



Serie de instrumentos 5500

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.

© 2017 AB Sciex



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

Contenido

| | |
|--|-----------|
| Capítulo 1 Precauciones y limitaciones de funcionamiento | 8 |
| Información general de seguridad..... | 8 |
| Cumplimiento normativo..... | 8 |
| Australia y Nueva Zelanda..... | 8 |
| Canadá..... | 9 |
| Unión Europea..... | 9 |
| Estados Unidos..... | 9 |
| Internacional..... | 10 |
| Precauciones eléctricas..... | 10 |
| Sobrecargas, suministro de CA..... | 10 |
| Conductor de protección de tierra..... | 11 |
| Precauciones químicas..... | 11 |
| Fluidos seguros para el sistema..... | 12 |
| Precauciones de ventilación..... | 13 |
| Entorno..... | 14 |
| Entorno..... | 14 |
| Desmantelamiento y eliminación..... | 15 |
| Personal cualificado..... | 16 |
| Condiciones de laboratorio..... | 16 |
| Condiciones de funcionamiento..... | 16 |
| Especificaciones de rendimiento..... | 16 |
| Uso y modificación del equipo..... | 17 |
| Contacto..... | 17 |
| Asistencia técnica..... | 18 |
| Símbolos y convenciones de la documentación..... | 18 |
| Documentación relacionada..... | 18 |
| Capítulo 2 Principios de funcionamiento | 20 |
| Descripción general del sistema..... | 20 |
| Descripción general del hardware..... | 21 |
| Teoría de funcionamiento: hardware..... | 24 |
| Descripción general del software Analyst®..... | 26 |
| Teoría de funcionamiento: software Analyst®..... | 33 |
| Capítulo 3 Instrucciones de funcionamiento: flujos de trabajo para la muestra | 36 |
| Capítulo 4 Instrucciones de funcionamiento: Hardware | 46 |
| Inicio del sistema..... | 46 |
| Restablecimiento del espectrómetro de masas..... | 47 |
| Apagado y ventilación del sistema..... | 47 |
| Ajuste de la posición de la bomba de jeringa integrada..... | 48 |
| Conexión de la válvula desviadora..... | 52 |
| Conexión de la válvula desviadora en modo inyector..... | 52 |

Contenido

| | |
|---|-----------|
| Conexión de tubos de la válvula desviadora en modo de desviador..... | 53 |
| Capítulo 5 Instrucciones de funcionamiento: perfiles de hardware y proyectos..... | 55 |
| Perfiles de hardware..... | 55 |
| Creación de un perfil de hardware..... | 55 |
| Adición de dispositivos a un perfil de hardware..... | 59 |
| Solución de problemas de activación del perfil de hardware..... | 61 |
| Proyectos y subproyectos..... | 62 |
| Creación de proyectos y subproyectos..... | 62 |
| Crear subproyectos..... | 63 |
| Copiar subproyectos..... | 63 |
| Cambio entre proyectos y subproyectos..... | 64 |
| Carpetas de proyecto instaladas..... | 64 |
| Copia de seguridad de la carpeta API Instrument..... | 65 |
| Recuperación de la carpeta API Instrument..... | 65 |
| Capítulo 6 Ajuste y calibración..... | 66 |
| Verificación del rendimiento del instrumento..... | 66 |
| Acerca del cuadro de diálogo Verifying or Adjusting Performance..... | 67 |
| Resumen de resultados..... | 67 |
| Capítulo 7 Optimización automática..... | 69 |
| Acerca de la optimización automática..... | 70 |
| Tipos de métodos de introducción de muestras..... | 70 |
| Optimización automática de un analito mediante infusión..... | 71 |
| Confirmación de la presencia de compuestos..... | 71 |
| Realización de una optimización MS/MS y MS automática utilizando la infusión con un ion precursor conocido y un ion producto desconocido..... | 73 |
| Revisión de los resultados de optimización..... | 76 |
| Optimización automática de un analito mediante FIA..... | 77 |
| Capítulo 8 Instrucciones de funcionamiento: métodos de adquisición..... | 84 |
| Creación de un método de adquisición utilizando el Acquisition Method Editor..... | 84 |
| Configuración de la bomba de jeringa integrada..... | 85 |
| Adición de un experimento..... | 85 |
| Creación de un período..... | 86 |
| Copia de un experimento en un período..... | 86 |
| Copia de un experimento dentro de un período..... | 86 |
| Técnicas de análisis..... | 86 |
| Tipos de análisis del modo cuádrupolo | 87 |
| Tipos de análisis en modo de LIT..... | 87 |
| Acerca de la adquisición de datos de espectro..... | 88 |
| Capítulo 9 Instrucciones de funcionamiento: análisis y procesamiento de datos cuantitativos..... | 90 |
| Análisis cuantitativo..... | 90 |
| Métodos de cuantificación..... | 90 |
| Acerca de las tablas de resultados..... | 91 |
| Métodos cuantitativos y tablas de resultados..... | 91 |
| Creación de un método mediante el editor de métodos de cuantificación..... | 91 |
| Creación de una tabla de resultados mediante el asistente de cuantificación..... | 93 |

| | |
|--|------------|
| Creación de una consulta estándar (opcional)..... | 94 |
| Menú contextual de la Results Table..... | 97 |
| Revisión de picos e integración manual de picos..... | 98 |
| Revisión de picos..... | 98 |
| Integración manual de picos..... | 103 |
| Menú contextual de Peak Review..... | 104 |
| Curvas de calibración..... | 104 |
| Visualización de curvas de calibración..... | 105 |
| Superposición de curvas de calibración..... | 106 |
| Menú contextual Calibration Curve..... | 107 |
| Estadísticas de muestras..... | 107 |
| Visualización de estadísticas de patrones y QC..... | 108 |
| Comparación de resultados entre lotes..... | 108 |
| Capítulo 10 Instrucciones de funcionamiento: análisis y exploración de datos..... | 110 |
| Apertura de archivos de datos..... | 110 |
| Navegación por las muestras de un archivo de datos..... | 110 |
| Visualización de las condiciones experimentales..... | 111 |
| Mostrar datos en tablas..... | 112 |
| Mostrar datos de ADC..... | 114 |
| Mostrar los datos cuantitativos básicos..... | 114 |
| Cromatogramas..... | 115 |
| Visualización de TIC desde un espectro..... | 116 |
| Visualización de un espectro desde un TIC..... | 117 |
| Acerca de la generación de los XIC..... | 118 |
| Generación de un XIC mediante el método de rango seleccionado..... | 119 |
| Generación de un XIC mediante el método de pico máximo..... | 119 |
| Generación de un XIC mediante el método de masas de pico base..... | 120 |
| Extracción de iones mediante el método de selección de masas..... | 120 |
| Generación de BPC..... | 121 |
| Generación de XWC..... | 122 |
| Generación de datos de DAD..... | 122 |
| Generación de TWC..... | 123 |
| Ajuste del umbral..... | 123 |
| Paneles de cromatograma..... | 124 |
| Paneles de espectro..... | 125 |
| Procesamiento de datos gráficos..... | 126 |
| Gráficos..... | 126 |
| Administrar datos..... | 126 |
| Ampliar el eje Y..... | 128 |
| Ampliar el eje X..... | 128 |
| Capítulo 11 Software Reporter..... | 130 |
| Interfaz del usuario de Analyst Reporter..... | 131 |
| Generación de informes..... | 133 |
| Capítulo 12 Instrucciones de funcionamiento: lotes..... | 135 |
| Configuración de las opciones de cola..... | 135 |
| Creación y envío de un lote..... | 136 |
| Adición de conjuntos y muestras a un lote..... | 136 |
| Equilibrado del sistema..... | 139 |
| Enviar una muestra o conjunto de muestras..... | 140 |

Contenido

| | |
|---|------------|
| Cambiar el orden de las muestras..... | 140 |
| Adquisición de datos..... | 140 |
| Definición de la ubicación de las muestras en el editor Batch Editor..... | 141 |
| Selección de la posición de los viales mediante la pestaña Locations (opcional)..... | 141 |
| Definición de los detalles de cuantificación en el Batch Editor (opcional)..... | 143 |
| Detención de la adquisición de muestras..... | 143 |
| Importación de archivos de lotes..... | 143 |
| Creación de un lote como archivo de texto..... | 144 |
| Importación de un lote de un archivo de texto..... | 144 |
| Menú contextual del Batch Editor..... | 145 |
| Estados de cola y de dispositivo..... | 146 |
| Estados de cola..... | 146 |
| Visualización de los iconos de estado de instrumento y dispositivo..... | 147 |
| Menú contextual de Queue..... | 148 |
| Capítulo 13 Información de servicio técnico y mantenimiento..... | 150 |
| Calendario de mantenimiento recomendado..... | 150 |
| Limpieza de las superficies..... | 153 |
| Limpieza de la parte delantera..... | 153 |
| Síntomas de la contaminación..... | 153 |
| Materiales necesarios | 154 |
| Prácticas correctas de limpieza..... | 155 |
| Preparación del espectrómetro de masas..... | 156 |
| Limpieza de la placa de chapa..... | 157 |
| Limpieza de la parte delantera de la placa del orificio..... | 158 |
| Puesta en servicio del espectrómetro de masas..... | 159 |
| Inspección del nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar..... | 159 |
| Vaciado de la botella de drenaje de escape de la fuente..... | 159 |
| Requisitos ambientales para la manipulación y el almacenamiento del espectrómetro de masas..... | 161 |
| Capítulo 14 Solución de problemas del espectrómetro de masas..... | 162 |
| Apéndice A Instrucciones de funcionamiento: optimización manual del compuesto..... | 165 |
| Acercas de la optimización manual del compuesto..... | 165 |
| Acercas de los tipos de análisis..... | 166 |
| Optimización manual de un analito..... | 166 |
| Confirmación de la presencia de compuestos..... | 166 |
| Optimización de parámetros específicos de MS..... | 168 |
| Determinación de los iones producto para la optimización..... | 169 |
| Optimización del potencial de salida de la celda de colisión de cada ion producto..... | 171 |
| Optimización manual de los parámetros de la fuente de iones y del gas..... | 171 |
| Preparación de la fuente de iones..... | 172 |
| Optimización de los parámetros de la fuente de iones..... | 172 |
| Parámetros avanzados..... | 173 |
| Optimización de AF2..... | 173 |
| Acercas de la dispersión de energías de colisión (CES) | 174 |
| Apéndice B Parámetros de sistemas de la serie 5500..... | 175 |
| Apéndice C Soluciones e iones de calibración..... | 178 |

Apéndice D Iconos de la barra de herramientas.....181
Apéndice E Glosario de símbolos.....190
Apéndice F Glosario de advertencias.....195

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 190](#) 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 15](#).

- **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 15](#).
- **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 14](#).
- **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 16](#).
- **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 14](#).
- **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, banco opcional 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, 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.

Fluidos seguros para el sistema

Los siguientes fluidos se pueden utilizar de forma segura con el sistema. Consulte [Materiales necesarios en la página 154](#) para obtener información sobre soluciones de limpieza seguras.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No utilice ningún otro fluido hasta que SCIEX confirme que no representa ningún riesgo. Esta lista no está completa.

- **Disolventes orgánicos**
 - Acetonitrilo de grado MS; hasta el 100 %
 - Metanol de grado MS; hasta el 100 %
 - Isopropanol; hasta el 100 %
 - Agua de grado HPLC o superior; hasta el 100 %
- **Tampones**
 - Acetato de amonio; menos del 1 %
 - Formato de amonio; menos del 1 %

- **Ácidos y bases**
 - Ácido fórmico; menos del 1 %
 - Ácido acético; menos del 1 %
 - Ácido trifluoroacético (TFA); menos del 1 %
 - Ácido heptafluorobutírico (HFBA); menos del 1 %
 - Amoníaco/hidróxido de amonio; menos del 1 %

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, 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! Peligro de radiación, riesgo 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, 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, 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.

Entorno

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

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 60 % 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 161](#).

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)
- 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:

- Temperatura ambiente: de 15 °C (59 °F) a 30 °C (86 °F).
Con el tiempo, la temperatura debe mantenerse dentro de un intervalo de 4 °C (7,2 °F), 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: del 20 % al 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](#)

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.

El sistema 5500 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®. 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®.



¡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. Asegúrese de que haya al menos seis personas disponibles para levantar el espectrómetro de masas. 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*.

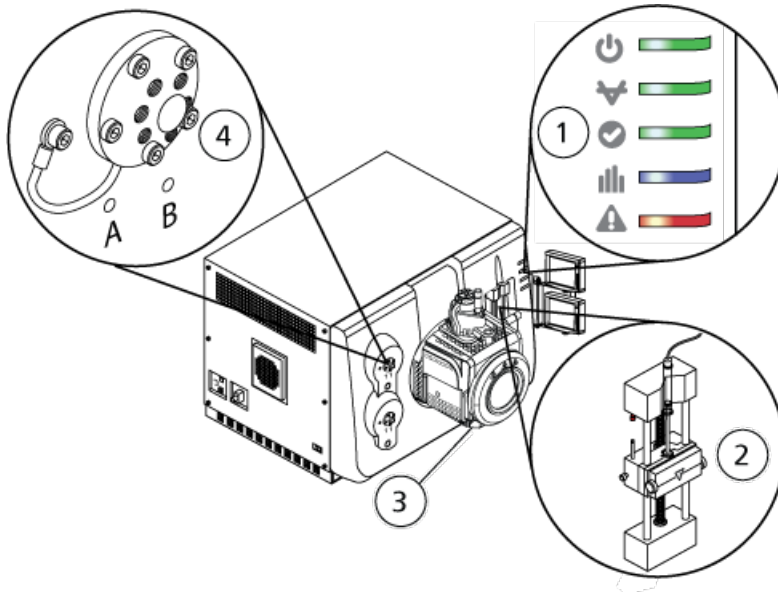
El sistema está previsto para el análisis cualitativo y cuantitativo de especies químicas.

Los instrumentos de la serie 5500 incluye los componentes siguientes:

- Un espectrómetro de masas SCIEX Triple Quad™ 5500 o QTRAP® 5500 con una bomba de vacío preliminar y una fuente de aire comprimido y nitrógeno
- Fuente de iones Turbo V™ que utiliza la sonda TurbolonSpray® o la sonda de ionización química a presión atmosférica (APCI). Consulte la Guía del operador de la fuente de iones *Turbo V™*.
- Ordenador y monitor suministrados por SCIEX con el software Analyst® para la optimización de instrumentos, el desarrollo de métodos de adquisición, el procesamiento y la adquisición de datos. Para conocer las especificaciones y los requisitos del ordenador, consulte la Guía de instalación del software *Analyst®*.

Descripción general del hardware

Figura 2-1 Vista frontal








| Artículo | Descripción | Consultar... |
|----------|--------------------|---|
| 1 | Símbolos del panel | Símbolos del panel en la página 21. |
| 2 | Bomba de jeringa | Ajuste de la posición de la bomba de jeringa integrada en la página 48 |
| 3 | Fuente de iones | <i>Guía del operador de la fuente de iones Turbo V™</i> , disponible en el DVD de documentación de la fuente de iones o en el sitio web de SCIEX, en sciex.com |
| 4 | Válvula desviadora | Conexión de la válvula desviadora en la página 52. |

Símbolos del panel

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

Tabla 2-1 Símbolos del panel

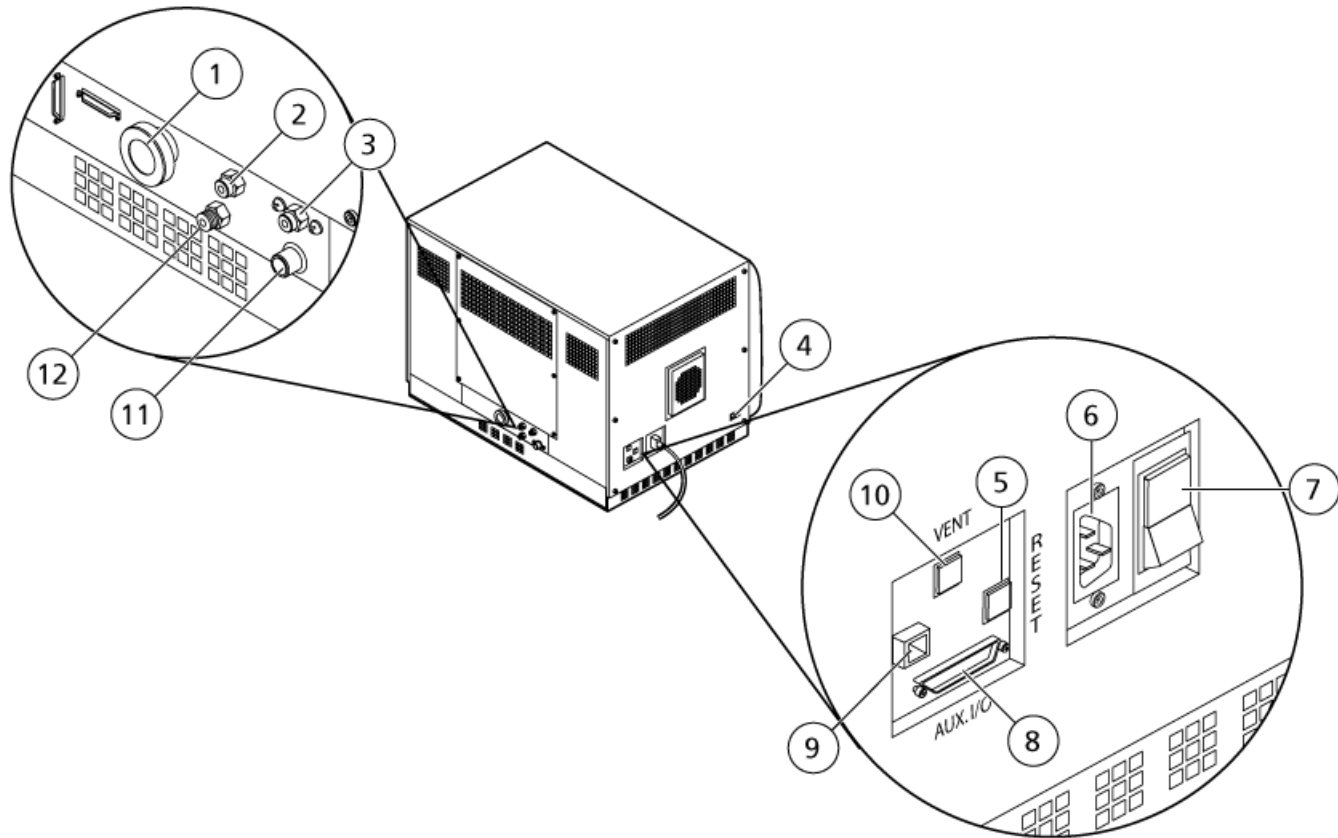
| LED | Color | Nombre | Descripción |
|---|-------|----------|--|
|  | Verde | Power | Se ilumina cuando se enciende el sistema. |
|  | Verde | Vacuum | Se ilumina cuando se ha alcanzado el nivel de vacío correcto. Parpadea cuando el vacío no se encuentra en el nivel correcto (durante la evacuación y ventilación). |
|  | Verde | Ready | Se ilumina cuando el sistema se encuentra en estado Ready. El sistema debe estar en estado Ready para funcionar. |
|  | Azul | Scanning | Se ilumina cuando el sistema está adquiriendo datos. |
|  | 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.

Conexiones

La [Figura 2-2](#) muestra la ubicación de las conexiones del espectrómetro de masas, incluidas las ubicaciones de los botones **RESET** (Reiniciar) y **VENT** (Ventilar), y del interruptor de corriente del espectrómetro de masas.

Figura 2-2 Vistas trasera y lateral



| Artículo | Descripción | Materiales principales | Para obtener más información... |
|----------|---|---|--|
| 1 | Conexión de vacío de la bomba de vacío preliminar | Aluminio (conector de manguera), acero con plancha de zinc (abrazadera de manguera) | Póngase en contacto con un representante del servicio técnico. |
| 2 | Suministro de aire (gas1/ gas2) | Plástico | Consulte la <i>Guía de planificación del centro</i> . El tubo del suministro de gas 1/gas 2 se conecta a este puerto. |
| 3 | Suministro de escape de la fuente | Acero inoxidable | Consulte la <i>Guía de planificación del centro</i> . El tubo del suministro de gas de escape de la fuente se conecta a este puerto. |
| 4 | Conexión de comunicación de la fuente | Aluminio | Póngase en contacto con un representante del servicio técnico. |

Principios de funcionamiento

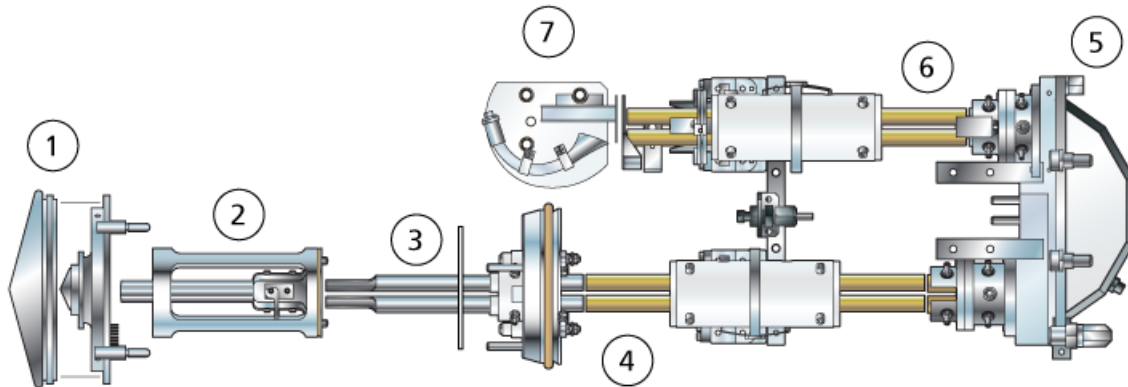
| Artículo | Descripción | Materiales principales | Para obtener más información... |
|----------|--|------------------------------|---|
| 5 | Botón RESET | Plástico | Consulte Restablecimiento del espectrómetro de masas en la página 47 . |
| 6 | Conexión de alimentación | Aluminio/plástico | Consulte Inicio del sistema en la página 46 o Apagado y ventilación del sistema en la página 47 . |
| 7 | Interruptor de corriente del espectrómetro de masas (arriba= encendido; abajo= apagado) | Plástico | Consulte Inicio del sistema en la página 46 o Apagado y ventilación del sistema en la página 47 . |
| 8 | Conexión E/S auxiliar | Chapa metálica (galvanizada) | Consulte la <i>Guía de configuración de dispositivos periféricos</i> . |
| 9 | Conexión Ethernet (conecta el espectrómetro de masas y el ordenador). | Chapa metálica (galvanizada) | Póngase en contacto con un representante del servicio técnico. |
| 10 | Botón VENT | Plástico | Consulte Inicio del sistema en la página 46 o Apagado y ventilación del sistema en la página 47 . |
| 11 | Residuos de escape de la fuente (a la botella de residuos) | Acero inoxidable | Consulte la <i>Guía de planificación y suministros de instalación</i> . |
| 12 | Suministro de gas nitrógeno (suministro de Curtain Gas™, gas CAD) | Acero inoxidable | Consulte la <i>Guía de planificación del centro</i> . El tubo del suministro de gas nitrógeno se conecta a este puerto. |

Teoría de funcionamiento: hardware

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 espectrómetro de masas 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 sistema y mejora la relación señal/ruido. En la zona Q0, los iones se vuelven a concentrar antes de pasar al cuadrupolo Q1.

Figura 2-3 Ruta iónica



| Artículo | Descripción |
|----------|----------------------|
| 1 | Placa del orificio |
| 2 | Guía de iones QJet |
| 3 | Zona Q0 |
| 4 | Cuadrupolo Q1 |
| 5 | Celda de colisión Q2 |
| 6 | Cuadrupolo Q3 |
| 7 | Detector |

El cuadrupolo Q1 es un cuadrupolo de filtrado que clasifica los iones antes de que entren en la celda de colisión Q2. La celda de colisión Q2 es donde se aumenta la energía interna de un ión 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.

Tras pasar por la celda de colisión Q2, los iones entran en el cuadrupolo Q3 para volver a filtrarse y, a continuación, entran en el detector. En el detector, los iones crean una corriente que se convierte en un impulso de tensión. Los impulsos de tensión procedentes del detector son directamente proporcionales a la cantidad de iones que entran en el detector. El sistema supervisa estos impulsos de tensión y convierte la información en una señal. La señal representa la intensidad de los iones de un valor de m/z determinado y el sistema muestra esta información como un espectro de masas.

La función de trampa lineal de iones (LIT) proporciona varios modos de funcionamiento mejorados. Un factor común de los modos mejorados es que los iones se atrapan en la región de cuadrupolo Q3 y, a continuación, se analizan para proporcionar datos del espectro completo. Muchos espectros se recogen rápidamente en un período de tiempo corto y son significativamente más intensos que los espectros recogidos en un modo de funcionamiento de cuadrupolo estándar comparable.

Principios de funcionamiento

Durante la fase de recogida, los iones pasan por la celda de colisión Q2, donde el gas CAD centra los iones en la región Q3. El cuadrupolo Q3 funciona solo con la tensión de RF principal aplicada. Se evita que los iones pasen a través del conjunto de barras del cuadrupolo Q3 y se reflejan mediante una lente de salida a la que se aplica una tensión de barrera de CC. Una vez transcurrido el tiempo de llenado (un tiempo definido por el usuario o determinado por la función Dynamic Fill Time), se aplica una tensión de barrera de CC a una lente de entrada Q3 (IQ3). Esto confina los iones recogidos en Q3 y detiene la entrada de más iones. Las barreras de tensión de CC de las lentes de entrada y salida y la tensión de RF aplicada a las barras de cuadrupolo confinan los iones dentro de Q3.

Durante la fase de análisis, la tensión en la lente de salida y la tensión de RF auxiliar se lanzan de forma simultánea con la tensión de RF principal para una mayor resolución y sensibilidad, en comparación con los análisis en modo cuadrupolo. Se aplica una frecuencia de CA auxiliar al cuadrupolo Q3. La amplitud de tensión de RF principal se lanza desde valores bajos hasta valores altos, lo que de forma secuencial hace entrar las masas en resonancia con la frecuencia de CA auxiliar. Cuando los iones entran en resonancia con la frecuencia de CA, adquieren suficiente velocidad axial para superar la barrera de la lente de salida y son expulsados axialmente hacia el detector de iones del espectrómetro de masas. La totalidad de los datos de los espectros se pueden adquirir a partir de los iones recogidos en Q3 mediante un rápido análisis de la tensión de RF principal.

Manipulación de los datos

El software Analyst[®] 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[®], 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.

Descripción general del software Analyst[®]

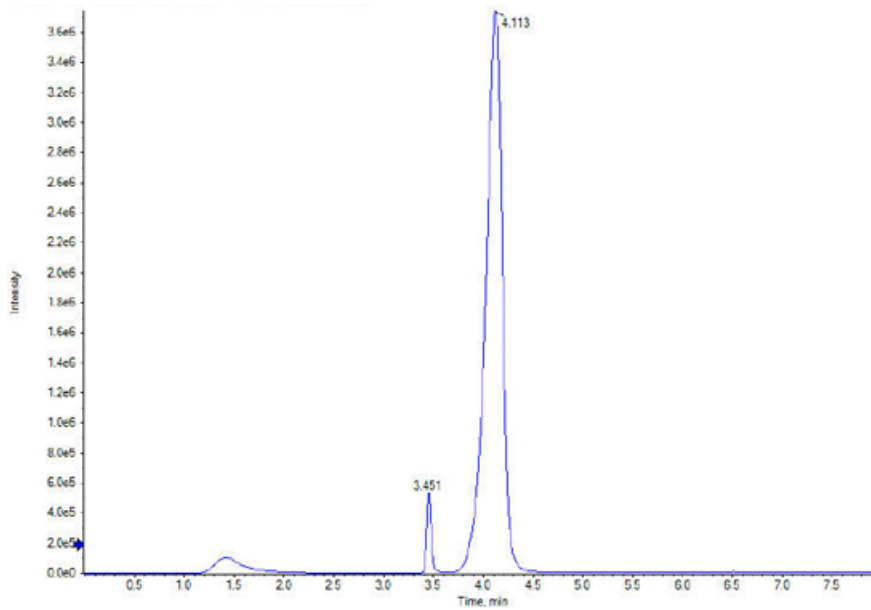
El software Analyst[®] funciona con el espectrómetro de masas y el sistema de cromatografía líquida (LC) y el firmware asociado para controlar el sistema y la adquisición de datos. Al utilizar el sistema, los datos adquiridos se envían al software Analyst[®], donde se pueden mostrar como espectros de masas completos, intensidad de uno o varios iones en el tiempo, o recuento total de iones en el tiempo.

Diferentes vistas de datos

Las siguientes figuras muestran ejemplos de dos tipos de vistas de datos: cromatograma de iones totales (TIC) y cromatograma de iones extraídos (XIC).

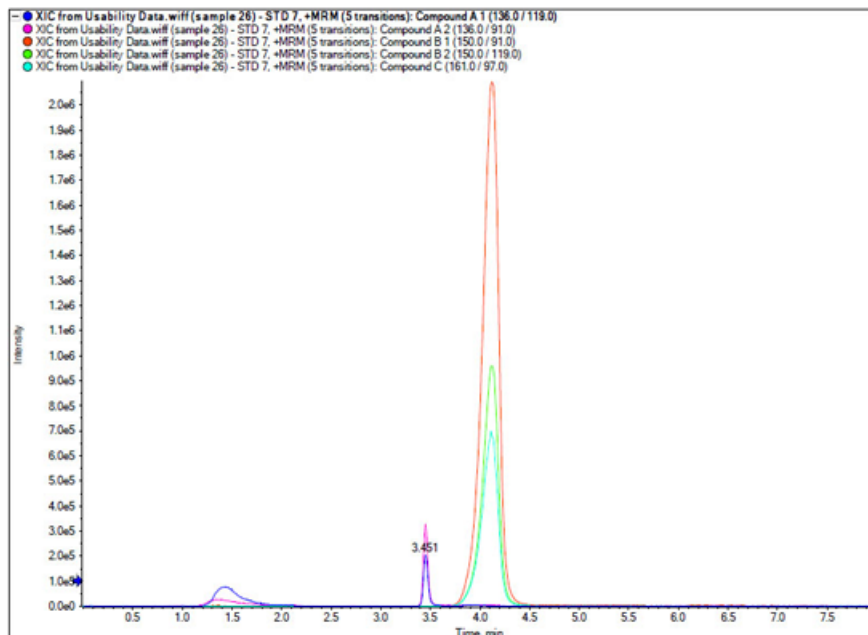
TIC: el trazado de la corriente de iones total como función del tiempo.

Figura 2-4 TIC de ejemplo



XIC: cromatograma de iones que se crea tomando los valores de intensidad de un valor de masa discreta individual o un rango de masas, de una serie de análisis de espectro de masas. Indica el comportamiento de una masa determinada, o rango de masas, como una función de tiempo.

Figura 2-5 XIC de ejemplo



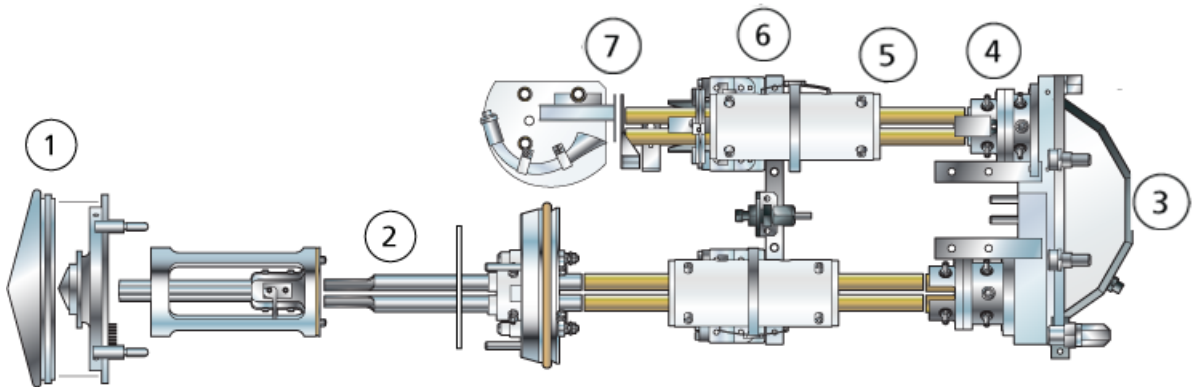
Parámetros

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.

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

Figura 2-6 Ruta óptica iónica y parámetros



| Posición | Parámetro | Parámetro fisiológico | Uso previsto | Tipo de análisis |
|----------|------------------------------------|-----------------------|--|------------------|
| 1 | IonSpray Voltage (IS) | Fuente y gas | El parámetro IS controla la tensión que se aplica al electrodo de la sonda de TurbolonSpray [®] , que ioniza la muestra en la fuente de iones. El parámetro depende de la polaridad y afecta a la estabilidad de la pulverización y a la sensibilidad. Este parámetro también se usa con las fuentes de iones NanoSpray [®] . Consulte la <i>Guía del operador</i> de la fuente de iones correspondiente. El parámetro puede ser dependiente de los compuestos y se debe optimizar con cada compuesto. | All |
| 1 | Nebulizer Current (NC) | Fuente y gas | El parámetro NC controla la corriente que se aplica a la aguja de descarga de la corona en la sonda APCI utilizada en la fuente de iones Turbo V TM o DuoSpray TM . La descarga ioniza las moléculas del disolvente que, a su vez, ionizan las moléculas de la muestra. | All |
| 1 | Interface Heater Temperature (IHT) | Fuente y gas | 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. 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. | All |
| 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 [®] . | All |
| 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. | All |

Principios de funcionamiento

| Posición | Parámetro | Parámetro fisiológico | Uso previsto | Tipo de análisis |
|----------|-----------------------------|-----------------------|--|------------------|
| 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. | All |
| 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. | All |
| 1 | sdp | Fuente y gas | El parámetro sdp controla la selección de las sondas de la fuente de iones DuoSpray™: sonda TurbolonSpray® o sonda APCI. | N/D |
| 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. | All |
| 2 | Entrance Potential (EP) | Compuesto | el parámetro EP controla la diferencia de potencial entre la tensión en Q0 y la toma a tierra. El potencial de entrada conduce y concentra los iones a través de alta presión de la zona Q0. Utilice el valor predefinido. | All |

| Posición | Parámetro | Parámetro fisiológico | Uso previsto | Tipo de análisis |
|----------|-----------------------|-----------------------|--|--|
| 2 | Q0 Trapping | Compuesto | <p>el parámetro Q0 Trapping controla el almacenamiento de iones en la región Q0. Se utiliza para aumentar la sensibilidad y el ciclo de trabajo, capturando iones en la región Q0 a medida que se expulsan los iones de la trampa lineal de iones en función de la masa. Con este parámetro, utilice un tiempo de llenado fijo.</p> <p>Active o desactive la función según se necesite para el experimento.</p> <p>Se recomienda usar un llenado fijo de 20 ms o superior.</p> | EMS, EMC, EPI, ER y MS/MS/MS |
| 3 | CAD Gas | Fuente y gas | <p>El parámetro CAD controla la presión del gas de colisión del gas CAD en la celda de colisión durante los análisis Q3, MS/MS y LIT. En los análisis Q3, el gas de colisión ayuda a concentrar los iones conforme atraviesan la celda de colisión Q2. 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. En los tipos de análisis LIT, el gas de colisión ayuda a concentrar y atrapar iones en la trampa lineal de iones.</p> <p>Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.</p> | Q3 MI, Q3 MS, MRM, Prec, NL, EMS, ER, EPI, MS/MS/MS, EMC y TDF |
| 3 | 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> | EPI, MS/MS/MS, MRM, MS2, Prec, NL y LIT |

Principios de funcionamiento

| Posición | Parámetro | Parámetro fisiológico | Uso previsto | Tipo de análisis |
|----------|--|-----------------------|---|------------------------------|
| 3 | Collision Energy Spread (CES) | Compuesto | 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 Enhanced Product Ion (EPI) o un análisis MS/MS/MS (MS3) que utilice el parámetro CES. Cuando se introduce un valor de dispersión de energía de colisión, el parámetro CES se activa automáticamente. Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico. | EPI y MS/MS/MS |
| 3 | Collision Cell Exit Potential (CXP) | Compuesto | El parámetro CXP Solo se utiliza en tipos de análisis Q3 y MS/MS. Este parámetro transmite los iones al cuádrupolo Q3. Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico. | Q3, MRM, MS2, Prec y NL |
| 4 | Q3 Entry Barrier | Compuesto | El parámetro Q3 Entry Barrier se utiliza para transferir los iones de Q2 hacia la trampa lineal de iones. Utilice el valor predefinido. | EMS, EMC, EPI, ER y MS/MS/MS |
| 4 | Q3 Empty Time | Compuesto | El parámetro Q3 Empty Time controla la cantidad de tiempo que transcurre antes de eliminar los iones con una sola carga de la trampa lineal de iones. Utilice el valor predefinido. | CEM |
| 5 | Multi-Charge Separation (MCS) Barrier | Compuesto | El parámetro MCS Barrier controla la tensión utilizada para eliminar los iones con una sola carga de la trampa lineal de iones. Utilice el valor predefinido. | CEM |
| 6 | MS/MS/MS Fragmentation Excitation Time | Compuesto | El parámetro MS/MS/MS Fragmentation Time controla el periodo de tiempo durante el que se aplica la energía de excitación. Se utiliza junto con la energía de excitación para fragmentar el segundo ión precursor aislado. Utilice el valor predefinido. | MS/MS/MS |

| Posición | Parámetro | Parámetro fisiológico | Uso previsto | Tipo de análisis |
|----------|-------------------------|-----------------------|---|-------------------------|
| 6 | Fixed LIT Fill Time | Compuesto | El parámetro Fixed LIT Fill Time controla el periodo de tiempo durante el que la LIT se llena con iones. Use el valor pre y ajústelo para conseguir la respuesta de señal deseada en función de la concentración de la muestra. | EMS, EPI, ER y MS/MS/MS |
| 6 | Dynamic Fill Time (DFT) | Compuesto | El parámetro DFT calcula dinámicamente, en función de la señal de iones entrante, la cantidad de tiempo durante el que los iones se recogen en la trampa lineal de iones. Cuando el parámetro DFT está activado, la señal se optimiza para aumentar la sensibilidad o minimizar la carga de espacio. Seleccione o borre la función basándose en su experimento. En el cuadro de diálogo Tools > Settings > Method Options , la configuración de DFT está optimizada para la velocidad de análisis predeterminada. Esta configuración está también disponible para otras velocidades de análisis LIT. | EMS, EPI, ER y MS/MS/MS |
| 7 | CEM | Detector | El parámetro CEM controla la tensión aplicada al detector. La tensión controla la respuesta del detector. | All |

Teoría de funcionamiento: software Analyst®

Cuantificación

El objetivo de la cuantificación en LC-MS/MS es determinar con precisión la concentración de un compuesto en una muestra desconocida. El tipo de análisis MRM se utiliza principalmente para el análisis cuantitativo en un espectrómetro de masas triple cuadrupolo o QTRAP®. En un análisis MRM, la capacidad de definir el ion precursor y el ion producto característico permite la creación de un par de alta especificidad del analito. La transición de MRM (par) relacionada con el tiempo de retención asociado con el analito durante la cromatografía líquida proporciona la especificidad de cuantificación necesaria.

La cuantificación se consigue gracias al uso de métodos de adquisición de LC-MS/MS de MRM validados, curvas estándar de adquisición de calibración y posterior integración de los picos asociados con los compuestos de interés. La relación de curva de calibración entre la respuesta de señal y la concentración se utiliza para determinar la cantidad de un analito en particular en una muestra desconocida.

Integración

En datos de LC-MS/MS, integración hace referencia a la obtención del área bajo una curva para el pico asociado con un compuesto específico. Mediante el desarrollo de un método que especifica las transiciones, tiempos de retención previstos, estándares internos, integración y parámetros de regresión, el software puede integrar automáticamente picos para un conjunto de muestras determinado.

Acerca de las tablas de resultados

En las tablas de resultados se resume la concentración calculada de un analito en cada muestra desconocida en función de la curva de calibración. Las tablas de resultados también incluyen las curvas de calibración, así como estadísticas de los resultados. El usuario puede personalizar la tabla de resultados y ver las tablas de resultados en diferentes disposiciones.

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

Curvas de calibración

Una curva de calibración, también conocida como curva de concentración patrón, es un método que permite determinar la concentración de una sustancia en una muestra desconocida comparando la muestra desconocida con un conjunto de muestras estándar de concentración desconocida. La curva de calibración es un gráfico de cómo responde el instrumento (la señal analítica) ante los cambios de concentración del analito (la sustancia que se va a medir). El operador prepara una serie de estándares en un rango de concentraciones próximas a la concentración esperada del analito en la muestra desconocida.

Los estándares de calibración se utilizan para generar curvas de calibración. Las lecturas incorrectas o ausentes en algunas de las muestras de calibración podrían indicar problemas con el procedimiento analítico. Siga métodos aceptables encontrados en la bibliografía y directrices de agencias reguladoras para crear una curva de calibración. Entre los ejemplos de buenas prácticas en la preparación de curvas de calibración se incluyen:

- Preparación de estándares de calibración en matriz en blanco, en los que se va a medir el analito.
- Generación de una curva de calibración para cada analito que se va a medir.
- Garantía de cobertura del rango de concentración previsto del analito, incluidas muestras típicas y atípicas.
- Uso de seis a ocho estándares para generar la curva.

Esta lista no es exhaustiva y se deben utilizar otras directrices para determinar la mejor práctica a la hora de desarrollar una curva de calibración para el laboratorio.

Nota: En algunos procedimientos analíticos, se utilizan estándares de calibración de un solo punto. Las calibraciones de un solo punto se realizan utilizando una muestra de matriz en blanco y una concentración de estándar único. La relación entre la respuesta del instrumento y la concentración del analito se determina mediante la línea creada por estos dos puntos. Tanto el método de procesamiento de cuantificación como el de adquisición se deben validar antes de aceptarlos para su uso previsto.

Tipos de regresión

El área de los picos de analito en los estándares de la curva de calibración se representa respecto a las concentraciones conocidas. Posteriormente, se ajusta una línea a los puntos. Esta línea de regresión se utiliza para calcular la concentración de las muestras desconocidas.

- Lineal ($y = mx + b$)
- Lineal a través de cero ($y = mx$)
- Cuadrática ($y = a_2 + bx + c$)

Asimismo, es posible agregar distintos tipos de ponderación para la regresión, incluidos:

- $1/x$
- $1/x^2$
- $1/y$
- $1/y^2$

Instrucciones de funcionamiento: flujos de trabajo para la muestra

3

Tabla 3-1 Configuración del sistema Flujo de trabajo

| 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 55 | 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 62 | El uso de proyectos y subproyectos facilita la gestión de los datos y la comparación de los resultados. |
| 3 | Optimizar el espectrómetro de masas. | Verificación del rendimiento del instrumento en la página 66 | 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 3-2 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 62 | El uso de proyectos y subproyectos facilita la gestión de los datos y la comparación de los resultados. |
| 2 | Crear un método de adquisición. | Instrucciones de funcionamiento: métodos de adquisición en la página 84 | 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 136 y Enviar una muestra o conjunto de muestras en la página 140 | 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 140 | 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 3-2 Flujo de trabajo de la adquisición de muestras (continuación)

| Paso | Para... | Busque la información en... | ¿Qué es lo que hace? |
|------|---|---|---|
| 5 | <p>Analizar datos en modo Explore.</p> <p>—O BIEN—</p> <p>Paso 6: Analizar datos cuantitativos.</p> | <p>Instrucciones de funcionamiento: análisis y exploración de datos en la página 110</p> | <p>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.</p> |
| 6 | <p>Analizar datos cuantitativos.</p> | <p>Instrucciones de funcionamiento: análisis y procesamiento de datos cuantitativos en la página 90</p> | <p>Haga uso de las diversas herramientas de creación de métodos cuantitativos del modo Quantitative para analizar los datos adquiridos y crear un método cuantitativo a fin de generar una tabla de resultados. Use la tabla para revisar manualmente todos los picos de cada analito y estándar interno de un lote y para ver las curvas de calibración, las estadísticas de la muestra y los gráficos métricos.</p> |

Tabla 3-3 Ejemplo de flujo de trabajo de análisis de rutina

| Paso | Para... | Busque la información en... | ¿Qué es lo que hace? |
|-------------|--|---|---|
| 1 | Activar un perfil de hardware aplicable al método. | Creación de un perfil de hardware en la página 55 | 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 62 | El uso de proyectos y subproyectos facilita la gestión de los datos y la comparación de los resultados. |
| 3 | Crear y enviar un lote. | Adición de conjuntos y muestras a un lote en la página 136 y Enviar una muestra o conjunto de muestras en la página 140 | 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 | Equilibrar el sistema. | Equilibrado del sistema en la página 139 | Equilibrar el sistema antes de iniciar la adquisición de datos. Un sistema que no se ha equilibrado puede dar como resultado datos deficientes. |
| 5 | Ejecutar las muestras para adquirir datos. | Adquisición de datos en la página 140 | 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 3-3 Ejemplo de flujo de trabajo de análisis de rutina (continuación)

| Paso | Para... | Busque la información en... | ¿Qué es lo que hace? |
|---|--|--|--|
| 6 | Analizar datos en modo Explore (opcional). | Instrucciones de funcionamiento: análisis y exploración de datos en la página 110 | 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. |
| <ul style="list-style-type: none"> • Para el análisis cuantitativo con el software MultiQuant™ siga los pasos de 7 a 8. El software MultiQuant™ está recomendado para conjuntos de datos más grandes. • Para el análisis cuantitativo con el software Analyst® siga los pasos de 9 a 10a. • Para el análisis cualitativo con el software Analyst® siga los pasos de 9 a 10b. | | | |
| 7 | Analizar datos cuantitativos en el software MultiQuant™. | <i>Guía de referencia del software MultiQuant™</i> : capítulos 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14 | Generar y usar una tabla de resultados para revisar manualmente todos los picos de cada analito y patrón interno de un lote y para ver las curvas de calibración, las estadísticas de la muestra y los gráficos de métricas. |
| 8 | Crear un informe en el software MultiQuant™. | <i>Guía de referencia del software MultiQuant™</i> : apéndice C | Generar un informe utilizando las plantillas de informe proporcionadas para los resultados generados y revisados. |
| 9 | Analizar los datos cualitativos (o cuantitativos) en el software Analyst®. | Instrucciones de funcionamiento: análisis y procesamiento de datos cuantitativos en la página 90 | Generar una tabla de resultados para revisar manualmente todos de los picos de cada analito y el patrón interno de un lote. Para el análisis cuantitativo, revise también las curvas de calibración, las estadísticas de la muestra y los gráficos de métricas. |

Tabla 3-3 Ejemplo de flujo de trabajo de análisis de rutina (continuación)

| Paso | Para... | Busque la información en... | ¿Qué es lo que hace? |
|------|---|-----------------------------|---|
| 10a | Crear un informe en Analyst Reporter. | Generación de informes | Generar un informe utilizando las plantillas de informe proporcionadas para los resultados generados y revisados. Para informes específicos del análisis cualitativo, se utiliza el conjunto de plantillas de informe etiquetadas con la búsqueda de biblioteca. |
| 10b | Seleccionar una biblioteca y, a continuación, crear un informe utilizando Analyst Reporter. | Generación de informes | Selecciona la biblioteca de espectros de MS/MS para obtener los resultados y genera un informe con las plantillas de informe proporcionadas etiquetadas con la búsqueda de biblioteca para los resultados generados y revisados. Para informes específicos del análisis cualitativo, se utiliza el conjunto de plantillas de informe etiquetadas con la búsqueda de biblioteca. |

Tabla 3-4 Ejemplo de flujo de trabajo del desarrollador de método

| 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 55 | 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 62 | El uso de proyectos y subproyectos facilita la gestión de los datos y la comparación de los resultados. |
| 3 | Optimizar el compuesto automáticamente. - O - Paso 4 Optimizar el compuesto de forma manual. | Optimización automática en la página 69 | El software optimiza automáticamente el compuesto y los parámetros del espectrómetro de masas de los compuestos de interés. |
| 4 | Optimizar el compuesto de forma manual. | Instrucciones de funcionamiento: optimización manual del compuesto en la página 165 | El usuario optimiza manualmente el compuesto y los parámetros del espectrómetro de masas de los compuestos de interés. La optimización manual proporciona a los usuarios más experimentados un mayor control durante el proceso de optimización. |

Tabla 3-4 Ejemplo de flujo de trabajo del desarrollador de método (continuación)

| Paso | Para... | Busque la información en... | ¿Qué es lo que hace? |
|------|--|---|---|
| 5 | Crear un método de adquisición. | Instrucciones de funcionamiento: métodos de adquisición en la página 84 | 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. |
| 6 | Crear y enviar un lote. | Adición de conjuntos y muestras a un lote en la página 136 y Enviar una muestra o conjunto de muestras en la página 140 | Una vez creado un método de adquisición, ejecute las muestras creando un lote de adquisición y enviando el lote a la cola de adquisición. |
| 7 | Equilibrar el sistema. | Equilibrado del sistema en la página 139 | Equilibrar el sistema antes de iniciar la adquisición de datos. Un sistema que no se ha equilibrado puede dar como resultado datos deficientes. |
| 8 | Ejecutar las muestras para adquirir datos. | Adquisición de datos en la página 140 | 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 3-4 Ejemplo de flujo de trabajo del desarrollador de método (continuación)

| Paso | Para... | Busque la información en... | ¿Qué es lo que hace? |
|---|--|---|--|
| 9 | Analizar datos en modo Explore (opcional). | Instrucciones de funcionamiento: análisis y exploración de datos en la página 110 | 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. |
| <ul style="list-style-type: none"> • Para el análisis cuantitativo con el software MultiQuant™ siga los pasos de 10 a 12. El software MultiQuant™ está recomendado para conjuntos de datos más grandes. • Para el análisis cuantitativo con el software Analyst® siga los pasos de 13 a 15. • Para el análisis cualitativo, póngase en contacto con la asistencia técnica. | | | |
| 10 | Crear un método cuantitativo en el software MultiQuant™. | <i>Guía de referencia del software MultiQuant™: editor de métodos de cuantificación</i> | Usar las diversas herramientas de creación de métodos cuantitativos del software para analizar los datos adquiridos y crear un método cuantitativo a fin de generar una tabla de resultados. |
| 11 | Analizar datos cuantitativos en el software MultiQuant™. | <i>Guía de referencia del software MultiQuant™: capítulos 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14</i> | Generar y usar una tabla de resultados para revisar manualmente todos los picos de cada analito y patrón interno de un lote y para ver las curvas de calibración, las estadísticas de la muestra y los gráficos de métricas. |
| 12 | Crear un informe en el software MultiQuant™. | <i>Guía de referencia del software MultiQuant™: apéndice C</i> | Generar un informe utilizando las plantillas de informe proporcionadas para los resultados generados y revisados. |

Tabla 3-4 Ejemplo de flujo de trabajo del desarrollador de método (continuación)

| Paso | Para... | Busque la información en... | ¿Qué es lo que hace? |
|------|--|--|--|
| 13 | Crear un método cuantitativo en el software Analyst®. | <i>Guía de referencia del software MultiQuant™</i> : editor de métodos de cuantificación | Usar las diversas herramientas de creación de métodos cuantitativos del software para analizar los datos adquiridos y crear un método cuantitativo a fin de generar una tabla de resultados. |
| 14 | Analizar los datos cualitativos (o cuantitativos) en el software Analyst®. | Instrucciones de funcionamiento: análisis y procesamiento de datos cuantitativos en la página 90 | Generar una tabla de resultados para revisar manualmente todos de los picos de cada analito y el patrón interno de un lote. Para el análisis cuantitativo, revise también las curvas de calibración, las estadísticas de la muestra y los gráficos de métricas. |
| 14 | Crear un informe en Analyst Reporter. | Generación de informes | Generar un informe utilizando las plantillas de informe proporcionadas para los resultados generados y revisados. Para informes específicos del análisis cualitativo, se utiliza el conjunto de plantillas de informe etiquetadas con la búsqueda de biblioteca. |

Instrucciones de funcionamiento: Hardware

4



¡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 8](#).

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 corriente del espectrómetro de masas 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.
- El cable Ethernet está conectado al espectrómetro de masas y al ordenador.

1. Encienda el interruptor de corriente del espectrómetro de masas. Consulte [Figura 2-2 en la página 23](#).
2. Encienda el ordenador.
3. Abra el software Analyst[®].

Restablecimiento del espectrómetro de masas

1. Detenga las exploraciones en curso y, a continuación, desactive el flujo de la muestra al espectrómetro de masas.
2. En el software Analyst[®], desactive el perfil de hardware si está activo.
3. Mantenga pulsado el botón **Reset** durante cinco segundos.

Se oye un clic cuando se activa el relé. Después de unos tres minutos, el espectrómetro de masas alcanza la presión de funcionamiento.

Apagado y ventilación 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.

Instrucciones de funcionamiento: Hardware

Nota: Si se debe desconectar el suministro de gas, libere la presión de las líneas de gas antes de desconectarlo.

¡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[®], desactive el perfil de hardware si está activado.
4. Cierre el software.
5. (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.

- a. Mantenga pulsado el botón **Vent** durante tres segundos.

El LED de vacío comienza a parpadear rápidamente (más rápidamente que durante el bombeo). La bomba turbo deja de girar gradualmente.
 - b. Deje ventilar el sistema durante 15 minutos.
6. Apague el interruptor de corriente del espectrómetro de masas.
 7. Desconecte el cable de alimentación principal del espectrómetro de masas de la toma de electricidad.
 8. (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



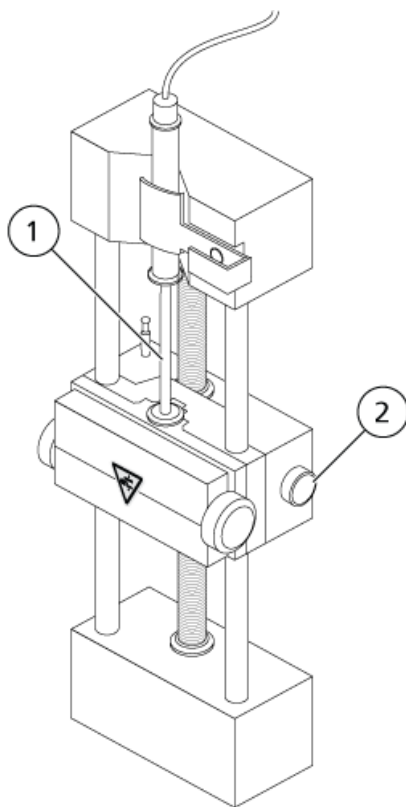
¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Tenga cuidado al manipular la jeringa. La punta de la jeringa es muy afilada.



¡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 4-1](#).

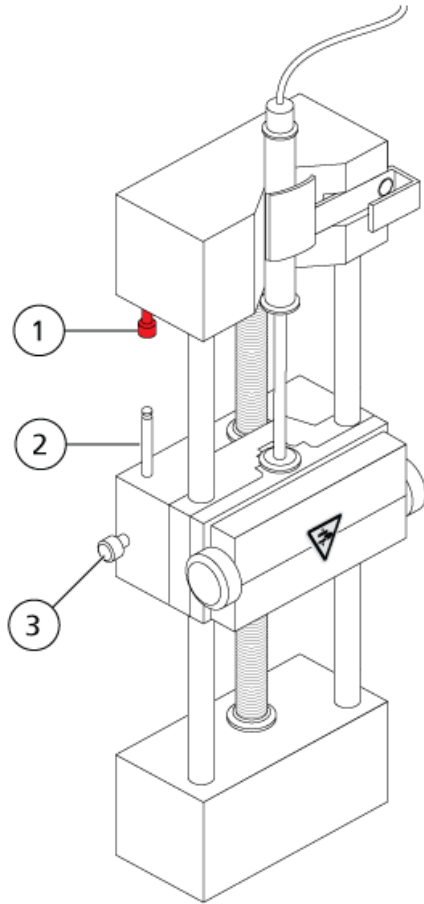
Figura 4-1 Bajada de la jeringa



| 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 4-2](#).

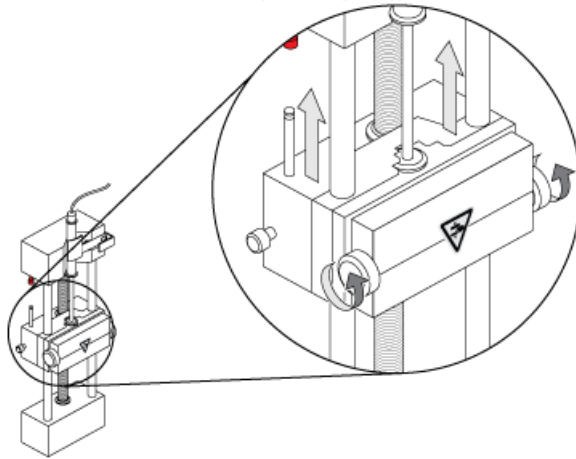
Figura 4-2 Tope automático de la jeringa



| 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 4-3](#).

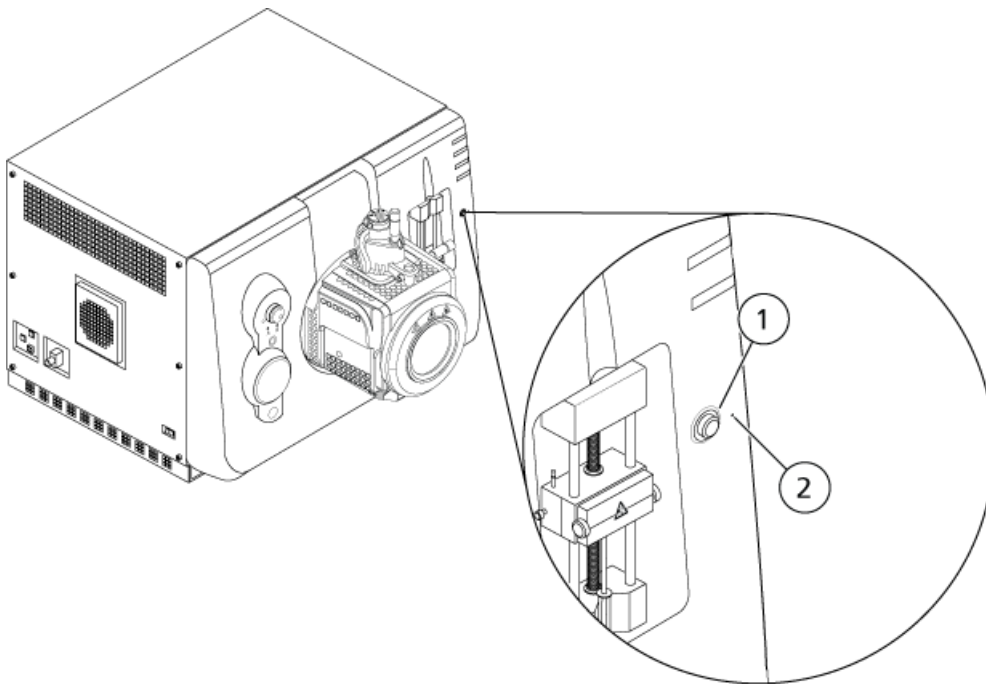
Figura 4-3 Tornillos de la bomba de jeringa



5. Asegúrese de que el espectrómetro de masas y la bomba de la jeringa están activados en el software.

Nota: Para su uso manual posterior, en el espectrómetro de masas, pulse el botón del lado derecho de la bomba de la jeringa para iniciar el flujo. Consulte [Figura 4-4](#). El LED situado junto al botón parpadea cuando la bomba de la jeringa está en uso. El flujo de la bomba de la jeringa también se puede controlar de forma automática mediante el software Analyst®.

Figura 4-4 LED de la bomba de la jeringa



| Artículo | Descripción |
|----------|---|
| 1 | Botón de activación y desactivación de la bomba de la jeringa |
| 2 | LED de estado de la bomba de la jeringa |

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

Conexión de la válvula desviadora

La válvula desviadora integrada, ubicada junto a la fuente de iones, puede conectarse en modo de inyector o de desviador. Para configurar la válvula, acceda a la pestaña **Configuration** y asegúrese de que la casilla de verificación **Use integrated injector/diverter valve** esté activada. Consulte [Adición de dispositivos a un perfil de hardware en la página 59](#).

PRECAUCIÓN: Posible resultado erróneo. No pulse el botón de la válvula desviadora durante una ejecución. Al hacerlo, pueden generarse datos erróneos.

Conexión de la válvula desviadora en modo inyector

Cuando la válvula está en la posición A, la muestra atraviesa el bucle externo. Cuando la válvula cambia a la posición B, la muestra se inyecta.

- Conexión de la válvula desviadora para el modo inyector.

Figura 4-5 Válvula desviadora, modo inyector posición A

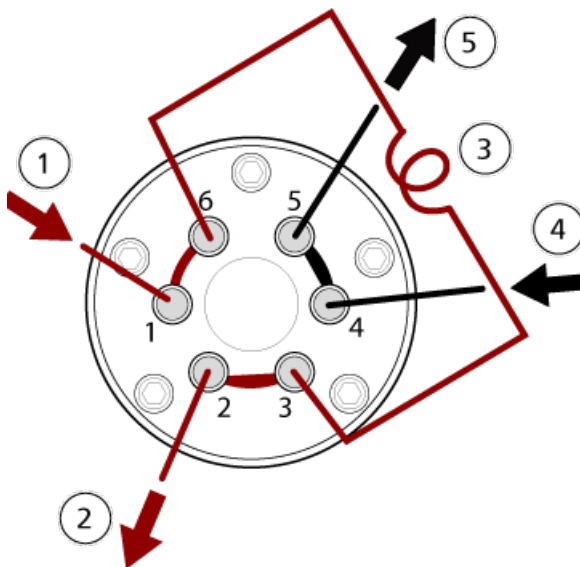
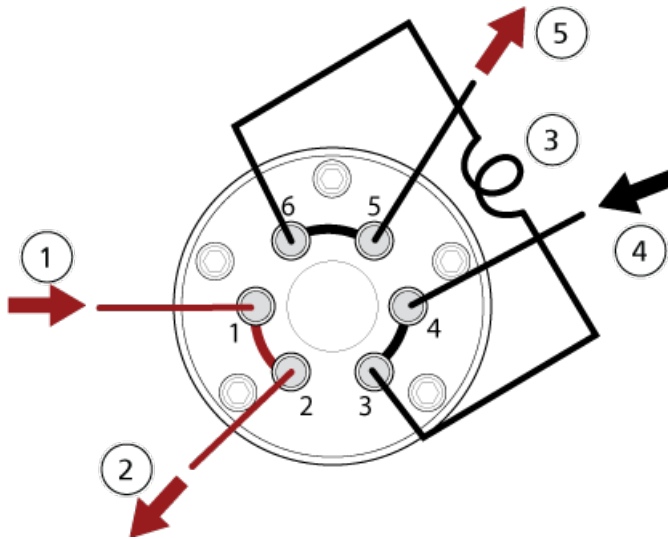


Figura 4-6 Válvula desviadora, modo inyector posición B



| Artículo | Descripción |
|----------|--|
| 1 | Entrada de muestra |
| 2 | Salida de residuos |
| 3 | Bucle de la muestra (puertos 3 y 6) |
| 4 | Entrada de fase móvil |
| 5 | A columna (o al espectrómetro de masas, si la columna no está instalada) |

Conexión de tubos de la válvula desviadora en modo de desviador

Cuando la válvula se encuentra en la posición A, el flujo va a los residuos. Cuando la válvula cambia a la Posición B, el flujo va al espectrómetro de masas.

- Conecte la válvula para el modo de desviador.

Figura 4-7 Válvula desviadora, modo desviador posición A

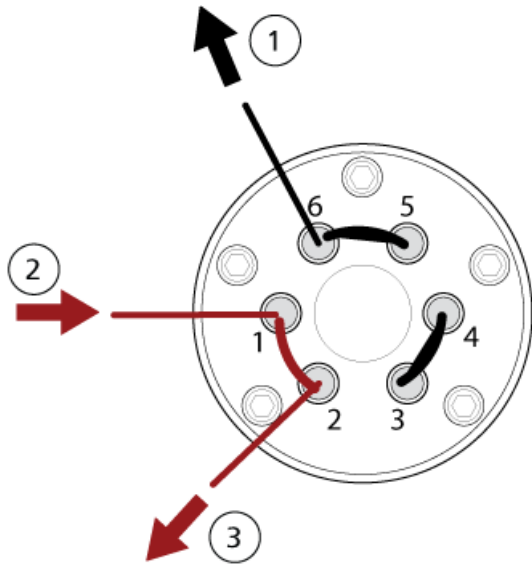
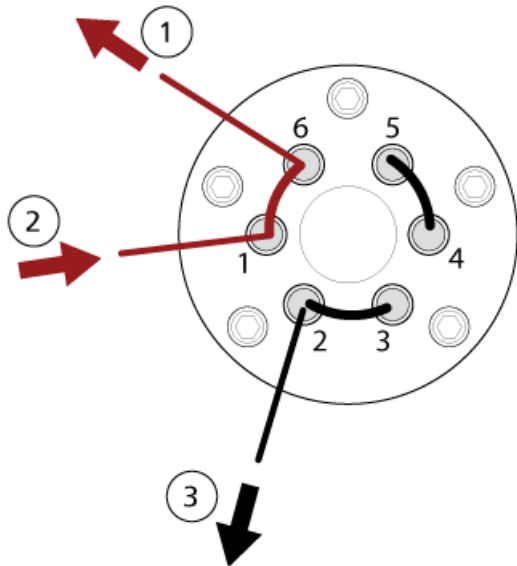


Figura 4-8 Válvula desviadora, modo desviador posición B



| Artículo | Descripción |
|----------|---------------------------|
| 1 | Al espectrómetro de masas |
| 2 | Desde la columna |
| 3 | Salida de residuos |

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.

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 se vayan a utilizar en el método. 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.

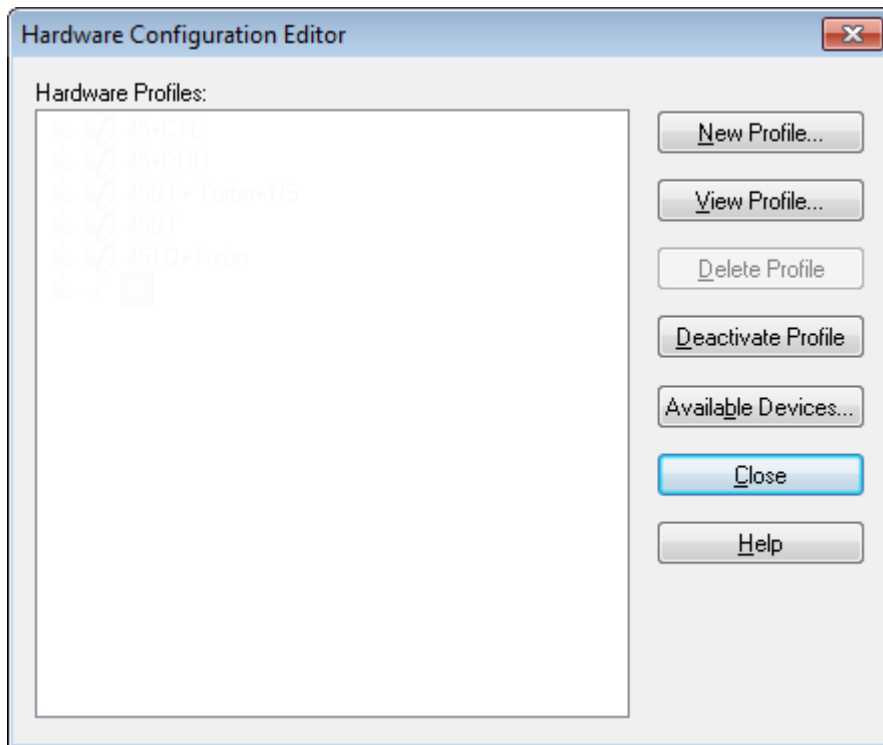
Para obtener información acerca de la configuración de conexiones físicas, consulte la *Guía de configuración de dispositivos periféricos*. Para ver una lista de los dispositivos compatibles, consulte la *Guía de instalación del software* de Analyst®.

Creación de un perfil de hardware

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

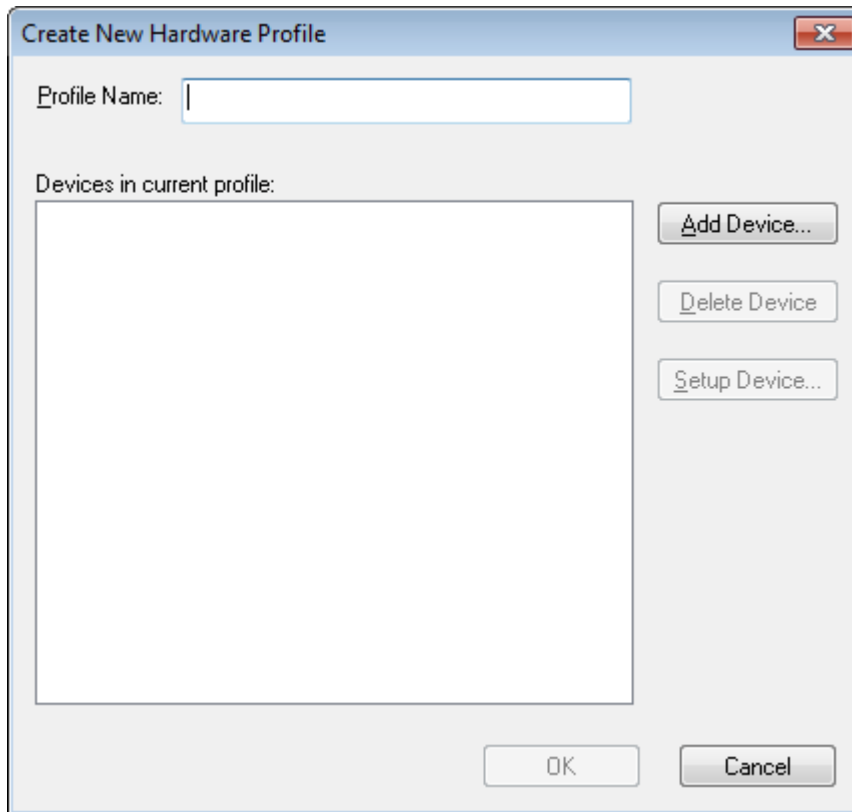
1. En la barra de navegación, en **Configure**, haga doble clic en **Hardware Configuration**.

Figura 5-1 Cuadro de diálogo Hardware Configuration Editor



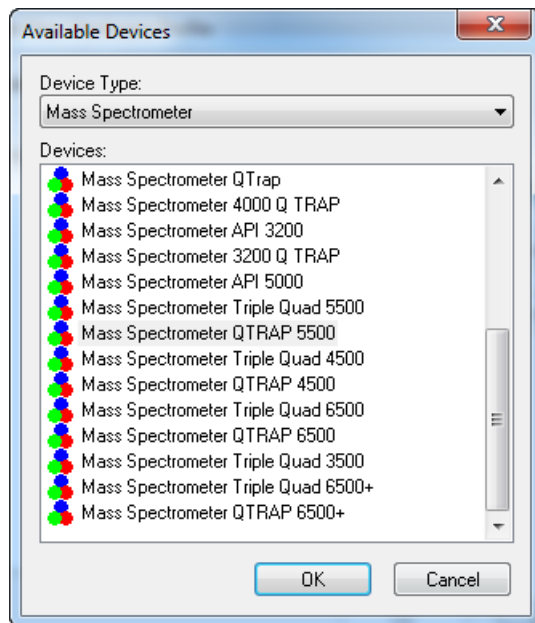
2. En el cuadro de diálogo Hardware Configuration Editor, haga clic en **New Profile**.

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**.
8. (Opcional) Para configurar el espectrómetro de masas para la válvula desviadora, en la pestaña **Configuration**, seleccione la casilla **Use integrated injector/diverter valve**.
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 59](#).
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.

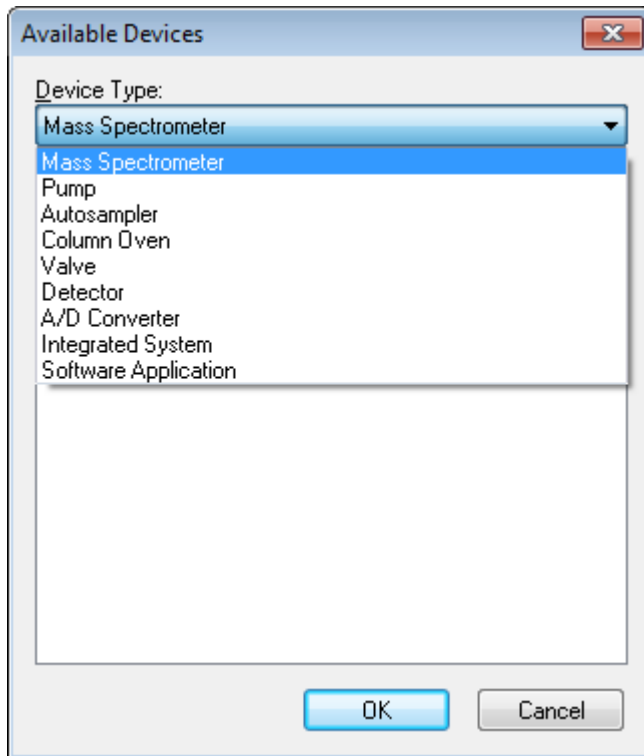
Solo los dispositivos configurados en el perfil de hardware activo y seleccionados en el cuadro de diálogo Add/Remove Device Method se muestran como iconos en el panel Acquisition Method Browser.

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**.

Nota: Recuerde agregar un espectrómetro de masas. Para obtener más información, consulte [Creación de un perfil de hardware en la página 55](#).

5. En el cuadro de diálogo Available Devices, seleccione el dispositivo en la lista **Device Type** y, a continuación, haga clic en **OK**.

Figura 5-4 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. Cuando se utiliza un cable de expansión en serie, el número seleccionado en el perfil es el número del cable más dos.

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 61](#).

¡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 o la dirección IP asignados al dispositivo sean correctos.

¡Sugerencia! En ordenadores con dos puertos serie integrados, el primer puerto de la tarjeta de expansión de puerto serie normalmente es COM3, incluso aunque el cable indique P1.

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.

Espere 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

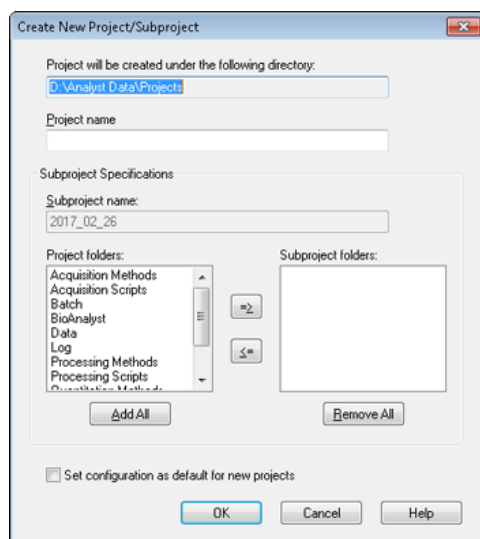
Antes de empezar un experimento, decida en qué lugar almacenará los archivos relacionados con este. Utilice proyectos y subproyectos para cada experimento con el fin de gestionar mejor los datos y comparar los resultados. Por ejemplo, puede utilizar subproyectos para almacenar los resultados de fechas 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 5-5 Cuadro de diálogo Create New Project/Subproject



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**.

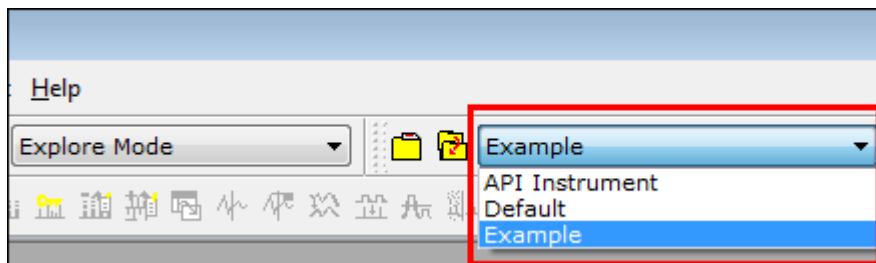
Se abrirá el cuadro de diálogo Copy Subproject.

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 5-6 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 o Quantitate utilizando los archivos de datos de ejemplo. Los archivos de ejemplo se ordenan en subcarpetas por tipo de espectrómetro y área de aplicación.

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. Para recuperar la carpeta API Instrument, haga lo siguiente:

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 instrument performance** semanalmente o tras limpiar el espectrómetro de masas, con el fin de confirmar que el sistema funciona correctamente. Por lo general, la calibración y resolución de los sistemas de triple cuádrupolo serán correctas durante un periodo de tres a seis meses, a menos que el sistema pierda vacío. En sistemas QTRAP[®], la resolución será correcta durante un periodo de tres a seis meses, pero no la calibración, que deberá realizarse una vez al mes aproximadamente. Si el sistema pierde vacío, compruebe la calibración y resolución antes de utilizarlo. Para obtener más información sobre el ajuste y la calibración, consulte la *Guía para usuarios avanzados* y el *Tutorial de ajustes manuales*.

¡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.
- Jeringas herméticas a los gases de serie de 5 ml, 1 ml y 250 µl.
- Tubo de muestra PEEK rojo.

Verificación del rendimiento del instrumento

El siguiente procedimiento describe cómo verificar o ajustar el rendimiento del espectrómetro de masas. Para obtener información sobre el resto de las opciones de rendimiento del instrumento, consulte la Ayuda. Consulte [Soluciones e iones de calibración](#).

1. En la barra de navegación, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
2. Active la bomba de la jeringa y, a continuación, ejecute un método de calibración. Confirme que el cromatograma de iones totales (TIC) es 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. Haga clic en **Verify instrument performance**.
5. Haga clic en **Next**.

6. Haga clic en **Approved Tuning**.
7. Haga clic en **Next**.
8. Seleccione una solución de ajuste en la lista **Tuning Solution**.

En función de la solución seleccionada, los modos disponibles serán unos u otros.

- a. Haga clic en una polaridad.
 - b. (Si está disponible) Haga clic en **Q1** y **Q3** en la sección **Quad**.
 - c. (Si está disponible) Haga clic en las velocidades de análisis necesarias.
 - d. (Si están disponibles) Haga clic en las velocidades de análisis en la sección **LIT**.
 - e. (Si está disponible) Haga clic en **Excitation** en la sección **MS/MS/MS**
9. Haga clic en **Next**.
 10. Si se abre la página **Select a mode**, seleccione **Automatic**.
 11. Haga clic en **Next**.
 12. Haga clic en **GO**.

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

13. Si procede, en función de las opciones seleccionadas, cambie las soluciones para los diferentes tipos de análisis y polaridades cuando se le indique.

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 incluye la ubicación de los archivos de datos y de las copias de seguridad de configuraciones del instrumento, así como los cambios detallados realizados durante la optimización y los resultados de estos.

Results Summary también muestra un informe de verificación. Este informe contiene una instantánea del espectro de masas para cada masa relevante de los modos de análisis que se están verificando. El espectro se etiqueta con la masa objetivo, dónde se ha detectado la masa, el cambio de masa, la anchura de pico y la intensidad de pico. El espectro se puede utilizar como registro visual de la forma de pico o del rendimiento del modo de análisis. A continuación del espectro figura una tabla en la que se resumen los 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.

los usuarios aprenderán cómo hacer lo siguiente:

- Optimizar automáticamente el analito utilizando el asistente Compound Optimization.
- Elegir entre infusión y análisis de inyección de flujo (FIA).
- Optimizar los parámetros:
 - Si se elige el análisis de infusión, utilice un método de infusión para optimizar los parámetros dependientes de los compuestos.
 - Si se elige el análisis de FIA, utilice FIA para optimizar los parámetros dependientes de los compuestos y de la fuente de iones.

En este tutorial se utiliza minoxidil, tolbutamida, reserpina y rescinamina como compuestos de ejemplo. Se pueden utilizar otros compuestos, pero deben ajustarse los métodos en consecuencia.

El usuario también puede optimizar los compuestos manualmente.

Requisitos previos

- Ajuste y calibración del espectrómetro de masas.
- (Para análisis FIA) Está disponible una plantilla para el método de adquisición.
- (Para análisis FIA) Una bomba de LC y un procesador de muestras automático están conectados y configurados en el perfil de hardware.
- Si el sistema tiene una bomba de jeringa integrada, en el perfil de hardware está configurada una bomba de jeringa.
- Todos los dispositivos periféricos necesarios, incluidos los componentes de LC, están configurados en el perfil de hardware, en caso necesario.

Materiales necesarios

- Una jeringa, preferiblemente de 1,0 ml.
- (Para análisis FIA) Fase móvil: 1:1 acetonitrilo:agua + 2 mM de acetato de amonio + 0,1 % de ácido fórmico.

Nota: Los usuarios pueden elegir una fase móvil diferente en función de las propiedades experimentales del compuesto.

- Bomba de LC y automuestreador.
- (Para análisis FIA) Viales para procesador de muestras automático.

Tabla 7-1 Compuestos y pesos moleculares

| Compuesto | <i>m/z</i> |
|-------------|------------|
| Minoxidil | 210,2 |
| Tolbutamida | 271,3 |
| Reserpina | 609,4 |
| Rescinamina | 635,4 |

Tabla 7-2 Valores estimados para las concentraciones de inicio

| Sistema | Concentration |
|---------------------------------|---------------|
| Sistema QTRAP® 5500 | 10 ng/ml |
| Sistema SCIEX Triple Quad™ 5500 | 10 ng/ml |

Acerca de la optimización automática

La optimización automática comprueba primero la presencia de los compuestos. Los voltajes de los diferentes parámetros de la ruta iónica se incrementan o reducen de forma gradual para determinar la intensidad de señal máxima (análisis Q1) de cada ion. Durante el proceso de optimización, se genera y muestra un archivo de texto. Este archivo registra los diferentes experimentos realizados y los valores óptimos para cada parámetro. También se genera una carpeta de archivos en la que se almacenan todos los experimentos realizados y a la que puede acceder abriendo la carpeta de archivos de datos en el modo Explorar. Para cada experimento realizado, también se genera un método de adquisición que se guarda en la carpeta de métodos de adquisición.

Durante el proceso de optimización, puede elegir la forma de seleccionar el ion precursor y los correspondientes iones producto.

Tipos de métodos de introducción de muestras

Infusión

La infusión consiste en introducir un flujo continuo de muestra con caudales bajos en la fuente de iones mediante el uso de una bomba de jeringa. Durante el proceso de optimización de la infusión, el software puede seleccionar los iones precursores y producto, así como optimizar el potencial de desagrupación, la energía de colisión y el potencial de salida de la celda de colisión. Los voltajes de los parámetros de la ruta iónica se incrementan o reducen de forma gradual para determinar la intensidad de señal máxima de cada ion precursor y producto.

Utilice la optimización de la infusión para optimizar los parámetros dependientes de los compuestos únicamente con caudales muy inferiores a los utilizados durante el análisis LC-MS/MS.

FIA

FIA consiste en la inyección de una muestra por parte del procesador de muestras automático en el espectrómetro de masas utilizando LC. Durante el proceso de optimización de FIA, se llevan a cabo varias inyecciones de muestra para los diferentes tipos de parámetros dependientes de los compuestos o de la fuente de iones, que varían entre las diferentes inyecciones. La optimización del compuesto FIA optimiza los parámetros mediante la realización de experimentos en bucle en sucesión. Primero se optimiza un parámetro dependiente del compuesto y, después, el siguiente parámetro dependiente del compuesto. FIA optimiza los parámetros dependientes de la fuente de iones mediante una inyección para cada valor.

Los parámetros de los compuestos deben reducirse utilizando, como mínimo, dos ciclos FIA adicionales. Utilice la optimización FIA para optimizar los parámetros dependientes tanto de la fuente de iones como de los compuestos, utilizando LC con caudales más elevados.

Tabla 7-3 Diferencias entre los métodos de introducción de muestras

| Método | Dispositivos necesarios | Parámetros | Rango de caudales típicos |
|----------|--------------------------------|---|---------------------------|
| Infusión | Bomba de jeringa | Dependientes de los compuestos | 5µl/min a 25µl/min |
| FIA | Bomba de LC y automuestreador. | Dependientes de los compuestos y la fuente de iones | 25 µl/min a 1000 µl/min |

Durante la optimización, se genera un archivo de texto que el sistema muestra a continuación. Este archivo registra los diferentes experimentos realizados y los valores óptimos para cada parámetro. También se genera una carpeta de archivos en la que se almacenan todos los archivos de datos. Para cada experimento realizado, también se genera un método de adquisición, que se guarda en la carpeta de métodos de adquisición.

Optimización automática de un analito mediante infusión

En esta sección, los usuarios aprenderán a realizar una optimización MS/MS automática utilizando la infusión con un ión precursor conocido y un ión producto desconocido.

Confirmación de la presencia de compuestos

Confirme la presencia de los compuestos de interés antes de continuar con la optimización automática.

1. En el software Analyst[®], cree un proyecto.
2. Active el perfil de hardware.
3. Infunda el compuesto en una solución con un caudal de entre 5 µl/min. y 10 µl/min.
4. En la barra de navegación, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
5. En el campo con la lista de métodos, haga clic en **Syringe Pump Method**.

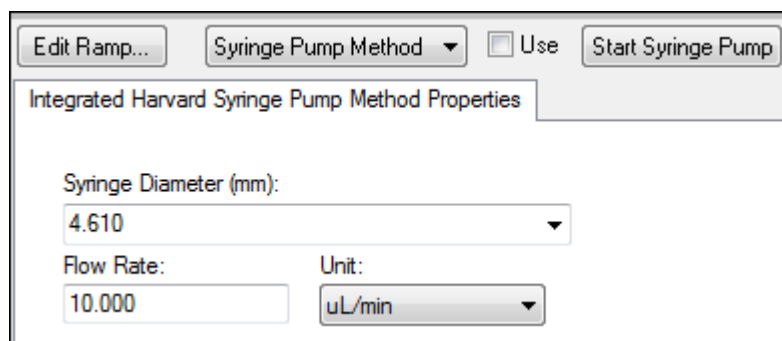
Optimización automática

6. En la pestaña Syringe Pump Method Properties, especifique los valores de los parámetros correspondientes. Consulte la [Tabla 7-4](#).

Tabla 7-4 Pestaña Syringe Pump Method Properties

| Parámetro | Valor típico |
|------------------|---|
| Syringe Diameter | Dependiente de la jeringa. El valor para una jeringa de 1,0 ml es de 4,610 mm |
| Flow Rate | 10 |
| Unit | µl/min. |

Figura 7-1 Pestaña Syringe Pump Method Properties

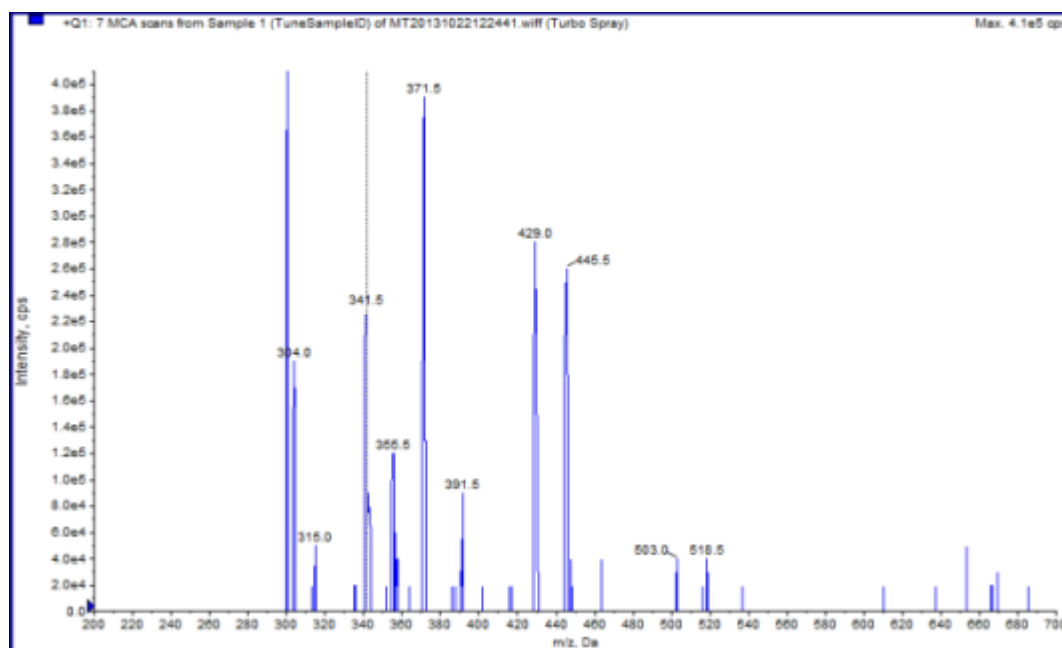


7. Haga clic en **Start Syringe Pump**.
8. Seleccione **MS Method** en la lista de métodos.
9. Haga clic en **Start**.
10. Espere hasta que aparezca un TIC uniforme a la izquierda y picos a la derecha. A continuación, haga clic en **Stop**.
11. Active la casilla de verificación **MCA**.
12. Escriba **10** en el campo **Cycles**.
13. Haga clic en **Start**.

Cuando finalicen los diez análisis, el gráfico debería mostrar las masas de los cuatro compuestos como iones.

Nota: Las intensidades de los compuestos deberían ser mucho mayores que los picos de ruido más pequeños, aunque no tanto como para que no se pueda ver ningún pico de ruido. En el primer caso, puede que el pico no sea un compuesto real. En el segundo caso, puede que la concentración sea muy elevada y esto impida que el software realice la optimización adecuadamente.

Figura 7-2 Iones de los compuestos



Realización de una optimización MS/MS y MS automática utilizando la infusión con un ion precursor conocido y un ion producto desconocido

La optimización automática para los análisis MS/MS optimiza determinados parámetros dependientes de los compuestos para una o más transiciones de MRM. El software detecta el ion de interés y optimiza así los parámetros dependientes de los compuestos para obtener la máxima sensibilidad para el compuesto. El software eleva la CE y selecciona los fragmentos más intensos que cumplan todos los criterios de selección de ion producto.

Si la señal del análisis Q1 inicial es demasiado alta, el software intentará reducir el CEM para mantener los iones dentro del rango del detector. Si la señal sigue siendo demasiado alta después de reducir el CEM, el proceso se detiene y se muestra un mensaje de error. Diluya la solución y reinicie la optimización. Asegúrese de purgar la línea de infusión. Los parámetros de la última optimización cuantitativa se almacenan.

1. Asegúrese de que se ha instalado la concentración de solución adecuada en la bomba de la jeringa y que la bomba de la jeringa se ha activado. Si se ha integrado una bomba de jeringa y se ha activado, el LED de estado de la bomba de la jeringa parpadea.

La bomba de la jeringa debe estar activada en la ventana Manual Tune antes de que se inicie la optimización del compuesto.

2. En la barra de navegación, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Compound Optimization**.
3. En la página Instrument Settings, en la sección **Inlet**, haga clic en **Infusion**.
4. En la sección **MS/MS Analysis**, haga clic en la sección **Mass Spectrometer**.

Optimización automática

5. Haga clic en **Next**.
6. En la página Ions to use in MS/MS Analysis, seleccione los valores de los parámetros correspondientes. Consulte la [Tabla 7-5](#).

Tabla 7-5 Ejemplo de parámetros para usar en la página MS/MS Analysis

| Parámetro | Valor |
|-----------------------|-------------|
| MW Ion: Search Window | 2,500 |
| Resolution | Unit |
| Polarity | Positive |
| Ion producto | Auto Select |
| Resolution | Unit |

Nota: El algoritmo de optimización busca el pico más intenso en la ventana de búsqueda especificada. Si el pico más intenso en ese intervalo no es la masa de interés, el software realiza la optimización utilizando el ion incorrecto.

7. Haga clic en **Criteria**, junto a la opción **Auto Select**.
8. En el cuadro de diálogo Product Ion Auto Selection Criteria, escriba los parámetros correspondientes. Consulte la [Tabla 7-6](#).

Tabla 7-6 Ejemplo de parámetros del cuadro de diálogo Product Ion Auto Selection Criteria

| Parámetro | Parámetro | Valor |
|--|-----------|---|
| From the Most Intense (peaks) | 3 | El número de picos de fragmento que se va a optimizar. El algoritmo genera un espectro de análisis de ion producto mientras eleva la CE en el modo MCA. En este ejemplo, el algoritmo toma los tres iones de fragmentación más intensos del espectro y, a continuación, prosigue con la optimización MS/MS únicamente en esos fragmentos. Para los compuestos desconocidos, seleccione más picos. |
| Build final method using (most intense peaks) | 2 | El número de iones de fragmentación por ión precursor (compuesto objetivo) que se va a incluir de forma automática en el método de adquisición. El número especificado define el número de transiciones de MRM que se incluirán para cada compuesto objetivo en el método. El orden de preferencia se basa en la intensidad del ión fragmentado. Dos es un mejor valor inicial que uno, ya que, normalmente, son necesarios dos iones producto para la cuantificación. Comience con tres por si hubiera algún problema con uno de los dos mejores. Vuelva y encontrará el tercero ya identificado. Para los compuestos desconocidos, seleccione más picos para su uso en caso de interferencia. |
| Exclude Product Ions within \pm (Da of Precursor Ion m/z) | 20.000 | El valor Da que define el intervalo de exclusión alrededor del ión precursor, de forma que los iones de fragmentación que entren dentro de este intervalo no serán seleccionados para la optimización MRM. Por ejemplo, si el usuario escribe ± 5 Da para un ion precursor con un valor m/z de 500, se excluye cualquier fragmentación dentro del intervalo de m/z de 495 a 505. Esto evita que el ion precursor se optimice como un ion producto. |
| Min. Mass for Product Ion (Da) | 60.000 | La masa de fragmento más pequeña que se va a tener en cuenta para la optimización. Utilice esta opción para reducir o ampliar el intervalo de iones de fragmentación que se van a tener en cuenta a partir de la masa del ión precursor. |
| Threshold for Product Ion (cps) | 100.000 | Número mínimo de recuentos de un ión producto para que se tenga en cuenta. |

9. Haga clic en **OK** para guardar los cambios en los criterios de selección.
10. Haga clic en **Next**.
11. En el cuadro de diálogo Target Components, especifique los valores de los parámetros correspondientes. Consulte la [Tabla 7-7](#).

Nota: El nombre del compuesto debe ser único para cada compuesto o transición.

Tabla 7-7 Ejemplo de parámetros del cuadro de diálogo Target Compounds

| Compuesto objetivo | Campo | Valor |
|--------------------|---------------|--------------|
| Reserpine | Compound Name | Reserpine |
| | MW (Da)* | 609,3 |
| | No. Charges | 1 |
| Minoxidil | Compound Name | Minoxidil |
| | MW (Da)* | 210,2 |
| | No. Charges | 1 |
| Tolbutamide | Compound Name | Tolbutamide |
| | MW (Da)* | 271,3 |
| | No. Charges | 1 |
| Rescinamina (IS) | Compound Name | Rescinnamine |
| | MW (Da)* | 635,4 |
| | No. Charges | 1 |

*Indique las masas de iones exactas.

12. Haga clic en **Finish** para comenzar el proceso de optimización.

La pantalla muestra dos ventanas: una de archivo de texto y otra de adquisición. Puede que el usuario tenga que minimizar una de ellas para ver la otra. El experimento que se está ejecutando se mostrará en la parte superior de la ventana de adquisición. El eje X muestra el parámetro que se está optimizando en cada experimento. La ventana de archivo de texto se actualiza a medida que se generan los resultados.

Una vez finalizada la optimización, se crea un archivo de adquisición MRM y se le asigna el nombre [compuesto]_QOpt_FinalMRM_Pos.dam, donde [compuesto] es el primer compuesto de la página Target Components.

Revisión de los resultados de optimización

Una vez finalice la optimización, los parámetros optimizados se guardarán en el método de adquisición. Todos los archivos .dam y .wiff generados en el proceso de optimización se guardarán en la carpeta Acquisition Methods y en una subcarpeta de la carpeta Data del proyecto correspondiente. El nombre de la subcarpeta se genera utilizando el nombre del compuesto y la fecha.

1. Una vez finalizada la optimización, imprima el archivo de texto que contiene los parámetros optimizados para cada compuesto.

- Haga clic en **File > Open** y seleccione el archivo Reserpine_QOpt_FinalMRM.POS.dam.
- Compare los valores del archivo de texto con los del archivo .dam.
- Inspeccione el contenido de las siguientes carpetas:
 - Data:** examine todos los ciclos ejecutados durante la optimización. Compare un archivo .wiff con el valor optimizado que figura en el método o en los parámetros impresos.
 - Acquisition Method:** archivo Reserpine_QOpt_FinalMRM.POS.dam y otros archivos .dam creados durante la optimización.
 - Log:** archivo de informe (.rtf) que se muestra durante el proceso de optimización.

Optimización automática de un analito mediante FIA

Requisitos previos

- Identifique los iones de los compuestos y guarde el método de adquisición básico.
- Añada un procesador de muestras automático y una bomba de LC al método de adquisición básico. Si se utiliza el FIA para la optimización, estos dispositivos tienen que estar activos en el perfil de hardware.
- Cree un método de adquisición LC-MS/MS basado en el archivo Reserpine_QOpt_FinalMRM.POS.dam y, a continuación, asigne un nombre al nuevo método FIA_AutoOpt_Tutorial.dam.
- Asegúrese de que el proyecto seleccionado contiene el método de adquisición que se va a utilizar.

Nota: Aunque FIA se puede utilizar para optimizar parámetros dependientes de los compuestos, esto no suele hacerse, debido al número de ciclos necesario para obtener los valores óptimos de los parámetros.

- Introduzca una disolución con una mezcla de los cuatro compuestos en un automuestreador.

Es precisa una cantidad de muestra suficiente para examinar cada variable de cada parámetro, y tenga en cuenta que debe sobrar muestra. Por ejemplo, si la temperatura debe ser de 300, 400 y 500 °C, en el caso de que el volumen de inyección sea de 10 µl, se necesitarán más de 30 µl (inyección de 3 × 10 µl).

- Confirme que se ha seleccionado **LC Sync** en el método.

Nota: En el modo de sincronización de LC, el espectrómetro de masas se coordina con la acción del sistema de LC para comprobar que los datos se adquieren correctamente.

Figura 7-3 Método de adquisición con la opción LC Sync seleccionada

- Asegúrese de que los parámetros de la fuente de iones y de gas se establecen en niveles razonables para evitar que el espectrómetro de masas se contamine en la optimización. Para obtener más información, consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.

Optimización automática

- Ajuste el micrómetro horizontal en 5 mm.
- Configure el micrómetro vertical en la fuente de iones en función del caudal. Como punto de partida, use los parámetros de la siguiente tabla: para obtener más información, consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.

Tabla 7-8 Parámetros verticales de la fuente de iones

| Caudal | Parámetros verticales iniciales |
|-------------------------|---------------------------------|
| 1 µl/min a 20 µl/min | 10 mm |
| 20 µl/min a 250 µl/min | 5 mm |
| 250 µl/min a 500 µl/min | 2 mm |
| + 500 µl/min | 0 mm |

- Establezca los valores para el sistema de HPLC y utilice un volumen de inyección del procesador de muestras automático de 10 µl. Utilice la misma concentración o una inferior para el experimento de infusión.

Las bombas de LC deben estar configuradas para un ciclo isocrático sin columna. Los periodos MS y LC deben ser los mismos para obtener los datos adecuados.

El caudal y el porcentaje de las fases móviles utilizadas deben basarse en la columna LC empleada, en la cromatografía general y en la concentración de fase móvil aproximada a la que los compuestos de interés se eluyen.

- En la barra de navegación, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Compound Optimization**.
- En la página Instrument Settings, en función del sistema de LC que se vaya a utilizar, especifique los valores de los parámetros correspondientes. Consulte la [Tabla 7-9](#).

Tabla 7-9 Ejemplo de parámetros de configuración de instrumentos

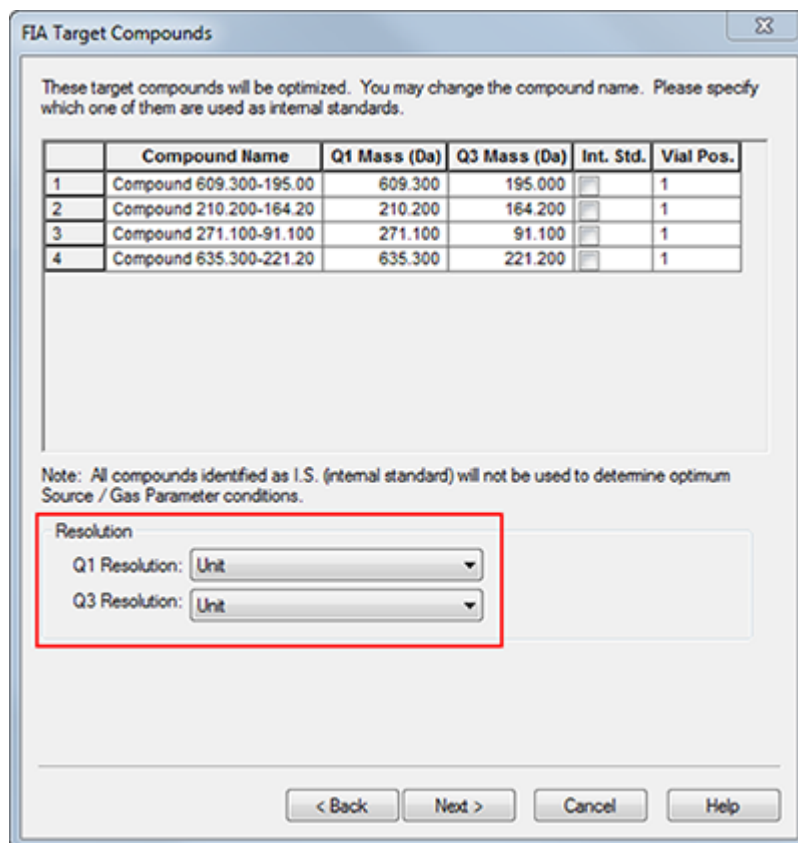
| Parámetro | Valor |
|---------------------|--------------------------|
| Inlet | FIA |
| Default Acq. Method | FIA_AutoOpt_Tutorial.dam |
| Rack Code | Autosampler specific |
| Rack Position | Autosampler specific |
| Injection Volume | 10 µl |
| Mass Spectrometer | MS/MS Analysis |

- Haga clic en **Next**.
- Asegúrese de que la casilla **Int. Std.** esté seleccionada.

Al seleccionar la casilla de verificación, se indica la MRM que corresponde a los estándares internos. Los estándares internos no se optimizan durante el proceso de optimización.

11. En la sección **Resolution**, seleccione **Unit** en los campos **Q1 Resolution** y **Q3 Resolution**.

Figura 7-4 Campos Resolution Q1 y Resolution Q3



FIA Target Compounds

These target compounds will be optimized. You may change the compound name. Please specify which one of them are used as internal standards.

| | Compound Name | Q1 Mass (Da) | Q3 Mass (Da) | Int. Std. | Vial Pos. |
|---|-------------------------|--------------|--------------|--------------------------|-----------|
| 1 | Compound 609.300-195.00 | 609.300 | 195.000 | <input type="checkbox"/> | 1 |
| 2 | Compound 210.200-164.20 | 210.200 | 164.200 | <input type="checkbox"/> | 1 |
| 3 | Compound 271.100-91.100 | 271.100 | 91.100 | <input type="checkbox"/> | 1 |
| 4 | Compound 635.300-221.20 | 635.300 | 221.200 | <input type="checkbox"/> | 1 |

Note: All compounds identified as I.S. (internal standard) will not be used to determine optimum Source / Gas Parameter conditions.

Resolution

Q1 Resolution: Unit

Q3 Resolution: Unit

< Back Next > Cancel Help

12. Haga clic en **Next**.

13. En la página FIA Source Parameters, especifique valores inferiores o superiores al valor original, siempre y cuando se mantengan dentro de las especificaciones.

Asegúrese de no utilizar valores muy reducidos, con el fin de mantener el sistema limpio. Consulte la [Tabla 7-10](#) para ver los parámetros que se pueden utilizar como punto de partida.

¡Sugerencia! Escriba los valores antes de seleccionar la casilla de verificación.

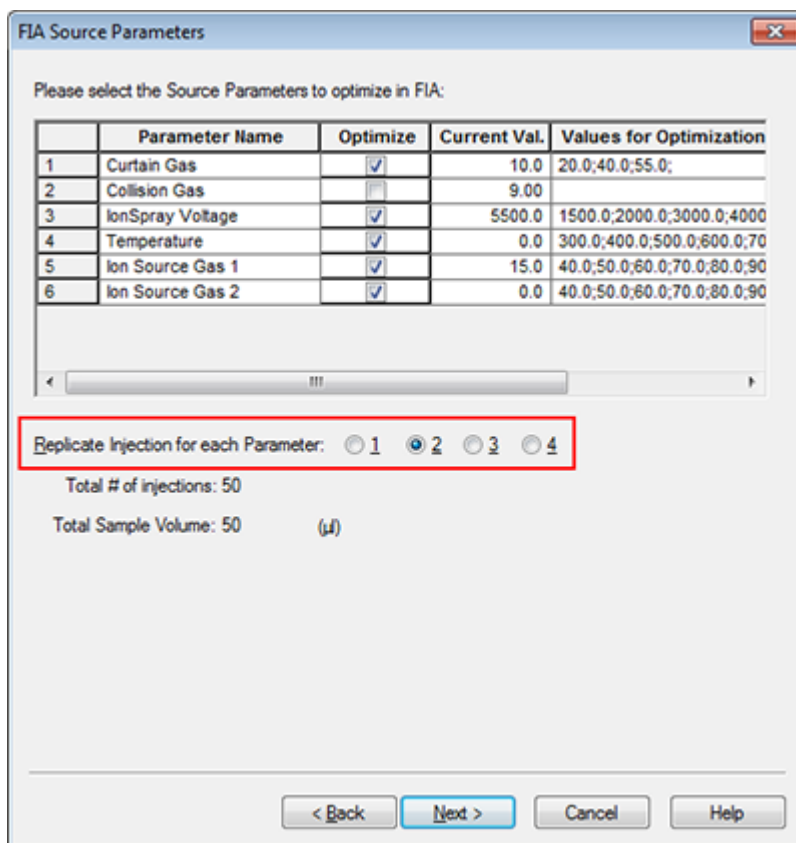
Tabla 7-10 Ejemplo de parámetros de la página FIA Source Parameters

| Parámetro | ¿Es necesario seleccionar la casilla Optimize? | Valores para la optimización |
|------------------|--|------------------------------|
| Curtain Gas | Sí | 20;40;55 |
| Collision Gas | No | — |
| IonSpray Voltage | Sí | 1500;2000;3000;4000;5000 |
| Temperature | Sí | 300;400;500;600;700 |
| Ion Source Gas 1 | Sí | 40;50;60;70;80;90 |
| Ion Source Gas 2 | Sí | 40;50;60;70;80;90 |
| Interface Heater | No | — |

14. Seleccione **1 o 2** junto a **Replicate Injection for each Parameter**.

El número total de inyecciones y el volumen total de la muestra se calcula en función de las especificaciones que se indiquen aquí. Tenga en cuenta el volumen total de la muestra necesario. En función del número de variables de cada parámetro que se vaya a optimizar, es posible que el volumen de muestra sea elevado, ya que cada variable es un método diferente.

Figura 7-5 Ejemplo del campo Replicate Injection para cada parámetro



15. Haga clic en **Next**.
16. En la página FIA Compound Parameters de cada analito, utilice los valores del parámetro del ejemplo provisto como punto de partida. Consulte la [Tabla 7-11](#).

Nota: Los valores de la [Tabla 7-11](#) son recomendaciones. Para obtener más información, consulte la Ayuda.

Tabla 7-11 Ejemplo de la página FIA Compound Parameters

| Parámetro | ¿Es necesario seleccionar la casilla Optimize? | Valores para la optimización |
|----------------------------|--|------------------------------|
| Potencial de desagrupación | Sí | 60;80;100;120;200 |
| Potencial de entrada | No | — |

Optimización automática

Tabla 7-11 Ejemplo de la página FIA Compound Parameters (continuación)

| Parámetro | ¿Es necesario seleccionar la casilla Optimize? | Valores para la optimización |
|---|--|------------------------------|
| Energía de colisión | Sí | 20;30;40;50;70;80;100 |
| Potencial de salida de la celda de colisión | Sí | 2;4;6;8;10;12 |

El número total de inyecciones y el volumen de la muestra dependiente se actualizan automáticamente. En comparación con los parámetros de la fuente de iones, que requieren una inyección por valor y replicación, los parámetros dependientes de compuestos solo requieren una inyección por parámetro. Se lleva a cabo un experimento en bucle para cada parámetro y los valores se alternan entre análisis dentro de una misma inyección.

Nota: No introduzca demasiados valores. Esto evitará la evaluación adecuada del parámetro.

17. Con la lista Compound, desplácese a otro compuesto y especifique los parámetros que desea optimizar.
18. Repita el paso 19 hasta que se proporcionen todos los parámetros de todos los compuestos.
19. Escriba **1,5** en el campo **Mass Spec. Duration**.

Nota: Este valor debe ser, como mínimo, el periodo de tiempo necesario para cada inyección.

Figura 7-6 Ejemplo del campo Mass Spec. Duration

The screenshot shows the 'FIA Compound Parameters' dialog box. At the top, it says 'Please select the Compound Parameters to optimize by FIA:'. Below that, there is a dropdown menu for 'Compound' set to 'Compound 609.300-195.000' and 'MRM: 609.300 - 195.000'. A table lists parameters to optimize:

| | Parameter Name | Optimize | Current Val. | Values for Optimization |
|---|-------------------------------|-------------------------------------|--------------|-----------------------------|
| 1 | Decustering Potential | <input checked="" type="checkbox"/> | 120.0 | 60.0;80.0;100.0;120.0;200. |
| 2 | Entrance Potential | <input type="checkbox"/> | 10.0 | |
| 3 | Collision Energy | <input checked="" type="checkbox"/> | 30.0 | 20.0;30.0;40.0;50.0;70.0;80 |
| 4 | Collision Cell Exit Potential | <input checked="" type="checkbox"/> | 15.0 | 2.0;4.0;6.0;8.0;10.0;12.0; |

Below the table, there are fields for 'Total # of Injections: 53' and 'Total Sample Volume: 53 (µl)'. The 'Mass Spec. Duration' field is highlighted with a red box and contains the value '1.5 (min)'. At the bottom, there are buttons for '< Back', 'Finish', 'Cancel', and 'Help'.

20. Haga clic en **Finish** para comenzar el proceso de optimización.

El software optimiza los parámetros especificados de la fuente de iones y los parámetros dependientes de los compuestos para obtener la máxima sensibilidad para la transición de MRM del compuesto. A medida que el software lleva a cabo la optimización, elabora un informe de **Compound Optimization**.

21. Para obtener parámetros optimizados, repita este procedimiento.

Nota: Normalmente, los parámetros de la fuente de iones y del gas tienen que reducirse utilizando un ciclo FIA adicional.

22. Abra el método FIA optimizado definitivo, llamado *_FIA_sample_1.

Nota: El software genera varios métodos de adquisición.

23. Guarde este método con un nombre más sencillo.

Instrucciones de funcionamiento: métodos de adquisición

8

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.

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 28](#).
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 85](#) y [Creación de un período en la página 86](#).

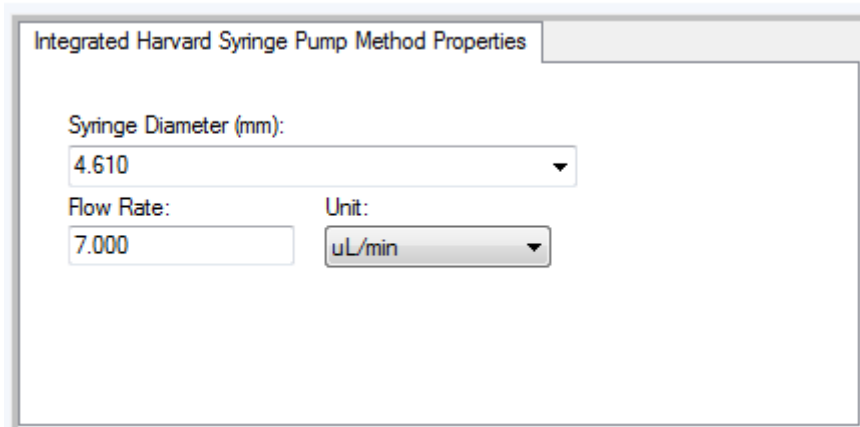
14. Haga clic en **File > Save**.

Configuración de la bomba de jeringa integrada

1. Confirme que la bomba de jeringa integrada está seleccionada en el perfil de hardware del dispositivo.
2. En el panel Acquisition method , haga clic en el icono **Syringe Pump**.

Se abrirá la pestaña Syringe Pump Method Properties en el Acquisition Method Editor.

Figura 8-1 Pestaña Syringe Pump Properties

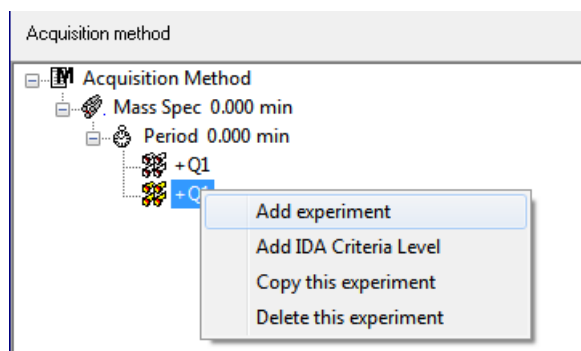


3. Escriba el diámetro de la jeringa en el campo **Syringe Diameter (mm)**.
4. Escriba el caudal en el campo **Flow Rate**.
5. Seleccione las unidades de caudal en la lista **Unit**.

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 8-2 Adición de un experimento



Instrucciones de funcionamiento: métodos de adquisición

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 periodo.

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.

Técnicas de análisis

MS: en los análisis MS, también denominados análisis MS individuales, los iones se separan en función de su relación masa-carga (m/z). Se puede utilizar un análisis MS individual para determinar el peso molecular de un compuesto. Los análisis MS individuales también se denominan análisis de estudio. Los análisis MS no proporcionan ninguna información relativa a la composición química de los iones, aparte de la masa. Realice análisis MS/MS o MS/MS/MS para obtener más información acerca de los iones.

MS/MS: los análisis MS/MS se utilizan para determinar una especie molecular.

- En el caso de análisis MS/MS en sistemas de triple cuadrupolo, la fragmentación del ion precursor se produce en la celda de colisión.
- Para los análisis MS/MS en los sistemas QTRAP[®], la fragmentación del ion precursor se produce en la celda de colisión o en la trampa lineal de iones.

Si se utiliza la suficiente energía, el ión precursor se fragmentará para producir iones producto característicos.

MS/MS/MS: los análisis MS/MS/MS de los sistemas de trampa lineal de iones (LIT) van un paso más allá que los análisis MS/MS. Los fragmentos que se producen en la celda de colisión se fragmentan aún más en la trampa lineal de iones para ofrecer más información estructural acerca del ión molecular.

Tipos de análisis del modo cuádrupolo

Los instrumentos de triple cuadrupolo ofrecen funciones de monitorización de reacciones múltiples (MRM) de gran sensibilidad, necesarias para los experimentos de cuantificación. Además, cuentan con tipos de análisis muy específicos, como análisis de iones precursores y de pérdida neutra que permiten realizar una búsqueda más avanzada de los componentes de las muestras.

Q1 MS (Q1): tipo de análisis completo que utiliza el primer cuadrupolo (Q1). Se devuelve la intensidad de los iones para cada masa del rango de análisis.

Q1 Multiple Ions (Q1 MI): tipo de análisis de anchura cero que utiliza el cuadrupolo Q1. Determina la intensidad de los iones solo para las masas especificadas.

Q3 MS (Q3): tipo de análisis completo que utiliza el tercer cuadrupolo (Q3). Se devuelve la intensidad de los iones para cada masa del rango de análisis.

Q3 Multiple Ions (Q3 MI): tipo de análisis de anchura cero que utiliza el cuadrupolo Q3. Determina la intensidad de los iones solo para las masas especificadas.

MRM (MRM): análisis MS/MS en el que un ion seleccionado por el usuario se transfiere por el cuádrupolo Q1 y se fragmenta después en la celda de colisión Q2. A continuación, el cuádrupolo Q3 selecciona qué ion fragmentado entra en el detector. Este modo de análisis se utiliza principalmente para la cuantificación.

Product Ion (MS2): análisis completo MS/MS en el que el cuadrupolo Q1 se fija para transmitir un ión precursor específico y el cuadrupolo Q3 analiza un rango de masa definido. Se utiliza para identificar todos los productos de un ión precursor concreto.

Precursor Ion (Prec): análisis MS/MS en el que el cuadrupolo Q3 se fija en una relación de masa-carga especificada para transmitir un ión producto específico y el cuadrupolo Q1 analiza un rango de masas. Se utiliza para confirmar la presencia de un ion precursor o, con mayor frecuencia, para identificar compuestos que comparten un ion producto común.

Neutral Loss (NL): un análisis MS/MS en el que el cuadrupolo Q1 y el Q3 analizan un rango de masas, con una diferencia de una masa fija. Se observa una respuesta si el ión elegido por el cuadrupolo Q1 se fragmenta perdiendo la masa fija (pérdida neutra) especificada. Se utiliza para confirmar la presencia de un ion precursor o, con mayor frecuencia, para identificar compuestos que comparten una pérdida neutra común.

Tipos de análisis en modo de LIT

Los análisis en modo de LIT utilizan el cuadrupolo Q3 como trampa lineal de iones. Los iones se capturan y almacenan en el cuadrupolo Q3 antes de analizarse fuera, lo que proporciona una mayor sensibilidad. Además,

Instrucciones de funcionamiento: métodos de adquisición

en la trampa lineal de iones se puede realizar el análisis MS/MS/MS, lo que proporciona más información sobre la muestra. Los tipos de análisis en modo de LIT se utilizan normalmente para mediciones cualitativas.

MS mejorada (EMS): los iones se analizan en el cuadrupolo Q1 hacia la trampa lineal de iones en la que se acumulan. Estos iones se analizan fuera del cuadrupolo Q3 para generar espectros de tipo MS únicos.

Multicarga mejorada (EMC): este análisis es parecido al análisis EMS, excepto en que antes de analizar los iones fuera de la trampa lineal de iones, hay un período de demora en el que los iones con estado de carga baja (principalmente iones con una sola carga) tienen preferencia para salir de la trampa lineal de iones. Cuando se analizan los iones retenidos, la población de iones con carga múltiple domina el espectro resultante.

Ion producto mejorado (EPI): este tipo de análisis se utiliza para obtener un espectro MS/MS de alta calidad en un ion específico. La fragmentación se realiza en la celda de colisión Q2 y por lo tanto proporciona el espectro MS/MS rico en información típico de la fragmentación de la disociación activada por colisión (CAD). En este modo de análisis, el ion precursor a fragmentar se selecciona primero en el cuadrupolo Q1 con un margen de masa de 1 a 4 Da de ancho, filtrando el resto de iones. El ion precursor se fragmenta en la celda de colisión Q2 mediante gas CAD. Los iones fragmentados generados se capturan en la trampa lineal de iones y luego se analizan a una de las tres velocidades de análisis, dependiendo de la resolución del fragmento de iones requerida.

Para los experimentos IDA, el campo **Product Of** está ajustado a 30 Da por defecto, valor que no se puede cambiar.

Resolución mejorada (ER): este análisis es parecido al análisis EMS, excepto en que se analiza una masa pequeña de 30 Da en torno a la masa precursora fuera de la trampa lineal de iones a la velocidad de análisis más baja, con el fin de producir un margen estrecho de los espectros mejor resueltos.

MS/MS/MS (MS3): el cuadrupolo Q1 selecciona un ion precursor que se fragmenta mediante disociación activada por colisión en la celda de colisión Q2. Todos los iones producto resultantes se transmiten a la trampa lineal de iones, donde es aislado un solo ion producto. El ión aislado se fragmenta aún más en la trampa lineal de iones, y los iones producto resultantes se analizan al salir de la trampa a una de las tres velocidades de análisis. Como con cualquier otra técnica de disociación inducida por colisión (CID) dentro de la trampa, hay un valor de corte de masa bajo para el segundo paso de MS/MS, debido a que el fragmento de menor masa y el precursor deben estar estables al mismo tiempo en la trampa. En sistemas QTRAP[®], esto produce una pérdida de iones inferior al 28 por ciento de la masa del ion precursor durante los experimentos MS3. Este fenómeno se conoce frecuentemente como regla de valor de corte de un tercio.

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 8-1](#).

Tabla 8-1 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 un rango de masas de 100 Da a 200 Da y un tamaño de paso de 0,1 Da, el espectrómetro de masas analiza de 99,95 a 100,05 (registrado como valor 100), de 100,05 a 101,15 (registrado como valor 101), de ... 199,95 a 200,05 (registrado como valor 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. |
| Centroid | En este modo, el espectrómetro de masas realiza el análisis igual que en el modo Profile, pero crea un centroide de los datos, sustituyendo los picos detectados por el centro de gravedad ponderado según la intensidad de cada pico. Los centroides de los datos tienen la ventaja de reducir notablemente el tamaño de archivo. La desventaja es que se pierde información relativa a la forma de pico y que, si los datos se han recopilado como un centroide, no se podrán alterar. Recomendamos utilizar el modo Profile y crear un centroide de los datos después de la adquisición. |

Instrucciones de funcionamiento: análisis y procesamiento de datos cuantitativos

9

En esta sección se describe cómo configurar el software Analyst[®] para analizar y procesar los datos cuantitativos. Los datos también se pueden procesar utilizando el software MultiQuant[™]. Le sugerimos que utilice el software MultiQuant[™] para cuantificar los datos. Consulte la documentación que acompaña al software MultiQuant[™].

Utilice los archivos de muestra de la carpeta Example para aprender a seleccionar muestras para su cuantificación, seleccionar consultas predefinidas y crear consultas específicas de tabla y cómo analizar los datos adquiridos. Para obtener más información, consulte la *Guía para usuarios avanzados*.

- Gráficos de métricas
- Disposición de una tabla de resultados

Análisis cuantitativo

El análisis cuantitativo se utiliza para determinar la concentración de una sustancia concreta en una muestra. Al analizar una muestra desconocida y compararla con otras muestras que contengan la misma sustancia en concentraciones conocidas (patrones), el software puede calcular la concentración de la muestra desconocida. El proceso consiste en crear una curva de calibración mediante el uso de los estándares y, a continuación, calcular la concentración de la muestra desconocida. Las concentraciones calculadas de cada muestra aparecen disponibles a continuación en la tabla de resultados.

Métodos de cuantificación

Un método de cuantificación es un conjunto de parámetros utilizados para generar picos en una muestra. El método de cuantificación puede incluir parámetros utilizados para localizar e integrar picos, generar curvas de patrones y calcular concentraciones desconocidas. Puede seleccionarse un método de cuantificación guardado anteriormente en el menú Quantitation del lote. El usuario puede crear un método de cuantificación antes de la adquisición de datos y, a continuación, aplicarlo a los datos cuantitativos automáticamente tras completarse el lote. Alternativamente, puede crear un método de cuantificación y aplicarlo después de la adquisición.

Para crear un método de cuantificación se pueden utilizar tres herramientas: Quantitation Wizard, Build Quantitation Method y Quick Quant.

Asistente de cuantificación

Si utiliza el asistente de cuantificación Quantitation Wizard, se genera una tabla de resultados al mismo tiempo que el método de cuantificación. Asimismo, se puede utilizar también un método de cuantificación existente para cuantificar los diferentes conjuntos de datos.

Diseñar método de cuantificación

La herramienta Build Quantitation Method no genera una Results Table de cuantificación, aunque el método se podrá utilizar posteriormente en el Quantitation Wizard para crear una Results Table. La herramienta Build

Quantitation Method también se puede utilizar para cambiar métodos de cuantificación existentes. Se trata del modo más flexible para crear un método de cuantificación. Consulte [Creación de un método mediante el editor de métodos de cuantificación en la página 91](#).

Cuantificación rápida

No se recomienda Quick Quant para la cuantificación de los resultados.

Quick Quant forma parte del Batch Editor. Use Quick Quant para agregar concentraciones de compuestos antes de la adquisición de datos. Debido a que la muestra no se ha adquirido, no se puede seleccionar una muestra representativa ni revisar los picos. Con este proceso, solo está definiendo los componentes del método.

Para utilizar un método de cuantificación guardado anteriormente, selecciónelo del menú Quantitation en el lote. Para obtener instrucciones sobre la creación de un lote, consulte [Creación y envío de un lote en la página 136](#).

Acerca de las tablas de resultados

En las tablas de resultados se resume la concentración calculada de un analito en cada muestra desconocida en función de la curva de calibración. Las tablas de resultados también incluyen las curvas de calibración, así como estadísticas de los resultados. El usuario puede personalizar la tabla de resultados y ver las tablas de resultados en diferentes disposiciones.

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

Métodos cuantitativos y tablas de resultados

Para los siguientes procedimientos, utilice datos de muestras instalados en la carpeta Example. La carpeta **Triple Quad** contiene los datos de archivos Mix_Batch_1 y Mix_Batch_2. Estos archivos de muestras se utilizan para demostrar la utilidad de gráficos métrico con el fin de aislar muestras problemáticas. Los iones analizados fueron reserpina (609,3/195,0), minoxidil (210,2/164,2), tolbutamida (271,1/91,1) y rescinamina (635,3/221,2), que es el patrón interno. Mix_Batch_1 no contiene errores en relación con la preparación de muestras, mientras que Mix_Batch_2 contiene una muestra de QC a la que se ha agregado el patrón interno dos veces (muestra QC2).

Creación de un método mediante el editor de métodos de cuantificación

| Requisitos previos |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• Seleccione el proyecto que contiene los datos que se va a cuantificar.• Cambio entre proyectos y subproyectos en la página 64 |

1. Asegúrese de que la carpeta Example está seleccionada.
2. En la barra de navegación, en **Quantitate**, haga doble clic en **Build Quantitation Method**.

Instrucciones de funcionamiento: análisis y procesamiento de datos cuantitativos

Se abrirá el cuadro de diálogo Select Sample.

3. Haga doble clic en la carpeta **Triple Quad** de la lista **Data Files**.
4. Seleccione **Mix_Batch_2.wiff**.

Las muestras del archivo de datos seleccionado aparecen en la lista **Samples**.

Nota: Si el campo **Compound ID** se rellenó para las muestras y los estándares internos en el método de adquisición, en la tabla **Internal Standards**, cuando seleccione un valor en el campo **Q1/Q3**, el campo **Name** se rellenará automáticamente.

5. Seleccione una muestra que proporcione una señal detectable para seleccionar parámetros de integración que se ajusten a todo el lote y, a continuación, haga clic en **OK**.
6. En la tabla **Internal Standards**, seleccione **rescinnamine** en la columna **Name**. En la columna **Q1/Q3**, seleccione **635.3/221.2**.
7. En la tabla **Analytes**, realice lo siguiente:
 - a. En la columna **Name**, seleccione **minoxidol** para las masas de la columna **Q1/Q3** de **210.2/164.188**, **tolbutamide** para **271.3/91.146** y **reserpine** para **609.4/195.039**.
 - b. En la columna **Internal Standard**, en la lista, seleccione **rescinnamine** como patrón interno que se asociará a cada analito.
 - c. Elimine **635.4/221.185** de la columna **Q1/Q3** de la tabla **Analytes**.

Nota: Si el campo Compound ID se rellenó para las muestras y los estándares internos en el método de adquisición, en la tabla **Analytes**, los campos **Name** y **Q1/Q3** se rellenarán automáticamente.

8. Haga clic en la pestaña **Integration**.

Los parámetros de integración predefinidos son adecuados para la mayoría de los picos.

9. Si la integración no es la adecuada, cambie el algoritmo. Consulte [Integración manual de picos en la página 103](#).
10. Haga clic en el icono **Show or Hide Parameters** para mostrar los algoritmos de integración adicionales.
11. Haga clic en la pestaña **Calibration**.

Los parámetros predefinidos son adecuados para estas muestras. El usuario puede cambiar los parámetros de ajuste, ponderación y regresión en función de las aplicaciones específicas.

12. Guarde el método de cuantificación.

Es posible utilizar el método nuevo cuando se crea un lote en el Batch Editor o cuando se use el asistente Quantitation Wizard para generar una Results Table.

¡Sugerencia! El método de cuantificación solo se puede usar en el proyecto actual, a menos que se copie en otro proyecto. Para ello, haga clic en **Tools > Project > Copy Data**. Se debe crear y seleccionar un proyecto nuevo para que esté disponible para su uso.

Creación de una tabla de resultados mediante el asistente de cuantificación

Requisitos previos

- Seleccione el proyecto que contiene los datos que se va a cuantificar.
- [Cambio entre proyectos y subproyectos en la página 64](#)

1. En la barra de navegación, en **Quantitate**, haga doble clic en **Quantitation Wizard**.

Se abrirá la página Create Quantitation Set - Select Samples.

2. Haga doble clic en la carpeta **Triple Quad** de la lista **Available Data**.
3. Seleccione **Mix_Batch_2. wiff**.
4. Haga clic en **Add All**.

Nota: Recomendamos a los usuarios que no procesen ni generen informes de los resultados de ninguna muestra de la que la adquisición finalice de manera anómala o inesperada.

5. Haga clic en **Next**.

Se abrirá la página Create Quantitation Set - Select Settings & Query.

6. Haga clic en **Select Existing: Query** en la sección **Default Query**.
7. Seleccione **Accuracy 15 %** en la lista **Query**.

Nota: Para crear una consulta al mismo tiempo, consulte [Creación de una consulta estándar \(opcional\) en la página 94](#).

Nota: El usuario es responsable de evaluar y validar la consulta que se utilizará en aplicaciones específicas.

8. Haga clic en **Next**.

Se abrirá la página Create Quantitation Set - Select Method.

9. Haga clic en **Choose Existing Method**.
10. Seleccione **PK Data_Mix.qmf** en la lista **Method**.
11. Haga clic en **Finish**.

Se abrirá la tabla de resultados.

¡Sugerencia! Para agregar o quitar muestras en la tabla de resultados, haga clic en **Tools > Results Table > Add/Remove Samples**.

12. Revise el tipo de muestra, la concentración real, la integración de picos, las curvas de calibración, el panel de estadísticas, el gráfico de métricas del patrón interno y otra información relacionada con la cuantificación de datos.
13. Guarde la tabla de resultados.

Nota: Recomendamos a los usuarios que no cambien los nombres de los archivos de datos (.wiff) si una tabla de resultados contiene muestras de ese archivo.

¡Sugerencia! Es posible crear informes con un formato adecuado a partir de una tabla de resultados mediante el software Reporter. Recomendamos al usuario que valide los resultados si se utiliza una plantilla de Reporter que contiene una consulta. Consulte [Software Reporter en la página 130](#).

Creación de una consulta estándar (opcional)

Los usuarios avanzados pueden utilizar varios métodos para crear una consulta y una consulta estándar. A continuación se muestra un ejemplo. Para obtener más información sobre la creación de consultas, consulte la Ayuda.

1. En la barra de navegación, en **Quantitate**, haga doble clic en **Quantitation Wizard**.
2. Seleccione muestras en la página Create Quantitation Set - Select Samples.
3. Haga clic en **Next**.
4. En la página Select Settings & Query, en la sección **Default Query**, seleccione **Create New Standard Query**.
5. Escriba un nombre de consulta.

Figura 9-1 Página de creación de un conjunto de cuantificación: seleccionar ajustes y consulta

Create Quantitation Set - Select Settings & Query

Please select the settings for the new results table and the default query (if any). Integration Algorithm: IntelliQuan

Settings to Use: Default

Default Query

None

Select Existing:
Query: Accuracy 15% Execute Query as Standard Query

Create New Standard Query
Name:

< Back Next > Finish Cancel Help

6. Haga clic en **Next**.

Figura 9-2 Página de creación de un conjunto de cuantificación: crear consulta predeterminada

Please specify the concentrations/sample names and the corresponding allowed accuracy variations (in percent). You can leave any of the "variation" fields empty as desired.

Maximum Allowed Accuracy Variation for QCs (%) Maximum Allowed Accuracy Variation for Standards (%)

| Concentration | Max. Variation |
|---------------|----------------|
| 4.000000 | |
| 40.000000 | |
| 400.000000 | |
| 4000.000000 | |
| 12000.000000 | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |

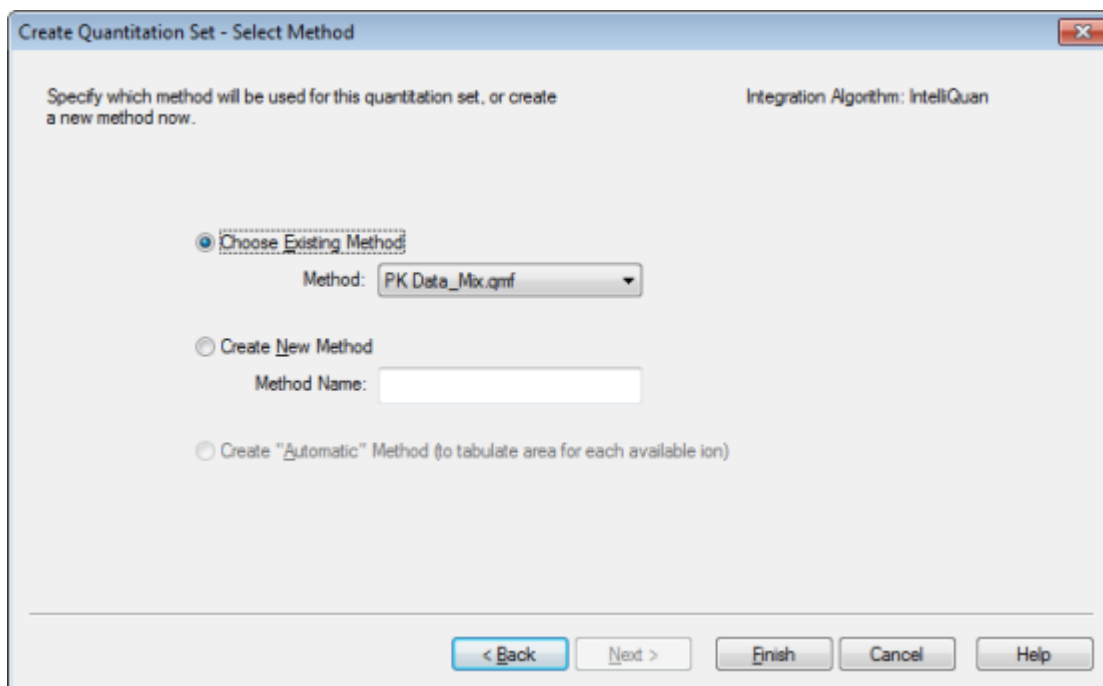
| Concentration | Max. Variation |
|---------------|----------------|
| 0.120000 | |
| 0.240000 | |
| 0.490000 | |
| 0.980000 | |
| 1.950000 | |
| 3.910000 | |
| 7.810000 | |
| 15.630000 | |
| 31.250000 | |
| 62.500000 | |
| 125.000000 | |

Query By Name

< Back Next > Finish Cancel Help

7. En la tabla **Maximum Allowed Accuracy Variation for QCs (%)**, en la columna **Max. Variation**, escriba el porcentaje máximo permitido de variación para cada QC, por ejemplo, 5 es $\pm 5\%$, en la misma fila que la concentración correspondiente. Si no se han especificado las concentraciones durante la adquisición, estas no se mostrarán aquí. En ese caso, indíquelas en la columna **Concentration**.
8. En la tabla **Maximum Allowed Accuracy Variation for Standards (%)**, en la columna **Max. Variation**, introduzca el máximo porcentaje de variación permisible para cada estándar, por ejemplo, 10 es $\pm 10\%$, en la misma fila que la concentración correspondiente. Si no se han especificado las concentraciones durante la adquisición, estas no se mostrarán aquí. Escriba las concentraciones en la columna **Concentration**.
9. Haga clic en **Next**.

Figura 9-3 Página de creación de un conjunto de cuantificación: seleccionar método



10. Seleccione o cree un método.

11. Haga clic en **Finish**.

La consulta se aplica como consulta estándar. Los resultados de la consulta se muestran como una entrada Pass o Fail de la columna **Standard Query Status** de la tabla de resultados.

¡Sugerencia! Para volver a la vista completa, haga clic con el botón secundario y, a continuación, haga clic en **Full**.

Menú contextual de la Results Table

Haga clic con el botón secundario en la Results Table para acceder a las opciones que se muestran en la [Tabla 9-1](#).

Tabla 9-1 Menú contextual de la Results Table

| Elemento de menú | Función |
|------------------|--------------------------------|
| Full | Muestra todas las columnas. |
| Summary | Muestra columnas específicas. |
| Analyte | Muestra un analito específico. |
| Analyte Group | Crea un grupo de analitos. |

Tabla 9-1 Menú contextual de la Results Table (continuación)

| Elemento de menú | Función |
|----------------------|---|
| Sample Type | Muestra las muestras de un tipo específico o todas las muestras. |
| Add Formula Column | Agrega una columna de fórmula. Recomendamos que el usuario valide los resultados si se utiliza una columna de fórmula. |
| Table Settings | Edita o selecciona una configuración de tabla. |
| Query | Crea o selecciona una consulta. |
| Sort | Crea una ordenación u ordena según el índice. |
| Metric Plot | Crea un gráfico de métricas. |
| Delete Pane | Elimina el panel activo. |
| Fill Down | Copia los mismos datos en las celdas seleccionadas. |
| Add Custom Column | Agrega una columna personalizada. |
| Delete Custom Column | Elimina la columna personalizada seleccionada. |

Revisión de picos e integración manual de picos

Utilice la revisión de picos para estudiar los picos que el software ha identificado y, a continuación, redefinir el pico o los puntos de inicio y fin cuando sea necesario.

Tras identificar los analitos y los patrones internos que el software debe buscar, el software busca los picos en las muestras. Cuando el software identifica un pico, muestra los cromatogramas de cada analito y estándar interno en la página crear método de cuantificación: Definir integración del asistente estándar o en la pestaña integración del editor de método completo. El usuario puede confirmar los picos que se han encontrado o modificar el método de cuantificación para definir mejor los picos. Recomendamos a los usuarios que revisen manualmente todos los resultados de integración.

Revisión de picos

Durante la revisión de picos, el usuario quizá desee ver un pico en su totalidad, o bien puede examinar la línea de referencia para comprobar la exactitud con la que el software ha detectado los puntos de inicio y fin del pico. La función de acercamiento automático puede usarse para ambos fines.

Para ayudar a que el software detecte un pico, pueden definirse manualmente los puntos de inicio y fin exactos y el fondo. Estos cambios se aplicarán únicamente a ese pico individual, a menos que actualice el método global.

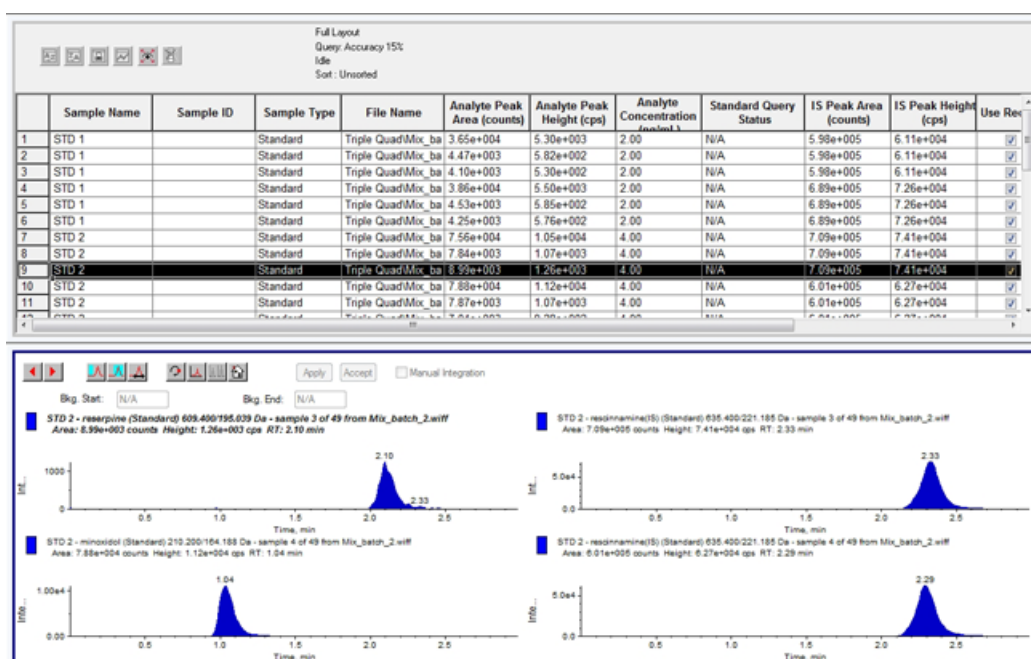
Nota: Le recomendamos que valide los resultados integrados de forma manual.

¡Sugerencia! Para revisar un pico individual, haga clic con el botón secundario en un punto de la curva y, a continuación, haga clic en **Show Peak**. El software abre la ventana Peak Review con el pico seleccionado.

1. Haga clic con el botón secundario en la **Results Table** y luego haga clic en **Analyte**.
2. Seleccione un analito.
3. Haga clic en **Tools > Peak Review > Pane**.

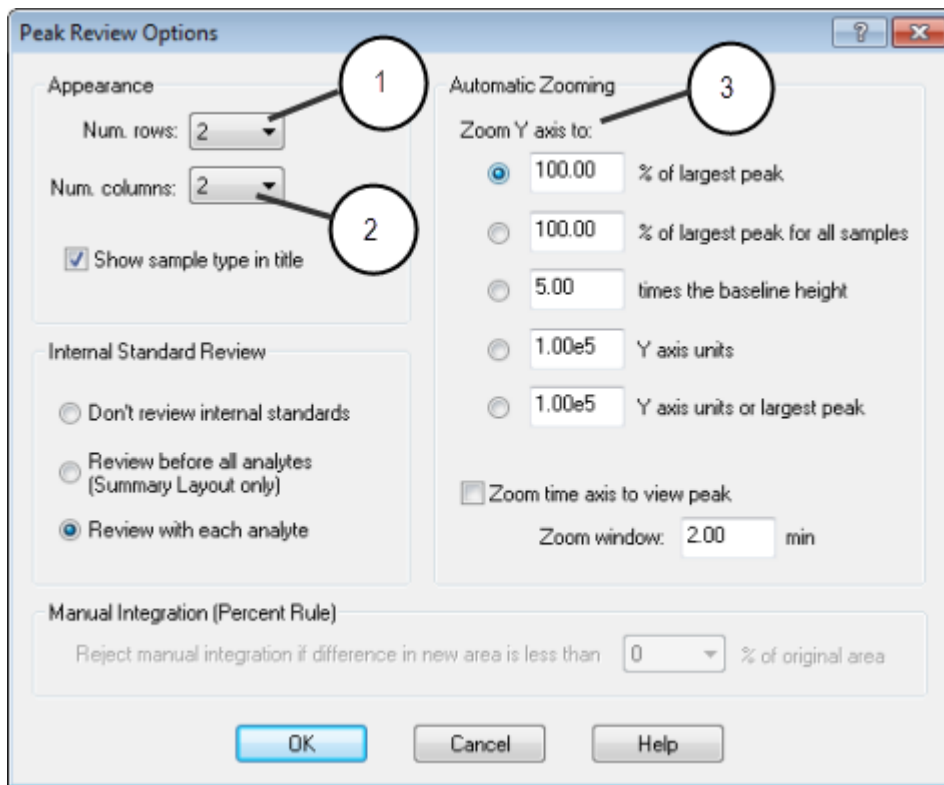
Los picos se muestran debajo de la **Results Table** y solo se muestran los picos enumerados en esta.

Figura 9-4 Revisión de picos



4. Haga clic con el botón secundario en el panel y, a continuación, haga clic en **Options**.
5. En el cuadro de diálogo **Peak Review Options**, en la sección **Appearance**, cambie **Num. rows** a **1** y **Num. columns** a **2**.
6. En la sección **Automatic Zooming**, haga clic en **Zoom Y axis to: 100 % of largest peak** para mostrar el pico completo.

Figura 9-5 cuadro de diálogo Peak Review Options



| Elemento | Definición |
|----------|--|
| 1 | Número de filas |
| 2 | Número de columnas |
| 3 | Zoom Y-axis to 100 % of largest peak para mostrar el pico completo. |

7. Haga clic en **OK**.
8. Para desplazarse por los picos, haga clic en la flecha hacia la derecha. Consulte la [Figura 9-6](#) y la [Figura 9-7 en la página 101](#).
9. Diríjase a la segunda inyección del patrón 3.

En este ejemplo, podría integrarse el pico más cercano al punto de referencia mediante la selección de la opción **Specify Parameters**.

¡Sugerencia! Para desplazarse a un pico específico en el panel Peak Review, seleccione la fila correspondiente en la tabla de resultados.

Figura 9-6 Panel de revisión de picos

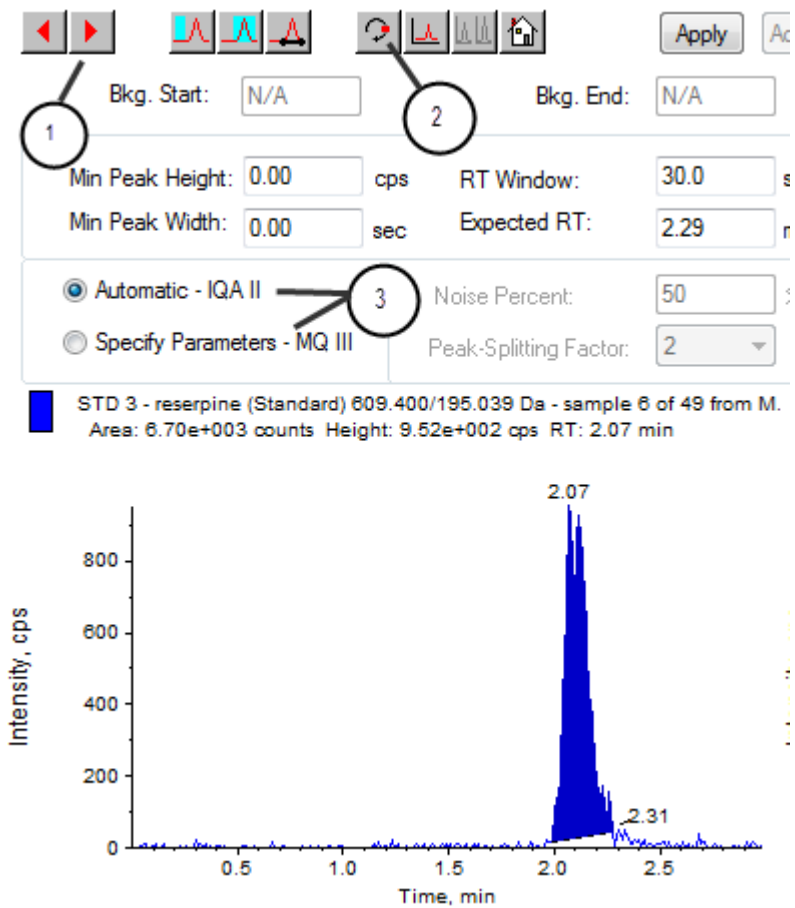
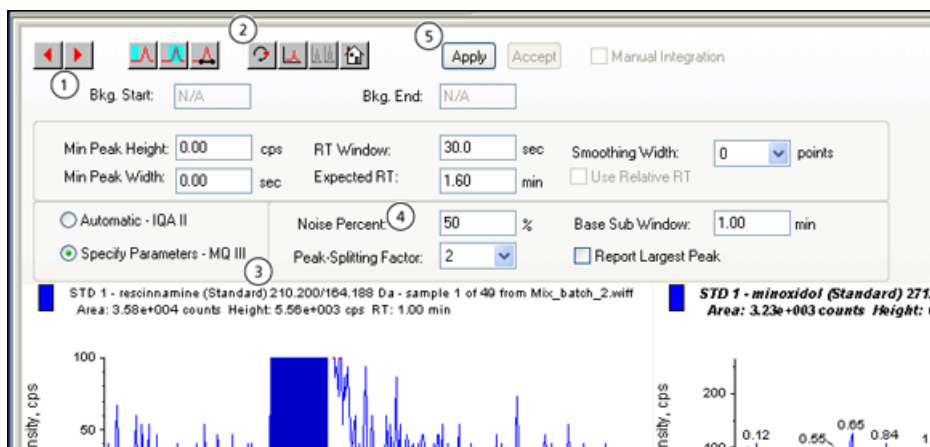


Figura 9-7 Panel de revisión de picos



| Elemento | Definición |
|----------|--|
| 1 | Flechas: haga clic para desplazarse por los picos. |
| 2 | Show or Hide Parameters: haga clic para mostrar los parámetros de integración. |
| 3 | Parámetros de integración: haga clic para cambiar los parámetros. |
| 4 | Porcentaje de ruido: indique un porcentaje de ruido. |
| 5 | Apply: haga clic para integrar los parámetros. |

10. Haga clic dos veces en **Show or Hide Parameters**.

11. Haga clic en **Specify Parameters - MQ III**.

12. Cambie el valor de **Noise Percent**.

13. Haga clic en **Apply**.

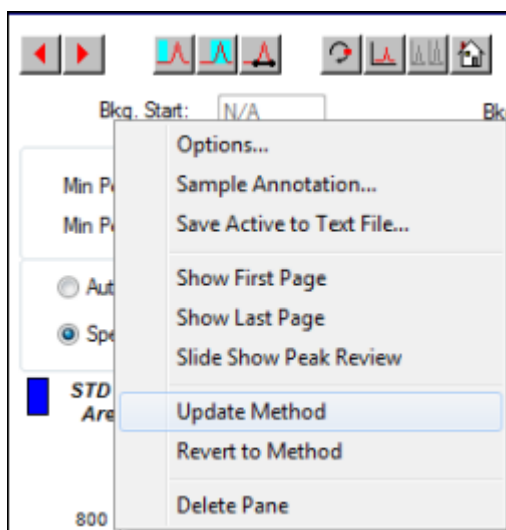
El pico se integra más cerca del punto de referencia.

14. Si el cambio no mejora la integración del pico, ajuste el parámetro **Noise Percent** hasta que se encuentre el valor óptimo.

Nota: La función **Update Method** solo actualizará los valores de algoritmo para ese analito específico (o patrón interno) y no para todos los analitos.

15. Para actualizar el algoritmo de todos los picos, haga clic con el botón secundario en el panel y, a continuación, seleccione **Update Method**.

Figura 9-8 Update Method



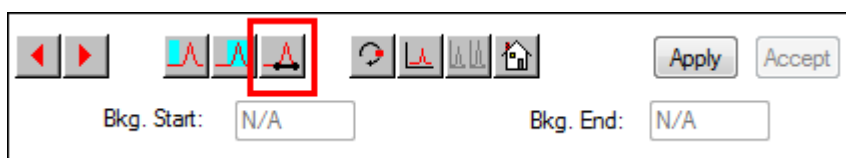
Integración manual de picos

La integración manual de picos debe realizarse en último lugar, para limitar la variabilidad de una persona a otra. Los picos deben integrarse manualmente solo si no se han detectado todos tras ajustar y actualizar los parámetros del algoritmo. Recomendamos que los usuarios validen los resultados para determinar si la integración manual es aceptable para aplicaciones específicas.

Nota: Los picos que se integran manualmente, o cuando se ha cambiado el algoritmo para únicamente ese pico, se identifican como tales en la columna Record Modified de la tabla de resultados, al igual que los picos que tienen cambios en los parámetros del algoritmo para una muestra pero que no se han aplicado al grupo de analitos completo.

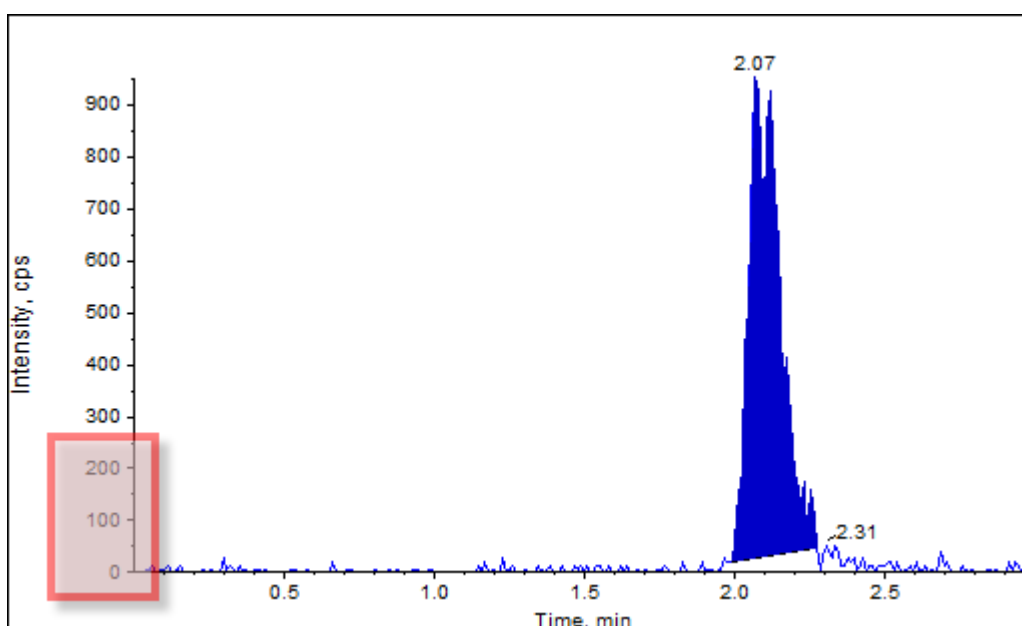
1. En el panel **Peak Review**, haga clic en **Manual Integration Mode**.

Figura 9-9 Panel Peak Review: integración manual



2. Aplique un zoom al 10 % inferior del pico.

Figura 9-10 Panel Peak Review: ampliar un pico



3. Coloque el puntero de cruz donde desee definir el inicio del pico y, a continuación, arrastre el puntero hasta donde desee definir el final del pico.

El software atenúa el área delimitada por la base y los lados del pico. Los parámetros del pico se atenúan puesto que ya no son aplicables porque el pico se ha dibujado manualmente.

4. Realice una de las siguientes acciones:

- Para que este cambio sea permanente, haga clic en **Accept**.
- Para descartar los cambios, desactive la casilla de verificación **Manual Integration**.

¡Sugerencia! Si considera que un pico era correcto cuando se seleccionó originalmente, haga clic con el botón secundario y, a continuación, haga clic en **Revert to Method**.

Menú contextual de Peak Review

Haga clic con el botón secundario en la ventana o panel **Peak Review** para acceder a las opciones mostradas en la [Tabla 9-2](#).

Tabla 9-2 menú contextual de Peak Review

| Elemento de menú | Función |
|--------------------------|---|
| Options | Abre el cuadro de diálogo Peak Review Options. |
| Sample Annotation | Abre el cuadro de diálogo Sample Annotation. |
| Save Active to Text File | Guarda el pico seleccionado como un archivo de texto. |
| Show First Page | Abre la primera muestra. |
| Show Last Page | Abre la última muestra. |
| Slide Show Peak Review | Abre la presentación de diapositivas. |
| Update Method | Actualiza el algoritmo para todos los picos. |
| Revert to Method | Selecciona un pico redefinido según el método de cuantificación actual. |
| Delete Pane | Elimina el panel activo. |

Curvas de calibración

Utilice las curvas de calibración para determinar la concentración calculada de las muestras, incluidas las de QC (control de calidad). Las muestras de QC se agregan a un lote para calcular la calidad de los datos y la precisión de los estándares del lote. Las muestras de QC tienen concentraciones de analitos conocidas pero se tratan como desconocidas para que se puedan comparar las concentraciones medidas con el valor real.

La curva de calibración se genera mediante la representación gráfica de la concentración del patrón frente a su área o altura. Si se utiliza un patrón interno, se representa la relación de concentración del patrón o el

patrón interno comparada con la relación de la altura o área del pico del patrón con respecto a la altura o área del pico del patrón interno. La relación de altura o área de una muestra se aplica a continuación a esta curva para determinar la concentración de la muestra, como refleja la tabla de resultados. Se genera una ecuación de regresión mediante esta curva de calibración de acuerdo con la regresión que se ha especificado. La ecuación de regresión se utiliza para calcular la concentración de las muestras desconocidas.

Visualización de curvas de calibración

El usuario puede ver la curva de calibración y cambiar las opciones de regresión en una tabla de resultados abierta. Si hay dos o más tablas de resultados abiertas, las curvas de calibración se pueden superponer. Para superponer curvas, se debe utilizar el mismo método para crear las tablas.

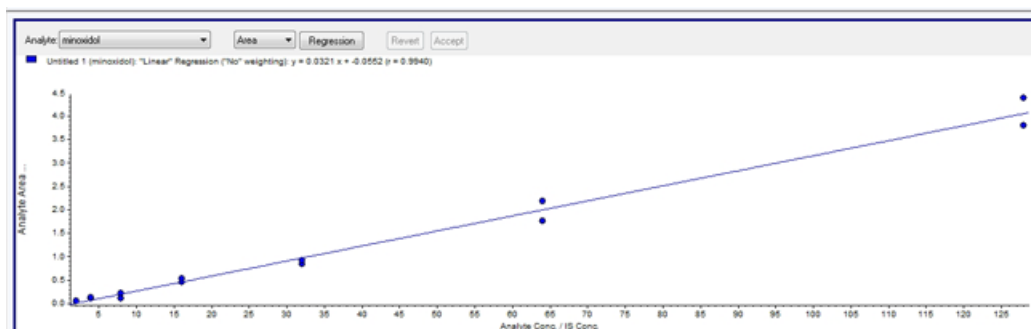
Represente gráficamente una curva de calibración para ver la curva utilizada para la regresión. El campo concentración calculada en la tabla de resultados refleja los cambios derivados del ajuste de la curva en los puntos del estándar.

Nota: Esta opción está disponible únicamente cuando hay una tabla de resultados abierta en el espacio de trabajo.

1. Abra una Results Table.
2. Haga clic en **Tools > Calibration > Pane**.

Se abre el panel Calibration Curve que contiene la curva de calibración.

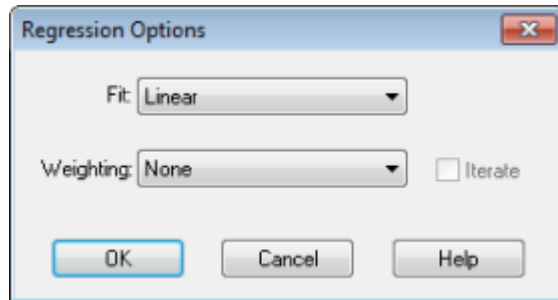
Figura 9-11 Curva de calibración



3. Si hay más de un analito, utilice uno de los siguientes pasos para ver la curva de calibración de otro analito:
 - a. En la lista **Analyte**, seleccione un analito.
 - b. En la lista siguiente, seleccione **Area** o **Height**, si es preciso.
4. Para cambiar las opciones de regresión de la curva de calibración, realice lo siguiente:

- a. Haga clic en **Regression**.

Figura 9-12 Cuadro de diálogo **Regression Options**



- b. En la lista **Fit**, seleccione **Linear**.
- c. En la lista **Weighting**, seleccione **1 / x**.
- d. Haga clic en **OK**.

Se abre la curva de calibración. Asimismo, el usuario también puede revisar picos individuales o excluir puntos de la curva para generar una curva más adecuada.

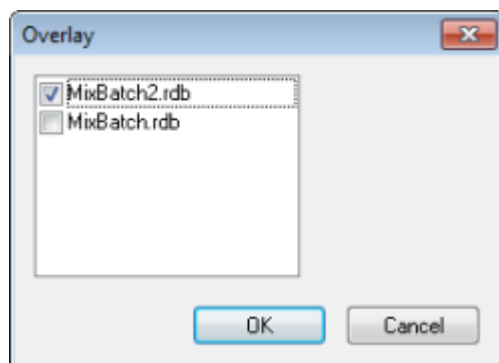
5. Si es necesario, repita estos pasos para crear una curva más adecuada.
6. Para guardar los cambios, haga clic en **Accept**.

Superposición de curvas de calibración

¡Sugerencia! Para examinar la curva de una tabla con mayor detalle, haga clic con el botón secundario en la curva y, a continuación, haga clic en **Active Plot**. Seleccione la curva que se va a representar gráficamente en la parte superior.

1. Con dos o más Results Tables abiertas, visualice la curva de calibración de una de las tablas.
2. Haga clic con el botón secundario en la curva de calibración y, a continuación, haga clic en **Overlay**.

Figura 9-13 Cuadro de diálogo **Overlay**



3. Seleccione las tablas que superpondrá con la curva actual.
4. Haga clic en **OK**.

El software representa gráficamente las curvas de todas las tablas seleccionadas en el mismo gráfico.

Menú contextual Calibration Curve

Haga clic con el botón secundario en la ventana Calibration para acceder a las opciones mostradas en la [Tabla 9-3](#).

Tabla 9-3 Menú contextual de la curva de calibración

| Elemento de menú | Función |
|---|---|
| Exclude (Include) | Haga clic con el botón secundario en el punto y, a continuación, seleccione Exclude para excluir el punto de la curva. Haga clic con el botón secundario en el punto y, a continuación, seleccione Include para incluir el punto. |
| Exclude All Analytes (Include All Analytes) | Haga clic con el botón secundario en un punto y, a continuación, haga clic en Exclude All Analytes para excluir todos los analitos de la curva. Haga clic con el botón secundario en un punto y, a continuación, haga clic en Include All Analytes para incluir los puntos. |
| Show Peak | Revisa un pico individual. |
| Overlay | Superpone dos gráficos. |
| Active Plot | Determina qué parcela está activa. |
| Legend | Muestra la leyenda del gráfico. |
| Log Scale X Axis* | Utiliza una escala logarítmica para el eje X. |
| Log Scale Y Axis* | Utiliza una escala logarítmica para el eje Y. |
| Delete Pane | Elimina el panel activo. |
| Home Graph | Cambia la escala del gráfico a su tamaño original |
| * Una escala logarítmica organiza los puntos de datos en una vista más manejable para que el efecto de todos los puntos se pueda supervisar de manera simultánea. Para esta vista, seleccione Log Scale Y Axis frente a Log Scale X y no solo el logaritmo de un eje. | |

Estadísticas de muestras

Utilice la ventana Statistics para ver las estadísticas de muestras, normalmente de los patrones y los QC (controles de calidad). Los datos de cada lote disponible en la tabla de resultados se presentan en formato tabular en la cuadrícula, donde cada fila de datos corresponde a la concentración de cada QC o patrón.

Visualización de estadísticas de patrones y QC

Cuando hay más de una tabla de resultados abierta, se puede obtener información estadística sobre los patrones y controles de calidad de los lotes adicionales en la ventana **Statistics**. Esto permite comparar resultados entre lotes e identificar tendencias en los patrones o QC (controles de calidad).

1. Abra una Results Table.
2. Haga clic en **Tools > Statistics**.
3. Seleccione **Concentration** de la lista **Statistics Metric**.
4. Seleccione un analito en el campo **Analyte Name**.
5. Seleccione **Standard** en el campo **Sample Type**.

Se mostrarán los resultados.

6. Observe las columnas **%CV** y **Accuracy**.

La columna **%CV** muestra el coeficiente de variación entre las mediciones de un único parámetro; por ejemplo, el área. **Accuracy** indica lo próximo que se encuentra el punto representado al valor interpolado.

7. Si es necesario, active la casilla de verificación **Display Low/High values** y, a continuación, examine los valores de **Low**, **High** y **Mean** para cada fila de la cuadrícula. Cada fila representa los patrones que tienen los mismos niveles de concentración.
8. Seleccione otro analito.

Los resultados se muestran para cada analito por separado.

9. Para comprobar las variaciones de **control de calidad** en los mismos niveles de concentración, seleccione **QC** en el campo **Sample Type**.

Comparación de resultados entre lotes

Cuando se muestra más de una tabla de resultados, obtenga información estadística de los patrones y controles de calidad de los lotes adicionales en la ventana **Statistics**. Normalmente se comparan los resultados entre lotes para buscar tendencias en los patrones o en los controles de calidad o para verificar que el método es válido.

Si tiene dos o más tablas de resultados abiertas, compare los resultados en la ventana **Statistics**. Ambos conjuntos de estadísticas se muestran en la ventana **Statistics**.

El número de analitos y los nombres de analito deben ser los mismos para que se combinen los datos en el panel **Statistics** (Estadísticas).

1. Abra una Results Table.
2. Haga clic en **Tools > Statistics**.
3. Realice una de las siguientes acciones:

- Para ordenar los datos por **tabla de resultados**, seleccione **Group By Batch** en la lista **Conc. as Rows** (Concentrar como filas).

- Para ordenar los datos por orden de concentración, seleccione **Group By Concentration** en la lista **Conc. as Rows** (Concentrar como filas).
- Para ordenar los datos por orden de concentración sin una fila que muestre las estadísticas para cada grupo o lote, seleccione **Group By Concentration (no All)** en la lista **Conc. as Rows** (Concentrar como filas).

El software ordena los resultados. Al final de cada lote o grupo, se muestra una o dos filas adicionales: **All** (estadísticas para todas las tablas de resultados en ese grupo) y **Average** (estadísticas sobre las estadísticas para ese lote o grupo).

Instrucciones de funcionamiento: análisis y exploración de datos

10

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.

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 D-5 en la página 183](#) 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 10-1](#) 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 10-1 Menú contextual del panel Show File Information

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

Tabla 10-1 Menú contextual del panel Show File Information (continuación)

| Elemento de menú | Función |
|---------------------------------------|--|
| 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 10-1 Pestaña Peak List

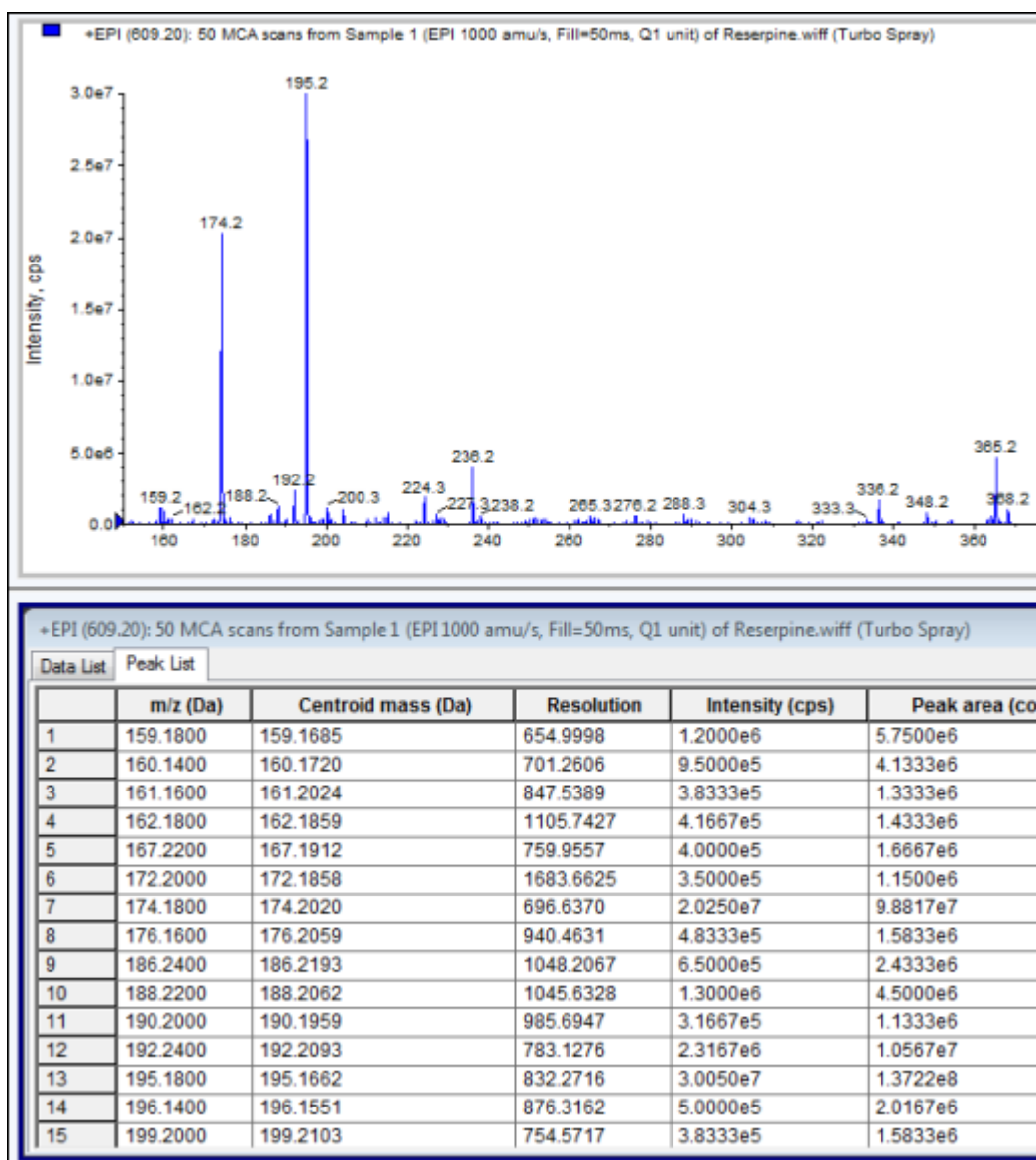


Tabla 10-2 Menú contextual de la pestaña Spectral Peak List

| 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 10-3 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 . |
| Save As Text | Guarda los datos como archivo .txt. |
| Delete Pane | Elimina el panel seleccionado. |

Mostrar datos de ADC

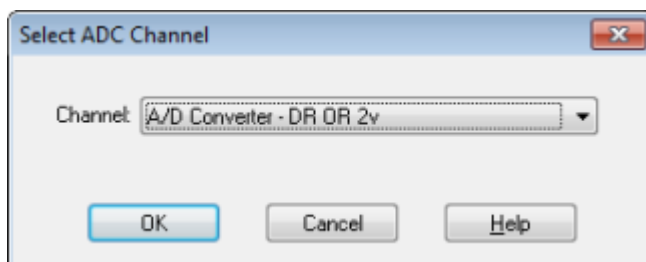
Los datos de ADC (convertidor analógico-digital) se adquieren a partir de un detector secundario (por ejemplo, de un detector UV a través de una tarjeta de ADC) y resultan útiles para la comparación con los datos del espectrómetro de masas. Para que los datos del ADC estén disponibles, debe adquirir 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 10-2 Cuadro de diálogo Select ADC Channel



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

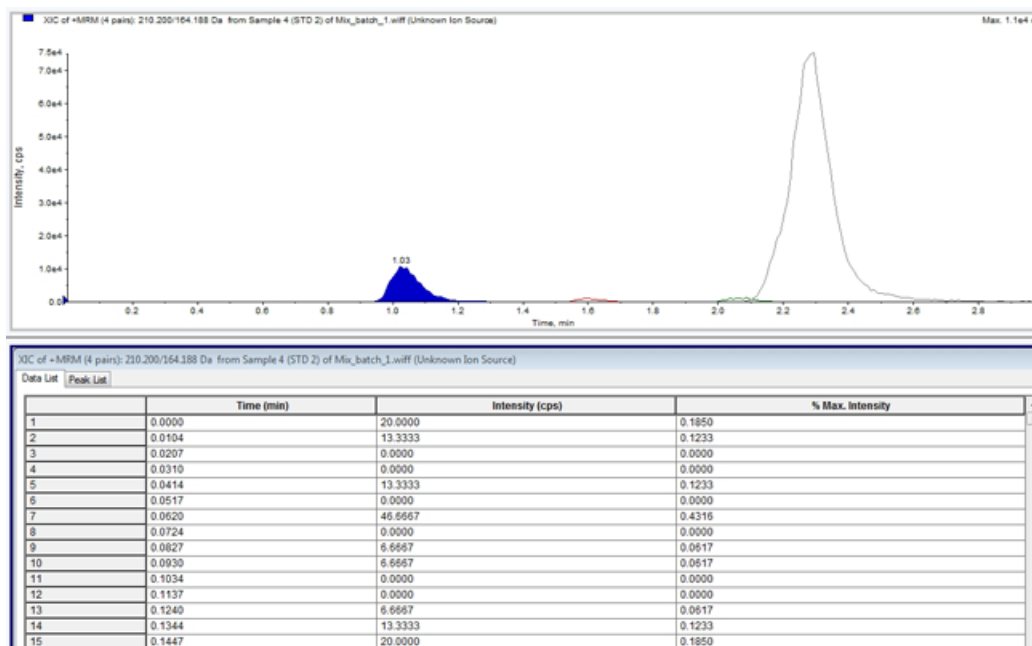
Se mostrarán los datos de ADC en un panel nuevo debajo del panel activo.

Mostrar los datos cuantitativos básicos

1. Abra un archivo de datos.

- Haga clic en **Explore > Show > Show List Data**.

Figura 10-3 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 10-6 en la página 124](#).

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 10-4](#) ofrece una descripción de los diversos tipos de cromatograma.

Consulte la [Tabla 10-8 en la página 127](#) para obtener más información acerca del uso de los iconos disponibles.

Tabla 10-4 Tipos de cromatograma

| Tipos de cromatogramas | Finalidad |
|--|---|
| TIC (Total Ion Chromatogram, cromatograma de iones totales) | 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. 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. 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. |
| 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

Para ver un ejemplo de archivo de datos, debe seleccionar el proyecto Example. Abra la carpeta LIT y, a continuación, abra el archivo Reserpine.wiff.

- 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

Un TIC se crea sumando las contribuciones de intensidad de todos los iones de una serie de análisis de masas. Utilice el TIC para ver un conjunto de datos completo en un único panel. Es la suma de las intensidades de todos los iones de un análisis, representada en función del tiempo en un panel cromatográfico. Si los datos contienen resultados de varios experimentos, el usuario puede crear TIC individuales para cada experimento y otro TIC que represente la suma de todos los experimentos.

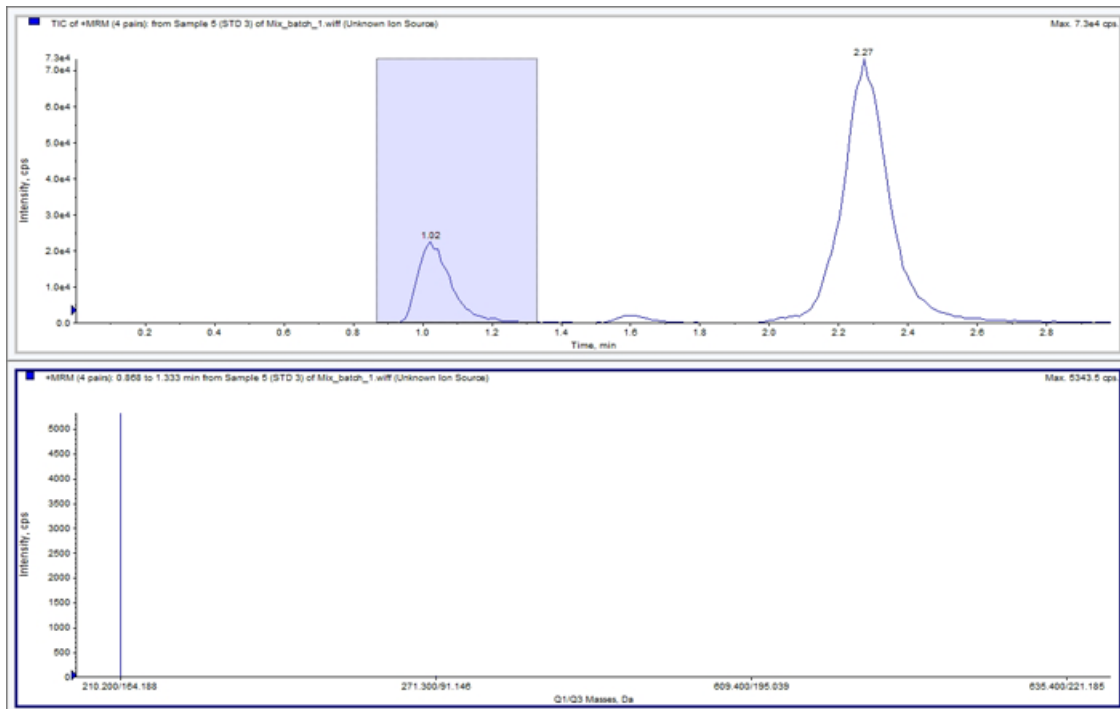
Cuando se abre un archivo de datos, se mostrará de manera predeterminada como un TIC. Sin embargo, si el experimento solo contiene un análisis, se mostrará como un espectro. Si el usuario activa la casilla de verificación MCA antes de la adquisición del archivo de datos, el archivo de datos se abrirá en el espectro de masas. Si la casilla de verificación MCA no está activada, el archivo de datos se abrirá con el 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 10-4 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 10-8 en la página 127](#) 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 10-5](#) contiene un resumen de los métodos que se pueden utilizar con cromatogramas y espectros.

Tabla 10-5 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. |

Tabla 10-5 Resumen de los métodos de generación de XIC (continuación)

| Método | Usar con cromatograma | Usar con espectro | Extracción |
|---------------------|-----------------------|-------------------|---|
| 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.

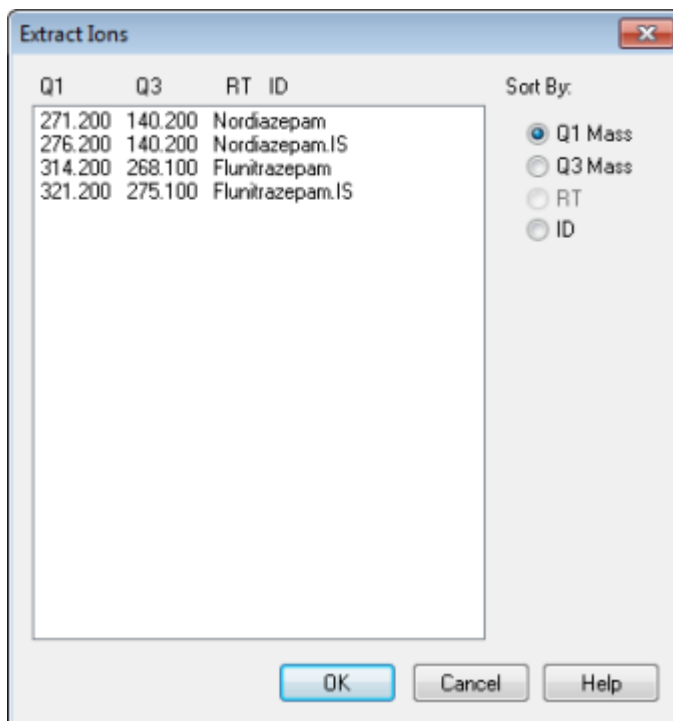
3. Haga clic en **Explore > Extract Ions > Use Base Peak Masses**.

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 10-5 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 10-6 Opciones de cromatograma de pico base

Base Peak Chromatogram Options

Mass Tolerance: 1 Da

Minimum Intensity: 0 cps

Minimum Mass: 300 Da

Maximum Mass: 2400 Da

Use Limited Range

Start Time: 31.881295 min

End Time: 33.603232 min

OK Cancel Help

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**.

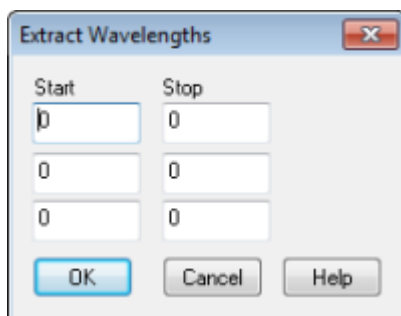
El BPC generado se abre en un panel nuevo.

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 10-8 en la página 127](#) 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 10-7 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.

Generación de 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 10-8 en la página 127](#) 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:

Instrucciones de funcionamiento: análisis y exploración de datos

- 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 10-6 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. |

Tabla 10-6 Menú contextual de los paneles de cromatograma (continuación)

| Elemento de menú | Función |
|-----------------------|--|
| Set Subtract Range | Define el rango de sustracción del panel. |
| Clear Subtract Range | Borra el rango de sustracción del panel. |
| 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 10-7 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. |
| Delete Pane | Elimina el panel seleccionado. |

Tabla 10-7 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.

El usuario puede aplicar zoom a una parte de un gráfico para ver un pico o área concretos con mayor detalle en espectros y cromatogramas. Asimismo, puede también aplicar zoom de manera repetida para ver picos más pequeños.

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 10-8 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. |  |

Tabla 10-8 Opciones de gráfico (continuación)

| Para realizar esta acción... | utilice esta opción de menú | o haga clic en este icono |
|---------------------------------|--|---|
| Vincular paneles | a. Con los dos gráficos abiertos, haga clic en uno para convertirlo en el panel activo. b. Haga clic en Explore > Link y, a continuación, haga clic en el otro panel. |  |
| 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.

El software Reporter amplía la función de generación de informes disponible en el software Analyst®.

Recomendamos que los usuarios validen los resultados si se utiliza una plantilla de Reporter modificada que contiene una consulta.

El software Reporter se puede utilizar para crear informes personalizados con Microsoft Word y Excel (2010, 2013 o 2016). El software Reporter reúne las siguientes características:

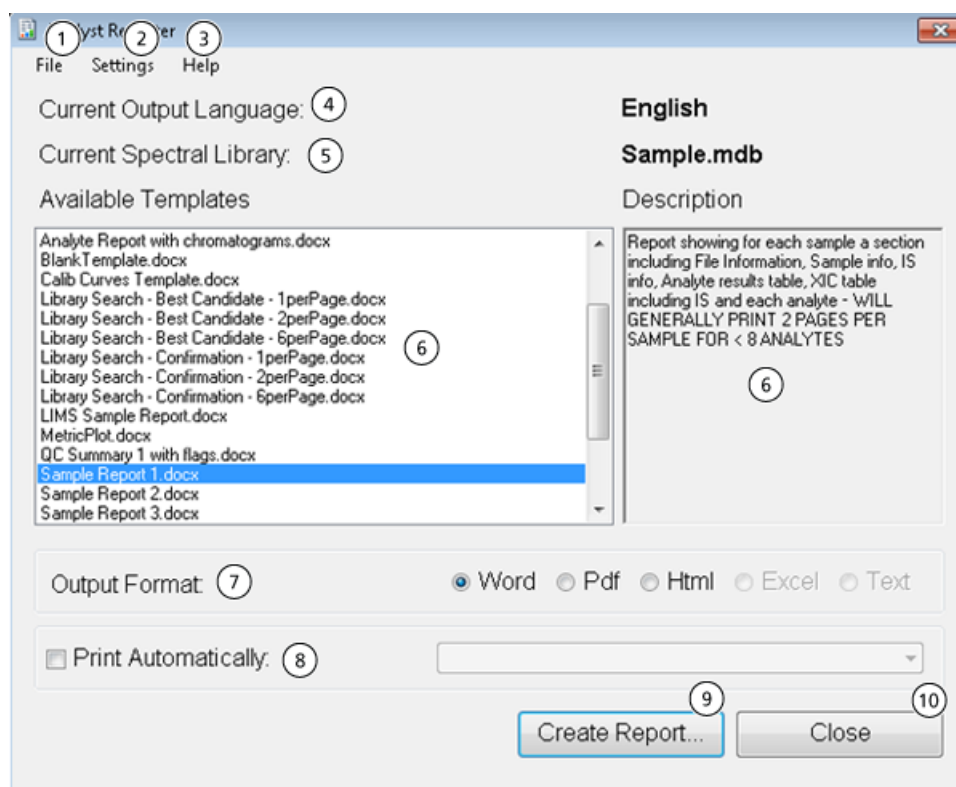
- Proporciona una variedad de informes que utilizan los datos disponibles en la tabla de resultados, la información de archivos de datos y las ventanas de revisión de picos cuantitativa.
- Proporciona una serie de informes que presentan los resultados de la búsqueda en la biblioteca de MS/MS. El usuario puede configurar el software Reporter para buscar en cualquier biblioteca de espectros de MS/MS que utilice el formato Analyst® (mdb).
- Utiliza plantillas de Microsoft Word para proporcionar la información de formato necesaria al generar informes. Estas plantillas se pueden crear o modificar para especificar formatos de informe personalizados. Consulte la ayuda para obtener información sobre cómo crear o editar el Report Template Editor.
- Contiene una plantilla de inicio en blanco que se puede utilizar en el entorno de edición del software Reporter de Analyst® para diseñar plantillas de informes que cumplan la mayoría de los requisitos de los informes.
- Automatiza la generación de informes mediante el uso del script de lotes Autoquan Reporter.
- Imprime automáticamente, exporta a formato Adobe Portable Document Format (pdf) y envía los resultados por correo electrónico.
- Adjunta los scripts de procesamiento a las plantillas de los informes para ampliar el contenido y el nivel de automatización de varios requisitos del flujo de trabajo.
- Genera informes desde aplicaciones de software que utilizan las bibliotecas de programación disponibles del software Analyst®.

El software Reporter se puede utilizar de los modos siguientes:

- Desde el software Analyst®, para generar manualmente un informe o conjunto de informes.
- Lo puede usar un script de lote para automatizar la generación de informes dentro de un lote. Es posible generar informes para cada muestra por separado, durante o después de la adquisición de muestras.
- Lo pueden usar aplicaciones que no utilicen el software Analyst®.

Interfaz del usuario de Analyst Reporter

Figura 11-1 Analyst Reporter



| Elemento | Opción | Descripción |
|----------|---|--|
| 1 | File > Exit | Cierra el programa y libera todos los recursos. |
| 2 | Settings > Select Output Language | Permite definir el diccionario de idioma que se va a utilizar para sustituir las etiquetas de idioma incluidas en una plantilla de informe. Las plantillas que cuentan con etiquetas de idioma pueden utilizarse para generar informes en cualquier idioma. Las etiquetas de idioma se sustituyen por el texto de la etiqueta coincidente del archivo de diccionario del idioma seleccionado. Estos archivos de diccionario se incluyen en la carpeta: C:\Program Files\AB SCIEX\AnalystReporter\Resources\Languages en los sistemas operativos Windows 7 de 32 bits o en C:\Program Files (x86)\AB SCIEX\AnalystReporter\Resources\Languages en los sistemas operativos Windows 7 de 64 bits o Windows 10 de 64 bits. |

| Elemento | Opción | Descripción |
|----------|---|---|
| 2 | Settings > Select Library | Permite desplazarse a una biblioteca de espectros. Esta biblioteca se utilizará para establecer la coincidencia y puntuación de datos MS/MS a partir de las tablas de resultados que contienen datos procedentes de MS/MS activada mediante adquisición dependiente de información (IDA). |
| 2 | Settings > Select Template Folder | Permite definir la carpeta a partir de la que se van a leer las plantillas disponibles. Para recuperar la carpeta de plantillas predeterminada, seleccione la opción Default . |
| 3 | Help > About | Muestra información acerca de la versión del software Reporter instalada actualmente. |
| 4 | Current Output Language | Muestra el diccionario de idioma seleccionado en ese momento, que se utilizará para sustituir las etiquetas de idioma incluidas en una plantilla de informe. El diccionario de idioma puede seleccionarse haciendo clic en Settings > Select Output Language . |
| 5 | Current Spectral Library | Muestra la biblioteca de espectros seleccionada en ese momento. La biblioteca de espectros puede seleccionarse haciendo clic en Settings > Select Library . |
| 6 | Available Templates and Description | Muestra una lista de las plantillas de informe disponibles. Al seleccionar una plantilla se mostrará una descripción de esta. Para cambiar la carpeta de la que se obtiene la lista de las plantillas disponibles, seleccione Settings > Select Template Folder > Browse . |

| Elemento | Opción | Descripción |
|----------|---------------------|---|
| 7 | Output Format | <p>Muestra los formatos de salida admitidos en el software Reporter. Solo los formatos compatibles con la plantilla de informe seleccionada estarán habilitados.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Word: esta opción genera un documento de Microsoft Word (.docx). Este documento puede abrirse en Microsoft Word 2010 o una versión posterior. • PDF: se crea un informe directamente en formato PDF. • HTML: esta opción utiliza Microsoft Word para generar un archivo HTML. Los archivos de imagen asociados se almacenan en una carpeta con el mismo nombre que el archivo HTML. • Excel: esta opción genera un archivo de texto sin formato (.csv). Las plantillas de informe que contienen valores separados por comas pueden abrirse en Microsoft Excel, donde cada valor se mostrará en una celda diferente. Solo las plantillas que se hayan marcado de forma específica como compatibles con texto pueden utilizarse en este formato de salida. • Text: esta opción genera un archivo de texto sin formato (.txt). Solo las plantillas que se hayan marcado de forma específica como compatibles con texto pueden utilizarse en este formato de salida. |
| 8 | Print Automatically | Una vez creado el informe, se imprime en la impresora seleccionada. Seleccione una de las impresoras disponibles. |
| 9 | Create Report | Crea un informe en el formato de salida seleccionado, utilizando la plantilla de informe elegida. |
| 10 | Close | Cierra el programa y libera todos los recursos. |

Generación de informes

El software Reporter extrae datos numéricos de la tabla de resultados e información de muestras y de gráficos del archivo .wiff.

Seleccione una plantilla en el campo Available Template.

¡Sugerencia! Para generar informes para cada muestra por separado, es posible que sea más eficiente generar los informes de forma automática con un script de lotes durante la adquisición para evitar prolongar los tiempos de procesamiento al final de la adquisición. Para obtener más información sobre los scripts de lotes, consulte la *Guía para usuarios de scripts*.

1. Abra una **Results Table**.

2. En **Companion Software**, haga doble clic en **Reporter**.
3. En el cuadro de diálogo **Analyst Reporter**, en el campo **Available Templates**, seleccione la plantilla de informe aplicable.
4. Haga clic en el formato de salida **PDF**.

La opción Word aparece ya seleccionada y el informe se guarda automáticamente en la carpeta Results del proyecto actual. Si esta opción no está seleccionada, el informe se crea y se abre en Word o se imprime, en función de lo que se haya seleccionado, pero el informe no se guarda. Esto permite al usuario editar el informe en Word antes de guardar el informe original.

5. Seleccione un documento que contenga todas las muestras o varios documentos con una muestra cada uno.
6. (Opcional) Active la casilla de verificación **Print Automatically** para imprimir automáticamente los informes en una impresora preseleccionada.

Se utilizará la impresora predeterminada de Windows, a menos que seleccione una diferente. La herramienta Reporter mantendrá la impresora seleccionada entre una operación y la siguiente. Si se configura la impresora con un controlador de impresión PDF, Reporter genera automáticamente versiones de archivo PDF de los informes creados.

7. Haga clic en **Create Report**.

En la pantalla se muestran varios indicadores de progreso a medida que la herramienta abre la plantilla y la rellena con los datos procedentes de la tabla de resultados. Algunos informes se generan en pocos segundos, mientras que otros tardan algo más. Un conjunto de datos grande con numerosas transiciones de MRM o un gran número de gráficos podría producir informes de varios cientos de páginas y tardar horas en generarse.

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.

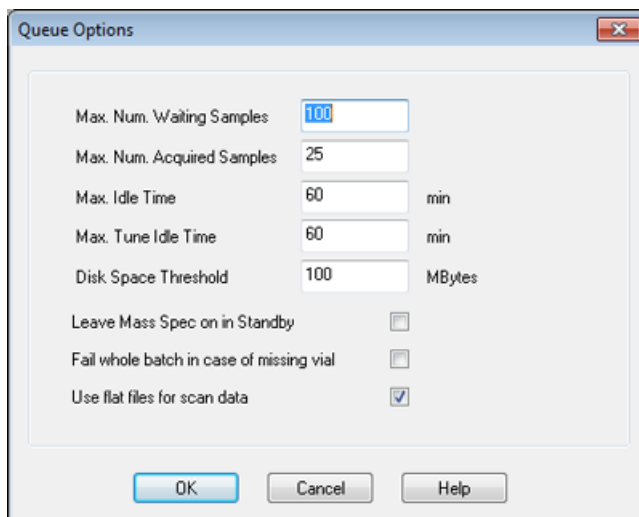
Configuración de las opciones de cola

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® 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 12-1 Cuadro de diálogo Queue Options



Instrucciones de funcionamiento: lotes

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.

Creación y envío de un lote

Utilice este flujo de trabajo para crear un lote. En este ejemplo, utilice el tipo de análisis MRM que ha creado anteriormente. Puede repetir este flujo de trabajo dos veces más para practicar, una vez utilizando el método Q1 MS y la segunda vez utilizando el método Q1 MI.

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 12-2 Cuadro de diálogo Batch Editor

Sample Locations Quantitation Submit

Select Method for Sample Set

Set: SET1

Quantitation: none Quick Quant

Add Set Remove Set

Add Samples Del Samples

Acquisition

Use as Template none Method Editor

Use Multiple Methods

Batch Script: Select Script

| Sample Name | Rack Code | Rack Position | Plate Code | Plate Position | Vial Position | Data File | Inj. Volume (µl) |
|-------------|-----------|---------------|------------|----------------|---------------|-----------|------------------|
|-------------|-----------|---------------|------------|----------------|---------------|-----------|------------------|

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 12-3 Cuadro de diálogo Add Sample

Add Sample

Sample name

Prefix: Sample Sample number:

Number of digits: 3

Data file

Prefix: Data Set name:

Auto Increment:

Sub Folder: Browse

New samples

Number: 1

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**.

Instrucciones de funcionamiento: lotes

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.

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 141](#)
 - [Selección de la posición de los viales mediante la pestaña Locations \(opcional\) en la página 141](#)

17. (Opcional) Para definir los detalles de cuantificación antes de enviar el lote, consulte [Definición de los detalles de cuantificación en el Batch Editor \(opcional\) en la página 143](#).

18. 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.

19. 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 [20](#).
- Si el mensaje indica que el lote no está preparado para su envío, realice los cambios que se indican en el mensaje.


20. 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.

21. Guarde el archivo.

Equilibrado del sistema

Equilibre el sistema antes de enviar un lote. El equilibrado calienta y prepara el espectrómetro de masas para la siguiente muestra o lote.

1. Haga clic en .

Se abre el cuadro de diálogo Equilibrate.

2. Seleccione el método de adquisición utilizado para el lote enviado.
3. Escriba el tiempo de equilibrado en el campo **Time (min)**, en minutos.
4. Seleccione **OK**. El sistema inicia el equilibrado.

Una vez completado el equilibrado, el sistema pasará al estado Ready.

¡Sugerencia! Si el equilibrado de la carga no finaliza de la forma esperada o si el estado del sistema no pasa a Ready al terminar el equilibrado, asegúrese de lo siguiente:

- El perfil de hardware activado es adecuado para el método de adquisición.
 - El sistema de HPLC está encendido.
 - El sistema de HPLC se ha comunicado con el software correctamente.
-

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** (Enviar) del **Batch Editor** (Editor de lotes).
3. Si la sección **Submit Status** (Estado de envío) 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**.


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.

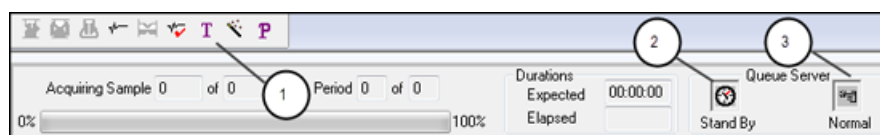
Adquisición de datos

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.

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

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

Figura 12-4 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 146 . |

- 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 136](#).

- En la pestaña **Sample**, en la lista **Set**, seleccione el conjunto.
- 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.
- Guarde el archivo.

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

- En el **Batch Editor**, haga clic en la pestaña **Locations**.
- Seleccione el conjunto en la lista **Set**.
- En la lista **Autosampler**, seleccione el automuestreador.
- 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.

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

Instrucciones de funcionamiento: lotes

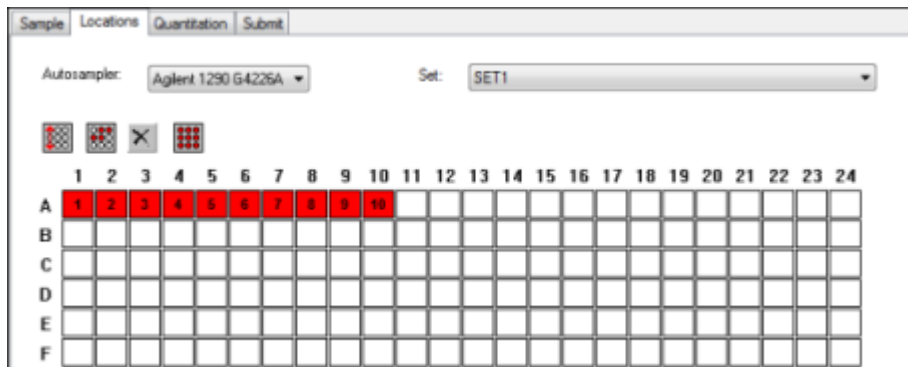
La vista gráfica de estante muestra el número de espacios de estante correspondiente al procesador de muestras automático seleccionado.

- 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 12-5 Pestaña Locations



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

- 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.

- 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.

Definición de los detalles de cuantificación en el Batch Editor (opcional)

Si se utiliza un método de cuantificación con un lote y no desea seleccionar detalles de cuantificación después de la adquisición, los detalles de cuantificación (tipo de muestra, concentración de la muestra) deben definirse antes de enviar el lote.

Las columnas **Internal Standard** y **Standard** correspondientes se muestran en la pestaña **Quantitation**, en función del método de cuantificación seleccionado en la pestaña **Sample**.

1. Con un archivo de lote abierto en la ventana **Batch Editor**, haga clic en la pestaña **Quantitation**.
2. Seleccione el conjunto que contenga las muestras.
3. Seleccione **Quant Type** para todas las muestras en la lista de la celda.
4. Si es aplicable, indique la concentración de analitos en la columna **Analyte**.
5. Si es aplicable, indique la concentración del patrón interno en la columna **Internal Standard**.
6. Repita este procedimiento para cada conjunto del lote.

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**.

Importación de archivos de lotes

Los usuarios pueden importar un archivo de texto que contenga la información del lote en lugar de crear un lote en el **Batch Editor**. Si todos los detalles de las muestras están en una hoja de cálculo, le resultará más rápido reorganizar e importar los datos de la hoja de cálculo que escribirlos manualmente en el **Batch Editor**.

Antes de importar la información del lote desde un archivo de texto, asegúrese de que la disposición y el formato de los datos del archivo son correctos. En concreto, los encabezados de columna de la hoja de cálculo deben coincidir con las columnas del **Batch Editor**.

Creación de un lote como archivo de texto

Requisitos previos

Asegúrese de que el perfil de hardware activo incluye todos los dispositivos que se van a utilizar para adquirir las muestras.

Para asegurarse de que el archivo de texto incluye los encabezados adecuados, debe crear un lote mediante el Batch Editor, exportarlo como archivo de texto, escribir los valores adecuados en un editor de hojas de cálculo y, a continuación, volver a importar el archivo al Batch Editor. Los usuarios solo pueden exportar un lote si este contiene al menos un conjunto con al menos una muestra. El archivo de texto guardado puede utilizarse más tarde como plantilla.

1. En el **Batch Editor**, cree un lote de un solo conjunto con una sola muestra.
2. Haga clic en **File > Export**.

Se abrirá el cuadro de diálogo **Save As**.

3. En el campo **File name**, escriba el nombre que desee utilizar para el archivo de texto y, a continuación, haga clic en **Save**.
4. Abra el archivo de texto en un programa de hojas de cálculo como Microsoft Excel.
5. Escriba, o copie y pegue, los detalles de las muestras: una muestra por fila, con los detalles bajo los encabezados adecuados.

Nota: No elimine ninguna columna. Las columnas de la hoja de cálculo deben coincidir con las columnas del Batch Editor.

6. Guarde el archivo de texto modificado como archivo .txt o .csv y, a continuación, cierre el programa de hojas de cálculo.

El archivo de texto ya se puede importar al Batch Editor.

Importación de un lote de un archivo de texto

1. En el **Batch Editor**, en la pestaña **Sample**, haga clic con el botón secundario y, a continuación, seleccione **Import From > File**.

Se abrirá el cuadro de diálogo **Open**.

2. Haga clic en el archivo de texto correspondiente y, a continuación, en **Open**.

Si utiliza un automuestreador, se abrirá el cuadro de diálogo **Select Autosampler**.

Nota: Si el archivo de texto guardado no aparece en la lista **Files of type**, seleccione **Microsoft Text Driver (*.txt; *.csv)**. Se mostrarán en el campo los archivos con la extensión .txt.

3. En la lista de automuestreadores, seleccione el automuestreador y, a continuación, haga clic en **OK**.

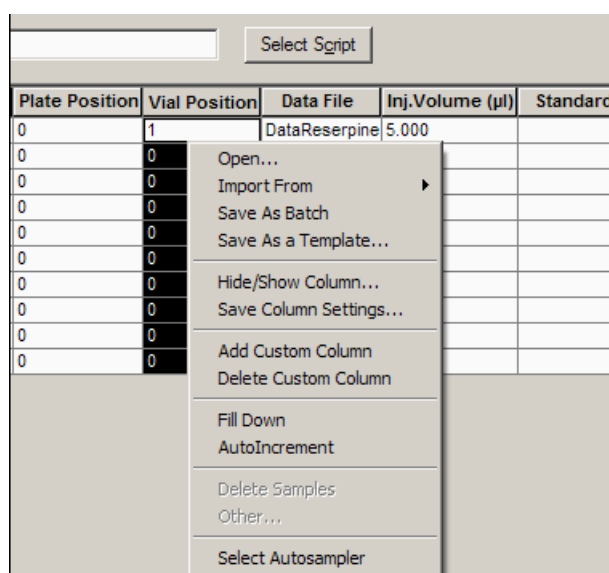
La tabla de muestras se rellena con los detalles del archivo de texto.

4. Envíe el lote.

Menú contextual del Batch Editor

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

Figura 12-6 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. |

Instrucciones de funcionamiento: lotes

| Elemento de menú | Función |
|--------------------|--------------------------------|
| 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 12-7 Indicador del servidor de cola en modo normal

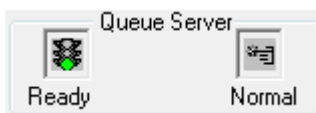
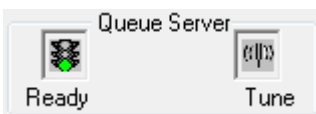


Figura 12-8 Indicador del servidor de cola en modo de ajuste



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 12-1](#) se describen los iconos y los estados de la cola.

Tabla 12-1 Estados de cola


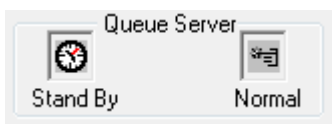


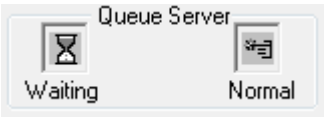
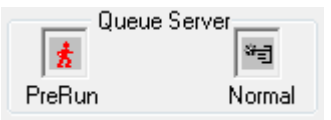


| Icono | Estado | Definición |
|---|-----------|---|
|  | Not Ready | El perfil de hardware está desactivado y la cola no acepta ningún envío de muestras. |
|  | Stand By | El perfil de hardware está activado, pero todos los dispositivos están inactivos. Las bombas no están en funcionamiento y los gases están apagados. |

Tabla 12-1 Estados de cola (continuación)

| Icono | Estado | Definición |
|---|------------|---|
|  | 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 . |
|  | 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. |
|  | Waiting | El sistema iniciará automáticamente la adquisición cuando se envíe la muestra siguiente. |
|  | 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. |
|  | Acquiring | El método está ejecutándose y se está llevando a cabo la adquisición de datos. |
|  | 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.

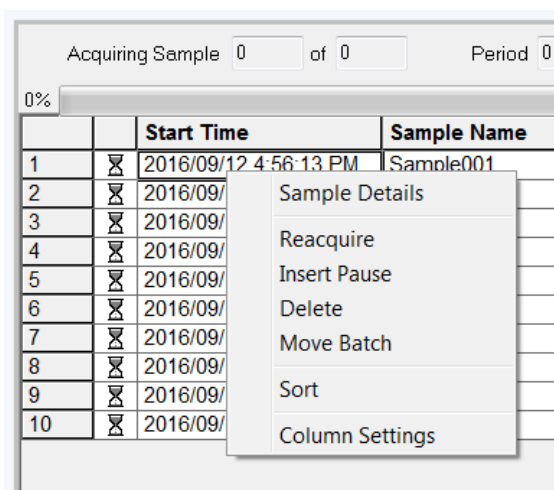
Tabla 12-2 Iconos de estado de instrumento y dispositivo

| 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. |
| Fault |  | 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 12-9 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. |

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, 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

La [Tabla 13-1](#) 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 13-1 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 11 . |
| Espectrómetro de masas | | | |
| Placa de chapa | Diariamente | Limpiar | Consulte Limpieza de la placa de chapa en la página 157 . |
| Placa del orificio (parte delantera) | Diariamente | Limpiar | Consulte Limpieza de la parte delantera de la placa del orificio en la página 158 . |
| 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 159 . |
| Filtro de aire del espectrómetro de masas | Cada 6 meses | Reemplazar | Póngase en contacto una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico. |
| Aceite de la bomba de vacío preliminar | Una vez al año | 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 153 . |
| 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 159 . |
| 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. |

Información de servicio técnico y mantenimiento

Tabla 13-1 Tareas de mantenimiento (continuación)

| Componente | Frecuencia | Tarea | Para obtener más información... |
|---|-----------------------|---------------------------|---|
| 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. |
| 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 11](#).

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

Información de servicio técnico y mantenimiento

- 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)
- SEGURIDAD BÁSICA
- 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 154](#).
- (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 pelusa, herramienta de limpieza del conjunto de barras Q0, cepillo de limpieza para la guía de iones QJet [®] y paquetes de Alconox. | 5020761 |

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, 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.

Información de servicio técnico y mantenimiento

- 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 13-1 Ejemplo: doblado del paño



- Para evitar la contaminación cruzada, deseché 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

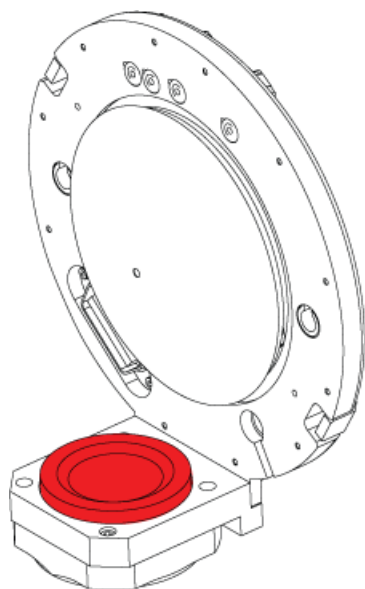
Nota: Los espectrómetros de masas con una fuente de iones NanoSpray[®] pueden requerir una limpieza completa para obtener los mejores resultados. Póngase en contacto con una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico.



¡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 13-2 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.

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

Información de servicio técnico y mantenimiento

¡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.
3. Active el perfil de hardware. Consulte la *Guía del usuario del sistema*.

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.

Vaciado de la botella de drenaje de escape de la fuente



¡ADVERTENCIA! Riesgo de radiación, 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, 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.

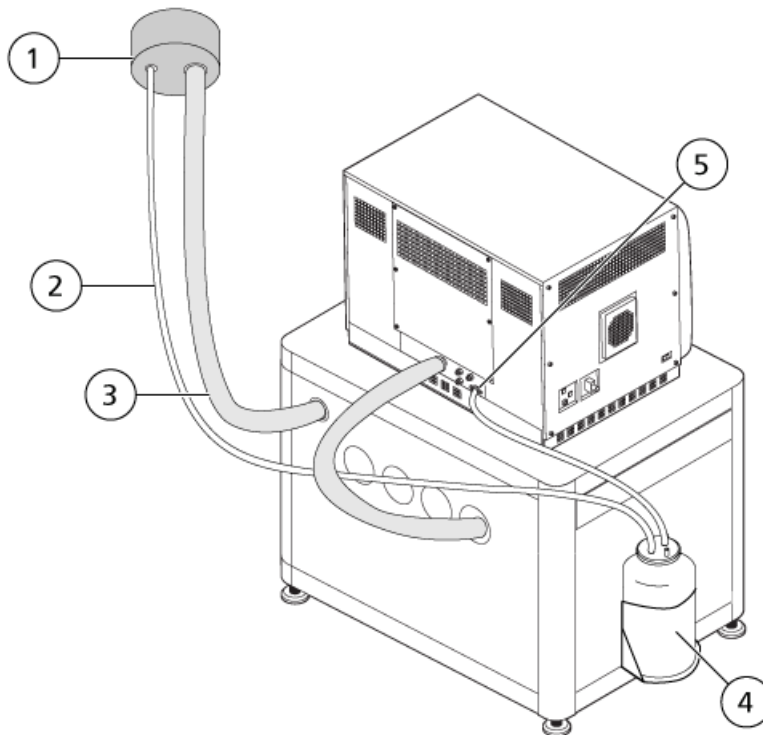
Inspeccione la botella de drenaje de escape de la fuente regularmente y vacíela antes de que esté llena. Inspeccione también la botella y sus conexiones para detectar fugas, y apriete las conexiones o cambie los componentes según sea necesario. Siga los pasos de este procedimiento para vaciar la botella.

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.
3. Desconecte las mangueras del tapón.
4. Si es preciso, saque la botella de drenaje del soporte.

Información de servicio técnico y mantenimiento

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 fijelas bien con las abrazaderas.

Figura 13-3 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. Asegúrese de que la botella esté bien fijada para evitar derrames. |
| 5 | Conexión al espectrómetro de masas: 1,6 cm (0,625 pulgadas) DI |

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.

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

14

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 14-1 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. El filtro de aire del espectrómetro de masas está bloqueado. 2. La temperatura ambiente es demasiado alta. | Póngase en contacto una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico. |
| El Analyst [®] 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. |
| El Analyst [®] 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. |

Tabla 14-1 Problemas del sistema (continuación)

| Síntoma | Posible causa | Acción correctiva |
|----------------------------------|---|--|
| 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"> 1. Los parámetros de la fuente de iones no están optimizados. 2. El espectrómetro de masas no está optimizado. 3. La placa de chapa está sucia. 4. La placa del orificio está sucia. 5. La guía de iones QJet[®] o la lente IQ0 están sucias. 6. La zona Q0 está sucia. 7. La jeringa o el conducto de la muestra tienen una fuga. 8. La muestra se ha degradado o tiene una concentración baja. 9. La sonda no está instalada correctamente. 10. La fuente de iones no está instalada correctamente o está defectuosa. 11. Faltan una o más de las juntas tóricas de la interfaz de vacío. 12. Existe un problema con las conexiones o el sistema de LC. | <ol style="list-style-type: none"> 1. Optimice los parámetros de la fuente de iones. Consulte el sistema de ayuda del software Analyst[®]. 2. Consulte Limpieza de la placa de chapa en la página 157. 3. Consulte Limpieza de la parte delantera de la placa del orificio en la página 158 o póngase en contacto con una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico. 4. Limpie la zona Q0. Póngase en contacto con una persona de mantenimiento cualificada o un representante del servicio técnico. 5. 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. 6. Compruebe la concentración de la muestra. Utilice una muestra nueva. 7. Retire e instale la sonda. 8. Retire e instale la fuente de iones y asegúrese de que los pestillos estén bien cerrados. Si esto no resuelve el problema, instale y optimice una fuente de iones alternativa. 9. 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. 10. Resuelva el problema del sistema LC. |

Solución de problemas del espectrómetro de masas

Tabla 14-1 Problemas del sistema (continuación)

| Síntoma | Posible causa | Acción correctiva |
|--|--|--|
| 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.

Instrucciones de funcionamiento: optimización manual del compuesto

A

El usuario debe controlar el procesador de muestras automático y la válvula de inyección manualmente, ya que estos dispositivos no se pueden controlar a través del sistema con el modo Tune and Calibrate activado.

Requisitos previos

- Ajuste y calibración del espectrómetro de masas.
- Se conocen las condiciones para una separación de LC.
- Todos los dispositivos periféricos necesarios (incluida una bomba de jeringa si fuera necesaria) y los componentes de LC se encuentran en el perfil de hardware.

Materiales necesarios

Para ajustar los parámetros de compuestos concretos, se recomiendan las siguientes soluciones. Para ilustrar los pasos del procedimiento, se utiliza una mezcla de cuatro compuestos.

- Fase móvil: 1:1 acetonitrilo:agua + 2 mM de acetato de amonio + 0,1 % de ácido fórmico.
- Bomba de LC y automuestreador.
- Viales para el automuestreador.

Tabla A-1 Compuestos y pesos moleculares

| Compuesto | <i>m/z</i> |
|-------------|------------|
| Minoxidil | 210,2 |
| Tolbutamida | 271,1 |
| Reserpine | 609,3 |
| Rescinamina | 635,3 |

Acerca de la optimización manual del compuesto

La optimización manual del compuesto se utiliza para optimizar los parámetros de un analito dependientes de los compuestos y de la fuente de iones. Cuando el usuario optimiza manualmente los parámetros de un analito, se crea un método de adquisición MS en el modo de ajuste y calibración. En función del método de introducción de muestras elegido, agregue un método LC al método de adquisición, con el fin de poder utilizar infusión o LC.

La optimización para obtener la señal más alta no siempre proporciona las relaciones señal/ruido más altas. En algunos parámetros, el ruido puede escalarse junto con la señal y debería verificarse durante la optimización, si el objetivo es obtener la máxima relación señal/ruido.

Al optimizar los parámetros dependientes de la fuente de iones, introduzca la muestra con el caudal que se vaya a utilizar durante el análisis de muestras, utilizando el análisis de inyección de flujos (FIA) o la infusión en T como método de introducción de muestras. El gas CAD es el único parámetro dependiente del compuesto que aparece en la pestaña Source/Gas y puede optimizarse fácilmente durante la infusión del analito.

Optimice la posición de la fuente de iones antes de optimizar los parámetros dependientes de la fuente de iones. Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.

Acerca de los tipos de análisis

Para este ejemplo, utilice los tipos de análisis Q1 MS, Q1 MI, Ion producto y MRM. El tipo de análisis Q1 MS se utiliza para confirmar la presencia de compuestos de interés. El tipo de análisis Q1 MI se utiliza para optimizar los voltajes de la celda previa a la colisión o MS. El análisis Product Ion se utiliza para determinar los iones producto de cada compuesto. El tipo de análisis MRM se utiliza para optimizar la energía de colisión (CE) y el potencial de salida de la celda de colisión (CXP) de cada ion producto o fragmento. Utilice los métodos creados en esta sección para realizar análisis cuantitativos o cualitativos.

Optimización manual de un analito

Una vez creado el método de adquisición, optimice los parámetros dependientes del compuesto mediante la función **Edit Ramp** o editando manualmente los parámetros en el Tune Method Editor. Los parámetros dependientes de la fuente de iones solo se pueden optimizar manualmente mediante el ajuste de los parámetros correspondientes en el Tune Method Editor. En función del tipo de análisis utilizado, podrá optimizar diferentes parámetros.

Siga los procedimientos en el orden especificado:

1. [Confirmación de la presencia de compuestos en la página 166](#)
2. [Optimización de parámetros específicos de MS en la página 168](#)
3. [Determinación de los iones producto para la optimización en la página 169](#)
4. [Determinación de los iones producto para la optimización en la página 169](#)
5. [Optimización del potencial de salida de la celda de colisión de cada ion producto en la página 171](#)

Confirmación de la presencia de compuestos

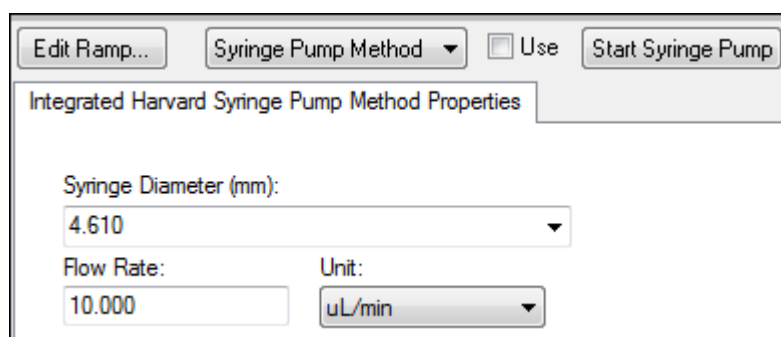
1. Cree un proyecto.
2. Active el perfil de hardware.
3. Prepare la muestra:
 - a. Aspire la solución del compuesto con una jeringa y elimine el aire de la jeringa.
 - b. Utilice el tubo con el conector especial para conectar la jeringa al espectrómetro de masas.

- c. Instale la jeringa en la bomba de jeringa integrada.
4. Infunda el compuesto en una solución con un caudal de entre 5 y 10 µl/min.
5. En la barra de navegación, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
6. En la pestaña Syringe Pump Method Properties, escriba los valores de los parámetros que se indican en la [Tabla A-2](#).

Tabla A-2 Pestaña Syringe Pump Method Properties

| Parámetro | Valor |
|------------------|---|
| Syringe Diameter | Dependen de de la jeringa. 4,610 mm si se utiliza una jeringa de 1,0 ml |
| Caudal | 10 |
| Unit | µl/min |

Figura A-1 Pestaña Syringe Pump Method Properties



7. Haga clic en **Start Syringe Pump**.
8. Seleccione **MS Method** en la lista de métodos.
9. Haga clic en **Start**.
10. Espere hasta que aparezca un TIC uniforme a la izquierda y picos a la derecha. A continuación, haga clic en **Stop**.
11. Active la casilla de verificación **MCA**.
12. Escriba **10** en el campo **Cycles**.
13. Haga clic en **Start**.
14. Cuando finalicen diez análisis, las masas de los cuatro compuestos se muestran como iones.

¡Sugerencia! Si el panel de cromatograma previo o esperado está oculto, seleccione la ventana que desea que se muestre en el menú **Window**.

Instrucciones de funcionamiento: optimización manual del compuesto

Nota: Las intensidades de los iones de los compuestos pueden mostrar grandes variaciones. Para facilitar el paso a una solución de mayor o menor concentración según sea necesario durante la optimización, prepare varios niveles de concentración antes de comenzar la optimización.

15. Haga clic con el botón secundario en el panel de espectros de la esquina inferior derecha y, a continuación, haga clic en **Open File**.
16. Busque los compuestos de interés y, a continuación, anote los valores m/z de los picos más altos. Estos valores deben encontrarse dentro del intervalo de 0,1 a 0,2 Da de la relación m/z prevista. En el siguiente procedimiento, utilice los valores m/z .

Optimización de parámetros específicos de MS

El potencial de desagrupación (DP) y el potencial de entrada (EP) son tensiones de la celda previas a la colisión. Para optimizar estos valores, es necesario modificar gradualmente el rango de voltaje supervisando la intensidad de la señal del compuesto.

El DP es la diferencia entre el orificio y la toma a tierra. Cuanto más elevada sea la diferencia de potencial, mayor será el grado de desagrupación.

El parámetro DP tiene un efecto significativo sobre la señal de analito. Los valores de DP típicos oscilan entre 20 y 150 V. Un valor demasiado bajo del DP dará lugar a una intensidad de los iones más baja y a potenciales interferencias de las agrupaciones. Un valor demasiado alto puede causar la fragmentación del analito en la fuente. Por lo general, el DP debe establecerse en el valor que proporcione la intensidad más alta.

El parámetro EP controla el potencial de entrada, que conduce y concentra los iones a través de la zona Q0 de alta presión. Este parámetro se ajusta normalmente en 10 V para los iones positivos o en -10 V para los iones negativos. El EP afecta en menor medida a la optimización de compuestos y generalmente pueden mantenerse los valores por defecto sin que ello afecte a los límites de detección del analito.

1. Vuelva al Tune Method Editor y cambie el método al tipo de análisis **Q1 Multiple Ions (Q1 MI)**.
2. En la tabla de masas, especifique los valores de los parámetros correspondientes. Consulte la [Tabla A-3](#).

Tabla A-3 Parámetros de la tabla de masas: iones múltiples de Q1 (Q1 MI)

| Compuesto | Masa de Q1 | Tiempo |
|-------------|------------|--------|
| Reserpina | 609,4 | 1 |
| Minoxidil | 210,2 | 1 |
| Tolbutamida | 271,3 | 1 |
| Rescinamina | 635,4 | 1 |

Comience con la reserpina para un caso sencillo. Repita el proceso de optimización manual con los compuestos restantes.

3. Haga clic en **Edit Ramp**.
4. En el cuadro de diálogo Ramp Parameter Settings, seleccione **Declustering Potential (DP)**.

Instrucciones de funcionamiento: optimización manual del compuesto

Nota: Es importante comenzar con el parámetro DP y después optimizar los demás parámetros en el mismo orden en el que se muestran en el cuadro de diálogo. Puede que los parámetros no se optimicen correctamente si se optimizan en otro orden.

5. Escriba los valores correspondientes en **Start**, **Stop** y **Step**.

¡Sugerencia! Los valores existentes son buenos puntos de partida. Utilice la función **Edit Ramp** para modificar estos valores y aumentar así la eficacia.

6. Haga clic en **OK**.
7. Haga clic en **Start**.
8. Haga clic con el botón secundario en el panel de XIC de la esquina inferior derecha y, a continuación, haga clic en **Open File** para maximizar la vista de XIC.
9. Supervise los XIC.

Nota: El valor que proporcione la mejor señal por segundo para el ion de interés es el valor óptimo.

10. Anote el valor óptimo del ión de interés.
11. Desplace el cursor a la tabla de masas, haga clic con el botón secundario y, a continuación, agregue el parámetro recién optimizado.

Se agrega una columna al final de la tabla.
12. Agregue el valor optimizado en la fila correspondiente.
13. Repita estos pasos con cada masa del método de adquisición hasta obtener una lista de los valores óptimos de todas las masas.
14. Repita estos pasos para optimizar el resto de parámetros específicos de MS.

Tabla A-4 Parámetros específicos de MS

| Parámetro | Comentario |
|-----------|---|
| DP | Ajuste el DP al valor que proporcione la intensidad más alta. |
| EP | Casi nunca optimice este parámetro, ya que su efecto es reducido. |

Determinación de los iones producto para la optimización

La energía de colisión (CE) controla la cantidad de energía que reciben los iones precursores a medida que se aceleran hacia el interior de la celda de colisión.

Lleve a cabo este procedimiento, compuesto por compuesto, utilizando los valores optimizados específicos de MS obtenidos anteriormente. Los iones producto proporcionan la masa Q3 de las transiciones de MRM.

En este ejemplo se utiliza el compuesto reserpina.

Instrucciones de funcionamiento: optimización manual del compuesto

1. En el Tune Method Editor, cierre los paneles de XIC.
2. En el campo **Scan type**, haga clic en **Product Ion (MS2)**.
3. Haga clic en la pestaña **Compound** y escriba el valor óptimo anotado anteriormente.
4. En la pestaña MS, escriba **609.4** en el campo **Product Of**. Este valor es la asignación de masas para la reserpina anotada anteriormente en [Confirmación de la presencia de compuestos en la página 166](#).
5. Asegúrese de que la casilla **Center / Width** no está activada.
6. En la tabla de masas, especifique los valores correspondientes de Start, Stop y Time. Consulte la [Tabla A-5](#).

Tabla A-5 Parámetros de la tabla de masas (análisis de ion producto)

| Campo | Valor |
|------------|-------|
| Start (Da) | 100 |
| Stop (Da) | 650 |
| Time (sec) | 2 |

7. Haga clic en **Edit Ramp**.
8. En el cuadro de diálogo Ramp Parameter Settings, seleccione **Collision Energy** y, a continuación, escriba los valores correspondientes en **Start**, **Stop** y **Step**.

Nota: Los valores existentes son buenos puntos de partida. Utilice la función **Edit Ramp** para modificar estos valores y aumentar así la eficacia.

9. Haga clic en **OK**.
10. Active la casilla de verificación **MCA**.
11. Haga clic en **Start**.
12. Haga clic con el botón secundario en el panel de XIC de la esquina inferior derecha y, a continuación, haga clic en **Open File**.
13. Seleccione los iones producto de mayor intensidad y anote el valor m/z de los iones producto incluyendo el primer decimal, por ejemplo, 195,1.

Recomendamos optimizar dos o tres iones producto por cada compuesto. Las transiciones adicionales se pueden utilizar como confirmación, o evitar la necesidad de volver a optimizar un compuesto en caso de que aparezca una interferencia.

Nota: Asegúrese de que los picos más altos seleccionados para la optimización no suponen una pérdida común a partir del ion precursor, como el agua o el dióxido de carbono. Asegúrese asimismo de que la masa del ion producto no es demasiado baja, en cuyo caso se podrían producir interferencias en esa transición en las muestras reales o en agrupaciones de la fase móvil durante el análisis en la columna.

14. Repita este procedimiento para los compuestos restantes.

Optimización del potencial de salida de la celda de colisión de cada ion producto

1. En el Tune Method Editor, cierre los paneles de XIC.
2. Abra el método guardado previamente.
3. En la tabla de masas, compruebe los valores m/z de Q1 y Q3 para el compuesto.
4. Seleccione la pestaña **Compound** y escriba los valores de DP y CE óptimos anotados anteriormente.
5. Haga clic en **Edit Ramp**.
6. Seleccione **Collision Cell Exit Potential (CXP)** en el cuadro de diálogo Ramp Parameter Settings.
7. Escriba los valores correspondientes en **Start**, **Stop** y **Step**.

¡Sugerencia! Los valores existentes son buenos puntos de partida. Utilice la función **Edit Ramp** para modificar estos valores y aumentar así la eficacia.

8. Haga clic en **OK**.
9. Haga clic en **Start**.
10. Haga clic con el botón secundario en el panel de XIC de la esquina inferior derecha y, a continuación, haga clic en **Open File**.
11. Anote el valor óptimo del ión de interés.

El valor que proporcione la mejor señal es el valor óptimo.
12. En la tabla de masas, haga clic con el botón derecho y luego, seleccione el parámetro recién optimizado.

De esta forma, se agregará una columna a la tabla.
13. Repita el procedimiento si se están supervisando otros iones producto.
14. Agregue los valores optimizados en la fila correspondiente.
15. Guarde el método.
16. Repita este procedimiento para cualquier otro compuesto que se haya optimizado con anterioridad.

Optimización manual de los parámetros de la fuente de iones y del gas

La configuración de la fuente de iones y del gas debe ajustarse correctamente para evitar la contaminación del espectrómetro de masas y para asegurar de que los compuestos de interés se han introducido de manera óptima en la fase gaseosa como iones.

Instrucciones de funcionamiento: optimización manual del compuesto

Nota: La configuración óptima de la fuente de iones y del gas está relacionada con la composición del disolvente y el caudal.

La configuración de la fuente de iones y del gas debe ajustarse cuando las condiciones de LC varíen significativamente.

Para optimizar los parámetros de la fuente de iones y del gas, configure una bomba de jeringa con los compuestos de interés y conecte la línea con un acople en T al dispositivo de LC. La bomba de LC se puede controlar manualmente o mediante el software.

Otra forma de optimizar manualmente la configuración de la fuente de iones y del gas consiste en utilizar el procesador de muestras automático para inyectar manualmente el compuesto de interés, mientras se modifican manualmente los parámetros en el modo de ajuste manual para determinar la configuración óptima.

Preparación de la fuente de iones

1. Ajuste el micrómetro horizontal a 5.
2. Configure el micrómetro vertical en la fuente de iones en función del caudal.

Utilice los parámetros de la [Tabla A-6](#).

Tabla A-6 Parámetros verticales de la fuente de iones Turbo V™

| Caudal | Parámetros verticales iniciales |
|-------------------------|---------------------------------|
| 1 µl/min a 20 µl/min | 10 |
| 20 µl/min a 250 µl/min | 5 |
| 250 µl/min a 500 µl/min | 2 |
| + 500 µl/min | 0 |

En función de cómo se lleve a cabo esta optimización, es posible que sea necesario configurar el perfil de hardware con las bombas de LC.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.

Optimización de los parámetros de la fuente de iones

Por lo general, los parámetros de la fuente de iones se optimizan con el fin de obtener la mejor relación señal/ruido para el compuesto de interés. El suministro de Curtain Gas™ está optimizado de forma que se utilice el parámetro más alto sin que por ello se pierda sensibilidad. Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.

Utilice el procedimiento siguiente para optimizar el parámetro de flujo Curtain Gas™. La función principal del parámetro de flujo de Curtain Gas™ es evitar la contaminación de la óptica iónica. El parámetro de flujo de Curtain Gas™ siempre debe mantenerse lo más alto posible, sin que se vea afectada la sensibilidad. El valor depende del tipo de espectrómetro de masas y de la fuente de iones.

No ajuste el parámetro en un valor inferior al de partida.

El caudal mínimo que admite la sonda APCI es de 200 µl/min.

Nota: En función del espectrómetro de masas, es probable que no estén disponibles todos los parámetros.

1. En la barra de navegación, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
2. Haga clic en **File > Open** (Archivo > Abrir).
3. En la lista **Files**, haga clic en el método de adquisición utilizado para optimizar el parámetro del compuesto y, a continuación, haga clic en **OK**.

El método se abre en el Tune Method Editor (Editor del método de ajuste).

4. Haga clic en la pestaña **Source/Gas**.
5. Utilice la guía de la fuente de iones y el flujo de gas para configurar todos los parámetros de la fuente de iones y del gas de acuerdo con el caudal.
6. Defina el tiempo de ejecución en un valor suficiente para permitir el ajuste de la mayor cantidad de parámetros posible. Puede comenzar con un tiempo de 15 minutos.
7. Haga clic en **Start**.

Los datos se muestran en paneles situados debajo del Tune Method Editor (Editor del método de ajuste).

8. Anote la señal del pico de interés.
9. En el campo **Curtain Gas (CUR)**, aumente el valor actual en cinco unidades.
10. Continúe aumentando el valor de **Curtain Gas (CUR)** hasta determinar el valor máximo que no suponga pérdida de sensibilidad.

Al igual que sucede con la mayoría de parámetros de Source/Gas, si dos valores proporcionan el mismo resultado, debe utilizar el valor más alto.

11. Repita este procedimiento con los demás parámetros Source/Gas.

Al optimizar estos parámetros, debe intentar utilizar la configuración que ofrezca el valor de relación señal/ruido más alto.

Parámetros avanzados

Los siguientes parámetros tan solo debe optimizarlos un operador con experiencia.

Optimización de AF2

El parámetro AF2 controla la fragmentación del segundo ión precursor en un análisis MS3. La cantidad de energía de excitación utilizada depende del compuesto y de la cantidad de fragmentación deseada.

1. Para los modos de ion positivo y negativo, programe la rampa de AF2 entre 0,07 V y 0,3 V, con un valor de paso de 0,01 V.

El rango permitido es de 0 V a 1 V.

2. Para los modos de ión positivo y negativo, programe la rampa de AF2 entre 0 mV y 200 mV, con un valor de paso de 5 mV.
3. Seleccione el valor de AF2 que proporcione la mayor cantidad de fragmentación.

Si selecciona el análisis MS3 cuando utiliza la serie de instrumentos 6500 y 6500⁺, la opción **No Fragmentation** no está disponible. No obstante, los usuarios pueden reproducir el efecto de la opción **No Fragmentation** si ajustan el parámetro **AF2** a **0** en la pestaña **Compound** del Tune Method Editor.

Acerca de la dispersión de energías de colisión (CES)

En los parámetros dependientes de los compuestos de los experimentos de ion producto mejorado (EPI) y MS3, el campo de dispersión de energías de colisión (CES) permite a los usuarios especificar la diferencia de energías de colisión que se aplicará en el experimento. Por ejemplo, si se utiliza un valor de CE de 30 y un valor de CES de 15, se utilizan energías de colisión de 15, 30 y 45.

Parámetros de sistemas de la serie 5500

B

El primer número que aparece debajo de cada tipo de análisis es el valor predefinido. El rango de números es el rango permitido para cada parámetro.

Tabla B-1 Parámetros de sistemas de la serie 5500

| ID de parámetro | ID de acceso | Modo de iones positivos | | | Modo de iones negativos | | |
|-----------------------------------|-----------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|---------------------|---------------------|
| | | Q1 | Q3 | MS/MS | Q1 | Q3 | MS/MS |
| CUR | CUR | 20 10 a 55 | 20 10 a 55 | 20 10 a 55 | 20 10 a 55 | 20 10 a 55 | 20 10 a 55 |
| CAD | CAD | 0 N/D | 6 N/D | Med (9) 0 a 12 | 0 N/D | 5 N/D | Med (9) 0 a 12 |
| IS ⁽¹⁾⁽²⁾ | IS ⁽¹⁾⁽²⁾ | 5500 0 a 5500 | 5500 0 a 5500 | 5500 0 a 5500 | -4500 -4500 a 0 | -4500 -4500 a 0 | -4500 -4500 a 0 |
| NC ⁽³⁾ | NC ⁽³⁾ | 3 0 a 5 | 3 0 a 5 | 3 0 a 5 | -3 -5 a 0 | -3 -5 a 0 | -3 -5 a 0 |
| TEM ⁽²⁾⁽³⁾ | TEM ⁽²⁾⁽³⁾ | 0 0 a 750 | 0 0 a 750 | 0 0 a 750 | 0 0 a 750 | 0 0 a 750 | 0 0 a 750 |
| OR (DP = OR) | DP | 100 0 a 300 | 100 0 a 300 | 100 0 a 300 | -100 -300 a 0 | -100 -300 a 0 | -100 -300 a 0 |
| Q0 (EP = -Q0) | EP | 10 2 a 15 | 10 2 a 15 | 10 2 a 15 | -10 -15 a -2 | -10 -15 a -2 | -10 -15 a -2 |
| IQ1 (IQ1 = Q0 + desviación) | IQ1 | Q0 + (-0.5) -0,1 a -2 | Q0 + (-0.5) -0,1 a -2 | Q0 + (-0.5) -0,1 a -2 | Q0 + 0.5 0,1 a 2 | Q0 + 0.5 0,1 a 2 | Q0 + 0.5 0,1 a 2 |
| ST (ST = Q0 + desviación) | ST | Q0 + (-8) -12 a -5 | Q0 + (-8) -12 a -5 | Q0 + (-8) -12 a -5 | Q0 + 8 12 a 5 | Q0 + 8 12 a 5 | Q0 + 8 12 a 5 |
| RO1 (IE1 = Q0 - RO1) | IE1 | 1 0 a 3 | N/D | 1 0 a 3 | -1 -3 a -0 | N/D | -1 -3 a -0 |

Tabla B-1 Parámetros de sistemas de la serie 5500 (continuación)

| ID de parámetro | ID de acceso | Modo de iones positivos | | | Modo de iones negativos | | |
|----------------------------------|--------------|-------------------------|-----------------------|-----------------------|-------------------------|-------------------|---------------------|
| | | Q1 | Q3 | MS/MS | Q1 | Q3 | MS/MS |
| IQ2 (IQ2 = Q0 + desviación) | IQ2 | Q0 +(-10) -30 a -8 | Q0 +(-10) -30 a -8 | Q0 +(-10) -30 a -8 | Q0 + 10 8 a 30 | Q0 + 10 8 a 30 | Q0 + 10 8 a 30 |
| RO2 | RO2 | -20 N/D | -20 N/D | N/D | 20 N/D | 20 N/D | N/D |
| RO2 (CE = Q0 - RO2) | CE | N/D | N/D | 30 5 a 180 | N/D | N/D | -30 -180 a -5 |
| ST 3 (ST3 = RO2 + desviación) | ST 3 | RO2 - 10 -30 a -5 | N/D | N/D | RO2 + 10 5 a 30 | N/D | N/D |
| ST 3 (CXP = RO2 - ST3) | CXP | N/D | 15 0 a 55 | 15 0 a 55 | N/D | -15 -55 a 0 | -15 -55 a 0 |
| RO3 | RO3 | -50 N/D | N/D | N/D | 50 N/D | N/D | N/D |
| RO3 (IE3 = RO2 - RO3) | IE3 | N/D | 1 0 a 5 | 1 0 a 5 | N/D | -1 -5 a 0 | -1 -5 a 0 |
| DF | DF | -200 -300 a 0 | -200 -300 a 0 | -200 -300 a 0 | 200 0 a 300 | 200 0 a 300 | 200 0 a 300 |
| CEM | CEM | 1800 0 a 3300 | 1800 0 a 3300 | 1800 0 a 3300 | 1800 0 a 3300 | 1800 0 a 3300 | 1800 0 a 3300 |
| GS1 | GS1 | 20 0 a 90 | 20 0 a 90 | 20 0 a 90 | 20 0 a 90 | 20 0 a 90 | 20 0 a 90 |
| GS2 | GS2 | 0 0 a 90 | 0 0 a 90 | 0 0 a 90 | 0 0 a 90 | 0 0 a 90 | 0 0 a 90 |
| IHT | IHT | 150 0 a 250 | 150 0 a 250 | 150 0 a 250 | 150 0 a 250 | 150 0 a 250 | 150 0 a 250 |

Tabla B-1 Parámetros de sistemas de la serie 5500 (continuación)

| ID de parámetro | ID de acceso | Modo de iones positivos | | | Modo de iones negativos | | |
|-----------------|--------------|-------------------------|------------|------------|-------------------------|------------|------------|
| | | Q1 | Q3 | MS/MS | Q1 | Q3 | MS/MS |
| sdp | sdp | 1 1 o 2 | 1 1 o 2 | 1 1 o 2 | 1 1 o 2 | 1 1 o 2 | 1 1 o 2 |

(1) Fuente de iones Turbo V™ (2) Sonda TurbolonSpray® DuoSpray™ (1=Sonda TurbolonSpray y 2=Sonda APCI)

Tabla B-2 QTRAP® Parámetros del sistema 5500 solo para los tipos de análisis LIT

| ID de parámetro | ID de acceso | Modo de iones positivos | Modo de iones negativos |
|-------------------|--------------|-----------------------------------|---------------------------------|
| CAD | CAD | Alto Low-High | Alto Low-High |
| AF2** | AF2 | 0,100 0 o 1 | 0,100 0 o 1 |
| AF3 | AF3 | Mass-Speed Dependent 0 a 10 | Mass-Speed Dependent 0 a 10 |
| EXB | EXB | Mass-Speed Dependent -165 to 0 | Mass-Speed Dependent 0 a 165 |
| CES | CES | 0 0 a 50 | 0 0 a 50 |
| ROS (Q0 - ROS) | CE | 10 5 a 180 | -10 -5 a -180 |

** Solo MS/MS/MS

Soluciones e iones de calibración

C

Tabla C-1 Frecuencia de ajuste

| Calibration | | | Optimización de la resolución | |
|------------------|---|-------------------------|-------------------------------|-------------------------|
| Tipo de análisis | Frecuencia | Manual/ automatizada | Frecuencia | Manual/ automatizada |
| Q1 y Q3 | 3 a 6 meses | Ambas | 3 a 6 meses | Ambas |
| LIT | Cada 2 semanas, según sea necesario | Ambas | 3 a 6 meses | Solo automatizada |

Tabla C-2 Soluciones de ajuste recomendadas para la serie de instrumentos 5500

| Sistema | Q1 y Q3 | | LIT |
|--|-----------------|--------------------|------------------------|
| | Positivo | Negativo | Positivo y Negativo |
| Sistema de LC-MS/MS SCIEX Triple Quad™ 5500 | POS PPG, 2e-7 M | PPG en NEG, 3e-5 M | N/A |
| Sistema de LC-MS/MS QTRAP® 5500 | POS PPG, 2e-7 M | PPG en NEG, 3e-5 M | Agilent ESI Tuning Mix |

Tabla C-3 Análisis de PPG en modo ion para Q1 y Q3

| Polaridad | Masas | | | | | |
|-----------|-------|--------|--------|---------|---------|---------|
| Positiva | 59,05 | 175,13 | 616,46 | 906,67 | 1080,80 | 1196,88 |
| Negativa | 45,00 | 585,39 | 933,64 | 1223,85 | 1572,10 | N/A |

Soluciones e iones de calibración

Tabla C-4 Análisis LIT del sistema de LC-MS/MS QTRAP® 5500 (Agilent)

| Polaridad | Masas | | | |
|------------------|--------------|--------|--------|--------|
| Positiva | 118,09 | 322,05 | 622,03 | 922,01 |
| Negativa | 112,99 | 431,98 | 601,98 | N/A |

Iconos de la barra de herramientas

D

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

Tabla D-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 D-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 Generación de datos de DAD en la página 122 . |
|  | ADC | Haga clic para abrir la pestaña ADC Properties. Consulte Mostrar datos de ADC en la página 114 . |

Iconos de la barra de herramientas

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



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

Tabla D-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. |
|  | Compound Optimization | Optimiza un compuesto mediante una infusión de FIA. |
|  | 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. |
|  | IDA Method Wizard | Inicia el IDA Method Wizard. |

Tabla D-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. |

Iconos de la barra de herramientas

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




















| Icono | Nombre | Descripción |
|---|-----------------------------|--|
|  | Show Previous Sample | Pasa a la muestra anterior. |
|  | Go To Sample | Abre el cuadro de diálogo Select Sample. |
|  | 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. |

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














| Icono | Nombre | Descripción |
|---|------------------------|--|
|  | 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. |
|  | 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 D-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 D-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 D-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 D-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. |

Iconos de la barra de herramientas

Tabla D-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 predeterminada (vista de todos los datos) (si, por ejemplo, el usuario ha aplicado zoom a un cromatograma). |

Tabla D-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 D-11 Referencia rápida de iconos: modo Quantitate










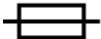
| Icono | Nombre | Descripción |
|---|----------------------|---|
|  | Add/Remove Samples | Añade o elimina muestras de la tabla de resultados. |
|  | Export as Text | Guarda la Results Table como archivo de texto. |
|  | Modify Method | Abre un archivo wiff. |
|  | Peak Review - Pane | Abre los picos 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













E






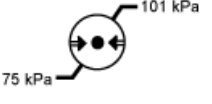

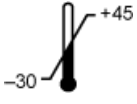
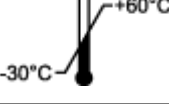



Nota: No todos los símbolos que aparecen en la tabla siguiente se aplican a todos los instrumentos.

| 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 |
|  | Precaución Nota: En la documentación de SCIEX, este símbolo identifica un riesgo de lesiones personales. |



| 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 |
|  | Frágil |
|  | Fusible |

Glosario de símbolos

| Símbolo | Descripción |
|---|---|
| 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 |
|  | Peligro de gas a presión |

| Símbolo | Descripción |
|---|---|
|  | Puesta a tierra de protección |
|  | Peligro de perforación |
|  | 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 |
|  | Conexión USB 3.0 |
|  | Riesgo de radiación ultravioleta |
| VA | Voltioamperio (potencia) |
| V | Voltios (voltaje) |

Glosario de símbolos

| Símbolo | Descripción |
|---|--|
|  | RAEE. No deseche el equipo como residuos urbanos sin clasificar. |
| W | Vatios |
|  | <i>aaaa-mm-dd</i> Fecha de fabricación |

Glosario de advertencias

F

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. |
| INDICADOR DE IMPACTO ADVERTENCIA DE PRODUCTO SENSIBLE | 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. |
| MINIMUM OF SIX PERSONS REQUIRED TO SAFELY LIFT THIS EQUIPMENT | PARA LEVANTAR ESTE EQUIPO SIN RIESGO SE NECESITAN AL MENOS SEIS PERSONAS |
| 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. |