

Sistemas SCIEX 4500MD

Guía de usuario del sistema



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



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

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



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



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.

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.

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.



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



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	11
Información general de seguridad.....	11
Símbolos y convenciones de la documentación.....	11
Cumplimiento normativo.....	12
Canadá.....	12
Europa.....	12
Estados Unidos.....	13
Internacional.....	13
Precauciones eléctricas.....	14
Alimentación.....	14
Conductor de protección de tierra.....	14
Precauciones químicas.....	15
Fluidos seguros para el sistema.....	16
Precauciones de ventilación.....	17
Precauciones físicas.....	18
Precauciones medioambientales.....	18
Entorno electromagnético.....	19
Desmantelamiento y eliminación.....	20
Capítulo 2: Uso y función	21
Uso previsto.....	21
Limitaciones de uso.....	21
Descripción.....	21
Personal cualificado.....	21
Directrices de control de calidad.....	22
Procesos de laboratorio.....	22
Muestras de control de calidad.....	22
Patrones internos.....	23
Referencias.....	23
Uso y modificación del equipo.....	23
Condiciones de laboratorio.....	24
Condiciones medioambientales seguras.....	24
Especificaciones de rendimiento.....	25
Capítulo 3: Procedimientos de instalación y requisitos especiales	26
Ajuste de la posición de la bomba de jeringa integrada.....	26
Conexión de la válvula desviadora.....	30
Conexión de la válvula desviadora en modo de inyector.....	31
Conexión de tubos de la válvula desviadora en modo de desviador.....	32
Instalación de la fuente de iones.....	34

Preparación de la instalación	34
Instalación de la sonda	35
Conexión del tubo de la fuente de iones	37
Instalación de la fuente de iones en el espectrómetro de masas	38
Capítulo 4: Principios de funcionamiento	40
Descripción general del sistema	40
Descripción general del espectrómetro de masas	41
Descripción general de la fuente de iones	44
Descripción general del software Analyst MD	50
Teoría de funcionamiento	56
Modo ESI	57
Modo APCI	58
Gestión de datos	58
Teoría de funcionamiento: software	59
Ventana del software Analyst MD	59
Modos del software Analyst MD	60
Análisis cuantitativo	61
Integración	62
Tablas de resultados	62
Curvas de calibración	62
Tipos de regresión	63
Capítulo 5: Características de rendimiento y especificaciones	64
Especificaciones del espectrómetro de masas	64
Capítulo 6: Instrucciones de funcionamiento: Flujos de trabajo para la muestra	68
Capítulo 7: Instrucciones de funcionamiento — Espectrómetro de masas y fuente de iones	74
Inicio del sistema	74
Optimización de la fuente de iones	75
Optimización de la sonda TurbolonSpray	76
Optimización de sonda APCI	81
Sugerencias de optimización	85
Procedimiento de calibración del espectrómetro de masas	86
Restablecimiento del espectrómetro de masas	87
Apagado y ventilación del sistema	87
Capítulo 8: Instrucciones de funcionamiento: Perfiles de hardware y proyectos	89
Perfiles de hardware	89
Creación de un perfil de hardware	89
Adición de dispositivos a un perfil de hardware	94
Edición de dispositivos en un perfil de hardware	96
Solución de problemas de activación del perfil de hardware	96
Proyectos y subproyectos	97

Tabla de contenido

Acerca de los subproyectos	97
Creación de proyectos y subproyectos	98
Crear subproyectos	99
Copia de subproyectos	100
Cambio entre proyectos y subproyectos	100
Carpetas del proyecto instaladas	101
Capítulo 9: Instrucciones de funcionamiento: ajuste y calibración	102
Acerca del ajuste y la calibración	102
Copia de seguridad de la carpeta API Instrument	103
Copia de seguridad de parámetros del instrumento	103
Restauración de parámetros del instrumento	103
Ajuste y calibración automáticos	104
Verificación del rendimiento del instrumento	104
Cuadro de diálogo Verifying or Adjusting Performance	106
Resumen de resultados	106
Recuperación de la carpeta API Instrument	107
Capítulo 10: Instrucciones de funcionamiento: Optimización automática	108
Acerca de la optimización automática	109
Tipos de métodos de introducción de muestras	109
Optimización automática de un analito mediante la infusión	110
Confirmación de la presencia de compuestos	111
Realización de una optimización MS/MS y MS automática utilizando la infusión con un ion precursor conocido y un ion producto desconocido	113
Revisión de los resultados de optimización	116
Optimización automática de un analito mediante FIA	117
Capítulo 11: Instrucciones de funcionamiento: Métodos de adquisición	124
Creación de un método de adquisición utilizando el Acquisition Method Editor	124
Acerca de los métodos de LC	125
Creación de métodos de espectrometría de masas	125
Adición o eliminación de dispositivos de los métodos de adquisición	132
Modificación de los métodos de adquisición	138
Técnicas de análisis	141
Tipos de análisis del modo cuadrupolo	141
Tipos de análisis en modo de LIT	142
Acerca de la adquisición de datos de espectro	143
Capítulo 12: Instrucciones de funcionamiento: Lotes	144
Creación y envío de lotes	144
Configuración de las opciones de cola	144
Creación y envío de un lote	146
Envío de una muestra o conjunto de muestras	150
Cambio del orden de las muestras	150
Selección de la posición de los viales mediante la pestaña Locations (opcional)	150

Definición de los detalles de cuantificación en el Batch Editor (opcional).....	153
Equilibrado del sistema.....	153
Adquisición de datos.....	154
Importación de archivos de lotes.....	154
Sugerencias relativas al Batch Editor y al Acquisition Method Editor.....	156
Sugerencias para la solución de problemas sobre lotes.....	157
Detención de la adquisición de muestras.....	157
Capítulo 13: Instrucciones de funcionamiento: Análisis y exploración de datos.....	158
Descripción general de los datos de espectro y cromatográficos.....	158
Análisis de datos.....	159
Apertura de archivos de datos.....	159
Navegación por las muestras de un archivo de datos.....	160
Visualización de las condiciones experimentales.....	160
Visualización de los datos en tablas.....	160
Visualización de los datos cuantitativos básicos.....	162
Espectros.....	163
Cromatogramas.....	163
Visualización de TIC desde un espectro.....	164
Visualización de un espectro desde un TIC.....	164
XIC.....	165
BPC.....	168
Ajuste del umbral.....	170
Generación de TWC.....	170
Generación de XWC.....	171
Visualización de datos de DAD.....	171
Mostrar datos de ADC.....	172
Procesamiento de datos gráficos.....	172
Gestión de datos.....	172
Aplicación de zoom a un gráfico.....	174
Etiquetado de gráficos.....	175
Superposición y suma de espectros o cromatogramas.....	176
Ejecución de sustracciones de fondo.....	177
Ejecución de una sustracción de fondo en un espectro.....	177
Desbloqueo de los intervalos.....	178
Algoritmos de suavización.....	179
Algoritmo de suavización.....	179
Algoritmo de suavización gaussiana.....	179
Suavizado de datos.....	180
Suavizado de datos mediante el algoritmo de suavizado.....	180
Suavizado de datos mediante el algoritmo de suavizado gaussiano.....	181
Creación de centroides de los datos.....	181
Almacenamiento y apertura de archivos de datos procesados.....	183
Guardar un archivo de datos procesados.....	183
Apertura de un archivo de datos procesados.....	184
Trabajo con gráficos de contorno.....	184
Visualización de un gráfico de contorno.....	185
Selección de una región en un gráfico de contorno.....	185

Tabla de contenido

Definición de la intensidad y la absorbencia en un gráfico de contorno	185
Cambio de los colores de un gráfico de contorno	186
Interpretación de fragmentos	186
Trabajo con la herramienta Fragment Interpretation	186
Visualización de las diferencias entre las fórmulas de los fragmentos	188
Bases de datos de biblioteca	189
Cambio entre bases de datos de biblioteca existentes	189
Conexión a una base de datos de biblioteca local	191
Conexión a una base de datos de biblioteca de servidor	192
Trabajo con registros de biblioteca	194
Búsqueda de un espectro similar	196
Consejos de búsqueda en biblioteca	198
Capítulo 14: Instrucciones de funcionamiento: Análisis y procesamiento de datos	
cuantitativos	201
Análisis cuantitativo	201
Métodos de cuantificación	202
Build Quantitation Method	202
Asistente de cuantificación	202
Cuantificación rápida	202
Métodos cuantitativos y tablas de resultados	202
Definición de la disposición de las tablas de resultados	208
Ordenación de los datos en las tablas de resultados	209
Revisión de picos e integración manual de picos	212
Revisión de picos	213
Integración manual de picos	217
Curvas de calibración	218
Visualización de curvas de calibración	219
Superposición de curvas de calibración	220
Estadísticas de muestras	221
Visualización de estadísticas de patrones y QC	221
Gráficos de métricas	221
Generación de gráficos de métrica	222
Capítulo 15: Software Reporter	226
Interfaz del usuario de Analyst Reporter	227
Generación de informes	229
Capítulo 16: Información de servicio técnico y mantenimiento: Espectrómetro de	
masas	231
Calendario de mantenimiento recomendado	231
Limpieza de las superficies	234
Vaciado de la botella de drenaje de escape de la fuente	235
Limpieza de la parte delantera	237
Síntomas de la contaminación	237
Materiales necesarios	238
Prácticas correctas de limpieza	239

Preparación del espectrómetro de masas	240
Limpieza de la placa de chapa	241
Limpieza de la parte delantera de la placa del orificio	242
Puesta en servicio del espectrómetro de masas	243
Almacenamiento y manipulación	243
Inspección del nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar	244
Servicio técnico y mantenimiento: fuente de iones	244
Manipulación de la fuente de iones	246
Extracción de la fuente de iones	247
Limpieza de las superficies	248
Limpieza de la sonda	248
Extracción de la sonda	249
Sustitución del electrodo	249
Sustitución de la aguja de descarga de corona	251
Sustitución del tubo de muestra	253
Capítulo 17: Solución de problemas del espectrómetro de masas	254
Apéndice A: Parámetros de los sistemas SCIEX 4500MD	260
Apéndice B: Tensiones y parámetros de la fuente	264
Parámetros de la sonda TurbolonSpray	264
Parámetros de la sonda APCI	265
Posición de la sonda	265
Composición de los disolventes	266
Apéndice C: Soluciones e iones de calibración	267
Apéndice D: Iconos de la barra de herramientas	269
Apéndice E: Teoría de funcionamiento: fuente de iones	279
Modo de ionización por electropulverización	279
Modo APCI	280
Región de ionización de APCI	283
Apéndice F: optimización manual del compuesto	285
Acerca de la optimización manual del compuesto	286
Acerca de los tipos de análisis	286
Optimización manual de un analito	286
Confirmación de la presencia de compuestos	287
Optimización de parámetros específicos de MS	289
Determinación de los iones producto para la optimización	290
Optimización del potencial de salida de la celda de colisión de cada ion producto ...	292
Optimización manual de los parámetros de la fuente de iones y del gas	292
Preparación de la fuente de iones	293

Tabla de contenido

Optimización de los parámetros de la fuente de iones	293
Parámetros avanzados	294
Optimización de AF2	294
Acerca de la dispersión de energías de colisión (CES)	294
Apéndice G: Menús contextuales	296
Editor de lotes	296
Estados de cola y de dispositivo	297
Estados de cola	297
Visualización de los iconos de estado de instrumento y dispositivo	299
Cola	300
Menú contextual de los paneles de gráficos de contorno	301
Menú contextual del panel Show File Information	301
Paneles de espectro	302
Paneles de cromatograma	303
Tabla de resultados	304
Revisión de picos	305
Calibration Curve	305
Apéndice H: Glosario de símbolos	307
Apéndice I: Glosario de advertencias	313
Contacto	315
Formación del cliente	315
Centro de aprendizaje en línea	315
Soporte SCIEX	315
Ciberseguridad	315
Documentación	315

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.

Precauciones y limitaciones de funcionamiento

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.

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
 - CAN/CSA C22.2 N.º 61010-2-101

Europa

- **Productos sanitarios para diagnóstico in vitro (IVD):** Reglamento para diagnósticos in vitro 2017/746
- **Compatibilidad Electromagnética (CEM):** Directiva sobre Compatibilidad Electromagnética 2014/30/UE según lo establecido en las siguientes normas:
 - EN 61326-1
 - EN 61326-2-6
 - 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
- EN 61010-2-101
- **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 y 2015/863/EU

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
 - IEC 61010-2-101

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
- IEC 61010-2-101

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 la sección [Características de rendimiento y especificaciones](#) o 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, banco opcional o bomba de vacío preliminar.

Conductor de protección de tierra

La alimentación debe incluir un conductor de protección de tierra correctamente instalado. El conductor de protección de tierra debe ser instalado o 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.

Precauciones y limitaciones de funcionamiento

- 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 [Materiales necesarios](#).



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 %
- **Tampones**
 - Acetato de amonio; menos de 100 mM
 - Formato de amonio; menos de 100 mM
- **Ácidos y bases**
 - Ácido fórmico; menos del 1 %
 - Ácido acético; menos del 1 %
 - Ácido trifluoroacético (TFA); menos del 1 %
 - Ácido heptafluorobutírico (HFBA); menos del 1 %
 - Amoníaco/hidróxido de amonio; menos del 1 %

Precauciones de ventilación

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

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



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



¡ADVERTENCIA! 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 por superficies calientes. Deje que la fuente de iones Turbo V 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 carga pesada. Utilice un dispositivo de elevación mecánico para levantar y mover el espectrómetro de masas. Si se debe mover el espectrómetro de masas de forma manual, se necesitan al menos seis personas para moverlo de forma segura. 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.

PRECAUCIÓN: Posible contaminación del sistema. Si se utiliza un generador de gas, consulte la documentación adjunta a este para obtener información del fabricante sobre el uso de un generador de gas con un compresor. Por ejemplo, si se utiliza un generador de gas con un compresor, los hidrocarburos pueden entrar en el espectrómetro de masas, si estos están presentes en el entorno.

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).

PRECAUCIÓN: Posible resultado erróneo. No utilice este dispositivo cerca de fuentes de radiación electromagnética intensas (CEM) (por ejemplo, fuentes de RF intencional sin blindaje), ya que la radiación CEM puede afectar a un funcionamiento correcto.

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.

Precauciones y limitaciones de funcionamiento

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.

Uso previsto

El sistema de HPLC 4500MD es un sistema de cromatografía líquida-espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS) diseñado para identificar compuestos inorgánicos u orgánicos en muestras humanas mediante la ionización del compuesto objeto de investigación y la separación de los iones resultantes, en función de su masa, mediante un campo eléctrico. Se trata de un sistema para uso diagnóstico *in vitro*.

Limitaciones de uso

El sistema 4500MD se ha diseñado para utilizarse exclusivamente en un entorno de laboratorio clínico por personal de laboratorio cualificado y para uso profesional.

Descripción

El sistema 4500MD incluye los siguientes componentes:

- Espectrómetro de masas SCIEX Triple Quad 4500MD o un espectrómetro de masas QTRAP 4500MD con una fuente de iones Turbo V que utiliza la sonda TurbolonSpray o la sonda de ionización química a presión atmosférica (APCI), una bomba de vacío preliminar y una fuente de aire comprimido y nitrógeno.
- Ordenador y monitor suministrados por SCIEX con el software Analyst MD para optimización de instrumentos, desarrollo de métodos de adquisición y adquisición de datos, y el software MultiQuant MD para el procesamiento.

Nota: En China, solo hay disponibles espectrómetros de masas de triple cuadrupolo. Estos sistemas no admiten los tipos de análisis de trampa lineal de iones (LIT).

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.

Directrices de control de calidad

Todo laboratorio clínico que utilice un sistema de 4500MD debe cumplir los procedimientos que se ocupan de cuestiones como las siguientes, aunque sin limitarse a ellas: formación del operador, desarrollo y validación de ensayos, y auditorías externas del rendimiento de los ensayos del laboratorio.

Procesos de laboratorio

Verifique los métodos antes de su implementación en el uso clínico para la notificación de resultados^{2,5}. De la misma forma, establezca los procedimientos normalizados de trabajo (PNT) para los métodos analíticos para garantizar que los procesos preanalítico, analítico y postanalítico no se alejan de su uso previsto³. Por ejemplo, como mínimo debe haber un procedimiento operativo estándar para:^{3,4}

- Métodos de recolección de muestras
- Métodos de preparación de muestras
- Configuración y condiciones iniciales de cromatografía líquida
- Configuración y condiciones iniciales de calibración del espectrómetro de masas
- Cromatografía líquida y mantenimiento de espectrometría de masas
- Métodos de adquisición del espectrómetro de masas
- Métodos de preparación de lista de lotes de muestras
- Métodos de análisis de datos
- Revisión de datos
- Emisión de protocolos una vez analizados los datos

Es recomendable que los usuarios revisen manualmente todos los resultados de la integración para garantizar la calidad de los datos sin procesar y la exactitud de las integraciones de picos llevadas a cabo por el software Analyst MD. La revisión de los picos cromatográficos debe realizarla un profesional cualificado. Si el software Analyst MD no ha integrado correctamente un pico cromatográfico (por ejemplo, a consecuencia de la presencia de picos de elución cercanos, picos divididos, datos con ruido o señal de fondo elevada), las integraciones de picos se deben corregir según los procedimientos operativos estándar establecidos en el laboratorio para los métodos analíticos.

Muestras de control de calidad

Las muestras de control de calidad (QC) brindan resultados sobre el desempeño del método analítico y evalúan la integridad y validez de las muestras desconocidas analizadas dentro de la ejecución². Los datos de muestras de QC deben supervisarse a diario. Siga las directrices adecuadas para la inclusión de muestras de QC en una serie analítica.

Las muestras de control de calidad se pueden obtener de una fuente comercial con la documentación adecuada o de un grupo bien caracterizado de muestras de pacientes². Se recomienda incluir al menos dos muestras de control de calidad por cada serie analítica

de las muestras del paciente^{1,2}. Utilice el proceso de revisión de datos para confirmar que las muestras de control de calidad se encuentran dentro de los límites predefinidos para el método analítico utilizado. Los datos adquiridos en una serie analítica en el que los controles de calidad se encuentren fuera de los límites predefinidos podrían no ser válidos². Consulte los procedimientos operativos estándar del laboratorio.

Patrones internos

Los patrones internos son analitos que son análogos estructuralmente similares o analitos isotópicamente etiquetados estables que se agregan a todos los tipos de muestras (es decir, patrones, blancos, QC y desconocidas) a concentraciones conocidas y constantes para facilitar la cuantificación³. La intensidad de la señal del patrón interno se puede supervisar durante una serie analítica para confirmar la integridad del método analítico y la validez de una muestra concreta.

Los SOP deben incluir criterios para la evaluación de los analitos de patrones internos y las muestras de control de calidad. Las muestras que estén fuera de los criterios podrían indicar problemas con el rendimiento del método, sistema o muestra^{2,5}. Utilice los patrones internos (analitos isotópicamente etiquetados) para mediciones que impliquen decisiones críticas. La identificación de estos problemas con antelación permite al laboratorio investigar, corregir y repetir potencialmente el análisis en caso necesario^{2,5}.

Referencias

1. Guidance for Industry: Bioanalytical Method Validation; U.S. Department of Health and Human Services Food and Drug Administration; Center for Drug Evaluation (CDER) Centre for Veterinary Medicine (CVM), May 2001 BP
2. CLSI Standard C50–A–Vol. 27, No. 24—Mass Spectrometry in the Clinical Laboratory: General Principles and Guidance: Approved Guideline
3. ISO 17025: 2005—General requirements for the competence of testing and calibration laboratories
4. ISO 15189:2012 Medical laboratories-Requirements for quality and competence
5. CLSI document C62-A: Liquid Chromatography-Mass Spectrometry Methods; Approved Guideline Volume 34 Number 16, October 2014

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. Si se debe mover el espectrómetro de masas de forma manual, se necesitan al menos seis personas para moverlo de forma segura. 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.

Los términos de la garantía están disponibles en la página sciex.com/warranty. El sistema 4500MD tiene una vida útil prevista de 7 años desde la fecha de fabricación. Esta vida útil puede ampliarse si se siguen los procedimientos de mantenimiento programados.

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 15 °C a 30 °C (de 59 °F a 86 °F)

Con el tiempo, la temperatura debe mantenerse dentro de un intervalo de 4 °C (7.2 °F), con una velocidad de cambio de temperatura no superior a 2 °C (3.6 °F) por hora. Las fluctuaciones de temperatura ambiental que excedan estos límites pueden provocar cambios de masa en los espectros.

- Humedad relativa del 20 % a 80 %, sin condensación.

Procedimientos de instalación y requisitos especiales

3

El representante del servicio técnico de SCIEX instala y configura el sistema.

Esta sección incluye procedimientos para conectar y configurar el hardware y el software del sistema. Consulte estos procedimientos si es necesario mover, reinstalar o reconfigurar el 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.

Para obtener información sobre la instalación del software Analyst MD, consulte la *Guía de instalación del software*.

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.

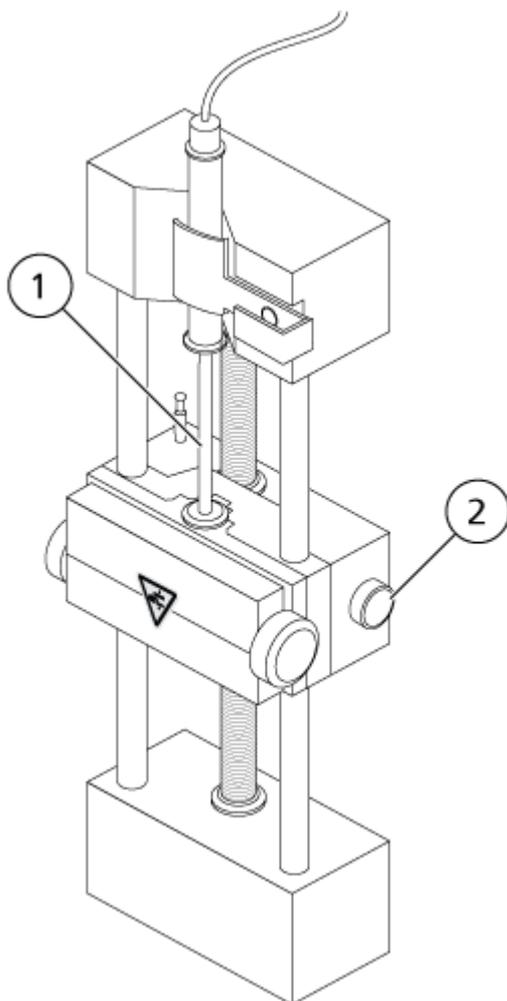


¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Asegúrese de que la jeringa esté correctamente asentada en la bomba de jeringa y de que el tope automático de la bomba de jeringa esté ajustado correctamente para no dañar ni romper la jeringa de cristal. En caso de que se rompa la jeringa, siga los procedimientos 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: [Descripción general del espectrómetro de masas](#).

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

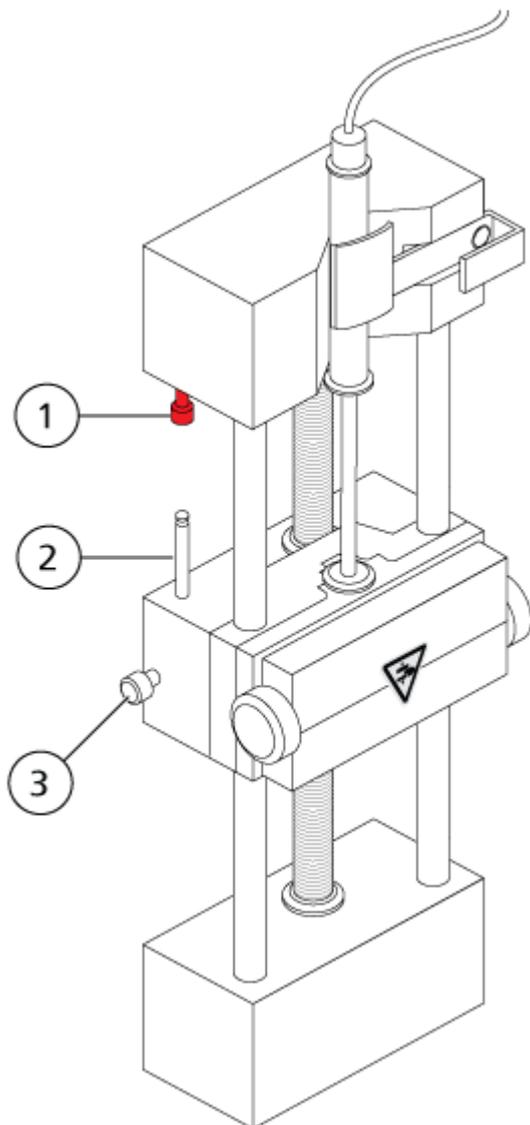
Figura 3-1: Bajada de la jeringa



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

3. 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.
4. 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.

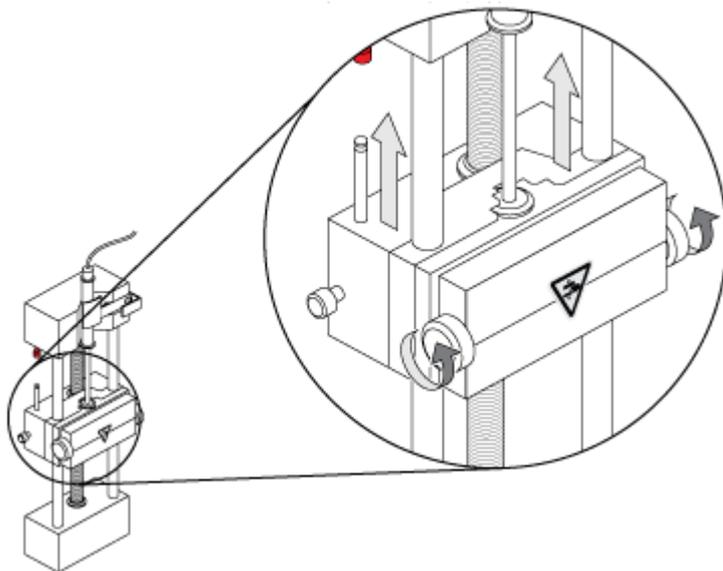
Figura 3-2: Tope automático de la jeringa



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.

5. Gire los tornillos de la bomba de jeringa para fijar la jeringa.

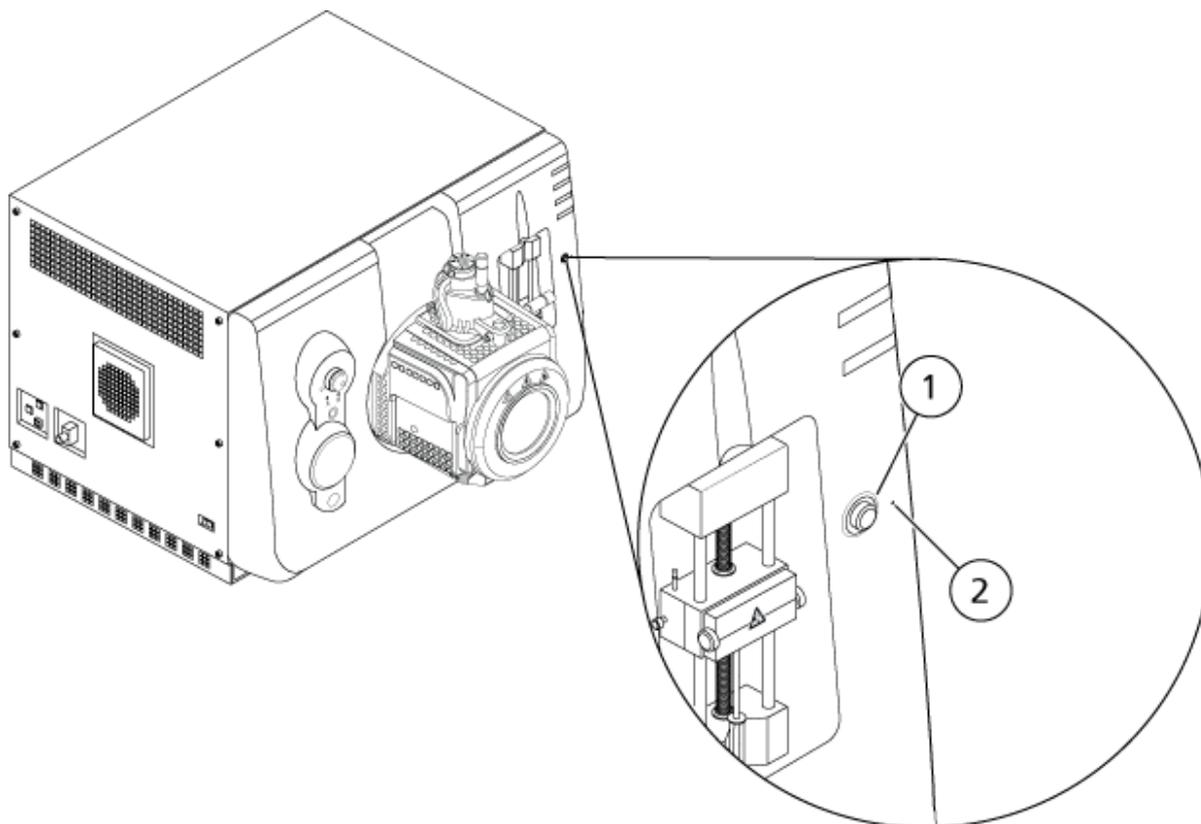
Figura 3-3: Tornillos de la bomba de jeringa



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

Nota: Para su uso manual posterior, una vez que el espectrómetro de masas esté en estado Ready, inicie el flujo pulsando el botón del espectrómetro de masas situado a la derecha de la jeringa. El LED situado junto al botón parpadea cuando la bomba de jeringa está en uso. El flujo de la bomba de jeringa también se puede controlar de forma automática mediante el software Analyst MD.

Figura 3-4: LED de la bomba de jeringa



Elemento	Descripción
1	Botón de activación y desactivación de la bomba de jeringa
2	LED de estado de la bomba de jeringa

7. En la barra de navegación del software Analyst MD, haga doble clic en **Manual Tuning**.
8. Haga clic en **Start Syringe**.
9. Para detener la bomba de jeringa, haga clic en **Stop Syringe**.

Conexión de la válvula desviadora

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

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

Conexión de la válvula desviadora en modo de inyector

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

Conecte la válvula para el modo de inyector.

Figura 3-5: Válvula desviadora, modo de inyector posición A

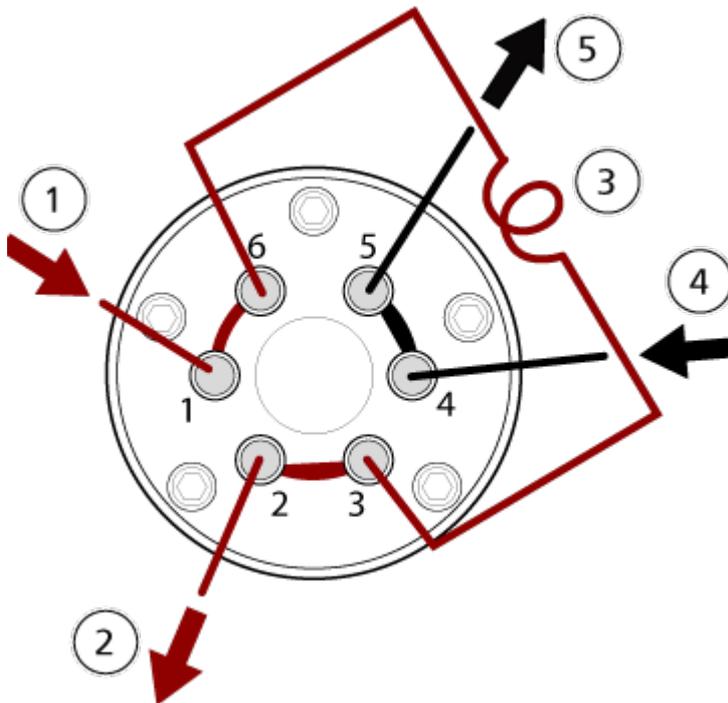
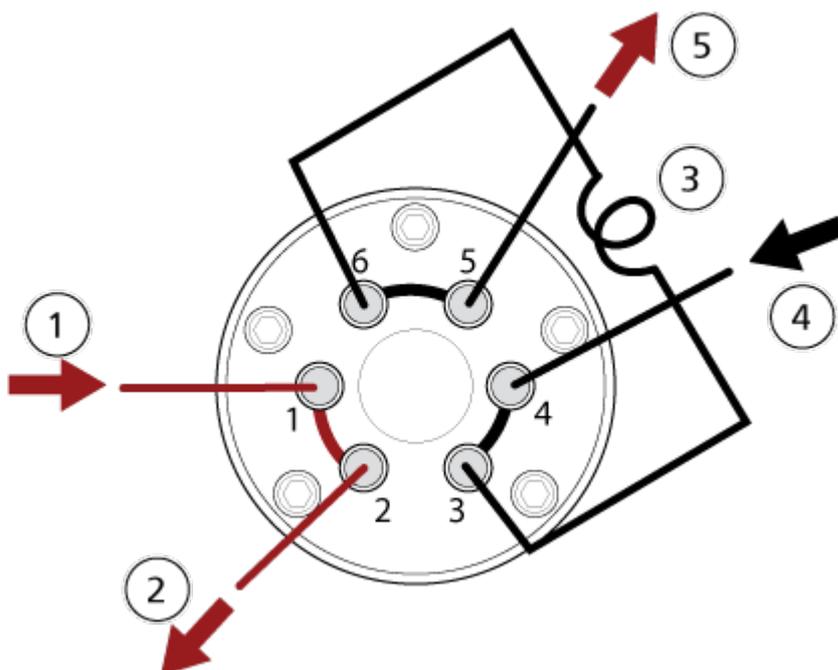


Figura 3-6: Válvula desviadora, modo de inyector posición B



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

Conexión de tubos de la válvula desviadora en modo de desviador

Si la válvula está en la posición A, el flujo de muestra va al espectrómetro de masas. Cuando la válvula cambia a la posición B, el flujo va a los residuos.

Conecte la válvula para el modo de desviador.

Figura 3-7: Válvula desviadora, modo de desviador posición A

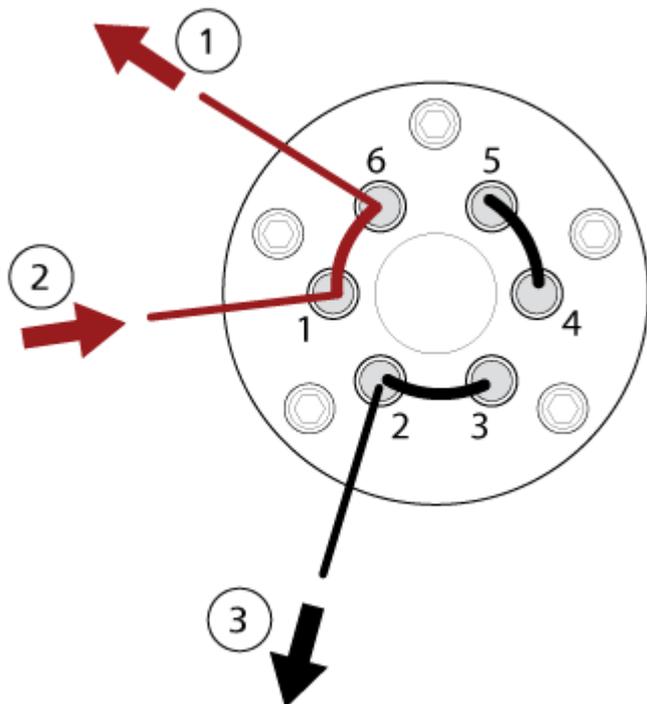
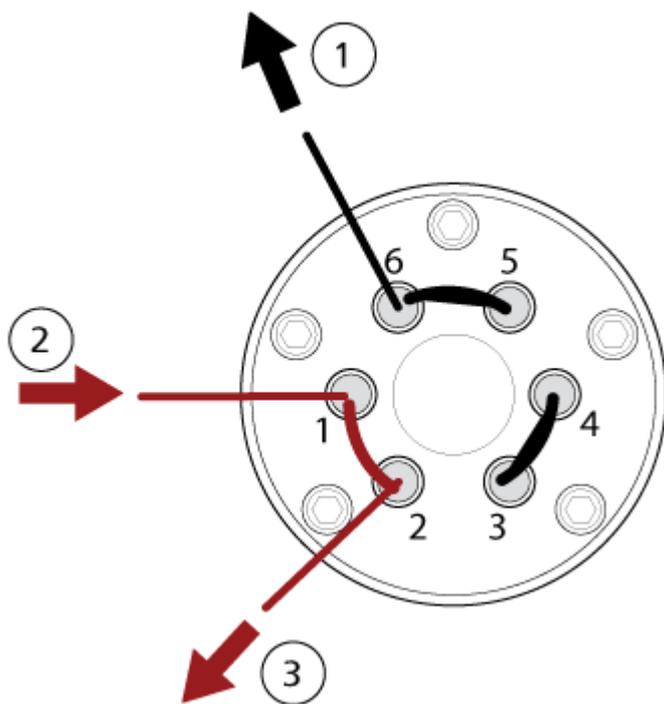


Figura 3-8: Válvula desviadora, modo de desviador posición B



Elemento	Descripción
1	Al espectrómetro de masas

Elemento	Descripción
2	Desde la columna
3	Salida de residuos

Instalación de la fuente de iones



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Instale la fuente de iones en el espectrómetro de masas como último paso de este procedimiento. Existe alta tensión cuando la fuente de iones está instalada.

PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. No levante ni transporte la fuente de iones con una mano. La fuente de iones está diseñada para levantarla o transportarla con dos manos, una mano a cada lado de la fuente de iones.

La fuente de iones se conecta a la interfaz de vacío y se mantiene en su posición gracias a dos pestillos de la fuente. El interior de la fuente de iones se puede observar a través de las ventanas que se encuentran en el lateral y en la parte delantera de la fuente de iones.

Cuando la fuente de iones está instalada, el software reconoce la fuente de iones y muestra su identificación.

En esta guía, el software que controla el espectrómetro de masas se denomina software de control.

Materiales necesarios

- Fuente de iones
- Sonda TurbolonSpray o sonda APCI
- Tubo PEEK rojo (calibre de 0,005 pulgadas)

Preparación de la instalación



¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Tenga cuidado al manipular el electrodo. La punta del electrodo es muy afilada.

Sugerencia: No deseche el paquete vacío. Utilícelo para guardar la fuente de iones cuando no la esté usando.

Ajuste la tuerca de ajuste del electrodo en la sonda para desplazar la punta del electrodo dentro del tubo del electrodo. Consulte las figuras [Figura 4-4](#) y [Figura 4-5](#).

Para obtener una estabilidad y rendimiento óptimos, la punta del electrodo debe extenderse entre 0,5 mm y 1,0 mm desde el extremo de la sonda. Consulte la sección [Optimización de la posición de la sonda TurbolonSpray](#) o [Optimización de la posición de la sonda APCI](#).

Instalación de la sonda



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Asegúrese de que la fuente de iones está totalmente desconectada del espectrómetro de masas antes de continuar.



¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Tenga cuidado al manipular el electrodo. La punta del electrodo es muy afilada.

PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. No permita que la punta del electrodo que sobresale ni la aguja de descarga de corona toquen ninguna pieza del alojamiento de la fuente de iones para evitar dañar la sonda.

PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. Asegúrese de que la punta de la aguja de descarga de corona no apunte hacia la abertura si se utiliza la sonda TurbolonSpray .

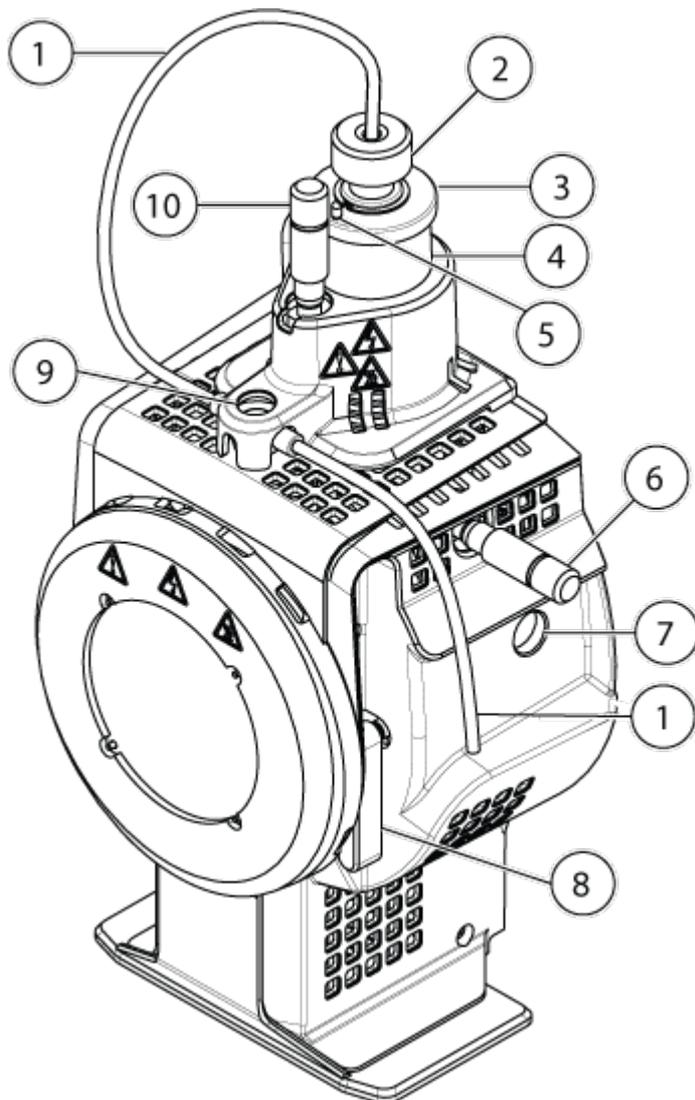
Procedimientos de condiciones previas

- [Extracción de la fuente de iones.](#)

La sonda no está previamente instalada en la fuente de iones. Extraiga siempre la fuente de iones del espectrómetro de masas antes de sustituir la sonda.

Nota: Si la sonda no está instalada correctamente en la fuente de iones, se desactiva el suministro de alta tensión para el espectrómetro de masas y el sistema de escape de la fuente.

Figura 3-9: Componentes de la fuente de iones



Elemento	Descripción
1	Tubo de muestra
2	Tuerca de ajuste del electrodo
3	Anillo de retención
4	Torre de sondeo
5	Tornillo de ajuste de la aguja de descarga de corona
6	Micrómetro empleado para colocar la sonda en el eje horizontal a fin de ajustar la sensibilidad de la fuente de iones
7	Puerto con ventana

Elemento	Descripción
8	Uno de los dos pestillos de la fuente que fijan la fuente de iones al espectrómetro de masas
9	Unión de conexión a tierra, situada bajo la cubierta de la fuente de iones
10	Micrómetro empleado para colocar la sonda en el eje vertical a fin de ajustar la sensibilidad de la fuente de iones

1. Asegúrese de que la punta de la aguja de descarga de corona apunte lejos de la abertura de la placa de chapa. Consulte la sección [Ajuste de la posición de la aguja de descarga de corona](#).
2. Inserte la sonda en la torre. Alinee el orificio de la sonda con el tornillo de ajuste de la aguja de descarga de corona en la parte superior de la fuente de iones. Consulte la sección [Componentes de la fuente de iones](#).
3. Presione suavemente la sonda para que los contactos se acoplen con los de la torre.
4. Gire el anillo de retención sobre la sonda, presiónelo para acoplar las roscas de la sonda con las roscas de la torre y, a continuación, apriete con la mano hasta el máximo.
5. Solo para la sonda APCI, asegúrese de que la punta de la aguja de descarga de corona apunte hacia la abertura en la placa de chapa. Consulte la sección [Ajuste de la posición de la aguja de descarga de corona](#).

Conexión del tubo de la fuente de iones



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. No derive la unión de conexión a tierra. La unión de conexión a tierra proporciona una conexión a tierra entre el espectrómetro de masas y el dispositivo de introducción de muestras.



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Para evitar fugas, compruebe que la tuerca del tubo de muestra está correctamente apretada antes de poner en funcionamiento este equipo.

Consulte la sección [Componentes de la fuente de iones](#).

1. Introduzca un trozo de 30 cm del tubo PEEK rojo en la tuerca del tubo de muestra.
2. Instale la tuerca del tubo de muestra en el puerto de la parte superior de la sonda y, a continuación, apriete la tuerca del tubo de muestra con las manos tanto como sea posible.
3. Conecte el otro extremo del tubo PEEK rojo a la unión de conexión a tierra en la fuente de iones.

Instalación de la fuente de iones en el espectrómetro de masas



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Instale la sonda en la fuente de iones antes de instalar la fuente de iones en el espectrómetro de masas.



¡ADVERTENCIA! Peligro de atrapamiento. Cuando instale la fuente de iones, tenga cuidado de no pillarse los dedos entre la fuente de iones y la interfaz de vacío.

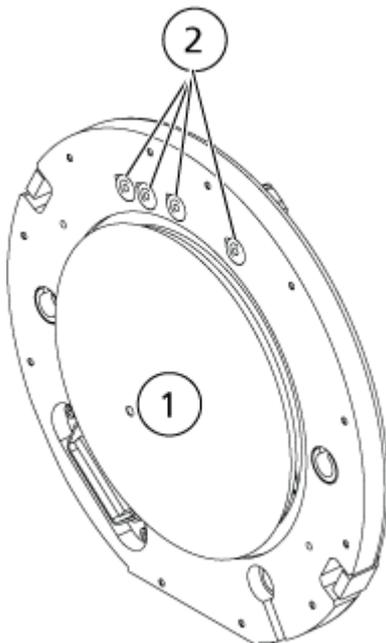
PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. No permita que la punta del electrodo que sobresale ni la aguja de descarga de corona toquen ninguna pieza del alojamiento de la fuente de iones para evitar dañar la sonda.

Nota: Si la sonda no está instalada correctamente en la fuente de iones, se desactiva el suministro de alta tensión para el espectrómetro de masas y el sistema de escape de la fuente.

Condiciones previas

- Asegúrese de que todas las juntas tóricas aparezcan en la interfaz de vacío.

Figura 3-10: Juntas tóricas en la interfaz de vacío



Elemento	Descripción
1	Placa de chapa
2	Juntas tóricas

1. Asegúrese de que los pestillos de la fuente a cada lado de la fuente de iones apunten hacia arriba, en la posición de las 12 en punto. Consulte la sección [Componentes de la fuente de iones](#).
2. Alinee la fuente de iones con la interfaz de vacío asegurándose de que los pasadores de guía de la fuente de iones estén alineados con las tomas de corriente de la interfaz de vacío.
3. Presione suavemente la fuente de iones contra la interfaz de vacío y, a continuación, gire los pestillos de la fuente de iones hacia abajo para fijar la fuente de iones en su sitio.
El espectrómetro de masas reconoce la fuente de iones y muestra la identificación de la fuente de iones en el software de control.
4. Conecte el tubo PEEK rojo del dispositivo de suministro de muestras a la unión de conexión a tierra del otro lado de la fuente de iones.

El sistema está destinado a identificar compuestos inorgánicos u orgánicos en muestras humanas.

El sistema está diseñado para la realización de análisis de moléculas pequeñas en muestras biológicas. Dependiendo de las propiedades de los analitos o la complejidad de la muestra inicial, la preparación de muestras puede incluir varios tipos de extracción o filtración antes de la extracción de analitos en una solución. La muestra se separa con un cromatograma líquido. Las fracciones separadas se introducen posteriormente en un espectrómetro de masas para realizar una separación adicional basada en la masa molecular de los compuestos.

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

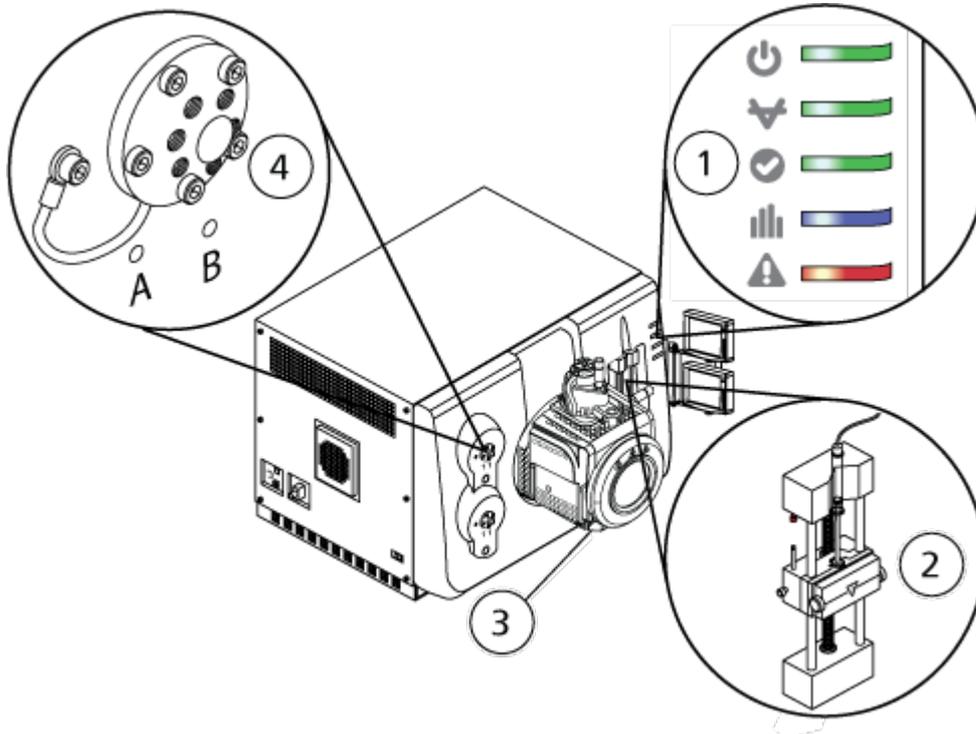
Descripción general del sistema

El sistema 4500MD incorpora los componentes siguientes:

- Un espectrómetro de masas SCIEX Triple Quad 4500MD o un espectrómetro de masas 4500MD QTRAP con una bomba de vacío preliminar y una fuente de aire comprimido y nitrógeno.
- Una fuente de iones Turbo V que use la sonda TurbolonSpray o la sonda de ionización química a presión atmosférica (APCI).
- Un ordenador y un monitor suministrados por SCIEX con el software Analyst MD para la optimización de los instrumentos, el desarrollo de métodos de adquisición y la adquisición y el procesamiento de datos. Para informarse de las especificaciones y los requisitos del ordenador, consulte el documento *Guía de instalación del software* para Analyst MD.

Descripción general del espectrómetro de masas

Figura 4-1: Vista frontal



Elemento	Descripción	Materiales principales	Consulte
1	Símbolos del panel	Plástico	Símbolos del panel.
2	Bomba de jeringa	Pintura sobre acero (cuerpo), acero inoxidable (rieles), latón, Cu, Sn, Pb (rodamientos)	Ajuste de la posición de la bomba de jeringa integrada
3	Fuente de iones	N/A	Descripción general de la fuente de iones
4	Válvula desviadora	Acero inoxidable	Conexión de la válvula desviadora.

Símbolos del panel

La tabla siguiente describe los LED de estado del espectrómetro de masas.

Principios de funcionamiento

Tabla 4-1: 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).
	Azul	Scanning	Se ilumina cuando el sistema está adquiriendo datos.
	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.

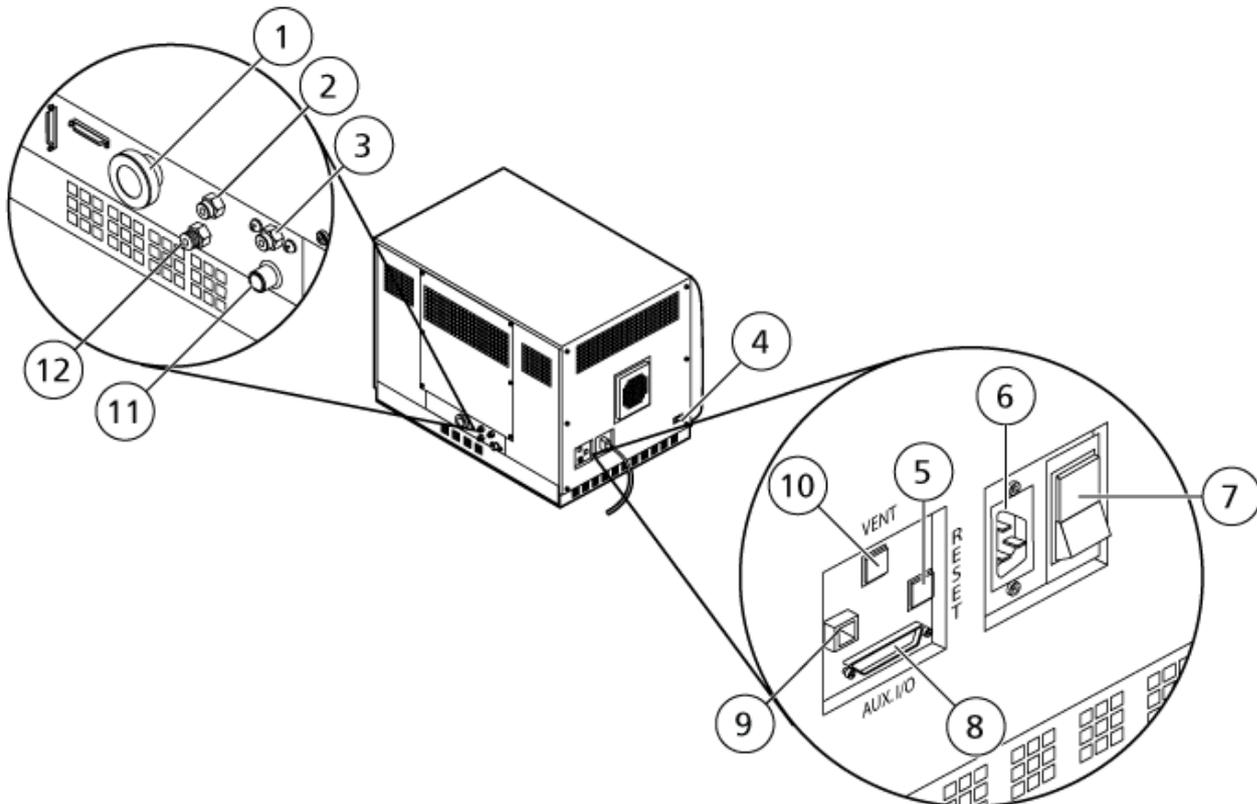
Conexiones

La siguiente figura muestra la ubicación de las conexiones del espectrómetro de masas, incluidas las ubicaciones de los botones **RESET** y **VENT** y del interruptor de corriente del espectrómetro de masas.



¡ADVERTENCIA! Peligro de lesiones personales: Tenga cuidado al trabajar con líneas de gas a presión. Si no se hace, podrían sufrirse lesiones.

Figura 4-2: Vistas trasera y lateral



Elemento	Descripción	Materiales principales	Para obtener más información
1	Conexión de vacío de la bomba de vacío preliminar	Aluminio (conector de manguera), acero con plancha de zinc (abrazadera de manguera)	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico (FSE). Esta conexión no puede ser reparada por el usuario.
2	Suministro de aire (gas 1/gas 2)	Plástico	Consulte la <i>Guía de planificación del centro</i> .
3	Suministro de escape de la fuente	Plástico	Consulte Sistema de escape de la fuente y el documento <i>Guía de planificación del centro</i> .
4	Conexión de comunicación de la fuente	Aluminio	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico (FSE).

Principios de funcionamiento

Elemento	Descripción	Materiales principales	Para obtener más información
5	Botón RESET	Plástico	Consulte la sección Restablecimiento del espectrómetro de masas .
6	Conexión de alimentación	Aluminio/plástico	Consulte la sección Inicio del sistema o Apagado y ventilación del sistema .
7	Interruptor de corriente del espectrómetro de masas <ul style="list-style-type: none">• Arriba = Encendido• Abajo = Apagado	Plástico	Consulte la sección Inicio del sistema o Apagado y ventilación del sistema .
8	Conexión E/S auxiliar	Chapa metálica (galvanizada)	Consulte el documento <i>Guía de configuración de dispositivos periféricos</i> .
9	Conexión Ethernet, conecta el espectrómetro de masas y el ordenador.	Chapa metálica (galvanizada)	Póngase en contacto con un representante del servicio técnico (FSE).
10	Botón VENT	Plástico	Consulte la sección Inicio del sistema o Apagado y ventilación del sistema .
11	Residuos de escape de la fuente, a la botella de drenaje de escape de la fuente	Acero inoxidable	Consulte el documento: <i>Guía de planificación del centro</i> .
12	Suministro de gas nitrógeno (suministro Curtain Gas™, gas CAD)	Acero inoxidable	Consulte el documento: <i>Guía de planificación del centro</i> .

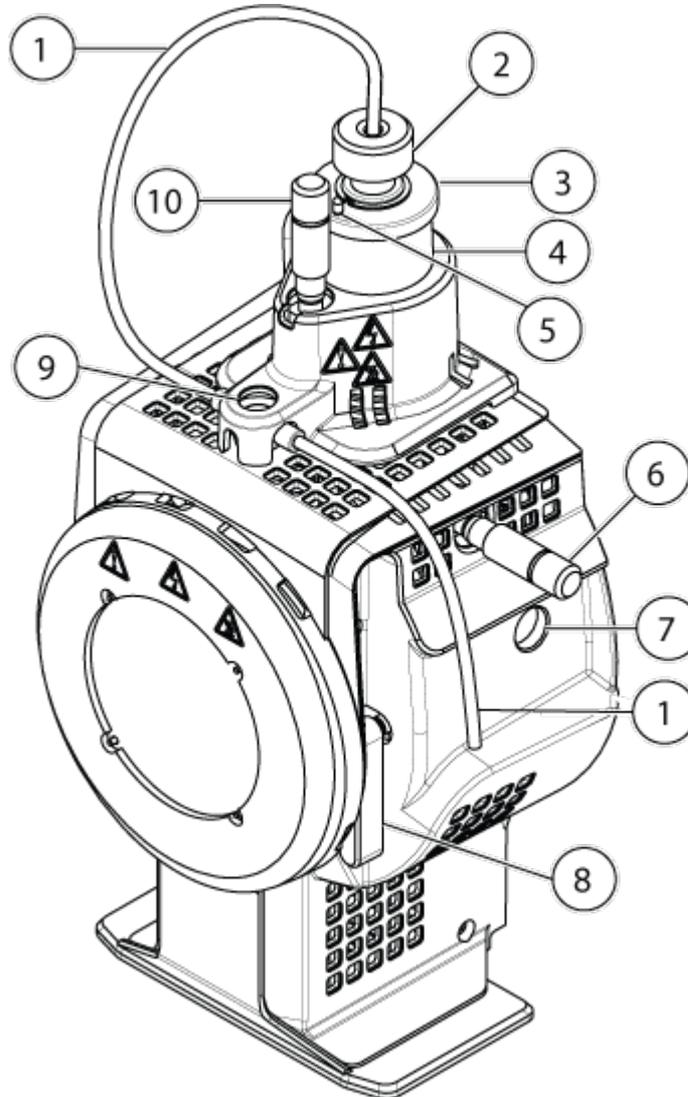
Descripción general de la fuente de iones

La fuente de iones Turbo V puede utilizarse para ionización por electropulverización (ESI) e ionización química a presión atmosférica (APCI).

La sonda TurbolonSpray se utiliza para el funcionamiento en modo ESI. La sonda APCI se utiliza para el funcionamiento en modo APCI.

Componentes de la fuente de iones

Figura 4-3: Componentes de la fuente de iones



Elemento	Descripción	Materiales principales
1	Tubo de muestra de un dispositivo de suministro de muestras	PEEK rojo
2	Tuerca de ajuste del electrodo	Polioximetileno
3	Anillo de retención	PEEK
4	Torre de sondeo	Acero inoxidable

Principios de funcionamiento

Elemento	Descripción	Materiales principales
5	Tornillo de ajuste de la aguja de descarga de corona	PEEK
6	Micrómetro empleado para colocar la sonda en el eje horizontal a fin de ajustar la sensibilidad de la fuente de iones	Vidrio
7	Puerto con ventana	Acero inoxidable
8	Uno de los dos pestillos de la fuente que fijan la fuente de iones al espectrómetro de masas	Acero inoxidable
9	Unión de conexión a tierra, situada bajo la cubierta de la fuente de iones.	Acero inoxidable
10	Micrómetro empleado para colocar la sonda en el eje vertical a fin de ajustar la sensibilidad de la fuente de iones	Polioximetileno

Sondas

Las sondas TurbolonSpray y APCI proporcionan diversas opciones para probar muestras. Seleccione la sonda y el método más adecuados para el compuesto de la muestra.

Tabla 4-2: Especificaciones de la fuente de iones

Especificación	Sonda TurbolonSpray	Sonda APCI
Rango de temperatura	Desde temperatura ambiente hasta 750 °C, en función del flujo de líquido	Desde temperatura ambiente hasta 750 °C, en función del flujo de líquido
Entrada de flujo de líquido	5 µl/min a 3000 µl/min	200 µl/min a 3000 µl/min
Gas de fuente de iones 1 / gas de fuente de iones 2	Consulte el documento del espectrómetro de masas <i>Guía de planificación del centro</i>	

El software del espectrómetro de masas determina la sonda que está instalada y permite emplear los controles de usuario correspondientes. Todos los datos que se adquieren mediante el uso de la fuente de iones se identifican con una abreviatura que hace referencia a la sonda empleada para adquirir los datos (TIS para la sonda TurbolonSpray y HN para la sonda APCI).

Sonda TurbolonSpray

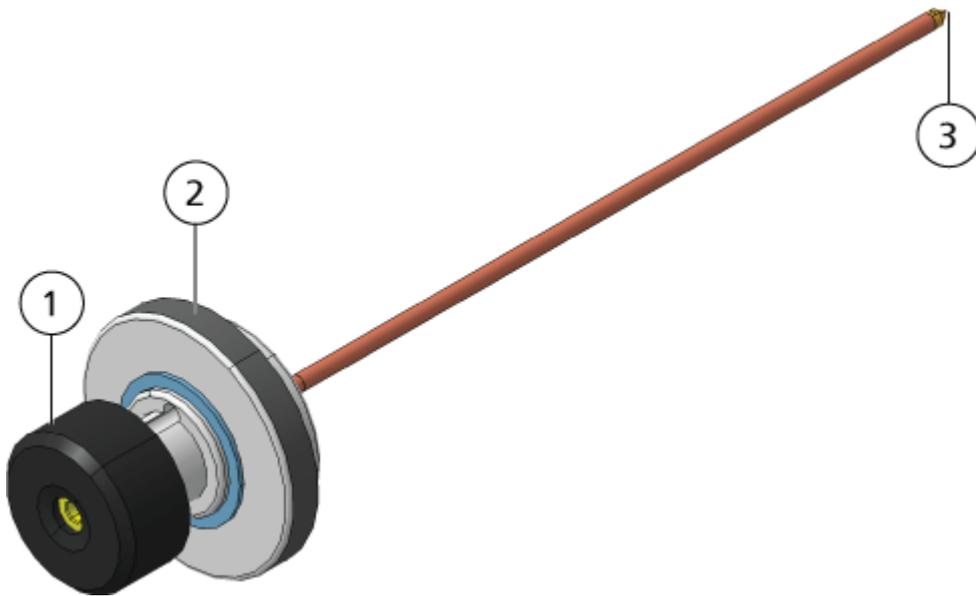
La sonda TurbolonSpray está compuesta por un tubo de acero inoxidable con un diámetro exterior (DE) de 300 µm (0,012 pulgadas). Está situada en el centro con los dos calentadores turbo colocados en un ángulo de 45 grados a ambos lados. Las muestras introducidas a través de la sonda TurbolonSpray se ionizan en el tubo mediante la aplicación

de alta tensión (**IonSpray Voltage**). Después se nebulizan mediante un chorro de aire grado cero caliente, seco de los calentadores turbo, creando un vapor de pequeñas gotas de alta carga. La combinación de efluentes de la fuente de iones y el gas seco caliente procedente del turbo pulverizador se proyecta en un ángulo de 90 grados a la ruta iónica. Consulte la sección [Teoría de funcionamiento: fuente de iones](#).



¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Tenga cuidado al manipular el electrodo. Las puntas de los electrodos están muy afiladas.

Figura 4-4: Piezas de la sonda TurbolonSpray



Elemento	Descripción
1	Tuerca de ajuste del electrodo (cuello negro) que ajusta la extensión de la punta del electrodo
2	Anillo de retención que sujeta la sonda a la torre de sondeo del alojamiento de la fuente de iones
3	Punta del electrodo a través de la cual las muestras se pulverizan en la zona de entrada de muestras de la fuente de iones

Sonda APCI

La sonda APCI consta de un tubo de acero inoxidable con un diámetro interior de 100 µm (0,004 pulgadas) rodeado por un flujo de gas nebulizador (Gas 1). La corriente de muestra líquida se bombea a través del pulverizador, donde se nebuliza en un tubo cerámico que contiene un calentador. La pared interna del tubo cerámico se puede mantener a un intervalo de temperatura de entre 100 °C y 750 °C, y está supervisada por el sensor integrado en el calentador.

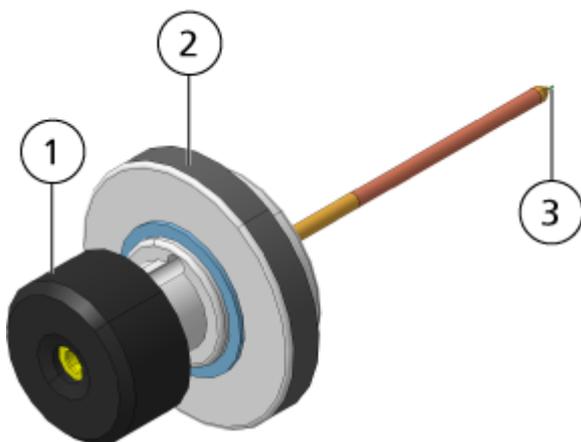
Principios de funcionamiento

Un chorro de gas nebulizador a alta velocidad fluye por la punta del electrodo para dispersar la muestra en forma de vapor de finas partículas. Se desplaza por el calentador de vaporización cerámico hasta la región de reacción de la fuente de iones y a continuación sobrepasa la aguja de descarga de corona, donde las moléculas de la muestra se ionizan a medida que pasan a través del alojamiento de la fuente de iones. Consulte la sección [Teoría de funcionamiento: fuente de iones](#).



¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Tenga cuidado al manipular el electrodo. Las puntas de los electrodos están muy afiladas.

Figura 4-5: Piezas de la sonda APCI



Elemento	Descripción
1	Tuerca de ajuste del electrodo (cuello negro) que ajusta la extensión de la punta del electrodo
2	Anillo de retención que sujeta la sonda en la torre de sondeo
3	Punta del electrodo a través de la cual las muestras se pulverizan en la zona de entrada de muestras de la fuente de iones

Conexiones de gas y electricidad

Las conexiones eléctricas de alta y baja tensión y de gas se realizan en la placa delantera de la interfaz de vacío y se conectan internamente a través del alojamiento de la fuente de iones. Cuando la fuente de iones se instala en el espectrómetro de masas, se realizan todas las conexiones de electricidad y gas.

Circuito detector de fuente de iones

Un circuito detector de fuente de iones deshabilita la alimentación eléctrica de alta tensión del espectrómetro de masas y el sistema de escape de la fuente en los siguientes casos:

- La fuente de iones no está instalada o no se ha instalado correctamente.
- No se ha instalado una sonda.

- El espectrómetro de masas detecta un fallo de gas.
- Se ha producido un fallo de un calentador turbo.
- La fuente de iones se ha sobrecalentado.

Sistema de escape de la fuente



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Asegúrese de que el sistema de escape de la fuente esté conectado y funcionando para eliminar el escape de vapor de la muestra del entorno del laboratorio. Las emisiones del equipo deben expulsarse hacia el sistema de escape general del edificio y no se debe permitir que se expulsen hacia el espacio de trabajo del laboratorio. Para conocer los requisitos del sistema de escape de la fuente, consulte el documento *Guía de planificación del centro*.



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Ventile el sistema de escape de la fuente con una campana extractora externa o un sistema de ventilación externo a fin de evitar que se liberen vapores peligrosos en el entorno del laboratorio.



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Si se utiliza un sistema de LC con el espectrómetro de masas y el sistema de escape de la fuente no funciona correctamente, apague el sistema de LC hasta que la funcionalidad del sistema de escape de la fuente se haya restaurado.



¡ADVERTENCIA! Peligro de incendio. No dirija más de 3 ml/min de disolvente inflamable a la fuente de iones. Aunque los componentes de LC pueden proporcionar un caudal de hasta 5 ml/min, si se sobrepasa el caudal máximo, el disolvente puede acumularse en la fuente de iones. No utilice la fuente de iones a menos que el sistema de escape de la fuente esté activado y funcionando cuando la fuente de iones y la sonda se encuentran correctamente instaladas.

Nota: Asegúrese de que todos los tubos de escape estén bien conectados para reducir el riesgo de que los vapores de escape del equipo entren en la sala.

Una fuente de iones produce tanto vapores de disolventes como de muestras. Estos vapores constituyen un posible riesgo para el entorno del laboratorio. El sistema de escape de la fuente está diseñado para eliminar de forma segura los vapores de muestras y disolventes y permitir su correcta manipulación. Una vez instalada la fuente de iones, el espectrómetro de masas no funciona a menos que el sistema de escape de la fuente esté en funcionamiento.

Un interruptor de vacío instalado en el circuito detector de escape de la fuente mide el vacío en la fuente. Si el vacío de la fuente aumenta por encima del punto de ajuste con la sonda instalada, el sistema entrará en estado de fallo de escape, es decir, estado Not Ready.

Principios de funcionamiento

Un sistema de escape activo elimina el escape de la fuente de iones, incluidos gases y vapores de disolvente y muestra, a través de un puerto de drenaje, sin introducir ruido químico. El puerto de drenaje se conecta, a través de una cámara de drenaje y una bomba de escape de la fuente, a una botella de drenaje y, desde ahí, a un sistema de ventilación de escape suministrado por el cliente. Para obtener más información sobre los requisitos de ventilación del sistema de escape de la fuente, consulte el documento: *Guía de planificación del centro*.

Nota: Examine el sistema de escape de la fuente periódicamente para asegurarse de que el tubo de escape esté intacto y de que no haya fugas del escape en la sala.

Descripción general del software Analyst MD

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

Diferentes vistas de datos

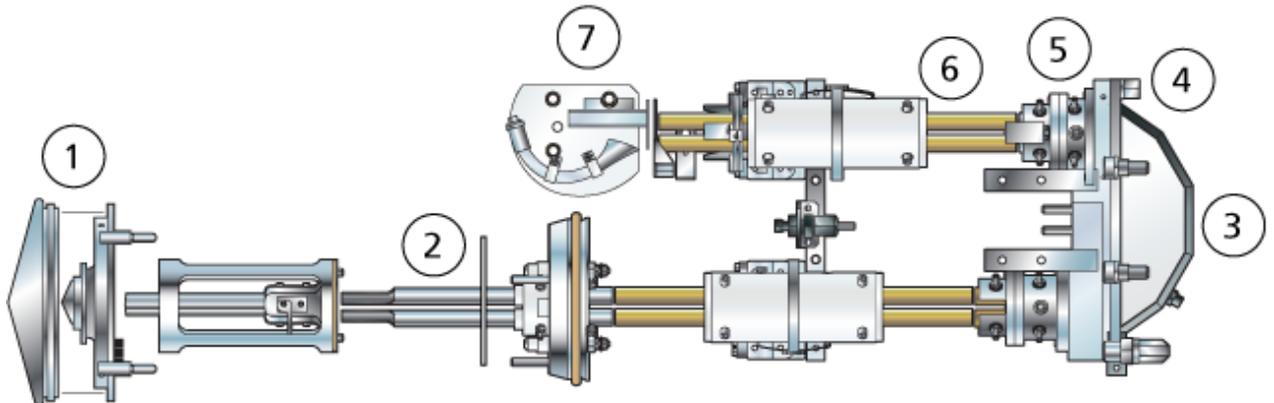
Parámetros de MS

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.

Figura 4-6: Ruta de óptica iónica y parámetros



Ubicación	Parámetro	Tipo de parámetro	Uso previsto	Tipo de análisis
1	IonSpray Voltage (IS)	Fuente y gas	El parámetro IS controla la tensión que se aplica al electrodo en la sonda ESI que ioniza la muestra en la fuente de iones. El parámetro depende de la polaridad y afecta a la estabilidad de la pulverización y a la sensibilidad. El parámetro puede ser dependiente de los compuestos y se debe optimizar para cada compuesto.	Todos
1	Nebulizer Current (NC)	Fuente y gas	El parámetro NC controla la corriente que se aplica a la aguja de descarga de corona en la sonda APCI. La descarga ioniza las moléculas del disolvente que, a su vez, ionizan las moléculas de la muestra.	Todos
1	Ion Source Gas 1 (GS1)	Fuente y gas	El parámetro GS1 controla el gas nebulizador de las sondas ESI y APCI.	Todos
1	Ion Source Gas 2 (GS2)	Fuente y gas	El parámetro GS2 controla el gas del calentador de la sonda ESI.	Todos
1	Temperatura (TEM)	Fuente y gas	El parámetro TEM controla la temperatura del gas del calentador de las sondas ESI y APCI.	Todos

Principios de funcionamiento

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	Declustering Potential (DP)	Compuesto	<p>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.</p> <p>Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.</p>	Todos
2	Entrance Potential (EP)	Compuesto	<p>El parámetro EP controla la diferencia de potencial entre la tensión en Q0 y la toma a tierra. El potencial de entrada conduce y concentra los iones a través de alta presión de la zona Q0.</p> <p>Utilice el valor predefinido.</p>	Todos

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

Principios de funcionamiento

Ubicación	Parámetro	Tipo de parámetro	Uso previsto	Tipo de análisis
3	Collision Energy (CE)	Compuesto	<p>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.</p> <p>Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.</p>	EPI, MS/MS/MS, MRM, MS2, Prec, NL y LIT
3	Collision Energy Spread (CES)	Compuesto	<p>El parámetro CES, junto con el parámetro CE, determina las tres energías de colisión discretas que se aplican a la masa precursora en un análisis de ion producto mejorado (EPI) o MS/MS/MS (MS3) que utilice el parámetro CES. Cuando se introduce un valor de dispersión de energía de colisión, el parámetro CES se activa automáticamente.</p> <p>Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.</p>	EPI y MS/MS/MS
3	Collision Cell Exit Potential (CXP)	Compuesto	<p>El parámetro CXP solo se utiliza en tipos de análisis Q3 y MS/MS. Este parámetro transmite los iones al cuadrupolo Q3.</p> <p>Utilice el valor predefinido y optimícelo para el compuesto específico.</p>	Q3, MRM, MS2, Prec y NL
4	Q3 Entry Barrier	Compuesto	<p>El parámetro Q3 Entry Barrier se utiliza para transferir los iones de la celda de colisión Q2 hacia la trampa lineal de iones.</p> <p>Utilice el valor predefinido.</p>	EMS, EPI, ER y MS/MS/MS

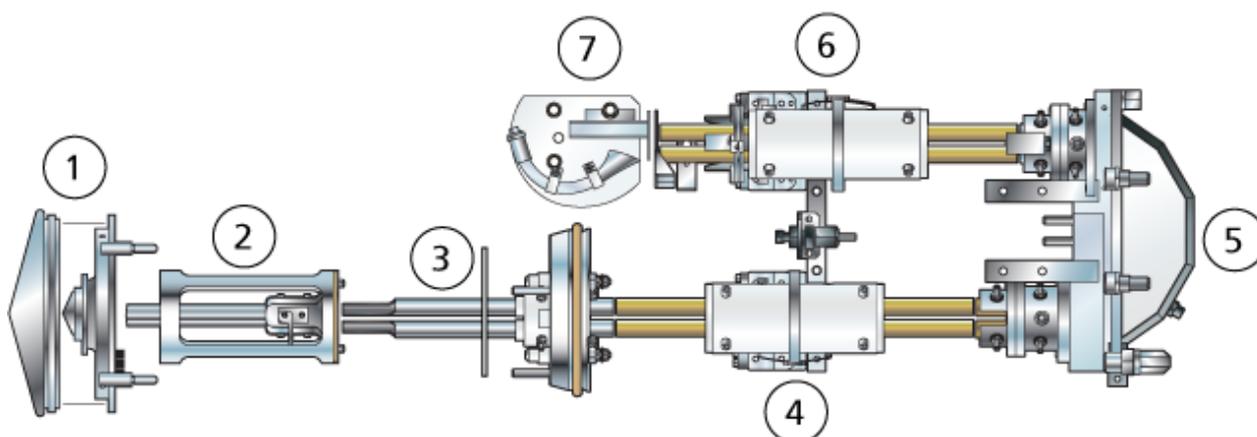
Ubicación	Parámetro	Tipo de parámetro	Uso previsto	Tipo de análisis
5	MS/MS/MS Fragmentation Excitation Time	Compuesto	El parámetro MS/MS/MS Fragmentation Excitation Time controla el periodo de tiempo durante el que se aplica la energía de excitación. Se utiliza junto con la energía de excitación para fragmentar el segundo ion precursor aislado. Utilice el valor predefinido.	MS/MS/MS
6	Fixed LIT Fill Time	Compuesto	El parámetro Fixed LIT Fill Time controla el periodo de tiempo durante el que la LIT se llena con iones. Use el valor predefinido y ajústelo para conseguir la respuesta de señal deseada en función de la concentración de la muestra.	EMS, EPI, ER y MS/MS/MS
6	Dynamic Fill Time (DFT)	Compuesto	El parámetro DFT calcula dinámicamente, en función de la señal de iones entrante, el periodo de tiempo durante el que los iones se recopilan en la trampa lineal de iones. Cuando el parámetro DFT está activado, la señal se optimiza para aumentar la sensibilidad o minimizar la carga de espacio. Seleccione o borre la función según su experimento. En el cuadro de diálogo Tools > Settings > Method Options , la configuración de DFT está optimizada para la velocidad de análisis predeterminada. Esta configuración está también disponible para otras velocidades de análisis LIT.	EMS, EPI, ER y MS/MS/MS
7	CEM	Detector	El parámetro CEM controla la tensión aplicada al detector. La tensión controla la respuesta del detector.	Todos

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 espectrómetro de masas cuenta con una serie de filtros mediante cuadrupolos que transfieren los iones en función de su proporción de masa y carga (m/z). El primer cuadrupolo de esta serie es la guía de iones QJet, ubicada 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. La guía de iones QJet ayuda a concentrar iones en la zona Q0. En la zona Q0, los iones se vuelven a concentrar antes de entrar en el cuadrupolo Q1.

Figura 4-7: Ruta iónica



Elemento	Descripción
1	Placa de chapa y placa del orificio
2	Guía de iones de QJet
3	Zona Q0
4	Cuadrupolo Q1
5	Celda de colisión Q2
6	Cuadrupolo Q3
7	Detector

El cuadrupolo Q1 es un cuadrupolo de filtrado que clasifica los iones antes de que entren en la celda de colisión Q2. La celda de colisión Q2 es donde la energía interna de un ion aumenta mediante colisiones con moléculas de gas hasta el punto en que los enlaces moleculares se rompen y crean iones producto. Esta técnica permite a los usuarios diseñar experimentos que miden la relación m/z de los iones producto para determinar la composición de los iones primarios.

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

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

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

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

Modo ESI

ESI produce iones de fase gaseosa de los analitos en una muestra al aplicar una alta tensión sobre el efluente de muestra que pasa a través de una aguja. Con ayuda del flujo de gas calentado, ESI produce iones con carga única o múltiple en condiciones relativamente suaves de forma que sean adecuados para un amplio rango de compuestos, incluidas pequeñas moléculas, como fármacos o pesticidas, y moléculas de mayor tamaño como péptidos, proteínas y otros biopolímeros. La sensibilidad depende de las propiedades químicas del analito, el caudal del gas, la temperatura, la tensión y la composición de la fase móvil.

La técnica de ionización por electropulverización (ESI) es lo suficientemente suave como para usarla con compuestos lábiles, tales como péptidos, proteínas y fármacos termolábiles.

Principios de funcionamiento

También funciona con caudales de entre 5 µl/min y 3000 µl/min y vaporiza disolventes 100 % acuosos a 100 % orgánicos.

Consulte la sección [Modo de ionización por electropulverización](#).

Modo APCI

El modo APCI es apto para lo siguiente:

- La ionización de compuestos que no forman inmediatamente iones en una solución. Suelen ser compuestos no polares.
- La creación de espectros de APCI simples para experimentos de LC-MS/MS.
- Los análisis de alto rendimiento de muestras complejas y sucias. Es menos sensible a los efectos de la supresión de iones.
- La rápida introducción de muestras mediante inyección de flujo con o sin una columna de LC.

La técnica APCI se puede utilizar para compuestos volátiles y termolábiles con una mínima descomposición térmica. La rápida desolvatación y vaporización de las gotas y los analitos arrastrados reduce la descomposición térmica y conserva la identidad molecular para la ionización mediante la aguja de descarga en corona. Los tampones son fácilmente tolerados por la fuente de iones sin una contaminación significativa y la vaporización intermitente del efluente pulverizado permite que el 100 % del agua se utilice. La sonda puede aceptar todo el efluente, sin dividirlo, con caudales de entre 200 µl/min y 3000 µl/min (a través de una columna de calibre ancho).

Consulte la sección [Modo APCI](#).

Gestión de datos

Software Reporter

El software Analyst MD es responsable de la adquisición y el procesamiento de los datos y no realiza ninguna decisión clínica. El software Reporter amplía la función de generación de informes disponible en el software Analyst MD. El software Reporter se puede utilizar para crear informes personalizados.

Software MultiQuant MD

El software MultiQuant MD es un software de procesamiento de datos cuantitativos que permite el procesamiento de varios analitos y muestras al mismo tiempo. Se instala junto con el software Analyst MD. El software MultiQuant MD no realiza ninguna decisión clínica. La función de generación de informes está disponible en el software MultiQuant MD y se puede utilizar para crear informes personalizados.

Software Cliquant MD

El software Cliquant MD proporciona a los usuarios un flujo de trabajo de espectrometría de masas fácil de usar y funciona junto con el software Analyst MD. El software Cliquant MD no controla el espectrómetro de masas ni procesa los datos directamente. En vez de ello,

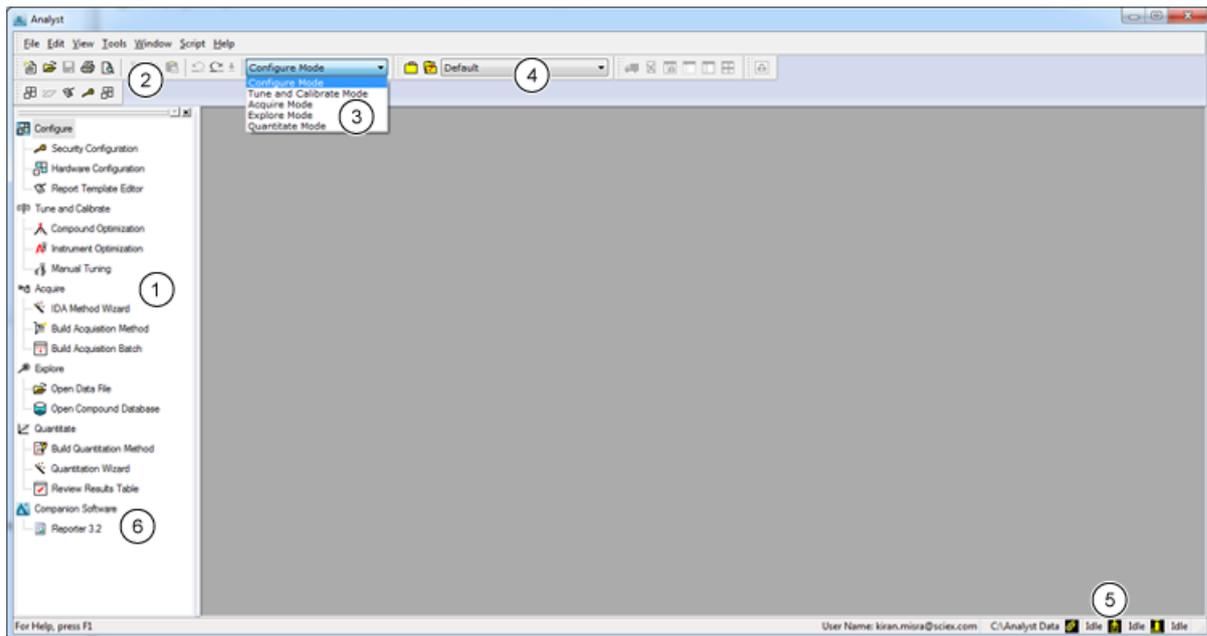
interactúa directamente con el software Analyst MD para interactuar con el espectrómetro de masas durante la adquisición de datos, procesar los datos adquiridos y realizar una revisión de picos. El software Cliquid MD no realiza ninguna decisión clínica.

Teoría de funcionamiento: software

Esta sección describe conceptos utilizados en el software.

Ventana del software Analyst MD

Figura 4-8: Software Analyst MD



Elemento	Descripción
1	<p>Barra de navegación: la barra de navegación permite acceder a los diferentes modos del software. Los usuarios pueden personalizar algunos elementos de la barra de navegación para adaptarla a sus preferencias. Por ejemplo, los usuarios pueden cambiar su tamaño, moverla o fijarla en su sitio. Para ocultar la barra de navegación, haga clic en la x de la esquina superior derecha. Para ver la barra de navegación, haga clic en View > Navigation Bar.</p> <p>El nivel superior del árbol de navegación tiene un icono que representa cada modo del software. Haga doble clic en el icono de un modo concreto para expandir o contraer el árbol. Esto muestra u oculta los iconos de las funciones disponibles en el modo seleccionado.</p>

Principios de funcionamiento

Elemento	Descripción
2	Barra de menús: cambia en función del modo. Algunas opciones, como cortar, copiar y pegar, son iguales en todos los modos. Otras opciones son específicas de ciertos modos y no están disponibles en el resto de modos.
3	Lista de modos: haga clic para cambiar de modo. Los diferentes modos disponen de diferentes iconos en la barra de herramientas.
4	Lista de proyectos: haga clic para cambiar el proyecto en el que se guardan los datos.
5	Estado del instrumento y del dispositivo periférico: la barra de estado contiene información sobre las actividades actuales. Representa el estado del instrumento según su color: verde (preparado), amarillo (inactivo), rojo (error) o blanco (sin estación local de trabajo del instrumento). Un icono indica el estado de un instrumento remoto. Haga doble clic en un icono para abrir la ventana de estado de dispositivos.
6	Software complementario: contiene software complementario instalado que se abre desde el software.

Modos del software Analyst MD

El software se divide en modos, que son áreas funcionales separadas que los usuarios pueden utilizar para llevar a cabo una variedad de actividades relacionadas con una tarea principal. Los usuarios pueden acceder a los modos a través de la barra de navegación o la lista de modos de la barra de herramientas, y pueden cambiar de un modo a otro sin perder el trabajo en curso.

Tabla 4-3: Modos del software Analyst MD

Nombre	Descripción
Configure	(Configurar) Utilice el modo para establecer la configuración de los dispositivos y el sistema. Ajuste diferentes opciones y parámetros del software, incluida la configuración de hardware y la plantilla de informe.

Tabla 4-3: Modos del software Analyst MD (continuación)

Nombre	Descripción
Tune and Calibrate	<p>(Ajuste y calibración) Utilice este modo para establecer las opciones de ajuste de los instrumentos para garantizar unos resultados óptimos. En este modo, los usuarios pueden hacer lo siguiente:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Realizar una optimización del instrumento. • Realizar el ajuste manual. • Cambiar la apariencia de las vistas gráficas, seleccionar los tipos de información que se muestran al abrir la información de los archivos y establecer las opciones de enlace y otras opciones de apariencia. • Cambiar las opciones de procesamiento.
Acquire	<p>(Adquirir) Utilice este modo para establecer las opciones que determinan cómo se deben adquirir las muestras. En este modo, los usuarios pueden hacer lo siguiente:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Crear un método de adquisición IDA con el asistente del método IDA. • Crear un método de adquisición con el editor de métodos de adquisición. • Crear un lote con el editor de lotes. • Ver la cola con el gestor de colas. • Supervisar el estado de la adquisición.
Explore	<p>(Explorar) Utilice este modo para realizar un análisis cualitativo de las muestras. En este modo, los usuarios pueden hacer lo siguiente:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Ver un gráfico. • Ver un cromatograma. • Ver un espectro. • Visualizar datos en tiempo real durante la adquisición de un lote.
Quantitate	<p>(Cuantificar) Utilice este modo para analizar los datos adquiridos y crear un método cuantitativo a fin de generar una tabla de resultados. Use la tabla para revisar manualmente todos los picos de cada analito y estándar interno de un lote y para ver las curvas de calibración, las estadísticas de la muestra y los gráficos de métricas.</p>

Análisis cuantitativo

El análisis cuantitativo se utiliza para determinar la concentración de una sustancia concreta en una muestra. Al analizar una muestra desconocida y compararla con otras muestras que contengan la misma sustancia en concentraciones conocidas, el software puede calcular

Principios de funcionamiento

la concentración de la muestra desconocida. El proceso consiste en crear una curva de calibración mediante el uso de la respuesta de señal o la proporción de respuesta de los patrones y, a continuación, calcular las concentraciones de las muestras desconocidas. Las concentraciones calculadas de todas las muestras se añaden a una tabla de resultados.

El análisis cuantitativo se lleva a cabo mayormente utilizando un análisis de monitorización de reacciones múltiples (MRM). En un análisis MRM, se utilizan un ion precursor y un ion producto característico para definir una transición de MRM muy específica del analito. La transición de MRM relacionada con el tiempo de retención asociado con el analito durante la cromatografía líquida proporciona la especificidad de cuantificación necesaria.

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

Integración

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

Tablas de resultados

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

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

Es recomendable que los usuarios no cambien el nombre de los archivos de datos después de crear las tablas de resultados.

Para obtener información sobre cómo usar el menú contextual de la tabla de resultados, consulte la sección: [Tabla de resultados](#).

Curvas de calibración

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

rango de concentraciones próximas a la concentración esperada del analito en la muestra desconocida.

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

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

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

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

Tipos de regresión

- Lineal ($y = mx + b$)
- Lineal a través de cero ($y = mx$)
- Cuadrática ($y = ax^2 + bx + c$)

Características de rendimiento y especificaciones

5

En esta sección, se incluyen características y especificaciones para el sistema SCIEX Triple Quad 4500MD LC-MS/MS y el sistema QTRAP 4500MD LC-MS/MS.

Especificaciones del espectrómetro de masas

Tabla 5-1: Especificaciones del espectrómetro de masas y de la bomba de vacío preliminar

Sensibilidad (modo MRM)	Reserpina 200 fg en la columna	Señal/ruido mayor que 2000 CV inferior al 5 %
Velocidad de análisis máxima	12.000 Da/s	
Velocidad de análisis máxima de trampa lineal de iones (solo sistemas QTRAP)	20.000 Da/s	
Cambio de polaridad	50 ms en modo <i>Scheduled</i> MRM y un mínimo de 50 ms en modo MRM	
Tiempo de permanencia de MRM mínimo	1 ms	
Rango de masas (m/z)	5 Da a 2000 Da	
Rango de masa de trampa lineal de iones (m/z) (solo sistemas QTRAP)	50 Da a 2000 Da	
Comunicación cruzada para reserpina 609/195	Menos del 0,5 % de comunicación cruzada es detectable con un tiempo de permanencia de 2 ms y un tiempo de pausa entre MRM de 3 ms	
Estabilidad de masa (Estabilidad de masa evaluada utilizando el análisis Q1 y el análisis de ion producto, a una velocidad de análisis de 10 Da/s).	0,1 Da durante 24 horas	

Tabla 5-1: Especificaciones del espectrómetro de masas y de la bomba de vacío preliminar (continuación)

Tipos de análisis	Análisis completo MS y MS de ion seleccionado para Q1 y Q3, análisis de ion producto, análisis de ion producto, análisis de pérdida o ganancia neutra, análisis de monitorización de reacciones múltiples (MRM) y tipos de análisis de MRM programada. En sistemas QTRAP, análisis de MS mejorado, análisis de ion producto mejorado, análisis de resolución mejorada y análisis de MS ³ .
Rango dinámico	Cuatro órdenes de magnitud
Peso	
Apilable: Peso máximo sobre el espectrómetro de masas	77,5 kg (171 libras)
Peso: Espectrómetro de masas	130 kg (287 libras)
Peso: Bomba de vacío preliminar	34 kg (75 lb)
Dimensiones	
Espectrómetro de masas (An × Pr × Al)	79 cm × 79 cm × 59 cm 32 × 32 × 24 pulgadas
Bomba de vacío preliminar (An × Pr × Al)	12 × 17 × 9 pulgadas
Banco del instrumento (An × Pr × Al)	100 cm × 84 cm × 78 cm

Tabla 5-2: Especificaciones de la sonda

Parámetro	Sonda TurbolonSpray	Sonda APCI
Rango de temperatura de la fuente de iones	Temperatura de la sonda desde temperatura ambiente hasta 750 °C, en función del flujo de líquido	Temperatura de la sonda desde temperatura ambiente hasta 750 °C, en función del flujo de líquido
Compatibilidad del caudal	5 µl/min a 3 ml/min	200 µl/min a 3 ml/min
	PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. No supere el caudal máximo. De hacerlo, se puede producir un rendimiento errático o posible daño del sistema.	

Características de rendimiento y especificaciones

Tabla 5-2: Especificaciones de la sonda (continuación)

Parámetro	Sonda TurbolonSpray	Sonda APCI
Gas 1 Gas 2	<ul style="list-style-type: none"> Aire grado cero, o póngase en contacto con SCIEX para ver otras opciones de entrada de gas. Presión de descarga de 100 psi (6,89 bar) a 105 psi (7,25 bar) con caudales de hasta 22 l/min <p>Consulte el documento <i>Guía de planificación del centro</i>.</p>	

Tabla 5-3: Especificaciones eléctricas

Espectrómetro de masas	
Tensión de entrada nominal	200 V CA a 240 V CA
Fluctuación de tensión de entrada	± 10 % de nominal
Frecuencia	50 Hz o 60 Hz
Corriente de entrada máxima	10 A
Potencia de entrada máxima	1000 VA
Bomba de vacío preliminar	
Tensión de entrada nominal	200 V CA a 240 V CA
Fluctuación de tensión de entrada	± 10 % de nominal
Frecuencia	50 Hz o 60 Hz
Corriente de entrada máxima	4,2 A (50 Hz), 4,7 A (60 Hz)
Potencia de entrada máxima	1420 VA (50 Hz), 1250 VA (60 Hz)
Ordenador	
Tensión de entrada nominal	100 V CA a 240 V CA
Fluctuación de tensión de entrada	± 10 % de nominal
Frecuencia	50 Hz o 60 Hz
Corriente de entrada máxima	8 A (50 Hz), 6 A (60 Hz)
Potencia de entrada máxima	460 W
Monitor	
Tensión de entrada nominal	100 V CA a 240 V CA

Tabla 5-3: Especificaciones eléctricas (continuación)

Frecuencia	50 Hz o 60 Hz
Corriente de entrada máxima	2,5 A

Instrucciones de funcionamiento: Flujos de trabajo para la muestra

6

Tabla 6-1: Configuración del sistema Flujo de trabajo

Paso	Para realizar esta acción	Busque la información en	¿Qué 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.	Verificación del rendimiento del instrumento	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 6-2: Ejemplo de flujo de trabajo de análisis de rutina

Paso	Para realizar esta acción	Busque la información en	¿Qué hace?
1	Activar un perfil de hardware aplicable al método.	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.

Tabla 6-2: Ejemplo de flujo de trabajo de análisis de rutina (continuación)

Paso	Para realizar esta acción	Busque la información en	¿Qué hace?
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.
4	Equilibrar el sistema.	Equilibrado del sistema	Equilibrar el sistema antes de iniciar la adquisición de datos. Un sistema que no se ha equilibrado puede dar como resultado datos deficientes.
5	Ejecutar las muestras para adquirir datos.	Adquisición de datos	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.
6	Analizar datos en modo Explore (opcional).	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.
<ul style="list-style-type: none"> • Para el análisis cuantitativo con el software MultiQuant MD, siga los pasos 7 a 8. El software MultiQuant MD está recomendado para conjuntos de datos más grandes. • Para el análisis cuantitativo con el software Analyst MD, siga los pasos 9 a 10a. • Para el análisis cualitativo con el software Analyst MD, siga los pasos 9 a 10b. 			

Instrucciones de funcionamiento: Flujos de trabajo para la muestra

Tabla 6-2: Ejemplo de flujo de trabajo de análisis de rutina (continuación)

Paso	Para realizar esta acción	Busque la información en	¿Qué hace?
7	Analizar datos cuantitativos en el software MultiQuant MD.	<i>MultiQuant MD Guía de referencia del software:</i> capítulos 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14	Generar y usar una tabla de resultados para revisar manualmente todos los picos de cada analito y patrón interno de un lote y para ver las curvas de calibración, las estadísticas de la muestra y los gráficos de métricas.
8	Crear un informe en el software MultiQuant MD.	<i>MultiQuant MD Guía de referencia del software:</i> Apéndice C	Generar un informe utilizando las plantillas de informe proporcionadas para los resultados generados y revisados.
9	Analizar los datos cualitativos (o cuantitativos) en el software Analyst MD.	Instrucciones de funcionamiento: Análisis y procesamiento de datos cuantitativos	Generar una tabla de resultados para revisar manualmente todos de los picos de cada analito y el patrón interno de un lote. Para el análisis cuantitativo, revise también las curvas de calibración, las estadísticas de la muestra y los gráficos de métricas.
10a	Crear un informe en el software Reporter.	Generación de informes	Generar un informe utilizando las plantillas de informe proporcionadas para los resultados generados y revisados. Para informes específicos del análisis cualitativo, se utiliza el conjunto de plantillas de informe etiquetadas con la búsqueda de biblioteca.
10b	Seleccionar una biblioteca y, a continuación, crear un informe utilizando el software Reporter.	Generación de informes	Selecciona la biblioteca de espectros de MS/MS para obtener los resultados y genera un informe con las plantillas de informe proporcionadas etiquetadas con la búsqueda de biblioteca para los resultados generados y revisados. Para informes específicos del análisis cualitativo, se utiliza el conjunto de plantillas de informe etiquetadas con la búsqueda de biblioteca.

Tabla 6-3: Ejemplo de flujo de trabajo del desarrollador de método

Paso	Para realizar esta acción	Busque la información en	¿Qué 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	Optimizar el compuesto automáticamente. O bien Paso 4: Optimizar el compuesto de forma manual.	Instrucciones de funcionamiento: Optimización automática	El software optimiza automáticamente el compuesto y los parámetros del espectrómetro de masas de los compuestos de interés.
4	Optimizar el compuesto de forma manual.	optimización manual del compuesto	El usuario optimiza manualmente el compuesto y los parámetros del espectrómetro de masas de los compuestos de interés. La optimización manual proporciona a los usuarios más experimentados un mayor control durante el proceso de optimización.
5	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, cuándo usarlos para adquirir datos y los parámetros correspondientes.

Instrucciones de funcionamiento: Flujos de trabajo para la muestra

Tabla 6-3: Ejemplo de flujo de trabajo del desarrollador de método (continuación)

Paso	Para realizar esta acción	Busque la información en	¿Qué hace?
6	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.
7	Equilibrar el sistema.	Equilibrado del sistema	Equilibrar el sistema antes de iniciar la adquisición de datos. Un sistema que no se ha equilibrado puede dar como resultado datos deficientes.
8	Ejecutar las muestras para adquirir datos.	Adquisición de datos	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.
9	Analizar datos en modo Explore (opcional).	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.
<ul style="list-style-type: none"> • Para el análisis cuantitativo con el software MultiQuant MD, siga los pasos 10 a 12. El software MultiQuant MD está recomendado para conjuntos de datos más grandes. • Para el análisis cuantitativo con el software Analyst MD, siga los pasos 13 a 15. • Para el análisis cualitativo, póngase en contacto con la asistencia técnica. • Para el análisis cualitativo con el software Analyst MD, siga los pasos 14 a 15. Para obtener pautas generales, póngase en contacto con la asistencia técnica. 			

Tabla 6-3: Ejemplo de flujo de trabajo del desarrollador de método (continuación)

Paso	Para realizar esta acción	Busque la información en	¿Qué hace?
10	Crear un método cuantitativo en el software MultiQuant MD.	<i>Guía del software MultiQuant MD: editor de métodos de cuantificación</i>	Usar las diversas herramientas de creación de métodos cuantitativos del software para analizar los datos adquiridos y crear un método cuantitativo a fin de generar una tabla de resultados.
11	Analizar datos cuantitativos en el software MultiQuant MD.	<i>MultiQuant MD Guía de referencia del software: capítulos 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14</i>	Generar y usar una tabla de resultados para revisar manualmente todos los picos de cada analito y patrón interno de un lote y para ver las curvas de calibración, las estadísticas de la muestra y los gráficos de métricas.
12	Crear un informe en el software MultiQuant MD.	<i>MultiQuant MD Guía de referencia del software: apéndice C</i>	Generar un informe utilizando las plantillas de informe proporcionadas para los resultados generados y revisados.
13	Crear un método cuantitativo en el software Analyst MD.	<i>Guía del software MultiQuant MD: editor de métodos de cuantificación</i>	Usar las diversas herramientas de creación de métodos cuantitativos del software para analizar los datos adquiridos y crear un método cuantitativo a fin de generar una tabla de resultados.
14	Analizar los datos cualitativos (o cuantitativos) en el software Analyst MD.	Instrucciones de funcionamiento: Análisis y procesamiento de datos cuantitativos	Generar una tabla de resultados para revisar manualmente todos de los picos de cada analito y el patrón interno de un lote. Para el análisis cuantitativo, revise también las curvas de calibración, las estadísticas de la muestra y los gráficos de métricas.
15	Crear un informe en Analyst Reporter.	Generación de informes	Generar un informe utilizando las plantillas de informe proporcionadas para los resultados generados y revisados. Para informes específicos del análisis cualitativo, se utiliza el conjunto de plantillas de informe etiquetadas con la búsqueda de biblioteca.

Instrucciones de funcionamiento — Espectrómetro de masas y fuente de iones

7



¡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.

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 corriente del espectrómetro de masas está apagado y el cable de alimentación está conectado 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. Espere cinco minutos y, a continuación, encienda el interruptor de corriente del espectrómetro de masas. Consulte la figura: [Figura 4-2](#).
3. Encienda el ordenador.
4. Abra el software de control.

Optimización de la fuente de iones



¡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! Peligro de incendio. No dirija más de 3 ml/min de disolvente inflamable a la fuente de iones. Aunque los componentes de LC pueden proporcionar un caudal de hasta 5 ml/min, si se sobrepasa el caudal máximo, el disolvente puede acumularse en la fuente de iones. No utilice la fuente de iones a menos que el sistema de escape de la fuente esté activado y funcionando cuando la fuente de iones y la sonda se encuentran correctamente instaladas.



¡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.

Optimice la fuente de iones cuando cambien la composición de la fase móvil, el analito o el caudal.

Al optimizar los parámetros dependientes de la fuente de iones, introduzca la muestra con el caudal que se vaya a utilizar durante el análisis de muestras, utilizando el análisis de inyección de flujo (FIA) o el conector en forma de T para infusión como método de introducción de muestras. Optimice la posición de la fuente de iones antes de optimizar los parámetros dependientes de la fuente de iones.

El rendimiento de la fuente se ve afectado por varios parámetros. Optimice el rendimiento cuando inyecte un compuesto conocido y supervise la señal del ión conocido. Ajuste los parámetros del micrómetro, el gas y la tensión para maximizar la relación señal/ruido y la estabilidad de la señal.

Consulte la sección [Optimización de la sonda TurbolonSpray](#) o [Optimización de sonda APCI](#).

Optimización de la sonda TurbolonSpray



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Asegúrese de que el sistema de escape de la fuente esté bien conectado y que la ventilación general del laboratorio sea adecuada. Es necesaria una ventilación adecuada del laboratorio para controlar las emisiones de los disolventes y muestras y para que el funcionamiento del sistema sea seguro.



¡ADVERTENCIA! Peligro de incendio. No dirija más de 3 ml/min de disolvente inflamable a la fuente de iones. Aunque los componentes de LC pueden proporcionar un caudal de hasta 5 ml/min, si se sobrepasa el caudal máximo, el disolvente puede acumularse en la fuente de iones. No utilice la fuente de iones a menos que el sistema de escape de la fuente esté activado y funcionando cuando la fuente de iones y la sonda se encuentran correctamente instaladas.



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Asegúrese de que el electrodo sobresalga más allá de la punta de la sonda a fin de evitar que escapen vapores peligrosos de la fuente. El electrodo no debe estar embutido dentro de la sonda.

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.

Nota: Para mantener el sistema limpio y con un funcionamiento óptimo, ajuste la posición de la sonda cuando cambie el caudal.

Sugerencia: Es más fácil optimizar la señal y la relación señal/ruido con el análisis de inyección de flujo que con las inyecciones en la columna.

Nota: Si el valor de **IonSpray Voltage** es demasiado alto, podría producirse una descarga de corona. Una descarga de corona puede verse como un resplandor azul en la punta de la sonda. Produce una reducción de la sensibilidad y la estabilidad de la señal.

Caudal y temperatura de la fuente de iones

El caudal de introducción de la muestra y la composición del disolvente de la muestra pueden afectar a la temperatura óptima de la sonda TurbolonSpray. Un caudal superior o un contenido más acuoso requieren una temperatura óptima mayor.

La sonda TurbolonSpray se emplea normalmente con flujos de muestra de entre 5 µl/min y 1000 µl/min. El calor se utiliza para aumentar el índice de evaporación, lo que mejora la eficiencia de ionización y da lugar a una mayor sensibilidad. Los caudales extremadamente

bajos de disolventes con alto contenido orgánico no suelen necesitar temperaturas elevadas. Consulte la sección [Tensiones y parámetros de la fuente](#).

En la tabla siguiente, se proporciona la temperatura típica de la fuente de iones para diferentes caudales. El usuario siempre debe optimizar la temperatura de la fuente de iones para una aplicación específica.

Tabla 7-1: Caudal y temperaturas típicas

Caudal (µl/min)	Temperatura típica de la fuente de iones (°C)
1 a 20	0 a 100
20 a 100	150 a 350
100 a 300	300 a 400
300 a 1000	400 a 500

Método

La corriente de muestra líquida se bombea a la fuente de iones mediante una bomba de LC, o bien mediante una bomba de jeringa. Si se introduce mediante una bomba de LC, la muestra se puede inyectar directamente en la fase móvil utilizando el análisis de inyección de flujo (FIA) o el conector en forma de T para infusión, a través de una bomba de jeringa, o bien mediante una columna de separación con un inyector de bucle o un procesador de muestras automático. Si se introduce con una bomba de jeringa, la muestra se inyecta directamente en la fuente de iones. La optimización de la infusión solo se puede utilizar para la optimización de la ruta iónica y la selección de fragmentos MS/MS.

Preparación del sistema

Para crear un método optimizado para un compuesto, consulte: [optimización manual del compuesto](#).

1. Abra el software Analyst MD.
2. En la barra de navegación, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
3. Abra un método optimizado con anterioridad, o bien cree un método basado en los compuestos.
4. Si la fuente de iones se ha dejado enfriar, haga lo siguiente.
 - a. Ajuste la temperatura de la fuente de iones a 450.
 - b. Deje que la fuente de iones se caliente durante 30 minutos.

La fase de 30 minutos de calentamiento evita que los vapores de los disolventes se condensen en la sonda fría.

5. Inicie el flujo de disolvente y la inyección de muestras.

Configuración de las condiciones iniciales

1. En el Tune Method Editor, asegúrese de que esté seleccionado el **Scan Type** correcto, así como los parámetros de compuestos adecuados.
2. Escriba un valor inicial para **Ion Source Gas 1**.
En bombas de LC, utilice un valor entre 40 y 60 para Gas 1.
3. Escriba un valor inicial para **Ion Source Gas 2 (GS2)**.
En bombas de LC, utilice un valor entre 30 y 50 para Gas 2.

Nota: Gas 2 se utiliza con caudales mayores típicos en un sistema de LC y en colaboración con una mayor temperatura.

4. Escriba 4500 en el campo **IonSpray Voltage (IS)**.
5. Escriba 20 en el campo **Curtain Gas (CUR)**.
6. Inicie la adquisición.

Optimización de la posición de la sonda TurbolonSpray



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Asegúrese de que el electrodo sobresalga más allá de la punta de la sonda a fin de evitar que escapen vapores peligrosos de la fuente. El electrodo no debe estar embutido dentro de la sonda.



¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Tenga cuidado al manipular el electrodo. La punta del electrodo es muy afilada.

Después de optimizar la sonda ya solo necesitará pequeños ajustes. Si ha quitado la sonda, o si cambia la composición del analito, el caudal o el disolvente, repita el procedimiento de optimización.

Consulte la sección [Componentes de la fuente de iones](#).

1. Mire a través de la ventana de la fuente de iones para ver la posición de la sonda.
2. Utilice la configuración anterior del micrómetro vertical y horizontal o defina **5** como su posición inicial.
3. Supervise la señal o la relación señal/ruido de los analitos en el software de control.
4. Utilice el micrómetro horizontal para ajustar la posición de la sonda con pequeños incrementos hasta alcanzar la mejor señal o relación señal/ruido.
La sonda se puede optimizar ligeramente a cada lado de la abertura.

Sugerencia: Ajuste la configuración del micrómetro horizontal para dirigir la pulverización de líquido de la sonda TurbolonSpray lejos de la abertura a fin de evitar su contaminación, evitar la penetración del flujo del gas de la interfaz de Curtain Gas, que puede dar lugar a una señal inestable, y evitar cortocircuitos debido a la presencia de líquidos.

5. Utilice el micrómetro vertical para ajustar la posición de la sonda con pequeños incrementos hasta alcanzar la mejor señal o relación señal/ruido.

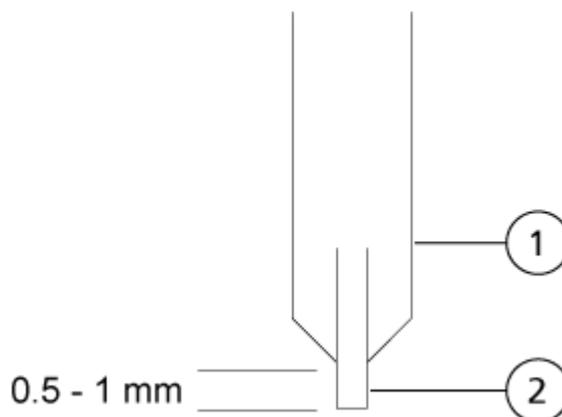
Nota: La posición vertical de la sonda depende del caudal. Con caudales más bajos, la sonda debe estar más cerca de la abertura. Con caudales más altos, la sonda debe estar más alejada de la abertura.

6. Ajuste la tuerca negra de ajuste del electrodo en la sonda para introducir el tubo del electrodo en la sonda y para extraerlo de esta (para ajustar la protrusión).

Nota: La punta del electrodo debe sobresalir entre 0,5 mm y 1,0 mm del extremo de la sonda.

El ajuste óptimo para la punta del electrodo depende del compuesto. La distancia a la que sobresale la punta del electrodo influye en la forma del cono de pulverización, y la forma del cono de pulverización afecta a la sensibilidad del espectrómetro de masas.

Figura 7-1: Ajuste de la extensión de la punta del electrodo



Elemento	Descripción
1	Sonda
2	Electrodo

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

Optimización del gas de fuente de iones 1 (gas nebulizador) para conseguir una mayor sensibilidad y estabilidad de la señal. El gas de fuente de iones 2 (gas del calentador) ayuda a evaporar el disolvente, lo que ayuda a incrementar la ionización de la muestra.

Una temperatura demasiado elevada puede provocar una vaporización prematura del disolvente en la punta de la sonda TurbolonSpray, especialmente si la sonda sobresale demasiado, lo que provoca inestabilidad en la señal y un alto ruido químico de fondo. De igual modo, un flujo de gas del calentador elevado puede producir una señal ruidosa o inestable.

Nota: Si el valor de **IonSpray Voltage** es demasiado alto, podría producirse una descarga de corona. Una descarga de corona puede verse como un resplandor azul en la punta de la sonda. Produce una reducción de la sensibilidad y la estabilidad de la señal.

1. Ajuste el gas de fuente de iones 1 y el gas de fuente de iones 2 en incrementos de 5 hasta alcanzar la mejor señal o relación señal/ruido.
2. Aumente el caudal del gas de la interfaz de Curtain Gas hasta que la señal empiece a disminuir.

Nota: Para evitar la contaminación, utilice el valor más alto posible para el caudal de gas de la interfaz Curtain Gas que no comprometa la sensibilidad. No establezca el caudal en un valor que sea inferior a los valores que se indican en la [Tabla 7-2](#). Esto ayuda a evitar la penetración del flujo de gas de la interfaz de Curtain Gas, que puede producir una señal ruidosa, a evitar la contaminación de la abertura y aumentar la relación señal/ruido general.

Tabla 7-2: Valores del parámetro CUR

Espectrómetro de masas	Valor inicial
Sistemas 4500MD	20

-
3. Ajuste el valor de **IonSpray Voltage (IS)** o tensión de pulverización en incrementos de 500 V a fin de maximizar la relación señal/ruido.

Optimización de la temperatura del calentador turbo

La temperatura óptima del calentador depende del compuesto, el caudal y la composición de la fase móvil. Cuanto mayor sea el caudal y mayor la composición acuosa, mayor será la temperatura optimizada.

Cuando optimice la temperatura de la fuente, asegúrese de que la fuente de iones está equilibrada con respecto al nuevo ajuste de la temperatura.

Ajuste la temperatura de la fuente de iones en incrementos de entre 50 °C y 100 °C hasta alcanzar la mejor señal o relación señal/ruido.

Optimización de sonda APCI



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Asegúrese de que el sistema de escape de la fuente esté bien conectado y que la ventilación general del laboratorio sea adecuada. Es necesaria una ventilación adecuada del laboratorio para controlar las emisiones de los disolventes y muestras y para que el funcionamiento del sistema sea seguro.



¡ADVERTENCIA! Peligro de incendio. No dirija más de 3 ml/min de disolvente inflamable a la fuente de iones. Aunque los componentes de LC pueden proporcionar un caudal de hasta 5 ml/min, si se sobrepasa el caudal máximo, el disolvente puede acumularse en la fuente de iones. No utilice la fuente de iones a menos que el sistema de escape de la fuente esté activado y funcionando cuando la fuente de iones y la sonda se encuentran correctamente instaladas.



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Asegúrese de que el electrodo sobresalga más allá de la punta de la sonda a fin de evitar que escapen vapores peligrosos de la fuente. El electrodo no debe estar embutido dentro de la sonda.

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.

Nota: El caudal mínimo compatible con la sonda APCI es de 200 µl/min. Para obtener una lista de parámetros de la sonda APCI, consulte la sección: [Parámetros de la sonda APCI](#) .

Sugerencia: Es más fácil optimizar la señal y la relación señal/ruido con el análisis de inyección de flujo que con las inyecciones en la columna.

Nota: Cuando utilice la sonda APCI, asegúrese de que la aguja de descarga de corona esté apuntando hacia la abertura.

Preparación del sistema

Para crear un método optimizado para un compuesto, consulte: [optimización manual del compuesto](#).

1. Abra el software Analyst MD.
2. En la barra de navegación, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.

3. Abra un método optimizado con anterioridad, o bien cree un método basado en los compuestos.
4. Si la fuente de iones se ha dejado enfriar, haga lo siguiente.
 - a. Ajuste la temperatura de la fuente de iones a 450.
 - b. Deje que la fuente de iones se caliente durante 30 minutos.

La fase de 30 minutos de calentamiento evita que los vapores de los disolventes se condensen en la sonda fría.
5. Inicie el flujo de disolvente y la inyección de muestras.

Configuración de las condiciones iniciales

1. En el Tune Method Editor, asegúrese de que esté seleccionado el **Scan Type** correcto, así como los parámetros de compuestos adecuados.
2. Escriba 30 en el campo **Ion Source Gas 1 (GS1)**.
3. Escriba 20 en el campo **Curtain Gas (CUR)**.
4. Escriba 1 en el campo **Nebulizer Current (NC)**.
5. En la pestaña Compound, en el campo **Declustering potential (DP)**, escriba 100.
6. Inicie la adquisición.

Optimización de los parámetros de la fuente y del gas

1. Ajuste el gas de fuente de iones 1 en incrementos de cinco hasta alcanzar la mejor señal o relación señal/ruido.
2. Aumente el caudal de gas de la interfaz Curtain Gas hasta que la señal comience a disminuir.

Nota: Para evitar la contaminación, utilice el valor más alto posible para el caudal de gas de la interfaz Curtain Gas que no comprometa la sensibilidad. No establezca el caudal en un valor que sea inferior a los valores que se indican en la [Tabla 7-3](#). Esto ayuda a evitar la penetración del flujo de gas de la interfaz de Curtain Gas, que puede producir una señal ruidosa, a evitar la contaminación de la abertura y aumentar la relación señal/ruido general.

Tabla 7-3: Valores del parámetro CUR

Espectrómetro de masas	Valor inicial
Sistemas 4500MD	20

Ajuste de la posición de la aguja de descarga de corona



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Siga este procedimiento para evitar el contacto con las altas tensiones aplicadas a la aguja de descarga de corona, la placa de chapa y los calentadores.

Materiales necesarios

- Destornillador de punta plana aislado

Cuando utilice la sonda APCI, asegúrese de que la aguja de descarga de corona esté apuntando hacia la abertura. Cuando utilice la sonda TurbolonSpray, asegúrese de que la aguja de descarga de corona no apunte hacia la abertura.

1. Utilice un destornillador de punta plana aislado para girar el tornillo de ajuste de la aguja de descarga de corona de la parte superior de la aguja.
2. Mire a través de la ventana de vidrio para asegurarse de que la aguja esté alineada con la punta que se dirige hacia la abertura.

Optimización de la posición de la sonda APCI



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Asegúrese de que el electrodo sobresalga más allá de la punta de la sonda a fin de evitar que escapen vapores peligrosos de la fuente. El electrodo no debe estar embutido dentro de la sonda.

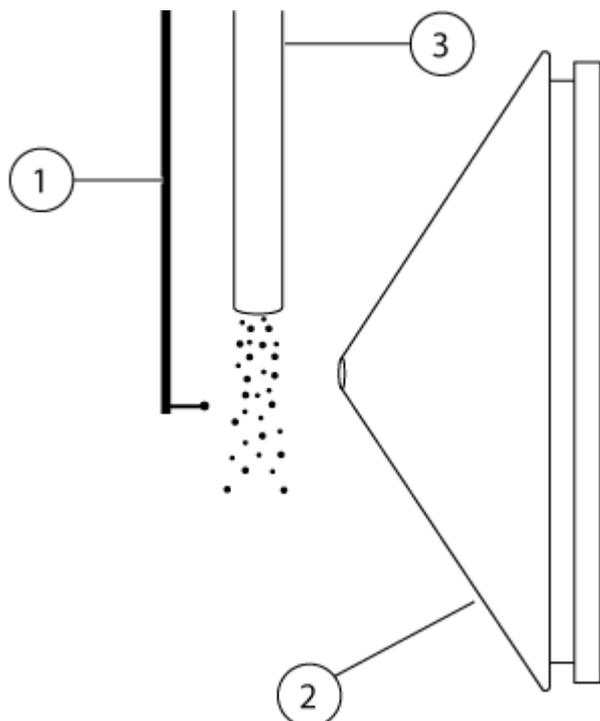


¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Tenga cuidado al manipular el electrodo. La punta del electrodo es muy afilada.

Asegúrese de que la abertura de la placa de chapa no presente disolvente ni gotas de disolvente en ningún momento.

La posición de la boquilla pulverizadora afecta a la sensibilidad y la estabilidad de la señal. Ajuste la posición de la sonda solo con pequeños incrementos. En el caso de caudales más bajos, coloque la sonda más cerca de la abertura. En el caso de caudales más altos, coloque la sonda más alejada de la abertura. Después de optimizar la sonda ya solo necesitará pequeños ajustes. Si se ha quitado la sonda, o si cambia la composición del analito, el caudal o el disolvente, repita el procedimiento de optimización.

Figura 7-2: Posición de la boquilla pulverizadora



Elemento	Descripción
1	Aguja de descarga de corona
2	Placa de chapa
3	Sonda APCI

1. Utilice la configuración anterior del micrómetro vertical y horizontal o defina 5 como su posición inicial.

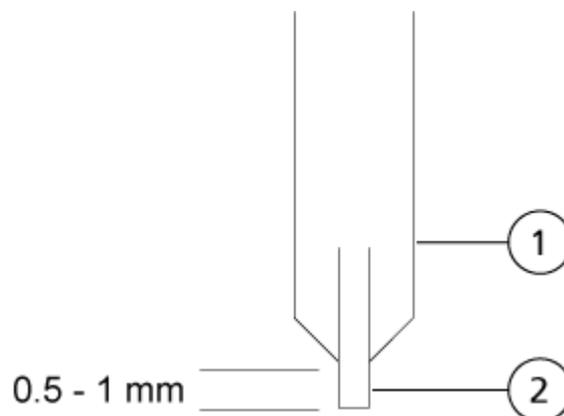
Nota: Para que el rendimiento del espectrómetro de masas no disminuya, no pulverice directamente en la abertura.

2. En el software de control, controle la señal o la relación señal/ruido de los analitos.
3. Utilice el micrómetro horizontal para ajustar la sonda con pequeños incrementos hasta alcanzar la mejor señal o relación señal/ruido.
4. Utilice el micrómetro vertical para ajustar la sonda en pequeños incrementos hasta alcanzar la mejor señal o relación señal/ruido.
5. Ajuste la tuerca negra de ajuste del electrodo en la sonda para introducir el tubo del electrodo en la sonda y para extraerlo de esta (para ajustar la protrusión).

Nota: La punta del electrodo debe sobresalir entre 0,5 mm y 1,0 mm del extremo de la sonda.

El ajuste óptimo para la punta del electrodo depende del compuesto. La distancia a la que sobresale la punta del electrodo influye en la forma del cono de pulverización, y la forma del cono de pulverización afecta a la sensibilidad del espectrómetro de masas.

Figura 7-3: Ajuste de la extensión de la punta del electrodo



Elemento	Descripción
1	Sonda
2	Electrodo

Optimización de la corriente nebulizante

La fuente de iones está controlada por corriente y no por tensión. Seleccione la corriente adecuada para el método de adquisición, independientemente de la posición seleccionada de la fuente de iones.

Comience con un valor de corriente nebulizante de 3 y, a continuación, aumentela o disminúyala para lograr la mejor señal o relación señal/ruido.

La corriente nebulizante aplicada a la aguja de descarga de corona se suele optimizar entre 1 μA y 5 μA en cualquier polaridad. Si no se observan cambios en la señal cuando aumenta la corriente, entonces deje la corriente en el valor más bajo que ofrezca la mejor señal o relación señal/ruido.

Optimización de la temperatura de la sonda APCI

La cantidad y el tipo de disolvente afectan a la temperatura óptima de la sonda APCI. A caudales mayores, aumenta la temperatura óptima.

Ajuste la temperatura de la fuente de iones en incrementos de entre 50 °C y 100 °C hasta alcanzar la mejor señal o relación señal/ruido.

Sugerencias de optimización

La optimización de la fuente de iones minimiza la necesidad de limpiar la fuente de iones y los componentes de la interfaz de vacío.

- Utilice la temperatura más alta posible al optimizar compuestos. Una temperatura de 700 °C es común para muchos compuestos. Las temperaturas altas ayudan a mantener limpia la fuente de iones y reducir el ruido de fondo.
- Utilice el valor más alto posible para el caudal de gas de la interfaz de Curtain Gas que no comprometa la sensibilidad. Esto lo ayudará a lo siguiente:
 - Evitar la penetración del caudal de gas para la interfaz de Curtain Gas, que puede producir una señal ruidosa.
 - Evitar la contaminación de la abertura.
 - Aumentar la relación señal/ruido general.
- Ajuste la configuración del micrómetro horizontal para alejar la pulverización de líquido de la sonda de la abertura para:
 - Evitar la contaminación de la abertura.
 - Evitar la penetración del caudal de gas para la interfaz de Curtain Gas, que podría producir una señal inestable.
 - Evitar cortocircuitos debido a la presencia de líquido.

Para ello, utilice el micrómetro vertical para elevar la sonda.

- Utilice el valor de tensión de IonSpray más bajo posible sin perder la señal. Céntrese en la señal/ruido y no solo en la señal.
- Para caudales superiores a 2 ml/min en el modo APCI, equilibre el espectrómetro de masas antes de iniciar el flujo de líquido para asegurar que se alcanza la temperatura de nebulización.

Procedimiento de calibración del espectrómetro de masas

La calibración de masas puede cambiar a lo largo del tiempo. Compruebe la calibración de masas con regularidad. Durante la instalación, se calibra la masa del sistema y se optimiza la resolución de los picos de espectro tanto en la unidad como a alta resolución, en modo positivo y negativo, para obtener la mejor sensibilidad y rendimiento del espectrómetro de masas. La calibración de masas garantiza que las señales que se originan a partir de los compuestos ionizados se registran con sus valores reales de m/z .¹ La escala m/z se calibra mediante compuestos de una pureza y una masa conocidas. Durante la optimización de la resolución, se ajustan la anchura y la forma del pico. La resolución del espectro de masas se representa como $(m/z)/\text{anchura}$, donde la anchura es la anchura de un pico de espectro en un valor determinado de m/z .¹ La anchura de pico se mide normalmente en los puntos en los que la intensidad es la mitad de la altura del pico.

¹ CLSI Standard C50–A–Vol. 27, No. 24—Mass Spectrometry in the Clinical Laboratory: General Principles and Guidance: Approved Guideline.

Nota: Con el aumento de la resolución, la sensibilidad disminuye. Conviene encontrar el equilibrio entre los requisitos de sensibilidad y resolución.

El módulo de optimización del instrumento del software Analyst MD se utiliza para calibrar la masa y optimizar la resolución. Verifique la calibración de masas y la resolución semanalmente o tras limpiar el instrumento para confirmar que el sistema funciona correctamente. Por lo general, la calibración y la resolución para un espectrómetro de masas cuadrupolo triple permanece estable entre tres y seis meses a menos que el sistema pierda vacío. Si el sistema pierde vacío, compruebe la calibración y resolución antes de utilizarlo. Consulte la sección [Instrucciones de funcionamiento: ajuste y calibración](#).

PRECAUCIÓN: Posible resultado erróneo. Asegúrese de que el sistema esté calibrado. Si el sistema no está correctamente calibrado, se puede identificar incorrectamente una masa o la cuantificación podría ser imprecisa.

Consulte las secciones: [Precauciones y limitaciones de funcionamiento](#) y [Soluciones e iones de calibración](#).

Restablecimiento del espectrómetro de masas

1. Detenga las exploraciones en curso y, a continuación, desactive el flujo de la muestra al espectrómetro de masas.
2. Cierre el software de control.
3. Mantenga pulsado el botón **Reset** durante cinco segundos. Se oye un clic cuando se activa el relé. Después de unos three minutos, el espectrómetro de masas alcanza la presión de funcionamiento.

Apagado y ventilación del sistema

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

PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. No apague las bombas de vacío preliminar hasta que las bombas turbo hayan dejado de girar.

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

Sugerencia: Si el espectrómetro de masas no se va a utilizar durante un periodo de tiempo prolongado, déjelo en 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.

Instrucciones de funcionamiento — Espectrómetro de masas y fuente de iones

2. Detenga el flujo de muestra hacia el sistema.
3. Cierre el software.
4. (En caso necesario) Siga estos pasos para ventilar el sistema:

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

- a. Mantenga pulsado el botón **Vent** durante tres segundos.
El LED de vacío comienza a parpadear más rápidamente que durante la evacuación. La bomba turbo deja de girar gradualmente.
 - b. Deje ventilar el sistema durante 15 minutos y, a continuación, apague la bomba de vacío preliminar.
5. Apague el interruptor de corriente del espectrómetro de masas.
 6. Desconecte el cable de alimentación principal del espectrómetro de masas de la toma de alimentación.
 7. (Si ventila el sistema) Desconecte el cable de alimentación de la bomba de vacío preliminar de la toma de alimentación.

Instrucciones de funcionamiento: Perfiles de hardware y proyectos

8

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 del software Analyst MD: *Guía de instalación del Software*.

Cuando se instala el software, también se instala el controlador necesario para cada dispositivo periférico. Después de que los dispositivos periféricos se hayan conectado físicamente al ordenador, defina la información de configuración adecuada.

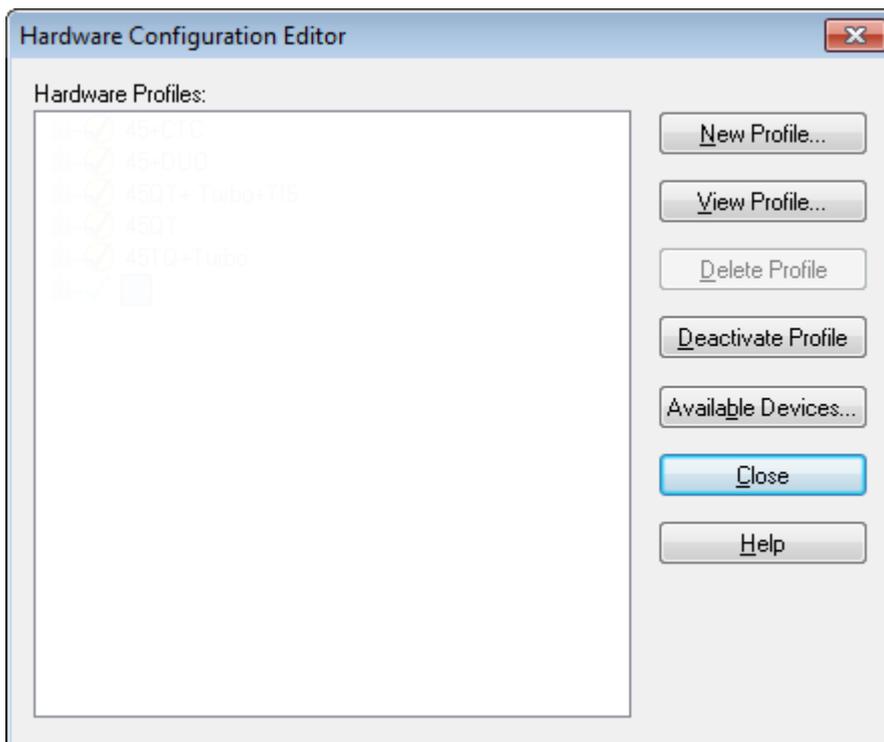
Cada perfil de hardware debe incluir un espectrómetro de masas. Antes de crear un método de adquisición, asegúrese de que se incluyen en el perfil de hardware todos los dispositivos que se vayan a utilizar en el método. Los dispositivos configurados en el perfil de hardware activo y seleccionados en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

Creación de un perfil de hardware

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

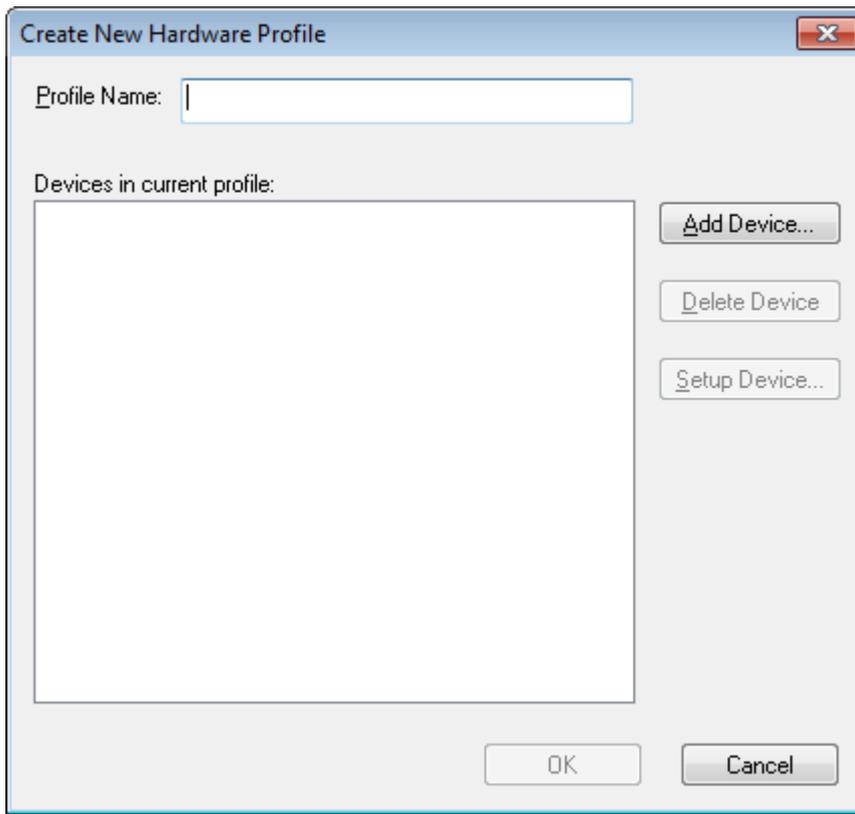
1. En la barra Navigation, en **Configure**, haga doble clic en **Hardware Configuration**.

Figura 8-1: Cuadro de diálogo del editor de configuración de hardware



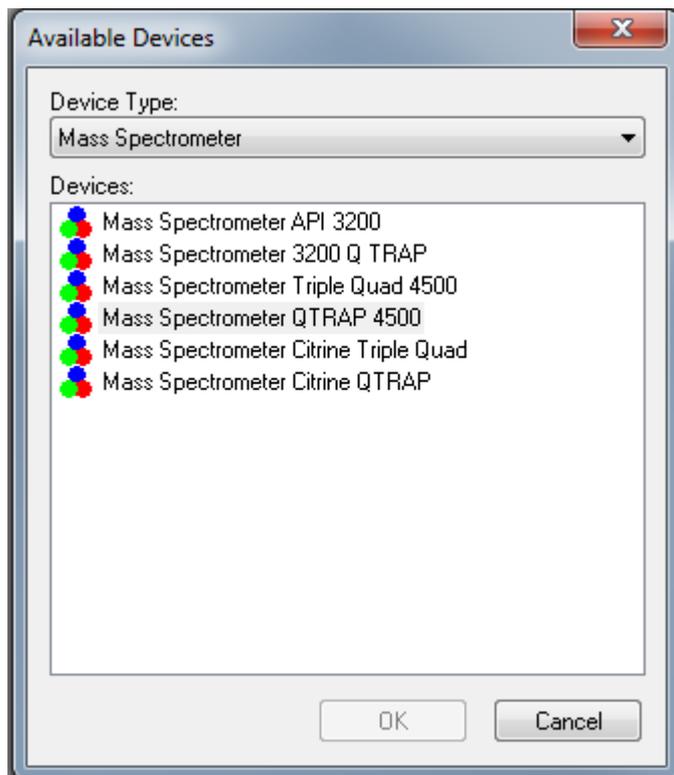
2. Haga clic en **New Profile**.

Figura 8-2: Cuadro de diálogo Create New Hardware Profile



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

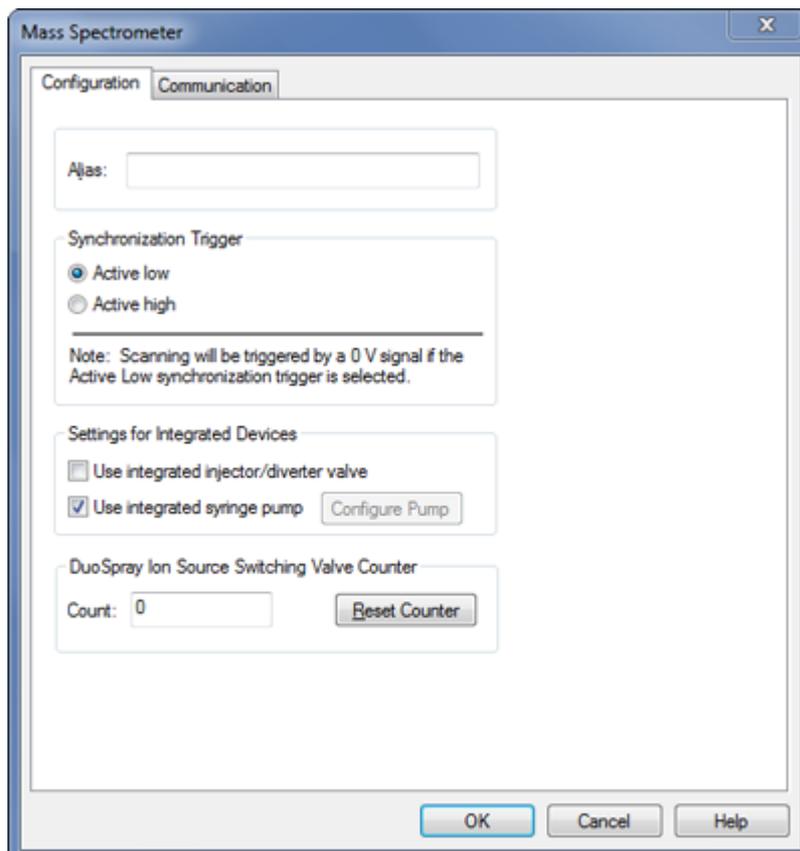
Figura 8-3: Cuadro de diálogo Available Devices



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 8-4: Pestaña Configuration y la bomba de jeringa configurada



8. (Opcional) Para configurar el espectrómetro de masas para la válvula desviadora, en la pestaña Configuration, seleccione la casilla **Use integrated injector/diverter valve**.
9. (Opcional) Seleccione otras funciones en las pestañas Configuration y Communication, según sea necesario.
10. Haga clic en **OK**.
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**.

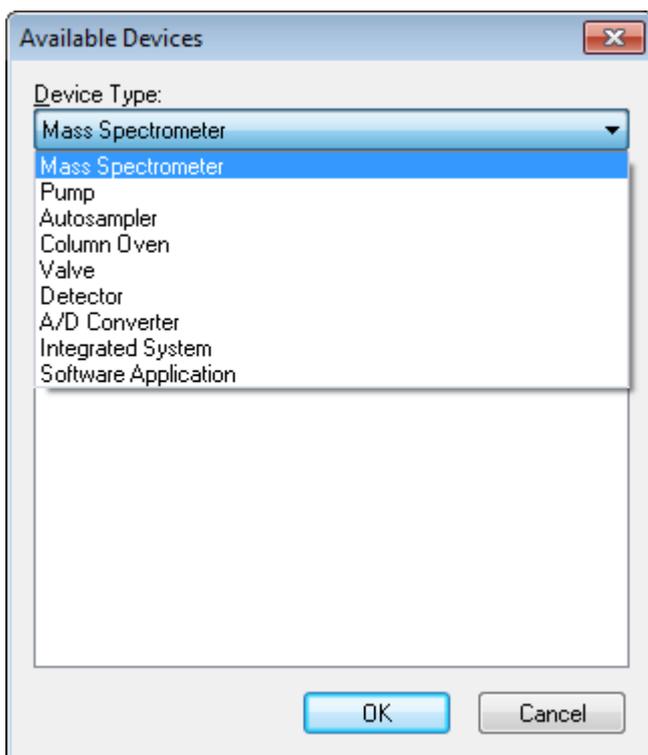
Nota: El modo de funcionamiento actual del perfil de hardware activo se puede ver en el cuadro de diálogo Detailed Status del instrumento; solo tiene que hacer doble clic en el icono Mass Spec de la sección inferior derecha de la ventana de software Analyst MD.

Adición de dispositivos a un perfil de hardware

Los dispositivos deben estar configurados para permitir que el software se comunice 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 8-5: 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 el documento *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**.

Edición de dispositivos en un perfil de hardware

1. Abra el Hardware Configuration Editor.
2. En la lista **Hardware Profiles**, desactive el perfil de hardware.
3. Haga clic en **Edit Profile**.
4. Seleccione el dispositivo correspondiente y, a continuación, haga clic en **Setup Device**. Se abre el cuadro de diálogo de configuración de dispositivos.
5. Edite la configuración y haga clic en **OK**.
6. Haga clic en **OK**.
7. Haga clic en **Activate Profile**.
La marca de verificación se vuelve de color verde. Si se muestra una x roja, existe algún problema con la activación del perfil de hardware. Para obtener más información, consulte 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.

8. 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 o la dirección IP asignados al dispositivo sean correctos.

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

4. 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.

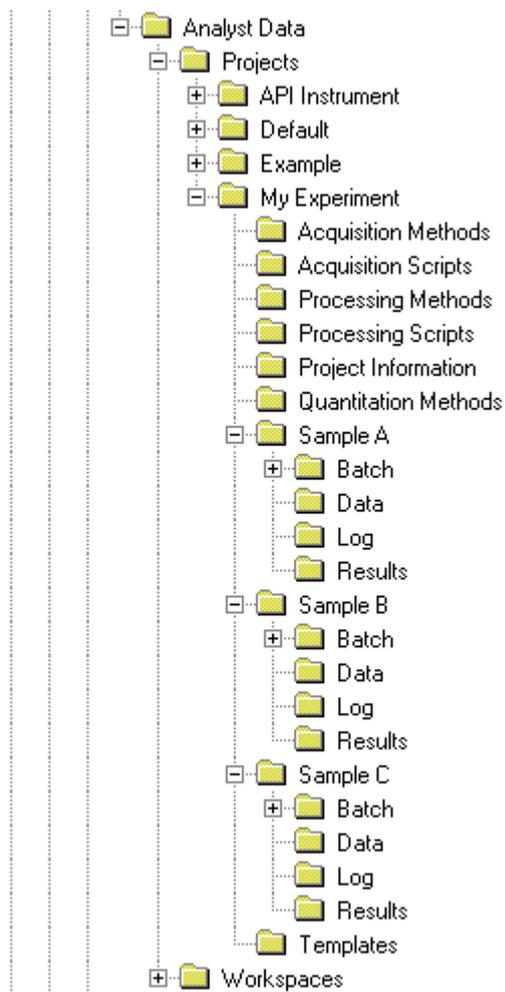
Proyectos y subproyectos

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.

Acerca de los subproyectos

Un subproyecto contiene un subconjunto de las carpetas del proyecto. Todos los subproyectos deben contener las mismas carpetas. Los subproyectos pueden resultar muy útiles para organizar sus datos. Por ejemplo, si hay diferentes laboratorios ejecutando muestras de varios compuestos que utilizan el mismo método de adquisición, se pueden utilizar los subproyectos para almacenar los resultados de cada laboratorio mientras la carpeta del método de adquisición se almacena en la carpeta del proyecto. De este modo, el método de adquisición estará disponible para su uso con cada subproyecto o laboratorio. Como alternativa, si las muestras se ejecutan para un periodo de varias semanas, los resultados de cada día se pueden almacenar en un subproyecto aparte.

Figura 8-6: Ejemplo de una estructura de carpetas con proyectos y subproyectos

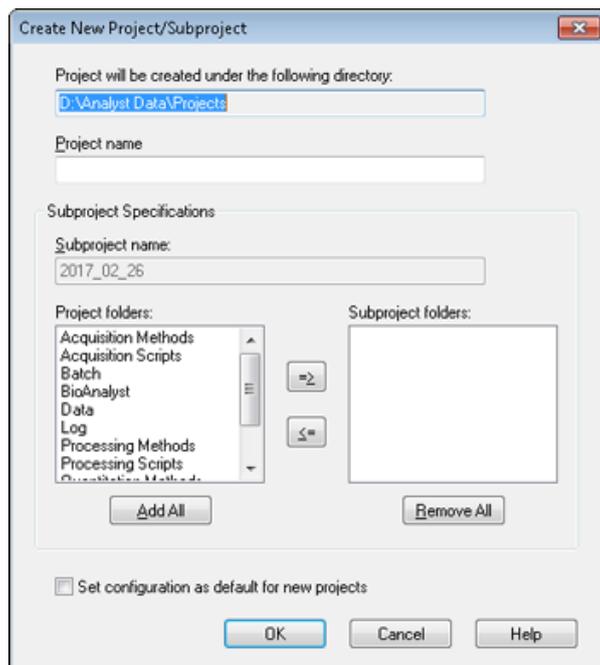


Creación de proyectos y subproyectos

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 8-7: 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

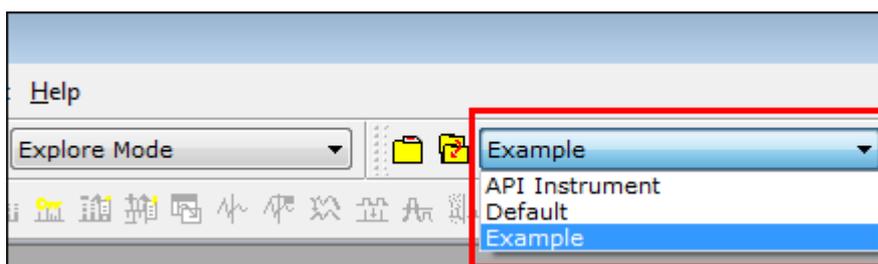
Se puede copiar un subproyecto de otro proyecto que tenga subproyectos existentes. Si los subproyectos copiados contienen carpetas que también existen en la carpeta del proyecto de destino, el software utiliza las carpetas de nivel del proyecto.

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 8-8: 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 o Quantitate utilizando los archivos de datos de ejemplo. Los archivos de ejemplo se ordenan en subcarpetas por tipo de espectrómetro y área de aplicación.

Instrucciones de funcionamiento: ajuste y calibración

9

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

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

Requisitos previos

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

Materiales necesarios

- Soluciones de ajuste, que se incluyen en el juego de productos químicos de estándares suministrado con el sistema. Si es necesario, se puede solicitar un nuevo juego a SCIEX. Consulte la sección [Soluciones e iones de calibración](#).
- Jeringas herméticas a los gases de serie de 5 ml, 1 ml o 250 µl.
- Tubo de muestra PEEK rojo.

Acerca del ajuste y la calibración

El ajuste del instrumento es el proceso de optimización de la resolución y los parámetros del instrumento destinado a obtener la mejor sensibilidad y rendimiento posibles del espectrómetro de masas. La optimización de la resolución implica el ajuste de la anchura y la forma de pico. Puede ajustar y calibrar el instrumento de manera automática o manual.

PRECAUCIÓN: Posible error de calibración. Si la temperatura varía en más de 2 °C, la resolución y la calibración de masas pueden verse afectadas.

Sugerencia: Limpie la zona Q0 periódicamente para reducir al mínimo el impacto de la carga (pérdida significativa de sensibilidad de los iones de interés en un corto periodo de tiempo) sobre los cuadrupolos. Para obtener más información, póngase en contacto con la persona de mantenimiento cualificada o un representante del servicio técnico.

Automatic tuning: el software realiza la optimización de la resolución y la calibración de masas mediante el asistente Instrument Optimization. En el caso de los instrumentos LIT, también se realizan optimizaciones de MS3.

Manual tuning: muchas de las optimizaciones y calibraciones de la resolución del instrumento se pueden efectuar manualmente.

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_modelo del instrumento3_010107`.

Copia de seguridad de parámetros del instrumento

1. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Instrument Optimization**.
2. Haga clic en **File > Backup Instrument Settings Files** en el cuadro de diálogo Instrument Optimization.
3. Escriba el nombre que desee asignar al archivo y, a continuación, haga clic en **Save**.
4. Haga clic en **Exit**.

Restauración de parámetros del instrumento

1. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Instrument Optimization**.
2. Haga clic en **File > Restore Instrument Settings Files** en el cuadro de diálogo Instrument Optimization.
3. Desplácese a la configuración del instrumento que desee restaurar y, a continuación, haga clic en **Open**.
4. Haga clic en **Exit**.

Ajuste y calibración automáticos

Instrument Optimization es un software de ajuste de instrumentos automático que ajusta los modos de cuadrupolo y LIT y realiza la calibración de masas. En el modo de cuadrupolo, ajusta las desviaciones de resolución. En el modo de LIT, optimiza AF3 y EXB. Para MS3, ajusta los coeficientes de excitación y aislamiento. Seleccione una de las opciones de rendimiento del instrumento:

- **Verify instrument performance:** prueba el rendimiento del instrumento, pero no cambia su configuración. Se genera un informe al final de la prueba. Puede utilizar esta opción semanalmente para comprobar la medida del rendimiento del instrumento.
- **Adjust mass calibration only:** comprueba y ajusta automáticamente la calibración de masas. Si la calibración de masas ha cambiado, el software la corrige. Esta opción puede utilizarse semanalmente para instrumentos LIT o mensualmente para comprobar y ajustar la calibración de masas, si es necesario.
- **Adjust instrument settings:** comprueba y ajusta la configuración del instrumento y la calibración de masas. La configuración del instrumento se actualiza de modo que la configuración actual adopta la configuración óptima. Utilice esta opción si el rendimiento del instrumento es bajo o si la forma del pico es incorrecta. La configuración del instrumento solo deben ajustarla usuarios calificados.

Nota: Los métodos LIT antiguos deben actualizarse con la nueva configuración. Cambie la velocidad de LIT en la pestaña Advanced MS y, a continuación, guarde el método.

- **Reset selected scan modes to default values and adjust instrument settings:** restablece los valores del instrumento en los valores predefinidos de fábrica. Seleccione esta opción si se ha reemplazado un componente principal del instrumento o tras la primera instalación. Esta función solo deben utilizarla representantes del servicio técnico.

Haga una copia de seguridad de los parámetros del instrumento actuales en caso de que deba restaurarlos más tarde. La ubicación predefinida de los parámetros del instrumento es <unidad>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Optimization\Instrument Settings Backups\User Created Backups.

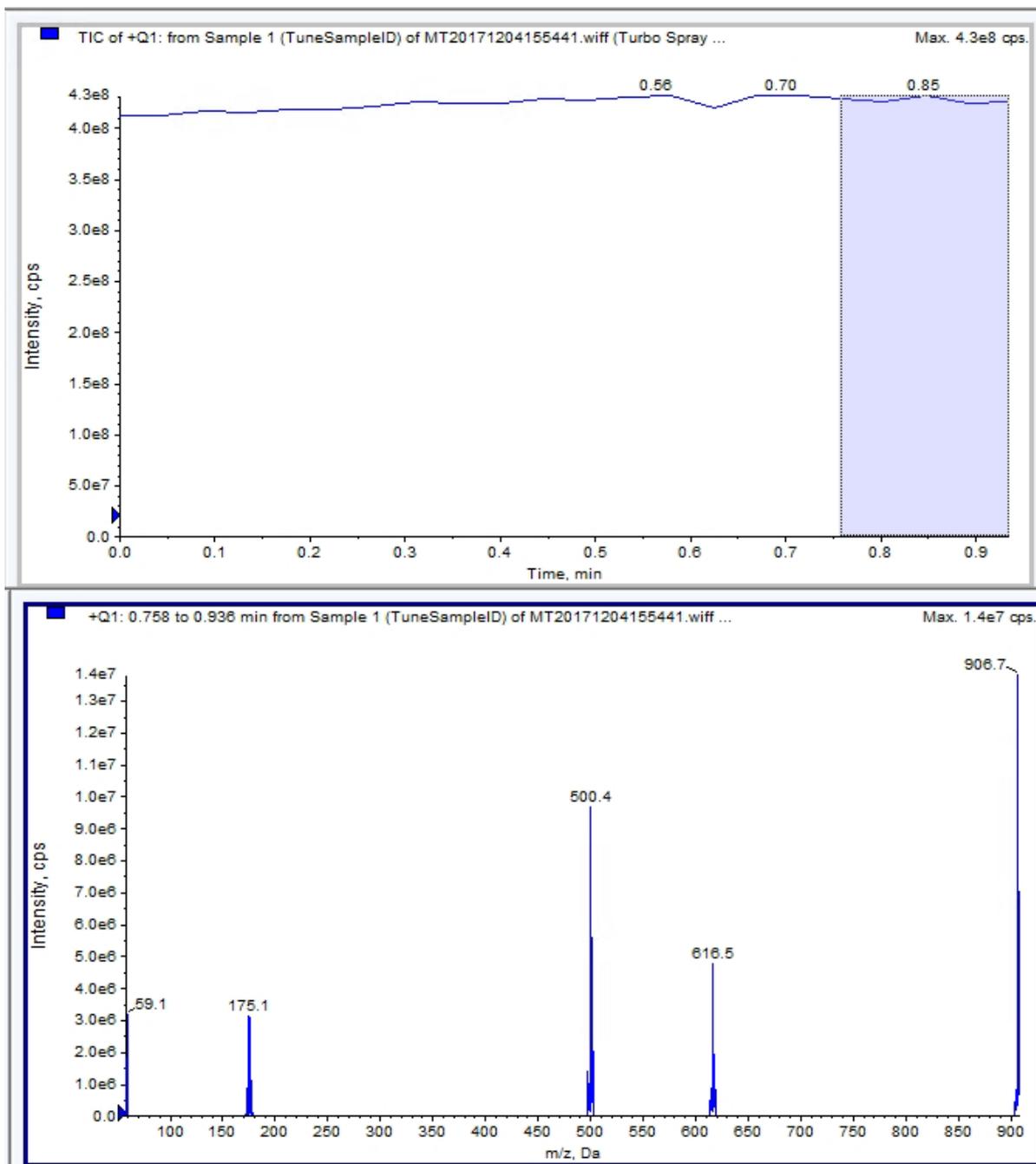
Verificación del rendimiento del instrumento

Siga este procedimiento para verificar o ajustar el rendimiento del espectrómetro de masas. Para obtener información sobre el resto de las opciones de rendimiento del instrumento, consulte el documento *Ayuda*.

Requisitos previos
<ul style="list-style-type: none">• Hay activada una bomba de jeringa en el perfil de hardware. Si la bomba de jeringa no está activada, edite el perfil de hardware. Consulte la sección Adición de dispositivos a un perfil de hardware.• Está seleccionada la carpeta API Instrument.

1. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
2. Inicie la bomba de jeringa, escriba **5** en el campo **Duration** y, a continuación, ejecute un método de calibración. Confirme que el cromatograma de iones totales (TIC) es estable y que los picos de interés estén presentes en el espectro.

Figura 9-1: Ejemplo de un TIC estable y de picos de interés



3. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Instrument Optimization**.

Instrucciones de funcionamiento: ajuste y calibración

Se abrirá el cuadro de diálogo Instrument Optimization.

4. Haga clic en **Verify instrument performance**.
5. Haga clic en **Next**.
6. Haga clic en **Approved Tuning**.
7. Haga clic en **Next**.
8. Seleccione una solución de ajuste en la lista **Tuning Solution**.
En función de la solución seleccionada, los modos disponibles serán unos u otros.
 - a. Haga clic en una polaridad.
 - b. (Si está disponible) Haga clic en **Q1** y **Q3** en la sección Quad.
 - c. (Si está disponible) Haga clic en las velocidades de análisis necesarias.
 - d. (Si están disponibles) Haga clic en las velocidades de análisis en la sección LIT.
 - e. (Si está disponible) Haga clic en **Excitation** en la sección MS/MS/MS.
9. Haga clic en **Next**.
10. Si se abre la página Select a mode, seleccione **Automatic**.
11. Haga clic en **Next**.
12. Haga clic en **GO**.
Se abre el cuadro Verifying or Adjusting Performance. Tras finalizar el proceso, se abrirá el Results Summary. Para obtener más información, consulte el documento *Ayuda*.
13. (Si es aplicable, según las opciones seleccionadas) Cuando el sistema se lo solicite, cambie las soluciones por otros tipos de análisis y polaridades.

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.

El resumen de resultados incluye la ubicación de los datos y archivos de copia de seguridad de la configuración de instrumentos, así como un registro paso a paso de los cambios y los resultados obtenidos durante la optimización.

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

El resumen de resultados se guarda automáticamente en la 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.

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: Optimización automática

10

Para ajustar los parámetros de compuestos concretos, se recomiendan los siguientes pasos. Para ilustrar los pasos del procedimiento usaremos una mezcla de cuatro compuestos. El usuario deberá aplicar el mismo procedimiento cuando utilice los compuestos adecuados para el ensayo de interés.

En esta sección se describe cómo:

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

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

El usuario también puede optimizar los compuestos manualmente. Consulte el documento *Guía de usuario del sistema* para obtener más información sobre el espectrómetro de masas.

Requisitos previos

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

Materiales necesarios

- Mezcla de cuatro compuestos (10 ng/ml) formada por reserpina, minoxidil, tolbutamida y rescinamina. La solución puede utilizarse para infusión y FIA. La concentración depende del sistema. Utilice una solución con un 49,9 % de acetonitrilo, un 50 % de agua desionizada y un 0,1 % de ácido fórmico como diluyente.

Nota: Esta es una mezcla de ejemplo para fines demostrativos. Los usuarios crearán su propio compuesto en un disolvente adecuado cuando desarrollen aplicaciones. Es preferible utilizar una solución de un solo compuesto. Al mezclar compuestos, asegúrese de que los compuestos no interfieren entre sí ni tienen el mismo peso molecular.

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

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

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

Acerca de la optimización automática

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

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

Tipos de métodos de introducción de muestras

Infusión

La infusión consiste en introducir un flujo continuo de muestra con caudales bajos en la fuente de iones mediante el uso de una bomba de jeringa. Durante el proceso de optimización de la infusión, el software puede seleccionar los iones precursores y producto, así como optimizar el potencial de desagrupación, la energía de colisión y el potencial de salida de la celda de colisión. Los voltajes de los parámetros de la ruta iónica se

Instrucciones de funcionamiento: Optimización automática

incrementan o reducen de forma gradual para obtener la intensidad de señal máxima de cada ion precursor y producto.

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

FIA

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

Los parámetros de los compuestos tienen que reducirse utilizando, como mínimo, dos ciclos FIA adicionales.

Utilice la optimización FIA para optimizar los parámetros dependientes tanto de los compuestos como de los orígenes, utilizando un sistema LC con caudales más elevados.

Tabla 10-1: Diferencias entre los métodos de introducción de muestras

Método	Dispositivos necesarios	Parámetros	Rango de caudales típicos
Infusión	Bomba de jeringa	Dependientes de los compuestos	De 5 µl/min a 25 µl/min
FIA	Bomba de LC y procesador de muestras automático	Dependientes de los compuestos y de la fuente de iones	De 25 µl/min a 1000 µl/min

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

Optimización automática de un analito mediante la infusión

Siga este procedimiento para realizar una optimización MS/MS automática utilizando la infusión con un ion precursor conocido y un ion producto desconocido.

Confirmación de la presencia de compuestos

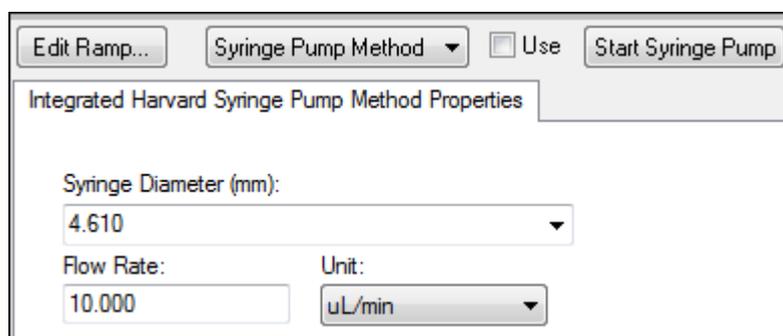
Confirme la presencia de los compuestos de interés antes de continuar con la optimización automática.

1. En el software Analyst MD, cree un proyecto.
2. Active el perfil de hardware.
3. Preparar la muestra:
 - a. Aspire la solución del compuesto con una jeringa y elimine el aire de la jeringa.
 - b. Utilice el tubo con el conector especial para conectar la jeringa al espectrómetro de masas.
 - c. Instale la jeringa en la bomba de jeringa integrada.
4. Infunda el compuesto en una solución con un caudal de entre 5 y 10 $\mu\text{l}/\text{min}$.
5. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
6. En el campo con la lista de métodos, haga clic en **Syringe Pump Method**.
7. En la pestaña Syringe Pump Method Properties, especifique los valores de los parámetros correspondientes. Consulte la tabla: [Tabla 10-2](#).

Tabla 10-2: Pestaña Syringe Pump Method Properties

Parámetro	Valor típico
Syringe Diameter	Dependiente de la jeringa. El valor para una jeringa de 1,0 ml es de 4,610 mm
Flow Rate	5 a 10
Unit	$\mu\text{l}/\text{min}$

Figura 10-1: Pestaña Syringe Pump Method Properties



8. Haga clic en **Start Syringe Pump**.
9. Seleccione **MS Method** (Método de MS) en la lista de métodos.
10. En la pestaña MS, escriba los parámetros que se muestran en la tabla: [Tabla 10-3](#).

Tabla 10-3: Pestaña MS

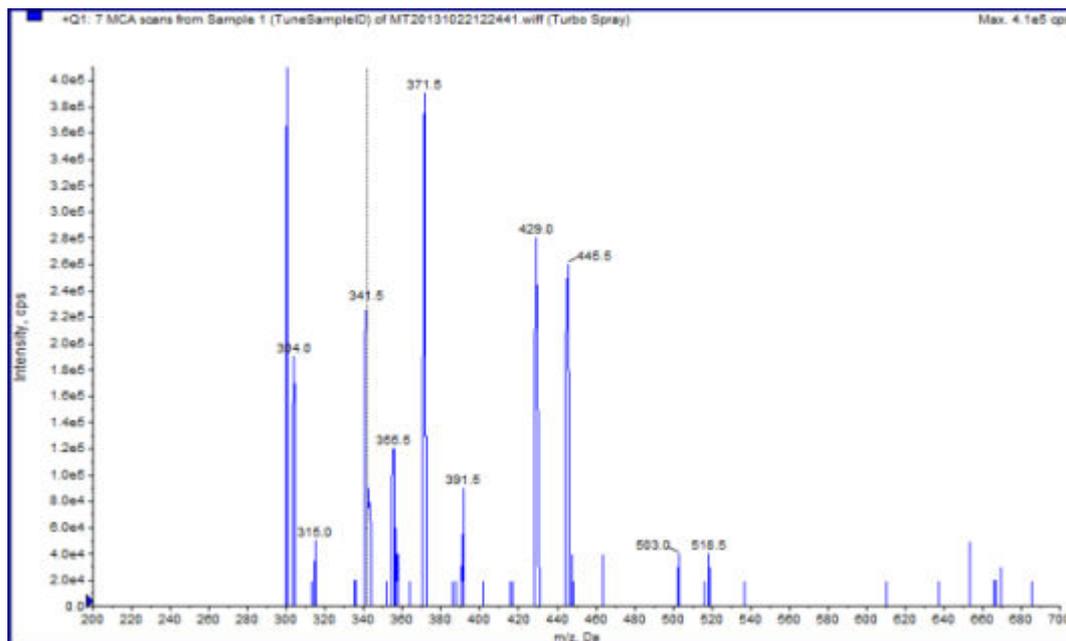
Parámetro	Valor
Scan type	Q1 MS (Q1)
Start (Da)	200
Stop (Da)	700
Scan rate (Da/s) (si está disponible)	200
Duration (min)	3

11. Haga clic en **Start**.
12. Espere hasta que aparezca un TIC uniforme a la izquierda y picos a la derecha. A continuación, haga clic en **Stop**.
13. Seleccione la casilla **MCA**.
14. Escriba 10 en el campo **Cycles**.
15. Haga clic en **Start**.

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

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

Figura 10-2: Iones de los compuestos



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

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

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

Los parámetros de la última optimización cuantitativa se almacenan.

1. Asegúrese de que se ha instalado la concentración de solución adecuada en la bomba de la jeringa y que la bomba de la jeringa se ha activado.

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

Si se ha integrado una bomba de jeringa y se ha activado, el LED de estado de la bomba de la jeringa parpadea.

2. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Compound Optimization**.

Se abrirá la página Instrument Settings.

Instrucciones de funcionamiento: Optimización automática

3. En la sección Inlet, haga clic en **Infusion**.
4. Haga clic en **MS/MS Analysis** en la sección Mass Spectrometer.
5. Haga clic en **Next**.
Se abrirá la página Ions to use in MS/MS Analysis.
6. Seleccione los valores de parámetro pertinentes. Consulte la tabla: [Tabla 10-4](#).

Tabla 10-4: Ejemplo de parámetros para usar en la página MS/MS Analysis

Parámetro	Valor
MW Ion: Search Window	2,500
Resolution	Unidad
Polarity	Positive o Negative, en función de las propiedades del compuesto objetivo
Product Ion	Selección automática
Resolution	Unidad

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

7. Haga clic en **Criteria**, al lado de la opción **Auto Select**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Product Ion Auto Selection Criteria.
8. Escriba los valores de parámetro pertinentes. Consulte la tabla: [Tabla 10-5](#).

Tabla 10-5: Ejemplo de parámetros del cuadro de diálogo Product Ion Auto Selection Criteria

Parámetro	Valor	Descripción
From the Most Intense (peaks)	3	El número de picos de fragmento que se va a optimizar. El algoritmo genera un espectro de análisis de ion producto mientras eleva la CE en el modo MCA. En este ejemplo, el algoritmo toma los tres iones de fragmentación más intensos del espectro y, a continuación, prosigue con la optimización MS/MS únicamente en esos fragmentos. Para los compuestos desconocidos, seleccione más picos.

Tabla 10-5: Ejemplo de parámetros del cuadro de diálogo Product Ion Auto Selection Criteria (continuación)

Parámetro	Valor	Descripción
Build final method using (most intense peaks)	2	<p>El número de iones de fragmentación por ion precursor (compuesto objetivo) que se va a incluir de forma automática en el método de adquisición. El número especificado define el número de transiciones de MRM que se incluirán para cada compuesto objetivo en el método. El orden de preferencia se basa en la intensidad del ion fragmentado.</p> <p>Dos es un valor inicial mejor que uno, ya que, normalmente, son necesarios dos iones producto para la cuantificación. Comience con tres por si hubiera algún problema con uno de los dos mejores. Vuelva y encontrará el tercero ya identificado.</p> <p>Para los compuestos desconocidos, seleccione más picos para su uso en caso de interferencia.</p>
Exclude Product Ions within \pm (Da of Precursor Ion m/z)	20,000	<p>El valor Da que define el intervalo de exclusión alrededor del ion precursor. Los iones de fragmentación que entren dentro de este intervalo no serán seleccionados para la optimización MRM. Por ejemplo, si el usuario escribe ± 5 Da para un ion precursor con un valor m/z de 500, se excluyen todas las fragmentaciones que estén dentro del intervalo de m/z de 495 a 505. Esto evita que el ion precursor se optimice como un ion producto.</p>
Min. Mass for Product Ion (Da)	60,000	<p>La masa de fragmento más pequeña que se va a tener en cuenta para la optimización. Utilice esta opción para ampliar o reducir el tamaño del intervalo que contiene iones de fragmentación que se van a tener en cuenta a partir de la masa del ion precursor.</p>
Threshold for Product Ion (cps)	100,000	<p>Número mínimo de recuentos de un ion producto para que se tenga en cuenta.</p>

9. Haga clic en **OK** para guardar los cambios en los criterios de selección.
10. Haga clic en **Next**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Target Components.
11. Escriba los valores de parámetro pertinentes. Consulte la tabla: [Tabla 10-6](#).

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

Tabla 10-6: Ejemplo de parámetros del cuadro de diálogo Target Compounds

Compuesto objetivo	Campo	Valor
Reserpina	Nombre del compuesto	Reserpine
	MW (Da) ²	609,3
	Núm. Cargas	1
Minoxidil	Nombre del compuesto	Minoxidil
	MW (Da) ²	210.2
	Núm. Cargas	1
Tolbutamida	Nombre del compuesto	Tolbutamide
	MW (Da) ²	271,1
	Núm. Cargas	1
Rescinamina (IS)	Nombre del compuesto	Rescinnamine
	MW (Da) ²	635,3
	Núm. Cargas	1

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

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

Al finalizar la optimización, se creará un archivo de adquisición MRM y se le dará el nombre *<compound>_QOpt_FinalMRM_Pos.dam*, donde *<compound>* es el primer compuesto de la página Target Components.

Revisión de los resultados de optimización

Al finalizar la optimización, los parámetros optimizados se guardan en un método de adquisición. Todos los archivos .dam y .wiff generados en el proceso de optimización se guardan en la carpeta *Acquisition Methods* y en una subcarpeta de la carpeta *Data* del proyecto correspondiente. El nombre de la subcarpeta se genera utilizando el nombre del compuesto y la fecha.

- Una vez finalizada la optimización, imprima el archivo de texto que contiene los parámetros optimizados para cada compuesto.
- Haga clic en **File > Open** y, a continuación, seleccione el archivo *Reserpine_QOpt_FinalMRM.POS.dam*.

² Indique las masas de iones exactas.

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

Optimización automática de un analito mediante FIA

Requisitos previos

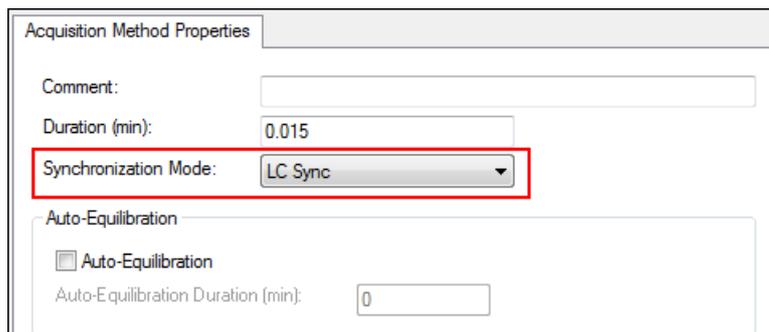
- Identifique los iones de los compuestos y guarde el método de adquisición básico.
- Añada un procesador de muestras automático y una bomba de LC al método de adquisición básico. Si se utiliza el FIA para la optimización, estos dispositivos tienen que estar activos en el perfil de hardware.
- Cree un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

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

1. Introduzca una disolución con una mezcla de los cuatro compuestos en un procesador de muestras automático.
La muestra debe tener la cantidad suficiente para poder examinar cada variable de cada parámetro y que después sobre muestra. Por ejemplo, si la temperatura debe ser de 300, 400 y 500 °C, en el caso de que el volumen de inyección sea de 10 µl, se necesitarán más de 30 µl (inyección de 3 × 10 µl).
2. Asegúrese de que la opción **LC Sync** esté seleccionada en el método.

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

Figura 10-3: Método de adquisición con la opción LC Sync seleccionada



3. Asegúrese de que los parámetros de la fuente de iones y de gas se establecen en niveles razonables para evitar que el espectrómetro de masas se contamine en la optimización. Consulte la sección [Optimización de la fuente de iones](#).
4. Ajuste el micrómetro horizontal en 5 mm.
5. Configure el micrómetro vertical en la fuente de iones en función del caudal. Para empezar, utilice los parámetros de la tabla siguiente.

Tabla 10-7: Parámetros verticales de la fuente de iones

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

6. Establezca los valores para el sistema de LC y utilice un volumen de inyección del procesador de muestras automático de 10 µl, por ejemplo. Use la misma concentración para el experimento de infusión, o bien una concentración más baja.

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

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

7. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Compound Optimization**.
Se abrirá la página Instrument Settings.
8. Según el sistema LC que se use, especifique los valores de parámetros adecuados. Consulte la tabla: [Tabla 10-8](#).

Tabla 10-8: Ejemplo de parámetros de configuración de instrumentos

Parámetro	Valor
Inlet	FIA
Rack Code	Específico del procesador de muestras automático
Rack Position	Específico del procesador de muestras automático
Injection Volume	10 µl (volumen de ejemplo)
Mass Spectrometer	Análisis MS/MS

9. Seleccione el método de adquisición predeterminado que corresponda.
10. Haga clic en **Next**.
11. Asegúrese de que la casilla **Int. Std.** no esté activada.
Al seleccionar la casilla de verificación, se indica la MRM que corresponde a los estándares internos. Los estándares internos no se optimizan durante el proceso de optimización.
12. En el grupo Resolution, seleccione **Unit** en los campos **Q1 Resolution** y **Q3 Resolution**.

Figura 10-4: Campos Q1 Resolution y Q3 Resolution

FIA Target Compounds

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

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

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

Resolution

Q1 Resolution:

Q3 Resolution:

< Back Next > Cancel Help

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

Nota: Para mantener limpio el sistema, asegúrese de que los valores no sean demasiado bajos. Para informarse de los parámetros que puede usar para empezar, consulte la tabla [Tabla 10-9](#).

Sugerencia: Escriba los valores antes de seleccionar la casilla de verificación.

Tabla 10-9: Ejemplo de parámetros de la página FIA Source Parameters

Parámetro	¿Es necesario seleccionar la casilla Optimize?	Valores para la optimización
Curtain Gas	Sí	20;40;55
Collision Gas	No	—
IonSpray Voltage	Sí	1500;2000;3000;4000;5000
Temperature	Sí	300;400;500;600;700

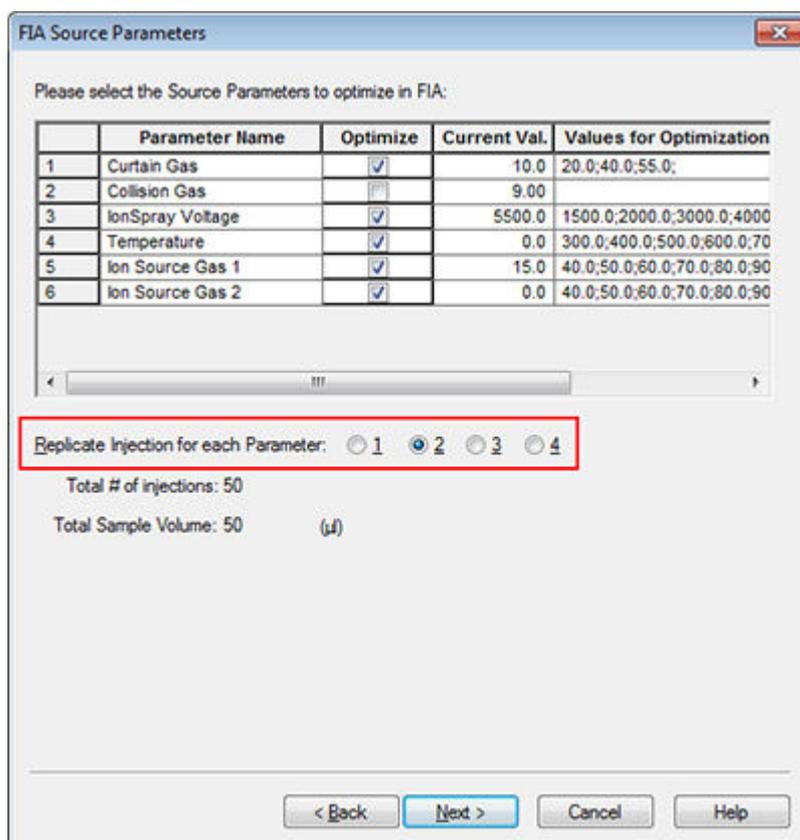
Tabla 10-9: Ejemplo de parámetros de la página FIA Source Parameters (continuación)

Parámetro	¿Es necesario seleccionar la casilla Optimize?	Valores para la optimización
Ion Source Gas 1	Sí	40;50;60;70;80;90
Ion Source Gas 2	Sí	40;50;60;70;80;90

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

El número total de inyecciones y el volumen total de la muestra se calcula en función de las especificaciones que se indiquen aquí. Tenga en cuenta el volumen total de la muestra necesario. El volumen de la muestra aumenta con el número de variables por cada parámetro que se optimice, ya que cada variable es un método independiente.

Figura 10-5: Ejemplo del campo Replicate Injection para cada parámetro



16. Haga clic en **Next**.

17. En la página FIA Compound Parameters de cada analito, utilice los valores del parámetro del ejemplo provisto como punto de partida. Consulte la tabla: [Tabla 10-10](#).

Nota: Los valores que se indican en la tabla siguiente son sugerencias. Para obtener más información, consulte el documento *Ayuda*.

Tabla 10-10: Ejemplo de la página FIA Compound Parameters

Parámetro	¿Es necesario seleccionar la casilla Optimize?	Valores para la optimización
Declustering Potential	Sí	60;80;100;120;200
Entrance Potential	No	—
Collision Energy	Sí	20;30;40;50;70;80;100
Collision Cell Exit Potential	Sí	2;4;6;8;10;12

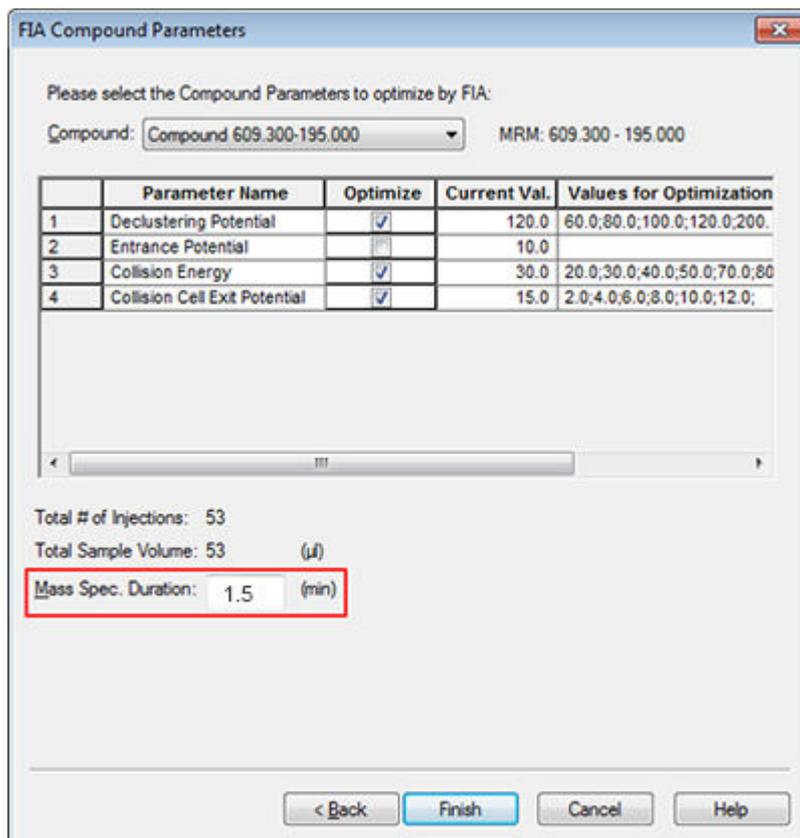
El número total de inyecciones y el volumen de la muestra dependiente se actualizan automáticamente. En comparación con los parámetros de la fuente de iones, que requieren una inyección por valor y replicación, los parámetros dependientes de compuestos solo requieren una inyección por parámetro. Se lleva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

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

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

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

Figura 10-6: Ejemplo del campo Mass Spec. Duration



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

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

22. Para obtener parámetros optimizados, repita esta rutina.

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

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

Nota: El software genera varios métodos de adquisición.

24. Guarde este método con un nombre más sencillo.

Instrucciones de funcionamiento: Métodos de adquisición

11

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.

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**.

Acerca de los métodos de LC

La creación de un método de adquisición mediante el uso de un dispositivo periférico, como un sistema de LC, incluye la especificación de los parámetros de funcionamiento de ese dispositivo. Si se crea un nuevo método de adquisición a partir de un archivo existente, se pueden utilizar todos o algunos de los métodos de dispositivo periférico en el método de adquisición.

Creación de métodos de espectrometría de masas

Utilice el Acquisition Method Editor para crear un método de adquisición del espectrómetro de masas (MS). En función del tipo de espectrómetro de masas configurado y el tipo de análisis seleccionado, los campos y las opciones disponibles serán unos u otros. El Acquisition Method Editor valida la configuración a medida que se introducen los parámetros.

Cree uno de los métodos siguientes y utilícelo para adquirir datos. Consulte la sección [Creación y envío de un lote](#)

- [Creación de un método mediante un tipo de análisis Q1 MS](#)
- [Creación de un método de análisis tipo Q1 MI](#)
- [Creación de un método de adquisición usando un tipo de análisis MRM](#)

Creación de un método mediante un tipo de análisis Q1 MS

Utilice el siguiente procedimiento para crear un método mediante el uso del análisis Q1 MS. Se determina la intensidad de los iones para cada masa solicitada en el rango de análisis.

Requisitos previos
<ul style="list-style-type: none">• Asegúrese de que haya activo un perfil de hardware que contenga el espectrómetro de masas y la bomba de jeringa.• En la barra de herramientas del software, asegúrese de que se ha seleccionado el proyecto adecuado.

1. En la barra Navigation, en **Acquire**, haga doble clic en **Build Acquisition Method**. Se muestra el Acquisition Method Editor con una plantilla de método basada en el perfil de hardware activo.
2. En el panel Acquisition method, haga clic en **Acquisition Method**.

Instrucciones de funcionamiento: Métodos de adquisición

3. En la pestaña Acquisition Method Properties, en la lista **Synchronization Mode**, asegúrese de que la opción **No Sync** esté seleccionada. Para obtener más información acerca de los modos de sincronización, consulte el documento *Ayuda*.
4. En el panel Acquisition method, haga clic en el icono **Mass Spec**.
5. En la pestaña MS, en la lista **Scan type**, seleccione **Q1 MS (Q1)**.
6. En la sección Polarity, haga clic en **Positive**.
7. Desactive las casillas de verificación **Center/Width** y **Parameter Range** si están activadas.
8. En la tabla de rangos de masa, escriba los valores que se muestran en la tabla siguiente.

Figura 11-1: Valores de los parámetros de la pestaña MS

	Start (Da)	Stop (Da)	Time (sec)
1			

Tabla 11-1: Valores de los parámetros de la pestaña MS

Campo	Valor de ejemplo
Start (Da)	200
Stop (Da)	700
Time (sec)	2,5
Scan rate (Da/s)	200
Duration (min)	3

9. En la pestaña Advanced MS, tenga en cuenta que **Scan mode** está configurado en **Profile** y **Step size** es 0,1.

Figura 11-2: Pestaña Advanced MS

MS	Advanced MS
Scan mode:	Profile
Step size:	0.1 (Da)
Resolution Q1:	Unit
Intensity threshold (total count):	0
Settling time:	0 (ms)
Pause between mass ranges:	5.007 (ms)

En este ejemplo, el cuadrupolo (Q1) está analizando un rango de 500 Da en pasos de 0,1 Da. Por este motivo, hay 5000 incrementos en el rango de masas. Si el análisis tarda 2,5 segundos, el tiempo de permanencia es de 0,5 ms por incremento. Normalmente, esta es la velocidad máxima a la que debe realizarse el análisis de Q1 o Q3 en un proceso de calibración estándar. Si se desea analizar con mayor rapidez un análisis Q1 o Q3, deberá prestarse especial atención a la calibración de masas.

Nota: El tamaño del incremento y el tiempo de análisis determinan el tiempo de permanencia por incremento para el análisis. El tiempo de permanencia es el periodo de tiempo empleado en adquirir la señal en cada incremento de un análisis.

- En la pestaña MS, haga clic en **Edit Parameters**. Se abre el cuadro de diálogo Parameter Table.
- En la pestaña Source/Gas, escriba los valores siguientes:

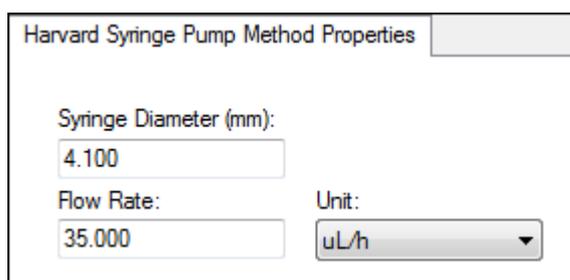
Tabla 11-2: Parámetros de la pestaña Source/Gas

Parámetros de fuente/gas	Valor típico
Curtain Gas (CUR)	35
IonSpray Voltage (IS)	5000
Temperature (TEM)	0
Ion Source Gas 1 (GS1)	20
Ion Source Gas 2 (GS2)	0

Instrucciones de funcionamiento: Métodos de adquisición

- Haga clic en la pestaña Compound y, a continuación, establezca **Declustering Potential (DP)** en 90 y deje **Entrance Potential (EP)** en 10.
Es posible que un valor de 90 no sea el más óptimo para el espectrómetro de masas, pero es un buen potencial de desagrupación por el que empezar.
- Haga clic en **OK**.
- En el panel Acquisition method, haga clic en el icono **Harvard Syringe Pump** o **Integrated Syringe Pump**.

Figura 11-3: Pestaña Harvard Syringe Pump Method Properties



Harvard Syringe Pump Method Properties

Syringe Diameter (mm):
4.100

Flow Rate: 35.000 Unit: uL/h

- Edite el método de bomba de jeringa para incluir **Syringe Diameter**, **Flow Rate** y **Unit**.
- Guarde el método de adquisición.
Pasos siguientes: utilice el método de adquisición para obtener los datos para el análisis preliminar. Para crear y enviar lotes, consulte la sección: [Creación y envío de un lote](#).

Creación de un método de análisis tipo Q1 MI

Utilice el siguiente procedimiento para crear un método mediante el uso del análisis Q1 MI. Se determina la intensidad de los iones solo para las masas especificadas.

Requisitos previos

- Asegúrese de que haya activo un perfil de hardware que contenga el espectrómetro de masas y la bomba de jeringa.
- En la barra de herramientas del software, asegúrese de que se ha seleccionado el proyecto adecuado.

- En la barra Navigation, en **Acquire**, haga doble clic en **Build Acquisition Method**. Se muestra el Method Editor con una plantilla de método basada en el perfil de hardware activo.
- En el panel Acquisition method, haga clic en **Acquisition Method**.
- En la pestaña Acquisition Method Properties, en la lista **Synchronization Mode**, asegúrese de que la opción **No Sync** esté seleccionada. Para obtener más información acerca de los modos de sincronización, consulte el documento *Ayuda*.
- En el panel Acquisition method, haga clic en el icono **Mass Spec**.

5. En la pestaña MS, en la lista **Scan type**, seleccione **Q1 Multiple Ions (Q1 MI)**.
6. En la sección Polarity, haga clic en **Positive**.
7. En la tabla de rangos de masa, escriba los valores que se muestran en la tabla siguiente.

Figura 11-4: Valores de los parámetros de la pestaña MS

Tabla 11-3: Valores de los parámetros de la pestaña MS

Campo	Valor
Q1 Mass (Da)	609
Time (msec)	100

8. Haga clic en **Edit Parameters**.
Se abre el cuadro de diálogo Parameter table.
9. En la pestaña Source/Gas, escriba los valores siguientes:

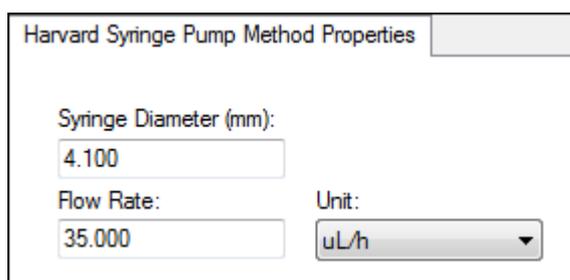
Tabla 11-4: Parámetros de la pestaña Source/Gas

Parámetros de fuente/gas	Valor típico
Curtain Gas (CUR)	35
IonSpray Voltage (IS)	5000
Temperature (TEM)	0
Ion Source Gas 1 (GS1)	20
Ion Source Gas 2 (GS2)	0

Instrucciones de funcionamiento: Métodos de adquisición

- Haga clic en la pestaña Compound y, a continuación, establezca **Declustering Potential (DP)** en 90 y deje **Entrance Potential (EP)** en 10.
Es posible que un valor de 90 no sea el más óptimo para el espectrómetro de masas, pero es un buen potencial de desagrupación por el que empezar.
- Haga clic en **OK**.
- En el panel Acquisition method, haga clic en el icono **Harvard Syringe Pump** o **Integrated Syringe Pump**.

Figura 11-5: Pestaña Harvard Syringe Pump Method Properties



Harvard Syringe Pump Method Properties

Syringe Diameter (mm):
4.100

Flow Rate: 35.000 Unit: uL/h

- Edite el método de bomba de jeringa para incluir **Syringe Diameter**, **Flow Rate** y **Unit**.
- Save** el método de adquisición.
Pasos siguientes: cree y envíe un lote que contenga este método de adquisición. Para crear y enviar lotes, consulte la sección: [Creación y envío de un lote](#).

Creación de un método de adquisición usando un tipo de análisis MRM

Utilice el siguiente procedimiento para crear un método mediante el uso del análisis MRM. Este tipo de análisis se utiliza en aplicaciones cuantitativas. Se puede utilizar un análisis MRM para determinar la cantidad de un compuesto presente en una muestra. Actualmente se utiliza en análisis de farmacocinética y cada vez más en mercados aplicados y aplicaciones de cribado.

Requisitos previos

- Asegúrese de que haya activo un perfil de hardware que contenga el espectrómetro de masas y la bomba de jeringa.
- En la barra de herramientas del software, asegúrese de que se ha seleccionado el proyecto adecuado.

- En la barra Navigation, en **Acquire**, haga doble clic en **Build Acquisition Method**.
Se muestra el Acquisition Method Editor con una plantilla de método basada en el perfil de hardware activo.
- En el panel Acquisition method, haga clic en **Acquisition Method**.

3. En la pestaña Acquisition Method Properties, en la lista **Synchronization Mode**, asegúrese de que la opción **No Sync** esté seleccionada. Para obtener más información acerca de los modos de sincronización, consulte el documento *Ayuda*.
4. En el panel Acquisition method, haga clic en el icono **Mass Spec**.
5. En la pestaña MS, en la lista **Scan type**, seleccione **MRM (MRM)**.
6. En la sección Polarity, haga clic en **Positive**.
7. En la tabla de rangos de masa, escriba los valores que se muestran en la tabla siguiente.

Figura 11-6: Tipo de análisis MRM

Tabla 11-5: Rango de masas y tiempo de permanencia

Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Time (msec)
609	397,2	100

8. En la pestaña MS, haga clic en **Edit Parameters**. Se abre el cuadro de diálogo Parameter Table.
9. En la pestaña Source/Gas, escriba los valores siguientes:

Tabla 11-6: Parámetros de la pestaña Source/Gas

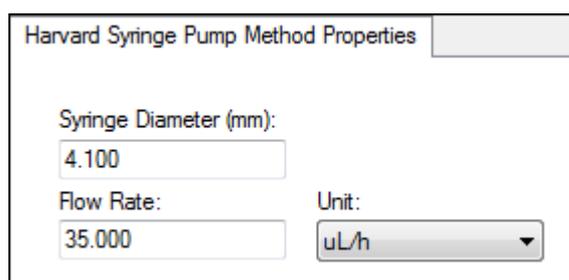
Parámetros de fuente/gas	Valor típico
Curtain Gas (CUR)	35
IonSpray Voltage (IS)	5000
Temperature (TEM)	0
Ion Source Gas 1 (GS1)	20

Tabla 11-6: Parámetros de la pestaña Source/Gas (continuación)

Parámetros de fuente/gas	Valor típico
Ion Source Gas 2 (GS2)	0

10. En la pestaña Compound, establezca **Declustering Potential (DP)** en 90 y deje el **Entrance Potential (EP)** en 45.
11. Haga clic en **OK**.
12. En el panel Acquisition method, haga clic en el icono **Harvard Syringe Pump**.

Figura 11-7: Pestaña Harvard Syringe Pump Method Properties



Harvard Syringe Pump Method Properties

Syringe Diameter (mm):
4.100

Flow Rate: 35.000 Unit: uL/h

13. En la pestaña Syringe Pump, edite el método de bomba de jeringa para incluir **Syringe Diameter**, **Flow Rate** y **Unit**.
14. **Save** el método de adquisición.
Pasos siguientes: cree y envíe un lote que contenga este método de adquisición. Para crear y enviar lotes, consulte la sección: [Creación y envío de un lote](#).

Adición o eliminación de dispositivos de los métodos de adquisición

Utilice el Acquisition Method Editor para personalizar el método de adquisición mediante la adición o eliminación de métodos de dispositivos periféricos de LC. Si el icono del dispositivo necesario no figura en el panel Acquisition Method Browser, solo podrá agregar ese dispositivo periférico si está incluido en el perfil de hardware activo.

Nota: Los parámetros disponibles para dispositivos de LC variarán en función del fabricante.

Creación o eliminación de un dispositivo de Cromatografía

1. Con un archivo de método abierto en el Acquisition Method Editor, en el panel Acquisition method, haga clic con el botón derecho en **Acquisition Method** y luego haga clic en **Add/Remove Device Method**.
2. Active o desactive la casilla de verificación situada junto al método de dispositivo correspondiente para agregar o quitar el método de dispositivo.
3. Haga clic en **OK**.

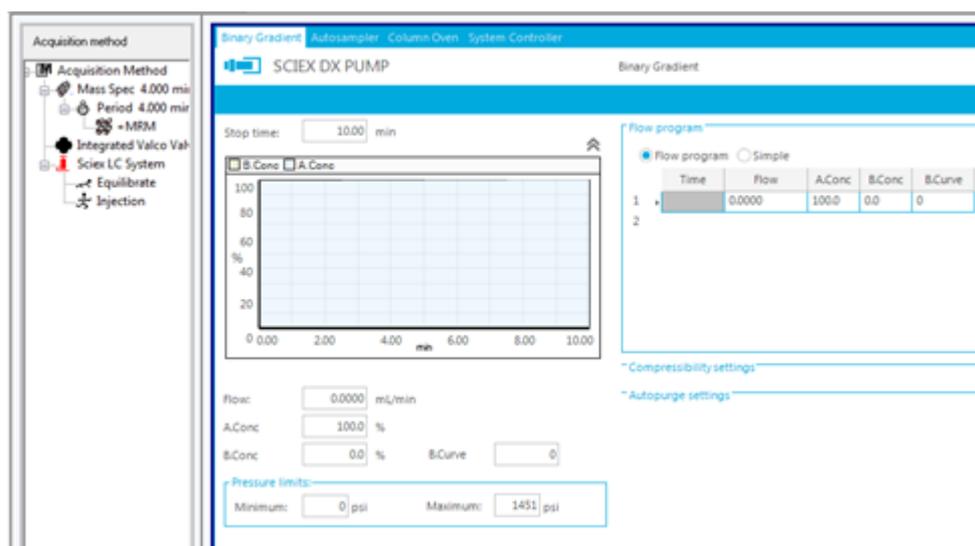
4. Si hay un dispositivo de LC seleccionado, en la pestaña **Acquisition Method Properties**, seleccione **LC sync** para el modo **Synchronization**.

Modificación de las propiedades de la bomba de LC

Modifique cada dispositivo del método en orden para que funcione correctamente para su método.

1. Con un archivo de método abierto en el Acquisition Method Editor en el panel Acquisition method, haga clic en el icono del dispositivo de LC. Se abrirá la pestaña LC Pump Gradient en el panel Acquisition Method Editor.

Figura 11-8: Parámetros de la bomba SCIEX DX

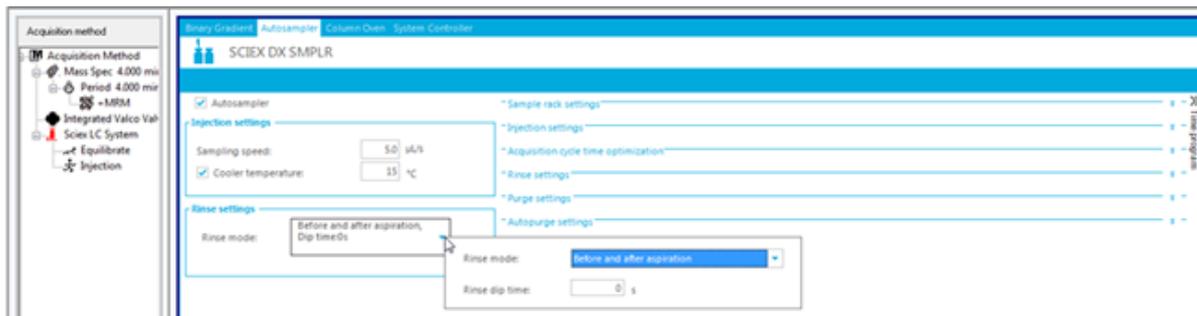


2. Edite el método de la bomba de LC según sea necesario para los experimentos.
3. Guarde el método.

Definición de las propiedades del procesador de muestras automático

1. Con un archivo de método abierto en el Acquisition Method Editor, en el panel Acquisition method, haga clic en el dispositivo **Autosampler**. Se abrirá la pestaña Autosampler Properties en el panel Acquisition Method Editor.

Figura 11-9: Parámetros de SCIEX DX Autosampler



2. Si es necesario, edite los detalles de inyección y lavado.
3. Guarde el método.

Definición de las propiedades del horno de columna

1. Con un archivo de método abierto en el Acquisition Method Editor, en el panel Acquisition method, haga clic en el dispositivo **Column Oven**.

Se abrirá la pestaña Column Oven Properties en el panel Acquisition Method Editor.

Figura 11-10: Parámetros del SCIEX DX Column Oven



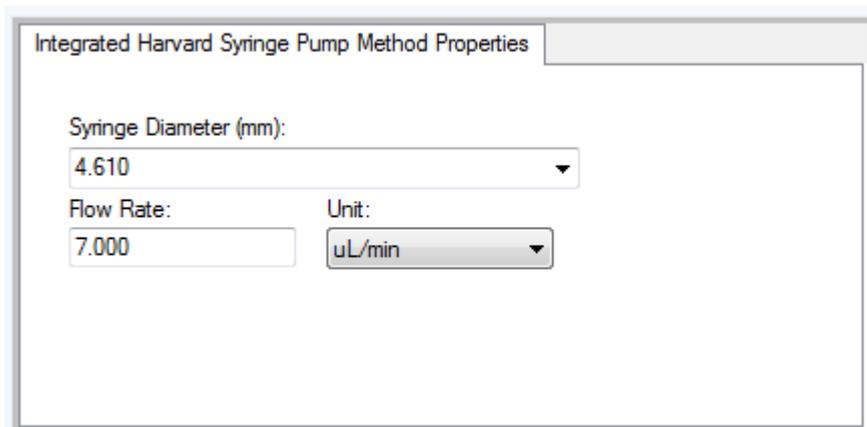
2. Indique la temperatura del horno de columna o los compartimentos de este en grados Celsius.
3. Guarde el archivo.

Configuración de la bomba de jeringa integrada

Este procedimiento está destinado a la bomba de jeringa integrada.

1. Asegúrese de que la bomba de jeringa integrada esté seleccionada en el perfil de hardware del dispositivo.
2. Haga clic en el icono **Syringe Pump** del panel Acquisition method. Se abrirá la pestaña Syringe Pump Method Properties en el Acquisition Method Editor.

Figura 11-11: Pestaña Syringe Pump Properties



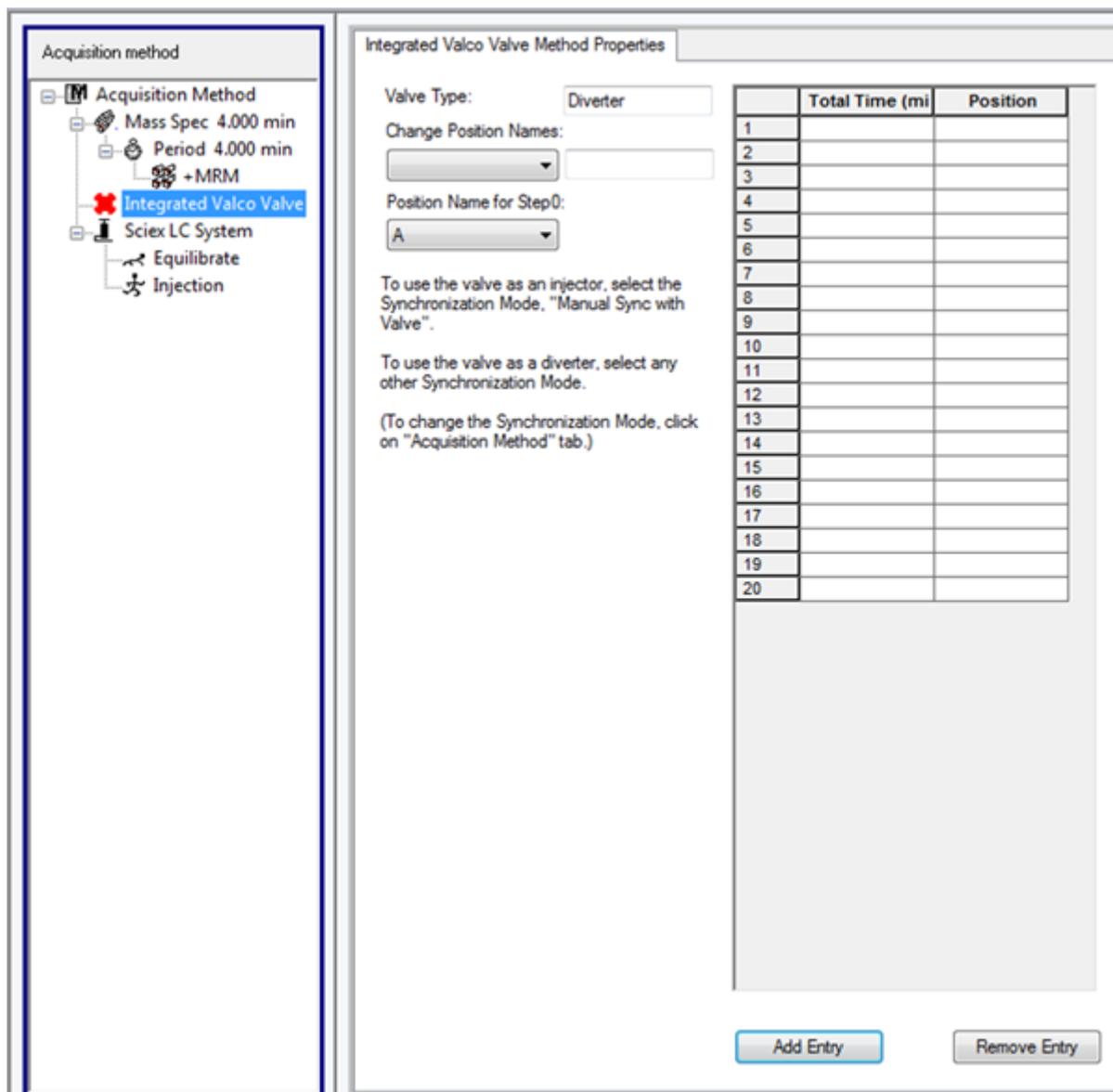
3. Escriba el diámetro de la jeringa en el campo **Syringe Diameter (mm)**.
4. Escriba el caudal en el campo **Flow Rate**.
5. Seleccione las unidades de caudal en la lista **Unit**.

Definición de las propiedades de la válvula desviadora

La válvula de conmutación se puede utilizar como válvula desviadora o de inyección.

1. Con un archivo de método abierto en el Acquisition Method Editor, haga clic en el icono **Valve** del panel Acquisition method.
Se abrirá la pestaña Valve Properties en el panel Acquisition Method Editor.

Figura 11-12: Válvula Falco integrada



- Si es necesario, cambie los nombres predefinidos de los nombres de posición.

En ocasiones, la válvula de conmutación se utiliza para desviar el flujo de disolvente al sistema de recogida de residuos o a otra columna. Los nombres de posición predefinidos son A y B.

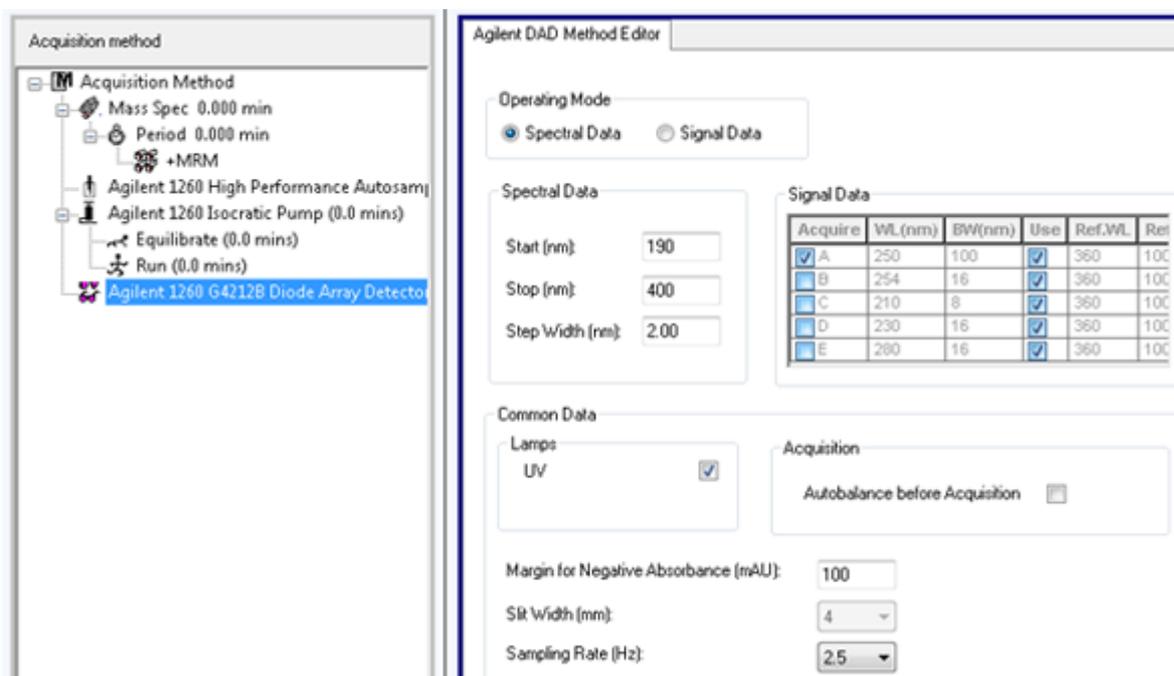
- En la lista **Change Position Names**, seleccione una posición.
- En la lista **Change Position Names**, cambie los nombres predefinidos de las posiciones A y B por Inject o Divert y Column o Waste, en función de cómo se haya conectado la válvula.

3. En la columna **Total Time (min)**, haga clic en una celda y, a continuación, escriba el tiempo total que la válvula permanecerá en esta posición.
4. En la columna **Position**, haga clic en una celda y, a continuación, en la lista **Position**, seleccione la posición de la válvula.
5. Repita los pasos 3 y 4 para cada cambio de la válvula requerido durante la adquisición.
6. Guarde el archivo.

Definición de las propiedades del detector de diodos en serie

1. Con un archivo de método abierto en el Acquisition Method Editor, en el panel Acquisition method, haga clic en el icono **Diode Array Detector (DAD)**. Se abrirá la pestaña DAD Method Editor en el panel Acquisition Method Editor.

Figura 11-13: Pestaña DAD Method Editor

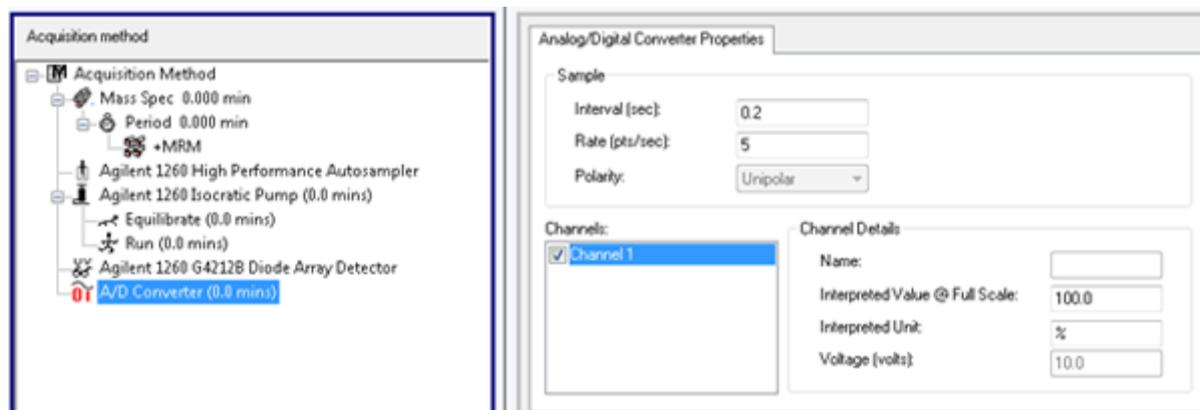


2. Realice una de las siguientes acciones:
 - Para analizar de una a cinco longitudes de onda individuales, en la sección **Operating Mode**, haga clic en **Signal Data** y, a continuación, edite los requisitos de datos.
 - Para analizar un rango de longitudes de onda, en la sección **Operating Mode**, haga clic en **Spectral Data** y, a continuación, edite los requisitos de datos.
3. Guarde el archivo.

Definición de las propiedades del convertidor analógico-digital

1. Con un archivo de método abierto en el Acquisition Method Editor, en el panel Acquisition method, haga clic en el icono **Analog to Digital Converter (ADC)**. Se abrirá la pestaña Analog/Digital Converter Properties en el panel Acquisition Method Editor.

Figura 11-14: Pestaña Analog to Digital Converter Properties



2. En la sección **Sample**, en el campo **Rate (pts/sec)**, indique la velocidad.

Nota: El intervalo y la velocidad son proporcionales entre sí. Cuando se modifica la velocidad, el software cambia automáticamente el intervalo.

3. Realice lo siguiente para establecer los detalles del canal:
 - En el campo **Channels**, haga clic en el nombre del canal y, a continuación, active la casilla de verificación situada junto al nombre para incluirlo en el método.
 - En el campo **Interpreted Value @ Full Scale**, indique el valor adecuado.
 - En el campo **Interpreted Unit**, indique la unidad adecuada.

El número de canales disponibles se especifica cuando se configura el ADC en el perfil de hardware.

4. Guarde el archivo.

Modificación de los métodos de adquisición

En el modo Acquire, los usuarios pueden agregar o eliminar periodos y experimentos de los métodos de adquisición existentes.

Periodos

Un periodo puede constar de uno o más experimentos en bucle. En un método de adquisición de periodo múltiple, los experimentos se llevan a cabo durante un periodo de tiempo específico, y después el software cambia a otro conjunto de experimentos. Los periodos son útiles cuando se conoce el tiempo de elución de los compuestos de un ciclo de

LC. El espectrómetro de masas puede llevar a cabo diferentes experimentos dependiendo de cuándo los compuestos se eluyan, para obtener la mayor información posible en el mismo ciclo.

La siguiente figura muestra un método de tres periodos.

Figura 11-15: Ejemplo de un experimento de periodos múltiples

The screenshot displays the software interface for configuring a mass spectrometry method. On the left, the 'Acquisition method' tree shows a 'Mass Spec' method with three periods: 3.000 min, 2.000 min, and 1.000 min, each containing MS2 scans. The right panel, 'MS Advanced MS', shows configuration for 'Experiment 1' with 'Scan type: Product Ion (MS2)', 'Scan rate: 200 (Da/s)', and 'Polarity: Positive'. A 'Period Summary' table is visible:

Start (Da)	Stop (Da)	Time (sec)
70.000	400.000	1.6505

Other parameters include 'Number of scans to sum: 1', 'Product ID: 609.300 (Da)', and 'Total Scan Time (includes pauses): 1.6555 (sec)'. A table below the summary shows the scan parameters for two cycles.

Experimentos

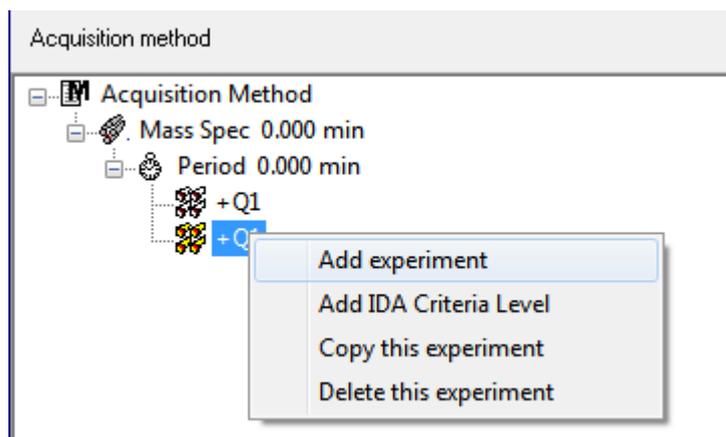
Un experimento incluye la configuración del espectrómetro de masas y el tipo de análisis durante un análisis MS. Un conjunto de análisis MS llevados a cabo durante un periodo de tiempo específico se denomina un periodo. Un método de adquisición en el que las acciones y parámetros de MS son los mismos durante su duración completa se denomina un método de periodo único y experimento único.

En los experimentos en bucle, la configuración de MS se modifica de análisis en análisis. Por ejemplo, si la muestra contiene dos compuestos, A y B, los usuarios posiblemente quieran llevar a cabo en bucle un experimento MS/MS del compuesto A y un experimento MS/MS del compuesto B, para obtener información sobre los dos compuestos en el mismo ciclo. El método del espectrómetro de masas alternará entre los dos tipos de análisis. Otros ejemplos de experimentos en bucle incluyen alternar entre el modo positivo y negativo en un ciclo y los métodos de adquisición dependiente de información (IDA).

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 11-16: 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.

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 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.

Técnicas de análisis

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

MS/MS: los análisis MS/MS se utilizan para determinar la información estructural.

- Para los análisis MS/MS en sistema de triple cuadrupolo, los iones seleccionados entran en la celda de colisión Q2 donde se activan por colisión para fragmentar, produciendo iones producto característicos.
- Para análisis de MS/MS en sistemas QTRAP, la fragmentación del ion precursor puede tener lugar en la celda de colisión Q2 o en la trampa lineal de iones.

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

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

Tipos de análisis del modo cuadrupolo

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

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

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

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

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

MRM (MRM): Análisis MS/MS en el que un ion seleccionado por el usuario se aísla en el cuadrupolo Q1 y se fragmenta después en la celda de colisión Q2. Luego se utiliza el cuadrupolo Q3 para aislar un fragmento definido por el usuario que el detector registra. Este tipo de análisis se utiliza principalmente para la cuantificación.

Instrucciones de funcionamiento: Métodos de adquisición

Product Ion (MS2): Análisis completo MS/MS en el que el cuadrupolo Q1 se utiliza para aislar y transmitir un ion precursor específico y el cuadrupolo Q3 analiza un rango de masa definido. Este tipo de análisis se utiliza para identificar todos los iones de fragmentación de un ion precursor concreto.

Precursor Ion (Prec): Análisis MS/MS en el que el cuadrupolo Q3 se fija en un valor de m/z especificado para transmitir un ion producto específico y el cuadrupolo Q1 analiza un rango de masas. Este tipo de análisis se utiliza para confirmar la presencia de un ion precursor o, con mayor frecuencia, para identificar compuestos que comparten un ion producto común.

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

Tipos de análisis en modo de LIT

Los análisis en modo de LIT utilizan el cuadrupolo Q3 como trampa lineal de iones. Los iones se capturan y almacenan en el cuadrupolo Q3 antes de analizarse fuera, lo que proporciona una mayor sensibilidad. Además, en la trampa lineal de iones se puede realizar el análisis MS/MS/MS, lo que proporciona más información sobre la muestra. Los tipos de análisis en modo de LIT se utilizan normalmente para mediciones cualitativas.

Nota: En China, solo hay disponibles espectrómetros de masas de triple cuadrupolo. Estos sistemas no admiten los tipos de análisis de trampa lineal de iones (LIT).

Enhanced MS (EMS): los iones se analizan en el cuadrupolo Q1 y luego se recopilan en la trampa lineal de iones. Estos iones se analizan fuera del cuadrupolo Q3 para generar espectros de tipo MS únicos.

Enhanced Product Ion (EPI): este tipo de análisis se usa para obtener un espectro MS/MS de alta calidad para un ion específico. La fragmentación se realiza en la celda de colisión Q2, lo que proporciona un espectro MS/MS que aporta mucha información, lo cual es típico de la fragmentación mediante disociación activada por colisión (CAD). En este modo de análisis, el ion precursor que se va a fragmentar se selecciona primero en el cuadrupolo Q1 con una ventana de masa de un ancho entre 1 Da y 4 Da que filtra todos los demás iones. El ion precursor se fragmenta en la celda de colisión Q2 mediante gas CAD. Los iones de fragmentación generados se capturan en la trampa lineal de iones y, a continuación, se analizan a una de las tres velocidades de análisis, dependiendo de la resolución necesaria para los iones de fragmentación.

En los experimentos de IDA, el campo **Product Of** está por defecto establecido en 30 Da y este valor no debe cambiarse.

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

MS/MS/MS (MS3): el cuadrupolo Q1 selecciona un ion precursor que se fragmenta mediante disociación activada por colisión en la celda de colisión Q2. Todos los iones producto resultantes se transmiten a la trampa lineal de iones, donde es aislado un solo ion producto. El ion aislado se fragmenta aún más en la trampa lineal de iones, y los iones producto resultantes se analizan al salir de la trampa a una de las tres velocidades de análisis. Como ocurre en cualquier técnica de disociación inducida por colisión (CID) dentro de trampa, existe un corte de masa baja para el segundo paso del MS/MS debido a que el fragmento de menor masa y el precursor deben estar estables en la trampa de manera simultánea. En los sistemas QTRAP, esto produce una pérdida de iones inferior al 28 por ciento de la masa del ion precursor durante los experimentos MS3. A este fenómeno se le conoce a menudo como la regla del tercio de corte.

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 11-7](#).

Tabla 11-7: 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 un rango de masas de 100 Da a 200 Da y un tamaño de paso de 0,1 Da, el espectrómetro de masas analiza de 99,95 a 100,95 (registrado como valor 100), de 100,05 a 101,05 (registrado como valor 101), de 199,95 a 200,05 (registrado como valor 200), etc.
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.
Centroid	En este modo, el espectrómetro de masas realiza el análisis igual que en el modo de perfil, pero crea un centroide de los datos, sustituyendo los picos detectados por el centro de gravedad ponderado según la intensidad de cada pico. Los datos de centroides tienen la ventaja de reducir notablemente el tamaño de archivo. La desventaja es que se pierde información relativa a la forma de pico y que, si los datos se han recopilado como un centroide, no se podrán alterar. Recomendamos utilizar el modo Profile y crear un centroide de los datos después de la adquisición.

Instrucciones de funcionamiento: Lotes

12

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 (opcional)
- Información de cuantificación (opcional)
- Datos de la muestra personalizados (opcional)
- Información del conjunto

Creación y envío de lotes

Un lote es una colección de información acerca de las muestras que se van a analizar. Los lotes indican al software el orden en que se analizan las muestras. Para obtener más información sobre la importación de lotes, consulte la *Guía para usuarios avanzados*.

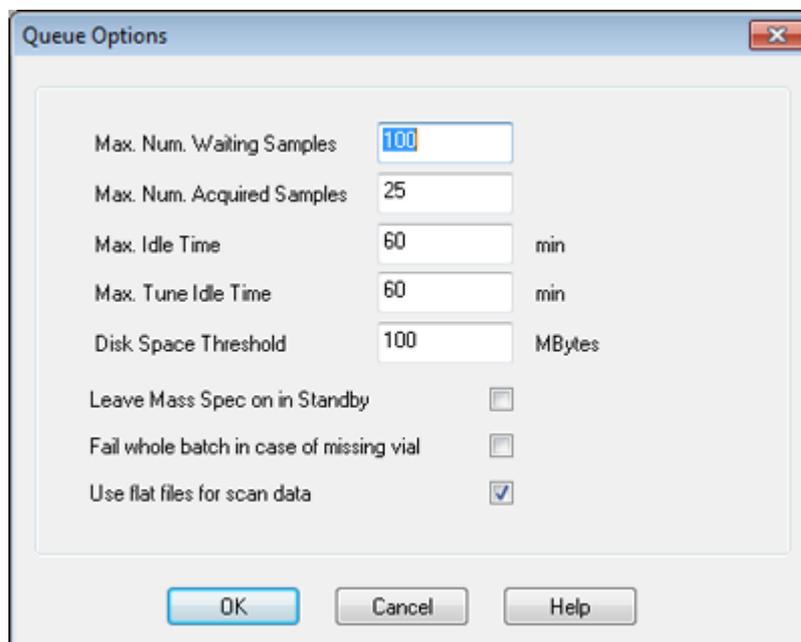
Configuración de las opciones de cola

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 12-1: 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.

Instrucciones de funcionamiento: Lotes

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

Creación y envío de un lote

Utilice este flujo de trabajo para crear un lote.

No utilice el método de cuantificación rápida Quick Quant generado automáticamente para realizar la cuantificación si se utiliza la función de cuantificación rápida para almacenar tipos de muestras y concentraciones en el archivo de datos. Este método de cuantificación no utiliza los parámetros de integración específicos de la muestra y el compuesto optimizados para la selección de picos.

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 12-2: Cuadro de diálogo Batch Editor

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

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

Figura 12-3: Agregar diálogo de muestra

The screenshot shows a dialog box titled "Add Sample". It is divided into three main sections. The first section, "Sample name", includes a "Prefix" text box with "Sample" entered, a "Sample number" checkbox which is checked, and a "Number of digits" text box with "3" entered. The second section, "Data file", includes a "Prefix" text box with "Data" entered, "Set name" and "Auto Increment" checkboxes both checked, and a "Sub Folder" text box with a "Browse" button to its right. The third section, "New samples", includes a "Number" text box with "1" entered. At the bottom of the dialog are three buttons: "OK", "Cancel", and "Help".

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

Si el espectrómetro de masas se emplea como dispositivo de diagnóstico *in vitro*, se recomienda adquirir tan solo una muestra por archivo de datos.

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**.

Instrucciones de funcionamiento: Lotes

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. En la pestaña **Sample**, en la lista **Set**, seleccione el conjunto.
16. 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.

Nota: Para rellenar automáticamente las muestras en la pestaña **Locations**, haga clic en el primer y el último vial de un conjunto manteniendo pulsada la tecla **Shift**. Estos viales aparecen como círculos rojos. En la pestaña **Locations**, se pueden realizar varias inyecciones del mismo vial; para hacerlo, pulse la tecla **Ctrl** a la vez que hace clic en la ubicación del vial. El círculo rojo se volverá verde.

17. Como alternativa, para utilizar la pestaña **Locations** para seleccionar las posiciones de los viales, consulte la sección [Selección de la posición de los viales mediante la pestaña Locations \(opcional\)](#).
18. (Opcional) Siga los procedimientos de la sección: [Tabla 12-1](#) según sea necesario.

Tabla 12-1: Sugerencias sobre el editor de lotes

Para realizar esta acción	Haga esto
Para cambiar todos los valores de una columna al mismo tiempo	Haga clic en un encabezado de columna y, a continuación, haga clic con el botón derecho. En el menú, seleccione los comandos Auto Increment y Fill Down para cambiar los valores de la columna. Esta función también sirve para varias celdas de una misma columna.
Para modificar un método de adquisición existente	Seleccione el método y, a continuación, haga clic en Method Editor , en la lista. Para crear un método de adquisición nuevo, seleccione None en la lista y, a continuación, haga clic en Method Editor . Esta función solo deben utilizarla usuarios calificados. No utilice esta función si está seleccionada la opción Use Multiple Methods .
Para aplicar un método de cuantificación creado anteriormente	Seleccione el método en la lista Quantitation .
Para seleccionar más de un pocillo o vial al mismo tiempo	Pulse la tecla Shift y haga clic en el primer y el último pocillo o vial del rango.

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

20. 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.

21. 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 22.
- Si el mensaje indica que el lote no está preparado para su envío, realice los cambios que se indican en el mensaje.

22. 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.

23. 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**.

Cambio del orden de las muestras

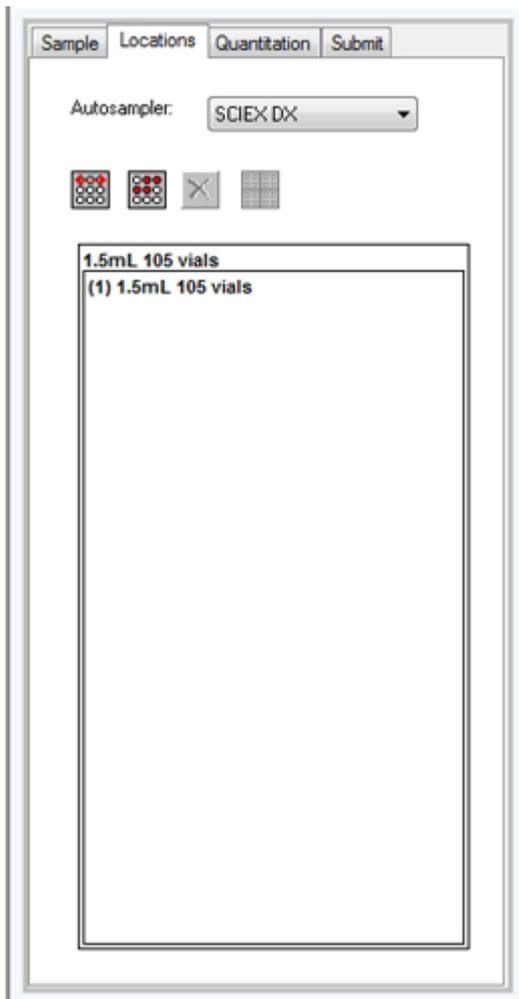
Es posible cambiar el orden de las muestras antes de enviarlas a la sección **Queue**.

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.

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.

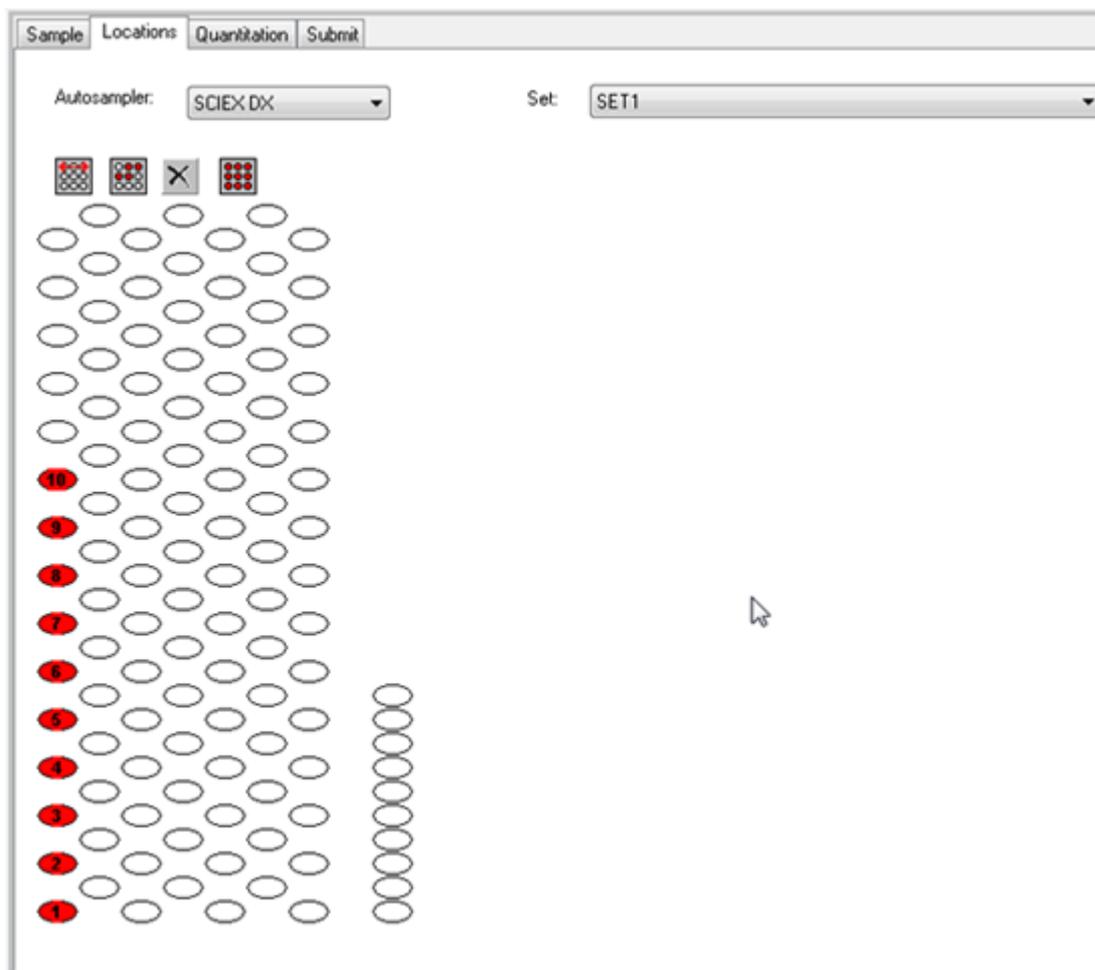
Figura 12-4: Ubicación de la muestra visual



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 12-5: Pestaña Locations



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

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.

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

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

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

1. Con un archivo de lote abierto en la ventana Batch Editor, abra la pestaña Quantitation.
2. Seleccione el conjunto que contenga las muestras.
3. Seleccione un **Quant Type**, **Dilution Factor** y **Weight/Volume** para todas las muestras en la lista de la celda.
4. (Si es necesario) En la columna **Analyte**, escriba la concentración del analito.
5. (Si es necesario) En la columna **Internal Standard**, escriba la concentración interna estándar.
6. Repita este procedimiento para cada conjunto del lote.

Equilibrado del sistema

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

1. Haga clic en **Equilibrate** ().
Se abre el cuadro de diálogo Equilibrate.
2. Seleccione el método de adquisición utilizado para el lote enviado.
3. Escriba el tiempo de equilibrado en el campo **Time (min)**, en minutos.
4. Haga clic en **OK**. El sistema inicia el equilibrado.
Al finalizar el equilibrado, el estado del sistema cambiará a Ready.

Sugerencia: Si el equilibrado de la carga no finaliza de la forma esperada o si el estado del sistema no pasa a Ready al terminar el equilibrado, asegúrese de que se cumplen las siguientes condiciones:

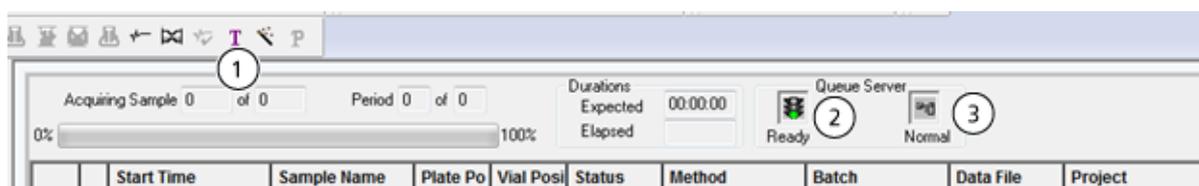
- El perfil de hardware activado es adecuado para el método de adquisición.
 - El sistema de LC está encendido.
 - El sistema de LC ha establecido comunicación correctamente con el software.
-

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** () 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 12-6: 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**.

Nota: Recomendamos procesar la muestra de nuevo si la adquisición de la misma finaliza de forma anormal.

Importación de archivos de lotes

Los usuarios pueden importar un archivo de texto que contenga la información del lote en lugar de crear un lote en el Batch Editor. Si todos los detalles de la muestra están en una hoja de cálculo, es más rápido reordenar e importar los datos en la hoja de cálculo que escribir manualmente los datos en Batch Editor.

Antes de importar la información del lote desde un archivo de texto, asegúrese de que la disposición y el formato de los datos del archivo sean correctos. En concreto, los encabezados de columna de la hoja de cálculo deben coincidir con los encabezados de columna del Batch Editor. Para asegurarse de que el archivo de texto incluye los encabezados adecuados, debe crear un lote mediante el editor de lotes, exportarlo como

archivo de texto, escribir los valores adecuados en un editor de hojas de cálculo y, a continuación, volver a importar el archivo al editor de lotes.

Para obtener ejemplos de archivos con el formato correcto, consulte la carpeta de lotes en el proyecto de ejemplo.

La información de un archivo de lotes también se puede exportar para su uso en otras aplicaciones, como Microsoft Excel, Microsoft Access y determinados programas de Sistema de Gestión de Información para Laboratorio (LIMS).

Creación de un lote como archivo de texto

Requisitos previos

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

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

1. En el Batch Editor, cree un lote de un solo conjunto con una sola muestra.
2. Haga clic en **File > Export**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Save As.
3. En el campo **File name**, escriba el nombre que desee utilizar para el archivo de texto y, a continuación, haga clic en **Save**.
4. Abra el archivo de texto en un programa de hojas de cálculo como Excel.
5. Escriba, o copie y pegue, los detalles de las muestras: una muestra por fila, con los detalles bajo los encabezados adecuados.

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

6. Guarde el archivo de texto modificado como archivo .txt o .csv y, a continuación, cierre el programa de hojas de cálculo.
El archivo de texto ya se puede importar al Batch Editor.

Importación de un lote de un archivo de texto

1. En el Batch Editor, en la pestaña Sample, haga clic con el botón secundario y, a continuación, seleccione **Import From > File**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Open.
2. Haga clic en el archivo de texto correspondiente y, a continuación, en **Open**.

Instrucciones de funcionamiento: Lotes

Si utiliza un procesador de muestras automático, se abrirá el cuadro de diálogo Select Autosampler.

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

3. En la lista de procesadores de muestras automáticos, seleccione el procesador y, a continuación, haga clic en **OK**.
La tabla de muestras se rellena con los detalles del archivo de texto.
4. Envíe el lote.

Sugerencias relativas al Batch Editor y al Acquisition Method Editor

Para realizar esta acción	Haga esto
Para cambiar los valores de la tabla	Haga clic en una celda y, a continuación, escriba el nuevo valor (por ejemplo, para cambiar el nombre de una muestra).
Para cambiar todos los valores de una columna al mismo tiempo	Haga clic en un encabezado de columna y, a continuación, haga clic con el botón derecho. En el menú que se muestra, utilice los comandos Auto Increment y Fill Down para cambiar los valores de la columna. Esta función también sirve para varias celdas de una misma columna.
Para modificar un método de adquisición existente	Seleccione el método en la lista y, a continuación, haga clic en Method Editor . Para crear un método de adquisición nuevo, seleccione None en la lista y, a continuación, haga clic en Method Editor . Esta función solo deben utilizarla usuarios calificados. No utilice esta función junto con la opción Use Multiple Methods .
Para aplicar un método de cuantificación creado anteriormente	Seleccione el método en el menú Quantitation .
Para seleccionar más de un pocillo o vial al mismo tiempo	Mantenga pulsada la tecla Shift y haga clic en el primer y el último pocillo o vial del rango que desee seleccionar.

Para obtener información sobre cómo usar el menú contextual Batch Editor, consulte la sección: [Editor de lotes](#).

Sugerencias para la solución de problemas sobre lotes

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
En el software Analyst MD, Batch Editor, la columna de volumen de inyección (uL) se muestra como -1.	El método de adquisición no está seleccionado en el lote.	Seleccione el método de adquisición correcto para el lote.
	El dispositivo de LC en el método de adquisición seleccionado no coincide con el dispositivo de LC activado en el perfil de hardware.	Abra y revise el método de adquisición previsto. Corrija la información del dispositivo de LC y guarde el método.
	El perfil de hardware activado no contiene un dispositivo de LC o contiene uno distinto.	Abra Hardware Configuration Editor y, a continuación, desactive el perfil de hardware. Edite el perfil de hardware, corrija la información del dispositivo de LC y active el perfil de hardware.

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**.

Instrucciones de funcionamiento: Análisis y exploración de datos

13

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.

Descripción general de los datos de espectro y cromatográficos

Los datos de espectro proporcionan información específica de la masa acerca de un compuesto. Un cromatograma proporciona una vista general de los datos, normalmente dependiente del tiempo cuando se utiliza una columna de LC, pero no proporciona información acerca de los componentes de un pico. Un espectro se centra, sin embargo, en un pico concreto y proporciona el peso molecular del compuesto correspondiente, que se puede utilizar para buscar información más específica. Por ejemplo, si bien un cromatograma puede mostrar únicamente un pico, ese pico puede representar más de un compuesto, es decir, masas diferentes. Un espectro muestra todas las masas que conforman un pico, incluida la intensidad de cada masa.

Los datos cromatográficos pueden cambiar tanto en tiempo como en intensidad si se produce un cambio en las condiciones cromatográficas de una muestra determinada. Las intensidades de espectro pueden cambiar, pero las masas son fijas porque la masa de un compuesto no cambia.

Hay dos formas de generar datos de espectro:

- Si solo se adquiere un análisis, los datos se muestran de manera predeterminada como un espectro.

- A partir de un cromatograma.

Un espectro típico se muestra con el peso molecular, etiquetado con la relación masa/carga (m/z) en el eje X. La intensidad se representa en el eje Y.

Análisis de datos

Cuando se abre un archivo de datos, los diferentes paneles se muestran en ventanas, en función del tipo de experimento realizado. El software almacena los datos en archivos con la extensión .wiff. Los archivos .wiff pueden contener datos de más de una muestra. Además de los archivos .wiff, el software puede abrir archivos .txt. Sin embargo, los archivos .txt solo contienen los datos de una única muestra.

La información contenida en un archivo de datos se puede ver en formato de gráfico o tabular. Los datos gráficos se presentan como cromatograma o como espectro. Los datos de cualquiera de estos formatos pueden aparecer como una tabla de puntos de datos y es posible realizar varias operaciones de clasificación sobre los datos.

Los usuarios pueden abrir archivos que contengan datos existentes o datos que se están adquiriendo actualmente. Los usuarios también pueden ver todos los datos relacionados con experimentos en formato tabular. El panel de la tabla se compone de dos pestañas, Data List y Peak List. La pestaña Data List contiene información relativa al experimento, como el tiempo de adquisición y la intensidad del análisis. La pestaña Peak List muestra información relacionada con los picos, como la altura de pico, el área de pico y el tipo de punto de referencia.

Si los datos contienen resultados de varios experimentos, los usuarios pueden crear un TIC (Total Ion Chromatogram, cromatograma de iones totales) para cada experimento y otro TIC que representa la suma de todos los experimentos.

El TIC predefinido que representa la suma de todos los experimentos se muestra con una herramienta divisora debajo del centro del eje X.

Apertura de archivos de datos

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

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

Navegación por las muestras de un archivo de datos

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

Para leer descripciones de los iconos de navegación utilizados para este procedimiento, consulte la tabla: [Tabla D-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 13-1: Pestaña Peak List (sistemas QTRAP)

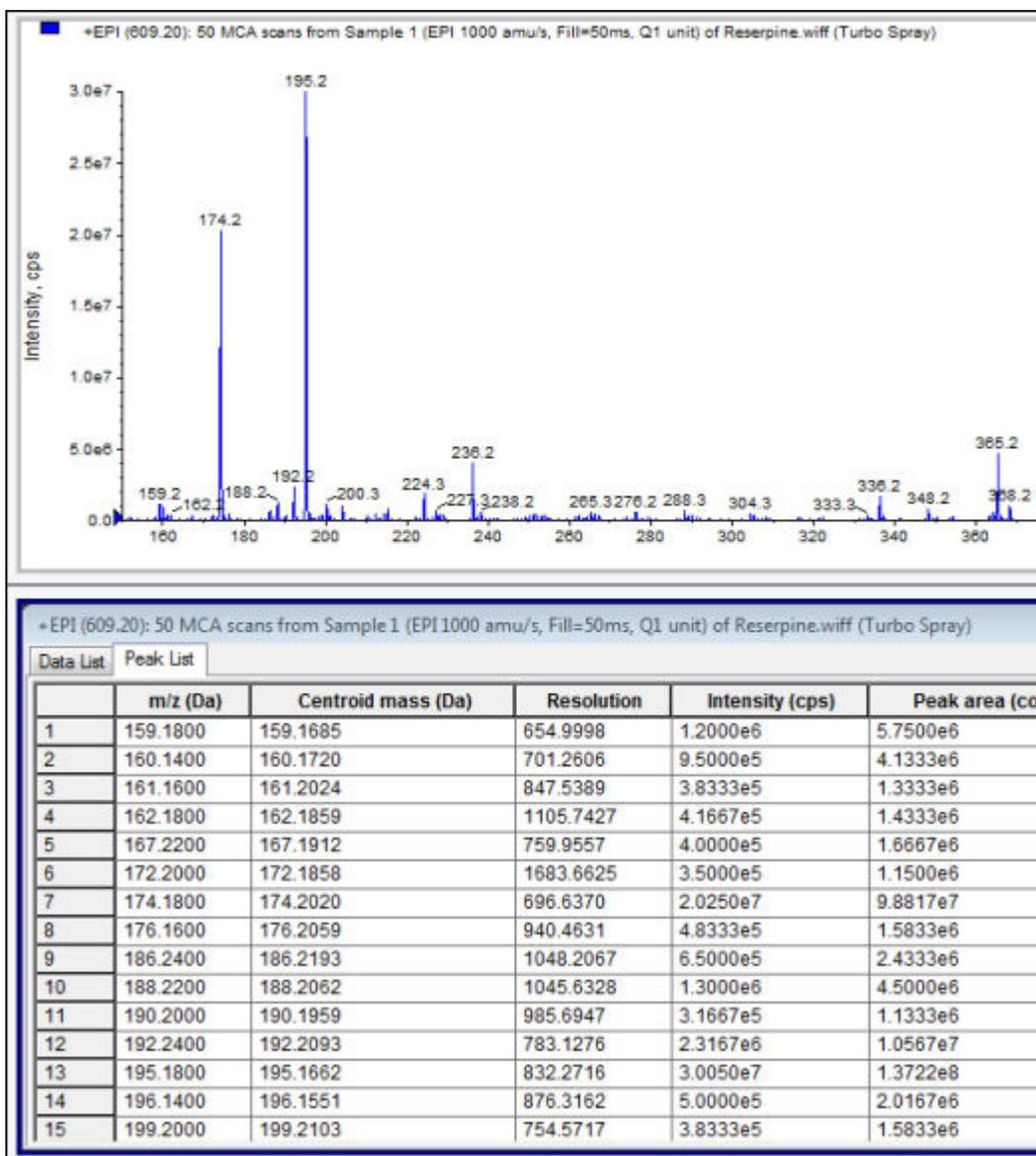


Tabla 13-1: Menú contextual de la pestaña Spectral Peak List

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.

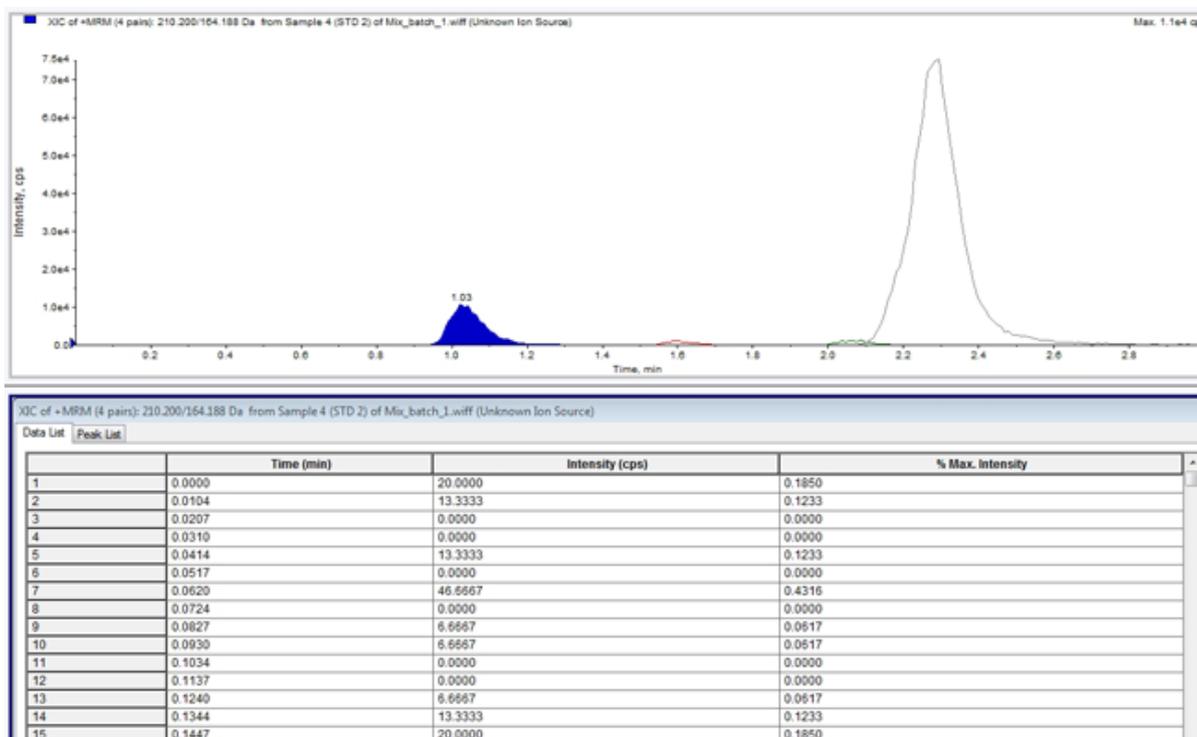
Tabla 13-2: Menú contextual de la pestaña Chromatographic Peak List

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.

Visualización de los datos cuantitativos básicos

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

Figura 13-2: List Data



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**.

Espectros

Un espectro son los datos que se obtienen directamente del espectrómetro de masas y normalmente representa el número de iones detectados con valores concretos de relación masa/carga (m/z). Se muestra como un gráfico con los valores m/z representados en el eje X y la intensidad (cps) representada en el eje Y. Para obtener más información sobre cómo trabajar con espectros, consulte la [Tabla G-4](#).

En el caso de los datos MS/MS, la intensidad se asocia con dos masas: la masa del ion precursor (Q1) y la masa o masas del ion producto (Q3).

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 13-3](#).

Para obtener más información acerca del uso de los iconos disponibles, consulte la tabla: [Tabla 13-5](#).

Tabla 13-3: Tipos de cromatogramas

Tipos de cromatogramas	Finalidad
Total Ion Chromatogram (TIC)	<p>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.</p> <p>Cuando se abre un archivo de datos, se abrirá de manera predeterminada como un TIC. Sin embargo, si el experimento solo contiene un análisis, se mostrará como un espectro.</p> <p>Si está activada la casilla de verificación MCA durante la adquisición del archivo de datos, el archivo de datos se abrirá en el espectro de masas. Si la casilla de verificación MCA no está activada, el archivo de datos se abrirá como TIC.</p>

Tabla 13-3: Tipos de cromatogramas (continuación)

Tipos de cromatogramas	Finalidad
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

Para ver un ejemplo de archivo de datos, debe seleccionar el proyecto `Example`.

Para ver un espectro de LIT, abra la carpeta `LIT` y, a continuación, abra el archivo `Reserpine.wiff`.

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

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

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.

Instrucciones de funcionamiento: Análisis y exploración de datos

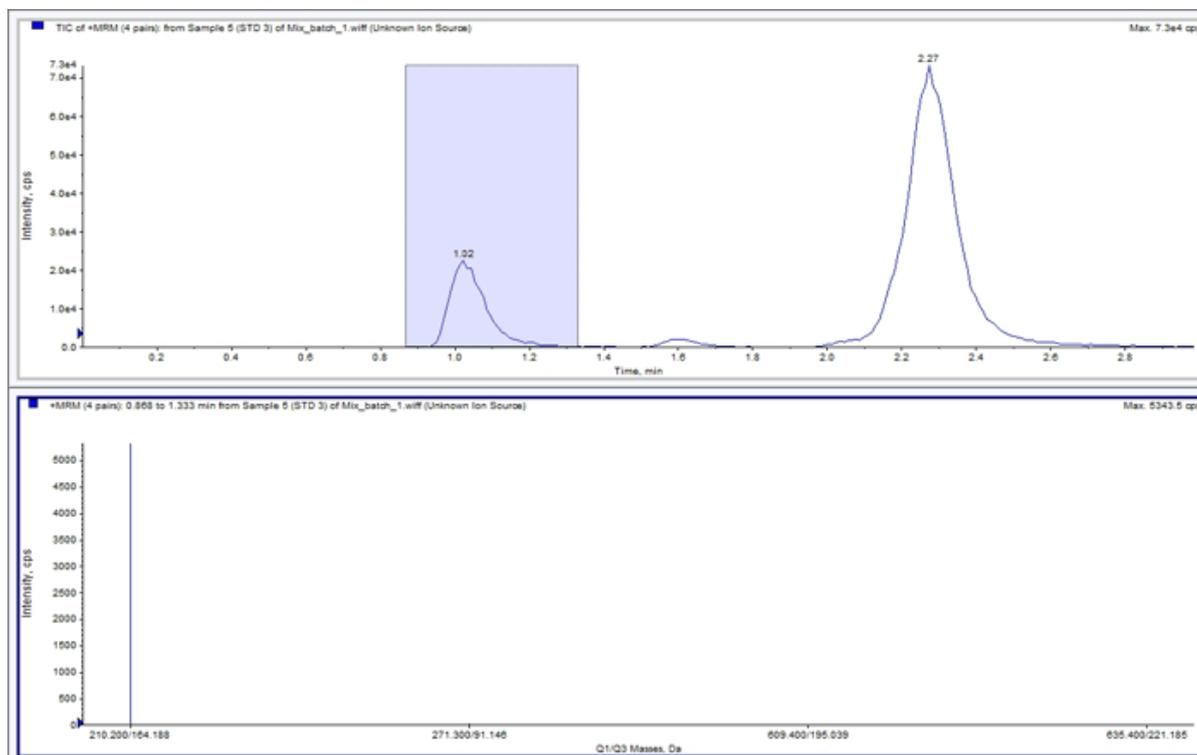
Cuando se abre un archivo de datos, se mostrará, de manera predeterminada, como un TIC. Sin embargo, si el experimento solo contiene un análisis, se mostrará como un espectro. Si el usuario selecciona la casilla **MCA** antes de la adquisición del archivo de datos, el archivo de datos se abrirá en el 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 13-3: Ejemplo de un TIC



XIC

Un XIC es un cromatograma de iones extraídos que se crea tomando los valores de intensidad de un valor de masa discreta individual, o un rango de masas, de una serie de análisis de espectro de masas. Muestra el comportamiento de una masa determinada, o un rango de masas, como una función de tiempo. La intensidad del ion, o la suma de las intensidades de todos los iones de un intervalo determinado, se representa en un panel cromatográfico.

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 13-5](#).

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 13-4: 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.
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.

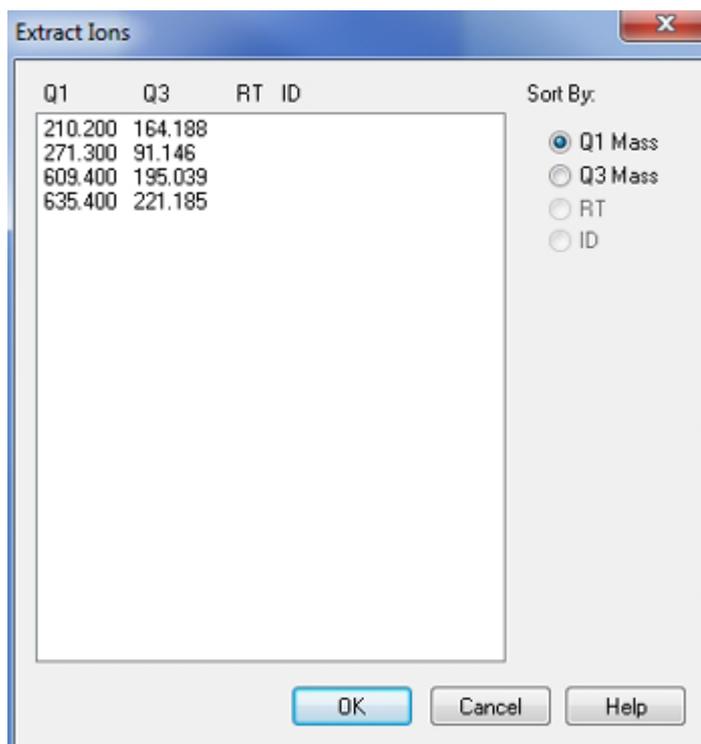
Generación de un XIC mediante el método de masas de pico base

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 13-4: 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.

BPC

Un BPC muestra la intensidad del ion más intenso de cada análisis como una función de número de análisis o tiempo de retención. Resulta útil en instancias en las que el TIC contiene tanto ruido que hay una gran desviación y resulta muy difícil distinguir los picos cromatográficos. También ayuda a distinguir entre componentes coeluidos. Los BPC se generan únicamente a partir de datos de periodos y experimentos individuales.

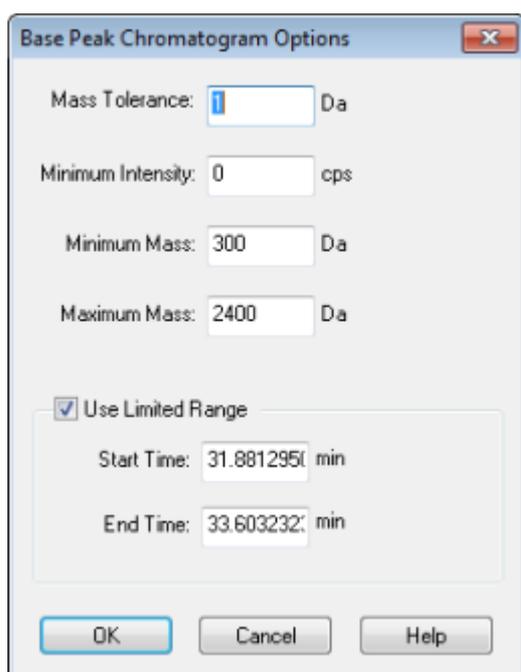
El gráfico utiliza dos colores, que se alternan cada vez que cambia la masa del pico de base. Los cambios de color se mantienen cuando se manipulan los datos al realizar desplazamientos o aplicar zoom. Para obtener más información acerca de la selección de los colores utilizados en el gráfico, consulte la *Ayuda*.

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 13-5: Opciones de cromatograma de pico base



4. En el campo **Mass Tolerance**, introduzca el valor para indicar el rango de masa utilizado para buscar un pico.
El software busca el pico utilizando un valor que es igual al doble del rango escrito (\pm el valor de masa).
5. 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.

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 incrementar el umbral, arrastre el triángulo azul hacia arriba en el eje Y.
 - Para reducir 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.

Generación de TWC

Los TWC son cromatogramas que se utilizan con poca frecuencia. Estos cromatogramas reflejan la absorbancia 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 13-5](#).

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.

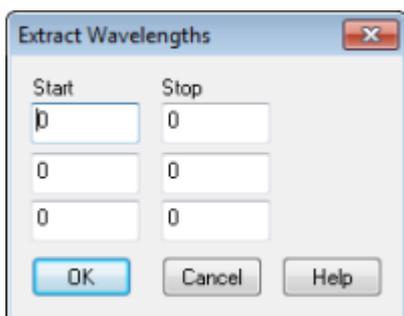
Sugerencia: Haga clic con el botón derecho en el interior del panel que contiene el espectro de DAD y, a continuación, haga clic en **Show DAD TWC**.

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 13-5](#).

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 13-6: 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.

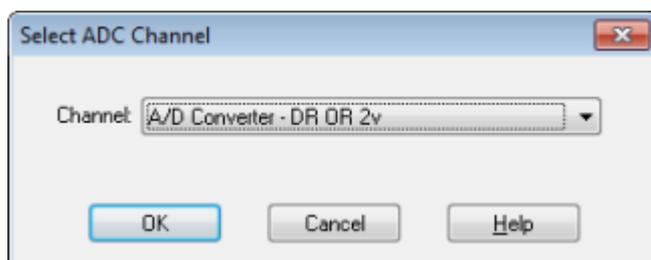
Sugerencia: Si el panel del TWC está cerrado, haga clic en cualquier punto del TWC para abrirlo de nuevo. Haga clic en **Explore > Show > Show DAD TWC**.

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 13-7: 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.

Procesamiento de datos gráficos

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

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

Gestión de datos

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

Tabla 13-5: 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	<ul style="list-style-type: none"> • Seleccione el gráfico. Haga clic en Window > Move Pane. • Seleccione el panel o ventana y, a continuación, arrástrelo a la nueva posición. Esta posición puede situarse en el interior de la misma ventana o de otra ventana diferente. <p>Cuando el cursor se sitúa sobre el límite de la ventana o panel activos, se muestra una flecha de cuatro puntas.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Si el panel se encuentra sobre o bajo el panel de destino, el panel se mueve para colocarse sobre o bajo ese panel, respectivamente. • Si el panel se encuentra a la izquierda o derecha del panel de destino, el panel se mueve para colocarse a la izquierda o la derecha de ese panel, respectivamente. • Si el panel se encuentra en cualquier otra posición, el panel se mueve a la fila de destino. La sombra paralela del panel conforme se mueve indica la nueva posición. 	
Vincular paneles	<ol style="list-style-type: none"> Con los dos gráficos abiertos, haga clic en uno para convertirlo en el panel activo. 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 13-5: 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.	

Aplicación de zoom a un gráfico

Aplique zoom a una parte de un gráfico para ver un pico o área concretos con mayor detalle en espectros y cromatogramas. Haga zoom repetidamente para ver los picos más pequeños.

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.**

Etiquetado de gráficos

Puede personalizarse el estilo preestablecido para las etiquetas de los gráficos y cromatogramas. Seleccione las fuentes que se utilizarán en las etiquetas de picos y ejes, así como los colores que se utilizarán en los trazos. Agregue etiquetas de eje y el tipo de etiqueta y precisión de los picos.

Adición de etiquetas de texto a un gráfico

Utilice etiquetas de texto específicas para etiquetar picos de interés o puntos importantes en el gráfico. Una etiqueta de texto específica junto a un pico permanece junto al pico cuando se amplía o reduce el tamaño del pico. Las etiquetas de texto específicas también permanecen con la muestra original cuando el usuario se desplaza por las muestras de un archivo de datos. Una etiqueta de texto específica consta de una línea de texto con un máximo de 128 caracteres.

1. En el espectro, haga clic con el botón derecho y, a continuación, seleccione **Add Caption**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Add Caption.
2. En el cuadro **Caption**, escriba el texto.
3. Para cambiar el tamaño y el estilo de la etiqueta de texto, haga clic en **Font**.
4. Para colocar la etiqueta de texto, haga clic en **OK**.

Sugerencia: Para cambiar la posición de la etiqueta de texto específica, arrástrela a una posición diferente. La etiqueta de texto específica permanece en el mismo lugar con respecto a los ejes X e Y cuando se amplía o reduce el tamaño del pico. Para editar o eliminar una etiqueta de texto específica, haga clic con el botón derecho en ella y, a continuación, seleccione el comando adecuado.

Adición de texto a un gráfico

Utilice texto para añadir varias líneas de información a un gráfico. A diferencia de las etiquetas de texto específicas, que se asocian con un pico específico y se mueven con él cuando el usuario amplía el gráfico, las etiquetas de texto permanecen en su ubicación original cuando el usuario aplica zoom en el gráfico. No permanecen con la muestra original cuando el usuario se desplaza por las muestras de un archivo de datos.

1. En el gráfico, haga clic con el botón derecho y seleccione **Add User Text**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Add User Text.
2. En el campo **User Text**, escriba el texto.
3. Para centrar el texto, seleccione la casilla de verificación **Center Text**.
4. Para cambiar el tamaño y el estilo de la etiqueta de texto específica, haga clic en **Font**.
5. Para insertar el texto, haga clic en **OK**.

Sugerencia: Para cambiar la posición del texto, arrástrelo a una posición diferente. Para editar o eliminar el texto, haga clic con el botón derecho en el texto y seleccione el comando adecuado.

Superposición y suma de espectros o cromatogramas

Superponga gráficos creados utilizando métodos similares para comparar visualmente dos o más conjuntos de datos. Una vez superpuestos, cada espectro se diferencia por el color del trazo. En el caso de los datos de análisis completos, el usuario puede visualizar las diferencias entre los espectros de varias muestras.

Cuando dos o más gráficos queden superpuestos, sume los gráficos para obtener un nuevo trazo. Cada punto del nuevo trazo es la suma de los puntos de los gráficos. La suma de varias superposiciones de tipos de datos similares puede facilitar y acelerar las posteriores operaciones de procesamiento. Por ejemplo, puede superponer varios XIC, sumarlos y, a continuación, suavizar la superposición sumada para eliminar el ruido.

La suma de superposiciones es similar a la generación de TIC, con la ventaja de poder seleccionar qué gráficos se van a superponer. Por ejemplo, si el usuario está consultando diez experimentos, el TIC agregará los diez experimentos juntos. Si se suman superposiciones, el usuario tendrá la opción de agregar solo nueve de los diez gráficos superpuestos. Esto resulta útil si los datos recopilados en el experimento uno son solo ruido.

Superposición de gráficos

Se pueden comparar visualmente dos o más conjuntos de datos mediante la superposición de los gráficos creados con métodos similares. Una vez superpuestos, cada espectro se diferencia por el color del trazo. En el caso de los datos de análisis completos, los usuarios pueden visualizar las diferencias entre los espectros de varias muestras.

Si se escoge uno o más paneles, entonces cada XIC se abrirá en un panel distinto.

Sugerencia: Para superponer menos de cuatro gráficos en el mismo panel, pulse **Ctrl**, haga clic con el botón derecho en un panel y, a continuación, haga clic en **Appearance Options**. En el cuadro de diálogo Appearance Options, en la pestaña Multiple Graph Options, seleccione **Yes** en el campo **Overlay Multiple Panes** de **Spectrum** y **Chromatogram**.

1. Seleccione el primer panel para superponer.
2. Haga clic en **Explore > Overlay**.
3. Haga clic en el segundo panel.

Los gráficos se superponen y los dos trazos se muestran en colores diferentes.

Sugerencia: Para ver una lista codificada por colores de los gráficos superpuestos, haga clic con el botón derecho en la barra de título del panel.

Alternancia entre gráficos superpuestos

1. Seleccione un panel que contenga gráficos superpuestos.

- Haga clic en **Explore > Cycle Overlays**.

La vista cambia para que el gráfico siguiente de la secuencia se muestre en primer plano.

Sum Overlays

- Superponga los gráficos que desee sumar.

- Haga clic en **Explore > Sum Overlays**.

Los gráficos superpuestos se sumarán.

Tabla 13-6: Referencia rápida de la barra de herramientas Explore: superposición de gráficos

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

Ejecución de sustracciones de fondo

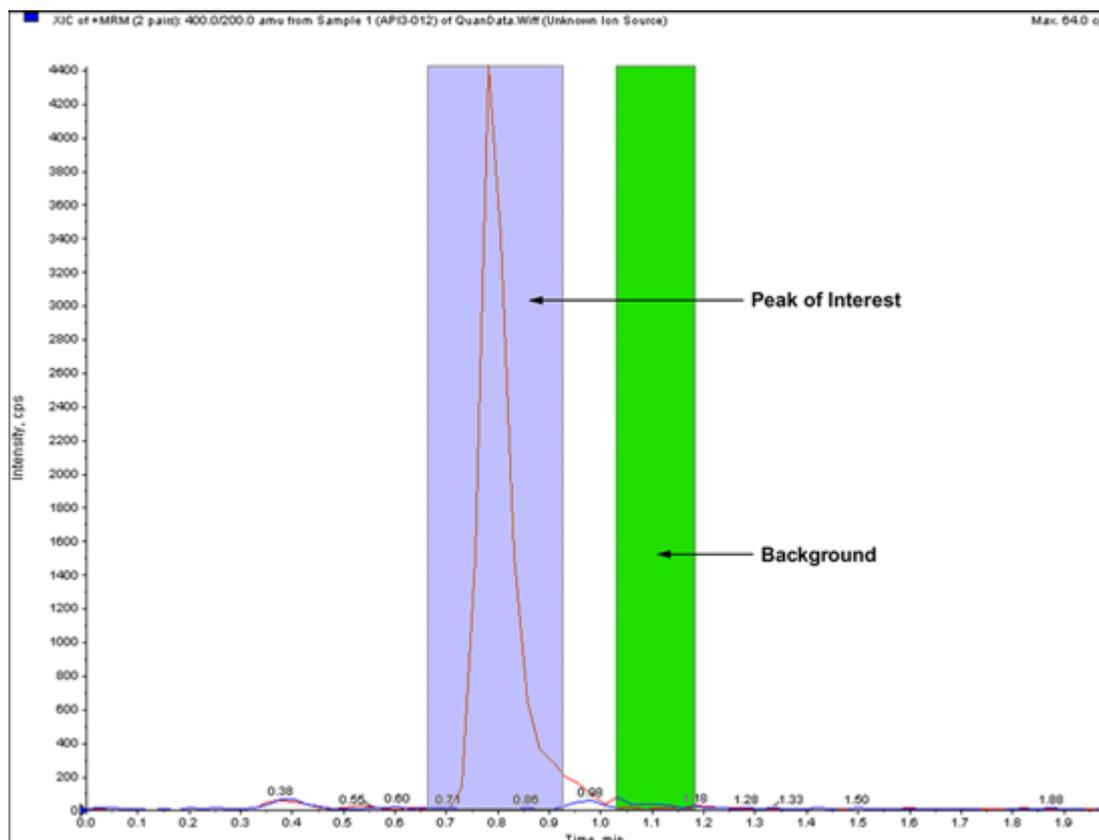
La sustracción de fondo reduce la cantidad de ruido de un espectro sustrayendo uno o dos rangos que contienen ruido de un rango que contiene un pico. Mueva los rangos de manera independiente, o bloquéelos y muévalos como una entidad única dentro del gráfico. Locked Background Subtraction es la configuración predefinida.

Background Subtract: utilice la sustracción de fondo para aislar un pico de interés. Resalte y sustraiga hasta dos rangos seleccionados de un pico. Bloquee los rangos y muévalos dentro del gráfico con el fin de optimizar el aislamiento del pico o para aislar otro pico.

Ejecución de una sustracción de fondo en un espectro

- Abra un archivo de datos.
- Seleccione un rango de fondo.

Figura 13-8: Rango de fondo seleccionado



3. Mantenga pulsada la tecla **Shift** y, a continuación, seleccione otro rango de fondo.
4. Para establecer el rango de sustracción, haga clic en **Explore > Background Subtract > Set Subtract Range**.
5. Seleccione el pico de interés.
6. Haga clic en **Explore > Background Subtract > Perform Background Subtract**.
El fondo se sustrae del pico y se genera un espectro nuevo.
7. Para aislar otro pico, arrastre los intervalos bloqueados en el cromatograma y repita la sustracción de fondo.

Nota: Para borrar la región de sustracción de fondo, haga clic en **Explore > Background Subtract > Clear Subtract Range**.

8. Para guardar el espectro sustraído del fondo como archivo de datos procesados, haga clic en **File > Save**.

Desbloqueo de los intervalos

El intervalo de sustracción seleccionado está definido como bloqueado.

- Haga clic en **Explore > Background Subtract > Subtract Range Locked**.

Los rangos se desbloquean y puede mover cada uno de manera independiente.

Tabla 13-7: Referencia rápida de la barra de herramientas Explore: sustracción de fondo

Icono	Nombre	Función
	Perform Background Subtract	Haga clic para realizar una sustracción de fondo tras la selección de los rangos de fondo.
	Subtract Range Locked	Haga clic para bloquear los rangos de fondo seleccionados. Desbloquee los rangos de fondo para moverlos de manera independiente.

Algoritmos de suavización

La suavización de un conjunto de datos elimina las variaciones locales que probablemente se hayan generado debido a ruido. Se pueden aplicar varios ciclos de suavización a los datos, aunque los usuarios solo pueden deshacer el más reciente. La suavización no está disponible para espectros de MI/MRM. Seleccione el algoritmo de suavización o el algoritmo de suavización gaussiano como el método de suavización predefinido.

Algoritmo de suavización

Cuando este algoritmo se utiliza para suavizar los datos, se definen los valores de ponderación de punto para tres puntos de datos: el punto de datos actual, el punto de datos anterior y el punto de datos siguiente. El algoritmo de suavización multiplica los puntos de datos por los valores de ponderación asignados, suma los valores obtenidos y, a continuación, divide el total por la suma de los valores de ponderación de punto. Se trata de una suavización más suave que la aplicada por el algoritmo gaussiano, y tarda más tiempo en suavizar datos con mucho ruido.

Algoritmo de suavización gaussiana

La suavización gaussiana implica la sustitución de cada punto de datos por el promedio ponderado de un número de puntos de datos a ambos lados de este. La ponderación de cada nuevo punto de datos se calcula en función de una curva gaussiana. Se trata de una suavización menos sofisticada que la del algoritmo de suavización, pero es un buen método para suavizar datos con mucho ruido.

Cuando se utiliza el método de suavización gaussiana, se definen dos valores:

Gaussian filter width (% of minimal distance between points): este valor indica la anchura utilizada para calcular la ponderación de puntos cercanos. La anchura se describe en términos de porcentaje de la distancia entre dos puntos del análisis, dónde la anchura predefinida de 100 % proporciona una distribución que es tan ancha como la distancia entre los puntos de datos.

Limit of Gaussian filter (number of minimal distance between points): este valor corresponde a los límites de la curva gaussiana, mostrada en múltiplos de la distancia entre los puntos. Por ejemplo, el valor predefinido de 10 crea una curva gaussiana que se trunca tras anchuras de diez puntos de datos a ambos lados del punto central.

Suavizado de datos

Puede elegir el método de suavización del software Analyst MD o el método de suavización gaussiana.

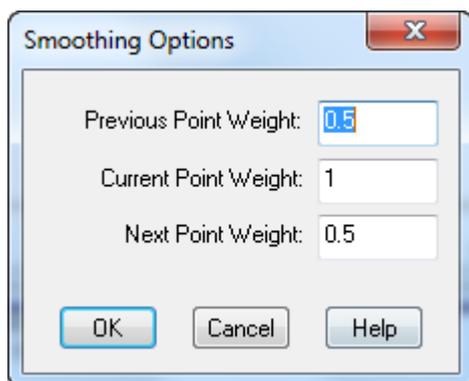
Sugerencia: Para deshacer el suavizado, haga clic en **Edit > Undo**. El software permite deshacer solo el último suavizado.

Suavizado de datos mediante el algoritmo de suavizado

Sugerencia: Para deshacer la suavización, haga clic en **Edit > Undo**. El software permite deshacer solo la última suavización.

1. Seleccione un panel que contenga un cromatograma o un espectro.
2. Haga clic en **Explore > Smooth**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Smoothing Options.

Figura 13-9: Cuadro de diálogo Smoothing Options

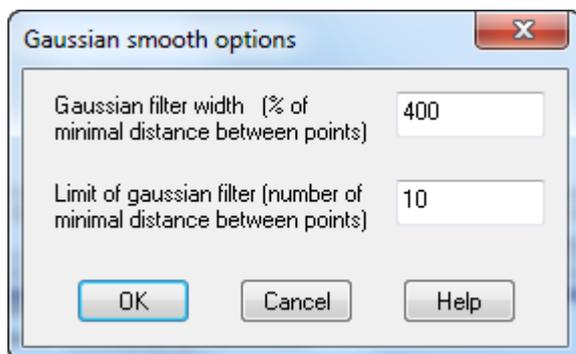


3. En el campo **Previous Point Weight**, indique el factor de ponderación que se aplicará al punto de datos anterior.
4. En el campo **Current Point Weight**, indique el factor de ponderación que se aplicará al punto de datos central.
5. En el campo **Next Point Weight**, indique el factor de ponderación que se aplicará al punto de datos siguiente.
6. Haga clic en **OK**.
El conjunto de datos se suaviza y se sustituye el conjunto de datos actual en el panel.

Suavizado de datos mediante el algoritmo de suavizado gaussiano

1. Seleccione un panel que contenga un cromatograma o un espectro.
2. Haga clic en **Explore > Gaussian Smooth**.
Se mostrará el cuadro de diálogo Gaussian smooth options.

Figura 13-10: Cuadro de diálogo Gaussian smooth options



3. En el campo **Gaussian filter width**, indique la anchura utilizada para encontrar la ponderación de puntos cercanos como un porcentaje de la distancia entre los dos puntos.
4. En el campo **Limit of gaussian filter**, indique el límite de la curva gaussiana, proporcionado en múltiplos de la distancia entre los puntos.
5. Para suavizar los datos, haga clic en **OK**.
El conjunto de datos se suaviza y se sustituye el conjunto de datos actual en el panel.

Tabla 13-8: Referencia rápida de la barra de herramientas Explore: suavización de datos

Icono	Nombre	Función
	Smooth	Haga clic para suavizar los datos mediante el algoritmo de suavización.
	Gaussian smooth	Haga clic para suavizar datos mediante el algoritmo de suavización gaussiana.

Creación de centroides de los datos

La creación de centroides convierte los valores de distribución de picos en un único valor de m/z e intensidad que representa un pico. La creación de centroides de los datos recogidos en el modo Profile simplifica los datos y reduce el tamaño del archivo. La creación de

Instrucciones de funcionamiento: Análisis y exploración de datos

centroides proporciona una asignación de picos más precisa y reduce la cantidad de datos, aunque también elimina la información sobre la forma de los picos.

El algoritmo de creación de centroides convierte los picos en valores individuales mediante el uso del promedio ponderado de intensidad para calcular el centro de gravedad del pico. El resultado del algoritmo es una lista de picos con parámetros, como se muestra en la tabla: [Tabla 13-9](#).

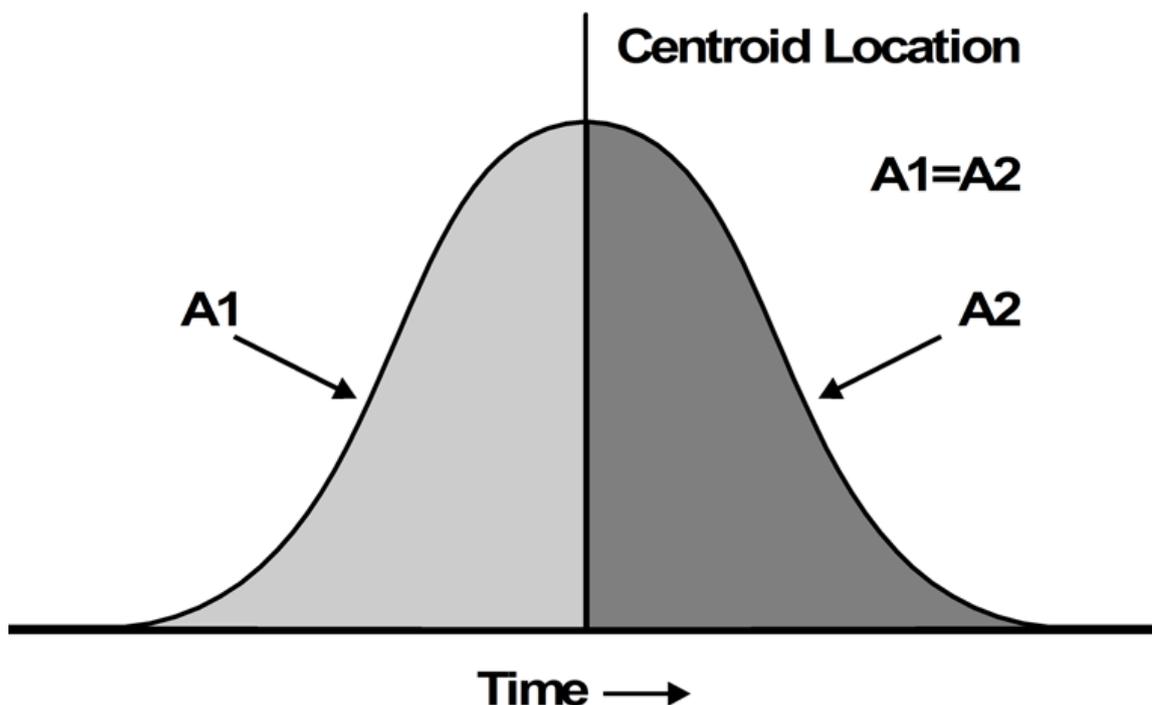
Tabla 13-9: Parámetros de picos

Parámetro	Definición
Centroid Value	El valor de los datos del centroide en unidades de masa o tiempo.
Intensity	La intensidad de cada pico, expresada en cps.
Width	La anchura del pico del centroide, expresada en amu.

Se crea automáticamente un centroide de los datos cuando se agregan a la biblioteca o cuando se realiza una búsqueda.

1. Seleccione un panel que contenga un espectro.
La creación de centroides de los datos cambia el aspecto del gráfico existente. Para comparar el resultado con los datos originales, realice una copia del gráfico antes de crear el centroide.
2. Haga clic en **Explore > Centroid**.
Se crea un centroide de los datos.

Figura 13-11: Ubicación centroide del analito



Icono	Nombre	Función
	Centroid	Haga clic para crear un centroide de los datos.

Almacenamiento y apertura de archivos de datos procesados

Los usuarios pueden guardar datos procesados, como disposiciones y etiquetas específicos, que se pueden volver a abrir solo en modo Explore. Estos archivos también contienen información histórica importante y son parecidos a los archivos de datos, excepto en que contendrán únicamente los datos del panel activo en Explore. Estos archivos tienen la extensión .pdt y se almacenan en la carpeta Data del proyecto actual.

Guardar un archivo de datos procesados

1. Seleccione el panel de datos que desee guardar.
2. Haga clic en **File > Save Processed Data File**.
3. Escriba un nombre en el campo **File name**.
4. Haga clic en **Save**.

Apertura de un archivo de datos procesados

1. En el modo Explore, haga clic en **File > Open Processed Data File**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Load Processed Data File.
2. Seleccione un archivo y, a continuación, haga clic en **Open**.

Trabajo con gráficos de contorno

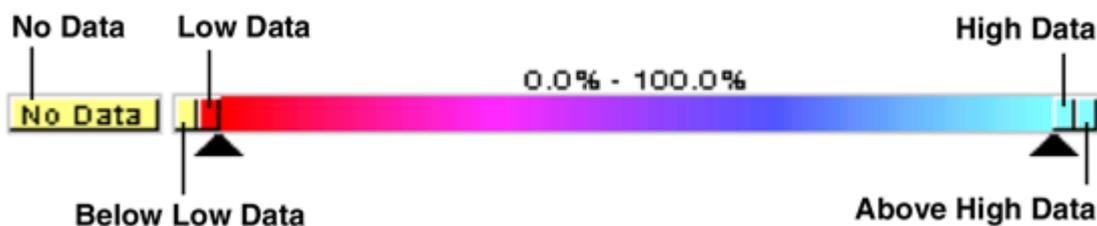
Un gráfico de contorno es un gráfico codificado con colores de un conjunto de datos completo que utiliza los colores para representar una tercera dimensión en el gráfico. En un gráfico de contorno de un TIC, el eje X representa el tiempo de retención o número de análisis, el eje Y representa la masa y el color representa la intensidad de los datos en ese punto. En un gráfico de contorno de un TWC para datos de DAD, el eje X representa el tiempo de retención o número de análisis, el eje Y representa la longitud de onda y el color representa la absorbancia. El gráfico de contorno es una herramienta postadquisición que no funciona en una adquisición de análisis en tiempo real.

Nota: El gráfico de contorno no es compatible con análisis MI o MRM, pero sí lo es con análisis de DAD.

El color es el tercer eje en un gráfico de contorno y representa la intensidad o la absorbancia. Cambie los valores de intensidad o absorbancia superior o inferior en el gráfico de contorno mediante los triángulos de control de la barra de color situada sobre el gráfico de contorno. Los parámetros porcentuales de la parte superior del panel Contour Plot indican los valores representados por los controles deslizantes de los valores superior e inferior. Los valores reales se basan en un porcentaje de la intensidad o absorbancia máximas en la región seleccionada. El valor se muestra en la esquina superior derecha del panel Contour Plot.

Los controles mostrados en la [Figura 13-12](#) cambian los colores de un gráfico de contorno.

Figura 13-12: Botones que controlan los colores del gráfico de contorno



Defina los colores de un gráfico de contorno para proporcionar un mejor contraste y mostrar especificaciones de los datos según sus necesidades. Por ejemplo, si define la intensidad/ longitud de onda y cambia el color de los valores de Below Low Data y Above High Data, puede eliminar ruido de fondo en un gráfico de contorno.

Los botones Below Low Data y Above High Data contraen o amplían la barra de colores si mueve los controles deslizantes. Cuando se cambian los colores del gráfico de contorno, los nuevos colores se convierten en los colores predefinidos para todos los gráficos siguientes.

Visualización de un gráfico de contorno

Los usuarios pueden ver un gráfico de contorno desde los gráficos TIC, XIC, TWC o XWC únicamente tras la adquisición. Los TIC y XIC están disponibles para todos los archivos de datos wiff. Los TWC y XWC están disponibles solo para los datos adquiridos por un DAD.

1. En el modo **Explore**, abra un archivo de datos como gráfico TIC, XIC, TWC o XWC.
2. Resalte el rango que desee ver en el gráfico de contorno. Si no se selecciona nada, se ve el rango completo.
3. Haga clic en **Explore > Show > Show Contour Plot**.
Se muestra un gráfico de contorno de la región seleccionada en un panel diferente.

Selección de una región en un gráfico de contorno

Los usuarios pueden ampliar una selección concreta o ver el espectro de masas correspondiente de esa selección.

Realice una de las siguientes acciones:

- Para seleccionar una región estándar en un recuadro, arrastre el puntero para crear un recuadro alrededor de una región del gráfico de contorno.
- Para realizar una selección vertical, pulse Ctrl y arrastre el puntero verticalmente.
- Para realizar una selección horizontal, pulse la barra espaciadora y arrastre el puntero horizontalmente.

Definición de la intensidad y la absorbencia en un gráfico de contorno

Realice una de las siguientes acciones:

- Para definir el valor inferior de intensidad/absorbencia en el gráfico de contorno, arrastre el control deslizante triangular izquierdo de la barra de colores situada sobre el gráfico de contorno hasta la posición requerida.

El gráfico de contorno ajusta automáticamente el color de los valores por debajo del valor definido para indicar que se encuentran fuera de rango.

- Para definir el valor superior de intensidad/absorbencia en el gráfico de contorno, arrastre el control deslizante triangular derecho de la barra de colores situada sobre el gráfico de contorno hasta la posición requerida.

El gráfico de contorno ajusta automáticamente el color de los valores por encima del valor definido para indicar que se encuentran fuera de rango.

Cambio de los colores de un gráfico de contorno

1. En el panel Contour Plot, haga clic en uno de los botones de color. Se abrirá el cuadro de diálogo Color.
2. Haga clic en un color y, a continuación, seleccione **OK**.

El gráfico cambia para reflejar el cambio de color.

Sugerencia: Utilice la paleta **Define Custom Colors** para crear los colores personalizados que desee utilizar en los gráficos de contorno.

Interpretación de fragmentos

La herramienta Fragment Interpretation ayuda al usuario a interpretar datos MS/MS. La herramienta Fragment Interpretation genera una lista de masas de fragmentación teórica a partir de la escisión de los enlaces no cíclicos individuales de una estructura molecular. La estructura molecular se puede crear en un programa de dibujo de terceros y, a continuación, guardarla como un archivo mol. La herramienta puede cotejar entonces la lista teórica con los picos en el espectro de masas actual. La herramienta Fragment Interpretation muestra los fragmentos teóricos en la lista de fragmentos y compara las masas de fragmentación con los picos del espectro de masas. Los picos que sobrepasan el umbral de intensidad y se encuentran dentro de la tolerancia de masa definida por el usuario para las masas de fragmentación (2 Da como máximo) se consideran coincidentes y se muestran en negrita en la lista de fragmentos.

Nota: La herramienta Fragment Interpretation no se puede utilizar con los siguientes tipos de análisis:

- Ion precursor
- Pérdida neutra
- Ion múltiple Q1
- Ion múltiple Q3
- Monitorización de reacciones múltiples (MRM)

Trabajo con la herramienta Fragment Interpretation

Si se visualizan varios paneles de espectro, la herramienta Fragment Interpretation se vincula al espectro activo. Si el archivo de datos contiene más de una muestra, la herramienta Fragment Interpretation se vincula al espectro activo.

La herramienta calcula automáticamente los fragmentos resultantes de la escisión de enlaces no cíclicos individuales a partir de un archivo .mol. Cuando la herramienta Fragment Interpretation se vincula a un espectro, los fragmentos teóricos resaltados en negrita indican un pico coincidente en el espectro dentro del umbral especificado de intensidad y de tolerancia de masas.

Si selecciona un enlace no cíclico individual en la estructura molecular, la herramienta Fragment Interpretation resalta los dos fragmentos obtenidos de la división de ese enlace y, a continuación, muestra los picos coincidentes en el espectro vinculado.

Vinculación de la herramienta Fragment Interpretation a un espectro

Si se abre un espectro con la herramienta Fragment Interpretation abierta, entonces el panel activo se vincula automáticamente al espectro abierto.

1. Haga clic en **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. En la esquina inferior derecha del panel Fragment Interpretation, haga clic en el botón de vinculación.
El puntero cambia para mostrar a la herramienta de vinculación.
3. Haga clic en el gráfico de espectro al que vaya vincular la herramienta Fragment Interpretation.
El indicador de gráfico vinculado de la esquina inferior izquierda contiene el nombre del gráfico vinculado con el panel de interpretación de fragmentos. La vinculación se interrumpe cuando se cierra el gráfico o la herramienta Fragment Interpretation. Si el archivo .wiff vinculado tiene más de una muestra, entonces el panel Fragment Interpretation se actualiza automáticamente a medida que el usuario se desplaza por las muestras.

Correspondencia de fragmentos con picos

1. Haga clic en **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Con un archivo mol abierto en el panel Fragment Interpretation, seleccione una celda resaltada en negrita en la lista **Fragment List**.

En el espectro, el software resalta el pico de espectro coincidente en el color seleccionado en la pestaña **Options**. En la estructura molecular, se resalta el enlace.

Si se hace clic en una fila que tiene más de un fragmento coincidente, el pico del espectro más próximo a su masa monoisotópica se resaltará en el espectro de masas en el color especificado en la pestaña **Options**.

Selección de un enlace en una estructura molecular

1. Haga clic en **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Con un archivo mol abierto en el panel Fragment Interpretation, haga clic en un enlace no cíclico individual de la estructura molecular.
Los dos fragmentos resultantes se muestran resaltados en la lista de fragmentos. Las masas de los dos fragmentos se muestran a un lado u otro del enlace.
Si hay un espectro vinculado, la herramienta Fragment Interpretation muestra todos los picos coincidentes en el gráfico. Si selecciona un fragmento en la lista y el fragmento se corresponde con un pico, la ventana Fragment Interpretation se ampliará sobre ese pico.

Visualización de isótopos

La herramienta Fragment Interpretation puede mostrar la distribución isotópica teórica de un pico que coincida con un fragmento de la lista de fragmentos.

1. Haga clic en **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. En el panel Fragment Interpretation, haga clic en la pestaña **Options**.
3. Active la casilla de verificación **Show Isotopes**.
4. Haga clic en **Apply**.
5. En la lista **Fragment List**, seleccione un fragmento que coincida con un pico. La distribución isotópica de los picos coincidentes se muestra en el espectro.

Visualización de las diferencias entre las fórmulas de los fragmentos

Se puede mostrar en el software la diferencia entre las fórmulas y las masas monoisotópicas de dos fragmentos hipotéticos relacionados. La diferencia entre las fórmulas se muestra cuando se seleccionan dos picos. La diferencia entre las fórmulas y las masas monoisotópicas se muestra cuando se seleccionan dos fragmentos o dos enlaces no cíclicos individuales.

Visualización de diferencias de fórmula en un espectro

1. Haga clic en un pico de fragmento.
2. Pulse la tecla **Mayús** y, a continuación, haga clic en otro pico de fragmento. Si la diferencia de fórmula es igual a un fragmento de la lista de fragmentos, el fragmento se resalta en la lista. En caso contrario, la diferencia entre las fórmulas de los fragmentos coincidentes de los picos se muestra en un cuadro de mensaje.

Visualización de diferencias de fórmula en la lista de fragmentos

1. Haga clic en el número de fila de un fragmento.
2. Pulse la tecla **Shift** y, a continuación, haga clic en otro pico de fragmento. La diferencia entre las fórmulas y las masas monoisotópicas se muestra en un cuadro de mensaje si los fragmentos están relacionados.

Visualización de diferencias de fórmula en una estructura molecular

1. Haga clic en un enlace no cíclico individual. Se selecciona el fragmento predeterminado (de los dos fragmentos resaltados). Para seleccionar el otro fragmento del enlace escindido, pulse **Ctrl** y, a continuación, haga clic en el enlace.
2. Seleccione un segundo enlace no cíclico. Para seleccionar el fragmento predeterminado, pulse la tecla **Shift** y, a continuación, haga clic en el enlace. Para seleccionar el otro fragmento del enlace escindido, pulse **Ctrl+Shift** y, a continuación, haga clic en el enlace.

La herramienta Fragment Interpretation calcula la diferencia entre las fórmulas y las masas monoisotópicas del fragmento seleccionado en el paso 1 y el fragmento seleccionado en el paso 2, si los fragmentos están relacionados. La diferencia entre las fórmulas y las masas monoisotópicas se muestra en el cuadro de mensaje.

Bases de datos de biblioteca

La función Library Search compara espectros desconocidos con los espectros de MS conocidos incluidos en la base de datos de la biblioteca y genera una lista de posibles coincidencias.

Utilice Library Search para lo siguiente:

- Comparar el contenido de la biblioteca con un espectro desconocido.
- Agregar registros a la biblioteca.
- Editar registros existentes.

Los datos de la biblioteca están guardados en las siguientes ubicaciones:

- MS Access en una base de datos local
- MS SQL Server

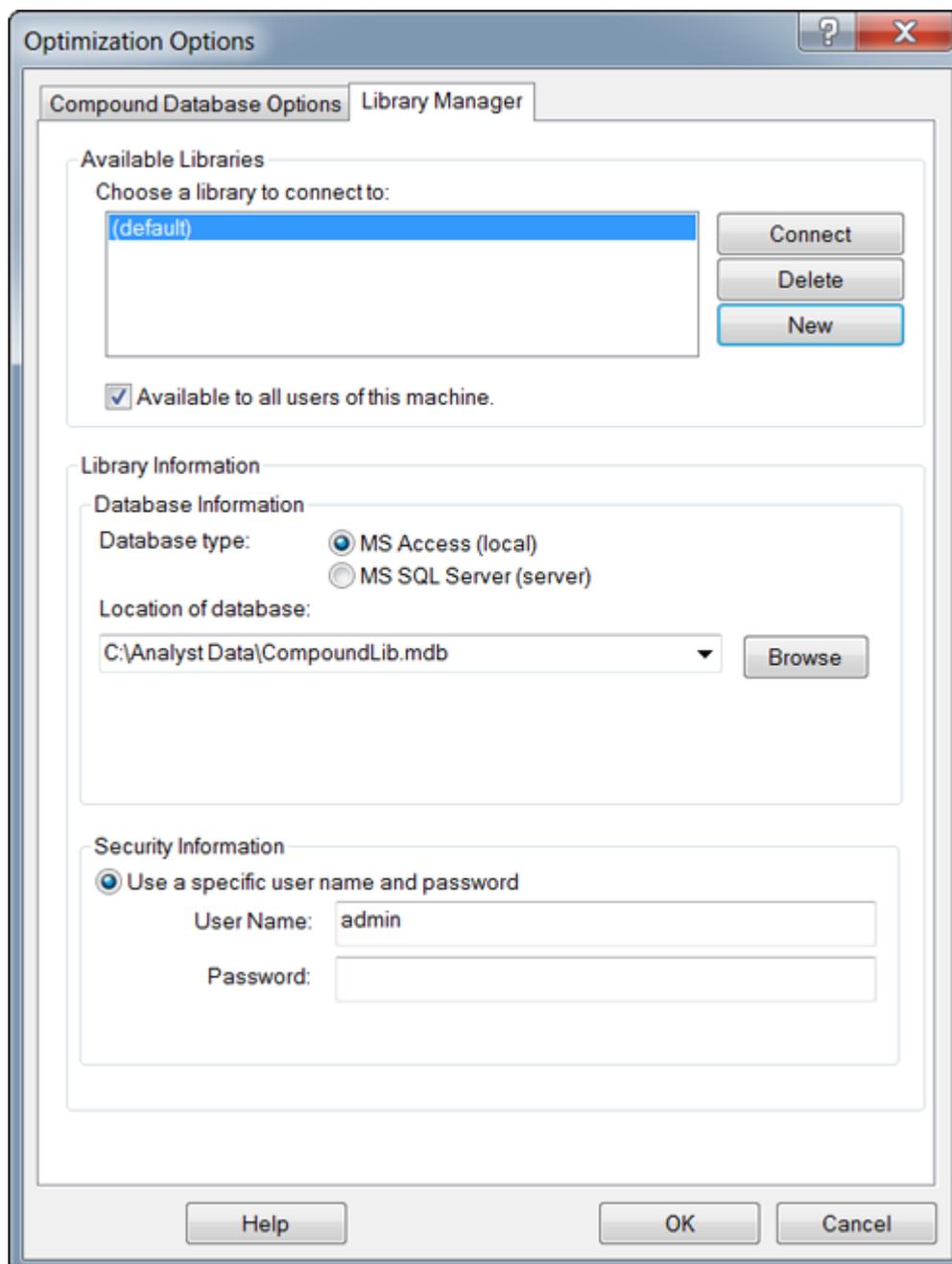
Antes de utilizar la función Library Search, localice dónde se almacenan los datos de la biblioteca y conecte el ordenador a esa ubicación. Las bases de datos de la biblioteca se pueden almacenar localmente en el ordenador o en un servidor al que se pueda acceder a través de una red.

Cambio entre bases de datos de biblioteca existentes

Es posible conectarse con cualquier base de datos que tenga alias ya configurados.

1. Haga clic en **Tools > Settings > Optimization Options**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Optimization Options.
2. Haga clic en la pestaña Library Manager.

Figura 13-13: Pestaña Library Manager



3. En la sección **Available Libraries**, haga clic en el alias de la base de datos a la que desee conectarse y, a continuación, haga clic en **Connect**.
4. Para permitir el acceso de otros usuarios a la base de datos, active la casilla de verificación **Available to all users of this machine**.
5. Haga clic en **OK**.

Conexión a una base de datos de biblioteca local

1. Haga clic en **Tools > Settings > Optimization Options**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Optimization Options.
2. Haga clic en la pestaña Library Manager.
3. En la sección **Available Libraries**, haga clic en **New**.

Figura 13-14: Cuadro de diálogo Add Library

The screenshot shows the 'Add Library' dialog box with the following fields and options:

- Library Information:** A text input field for 'Enter a Name for the Library'.
- Database Information:** Radio buttons for 'MS Access (local)' (selected) and 'MS SQL Server (server)'. A text input field for 'Enter the location of the database:' with a 'Browse' button.
- Security Information:** Radio button for 'Use a specific user name and password' (selected). Text input fields for 'User Name:' and 'Password:'.
- Buttons:** 'Save' and 'Cancel' at the bottom.

4. Escriba un nombre para la biblioteca.
5. En la sección **Database Information**, seleccione **MS Access (local)**.
6. Escriba la ubicación de la base de datos.

7. En la sección **Security Information**, si es necesario un nombre de usuario y contraseña para acceder a esta base de datos, facilite el nombre de usuario y contraseña.
8. Haga clic en **Save**.

Conexión a una base de datos de biblioteca de servidor

1. Haga clic en **Tools > Settings > Optimization Options**.
Se abrirá el cuadro de diálogo Optimization Options.
2. Haga clic en la pestaña Library Manager.
3. En la sección **Available Libraries**, haga clic en **New**.
4. Escriba un nombre para la biblioteca.
5. En la sección **Database Information**, seleccione **MS SQL Server (server)**.

Figura 13-15: Cuadro de diálogo Add Library

The dialog box 'Add Library' is structured as follows:

- Library Information:** A text input field for 'Enter a Name for the Library'.
- Database Information:**
 - Radio buttons for 'Database type': 'MS Access (local)' and 'MS SQL Server (server)' (selected).
 - A dropdown menu for 'Enter the name of the database server:' with a 'Refresh' button.
 - A text input field for 'Enter the name of the database on the server:'.
- Security Information:**
 - Radio buttons for security options: 'Use Windows integrated security' and 'Use a specific user name and password' (selected).
 - Text input fields for 'User Name:' and 'Password:'.
- Buttons:** 'Save' and 'Cancel' buttons at the bottom.

6. Escriba el nombre del servidor de la base de datos.
7. Escriba el nombre de la base de datos.
8. Realice una de las siguientes acciones de la sección **Security Information**:
 - Si es necesario un nombre de usuario y contraseña específicos para acceder a esta base de datos, escriba el nombre de usuario y contraseña.
 - Para utilizar la seguridad de Windows, seleccione la opción **Use Windows integrated security**.
9. Haga clic en **Save**.

Trabajo con registros de biblioteca

Si se buscan los contenidos de la biblioteca sin restricciones, se mostrarán todos los registros. Si se buscan los contenidos de la biblioteca con restricciones, solo se mostrarán aquellos registros que coincidan con las restricciones especificadas. El número de registros mostrado dependerá del número de restricciones seleccionado. Si se seleccionan muchas restricciones, se mostrarán pocos registros.

Visualización de todos los registros de la biblioteca

Haga clic en **Explore > Library Search > List**.

Se abrirá el cuadro de diálogo Librarian, con todos los registros de la base de datos.

Búsqueda de registros de la biblioteca con restricciones

1. Haga clic en **Explore > Library Search > List With Constraints**.

Figura 13-16: Cuadro de diálogo List Constraints

Field Name:	Relation:	Value:
Formula	Contains	

Element	Min.	Max.
1		
2		
3		

Element
1
2
3

2. En la lista **Field Name**, seleccione el campo en el que desee basar la restricción.

Instrucciones de funcionamiento: Análisis y exploración de datos

3. En la lista **Relation**, seleccione la relación (operador) que se aplica al nombre del campo.
4. En el campo **Value**, escriba el valor del nombre del campo basado en la relación.
5. Para agregar la restricción seleccionada a la lista **Conditions**, haga clic en **Add**.
6. Siga agregando restricciones a la lista de condiciones según sea necesario.
7. La agrupación de restricciones diferentes en la lista **Conditions** crea condiciones más específicas que mejoran la búsqueda.
 - Para agrupar restricciones, seleccione las restricciones y, a continuación, haga clic en **Group**.
 - Para separar las restricciones agrupadas, haga clic en el grupo y, a continuación, en **Ungroup**.
8. Para cambiar la relación entre las restricciones, haga clic en la relación y, a continuación, haga clic en **And** u **Or**.
9. Para excluir compuestos que contienen un número concreto de átomos de elementos específicos, seleccione o escriba los elementos en la tabla **Elements Included** y, a continuación, escriba un número mínimo y máximo de átomos del elemento.

Nota: Los símbolos de los elementos distinguen entre mayúsculas y minúsculas. Por ejemplo, el hidrógeno es H, no h, y el Sodio es Na, no NA ni na.

10. Para excluir compuestos que contienen elementos concretos, seleccione o escriba los elementos en la tabla **Excluded**.
11. Para buscar los compuestos que se ajusten a sus criterios, haga clic en **List**. Los registros que coincidan con todas las restricciones se mostrarán en la tabla **Records**. Se guardarán las restricciones de lista.

Adición de un registro a la biblioteca

1. Haga clic con el botón derecho en un espectro activo y, a continuación, haga clic en **Add a Record**.
Se creará automáticamente un centroide del espectro si aún no se ha creado.
Se abrirá el cuadro de diálogo **Add a Record**, con datos del espectro.
2. En la pestaña **Mass Spectral Information**, escriba un nombre en el campo **Compound Name**. El nombre del compuesto es obligatorio y debe identificar de manera exclusiva al compuesto en la biblioteca.
3. Edite el resto de campos. Muchos de los campos se rellenarán automáticamente a partir de los datos asociados al espectro.
4. Haga clic en la pestaña **General Information**, edite los campos según sea necesario y, a continuación, haga clic en **OK**.

Búsqueda de un espectro similar

Los usuarios pueden buscar en la biblioteca un espectro (y la información de compuesto relacionada) que coincida con un espectro activo (o sea similar a este). Las búsquedas se pueden realizar con o sin restricciones. Cuando se busca con restricciones, solo se muestran en la lista los registros que coincidan con todos los criterios. Los resultados se muestran en una lista clasificada. El primer elemento de la lista es el que se ajusta en mayor medida al espectro activo. Las entradas inferiores de la lista no mantienen una correspondencia tan buena.

Cuanto mayor sea el número de restricciones seleccionadas, más precisa será la lista y menos coincidencias se mostrarán, aunque estas serán más relevantes. Después de definir un conjunto de restricciones, se aplicarán a todas las búsquedas subsiguientes, a menos que estas se editen.

En la búsqueda solo se utilizan los picos por encima del umbral. Al seleccionar restricciones de búsqueda, también puede agregar o quitar picos del espectro activo. Por ejemplo, si un pico se considera un pico de ruido o de fondo, entonces no se debe utilizar en la búsqueda porque podría producir resultados imprecisos.

Cuando se realicen búsquedas sin restricciones, habrá una lista mucho más amplia de espectros sugeridos, ya que la biblioteca crea coincidencias con los datos del espectro menos específicas.

Búsqueda de un espectro similar

1. Haga clic con el botón derecho en un espectro activo y, a continuación, haga clic en **Search With Constraints**.
El software centrará el espectro automáticamente, si es necesario.

Figura 13-17: Cuadro de diálogo Search Constraints

Search Constraints

Maximum Number of Match: 25

Preselect Constraints:

- Mass Tolerance
- Intensity Factor
- 1st Precursor m/z
- Collision Energy
- 2nd Precursor m/z
- Excitation Energy
- Retention Time
- Record Contains UV Spectrum
- Record Contains Molecular Structure

Preset Tolerance:

- +/- 0.2 Da
- +/- 2
- +/- 0.25 Da
- +/- 5
- +/- 0.25 Da
- +/- 5
- +/- 0.1 min

Result Sorted by: [dropdown]

Comment Contains: [text box]

Keyword Contains: [text box]

Compound Name: [text box]

Formula: [text box]

Compound Class: [text box]

CAS Number: [text box]

Default Search Cancel Apply Peak Constraints >> Help

2. En el campo **Maximum Number of Match**, indique el número máximo de compuestos que desea que devuelva la búsqueda.
3. En la sección **Preselect Constraints**, active las casillas de verificación de las restricciones que se desee aplicar.
4. Para cada restricción seleccionada, en la sección **Preset Tolerance**, indique la tolerancia.

Instrucciones de funcionamiento: Análisis y exploración de datos

5. Si es necesario, seleccione un método de ordenación de registros en la lista **Result Sorted by**.
6. Si es necesario, escriba texto en el campo **Comment Contains**.
7. Si es necesario, escriba texto en el campo **Keyword Contains**.
8. Para aplicar restricciones de picos mediante la adición o eliminación de picos, haga clic en **Peak Constraints**.
Se abrirá la tabla **Peaks Included**.
9. Para agregar picos a la lista en la que desee buscar, haga clic en **Add** y, a continuación, escriba el valor de m/z y la intensidad correspondiente en la celda vacía.
10. Para eliminar picos para que no se incluyan en la búsqueda, seleccione los picos que desee excluir de la lista y, a continuación, haga clic en **Remove**.
11. Haga clic en **Search** para guardar las restricciones e iniciar la búsqueda.

Visualización de un compuesto desde los resultados de la búsqueda

Si varios espectros coinciden con el espectro desconocido, el resto de espectros pueden visualizarse y compararse con él.

1. En el cuadro de diálogo Search Results, en la lista de compuestos, seleccione el número de fila del compuesto.
2. Haga clic en el panel del espectro de uno de los compuestos conocidos.
Se abrirá el espectro del compuesto seleccionado.

Consejos de búsqueda en biblioteca

Para realizar esta acción	Haga esto
Búsquedas en biblioteca: para agrupar condiciones	Seleccione las condiciones que desee agrupar y, a continuación, haga clic en Group . Esta función tiene el mismo comportamiento que los paréntesis en las fórmulas.
Búsquedas en biblioteca: para buscar sin utilizar restricciones	Haga clic con el botón derecho en un espectro activo y, a continuación, haga clic en Search Library . Se abrirá el cuadro de diálogo Search Results.

Instrucciones de funcionamiento: Análisis y exploración de datos

Para realizar esta acción	Haga esto
Consultas específicas de la tabla: para ver de nuevo la tabla completa	<p>Haga clic con el botón derecho en cualquier lugar de la tabla de resultados y, a continuación, haga clic en Query > Show All. Las consultas se pueden volver a aplicar o editar.</p> <p>Se recomienda que el usuario valide cualquier consulta que se utilice para analizar los datos de una tabla de resultados.</p>
Integración de picos: para revisar picos	<p>Para revisar todos los picos, asegúrese de que se muestran todas las muestras en la tabla de resultados.</p> <p>La ventana Peak Review contiene los picos enumerados en la tabla de resultados. Si se ocultan algunas muestras en la tabla (por ejemplo, si ha aplicado una consulta), estas tampoco aparecerán en la revisión de picos.</p> <p>Se recomienda que el usuario valide cualquier consulta que se utilice para analizar los datos de una tabla de resultados.</p>
Integración de picos: para desplazarse al primer pico del lote	<p>Haga clic con el botón derecho en cualquier lugar del panel Peak Review y, a continuación, haga clic en Show First Page. Para desplazarse al último pico del lote, haga clic con el botón derecho en cualquier lugar del panel Peak Review y, a continuación, haga clic en Show Last Page.</p>
Para examinar curvas de calibración	<p>Haga clic con el botón derecho en cualquier lugar de la curva, haga clic en Active Plot y seleccione la curva que se va a representar en la parte superior.</p>
Revisión de estadísticas de muestras: para revisar un pico individual	<p>Seleccione la casilla de verificación Display the Data Set(s) y, a continuación, en la columna Data Point, haga doble clic en el punto de datos que representa el pico. El software muestra la ventana Peak Review con el pico seleccionado.</p>
Tablas de resultados: para devolver la tabla de resultados a su orden original	<p>Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y haga clic en Sort > Sort By Index.</p>

Instrucciones de funcionamiento: Análisis y exploración de datos

Para realizar esta acción	Haga esto
Métodos de adquisición: para crear un método de adquisición desde el panel de información de archivo	Haga clic con el botón derecho en el panel de información de archivo y, a continuación, haga clic en Save Acquisition Method .

Instrucciones de funcionamiento: Análisis y procesamiento de datos cuantitativos

14

En esta sección se describe cómo usar el software Analyst MD para analizar y procesar datos cuantitativos. Los datos también se pueden procesar utilizando el software MultiQuant MD. Recomendamos usar el software MultiQuant MD para cuantificar datos. Consulte la documentación que se entrega junto con el software MultiQuant MD.

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

Recomendamos que el usuario valide cualquier consulta que se utilice para analizar los datos de una Results table.

- Gráficos de métricas.
- Disposición de una tabla de resultados.

Análisis cuantitativo

El análisis cuantitativo se utiliza para determinar la concentración de una sustancia concreta en una muestra. Al analizar una muestra desconocida y compararla con otras muestras que contengan la misma sustancia en concentraciones conocidas, el software puede calcular la concentración de la muestra desconocida. El proceso consiste en crear una curva de calibración mediante el uso de la respuesta de señal o la proporción de respuesta de los patrones y, a continuación, calcular las concentraciones de las muestras desconocidas. Las concentraciones calculadas de todas las muestras se añaden a una tabla de resultados.

El análisis cuantitativo se lleva a cabo mayormente utilizando un análisis de monitorización de reacciones múltiples (MRM). En un análisis MRM, se utilizan un ion precursor y un ion producto característico para definir una transición de MRM muy específica del analito. La transición de MRM relacionada con el tiempo de retención asociado con el analito durante la cromatografía líquida proporciona la especificidad de cuantificación necesaria.

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

Métodos de cuantificación

Un método de cuantificación es un conjunto de parámetros utilizados para generar picos en una muestra. El método de cuantificación puede incluir parámetros utilizados para localizar e integrar picos, generar curvas de patrones y calcular concentraciones desconocidas. Puede seleccionarse un método de cuantificación guardado anteriormente en el menú **Quantitation** del lote.

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

Build Quantitation Method

La herramienta Build Quantitation Method no genera una tabla de resultados de cuantificación, aunque el método se podrá utilizar posteriormente en el Asistente de cuantificación para crear una tabla de resultados. La herramienta Build Quantitation Method también se puede utilizar para cambiar métodos de cuantificación existentes. Se trata del modo más flexible para crear un método de cuantificación. Consulte la sección: [Creación de un método mediante el editor de métodos de cuantificación](#).

Asistente de cuantificación

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

Cuantificación rápida

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

Quick Quant forma parte del Batch Editor. Use Quick Quant para añadir concentraciones de compuestos antes de la adquisición de datos. Dado que la muestra no se ha adquirido, no se puede escoger una muestra representativa ni revisarse los picos. Con esta función, solo se definen los componentes del método.

No utilice el método Quick Quant generado automáticamente para realizar la cuantificación si se utiliza la función Quick Quant para almacenar tipos de muestras y concentraciones en el archivo de datos. Este método de cuantificación no utiliza los parámetros de integración específicos de la muestra y el compuesto optimizados para la selección de picos.

Para utilizar un método de cuantificación guardado anteriormente, selecciónelo en el menú **Quantitation** del lote. Para obtener instrucciones sobre cómo crear un lote, consulte: [Creación y envío de un lote](#).

Métodos cuantitativos y tablas de resultados

Para los siguientes procedimientos, utilice datos de muestras instalados en la carpeta `Example/Triple Quad`. La carpeta contiene los archivos de datos, `Mix_Batch_1` y `Mix_Batch_2`. Estos archivos de muestras se utilizan para demostrar la utilidad de gráficos métrico con el fin de aislar muestras problemáticas. Los iones analizados fueron reserpina

(609,3/195,0), minoxidil (210,2/164,2), tolbutamida (271,1/91,1) y rescinamina (635,3/221,2), que es el patrón interno. Mix_Batch_1 no contiene errores, pero Mix_Batch_2 contiene una muestra de control de calidad a la que se ha agregado dos veces el patrón interno (muestra QC2).

Creación de un método mediante el editor de métodos de cuantificación

Nota: Recomendamos que el usuario valide cualquier consulta que se utilice para analizar los datos en una tabla de resultados.

Requisitos previos

- Seleccione el proyecto o subproyecto que contenga los datos que se van a cuantificar. Consulte la sección [Cambio entre proyectos y subproyectos](#)

1. Asegúrese de que el proyecto `Example` esté seleccionado.
2. En la barra Navigation, en **Quantitate**, haga doble clic en **Build Quantitation Method**. Se abrirá el cuadro de diálogo Select Sample.
3. Haga doble clic en la carpeta **Triple Quad** de la lista **Data Files**.
4. Seleccione **Mix_Batch_2.wiff**.
Las muestras del archivo de datos seleccionado aparecen en la lista **Samples**.

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

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

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

Instrucciones de funcionamiento: Análisis y procesamiento de datos cuantitativos

8. Abra la pestaña Integration.
Los parámetros de integración predefinidos son adecuados para la mayoría de los picos.
9. Si la integración no es la adecuada, cambie el algoritmo. Consulte la sección [Integración manual de picos](#).
10. Haga clic en **Show or Hide Parameters** () para mostrar los algoritmos de integración adicionales.
11. Abra la pestaña Calibration.
Los parámetros predefinidos son adecuados para estas muestras. El usuario puede cambiar los parámetros de ajuste, ponderación y regresión en función de las aplicaciones específicas.
12. Guarde el método de cuantificación.
Es posible utilizar el método nuevo cuando se crea un lote en el editor Batch Editor o cuando se usa el asistente Quantitation Wizard para generar una Results Table.

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

Creación de una tabla de resultados mediante el asistente de cuantificación

Nota: Recomendamos que el usuario valide cualquier consulta que se utilice para analizar los datos en una tabla de resultados.

Requisitos previos

- Seleccione el proyecto o subproyecto que contenga los datos que se van a cuantificar. Consulte la sección [Cambio entre proyectos y subproyectos](#)

1. En la barra Navigation, en **Quantitate**, haga doble clic en **Quantitation Wizard**.
Se abrirá la página Create Quantitation Set - Select Samples.
2. En la lista **Available Data Files**, haga doble clic en la carpeta **Triple Quad**.
3. Seleccione **Mix_batch_2.wiff**.
4. Haga clic en **Add All**.

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

5. Haga clic en **Next**.
Se abrirá la página Create Quantitation Set - Select Settings & Query.

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

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

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

8. Haga clic en **Next**.
Se abrirá la página Create Quantitation Set - Select Method.
9. Haga clic en **Choose Existing Method**.
10. Seleccione **PK Data_Mix.qmf** en la lista **Method**.
11. Haga clic en **Finish**.
Se abrirá la Results Table.

Sugerencia: Para agregar o quitar muestras en la Results Table, haga clic en **Tools > Results Table > Add/Remove Samples**.

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

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

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

Creación de una consulta estándar (opcional)

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

Recomendamos que el usuario valide cualquier consulta que se utilice para analizar los datos de una **Results Table**.

1. En la barra Navigation, en **Quantitate**, haga doble clic en **Quantitation Wizard**.
Se abrirá la página Create Quantitation Set - Select Samples.
2. Seleccione las muestras que se usarán en el conjunto de cuantificación.
3. Haga clic en **Next**.

Se abrirá la página Select Settings & Query.

4. En la sección **Default Query**, seleccione **Create New Standard Query**.
5. Escriba un nombre de consulta.

Figura 14-1: Página Create Quantitation Set — Select Settings & Query (Crear conjunto de cuantificación - Seleccionar ajustes y consulta)

Create Quantitation Set - Select Settings & Query

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

Settings to Use: Default

Default Query

None

Select Existing:

Query: Accuracy 15% Execute Query as Standard Query

Create New Standard Query

Name:

< Back Next > Finish Cancel Help

6. Haga clic en **Next**.

Figura 14-2: Página Create Quantitation Set — Create Default Query (Crear conjunto de cuantificación - Crear consulta predeterminada)

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

Maximum Allowed Accuracy Variation for QCs (%)

Concentration	Max. Variation
4.000000	
40.000000	
400.000000	
4000.000000	
12000.000000	

Maximum Allowed Accuracy Variation for Standards (%)

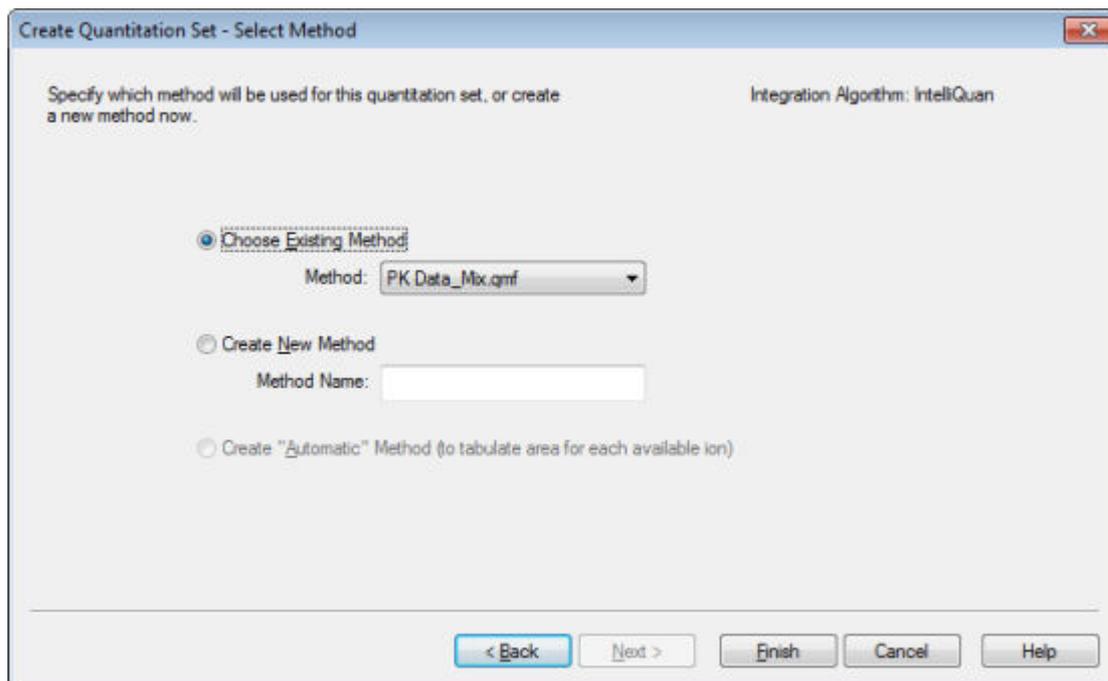
Concentration	Max. Variation
0.120000	
0.240000	
0.490000	
0.980000	
1.950000	
3.910000	
7.810000	
15.630000	
31.250000	
62.500000	
125.000000	

Query By Name

< Back Next > Finish Cancel Help

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

Figura 14-3: Página Create Quantitation Set — Select Method



10. Seleccione o cree un método.

11. Haga clic en **Finish**.

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

Sugerencia: Para volver a la vista completa, haga clic con el botón secundario y seleccione **Full**.

Definición de la disposición de las tablas de resultados

El sistema ofrece varias vistas predefinidas de la tabla de resultados.

Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y, a continuación, haga clic en una de las siguientes opciones:

- Para ver la disposición completa, haga clic en **Full**.
Se muestran todos los analitos.
- Para ver la disposición resumen, haga clic en **Summary** y, a continuación, en un nombre de campo.
- Para ver la disposición analito, haga clic en **Analyte** y, a continuación, en un único analito, si es que hay más de uno.
- Para ver la disposición grupo de analitos, haga clic en **Analyte Group** y, a continuación, en un grupo de analitos.

Sugerencia: Primero se debe crear un nuevo grupo de analitos. Para hacerlo, haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y, a continuación, haga clic en **Analyte Group > New**.

Sugerencia: Para volver a la vista completa, haga clic con el botón derecho y seleccione **Full**.

Se muestra la tabla con la disposición seleccionada.

Ordenación de los datos en las tablas de resultados

Los datos de la tabla de resultados se pueden ordenar de las siguientes formas:

- Ordenar rápidamente la tabla de una a tres columnas, utilizando uno de los botones de ordenar. Estos criterios de ordenación no se pueden guardar.
- Crear un orden específico para la tabla para guardar los criterios de ordenación con la tabla actual. Las ordenaciones específicas de tabla permiten al usuario ordenar la tabla actual en una a tres columnas y guardar el criterio para su uso con esa tabla.
- Uso de una ordenación predefinida creada previamente. Los usuarios pueden crear y guardar una ordenación y aplicarla más tarde a una tabla de resultados.

Sugerencia: Para guardar una ordenación o cualquier otra configuración de tabla, haga clic con el botón derecho en la tabla y, a continuación, haga clic en **Table Settings > Export To New Table Settings**. Los parámetros de ordenación y otros parámetros solo se pueden utilizar en el proyecto actual. Para utilizar la configuración de tabla en un proyecto diferente, cópiela en otro proyecto. Haga clic en **Tools > Project > Copy Data**. Se debe crear y seleccionar un proyecto nuevo para que esté disponible para su uso.

Ordenación de una tabla de resultados

1. Seleccione hasta tres columnas en la tabla de resultados en el orden adecuado.
2. Realice una de las siguientes acciones:
 - Para ordenar en orden ascendente, haga clic en **A-Z**.
 - Para ordenar en orden descendente, haga clic en **Z-A**.

Ordenación de una tabla de resultados y almacenamiento de los criterios de ordenación

1. Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y, a continuación, haga clic en **Sort > New**.

Figura 14-4: Cuadro de diálogo Sort

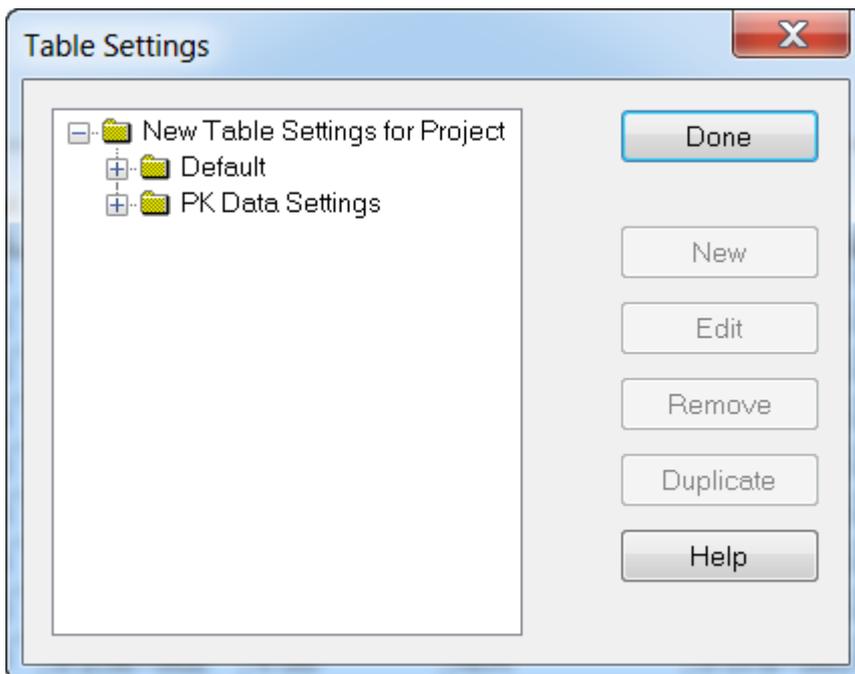


2. En el campo **Name**, escriba el nombre de la nueva ordenación.
3. Para cada regla de ordenación, en las secciones **Sort By** y **Then By**, realice lo siguiente:
 - En la lista **Group**, seleccione el tipo de columna según la cual desea ordenar la tabla.
 - En la lista **Column**, seleccione la columna según la cual desea ordenar la tabla.
 - Seleccione la dirección de ordenación: **Ascending** o **Descending**.
4. Realice una de las siguientes acciones:
 - Para aplicar la ordenación, guardar los criterios de ordenación y cerrar el cuadro de diálogo **Sort**, haga clic en **Save/Execute**.
 - Para aplicar la ordenación y cerrar el cuadro de diálogo **Sort** sin guardar los criterios de ordenación, haga clic en **Execute**.

Almacenamiento de criterios de ordenación predeterminados para futuras tablas de resultados

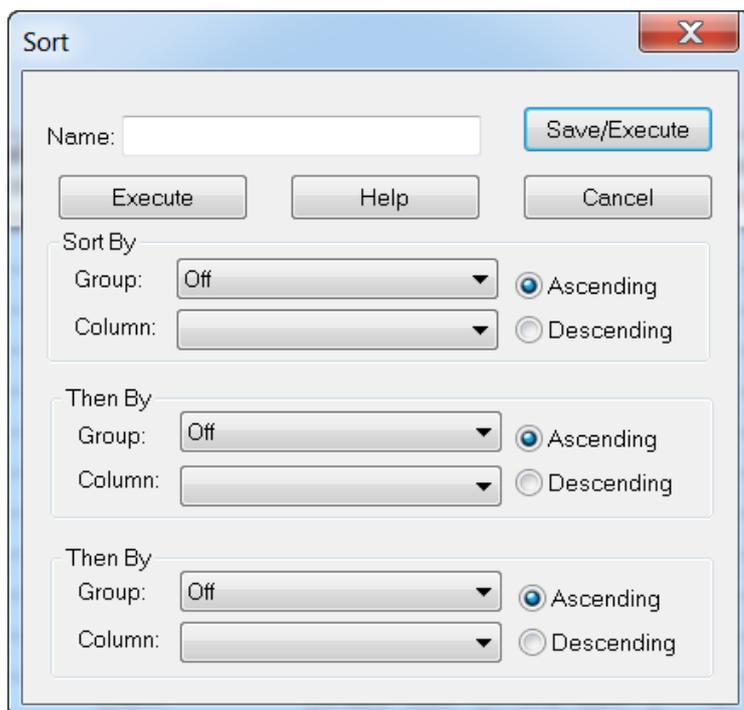
1. Haga clic en **Tools > Settings > New Quantitation Results Table Settings**.

Figura 14-5: Cuadro de diálogo Table Settings



2. Expanda la carpeta **Table Settings** y, a continuación, haga doble clic en la carpeta **Default**.
3. Desde la carpeta **Default**, seleccione la carpeta **Sorts** y, a continuación, haga clic en **New**.

Figura 14-6: Cuadro de diálogo Sort



4. En el campo **Name**, escriba el nombre de la nueva ordenación.
5. Para cada regla de ordenación, en las secciones **Sort By** y **Then By**, realice lo siguiente:
 - En la lista **Group**, seleccione el tipo de columna según la cual desea ordenar la tabla.
 - En la lista **Column**, seleccione la columna según la cual desea ordenar la tabla.
 - Seleccione la dirección de ordenación: **Ascending** o **Descending**.
6. Para guardar los criterios y cerrar el cuadro de diálogo **Sort**, haga clic en **OK**.
7. Para cerrar el cuadro de diálogo **Table Settings**, haga clic en **Done**.

Ordenación de una tabla de resultados mediante criterios de ordenación predefinidos

- Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados, haga clic en **Sort** y, a continuación, seleccione el nombre de la clasificación.

Revisión de picos e integración manual de picos

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

Tras identificar los analitos y los patrones internos que el software debe buscar, el software busca los picos en las muestras. Cuando el software identifica un pico, muestra los cromatogramas de cada analito y patrón interno en la página Create Quantitation Method: Define Integration de Standard Wizard o en la pestaña Integration de Full Method Editor. El usuario puede confirmar los picos que se han encontrado o modificar el método de cuantificación para definir mejor los picos. Recomendamos a los usuarios que revisen manualmente todos los resultados de integración.

Para obtener información sobre cómo usar el menú contextual Peak Review, consulte la sección: [Revisión de picos](#).

Revisión de picos

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

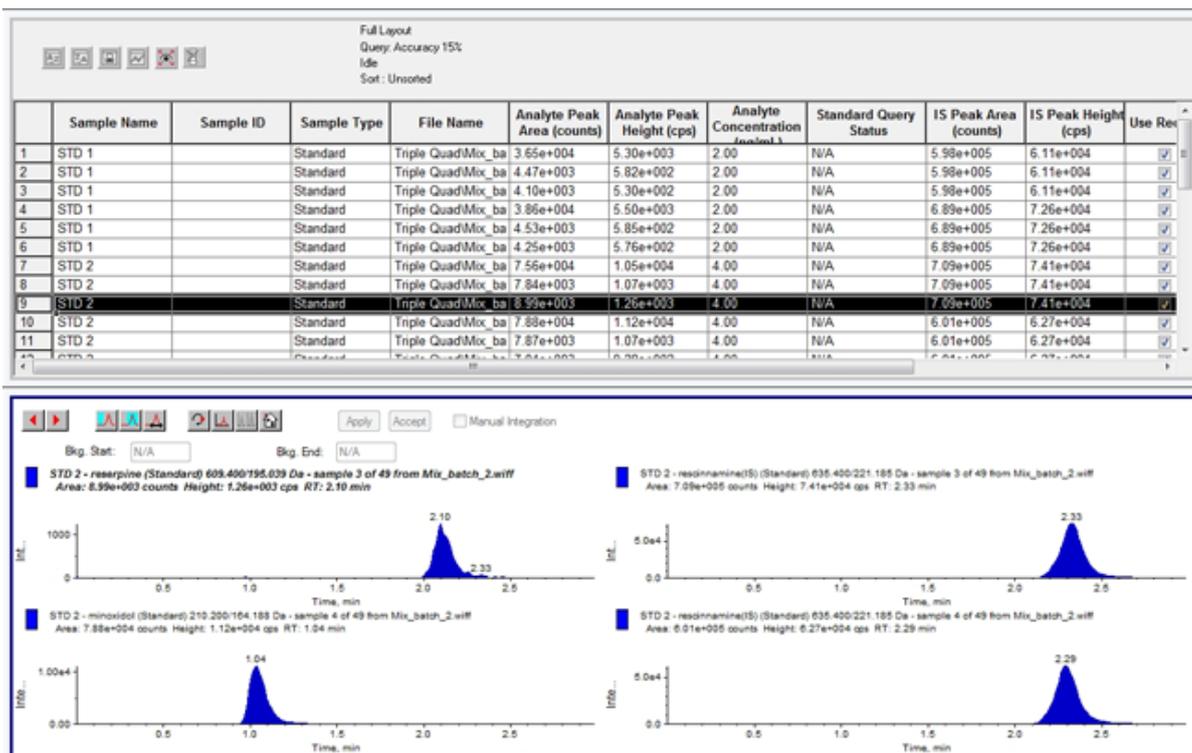
Para ayudar a que el software detecte un pico, pueden definirse manualmente los puntos de inicio y fin exactos y el fondo. Estos cambios se aplicarán únicamente a ese pico individual, a menos que actualice el método global.

Nota: Se recomienda validar los resultados integrados de forma manual.

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

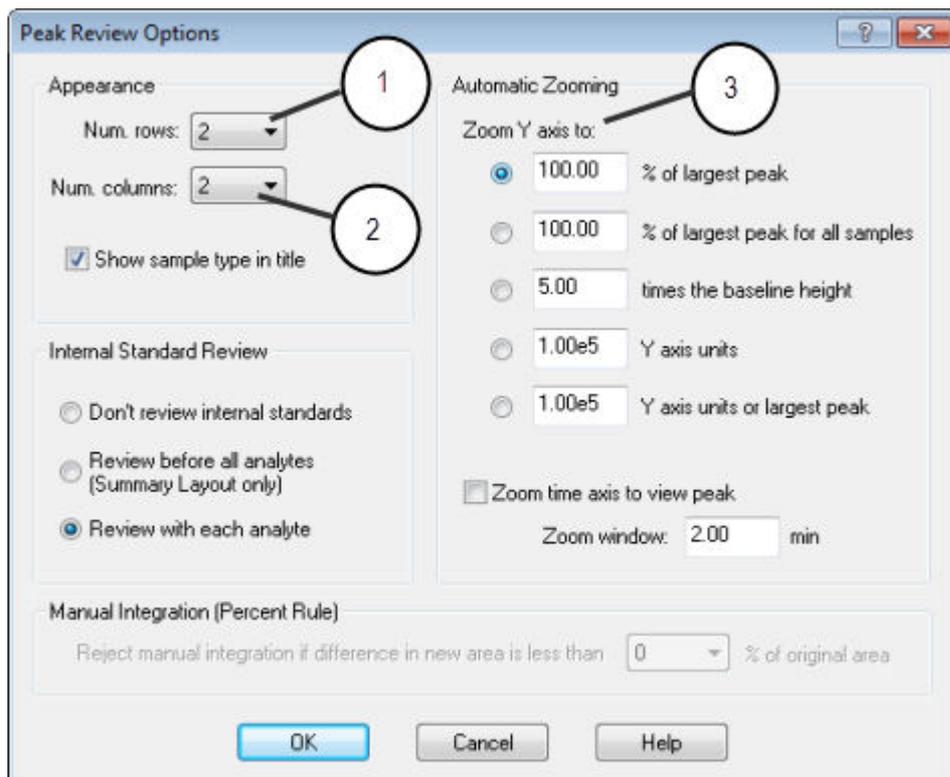
1. Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y, a continuación, haga clic en **Analyte**.
2. Seleccione un analito.
3. Haga clic en **Tools > Peak Review > Pane**.
Los picos se muestran debajo de la Results Table y solo se muestran los picos que figuran en esta tabla.

Figura 14-7: Revisión de picos



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

Figura 14-8: Cuadro de diálogo de opciones de revisión de picos

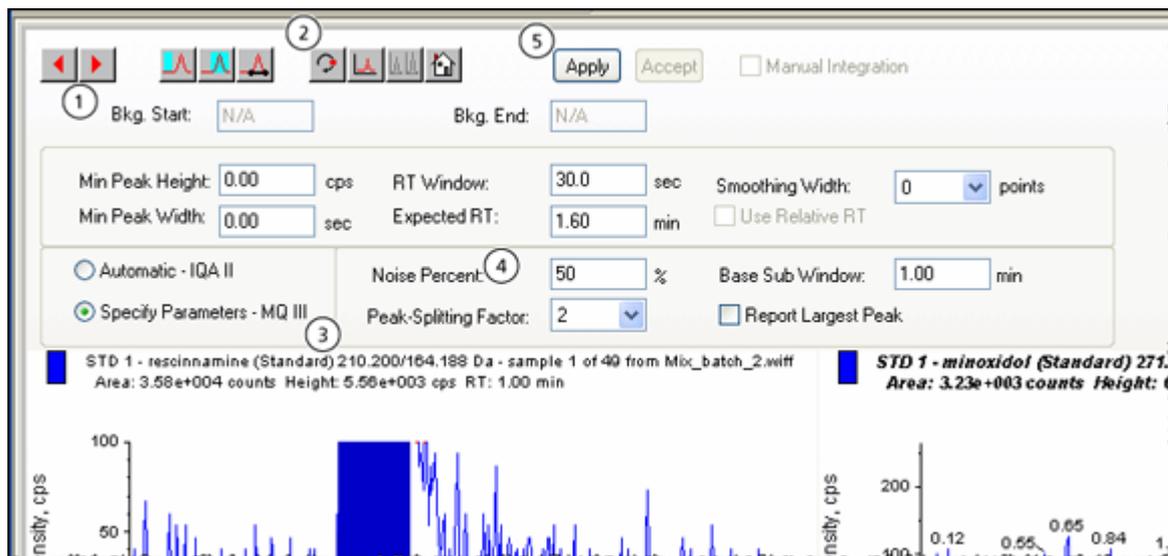


Elemento	Definición
1	Número de filas
2	Número de columnas
3	Zoom Y-axis to 100 % of largest peak para mostrar el pico completo

7. Haga clic en **OK**.
8. Para desplazarse por los picos, haga clic en la flecha hacia la derecha. Consulte la figura: [Figura 14-9](#).
9. Diríjase a la segunda inyección del patrón 3.
En este ejemplo, podría integrarse el pico más cercano al punto de referencia mediante la selección de la opción **Specify Parameters**.

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

Figura 14-9: Panel Peak Review



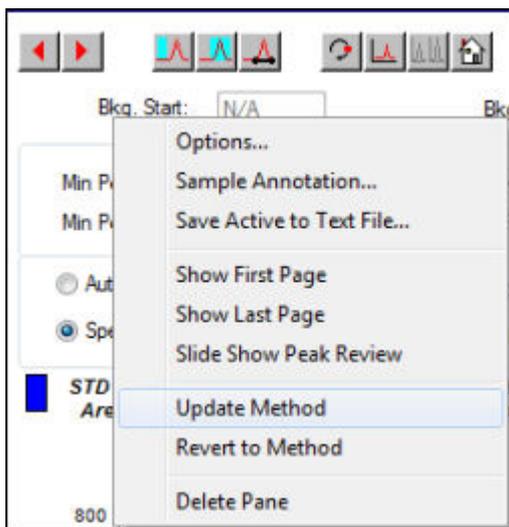
Elemento	Definición
1	Flechas: haga clic para desplazarse por los picos.
2	Show or Hide Parameters : haga clic para mostrar los parámetros de integración.
3	Parámetros de integración: haga clic para cambiar los parámetros.
4	Noise Percentage : escriba un porcentaje de ruido.
5	Apply : haga clic para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

10. Haga clic en **Show or Hide Parameters** dos veces.
11. Haga clic en **Specify Parameters - MQ III**.
12. Cambie el valor de **Noise Percent**.
13. Haga clic en **Apply**.
El pico se integra más cerca del punto de referencia.
14. Si el cambio no mejora la integración del pico, ajuste el parámetro **Noise Percent** hasta que se encuentre el valor óptimo.

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

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

Figura 14-10: Update Method



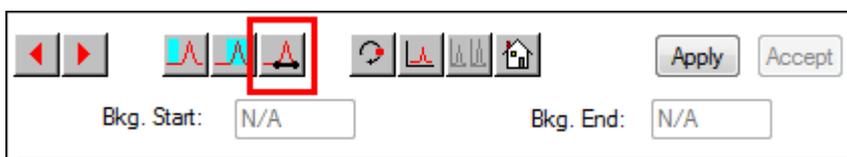
Integración manual de picos

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

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

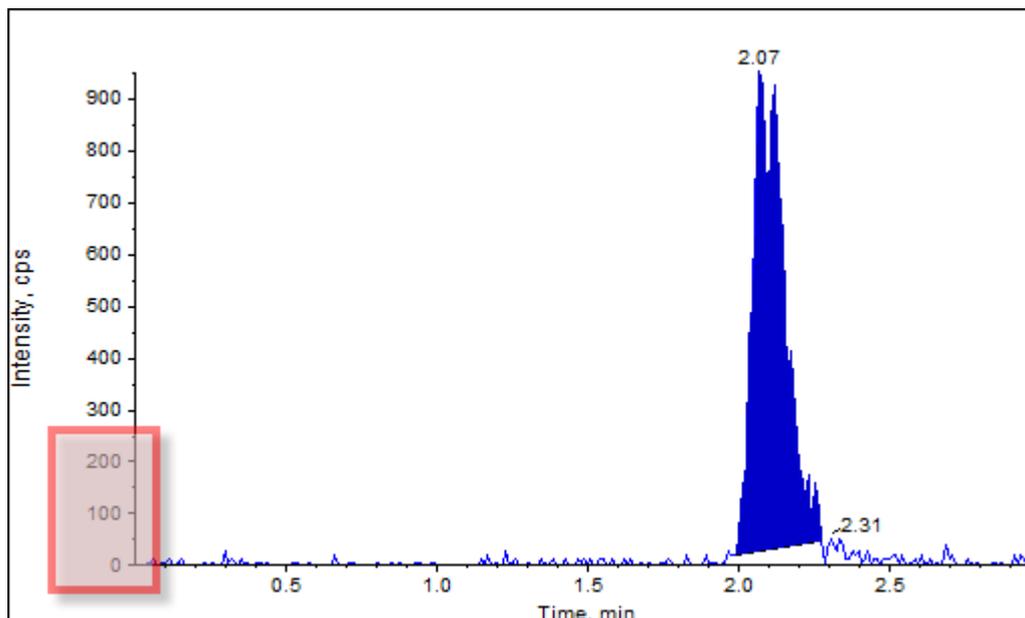
1. En el panel **Peak Review**, haga clic en **Manual Integration Mode**.

Figura 14-11: Panel de revisión de picos: modo de integración manual



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

Figura 14-12: Panel de revisión de picos: aplicación de un zoom a un pico



3. Coloque el puntero de cruz donde desee definir el inicio del pico y, a continuación, arrastre el puntero hasta donde desee definir el final del pico. El software atenúa el área delimitada por la base y los lados del pico. Los parámetros del pico se atenúan puesto que ya no son aplicables porque el pico se ha dibujado manualmente.
4. Realice una de las siguientes acciones:
 - Para que este cambio sea permanente, haga clic en **Accept**.
 - Para descartar los cambios, desactive la casilla de verificación **Manual Integration**.

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

Curvas de calibración

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

La curva de calibración se genera mediante la representación gráfica de la concentración del patrón frente a su área o altura. Si se utiliza un patrón interno, se representa la relación de concentración del patrón o el patrón interno comparada con la relación de la altura o área del pico del patrón con respecto a la altura o área del pico del patrón interno. La relación de altura o área de una muestra se aplica a continuación a esta curva para determinar la concentración de la muestra, como refleja la tabla de resultados. Se genera una ecuación

Instrucciones de funcionamiento: Análisis y procesamiento de datos cuantitativos

de regresión mediante esta curva de calibración de acuerdo con la regresión que se ha especificado. La ecuación de regresión se utiliza para calcular la concentración de las muestras desconocidas.

Se recomienda utilizar la regresión lineal para la curva de calibración.

Recomendamos que el usuario no notifique los valores cuantitativos que se encuentren fuera del rango de concentración cubierto por la curva de calibración.

Para obtener información sobre cómo usar el menú contextual Calibration Curve, consulte la sección: [Calibration Curve](#).

Visualización de curvas de calibración

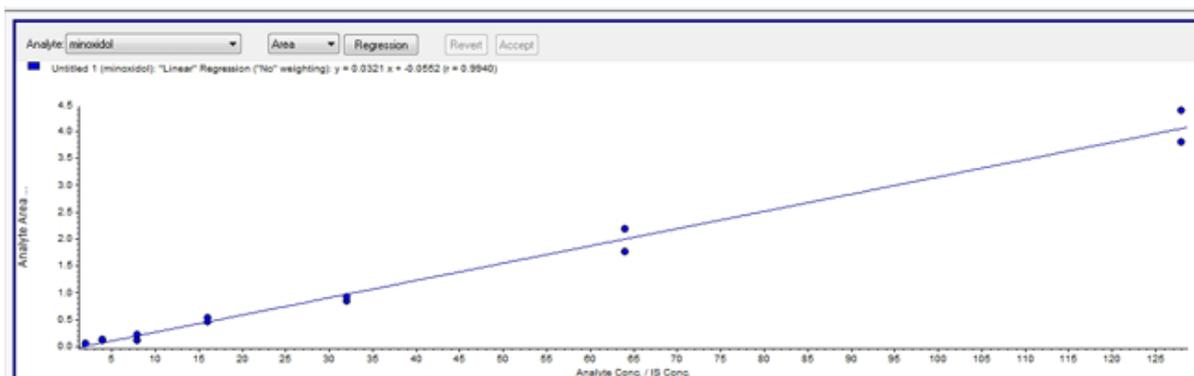
El usuario puede ver la curva de calibración y cambiar las opciones de regresión en una tabla de resultados abierta. Si hay dos o más tablas de resultados abiertas, las curvas de calibración se pueden superponer. Para superponer curvas, se debe utilizar el mismo método para crear las tablas.

Represente gráficamente una curva de calibración para ver la curva utilizada para la regresión. La columna **Calculated Concentration** de la Results Table refleja los cambios derivados del ajuste de la curva a los puntos del patrón.

Nota: Esta opción está disponible únicamente cuando hay una tabla de resultados abierta.

1. Abra una Results Table.
2. Haga clic en **Tools > Calibration > Pane**.
Se abre el panel Calibration Curve que contiene la curva de calibración.

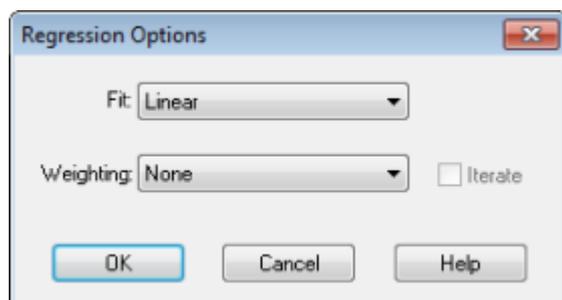
Figura 14-13: Calibration Curve



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

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

Figura 14-14: Cuadro de diálogo Regression Options



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

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

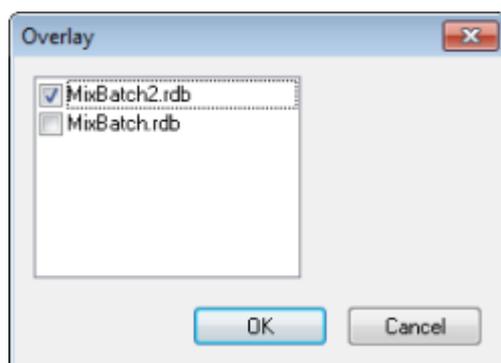
5. Si es necesario, repita estos pasos para crear una curva más adecuada.
6. Para guardar los cambios, haga clic en **Accept**.

Superposición de curvas de calibración

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

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

Figura 14-15: Cuadro de diálogo de superposición



3. Seleccione las tablas que superpondrá con la curva actual.
4. Haga clic en **OK**.
El software representa gráficamente las curvas de todas las tablas seleccionadas en el mismo gráfico.

Estadísticas de muestras

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

Recomendamos que se incluyan las estadísticas del lote en los informes para asegurarse de la validez de los resultados.

Visualización de estadísticas de patrones y QC

Cuando se abre más de una Results Table, se puede mostrar información estadística de los patrones y controles de calidad de los lotes adicionales en la ventana Statistics. Esto permite comparar resultados entre lotes e identificar tendencias en los patrones o QC (controles de calidad).

1. Abra una tabla de resultados.
2. Haga clic en **Tools > Statistics**.
3. Seleccione **Concentration** en la lista **Statistics Metric**.
4. Seleccione un analito en el campo **Analyte Name**.
5. Seleccione **Standard** en el campo **Sample Type**.
Se mostrarán los resultados.
6. Examine las columnas **%CV** y **Accuracy**.
La columna **%CV** muestra el coeficiente de variación entre las mediciones de un único parámetro; por ejemplo, el área. **Accuracy** indica lo próximo que se encuentra el punto representado al valor interpolado.
7. Si es necesario, active la casilla de verificación **Display Low/High values** y, a continuación, examine los valores de **Low**, **High** y **Mean** para cada fila de la cuadrícula. Cada fila representa los patrones que tienen los mismos niveles de concentración.
8. Seleccione otro analito.
Los resultados se muestran para cada analito por separado.
9. Para comprobar las variaciones de control de calidad (QC) en los mismos niveles de concentración, seleccione **QC** en el campo **Sample Type**.

Gráficos de métricas

Un gráfico de métrica muestra gráficamente los datos de una columna de la tabla de resultados representados en función del eje X o el eje Y, o los datos de dos columnas

representadas la una con respecto a la otra. En esta sección se describe cómo generar gráficos de métricas y cómo trabajar con ellos.

El software incluye algunos gráficos de métrica predefinidos:

- Int_Std_Response (para localizar una muestra problemática)
- Analyte_Area versus Height (para verificar el comportamiento de la cromatografía)
- PK profile (conc. frente a punto de tiempo; para ejecutar tras una consulta de muestra)

Generación de gráficos de métrica

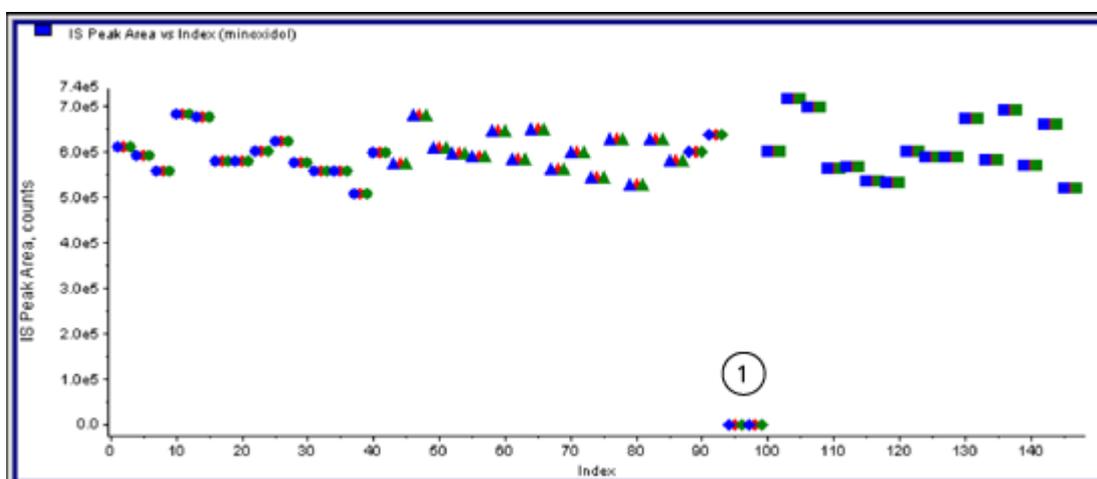
Utilice los gráficos de métrica para representar una columna determinada de la tabla de resultados, como Analyte Peak Area, Accuracy o Calculated Concentration. También se pueden representar dos campos de la tabla de resultados comparados entre sí y utilizar el gráfico para investigar puntos mostrados fuera del rango habitual. Los gráficos de métrica se utilizan a menudo con consultas. Para obtener más información sobre las consultas, consulte la *Ayuda*.

Genere gráficos de métrica mediante los siguientes métodos:

- Utilice el botón Plot para representar una o varias columnas de la tabla de resultados actual, aunque sin guardar los criterios de representación.
- Cree un gráfico específico de tabla para guardar los criterios de representación con la tabla actual.
- Cree un gráfico global para guardar los criterios de representación para su uso con tablas de resultados futuras.

No se muestran QC, muestras desconocidas, blancos, blancos dobles ni disolventes en la curva de calibración, pero pueden generarse sus gráficos de métricas.

Figura 14-16: Ejemplo de gráfico de métricas



Elemento	Descripción
1	Blancos dobles

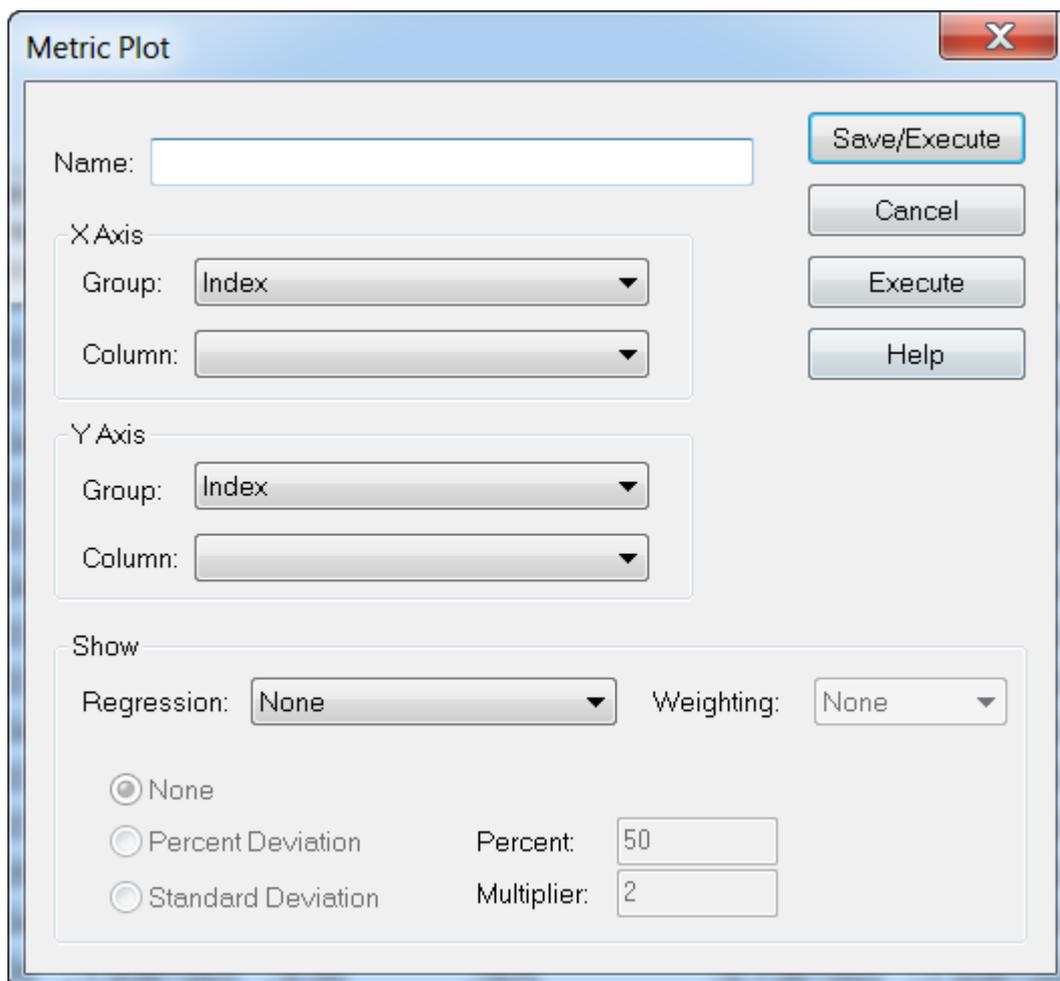
Generación de un gráfico temporal de métricas

1. Con una tabla de resultados abierta, realice una de las siguientes acciones:
 - Para representar los datos en el eje Y con el eje X como índice, haga clic en el encabezado de la columna de los datos que se van a representar.
 - Para representar los datos de la primera columna seleccionada en el eje X y los de la segunda columna seleccionada en el eje Y, seleccione dos columnas pulsando la tecla **Ctrl** mientras hace clic en los encabezados de columna.
2. Sobre la tabla de resultados, haga clic en el icono **Metric Plot by Selection**. Consulte la [Tabla D-9](#).
Se abrirá el gráfico de métrico.
3. Haga clic con el botón derecho en el panel de gráfico y, a continuación, haga clic en **Data Legend** para ver una explicación de los colores utilizados en el gráfico.
4. Haga clic con el botón derecho en el panel del gráfico y, a continuación, haga clic en **Point Legend** para ver una explicación de los símbolos utilizados en el gráfico.

Generación de un gráfico de métrica y almacenamiento de los criterios de representación

1. Abra la tabla de resultados adecuada.
2. Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y, a continuación, haga clic en **Metric Plot > New**.

Figura 14-17: Cuadro de diálogo Metric Plot



3. En el campo **Name**, escriba el nombre de los nuevos criterios de representación.
4. En la sección **X-Axis**, en la lista **Group**, para representar un campo en el eje Y utilizando el eje X como índice, seleccione **Index** y deje en blanco la lista **Column**.
5. Para representar dos columnas comparadas entre sí, en la sección **Y-axis**, en la lista **Group**, seleccione **Internal Standard** y, a continuación, en la lista **Column**, seleccione **IS Peak Area**.
6. Si es necesario, en la lista **Regression**, seleccione el tipo de regresión que desee utilizar y, a continuación, seleccione la configuración de regresión adecuada.
7. Para generar el gráfico y guardar los criterios de representación, haga clic en **Save/Execute**.

Se abrirá el gráfico de métricas. Para obtener más información, consulte la [Figura 14-16](#).

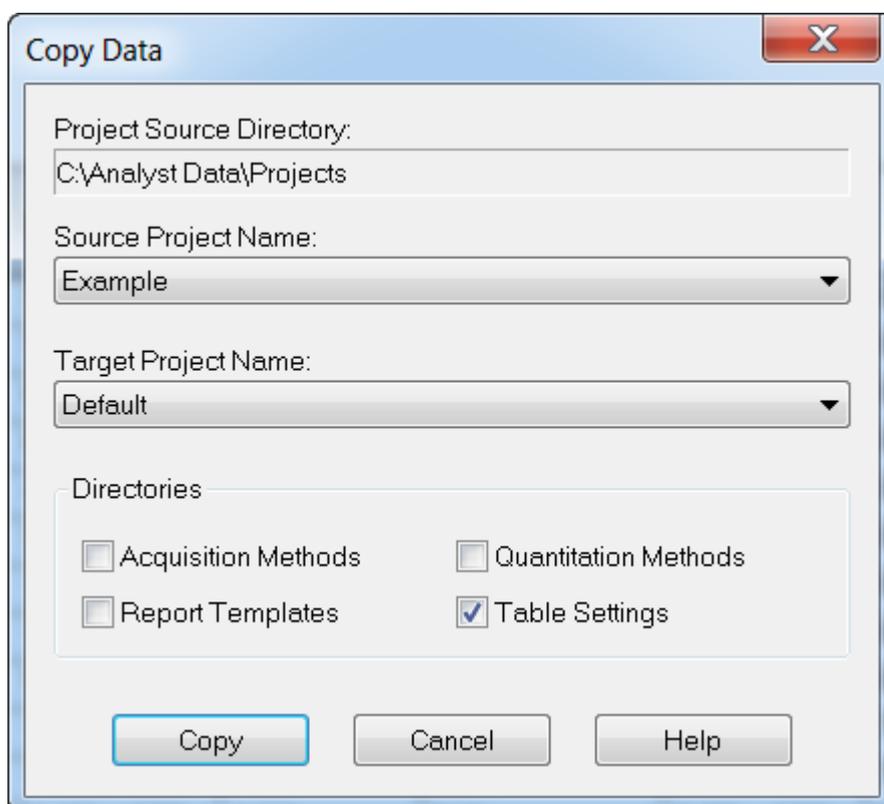
8. Haga clic con el botón derecho en el panel de gráfico y, a continuación, haga clic en **Data Legend** para ver una explicación de los colores utilizados en el gráfico.

- Haga clic con el botón derecho en el panel de gráfico y, a continuación, haga clic en **Point Legend** para ver una explicación de los símbolos utilizados en el gráfico.
Este conjunto de criterios está ahora disponible para futuros gráficos de esta tabla de resultados en el menú contextual de la tabla de resultados. Los usuarios también pueden editar los criterios de representación.
- Para ver la muestra problemática, intente representar la concentración de la muestra desconocida con respecto al tiempo o representar el área del estándar interno con respecto al índice.

Almacenamiento de criterios de representación predeterminados para futuras tablas de resultados

- Haga clic con el botón derecho en la tabla de resultados y luego haga clic en **Table Settings > Export To New Table Settings**.
De esta forma se exportará la configuración de la tabla del rdb para que pueda utilizarse en otros procesamientos de cuantificación dentro del proyecto.
- Para exportar la configuración de la tabla a otro proyecto, haga clic en **Tools > Project > Copy Data**.

Figura 14-18: Cuadro de diálogo Copy Data



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

PRECAUCIÓN: Posibles resultados erróneos. Para evitar resultados incorrectos:

- **Valide todas las consultas de Reporter antes de utilizarlas.**
 - **Valide los resultados si se utiliza una plantilla de Reporter modificada o una que contenga una consulta.**
 - **Asegúrese de que la validación se haya completado en las plantillas de Reporter.**
-

El software Reporter se puede utilizar para crear informes personalizados con Microsoft Word y Excel (2013, 2016 u Office 365). El software Reporter reúne las siguientes características:

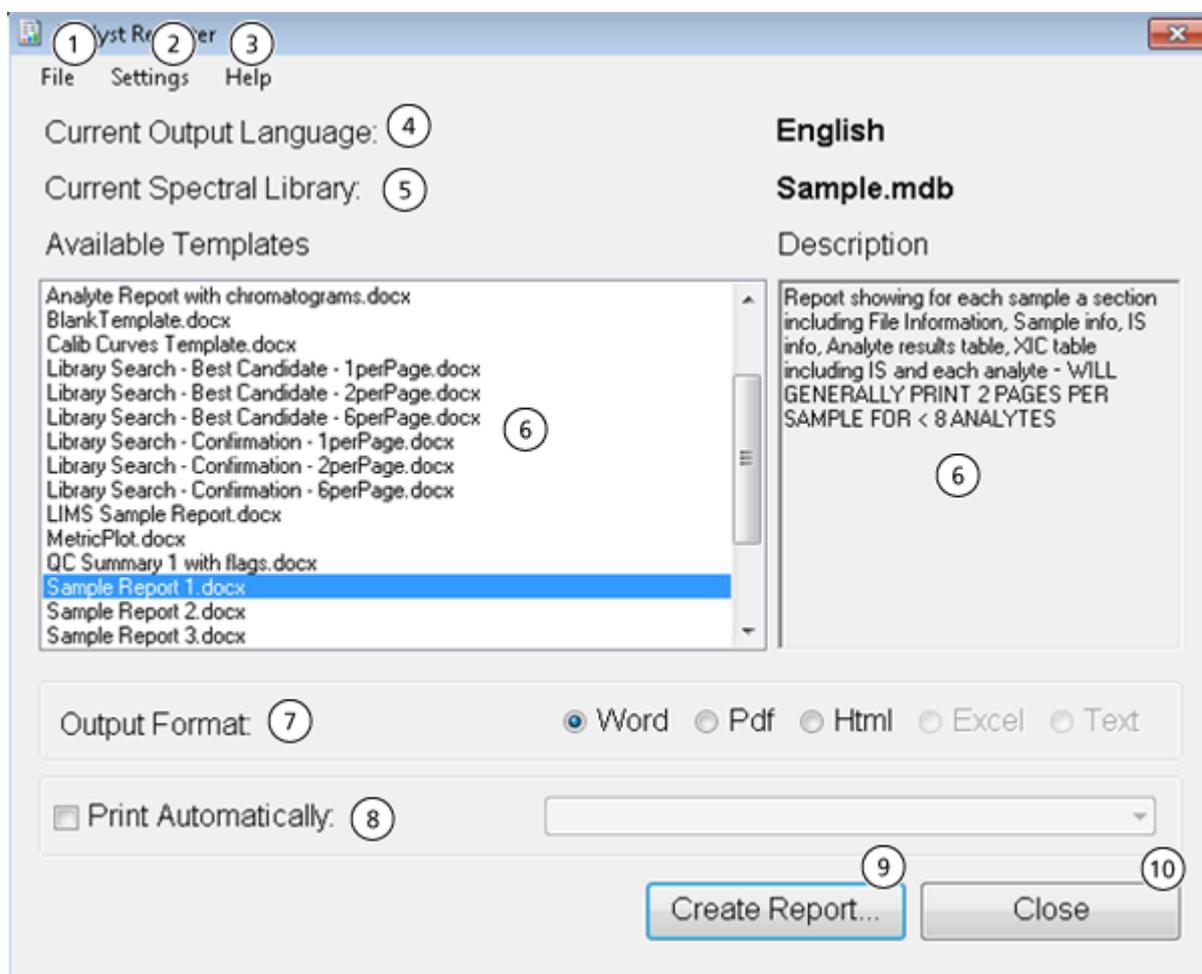
- Proporciona una variedad de informes que utilizan los datos disponibles en la tabla de resultados, la información de archivos de datos y las ventanas de revisión de picos cuantitativa.
- Proporciona una serie de informes que presentan los resultados de la búsqueda en la biblioteca de MS/MS. El usuario puede configurar el software Reporter para buscar en cualquier biblioteca de espectros de MS/MS que utilice el formato de software Analyst MD (mdb).
- Utiliza plantillas de Microsoft Word para proporcionar la información de formato necesaria al generar informes. Estas plantillas se pueden crear o modificar para especificar formatos de informe personalizados. Para obtener información sobre cómo crear o editar el Report Template Editor, consulte el documento *Ayuda*.
- Contiene una plantilla de inicio en blanco que se puede utilizar en el entorno de edición del software Reporter para diseñar plantillas de informes que cumplan la mayoría de los requisitos de los informes.
- Imprime automáticamente, exporta a formato Adobe Portable Document Format (pdf) y envía los resultados por correo electrónico.
- Genera informes desde aplicaciones de software personalizadas que utilizan las bibliotecas de programación disponibles del software Analyst MD.

El software Reporter se puede utilizar de los modos siguientes:

- Desde el software Analyst MD, para generar manualmente un informe o conjunto de informes.
- Lo pueden usar aplicaciones que no utilicen el software Analyst MD.

Interfaz del usuario de Analyst Reporter

Figura 15-1: Analyst Reporter



Elemento	Opción	Descripción
1	File > Exit	Cierra el programa y libera todos los recursos.

Elemento	Opción	Descripción
2	Settings > Select Output Language	Permite definir el diccionario de idioma que se va a utilizar para sustituir las etiquetas de idioma incluidas en una plantilla de informe. Las plantillas que cuentan con etiquetas de idioma pueden utilizarse para generar informes en cualquier idioma. Las etiquetas de idioma se sustituyen por el texto de la etiqueta coincidente del archivo de diccionario del idioma seleccionado. Estos archivos de diccionario se incluyen en la carpeta: C:\Program Files\AB SCIEX\AnalystReporter\Resources\Languages, en los sistemas operativos Windows 7 de 32 bits, o en C:\Program Files (x86)\AB SCIEX\AnalystReporter\Resources\Languages, en los sistemas operativos Windows 7 de 64 bits o Windows 10 de 64 bits.
2	Settings > Select Library	Permite desplazarse a una biblioteca de espectros. Esta biblioteca se utilizará para establecer la coincidencia y puntuación de datos MS/MS a partir de las tablas de resultados que contienen datos procedentes de MS/MS activada mediante adquisición dependiente de información (IDA).
2	Settings > Select Template Folder	Permite definir la carpeta a partir de la que se van a leer las plantillas disponibles. Para recuperar la carpeta de plantillas predeterminada, seleccione la opción Default .
3	Help > About	Muestra información acerca de la versión del software Reporter instalada actualmente.
4	Current Output Language	Muestra el diccionario de idioma seleccionado en ese momento, que se utilizará para sustituir las etiquetas de idioma incluidas en una plantilla de informe. Para seleccionar el diccionario de un idioma, haga clic en Settings > Select Output Language .
5	Current Spectral Library	Muestra la biblioteca de espectros seleccionada en ese momento. Para seleccionar una biblioteca de espectros, haga clic en Settings > Select Library .
6	Available Templates y Description	Muestra una lista de las plantillas de informe disponibles. Seleccione una plantilla para leer su descripción. Para cambiar la carpeta de la que se obtiene la lista de las plantillas disponibles, seleccione Settings > Select Template Folder > Browse .

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

Generación de informes

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

1. Abra una **Results Table**.
2. En **Companion Software**, haga doble clic en **Reporter**.
Se abre **Analyst Reporter**.
3. En el campo **Available Templates**, seleccione la plantilla de informe aplicable.

4. Haga clic en el formato de salida **PDF**.
La opción Word aparece ya seleccionada y el informe se guarda automáticamente en la carpeta Results del proyecto actual. Si el formato de salida PDF no está seleccionado, el informe se crea y se abre en Word o se imprime, en función de lo que se haya seleccionado, pero el informe no se guarda. Esto permite al usuario editar el informe en Word antes de guardar el informe original.
5. Opcional para un flujo de trabajo de búsqueda en biblioteca (cualitativa) cuando se utilizan tablas de resultados con datos procedentes de tipos de análisis MS/MS activados mediante la adquisición dependiente de información (IDA): haga clic en **Settings > Select Library**, vaya a la base de datos (formato mdb) correspondiente de la biblioteca MS/MS y, a continuación, haga clic en **Open**.
6. (Opcional) Active la casilla de verificación **Print Automatically** para imprimir automáticamente los informes en una impresora preseleccionada.
Se utilizará la impresora predeterminada de Windows, a menos que seleccione otra. El software Reporter mantendrá la impresora seleccionada entre una operación y la siguiente. Si se configura la impresora con un controlador de impresión PDF, Reporter genera automáticamente versiones de archivo PDF de los informes creados.
7. Haga clic en **Create Report**.
En la pantalla se muestran varios indicadores de progreso a medida que el software abre la plantilla y la rellena con los datos procedentes de la tabla de resultados. Algunos informes se generan en pocos segundos, mientras que otros tardan algo más. Un conjunto de datos grande con numerosas transiciones de MRM o un gran número de gráficos podría producir informes de varios cientos de páginas y tardar horas en generarse.

Información de servicio técnico y mantenimiento: Espectrómetro de masas

16

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, examine con cuidado las piezas del sistema de suministro de gas externo, incluidos los tubos conectados al equipo, para confirmar que el estado es correcto. Reemplace cualquier tubo agrietado, comprimido o contraído.

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

Información de servicio técnico y mantenimiento: Espectrómetro de masas

- 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 obtener información acerca de la frecuencia de ajuste, consulte la sección [Soluciones e iones de calibración](#).

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 16-1: 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 Limpieza de la placa de chapa .
Aceite de 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 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 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) locales.
Placa del orificio (parte delantera)	Según sea necesario	Limpiar	Consulte la sección Limpieza de la parte delantera de la placa del orificio .

Tabla 16-1: Tareas de mantenimiento del espectrómetro de masas (continuación)

Componente	Frecuencia	Tarea	Para obtener más información
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.
Filtro de aire del espectrómetro de masas	Según sea necesario	Reemplazar	Póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado (QMP) o con un representante del servicio técnico (FSE) local.
QJetGuía de iones y lente IQ0	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 16-2: Tareas de mantenimiento de la fuente de iones

Componente	Frecuencia	Tarea	Para obtener más información
Sondas TurbolonSpray y APCI	Según sea necesario	Examinar y sustituir	Consulte la sección: Extracción de la sonda y Instalación de la sonda .

Tabla 16-2: Tareas de mantenimiento de la fuente de iones (continuación)

Componente	Frecuencia	Tarea	Para obtener más información
Electrodos para las sondas TurbolonSpray y APCI	Según sea necesario	Examinar y sustituir	Consulte la sección Sustitución del electrodo .
Aguja de descarga de corona	Según sea necesario	Reemplazar	Consulte la sección Sustitución de la aguja de descarga de corona .
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.
Tubo de muestra	Según sea necesario	Reemplazar	Consulte la sección Conexión del tubo de la fuente de iones .

Para las tareas "Según las necesidades", siga estas directrices:

- Limpie las superficies del espectrómetro de masas después de un derrame o cuando estén sucias.
- Vacíe la botella de drenaje 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).

- Para los sistemas con bombas de vacío preliminar selladas con aceite, rellene el aceite cuando esté por debajo del nivel mínimo.
- 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 Turbo V 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.



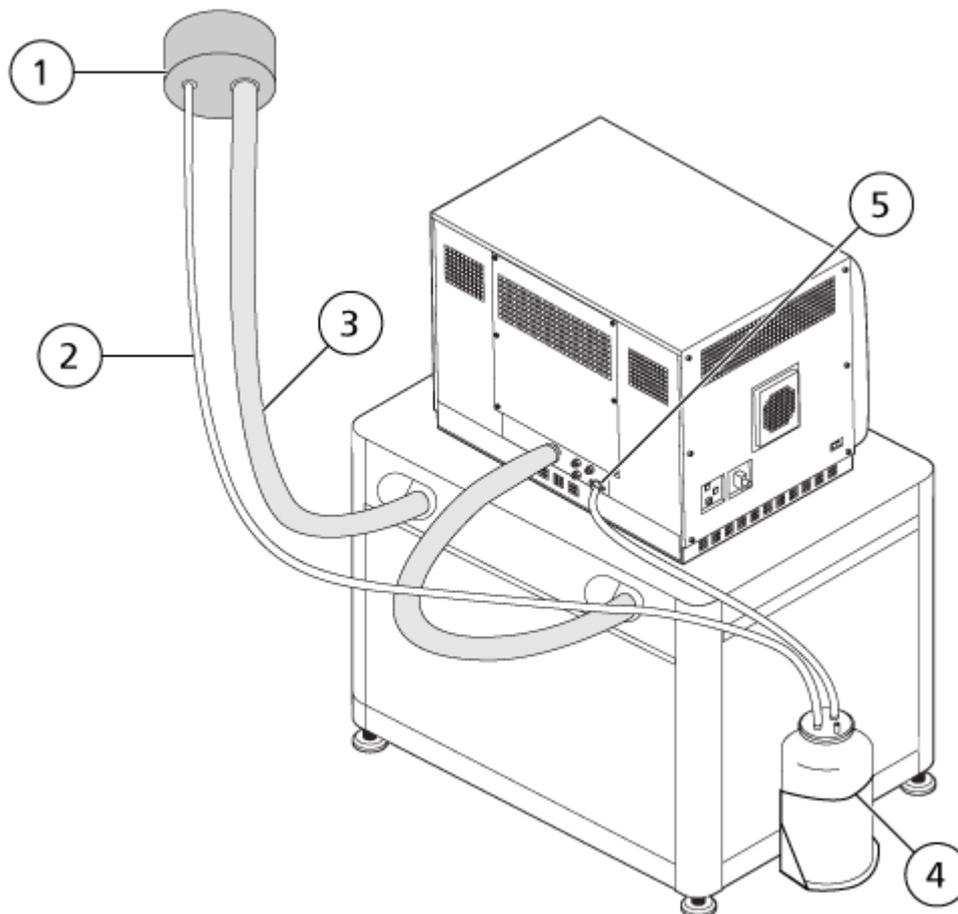
¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Tome las precauciones necesarias para ventilar los gases de escape a una campana extractora o un sistema de escape específicos del laboratorio, y asegúrese de que los tubos de ventilación estén fijados con 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.
2. Afloje las abrazaderas que conectan las mangueras a la tapa de la botella de drenaje de escape de la fuente.

Figura 16-1: 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 Asegúrese de que la botella esté bien fijada para evitar derrames.
5	Conexión del escape de la fuente al espectrómetro de masas: 1,6 cm (0,625 pulgadas) de diámetro interior

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. 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.

Limpieza de la parte delantera

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



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. Deje que la fuente de iones Turbo V 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.

Limpie la parte delantera del espectrómetro de masas utilizando el método de limpieza habitual con el fin de:

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

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

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

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

Síntomas de la contaminación

Si se observa alguno de los siguientes efectos, el sistema podría estar contaminado.

- Pérdida importante de sensibilidad.
- Mayor ruido de fondo.
- Los picos adicionales no forman parte de la muestra en los métodos de análisis completo o análisis de estudio.

Información de servicio técnico y mantenimiento: Espectrómetro de masas

Si observa alguno de los problemas anteriores, limpie la parte delantera del espectrómetro de masas.

Materiales necesarios

Nota: Para obtener información sobre pedidos de consumibles y otras consultas, consulte la *Guía de piezas y equipos de la serie de instrumentos MD*. Póngase en contacto con su representante del servicio técnico o visite sciex.com para obtener más información.

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

Herramientas y suministros disponibles del fabricante

Nota: Para obtener información sobre los números de referencia, consulte el documento *Guía de piezas y equipos*.

- Torunda de poliéster pequeña, termoadherida. También disponible en el juego de limpieza.
- Paño pequeño que no suelta fibras (11 cm x 21 cm, 4,3 pulgadas x 8,3 pulgadas). También disponible en el juego de limpieza.

- Juego de limpieza. Contiene la torunda de poliéster pequeña, paños que no sueltan fibras, una herramienta de limpieza del conjunto de barras Q0, un cepillo de limpieza recto para la guía de iones QJet y Alconox

Prácticas correctas de limpieza



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. Deje que la fuente de iones Turbo V 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 toxicidad química. Consulte las fichas técnicas de los productos químicos y siga todos los procedimientos de seguridad recomendados cuando manipule, almacene y elimine los productos químicos.



¡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.

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

Sugerencia: Coloque el paño alrededor de una torunda de poliéster termoadherida.

Figura 16-2: Ejemplo: doblado del paño



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

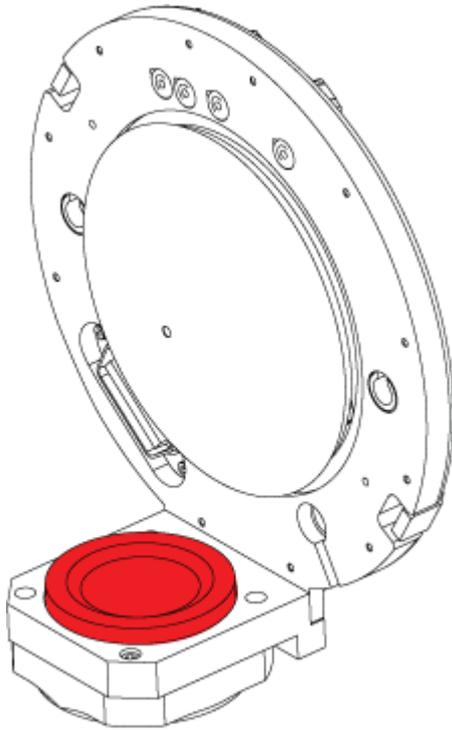
Preparación del espectrómetro de masas



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. Deje que la fuente de iones Turbo V 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.

PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. No deje caer nada en el drenaje de la fuente al retirar la fuente de iones.

Figura 16-3: Drenaje de la fuente en la interfaz de vacío



1. Desactive el perfil de hardware. Consulte el documento *Guía de usuario del software*.
2. Retire la fuente de iones. Consulte la sección: [Extracción de la fuente de iones](#).
Guarde la fuente de iones mientras no la esté utilizando para protegerla de posibles daños y preservar su integridad de funcionamiento.

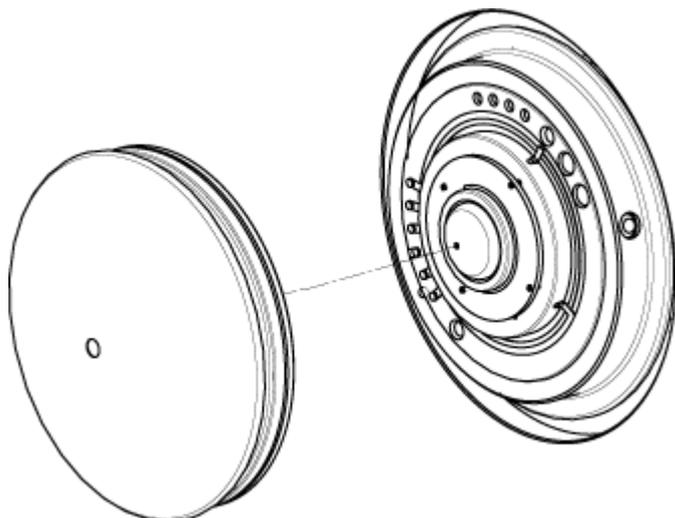
Limpieza de la placa de chapa

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

PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. Para evitar daños en la abertura, no introduzca un cepillo de alambre o de metal en la abertura sobre la placa de chapa, la placa del orificio o el calentador de la interfaz.

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

Figura 16-4: Extracción de la placa de chapa



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

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

2. Humedezca un paño que no suelte fibras con agua de grado LC-MS y limpie ambos lados de la placa de chapa.

Nota: Utilice varios paños si es necesario.

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

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

Limpeza de la parte delantera de la placa del orificio

PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. Al limpiar la superficie de la placa del orificio, no retire el calentador de la interfaz. La retirada frecuente del calentador de la interfaz puede provocar daños en este. Para la limpieza normal, basta con limpiar la superficie del calentador de la interfaz.

PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. Para evitar daños en la abertura, no introduzca un cepillo de alambre o de metal en la abertura sobre la placa de chapa, la placa del orificio o el calentador de la interfaz.

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

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

Puesta en servicio del espectrómetro de masas

1. Instale la placa de chapa.
2. Instale la fuente de iones en el espectrómetro de masas. Consulte la sección [Instalación de la fuente de iones en el espectrómetro de masas](#).
Apriete la fuente de iones girando los pestillos hacia abajo hasta la posición de bloqueo.
3. Si el espectrómetro de masas está conectado al sistema de LC, restablezca todas las conexiones al sistema de LC.
4. Active el perfil de hardware. Consulte el documento *Guía de usuario del software*.

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 espectrómetro 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.

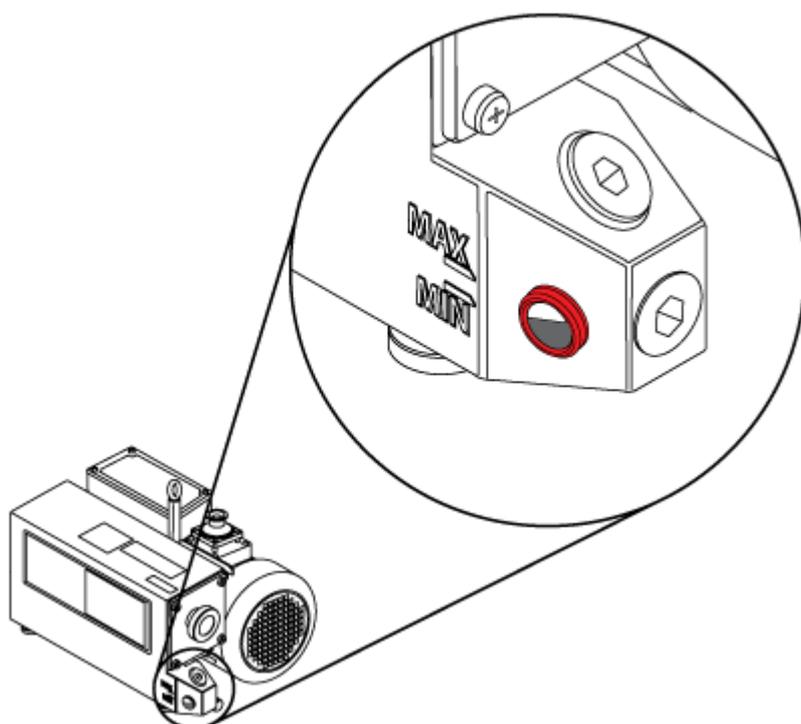
Nota: La fuente de iones y el espectrómetro de masas deben transportarse y almacenarse a una temperatura de entre $-30\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $+60\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($-22\text{ }^{\circ}\text{F}$ a $140\text{ }^{\circ}\text{F}$) y la humedad relativa no debe ser superior al 99 % sin condensación. Almacene el sistema a una altitud no superior a los 2000 m (6562 ft) sobre el nivel del mar.

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 16-5: Mirilla



Servicio técnico y mantenimiento: fuente de iones

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



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. Deje que la fuente de iones Turbo V 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! Riesgo de incendio y peligro de toxicidad química. Mantenga los líquidos inflamables lejos de las llamas y las chispas, y utilícelos solo en campanas extractoras de humos químicos ventilados o en cabinas de seguridad.



¡ADVERTENCIA! Peligro de toxicidad química. Utilice equipo de protección individual, incluidos una bata de laboratorio, guantes y gafas de seguridad, para evitar la exposición de la piel o los ojos.



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. En caso de derrame de sustancias químicas, revise las fichas técnicas para conocer las instrucciones específicas. Compruebe que el sistema se encuentre en estado Standby antes de limpiar un derrame cercano a la fuente de iones. Utilice el equipo de protección individual adecuado y toallitas absorbentes para contener el derrame y deséchelas según lo dispuesto por las normativas locales.



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Evite el contacto con las altas tensiones aplicadas a la fuente de iones durante el funcionamiento. Ponga el sistema en el estado Standby antes de ajustar el tubo de muestra u otros equipos cerca de 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.

PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. No levante ni transporte la fuente de iones con una mano. La fuente de iones está diseñada para levantarla o transportarla con dos manos, una mano a cada lado de la fuente de iones.

Esta sección contiene procedimientos generales de mantenimiento para la fuente de iones. Para determinar con qué frecuencia debe limpiar o realizar tareas de mantenimiento en la fuente de iones, considere lo siguiente:

- Compuestos probados
- Limpieza de las muestras y técnicas de preparación de muestras
- Cantidad de tiempo que una sonda inactiva contiene una muestra
- Tiempo de ejecución del sistema general

Estos factores pueden provocar cambios en el rendimiento de la fuente de iones, lo que indica que se requiere un mantenimiento.

Información de servicio técnico y mantenimiento: Espectrómetro de masas

Asegúrese de que la fuente de iones instalada esté totalmente sellada al espectrómetro de masas y que no haya signos de fugas de gas. Inspeccione con regularidad la fuente de iones y sus adaptadores para comprobar que no existan fugas. Limpie los componentes de la fuente de iones con regularidad para mantenerla en buen estado de funcionamiento.

PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. Utilice solo el método de limpieza y los materiales recomendados para evitar dañar los equipos.

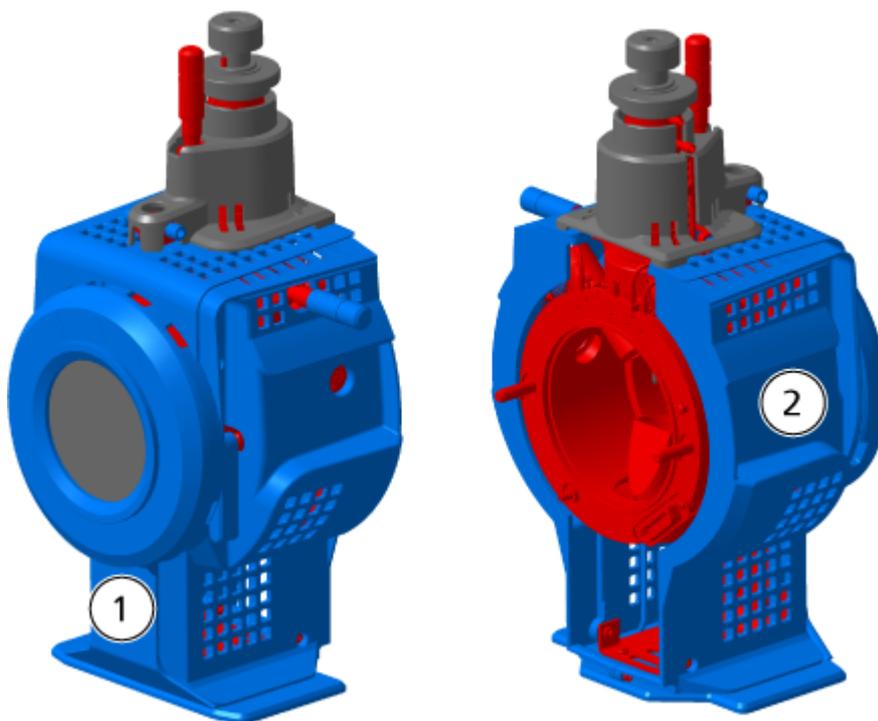
Materiales necesarios

- Llave de boca de 0,25 pulgadas
- Destornillador de punta plana
- Metanol de grado LC-MS
- Agua desionizada de grado LC-MS
- Gafas de seguridad.
- Máscara y filtro de respiración
- Guantes no empolvados (se recomienda que sean de nitrilo o neopreno)
- Bata de laboratorio

Manipulación de la fuente de iones

Algunas superficies de la fuente de iones se calientan durante su funcionamiento. Las siguientes figuras muestra las superficies que están más frías (azul y gris) y superficies que permanecen calientes durante un periodo prolongado de tiempo (rojo). No toque las superficies rojas mientras utiliza o retira la fuente de iones.

Figura 16-6: Superficies calientes de la fuente de iones (Rojo = Caliente, Gris = Templado, Azul = Manejar con precaución)



Elemento	Descripción
1	Delante
2	Detrás

Extracción de la fuente de iones

Nota: El nitrógeno sigue fluyendo a una velocidad de 5,3 l/min cuando el espectrómetro de masas está apagado o la fuente de iones se retira del sistema. Para minimizar el consumo de gas nitrógeno y para mantener limpio el espectrómetro de masas cuando no se esté utilizando, deje instalada la fuente de iones en el espectrómetro y el sistema encendido.

La fuente de iones se puede extraer fácil y rápidamente sin necesidad de herramientas. Extraiga siempre la fuente de iones del espectrómetro de masas antes de realizar cualquier operación de mantenimiento en la fuente de iones o de intercambiar sondas.

1. Detenga todos los análisis en curso.
2. Desconecte la corriente de muestra.
3. Ajuste el valor de **Temperature** de la fuente de iones a 0 si los calentadores están en uso.
4. Espere al menos 30 minutos para que la fuente de iones se enfríe.
5. Desconecte el tubo de muestra de la unión de conexión a tierra.

Información de servicio técnico y mantenimiento: Espectrómetro de masas

6. Gire los dos pestillos de la fuente hacia arriba, hasta la posición de las 12 en punto, para liberar la fuente de iones.
7. Separe suavemente la fuente de iones de la interfaz de vacío.

Nota: Tenga cuidado de no perder las juntas tóricas instaladas en la interfaz de vacío.

8. Coloque la fuente de iones sobre una superficie limpia y segura.

Limpieza de las superficies



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Asegúrese de que la fuente de iones está totalmente desconectada del espectrómetro de masas antes de continuar.

Limpie las superficies de la fuente de iones después de un derrame o cuando estén sucias.

Procedimientos de condiciones previas

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• Extracción de la fuente de iones |
|--|

Limpie la superficie de la fuente de iones con un paño suave y húmedo.

Limpieza de la sonda

Enjuague periódicamente la fuente de iones, independientemente del tipo de compuestos muestreado. Hágalo mediante la configuración de un método en el software de control específicamente para realizar una operación de enjuague.

1. Cambie a una fase móvil con una proporción 1:1 de agua:acetonitrilo, o bien 1:1 de agua:metanol.
2. Ajuste la posición de la sonda de modo que quede lo más lejos posible del orificio.
3. En el software de control, haga lo siguiente.
 - a. Cree un método de MS.
 - b. Ajuste la temperatura de la fuente de iones a entre 500 °C y 600 °C.
 - c. Ajuste el gas de fuente de iones 1 y el gas de fuente de iones 2 al menos a 40.
 - d. Ajuste el caudal del gas de la interfaz de Curtain Gas al valor más alto posible.
4. Espere hasta que se alcance el punto de ajuste de temperatura establecido.
5. Asegúrese de que la sonda y el tubo de muestra queden perfectamente enjuagados.

Extracción de la sonda



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Retire la fuente de iones del espectrómetro de masas antes de iniciar este procedimiento. Siga todas las prácticas de trabajo seguro con electricidad.

PRECAUCIÓN: Posible daño del sistema. No permita que la punta del electrodo que sobresale ni la aguja de descarga de corona toquen ninguna pieza del alojamiento de la fuente de iones para evitar dañar la sonda.

Procedimientos de condiciones previas

- [Extracción de la fuente de iones.](#)

La sonda se puede extraer fácil y rápidamente sin necesidad de herramientas. Extraiga siempre la fuente de iones del espectrómetro de masas antes de cambiar las sondas o de realizar el mantenimiento de la sonda.

1. Afloje la tuerca del tubo de muestra y luego desconecte el tubo de muestra de la sonda.
2. Afloje el anillo de retención que sujeta la sonda en el alojamiento de la fuente de iones.
3. Tire suavemente de la sonda hacia arriba y sáquela de la torre.
4. Coloque la sonda en una superficie limpia y segura.

Sustitución del electrodo



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Retire la fuente de iones del espectrómetro de masas antes de iniciar este procedimiento. Siga todas las prácticas de trabajo seguro con electricidad.



¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Tenga cuidado al manipular el electrodo. La punta del electrodo es muy afilada.

Procedimientos de condiciones previas

- [Extracción de la fuente de iones.](#)
- [Extracción de la sonda.](#)

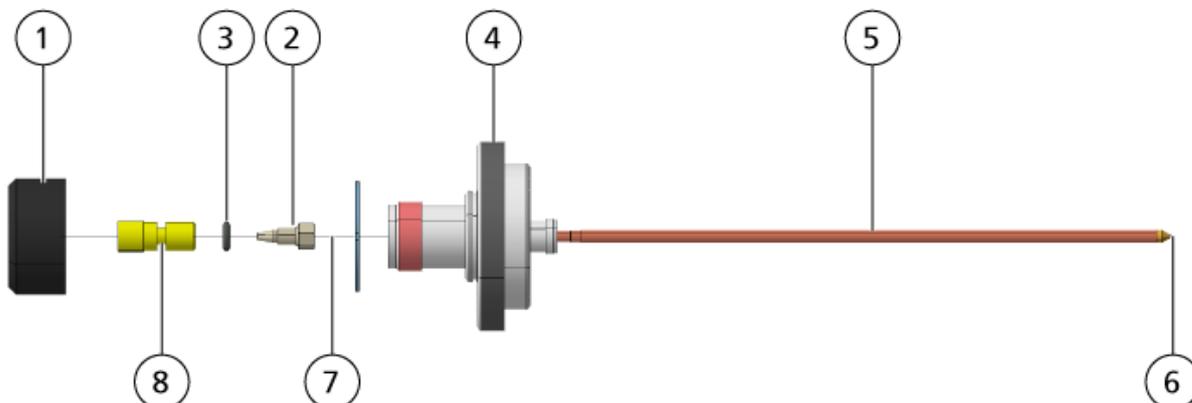
La sonda contiene un electrodo. Cambie el electrodo cuando observe un descenso del rendimiento.

Nota: Después de cambiar el electrodo, evalúe el efecto del cambio en el rendimiento del sistema.

Este procedimiento se aplica a ambas sondas.

1. Extraiga la tuerca de ajuste del electrodo y, a continuación, saque el electrodo.
2. Mientras sostiene la sonda con la punta hacia abajo, de manera que el muelle permanezca dentro de la sonda, instale un adaptador para muestras en la unión PEEK y apriete a mano.

Figura 16-7: Sonda, vista ampliada



Elemento	Descripción
1	Tuerca de ajuste del electrodo
2	Tuerca de retención de 1/4 pulgadas
3	Resorte
4	Anillo de retención
5	Tubo del pulverizador
6	Punta del electrodo
7	Tubo del electrodo
8	Unión PEEK

3. Extraiga la unión PEEK y el tubo del electrodo adjunto de la sonda.
4. Retire el adaptador para muestras de la unión PEEK.
5. Utilice la llave de boca de 0,25 pulgadas para extraer la tuerca de retención que sostiene el tubo del electrodo en la unión PEEK.
6. Extraiga el tubo del electrodo de la tuerca de retención.
7. Introduzca el nuevo tubo del electrodo en la tuerca de retención y, a continuación, en la unión PEEK.

Asegúrese de que el tubo del electrodo está tan introducido como sea posible en la unión PEEK. Si existe un hueco entre el tubo del electrodo y su emplazamiento dentro de la unión, puede producirse un volumen muerto.

8. Apriete la tuerca de retención.

No fuerce la tuerca de retención ni la apriete excesivamente, ya que el tubo podría presentar fugas.

9. Asegúrese de que el resorte esté aún dentro de la sonda y, a continuación, apriete la tuerca de ajuste del electrodo.
10. Alinee el tubo del electrodo con la abertura estrecha del tubo del pulverizador e introduzca la unión PEEK y el tubo del electrodo adherido en la sonda. Tenga cuidado de no doblar el tubo del electrodo.
11. Instale y después apriete la tuerca de ajuste del electrodo.
12. Instale la sonda. Consulte la sección [Instalación de la sonda](#).
13. Instale la fuente de iones en el espectrómetro de masas. Consulte la sección [Instalación de la fuente de iones](#).
14. Conecte el tubo de muestra. Consulte la sección [Conexión del tubo de la fuente de iones](#).
15. Ajuste la extensión de la punta del electrodo. Consulte la sección [Optimización de la posición de la sonda TurbolonSpray](#) o [Optimización de la posición de la sonda APCI](#).

Sustitución de la aguja de descarga de corona



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Retire la fuente de iones del espectrómetro de masas antes de iniciar este procedimiento. Siga todas las prácticas de trabajo seguro con electricidad.



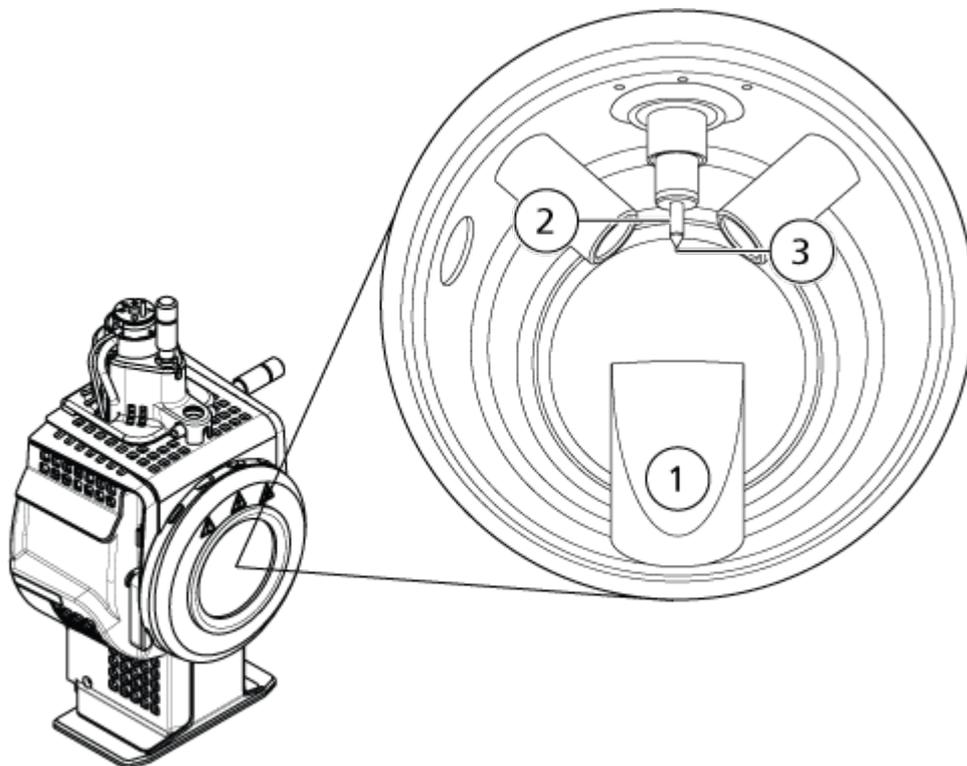
¡ADVERTENCIA! Peligro de perforación. Manipule con cuidado la aguja. La punta de la aguja es muy afilada.

Procedimientos de condiciones previas
<ul style="list-style-type: none">• Extracción de la fuente de iones.• Extracción de la sonda.

Si la punta de la aguja de descarga de corona se corroe, es posible que no pueda sacarla manualmente. En ese caso, corte la punta de la aguja para sacarla y después sustituya todo el conjunto de la aguja de descarga de corona.

1. Gire la fuente de iones para que se pueda acceder al lado abierto.

Figura 16-8: Aguja de descarga de corona



Elemento	Descripción
1	Chimenea de escape
2	Manguito cerámico
3	Punta de la aguja de descarga de corona

2. Mientras sostiene el tornillo de ajuste de la aguja de descarga de corona entre el dedo índice y el pulgar de una mano y la aguja de descarga de corona con la otra mano, gire la punta de la aguja de descarga de corona en sentido antihorario para aflojar y extraer con cuidado la punta. Consulte la sección [Componentes de la fuente de iones](#).
3. Tire hacia abajo y con cuidado de la aguja de descarga de corona a través de la chimenea de escape para extraerla.
4. Introduzca la nueva aguja a través de la chimenea de escape en el manguito cerámico hasta donde le sea posible.
5. Sosteniendo una punta nueva entre el dedo índice y el pulgar de una mano y el tornillo de ajuste de la aguja de descarga de corona con la otra mano, gire la punta de la aguja de descarga de corona en sentido horario para instalar la punta.
6. Inserte la sonda y, a continuación, instale la fuente de iones en el espectrómetro de masas. Consulte la sección [Instalación de la fuente de iones](#).

Sustitución del tubo de muestra



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. Retire la fuente de iones del espectrómetro de masas antes de iniciar este procedimiento. Siga todas las prácticas de trabajo seguro con electricidad.

Procedimientos de condiciones previas

- Detenga el flujo de muestra y asegúrese de que todo el gas restante se haya eliminado a través del sistema de escape de la fuente.
- Retire la fuente de iones. Consulte la sección [Extracción de la fuente de iones](#).

Utilice el siguiente procedimiento para reemplazar el tubo de muestra si presenta un bloqueo.

1. Desconecte el tubo de muestras de la sonda y la unión de conexión a tierra.
2. Sustituya el tubo de muestras por un tubo de la longitud apropiada; corte con un cortador de tubos adecuado. Consulte la sección [Conexión del tubo de la fuente de iones](#).
3. Instale la fuente de iones. Consulte la sección [Instalación de la fuente de iones](#).
4. Inicie el flujo de muestra.

Solución de problemas del espectrómetro de masas

17

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 17-1: 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 aumentelo si procede.
Se ha producido un fallo del sistema debido a que la presión de vacío es demasiado alta.	<ol style="list-style-type: none">1. el nivel de aceite es demasiado bajo.2. Hay una fuga.3. Se ha instalado la placa del orificio incorrecta.	<ol style="list-style-type: none">1. inspeccione el nivel de aceite de la bomba de vacío preliminar y, 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 17-1: 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.	<ol style="list-style-type: none"> 1. El filtro de aire del espectrómetro de masas está bloqueado. 2. La caja de bobinas no está ajustada. 3. La temperatura ambiente es demasiado alta. 	<ol style="list-style-type: none"> 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 <i>Guía de planificación del centro</i> del sistema.
El software de control notifica que el espectrómetro de masas se encuentra en estado Fault debido a la fuente de iones.	<ol style="list-style-type: none"> 1. La sonda no está instalada. 2. La sonda no está conectada firmemente. 	<p>Confirme el fallo en el panel de estado de la página de detalles del dispositivo.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Instale la sonda. Consulte la sección Instalación de la sonda. 2. Retire e instale la sonda. Apriete con firmeza el anillo de retención. Consulte la sección: Extracción de la sonda y Instalación de la sonda.
El software de control indica que la sonda APCI está en uso, pero la sonda TurbolonSpray 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 la sección Sustitución del electrodo .
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.

Solución de problemas del espectrómetro de masas

Tabla 17-1: Problemas del sistema (continuación)

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
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 los documentos: <i>Guía de usuario de software</i> o <i>Ayuda</i> .
El rendimiento del espectrómetro de masas ha disminuido.	<ol style="list-style-type: none">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.	<ol style="list-style-type: none">1. Optimice las condiciones de la fuente de iones. Consulte la sección: Optimización de la posición de la sonda TurbolonSpray o Optimización de la posición de la sonda APCI.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 17-1: 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 TurbolonSpray, gire la aguja de descarga de corona hacia la placa de chapa y retírela de la corriente de gas del calentador. Consulte la sección Ajuste de la posición de la aguja de descarga de corona .

Tabla 17-2: 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 Limpieza de la placa de chapa .
La placa del orificio está sucia.	Consulte la sección Limpieza de la parte delantera de la placa del orificio 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 jeringa o el conducto de la muestra gotean.	Inspeccione la jeringa o el conducto de la muestra para detectar fugas y repárelas. Asegúrese de que todos los adaptadores son del tipo y tamaño correctos.

Solución de problemas del espectrómetro de masas

Tabla 17-2: Problemas de sensibilidad (continuación)

Posible causa	Acción correctiva
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.
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.	Limpié el electrodo. Consulte la sección Sustitución del electrodo .
No hay señal o la señal es inestable	
El tubo está bloqueado.	Sustituya el tubo de muestras. Consulte la sección Conexión del tubo de la fuente de iones .

Tabla 17-3: 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 la sección: Optimización de la sonda TurbolonSpray o Optimización de sonda APCI .
La jeringa o el conducto de la muestra están sucios.	Limpié o sustituya la jeringa o el conducto de la muestra.
La placa de chapa está sucia.	Limpié la placa de chapa. Consulte la sección Limpieza de la placa de chapa .
La placa del orificio está sucia.	Limpié la parte delantera de la placa del orificio. Consulte la sección Limpieza de la parte delantera de la placa del orificio .

Tabla 17-3: Problemas de ruido de fondo (continuación)

Posible causa	Acción correctiva
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).
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: <ol style="list-style-type: none"> 1. Mueva la sonda a la posición más alejada de la abertura, en vertical y en horizontal. 2. (Software Analyst MD) 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.

Parámetros de los sistemas SCIEX 4500MD

A

En la tabla siguiente se muestran los parámetros generales de los sistemas SCIEX 4500MD. El primer número que aparece debajo de cada tipo de análisis es el valor predefinido. El rango de números es el rango permitido para cada parámetro.

Tabla A-1: Parámetros del sistema para los tipos de análisis de triple cuadrupolo

ID de acceso	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
	Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR ^{3 4}	20 10 a 55	20 10 a 55	20 10 a 55	20 10 a 55	20 10 a 55	20 10 a 55
CAD ⁵	0 Fijo	6 Fijo	Medio Bajo, Medio, Alto	0 Fijo	6 Fijo	Medio Bajo, Medio, Alto
CAD ⁶	0 Fijo	5 Fijo	9 0 a 12	0 Fijo	5 Fijo	9 0 a 12
IS ^{3 4}	5500 0 a 5500	5500 0 a 5500	5500 0 a 5500	-4500 -4500 a 0	-4500 -4500 a 0	-4500 -4500 a 0
NC ⁷	3 0 a 5	3 0 a 5	3 0 a 5	-3 -5 a 0	-3 -5 a 0	-3 -5 a 0
TEM ^{4 7}	0 0 a 750	0 0 a 750	0 0 a 750	0 0 a 750	0 0 a 750	0 0 a 750
DP ⁵	200 0 a 300	100 0 a 300	100 0 a 300	-100 -300 a 0	-100 -300 a 0	-100 -300 a 0

³ Fuente de iones Turbo V

⁴ Sonda TurbolonSpray

⁵ Sistema QTRAP 4500MD

⁶ Sistema SCIEX Triple Quad 4500MD

⁷ Sonda APCI

Tabla A-1: Parámetros del sistema para los tipos de análisis de triple cuadrupolo (continuación)

ID de acceso	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
DP ⁶	130 0 a 300	130 0 a 300	120 0 a 300	-60 -300 a 0	-60 -300 a 0	-150 -300 a 0
EP	10 2 a 15	10 2 a 15	10 2 a 15	-10 -15 a -2	-10 -15 a -2	-10 -15 a -2
CEM ⁵	1800 0 a 3300	1800 0 a 3300	1800 0 a 3300	1800 0 a 3300	1800 0 a 3300	1800 0 a 3300
CEM ⁶	2000 0 a 3300	2000 0 a 3300	2000 0 a 3300	2000 0 a 3300	2000 0 a 3300	2000 0 a 3300
GS1 ⁵	20 0 a 90	20 0 a 90	20 0 a 90	20 0 a 90	20 0 a 90	20 0 a 90
GS1 ⁶	15 0 a 90	15 0 a 90	15 0 a 90	15 0 a 90	15 0 a 90	15 0 a 90
GS2	0 0 a 90	0 0 a 90	0 0 a 90	0 0 a 90	0 0 a 90	0 0 a 90
CE ⁵	N/A	N/A	30 5 a 180	N/A	N/A	-30 -180 a -5
CE ⁶	N/A	N/A	53 5 a 180	N/A	N/A	-40 -180 a -5
CXP ⁵	N/A	15 0 a 55	15 0 a 55	N/A	-15 -55 a 0	-15 -55 a 0
CXP ⁶	N/A	9 0 a 55	27 0 a 55	N/A	-17 -55 a 0	-12 -55 a 0

Parámetros de los sistemas SCIEX 4500MD

Tabla A-2: Parámetros del sistema solo para los tipos de análisis LIT (solo QTRAP)

ID de acceso	Modo de iones positivos	Modo de iones negativos
CUR ^{3 4 7}	20 10 a 55	20 10 a 55
CAD	Alto Bajo, Medio, Alto	Alto Bajo, Medio, Alto
IS ³	5500 0 a 5500	-4500 -4500 a 0
NC ⁷	3 0 a 5	-3 -5 a 0
TEM ^{4 7}	0 0 a 750	0 0 a 750
DP	100 0 a 300	-100 -300 a 0
EP	10 2 a 15	-10 -15 a -2
AF2	0.100 0 o 1	0.100 0 o 1
AF3	Dependiente de la velocidad de la masa 0 a 10	Dependiente de la velocidad de la masa 0 a 10
EXB	Dependiente de la velocidad de la masa -165 a 0	Dependiente de la velocidad de la masa 0 a 165
CEM	1800 0 a 3300	1800 0 a 3300

**Tabla A-2: Parámetros del sistema solo para los tipos de análisis LIT (solo QTRAP)
(continuación)**

ID de acceso	Modo de iones positivos	Modo de iones negativos
GS1	20 0 a 90	20 0 a 90
GS2	0 0 a 90	0 0 a 90
CES	0 0 a 50	0 0 a 50
CE	10 5 a 180	-30 -180 a -10

Tensiones y parámetros de la fuente

B

Parámetros de la sonda TurbolonSpray

En la tabla siguiente se muestran las condiciones de funcionamiento recomendadas para la sonda TurbolonSpray en tres caudales diferentes. Para cada caudal, el caudal del gas para la interfaz de Curtain Gas deberá ser el más alto posible. La composición del disolvente empleado para la optimización fue 1:1 de agua:acetonitrilo. Estas condiciones representan un punto de partida desde el que optimizar la sonda. Utilizando un proceso iterativo, optimice los parámetros utilizando el análisis de inyección de flujo para obtener la mejor señal o señal/ruido para el compuesto de interés.

Tabla B-1: Optimización de parámetros para la sonda TurbolonSpray

Parámetros	Valores típicos			Intervalo operativo
	Bajo	Medio	Alto	
Caudal de LC	5 µl/min a 50 µl/min	200 µl/min	1000 µl/min	5 µl/min a 3000 µl/min
Gas de fuente de iones 1 (gas nebulizador)	20 psi a 40 psi	40 psi a 60 psi	40 psi a 60 psi	0 psi a 90 psi
Gas de fuente de iones 2 (gas del calentador)	0 psi	50 psi	50 psi	0 psi a 90 psi
IonSpray Voltage	5500 V	5500 V	5500 V	5500 V
Gas para la interfaz de Curtain Gas interface	20 psi	20 psi	20 psi	20 psi a 50 psi
Temperatura de la fuente de iones ⁸	Ambiente a 200 °C	200 °C a 650 °C	400 °C a 750 °C	Hasta 750 °C
Potencial de desagrupación (DP) ⁹	Positivo: 70 V Negativo: -70 V	Positivo: 70 V Negativo: -70 V	Positivo: 100 V Negativo: -100 V	Positivo: 0 V a 400 V Negativo: -400 V a 0 V

⁸ Los valores óptimos de temperatura dependen en la composición de la fase móvil y el compuesto. Un contenido más acuoso requiere una temperatura mayor. Cero (0) significa que no se aplica temperatura.

⁹ Los valores de DP dependen del compuesto.

Tabla B-1: Optimización de parámetros para la sonda TurbolonSpray (continuación)

Parámetros	Valores típicos			Intervalo operativo
	Bajo	Medio	Alto	
Configuración del micrómetro vertical de la sonda	7 a 10	2 a 5	0 a 2	0 a 13
Configuración del micrómetro horizontal de la sonda	4 a 6	4 a 6	4 a 6	0 a 10

Parámetros de la sonda APCI

Tabla B-2: Optimización de parámetros para la sonda APCI

Parámetro	Valor típico	Intervalo operativo
Caudal de LC	1000 µl/min	200 µl/min a 3000 µl/min
Ion source gas 1 (gas nebulizador)	30 psi	0 psi a 90 psi
Gas para la interfaz de Curtain Gas interface	20 psi	20 psi a 50 psi
Temperatura de la fuente de iones ¹⁰	400 °C	100 °C a 750 °C
Corriente nebulizante	Positivo: 3 µA Negativo: -3 µA	Positivo: 0 mA a 5 µA Negativo: -5 mA a 0 µA
Potencial de desagrupación (DP)	Positivo: 60 V Negativo: -60 V	Positivo: 0 V a 300 V Negativo: -300 V a 0 V
Configuración del micrómetro vertical de la sonda	4	Escala de 0 a 13

Posición de la sonda

La posición de la sonda puede afectar a la sensibilidad del análisis. Para obtener más información sobre cómo optimizar la posición de la sonda, consulte la sección [Optimización de la fuente de iones](#).

¹⁰ Los valores de temperatura dependen del compuesto.

Composición de los disolventes

La concentración estándar del formato de amonio o el acetato de amonio es de 2 mmol/l a 10 mmol/l para iones positivos y de 2 mmol/l a 50 mmol/l para iones negativos. La concentración de los ácidos orgánicos es de entre el 0,1 % y el 0,5 % por volumen para la sonda TurbolonSpray y entre el 0,1 % y el 1,0 % por volumen para la sonda APCI .

Los disolventes empleados habitualmente son:

- Acetonitrilo
- Metanol
- Propanol
- Agua

Los modificadores empleados habitualmente son:

- Ácido acético
- Ácido fórmico
- Formato de amonio
- Acetato de amonio

Los siguientes modificadores no se utilizan habitualmente porque complican el espectro con sus mezclas de iones y combinaciones de agrupamientos. También pueden suprimir la fuerza de la señal de iones del compuesto objetivo.

- Trietilamina (TEA)
- Fosfato sódico
- Ácido trifluoroacético (TFA)
- Dodecilsulfato de sodio

Soluciones e iones de calibración

C

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

Tabla C-1: Frecuencia de ajuste

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

Tabla C-2: Suggested Tuning Solutions for the 4500MD Series of Instruments

Sistema	Q1 y Q3		LIT
	Positiva	Negativa	Positiva y Negativa
SCIEX Triple Quad 4500MD LC-MS/MS system	POS PPG, 2e-6 M	NEG PPG, 3e-4 M	N/A
QTRAP 4500MD LC-MS/MS system	POS PPG, 2e-6 M	NEG PPG, 3e-4 M	ES Tuning Solution (1:100 dilution)

Soluciones e iones de calibración

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

Instrumento	Masas							
SCIEX Triple Quad 4500MD LC-MS/MS system	59,0	175,1	500,3	616,5	906,7	1254,9	1545,1	1952,4
QTRAP 4500MD LC-MS/MS system	59,0	175,1	500,3	616,5	906,7	1254,9	1545,1	1952,4

Tabla C-4: Análisis de iones negativos PPG de Q1 y Q3

Instrumento	Masas							
SCIEX Triple Quad 4500MD LC-MS/MS system	45,0	411,2	585,4	933,6	1223,8	1572,1	1863,3	1979,3
QTRAP 4500MD LC-MS/MS system	45,0	411,2	585,4	933,6	1223,8	1572,1	1863,3	1979,3

Tabla C-5: Masses and Polarity for the QTRAP 4500MD LC-MS/MS System (Agilent)

Instrumento/polaridad	Masas				
LIT positivo	118,087	322,049	622,030	922,010	1521,972
LIT negativo	112,985	431,982	601,978	1033,988	1633,949

Iconos de la barra de herramientas **D**

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

Tabla D-1: Iconos de la barra de herramientas

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

Tabla D-2: Iconos del Acquisition Method Editor

Icono	Nombre	Descripción
	Mass Spec	Haga clic para mostrar la pestaña MS en el editor Acquisition Method (Método de adquisición).
	Period	Agrega un experimento, un IDA Criteria Level , o bien 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 .

Iconos de la barra de herramientas

Tabla D-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 de que se haya completado el procesamiento de todas las muestras.
	Equilibrate	Selecciona el método que se va a usar para equilibrar los dispositivos. Este método debe ser el mismo que el que se ha utilizado con la primera muestra de la cola.
	Standby	Pone el instrumento en el estado Standby .
	Ready	Pone el instrumento en el estado Ready .
	Reserve Instrument for Tuning	Reserva el espectrómetro de masas para el ajuste y la calibración.
	IDA Method Wizard	Inicia el IDA Method Wizard .

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.

Icono	Nombre	Descripción
	Compound Optimization	Optimiza un compuesto mediante una infusión de FIA.
	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.
	IDA Method Wizard	Inicia el IDA Method Wizard.

Tabla D-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.
	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.

Iconos de la barra de herramientas

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

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

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

Icono	Nombre	Descripción
	Show History	Muestra un resumen de las operaciones de procesamiento de datos realizadas en un archivo concreto, como suavización, sustracción, calibración y filtrado de ruido.
	Open Compound Database	Abre la base de datos de compuestos.
	Set Threshold	Ajuste del umbral.
	Show Contour Plot	Muestra los datos seleccionados como un gráfico de espectro o un XIC. De manera adicional, para los datos adquiridos mediante un DAD, el gráfico de contorno puede mostrar los datos seleccionados como un espectro de DAD o un XWC.
	Show DAD TWC	Genera un TWC del espectro de DAD.
	Show DAD Spectrum	Genera un espectro de DAD.
	Extract Wavelength	Extrae hasta tres rangos de longitud de onda de un espectro de DAD para ver el XWC.

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

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

Iconos de la barra de herramientas

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

Icono	Nombre	Función
	Open File	Abre archivos.
	Show Next Sample	Pasa a la siguiente muestra.
	Show Previous Sample	Pasa 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.
	Show Spectrum	Genera un espectro a partir de un TIC.
	Copy Graph to new Window	Copia el gráfico activo en una ventana nueva.
	Baseline Subtract	Abre el cuadro de diálogo Baseline Subtract.
	Threshold	Ajuste del umbral.
	Noise Filter	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.

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

Icono	Nombre	Función
	Show Auxiliary Traces	Abre el cuadro de diálogo Select Auxiliary Trace Channel.
	Show File Info	Muestra las condiciones experimentales utilizadas para recopilar los datos.
	Add arrows	Agrega flechas al eje X del gráfico activo.
	Remove all arrows	Elimina las flechas del eje X del gráfico activo.
	Offset Graph	Compensa las ligeras diferencias en el tiempo durante el que se registraron los datos de ADC y del espectrómetro de masas. Esto resulta útil al superponer gráficos para su comparación.
	Force Peak Labels	Etiqueta todos los picos.
	Expand Selection By	Configura el factor de ampliación de la parte del gráfico que se desee ver con más 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	Escala un gráfico al máximo, de manera que el pico más intenso se amplíe a escala completa, esté visible o no.
	Show History	Muestra un resumen de las operaciones de procesamiento de datos realizadas en un archivo concreto, como suavización, sustracción, calibración y filtrado de ruido.
	Open Compound Database	Abre la base de datos de compuestos.
	Set Threshold	Ajuste del umbral.

Iconos de la barra de herramientas

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

Icono	Nombre	Función
	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 de DAD.
	Show DAD Spectrum	Genera un espectro de DAD.
	Extract Wavelength	Extrae hasta tres rangos de longitud de onda de un espectro de DAD para ver el XWC.

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

Tabla D-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 Results Table.
	Delete Formula Column	Eliminar la columna de fórmula.
	Report Generator	Abre el software Reporter.

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

Icono	Nombre	Descripción
	Add/Remove Samples	Haga clic para agregar muestras a la Results Table o quitarlas.
	Export as Text	Guarda la Results Table como archivo de texto.
	Modify Method	Abre un archivo wiff.
	Peak Review - Pane	Abre los picos en un panel.
	Peak Review - Window	Abre los picos en una ventana.
	Calibration - Pane	Abre la curva de calibración en un panel.
	Calibration - Window	Abre la curva de calibración en una ventana.
	Show First Peak	Muestra el primer pico en el panel o la ventana.
	Show Last Peak	Muestra el último pico en el panel o la ventana.

Iconos de la barra de herramientas

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

Icono	Nombre	Descripción
	Show Audit Trail	Muestra la pista de auditoría de la Results Table.
	Clear Audit Trail	Borra la pista de auditoría de la Results Table. Esta función no está disponible.
	Statistics	Abre la ventana Statistics.
	Report Generator	Abre el software Reporter.

Tabla D-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.
	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 método utilizado con la primera muestra de la cola.

Teoría de funcionamiento: fuente de iones

E

Modo de ionización por electropulverización

La sonda se encuentra en el centro entre los dos calentadores turbo, que están colocados en un ángulo de 45 grados a cada lado de la sonda. La combinación de pulverización y gas seco caliente procedente los calentadores turbo se proyecta a un ángulo de 90 grados a la abertura en la placa de chapa.

Solo los compuestos que se ionizan en el disolvente líquido se pueden generar como iones de fase gaseosa en la fuente. La eficiencia y el índice de generación de iones dependen de las energías de solvatación de los iones específicos. Los iones con energías de solvatación más baja son más proclives a evaporarse que los iones con energías de solvatación más elevada.

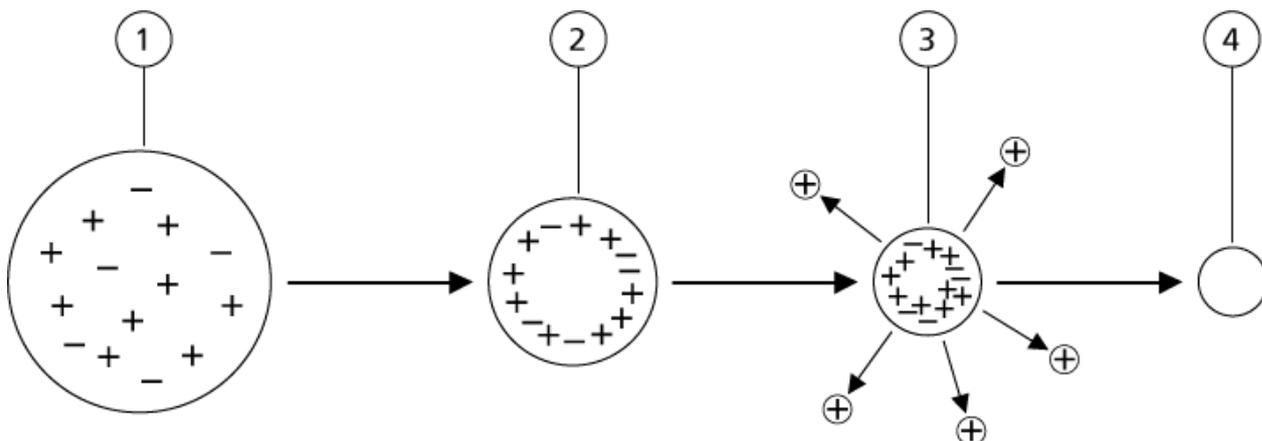
La interacción entre **IonSpray Voltage** y los calentadores turbo ayuda a centrar la corriente y aumenta el índice de evaporación de gotas, lo que da lugar a un aumento de la señal de iones. El gas caliente aumenta la eficiencia de la evaporación de iones, lo que da lugar a una mayor sensibilidad y a la capacidad de manejar flujos de muestras líquidas mayores.

Un flujo de alta velocidad de gas del nebulizador comparte gotas de la corriente de muestra líquida en la entrada de **IonSpray Voltage**. Mediante la alta tensión variable aplicada al pulverizador, la fuente de iones aplica una carga neta a cada gota. Esta carga facilita la dispersión de las gotas. Los iones de una sola polaridad son, de manera preferente, atraídos por la alta tensión a las gotas cuando se separan de la corriente líquida. No obstante, esta separación es incompleta y cada gota contiene muchos iones de ambas polaridades. En cada gota predominan iones de una determinada polaridad y la diferencia entre el número de iones cargados positivamente o negativamente da lugar a la carga neta. Solo el exceso de iones de la polaridad predominante estará disponible para la evaporación de iones y solo una fracción de estos llega a evaporarse.

La sonda puede generar iones con carga múltiple a partir de compuestos que tienen múltiples centros de carga, tales como los péptidos y los oligonucleótidos. Esto resulta útil cuando se analizan especies de elevado peso molecular, donde las múltiples cargas producen iones con una relación masa/carga (m/z) dentro del rango de masa del espectrómetro de masas. Esto permite determinaciones de peso molecular normal de los compuestos en el rango de kiloDalton (kDa).

Cada gota cargada contiene disolvente e iones positivos y negativos, pero con iones de una polaridad predominante. Consulte la figura: [Figura E-1](#). Como medio conductor, el exceso de cargas se encuentra en la superficie de la gota. A medida que el disolvente se evapora, el campo eléctrico de la superficie de la gota aumenta debido a que disminuye el radio de la gota.

Figura E-1: Evaporación de iones



Elemento	Descripción
1	La gota contiene iones de ambas polaridades, pero una de ellas predomina.
2	A medida que el disolvente se evapora, el campo eléctrico aumenta y los iones se desplazan a la superficie.
3	Con un determinado valor de campo crítico, los iones se desprenden de las gotas.
4	Los residuos no volátiles permanecen como partículas secas.

Si la gota contiene un exceso de iones y se evapora suficiente disolvente de la gota, se alcanza un campo crítico en el que los iones se desprenden de la superficie. Al final todo el disolvente se evaporará de la gota, dejando una partícula seca formada por componentes no volátiles de la solución de muestra.

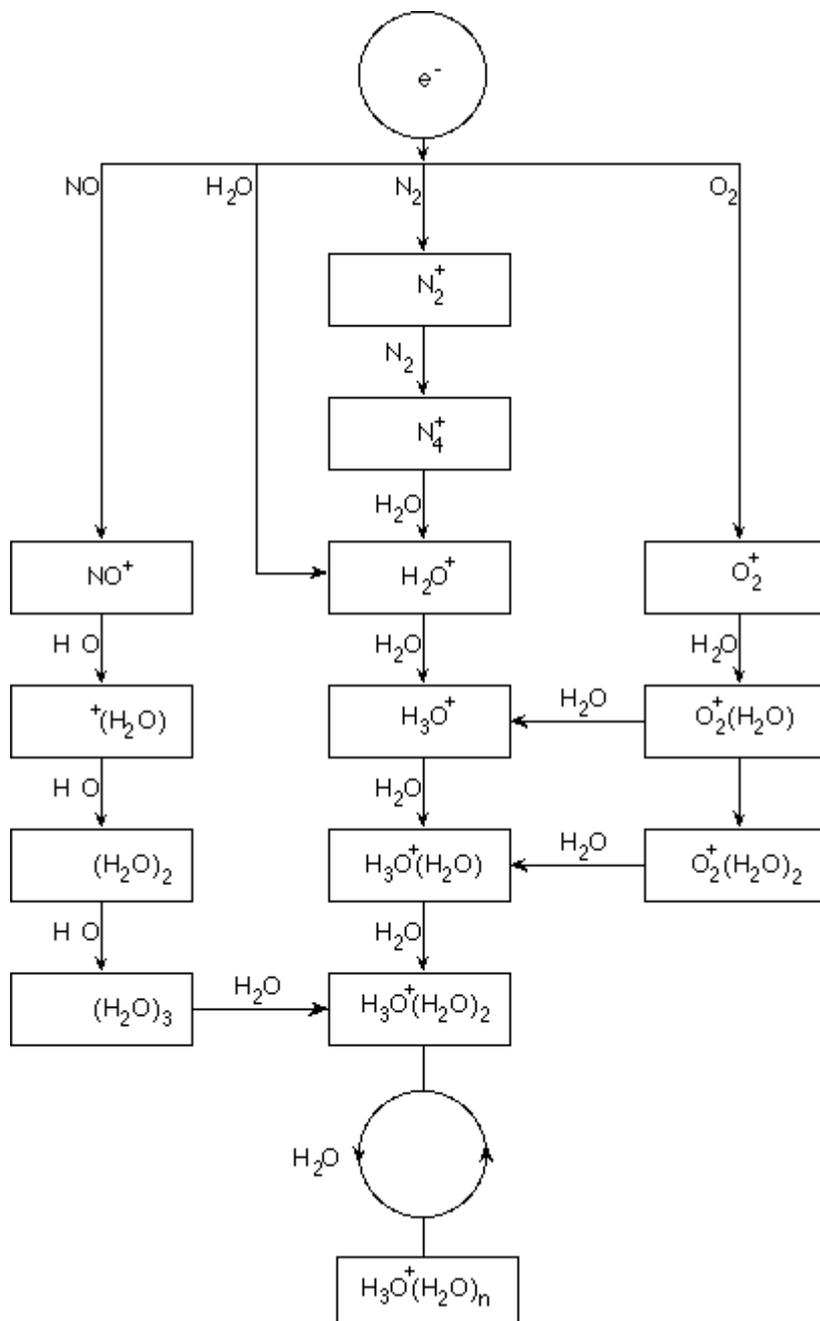
Debido a que se desconocen las energías de solvatación de la mayoría de las moléculas orgánicas, resulta difícil predecir las sensibilidades de un determinado ion orgánico para la evaporación de iones. La importancia de la energía de solvatación es evidente debido a que los surfactantes que se concentran en la superficie de un líquido se pueden detectar con mucha sensibilidad.

Modo APCI

La base para las antiguas incompatibilidades a la hora de vincular la cromatografía líquida con la espectrometría de masas surgió a partir de las dificultades para convertir moléculas relativamente no volátiles en solución líquida en un gas molecular sin inducir una descomposición excesiva. El proceso de la sonda APCI, que consiste en una nebulización sutil de la muestra en pequeñas gotas finamente dispersadas en un tubo cerámico calentado, genera una rápida vaporización de la muestra de forma que las moléculas de esta no se descompongan.

La siguiente figura muestra el flujo de reacción del proceso de la ionización química a presión atmosférica (APCI) para iones positivos reactivos, hidratos de protón, $H_3O^+[H_2O]_n$.

Figura E-2: Diagrama de flujo de la reacción APCI



Los iones primarios principales N_2^+ , O_2^+ , H_2O^+ , y NO^+ están formados por el impacto de los electrones creados en la corona en los principales componentes neutros del aire. Aunque NO^+ normalmente no es un componente principal del aire limpio, la concentración de esta especie en la fuente de iones se ha mejorado debido a reacciones neutras iniciadas por la descarga de corona.

Teoría de funcionamiento: fuente de iones

Las muestras que se introducen a través de la sonda APCI se pulverizan, con ayuda de un gas nebulizador, en el tubo cerámico caliente. Dentro del tubo, las gotas finamente dispersadas de la muestra y el disolvente experimentan una rápida vaporización con una descomposición térmica mínima. La sutil vaporización conserva la identidad molecular de la muestra.

Las moléculas gaseosas del disolvente y la muestra se desplazan al alojamiento de la fuente de iones, donde la ionización mediante APCI se induce a través de una aguja de descarga de corona conectada al extremo del tubo cerámico. Las moléculas de la muestra se ionizan al colisionar con los iones de reactivo creados por la ionización de las moléculas de disolvente de fase móvil. Las moléculas del disolvente vaporizadas se ionizan para producir los iones de reactivo $[X+H]^+$ en polaridad positiva y $[X-H]^-$ en polaridad negativa. Consulte la figura: [Figura E-3](#). Son estos iones de reactivo los que producen los iones estables de la muestra al colisionar con las moléculas de la muestra.

Figura E-3: Ionización química a presión atmosférica

Elemento	Descripción
1	Muestra
2	Los iones primarios se crean en las proximidades de la aguja de descarga de corona
3	La ionización genera predominantemente iones de disolvente
4	Los iones de reactivo reaccionan con las moléculas de la muestra formando agrupamientos
5	Placa de chapa
6	Interfaz

x = moléculas del disolvente; M = moléculas de la muestra

Las moléculas de la muestra se ionizan mediante un proceso de transferencia de protones en polaridad positiva y mediante la transferencia de electrones o la transferencia de protones en polaridad negativa. La energía del proceso de ionización de APCI está dominada por la colisión debido a la presión atmosférica relativamente alta de la fuente de iones.

En aplicaciones de fase inversa, los iones de reactivo constan de moléculas de disolvente protonadas en polaridad positiva e iones de oxígeno solvatados en polaridad negativa. Con una termodinámica favorable, la adición de modificadores altera la composición de los iones de reactivo. Por ejemplo, la adición de modificadores o tampones de acetato pueden convertir el ion acetato $[CH_3COO]^-$ en el reactivo primario en polaridad negativa. Los modificadores de amonio pueden convertir el amoniaco protonado $[NH_4]^+$ en el reactivo primario en polaridad positiva.

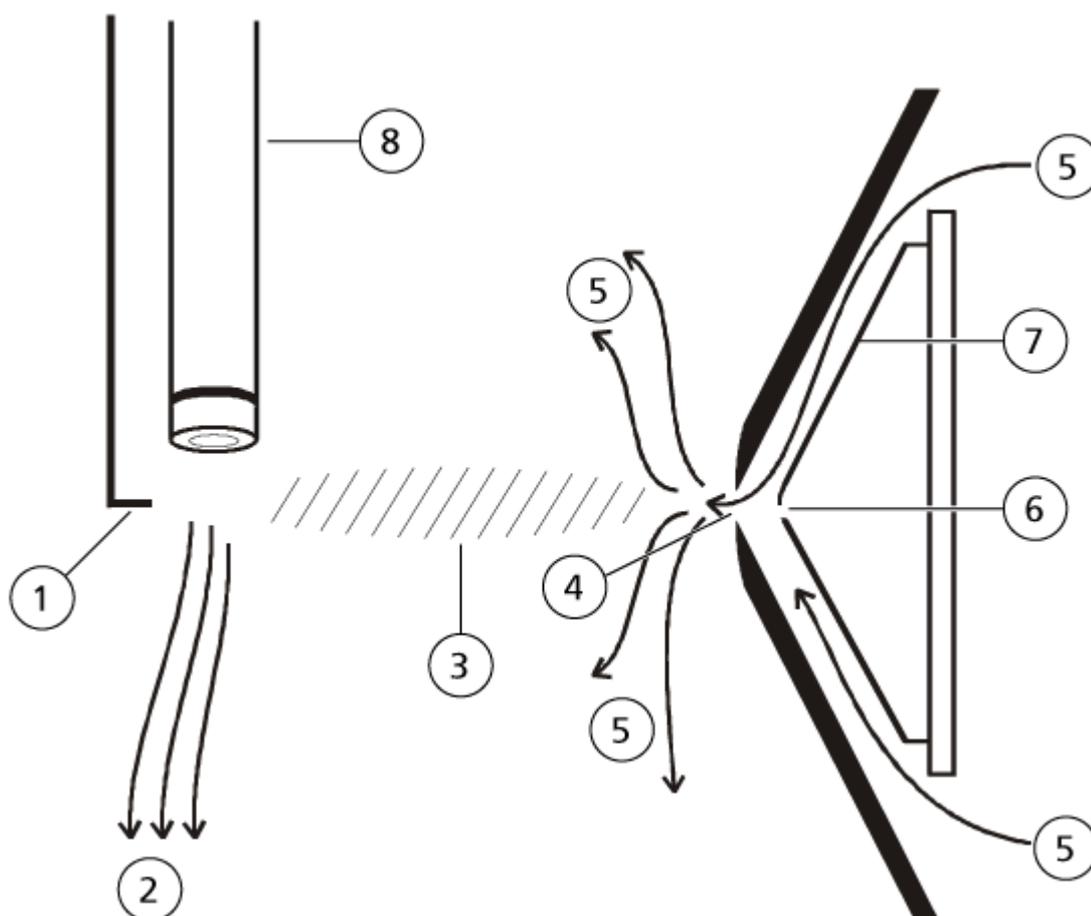
Con colisiones se consigue mantener una distribución equilibrada de ciertos iones como, por ejemplo, iones agrupados de agua protonada. La posibilidad de una fragmentación prematura de los iones de la muestra en la fuente de iones es reducida debido a la

moderada influencia de las agrupaciones del disolvente en los iones de reactivo y la presión relativamente alta del gas en la fuente. Como resultado, el proceso de ionización produce principalmente iones de producto moleculares para el análisis de masas en el espectrómetro de masas.

Región de ionización de APCI

En la figura siguiente se muestra la ubicación general del reactor ion-molécula de la sonda APCI. Las líneas inclinadas indican un reactor sin paredes. Se crea una corriente de iones de descarga de la corona de encendido automático en el rango del microamperio como resultado del campo eléctrico entre la aguja de descarga y la placa de chapa. Los iones primarios, por ejemplo, N_2^+ y O_2^+ , se crean mediante la pérdida de los electrones que se originan en el plasma en las proximidades de la punta de la aguja de descarga. La energía de estos electrones se modera mediante diversas colisiones con moléculas de gas antes de alcanzar una energía donde su sección transversal de ionización efectiva les permite ionizar moléculas neutras con eficacia.

Figura E-4: Región de ionización de APCI



Teoría de funcionamiento: fuente de iones

Elemento	Descripción
1	Punta de la aguja de descarga
2	Flujo de muestra
3	Reactor sin paredes
4	Abertura de la placa de chapa
5	Gas para la interfaz de Curtain Gas
6	Orificio
7	Placa del orificio
8	Tubo cerámico

Los iones primarios, a su vez, generan iones intermedios que conducen a la formación de iones de muestra. Los iones de la polaridad seleccionada son arrastrados bajo la influencia del campo eléctrico en la dirección de la placa de chapa y a través de la barrera de gas hacia el analizador de masas. La totalidad del proceso de formación de iones está dominado por la colisión debido a la relativamente alta presión atmosférica de la sonda APCI. Excepto en las proximidades de la punta de la aguja de descarga, donde la fuerza del campo eléctrico es mayor, la energía transmitida a un ion por el campo eléctrico es pequeña en comparación con la energía térmica del ion.

Mediante las colisiones se consigue mantener una distribución equitativa de ciertos iones (por ejemplo, iones agrupados de agua protonada). Cualquier exceso de energía que un ion pudiera adquirir en el proceso de reacción ion-molécula está termalizado. Mediante la estabilización por colisión, muchos de los iones producto se corrigen, aunque se produzcan muchas colisiones posteriormente. La formación de iones producto e iones reactivos se rige por condiciones de equilibrio a una presión de funcionamiento (atmosférica) de 760 torr.

La sonda APCI funciona como un reactor sin paredes, ya que los iones que se desplazan de la fuente a la cámara de vacío y finalmente al detector nunca experimentan colisiones con una pared: solo colisiones con otras moléculas. Los iones también se forman fuera de la fuente de iones designada, pero no se detectan y finalmente se neutralizan al interactuar con una superficie de pared.

La temperatura de la sonda es un factor importante en el funcionamiento de la sonda APCI. Para conservar la identidad molecular, se debe establecer la temperatura con un valor lo bastante elevado como para que garantice una rápida evaporación. A una temperatura de funcionamiento lo bastante elevada, las gotas se vaporizan rápidamente de manera que las moléculas orgánicas se desorben de las gotas con una degradación térmica mínima. Sin embargo, si se establece la temperatura con un valor demasiado bajo, el proceso de evaporación será más lento y la pirolisis o descomposición puede producirse antes de que se complete la vaporización. Si se utiliza la sonda APCI con temperaturas superiores a la temperatura óptima, se puede provocar la descomposición térmica de la muestra.

optimización manual del compuesto

F

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

Requisitos previos

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

Materiales necesarios

Para ajustar los parámetros de compuestos concretos, se recomiendan las siguientes soluciones. Para ilustrar los pasos del procedimiento, se utiliza una mezcla de cuatro compuestos. El usuario debe aplicar el mismo procedimiento cuando utilice los compuestos adecuados para el ensayo de interés.

- Fase móvil: 1:1 acetonitrilo:agua + 2 mM de acetato de amonio + 0,1% de ácido fórmico.
- Bomba de LC y procesador de muestras automático.
- Viales para el procesador de muestras automático.
- Mezcla de cuatro compuestos (10 ng/ml) formada por reserpina, minoxidil, tolbutamida y rescinamina. La solución puede utilizarse para infusión y FIA. La concentración depende del sistema. Utilice una solución con un 49,9 % de acetonitrilo, un 50 % de agua desionizada y un 0,1 % de ácido fórmico como diluyente. Se pueden sustituir otros compuestos, siempre y cuando su peso molecular sea conocido y sea razonable ionizar el compuesto mediante la fuente de iones Turbo V.

Tabla F-1: Compuestos y valores *m/z*

Compuesto	Valor <i>m/z</i>
Minoxidil	210,2
Tolbutamida	271,1
Reserpina	609,3

Tabla F-1: Compuestos y valores *m/z* (continuación)

Compuesto	Valor <i>m/z</i>
Rescinamina	635,3

Acerca de la optimización manual del compuesto

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

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

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

Optimice la posición de la fuente de iones antes de optimizar los parámetros dependientes de la fuente de iones. Consulte la sección [Optimización de la fuente de iones](#).

Acerca de los tipos de análisis

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

Optimización manual de un analito

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

Siga los procedimientos en el orden especificado:

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

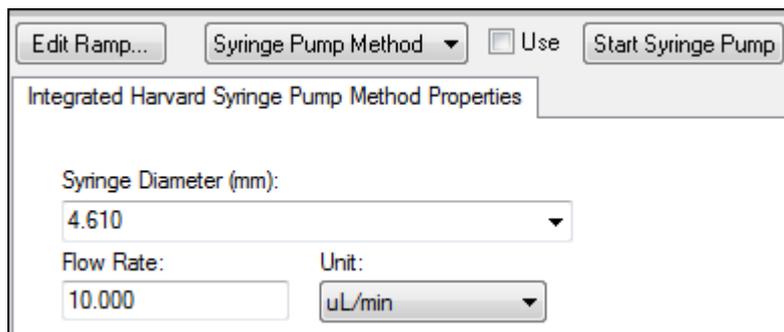
Confirmación de la presencia de compuestos

1. Cree un proyecto.
2. Active el perfil de hardware.
3. Preparar la muestra:
 - a. Aspire la solución del compuesto con una jeringa y elimine el aire de la jeringa.
 - b. Utilice el tubo con el conector especial para conectar la jeringa al espectrómetro de masas.
 - c. Instale la jeringa en la bomba de jeringa integrada.
4. Infunda el compuesto en una solución con un caudal de entre 5 y 10 µl/min.
5. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
6. En el campo con la lista de métodos, haga clic en **Syringe Pump Method**.
7. En la pestaña Syringe Pump Method Properties, escriba los valores de los parámetros que se indican en la tabla siguiente.

Tabla F-2: Pestaña Syringe Pump Method Properties

Parámetro	Valor
Syringe Diameter	Dependen de la jeringa. 4,610 mm si se utiliza una jeringa de 1.0 mL
Flow Rate	10
Unit	µl/min

Figura F-1: Pestaña Syringe Pump Method Properties



8. Haga clic en **Start Syringe Pump**.
9. Seleccione **MS Method** en la lista de métodos.
10. En la pestaña MS, escriba los valores de parámetro que se muestran en la tabla siguiente.

Tabla F-3: Pestaña MS

Parámetro	Valor
Scan type	Q1 MS (Q1)
Start (Da)	200
Stop (Da)	700
Scan rate (Da/s)	200
Duration (min)	3

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

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

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

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

Optimización de parámetros específicos de MS

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

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

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

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

Tabla F-4: Parámetros de la tabla de masas: Iones múltiples de Q1 (Q1 MI)

Compound	Q1 Mass	Time
Reserpine	609,3	1
Minoxidil	210,2	1
Tolbutamide	271,1	1
Rescinnamine	635,3	1

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

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

Nota: Empezar por el parámetro DP y después optimice los demás parámetros en el mismo orden en el que se muestran en el cuadro de diálogo. Puede que los parámetros no se optimicen correctamente si se optimizan en otro orden.

optimización manual del compuesto

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

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

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

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

10. Anote el valor óptimo del ion de interés.
11. Desplace el cursor a la tabla de masas, haga clic con el botón secundario y, a continuación, agregue el parámetro recién optimizado. Se agrega una columna al final de la tabla.
12. Añada el valor optimizado en la fila correspondiente.
13. Repita estos pasos con cada masa del método de adquisición hasta obtener una lista de los valores óptimos de todas las masas.
14. Repita estos pasos para optimizar el resto de los parámetros específicos de MS.

Tabla F-5: Parámetros específicos de MS

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

Determinación de los iones producto para la optimización

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

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

En este ejemplo se utiliza el compuesto reserpina.

1. En el Tune Method Editor, cierre los paneles de XIC.
2. Haga clic en **Product Ion (MS2)**, en el campo **Scan type**.

3. En la pestaña Compound, escriba el valor óptimo que figura en la sección: [Optimización de parámetros específicos de MS](#).
4. En la pestaña MS, escriba 609.4 en el campo **Product Of**.
Este valor es la asignación de masas para la reserpina anotada anteriormente en la sección: [Confirmación de la presencia de compuestos](#).
5. Asegúrese de que la casilla **Center / Width** no está activada.
6. En la tabla de masas, especifique los valores de **Start**, **Stop** y **Time** pertinentes. Consulte la tabla: [Tabla F-6](#).

Tabla F-6: Parámetros de la tabla de masas (análisis de ion producto)

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

7. Haga clic en **Edit Ramp**.
Se abre el cuadro de diálogo Ramp Parameter Settings.
8. Seleccione **Collision Energy** y, a continuación, escriba los valores **Start**, **Stop** y **Step** necesarios.

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

9. Haga clic en **OK**.
10. Seleccione la casilla **MCA**.
11. Haga clic en **Start**.
12. Haga clic con el botón secundario en el panel de XIC de la esquina inferior derecha y, a continuación, haga clic en **Open File**.
13. Seleccione los iones producto de mayor intensidad y anote el valor m/z de los iones producto hasta el primer decimal (por ejemplo, 195,1).
Recomendamos optimizar dos o tres iones producto por cada compuesto. Las transiciones adicionales se pueden utilizar como confirmación, o evitar la necesidad de volver a optimizar un compuesto en caso de que aparezca una interferencia.

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

14. Repita este procedimiento para los compuestos restantes.

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

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

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

8. Haga clic en **OK**.
9. Haga clic en **Start**.
10. Haga clic con el botón secundario en el panel de XIC de la esquina inferior derecha y, a continuación, haga clic en **Open File**.
11. Anote el valor óptimo del ion de interés.
El valor que proporcione la mejor señal es el valor óptimo.
12. En la tabla de masas, haga clic con el botón derecho y luego, seleccione el parámetro recién optimizado.
De esta forma, se agregará una columna a la tabla.
13. Repita el procedimiento si se están supervisando otros iones producto.
14. Añada los valores optimizados en la fila correspondiente.
15. Guarde el método.
16. Repita este procedimiento para cualquier otro compuesto que se haya optimizado con anterioridad.

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

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

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

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

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

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

Preparación de la fuente de iones

1. Ajuste el micrómetro horizontal en 5 mm.
2. Configure el micrómetro vertical en la fuente de iones en función del caudal. Utilice los parámetros de la siguiente tabla.

Tabla F-7: Parámetros verticales de la fuente de iones Turbo V

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

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

Consulte la sección [Optimización de la fuente de iones](#).

Optimización de los parámetros de la fuente de iones

Por lo general, los parámetros de la fuente de iones se optimizan con el fin de obtener la mejor relación señal/ruido para el compuesto de interés. El caudal de gas de la interfaz Curtain Gas se optimiza en el valor más alto posible sin que se vea afectada la sensibilidad. Consulte la sección [Optimización de la fuente de iones](#).

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

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

1. En la barra Navigation, en **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tuning**.
2. Haga clic en **File > Open**.

optimización manual del compuesto

3. En la lista **Files**, haga clic en el método de adquisición utilizado para optimizar el parámetro del compuesto y, a continuación, haga clic en **OK**.
El método se abre en el Tune Method Editor.
4. Abra la pestaña Source/Gas.
5. Utilice la guía de la fuente de iones y el flujo de gas para configurar todos los parámetros de la fuente de iones y del gas de acuerdo con el caudal.
6. Defina el tiempo de ejecución en un valor suficiente para permitir el ajuste de la mayor cantidad de parámetros posible. Puede comenzar con un tiempo de 15 minutos.
7. Haga clic en **Start**.
Los datos se muestran en paneles situados debajo del Tune Method Editor.
8. Anote la señal del pico de interés.
9. En el campo **Curtain Gas (CUR)** , aumente el valor en cinco unidades.
10. Continúe aumentando el valor de **Curtain Gas (CUR)** hasta determinar el valor máximo que no suponga pérdida de sensibilidad.
Al igual que sucede con la mayoría de los parámetros de Source/Gas, si dos valores proporcionan el mismo resultado, debe utilizar el valor más alto.
11. Repita este procedimiento con los demás parámetros Source/Gas.
Al optimizar estos parámetros, debe intentar utilizar la configuración que ofrezca el valor de relación señal/ruido más alto.

Parámetros avanzados

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

Optimización de AF2

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

1. Para los modos de ion positivo y negativo, programe la rampa **AF2** como se indica a continuación: De 70 mV a 300 mV, con un valor de **Step** de 10 mV. El rango permitido si es de 0 mV a 1000 mV.
2. Seleccione el valor de AF2 que proporcione la mayor cantidad de fragmentación.

Acerca de la dispersión de energías de colisión (CES)

Una funcionalidad exclusiva del espectrómetro de masas QTRAP es la capacidad de llevar a cabo experimentos AutoFrag. Se puede obtener un espectro compuesto llenando la trampa lineal de iones con iones de tres energías de colisión diferentes, lo que elimina la necesidad de optimizar la energía de colisión.

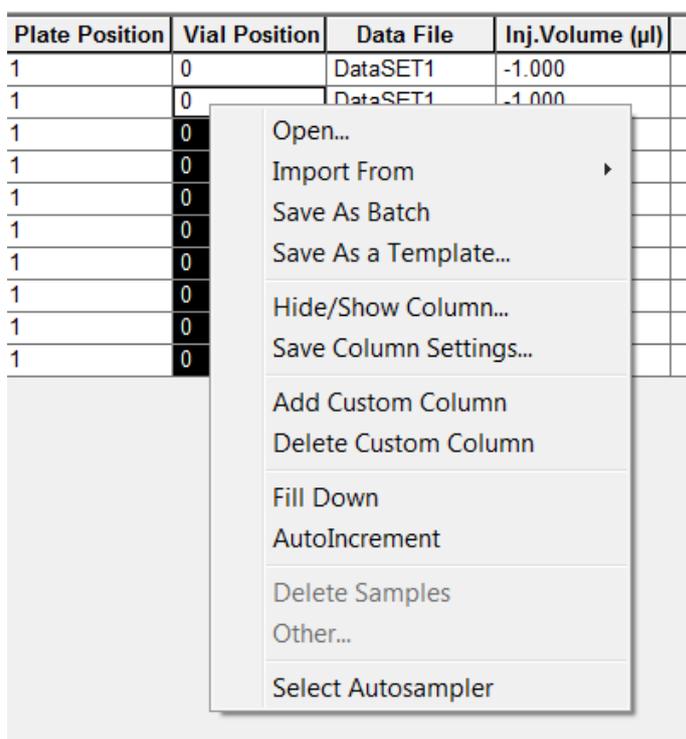
En los parámetros dependientes de los compuestos de los experimentos de ion producto mejorado (EPI) y MS3, el campo de dispersión de energías de colisión (CES) permite a los usuarios especificar la diferencia de energías de colisión que se aplicará en el experimento.

Por ejemplo, si se utiliza un valor de CE de 30 y un valor de CES de 15, se utilizan energías de colisión de 15, 30 y 45.

Editor de lotes

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

Figura G-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.

Menú	Función
Add Custom Column	(Añadir columna personalizada)Añade una columna personalizada.
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.

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 G-2: Modo Normal mostrado en el indicador del servidor de cola

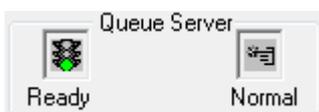
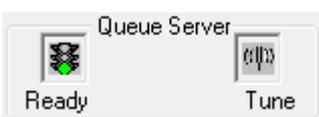


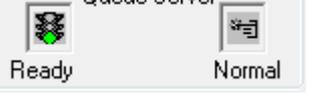
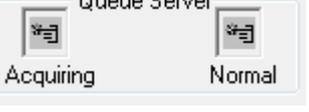
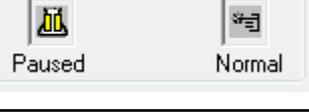
Figura G-3: Modo Tune mostrado en el indicador del servidor de cola



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 G-1](#).

Menús contextuales

Tabla G-1: Estados de cola

Iconos	Estado	Definición
 <p>Queue Server Not Ready Normal</p>	Not Ready	El perfil de hardware está desactivado y la cola no acepta ningún envío de muestras.
 <p>Queue Server Stand By Normal</p>	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.
 <p>Queue Server Warming Up Normal</p>	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 .
 <p>Queue Server Ready Normal</p>	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.
 <p>Queue Server Waiting Normal</p>	Waiting	El sistema iniciará automáticamente la adquisición cuando se envíe la muestra siguiente.
 <p>Queue Server PreRun Normal</p>	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.
 <p>Queue Server Acquiring Normal</p>	Acquiring	El método está ejecutándose y se está llevando a cabo la adquisición de datos.
 <p>Queue Server Paused Normal</p>	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.

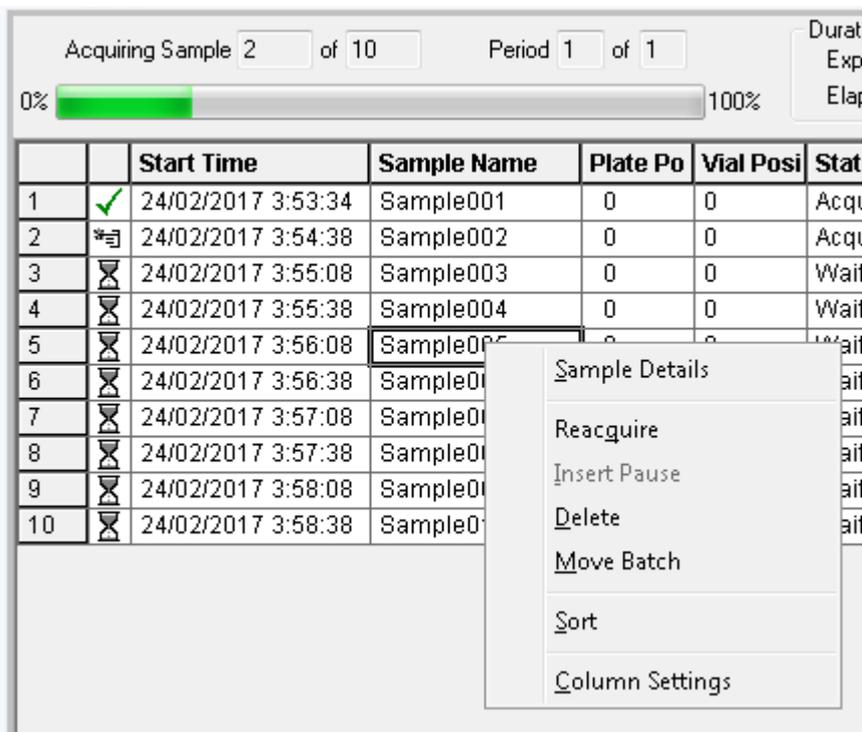
Tabla G-2: Iconos de estado de instrumento y dispositivo

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.

Cola

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

Figura G-4: 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. Esta función no está disponible en esta versión del software.
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.
Column Settings	(Configuración de columna)Cambia la configuración de la columna.

Menú contextual de los paneles de gráficos de contorno

Elemento de menú	Función
Show DAD Spectrum	Abre un panel nuevo con el espectro de DAD.
Extract Wavelengths (Use Range)	Extrae hasta tres rangos de longitud de onda de un espectro de DAD para mostrar el XWC.
Extract Wavelengths (Use Maximum)	Extrae rangos de longitud de onda utilizando las longitudes de onda máximas.
Zoom to selection	Amplía la región seleccionada.
Add User Text	Agrega un recuadro de texto en la posición del cursor.
Undo Zoom	Devuelve el gráfico a la escala original.
Delete Pane	Elimina el panel seleccionado.
Show Cross-Hair	Muestra el puntero de cruz (nm/min).

Menú contextual del panel Show File Information

Tabla G-3: 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.

Menús contextuales

Tabla G-3: Menú contextual del panel Show File Information (continuación)

Menú	Función
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 espectro

Tabla G-4: 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.
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.
Delete Pane	Elimina el panel seleccionado.

Tabla G-4: Menú contextual de los paneles de espectro (continuación)

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

Paneles de cromatograma

Tabla G-5: 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.
Show ADC Data	Genera un panel nuevo que contiene el trazo de datos de ADC, si se han adquirido.
Show Auxiliary Traces	Abre el cuadro de diálogo Select Auxiliary Trace Channel.
Show UV Detector Data	Genera un panel nuevo que contiene el trazo de datos de UV, si se han adquirido.
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).

Menús contextuales

Tabla G-5: Menú contextual de los paneles de cromatograma (continuación)

Menú	Función
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.

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 G-6: 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. Recomendamos que el usuario valide cualquier consulta que se utilice para analizar los datos en una tabla de resultados.
Sort	(Ordenar) Crea una ordenación u ordena por índice.
Metric Plot	(Gráfico métrico) Crea un gráfico métrico.

Tabla G-6: Menú contextual de la tabla de resultados (continuación)

Menú	Función
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 G-7](#).

Tabla G-7: 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.
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.

Menús contextuales

Tabla G-8: 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.
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

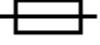
H

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.

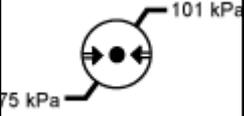
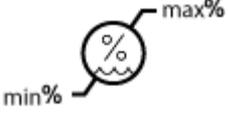
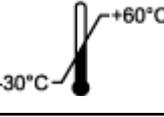
Glosario de símbolos

Símbolo	Descripción
	<p>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.</p>
	<p>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.</p>
	<p>Consultar instrucciones de uso</p>
	<p>Peligro de aplastamiento</p>
	<p>Marca cTUVus para TUV Rheinland de Norteamérica</p>
	<p>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)</p>
	<p>Peligro medioambiental</p>
	<p>Conexión Ethernet</p>
	<p>Peligro de explosión</p>

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
	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
	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
	<i>aaaa-mm-dd</i> Fecha de fabricación

Glosario de advertencias



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)
EN61326—1, EN61326—2-6, CLASS A, GROUP 1, ISM-IVD EQUIPMENT	EQUIPO EN61326-1, EN61326-2-6, CLASE A, GRUPO 1, ISM-IVD
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.
MINIMUM OF SIX PERSONS REQUIRED TO SAFELY LIFT THIS EQUIPMENT	PARA LEVANTAR ESTE EQUIPO SIN RIESGO SE NECESITAN AL MENOS SEIS PERSONAS Nota: Consultar instrucciones de uso.

Glosario de advertencias

Etiqueta	Traducción (si procede)
TIP & TELL	<p data-bbox="842 344 1118 376">Indicador de volcado</p> <hr/> <p data-bbox="842 416 1430 622">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.</p>
TiltWatch PLUS ShockWatch	<p data-bbox="842 674 1118 705">Indicador de volcado</p> <hr/> <p data-bbox="842 745 1430 952">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.</p>
WARNING: DO NOT OPERATE WITHOUT FIRST ENSURING BOTTLE CAP IS SECURED.	<p data-bbox="842 999 1362 1128">ADVERTENCIA: NO UTILIZAR SIN ASEGURARSE PRIMERO DE QUE EL TAPÓN DE LA BOTELLA ESTÁ BIEN CERRADO.</p> <hr/> <p data-bbox="842 1169 1406 1238">Nota: Esta advertencia se adjunta a la botella de residuos de escape de la fuente.</p>
WARNING: NO USER SERVICEABLE PARTS INSIDE. REFER SERVICING TO QUALIFIED PERSONNEL.	<p data-bbox="842 1285 1362 1458">ADVERTENCIA: EN EL INTERIOR NO HAY NINGUNA PIEZA QUE PUEDA REPARAR EL USUARIO. ACUDA A PERSONAL CUALIFICADO PARA LAS REPARACIONES.</p> <hr/> <p data-bbox="842 1498 1337 1529">Nota: Consultar instrucciones de uso.</p>

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.

Contacto

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