

## Fuente de iones

## Sistemas SCIEX Triple Quad<sup>™</sup>, QTRAP<sup>®</sup> y TripleTOF<sup>®</sup>

Pruebas, especificaciones y registro de datos



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

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

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

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

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

AB Sciex hace negocios como SCIEX.

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

AB SCIEX<sup>™</sup> se usa bajo licencia.

© 2019 AB Sciex



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

## Contenido

1 Pruebas para fuentes de iones IonDrive <sup>TM</sup> Turbo V	6
Preparación para la prueba	7
Prueba para la sonda TurbolonSpray <sup>®</sup>	8
Prueba para la sonda APCI	10
2 Pruebas para la fuente de iones Turbo V <sup>™</sup>	
Preparación para la prueba	
Prueba para la fuente de iones en los sistemas de triple cuadrupolo v	
OTRAP <sup>®</sup>	16
Prueba para la sonda TurbolonSprav <sup>®</sup>	
Prueba para la sonda APCI	
Prueba para la fuente de iones en sistemas TripleTOF <sup>®</sup>	
Preparación de la solución de prueba	
Prueba para la sonda TurbolonSpray®	
Prueba para la sonda APCI	
2 Prushas para la fuente de jones DueSpray <sup>TM</sup>	24
Proparación para la pruoba	<b>۲4</b> 25
Prueba para la fuente de jones en sistemas TrinleTOF	2J 77
Prenaración de la solución de nrueha	27 77
Prueba nara la sonda Turbolon Snrav	27 28
Prueba para la sonda ΔPCI	20 20
Prueba para la fuente de iones en los sistemas de triple cuadrunolo v	
OTRAP	33
Prueha nara la sonda TurbolonSpray	33
Prueba para la sonda APCI	
4 Pruebas para la fuente de iones OptiFlow Turbo V	
Preparación para la prueba	
Prueba para la fuente de lones en los sistemas de triple cuadrupolo y	40
UIKAP	40
Prueba de una sonda SteadySpray	40
Prueba para la fuente de lones en sistemas TripleTOF	41 42
Prueba de una sonda SteadySpray	42
5 Pruebas para la fuente de iones NanoSpray	44
Preparación para la prueba	45
Preparación de la dilución de [Glu <sup>1</sup> ]-fibrinopéptido B.	47
Prueba para la fuente de iones en sistemas TripleTOF	48
Prueba y calibración en modo TOF MS	49
Prueba y calibración en modo Product Ion (High Sensitivity) (solo	
sistemas 5600/5600+ y 6600/6600+)	55
Prueba y calibración en modo Product Ion	59
Prueba para la fuente de iones en los sistemas de triple cuadrupolo y	
QTRAP <sup>~</sup>	62

### Contenido

Prueba en modo Q1	63
Prueba en modo Q3	68
Prueba y calibracion en modo EPI (solo sistemas QTKAP o QTKAP Enabled Triple Quad 5500+)	70
Prueba para la fuente de iones en sistemas de la serie 3200	
Preparación de 2 ml de mezcla de renina (500 fmol/µl)	77
Prueba en modos Q1 y MS2	
Prueba en modo EPI (solo sistemas 3200 QTRAP)	80 01
	01
6 Pruebas para la fuente de iones PhotoSpray	82 دە
Prueba para la fuente de jones	
7 Conseios de solución de problemas	
A Pagistra da datas: fuenta da janas lanDriva <sup>TM</sup> Turba V	01
Información del sistema.	
Aprobación y firma	92
Comentarios y excepciones	93
B Registro de datos: fuente de iones Turbo V <sup>TM</sup>	94
Información del sistema	94
Aprobación y firma Comentarios y excenciones	95 96
C Registro de datos: fuente de iones DuoSpray	
Aprobación y firma	
Comentarios y excepciones	99
D Registro de datos: fuente de iones OptiFlow <sup>™</sup> Turbo V	100
Información del sistema	
Aprobación y firma	
E Registro de datos: fuente de iones NanoSpray	<b>103</b> 103
Aprobación v firma.	
Comentarios y excepciones	
F Registro de datos: fuente de iones PhotoSpray <sup>®</sup>	110
Información del sistema	110
Aprobación y firma	
contentations y exceptiones	
G Parametros del sistema TripleTOF	
H Parámetros del sistema de las series 6500 y 6500+	117
I Parámetros de los sistemas de las series 5500 y 5500+	123
J Parámetros del sistema API 5000 <sup>™</sup>	128
K Parámetros de los sistemas de la serie 4500	132
L Parámetros de los sistemas de la serie 4000	137
M Parámetros del sistema SCIEX Triple Quad <sup>TM</sup> 3500	143

N Parámetros de los sistemas de la serie 3200	.147
O Masas de [Glu <sup>1</sup> ]-fibrinopéptido B	.154
P Preparación de una dilución de reserpina de 60:1 (10 pg/μl)	.156

## Pruebas para fuentes de iones IonDrive<sup>™</sup> Turbo V

Dichas pruebas son aplicables a las fuentes de iones IonDrive<sup>™</sup> Turbo V instaladas en sistemas de las series 6500 o 6500+.

Ejecute estas pruebas en cualquiera de las situaciones siguientes:

- Cuando se instala una nueva fuente de iones.
- Después de una operación importante de mantenimiento de la fuente de iones.
- Cuando sea necesario evaluar el rendimiento de la fuente de iones, antes de empezar un proyecto o como parte de un procedimiento de funcionamiento estándar.



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Utilice la fuente de iones solo si dispone de los conocimientos y la formación adecuados para utilizar, contener y evacuar los materiales tóxicos o nocivos que se emplean con la fuente de iones.



¡ADVERTENCIA! Riesgo de perforación, peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Deje de usar la fuente de iones si su 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.



¡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 hojas de datos de seguridad para conocer las instrucciones específicas. Compruebe que el sistema se encuentre en modo 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.

#### **Materiales necesarios**

- Disolvente de fase móvil: solución 70:30 de acetonitrilo:agua
- Solución de prueba: 0,0167 pmol/µl (equivalente a 10 pg/µl) de reserpina. Utilice la solución de reserpina de 0,0167 pmol/µl previamente diluida incluida en el juego de productos químicos de patrones SCIEX (referencia 4406127)
- Para los sistemas TripleTOF<sup>®</sup>, prepare la solución de prueba a partir de la solución de reserpina de 0,167 pmol/µl y el diluyente estándar suministrados con el kit de sustancias químicas del sistema SCIEX TripleTOF<sup>®</sup> (referencia 4456736)
- Bomba de HPLC (para fase móvil)
- Inyector manual (8125 Rheodyne o similar) con un bucle de 5  $\mu l$  o una configuración del automuestreador para inyecciones de 5  $\mu l$
- Tubo PEEK de 1/16 pulgadas de diámetro exterior (DE), 0,005 pulgadas de diámetro interior (DI)
- Fuente de iones con una sonda instalada
- Jeringa de 250 µl a 1000 µl
- Guantes no empolvados (se recomienda que sean de nitrilo o neopreno)
- Gafas de seguridad.
- Bata de laboratorio

**Nota:** Todas las soluciones de prueba se deben conservar refrigeradas. Si se dejan fuera del refrigerador durante más de 48 horas, deséchelas y utilice soluciones nuevas.

## Preparación para la prueba



¡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 modo Standby antes de ajustar el tubo de muestra u otros equipos cerca de la fuente de iones.

- Cuando instale una fuente de iones nueva, asegúrese de que el espectrómetro de masas funciona según las especificaciones de la fuente de iones existente.
- Instale la fuente de iones en el espectrómetro de masas.
- Asegúrese de que la fuente de iones esté completamente optimizada. Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.
- Consulte todas las hojas de datos de seguridad aplicables para tomar las precauciones necesarias antes de manipular soluciones químicas o disolventes.
- Asegúrese de que los usuarios han recibido suficiente formación sobre el funcionamiento y los procedimientos de seguridad del espectrómetro de masas.

- Instale la sonda que haya que probar.
- Conecte la unión de conexión a tierra de la fuente de iones a una bomba mediante un inyector manual equipado con un bucle de 5 μl, o a un automuestreador.

Consulte la Figura 1-1.

### Figura 1-1 Configuración de la bomba de LC



Elemento	Descripción
1	Bomba para la entrada de flujo
2	Inyector o automuestreador
3	Fuente de iones

## Prueba para la sonda TurbolonSpray<sup>®</sup>



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. Espere un mínimo de 90 minutos para que la fuente de iones se enfríe antes de iniciar cualquier procedimiento de mantenimiento. Las superficies de la fuente de iones se calientan durante su funcionamiento.

## PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente hasta que la fuente de iones haya alcanzado la temperatura adecuada.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener información sobre la instalación y optimización de la fuente de iones.

- 1. Configure la bomba de HPLC para suministrar 0,5 ml/min de la fase móvil.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

Parámetro	Valor			
Parámetros de MS				
Scan Mode	MRM			
Q1	609,3			
Q3	195,1			
Scan Time (seconds)	0,200			
Duration (minutes)	10			
Parámetros de Source/Gas	•			
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	30 (u optimizado)			
Temperature (TEM)	700 (u optimizado)			
lon Source Gas 1 (GS1)	60 (u optimizado)			
lon Source Gas 2 (GS2)	70 (u optimizado)			
IonSpray Voltage (IS)	4500 (u optimizado)			
Parámetros de Compound	-			
Declustering Potential (DP) 100 (u optimizado)				
Collision Energy (CE)	45 (u optimizado)			
Collision Exit Potential (CXP)	Optimizado			

#### Tabla 1-1 Parámetros del método

4. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.



¡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: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

- 5. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 6. Aplique tres inyecciones de 5 µl de la solución de reserpina.

**¡Sugerencia!** Se recomienda sobrellenar el bucle de 5 µl con 30 µl hasta 40 µl de la solución.

- 7. Imprima los resultados.
- 8. Obtenga el promedio de las tres intensidades de los iones y, a continuación, registre el resultado en el registro de datos.
- 9. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones IonDrive<sup>™</sup> Turbo V.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

10. Después de finalizar las pruebas, detenga la bomba de LC y configure **TEM** en 0 y luego deje enfriar la sonda.

## Prueba para la sonda APCI



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. Espere un mínimo de 90 minutos para que la fuente de iones se enfríe antes de iniciar cualquier procedimiento de mantenimiento. Las superficies de la fuente de iones se calientan durante su funcionamiento.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente hasta que la fuente de iones haya alcanzado la temperatura adecuada.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener información sobre la instalación y optimización de la fuente de iones.

- 1. Configure la bomba de HPLC para suministrar 1 ml/min de la fase móvil.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

Parámetro	Valor		
Parámetros de MS			
Scan Mode	MRM		
Q1	609,3		
Q3	195,1		
Scan Time (seconds)	0,200		
Duration (minutes)	10		
Parámetros de Source/Gas			
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	30 (u optimizado)		
CAD Gas	9 (u optimizado)		
Nebulizer Current (NC)	3 (u optimizado)		
Temperature (TEM)	425		
lon Source Gas 1 (GS1)	70 (u optimizado)		
Parámetros de Compound			
Declustering Potential (DP)	100 (u optimizado)		
Collision Energy (CE)	45 (u optimizado)		
Collision Exit Potential (CXP)	Optimizado		

#### Tabla 1-2 Parámetros del método

4. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.



¡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: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

- 5. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 6. Aplique tres inyecciones de 5 µl de la solución de reserpina.

¡Sugerencia! Se recomienda sobrellenar el bucle de 5 µl con 30 µl hasta 40 µl de la solución.

7. Imprima los resultados.

- 8. Obtenga el promedio de las tres intensidades de los iones y, a continuación, registre el resultado en el registro de datos.
- 9. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones IonDrive<sup>™</sup> Turbo V.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

10. Después de finalizar las pruebas, detenga la bomba de LC y configure **TEM** en 0 y luego deje enfriar la sonda.

## Pruebas para la fuente de iones Turbo V<sup>™</sup>

Ejecute estas pruebas en cualquiera de las situaciones siguientes:

- Cuando se instala una nueva fuente de iones.
- Después de una operación importante de mantenimiento de la fuente de iones.
- Cuando sea necesario evaluar el rendimiento de la fuente de iones, antes de empezar un proyecto o como parte de un procedimiento de funcionamiento estándar.



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Utilice la fuente de iones solo si dispone de los conocimientos y la formación adecuados para utilizar, contener y evacuar los materiales tóxicos o nocivos que se emplean con la fuente de iones.



¡ADVERTENCIA! Riesgo de perforación, peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Deje de usar la fuente de iones si su 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.



¡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 hojas de datos de seguridad para conocer las instrucciones específicas. Compruebe que el sistema se encuentre en modo 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.

#### **Materiales necesarios**

- Disolvente de fase móvil: solución 70:30 de acetonitrilo:agua
- Solución de prueba:
  - Para los sistemas 4500, 5500, 5500+, 6500 y 6500+, utilice la solución de reserpina de 0,0167 pmol/ µl previamente diluida incluida en el juego de productos químicos de patrones SCIEX (referencia 4406127)
  - Con los sistemas 3200 y 3500, utilice la solución de reserpina de 0,167 pmol/µl previamente diluida incluida en el juego de productos químicos de patrones SCIEX (referencia 4406127)
  - Para los sistemas TripleTOF<sup>®</sup>, prepare la solución de prueba a partir de la solución de reserpina de 0,167 pmol/µl y el diluyente estándar suministrados con el kit de sustancias químicas del sistema SCIEX TripleTOF<sup>®</sup> (referencia 4456736)

Es necesario un mezclador de vórtice.

- Bomba de HPLC (para fase móvil)
- Inyector manual (8125 Rheodyne o similar) con un bucle de 5 μl o una configuración del automuestreador para inyecciones de 5 μl
- Tubo PEEK de 1/16 pulgadas de diámetro exterior (DE), 0,005 pulgadas de diámetro interior (DI)
- Fuente de iones con una sonda instalada
- Jeringa de 250 μl a 1000 μl
- Guantes no empolvados (se recomienda que sean de nitrilo o neopreno)
- Gafas de seguridad.
- Bata de laboratorio

**Nota:** Todas las soluciones de prueba se deben conservar refrigeradas. Si se dejan fuera del refrigerador durante más de 48 horas, deséchelas y utilice soluciones nuevas.

PRECAUCIÓN: posible resultado erróneo. No utilice soluciones caducadas.

### Preparación para la prueba



¡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 modo Standby antes de ajustar el tubo de muestra u otros equipos cerca de la fuente de iones.

- Cuando instale una fuente de iones nueva, asegúrese de que el espectrómetro de masas funciona según las especificaciones de la fuente de iones existente.
- Instale la fuente de iones en el espectrómetro de masas.

- Asegúrese de que la fuente de iones esté completamente optimizada. Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.
- Consulte todas las hojas de datos de seguridad aplicables para tomar las precauciones necesarias antes de manipular soluciones químicas o disolventes.
- Instale la sonda que haya que probar.
- Conecte la unión de conexión a tierra de la fuente de iones a una bomba mediante un inyector manual equipado con un bucle de 5 µl, o a un automuestreador.

Consulte la Figura 2-1.

### Figura 2-1 Configuración de la bomba de LC



Elemento	Descripción
1	Bomba para la entrada de flujo
2	Inyector o automuestreador
3	Fuente de iones

# Prueba para la fuente de iones en los sistemas de triple cuadrupolo y QTRAP<sup>®</sup>

### Prueba para la sonda TurbolonSpray<sup>®</sup>



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

## PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente hasta que la fuente de iones haya alcanzado la temperatura adecuada.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener información sobre la instalación y optimización de la fuente de iones.

- 1. Configure la bomba de HPLC para suministrar 0,2 ml/min de la fase móvil.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

Parámetro	Valor			
Parámetros de MS				
Scan Mode	MRM			
Q1	609,3 (u optimizado)			
Q3	195,1 (u optimizado)			
Scan Time (seconds)	0,200			
Duration (minutes)	10			
Parámetros de Source/Gas				
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20 (u optimizado)			
Temperature (TEM)	700 (u optimizado)			
lon Source Gas 1 (GS1)	60 (u optimizado)			
Ion Source Gas 2 (GS2)	70 (u optimizado)			
IonSpray <sup>™</sup> Voltage (IS)	4500 (u optimizado)			

#### Tabla 2-1 Parámetros del método

Tab	la 2-1	Parámetros	del r	nétodo (	(continua	ación)	
	-						

Parámetro	Valor		
Parámetros de Compound			
Declustering Potential (DP)	100 (u optimizado)		
Collision Energy (CE)	45 (u optimizado)		
Collision Exit Potential (CXP)	Optimizado		

4. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.



¡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: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

- 5. Aplique varias inyecciones de 5 µl de la solución de reserpina mientras optimiza los parámetros siguientes para obtener la máxima intensidad y estabilidad de la señal:
  - La posición vertical y horizontal de la sonda
  - La extensión de la punta del electrodo
  - CUR, TEM, GS1, GS2 e IS
- 6. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 7. Aplique tres inyecciones de 5  $\mu$ l de la solución de reserpina.

**¡Sugerencia!** Se recomienda sobrellenar el bucle de 5 µl con 30 µl hasta 40 µl de la solución.

- 8. Imprima los resultados.
- 9. Obtenga el promedio de las tres intensidades de los iones y, a continuación, registre el resultado en el registro de datos.
- 10. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones Turbo V<sup>TM</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

11. Después de finalizar las pruebas, detenga la bomba de LC y configure **TEM** en 0 y luego deje enfriar la sonda.

### Prueba para la sonda APCI



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

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente hasta que la fuente de iones haya alcanzado la temperatura adecuada.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener información sobre la instalación y optimización de la fuente de iones.

- 1. Configure la bomba de HPLC para suministrar 1 ml/min de la fase móvil.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

Parámetro	Valor			
Parámetros de MS				
Scan Mode	MRM			
Q1	609,3 (u optimizado)			
Q3	195,1 (u optimizado)			
Scan Time (seconds)	0,200			
Duration (minutes)	10			
Parámetros de Source/Gas				
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20 (u optimizado)			
CAD Gas	9 (u optimizado)			
Nebulizer Current (NC)	3 (u optimizado)			
Temperature (TEM)	425			
Ion Source Gas 1 (GS1)	70 (u optimizado)			
Parámetros de Compound				
Declustering Potential (DP)	100 (u optimizado)			
Collision Energy (CE)	45 (u optimizado)			
Collision Exit Potential (CXP)	Optimizado			

#### Tabla 2-2 Parámetros del método

4. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.



¡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: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

- 5. Aplique varias inyecciones de 5 µl de la solución de reserpina mientras optimiza los parámetros siguientes para obtener la máxima intensidad y estabilidad de la señal:
  - La posición vertical y horizontal de la sonda
  - La extensión de la punta del electrodo
  - CUR, GS1 y NC
- 6. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 7. Aplique tres inyecciones de 5 µl de la solución de reserpina.

¡Sugerencia! Se recomienda sobrellenar el bucle de 5 µl con 30 µl hasta 40 µl de la solución.

- 8. Imprima los resultados.
- 9. Obtenga el promedio de las tres intensidades de los iones y, a continuación, registre el resultado en el registro de datos.
- 10. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones Turbo V<sup>TM</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

11. Después de finalizar las pruebas, detenga la bomba de LC y configure **TEM** en 0 y luego deje enfriar la sonda.

## Prueba para la fuente de iones en sistemas TripleTOF<sup>®</sup>

**Nota:** Las especificaciones no están disponibles para el sistema 4600TripleTOF<sup>®</sup> La fuente de iones recomendada para los sistemas TripleTOF<sup>®</sup>.DuoSpray<sup>™</sup>

### Preparación de la solución de prueba

- 1. Combine 100 µl de los 0,167 pmol/µl de solución de reserpina y los 900 µl de diluyente estándar.
- 2. Mezcle con un mezclador de vórtice durante 30 segundos.

Este paso produce los 0,0167 pmol/µl de solución de reserpina.

### Prueba para la sonda TurbolonSpray®



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

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente hasta que la fuente de iones haya alcanzado la temperatura adecuada.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener información sobre la instalación y optimización de la fuente de iones.

- 1. Configure la bomba de HPLC para suministrar 0,2 ml/min de la fase móvil.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup> TF, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

Parámetro	Valor			
Parámetros de MS				
Scan Mode	lon producto			
High Sensitivity (solo sistemas 5600/5600+ y 6600/ 6600+)	Activado			
Product Of	609,2807			
TOF Masses (Da)	150 a 650			
Accumulation time (seconds)	0,200			
Duration (minutes)	10			
Parámetros de Source/Gas				
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20			
Temperature (TEM)	700			

#### Tabla 2-3 Parámetros del método

Parámetro	Valor	
lon Source Gas 1 (GS1)	50	
lon Source Gas 2 (GS2)	50	
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	5000	
Parámetros de Compound		
Declustering Potential (DP)	100	
Collision Energy (CE)	45	
Parámetros de Resolution		
Q1 Resolution	Unidad	

Tabla 2-3 Parámetros del método (continuación)

4. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.



¡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: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

- 5. Aplique varias inyecciones de 5 μl de la solución de 0,0167 pmol/μl de reserpina mientras optimiza los parámetros siguientes para obtener la máxima intensidad y estabilidad de la señal:
  - La posición vertical y horizontal de la sonda
  - La extensión de la punta del electrodo
  - CUR, TEM, GS1, GS2 e ISVF
- 6. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 7. Aplique tres inyecciones de 5  $\mu$ l de la solución de reserpina.

**¡Sugerencia!** Se recomienda sobrellenar el bucle de 5 µl con 30 µl hasta 40 µl de la solución.

- 8. Imprima los resultados.
- 9. Obtenga el promedio de las tres intensidades de los iones y, a continuación, registre el resultado en el registro de datos.
- 10. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones Turbo V<sup>TM</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

11. Después de finalizar las pruebas, detenga la bomba de LC y configure **TEM** en 0 y luego deje enfriar la sonda.

### Prueba para la sonda APCI



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

## PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente hasta que la fuente de iones haya alcanzado la temperatura adecuada.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener información sobre la instalación y optimización de la fuente de iones.

- 1. Configure la bomba de HPLC para suministrar 1 ml/min de la fase móvil.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup> TF, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

Parámetro	Valor		
Parámetros de MS			
Scan Mode	Ion producto		
High Sensitivity (solo sistemas 5600/5600+ y 6600/ 6600+)	Activado		
Product Of	609,2807		
TOF Masses (Da)	150 a 650		
Accumulation time (seconds)	0,200		
Duration (minutes)	10		
Parámetros de Source/Gas			
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20 (u optimizado)		
Temperature (TEM)	425		
lon Source Gas 1 (GS1)	70 (u optimizado)		
Nebulizer Current (NC)	3 (u optimizado)		

#### Tabla 2-4 Parámetros del método

Parámetro	Valor	
Parámetros de Compound		
Declustering Potential (DP)	100	
Collision Energy (CE)	45	
Parámetros de Resolution		
Q1 Resolution	Unidad	

Tabla 2-4 Parámetros del método (continuación)

4. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.



¡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: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

- 5. Aplique varias inyecciones de 5 µl de la solución de reserpina mientras optimiza los parámetros siguientes para obtener la máxima intensidad y estabilidad de la señal:
  - La posición vertical y horizontal de la sonda
  - La extensión de la punta del electrodo
  - CUR, GS1 y NC
- 6. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 7. Aplique tres inyecciones de 5 µl de la solución de reserpina.

¡Sugerencia! Se recomienda sobrellenar el bucle de 5 µl con 30 µl hasta 40 µl de la solución.

- 8. Imprima los resultados.
- 9. Obtenga el promedio de las tres intensidades de los iones y, a continuación, registre el resultado en el registro de datos.
- 10. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones Turbo V<sup>TM</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

11. Después de finalizar las pruebas, detenga la bomba de LC y configure **TEM** en 0 y luego deje enfriar la sonda.

## Pruebas para la fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>

Ejecute estas pruebas en cualquiera de las situaciones siguientes:

- Cuando se instala una nueva fuente de iones.
- Después de una operación importante de mantenimiento de la fuente de iones.
- Cuando sea necesario evaluar el rendimiento de la fuente de iones, antes de empezar un proyecto o como parte de un procedimiento de funcionamiento estándar.



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Utilice la fuente de iones solo si dispone de los conocimientos y la formación adecuados para utilizar, contener y evacuar los materiales tóxicos o nocivos que se emplean con la fuente de iones.



¡ADVERTENCIA! Riesgo de perforación, peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Deje de usar la fuente de iones si su 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.



¡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 hojas de datos de seguridad para conocer las instrucciones específicas. Compruebe que el sistema se encuentre en modo 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.

#### **Materiales necesarios**

- Disolvente de fase móvil: solución 70:30 de acetonitrilo:agua
- Solución de prueba:
  - Para los sistemas 4500, 5500, 5500+, 6500 y 6500+, utilice la solución de reserpina de 0,0167 pmol/ µl previamente diluida incluida en el juego de productos químicos de patrones SCIEX (referencia 4406127)
  - Con los sistemas 3200 y 3500, utilice la solución de reserpina de 0,167 pmol/µl previamente diluida incluida en el juego de productos químicos de patrones SCIEX (referencia 4406127)
  - Para los sistemas TripleTOF<sup>®</sup>, prepare la solución de prueba a partir de la solución de reserpina de 0,167 pmol/µl y el diluyente estándar suministrados con el kit de sustancias químicas del sistema SCIEX TripleTOF<sup>®</sup> (referencia 4456736)

Es necesario un mezclador de vórtice.

- Bomba de HPLC (para fase móvil)
- Inyector manual (8125 Rheodyne o similar) con un bucle de 5 μl o una configuración del automuestreador para inyecciones de 5 μl
- Tubo PEEK de 1/16 pulgadas de diámetro exterior (DE), 0,005 pulgadas de diámetro interior (DI)
- Fuente de iones con una sonda instalada
- Jeringa de 250 μl a 1000 μl
- Guantes no empolvados (se recomienda que sean de nitrilo o neopreno)
- Gafas de seguridad.
- Bata de laboratorio

**Nota:** Todas las soluciones de prueba se deben conservar refrigeradas. Si se dejan fuera del refrigerador durante más de 48 horas, deséchelas y utilice soluciones nuevas.

PRECAUCIÓN: posible resultado erróneo. No utilice soluciones caducadas.

### Preparación para la prueba



¡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 modo Standby antes de ajustar el tubo de muestra u otros equipos cerca de la fuente de iones.

- Cuando instale una fuente de iones nueva, asegúrese de que el espectrómetro de masas funciona según las especificaciones de la fuente de iones existente.
- Instale la fuente de iones en el espectrómetro de masas.

- Asegúrese de que la fuente de iones esté completamente optimizada. Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.
- Consulte todas las hojas de datos de seguridad aplicables para tomar las precauciones necesarias antes de manipular soluciones químicas o disolventes.
- Conecte la unión de conexión a tierra de la fuente de iones a una bomba mediante un inyector manual equipado con un bucle de 5 μl, o a un automuestreador.

Consulte la Figura 3-1 y la Figura 3-2.

### Figura 3-1 Configuración de la bomba de LC: sonda TurbolonSpray<sup>®</sup>





### Figura 3-2 Configuración de la bomba: sonda APCI

Elemento	Descripción
1	Bomba de LC
2	Inyector o automuestreador
3	Fuente de iones

## Prueba para la fuente de iones en sistemas TripleTOF<sup>®</sup>

### Preparación de la solución de prueba

- 1. Combine 100  $\mu l$  de los 0,167 pmol/ $\mu l$  de solución de reserpina y los 900  $\mu l$  de diluyente estándar.
- 2. Mezcle con un mezclador de vórtice durante 30 segundos.

Este paso produce los 0,0167 pmol/µl de solución de reserpina.

### Prueba para la sonda TurbolonSpray®



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

## PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente hasta que la fuente de iones haya alcanzado la temperatura adecuada.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener información sobre la instalación y optimización de la fuente de iones.

- 1. Configure la bomba de HPLC para suministrar 0,2 ml/min de la fase móvil.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup> TF, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. Ajuste las posiciones de la sonda tal como se muestran en la tabla siguiente.

#### Tabla 3-1 Posiciones de sonda

Sonda	Posición vertical	Posición horizontal	Extensión de la punta del electrodo
APCI	5	_	0,5 mm
TurbolonSpray	5	5	0,5 mm

4. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

#### Tabla 3-2 Parámetros del método

Parámetro	Valor	
Parámetros de MS		
Scan Mode	lon producto	
High Sensitivity (solo sistemas 5600/5600+ y 6600/ 6600+)	Activado	
Product of	609,2807	
TOF Masses (Da)	150 a 650	
Accumulation time (seconds)	0,200	
Duration (minutes)	10	

Parámetro	Valor	
Parámetros de Source/Gas		
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20	
Temperature (TEM)	650	
Ion Source Gas 1 (GS1)	50	
Ion Source Gas 2 (GS2)	70	
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	5500	
Parámetros de Compound		
Declustering Potential (DP)	100	
Collision Energy (CE)	45	
Parámetros de Resolution		
Q1 Resolution	Unidad	

Tabla 3-2 Parámetros del método (continuación)

5. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.



¡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: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

- 6. Aplique varias inyecciones de 5 μl de la solución de 0,0167 pmol/μl de reserpina mientras optimiza los parámetros siguientes para obtener la máxima intensidad y estabilidad de la señal:
  - La posición vertical y horizontal de la sonda
  - La extensión de la punta del electrodo
  - CUR, TEM, GS1, GS2 e ISVF
- 7. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 8. Aplique tres inyecciones de 5 µl de la solución de reserpina.

**¡Sugerencia!** Se recomienda sobrellenar el bucle de 5 µl con 30 µl hasta 40 µl de la solución.

- Tras la adquisición, por cada inyección, genere un XIC de la ventana de 50 mDa centrada en la relación m/z 195,0652 (o la masa observada en la calibración). Registre la intensidad (altura de pico) de cada inyección.
- 10. Imprima los resultados.

Los resultados deberían ser similares a los de la figura siguiente.





- 11. Obtenga el promedio de las tres intensidades de los iones y, a continuación, registre el resultado en el registro de datos.
- 12. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

13. Después de finalizar las pruebas, detenga la bomba de LC y configure **TEM** en 0 y luego deje enfriar la sonda.

### Prueba para la sonda APCI



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

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente hasta que la fuente de iones haya alcanzado la temperatura adecuada.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener información sobre la instalación y optimización de la fuente de iones.

- 1. Configure la bomba de HPLC para suministrar 1 ml/min de la fase móvil.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup> TF, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.

3. Ajuste las posiciones de la sonda tal como se muestran en la tabla siguiente.

### Tabla 3-3 Posiciones de sonda

Sonda	Posición vertical	Posición horizontal	Extensión de la punta del electrodo
APCI	5	—	0,5 mm
TurbolonSpray	5	5	0,5 mm

4. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

#### Tabla 3-4 Parámetros del método

Parámetro	Valor	
Parámetros de MS		
Scan Mode	lon producto	
High Sensitivity (solo sistemas 5600/5600+ y 6600/ 6600+)	Activado	
Product Of	609,2807	
TOF Masses (Da)	150 a 650	
Accumulation time (seconds)	0,200	
Duration (minutes)	10	
Parámetros de Source/Gas		
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20	
Temperature (TEM)	650	
lon Source Gas 2 (GS2)	70	
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	5500	
Parámetros de Compound		
Declustering Potential (DP)	100	
Collision Energy (CE)	45	
Parámetros de Resolution		
Q1 Resolution	Unidad	

5. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.



¡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: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

- 6. Aplique varias inyecciones de 5 μl de la solución de 0,0167 pmol/μl de reserpina mientras optimiza los parámetros siguientes para obtener la máxima intensidad y estabilidad de la señal:
  - La posición vertical de la sonda
  - La extensión de la punta del electrodo
  - CUR, TEM, GS2 e ISVF
- 7. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 8. Aplique tres inyecciones de 5 µl de la solución de reserpina.

**¡Sugerencia!** Se recomienda sobrellenar el bucle de 5 µl con 30 µl hasta 40 µl de la solución.

- 9. Tras la adquisición, por cada inyección, genere un XIC de la ventana de 50 mDa centrada en la relación m/z 195,0652 (o la masa observada en la calibración). Registre la intensidad (altura de pico) de cada inyección.
- 10. Imprima los resultados.

Los resultados deberían ser similares a los de la figura siguiente.





11. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

12. Después de finalizar las pruebas, detenga la bomba de LC y configure **TEM** en 0 y luego deje enfriar la sonda.

# Prueba para la fuente de iones en los sistemas de triple cuadrupolo y QTRAP<sup>®</sup>

Prueba para la sonda TurbolonSpray<sup>®</sup>



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

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente hasta que la fuente de iones haya alcanzado la temperatura adecuada.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener información sobre la instalación y optimización de la fuente de iones.

- 1. Configure la bomba de HPLC para suministrar 0,2 ml/min de la fase móvil.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. En la pestaña Source/Gas, seleccione TIS en la lista.
- 4. Ajuste las posiciones de la sonda tal como se muestran en la tabla siguiente.

Sonda	Posición vertical	Posición horizontal	Extensión de la punta del electrodo
APCI	5	—	0,5 mm
TurbolonSpray	5	5	0,5 mm

5. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

Parámetro	Valor	
Parámetros de MS	lon producto	
Scan Mode	MRM	
Q1	609,3	
Q3	195,1	
Scan Time (ms)	200	
Duration (minutes)	10	
Parámetros de Source/Gas		
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20 (u optimizado)	
IonSpray Voltage (IS)	4500 (u optimizado)	
Temperature (TEM)	700 (u optimizado)	
Ion Source Gas 1 (GS1)	60 (u optimizado)	
Ion Source Gas 2 (GS2)	70 (u optimizado)	
Parámetros de Compound		
Declustering Potential (DP)	100 (u optimizado)	
Collision Energy (CE)	45 (u optimizado)	
Collision Exit Potential (CXP)	Optimizado	

### Tabla 3-6 Parámetros del método

6. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.



¡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: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

- 7. Aplique varias inyecciones de 5 μl de la solución de reserpina mientras optimiza los parámetros siguientes para obtener la máxima intensidad y estabilidad de la señal:
  - La posición vertical y horizontal de la sonda
  - La extensión de la punta del electrodo
  - CUR, TEM, GS1, GS2 e IS

- 8. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 9. Aplique tres inyecciones de 5 μl de la solución de prueba de 10 pg/μl monitorizando la ventana de 50 mDa alrededor de la masa de m/z 195 del centroide.

**¡Sugerencia!** Se recomienda sobrellenar el bucle de 5 µl con 30 µl hasta 40 µl de la solución.

10. Imprima los resultados.

Los resultados deberían ser similares a los de la figura siguiente.





- 11. Obtenga el promedio de las tres intensidades de los iones y, a continuación, registre el resultado en el registro de datos.
- 12. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

13. Después de finalizar las pruebas, detenga la bomba de LC y configure **TEM** en 0 y luego deje enfriar la sonda.

### Prueba para la sonda APCI



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

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente hasta que la fuente de iones haya alcanzado la temperatura adecuada.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener información sobre la instalación y optimización de la fuente de iones.

- 1. Configure la bomba de HPLC para suministrar 1 ml/min de la fase móvil.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. Ajuste las posiciones de la sonda tal como se muestran en la tabla siguiente.

#### Tabla 3-7 Posiciones de sonda

Sonda	Posición vertical	Posición horizontal	Extensión de la punta del electrodo
APCI	5	—	0,5 mm
TurbolonSpray	5	5	0,5 mm

4. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

## Tabla 3-8 Parámetros del método

Parámetro	Valor		
Parámetros de MS			
Scan Mode	MRM		
Q1	609,3		
Q3	195,1		
Scan Time (ms)	200		
Duration (minutes)	10		
Parámetros de Source/Gas			
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20 (u optimizado)		
Nebulizer Current (NC)	3 (u optimizado)		
Temperature (TEM)	350 (u optimizado)		
Ion Source Gas 2 (GS2)	70 (u optimizado)		
Parámetros de Compound			
Declustering Potential (DP)	100 (u optimizado)		
Collision Energy (CE)	45 (u optimizado)		
Collision Exit Potential (CXP)	Optimizado		

5. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.


¡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: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

- 6. Aplique varias inyecciones de 5 μl de la solución de reserpina mientras optimiza los parámetros siguientes para obtener la máxima intensidad y estabilidad de la señal:
  - La posición vertical y horizontal de la sonda
  - La extensión de la punta del electrodo
  - CUR, GS1 y NC
- 7. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 8. Aplique tres inyecciones de 5 µl de la solución de reserpina.

**¡Sugerencia!** Se recomienda sobrellenar el bucle de 5 µl con 30 µl hasta 40 µl de la solución.

- Tras la adquisición, por cada inyección, genere un XIC de la ventana de 50 mDa centrada en la relación m/z 195,0652 (o la masa observada en la calibración). Registre la intensidad (altura de pico) de cada inyección.
- 10. Imprima los resultados.
- 11. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

12. Después de finalizar las pruebas, detenga la bomba de LC y configure **TEM** en 0 y luego deje enfriar la sonda.

# Pruebas para la fuente de iones OptiFlow<sup>™</sup> Turbo V

Ejecute estas pruebas en cualquiera de las situaciones siguientes:

- Cuando se instala una nueva fuente de iones.
- Después de una operación importante de mantenimiento de la fuente de iones.
- Cuando sea necesario evaluar el rendimiento de la fuente de iones, antes de empezar un proyecto o como parte de un procedimiento de funcionamiento estándar.



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Utilice la fuente de iones solo si dispone de los conocimientos y la formación adecuados para utilizar, contener y evacuar los materiales tóxicos o nocivos que se emplean con la fuente de iones.



¡ADVERTENCIA! Riesgo de perforación, peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Deje de usar la fuente de iones si su 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.



¡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 hojas de datos de seguridad para conocer las instrucciones específicas. Compruebe que el sistema se encuentre en modo 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.

#### **Materiales necesarios**

 Solución de prueba preparada a partir de la solución de reserpina de 0,167 pmol/µL y el diluyente estándar proporcionados en el kit de sustancias químicas del sistema SCIEX TripleTOF<sup>®</sup> (referencia 4456736)

**Nota:** Esta solución también se utiliza para probar la fuente de iones OptiFlow<sup>TM</sup> Turbo V en espectrómetros de masas SCIEX Triple Quad<sup>TM</sup> y QTRAP<sup>®</sup>.

- Tubo PEEK de 1/16 pulgadas de diámetro exterior (DE), 0,005 pulgadas de diámetro interior (DI)
- Fuente de iones con una sonda MICRO instalada con un electrodo de microflujo bajo.
- Jeringa de 250 µl a 1000 µl
- Guantes no empolvados (se recomienda que sean de nitrilo o neopreno)
- Gafas de seguridad.
- Bata de laboratorio

**Nota:** Todas las soluciones de prueba se deben conservar refrigeradas. Si se dejan fuera del refrigerador durante más de 48 horas, deséchelas y utilice soluciones nuevas.

PRECAUCIÓN: posible resultado erróneo. No utilice soluciones caducadas.

# Preparación para la prueba



¡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 modo Standby antes de ajustar el tubo de muestra u otros equipos cerca de la fuente de iones.

- Cuando instale una fuente de iones nueva, asegúrese de que el espectrómetro de masas funciona según las especificaciones de la fuente de iones existente.
- Instale la fuente de iones en el espectrómetro de masas.
- Asegúrese de que la fuente de iones esté completamente optimizada. Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.
- Consulte todas las hojas de datos de seguridad aplicables para tomar las precauciones necesarias antes de manipular soluciones químicas o disolventes.
- Instale la sonda que haya que probar.

# Prueba para la fuente de iones en los sistemas de triple cuadrupolo y QTRAP<sup>®</sup>

# Prueba de una sonda SteadySpray



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. Espere un mínimo de 60 minutos para que la fuente de iones se enfríe antes de iniciar cualquier procedimiento de mantenimiento. Las superficies de la fuente de iones se calientan durante su funcionamiento.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente hasta que la fuente de iones haya alcanzado la temperatura adecuada.

**Nota:** La fuente de iones OptiFlow<sup>™</sup> Turbo V solo está disponible para los sistemas de las series 5500, 5500+, 6500 y 6500+.

**Nota:** Esta prueba solo es para la sonda MICRO y el electrodo de microflujo bajo.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener información sobre la instalación y optimización de la fuente de iones.

- 1. Infunda la solución de reserpina con un caudal de 5 µl/min.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

## Tabla 4-1 Parámetros del método

Parámetro	Valor				
Parámetros de MS					
Scan Mode	MRM				
Q1	609,3 (u optimizado)				
Q3	195,1 (u optimizado)				
Scan Time (seconds)	0,200				
Duration (minutes)	10				
Parámetros de Source/Gas					
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20 (u optimizado)				
Temperature (TEM)	350 (optimizado, con un máximo de 350 °C)				

Parámetro	Valor				
lon Source Gas 1 (GS1)	25 (u optimizado)				
lon Source Gas 2 (GS2)	65 (u optimizado)				
IonSpray <sup>™</sup> Voltage (IS)	4500 (máximo 4500)				
Parámetros de Compound					
Declustering Potential (DP)	100 (u optimizado)				
Collision Energy (CE)	45 (u optimizado)				
Parámetros de Syringe Pump Method					
Flow rate (µL/min)	5				
Syringe Size (µL)	250 µl a 1000 µl				

Tabla 4-1 Parámetros del método (continuación)

4. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.

# PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

- 5. Infunda la solución de reserpina a 5 μl/min durante al menos 5 minutos mientras optimiza CUR, TEM, GS1, GS2 e IS para obtener la máxima intensidad y estabilidad de la señal.
- 6. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 7. Imprima los resultados.
- 8. Registre el resultado en el registro de datos.
- 9. Obtenga el promedio de las tres intensidades de los iones y, a continuación, registre el resultado en el registro de datos.
- 10. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones OptiFlow<sup>™</sup> Turbo V.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

# Prueba para la fuente de iones en sistemas TripleTOF<sup>®</sup>

**Nota:** La fuente de iones OptiFlow<sup>TM</sup> Turbo V solo está disponible para el sistema TripleTOF<sup>®</sup> 6600+ y cualquier sistema TripleTOF<sup>®</sup> 6600 actualizado para utilizar la fuente de iones OptiFlow<sup>TM</sup> Turbo V.

# Prueba de una sonda SteadySpray



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. Espere un mínimo de 60 minutos para que la fuente de iones se enfríe antes de iniciar cualquier procedimiento de mantenimiento. Las superficies de la fuente de iones se calientan durante su funcionamiento.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente hasta que la fuente de iones haya alcanzado la temperatura adecuada.

Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones para obtener información sobre la instalación y optimización de la fuente de iones.

Nota: Esta prueba solo es para la sonda MICRO y el electrodo de microflujo bajo.

- 1. Infunda la solución de reserpina con un caudal de 5 µl/min.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup> TF, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

Parámetro	Valor					
Parámetros de MS						
Scan Mode	Ion producto					
High Sensitivity	Activado					
Product Of	609,2807					
TOF Masses (Da)	150 a 650					
Accumulation time (seconds)	0,200					
Duration (minutes)	10					
Parámetros de Source/Gas						
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20 (u optimizado)					
Temperature (TEM)	350 (optimizado, con un máximo de 350 °C)					
lon Source Gas 1 (GS1)	25 (u optimizado)					
Ion Source Gas 2 (GS2)	65 (u optimizado)					
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	4500 (máximo 4500)					
Parámetros de Compound						

## Tabla 4-2 Parámetros del método

Parámetro	Valor					
Declustering Potential (DP)	100 (u optimizado)					
Collision Energy (CE)	45 (u optimizado)					
Parámetros de Resolution						
Q1 Resolution	Unidad					
Parámetros de Syringe Pump Method						
Flow rate (µL/min)	5					
Syringe Size (µL)	250 µl a 1000 µl					

4. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.

# PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

- 5. Infunda la solución de reserpina de 0,167 pmol/μl mientras optimiza CUR, TEM, GS1, GS2 e ISVF para obtener la máxima intensidad y estabilidad de la señal.
- 6. Haga clic en Acquire para comenzar a recopilar datos durante 5 minutos como mínimo.
- 7. Imprima los resultados.
- 8. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones Turbo V<sup>™</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

# Pruebas para la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>

Las pruebas de esta sección son para la fuente de iones NanoSpray III. Consulte el *Manual de instalación* New Objective para obtener información sobre las pruebas de la fuente de iones DPV-450 Digital PicoView<sup>®</sup> Fuente de iones Nanospray para los espectrómetros de masas SCIEX.

Ejecute estas pruebas en cualquiera de las situaciones siguientes:

- Cuando se instala una nueva fuente de iones.
- Después de una operación importante de mantenimiento de la fuente de iones.
- Cuando sea necesario evaluar el rendimiento de la fuente de iones, antes de empezar un proyecto o como parte de un procedimiento de funcionamiento estándar.



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Utilice la fuente de iones solo si dispone de los conocimientos y la formación adecuados para utilizar, contener y evacuar los materiales tóxicos o nocivos que se emplean con la fuente de iones.



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. No utilice nunca la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> sin el iluminador, la cámara, el tope y las cubiertas bien instalados. No toque nunca la placa de chapa ni deje que la punta de emisión entre en contacto con esta. Cuando el espectrómetro de masas está operativo y la fuente de iones instalada, hay alta tensión en la placa de chapa, incluso aunque se aleje la unidad de posicionamiento X-Y-Z de la interfaz.



¡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 hojas de datos de seguridad para conocer las instrucciones específicas. Compruebe que el sistema se encuentre en modo 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.

# Preparación para la prueba



¡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 modo Standby antes de ajustar el tubo de muestra u otros equipos cerca de la fuente de iones.

- Cuando instale una fuente de iones nueva, asegúrese de que el espectrómetro de masas funciona según las especificaciones de la fuente de iones existente.
- Instale la fuente de iones en el espectrómetro de masas.
- Asegúrese de que la fuente de iones esté completamente optimizada. Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.
- Consulte todas las hojas de datos de seguridad aplicables para tomar las precauciones necesarias antes de manipular soluciones químicas o disolventes.



Figura 5-1 Flujo de trabajo de una prueba

# Preparación de la dilución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B

## Materiales necesarios

- [Glu1]-fibrinopéptido B, incluido en el juego de calibración de péptidos LC/MS (referencia 4465867)
- Diluyente estándar, incluido en el juego de calibración de péptidos LC/MS
- Guantes no empolvados (se recomienda que sean de nitrilo o neopreno)
- Gafas de seguridad.
- Bata de laboratorio

Para la lista de masas de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B, consulte Masas de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B.

Nota: Prepare siempre la dilución justo antes de realizar la prueba.

**Nota:** El [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B puede quedarse alojado en el tabique de goma del vial. Golpee suavemente o sacuda antes de abrir el vial. Acto seguido, saque parcialmente el tabique para revelar una ranura. Añada el disolvente de dilución a través de la ranura. A continuación, empuje el tabique de nuevo a su sitio y mezcle bien para disolver.

## PRECAUCIÓN: posible resultado erróneo. No utilice soluciones caducadas.

- Añada 900 μl de diluyente estándar (ácido fórmico al 0,1 %, acetonitrilo al 10 %) al vial de vidrio ámbar que contiene 0,1 mg de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B.
- 2. Tape bien el vial, agítelo y, a continuación, agite vorticialmente durante al menos 2 minutos, asegurándose de que el péptido se ha disuelto completamente.

**Nota:** La concentración de péptido puede variar dependiendo del contenido de péptido total y de la pureza del péptido de la solución estándar. Consulte el certificado de análisis suministrado por el proveedor. Al 100 % de pureza, 0,1 mg de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B disuelto como se describe en los pasos anteriores produce una solución madre con una concentración de aproximadamente 66,67 pmol/µl.

- 3. Haga alícuotas de la solución madre en volúmenes de 50 µl en tubos limpios. Congele las alícuotas no utilizadas a -20 °C para su uso posterior.
- 4. Ponga 50 μl de la solución madre en un tubo limpio y luego añada 450 μl de diluyente estándar.
- 5. Agite vorticialmente el tubo durante 30 segundos.

Esta es una dilución al 1:10, que proporciona 500 µl de una solución de 6,7 pmol/µl.

- 6. Ponga 50 μl de la solución de 6,7 pmol/μl en otro tubo limpio.
- 7. Añada 450 µl de diluyente estándar.

8. Agite vorticialmente el tubo durante 30 segundos.

Esta es una dilución al 1:10, que proporciona 500 µl de una solución de 667 fmol/µl.

- 9. Ponga 50 µl de la solución de 667 fmol/µl en otro tubo limpio.
- 10. Añada 450 µl de diluyente estándar.
- 11. Agite vorticialmente el tubo durante 30 segundos.

Esta es una dilución al 1:10, que proporciona 500  $\mu$ l de la solución final de 66,7 fmol/ $\mu$ l, para usarse en la prueba de infusión.

# Prueba para la fuente de iones en sistemas TripleTOF<sup>®</sup>



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. No utilice nunca la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> sin el iluminador, la cámara, el tope y las cubiertas bien instalados. No toque nunca la placa de chapa ni deje que la punta de emisión entre en contacto con esta. Cuando el espectrómetro de masas está operativo y la fuente de iones instalada, hay alta tensión en la placa de chapa, incluso aunque se aleje la unidad de posicionamiento X-Y-Z de la interfaz.



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. No toque el riel de alta tensión ni la punta de emisión.

Consulte la Figura 5-1

Para los sistemas TripleTOF<sup>®</sup>

- Preparación de la dilución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B
- Prueba y calibración en modo TOF MS
- Prueba y calibración en modo Product Ion

Para los sistemas TripleTOF<sup>®</sup> 5600/5600+ y 6600/6600+, realice las siguientes tareas:

- Preparación de la dilución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B
- Prueba y calibración en modo TOF MS
- Prueba y calibración en modo Product Ion (High Sensitivity) (solo sistemas 5600/5600+ y 6600/6600+)
- Prueba y calibración en modo Product Ion. Esta prueba se realiza en modo High Resolution.

## Materiales necesarios

- Dilución de [Glu1]-fibrinopéptido B. Consulte Preparación de la dilución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B.
- Jeringuilla de 100 μl (1,46 mm de DI) o equivalente para una infusión con la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>
- (Opcional) Jeringuilla de 1 ml (4,61 mm de Dl) o equivalente para una infusión con la fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>
- Guantes no empolvados (se recomienda que sean de nitrilo o neopreno)
- Gafas de seguridad.
- Bata de laboratorio

# Prueba y calibración en modo TOF MS

# (Opcional) Realización de la prueba TOF MS con la fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>

Este procedimiento confirma la integridad de la dilución.

**Nota:** Antes de llenar la jeringa con la solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B, lávela tres veces con la solución de lavado. A continuación, conecte la jeringa al tubo adecuado y lávela de nuevo antes de conectarla a la unión del riel de alta tensión. A continuación, enjuague los tubos con solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B.

- 1. Instale la fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup> en el espectrómetro de masas. Consulte la *Guía del operador de la fuente de iones DuoSpray*<sup>™</sup>.
- 2. Con la jeringa de 1 ml, introduzca la solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B con un caudal de 5 µl/min.
- 3. En el software Analyst<sup>®</sup> TF, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 4. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

## Tabla 5-1 Parámetros para la prueba TOF MS con la fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>

Parámetro	Valor					
Parámetros de MS						
Scan type	TOF MS					
Accumulation time (sec)						
Polarity	Positivo					
TOF masses (Da)	400 a 1800					
Duration (min)	0,5					
Parámetros de Advanced MS						
МСА	Apagado					

# Tabla 5-1 Parámetros para la prueba TOF MS con la fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup> (continuación)

Parámetro	Valor				
Auto Adjust with mass	Activado				
Q1 Transmission Window	Predeterminado (con ajuste automático)				
Pulsar Frequency	Predeterminado (con ajuste automático)				
Time bins to sum	4				
Settling time	Predeterminado				
Pause between mass ranges	Predeterminado				
Parámetros de Source/Gas	·				
lon Source Gas 1 (GS1)	20				
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20				
Temperature (TEM) (°C)	0				
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	5500				
Parámetros de Compound					
Declustering Potential (DP) 100					
Parámetros de Syringe Pump Method					
Flow rate (µL/min)	5				
Syringe Size	1 ml (4,61 mm i.d.)				

5. Guarde el nuevo método.

**¡Sugerencia!** Guarde los métodos utilizados para las pruebas de la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> en una carpeta distinta, denominada NanoSpray Installation <fecha>.

- 6. Haga clic en **Acquire** para adquirir 30 segundos de datos.
- 7. Resalte 30 segundos en la ventana **TIC of +TOF MS** en el panel inferior izquierdo y, a continuación, haga clic para ver un espectro promedio.
- 8. Haga clic con el botón secundario en el espectro promedio, que aparece en el panel inferior y, a continuación, en **List Data**. A continuación, registre la intensidad y resolución del centroide.
- 9. Confirme que la intensidad y la resolución del centroide sean aceptables. Consulte Registro de datos: fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>.

**Pauta**: La intensidad y la resolución del centroide obtenidas con la fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup> deben cumplir las especificaciones indicadas para la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>. En caso contrario, prepare una nueva dilución.

# Realización de la prueba TOF MS con la fuente de iones NanoSpray®

**Nota:** Antes de llenar la jeringa con la solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B, lávela tres veces con la solución de lavado. A continuación, conecte la jeringa al tubo adecuado y lávela de nuevo antes de conectarla a la unión del riel de alta tensión. A continuación, enjuague los tubos con solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B.

- 1. Instale la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> en el espectrómetro de masas. Consulte la *Guía del operador de la fuente de iones NanoSpray*<sup>®</sup>.
- 2. Prepare el cabezal de NanoSpray III. Consulte la *Guía del operador de la fuente de iones NanoSpray*<sup>®</sup>.
- 3. Con la jeringa de 100 µl, infunda la solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B con un caudal de 0,5 µl/min.
- 4. En el software Analyst<sup>®</sup> TF, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 5. Si se realiza el procedimiento opcional, (Opcional) Realización de la prueba TOF MS con la fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>, abra el método y, a continuación, ajuste los parámetros tal y como se muestra en la table siguiente. Si no se realiza el procedimiento, cree un método con estos parámetros.

Parámetro	Valor						
Parámetros de MS							
Scan type	TOF MS						
Accumulation time (sec)	1,0						
Polarity	Positivo						
TOF masses (Da)         400 a 1800							
Duration (min)	0,5						
Parámetros de Advanced MS							
МСА	Apagado						
Auto Adjust with mass	Activado						
Q1 Transmission Window	Predeterminado (con ajuste automático)						
Pulsar Frequency	Predeterminado (con ajuste automático)						
Time bins to sum	4						
Settling time	Predeterminado						
Pause between mass ranges Predeterminado							
Parámetros de Source/Gas							
lon Source Gas 1 (GS1)	3						
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	25						

## Tabla 5-2 Parámetros del método TOF MS con la fuente de iones NanoSpray®

# Tabla 5-2 Parámetros del método TOF MS con la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> (continuación)

Parámetro	Valor					
Interface Heater Temperature (IHT) (°C)	75					
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	2100					
Parámetros de Compound						
Declustering Potential (DP) 100						
Parámetros de Syringe Pump Method						
Flow rate (µL/min)	0,5					
Syringe Size	100 Gastight (1,46 mm)					

6. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No deje que la punta de emisión entre en contacto con la placa de chapa. Utilice la perilla de ajuste fino del eje Z para ajustar la posición del pulverizador y evitar daños en la punta de emisión.

PRECAUCIÓN: Posible contaminación del sistema. No introduzca el extremo de la punta de emisión en la abertura de la placa de chapa. Asegúrese de que la punta de emisión esté, como mínimo, a una distancia de entre 2 mm y 5 mm fuera de la abertura. Rociar demasiado cerca de la abertura puede causar la contaminación del espectrómetro de masas.

- 7. Ajuste la posición del cabezal pulverizador en relación con la abertura de la placa de chapa para optimizar la intensidad de señal. Registre los valores XYZ para su uso futuro.
- 8. Ajuste **ISVF** en incrementos de 100 V para obtener la mejor señal y relación señal/ruido.

**Nota:** Si la tensión de IonSpray<sup>™</sup> es demasiado alta, podría producirse una descarga de corona. Esto es visible como un resplandor azul en la punta de la sonda. Una descarga de corona producirá una reducción de la sensibilidad y la estabilidad de la señal.

9. Aumente **GS1** hasta que la señal comience a disminuir y, a continuación, reduzca **GS1** hasta que la señal alcance su máximo valor.

**GS1** normalmente se optimiza entre 3 y 10. Si **GS1** está fuera del intervalo, la protrusión de la punta es incorrecta (entre 1 y 2 mm) o puede que haya que cambiar la punta.

**Nota:** El parámetro GS1 se puede optimizar a cero.

10. Aumente **CUR** hasta que la señal comience a disminuir y, a continuación, reduzca **CUR** hasta que la señal alcance su máximo valor.

**Nota:** Para evitar la contaminación, utilice el valor de CUR más alto posible sin sacrificar sensibilidad. No configure un valor de CUR por debajo de 20. Esto ayuda a evitar la penetración del flujo de Curtain Gas<sup>™</sup> que puede producir una señal ruidosa, evitar la contaminación de la abertura y aumentar la relación señal/ruido general.

- 11. Si ha movido el cabezal de pulverización para optimizar la intensidad de la señal, ajuste la posición del iluminador según sea necesario.
- 12. Guarde el nuevo método.

**¡Sugerencia!** Guarde los métodos utilizados para las pruebas de la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> en una carpeta distinta, denominada NanoSpray Installation <fecha>.

- 13. Ejecute el método durante al menos 20 minutos. Supervise la estabilidad de la pulverización. Si la pulverización es estable, solo se observan fluctuaciones mínimas en el TIC.
- 14. Cuando la pulverización se haya optimizado y estabilizado, haga clic en **Acquire** y adquiera 30 segundos de datos de análisis.
- 15. Resalte 30 segundos en la ventana **TIC of +TOF MS** en el panel inferior izquierdo y, a continuación, haga clic para ver un espectro promedio.
- 16. Haga clic con el botón secundario en el espectro promedio, que aparece en el panel inferior y, a continuación, en **List Data**. Registre la intensidad y resolución del centroide.
- 17. Confirme que la intensidad y la resolución del centroide sean aceptables. Consulte la Figura 5-2 y Registro de datos: fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>.

#### Figura 5-2 Espectros de muestra: análisis TOF MS de Glu-fibrinopéptido B, sistema TripleTOF 5600



Si los resultados no son aceptables, consulte Consejos de solución de problemas.

18. Imprima una copia de los resultados y registre la intensidad y resolución del centroide en el registro de datos.

# Actualización de la tabla de referencia de calibración para [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B

- 1. En el software Analyst<sup>®</sup> TF, en el modo **Tune and Calibrate**, haga clic en **Tools > Settings > Tuning Options.**
- 2. En la pestaña **Calibration**, haga clic en **Reference**.
- 3. En Reference Table Editor, en el campo Name, seleccione Glu-fibrinopeptide B.
- 4. En la tabla de **Reference Ions for TOF MS Calibration** (en el lado izquierdo), añada las masas que se muestran en la Figura 5-3. Para ver la lista de masas de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B, consulte Masas de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B.

ere	nce Ions	for TOF MS Calibrat	ion:						Refere	ence Ions	for MS/MS Calibrat	ion:
								_	(Produc	t of 785.8	4210 Da)	
	Use	Compound Name	Precursor m/z (Da)	Use for MS/MS	CE for MS/MS	DP for MS/MS	Retention Time (min)	<u>^</u>		Use	Fragment Name	Fragment m/z (Da)
	ম	y4	480.25650	Г	45.000	100.000	0.00		1	ম	y1	175.11900
	ঘ	у6	684.34640	Г	45.000	100.000	0.00	1	2	ম	у3	333.18810
	ঘ	Glu-fibrinopeptide	785.84210	ঘ	45.000	100.000	0.00	1	3	<b>N</b>	y4	480.25650
	ঘ	y7	813.38900	Г	45.000	100.000	0.00	1	4	ম	y6	684.34640
	ঘ	y8	942.43160	Г	45.000	100.000	0.00	1	5	ম	Parent	785.84210
	ঘ	y9	1056.47450	Г	45.000	100.000	0.00	1	6	ম	y8	942.43160
	ঘ	y10	1171.50140		45.000	100.000	0.00	1	7	ব	y10	1171.50140
	ঘ	y11	1285.54440	Г	45.000	100.000	0.00	1	8	ব	y11	1285.54440
				Г				1	9			
				Г				1	10			
								1	11			
	Г			Г				1	12			
									13			
		1		Г				$\sim$	14		1	

#### Figura 5-3 Reference Table Editor: Reference Ions for TOF MS Calibration

- 5. Haga clic en **OK**.
- 6. En el cuadro de diálogo **Tuning Options**, haga clic en **OK**.

## Calibración en modo TOF MS

- 1. En el modo **Manual Tune**, asegúrese de que los parámetros estén ajustados de acuerdo con los valores especificados en la Realización de la prueba TOF MS con la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>. Consulte Tabla 5-2.
- 2. En la pestaña **Compound**, configure **Collision Energy (CE)** como **35** V.
- 3. Cuando la pulverización sea estable, haga clic en **Acquire** y adquiera 30 segundos de datos de análisis.
- 4. En la ventana **TIC of +TOF MS** (en el panel inferior izquierdo), resalte 30 segundos de señal TIC para ver un promedio y luego haga doble clic.

- 5. En la nueva ventana que aparece (en la parte inferior de la ventana del software Analyst<sup>®</sup> TF), haga clic con el botón derecho en **Re-Calibrate TOF**.
- 6. En el diálogo TOF Calibration, en la lista Reference Table, seleccione Glu-fibrinopeptide B.
- 7. Compruebe que se hayan identificado las masas experimentales correctas en el espectro de infusión y que coincidan con las masas teóricas de la tabla de referencia.
- 8. Haga clic en el valor **Average Error** que se muestra a la derecha del botón **Calculate New Calibrations**.
- 9. Haga clic en **Calculate New Calibrations** y asegúrese de que el valor **Average Error** se reduzca hasta alcanzar menos de 2 ppm.
- 10. Bajo Calibration Values, haga clic en Calibrate Spectrum.
- 11. Bajo Save Current Calibration, seleccione Set as Instrument Default y Overwrite Current File.
- 12. Haga clic en Entire File.
- 13. Haga clic en **Close**.

# Prueba y calibración en modo Product Ion (High Sensitivity) (solo sistemas 5600/5600+ y 6600/6600+)

# Realización de la prueba en modo Product Ion (High Sensitivity) (solo sistemas 5600/5600+ y 6600/6600+)

- 1. En el software Analyst<sup>®</sup> TF, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 2. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

## Tabla 5-3 Parámetros del método de ion producto

Parámetro	Valor					
Parámetros de MS						
Scan type	Ion producto					
Product of	785,8					
Accumulation time (sec)	1,0					
Polarity	Positivo					
TOF masses (Da)	100 a 1800					
High sensitivity	Activado					
Duration (min)	0,5					
Parámetros de Advanced MS						

Parámetro	Valor						
МСА	Apagado						
Auto Adjust with mass	Activado						
Q1 Transmission windows	Predeterminado (con ajuste automático)						
Pulsar Frequency	Predeterminado (con ajuste automático)						
Time Bins to Sum	4						
Settling time	Predeterminado						
Pause between mass	Predeterminado						
Parámetros de Source/Gas							
lon Source Gas 1 (GS1)	Optimizado						
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	Optimizado						
Interface Heater Temperature (IHT) (°C)	75						
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	Optimizado						
Parámetros de Compound							
Collision Energy (CE) (V)	45 (u optimizado)						
Parámetros de Resolution							
Q1 resolution	Unidad						

Tabla 5-3 Parámetros del método de ion producto (continuación)

**Nota:** La CE normalmente se optimiza entre 40 V y 48 V. Si la CE no se encuentra en este intervalo, el valor del gas CAD puede haberse ajustado demasiado bajo. Si la intensidad del ion precursor a m/z 785,9 no es del 10 % o es inferior a la intensidad original, la interacción de la CE y el gas CAD es incorrecta. Póngase en contacto con el servicio de asistencia técnica de SCIEX para obtener más información.

- 3. Guarde el nuevo método.
- 4. Cuando la pulverización sea estable, haga clic en **Acquire** y adquiera al menos 30 segundos de análisis.
- 5. Resalte 30 segundos en la ventana **TIC of +TOF Product** en el panel inferior izquierdo y, a continuación, haga doble clic para mostrar un espectro promedio.
- 6. Haga clic con el botón secundario en el espectro promedio, que aparece en el panel inferior y, a continuación, en List Data.
- 7. Haga clic en la pestaña Peak List.
- 8. Haga clic con el botón secundario del ratón en la fila del encabezado de la columna y seleccione **Column Options**.

Spectrum List Columns	Baak start (Da)
liv intersite (coo)	Peak start (Da)
M Intensity (cps)	Peak end (Daj
Centroid mass	🔽 Width (Da)
🗆 Charges	Resolution
Peak area	
🗆 Is Mono-Isotopic	🗆 % Centroid
🗆 Intensity sum	☐ Width at 5%
Centroid intensity	Raw Resolution
0	K Cancel

## Figura 5-4 Select Columns for Peak List Dialog

- 9. Seleccione las casillas m/z (Da), Intensity, Centroid mass, Centroid Intensity, Width (Da) y Resolution.
- 10. Haga clic en **OK**.
- 11. Confirme que la intensidad y la resolución del centroide sean aceptables. Consulte la Figura 5-5 y Registro de datos: fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>.



Figura 5-5 Espectros de muestra: prueba de alta sensibilidad de iones producto

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

12. Imprima una copia de los resultados y registre la intensidad y resolución del centroide en el registro de datos.

## Calibración en modo Product Ion (High Sensitivity)

- En el modo Manual Tune, asegúrese de que los parámetros estén ajustados de acuerdo con los valores especificados en la Realización de la prueba en modo Product Ion (High Sensitivity) (solo sistemas 5600/ 5600+ y 6600/6600+). Consulte Tabla 5-3.
- 2. Cuando la pulverización sea estable, haga clic en **Acquire** y adquiera al menos 30 segundos de datos de análisis.
- 3. En la ventana **TIC of +TOF Product** (en el panel inferior izquierdo), resalte 30 segundos de señal TIC para ver un promedio y luego haga doble clic.
- 4. En la nueva ventana que aparece (en la parte inferior de la ventana del Analyst<sup>®</sup> TF), haga clic con el botón derecho en **Re-Calibrate TOF**.
- 5. En el diálogo TOF Calibration, en la lista Reference Table, seleccione Glu-fibrinopeptide B.
- 6. Compruebe que se hayan identificado las masas experimentales correctas en el espectro de infusión y que coincidan con las masas teóricas de la tabla de referencia.
- 7. Seleccione el valor **Average Error** que se muestra a la derecha del botón **Calculate New Calibrations**.

- 8. Haga clic en **Calculate New Calibrations** y asegúrese de que el valor **Average Error** se reduzca hasta alcanzar menos de 2 ppm.
- 9. Bajo Calibration Values, haga clic en Calibrate Spectrum.
- 10. Bajo Save Current Calibration, seleccione Set as Instrument Default y Overwrite Current File.
- 11. Haga clic en **Entire File**.
- 12. Haga clic en **Close**.

# Prueba y calibración en modo Product Ion

Con los sistemas SCIEX TripleTOF<sup>®</sup> 5600/5600+ y 6600/6600+, esta prueba se ejecuta en modo High Resolution (alta resolución).

## Realización de la prueba de ion producto

- 1. En el software Analyst<sup>®</sup> TF, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 2. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

#### Tabla 5-4 Parámetros del método de ion producto

Parámetro	Valor
Parámetros de MS	
Scan type	lon producto
Product of	785,8
Accumulation time (sec)	1,0
Polarity	Positivo
TOF masses (Da)	100 a 1800
High resolution	Activado
(solo sistemas 5600/5600+ y 6600/6600+)	
Duration (min)	0,5
Parámetros de Advanced MS	
МСА	Apagado
Auto Adjust with mass	Activado
Q1 Transmission windows	Predeterminado (con ajuste automático)
Pulsar Frequency	Predeterminado (con ajuste automático)
Time Bins to Sum	4

Tabla 5-4 Parámetros del	método de ion	producto (	continuación)
	metodo de lom	piouucio (	continuation

Parámetro	Valor	
Settling time	Predeterminado	
Pause between mass	Predeterminado	
Parámetros de Source/Gas		
lon Source Gas 1 (GS1)	Optimizado	
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	Optimizado	
Interface Heater Temperature (IHT) (°C)	75	
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	Optimizado	
Parámetros de Compound		
Collision Energy (CE) (V)	45 (u optimizado)	
Parámetros de Resolution		
Q1 resolution	Unidad	

**Nota:** La CE normalmente se optimiza entre 40 V y 48 V. Si la CE no se encuentra en este intervalo, el valor del gas CAD puede haberse ajustado demasiado bajo. Si la intensidad del ion precursor a m/z 785,9 no es del 10 % o es inferior a la intensidad original, la interacción de la CE y el gas CAD es incorrecta. Póngase en contacto con el servicio de asistencia técnica de SCIEX para obtener más información.

- 3. Guarde el nuevo método.
- 4. Cuando la pulverización sea estable, haga clic en **Acquire** y adquiera al menos 30 segundos de análisis.
- 5. Resalte 30 segundos en la ventana **TIC of +TOF Product** en el panel inferior izquierdo y, a continuación, haga doble clic para ver un espectro promedio.
- 6. Haga clic con el botón secundario en el espectro promedio, que aparece en el panel inferior y, a continuación, en List Data.
- 7. Haga clic en la pestaña **Peak List**.
- 8. Confirme que la intensidad y la resolución del centroide sean aceptables. Consulte la Figura 5-6 y Registro de datos: fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>.



Figura 5-6 Espectros de muestra: prueba de ion producto, sistema TripleTOF 5600

Si los resultados no son aceptables, consulte Consejos de solución de problemas.

9. Imprima una copia de los resultados y registre la intensidad y resolución del centroide en el registro de datos.

# Calibración en modo Product Ion

Para los sistemas SCIEX TripleTOF<sup>®</sup> 5600/5600+ y 6600/6600+ este procedimiento calibra en modo High Resolution (alta resolución).

- 1. En el modo **Manual Tune**, asegúrese de que los parámetros estén ajustados de acuerdo con los valores especificados en la Realización de la prueba de ion producto. Consulte Tabla 5-4.
- 2. Cuando la pulverización sea estable, haga clic en **Acquire** y adquiera al menos 30 segundos de datos de análisis.
- 3. En la ventana **TIC of +TOF Product** (en el panel inferior izquierdo), resalte 30 segundos de señal TIC para ver un promedio y luego haga doble clic.
- 4. En la nueva ventana que aparece (en la parte inferior de la ventana del Analyst<sup>®</sup> TF), haga clic con el botón derecho en **Re-Calibrate TOF**.
- 5. En el diálogo TOF Calibration, en la lista Reference Table, seleccione Glu-fibrinopeptide B.
- 6. Compruebe que se hayan identificado las masas experimentales correctas en el espectro de infusión y que coincidan con las masas teóricas de la tabla de referencia.
- 7. Haga clic en el valor **Average Error** que se muestra a la derecha del botón **Calculate New Calibrations** .

- 8. Haga clic en **Calculate New Calibrations** y asegúrese de que el valor **Average Error** se reduzca hasta alcanzar menos de 2 ppm.
- 9. Bajo Calibration Values, haga clic en Calibrate Spectrum.
- 10. Bajo Save Current Calibration, haga clic en Entire File.
- 11. Haga clic en **Close**.

## Recapitulación

**Nota:** El representante del servicio técnico de SCIEX debe enviar por correo electrónico los resultados de la prueba de aceptación posterior a la instalación de NanoSpray<sup>®</sup> a servicedata@sciex.com.

- 1. Limpie a fondo la punta y el conducto de infusión.
- 2. Realice una copia del registro de datos y los resultados de la prueba obtenidos y proporcione al cliente los originales.

# Prueba para la fuente de iones en los sistemas de triple cuadrupolo y QTRAP<sup>®</sup>



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. No toque el riel de alta tensión ni la punta de emisión.



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. No utilice nunca la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> sin el iluminador, la cámara, el tope y las cubiertas bien instalados. No toque nunca la placa de chapa ni deje que la punta de emisión entre en contacto con esta. Cuando el espectrómetro de masas está operativo y la fuente de iones instalada, hay alta tensión en la placa de chapa, incluso aunque se aleje la unidad de posicionamiento X-Y-Z de la interfaz.

Consulte la Figura 5-1

Con los sistemas Triple Quad<sup>™</sup>, salvo los sistemas de la serie 3200, realice las tareas siguientes:

- Preparación de la dilución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B
- Prueba en modo Q1
- Prueba en modo Q3

Con los sistemas QTRAP<sup>®</sup>, salvo los sistemas 3200 QTRAP<sup>®</sup>, realice las tareas siguientes:

- Preparación de la dilución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B
- Prueba en modo Q1
- Prueba en modo Q3

• Prueba y calibración en modo EPI (solo sistemas QTRAP<sup>®</sup> o QTRAP<sup>®</sup> Enabled Triple Quad 5500+)

En el caso de los sistemas API 3200<sup>™</sup> y 3200 QTRAP<sup>®</sup>, consulte Prueba para la fuente de iones en sistemas de la serie 3200.

## Materiales necesarios

- [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B, incluido en el kit de calibración de péptidos LC/MS (referencia 4465867)
- Diluyente estándar
- Jeringuilla de 100 μl (1,46 mm de DI) o equivalente para una infusión con la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>
- (Opcional) Jeringa de 1 ml (4,61 mm de DI) o equivalente para una infusión con la fuente de iones Turbo V<sup>™</sup>
- Guantes no empolvados (se recomienda que sean de nitrilo o neopreno)
- Gafas de seguridad.
- Bata de laboratorio

# Prueba en modo Q1

# (Opcional) Realización de la prueba Q1 con la fuente de iones Turbo V<sup>™</sup>

Este procedimiento confirma la integridad de la dilución.

**Nota:** Antes de llenar la jeringa con la solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B, lávela tres veces con la solución de lavado. A continuación, conecte la jeringa al tubo adecuado y lávela de nuevo antes de conectarla a la unión del riel de alta tensión. A continuación, enjuague los tubos con solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B.

- 1. Instale la fuente de iones Turbo V<sup>™</sup> en el espectrómetro de masas. Consulte la *Guía del operador de la fuente de iones Turbo V<sup>™</sup>*.
- 2. Con la jeringa de 1 ml, introduzca la solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B con un caudal de 5 µl/min.
- 3. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 4. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

## Tabla 5-5 Parámetros para la prueba Q1 con la fuente de iones Turbo V<sup>™</sup>

Parámetro	Valor
Parámetros de MS	
Scan type	Q1 scan
Mass Mode (sistemas de las series 6500 y 6500+)	Masa baja
Polarity	Positivo

Parámetro	Valor
Display masses (Da)	Centro: 785,9
	Ancho: 20
Scan Speed (Da/sec)	10
МСА	Activado
Cycles	10
Parámetros de Source/Gas	
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20
IonSpray Voltage (IS)	5500
lon Source Gas 1 (GS1)	20
Interface Heater (IHT)	No se utiliza
Parámetros de Compound	<b>!</b>
Declustering Potential (DP)	100
Parámetros de Syringe Pump Method	<b>!</b>
Flow rate (µL/min)	5
Syringe Size	1 ml (4,61 mm i.d.)

## Tabla 5-5 Parámetros para la prueba Q1 con la fuente de iones Turbo V<sup>™</sup> (continuación)

5. Guarde el método.

**¡Sugerencia!** Guarde los métodos utilizados para las pruebas de la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> en una carpeta distinta, denominada NanoSpray Installation <fecha>.

- 6. Haga clic en **Acquire** para adquirir 30 segundos de datos.
- 7. Registre la intensidad del pico a m/z 785,8421.
- 8. Repita dos veces más los pasos 6 y 7.
- 9. Obtenga el promedio de los tres análisis.
- 10. Compare la intensidad y la resolución del centroide con las especificaciones de la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> que se muestran en Registro de datos: fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>.

**Pauta**: La intensidad y resolución del centroide obtenidas con la fuente de iones Turbo V deben cumplir las especificaciones indicadas para la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>. En caso contrario, prepare una nueva dilución.

# Realización de la prueba Q1 con la fuente de iones NanoSpray®

**Nota:** Antes de llenar la jeringa con la solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B, lávela tres veces con la solución de lavado. A continuación, conecte la jeringa al tubo adecuado y lávela de nuevo antes de conectarla a la unión del riel de alta tensión. A continuación, enjuague los tubos con solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B.

- 1. Instale la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> en el espectrómetro de masas. Consulte la *Guía del operador de la fuente de iones NanoSpray*<sup>®</sup>.
- 2. Prepare el cabezal NanoSpray<sup>®</sup> III. Consulte la *Guía del operador de la fuente de iones NanoSpray*<sup>®</sup>.
- 3. Con la jeringa de 100 µl, infunda la solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B con un caudal de 0,5 µl/min.
- 4. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 5. Si se ha realizado el procedimiento opcional, (Opcional) Realización de la prueba Q1 con la fuente de iones Turbo V<sup>TM</sup>, abra el método creado y ajuste los parámetros de la forma especificada en la (Opcional) Realización de la prueba Q1 con la fuente de iones Turbo V<sup>TM</sup>. Consulte Tabla 5-5. Si no se ha realizado el procedimiento, cree un método utilizando estos parámetros.

Parámetro	Valor	
Parámetros de MS		
Scan type	Q1 scan	
Mass Mode (sistemas de las series 6500 y 6500+)	Masa baja	
Polarity	Positivo	
Mass Range	400 a 1000	
Scan Speed (Da/sec)	2000	
(sistemas de las series 4500, 5500/5500+ y 6500/ 6500+)		
Scan Time (sec)	3	
(sistemas de la serie 4000)		
МСА	Apagado	
Cycles	<b>Nota</b> : El número de ciclos analizados en caso de que se hayan fijado para el instrumento concreto. Consulte los parámetros anteriores.	
	500 (sistemas de la serie 4000)	
	50 (sistemas de las series 4500, 5500/5500+ y 6500/ 6500+)	
Parámetros de Source/Gas	·	

# Tabla 5-6 Parámetros del método con la fuente de iones NanoSpray®

Parámetro	Valor
CAD Gas	Bajo (sistemas de la serie 4000) Medio (u optimizado) (sistemas de las series 4500, 5500/5500 + y 6500/6500+)
IonSpray Voltage (IS)	2100
lon Source Gas 1 (GS1)	10
Interface Heater Temperature (IHT) (°C)	75
Parámetros de Compound	
Declustering Potential (DP)	70 (sistemas de la serie 4000)
	100 (sistemas de las series 4500, 5500/5500+ y 6500/6500+)
Parámetros del Syringe Pump Method	
Flow rate (µL/min)	0,5
Syringe Size (µL)	100 Gastight (1,46 mm)

Tabla 5-6 Parámetros del método con la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> (continuación)

6. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No deje que la punta de emisión entre en contacto con la placa de chapa. Utilice la perilla de ajuste fino del eje Z para ajustar la posición del pulverizador y evitar daños en la punta de emisión.

PRECAUCIÓN: Posible contaminación del sistema. No introduzca el extremo de la punta de emisión en la abertura de la placa de chapa. Asegúrese de que la punta de emisión esté, como mínimo, a una distancia de entre 2 mm y 5 mm fuera de la abertura. Rociar demasiado cerca de la abertura puede causar la contaminación del espectrómetro de masas.

- 7. Ajuste la posición del cabezal pulverizador en relación con la abertura de la placa de chapa para optimizar la intensidad de señal. Registre los valores XYZ para su uso futuro.
- 8. Ajuste IS en incrementos de 100 V para obtener la mejor señal y relación señal/ruido.

**Nota:** Si la tensión de lonSpray<sup>™</sup> es demasiado alta, podría producirse una descarga de corona. Esto es visible como un resplandor azul en la punta de la sonda. Una descarga de corona producirá una reducción de la sensibilidad y la estabilidad de la señal.

9. Aumente GS1 hasta que la señal comience a disminuir y, a continuación, reduzca GS1 hasta que la señal alcance su máximo valor.

Nota: El parámetro GS1 se puede optimizar a cero.

10. Aumente CUR hasta que la señal comience a disminuir y, a continuación, reduzca CUR hasta que la señal alcance su máximo valor.

**Nota:** Para evitar la contaminación, utilice el valor de CUR más alto posible sin sacrificar sensibilidad. No configure un valor de CUR por debajo de 20. Esto ayuda a evitar la penetración del flujo de Curtain Gas<sup>™</sup> que puede producir una señal ruidosa, evitar la contaminación de la abertura y aumentar la relación señal/ruido general.

- 11. Si ha movido el cabezal de pulverización para optimizar la intensidad de la señal, ajuste la posición del iluminador según sea necesario.
- 12. Guarde el nuevo método.

**¡Sugerencia!** Guarde los métodos utilizados para las pruebas de la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> en una carpeta distinta, denominada NanoSpray Installation <fecha>.

13. Supervise la estabilidad de la pulverización durante 5 minutos. Si la pulverización es estable, solo se observan fluctuaciones mínimas en el TIC.





**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C

- 14. Cuando la pulverización se haya estabilizado, cambie **Scan Speed** a **10**.
- 15. Seleccione **Center/Width** y escriba **785.9** en la columna **Center** y **20** en la columna **Width**.
- 16. Encienda el **MCA**.
- 17. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 18. Registre la intensidad del pico a m/z 785,9.
- 19. Repita dos veces más los pasos 17 y 18.
- 20. Obtenga el promedio de las tres intensidades.
- 21. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

22. Imprima una copia de los resultados y registre la intensidad en el registro de datos.

# Prueba en modo Q3

**Nota:** Antes de llenar la jeringa con la solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B, lávela tres veces con la solución de lavado. A continuación, conecte la jeringa al tubo adecuado y lávela de nuevo antes de conectarla a la unión del riel de alta tensión. A continuación, enjuague los tubos con solución de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B.

- 1. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 2. Abra el método utilizado para la prueba Q1.
- 3. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

Parámetro	Valor	
Parámetros de MS		
Scan type	Q3 scan	
Mass Mode (sistemas de las series 6500/6500+)	Masa baja	
Display masses (Da)	Centro: 785,9 Ancho: 20	
Scan Speed (Da/sec)	10	
МСА	Apagado	
Cycles	10	

## Tabla 5-7 Parámetros del método Q3

Parámetro	Valor
Parámetros de Compound	
Collision Cell Exit Potential (CXP) (V)	15 (u optimizado) (sistemas de la serie 4000)
	30 (u optimizado) (sistemas de las series 4500, 5500/ 5500+ y 6500/6500+)

Tabla 5-7 Parámetros del método Q3 (continuación)

- 4. Guarde el nuevo método.
- 5. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.
- 6. Cuando la pulverización sea estable, encienda el MCA.
- 7. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 8. Registre la intensidad del pico a m/z 785,9.
- 9. Repita dos veces más los pasos 7 y 8.





- 10. Imprima los resultados.
- 11. Obtenga el promedio de las tres intensidades de los iones y, a continuación, registre el resultado en el registro de datos.
- 12. Confirme que la intensidad media sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

# Prueba y calibración en modo EPI (solo sistemas QTRAP<sup>®</sup> o QTRAP<sup>®</sup> Enabled Triple Quad 5500+)

# Realización de la prueba en modo EPI

- 1. Utilizando la jeringa de 100 μl, infunda la solución de [Glu1]-fibrinopéptido B con un caudal de 0,5 μl/min.
- 2. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros como se muestra en la tabla siguiente.

Tabla 5-8 Parámetros del método EP
------------------------------------

Parámetro	Valor
Parámetros de MS	
Scan type	EPI Scan
Mass Mode (sistemas de las series 6500/6500+)	Masa baja
Polarity	Positivo
Mass Range (Da)	100 a 1500 (sistemas de la serie 4000)
	100 a 1000 (sistemas de las series 4500, 5500/ 5500+ y 6500/6500+)
Scan speed (Da/sec)	4000 (sistemas de la serie 4000)
	10 000 (sistemas de las series 4500, 5500/5500+ y 6500/6500+)
Precursors of	785,9
МСА	Encendido
Scans to sum	1
Cycles	10 (sistemas de la serie 4000)
	50 (sistemas de las series 4500, 5500/5500+ y 6500/ 6500+)
Parámetros de Advanced MS	
Fixed LIT Fill Time (ms)	50 (sistemas de la serie 4000)
	10 (sistemas de las series 4500, 5500/5500+ y 6500/ 6500+)
Parámetros de Compound	
Collision Energy (CE) (V)	45 (u optimizado)
Declustering Potential (DP)	70 (u optimizado)

## Tabla 5-8 Parámetros del método EPI (continuación)

Parámetro	Valor		
Parámetros de Syringe Pump Method			
Flow rate (µL/min)	0,5		
Syringe Size (µL)	100 Gastight (1,46 mm)		

**Nota:** La CE normalmente se optimiza entre 40 V y 48 V. Si la CE no se encuentra en este intervalo, el valor del gas CAD puede haberse ajustado demasiado bajo. Si la intensidad del ion precursor a m/z 785,9 no es del 10 % o es inferior a la intensidad original, la interacción de la CE y el gas CAD es incorrecta. Póngase en contacto con el servicio de asistencia técnica de SCIEX para obtener más información.

- 4. Haga clic en **Start** para ejecutar el método.
- 5. Optimice CE para maximizar la intensidad de los fragmentos de la relación *m/z* 480,3, 813,4, 942,4 y 1171,7.
- 6. Guarde el nuevo método.
- 7. Cuando la pulverización sea estable, haga clic en **Acquire** y adquiera los datos.
- 8. Registre las intensidades de los fragmentos con la relación *m/z* 480,3, 813,4, 942,4 y 1171,7.
- 9. Repita dos veces más los pasos 7 y 8.
- 10. Imprima los resultados.
- 11. Obtenga el promedio de las tres intensidades de los iones y, a continuación, registre el resultado en el registro de datos.
- 12. Confirme que las intensidades medias sean aceptables. Consulte Registro de datos: fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>.

Si los resultados no son aceptables, consulte Consejos de solución de problemas.

## Creación de una tabla de referencia para la calibración

Antes de poder calibrar el espectrómetro de masas a partir del espectro de datos, deberá definir la tabla de referencia para el calibrador que se está utilizando. Si no existe una tabla de referencia para [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B, siga estos pasos para crearla.

- 1. Haga clic en **Tools > Settings > Tuning Options.**
- 2. Haga clic en **Reference**.

Figura 5-9 Reference Table Editor

	175 120	intensity (cps)	# charges	Cae Intel	- 6
2	175.120	1.000		V	
2	333.190	1.000		121	
4	684 350	1.000		2	
5	813 390	1.000		<b>v</b>	
6	942 430	1.000	1	2	
7	1285.544	1.000	1		1
8				100	1
9				(177)	1
10				(m)	1
11				(m)	1
12				100	]
13					
14				[17]	- 1

- 3. Cree una tabla de referencia para [Glu1]-fibrinopéptido B con las entradas que se muestran en la figura anterior. Asegúrese de introducir los valores para los fragmentos de masa más bajos y más altos en los campos **Low Mass** y **High Mass**.
- 4. Haga clic en **Update Ref**.
- 5. Haga clic en **Close**.
- 6. Haga clic en **New**.

## Figura 5-10 Cuadro de diálogo Tuning Options

Tuning Options
Calibration Resolution
Standard: GluFb.pce  New
Positive
Reference: Glu Fib pos
Q1 Method: Q1 Pos PPG.dam
Q3 Method: Q3 Pos PPG.dam
LIT Method: GluFib pos EPLdam
Negative
Reference:
Q1 Method:
Q3 Method:
LIT Nethod:
Lodate Std. Delete Std. <u>R</u> eference
Print and Save CK Cancel Heip

- 7. En el campo **Standard**, escriba **GluFib pos**.
- 8. Seleccione la casilla **Positive**.
- 9. En el campo **Q1 Method**, seleccione el método utilizado para la calibración Q1.
- 10. En el campo **Q3 Method**, seleccione el método utilizado para la calibración Q3.
- 11. En el campo LIT Method, seleccione el método creado en Realización de la prueba en modo EPI.
- 12. Haga clic en **Update Std**.
- 13. Haga clic en **OK**.

### Calibración en modo EPI

- 1. En el modo **Manual Tune**, asegúrese de que los parámetros estén ajustados de acuerdo con los valores especificados en la Realización de la prueba en modo EPI. Consulte Tabla 5-8.
- 2. Cuando la pulverización sea estable, haga clic en **Acquire** y adquiera al menos 30 segundos de datos de análisis.
- 3. Haga clic en el panel de espectro EPI.
- 4. Haga clic en el botón Calibrate ( .



Figura 5-12 Cuadro de diálogo LIT Mass Calibration para los sistemas de las series 4500, 5500, 5500+, 6500 y 6500+



- 5. En el campo **Standard**, seleccione el patrón creado en el paso 7 Creación de una tabla de referencia para la calibración (**GluFib pos**).
- 6. Haga clic en **Start**.

Se abre el panel Mass Calibration Report. El gráfico superior muestra el cambio de masa en los iones de calibración desde la última calibración.



Figura 5-13 Informe de calibración de masas

 Si los espectros de datos tienen buen aspecto y los cambios de masa están dentro del intervalo especificado, haga clic en **Replace Calibration** (<sup>122</sup>).

### Figura 5-14 Cuadro de diálogo TuneDir



8. Haga clic en Yes.

Los valores de la nueva calibración aparecen en la parte inferior del panel de informe de resumen de calibración.

**Nota:** Si la masa o intensidad de uno de los iones de fragmentación cambia drásticamente, determine la razón por la que se ha producido el cambio antes de utilizar este ion en la calibración. Haga clic en **No** en el cuadro de diálogo **TuneDir** y, a continuación, compruebe el informe de resumen de calibración. Busque la masa en la columna **Found Mass** y observe la calidad del ion en el espectro de datos sin procesar. Si se ha elegido el ion incorrecto, amplíe o restrinja el **Search Range** en el cuadro de diálogo LIT Mass Calibration. El software utiliza el centroide del pico más intenso en el intervalo de búsqueda de la calibración.

#### Figura 5-15 Informe de resultados de LIT Mass Calibration

LIT Mass Calibration Results for Positive Ions at 4000 daltons per second		
Generated On: August 18, 2003 13:27:59		
Last Calibration: August 18, 2003 13:26:39		
Peak Search Perseneters: Search Respe: 0.250 Threshold: 200.000 Peak Vidth At: 50.000		
Config. table ver.:       03         Firmwore ver.:       Holid00 B4T0001 H01408 B1T0000         Instrument name:       Linear Ion Trap Quadrupole LC/MS/MS Mass Spectrometer         Instrument ID:       OTrap         Nanufacturer:       AS Spice Instruments         Seriel number:       0130000 Instruments         Model Number:       027170c         Operator same:       settince         Gorksteine:       ELOPR04		
Acq. Method: testTupe.dan		
Data Filename: D:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Tuning Cache\MT20030818132658.wiff Standard name: GluFib TIS Reference table name: GluFib cal Spectral information:		
Expected Hass Found Mass Mass Shift Peak Width PV Shift Intensity Change(%) 175.119 175.020 0.099 0.350 0.350 43.65 400.257 480.323 -0.066 0.408 0.292 37.08 013.309 013.420 -0.031 0.496 0.204 21.16 1285.544 1285.584 -0.040 0.576 0.124 24.76		
Average Slope Variations for Active Calibratica Table           Average Slope (DAC/anu):         37.326           Mass         DAC           480.257         12908           420.257         12908           1285.544         42966           1285.544         42966		

9. Calibre las otras dos velocidades de análisis cambiando la velocidad de análisis en el método y repitiendo este procedimiento.

#### Recapitulación

**Nota:** El representante del servicio técnico de SCIEX debe enviar por correo electrónico los resultados de la prueba de aceptación posterior a la instalación de NanoSpray<sup>®</sup> a servicedata@sciex.com.

1. Limpie a fondo la punta y el conducto de infusión.

2. Realice una copia del registro de datos y los resultados de la prueba obtenidos y proporcione al cliente los originales.

# Prueba para la fuente de iones en sistemas de la serie 3200



¡ADVERTENCIA! Peligro por superficies calientes. No toque el riel de alta tensión ni la punta de emisión.



¡ADVERTENCIA! Peligro de descarga eléctrica. No utilice nunca la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> sin el iluminador, la cámara, el tope y las cubiertas bien instalados. No toque nunca la placa de chapa ni deje que la punta de emisión entre en contacto con esta. Cuando el espectrómetro de masas está operativo y la fuente de iones instalada, hay alta tensión en la placa de chapa, incluso aunque se aleje la unidad de posicionamiento X-Y-Z de la interfaz.

Para los sistemas API 3200<sup>™</sup> realice esta prueba:

• Prueba en modos Q1 y MS2

Para los sistemas 3200 QTRAP<sup>®</sup> realice las siguientes pruebas:

- Prueba en modos Q1 y MS2
- Prueba en modo EPI (solo sistemas 3200 QTRAP<sup>®</sup>)

**Nota:** La fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> no es compatible con todos los instrumentos de la serie 3200. Póngase en contacto con un representante de ventas para obtener más información.

#### Materiales necesarios

- 10 pmol/µl de renina, incluida en el juego 2 de productos químicos MS y el juego de PPG en concentraciones elevadas (referencia 5512399)
- Disolvente de dilución
- Jeringa de 100 µl (diámetro interior de 1,46 mm) o equivalente para la infusión
- Guantes no empolvados (se recomienda que sean de nitrilo o neopreno)
- Gafas de seguridad.
- Bata de laboratorio

### Preparación de 2 ml de mezcla de renina (500 fmol/µl)

1. Mezcle 2 ml de disolvente (incluido en el juego) en un vial.

- 2. Quite y deseche 100 µl de disolvente.
- 3. Añada 100 µl de renina 10 pmol/µl al vial.
- 4. Mezcle.

### Prueba en modos Q1 y MS2

- 1. Instale la fuente de iones NanoSpray en el espectrómetro de masas. Consulte la *Guía del operador de la fuente de iones de NanoSpray*<sup>®</sup>.
- 2. Prepare el cabezal de NanoSpray III. Consulte la *Guía del operador de la fuente de iones de NanoSpray*<sup>®</sup>.
- 3. Infunda la mezcla de renina con un caudal de 0,5  $\mu$ l/min.

PRECAUCIÓN: Posible contaminación del sistema. No introduzca el extremo de la punta de emisión en la abertura de la placa de chapa. Asegúrese de que la punta de emisión esté, como mínimo, a una distancia de entre 2 mm y 5 mm fuera de la abertura. Rociar demasiado cerca de la abertura puede causar la contaminación del espectrómetro de masas.

- 4. Ajuste el GS1 hasta que se alcance una pulverización estable. Comience con un valor bajo (2 o 3) y vaya aumentándolo lentamente, hasta que la pulverización sea estable y no haya picos de ruido de anchura cero. La pulverización puede tardar algunos minutos en estabilizarse.
- 5. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 6. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros del método como se muestra en la table siguiente.

Parámetro	Valor	
Parámetros de MS Method		
Scan type	Q1 MS (Q1)	
Mass range	100 a 1200	
Parámetros de Advanced MS		
Step size (Da)	0,1	
Parámetros de Source/Gas		
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	20	
IonSpray Voltage (IS)	2100	
Ion Source Gas 1 (GS1)	3	
Interface Heater Temperature (IHT) (°C)	75	

### Tabla 5-9 Parámetros del método Q1

### Tabla 5-9 Parámetros del método Q1 (continuación)

Parámetro	Valor
Parámetros de Compound	
Declustering Potential (DP)	70 (u optimizado)

7. Ejecute el método.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No deje que la punta de emisión entre en contacto con la placa de chapa. Utilice la perilla de ajuste fino del eje Z para ajustar la posición del pulverizador y evitar daños en la punta de emisión.

PRECAUCIÓN: Posible contaminación del sistema. No introduzca el extremo de la punta de emisión en la abertura de la placa de chapa. Asegúrese de que la punta de emisión esté, como mínimo, a una distancia de entre 2 mm y 5 mm fuera de la abertura. Rociar demasiado cerca de la abertura puede causar la contaminación del espectrómetro de masas.

- 8. Ajuste la posición del cabezal pulverizador en relación con la abertura de la placa de chapa para optimizar la intensidad de señal. Registre los valores XYZ para su uso futuro.
- 9. Ajuste IS en incrementos de 100 V hasta obtener la mejor señal y relación señal/ruido.

**Nota:** Si la tensión de lonSpray<sup>™</sup> es demasiado alta, podría producirse una descarga de corona. Esto es visible como un resplandor azul en la punta de la sonda. Una descarga de corona producirá una reducción de la sensibilidad y la estabilidad de la señal.

10. Aumente GS2 hasta que la señal comience a disminuir y, a continuación, reduzca GS1 hasta que la señal alcance su máximo valor.

Nota: El parámetro GS1 se puede optimizar a cero.

11. Aumente CUR hasta que la señal comience a disminuir y, a continuación, reduzca CUR hasta que la señal alcance su máximo valor.

**Nota:** Para evitar la contaminación, utilice el valor de CUR más alto posible sin sacrificar sensibilidad. No configure un valor de CUR por debajo de 20. Esto ayuda a evitar la penetración del flujo de Curtain Gas<sup>™</sup> que puede producir una señal ruidosa, evitar la contaminación de la abertura y aumentar la relación señal/ruido general.

- 12. Imprima una copia de los resultados y guarde el método de adquisición de Q1 optimizado.
- 13. Defina Product ion (MS2) como Scan type y defina 587 como Product Of.
- 14. Ajuste CAD en Medium (6).

- 15. Ajuste **CE** para optimizar la intensidad de los iones de fragmentación a *m*/*z* 136 y 784.
- 16. Imprima una copia de los resultados y guarde el método **Product Ion** optimizado.
- 17. Compruebe que la intensidad en el modo MS2 cumpla las especificaciones de Registro de datos: fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>.

Si los resultados no son aceptables, consulte Consejos de solución de problemas.

18. Registre los resultados en el registro de datos.

### Prueba en modo EPI (solo sistemas 3200 QTRAP<sup>®</sup>)

1. Infunda la mezcla de renina con un caudal de 0,5 µl/min.

PRECAUCIÓN: Posible contaminación del sistema. No introduzca el extremo de la punta de emisión en la abertura de la placa de chapa. Asegúrese de que la punta de emisión esté, como mínimo, a una distancia de entre 2 mm y 5 mm fuera de la abertura. Rociar demasiado cerca de la abertura puede causar la contaminación del espectrómetro de masas.

- 2. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 3. Abra el método Q1 optimizado guardado en el paso 12 Prueba en modos Q1 y MS2.
- 4. Ajuste los parámetros del método tal y como se muestra en la tabla siguiente.

### Tabla 5-10 Parámetros del método EPI

Parámetro	Valor	
Parámetros de MS		
Scan type	EPI	
Mass range (Da)	100 a 1200	
Product Of (Da)	587,4	
Duration (sec)	120	
Parámetros de Advanced MS		
Fixed LIT fill time (ms)	20	
Q0 trapping	Apagado	
Q3 entry barrier	8	
Parámetros de Source/Gas		
Curtain Gas <sup>™</sup> flow (CUR)	Optimizado	
Collision Gas (CAD)	Alto	

Parámetro	Valor	
IonSpray Voltage (IS)	Optimizado	
Temperature (TEM) (°C)	150	
Ion Source Gas 1 (GSI)	Optimizado	
lon Source Gas 2 (GS2)	0	
Interface Heater Temperature (IHT)	Encendido	
Parámetros de Compound		
Declustering Potential (DP)	80	
Collision Energy (CE) (V)	45 (u optimizado)	
Collision Energy Spread (CES)	0	
Parámetros de Resolution		
Q1 resolution	Baja	

Tabla 5-10 Parámetros del método EPI (continuación)

- 5. Ejecute el método.
- 6. Ajuste **CE** para optimizar la intensidad de los picos a 136, 647, 784 y 1028.
- 7. Imprima una copia de los resultados y guarde el método EPI optimizado.
- 8. Compruebe que la intensidad cumpla las especificaciones de Registro de datos: fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

9. Revise la copia impresa de los resultados y registre los resultados en el registro de datos.

### Recapitulación

**Nota:** El representante del servicio técnico de SCIEX debe enviar por correo electrónico los resultados de la prueba de aceptación posterior a la instalación de NanoSpray<sup>®</sup> a servicedata@sciex.com.

- 1. Limpie a fondo la punta y el conducto de infusión.
- 2. Realice una copia del registro de datos y los resultados de la prueba obtenidos y proporcione al cliente los originales.

## Pruebas para la fuente de iones PhotoSpray<sup>®</sup>

Ejecute estas pruebas en cualquiera de las situaciones siguientes:

- Cuando se instala una nueva fuente de iones.
- Después de una operación importante de mantenimiento de la fuente de iones.
- Cuando sea necesario evaluar el rendimiento de la fuente de iones, antes de empezar un proyecto o como parte de un procedimiento de funcionamiento estándar.



¡ADVERTENCIA! Peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Utilice la fuente de iones solo si dispone de los conocimientos y la formación adecuados para utilizar, contener y evacuar los materiales tóxicos o nocivos que se emplean con la fuente de iones.



¡ADVERTENCIA! Riesgo de perforación, peligro de radiación ionizante, riesgo biológico o peligro de toxicidad química. Deje de usar la fuente de iones si su 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.



¡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 hojas de datos de seguridad para conocer las instrucciones específicas. Compruebe que el sistema se encuentre en modo 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.

### Materiales necesarios

- Metanol de grado MS
- Agua desionizada de grado HPLC
- Disolvente de fase móvil: solución 70:30 de acetonitrilo:agua
- Dopante: tolueno (grado HPLC) infundido a entre 100 y 150  $\mu$ l/min. El dopante debe infundirse con una bomba de HPLC independiente
- Solución de 0,0167 pmol/µl de reserpina previamente diluida, incluida en el juego de productos químicos de patrones SCIEX (referencia 4406127)
- Bomba de HPLC (para fase móvil)
- Bomba de HPLC para infusión de dopante.
- Inyector manual (8125 Rheodyne o similar) con un bucle de 5  $\mu l$  o una configuración del automuestreador para inyecciones de 5  $\mu l$
- Tubo PEEK de 1/16 pulgadas de diámetro exterior (DE), 0,005 pulgadas de diámetro interior (DI)
- Jeringa de 250 µl a 1000 µl
- Guantes no empolvados (se recomienda que sean de nitrilo o neopreno)
- Gafas de seguridad.
- Bata de laboratorio

**Nota:** Todas las soluciones de prueba se deben conservar refrigeradas. Si se dejan fuera del refrigerador durante más de 48 horas, deséchelas y utilice soluciones nuevas.

PRECAUCIÓN: posible resultado erróneo. No utilice soluciones caducadas.

## Preparación para la prueba



¡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 modo Standby antes de ajustar el tubo de muestra u otros equipos cerca de la fuente de iones.

- Cuando instale una fuente de iones nueva, asegúrese de que el espectrómetro de masas funciona según las especificaciones de la fuente de iones existente.
- Instale la fuente de iones en el espectrómetro de masas.
- Asegúrese de que la fuente de iones esté completamente optimizada. Consulte la *Guía del operador* de la fuente de iones.

• Consulte todas las hojas de datos de seguridad aplicables para tomar las precauciones necesarias antes de manipular soluciones químicas o disolventes.

Nota: Independientemente de la bomba utilizada, hay una contrapresión notable en el conducto del dopante.

### Prueba para la fuente de iones



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

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. No introduzca ningún flujo de disolvente antes de haber comprobado que la fuente de iones ha alcanzado la temperatura adecuada.

PRECAUCIÓN: Posibles daños al sistema. Optimice con el valor más alto posible para el caudal de Curtain Gas<sup>™</sup> para evitar contaminar el espectrómetro de masas.

**Nota:** La tensión de transferencia de iones óptimo depende de la altura de la lámpara de UV. Solo hay una tensión de transferencia de iones óptimo para cada altura de la lámpara UV, y solo hay una altura de la lámpara UV óptima para cada tensión de transferencia de iones. Si el usuario cambia la altura de la lámpara UV, optimice la tensión de transferencia de iones con cada nuevo ajuste de altura, para converger en el mejor ajuste de altura de la lámpara UV y de tensión de transferencia de iones.

- 1. En el software Analyst<sup>®</sup>, en el modo **Tune and Calibrate**, haga doble clic en **Manual Tune**.
- 2. Abra un método previamente optimizado o ajuste los parámetros como se muestra en la tabla siguiente.

#### Tabla 6-1 Parámetros del método

Parámetro	Valor	
Parámetros de Probe		
Sample concentration	10 pg/µl	
Mobile phase	70:30 ACN:H <sub>2</sub> O	
Flow rate (µL/min)	500	
Injection volume (µL)	25 (sobrellenar el bucle)	
Sample loop (µL)	5	
Ionization mode	Positivo	
Probe vertical micrometer setting	2	

Parámetro	Valor	
Probe horizontal micrometer setting	5	
UV Lamp vertical micrometer setting	5	
Dopant	Caudal de 100 µl/min a 150 µl/min	
Parámetros de MS	·	
Scan mode	MRM	
Q1 mass (Da)	609,3 (o masa exacta)	
Q3 mass (Da)	195,1 (o masa exacta)	
Parámetros de Source/Gas		
Curtain Gas <sup>™</sup> (CUR)	30 (u optimizado)	
Collision Gas (CAD)	Medio	
lon Transfer Voltage (IS)	800 (u optimizado)	
Temperature (TEM)	400 (u optimizado)	
lon Source Gas 1 (GS1)	60 (u optimizado)	
lon Source Gas 2 (GS2)	20 (u optimizado)	
Parámetros de Compound		
Declustering Potential (DP)	100 (u optimizado)	
Collision Energy (CE)	45 (u optimizado)	
Collision Exit Potential (CXP)	Optimizado	
Parámetros de resolución		
Resolution	Unidad/Unidad	
Los valores iniciales obtenidos durante la validación del instrumento pueden diferir de los que figuran en esta tabla.		

Tabla 6-1 Parámetros del método (continuación)

- 3. Haga clic en **Acquire** para comenzar a recopilar datos.
- 4. Introduzca una solución de acetonitrilo-agua 70:30 con un caudal de 500 µl/min por la entrada de muestras.
- 5. Introduzca el dopante con un caudal de 75  $\mu$ l/min por la entrada de dopantes.
- 6. Sobrellene el bucle de muestra con la solución de prueba.
- 7. Inyecte 10 pg/µl de solución de prueba de reserpina mientras supervisa la transición 609/195 de la monitorización de reacciones múltiples (MRM).
- 8. Optimice los parámetros específicos del compuesto.
- 9. Optimice las posiciones de la sonda y la lámpara de luz ultravioleta.

- 10. Optimice los parámetros de la fuente de iones.
- 11. Imprima los resultados.
- 12. Revise la copia impresa de los resultados.
- 13. Confirme que la intensidad media de las cinco inyecciones sea aceptable. Consulte Registro de datos: fuente de iones PhotoSpray<sup>®</sup>.

Si el resultado no es aceptable, consulte Consejos de solución de problemas.

## Consejos de solución de problemas

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
Sin señal	<ol> <li>No se está generando ninguna pulverización.</li> <li>(Fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>) La posición del cabezal de la fuente de iones es incorrecta.</li> </ol>	<ol> <li>Consulte la <i>Guía del operador</i> de la fuente de iones para resolver problemas relacionados con la pulverización.</li> <li>Utilice las perillas de ajuste de los ejes X-Y-Z para ajustar la posición de la punta de emisión.</li> </ol>
Picos de LC o bajadas inesperadamente anchos	(Fuente de iones NanoSpray <sup>®</sup> ) La unión tiene un volumen muerto.	<ul> <li>Asegúrese de que todos los tubos poscolumna tengan un diámetro interior de un máximo de 25 micrones.</li> <li>Compruebe todas las conexiones para asegurarse de que estén bien encajadas.</li> <li>Todos los cortes deben estar al mismo nivel.</li> <li>Sustituya la punta de emisión.</li> </ul>
Baja intensidad de pico	<ol> <li>La posición de la fuente, la protrusión de la punta o los valores de los parámetros de la fuente son incorrectos.</li> <li>La jeringa o el conducto de la muestra tienen una fuga.</li> <li>Q1 o Q3 no están calibrados.</li> <li>La muestra se ha degradado o tiene una concentración baja.</li> <li>Existe un problema con el sistema de LC.</li> </ol>	<ol> <li>Optimice la fuente.</li> <li>Compruebe que no haya fugas.</li> <li>Utilice el asistente de Instrument Optimization para calibrar Q1 o Q3.</li> <li>Compruebe la concentración de la muestra. Utilice una nueva muestra o una muestra que haya sido congelada.</li> <li>Resuelva el problema del sistema de LC.</li> </ol>
Escasa resolución	El instrumento no está optimizado.	Optimice el instrumento.

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
Sensibilidad no adecuada	<ol> <li>Los componentes de la interfaz (parte delantera) están sucios.</li> <li>En la región del analizador, hay vapor del disolvente y otros compuestos desconocidos.</li> <li>La muestra no se había preparado correctamente o se ha degradado.</li> <li>Hay fugas en la entrada de muestra.</li> <li>La fuente de iones está defectuosa.</li> </ol>	<ol> <li>Limpie los componentes de la interfaz y vuelva a colocar la fuente de iones.</li> <li>Optimice el flujo de Curtain Gas<sup>™</sup>.</li> <li>Confirme que la muestra estaba preparada correctamente.</li> <li>Compruebe que los adaptadores están apretados y reemplácelos si las fugas continúan. No apriete los adaptadores demasiado.</li> <li>Instale y optimice una fuente de iones alternativa. Si el problema no se soluciona, póngase en contacto con un representante del servicio técnico.</li> </ol>
Señal baja	<ol> <li>El potencial de desagrupación (DP) no está optimizado.</li> <li>El electrodo puede estar sucio u obstruido.</li> </ol>	<ol> <li>Optimice la desagrupación para obtener la mejor señal o relación señal/ruido. Los valores óptimos pueden diferir de los correspondientes a otras fuentes de iones.</li> <li>Limpie el electrodo.</li> </ol>
Relación señal/ruido baja	<ol> <li>La posición de la fuente, la protrusión de la punta o los valores de los parámetros de la fuente son incorrectos.</li> <li>La jeringa o el conducto de la muestra tienen una fuga.</li> <li>El diluyente está contaminado.</li> </ol>	<ol> <li>Optimice la fuente.</li> <li>Compruebe si existen fugas.</li> <li>Utilice diluyente de preparación reciente elaborado con reactivos de grado MS (0,1 % de ácido fórmico, 10 % de acetonitrilo).</li> </ol>

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
Fondo elevado de fondo elevado ?	<ol> <li>El diluyente está contaminado.</li> <li>La jeringa o el conducto de la muestra están sucios.</li> </ol>	<ol> <li>Utilice diluyente de preparación reciente elaborado con reactivos de grado MS (0,1 % de ácido fórmico, 10 % de acetonitrilo).</li> </ol>
	3. Hay residuos en la interfaz.	2. Limpie o sustituya la jeringa o el conducto de la muestra.
	4. La temperatura (TEM) es demasiado alta.	3. Limpie la placa de chapa y la placa del
5	5. El caudal de gas del calentador (GS2) es demasiado alto.	personal de mantenimiento cualificado del espectrómetro de masas). Si es necesario, hornee la
	6. La fuente de iones está contaminada.	limpie Q0 o la guía de iones QJet <sup>®</sup> .
		4. Optimice la temperatura.
		5. Optimice el flujo de gas del calentador.
		<ol> <li>Limpie o sustituya los componentes de la fuente de iones y acondicione la fuente y la parte delantera:</li> </ol>
		a. Mueva la sonda APCI o TIS a la posición más alejada de la abertura (vertical y horizontalmente).
		<ul> <li>b. Infunda o inyecte metanol:agua</li> <li>(50:50) con un caudal de bomba de 1 ml/min.</li> </ul>
		c. En el software Analyst <sup>®</sup> /Analyst <sup>®</sup> TF, ajuste TEM a 650, GS1 a 60 y GS2 a 60.
		d. Defina el flujo de Curtain Gas en 45 o 50.
		<ul> <li>Ejecútelo durante 2 horas como mínimo o preferiblemente por la noche para obtener resultados óptimos.</li> </ul>
		<ol> <li>Ajuste la posición de la punta de emisión.</li> </ol>

Síntoma	Posible causa	Acción correctiva
Durante la prueba, la fuente de iones no cumple las especificaciones	El espectrómetro de masas no ha superado las pruebas de instalación.	Realice pruebas de instalación en el espectrómetro de masas con la fuente predeterminada.
No se ha alcanzado la temperatura o es demasiado alta o inestable	El calentador de la interfaz está defectuoso.	Abra el cuadro de diálogo <b>Mass</b> <b>Spectrometer Detailed Status</b> . El campo <b>Source Temperature</b> debe contener la temperatura establecida y el <b>Interface Heater Status</b> debe ser <b>Ready</b> . En caso contrario, póngase en contacto con el personal de mantenimiento cualificado o con un representante del servicio técnico para sustituir el calentador de la interfaz.

## Registro de datos: fuente de iones IonDrive<sup>™</sup> Turbo V

Α

### Información del sistema

Tabla A-1 Información del espectrómetro de masas

Número de serie del espectrómetro de masas

### Información de la fuente de iones

Componente	Número de serie
Fuente de iones	
Sonda TurbolonSpray <sup>®</sup>	
Sonda APCI	

### IonDrive Turbo V

**Nota:** La fuente de iones IonDrive<sup>™</sup> Turbo V solo es compatible con las series de instrumentos 6500 y 6500+ y los sistemas 6600/6600+.

**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C Fuente de iones 91 / 156

Sonda	Intensidad (cps)	Intensidad (cps)	Resultados (cps)
	6500	6500+	
Sonda TurbolonSpray <sup>®</sup>	1,25 × 10 <sup>6</sup>	1,9 × 10 <sup>6</sup>	
Sonda APCI	5,0 × 10 <sup>5</sup>	7,5 × 10 <sup>5</sup>	

## Aprobación y firma

Empresa	
Nombre del representante del servicio técnico	Fecha (aaaa-mm-dd)
Firma del representante del servicio técnico	

## **Comentarios y excepciones**

**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C Fuente de iones 93 / 156

## Registro de datos: fuente de iones Turbo V<sup>™</sup>

### Información del sistema

Tabla B-1 Información del espectrómetro de masas

Número de serie del espectrómetro de masas

### Información de la fuente de iones

Componente	Número de serie
Fuente de iones	
Sonda TurbolonSpray <sup>®</sup>	
Sonda APCI	

### Turbo V

Nota: Las especificaciones no están disponibles para el sistema TripleTOF<sup>®</sup> 4600. La fuente recomendada para este sistema es la fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>.

Fuente de iones 94 / 156 Pruebas, especificaciones y registro de datos RUO-IDV-05-7280-ES-C **Nota:** Las pruebas de los sistemas de la serie 6500 y 6500+ se ejecutan en modo de baja masa.

Intensidad (cps)				Resultados				
3200	3500	4000	4500	5000 y 5500/ 5500+	5600/5600+ y 6600/6600+	6500	6500+	
TurbolonSpra	ay®			·		<u>.</u>		
1,0 × 10 <sup>4</sup>	2,0 × 10 <sup>4</sup>	1,0 × 10 <sup>5</sup>	2,0 × 10 <sup>5</sup>	5,0 × 10 <sup>5</sup>	1,0 × 10 <sup>4</sup>	1,0 × 10 <sup>6</sup>	1,5 × 10 <sup>6</sup>	
Sonda APCI								
5,0 × 10 <sup>3</sup>	1,0 × 10 <sup>4</sup>	5,0 × 10 <sup>4</sup>	1,0 × 10 <sup>5</sup>	2,5 × 10 <sup>5</sup>	5,0 × 10 <sup>3</sup>	5,0 × 10 <sup>5</sup>	7,5 × 10 <sup>5</sup>	

## Aprobación y firma

Empresa	
Nombre del representante del servicio técnico	Fecha (aaaa-mm-dd)
Firma del representante del servicio técnico	

## **Comentarios y excepciones**

## Registro de datos: fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>

Información del sistema

Tabla C-1 Información del espectrómetro de masas

Número de serie del espectrómetro de masas

### Información de la fuente de iones

Componente	Número de serie
Fuente de iones	
Sonda TurbolonSpray <sup>®</sup>	
Sonda APCI	

### Resultados de la prueba para la fuente de iones DuoSpray

**Nota:** Las pruebas de los sistemas de la serie 6500 y 6500+ se ejecutan en modo de baja masa.

**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C Fuente de iones 97 / 156

### Registro de datos: fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>

Intensidad (cps)					Resultados			
3200	4000	4500	4600	5000 y 5500/ 5500+	5600/5600+ y 6600/6600+	6500	6500+	
TurbolonSpra	ay®							
5,0 × 10 <sup>3</sup>	5,0 × 10 <sup>4</sup>	1,0 × 10 <sup>5</sup>	2,0 × 10 <sup>3</sup>	2,5 × 10 <sup>5</sup>	5,0 × 10 <sup>3</sup>	5,0 × 10 <sup>5</sup>	7,5 × 10 <sup>5</sup>	
Sonda APCI				•				
2,5 × 10 <sup>3</sup>	$2,5 \times 10^4$	5,0 × 10 <sup>4</sup>	1,0 × 10 <sup>3</sup>	1,25 × 10 <sup>5</sup>	2,5 × 10 <sup>3</sup>	2,5 × 10 <sup>5</sup>	3,8 × 10 <sup>5</sup>	

## Aprobación y firma

Empresa		
Nombre del representante del servicio técnico	Fecha (aaaa-mm-dd)	
Firma del representante del servicio técnico		

## **Comentarios y excepciones**

## Registro de datos: fuente de iones OptiFlow<sup>™</sup> Turbo V

D

### Información del sistema

Tabla D-1 Información del espectrómetro de masas

Número de serie del espectrómetro de masas

### Información de la fuente de iones

Componente	Número de serie
Fuente de iones	
Sonda SteadySpray	
Número de lote del electrodo	

### **OptiFlow Turbo V**

Nota: Las pruebas de los sistemas de la serie 6500 y 6500+ se ejecutan en modo de baja masa.

Fuente de iones 100 / 156 Pruebas, especificaciones y registro de datos RUO-IDV-05-7280-ES-C

Intensidad (cps)				Resultados
5500/5500+ 6500 6500+ 6600/6600+				
Sonda SteadySpray				
5,0 × 10 <sup>5</sup>	1,0 × 10 <sup>6</sup>	1,5 × 10 <sup>6</sup>	$1,0 \times 10^4$	

### Aprobación y firma

Empresa	
Nombre del representante del servicio técnico	Fecha (aaaa-mm-dd)
Firma del representante del servicio técnico	

## **Comentarios y excepciones**

Fuente de iones 102 / 156 Pruebas, especificaciones y registro de datos RUO-IDV-05-7280-ES-C

## Registro de datos: fuente de iones NanoSpray®

Ε

### Información del sistema

Tabla E-1 Información del espectrómetro de masas

Número de serie del espectrómetro de masas

### Información de la fuente de iones

Componente	Número de serie
Fuente de iones	
Sonda TurbolonSpray <sup>®</sup>	
Sonda APCI	

### Resultados de la prueba para la fuente de iones NanoSpray (sistemas TripleTOF)

**Nota:** El representante del servicio técnico de SCIEX debe enviar por correo electrónico los resultados de la prueba de aceptación posterior a la instalación de NanoSpray<sup>®</sup> a servicedata@sciex.com.

### Tabla E-2 Resultados de la prueba TOF MS

Masa 786	Especif	Resultado	
	4600	5600/5600+ y 6600/6600+	
Intensidad del centroide (altura máxima, cps)	≥ 1500	≥ 4000	
Resolución	≥ 25 000	≥ 30 000	
Impresiones requeridas: 785,8421		·	

### Tabla E-3 Resultados de la prueba de alta sensibilidad en modo ion producto (solo sistemas 5600/5600+ y 6600/6600+)

Masa	Intensidad del centroide (cps)		Resolución	
	Especificación	Resultado	Especificación	Resultado
187,0713	≥ 60		N/D	N/D
480,2565	≥ 212		≥ 15 000	
813,3890	≥ 375		≥ 15 000	

Masa	Intensidad del centroide (cps)		Resolución		
	Especificación	Resultado	Especificación	Resultado	
1056,4745	≥ 225		≥ 15 000		
Impresiones requeridas: 187,0713, 480,2565, 813,3890 y 1056,4745					

### Tabla E-3 Resultados de la prueba de alta sensibilidad en modo ion producto (solo sistemas 5600/5600+ y 6600/6600+) (continuación)

### Tabla E-4 Resultados de la prueba de ion producto

Masa	Intensidad del centroide (cps)			Resolución		
	4600	5600/5600+ y 6600/ 6600+	Resultado	4600	5600/5600+ y 6600/ 6600+	Resultado
187,0713	≥ 8	≥ 20		N/D	N/D	N/D
480,2565	≥ 25	≥ 65		≥ 24 000	≥ 25 000	
813,3890	≥ 35	≥ 125		≥ 25 000	≥ 25 000	
1056,4745	≥ 25	≥ 65		≥ 25 000	≥ 25 000	
Nota: En el caso de los sistemas 5600/5600+ y 6600/6600+, esta prueba se ejecuta en modo High Resolution (alta resolución).						
Impresiones requ	ueridas: 187,0713,	, 480,2565, 813,3890 y 1056,47	745			

## Resultados de la prueba para la fuente de iones NanoSpray (sistemas de las series 4000, 4500, 5500, 5500+, 6500 y 6500+)

Las especificaciones de esta sección corresponden a la fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup> III. Consulte el nuevo *Manual de instalación* de objetivos para ver las especificaciones correspondientes a la fuente de iones DPV-450 Digital PicoView<sup>®</sup>NanoSpray para espectrómetros de masas SCIEX.

**Nota:** El representante del servicio técnico de SCIEX debe enviar por correo electrónico los resultados de la prueba de aceptación posterior a la instalación de NanoSpray<sup>®</sup> a servicedata@sciex.com.

#### Tabla E-5 Resultados de la prueba en modo Q1

Masa	Intensidad (cps)					
	4000	4000 4500 5500/5500+ 6500 6500+ Resultado				
786	1,0 × 10 <sup>5</sup>	2,5 × 10 <sup>5</sup>	5,0 × 10 <sup>5</sup>	1,0 × 10 <sup>6</sup>	1,5 × 10 <sup>6</sup>	

#### Tabla E-6 Resultados de la prueba en modo Q3

Masa	Intensidad (cps)					
	4000	4500	5500/5500+	6500	6500+	Resultado
786	1,0 × 10 <sup>5</sup>	2,5 × 10 <sup>5</sup>	5,0 × 10 <sup>5</sup>	1,0 × 10 <sup>6</sup>	1,5 × 10 <sup>6</sup>	

Masa		Intensidad (cps)					
	4000	4500	5500/5500+	6500	6500+	Resultado	
	Intensidad (cps)						
480,3	1,0 × 10 <sup>5</sup>	5,0 × 10 <sup>5</sup>	1,0 × 10 <sup>6</sup>	5,0 × 10 <sup>6</sup>	7,5 × 10 <sup>6</sup>		
813,4	1,0 × 10 <sup>5</sup>	5,0 × 10 <sup>5</sup>	1,0 × 10 <sup>6</sup>	5,0 × 10 <sup>6</sup>	7,5 × 10 <sup>6</sup>		
942,4	5,0 × 10 <sup>4</sup>	2,5 × 10 <sup>5</sup>	5,0 × 10 <sup>5</sup>	2,5 × 10 <sup>6</sup>	3,8 × 10 <sup>6</sup>		
1171,7	$4,0 \times 10^4$	2,0 × 10 <sup>5</sup>	N/D	N/D	N/D		

Tabla E-7 Resultados de la prueba en modo EPI (solo los sistemas QTRAP<sup>®</sup>)

### Resultados de la prueba para la fuente de iones NanoSpray (sistemas de la serie 3200)

 Tabla E-8 Resultados de la prueba en modo MS2

Masa	Intensidad (cps)	Resultados (cps)
136,1	≥ 1,6 × 105	
784,4	≥ 5000	

### Tabla E-9 Resultados de la prueba en modo EPI

Masa	Intensidad (cps)	Resultados (cps)
136,1	1,0 × 10 <sup>5</sup>	
647,3	$4,0 \times 10^4$	
784,4	8,0 × 10 <sup>4</sup>	
1028,5	1,0 × 10 <sup>4</sup>	

## Aprobación y firma

Empresa	
Nombre del representante del servicio técnico	Fecha (aaaa-mm-dd)
Firma del representante del servicio técnico	
## **Comentarios y excepciones**

**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C Fuente de iones 109 / 156

# **Registro de datos: fuente de iones PhotoSpray**<sup>®</sup>

Información del sistema

Tabla F-1 Información del espectrómetro de masas

Número de serie del espectrómetro de masas

### Información de la fuente de iones

Componente	Número de serie
Fuente de iones	
Sonda TurbolonSpray <sup>®</sup>	
Sonda APCI	

### Resultados de la prueba para la fuente de iones PhotoSpray

**Nota:** Las pruebas de los sistemas de la serie 6500 y 6500+ se ejecutan en modo de baja masa.

Fuente de iones 110 / 156

	Intensidad (cps)							
3200 4000 4500 5000 y 5500 6500 6500+ Resulta								
2,5 × 10 <sup>3</sup>	5,0 × 10 <sup>4</sup>	1,0 × 10 <sup>5</sup>	2,5 × 10 <sup>5</sup>	5,0 × 10 <sup>5</sup>	7,5 × 10 <sup>5</sup>			

## Aprobación y firma

Empresa	
Nombre del representante del servicio técnico	Fecha (aaaa-mm-dd)
Firma del representante del servicio técnico	

# **Comentarios y excepciones**

Fuente de iones 112 / 156

# Parámetros del sistema TripleTOF<sup>®</sup>

La tabla siguiente contiene parámetros genéricos para los sistemas TripleTOF<sup>®</sup> 4600, 5600, 5600+, 6600 y 6600+.

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.

ID de parámetro	ID de acceso	Мо	do de iones posit	ivos	Modo de iones negativos		
		Q1	TOF MS	MS/MS	Q1	TOF MS	MS/MS
GS1	GS1	20	20	20	20	20	20
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90
GS2	GS2	15	15	15	15	15	15
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90
CUR	CUR	25	25	25	25	25	25
		10 a 55	10 a 55	10 a 55	10 a 55	10 a 55	10 a 55

#### Tabla G-1 Parámetros del sistema TripleTOF®

#### Parámetros del sistema TripleTOF<sup>®</sup>

ID de	ID de acceso	Мо	do de iones posit	ivos	Modo de iones negativos			
parametro		Q1	TOF MS	MS/MS	Q1	TOF MS	MS/MS	
TEM <sup>1,2,3,4,5,15</sup>	TEM	0	0	0	0	0	0	
		0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	
ISVF <sup>1,4,15</sup>	IS	5000	5000	5000	-4000	-4000	-4000	
(ISVF = IS - OR)		0 a 5500	0 a 5500	0 a 5500	-4500 a 0	-4500 a 0	-4500 a 0	
ISVF <sup>7</sup>	IS	1000	1000	1000	-1000	-1000	-1000	
(ISVF = IS - OR)		0 a 4000	0 a 4000	0 a 4000	–4000 a 0	–4000 a 0	–4000 a 0	
NC⁵	NC	3	3	3	-3	-3	-3	
		0 a 5	0 a 5	0 a 5	-5 a 0	-5 a 0	-5 a 0	
IHT <sup>7</sup>	ІНТ	150	150	150	150	150	150	
		0 a 225	0 a 225	0 a 225	0 a 225	0 a 225	0 a 225	

#### Tabla G-1 Parámetros del sistema TripleTOF<sup>®</sup> (continuación)

<sup>1</sup> Fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>

<sup>2</sup> Fuente de iones Turbo  $V^{TM}$ 

<sup>3</sup> Fuente de iones IonDrive<sup>™</sup> Turbo V (si procede)

<sup>4</sup> Sonda TurbolonSpray<sup>®</sup>

<sup>5</sup> Sonda APCI

<sup>6</sup> OptiFlow<sup>™</sup> Turbo V

<sup>7</sup> Fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>

Fuente de iones 114 / 156

ID de	ID de acceso	Mo	do de iones posit	ivos	Modo de iones negativos			
parametro		Q1	TOF MS	MS/MS	Q1	TOF MS	MS/MS	
0	DP	80	100	80	-80	-80	-80	
(DP=OR-Q0)		0 a 300	0 a 300	0 a 300	–300 a 0	–300 a 0	–300 a 0	
Q0	Q0	40	N/D	N/D	-40	N/D	N/D	
		–300 a 300			–300 a 300			
Q0	CE	N/D	10	30	N/D	-10	-30	
(CE = Q0 - RO2)			5 a 150	0 a 150		–150 a –5	–150 a 0	
CES	CES	N/D	N/D	0	N/D	N/D	0	
				0 a 50			0 a 50	
RO1	IE1	2	2	2	-2	-2	-2	
(IE1 = Q0 - RO1)		–300 a 300	–300 a 300	–300 a 300	–300 a 300	–300 a 300	–300 a 300	
IQ2	IQ2	0	25	0	0	-25	0	
		–300 a 300	–300 a 300	–300 a 300	–300 a 300	–300 a 300	–300 a 300	
CAD	CAD	6	6	6	6	6	6	
		0 a 12	0 a 12	0 a 12	0 a 12	0 a 12	0 a 12	
RO2	RO2	30	30	30	-30	-30	-30	
		–57 a 57	–57 a 57	–57 a 57	–57 a 57	–57 a 57	–57 a 57	

Tabla G-1 Parámetros del sistema TripleTOF<sup>®</sup> (continuación)

**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C

Fuente de iones 115 / 156

## Parámetros del sistema TripleTOF®

ID de	ID de acceso	Мс	do de iones posi	tivos	Modo de iones negativos			
parámetro		Q1	TOF MS	MS/MS	Q1	TOF MS	MS/MS	
IRD	IRD	30	30	30	30	30	30	
		6 a 1000	6 a 1000	6 a 1000	6 a 1000	6 a 1000	6 a 1000	
IRW	IRW	15	15	15	15	15	15	
		5 a 1000	5 a 1000	5 a 1000	5 a 1000	5 a 1000	5 a 1000	
LNR	LNR	-15000	-15000	-15000	15000	15000	15000	
		–20000 a 20000	–20000 a 20000	–20000 a 20000	–20000 a 20000	–20000 a 20000	–20000 a 20000	
CEM	CEM	2300	2200	2200	2200	2200	2200	
		0 a 3000	0 a 3000	0 a 3000	0 a 3000	0 a 3000	0 a 3000	
OFS	OFS	30	30	30	-60	-60	-60	
		–100 a 100	–100 a 100	–100 a 100	–100 a 100	–100 a 100	–100 a 100	
MGV	MGV	-975	-975	-975	975	975	975	
		–2000 a 2000	–2000 a 2000	–2000 a 2000	–2000 a 2000	–2000 a 2000	–2000 a 2000	
MPV	MPV	2600	2600	2600	-2600	-2600	-2600	
		–4000 a 4000	–4000 a 4000	–4000 a 4000	–4000 a 4000	–4000 a 4000	–4000 a 4000	

### Tabla G-1 Parámetros del sistema TripleTOF<sup>®</sup> (continuación)

# Parámetros del sistema de las series 6500 y 6500+

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 H-1	l Parámetros de	l sistema de las	series 6500 y 6500+
-----------	-----------------	------------------	---------------------

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Mod	o de iones nega	ativos
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20	20	20	20	20	20
		20 a 55	20 a 55	20 a 55	20 a 55	20 a 55	20 a 55
CAD 8,9	CAD <sup>8,9</sup>	0	6	Med	0	6	Med
		N/D	N/D	Low, Medium, High	N/D	N/D	Low, Medium, High
CAD <sup>10,11</sup>	CAD <sup>10,11</sup>	0	6	9	0	6	9
		N/D	N/D	0 a 12	N/D	N/D	0 a 12

 $^{8}$  Sistema QTRAP  $^{\circ}$  6500 o 6500+, masa baja (LM)

 $^9$  Sistema QTRAP $^{\circ}$  6500 o 6500+, masa alta (HM)

<sup>10</sup>Sistema SCIEX Triple Quad<sup>™</sup> 6500 o 6500+, masa baja (LM)

<sup>11</sup>Sistema SCIEX Triple Quad<sup>™</sup> 6500 o 6500+, masa alta (HM)

**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C Fuente de iones 117 / 156

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Mod	o de iones nega	ativos
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
IS <sup>12,13,14,15</sup>	IS <sup>12,13,14</sup>	5500	5500	5500	-4500	-4500	-4500
		0 a 5500	0 a 5500	0 a 5500	-4500 a 0	-4500 a 0	-4500 a 0
IS <sup>16</sup>	IS <sup>16</sup>	1500	1500	1500	-1500	-1500	-1500
		0 a 2500	0 a 2500	0 a 2500	-2500 a 0	-2500 a 0	-2500 a 0
IS <sup>17</sup>	IS <sup>17</sup>	1000	1000	1000	-1000	-1000	-1000
		0 a 4000	0 a 4000	0 a 4000	-4000 a 0	-4000 a 0	-4000 a 0
NC <sup>13,16,19,18</sup>	NC <sup>13,16,19,18</sup>	3	3	3	-3	-3	-3
		0 a 5	0 a 5	0 a 5	-5 a 0	-5 a 0	-5 a 0
TEM <sup>12,13,16,19,14,18,15</sup>	TEM <sup>12,13,16,19,14,18</sup>	0	0	0	0	0	0
		0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750

<sup>12</sup>Fuente de iones Turbo V<sup>™</sup>

<sup>13</sup>Fuente de iones IonDrive<sup>™</sup> Turbo V

<sup>14</sup>Sonda TurbolonSpray<sup>®</sup> (TIS)

<sup>15</sup>OptiFlow<sup>™</sup> Turbo V

<sup>16</sup>Fuente de iones PhotoSpray®

<sup>17</sup>Fuente de iones NanoSpray<sup>®</sup>

<sup>18</sup>Sonda APCI

<sup>19</sup>Fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup>

Fuente de iones 118 / 156

ID de parámetro	ID de acceso	Modo	de iones positi	vos	Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
0	DP	100	100	100	-100	-100	-100
(DP=OR)		0 a 300	0 a 300	0 a 300	–300 a 0	–300 a 0	–300 a 0
Q0	EP	10	10	10	-10	-10	-10
(EP=-Q0)		2 a 15	2 a 15	2 a 15	–15 a –2	–15 a –2	–15 a –2
IQ1	IQ1	Q0 + (-0.5)	Q0 + (-0.5)	Q0 + (-0.5)	Q0 + 0.5	Q0 + 0.5	Q0 + 0.5
(IQ1 = Q0 + desviación)		–0.1 a –2	–0.1 a –2	–0.1 a –2	0.1 a 2	0.1 a 2	0.1 a 2
ST	ST	Q0 + (-8)	Q0 + (8)	Q0 + (8)	Q0 + 8	Q0 + 8	Q0 + 8
(ST = Q0 + desviación)		–12 a –5	–12 a –5	–12 a –5	5 a 12	5 a 12	5 a 12
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0 a 3	N/D	1 0 a 3	–1 –3 a –0	N/D	–1 –3 a –0
IQ2	IQ2	Q0+ (-10)	Q0+ (-10)	Q0+ (–10)	Q0 + 10	Q0 + 10	Q0 + 10
(IQ2 = Q0 + desviación)		–30 a –8	–30 a –8	–30 a –8	8 a 30	8 a 30	8 a 30
RO2	RO2	-20	-20	N/D	20	20	N/D
		N/D	N/D		N/D	N/D	
RO2	CE	N/D	N/D	30	N/D	N/D	-30
(CE = Q0 - RO2)				5 a 180			–180 a
							-5

**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C

Fuente de iones 119 / 156

ID de parámetro	ID de acceso	Modo	Modo de iones positivos		Mod	o de iones nega	ativos
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
ST3	ST3	RO2 – 10	N/D	N/D	RO2 + 10	N/D	N/D
(ST3 = RO2 + desviación)		–30 a –5			5 a 30		
ST3	СХР	N/D	15	15	N/D	-15	-15
(CXP = RO2 - ST3)			0 a 55	0 a 55		-55 a 0	-55 a 0
RO3	RO3	-50	N/D	N/D	50	N/D	N/D
		N/D			N/D		
RO3	IE3	N/D	1	1	N/D	-1	-1
(IE3=RO2-RO3)			0 a 5	0 a 5		-5 a 0	-5 a 0
CEM	CEM	1700	1700	1700	1700	1700	1700
		0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300
GS1	GS1	20	20	20	20	20	20
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90
GS2	GS2	0	0	0	0	0	0
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Mod	o de iones nega	ativos
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
IHT <sup>17</sup>	IHT <sup>17</sup>	150	150	150	150	150	150
sdp <sup>19</sup>	sdp <sup>19</sup>	1	1	1	1	1	1
		1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2

#### Tabla H-2 Parámetros del sistema de la serie 6500 y 6500+ solo para los tipos de análisis LIT

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos	Modo de iones negativos
CAD	CAD	High	High
		Low, Medium, High	Low, Medium, High
AF2 <sup>20</sup>	AF2	0.1	0.1
		0 a 1	0 a 1
AF3	AF3	Mass-Speed Dependent	Mass-Speed Dependent
		0 a 10	0 a 10
EXB	EXB	Mass-Speed Dependent	Mass-Speed Dependent
		–165 a 0	0 a 165

#### <sup>20</sup>Solo MS/MS/MS

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos	Modo de iones negativos
CES	CES	0	0
		0 a 50	0 a 50
ROS	CE	10	-10
(Q0 – ROS)		5 a 180	–5 a –180

Tabla H-2 Parámetros del sistema de la serie 6500	v 6500+ solo para los tipos de análisis LIT (continuación)

# Parámetros de los sistemas de las series 5500 y 5500+

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 I-1 Parámetros de los sistemas de las series 5500 y 5500+

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Mod	o de iones nega	ativos
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20	20	20	20	20	20
		10 a 55	10 a 55	10 a 55	10 a 55	10 a 55	10 a 55
CAD	CAD	0	6	Med (9)	0	5	Med (9
		N/D	N/D	0 a 12	N/D	N/D	0 a 12
IS <sup>21,22</sup>	IS <sup>21,22</sup>	5500	5500	5500	-4500	-4500	-4500
		0 a 5500	0 a 5500	0 a 5500	-4500 a 0	-4500 a 0	-4500 a 0
NC <sup>24</sup>	NC <sup>24</sup>	3	3	3	-3	-3	-3
		0 a 5	0 a 5	0 a 5	-5 a 0	-5 a 0	-5 a 0

<sup>21</sup>Fuente de iones Turbo  $V^{TM}$ 

<sup>22</sup>Sonda TurbolonSpray<sup>®</sup>

<sup>23</sup>OptiFlow<sup>™</sup> Turbo V

<sup>24</sup>Sonda APCI

ID de parámetro	ID de acceso	Modo d	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS	
TEM <sup>22,24,15</sup>	TEM <sup>22,24</sup>	0	0	0	0	0	0	
		0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	
0	DP	100	100	100	-100	-100	-100	
(DP=OR)		0 a 300	0 a 300	0 a 300	–300 a 0	–300 a 0	–300 a 0	
Q0	EP	10	10	10	-10	-10	-10	
(EP = -Q0)		2 a 15	2 a 15	2 a 15	–15 a –2	–15 a –2	–15 a –2	
IQ1	IQ1	Q0 + (-0.5)	Q0 + (-0.5)	Q0 + (-0.5)	Q0 + 0.5	Q0 + 0.5	Q0 + 0.5	
(IQ1 = Q0 + desviación)		–0.1 a –2	-0.1 a -2	–0.1 a –2	0.1 a 2	0.1 a 2	0.1 a 2	
ST	ST	Q0 + (-8)	Q0 + (8)	Q0 + (8)	Q0 + 8	Q0 + 8	Q0 + 8	
(ST = Q0 + desviación)		–12 a –5	–12 a –5	–12 a –5	12 a 5	12 a 5	12 a 5	
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0 a 3	N/D	1 0 a 3	−1 −3 a −0	N/D	–1 –3 a –0	
IQ2	IQ2	Q0+ (-10)	Q0+ (-10)	Q0+ (-10)	Q0 + 10	Q0 + 10	Q0 + 10	
(IQ2 = Q0 + desviación)		–30 a –8	–30 a –8	–30 a –8	8 a 30	8 a 30	8 a 30	

ID de parámetro ID de acceso		Мо	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS	
RO2	RO2	-20	-20	N/D	20	20	N/D	
		N/D	N/D		N/D	N/D		
RO2	CE	N/D	N/D	30	N/D	N/D	-30	
(CE = Q0 - RO2)				5 a 180			–180 a	
							-5	
ST3	ST3	RO2 – 10	N/D	N/D	RO2 + 10	N/D	N/D	
(ST3 = RO2 + desviación)		–30 a –5			5 a 30			
ST3	СХР	N/D	15	15	N/D	-15	-15	
(CXP = RO2 - ST3)			0 a 55	0 a 55		-55 a 0	-55 a 0	
RO3	RO3	-50	N/D	N/D	50	N/D	N/D	
		N/D			N/D			
RO3	IE3	N/D	1	1	N/D	-1	-1	
(IE3 = RO2 - RO3)			0 a 5	0 a 5		-5 a 0	-5 a 0	
DF 25	DF	-200	-200	-200	200	200	200	
		–300 a 0	–300 a 0	-300 a 0	0 a 300	0 a 300	0 a 300	

<sup>25</sup>Solo sistemas de la serie 5500

**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C

Fuente de iones 125 / 156

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos		itivos Modo de iones neg			ativos
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CEM <sup>25</sup>	CEM	1800	1800	1800	1800	1800	1800
		0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300
CEM <sup>26</sup>	CEM	1700	1700	1700	1700	1700	1700
		0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300
GS1	GS1	20	20	20	20	20	20
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90
GS2	GS2	0	0	0	0	0	0
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90
IHT	IHT	150	150	150	150	150	150
		0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250
sdp <sup>27</sup>	sdp	1	1	1	1	1	1
		1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2

<sup>26</sup>Solo sistemas de la serie 5500+

<sup>27</sup>Fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup> (1=sonda TurbolonSpray y 2=sonda APCI)

Fuente de iones 126 / 156

Tabla I-2 Parámetros del sistema OTRAP	5500 v Triple Ouad 5500+ habilitados para	OTRAP	solo para los tipos de análisis LIT
	ssee y mpie Quad ssee masintades para		

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos	Modo de iones negativos
CAD	CAD	High	High
		Low–High	Low–High
AF2 <sup>28</sup>	AF2	0.100	0.100
		0 o 1	0 o 1
AF3	AF3	Mass-Speed Dependent	Mass-Speed Dependent
		0 a 10	0 a 10
EXB	EXB	Mass-Speed Dependent	Mass-Speed Dependent
		–165 a 0	0 a 165
CES	CES	0	0
		0 a 50	0 a 50
ROS	CE	10	-10
(Q0 – ROS)		5 a 180	–5 a –180

<sup>28</sup>Solo MS/MS/MS

# Parámetros del sistema API 5000<sup>™</sup>

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 J-1 Parámetros del sistema API 5000<sup>™</sup>

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Mod	o de iones nega	ativos
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	10	10	10	10	10	10
		10 a 50	10 a 50	10 a 50	10 a 50	10 a 50	10 a 50
CAD	CAD	0	1	4	0	1	4
		N/D	0 a 12	0 a 10	N/D	0 a 12	0 a 12
IS <sup>29,30</sup>	IS <sup>29,30</sup>	5500	5500	5500	-4500	-4500	-4500
		0 a 5500	0 a 5500	0 a 5500	-4500 a 0	-4500 a 0	-4500 a 0
NC <sup>31</sup>	NC <sup>31</sup>	3	3	3	-3	-3	-3
		0 a 5	0 a 5	0 a 5	-5 a 0	-5 a 0	-5 a 0

<sup>29</sup>Fuente de iones Turbo V<sup>™</sup>

<sup>30</sup>Sonda TurbolonSpray<sup>®</sup>

<sup>31</sup>Sonda APCI

Fuente de iones 128 / 156

ID de parámetro	ID de acceso	Мо	do de iones posi	tivos	M	Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS	
TEM <sup>30,31</sup>	TEM <sup>30,31</sup>	0	0	0	0	0	0	
		0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	
0	DP	120	120	120	-100	-100	-100	
(DP=OR)		0 a 400	0 a 400	0 a 400	–400 a 0	–400 a 0	–400 a 0	
Q0	EP	10	10	10	-10	-10	-10	
(EP = -Q0)		15 a 2	15 a 2	15 a 2	–15 a –2	–15 a –2	–15 a –2	
IQ1	IQ1	Q0 + (-1)	Q0 + (-1)	Q0 + (-1)	Q0 + 1	Q0 + 1	Q0 + 1	
(IQ1 = Q0 + desviación)		–0.5 a –2	−0.5 a −2	–0.5 a –2	0.5 a 2	0.5 a 2	0.5 a 2	
ST	ST	Q0 + (-7)	Q0 + (-7)	Q0 + (-7)	Q0 + 7	Q0 + 7	Q0 + 7	
(ST = Q0 + desviación)		–12 a –5	–12 a –5	–12 a –5	12 a 5	12 a 5	12 a 5	
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0.5 a 2	N/D	1 0.5 a 2	–1 –2 a –0,5	N/D	-1 -2 a -0,5	
RO1	RO1	N/D	Q0 + (2)	N/D	N/D	Q0 + 2	N/D	
(IE1 = Q0 + desviación)			−0.5 a −2			0.5 a 2		

Tabla J-1 Parámetros del sistema API 5000<sup>™</sup> (continuación)

#### Parámetros del sistema API 5000™

ID de parámetro	ID de acceso	Мо	do de iones posi	tivos	Mo	Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS	
IQ2	IQ2	Q0+ (-20)	Q0+ (-20)	Q0+ (-20)	Q0 + 20	Q0 + 20	Q0 + 20	
(IQ2 = Q0 + desviación)		–100 a –8	N/D	N/D	100 a 8	N/D	N/D	
RO2	RO2	-100	-20	N/D	100	20	N/D	
		–200 a 200	–145 a –2		–200 a 200	2 a 145		
RO2	CE	N/D	N/D	30	N/D	N/D	-30	
(CE = Q0 - RO2)				5 a 130			–130 a	
							-5	
ST3	ST3	-120	N/D	N/D	N/D	N/D	N/D	
		–200 a 200						
ST3	СХР	N/D	20	15	N/D	-20	–15	
(CXP = RO2 - ST3)			0 a 55	0 a 55		-55 a 0	-55 a 0	
RO3	RO3	-150	N/D	N/D	100	N/D	N/D	
		–200 a 200			–200 a 200			
RO3	IE3	N/D	2	2	N/D	-1.5	-1.5	
(IE3 = RO2 - RO3)			–0.5 a 5	–0.5 a 5		-5 a 0	-5 a 0	

### Tabla J-1 Parámetros del sistema API 5000<sup>™</sup> (continuación)

ID de parámetro	ID de acceso	Modo d	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS	
DF	DF	-200	-200	-200	200	200	200	
		–400 a 0	–400 a 0	–400 a 0	0 a 400	0 a 400	0 a 400	
CEM	CEM	2000	2000	2000	2000	2000	2000	
		500 a 3297	500 a 3297	500 a 3297	500 a 3297	500 a 3297	500 a 3297	
GS1	GS1	20	20	20	15	15	20	
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	
GS2	GS2	0	0	0	0	0	0	
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	
ihe <sup>32</sup>	ihe	1	1	1	1	1	1	
		0 o 1	0 o 1	0 o 1	0 o 1	0 o 1	0 o 1	
IHT	IHT	40	40	40	40	40	40	
		0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	
svp <sup>33</sup>	svp	1	1	1	1	1	1	
		1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	

## Tabla J-1 Parámetros del sistema API 5000<sup>™</sup> (continuación)

 $^{32}$ 1 = Activada y 0 = Desactivada

<sup>33</sup>Fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup> (1=TurbolonSpray<sup>®</sup> y 2=sonda APCI)

**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C Fuente de iones 131 / 156

# Parámetros de los sistemas de la serie 4500

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 K-1 Parametros de los instrumentos de la serie 450	Tabla K-1	Parámetros de	e los instrumentos	de la serie 4500
--	-----------	---------------	--------------------	------------------

ID de parámetro	ID de acceso	Mod	Modo de iones positivos		Modo de iones negativos		ativos
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20	20	20	20	20	20
		10 a 55	10 a 55	10 a 55	10 a 55	10 a 55	10 a 55
CAD	CAD	0	6	Medium (9)	0	6	Medium (9)
		N/D	N/D	0 a 12	N/D	N/D	0 a 12
IS <sup>34,35</sup>	IS <sup>34,35</sup>	5500	5500	5500	-4500	-4500	-4500
		0 a 5500	0 a 5500	0 a 5500	-4500 a 0	-4500 a 0	-4500 a 0
NC <sup>36</sup>	NC <sup>36</sup>	3	3	3	-3	-3	-3
		0 a 5	0 a 5	0 a 5	-5 a 0	-5 a 0	-5 a 0

<sup>34</sup>Fuente de iones Turbo V<sup>™</sup>

<sup>35</sup>Sonda TurbolonSpray<sup>®</sup>

<sup>36</sup>Sonda APCI

Fuente de iones 132 / 156 Pruebas, especificaciones y registro de datos RUO-IDV-05-7280-ES-C

Κ

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
TEM <sup>35,36</sup>	TEM <sup>35,36</sup>	0	0	0	0	0	0
		0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750
0	DP	100	100	100	-100	-100	-100
(DP = OR)		0 a 300	0 a 300	0 a 300	–300 a 0	–300 a 0	–300 a 0
QO	EP	10	10	10	-10	-10	-10
(EP = -Q0)		2 a 15	2 a 15	2 a 15	–15 a –2	–15 a –2	–15 a –2
IQ1	IQ1	Q0 + (-0.5)	Q0 + (-0.5)	Q0 + (-0.5)	Q0 + 0.5	Q0 + 0.5	Q0 + 0.5
(IQ1 = Q0 + desviación)		–0.1 a –2	–0.1 a –2	–0.1 a –2	0.1 a 2	0.1 a 2	0.1 a 2
ST	ST	Q0 + (-8)	Q0 + (-8)	Q0 + (-8)	Q0 + 8	Q0 + 8	Q0 + 8
(ST = Q0 + desviación)		–12 a –5	–12 a –5	–12 a –5	12 a 5	12 a 5	12 a 5
RO1	IE1	1	N/D	1	-1	N/D	-1
(IE1 = Q0 - RO1)		0 a 3		0 a 3	–3 a 0		–3 a 0
IQ2	IQ2	Q0 + (-10)	Q0 + (-11)	Q0 + (-10)	Q0 + 10	Q0 + 10	Q0 + 10
(ST = Q0 + desviación)		–30 a –8	–30 a –8	–30 a –8	8 a 30	8 a 30	8 a 30
RO2	RO2	-20	-20	N/D	20	20	N/D
		N/D	N/D		N/D	N/D	

**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C

Fuente de iones 133 / 156

ID de parámetro	ID de acceso	Mod	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS	
RO2	CE	N/D	N/D	30	N/D	N/D	-30	
(CE = Q0 - RO2)				5 a 180			–180 a -5	
ST3	ST3	RO2 – 10	N/D	N/D	RO2 + 10	N/D	N/D	
(ST3 = RO2 + desviación)		–30 a –5			5 a 30			
ST2	СХР	N/D	15	15	N/D	-15	-15	
(CXP = RO2 - ST3)			0 a 55	0 a 55		-55 a 0	-55 a 0	
RO3	RO3	-50	N/D	N/D	50	N/D	N/D	
		Fixed			Fixed			
RO3	IE3	N/D	1	1	N/D	-1	-1	
(IE3 = RO2 - RO3)			0 a 5	0 a 5		-5 a 0	-5 a 0	
DF	DF	-200	-200	-200	200	200	200	
		–300 a 0	–300 a 0	–300 a 0	0 a 300	0 a 300	0 a 300	
CEM	CEM	2000	2000	2000	2000	2000	2000	
		0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	
GS1	GS1	20	20	20	20	20	20	
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Mode	Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS	
GS2	GS2	0	0	0	0	0	0	
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	
IHT	ІНТ	150	150	150	150	150	150	
		0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	
sdp <sup>37</sup>	sdp	1	1	1	1	1	1	
		1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	

### Tabla K-2 Parámetros del sistema QTRAP<sup>®</sup> 4500 solo para los tipos de análisis LIT

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos	Modo de iones negativos
CAD	CAD	High	High
		Low–High	Low–High
AF2 <sup>38</sup>	AF2	0.100	0.100
		0 o 0.2	0 o 0.2
AF3	AF3	Mass-Speed Dependent	Mass-Speed Dependent
		0 a 10	0 a 10

<sup>37</sup>Fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup> (1=sonda TurbolonSpray y 2=sonda APCI)

38Solo MS/MS/MS

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos	Modo de iones negativos
EXB	EXB	Mass-Speed Dependent	Mass-Speed Dependent
		–165 a 0	0 a 165
CES	CES	0	0
		0 a 50	0 a 50
ROS	CE	10	-10
(Q0 – ROS)		5 a 180	–180 a -5

Tabla K-2 Parámetros del sistema QTRAP° 4500 solo para los tipos de análisi
---

# Parámetros de los sistemas de la serie 4000

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 L-1 Parámetros de los instrumentos de la serie 4000

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivosModo de iones negativos				ativos	
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20	20	20	20	20	20
		10 a 50	10 a 50	10 a 50	10 a 50	10 a 50	10 a 50
CAD <sup>39</sup>	CAD	0	1	4	0	1	4
		N/D	0 a 12	0 a 10	N/D	0 a 12	0 a 12
CAD <sup>40</sup>	CAD	0	1	6	0	1	6
		N/D	0 a 12	0 a 10	N/D	0 a 12	0 a 12
IS <sup>41,42</sup>	IS <sup>41,42</sup>	5500	5500	5500	-4500	-4500	-4500
		0 a 5500	0 a 5500	0 a 5500	-4500 a 0	-4500 a 0	-4500 a 0

<sup>39</sup>Sistemas API 4000<sup>™</sup>

<sup>40</sup>Sistemas 4000 QTRAP<sup>®</sup>

<sup>41</sup>Fuente de iones Turbo  $V^{\text{TM}}$ 

<sup>42</sup>Sonda TurbolonSpray<sup>®</sup>

ID de parámetro	ID de acceso	Modo c	le iones positiv	OS	Modo de iones negativos			
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS	
NC <sup>43</sup>	NC <sup>43</sup>	3	3	3	-3	-3	-3	
		0 a 5	0 a 5	0 a 5	-5 a 0	-5 a 0	-5 a 0	
TEM <sup>42,43</sup>	TEM <sup>42, 43</sup>	0	0	0	0	0	0	
		0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	
0	DP	20	20	20	-20	-20	-20	
(DP = OR)		0 a 400	0 a 400	0 a 400	–400 a 0	–400 a 0	–400 a 0	
Q0	EP	10	10	10	-10	-10	-10	
(EP = -Q0)		2 a 15	2 a 15	2 a 15	–15 a –2	–15 a –2	–15 a –2	
IQ1	IQ1	Q0 + (-1)	Q0 + (-1)	Q0 + (-1)	Q0 + 1	Q0 + 1	Q0 + 1	
(IQ1 = Q0 + desviación)		–0.5 a –2	–0.5 a –2	-0.5 a -2	0.5 a 2	0.5 a 2	0.5 a 2	
ST	ST	Q0 + (-5)	Q0 + (-5)	Q0 + (-5)	Q0 + 5	Q0 + 5	Q0 + 5	
(ST = Q0 + desviación)		-7 a -4	–7 a –4	-7 a -4	4 a 7	4 a 7	4 a 7	
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0.5 a 2	N/D	1 0.5 a 2	−1 −2 a −0,5	N/D	–1 –2 a –0,5	

<sup>43</sup>Sonda APCI

Fuente de iones 138 / 156

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos			
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS	
RO1	RO1	N/D	Q0 + (-1)	N/D	N/D	Q0 + 1	N/D	
(IE1 = Q0 + desviación)			-0.5 a -2			0.5 a 2		
IQ2	IQ2	Q0 +(-8)	Q0 +(-8)	Q0 +(-8)	Q0 + 8	Q0 + 8	Q0 + 8	
(IQ2 = Q0 + desviación)		N/D	N/D	N/D	N/D	N/D	N/D	
RO2	RO2	-60	-20	N/D	60	20	N/D	
		–145 a 20	–145 a –20		60 a 100	20 a 145		
RO2	CE	N/D	N/D	30	N/D	N/D	-30	
(CE = Q0 - RO2)				5 a 130			–130 a	
							-5	
ST3	ST3	-80	N/D	N/D	80	N/D	N/D	
		–80 a 200			80 a 200			
ST3	СХР	N/D	15	15	N/D	-15	-15	
(CXP = RO2 - ST3)			0 a 55	0 a 55		-55 a 0	-55 a 0	
RO3	RO3	-62	N/D	N/D	62	N/D	N/D	
		–60 a 200			60 a 200			

**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C

Fuente de iones 139 / 156

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos			
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS	
RO3	IE3	N/D	2	2	N/D	-1.5	-1.5	
(IE3 = RO2 - RO3)			–0.5 a 5	–0.5 a 5		-5 a 0	-5 a 0	
C2	C2	RO3 + 0	RO3 + 0	RO3 + 0	RO3 + 0	RO3 + 0	RO3 + 0	
		N/D	N/D	N/D	N/D	N/D	N/D	
DF	DF	0	0	0	0	0	0	
		–400 a 0	–400 a 0	–400 a 0	0 a 400	0 a 400	0 a 400	
CEM	CEM	1800	1800	1800	1800	1800	1800	
		500 a 3297	500 a 3297	500 a 3297	500 a 3297	500 a 3297	500 a 3297	
GS1	GS1	20	20	20	20	20	20	
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	
GS2	GS2	0	0	0	0	0	0	
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	
ihe <sup>44</sup>	ihe	1	1	1	1	1	1	
		0 o 1	0 o 1	0 o 1	0 o 1	0 o 1	0 o 1	

<sup>44</sup>1 = Activada y 0 = Desactivada

Fuente de iones 140 / 156

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
IHT	IHT	40	40	40	40	40	40
		0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250
svp <sup>45</sup>	svp	1	1	1	1	1	1
		1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2

Tabla L-2 Parámetros del sistema 4000 QTRAP<sup>®</sup> solo para los tipos de análisis LIT

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos	Modo de iones negativos
CAD	CAD	High	High
		Low–High	Low–High
AF2 <sup>46</sup>	AF2	100	100
		0 a 200	0 a 200
AF3	AF3	Mass-Speed Dependent	Mass-Speed Dependent
		0 a 5	0 a 5
EXB	EXB	Mass-Speed Dependent	Mass-Speed Dependent
		–200 a 0	0 a 200

<sup>45</sup>Fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup> (1=sonda TurbolonSpray<sup>®</sup> y 2=sonda APCI)

<sup>46</sup>Solo MS/MS/MS

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos	Modo de iones negativos
CES	CES	0	0
		–50 a 50	–50 a 50
ROS	CE	30	-30
(Q0 – ROS)		5 a 130	–130 a –5

### Tabla L-2 Parámetros del sistema 4000 QTRAP<sup>®</sup> solo para los tipos de análisis LIT (continuación)

# Parámetros del sistema SCIEX Triple Quad<sup>™</sup> 3500

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 M-1 Parámetros del sistema SCIEX Triple Quad<sup>™</sup> 3500

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20	20	20	20	20	20
		10 a 55	10 a 55	10 a 55	10 a 55	10 a 55	10 a 55
CAD	CAD	0	6	Medium (9)	0	6	Medium (9)
		N/D	N/D	0 a 12	N/D	N/D	0 a 12
IS <sup>47,48</sup>	IS <sup>47,47,48</sup>	5500	5500	5500	-4500	-4500	-4500
		0 a 5500	0 a 5500	0 a 5500	-4500 a 0	-4500 a 0	-4500 a 0
NC <sup>49</sup>	NC <sup>49</sup>	3	3	3	-3	-3	-3
		0 a 5	0 a 5	0 a 5	-5 a 0	-5 a 0	-5 a 0

<sup>47</sup>Fuente de iones Turbo V<sup>™</sup>

<sup>48</sup>Sonda TurbolonSpray<sup>®</sup>

49Sonda APCI

M

ID de parámetro	ID de acceso	Mod	o de iones posi	tivos	Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
TEM <sup>48,49</sup>	TEM <sup>48,49</sup>	0	0	0	0	0	0
		0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750
0	DP	100	100	100	-100	-100	-100
(DP = OR)		0 a 300	0 a 300	0 a 300	–300 a 0	–300 a 0	–300 a 0
Q0	EP	10	10	10	-10	-10	-10
(EP = -Q0)		2 a 15	2 a 15	2 a 15	–15 a –2	–15 a –2	–15 a –2
IQ1	IQ1	Q0 + (-0.5)	Q0 + (-0.5)	Q0 + (-0.5)	Q0 + 0.5	Q0 + 0.5	Q0 + 0.5
(IQ1 = Q0 + desviación)		–0.1 a –2	–0.1 a –2	–0.1 a –2	0.1 a 2	0.1 a 2	0.1 a 2
ST	ST	Q0 + (-8)	Q0 + (8)	Q0 + (-8)	Q0 + 8	Q0 + 8	Q0 + 8
(ST = Q0 + desviación)		–12 a –5	–12 a –5	–12 a –5	12 a 5	12 a 5	12 a 5
RO1	IE1	1	N/D	1	-1	N/D	-1
(IE1 = Q0 - RO1)		0 a 3		0 a 3	–3 a 0		–3 a 0
IQ2	IQ2	Q0 + (-10)	Q0 + (-11)	Q0 + (-10)	Q0 + 10	Q0 + 10	Q0 + 10
(ST = Q0 + desviación)		–30 a –8	–30 a –8	–30 a –8	8 a 30	8 a 30	8 a 30
RO2	RO2	-20	-20	N/D	20	20	N/D
		N/D	N/D		N/D	N/D	

### Tabla M-1 Parámetros del sistema SCIEX Triple Quad<sup>™</sup> 3500 (continuación)

Fuente de iones 144 / 156
ID de parámetro	ID de acceso	M	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS	
RO2	CE	N/D	N/D	30	N/D	N/D	-30	
(CE = QO - RO2)				5 a 180			–180 a -5	
ST3	ST3	RO2 – 10	N/D	N/D	RO2 + 10	N/D	N/D	
(ST3 = RO2 + desviación)		–30 a –5			5 a 30			
ST2	СХР	N/D	15	15	N/D	-15	–15	
(CXP = RO2 - ST3)			0 a 55	0 a 55		-55 a 0	-55 a 0	
RO3	RO3	-50	N/D	N/D	50	N/D	N/D	
		Fixed			Fixed			
RO3	IE3	N/D	1	1	N/D	-1	-1	
(IE3 = RO2 - RO3)			0 a 5	0 a 5		-5 a 0	-5 a 0	
DF	DF	-200	-200	-200	200	200	200	
		–300 a 0	–300 a 0	–300 a 0	0 a 300	0 a 300	0 a 300	
CEM	CEM	2000	2000	2000	2000	2000	2000	
		0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	0 a 3300	
GS1	GS1	20	20	20	20	20	20	
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	

Tabla M-1 Parámetros del sistema SCIEX Triple Quad<sup>™</sup> 3500 (continuación)

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
GS2	GS2	0	0	0	0	0	0
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90
IHT	IHT	150	150	150	150	150	150
		0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250

# Tabla M-1 Parámetros del sistema SCIEX Triple Quad<sup>™</sup> 3500 (continuación)

# Parámetros de los sistemas de la serie 3200

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 N-1 Parámetros de los sistemas de la serie 3200

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos		Modo de iones negativos			
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20	20	20	20	20	20
		10 a 50	10 a 50	10 a 50	10 a 50	10 a 50	10 a 50
CAD <sup>50</sup>	0	2	3	0	2	3	
	Fixed	Fixed	0 a 12	Fixed	Fixed	0 a 12	
CAD <sup>51</sup>	0	2	Medium	0	2	Medium	
	Fixed	Fixed	Low, Medium, High	Fixed	Fixed	Low, Medium, High	
IS <sup>52</sup>	IS <sup>52</sup>	5500	5500	5500	-4200	-4200	-4200
		0 a 5500	0 a 5500	0 a 5500	-4500 a 0	-4500 a 0	-4500 a 0

<sup>50</sup>Sistemas API 3200<sup>™</sup>

<sup>51</sup>Sistemas 3200 QTRAP<sup>®</sup>

<sup>52</sup>Fuente de iones Turbo V<sup>™</sup>

ID de parámetro ID de acceso		Modo	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS	
IS <sup>53</sup>	IS <sup>53</sup>	1000	1000	1000	-1000	-1000	-1000	
		0 a 5500	0 a 5500	0 a 5500	-4500 a 0	-4500 a 0	-4500 a 0	
IS <sup>54</sup>	IS <sup>(4)</sup>	1500	1500	1500	-1500	-1500	-1500	
		0 a 2500	0 a 2500	0 a 2500	–2500 a 0	–2500 a 0	–2500 a 0	
NC <sup>55</sup>	NC <sup>55</sup>	1	1	1	-1	-1	-1	
		0 a 5	0 a 5	0 a 5	-5 a 0	-5 a 0	-5 a 0	
NC <sup>56</sup>	NC <sup>56</sup>	1	3	3	-3	-3	-3	
		0 a 5	0 a 5	0 a 5	-5 a 0	-5 a 0	-5 a 0	
TEM <sup>52,55,54</sup>	TEM <sup>53,55</sup>	0	0	0	0	0	0	
		0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	0 a 750	
0	DP	20	20	20	-20	-20	-20	
(DP = OR)		0 a 400	0 a 400	0 a 400	–400 a 0	–400 a 0	–400 a 0	

<sup>53</sup>Fuente de iones NanoSpray®

<sup>54</sup>Fuente de iones PhotoSpray<sup>®</sup>

<sup>55</sup>Fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup> (1=sonda TurbolonSpray<sup>®</sup> y 2=sonda APCI)

56Sonda APCI

<sup>57</sup>Sonda TurbolonSpray<sup>®</sup>

Fuente de iones 148 / 156

ID de parámetro	ID de acceso	Modo	de iones positiv	OS	Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
Q0	EP	10	10	10	-10	-10	-10
(EP = -Q0)		1 a 12	1 a 12	1 a 12	–12 a –1	–12 a –1	–12 a –1
IQ1	IQ1	Q0 + (-1)	Q0 + (-1)	Q0 + (-1)	Q0 + 1	Q0 + 1	Q0 + 1
(IQ1 = Q0 + desviación)		–2 a –1	–2 a –1	−2 a −1	1 a 2	1 a 2	1 a 2
ST	ST	Q0 + (-5)	Q0 + (5)	Q0 + (-5)	Q0 + 5	Q0 + 5	Q0 + 5
(ST = Q0 + desviación)		–8 a –2	-8 a -2	8 a2	2 a 8	2 a 8	2 a 8
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0.5 a 2	N/D	1 0.5 a 2	–1 −2 a –0,5	N/D	–1 –2 a –0,5
RO1	RO1	N/D	Q0 + (2)	N/D	N/D	Q0 + 2	N/D
(IE1 = Q0 + desviación)			–2 a –0,5			0.5 a 2	
IQ2	CEP	Según la masa	N/D	Según la masa	Según la masa	N/D	Según la masa
(CEP = Q0 - IQ2)		0 a 188		0 a 188	–188 a 0		–188 a 0
IQ2	IQ2	N/D	RO2 + 0	N/D	N/D	RO2 + 0	N/D
(IQ2 = RO2 + desviación)			0 a 2			–2 a 0	

**Pruebas, especificaciones y registro de datos** RUO-IDV-05-7280-ES-C

Fuente de iones 149 / 156

ID de parámetro	ID de acceso	Modo	de iones positiv	/05	Mod	lo de iones neg	ativos
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
RO2	CE	N/D	N/D	30	N/D	N/D	-30
(CE = Q0 - RO2)				5 a 130			–130 a
							-5
RO2	RO2	-100	-20	N/D	100	20	N/D
		–150 a 20	–130 a –5		20 a 150	5 a 130	
IQ3	СХР	N/D	Según la masa	5	N/D	Según la masa	-5
(CXP = RO2 - IQ3)			0 a 58	0 a 58		–58 a 0	–58 a 0
IQ3	IQ3	-125	N/D	N/D	125	N/D	N/D
		–200 a –100			100 a 200		
RO3	IE3	N/D	4	4	N/D	-4	-4
(IE3 = RO2 - RO3)			0.5 a 8	0.5 a 8		–8 a 0.5	–8 a 0.5
RO3	RO3	-150	N/D	N/D	150	N/D	N/D
		–200 a –100			150 a 200		
EX	EX	-200	-200	-200	200	200	200
		N/D	N/D	N/D	N/D	N/D	N/D
DF	DF	-100	-100	-100	100	100	100
		–400 a 0	–400 a 0	–400 a 0	0 a 400	0 a 400	0 a 400

Fuente de iones 150 / 156 Pruebas, especificaciones y registro de datos RUO-IDV-05-7280-ES-C

ID de parámetro ID de acceso		Modo	de iones positiv	OS	Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CEM	CEM	1800	1800	1800	1800	1800	1800
		500 a 3297	500 a 3297	500 a 3297	500 a 3297	500 a 3297	500 a 3297
GS1	GS1	20	20	20	20	20	20
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90
GS2	GS2	0	0	0	0	0	0
		0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90	0 a 90
ihe⁵	ihe	1	1	1	1	1	1
		0 o 1	0 o 1	0 o 1	0 o 1	0 o 1	0 o 1
C2	C2	0	0	0	0	0	0
		N/D	N/D	N/D	N/D	N/D	N/D
ХАЗ	ХАЗ	0	0	0	0	0	0
		N/D	N/D	N/D	N/D	N/D	N/D
XA2	XA2	0	0	0	0	0	0
		N/D	N/D	N/D	N/D	N/D	N/D

<sup>58</sup>1 = Activada y 0 = Desactivada

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos			Modo de iones negativos		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
IHT <sup>53</sup>	IHT	40	40	40	40	40	40
		0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250	0 a 250
svp <sup>59</sup>	svp	1	1	1	1	1	1
		1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2	1 o 2

Tabla N-2 Parámetros del sistema 3200 QTRAP<sup>®</sup> solo para los tipos de análisis LIT

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos	Modo de iones negativos
CAD	CAD	High	High
		Low–Medium–High	Low–High
FI2	CEP	Mass-Speed Dependent	Mass-Speed Dependent
		0 a 188	–188 a 0
ROS	CE	30	-30
(Q0 – RO2)		5 a 130	–5 a –130
AF2 <sup>60</sup>	AF2	100	100
		0 a 200	0 a 200

<sup>59</sup>Fuente de iones DuoSpray<sup>™</sup> (1=sonda TurbolonSpray<sup>®</sup> y 2=sonda APCI)

60Solo MS/MS/MS

Fuente de iones 152 / 156

ID de parámetro	ID de acceso	Modo de iones positivos	Modo de iones negativos
AF3	AF3	Mass-Speed Dependent	Mass-Speed Dependent
		0 a 5	0 a 5
EXB	EXB	Mass-Speed Dependent	Mass-Speed Dependent
		-200 a 0	0 a 200
DF	DF	-400	400
		N/D	N/D
C2B	C2B	Mass-Speed Dependent	Mass-Speed Dependent
		–500 a 500	–500 a 500
CES	CES	0	0
		–50 a 50	–50 a 50

# Tabla N-2 Parámetros del sistema 3200 QTRAP<sup>®</sup> solo para los tipos de análisis LIT (continuación)

# Masas de [Glu<sup>1</sup>]-fibrinopéptido B

Carga	(M+nH)n <sup>+</sup> m/z monoisotópica
+1	1570,6768
+2	785,8421*
+3	524,2305*
+4	393,4247
+5	—
+6	—

## Tabla O-1 [Glu1]-fibrinopéptido B (peso molecular monoisotópico, 1569,6696 Da)

\* Indica los estados cargados que se observan con más frecuencia.

La Tabla O-2 contiene las masas monoisotópicas exactas de las escisiones teóricas de [Glu1]-fibrinopéptido B, según lo calculado para el modo de iones positivos.

lon	es b	lon	es y
m/z	Fragmento	m/z	Fragmento
_	—	1570,6768	EGVNDNEEGFFSAR
130,0499	E	1441,6342	GVNDNEEGFFSAR
187,0713	EG	1384,6128	VNDNEEGFFSAR
286,1397	EGV	1285,5444	NDNEEGFFSAR
400,1827	EGVN	1171,5014	DNEEGFFSAR
515,2096	EGVND	1056,4745	NEEGFFSAR
629,2525	EGVNDN	942,4316	EEGFFSAR
758,2951	EGVNDNE	813,3890	EGFFSAR
887,3377	EGVNDNEE	684,3464	GFFSAR
944,3592	EGVNDNEEG	627,3249	FFSAR
1091,4276	EGVNDNEEGF	480,2565	FSAR
1238,4960	EGVNDNEEGFF	333,1881	SAR

Tabla O-2 lones de fragmentación teóricos de [Glu1]-fibrinopéptido B

lones b		lones y	
1325,5281	EGVNDNEEGFFS	246,1561	AR
1396,5652	EGVNDNEEGFFSA	175,1190	R
1552,6663	EGVNDNEEGFFSAR	_	—

# Tabla O-2 lones de fragmentación teóricos de [Glu1]-fibrinopéptido B (continuación)

# Preparación de una dilución de reserpina de 60:1 (10 pg/µl)

Siga este procedimiento para crear la dilución de reserpina a partir de 1 pmol/µl de reserpina (referencia 4405236).

- 1. Elabore la solución madre añadiendo 4,0 ml de disolvente de dilución al vial.
- 2. Tape el vial y mezcle su contenido suavemente o aplíquele ultrasonidos para disolver el material.

Este paso produce una solución de 1 pmol/µl de reserpina.

- 3. Introduzca 1 ml de solución madre de reserpina en un vial limpio y añada 5 ml de disolvente de dilución.
- 4. Combine 1 ml de la dilución 6:1 y 9 ml de disolvente de dilución.

Este paso produce una dilución de reserpina 60:1.