
Software Analyst MD

Esercitazione sulla sintonizzazione manuale



Questo documento viene fornito ai clienti che hanno acquistato apparecchiature SCIEX come guida all'utilizzo e al funzionamento delle stesse. Questo documento è protetto da copyright e qualsiasi riproduzione, parziale o totale, dei suoi contenuti è severamente vietata, a meno che SCIEX non abbia autorizzato per iscritto diversamente.

IVD

Il software menzionato in questo documento viene fornito con un contratto di licenza. La copia, le modifiche e la distribuzione del software con qualsiasi mezzo sono vietate dalla legge, salvo diversa indicazione contenuta nel contratto di licenza. Inoltre, il contratto di licenza può vietare che il software venga disassemblato, sottoposto a reverse engineering o decompilato per qualsiasi scopo. Le garanzie sono indicate in questo documento.

Alcune parti di questo documento possono far riferimento a produttori terzi e/o a loro prodotti, che possono contenere parti i cui nomi siano registrati come marchi e/o utilizzati come marchi dei rispettivi proprietari. Tali riferimenti mirano unicamente a designare i prodotti di terzi forniti da SCIEX e incorporati nelle sue apparecchiature e non implicano alcun diritto e/o licenza circa l'utilizzo o il permesso concesso a terzi di utilizzare i nomi di tali produttori e/o dei loro prodotti come marchi.

CE

Le garanzie di SCIEX sono limitate alle garanzie esplicite fornite al momento della vendita o della licenza dei propri prodotti e costituiscono le uniche ed esclusive dichiarazioni, garanzie e obbligazioni di SCIEX. SCIEX non rilascia altre garanzie di nessun tipo, né espresse né implicite, comprese, a titolo di esempio, garanzie di commerciabilità o di idoneità per un particolare scopo, derivanti da leggi o altri atti normativi o dovute a pratiche e usi commerciali, tutte espressamente escluse, né si assume alcuna responsabilità o passività potenziale, compresi danni indiretti o conseguenti, per qualsiasi utilizzo da parte dell'acquirente o per eventuali circostanze avverse conseguenti.

UK
CA

Per uso diagnostico *in vitro*. Prodotti non disponibili in tutti i paesi. Per ulteriori informazioni, contattare il rappresentante di vendita di zona o visitare sciex.com/diagnostics.

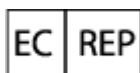
Rx only.

I prodotti potrebbero non essere disponibili in tutti i Paesi. Per ulteriori informazioni, contattare il rappresentante di vendita locale o fare riferimento al sito [Web sciex.com](http://Web.sciex.com).

I marchi e/o i marchi registrati menzionati nel presente documento, inclusi i loghi associati, sono di proprietà di AB Sciex Pte. Ltd., o dei rispettivi proprietari, negli Stati Uniti e/o in altri Paesi (vedere: sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ è utilizzato su licenza.

© 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

Sommario

Esercitazione sulla Sintonizzazione Manuale	5
Informazioni sulla ottimizzazione	5
Risoluzione e sensibilità	6
Regolazione manuale della risoluzione	6
Regolazione della risoluzione su strumenti LIT	7
Calibrazione massa	7
Calibrazione di massa manuale	8
Assistenza tecnica	8
Ottimizzazione e calibrazione manuale in modalità quadrupolo	8
Selezione di un metodo di acquisizione	9
Regolazione della risoluzione	9
Esecuzione di una calibrazione di massa in modalità quadrupolo	10
Calibrazione manuale dello spettrometro di massa in modalità LIT	13
Selezione del metodo di acquisizione per la calibrazione manuale in modalità LIT	13
Esecuzione della calibrazione di massa in modalità LIT	14
Icone modalità di messa a punto e calibrazione	17
 Contatti	 18
Formazione dei clienti	18
Centro di istruzione online	18
Assistenza SCIEX	18
Sicurezza informatica	18
Documentazione	18

Esercitazione sulla Sintonizzazione Manuale

Gli utenti apprenderanno come eseguire manualmente il tuning e la calibrazione di uno spettrometro di massa in modalità quadrupolo e trappola ionica lineare (LIT).

Prerequisiti

Gli utenti devono essere in grado di:

- Generare un metodo di acquisizione.
- Inviare un lotto.

Si consigliano le seguenti periferiche e apparecchiature:

- Un profilo hardware contenente lo spettrometro di massa e la pompa a siringa.
- PPG o soluzioni di sintonizzazione appropriate.

Informazioni sulla ottimizzazione

L'ottimizzazione manuale dei parametri massimizza le prestazioni di risoluzione e intensità dello spettrometro di massa. Quando si sintonizza uno spettrometro di massa, eseguire le seguenti operazioni:

- Regolare i valori di offset della risoluzione per regolare l'intensità e la risoluzione delle masse calibranti (solo per la modalità quadrupolo).
- Selezionare le masse da calibrare. Se necessario, le masse possono essere aggiunte e rimosse dall'elenco della calibrazione.
- Creare uno o più gruppi standard di calibrazione unici. Un gruppo standard di calibrazione deve avere almeno due composti per gli estremi inferiore e superiore del range di massa di interesse.

Quando lo spettrometro di massa è sintonizzato e calibrato, le modifiche della configurazione vengono salvate in un file `InstrumentData` nella cartella API Instrument. È necessario utilizzare i parametri preimpostati nella cartella del metodo API Instrument, perché sono stati ottimizzati dal Responsabile dell'Assistenza Tecnica (FSE) durante l'installazione.

Tabella 1: Frequenza ottimizzazione

Tipo di scansione	Calibrazione		Ottimizzazione risoluzione	
	Frequenza	Manuale/ automatico	Frequenza	Manuale/ automatico
Q1 e Q3	da 3 a 6 mesi	Entrambi	da 3 a 6 mesi	Entrambi

Tabella 1: Frequenza ottimizzazione (continua)

Tipo di scansione	Calibrazione		Ottimizzazione risoluzione	
	Frequenza	Manuale/ automatico	Frequenza	Manuale/ automatico
LIT	Ogni due settimane, secondo necessità	Entrambi	da 3 a 6 mesi	Solo automatico

Risoluzione e sensibilità

Il software utilizza valori predefiniti di risoluzione unitaria, alta, bassa e aperta per la modalità quadrupolo. Per le scansioni a quadrupolo, c'è un equilibrio tra risoluzione e sensibilità. Più il picco è ampio, più sarà intenso. Per picchi più stretti è vero il contrario. La risoluzione e la sensibilità in LIT (trappola ionica lineare) non sono collegate a causa del modo di funzionamento della LIT.

I seguenti offset per risoluzione bassa e aperta sono tipici, ma possono essere modificati secondo procedure operative standard.

- Bassa risoluzione (diminuzione della tensione da risoluzione unitaria): 0,03
- Risoluzione aperta (diminuzione della tensione da risoluzione unitaria): 0,30

Suggerimento! Le impostazioni di risoluzione possono essere verificate o modificate nella scheda Resolution nella finestra di dialogo Tuning Options. Per aprire la finestra di dialogo, in modalità **Tune and Calibrate** fare clic su **Tools > Settings > Tuning Options**.

Regolazione manuale della risoluzione

Il software dispone di quattro parametri di risoluzione per i quadrupoli: unitaria, alta, bassa e aperta. Le larghezze dei picchi sono impostate su 0,7 ($\pm 0,1$ Da FWHH (Full Width at Half Height, larghezza totale a metà altezza)) per risoluzione unitaria e 0,5 ($\pm 0,1$) per alta risoluzione. Questo viene fatto regolando gli offset di risoluzione. Il software calcola i parametri di risoluzione bassa e aperta dal parametro della risoluzione unitaria. Le regolazioni degli offset di risoluzione vengono effettuati nella scheda Resolution in Tune Method Editor.

La risoluzione Q1 varia per le scansioni LIT a seconda della scansione utilizzata. La risoluzione Q1 è fissa per le scansioni ER ed EMS. La risoluzione Q1 per le scansioni ER è preimpostata su aperta, il che consente una ragionevole larghezza delle masse nella LIT.

Per le scansioni EPI e MS3, impostare la risoluzione Q1 su uno dei parametri di risoluzione selezionati. In generale, viene impostata sulla risoluzione unitaria, ma può anche essere impostata su una risoluzione più bassa per consentire una finestra di massa più ampia nella camera di collisione e per mostrare più isotopi oppure per aumentare la sensibilità, in modo analogo all'esecuzione di una scansione MRM a bassa risoluzione.

Per le modalità di scansione LIT, la risoluzione è influenzata dalla velocità di scansione. In generale, più bassa è la velocità di scansione, migliore è la risoluzione.

Regolazione della risoluzione su strumenti LIT

La risoluzione di un picco è determinata dalla massa di tale picco e dalla sua larghezza. Nella modalità LIT, la risoluzione dipende da quanto velocemente gli ioni vengono espulsi dalla LIT a seconda della massa. Per cambiare la sensibilità e la risoluzione dei tipi di scansioni LIT, utilizzare la funzione Instrument Optimization. Fare riferimento al documento: *Guida per l'utente del sistema o Analyst MDGuida in linea del software*.

Calibrazione massa

La calibrazione della massa è il processo di assegnazione dei valori massa/carica corretti ai picchi di massa. Eseguendo una calibrazione della massa con uno standard di calibrazione, come glicole di polipropilene (PPG), confrontare i risultati con una calibrazione precedente per determinare quanto i valori massa/carica per i picchi osservati siano vicino ai valori teorici. Aggiornare la calibrazione precedente oppure, come avviene in generale, sostituirla con quella nuova.

Selezionare più masse quando si calibrano le scansioni Q1, Q3 e tutte le scansioni LIT per ciascuna polarità. I risultati sono archiviati in una tabella di calibrazione. Quando si esegue una calibrazione di massa, si aggiorna la tabella di calibrazione con nuovi valori del convertitore digitale-analogico (DAC) ottenuti dalla nuova calibrazione. I valori DAC delle masse già presenti nella tabella di calibrazione vengono aggiornati. Tutti i dati delle masse non calibrate nell'attuale calibrazione sono mantenuti ma non utilizzati. Se la calibrazione della massa viene sostituita, vengono sostituiti anche tutti i valori di calibrazione precedenti per tutte le masse selezionate per l'uso.

Eseguire una calibrazione della massa utilizzando uno spettro recentemente acquisito oppure utilizzando uno spettro ricavato da un file di dati memorizzato.

Mentre si esegue una calibrazione di massa, il software:

1. Trova il picco più ampio nel range di ricerca per ciascuna massa selezionata.
2. Ottiene i valori di massa, intensità e larghezza di picco.
3. Confronta la massa osservata con la massa prevista e calcola l'eventuale spostamento.
4. Confronta la larghezza del picco con la larghezza del picco target.
5. Confronta l'intensità con la calibrazione precedente.
6. Mostra i risultati in un formato grafico e testo.
7. Salva la tabella di calibrazione nel file di dati strumento nella cartella
<Drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Data.

Calibrazione di massa manuale

Dopo aver regolato manualmente le risoluzioni Q1 e Q3 dei quadrupoli, controllare la calibrazione. Le modifiche apportate ai parametri durante una ottimizzazione della risoluzione possono influire sulla calibrazione di massa precedente.

Il rapporto di calibrazione mostra tre grafici: spostamento della massa, larghezza del picco e differenza di intensità.

- Il grafico dello spostamento della massa mostra la differenza tra le masse misurate nella calibrazione attuale e le masse effettive della tabella di riferimento.
- Il grafico della larghezza del picco mostra la larghezza del picco per ciascuna massa confrontato con la larghezza target selezionata nel metodo di acquisizione.
- Il grafico della differenza di intensità mostra la differenza di intensità tra la calibrazione precedente e quella attuale.

La sintonizzazione e la calibrazione devono essere eseguite solo da operatori esperti e la sintonizzazione dei parametri deve essere eseguita solo dai Responsabili dell'Assistenza Tecnica (FSE).

Assistenza tecnica

SCIEX e i suoi rappresentanti si affidano a uno staff di tecnici di manutenzione e assistenza formati e qualificati, presenti in tutto il mondo. Saranno felici di rispondere a domande sul sistema o su eventuali problemi tecnici che potrebbero sorgere. Per ulteriori informazioni, visitare il sito web all'indirizzo sciex.com.

Ottimizzazione e calibrazione manuale in modalità quadrupolo

Per sintonizzare e calibrare correttamente lo spettrometro di massa, regolare la risoluzione ed eseguire una calibrazione di massa.

Per ciascun tipo di scansione che utilizza una particolare soluzione di calibrazione, è richiesto un metodo di acquisizione diverso. Per la calibrazione in modalità positiva e negativa vengono usate soluzioni di calibrazione diverse. Se l'analisi è un sottoinsieme sia del tipo di scansione che della polarità, l'utente può anche sintonizzare solo un quadrupolo, una polarità oppure un tipo di risoluzione anziché eseguire l'intero processo di sintonizzazione e calibrazione per tutte le combinazioni di quadrupolo, polarità e tipo di risoluzione.

Seguire le procedure nell'ordine indicato:

1. [Selezione di un metodo di acquisizione](#)
2. [Regolazione della risoluzione](#)
3. [Esecuzione di una calibrazione di massa in modalità quadrupolo](#)

Selezione di un metodo di acquisizione

1. Creare un progetto nel quale salvare i metodi di calibrazione e i risultati.
Può essere specifico per la sintonizzazione oppure può fare parte di un progetto di lavoro.
2. Sulla barra di navigazione, in **Tune and Calibrate**, fare doppio clic su **Manual Tuning**.
3. Creare un metodo di acquisizione appropriato in Manual Tune oppure andare alla cartella **API Instrument** e quindi aprire il metodo di acquisizione per la calibrazione se viene utilizzato uno strumento della serie 3200MD.

Suggerimento! (Applicabile solo agli strumenti della serie 3200MD) Il software non è installato con i metodi di acquisizione predefiniti per l'ottimizzazione ad alta risoluzione. Tuttavia, l'unica differenza tra questi metodi e i metodi per la risoluzione unitaria (Q1PosPPG.dam, Q1NegPPG.dam, Q3PosPPG.dam e Q3NegPPG.dam) è data dal tipo di risoluzione. La prima volta che si esegue il tuning lo spettrometro di massa e si richiedono i metodi di alta risoluzione, aprire i metodi di risoluzione unitaria, cambiare il tipo di risoluzione in alta e quindi salvarli con un nome diverso, ad esempio Q1PosPPG_high.dam.

4. Infondere da 5 a 10 µL/min di soluzione PPG per il tuning di Q1 e Q3 in modalità positiva, oppure PPG 3000, soluzione per il tuning di Q1 e Q3 in modalità negativa.

Suggerimento! Copiare il metodo in modo da poter mantenere il metodo originale per il Responsabile dell'Assistenza Tecnica (FSE).

5. Selezionare un nuovo progetto dall'elenco progetti e salvare il metodo con lo stesso nome.

Regolazione della risoluzione

Assicurarsi che la nebulizzazione sia stabile.

1. In Tune Method Editor, nella scheda MS, assicurarsi che la casella di controllo **MCA** sia selezionata.
2. Nella sezione **Period Summary**, nel campo **Cycles**, digitare 10.
3. Fare clic su **Start**.
Nella parte inferiore della finestra Manual Tune viene visualizzato un riquadro dello spettro di massa.
4. Dopo che lo spettrometro di massa è entrato nello stato Idle, fare clic con il pulsante destro del mouse nel riquadro dello spettro di massa, quindi fare clic su **Open File**.
In una nuova finestra, viene mostrato un riquadro dei dati dello spettro di massa per ciascuna massa del metodo.
5. In uno dei riquadri di dati, fare clic con il tasto destro e quindi clic su **List Data**.
Si apre un nuovo riquadro con l'elenco dei dati per lo spettro. Questo riquadro contiene le schede Data List, Calibration Peak List e Peak List.
6. Aprire la scheda Calibration Peak List.

Suggerimento! Questa scheda viene mostrata solo se è selezionata l'opzione di visualizzazione della stessa. Per mostrare la scheda Calibration Peak List, fare clic su **Tools > Settings > Appearance Options**. nella scheda Miscellaneous, selezionare la casella di controllo **Show Mass Calibration Peak List**, quindi fare clic su **OK**.

7. Se le masse target in non corrispondono alle masse mostrate, fare clic con il tasto destro su **Calibration Peak List** Calibration Peak List, fare clic sull'elenco **Reference** appropriato e quindi fare clic su **Use as Reference**.
8. Esaminare i dati nel **Calibration Peak List**.

Nota: Se i valori nella colonna **Width (Da)** sono tutti $0,7 \pm 0,1$ Da per risoluzione unitaria o $0,5 \pm 0,1$ Da per alta risoluzione, la risoluzione è accettabile.

- Se la risoluzione è accettabile, continuare con il passaggio 14.
 - Se i valori non rientrano nella tolleranza richiesta, continuare con il passaggio 9.
9. Chiudere i riquadri e aprire la scheda Resolution in Tune Method Editor.
 10. Fare clic su **Advanced**.

Si apre la finestra di dialogo Resolution Table. Questa finestra elenca le masse dei picchi di calibrazione e i loro valori di offset di risoluzione per tale scansione.
 11. Per ciascuna massa che non rientra nei criteri di larghezza del picco di $0,7 \pm 0,1$ Da per risoluzione unitaria o $0,5 \pm 0,1$ Da per alta risoluzione, regolare l'offset nel modo seguente:
 - Se il picco è troppo ampio, aumentare l'offset di 0,05 o meno.
 - Se il picco è troppo stretto, diminuire l'offset di 0,05 o meno.
 12. Fare clic su **Apply**.
Le modifiche vengono salvate nel file InstrumentData.
 13. Fare clic su **Close**.
 14. Ripetere i passaggi da 1 a 8 per ogni picco di massa finché tutti i picchi in Calibration Peak List non soddisfano i criteri di larghezza del picco di $0,7 \pm 0,1$ Da per risoluzione unitaria o $0,5 \pm 0,1$ Da per alta risoluzione.
 15. Fare clic su **Close**.

Esecuzione di una calibrazione di massa in modalità quadrupolo

1. Sulla barra di navigazione, in **Tune and Calibrate**, fare doppio clic su **Manual Tuning**.
2. In Tune Method Editor, nella scheda MS, assicurarsi che la casella di controllo **MCA** sia selezionata.
3. Nella sezione **Period Summary**, nel campo **Cycles**, digitare 10.
4. Fare clic su **Start**.

Nella parte inferiore della finestra Manual Tune viene visualizzato un riquadro dello spettro di massa.

5. Dopo che lo spettrometro di massa è entrato nello stato Idle, fare clic con il pulsante destro del mouse nel riquadro dello spettro di massa, quindi fare clic su **Open File**. In una nuova finestra, viene mostrato un riquadro dei dati dello spettro di massa per ciascuna massa del metodo.
6. In uno dei riquadri di dati, fare clic con il tasto destro e quindi clic su **List Data**. Si apre un nuovo riquadro che mostra i dati per lo spettro. Questo riquadro contiene le schede Data List, Calibration Peak List e Peak List.
7. Aprire la scheda Calibration Peak List.

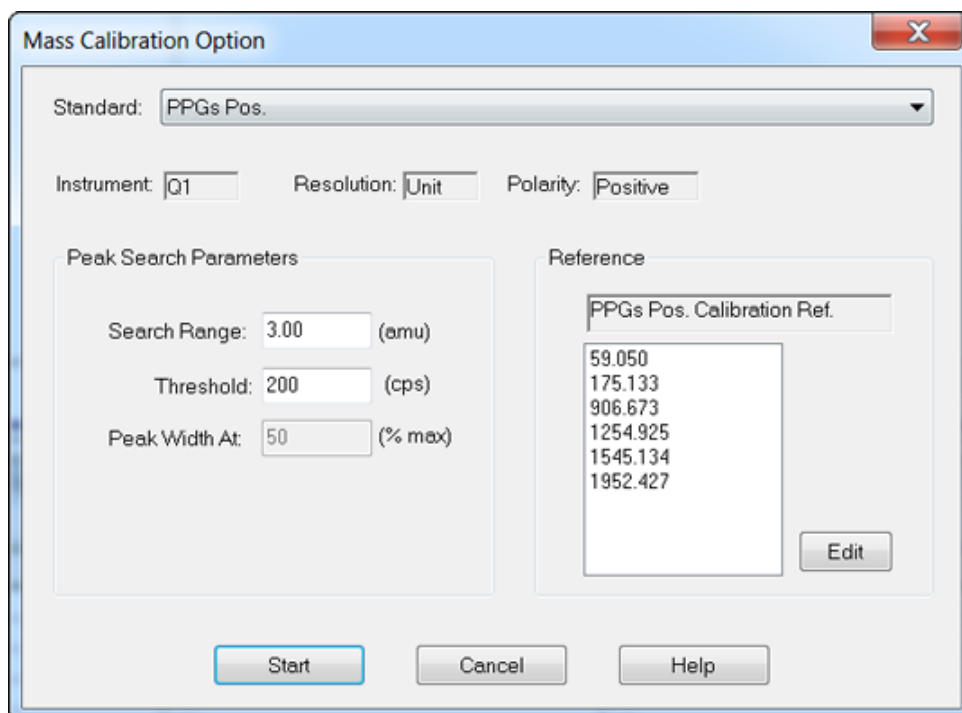
Suggerimento! Questa scheda viene mostrata solo se è selezionata l'opzione di visualizzazione della stessa. Per mostrare la scheda Calibration Peak List, fare clic su **Tools > Settings > Appearance Options**. nella scheda Miscellaneous, selezionare la casella di controllo **Show Mass Calibration Peak List**, quindi fare clic su **OK**.

8. Esaminare i dati nella scheda Calibration Peak List. Se il valore nella colonna **Mass Shift (Da)** è maggiore di 0,1 Da per qualsiasi massa, procedere al passaggio successivo. Altrimenti, la calibrazione di massa è completata.

Nota: Le etichette dei picchi nel grafico sono i valori apice, ma i valori di picco elencati nella colonna **Found At** nella scheda Calibration Peak List sono i valori del centroide. Se un picco non è perfettamente simmetrico, il valore apice e il valore del centroide per lo stesso picco potrebbero essere leggermente differenti. I valori del centroide più precisi sono utilizzati per la calibrazione.

9. Fare clic in un punto qualsiasi in uno dei riquadri dello spettro di massa.
10. Fare clic su **Tools > Calibrate from Spectrum**. Si apre la finestra di dialogo Mass Calibration Option.

Figura 1: Finestra di dialogo Mass Calibration Option



11. Nell'elenco **Standard**, fare clic su **PPGs Pos.** o su **PPGs Neg.** secondo la polarità indicata dal metodo di acquisizione utilizzato.
12. I parametri preimpostati in Peak Search Parameters sono appropriati per la maggior parte delle situazioni. Se si desidera cambiarli, fare clic su un campo e quindi immettere i nuovi valori.

Nota: In spettrometri di massa con un range di massa più ampio, i picchi PPG di circa 2000 possono dare picchi dove l'isotopo più intenso non è il primo isotopo, il che può causare problemi di calibrazione. In questi casi, è possibile restringere l'intervallo di ricerca a 0,8.

13. Verificare che le masse riportate nell'elenco Reference corrispondano a quelle per cui sono stati acquisiti dati. Se le masse corrispondono, procedere al passaggio successivo. Se non corrispondono, eseguire le seguenti operazioni:
 - a. Fare clic su **Edit**.
Si apre la finestra di dialogo Reference Table.
 - b. Abbinare le masse dell'elenco **Reference** alle masse per le quali sono stati acquisiti i dati selezionando o deselezionando le caselle di controllo nella colonna **Use**.
 - c. Fare clic su **Update Ref.** per salvare le modifiche.
 - d. Fare clic su **Close**.
14. Fare clic su **Start** per iniziare la calibrazione di massa.

- Il software trova il picco più ampio nel range di ricerca per ciascuna massa e determina i valori di massa, intensità e larghezza del picco.
 - Il software confronta la massa con la massa prevista e determina l'eventuale spostamento, confronta la larghezza del picco con la larghezza del picco target e confronta l'intensità con la calibrazione precedente.
 - Il software mostra i risultati della calibrazione della massa in un grafico e in forma di rapporto.
15. Se il software non ha selezionato il picco corretto per la massa target, è possibile escludere il punto dalla calibrazione.

Suggerimento! Sul punto da escludere, fare clic con il tasto destro e quindi clic su **Exclude**.

16. Fare clic su **Window** e quindi sui risultati di calibrazione.
Viene visualizzata una versione di testo del report di calibrazione.
17. Nella finestra Calibration report effettuare una delle seguenti operazioni:
- Per aggiornare i valori delle masse modificate e aggiungere i valori di qualsiasi nuova massa alla calibrazione di massa esistente, fare clic su **Update Mass Calibration**. Saranno sovrascritti solo i valori di calibrazione esistenti per le masse che sono state calibrate.
 - Per sostituire completamente le masse e i valori esistenti con nuove masse e valori, fare clic su **Replace Mass Calibration**. Tutti i valori di calibrazione esistenti vengono sovrascritti e qualsiasi massa non calibrata viene rimossa dalla tabella di calibrazione.
18. Affinché le modifiche alla calibrazione di massa vengano applicate, fare clic su **Save**.
19. Fare clic su **Close**.
20. Eseguire una MCA a 10 scansioni per controllare la calibrazione.

Nota: Se necessario, ripetere la procedura di calibrazione.

Calibrazione manuale dello spettrometro di massa in modalità LIT

Per calibrare lo spettrometro di massa in modalità LIT, eseguire una calibrazione di massa per le velocità di scansione in modalità sia positiva che negativa.

Seguire le procedure nell'ordine indicato:

1. [Calibrazione manuale dello spettrometro di massa in modalità LIT](#)
2. [Esecuzione della calibrazione di massa in modalità LIT](#)

Selezione del metodo di acquisizione per la calibrazione manuale in modalità LIT

1. Infondere Agilent Mix o PPG 3000 da 5 µL/min a 10 µL/min.

2. Sulla barra di navigazione, in **Tune and Calibrate**, fare doppio clic su **Manual Tuning**.
3. (sistemi 3200MD QTRAP). Creare un metodo di acquisizione Enhanced Resolution alla velocità di scansione selezionata oppure fare clic su **File > Open**.
4. Nell'elenco **Files**, selezionare un metodo da **API Instrument > Acquisition Methods > QTRAP3200**.
5. Fare clic su **OK**.
Tune Method Editor mostra i dettagli del metodo selezionato.
6. Selezionare un nuovo progetto dall'elenco progetti e salvare i dati del metodo.

Esecuzione della calibrazione di massa in modalità LIT

1. In Tune Method Editor, nella scheda MS, assicurarsi che la casella di controllo **MCA** sia selezionata.
2. Nella scheda MS, selezionare la polarità e la velocità di scansione.
3. Nella scheda MS, nella sezione **Period Summary**, nel campo **Cycles**, digitare 50.
4. Fare clic su **Start**.
Nella parte inferiore della finestra Manual Tune viene visualizzato un riquadro dello spettro di massa.
5. Quando nell'icona MS appare Idle, nel riquadro dello spettro di massa, fare clic con il tasto destro e quindi clic su **Open File**.
Si apre una nuova finestra con ciascun ione di interesse in un riquadro separato.
6. In uno dei riquadri di dati, fare clic con il tasto destro e quindi clic su **List Data**.
Si apre un nuovo riquadro che mostra i dati per lo spettro. Questo riquadro contiene le schede Data List, Calibration Peak List e Peak List.
7. Aprire la scheda Calibration Peak List.

Suggerimento! Questa scheda viene mostrata solo se è selezionata l'opzione di visualizzazione della stessa. Per mostrare la scheda Calibration Peak List, fare clic su **Tools > Settings > Appearance Options**. nella scheda Miscellaneous, selezionare la casella di controllo **Show Mass Calibration Peak List**, quindi fare clic su **OK**.

8. Fare clic con il tasto destro del mouse nella tabella Calibration Peak List e nel menu tasto destro verificare che sia selezionata la tabella di riferimento corretta.
Se non è selezionata la tabella di riferimento corretta, selezionarla e fare clic su **Use as Reference**.

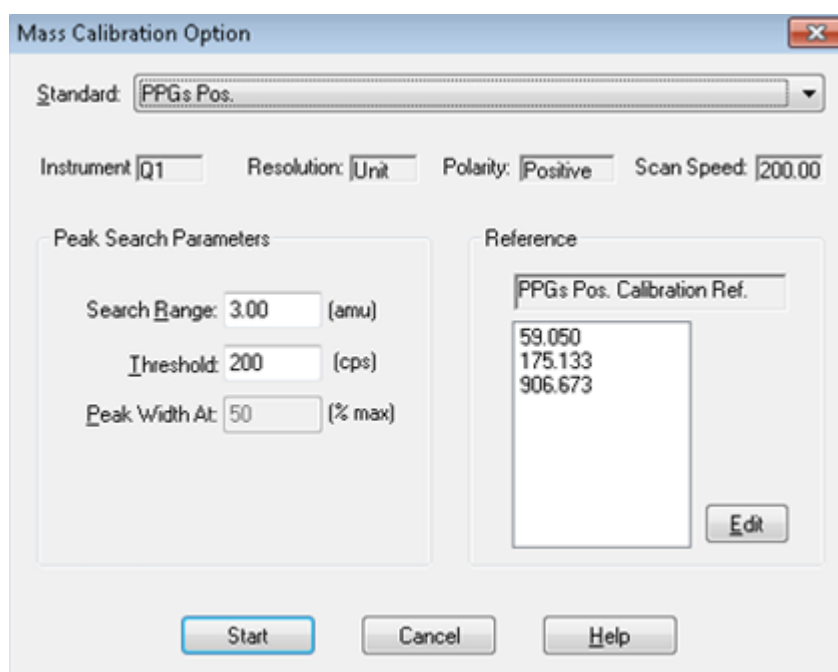
Nota: Se nella scheda **Calibration Peak List** non sono riportate tutte le masse, fare clic con il pulsante destro del mouse nella tabella Calibration Peak List. Nel menu del pulsante destro del mouse, posizionare il cursore sulla tabella di riferimento in uso e, nel menu secondario, fare clic su **Edit Reference Table**. Nella finestra di dialogo Reference Table Edit, selezionare la casella **Use** per le masse da mostrare nella scheda Calibration Peak List, quindi fare clic su **Update Ref**.

9. Esaminare i dati nella scheda Calibration Peak List. Se il valore nella colonna **Mass Shift (Da)** è maggiore di 0,1 Da per qualsiasi massa, procedere al passaggio successivo. Altrimenti, la calibrazione di massa è completata.

Nota: Le etichette dei picchi nel grafico sono i valori apice, ma i valori di picco elencati nella colonna **Found At** nella scheda Calibration Peak List sono i valori del centroide. Se un picco non è perfettamente simmetrico, il valore apice e il valore del centroide per lo stesso picco potrebbero essere leggermente differenti. I valori del centroide più precisi sono utilizzati per la calibrazione.

10. Fare clic in un punto qualsiasi in uno dei riquadri dello spettro di massa.
11. Fare clic su **Tools > Calibrate from Spectrum**.
Si apre la finestra di dialogo Mass Calibration Option.

Figura 2: Finestra di dialogo Mass Calibration Option



12. Nell'elenco **Standard**, se è stata utilizzata PPG come soluzione standard, fare clic su **PPGs Pos. LIT Ref.** o su **PPGs Neg. LIT Ref.** secondo la polarità indicata dal metodo di acquisizione utilizzato.
13. Per modificare i Peak Search Parameters, fare clic su un campo e immettere i nuovi valori.
I parametri preimpostati in Peak Search Parameters sono appropriati per la maggior parte delle situazioni.
14. Controllare che le masse indicate nell'elenco **Reference** corrispondano a quelle per le quali sono stati acquisiti i dati.

Se le masse corrispondono, procedere al passaggio successivo. Se le masse non corrispondono, eseguire le seguenti operazioni:

Esercitazione sulla Sintonizzazione Manuale

- a. Fare clic su **Edit**.

Si apre la finestra di dialogo Reference Table.

- b. Abbinare le masse dell'elenco **Reference** alle masse per le quali sono stati acquisiti i dati selezionando o deselezionando le caselle di controllo nella colonna **Use**.
- c. Fare clic su **Update Ref.** per salvare le modifiche.

15. Premere **Start** per iniziare la calibrazione di massa.










- Il software trova il picco più ampio nel range di ricerca per ciascuna massa e determina i valori di massa, intensità e larghezza del picco.
- Il software confronta la massa con la massa prevista e determina l'eventuale spostamento, confronta la larghezza del picco con la larghezza del picco target e confronta l'intensità con la calibrazione precedente.
- Il software mostra i risultati della calibrazione della massa in un grafico e in forma di rapporto.

Nota: Non utilizzare gli indicatori del grafico della larghezza del picco centrale, cioè le linee tratteggiate. Sono stati creati per le scansioni a quadrupolo e non si applicano alle scansioni LIT.

16. Fare clic su **Window** e quindi sui risultati di calibrazione.
Viene visualizzata una versione di testo del report di calibrazione.
17. Esaminare i valori di variazione della pendenza. Devono essere $1,000 \pm 0,002$. Ci sarà un **N/A** per il punto dati più basso perché un punto non può avere una pendenza.
18. Se la differenza è maggiore di 0,002, non calibrare lo spettrometro di massa. Contattare l'assistenza SCIEX sul sito scieux.com/request-support.
19. Se i numeri della variazione della pendenza sono buoni, andare alla finestra Calibration report.
20. Nella finestra Calibration report effettuare una delle seguenti operazioni:
 - Per aggiornare i valori delle masse modificate e aggiungere i valori di qualsiasi nuova massa alla calibrazione di massa esistente, fare clic su **Update Mass Calibration**. Saranno sovrascritti solo i valori di calibrazione esistenti per le masse che sono state calibrate.
 - Per sostituire completamente le masse e i valori esistenti con nuove masse e valori, fare clic su **Replace Mass Calibration**. Tutti i valori di calibrazione esistenti vengono sovrascritti e qualsiasi massa non calibrata viene rimossa dalla tabella di calibrazione.
21. Affinché le modifiche alla calibrazione di massa vengano applicate, fare clic su **Save**.
22. Fare clic su **Close**.
23. Eseguire una MCA a 10 scansioni per controllare la calibrazione.

Nota: Se necessario, ripetere la procedura di calibrazione.

Icone modalità di messa a punto e calibrazione

Icona	Nome	Descrizione
	Calibrate from spectrum	Apri la finestra di dialogo Mass Calibration Option e utilizza lo spettro attivo per calibrare lo spettrometro di massa.
	Manual Tune	Apri il Manual Tune Editor.
	Compound Optimization	Ottimizza il composto usando l'infusione di FIA.
	Instrument Optimization	Verifica le prestazioni dello strumento, regola la calibrazione di massa o le impostazioni dello spettrometro di massa.
	View Queue	Mostra la coda dei campioni.
	Instrument Queue	Visualizza uno strumento remoto.
	Status for Remote Instrument	Visualizza lo stato di uno strumento remoto.
	Reserve Instrument for Tuning	Prepara lo strumento per la messa a punto e la calibrazione.
	IDA Method Wizard	Avvia IDA Method Wizard.

Contatti

Formazione dei clienti

- In Nord America: NA.CustomerTraining@sciex.com
- In Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Al di fuori dell'Unione Europea e del Nord America, visitare sciex.com/education per trovare le informazioni di contatto.

Centro di istruzione online

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

Assistenza SCIEX

SCIEX e i suoi rappresentanti si affidano a uno staff di tecnici di manutenzione e assistenza formati e qualificati, presenti in tutto il mondo. Saranno felici di rispondere a domande sul sistema o su eventuali problemi tecnici che potrebbero sorgere. Per ulteriori informazioni, visitare il sito web SCIEX all'indirizzo sciex.com oppure è possibile contattarci in uno dei seguenti modi:

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

Sicurezza informatica

Per le ultime indicazioni sulla sicurezza informatica per i prodotti SCIEX, visitare il sito sciex.com/productsecurity.

Documentazione

Questa versione sostituisce tutte le versioni precedenti del documento.

Per visualizzare il documento in formato elettronico, è necessario che sia installato Adobe Acrobat Reader. Per scaricare la versione più recente, visitare il sito Web <https://get.adobe.com/reader>.

Per reperire la documentazione del software del prodotto, fare riferimento alle note sulla versione o alla guida all'installazione del software fornita con il software.

Per reperire la documentazione del prodotto hardware, fare riferimento al DVD *Customer Reference* fornito con il sistema o il componente.

Nota: per richiedere una versione stampata gratuita del presente documento, contattare sciex.com/contact-us.
