

---

# Logiciel Analyst MD

Tutoriel sur le réglage manuel



Ce document est fourni aux clients qui ont acheté un équipement SCiEX afin de les informer sur le fonctionnement de leur équipement SCiEX. Ce document est protégé par les droits d'auteur et toute reproduction de tout ou partie de son contenu est strictement interdite, sauf autorisation écrite de SCiEX.

Le logiciel éventuellement décrit dans le présent document est fourni en vertu d'un accord de licence. Il est interdit de copier, modifier ou distribuer un logiciel sur tout support, sauf dans les cas expressément autorisés dans le contrat de licence. En outre, l'accord de licence peut interdire de décomposer un logiciel intégré, d'inverser sa conception ou de le décompiler à quelque fin que ce soit. Les garanties sont celles indiquées dans le présent document.

Certaines parties de ce document peuvent faire référence à d'autres fabricants ou à leurs produits, qui peuvent comprendre des pièces dont les noms sont des marques déposées ou fonctionnent comme des marques de commerce appartenant à leurs propriétaires respectifs. Cet usage est destiné uniquement à désigner les produits des fabricants tels que fournis par SCiEX intégrés dans ses équipements et n'induit pas implicitement le droit et/ou l'autorisation de tiers d'utiliser ces noms de produits comme des marques commerciales.

Les garanties fournies par SCiEX se limitent aux garanties expressément offertes au moment de la vente ou de la cession de la licence de ses produits. Elles sont les uniques représentations, garanties et obligations exclusives de SCiEX. SCiEX ne fournit aucune autre garantie, quelle qu'elle soit, expresse ou implicite, notamment quant à leur qualité marchande ou à leur adéquation à un usage particulier, en vertu d'un texte législatif ou de la loi, ou découlant d'une conduite habituelle ou de l'usage du commerce, toutes étant expressément exclues, et ne prend en charge aucune responsabilité ou passif éventuel, y compris des dommages directs ou indirects, concernant une quelconque utilisation effectuée par l'acheteur ou toute conséquence néfaste en découlant.

**Usage réservé au diagnostic *in vitro*.** Produit(s) non disponible(s) dans tous les pays. Pour plus d'informations, contactez votre représentant commercial local ou consultez la page [Web.sciex.com/diagnostics](http://Web.sciex.com/diagnostics).

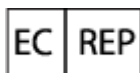
**Rx only.**

**La disponibilité des produits est variable en fonction des pays. Pour plus d'informations, contactez votre représentant commercial local ou consultez la page [sciex.com](http://sciex.com).**

Les marques commerciales et/ou marques déposées mentionnées dans le présent document, y compris les logos associés, appartiennent à AB Sciex Pte. Ltd, ou à leurs propriétaires respectifs, aux États-Unis et/ou dans certains autres pays (voir [sciex.com/trademarks](http://sciex.com/trademarks)).

AB Sciex™ est utilisé sous licence.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



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

IVD

CE

UK  
CA



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

# Table des matières

---

<b>Tutoriel sur le réglage manuel.....</b>	<b>5</b>
À propos du réglage .....	5
Résolution et sensibilité .....	6
Réglage manuel de la résolution .....	6
Réglage de la résolution sur les instruments LIT .....	7
Étalonnage de la masse .....	7
Étalonnage de masse manuel .....	8
Assistance technique .....	8
Régler et étalonner manuellement en mode quadripolaire .....	8
Sélectionner une méthode d'acquisition .....	9
Régler la résolution .....	9
Effectuer l'étalonnage de masse en mode quadripolaire .....	10
Étalonner manuellement le spectromètre de masse en mode LIT .....	13
Sélectionner la méthode d'acquisition pour étalonner manuellement en mode LIT .....	14
Effectuer l'étalonnage de masse en mode LIT .....	14
Icônes du mode Tune and Calibrate .....	17
 <b>Nous contacter .....</b>	 <b>18</b>
Formation destinée aux clients .....	18
Centre d'apprentissage en ligne .....	18
Assistance technique SCIEX .....	18
Cybersécurité .....	18
Documentation .....	18

# Tutoriel sur le réglage manuel

L'utilisateur apprendra à régler et étalonner manuellement un spectromètre de masse en mode quadripolaire et en mode piège à ions linéaire (LIT).

## Conditions préalables

Les utilisateurs doivent être en mesure de :

- créer une méthode d'acquisition,
- envoyer un lot.

Les périphériques et les équipements suivants sont conseillés :

- Un profil matériel actif contenant le spectromètre de masse et une pompe à seringue.
- PPG ou solutions de réglage appropriées.

## À propos du réglage

Le réglage optimise les performances du spectromètre de masse en termes de résolution et d'intensité. Lors du réglage du spectromètre de masse, effectuez les actions suivantes :

- Réglez les valeurs de décalage de la résolution afin de régler l'intensité et la résolution des masses étalons (pour le mode quadripolaire uniquement).
- Sélectionnez les masses à étalonner. Au besoin, les masses peuvent être ajoutées et supprimées de la liste d'étalonnage.
- Créez un ou plusieurs ensembles de standards d'étalonnage uniques. Un ensemble de standards d'étalonnage doit comporter au moins deux composés pour les extrémités haute et basse de la plage de masses concernée.

Dès que le spectromètre de masse est réglé et étalonné, les modifications apportées à la configuration sont enregistrées dans un fichier `InstrumentData` contenu dans le dossier API Instrument. Les paramètres prédéfinis contenus dans le dossier relatif à la méthode de l'API Instrument doivent être utilisés, car ils ont été optimisés par les employés d'entretien sur site (FSE) pendant l'installation.

**Tableau 1 : Fréquence de réglage**

Type de balayage	Étalonnage		Optimisation de la résolution	
	Fréquence	Manuel/ Automatique	Fréquence	Manuel/ Automatique
Q1 et Q3	3 à 6 mois	Les deux	3 à 6 mois	Les deux

Tableau 1 : Fréquence de réglage (suite)

Type de balayage	Étalonnage		Optimisation de la résolution	
	Fréquence	Manuel/ Automatique	Fréquence	Manuel/ Automatique
LIT	Toutes les deux semaines, comme requis	Les deux	3 à 6 mois	Automatique uniquement

## Résolution et sensibilité

Le logiciel utilise des valeurs de résolution unitaire, élevée, faible et ouverte prédéfinies pour le mode quadripolaire. Pour les balayages quadripolaires, il existe un équilibre entre la résolution et la sensibilité. Plus le pic est large, plus il est intense. Le contraire est valable pour les pics plus étroits. La sensibilité et la résolution LIT (trappe à ions linéaire) ne sont pas liées en raison du mode de fonctionnement de la LIT.

Les écarts suivants pour une faible résolution et une résolution ouverte sont typiques, mais peuvent être modifiés selon les modes opératoires normalisés.

- Faible résolution (la tension diminue à partir de la résolution unitaire) : 0,03
- Résolution ouverte (la tension diminue à partir de la résolution unitaire) : 0,30

---

**Conseil !** Les paramètres de résolution peuvent être vérifiés ou modifiés dans l'onglet Resolution de la boîte de dialogue Tuning Options. Pour ouvrir la boîte de dialogue, dans le mode **Tune and Calibrate**, cliquez sur **Tools > Settings > Tuning Options**.

---

## Réglage manuel de la résolution

Le logiciel est doté de quatre paramètres pour les résolutions quadripolaires : Unit, High, Low et Open. Les largeurs de pic sont définies sur 0,7 ( $\pm 0,1$  Da LMH (pleine largeur à mi-hauteur)) pour la résolution unitaire et sur 0,5 ( $\pm 0,1$ ) pour la haute résolution. Ceci s'effectue en réglant les écarts de résolution. Le logiciel calcule les paramètres de faible résolution et de résolution ouverte à partir du paramètre de résolution unitaire. Les réglages apportés aux écarts de résolution sont effectués dans l'onglet Resolution du Tune Method Editor.

La résolution Q1 varie pour les balayages LIT selon le balayage utilisé. La résolution Q1 est fixée pour les balayages ER et EMS. La résolution Q1 des balayages ER est prédéfinie sur ouverte, ce qui permet de faire entrer une largeur conséquente de masses dans la LIT.

Pour les balayages EPI et MS3, l'utilisateur peut définir la résolution Q1 sur les paramètres de résolution sélectionnés. En règle générale, la résolution définie est Unit, mais elle peut aussi être définie à une résolution inférieure, soit pour laisser entrer une plus grande plage de masses dans la cellule de collision et afficher plus d'isotopes, soit pour augmenter la sensibilité comme pour exécuter un balayage MRM à faible résolution.

Pour les modes de balayage LIT, la résolution est affectée par la vitesse de balayage. D'une manière générale, plus la vitesse de balayage est lente, meilleure est la résolution.

## Réglage de la résolution sur les instruments LIT

La résolution d'un pic est déterminée par sa masse et sa largeur. En mode LIT, la résolution dépend de la vitesse à laquelle les ions sont éjectés de l'instrument LIT en fonction de leur masse. Pour modifier la sensibilité et la résolution des types de balayage LIT, utilisez la fonction Instrument Optimization. Consultez le *Guide de l'utilisateur du système* ou l'*Aide du logiciel Analyst MD*.

## Étalonnage de la masse

L'étalonnage de masse est le processus consistant à attribuer les rapports masse sur charge corrects aux pics de masse. En effectuant un étalonnage de masse à l'aide d'un étalon de calibrage, tel que le polypropylène glycol (PPG), comparez les résultats avec un étalonnage précédent afin de comparer les rapports masse sur charge pour les pics observés aux valeurs théoriques. Mettez à jour l'étalonnage précédent ou, de manière plus courante, remplacez-le par le nouvel étalonnage.

Sélectionnez plusieurs masses lors de l'étalonnage des balayages de Q1, de Q3 et de tous les balayages LIT pour chaque polarité. Les résultats sont enregistrés dans un tableau d'étalonnage. Lors d'un étalonnage de masse, le tableau d'étalonnage est mis à jour avec les nouvelles valeurs de convertisseur numérique-analogique (DAC) issues du nouvel étalonnage. Les valeurs DAC pour les masses se trouvant déjà dans le tableau d'étalonnage sont mises à jour. Toutes les données des masses non calibrées dans l'étalonnage actuel sont conservées mais non utilisées. Si l'étalonnage de masse est remplacé, toutes les valeurs d'étalonnage antérieures correspondant à toutes les masses sélectionnées pour être utilisées sont remplacées.

Effectuez un étalonnage de masse à l'aide d'un nouveau spectre acquis, ou utilisez un spectre issu d'un fichier de données stocké.

Lors de l'étalonnage de masse, le logiciel :

1. Cherche le plus grand pic dans la plage de recherche pour chaque masse sélectionnée.
2. Obtient les valeurs de la masse, de l'intensité et de la largeur du pic.
3. Compare la masse observée avec la masse attendue, et détermine l'écart, s'il y a lieu.
4. Compare la largeur du pic avec celle du pic cible.
5. Compare l'intensité avec l'étalonnage précédent.
6. Affiche les résultats sous forme de graphique et de texte.
7. Enregistre le tableau d'étalonnage dans le fichier de données d'instrument du dossier  
<Drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Data

## Étalonnage de masse manuel

Après le réglage manuel des résolutions quadripolaires Q1 et Q3, vérifiez l'étalonnage. Les modifications apportées aux paramètres pendant l'optimisation de la résolution peut influencer sur l'étalonnage de masse précédent.

Le rapport d'étalonnage affiche trois graphiques : la variation de masse, la largeur du pic et la différence d'intensité.

- Le graphique de la variation de masse présente la différence entre les masses mesurées à partir de l'étalonnage actuel et les masses réelles issues du tableau de référence.
- Le graphique de largeur du pic présente la largeur du pic pour chaque masse par rapport à la largeur cible sélectionnée dans la méthode d'acquisition.
- Le graphique de différence d'intensité présente la différence d'intensité entre l'étalonnage précédent et l'étalonnage actuel.

Le réglage et l'étalonnage doivent être effectués uniquement par des opérateurs expérimentés et les paramètres de réglage par les techniciens de service (FSE).

## Assistance technique

SCIEX et ses représentants disposent de personnel dûment qualifié et de spécialistes techniques dans le monde entier. Ils peuvent répondre aux questions sur le système ou à tout problème technique qui pourrait survenir. Pour plus d'informations, visitez le site Web à l'adresse [sciex.com](https://www.sciex.com).

## Régler et étalonner manuellement en mode quadripolaire

Afin de régler et étalonner correctement le spectromètre de masse, réglez la résolution et effectuez un étalonnage de masse.

Pour chaque type de balayage utilisant une solution d'étalonnage particulière, une méthode d'acquisition distincte est requise. Plusieurs solutions d'étalonnage sont utilisées pour l'étalonnage en mode positif et négatif. Si l'analyse est un sous-ensemble du type de balayage et de la polarité, l'utilisateur peut également régler juste un type de quadripôle, un type de polarité ou un type de résolution au lieu d'effectuer un processus complet de réglage et d'étalonnage pour toutes les combinaisons de type de quadripôle, de polarité et de résolution.

Suivez les procédures dans l'ordre indiqué :

1. [Sélectionner une méthode d'acquisition](#)
2. [Régler la résolution](#)
3. [Effectuer l'étalonnage de masse en mode quadripolaire](#)



---

## Sélectionner une méthode d'acquisition

1. Créez un projet pour enregistrer les méthodes et résultats d'étalonnage.  
Ce projet peut être destiné au réglage ou faire partie d'un projet.
2. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Manual Tuning**.
3. Créez une méthode d'acquisition appropriée dans Manual Tune ou accédez au dossier **API Instrument**, puis ouvrez la méthode d'acquisition pour l'étalonnage en cas d'utilisation d'un instrument de la série 3200MD.

---

**Conseil ! (Applicable uniquement à la série d'instruments 3200MD)** Le logiciel n'est pas installé avec les méthodes d'acquisition par défaut pour une optimisation à haute résolution. Toutefois, la seule différence entre ces méthodes et les méthodes de résolution unitaire (Q1PosPPG.dam, Q1NegPPG.dam, Q3PosPPG.dam et Q3NegPPG.dam) demeure dans le type de résolution. Lors du réglage initial du spectromètre de masse et si des méthodes de haute résolution sont nécessaires, ouvrez les méthodes de résolution Unit, réglez le type de résolution sur High, puis enregistrez-les sous un autre nom tel que Q1PosPPG\_high.dam.

---

4. Perfusez 5 à 10 µl/min de solution PPG pour le réglage de Q1 et Q3 en mode positif, ou de solution PPG 3 000 pour le réglage en mode négatif Q1 et Q3.

---

**Conseil !** Copiez la méthode afin de conserver la méthode d'origine pour le technicien de service.

---

5. Sélectionnez un nouveau projet dans la liste de projets, puis enregistrez la méthode avec le même nom.

## Régler la résolution

Assurez-vous que la pulvérisation est stable.

1. Dans Tune Method Editor, sous l'onglet MS, vérifiez que la case **MCA** est cochée.
2. Dans la section **Period Summary**, dans le champ **Cycles**, saisissez 10.
3. Cliquez sur **Start**.  
Un volet du spectre de masse s'affiche dans la partie inférieure de la fenêtre Manual Tune.
4. Une fois le spectromètre de masse en veille, cliquez avec le bouton droit de la souris sur ce volet, puis cliquez sur **Open File**.  
Dans une nouvelle fenêtre, un volet de données du spectre de masse s'ouvre pour chaque masse de la méthode.
5. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'un des volets de données, puis cliquez sur **List Data**.  
Un nouveau volet s'ouvre, affichant la liste des données du spectre. Ce volet contient les onglets Data List, Calibration Peak List et Peak List.
6. Ouvrez l'onglet Calibration Peak List.

**Conseil !** Cet onglet ne s'affiche que lorsque l'option pour l'afficher est sélectionnée. Pour afficher l'onglet Calibration Peak List, cliquez sur **Tools > Settings > Appearance Options**. dans l'onglet Miscellaneous, cochez la case **Show Mass Calibration Peak List**, puis cliquez sur **OK**.

---

7. Si les masses cibles de la liste des pics d'étalonnage ne correspondent pas aux masses affichées, cliquez avec le bouton droit de la souris sur **Calibration Peak List**, cliquez sur la liste **Reference** appropriée, puis cliquez sur **Use as Reference**.
8. Vérifiez les données de la liste **Calibration Peak List**.

**Remarque :** Si les valeurs de la colonne **Width (Da)** sont toutes égales à  $0,7 \pm 0,1$  Da pour la résolution unitaire ou  $0,5 \pm 0,1$  Da pour la résolution haute, la résolution est acceptable.

---

- Si la résolution est acceptable, continuez avec l'étape 14.
  - Si les valeurs ne correspondent pas à la tolérance requise, passez à l'étape suivante 9.
9. Fermez les volets, puis dans le Tune Method Editor, cliquez sur l'onglet Resolution.
  10. Cliquez sur **Advanced**.

La boîte de dialogue Resolution Table s'ouvre. Cette boîte de dialogue répertorie les masses de pic d'étalonnage et leurs valeurs de décalage de résolution pour ce balayage.
  11. Pour chaque masse ne répondant pas aux critères de largeur de pic de  $0,7 \pm 0,1$  Da pour la résolution unitaire ou  $0,5 \pm 0,1$  Da pour la résolution haute, réglez l'écart comme suit :
    - Si le pic est trop large, augmentez l'écart de 0,05 ou moins.
    - Si le pic est trop étroit, diminuez l'écart de 0,05 ou moins.
  12. Cliquez sur **Apply**.

Les modifications sont enregistrées dans le fichier InstrumentData.
  13. Cliquez sur **Close**.
  14. Répétez les étapes 1 à 8 pour chaque pic de masse jusqu'à ce que tous les pics de la Calibration Peak List répondent aux critères de la largeur de pic de  $0,7 \pm 0,1$  Da pour la résolution unitaire ou  $0,5 \pm 0,1$  Da pour la résolution haute.
  15. Cliquez sur **Close**.

## Effectuer l'étalonnage de masse en mode quadripolaire

1. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Manual Tuning**.
2. Dans Tune Method Editor, sous l'onglet MS, vérifiez que la case **MCA** est cochée.
3. Dans la section **Period Summary**, dans le champ **Cycles**, saisissez 10.
4. Cliquez sur **Start**.

Un volet du spectre de masse s'affiche dans la partie inférieure de la fenêtre Manual Tune.

5. Une fois le spectromètre de masse en veille, cliquez avec le bouton droit de la souris sur ce volet, puis cliquez sur **Open File**.  
Dans une nouvelle fenêtre, un volet de données du spectre de masse s'ouvre pour chaque masse de la méthode.
6. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'un des volets de données, puis cliquez sur **List Data**.  
Un nouveau volet s'ouvre, affichant les données du spectre. Ce volet contient les onglets Data List, Calibration Peak List et Peak List.
7. Ouvrez l'onglet Calibration Peak List.

---

**Conseil !** Cet onglet ne s'affiche que lorsque l'option pour l'afficher est sélectionnée. Pour afficher l'onglet Calibration Peak List, cliquez sur **Tools > Settings > Appearance Options**. dans l'onglet Miscellaneous, cochez la case **Show Mass Calibration Peak List**, puis cliquez sur **OK**.

---

8. Vérifiez les données dans l'onglet Calibration Peak List. Si la valeur de la colonne **Mass Shift (Da)** est supérieure à 0,1 Da pour l'une des masses, passez à l'étape suivante. Dans le cas contraire, l'étalonnage de masse est terminé.

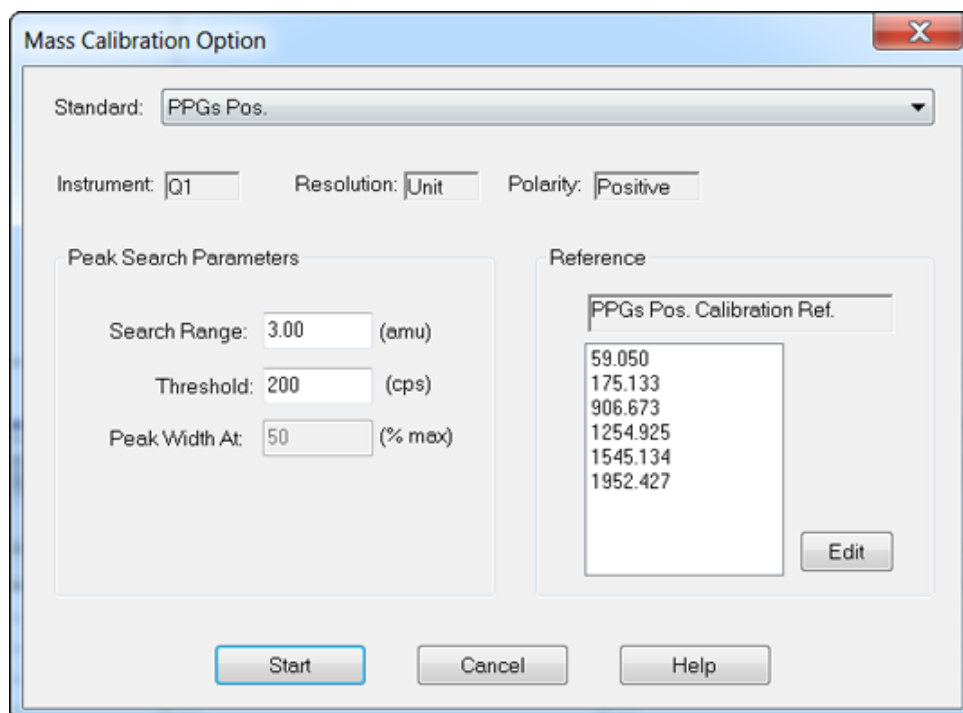
---

**Remarque :** Les étiquettes des pics dans le graphique correspondent aux valeurs des points culminants, mais les valeurs de pic répertoriées dans la colonne **Found At** de l'onglet Calibration Peak List sont les valeurs du centroïde. Si un pic n'est pas parfaitement symétrique, la valeur du point culminant et la valeur du centroïde pour le même pic pourraient alors différer légèrement. Les valeurs les plus précises du centroïde sont utilisées pour l'étalonnage.

---

9. Cliquez n'importe où dans l'un des volets du spectre de masse.
10. Cliquez sur **Tools > Calibrate from Spectrum..**.  
La boîte de dialogue Mass Calibration Option s'ouvre.

### Illustration 1 : Boîte de dialogue Mass Calibration Option



11. Dans la liste **Standard**, cliquez sur **PPGs Pos.** ou **PPGs Neg.** selon la polarité indiquée par la méthode d'acquisition utilisée.
12. Les paramètres de recherche de pics prédéfinis dans la section Peak Search Parameters conviennent à la plupart des situations. Si l'utilisateur souhaite les modifier, cliquez sur un champ, puis saisissez les nouvelles valeurs.

**Remarque :** Sur les spectromètres de masse à plage de masses plus large, les pics de PPG aux alentours de 2 000 peuvent donner des pics où l'isotope le plus intense n'est pas le premier, ce qui peut provoquer des problèmes d'étalonnage. Dans ce cas, réduisez la plage de recherche à 0,8.

13. Vérifiez que les masses répertoriées dans la liste Reference correspondent à celles pour lesquelles les données sont acquises. Si les masses correspondent, passez à l'étape suivante. Sinon, procédez comme suit :
  - a. Cliquez sur **Edit**.

La boîte de dialogue Reference Table s'ouvre.
  - b. Faites correspondre les masses de la liste **Reference** avec celles pour lesquelles les données sont acquises en cochant ou en décochant les cases de la colonne **Use**.
  - c. Cliquez sur **Update Ref.** pour enregistrer les modifications.
  - d. Cliquez sur **Close**.
14. Cliquez sur **Start** pour lancer l'étalonnage de masse.

- Le logiciel cherche le plus grand pic dans la plage de recherche pour chaque masse et détermine les valeurs de la masse, l'intensité et la largeur du pic.
  - Le logiciel compare la masse avec celle attendue et détermine la variation de masse, le cas échéant. Il compare la largeur du pic avec la largeur du pic cible et compare l'intensité avec l'étalonnage précédent.
  - Le logiciel affiche les résultats de l'étalonnage de masse sous forme graphique et sous forme de rapport.
15. Si le logiciel n'a pas sélectionné le bon pic pour la masse cible, excluez le point de l'étalonnage.

---

**Conseil !** Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le point à exclure, puis cliquez sur **Exclude**.

---

16. Cliquez sur **Window**, puis cliquez sur les résultats d'étalonnage. Une version texte du rapport d'étalonnage s'affiche.
17. Dans la fenêtre Calibration report, effectuez l'une des opérations suivantes :
- Pour mettre à jour les valeurs des masses modifiées et ajouter les valeurs des nouvelles masses à l'étalonnage de masse existant, cliquez sur **Update Mass Calibration**. Seules les valeurs d'étalonnage existantes pour les masses qui ont été étalonnées sont remplacées.
  - Pour remplacer définitivement les masses et les valeurs existantes par les nouvelles masses et valeurs, cliquez sur **Replace Mass Calibration**. Toutes les valeurs d'étalonnage existantes sont remplacées et toute masse non étalonnée est supprimée du tableau d'étalonnage.
18. Pour valider les modifications apportées à l'étalonnage de masse, cliquez sur **Save**.
19. Cliquez sur **Close**.
20. Effectuez un MCA à 10 balayages pour vérifier l'étalonnage.

---

**Remarque :** Répétez la procédure d'étalonnage au besoin.

---

## Étalonner manuellement le spectromètre de masse en mode LIT

Pour étalonner le spectromètre de masse en mode LIT, effectuez un étalonnage de masse pour les vitesses de balayage aussi bien en mode positif que négatif.

Suivez les procédures dans l'ordre indiqué :

1. [Étalonner manuellement le spectromètre de masse en mode LIT](#)
2. [Effectuer l'étalonnage de masse en mode LIT](#)

## Sélectionner la méthode d'acquisition pour étalonner manuellement en mode LIT

1. Perfusez le mélange Agilent ou PPG 3 000 à un débit de 5 à 10 µl/min.
2. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Manual Tuning**.
3. (systèmes 3200MD QTRAP). Créez une méthode d'acquisition à résolution améliorée à une vitesse de balayage appropriée ou cliquez sur **File > Open**.
4. Dans la liste **Files**, sélectionnez une méthode dans **API Instrument > Acquisition Methods > QTRAP3200**.
5. Cliquez sur **OK**.  
Le Tune Method Editor affiche les détails de la méthode sélectionnée.
6. Sélectionnez un nouveau projet dans la liste des projets, puis enregistrez les données de la méthode.

## Effectuer l'étalonnage de masse en mode LIT

1. Dans Tune Method Editor, sous l'onglet MS, vérifiez que la case **MCA** est cochée.
2. Dans l'onglet MS, sélectionnez la polarité et la vitesse de balayage.
3. Dans l'onglet MS, dans la section **Period Summary**, dans le champ **Cycles**, saisissez 50.
4. Cliquez sur **Start**.  
Un volet du spectre de masse s'affiche dans la partie inférieure de la fenêtre Manual Tune.
5. Lorsque l'icône MS affiche Idle, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le volet du spectre de masse, puis sélectionnez **Open File**.  
Une nouvelle fenêtre s'ouvre avec chaque ion concerné dans un volet séparé.
6. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'un des volets de données, puis cliquez sur **List Data**.  
Un nouveau volet s'ouvre, affichant les données du spectre. Ce volet contient les onglets Data List, Calibration Peak List et Peak List.
7. Ouvrez l'onglet Calibration Peak List.

---

**Conseil !** Cet onglet ne s'affiche que lorsque l'option pour l'afficher est sélectionnée. Pour afficher l'onglet Calibration Peak List, cliquez sur **Tools > Settings > Appearance Options**. dans l'onglet Miscellaneous, cochez la case **Show Mass Calibration Peak List**, puis cliquez sur **OK**.

---

8. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau Calibration Peak List, puis vérifiez que le tableau de référence sélectionné dans le menu contextuel est correct.  
Si le tableau de référence correct n'est pas sélectionné, choisissez le tableau de référence correct et cliquez sur **Use as Reference**.

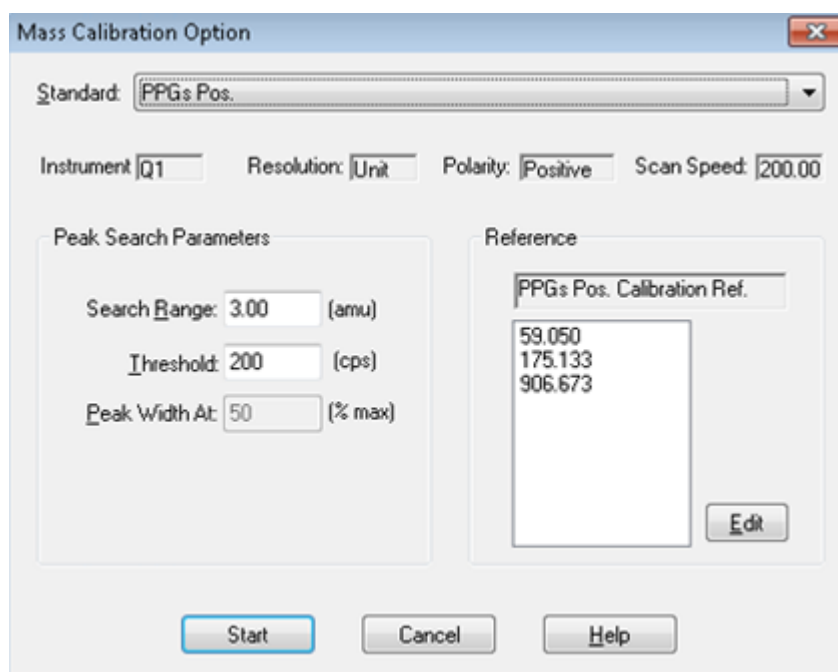
**Remarque :** Si toutes les masses ne s'affichent pas dans l'onglet **Calibration Peak List**, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau Calibration Peak List. Dans le menu contextuel, placez le curseur sur le tableau de référence utilisé, puis dans le sous-menu, cliquez sur **Edit Reference Table**. Dans la boîte de dialogue Reference Table Edit, cochez la case **Use** correspondant aux masses à afficher dans la liste Calibration Peak List, puis cliquez sur **Update Ref**.

9. Vérifiez les données dans l'onglet Calibration Peak List. Si la valeur de la colonne **Mass Shift (Da)** est supérieure à 0,1 Da pour l'une des masses, passez à l'étape suivante. Dans le cas contraire, l'étalonnage de masse est terminé.

**Remarque :** Les étiquettes des pics dans le graphique correspondent aux valeurs des points culminants, mais les valeurs de pic répertoriées dans la colonne **Found At** de l'onglet Calibration Peak List sont les valeurs du centroïde. Si un pic n'est pas parfaitement symétrique, la valeur du point culminant et la valeur du centroïde pour le même pic pourraient alors différer légèrement. Les valeurs les plus précises du centroïde sont utilisées pour l'étalonnage.

10. Cliquez n'importe où dans l'un des volets du spectre de masse.
11. Cliquez sur **Tools > Calibrate from Spectrum..**  
La boîte de dialogue Mass Calibration Option s'ouvre.

### Illustration 2 : Boîte de dialogue Mass Calibration Option



12. Dans la liste **Standard**, si vous avez utilisé le PPG comme solution standard, cliquez sur **PPGs Pos. LIT Ref.** ou **PPGs Neg. LIT Ref.** selon la polarité indiquée par la méthode d'acquisition employée.
13. Pour modifier les paramètres de la fenêtre Peak Search Parameters, cliquez sur un champ et saisissez les nouvelles valeurs.

Les paramètres de recherche de pics prédéfinis dans la section Peak Search Parameters conviennent à la plupart des situations.

14. Vérifiez que les masses répertoriées dans la liste **Reference** correspondent à celles pour lesquelles l'utilisateur a acquis les données.

Si les masses correspondent, passez à l'étape suivante. Dans le cas contraire, exécutez les étapes suivantes :

- a. Cliquez sur **Edit**.

La boîte de dialogue Reference Table s'ouvre.

- b. Faire correspondre les masses de la liste **Reference** avec celles pour lesquelles les données sont acquises en cochant ou en décochant les cases de la colonne **Use**.
- c. Cliquez sur **Update Ref.** pour enregistrer les modifications.

15. Appuyez sur **Start** pour lancer l'étalonnage de masse.

- Le logiciel cherche le plus grand pic dans la plage de recherche pour chaque masse et détermine les valeurs de la masse, l'intensité et la largeur du pic.
- Le logiciel compare la masse avec celle attendue et détermine la variation de masse, le cas échéant. Il compare la largeur du pic avec la largeur du pic cible et compare l'intensité avec l'étalonnage précédent.
- Le logiciel affiche les résultats de l'étalonnage de masse sous forme graphique et sous forme de rapport.

---

**Remarque :** Ne pas utiliser les indicateurs du milieu du graphique de la largeur du pic, c'est-à-dire les lignes pointillées. Ces indicateurs ont été créés pour les balayages quadripolaires et ne s'appliquent pas aux balayages LIT.

---

16. Cliquez sur **Window**, puis cliquez sur les résultats d'étalonnage.  
Une version texte du rapport d'étalonnage s'affiche.
17. Vérifiez les valeurs de variation de la pente. Elles doivent être égales à  $1,000 \pm 0,002$ .  
La mention **N/A** (sans objet) apparaît pour le point de données le plus faible, car un point ne peut pas avoir de pente.
18. Si la différence est supérieure à 0,002, n'étalonnez pas le spectromètre de masse.  
Contactez l'assistance de SCIEX à l'adresse [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support).
19. Si les chiffres de variation de la pente sont bons, accédez à la fenêtre Calibration Report.
20. Dans la fenêtre Calibration report, effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Pour mettre à jour les valeurs des masses modifiées et ajouter les valeurs des nouvelles masses à l'étalonnage de masse existant, cliquez sur **Update Mass Calibration**. Seules les valeurs d'étalonnage existantes pour les masses qui ont été étalonnées sont remplacées.
  - Pour remplacer définitivement les masses et les valeurs existantes par les nouvelles masses et valeurs, cliquez sur **Replace Mass Calibration**. Toutes les



valeurs d'étalonnage existantes sont remplacées et toute masse non étalonnée est supprimée du tableau d'étalonnage.










21. Pour valider les modifications apportées à l'étalonnage de masse, cliquez sur **Save**.
22. Cliquez sur **Close**.
23. Effectuez un MCA à 10 balayages pour vérifier l'étalonnage.

---

**Remarque :** Répétez la procédure d'étalonnage au besoin.

---

## Icônes du mode Tune and Calibrate

Icône	Nom	Description
	<b>Calibrate from spectrum</b>	Ouvre la boîte de dialogue Mass Calibration Option et utilise le spectre actif pour étalonner le spectromètre de masse.
	<b>Manual Tune</b>	Ouvre l'éditeur Manual Tune.
	<b>Compound Optimization</b>	Optimise un composé en utilisant la perfusion par FIA.
	<b>Instrument Optimization</b>	Vérifie la performance de l'instrument, ajuste l'étalonnage de masse ou ajuste les paramètres du spectromètre de masse.
	<b>View Queue</b>	Affiche la file d'attente d'échantillons.
	<b>Instrument Queue</b>	Affiche un instrument à distance.
	<b>Status for Remote Instrument</b>	Affiche le statut d'un instrument à distance.
	<b>Reserve Instrument for Tuning</b>	Réserve l'instrumentation pour le réglage et l'étalonnage.
	<b>IDA Method Wizard</b>	Démarre l'IDA Method Wizard.

# Nous contacter

---

## Formation destinée aux clients

- En Amérique du Nord : [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- En Europe : [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- En dehors des États-Unis et de l'Amérique du Nord, visitez le site [sciex.com/education](http://sciex.com/education) pour obtenir les coordonnées.

## Centre d'apprentissage en ligne

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

## Assistance technique SCIEX

SCIEX et ses représentants disposent de personnel dûment qualifié et de spécialistes techniques dans le monde entier. Ils peuvent répondre aux questions sur le système ou tout problème technique qui pourrait survenir. Pour plus d'informations, consultez le site Web SCIEX à l'adresse [sciex.com](http://sciex.com) ou choisissez parmi les options suivantes pour nous contacter :

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

## Cybersécurité

Pour obtenir les informations les plus récentes sur la cybersécurité des produits SCIEX, consultez la page [sciex.com/productsecurity](http://sciex.com/productsecurity).

## Documentation

Cette version du document remplace toutes les versions précédentes de ce document.

Adobe Acrobat Reader est nécessaire pour afficher ce document sous forme électronique. Pour télécharger la dernière version, accéder à <https://get.adobe.com/reader>.

Pour trouver la documentation du logiciel, consulter les notes de version ou le guide d'installation du logiciel fourni avec ce dernier.

Pour trouver la documentation du matériel, reportez-vous au DVD *Customer Reference* fourni avec le système ou le composant.

---

**Remarque** : Pour demander une version imprimée gratuite de ce document, contacter [sciex.com/contact-us](http://sciex.com/contact-us).

---