

---

# Software Analyst MD

Tutorial de ajustes manuales



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.

IVD

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.

**Se trata de un sistema para uso diagnóstico *in vitro*.** Producto(s) no disponible(s) en todos los países. Para obtener más información, póngase en contacto con el representante de ventas local o consulte [sciex.com/diagnostics](http://sciex.com/diagnostics).

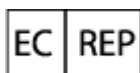
**Rx only.**

**Es posible que los productos no estén disponibles en todos los países. Si desea obtener más información, póngase en contacto con el representante local de ventas o consulte el sitio web [sciex.com](http://sciex.com).**

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](http://sciex.com/trademarks)).

AB Sciex™ se usa bajo licencia.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



Leica Microsystems CMS GmbH  
Ernst-Leitz-Strasse 17-37  
35578 Wetzlar  
Germany

CE

UK  
CA



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

# Tabla de contenido

---

<b>Tutorial de ajustes manuales</b> .....	<b>5</b>
Acerca de los ajustes.....	5
Resolución y sensibilidad.....	6
Ajuste manual de la resolución.....	6
Ajustar la resolución en los instrumentos LIT.....	7
Calibración de masa.....	7
Calibración de masas manual.....	8
Asistencia técnica.....	8
Ajustes y calibración manuales en el modo cuadrupolo.....	8
Seleccionar un método de adquisición.....	8
Ajuste de la resolución.....	9
Realizar una calibración de masas en el modo cuadrupolo.....	10
Calibración manual del espectrómetro de masas en el modo LIT.....	13
Seleccionar el método de adquisición para la calibración manual en el modo LIT.....	14
Realizar una calibración de masas en el modo LIT.....	14
Iconos de modo de Ajuste y calibración.....	17
 <b>Contacto</b> .....	 <b>18</b>
Formación del cliente.....	18
Centro de aprendizaje en línea.....	18
Soporte SCIEX.....	18
Ciberseguridad.....	18
Documentación.....	18

# Tutorial de ajustes manuales

Los usuarios aprenderán a ajustar y calibrar manualmente un espectrómetro de masas en el modo cuadrupolo y en el modo de trampa de iones lineal (LIT).

## Requisitos previos

Los usuarios podrán:

- Crear un método de adquisición
- Enviar un lote

Se recomienda utilizar los siguientes equipos y dispositivos periféricos:

- Un perfil de hardware activo que contiene el espectrómetro de masas y la bomba de jeringa.
- PPG o soluciones de ajuste adecuadas.

## Acerca de los ajustes

Los ajustes optimizan el rendimiento de la resolución y la intensidad del espectrómetro de masas. Cuando ajuste un espectrómetro de masas, realice lo siguiente:

- Ajuste los valores de desviación de la resolución para ajustar la intensidad y la resolución de las masas de calibración (solo para el modo cuádrupolo).
- Seleccione las masas que desee calibrar. Si es necesario, puede agregar y eliminar masas de la lista de calibración.
- Cree uno o varios conjuntos de estándares de calibración únicos. Un conjunto de estándares de calibración debe constar de al menos dos compuestos para los extremos alto y bajo del rango de masas de interés.

Durante el proceso de ajuste y calibración del espectrómetro de masas, los cambios en la configuración se guardan en el archivo `InstrumentData` dentro de la carpeta API Instrument. Es necesario utilizar los parámetros predefinidos de la carpeta de métodos API Instrument, ya que son parámetros optimizados por el representante del servicio técnico durante la instalación.

**Tabla 1: Frecuencia de ajuste**

Tipo de análisis	Calibración		Optimización de la resolución	
	Frecuencia	Manual/ automatizada	Frecuencia	Manual/ automatizada
Q1 y Q3	3 a 6 meses	Ambas	3 a 6 meses	Ambas

**Tabla 1: Frecuencia de ajuste (continuación)**

Tipo de análisis	Calibración		Optimización de la resolución	
	Frecuencia	Manual/ automatizada	Frecuencia	Manual/ automatizada
LIT	Cada dos semanas, según sea necesario	Ambas	3 a 6 meses	Solo automatizada

## Resolución y sensibilidad

El software utiliza valores predefinidos de resolución unitaria, alta, baja y abierta para el modo cuádrupolo. En el caso de los análisis en modo cuádrupolo, existe un equilibrio entre la resolución y la sensibilidad. Cuanto más ancho sea el pico, más intenso será también. Para los picos más estrechos, ocurre lo contrario. La resolución y la sensibilidad LIT (trampa de iones lineal) no guardan ninguna relación debido al modo en que funciona la trampa de iones lineal.

Los valores de desviación indicados a continuación para las resoluciones baja y abierta son los habituales. No obstante, se pueden modificar de acuerdo con los procedimientos de funcionamiento estándar.

- Resolución baja (tensión reducida con respecto a la resolución unitaria): 0,03
- Resolución abierta (tensión reducida con respecto a la resolución unitaria): 0,30

---

**Sugerencia:** Los ajustes de resolución se pueden comprobar o editar en la pestaña Resolution del cuadro de diálogo Tuning Options. Para abrir el cuadro de diálogo, en el modo **Tune and Calibrate**, haga clic en **Tools > Settings > Tuning Options**.

---

## Ajuste manual de la resolución

El software cuenta con cuatro parámetros de resolución para los cuádrupolos: unitaria, alta, baja y abierta. Las anchuras de pico se establecen en 0,7 ( $\pm 0,1$  Da de anchura del pico a media altura) para la resolución de la unidad y en 0,5 ( $\pm 0,1$ ) para la resolución alta. Esto se lleva a cabo ajustando las desviaciones de resolución. El software calcula los parámetros de resolución baja y abierta a partir del parámetro de resolución unitaria. Los ajustes a las desviaciones de resolución se efectúan en la pestaña Resolution de Tune Method Editor.

La resolución Q1 varía para los análisis LIT en función del análisis utilizado. La resolución Q1 es fija para los análisis ER y EMS. La resolución Q1 para los análisis ER está configurada de forma predefinida como abierta, lo que permite una anchura razonable de las masas en la LIT.

Para los análisis EPI y MS3, establezca la resolución Q1 en cualquiera de los parámetros de resolución seleccionados. En general, se establece la resolución unitaria para este parámetro, pero puede definirse en una resolución inferior para permitir una ventana de masa más amplia en la celda de colisión y mostrar más isótopos, o bien para aumentar la

sensibilidad de la misma forma que si se ejecutase un análisis de MRM a una resolución baja.

Para los modos de análisis LIT, la resolución depende de la velocidad del análisis. En general, cuanto más baja sea la velocidad de análisis, mejor resolución.

## Ajustar la resolución en los instrumentos LIT

La resolución de un pico está determinada por la masa y la anchura de ese pico. En el modo LIT, la resolución depende de la velocidad con la que los iones se expulsan de la LIT en función de la masa. Para cambiar la sensibilidad y la resolución de los tipos de análisis LIT, utilice la función Optimización del instrumento. Consulte el documento *Guía de usuario del sistema* o la *Ayuda del software Analyst MD*.

## Calibración de masa

La calibración de masas es el proceso mediante el que se asignan los valores correctos de la relación masa-carga a los picos de masa. Realizando una calibración de masas con un estándar de calibración, como el glicol de polipropileno (PPG), compare los resultados con una calibración anterior, para determinar cuánto se aproximan a los valores teóricos los valores de la relación masa-carga de los picos observados. Actualice la calibración anterior o, lo que es más habitual, sustitúyala por la calibración nueva.

Seleccione varias masas cuando calibre análisis Q1, Q3 y todos los análisis LIT para cada polaridad. Los resultados se almacenan en una tabla de calibración. Cuando se realiza una calibración de masas, se actualiza la tabla de calibración con los nuevos valores de DAC (convertidor digital-analógico, por sus siglas en inglés) a partir de la nueva calibración. Los valores CAD de las masas que ya figuran en la tabla de calibración se actualizan. Todos los datos de las masas no calibradas en la calibración actual se conservan, pero no se utilizan. Si se sustituye la calibración de masas, se sustituyen todos los valores de calibración anteriores de todas las masas seleccionadas para usarlas.

Realice una calibración de masas utilizando un espectro recién adquirido o utilice un espectro de un archivo de datos almacenado.

Durante una calibración de masas, el software:

1. Busca el pico más amplio en el rango de búsqueda de cada masa seleccionada.
2. Obtiene los valores de masa, intensidad y anchura de pico.
3. Compara la masa registrada con la masa prevista y calcula el desplazamiento, si lo hay.
4. Compara la anchura de pico con la anchura de pico objetivo.
5. Compara la intensidad con la calibración anterior.
6. Muestra los resultados en formato de gráfico y texto.
7. Guarda la tabla de calibración en el archivo de datos del instrumento en la carpeta  
`<Drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Data.`

## Calibración de masas manual

Una vez ajustadas manualmente las resoluciones de los cuadrupolos Q1 y Q3, compruebe la calibración. Los cambios realizados en los parámetros durante una optimización de la resolución pueden afectar a la calibración de masas anterior.

El informe de calibración muestra tres gráficos: el desplazamiento de las masas, la anchura de pico y la diferencia de intensidad.

- El gráfico de desplazamiento de las masas muestra la diferencia entre las masas medidas de la calibración actual y las masas reales de la tabla de referencia.
- El gráfico de anchuras de pico muestra la anchura de pico de cada masa comparada con la anchura objetivo seleccionada en el método de adquisición.
- El gráfico de diferencia de intensidad muestra la diferencia de intensidad entre la calibración anterior y la calibración actual.

El ajuste y la calibración tan solo deben llevarlos a cabo operadores con experiencia, y los parámetros de ajuste del deben determinarlos los representantes del servicio técnico.

## Asistencia técnica

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

## Ajustes y calibración manuales en el modo cuadrupolo

Para ajustar y calibrar correctamente el espectrómetro de masas, ajuste la resolución y realice una calibración de masas.

Es necesario un método de adquisición diferente para cada tipo de análisis que utilice una solución de calibración en particular. Para la calibración en modo positivo y negativo, se utilizan diferentes soluciones de calibración. Si el análisis es un subconjunto tanto del tipo de análisis como de la polaridad, el usuario también puede ajustar solamente un cuadrupolo, polaridad o tipo de resolución, en lugar de llevar a cabo el proceso de ajuste y calibración completo para todas las combinaciones de cuadrupolo, polaridad y tipo de resolución.

Siga los procedimientos en el orden especificado:

1. [Seleccionar un método de adquisición](#)
2. [Ajuste de la resolución](#)
3. [Realizar una calibración de masas en el modo cuadrupolo](#)

### Seleccionar un método de adquisición

1. Cree un proyecto para guardar los métodos de calibración y los resultados.



Puede tratarse de un proyecto específico para el proceso de ajuste o puede formar parte de un proyecto de trabajo.

2. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
3. Cree un método de adquisición adecuado en Manual Tune o vaya a la carpeta **API Instrument** y abra el método de adquisición para la calibración si se utiliza un instrumento de la serie 3200MD.

---

**Sugerencia: (Solo aplicable a los instrumentos de la serie 3200MD)** El software no se instala con los métodos de adquisición predeterminados para llevar a cabo optimizaciones a una resolución alta. No obstante, la única diferencia entre estos métodos y los métodos específicos de la resolución unitaria (Q1PosPPG.dam, Q1NegPPG.dam, Q3PosPPG.dam y Q3NegPPG.dam) es el tipo de resolución. La primera vez que ajuste el espectrómetro de masas y tenga que utilizar los métodos de alta resolución, abra los métodos de resolución de la unidad, cambie el tipo de resolución a alta y, a continuación, guárdelos con un nombre distinto, por ejemplo, Q1PosPPG\_alta.dam.

---

4. Infunda de 5 a 10 µl/min de solución de PPG para ajustar Q1 y Q3 en modo positivo, o solución de PPG 3000 para ajustar Q1 y Q3 en modo negativo.

---

**Sugerencia:** Copie el método, de manera que pueda conservar el método original para el representante del servicio técnico.

---

5. Seleccione un proyecto nuevo de la lista de proyectos y, a continuación, guarde el método con el mismo nombre.

## Ajuste de la resolución

Asegúrese de que la pulverización es estable.

1. En la pestaña MS del Tune Method Editor, asegúrese de que la casilla de verificación **MCA** está seleccionada.
2. En el campo **Period Summary** de la sección **Cycles**, escriba 10.
3. Haga clic en **Start**.  
Se abrirá un panel de espectros de masas en la parte inferior de la ventana Manual Tune.
4. Una vez que el espectrómetro de masas está en estado de reposo, haga clic con el botón derecho en el panel del espectro de masas y, a continuación, haga clic en **Open File**.  
Aparecerá una ventana nueva, en la que se abrirá un panel de datos de espectro de masas por cada masa del método.
5. Haga clic con el botón derecho en uno de los paneles de datos y, a continuación, haga clic en **List Data**.  
Se abrirá un panel nuevo con todos los datos del espectro. Este panel contiene las pestañas Data List, Calibration Peak List y Peak List.
6. Abra la pestaña Calibration Peak List.

**Sugerencia:** Esta pestaña solo se muestra si está seleccionada la opción correspondiente para mostrarla. Para ver la pestaña Calibration Peak List, haga clic en **Tools > Settings > Appearance Options**. En la pestaña Miscellaneous, seleccione la casilla de verificación **Show Mass Calibration Peak List** y luego haga clic en **OK**.

---

7. Si las masas objetivo que aparecen en la lista de picos de calibración no coinciden con las masas mostradas, haga clic con el botón derecho en **Calibration Peak List**, haga clic en la lista **Reference** correspondiente y, a continuación, haga clic en **Use as Reference**.
8. Revise los datos de la **Calibration Peak List**.

**Nota:** Si los valores de la columna **Width (Da)** son  $0,7 \pm 0,1$  Da para la resolución de la unidad o  $0,5 \pm 0,1$  Da para la resolución alta, la resolución es aceptable.

---

- Si la resolución es aceptable, continúe con el paso 14.
  - Si los valores no se encuentran dentro del intervalo de tolerancia necesario, continúe con el paso 9.
9. Cierre los paneles y, a continuación, en Tune Method Editor, abra la pestaña Resolution.
  10. Haga clic en **Advanced**.

Se abrirá el cuadro de diálogo Tabla de resoluciones. Este cuadro de diálogo enumera las masas pico de calibración y los valores de desviación de la resolución del análisis específico.
  11. En el caso de masas que no se ajusten al criterio de anchura de pico de  $0,7 \pm 0,1$  Da para la resolución de la unidad o de  $0,5 \pm 0,1$  Da para la resolución alta, ajuste la desviación de la forma siguiente:
    - Si el pico es demasiado ancho, aumente la desviación en 0,05 o menos.
    - Si el pico es demasiado estrecho, disminuya la desviación en 0,05 o menos.
  12. Haga clic en **Apply**.

Los cambios se guardan en el archivo InstrumentData.
  13. Haga clic en **Close**.
  14. Repita los pasos 1 a 8 para todos los picos de masa hasta que cada uno de los picos en la lista Calibration Peak List cumpla el criterio de anchura de pico de  $0,7 \pm 0,1$  Da para la resolución unitaria, o de  $0,5 \pm 0,1$  Da para la resolución alta.
  15. Haga clic en **Close**.

## Realizar una calibración de masas en el modo cuadrupolo

1. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
2. En la pestaña MS del Tune Method Editor, asegúrese de que la casilla de verificación **MCA** está seleccionada.
3. En el campo **Period Summary** de la sección **Cycles**, escriba 10.
4. Haga clic en **Start**.

Se abrirá un panel de espectros de masas en la parte inferior de la ventana Manual Tune.

5. Una vez que el espectrómetro de masas está en estado de reposo, haga clic con el botón derecho en el panel del espectro de masas y, a continuación, haga clic en **Open File**.  
Aparecerá una ventana nueva, en la que se abrirá un panel de datos de espectro de masas por cada masa del método.
6. Haga clic con el botón derecho en uno de los paneles de datos y, a continuación, haga clic en **List Data**.  
Se abrirá un panel nuevo en el que se muestran todos los datos del espectro. Este panel contiene las pestañas Data List, Calibration Peak List y Peak List.
7. Abra la pestaña Calibration Peak List.

---

**Sugerencia:** Esta pestaña solo se muestra si está seleccionada la opción correspondiente para mostrarla. Para ver la pestaña Calibration Peak List, haga clic en **Tools > Settings > Appearance Options**. En la pestaña Miscellaneous, seleccione la casilla de verificación **Show Mass Calibration Peak List** y luego haga clic en **OK**.

---

8. Revise los datos de la pestaña Calibration Peak List. Si el valor de la columna **Mass Shift (Da)** es superior a 0,1 Da para cualquiera de las masas, continúe con el paso siguiente. En caso contrario, habrá finalizado la calibración de masas.

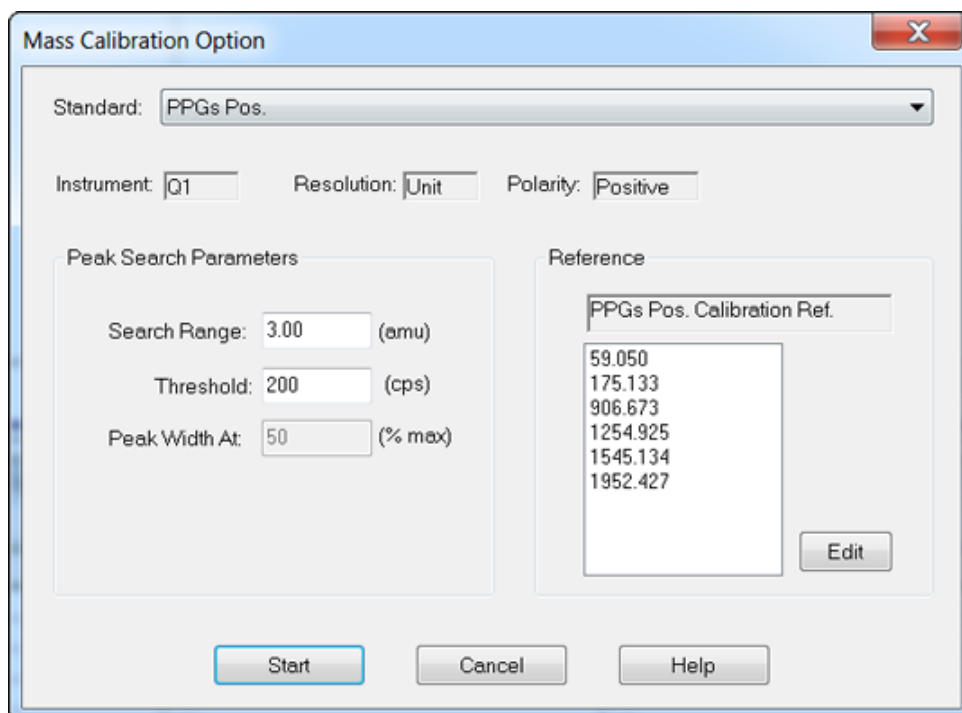
---

**Nota:** Las etiquetas de picos del gráfico son los valores de ápice, pero los valores de pico indicados en la columna **Found At** de la pestaña Calibration Peak List son valores de centroides. Si algún pico no es perfectamente simétrico, el valor de ápice y el del centroide para ese pico pueden ser ligeramente diferentes. Los valores de centroide deben ser lo más exactos posible para la calibración.

---

9. Haga clic en cualquier punto de uno de los paneles de espectro de masas.
10. Haga clic en **Tools > Calibrate from Spectrum**.  
Se abre el cuadro de diálogo Mass Calibration Option.

**Figura 1: Cuadro de diálogo Mass Calibration Option**



11. En la lista **Standard**, haga clic en **PPGs Pos.** o **PPGs Neg.** según la polaridad indicada por el método de adquisición utilizado.
12. Los parámetros predefinidos de búsqueda de picos son adecuados para la mayoría de los casos. Si desea modificarlos, haga clic en un campo y, a continuación, escriba los valores nuevos.

---

**Nota:** En espectrómetros de masas cuyo rango de masas sea superior, los picos de PPG 2000 pueden dar lugar a picos en los que el isótopo más intenso no sea el primero, lo que puede causar problemas de calibración. Si esto ocurre, estreche el rango de búsqueda a 0,8.

---

13. Compruebe que las masas que se enumeran en la lista Reference coincidan con las masas para las que se adquieren los datos. Si las masas coinciden, continúe en el paso siguiente. Si las masas no coinciden, haga lo siguiente:
  - a. Haga clic en **Edit**.  
Se abrirá el cuadro de diálogo Reference Table.
  - b. Haga coincidir las masas de la lista **Reference** con las masas para las que se adquieren los datos, seleccionando o deseleccionando las casillas de verificación de la columna **Use**.
  - c. Haga clic en **Update Ref.** para guardar los cambios.
  - d. Haga clic en **Close**.
14. Haga clic en **Start** para comenzar la calibración de masas.

- El software busca el pico más amplio del rango de búsqueda para cada masa y determina los valores de masa, intensidad y anchura de pico.
  - El software compara la masa con la masa prevista y determina el desplazamiento, si lo hay, compara la anchura de pico con la anchura de pico objetivo y compara asimismo la intensidad con la calibración anterior.
  - El software muestra los resultados de la calibración de masas en un gráfico y en un informe.
15. Si el software no ha seleccionado el pico correcto para la masa objetivo, excluya el punto de la calibración.

---

**Sugerencia:** Haga clic con el botón derecho en el punto que vaya a excluir y, a continuación, haga clic en **Exclude**.

---

16. Haga clic en **Window** y, a continuación, en los resultados de calibración. Se muestra una versión en texto del informe de calibración.
17. En la ventana Calibration report, realice una de las siguientes acciones:
- Para actualizar los valores de las masas modificadas y agregar los valores de cualquiera de las masas nuevas a la calibración de masas existente, haga clic en **Update Mass Calibration**. Solo se sobrescribirán los valores de la calibración existente de las masas que se hayan calibrado.
  - Para reemplazar por completo las masas y los valores existentes por las masas y los valores nuevos, haga clic en **Replace Mass Calibration**. Todos los valores de la calibración existentes se sobrescribirán y aquellas masas que no se hayan calibrado se eliminarán de la tabla de calibración.
18. Para que los cambios realizados en la calibración de masas tengan efecto, haga clic en **Save**.
19. Haga clic en **Close**.
20. Lleve a cabo un MCA de 10 análisis para comprobar la calibración.

---

**Nota:** Repita el procedimiento de calibración, si es necesario.

---

## Calibración manual del espectrómetro de masas en el modo LIT

Para calibrar el espectrómetro de masas en el modo LIT, lleve a cabo una calibración de masas de las velocidades de análisis en los modos positivo y negativo.

Siga los procedimientos en el orden especificado:

1. [Calibración manual del espectrómetro de masas en el modo LIT](#)
2. [Realizar una calibración de masas en el modo LIT](#)

## Seleccionar el método de adquisición para la calibración manual en el modo LIT

1. Infunda Agilent Mix o PPG 3000 a una velocidad de 5 a 10 µl/min.
2. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
3. (sistemas 3200MD QTRAP). Cree un método de adquisición de resolución mejorada adecuado a una velocidad de análisis seleccionada o haga clic en **File > Open**.
4. En la lista **Files**, seleccione un método en **API Instrument > Acquisition Methods > QTRAP3200**.
5. Haga clic en **OK**.  
En Tune Method Editor, se muestran los detalles del método seleccionado.
6. Seleccione un proyecto nuevo de la lista de proyectos y, a continuación, guarde los datos del método.

## Realizar una calibración de masas en el modo LIT

1. En la pestaña MS del Tune Method Editor, asegúrese de que la casilla de verificación **MCA** está seleccionada.
2. En la pestaña MS, seleccione la polaridad y la velocidad de análisis.
3. En la sección de la pestaña **MSPeriod Summary**, escriba **Cycles50** en el campo .
4. Haga clic en **Start**.  
Se abrirá un panel de espectros de masas en la parte inferior de la ventana Manual Tune.
5. Cuando el icono MS esté inactivo, haga clic con el botón derecho en el panel de espectros de masas y, a continuación, haga clic en **Open File**.  
Se abrirá una ventana nueva con cada ion de interés en un panel independiente.
6. Haga clic con el botón derecho en uno de los paneles de datos y, a continuación, haga clic en **List Data**.  
Se abrirá un panel nuevo en el que se muestran todos los datos del espectro. Este panel contiene las pestañas Data List, Calibration Peak List y Peak List.
7. Abra la pestaña Calibration Peak List.

---

**Sugerencia:** Esta pestaña solo se muestra si está seleccionada la opción correspondiente para mostrarla. Para ver la pestaña Calibration Peak List, haga clic en **Tools > Settings > Appearance Options**. En la pestaña Miscellaneous, seleccione la casilla de verificación **Show Mass Calibration Peak List** y luego haga clic en **OK**.

---

8. Haga clic con el botón derecho en la tabla Calibration Peak List y, en el menú contextual, asegúrese de que se ha seleccionado la tabla de referencia correcta.  
Si la tabla de referencia correcta no está seleccionada, seleccione la tabla de referencia correcta y haga clic en **Use as Reference**.

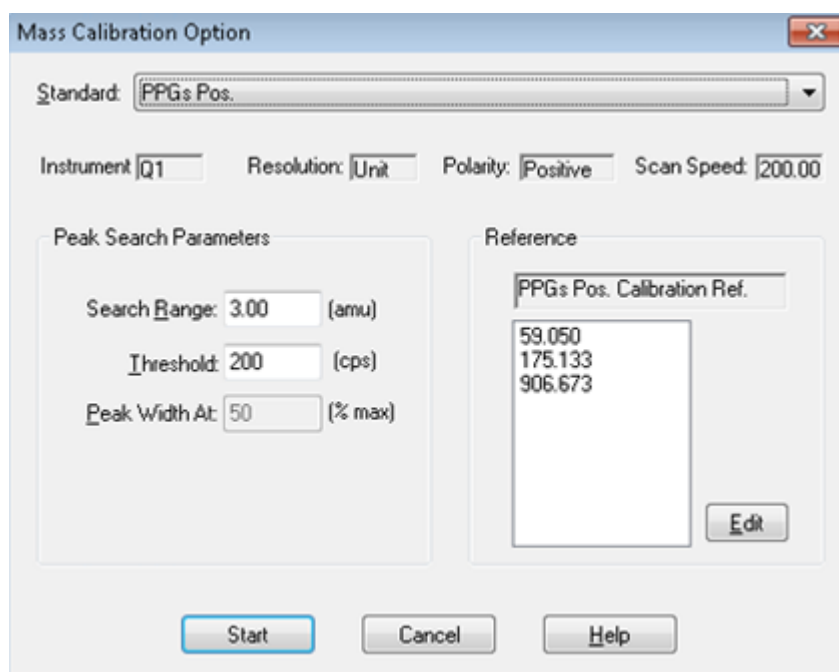
**Nota:** Si no se muestran todas las masas en la pestaña **Calibration Peak List**, haga clic con el botón derecho del ratón en la tabla Calibration Peak List. En el menú contextual, coloque el cursor en la tabla de referencia que se esté utilizando y, a continuación, en el submenú haga clic en **Edit Reference Table**. En el cuadro de diálogo Reference Table Edit, marque la casilla de verificación **Use** correspondiente a las masas que se deben mostrar en la pestaña Calibration Peak List y haga clic en **Update Ref**.

9. Revise los datos de la pestaña Calibration Peak List. Si el valor de la columna **Mass Shift (Da)** es superior a 0,1 Da para cualquiera de las masas, continúe con el paso siguiente. En caso contrario, habrá finalizado la calibración de masas.

**Nota:** Las etiquetas de picos del gráfico son los valores de ápice, pero los valores de pico indicados en la columna **Found At** de la pestaña Calibration Peak List son valores de centroides. Si algún pico no es perfectamente simétrico, el valor de ápice y el del centroide para ese pico pueden ser ligeramente diferentes. Los valores de centroide deben ser lo más exactos posible para la calibración.

10. Haga clic en cualquier punto de uno de los paneles de espectro de masas.
11. Haga clic en **Tools > Calibrate from Spectrum**.  
Se abre el cuadro de diálogo Mass Calibration Option.

**Figura 2: Cuadro de diálogo Mass Calibration Option**



12. En la lista **Standard**, si se ha utilizado PPG como solución estándar, haga clic en **PPGs Pos. LIT Ref.** o **PPGs Neg. LIT Ref.** en función de la polaridad indicada por el método de adquisición utilizado.
13. Para cambiar los valores de Peak Search Parameters, haga clic en un campo y, a continuación, escriba los nuevos valores.

Los valores predefinidos de Peak Search Parameters son adecuados para la mayoría de los casos.

14. Compruebe que las masas enumeradas en la lista **Reference** coinciden con las masas para las que se adquieren los datos.

Si las masas coinciden, continúe en el paso siguiente. Si las masas no coinciden, realice los pasos siguientes:

- a. Haga clic en **Edit**.

Se abrirá el cuadro de diálogo Reference Table.

- b. Haga coincidir las masas de la lista **Reference** con las masas para las que se adquieren los datos, seleccionando o deseleccionando las casillas de verificación de la columna **Use**.
- c. Haga clic en **Update Ref.** para guardar los cambios.

15. Haga clic en **Start** para comenzar la calibración de masas.

- El software busca el pico más amplio del rango de búsqueda para cada masa y determina los valores de masa, intensidad y anchura de pico.
- El software compara la masa con la masa prevista y determina el desplazamiento, si lo hay, compara la anchura de pico con la anchura de pico objetivo y compara asimismo la intensidad con la calibración anterior.
- El software muestra los resultados de la calibración de masas en un gráfico y en un informe.

---

**Nota:** No utilice los indicadores del gráfico de anchuras de pico intermedias, es decir, las líneas discontinuas. Estos indicadores se han creado para los análisis de cuádrupolos y no se aplican a los análisis de LIT.

---

16. Haga clic en **Window** y, a continuación, en los resultados de calibración.  
Se muestra una versión en texto del informe de calibración.
17. Revise los valores de variación de la pendiente. Deben ser de  $1,000 \pm 0,002$ . Dado que el punto de datos más bajo no puede tener pendiente, se mostrará **N/A** para este punto.
18. Si la diferencia es superior a 0,002, no calibre el espectrómetro de masas. Póngase en contacto con el soporte de SCIEX en [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support).
19. Si los valores de variación de la pendiente son correctos, vaya a la ventana del informe de calibración.
20. En la ventana Calibration report, realice una de las siguientes acciones:
  - Para actualizar los valores de las masas modificadas y agregar los valores de cualquiera de las masas nuevas a la calibración de masas existente, haga clic en **Update Mass Calibration**. Solo se sobrescribirán los valores de la calibración existente de las masas que se hayan calibrado.
  - Para reemplazar por completo las masas y los valores existentes por las masas y los valores nuevos, haga clic en **Replace Mass Calibration**. Todos los valores de la












calibración existentes se sobrescribirán y aquellas masas que no se hayan calibrado se eliminarán de la tabla de calibración.

21. Para que los cambios realizados en la calibración de masas tengan efecto, haga clic en **Save**.
22. Haga clic en **Close**.
23. Lleve a cabo un MCA de 10 análisis para comprobar la calibración.

**Nota:** Repita el procedimiento de calibración, si es necesario.

## Iconos de modo de Ajuste y calibración

Icono	Nombre	Descripción
	<b>Calibrate from spectrum</b>	Abre el cuadro de diálogo Mass Calibration Option y utiliza el espectro activo para calibrar el espectrómetro de masas.
	<b>Manual Tune</b>	Abre el Manual Tune Editor.
	<b>Compound Optimization</b>	Optimiza un compuesto mediante una infusión de FIA.
	<b>Instrument Optimization</b>	Verifica el rendimiento del instrumento, ajusta la calibración de masas o la configuración del espectrómetro de masas.
	<b>View Queue</b>	Muestra la cola de muestras.
	<b>Instrument Queue</b>	Muestra un instrumento remoto.
	<b>Status for Remote Instrument</b>	Muestra el estado de un instrumento remoto.
	<b>Reserve Instrument for Tuning</b>	Reserva el instrumento para el ajuste y la calibración.
	<b>IDA Method Wizard</b>	Inicia el IDA Method Wizard.

# Contacto

---

## Formación del cliente

- En América del Norte: [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- En Europa: [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- Fuera de la UE y América del Norte, visite [sciex.com/education](https://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](https://sciex.com) o póngase en contacto con nosotros de una de las siguientes formas:

- [sciex.com/contact-us](https://sciex.com/contact-us)
- [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support)

## Ciberseguridad

Para obtener las indicaciones sobre ciberseguridad más recientes para los productos SCIEX, visite [sciex.com/productsecurity](https://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.

---

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

---