
Analyst MD-software

Vejledning i manuel afstemning



Dette dokument leveres til kunder, der har købt SCIEX-udstyr, til brug for driften af dette SCIEX-udstyr. Dette dokument er ophavsretligt beskyttet, og enhver reproduktion af dette dokument eller dele af dette dokument er strengt forbudt, medmindre SCIEX skriftligt har givet tilladelse hertil.

Software, som kan være beskrevet i dette dokument, leveres i henhold til en licensaftale. Det er ulovligt at kopiere, ændre eller distribuere softwaren på ethvert medium, medmindre det specifikt er tilladt i licensaftalen. Desuden kan licensaftalen forbyde, at softwaren demonteres, omvendt manipuleres eller dekompileres til ethvert formål. Garantier er som anført i aftalen.

I dele af dette dokument kan der være henvisninger til andre producenter og/eller deres produkter, som kan indeholde dele, hvis navne er registreret som varemærker og/eller fungerer som varemærker tilhørende deres respektive ejere. Enhver sådan brug har kun til formål at betegne disse producenters produkter som leveret af SCIEX til indbygning i dets udstyr og indebærer ikke nogen ret og/eller licens til at bruge eller tillade andre at bruge sådanne producenters og/eller deres produktnavne som varemærker.

SCIEX' garantier er begrænset til de udtrykkelige garantier, der gives på tidspunktet for salg eller licens af dets produkter, og er SCIEX' eneste og eksklusive erklæringer, garantier og forpligtelser. SCIEX giver ingen andre garantier af nogen art, hverken udtrykkelige eller stiltiende, herunder uden begrænsning garantier for salgbarhed eller egnethed til et bestemt formål, uanset om de følger af en lov eller på anden måde af loven eller af en handelspraksis eller handelsbrug, som alle udtrykkeligt fraskrives, og påtager sig intet ansvar eller eventualanvar, herunder indirekte eller følgeskader, for købers brug af produktet eller for eventuelle negative omstændigheder, der måtte opstå som følge heraf.

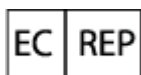
(GEN-IDV-09-10816-D)

Til *in vitro*-diagnostisk brug. Produkt(er) er ikke tilgængeligt/tilgængelige i alle lande. Kontakt din lokale salgsrepræsentant, eller se sciex.com/diagnostics for yderligere oplysninger.

Mærker og/eller registrerede varemærker, der er nævnt heri, herunder tilknyttede logoer, tilhører AB Sciex Pte. Ltd. eller deres respektive ejere i USA og/eller visse andre lande (se sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ anvendes under licens.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



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



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

IVD

CE

UK
CA

Indholdsfortegnelse

Vejledning i manuel afstemning	4
Om afstemning	4
Opløsning og følsomhed	5
Manuel justering af opløsningen	5
Justering af opløsningen på LIT-instrumenter	5
Massekalibrering	6
Manuel massekalibrering	6
Teknisk support	7
Manuel afstemning og kalibrering i quadropoltilstand	7
Valg af en dataopsamlingsmetode	7
Justering af opløsningen	8
Udførelse af massekalibrering i quadropoltilstand	9
Manuel kalibrering af massespektrometeret i LIT-tilstand	11
Valg af dataopsamlingsmetode til manuel kalibrering i LIT-tilstand	11
Udførelse af massekalibrering i LIT-tilstand	12
Ikoner for afstemnings- og kalibreringstilstand	15
 Kontakt os	 16
Kundeuddannelse	16
Online-læringscenter	16
SCIEX	16
Cybersikkerhed	16
Dokumentation	16

Vejledning i manuel afstemning

Brugerne vil lære, hvordan man manuelt afstemmer og kalibrerer et massespektrometer i Quadrupol-tilstand og i lineær ionfældetilstand (LIT).

Forudsætninger

Brugerne skal kunne:

- Opbygge en dataopsamlingsmetode.
- Sende en batch.

Følgende perifere enheder og udstyr foreslås:

- En aktiv hardwareprofil, der indeholder massespektrometeret og sprøjtepumpen.
- PPG eller passende afstemningsløsninger.

Om afstemning

Afstemning maksimerer opløsningen og intensitetsfunktionen af massespektrometeret. Gør følgende under afstemning af et massespektrometer:

- Tilpas opløsningens forskydningsværdier for at justere intensiteten og opløsningen af kalibreringsmasserne (kun for quadrupoltilstand).
- Vælg de masser, der skal kalibreres. Masser kan tilføjes og fjernes fra kalibreringslisten efter behov.
- Opret ét eller flere unikke kalibreringsstandardsæt. Et kalibreringsstandardsæt skal have mindst to forbindelser for de lave og høje ender af det relevante masseområde.

I takt med at massespektrometeret afstemmes og kalibreres, gemmes ændringer i konfigurationen i en `InstrumentData`-fil i API-instrumentmappen. De forudindstillede parametre i API-instrumentmetodemappen bør anvendes, idet de blev optimeret af felt servicemedarbejderen (FSE) under installationen.

Tabel 1: Hyppighed af afstemning

Scanningstype	Kalibrering		Optimering af opløsning	
	Hyppighed	Manuel/ automatisk	Hyppighed	Manuel/ automatisk
Q1 og Q3	3-6 måneder	Begge	3-6 måneder	Begge
LIT	Hver 2. uge efter behov	Begge	3-6 måneder	Kun automatisk

Opløsning og følsomhed

Softwaren bruger foruddefinerede opløsningsværdier for enhed, høj, lav og åben for quadropoltilstanden. For quadropolscanninger er der en balance mellem opløsning og følsomhed. Jo bredere toppen er, jo mere intens vil den være. Det modsatte gælder for smallere toppe. LIT (lineær ionfælde)-opløsning og -følsomhed er ikke forbundet som følge af, hvordan LIT fungerer.

Følgende forskydninger for lav og åben opløsning er typiske, men de kan ændres i overensstemmelse med standarddriftsprocedureerne.

- Lav opløsning (spændingsfald fra enhedsopløsning): 0,03
- Åben opløsning (spændingsfald fra enhedsopløsning): 0,30

Tip! Opløsningsindstillinger kan kontrolleres eller redigeres på fanen Resolution i dialogboksen Tuning Options. For at åbne dialogboksen i **Tune and Calibrate**-tilstand skal du klikke på **Tools > Settings > Tuning Options**.

Manuel justering af opløsningen

Softwaren har fire opløsningsparametre for kvadrupoler: Enhed, høj, lav, og åben. Topbredderne er angivet til 0,7 ($\pm 0,1$ Da FWHH (fuld bredde ved halv højde)) for enheden og 0,5 ($\pm 0,1$) for høj opløsning. Dette gøres ved at justere opløsningsforskydningerne. Softwaren beregner parametrene for lav og åben opløsning ud fra enhedens opløsningsparameter. Justeringer af opløsningsforskydningerne foretages på fanen Resolution i Tune Method Editor.

Q1-opløsningen varieres for LIT-scanninger afhængigt af den anvendte scanning. Q1-opløsningen er fast for ER- og EMS scanninger. Q1-opløsningen for ER-scanninger er forudindstillet til at åbne, hvilket tillader en rimelig bredde af masser i LIT.

Ved EPI- og MS3- angives Q1-opløsning til en vilkårlig af de valgte opløsningsparametre. Dette angives generelt til enhedsopløsningen, men kan angives til en lavere opløsning enten for at tillade et større massevindue i kollisionscellen og vise flere isotoper eller for at øge følsomheden på samme måde som ved kørsel af en MRM-scanning ved lav opløsning.

Ved LIT-scanningstilstande påvirkes opløsningen af scanningshastigheden. Jo langsommere scanningshastighed, jo bedre er opløsningen generelt.

Justering af opløsningen på LIT-instrumenter

Opløsningen af en top bestemmes af toppens masse og dens topbredde. I LIT-tilstand afhænger opløsningen af, hvor hurtigt ionerne masseselektivt skubbes ud fra LIT. For at ændre følsomheden og opløsningen for LIT-scanningstyperne skal du bruge funktionen Instrument Optimization. Se dokumentet: *Brugervejledning til systemet* eller *Analyst MD Softwarehjælp*.

Massekalibrering

Massekalibrering er processen med at tildele de korrekte værdier af masse/ladningsforhold til massetoppe. Ved at udføre en massekalibrering ved hjælp af en kalibreringsstandard, f.eks. polypropylenglycol (PPG), kan resultaterne sammenlignes med en tidligere kalibrering for at bestemme, hvor tæt værdierne for masse/ladning er op de teoretiske værdier. Opdatering af den forrige kalibrering eller mere typisk erstatning med den nye kalibrering.

Vælg flere masser, når Q1-, Q3- og alle LIT-scanninger for hver polaritet kalibreres. Resultaterne gemmes i en kalibreringstabel. Når der udføres en massekalibrering, opdateres kalibreringstabellen med nye DAC-værdier (digital-til-analog-konverter) fra den nye kalibrering. DAC-værdier for masser, som allerede er i kalibreringstabellen, opdateres. Alle data for masser, der ikke er kalibreret i den aktuelle kalibrering, gemmes, men anvendes ikke. Hvis massekalibreringen erstattes, erstattes alle tidligere kalibreringsværdier for alle masser, der er valgt til anvendelse.

Udfør en massekalibrering ved hjælp af et nyerhvervet spektrum, eller brug et spektrum fra en lagret datafil.

Følgende gælder for softwaren, når der foretages en massekalibrering:

1. Finder den største top i søgeområdet for hver valgt masse.
2. Indhenter værdierne for masse, intensitet og topbredde.
3. Sammenligner den observerede masse med den forventede masse og beregner skiftet, hvis det er relevant.
4. Sammenligner topbredden med måltopbredden.
5. Sammenligner intensiteten med den forrige kalibrering.
6. Viser resultaterne i et graf- og tekstformat.
7. Gemmer kalibreringstabellen i instrumentdatafilen i mappen <Drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Data.

Manuel massekalibrering

Efter manuel justering af Q1- og Q3-quadrupolopløsningerne skal kalibreringen kontrolleres. Ændringer af parametrene under en optimering af opløsning kan påvirke den forrige massekalibrering.

Kalibreringsrapporten viser tre grafer: Masseforskydningen, topbredden og intensitetsforskellen.

- Masseforskydningsgrafen viser forskellen mellem de målte masser fra den aktuelle kalibrering og de faktiske masser fra referencetabellen.
- Grafen over topbredden viser topbredden for hver masse sammenlignet med den målbredde, der er valgt i dataopsamlingsmetoden.
- Grafen over intensitetsforskel viser intensitetsforskellen mellem den forrige kalibrering og den aktuelle kalibrering.

Afstemning og kalibrering bør kun udføres af erfarne, og afstemning af bør kun udføres af FSE'er.

Teknisk support

SCIEX og dets repræsentanter har et personale af fuldt uddannede service- og tekniske specialister, der er placeret over hele verden. De kan besvare spørgsmål om systemet eller eventuelle tekniske problemer, der måtte opstå. Besøg webstedet på sciex.com for at få flere oplysninger.

Manuel afstemning og kalibrering i quadrupoltilstand

Juster opløsningen, og udfør en massekalibrering for at afstemme og kalibrere massespektrometeret korrekt.

For hver scanningstype, der anvender en bestemt kalibreringsopløsning, kræves der en anden dataopsamlingsmetode. Der anvendes forskellige kalibreringsopløsninger til kalibrering i positiv og negativ tilstand. Hvis analysen er en delmængde af både scanningstype og polaritet, kan brugeren nøjes med at afstemme én quadrupol, én polaritet eller én opløsningstype i stedet for at udføre hele indstillings- og kalibreringsprocessen for alle kombinationer af quadrupol, polaritet og opløsningstype.

Følg procedurerne i den angivne rækkefølge:

1. [Valg af en dataopsamlingsmetode](#)
2. [Justering af opløsningen](#)
3. [Udførelse af massekalibrering i quadrupoltilstand](#)

Valg af en dataopsamlingsmetode

1. Opret et projekt for at gemme kalibreringsmetoderne og resultaterne.
Dette kan være specifikt for afstemning, eller det kan være en del af et igangværende projekt.
2. Dobbeltklik på **Manual Tuning** på navigationslinjen under **Tune and Calibrate**.
3. Opret en passende dataopsamlingsmetode i Manual Tuning, eller gå til mappen **API Instrument**, og åbn dataopsamlingsmetoden for kalibrering, hvis der anvendes et instrument i 3200MD-serien.

Tip! (Gælder kun for instrumenter i 3200MD-serien) Softwaren installeres ikke med standarddataopsamlingsmetoderne for optimering ved høj opløsning. Den eneste forskel på disse metoder og metoderne til enhedsopløsning (Q1PosPPG.dam, Q1NegPPG.dam, Q3PosPPG.dam og Q3NegPPG.dam) er dog opløsningstypen. Første gang massespektrometeret afstemmes, og de høje opløsningsmetoder er påkrævede, skal du åbne enhedens opløsningsmetoder, ændre opløsningstypen til høj og derefter gemme dem med et andet navn som f.eks. Q1PosPPG_high.dam.

Vejledning i manuel afstemning

4. Tilfør 5 µl/min. til 10 µl/min. af enten PPG-opløsningen til afstemning i Q1- og Q3-positiv tilstand eller PPG 3000, opløsningen til afstemning i Q1- og Q3-negativ tilstand.

Tip! Kopiér metoden, så den originale metode kan opbevares til FSE.

5. Vælg et nyt projekt på projektlisten, og gem derefter metoden under det samme navn.

Justering af opløsningen

Sørg for, at sprayen er stabil.

1. Kontrollér, at afkrydsningsfeltet **MCA** er markeret i Tune Method Editor på fanen MS.
2. Indtast 10 i feltet **Cycles** i afsnittet **Period Summary**.
3. Klik på **Start**.
En massespektrumsrude vises nederst i vinduet Manual Tune.
4. Når massespektrometeret er i tomgang, skal du højreklikke i massespektrumruden og derefter klikke på **Open File**.
I et nyt vindue vises en massespektrumdatafane for hver masse i metoden.
5. Højreklik på én af dataruderne, og klik derefter på **List Data**.
Der åbnes en ny rude med data for spektret. Denne rude indeholder fanerne Data List, Calibration Peak List og Peak List.
6. Åbn fanen Calibration Peak List.

Tip! Denne fane vises kun, hvis indstillingen til at vise den er valgt. Hvis du vil vise fanen Calibration Peak List, skal du klikke på **Tools > Settings > Appearance Options**. på fanen Miscellaneous, markere afkrydsningsfeltet **Show Mass Calibration Peak List** og derefter klikke på **OK**.

7. Hvis målmasserne på listen Calibration Peak ikke stemmer overens med de viste masser, skal du højreklikke på **Calibration Peak List**, klikke på den relevante **Reference**-liste og derefter klikke på **Use as Reference**.
8. Undersøg dataene i **Calibration Peak List**.

Bemærk: Hvis værdierne i kolonnen **Width (Da)** alle er $0,7 \pm 0,1$ Da for enhedsopløsning eller $0,5 \pm 0,1$ Da for høj opløsning, er opløsningen acceptabel.

- Hvis opløsningen er acceptabel, skal du fortsætte med trin 14.
 - Hvis værdierne ikke er inden for den krævede tolerance, skal du fortsætte med trin 9.
9. Luk ruderne, og åbn derefter fanen Resolution i Tune Method Editor.
 10. Klik på **Advanced**.

Dialogboksen Resolution Table åbnes. Denne dialogboks viser kalibreringens topmasser og opløsningens forskydningsværdier for den pågældende scanning.

11. For hver masse, som ikke falder inden for kriterierne for topbredde på $0,7 \pm 0,1$ Da for enhedsopløsning eller $0,5 \pm 0,1$ Da for høj opløsning, skal du justere forskydningen som følger:

- Hvis toppen er for bred, øges forskydningen med 0,05 eller mindre.
 - Hvis toppen er for smal, reduceres forskydningen med 0,05 eller mindre.
12. Klik på **Apply**.
Ændringerne gemmes i filen InstrumentData.
 13. Klik på **Close**.
 14. Gentag trin 1 til 8 for hver massetop, indtil alle toppene på listen Calibration Peak opfylder kriterierne for topbredde på $0,7 \pm 0,1$ Da for enhedsopløsning eller $0,5 \pm 0,1$ Da for høj opløsning.
 15. Klik på **Close**.

Udførelse af massekalibrering i quadrupoltilstand

1. Dobbeltklik på **Manual Tuning** under **Tune and Calibrate** på navigationslinjen.
2. Kontrollér, at afkrydsningsfeltet **MCA** er markeret i Tune Method Editor på fanen MS.
3. Indtast 10 i feltet **Cycles** i afsnittet **Period Summary**.
4. Klik på **Start**.
En massespektrumsrude vises nederst i vinduet Manual Tune.
5. Når massespektrometeret er i tomgang, skal du højreklikke i massespektrumruden og derefter klikke på **Open File**.
I et nyt vindue vises en massespektrumdatafane for hver masse i metoden.
6. Højreklik på én af dataruderne, og klik derefter på **List Data**.
Der åbnes en ny rude, som viser dataene for spektrummet. Denne rude indeholder fanerne Data List, Calibration Peak List og Peak List.
7. Åbn fanen Calibration Peak List.

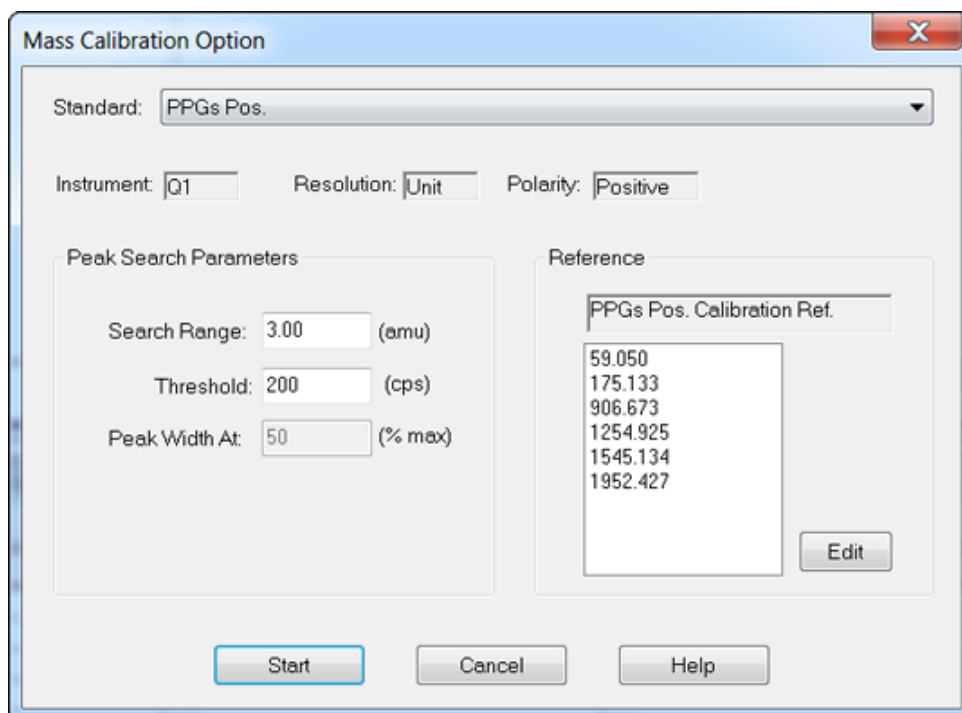
Tip! Denne fane vises kun, hvis indstillingen til at vise den er valgt. Hvis du vil vise fanen Calibration Peak List, skal du klikke på **Tools > Settings > Appearance Options**. på fanen Miscellaneous, markere afkrydsningsfeltet **Show Mass Calibration Peak List** og derefter klikke på **OK**.

8. Undersøg dataene på fanen Calibration Peak List. Hvis værdien i kolonnen **Mass Shift (Da)** er større end 0,1 Da for nogen af masserne, skal du gå videre til næste trin. Ellers er massekalibreringen afsluttet.

Bemærk: Topmærkaterne i grafen er spidsværdierne, men topværdierne i kolonnen **Found At** på fanen Calibration Peak List er massemidtpunktsværdier. Hvis en top ikke er perfekt symmetrisk, kan spidsværdien og massemidtpunktsværdien for den samme top være lidt forskellige. De mere nøjagtige massemidtpunktsværdier anvendes til kalibrering.

9. Klik et vilkårligt sted i en af massespektrumsruderne.
10. Klik på **Tools > Calibrate from Spectrum**.
Dialogboksen Mass Calibration Option åbnes.

Figur 1: Dialogboksen Mass Calibration Option



11. Klik på **PPGs Pos** eller **PPGs Neg** på listen **Standard** i henhold til den polaritet, der angives af den anvendte dataopsamlingsmetode.
12. De forudindstillede parametre for topsøgning er passende i de fleste situationer. Hvis du vil ændre dem, skal du klikke på et felt og derefter indtaste de nye værdier.

Bemærk: På massespektrometre med et større masseområde kan PPG-toppe omkring 2000 give toppe, hvor den mest intense isotop ikke er den første isotop. Dette kan give kalibreringsproblemer. Hvis dette sker, skal du indsnævre søgeområdet til 0,8.

13. Kontrollér, at masserne, der er angivet på listen Reference stemmer overens med dem, der er indsamlet data for. Fortsæt til næste trin, hvis masserne stemmer overens. Gør følgende, hvis masserne ikke stemmer overens:
 - a. Klik på **Edit**.
Dialogboksen Reference Table åbnes.
 - b. Match masserne på listen **Reference** med de masser, der er indsamlet data for, ved at markere eller fjerne markeringerne i afkrydsningsfelterne i kolonnen **Use**.
 - c. Klik på **Update Ref.** for at gemme ændringerne.
 - d. Klik på **Close**.
14. Klik på **Start** for at begynde massekalibreringen.
 - Softwaren finder den største top i søgeområdet for hver masse og bestemmer værdierne for masse, intensitet og topbredde.

- Softwaren sammenligner massen med den forventede masse og bestemmer masseforskydningen, hvis der er nogen, sammenligner topbredden med den ønskede topbredde og sammenligner intensiteten med den forrige kalibrering.
 - Softwaren viser massekalibreringens resultater grafisk og i rapportform.
15. Hvis softwaren ikke har valgt den korrekte top for den ønskede masse, skal du udelukke det pågældende punkt fra kalibreringen.

Tip! Højreklik på det punkt, der skal udelukkes, og klik derefter på **Exclude**.

16. Klik på **Window**, og klik derefter på kalibreringsresultaterne.
Der vises en tekstversion af kalibreringsrapporten.
17. I vinduet Calibration report skal du gøre ét af følgende:
- Klik på **Update Mass Calibration** for at opdatere værdierne for de ændrede masser og for at føje værdierne fra eventuelle nye masser til den eksisterende massekalibrering. Kun de eksisterende kalibreringsværdier for de masser, der blev kalibreret ud fra, overskrives.
 - Hvis du vil erstatte de eksisterende masser og værdier fuldstændigt med de nye masser og værdier, skal du klikke på **Replace Mass Calibration**. Alle de eksisterende kalibreringsværdier overskrives, og alle masser, der ikke er kalibreret ud fra, fjernes fra kalibreringstabellen.
18. Klik på **Save**, så massekalibreringsændringerne træder i kraft.
19. Klik på **Close**.
20. Udfør en MCA med 10 scanninger for at kontrollere kalibreringen.

Bemærk: Gentag kalibreringsproceduren om nødvendigt.

Manuel kalibrering af massespektrometeret i LIT-tilstand

For at kalibrere massespektrometeret i LIT-tilstand skal du udføre en massekalibrering for scanningshastighederne i både positiv og negativ tilstand.

Følg procedurerne i den angivne rækkefølge:

1. [Manuel kalibrering af massespektrometeret i LIT-tilstand](#)
2. [Udførelse af massekalibrering i LIT-tilstand](#)

Valg af dataopsamlingsmetode til manuel kalibrering i LIT-tilstand

1. Tilfør Agilent Mix til PPG 3000 ved 5 µl/min. til 10 µl/min.
2. Dobbeltklik på **Manual Tuning** på navigationslinjen under **Tune and Calibrate**.

3. (3200MD QTRAP-systemer). Opret en korrekt dataopsamlingsmetode med forbedret opløsning ved den valgte scanningshastighed, eller klik på **File > Open**.
4. På listen **Files** skal du vælge en metode fra **API Instrument > Acquisition Methods > QTRAP3200**.
5. Klik på **OK**.
Tune Method Editor viser detaljerne for den valgte metode.
6. Vælg et nyt projekt fra projektlisten, og gem derefter metodedataene.

Udførelse af massekalibrering i LIT-tilstand

1. Kontrollér, at afkrydsningsfeltet **MCA** er markeret i Tune Method Editor på fanen MS.
2. På fanen MS skal du vælge polariteten og scanningshastigheden.
3. På fanen MS i afsnittet **Period Summary** skal du indtaste 50 i feltet **Cycles**.
4. Klik på **Start**.
En massespektrumrude vises nederst i vinduet Manual Tune.
5. Når MS-ikonet viser Idle, skal du højreklikke i massespektrumruden og derefter klikke på **Open File**.
Der åbnes et nyt vindue med hver ion af interesse i en separat rude.
6. Højreklik på én af dataruderne, og klik derefter på **List Data**.
Der åbnes en ny rude, som viser dataene for spektrummet. Denne rude indeholder fanerne Data List, Calibration Peak List og Peak List.
7. Åbn fanen Calibration Peak List.

Tip! Denne fane vises kun, hvis indstillingen til at vise den er valgt. Hvis du vil vise fanen Calibration Peak List, skal du klikke på **Tools > Settings > Appearance Options**. på fanen Miscellaneous, markere afkrydsningsfeltet **Show Mass Calibration Peak List** og derefter klikke på **OK**.

8. Højreklik i tabellen Calibration Peak List, og højreklik derefter i menuen, og sørg for, at den korrekte referencetabel er valgt.
Hvis den korrekte referencetabel ikke er valgt, skal du vælge den korrekte referencetabel og klikke på **Use as Reference**.

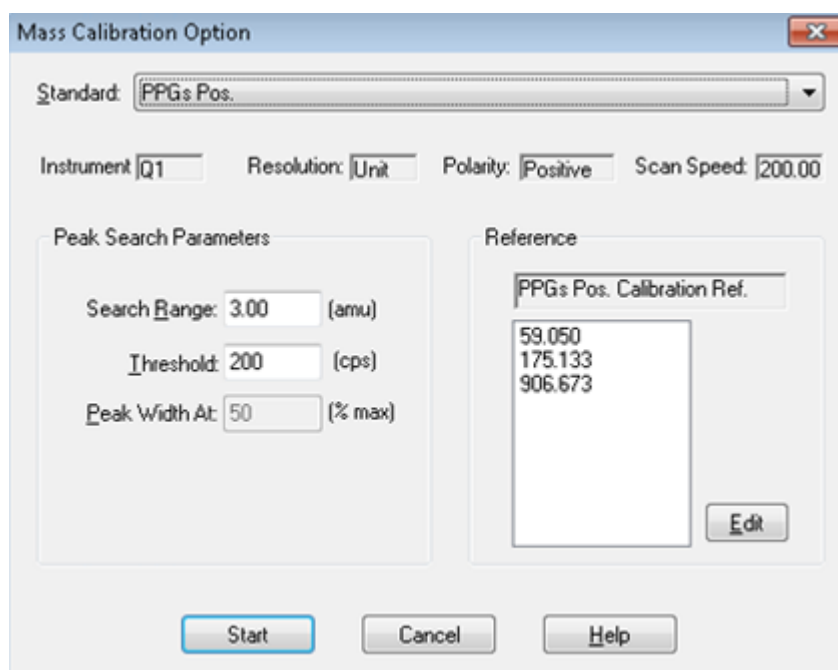
Bemærk: Hvis ikke alle masser vises på fanen **Calibration Peak List**, skal du højreklikke i tabellen Calibration Peak List. I højrekliksmenuen skal du placere markøren på den anvendte referencetabel og derefter klikke på **Edit Reference Table** i undermenuen. I dialogboksen Reference Tabel Edit skal du markere feltet **Use** for de masser, der skal vises på fanen Calibration Peak List og derefter klikke på **Update Ref**.

9. Undersøg dataene på fanen Calibration Peak List. Hvis værdien i kolonnen **Mass Shift (Da)** er større end 0,1 Da for nogen af masserne, skal du gå videre til næste trin. Ellers er massekalibreringen afsluttet.

Bemærk: Topmærkaterne i grafen er spidsværdierne, men topværdierne i kolonnen **Found At** på fanen Calibration Peak List er massemidtpunktsværdier. Hvis en top ikke er perfekt symmetrisk, kan spidsværdien og massemidtpunktsværdien for den samme top være lidt forskellige. De mere nøjagtige massemidtpunktsværdier anvendes til kalibrering.

10. Klik et vilkårligt sted i en af massespektrumsruderne.
11. Klik på **Tools > Calibrate from Spectrum**.
Dialogboksen Mass Calibration Option åbnes.

Figur 2: Dialogboksen Mass Calibration Option



12. Hvis PPG blev brugt som standardopløsning på listen **Standard**, skal du klikke på **PPGs Pos. LIT Ref.** eller **PPGs Neg. LIT Ref.** i henhold til den polaritet, der angives af den anvendte dataopsamlingsmetode.
13. For at ændre Peak Search Parameters skal du klikke på et felt og derefter indtaste de nye værdier.
De forudindstillede Peak Search Parameters er passende i de fleste situationer.
14. Kontroller, at masserne på listen **Reference** stemmer overens med dem, for hvilke der er opsamlet data.

Fortsæt til næste trin, hvis masserne stemmer overens. Hvis masserne ikke stemmer overens, skal du gennemføre følgende trin:

- a. Klik på **Edit**.
Dialogboksen Reference Table åbnes.

- b. Sørg for, at masserne på listen **Reference** stemmer overens med de masser, der er opsamlet data for, ved at markere eller fjerne markeringerne i afkrydsningsfelterne i kolonnen **Use**.
- c. Klik på **Update Ref.** for at gemme ændringerne.

15. Tryk på **Start** for at begynde massekalibreringen.

- Softwaren finder den største top i søgeområdet for hver masse og bestemmer værdierne for masse, intensitet og topbredde.
- Softwaren sammenligner massen med den forventede masse og bestemmer masseforskydningen, hvis der er nogen, sammenligner topbredden med den ønskede topbredde og sammenligner intensiteten med den forrige kalibrering.
- Softwaren viser massekalibreringens resultater grafisk og i rapportform.

Bemærk: Undlad at bruge de midterste grafindikatorer for topbredde, dvs. de stiplede linjer. Disse blev oprettet til quadrupolscanninger og gælder ikke for LIT-scanninger.

16. Klik på **Window**, og klik derefter på kalibreringsresultaterne.

Der vises en tekstversion af kalibreringsrapporten.

17. Undersøg værdierne for hældningsvariationen. De skal være $1,000 \pm 0,002$. Der vil være et **N/A** for det nederste datapunkt, fordi et punkt ikke kan have en hældning.

18. Hvis forskellen er større end 0,002, skal du ikke kalibrere massespektrometeret. Kontakt SCIEX Support på sciex.com/request-support.

19. Hvis tallene for hældningsvariationen er gode, skal du gå til vinduet Calibration report.

20. I vinduet Calibration report skal du gøre ét af følgende:

- Klik på **Update Mass Calibration** for at opdatere værdierne for de ændrede masser og for at føje værdierne fra eventuelle nye masser til den eksisterende massekalibrering. Kun de eksisterende kalibreringsværdier for de masser, der blev kalibreret ud fra, overskrives.
- Hvis du vil erstatte de eksisterende masser og værdier fuldstændigt med de nye masser og værdier, skal du klikke på **Replace Mass Calibration**. Alle de eksisterende kalibreringsværdier overskrives, og alle masser, der ikke er kalibreret ud fra, fjernes fra kalibreringstabellen.










21. Klik på **Save**, så massekalibreringsændringerne træder i kraft.

22. Klik på **Close**.

23. Udfør en MCA med 10 scanninger for at kontrollere kalibreringen.

Bemærk: Gentag kalibreringsproceduren om nødvendigt.

Ikoner for afstemnings- og kalibreringstilstand

Ikon	Navn	Beskrivelse
	Calibrate from spectrum	Åbner dialogboksen Mass Calibration Option og bruger det aktive spektrum til at kalibrere massespektrometeret.
	Manual Tune	Åbner Manual Tune Editor.
	Compound Optimization	Optimerer til en forbindelse ved hjælp af infusion med FIA.
	Instrument Optimization	Kontrollerer instrumentets ydeevne, justerer massekalibreringen eller justerer indstillingerne for massespektrometeret.
	View Queue	Viser prøvekøen.
	Instrument Queue	Viser et fjerninstrument.
	Status for Remote Instrument	Viser status for et fjerninstrument.
	Reserve Instrument for Tuning	Reserverer instrumentet til afstemning og kalibrering.
	IDA Method Wizard	Starter IDA Method Wizard.

Kontakt os

Kundeuddannelse

- I Nordamerika: NA.CustomerTraining@sciex.com
- I Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Uden for EU og Nordamerika kan du besøge sciex.com/education for at få kontaktoplysninger.

Online-læringscenter

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

SCIEX

SCIEX og dets repræsentanter har et personale af fuldt uddannede service- og tekniske specialister, der er placeret over hele verden. De kan besvare spørgsmål om systemet eller eventuelle tekniske problemer, der måtte opstå. Besøg SCIEX hjemmeside på sciex.com eller kontakt os på en af følgende måder for at få yderligere oplysninger:

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

Cybersikkerhed

Besøg [SCIEXsciex.com/productsecurity](http://sciex.com/productsecurity)-produkter.

Dokumentation

Denne version af dokumentet overgår alle tidligere versioner af dette dokument.

Hvis du vil se dette dokument elektronisk, er Adobe Acrobat Reader påkrævet. Gå til <https://get.adobe.com/reader> for at downloade den seneste version.

Se udgivelsesbemærkninger eller software installationsvejledning, der følger med softwaren, for at finde software produktdokumentation.

For at finde hardwareproduktdokumentation henvises der til *kundereference*-DVD'en, der følger med systemet eller komponenten.

Bemærk: Kontakt sciex.com/contact-us for at anmode om en gratis, trykt version af dette dokument.
