SCIEX
The Power of Precision

TripleTOF Sistema 5600/5600+

Guía de usuario del sistema

RUO-IDV-05-7040-ES-E

Marzo de 2022

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.

Las marcas comerciales o marcas registradas aquí mencionadas, incluidos sus correspondientes logotipos, son propiedad de AB Sciex Pte. Ltd. o sus respectivos propietarios, en Estados Unidos y algunos otros países (consulte sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ se usa bajo licencia.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

AB Sciex Pte. Ltd.
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

Tabla de contenido

Capítulo 1: Precauciones y limitaciones de funcionamiento 7
Información general de seguridad 7
Símbolos y convenciones de la documentación 7
Cumplimiento normativo 8
Australia y Nueva Zelanda 8
Canadá 8
Europa 8
Estados Unidos 9
Internacional 9
Precauciones eléctricas 10
Alimentación 10
Conductor de protección de tierra 10
Precauciones químicas 11
Fluidos seguros para el sistema 12
Precauciones de ventilación 13
Precauciones físicas 14
Precauciones medioambientales 14
Entorno electromagnético 15
Desmantelamiento y eliminación 16
Personal cualificado 16
Condiciones de laboratorio 17
Condiciones medioambientales seguras 17
Especificaciones de rendimiento 17
Uso y modificación del equipo 17

Capítulo 2: Principios de funcionamiento 19
Descripción general del sistema 19
Descripción general del hardware 19
Símbolos del panel 23
Teoría de funcionamiento 24
Gestión de datos 25

Capítulo 3: Instrucciones de funcionamiento 26
Inicio del sistema 26
Apagado del sistema 27
Ajuste de la posición de la bomba de jeringa integrada 28
Restablecimiento de la bomba de jeringa 31

Capítulo 4: Instrucciones de funcionamiento: Flujos de trabajo para la muestra 33

Capítulo 5: Instrucciones de funcionamiento: Perfiles de hardware y proyectos 37
Perfiles de hardware 37
Creación de un perfil de hardware 37
Adición de dispositivos a un perfil de hardware 42
Solución de problemas de activación del perfil de hardware 44
Proyectos y subproyectos 45
Creación de proyectos y subproyectos 45
Crear subproyectos 46
Copia de subproyectos 46
Cambio entre proyectos y subproyectos 47
Carpetas del proyecto instaladas 47
Copia de seguridad de la carpeta API Instrument 48
Recuperación de la carpeta API Instrument 48

Capítulo 6: Instrucciones de funcionamiento: Ajuste y calibración 49
Optimización del espectrómetro de masas 50
Cuadro de diálogo Verifying or Adjusting Performance 50
Resumen de resultados 51

Capítulo 7: Instrucciones de funcionamiento: Métodos de adquisición 52
Creación de un método de adquisición utilizando el Acquisition Method Editor 52
Adición de un experimento 53
Creación de un periodo 54
Copia de un experimento en un periodo 54
Copiar un experimento dentro de un periodo 54
Creación de un método de adquisición mediante el asistente de método 54
Técnicas de análisis 55
Espectrometría de masas simple 55
Espectrometría de masas simple de cuadrupolo 55
Espectrometría de masas simple con tiempo de vuelo 56
Espectrómetro de masas en tándem 56
Espectrometría de masas de ion producto 56
Espectrometría de masas de ion precursor 56
Acerca de la adquisición de datos de espectro 56
Parámetros de MS 57

Capítulo 8: Instrucciones de funcionamiento: Lotes 62
Configuración de las opciones de cola 62
Adición de conjuntos y muestras a un lote 64
Envío de una muestra o conjunto de muestras 67
Configuración de la calibración de muestras 67
Cambio del orden de las muestras 68
Adquisición de datos 68
Definición de la ubicación de las muestras en el Batch Editor 69
Selección de la posición de los viales mediante la pestaña Locations (opcional) 69

Detención de la adquisición de muestras 70
Estados de cola y de dispositivo 71
Estados de cola 71
Visualización de los iconos de estado de instrumento y dispositivo 72

Capítulo 9: Instrucciones de funcionamiento: Análisis y exploración de datos 74
Apertura de archivos de datos 74
Navegación por las muestras de un archivo de datos 75
Visualización de las condiciones experimentales 75
Visualización de los datos en tablas 76
Mostrar datos de ADC 77
Visualización de los datos cuantitativos básicos 78
Cromatogramas 78
Visualización de TIC desde un espectro 80
Visualización de un espectro desde un TIC 80
Generación de XIC 81
Generación de un XIC mediante el método de rango seleccionado 82
Generación de un XIC mediante el método de pico máximo 82
Generación de un XIC mediante el método de masas de pico base 83
Extracción de iones mediante el método de selección de masas 83
Generación de BPC 84
Generación de XWC 85
Visualización de datos de DAD 85
Generación de TWC 86
Ajuste del umbral 86
Procesamiento de datos gráficos 87
Gráficos 87
Gestión de datos 87
Ampliación del eje Y 89
Ampliación del eje X 89

Capítulo 10: Información de servicio técnico y mantenimiento 90
Calendario de mantenimiento recomendado 90
Limpieza de las superficies 93
Vaciado de la botella de drenaje de escape de la fuente 94
Inspección del nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar 96
Sustitución del filtro del ventilador de refrigeración del espectrómetro de masas 97
Almacenamiento y manipulación 99

Capítulo 11: Solución de problemas del espectrómetro de masas 100

Apéndice A: Iones de calibración recomendados 106

Apéndice B: Masas exactas y fórmulas químicas 109

Apéndice C: Iconos de la barra de herramientas 112

Apéndice D: Menús contextuales 123
Editor de lotes 123
Cola 124
Menú contextual del panel Show File Information 125
Paneles de cromatograma 125
Paneles de espectro 126
Tabla de resultados 127
Revisión de picos 128
Calibration Curve 129

Apéndice E: Glosario de símbolos 131

Apéndice F: Glosario de advertencias 137

Contacto 139
Formación del cliente 139
Centro de aprendizaje en línea 139
Soporte SCIEX 139
Ciberseguridad 139
Documentación 139

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 normativo. También describe los riesgos posibles para el sistema y las advertencias, así como las precauciones que se deben tener en cuenta para minimizar los peligros.

Además de esta sección, para obtener información sobre los símbolos y convenciones utilizados en el entorno del laboratorio, en el sistema y en esta documentación, consulte la sección Glosario de símbolos. Para informarse de los requisitos del sitio, como la alimentación, el escape de la fuente, la ventilación, el aire comprimido, el nitrógeno o la bomba de vacío preliminar, consulte el documento: *Guía de planificación del centro*.

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 las fichas técnicas de seguridad química del fabricante y de la información de la etiqueta del producto. Las etiquetas se muestran con símbolos reconocidos internacionalmente. Hacer caso omiso de estas advertencias podría dar lugar a que se produjeran lesiones graves.

El objetivo de la información de seguridad es complementar las normativas y leyes sobre medio ambiente, 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.

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 causar 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: Una "Sugerencia" proporciona información útil que ayuda a aplicar las técnicas y los procedimientos de la guía con un fin específico; también proporciona métodos de acceso directo. Sin embargo, las sugerencias no son esenciales para la finalización de un procedimiento.

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 los componentes individuales de este. 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 la sección Interferencias electromagnéticas.
- **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 la sección Interferencias electromagnéticas.
- **Seguridad:**
  - CAN/CSA C22.2 N.º 61010-1
  - CAN/CSA C22.2 N.º 61010-2-061

Europa

- **Compatibilidad Electromagnética (CEM):** Directiva sobre Compatibilidad Electromagnética 2014/30/UE según lo establecido en las siguientes normas:
  - EN 61326-1
  - EN 55011 (Clase A)

  Consulte la sección Compatibilidad electromagnética.

- **Seguridad:** Directivas de baja tensión 2014/35/UE según lo establecido en las siguientes normas:
  - EN 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 la sección Residuos de aparatos eléctricos y electrónicos.
- **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:
  - UL 61010-1
  - UL 61010-061

Internacional

- **Compatibilidad electromagnética (CEM):**
  - IEC 61326-1
  - IEC CISPR 11 (Clase A)
  - IEC 61000-3-2
  - IEC 61000-3-3

  Consulte la sección Compatibilidad electromagnética.
- **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 (FSE) 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 gestión de cables para controlar los cables eléctricos. Esto reducirá el riesgo de tropezar.

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

Alimentación

Conecte el sistema a una toma de alimentación compatible como se indica 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 cumplan 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 solo los cables de alimentación que se suministran con el sistema. No utilice cables de alimentación que no estén clasificados correctamente para el funcionamiento de este sistema.

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

Conductor de protección de tierra

La alimentación debe incluir un conductor de protección de tierra correctamente instalado. El conductor de protección de tierra debe ser instalado o examinado 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 muestra y un punto de conexión a tierra adecuado en la fuente de iones. Esta conexión a tierra adicional refuerza la configuración de seguridad especificada por SCIEX.

Precauciones químicas

¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Determine si se precisa descontaminación antes de proceder a la limpieza o el mantenimiento. Si se han utilizado con el sistema materiales radiactivos, agentes biológicos o sustancias químicas tóxicas, el cliente debe descontaminar el sistema antes de la limpieza o el mantenimiento.

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

¡ADVERTENCIA! Riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Conecte correctamente los tubos de drenaje al espectrómetro de masas y a la botella de drenaje de escape de la fuente para evitar fugas.

- Determine qué productos químicos se han utilizado en el sistema antes de su reparación o mantenimiento habitual. Para conocer las precauciones de higiene y seguridad que deben seguirse con respecto a los productos químicos, consulte el documento: *Ficha técnica*. Para obtener información sobre el almacenamiento, consulte el documento: *Certificado de análisis*. Para buscar una *ficha técnica* o un *certificado de análisis* de SCIEX, vaya a sciex.com/tech-regulatory.
- Utilice siempre el equipo de protección personal adecuado, incluidos guantes no empolvados, gafas de seguridad y una bata de laboratorio.

  Nota: Se recomienda el uso de guantes de nitrilo o neopreno.
- Trabaje en zonas bien ventiladas o en las que se disponga de una campana extractora.
- 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 eliminar sustancias químicas. Existe el riesgo de sufrir lesiones personales si las sustancias químicas no se manipulan ni eliminan como es debido.
- Evite que las sustancias químicas entren en contacto con la piel durante los procedimientos de limpieza y lávese las manos después de utilizarlas.
- Asegúrese de que todas las mangueras de escape estén conectadas correctamente y de que todas las conexiones funcionen 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 y radiactivos.
- (Recomendado) Utilice cubetas secundarias de recogida debajo de la bomba 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.Para obtener más información acerca de las soluciones de limpieza seguras, consulte la sección .

PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. No utilice ningún otro fluido hasta que SCIEX confirme que no representa ningún riesgo. Esta lista no es una lista completa.

Nota: Utilice sólo disolventes nuevos recién preparados de grado LC-MS o mejores para las fases móviles de LC.

- **Disolventes orgánicos**
  - Acetonitrilo de grado LC-MS; hasta el 100 %
  - Metanol de grado LC-MS; hasta el 100 %
  - Isopropanol de grado LC-MS; hasta el 100 %
  - Agua de grado LC-MS o superior; hasta el 100 %
  - Acetonitrilo; hasta el 100 %
  - Metanol; hasta el 100 %
  - Isopropanol; hasta el 100 %
  - Agua doblemente desionizada (DDI); hasta el 100 %
  - Tetrahidrofurano; hasta el 100 %
  - Tolueno y otros disolventes orgánicos; hasta el 100 %
  - Hexanos; hasta el 100 %
- **Tampones**
  - Acetato de amonio; menos de 100 mM
  - Formato de amonio; menos de 100 mM
  - Fosfato; 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 %
- Ácido fosfórico; menos del 1 %
- Trimetilamina; menos de un 1 %
- Trietilamina; menos de un 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! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. 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 fijados con abrazaderas. Asegúrese de que el laboratorio tiene una tasa de intercambio de aire adecuada para el trabajo realizado.

¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. 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. Examine los tubos de escape con regularidad para asegurarse de que no haya 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! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. No utilice la fuente de iones si no dispone de los conocimientos y la formación adecuados para utilizar, recoger y evacuar los materiales tóxicos o nocivos que se emplean con la fuente de iones.

¡ADVERTENCIA! Riesgo de perforación, peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Deje de usar la fuente de iones si la ventana está agrietada o rota y póngase en contacto con un representante del servicio técnico (FSE) de SCIEX. Cualquier material tóxico o nocivo introducido en el equipo estará presente en la salida de escape de la fuente. El escape del equipo se debe expulsar de la sala. Deseche los objetos afilados siguiendo los procedimientos de seguridad establecidos del laboratorio.

Precauciones físicas

¡ADVERTENCIA! Peligro de carga pesada. Utilice un dispositivo de elevación mecánico para levantar y mover el espectrómetro de masas. Siga los procedimientos establecidos para la elevación segura de cargas. Recomendamos el uso de un servicio de mudanza profesional. Para conocer el peso de los componentes del sistema, consulte el documento: *Guía de planificación del centro*.

Precauciones medioambientales

La instalación de los suministros y elementos de alimentación eléctrica, calefacción, ventilación y fontanería debe llevarla a cabo personal calificado. 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 el documento: *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! Riesgo biológico. Para el uso de materiales de riesgo biológico, deben cumplirse en todo momento las correspondientes normativas locales de evaluación, control y manipulación de riesgos. Ni este sistema ni ninguna parte de este están previstos para actuar como un contenedor de residuos biológicos.

¡ADVERTENCIA! Peligro medioambiental. Siga los procedimientos establecidos para eliminar los residuos con riesgo biológico, tóxicos, radioactivos y electrónicos. El cliente es responsable de eliminar las sustancias peligrosas, incluidos los productos químicos, aceites usados y componentes eléctricos, conforme a las leyes y normativas locales.

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

Entorno electromagnético

Compatibilidad electromagnética

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

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

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

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

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

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

Debe asegurarse de mantener un entorno electromagnético compatible para un mantenimiento adecuado del equipo que permita que el dispositivo funcione de la forma prevista. Si la línea de alimentación eléctrica está sometida a un nivel alto de ruido eléctrico, instale un protector de sobretensión.

Interferencias electromagnéticas

Equipo de grupo 1: este equipo está clasificado como equipo industrial, científico y médico (ISM) que puede llegar a usar energía de RF para su funcionamiento interno.

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 alimentación eléctrica de baja tensión que abastezca a edificios destinados a viviendas. [Derivada de CISPR 11:2009, 5.3] El equipo de clase A debe respetar los límites de la clase A.

PRECAUCIÓN: Posibles interferencias de radio. Este equipo no está pensado para su uso en entornos residenciales y puede que no proporcione una protección adecuada ante la recepción de radio en dichos entornos.

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 costes. Los cambios o las modificaciones que el fabricante no haya aprobado explícitamente pueden anular su autorización para utilizar el equipo.

Desmantelamiento y eliminación

¡ADVERTENCIA! Peligro medioambiental. Siga los procedimientos establecidos para eliminar los residuos con riesgo biológico, tóxicos, radioactivos y electrónicos. El cliente es responsable de eliminar las sustancias peligrosas, incluidos los productos químicos, aceites usados y componentes eléctricos, conforme a las leyes y normativas locales.

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

Cuando el sistema vaya a retirarse del servicio, separe los distintos materiales y recíclelos de acuerdo con las normativas medioambientales nacionales y locales. Consulte la sección Almacenamiento y manipulación.

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 (FSE) para obtener una copia del formulario.

No deseche 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. Es posible que la garantía de SCIEX no cubra los daños que se produzcan en un sistema si el servicio técnico del equipo lo realiza personal no autorizado por SCIEX.

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 (QMP) durante la instalación. Una 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 medioambientales seguras

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

- Interiores
- Altitud: hasta 2000 m (6560 ft) sobre el nivel del mar
- Temperatura ambiente: de 5 °C (41 °F) a 40 °C (104 °F)
- Humedad relativa: del 20 % al 80 %, sin condensación
- Fluctuaciones de tensión de la alimentación: ±10 % de la tensión nominal
- Sobretensiones transitorias: hasta los niveles de categoría de sobretensión II
- Sobretensiones temporales de la alimentación
- Grado de contaminación 2

Especificaciones de rendimiento

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

- Una temperatura ambiente de 18 °C a 26 °C (de 64 °F a 79 °F)

  Con el tiempo, la temperatura debe mantenerse dentro de un intervalo de 2 °C (3.6 °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 % a 80 %, sin condensación.

Uso y modificación del equipo

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

¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. No retire las cubiertas. Si lo hace, puede provocar lesiones o un funcionamiento incorrecto del sistema. Las cubiertas no tienen que retirarse para las tareas de mantenimiento rutinario, inspección o ajuste. Póngase en contacto con un representante del servicio técnico (FSE) 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 piezas no recomendadas por SCIEX o el uso de piezas con una finalidad que no sea la prevista pueden poner al usuario en riesgo de sufrir lesiones o afectar negativamente al rendimiento del sistema.

¡ADVERTENCIA! Peligro de carga pesada. Utilice un dispositivo de elevación mecánico para levantar y mover el espectrómetro de masas. Siga los procedimientos establecidos para la elevación segura de cargas. Recomendamos el uso de un servicio de mudanza profesional. Para conocer el peso de los componentes del sistema, consulte el documento: *Guía de planificación del centro*.

¡ADVERTENCIA! Peligro de aplastamiento. Utilice calzado protector al mover objetos pesados.

Utilice el sistema en el interior de un laboratorio que cumpla con las condiciones medioambientales recomendadas en el documento *Guía de planificación del centro* del espectrómetro de masas.

Si el sistema se utiliza en un entorno o en un modo diferente a los indicados por el fabricante, esto podría afectar al rendimiento y al grado de protección que ofrece el equipo.

La modificación o uso no autorizados del sistema puede causar lesiones personales o daños en el equipo y puede anular la garantía. Se pueden generar datos erróneos si el sistema se utiliza fuera de 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.

Principios de funcionamiento 2

El sistema está destinado al análisis cualitativo y cuantitativo de especies químicas.

En esta sección se incluye información sobre el espectrómetro de masas. Para consultar una descripción general de la fuente de iones, consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*.

Para obtener información acerca del ordenador y el software, consulte el documento *Guía de instalación del software* para el software.

Descripción general del sistema

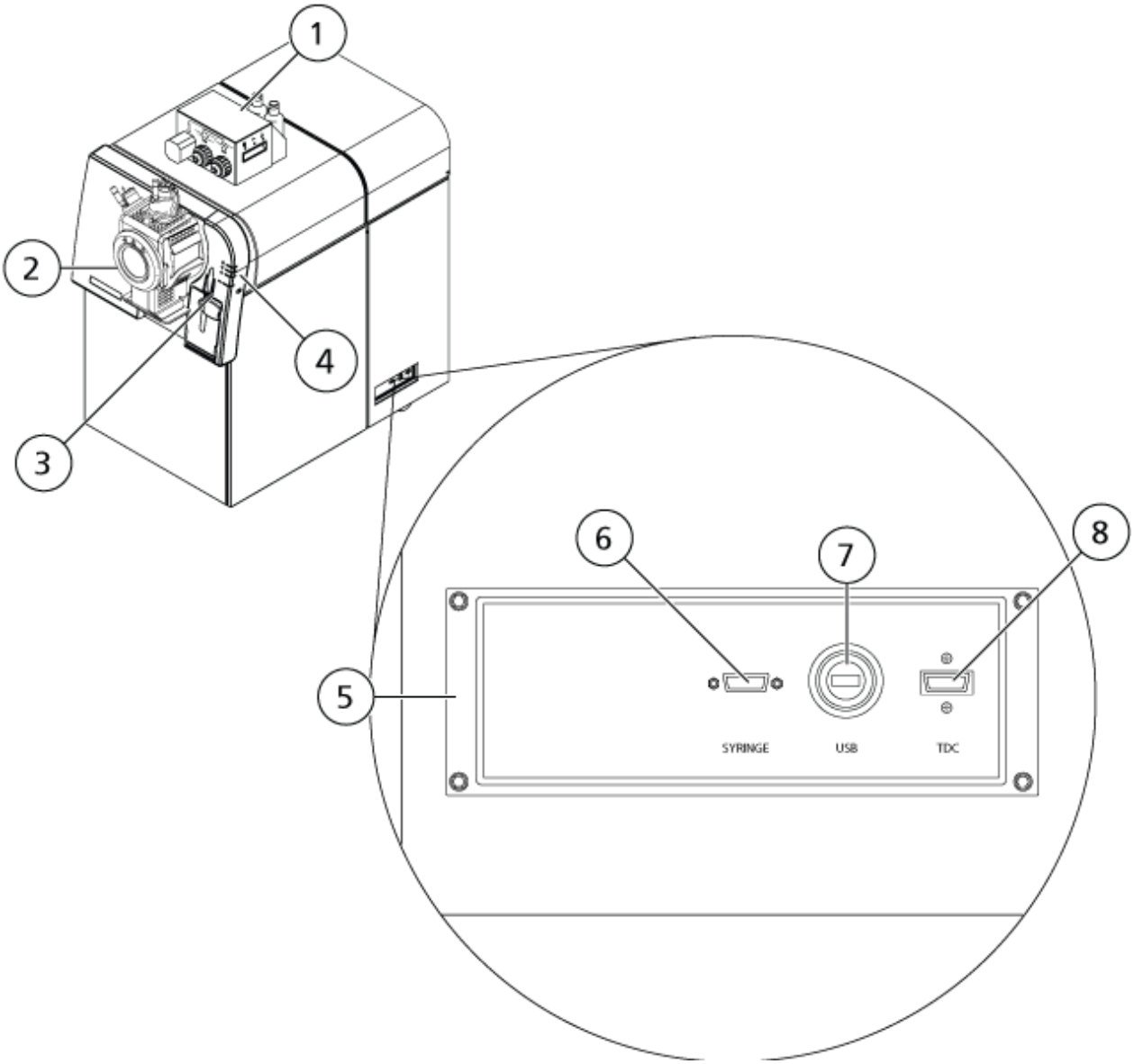
El sistema TripleTOF 5600/5600+ incorpora los componentes siguientes:

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

Descripción general del hardware

La Figura 2-1 y la Figura 2-2 muestran los componentes y conexiones del espectrómetro de masas.

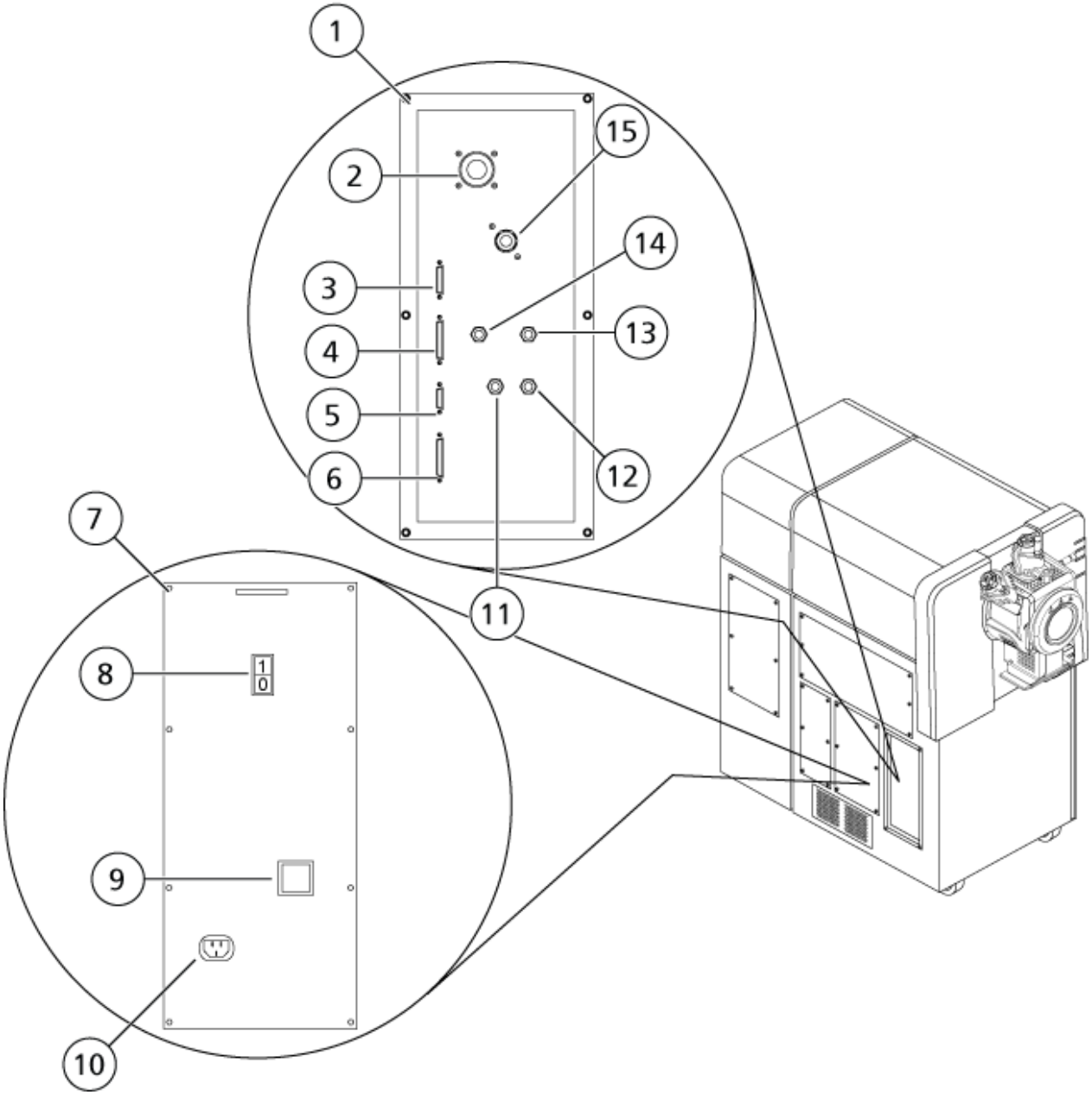
Figura 2-1: Vista frontal y del lado derecho



Elemento	Descripción	Para obtener más información...
1	CDS opcional	Consulte la publicación *CDS Operator Guide*.
2	Fuente de iones DuoSpray	Consulte la publicación *Fuente de iones DuoSpray para los sistemas TripleTOF Guía del operador*.
3	Bomba de jeringa	Consulte Ajuste de la posición de la bomba de jeringa integrada.
4	LED de estado del espectrómetro de masas	Consulte Símbolos del panel.

Elemento	Descripción	Para obtener más información...
5	Compartimento de comunicaciones	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico (FSE) de SCIEX.
6	Conexión por cable serie (RS-232) para la bomba de jeringa	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico (FSE).
7	Conexión por cable USB para la tarjeta USB-GPIB	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico (FSE).
8	Conexión del cable InfiniBand para la tarjeta TDC	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico (FSE).

Figura 2-2: Vista lateral izquierda



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

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

Símbolos del panel

La tabla siguiente 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 de funcionamiento correcto. Parpadea cuando el vacío no se encuentra en el nivel correcto, es decir, durante la evacuación y ventilación.
	Verde	Ready	Se ilumina cuando el sistema se encuentra en estado Ready. El sistema debe estar en estado Ready (listo para funcionar).
	Rojo	Fault	Se ilumina cuando el sistema encuentra un fallo del sistema.

Una vez que el sistema se ha encendido, se iluminan todos los LED. El LED de alimentación permanece iluminado. 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 de funcionamiento correcto, este LED permanece iluminado.

Teoría de funcionamiento

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

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

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

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

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

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

Gestión de datos

El software Analyst TF requiere un ordenador con el sistema operativo Windows 7 (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 Analyst TF, donde se pueden mostrar como espectros de masa completos, cromatograma de iones o espectros de iones o como corriente de iones total en el tiempo.

Instrucciones de funcionamiento 3

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

Inicio del sistema

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

¡ADVERTENCIA! Peligro de carga pesada. No mueva el sistema sin consultarlo antes con un representante del servicio técnico (FSE). Riesgo de lesiones personales o daños al sistema. Si se debe mover el sistema, póngase en contacto con un representante del servicio técnico (FSE).

Nota: Antes de utilizar el instrumento, lea la información de seguridad en: Precauciones y limitaciones de funcionamiento.

Condiciones previas
• Se cumplen los requisitos de la instalación especificados en la *Guía de planificación del centro*. La *Guía de planificación del centro* incluye información sobre la alimentación 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 SCIEX 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. • El gas 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 están bien fijadas al espectrómetro de masas, la botella de drenaje de escape de la fuente y las conexiones de ventilación. • El interruptor de encendido del instrumento está apagado y el cable de alimentación está enchufado al espectrómetro de masas. • Los cables de alimentación del espectrómetro de masas y de la bomba de vacío preliminar están conectados a la alimentación eléctrica de 200 V CA a 240 V CA. • El cable Ethernet está conectado al espectrómetro de masas y al ordenador.

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

Apagado del sistema

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

Nota: Si se debe desconectar el tubo 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 estado Standby con la fuente de iones colocada. Si es necesario apagar el espectrómetro de masas, siga estas instrucciones.

1. Finalice o detenga todos los análisis en curso.

   PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. Detenga el flujo de muestra antes de apagar el sistema.

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

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

   a. Apague la bomba de vacío preliminar.

   b. Espere a que el sistema se ventile. Tarda entre 15 y 25 minutos.

7. Retire la cubierta del interruptor del disyuntor en el lado izquierdo del espectrómetro de masas y apague el disyuntor. Consulte Figura 2-2.
8. Instale la cubierta sobre el interruptor del disyuntor y después apriete a mano el tornillo que sujeta la cubierta hasta que quede bien apretado.
9. (Si ventila el sistema) Desconecte el cable de alimentación de la bomba de vacío preliminar de la toma de alimentación.

Ajuste de la posición de la bomba de jeringa integrada

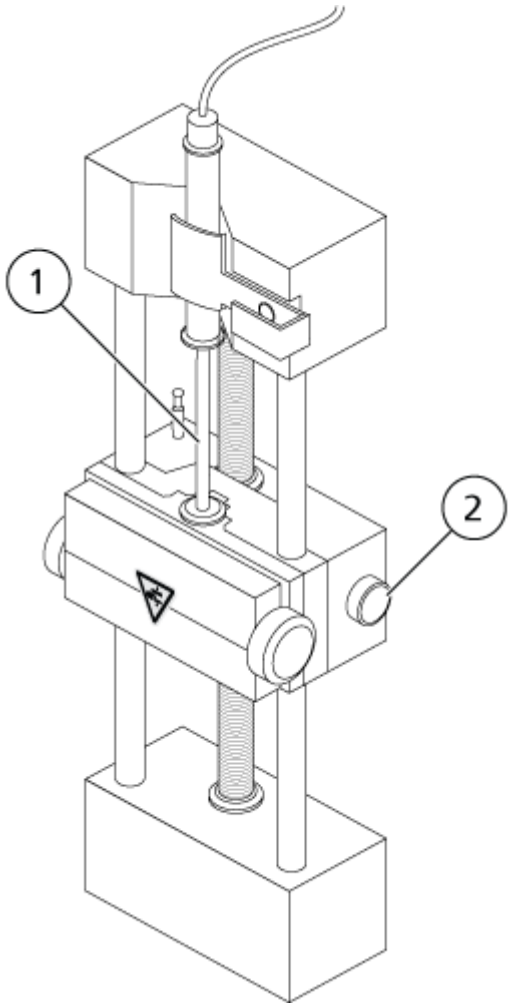
¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Tenga cuidado al manipular la jeringa. La punta de la jeringa está muy afilada.

¡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 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 la eliminación de objetos afilados.

Para la ubicación de la bomba de jeringa en el espectrómetro de masas, consulte la figura: Figura 2-1.

1. Pulse el botón Release en el lado derecho de la bomba de jeringa para bajar la base y después inserte la jeringa.

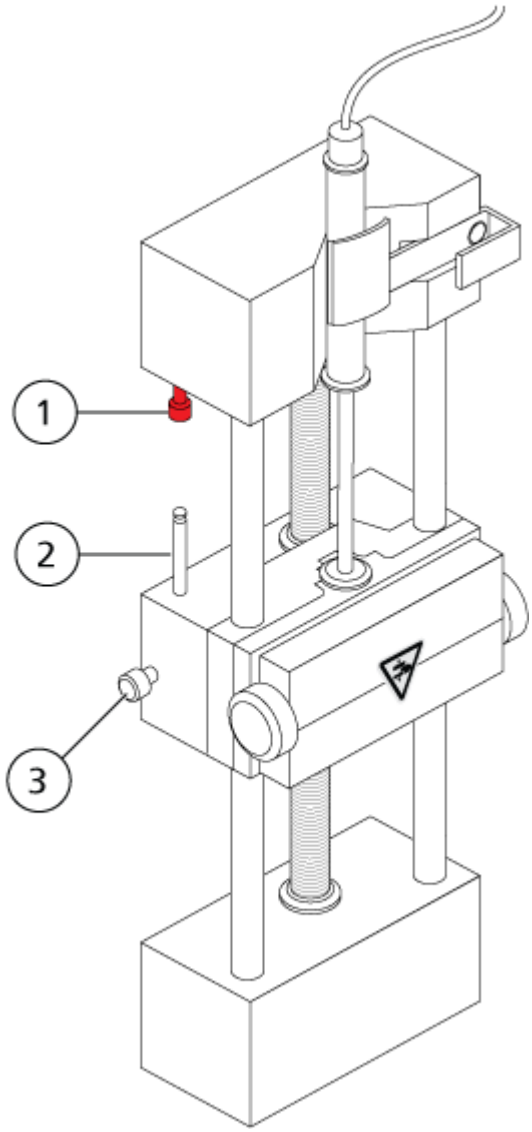
Figura 3-1: Bajada de la jeringa



Elemento	Descripción
1	Émbolo de la jeringa
2	Botón Release. Pulse para levantar o bajar la base.

2. Asegúrese de que el extremo de la jeringa quede nivelado con 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.

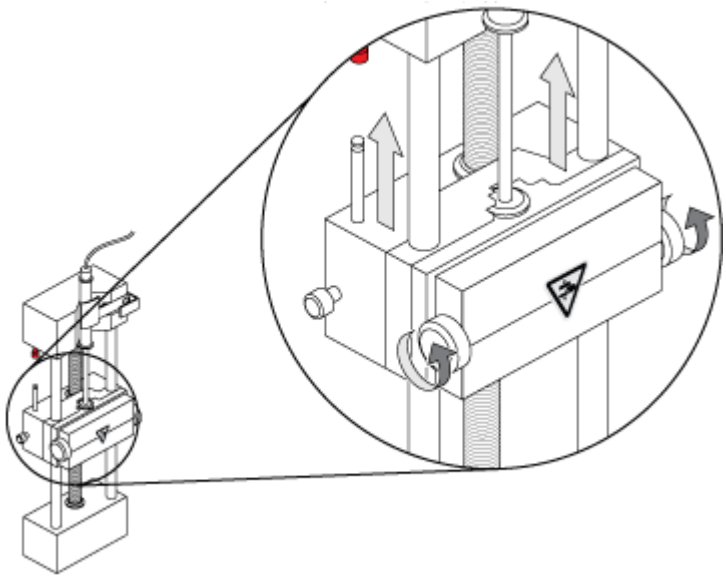
Figura 3-2: Tope automático de la jeringa



Elemento	Descripción
1	Tope automático de la jeringa. Después de que el poste golpee el tope automático de la jeringa, la bomba de 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 de la bomba de jeringa para fijar la jeringa.

Figura 3-3: Tornillos de la bomba de jeringa



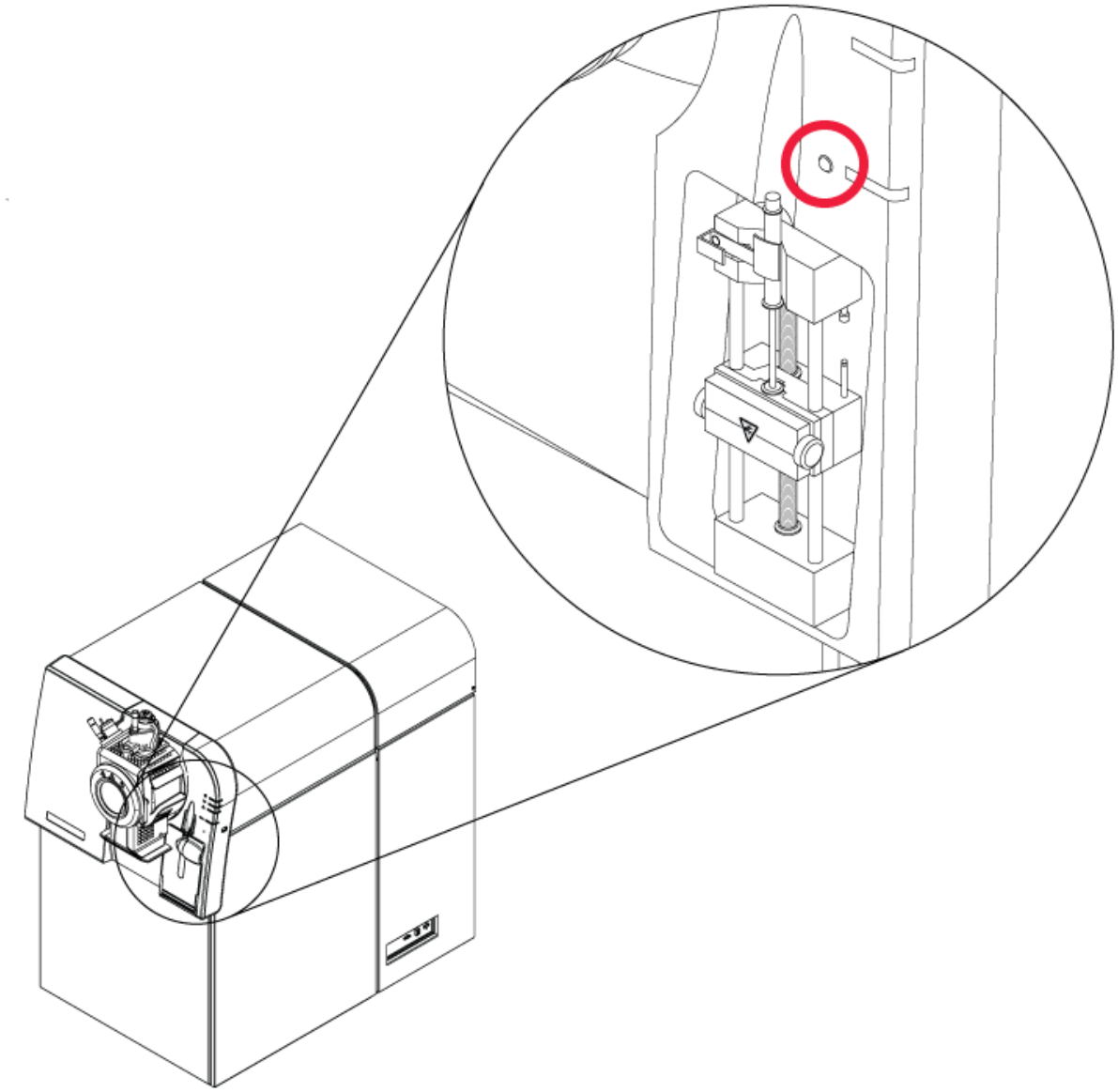
5. Asegúrese de que el espectrómetro de masas y la bomba de jeringa están activados en el software.
6. En la barra de navegación del software Analyst TF, haga doble clic en **Manual Tuning**.
7. Haga clic en **Start Syringe**.
8. Para detener la bomba de jeringa, haga clic en **Stop Syringe**.

Restablecimiento de la bomba de jeringa

Si el software Analyst TF deja de comunicarse con la bomba de jeringa, restablézcala.

Utilice un clip para papel o similar para pulsar el botón de restablecimiento, que se muestra en la Figura 3-4.

Figura 3-4: Botón Reset (Reiniciar)



Instrucciones de funcionamiento: Flujos de trabajo para la muestra 4

Tabla 4-1: Configuración del sistema

Paso	Para realizar esta acción...	Busque la información en...	¿Qué es lo que hace?
1	Crear un perfil de hardware.	Creación de un perfil de hardware	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	El uso de proyectos y subproyectos facilita la gestión de los datos y la comparación de los resultados.
3	Optimice el espectrómetro de masas.	Optimización del espectrómetro de masas	Este es el proceso de optimización de la resolución y los parámetros del espectrómetro de masas, y de calibración de este último para conseguir la mejor sensibilidad y rendimiento posibles del sistema.

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

Paso	Para realizar esta acción...	Busque la información en...	¿Qué es lo que hace?
1	Crear proyectos para almacenar los datos.	Creación de proyectos y subproyectos	Antes de empezar un experimento, decida en qué lugar almacenará los archivos relacionados con este. El uso de proyectos y subproyectos mejora la gestión de los datos y facilita la comparación de los resultados.
2	Crear un método de adquisición.	Instrucciones de funcionamiento: Métodos de adquisición	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	Cree y envíe un lote.	Adición de conjuntos y muestras a un lote y Envío de una muestra o conjunto de muestras	Una vez creado un método de adquisición, ejecute las muestras creando un lote de adquisición y enviando el lote a la cola de adquisición.

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

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

Tabla 4-3: Flujo de trabajo de usuario experimentado

Paso	Para realizar esta acción...	Busque la información en...
1	Realizar la calibración de masas del instrumento.	Tutorial de calibración de masas que se encuentra en • En los sistemas operativos Windows 7: haga clic en **Start** > **All Program** > **SCIEX** > **Analyst TF** > **Software Guides.** • En los sistemas operativos Windows 10: haga clic en **Start** > **SCIEX Analyst TF** > **Analyst TF Documentation,** y luego haga doble clic en la carpeta **Software Guides**.
2	Optimizar el espectrómetro de masas.	Tutorial sobre optimización manual que se encuentra en • En los sistemas operativos Windows 7: haga clic en **Start** > **All Program** > **SCIEX** > **Analyst TF** > **Software Guides.** • En los sistemas operativos Windows 10: haga clic en **Start** > **SCIEX Analyst TF** > **Analyst TF Documentation,** y luego haga doble clic en la carpeta **Software Guides**.

Instrucciones de funcionamiento: Perfiles de hardware y proyectos 5

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. Para configurar los dispositivos periféricos, se requieren dos procedimientos:

- Establecer las conexiones físicas. Para obtener información acerca de cómo establecer las conexiones físicas a los dispositivos, consulte el *Manual de configuración de dispositivos periféricos*.
- Configurar el software para que se comunique con los dispositivos periféricos. Para ver una lista de los dispositivos periféricos compatibles, consulte el documento *Guía de instalación del software* de Analyst TF.

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.

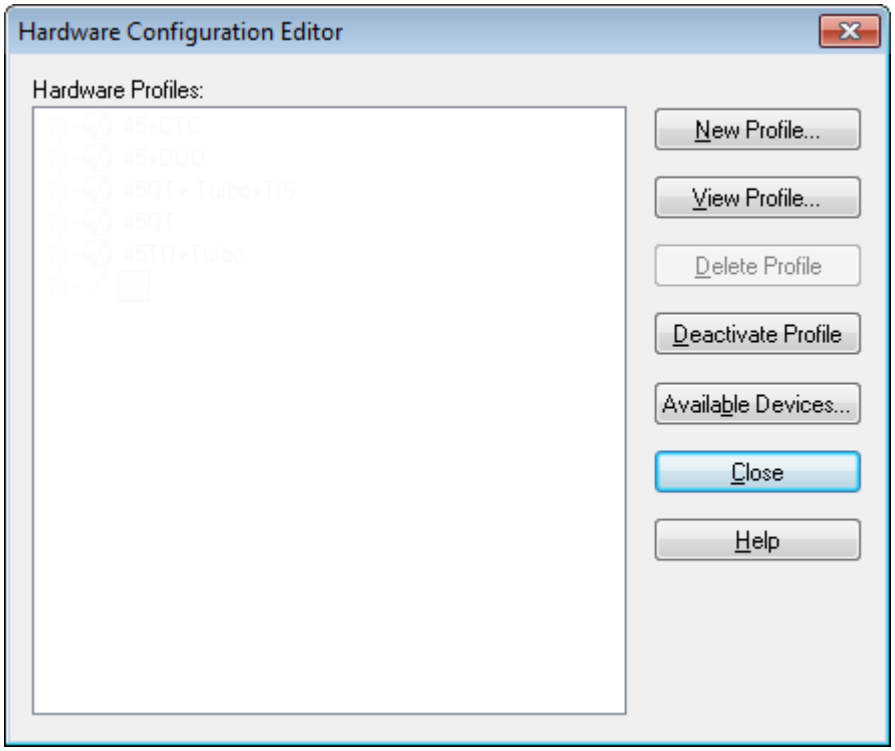
Cada perfil de hardware debe incluir un espectrómetro de masas. Antes de crear un método de adquisición, asegúrese de que se incluyan en el perfil de hardware todos los dispositivos que vaya a utilizar en el método, incluida la bomba de jeringa. Los dispositivos configurados en el perfil de hardware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

Creación de un perfil de hardware

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

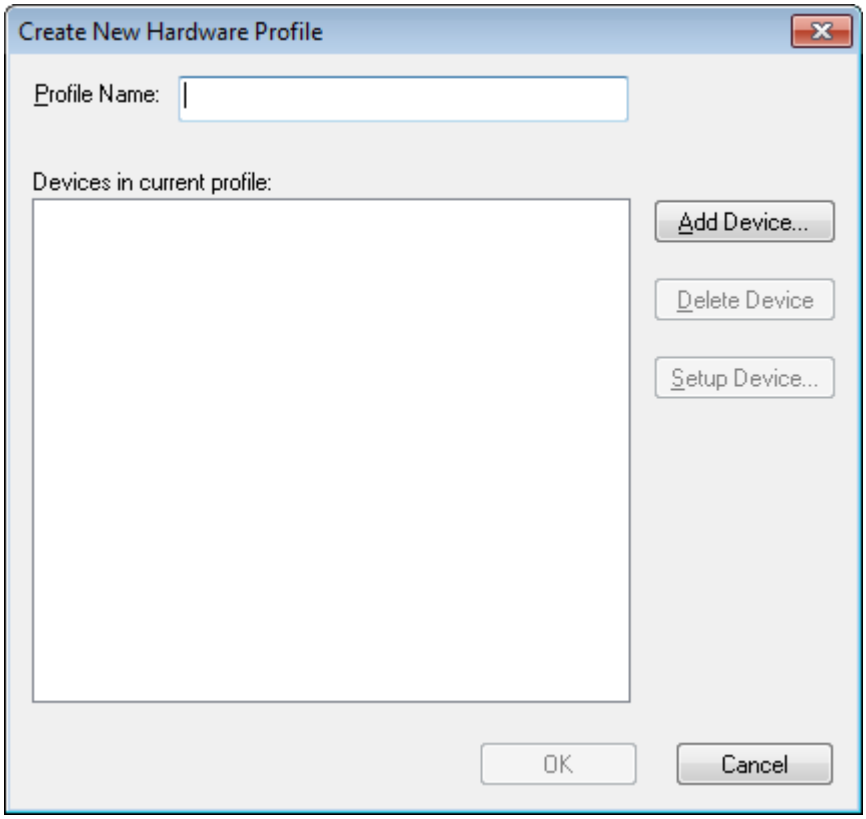
1. En la barra Navigation, en **Configure**, haga doble clic en **Hardware Configuration**.

Figura 5-1: Cuadro de diálogo del editor de configuración de hardware



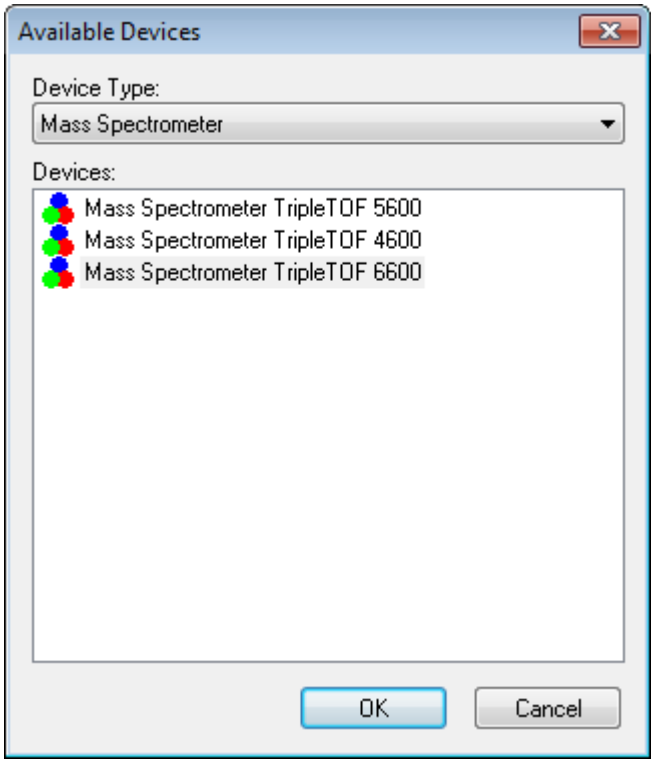
2. Haga clic en **New Profile**.

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**.

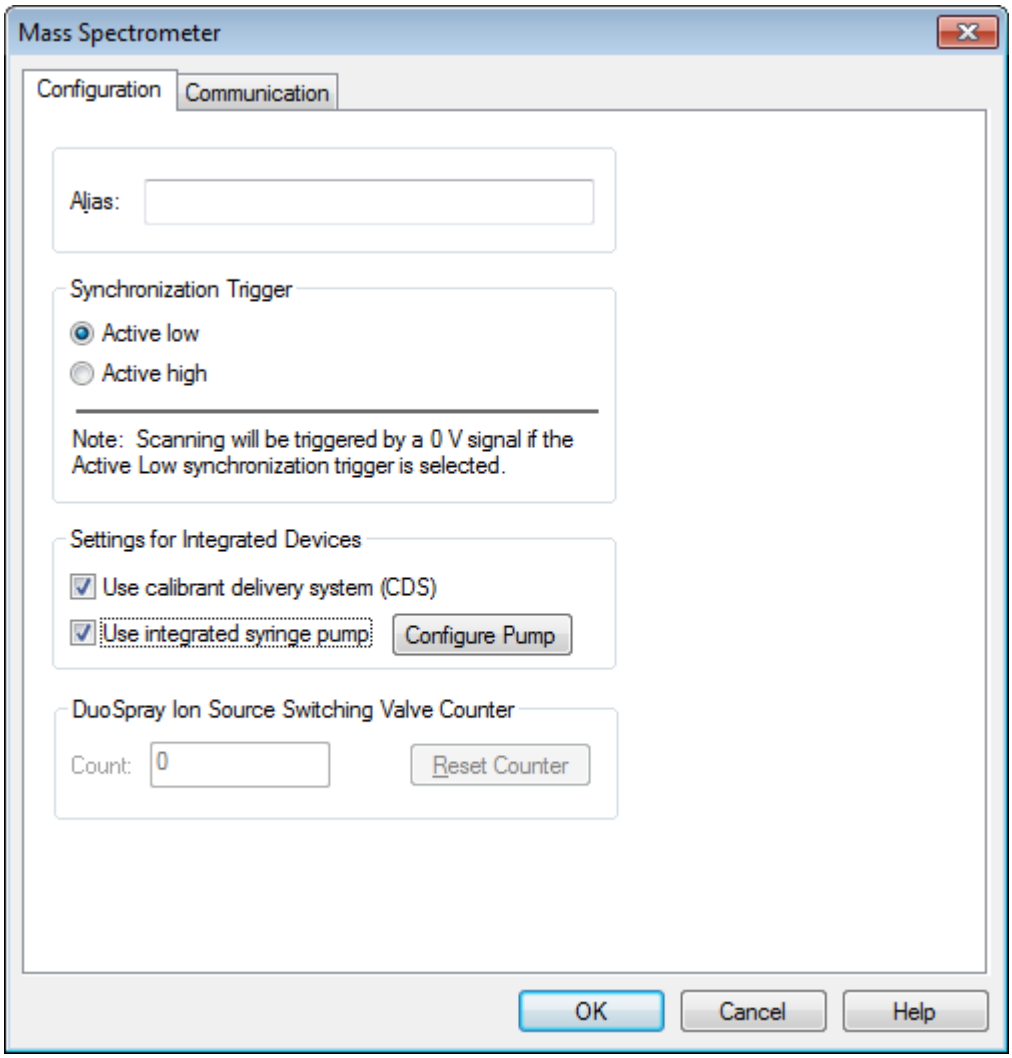
Figura 5-3: Cuadro de diálogo Available Devices



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

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

Figura 5-4: Pestaña Configuration (Configuración) con el CDS y la bomba de jeringa configurados



8. (Opcional) Para configurar el espectrómetro de masas para el CDS, en la pestaña Configuration, seleccione la casilla **Use calibrant delivery system (CDS)**.
9. (Opcional) Seleccione otras funciones en las pestañas Configuration y Communication, según sea necesario.
10. Haga clic en **OK**.
11. En el cuadro de diálogo Create New Hardware Profile, haga clic en **Add Device** y, a continuación, agregue y configure todos los dispositivos que se usen con el espectrómetro de masas. Consulte la sección Adición de dispositivos a un perfil de hardware.
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 × 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 el perfil de hardware y, a continuación, haga clic en **Activate Profile**. El perfil activo se desactivará automáticamente.

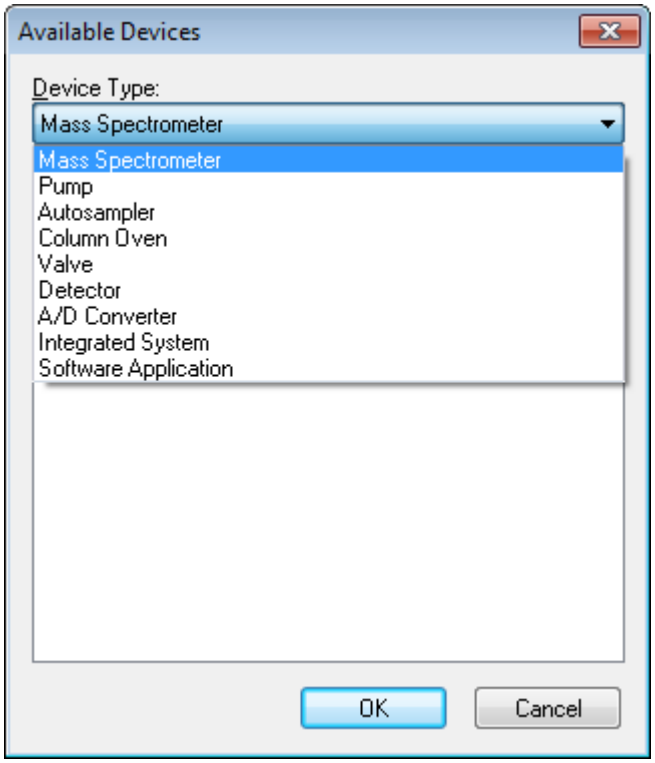
15. Haga clic en **Close**.

Adición de dispositivos a un perfil de hardware

Los dispositivos deben estar configurados para permitir que el software se comunique con ellos. Cuando se instala el software, también se instala el controlador necesario para cada dispositivo. Para poder configurar los dispositivos, es preciso conectarlos físicamente al ordenador. Para obtener más información, consulte el documento *Guía de configuración de dispositivos periféricos*.

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

Figura 5-5: Cuadro de diálogo Available Devices



6. Haga clic en **OK**.
7. Seleccione el dispositivo de la lista **Devices** y, a continuación, haga clic en **OK**.
8. Haga clic en **Setup Device**.
   Se abrirá un cuadro de diálogo con los valores de configuración del dispositivo.
9. (Opcional) En la pestaña Communication, en el campo **Alias**, escriba un nombre u otro identificador para el dispositivo.

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

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

- Si el dispositivo utiliza un **Serial Port** 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 **GPIB Board** 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 los pasos 4 a 11 por cada dispositivo.
13. Haga clic en **OK** en el cuadro de diálogo Create New Hardware Profile.
14. Para activar el perfil de hardware:
    a. En Hardware Configuration Editor, haga clic en el perfil de hardware.
    b. Haga clic en **Activate Profile**.

    La marca de verificación se vuelve de color verde. Si se muestra una × roja, existe algún problema con la activación del perfil de hardware. Para obtener más información, consulte la sección Solución de problemas de activación del perfil de hardware.

    Sugerencia: Un perfil de hardware activo no tiene que ser desactivado 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.
15. 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 qué dispositivo del perfil no se ha activado. 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. Asegúrese de que el dispositivo esté conectado a la alimentación y encendido.
3. Asegúrese de que el puerto COM asignado al dispositivo sea correcto.
4. Asegúrese de que la configuración de comunicación del dispositivo, por ejemplo, la configuración de interruptor DIP (paquete en línea dual), 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 hayan finalizado 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, vaya a sciex.com/request-support.

Proyectos y subproyectos

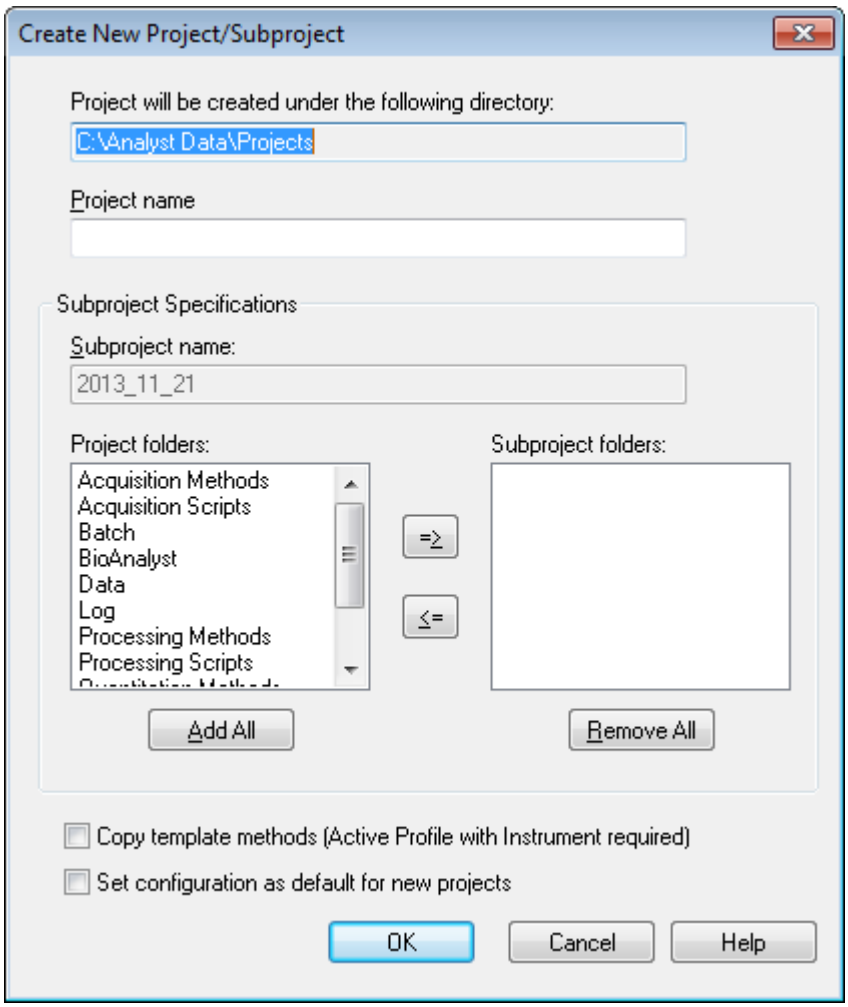
Antes de empezar un experimento, decida en qué lugar almacenará los archivos relacionados con este. Utilice proyectos y subproyectos para cada experimento con el fin de gestionar mejor los datos y comparar los resultados. Por ejemplo, puede utilizar subproyectos para almacenar los resultados de fechas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

Creación de proyectos y subproyectos

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

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

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



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:
   a. Seleccione las carpetas necesarias y, a continuación, utilice los botones de flecha para moverlas a la lista **Subproject folders**.
   b. En el campo **Subproject name**, escriba el nombre del primer subproyecto o utilice la fecha ya existente.
4. (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.
5. 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**.

Copia de subproyectos

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 de destino, 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 examinar el origen del subproyecto.
3. Haga clic en **OK**.
4. En la lista **Source Subproject**, seleccione el subproyecto.
5. Haga clic en **Browse** para examinar el destino del subproyecto.
6. Escriba el nombre en el campo **Target Subproject**.
7. Haga clic en **OK**.
8. Realice una de las siguientes acciones:

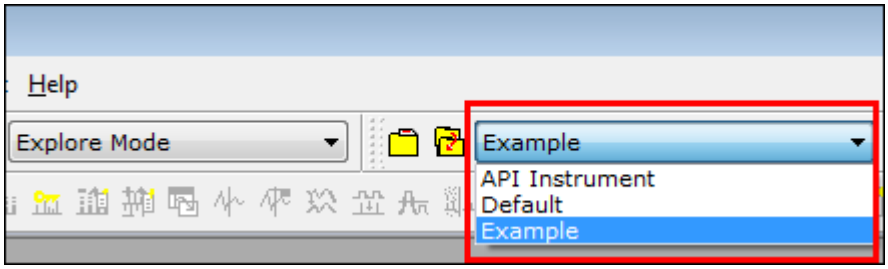
- Para copiar todas las carpetas y archivos de **Subproject Source** a **Subproject Destination**, active la casilla de verificación **Copy Contents**.
- Para copiar únicamente las carpetas en la misma estructura que **Subproject Destination**, asegúrese de que no esté activada la casilla de verificación **Copy Contents**.

9. Haga clic en **Copy**.

Cambio entre proyectos y subproyectos

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

Figura 5-7: Lista de proyectos



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

Carpetas del 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
- Métodos de adquisición utilizados durante el ajuste automático

La carpeta API Instrument también contiene los archivos de datos de ajuste manual 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\Tuning Cache` y se les asigna un nombre compuesto por la fecha y hora en que se crearon. La carpeta Tuning Cache se borra automáticamente y de forma periódica.

Carpeta Default

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

Carpeta Example

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

Copia de seguridad de la carpeta API Instrument

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

Copie la carpeta `API Instrument`, péguela en una ubicación diferente, preferiblemente en otro ordenador, y cambie el nombre de la carpeta. Use la fecha y la referencia de un espectrómetro de masas cuando dé un nombre a la carpeta si hay más de un espectrómetro de masas. Por ejemplo, Instrumento API_QT6500plus3_010121

Recuperación de la carpeta API Instrument

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

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

Instrucciones de funcionamiento: Ajuste y calibración 6

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

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

Para el modo positivo:

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

En modo negativo:

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

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

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

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

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

Materiales necesarios
• Soluciones de ajuste, que se incluyen en el juego de productos químicos de estándares suministrado con el sistema. Si es necesario, se puede solicitar un nuevo juego a SCIEX. • Jeringa hermética (se recomienda 1 ml) • Tubo de muestra PEEK rojo. • (Opcional) Bomba de jeringa, si se usa un sistema sin una bomba de jeringa integrada.

Optimización del espectrómetro de masas

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

1. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
2. Ejecute un análisis MS o de ion producto en TOF y confirme que hay un TIC estable y que los picos de interés están presentes en el espectro.
3. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Instrument Optimization**.
   Se abrirá el cuadro de diálogo Instrument Optimization.
4. Seleccione una solución de ajuste. Asegúrese de que la solución de ajuste coincide con la tabla de referencia.
5. La casilla de verificación **Verify Performance Only** está seleccionada de forma predeterminada. Haga clic en **Next**.
   Para este ejemplo, deje esta opción seleccionada. Si el informe indica que el equipo necesita un ajuste, vuelva a ejecutar Instrument Optimization y seleccione uno o más modos de análisis para optimizarlos.
6. Asegúrese de que los parámetros de la fuente de iones y de la jeringa son adecuados.

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

   Nota: Asegúrese de que se ha seleccionado la Calibrant Valve Position adecuada en Reference Table Editor para la tabla de referencia seleccionada. CDS puede seleccionar de entre cuatro posiciones como máximo, de la A a la D.
7. Haga clic en **GO**.
   Se abre la ventana **Verifying or Adjusting Performance**. Tras finalizar el proceso, se abrirá el **Results Summary**. Para obtener más información, consulte la Ayuda.

Cuadro de diálogo Verifying or Adjusting Performance

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

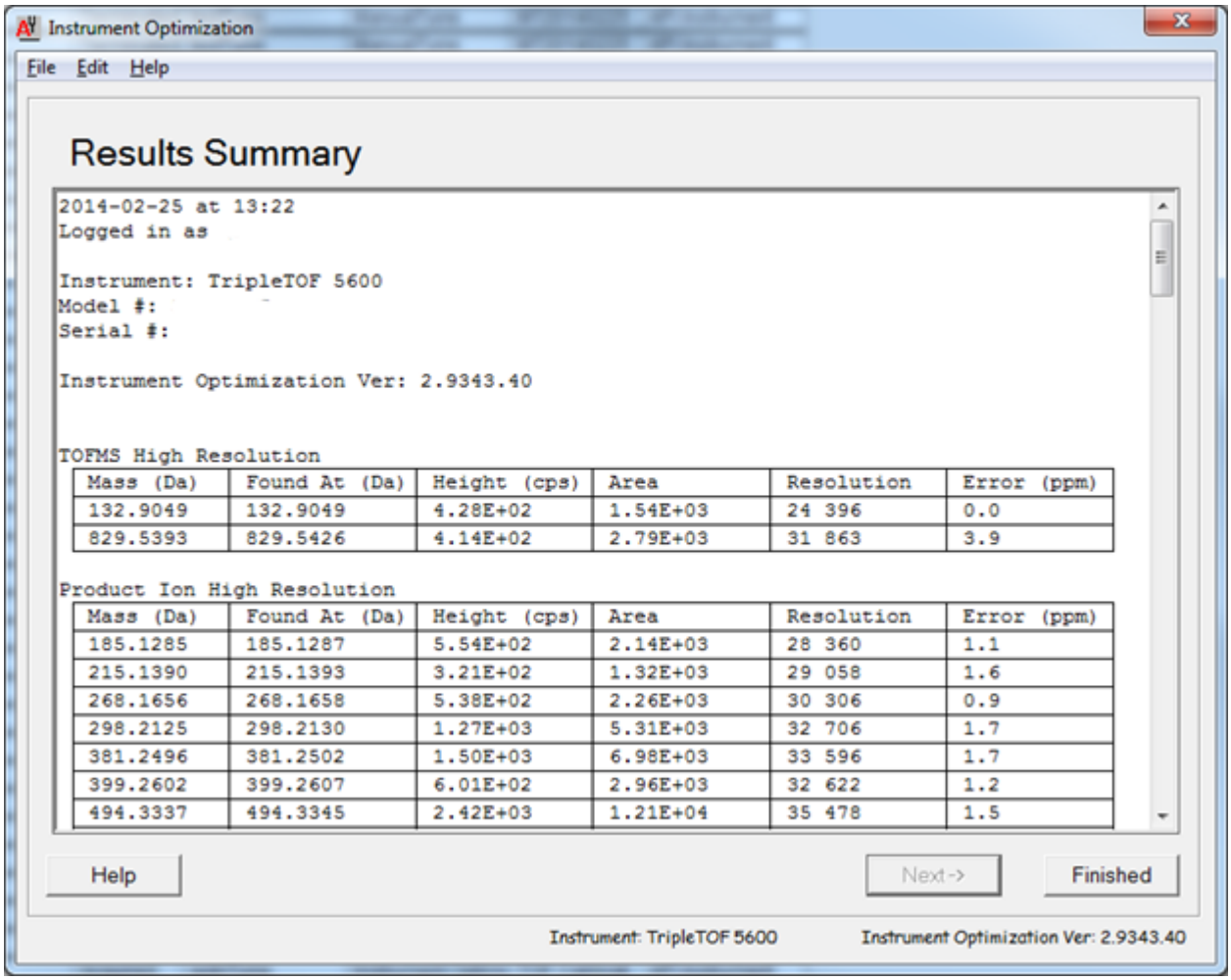
El gráfico Current Spectrum muestra el espectro del análisis actual, el análisis óptimo seleccionado por el software, o el análisis en el valor de parámetro actual cuando los resultados del software se visualizan en el modo interactivo.

Los Instrument Optimization Decision Plots, 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: sistema TripleTOF 5600



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

Instrucciones de funcionamiento: Métodos de adquisición 7

Un método de adquisición consta de experimentos y periodos. Use el Acquisition Method Editor para crear una secuencia de períodos y experimentos para espectrómetros de masas y cualquier dispositivo del perfil de hardware activo.

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

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

Use la función de adquisición SWATH, disponible tanto para el Method Wizard como para el Acquisition Method Editor, para crear métodos de adquisición SWATH. Asimismo, los métodos de la ventana de ancho variable SWATH pueden crearse mediante el Method Wizard o el Acquisition Method Editor. Para obtener más información, consulte la *Guía para usuarios avanzados*, la ayuda de Analyst TF y la ayuda del Method Wizard.

Recomendamos que tan solo creen o modifiquen métodos de adquisición y cuantificación aquellos usuarios que tengan experiencia en el desarrollo de métodos. Para obtener más información sobre las funciones y la seguridad, consulte el documento *Guía del director del laboratorio*.

Creación de un método de adquisición utilizando el Acquisition Method Editor

Sugerencia: Si los usuarios están creando un archivo de método de adquisición nuevo a partir de un archivo existente, podrían utilizarse 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 el documento *Guía de configuración de dispositivos periféricos*.

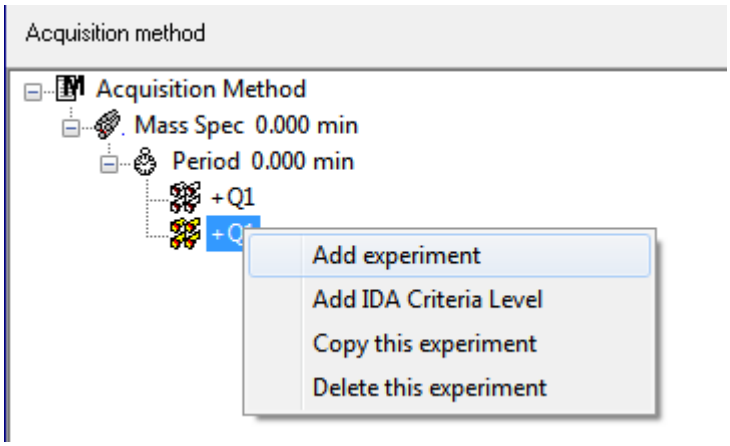
1. Asegúrese de que haya activo un perfil de hardware que contenga el espectrómetro de masas y los dispositivos periféricos.
2. En la barra Navigation, en **Acquire**, haga doble clic en **Build Acquisition Method**.
3. Seleccione un **Synchronization Mode** en la pestaña Acquisition Method Properties.
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. En la pestaña MS, seleccione un **Scan type**.
7. Escriba los valores de los otros campos según sea necesario.
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 según sea necesario.
12. Haga clic en **OK**.
13. Haga clic en un icono del dispositivo y, a continuación, establezca los parámetros del dispositivo.
14. Agregue cualquier experimento y periodo adicional. Consulte las secciones: Adición de un experimento y Creación de un periodo.
15. Haga clic en **File** > **Save.**

Adición de un experimento

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

Figura 7-1: Add Experiment



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 pertinentes.

Creación de un periodo

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 periodos en un experimento IDA.

Copia de un experimento en un periodo

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.

Copiar un experimento dentro de un periodo

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.

Creación de un método de adquisición mediante el asistente de método

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

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

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

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

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

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

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

Técnicas de análisis

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

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

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

Espectrometría de masas simple

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

Espectrometría de masas simple de cuadrupolo

En un análisis de espectrometría de masas simple de cuadrupolo (Q1 MS), el sistema funciona como un espectrómetro de masas de cuadrupolo tradicional. En este modo,

el sistema genera información de espectrometría de masas simple utilizando la primera sección (Q1) del instrumento cuadrupolar.

Espectrometría de masas simple con tiempo de vuelo

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

Espectrómetro de masas en tándem

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

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

Espectrometría de masas de ion producto

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

Espectrometría de masas de ion precursor

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

Acerca de la adquisición de datos de espectro

Para ver una descripción de los modos en que los datos de espectro se pueden adquirir, consulte la tabla: Tabla 7-1.

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

Tabla 7-1: Datos de espectro

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

Parámetros de MS

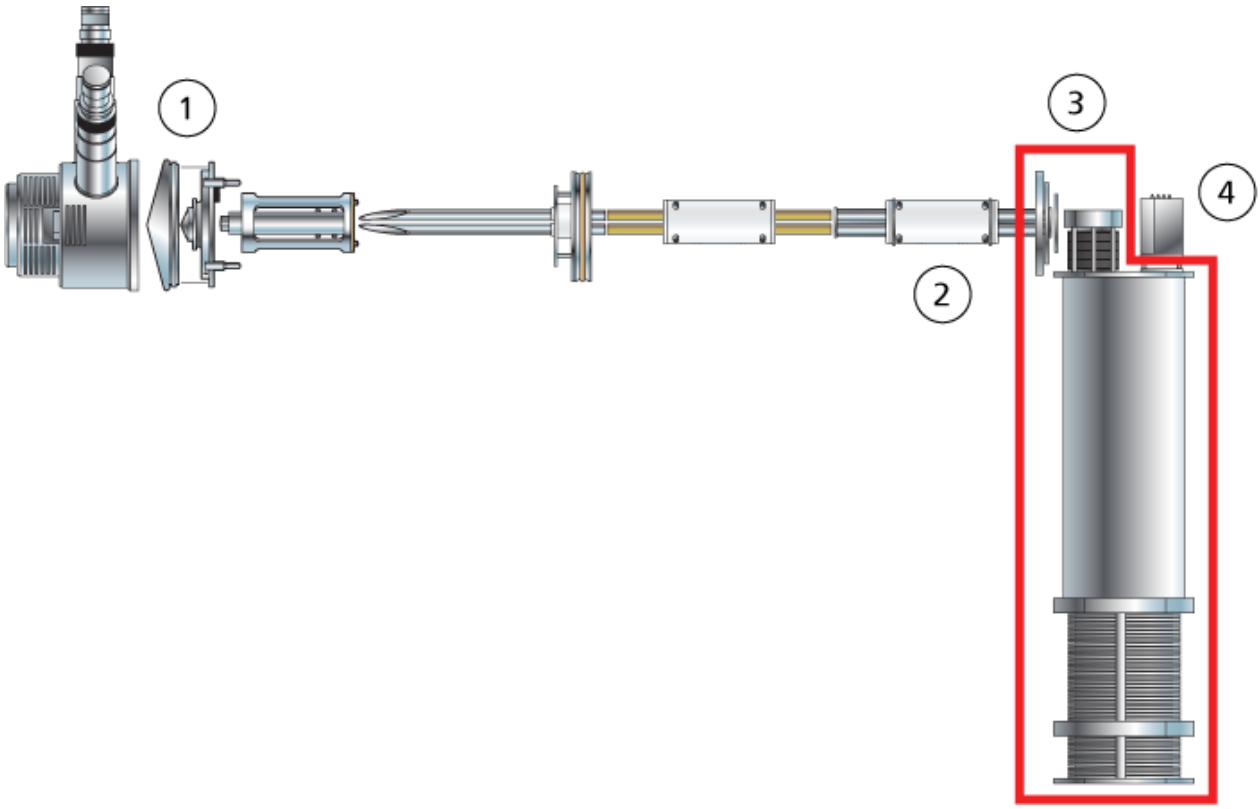
Los parámetros de trabajo son el conjunto de parámetros del espectrómetro de masas (MS) que se está utilizando.

Los parámetros de compuestos y los parámetros de la fuente y del gas se guardan con el método. Los parámetros de resolución y de detector dependen del espectrómetro de masas y se guardan como datos del instrumento. Si el modo de ajuste y calibración se utiliza para crear un método, los parámetros de trabajo se pueden optimizar para mejorar el rendimiento del instrumento. También puede aumentar cada parámetro, uno por uno, mientras realiza el ciclo de un experimento.

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

Los parámetros de la tabla se aplican a la fuente de iones que se suministra con el sistema. Para obtener información sobre otras fuentes de iones, consulte la *guía del operador* que se suministra con la fuente de iones. En la figura siguiente se muestra la ubicación de los parámetros de trabajo en la ruta de óptica iónica.

Figura 7-2: Ruta de óptica iónica y parámetros



Ubicación	Parámetro	Tipo de parámetro	Uso previsto	Tipo de análisis
1	IonSpray Voltage Floating (ISVF)	Fuente y gas	El parámetro ISVF afecta a la estabilidad de la pulverización y, por tanto, a la sensibilidad. Se trata de la tensión aplicada a la aguja que pulveriza la muestra.	Todos
1	Ion Source Gas 1 (GS1)	Fuente y gas	El parámetro GS1 controla el gas nebulizador de la sonda ESI.	Todos
1	Ion Source Gas 2 (GS2)	Fuente y gas	El parámetro GS2 controla el gas del calentador de la sonda ESI y el gas nebulizador de la sonda APCI.	Todos
1	Temperatu-re (TEM)	Fuente y gas	El parámetro TEM controla la temperatura del gas del calentador de la sonda TurboIonSpray o la temperatura de la sonda APCI.	Todos

Ubicación	Parámetro	Tipo de parámetro	Uso previsto	Tipo de análisis
1	Curtain Gas (CUR)	Fuente y gas	El parámetro CUR controla el flujo del gas de la interfaz de Curtain Gas. La interfaz de Curtain Gas se ubica entre la placa de chapa y el orificio. Su función es evitar la contaminación de la óptica iónica.	Todos
1	Decluster-ing Potential (DP)	Compuesto	El parámetro DP controla el voltaje 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 puede producir una fragmentación no deseada. Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.	Todos
2	CAD Gas	Fuente y gas	El parámetro CAD controla la presión del gas CAD en la celda de colisión. El gas de colisión ayuda a concentrar los iones conforme atraviesan la celda de colisión; el valor predefinido para el parámetro CAD es el modo fijo. En los tipos de análisis MS/MS, el gas CAD ayuda a fragmentar los iones precursores. Cuando los iones precursores colisionan con el gas de colisión, se disocian para formar iones producto. Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.	Todos

Ubicación	Parámetro	Tipo de parámetro	Uso previsto	Tipo de análisis
2	Collision Energy (CE)	Compuesto	El parámetro CE controla la diferencia de potencial entre la zona 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. Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.	TOF MS, TOF MS/MS
2	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 precursora en un análisis de ion producto que utilice el parámetro CES. La energía de colisión se lanza de abajo arriba. Por ejemplo, en modo positivo, la energía de colisión se lanza desde CE - CES hasta CE + CES. Al introducir un valor CES, se activa automáticamente la dispersión de energía de colisión. Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.	TOF MS/MS

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

Instrucciones de funcionamiento: Lotes 8

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

Un lote es una colección de información acerca de las muestras que se van a analizar. Las muestras suelen agruparse en conjuntos para simplificar su presentación. Agrupar las muestras en conjuntos también reduce la cantidad de datos que hay que escribir manualmente. Un conjunto consta de una sola muestra o de varias muestras. Todos los conjuntos de un lote utilizan el mismo perfil de hardware. Sin embargo, las muestras de un conjunto pueden tener métodos de adquisición diferentes. Un lote se puede enviar solamente desde un ordenador de adquisición.

Los lotes cuentan con la siguiente información:

- Información de muestras, como nombre, ID y comentario
- Información del bastidor del procesador de muestras automático, posición de viales y volumen de inyección
- Métodos de adquisición
- Método de procesamiento o script (opcional)
- Información de cuantificación (opcional)
- Datos de la muestra personalizados (opcional)
- Información del conjunto

Configuración de las opciones de cola

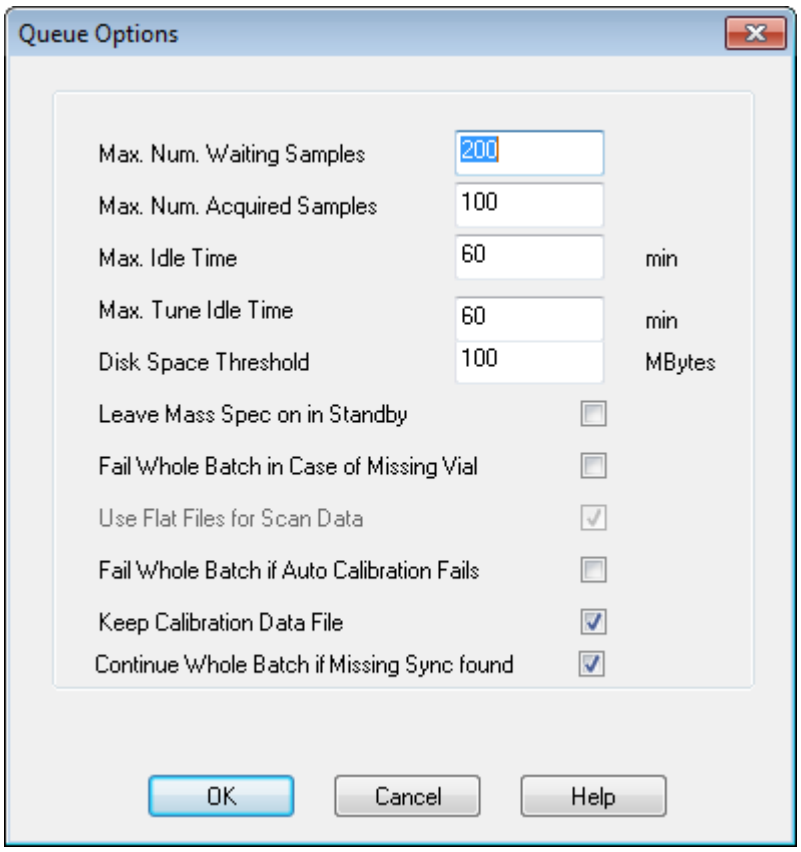
El software revisa una por una todas las muestras de la lista de la cola y adquiere cada muestra con el método de adquisición seleccionado. Una vez que haya adquirido todas las muestras, la adquisición se detendrá y el espectrómetro de masas entrará en el estado Standby después de que haya transcurrido el **Max. Idle Time** configurado en Queue Options. En el estado Standby, se apagan las bombas de LC y algunas tensiones del instrumento.

El usuario puede cambiar cuánto tiempo pasa entre la adquisición de la última muestra y el cambio al estado Standby. Para obtener más información sobre el resto de los campos del cuadro de diálogo Queue Options, consulte el documento *Ayuda*.

1. En la barra Navigation, haga clic en **Configure**.

2. Haga clic en **Tools** > **Settings** > **Queue Options.**

Figura 8-1: Cuadro de diálogo de opciones de cola



3. En el campo **Max. Num. Waiting Samples**, establezca un valor para el número máximo de muestras que sea mayor que el número de muestras que se van a enviar a la cola.
4. En el campo **Max. Idle Time**, indique la cantidad de tiempo que el software esperará después de que haya finalizado la adquisición antes de pasar al estado 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 que falle todo el lote cuando se detecte que falta un vial.

   Si no se selecciona esta opción, solo se dará por incorrecta la muestra actual y el software pasará a la siguiente muestra.

7. Seleccione la casilla **Fail Whole Batch if Auto Calibration Fails** para que se detenga el lote si falla la calibración.

8. Seleccione la casilla **Keep Calibration Data File** para que el archivo de datos de calibración se guarde en una subcarpeta de la carpeta Data del proyecto al que pertenecen las muestras enviadas.

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

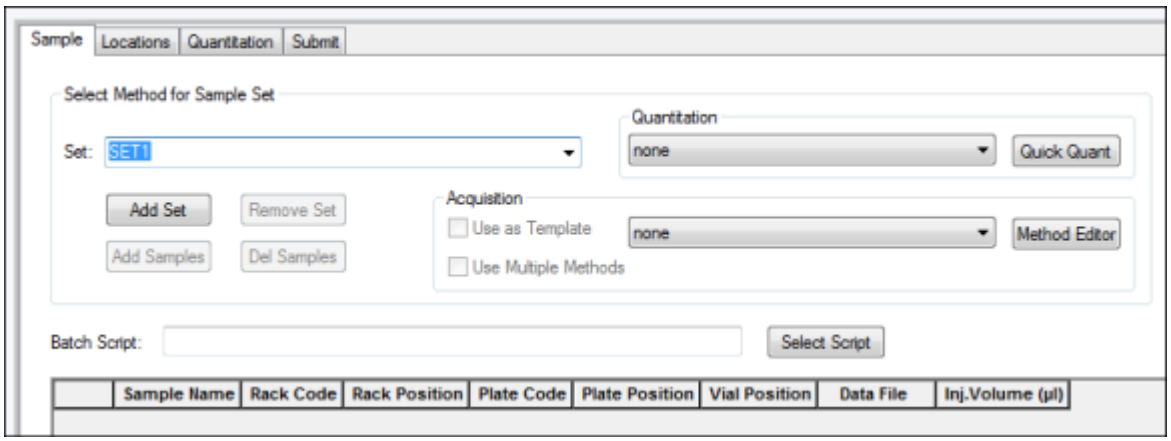
Adición de conjuntos y muestras a un lote

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

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

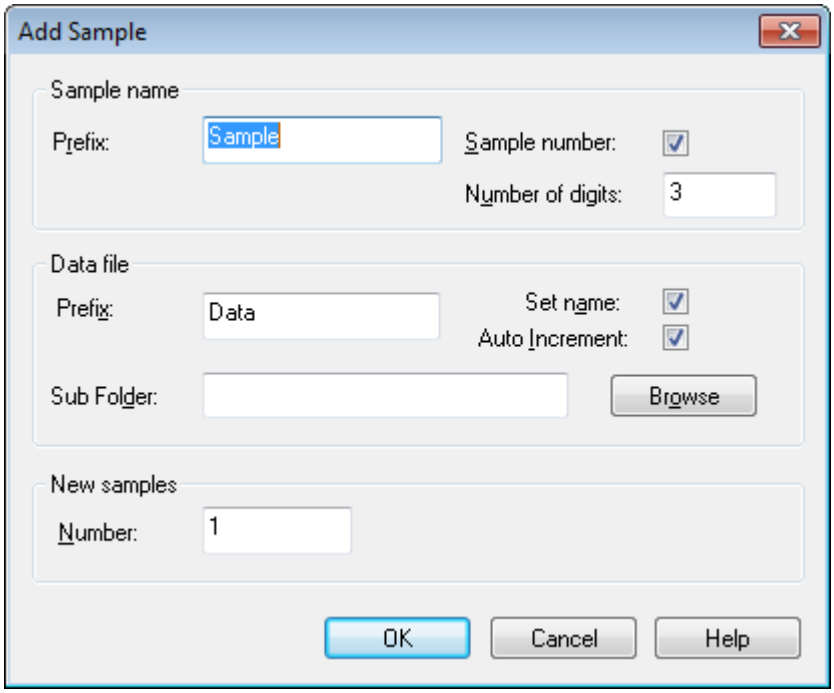
1. En la barra Navigation, en **Acquire**, haga doble clic en **Build Acquisition Batch**.

   Figura 8-2: Cuadro de diálogo Batch Editor



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

Figura 8-3: Agregar diálogo de muestra



5. En la sección Sample name, en el campo **Prefix**, escriba un nombre para las muestras de este conjunto.
6. Para incluir un número en aumento al final del nombre de muestra, active la casilla de verificación **Sample number**.
7. Si está activada la casilla de verificación **Sample number** en el campo **Number of digits**, escriba el número de dígitos que se incluirán en el nombre de muestra.
   Por ejemplo, si se escribe 3, los nombres de muestra serán nombremuestra001, nombremuestra002, nombremuestra003.
8. En la sección Data file, en el campo **Prefix**, escriba un nombre para el archivo de datos que almacenará la información de muestra.
9. Para incluir el nombre del conjunto como parte del nombre del archivo de datos, active la casilla de verificación **Set name**.
10. Active la casilla de verificación **Auto Increment** para que los nombres de archivo de datos vayan en aumento automáticamente.

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

---

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

12. En la sección New samples, en el campo **Number**, escriba el número de muestras nuevas que se añadirán.
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 procesador de muestras automático. 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 cambiar los volúmenes de inyección de los volúmenes que se muestran en el método, en la columna **Inj. Volume (µL)** , escriba el volumen de inyección de 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 Batch Editor
    - Selección de la posición de los viales mediante la pestaña Locations (opcional)
17. Abra la pestaña Submit.

    Nota: Es posible editar el orden de las muestras antes de enviarlas a la cola. Para cambiar el orden de las muestras, en la pestaña Submit, haga doble clic en cualquiera de los números del extremo izquierdo de la tabla (aparece un recuadro muy atenuado) y, a continuación, arrástrelo a la nueva ubicación.
18. Si la sección Submit Status contiene un mensaje sobre el estado del lote, realice una de las siguientes acciones:
    - Si el mensaje indica que el lote está preparado para su envío, continúe en el paso 19.
    - Si el mensaje indica que el lote no está preparado para su envío, realice los cambios que se indican en el mensaje.
19. Después de confirmar que toda la información del lote es correcta, haga clic en **Submit**. El lote se envía a la cola y se puede ver desde el Queue Manager.
20. Guarde el archivo.

Envío de una muestra o conjunto de muestras

Nota: Si la adquisición de muestras se interrumpe de forma inesperada, ejecute la muestra de nuevo. 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. Abra la pestaña Submit del Batch Editor.
3. Si el grupo 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 siguiente.
   - Si el mensaje indica que el lote no está preparado para su envío, realice los cambios que se indican en el mensaje.
4. Haga clic en **Submit**.

Configuración de la calibración de muestras

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

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

1. En el **Batch Editor** (Editor de lotes), haga clic en la pestaña **Calibrate** (Calibrar).
2. En el campo **Calibrate Every _ Samples** (Calibrar todas las muestras), indique el número de muestras que se deben adquirir entre las muestras de calibración.
3. En la lista **Calibrant Reference Table** (Tabla de referencia de calibración), seleccione una tabla de la lista de tablas de referencia de calibración disponibles para la polaridad correspondiente. Asegúrese de que la tabla de referencia seleccionada disponga de la **Calibrant Valve Position** (Posición de la válvula de calibración).
4. Ajuste el **CDS Inject Flow Rate** (Caudal de inyección del CDS).
   Cuando se envía el lote, se introducen en la cola las muestras de calibración. Cada conjunto empieza con una muestra de calibración. El método de calibración se denomina AnalystCal_ más el nombre del método de adquisición (por ejemplo, AnalystCal_TOF.dam). Si está configurado el CDS, el software crea automáticamente un método de calibración que coincida con el método de adquisición utilizado para la siguiente muestra de la cola. Los datos de calibración se guardan en un archivo de datos diferente para cada muestra de calibración. Si en el cuadro de diálogo Queue Options (Opciones de cola), se selecciona Keep Calibration Data File (Conservar archivo de datos de calibración), este archivo se guarda junto con el

informe de calibración en la subcarpeta Cal Data (Datos de calibración) y se nombra a partir de Cal más la fecha y el índice de muestra de calibración (por ejemplo, Cal200906261038341.wiff). El informe de calibración se nombra con Cal más la fecha, el índice de muestra de calibración y la palabra «report» (informe) (por ejemplo, Cal20130822154447030_report.txt). El informe muestra los criterios de búsqueda de picos, los parámetros y las masas utilizadas para la calibración e informa a los usuarios de si la calibración se ha realizado correctamente. Asimismo, resume los parámetros utilizados para la calibración.

Cambio del orden de las muestras

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

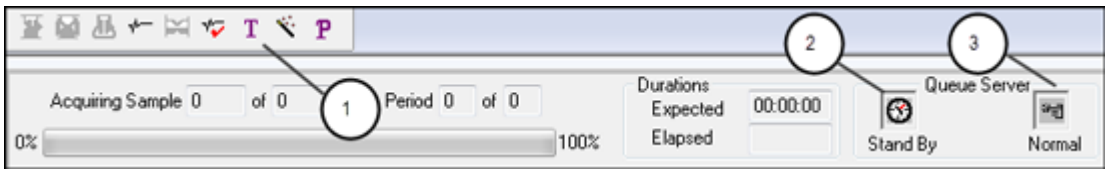
En la pestaña Submit, haga doble clic en cualquiera de los números del extremo izquierdo de la tabla (aparece un recuadro muy atenuado) y, a continuación, arrástrelo a la nueva ubicación.

Adquisición de datos

Cuando inicie la adquisición de muestras, el software 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 estado 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 **Reserve Instrument for Tuning** (T) no esté pulsado.
3. En la barra Navigation, haga clic en **Acquire**.
4. Haga clic en **View** > **Sample Queue.**
   Se abrirá Queue Manager, con todas las muestras enviadas.

Figura 8-4: Gestor de colas



Elemento	Descripción
1	El icono **Reserve Instrument for Tuning** no debe estar pulsado.
2	El estado de Queue debe ser Ready.
3	El estado de **Queue Server** debe ser Normal. Consulte la sección Estados de cola.

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

Definición de la ubicación de las muestras en el Batch Editor

Si se utiliza un procesador de muestras automático 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 o en la pestaña Locations. Para obtener más información sobre la creación de lotes, consulte la sección Adición de conjuntos y muestras a un lote.

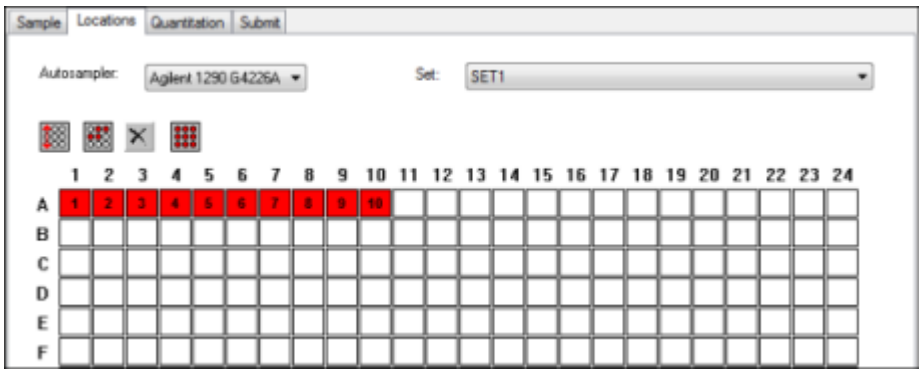
1. En la pestaña Sample, en la lista **Set**, seleccione el conjunto.
2. Para cada muestra del conjunto, realice la siguiente acción si corresponde:
   - En la columna **Rack Code**, seleccione el tipo de estante.
   - En la columna **Rack Position**, seleccione la posición del estante en el procesador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

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

1. En el Batch Editor, abra la pestaña Locations.
2. En la lista **Set**, seleccione el conjunto.
3. En la lista **Autosampler**, seleccione el procesador de muestras automático.
4. En el espacio asociado a la gradilla, haga clic con el botón secundario y seleccione el tipo de gradilla.
   Las placas o bandejas seleccionadas se muestran en la gradilla.
5. Haga doble clic en el espacio en blanco con la etiqueta de tipo de gradilla. Se muestra una disposición de gradilla de muestras visual.
   La vista gráfica de gradilla muestra el número de espacios de gradilla correspondiente al procesador de muestras automático seleccionado.
6. Haga doble clic en uno de los rectángulos.
   Se mostrarán círculos que representan los pocillos o viales de la placa o bandeja.

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

Figura 8-5: Pestaña Locations



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

7. Para seleccionar si las muestras se marcarán por fila o por columna, haga clic en el botón selector **Row/Column selection**.
   Si el botón muestra una línea roja horizontal, el Batch Editor marcará las muestras por fila. Si el botón muestra una línea roja vertical, el Batch Editor marcará las muestras por columna.
8. Haga clic en los pocillos o viales de muestra en el orden en que deben analizarse.

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

Sugerencia: Para rellenar las muestras automáticamente, mantenga pulsada la tecla **Shift** y haga clic en el primero y en el último vial de un conjunto. Para realizar varias inyecciones desde el mismo vial, mantenga pulsada la tecla **Ctrl** y haga clic en la ubicación del vial. El círculo rojo cambia a un círculo verde.

Detención de la adquisición de muestras

Cuando se detiene una adquisición de muestras, el software finaliza el análisis actual antes de detener 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 Navigation, haga clic en **Acquire**.
3. Haga clic en **Acquire** > **Stop Sample.**
   La adquisición se detiene tras adquirir 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 las muestras siguientes de la cola cambia a **Waiting**.
4. Cuando esté preparado para continuar procesando el lote, haga clic en **Acquire** > **Start Sample.**

Estados de cola y de dispositivo

En Queue Manager se muestra el estado de la cola, el lote y la muestra. También es posible ver la información detallada de una muestra concreta de la cola.

Sugerencia: Haga clic en **View Queue** ( ) para ver la cola.

Para obtener información sobre cómo usar el menú contextual Queue, consulte la sección: Cola.

Estados de cola

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

Figura 8-6: Modo Normal mostrado en el indicador del servidor de cola

Figura 8-7: Modo Tune mostrado en el indicador del servidor de cola

El primer icono indica el estado de la cola. El segundo icono indica si la cola se encuentra en modo Tune (para realizar ajustes) o en modo Normal (para analizar muestras). Para leer descripciones de los iconos y los estados de cola, consulte la tabla: Tabla 8-1.

Tabla 8-1: Estados de cola

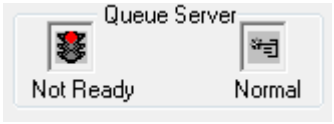
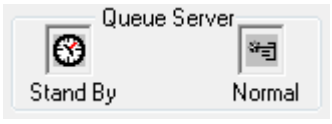
Iconos	Estado	Definición
	**Not Ready**	El perfil de hardware está desactivado y la cola no acepta ningún envío de muestras.
	**Stand By**	El perfil de hardware está activado, pero todos los dispositivos están inactivos. Las bombas no están en funcionamiento y los gases están apagados.

Tabla 8-1: Estados de cola (continuación)

Iconos	Estado	Definición
	Warming Up	El espectrómetro de masas y los dispositivos se están equilibrando, las columnas se están acondicionando, la aguja del procesador de muestras automático 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 decidir si la presión de esa bomba es la correcta, o ver el estado detallado del espectrómetro de masas para supervisar la temperatura de la fuente de iones.

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

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

Se abrirá el cuadro de diálogo Instrument Status.

Tabla 8-2: Iconos de estado de instrumento y dispositivo

Estado	Icono	Color de fondo	Descripción
Idle (Inactivo)		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 funcionar.
Equilibrating (Equilibrando)		Verde o amarillo	El dispositivo se está equilibrando.
En espera		Verde	El dispositivo está esperando un comando del software o de otro dispositivo o alguna acción por parte del operador.
Running (Funcionando)		Verde	El dispositivo está procesando un lote.
Aborting (Anulando)		Verde	El dispositivo está anulando un procesamiento.
Downloading (Descargando)		Verde	Se está transfiriendo un método al dispositivo.
Ready		Verde	El dispositivo no está en funcionamiento, pero está preparado.
Error		Rojo	El dispositivo ha detectado un error que se debe investigar.

Instrucciones de funcionamiento: Análisis y exploración de datos 9

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

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

Apertura de archivos de datos

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

1. En la barra de navegación, en **Explore**, haga doble clic en **Open Data File**.
   Se muestra el cuadro de diálogo Select Sample.
2. En la lista **Data Files**, desplácese al archivo de datos que desee abrir y haga clic en **OK**.
   Se muestran los datos adquiridos de la muestra. Si aún se están adquiriendo datos, el espectro de masas, el trazo de DAD/UV y el TIC se seguirán actualizando automáticamente.

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

Navegación por las muestras de un archivo de datos

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

Para leer descripciones de los iconos de navegación utilizados para este procedimiento, consulte la tabla: Tabla C-4.

Abra un archivo de datos que contenga varias muestras y lleve a cabo uno de los siguientes procedimientos:

- Para saltar a la muestra siguiente del archivo de datos, haga clic en el icono **Show Next Sample** ( ).
- Para saltar a una muestra no secuencial, haga clic en el icono **Go to Sample** ( ).
- En el cuadro de diálogo Select , en la lista **Sample**Sample, seleccione la muestra que desee ver.
- Para ir a la muestra anterior del archivo de datos, haga clic en el icono **Show Previous Sample** ( ).

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 LC, incluido el 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 cuanto a la función de software disponible cuando el usuario mira la información del archivo, consulte la sección: Menú contextual del panel Show File Information.

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 cuando el usuario se desplace 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.

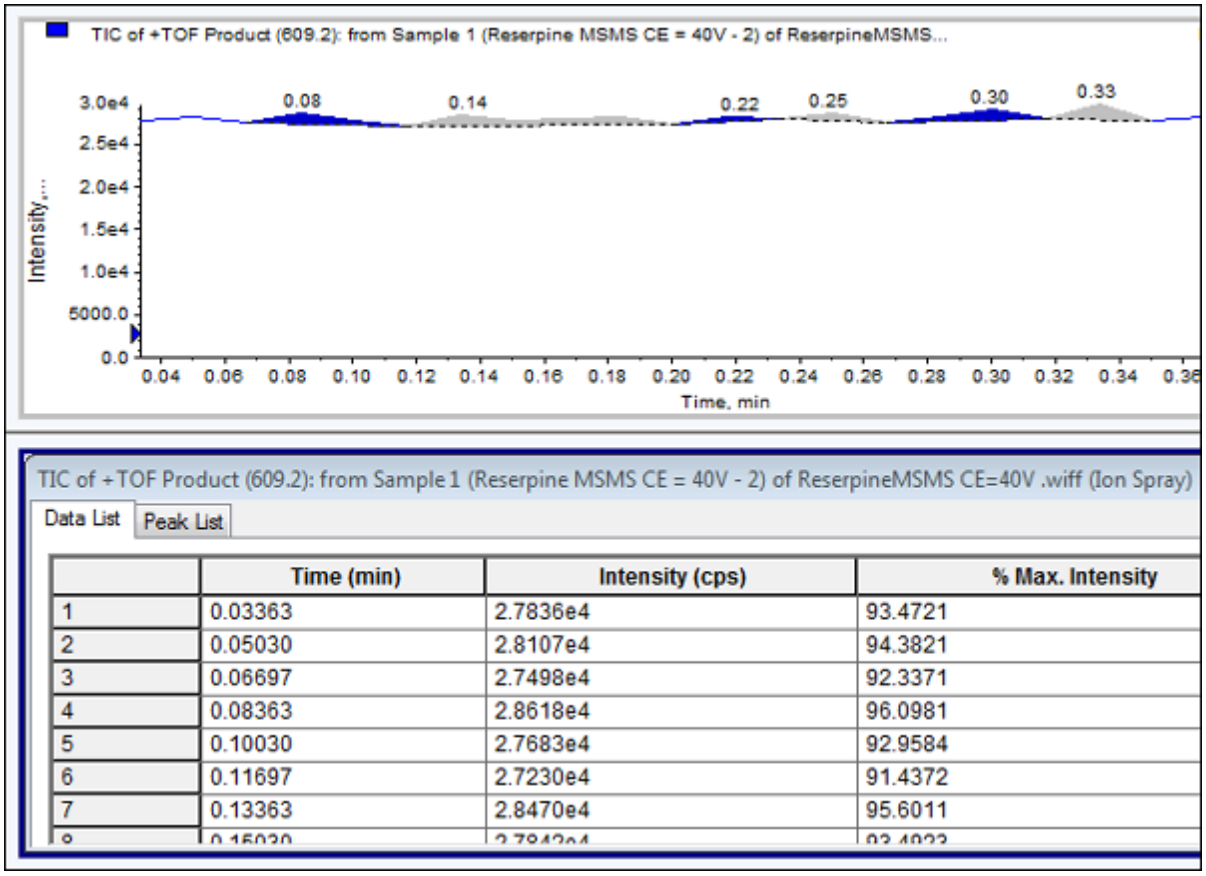
Haga clic en **Explore** > **Show** > **Show File Information.**
El panel File Information se abre debajo del gráfico.

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

Visualización de los datos en tablas

1. Abra un archivo de datos.
2. Haga clic en **Explore** > **Show** > **Show List Data.**
   Los datos se muestran en un panel debajo del gráfico.

Figura 9-1: Pestaña Peak List (sistemas TripleTOF)



	Time (min)	Intensity (cps)	% Max. Intensity
1	0.03363	2.7836e4	93.4721
2	0.05030	2.8107e4	94.3821
3	0.06697	2.7498e4	92.3371
4	0.08363	2.8618e4	96.0981
5	0.10030	2.7683e4	92.9584
6	0.11697	2.7230e4	91.4372
7	0.13363	2.8470e4	95.6011

Tabla 9-1: Menú contextual de la pestaña Spectral Peak List

Menú	Función
Column Options	(Opciones de columna) Abre el cuadro de diálogo **Select Columns for Peak List**.
Save As Text	(Guardar como texto) Guarda los datos como archivo .txt.
Delete Pane	(Eliminar panel) Elimina el panel seleccionado.

Tabla 9-2: Menú contextual de la pestaña Chromatographic Peak List

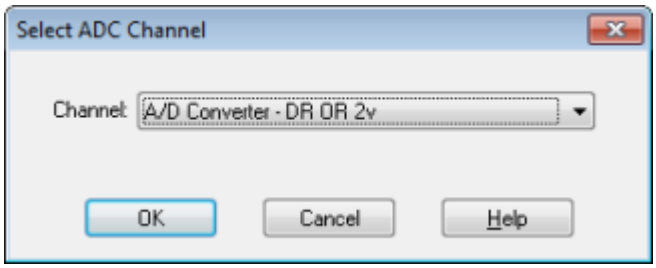
Menú	Función
Show Peaks in Graph	(Mostrar picos en gráfico) Muestra los picos en dos colores, en el gráfico.
IntelliQuan Parameters	(Parámetros de IntelliQuan) Abre el cuadro de diálogo **Intelliquan**.
Save As Text	(Guardar como texto) Guarda los datos como archivo txt.
Delete Pane	(Eliminar panel) Elimina el panel seleccionado.

Mostrar datos de ADC

Los datos del convertidor analógico-digital (ADC) se adquieren de un detector secundario (por ejemplo, de un detector UV a través de una tarjeta de ADC) y son útiles para la comparación con los datos del espectrómetro de masas. Para que los datos del ADC estén disponibles, adquiera dichos datos y los datos del espectrómetro de masas simultáneamente. Ambos tipos de datos se guardan en el mismo archivo.

1. Asegúrese de que la carpeta del proyecto donde se guardan los datos del ADC esté seleccionada. Por ejemplo, haga clic en la carpeta `Example`.
2. En la barra Navigation, 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 la carpeta de subdatos (si corresponde) y, a continuación, haga clic en el archivo de datos que se quiere abrir. Por ejemplo, en la carpeta `Example`, haga doble clic en **Devices** y, a continuación, haga clic en **Adc16chan.wiff**.
4. En la lista **Samples**, seleccione una muestra y, a continuación, haga clic en **OK**.
5. Haga clic en **Explore** > **Show** > **Show ADC Data**.

Figura 9-2: Cuadro de diálogo Select ADC Channel

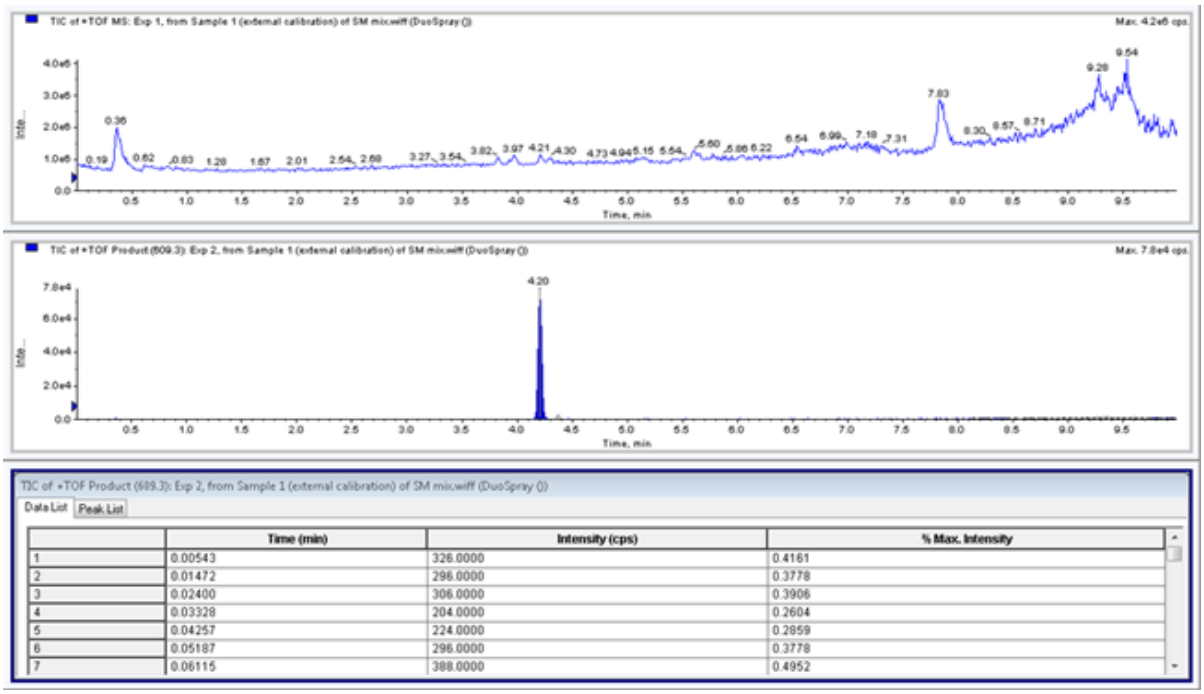


6. En la lista **Channel**, seleccione un canal y, a continuación, haga clic en **OK**.
   Se mostrarán los datos de ADC en un panel nuevo debajo del panel activo.

Visualización de los datos cuantitativos básicos

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

Figura 9-3: List Data



	Time (min)	Intensity (cps)	% Max. Intensity
1	0.00543	326.0000	0.4161
2	0.01472	296.0000	0.3778
3	0.02400	306.0000	0.3906
4	0.03328	204.0000	0.2604
5	0.04257	224.0000	0.2859
6	0.05187	296.0000	0.3778
7	0.06115	388.0000	0.4952

3. En la pestaña Peak List, haga clic con el botón derecho y seleccione **Show Peaks in Graph**.
   Los picos se muestran en dos colores.
4. Para cambiar la configuración del algoritmo de detección de picos, haga clic con el botón derecho y seleccione **Analyst Classic Parameters** o **Intelliquan Parameters** (la opción que esté activa).
5. (Opcional) Para eliminar los picos de colores, haga clic con el botón derecho 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 la funcionalidad de software disponible para cromatogramas y de cómo usar el menú contextual de Chromatogram Panes, consulte la sección: Paneles de cromatograma.

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. Para ver una descripción de los tipos de cromatogramas, consulte la tabla: Tabla 9-3.

Para obtener más información acerca del uso de los iconos disponibles, consulte la tabla: Tabla 9-5.

Tabla 9-3: Tipos de cromatogramas

Tipos de cromatogramas	Finalidad
Total Ion Chromatogram (TIC)	Cromatograma generado 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.
Extracted Ion Chromatogram (XIC)	Cromatograma 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 del tiempo.
Cromatograma de pico base (BPC)	Cromatograma que muestra la intensidad del ion más intenso de un análisis en función del tiempo o del número de análisis.
Cromatograma de longitud de onda total (TWC)	Cromatograma resultado de sumar todos los valores de absorbancia en el rango de longitud de onda adquirido y, a continuación, representar dichos valores en función del tiempo. Es la suma de la absorbancia de todos los iones de un análisis representada en función del tiempo en un panel cromatográfico.
Cromatograma de longitud de onda extraída (XWC)	Subconjunto de un TWC. Un XWC muestra la absorbancia de una longitud de onda individual o la suma de la absorbancia de un rango de longitudes de onda.
Diode Array Detector (DAD)	Cromatograma que muestra el espectro de absorción de compuestos de elución en una o más longitudes de onda.

Visualización de TIC desde un espectro

Haga clic en **Explore** > **Show** > **Show TIC.**
Se abrirá el TIC en un panel nuevo.

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

Para obtener información sobre cómo usar el menú contextual **Spectra Panes**, consulte la sección: Paneles de espectro.

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, puede crear TIC individuales para cada experimento inferior al TIC que represente la suma de todos los experimentos.

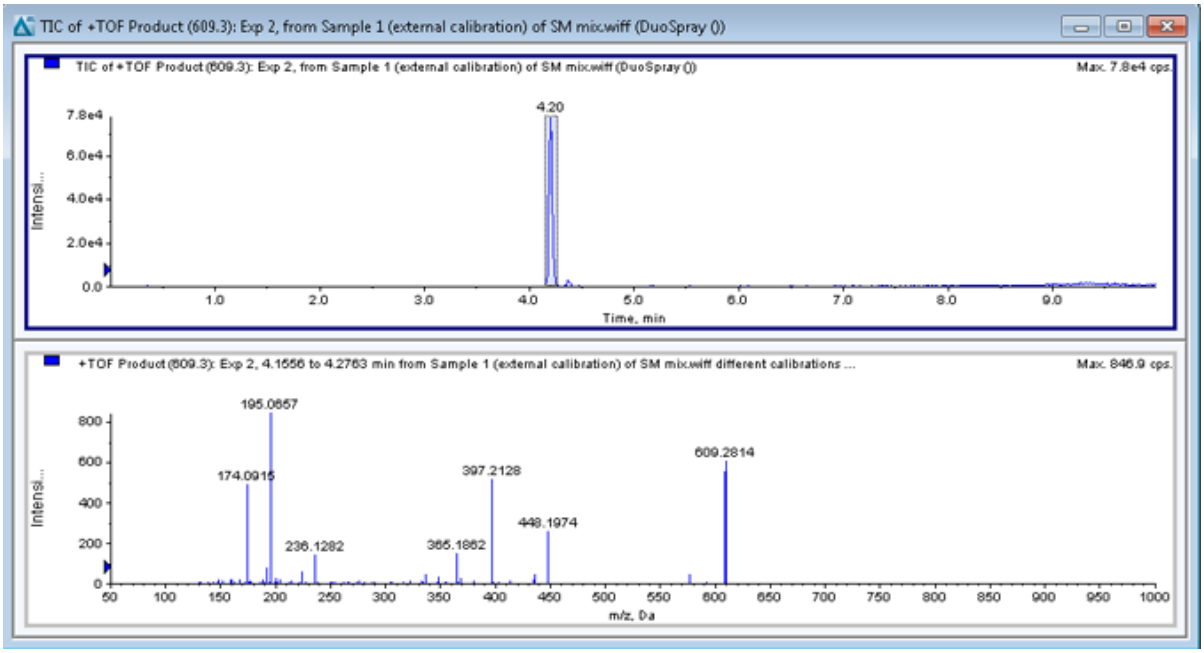
Cuando se abre un archivo de datos, se mostrará, de manera predeterminada, como un TIC. Sin embargo, si el experimento solo contiene un análisis, se mostrará como un espectro. Si el usuario selecciona la casilla **MCA** antes de la adquisición del archivo de datos, el archivo de datos se abrirá en el espectro de masas. Si la casilla **MCA** no está activada, el archivo de datos se abrirá con el TIC.

Para obtener información sobre cómo usar el menú contextual Spectra Panes, consulte la sección: Paneles de espectro.

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

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

Figura 9-4: Ejemplo de un TIC



Generación de XIC

Los XIC se pueden generar únicamente a partir de un periodo individual, cromatogramas de experimentos individuales o espectros. Para obtener un XIC a partir de datos de varios periodos o varios experimentos, primero debe dividir los datos en distintos paneles, haciendo clic en el triángulo que se muestra bajo el eje X. Para obtener más información acerca del uso de los iconos disponibles, consulte la tabla: Tabla 9-5.

Existen varios métodos para extraer iones con el fin de generar un XIC, en función de si se está trabajando con datos cromatográficos o de espectro. Para consultar un resumen de los métodos que se pueden usar con los cromatogramas y los espectros, vea la tabla siguiente.

Tabla 9-4: Resumen de los métodos de generación de XIC

Método	Usar con cromatograma	Usar con espectro	Extracción
Selected range	No	Sí	Extrae iones de un área seleccionada en un espectro.
Maximum	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 9-4: Resumen de los métodos de generación de XIC (continuación)

Método	Usar con cromatograma	Usar con espectro	Extracción
Masas de pico de base	Sí	Sí	Solo se puede utilizar con BPC (cromatogramas de pico base). Utilice el comando **Use Base Peak Masses** para extraer resultados de iones en 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.
Specified masses	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 final del rango 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.

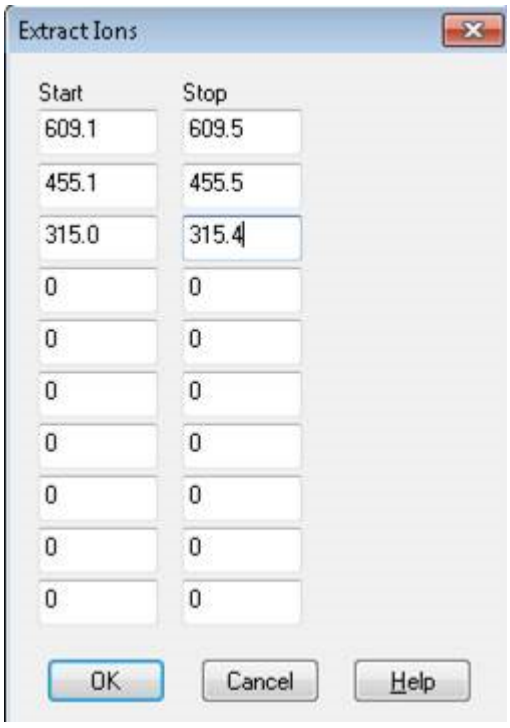
Generación de un XIC mediante el método de masas de pico base

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 del experimento de la parte superior del panel contiene el rango de masas y la intensidad máxima en recuentos por segundo.

Extracción de iones mediante el método de selección de masas

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

Figura 9-5: Cuadro de diálogo Extract Ions



3. Escriba los valores de cada XIC que desee crear.
   - 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.

Nota: Si no se escribe un valor de parada, el rango se define mediante el valor inicial.

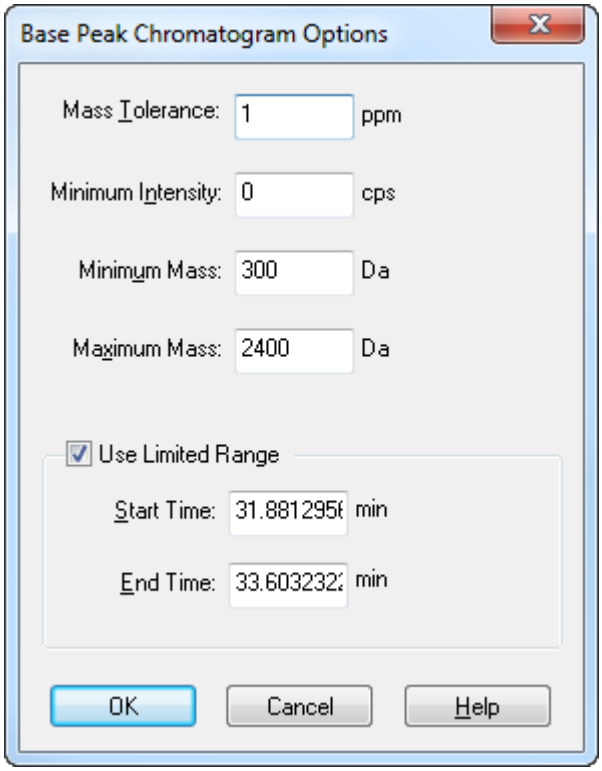
4. Haga clic en **OK**.
   El XIC de la selección se abre debajo del panel de cromatograma. La información de experimento de la parte superior del panel incluye las masas y la intensidad máxima en recuentos por segundo.

Generación de BPC

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

1. Abra un archivo de datos.
2. Seleccione un área dentro de un TIC.
   La selección está indicada en azul.
3. Haga clic en **Explore** > **Show** > **Show Base Peak Chromatogram.**
   Se mostrarán las selecciones en los campos **Start Time** y **End Time**.

Figura 9-6: Opciones de cromatograma de pico base



4. En el campo **Mass Tolerance**, introduzca el valor para indicar el rango de masa utilizado para buscar un pico.
   El software busca el pico utilizando un valor que es igual al doble del rango escrito (± el valor de masa).

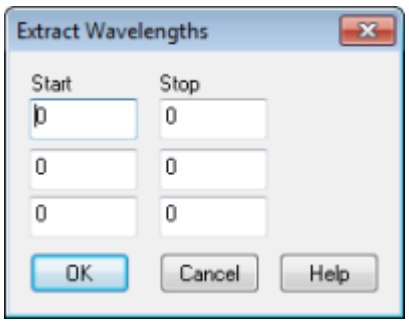
5. En el campo **Minimum Intensity**, escriba la intensidad por debajo de la cual el algoritmo no tendrá en cuenta los picos.
6. En el campo **Minimum Mass**, escriba la masa en el inicio del rango de análisis.
7. En el campo **Maximum Mass**, escriba la masa en el final del rango de análisis.
8. Para 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 la hora de inicio del rango objetivo del experimento.
   - En el campo **End Time**, escriba la hora final del rango objetivo 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 tomando la suma de la absorbancia de un rango de varias longitudes onda. Pueden extraerse hasta tres intervalos de un espectro de DAD para generar el XWC. Para obtener más información acerca del uso de los iconos disponibles, consulte la tabla: Tabla 9-5.

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

Figura 9-7: Cuadro de diálogo Extract Wavelengths



3. Escriba los valores de **Start** y **Stop**.
4. Haga clic en **OK**.
   El XWC se muestra en el panel debajo del espectro de DAD.

Visualización 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 absorbancia y el eje X representa la longitud de onda.

   Sugerencia: Si el panel del TWC está cerrado, haga clic en cualquier punto 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 absorbancia de todos los iones de un análisis representada en función del tiempo en un cromatograma. Si los datos contienen resultados de varios experimentos, puede crear TWC individuales para cada experimento inferior al TWC que represente la suma de todos los experimentos.

Un TWC muestra la absorbancia total (mAU) en el eje Y representada en relación con el tiempo, en el eje X. Para obtener más información acerca del uso de los iconos disponibles, consulte la tabla: Tabla 9-5.

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. Realice una de las siguientes acciones:

- 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 del 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.

Procesamiento de datos gráficos

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

Gráficos

Los datos gráficos pueden examinarse de maneras diferentes. En esta sección se proporciona información y se describen los procedimientos de uso de algunas de las funciones más utilizadas.

También pueden conservarse los datos para poder establecer comparaciones antes de que se lleven a cabo 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 contenga también cambiará para ajustarse a las nuevas dimensiones. No puede reducirse 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 se aplica zoom a un panel o una 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 presentan la misma ampliación.

Gestión de datos

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

Tabla 9-5: Opciones de gráficos

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 desee 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	• 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. Cuando el cursor se sitúa sobre el límite de la ventana o panel activos, se muestra una flecha de cuatro puntas. • Si el panel se encuentra sobre o bajo el panel de destino, el panel se mueve para colocarse sobre o bajo ese panel, respectivamente. • Si el panel se encuentra a la izquierda o derecha del panel de destino, el panel se mueve para colocarse a la izquierda o la derecha de ese panel, respectivamente. • Si el panel se encuentra en cualquier otra posición, el panel se mueve a la fila de destino. La sombra paralela del panel conforme se mueve indica la nueva posición.	
Vincular paneles	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.**	

Tabla 9-5: Opciones de gráficos (continuación)

Para realizar esta acción	Utilice esta opción de menú	O haga clic en este icono
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.**	
Tile panes	Seleccione el gráfico. Haga clic en **Window** > **Tile all Panes.**	

Ampliación del eje Y

1. Mueva el puntero que se encuentra en 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 lo aplica demasiado lejos, el recuadro del zoom se cierra.

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

   Sugerencia: Para devolver el eje Y del 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.**

Ampliación del eje X

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.

   Sugerencia: Para devolver el eje Y del gráfico a la escala original, haga doble clic en el eje X. Para devolver el gráfico completo a la escala original, haga clic en **Explore** > **Home Graph.**

Información de servicio técnico y mantenimiento 10

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

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

¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Determine si se precisa descontaminación antes de proceder a la limpieza o el mantenimiento. Si se han utilizado con el sistema materiales radiactivos, agentes biológicos o sustancias químicas tóxicas, el cliente debe descontaminar el sistema antes de la limpieza o el mantenimiento.

Calendario de mantenimiento recomendado

En las tablas siguientes se ofrece un programa recomendado de limpieza y mantenimiento del sistema.

Sugerencia: Realice las tareas de mantenimiento regularmente para garantizar que el sistema tenga un rendimiento óptimo.

- Realice pruebas de fuga de gases e inspecciones generales de mantenimiento periódicamente para garantizar que el funcionamiento del sistema sea seguro.
- Limpie el sistema con regularidad para mantenerlo en un buen estado de funcionamiento.
- Durante el mantenimiento del sistema, inspeccione con cuidado las piezas del sistema de suministro de gas externo, incluidos los tubos conectados al equipo, para confirmar que su estado es correcto. Reemplace cualquier tubo agrietado, comprimido o contraído.

Para obtener información sobre cómo mantener la fuente de iones, consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*.

Para determinar con qué frecuencia debe limpiar o realizar tareas de mantenimiento en el espectrómetro de masas y la fuente de iones, tenga en cuenta los factores siguientes. Estos factores pueden provocar cambios en el rendimiento del espectrómetro de masas, lo que indica que se requiere un mantenimiento.

- Compuestos probados

- Limpieza de las muestras y métodos de preparación de muestras
- Cantidad de tiempo que la sonda está expuesta a la muestra
- Tiempo de ejecución del sistema general

Para realizar el pedido de piezas consumibles e informarse de los requisitos de básicos de servicio y mantenimiento, póngase en contacto con una persona de mantenimiento cualificada o consulte el documento: *Guía de piezas y equipos*. Póngase en contacto con un representante del servicio técnico de SCIEX para el resto de los requisitos de mantenimiento y reparaciones.

Tabla 10-1: Tareas de mantenimiento del espectrómetro de masas

Componente	Frecuencia	Tarea	Para obtener más información
Sistema	Diariamente	Comprobar que no haya fugas	Consulte la sección Precauciones químicas.
Placa de chapa	Diariamente	Limpiar	Consulte la sección .
Aceite de la bomba de vacío preliminar	Semanalmente	Inspeccionar el nivel	Consulte la sección Inspección del nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar. Para agregar aceite, póngase en contacto con una persona de mantenimiento cualificada o con un representante del servicio técnico si es necesario.
Aceite de la bomba de vacío preliminar	Cada 3 años o según sea necesario	Reemplazar	Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local.
Aceite de la bomba de vacío preliminar	Según sea necesario	Rellenar	Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local.
Placa del orificio (parte delantera)	Según sea necesario	Limpiar	Consulte la sección .
Placa del orificio (partes delantera y trasera)	Según sea necesario	Limpiar	Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local.

Tabla 10-1: Tareas de mantenimiento del espectrómetro de masas (continuación)

Componente	Frecuencia	Tarea	Para obtener más información
QJet	Según sea necesario	Limpiar	Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local.
Conjunto de barras Q0 y lente IQ1	Según sea necesario	Limpiar	Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local.
Superficies del instrumento	Según sea necesario	Limpiar	Consulte la sección Limpieza de las superficies.
Botella de drenaje de escape de la fuente	Según sea necesario	Vaciar	Consulte la sección Vaciado de la botella de drenaje de escape de la fuente.
Calentador de la interfaz	Según sea necesario	Reemplazar	Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local.

Tabla 10-2: Tareas de mantenimiento de la fuente de iones

Componente	Frecuencia	Tarea	Para obtener más información
Sondas TurboIonSpray y APCI	Según sea necesario	Examinar y sustituir	Consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*.
Electrodos para las sondas TurboIonSpray y APCI	Según sea necesario	Examinar y sustituir	Consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*.
Aguja de descarga de corona	Según sea necesario	Reemplazar	Consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*.
Calentador turbo	Según sea necesario	Reemplazar	Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local.

Tabla 10-2: Tareas de mantenimiento de la fuente de iones (continuación)

Componente	Frecuencia	Tarea	Para obtener más información
Tubo de muestra	Según sea necesario	Reemplazar	Consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*.

Para las tareas «Según sea necesario», siga estas directrices:

- Limpie las superficies del espectrómetro de masas después de un derrame o cuando estén sucias.
- Vacíe la botella de drenaje de escape de la fuente 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 periódicamente para reducir al mínimo el impacto de la carga, que produce una 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 el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o un representante del servicio técnico (FSE).

- Rellene el aceite de la bomba de vacío preliminar cuando baje del nivel mínimo de aceite.
- Compruebe periódicamente todas las conexiones de escape para asegurarse de que se mantenga la integridad y de que se eliminen los posibles escapes del laboratorio del cliente.

Limpieza de las superficies

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

PRECAUCIÓN: Posible daño del 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.

Vaciado de la botella de drenaje de escape de la fuente

¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. Deje que la fuente de iones DuoSpray se enfríe durante al menos 30 minutos antes de iniciar cualquier procedimiento de mantenimiento. Algunas superficies de la fuente de iones y la interfaz de vacío se calientan durante su funcionamiento.

¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Deposite los materiales peligrosos en contenedores de residuos debidamente etiquetados y deséchelos según lo dispuesto por las normativas locales.

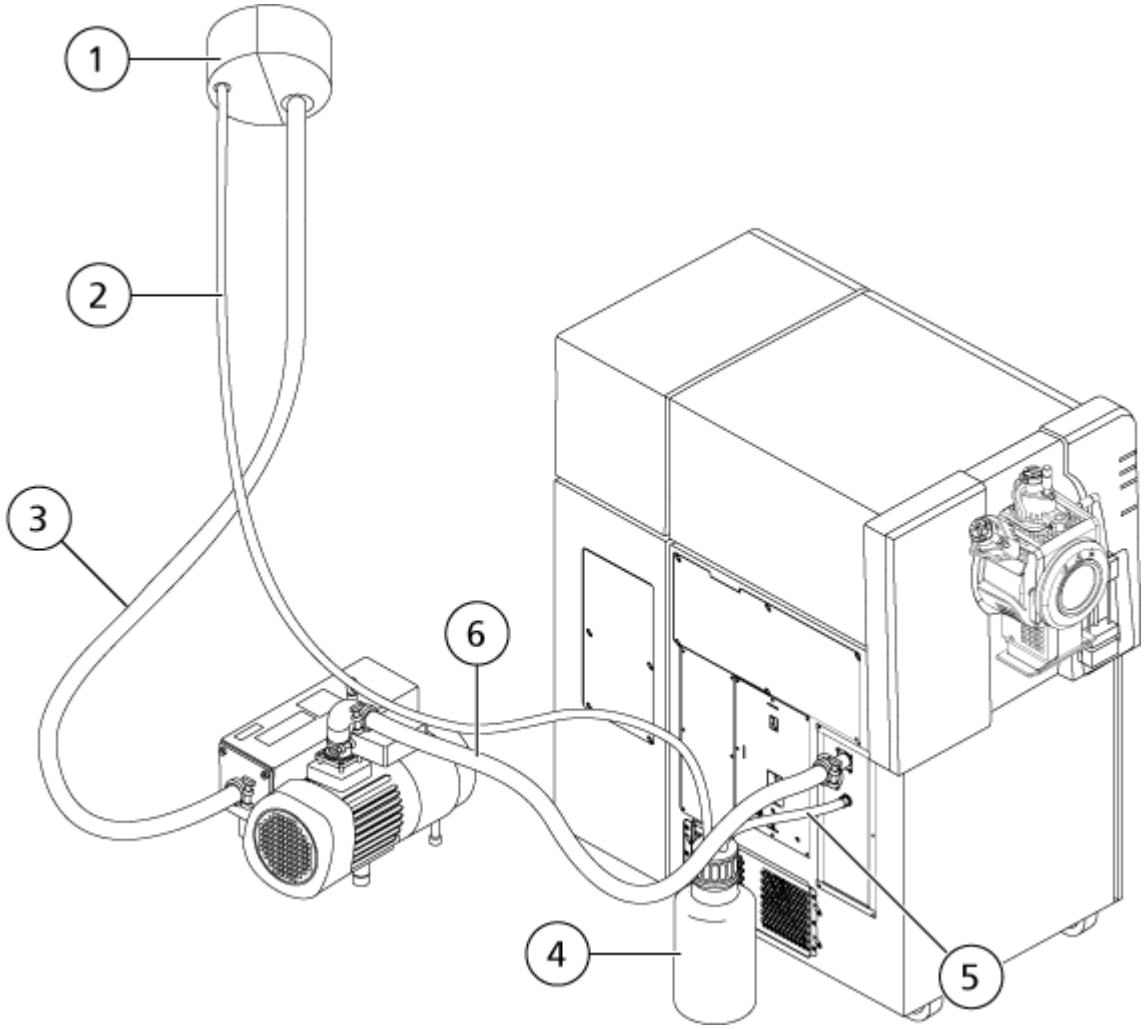
¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Tome las precauciones necesarias para ventilar los gases de escape a una campana extractora o un sistema de escape específicos del laboratorio, y asegúrese de que los tubos de ventilación estén fijados con abrazaderas. Asegúrese de que el laboratorio tiene una tasa de intercambio de aire adecuada para el trabajo realizado.

Nota: Asegúrese de que no haya torceduras, zonas hundidas ni dobleces en el conducto de residuos de la fuente.

Inspeccione la botella de drenaje de escape de la fuente regularmente y vacíela antes de que esté llena. Inspeccione también la botella y los conectores 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 el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*.
2. Afloje las abrazaderas que conectan las mangueras a la tapa de la botella de drenaje de escape de la fuente.

Figura 10-1: Botella de drenaje de escape de la fuente



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

Elemento	Descripción
5	Conexión del escape de la fuente al espectrómetro de masas: 1,6 cm (0,625 pulgadas) de diámetro interior
6	Manguera de entrada de vacío de la bomba de vacío preliminar

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

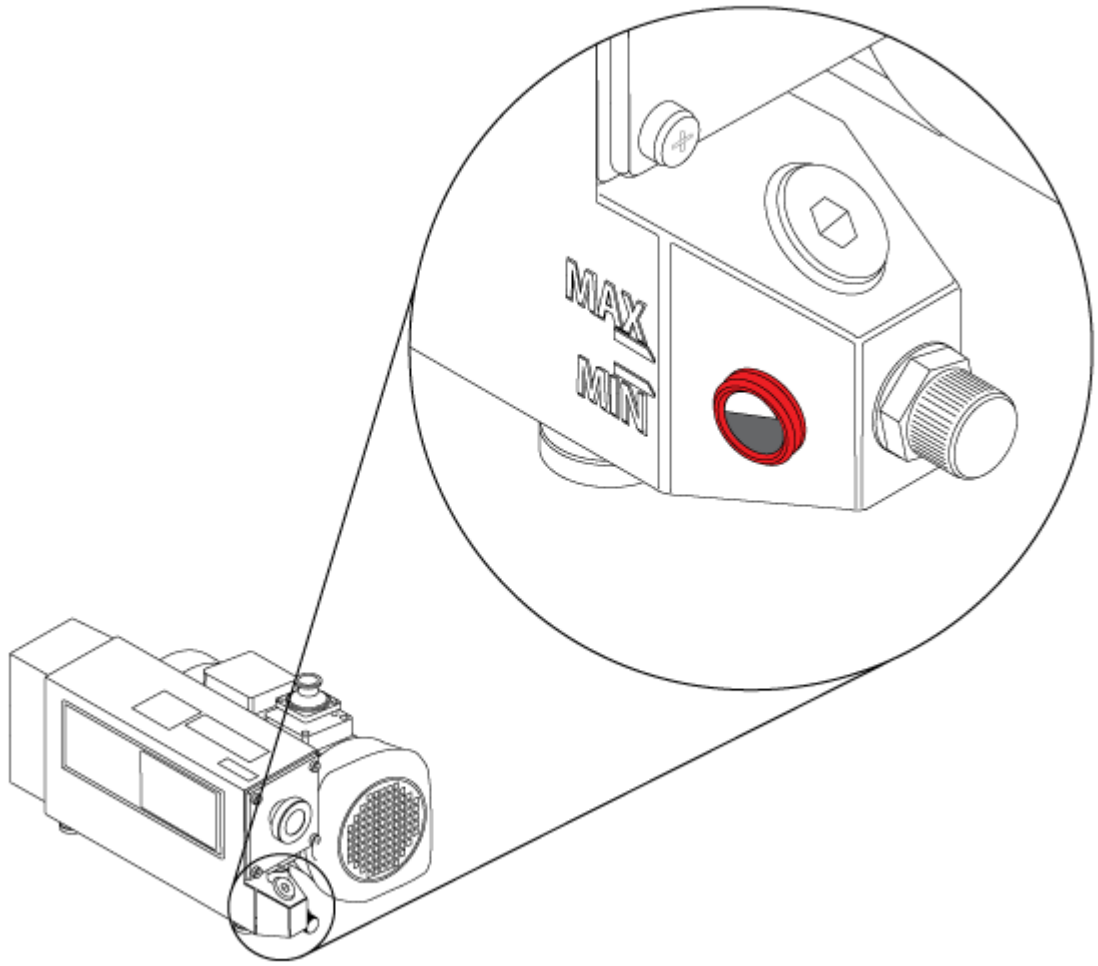
3. Si es preciso, saque la botella de drenaje del soporte.
4. Desconecte las mangueras de la tapa.
5. Quite la tapa de la botella de drenaje.
6. Vacíe la botella de drenaje y después deseche los residuos siguiendo los procedimientos del laboratorio y las normativas locales sobre residuos.
7. Ponga la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

Inspección del nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar

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

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

Figura 10-2: Mirilla



Sustitución del filtro del ventilador de refrigeración del espectrómetro de masas

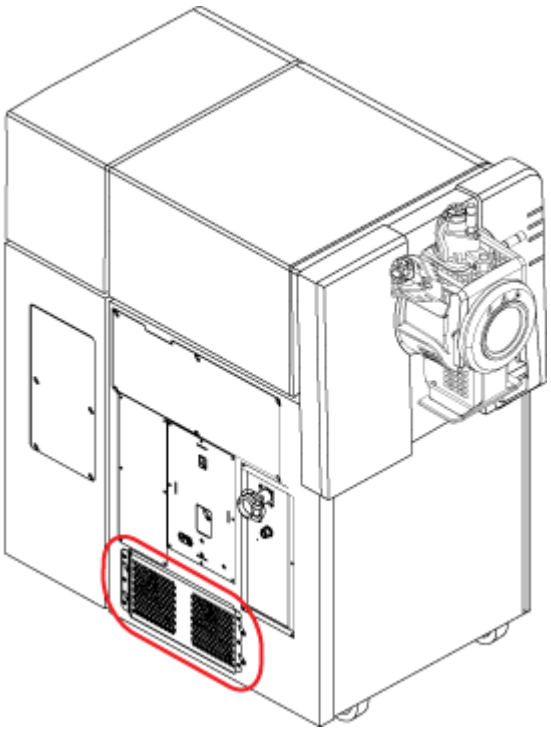
Los ventiladores de refrigeración del espectrómetro de masas están situados en el lado izquierdo del espectrómetro de masas.

Procedimientos de condiciones previas
• Apague el sistema siguiendo el procedimiento de la *Guía de usuario del sistema*.

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

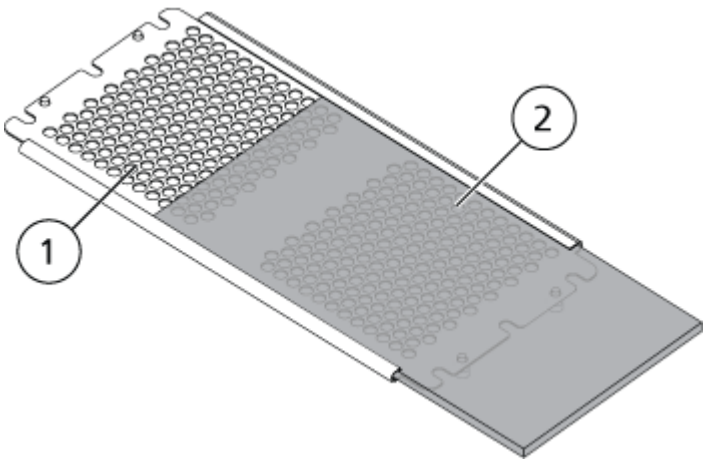
1. Retire los cuatro tornillos de mariposa de la cubierta del ventilador de refrigeración.

Figura 10-3: Filtros del ventilador de refrigeración



2. Quite el filtro y cámbielo por otro nuevo.

Figura 10-4: Filtro de los ventiladores de refrigeración



Elemento	Descripción
1	Cubierta de los ventiladores de refrigeración
2	Filtro

3. Coloque la cubierta del filtro.

Almacenamiento y manipulación

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

Si se debe almacenar el espectómetro de masas durante un periodo prolongado o si debe prepararse para su envío, póngase en contacto con un representante del servicio técnico de SCIEX para obtener información sobre el desmantelamiento. 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) y la humedad relativa no debe ser superior al 99 % sin condensación. Almacene el sistema a una altitud no superior a los 2000 m (6562 ft) sobre el nivel del mar.

Solución de problemas del espectrómetro de masas 11

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

Tabla 11-1: Problemas del sistema

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
La guía de iones QJet está extremadamente sucia o se ensucia con frecuencia.	El caudal del gas de la interfaz Curtain Gas es demasiado bajo.	Examine el ajuste del gas de la interfaz de Curtain Gas y auméntelo si procede.
Se ha producido un fallo del sistema debido a que la presión de vacío es demasiado alta.	1. el nivel de aceite es demasiado bajo. 2. Hay una fuga. 3. Se ha instalado la placa del orificio incorrecta.	1. inspeccione el nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar y, a continuación, póngase en contacto con una persona de mantenimiento (QMP) local o con un representante del servicio técnico (FSE) cualificados para añadir aceite. Consulte la sección Inspección del nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar. 2. Inspeccione y repare las fugas. 3. Instale la placa del orificio correcta.

Tabla 11-1: Problemas del sistema (continuación)

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
Se ha producido un fallo del sistema debido a que la temperatura del módulo excitador QPS es demasiado alta.	1. La temperatura ambiente es demasiado alta.	1. Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local. 2. Para informarse de las especificaciones de temperatura ambiente, consulte la *Guía de planificación del centro* del sistema.
El software de control notifica que el espectrómetro de masas se encuentra en estado Fault debido a la fuente de iones.	1. La sonda no está instalada. 2. La sonda no está conectada firmemente.	Confirme el fallo en el panel de estado de la página de detalles del dispositivo. 1. Instale la sonda. Consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*. 2. Retire e instale la sonda. Apriete con firmeza el anillo de retención. Consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*.
El software de control indica que la sonda APCI está en uso, pero la sonda TurboIonSpray está instalada.	El fusible F3 está fundido.	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico (FSE).
La pulverización no es uniforme.	El electrodo está bloqueado.	Limpie o reemplace el electrodo. Consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*.

Tabla 11-1: Problemas del sistema (continuación)

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
El calentador de la interfaz no está preparado.	El calentador de la interfaz está defectuoso.	Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local.
La resolución del espectrómetro de masas es insuficiente.	El espectrómetro de masas no se ha ajustado.	Utilice el asistente Instrument Optimization para optimizar el espectrómetro de masas. Consulte la *Guía del usuario del software* o el sistema de ayuda.
El rendimiento del espectrómetro de masas ha disminuido.	1. Las condiciones de la fuente de iones no están optimizadas. 2. La muestra no se había preparado correctamente o se ha degradado. 3. Hay una fuga en los conectores de entrada de muestras.	1. Optimice las condiciones de la fuente de iones. Consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*. 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 (FSE) si el problema persiste.

Tabla 11-1: Problemas del sistema (continuación)

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
Se producen arcos o chispas.	La posición de la aguja de descarga de corona no es correcta.	Si se está utilizando la sonda TurboIonSpray, gire la aguja de descarga de corona hacia la placa de chapa y retírela de la corriente de gas del calentador. Consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*.

Tabla 11-2: Problemas de sensibilidad

Posible causa	Acción correctiva
Disminución de la sensibilidad	
Los parámetros de la fuente de iones no están optimizados.	Optimice los parámetros de la fuente de iones.
El espectrómetro de masas no está optimizado.	Utilice el asistente Instrument Optimization para optimizar el espectrómetro de masas.
La placa de chapa está sucia.	Limpie la placa de chapa. Consulte la sección .
La placa del orificio está sucia.	Consulte la sección o póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico local (FSE).
La guía de iones QJet o la lente IQ0 están sucias.	Limpie la fuente de iones QJet y la lente IQ0. Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local.
La zona Q0 está sucia.	Prueba de contaminación de la zona Q0. Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local.
La muestra se ha degradado o tiene una concentración baja.	Compruebe la concentración de la muestra. Utilice una muestra nueva.
La sonda no está instalada correctamente.	Retire e instale la sonda.

Tabla 11-2: Problemas de sensibilidad (continuación)

Posible causa	Acción correctiva
La fuente de iones no está instalada correctamente o está defectuosa.	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.
Faltan una o más de las juntas tóricas de la interfaz de vacío.	Si las juntas tóricas se encuentran en la fuente de iones, instálelas en la interfaz de vacío. Si no están, vuelva a colocarlas.
Existe un problema con las conexiones o el sistema de LC.	Resuelva el problema del sistema de LC.
El potencial de desagrupación (DP) no está optimizado.	Optimice el DP.
El electrodo está sucio o bloqueado.	Limpie el electrodo. Consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*.
No hay señal o la señal es inestable	
El tubo está bloqueado.	Sustituya el tubo de muestras.

Tabla 11-3: Problemas de ruido de fondo

Posible causa	Acción correctiva
Los valores de **Temperature (TEM)**, tensión de IonSpray (IS) o flujo de gas del calentador (GS2) son demasiado altos.	Optimice los parámetros de la fuente de iones. Consulte el documento: *Fuente de iones DuoSpray Guía del operador*.
La placa de chapa está sucia.	Limpie la placa de chapa. Consulte la sección .
La placa del orificio está sucia.	Limpie la parte delantera de la placa del orificio. Consulte la sección .
La guía de iones QJet o la lente IQ0 están sucias.	Realice una limpieza completa de los componentes del extremo delantero del espectrómetro de masas. Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local.
La zona Q0 está sucia.	Limpie la zona Q0. Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE).

Tabla 11-3: Problemas de ruido de fondo (continuación)

Posible causa	Acción correctiva
La fase móvil está contaminada.	Sustituya la fase móvil.
La fuente de iones está contaminada.	Limpie o sustituya los componentes de la fuente de iones y acondicione la fuente de iones y la parte delantera: 1. Mueva la sonda a la posición más alejada de la abertura, en vertical y en horizontal. 2. (Software Analyst TF) Asegúrese de que el calentador de la interfaz esté encendido. 3. Infunda o inyecte metanol:agua a una proporción 50:50 con un caudal de la bomba de 1 ml/min. 4. En el software de control, establezca la temperatura en `650`, el gas de la fuente de iones 1 en `60` y el gas de la fuente de iones 2 en `60`. 5. Establezca el caudal del gas de la interfaz de Curtain Gas en `45` o `50`. 6. Ejecútelo durante dos horas como mínimo o preferiblemente por la noche para obtener resultados óptimos.

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

Iones de calibración recomendados A

PRECAUCIÓN: Posible resultado erróneo. No utilice soluciones caducadas o soluciones que no se hayan almacenado a la temperatura de almacenamiento indicada.

En las tablas siguientes se enumeran los estándares que recomienda SCIEX para calibrar el sistema TripleTOF 5600/5600+. Para obtener información acerca de las soluciones de ajuste, consulte Instrucciones de funcionamiento: Ajuste y calibración.

Tabla A-1: Iones de calibración positivos PPG de Q1

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

Tabla A-2: Iones de calibración negativos PPG de Q1

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Masas exactas y fórmulas químicas B

PPG

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

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

Tabla B-1: Masas exactas PPG

n	Masa exacta (M)	$(M + NH_4)^+$	Fragmentos MSMS	$(M + NH_4)^{2+}$	$(M + COOH)^-$
1	76,05242	94,08624	59,04914	56,06003	121,05061
2	134,09428	152,12810	117,09100	85,08096	179,09247
3	192,13614	210,16996	175,13286	114,10189	237,13433
4	250,17800	268,21182	233,17472	143,12282	295,17619
5	308,21986	326,25368	291,21658	172,14375	353,21805
6	366,26172	384,29554	349,25844	201,16468	411,25991
7	424,30358	442,33740	407,30030	230,18561	469,30177
8	482,34544	500,37926	465,34216	259,20654	527,34363
9	540,38730	558,42112	523,38402	288,22747	585,38549
10	598,42916	616,46298	581,42588	317,24840	643,42735
11	656,47102	674,50484	639,46774	346,26933	701,46921
12	714,51288	732,54670	697,50960	375,29026	759,51107
13	772,55474	790,58856	755,55146	404,31119	817,55293
14	830,59660	848,63042	813,59332	433,33212	875,59479
15	888,63846	906,67228	871,63518	462,35305	933,63665
16	946,68032	964,71414	929,67704	491,37398	991,67851
17	1004,72218	1022,75600	987,71890	520,39491	1049,72037
18	1062,76404	1080,79786	1045,76076	549,41584	1107,76223
19	1120,80590	1138,83972	1103,80262	578,43677	1165,80409

Tabla B-1: Masas exactas PPG (continuación)

n	Masa exacta (M)	$(M + NH_4)^+$	Fragmentos MSMS	$(M + NH_4)^{2+}$	$(M + COOH)^-$
20	1178,84776	1196,88158	1161,84448	607,45770	1223,84595
21	1236,88962	1254,92344	1219,88634	636,47863	1281,88781
22	1294,93148	1312,96530	1277,92820	665,49956	1339,92967

Reserpina

Tabla B-2: Masas exactas de reserpina ($C_{33}H_{40}N_2O_9$)

Descripción	Masa
Ion molecular $C_{33}H_{41}N_2O_9$	609,28066
Fragmento $C_{23}H_{30}NO_8$	448,19659
Fragmento $C_{23}H_{29}N_2O_4$	397,21218
Fragmento $C_{22}H_{25}N_2O_3$	365,18597
Fragmento $C_{13}H_{18}NO_3$	236,12812
Fragmento $C_{10}H_{11}O_4$	195,06519
Fragmento $C_{11}H_{12}NO$	174,09134

Ácido taurocólico

Tabla B-3: Masas exactas de ácido taurocólico ($C_{26}H_{45}NO_7S$)

Descripción	Masa
Ion molecular $C_{26}H_{44}NO_7S$	514,28440
Fragmento $C_2H_3O_3S$	106,98084
Fragmento $C_2H_6NO_3S$	124,00739
Fragmento SO_3	79,95736

Solución de calibración de TOF

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

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

Péptido ALILTLVS

Tabla B-5: Masa exacta de péptido ALILTLVS

Nombre	Secuencia	Masa	Estado de carga
Ion precursor	ALILTLVS	829,5393	1+
b8	ALILTLVS	811,5288	1+
b7	ALILTLV	724,4967	1+
b7-18	ALILTLV	706,4862	1+
b6-18	ALILTLV	607,4178	1+
y5	LTLVS	532,3341	1+
b5	ALILT	512,3443	1+
b5-18	ALILT	494,3337	1+
b4	ALIL	411,2966	1+
b3	ALI	298,2125	1+
Fragmento interno y|b	IL o LI	227,1754	1+
Fragmento interno y|b	LT o TL	215,139	1+
b2	AL	185,1285	1+
a2	AL	157,1335	1+
Iones imonio	I o L	86,09643	1+

Iconos de la barra de herramientas C

Consulte el documento *Guía para usuarios avanzados* para conocer otros iconos de la barra de herramientas.

Tabla C-1: Iconos de la barra de herramientas

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

Tabla C-2: Iconos de Acquisition Method Editor

Icono	Nombre	Descripción
	Mass Spec	Haga clic para mostrar la pestaña MS en el editor Acquisition Method.
	Period	Añade un experimento o un **IDA Criteria Level** o elimina el periodo.
	Autosampler	Abre la pestaña Autosampler Properties.
	Syringe Pump	Abre la pestaña Syringe Pump Properties.
	Column Oven	Abre la pestaña Column Oven Properties.
	Valve	Abre la pestaña Valve Properties.
	DAD	Abre el DAD Method Editor. Consulte la sección Visualización de datos de DAD.
	ADC	Abre la pestaña ADC Properties. Consulte la sección Mostrar datos de ADC.

Tabla C-3: Iconos del modo Acquire

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 que 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 que se haya utilizado con la primera muestra de la cola.
	Standby	Pone el instrumento en estado **Standby**.
	Ready	Pone el instrumento en estado **Ready**.

Tabla C-3: Iconos del modo Acquire (continuación)

Icono	Nombre	Descripción
	Reserve Instrument for Tuning	Reserva el espectrómetro de masas para el ajuste y la calibración.
	Method Wizard	Inicia el **Method Wizard**.
	Purge Modifier	Inicia la purga del modificador desde la bomba del modificador.

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

Tabla C-4: 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.

Tabla C-4: 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	Ajusta el 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.

Tabla C-4: Referencia rápida de la barra de herramientas Explore: cromatogramas y espectros (continuación)

Icono	Nombre	Descripción
	Offset Graph	Compensa las ligeras diferencias en el tiempo durante el que se registraron los datos de ADC y del espectrómetro de masas. Esto resulta útil al superponer gráficos para su comparación.
	Force Peak Labels	Etiqueta todos los picos.
	Expand Selection By	Configura el factor de ampliación de la parte del gráfico que se desee ver con mayor detalle.
	Clear ranges	Devuelve la selección ampliada a la vista normal.
	Set Selection	Escribe los puntos de inicio y detención de una selección. Esta función proporciona una selección más precisa que la que se obtiene seleccionando la región mediante el uso del cursor.
	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	Ajusta el umbral.
	Show Contour Plot	Muestra los datos seleccionados como un gráfico de espectro o un XIC. De manera adicional, para los datos adquiridos mediante un DAD, el gráfico de contorno puede mostrar los datos seleccionados como un espectro de DAD o un XWC.
	Show DAD TWC	Genera un TWC del espectro de DAD.
	Show DAD Spectrum	Genera un espectro de DAD.
	Extract Wavelength	Extrae hasta tres rangos de longitud de onda de un espectro de DAD para ver el XWC.

Tabla C-5: Referencia rápida de la barra de herramientas Explore: superposición de gráficos

Icono	Nombre	Descripción
	Home Graph	Recupera la escala original del gráfico.
	Overlay	Superpone gráficos.
	Cycle Overlays	Alterna entre gráficos superpuestos.
	Sum Overlays	Suma los gráficos.

Tabla C-6: Referencia rápida de la barra de herramientas Explore: herramienta de interpretación de fragmentos

Icono	Nombre	Descripción
	Show Fragment Interpretation Tool	Abre la herramienta Fragment Interpretation, que calcula los fragmentos de la escisión de enlaces no cíclicos individuales a partir de un archivo .mol.

Tabla C-7: Iconos de navegación de la barra de herramientas Explore

Icono	Nombre	Función
	Open File	Abre archivos.
	Show Next Sample	Se desplaza a la siguiente muestra.
	Show Previous Sample	Se desplaza a la muestra anterior.
	GoTo 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	Haga clic para extraer iones mediante la selección de masas.
	Show Base Peak Chromatogram	Genera un BPC.

Tabla C-7: Iconos de navegación de la barra de herramientas Explore (continuación)

Icono	Nombre	Función
	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	Ajusta el umbral.
	Noise Filter	Abre 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 una parte de un gráfico para verla con mayor detalle.
	Clear ranges	Devuelve la selección ampliada a la vista normal.
	Set Selection	Establece 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	Aumenta la escala de un gráfico al máximo, de manera que el pico más intenso se amplíe a escala completa, esté visible o no.

Tabla C-7: Iconos de navegación de la barra de herramientas Explore (continuación)

Icono	Nombre	Función
	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	Ajusta el umbral.
	Show Contour Plot	Muestra 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	Genera un TWC del DAD.
	Show DAD Spectrum	Genera un espectro de DAD.
	Extract Wavelength	Extrae hasta tres rangos de longitud de onda de un espectro de DAD para ver el XWC.

Tabla C-8: 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	Muestra u oculta los parámetros de búsqueda de picos.
	Show Active Graph	Muestra únicamente el cromatograma del analito.

Tabla C-8: Iconos de la pestaña Integration y del asistente Quantitation Wizard (continuación)

Icono	Nombre	Descripción
	Show Both Analyte and IS	Muestra el analito y su cromatograma asociado. Solo está disponible si existe un patrón interno asociado.
	Use Default View for Graph	Vuelve a la vista predefinida (vista de todos los datos) si, por ejemplo, el usuario ha aplicado zoom a un cromatograma.

Tabla C-9: Iconos de la tabla de resultados

Icono	Nombre	Descripción
	Sort Ascending by Selection	Ordena la columna seleccionada en orden ascendente.
	Sort Descending by Selection	Ordena 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 tabla de resultados.
	Delete Formula Column	Elimina la columna de fórmula.
	Report Generator	Abre el software Reporter.

Tabla C-10: Referencia rápida de iconos: modo Quantitate

Icono	Nombre	Descripción
	Add/Remove Samples	Haga clic para agregar muestras a la tabla de resultados o quitarlas.
	Export as Text	Guarda la Results Table como archivo de texto.

Tabla C-10: Referencia rápida de iconos: modo Quantitate (continuación)

Icono	Nombre	Descripción
	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 tabla de resultados.
	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.

Tabla C-11: Iconos del modo Acquire

Icono	Nombre	Función
	Start Sample	Haga clic para iniciar la muestra en la cola.
	Stop Sample	Haga clic para detener la muestra en la cola.

Tabla C-11: Iconos del modo Acquire (continuación)

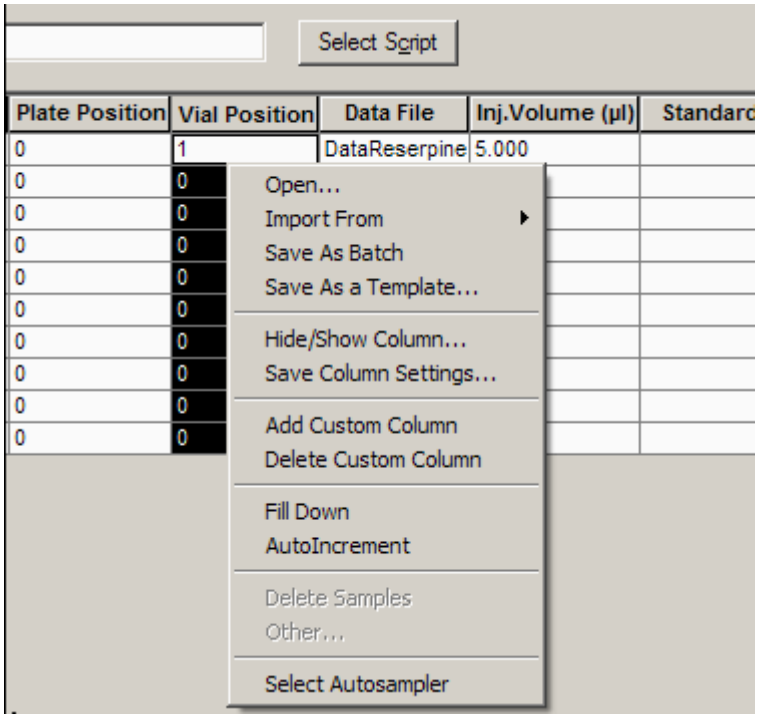
Icono	Nombre	Función
	Equilibrate	Haga clic para seleccionar el método que desee utilizar para equilibrar el espectrómetro de masas, que incluye la fuente de iones, la columna LC, en caso de utilizar una, y cualquier dispositivo periférico. Este método debe ser el mismo que el utilizado con la primera muestra de la cola.

Menús contextuales D

Editor de lotes

Haga clic con el botón derecho en la tabla Batch Editor para obtener acceso a las opciones.

Figura D-1: Menú contextual del editor de lotes



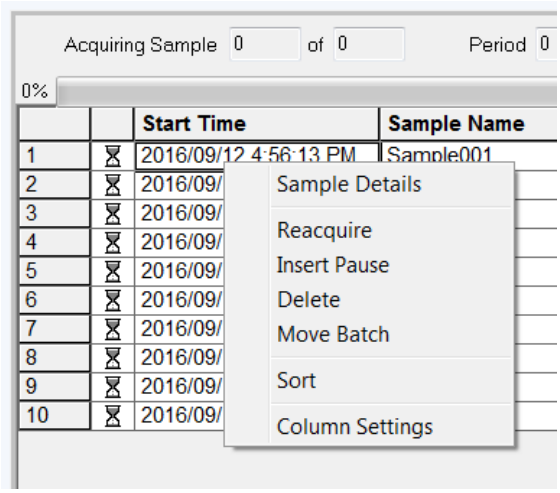
Menú	Función
Open	(Abrir)Abre un archivo de lote.
Import From	(Importar desde)Importa un lote desde un archivo.
Save As Batch	(Guardar como lote)Guarda el lote con otro nombre.
Save As a Template	(Guardar como plantilla)Guarda el lote como plantilla.
Hide/Show Column	(Mostrar/Ocultar columna)Oculta o muestra una columna.
Save Column Settings	(Guardar configuración de columna)Guarda la configuración de columna del lote.
Add Custom Column	(Añadir columna personalizada)Añade una columna personalizada.

Menú	Función
Delete Custom Column	(Eliminar columna personalizada)Elimina una columna personalizada.
Fill Down	(Rellenar hacia abajo)Copia los mismos datos en las celdas seleccionadas.
AutoIncrement	(Autoincrementar)Incrementa automáticamente los datos de las celdas seleccionadas.
Delete Samples	(Eliminar muestras)Elimina la fila seleccionada.
Select Autosampler	(Seleccionar procesador de muestras automático)Selecciona un procesador de muestras automático.

Cola

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

Figura D-2: Menú contextual de Queue Manager



Menú	Función
Sample Details	(Detalles de la muestra)Abre el cuadro de diálogo Sample Details.
Reacquire	(Volver a adquirir)Adquiere una muestra de nuevo.
Insert Pause	(Insertar pausa)Inserta una pausa, en segundos, entre dos muestras.
Delete	(Eliminar)Elimina el lote o las muestras seleccionadas.
Move Batch	(Mover lote)Mueve el lote dentro de la cola.
Sort	(Ordenar)Ordena en la columna preseleccionada.

Menú	Función
Column Settings	(Configuración de columna)Cambia la configuración de la columna.

Menú contextual del panel Show File Information

Tabla D-1: Menú contextual del panel Show File Information

Menú	Función
Copy	(Copiar)Copia los datos seleccionados.
Paste	(Pegar)Pega datos.
Select All	(Seleccionar todo)Selecciona todos los datos del panel.
Save To File	(Guardar en archivo)Guarda los datos en un archivo rtf.
Font	(Fuente)Cambia la fuente.
Save Acquisition Method	(Guardar método de adquisición)Guarda el método de adquisición como archivo .dam.
Save Acquisition Method to CompoundDB	(Guardar métodos de adquisición en 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	(Eliminar panel)Elimina el panel seleccionado.

Paneles de cromatograma

Tabla D-2: Menú contextual de los paneles de cromatograma

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 ion 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.

Tabla D-2: Menú contextual de los paneles de cromatograma (continuación)

Menú	Función
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 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 (historial de procesamiento de exploración).
Add Caption	Agrega una etiqueta de texto en la ubicación del cursor en el panel.
Add User Text	Agrega un recuadro de texto en la ubicación del cursor en el panel.
Set Subtract Range	Define el rango de sustracción del panel.
Clear Subtract Range	Borra el rango de sustracción del panel.
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 D-3: Menú contextual de los paneles de espectro

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 ion específico o conjunto de iones de un panel seleccionado y, a continuación, genera un panel nuevo que contiene un cromatograma de los iones específicos.

Tabla D-3: Menú contextual de los paneles de espectro (continuación)

Menú	Función
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 denominados 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 (historial de procesamiento de exploración).
Add Caption	Agrega una etiqueta de texto en la ubicación del cursor en el panel.
Add User Text	Agrega un recuadro de texto en la ubicación del cursor en el panel.
Show Last Scan	Muestra el análisis anterior a la selección.
Select Peaks For Label	En este cuadro de diálogo, seleccione los parámetros para reducir el etiquetado de picos.
Re-Calibrate TOF	Abre el cuadro de diálogo TOF Calibration.
Abscissa (Time)	Cambia la vista para mostrar los valores TOF en el eje x.
Delete Pane	Elimina el panel seleccionado.
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.

Tabla de resultados

Haga clic con el botón derecho en Results Table para obtener acceso a las opciones mostradas en la tabla que indicamos a continuación.

Tabla D-4: Menú contextual de la tabla de resultados

Menú	Función
Full	(Completo) Muestra todas las columnas.
Summary	(Resumen) Muestra columnas específicas.
Analyte	(Analito) Muestra un analito específico.
Analyte Group	(Grupo de analitos) Crea un grupo de analitos.
Sample Type	(Tipo de muestra) Enseña muestras de un tipo específico o todas las muestras.
Add Formula Column	(Añadir columna de fórmula) Añade una columna de fórmula. Se recomienda que el usuario valide los resultados si se utiliza una columna de fórmula.
Table Settings	(Configuración de tabla) Edita o selecciona una configuración de tabla.
Query	(Consulta) Crea o selecciona una consulta.
Sort	(Ordenar) Crea una ordenación u ordena por índice.
Metric Plot	(Gráfico métrico) Crea un gráfico métrico.
Delete Pane	(Eliminar panel) Elimina el panel activo.
Fill Down	(Rellenar hacia abajo) Copia los mismos datos en las celdas seleccionadas.
Add Custom Column	(Añadir columna personalizada) Añade una columna personalizada.
Delete Custom Column	(Eliminar columna personalizada) Elimina la columna personalizada seleccionada.

Revisión de picos

Haga clic con el botón derecho en la ventana o panel **Peak Review** para obtener acceso a las opciones mostradas en Tabla D-5.

Tabla D-5: Menú contextual de revisión de picos

Menú	Función
Options	(Opciones) Abre el cuadro de diálogo Peak Review Options.
Sample Annotation	(Anotación de muestra) Abre el cuadro de diálogo Sample Annotation.

Tabla D-5: Menú contextual de revisión de picos (continuación)

Menú	Función
Save Active to Text File	(Guardar activo como archivo de texto) Guarda el pico seleccionado como archivo de texto.
Show First Page	(Mostrar primera página) Va a la primera muestra.
Show Last Page	(Mostrar última página) Va a la última muestra.
Slide Show Peak Review	(Revisión de picos de presentación de diapositivas) Abre la presentación de diapositivas.
Update Method	(Actualizar método) Actualiza el algoritmo de todos los picos.
Revert to Method	(Revertir a método) Selecciona un pico redefinido en función del método de cuantificación actual.
Delete Pane	(Eliminar panel) Elimina el panel activo.

Calibration Curve

Haga clic con el botón derecho en la ventana o en la tabla del panel Calibration para obtener acceso a las opciones mostradas en la tabla que indicamos a continuación.

Tabla D-6: Menú contextual de la curva de calibración

Menú	Función
Exclude (Include)	(Excluir [Incluir]) Haga clic con el botón derecho en un punto y, a continuación, haga clic en **Exclude** para excluir el punto de la curva. Haga clic con el botón derecho en un punto y, a continuación, haga clic en **Include** para incluir el punto.
Exclude All Analytes (Include All Analytes)	(Excluir todos los analitos [Incluir todos los analitos]) Haga clic con el botón derecho 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 derecho en un punto y, a continuación, haga clic en **Include All Analytes** para incluir los puntos.
Show Peak	(Mostrar pico) Revisa un pico individual.
Overlay	(Superponer) Superpone dos gráficos.
Active Plot	(Gráfico activo) Determina qué gráfico está activo.
Legend	(Leyenda) Muestra la leyenda del gráfico.
Log Scale X Axis*	(Escala logarítmica eje X) Usa una escala logarítmica para el eje X.

Tabla D-6: Menú contextual de la curva de calibración (continuación)

Menú	Función
Log Scale Y Axis*	(Escala logarítmica eje Y) Usa una escala logarítmica para el eje Y.
Delete Pane	(Eliminar panel) Elimina el panel activo.
Home Graph	(Gráfico de inicio) 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.	

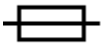
Glosario de símbolos E

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 el producto cumple los requisitos de CEM de la Autoridad de medios de comunicación de Australia (ACMA, Australian Communications Media Authority).
	Corriente alterna
A	Amperios (corriente)
	Peligro de asfixia
	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. Consulte las instrucciones para obtener información sobre un posible peligro. **Nota:** En la documentación de SCIEX, este símbolo identifica un riesgo de lesiones personales.

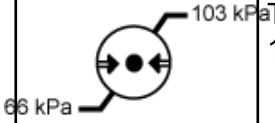
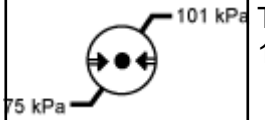
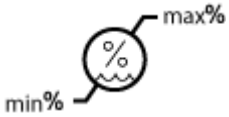
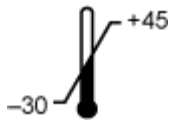
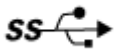
Glosario de símbolos

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 medioambiente (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.
	Consultar instrucciones de uso
	Peligro de aplastamiento
	Marca cTUVus para TUV Rheinland de Norteamérica
	Símbolo de la matriz de datos que se puede escanear con un lector de códigos de barras para obtener el identificador único de dispositivos (UDI)
	Peligro medioambiental
	Conexión Ethernet
	Peligro de explosión

Símbolo	Descripción
	Riesgo de lesiones oculares
	Peligro de incendio
	Peligro de productos químicos inflamables
	Frágil
	Fusible
Hz	Hercios
	Símbolo de seguridad internacional "Cuidado, riesgo de descarga eléctrica" (ISO 3864), también conocido como símbolo de alta tensión. 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 por 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 %.

Glosario de símbolos

Símbolo	Descripción
	Mantener hacia arriba
	Peligro de desgarro/corte
	Peligro de radiación laser
	Peligro de carga pesada
	Peligro magnético
	Fabricante
	Peligro de piezas móviles
	Riesgo por marcapasos. No se permite el acceso a personas con marcapasos.
	Riesgo de quedarse atrapado
	Peligro de gas a presión
	Toma de tierra de protección
	Peligro de perforación

Símbolo	Descripción
	Peligro de sustancias químicas reactivas
SN	Número de serie
	Peligro de toxicidad química
	Transporte y almacene el sistema a una presión de entre 66 kPa y 103 kPa.
	Transporte y almacene el sistema a una presión de entre 75 kPa y 101 kPa.
	Transporte y almacene el sistema dentro de los niveles mínimo (**min**) y máximo (**max**) de humedad relativa sin condensación.
	Transporte y almacene el sistema a una temperatura de entre –30 °C y +45 °C.
	Transporte y almacene el sistema a una temperatura de entre –30 °C y +60 °C.
	Conexión USB 2.0
	Conexión USB 3.0
	Peligro de radiación ultravioleta
UK CA	Marca de evaluación de conformidad del Reino Unido
VA	Voltioamperio (potencia)

Glosario de símbolos

Símbolo	Descripción
V	Voltios (voltaje)
	RAEE. No deseche el equipo como residuos urbanos sin clasificar. Peligro medioambiental
W	Vatios
	aaaa-mm-dd 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 un representante del servicio técnico (FSE).

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

Etiqueta	Traducción (si procede)
TIP & TELL	Indicador de volcado **Nota:** Indica si el contenedor se ha volcado o manipulado incorrectamente. Anote el incidente en la hoja de porte y compruebe si hay daños. Cualquier reclamación por volcado debe registrarse en este documento.
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 y compruebe 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 ESTÁ 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:** Consultar instrucciones de uso.

Contacto

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

- SCIEX Now Learning Hub

Soporte SCIEX

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 o póngase en contacto con nosotros de una de las siguientes formas:

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

Ciberseguridad

Para obtener las indicaciones sobre ciberseguridad más recientes para los productos SCIEX, visite sciex.com/productsecurity.

Documentación

Esta versión del documento sustituye a todas las versiones anteriores de este documento.

Para ver este documento electrónicamente se necesita Adobe Acrobat Reader. Para descargar la última versión, vaya a https://get.adobe.com/reader.

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.

Para localizar la documentación relacionada con los productos de hardware, consulte el DVD *Customer Reference* que se suministra con el sistema o componente.

Las últimas versiones del documento están disponibles en el sitio web de SCIEX, en sciex.com/customer-documents.

Contacto

Nota: Para solicitar una versión impresa y gratuita de este documento, póngase en contacto con sciex.com/contact-us.