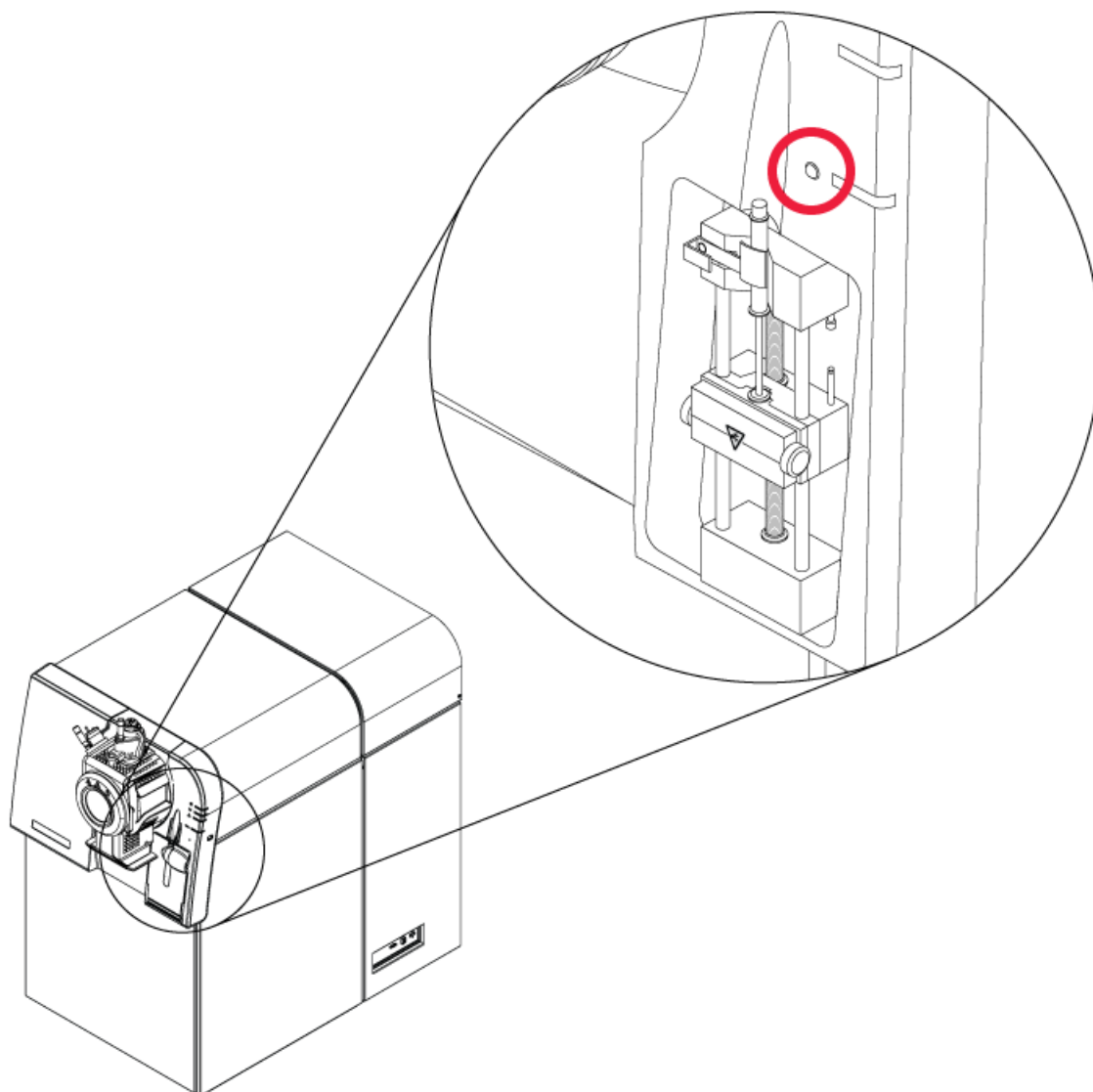
5. En el software Analyst[®], en la barra de navegación, haga doble clic en **Manual Tuning**.
6. Haga clic en **Start Syringe**.
7. Para detener la bomba de jeringa, haga clic en **Stop Syringe**.

Restablecimiento de la bomba de jeringa

Si el software Analyst[®] TF deja de comunicarse con la bomba de jeringa, restablezca esta última.

- Utilice un clip para papel o algo semejante para pulsar el botón de restablecimiento, que se muestra en la [Figura 3-4 en la página 29](#).

Figura 3-4 Botón Reset (Reiniciar)



Instrucciones de funcionamiento: flujos de trabajo para la muestra

4

Tabla 4-1 Configuración del sistema

Paso	Para...	Busque la información en...	¿Qué es lo que hace?
1	Crear un perfil de hardware.	Creación de un perfil de hardware en la página 33	Cada perfil de hardware debe incluir un espectrómetro de masas y otros dispositivos, como un sistema de LC. Al crear los métodos de adquisición solo se pueden utilizar los dispositivos incluidos en el perfil de hardware activo.
2	Crear proyectos para almacenar los datos.	Creación de proyectos y subproyectos en la página 40	El uso de proyectos y subproyectos facilita la gestión de los datos y la comparación de los resultados.
3	Optimizar el espectrómetro de masas.	Optimización del espectrómetro de masas en la página 46	Este es el proceso de optimización de la resolución y los parámetros del espectrómetro de masas, y de calibración de este último para conseguir la mejor sensibilidad y rendimiento posibles del sistema.

Tabla 4-2 Flujo de trabajo de la adquisición de muestras

Paso	Para...	Busque la información en...	¿Qué es lo que hace?
1	Crear proyectos para almacenar los datos.	Creación de proyectos y subproyectos en la página 40	Antes de empezar un experimento, decida en qué lugar almacenará los archivos relacionados con este. El uso de proyectos y subproyectos mejora la gestión de los datos y facilita la comparación de los resultados.
2	Crear un método de adquisición.	Instrucciones de funcionamiento: métodos de adquisición en la página 48	Para analizar muestras, cree un método de adquisición para el espectrómetro de masas y los dispositivos de LC. Los métodos de adquisición indican qué dispositivos periféricos usar, y cuándo usarlos para adquirir datos, y los parámetros correspondientes.
3	Crear y enviar un lote.	Adición de conjuntos y muestras a un lote en la página 60 y Enviar una muestra o conjunto de muestras en la página 63	Una vez creado un método de adquisición, ejecute las muestras creando un lote de adquisición y enviando el lote a la cola de adquisición.
4	Ejecutar las muestras para adquirir datos.	Adquisición de datos en la página 64	La ejecución de muestras implica gestionar la cola de adquisición y supervisar el estado del instrumento y de los dispositivos. Use Queue Manager para enviar muestras y adquirir datos. El gestor Queue Manager muestra el estado de la cola, los lotes y las muestras y facilita la gestión de las muestras y los lotes de la cola.

Tabla 4-2 Flujo de trabajo de la adquisición de muestras (continuación)

Paso	Para...	Busque la información en...	¿Qué es lo que hace?
5	Analizar datos en modo Explore. —O BIEN—	Instrucciones de funcionamiento: análisis y exploración de datos en la página 72	En el modo Explore hay disponibles muchas herramientas para ver y procesar los datos adquiridos. Los gráficos pueden personalizarse con etiquetas para los picos y los títulos, pueden mostrarse gráficos de contorno y los espectros pueden guardarse en la biblioteca.
6	Analizar datos e imprimir informes usando el software complementario.	MultiQuant™ Software/PeakView® Software	Use el software MultiQuant™ o PeakView® para analizar los datos. Para obtener más información, consulte la documentación que acompaña al software.

Tabla 4-3 Flujo de trabajo de usuario experimentado

Paso	Para...	Busque la información en...
1	Realizar la calibración de masas del instrumento.	Tutorial de calibración de masas que se encuentra en Start (Inicio) > Programs (Programas) > AB SCIEX > Analyst® TF > Software Guides (Guías de software) .
2	Optimice el espectrómetro de masas.	Tutorial de optimización de masas que se encuentra en Start (Inicio) > Programs (Programas) > AB SCIEX > Analyst® TF > Software Guides (Guías de software) .

Perfiles de hardware

Un perfil de hardware indica al software cómo se configurarán y conectarán al ordenador el espectrómetro de masas y los demás dispositivos. Se pueden configurar varios perfiles de hardware, pero solo puede haber un perfil activo en un determinado momento.

Cuando se crea un perfil de hardware en el Hardware Configuration Editor, los dispositivos periféricos deben configurarse de modo que el software pueda comunicarse con ellos. La configuración de los dispositivos periféricos requiere dos procedimientos: la configuración de las conexiones físicas y la configuración del software para que se comunique con los dispositivos periféricos. Cuando se instala el software, también se instala el controlador necesario para cada dispositivo periférico. Después de que los dispositivos periféricos se hayan conectado físicamente al ordenador, defina la información de configuración adecuada.

Cada perfil de hardware debe incluir un espectrómetro de masas. Antes de crear un método de adquisición, asegúrese de que se incluyen en el perfil de hardware todos los dispositivos que vaya a utilizar en el método, incluida la bomba de jeringa. Los dispositivos configurados en el perfil de hardware activo y seleccionados en el cuadro de diálogo Add/Remove Device Method se muestran como iconos en el panel Acquisition method. Al crear los métodos de adquisición solo se pueden utilizar los dispositivos periféricos incluidos en el perfil de hardware activo.

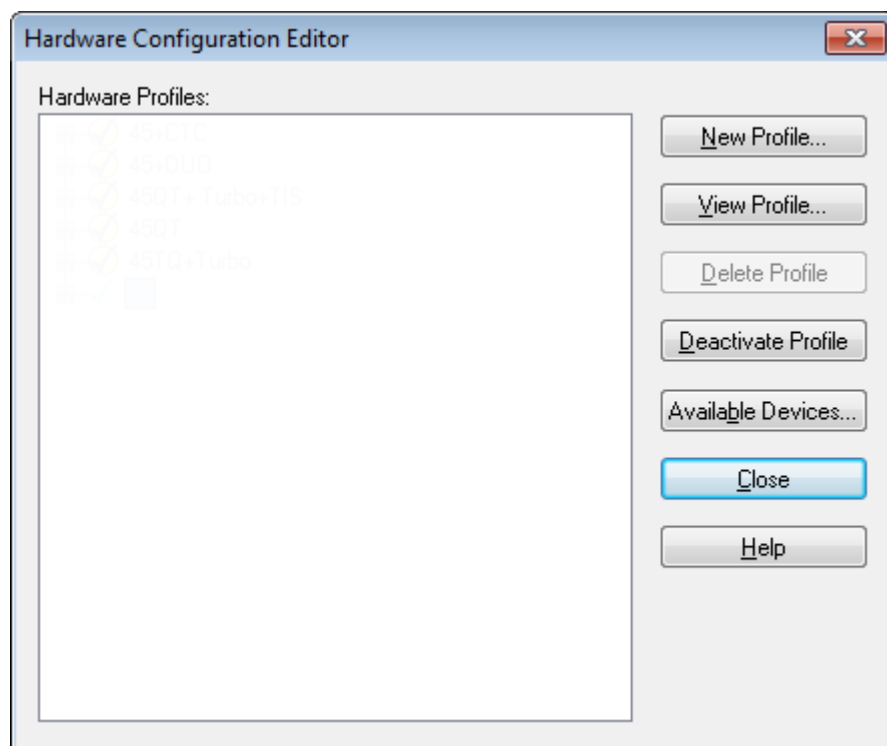
Para obtener información acerca de la configuración de conexiones físicas, consulte la *Guía de configuración de dispositivos periféricos*. Para ver una lista de los dispositivos compatibles, consulte la *Guía de instalación del software* de Analyst® TF.

Creación de un perfil de hardware

Aunque es posible configurar varios perfiles de hardware, solo puede haber uno activo en un momento determinado.

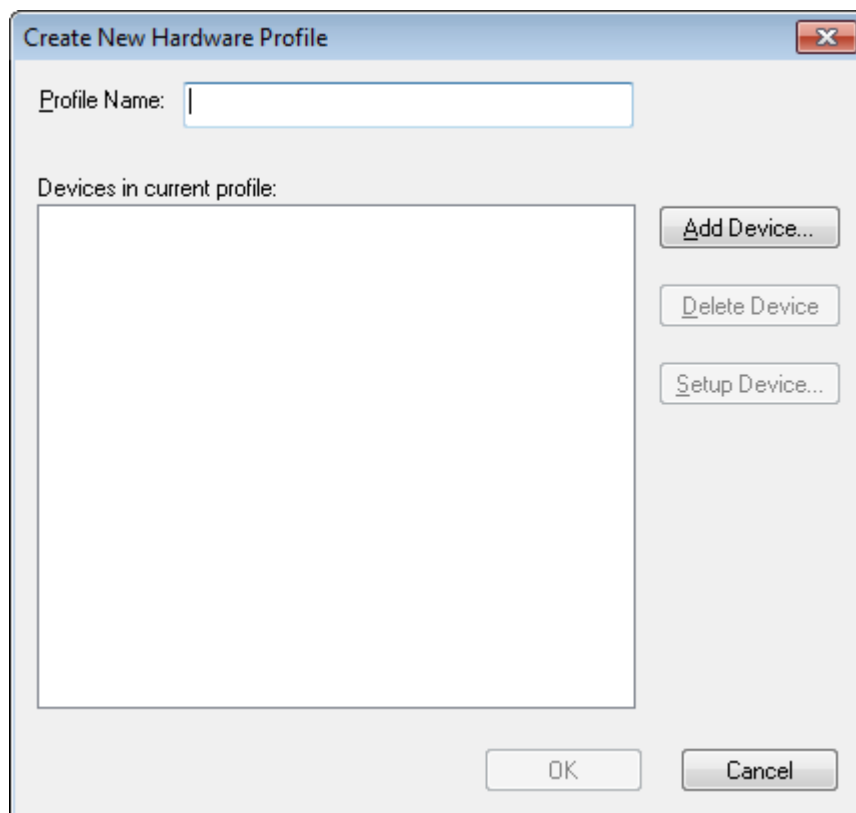
1. En la barra de navegación, en **Configure**, haga doble clic en **Hardware Configuration**.

Figura 5-1 Cuadro de diálogo Hardware Configuration Editor



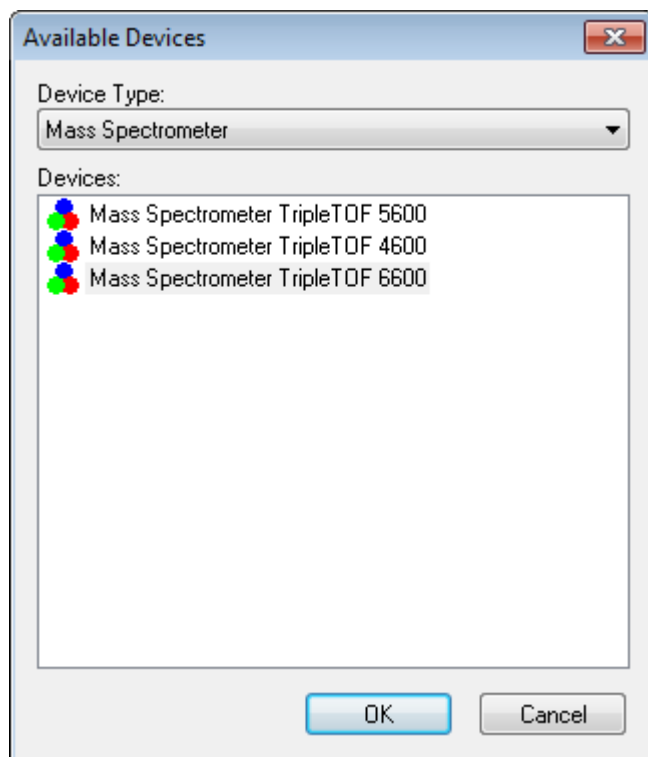
2. En el cuadro de diálogo Hardware Configuration Editor, haga clic en **New Profile**.

Figura 5-2 Cuadro de diálogo Create New Hardware Profile



3. Escriba un nombre en el campo **Profile Name**.
4. Haga clic en **Add Device**.

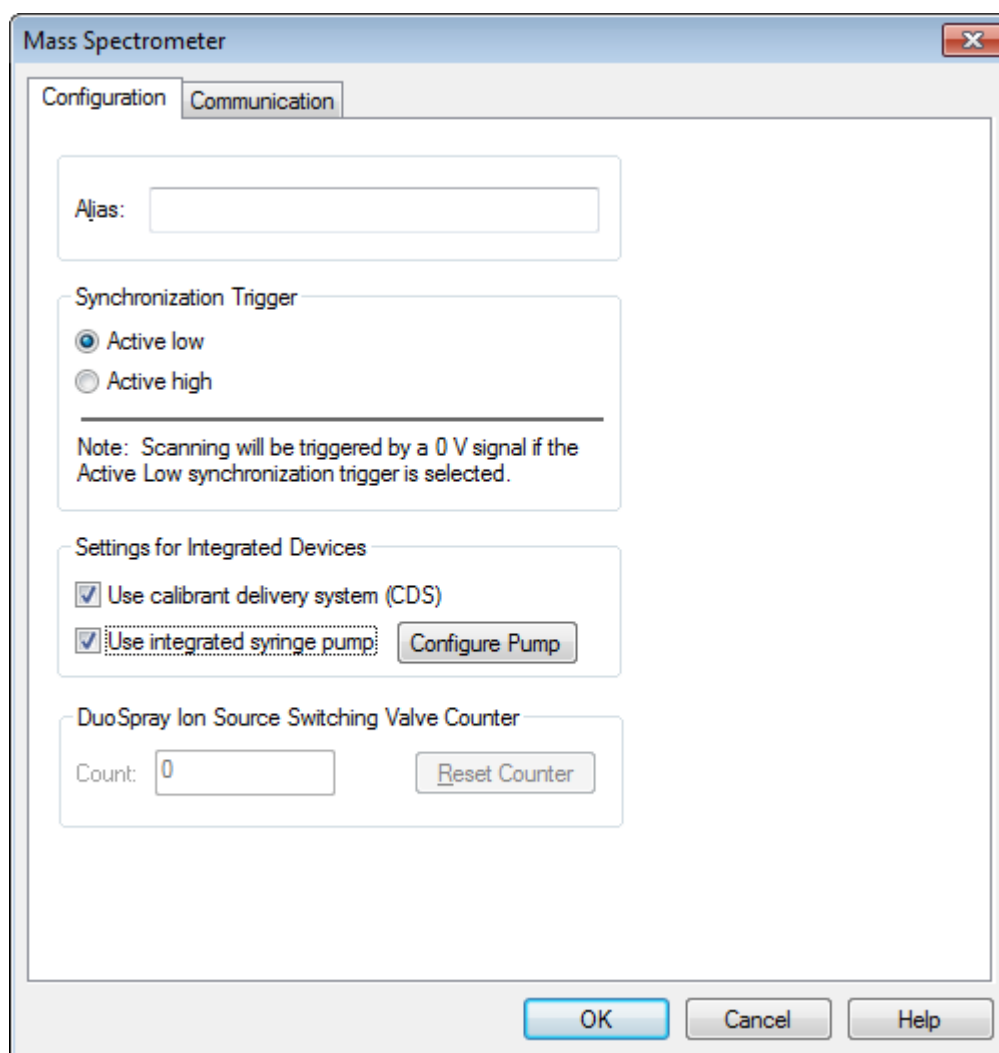
Figura 5-3 Cuadro de diálogo Available Devices



En el cuadro de diálogo Available Devices, el valor predeterminado del campo **Device Type** es **Mass Spectrometer**.

5. En la lista **Devices**, seleccione el espectrómetro de masas correspondiente y, a continuación, haga clic en **OK** para volver al cuadro de diálogo Create New Hardware Profile.
6. Haga clic en **Setup Device**.
7. (Opcional) Para configurar los espectrómetros de masas que utilizan la bomba de jeringa integrada, en la pestaña **Configuration**, seleccione la casilla **Use integrated syringe pump**.

Figura 5-4 Pestaña Configuration con CDS y la bomba de jeringa configurada



8. (Opcional) Para configurar el espectrómetro de masas para el CDS, en la pestaña **Configuration**, seleccione la casilla **Use calibrant delivery system (CDS)**.
9. (Opcional) Seleccione otras funciones en las pestañas **Configuration** y **Communication**, según sea necesario.
10. Haga clic en **OK** para volver al cuadro de diálogo Create New Hardware Profile.
11. Haga clic en **Add Device** y, a continuación, agregue y configure cada dispositivo que se utiliza con el espectrómetro de masas. Consulte [Adición de dispositivos a un perfil de hardware en la página 38](#).
12. Haga clic en **OK** en el cuadro de diálogo **Create New Hardware Profile**.
13. Haga clic en el perfil de hardware que desee activar en **Hardware Configuration Editor**.
14. Haga clic en **Activate Profile**.

La marca de verificación se vuelve de color verde. Si se muestra una x roja, existe algún problema con la activación del perfil de hardware.

¡Sugerencia! No es necesario desactivar un perfil de hardware activo antes de activar otro. Haga clic en un perfil de hardware y, a continuación, haga clic **Activate Profile**. El otro perfil se desactivará automáticamente.

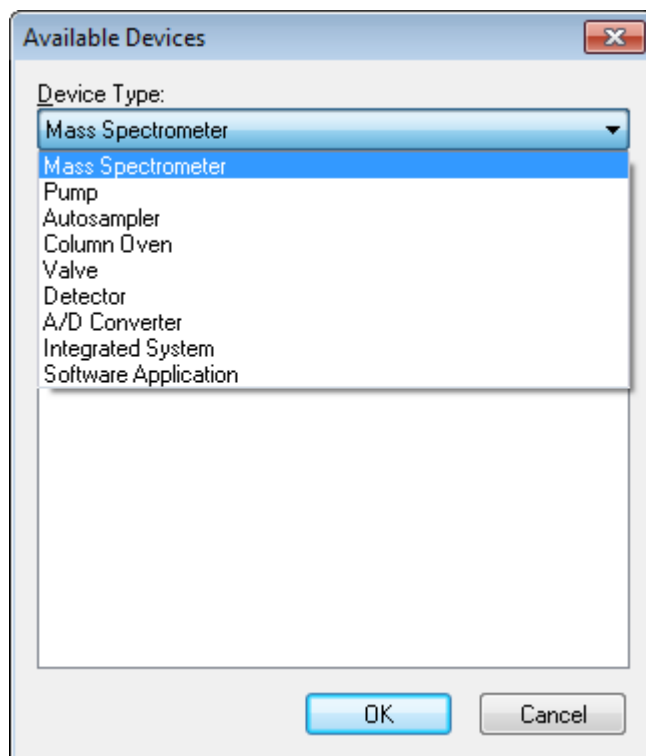
15. Haga clic en **Close**.

Adición de dispositivos a un perfil de hardware

Los dispositivos deben estar configurados para permitir que el software se comuniquen con ellos. Cuando se instala el software, también se instala el controlador necesario para cada dispositivo. Después de que los dispositivos se hayan conectado físicamente al ordenador, configúrelos.

1. Abra el Hardware Configuration Editor.
2. En la lista **Hardware Profiles**, desactive el perfil de hardware.
3. Haga clic en **Edit Profile**.
4. Haga clic en **Add Device**.
5. En el cuadro de diálogo Available Devices, seleccione el dispositivo en la lista **Device Type** y, a continuación, haga clic en **OK**.

Figura 5-5 Cuadro de diálogo Available Devices



6. Haga clic en **OK**.
7. Seleccione el dispositivo de la lista **Devices** y, a continuación, haga clic en **OK**.
8. Haga clic en **Setup Device**.

Se abrirá un cuadro de diálogo con los valores de configuración del dispositivo.

9. (Opcional) En la pestaña Communication, en el campo **Alias**, escriba un nombre u otro identificador para el dispositivo.

Nota: En el caso de los dispositivos que utilizan comunicación en serie, asegúrese de que el puerto serie seleccionado coincide con el puerto serie al que está conectado físicamente el dispositivo.

Nota: El campo **Alias** también se conoce como el cuadro **Name**, y se encuentra en otra pestaña de **Alias**.

- Si el dispositivo utiliza un **Puerto serie** como interfaz de comunicaciones, en la lista **COM Port Number**, seleccione el puerto COM al que está conectado el dispositivo.
- Si el dispositivo utiliza **Ethernet** como interfaz de comunicaciones, indique la **IP Address** que ha asignado el administrador al dispositivo o bien utilice el **Host Name** correspondiente para la dirección.
- Si el dispositivo utiliza una **tarjeta GPIB** como interfaz de comunicaciones, no cambie la configuración de la tarjeta GPIB.

Es probable que el resto de los valores predefinidos para el dispositivo sean los adecuados. No los cambie. Para obtener más información acerca de las pestañas Configuration y Communication, consulte la Ayuda.

10. Para restaurar los valores predefinidos del dispositivo, en la pestaña Communication, haga clic en **Set Defaults**.
11. Para guardar la configuración, haga clic en **OK**.
12. Repita del paso 4 al 11 para cada dispositivo.
13. Haga clic en **OK** en el cuadro de diálogo Create New Hardware Profile.
14. Para activar el perfil de hardware, haga clic en el mismo en la lista Hardware Configuration Editor.
15. Haga clic en **Activate Profile**.

La marca de verificación se vuelve de color verde. Si se muestra una x roja, existe algún problema con la activación del perfil de hardware. Para obtener más información, consulte [Solución de problemas de activación del perfil de hardware en la página 40](#).

¡Sugerencia! No es necesario desactivar un perfil de hardware activo antes de activar otro. Haga clic en un perfil de hardware inactivo y, a continuación, haga clic en **Activate Profile**. El otro perfil se desactivará automáticamente.

16. Haga clic en **Close**.

Solución de problemas de activación del perfil de hardware

Si se produce un error en la activación de un perfil de hardware, se abre un cuadro de diálogo que indica que el dispositivo del perfil ha fallado. Los errores de comunicación pueden provocar que un dispositivo falle durante la activación.

1. Lea el mensaje de error generado. En función del mensaje, puede que haya un problema con un dispositivo o con el modo en que se ha configurado la comunicación.
2. Verifique que el dispositivo reciba alimentación eléctrica y esté encendido.
3. Verifique que el puerto COM asignado al dispositivo sea correcto.
4. Compruebe que la configuración de comunicación para el dispositivo (por ejemplo, la configuración de interruptor DIP) se haya definido correctamente y que coincida con la configuración de la pestaña Communication.
5. Apague el dispositivo.
6. Espere 10 minutos.
7. Encienda el dispositivo.

Espera hasta que se completen todas las actividades de arranque del dispositivo antes de intentar activar de nuevo el perfil de hardware. Algunos dispositivos periféricos pueden tardar 30 segundos o más hasta completar las actividades de arranque.

8. Active el perfil de hardware.
9. Si continúa el problema, elimine el perfil con errores y, a continuación, cree uno nuevo.
10. Si el problema persiste, póngase en contacto con el servicio de asistencia técnica.

Proyectos y subproyectos

Antes de empezar un experimento, decida en qué lugar almacenará los archivos relacionados con este. Utilice proyectos y subproyectos para cada experimento con el fin de gestionar mejor los datos y comparar los resultados. Por ejemplo, puede utilizar subproyectos para almacenar los resultados de fechas específicas.

Creación de proyectos y subproyectos

Para utilizar una estructura de subproyectos dentro de un proyecto, cree una estructura de subproyectos al crear el proyecto.

1. Haga clic en **Tools > Project > Create Project**.

Figura 5-6 Cuadro de diálogo Create New Project/Subproject

Project will be created under the following directory:

C:\Analyst Data\Projects

Project name

Subproject Specifications

Subproject name:

2013_11_21

Project folders:

- Acquisition Methods
- Acquisition Scripts
- Batch
- BioAnalyst
- Data
- Log
- Processing Methods
- Processing Scripts
- Retention Methods

Subproject folders:

Add All Remove All

☐ Copy template methods (Active Profile with Instrument required)

☐ Set configuration as default for new projects

OK Cancel Help

Nota: No se puede crear un subproyecto nuevo para un proyecto que no se haya creado originalmente con un subproyecto.

2. Escriba el nombre del proyecto en el campo **Project name**.
3. (Opcional) Para utilizar subproyectos, seleccione las carpetas necesarias y, a continuación, utilice los botones de flecha para moverlas a la lista **Subproject folders**.
4. (Si se están utilizando subproyectos) En el campo **Subproject name**, escriba el nombre del primer subproyecto o utilice la fecha existente.
5. (Opcional) Para utilizar esta organización de carpetas de proyecto y subproyecto para todos los proyectos nuevos, active la casilla de verificación **Set configuration as default for new projects**.

Todos los proyectos nuevos se crean con esta configuración de carpetas.

6. Haga clic en **OK**.

Crear subproyectos

Los subproyectos solo se pueden crear en un proyecto que tiene una estructura de subproyecto existente.

1. En la barra de herramientas **Project**, en la lista **Project**, seleccione el proyecto.
2. Haga clic en **Tools > Project > Create Subproject**.
3. En el cuadro **Subproject name**, escriba el nombre del subproyecto o utilice la fecha existente.
4. Haga clic en **OK**.

Copiar subproyectos

Solo se puede copiar un subproyecto de otro proyecto que tenga subproyectos existentes. Si los subproyectos copiados contienen carpetas que también existen en la carpeta del proyecto, el software utiliza las carpetas de nivel del proyecto.

1. Haga clic en **Tools > Project > Copy Subproject**.

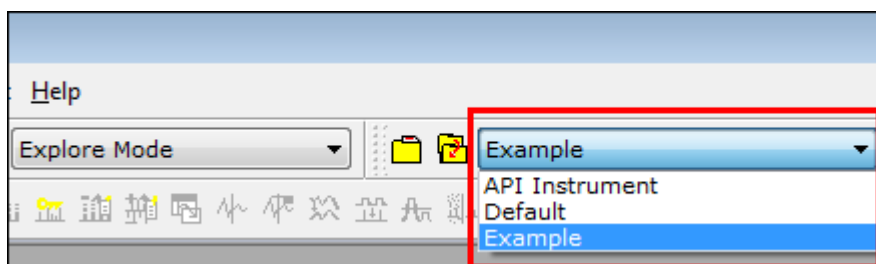
Se abrirá el cuadro de diálogo Copy Subproject.

2. Haga clic en **Browse** para desplazarse a la fuente del subproyecto.
3. Haga clic en **OK**.
4. En la lista **Source Subproject**, seleccione el subproyecto.
5. Haga clic en **Browse** para desplazarse a la ubicación de destino del subproyecto.
6. Escriba el nombre en el campo **Target Subproject**.
7. Haga clic en **OK**.
8. Realice una de las siguientes acciones:
 - Para copiar todas las carpetas y archivos de **Subproject Source** a **Subproject Destination**, active la casilla de verificación **Copy Contents**.
 - Para copiar únicamente las carpetas en la misma estructura que **Subproject Destination**, asegúrese de que no esté activada la casilla de verificación **Copy Contents**.
9. Haga clic en **Copy**.

Cambio entre proyectos y subproyectos

- Abra la barra de herramientas del software y, en la lista de proyectos, haga clic en el proyecto o subproyecto correspondiente.

Figura 5-7 Lista de proyectos



La lista de proyectos de esta figura muestra las carpetas **API Instrument**, **Default** y **Example**.

Carpetas de proyecto instaladas

Con el software se instalan tres carpetas de proyecto: **API Instrument**, **Default** y **Example**.

Carpeta API Instrument

La carpeta API Instrument es única y muy importante para el correcto funcionamiento del espectrómetro de masas. La carpeta API Instrument contiene la información necesaria para ajustar y calibrar el espectrómetro de masas. Esta información incluye archivos de configuración de parámetros, archivos de referencia, archivos de datos del instrumento que contienen información de calibración y resolución, y los métodos de adquisición utilizados durante el ajuste automático. La carpeta API Instrument también contiene los archivos de datos de los ajustes manuales que se han realizado con el botón Start en lugar de con el botón Acquire. Estos archivos de datos se guardan automáticamente en la carpeta API Instrument de la carpeta Tuning Cache y se les asigna un nombre compuesto por la fecha y la hora en la que se crearon. La carpeta Tuning Cache se borra automáticamente y de forma periódica.

Carpeta Default

La carpeta Default contiene carpetas que se incluyen en todo nuevo proyecto y se utiliza como plantilla para proyectos nuevos.

Carpeta Example

La carpeta Example contiene los métodos y los archivos de datos. Los usuarios pueden practicar el trabajo con los modos Explore utilizando los archivos de datos de ejemplo.

Copia de seguridad de la carpeta API Instrument

Realice una copia de seguridad de la carpeta API Instrument regularmente y después de efectuar las operaciones de mantenimiento de rutina.

- Copie la carpeta API Instrument, péguela en una ubicación diferente, preferiblemente en otro ordenador, y cambie el nombre de la carpeta. Si tiene más de un espectrómetro de masas, cuando cambie el nombre

de la carpeta debe utilizar la fecha y una referencia al espectrómetro de masas en cuestión. Por ejemplo, *API Instrument_modelo del instrumento3_010107*.

Recuperación de la carpeta API Instrument

Realice una copia de seguridad de la carpeta **API Instrument** regularmente y después de efectuar las operaciones de mantenimiento de rutina.

1. Cambie el nombre de la carpeta actual **API Instrument**.
2. Copie la copia de seguridad de la carpeta en la carpeta **Projects**.
3. A continuación, cambie el nombre de la copia de seguridad de la carpeta a **API Instrument**.

Ejecute la opción **Verify Performance Only** en cualquier momento. No obstante, ajuste el instrumento solo si ha detectado una pérdida de sensibilidad o resolución. Para obtener más información sobre el ajuste y la calibración, consulte la *Guía para usuarios avanzados*.

Para ajustar el sistema, utilice las siguientes soluciones que vienen con el kit de instalación:

Para el modo positivo:

- Para optimizar TOF MS - Alta resolución de iones de producto o Alta sensibilidad de iones de producto, utilice la solución de ajuste.
- Para la calibración de Q1, utilice la solución PPG POS.

En modo negativo:

- Para optimizar TOF MS - Alta resolución de iones de producto o Alta sensibilidad de iones de producto, utilice ácido taurocólico.

Nota: Después de usar el ácido taurocólico, recomendamos repetir la alineación de canal mediante la solución PPG POS.

- Para la calibración de Q1, utilice la solución PPG POS.

¡Sugerencia! Realice las tareas de mantenimiento regularmente para garantizar que el espectrómetro de masas tenga un rendimiento óptimo.

Requisitos previos

- La pulverización es estable y se utiliza la solución de ajuste correcta.
- Se ha configurado una impresora.

Materiales necesarios

- Soluciones de ajuste, que se incluyen en el juego de productos químicos de patrones suministrado con el sistema. Si es necesario, se puede solicitar un nuevo juego a SCIEX. Consulte [Iones de calibración recomendados](#).
- Jeringa hermética (se recomienda 1,0 ml)
- Tubo de muestra PEEK rojo.

Optimización del espectrómetro de masas

El siguiente procedimiento describe cómo verificar el rendimiento del espectrómetro de masas. Para obtener más información sobre el uso del resto de opciones de rendimiento del instrumento, consulte la Ayuda.

1. En la barra de navegación, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
2. Ejecute un análisis MS o de ion producto en TOF y confirme que hay un TIC estable y que los picos de interés están presentes en el espectro.
3. En la barra de navegación, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Instrument Optimization**.

Se abrirá el cuadro de diálogo Instrument Optimization.

4. Seleccione una solución de ajuste. Asegúrese de que la solución de ajuste coincide con la tabla de referencia.
5. La casilla de verificación **Verify Performance Only** está seleccionada de forma predeterminada. Haga clic en **Next**.

Para este ejemplo, deje esta opción seleccionada. Si el informe indica que el equipo necesita un ajuste, vuelva a ejecutar Instrument Optimization y seleccione uno o más modos de análisis para optimizarlos.

6. Asegúrese de que los parámetros de la fuente de iones y de la jeringa son adecuados.

Nota: Los usuarios también pueden utilizar el CDS para inyectar la solución. Asegúrese de que la solución de ajuste coincide con la configuración de la tabla de referencia. Configure el caudal apropiado y, a continuación, haga clic en CDS Inject.

Nota: Asegúrese de que se ha seleccionado la Calibrant Valve Position adecuada en Reference Table Editor para la tabla de referencia seleccionada. CDS puede seleccionar de entre cuatro posiciones como máximo, de la A a la D.

7. Haga clic en **GO**.

Se abrirá la pantalla **Verifying or Adjusting Performance**. Tras finalizar el proceso, se abrirá el **Results Summary**. Para obtener más información, consulte la Ayuda.

Acerca del cuadro de diálogo Verifying or Adjusting Performance

En la esquina superior izquierda se indica la parte del instrumento que se está ajustando.

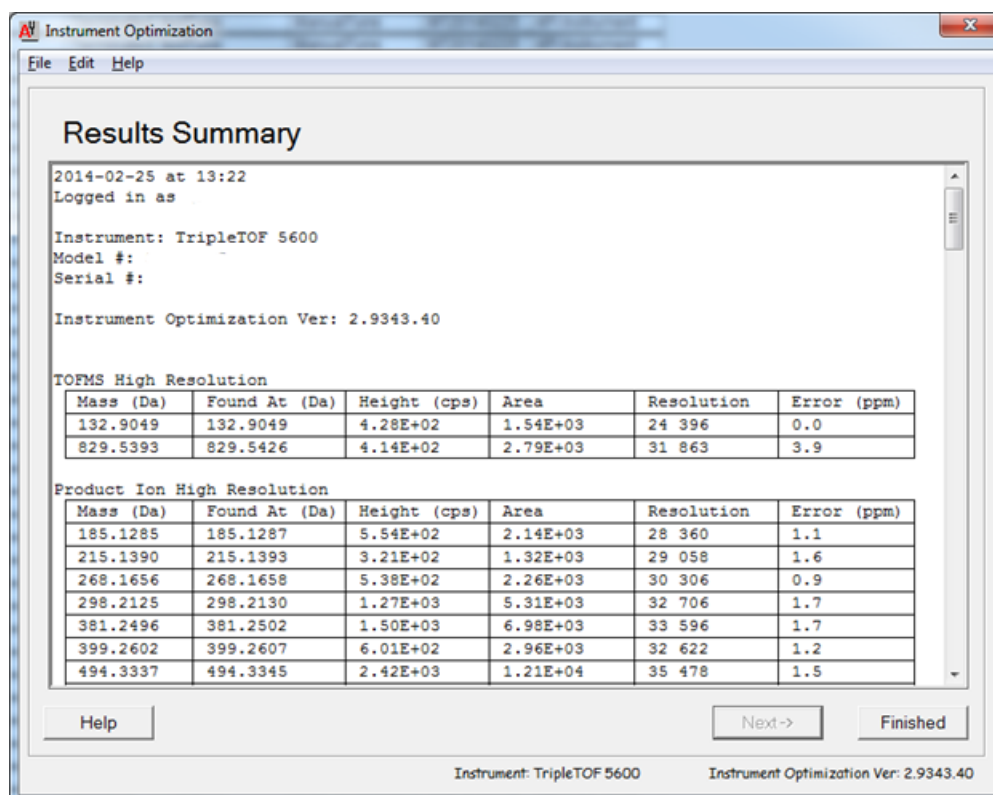
El gráfico Current Spectrum muestra el espectro del análisis actual, el análisis óptimo seleccionado por el software, o el análisis en el valor de parámetro actual cuando los resultados del software se visualizan en el modo interactivo.

Los gráficos de decisión de optimización del instrumento, en el gráfico de la esquina superior derecha, representan dinámicamente la intensidad en relación con las curvas de tensión de los parámetros que se están optimizando actualmente.

Resumen de resultados

El resumen de resultados es un registro de todos los cambios en la configuración del instrumento realizados por el asistente Instrument Optimization.

Figura 6-1 Resumen de resultados



El resumen de resultados se guarda automáticamente en la siguiente ruta: <drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Data\Instrument Optimization\yyyy-mm-dd\results.doc, , donde *yyyy-mm-dd* es la fecha en la que se creó el informe. Los usuarios pueden imprimir el resumen de resultados o abrir un resumen de resultados guardado anteriormente.

Instrucciones de funcionamiento: métodos de adquisición

7

Un método de adquisición consta de experimentos y períodos. Utilice Acquisition Method Editor para crear una secuencia de experimentos y períodos para el instrumento y los dispositivos.

Un método de adquisición consta del método para el espectrómetro de masas y de los dispositivos para cromatografía líquida (LC). Los usuarios pueden crear fácilmente un método de adquisición utilizando el asistente de (Method Wizard).

El Acquisition Method Editor se puede utilizar también para añadir una secuencia de períodos y experimentos para el instrumento y los dispositivos.

Use la función de adquisición SWATH[®], disponible tanto para el Method Wizard como para el Acquisition Method Editor, para crear métodos de adquisición SWATH[®]. Además, se pueden crear métodos de margen de anchura variable de SWATH[®] utilizando el Method Wizard o el Acquisition Method Editor. Para obtener más información, consulte la *Guía para usuarios avanzados*, la ayuda de Analyst[®] y la ayuda del Method Wizard.

Recomendamos que tan solo creen o modifiquen métodos de adquisición y cuantificación aquellos usuarios que tengan experiencia en el desarrollo de métodos. Acceda a más información sobre roles y seguridad en la *Guía del director del laboratorio*.

Creación de un método de adquisición utilizando el Acquisition Method Editor

¡Sugerencia! Si los usuarios van a crear un archivo de método de adquisición nuevo a partir de un archivo existente, podría optar por utilizar algunos o todos los métodos de dispositivo periférico en el método de adquisición.

Solo los dispositivos configurados en el perfil de hardware activo se muestran en el panel Acquisition Method Editor. Los dispositivos agregados al perfil de hardware también se deben agregar a los métodos de adquisición existentes. Para obtener más información sobre dispositivos, consulte la *Guía de configuración de dispositivos periféricos*.

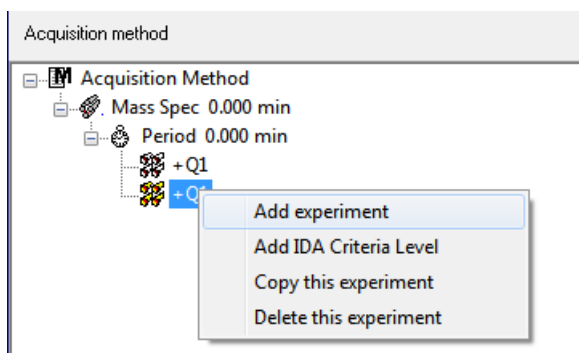
1. Asegúrese de que haya activo un perfil de hardware que contenga el espectrómetro de masas y los dispositivos periféricos.
2. En la barra de navegación, en **Acquire**, haga doble clic en **Build Acquisition Method**.
3. Seleccione un **Synchronization Mode** en la pestaña Acquisition Method Properties.
4. (Opcional) Active la casilla de verificación **Auto-Equilibration** y, a continuación, especifique el tiempo de equilibrado en minutos.
5. En el panel Acquisition method, haga clic en el icono **Mass Spec**.
6. Seleccione un **Scan type** en la pestaña MS.

7. Escriba los valores en los campos correspondientes. Consulte [Parámetros en la página 53](#).
8. En la pestaña Advanced MS, escriba los valores en los campos correspondientes.
9. En la pestaña MS, haga clic en **Edit Parameters**.
10. En la pestaña Source/Gas, escriba los valores en los campos correspondientes.
11. En la pestaña Compound, escriba los valores en los campos correspondientes y haga clic en **OK**.
12. Haga clic en un icono del dispositivo y, a continuación, seleccione los parámetros para el dispositivo.
13. Agregue cualquier experimento y periodo adicional. Consulte [Adición de un experimento en la página 49](#) y [Creación de un período en la página 49](#).
14. Haga clic en **File > Save** (Archivo > Guardar)

Adición de un experimento

1. Haga clic con el botón derecho en el panel Acquisition method, dentro del periodo en el que se van a añadir los experimentos y, a continuación, haga clic en **Add experiment**.

Figura 7-1 Adición de un experimento



Se agregará un experimento debajo del último experimento del periodo.

Nota: Un experimento no se puede insertar entre experimentos, criterios IDA o periodos. Los usuarios solo pueden agregar un experimento al final del período.

2. En la pestaña MS, seleccione los parámetros correspondientes.

Creación de un período

- En el panel Acquisition method, haga clic con el botón secundario en el icono **Mass Spec** y, a continuación, haga clic en **Add period**.

Se agrega un periodo debajo del último periodo creado.

Nota: Los usuarios no pueden utilizar varios períodos en un experimento IDA.

Copia de un experimento en un período

1. Abra un método de múltiples periodos.
2. En el panel Acquisition method, pulse la tecla **Ctrl** y, a continuación, arrastre el experimento al periodo.

El experimento se copiará debajo del último experimento del periodo.

Copia de un experimento dentro de un período

Utilice este procedimiento para agregar los mismos experimentos o experimentos similares a un periodo o si todos los parámetros son los mismos.

- Haga clic con el botón secundario en el experimento y, a continuación, haga clic en **Copy this experiment**.

Se agrega una copia del experimento debajo del último experimento creado. Esto es útil cuando se añaden experimentos iguales o similares a un método de adquisición.

Creación de un método de adquisición mediante el asistente de método

El método de adquisición se puede guardar en un proyecto existente.

¡Sugerencia! Para copiar los métodos de las plantillas del **Method Wizard** (Asistente de método) en la carpeta **Acquisition Methods** (Métodos de adquisición) que se encuentra en la carpeta del proyecto, seleccione la casilla **Copy method templates** (Copiar plantillas de métodos) del cuadro de diálogo **Create New Project or Subproject** (Crear nuevo proyecto o subproyecto). Para abrir este cuadro de diálogo, haga clic en **Tools > Project > Create Project o Create Subproject** (Herramientas > Proyecto > Crear proyecto o Crear subproyecto).

1. Asegúrese de que haya activo un perfil de hardware que contenga el espectrómetro de masas y los dispositivos periféricos.
2. En la barra de herramientas del software, asegúrese de que se ha seleccionado el proyecto adecuado.
3. En la barra de navegación, en el modo **Acquire**, haga doble clic en **Method Wizard**.

Se abre el **Method Wizard** (Asistente de método).

¡Sugerencia! Desplace el cursor por la interfaz para ver las informaciones y los procedimientos relativos a las herramientas.

4. Seleccione **TOF MS (+)** en la lista **Choose MS Method** (Escoger método de MS).
5. Seleccione en la lista **Choose LC Method** (Escoger método de LC) el método de LC que se ha creado para el perfil de hardware.
6. Escriba un nombre para el método y pulse **Enter** (Intro).
7. Haga clic en **Next**.
8. En la pestaña **Ion Source Parameters** (Parámetros de fuente de iones), compruebe los valores y edítelos si es necesario y, a continuación, haga clic en **Next** (Siguiente).
9. En la pestaña **TOF MS**, compruebe los valores y edítelos si es necesario y, a continuación, haga clic en **Finish** (Finalizar).

¡Sugerencia! Si es necesario, los usuarios pueden realizar más modificaciones en el método de adquisición mediante el **Acquisition Method Editor** (Editor de métodos de adquisición). En modo **Acquire**, haga clic en **File > Open** y, a continuación, abra el método que se ha creado mediante el **Method Wizard**.

Pasos siguientes: el nuevo método de adquisición creado ya se puede utilizar para adquirir datos para el análisis preliminar.

Técnicas de análisis

Se trata de un sistema versátil y fiable para efectuar análisis de espectrometría de masas con cromatografía líquida de corrientes de muestras líquida a fin de identificar, cuantificar y examinar compuestos.

El sistema utiliza las siguientes técnicas de espectrometría de masas para analizar muestras:

- Dos modos de espectrometría de masas simple (MS):
 - Espectrometría de masas simple de cuadrupolo (solo para calibración Q1)
 - Espectrometría de masas simple por tiempo de vuelo
- Dos modos de espectrometría de masas en tándem (MS/MS):
 - Espectrometría de masas de ión producto
 - Espectrometría de masas de ión precursor

Espectrometría de masas simple

La espectrometría de masas simple (MS) se utiliza para analizar moléculas cargadas con el fin de averiguar el peso molecular y la cantidad de iones detectados. Los iones individuales detectados por la MS pueden indicar la presencia de un analito objetivo.

Espectrometría de masas simple de cuadrupolo

En un análisis de espectrometría de masas simple de cuadrupolo (Q1 MS), el sistema funciona como un espectrómetro de masas de cuadrupolo tradicional. En este modo, el sistema genera información de espectrometría de masas simple utilizando la primera sección (Q1) del instrumento cuadrupolar.

Espectrometría de masas simple con tiempo de vuelo

En el análisis de espectrometría de masas simple con tiempo de vuelo (TOF MS) el sistema genera información espectrométrica de masas al enviar iones a un tubo de vuelo y registrar con precisión el tiempo que tardan en llegar al detector. Los iones con una relación mayor de masa-carga tardan más en pasar por el tubo de vuelo.

Espectrómetro de masas en tándem

La técnica de MS/MS es adecuada para el análisis de mezclas, ya que los espectros de iones producto característicos se pueden obtener para cada componente en una mezcla sin interferencia de los demás componentes, en el supuesto de que los iones producto tengan una relación m/z única.

Utilice MS/MS para el análisis objetivo mediante la monitorización de iones precursor/producto específicos, mientras que se eluye la muestra. Este tipo de análisis es más específico que el MS individual, que solo discrimina en función de la relación de masa a carga.

Espectrometría de masas de ión producto

En un análisis de ión producto (**Product Ion** [Ión producto]), el sistema genera información espectrométrica de masas seleccionando una determinada ventana de ión precursor en Q1, fragmentando en Q2 (celda de colisión) y enviando los iones a un tubo de vuelo y registrando con precisión el tiempo que tardan en llegar al detector. Los iones producto pueden proporcionar información sobre la estructura molecular de los iones originales (precursores).

Espectrometría de masas de ión precursor

En un análisis de iones precursores, el sistema detecta los iones precursores que generan un ión producto específico. El instrumento utiliza Q1 en el modo de resolución de masa para analizar el rango de masas de interés, mientras que la sección TOF registra los espectros de iones producto para cada ión precursor. El espectro de masas Q1 muestra todos los iones precursores que producen el ión producto de interés.

Acerca de la adquisición de datos de espectro

Los datos de espectro se pueden adquirir mediante uno de los modos disponibles, como se muestra en la [Tabla 7-1](#).

Los datos de espectro solo se pueden adquirir con los tipos de análisis de Q1 e ion precursor.

Tabla 7-1 Datos de espectro

Modo	Descripción
Profile	El valor predefinido es 0,1 Da. Los datos de Profile son los datos generados por el espectrómetro de masas y se corresponden con la intensidad registrada en una serie de valores de masa discreta espaciados uniformemente. Por ejemplo, para el rango de masa de 100 Da a 200 Da y tamaño de paso de 0,1, el instrumento analiza de 100 Da a 200 Da en incrementos de 0,1 (por ejemplo, 100, 100,1, 100,2, 100,3 ... hasta 200).
Peak Hopping	El valor predefinido es 1,0 Da. Peak Hopping es un modo de funcionamiento de un espectrómetro de masas en el que se realizan pasos largos (aproximadamente de 1 Da). La ventaja de este modo es la velocidad (se realizan menos pasos de datos) pero se pierde información relativa a la forma de pico.

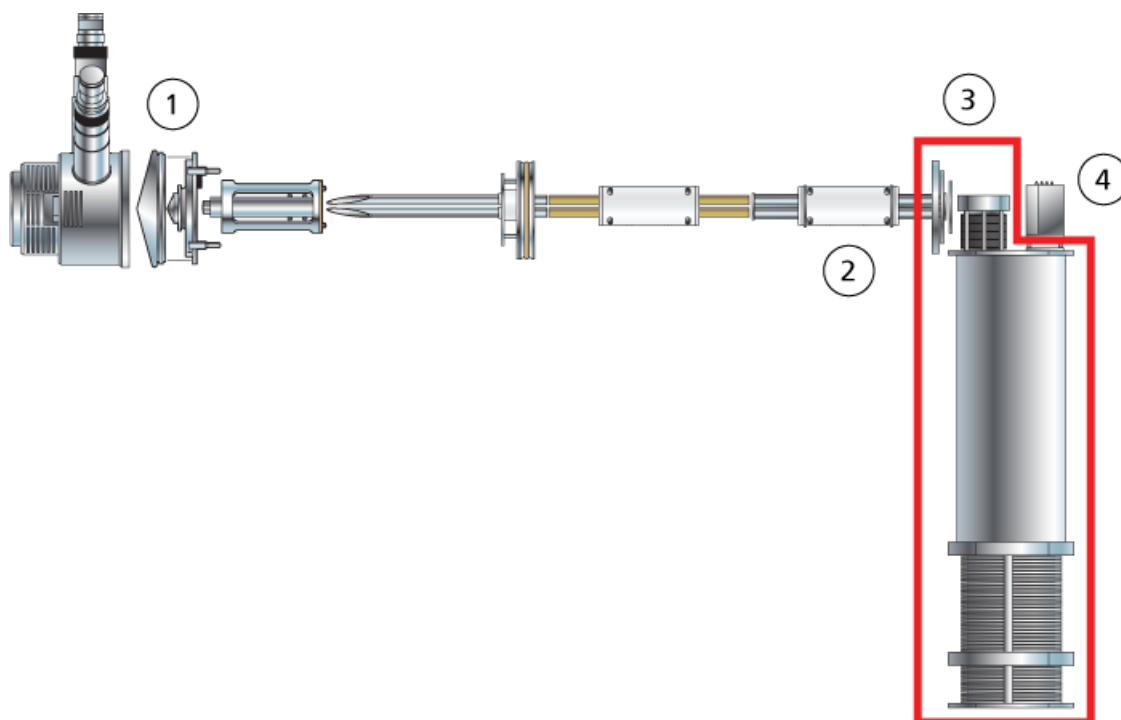
Parámetros

Los parámetros de trabajo son el conjunto de parámetros del instrumento que se están usando.

- Parámetros de la fuente y del gas: estos parámetros se pueden cambiar en función de la fuente de iones que se emplee.
- Parámetros de compuestos: estos parámetros son, en su mayoría, tensiones en la ruta iónica. Los valores óptimos de los parámetros dependientes de los compuestos varían en función del compuesto que se esté analizando.
- Parámetros de resolución: Estos parámetros afectan a la resolución y la calibración.
- Parámetros del detector: estos parámetros afectan al detector. La placa multicanal es el detector de los instrumentos de TOF y consta de cuatro canales para detección de iones. El total de los canales representa la intensidad de los iones. Este parámetro se puede optimizar con Instrument Optimization.

En la figura siguiente se muestra la ubicación de los parámetros de trabajo en la ruta de óptica iónica.

Figura 7-2 Ruta óptica iónica y parámetros



Posición	Parámetro	Parámetro fisiológico	Uso previsto	Tipo de análisis
1	IonSpray Voltage Floating (ISVF)	Fuente y gas	El parámetro ISVF afecta a la estabilidad de la pulverización y, por tanto, a la sensibilidad. Se trata de la tensión aplicada a la aguja que pulveriza la muestra.	Todo
1	Interface Heater Temperature (IHT)	Fuente y gas	<p>El parámetro IHT controla la temperatura del calentador de la interfaz de NanoSpray® y solo está disponible si está instalada la fuente de iones NanoSpray® y la interfaz.</p> <p>La temperatura óptima del calentador depende del tipo de muestra que se esté analizando y del disolvente utilizado. Si la temperatura es demasiado alta, la señal disminuye. Generalmente las temperaturas del calentador están entre 130 y 180 °C. La temperatura máxima del calentador ajustable es de 250 °C, pero es demasiado alta para la mayoría de aplicaciones.</p>	Todo

Instrucciones de funcionamiento: métodos de adquisición

Posición	Parámetro	Parámetro fisiológico	Uso previsto	Tipo de análisis
1	Ion Source Gas 1 (GS1)	Fuente y gas	El parámetro GS1 controla el gas nebulizador de las sondas TurbolonSpray® y APCI. El parámetro GS1 controla el gas nebulizador de la sonda TurbolonSpray®.	Todo
1	Ion Source Gas 2 (GS2)	Fuente y gas	El parámetro GS2 controla el gas del calentador de la sonda TurbolonSpray®. El parámetro GS2 controla el gas del calentador de la sonda TurbolonSpray® y el gas del nebulizador para la sonda APCI.	Todo
1	Temperature (TEM)	Fuente y gas	El parámetro TEM controla la temperatura del gas del calentador de la sonda TurbolonSpray® o la temperatura de la sonda APCI.	Todo
1	Curtain Gas (CUR)	Fuente y gas	El parámetro CUR controla el flujo de gas de la interfaz de Curtain Gas™. El caudal de Curtain Gas™ se ubica entre la placa de chapa y el orificio. Su función es evitar la contaminación de la óptica iónica.	Todo
1	Declustering Potential (DP)	Compuesto	El parámetro DP controla la tensión en el orificio, que a su vez controla la capacidad de desagrupar iones entre el orificio y la guía de iones QJet®. Se utiliza para reducir al mínimo las agrupaciones de disolvente que podrían permanecer en los iones de la muestra tras entrar estos en la cámara de vacío y, si es necesario, para fragmentar iones. Cuanto mayor sea la tensión, mayor será la energía transmitida a los iones. Si el parámetro DP es demasiado alto, se podría producir una fragmentación no deseada. Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.	Todo

Instrucciones de funcionamiento: métodos de adquisición

Posición	Parámetro	Parámetro fisiológico	Uso previsto	Tipo de análisis
2	CAD Gas	Fuente y gas	<p>El parámetro CAD controla la presión del gas CAD en la celda de colisión. El gas de colisión ayuda a concentrar los iones conforme atraviesan la celda de colisión; el valor predefinido para el parámetro CAD es el modo fijo. En los tipos de análisis MS/MS, el gas CAD ayuda a fragmentar los iones precursores. Cuando los iones precursores colisionan con el gas de colisión, se desasocian para formar iones producto.</p> <p>Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.</p>	Todo
2	Collision Energy (CE)	Compuesto	<p>El parámetro CE controla la diferencia de potencial entre la región Q0 y la celda de colisión Q2. Se utiliza únicamente en análisis de tipo MS/MS. Este parámetro fija la cantidad de energía que reciben los iones precursores a medida que se aceleran hacia el interior de la celda de colisión Q2, donde colisionan con las moléculas de gas y se fragmentan.</p> <p>Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.</p>	TOF MS, TOF MS/MS
2	Collision Energy Spread (CES)	Compuesto	<p>El parámetro CES, junto con el parámetro CE, determina las tres energías de colisión discretas que se aplican a la masa del ión precursor en un análisis de un de un ión producto que utilice el parámetro CES. La energía de colisión se lanza de abajo arriba. Por ejemplo, en modo positivo, la energía de colisión se lanza desde CE - CES hasta CE + CES. Al introducir un valor CES, se activa automáticamente la dispersión de energía de colisión.</p> <p>Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.</p>	TOF MS/MS

Instrucciones de funcionamiento: métodos de adquisición

Posición	Parámetro	Parámetro fisiológico	Uso previsto	Tipo de análisis
3	Ion Release Delay (IRD)	Compuesto	<p>Cantidad de tiempo en milisegundos hasta el pulso de iones. El valor predeterminado (11 ms) se calcula de acuerdo con las masas TOF y el operador puede ajustarlo. El intervalo suele estar entre 6 y 333 ms.</p> <p>Este parámetro se optimiza con el asistente Instrument Optimization si se selecciona la opción Enhanced Ion en las opciones de Advanced. En general, no hay que cambiar los valores predeterminados.</p>	Solo MS/MS/MS, mejorado
3	Ion Release Width (IRW)	Compuesto	<p>Se trata de la anchura o la duración del pulso de iones en milisegundos y se calcula de acuerdo con el IRD. El intervalo suele estar entre 5 y 328 ms, con un valor predeterminado de 10 ms.</p> <p>Este parámetro se optimiza con el asistente Instrument Optimization si se selecciona la opción Enhanced Ion en las opciones de Advanced. En general, no hay que cambiar los valores predeterminados.</p>	Solo MS/MS/MS, mejorado
4	MCP (CEM)	Detector	El parámetro CEM controla la tensión aplicada al detector. La tensión afecta a la respuesta del detector.	Todo

Instrucciones de funcionamiento: lotes

8

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. Si el sistema HPLC conectado al espectrómetro de masa no está controlado por el software, no deje desatendido el espectrómetro de masas mientras está en funcionamiento. La corriente de líquido de los del sistema HPLC puede inundar la fuente de iones cuando el espectrómetro de masas pasa al modo de espera.

Configuración de las opciones de cola

La cola pasa de un elemento de la lista al siguiente, adquiriendo cada muestra con el método de adquisición seleccionado. Después de que se hayan adquirido todas las muestras, la cola se detiene y el espectrómetro de masas pasa al modo Standby. En el modo Standby, se apagan las bombas de LC y algunas tensiones del instrumento.

El usuario puede modificar la cantidad de tiempo que la cola funcionará después de que haya terminado la última adquisición, antes de que el software Analyst® TF ponga al espectrómetro de masas en el modo Standby. Para obtener más información sobre el resto de campos del cuadro de diálogo Queue Options, consulte la Ayuda.

1. En la barra de navegación, haga clic en **Configure**.
2. Haga clic en **Tools > Settings > Queue Options**.

Figura 8-1 Cuadro de diálogo Queue Options

Queue Options

Max. Num. Waiting Samples: 200

Max. Num. Acquired Samples: 100

Max. Idle Time: 60 min

Max. Tune Idle Time: 60 min

Disk Space Threshold: 100 MBytes

Leave Mass Spec on in Standby: ☐

Fail Whole Batch in Case of Missing Vial: ☐

Use Flat Files for Scan Data: ☒

Fail Whole Batch if Auto Calibration Fails: ☐

Keep Calibration Data File: ☒

Continue Whole Batch if Missing Sync found: ☒

OK Cancel Help

3. En el campo **Max. Número Waiting Samples**, establezca un valor para el número máximo de muestras mayor que el número de muestras que se va a enviar a la cola.
4. En el campo **Max. Idle Time**, indique la cantidad de tiempo que la cola esperará después de que haya finalizado la adquisición antes de pasar al modo Standby. El valor predefinido es 60 minutos.

Si se usan bombonas de gas, ajuste este valor de tiempo para asegurarse de que no se agote el gas.

Si se usa un método de LC, antes de que se inicie el procesamiento, asegúrese de que la cantidad de disolvente en los depósitos sea suficiente para suministrar el caudal primario para el análisis de todas las muestras y el tiempo máximo de inactividad.

5. Seleccione la casilla **Leave Mass Spec on in Standby** para que el espectrómetro de masas siga en funcionamiento una vez terminado el análisis. Esta función permite que los calentadores y gases sigan funcionando, aunque los dispositivos hayan pasado al estado Idle, de forma que la fuente de iones y la entrada al espectrómetro de masas se mantenga libre de contaminantes.
6. Seleccione la casilla **Fail Whole Batch in Case of Missing Vial** para dar por incorrecto todo el lote cuando falte un vial. Si no se selecciona esta opción, solo se dará por incorrecta la muestra actual y la cola pasará a la siguiente muestra.
7. Seleccione la casilla **Fail Whole Batch if Auto Calibration Fails** para que se detenga el lote si falla la calibración.
8. Seleccione la casilla **Keep Calibration Data File** para que el archivo de datos de calibración se guarde en una subcarpeta de la carpeta de datos del proyecto al que pertenecen las muestras enviadas.

9. Seleccione la casilla **Continue Whole Batch if Missing Sync found** para seguir adquiriendo todo el lote aunque falte una señal de sincronización. Si no se selecciona esta casilla, falla la muestra actual y la cola no prosigue con la siguiente muestra aunque se encuentre la señal.

Adición de conjuntos y muestras a un lote

Un conjunto consta de una sola muestra o de varias muestras.

Nota: Para obtener más información acerca de cómo añadir información de cuantificación a un lote, consulte la *Guía para usuarios avanzados*.

1. En la barra de navegación, en **Acquire**, haga doble clic en **Build Acquisition Batch**.

Figura 8-2 Cuadro de diálogo Batch Editor

2. En la pestaña **Sample**, en la lista **Set**, escriba un nombre.
3. Haga clic en **Add Set**.
4. Haga clic en **Add Samples** para agregar muestras al nuevo conjunto.

Figura 8-3 Cuadro de diálogo Add Sample

The 'Add Sample' dialog box contains the following fields and options:

- Sample name:**
 - Prefix:
 - Sample number: ☒
 - Number of digits:
- Data file:**
 - Prefix:
 - Set name: ☒
 - Auto Increment: ☒
 - Sub Folder:
 - Browse:
- New samples:**
 - Number:

Buttons: OK, Cancel, Help

5. En la sección **Sample name**, en el campo **Prefix**, escriba un nombre para las muestras de este conjunto.
6. Para incluir un número en aumento al final del nombre de muestra, active la casilla de verificación **Sample number**.
7. Si está activada la casilla de verificación **Sample number** en el campo **Number of digits**, escriba el número de dígitos que se incluirán en el nombre de muestra.

Por ejemplo, si se escribe 3, los nombres de muestra serán nombremuestra001, nombremuestra002, nombremuestra003.

8. En la sección **Data file**, en el campo **Prefix**, escriba un nombre para el archivo de datos que almacenará la información de muestra.
9. Para incluir el nombre del conjunto como parte del nombre del archivo de datos, active la casilla de verificación **Set name**.
10. Active la casilla de verificación **Auto Increment** para que los nombres de archivo de datos vayan en aumento automáticamente.

Nota: Los datos de cada muestra se pueden almacenar en el mismo archivo de datos o en uno diferente. Los nombres de archivo de datos tendrán sufijos numéricos, empezando por el 1.

11. Escriba un nombre en el campo **Sub Folder**.

La carpeta se almacena en la carpeta Data del proyecto actual. Si se deja en blanco el campo **Sub Folder**, el archivo de datos se almacena en la carpeta **Data** y no se crea una subcarpeta.

Instrucciones de funcionamiento: lotes

12. En la sección **New samples**, en el campo **Number**, escriba el número de muestras nuevas que se agregarán.

13. Haga clic en **OK**.

La tabla de muestras se rellena con los nombres de muestra y los nombres de archivo de datos.

¡Sugerencia! Las opciones **Fill Down** y **Auto Increment** están disponibles en el menú contextual tras seleccionar un único encabezado de columna o varias filas de una columna.

14. En la pestaña **Sample**, en la sección **Acquisition**, seleccione un método de la lista.

Dependiendo de cómo esté configurado el sistema, debe introducirse una información específica para el automuestreador. Incluso si el volumen de inyección se ha definido en el método, el usuario podrá cambiarlo para una o más muestras modificando el valor de la columna de volumen de inyección.

Nota: Si desea utilizar métodos diferentes para algunas muestras de este conjunto, seleccione **Use Multiple Methods**. La columna **Acquisition Method** se muestra en la tabla **Sample**. Seleccione el método de adquisición de cada muestra en esta columna.

15. Para modificar los volúmenes de inyección mostrados en el método, en la columna **Inj. Volume (µl)**, indique el volumen de inyección para cada muestra.

16. Para definir la ubicación de las muestras, realice una de las siguientes acciones:

- [Definición de la ubicación de las muestras en el editor Batch Editor en la página 65](#)
- [Selección de la posición de los viales mediante la pestaña Locations \(opcional\) en la página 65](#)

17. Haga clic en la pestaña **Submit**.

Nota: Es posible editar el orden de las muestras antes de enviarlas a la cola. Para cambiar el orden de las muestras, en la pestaña **Submit**, haga doble clic en cualquiera de los números del extremo izquierdo de la tabla (aparece un recuadro muy atenuado) y, a continuación, arrástrelo a la nueva ubicación.

18. Si la sección **Submit Status** contiene un mensaje sobre el estado del lote, realice una de las siguientes acciones:

- Si el mensaje indica que el lote está preparado para su envío, continúe en el paso [19](#).
- Si el mensaje indica que el lote no está preparado para su envío, realice los cambios que se indican en el mensaje.

19. Después de confirmar que toda la información del lote es correcta, haga clic en **Submit**.

El lote se envía a la cola y se puede ver desde el Queue Manager.

20. Guarde el archivo.

Enviar una muestra o conjunto de muestras

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

1. Seleccione una muestra o un conjunto de muestras.
2. Haga clic en la pestaña **Submit** del **Batch Editor**.
3. Si la sección **Submit Status** contiene un mensaje sobre el estado del lote, realice una de las siguientes acciones:
 - Si el mensaje indica que el lote está preparado para su envío, continúe con el paso siguiente.
 - Si el mensaje indica que el lote no está preparado para su envío, realice los cambios que se indican en el mensaje.
4. Haga clic en **Submit**.

Configuración de la calibración de muestras

El software puede programar y ejecutar de modo automático la calibración automática mientras se adquieren las muestras en modo de lote. De esta manera se asegura que la precisión de las masas durante la adquisición sea correcta.

Si no está configurado el CDS, la calibración se realiza utilizando un automuestreador y los usuarios deben proporcionar el método de calibración (*.dam) y la posición del vial de la muestra de calibración.

1. En el **Batch Editor** (Editor de lotes), haga clic en la pestaña **Calibrate** (Calibrar).
2. En el campo **Calibrate Every _ Samples** (Calibrar todas las muestras), indique el número de muestras que se deben adquirir entre las muestras de calibración.
3. En la lista **Calibrant Reference Table** (Tabla de referencia de calibración), seleccione una tabla de la lista de tablas de referencia de calibración disponibles para la polaridad correspondiente. Asegúrese de que la tabla de referencia seleccionada disponga de la **Calibrant Valve Position** (Posición de la válvula de calibración).
4. Ajuste el **CDS Inject Flow Rate** (Caudal de inyección del CDS).

Cuando se envía el lote, se introducen en la cola las muestras de calibración. Cada conjunto empieza con una muestra de calibración. El método de calibración se denomina AnalystCal_ más el nombre del método de adquisición (por ejemplo, AnalystCal_TOF.dam). Si está configurado el CDS, el software crea automáticamente un método de calibración que coincida con el método de adquisición utilizado para la siguiente muestra de la cola. Los datos de calibración se guardan en un archivo de datos diferente para cada muestra de calibración. Si en el cuadro de diálogo Queue Options (Opciones de cola), se selecciona Keep Calibration Data File (Conservar archivo de datos de calibración), este archivo se guarda junto con el informe de calibración en la subcarpeta Cal Data (Datos de calibración) y se nombra a partir de Cal más la fecha y el índice de muestra de calibración (por ejemplo, Cal200906261038341.wiff). El informe de calibración se nombra con Cal más la fecha, el índice de muestra de calibración y la palabra «report»

(informe) (por ejemplo, Cal20130822154447030_report.txt). El informe muestra los criterios de búsqueda de picos, los parámetros y las masas utilizadas para la calibración e informa a los usuarios de si la calibración se ha realizado correctamente. Asimismo, resume los parámetros utilizados para la calibración.


Cambiar el orden de las muestras

Es posible editar el orden de las muestras antes de enviarlas a la **Queue**.

- En la pestaña **Submit**, haga doble clic en cualquiera de los números del extremo izquierdo de la tabla (aparece un recuadro muy atenuado) y, a continuación, arrástrelo a la nueva ubicación.

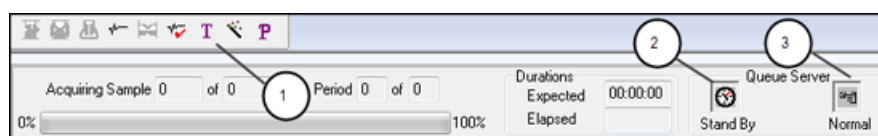
Adquisición de datos

Cuando inicie la adquisición de muestras, el sistema no debe encontrarse en modo Tune and Calibrate. Además, si el sistema se ha utilizado anteriormente ese día y aún no se ha activado el modo Standby, la adquisición de muestras se iniciará automáticamente.

- Asegúrese de que se ha alcanzado la temperatura del horno de columna.
- Asegúrese de que el icono  no está pulsado.
- En la barra de navegación, haga clic en **Acquire**.
- Haga clic en **View > Sample Queue**.

Se abrirá el gestor Queue Manager, con todas las muestras enviadas.

Figura 8-4 Gestor de colas



Elemento	Descripción
1	El icono Reserve Instrument for Tuning no se debe pulsar.
2	El estado de la cola debe ser el modo Ready.
3	El servidor Queue Server debe estar en Normal. Consulte Estados de cola en la página 68 .

- Haga clic en **Acquire > Start Sample**.

Definición de la ubicación de las muestras en el editor Batch Editor

Si se utiliza un automuestreador en el método de adquisición, se deben definir las posiciones de los viales de las muestras en el lote de adquisición. Defina la ubicación en la pestaña **Sample** (Muestra) o en la pestaña **Locations** (Ubicaciones). Para obtener más información sobre la creación de lotes, consulte [Adición de conjuntos y muestras a un lote en la página 60](#).

1. En la pestaña **Sample**, en la lista **Set**, seleccione el conjunto.
2. Para cada muestra del conjunto, realice la siguiente acción si corresponde:
 - En la columna **Rack Code**, seleccione el tipo de estante.
 - En la columna **Rack Position**, seleccione la posición del estante en el automuestreador.
 - En la columna **Plate Code**, seleccione el tipo de placa.
 - En la columna **Plate Position**, seleccione la posición de la placa en el estante.
 - En la columna **Vial Position**, indique la posición del vial en la placa o la bandeja.
3. Guarde el archivo.

Selección de la posición de los viales mediante la pestaña Locations (opcional)

1. En el **Batch Editor**, haga clic en la pestaña **Locations**.
2. Seleccione el conjunto en la lista **Set**.
3. En la lista **Autosampler**, seleccione el automuestreador.
4. En el espacio asociado al estante, haga clic con el botón secundario y seleccione el tipo de estante.

Las placas o bandejas seleccionadas se muestran en el estante.

5. Haga doble clic en el espacio en blanco con la etiqueta de tipo de gradilla. Se muestra una disposición de gradilla de muestras visual.

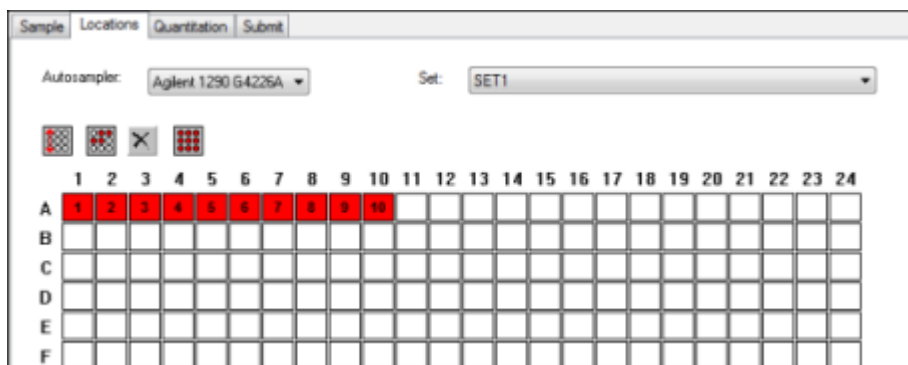
La vista gráfica de estante muestra el número de espacios de estante correspondiente al procesador de muestras automático seleccionado.

6. Haga doble clic en uno de los rectángulos.

Se mostrarán círculos que representan los pocillos o viales de la placa o bandeja.

¡Sugerencia! Para ver el número de vial correspondiente en la representación gráfica, pase el cursor por encima de la posición de la muestra. Utilice esta información para confirmar que las posiciones del vial en el software coinciden con las posiciones del vial en el procesador de muestras automático.

Figura 8-5 Pestaña Locations



Nota: En función del procesador de muestras automático que se utilice, es posible que no sea necesario indicar detalles en columnas adicionales.

7. Para seleccionar si las muestras se marcarán por fila o por columna, haga clic en el botón selector **Row/Column Selection**.

Si el botón muestra una línea roja horizontal, el **Batch Editor** marcará las muestras por fila. Si el botón muestra una línea roja vertical, el **Batch Editor** marcará las muestras por columna.

8. Haga clic en los pocillos o viales de muestra en el orden en que deben analizarse.

¡Sugerencia! Haga clic en un pocillo o vial seleccionado para anular su selección.

¡Sugerencia! Para rellenar las muestras, mantenga pulsada la tecla **Shift** y haga clic en el primero y en el último vial de un conjunto. Para realizar diferentes inyecciones desde el mismo vial, mantenga pulsada la tecla **Ctrl** y haga clic en la ubicación del vial. El círculo rojo se volverá verde.

Detención de la adquisición de muestras

Siempre que se detiene una adquisición de muestras, el análisis que se está procesando en ese momento finaliza antes de que se detenga la adquisición.

1. En el gestor **Queue Manager**, haga clic en la muestra de la cola situada tras el punto donde debe detenerse la adquisición.
2. En la barra de navegación, haga clic en **Acquire**.
3. Haga clic en **Acquire > Stop Sample**.

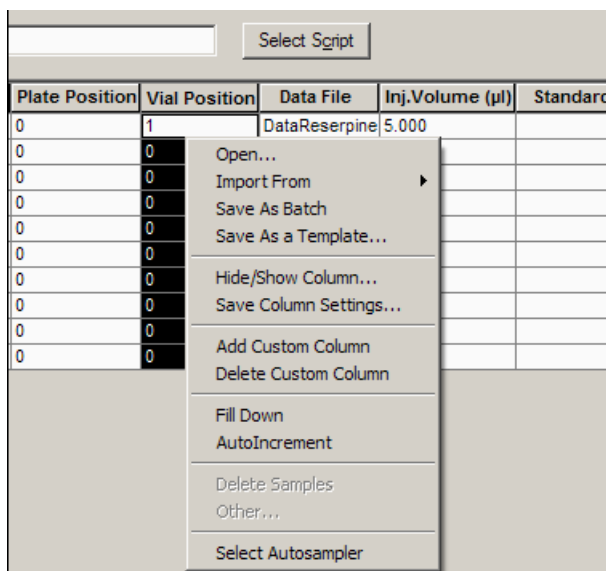
La cola se detiene tras finalizar el análisis actual de la muestra seleccionada. El estado de la muestra en la ventana **Queue Manager (Local)** cambia a **Terminated** y el del resto de muestras siguientes de la cola cambia a **Waiting**.

4. Cuando esté preparado para continuar procesando el lote, haga clic en **Acquire > Start Sample**.

Menú contextual del Batch Editor

Haga clic con el botón secundario en la tabla **Batch Editor** para acceder a las opciones.


Figura 8-6 Menú contextual del editor de lotes



Elemento de menú	Función
Open	Abre un archivo de lote.
Import From	Importa un archivo.
Save As Batch	Guarda el lote con un nombre diferente.
Save As a Template	Guarda el lote como una plantilla.
Hide/Show Column	Oculto o muestra una columna.
Save Column Settings	Guarda la configuración de columna del lote.
Add Custom Column	Agrega una columna personalizada.
Delete Custom Column	Elimina una columna personalizada.
Fill Down	Copia los mismos datos en las celdas seleccionadas.
AutoIncrement	Incrementa automáticamente los datos en las celdas seleccionadas.
Delete Samples	Elimina la fila seleccionada.
Select Autosampler	Selecciona un automuestreador.

Estados de cola y de dispositivo

Queue Manager muestra la cola, el lote y el estado de la muestra. También se puede consultar información detallada de una muestra concreta de la cola.

¡Sugerencia! Haga clic en  para ver la cola.

Estados de cola

El estado actual de la cola se indica en el servidor **Queue Server**.

Figura 8-7 Indicador del servidor de cola en modo normal

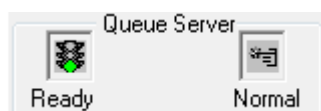
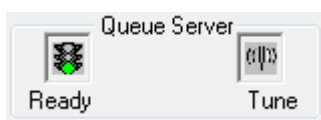


Figura 8-8 Indicador del servidor de cola en modo de ajuste



El primer icono indica el estado de la cola. El segundo icono indica si la cola se encuentra en modo **Tune** (para ajuste) o **Normal** (para analizar las muestras). En la [Tabla 8-1](#) se describen los iconos y los estados de la cola.

Tabla 8-1 Estados de cola

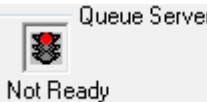

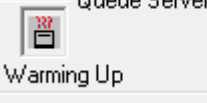





Icono	Estado	Definición
 Queue Server Not Ready	Not Ready	El perfil de hardware está desactivado y la cola no acepta ningún envío de muestras.
 Queue Server Stand By	Stand By	El perfil de hardware está activado, pero todos los dispositivos están inactivos. Las bombas no están en funcionamiento y los gases están apagados.
 Queue Server Warming Up	Warming Up	El espectrómetro de masas y los dispositivos se están equilibrando, las columnas se están acondicionando, la aguja del automuestreador se está lavando y los hornos de columna están alcanzando la temperatura adecuada. El usuario selecciona la duración de equilibrado. Desde este estado, el sistema puede pasar al estado Ready .

Tabla 8-1 Estados de cola (continuación)

Icono	Estado	Definición
 Queue Server Ready Normal	Ready	El sistema está preparado para iniciar el análisis de muestras y los dispositivos se han equilibrado y están listos para su funcionamiento. En este estado, la cola puede recibir muestras y se procesará una vez que haya recibido las muestras.
 Queue Server Waiting Normal	Waiting	El sistema iniciará automáticamente la adquisición cuando se envíe la muestra siguiente.
 Queue Server PreRun Normal	PreRun	El método se está descargando en cada dispositivo y se está llevando a cabo el equilibrado de los dispositivos. Este estado se produce antes de la adquisición de cada muestra de un lote.
 Queue Server Acquiring Normal	Acquiring	El método está ejecutándose y se está llevando a cabo la adquisición de datos.
 Queue Server Paused Normal	Paused	El sistema se ha colocado en pausa durante la adquisición.

Visualización de los iconos de estado de instrumento y dispositivo









Los iconos que representan al espectrómetro de masas y a cada dispositivo del perfil de hardware activo se muestran en la barra de estado de la esquina inferior derecha de la ventana. El usuario puede ver el estado detallado de una bomba de LC para determinar si la presión de esta bomba es la correcta, o ver el estado detallado del espectrómetro de masas para confirmar la temperatura de la fuente de iones.

Nota: Para cada uno de estos estados, el color de fondo puede ser rojo. Un fondo rojo indica que el dispositivo ha detectado un error mientras se encontraba en ese estado.

- En la barra de estado, haga doble clic en el icono del dispositivo o espectrómetro de masas.

Se abrirá el cuadro de diálogo Instrument Status.

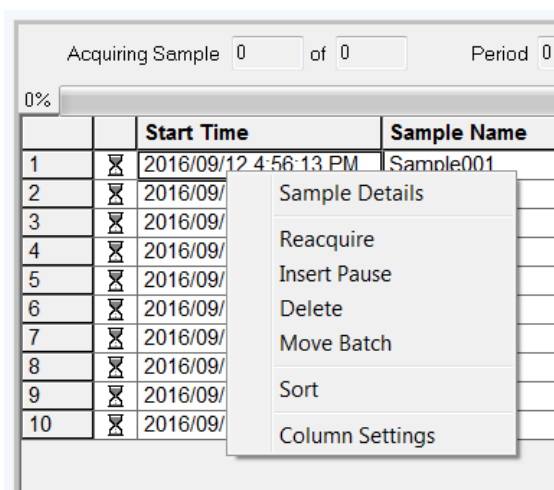
Tabla 8-2 Iconos de estado de instrumento y dispositivo

Estado	Icono	Color de fondo	Descripción
Idle		Verde o amarillo	El dispositivo no está en funcionamiento. Si el color de fondo es amarillo, el dispositivo se debe equilibrar antes de que esté preparado para su funcionamiento. Si el color de fondo es verde, el dispositivo está preparado para su funcionamiento.
Equilibrating		Verde o amarillo	El dispositivo se está equilibrando.
Waiting		Verde	El dispositivo está esperando un comando del software o de otro dispositivo o alguna acción por parte del operador.
Running		Verde	El dispositivo está procesando un lote.
Aborting		Verde	El dispositivo está anulando un procesamiento.
Downloading		Verde	Se está transfiriendo un método al dispositivo.
Ready		Verde	El dispositivo no está en funcionamiento pero está preparado.
Error		Rojo	El dispositivo ha detectado un error que se debe investigar.

Menú contextual de Queue

Haga clic con el botón secundario en la tabla Queue para acceder a las opciones.

Figura 8-9 Menú contextual de Queue Manager



Elemento de menú	Función
Sample Details	Abre el cuadro de diálogo Sample Details.
Reacquire	Vuelve a adquirir una muestra.
Insert Pause	Inserta una pausa, en segundos, entre dos muestras.
Delete	Elimina el lote o las muestras seleccionadas.
Move Batch	Mueve el lote dentro de la cola.
Sort	Ordena por la columna preseleccionada.
Column Settings	Modifica la configuración de columna.

Instrucciones de funcionamiento: análisis y exploración de datos

9

Utilice los archivos de muestra instalados en la carpeta Example para aprender a consultar y analizar los datos mediante el uso de las herramientas más comunes de análisis y procesamiento. Para obtener más información sobre los siguientes temas, consulte la *Guía para usuarios avanzados*:

- Etiquetado de gráficos
- Superposición y suma de espectros o cromatogramas
- Ejecución de sustracciones de fondo
- Algoritmos de suavización
- Suavización de datos
- Trabajo con datos del centroide
- Trabajo con gráficos de contorno
- Trabajo con la herramienta de interpretación de fragmentos
- Trabajo con registros y bases de datos de biblioteca

Apertura de archivos de datos

¡Sugerencia! Para desactivar la actualización automática en el espectro de masas, haga clic con el botón secundario en el espectro de masas y, a continuación, seleccione **Show Last Scan**. Si hay una marca de verificación junto a **Show Last Scan**, el espectro se actualizará en tiempo real.

1. En la barra de navegación, en **Explore**, haga doble clic en **Open Data File**.

Se muestra el cuadro de diálogo Select Sample.

2. En la lista **Data Files**, desplácese al archivo de datos que desee abrir y haga clic en **OK**.

Se muestran los datos adquiridos de la muestra. Si aún se están adquiriendo datos, el espectro de masas, el trazo de DAD/UV y el TIC se seguirán actualizando automáticamente.

¡Sugerencia! Para ver un archivo de datos de ejemplo, asegúrese de seleccionar el proyecto **Example**. Abra la carpeta TOF y, a continuación, abra el archivo **TOFMS PPGs3000.wiff**. En la lista de muestras, seleccione **TOFMS**.

Navegación por las muestras de un archivo de datos

Nota: Si las muestras se han guardado en archivos de datos diferentes, es preciso abrir cada archivo de manera individual.

En la [Tabla C-5 en la página 117](#) se muestran los iconos de navegación utilizados en este procedimiento.

- Abra un archivo de datos que contenga varias muestras y lleve a cabo uno de los siguientes procedimientos:
 - Haga clic en el icono de flecha hacia la derecha para pasar a la muestra siguiente del archivo de datos.
 - Haga clic en el icono de flecha curva hacia la derecha para pasar a una muestra no secuencial.
 - En el cuadro de diálogo Select Sample, en la lista **Sample**, seleccione la muestra que desee ver.
 - Haga clic en el icono de flecha hacia la izquierda para ir a la muestra anterior del archivo de datos.

Visualización de las condiciones experimentales

Las condiciones experimentales utilizadas para recopilar los datos se almacenan en el archivo de datos junto con los resultados. Esta información incluye los detalles del método de adquisición utilizado: el método de adquisición MS (es decir, el número de periodos, experimentos y ciclos), incluidos los parámetros del instrumento y el método del dispositivo HPLC (caudal de la bomba de LC). Además, también contiene las tablas de resolución de MS y de calibración de masas utilizadas para la adquisición de muestras. En la [Tabla 9-1](#) se enumeran las funciones de software disponibles cuando el usuario consulta la información de archivo.

Nota: Si se adquieren datos de más de una muestra en el mismo archivo .wiff, el panel de información de archivo no se actualizará automáticamente a medida que se desplaza por las muestras. Cierre el panel de información de archivo y, a continuación, vuelva a abrirlo para ver los detalles de la siguiente muestra en el archivo .wiff.

- Haga clic en **Explore > Show > Show File Information**.

El panel File Information se abre debajo del gráfico.

¡Sugerencia! Para crear un método de adquisición desde el panel **File Information**, haga clic con el botón secundario en el panel **File Information** y, a continuación, haga clic en **Save Acquisition Method**.

Tabla 9-1 Menú contextual del panel Show File Information

Elemento de menú	Función
Copy	Copia los datos seleccionados.
Paste	Pega los datos.

Tabla 9-1 Menú contextual del panel Show File Information (continuación)

Elemento de menú	Función
Select All	Selecciona todos los datos del panel.
Save To File	Guarda los datos como archivo .rtf.
Font	Cambia la fuente.
Save Acquisition Method	Guarda el método de adquisición como archivo .dam.
Save Acquisition Method to CompoundDB	Abre el cuadro de diálogo Specify Compound Information. Seleccione los identificadores y los pesos moleculares que se guardarán en la base de datos de compuestos.
Delete Pane	Elimina el panel seleccionado.

Mostrar datos en tablas

1. Abra un archivo de datos.
2. Haga clic en **Explore > Show > Show List Data**.

Los datos se muestran en un panel debajo del gráfico.

Figura 9-1 Pestaña Peak List

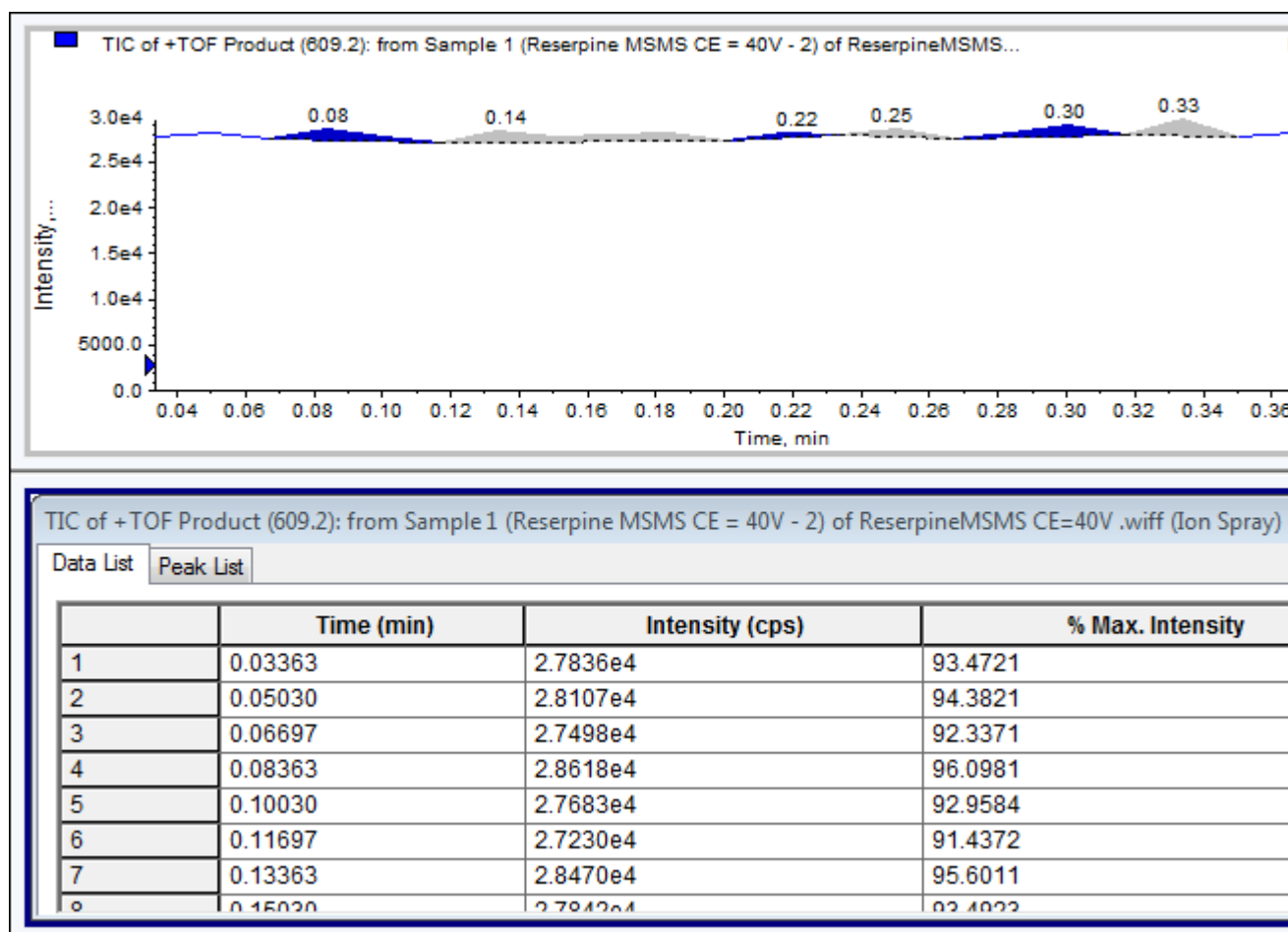


Tabla 9-2 Menú contextual de la pestaña Spectral Peak List

Elemento de menú	Función
Column Options	Abre el cuadro de diálogo Select Columns for Peak List .
Save As Text	Guarda los datos como archivo de texto.
Delete Pane	Elimina el panel seleccionado.

Tabla 9-3 Menú contextual de la pestaña Chromatographic Peak List

Elemento de menú	Función
Show Peaks in Graph	Muestra los picos en dos colores en el gráfico.
IntelliQuan Parameters	Abre el cuadro de diálogo IntelliQuan .

Tabla 9-3 Menú contextual de la pestaña Chromatographic Peak List (continuación)

Elemento de menú	Función
Save As Text	Guarda los datos como archivo .txt.
Delete Pane	Elimina el panel seleccionado.

Mostrar datos de ADC

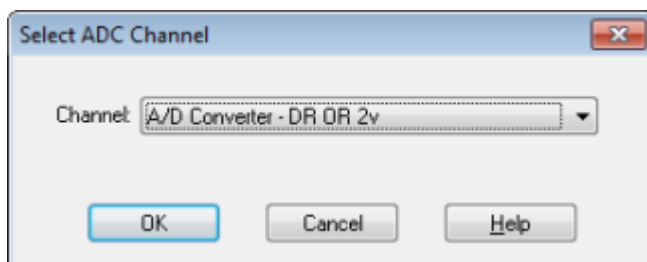
Los datos de ADC (convertidor analógico-digital) se adquieren a partir de un detector secundario (por ejemplo, de un detector UV a través de una tarjeta de ADC) y resultan útiles para la comparación con los datos del espectrómetro de masas. Para que los datos del ADC estén disponibles, debe adquirir estos datos y los datos del espectrómetro de masas de manera simultánea y guardarlos en el mismo archivo.

1. Asegúrese de que la carpeta **Example** está seleccionada.
2. En la barra de navegación, en **Explore**, haga doble clic en **Open Data File**.

Se abrirá el cuadro de diálogo Select Sample.

3. En el campo **Data Files**, haga doble clic en **Devices** y, a continuación, seleccione **Adc16chan.wiff**.
4. En la lista **Samples**, seleccione una muestra y, a continuación, haga clic en **OK**.
5. Haga clic en **Explore > Show > Show ADC Data**.

Figura 9-2 Cuadro de diálogo Select ADC Channel



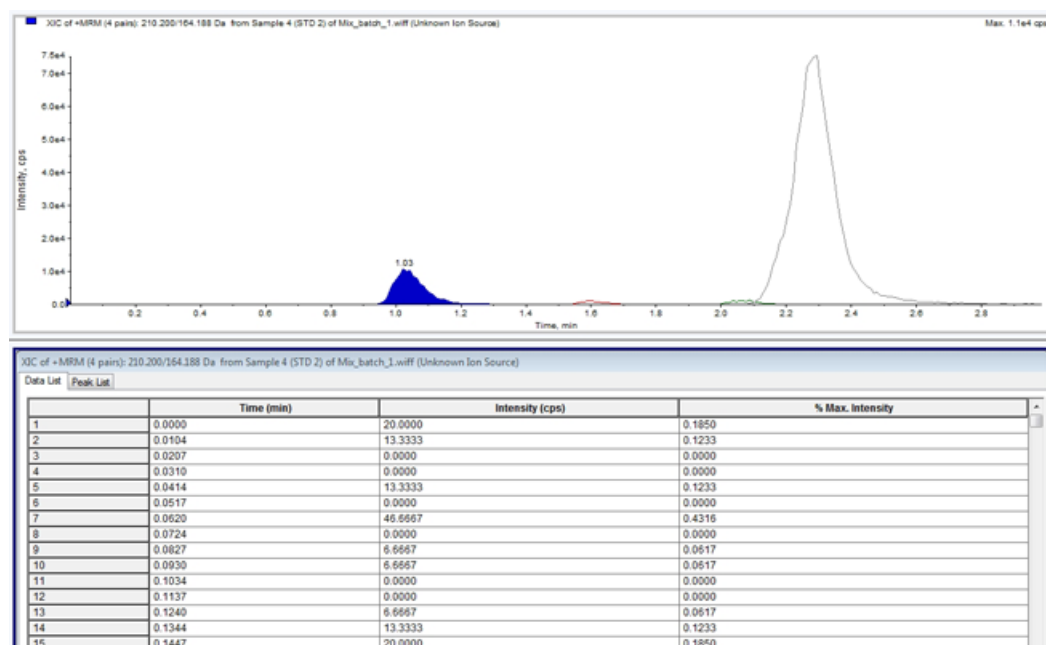
6. En la lista **Channel**, seleccione un canal y, a continuación, haga clic en **OK**.

Se mostrarán los datos de ADC en un panel nuevo debajo del panel activo.

Mostrar los datos cuantitativos básicos

1. Abra un archivo de datos.
2. Haga clic en **Explore > Show > Show List Data**.

Figura 9-3 List Data



- En la pestaña Peak List, haga clic con el botón secundario y seleccione **Show Peaks in Graph**.

Los picos se muestran en dos colores.

- Para cambiar la configuración del algoritmo de detección de picos, haga clic con el botón secundario y seleccione **Analyst Classic Parameters** o **IntelliQuan Parameters**, la opción que esté activa.
- (Opcional) Para eliminar los picos de colores, haga clic con el botón secundario en la pestaña Peak List y desactive **Show Peaks in Graph**.

Cromatogramas

Un cromatograma es una vista gráfica de los datos obtenidos del análisis de una muestra. Traza la intensidad de la señal a lo largo de un eje que representa el tiempo o el número de análisis. Para obtener más información acerca de las funciones del software disponibles para los cromatogramas, consulte la [Tabla 9-6 en la página 86](#).

El software representa gráficamente la intensidad, en recuentos por segundo (cps), en el eje Y en función del tiempo, en el eje X. Los picos por encima del umbral definido se etiquetan automáticamente. En el caso de LC-MS, el cromatograma se muestra a menudo como una función del tiempo. La [Tabla 9-4](#) ofrece una descripción de los diversos tipos de cromatograma.

Consulte la [Tabla 9-8 en la página 89](#) para obtener más información acerca del uso de los iconos disponibles.

Tabla 9-4 Tipos de cromatograma

Tipos de cromatogramas	Finalidad
TIC (Total Ion Chromatogram, cromatograma de iones totales)	<p>Vista cromatográfica generada mediante la representación gráfica de la intensidad de todos los iones de un análisis en función del tiempo o del número de análisis.</p> <p>Cuando se abre un archivo de datos, se abrirá de manera predeterminada como un TIC. Sin embargo, si el experimento solo contiene un análisis, se mostrará como un espectro.</p> <p>Si está activada la casilla de verificación MCA durante la adquisición del archivo de datos, el archivo de datos se abrirá en el espectro de masas. Si la casilla de verificación MCA no está activada, el archivo de datos se abrirá como TIC.</p>
XIC (Extracted Ion Chromatogram, cromatograma de iones extraídos)	Cromatograma de iones resultado de tomar los valores de intensidad de un valor de masa discreta individual, o un rango de masas, de una serie de análisis de espectro de masas. Refleja el comportamiento de una masa determinada, o rango de masas, como una función de tiempo.
BPC (Base Peak Chromatogram, cromatograma de pico base)	Gráfico cromatográfico que muestra la intensidad del ión más intenso de un análisis en función del tiempo o del número de análisis.
TWC (Total Wavelength Chromatogram, cromatograma de longitud de onda total)	Vista cromatográfica resultado de sumar todos los valores de absorbencia en el rango de longitud de onda adquirido y, a continuación, representar dichos valores en función del tiempo. Es la suma de la absorbencia de todos los iones de un análisis representada en función del tiempo en un panel cromatográfico.
XWC (Extracted Wavelength Chromatogram, cromatograma de longitud de onda extraída)	Subconjunto de un TWC. Un XWC muestra la absorbencia de una longitud de onda individual o la suma de la absorbencia de un rango de longitudes de onda.
DAD (Diode Array Detector, detector de diodos en serie)	Detector de UV que supervisa el espectro de absorción de compuestos de elución en una o más longitudes de onda.

Visualización de TIC desde un espectro

- Haga clic en **Explore > Show > Show TIC**.

Se abrirá el TIC en un panel nuevo.

¡**Sugerencia!** Haga clic con el botón secundario en el interior de un panel que contenga un espectro y, a continuación, haga clic en **Show TIC**.

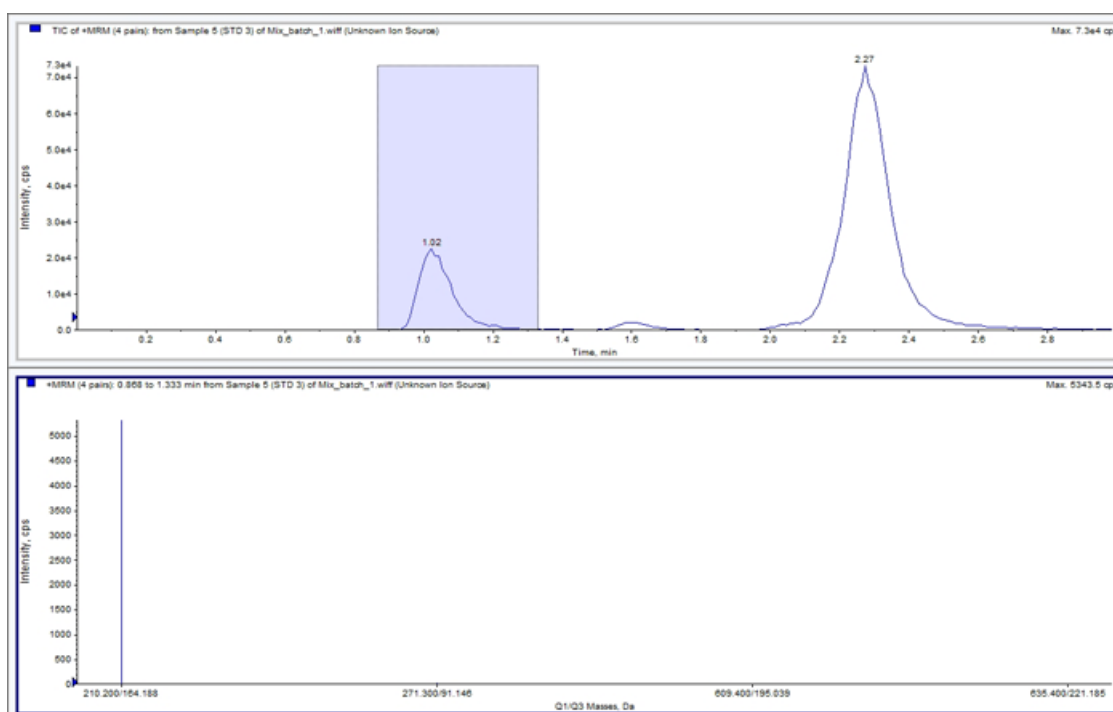
Visualización de un espectro desde un TIC

1. En un panel que contenga un TIC, seleccione un intervalo.
2. Haga clic en **Explore > Show > Show Spectrum**.

El espectro se abre en un panel nuevo.

¡**Sugerencia!** Haga doble clic en el panel de TIC, en un punto temporal concreto, para mostrar el espectro.

Figura 9-4 Ejemplo de un TIC



Acerca de la generación de los XIC

Los XIC se pueden generar únicamente a partir de un período individual, cromatogramas de experimentos individuales o espectros. Para obtener un XIC a partir de datos de varios períodos o varios experimentos, primero debe dividir los datos en distintos paneles, haciendo clic en el triángulo que se muestra bajo el eje X. Consulte la [Tabla 9-8 en la página 89](#) para obtener más información acerca del uso de los iconos disponibles.

Hay varios métodos para extraer iones con el fin de generar un XIC, en función de que se utilicen datos cromatográficos o de espectro. La [Tabla 9-5](#) contiene un resumen de los métodos que se pueden utilizar con cromatogramas y espectros.

Tabla 9-5 Resumen de los métodos de generación de XIC

Método	Usar con cromatograma	Usar con espectro	Extracción
Rango seleccionado	No	Sí	Extrae iones de un área seleccionada en un espectro.
Pico máximo	No	Sí	Extrae iones de un área seleccionada en un espectro utilizando el pico más intenso del área seleccionada. Esta opción crea un XIC que utiliza la masa máxima del rango de espectro seleccionado.
Masas de pico base	Sí	Sí	Solo se puede utilizar con BPC (cromatogramas de pico base). Utilizar el comando Use Base Peak Masses para extraer iones genera un XIC con un trazo de color diferente para cada masa. Si la selección incluye varios picos, el XIC resultante tendrá un número igual de trazos de color, uno para cada masa.
Masas especificadas	Sí	Sí	Extrae iones de cualquier tipo de espectro o cromatograma. Seleccione hasta diez masas de inicio y detención para las que generar XIC.

Generación de un XIC mediante el método de rango seleccionado

1. Abra un archivo de datos que contenga espectros.
2. Seleccione un rango pulsando el botón principal del ratón en el comienzo del rango y, a continuación, arrastre el cursor hasta el punto de detención y suelte el botón.

La selección está indicada en azul.

3. Haga clic en **Explore > Extract Ions > Use Range**.

El XIC de la selección se abre en un panel debajo del panel de espectro. La información de experimento de la parte superior del panel contiene el rango de masas y la intensidad máxima en recuentos por segundo.

Generación de un XIC mediante el método de pico máximo

1. Abra un archivo de datos que contenga espectros.
2. Seleccione un rango en un espectro.

La selección está indicada en azul.

3. Haga clic en **Explore > Extract Ions > Use Maximum**.

El XIC de la selección de pico máximo especificada se abre debajo del panel de espectro. La información de experimento de la parte superior del panel contiene el rango de masas y la intensidad máxima en recuentos por segundo.

Generación de un XIC mediante el método de masas de pico base

1. Abra un archivo de datos que contenga espectros.
2. En un BPC, seleccione el pico del que desea extraer iones.

La selección está indicada en azul.

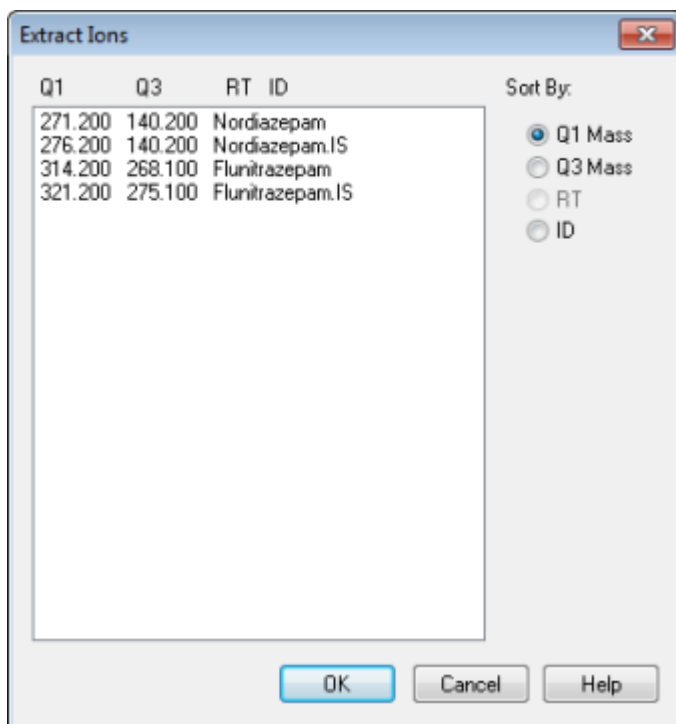
3. Haga clic en **Explore > Extract Ions > Use Base Peak Masses**.

El XIC de la selección especificada se abre debajo del panel de espectro. La información de experimento de la parte superior del panel contiene el rango de masas y la intensidad máxima en recuentos por segundo.

Extracción de iones mediante el método de selección de masas

1. Abra un espectro o cromatograma.
2. Haga clic en **Explore > Extract Ions > Use Dialog**.

Figura 9-5 Cuadro de diálogo de extracción de iones



3. Escriba los valores de cada XIC que desee crear. Si no se escribe un valor de parada, el rango se define mediante el valor inicial.

- En el campo **Start**, escriba el valor de inicio (valor más bajo) del rango de masas.
- En el campo **Stop**, escriba el valor de detención (valor más alto) del rango de masas.

4. Haga clic en **OK**.

El XIC de la selección se abre debajo del panel de cromatograma. La información de experimento de la parte superior del panel incluye las masas y la intensidad máxima en recuentos por segundo.

Generación de BPC

Los BPC se pueden generar únicamente a partir de datos de periodos y experimentos individuales.

1. Abra un archivo de datos.
2. Seleccione un área dentro de un TIC.

La selección está indicada en azul.

3. Haga clic en **Explore > Show > Show Base Peak Chromatogram**.

Se mostrarán las selecciones en los campos **Start Time** y **End Time**.

Figura 9-6 Opciones de cromatograma de pico base

4. En el campo **Mass Tolerance**, introduzca el valor para indicar el rango de masa utilizado para buscar un pico. El software busca el pico utilizando un valor que es igual al doble del rango escrito (\pm el valor de masa).
5. Escriba la intensidad por debajo de la cual el algoritmo no tendrá en cuenta los picos en el campo **Minimum Intensity**.
6. Escriba la masa que determina el inicio del rango de análisis en el campo **Minimum Mass**.
7. Escriba la masa que determina el fin del rango de análisis en el campo **Maximum Mass**.
8. Para establecer los tiempos de inicio y fin, active la casilla de verificación **Use Limited Range** y realice lo siguiente:
 - En el campo **Start Time**, escriba el tiempo que determina el inicio del experimento.
 - En el campo **End Time**, escriba el tiempo que determina el fin del experimento.
9. Haga clic en **OK**.

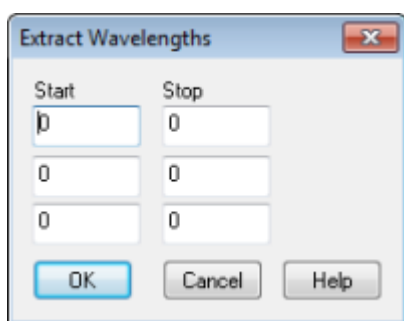
El BPC generado se abre en un panel nuevo.

Generación de XWC

Un XWC es un cromatograma de longitud de onda que se crea tomando los valores de intensidad de una única longitud de onda o la suma de la absorbencia de un rango de varias longitudes onda. Pueden extraerse hasta tres intervalos de un espectro de DAD para generar el XWC. Consulte la [Tabla 9-8 en la página 89](#) para obtener más información acerca del uso de los iconos disponibles.

1. Abra un archivo de datos que contenga un espectro de DAD.
2. Haga clic con el botón secundario en cualquier lugar del panel y, a continuación, seleccione **Extract Wavelengths**.

Figura 9-7 Cuadro de diálogo Extract Wavelengths



3. Escriba los valores de **Start** y **Stop**.
4. Haga clic en **OK**.

El XWC se muestra en el panel debajo del espectro de DAD.

Datos de DAD

Los datos de DAD pueden verse en formato de cromatograma o de espectro, al igual que los datos del espectrómetro de masas. Los usuarios pueden ver el espectro de DAD de un único punto temporal o de un rango de tiempo como un cromatograma de longitud de onda total (TWC).

1. Abra un archivo de datos que contenga datos adquiridos con un DAD.

El TWC, que es equivalente a un TIC, se abre en un panel debajo del TIC.

2. En el panel TWC, haga clic en un punto para seleccionar un único punto temporal, o resalte un área del espectro para seleccionar un intervalo de tiempo.
3. Haga clic en **Explore > Show > Show DAD Spectrum**.

El espectro de DAD se abre en un panel debajo del TWC. El eje Y indica la absorbencia y el eje X representa la longitud de onda.

¡Sugerencia! Si el panel TWC está cerrado, haga clic en cualquier lugar del TWC para abrirlo de nuevo. Haga clic en **Explore > Show > Show DAD TWC**.

Generación de TWC

Los TWC son cromatogramas que se utilizan con poca frecuencia. Estos cromatogramas reflejan la absorbencia total (mAU) como una función de tiempo. El TWC proporciona un método para visualizar un conjunto de datos completo en un único panel. Es la suma de la absorbencia de todos los iones de un análisis representada en función del tiempo en un panel cromatográfico. Si los datos contienen resultados de varios experimentos, puede crear TWC individuales para cada experimento y otro TWC que represente la suma de todos los experimentos.

Un TWC muestra la absorbencia total (mAU) en el eje Y representada en relación con el tiempo, en el eje X. Consulte la [Tabla 9-8 en la página 89](#) para obtener más información acerca del uso de los iconos disponibles.

1. Abra un archivo de datos que contenga un espectro de DAD.
2. Haga clic en **Explore > Show > Show DAD TWC**.

El TWC se muestra en el panel debajo del espectro de DAD.

¡Sugerencia! Haga clic con el botón derecho en el interior del panel que contiene el espectro de DAD y, a continuación, haga clic en **Show DAD TWC**.

Ajuste del umbral

El umbral es una línea invisible dibujada paralela al eje X de un gráfico que establece un límite por debajo del cual el software no incluirá picos en un espectro. La línea tiene un controlador, representado mediante un triángulo azul a la izquierda del eje Y. Haga clic en el triángulo azul para ver una línea discontinua, que representa el umbral. El umbral se puede aumentar o disminuir, pero cambiar el valor del umbral no cambia los datos. El software no etiqueta ningún pico de la región que se encuentra debajo del umbral.

1. Abra un archivo de datos.
2. Lleve a cabo uno de los siguientes procedimientos:
 - Para subir el umbral, arrastre el triángulo azul hacia arriba en el eje Y. Para bajar el umbral, arrastre el triángulo azul hacia abajo.
 - Haga clic en **Explore > Set Threshold**. En el cuadro de diálogo Threshold Options que se abre, escriba el valor de umbral y, a continuación, haga clic en **OK**.
 - Haga clic en **Explore > Threshold**.

El gráfico se actualiza para mostrar el nuevo umbral. También se actualizarán el etiquetado de picos y la lista de picos.

¡Sugerencia! Para ver el valor de umbral actual, mueva el puntero sobre el controlador del umbral.

Paneles de cromatograma

Tabla 9-6 Menú contextual de los paneles de cromatograma

Elemento de menú	Función
List Data	Muestra los puntos de datos e integra los picos encontrados en los cromatogramas.
Show Spectrum	Genera un panel nuevo que contiene el espectro.
Show Contour Plot	Muestra un gráfico codificado por colores de un conjunto de datos, en el que el color representa la intensidad de los datos en ese punto. Solo es compatible con ciertos modos de MS.
Extract Ions	Extrae un ión específico o conjunto de iones de un panel seleccionado y, a continuación, genera un panel nuevo que contiene un cromatograma de los iones específicos.
Show Base Peak Chromatogram	Genera un panel nuevo que contiene un cromatograma de picos base.
Show ADC Data	Genera un panel nuevo que contiene el trazo de datos de ADC, si se han adquirido.
Show UV Detector Data	Genera un panel nuevo que contiene el trazo de datos de UV, si se han adquirido.
Spectral Arithmetic Wizard	Abre el asistente Spectral Arithmetic Wizard.
Save to Text File	Genera un archivo de texto que contiene los datos en un panel, que se puede abrir en Microsoft Excel u otros programas.
Save Explore History	Guarda la información de los cambios realizados en los parámetros de procesamiento, también denominados opciones de procesamiento, que se realizaron al procesar un archivo .wiff en el modo Explore. El historial de procesamiento se almacena en un archivo con la extensión .eph (Explore Processing History).
Add Caption	Agrega una etiqueta de texto específica en la posición del cursor en el panel.
Add User Text	Agrega un recuadro de texto en la posición del cursor en el panel.
Set Subtract Range	Define el rango de sustracción del panel.
Clear Subtract Range	Borra el rango de sustracción del panel.

Tabla 9-6 Menú contextual de los paneles de cromatograma (continuación)

Elemento de menú	Función
Subtract Range Locked	Bloquea o desbloquea los rangos de sustracción. Si los rangos de sustracción no están bloqueados, se podrá mover cada rango de sustracción de manera independiente. De forma predeterminada, los rangos de sustracción están bloqueados.
Delete Pane	Elimina el panel seleccionado.

Paneles de espectro

Tabla 9-7 Menú contextual de los paneles de espectro

Elemento de menú	Función
List Data	Muestra los puntos de datos e integra los cromatogramas.
Show TIC	Genera un panel nuevo que contiene el TIC.
Extract Ions (Use Range)	Extrae un ión específico o conjunto de iones de un panel seleccionado y, a continuación, genera un panel nuevo que contiene un cromatograma de los iones específicos.
Extract Ions (Use Maximum)	Extrae iones utilizando el pico más intenso del área seleccionada.
Save to Text File	Genera un archivo de texto del panel, que se puede abrir en Microsoft Excel u otros programas.
Save Explore History	Guarda la información de los cambios realizados en los parámetros de procesamiento, también denominado Processing Options, que se realizaron al procesar un archivo .wiff en el modo Explore. El historial de procesamiento se almacena en un archivo con la extensión .eph (Explore Processing History).
Add Caption	Agrega una etiqueta de texto específica en la posición del cursor en el panel.
Add User Text	Agrega un recuadro de texto en la posición del cursor en el panel.
Show Last Scan	Muestra el análisis anterior a la selección.
Select Peaks For Label	En este cuadro de diálogo, seleccione los parámetros para reducir el etiquetado de picos.
Re-Calibrate TOF	Abre el cuadro de diálogo TOF Calibration.
Abscissa (Time)	Cambia la vista para mostrar los valores TOF en el eje x.
Delete Pane	Elimina el panel seleccionado.

Tabla 9-7 Menú contextual de los paneles de espectro (continuación)

Elemento de menú	Función
Add a Record	Agrega registros y datos relacionados con compuestos que incluyen espectros a la biblioteca. Para poder realizar esta tarea, es preciso tener un espectro activo.
Search Library	Busca en la biblioteca sin restricciones o con restricciones previamente guardadas.
Set Search Constraints	Busca en la biblioteca utilizando los criterios escritos en el cuadro de diálogo Search Constraints .

Procesamiento de datos gráficos

Los datos gráficos pueden procesarse de muchas maneras. En esta sección se proporciona información y se describen los procedimientos de uso de algunas de las herramientas más utilizadas.

Gráficos

Los mismos datos se pueden examinar de diferentes maneras. Los datos se pueden conservar para poder establecer comparaciones antes de realizar operaciones de procesamiento como la suavización o la sustracción.

Cada ventana contiene uno o varios paneles, organizados de forma que todos los paneles son completamente visibles y no se superponen.

Los paneles pueden tener un tamaño variable o fijo. Los paneles se apilan automáticamente dentro de la ventana y se organizan en formato de columnas y filas. Si se cambia el tamaño de una ventana, el tamaño de los paneles que contiene también cambiarán para ajustarse al nuevo tamaño. No puede reducir el tamaño de una ventana hasta el punto en que alguno de los paneles tenga un tamaño inferior al tamaño mínimo.

Se pueden vincular dos o más ventanas o paneles que contengan datos similares, por ejemplo, espectros con rangos de masas similares. Cuando aplique un zoom a un panel o ventana, se aplicará el mismo efecto al otro panel de manera simultánea. Por ejemplo, el usuario puede vincular un XIC al BPC del que se ha extraído. Al aplicar un zoom al BPC también se aplicará al XIC, de manera que ambos cromatogramas se ampliarán en la misma medida.

Administrar datos

Los datos se pueden comparar o examinar de diferentes formas. Puede que los usuarios deseen conservar los datos para poder establecer comparaciones antes de realizar operaciones de procesamiento como la suavización o la sustracción.

Cada ventana contiene uno o varios paneles, organizados de forma que todos los paneles sean completamente visibles y no se superpongan.

Los paneles pueden tener un tamaño variable o fijo. Los paneles se apilan automáticamente dentro de la ventana y se organizan en formato de columnas y filas. Si se cambia el tamaño de una ventana, el tamaño de los paneles que contenga también cambiará para ajustarse al nuevo tamaño. No puede modificar el tamaño de una ventana hasta el punto en que alguno de los paneles tenga un tamaño inferior al tamaño mínimo.

Se pueden vincular dos o más ventanas o paneles que contengan datos similares, por ejemplo, espectros con rangos de masas similares. Cuando el usuario aplique un zoom a un panel o ventana, se aplicará el mismo efecto al otro panel de manera simultánea. Por ejemplo, el usuario puede vincular un XIC al BPC del que se ha extraído. Al aplicar un zoom al BPC también se aplicará al XIC, de manera que ambos cromatogramas se muestran con la misma ampliación.

- Utilice las siguientes opciones de menú o iconos para gestionar los datos de los gráficos.

Tabla 9-8 Opciones de gráfico











Para realizar esta acción...	utilice esta opción de menú	o haga clic en este icono
Copiar un gráfico en una ventana nueva	Seleccione el gráfico que va a copiar. Haga clic en Explore > Duplicate Data > In New Window.	
Cambiar la escala de un gráfico a su tamaño original	Seleccione el gráfico. Haga clic en Explore > Home Graph.	
Mover un panel	<ul style="list-style-type: none"> • Seleccione el gráfico. Haga clic en Window > Move Pane. • Seleccione el panel o ventana y, a continuación, arrástrelo a la nueva posición. Esta posición puede situarse en el interior de la misma ventana o de otra ventana diferente. <p>Cuando el cursor se sitúa sobre el límite de la ventana o panel activos, se muestra una flecha de cuatro puntas.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Si el panel se encuentra sobre o bajo el panel de destino, el panel se mueve para colocarse sobre o bajo ese panel, respectivamente. • Si el panel se encuentra a la izquierda o derecha del panel de destino, el panel se mueve para colocarse a la izquierda o la derecha de ese panel, respectivamente. • Si el panel se encuentra en cualquier otra posición, el panel se mueve a la fila de destino. La sombra paralela del panel conforme se mueve indica la nueva posición. 	
Vincular paneles	<p>a. Con los dos gráficos abiertos, haga clic en uno para convertirlo en el panel activo.</p> <p>b. Haga clic en Explore > Link y, a continuación, haga clic en el otro panel.</p>	

Tabla 9-8 Opciones de gráfico (continuación)

Para realizar esta acción...	utilice esta opción de menú	o haga clic en este icono
Eliminar vinculación	Cierre uno de los paneles. Haga clic en Explore > Remove Link .	
Eliminar un panel	Seleccione el gráfico. Haga clic en Window > Delete Pane .	
Bloquear un panel	Seleccione el gráfico. Haga clic en Window > Lock Panes .	
Ocultar un panel	Seleccione el gráfico. Haga clic en Window > Hide Pane .	
Maximizar un panel	Seleccione el gráfico. Haga clic en Window > Maximize Pane .	
Disponer los paneles en mosaico	Seleccione el gráfico. Haga clic en Window > Tile all Panes .	

Ampliar el eje Y

1. Mueva el puntero que se encuentra bajo el eje X hacia uno u otro lado del área que desee ampliar y, a continuación, arrastre alejándose del punto de inicio en dirección vertical manteniendo pulsado el botón izquierdo del ratón.

Se dibuja un recuadro a lo largo del eje Y que representa la nueva escala.

Nota: Tenga cuidado al aplicar zoom en el punto de referencia. Si amplía demasiado se cerrará el cuadro de aplicación de zoom.

2. Suelte el botón del ratón para dibujar el gráfico con la nueva escala.

Ampliar el eje X

¡Sugerencia! Para devolver el gráfico a la escala original, haga doble clic en cualquiera de los ejes. Para devolver el gráfico completo a la escala original, haga clic en **Explore > Home Graph**.

1. Mueva el puntero que se encuentra bajo el eje X hacia uno u otro lado del área que desee ampliar y, a continuación, arrastre alejándose del punto de inicio en dirección horizontal manteniendo pulsado el botón izquierdo del ratón.
2. Suelte el botón del ratón para dibujar el gráfico con la nueva escala.

Información de servicio técnico y mantenimiento

10

Limpie y realice el mantenimiento del sistema periódicamente para que el rendimiento del sistema sea óptimo.



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. No retire las cubiertas. Si lo hace, puede provocar lesiones o un funcionamiento incorrecto del sistema. Las cubiertas no tienen que retirarse para las tareas de mantenimiento rutinario, inspección o ajuste. Póngase en contacto con un representante del servicio técnico de SCIEX cuando haya que hacer reparaciones en las que sea necesario quitar las cubiertas.



¡ADVERTENCIA! Riesgo de radiación ionizante, material biológico o sustancias químicas tóxicas. Determine si se precisa descontaminación antes de proceder a la limpieza o el mantenimiento. El cliente debe descontaminar el sistema antes de limpiarlo o realizar tareas de mantenimiento si se han utilizado materiales radiactivos, agentes biológicos o sustancias químicas tóxicas con el sistema.

Calendario de mantenimiento recomendado

En la [Tabla 10-1](#) se proporciona el programa recomendado de limpieza y mantenimiento del sistema.

¡Sugerencia! Realice las tareas de mantenimiento regularmente para garantizar que el espectrómetro de masas tenga un rendimiento óptimo.

Para obtener información acerca del mantenimiento de la fuente de iones, consulte la *Guía del operador*.

Póngase en contacto con una persona de mantenimiento cualificada para solicitar piezas consumibles. Póngase en contacto con un representante del servicio técnico de SCIEX para obtener servicio de mantenimiento y soporte.

Tabla 10-1 Tareas de mantenimiento

Componente	Frecuencia	Tarea	Para obtener más información...
Sistema			
Tubo	Diariamente	Inspeccione los tubos y los adaptadores para comprobar que están bien conectados y que no hay fugas.	Consulte Precauciones químicas en la página 9 .
Espectrómetro de masas			
Placa de chapa	Diariamente	Limpiar	Consulte Limpieza de la placa de chapa en la página 98 .
Placa del orificio (parte delantera)	Diariamente	Limpiar	Consulte Limpieza de la parte delantera de la placa del orificio en la página 99 .
Aceite de la bomba de vacío preliminar	Semanalmente	Inspeccionar el nivel	Consulte Inspección del nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar en la página 102 .
Aceite de la bomba de vacío preliminar	Cada 6-12 meses	Reemplazar	Póngase en contacto una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico.
Superficies del instrumento	Según las necesidades	Limpiar	Consulte Limpieza de las superficies en la página 94 .
Botella de drenaje de escape de la fuente	Según las necesidades	Vaciar	Consulte Vaciado de la botella de drenaje de escape de la fuente en la página 100 .
Placa del orificio (partes delantera y trasera)	Según las necesidades	Limpiar	Póngase en contacto una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico.
Guía de iones QJet® y lente IQ0	Según las necesidades	Limpiar	Póngase en contacto una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico.
Conjunto de barras Q0 y lente IQ1	Según las necesidades	Limpiar	Póngase en contacto una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico.
Aceite de la bomba de vacío preliminar	Según las necesidades	Rellenar	Póngase en contacto una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico.

Tabla 10-1 Tareas de mantenimiento (continuación)

Componente	Frecuencia	Tarea	Para obtener más información...
Filtro del ventilador de refrigeración del espectrómetro de masas	Según las necesidades	Reemplazar	Sustitución del filtro del ventilador de refrigeración del espectrómetro de masas en la página 103.
Calentador de la interfaz	Según las necesidades	Reemplazar	Póngase en contacto una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico.
Fuente de iones			
TurbolonSpray® y electrodos de APCI	Según las necesidades	Inspeccionar y reemplazar	Consulte la <i>Guía del operador</i> de la fuente de iones.
Aguja de descarga de la corona	Según las necesidades	Reemplazar	Consulte la <i>Guía del operador</i> de la fuente de iones.
Calentador turbo	Según las necesidades	Reemplazar	Póngase en contacto una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico.
Tubo de muestra	Según las necesidades	Reemplazar	Consulte la <i>Guía del operador</i> de la fuente de iones.

Para las tareas «según las necesidades», siga estas directrices:

- Limpie las superficies del espectrómetro de masas después de un derrame o cuando estén sucias.
- Vacíe la botella de drenaje antes de que se llene.
- Limpie la placa del orificio, la guía de iones QJet® y la zona Q0 si disminuye la sensibilidad del sistema.

¡Sugerencia! Limpie la zona Q0 de forma regular para reducir al mínimo el impacto de la carga (pérdida significativa de sensibilidad de los iones de interés en un corto período de tiempo) sobre los cuadrupolos y las lentes. Póngase en contacto con una persona de mantenimiento cualificada o un representante del servicio técnico.

- Limpie la guía de iones QJet® y la zona Q0 si disminuye la sensibilidad del sistema.

¡Sugerencia! Limpie la zona Q0 de forma regular para reducir al mínimo el impacto de la carga (pérdida significativa de sensibilidad de los iones de interés en un corto periodo de tiempo) sobre los cuadrupolos y las lentes. Póngase en contacto con una persona de mantenimiento cualificada o un representante del servicio técnico.

- Rellene el aceite de la bomba de vacío preliminar cuando baje del nivel mínimo de aceite.

Limpieza de las superficies

Limpie las superficies externas del espectrómetro de masas después de un derrame o cuando estén sucias.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. Utilice solo el método de limpieza y los materiales recomendados para evitar dañar los equipos.

1. Limpie las superficies externas con un paño suave humedecido con agua tibia con jabón.
2. Limpie las superficies externas con un paño suave humedecido con agua para eliminar cualquier residuo de jabón.

Limpieza de la parte delantera

La siguiente advertencia se aplica a todos los procedimientos de esta sección:



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. Espere un mínimo de 30 minutos para que la fuente de iones se enfríe antes de iniciar cualquier procedimiento de mantenimiento. Las superficies de la fuente de iones y los componentes de la interfaz de vacío se calientan durante su funcionamiento.

Limpie la parte delantera del espectrómetro de masas utilizando el método de limpieza habitual para lo siguiente:

- Minimizar el tiempo de inactividad no programado del sistema.
- Mantener una sensibilidad óptima.
- Evitar una limpieza más exhaustiva que requiera una visita de servicio.

Cuando detecte signos de contaminación, realice una limpieza normal inicial. Limpie hasta la parte delantera de la placa del orificio, incluida la propia placa. Si la limpieza normal no resuelve los problemas de sensibilidad, puede ser necesario realizar una limpieza completa. Póngase en contacto una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico.

En esta sección se proporcionan instrucciones para realizar la limpieza normal sin que afecte al vacío.

Nota: Siga todas las normativas locales aplicables. Para obtener directrices de seguridad e higiene, consulte [Precauciones químicas en la página 9](#).

Síntomas de la contaminación

Si observa algo de lo siguiente es posible que el sistema esté contaminado:

- Pérdida importante de sensibilidad
- Mayor ruido de fondo

- Aparecen picos adicionales que no forman parte de la muestra en los métodos de análisis completo o de estudio

Si observa alguno de los problemas anteriores, limpie el extremo delantero del espectrómetro de masas.

Materiales necesarios

Nota: Los clientes de EE. UU. pueden llamar al 877-740-2129 para obtener información sobre pedidos y realizar consultas. Los clientes internacionales pueden visitar sciex.com/contact-us.

- Guantes no empolvados (se recomienda que sean de nitrilo o neopreno)
- Gafas de seguridad
- Bata de laboratorio
- Agua (pura) fresca de alta calidad (agua desionizada de al menos 18 MΩ o agua ultrapura de grado HPLC). El agua no reciente puede contener contaminantes que agravarían el estado de contaminación del espectrómetro de masas.
- Acetonitrilo, isopropanol (2-propanol) o metanol de grado MS
- Solución de limpieza. Utilice una de las siguientes:
 - Metanol al 100 %
 - Isopropanol al 100 %
 - Solución de acetonitrilo y agua 1:1 (recién preparada)
 - Solución de acetonitrilo y agua 1:1 con solución de ácido acético al 0,1 % (recién preparada)
- Limpieza de un vaso de boca ancha de vidrio de 1 l o 500 ml para preparar soluciones de limpieza
- Vaso de boca ancha de 1 l para el disolvente utilizado
- Recipiente de residuos orgánicos
- Paños que no suelten fibras. Consulte [Herramientas y suministros disponibles del fabricante en la página 95](#).
- (Opcional) Torundas de poliéster (poli)

Herramientas y suministros disponibles del fabricante

Descripción	Referencia
Torunda de poliéster pequeña (termoadherida). También disponible en el kit de limpieza.	1017396
Paño pequeño que no suelte fibras (11 cm x 21 cm, 4,3 pulgadas x 8,3 pulgadas). También disponible en el kit de limpieza.	018027
Juego de limpieza. Incluye torundas de poliéster pequeñas, paños sin fibra, herramienta de limpieza del conjunto de barras Q0, cepillo de limpieza para la guía de iones QJet® y paquetes de Alconox.	5020763

Prácticas correctas de limpieza



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. Espere un mínimo de 30 minutos para que la fuente de iones se enfríe antes de iniciar cualquier procedimiento de mantenimiento. Las superficies de la fuente de iones y los componentes de la interfaz de vacío se calientan durante su funcionamiento.



¡ADVERTENCIA! Riesgo de toxicidad química. Consulte las *fichas técnicas de seguridad* de los productos químicos y siga todos los procedimientos de seguridad recomendados cuando manipule, almacene y elimine los productos químicos. Para obtener directrices de seguridad e higiene, consulte la *Guía del usuario del sistema*.



¡ADVERTENCIA! Riesgo de radiación ionizante, material biológico o sustancias químicas tóxicas. Determine si se precisa descontaminación antes de proceder a la limpieza o el mantenimiento. El cliente debe descontaminar el sistema antes de limpiarlo o realizar tareas de mantenimiento si se han utilizado materiales radiactivos, agentes biológicos o sustancias químicas tóxicas con el sistema.



¡ADVERTENCIA! Peligro medioambiental. No elimine los componentes del sistema como residuos urbanos sin clasificar. Siga las normas locales de eliminación de componentes.

- Deje que la fuente de iones se enfríe antes de retirarla.
- Lleve siempre guantes limpios y sin polvo (recomendamos los guantes de nitrilo o neopreno) para los procedimientos de limpieza.
- Después de limpiar los componentes del espectrómetro de masas y antes de volver a instalarlos, póngase unos guantes nuevos limpios.
- No utilice productos de limpieza aparte de los especificados en este procedimiento.
- Si es posible, prepare las soluciones de limpieza justo antes de comenzar la limpieza.
- Todas las soluciones orgánicas y soluciones con contenido orgánico deben prepararse y almacenarse exclusivamente en recipientes de vidrio completamente limpios. No utilice nunca botellas de plástico. Es posible que las sustancias contaminantes contenidas en estas botellas se filtren y contaminen en mayor medida el espectrómetro de masas.
- A fin de evitar la contaminación de la solución de limpieza, vierta la solución precisa sobre el paño o torunda.

- Deje únicamente que la parte central del paño entre en contacto con la superficie del espectrómetro de masas. Los bordes recortados pueden soltar fibras.

¡Sugerencia! Coloque el paño alrededor de una torunda de poliéster termoadherida.

Figura 10-1 Ejemplo: doblado del paño



- Para evitar la contaminación cruzada, deseche el paño o la torunda tras haber tocado la superficie una vez.
- Las partes más grandes de la interfaz de vacío, como la plato cortina, pueden necesitar varias limpiezas, para las que debe utilizar varios paños.
- Humedezca el paño o la torunda solo ligeramente al aplicar agua o solución de limpieza. El agua, más a menudo que los disolventes orgánicos, puede hacer que el paño se deteriore y deje residuos en el espectrómetro de masas.
- No frote con el paño por dentro de la abertura. Frote alrededor de la abertura para evitar que entren fibras de paños en el espectrómetro de masas.
- No introduzca el cepillo en la abertura sobre la placa de chapa o la placa del orificio.

Preparación del espectrómetro de masas

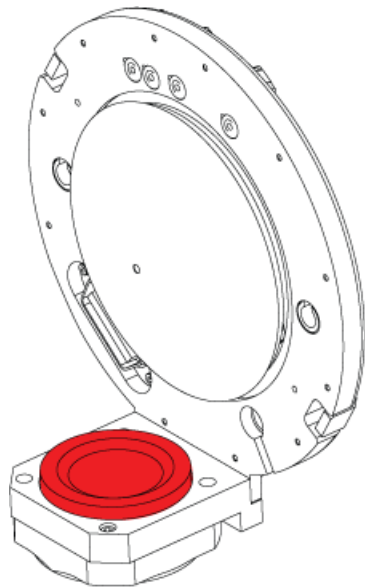
Nota: Los espectrómetros de masas con una fuente de iones NanoSpray® pueden requerir una limpieza completa para obtener los mejores resultados. Póngase en contacto con una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico.



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. Espere un mínimo de 30 minutos para que la fuente de iones se enfríe antes de iniciar cualquier procedimiento de mantenimiento. Las superficies de la fuente de iones y los componentes de la interfaz de vacío se calientan durante su funcionamiento.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No deje caer nada en el drenaje de la fuente al retirar la fuente de iones.

Figura 10-2 Drenaje de la fuente en la interfaz de vacío



1. Desactive el perfil de hardware.
2. Retire la fuente de iones. Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.

Guarde la fuente de iones mientras no la esté utilizando para protegerla de posibles daños y preservar su integridad de funcionamiento.

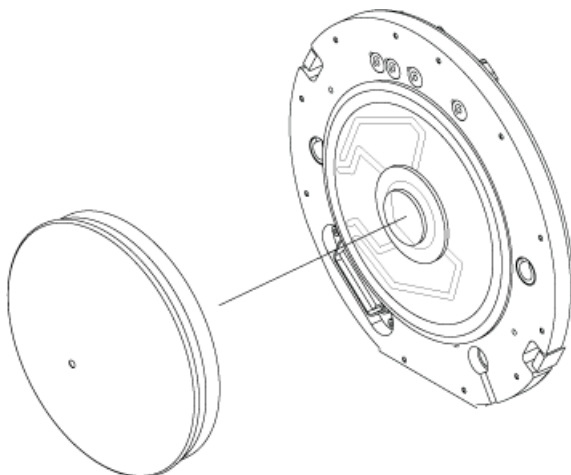
Limpieza de la placa de chapa

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No apoye la placa de chapa ni la placa de orificio en la punta de la abertura. Compruebe que el lado cónico de la placa de chapa está orientado hacia arriba.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca un cepillo de alambre o de metal en la abertura de la placa de chapa, la placa del orificio ni el calentador de la interfaz para evitar dañar la abertura.

1. Tire de la placa de chapa para sacarla de la interfaz de vacío y colóquela, con el lado cónico hacia arriba, sobre una superficie estable y limpia.

Figura 10-3 Extracción de la placa de chapa



La placa de chapa se mantiene en la posición correcta mediante tres pestillos de bola de retención montados en la placa del orificio.

¡Sugerencia! Si la placa de chapa no se separa inmediatamente de la placa del orificio, gire ligeramente la placa de chapa (menos de 90 grados) para soltar los pestillos de resorte de bola.

2. Humedezca un paño que no suelte fibras con agua pura y limpie ambos lados de la placa de chapa.

Nota: Utilice varios paños si es necesario.

3. Repita el paso 2 utilizando la solución de limpieza.
4. Limpie la abertura con la ayuda de un paño o una pequeña torunda de poliéster humedecidos.
5. Espere hasta que la placa de chapa se haya secado.
6. Examine la placa de chapa para ver si tiene manchas de disolvente o fibras y, en caso de que así sea, elimine cualquier residuo con un paño que no suelte fibras, limpio y ligeramente humedecido.

Nota: La formación repetida de manchas o de una película es un claro indicador de contaminación por disolvente.

Limpieza de la parte delantera de la placa del orificio

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. Al limpiar la superficie de la placa de orificio, no retire el calentador de la interfaz. La retirada frecuente del calentador de la interfaz puede provocar daños en el mismo. Para la limpieza habitual, basta con limpiar la superficie del calentador de la interfaz.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca un cepillo de alambre o de metal en la abertura de la placa de chapa, la placa del orificio ni el calentador de la interfaz para evitar dañar la abertura.

1. Humedezca un paño que no suelte fibras con agua y limpie la parte delantera de la placa del orificio, incluido el calentador de la interfaz.
2. Repita el paso 1 utilizando la solución de limpieza.
3. Espere hasta que la placa del orificio se haya secado.
4. Examine la placa del orificio para ver si tiene manchas de disolvente o fibras y, en caso de que así sea, elimine cualquier residuo con un paño que no suelte fibras, limpio y ligeramente humedecido.

Nota: La formación repetida de manchas o de una película es un claro indicador de contaminación por disolvente.

Puesta en servicio del espectrómetro de masas

1. Instale la placa de chapa en el espectrómetro de masas.
2. Instale la fuente de iones en el espectrómetro de masas. Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.

Apriete la fuente de iones girando los pestillos hacia abajo hasta la posición de bloqueo.

3. Active el perfil de hardware.

Vaciado de la botella de drenaje de escape de la fuente



¡ADVERTENCIA! Riesgo de radiación ionizante, material biológico o sustancias químicas tóxicas. Deposite los materiales peligrosos en contenedores debidamente etiquetados y deséchelos según lo dispuesto por las normas locales.

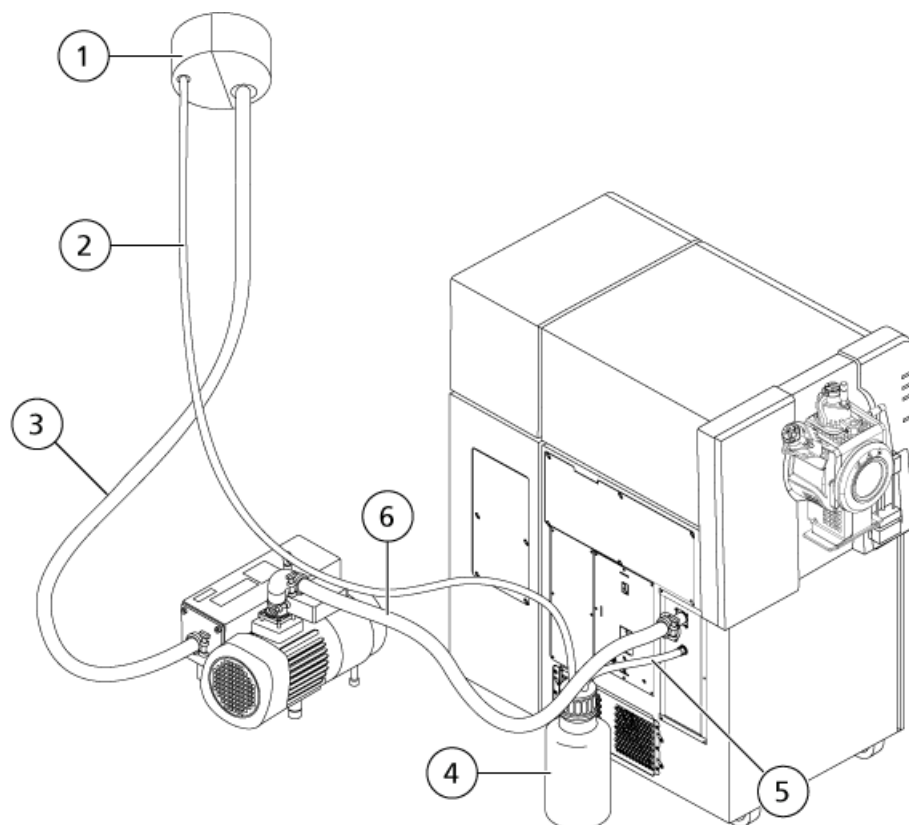


¡ADVERTENCIA! Riesgo de radiación ionizante, material biológico o sustancias químicas tóxicas. Tome las precauciones necesarias para ventilar los gases de escape a una campana extractora o un sistema de escape específicos del laboratorio, y asegúrese de que los tubos de ventilación estén asegurados con pinzas. Asegúrese de que el laboratorio tiene una tasa de intercambio de aire adecuada para el trabajo realizado.

Inspeccione la botella de drenaje de escape de la fuente regularmente y vacíela antes de que esté llena. Inspeccione también la botella y sus conexiones para detectar fugas, y apriete las conexiones o cambie los componentes según sea necesario. Siga los pasos de este procedimiento para vaciar la botella.

1. Retire la fuente de iones. Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.
2. Afloje las abrazaderas que conectan las mangueras al tapón de la botella de drenaje de escape de la fuente.

Figura 10-4 Botella de drenaje de escape de la fuente



Artículo	Descripción
1	Conexión al orificio de ventilación
2	Tubo de drenaje de escape de la fuente: diámetro interior de 2,5 cm (1,0 pulgadas)
3	Manguera de escape de la bomba de vacío preliminar: 3,2 cm (1,25 pulgadas) de diámetro interior
4	Botella de drenaje de escape de la fuente. En esta ilustración, la botella de drenaje tapada se muestra en la parte posterior del espectrómetro de masas, para hacer visibles los puntos de conexión. La botella de drenaje puede estar situada en su soporte al lado del espectrómetro de masas. Asegúrese de que la botella esté bien fijada para evitar derrames.

Artículo	Descripción
5	Conexión al espectrómetro de masas: 1,6 cm (0,625 pulgadas) DI
6	Manguera de entrada de vacío de la bomba de vacío preliminar

Nota: Las conexiones de la manguera de escape de la fuente en la botella de drenaje, el espectrómetro de masas y el orificio de ventilación del laboratorio se fijan con abrazaderas de manguera.

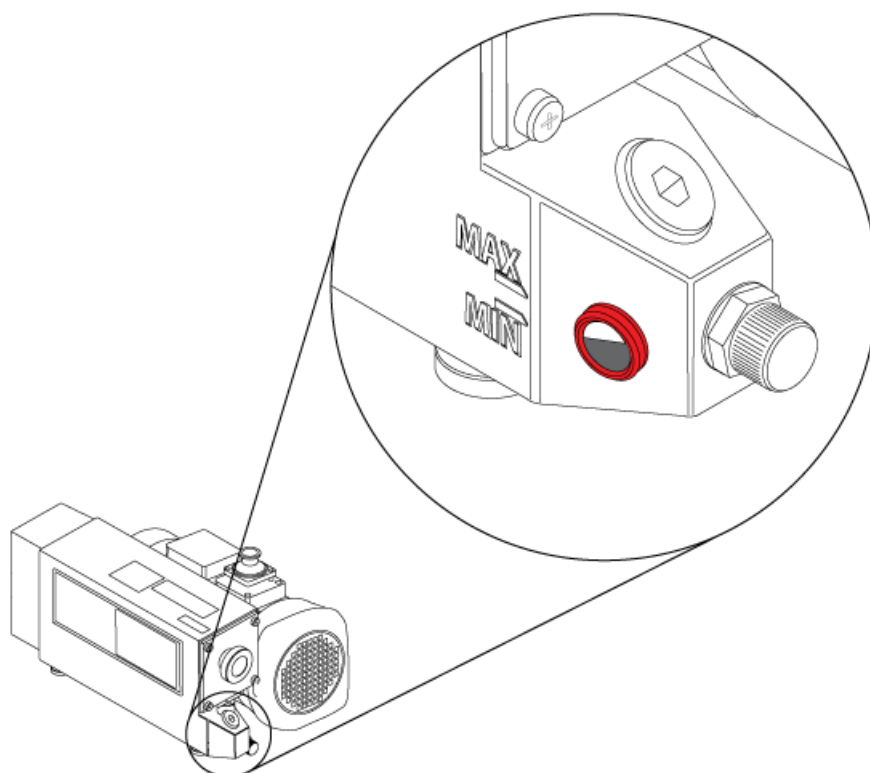
3. Desconecte las mangueras del tapón.
4. Si es preciso, saque la botella de drenaje del soporte.
5. Quite la tapa de la botella de drenaje.
6. Vacíe la botella de drenaje y después deseche los residuos siguiendo los procedimientos del laboratorio y las normativas locales sobre residuos.
7. Ponga la tapa de la botella y ponga la botella en el soporte.
8. Conecte las mangueras a la tapa y fíjelas bien con las abrazaderas.

Inspección del nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar

- Inspeccionar la mirilla de la bomba de vacío preliminar para comprobar que el aceite está por encima del nivel mínimo.

Si el aceite está por debajo del nivel mínimo, póngase en contacto con la persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico de SCIEX.

Figura 10-5 Mirilla



Sustitución del filtro del ventilador de refrigeración del espectrómetro de masas

Los ventiladores de refrigeración del espectrómetro de masas están situados en el lado izquierdo del espectrómetro de masas.

Procedimientos de condiciones previas

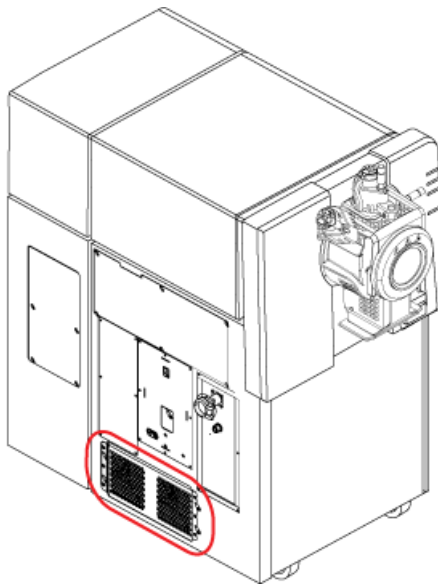
- Apague el sistema siguiendo el procedimiento de la *Guía de usuario del sistema*.



¡ADVERTENCIA! Peligro medioambiental. No elimine los componentes del sistema como residuos urbanos sin clasificar. Siga las normas locales de eliminación de componentes.

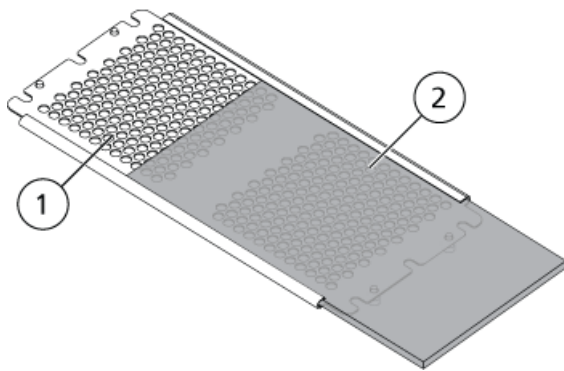
1. Retire los cuatro tornillos de mariposa en la cubierta del ventilador de refrigeración.

Figura 10-6 Filtros del ventilador de refrigeración



2. Quite el filtro y cámbielo por otro nuevo.

Figura 10-7 Filtro de los ventiladores de refrigeración



Artículo	Descripción
1	Cubierta de los ventiladores de refrigeración
2	Filtro

3. Coloque la cubierta del filtro.

Requisitos ambientales para la manipulación y el almacenamiento del espectrómetro de masas



¡ADVERTENCIA! Peligro medioambiental. No elimine los componentes del sistema como residuos urbanos sin clasificar. Siga las normas locales de eliminación de componentes.

Si el espectrómetro de masas debe almacenarse durante un largo período de tiempo o prepararse para su envío, póngase en contacto con un representante del servicio técnico de SCIEX para obtener información sobre la retirada del servicio. Para desactivar la alimentación del espectrómetro de masas, desenchufe el conector de alimentación de la alimentación de CA.

Nota: La fuente de iones y el espectrómetro de masas deben transportarse y almacenarse a una temperatura de entre -30 °C y +60 °C (-22 °F a 140 °F). Almacene el sistema a una altura que no supere los 2000 m (6562 pies) por encima del nivel del mar.

Solución de problemas del espectrómetro de masas

11

Esta sección contiene información para solucionar problemas básicos del sistema. Ciertas actividades solamente pueden ser realizadas por una persona de mantenimiento cualificada de SCIEX en el laboratorio. Para la solución de problemas avanzada, póngase en contacto con un representante del servicio técnico de SCIEX.

Tabla 11-1 Problemas del sistema

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
La guía de iones QJet [®] está extremadamente sucia o se ensucia con frecuencia.	El caudal de Curtain Gas [™] es demasiado bajo.	Compruebe la configuración del parámetro CUR y aumentela, si procede.
Se ha producido un fallo del sistema debido a que la presión de vacío es demasiado alta.	<ol style="list-style-type: none">1. El nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar es demasiado bajo.2. Hay una fuga.3. Se ha instalado la placa del orificio incorrecta.	<ol style="list-style-type: none">1. Inspeccione el nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar y póngase en contacto con una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico para añadir más aceite.2. Inspeccione y repare las fugas.3. Instale la placa del orificio correcta.
Se ha producido un fallo del sistema debido a que la temperatura del módulo excitador QPS es demasiado alta.	<ol style="list-style-type: none">1. La temperatura ambiente es demasiado alta.	Póngase en contacto una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico.
El Analyst [®] TF indica que el espectrómetro de masas se encuentra en estado Fault debido a la fuente de iones.	<ol style="list-style-type: none">1. La sonda no está instalada.2. La sonda no está conectada firmemente.	<ol style="list-style-type: none">1. Confirme el fallo en el panel de estado de la página de detalles del dispositivo.2. Instale la sonda. Consulte la <i>Guía del operador</i> de la fuente de iones.3. Retire y reemplace la sonda. Apriete con firmeza el anillo de retención. Consulte la <i>Guía del operador</i> de la fuente de iones.

Tabla 11-1 Problemas del sistema (continuación)

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
El Analyst® TF indica que se está utilizando la sonda APCI, pero está instalada la sonda TurbolonSpray®.	El fusible F3 está fundido.	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico.
La pulverización no es uniforme.	El electrodo está bloqueado.	Limpie o reemplace el electrodo. Consulte la <i>Guía del operador</i> de la fuente de iones.
La sensibilidad se ha reducido.	<ol style="list-style-type: none"> Los parámetros de la fuente de iones no están optimizados. El espectrómetro de masas no está optimizado. La placa de chapa está sucia. La placa del orificio está sucia. La guía de iones QJet® o la lente IQ0 están sucias. La zona Q0 está sucia. La jeringa o el conducto de la muestra tienen una fuga. La muestra se ha degradado o tiene una concentración baja. La sonda no está instalada correctamente. 	<ol style="list-style-type: none"> Optimice los parámetros de la fuente de iones. Consulte el sistema de ayuda del software Analyst® TF. Consulte Limpieza de la placa de chapa en la página 98. Consulte Limpieza de la parte delantera de la placa del orificio en la página 99 o póngase en contacto con una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico. Limpie la zona Q0. Póngase en contacto con una persona de mantenimiento cualificada o un representante del servicio técnico. Inspeccione la jeringa o el conducto de la muestra para detectar fugas y repárelas. Asegúrese de que todos los adaptadores son del tipo y tamaño correctos. Compruebe la concentración de la muestra. Utilice una muestra nueva. Retire e instale la sonda.

Tabla 11-1 Problemas del sistema (continuación)

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
La sensibilidad se ha reducido. (continuación)	<ol style="list-style-type: none"> 1. La fuente de iones no está instalada correctamente o está defectuosa. 2. Faltan una o más de las juntas tóricas de la interfaz de vacío. 3. Existe un problema con las conexiones o el sistema de LC. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Retire e instale la fuente de iones y asegúrese que de los pestillos estén bien cerrados. Si esto no resuelve el problema, instale y optimice una fuente de iones alternativa. 2. Si las juntas tóricas se encuentran en la fuente de iones, instálelas en la interfaz de vacío. Si faltan, póngase en contacto con un representante del servicio técnico. 3. Resuelva el problema del sistema LC.
El rendimiento del espectrómetro de masas ha disminuido.	<ol style="list-style-type: none"> 1. La sonda no está optimizada. 2. La muestra no se había preparado correctamente o se ha degradado. 3. Hay una fuga en los conectores de entrada de muestras. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Optimice la sonda. Consulte la <i>Guía del operador</i> de la fuente de iones. 2. Confirme que la muestra estaba preparada correctamente. 3. Compruebe que los adaptadores son del tipo y tamaño correcto, y asegúrese de que están apretados. No apriete los adaptadores demasiado. Sustituya los adaptadores si las fugas continúan. 4. Instale y optimice una fuente de iones alternativa. 5. Póngase en contacto con un representante del servicio técnico si el problema persiste.
Se producen arcos o chispas.	La posición de la aguja de descarga de la corona no es correcta.	Gire la aguja de descarga de la corona hacia la placa de chapa y retírela de la corriente de gas del calentador. Consulte la <i>Guía del operador</i> de la fuente de iones.

Para obtener información sobre ventas, asistencia técnica o servicio, póngase en contacto con un representante del servicio técnico o visite el sitio web de SCIEX en sciex.com para obtener los datos de contacto.

Iones de calibración recomendados

A

En las tablas siguientes se enumeran los estándares que recomienda SCIEX para calibrar el sistema TripleTOF® 5600⁺. Para obtener información acerca de las soluciones de ajuste, consulte [Ajuste y calibración en la página 45](#).

Tabla A-1 Iones de calibración positivos PPG de Q1

Masas					
59,04914	233,17472	442,33740	674,50484	906,67228	1196,88158

Tabla A-2 Iones de calibración negativos PPG de Q1

Masas				
44,99819	411,25991	585,38549	933,63665	1165,80409

Tabla A-3 Solución de calibración positiva de APCI y solución de calibración positiva de ESI: TOF MS

TOF MS	Masas
ácido aminoheptanoico	146,11756
ácido amino-dPEG 4	266,15981
clomipramina	315,16225
ácido amino-dPEG 6	354,21224
ácido amino-dPEG 8	442,26467
reserpina	609,28066
ácido amino-dPEG 12	618,36953
Hexakis (2,2,3,3-tetrafluoropropoxi) fosfaceno	922,0098
Hexakis (1H,1H,5H-octafluoropentoxi) fosfaceno	1521,97148

Iones de calibración recomendados

Tabla A-4 Solución de calibración positiva de APCI y solución de calibración positiva de ESI: MSMS (clomipramina)

MSMS (clomipramina)	Masas
C_3H_8N	58,0651
$C_5H_{12}N$	86,0964
$C_{16}H_{14}N$	220,1121
$C_{14}H_{10}NCl$	227,0496
$C_{17}H_{17}N$	235,1356
$C_{15}H_{13}NCl$	242,0731
$C_{17}H_{17}ClN$	270,1044
$C_{19}H_{23}ClN_2$	315,16225

Tabla A-5 Solución de calibración negativa de APCI y solución de calibración negativa de ESI: TOF MS

TOF MS	Masas
7-ácido aminoheptanoico	144,103
ácido amino-dPEG 4	264,14526
fragmento de sulfinpirazona	277,09825
ácido amino-dPEG 6	352,19769
sulfinpirazona	403,11219
ácido amino-dPEG 8	440,25012
ácido amino-dPEG 12	616,35498
ácido amino-dPEG 16	792,45984

Tabla A-6 Solución de calibración negativa de APCI y solución de calibración negativa de ESI: MSMS (sulfinpirazona)

MSMS (sulfinpirazona)	Masas
C_6H_5O	93,0344
C_6H_5OS	125,0067
$C_{10}H_8NO$	158,06114
$C_{17}H_{13}N_2O_2$	277,0983
$C_{23}H_2ON_2OS_3$	403,11219

Tabla A-7 Solución de calibración negativa de APCI y solución de calibración negativa de ESI: MSMS (fragmento de sulfinpirazona)

MSMS (fragmento de sulfinpirazona)	Masas
C_6H_5	77,03967
C_8H_6N	116,0506
C_9H_8N	130,0662
$C_{10}H_8NO$	158,0611
$C_{11}H_8N_2O_2$	200,0591
$C_{15}H_9N_2$	217,0771
$C_{16}H_{13}N_2O$	249,1033
$C_{17}H_{13}N_2O_2$	277,09825

Masas exactas y fórmulas químicas

B

PPG

La [Tabla B-1](#) incluye las masas monoisotópicas exactas y las especies cargadas (positivas y negativas) registradas con las soluciones de calibración de PPG (glicol de polipropileno). Las masas y los iones se calcularon utilizando la fórmula $M = H[OC_3H_6]_nOH$, mientras que para los fragmentos MSMS de iones positivos se utilizó la fórmula $[OC_3H_6]_n(H^+)$. En todos los cálculos, $H = 1,007825$, $O = 15,99491$, $C = 12,00000$ y $N = 14,00307$.

Nota: Si realiza calibraciones con soluciones de PPG, utilice el pico de isótopos correcto.

Tabla B-1 Masas exactas PPG

n	Masa exacta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Fragmentos MSMS	(M + NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
1	76,05242	94,08624	59,04914	56,06003	121,05061
2	134,09428	152,12810	117,09100	85,08096	179,09247
3	192,13614	210,16996	175,13286	114,10189	237,13433
4	250,17800	268,21182	233,17472	143,12282	295,17619
5	308,21986	326,25368	291,21658	172,14375	353,21805
6	366,26172	384,29554	349,25844	201,16468	411,25991
7	424,30358	442,33740	407,30030	230,18561	469,30177
8	482,34544	500,37926	465,34216	259,20654	527,34363
9	540,38730	558,42112	523,38402	288,22747	585,38549
10	598,42916	616,46298	581,42588	317,24840	643,42735
11	656,47102	674,50484	639,46774	346,26933	701,46921
12	714,51288	732,54670	697,50960	375,29026	759,51107
13	772,55474	790,58856	755,55146	404,31119	817,55293
14	830,59660	848,63042	813,59332	433,33212	875,59479
15	888,63846	906,67228	871,63518	462,35305	933,63665
16	946,68032	964,71414	929,67704	491,37398	991,67851
17	1004,72218	1022,75600	987,71890	520,39491	1049,72037

Tabla B-1 Masas exactas PPG (continuación)

n	Masa exacta (M)	(M + NH ₄) ⁺	Fragmentos MSMS	(M + NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
18	1062,76404	1080,79786	1045,76076	549,41584	1107,76223
19	1120,80590	1138,83972	1103,80262	578,43677	1165,80409
20	1178,84776	1196,88158	1161,84448	607,45770	1223,84595
21	1236,88962	1254,92344	1219,88634	636,47863	1281,88781
22	1294,93148	1312,96530	1277,92820	665,49956	1339,92967

Reserpina

Tabla B-2 Masas exactas de reserpina

Reserpina (C₃₃H₄₀N₂O₉)

Descripción	Masa
Ión molecular C ₃₃ H ₄₁ N ₂ O ₉	609,28066
Fragmento C ₂₃ H ₃₀ NO ₈	448,19659
Fragmento C ₂₃ H ₂₉ N ₂ O ₄	397,21218
Fragmento C ₂₂ H ₂₅ N ₂ O ₃	365,18597
Fragmento C ₁₃ H ₁₈ NO ₃	236,12812
Fragmento C ₁₀ H ₁₁ O ₄	195,06519
Fragmento C ₁₁ H ₁₂ NO	174,09134

Ácido taurocólico

Tabla B-3 Masas exactas de ácido taurocólico

Ácido taurocólico (C₂₆H₄₅NO₇S)

Descripción	Masa
Ión molecular C ₂₆ H ₄₄ NO ₇ S	514,28440
Fragmento C ₂ H ₃ O ₃ S	106,98084
Fragmento C ₂ H ₆ NO ₃ S	124,00739
Fragmento SO ₃	79,95736

Solución de calibración de TOF

Tabla B-4 Masas exactas de solución de calibración de TOF

Descripción	Masa
Ión molecular Cs ⁺	132,90488
Péptido de ión molecular ALILTLVS	829,53933

Iconos de la barra de herramientas

C

Para obtener más información sobre los iconos de la barra de herramientas, consulte la *Guía para usuarios avanzados*.

Tabla C-1 Iconos de la barra de herramientas



Icono	Nombre	Descripción
	New Subproject	Crea un subproyecto. Solo se pueden crear subproyectos más adelante si el proyecto se ha creado originalmente con subproyectos.
	Copy Subproject	Copia la carpeta de un subproyecto. Solo se puede copiar un subproyecto de otro proyecto que tenga subproyectos existentes. Si existen las mismas carpetas en los niveles del proyecto y del subproyecto, el software utiliza las carpetas del nivel de proyecto.

Tabla C-2 Iconos del editor de métodos de adquisición









Icono	Nombre	Descripción
	Mass Spec	Haga clic para mostrar la pestaña MS en el editor de métodos de adquisición.
	Period	Haga clic con el botón secundario para agregar un experimento, agregar un IDA Criteria Level o eliminar el periodo.
	Autosampler	Haga clic para abrir la pestaña Autosampler Properties.
	Syringe Pump	Haga clic para abrir la pestaña Syringe Pump Properties.
	Column Oven	Haga clic para abrir la pestaña Column Oven Properties.
	Valve	Haga clic para abrir la pestaña Valve Properties.
	DAD	Haga clic para abrir el DAD Method Editor. Consulte Datos de DAD en la página 84 .
	ADC	Haga clic para abrir la pestaña ADC Properties. Consulte Mostrar datos de ADC en la página 76 .

Tabla C-3 Iconos del modo de adquisición


















Icono	Nombre	Descripción
	View Queue	Muestra la cola de muestras.
	Instrument Queue	Muestra un instrumento remoto.
	Status for Remote Instrument	Muestra el estado de un instrumento remoto.
	Start Sample	Inicia la muestra en la cola.
	Stop Sample	Detiene la muestra en la cola.
	Abort Sample	Interrumpe la adquisición de una muestra en mitad del procesamiento de esa muestra.
	Stop Queue	Detiene la cola antes de que se haya completado el procesamiento de todas las muestras.
	Pause Sample Now	Inserta una pausa en la cola.
	Insert Pause before Selected Sample(s)	Inserta una pausa antes de una determinada muestra.
	Continue Sample	Continúa la adquisición de la muestra.
	Next Period	Inicia un nuevo periodo.
	Extend Period	Amplía el periodo actual.
	Next Sample	Detiene la adquisición de la muestra actual e inicia la adquisición de la muestra siguiente.
	Equilibrate	Selecciona el método que se va a usar para equilibrar los dispositivos. Este método debe ser el mismo que el utilizado con la primera muestra de la cola.
	Standby	Pone el instrumento en el modo en espera.
	Ready	Pone el instrumento en el modo listo.
	Reserve Instrument for Tuning	Reserva el espectrómetro de masas para el ajuste y la calibración.

Tabla C-3 Iconos del modo de adquisición (continuación)



Icono	Nombre	Descripción
	Method Wizard	Inicia el Method Wizard.
	Purge Modifier	Inicia la purga del modificador desde la bomba del modificador.

Tabla C-4 Iconos del modo de ajuste y calibración









Icono	Nombre	Descripción
	Calibrate from spectrum	Abre el cuadro de diálogo Mass Calibration Option y utiliza el espectro activo para calibrar el espectrómetro de masas.
	Manual Tune	Abre el Manual Tune Editor.
	Instrument Optimization	Verifica el rendimiento del instrumento, ajusta la calibración de masas o ajusta la configuración del espectrómetro de masas.
	View Queue	Muestra la lista de muestras en espera.
	Instrument Queue	Muestra un instrumento remoto.
	Status for Remote Instrument	Muestra el estado de un instrumento remoto.
	Reserve Instrument for Tuning	Reserva el instrumento para el ajuste y la calibración.
	Purge Modifier	Haga clic para purgar o quitar el modificador de la bomba del modificador.

Tabla C-5 Referencia rápida de la barra de herramientas Explore: cromatogramas y espectros





Icono	Nombre	Descripción
	Open Data File	Abre archivos.
	Show Next Sample	Pasa a la siguiente muestra.
	Show Previous Sample	Pasa a la muestra anterior.
	Go To Sample	Abre el cuadro de diálogo Select Sample.

Tabla C-5 Referencia rápida de la barra de herramientas Explore: cromatogramas y espectros (continuación)

Icono	Nombre	Descripción
	List Data	Muestra los datos en tablas.
	Show TIC	Genera un TIC a partir de un espectro.
	Extract Using Dialog	Extrae iones mediante el método de selección de masas.
	Show Base Peak Chromatogram	Genera un BPC.
	Show Spectrum	Genera un espectro a partir de un TIC.
	Copy Graph to new Window	Copia el gráfico activo en una ventana nueva.
	Baseline Subtract	Abre el cuadro de diálogo Baseline Subtract.
	Threshold	Ajuste del umbral.
	Noise Filter	Muestra el cuadro de diálogo Noise Filter Options para definir la anchura mínima de un pico. Las señales por debajo de esta anchura mínima se considerarán ruido.
	Show ADC	Muestra datos de ADC.
	Show File Info	Muestra las condiciones experimentales utilizadas para recopilar los datos.
	Add arrows	Agrega flechas al eje X del gráfico activo.
	Remove all arrows	Elimina las flechas del eje X del gráfico activo.
	Offset Graph	Compensa las ligeras diferencias en el tiempo durante el que se registraron los datos de ADC y del espectrómetro de masas. Esto resulta útil al superponer gráficos para su comparación.
	Force Peak Labels	Etiqueta todos los picos.
	Expand Selection By	Configura el factor de ampliación de la parte del gráfico que se desee ver con mayor detalle.
	Clear ranges	Devuelve la selección ampliada a la vista normal.
	Set Selection	Escribe los puntos de inicio y detención de una selección. Esta función proporciona una selección más precisa que la que se obtiene seleccionando la región mediante el uso del cursor.

Tabla C-5 Referencia rápida de la barra de herramientas Explore: cromatogramas y espectros (continuación)













Icono	Nombre	Descripción
	Normalize To Max	Amplía un gráfico al máximo, de manera que el pico más intenso se amplíe a su escala completa, esté visible o no.
	Show History	Muestra un resumen de las operaciones de procesamiento de datos realizadas en un archivo concreto, como suavización, sustracción, calibración y filtrado de ruido.
	Open Compound Database	Abre la base de datos de compuestos.
	Set Threshold	Ajuste del umbral.
	Show Contour Plot	Muestra los datos seleccionados como un gráfico de espectro o un XIC. De manera adicional, para los datos adquiridos mediante un DAD, el gráfico de contorno puede mostrar los datos seleccionados como un espectro de DAD o un XWC.
	Show DAD TWC	Genera un TWC del espectro de DAD.
	Show DAD Spectrum	Genera un espectro de DAD.
	Extract Wavelength	Extrae hasta tres rangos de longitud de onda de un espectro de DAD para ver el XWC.

Tabla C-6 Referencia rápida de la barra de herramientas Explore: superposición de gráficos

Icono	Nombre	Descripción
	Home Graph	Haga clic para devolver el gráfico a su escala original.
	Overlay	Haga clic para superponer gráficos.
	Cycle Overlays	Haga clic para alternar la visualización de los gráficos superpuestos.
	Sum Overlays	Haga clic para sumar los gráficos.

Iconos de la barra de herramientas

Tabla C-7 Referencia rápida de la barra de herramientas Explore: herramienta de interpretación de fragmentos


Icono	Nombre	Descripción
	Mostrar herramienta de interpretación de fragmentos	Haga clic para abrir la herramienta de interpretación de fragmentos, que calcula los fragmentos de la escisión de enlaces no cíclicos individuales a partir de un archivo .mol.

Tabla C-8 Iconos de navegación de la barra de herramientas Explore
















Icono	Nombre	Función
	Open File	Haga clic para abrir archivos.
	Show Next Sample	Haga clic para desplazarse a la muestra siguiente.
	Show Previous Sample	Haga clic para desplazarse a la muestra anterior.
	GoTo Sample	Haga clic para abrir el cuadro de diálogo seleccionar muestra.
	List Data	Haga clic para ver los datos en tablas.
	Show TIC	Haga clic para generar un TIC a partir de un espectro.
	Extract Using Dialog	Haga clic para extraer iones mediante la selección de masas.
	Show Base Peak Chromatogram	Haga clic para generar un BPC.
	Show Spectrum	Haga clic para generar un espectro a partir de un TIC.
	Copy Graph to new Window	Haga clic para copiar el gráfico activo en una ventana nueva.
	Baseline Subtract	Haga clic para abrir el cuadro de diálogo sustracción de línea de referencia.
	Threshold	Haga clic para ajustar el umbral.
	Noise Filter	Haga clic para utilizar el cuadro de diálogo opciones de filtro de ruidos para definir la anchura mínima de un pico. Las señales por debajo de esta anchura mínima se considerarán ruido.
	Show ADC	Haga clic para ver datos de ADC.
	Show File Info	Haga clic para mostrar las condiciones experimentales que ha utilizado para recopilar los datos.

Tabla C-8 Iconos de navegación de la barra de herramientas Explore (continuación)
















Icono	Nombre	Función
	Add arrows	Haga clic para agregar flechas al eje X del gráfico activo.
	Remove all arrows	Haga clic para eliminar las flechas del eje X del gráfico activo.
	Offset Graph	Haga clic para compensar las ligeras diferencias en el tiempo durante el que se registraron los datos de ADC y del espectrómetro de masas. Esto resulta útil al superponer gráficos para su comparación.
	Force Peak Labels	Haga clic para etiquetar todos los picos.
	Expand Selection By	Haga clic para configurar el factor de ampliación de la parte del gráfico que desee ver con mayor detalle.
	Clear ranges	Haga clic para devolver la selección ampliada a la vista normal.
	Set Selection	Haga clic para escribir los puntos de inicio y detención de una selección. Esto proporciona una selección más precisa que la que se obtiene resaltando la región mediante el uso del cursor.
	Normalize to Max	Haga clic para ampliar un gráfico al máximo, de manera que el pico más intenso se amplíe a escala completa, esté visible o no.
	Show History	Haga clic para ver un resumen de las operaciones de procesamiento de datos realizadas en un archivo concreto, como suavización, sustracción, calibración y filtrado de ruido.
	Open Compound Database	Haga clic para abrir la base de datos de compuestos.
	Set Threshold	Haga clic para ajustar el umbral.
	Show Contour Plot	Haga clic para mostrar los datos seleccionados como un gráfico de espectro o un XIC. Además, para los datos adquiridos mediante un DAD, el gráfico de contorno puede mostrar los datos seleccionados como un espectro de DAD o un XWC.
	Show DAD TWC	Haga clic para generar un TWC del DAD.
	Show DAD Espectro	Haga clic para generar un espectro de DAD.
	Extract Wavelength	Haga clic para extraer hasta tres rangos de longitud de onda de un espectro de DAD para ver el XWC.

Tabla C-9 Iconos de la pestaña Integration y del asistente Quantitation Wizard








Icono	Nombre	Descripción
	Set parameters from Background Region	Utiliza el pico seleccionado.
	Select Peak	Utiliza el fondo seleccionado.
	Manual Integration Mode	Integra los picos de forma manual.
	Show or Hide Parameters	Alterna entre mostrar y ocultar los parámetros de búsqueda de picos.
	Show Active Graph	Muestra únicamente el cromatograma del analito.
	Show Both Analyte and IS	Muestra el analito y su cromatograma asociado (solo disponible si existe un patrón interno asociado).
	Use Default View for Graph	Vuelve a la vista predefinida (vista de todos los datos) (si, por ejemplo, el usuario ha aplicado zoom a un cromatograma).

Tabla C-10 Iconos de la tabla de resultados








Icono	Nombre	Descripción
	Sort Ascending by Selection	Ordena los valores de la columna seleccionada en orden ascendente.
	Sort Descending by selection	Ordena los valores de la columna seleccionada en orden descendente.
	Lock or Unlock Column	Bloquea o desbloquea la columna seleccionada. Las columnas bloqueadas no se pueden mover.
	Metric Plot by Selection	Crea un gráfico de métricas a partir de la columna seleccionada.
	Show all Samples	Muestra todas las muestras en la Results Table.
	Delete Formula Column	Eliminar la columna de fórmula.
	Report Generator	Abre el software Reporter.









Tabla C-11 Referencia rápida de iconos: modo Quantitate











Icono	Nombre	Descripción
	Add/Remove Samples	Añade o elimina muestras de la tabla de resultados.
	Export as Text	Guarda la Results Table como archivo de texto.
	Modify Method	Abre un archivo wiff.
	Peak Review - Pane	Abre los picos en un panel.
	Peak Review - Window	Abre los picos en una ventana.
	Calibration - Pane	Abre la curva de calibración en un panel.
	Calibration - Window	Abre la curva de calibración en una ventana.
	Show First Peak	Muestra el primer pico en el panel o la ventana.
	Show Last Peak	Muestra el último pico en el panel o la ventana.
	Show Audit Trail	Muestra la pista de auditoría de la Results Table.
	Clear Audit Trail	Borra la pista de auditoría de la tabla de resultados. Esta función no está disponible.
	Statistics	Abre la ventana Statistics.
	Report Generator	Abre el software Reporter .

Glosario de símbolos

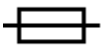











D








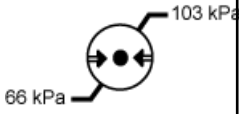
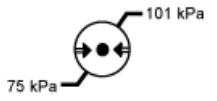

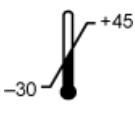
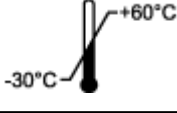

Nota: No todos los símbolos que aparecen en la tabla siguiente se aplican a todos los instrumentos.

Símbolo	Descripción
	Marca de conformidad con la normativa australiana. Indica que los productos cumplen con los requisitos de ECM de la Autoridad de medios de comunicación de Australia (ACMA, Australian communications Media Authority).
	Corriente alterna
A	Amperios (corriente)
	Representante autorizado de la Comunidad Europea
	Riesgo biológico
	Marcado CE de conformidad
	Marca cCSAus. Certifica la seguridad eléctrica del equipo para el mercado de Canadá y EE. UU.
	Número de catálogo
	<p>Precaución</p> <hr/> <p>Nota: En la documentación de SCIEX, este símbolo identifica un riesgo de lesiones personales.</p> <hr/>





Símbolo	Descripción
	Etiqueta de precaución sobre el cumplimiento por China de la Directiva RoHS (restricciones a la utilización de determinadas sustancias peligrosas en aparatos eléctricos y electrónicos). El producto de información electrónica contiene ciertas sustancias tóxicas o peligrosas. El número central es la fecha del periodo de uso respetuoso con el medio ambiente (EFUP) e indica el número de años naturales durante los que el producto puede estar en funcionamiento. Tras el vencimiento del EFUP, el producto debe reciclarse inmediatamente. Las flechas en círculo indican que el producto es reciclable. El código de fecha en la etiqueta o el producto indica la fecha de fabricación.
	Logotipo del cumplimiento por China de la Directiva RoHS (restricciones a la utilización de determinadas sustancias peligrosas en aparatos eléctricos y electrónicos). Este dispositivo no contiene sustancias tóxicas ni peligrosas, ni elementos que superen los valores máximos de concentración, y es un producto respetuoso con el medioambiente porque se puede reciclar y volver a utilizar.
	Consulte las instrucciones de uso.
	Marca cTUVus para TUV Rheinland de Norteamérica.
	Símbolo de la matriz de datos que se puede escanear con un lector de código de barras para obtener el identificador único de dispositivos (UDI).
	Conexión Ethernet
	Peligro de explosión
	Peligro de incendio
	Peligro de productos químicos inflamables
	Frágil

Glosario de símbolos

Símbolo	Descripción
	Fusible
Hz	Hercios
	Alta tensión. Peligro de descarga eléctrica Si debe retirar la cubierta principal, póngase en contacto con un representante del servicio técnico de SCIEX para evitar que se produzcan descargas eléctricas.
	Peligro de superficies calientes
	Dispositivo de diagnóstico in vitro
	Peligro de radiación ionizante
	Mantener seco. No exponer a la lluvia. La humedad relativa no debe exceder el 99 %.
	Mantener hacia arriba
	Peligro de radiación láser
	Peligro de carga
	Fabricante
	Peligro de las piezas móviles
	Riesgo de quedarse atrapado

Símbolo	Descripción
	Peligro de gas a presión
	Puesta a tierra de protección
	Peligro de perforación
	Peligro de perforación
	Peligros de sustancias químicas reactivas
	Número de serie
	Riesgo de toxicidad química
	Transporte y almacene el sistema a una presión de entre 66 y 103 kPa.
	Transporte y almacene el sistema a una presión de entre 75 y 101 kPa.
	Transportar y almacenar el sistema a una humedad relativa de entre el 10 y el 90 %.
	Transportar y almacenar el sistema a una temperatura de entre -30 y +45 °C.
	Transportar y almacenar el sistema a una temperatura de entre -30 y +60 °C.
	Conexión USB 2.0

Glosario de símbolos

Símbolo	Descripción
	Conexión USB 3.0
	Riesgo de radiación ultravioleta
VA	Voltioamperio (potencia)
V	Voltios (voltaje)
	RAEE. No deseche el equipo como residuos urbanos sin clasificar. Peligro medioambiental
W	Vatios
	<i>aaaa-mm-dd</i> Fecha de fabricación

Glosario de advertencias

E

Nota: Si se desprende alguna de las etiquetas que se usan para identificar un componente, póngase en contacto con su representante del servicio técnico.

Etiqueta	Traducción (si procede)
FOR RESEARCH USE ONLY. NOT FOR USE IN DIAGNOSTIC PROCEDURES.	PARA USO EXCLUSIVO EN INVESTIGACIÓN. NO INDICADO PARA USO EN PROCEDIMIENTOS DIAGNÓSTICOS.
IMPACT INDICATOR SENSITIVE PRODUCT WARNING	INDICADOR DE IMPACTO ADVERTENCIA DE PRODUCTO SENSIBLE Nota: Si se activa el indicador, significa que la caja se ha caído o manipulado incorrectamente. Registre el incidente en la hoja de porte y compruebe si hay daños. Cualquier reclamación por daños por golpes debe registrarse en este documento.
IMPORTANT! RECORD ANY VISIBLE CRATE DAMAGE INCLUDING TRIPPED "IMPACT INDICATOR" OR "TILT INDICATOR" ON THE WAYBILL BEFORE ACCEPTING SHIPMENT AND NOTIFY YOUR LOCAL AB SCIEX CUSTOMER SUPPORT ENGINEER IMMEDIATELY. DO NOT UNCRATE. CONTACT YOUR LOCAL CUSTOMER SUPPORT ENGINEER FOR UNCRATING AND INSTALLATION.	¡IMPORTANTE! REGISTRE CUALQUIER DAÑO VISIBLE EN LA CAJA, INCLUIDO SI SE HA ACTIVADO EL "INDICADOR DE IMPACTO" O EL "INDICADOR DE VUELCO", EN LA HOJA DE PORTE ANTES DE ACEPTAR EL ENVÍO Y NOTIFÍQUESELO INMEDIATAMENTE A SU INGENIERO DE SOPORTE TÉCNICO DE AB SCIEX. NO LO DESEMBALE. PÓNGASE EN CONTACTO CON SU INGENIERO DE SOPORTE TÉCNICO PARA QUE LO DESEMBALE Y LO INSTALE.
TIP & TELL	Indicador de volcado Nota: Indica si el contenedor se ha volcado o manipulado incorrectamente. Anote el incidente en la hoja de porte e inspeccione si hay daños. Cualquier reclamación por volcado debe registrarse en este documento.

Glosario de advertencias

Etiqueta	Traducción (si procede)
TiltWatch PLUS ShockWatch	Indicador de volcado Nota: Indica si el contenedor se ha volcado o manipulado incorrectamente. Anote el incidente en la hoja de porte e inspeccione si hay daños. Cualquier reclamación por volcado debe registrarse en este documento.
WARNING: DO NOT OPERATE WITHOUT FIRST ENSURING BOTTLE CAP IS SECURED.	ADVERTENCIA: NO UTILIZAR SIN ASEGURARSE PRIMERO DE QUE EL TAPÓN DE LA BOTELLA ESTÉ BIEN CERRADO. Nota: Esta advertencia se adjunta a la botella de residuos de escape de la fuente.
WARNING: NO USER SERVICEABLE PARTS INSIDE. REFER SERVICING TO QUALIFIED PERSONNEL.	ADVERTENCIA: EN EL INTERIOR NO HAY NINGUNA PIEZA QUE PUEDA REPARAR EL USUARIO. ACUDA A PERSONAL CUALIFICADO PARA LAS REPARACIONES. Nota: Consulte las instrucciones de uso.