

Systeme 4600 TripleTOF®

Guide de l'utilisateur du systeme



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

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

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

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

Réservé exclusivement à des fins de recherche. Ne pas utiliser dans le cadre de procédures de diagnostic.

Les marques commerciales citées dans le présent document appartiennent à AB Sciex Pte. Ltd. ou à leurs propriétaires respectifs.

AB SCIEX™ est utilisé sous licence.

© 2014 AB Sciex Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk 33, #04-06
Marsiling Ind Estate Road 3
Woodlands Central Indus. Estate.
SINGAPOUR 739256

Table des matières

Chapitre 1 Précautions et limitations de fonctionnement	6
Informations générales de sécurité.....	6
Conformité réglementaire.....	6
Précautions électriques.....	8
Alimentation sur secteur.....	8
Conducteur de protection.....	8
Précautions chimiques.....	8
Fluides sécurisés du système.....	9
Précautions relatives à la ventilation.....	10
Précautions pour l'environnement.....	11
Environnement électromagnétique.....	11
Mise hors service et mise au rebut (déchets, équipements électriques et électroniques).....	11
Personnel qualifié.....	12
Formation et documentation destinées aux clients.....	12
Utilisation de l'équipement et modification.....	12
Chapitre 2 Symboles de danger	14
Symboles sur la santé et la sécurité.....	14
Symboles, indicateurs et étiquettes : emballage.....	16
Symboles, indicateurs et étiquettes : spectromètre de masse.....	18
Symboles et conventions de la documentation.....	19
Chapitre 3 Principes de fonctionnement	20
Présentation du système.....	20
Symboles du panneau.....	23
Principes de fonctionnement.....	24
Manipulation des données.....	24
Chapitre 4 Instructions d'utilisation : Matériel	25
Démarrer le système.....	25
Désactivation du système.....	26
Ajuster la Integrated Syringe Pump Position (position de la pompe à seringue intégrée).....	26
Réinitialiser la pompe à seringue.....	29
Chapitre 5 Instructions d'utilisation : flux de travail des échantillons	31
Chapitre 6 Instructions d'utilisation : profils matériels et projets	35
Profils de matériel.....	35
Créer un profil matériel.....	35
Ajouter des périphériques à un profil d'équipement.....	40
Dépannage des problèmes liés à l'activation du profil matériel.....	42
Projets et sous-projets.....	42
Créer des projets et des sous-projets.....	42
Créer des sous-projets.....	44

Table des matières

Copier des sous-projets.....	44
Basculer entre les projets et sous-projets.....	44
Dossiers projet installé.....	45
Sauvegardez le dossier API Instrument.....	45
Récupérez le dossier API Instrument (Instrument API).....	46
Chapitre 7 Instructions d'utilisation : réglage et étalonnage.....	47
Optimiser le spectromètre de masse.....	47
À propos de la boîte de dialogue Verifying or Adjusting Performance (Vérification ou réglage des performances).....	48
Récapitulatif des résultats.....	48
Chapitre 8 Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition.....	50
Créer une méthode d'acquisition à l'aide de l'assistant de méthode.....	50
Créer une méthode d'acquisition en utilisant l'Éditeur de méthode d'acquisition.....	51
Ajouter une expérience.....	52
Ajouter une période.....	52
Copier une expérience dans une période.....	52
Copier une expérience dans une période.....	52
Techniques de balayage.....	53
Spectrométrie de masse simple.....	53
La Spectrométrie de masse simple à base quadripolaire.....	53
La Spectrométrie de masse simple à temps de vol.....	53
Spectromètre de masse en tandem.....	53
Spectrométrie de masse d'ions produits.....	54
Sur l'acquisition de données spectrales.....	54
Paramètres.....	54
Chapitre 9 Instructions d'utilisation : lots.....	60
Régler les options de file d'attente.....	60
Ajouter des ensembles et des échantillons à un lot.....	61
Soumettre un échantillon ou un groupe d'échantillons.....	65
Configurer l'étalonnage de l'échantillon.....	65
Changer l'ordre de l'échantillon.....	66
Acquérir les données.....	66
Régler les emplacements de l'échantillon dans l'Éditeur de lot.....	67
Sélectionnez les emplacements des flacons à l'aide de l'onglet Locations (Emplacements) (facultatif).....	67
Arrêter l'acquisition d'échantillons.....	68
Menu contextuel de l'éditeur de lot.....	69
États de la file d'attente et l'état du périphérique.....	69
Statut de la file d'attente.....	70
Vue Instrumentation et icônes du statut des périphériques.....	71
Menu contextuel de la file d'attente.....	72
Chapitre 10 Instructions d'utilisation : analyser et traiter des données.....	73
Ouvrir les fichiers de données.....	73
Naviguer entre les échantillons dans un fichier de données.....	74
Affichage de conditions expérimentales.....	74
Afficher les données dans des tableaux.....	75
Afficher données ADC.....	77
Afficher données quantitatives de base.....	77
Chromatogrammes.....	77
Montrer les TIC d'un spectre.....	78
Afficher un spectre d'un TIC.....	79

À propos de la création de XIC.....	79
Générez un XIC en utilisant une plage sélectionnée.....	80
Générez un XIC en utilisant le pic maximal.....	80
Générez un XIC en utilisant les masses du pic de base.....	81
Extraire des ions en sélectionnant les masses.....	81
Générer BPC.....	82
Générer XWC.....	83
Générer des données DAD.....	84
Générer TWC.....	84
Ajuster le seuil.....	84
Volet de chromatogramme.....	85
Spectra Panes (Fenêtres spectrales).....	86
Traitement des données.....	87
Graphiques.....	87
Gestion des données.....	88
Effectuez un zoom avant sur l'axe des y.....	89
Effectuez un zoom avant sur l'axe des x.....	89
Chapitre 11 Informations relatives au service et à l'entretien.....	90
Calendrier recommandé de nettoyage et de maintenance.....	90
Nettoyer les surfaces.....	91
Nettoyer la façade.....	91
Symptômes de contamination.....	92
Matériel nécessaire.....	92
Meilleures pratiques.....	93
Préparer le spectromètre de masse.....	94
Nettoyer la plaque rideau.....	95
Nettoyer l'avant de la plaque à orifice.....	96
Remettre le spectromètre de masse en service.....	96
Vider le conteneur de trop-plein.....	97
Stockage et manutention.....	99
Chapitre 12 Résolution des problèmes.....	100
Appendice A Ions d'étalonnage recommandés.....	101
Appendice B Masses exactes et formules chimiques.....	104
Appendice C Icônes de la Barre d'Outils.....	107
Historique des révisions.....	113
Indice.....	114

Précautions et limitations de fonctionnement

1

Remarque : Avant d'utiliser le système, lisez attentivement toutes les sections du présent guide.

Cette section contient des informations générales relatives à la sécurité et fournit des informations relatives à la conformité réglementaire. Elle décrit également les dangers potentiels et les avertissements associés pour le système ainsi que les précautions qui doivent être prises pour minimiser les risques.

Outre cette section, consultez [Symboles de danger à la page 14](#) pour obtenir des informations sur les symboles et les conventions utilisés dans l'environnement du laboratoire, sur le système et dans le présent document. Consultez le *Site Planning Guide* (Guide de planification du site d'installation) pour ce qui concerne les exigences du site, dont celles relatives à l'alimentation secteur, l'évacuation de la source, la ventilation, l'air, l'azote et la pompe primaire.

Informations générales de sécurité

Pour éviter toute blessure ou tout endommagement du système, lisez, comprenez et respectez toutes les précautions de sécurité, les avertissements présents dans ce document et sur les étiquettes du spectromètre de masse. Ces étiquettes présentent des symboles internationalement reconnus. Ne pas tenir compte de ces avertissements peut entraîner des blessures graves.

Les informations de sécurité sont destinées à compléter les règlements fédéraux, locaux ou provinciaux sur l'environnement, la santé et la sécurité (EHS). L'information fournie concerne la sécurité du système au regard du fonctionnement du spectromètre de masse. Il ne couvre pas toutes les procédures de sécurité devant être pratiquées. En fin de compte, vous et votre organisation êtes responsables du respect des règlements EHS fédéraux, locaux ou provinciaux sur le maintien d'un environnement de laboratoire sécurisé.

Pour plus d'informations, reportez-vous à la documentation de référence appropriée du laboratoire et aux procédures d'exploitation standardisées.

Conformité réglementaire

Ce système est conforme aux standards et règlements figurant dans cette section. Les étiquettes s'y afférant ont été apposées sur le système.

Australie et Nouvelle-Zélande

- **Interférence électromagnétique**—AS/NZ CISPR 11 (classe A)
- **Sécurité**—AS/NZ 61010-1 et CEI 61010-2-061

Canada

- **Interférence électromagnétique**—CAN/CSACISPR11. Cet appareil ISM est conforme à la norme canadienne ICES-001.
- **Sécurité**—CAN/CSA C22.2 No. 61010-1 et CAN/CSA C22.2 No 61010-2-061

Europe

- **Perturbations électromagnétiques** Directive sur la compatibilité électromagnétique 2004/108/CE, telle que transposée dans ces normes :
 - EN 55011 (Classe A)
 - EN 61326-1
- **Sécurité**—Directives de basse tension 2006/95/CE telle que transposée dans ces normes :
 - EN 61010-1
 - EN 61010-2-061
- **DEEE** relative aux déchets d'équipements électriques et électroniques 2002/96/CEE, telle que transposée dans la norme EN 40519

ÉTATS-UNIS

- **Perturbations électromagnétiques, FCC Part 15, Classe A**— Cet équipement a été testé et déclaré conforme aux limites pour un appareil numérique de Classe A, conformément à l'article 15 des règles de la FCC (Federal Communications Commission).

Ces limites sont conçues pour fournir une protection raisonnable contre les interférences nuisibles lorsque l'équipement est utilisé dans un environnement commercial. Cet équipement génère, utilise et peut émettre une énergie de fréquence radio et, s'il n'est pas installé et utilisé conformément au manuel de l'opérateur, peut causer des interférences nuisibles aux communications radio.

Le fonctionnement de cet équipement dans une zone résidentielle est susceptible de provoquer des interférences nuisibles, auquel cas il vous sera nécessaire de corriger les interférences, à vos frais. Les changements ou modifications non expressément approuvés par le fabricant peuvent annuler votre droit d'utiliser l'équipement.

- **Sécurité**—UL 61010-1 et CEI 61010-2-061

International

- **Compatibilité électromagnétique**—CEI 61326-1 et CEI/IEC CISPR 11 Classe A
- **Sécurité**—CEI 61010-1 et CEI 61010-2-061

Pour de plus amples informations, consultez la déclaration de conformité fournie avec le système.

Précautions électriques

Alimentation sur secteur



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique : l'installation de toutes les alimentations électriques et de tous les branchements doit uniquement être exécutée par un personnel qualifié. S'assurer que toutes les installations sont conformes aux réglementations en vigueur et aux normes de sécurité.

Un transformateur de ligne externe n'est pas nécessaire pour le spectromètre de masse, pour le meuble optionnel ou la pompe primaire.

Attention : Risque d'endommagement du système : ne pas ouvrir la caisse du spectromètre de masse ni les caisses ou cartons d'ordinateurs. Le FSE va déballer et manipuler le spectromètre de masse au moment de l'installation.

Pour plus d'informations sur les spécifications électriques du système, voir le *Guide d'installation du site*.

Conducteur de protection

L'alimentation principale doit comprendre une ligne de terre de sécurité correctement installée. La ligne de terre de sécurité doit être correctement installée et vérifiée par un électricien qualifié avant de brancher le spectromètre de masse. Vérifiez que le connecteur d'alimentation secteur est accessible afin de pouvoir déconnecter l'appareil.



AVERTISSEMENT ! Risque d'électrocution : ne pas débrancher délibérément la ligne de terre de sécurité. Toute interruption de cette protection peut rendre cette installation dangereuse.

Précautions chimiques

- Déterminez quels sont les produits chimiques qui peuvent avoir été utilisés dans le spectromètre de masse avant sa mise en service et son entretien régulier. Reportez-vous aux fiches techniques de sécurité pour les précautions d'hygiène et de sécurité qui doivent être suivies avec les produits chimiques.
- Travailler dans un endroit bien aéré.
- Toujours porter l'équipement de protection individuelle attribué, y compris des gants en néoprène non poudrés, des lunettes de sécurité et une blouse de laboratoire.
- Suivre les usages des travaux en électricité en sécurité.
- Éviter les sources d'étincelles lors de l'utilisation de matériaux inflammables, comme l'isopropanol, le méthanol, et autres solvants inflammables.

- Utiliser et éliminer les produits chimiques avec précaution. Risque potentiel de lésion corporelle si les procédures adéquates de manipulation et d'élimination des produits chimiques ne sont pas respectées.
- Éviter tout contact des produits chimiques avec la peau pendant le nettoyage, et se laver les mains après utilisation.
- Se conformer à toutes les réglementations locales pour le stockage, la manipulation et la mise au rebut des déchets biologiques, toxiques ou radioactifs dangereux.

Fluides sécurisés du système

Les liquides suivants peuvent être utilisés de façon sûre avec le système. Voir [Informations relatives au service et à l'entretien à la page 90](#) pour des informations sur les solutions de nettoyage sûres.

Attention : Risque d'endommagement du système : ne pas utiliser d'autre liquide sans confirmation reçue d'AB SCIEX relativement à sa nature inoffensive. Cette liste n'est pas exhaustive.

- **Solvants organiques**
 - Acétonitrile de qualité MS, jusqu'à 100 %
 - Méthanol de qualité MS, jusqu'à 100 %
 - Isopropanol, jusqu'à 100 %
 - Eau de qualité HPLC ou supérieure, jusqu'à 100 %
- **Tampons**
 - Acétate d'ammonium, moins de 1 %
 - Formiate d'ammonium, moins de 1 %
- **Acides et Bases**
 - Acide formique, moins de 1 %
 - Acide acétique, moins de 1 %
 - Acide trifluoroacétique (TFA), moins de 1 %
 - Acide heptafluorobutyrique (HFBA), moins de 1 %
 - Ammoniaque/Hydroxyde d'ammonium, moins de 1 %

Précautions relatives à la ventilation

L'évacuation des fumées et l'élimination des déchets doivent être conformes à toutes les règles fédérales, locales ou régionales sur la santé et la sécurité. Utiliser le système à l'intérieur dans un laboratoire conforme aux conditions environnementales recommandées dans le *Guide d'aménagement du site* du système.

Le système d'évacuation de la source d'ions du spectromètre de masse et de la pompe primaire doit être assuré soit par une hotte aspirante externe soit par un système de ventilation externe, tel que recommandé dans le *Guide d'aménagement du site* du système.



AVERTISSEMENT ! Risque de toxicité chimique ou risque biologique : veiller à évacuer les gaz d'échappement dans une hotte aspirante de laboratoire ou un système d'évacuation dédié et à ce que le tube de ventilation soit maintenu en place par des pinces. L'utilisation de spectromètres de masse sans ventilation adéquate vers l'extérieur peut constituer un danger pour la santé et peut entraîner des blessures graves.



AVERTISSEMENT ! Risque d'irradiation, risques biologiques ou de toxicité chimique : s'assurer que le spectromètre de masse est connecté au système d'évacuation local et dispose d'un conduit permettant de contrôler les émissions de gaz dangereux. Le système doit uniquement être utilisé dans un environnement de laboratoire bien ventilé dans le respect des réglementations locales et avec échange d'air approprié pour le travail effectué. Certaines juridictions recommandent 4 à 12 renouvellements d'air par heure dans les laboratoires.



AVERTISSEMENT ! Risque d'irradiation, risques biologiques ou de toxicité chimique : ne pas faire fonctionner le spectromètre de masse si le conduit d'évacuation de la source et les conduits d'évacuation de la pompe primaire ne sont pas correctement raccordés au système de ventilation du laboratoire. Certaines procédures nécessaires pendant le fonctionnement du spectromètre de masse peuvent entraîner une fuite de gaz dans le courant d'évacuation. Effectuer une vérification régulière du tube d'évacuation pour s'assurer qu'il n'existe aucune fuite.



AVERTISSEMENT ! Risque d'irradiation, risques biologiques ou de toxicité chimique : utiliser la source d'ions uniquement si vous avez les qualifications et la formation appropriées et si vous connaissez les règles d'utilisation correcte, de confinement et d'évacuation des matériaux toxiques ou nuisibles utilisés avec la source d'ions. Cessez d'utiliser la source d'ions si la fenêtre est fissurée ou cassée et contactez un Field Service Employee (technicien) AB SCIEX. Tout matériau toxique ou nocif introduit dans l'équipement sera présent dans la source d'ions et la sortie d'évacuation. Éliminer les objets tranchants conformément aux procédures de sécurité établies par le laboratoire.

Précautions pour l'environnement

Utilisation du personnel qualifié pour l'installation des fournitures et accessoires de l'alimentation électrique, du chauffage, de la ventilation et de la plomberie. Vérifiez que toutes les installations respectent les lois locales et les règlements sur les risques biologiques. Pour plus d'informations sur les exigences environnementales du système, voir le *Guide d'installation du site*.



DANGER ! Risque d'explosion : ne pas faire fonctionner le système dans un environnement contenant des gaz explosifs. Le système n'est pas conçu pour un fonctionnement dans un environnement explosif.



AVERTISSEMENT ! Risque biologique : utilisation de matériel biologiquement dangereux, toujours observer les réglementations en vigueur pour l'évaluation des risques, le contrôle et la manipulation. Ce spectromètre de masse ou toute pièce ne sont pas destinés à fonctionner dans un système de confinement biologique.

Attention : Changements de masse potentiels. Maintenir une température ambiante stable. Si la température varie de plus de 2 °C, la résolution et l'étalonnage des masses seront affectés.

Environnement électromagnétique

Attention : Résultat potentiellement erroné : ne pas utiliser cet appareil à proximité de sources de rayonnements électromagnétiques intenses (des sources intentionnelles de RF non blindées, par exemple), car elles peuvent interférer avec son fonctionnement correct et conduire à des résultats erronés.

Veillez à maintenir un environnement électromagnétique compatible avec l'appareil afin que celui-ci puisse fonctionner comme prévu.

Dans un environnement domestique, l'appareil peut provoquer des interférences radio. Si tel est le cas, l'utilisateur peut devoir prendre des mesures afin d'atténuer ces interférences. L'environnement électromagnétique doit être évalué préalablement au fonctionnement de l'appareil.

Les changements ou modifications non expressément approuvés par le fabricant peuvent annuler votre droit d'utiliser l'équipement.

Mise hors service et mise au rebut (déchets, équipements électriques et électroniques)

Décontaminer le système avant sa mise hors service conformément aux réglementations locales. Respecter le processus AB SCIEX Red Tag et remplir un Formulaire de décontamination de l'instrument en cas de retour de celui-ci.

Précautions et limitations de fonctionnement

Lors de la mise hors service du système, séparez et recyclez divers matériaux conformément aux réglementations environnementales nationales et locales. Voir [Stockage et manutention à la page 99](#).

Ne pas jeter de composants ou d'assemblages, y compris les pièces d'ordinateur, dans des déchetteries municipales. Suivre les ordonnances municipales sur les déchets pour la mise au rebut en vue de réduire l'impact environnemental des DEEE (déchets électriques et matériel électronique). Pour mettre cet appareil au rebut en toute sécurité, contacter un bureau local du Service clientèle pour bénéficier d'un enlèvement gratuit pour le recyclage de l'équipement.

Remarque : AB SCIEX n'acceptera aucun système en retour sans un Formulaire de décontamination dûment rempli.

Personnel qualifié

Seul le personnel qualifié d'AB SCIEX installera et entretiendra l'équipement. Une fois le système installé, le technicien de service utilise le *Guide de familiarisation du client* pour informer le client sur le fonctionnement, le nettoyage et la maintenance du système.

Seul le personnel qualifié par le fabricant doit entretenir les équipements. Une personne désignée par le laboratoire peut être familiarisée avec les procédures de responsable de maintenance qualifié (QMP) pendant l'installation.

Formation et documentation destinées aux clients

Pour de plus amples renseignements sur la formation, consulter le site Web AB SCIEX (www.absciex.com/training).

Le *Guide d'aménagement du site* est remis au client avant l'installation. Les guides applicables au logiciel Analyst[®] TF sont automatiquement installés avec le logiciel et sont accessibles à partir du menu Start (Démarrer) : **All Programs (Tous les programmes) > AB SCIEX > Analyst TF**. Les guides applicables au spectromètre de masse sont disponibles sur le DVD *Hardware Documentation (Documentation du matériel)*. La documentation relative à la source d'ions se trouve sur le CD *Ion Source Customer Reference (Référence client de la source d'ions)*. Une liste complète des documents disponibles se trouve dans la rubrique Help. Pour afficher la rubrique Help (Aide) du logiciel **Analyst TF**, appuyez sur **F1**.

Utilisation de l'équipement et modification

Utiliser le système à l'intérieur, dans un laboratoire conforme aux conditions environnementales recommandées dans le *Guide d'aménagement du site*.

Si le système est utilisé dans un environnement ou d'une manière non prévue par le fabricant, la protection fournie par l'équipement peut être compromise.

Une modification ou une manipulation du système non autorisée peut être à l'origine de blessures ou de dommages matériels et peut annuler la garantie. Des données erronées peuvent être générées si le système fonctionne hors des conditions environnementales recommandées ou avec des modifications non autorisées. Contactez un FSE pour plus d'informations sur l'entretien du système.



AVERTISSEMENT ! Risque de blessure corporelle : utiliser uniquement les pièces recommandées par AB SCIEX. L'utilisation de pièces non recommandées par AB SCIEX ou l'utilisation de pièces pour tout usage différent de celui auquel elles sont destinées peuvent porter atteinte à l'utilisateur ou avoir une incidence négative sur les performances du système. La protection fournie par l'équipement peut être compromise si l'équipement est utilisé sans tenir compte des précisions données par AB SCIEX.

Symboles de danger

2

Cette section répertorie les symboles de danger et les conventions utilisés dans l'environnement du laboratoire, sur le système et dans la documentation.

Symboles sur la santé et la sécurité

Cette section décrit certains symboles relatifs à la santé et à la sécurité présents dans la documentation et l'environnement du laboratoire.

Tableau 2-1 Symboles des dangers chimiques




Symbole de sécurité	Définition
	Bio-danger
	Risque d'explosion
	Risque de toxicité chimique

Tableau 2-2 Symboles d'avertissement des dangers électriques


Symbole de sécurité	Définition
	Risque de choc électrique

Tableau 2-3 Symboles d'avertissement des dangers du gaz pressurisé






Symbole de sécurité	Définition
	Risque de gaz pressurisé

Tableau 2-4 Symboles des dangers mécaniques

Symbole de sécurité	Définition
	Risque sur surface chaude
	Risque de levage
	Danger de perforation
	Risque de radiation au laser

Symboles, indicateurs et étiquettes : emballage

Tableau 2-5 Étiquettes sur le matériel d'expédition du spectromètre de masse




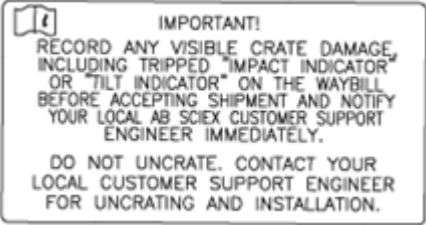


Étiquette/Symbole	Définition
 <p>The image shows two types of shipping labels. The top one is yellow with the text 'TILTWATCH PLUS' and 'SWICKWATCH' and features a graphic of a watch. The bottom one is red with the text 'TIP & TELL' and features a graphic of a white arrow pointing up from two blue footprints. Below the labels is the word 'ou'.</p> <p>ou</p>	<p>Indicateur d'inclinaison</p> <p>Indique que le conteneur a été renversé ou a fait l'objet d'une mauvaise manipulation.</p> <p>Porter l'incident sur le connaissance et vérifier l'absence de dommages. Toute réclamation pour un renversement nécessite une note écrite.</p>








Tableau 2-5 Étiquettes sur le matériel d'expédition du spectromètre de masse (suite)

Étiquette/Symbole	Définition
	Conserver en position droite.
	<p>Indicateur d'impact</p> <p>Si l'indicateur a été activé, ce conteneur a fait une chute ou a fait l'objet d'une mauvaise manipulation.</p> <p>Portez la remarque sur le connaissement et vérifiez l'absence de dommages.</p>
	<p>IMPORTANT !</p> <p>ENREGISTRER SUR LE CONNAISSEMENT TOUT DOMMAGE VISIBLE SUR LA CAISSE PARMI LESQUELS LES « INDICATEURS D'IMPACT » OU LES « INDICATEURS D'INCLINAISON » ACTIVÉS AVANT D'ACCEPTER LA LIVRAISON ET LES SIGNALER IMMÉDIATEMENT À VOTRE TECHNICIEN D'ASSISTANCE À LA CLIENTÈLE AB SCIEX.</p> <p>NE PAS DÉBALLER. CONTACTER VOTRE TECHNICIEN D'ASSISTANCE À LA CLIENTÈLE POUR LE DÉBALLAGE ET L'INSTALLATION.</p>
	Conserver au sec.
	Fragile

Symboles, indicateurs et étiquettes : spectromètre de masse

Reportez-vous [Symboles du panneau à la page 23](#) pour plus d'informations.

Tableau 2-6 Étiquettes sur le spectromètre de masse

Étiquette	Définition
<p>WARNING: NO USER SERVICEABLE PARTS INSIDE. REFER SERVICING TO QUALIFIED PERSONNEL.</p>	<p>AVERTISSEMENT : aucune pièce réparable par l'utilisateur à l'intérieur. Confiez l'entretien à un personnel qualifié.</p> <p>Consulter le mode d'emploi</p>
	<p>Ne pas jeter cet équipement comme déchet municipal non trié (DEEE).</p>
	<p>AVERTISSEMENT : Risque sur surface chaude.</p>
	<p>Consulter le mode d'emploi</p>
	<p>Avertissement : Haute tension. Risque de choc électrique.</p>
	<p>Ligne de terre de sécurité</p>
	<p>Courant alternatif</p>
<p>A</p>	<p>Ampères (courant)</p>
<p>V</p>	<p>Volts (tension)</p>
<p>VA</p>	<p>Volts Ampères (alimentation)</p>
	<p>AVERTISSEMENT : ne pas utiliser avant d'avoir vérifié que le couvercle du flacon est correctement fixé. Cet avertissement figure sur l'évacuation de la source (bouteille de trop-plein)</p>

Symboles et conventions de la documentation

Les symboles et conventions suivants sont utilisés tout au long de ce guide.



DANGER ! Danger signifie une action qui conduit à des blessures graves ou la mort.



AVERTISSEMENT ! Avertissement signifie une action susceptible de provoquer des blessures corporelles si les précautions nécessaires ne sont pas suivies.

Attention : Attention signifie une opération susceptible d'endommager le système ou de conduire à une perte de données si les précautions nécessaires ne sont pas suivies.

Remarque : Une remarque souligne une information importante dans une procédure ou une description.

Conseil ! Un conseil fournit une information utile pour mettre en application les techniques et les procédures du texte pour un besoin spécifique et fournit des raccourcis, mais n'est pas indispensable à l'achèvement de la procédure.

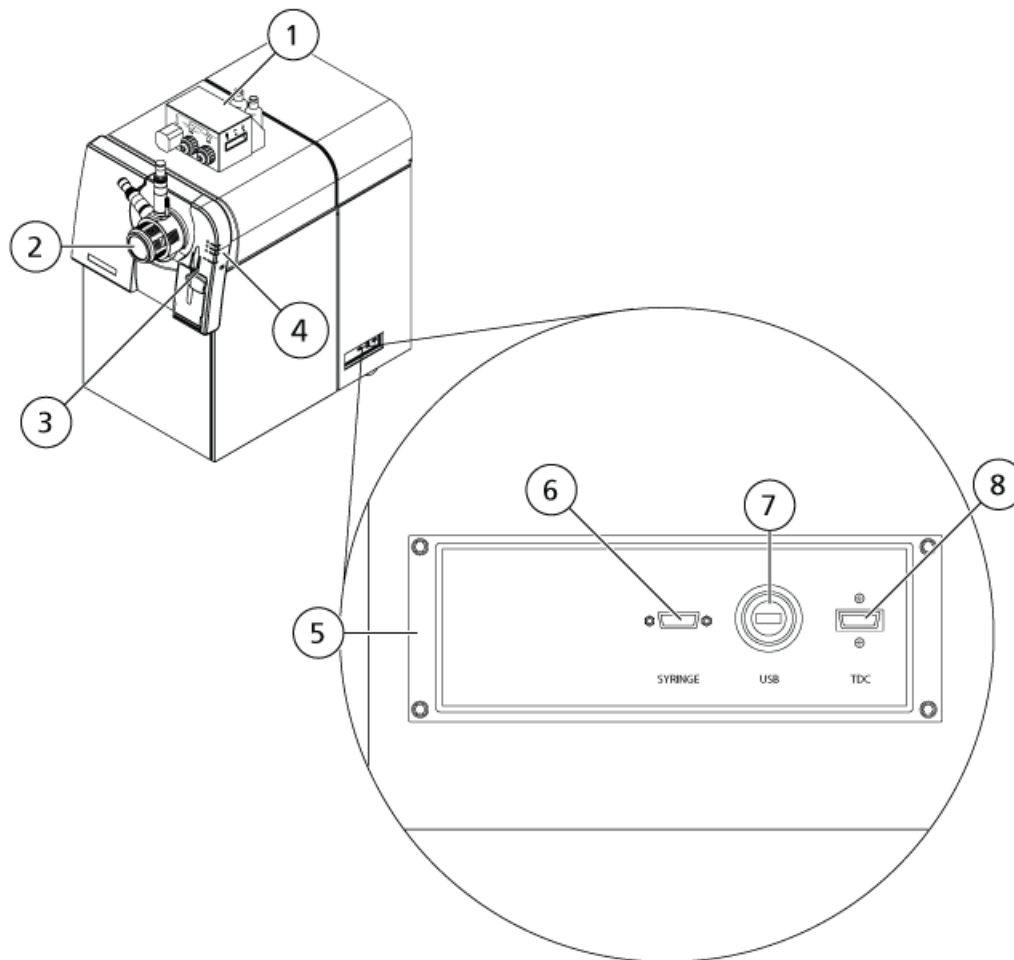
Les systèmes AB SCIEX TripleTOF[®] 4600 sont destinés à l'analyse qualitative et quantitative d'espèces chimiques.

Présentation du système

Le système comporte les composants suivants :

- Un spectromètre de masse AB SCIEX TripleTOF[®] 4600 avec DuoSpray[™] source d'ions et pompe primaire.
- Le calibrant delivery system (CDS) facultatif.
- Ordinateur et moniteur fournis par AB SCIEX, équipés du logiciel Analyst[®] TF pour l'optimisation de l'instrument, le développement de la méthode d'acquisition, l'acquisition .

Figure 3-1 Affichage de l'avant et du côté droit

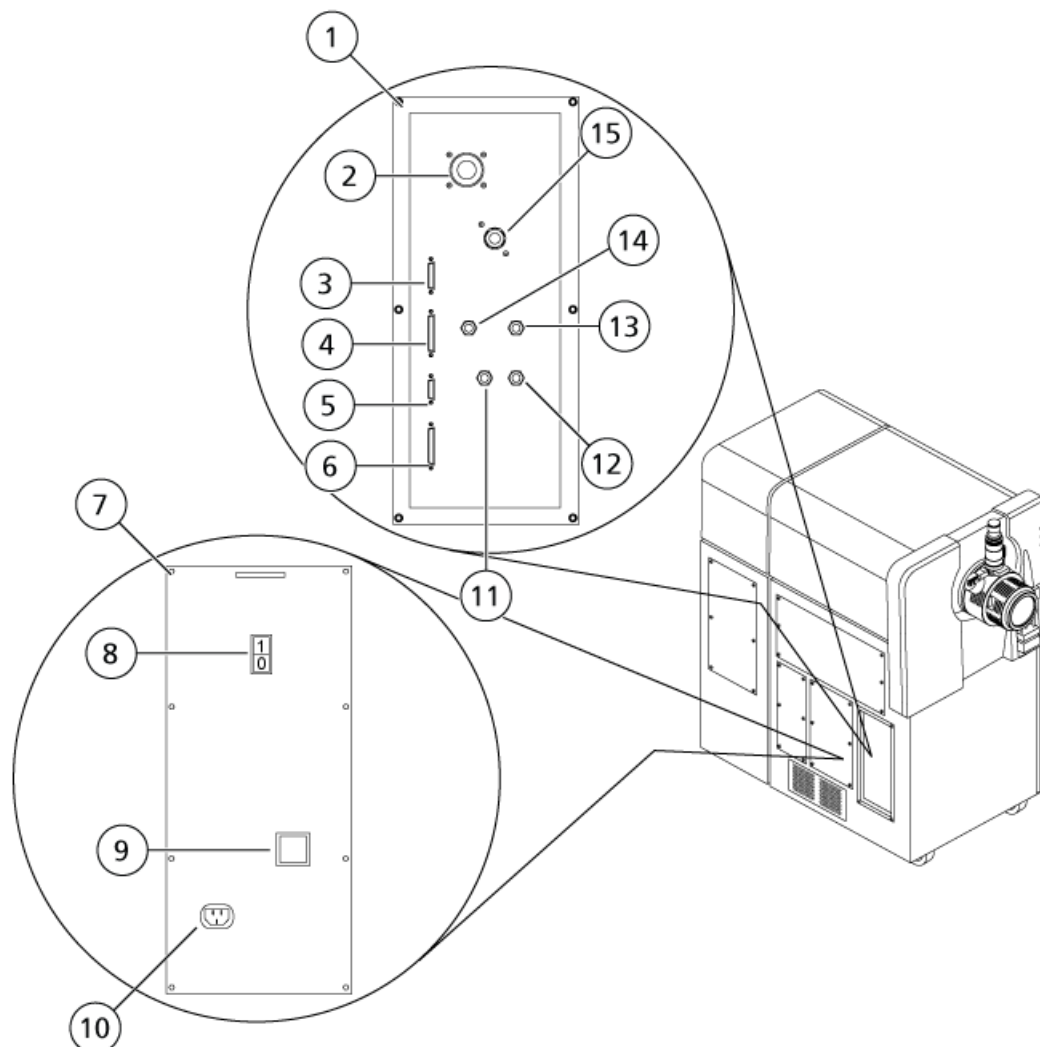


Élément	Description	Pour plus d'informations ...
1	CDS facultatif	Consultez le <i>CDS Operator Guide</i> (guide de l'opérateur du CDS).
2	DuoSpray™ source d'ions	Se reporter à la source d'ions dans le <i>DuoSpray™ Guide de l'opérateur du système TripleTOF®</i> .
3	Pompe à seringue	Voir <i>Ajuster la Integrated Syringe Pump Position (position de la pompe à seringue intégrée)</i> .
4	LED (diodes électroluminescentes) d'état du spectromètre de masse	Voir <i>Symboles du panneau</i> .
5	Cloisons de communications	Communiquez avec un AB SCIEXtechnicien d'entretien (FSE).

Principes de fonctionnement

Élément	Description	Pour plus d'informations ...
6	Câble de connexion de série (RS-232) pour la pompe à seringue	Contacteur un FSE.
7	Câble de connexion USB pour la carte USB-GPIB	Contacteur un FSE.
8	Câble de connexion InfiniBand pour la carte TDC	Contacteur un FSE.

Figure 3-2 Affichage du côté gauche



Élément	Description	Pour plus d'informations ...
1	Cloison de gaz et de dépression	Contacteur un FSE.
2	Connexion de la dépression de la pompe primaire	Contacteur un FSE.

Élément	Description	Pour plus d'informations ...
3	Connexion de contrôle d'étalonnage	Consultez le <i>CDS Operator Guide</i> (Guide de l'opérateur du CDS).
4	Connexion auxiliaire IO Le signal de démarrage facultatif du système LC se connecte à ce port.	Contactez un FSE.
5	Connexion de contrôle externe. Ce port est conçu pour une utilisation ultérieure.	Contactez un FSE.
6	Connexion des sources. Quelques sources d'ions se connectent à ce port.	Contactez un FSE.
7	Panneau de distribution de l'alimentation.	Contactez un FSE.
9	Commutateur de l'appareil.	Voir <i>Démarrer le système</i> .
9	Couverture du disjoncteur.	Se reporter à <i>Démarrer le système</i> . Utilisez le commutateur plutôt que le disjoncteur pour désactiver le système.
10	Connexion de l'alimentation principale	Voir <i>Démarrer le système</i> .
11	Curtain Gas™ (azote) connexion d'alimentation.	Contactez un FSE.
12	Connexion d'alimentation des Gaz 1 et Gaz 2 (zéro).	Contactez un FSE.
13	Connexion d'alimentation du gaz d'évacuation de la source (air grade zero ou azote).	Contactez un FSE.
14	Connexion d'alimentation du gaz CAD (azote).	Contactez un FSE.
15	Connexion des déchets d'évacuation de la source.	Contactez un FSE.

Symboles du panneau

Tableau 3-1 décrit les voyants d'état du spectromètre de masse.

Tableau 3-1 Symboles du panneau





Voyant LED	Couleur	Nom	Description
	Vert	Puissance	Allumé lorsque le système est sous tension.
	Vert	Dépression	Allumé après que le niveau d'aspiration suffisant a été atteint. Clignotant si la dépression n'est pas correcte (pendant le tirage et la ventilation.)

Tableau 3-1 Symboles du panneau (suite)

Voyant LED	Couleur	Nom	Description
	Vert	Prêt	Allumé lorsque le système est sur PRÊT. Le système doit être à l'état Prêt pour fonctionner.
	Rouge	État	Allumé lorsque le système détecte une défaillance du système.

Après la mise sous tension du système, tous les voyants LED s'allument. Le voyant d'alimentation reste allumé. Les quatre autres voyants clignotent pendant deux secondes, puis s'éteignent. Le voyant de l'aspiration commence à clignoter. Après avoir atteint le niveau d'aspiration suffisant, ce voyant reste allumé.

Principes de fonctionnement

Le Spectromètre de masse mesure le rapport masse sur charge des ions pour identifier les composés inconnus, quantifier les composés connus, et fournir des informations sur les structures et propriétés chimiques des molécules.

Les systèmes TripleTOF[®] 4600 disposent d'une série de filtres quadripôles qui transmettent des ions en fonction de leur valeur masse/charge (m/z). Le premier quadripôle dans cette série est le guide d'ions QJet[®] situé entre la plaque d'orifice et la zone Q0. Le guide d'ions QJet ne filtre pas les ions, mais les concentre avant qu'ils n'entrent dans la zone Q0. En préconcentrant le flux des ions les plus grands par l'orifice le plus large, le guide d'ions QJet augmente la sensibilité de l'instrument et améliore le rapport signal-sur-bruit. Dans la zone Q0, les ions sont encore concentrés avant de passer dans le quadripôle Q1.

Le quadripôle Q1 trie les ions avant qu'ils n'entrent dans la cellule de collision Q2. Dans la cellule de collision Q2, l'énergie interne des ions est augmentée par les collisions des molécules de gaz jusqu'à ce que la rupture des liaisons moléculaires crée des ions produits. Cette technique permet aux utilisateurs de concevoir des expériences qui mesurent m/z des ions pour déterminer la composition des ions parents.

Après le passage par la cellule de collision Q2, les ions entrent dans la région TOF pour une analyse de masse supplémentaire, puis entrent dans le détecteur. Dans le détecteur, les ions créent un courant qui se convertit en une impulsion de tension. Les impulsions de tension sont comptées et le nombre d'impulsions quittant le détecteur est directement proportionnel à la quantité d'ions entrant dans le détecteur. L'instrument surveille ces impulsions de tension et convertit les informations en signal. Le signal représente l'intensité de l'ion pour une valeur spécifique de m/z et l'instrument affiche cette formation sous forme de spectre de masse.

Manipulation des données

Le logiciel Analyst[®] TF requiert un ordinateur sous système d'exploitation Windows 7 (32-bit). L'ordinateur avec le logiciel du système associé fonctionne avec le contrôleur système et le micrologiciel correspondant pour contrôler le système et l'acquisition de données. Pendant le fonctionnement du système, les données acquises sont envoyées au logiciel pour être affichées sous forme de spectres de masse complets, d'intensités d'ions multiples ou simples par rapport au temps ou en courant ionique total par rapport au temps.

Instructions d'utilisation : Matériel

4

Démarrer le système

Remarque : Avant de faire fonctionner l'instrument, consultez les informations de sécurité dans les [Précautions et limitations de fonctionnement](#).



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique : vérifier que le spectromètre de masse peut être complètement débranché de l'alimentation secteur en cas d'urgence. Ne pas bloquer la prise de sortie de l'alimentation secteur.

Avant de mettre le système sous tension, assurez-vous que les exigences spécifiées dans le *Guide d'installation du site* sont remplies. Ce guide comprend des informations sur l'alimentation secteur et les connexions, l'évacuation de la source, l'air comprimé, l'azote, la pompe primaire, la ventilation, l'extraction et le nettoyage du site.

Suivez les procédures suivantes pour mettre en marche ou arrêter le système. Pour procéder à l'entretien du système, il faut en général l'arrêter.

1. S'assurer que la bouteille de vidange de 4 L est branchée au raccord de la **ligne d'évacuation des déchets** à l'arrière de l'instrument et au système de ventilation du laboratoire.
2. S'assurer que le câble d'alimentation secteur est branché au spectromètre de masse.
3. S'assurer que le câble d'alimentation du spectromètre de masse et de la pompe primaire est branché sur l'alimentation 200-240 V.
4. S'assurer que trois câbles sont branchés à la fois au spectromètre de masse et à l'ordinateur : un câble série (RS-232), un câble USB et un câble InfiniBand. Voir [Figure 3-1](#).
5. Mettre la pompe primaire sous tension.
6. Retirer le capot de l'interrupteur du disjoncteur sur le côté gauche du spectromètre de masse, vu de face et actionner le disjoncteur. Voir [Figure 3-1](#).
7. Remettre le capot de l'interrupteur du disjoncteur et serrer à fond la vis qui maintient ce capot.
8. Mettre l'instrument sous tension en actionnant l'interrupteur. Voir [Figure 3-1](#).
9. Allumer l'ordinateur s'il a été désactivé.
10. Démarrez le logiciel.

Désactivation du système

1. Terminer ou arrêter toutes les analyses en cours éventuelles. Voir [Arrêter l'acquisition d'échantillons](#).

Attention : Risque d'endommagement du système : arrêter le débit de l'échantillon avant d'arrêter le système.

2. Arrêter le débit de l'échantillon vers le spectromètre de masse et débrancher les lignes d'échantillons du périphérique à la source d'ions. Laisser la source branchée pour assurer un bon refroidissement.
3. Désactiver le profil matériel, s'il est activé, et fermer le logiciel.
4. Mettre l'instrument hors tension en actionnant l'interrupteur du côté gauche de l'instrument. Voir [Figure 3-1](#).
5. Mettre la pompe primaire hors tension.
6. Attendre 15 à 20 minutes pour ventiler complètement le système.
7. Retirer le capot de l'interrupteur du disjoncteur sur le côté gauche du spectromètre de masse, vu de face et actionner le disjoncteur. Voir [Figure 3-1](#)
8. Remettre le capot de l'interrupteur du disjoncteur et serrer à fond la vis qui maintient ce capot.

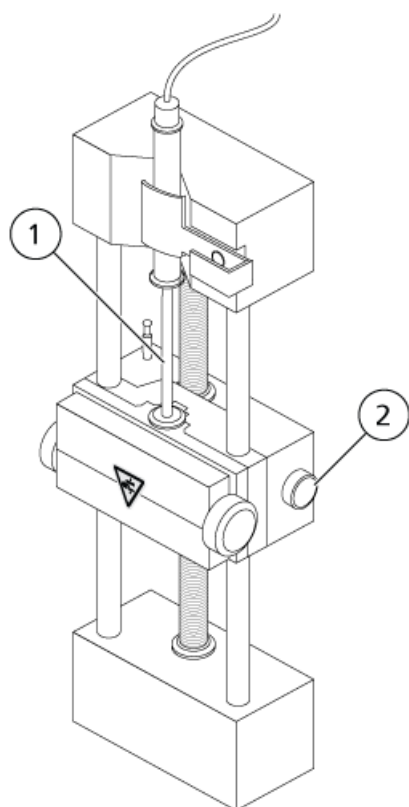
Ajuster la Integrated Syringe Pump Position (position de la pompe à seringue intégrée)



AVERTISSEMENT ! Danger de perforation : prendre des précautions lors de l'insertion de la seringue. L'extrémité de la seringue est extrêmement acérée.

1. Appuyer sur le bouton **Release** sur le côté droit de la pompe à seringue pour abaisser la base et insérer la seringue. Voir [Figure 4-1](#).
2. S'assurer que l'extrémité de la seringue affleure la base et que l'axe de la seringue reste dans l'encoche.

Figure 4-1 Descente de la seringue



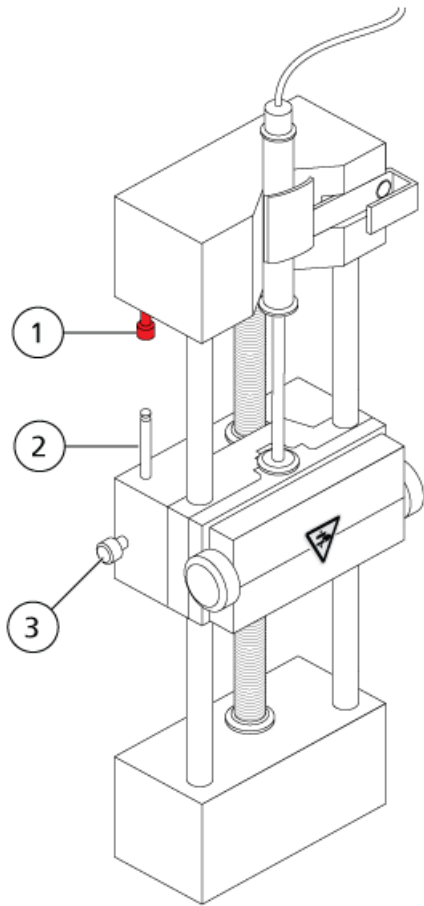
Élément	Description
1	Le piston de la seringue
2	Relâcher le bouton. Appuyer pour augmenter ou abaisser le niveau de la base.



AVERTISSEMENT ! Risque de blessure corporelle : s'assurer que la seringue est correctement installée dans la pompe à seringue et que la pompe à seringue automatique est réglée correctement pour éviter d'endommager ou de casser la seringue en verre.

3. Régler la tringle de façon à ce qu'elle déclenche l'arrêt automatique de la seringue avant que le piston n'arrive au fond de la seringue en verre. Voir [Figure 4-2](#).

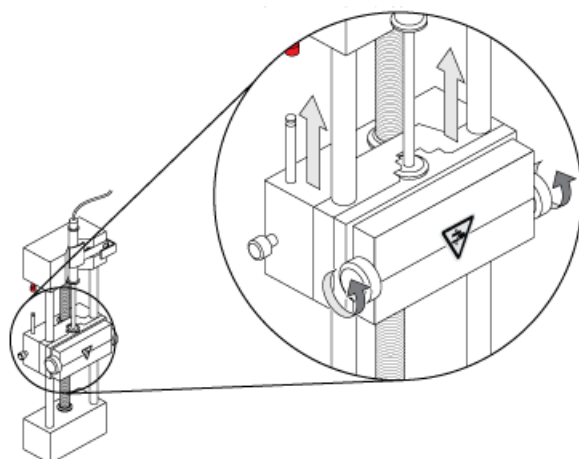
Figure 4-2 Arrêt automatique de la seringue.



Élément	Description
1	Arrêt automatique de la seringue. Après que la tringle bute sur l'arrêt automatique de la seringue, la pompe à seringue s'arrête.
2	Tringle. Régler la hauteur pour empêcher le piston de la seringue de heurter la seringue lors de l'introduction de l'échantillon.
3	Vis de blocage de la tringle. Serrer la vis après que la hauteur de la tringle a été réglée.

4. Tourner les vis latérales comme illustré pour assurer la seringue [Figure 4-3](#).

Figure 4-3 Vis de la pompe à seringue



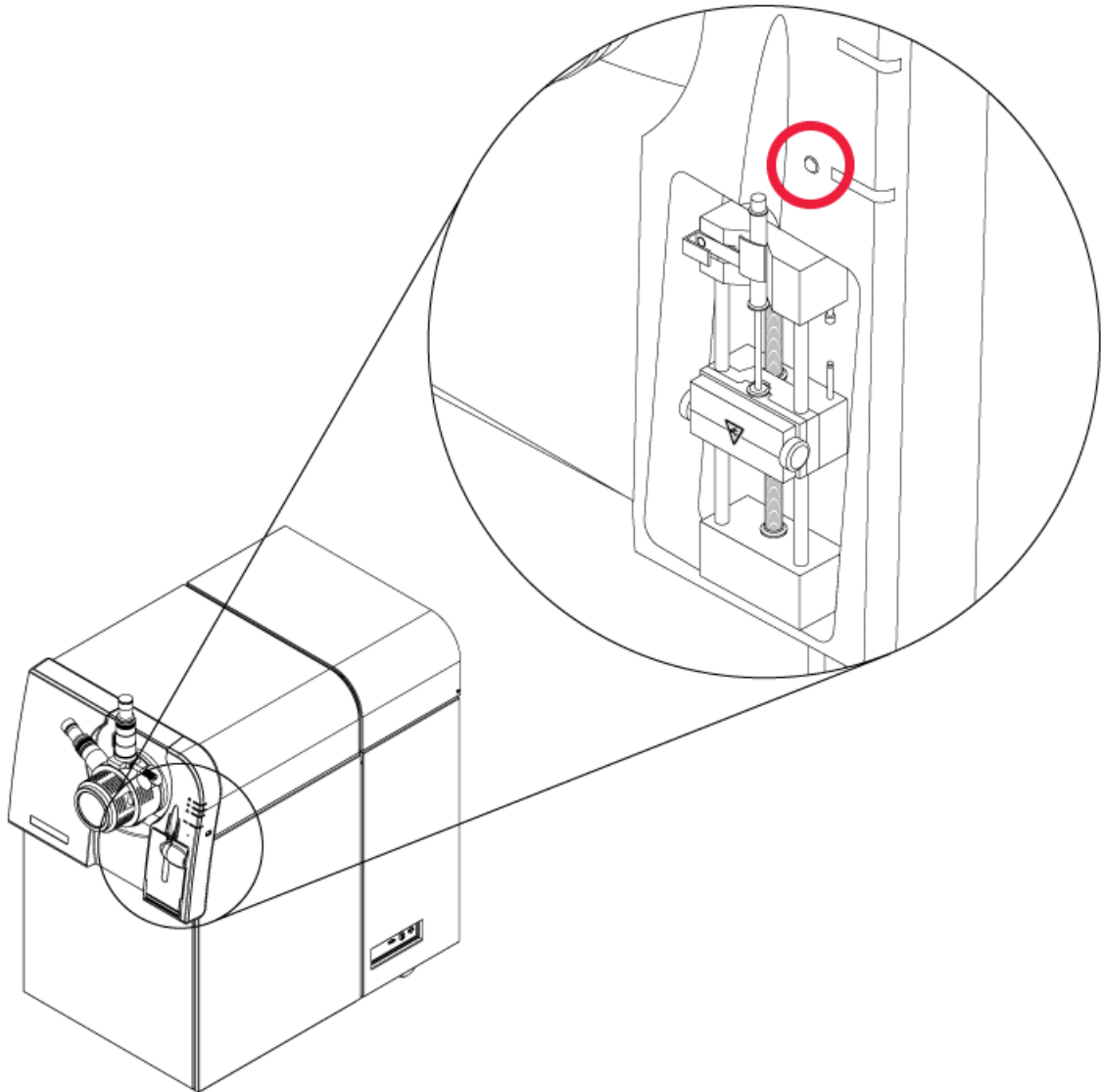
5. Dans la barre de navigation du logiciel Analyst[®] TF, double cliquez sur **Manual Tuning** (Réglage manuel).
6. Cliquez sur **Start Syringe** (Démarrer la seringue).
7. Pour arrêter la pompe à seringue, cliquez sur **Stop Syringe** (Arrêter la seringue).

Réinitialiser la pompe à seringue

Si la communication entre le logiciel Analyst[®] TF et la pompe à seringue est interrompue, réinitialisez la pompe à seringue.

- Utilisez un trombone ou un outil similaire pour appuyer sur le bouton de réinitialisation illustré dans la [Figure 4-4](#).

Figure 4-4 Bouton de réinitialisation



Instructions d'utilisation : flux de travail des échantillons

5

Tableau 5-1 Configuration de l'instrument

Étape	Pour ce faire...	Chercher l'information dans...	Qu'est ce que cela fait ?
1	Créer un profil matériel.	<i>Créer un profil matériel</i>	Chaque profil d'équipement doit inclure un spectromètre de masse. Seuls les périphériques inclus dans le profil matériel peuvent être utilisés lors de la création des méthodes d'acquisition.
2	Créer des projets pour stocker les données.	<i>Créer des projets et des sous-projets</i>	Avant de commencer une expérience, décidez de l'emplacement où stocker les fichiers liés à l'expérience. L'utilisation des projets et des sous-projets simplifie la gestion des données et facilite la comparaison des résultats.
3	Optimiser le spectromètre de masse.	<i>Optimiser le spectromètre de masse</i>	Il s'agit du processus d'optimisation de la résolution et des paramètres du spectromètre de masse, et de son étalonnage pour améliorer la sensibilité et la performance de l'appareil.

Tableau 5-2 Flux de travail des acquisitions d'échantillons

Étape	Pour ce faire...	Chercher l'information dans...	Qu'est ce que cela fait ?
1	Créer des projets pour stocker les données.	<i>Créer des projets et des sous-projets</i>	Avant de commencer une expérience, décidez de l'emplacement où stocker les fichiers liés à l'expérience. L'utilisation des projets et des sous-projets simplifie la gestion des données et facilite la comparaison des résultats.
2	Créer une méthode d'acquisition.	<i>Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition</i>	Pour analyser les échantillons, créez une méthode d'acquisition pour le spectromètre de masse et tout appareil de chromatographie en phase liquide (LC). Une méthode d'acquisition indique les périphériques à utiliser, le moment pour les utiliser pour l'acquisition des données ainsi que les paramètres associés.
3	Créer et soumettre un lot.	<i>Ajouter des ensembles et des échantillons à un lot et Soumettre un échantillon ou un groupe d'échantillons</i>	Après avoir créé une méthode d'acquisition, traitez les échantillons en créant un lot acquisition et en l'envoyant dans la file d'attente d'acquisition.

Tableau 5-2 Flux de travail des acquisitions d'échantillons (suite)

Étape	Pour ce faire...	Chercher l'information dans...	Qu'est ce que cela fait ?
4	Acquérir les données.	<i>Acquérir les données</i>	L'exécution des échantillons implique de gérer la file d'attente d'acquisition et de surveiller l'état de l'instrument et du périphérique. Pour envoyer des échantillons et acquérir des données, utilisez le gestionnaire de file d'attente. Le gestionnaire de file d'attente affiche l'état de la file d'attente, des lots et des échantillons, tout en facilitant la gestion des échantillons et des lots dans la file d'attente.
5	Analyser les données en mode Explore (Exploration). —OU—	<i>Instructions d'utilisation : analyser et traiter des données</i>	En mode Explore, pour visualiser et traiter les données acquises, il existe de nombreux outils. Il est possible de personnaliser les graphiques avec des étiquettes et des légendes de pics, d'afficher des graphiques de contour et d'enregistrer les spectres dans la bibliothèque.
6	Analyser les données et imprimer les rapports à l'aide du logiciel Companion.	logiciel MultiQuant™ /logicielPeakView®	Utiliser les logiciels MultiQuant ou PeakView pour analyser les données. Pour de plus amples informations, reportez-vous à la documentation fournie avec le logiciel.

Tableau 5-3 Flux de travaux de l'utilisateur expérimenté

Étape	Pour ce faire...	Chercher l'information dans...
1	Procéder à l'étalonnage de masse de l'instrument.	Le tutoriel de l'étalonnage de masse se trouve dans Démarrer > Programmes > AB SCIEX > Analyst® TF > Guides des logiciels.
2	Optimiser le spectromètre de masse.	Le tutoriel d'optimisation manuelle se trouve dans Démarrer > Programmes > AB SCIEX > Analyst® TF > Guides des logiciels.

Profils de matériel

Un profil de matériel indique au logiciel la manière dont le spectromètre de masse et les périphériques sont configurés et connectés à l'ordinateur.

Chaque profil d'équipement doit inclure un spectromètre de masse. Avant de créer une méthode d'acquisition, assurez-vous que tous les périphériques utilisés dans la méthode sont inclus dans le profil matériel. Dans les options de configuration pour le spectromètre de masse, vérifiez que la pompe à seringue est activée si elle doit être utilisée au cours de l'acquisition.

Seuls les périphériques configurés dans le profil matériel actif et sélectionnés dans la boîte de dialogue **Add/Remove Device Method** (Ajouter/supprimer méthode de périphérique) apparaissent sous forme d'icônes dans le volet de navigation **Acquisition Method** (Méthode d'acquisition). Seuls les périphériques inclus dans le profil d'équipement peuvent être utilisés pour créer des méthodes d'acquisition.

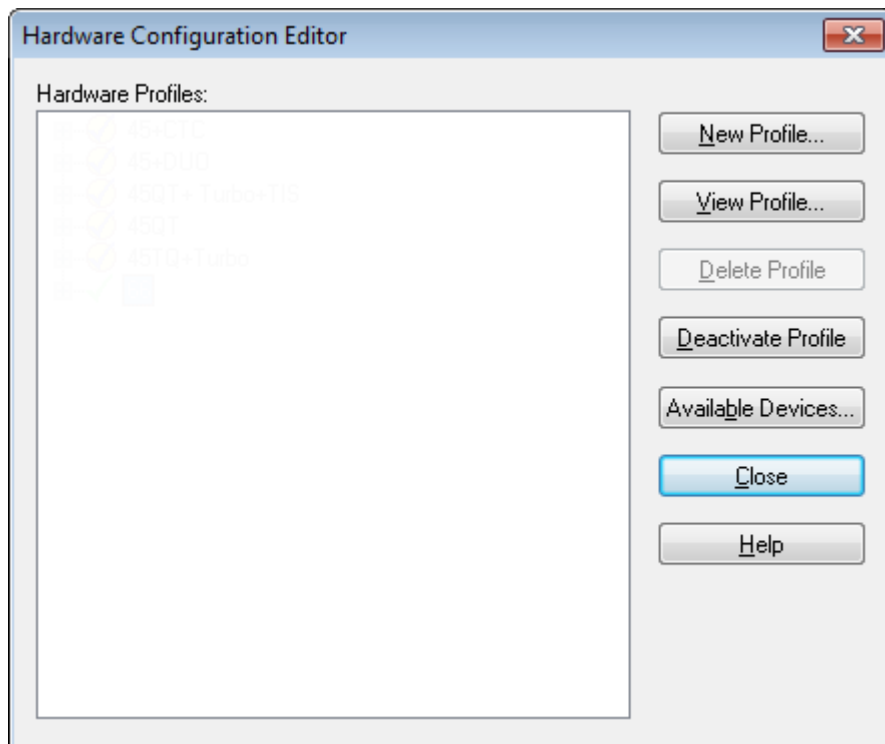
Pour plus d'informations sur la configuration des connexions physiques aux périphériques, consultez le *Peripheral Devices Setup Guide* (Guide d'installation des périphériques). Pour obtenir la liste des périphériques pris en charge, consultez le *Software Installation Guide* Guide d'installation du logiciel Analyst[®] TF.

Créer un profil matériel

L'utilisateur peut créer plusieurs profils d'équipement, mais seul un profil peut être actif à tout moment.

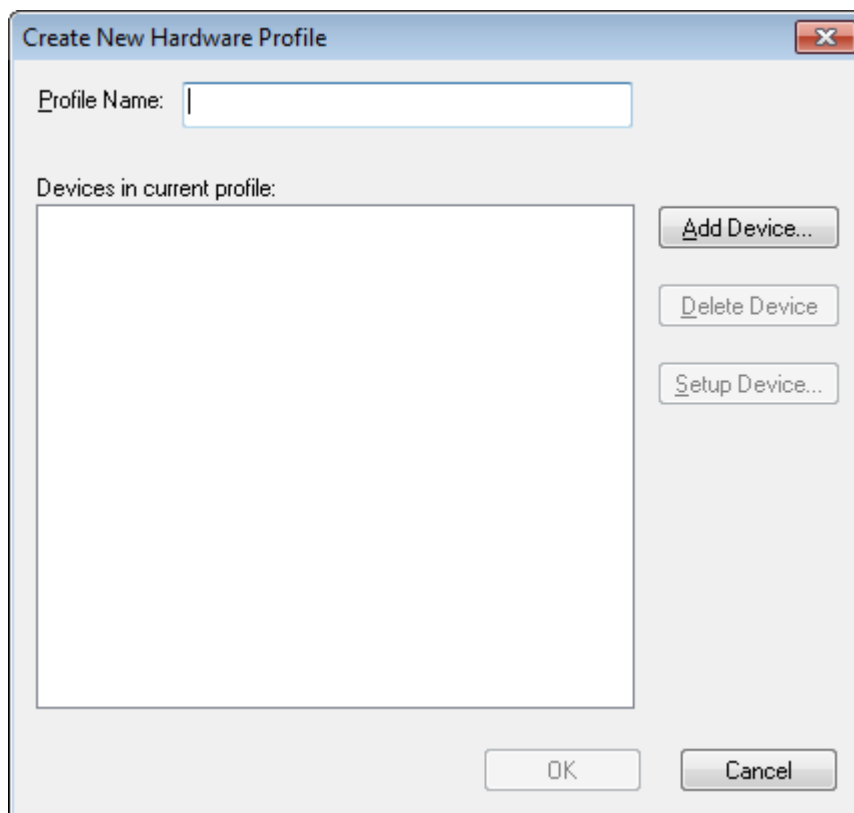
1. Dans la barre de navigation, sous **Configure** (Configurer), double-cliquez sur **Hardware Configuration** (Configuration du matériel).

Figure 6-1 Boîte de dialogue Hardware Configuration Editor (Éditeur de configuration du matériel)



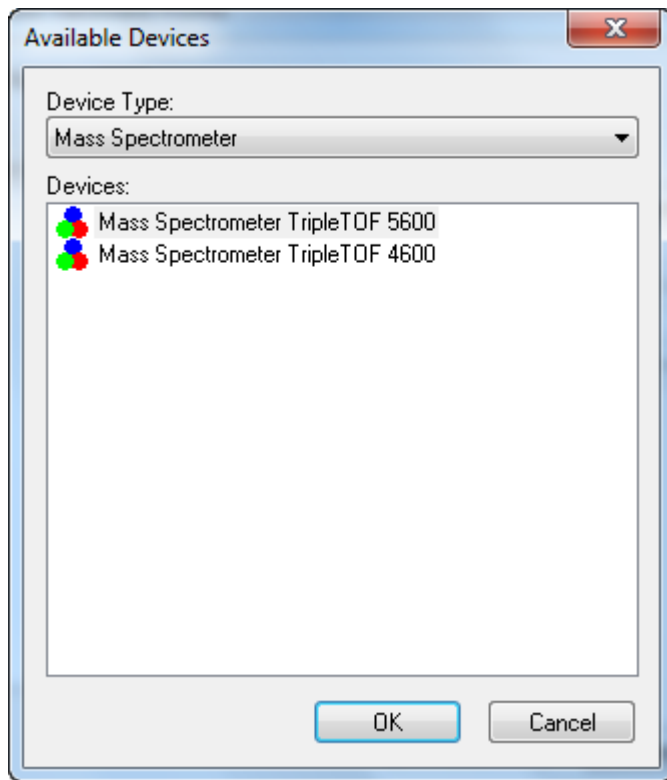
2. Cliquez sur **New Profile** (Nouveau profil).

Figure 6-2 Boîte de dialogue New Hardware Profile (Créer un nouveau profil matériel)



3. Saisissez un nom dans le champ **Profile Name** (Nom du profil).
4. Cliquez sur **Add Device (Ajouter périphériques)**.
Dans la boîte de dialogue **Available Devices** (Périphériques disponibles) dans le champ **Device Type** (Type de périphérique), la valeur prédéfinie est **Mass Spectrometer** (Spectromètre de masse).
5. Sélectionnez le spectromètre de masse dans la liste **Devices** (Périphériques).
6. Cliquez sur **OK**.
7. Sélectionnez le spectromètre de masse dans la liste **Devices in current profile** (Périphériques dans le profil actuel).

Figure 6-3 Boîte de dialogue Available Devices (Périphériques disponibles)

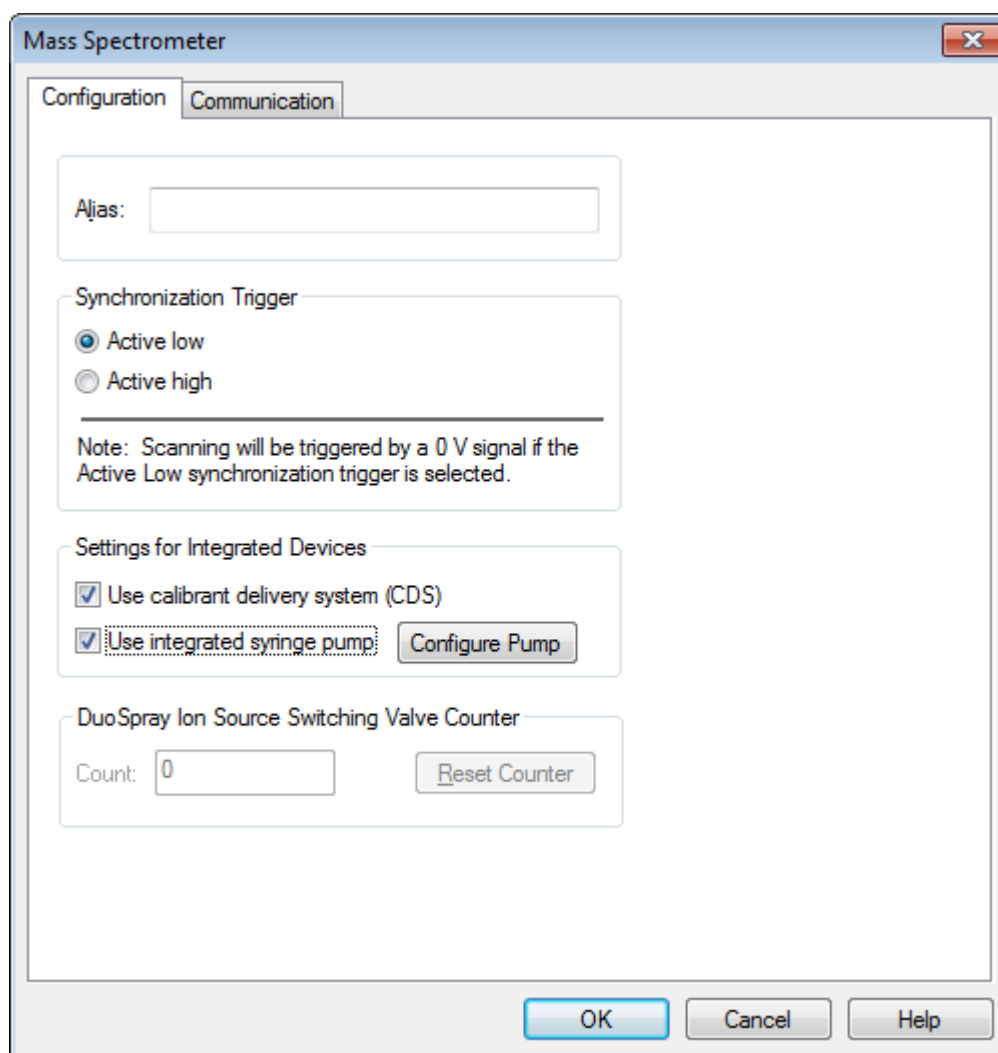


8. Cliquez sur **Setup Devices (Régler périphériques)**.
9. (Facultatif) Pour configurer le spectromètre de masse pour la pompe à seringue intégrée, dans l'onglet **Configuration**, sélectionnez la case **Use integrated syringe pump** (Utiliser la pompe à seringue intégrée).



AVERTISSEMENT ! Risque de blessure corporelle : s'assurer que la seringue est correctement installée dans la pompe à seringue et que la pompe à seringue automatique est réglée correctement pour éviter d'endommager ou de casser la seringue en verre.

Figure 6-4 Onglet Configuration avec CDS et pompe à seringue configurés



10. Sélectionnez des fonctions supplémentaires dans les onglets **Configuration** et **Communication**, selon les besoins.
11. Cliquez sur **OK** pour revenir à **Création d'un nouveau profil d'équipement**.
12. Ajoutez et configurez chaque périphérique utilisé avec le spectromètre de masse.
13. Cliquez sur **OK** dans la boîte de dialogue **Create New Hardware Profile** (Créer un nouveau profil matériel).
14. Cliquez sur le profil matériel dans **Hardware Configuration Editor** (Éditeur de configuration du matériel).
15. Cliquez sur **Activer le profil**.

La case devient verte. Si un x rouge s'affiche, alors il y a un problème avec l'activation du profil d'équipement.

Conseil ! Il n'est pas nécessaire de désactiver un profil matériel avant d'en activer un autre. Cliquez sur un profil d'équipement, puis cliquez sur **Activate Profile (Activer le profil)**. L'autre profil est automatiquement désactivé.

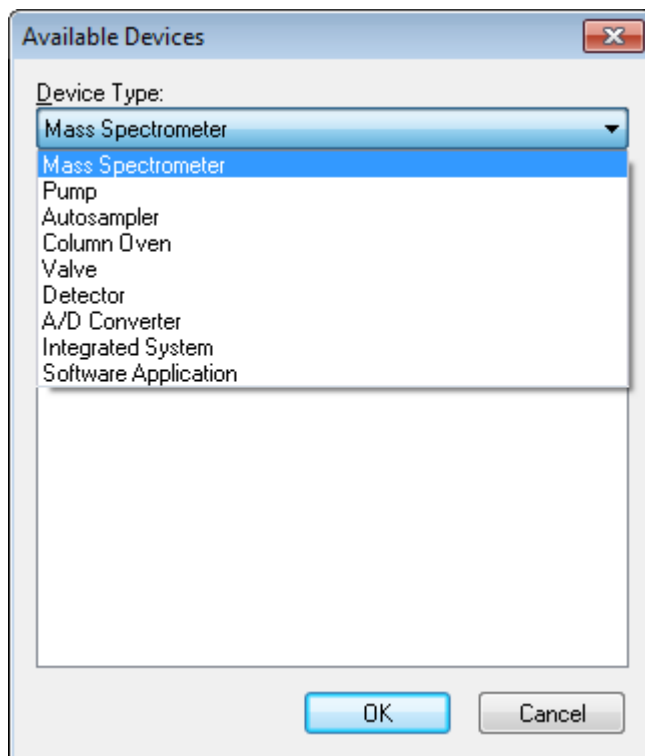
16. Cliquez sur **Close (Fermer)**.

Ajouter des périphériques à un profil d'équipement

Les périphériques doivent être configurés de façon autoriser le logiciel à communiquer avec eux. Lorsque le logiciel est installé, le pilote requis pour chaque périphérique est également installé. Une fois que les appareils sont connectés physiquement à l'ordinateur, configurer le périphérique.

1. Ouvrez le **Hardware Configuration Editor** (Éditeur de configuration du matériel).
2. Dans **Hardware Profiles (Profil d'équipement)**, désactiver le profil d'équipement.
3. Cliquez sur **Edit Profile (Éditer profil)**.
4. Cliquez sur **Add Device (Ajouter périphériques)**.
5. Dans **Available Devices (Périphériques disponibles)**, dans **Device Type (Type de périphérique)**, sélectionnez le périphérique.

Figure 6-5 Boîte de dialogue Available Devices (Périphériques disponibles)



6. Cliquez sur **OK**.

7. Sélectionnez le périphérique dans la liste **Devices in current profile** (Périphériques dans le profil actuel).
8. Cliquez sur **Setup Devices (Régler périphériques)**.
Une boîte de dialogue contenant les valeurs de configuration de périphérique s'ouvre.
9. (Facultatif) Dans l'onglet **Communication**, dans le champ **Alias**, saisissez un nom ou un autre identifiant.

Remarque : Pour les périphériques utilisant une communication série, s'assurer que le port série sélectionné corresponde à celui auquel le périphérique est physiquement connecté.

Remarque : Le champ **Alias** peut aussi être appelé boîte du **Nom** et peut figurer sous un autre onglet sous **Alias**.

- Si le périphérique utilise un **port série** comme interface de communication, dans la liste **COM Port Number** (Numéro de port COM), sélectionnez le port COM auquel le périphérique est connecté.
- Si le périphérique utilise **Ethernet** comme interface de communication, saisissez l'**adresse IP** attribuée au périphérique par l'administrateur ou utilisez le **nom d'hôte** correspondant à l'adresse.
- Si le périphérique utilise une **carte GPIB** comme interface de communication, ne modifiez pas les paramètres de la carte GPIB.

Les valeurs prédéfinies restantes pour le périphérique sont probablement appropriées. Ne les modifiez pas. Pour plus d'informations sur les onglets **Configuration** et **Communication**, consultez l'aide.

10. Pour restaurer les valeurs prédéfinies des périphériques, dans l'onglet **Communication**, cliquez sur **Set Defaults**.
11. Pour enregistrer les modifications, cliquez sur **OK (Accepter)**.
12. Répétez les étapes 4 à 11 pour chaque périphérique.
13. Cliquez sur **OK** dans la boîte de dialogue **Create New Hardware Profile** (Créer un nouveau profil matériel).
14. Pour activer un profil d'équipement, dans l'**éditeur de configuration d'équipement**, cliquez sur le profil d'équipement.
15. Cliquez sur **Activer le profil**.

La case devient verte. Si un x rouge s'affiche, alors il y a un problème avec l'activation du profil d'équipement. Pour plus d'informations, se reporter à [Dépannage des problèmes liés à l'activation du profil matériel à la page 42](#).

Conseil ! Il n'est pas nécessaire de désactiver le profil matériel actif avant d'en activer un autre. Cliquez sur un profil matériel inactif, puis cliquez sur **Activate Profile** (Activer profil). L'autre profil est automatiquement désactivé.

16. Cliquez sur **Close (Fermer)**.

Dépannage des problèmes liés à l'activation du profil matériel

Si un profil matériel ne parvient pas à devenir actif, une boîte de dialogue s'ouvre, indiquant quel appareil du profil est à l'origine de la panne. Un profil peut être défectueux en raison d'une erreur de communication.

1. Lire le message d'erreur correspondant. Selon le type de message, il peut y avoir un problème avec un périphérique ou la configuration de la communication.
2. Vérifier que le périphérique est sous tension et actif.
3. Vérifiez que le port COM affecté au périphérique est correct.
4. Vérifiez que les paramètres de communication avec le périphérique (par exemple, les réglages du micro-interrupteur) sont correctement définis et correspondent aux paramètres de l'onglet **Communication**.
5. Mettre le périphérique hors tension.
6. Attendre 10 secondes.
7. Mettre le périphérique sous tension.

Patiencez jusqu'à ce que tous les périphériques soient mis sous tension avant d'essayer d'activer le nouveau profil d'équipement. Certains périphériques nécessitent 30 secondes ou plus pour réaliser les opérations de mise sous tension.

8. Activer le profil d'équipement.
9. Si le problème persiste, supprimez le profil qui pose problème, puis créez-en un nouveau.
10. Si le problème persiste, contactez l'assistance technique.

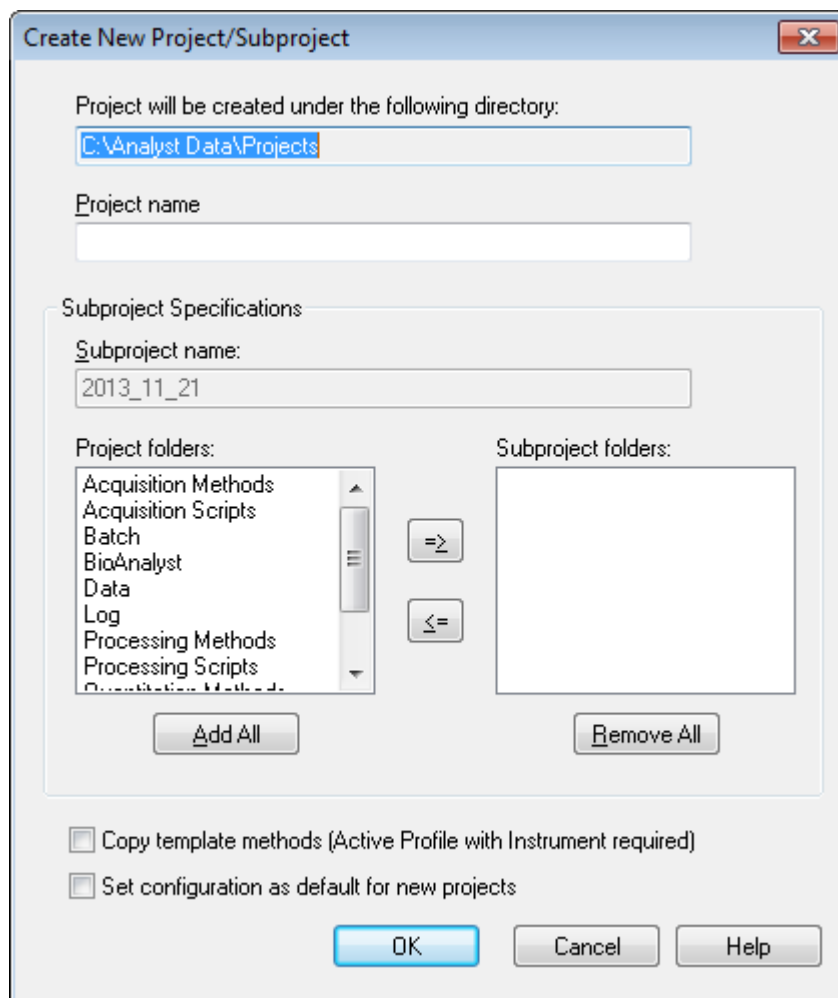
Projets et sous-projets

Créer des projets et des sous-projets

Pour utiliser une structure de sous-projet dans le cadre d'un projet, créer la structure de sous-projet lorsque le projet est créé.

1. Cliquez sur Tools (**Outils**) Project > (**Projet**) > Create Project (Créer un projet).

Figure 6-6 Boîte de dialogue Create New Project/Subproject (Créer un nouveau projet/Sous-projet)



2. Saisissez un nom de projet dans le champ **Project name** (Nom de projet).
3. (Facultatif) Pour utiliser les sous-projets, sélectionnez les dossiers concernés puis utilisez les flèches pour les déplacer dans **Dossier des sous-projets**.
4. (Si vous utilisez des sous-projets) Saisissez un nom pour le premier sous-projet dans le champ **Subproject name** (Nom du sous-projet), ou utilisez la date existante.
5. (Facultatif) Pour utiliser cette organisation de dossiers de projet et de sous-projet pour tous les nouveaux projets, cochez la case **Set configuration as default for new projects** (Définir cette configuration comme choix par défaut pour de nouveaux projets).

Tous les nouveaux projets sont créés avec ce dossier configuration.

6. Cliquez sur **OK**.

Créer des sous-projets

Les sous-projets ne peuvent être créés que dans le cadre d'un projet avec une structure de sous-projet.

1. Sur la barre d'outils **Project** (Projet), dans la liste **Project** (Projet), sélectionnez le projet.
2. Cliquez sur **Tools** (Outils) > **Project** (Projet) **Create SubProject (Créer un sous-projet)**.
3. Dans la case **Subproject name** (Nom de sous-projet), entrez un nom pour le sous-projet ou utilisez la date existante.
4. Cliquez sur **OK**.

Copier des sous-projets

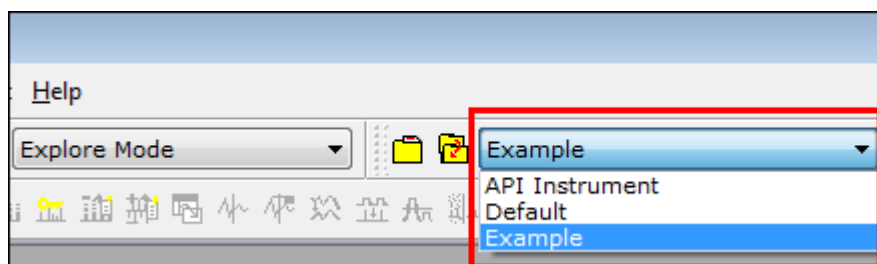
Un sous-projet peut être copié à partir d'un autre projet ayant des sous-projets existants. Si les sous-projets copiés contiennent des dossiers qui existent aussi dans le dossier du projet, alors le logiciel utilise les dossiers du projet.

1. Cliquez sur **Tools (outils) > Project (projet) Copy Subproject** (copie d'un sous-projet).
2. Cliquez sur **Browse** (parcourir) pour naviguer jusqu'à la source du sous-projet dans la boîte de dialogue **Copy Subproject** (copie d'un sous-projet).
3. Cliquez sur **OK**.
4. Sélectionnez le sous-projet de la liste **Source Subproject** (sous-projet source).
5. Cliquez sur **Parcourir** pour aller à destination du sous-projet
6. Tapez le nom dans le champ **Target Subproject** (sous-projet cible).
7. Cliquez sur **OK**.
8. Effectuer l'une des opérations suivantes :
 - Pour copier tous les dossiers et fichiers de **Sous-projet source** dans **Destination sous-projet**, sélectionnez en cochant **Copier contenu**.
 - Pour copier uniquement les dossiers dans la même structure dans **Destination sous-projet**, s'assurer que **Copier contenu** est effacé.
9. Cliquez sur **Copier**.

Basculer entre les projets et sous-projets

- Sur la barre d'outils du logiciel, à partir de la liste de projets, cliquez sur le sous-projet ou le projet demandé.

Figure 6-7 Liste de projets



La liste de projets de ce croquis affiche les dossiers **API Instrument** (instrument API), **Default** (défaut) et **Example** (exemple).

Dossiers projet installé

Trois dossiers de projet sont installés avec le logiciel : **API Instrument** (Instrument API), **Default** (Par défaut) et **Example** (Exemple).

Dossier API Instrument

Le dossier **API Instrument** (Instrument API) est unique et très important pour le bon fonctionnement du spectromètre de masse. Le dossier **API Instrument** (Instrument API) contient les informations requises pour le réglage et l'étalonnage du spectromètre de masse. Cette information comprend des fichiers de paramètres de réglage, des fichiers de référence, de données de l'instrumentation qui contiennent des informations sur l'étalonnage et la résolution et les méthodes d'acquisition utilisées pendant la syntonisation automatique. Le dossier **API Instrument** également contient les fichiers de données pour effectuer un **Start** manuel à partir de la commande démarrage plutôt que **Acquire**. Ces fichiers de données sont automatiquement enregistrés dans le dossier **API Instrument** dans le dossier **Tuning Cache** et nommés par la date et l'heure à laquelle ils ont été créés. Le **Tuning Cache** dossier est automatiquement et régulièrement effacé.

Dossier par défaut

Le **Dossier par défaut** contient des dossiers qui sont présents dans de nouveaux projets pour lesquels il sert de modèle.

Dossier Exemple

Le dossier **Exemple** contient des exemples de méthodes et des fichiers de données. Les utilisateurs peuvent s'exercer à travailler avec les modes **Explore** (Quantification) à l'aide des fichiers d'exemple de données

Sauvegardez le dossier API Instrument

Sauvegardez le dossier **API Instrument** (Instrument API) régulièrement et après qu'une maintenance de routine a été effectuée.

- Copiez le dossier **API Instrument** (Instrument API) et collez-le dans un autre emplacement, de préférence dans un autre ordinateur, puis renommez-le. Utilisez la date et le spectromètre de masse de référence s'il y a plus d'un spectromètre de masse lorsque le dossier est nommé. Pour récupérer le projet, renommez le

dossier **API Instrument** (Instrument API) actuel, copiez le dossier sauvegardé dans le dossier **Projects** (Projets), puis changez à nouveau le nom du dossier sauvegardé dans **API Instrument** (Instrument API).

Récupérez le dossier API Instrument (Instrument API)

Sauvegardez le dossier **API Instrument** (Instrument API) régulièrement et après qu'une maintenance de routine a été effectuée.

1. Renommez le dossier **API Instrument (Instrument API)** actuel.
2. Copiez le dossier de sauvegarde dans le dossier **Projects (Projets)**.
3. Changez le nom du dossier de sauvegarde en **API Instrument (Instrument API)**.

Instructions d'utilisation : réglage et étalonnage

7

Matériel nécessaire

- Les solutions de réglage fournies dans le Kit de produits chimiques standard sont livrées avec le système. Si nécessaire, il est possible de commander un nouveau Kit auprès d'AB SCIEX.
- Seringue étanche au gaz (1,0 ml recommandé)
- Tubulure d'échantillonnage PEEK rouge.

Conditions préalables

- La pulvérisation est stable et la solution de réglage est adaptée.

Optimiser le spectromètre de masse

La procédure suivante décrit le contrôle des performances du spectromètre de masse. Pour plus d'informations sur l'utilisation des options de contrôle des performances de l'instrumentation, se reporter à l'aide.

1. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate** (Réglage et étalonnage), double cliquez sur **Manual Tuning** (Réglage manuel).
2. Exécuter un TOF MS ou un type de balayage des ions produits et confirmer qu'il existe un TIC stable et que les pics d'intérêt sont présents dans le spectre.
3. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate** (Réglage et étalonnage), double cliquez sur **Instrument Optimization** (Optimisation de l'instrument).

La boîte de dialogue Instrument Optimization (Optimisation de l'instrument) s'ouvre.

4. Sélectionnez Tuning Solution (Solution d'ajustement). Assurez-vous que la solution d'ajustement respecte le tableau de référence.
5. La case **Verify Performance Only** (vérifier uniquement les performances) est sélectionnée. Cliquez sur **Next**.

Pour cet exemple, maintenir la sélection de cette option. Si le rapport indique que l'instrument a besoin d'un ajustement, exécuter l'optimisation de l'instrument une autre fois et sélectionner un ou plusieurs modes de balayage pour l'optimisation.

6. S'assurer que les paramètres de la source d'ions et de la seringue conviennent.

Remarque : Les utilisateurs peuvent également se servir du CDS pour injecter la solution. S'assurer que la solution d'ajustement se conforme à la configuration dans le tableau de références. Définir le paramètre approprié pour le débit et cliquer ensuite sur injecter CDS.

Remarque : S'assurer que la position de la vanne de l'étalon de calibrage adéquate est bien sélectionnée dans l'Éditeur des tableaux de référence pour le tableau de référence choisi. Le CDS peut sélectionner jusqu'à quatre types différents de positions, de A à D.

7. Cliquez sur **GO (Aller)**.

L'écran **Verifying or Adjusting Performance (Vérification ou ajustement des performances)** s'ouvre. Une fois le processus terminé, l'écran **Results Summary** (Récapitulatif des résultats) s'ouvre. Pour plus d'informations, reportez-vous à l'Aide.

À propos de la boîte de dialogue **Verifying or Adjusting Performance (Vérification ou réglage des performances)**

Le coin supérieur gauche indique la partie de l'instrument qui est en train d'être réglée.

Le graphique **Current Spectrum** (Spectre actuel) affiche le spectre du balayage en cours, le balayage optimal sélectionné par le logiciel ou le balayage à la valeur paramétrée actuelle quand les résultats du logiciel sont visualisés en mode interactif.

Les **Instrument Optimization Decision Plots** (Tracés des décisions d'optimisation de l'instrument), en haut à droite du graphique, affichent de manière dynamique les courbes d'intensité par rapport aux courbes de tension des paramètres actuellement en cours d'optimisation.

Récapitulatif des résultats

Le **Results Summary** (récapitulatif des résultats) est un enregistrement de toutes les modifications de paramètres sur l'instrument faites par l'assistant **Instrument Optimization** (optimisation de l'instrument).

Figure 7-1 Récapitulatif des résultats

Results Summary

2014-02-25 at 12:44
 Logged in as

Instrument: TripleTOF 4600
 Model #:
 Serial #:

Instrument Optimization Ver: 2.9188.40

TOFMS

Mass (Da)	Found At (Da)	Height (cps)	Area	Resolution	Error (ppm)
132.9049	132.9057	5.09E+02	3.62E+03	15 061	6.0
829.5393	829.5417	1.28E+02	1.84E+03	18 447	2.8

Product Ion

Mass (Da)	Found At (Da)	Height (cps)	Area	Resolution	Error (ppm)
185.1285	185.1290	1.48E+02	1.19E+03	15 311	2.9
215.1390	215.1387	9.90E+01	7.81E+02	17 509	1.2
298.2125	298.2131	4.47E+02	4.32E+03	16 496	2.1
381.2496	381.2505	4.49E+02	5.15E+03	16 041	2.3
494.3337	494.3346	1.01E+03	1.18E+04	17 758	1.7
607.4178	607.4187	9.10E+02	1.19E+04	17 589	1.4
625.4283	625.4295	5.13E+02	6.61E+03	17 837	2.0

Buttons: Help, Next->, Finished

Instrument: TripleTOF 4600 Instrument Optimization Ver: 2.9188.40

Le **Results Summary** (récapitulatif des résultats) est enregistré comme un document dans le dossier suivant : **\Analyst Data\Projects\API Instrument\Data\Instrument Optimisation** (\Analyse des données\Projet\Instrument API\Données\Optimisation instrument). Vous pouvez imprimer le **Results Summary** (récapitulatif des résultats) ou ouvrir un **Results Summary** (récapitulatif des résultats) précédemment sauvegardé.

Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

8

Utilisez la fonction d'acquisition SWATH™, qui se trouve à la fois dans le **Method Wizard** (Assistant de méthode) ou de l'**Acquisition Method Editor** (Éditeur de méthode d'acquisition) pour créer des méthodes d'acquisition SWATH. De plus, SWATH les méthodes à largeur de fenêtre variable peuvent être créées à l'aide du **Method Wizard** (Assistant de méthode) ou de l'**Acquisition Method Editor (Éditeur de méthode d'acquisition)**. Pour de plus amples informations, consultez le *Guide d'utilisation avancé*, l'aide Analyst® TF et l'aide de **Method Wizard** (Assistant de méthode).

Il est recommandé que seuls les utilisateurs compétents en développement de méthode créent ou modifient les méthodes d'acquisition et de quantification. Voir la section À propos des personnes et des rôles dans le *Guide des directeurs de laboratoire* pour plus d'informations sur les rôles et la sécurité.

Créer une méthode d'acquisition à l'aide de l'assistant de méthode

La méthode d'acquisition peut être enregistrée dans un projet existant.

Conseil ! Pour copier les méthodes d'échantillons du **Method Wizard** (Assistant de méthode) dans le dossier **Acquisition Methods** (Éditeur de méthode d'acquisition) du dossier de projets, cochez la case **Copy method templates** (Copier méthodes d'échantillons) dans le dialogue **Create New Project or Subproject** (Créer nouveau projet ou sous-projet). Pour ouvrir cette boîte de dialogue, cliquez sur **Tools > Project > Create Project or Create Subproject** (Outils > Projet > Créer projet ou sous-projet).

1. Veillez à ce que le profil matériel contenant le spectromètre de masse et les périphériques soit actif.
2. Veillez à sélectionner le projet approprié sur la barre d'outils du logiciel.
3. Dans la barre de navigation, sous le mode **Acquire** (Acquérir), double cliquez sur **Method Wizard** (Assistant de méthode).

Le **Method Wizard** (Assistant de méthode) s'ouvre.

Conseil ! Déplacez le curseur sur l'interface pour afficher les conseils sur les outils et les procédures associées.

4. Sélectionnez **TOF MS (+)** dans la liste **Choose MS Method** (Choisir la méthode MS).
5. Sélectionnez la méthode LC créée pour le profil matériel dans la liste **Choose LC Method** (Choisir la méthode LC).
6. Saisissez un nom pour la méthode, puis appuyez sur **Enter** (Entrée).
7. Cliquez sur **Next**.

8. Dans l'onglet **Ion Source Parameters** (Paramètres de la source d'ions), vérifiez les valeurs, modifiez-les si nécessaire, puis cliquez sur **Next** (Suivant).
9. Dans l'onglet **TOF MS**, vérifiez les valeurs, modifiez-les si nécessaire, puis cliquez sur **Finish** (Terminer).

Conseil ! Le cas échéant, les utilisateurs peuvent modifier ultérieurement la méthode d'acquisition à l'aide de l'**Acquisition Method Editor** (Éditeur de méthode d'acquisition). En mode **Acquire** (Acquérir), cliquez sur **File** (Fichier) > **Open** (Ouvrir), puis ouvrez la méthode créée à l'aide du **Method Wizard** (Assistant de méthode d'acquisition).

Étapes suivantes : la méthode d'acquisition nouvellement créée peut désormais être utilisée pour acquérir des données pour une analyse préliminaire.

Créer une méthode d'acquisition en utilisant l'Éditeur de méthode d'acquisition

Conseil ! Si vous créez un nouveau fichier de méthode d'acquisition à partir d'un fichier existant, toutes ou certaines des méthodes de périphériques peuvent être utilisées dans la méthode d'acquisition.

Seuls les périphériques configurés dans le profil d'équipement actif apparaissent sur le panneau **Acquisition method** (Méthode d'acquisition). Tous périphériques ajoutés au profil d'équipement doivent également l'être aux méthodes d'acquisition existantes. Pour plus d'informations sur les périphériques, reportez-vous au *Guide d'installation des périphériques*.

1. Vérifiez que le profil d'équipement contenant le spectromètre de masse et les périphériques sont activés.
2. Sur la barre de Navigation, sous **Acquire**, double cliquez sur **Build Acquisition Method**.
3. Dans l'onglet **Acquisition Method Properties** (Propriétés de la méthode d'acquisition), sélectionnez **Synchronisation Mode** (Mode de synchronisation).
4. (Facultatif) Sélectionnez la case à cocher **Auto-Equilibration** (Équilibrage automatique), puis tapez le temps d'équilibrage requis, en minutes.
5. Dans le panneau **Acquisition method** (Méthode d'acquisition), cliquez sur l'icône **Mass Spec**.
6. Dans l'onglet **MS**, sélectionnez **Scan type** (Type de balayage).
7. Tapez les valeurs dans les champs prévus. Reportez-vous à [Paramètres à la page 54](#).
8. Dans l'onglet **Advanced MS** (MS avancé), tapez les valeurs dans les champs prévus.
9. Sous l'onglet **MS**, cliquez sur **Edit Parameters**.
10. Dans l'onglet **Source/Gas** (source/gaz), des valeurs spécifiques dans les champs sont requises.
11. Dans l'onglet **Compound** (composé), des valeurs spécifiques dans les champs sont requises, puis cliquez sur **OK**.
12. Cliquez sur l'icône d'un périphérique, puis sélectionnez les paramètres pour ce périphérique.
13. Ajouter d'autres périodes et expériences. Voir [Ajouter une expérience à la page 52](#) et [Ajouter une période à la page 52](#).

14. Cliquez sur **File** (fichier) > **Save** (sauvegarder).

Ajouter une expérience

1. Cliquez avec le bouton droit sur la période, puis cliquez sur **Add Experiment (Ajouter expérience)**.

Une expérience est ajoutée en dessous de la dernière expérience de la période.

Remarque : Une expérience ne peut pas être ajoutée entre des expériences ou des périodes. Les utilisateurs ne peuvent ajouter d'expérience qu'à la fin de la période.

2. Sélectionner les paramètres correspondant à l'appareil ou à l'instrument dans le volet **Acquisition Method Editor (Éditeur de la méthode d'acquisition)**

Remarque : Les utilisateurs ne peuvent pas utiliser de périodes multiples dans une expérience IDA.

Ajouter une période

- Dans le panneau **Acquisition Method (Méthode d'acquisition)**, cliquez avec le bouton droit sur l'icône **Masse Spec**, puis cliquez sur **Add Period (Ajouter période)**.

Une période est ajoutée sous la dernière période créée.

Remarque : Vous ne pouvez pas utiliser de périodes multiples dans une expérience IDA.

Copier une expérience dans une période

1. Ouvrir une méthode à périodes multiples.

2. Dans le volet **Acquisition Method (Méthode d'acquisition)**, appuyez sur **Ctrl**, puis faites glisser l'expérience vers la période.

L'expérience est copiée sous la dernière expérience de la période.

Copier une expérience dans une période

Utiliser cette procédure pour ajouter les mêmes expériences ou similaires pour une période si la plupart ou la totalité des paramètres sont les mêmes.

- Cliquez avec le bouton droit sur expérience puis cliquez sur **Copy this experiment (Copier cette expérience)**.

Une copie de l'expérience est ajoutée en dessous de la dernière expérience créée. Cela peut s'avérer utile lorsque la même expérience ou des expériences similaires sont ajoutées à une méthode d'acquisition.

Techniques de balayage

Ce système polyvalent et fiable est conçu pour la réalisation d'analyses de flux d'échantillons liquides par spectrométrie de masse et chromatographie en phase liquide dans le but de déterminer, quantifier et observer les composés polaires en présence.

Afin d'analyser les échantillons, le système utilise les techniques de spectrométrie de masse suivantes.

- Deux modes de spectrométrie de masse simple (MS) :
 - la spectrométrie de masse simple quadripolaire (calibration Q1 uniquement) ;
 - la spectrométrie de masse simple à temps de vol.
- de spectrométrie de masse en tandem (MS/MS) :
 - la spectrométrie de masse avec analyse d'ions produits.

Spectrométrie de masse simple

La spectrométrie de masse simple (MS) est utilisée pour analyser les molécules chargées pour déterminer la masse moléculaire et la quantité d'ions détectées. Les ions détectés par MS peuvent indiquer la présence d'un analyte cible.

La Spectrométrie de masse simple à base quadripolaire

Dans un balayage de spectrométrie de masse simple à base quadripolaire (Q1 MS), le système fonctionne comme un spectromètre de masse quadripôle. Dans ce mode, le système fournit des informations de spectrométrie de masse simple en utilisant la première section quadripôle (Q1) de l'instrument.

La Spectrométrie de masse simple à temps de vol.

Dans un balayage de spectrométrie de masse simple à temps de vol, le système génère des informations de spectrométrie de masse en envoyant des ions dans un tube de vol et en enregistrant leur temps d'arrivée précis au détecteur. Les ions ayant un rapport masse/charge supérieur prennent plus de temps à voyager dans le tube de vol.

Spectromètre de masse en tandem

La technique de MS/MS est adaptée à l'analyse des mélanges, car les spectres de l'ion produit caractéristique peuvent être obtenus pour chaque composant dans un mélange sans interférences des autres composants, en considérant que les ions produits ont un rapport m/z unique.

Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

Utilisez la technique MS/MS pour l'analyse ciblée en surveillant des ions précurseurs/produits spécifiques pendant l'élution de l'échantillon. Ce type d'analyse est plus spécifique qu'une MS seule, qui isole uniquement en fonction du rapport masse/charge.

Spectrométrie de masse d'ions produits

Dans un balayage d'ions produits (**Product Ion**), le système génère des informations de spectrométrie de masse en sélectionnant une fenêtre d'ions précurseurs particuliers dans Q1, en fragmentant dans Q2 (une cellule de collision) et en envoyant les ions (ions fragments) dans un tube de vol et en enregistrant leur temps d'arrivée précis au détecteur. Les ions produits peuvent fournir des informations sur la structure moléculaire des ions d'origine (précurseurs).

Sur l'acquisition de données spectrales

Les données spectrales peuvent être acquises selon l'un des modes décrits dans [Tableau 8-1](#).

Tableau 8-1 Données spectrales

Mode	Description
Profil	La valeur par défaut est 0,1 Da. Le profil des données est constitué de données générées par le spectromètre de masse et correspond à l'intensité enregistrée sur une série de valeurs de masse discrète espacées uniformément. Par exemple, pour une plage de masse de 100 Da à 200 Da avec un incrément de 0,1, l'instrument balaye de 100 à 200 Da par incréments de 0,1 Da (par exemple, 100,0 ; 100,1 ; 100,2 ; 100,3... jusqu'à 200,0).
Saut de pic ou peak hopping	La valeur par défaut est 1,0 Da. Le peak hopping est un mode de fonctionnement d'un spectromètre de masse avec des étapes espacées large (environ 1 Da). Ce mode a l'avantage de la rapidité (moins d'étapes de données), mais avec une perte de l'information sur la forme du pic.

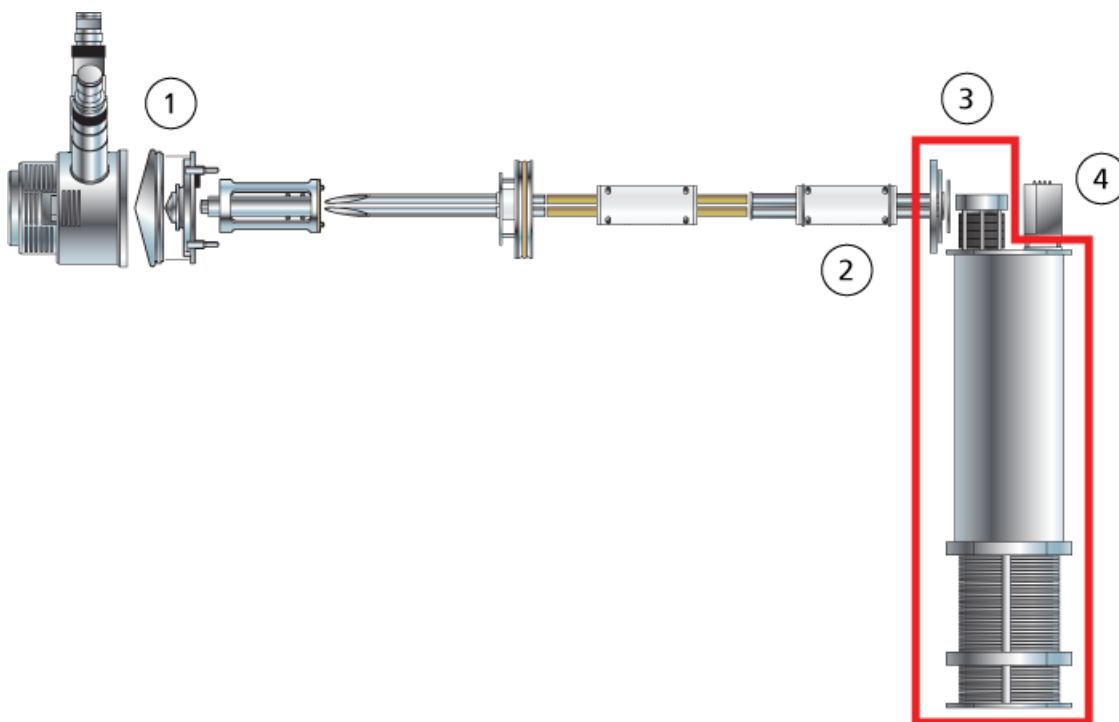
Paramètres

Les paramètres de fonctionnement sont les réglages des paramètres de l'instrumentation en cours d'utilisation.

- Paramètres des gaz et de la source : (dépendant de la source d'ions) ces paramètres peuvent varier selon la source d'ions utilisée.
- Paramètres des composés : ces paramètres se composent principalement des tensions sur le trajet des ions. Les valeurs optimales pour les paramètres dépendant du composé varient en fonction du composé en cours d'analyse.
- Paramètres du détecteur : ces paramètres ont un impact sur le détecteur. La plaque multicanal constitue le détecteur dans un instrument de spectrométrie à temps de vol (TOF) et se compose de quatre canaux destinés à la détection des ions. La somme des canaux est égale à l'intensité ionique. Ce paramètre peut être optimisé à l'aide d'Instrument Optimization (Optimisation de l'instrument).

La [Figure 8-1](#) indique où trouver les paramètres sur le trajet optique des ions.

Figure 8-1 Trajet optique des ions et paramètres



Élément	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type d'analyse
1	IonSpray Voltage Floating (ISVF) (Tension flottante IonSpray)	Source et gaz	Le paramètre ISVF influence la stabilité du nébulisat et par conséquent la sensibilité du signal. Voici la tension s'appliquant à l'aiguille qui nébulise l'échantillon.	Tous
1	Nebulizer Current (NC) (Électro-nébuliseur)	Source et gaz	Le paramètre NC règle le courant s'appliquant à l'aiguille de décharge corona dans la sonde d'ionisation chimique à pression atmosphérique (APCI). La décharge ionise les molécules de solvant qui à leur tour ionisent les molécules de l'échantillon.	Tous

Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

Élément	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type d'analyse
1	Interface Heater Temperature (IHT) (Température du chauffage de l'interface)	Source et gaz	Le paramètre IHT règle la température du chauffage de l'interface NanoSpray® et n'est accessible que lorsque la source d'ions et l'interface NanoSpray sont installées. La température optimale du chauffage dépend du type d'échantillon en cours d'analyse et du solvant utilisé. Si la température du chauffage est trop élevée, le signal se dégrade. Généralement, les températures du chauffage sont comprises entre 130 °C et 180 °C. Le chauffage peut être réglé à la température maximale de 250 °C, mais une telle température est trop élevée pour la plupart des utilisations.	Tous
1	Ion Source Gas 1 (GS1) (Gaz 1 de la source d'ions)	Source et gaz	Pour la source d'ions Turbo V™, le paramètre GS1 contrôle le gaz nébuliseur pour les sondes TurbolonSpray® et APCI. Dans le cas de la source d'ions DuoSpray™ TurbolonSpray, le paramètre GS1 règle le gaz nébuliseur pour la sonde.	Tous
1	Ion Source Gas 2 (GS2) (Gaz 2 de la source d'ions)	Source et gaz	Pour la source d'ions Turbo V™, le paramètre GS2 contrôle le gaz chauffant pour la sonde TurbolonSpray®. Dans le cas de la source d'ions DuoSpray™ TurbolonSpray, le paramètre GS2 règle le gaz chauffant pour la sonde et le gaz nébuliseur pour la sonde APCI.	Tous
1	Temperature (TEM) (Température)	Source et gaz	Le paramètre TEM contrôle la température du gaz chauffant dans la sonde TurbolonSpray ou celle de la sonde APCI.	Tous

Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

Élément	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type d'analyse
1	Débit de Curtain Gas (CUR)	Source et gaz	Le paramètre CUR contrôle le débit du gaz de l'interface du Curtain Gas™. L'interface du Curtain Gas est située entre la plaque rideau et l'ouverture. Elle prévient la contamination des optiques ioniques.	Tous
1	Declustering Potential (DP) (Potentiel de défragmentation)	Composé	Le paramètre DP règle la tension de l'orifice, ce qui règle la capacité à séparer les ions de leurs massifs entre l'orifice et l'ion guide QJet®. Il est utilisé pour minimiser les grappes de solvant qui peuvent rester sur l'ion échantillon après son entrée dans la chambre à dépression et si besoin pour fragmenter les ions. Plus la tension est élevée, plus l'énergie impartie aux ions est importante. Si le paramètre DP est trop élevé, une fragmentation indésirable est possible. Utiliser la valeur prédéfinie et optimiser pour le composé.	Tous
2	Gaz CAD	Source et gaz	Le paramètre CAD règle la pression du gaz CAD dans la cellule de collision. Le gaz de collision permet de concentrer les ions lors de leur passage dans la cellule de collision ; le pré réglage pour le paramètre CAD est en mode fixe. Pour les types de balayage MS/MS, le gaz CAD permet de fragmenter les ions précurseurs. Lorsque les ions précurseurs entrent en collision avec le gaz, ils se dissocient pour former des ions produits. Utiliser la valeur prédéfinie et optimiser pour le composé.	Tous

Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

Élément	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type d'analyse
2	Collision Energy (CE) (Énergie de collision)	Composé	<p>Le paramètre CE contrôle la différence de potentiel entre la zone Q0 et la cellule de collision Q2. Il est utilisé uniquement dans les balayages MS/MS. Ce paramètre est la quantité d'énergie que les ions précurseurs reçoivent quand ils sont accélérés dans la cellule de collision Q2, où ils entrent en collision avec des molécules de gaz et se fragmentent.</p> <p>Utiliser la valeur prédéfinie et optimiser pour le composé.</p>	TOF MS, TOF MS/MS
2	Collision Energy Spread (CES) (Diffusion de l'énergie de collision)	Composé	<p>Le paramètre CES, en conjonction avec le paramètre CE, décide de l'application d'une des trois énergies de collision appliquées à la masse de précurseur dans le scan des ions produits lors de l'utilisation du CES. L'énergie de collision est incrémentée d'une valeur basse à une valeur haute. En mode positif par exemple, l'énergie de collision est incrémentée de CE – CES à CE + CES. Lorsqu'une valeur CES est saisie, la propagation de l'énergie de collision s'active automatiquement.</p> <p>Utiliser la valeur prédéfinie et optimiser pour le composé.</p>	TOF MS/MS

Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

Élément	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type d'analyse
3	Délai de libération des ions (IRD)	Composé	<p>Durée en millisecondes avant l'impulsion des ions. La valeur par défaut (11 ms) est calculée en fonction des masses TOF et peut être réglée par l'opérateur. La plage est habituellement comprise en 6 et 333 ms.</p> <p>Ce paramètre est optimisé à l'aide de l'assistant Instrument Optimization (Optimisation de l'instrument) si l'option Enhanced Ion (Ion amélioré) est sélectionnée dans les options Advanced (Avancé). De manière générale, les valeurs par défaut n'ont pas à être modifiées.</p>	MS/MS uniquement, Enhanced (Amélioré)
3	Largeur de libération des ions (IRW)	Composé	<p>Il s'agit de la largeur, ou de la durée d'impulsion, des ions en millisecondes. Elle est calculée en fonction de l'IRD. La plage est habituellement comprise entre 5 et 328 ms avec une valeur par défaut de 10 ms.</p> <p>Ce paramètre est optimisé à l'aide de l'assistant Instrument Optimization (Optimisation de l'instrument) si l'option Enhanced Ion (Ion amélioré) est sélectionnée dans les options Advanced (Avancé). De manière générale, les valeurs par défaut n'ont pas à être modifiées.</p>	MS/MS uniquement, Enhanced (Amélioré)
4	MCP (CEM)	Détecteur	Le paramètre CEM contrôle la tension appliquée au détecteur. La tension a une incidence sur la réponse du détecteur.	Tous

Un lot est un ensemble d'informations sur les échantillons à analyser. Les lots indiquent au logiciel l'ordre dans lequel analyser les échantillons. Pour obtenir des d'informations sur l'importation de lots, consultez le *Advanced User Guide* Guide de l'utilisateur expert.

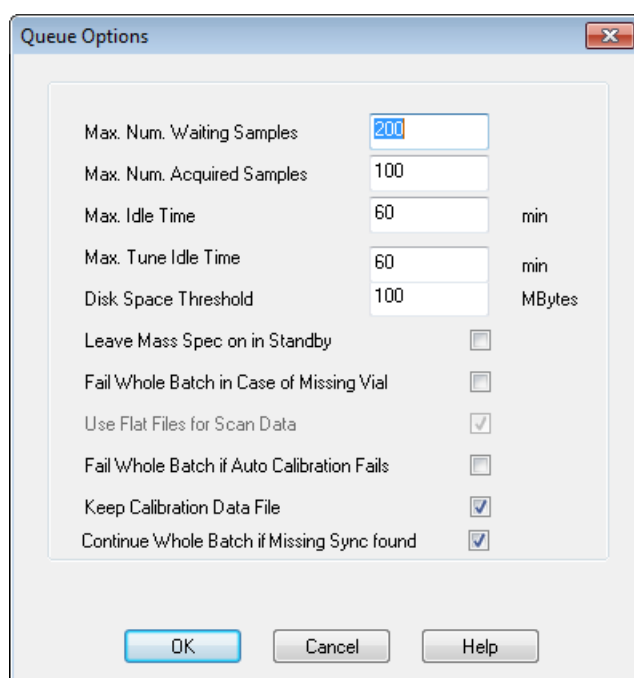
Régler les options de file d'attente

La file d'attente passe un à un les échantillons de la liste, traitant chaque échantillon avec la méthode d'acquisition sélectionnée. Après que tous les échantillons ont été acquis, la file d'attente s'arrête et le spectromètre de masse passe en mode **Standby** (Veille). En mode **Standby** (Veille), les pompes LC et l'alimentation sur certains instruments sont mises hors tension.

L'utilisateur peut modifier le temps d'attente après la fin de la dernière acquisition et avant que le logiciel Analyst[®] TF ne mette le spectromètre de masse en mode **Standby** (Veille). Pour plus d'informations sur les autres champs dans la boîte de dialogue **Queue Options** (Options de la file d'attente), consultez la rubrique Aide.

1. Dans la barre de navigation, cliquez sur **Configure** (Configurer).
2. Cliquez sur **Tools (Outils) > Settings (Paramètres) > Queue Options (Options de la file d'attente)**.

Figure 9-1 Boîte de dialogue Queue Options (Options de la file d'attente)



3. Dans le champ **Max. Num. Waiting Samples (Nombre maximum d'échantillons en attente)**, choisissez pour le nombre maximum d'échantillons en attente, une valeur supérieure au nombre d'échantillons présents dans la file d'attente.
4. Dans le champ **Max. Idle Time (Temps d'inactivité maximal)**, saisissez le temps d'attente après acquisition avant de passer en mode **Standby (Veille)**. La valeur prédéfinie est de 60 min.

En cas d'utilisation de bouteilles de gaz, réglez le temps pour vous assurer que le gaz dans les cylindres ne se décharge pas.

Pour une méthode LC, vérifiez avant le démarrage de la procédure qu'il y a suffisamment de solvant dans les réservoirs pour le débit primaire pour tous les passages d'échantillon et le temps d'inactivité maximal.
5. Cochez la case **Leave Mass Spec on in Standby (Laisser le spectromètre de masse en veille)** pour maintenir le spectromètre de masse allumé après la fin de l'analyse. Cette fonction permet aux chauffages et aux gaz de rester allumés même après le passage des appareils en mode **Idle (Inactif)**, afin d'éviter l'entrée de contaminants dans la source d'ions et l'entrée du spectromètre de masse.
6. Cochez la case **Fail Whole Batch in Case of Missing Vial (Mettre en échec tout le lot en cas de flacon manquant)** pour mettre en échec tout le lot en cas de flacon manquant. Si la case n'est pas cochée, seul l'échantillon en cours est mis en échec et l'échantillon suivant dans la liste d'attente est analysé.
7. Cochez la case **Fail Whole Batch if Auto Calibration Fails (Mettre en échec tout le lot si la calibration automatique échoue)** pour arrêter le lot si la calibration automatique échoue.
8. Cochez la case **Keep Calibration Data File (Conserver le fichier de données de calibration)** pour enregistrer le fichier de données de calibration dans un sous-dossier du dossier Data (Données) du projet soumettant les échantillons.
9. Cochez la case **Continue Whole Batch if Missing Sync found (Continuer tout le lot en cas de synchronisation manquante)** pour continuer l'acquisition de tout le lot en cas de signal de synchronisation manquant. Si cette case n'est pas cochée, l'échantillon en cours échoue et la file d'attente ne se poursuit pas avec l'échantillon suivant lorsque ce signal apparaît.

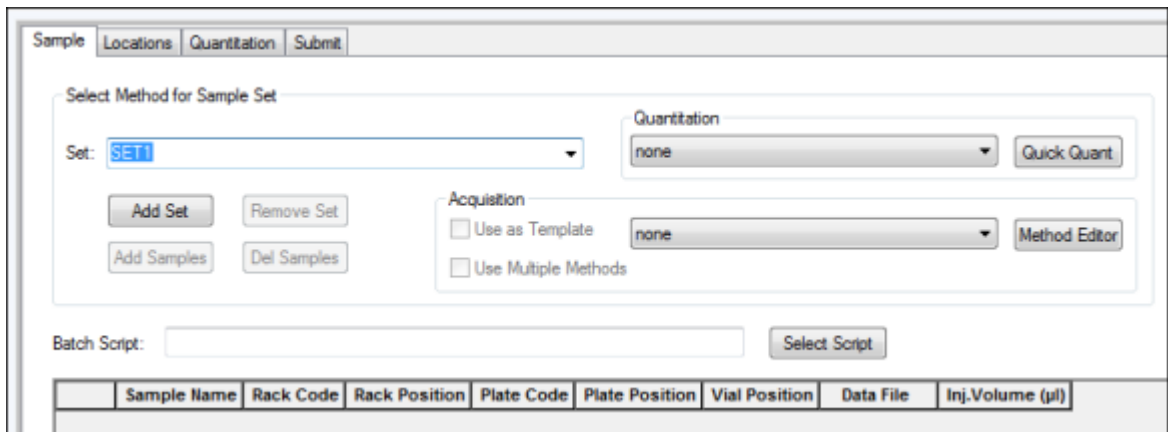
Ajouter des ensembles et des échantillons à un lot

Un ensemble peut être composé d'un seul ou de plusieurs échantillons.

Remarque : Pour plus d'informations sur le rajout d'une quantification sur un lot, reportez-vous au *guide de l'utilisateur expert*.

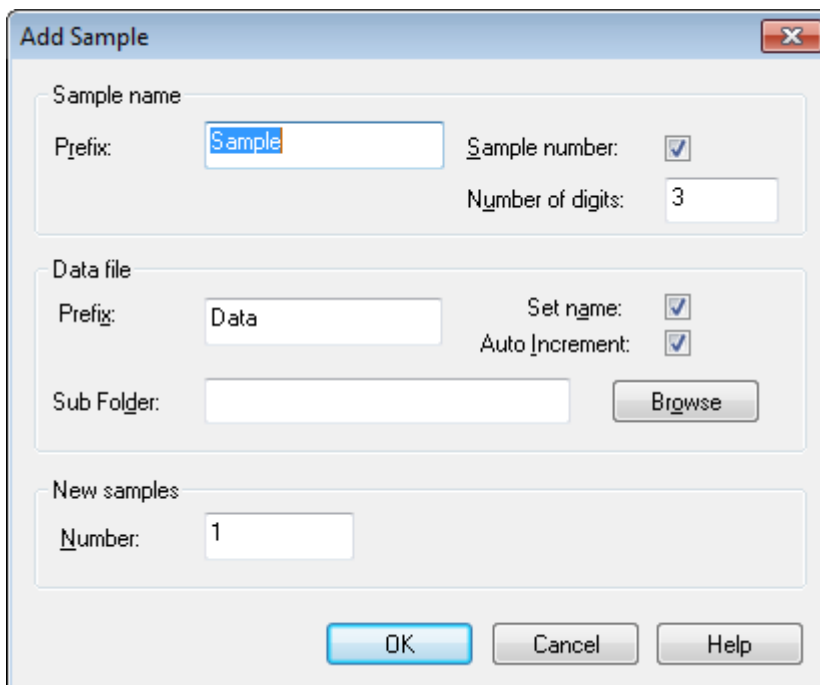
1. Dans la barre de navigation, sous **Acquire**, double-cliquez sur **Build Acquisition Batch**.

Figure 9-2 Boîte de dialogue Batch Editor (Éditeur de lot)



2. Dans l'onglet **Sample** (échantillon), dans la liste **Set** (Réglage), tapez un nom.
3. Cliquez sur **Add Set (Ajouter un ensemble)**.
4. Cliquez sur **Add Samples** pour ajouter des échantillons au nouvel ensemble.

Figure 9-3 Boîte de dialogue Add Sample (Ajouter Échantillon)



5. Dans la section **Sample name**, dans le champ **Prefix**, entrez un nom pour les échantillons de cet ensemble.
6. Pour ajouter une numérotation progressive à la fin du nom de l'échantillon, sélectionnez la case **Numéro d'échantillon**.

7. Si la case **Sample number** (Numéro d'échantillon) est sélectionnée, dans le champ **Number of digits** (Nombre de chiffres), saisissez le nombre de chiffres à inclure dans le nom de l'échantillon.
Par exemple, si vous saisissez 3, les noms des échantillons pourraient être `samplename001`, `samplename002` et `samplename003`.
8. Dans la **Data file (Fichier de données)**, dans **Prefix (Préfixe)**, entrez un nom pour le fichier de données qui stockera les informations relatives à l'échantillon.
9. Sélectionnez **Set name (Nom de l'ensemble)** à utiliser comme partie intégrante du nom du fichier de données.
10. Sélectionnez **Auto Increment (Auto incrémentation)** pour incrémenter automatiquement les noms de fichiers de données.
11. Saisissez un nom dans le champ **Sub Folder** (Sous-dossier).
Le classeur est stocké dans le dossier **Data** (Données) correspondant au projet actuel. Si le champ **Sub Folder** (Sous-dossier) est laissé vide, le fichier de données est stocké dans le dossier **Data** (Données) et aucun sous-dossier n'est créé.
12. Dans **New Samples (Nouveaux échantillons)**, dans **Number (Numéro)** saisissez le chiffre des nouveaux échantillons.
13. Cliquez sur **OK**.

Le tableau des échantillons complète les noms des échantillons et les noms des fichiers de données.

Conseil ! Fill Down (Remplir vers le bas) et Auto Increment (Auto incrémentation) sont des options disponibles dans le menu contextuel une colonne de tête seule ou plusieurs lignes d'une colonne sont sélectionnées.

14. Dans **Sample (Échantillon)** dans **Acquisition (Acquisition)**, sélectionnez une méthode à partir de la liste.
En fonction de la manière dont le système est configuré, les informations spécifiques à l'auto-échantillonneur doivent être entrées. Même si le volume d'injection est défini dans la méthode, l'utilisateur peut le modifier pour un ou plusieurs échantillons en changeant la valeur dans la colonne volume d'injection.
Remarque : Pour utiliser des méthodes différentes pour certains des échantillons dans cet ensemble, sélectionnez la case **Use Multiple Methods** (Utiliser des méthodes multiples). La colonne **Acquisition Method** (Méthode d'acquisition) s'affiche dans le tableau **Sample** (Échantillon). Sélectionnez la méthode d'acquisition pour chaque échantillon dans cette colonne.
15. Pour modifier les volumes d'injection à partir des volumes répertoriés dans la méthode, dans **Inj. Colonne volume (µl)**, saisissez le volume d'injection pour chaque échantillon.
16. Indiquez les positions des flacons dans la colonne **Vial Position** (Position des flacons).

Remarque : Pour remplir automatiquement les échantillons à partir de l'onglet **Locations** (Emplacements), cliquez sur le premier et le dernier flacon d'un ensemble tout en gardant la touche **Shift** (Maj) enfoncée. Ces flacons s'affichent sous forme de cercles rouges. Dans l'onglet **Locations** (Emplacements), il est possible de réaliser de multiples injections à partir du même flacon en appuyant sur la touche **Ctrl** tout en cliquant sur l'emplacement du flacon. Le cercle rouge devient vert.

17. (Facultatif) Utilisez les procédures de [Tableau 9-1](#) comme requis.

Tableau 9-1 Conseils relatifs à l'Éditeur de lot

Pour ce faire...	... faire ce qui suit
Pour modifier toutes les valeurs d'une colonne simultanément	Cliquez sur un en-tête de colonne, puis cliquez sur le bouton droit de la souris. Dans le menu, utilisez la fonction Auto Increment (Auto-incrémentation) et les commandes Fill Down (Remplir vers le bas) pour modifier les valeurs de la colonne. Cela fonctionne également pour plusieurs cellules de la même colonne.
Pour modifier une méthode d'acquisition existante	Sélectionnez la méthode dans la liste, puis cliquez sur Method Editor (Éditeur de méthode). Pour créer une nouvelle méthode d'acquisition, sélectionnez None (Aucune) dans la liste, puis cliquez sur Method Editor (Éditeur de méthode). Seuls les utilisateurs expérimentés doivent utiliser cette fonction. N'utilisez pas cette fonction si l'option Use Multiple Methods (Utiliser Méthodes Multiples) est sélectionnée.
Pour appliquer une méthode de quantification créé précédemment	Sélectionnez la méthode à partir de la liste Quantitation (Quantification).
Pour sélectionnez plus d'un flacon ou fioles à un moment	Maintenez la touche Shift (Maj) enfoncée, puis cliquez sur le premier et le dernier puits ou flacon dans la plage.

18. Pour définir les emplacements des échantillons, effectuer l'une des opérations suivantes :

- [Régler les emplacements de l'échantillon dans l'Éditeur de lot à la page 67](#)
- [Sélectionnez les emplacements des flacons à l'aide de l'onglet Locations \(Emplacements\) \(facultatif\) à la page 67](#)

19. Cliquez sur **Submit (Envoyer)**.

20. Si la section **Submit Status** (Envoyer état) contient un message sur l'état du lot, procédez de l'une des manières suivantes :

- Si le message indique que le lot est prêt à être envoyé, passez à l'étape 21.

- Si le message indique que le lot n'est pas prêt, apportez les changements comme indiqué par le message.

21. Cliquez sur **Submit**.

La boîte de dialogue **Acquisition** s'ouvre.

22. Enregistrer le fichier.

Soumettre un échantillon ou un groupe d'échantillons

1. Cliquez sur l'onglet **Submit** (envoyer) sur le **Batch Editor** (éditeur de lots).
2. Si la section **Submit Status** (Statut de l'envoi) contient un message sur l'état du lot, procédez de l'une des manières suivantes :
 - Si le message indique que le lot est prêt pour être envoyé, passez à l'étape 3.
 - Si le message indique que le lot n'est pas prêt à être envoyé, apportez les changements indiqués dans le message.
3. Cliquez sur **Submit**.
4. Enregistrer le fichier.

Configurer l'étalonnage de l'échantillon

Le logiciel peut programmer et réaliser automatiquement l'étalonnage automatique externe lors de l'acquisition des échantillons en mode par lots. Cela garantit une bonne précision de masse tout au long de l'acquisition. Si le CDS n'est pas configuré, l'étalonnage est effectué à l'aide d'un auto-échantillonneur et les utilisateurs fournissent la méthode d'étalonnage (*.dam) et la position du flacon de l'échantillon étalon.

1. Dans **Batch Editor** (Éditeur de lots), cliquez sur **Calibrate** (Étalonner).
2. Dans le champ **Calibrate Every _ Samples** (Étalonner tous les _ échantillons), saisissez le nombre d'échantillons à acquérir entre les échantillons d'étalonnage.
3. Dans le **Calibrant Reference Table** (Tableau de référence de l'étalon), sélectionnez des tableaux de référence de l'étalon disponibles pour la polarité actuelle. Assurez-vous que le tableau de référence sélectionné correspond à la bonne **Calibrant Valve Position** (Position de vanne étalon).
4. Réglez le **CDS Inject Flow Rate** (Débit d'injection du CDS).

Lors de l'envoi du lot, les échantillons d'étalonnage sont insérés dans la file d'attente. Chaque lot démarre avec un échantillon d'étalonnage. La méthode d'étalonnage est dénommée AnalystCal_ suivi du nom de la méthode d'acquisition (par exemple AnalystCal_TOF.dam). Si le CDS est configuré, le logiciel crée automatiquement une méthode d'étalonnage correspondant à la méthode d'acquisition utilisée pour l'échantillon suivant dans la file d'attente. Les données d'étalonnage sont enregistrées sur un fichier de données distinct pour chaque échantillon d'étalonnage. Le fichier de données d'étalonnage ainsi que le

rapport d'étalonnage sont enregistrés dans le sous-dossier Cal Data (Données d'étalonnage) et dénommés Cal suivi de l'horodatage et de l'index de l'échantillon d'étalonnage (par exemple Cal200906261038341.wiff) si l'option Keep Calibration Data File (Conserver le fichier de données de calibration) a été sélectionnée dans la boîte de dialogue Queue Options (Options de la file d'attente). Le rapport d'étalonnage est dénommé Cal suivi de l'horodatage, de l'index de l'échantillon ainsi que du rapport Word (par exemple Cal20130822154447030_report.txt). Le rapport affiche les critères de recherche des pics, les paramètres et les masses utilisés pour l'étalonnage. Il indique aux utilisateurs si l'étalonnage a été réalisé avec succès. Le rapport résume également les paramètres utilisés pour l'étalonnage.

Changer l'ordre de l'échantillon

L'ordre des échantillons peut être modifié avant qu'ils ne rentrent dans la **Queue** (File d'attente).

- Dans l'onglet **Submit** (Soumettre), double cliquez sur un des nombres à l'extrême gauche du tableau (une case floue est visible), puis faites-les glisser vers le nouvel emplacement.

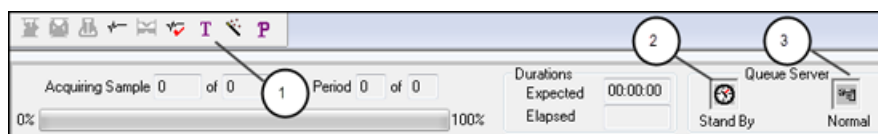
Acquérir les données

Le système ne doit pas être en mode **Tune and Calibrate** (Régler et étalonner) lorsque l'acquisition de l'échantillon a démarré. De même, si le système a déjà été exécuté dans la journée, et n'a pas encore été mis en mode **Standby** (Veille), l'acquisition de l'échantillon démarre automatiquement.

1. Dans la barre de navigation, cliquez sur **Acquire** (Acquérir).
2. Cliquez sur **View (Afficher) > Sample Queue (Liste d'attente des échantillons)**.

Tous les échantillons envoyés s'affichent lors de l'ouverture du **Queue Manager** (Gestionnaire de file d'attente).

Figure 9-4 Gestionnaire de file d'attente



Élément	Description
1	N'appuyez pas sur l'icône Reserve Instrument for Tuning (Réserver instrumentation pour réglage).
2	La file d'attente doit être en mode Standby (Veille).
3	Le serveur de file d'attente doit être en mode Normal . Voir Statut de la file d'attente à la page 70 .

3. Cliquez sur **Acquire (Acquérir) > Start Sample (Démarrer échantillon)**.

Remarque : Le fabricant recommande d'analyser de nouveau l'échantillon si un arrêt anormal survient pendant l'acquisition d'échantillons.

Régler les emplacements de l'échantillon dans l'Éditeur de lot

Si un auto-échantillonneur est utilisé dans la méthode d'acquisition, alors les positions des fioles d'échantillons doivent être définies dans l'acquisition par lot. Définissez l'emplacement de l'échantillon dans l'onglet **Sample** (Échantillon) ou dans l'onglet **Locations** (Emplacements). Pour plus d'informations sur la création de lots, reportez-vous à [Ajouter des ensembles et des échantillons à un lot à la page 61](#)

Remarque : Selon l'auto-échantillonneur utilisé, il peut ne pas être nécessaire de renseigner les détails dans les colonnes supplémentaires.

1. Dans l'onglet **Sample** (Échantillon), dans la liste **Set** (Réglage), sélectionnez le réglage.
2. Pour chaque échantillon dans l'ensemble, faire ce qui suit si nécessaire:
 - Dans la colonne **Rack Code (Code Rack)**, sélectionnez le type de rack.
 - Dans la colonne **Rack Position (Position Rack)**, sélectionnez la position du rack dans l'auto-échantillonneur.
 - Dans la colonne **Plate Code (Code Plaque)**, sélectionnez le type de plaque.
 - Dans la colonne **Plate Position (Position Plaque)**, sélectionnez la position de la plaque sur le rack.
 - Dans la colonne **Vial Position (Position Fioles)**, sélectionnez la position des fioles dans la plaque ou le bac.
3. Enregistrer le fichier.

Sélectionnez les emplacements des flacons à l'aide de l'onglet Locations (Emplacements) (facultatif)

1. Cliquez sur l'onglet **Locations (Emplacements)** dans le **Batch Editor (Éditeur de lot)**
2. Sélectionnez le réglage dans la liste **Set (Réglage)**.
3. Sélectionnez l'auto-échantillonneur dans la liste **Autosampler (Auto-échantillonneur)**.

Le nombre exact d'espaces dans le carrousel pour l'auto-échantillonneur apparaît dans la représentation graphique du carrousel.

Instructions d'utilisation : lots

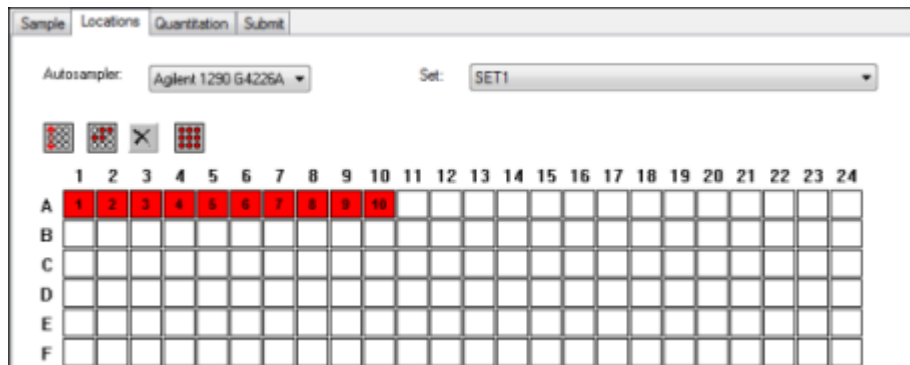
4. Dans l'espace associé avec le rack, cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez le type de rack.

Les plaques ou bacs sont indiqués dans le rack.

5. Double-cliquer sur l'un des rectangles.

Les cercles indiquant les puits ou les fioles pour la plaque ou le bac apparaissent.

Figure 9-5 Onglet Locations (Emplacements)



6. Pour choisir de marquer les échantillons par ligne ou colonne, cliquez sur le bouton de sélection **Row/Column selection** (Sélection ligne/colonne).

Si le bouton affiche une ligne horizontale rouge, le **Batch Editor** (Éditeur de lot) marque les échantillons par ligne. Si le bouton affiche une ligne verticale rouge, le **Batch Editor** (Éditeur de lot) marque les échantillons par colonne.

7. Cliquez sur le puits d'échantillon ou fioles pour être analysés. Cliquez sur un puits sélectionné une nouvelle fois pour effacer.
8. Enregistrer le fichier.

Conseil ! Pour remplir automatiquement les échantillons, maintenez la touche **Shift** (Maj) enfoncée tout en cliquant sur le premier et le dernier flacon d'un ensemble. Pour effectuer plusieurs injections à partir du même flacon, maintenez la touche **Ctrl** enfoncée tout en cliquant sur l'emplacement du flacon. Le cercle rouge devient vert.

Arrêter l'acquisition d'échantillons

Lorsqu'une acquisition d'échantillon est arrêtée, l'acquisition en cours se termine avant qu'elle soit interrompue.

1. Dans **Queue Manager**, cliquez sur l'échantillon dans la file d'attente après le point où l'acquisition devrait s'arrêter.
2. Dans la barre de navigation, cliquez sur **Acquire** (Acquérir).
3. Cliquez sur **Acquire** (Acquérir) > **Stop Sample** (Arrêter échantillon).

La file d'attente s'arrête après le balayage en et quand l'échantillon sélectionné se termine. L'état de l'échantillon dans la fenêtre **Queue Manager (Local)** (Gestionnaire de file d'attente [Local]), passe à **Terminated** (Terminé) et tous les autres échantillons de la file d'attente sont en mode **Waiting** (Attente).

4. Pour poursuivre le traitement du lot, cliquez sur **Acquire (Acquérir) > Start Sample (Démarrer échantillon)**.

Menu contextuel de l'éditeur de lot

Cliquez avec le bouton droit dans le tableau **Batch Editor** (Éditeur de lots) pour accéder aux options.

Menu	Fonction
Ouvrir	Ouvre un fichier de séquence d'injections.
Importer à partir de	Importe un fichier.
Enregistrer sous forme de lot	Enregistre le lot sous un nom différent.
Save As a template (Enregistrer comme modèle)	Enregistre le lot comme un modèle. Utilisé avec la fonction de Vue Express.
Masquer/Afficher la colonne	Masque ou affiche une colonne.
Enregistrer les paramètres de colonne	Enregistre les paramètres de colonne par lot.
Ajouter Colonne personnalisée	Ajoute une colonne personnalisée.
Supprimer Colonne personnalisée	Supprime une colonne personnalisée.
Remplir vers le bas	Copie les mêmes données dans les cellules sélectionnées.
Incrémentation automatique	Remplit les données automatiquement dans les cellules sélectionnées.
Supprimer des échantillons	Supprime la ligne sélectionnée.
Sélectionnez Auto-échantillonneur	Sélectionne un auto-échantillonneur.

États de la file d'attente et l'état du périphérique

Le gestionnaire de file d'attente **montre la file d'attente, les lots et l'état de l'échantillon**. Les informations détaillées d'un échantillon particulier dans la file d'attente peuvent également être consultées.

Statut de la file d'attente

L'état actuel de la file d'attente est indiqué dans le **Queue Server** (Serveur de file d'attente).

Figure 9-6 Serveur de file d'attente affichant un mode **Normal**

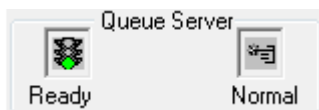
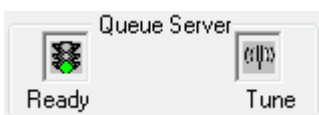


Figure 9-7 Serveur de file d'attente affichant un mode **Réglage**



La première icône indique l'état de la file d'attente. La deuxième icône indique si la file d'attente est en mode **Tune** (Réglage) ou en mode **Normal** (pour l'exécution des échantillons). La [Tableau 9-2](#) décrit les icônes et les statuts de la file d'attente.

Tableau 9-2 Statut de la file d'attente

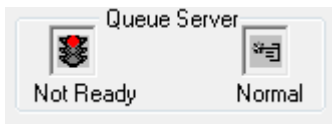
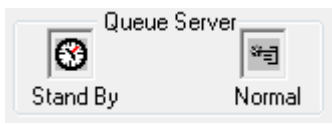

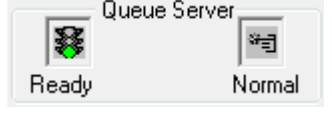
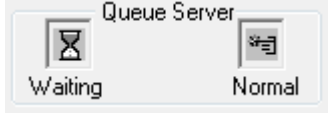

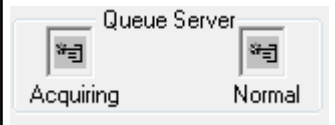
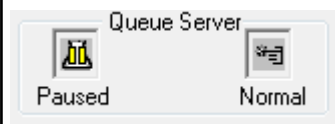
Icônes	Phase	Définition
	Pas prêt	Le profil matériel est désactivé et la file d'attente n'accepte aucun des échantillons soumis.
	En attente	Le profil matériel a été activé, mais tous les périphériques sont inactifs. Les pompes ne sont pas en route et le gaz est coupé.
	Préchauffage	L'équilibrage du spectromètre de masse et des périphériques, la préparation des colonnes, le lavage de l'aiguille de l'auto-échantillonneur et la montée en température des fours à colonne sont en cours. La durée de l'équilibrage est sélectionnée par l'opérateur. À partir de cette phase, le système peut passer à l'état Ready (Prêt).
	Prêt	Le système est prêt à commencer le traitement des échantillons et les périphériques ont été équilibrés et sont prêts à fonctionner. À cette phase, la file d'attente peut recevoir des échantillons qui seront traités après leur soumission acceptée.
	En attente	Le système lancera automatiquement l'acquisition lorsque l'échantillon suivant sera présenté.

Tableau 9-2 Statut de la file d'attente (suite)

Icônes	Phase	Définition
	Préexécuter	La méthode est téléchargée pour chaque périphérique avec un rééquilibrage. Cette phase a lieu avant l'acquisition de chaque échantillon dans un lot.
	Acquisition	La méthode fonctionne et l'acquisition des données a lieu.
	En pause	Le système a été mis en pause pendant l'acquisition.

Vue Instrumentation et icônes du statut des périphériques

Les icônes représentant le spectromètre de masse et chaque périphérique présent dans la configuration matérielle active s'affichent sur la barre d'état en bas à droite de la fenêtre. L'utilisateur peut afficher le statut détaillé d'une pompe LC pour vérifier si la pression de celle-ci est adéquate ou afficher le statut détaillé du spectromètre de masse pour vérifier la température de la source d'ions.

Remarque : Pour chaque état, la couleur d'arrière-plan peut être le rouge. Un arrière-plan rouge signifie que le périphérique a rencontré une erreur au cours de cette phase.

- Sur la barre d'état, double cliquez sur l'icône correspondant au périphérique ou au spectromètre de masse. La boîte de dialogue **Instrument Status** (État de l'instrument) s'ouvre.

Tableau 9-3 Icônes d'état de l'instrument et du périphérique









Statut	Icône	Couleur d'arrière-plan	Description
Inoccupé		Vert ou jaune	Le périphérique n'est pas en fonction. Si l'arrière-plan est de couleur jaune, le périphérique doit être équilibré avant qu'il ne soit prêt à fonctionner. Si la couleur d'arrière-plan est verte, le périphérique est prêt à fonctionner.
Équilibrage		Vert ou jaune	Le périphérique est équilibré.
En attente		Vert	Le périphérique est en attente d'un ordre du logiciel ou d'un autre périphérique, ou de quelque action de la part de l'opérateur.

Tableau 9-3 Icônes d'état de l'instrument et du périphérique (suite)

Statut	Icône	Couleur d'arrière-plan	Description
En fonction		Vert	Le périphérique est en train d'analyser un lot.
Abandon		Vert	Le périphérique abandonne une exécution.
Téléchargement		Vert	Une méthode est en cours de transfert vers le périphérique.
Prêt		Vert	Le périphérique n'est pas en fonctionnement mais est prêt.
Erreur		Rouge	Le périphérique a rencontré une erreur qui doit faire l'objet d'étude.

Menu contextuel de la file d'attente

Cliquez avec le bouton droit dans le tableau **Queue** (File d'attente) pour accéder aux options suivantes.

Menu	Fonction
Détails sur l'échantillon	Ouvrez la boîte de dialogue Sample Details (Détails sur l'échantillon).
Réacquérir	Acquiert un nouvel échantillon.
Insérer pause	Insère une pause, en secondes, entre deux échantillons.
Supprimer	Supprime le lot ou les échantillons sélectionnés.
Déplacer le lot	Déplace le lot dans la file d'attente.
Trier	Trie selon la colonne présélectionnée.
Paramètres colonne	Modifie les paramètres de colonne.

Instructions d'utilisation : analyser et traiter des données

10

Utilisez les fichiers d'échantillons figurant dans le dossier **Example** (Exemple) pour apprendre à afficher et analyser les données avec les outils d'analyse et de traitement habituels. Pour plus d'informations sur les rubriques suivantes, reportez-vous au *guide de l'utilisateur expert*.

- Graphiques d'étiquetage
- Superposition et addition des spectres ou des chromatogrammes
- Exécution des soustractions en arrière-plan
- Algorithmes de lissage
- Travailler avec des données lissées
- Travailler avec des données centroïdes
- Travailler avec un tracé des contours
- Travailler avec l'outil d'interprétation de la fragmentation
- Utilisation une bibliothèque de bases de données et d'enregistrements

Ouvrir les fichiers de données

Conseil ! Pour désactiver la mise à jour automatique sur le spectre de masse, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le spectre de masse, puis cliquez sur Afficher le **dernier balayage**. S'il y a une marque de contrôle à côté de **Show Last Scan** (Afficher le dernier balayage), alors le spectre se met à jour en temps réel.

1. Sur la barre de navigation, sous **Explore** (Explorer), double cliquez sur **Open Data File** (Ouvrir le fichier de données).
2. Dans la liste **Data Files** (Fichiers de données), déplacez-vous jusqu'au fichier de données pour ouvrir, sélectionnez un échantillon puis cliquez sur **OK**.

La boîte de dialogue **Select Sample** (sélectionner un échantillon) s'ouvre. Les données acquises à partir de l'échantillon sont diffusées. Si les données sont encore en cours d'acquisition, le spectre de masse, le tracé DAD/UV, et TIC continueront de se mettre à jour automatiquement.

Conseil ! Pour voir un exemple de fichier de données, vérifiez que le projet **Example** (Exemple) est sélectionné. Ouvrez le dossier TOF, puis ouvrez le fichier **TOFMS PPGs3000.wiff**. Dans la liste d'échantillons, sélectionnez **TOFMS**.

Naviguer entre les échantillons dans un fichier de données

Remarque : Le [Tableau C-5 à la page 109](#) affiche les icônes de navigation utilisées dans cette procédure. Si des échantillons ont été enregistrés dans des fichiers séparés, ouvrir chaque fichier individuellement.

- Ouvrez un fichier de données et effectuez l'une des opérations suivantes :
 - Pour passer à l'échantillon suivant dans le fichier de données, cliquez sur l'icône avec la flèche pointant vers la droite.
 - Pour passer à un échantillon non séquentiel, cliquez sur l'icône avec la flèche courbe vers la droite.
 - Dans la boîte de dialogue **Select Sample** (Sélectionnez échantillon), dans **Sample** (Échantillon), sélectionnez l'échantillon.
 - Pour passer à l'échantillon précédent dans le fichier de données, cliquez sur l'icône avec la flèche pointant vers la gauche.

Affichage de conditions expérimentales

Les conditions expérimentales utilisées pour recueillir les données sont stockées dans le fichier de données avec les résultats. Les informations contiennent des détails sur la méthode d'acquisition utilisée : méthode d'acquisition MS (nombre de périodes, expériences et cycles) y compris les méthodes de paramètres de l'instrumentation et de l'appareillage HPLC (débit de pompe LC). En plus, elles contiennent aussi les tableaux d'étalonnage de résolution de masse utilisés pour l'acquisition d'échantillons. Le [Tableau 10-1](#) affiche les fonctionnalités du logiciel disponibles lorsque l'utilisateur affiche les informations de fichier.

- Cliquez sur **Explore (Explorer) > Show (Afficher) > Show File Information (Afficher Informations sur le fichier)**.

Le volet des **File information** (Informations sur le fichier) s'ouvre sous le graphique.

Conseil ! Pour créer une méthode d'acquisition à partir du volet des **File information (Informations sur le fichier)**, cliquez avec le bouton droit sur le volet **File information (Informations sur le fichier)**, puis cliquez sur **Save Acquisition Method** (Enregistrer la méthode d'acquisition).

Tableau 10-1 Cliquez droit sur Menu pour afficher l'onglet Informations sur le fichier

Menu	Fonction
Copy	Copie les données sélectionnées.
Paste	Colle les données.
Sélectionner tout	Sélectionne toutes les données dans le volet.
Save To File	Enregistre les données dans un fichier .rtf.

Tableau 10-1 Cliquez droit sur Menu pour afficher l'onglet Informations sur le fichier (suite)

Menu	Fonction
Font	Modifie la police.
Save Acquisition Method (Enregistrer Méthode d'acquisition)	Enregistre la méthode d'acquisition en tant que fichier .dam.
Enregistrer méthode d'acquisition à composé DB	Ouvre la boîte de dialogue Specify Compound Information (Préciser les information sur les composés). Sélectionnez les IDs (identifiants) et les poids moléculaires à enregistrer dans la base de données des composés.
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre sélectionnée.

Afficher les données dans des tableaux

1. Ouvrir un fichier de données.
2. Cliquez sur **Explore** (Explorer) > **Show** (Afficher) > **Show List Data** (Afficher les données de la liste).

Les données sont affichées dans une fenêtre sous le graphique.

Figure 10-1 Onglet Peak List (Liste des pics)

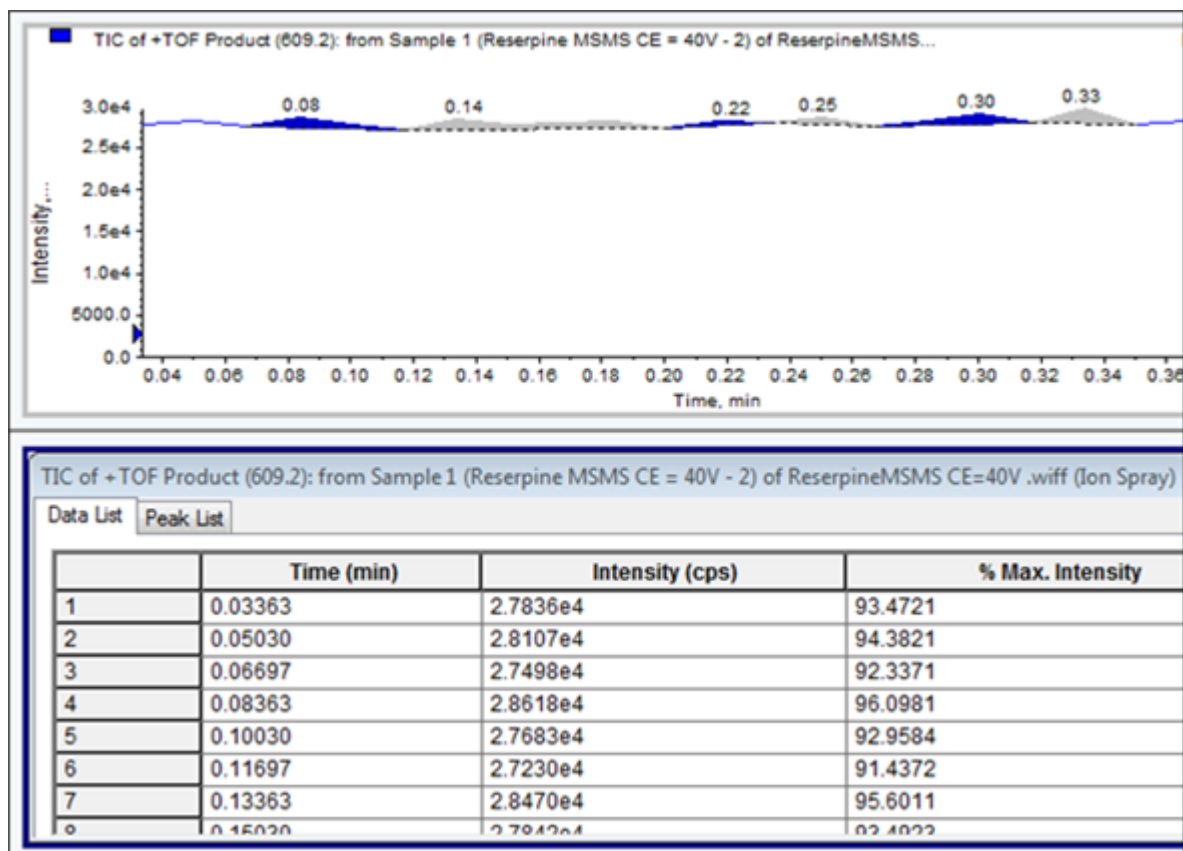


Tableau 10-2 Menu contextuel de l'onglet de la liste des pics spectraux

Menu	Fonction
Options de colonne	Ouvre la boîte de dialogue Select Columns for Peak List (Sélectionner colonne pour la liste des pics).
Enregistrer sous forme de texte	Enregistre les données dans un fichier .txt.
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre sélectionnée.

Tableau 10-3 Menu contextuel de l'onglet de la liste des pics chromatographiques

Menu	Fonction
Show Peaks in Graph (Afficher pics dans le graphique)	Affiche les pics en deux couleurs sur le graphique.
Paramètres IntelliQuan	Ouvre la boîte de dialogue IntelliQuan .
Enregistrer sous forme de texte	Enregistre les données dans un fichier .txt.
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre sélectionnée.

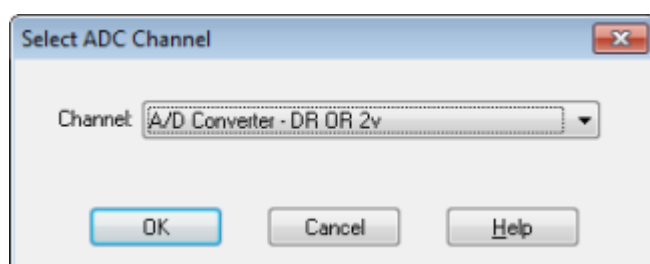
Afficher données ADC

Les données du convertisseur analogique/numérique (CAN) sont acquises par un détecteur secondaire (par exemple à partir d'un détecteur UV au travers d'une carte CAN) et sont utiles pour la comparaison avec les données du spectromètre de masse. Pour rendre des données CAN disponibles, acquérez simultanément les données CAN et celles du spectromètre de masse et enregistrez-les dans le même fichier.

1. Ouvrez un fichier de données contenant des données CAN.
2. Cliquez sur **Explore** (Explorer) > **Show** (Afficher) > **Show ADC Data** (Afficher données CAN).

La boîte de dialogue **Select ADC Channel** (Sélectionner canal CAN) s'ouvre.

Figure 10-2 Boîte de dialogue Select ADC Channel (Sélectionner canal CAN)



3. Sélectionnez un canal dans la liste **Channel** (Canal).
4. Cliquez sur **OK**.

Les données du CAN s'ouvrent dans un nouveau volet sous le volet actif.

Afficher données quantitatives de base

1. Ouvrir un fichier de données.
2. Cliquez sur **Explore** > **Show** > **Show List Data** (explorer > afficher > afficher les données de la liste).
3. Dans l'onglet **Peak List** (Liste des pics), cliquez avec le bouton droit et sélectionnez **Show Peaks in Graph** (Afficher les pics sur le graphique).

Les pics s'affichent en deux couleurs.

4. Pour modifier les réglages de l'algorithme de recherche de pics, cliquez sur le bouton droit, puis sélectionnez soit **Analyst Classic parameters**, soit **IntelliQuan Parameters**, selon l'option qui est active.
5. (Facultatif) Pour enlever les pics colorés, cliquez avec le bouton droit dans l'onglet **Peak List** (Liste des pics), puis désélectionnez **Show Peaks in Graph** (Afficher les pics sur le graphique).

Chromatogrammes

Consultez le [Tableau 10-8 à la page 88](#) pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles.

Tableau 10-4 Types de chromatogrammes

Types de chromatogrammes	Objectif
Chromatogramme ionique total (TIC)	<p>Vue chromatographique générée par le tracé de l'intensité de tous les ions dans un balayage, en fonction du temps ou du nombre de balayages.</p> <p>Lorsqu'un fichier de données est ouvert, il est pré-réglé pour s'ouvrir comme un TIC. Si l'expérience contient un seul balayage, il est représenté comme un spectre.</p> <p>Si la case MCA est sélectionnée au cours de l'acquisition d'un fichier de données, alors le fichier s'ouvre au spectre de masse. Si la case MCA n'est pas sélectionnée, alors le fichier de données s'ouvre avec le TIC.</p>
Chromatogramme en ion extrait (XIC)	<p>Un chromatogramme d'ion créé en prenant les valeurs d'intensité à la valeur de la masse simple, discrète, ou une gamme de masse, à partir d'une série de balayages spectraux d'une série de masses. Il indique le comportement d'une masse donnée, ou sa plage de masse, en fonction du temps.</p>
Chromatogramme des pics de base (BPC)	<p>Tracé chromatographique affichant l'ion doté de l'intensité la plus forte sur un balayage par rapport au nombre de balayages ou à leur durée.</p>
Chromatogramme de longueur d'onde total (TWC)	<p>Vue chromatographique créée en additionnant toutes les valeurs d'absorbance dans la plage de longueurs d'onde acquise, puis en représentant les valeurs en fonction du temps. Il se compose de la somme des absorbances de tous les ions dans un balayage tracé face au temps dans une fenêtre chromatographique.</p>
Chromatogramme de longueur d'onde extraites (XWC)	<p>Un sous-ensemble de TWC. Un XWC montre la valeur de l'absorbance pour une longueur d'onde unique ou la somme des absorbances pour une gamme de longueurs d'onde.</p>
Détecteurs à barrettes de diodes (DAD)	<p>Un détecteur d'UV qui surveille le spectre d'absorption des composés à élution à une ou plusieurs longueurs d'onde.</p>

Montrer les TIC d'un spectre

- Cliquez sur **Explore (Explorer) > Show (Afficher) > Show TIC (Afficher TIC)**.
Le TIC s'ouvre dans un nouveau volet.

Conseil ! Cliquez avec le bouton droit à l'intérieur d'un volet contenant un spectre, puis cliquez sur **Show TIC (Afficher TIC)**.

Afficher un spectre d'un TIC

1. Dans un volet contenant un TIC, sélectionnez une gamme.
2. Cliquez sur **Explore** (Explorer) > **Show** (Afficher) > **Show Spectrum** (Afficher spectre).

Le spectre s'ouvre dans un nouveau volet.

Conseil ! Double cliquez sur le volet **TIC** à un moment donné pour afficher le spectre.

À propos de la création de XIC

Vous pouvez générer un XIC uniquement à partir des chromatogrammes ou spectres d'une seule période et d'une seule expérience. Pour obtenir un XIC des données de période ou expériences multiples séparer les données dans différents volets en cliquant sur le triangle sous l'abscisse x. Consulter le [Tableau 10-8 à la page 88](#) pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles.

Il existe plusieurs méthodes d'extraction des ions pour générer un XIC, en fonction des données chromatographiques ou spectrales utilisées. Le [Tableau 10-5](#) contient un résumé des méthodes qui peuvent être utilisées avec des chromatogrammes et des spectres.

Tableau 10-5 Récapitulatif des méthodes pour générer XIC

Méthode	Utiliser avec un chromatogramme	Utiliser avec un spectre	Extraction
Gamme sélectionnée	Non	Oui	Extrait les ions d'une zone sélectionnée dans un spectre.
Maximum	Non	Oui	Extrait les ions d'une zone sélectionnée dans un spectre à l'aide du pic le plus intense dans la zone sélectionnée. Cette option crée un XIC en utilisant la masse maximale de la gamme spectrale sélectionnée.

Tableau 10-5 Récapitulatif des méthodes pour générer XIC (suite)

Méthode	Utiliser avec un chromatogramme	Utiliser avec un spectre	Extraction
Masses de pics de base	Oui	Oui	Ne peut être utilisée qu'avec des chromatogrammes de pics de base (BPC). Utilisez la commande Use Base Peak Masses (Utiliser des masses de pics de base) pour extraire des résultats d'ions dans un XIC avec un tracé de couleur différente pour chaque masse. Si la sélection inclut plusieurs pics, le XIC trouvé aura un nombre égal de tracés colorés représentant chaque masse.
Masses spécifiées	Oui	Oui	Extrait des ions de tout type de spectre ou chromatogramme. Sélectionnez jusqu'à dix démarrages et arrêts pour lesquels un XIC sera généré

Générez un XIC en utilisant une plage sélectionnée

1. Ouvrez un fichier de données contenant des spectres.
2. Sélectionnez une plage en pressant sur le bouton gauche de la souris au début de la plage, faites glisser le curseur jusqu'au point d'arrêt puis relâchez le bouton gauche de la souris.

La sélection est indiquée en bleu.

3. Cliquez sur **Explore** (Explorer) > **Extract Ions** (Extraire les ions) > **Use Range** (Utiliser la plage).

Un XIC de la sélection s'ouvre dans un volet sous le volet du spectre. L'information de l'expérience en haut du volet contient la gamme de masse et l'intensité maximale comptée par seconde.

Générez un XIC en utilisant le pic maximal.

1. Ouvrez un fichier de données contenant des spectres.
2. Sélectionnez une plage
La sélection est indiquée en bleu.
3. Cliquez sur **Explore** (Explorer) > **Extract Ions** (Extraction d'ions) > **Use Maximum** (Utiliser maximum).

Un XIC du pic maximum spécifié s'ouvre sous le volet du spectre. L'information de l'expérience en haut du volet contient la gamme de masse et l'intensité maximale comptée par seconde.

Générer un XIC en utilisant les masses du pic de base

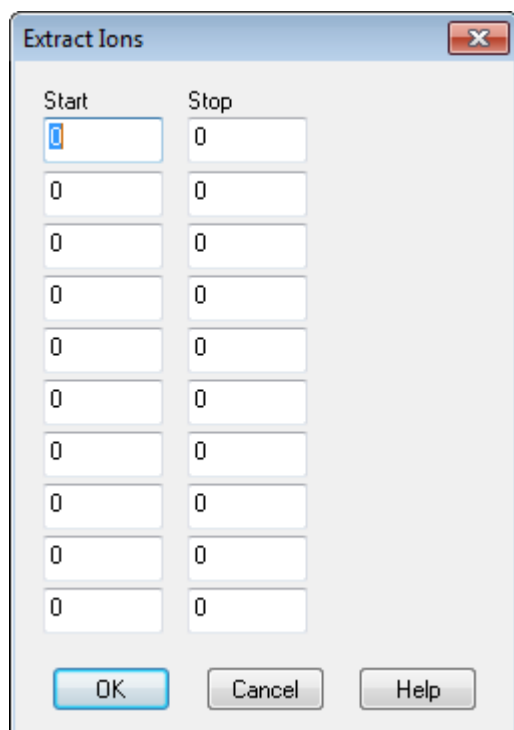
1. Ouvrez un fichier de données contenant des spectres.
2. Dans un BPC, sélectionnez le pic à partir de laquelle il faut extraire des ions.
La sélection est indiquée en bleu.
3. Cliquez sur **Explore (Explorer) > Extract Ions (Extraction d'ions) > Use Base Peak Masses (Utiliser les masses du pic de base)**.

Un XIC de la sélection spécifiée s'ouvre sous le volet du spectre. L'information de l'expérience en haut du volet contient la gamme de masse et l'intensité maximale comptée par seconde.

Extraire des ions en sélectionnant les masses

1. Ouvrir un spectre ou un chromatogramme.
2. Cliquez sur **Explore (Explorer) > Extract Ions (Extraire les ions) > Use Dialog (Utiliser la boîte de dialogue)**.

Figure 10-3 Boîte de dialogue Extract Ions (Extraire les ions)



3. Entrez les valeurs pour chaque XIC à créer. Si une valeur d'arrêt n'est pas saisie, alors la plage est définie par la valeur de démarrage.
 - Dans le champ **Start (Début)**, entrez la valeur de départ (valeur la plus basse) pour la gamme de masse.

- Dans le champ **Stop (Arrêt)**, entrez la valeur d'arrêt (valeur la plus haute) pour la gamme de masse.
4. Cliquez sur **OK**.
Un XIC de la sélection s'ouvre sous le volet du chromatogramme. L'information de l'expérience en haut du volet contient les masses et l'intensité maximale comptée par seconde.

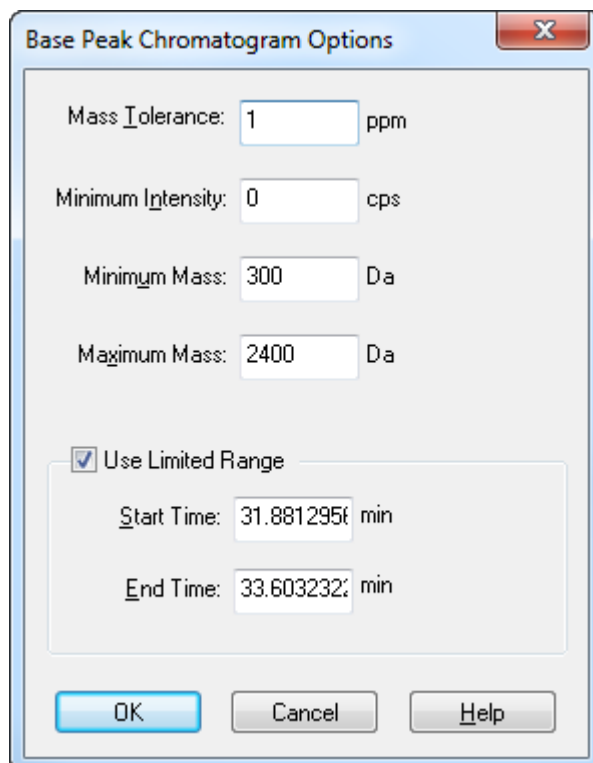
Générer BPC

Les BPC peuvent être créés uniquement à partir des données de période unique et d'expérience unique.

1. Ouvrir un fichier de données.
2. Sélectionnez une zone à l'intérieur d'un TIC.
La sélection est indiquée en bleu.
3. Cliquez sur **Explore** (Explorer) > **Show** (Afficher) > **Show Base Peak Chromatogram** (Afficher le chromatogramme des pics de base).

Les sélections sont affichées dans les champs **Start Time** (Heure de début) et **End Time** (Heure de fin).

Figure 10-4 Options du chromatogramme des pics de base



4. Dans le champ **Mass Tolerance (Tolérance de masse)**, tapez la valeur pour indiquer la plage de masses à utiliser pour trouver un pic. Le logiciel détecte le pic en utilisant une valeur de deux fois celle de la plage entrée (\pm la valeur de la masse).

5. Dans le champ **Minimum Intensity** (Valeur minimale d'intensité), entrez l'intensité au-dessous de laquelle les pics seront ignorés par l'algorithme.
6. Dans le champ **Minimum Mass** (Masse minimale), entrez la masse qui détermine le début de la plage du balayage.
7. Dans le champ **Maximum Mass** (Masse maximale), entrez la masse qui détermine la fin de la plage du balayage.
8. Pour définir les heures de début et de fin, sélectionnez la case à cocher **Use Limited range (Utiliser une plage limitée)** et procédez comme suit :
 - Dans le champ **Start Time (Heure de début)** entrez l'heure de commencement de l'expérience. la masse qui détermine la fin de la plage du balayage.
 - Dans le champ **End Time (heure de fin)**, entrez l'heure de fin d'expérience.
9. Cliquez sur **OK**.

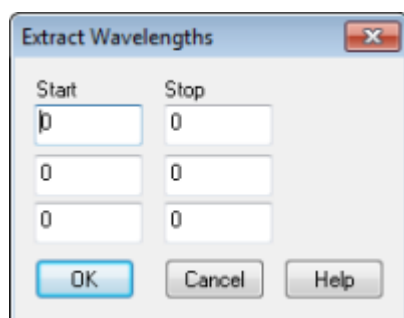
Le BPC est généré dans un nouveau volet.

Générer XWC

Jusqu'à trois plages peuvent être extraites d'un spectre DAD pour générer le XWC. Consultez [Tableau 10-8 à la page 88](#) pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles.

1. Ouvrir un fichier de données qui contient un spectre DAD.
2. Cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans la fenêtre, puis cliquez sur **Extract Wavelength** (Extraire longueurs d'onde).

Figure 10-5 Boîte de dialogue Extract Wavelength (Extraire longueurs d'onde)



3. Saisissez les valeurs **Start** (Démarrage) et **Stop** (Fin).
4. Cliquez sur **OK**.

Le XWC s'ouvre dans un volet en dessous du spectre DAD.

Générer des données DAD

Vous pouvez afficher les données DAD dans un chromatogramme ou un spectre, de la même manière que les données d'un spectromètre de masse.

1. Ouvrir un fichier de données contenant les données acquises avec un DAD.
Le TWC, comme pour un TIC, s'ouvre dans un volet sous le TIC.
2. Dans le volet **TWC**, cliquez sur un point pour sélectionner un unique point dans le temps ou mettez en évidence une zone du spectre pour sélectionner une plage de temps.
3. Cliquez sur **Explore** (Explorer) > **Show** (Afficher) > **Show DAD Spectrum** (Afficher le spectre DAD).

Le spectre DAD s'ouvre dans un volet sous le TWC. L'axe des y affiche l'absorbance et l'axe des x la longueur d'onde.

Conseil ! Si le volet avec le TWC est fermé, cliquez sur un point quelconque dans le TWC pour l'ouvrir à nouveau. Cliquez sur **Explore** (Explorer) > **Show** (Afficher) > **Show Spectrum** (Afficher le spectre).

Générer TWC

Le TWC indique le nombre total d'absorbances (mAU) sur l'axe des y avec le temps sur l'axe des x. Consultez le [Tableau 10-8 à la page 88](#) pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles.

1. Ouvrir un fichier de données qui contient un spectre DAD
2. Cliquez sur **Explore** (Explorer) > **Show** (Afficher) > **Show Spectrum** (Afficher le spectre).

Le TWC s'ouvre dans un volet sous le spectre DAD.

Conseil ! Cliquez avec le bouton droit à l'intérieur du volet contenant le spectre DAD, puis cliquez sur **Show DAD TWC** (Afficher DAD TWC).

Ajuster le seuil

Le seuil est une ligne invisible tirée parallèlement à l'axe des x d'un graphique qui définit une limite au-dessous de laquelle le logiciel n'inclura pas les pics dans un spectre. La ligne a une commande, représentée par un triangle bleu sur la gauche de l'axe des y. Cliquez sur le triangle bleu pour afficher une ligne pointillée que représente le seuil. Le seuil peut être relevé ou abaissé, mais le changement de la valeur du seuil ne modifie pas les données. Le logiciel ne marquera pas les pics dans la zone sous le seuil.

1. Ouvrir un fichier de données.
2. Effectuer l'une des opérations suivantes :

- Pour relever le seuil, faites glisser vers le haut le triangle bleu de l'axe des y. Pour baisser le seuil, faites glisser vers le bas le triangle bleu de l'axe des y.
- Cliquez sur **Explore > pour Paramétrer le Seuil**. Dans la boîte de dialogue **Threshold Options** (options du seuil) qui s'ouvre, tapez la valeur de seuil, puis cliquez sur **OK**.
- Cliquez sur **Explore** (explorer) > **Threshold** (seuil).

Le graphique se met à jour pour afficher le nouveau seuil. L'étiquetage de pics et leur liste sont également mis à jour.

Volet de chromatogramme

Tableau 10-6 Menu contextuel du volet de chromatogramme

Menu	Fonction
Données de la liste	Donne les points des données et intègre les pics trouvés dans les chromatogrammes.
Afficher le spectre	Génère un nouveau volet contenant le spectre.
Afficher tracé de contour	Affiche un tracé en couleur codifié d'un ensemble de données dans lesquels la couleur représente l'intensité des données à ce point. Seuls certains modes MS sont pris en charge.
Extraction d'ions	Extrait un ion spécifique ou un ensemble d'ions d'une fenêtre sélectionnée, puis génère un nouveau volet contenant un chromatogramme pour les ions spécifiques.
Afficher Chromatogramme de pics de base	Génère un nouveau volet contenant un chromatogramme de pic de base.
Afficher données ADC	Génère un nouveau volet contenant les traces de données UV si acquises.
Afficher les données du détecteur UV	Génère un nouveau volet contenant les traces de données UV si acquises.
Assistant arithmétique spectrale	Ouvre l'assistant pour l'arithmétique spectrale.
Enregistrer dans un fichier texte	Génère un fichier texte du volet, qui peut être ouvert dans Microsoft Excel ou d'autres programmes.
Enregistrer Exploration Historique	Enregistre les informations sur les modifications apportées aux paramètres de traitement, également appelés Processing Options (Options de traitement), lorsqu'un fichier .wiff a été traité en mode Explore (Explorer). L'historique du traitement est stocké dans un fichier avec une extension EPH (Exploration Historique du traitement).
Ajouter une légende	Ajoute une légende au point du curseur dans le volet.
Ajouter texte utilisateur	Ajoute une zone de texte au point du curseur dans le volet.

Tableau 10-6 Menu contextuel du volet de chromatogramme (suite)

Menu	Fonction
Définir plage à soustraire	Définit la plage à soustraire dans le volet.
Effacer plage à soustraire	Efface la plage à soustraire dans le volet.
Plage à soustraire verrouillée	Verrouille ou déverrouille la plage sélectionnée. Si les plages à soustraire ne sont pas verrouillées, alors chacune peut être déplacée indépendamment. Les plages à soustraire sont pré-régées verrouillées.
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre sélectionnée.

Spectra Panes (Fenêtres spectrales)

Tableau 10-7 Menu contextuel des Spectra Panes (Fenêtres spectrales)

Menu	Fonction
Données de la liste	Donne les points des données et intègre les chromatogrammes.
Afficher TIC	Génère un nouveau volet contenant les TIC.
Extraction d'ions (Use Range) (Extraire les ions [Utiliser la plage])	Extrait un ion spécifique ou un ensemble d'ions d'une fenêtre sélectionnée, puis génère un nouveau volet contenant un chromatogramme pour les ions spécifiques.
Extract ions (Use Maximum) (Extraire les ions [Utiliser maximum])	Extrait les ions à l'aide du pic le plus intense dans la zone sélectionnée.
Enregistrer dans un fichier texte	Génère un fichier texte du volet, qui peut être ouvert dans Excel ou d'autres programmes.
Enregistrer Exploration Historique	Enregistre les informations sur les modifications apportées aux paramètres de traitement, également appelés Processing Options (Options de traitement), lorsqu'un fichier .wiff a été traité en mode Explore (Explorer). L'historique du traitement est stocké dans un fichier avec une extension EPH(Exploration Historique du traitement).
Ajouter une légende	Ajoute une légende au point du curseur dans le volet.
Ajouter texte utilisateur	Ajoute une zone de texte au point du curseur dans le volet.
Affiche le dernier balayage	Affiche une analyse avant la sélection.
Sélection des pics pour étiquette	Dans cette boîte de dialogue, sélectionnez les paramètres pour réduire l'étiquetage des pics.
Re-Calibrate TOF (Étalonner à nouveau TOF)	Ouvre la boîte de dialogue Re-Calibrate TOF (Étalonner à nouveau TOF)

Tableau 10-7 Menu contextuel des Spectra Panes (Fenêtres spectrales) (suite)

Menu	Fonction
Abscissa (Time) (Abcisses [Temps])	Change l'affichage afin d'afficher les valeurs TOF sur l'axe des x.
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre sélectionnée.
Ajouter un enregistrement	Ajoute des enregistrements et des données relatives aux composés, y compris des données spectrales, à la bibliothèque. Un spectre actif est requis pour effectuer cette tâche.
Rechercher dans la bibliothèque	Recherche dans la bibliothèque sans contrainte ou avec contraintes précédemment enregistrées.
Set Search Constraints (Définir les contraintes de recherche)	Effectue une recherche dans la bibliothèque à l'aide de la boîte de dialogue Search Constraints (Contraintes de recherche).

Traitement des données

Des données graphiques peuvent être traitées de nombreuses façons. Cette section fournit des informations et des procédures pour utiliser certains des outils les plus couramment utilisés.

L'utilisateur peut effectuer un zoom avant sur une partie d'un graphique pour visualiser un pic particulier ou une zone plus en détail tant dans un spectre que dans un chromatogramme. L'utilisateur peut également effectuer un zoom avant à plusieurs reprises pour afficher les petits pics.

Nous recommandons aux utilisateurs de ne pas utiliser les fonctionnalités de création de sous-ensembles incluses dans le logiciel .

Graphiques

Les mêmes données peuvent être examinées de différentes manières. Les données peuvent également être conservées à des fins de comparaison avant l'exécution d'opérations comme le lissage ou la soustraction.

Une fenêtre contenant une ou plusieurs sous-fenêtres disposées de telle manière que tous les volets sont entièrement visibles et qu'ils ne se chevauchent pas.

Les volets peuvent être de taille variable ou fixe. Les volets sont automatiquement mis dans la fenêtre et sont disposés en colonnes et lignes. Si la taille de la fenêtre est modifiée, les volets dans la fenêtre changent en taille pour s'y adapter. Une fenêtre ne doit pas être petite au point que les volets soient réduits à une taille inférieure à leur taille minimale.

Deux ou plusieurs fenêtres ou volets contenant des données semblables peuvent être reliés, par exemple, spectre avec des plages de masses similaires. Quand un volet ou une fenêtre est agrandi, l'autre volet aussi simultanément. Par exemple, l'utilisateur peut relier un XIC au BPC d'où le XIC a été extrait. Agrandir le BPC agrandit également le XIC, ainsi les deux chromatogrammes affichent la même définition.

Gestion des données

- Utilisez les options du menu ou les icônes suivants pour gérer les données dans les graphiques.

Tableau 10-8 Options de graphique











Pour ce faire...	utilisez cette option de menu ou cliquez sur cette icône
Copier un graphique dans une nouvelle fenêtre	Sélectionnez le graphique à copier. Cliquez sur Explore (explorer) > Duplicate Data (dupliquer les données) > In New Window (dans une nouvelle fenêtre).	
Remet à l'échelle d'origine le graphique	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Explore (explorer) > Home Graph (accueil des graphiques).	
Déplacer un volet	<ul style="list-style-type: none"> Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window (Fenêtre) > Move Pane (Déplacer le volet). Sélectionnez le volet ou la fenêtre et puis faites-le glisser vers la nouvelle position. Cette position peut être dans la même fenêtre ou dans une autre fenêtre. <p>Une flèche à quatre pointes est affichée lorsque le curseur est sur la limite de la fenêtre active ou le volet.</p> <ul style="list-style-type: none"> Si le volet est en haut ou en bas du volet cible, la fenêtre se déplace au-dessus ou au-dessous de ce volet, respectivement. Si le volet est à droite ou à gauche du volet cible, la fenêtre se déplace à droite ou à gauche de ce volet, respectivement. Si le volet est dans une autre position, le volet se déplace vers la ligne cible. L'ombre portée du volet quand il est déplacé indique sa nouvelle position. 	
Lien volets	<ol style="list-style-type: none"> Avec deux graphes ouverts, cliquez sur l'un pour le rendre actif. Cliquez sur Explore (Explorer), > Link (Lien), puis cliquez sur l'autre volet. 	
Supprimer le lien	Fermer l'un des volets. Cliquez sur Explore (Explorer), puis > Remove Link (Supprimer le lien).	
Supprimer un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window (Fenêtre) > Delete Pane (Supprimer le volet).	
Verrouiller un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window (fenêtre), puis > Lock Panes (verrouiller les volets).	

Tableau 10-8 Options de graphique (suite)

Pour ce faire...	utilisez cette option de menu ou cliquez sur cette icône
Masquer un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window (fenêtre), puis > Hide Pane (masquer un volet).	
Maximiser un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window (fenêtre), puis > Maximize Pane (maximiser un volet).	
Organiser les volets en mosaïque	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window (fenêtre), puis > Tile all Panes (Organiser tous les volets en mosaïque).	

Effectuez un zoom avant sur l'axe des y

1. Déplacez le pointeur vers la gauche de l'axe des y d'un côté ou de l'autre de la zone à développer puis faites glisser depuis le point de départ en direction verticale tout en maintenant appuyé le bouton gauche de la souris.

Une case est tracée le long de l'axe des y représentant la nouvelle échelle.

Remarque : Prenez garde lorsque vous effectuez un zoom avant sur la ligne de base. Si l'agrandissement est trop important, la boîte d'agrandissement se ferme.

2. Relâcher le bouton de la souris pour tracer le graphe à la nouvelle échelle.

Effectuez un zoom avant sur l'axe des x

Conseil ! Restaurez le graphique à son échelle d'origine en double cliquant sur l'un des axes. Pour restaurer le graphique à son échelle d'origine, cliquez sur **Explore** (Explorer) > **Home Graph** (Accueil graphique).

1. Déplacez le pointeur sous l'axe des x d'un côté ou de l'autre de la zone à développer puis faites glisser depuis le point de départ en direction horizontale tout en maintenant appuyé le bouton gauche de la souris.
2. Relâcher le bouton de la souris pour tracer le graphe à la nouvelle échelle.

Informations relatives au service et à l'entretien

11

Nettoyer régulièrement et entretenir le système pour garder des performances optimales. Consultez le [Tableau 11-1](#) pour plus d'informations sur la fréquence des réglages.



AVERTISSEMENT ! Risque d'irradiation, risques biologiques ou de toxicité chimique : déterminer si une décontamination du spectromètre de masse est nécessaire avant de procéder au nettoyage ou à la maintenance. La décontamination doit être effectuée avant tout nettoyage si des matières radioactives, des agents biologiques ou des produits chimiques toxiques ont été utilisés avec un spectromètre de masse.

Calendrier recommandé de nettoyage et de maintenance

Tableau 11-1 Tâches de Maintenance

Composant	Fréquence	Tâche	Pour plus d'informations ...
Plaque rideau	Quotidienne	Nettoyer	Voir Nettoyer la plaque rideau à la page 95 .
Plaque à orifice (avant)	Quotidienne	Nettoyer	Voir Nettoyer l'avant de la plaque à orifice à la page 96 .
Plaque à orifice (avant et arrière)	Selon besoin	Nettoyer	Communiquez avec le responsable de maintenance qualifié local (QMP) ou le technicien de service (FSE) AB SCIEX.
guide d'ions QJet® et lentille IQ0	Selon besoin	Nettoyer	Contactez un technicien QMP ou FSE.
Lentille Q0 et IQ1	Selon besoin	Nettoyer	Contactez un technicien QMP ou FSE.
Surfaces de l'instrumentation	Selon besoin	Nettoyer	Voir Nettoyer les surfaces à la page 91 .
Bouteille de vidange	Selon besoin	Vider	Voir Vider le conteneur de trop-plein à la page 97 .
Huile de pompe primaire	Selon besoin	Contrôler et remplir	Contactez un technicien QMP ou FSE.

Tableau 11-1 Tâches de Maintenance (suite)

Composant	Fréquence	Tâche	Pour plus d'informations ...
Instrumentation filtre à air	Tous les 6 mois	Inspecter et nettoyer ou remplacer	Contactez un technicien QMP ou FSE.
TurbolonSpray® et électrodes APCI	Selon besoin	Inspecter et nettoyer ou remplacer	
Aiguille de décharge par effet corona	Selon besoin	Remplacer	

Pour les tâches « Selon besoin », suivez ces directives :

- Nettoyez le guide d'ions QJet et la zone Q0 si la sensibilité du système se dégrade.

Conseil ! Nettoyez la zone Q0 régulièrement afin de minimiser l'impact de la charge (perte considérable de sensibilité des ions d'intérêt sur une courte durée) sur les quadripôles et les lentilles. Communiquez avec un responsable de maintenance qualifié (QMP) ou un technicien de service (FSE) AB SCIEX.

- Nettoyez les surfaces du spectromètre de masse après un déversement ou si elles sont sales.
- Videz la bouteille de vidange lorsqu'elle est pleine.

Nettoyer les surfaces

Nettoyez les surfaces externes du spectromètre de masse après un déversement ou si elles sont sales.



AVERTISSEMENT ! Risque biologique, risque de toxicité chimique : prendre toutes les précautions de sécurité nécessaires et respecter toutes les réglementations et directives en vigueur lors de la manipulation et de l'élimination de l'huile de la pompe primaire. Veiller à éviter les déversements, et en cas de déversement, suivre les procédures de contrôle des déversements en vigueur.

1. Essuyer les surfaces extérieures avec un chiffon doux humidifié à l'eau tiède et savonneuse.
2. Essuyez les surfaces extérieures avec un chiffon doux imbibé d'eau tiède et savonneuse.

Nettoyer la façade

Nettoyer l'avant du spectromètre de masse de manière classique, pour :

- Minimiser les temps d'arrêt du système.

Informations relatives au service et à l'entretien

- Maintenir une sensibilité optimale.
- Éviter un nettoyage plus important lors des visites d'entretien.

Lors d'une contamination, effectuer un premier nettoyage de routine. Nettoyer jusqu'à et y compris l'avant de la plaque à orifice. Si le nettoyage ne résout pas les problèmes de sensibilité, un nettoyage complet peut être nécessaire.

Cette section fournit des instructions du nettoyage de routine sans interrompre la dépression et du nettoyage complet sous atmosphère, après ventilation du spectromètre de masse.

Remarque : Suivre les réglementations locales applicables. Pour obtenir des consignes de santé et de sécurité, consultez [Précautions chimiques à la page 8](#).

Symptômes de contamination

Le système peut être contaminé si l'un des éléments suivants n'est pas respecté :

- Importante perte de sensibilité
- Bruit de fond accru
- Les pics supplémentaires qui ne font pas partie de l'échantillon apparaissent dans les méthodes à balayage complet ou à balayage d'exploration

Si l'utilisateur détecte l'un de ces problèmes, nettoyer la façade du spectromètre de masse.

Matériel nécessaire

Remarque : Les clients basés aux États-Unis peuvent composer le 877-740-2129 pour solliciter des informations et renseignements. Les clients internationaux peuvent consulter le site www.absciex.com/contact-us.

- Gants non poudrés (nitrile ou néoprène recommandé)
- Lunettes de sécurité
- Blouse de laboratoire
- Eau (pure) fraîche et de grande qualité (minimum eau dé-ionisée 18 M Ω [DI] ou eau de qualité HPLC). De l'eau ancienne peut contenir des éléments susceptibles de contaminer le spectromètre de masse.
- Méthanol, isopropanol (2-propanol) ou acétonitrile de qualité MS
- Solution de nettoyage. Utilisez l'une des options suivantes :
 - 100% de méthanol
 - 100 % d'isopropanol
 - Solution à 50:50 d'acétonitrile et d'eau (préparation au jour le jour)
 - Solution à 50:50 d'acétonitrile et d'eau avec 0,1 % d'acide acétique (préparation au jour le jour)
- Nettoyer le pichet en verre de 1 l ou 500 ml pour préparer des solutions de nettoyage.

- Pichet de 1 l pour récupérer le solvant utilisé
- Conteneur de déchets organiques
- Lingettes non pelucheuses. Se reporter à [Outils et fournitures disponibles auprès du fabricant à la page 93](#).
- (En option) Cotons-tiges

Outils et fournitures disponibles auprès du fabricant

Description	Numéro de référence
Petite tige en polyester (thermoliée). Disponible dans le kit de nettoyage.	1017396
Lingette non pelucheuse (11 cm x 21 cm). Disponible dans le kit de nettoyage.	018027
Outil de nettoyage Q0 pour nettoyer le jeu de tiges du Q0. Disponible dans le kit de nettoyage.	1028234
Brosse QJet® de nettoyage du guide d'ions personnalisée (conique). Disponible dans le kit de nettoyage.	5020895
Paquets d'Alconox. Disponible dans le kit de nettoyage.	5020893
Kit de nettoyage. Comprend les petits écouvillons en polyester, les lingettes non pelucheuses, l'outil de nettoyage du Q0, la brosse de nettoyage du guide d'ions conique QJet et des sachets d'alconox.	5020763

Meilleures pratiques



AVERTISSEMENT ! Risque de toxicité chimique : suivre toutes les consignes de sécurité lors de la manipulation, de la conservation et de l'élimination des produits chimiques.



AVERTISSEMENT ! Risque d'irradiation, risques biologiques ou de toxicité chimique : déterminer si une décontamination du spectromètre de masse est nécessaire avant de procéder au nettoyage ou à la maintenance. La décontamination doit être effectuée avant tout nettoyage si des matières radioactives, des agents biologiques ou des produits chimiques toxiques ont été utilisés avec un spectromètre de masse.



AVERTISSEMENT ! Risque pour l'environnement : ne pas jeter de composants du système dans les déchetteries municipales. Suivre les procédures en vigueur applicables à l'élimination des composants.

- Toujours porter des gants sans poudre, pour les procédures de nettoyage.

Informations relatives au service et à l'entretien

- Après le nettoyage des composants du spectromètre de masse et avant de les remonter, enfiler une paire de gants propres et neufs.
- Ne pas utiliser les produits de nettoyage autres que ceux spécifiés dans cette procédure.
- Si possible, préparer les solutions de nettoyage juste avant de commencer à nettoyer.
- Préparer et stocker toutes les solutions organiques et celles contenant de l'organique dans du verre très propre uniquement. Ne jamais utiliser de bouteilles en plastique. Les contaminants peuvent s'infiltrer dans ces bouteilles et contaminer après le spectromètre de masse.
- Ne mettre que la partie centrale de la lingette en contact avec la surface du spectromètre de masse. Les bords de coupe peuvent perdre des fibres.

Conseil ! Envelopper la lingette autour de l'écouvillon en polyester thermolié (écouvillon en polyester).

Figure 11-1 Exemple : Plier la lingette



- Afin d'éviter toute contamination croisée, jeter la lingette ou la tige après une seule entrée en contact avec la surface.
- Les plus grandes pièces de l'interface avec le vide, comme la plaque rideau, peuvent nécessiter plusieurs nettoyages, utiliser plusieurs lingettes.
- Pour éviter de contaminer la solution de nettoyage, verser la solution sur la lingette ou sur l'écouvillon.
- Humidifier la lingette ou la tige lors de l'utilisation d'eau ou de solution de nettoyage. L'eau, plus souvent que les solvants organiques, risque de désagréger la lingette et de laisser des résidus sur le spectromètre de masse.
- Ne pas frotter la lingette sur l'ouverture. Essuyer autour de l'ouverture pour éviter que les fibres de la lingette n'entrent dans le spectromètre de masse.
- Ne pas introduire la brosse dans l'orifice de la plaque rideau ou de la plaque à orifice.

Préparer le spectromètre de masse

L'avertissement suivant s'applique à toutes les procédures citées dans cette section :



AVERTISSEMENT ! Risque sur surface chaude. Laisser la source d'ions refroidir pendant au moins 30 minutes avant de commencer la moindre procédure de maintenance. Les surfaces de la source d'ions et des composants de l'interface avec le vide deviennent chaudes pendant le fonctionnement.

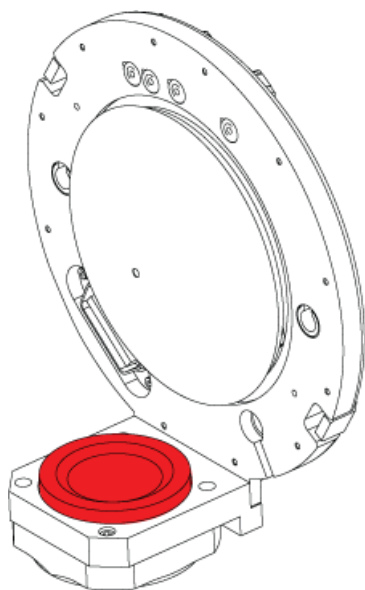
Remarque : Les spectromètres de masse avec une source d'ions NanoSpray[®] peuvent nécessiter un nettoyage complet pour obtenir des résultats optimaux. Contacter un FSE.

1. Désactiver le profil matériel. Se reporter au *Guide de l'utilisateur du système*.
2. Enlever la source d'ions. Se référer au *Guide de l'opérateur* de la source d'ions.

Attention : Risque d'endommagement du système. Ne rien laisser tomber dans le drain de la source une fois la source d'ions retirée.

Lorsque la source d'ions n'est pas utilisée, la ranger afin de la protéger contre les détériorations et de maintenir l'intégrité de son fonctionnement.

Figure 11-2 Drain de la source sur l'interface de dépression

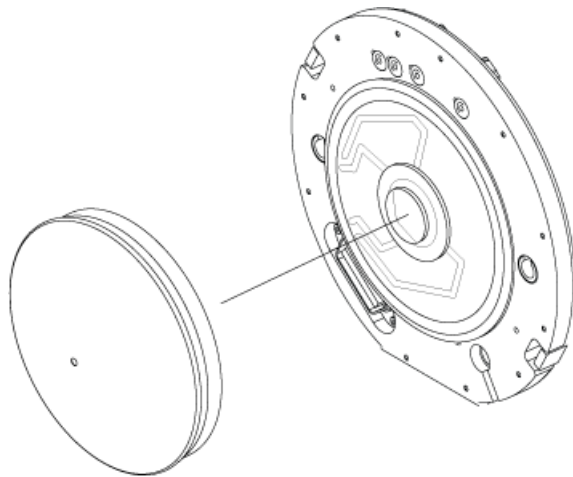


Nettoyer la plaque rideau

Attention : Risque d'endommagement du système : ne pas poser la plaque rideau ni la plaque à orifice sur la pointe de l'orifice. Vérifier que le côté conique de la plaque rideau est tourné vers le haut.

1. Retirer la plaque rideau puis la placer, côté conique tourné vers le haut, sur une surface propre et stable.

Figure 11-3 Retrait de la plaque rideau



Attention : Risque d'endommagement du système : ne pas introduire un câble ou une brosse métallique dans l'ouverture de la plaque rideau, de la plaque à orifice ou du chauffage de l'interface pour éviter d'endommager l'ouverture.

- Humidifier une lingette non pelucheuse avec de l'eau pure et nettoyer les deux côtés de la plaque rideau. Utiliser plusieurs lingettes si nécessaire.
- Répéter l'étape 2 avec la solution de nettoyage.
- Utiliser un chiffon humidifié ou une petite tige, nettoyez l'ouverture.
- Attendre le séchage de la plaque rideau.
- Inspecter la plaque rideau pour s'assurer qu'elle est exempte de taches de solvant ou de peluches, éliminer les résidus avec une lingette propre, légèrement humide et non pelucheuse.

Remarque : Les taches ou films persistants indiquent la présence d'un solvant contaminé.

Nettoyer l'avant de la plaque à orifice

Lors du nettoyage de la plaque à orifice standard équipée d'un chauffage d'interface amovible, ne pas retirer le chauffage d'interface. La surface du chauffage d'interface peut être nettoyée régulièrement.

Attention : Risque d'endommagement du système : ne pas introduire un câble ou une brosse métallique dans l'ouverture de la plaque rideau, de la plaque à orifice ou du chauffage de l'interface pour éviter d'endommager l'ouverture.

Remettre le spectromètre de masse en service

- Installer la plaque rideau sur le spectromètre de masse.

2. Installer la source d'ions sur le spectromètre de masse. Ne pas oublier de serrer la source d'ions en tournant ses loquets de verrouillage vers le bas, en position de verrouillage.
3. Activer le profil d'équipement.

Vider le conteneur de trop-plein

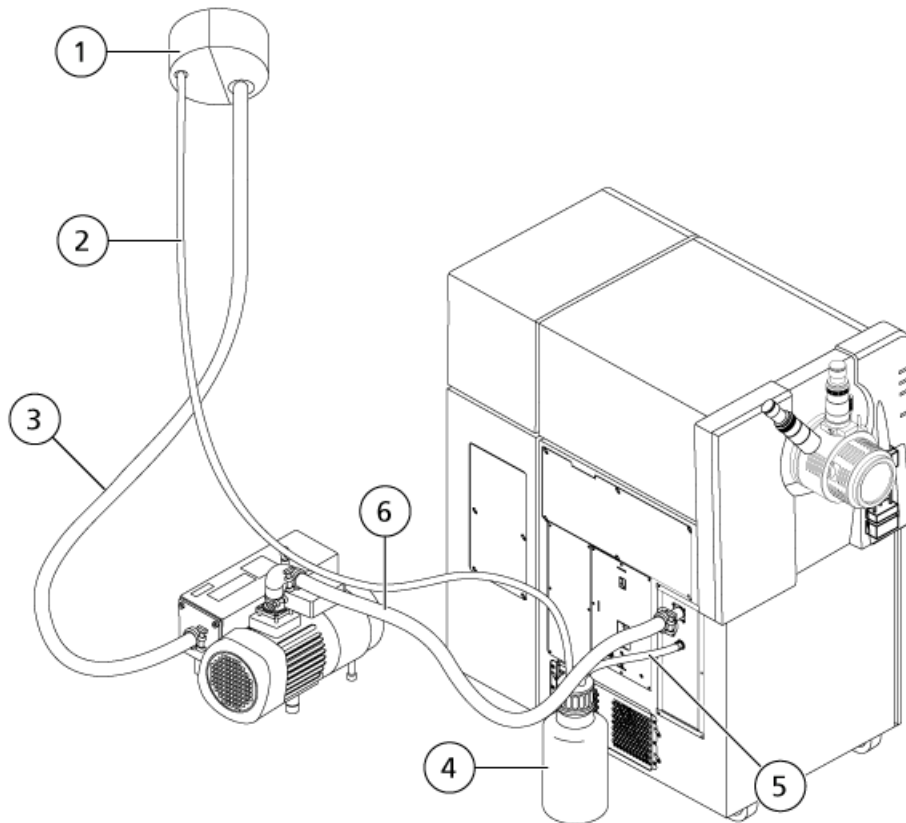
Vider la bouteille de vidange de la source avant qu'elle ne soit pleine.



AVERTISSEMENT ! Risque d'irradiation, risques biologiques ou de toxicité chimique : déposer le matériel biologique dangereux dans des conteneurs de déchets étiquetés correctement. Risque de blessure si les procédures adéquates de traitement et d'élimination des matériaux dangereux ne sont pas suivies.

1. Desserrez les colliers qui relient les tuyaux au capuchon de la bouteille de vidange de la source.
2. Détachez les tuyaux du capuchon.
3. Le cas échéant, soulevez la bouteille de vidange et retirez-la de son support.
4. Retirez le bouchon du conteneur de trop-plein.
5. Videz la bouteille de vidange, puis débarrassez-vous des déchets.
6. Remettez le capuchon sur la bouteille et replacez celle-ci dans son support.
7. Reliez les tuyaux au capuchon et fixez-les convenablement à l'aide des colliers.

Figure 11-4 Conteneur de trop-plein



Élément	Description
1	Connexion à la ventilation.
2	Tubulure d'évacuation pour la vidange de la source : 2,5 cm (1,0 po) de diamètre intérieur
3	Flexible d'évacuation de la pompe primaire : 3,2 cm (1.25 p) de diamètre intérieur
4	Bouteille de vidange de la source (Ce schéma présente la bouteille de vidange pourvue de son capuchon à l'arrière du spectromètre de masse afin que les ports de branchement soient visibles.) La bouteille de vidange peut se trouver sur le côté du spectromètre de masse, logée dans son support. Assurez-vous que la bouteille est bien fixée afin d'empêcher les déversements.)
5	Branchement au spectromètre de masse : 1,6 cm (0,625 po) de diamètre intérieur
6	Flexible d'entrée de dépression de la pompe primaire

Stockage et manutention



AVERTISSEMENT ! Risque pour l'environnement : ne pas jeter de composants du système dans les déchetteries municipales. Suivre les procédures en vigueur applicables à l'élimination des composants.

Si le spectromètre de masse doit être entreposé pendant une période prolongée ou préparé pour expédition, communiquer avec un technicien de service (FSE) AB SCIEX pour obtenir des informations relatives à sa mise hors service. Pour débrancher l'alimentation du spectromètre de masse, retirer la prise électrique de la prise secteur murale.

Remarque : Le système doit être transporté et stocké entre -30 °C et $+60\text{ °C}$. Stocker le système à moins de 2000 m d'altitude.

Ce chapitre contient des informations de base pour le dépannage de problèmes basiques sur le système. Certaines activités peuvent être menées par le responsable de maintenance qualifié (QMP) formé d'AB SCIEX dans le laboratoire. Pour un dépannage plus important, contacter un technicien.

Tableau 12-1 Problèmes sur le système

Symptôme	Cause possible	Action corrective
Perte de sensibilité	L'instrumentation ou la source d'ions nécessite un réglage et une optimisation	Voir <i>Instructions d'utilisation : réglage et étalonnage à la page 47</i> . système d'aide du Logiciel Analyst® TF
	Plaque rideau sale	Voir <i>Nettoyer la plaque rideau à la page 95</i> .
	Plaque à orifice sale	Voir <i>Nettoyer l'avant de la plaque à orifice à la page 96</i> .
	Guide d'ions QJet® filtre, Q0 or IQ0 sales	Contactez un technicien de service ou un responsable de maintenance qualifié (QMP).
Contaminations fréquentes ou fortes du guide d'ions QJet	Le débit (CUR) Curtain Gas™ est trop faible.	Vérifiez le réglage du paramètre CUR et augmentez-le le cas échéant.
Pression basse de l'aspiration	Niveau bas de l'huile de la pompe primaire	Vérifiez le niveau d'huile de la pompe primaire et ajoutez de l'huile si nécessaire. Contactez un technicien de service ou un responsable de maintenance qualifié (QMP).

Pour les ventes, une assistance technique ou de maintenance, communiquez avec un technicien de service FSE ou visitez le site d'AB SCIEX à l'adresse www.absciex.com pour obtenir leurs coordonnées.

Ions d'étalonnage recommandés

A

Les tableaux suivants présentent les normes recommandées par AB SCIEX pour l'étalonnage des systèmes AB SCIEX TripleTOF® 4600. Pour plus d'informations sur les solutions d'ajustement, reportez-vous à [Instructions d'utilisation : réglage et étalonnage à la page 47](#).

Tableau A-1 Ions d'étalonnage positifs Q1 PPG

Masses					
59,04914	233,17472	442,33740	674,50484	906,67228	1196,88158

Tableau A-2 Ions d'étalonnage négatif Q1 PPG

Masses				
44,99819	411,25991	585,38549	933,63665	1165,80409

Tableau A-3 Solution d'étalonnage positif APCI et solution d'étalonnage positif ESI : TOF MS

TOF MS	Masses
acide aminoheptanoïque	146,11756
acide aminé dPEG-4	266,15981
clomipramine	315,16225
acide aminé dPEG-6	354,21224
acide aminé dPEG-8	442,26467
réserpine	609,28066
acide aminé dPEG-12	618,36953
Hexakis(2,2,3,3-tétrafluoropropoxy) phosphazine	922,0098
Hexakis(1H,1H,5H-octafluoropentoxy) phosphazine	1521,97148

Ions d'étalonnage recommandés

Tableau A-4 Solution d'étalonnage positif APCI et solution d'étalonnage positif ESI : MS/MS (clomipramine)

MSMS (clomipramine)	Masses
C ₃ H ₈ N	58,0651
C ₅ H ₁₂ N	86,0964
C ₁₆ H ₁₄ N	220,1121
C ₁₄ H ₁₀ NCl	227,0496
C ₁₇ H ₁₇ N	235,1356
C ₁₅ H ₁₃ NCl	242,0731
C ₁₇ H ₁₇ ClN	270,1044
C ₁₉ H ₂₃ ClN ₂	315,16225

Tableau A-5 Solution d'étalonnage négatif APCI et solution d'étalonnage négatif ESI : TOD MS

TOF MS	Masses
acide aminoheptanoïque-7	144,103
acide aminé dPEG-4	264,14526
fragment de sulfinpyrazone	277,09825
acide aminé dPEG-6	352,19769
sulfinpyrazone	403,11219
acide aminé dPEG-8	440,25012
acide aminé dPEG-12	616,35498
acide aminé dPEG-16	792,45984

Tableau A-6 Solution d'étalonnage négatif APCI et solution d'étalonnage négatif ESI : MS/MS (sulfinpyrazone)

MS/MS (sulfinpyrazone)	Masses
C ₆ H ₅ O	93,0344
C ₆ H ₅ OS	125,0067
C ₁₀ H ₈ NO	158,06114
C ₁₇ H ₁₃ N ₂ O ₂	277,0983
C ₂₃ H ₂ ON ₂ OS ₃	403,11219

Tableau A-7 Solution d'étalonnage négatif APCI et solution d'étalonnage négatif ESI : MS/MS (fragment sulfinpyrazone)

MS/MS (Fragment sulfinpyrazone)	Masses
C ₆ H ₅	77,03967
C ₈ H ₆ N	116,0506
C ₉ H ₈ N	130,0662
C ₁₀ H ₈ NO	158,0611
C ₁₁ H ₈ N ₂ O ₂	200,0591
C ₁₅ H ₉ N ₂	217,0771
C ₁₆ H ₁₃ N ₂ O	249,1033
C ₁₇ H ₁₃ N ₂ O ₂	277,09825

Masses exactes et formules chimiques

B

PPG

Le [Tableau B-1](#) contient les masses monoisotopiques exactes et les espèces chargées (positives et négatives) observées avec les solutions d'étalonnage du PPG (polypropylène glycol). Les masses et les ions ont été calculés à l'aide de la formule $M = H[OC_3H_6]_nOH$, bien que les fragments MS/MS de l'ion positif aient utilisé la formule, $[OC_3H_6]_n(H^+)$. Dans tous les calculs, $H = 1,007825$, $O = 15,99491$, $C = 12,00000$ et $N = 14,00307$.

Remarque : Lors de la réalisation des étalonnages avec les solutions de PPG, utilisez le pic isotopique adéquat.

Tableau B-1 Masses exactes du PPG

n	Masse exacte (M)	(M + NH ₄) ⁺	Fragments MS/MS	(M + NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
1	70,05242	94,08624	59,04914	56,06003	121,05061
2	134,09428	152,12810	117,09100	85,08096	179,09247
3	192,13614	210,16996	175,13286	114,10189	237,13433
4	250,17800	268,21182	233,17472	143,12282	295,17619
5	308,21986	326,25368	291,21658	172,14375	353,21805
6	366,26172	384,29554	349,25844	201,16468	411,25991
7	424,30358	442,33740	407,30030	230,18561	469,30177
8	482,34544	500,37926	465,34216	259,20654	527,34363
9	540,38730	558,42112	523,38402	288,22747	585,38549
10	598,42916	616,46298	581,42588	317,24840	643,42735
11	656,47102	674,50484	639,46774	346,26933	701,46921
12	714,51288	732,54670	697,50960	375,29026	759,51107
13	772,55474	790,58856	755,55146	404,31119	817,55293
14	830,59660	848,63042	813,59332	433,33212	875,59479
15	888,63846	906,67228	871,63518	462,35305	933,63665
16	946,68032	964,71414	929,67704	491,37398	991,67851
17	1004,72218	1022,75600	987,71890	520,39491	1049,72037

Tableau B-1 Masses exactes du PPG (suite)

n	Masse exacte (M)	(M + NH ₄) ⁺	Fragments MS/MS	(M + NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
18	1062,76404	1080,79786	1045,76076	549,41584	1107,76223
19	1120,80590	1138,83972	1103,80262	578,43677	1165,80409
20	1178,84776	1196,88158	1161,84448	607,45770	1223,84595
21	1236,88962	1254,92344	1219,88634	636,47863	1281,88781
22	1294,93148	1312,96530	1277,92820	665,49956	1339,92967

Résérpine

Résérpine (C₃₃H₄₀N₂O₉)

Tableau B-2 Masses exactes de résérpine

Description	Masse
Ion moléculaire C ₃₃ H ₄₁ N ₂ O ₉	609,28066
Fragment C ₂₃ H ₃₀ NO ₈	448,19659
Fragment C ₂₃ H ₂₉ N ₂ O ₄	397,21218
Fragment C ₂₂ H ₂₅ N ₂ O ₃	365,18597
Fragment C ₁₃ H ₁₈ NO ₃	236,12812
Fragment C ₁₀ H ₁₁ O ₄	195,06519
Fragment C ₁₁ H ₁₂ NO	174,09134

Acide taurocholique

Acide taurocholique (C₂₆H₄₅NO₇S)

Tableau B-3 Masses exactes de l'acide taurocholique

Description	Masse
Ion moléculaire C ₂₆ H ₄₄ NO ₇ S	514,28440
Fragment C ₂ H ₃ O ₃ S	106,98084
Fragment C ₂ H ₆ NO ₃ S	124,00739
Fragment SO ₃	79,95736

Solution d'étalonnage TOF

Tableau B-4 Masses exactes de la solution d'étalonnage TOF

Description	Masse
Ion moléculaire Ion Cs ⁺	132,90488
Ion moléculaire du peptide ALILTLVS	829,53933

Icônes de la Barre d'Outils

C

Pour les icônes supplémentaires de la barre d'outils, reportez-vous au *Advanced User Guide* (guide de l'utilisateur expert).

Tableau C-1 Icônes de la barre d'outils



Icône	Nom	Description
	Nouveau sous-projet	Créer un sous-projet. Les sous-projets peuvent uniquement être créés plus tard dans le processus si le projet a été initialement créé avec des sous-projets.
	Copier sous-projet	Copie un dossier sous-projet. Les sous-projets peuvent être copiés seulement à partir d'un autre projet qui possède déjà des sous-projets. Si les mêmes dossiers existent tant au niveau du projet que du sous-projet, le logiciel utilise les dossiers au niveau du projet.

Tableau C-2 Icônes Acquisition Method Editor (éditeur des méthodes d'acquisition)









Icône	Nom	Description
	Spécification de la masse	Affiche l'onglet MS dans l'éditeur Acquisition Method (Méthode d'acquisition).
	Période	Cliquez avec le bouton droit pour ajouter une expérience, un IDA Criteria Level (Niveau de critère IDA) ou supprimer la période.
	Auto-échantillonneur	Ouvre l'onglet Autosampler Properties (Propriétés de l'auto-échantillonneur).
	Pompe de la seringue	Ouvre l'onglet Syringe Pump Properties (Propriétés de la pompe à seringue).
	Four à colonne	Ouvre l'onglet Column Oven Properties (Propriétés du four à colonne)
	Soupape	Ouvre l'onglet Valve Properties (Propriétés de la soupape).
	DAD	Ouvre le DAD Method Editor (Éditeur de la méthode DAD). Voir Générer des données DAD à la page 84 .
	ADC	Ouvre l'onglet ADC Properties (propriétés de ADC). Voir Afficher données ADC à la page 77 .

Tableau C-3 Icônes du mode Acquisition


















Icône	Nom	Description
	Afficher la file d'attente	Affiche la file d'attente d'échantillons.
	File d'attente Instrumentation	Affiche un poste d'instrument à distance.
	Statut de l'instrumentation à distance	Affiche le statut d'un instrument à distance.
	Démarrer échantillon	Démarre l'échantillon dans la file d'attente.
	Arrêter échantillons	Arrête l'échantillon dans la file d'attente.
	Abandonne échantillon	Interrompt une acquisition d'échantillons au milieu de son traitement.
	Arrêt de file d'attente	Arrête la file d'attente avant d'avoir terminé le traitement de tous les échantillons.
	Pause échantillon immédiate	Insère une pause dans la file d'attente.
	Insérer Pause avant Sélection d'échantillon(s)	Insère une pause avant un échantillon spécifique.
	Continuer échantillon	Continue l'acquisition de l'échantillon.
	Prochaine Période	Démarre une nouvelle période.
	Prolonger la période	Étend la période en cours.
	Échantillon suivant	Arrête l'acquisition de l'échantillon actuel et commence l'acquisition de l'échantillon suivant.
	Équilibrer	Sélectionne la méthode utilisée pour équilibrer les appareils. Cette méthode doit être la même que la méthode utilisée avec le premier échantillon dans la file d'attente.
	Mise en veille	Met l'instrument en mode Standby (Veille).
	Prêt	Met l'instrument en mode Ready (Prêt).
	Réserver Instrumentation pour réglage	Réserve le spectromètre de masse pour le réglage et l'étalonnage.

Tableau C-3 Icônes du mode Acquisition (suite)



Icône	Nom	Description
	Assistant Méthode	Démarre l' Method Wizard (assistant de la méthode IDA).
	Modificateur de la purge	Démarre la purge du modificateur de la pompe du modificateur.

Tableau C-4 Icônes du mode Tune and Calibrate (Réglage et étalonnage)









Icône	Nom	Description
	Étalonnage à partir d'un spectre	Ouvre la Mass Calibration Option (option d'étalonnage de la masse) et utilise le spectre actif pour étalonner le spectromètre de masse.
	Réglage manuel	Ouvre le Manual Tune Editor (éditeur de réglage manuel).
	Optimisation de l'instrument	Vérifie la performance de l'instrument, ajuste l'étalonnage de masse ou ajuste les paramètres du spectromètre de masse.
	Afficher la file d'attente	Affiche la file d'attente
	File d'attente Instrumentation	Affiche un instrument à distance
	Statut de l'instrumentation à distance	Affiche l'état d'un instrument à distance.
	Réserver Instrumentation pour réglage	Réserve l'instrumentation pour le réglage et l'étalonnage.
	Modificateur de la purge	Cliquez pour nettoyer ou vider le modificateur de la pompe du modificateur.

Tableau C-5 Référence exploration rapide: chromatogrammes et spectre




Icône	Nom	Description
	Ouvrez les fichiers de données	Ouvre les fichiers.
	Afficher échantillon Suivant	Va à l'échantillon suivant.
	Afficher échantillon précédent	Va à l'échantillon précédent.

Tableau C-5 Référence exploration rapide: chromatogrammes et spectre (suite)


















Icône	Nom	Description
	Aller à Échantillon	Ouvre la boîte de dialogue Select Sample (Sélectionner un échantillon).
	Données de la liste	Vues des données dans des tableaux.
	Afficher TIC	Génère un TIC à partir d'un spectre.
	Boîte de dialogue Utilisation Extraction	Extrait des ions en sélectionnant les masses
	Afficher Chromatogramme de pics de base	Génère un BPC
	Afficher le spectre	Génère un spectre à partir d'un TIC
	Copier un graphique dans une nouvelle fenêtre	Copie le graphique actif dans une nouvelle fenêtre
	Enlever la référence	Ouvre la boîte de dialogue Baseline Subtract (Enlever la référence).
	Seuil	Ajuste le seuil
	Filtre pour le bruit	Affiche la boîte de dialogue Noise Filter Options (options du filtre pour le bruit), qui peut être utilisée pour définir la largeur minimum d'un pic. Les signaux en dessous de cette largeur minimale sont considérés comme du bruit.
	Afficher ADC	Affiche les données CAN.
	Afficher le fichier Info	Affiche les conditions de l'expérience dans la collecte des données.
	Ajoutez des flèches	Ajoute des flèches à l'axe des x du graphique actif.
	Enlever toutes les flèches	Enlève des flèches de l'axe des x du graphique actif.
	Décalage graphique	Compense les légères différences de temps pendant lequel les données CAN et celles du spectromètre de masse ont été enregistrées. Ceci est utile lors de la superposition des graphiques pour comparaison.
	Forcer pour les étiquettes des pics	Étiquette tous les pics.
	Dérouler Sélection par	Définit le facteur d'expansion pour une portion d'un graphique pour être affiché de manière plus détaillée.

Tableau C-5 Référence exploration rapide: chromatogrammes et spectre (suite)











Icône	Nom	Description
	Effacer les plages	Remet la sélection étendue à son affichage normal.
	Définir la sélection	Définit les points de départ et de fin pour une sélection. Cette fonctionnalité permet de sélectionner avec plus de précision qu'en sélectionnant la zone avec le curseur.
	Normaliser au maximum	Agrandit un graphique au maximum, de sorte que le pic le plus intense soit à pleine échelle, qu'il soit visible ou non.
	Afficher l'historique	Affiche un résumé des opérations de traitement de données effectuées sur un fichier particulier, telles que le lissage, la soustraction, l'étalonnage et le filtrage du bruit.
	Ouvrir une base de données des composés	Ouvre la base de données des composés.
	Définir les seuils	Ajuste le seuil
	Afficher tracé de contour	Affiche les données sélectionnées soit en graphique spectral soit en XIC. En plus, pour les données acquises par DAD, un tracé peut afficher des données sélectionnées soit en spectre DAD soit en XWC.
	Afficher DAD TWC	Génère un TWC du spectre DAD.
	Show DAD Spectrum	Génère un spectre DAD.
	Extraire une longueur d'onde	L'utilisateur peut extraire jusqu'à trois plages de longueurs d'onde d'un spectre DAD pour afficher le XWC.

Tableau C-6 Icônes de tableaux de résultats








Icône	Nom	Description
	Trier dans l'ordre croissant par sélection	Trie la colonne sélectionnée par ordre décroissant des valeurs.
	Tri dans l'ordre décroissant par sélection	Trie la colonne sélectionnée par ordre décroissant des valeurs.
	Verrouillage ou déverrouillage d'une colonne	Verrouille ou déverrouille la colonne sélectionnée. Une colonne verrouillée ne peut pas être déplacée.
	Tracé métrique par sélection	Crée un tracé métrique à partir de la colonne sélectionnée.

Tableau C-6 Icônes de tableaux de résultats (suite)

Icône	Nom	Description
	Afficher tous les échantillons	Affiche tous les échantillons dans le Results Table (Tableau de résultats).
	Supprimer Colonne de formule	Supprime la colonne de formule
	Générateur de rapports	Ouvre le logiciel pour les rapports.

Historique des révisions

Révision	Raison de la modification	Date
A	Première version du document.	Juillet 2014

Indice

A

acides, liste des 9
acquisition de données spectrales, description 54
acquisition, arrêt 68
activation
 dépannage de l'activation du profil matériel 42
 profils matériels 39
affichage
 données quantitatives 77
affichage : génération
agrandissement
 axe des x 89
 axe des y 89
 graphiques 87
ajout
 échantillons à lots 61
 expériences 52
 périodes 52
 périphériques 40
ajouter
 enregistrements 87
ajustement
 seuil 84
ajuster
 position de la pompe à seringue intégrée 26
appareils profils matériels
application
 méthodes de quantification 64
arrêt, échantillons 68
axe des x, agrandissement 89
axe des y, agrandissement 89

B

bases, liste des 9
bibliothèque
 recherche 87
 recherche avec contraintes 87
Bouteille de vidange
 vidange 97
BPC chromatogrammes des pics de base

C

changement d'échelle des graphiques 88
chromatogramme en courant ionique total
 génération de BPC 82
chromatogrammes
 description 77
 enregistrer l'historique d'exploration 85
 extraction d'ions en sélectionnant les masses 81
 génération de chromatogrammes des pics de base 82
 icônes 109
 plage à soustraire verrouillée 86
 spectre à partir d'un TIC, afficher 79
 TIC des spectres, affichage 78
 volets, menu contextuel 85
 XIC, générer 79
chromatogrammes d'ion extrait
 XIC, générer en utilisant les masses du pic de base 81
 XIC, générer en utilisant les pics maximum 80
chromatogrammes d'ions extraits
 extraction d'ions en sélectionnant les masses 81
chromatogrammes des ions extraits
 génération en utilisant des plages sélectionnées 80
 générer 79
chromatogrammes des pics de base, génération 82
chromatogrammes en longueur d'onde totale, données de génération 84
colonnes
 modification de valeurs dans l'éditeur de lot 64
conditions environnementales, requises 11
configuration
 pompe à seringue 38
conformité réglementaire 6
conformité, réglementaire 6
conseils
 dépannage 100
 éditeur de lot 64
contamination croisée, éviter 94
contamination, conseils de dépannage 100

copie
graphiques dans une nouvelle fenêtre 88
sous-projets 44

copier
expériences au cours d'une période 52
expériences dans une période 52

création
lots 61
méthodes d'acquisition 50, 51
profils matériels 35
projets et sous-projets 42
sous-projets 44

D

DAD détecteur à barrettes de diodes

démarrage
acquisition 65

dépannage
profils matériels 42
système 100

déplacement, volets 88

dépression, nettoyage de routine 92

détecteur à barrettes de diodes
génération de TWC 84
générer des données 84

dissimulation, volets 89

données CAN, génération 77

données graphiques, traitement 87

données quantitatives, affichage 77

dossier API Instrument (Instrument API)
contenu 45

Dossier API Instrument (Instrument API)
récupération 46
sauvegarde 46

Dossier Exemple (Exemple), contenu 45

dossier par défaut, dossier 45

E

eau et nettoyage du système 94

enregistrements, ajouter 87

environnement domestique et interférences radio 11

envoi
échantillons 65
groupes 65

exigences de ventilation 10

expériences
ajout 52

copier au cours d'une période 52
copier dans une méthode 52

F

fenêtres volets

fiches de données
données quantitatives, affichage 77

Fiches de données de sécurité 8

fichiers de données échantillons

fichiers de données
affichage des conditions de l'expérience 74
afficher les données dans des tableaux 75
ajustement du seuil 84
changement d'échelle des graphiques 88
déplacement des volets 88
données CAN 77
génération de TWC 84
générer des données DAD 84
navigation entre les échantillons 74
ouverture 73
passez à l'échantillon suivant 74
passez à un échantillon non séquentiel 74
passez à un échantillon précédent 74
traitement des données graphiques 87
volets, dissimulation 89
volets, maximisation 89
volets, organisation en mosaïque 89
volets, suppression 88
volets, verrouillage 88

file d'attente
décrite 60

filtre à air
fréquence de la maintenance 91

flacons
sélection dans un lot 64
sélection des positions 67

Formulaires de décontamination et renvois de systèmes 12

G

génération affichage

génération
chromatogrammes des pics de base 82
données CAN 77
TIC des spectres 78
TWC 84

générer

Indice

données DAD 84
spectre à partir d'un TIC 79
XIC, présentation 79
Gestionnaire de file d'attente
description 69
menu contextuel 72
graphiques
agrandissement 87
changement d'échelle 88
comparaison 87
copie dans une nouvelle fenêtre 88
description 87
icônes 88
options 88
graphiques de contour, affichage 85
Guide d'ions QJet et lentille IQ0
fréquence d'entretien 90

I

icônes
tableau de résultats 111
icônes
barre d'outils 107
chromatogrammes et spectres 109
icônes du mode Acquisition 108
Icônes du mode Tune and Calibrate (Réglage et étalonnage) 109
méthode d'acquisition des icônes 107
icônes de la barre d'outils 107

L

lentilles Q0 et IQ1
fréquence de la maintenance 90
lingettes, pliage pour le nettoyage 94
Liste des pics spectraux, menu contextuel 76
logiciel, icônes d'état 71
lots
ajout d'ensembles et d'échantillons 61
description 60
envoi 65
modification de valeurs dans les colonnes 64

M

maintenance
et performance 90
exigences pour le personnel 12

sauvegarde du dossier API Instrument (Instrument API) 46
manipulation des données, description 24
matériel nécessaire
nettoyage 92
maximisation, volets 89
méthodes d'acquisition
conditions expérimentales 74
création 50, 51
modification à partir de l'éditeur de lot 64
méthodes de quantification
application 64
Mode Acquisition, icônes 108
Mode Tune and Calibrate (Réglage et étalonnage), icônes 109
modification
méthodes d'acquisition dans l'éditeur de lot 64
ordre des échantillons 66
modification du système 12

N

nettoyage
avant de la plaque à orifice 96
bonnes pratiques 93
façade 92
matériel nécessaire 92
motifs 92
plaque rideau 95
préparation 95
nettoyage
surfaces 91

O

Onglet Show File Information (Afficher les informations sur le fichier), menu contextuel 74
options de la file d'attente, paramètre 60
organisation en mosaïque des volets 89
ouverture, fichiers de données 73

P

paramétrage
options de seuil 85
Paramètre CAD Gas (Gaz CAD), définition 57
Paramètre Collision Energy (Énergie de collision)
définition 58
Paramètre Curtain Gas, définition 57

Paramètre Declustering Potential (Potentiel de défragmentation), définition 57

Paramètre GS1
défini 56

Paramètre GS2
défini 56

Paramètre Interface Heater Temperature (Température du chauffage de l'interface), définition 56

Paramètre Ion Release Delay (Délai de libération des ions), définition 59

Paramètre Ion Release Width (Largeur de libération des ions), définition 59

Paramètre ISVF, défini 55

Paramètre MCP, définition 59

Paramètre Nebulizer Current (Électro-nébuliseur), définition 55

Paramètre TEM, défini 56

paramètres
trajet optique des ions, défini 54

performances de l'instrument
conditions préalables 47
matériel nécessaire 47

périodes
ajout 52
générer, XIC 79

périphériques
ajout à des profils matériels 40
carte GPIB 41
Ethernet 41
ports en série 41

perte de sensibilité, dépannage 100

plaque à orifice
nettoyage 96

plaque à orifice
fréquence de la maintenance 90

plaque rideau
fréquence de la maintenance 90

pompe à seringue
ajuster la position 26
configuration 38

précautions chimiques, équipement de protection 8

pression de l'aspiration, conseils de dépannage 100

Processus de l'étiquette rouge AB SCIEX 11

profil, acquisition de données spectrales 54

profils matériels
activation 39
ajout de périphériques 40
création 35

description 35

échec de l'activation 42

projets
changement entre projets et sous-projets 44
copie de sous-projets 44
création de sous-projets 44
dossier API Instrument (Instrument API) 45
dossier Example (Exemple) 45
dossier par défaut 45
dossiers installés 45
list de projets 44

R

Récapitulatif des résultats, description 48

recherche
bibliothèque 87
recherche avec contraintes 87

règles sur la sécurité et l'hygiène de l'environnement 6

retrait
liens 88

S

saut de pic, acquisition de données spectrales 54

sélection
emplacements des flacons 67
flacons 64

sensibilité et maintenance 91

seuils
ajustement 84

solutions organiques, conservation 94

solvant
taches sur la plaque rideau 96

solvants organiques, liste des 9

sous-projets
copie 44
création 44

spectre
XIC, génération en utilisant des plages sélectionnées 80
XIC, générer en utilisant les masses du pic de base 81
XIC, générer en utilisant les pics maximum 80

spectres
afficher à partir d'un TIC 79
bibliothèque, recherche 87
enregistrements, ajouter 87

Indice

- enregistrer l'historique d'exploration 86
 - extraction d'ions en sélectionnant les masses 81
 - icônes 109
 - menu contextuel 86
 - spectromètre de masse système
 - spectromètre de masse
 - accès au connecteur d'alimentation secteur 8
 - déconnecter l'alimentation 99
 - LED (diode électroluminescente) 23
 - nettoyage des surfaces 91
 - pièces 20
 - renvoi au fabricant 12
 - stockage ou envoi, préparation 99
 - symboles du panneau 23
 - vérification des performances 47
 - statut Acquisition, description 71
 - Statut de la file d'attente, description 70
 - statut En attente, description 70
 - statut En pause, description 71
 - statut Pas prêt, description 70
 - statut Préchauffage, description 70
 - statut Préexécuter, description 71
 - statut Prêt, description 70
 - suppression
 - colonnes personnalisées 69
 - échantillons à partir des lots 69
 - volets 88
 - surfaces
 - spectromètre de masse, nettoyage 91
 - symboles de danger 14
 - symboles du panneau, décrits 23
 - système
 - conseils de dépannage 100
 - remettre en service 96
 - spectromètre de masse
 - système
 - description 20
 - exigences pour le personnel de maintenance 12
 - icônes d'état 71
 - manipulation des données 24
 - nettoyage des surfaces 91
 - pièces 20
 - renvoi au fabricant 12
 - utilisation et modification 12
 - tampons, liste des 9
 - TIC chromatogrammes en courant ionique total
 - total ion chromatogram (chromatogramme en courant ionique total)
 - génération à partir d'un spectre 78
 - traitement
 - données graphiques 87
 - trajet optique des ions, paramètres 54
 - TWC chromatogrammes en longueur d'onde totale
-

V

- vérification
 - spectromètre de masse 47
 - verrouillage des volets 88
 - vidange d'évacuation de la source
 - fréquence de la maintenance 90
 - vidange, bouteille de vidange de la source 97
 - volets
 - suppression 88
 - volets
 - déplacement 88
 - dissimulation 89
 - liaison 88
 - liens, retrait 88
 - maximisation 89
 - organisation en mosaïque 89
 - verrouillage 88
 - volets de liaison 88
 - voyants, description 23
-

X

- XIC chromatographies à échange d'ions
 - XWC chromatographies à échange d'ions
-

Z

- zone Q0
 - nettoyage 91

T

- Tableaux de résultats
 - icônes 111