



---

# Tecnologia SelexION<sup>®</sup> /SelexION<sup>®</sup> + per sistemi SCIEX Triple Quad<sup>™</sup> e QTRAP<sup>®</sup>

Guida per l'utente



---

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.

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.

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.

Solo per scopi di ricerca. Non usare in procedure diagnostiche.

AB Sciex opera nel mercato come SCIEX.

I marchi qui menzionati sono di proprietà di AB Sciex Pte. Ltd. o dei rispettivi titolari.

AB SCIEX™ è utilizzato su licenza.

© 2019 AB Sciex



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

# Contenuto

---

<b>1 Introduzione alla tecnologia DMS.....</b>	<b>5</b>
La tecnologia DMS.....	5
Benefici della tecnologia DMS.....	7
Ruolo dei modificatori nella tecnologia DMS.....	7
Regolazione dello strumento.....	8
Modalità di funzionamento DMS Off.....	8
<b>2 Utilizzo della tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup> +.....</b>	<b>10</b>
Installazione della tecnologia SelexION <sup>®</sup> /SelexION <sup>®</sup> +.....	13
Rimozione della tecnologia SelexION <sup>®</sup> /SelexION <sup>®</sup> +.....	19
Pulizia e allineamento degli elettrodi della cella di mobilità ionica SelexION <sup>®</sup> .....	21
Pulizia e allineamento degli elettrodi della cella di mobilità ionica SelexION <sup>®</sup> + con tecnologia di iniezione a getto.....	23
Riempimento del contenitore del modificatore.....	26
Pulizia delle superfici del modulo di controllo.....	26
<b>3 Ottimizzazione dei parametri DMS.....</b>	<b>27</b>
Ottimizzazione dei parametri DMS in Manual Tuning.....	27
Creazione di un metodo di acquisizione e ottimizzazione dei parametri DMS senza un modificatore.....	28
Creazione di un metodo di acquisizione con un modificatore selezionato e ottimizzazione dei parametri DMS.....	32
Controllo parametri del modificatore in tempo reale.....	35
Eliminazione del modificatore.....	35
Ottimizzazione dei parametri DMS attraverso Compound Optimization.....	39
Ottimizzazione dei parametri DMS esclusivamente con ottimizzazione di tipo Infusione-T.....	39
Ottimizzazione dei parametri del composto e DMS con il tipo di ottimizzazione Infusione-T.....	42
Ottimizzazione di COV attraverso l'iniezione in flusso (FIA).....	45
Ottimizzazione dello strumento.....	46
<b>4 Creare e trasmettere i batch.....</b>	<b>47</b>
Creazione di un metodo di acquisizione con parametri DMS fissati nella modalità Acquire.....	47
Separazione dei composti isobarici utilizzando la tecnologia SelexION.....	49
Differenziare i Composti Isobarici nei metodi di acquisizione con algoritmo MRM e <i>Scheduled MRM</i> <sup>TM</sup> .....	50
Utilizzo dei parametri DMS in un metodo di acquisizione con algoritmo <i>Scheduled MRM</i> .....	51
Creazione di un metodo di acquisizione per l'incremento graduale di COV durante l'acquisizione batch.....	52
Calcolo del consumo di modificatore.....	54

## Contenuto

---

Esempio di calcolo del consumo di modificatore.....	55
Calcolo del consumo adeguato del modificatore per un batch.....	55
<b>5 Analisi ed elaborazione dati.....</b>	<b>57</b>
Analisi dei dati quantitativi.....	57
Visualizzazione dei parametri DMS utilizzati per l'acquisizione in File Information durante la visualizzazione dei file di dati.....	57
Creazione di metodi di quantificazione e generazione di tabelle di risultati.....	58
Quantificazione dei composti isobarici.....	58
<b>Generazione di rapporti sui dati.....</b>	<b>58</b>
Analisi dei dati qualitativi.....	58
Revisione di un file di dati acquisito con il parametro COV incrementato gradualmente.....	58
Visualizzazione di un contour plot per i dati acquisiti con il parametro COV incrementato gradualmente (solo opzione Ramp COV for Cycle).....	60
Visualizzazione dei parametri DMS incrementati gradualmente in File Information mentre si visualizzano i file dati.....	62
<b>6 Utilizzo dei parametri DMS in IDA.....</b>	<b>63</b>
Creazione di un metodo di acquisizione IDA per l'incremento graduale di COV durante l'acquisizione batch.....	63
Creazione di un metodo di acquisizione IDA per l'incremento graduale di COV durante la modalità di acquisizione batch.....	64
Visualizzazione dei dati IDA acquisiti con l'incremento graduale del parametro COV in IDA Explorer.....	66
<b>7 Risoluzione dei problemi.....</b>	<b>69</b>
Errore scarica DMS nel software Analyst <sup>®</sup> .....	69
Non scorre alcun fluido modificatore.....	71
Il motore della pompa emette eccessivo rumore.....	72
Il modificatore scorre nella direzione sbagliata.....	72
I livelli di rumore sono elevati quando sono utilizzati i modificatori.....	73
Si è verificato un errore di temperatura DMS (DT).....	73
Il COV varia.....	73
<b>A Parametri DMS.....</b>	<b>74</b>
Descrizione dei parametri DMS.....	74
Stato dei parametri DMS nella modalità DMS Off.....	77
Valori dei parametri DMS e della sorgente utilizzati durante l'eliminazione del modificatore.....	77
Valori dei parametri DMS e della sorgente dopo il completamento o l'interruzione dell'eliminazione del modificatore.....	78
<b>B Infusione-T del campione nel flusso LC.....</b>	<b>79</b>
<b>C Glossario dei simboli.....</b>	<b>80</b>
<b>Per contattarci.....</b>	<b>85</b>
Formazione dei clienti.....	85
Centro di istruzione online.....	85
Assistenza SCIEX.....	85
Sicurezza informatica.....	85
Documentazione.....	85

---

**Nota:** per istruzioni sulla sicurezza, fare riferimento alla *Guida per l'utente del sistema* dello spettrometro di massa.

---

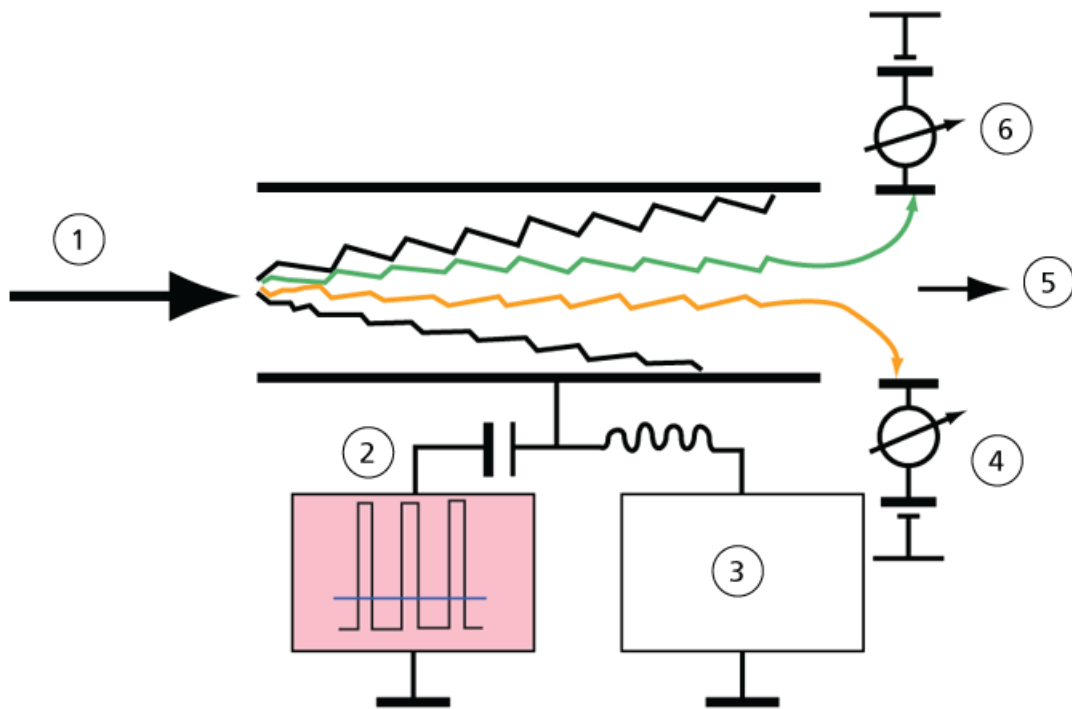
Questa sezione descrive la tecnologia di spettrometria a mobilità differenziale (DMS), i suoi benefici e il ruolo dei modificatori. Viene discussa anche la modalità di funzionamento DMS Off.

## La tecnologia DMS

DMS è un metodo per separare gli ioni basato sulla differenza di mobilità degli ioni nei campi elettrici ad alta e bassa intensità con gas alla pressione atmosferica o a una pressione prossima a questa. DMS è una variante della spettrometria di mobilità ionica (IMS).

Nella tecnologia DMS, le tensioni di separazione (SV) vengono applicate al canale di trasporto ionico, perpendicolarmente al flusso del gas di trasporto, come mostrato in [Figura 1-1](#). A causa della differenza tra i coefficienti di mobilità ionica nei campi elettrici ad alta o bassa intensità, gli ioni migrano verso le pareti lasciando la traiettoria iniziale. La loro traiettoria viene corretta da una tensione CC di contro-bilanciamento, chiamata tensione di compensazione (COV).

Figura 1-1 Tecnologia DMS



Elemento	Descrizione
1	Specie ioniche nel flusso del gas
2	Tensione di separazione (SV)
3	Voltaggio di compensazione (COV)
4	Ioni positivi
5	Allo spettrometro di massa
6	Ioni negativi

Invece di registrare la durata del passaggio di uno ione nel canale di trasporto ionico, la tecnologia DMS registra il valore COV necessario per correggere la traiettoria di un determinato ione per un intervallo di ampiezze SV. Il COV può essere scansionato per far passare ioni in serie secondo la loro mobilità differenziale, o impostato a un valore fisso per far passare esclusivamente le specie ioniche con una precisa mobilità differenziale.

Alcune combinazioni dei campi SV e COV permettono all'ione target di passare attraverso la zona analitica del dispositivo SelexION®/SelexION®+ senza entrare in collisione con gli elettrodi. Pertanto, scansionando o fissando SV e COV, il dispositivo può funzionare nelle seguenti modalità:

- È possibile selezionare una precisa combinazione di SV e COV che produce il filtraggio continuo di particolari specie ioniche.

- Fissando SV e scansionando COV, si può registrare uno spettro DMS lineare.

### Benefici della tecnologia DMS

Il dispositivo con tecnologia di separazione a mobilità differenziale SelexION<sup>®</sup> per i sistemi 5500, 5500+ e 6500 e il dispositivo con tecnologia di separazione a mobilità differenziale SelexION<sup>®</sup> + per i sistemi 6500+ introducono una dimensione di separazione supplementare nel sistema LC-MS/MS.

- Aumenta la qualità dell'analisi di massa e l'accuratezza quantitativa riducendo il rumore chimico e separando anticipatamente gli ioni di massa simile.
- Fornisce tempi rapidi di passaggio degli ioni e propone un funzionamento trasparente (simile a quando la tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup> + non è installata nel sistema) che permette la trasmissione di tutti gli ioni, senza discriminazione, quando SV e COV sono impostati a zero.
- Supporta trasmissioni contemporanee di ioni di entrambe le polarità e separa ogni ione in base alla sua costante di mobilità differenziale.

### Ruolo dei modificatori nella tecnologia DMS

I modificatori possono essere aggiunti al gas di trasporto degli ioni attraverso il dispositivo SelexION<sup>®</sup> o SelexION<sup>®</sup> + per aumentare la capacità di picco e la potenza di separazione di questo dispositivo. La presenza di questi modificatori, solitamente comuni solventi cromatografici (ad esempio, alcol isopropilico [2-propanolo], acetonitrile o metanolo), influenza la mobilità degli ioni in questo dispositivo. Gli ioni che entrano nella cella di mobilità formano dei complessi con le molecole del modificatore che ne alterano le caratteristiche di mobilità. I complessi possono formarsi in condizioni di campo elettrico a bassa intensità ma si disgregano nuovamente con campi elettrici ad alta intensità, in base al modello dinamico cluster-decluster. L'effetto netto della formazione di complessi è l'amplificazione delle differenze tra le mobilità nel campo elettrico ad alta o bassa densità, producendo una potenza di separazione superiore e un'aumentata capacità di picco. Inoltre, dal momento che la formazione di complessi dipende dall'interazione specifica tra lo ione di un analita e un modificatore selezionato dall'utente, l'utilizzo dei modificatori fornisce una dimensione ulteriore di separazione rispetto agli approcci tradizionali della cromatografia e della spettrometria di massa. Ulteriori informazioni sugli effetti dei modificatori sono disponibili nel seguente articolo: B.B. Schneider, T.R. Covey, S.L. Coy, E.V. Krylov, and E.G. Nazarov, *Anal. Chem.* **2010**, *82*, 1867-1880.

Dal momento che l'uso del modificatore coinvolge la chimica di ionizzazione in fase gassosa, possono essere previsti alcuni comportamenti generali. Nella modalità ione positivo, se il modificatore ha una maggiore affinità protonica rispetto allo ione dell'analita, la carica può essere rimossa dall'analita producendo un segnale più basso ma non necessariamente un rapporto segnale/rumore più basso. In alternativa, se il modificatore ha una acidità di fase gassosa maggiore rispetto all'analita, la corrente dello ione negativo verrà ridotta. La conoscenza delle caratteristiche dell'analita e del modificatore può favorire la scelta del modificatore adeguato. Utilizzare il 2-propanolo come modificatore è un buon punto di inizio per studiare gli effetti dei modificatori su una specifica separazione DMS dal momento che si osserva un aumento del potere di separazione per una ampia quantità di composti.

## Regolazione dello strumento

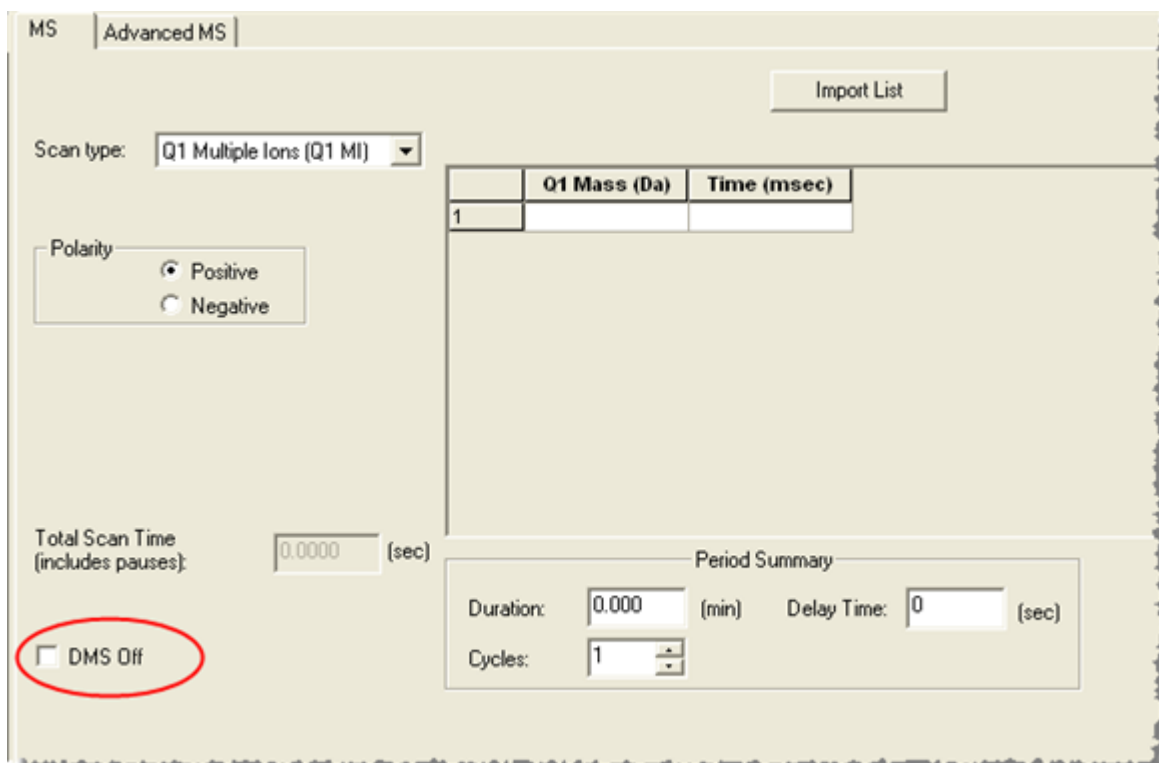
Prima di installare la tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup>+ sullo spettrometro di massa, assicurarsi che quest'ultimo sia stato sintonizzato e calibrato.

## Modalità di funzionamento DMS Off

Quando si installa la tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup>+ sullo spettrometro di massa, gli utenti possono avere la necessità di acquisire dati di spettro senza utilizzare la tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup>+. Invece di rimuovere la tecnologia dal sistema, gli utenti possono utilizzare la modalità di funzionamento DMS Off per acquisire dati. Il software Analyst<sup>®</sup> offre una modalità di funzionamento DMS Off che consente all'utente di lavorare in un ambiente simile a quello precedente all'installazione della tecnologia sullo spettrometro di massa. Tuttavia, nella modalità DMS Off, le intensità del segnale saranno notevolmente inferiori se paragonate a quelle dei dati acquisiti rimuovendo la tecnologia dallo spettrometro di massa.

Per lavorare nella modalità di funzionamento DMS Off, selezionare la casella di controllo **DMS Off** disponibile nella scheda MS nella finestra Acquisition method o sulla scheda **MS** nella finestra Tune Method Editor.

Figura 1-2 Casella di controllo DMS Off in Tune Method Editor



Nella modalità di funzionamento DMS Off, avvengono le seguenti modifiche:

- La maggior parte dei parametri DMS non sono più disponibili. Fare riferimento alla [Stato dei parametri DMS nella modalità DMS Off](#). Solamente il parametro **DMS Temperature (DT)** è visibile nella modalità **DMS Off** e lo si può ottimizzare in questa modalità al fine di ottenere la massima sensibilità.



- I parametri DMS (SV, COV e DMO) vengono rimossi dall'elenco dei parametri nella finestra Ramp Parameter Settings.
- Il periodo di pausa tra gli intervalli di massa è di 5 ms.

# Utilizzo della tecnologia SelexION<sup>®</sup> /SelexION<sup>®</sup> +

## 2



**AVVERTENZA! Pericolo di scosse elettriche. Non rimuovere il coperchio né tentare di eseguire la manutenzione sul modulo di controllo. Non contiene parti riparabili dall'utente.**

Il dispositivo con tecnologia di separazione a mobilità differenziale SelexION<sup>®</sup> /SelexION<sup>®</sup> + comprende un modulo di controllo installato da un Responsabile dell'assistenza tecnica (FSE) e l'elettronica associata, insieme a un dispositivo interfaccia installato dal cliente.

**Figura 2-1 Sistema QTRAP<sup>®</sup> 6500+ con tecnologia SelexION<sup>®</sup> +**



Elemento	Descrizione	Commenti
1	Modulo di controllo con vassoio laterale	Aggiornamento FSE
2	Sorgente di ionizzazione IonDrive <sup>™</sup> Turbo V	La figura mostra la sorgente di ionizzazione IonDrive <sup>™</sup> Turbo V su un sistema serie 6500+. Turbo V <sup>™</sup> è utilizzato con i sistemi 5500 e 5500+. IonDrive <sup>™</sup> Turbo V è utilizzato con i sistemi serie 6500 e 6500+.

**Nota:** la sorgente di ionizzazione NanoSpray<sup>®</sup> può essere installata su un sistema serie 5500, 6500 o 6500+ dotato di tecnologia SelexION<sup>®</sup> /SelexION<sup>®</sup> +. Tuttavia, non è possibile utilizzare il modificatore. Gli utenti possono creare metodi di acquisizione che comprendono i flussi e le informazioni del modificatore, ma, quando verranno eseguiti, la pompa del modificatore sarà disattivata.

La tecnologia SelexION® per i sistemi 5500, 5500+ e 6500 comprende i seguenti componenti sostituibili dal cliente:

- Modulo di controllo SelexION®
- Cella di mobilità ionica (sostituibile dal cliente)
- Anello adattatore (sostituibile dal cliente)  
Sono disponibili due anelli adattatori, l'anello NanoSpray®, utilizzato con la sorgente di ionizzazione NanoSpray®, e l'anello standard, utilizzato con tutte le altre sorgenti di ionizzazione supportate.

---

**Nota:** la sorgente di ionizzazione NanoSpray® non è supportata dal sistema SCIEX Triple Quad™ 5500+.

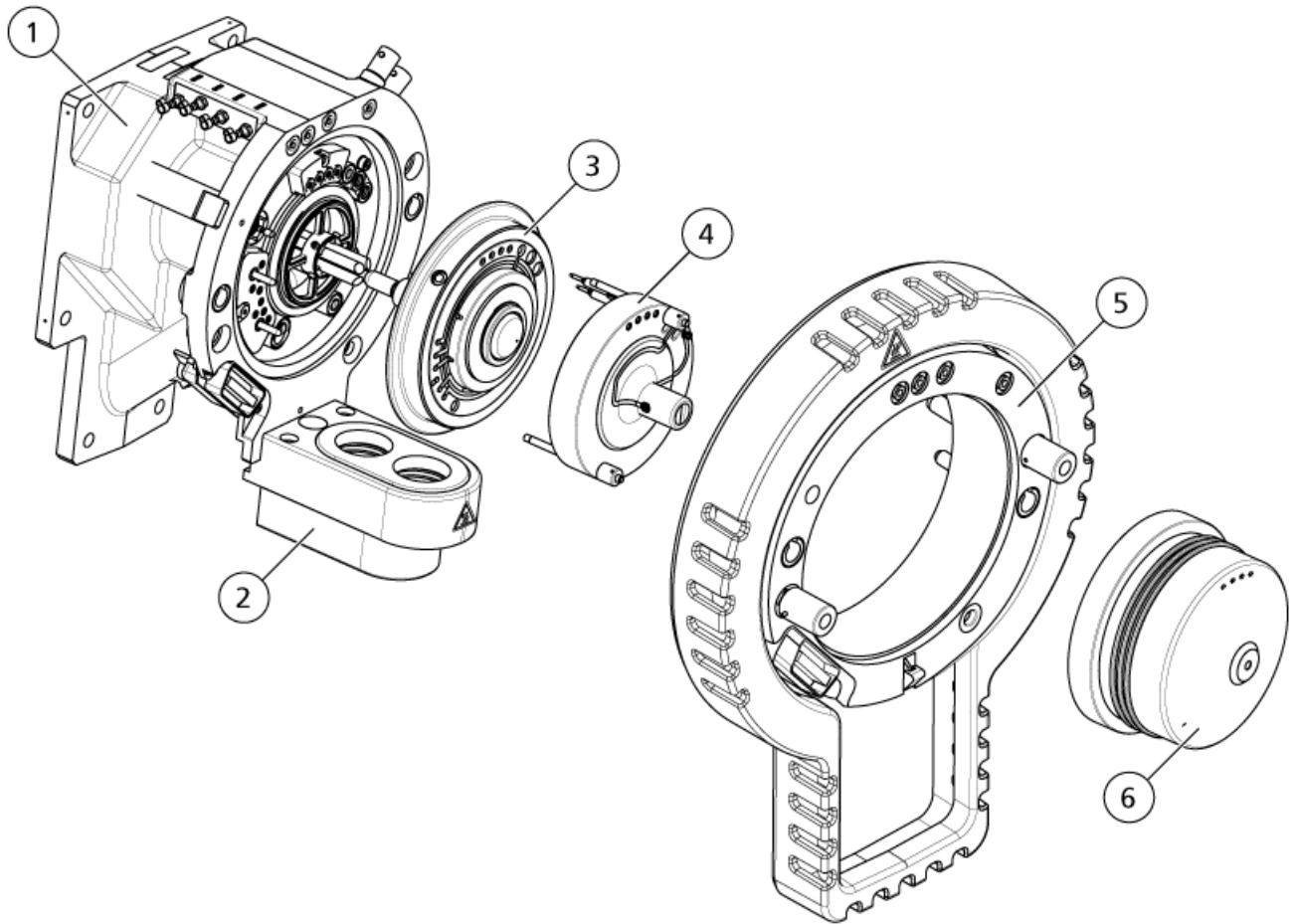
---

- Separatore di vuoto SelexION® (sostituibile dal cliente)
- Separatore di interfaccia SelexION® (sostituibile dal cliente)

Il dispositivo con tecnologia di separazione a mobilità differenziale SelexION® + per gli strumenti della serie 6500+ comprende i seguenti componenti:

- Modulo di controllo SelexION® +
- Cella di mobilità ionica con tecnologia di iniezione a getto (sostituibile dal cliente)
- Anello adattatore (sostituibile dal cliente)  
Sono disponibili due anelli adattatori, l'anello NanoSpray®, utilizzato con la sorgente di ionizzazione NanoSpray®, e l'anello standard, utilizzato con tutte le altre sorgenti di ionizzazione supportate.
- Separatore di vuoto SelexION® (sostituibile dal cliente)
- Separatore di interfaccia SelexION® (sostituibile dal cliente)

Figura 2-2 Tecnologia SelexION per sistemi SCIEX Triple Quad™ 5500+



Elemento	Descrizione	Commenti
1	Alloggiamento dell'interfaccia di vuoto	Aggiornamento FSE
2	Gruppo del doppio scarico	Aggiornamento FSE
3	Separatore di vuoto SelexION®	Aggiornamento FSE
4	Cella di mobilità ionica	Installabile dal cliente
5	Anello adattatore	Installabile dal cliente
6	Separatore di interfaccia SelexION®	Installabile dal cliente

## Installazione della tecnologia SelexION®/SelexION®+



**AVVERTENZA!** Pericolo di superfici calde. Quando si utilizza la sorgente di ionizzazione IonDrive™ Turbo V, lasciar raffreddare la sorgente di ionizzazione e l'interfaccia per almeno 90 minuti prima di iniziare qualsiasi procedura di manutenzione. Quando si utilizza la sorgente di ionizzazione Turbo V™ o DuoSpray™, lasciar raffreddare la sorgente di ionizzazione e l'interfaccia per almeno 30 minuti prima di iniziare qualsiasi procedura di manutenzione. Quando si utilizza la sorgente di ionizzazione NanoSpray®, lasciar raffreddare la sorgente di ionizzazione e l'interfaccia per almeno 60 minuti prima di iniziare qualsiasi procedura di manutenzione. Alcune superfici della sorgente di ionizzazione e dell'interfaccia di vuoto raggiungono temperature considerevoli durante il funzionamento.

---

**ATTENZIONE:** rischio di danni al sistema. Manipolare con cura i componenti dell'interfaccia di vuoto. Sono fragili e costosi.

---

**ATTENZIONE:** rischio di danni al sistema. Assicurarsi che i componenti dell'interfaccia di vuoto siano tenuti puliti e non presentino contaminazione chimica né da polvere. Indossare sempre guanti senza polvere per evitare contaminazioni quando si maneggiano questi componenti.

---

**ATTENZIONE:** rischio di danni al sistema. Disattivare il profilo hardware prima di accendere o spegnere il modulo di controllo. Una procedura differente da quella appena descritta potrebbe provocare uno stato di instabilità dello spettrometro di massa e la conseguente perdita di controllo nel software Analyst®. Qualora il profilo hardware non fosse disattivato e lo spettrometro di massa divenisse in questo modo instabile, recuperare il controllo rimuovendo e installando la sorgente di ionizzazione, oppure spegnendo e riaccendendo lo spettrometro di massa e il modulo di controllo e quindi riattivando il profilo hardware.

---

Seguire questa procedura per installare la cella di mobilità ionica, l'anello adattatore e il curtain plate SelexION®.

---

**Nota:** le illustrazioni presenti in questa sezione mostrano la cella di mobilità ionica SelexION®. La procedura di installazione della cella di mobilità ionica SelexION®+ con tecnologia di iniezione a getto è identica.

---

### Procedure preliminari

- Verificare che sia la cella di mobilità ionica che l'interfaccia di vuoto siano pulite. Per pulire le superfici usare del metanolo.
- Se i componenti dell'interfaccia NanoSpray<sup>®</sup> sono installati, rimuoverli e installare i componenti dell'interfaccia standard. Per istruzioni dettagliate, fare riferimento alla *Guida per l'operatore della sorgente di ionizzazione NanoSpray<sup>®</sup>*.

---

**Nota:** prima di cambiare i componenti dell'interfaccia, è necessario spegnere e spurgare lo spettrometro di massa.

---

### Materiali richiesti

- Guanti senza polvere (consigliati in neoprene o nitrile)

1. Completare le scansioni in corso o fare clic su **Acquire > Abort Sample** per interromperle.
2. Arrestare il flusso del campione verso lo spettrometro di massa.
3. Disattivare il profilo hardware.
4. Sbloccare la sorgente di ionizzazione girando i due fermi di sicurezza verso la posizione ore 12.
5. Staccare delicatamente la sorgente di ionizzazione dall'interfaccia di vuoto.

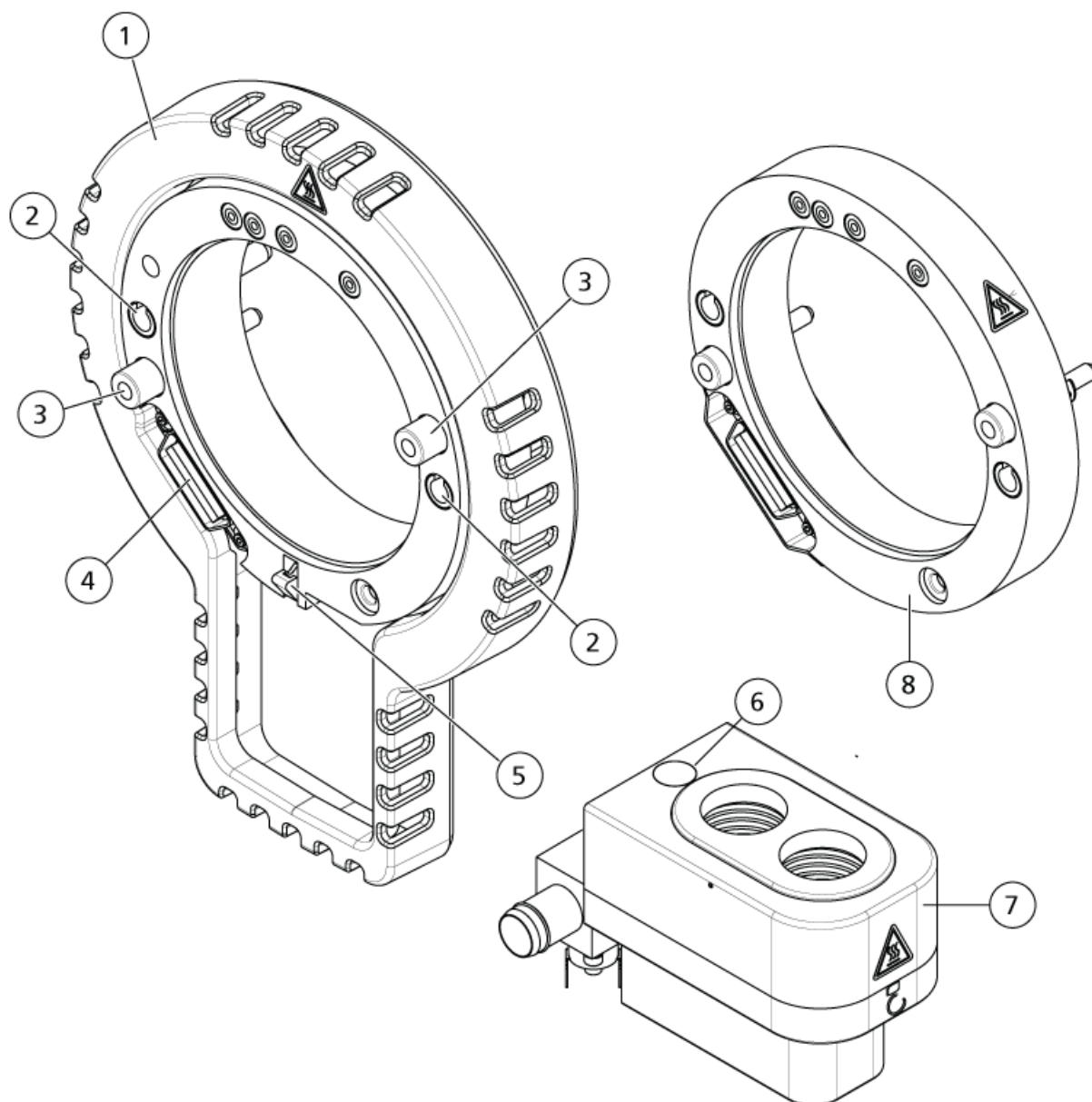
---

**Nota:** prestare attenzione a non allentare gli O-ring installati sull'interfaccia di vuoto.

---

6. Rimuovere il curtain plate estraendolo direttamente dall'interfaccia di vuoto. Il curtain plate è tenuta fermo da tre nottolini a sfera montati sul separatore di vuoto.

Figura 2-3 Anello adattatore e doppio scarico



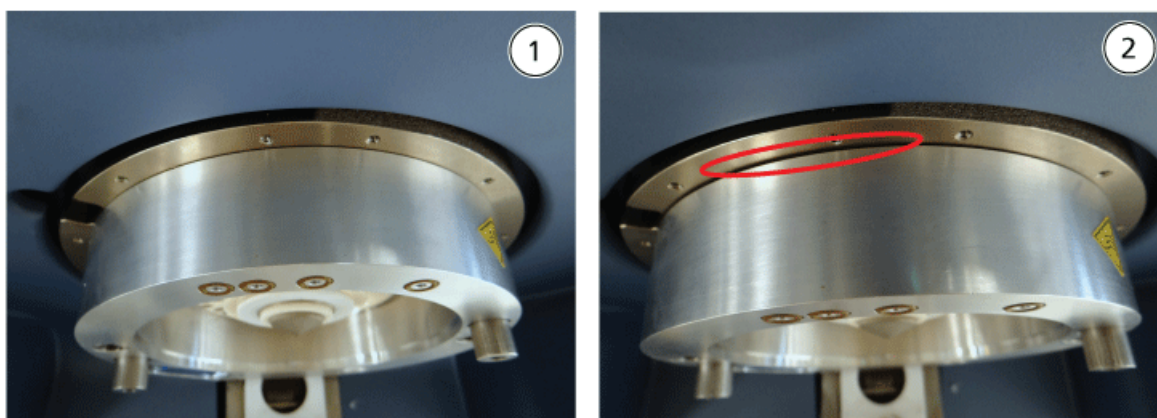
Elemento	Descrizione
1	Anello adattatore standard
2	Alloggiamenti (per i perni guida della sorgente di ionizzazione)
3	Vite a testa piatta
4	Connettore dell'interfaccia
5	Camma
6	Pulsante caricato a molla

Elemento	Descrizione
7	Doppio scarico
8	Posizione della Testina {NanoSpray®
	<b>Nota:</b> la sorgente di ionizzazione NanoSpray® non è supportata dal sistema SCIEX Triple Quad™ 5500+.

7. Posizionare l'anello adattatore nell'alloggiamento dell'interfaccia di vuoto, allineando il connettore sull'anello con il connettore della sorgente sull'interfaccia di vuoto e inserendo le due viti a galletto sull'anello adattatore negli alloggiamenti dell'interfaccia di vuoto. Accertarsi che il connettore della sorgente sia installato completamente e che non ci sia dello spazio vuoto tra l'anello adattatore e l'interfaccia di vuoto.

**Nota:** se l'anello adattatore è dotato di perno di centraggio sul fondo che preme su una piastra caricata a molla nell'alloggiamento dello scarico duplice, posizionare il perno di centraggio nell'alloggiamento del doppio scarico, inclinare l'anello adattatore in direzione opposta rispetto allo spettrometro di massa, quindi inclinare la parte superiore dell'anello adattatore verso lo spettrometro di massa. Altrimenti, se si installa l'anello adattatore dotato di fermo (elemento 5), passare direttamente al punto successivo.

Figura 2-4 Anello installato correttamente (sinistra) e non correttamente (destra)



Elemento	Descrizione
1	Installato correttamente (senza spazio vuoto)
2	Installato non correttamente (spazio vuoto in evidenza)

8. Serrare le viti in modo uniforme (alternando le due viti), applicando una pressione costante.

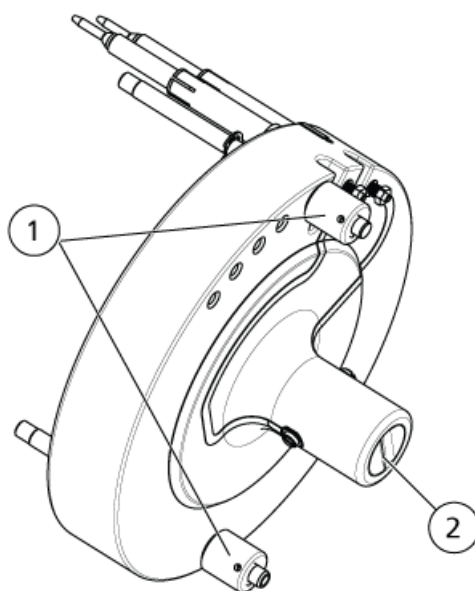
**Suggerimento!** Dopo aver serrato completamente le viti, tirare l'anello di prolunga per verificare che sia fissato correttamente. Se compare dello spazio vuoto, serrare l'anello ulteriormente.



**Suggerimento!** Per verificare che l'anello sia installato correttamente, installare la sorgente di ionizzazione, quindi aprire il software Analyst®. In modalità Manual Tune, impostare GS1 e GS2 su 80. Se, nella parte anteriore dello strumento, si avverte un forte sibilo, significa che c'è dello spazio vuoto. (L'anello non è installato correttamente.)

**Suggerimento!** Per serrare le viti sull'anello NanoSpray®, utilizzare un cacciavite.

Figura 2-5 Cella di mobilità ionica SelexION®



Elemento	Descrizione
1	Vite a testa piatta
2	Elettrodi

9. Installare la cella di mobilità ionica SelexION® sul separatore di vuoto SelexION®, tenendo la cella di mobilità ionica in verticale (perpendicolare al piano del separatore di vuoto) e verificando che i connettori siano allineati con gli attacchi presenti sul separatore di vuoto.

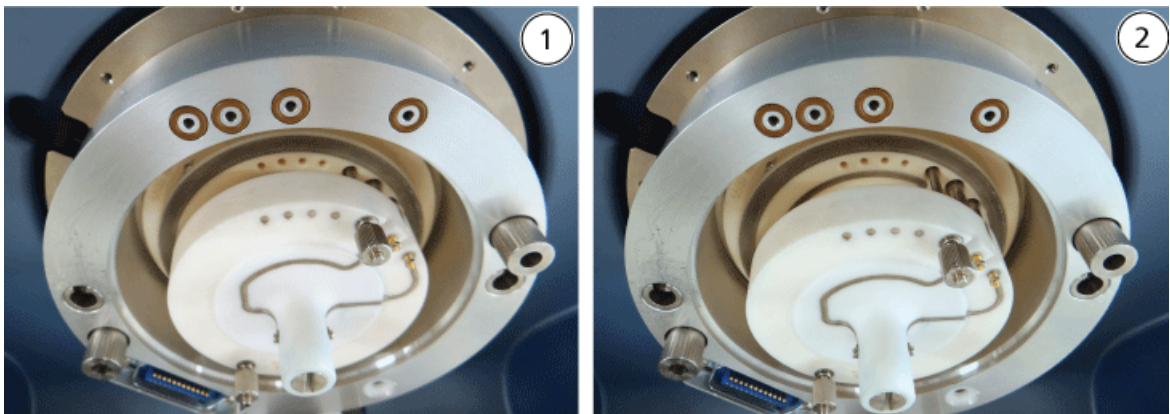
**ATTENZIONE: rischio di danni al sistema. Evitare graffi o la contaminazione della guarnizione sulla cella di mobilità ionica.**

Figura 2-6 Installazione della cella di mobilità ionica



Elemento	Descrizione
1	Cella di mobilità ionica
2	Interfaccia di vuoto con l'anello installato
3	Installazione della cella di mobilità ionica

Figura 2-7 Cella di mobilità ionica posizionata correttamente (sinistra) e non correttamente (destra)



Elemento	Descrizione
1	Posizione corretta (verticale)
2	Posizione non corretta (angolata)

10. Serrare le viti in modo uniforme, applicando una pressione costante.

**Nota:** non allentare i dadi sui perni vicini alle viti.

11. Allineare i perni del curtain plate SelexION<sup>®</sup> con i fori nella cella di mobilità ionica, poi premere il curtain plate SelexION<sup>®</sup> sulla cella di mobilità ionica.

12. Assicurarsi che i due fermi sulla sorgente di ionizzazione puntino verso l'alto in posizione aperta (ore 12).

13. Posizionare la sorgente di ionizzazione sull'anello adattatore. Assicurarsi che i perni guida sulla sorgente di ionizzazione siano allineati con gli alloggiamenti nell'anello adattatore, spingere la sorgente di ionizzazione verso l'interfaccia fino ad inserirla completamente, quindi ruotare i fermi della sorgente verso il basso nella posizione di blocco (ore 6:30) per bloccare la sorgente di ionizzazione in posizione.

14. Accendere il modulo di controllo.

L'interruttore è situato sulla parte posteriore del modulo di controllo.



**AVVERTENZA! Pericolo di esposizione ad agenti chimici tossici: prestare attenzione durante il riempimento dei contenitori del modificatore. Fare riferimento alle schede tecniche di sicurezza delle sostanze chimiche e adottare le precauzioni appropriate. Non riempire il contenitore del modificatore quando si trova nel vassoio laterale. Scollegare la linea del liquido dal contenitore, riempire il contenitore in un luogo sicuro e reinstallare il contenitore e la linea del liquido nel vassoio laterale.**

---

15. Se vengono eseguiti degli esperimenti SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup> + utilizzando i modificatori, spurgare la pompa del modificatore. Fare riferimento al paragrafo [Eliminazione del modificatore](#).

## Rimozione della tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup> +



**AVVERTENZA! Pericolo di superfici calde. Quando si utilizza la sorgente di ionizzazione IonDrive<sup>™</sup> Turbo V, lasciar raffreddare la sorgente di ionizzazione e l'interfaccia per almeno 90 minuti prima di iniziare qualsiasi procedura di manutenzione. Quando si utilizza la sorgente di ionizzazione Turbo V<sup>™</sup> o DuoSpray<sup>™</sup>, lasciar raffreddare la sorgente di ionizzazione e l'interfaccia per almeno 30 minuti prima di iniziare qualsiasi procedura di manutenzione. Quando si utilizza la sorgente di ionizzazione NanoSpray<sup>®</sup>, lasciar raffreddare la sorgente di ionizzazione e l'interfaccia per almeno 60 minuti prima di iniziare qualsiasi procedura di manutenzione. Alcune superfici della sorgente di ionizzazione e dell'interfaccia di vuoto raggiungono temperature considerevoli durante il funzionamento.**

---

**ATTENZIONE: rischio di danni al sistema. Manipolare con cura i componenti dell'interfaccia di vuoto. Sono fragili e costosi.**

---

**ATTENZIONE: rischio di danni al sistema. Assicurarsi che i componenti dell'interfaccia di vuoto siano tenuti puliti e non presentino contaminazione chimica né da polvere. Indossare sempre guanti senza polvere per evitare contaminazioni quando si maneggiano questi componenti.**

---

**ATTENZIONE:** rischio di danni al sistema. Disattivare il profilo hardware prima di accendere o spegnere il modulo di controllo. Una procedura differente da quella appena descritta potrebbe provocare uno stato di instabilità dello spettrometro di massa e la conseguente perdita di controllo nel software Analyst®. Qualora il profilo hardware non fosse disattivato e lo spettrometro di massa divenisse in questo modo instabile, recuperare il controllo rimuovendo e installando la sorgente di ionizzazione, oppure spegnendo e riaccendendo lo spettrometro di massa e il modulo di controllo e quindi riattivando il profilo hardware.

---

### Materiali richiesti

- Guanti senza polvere (consigliati in neoprene o nitrile)

Seguire questi passaggi per:

- Rimuovere il curtain plate SelexION®
- Rimuovere l'anello adattatore
- Rimuovere la cella di mobilità ionica SelexION® o la cella di mobilità ionica SelexION®+ con tecnologia di iniezione a getto
- Installare il curtain plate standard

Questa procedura ripristina le prestazioni standard del sistema 5500, 5500+, 6500 o 6500+.

1. Completare le scansioni in corso o fare clic su **Acquire > Abort Sample** per interromperle.
2. Arrestare il flusso del campione verso lo spettrometro di massa.
3. Disattivare il profilo hardware.
4. Spegnere il modulo di controllo.

L'interruttore è situato sulla parte posteriore del modulo di controllo.

5. Rimuovere la sorgente di ionizzazione. Fare riferimento alla *Guida per l'operatore* della sorgente di ionizzazione.
6. Rimuovere il curtain plate SelexION® estraendolo direttamente dalla cella di mobilità ionica.
7. Rimuovere l'anello adattatore allentando le viti, quindi estraendo l'anello adattatore dall'interfaccia di vuoto.
8. Rimuovere la cella di mobilità ionica allentando le viti, quindi estrarre la cella dal separatore di vuoto.
9. Installare il curtain plate standard.

---

**Nota:** non è necessario rimuovere il separatore di vuoto SelexION® e il gruppo del doppio scarico. La sorgente di ionizzazione IonDrive™ Turbo V funziona con il separatore di vuoto SelexION® e utilizza il foro di scarico del gruppo del doppio scarico più prossimo all'alloggiamento dell'interfaccia.

---

10. Assicurarsi che i due fermi sulla sorgente di ionizzazione puntino verso l'alto in posizione aperta (ore 12).

11. Posizionare la sorgente di ionizzazione sull'anello adattatore. Assicurarsi che i perni guida sulla sorgente di ionizzazione siano allineati con gli alloggiamenti nell'anello adattatore, spingere la sorgente di ionizzazione verso l'interfaccia fino ad inserirla completamente, quindi ruotare i fermi della sorgente verso il basso nella posizione di blocco (ore 6:30) per bloccare la sorgente di ionizzazione in posizione.

## Pulizia e allineamento degli elettrodi della cella di mobilità ionica SelexION®



**AVVERTENZA!** Pericolo di superfici calde. Quando si utilizza la sorgente di ionizzazione IonDrive™ Turbo V, lasciar raffreddare la sorgente di ionizzazione e l'interfaccia per almeno 90 minuti prima di iniziare qualsiasi procedura di manutenzione. Quando si utilizza la sorgente di ionizzazione Turbo V™ o DuoSpray™, lasciar raffreddare la sorgente di ionizzazione e l'interfaccia per almeno 30 minuti prima di iniziare qualsiasi procedura di manutenzione. Quando si utilizza la sorgente di ionizzazione NanoSpray®, lasciar raffreddare la sorgente di ionizzazione e l'interfaccia per almeno 60 minuti prima di iniziare qualsiasi procedura di manutenzione. Alcune superfici della sorgente di ionizzazione e dell'interfaccia di vuoto raggiungono temperature considerevoli durante il funzionamento.

**ATTENZIONE:** rischio di danni al sistema. Assicurarsi che i componenti dell'interfaccia di vuoto siano tenuti puliti e non presentino contaminazione chimica né da polvere. Indossare sempre guanti senza polvere per evitare contaminazioni quando si maneggiano questi componenti.

**ATTENZIONE:** rischio di danni al sistema. Disattivare il profilo hardware prima di accendere o spegnere il modulo di controllo. Una procedura differente da quella appena descritta potrebbe provocare uno stato di instabilità dello spettrometro di massa e la conseguente perdita di controllo nel software Analyst®. Qualora il profilo hardware non fosse disattivato e lo spettrometro di massa divenisse in questo modo instabile, recuperare il controllo rimuovendo e installando la sorgente di ionizzazione, oppure spegnendo e riaccendendo lo spettrometro di massa e il modulo di controllo e quindi riattivando il profilo hardware.

**Nota:** per una pulizia più approfondita, usare il kit opzionale Ion Mobility Cell Cleaning. Questo kit deve essere usato solo da un addetto alla manutenzione qualificato (QMP). Per ottenere il kit o per avere maggiori informazioni, contattare il servizio clienti SCIEX.

### Procedure preliminari

- [Rimozione della tecnologia SelexION®/SelexION®+](#)

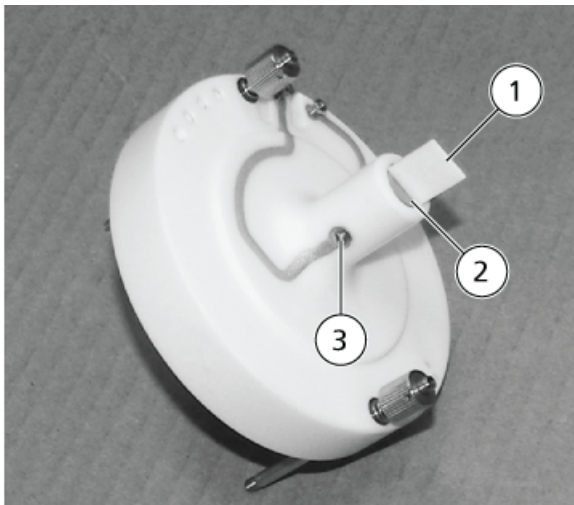
### Materiali richiesti

- Guanto senza polvere
- Cacciavite a taglio piccolo
- Soluzione 1:1 di metanolo:acqua
- Panno antipelo
- Distanziale

Pulire e allineare gli elettrodi quando si osserva contaminazione sulle superfici o quando si verificano ripetutamente errori di scariche ad alta tensione.

1. Utilizzando un cacciavite a taglio piccolo, allentare le viti finché gli elettrodi non si muovono liberamente nella cella di mobilità ionica, quindi rimuovere gli elettrodi dalla cella di mobilità ionica.

**Figura 2-8** Cella di mobilità ionica SelexION®



Elemento	Descrizione	Commento
1	Distanziale	Utilizzato per allineare gli elettrodi
2	Elettrodo	—
3	Vite	—

**Nota:** se le viti vengono completamente rimosse dalla cella di mobilità ionica, assicurarsi che le rondelle curve siano riposizionate nel verso originale.

2. Pulire le superfici dell'elettrodo con un panno antipelo inumidito con una soluzione metanolo:acqua.

**Suggerimento!** Se la pulizia con acqua e metanolo non migliora le prestazioni, pulire gli elettrodi con un detergente non abrasivo, come Alconox. Se questo non migliora le prestazioni, strofinare leggermente le superfici piane con carta vetrata #600.

---

3. Far asciugare gli elettrodi.

**ATTENZIONE: rischio di danni al sistema. Ridurre al minimo lo spostamento delle barre dopo averle inserite nella cella. Lo spostamento delle barre all'interno della cella può graffiare le barre o la cella o lasciare residui che possono causare scariche elettriche.**

---

4. Allineare i fori degli elettrodi con le viti della cella di mobilità ionica, poi installare gli elettrodi nella cella dal retro.
5. Serrare leggermente le viti.
6. Inserire il distanziale nello spazio tra gli elettrodi davanti alla cella di mobilità ionica in modo che il distanziale risulti centrato nella cella di mobilità ionica.

Verificare che il distanziale sia alloggiato tra gli elettrodi.

7. Utilizzando un cacciavite a taglio piccolo, serrare le viti su entrambi i lati della cella di mobilità ionica per fissare gli elettrodi.
8. Posizionare la cella di mobilità ionica SelexION<sup>®</sup> sul separatore di vuoto SelexION<sup>®</sup>, quindi serrare le viti. Fare riferimento a [Installazione della tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup> +](#).

## Pulizia e allineamento degli elettrodi della cella di mobilità ionica SelexION<sup>®</sup> + con tecnologia di iniezione a getto



**AVVERTENZA! Pericolo di superfici calde.** Quando si utilizza la sorgente di ionizzazione IonDrive<sup>™</sup> Turbo V, lasciar raffreddare la sorgente di ionizzazione e l'interfaccia per almeno 90 minuti prima di iniziare qualsiasi procedura di manutenzione. Quando si utilizza la sorgente di ionizzazione Turbo V<sup>™</sup> o DuoSpray<sup>™</sup>, lasciar raffreddare la sorgente di ionizzazione e l'interfaccia per almeno 30 minuti prima di iniziare qualsiasi procedura di manutenzione. Quando si utilizza la sorgente di ionizzazione NanoSpray<sup>®</sup>, lasciar raffreddare la sorgente di ionizzazione e l'interfaccia per almeno 60 minuti prima di iniziare qualsiasi procedura di manutenzione. Alcune superfici della sorgente di ionizzazione e dell'interfaccia di vuoto raggiungono temperature considerevoli durante il funzionamento.

---

**ATTENZIONE:** rischio di danni al sistema. Assicurarsi che i componenti dell'interfaccia di vuoto siano tenuti puliti e non presentino contaminazione chimica né da polvere. Indossare sempre guanti senza polvere per evitare contaminazioni quando si maneggiano questi componenti.

---

**ATTENZIONE:** rischio di danni al sistema. Disattivare il profilo hardware prima di accendere o spegnere il modulo di controllo. Una procedura differente da quella appena descritta potrebbe provocare uno stato di instabilità dello spettrometro di massa e la conseguente perdita di controllo nel software Analyst®. Qualora il profilo hardware non fosse disattivato e lo spettrometro di massa divenisse in questo modo instabile, recuperare il controllo rimuovendo e installando la sorgente di ionizzazione, oppure spegnendo e riaccendendo lo spettrometro di massa e il modulo di controllo e quindi riattivando il profilo hardware.

---

**Nota:** per una pulizia più approfondita, usare il kit opzionale Ion Mobility Cell Cleaning. Questo kit deve essere usato solo da un addetto alla manutenzione qualificato (QMP). Per ottenere il kit o per avere maggiori informazioni, contattare il servizio clienti SCIEX.

---

### Procedure preliminari

- [Rimozione della tecnologia SelexION®/SelexION®+](#)

### Materiali richiesti

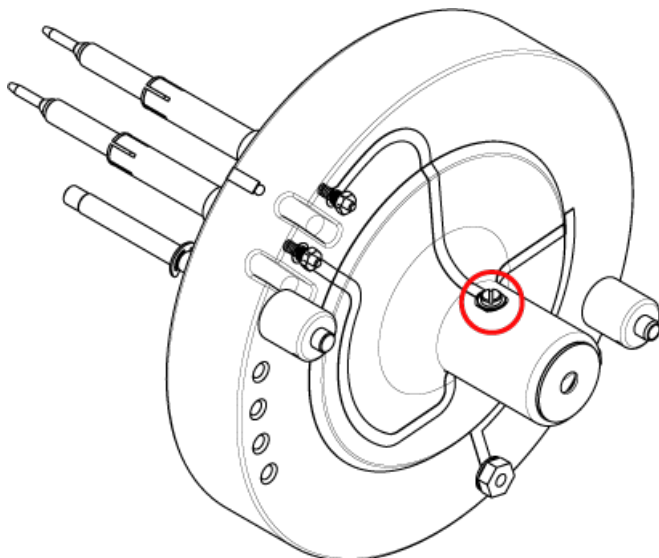
- Guanto senza polvere
- Cacciavite a taglio piccolo
- Soluzione 1:1 di metanolo:acqua
- Panno antipelo
- Distanziale

Pulire e allineare gli elettrodi quando si osserva contaminazione sulle superfici o quando si verificano ripetutamente errori di scariche ad alta tensione.

1. Utilizzando un cacciavite a taglio piccolo, allentare le viti finché gli elettrodi non si muovono liberamente nella cella di mobilità ionica, quindi rimuovere gli elettrodi dalla cella di mobilità ionica.



**Figura 2-9 Vite sulla cella di mobilità ionica SelexION<sup>®</sup> + con tecnologia di iniezione a getto**



---

**Nota:** se le viti vengono completamente rimosse dalla cella di mobilità ionica, assicurarsi che le rondelle curve siano riposizionate nel verso originale.

---

2. Pulire le superfici dell'elettrodo con un panno antipelo inumidito con una soluzione metanolo:acqua.

---

**Suggerimento!** Se la pulizia con acqua e metanolo non migliora le prestazioni, pulire gli elettrodi con un detergente non abrasivo, come Alconox. Se questo non migliora le prestazioni, strofinare leggermente le superfici piane con carta vetrata #600.

---

3. Far asciugare gli elettrodi.

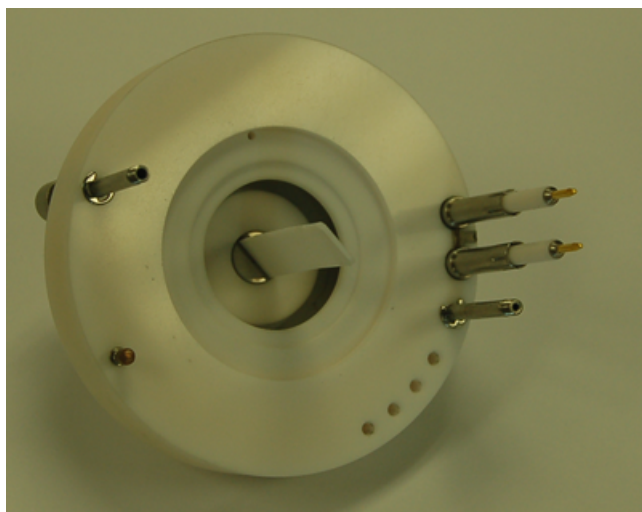
---

**ATTENZIONE: rischio di danni al sistema. Ridurre al minimo lo spostamento delle barre dopo averle inserite nella cella. Lo spostamento delle barre all'interno della cella può graffiare le barre o la cella o lasciare residui che possono causare scariche elettriche.**

---

4. Allineare i fori degli elettrodi con le viti della cella di mobilità ionica, poi installare gli elettrodi nella cella dal retro.
5. Serrare leggermente le viti.
6. Installare il distanziale tra gli elettrodi inserendolo fino in fondo.

Figura 2-10 Distanziale



7. Utilizzando un cacciavite a taglio piccolo, serrare le viti su entrambi i lati della cella di mobilità ionica per fissare gli elettrodi.
8. Posizionare la cella di mobilità ionica SelexION® sul separatore di vuoto SelexION®, quindi serrare le viti. Fare riferimento a [Installazione della tecnologia SelexION®/SelexION®+](#).

## Riempimento del contenitore del modificatore



**AVVERTENZA!** Pericolo di esposizione ad agenti chimici tossici: prestare attenzione durante il riempimento dei contenitori del modificatore. Fare riferimento alle schede tecniche di sicurezza delle sostanze chimiche e adottare le precauzioni appropriate. Non riempire il contenitore del modificatore quando si trova nel vassoio laterale. Scollegare la linea del liquido dal contenitore, riempire il contenitore in un luogo sicuro e reinstallare il contenitore e la linea del liquido nel vassoio laterale.

---

1. Scollegare la linea del liquido dal contenitore del modificatore nel vassoio laterale.
2. Riempire il contenitore del modificatore in un luogo sicuro con la dovuta cautela.
3. Reinstallare il contenitore del modificatore nel vassoio laterale, quindi ricollegare la linea del liquido.

## Pulizia delle superfici del modulo di controllo

Pulire le superfici esterne del modulo di controllo dopo un'eventuale fuoriuscita di liquido o quando sono sporche.

- Strofinare le superfici esterne con acqua calda, sapone e un panno morbido.

# Ottimizzazione dei parametri DMS

# 3

Per ottenere il segnale migliore e la separazione dei composti di interesse è necessario ottimizzare i parametri DMS. Per maggiori informazioni sui parametri DMS, fare riferimento a [Descrizione dei parametri DMS](#).

Ottimizzare i parametri DMS con o senza modificatore nella modalità **Manual Tuning**. I parametri DMS possono essere ottimizzati nella modalità **Tune and Calibrate** in uno dei seguenti modi:

- Iniziare da un metodo di acquisizione esistente che sia stato creato per i composti da analizzare e che contenga i parametri del composto, i parametri della sorgente e la velocità di flusso LC ottimizzati, quindi ottimizzare i parametri DMS.
- Creare un metodo di acquisizione, ottimizzando i parametri del composto, i parametri della sorgente e la velocità di flusso LC, quindi ottimizzando i parametri DMS.

In questa sezione è descritto il secondo metodo per l'ottimizzazione dei parametri DMS. Il primo metodo è un sottoinsieme del secondo metodo descritto in questa sezione.

## Ottimizzazione dei parametri DMS in Manual Tuning

Questa sezione descrive come:

- Creare un metodo di acquisizione in modalità **Manual Tuning** e ottimizzare i parametri DMS senza modificatore.
- Eliminare il modificatore.
- Creare un metodo di acquisizione e ottimizzare i parametri DMS nella modalità **Manual Tuning**, con un modificatore selezionato.

**Nota:** per acquisire dati utilizzando un modificatore è necessario creare il metodo di acquisizione, quindi ottimizzare i parametri DMS con il modificatore selezionato nel metodo. I parametri DMS [Separation Voltage (SV), Compensation Voltage (COV) e DMS Offset (DMO)] sono influenzati dalla scelta di un modificatore. Di conseguenza, l'aggiunta o la modifica del modificatore o della concentrazione del modificatore successiva all'ottimizzazione dei parametri SV, COV e DMO richiederà una nuova ottimizzazione di questi parametri.

### Prerequisiti

- La tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup> + è installata sullo spettrometro di massa e il modulo di controllo è acceso.

**Nota:** prima di accendere o spegnere il modulo di controllo (per aggiungere o rimuovere temporaneamente la tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup>+ dal sistema), disattivare il profilo hardware attivo nel software Analyst<sup>®</sup>. Una procedura differente da quella appena descritta potrebbe provocare uno stato di instabilità dello spettrometro di massa e la conseguente perdita di controllo nel software Analyst<sup>®</sup>. Qualora il profilo hardware non fosse disattivato e lo spettrometro di massa divenisse in questo modo instabile, riprendere il controllo rimuovendo e riposizionando la sorgente di ionizzazione, oppure spegnendo e accendendo nuovamente lo spettrometro di massa e il modulo di controllo e riattivando il profilo hardware.

---

## Creazione di un metodo di acquisizione e ottimizzazione dei parametri DMS senza un modificatore

Utilizzare questa procedura per creare un metodo di acquisizione e ottimizzare i parametri DMS per il composto nella modalità **Manual Tuning**. Per questa procedura non è necessario un modificatore.

1. Attivare un profilo hardware che contenga una pompa a siringa. Fare riferimento a *Creazione di profili hardware e progetti* nella *Guida introduttiva* o nella *Guida per l'utente del sistema*.
2. Eseguire l'infusione-T (o l'infusione separata) del campione nel flusso LC. Fare riferimento a [Infusione-T del campione nel flusso LC](#).
3. Nella barra di navigazione, fare clic su **Tune and Calibrate** e fare doppio clic su **Manual Tuning**.
4. Selezionare un tipo di scansione, quindi digitare intervalli di massa, transizioni, velocità di scansione e le altre informazioni richieste. Ottimizzare i parametri del composto e della sorgente di ionizzazione. Dopodiché, ottimizzare la velocità di flusso LC per la configurazione del metodo cromatografico. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione manuale*.
5. Fare clic sulla scheda **DMS**.

**Figura 3-1 Impostazioni predefinite del parametro DMS**

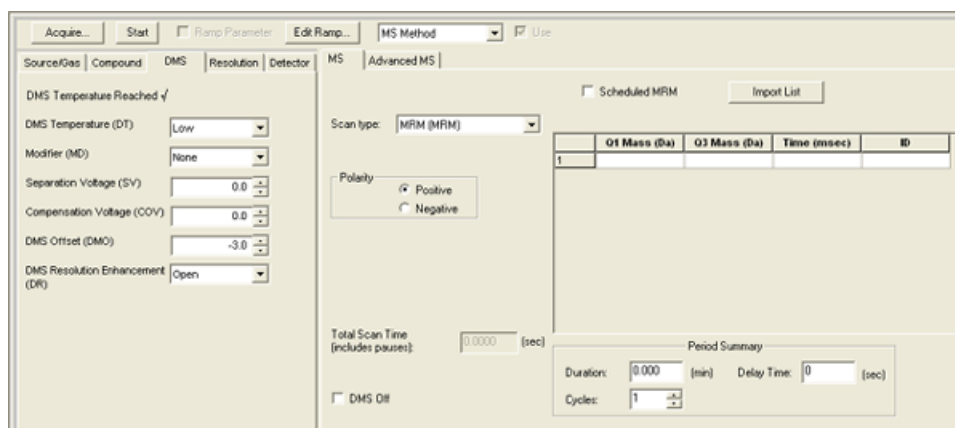
Source/Gas	Compound	DMS	Resolution	Detector
DMS Temperature Reached				
DMS Temperature (DT)		Low		
Modifier (MD)		None		
Separation Voltage (SV)		0.0		
Compensation Voltage (COV)		0.0		
DMS Offset (DMO)		-3.0		
DMS Resolution Enhancement (DR)		Off		

Tutti i parametri DMS hanno dei valori predefiniti. Per **Separation Voltage (SV)** e **Compensation Voltage (COV)** il valore predefinito è zero.

6. Ottimizzare i parametri DMS per ottenere una migliore separazione e una maggiore sensibilità. I seguenti parametri devono essere ottimizzati nell'ordine specificato:

- a. **DMS Temperature (DT):** fare clic su **Start** per verificare questo parametro con il valore predefinito **Low**. Per la verifica, utilizzare i valori predefiniti per altri parametri DMS (SV = 0; COV = 0; Modifier = None) o passare alla modalità DMS Off selezionando la casella di controllo **DMS Off** nella scheda MS.

**Figura 3-2 Tune Method Editor con impostazioni predefinite del parametro DMS in uno strumento di serie 6500**



I dati sono mostrati nei riquadri sotto Tune Method Editor. Se non si reputa soddisfacente il segnale ottenuto per il picco di interesse, modificare il valore di DT in **Medium** o **High** ed effettuare una nuova misurazione del segnale, fino a ottenere il segnale migliore.

**Nota:** per ogni modifica del valore DT, attendere che il sistema raggiunga l'equilibrio per almeno 30 minuti prima di ottimizzare i parametri DMS.

- b. **Modifier (MD):** assicurarsi che il valore di questo parametro sia **None**.
- c. **Separation Voltage (SV) e Compensation Voltage (COV):** SV e COV vengono verificati insieme ripetutamente al fine di trovare la combinazione SV e COV che restituisca miglior segnale e separazione. Aumentare SV da 0 all'intervallo SV massimo consentito mentre si incrementa gradualmente COV nell'intervallo COV completo. Fare riferimento a [Incremento graduale dei valori di Separation Voltage e Compensation Voltage](#).

**Nota:** l'intervallo COV completo va da -100 volt a 100 volt. Tuttavia, la maggior parte dei composti viene ottimizzata tra -20 volt e 30 volt in assenza di modificatore. Alcuni composti potrebbero essere ottimizzati anche oltre i 30 volt. Qualora sia presente un modificatore, si consiglia di utilizzare un intervallo COV che sia compreso almeno tra -60 volt e 20 volt, poiché gli spostamenti COV negativi per alcuni composti possono essere molto grandi. Il valore massimo di SV è legato ai parametri DT e TEM.

- d. **DMS Offset (DMO):** incrementare gradualmente DMO per la combinazione SV e COV ottimizzata. Fare riferimento a [Incremento graduale di DMO per la combinazione SV e COV ottimizzata](#)

### e. DMS Resolution Enhancement (DR):

- Sistemi 6500 e 6500+: per un singolo composto, si dovrebbe utilizzare il valore DR **Open** (senza aggiunta di gas acceleratore). Quando è necessario migliorare la separazione dei composti, si utilizzano altri valori DR, come **Off, Low, Medium o High**. Per esempio, quando due composti hanno COV simili e devono essere separati a livello basale, provare i valori DR **Off, Low, Medium o High** per ottenere la separazione migliore. Selezionare il valore desiderato (**Off, Low, Medium o High**) per il parametro DR e fare clic su **Start** per incrementare gradualmente COV a un valore SV particolare per valutare il segnale e la separazione dei composti. Provare diversi valori DR fino a ottenere una separazione dei composti soddisfacente.
- Sistemi 5500 e 5500+: per un singolo composto, per DR dovrebbe essere utilizzato il valore **Off** (senza aggiunta di gas acceleratore). Quando è necessario migliorare la separazione dei composti, vengono utilizzati altri valori di DR: Low, Medium o High.

---

**Nota:** per i sistemi 6500 e 6500+, quando il valore DR è impostato su Off, Low, Medium o High, è attivo il flusso del gas tra l'uscita del dispositivo SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup>+ e l'ingresso del separatore nello spettrometro di massa, il che aumenta la risoluzione del dispositivo. Per i sistemi 5500 e 5500+, il valore DR Low, Medium o High attiva il flusso del gas tra l'uscita del dispositivo SelexION<sup>®</sup> e l'ingresso del separatore nello spettrometro di massa.

---

La [Tabella 3-1](#) mostra i diversi valori di DR e la pausa corrispondente tra i tempi degli intervalli di massa.

**Tabella 3-1 Valori DR e pausa corrispondente tra i tempi degli intervalli di massa**

Valori DR	Pausa tra i valori dei range di massa	
	Sistemi 6500 e 6500+	Sistemi 5500 e 5500+
Open (impostazione predefinita per i sistemi 6500 e 6500+)	20 ms (predefinito)	—
Off (impostazione predefinita per i sistemi 5500 e 5500+)	20 ms	20 ms
Low	30 ms	30 ms
Medio	40 ms	40 ms
Alto	50 ms	50 ms

---

**Nota:** le letture di ritorno di DR mostrano la pressione attuale nella finestra di dialogo Mass Spec Detailed Status. Per aprire questa finestra di dialogo, fare doppio clic sull'icona **Mass Spec** nella barra di stato.

---

7. Salvare il metodo di acquisizione dopo aver ottimizzato correttamente tutti i parametri DMS.

## Incremento graduale dei valori di Separation Voltage e Compensation Voltage

1. Iniziare con un valore **SV** uguale a **0**.

2. Fare clic su **Edit Ramp**.

Si apre la finestra di dialogo Ramp Parameter Settings.

3. Selezionare **Compensation Voltage** nel campo **Parameter**.

4. Digitare **-20** nel campo **Start**.

5. Digitare **30** nel campo **Stop**.

6. Utilizzare il valore predefinito nel campo **Step** o immettere la dimensione dell'intervallo richiesta, quindi fare clic su **OK**.

La casella di controllo **Ramp Parameter** è selezionata.

7. Fare clic su **Start**.

I dati sono mostrati nei riquadri sotto **Tune Method Editor**. Annotare l'intensità massima del segnale. Il valore COV al quale viene raggiunta questa sensibilità massima deve essere zero.

8. Modificare il valore SV in un numero tra 0 e l'intervallo SV massimo consentito, per esempio 2000.

Utilizzare SV con incrementi di 500 o più, poiché l'intervallo SV ammesso è ampio.

9. Utilizzare lo stesso intervallo COV per l'incremento graduale e fare clic su **Start** per effettuare una nuova misurazione del segnale.

I dati sono mostrati nei riquadri sotto Tune Method Editor. Annotare l'intensità massima del segnale e il valore COV al quale viene raggiunto il segnale massimo.

10. Ripetere la procedura di incremento graduale di SV e COV, quindi annotare il valore SV che restituisce la migliore intensità del segnale. Dopo che l'intensità del segnale inizia a diminuire, interrompere il processo. Regolare ulteriormente il valore SV ripetendo la suddetta procedura con intervalli SV inferiori nell'intervallo da 100 volt a 200 volt utilizzato sopra e incrementando gradualmente COV.

Successivamente all'identificazione della coppia SV e COV ottimale, impostare questi valori per i parametri SV e COV nel metodo.

### Incremento graduale di DMO per la combinazione SV e COV ottimizzata

1. Fare clic su **Edit Ramp**.

Si apre la finestra di dialogo Ramp Parameter Settings.

2. Selezionare **DMS Offset** nel campo **Parameter**.

3. Digitare **-100** nel campo **Start**.

4. Digitare **100** nel campo **Stop**.

5. Utilizzare il valore predefinito nel campo **Step** o immettere un numero, quindi fare clic su **OK**.

6. Fare clic su **Start**.

I dati sono mostrati nei riquadri sotto Tune Method Editor. L'intervallo consentito per DMO va da -100 volt a 100 volt.

# Creazione di un metodo di acquisizione con un modificatore selezionato e ottimizzazione dei parametri DMS

---

**Nota:** non si possono utilizzare dei modificatori con la sorgente di ionizzazione NanoSpray<sup>®</sup>. Gli utenti possono creare metodi di acquisizione che comprendono i flussi e le informazioni del modificatore, ma, quando verranno eseguiti, la pompa del modificatore sarà disattivata.

---

Se il composto di interesse non venisse separato adeguatamente nella modalità DMS, si potrebbe introdurre un modificatore per coadiuvare la separazione dei composti. Un modificatore è un prodotto chimico che viene aggiunto nel flusso di Curtain Gas<sup>™</sup> per migliorare la separazione dei composti.

Selezionare un modificatore e ottimizzare i parametri DMS nella modalità **Manual Tuning**, quindi creare un metodo di acquisizione per salvare le impostazioni ottimizzate dei parametri.

Prima di selezionare un modificatore per la prima volta o quando si cambia il modificatore, svuotare la linea del modificatore. Fare riferimento a [Eliminazione del modificatore](#).

### Prerequisiti

- Nel contenitore del modificatore è presente un quantitativo di modificatore sufficiente per l'acquisizione. Per maggiori informazioni sul calcolo del consumo del modificatore, fare riferimento a [Calcolo del consumo adeguato del modificatore per un batch](#).
- Per riempire il contenitore del modificatore, fare riferimento a [Riempimento del contenitore del modificatore](#).

1. Eseguire l'infusione-T del campione nel flusso LC. Per maggiori dettagli, vedere [Infusione-T del campione nel flusso LC](#).
2. Sotto la voce **Tune and Calibrate** della barra di navigazione, fare doppio clic su **Manual Tuning**.
3. Selezionare un tipo di scansione, quindi digitare intervalli di massa, transizioni, velocità di scansione e le altre informazioni richieste. Ottimizzare i parametri del composto e della sorgente. Ottimizzare quindi la velocità di flusso LC secondo la configurazione del metodo cromatografico. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione manuale*.

---

**Suggerimento!** Come punto di partenza, è possibile utilizzare un metodo di acquisizione esistente che sia stato ottimizzato per i composti da analizzare. Il metodo esistente non può utilizzare alcun modificatore oppure può utilizzarne uno diverso da quello attualmente in uso. Il metodo utilizzato come punto di partenza fornisce dei parametri di sorgente e composto ottimizzati e una velocità di flusso LC. I parametri DMS devono essere modificati per il modificatore richiesto.

---

4. Fare clic sulla scheda **DMS**.
5. Ottimizzare il parametro DT come descritto in [Creazione di un metodo di acquisizione e ottimizzazione dei parametri DMS senza un modificatore](#).
6. Nel parametro **Modifier (MD)**, selezionare un modificatore dall'elenco. Selezionare uno dei modificatori predefiniti. Per utilizzare un modificatore diverso, selezionare **Custom**.



Figura 3-3 Impostazioni parametro DMS

Source/Gas	Compound	DMS	Resolution	Detector
DMS Temperature Reached				
DMS Temperature (DT)		Low		
Modifier (MD)		2-Propanol		
Modifier Composition (MDC)		Low		
Separation Voltage (SV)		0.0		
Compensation Voltage (COV)		0.0		
DMS Offset (DMO)		-3.0		
DMS Resolution Enhancement (DR)		Off		

Il parametro **Modifier Composition (MDC)** è mostrato con il suo valore predefinito, impostato su **Low**.

7. Nel parametro **MDC**, se necessario, selezionare **High** per provare la concentrazione del modificatore che dovrebbe fornire la separazione ottimale.

**Low è 1,5% o più, mentre High è 3,0% della concentrazione del modificatore.**

Il software utilizza il valore della velocità di flusso del **Curtain Gas** e la densità e il peso molecolare del modificatore selezionato per calcolare la velocità di flusso del modificatore, quindi applica tale velocità in modo automatico.

8. Se è stata selezionata l'opzione **Custom** per il parametro **Modifier (MD)** nel passaggio 6, fornire la densità e il peso molecolare del modificatore personalizzato come indicato in [Figura 3-4](#) in modo che il software possa calcolare la velocità di flusso del modificatore per l'impostazione specificata (**Low o High**), quindi applicarla.

Figura 3-4 Impostazioni parametro DMS

Parametro	Descrizione
Modifier Density (g/mL) (MDD)	Specificare la densità del modificatore personalizzato. Il software utilizza questa densità in aggiunta al peso molecolare del modificatore ( <b>Modifier Molecular Weight (MDW)</b> ) e al valore della velocità di flusso del <b>Curtain Gas</b> per determinare la velocità di flusso del modificatore personalizzato.
Modifier MW (MDW)	Specificare il peso molecolare del modificatore personalizzato in g/mol. Il software utilizza il valore di questo parametro in aggiunta alla densità del modificatore ( <b>Modifier Density (MDD)</b> ) e al valore della velocità di flusso del <b>Curtain Gas</b> per determinare la velocità di flusso del modificatore personalizzato.

**Suggerimento!** Per visualizzare la velocità di flusso della pompa del modificatore nella finestra di dialogo Mass Spec Detailed Status, fare doppio clic sull'icona **Mass Spec** sulla barra di stato.

- Per il modificatore selezionato e per il valore MDC, regolare i parametri SV, COV e DMO come descritto in [Creazione di un metodo di acquisizione e ottimizzazione dei parametri DMS senza un modificatore](#), finché non si ottengono un segnale e una separazione soddisfacenti.

**Nota:** per ogni modifica del tipo o della concentrazione del modificatore, attendere che il sistema raggiunga l'equilibrio per almeno 30 minuti prima di ottimizzare i parametri DMS.

Per provare una concentrazione differente (High o Low) dello stesso modificatore (selezionato nel passaggio 6), selezionare un valore MDC diverso (Low o High) e ottimizzare nuovamente i parametri SV, COV e DMO come descritto in [Creazione di un metodo di acquisizione e ottimizzazione dei parametri DMS senza un modificatore](#).

Per utilizzare un modificatore diverso, procedere come segue:

- a. Eliminare la linea del modificatore. Fare riferimento alla [Eliminazione del modificatore](#).
  - b. Selezionare un altro modificatore nel metodo di acquisizione, quindi specificare il valore MDC per il nuovo modificatore.
  - c. Ottimizzare nuovamente i parametri SV, COV e DMO come descritto in [Creazione di un metodo di acquisizione e ottimizzazione dei parametri DMS senza un modificatore](#).
10. Se necessario, ottimizzare il parametro DR come descritto in [Creazione di un metodo di acquisizione e ottimizzazione dei parametri DMS senza un modificatore](#).
11. Salvare il metodo di acquisizione.

## Controllo parametri del modificatore in tempo reale

Se i dati vengono acquisiti in **Manual Tuning** utilizzando il metodo di acquisizione creato nell'argomento precedente e l'utente cambia il valore MDC da **Low** a **High** o da **High** a **Low** durante l'acquisizione, il software calcola immediatamente la velocità di flusso necessaria della pompa del modificatore e regola la pompa del modificatore di conseguenza.

In modo analogo, se durante l'acquisizione l'utente modifica il peso molecolare o la densità molecolare del modificatore personalizzato specificato nel metodo di acquisizione, il software calcola immediatamente la velocità di flusso necessaria della pompa del modificatore e regola la pompa del modificatore di conseguenza.

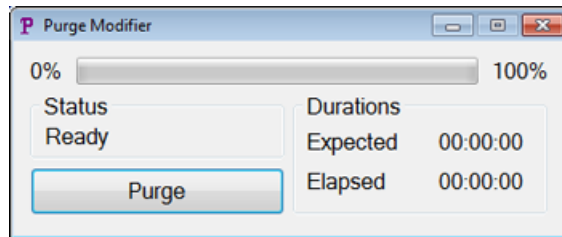
## Eliminazione del modificatore

Prima di utilizzare un nuovo modificatore, eliminare il modificatore attualmente in uso dalla pompa del modificatore. L'eliminazione del modificatore richiederà circa quattro minuti durante i quali lo spettrometro di massa non sarà utilizzabile.

Un modificatore può essere eliminato o rimosso dalla pompa del modificatore dalla modalità **Manual Tuning** o **Acquire** quando il modulo di controllo è acceso.

1. Verificare che il modulo di controllo SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup> + sia acceso, quindi attivare un profilo hardware. Fare riferimento a *Creazione di profili hardware e progetti* nella *Guida per l'utente del sistema*.
2. Collegare alla pompa del modificatore il contenitore contenente l'altro modificatore.
3. Compiere una delle seguenti operazioni:
  - Se il software è in modalità **Acquire** con campioni nella coda di acquisizione, fare riferimento a [Eliminazione di modificatori dalla modalità di acquisizione con campioni nella coda di acquisizione](#).
  - Se il software è già in modalità **Manual Tuning** o **Acquire**, andare al passo 4.
  - Se il software non è nella modalità **Manual Tuning** o **Acquire**, fare clic su **Acquire** o su **Tune and Calibrate** sulla barra di navigazione.
4. Fare clic sull'icona **Purge Modifier** nella barra degli strumenti.

**Figura 3-5 Finestra di dialogo Purge Modifier**



Si aprirà la finestra di dialogo Purge Modifier. Per la voce Status sarà visualizzato **Ready**, a indicare che il sistema è pronto a iniziare la procedura Purge.

5. Fare clic sul pulsante **Purge**.

Inizia il processo di eliminazione. Se l'eliminazione del modificatore è stata avviata dalla modalità **Manual Tuning**, il sistema entra automaticamente in una modalità non-Tuning e viene deselezionata sulla barra degli strumenti l'icona **Reserve Instrument for Tuning**. Fare riferimento alla [Processo di eliminazione](#).

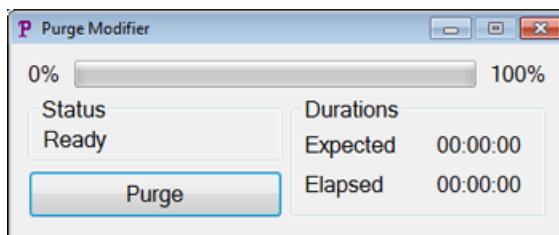
6. Fare clic su **X** per chiudere la finestra di dialogo Purge Modifier.

Al termine dell'eliminazione, equilibrare il sistema per circa 30 minuti. Per equilibrare il sistema, aprire il metodo di acquisizione da eseguire e avviarlo. Dopodiché, arrestare l'acquisizione. Attendere 30 minuti.

### Processo di eliminazione

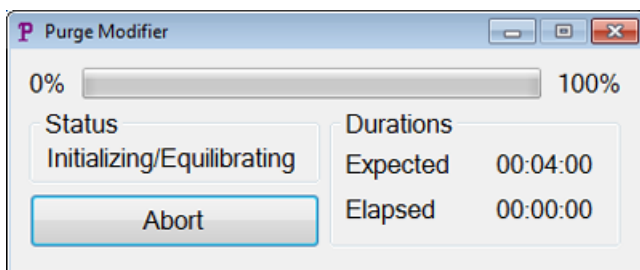
Se l'eliminazione del modificatore è stata avviata in modalità Manual Tuning, il sistema entra automaticamente in una modalità non-Tuning e viene deselezionata sulla barra degli strumenti l'icona **Reserve Instrument for Tuning**.

**Figura 3-6 Finestra di dialogo Purge Modifier**



La procedura di eliminazione accede alla modalità **Initializing/Equilibrating**. Nella modalità Initializing, vengono creati in background un metodo di acquisizione e un file batch. Durante la modalità **Equilibrating**, il sistema si sta equilibrando.

Figura 3-7 Finestra di dialogo Purge Modifier

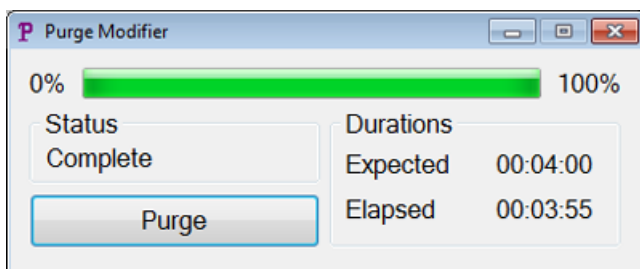


Nella finestra di dialogo Purge Modifier lo stato cambia quindi da **Initializing/Equilibrating** a **Purging**, a indicare che si sta eliminando il modificatore dalla pompa del modificatore. Durante l'eliminazione del modificatore, lo spettrometro di massa effettua una scansione e raccoglie i dati nella cartella API Instrument\Data. Al termine dell'eliminazione, il metodo di acquisizione eliminazione, il file batch e i dati vengono automaticamente rimossi.

Durante l'eliminazione, il pulsante **Purge** cambia in **Abort**. Vengono visualizzati il tempo stimato per l'eliminazione (quattro minuti) e il tempo trascorso nel ciclo Purge. La configurazione di sicurezza del progetto con Analyst<sup>®</sup> imposta automaticamente i parametri DMS e della sorgente a nuovi valori per quattro minuti (tempo stimato per l'eliminazione). Per visualizzare questi valori, fare riferimento a [Valori dei parametri DMS e della sorgente utilizzati durante l'eliminazione del modificatore](#).

**Suggerimento!** Gli utenti possono visualizzare l'avanzamento della procedura di eliminazione nella finestra di dialogo Mass Spec Detailed Status. Per visualizzare questa finestra di dialogo, fare doppio clic sull'icona **Mass Spec** nella barra di stato.

Figura 3-8 Finestra di dialogo Purge Modifier



L'eliminazione del modificatore dalla pompa del modificatore richiede circa quattro minuti. Al termine della procedura Purge, nella finestra di dialogo Purge Modifier lo stato cambia in **Complete**. Il pulsante **Abort** cambia nuovamente in **Purge**. Il sistema automaticamente accede di nuovo alla modalità Manual Tuning se l'eliminazione del modificatore era stata avviata da tale modalità. Vengono reimpostati i valori di alcuni parametri DMS e della sorgente. Per visualizzare i valori reimpostati, fare riferimento a [Valori dei parametri DMS e della sorgente dopo il completamento o l'interruzione dell'eliminazione del modificatore](#).

### Informazioni sul processo Purge

- Nella finestra di dialogo Purge Modifier, fare clic su **Abort**.

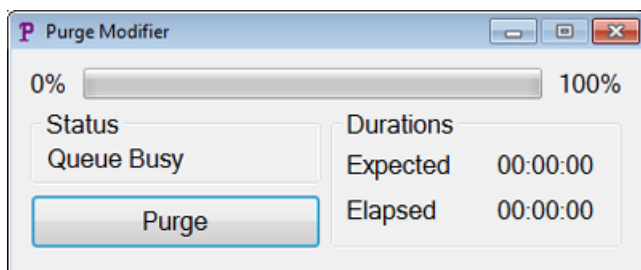
Il ciclo di eliminazione viene interrotto e vengono reimposti i valori di alcuni parametri DMS e della sorgente. Per visualizzare i valori reimposti, fare riferimento a [Valori dei parametri DMS e della sorgente dopo il completamento o l'interruzione dell'eliminazione del modificatore](#).

L'opzione **Status** cambia in **Aborted** e il pulsante **Abort** cambia in **Purge**. Se l'eliminazione del modificatore era stata avviata dalla modalità Manual Tuning, dopo l'interruzione il sistema torna alla modalità Manual Tuning. Dopo l'interruzione dell'eliminazione del modificatore, attendere che il sistema raggiunga l'equilibrio per circa 30 minuti con le condizioni della sorgente desiderate e il nuovo modificatore in uso prima dell'acquisizione di nuovi campioni.

### Eliminazione di modificatori dalla modalità di acquisizione con campioni nella coda di acquisizione

Se il sistema è in modalità **Acquire** con campioni nella coda di acquisizione e l'utente seleziona l'icona **Purge Modifier**, viene visualizzato un messaggio Queue Busy nella finestra di dialogo Purge Modifier.

Figura 3-9 Finestra di dialogo Purge Modifier



Facendo clic sul pulsante **Purge**, viene visualizzato un messaggio a indicare che è in corso l'acquisizione. Per continuare l'eliminazione, completare o annullare il processo di acquisizione e assicurarsi che non ci siano altri campioni in attesa nella coda.

### Stato di eliminazione del modificatore

Stato di eliminazione	Descrizione
Ready	Il sistema è pronto ad avviare il processo Purge.
Initializing/Equilibrating	Durante la modalità Initializing vengono creati un metodo di acquisizione e dei file batch. Il sistema si equilibra durante la modalità Equilibrating.
Purging	L'eliminazione del modificatore è in esecuzione.
Aborted	Il ciclo di eliminazione è terminato.
Queue Busy	L'acquisizione è in esecuzione. L'eliminazione non è consentita.
Complete	Il processo di eliminazione è terminato.

## Ottimizzazione dei parametri DMS attraverso Compound Optimization

Il tipo di ottimizzazione infusione-T nella modalità **Compound Optimization** permette agli utenti di ottimizzare automaticamente quanto segue:

- Parametri DMS (SV, COV e DMO)
- Parametri Composto e DMS (SV, COV e DMO)

Utilizzare il tipo di ottimizzazione FIA per ottimizzare solo il parametro COV per un determinato valore SV per la tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup>+. Può essere utilizzato anche per utilizzare parametri dipendenti dalla sorgente e dal composto.

**Nota:** la durata predefinita dei metodi Shimadzu LC è di 90 minuti. Quando si utilizza un sistema Shimadzu LC per l'ottimizzazione del composto FIA, utilizzare l'editor del metodo per modificare tale durata nella scheda Time Program relativa al sistema in uso. Se la durata non viene modificata, un metodo di sintonizzazione con durata della scansione dello spettrometro di massa inferiore a quella programmata per il sistema Shimadzu non può essere interrotto con il software Analyst<sup>®</sup> una volta che lo spettrometro di massa ha completato la scansione. L'esecuzione può essere interrotta soltanto con il tasto **Run** sul CBM Shimadzu.

### Prerequisiti

Prima di avviare l'ottimizzazione Infusione-T, creare un metodo di acquisizione che sarà utilizzato come iniziatore del metodo di acquisizione per l'ottimizzazione Infusione-T. Questo metodo dovrebbe includere quanto segue:

- Un metodo LC isocratico (opzionale se viene utilizzato una pompa LC isocratica esterna).
- Una pompa a siringa (opzionale se viene utilizzata una pompa a siringa esterna).
- Tipo di scansione MRM o Q1 MI.
- Parametri sorgente/gas ottimizzati.
- Parametro temperatura DMS ottimizzato con valori predefiniti SV, COV e DMO.
- Tipo di modificatore e flusso possono essere o meno specificati.
- Se viene utilizzata una guida AAO o una guida Shimadzu integrata come pompa LC, impostare una durata LC lunga a sufficienza per l'acquisizione. Il software Analyst<sup>®</sup> non può modificare la durata LC.
- Il numero massimo di composti è 20.

## Ottimizzazione dei parametri DMS esclusivamente con ottimizzazione di tipo Infusione-T

Usare questa procedura per ottimizzare automaticamente i parametri SV, COV e DMO con il metodo Infusione-T.

1. Assicurarsi che sia attivo un profilo hardware. Se il metodo iniziatore contiene un metodo pompa a siringa o un metodo pompa LC, il profilo hardware deve contenere anche una pompa a siringa o pompa

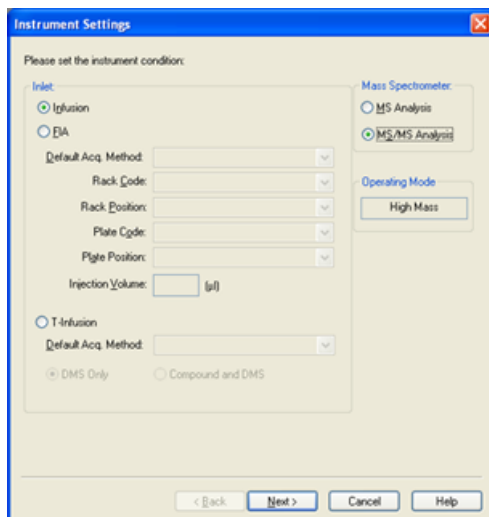
## Ottimizzazione dei parametri DMS

---

LC, rispettivamente. Fare riferimento a *Creazione di Profili Hardware e Progetti* nella *Guida Introductiva*.

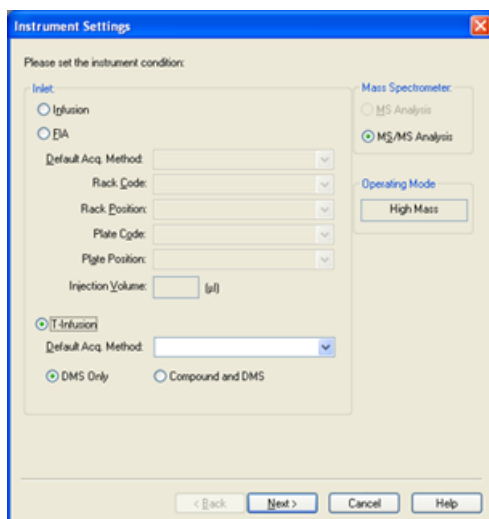
2. Eseguire l'infusione-T del campione nel flusso LC. Fare riferimento a [Infusione-T del campione nel flusso LC](#).
3. Sotto la voce **Tune and Calibrate** della barra di navigazione, fare doppio clic su **Compound Optimization**.

**Figura 3-10** Finestra di dialogo Instrument Settings in uno strumento di serie 6500



4. Nel gruppo **Inlet** presente nella pagina **Instruments Settings**, fare clic su **T-Infusion**.

**Figura 3-11** Finestra di dialogo Instrument Settings in uno strumento di serie 6500



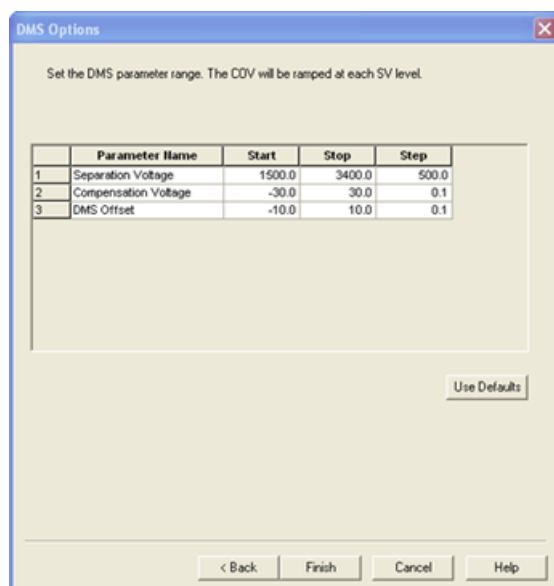


5. Nel campo **Default Acq. Method**, selezionare dall'elenco il metodo di acquisizione che verrà utilizzato come metodo iniziatore.
6. La casella di controllo **DMS Only** è selezionata.

L'opzione Mass Spectrometer (Analisi MS o Analisi MS/MS) è impostata in base al tipo di scansione del metodo di scansione iniziatore.

7. Fare clic su **Next**.

**Figura 3-12 Finestra di dialogo DMS Options**



Si aprirà la finestra di dialogo DMS Options. Nella finestra di dialogo vengono visualizzati i valori predefiniti **Start**, **Stop** e **Step** per i parametri SV, COV e DMO.

8. Nella finestra di dialogo DMS Options, specificare i valori da utilizzare per ottimizzare i parametri SV, COV e DMO. Utilizzare i valori predefiniti o un intervallo minore che può ridurre il tempo necessario per il processo di ottimizzazione. Si utilizza l'ampiezza predefinita dell'intervallo a meno che non venga specificata un'ampiezza differente per i parametri SV, COV e DMO. Gli intervalli consentiti per SV, COV e DMO sono elencati nella [Tabella 3-2](#).

**Tabella 3-2 Intervalli**

Nome del parametro	Inizio	Fine
Separation Voltage (SV)	0	Verrà visualizzato in questo campo il massimo SV consentito in base ai valori DT e TM specificati nel metodo di acquisizione iniziatore.
Compensation Voltage (COV)	-100	100
DMS Offset (DMO)	-100	100

COV viene incrementato gradualmente per ciascun livello di SV. Dopo l'incremento graduale di COV, viene incrementato gradualmente DMO.

---

**Nota:** la maggior parte dei composti viene ottimizzata tra -20 volt e 30 volt in assenza di modificatore. Alcuni composti potrebbero essere ottimizzati anche oltre i 30 volt. Qualora sia presente un modificatore, si consiglia di utilizzare un intervallo COV compreso almeno tra -60 e 20 volt, poiché gli spostamenti COV negativi per alcuni composti possono essere molto grandi.

---

9. Fare clic su **Finish** per iniziare la procedura di ottimizzazione.

Inizia la procedura di ottimizzazione. Lo schermo visualizza due finestre, una finestra file di testo e una finestra di acquisizione. Se necessario, minimizzarne una per vedere l'altra. L'asse x mostra il parametro che si sta ottimizzando, in volt, per esempio, COV. L'asse y mostra l'intensità in conteggi al secondo (cps). La finestra file di testo viene aggiornata quando si generano risultati.

Al termine del processo di ottimizzazione, viene salvata la combinazione dei parametri che forniscono la maggiore intensità del segnale. Se l'intensità è inferiore al valore minimo (100 cps), viene visualizzato un messaggio di errore nella finestra file di testo.

Quando la procedura di ottimizzazione si conclude correttamente, i parametri ottimizzati vengono aggiunti in una copia del metodo iniziatore e il nuovo metodo viene salvato con il nome:

"[startmethodname]\_DMS.dam", nella cartella <unità>:\Analyst Data\Projects\[Your\_Project folder]\Acquisition Methods. Il file di testo viene salvato nella cartella <unità>:\Analyst Data\Projects\[Your\_Project folder]\Log.

Tutti i file .wiff generati durante la procedura di ottimizzazione vengono salvati nella cartella <unità>:\Analyst Data\Projects\[Your\_Project folder]\Data.

## Ottimizzazione dei parametri del composto e DMS con il tipo di ottimizzazione Infusione-T

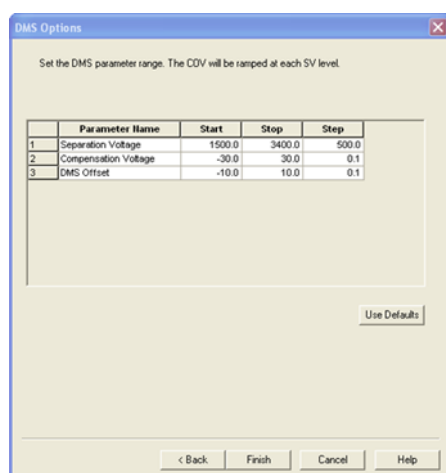
Il software Analyst<sup>®</sup> fornisce un'opzione per ottimizzare insieme i parametri composto e DMS nella modalità Compound Optimization. Quando viene utilizzata questa opzione, vengono prima ottimizzati i parametri composto in infusione-T utilizzando un flusso di lavoro simile all'ottimizzazione infusione, alla fine vengono ottimizzati i parametri DMS in modo simile all'opzione DMS Only.

1. Sotto la voce **Tune and Calibrate** della barra di navigazione, fare doppio clic su **Compound Optimization**.
2. Nella sezione Inlet della pagina Instruments Settings , fare clic su **T-Infusion**.
3. Nel campo **Default Acq. Method**, selezionare dall'elenco il metodo di acquisizione che verrà utilizzato come metodo iniziatore.
4. Fare clic su **Compound** e su **DMS**.

Le opzioni Spettrometri di Massa sono attive.

5. Fare clic su **MS Analysis** o **MS/MS Analysis** in base al tipo di scansione selezionato nel metodo di acquisizione predefinito.
6. Fare clic su **Next**.  
Si aprirà la finestra di dialogo Ions to use in MS/MS Analysis.
7. Nella finestra di dialogo Ions to use in MS/MS Analysis, digitare i valori per tutti i campi. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione automatica*.
8. Fare clic su **Criteria** vicino all'opzione **Auto Select**.
9. Nella finestra di dialogo Product Ion Auto Selection Criteria, digitare i valori per tutti i campi. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione automatica*.
10. Fare clic su **OK** per salvare le modifiche ai criteri di selezione.
11. Fare clic su **Next**.
12. Nella finestra di dialogo Target Components, digitare i nomi dei composti e le loro masse Q1 e Q3. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione automatica*.
13. Fare clic su **Next**.

**Figura 3-13 Finestra di dialogo DMS Options**



Si aprirà la finestra di dialogo DMS Options. Nella finestra di dialogo vengono visualizzati i valori predefiniti **Start**, **Stop** e **Step** per i parametri SV, COV e DMO.

## Ottimizzazione dei parametri DMS

---

14. Nella finestra di dialogo DMS Options, specificare i valori da utilizzare per ottimizzare i parametri SV, COV e DMO. Utilizzare i valori predefiniti o un intervallo minore che può ridurre il tempo necessario per il processo di ottimizzazione. L'ampiezza predefinita dell'intervallo viene utilizzata a meno che non venga specificata un'ampiezza differente per SV, COV e DMO. Gli intervalli consentiti per SV, COV e DMO sono elencati nella [Tabella 3-3](#).

**Tabella 3-3 Intervalli consentiti per SV, COV e DMO**

Nome del parametro	Inizio	Fine
Separation Voltage (SV)	0	Verrà visualizzato in questo campo Il massimo SV consentito in base ai valori DT e TM specificati nel metodo di acquisizione iniziatore.
Compensation Voltage (COV)	-100	100
DMS Offset (DMO)	-100	100

COV viene incrementato gradualmente per ciascun livello di SV. Dopo l'incremento graduale di COV, viene incrementato gradualmente DMO.

---

**Nota:** la maggior parte dei composti viene ottimizzata tra -20 volt e 30 volt in assenza di modificatore. Alcuni composti potrebbero essere ottimizzati anche oltre i 30 volt. Qualora sia presente un modificatore, si consiglia di utilizzare un intervallo COV che sia compreso almeno tra -60 volt e 20 volt, poiché gli spostamenti COV negativi per alcuni composti possono essere molto grandi.

---

15. Fare clic su **Finish** per iniziare la procedura di ottimizzazione.

Inizia la procedura di ottimizzazione. Lo schermo visualizza due finestre, una finestra file di testo e una finestra di acquisizione. Può rendersi necessario minimizzare una finestra per vedere l'altra. L'asse x mostra il parametro che si sta ottimizzando, in volt, per esempio, COV. L'asse y mostra l'intensità in conteggi al secondo (cps). La finestra file di testo viene aggiornata quando si generano risultati.

Al termine del processo di ottimizzazione, viene salvata la combinazione dei parametri che forniscono la maggiore intensità del segnale. Se l'intensità è inferiore al valore minimo (100 cps), viene visualizzato un messaggio di errore nella finestra file di testo.

Quando la procedura di ottimizzazione si conclude correttamente, i parametri ottimizzati vengono aggiunti in una copia del metodo iniziatore e il nuovo metodo viene salvato con il nome:

"[startmethodname]\_DMS.dam", nella cartella <drive>:\Analyst Data\Projects\[Your\_Project folder]\Acquisition Methods. Il file di testo viene salvato nella cartella <drive>:\Analyst Data\Projects\[Your\_Project folder]\Log.

Tutti i file .wiff generati durante la procedura di ottimizzazione vengono salvati nella cartella <drive>:\Analyst Data\Projects\[Your\_Project folder]\Data.

## Ottimizzazione di COV attraverso l'iniezione in flusso (FIA)

COV è l'unico parametro DMS che può essere ottimizzato attraverso il metodo FIA. Il metodo FIA viene utilizzato anche per la messa a punto dei parametri dipendenti dalla sorgente e dal composto.

Prima di avviare l'ottimizzazione FIA, creare un metodo di acquisizione con parametri di sorgente, composto e DMS ottimizzati attraverso il metodo Infusione-T descritto in [Ottimizzazione dei parametri del composto e DMS con il tipo di ottimizzazione Infusione-T](#). Per vuoto nei metodi utilizzati per l'ottimizzazione FIA sia incluso un autocampionatore. Questo metodo sarà utilizzato come metodo iniziatore per FIA.

1. Sotto la voce **Tune and Calibrate** della barra di navigazione, fare doppio clic su **Compound Optimization**.
2. Nella pagina Instrument Settings, a seconda della pila HPLC utilizzata, digitare quanto segue:

**Tabella 3-4 Pagina Instrument Settings**

Campo	Valore
Inlet	FIA
Default Acq. Metodo	Metodo di acquisizione iniziatore
Rack Code	Specifico dell'autocampionatore
Rack Position	Specifico dell'autocampionatore
Injection Volume	Quantità di campione da iniettare in µL
Mass Spectrometer	Analisi MS/MS

3. Fare clic su **Next**.
4. Nella pagina FIA Target Compounds, non selezionare la casella di controllo **Int. Std.** perché qualsiasi transizione contrassegnata come Internal Standard non verrà ottimizzata.
5. Nella sezione **Resolution**, selezionare **Unit** in entrambi i campi **Q1 Resolution** e **Q3 Resolution**.
6. Fare clic su **Next**.
7. Nella pagina FIA Source Parameters, se necessario, per ciascun parametro da ottimizzare, digitare almeno due valori da ottimizzare, quindi selezionare la casella di controllo nella colonna **Optimize**. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione automatica*.
8. Fare clic su **Next**.
9. Nella pagina FIA Compound Parameters, se necessario, per ciascun composto, digitare i valori da utilizzare per eseguire l'ottimizzazione per Declustering Potential, Collision Energy e Collision Cell Exit Potential. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione automatica*.
10. Nella stessa pagina, per ciascun composto, digitare i valori da ottimizzare per il parametro COV nella colonna **Values for Optimization** separata da punto e virgola (;). Per esempio, 2.1;2.2;2.3;

## Ottimizzazione dei parametri DMS

---

**Nota:** la maggior parte dei composti viene ottimizzata tra -20 volt e 30 volt in assenza di modificatore. Alcuni composti potrebbero essere ottimizzati anche oltre i 30 volt. Qualora sia presente un modificatore, si consiglia di utilizzare un intervallo COV che sia compreso almeno tra -60 volt e 20 volt, poiché gli spostamenti COV negativi per alcuni composti possono essere molto grandi.

---

11. Selezionare la casella di controllo nella colonna **Optimize** per COV.

I campi **Total # of Injections** e **Total Sample Volume** si aggiornano automaticamente. Nel campo **Mass Spec. Duration** viene visualizzata la durata dal metodo iniziatore selezionato in [2](#).

12. Fare clic su **Finish** per iniziare la procedura di ottimizzazione.

La configurazione di sicurezza del progetto con Analyst<sup>®</sup> esegue i valori specificati dei parametri dipendenti dalla sorgente e dal composto, compreso COV, e seleziona il valore con la risposta maggiore per ottenere il miglior segnale per i composti di interesse. Mentre il software procede con l'ottimizzazione, viene creato un report di ottimizzazione FIA. Il report di ottimizzazione FIA riporterà il valore COV ottimale per SV specificato nel metodo iniziatore per ciascun composto.

13. Il software genera un metodo finale di acquisizione FIA ottimizzato, chiamato "**\*\_DMS.dam**". È possibile aprire questo metodo e salvarlo utilizzando un nome più semplice.

Per ottimizzare COV per un valore SV differente, modificare il metodo iniziatore, quindi avviare nuovamente l'ottimizzazione FIA.

## Ottimizzazione dello strumento

L'ottimizzazione dello strumento con la tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup> + installata dovrebbe essere utilizzata esclusivamente per la risoluzione di problemi o per correggere piccoli problemi di risoluzione o calibrazione. Per l'ottimizzazione completa dello strumento, si consiglia di rimuovere la cella di mobilità ionica o la cella di mobilità ionica con tecnologia a iniezione a getto dalla sorgente di ionizzazione prima di effettuare l'ottimizzazione dello strumento.

Questa sezione descrive come eseguire le seguenti operazioni:

- Creare un metodo di acquisizione con parametri DMS fissati nella modalità Acquire.
- Acquisire ulteriori informazioni sulla capacità della tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup> + di separare composti isobarici.
- Differenziare i composti isobarici nei metodi di acquisizione con algoritmo MRM e *Scheduled MRM*<sup>™</sup>.
- Creare un metodo di acquisizione con algoritmo *Scheduled MRM*<sup>™</sup> con parametri DMS.
- Creare un metodo di acquisizione per l'incremento graduale di COV nella modalità di acquisizione batch.
- Ulteriori informazioni sul calcolo del consumo di modificatore.

## Prerequisiti

- La tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup> + è installata sullo spettrometro di massa e il modulo di controllo è acceso.

Utilizzare i metodi creati in questa sezione per inviare batch per acquisire dati. Fare riferimento alla *Guida introduttiva* o alla *Guida per l'utente del sistema* dello spettrometro di massa.

## Creazione di un metodo di acquisizione con parametri DMS fissati nella modalità Acquire

Utilizzare questa procedura se i parametri DMS sono già stati ottimizzati e sono necessari per creare un metodo di acquisizione.

1. Attivare un profilo hardware. Fare riferimento a *Creazione di profili hardware e progetti* nella *Guida introduttiva* del software Analyst<sup>®</sup> o nella *Guida per l'utente del sistema* in uso.
2. Sotto la voce **Acquire** della barra di navigazione, fare doppio clic su **Build Acquisition Method**.

Si aprirà la finestra Acquisition Method.

3. Fare clic su **Mass Spec** nel riquadro del metodo Acquisition.

La casella di controllo **Ramp COV** nella scheda **MS** è deselezionata per consentire l'uso di un valore COV fissato e senza aumentare gradualmente il parametro COV.

4. Selezionare un tipo di scansione e immettere, se disponibili, intervallo di massa, transizioni MRM, tempo di diffusione, velocità di scansione e altre informazioni richieste. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione manuale*.

## Creare e trasmettere i batch

---

5. Fare clic col pulsante destro sulla tabella degli intervalli di massa e selezionare **Separation Voltage SV**.

Alla tabella dei range di massa viene aggiunta una nuova colonna chiamata **SV (volts)**.

6. Digitare il valore SV ottimizzato nella prima riga della colonna **SV (volt)**.
7. Fare clic col pulsante destro sulla tabella degli intervalli di massa e fare clic su **Compensation Voltage COV**.

Alla tabella dei range di massa viene aggiunta una nuova colonna chiamata **COV (volts)**.

8. Digitare il valore COV ottimizzato nella prima riga della colonna **COV (volt)**.
9. Fare clic col pulsante destro sulla tabella degli intervalli di massa e fare clic su **DMS Offset DMO**.

Alla tabella dei range di massa viene aggiunta una nuova colonna chiamata **DMO (volts)**.

10. Digitare il valore DMO ottimizzato nella prima riga della colonna **DMO (volt)**.
11. Digitare le masse e altre informazioni, compresi i valori SV, COV e DMO per tutti gli altri composti nella tabella dei range di massa.
12. Fare clic su **Edit Parameters**.

Si aprirà la finestra di dialogo Period 1 Experiment 1 Parameter Table.

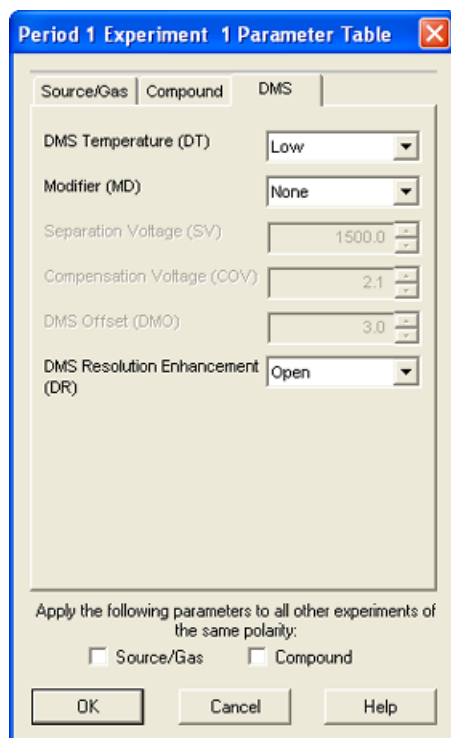
13. Digitare i valori ottimizzati dei parametri del composto nella scheda **Compound**. Digitare i valori ottimizzati dei parametri della sorgente di ionizzazione e del gas nella scheda **Source/Gas**. Verificare che la temperatura della sorgente specificata qui sia la stessa utilizzata per l'ottimizzazione dei parametri DMS.

Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione manuale*.

14. Selezionare la scheda **DMS**, quindi selezionare i valori necessari per i parametri **DMS Temperature (DT)**, **Modifier (MD)** e **DMS Resolution Enhancement (DR)**. Assicurarsi che la temperatura DMS specificata sia la stessa utilizzata per l'ottimizzazione dei parametri DMS.



Figura 4-1 Finestra di dialogo Period 1 Experiment 1 Parameter Table



15. Fare clic su **OK**.
16. Se necessario, fornire i valori dei parametri delle periferiche incluse nel profilo hardware.
17. Salvare il metodo di acquisizione.

La durata della pausa tra gli intervalli di massa è legata al valore **DMS Resolution Enhancement (DR)**, ma gli utenti possono utilizzare il loro valore predefinito. Tuttavia, l'utilizzo di una durata della pausa tra gli intervalli di massa inferiore al valore predefinito (20 ms) impostato dal software può produrre una perdita di segnale.

---

**Nota:** per ottimizzare valori differenti per i parametri DMS, aprire il metodo di acquisizione in modalità **Manual Tuning**, quindi ottimizzare nuovamente i parametri con valori diversi.

---

## Separazione dei composti isobarici utilizzando la tecnologia SelexION

I composti isobarici hanno la stessa massa nominale e per questo non possono essere distinti dallo spettrometro di massa. La tecnologia SelexION®/SelexION®+ elimina automaticamente l'interconnessione e può separare i composti isobarici.

## Creare e trasmettere i batch

---

Quando si crea un metodo di acquisizione MRM per molteplici composti isobarici, si consiglia di alternare, se possibile, le masse isobariche con gli intervalli di massa degli altri composti e di evitare masse isobariche in transizioni MRM consecutive.

Procedere come segue qualora vi siano due composti isobarici e due composti non isobarici in un metodo MRM:

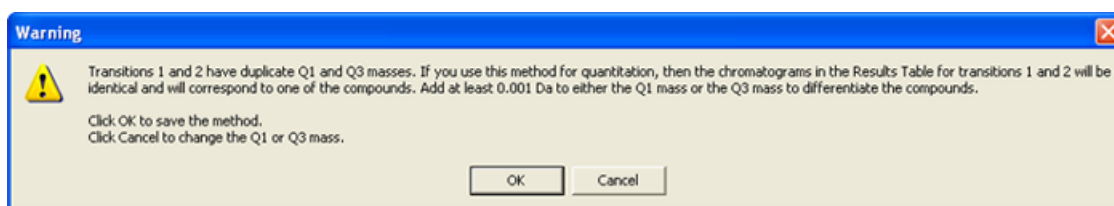
1. Immettere gli intervalli di massa di un composto isobarico.
2. Immettere gli intervalli di massa di un composto non isobarico.
3. Immettere la massa del secondo composto isobarico.
4. Immettere la massa del secondo composto non isobarico.

Qualora fosse impossibile evitare isobarici consecutivi in un metodo, il software starà attento ad evitare l'interconnessione a spese di una durata del ciclo leggermente superiore.

## Differenziare i Composti Isobarici nei metodi di acquisizione con algoritmo MRM e *Scheduled MRM*<sup>TM</sup>

Quando si salva un metodo di acquisizione MRM, Q1 MI, Q3 MI o un metodo di acquisizione con algoritmo *Scheduled MRM*<sup>TM</sup> che contiene due o più composti isobarici consecutivi con le stesse masse Q1 e Q3, il software visualizza un avviso. L'avviso indica che, se viene utilizzato questo metodo per la quantificazione, i cromatogrammi nella tabella dei risultati per i composti isobarici saranno identici e corrisponderanno a uno solo dei composti isobarici.

Figura 4-2 Messaggio di avviso



Per risolvere questo conflitto, differenziare nel metodo di acquisizione i composti isobarici, con l'aggiunta di almeno 0.001 Da a una delle masse Q1 o Q3 di uno (o più) composti isobarici. Per esempio, le masse Q1 di alcuni composti isobarici consecutivi possono essere modificate come segue: 700.000, 700.001, 700.002 e così via.

Un altro metodo utilizzato per differenziare i composti isobarici è quello di digitare il nome dei composti isobarici nel campo **Compound ID** del metodo di acquisizione. In questo modo, l'utente potrà identificare correttamente i composti isobarici mentre si crea il metodo di quantificazione per questi composti.

Se si utilizza il software MultiQuant<sup>TM</sup> per la quantificazione e le analisi dei dati, masse identiche vengono quantificate separatamente in base al loro **Compound ID** (ID composto).

---

## Utilizzo dei parametri DMS in un metodo di acquisizione con algoritmo *Scheduled* MRM

Il software supporta l'utilizzo di parametri DMS con l'algoritmo *Scheduled* MRM™ per ottenere il segnale migliore e la separazione dei composti di interesse.

È possibile utilizzare questa procedura se si dispone già dei valori ottimizzati per tutti i parametri DMS e si ha necessità di creare un metodo di acquisizione con algoritmo *Scheduled* MRM™.

---

**Nota:** invece di creare un nuovo metodo di acquisizione con algoritmo *Scheduled* MRM™, utilizzare, come punto di partenza, un metodo di acquisizione esistente che contenga parametri composto, sorgente di ionizzazione e DMS ottimizzati e velocità di flusso LC. A questo metodo di acquisizione aggiungere le informazioni richieste per la programmazione MRM. Fare riferimento all'*Esercitazione algoritmo Scheduled MRM*.

---

1. Attivare un profilo hardware. Fare riferimento a *Creazione di profili hardware e progetti* nella *Guida introduttiva* del software Analyst® o nella *Guida per l'utente del sistema* in uso.
2. Sotto la voce **Acquire** della barra di navigazione, fare doppio clic su **Build Acquisition Method**.  
  
Si aprirà la finestra Acquisition Method.
3. Fare clic su **Mass Spec** nel riquadro del metodo Acquisition.
4. Creazione di un metodo di acquisizione con algoritmo *Scheduled* MRM™. Fare riferimento a *Esercitazione algoritmo Scheduled MRM*.
5. Aggiungere i valori ottimizzati SV, COV e DMO alla tabella degli intervalli di massa per la transizione MRM procedendo come illustrato di seguito:

- Fare clic col pulsante destro sulla tabella degli intervalli di massa e selezionare **Separation Voltage SV** nel menu contestuale.  
Alla tabella dei range di massa viene aggiunta una nuova colonna chiamata **SV (volts)**. Viene aggiunto anche il valore ottimizzato di SV.
- Fare clic col pulsante destro sulla tabella dei range di massa e fare clic su **Compensation Voltage COV**.  
Alla tabella dei range di massa viene aggiunta una nuova colonna chiamata **COV (volts)**. Viene aggiunto anche il valore ottimizzato di COV.
- Fare clic col pulsante destro sulla tabella dei range di massa e fare clic su **DMS Offset DMO**.  
Alla tabella dei range di massa viene aggiunta una nuova colonna chiamata **DMO (volts)**. Viene aggiunto anche il valore ottimizzato di DMO.

6. Ripetere il passaggio 5 per tutte le transizioni MRM nel metodo di acquisizione.
7. Fare clic su **Edit Parameters**.  
  
Si aprirà la finestra di dialogo Period 1 Experiment 1 Parameter Table.
8. Digitare i valori ottimizzati dei parametri del composto nella scheda **Compound**. Digitare i valori ottimizzati dei parametri della sorgente di ionizzazione e del gas nella scheda **Source/Gas**. Assicurarsi che la

temperatura della sorgente specificata corrisponda al valore utilizzato per l'ottimizzazione dei parametri DMS. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione manuale*.

9. Selezionare la scheda **DMS** e selezionare i valori necessari per i parametri DMS Temperature (DT), Modifier (MD) e DMS Resolution Enhancement (DR). Assicurarsi che la temperatura DMS specificata sia la stessa utilizzata per l'ottimizzazione dei parametri DMS.
10. Fare clic su **OK**.
11. Se necessario, fornire i valori dei parametri delle periferiche incluse nel profilo hardware e salvare quindi il metodo di acquisizione.

In un metodo di acquisizione con algoritmo *Scheduled MRM*<sup>TM</sup>, la durata della pausa tra gli intervalli di massa è legata al valore **DMS Resolution Enhancement (DR)**, ma gli utenti possono utilizzare il loro valore preferito. Tuttavia, l'utilizzo di una durata della pausa tra gli intervalli di massa inferiore al valore predefinito (20 ms) impostato dal software produce una perdita di segnale.

## Creazione di un metodo di acquisizione per l'incremento graduale di COV durante l'acquisizione batch

Per l'analisi di campioni per infusione, ad esempio nel metabolismo con l'uso di tecniche di campionamento di superficie, la tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup>+ può essere usata per separare composti al posto della cromatografia liquida (LC) e la funzione di incremento graduale del voltaggio di compensazione (COV) può essere utilizzata per simulare il gradiente LC.

Oltre alla modalità Manual Tuning, il parametro COV può essere incrementato gradualmente anche durante l'acquisizione batch, selezionando la casella di controllo **Ramp COV** nell'Acquisition Method Editor. Il parametro COV viene trattato come un parametro dipendente dal ciclo. La funzione di incremento graduale di COV funziona per un metodo di acquisizione DMS a singolo periodo.

Utilizzare questa procedura una volta ottimizzati i valori o i valori predefiniti accettabili per tutti i parametri DMS ad eccezione di COV.

1. Attivare un profilo hardware. Fare riferimento a *Creazione di profili hardware e progetti* nella *Guida introduttiva* del software Analyst<sup>®</sup> o nella *Guida per l'utente del sistema* in uso.
2. Sotto la voce **Acquire** della barra di navigazione, fare doppio clic su **Build Acquisition Method**.

Si aprirà la finestra Acquisition Method.

3. Fare clic su **Mass Spec** nel riquadro del metodo Acquisition.
4. Selezionare un tipo di scansione e digitare, se disponibili, range di massa, transizioni MRM, tempo di diffusione, velocità di scansione e altre informazioni necessarie per tutti i composti. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione manuale*.
5. Selezionare la casella di controllo **Ramp COV** nella scheda **MS** e digitare i seguenti valori COV nell'intervallo COV consentito compreso tra -100 volt e 100 volt:

Tabella 4-1 Parametri di incremento graduale

Parametro	Valori
Start	Digitare la tensione alla quale iniziare l'incremento graduale.
Fine	Digitare la tensione alla quale interrompere l'incremento graduale.
Step	Impostare l'ampiezza degli intervalli di ogni ciclo.

**Nota:** la maggior parte dei composti viene ottimizzata nell'intervallo tra -20 volt e 30 volt in assenza di modificatore. Alcuni composti potrebbero essere ottimizzati anche oltre i 30 volt. Qualora sia presente un modificatore, si consiglia di utilizzare un intervallo COV che sia compreso almeno tra -60 volt e 20 volt, poiché gli spostamenti COV negativi per alcuni composti possono essere molto grandi.

Figura 4-3 Scheda MS

The screenshot shows the 'Advanced MS' interface. Key parameters include: Experiment: 1, Scan type: MRM (MRM), Polarity: Positive, Scheduled MRM: Enabled, Duration: 0.844 (min), Delay Time: 0 (sec), Cycles: 241, Cycle: 0.2100 (sec). A table of scan results is displayed below the parameters.

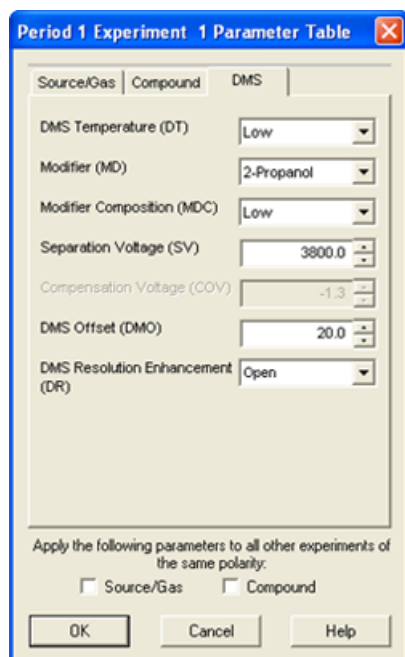
	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Time (msec)	ID	CE (volts)
1	316.000	298.000	10.0	Frag-298	35.000
2	316.000	159.000	10.0	Frag-159	35.000
3	316.000	243.000	10.0	Frag-243	35.000
4	316.000	241.000	10.0	Frag-241	35.000
5	316.000	316.000	10.0	Parent (no fragme	10.000
6	316.000	105.000	10.0	Frag-105	35.000
7	316.000	165.000	10.0	Frag-165	35.000
8					

6. Fare clic su **Edit Parameters**.

Si aprirà la finestra di dialogo Period 1 Experiment 1 Parameter Table.

- Digitare i valori ottimizzati dei parametri del composto nella scheda **Compound**. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione manuale*.
- Digitare i valori ottimizzati dei parametri della sorgente di ionizzazione e del gas nella scheda **Source/ Gas**. Assicurarsi che la temperatura della sorgente (TEM) specificata corrisponda al valore utilizzato per l'ottimizzazione dei parametri DMS. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione manuale*.
- Selezionare la scheda **DMS** e aggiornare i campi con le informazioni riportate nella seguente tabella.

Figura 4-4 Scheda DMS



Parametro	Valori
DMS Temperature (DT)	Selezionare il valore richiesto. Assicurarsi che la temperatura DMS specificata sia la stessa utilizzata per l'ottimizzazione dei parametri DMS.
Modifier (MD)	Selezionare il valore richiesto.
DMS Resolution Enhancement (DR)	Selezionare il valore richiesto.
Separation Voltage (SV)	Digitare il valore SV ottimizzato per tutti i composti.
DMS Offset (DMO)	Digitare il valore DMO ottimizzato per tutti i composti.

10. Fare clic su **OK**.
11. Se necessario, fornire i valori dei parametri delle periferiche incluse nel profilo hardware.
12. Salvare il metodo di acquisizione. Si può utilizzare per acquisire dati e incrementare gradualmente COV durante l'acquisizione batch dei campioni e l'acquisizione di dati.

## Calcolo del consumo di modificatore

La velocità di flusso della pompa del modificatore per i modificatori predefiniti nel software Analyst<sup>®</sup> viene calcolata dal software utilizzando la densità del modificatore e il suo peso molecolare. La densità e il peso molecolare dei modificatori predefiniti nel software Analyst<sup>®</sup> sono elencati nella [Tabella 4-2](#).

Tabella 4-2 Densità e peso molecolare dei modificatori predefiniti

Modificatore	Peso molecolare (g/mol)	Densità (g/cm <sup>3</sup> )
2-propanol	60,10	0,7860
Acetonitrile	41,05	0,7822
Metanolo	32,04	0,7918
Acetone	58,08	0,7925

La configurazione di sicurezza del progetto con Analyst<sup>®</sup> utilizza la formula seguente per calcolare la portata della pompa del modificatore in µL/min:

$$\text{Modifier Pump Flow Rate} = \frac{(0.1636 \times \text{CUR} + 1.7726) \times \text{MDC} \times 0.04089 \times \text{MDW} \times 1000}{(100 - \text{MDC}) \times \text{MDD}}$$

dove:

- **MDW** è il peso del modificatore in g/mol.
- **MDC** è la composizione del modificatore.
- **MDD** è la densità del modificatore in g/mL.
- **CUR** è il valore del flusso di Curtain Gas<sup>™</sup>.

## Esempio di calcolo del consumo di modificatore

Come esempio, il consumo approssimativo del modificatore calcolato per tutti i modificatori predefiniti nel software Analyst<sup>®</sup> con un flusso di Curtain Gas<sup>™</sup> di 20 psi e a diverse concentrazioni di modificatore per un lotto di 24 ore viene visualizzato nella [Tabella 4-3](#).

Tabella 4-3 Consumo approssimativo del modificatore (in mL) con una velocità di flusso del Curtain Gas di 20 psi per un batch di 24 ore

Modificatore\Concentrazione	Low (1,5%) (mL/24 ore)	High (3,0%) (mL/24 ore)
2-propanolo	240,2	487,8
Acetonitrile	164,9	334,8
Metanolo	127,1	258,1
Acetone	230,2	467,5

## Calcolo del consumo adeguato del modificatore per un batch

1. Determinare la durata del batch.

## Creare e trasmettere i batch

---

2. Determinare la velocità di flusso della pompa del modificatore dalla finestra di dialogo Mass Spec Detailed Status facendo clic sull'icona **Mass Spec** nella barra Status nell'angolo in basso a destra della finestra del software Analyst<sup>®</sup> mentre si esegue il metodo dal software Analyst<sup>®</sup>.

---

**Nota:** si consiglia l'utilizzo di 2 L di modificatore da quando si eseguono batch lunghi a valori CUR elevati e alta concentrazione di modificatore.

---

3. Moltiplicare la velocità di flusso ( $\mu\text{L}/\text{min}$ ) della pompa del modificatore per la durata del batch (minuti) per ottenere il volume approssimativo del modificatore necessario per un batch.



Questa sezione descrive come eseguire le seguenti operazioni:

- Visualizzare i parametri DMS in File Information mentre si visualizzano i file di dati.
- Creare un metodo di quantificazione e generare una **Results Table**.
- Quantificare i composti isobarici.
- Riportare dati.
- Riesaminare un file di dati acquisito con il parametro COV incrementato gradualmente.
- Visualizzare un contour plot per i dati acquisiti con il parametro COV incrementato gradualmente
- Visualizzare i parametri DMS incrementati gradualmente in File Information mentre si visualizzano i file di dati.

## Analisi dei dati quantitativi

### Visualizzazione dei parametri DMS utilizzati per l'acquisizione in File Information durante la visualizzazione dei file di dati

Le condizioni sperimentali usate per raccogliere i dati sono conservate nei file di dati assieme ai risultati. Nel riquadro File Information del file di dati si possono vedere i parametri DMS utilizzati per acquisire campioni.

1. Sotto la voce **Explore** della barra di navigazione, fare doppio clic su **Open Data File**.

Si aprirà la finestra di dialogo Select Sample.

2. Nel riquadro Data Files, selezionare un file wiff da visualizzare.
3. Nel riquadro Samples, selezionare il campione da visualizzare, quindi fare clic su **OK**.

Vengono mostrati i dati acquisiti dal campione.

4. Per visualizzare le informazioni sul file, fare clic sull'icona **Show File Info**.

Si aprirà il riquadro File Information sotto al grafico.

5. Estendere il periodo desiderato nel riquadro sinistro del riquadro **File Information** e fare quindi clic sul link all'esperimento del periodo desiderato.

I valori start, stop e step del parametro COV utilizzati durante l'acquisizione del campione vengono registrati nella sezione periodo. I valori start e stop di COV di ogni composto vengono registrati nella sezione periodo esperimento. Tutti i parametri DMS (eccetto COV) e i parametri del modificatore utilizzati durante l'acquisizione del campione vengono registrati nella Sezione della tabella parametri per l'esperimento e il periodo selezionati.

Fare riferimento alla sezione *Analisi ed elaborazione dei dati* nella *Guida per l'utente del sistema* dello spettrometro di massa.

## Creazione di metodi di quantificazione e generazione di tabelle di risultati

Utilizzare le informazioni disponibili nella sezione *Analisi quantitativa* della *Guida introduttiva* del software Analyst® per creare un metodo di quantificazione e generare una tabella di risultati. Fare riferimento anche alla *Guida per l'utente del sistema* relativa al sistema in uso o alla *Guida avanzata per l'utente* del software Analyst®.

## Quantificazione dei composti isobarici

Quando si crea un metodo quantitativo per i composti isobarici, è molto più semplice identificarli se il nome del composto è stato inserito nel campo **Compound ID** nel metodo di acquisizione. Questo perché il nome di ciascun composto isobarico (o qualsiasi composto presente nel metodo di acquisizione) viene automaticamente immesso dopo la sua massa Q1/Q3 nella tabella Analyte durante la costruzione di un metodo quantitativo.

Qualora il nome del composto non fosse fornito nel metodo di acquisizione per i composti isobarici, durante la creazione del metodo quantitativo, identificare correttamente i composti isobarici e digitare a mano i loro nomi dopo la loro massa Q1/Q3. Fare riferimento a [Differenziare i Composti Isobarici nei metodi di acquisizione con algoritmo MRM e Scheduled MRM™](#).

Per quantificare i composti isobarici e per generare la Results Table di questi, fare riferimento al menu Help del software Analyst®.

## Generazione di rapporti sui dati

Creare report da una tabella di risultati utilizzando il software Reporter. Fare riferimento alla *Guida per l'utente* del software Reporter disponibile in **Start > All Programs > SCIEX > Reporter 3.2 > Reporter 3.2 User Manual**.

Se si utilizza il software MultiQuant™ per quantificare i dati, si può usare il software Reporter per creare rapporti.

## Analisi dei dati qualitativi

### Revisione di un file di dati acquisito con il parametro COV incrementato gradualmente

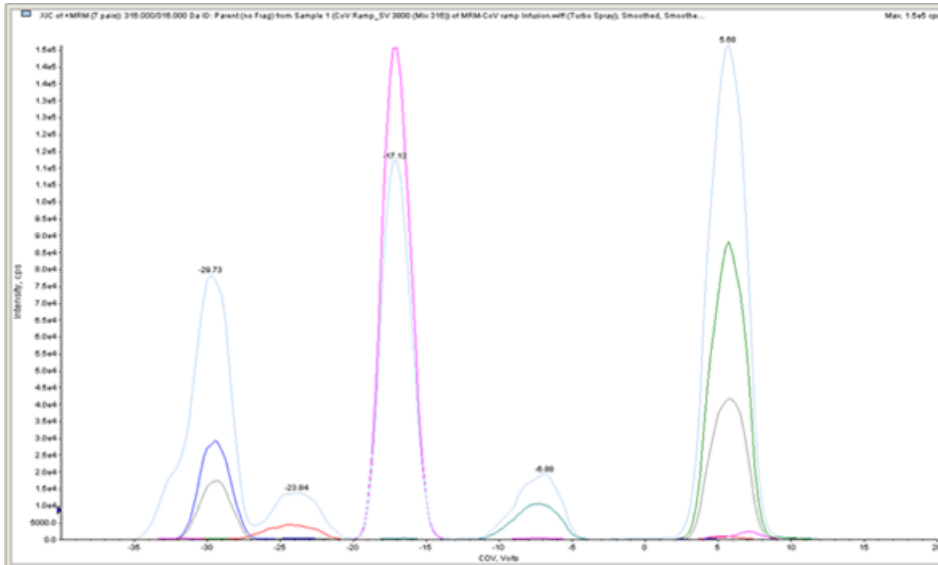
1. Aprire la cartella del progetto contenente i dati acquisiti.
2. Sotto la voce **Explore** della barra di navigazione, fare doppio clic su **Open Data File**.

Si aprirà la finestra di dialogo Select Sample.

3. Dall'elenco **Data Files**, selezionare il file .wiff che contiene i dati acquisiti.

- Se necessario, fare clic su un campione nell'elenco **Samples**, quindi fare clic su **OK**.

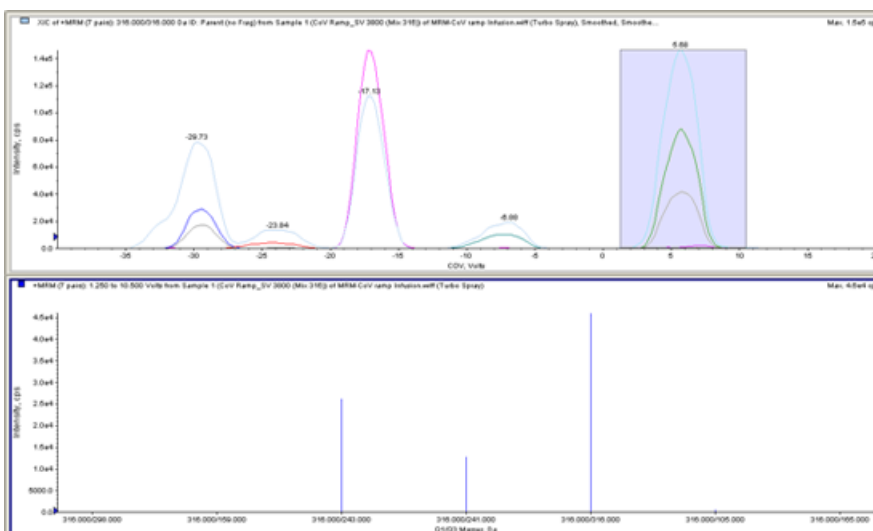
Figura 5-1 XIC



Si aprirà XIC per il file dati selezionato. L'asse x visualizza COV in volt e l'asse y visualizza l'intensità in cps. XIC viene visualizzato con un colore diverso per ciascun composto.

- Selezionare un intervallo COV in XIC, fare clic con il pulsante destro del mouse, quindi selezionare **Show Spectrum**.

Figura 5-2 Spettro



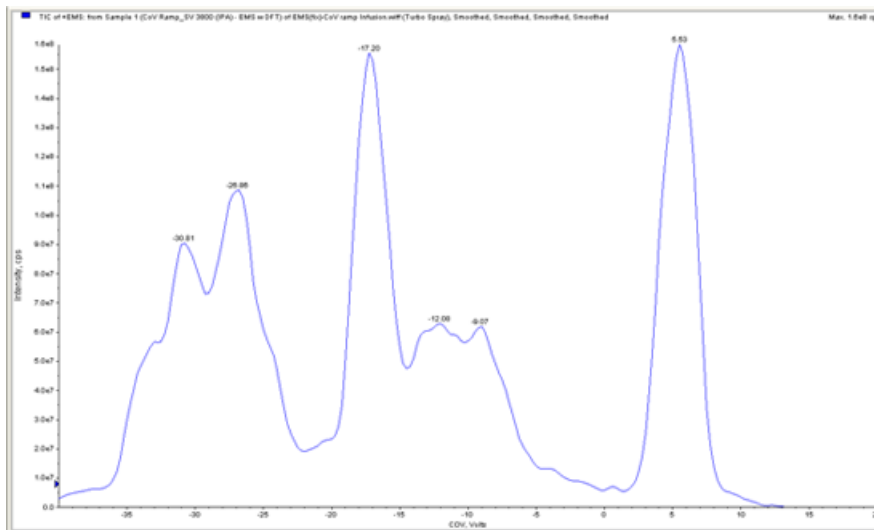
Sotto XIC viene visualizzato lo spettro per l'intervallo COV selezionato, con l'intensità sull'asse y e le masse Q1/Q3 in Da sull'asse x. Visualizza l'intensità di tutti i composti che compaiono nella cella di mobilità ionica o nella cella di mobilità ionica con tecnologia di iniezione a getto nell'intervallo COV selezionato. Nel titolo dello spettro aperto è visualizzato l'intervallo COV selezionato.

## Visualizzazione di un contour plot per i dati acquisiti con il parametro COV incrementato gradualmente (solo opzione Ramp COV for Cycle)

La configurazione di sicurezza del progetto con Analyst® può visualizzare un contour plot per i dati acquisiti utilizzando un metodo di acquisizione con il parametro COV incrementato gradualmente e un tipo di scansione completa. I contour plot forniscono la visualizzazione della separazione dei composti. Per maggiori informazioni sui contour plot, fare riferimento a *Contour Plot* nella sezione *Analisi ed elaborazione dei dati* della *Guida per l'utente del sistema* dello spettrometro di massa e all'*Analisi qualitativa dei dati* della Guida avanzata per l'utente del software Analyst®.

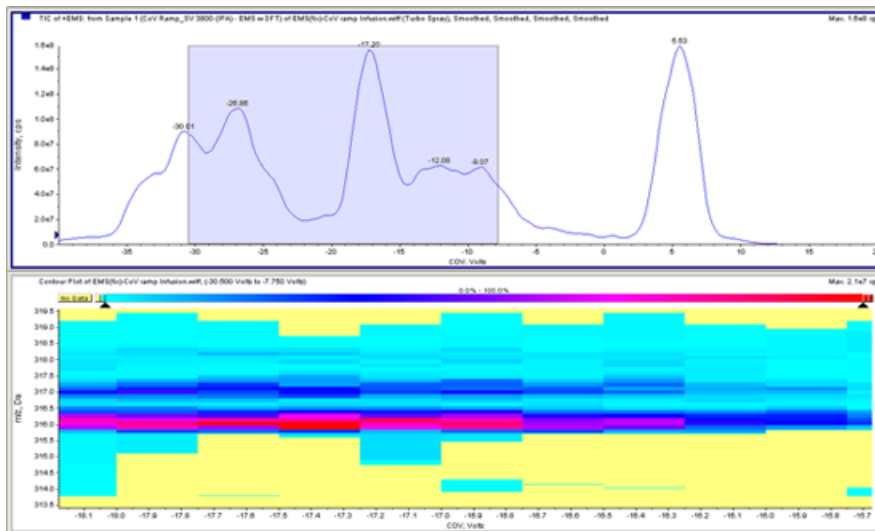
1. Sotto la voce **Explore** della barra di navigazione, fare doppio clic su **Open Data File**.
2. Nell'elenco **Data Files** della finestra di dialogo Select Sample, selezionare un file di dati (file .wiff).
3. Selezionare un campione nel riquadro Samples.
4. Fare clic su **OK**.

Figura 5-3 TIC



- Si aprirà TIC per il file di dati selezionato. Sull'asse x è mostrato COV in volt, sull'asse y l'intensità in cps.
5. Evidenziare l'intervallo da visualizzare nel contour plot. Quando non si effettui una selezione, appare l'intervallo intero.
  6. Fare clic con il pulsante destro del mouse in TIC, quindi fare clic su **Show Contour Plot**.

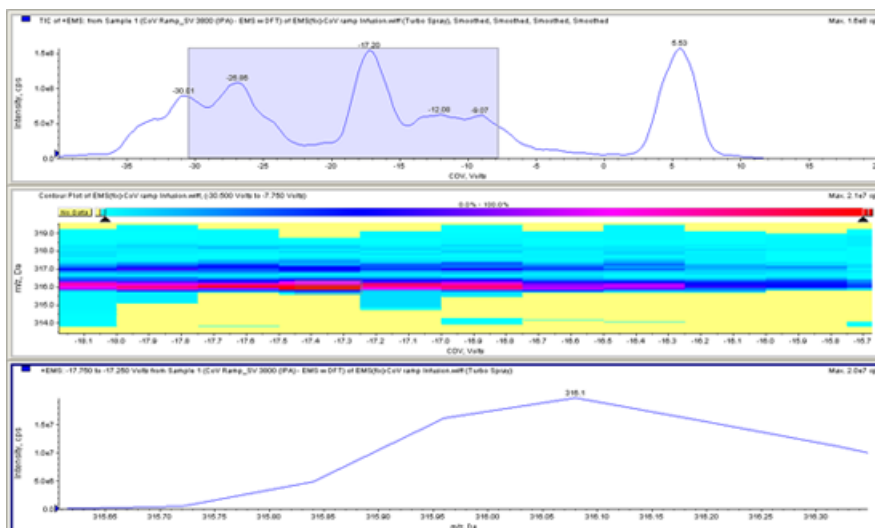
Figura 5-4 Contour plot



Il contour plot per il campione selezionato viene mostrato sotto la finestra TIC. Sull'asse x è mostrato COV in volt, sull'asse y  $m/z$  in Da.

7. Per visualizzare lo spettro, selezionare un'area nel contour plot, fare clic con il pulsante destro del mouse e fare clic su **Show Spectrum**.

Figura 5-5 Spettro



Lo spettro per l'intervallo COV selezionato viene mostrato sotto la finestra del contour plot. Mostra l'intensità (asse y) di tutti i valori  $m/z$  (asse x) nell'intervallo COV selezionato. Nel titolo dello spettro aperto è visualizzato l'intervallo COV selezionato.

## Visualizzazione dei parametri DMS incrementati gradualmente in File Information mentre si visualizzano i file dati

Le condizioni sperimentali usate per raccogliere i dati sono conservate nei file di dati assieme ai risultati. Nell'opzione File Information del file di dati gli utenti possono vedere i parametri DMS incrementati gradualmente che sono stati utilizzati per acquisire campioni.

1. Sotto la voce **Explore** della barra di navigazione, fare doppio clic su **Open Data File**.

Si aprirà la finestra di dialogo Select Sample.

2. Nel riquadro Data Files, selezionare il file .wiff da visualizzare.

3. Nel riquadro Samples, selezionare il campione da visualizzare, quindi fare clic su **OK**.

Si aprirà XIC per il file dati selezionato.

4. Per visualizzare le informazioni del file, fare clic sull'icona **Show File Info** sulla barra degli strumenti.

Si aprirà il riquadro File Information sotto TIC.

5. Fare clic su **Period 1** nel lato sinistro del riquadro File Information.

I valori start, stop e step utilizzati per il parametro COV incrementato gradualmente vengono visualizzati insieme ad altre informazioni nella parte sinistra del riquadro File Information.

Selezionare il periodo e l'esperimento necessari nel riquadro sinistro per vedere le diverse configurazioni sperimentali utilizzate nel metodo di acquisizione utilizzato per raccogliere dati. Lì sono registrati anche tutti i parametri DMS utilizzati durante l'acquisizione del campione.

Questa sezione descrive come:

- Creare un metodo di acquisizione dipendente dalle informazioni (IDA) per incrementare gradualmente Compensation Voltage (COV) durante la modalità di acquisizione batch.
- Visualizzare i dati IDA acquisiti con l'incremento graduale di COV in IDA Explorer.

## Prerequisiti

La tecnologia SelexION<sup>®</sup> o SelexION<sup>®</sup> + è installata sullo strumento e il modulo di controllo è acceso.

Utilizzare il metodo di acquisizione IDA per creare e inviare batch per acquisire dati. Fare riferimento all'*Esercitazione IDA, Guida per l'utente del sistema* dello spettrometro di massa o alla *Guida avanzata per l'utente* del software Analyst<sup>®</sup>.

## Creazione di un metodo di acquisizione IDA per l'incremento graduale di COV durante l'acquisizione batch

Invece di utilizzare la cromatografia liquida (LC) per analizzare i campioni, utilizzare la tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup> + con l'infusione per separare i composti di interesse e filtrare interferenze o disturbi chimici. Con la tecnologia SelexION<sup>®</sup>/SelexION<sup>®</sup> +, la funzione di incremento graduale di COV del software Analyst<sup>®</sup> può essere utilizzata per simulare il gradiente LC.

Oltre alla modalità Manual Tuning, il parametro COV può essere incrementato gradualmente anche durante l'acquisizione batch, selezionando la casella di controllo **Ramp COV** in un metodo di acquisizione nell'Acquisition Method Editor. Il parametro COV viene trattato come un parametro dipendente dal ciclo. La funzione di incremento graduale di COV funziona per un metodo di acquisizione DMS a singolo periodo.

I metodi di algoritmo IDA, Dynamic Fill Time (DFT) e *Scheduled MRM*<sup>™</sup> senza il parametro COV a incremento graduale saranno eseguiti per la durata necessaria al metodo, mentre i metodi IDA e DFT con incremento graduale di COV saranno eseguiti per il numero di cicli necessari in base ai valori di inizio, fine e intervallo di COV a incremento graduale. L'esecuzione del metodo si arresterà con l'acquisizione dell'ultimo intervallo di COV e non quando verrà raggiunta la durata del metodo. Il valore di COV è calcolato in modo dinamico e viene impostato per ogni ciclo.

I valori COV, SV, DT e DMO delle transizioni MRM nella scansione di verifica (o qualsiasi altra scansione IDA di verifica supportata) vengono propagati automaticamente alle scansioni dipendenti in un metodo IDA. Questo si applica anche al metodo IDA con algoritmo *Scheduled MRM*<sup>™</sup> e alla pre-scansione DFT per un metodo IDA MRM-triggered con scansioni DFT.

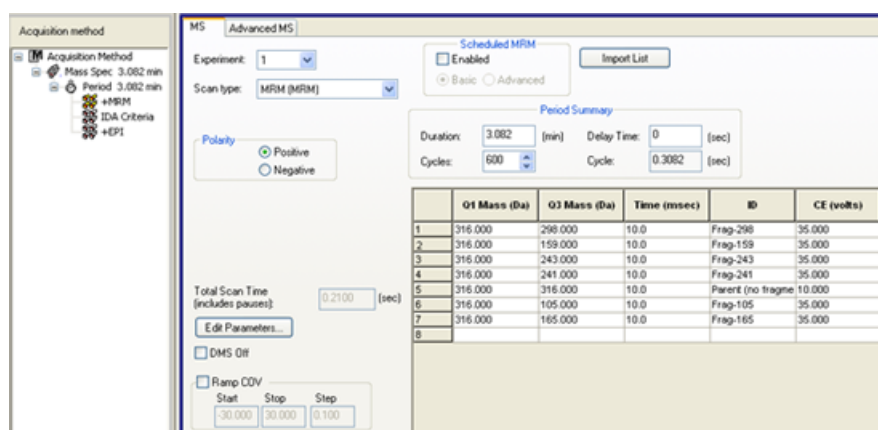
Anche il modificatore utilizzato nella scansione di verifica di un metodo MRM IDA viene automaticamente propagato alle scansioni dipendenti.

Utilizzare questa procedura dopo aver ottimizzato tutti i parametri DMS ad eccezione di COV.

### Creazione di un metodo di acquisizione IDA per l'incremento graduale di COV durante la modalità di acquisizione batch

1. Attivare un profilo hardware. Fare riferimento a *Creazione di profili hardware e progetti* nella *Guida per l'utente del sistema* dello spettrometro di massa.
2. Creare un metodo IDA con una scansione MRM come scansione di verifica. Fare riferimento a *Esercitazione IDA*.
3. Dal metodo IDA aperto nell'editor del metodo di acquisizione, fare clic su **MRM** nel riquadro Acquisition Method.

**Figura 6-1 Metodo MRM**



4. Selezionare la casella di controllo **Ramp COV** nella scheda **MS** e digitare i seguenti valori COV nell'intervallo COV consentito compreso tra -100 volt e 100 volt:

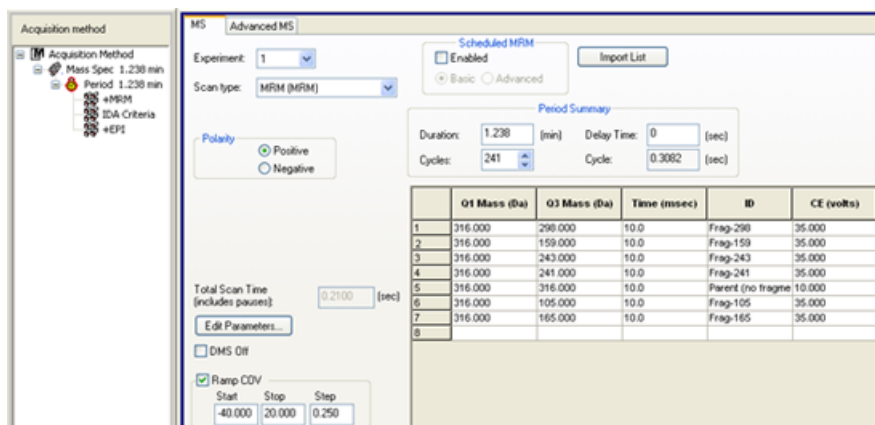
**Tabella 6-1 Parametri di incremento graduale**

Campo	Descrizione
<b>Start</b>	Digitare la tensione alla quale iniziare l'incremento graduale.
<b>Fine</b>	Digitare la tensione alla quale interrompere l'incremento graduale.
<b>Step</b>	Impostare l'ampiezza degli intervalli di ogni ciclo.

**Nota:** la maggior parte dei composti viene ottimizzata tra -20 volt e 30 volt in assenza di modificatore. Alcuni composti potrebbero essere ottimizzati anche oltre i 30 volt. Qualora sia presente un modificatore, si consiglia di utilizzare un intervallo COV che sia almeno da -60 a 20 volt poiché gli spostamenti COV negativi per alcuni composti possono essere drammatici.



Figura 6-2 Parametri MS

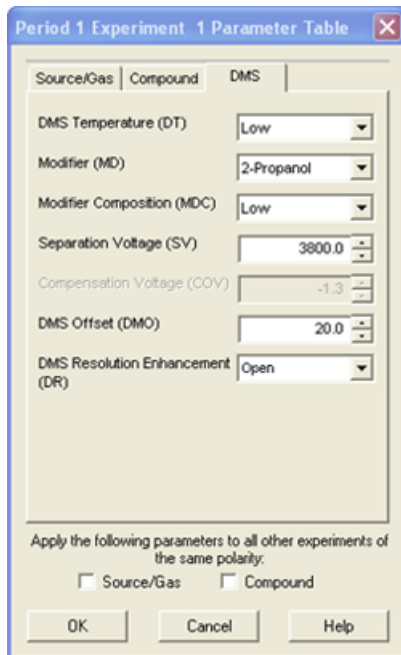


5. Fare clic su **Edit Parameters**.

Si aprirà la finestra di dialogo Period 1 Experiment 1 Parameter Table.

6. Digitare i valori ottimizzati dei parametri della sorgente di ionizzazione e del gas nella scheda **Source/ Gas**. Assicurarsi che la temperatura della sorgente (TEM) specificata corrisponda a quella utilizzata per l'ottimizzazione dei parametri DMS. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione manuale*.
7. Digitare i valori ottimizzati dei parametri del composto nella scheda **Compound**. Fare riferimento a *Esercitazione di ottimizzazione manuale*.
8. Selezionare la scheda **DMS** e procedere come segue:
  - a. Selezionare i valori desiderati per i parametri **DMS Temperature (DT)**, **Modifier (MD)** e **DMS Resolution Enhancement (DR)**. Assicurarsi che la temperatura DMS specificata sia la stessa utilizzata per l'ottimizzazione dei parametri DMS.
  - b. Digitare il valore SV ottimizzato per tutti i composti nel campo **Separation Voltage (SV)**.
  - c. Digitare il valore DMO ottimizzato per tutti i composti nel campo **DMS Offset (DMO)**.

Figura 6-3 Finestra Period 1 Experiment 1 Parameter Table



9. Fare clic su **OK**.
10. Se necessario, fornire i valori dei parametri delle periferiche incluse nel profilo hardware.
11. Salvare il metodo di acquisizione. Può essere utilizzato per incrementare gradualmente COV durante l'acquisizione del lotto e l'acquisizione dei dati.

---

**Nota:** qualora la scansione dipendente fosse una scansione LIT, è consigliabile aumentare di 20 ms il tempo di configurazione nella scansione di verifica al fine di evitare che in alcuni casi vengano visualizzati ioni residui nella scansione di verifica.

---

## Visualizzazione dei dati IDA acquisiti con l'incremento graduale del parametro COV in IDA Explorer

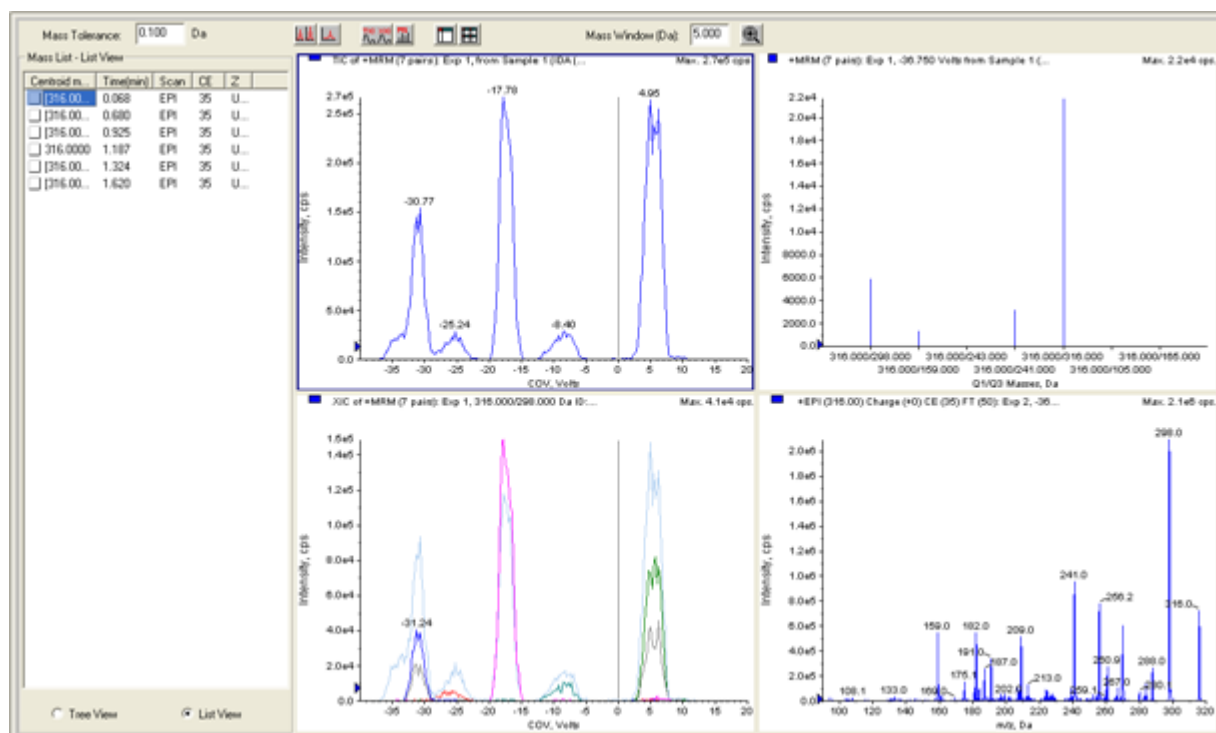
Quando i dati vengono acquisiti con un metodo IDA, i dati non saranno aperti nell'IDA Viewer finché l'acquisizione non è terminata, ma saranno mostrati nella finestra Explore durante l'acquisizione.

Per visualizzare i dati IDA in modo semplice, impostare l'IDA Explorer come visualizzatore predefinito. Utilizzare la scheda **IDA Explorer** nella finestra di dialogo Appearance Options per utilizzare l'IDA Explorer per visualizzare i dati IDA. Gli utenti possono anche selezionare le colonne del riquadro Mass List - List View. L'IDA Explorer è preimpostato per visualizzare i campioni IDA.

Per maggiori informazioni, fare riferimento a *Visualizzazione dei dati IDA in Esercitazione IDA*.

1. Aprire la cartella del progetto contenente i dati IDA acquisiti.
2. Sotto la voce **Explore** della barra di navigazione, fare doppio clic su **Open Data File**.  
Si aprirà la finestra di dialogo Select Sample.
3. Dall'elenco **Data Files**, selezionare il file wiff che contiene i dati IDA acquisiti da visualizzare.
4. Nell'elenco **Samples**, fare clic sul campione necessario, quindi fare clic su **OK**.

Figura 6-4 IDA Explorer

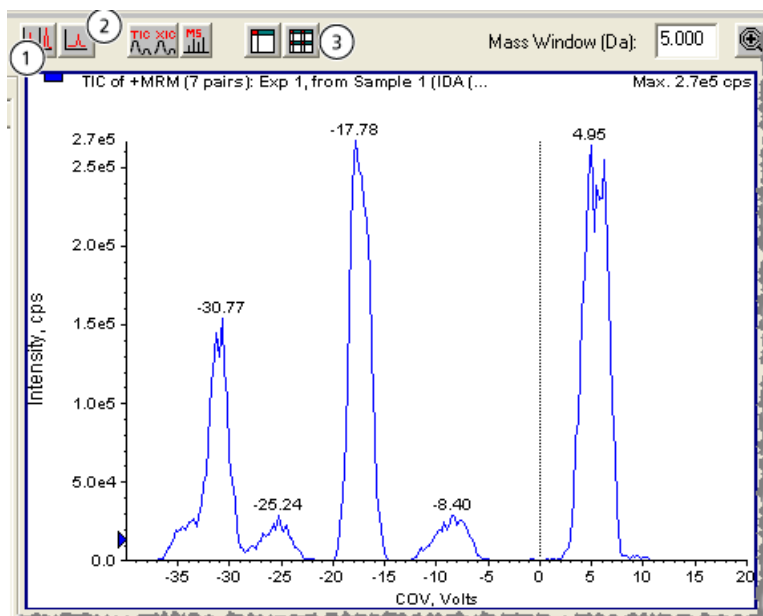


Si aprirà la finestra IDA Explorer. Nel lato sinistro del riquadro viene mostrato un elenco di masse inviate alla scansione dipendente con una visualizzazione ad albero o una visualizzazione elenco. Passare da una vista all'altra facendo clic su **Tree View** o **List View** in fondo al riquadro Mass List.

Nella sezione destra del riquadro sono visualizzati graficamente i dati IDA acquisiti. Invece del tempo, sull'asse x dei grafici TIC e XIC viene visualizzato l'intervallo COV a incremento graduale.

5. Utilizzare i due pulsanti sopra al grafico per passare dalla visualizzazione a singolo grafico a quella a più grafici.
  - Per visualizzare solamente il grafico attivo, fare clic su **Show only active graph**.
  - Per tornare alla visualizzazione a più grafici, fare clic su **Show all the graphs**.
  - Per visualizzare tutti i grafici in Explorer, fare clic su **Export all the graphs to Explorer**.

Figura 6-5 Pulsanti nell'Explorer IDA




Elemento	Nome del pulsante
1	Mostra tutti i grafici
2	Mostra solo il grafico attivo
3	Esporta tutti i grafici nell'Explorer

## Errore scarica DMS nel software Analyst<sup>®</sup>

Probabile causa	Diagnosi	Azioni correttive
Gli elettrodi sono sporchi.	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Diminuire la tensione di separazione (SV) fino a quando la scarica si arresta.</li><li>2. Aumentare la SV e monitorare la scarica fisica del separatore.</li></ol> Risultato: si osserva una scarica.	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Rimuovere la cella di mobilità ionica.</li><li>2. Rimuovere e pulire gli elettrodi seguendo la procedura di pulizia stabilita.</li></ol>
Il fluido del modificatore non è completamente vaporizzato.	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Rimuovere il curtain plate e la cella di mobilità ionica.</li><li>2. Utilizzare azoto UHP per asciugare la cella di mobilità ionica.</li><li>3. Installare il curtain plate e la cella di mobilità ionica, quindi lasciare equilibrare il riscaldatore per 40 minuti.</li></ol>	Impostare il tempo di equilibrio standard per la cella di mobilità ionica a 40 minuti per essere sicuri che il riscaldatore e la cella di mobilità ionica siano equilibrati.

## Risoluzione dei problemi

Probabile causa	Diagnosi	Azioni correttive
Gli elettrodi sono disallineati.	<ol style="list-style-type: none"><li data-bbox="480 324 948 465">1. (Tecnologia SelexION<sup>®</sup>+) Verificare che la lettera "B" sia visibile sul lato della cella di mobilità ionica rivolto verso lo spettrometro di massa.  <b>Figura 7-1 Lettera "B" sugli elettrodi</b> </li></ol>	Riassemblare e allineare gli elettrodi con il distanziale.

## Non scorre alcun fluido modificatore

Probabile causa	Diagnosi	Azioni correttive
La pompa non è adescata.	Le linee del modificatore richiedono uno spurgo.	Spurgare il modificatore. Fare riferimento a <a href="#">Eliminazione del modificatore a pagina 35</a> .
Sulla pompa sono stati utilizzati gli attacchi non corretti.	Ispezionare le connessioni della pompa per assicurarsi che siano attacchi di colore verde. Risultato: gli attacchi sono di tipo sbagliato.	Installare gli attacchi corretti.
I tubi dei liquidi sono bloccati o parzialmente bloccati, quindi il fluido non scorre, anche se il motore sta girando.	Verificare la presenza di bolle d'aria o danni nei tubi dei liquidi. Risultato: si osservano blocchi o danni.	Sostituire i tubi o gli attacchi.
Il motore della pompa non gira perché è grippato o difettoso.	Verificare se il fluido scorre. Risultato: il fluido non scorre.	Contattare il responsabile dell'assistenza tecnica (FSE).
Il motore della pompa non gira a causa di un errore di comunicazione.	1. Arrestare il sistema. 2. Avviare il sistema. Risultato: il motore della pompa non si avvia o la velocità del flusso del modificatore non è corretta.	Contattare il responsabile dell'assistenza tecnica (FSE).
Il flusso Curtain Gas™ è troppo alto.	Ridurre il flusso di Curtain Gas™, monitorare il flusso nelle linee del modificatore. Risultato: il modificatore inizia a scorrere quando il flusso viene ridotto.	Aggiornare il flusso Curtain Gas™ nel metodo.
Il filtro di aspirazione del modificatore è ostruito.	1. Rimuovere il filtro di aspirazione dalla linea del modificatore. 2. Testare il flusso della pompa del modificatore. Risultato: il modificatore scorre correttamente.	Sostituire il filtro di aspirazione.

## Il motore della pompa emette eccessivo rumore

Probabile causa	Diagnosi	Azioni correttive
La pompa non è adescata.	Le linee del modificatore richiedono uno spurgo.	Spurgare il modificatore. Fare riferimento a <a href="#">Eliminazione del modificatore a pagina 35</a> .
Il motore della pompa non gira perché è grippato o difettoso.	Verificare se il fluido scorre. Risultato: il fluido non scorre.	Contattare il responsabile dell'assistenza tecnica (FSE).
Il motore della pompa non gira a causa di un errore di comunicazione.	1. Arrestare il sistema. 2. Avviare il sistema.  Risultato: il motore della pompa non si avvia o la velocità del flusso del modificatore non è corretta.	Contattare il responsabile dell'assistenza tecnica (FSE).

## Il modificatore scorre nella direzione sbagliata

Probabile causa	Diagnosi	Azioni correttive
Nelle linee del modificatore è presente dell'aria.	Le linee del modificatore richiedono uno spurgo.	Spurgare il modificatore. Fare riferimento a <a href="#">Eliminazione del modificatore a pagina 35</a> .
Sulla pompa sono stati utilizzati gli attacchi non corretti.	Ispezionare le connessioni della pompa per assicurarsi che siano attacchi di colore verde. Risultato: gli attacchi sono di tipo sbagliato.	Installare gli attacchi corretti.
Il flusso Curtain Gas™ è troppo alto.	Ridurre il flusso di Curtain Gas™, monitorare il flusso nelle linee del modificatore. Risultato: il modificatore inizia a scorrere quando il flusso viene ridotto.	Aggiornare il flusso Curtain Gas™ nel metodo.



## I livelli di rumore sono elevati quando sono utilizzati i modificatori

Probabile causa	Diagnosi	Azioni correttive
La linea del modificatore contiene bollicine.	Verificare la presenza di perdite. Risultato: si osservano delle perdite.	Serrare i collegamenti o sostituire le linee che hanno delle perdite.
Il manifold del miscelatore o la valvola del modificatore sono difettosi.	N/D	Contattare il responsabile dell'assistenza tecnica (FSE).

## Si è verificato un errore di temperatura DMS (DT)

Probabile causa	Diagnosi	Azioni correttive
Si è verificato un corto circuito nel curtain plate SelexION <sup>®</sup> / SelexION <sup>®</sup> +.	N/D	Sostituire il curtain plate.

## Il COV varia

La sensibilità è bassa o il COV si sposta durante l'ottimizzazione.

Probabile causa	Diagnosi	Azioni correttive
Il tempo di equilibratura della cella di mobilità ionica è insufficiente.	Aumentare il tempo di equilibratura. Risultato: il COV non varia.  <b>Nota:</b> quando si utilizza un modificatore, possono essere necessari tempi di equilibratura superiori a 30 minuti.	Aggiornare il metodo con il nuovo tempo di equilibratura.
I solventi non sono nuovi.	Verificare i flaconi di solvente per determinare la data di preparazione. Risultato: i solventi non sono nuovi.	Preparare nuovi solventi ed eseguire nuovamente il test COV.
La scheda ambientale è difettosa.	N/D	Contattare il responsabile dell'assistenza tecnica (FSE).

## Descrizione dei parametri DMS

Nome del parametro	Descrizione	Possibili valori
DMS Temperature (DT)	La temperatura applicata al riscaldatore ceramico, installato sulla parte posteriore dello scambiatore termico della piastra Curtain. Per ogni modifica del valore DT, lasciare che il sistema raggiunga l'equilibrio per almeno 10-15 minuti prima di ottimizzare qualsiasi parametro DMS. Quando si raggiunge la nuova temperatura, viene visualizzato <b>DMS Temperature reached</b> sopra al campo DT.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• (Predefinito) Low (150 °C)</li> <li>• Medium (225 °C)</li> <li>• High (300 °C)</li> </ul>
Modifier (MD)	Prodotto chimico che viene aggiunto nel flusso di Curtain Gas™ per migliorare la separazione degli ioni. Se il valore MD è impostato a <b>None</b> , i parametri MDC, MDD e MDW non sono disponibili. Se il valore MD è impostato a un valore diverso da <b>None</b> , il parametro MDC diventa disponibile. Se si imposta MD sul valore <b>Custom</b> , i parametri MDC, MDD e MDW diventano disponibili.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• (Predefinito) None</li> <li>• 2-propanol</li> <li>• Acetonitrile</li> <li>• Methanol</li> <li>• Acetone</li> <li>• Custom</li> </ul>
Modifier Composition (MDC)	Il parametro che controlla la concentrazione del modificatore. Il software Analyst® utilizza la densità e il peso molecolare del modificatore selezionato e la velocità di flusso di Curtain Gas™ per calcolare la velocità di flusso della pompa del modificatore e applicare automaticamente tale velocità a quella della pompa.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Off (0)</li> <li>• (Predefinito) Low (1,5% o più)</li> <li>• High (3,0)</li> </ul>
Modifier Density (g/mL) (MDD)	La densità di un modificatore personalizzato. Il software Analyst® utilizza questa densità in aggiunta al valore <b>Modifier MW</b> e alla velocità di flusso di Curtain Gas™ per determinare la velocità di flusso della pompa del modificatore.	Indicare la densità del modificatore in g/mL.

Nome del parametro	Descrizione	Possibili valori
Modifier MW (MDW)	Il peso molecolare in g/mol di un modificatore personalizzato. Il software Analyst <sup>®</sup> utilizza il valore di questo parametro in aggiunta al valore <b>Modifier Density</b> e alla velocità di flusso di Curtain Gas <sup>™</sup> per determinare la velocità di flusso della pompa del modificatore.	Indicare il peso molecolare (g/mol) del modificatore.
Separation Voltage (SV)	L'ampiezza da picco a picco della forma d'onda della tensione di separazione.	Indicare il valore di Separation Voltage da applicare. <ul style="list-style-type: none"> <li>• (Predefinito) 0.0</li> <li>• Intervallo: da 0 al massimo valore SV in base ai parametri DT e TEM in ciascun metodo</li> </ul>
Compensation Voltage (COV)	Un potenziale di offset CC tra i due elettrodi del dispositivo di mobilità. Per esempio, se COV misura 5 volt, uno dei due elettrodi ha un potenziale applicato più elevato di 5 volt rispetto all'altro elettrodo.	Indicare il valore di Compensation Voltage da applicare. <ul style="list-style-type: none"> <li>• (Predefinito) 0.0</li> <li>• Intervallo: da -100 a 100</li> </ul>

## Parametri DMS

Nome del parametro	Descrizione	Possibili valori
DMS Offset (DMO)	Tensione applicata ai due elettrodi della cella di mobilità ionica o della cella di mobilità ionica con tecnologia di iniezione a getto, relativa al potenziale del separatore. Per esempio, se il potenziale offset DMS misura 5 volt e il potenziale del separatore è 100 volt, i due elettrodi di fronte all'ingresso del separatore hanno un potenziale di 105 volt. Il <b>DMS Offset</b> è un modo per regolare la trasmissione fuori dalla cella di mobilità ionica nello spettrometro di massa.	<p>Specificare il valore DMS Offset.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>(Predefinito) –3,0 volt in polarità positiva; 3,0 volt in polarità negativa</li> <li>Intervallo: da –100 a 100</li> </ul>
DMS Resolution Enhancement (DR)	<p>L'utilizzo del parametro DR fa aumentare il tempo di residenza degli ioni nella cella di mobilità ionica o nella cella di mobilità ionica con tecnologia di iniezione a getto, con conseguente riduzione della sensibilità dovuta alla consistente perdita di segnale diffusionale. Modificando il valore DR, vengono aggiornate la durata della pausa tra gli intervalli di massa e la durata totale della scansione per tenere conto del trasporto di ioni attraverso la cella. Durante le scansioni RF/DC (scansioni quadripolari), verranno aggiornate la durata della pausa tra i range di massa e la durata totale della scansione.</p> <p>Controlla il flusso del gas azoto che può essere attivato tra l'uscita del dispositivo SelexION<sup>®</sup> o SelexION<sup>®</sup> + e l'ingresso del separatore nello spettrometro di massa.</p> <p>DR si riferisce anche al gas accelerante.</p> <p><b>Sistemi 6500 e 6500+:</b> quando il valore DR è impostato su Off, Low, Medium o High è attivo, il flusso del gas, il che aumenta la risoluzione della tecnologia SelexION<sup>®</sup> o SelexION<sup>®</sup> +.</p> <p><b>Sistemi 5500 e 5500+:</b> quando il valore DR è impostato su Low, Medium o High, il flusso del gas è attivo, il che aumenta la risoluzione della tecnologia SelexION<sup>®</sup>.</p>	<p><b>Sistemi 6500 e 6500+:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Open (0; predefinito)</li> <li>Off (10)</li> <li>Low (22)</li> <li>Medio (34)</li> <li>Alto (43)</li> </ul> <p><b>Sistemi 5500 e 5500+:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Off (0; predefinito)</li> <li>Low (10)</li> <li>Medium (25)</li> <li>High (40)</li> </ul>

## Stato dei parametri DMS nella modalità DMS Off

Parametri DMS	Modalità DMS Off	
	Stato	Valore
DMS Temperature (DT)	Visibile su UI (interfaccia utente)	Low (impostazione predefinita)
Modifier (MD)	Nascosto	None (Nessuno)
Separation Voltage (SV)	Nascosto	0
Compensation Voltage (COV)	Nascosto	0
DMS Offset (DMO)	Nascosto	-3,0 volt in polarità positiva; 3,0 volt in polarità negativa
DMS Resolution Enhancement (DR)	Nascosto	<b>Sistemi 6500 e 6500+:</b> Open <b>Sistemi 5500 e 5500+:</b> Off

## Valori dei parametri DMS e della sorgente utilizzati durante l'eliminazione del modificatore

Nome del parametro	Valore impostato durante l'eliminazione del modificatore
Modifier Pump Flow Rate	1000 (µL/min)
Temperature (TEM)	300
DMS Temperature (DT)	225
DMS Resolution Enhancement (DR)	0
Separation Voltage (SV)	0
Compensation Voltage (COV)	0
DMS Offset (DMO)	3
Ion Source Gas 1 (GS1)	50
Ion Source Gas 2 (GS2)	50
Curtain Gas (CUR)	20
IonSpray Voltage (IS) (Vtaggio IonSpray (IS))	0
Collision Gas (CAD)	Predefinito del sistema

## Valori dei parametri DMS e della sorgente dopo il completamento o l'interruzione dell'eliminazione del modificatore

Nome del parametro	Valore dopo il completamento o l'interruzione dell'eliminazione del modificatore
DMS Temperature (DT)	150
Temperature (TEM)	0
Modifier Pump Flow Rate	0
GS1	20
GS2	0
CUR	30
CAD	<p><b>Sistemi SCIEX Triple Quad™ 5500, 5500+, 6500 e 6500+: 6</b></p> <p><b>Sistemi QTRAP® 5500, 6500 e 6500+ e sistemi Triple Quad abilitati QTRAP®: 9 (medio)</b></p>

# Infusione-T del campione nel flusso LC

# B



**AVVERTENZA!** Pericolo di scosse elettriche. Non bypassare la giunzione di messa a terra. La giunzione di messa a terra fornisce una protezione tra lo spettrometro di massa e il sistema di introduzione del campione.



**AVVERTENZA!** Pericolo di contaminazione da radiazioni ionizzanti, rischio biologico o pericolo di esposizione ad agenti chimici tossici. Per evitare perdite, assicurarsi che il dado del tubo di campionamento sia stretto correttamente prima di usare questa apparecchiatura.









**Nota:** L'infusione-T (infusione separata) può essere eseguita anche utilizzando un raccordo a T esterno per collegare le tre linee. I flussi della siringa e LC si collegano al raccordo a T, che a sua volta è collegato alla giunzione di messa a terra a due vie.

1. Sostituire la giunzione di messa a terra a due vie con una giunzione di messa a terra a tre vie (raccordo di giunzione con alesatura 0,15 mm, cod. art. 018786; anello a T per montaggio cod. art. 018786) sulla sorgente di ionizzazione.
2. Collegare il tubo in PEEK rosso dalla pompa a siringa fino alla giunzione di messa a terra posta sulla sorgente di ionizzazione.
3. Collegare la giunzione di messa a terra sulla sorgente di ionizzazione a una pompa LC.
4. Collegare il dado del tubo di campionamento alla giunzione di messa a terra attraverso un pezzo di tubo in PEEK rosso. Fare riferimento a *Collegamento di tubi e cavi* nella *Guida per l'operatore* della sorgente di ionizzazione.












# Glossario dei simboli

# C

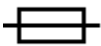





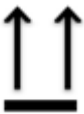





**Nota:** non tutti i simboli presenti nella seguente tabella sono applicabili a ogni strumento.








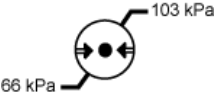
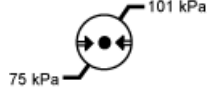

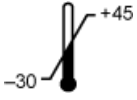
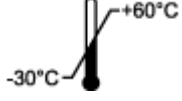


Simbolo	Descrizione
	Marchio di conformità alle normative per l'Australia. Indica che il prodotto è conforme ai requisiti EMC dell'autorità australiana per i media e le comunicazioni (ACMA, Australian Communications Media Authority).
	Corrente alternate.
A	Ampere (corrente).
	Rappresentante autorizzato nella Comunità Europea.
	Rischio biologico.
	Marchio CE di conformità.
	Marchio cCSAus. Si tratta di una certificazione di sicurezza elettrica per il mercato canadese e statunitense.
	Numero catalogo.
	Attenzione. <b>Nota:</b> nella documentazione SCIEX, questo simbolo indica un rischio di lesioni personali.



Simbolo	Descrizione
	Etichetta di attenzione RoHS per la Cina. Il prodotto informativo elettronico contiene alcune sottosostanze tossiche o pericolose. Il numero al centro è il periodo d'uso a basso impatto ambientale (EFUP, Environmentally Friendly Use Period) e indica il numero di anni civili di uso consentito del prodotto. Alla scadenza dell'EFUP, il prodotto deve essere tempestivamente riciclato. Le frecce in cerchio indicano che il prodotto è riciclabile. Il codice data riportato sull'etichetta o sul prodotto indica la data di produzione.
	Logo RoHS per la Cina. Il dispositivo non contiene sottosostanze tossiche e pericolose o elementi al di sopra dei valori di concentrazione massima ed è un prodotto ecologico, riciclabile e riutilizzabile.
	Fare riferimento alle istruzioni per l'uso.
	Marchio cTUVus per TÜV Rheinland del Nord America.
	Simbolo Matrice Dati che è possibile scansionare con un lettore di codice a barre per ottenere un identificativo univoco del dispositivo (UDI).
	Pericolo per l'ambiente.
	Collegamento Ethernet.
	Pericolo di esplosione.
	Pericolo di incendio.
	Pericolo di esposizione ad agenti chimici infiammabili.
	Fragile.




## Glossario dei simboli

Simbolo	Descrizione
	Fusibile.
Hz	Hertz.
	Alta tensione. Pericolo di scosse elettriche. Se è necessario rimuovere la copertura principale, contattare un rappresentante SCIEX per evitare scosse elettriche.
	Pericolo di superfici calde.
	Dispositivo per uso diagnostico in vitro.
	Pericolo di radiazioni ionizzanti.
	Conservare all'asciutto. Non esporre alla pioggia. L'umidità relativa non deve essere superiore al 99%.
	Tenere in posizione verticale.
	Rischio di lacerazione/Grave.
	Pericolo di radiazione laser.
	Pericolo di sollevamento.
	Produttore.
	Rischio derivante da parti in movimento.

Simbolo	Descrizione
	Rischio di schiacciamento.
	Pericolo di gas sotto pressione.
	Messa a terra (protezione).
	Pericolo di perforazione.
	Pericolo di esposizione ad agenti chimici reattivi.
	Numero di serie.
	Pericolo di esposizione ad agenti chimici tossici.
	Trasportare e stoccare il sistema in un intervallo compreso tra 66 kPa e 103 kPa.
	Trasportare e stoccare il sistema in un intervallo compreso tra 75 kPa e 101 kPa.
	Trasportare e stoccare il sistema ad un'umidità relativa compresa tra il 10% e il 90%.
	Trasportare e stoccare il sistema ad una temperatura compresa tra -30 °C e +45 °C.
	Trasportare e stoccare il sistema ad una temperatura compresa tra -30 °C e +60 °C.
	Collegamento USB 2.0.
	Collegamento USB 3.0.

## Glossario dei simboli

---

Simbolo	Descrizione
	Pericolo da radiazione ultravioletta.
VA	Volt Ampere (potenza).
V	Volt (tensione).
	RAEE. Non smaltire l'apparecchiatura nei rifiuti urbani indifferenziati. Pericolo per l'ambiente.
W	Watt.
	<i>aaaa-mm-gg</i> Data di produzione.

# Per contattarci

---

## Formazione dei clienti

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

## Centro di istruzione online

- [SCIEXUniversity](#)

## 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](http://sciex.com) oppure è possibile contattarci in uno dei seguenti modi:

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

## Sicurezza informatica

Per le ultime indicazioni sulla sicurezza informatica per i prodotti SCIEX, visitare il sito [sciex.com/productsecurity](http://sciex.com/productsecurity).

## Documentazione

Questa versione del documento sostituisce tutte le precedenti.

Per visualizzare questo documento in formato elettronico, è necessario Adobe Acrobat Reader. Scaricare l'ultima versione da <https://get.adobe.com/reader>.

Per reperire la documentazione del software del prodotto, fare riferimento alle note di rilascio o alla guida all'installazione del software fornita con il software. La documentazione per i prodotti hardware può essere reperita sul DVD *Customer Reference* fornito con il sistema o il componente.

## Per contattarci

---

Per le versioni più recenti della documentazione, visitare il sito Web SCIEX all'indirizzo [sciex.com](http://sciex.com).

---

**Nota:** per richiedere una versione stampata gratuita di questo documento, contattare [sciex.com/contact-us](http://sciex.com/contact-us).

---