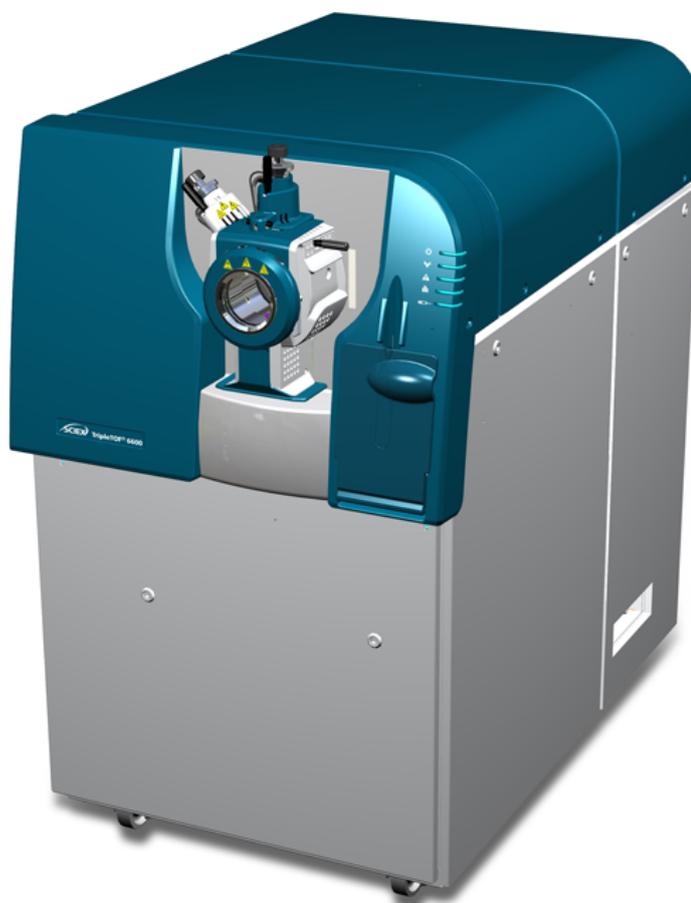




Systeme TripleTOF[®] 6600

Guide de l'utilisateur du systeme



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

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

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

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

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

AB Sciex faisant affaire sous le nom de SCIEX.

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.

© 2018 AB Sciex



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

Table des matières

1 Précautions et limites de fonctionnement.....	6
Informations générales de sécurité.....	6
Conformité réglementaire.....	6
Australie et Nouvelle-Zélande.....	7
Canada.....	7
Europe.....	7
États-Unis.....	7
International.....	8
Précautions électriques.....	8
Alimentation secteur.....	8
Prise de terre.....	9
Précautions chimiques.....	9
Précautions relatives à la ventilation.....	10
Précautions pour l'environnement.....	11
Environnement électromagnétique.....	12
Mise hors service et mise au rebut.....	13
Personnel qualifié.....	13
Conditions de laboratoire.....	13
Conditions de fonctionnement.....	13
Spécifications des performances.....	14
Utilisation de l'appareil et modification.....	14
Nous contacter.....	15
Assistance technique.....	15
Symboles et conventions de la documentation.....	15
Documentation connexe.....	16
2 Principes de fonctionnement.....	17
Présentation du système.....	17
Présentation du matériel.....	17
Symboles du panneau.....	20
Principes de fonctionnement.....	21
Traitement des données.....	22
3 Instructions d'utilisation - Matériel.....	23
Démarrer le système.....	23
Désactivation du système.....	24
Régler la position de la pompe à seringue intégrée.....	25
Réinitialiser la pompe à seringue.....	28
4 Instructions d'utilisation : flux de travail des échantillons.....	30
5 Instructions d'utilisation : profils de matériel et projets.....	34
Profils de matériel.....	34
Créer un profil matériel.....	34
Ajouter des périphériques à un profil de matériel.....	39

Table des matières

Dépannage des problèmes liés à l'activation du profil de matériel.....	41
Projets et sous-projets.....	41
Créer des projets et des sous-projets.....	41
Créer des sous-projets.....	43
Copier des sous-projets.....	43
Basculer entre les projets et sous-projets.....	43
Dossiers projet installé.....	44
Sauvegarder le dossier API Instrument.....	44
Récupérer le dossier API Instrument.....	45
6 Tune and Calibrate.....	46
Optimiser le spectromètre de masse.....	47
À propos de la boîte de dialogue Verifying or Adjusting Performance.....	47
Récapitulatif des résultats.....	48
7 Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition.....	49
Créer une méthode d'acquisition en utilisant l'éditeur de méthode d'acquisition.....	49
Ajouter une expérience.....	50
Ajouter une période.....	50
Copier une expérience dans une période.....	51
Copier une expérience dans une période.....	51
Créer une méthode d'acquisition à l'aide de l'assistant de méthode.....	51
Techniques de balayage.....	52
Spectrométrie de masse simple.....	52
Spectrométrie de masse simple à base quadripolaire.....	52
Spectrométrie de masse simple à temps de vol.....	53
Spectrométrie de masse en tandem.....	53
Spectrométrie de masse d'ions produits.....	53
Spectrométrie de masse d'ions précurseurs.....	53
À propos de l'acquisition de données spectrales.....	53
Paramètres.....	54
8 Instructions d'utilisation — Lots.....	59
Régler les options de file d'attente.....	59
Ajouter des ensembles et des échantillons à un lot.....	61
Soumettre un échantillon ou un groupe d'échantillons.....	64
Configurer l'étalonnage de l'échantillon.....	64
Changer l'ordre de l'échantillon.....	65
Acquérir les données.....	65
Régler les emplacements de l'échantillon dans l'Éditeur de lot.....	66
Sélectionner les emplacements des flacons à l'aide de l'onglet Locations (facultatif).....	66
Arrêter l'acquisition d'échantillons.....	67
Menu contextuel Batch Editor.....	68
États de la file d'attente et état du périphérique.....	69
États de la file d'attente.....	69
Vue Instrumentation et icônes de l'état des périphériques.....	70
Menu contextuel Queue.....	71
9 Instructions d'utilisation : analyser et explorer les données.....	73
Ouvrir les fichiers de données.....	73
Naviguer entre les échantillons dans un fichier de données.....	74
Afficher les conditions expérimentales.....	74

Afficher les données dans des tableaux.....	75
Afficher les données ADC.....	77
Afficher les données quantitatives de base.....	77
Chromatogrammes.....	78
Montrer les TIC d'un spectre.....	79
Afficher un spectre d'un TIC.....	80
À propos de la création de XIC.....	80
Générer un XIC en utilisant une plage sélectionnée.....	81
Générer un XIC en utilisant le pic maximal.....	81
Générer un XIC en utilisant les masses du pic de base.....	82
Extraire des ions en sélectionnant les masses.....	82
Générer des BPC.....	83
Générer XWC.....	85
Données DAD.....	85
Générer TWC.....	86
Ajuster le seuil.....	86
Volets Chromatogram.....	87
Volets Spectra.....	88
Traitement des données graphiques.....	89
Graphiques.....	89
Gestion des données.....	89
Effectuez un zoom avant sur l'axe des y.....	91
Effectuer un zoom avant sur l'axe des x.....	91
10 Informations relatives au service et à la maintenance.....	92
Calendrier recommandé de maintenance.....	92
Nettoyer les surfaces.....	94
Nettoyer la façade.....	95
Symptômes de contamination.....	95
Matériel nécessaire	96
Bonnes pratiques de nettoyage.....	97
Préparer le spectromètre de masse.....	98
Nettoyer la plaque rideau.....	99
Nettoyer l'avant de la plaque à orifice.....	100
Remettez le spectromètre de masse en service.....	101
Vider le conteneur de trop-plein.....	101
Vérifier le niveau d'huile de la pompe primaire.....	103
Remplacer les filtres à air des ventilateurs du spectromètre de masse.....	104
Stockage et manutention.....	106
11 Dépannage du spectromètre de masse.....	108
A Ions d'étalonnage recommandés.....	111
B Masses exactes et formules chimiques.....	114
C Icônes de la barre d'outils.....	117
D Glossaire des symboles.....	127
E Glossaire des avertissements.....	132

Précautions et limites 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 le [Glossaire des symboles à la page 127](#) 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 *Guide de planification du site d'installation* pour connaître les exigences du site, notamment l'alimentation secteur, l'évacuation de la source, la ventilation, l'air comprimé, l'azote et la pompe primaire.

Informations générales de sécurité

Pour empêcher toute blessure personnelle ou tout endommagement du système, lisez, comprenez et observez toutes les précautions de sécurité et mises en garde présentes dans ce document, la fiche de données de sécurité (FDS) du fabricant relative aux produits chimiques ainsi que les informations figurant sur l'étiquette du produit. 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 régionaux sur l'environnement, la santé et la sécurité (EHS). Les informations fournies concernent la sécurité liée au système au regard du fonctionnement du système. Elles ne couvrent pas toutes les procédures de sécurité devant être pratiquées. En fin de compte, vous et votre société êtes responsables du respect des règlements EHS fédéraux, locaux ou régionaux sur le maintien d'un environnement de laboratoire sécurisé.

Consultez la documentation de référence appropriée du laboratoire et les procédures opérationnelles normalisées.

Conformité réglementaire

Ce système est conforme aux réglementations et aux normes figurant dans cette section. Consultez la déclaration de conformité incluse avec le système et les composants individuels du système pour obtenir des références datées. Les étiquettes y afférant ont été apposées sur le système.

Australie et Nouvelle-Zélande

- **Compatibilité électromagnétique (CEM)** : Loi sur les communications radio (Radio Communications Act) de 1992 telle que mise en œuvre dans les normes suivantes :
 - Interférences électromagnétiques —AS/NZS CISPR 11/EN 55011/CISPR 11 (Classe A). Se reporter à [Perturbations électromagnétiques à la page 12](#).
- **Sécurité** : AS/NZ 61010-1 et CEI 61010-2-061

Canada

- **Interférences électromagnétiques (EMI)** : CAN/CSA CISPR11. Cet appareil ISM est conforme à la norme canadienne ICES-001. Consultez [Perturbations électromagnétiques à la page 12](#).
- **Sécurité** :
 - CAN/CSA C22.2 N° 61010-1
 - CAN/CSA C22.2 N° 61010-2-061

Europe

- **Compatibilité électromagnétique (CEM)** : Directive 2014/30/EU relative à la compatibilité électromagnétique telle que mise en œuvre dans les normes suivantes :
 - EN 61326-1
 - EN 55011 (Classe A)Consultez [Compatibilité électromagnétique à la page 12](#).
- **Sécurité** : Directives 2014/35/EU relatives à la basse tension telles que mises en œuvre dans les normes suivantes :
 - EN 61010-1
 - EN 61010-2-061
- **Déchets d'équipements électriques et électroniques (DEEE)** : Directive relative aux déchets d'équipements électriques et électroniques 2012/96/CEE telle que mise en œuvre dans la norme EN 40519. Consultez [Déchets d'équipements électriques et électroniques à la page 13](#).
- **Emballages et déchets d'emballage (EDE)** : Directive 94/62/CE relative aux emballages et aux déchets d'emballage
- **Limitation de l'utilisation des substances dangereuses (RoHS)** : Directive RoHS 2011/65/UE

États-Unis

- **Réglementation relative aux perturbations des émissions radio** : 47 CFR 15 telle que mise en œuvre dans la réglementation FCC Partie 15 (Classe A)

Précautions et limites de fonctionnement

- **Sécurité** : Réglementation relative à la sécurité et à la santé au travail, 29 CFR 1910, telle que mise en œuvre dans les normes suivantes :
 - UL 61010-1
 - CEI 61010-2-061

International

- **Compatibilité électromagnétique (CEM)** :
 - CEI 61326-1
 - CEI CISPR 11 (Classe A)
 - CEI 61000-3-2
 - CEI 61000-3-3Consultez [Compatibilité électromagnétique à la page 12](#).
- **Sécurité** :
 - CEI 61010-1
 - CEI 61010-2-061

Précautions électriques



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. Ne retirez pas les capots. Le retrait des capots peut provoquer des blessures ou le dysfonctionnement du système. Il n'est pas nécessaire de retirer les capots pour procéder à la maintenance courante, à l'inspection ou au réglage. Contactez un technicien de service (FSE) SCIEX pour exécuter les réparations qui nécessitent de retirer les capots.

- Suivez les pratiques sécurisées pour les travaux d'électricité.
- Utilisez les pratiques de gestion de câble pour contrôler les câbles électriques. Cela permet de réduire le risque de trébuchement.

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

Alimentation secteur

Raccordez le système à une alimentation secteur compatible selon les instructions de ce guide.



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. L'installation de toutes les alimentations électriques et de tous les branchements ne doit être exécutée que par un personnel qualifié. Assurez-vous que toutes les installations sont conformes aux réglementations en vigueur et aux normes de sécurité.



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. Vérifiez que le système peut être débranché de la prise d'alimentation secteur en cas d'urgence. Ne bloquez pas la prise de l'alimentation secteur.



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. Utilisez exclusivement les câbles d'alimentation fournis avec le système. N'utilisez pas de câbles qui ne sont pas correctement conçus pour le fonctionnement de ce système.

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

Prise de terre

L'alimentation principale doit comprendre une prise de terre correctement installée. La prise de terre doit être installée ou vérifiée par un électricien qualifié avant de brancher le système.



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. N'interrompez pas délibérément la mise à la terre. Toute interruption de la mise à la terre engendre un risque de choc électrique.



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. Assurez-vous qu'une mise à la terre (câble de mise à la terre) relie la boucle de l'échantillon et un point de mise à la terre adéquat au niveau de la source d'ions. Cette masse supplémentaire renforcera les mesures de sécurité spécifiées par SCIEX.

Précautions chimiques



AVERTISSEMENT ! Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Déterminez si une décontamination est nécessaire avant de procéder au nettoyage ou à l'entretien. Le client doit décontaminer le système avant de procéder au nettoyage ou à l'entretien si des matières radioactives, des agents biologiques ou des produits chimiques toxiques ont été utilisés avec le système.



AVERTISSEMENT ! Risque pour l'environnement. Ne jetez pas les composants du système dans les déchetteries municipales. Suivez les réglementations locales lors de la mise au rebut des composants.



AVERTISSEMENT ! Risques biologiques et de toxicité chimique. Raccordez correctement la conduite de vidange au spectromètre de masse et au conteneur trop-plein de l'évacuation de la source pour éviter les fuites.

Précautions et limites de fonctionnement

- Déterminez quels sont les produits chimiques qui peuvent avoir été utilisés dans le système avant les opérations de service et son entretien régulier. Consultez les *fiches de données de sécurité* pour les précautions d'hygiène et de sécurité qui doivent être suivies avec les produits chimiques. Les fiches de données de sécurité SCIEX sont disponibles sous sciex.com/tech-regulatory.
- Travaillez dans un endroit bien aéré ou doté d'une hotte aspirante.
- Portez toujours l'équipement de protection individuelle attribué comprenant des gants en néoprène ou en nitrile non poudrés, des lunettes de sécurité et une blouse de laboratoire.
- Évitez les sources d'étincelles lors de l'utilisation de matériaux inflammables comme l'isopropanol, le méthanol et autres solvants inflammables.
- Utilisez et éliminez les produits chimiques avec précaution. Risque potentiel de blessure corporelle si les procédures adéquates de manipulation et d'élimination des produits chimiques ne sont pas respectées.
- Évitez tout contact des produits chimiques avec la peau pendant le nettoyage et lavez-vous les mains après utilisation.
- Assurez-vous que tous les tuyaux d'évacuation sont raccordés correctement et que toutes les connexions fonctionnent comme prévu.
- Collectez tous les liquides usagés et mettez-les au rebut comme des déchets dangereux.
- Conformez-vous à toutes les réglementations locales pour le stockage, la manipulation et la mise au rebut des déchets biologiques, toxiques ou radioactifs.
- (Recommandé) Utilisez des plateaux de confinement secondaires sous la pompe primaire, les bouteilles de solvant ainsi que le conteneur de collecte des déchets afin de capturer les déversements chimiques éventuels.

Précautions relatives à la ventilation

L'évacuation des fumées et l'élimination des déchets doivent être conformes à toutes les règles fédérales, nationales, locales ou régionales sur la santé et la sécurité. Il est de la responsabilité du client de s'assurer que la qualité de l'air est maintenue en conformité avec les règles locales sur la santé et la sécurité.

La ventilation du système d'évacuation de la source et de la pompe primaire doit être assurée par une hotte aspirante de laboratoire dédiée ou par un système d'évacuation externe.



AVERTISSEMENT ! Risque d'incendie. Vérifiez que le système d'évacuation de la source est branché et en service afin d'éviter l'accumulation de vapeurs inflammables dans la source d'ions.



AVERTISSEMENT ! Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Veillez à évacuer les gaz d'échappement dans une hotte aspirante de laboratoire prévue à cet effet ou un système d'évacuation et assurez-vous que le tuyau de ventilation est maintenu en place par des pinces. Vérifiez que le laboratoire dispose d'un échange d'air approprié pour le travail effectué.



AVERTISSEMENT ! Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Ne faites pas 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. Vérifiez régulièrement la conduite d'évacuation pour garantir l'absence de fuite. L'utilisation de spectromètres de masse sans ventilation correcte du système peut constituer un danger pour la santé et entraîner des blessures graves.



AVERTISSEMENT ! Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. N'utilisez la source d'ions que si vous avez les qualifications et la formation appropriées et si vous connaissez les règles de confinement et d'évacuation des matériaux toxiques ou nuisibles utilisés avec la source d'ions.



AVERTISSEMENT ! Risque de perforation, risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Cessez d'utiliser la source d'ions si la fenêtre correspondante est fissurée ou cassée et contactez un technicien de service (FSE) SCIEX. Tout matériau toxique ou nocif introduit dans l'appareil sera présent dans les émissions de la source. Éliminez les objets tranchants conformément aux procédures de sécurité établies par le laboratoire.

Précautions pour l'environnement

Faites appel à du personnel qualifié pour l'installation des fournitures et des 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 les informations sur les conditions environnementales requises pour le système, consultez le *Guide d'aménagement sur site*.

Laissez un espace d'accès autour de l'équipement lors de la configuration du système.



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



AVERTISSEMENT ! Risque biologique. Pour l'utilisation de matériel biologiquement dangereux, respectez systématiquement les réglementations en vigueur pour l'évaluation des risques, le contrôle et la manipulation. Ce système ni aucune pièce ne sont conçus pour faire office de confinement biologique.

ATTENTION : Changements de masse potentiels. Maintenez une température ambiante stable. Si la température change de plus de 2 °C par heure, la résolution et l'étalonnage de la masse peuvent alors être affectés.

Environnement électromagnétique

Compatibilité électromagnétique

Environnement électromagnétique de base : Environnement existant sur des sites caractérisés par une alimentation directe basse tension provenant du réseau secteur public.

Critère de performance A (critère A) : L'équipement doit fonctionner comme prévu sans détérioration des performances ni perte de fonction durant ou après le test.

Critère de performance B (critère B) : Bien que l'équipement puisse subir une perte de fonction (une ou plusieurs) durant le test, il continuera à fonctionner comme prévu en enregistrant une détérioration des performances et des fonctions qui seront automatiquement récupérées après le test.

Critère de performance C (critère C) : Bien que l'équipement puisse subir une perte de fonction (une ou plusieurs) durant le test, il continuera à fonctionner comme prévu en enregistrant une détérioration des performances et des fonctions que l'opérateur pourra récupérer après le test.

L'équipement est conçu pour une utilisation dans un environnement électromagnétique de base.

La perte de performance attendue dans les conditions d'immunité électromagnétique correspond à une modification inférieure à 20 % du nombre total d'ions (TIC).

Veillez à maintenir un environnement électromagnétique compatible avec l'appareil afin que le dispositif puisse fonctionner comme prévu. Si la ligne d'alimentation produit un bruit électrique élevé, installez une protection de surtension.

Perturbations électromagnétiques

Équipement de classe A : Équipement convenant à une utilisation dans tous les bâtiments autres que les bâtiments résidentiels et ceux directement raccordés au réseau d'alimentation électrique basse tension qui dessert les bâtiments réservés à des fins résidentielles. [Tiré de la norme CISPR 11:2009, 5.3] Les équipements de classe A doivent satisfaire aux limites de 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 perturbations 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, il peut causer des perturbations nuisibles aux communications radio.

Le fonctionnement de cet équipement dans une zone résidentielle est susceptible de provoquer des perturbations nuisibles, auquel cas il vous sera nécessaire de corriger les perturbations à vos frais. 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



AVERTISSEMENT ! Risque pour l'environnement. Ne jetez pas les composants du système dans les déchetteries municipales. Suivez les réglementations locales lors de la mise au rebut des composants.

Avant la mise hors service, décontaminez le système dans son intégralité selon les réglementations locales.

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 106](#).

Remarque : SCIEX n'acceptera aucun retour du système sans un formulaire de décontamination dûment rempli. Contactez un ingénieur service pour obtenir un exemplaire du formulaire.

Ne jetez pas de composants ou d'assemblages, y compris les pièces d'ordinateur, dans des déchetteries municipales.

Déchets d'équipements électriques et électroniques

Suivez les ordonnances municipales sur les déchets pour la mise au rebut en vue de réduire l'impact environnemental des déchets d'équipements électriques et électroniques (DEEE). Afin d'éliminer cet appareil en toute sécurité, contactez un bureau du service à la clientèle local pour bénéficier de l'enlèvement et du recyclage gratuits de l'appareil.

Personnel qualifié

Seul le personnel qualifié de SCIEX doit installer, inspecter et entretenir l'appareil. Après avoir installé le système, le technicien de service utilise le *Guide de familiarisation du client* pour informer le client sur le fonctionnement, le nettoyage et la maintenance de base 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 du responsable de maintenance qualifié (QMP) pendant l'installation. Le QMP est une personne informée des risques électriques et chimiques associés à la maintenance des équipements de laboratoire.

Conditions de laboratoire

Conditions de fonctionnement

Le système est conçu pour fonctionner en toute sécurité dans ces conditions :

- À l'intérieur
- Altitude : jusqu'à 2 000 m (6 400 pieds) au-dessus du niveau de la mer
- Température ambiante : entre 5 °C (41 °F) et 40 °C (104 °F)

Précautions et limites de fonctionnement

- Humidité relative : de 80 % pour des températures allant jusqu'à 31 °C (88 °F), décroissant linéairement à 50 % à 40 °C (104 °F)
- Variations de tension de l'alimentation secteur : ± 10 % de la tension nominale
- Surtensions temporaires : jusqu'aux niveaux de catégorie de surtension II
- Surtensions temporaires sur l'alimentation secteur
- Degré de pollution : degré de pollution 2

Spécifications des performances

Le système est conçu pour répondre aux spécifications dans ces conditions :

- Température ambiante de 18 à 25 °C (64 à 77 °F)
Au fil du temps, la température doit rester comprise dans une plage de 2 °C (3,6 °F) par rapport à la température obtenue lors du dernier étalonnage, sa vitesse de fluctuation ne devant pas excéder 2 °C (3,6 °F) par heure. Les fluctuations de la température ambiante dépassant ces limites peuvent entraîner des changements de masse dans le spectre.
- Humidité relative de 20 % à 80 %, sans condensation

Utilisation de l'appareil et modification



AVERTISSEMENT ! Risque de blessure corporelle. Contactez le représentant SCIEX si l'installation, un réglage ou un déplacement du produit est nécessaire.



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. Ne retirez pas les capots. Le retrait des capots peut provoquer des blessures ou le dysfonctionnement du système. Il n'est pas nécessaire de retirer les capots pour procéder à la maintenance courante, à l'inspection ou au réglage. Contactez un technicien de service (FSE) SCIEX pour exécuter les réparations qui nécessitent de retirer les capots.



AVERTISSEMENT ! Risque de blessure corporelle. Utilisez uniquement les pièces recommandées par SCIEX. L'utilisation de pièces non recommandées par SCIEX ou l'utilisation de pièces pour tout usage autre que celui auquel elles sont destinées peut porter atteinte à l'utilisateur ou avoir une incidence négative sur les performances du système.

Utilisez le spectromètre de masse et la source d'ions à l'intérieur dans un laboratoire conforme aux conditions environnementales recommandées dans le *Guide d'aménagement sur site*.

Si le spectromètre de masse et la source d'ions sont utilisés dans un environnement ou d'une manière non prévu(e) par le fabricant, la protection fournie par l'équipement peut être compromise.

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

Nous contacter

Assistance SCIEX

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

Formation destinée aux clients

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

Centre d'apprentissage en ligne

- [SCIEXUniversity](https://sciex.com/education)

Cybersécurité

Pour connaître les dernières consignes relatives à la cybersécurité des produits SCIEX, rendez-vous sur le site sciex.com/Documents/brochures/win7-SecurityGuidance.pdf.

Assistance technique

SCIEX et ses représentants maintiennent un personnel et des techniciens dûment formés installés dans le monde entier. Ils peuvent répondre aux questions sur le système ou tout problème technique qui pourrait survenir. Pour plus d'informations, visitez le site Web SCIEX à l'adresse sciex.com.

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 entraîne 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 la réalisation de la procédure.

Documentation connexe

Pour trouver la documentation du logiciel, consultez les notes de version ou le guide d'installation du logiciel fourni avec ce dernier. La documentation du matériel se trouve sur le DVD *Customer Reference* fourni avec le système ou le composant.

Pour obtenir les dernières versions de la documentation, consultez le SCIEX site Web à sciex.com.

Les instruments de la série TripleTOF[®] 6600 est conçu pour l'analyse qualitative et quantitative d'espèces chimiques.

Cette section comporte des informations sur le spectromètre de masse et le logiciel Version du logiciel[®] TF. Consultez le *Guide de l'opérateur* de la source d'ions pour une présentation de la source d'ions.

Pour plus d'informations sur l'ordinateur et le logiciel, consultez le *Guide d'installation du logiciel* pour le logiciel Version du logiciel[®] TF.



AVERTISSEMENT ! Risque de levage. Ne pas déplacer le système. Risque de blessure ou de dommage sur le système. Si le système doit être déplacé, contacter un technicien (FSE).

Présentation du système



AVERTISSEMENT ! Risque de levage. Respectez les procédures de levage en toute sécurité en vigueur. Consultez le *Guide d'aménagement sur site* pour le poids des composants du système.

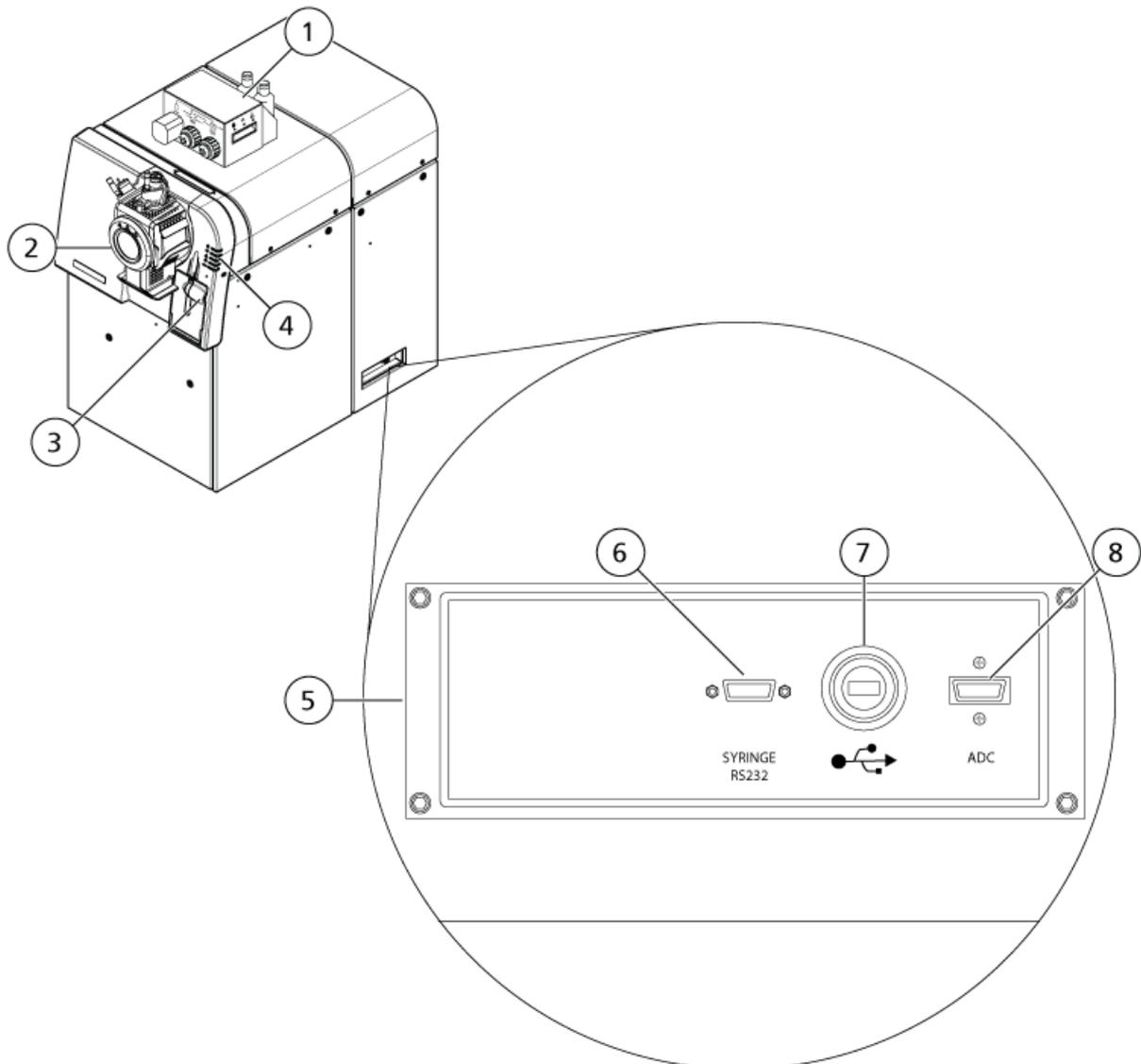
Le système TripleTOF[®] 6600 comprend les composants suivants :

- Un spectromètre de masse TripleTOF[®] 6600 avec une pompe primaire.
- Une source d'ions DuoSpray[™]. Consultez le *Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray[™]*.
- Ordinateur et un écran fournis par SCIEX avec le logiciel Version du logiciel[®] TF pour l'optimisation de l'instrument, le développement de la méthode d'acquisition ainsi que l'acquisition des données. Pour obtenir les caractéristiques techniques et les exigences relatives à l'ordinateur, consultez le *Guide d'installation du logiciel* pour le logiciel Version du logiciel[®] TF.
- Le système d'administration de solution d'étalonnage (CDS) en option

Présentation du matériel

Figure 2-1 et *Figure 2-2* affiche les composants du spectromètre de masse et ses connexions.

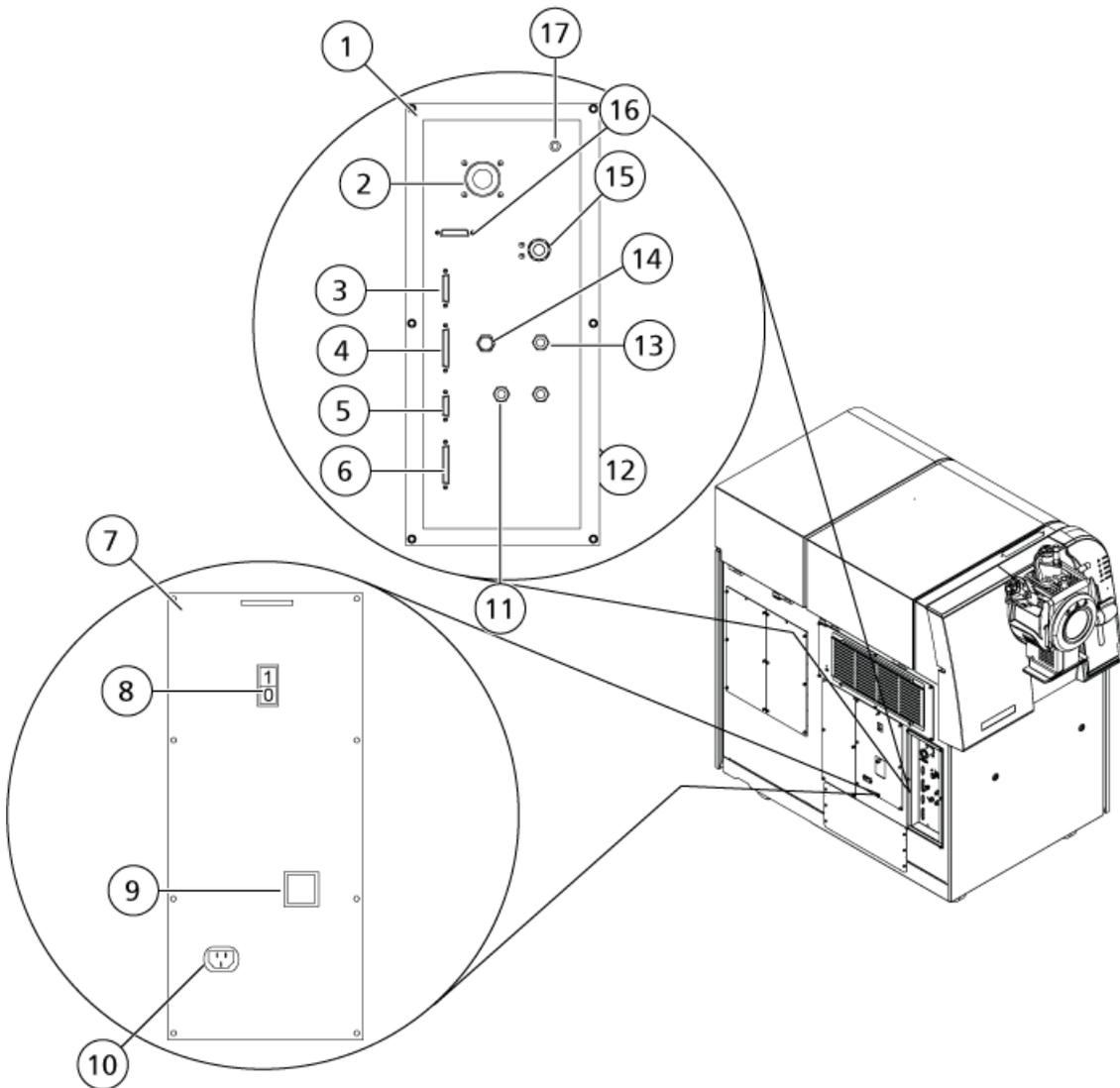
Figure 2-1 Affichage de la façade et du côté droit



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	Consultez le Guide de l'opérateur de la source d'ions <i>DuoSpray™ pour les systèmes TripleTOF®</i> .
3	Pompe à seringue	Voir Régler la position de la pompe à seringue intégrée à la page 25 .
4	LED (diodes électroluminescentes) d'état du spectromètre de masse	Voir Symboles du panneau .

Élément	Description	Pour plus d'informations ...
5	Cloisons de communications	Contactez un technicien de service SCIEEX.
6	Câble de connexion de série (RS-232) pour la pompe à seringue	Contactez un FSE.
7	Câble de connexion USB pour la carte USB-GPIB	Contactez un FSE.
8	Câble de connexion InfiniBand pour la carte ADC	Contactez un FSE.

Figure 2-2 Affichage du côté gauche



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

Principes de fonctionnement

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.
8	Commutateur de l'appareil.	Voir Démarrer le système à la page 23 .
9	Couverture du disjoncteur.	Se reporter à Démarrer le système à la page 23 . Utilisez le commutateur plutôt que le disjoncteur pour désactiver le système.
10	Connexion de l'alimentation principale	Voir Démarrer le système à la page 23 .
11	Curtain Gas™ (azote).	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.
16	Non utilisé	S.O..
17	Non utilisé	S.O..

Symboles du panneau

Le [Tableau 2-1](#) décrit les voyants d'état du spectromètre de masse.

Tableau 2-1 Symboles du panneau

LED	Couleur	Nom	Description
	Vert	Alimentation	Allumé lorsque le système est sous tension.
	Vert	Dépression	Allumé lorsque le niveau de vide correct a été atteint. Clignote si le vide n'est pas au niveau correct (pendant l'arrêt et la ventilation de la pompe).

Tableau 2-1 Symboles du panneau (Suite)

LED	Couleur	Nom	Description
	Vert	Prêt	Allumé lorsque le système est sur Ready. Le système doit être à l'état Ready pour fonctionner.
	Bleu	Balayage	Clignote quand le système acquiert des données.
	Rouge	Défaillance	Allumé lorsque le système détecte une défaillance du système.
	Vert	État de la pompe à seringue	Allumé quand la pompe à seringue est en cours d'utilisation.

Après la mise sous tension du système, tous les voyants s'allument. Le voyant d'alimentation reste allumé. Les autres voyants clignotent pendant deux secondes, puis s'éteignent. Le voyant du vide commence à clignoter. Une fois que le niveau de vide correct est atteint, 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.

Le système TripleTOF[®] 6600 dispose d'une série de filtres quadripolaires qui transmettent les ions en fonction de leur rapport masse sur charge (m/z). Le premier quadripôle de cette série est le guide d'ions QJet[®] situé entre la plaque à orifice et la zone Q0. Le guide d'ions QJet[®] ne filtre pas les ions, mais les focalise avant qu'ils n'entrent dans la zone Q0. En préfocalisant le flux d'ions le plus grand créé par l'orifice le plus large, le guide d'ions QJet[®] augmente la sensibilité de l'instrument et améliore le rapport signal/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. Le quadripôle Q1 fonctionne en deux modes opérationnels :

- Passage de tous les ions de la plage de valeurs m/z spécifiée dans la cellule de collision Q2. Il s'agit d'un balayage TOF MS. Tous les ions sont analysés par le système TOF.
- Passage d'un ion d'un rapport m/z spécifié dans la cellule de collision Q2. Il s'agit d'un balayage TOF MS/MS. Seul l'ion sélectionné est analysé.

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. Avec cette technique, les utilisateurs peuvent concevoir des expériences qui mesurent le rapport m/z des ions produits, ce qui leur permet de déterminer la composition des ions parent et d'obtenir des informations sur les propriétés structurales et chimiques des molécules.

Après le passage par la cellule de collision Q2, les ions entrent dans la zone TOF pour une analyse de masse supplémentaire. Ils atteignent le détecteur à des instants différents en fonction de leur rapport m/z . Dans le détecteur, les ions créent un courant qui se convertit en une impulsion de tension. Les impulsions de tension

Principes de fonctionnement

sont comptées et le nombre d'impulsions est directement proportionnel à la quantité d'ions entrant dans le détecteur. Le spectromètre de masse convertit les impulsions de tension en signal, puis met en corrélation le signal avec la durée nécessaire à chaque ion pour atteindre le détecteur. Le signal représente l'intensité de l'ion. La durée nécessaire pour atteindre le détecteur représente, quant à elle, une valeur m/z spécifique. Le spectromètre de masse affiche ces données sous la forme d'un spectre de masse.

Traitement des données

Le logiciel Version du logiciel[®] TF nécessite un ordinateur fonctionnant avec le système d'exploitation Windows 7 (32 ou 64 bits) ou Windows 10 (64 bits). L'ordinateur et le logiciel du système associé fonctionnent avec le contrôleur système et le micrologiciel associé pour contrôler le système et l'acquisition de données. Pendant le fonctionnement du système, les données acquises sont envoyées au logiciel Version du logiciel[®] TF pour y être affichées sous la forme de spectres de masse complets, d'intensités d'ions simples ou multiples dans le temps ou de courant ionique total dans le temps.

Instructions d'utilisation - Matériel

3



AVERTISSEMENT ! Risque de blessure corporelle. Suivez les instructions décrites dans la documentation lors de l'utilisation du système. La protection fournie par l'équipement peut être compromise si l'équipement est utilisé sans tenir compte des spécifications données par SCIEX.

Démarrer le système



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. Vérifiez que le système peut être débranché de la prise d'alimentation secteur en cas d'urgence. Ne bloquez pas la prise de l'alimentation secteur.



AVERTISSEMENT ! Risque de levage. Ne pas déplacer le système. Risque de blessure ou de dommage sur le système. Si le système doit être déplacé, contacter un technicien (FSE).

Remarque : Avant de faire fonctionner l'instrument, consultez les informations de sécurité dans [Précautions et limites de fonctionnement à la page 6](#).

Conditions préalables

- Les exigences spécifiées dans le *Guide d'aménagement sur site* sont remplies. Le *Guide d'aménagement sur site* comporte des informations sur l'alimentation secteur et les connexions, l'air comprimé, l'azote, la pompe primaire, la ventilation, l'évacuation et les exigences relatives au dégagement du site. Contactez-nous pour obtenir une copie du *Guide d'aménagement sur site*, le cas échéant. Pour obtenir les coordonnées, rendez-vous sur sciex.com/contact-us.
- L'évacuation de la source d'ions, l'air comprimé et l'azote sont raccordés au spectromètre de masse.
- Le conteneur de trop-plein de l'évacuation de la source de 4 l est raccordé au connecteur des déchets d'évacuation à l'arrière du spectromètre de masse et au système de ventilation du laboratoire.
- Les tuyaux d'évacuation de la source sont solidement serrés aux raccordement du spectromètre de masse, du conteneur de trop-plein et de la ventilation.
- L'interrupteur d'alimentation de l'instrument est hors tension et le câble d'alimentation secteur est branché au spectromètre de masse.
- Les câbles d'alimentation secteur du spectromètre de masse et de la pompe primaire sont branchés sur l'alimentation en 200 V à 240 VCA.

1. Mettre la pompe primaire sous tension.
2. 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 2-2](#).
3. Remettre le capot de l'interrupteur du disjoncteur et serrer à fond la vis qui maintient ce capot.
4. Mettre l'instrument sous tension en actionnant l'interrupteur. Voir [Figure 2-2](#).
5. Allumez l'ordinateur.
6. Ouvrez le logiciel Version du logiciel[®] TF.

Désactivation du système

Certaines procédures nécessitent l'arrêt du système. D'autres procédures nécessitent également sa ventilation. Suivez les étapes ci-dessous pour arrêter et, si nécessaire, ventiler le système.

Remarque : Si la tubulure de gaz doit être déconnectée, relâchez d'abord la pression dans les lignes de gaz.

Conseil ! Si le spectromètre de masse n'est pas utilisé pendant un certain temps, laissez-le en mode Veille avec la source d'ions en place. Si le spectromètre de masse doit être éteint, suivez alors ces instructions. N'éteignez pas la pompe primaire jusqu'à ce que les turbo-pompes soient arrêtées.

1. Terminez ou arrêtez toutes les analyses en cours éventuelles.

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

2. Arrêtez le débit de l'échantillon vers le système.
3. Dans le logiciel Version du logiciel[®] TF, désactivez le profil d'équipement, si celui-ci est activé.
4. Quittez le logiciel.
5. Éteignez l'interrupteur de l'appareil sur le côté gauche de l'appareil. Voir [Présentation du matériel](#).
6. (Si nécessaire) Suivez ces étapes pour ventiler le système :

Remarque : Ventilez le système avant d'effectuer un nettoyage complet de l'interface avec le vide, avant de nettoyer la région Q0 et avant de remplacer l'huile de la pompe primaire. Pour plus d'informations, contactez le responsable de maintenance qualifié (QMP) ou un technicien de service.

Remarque : Laissez la source d'ions installée pour assurer un bon refroidissement.

- a. Mettez la pompe primaire hors tension. Laissez le système ventiler pendant 20 minutes.

7. Retirez le capot de l'interrupteur du disjoncteur sur le côté gauche du spectromètre de masse puis désactivez le disjoncteur. Voir [Figure 2-2](#).
8. Remettez le capot de l'interrupteur du disjoncteur et serrez à fond la vis qui maintient ce capot.
9. (En cas de ventilation du système) Débranchez le câble d'alimentation secteur de la pompe primaire de la prise d'alimentation secteur.

Régler la position de la pompe à seringue intégrée



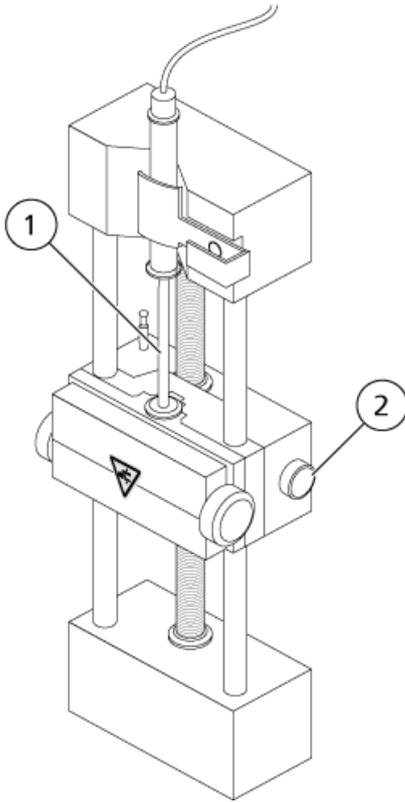
AVERTISSEMENT ! Risque de perforation. Prenez des précautions lors de la manipulation de la seringue. La pointe de la seringue est extrêmement acérée.



AVERTISSEMENT ! Risque de perforation. Assurez-vous que la seringue est correctement installée dans la pompe à seringue et que l'arrêt automatique de la pompe à seringue est réglé correctement pour éviter d'endommager ou de casser la seringue en verre. Si la seringue se casse, suivez les procédures de sécurité établies pour l'élimination des objets tranchants.

1. Appuyez sur le bouton **Release** sur le côté droit de la pompe à seringue pour abaisser la base et insérer la seringue. Consultez la [Figure 3-1](#).

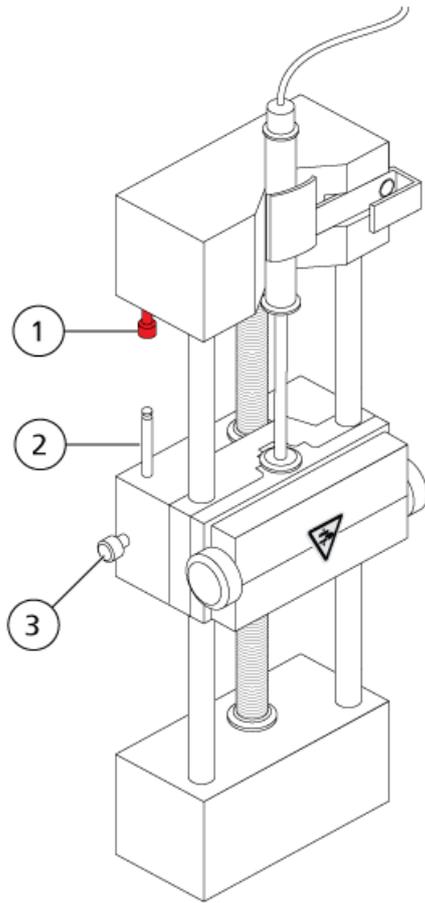
Figure 3-1 Descente de la seringue



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

2. Assurez-vous que l'extrémité de la seringue affleure la base et que l'axe de la seringue reste dans l'encoche.
3. Réglez la tige 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. Consultez la [Figure 3-2](#).

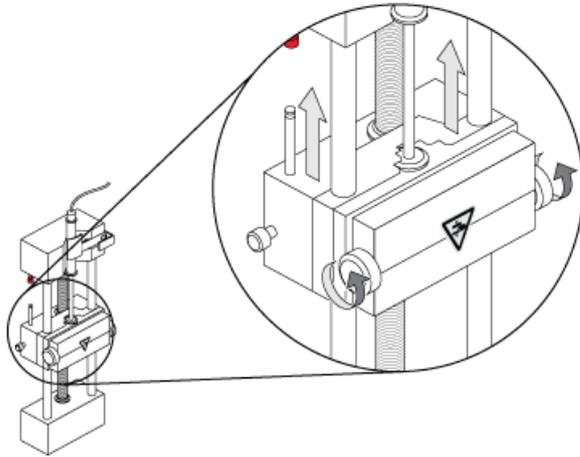
Figure 3-2 Arrêt automatique de la seringue



Élément	Description
1	Arrêt automatique de la seringue (butoir). Après que la tige bute sur l'arrêt automatique de la seringue, la pompe à seringue s'arrête.
2	Tige. 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 tige. Serrez la vis après que la hauteur de la tige a été réglée.

4. Tournez les vis latérales comme illustré à la [Figure 3-3](#) pour fixer la seringue.

Figure 3-3 Vis de la pompe à seringue



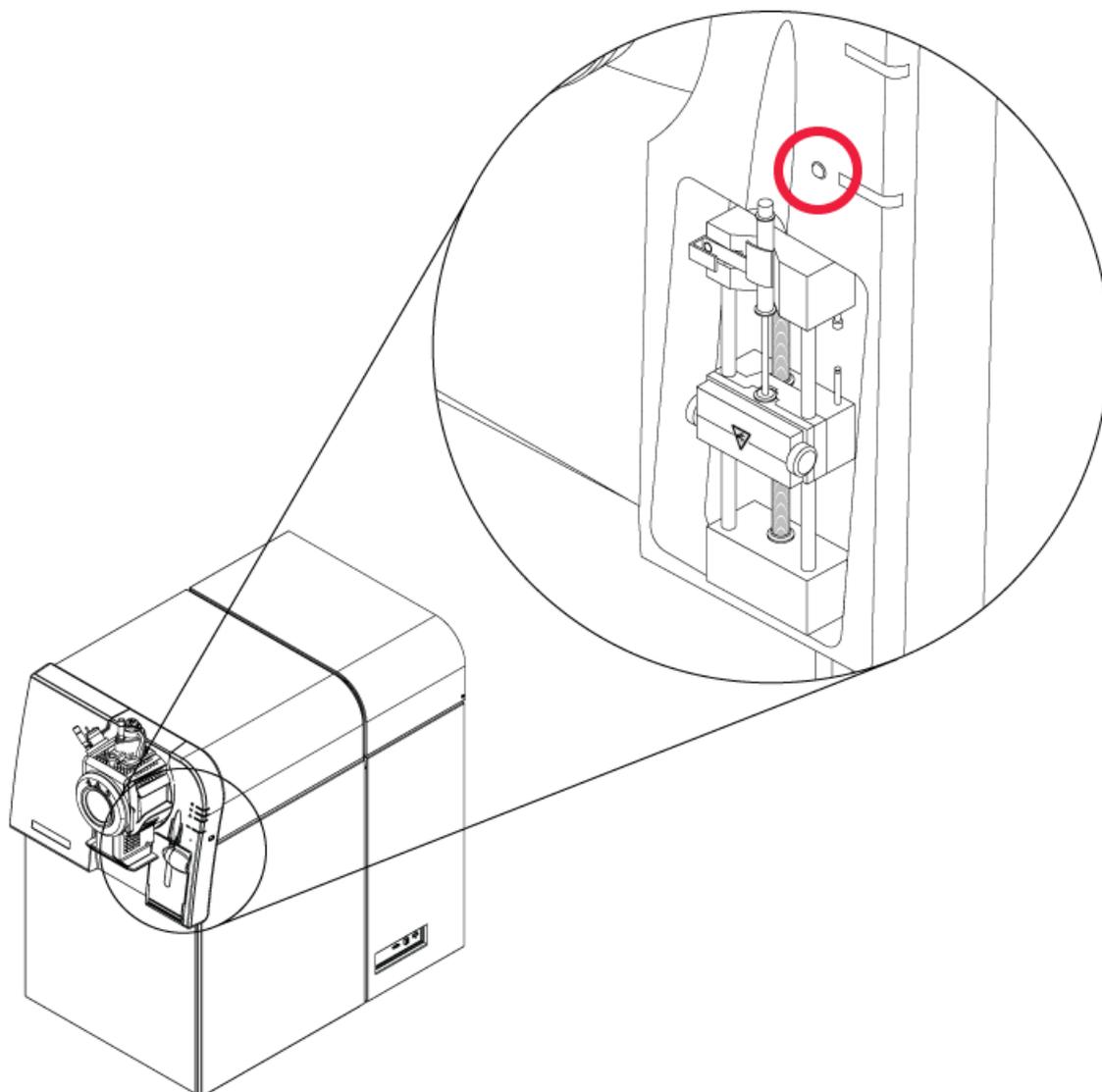
5. Dans le logiciel Analyst[®], double-cliquez sur **Manual Tuning** dans la barre de navigation.
6. Cliquez sur **Start Syringe**.
7. Pour arrêter la pompe à seringue, cliquez sur **Stop Syringe**.

Réinitialiser la pompe à seringue

Si la communication entre le logiciel Version du logiciel[®] 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 3-4 à la page 29](#).

Figure 3-4 Bouton de réinitialisation



Instructions d'utilisation : flux de travail des échantillons

4

Tableau 4-1 Configuration de l'instrument

Étape	Pour ce faire...	Chercher l'information dans...	Qu'est ce que cela fait ?
1	Créer un profil de matériel.	Créer un profil matériel à la page 34	Chaque profil de matériel doit comprendre un spectromètre de masse ainsi que d'autres dispositifs, comme un système LC. 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.	Créer des projets et des sous-projets à la page 41	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.	Optimiser le spectromètre de masse à la page 47	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 les performances du système.

Tableau 4-2 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.	Créer des projets et des sous-projets à la page 41	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.	Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition à la page 49	Pour analyser les échantillons, créer 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.	Ajouter des ensembles et des échantillons à un lot à la page 61 et Soumettre un échantillon ou un groupe d'échantillons à la page 64	Après avoir créé une méthode d'acquisition, traiter les échantillons en créant un lot d'acquisition et en l'envoyant dans la file d'attente d'acquisition.

Tableau 4-2 Flux de travail des acquisitions d'échantillons (Suite)

Étape	Pour ce faire...	Chercher l'information dans...	Qu'est ce que cela fait ?
4	Traiter les échantillons pour acquérir des données.	Acquérir les données à la page 65	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 Queue Manager 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—	Instructions d'utilisation : analyser et explorer les données à la page 73	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.	MultiQuant™/logiciel PeakView®	Utilisez le logiciel MultiQuant™ ou le logiciel PeakView® pour analyser les données. Pour de plus amples informations, reportez-vous à la documentation fournie avec le logiciel.

Tableau 4-3 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 > SCIEX > Analyst® TF > Guides des logiciels.
2	Optimiser le spectromètre de masse.	Le tutoriel d'optimisation manuelle se trouve dans Démarrer > Programmes > 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. Plusieurs profils de matériel peuvent être définis, mais seul un profil peut être actif à la fois.

Lorsqu'un profil de matériel est créé dans Hardware Configuration Editor, les périphériques doivent être configurés afin que le logiciel puisse communiquer avec eux. La configuration des périphériques nécessite deux procédures : la configuration des connexions physiques et la configuration du logiciel pour communiquer avec les périphériques. Lorsque le logiciel est installé, le pilote requis pour chaque périphérique est également installé. Une fois les périphériques connectés physiquement à l'ordinateur, définissez les informations de configuration appropriées.

Chaque profil d'équipement doit inclure un spectromètre de masse. Avant de créer une méthode d'acquisition, assurez-vous que tous les périphériques à utiliser dans la méthode sont inclus dans le profil de matériel, y compris la pompe à seringue. Seuls les périphériques configurés dans le profil matériel actif et sélectionnés dans la boîte de dialogue Add/Remove Device Method apparaissent sous forme d'icônes dans le volet de navigation Acquisition Method. Seuls les périphériques inclus dans le profil matériel peuvent être utilisés lors de la création des méthodes d'acquisition.

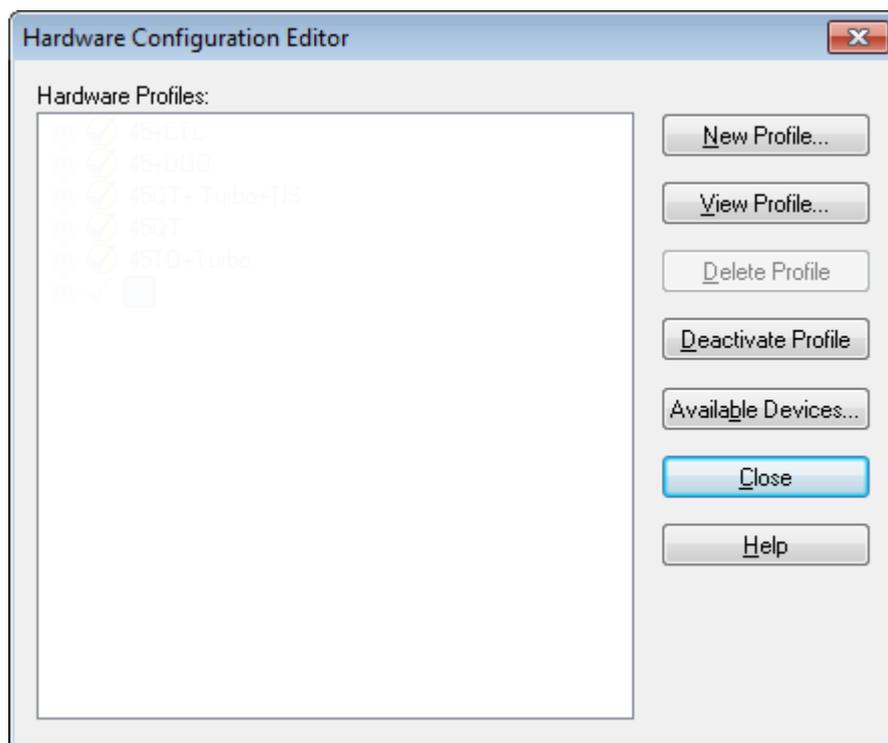
Pour plus d'informations sur la configuration des connexions physiques aux périphériques, consultez le *Guide d'installation des périphériques*. Pour obtenir la liste des appareils pris en charge, consultez le *Guide d'installation du logiciel* pour le logiciel Version du logiciel[®] TF.

Créer un profil matériel

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

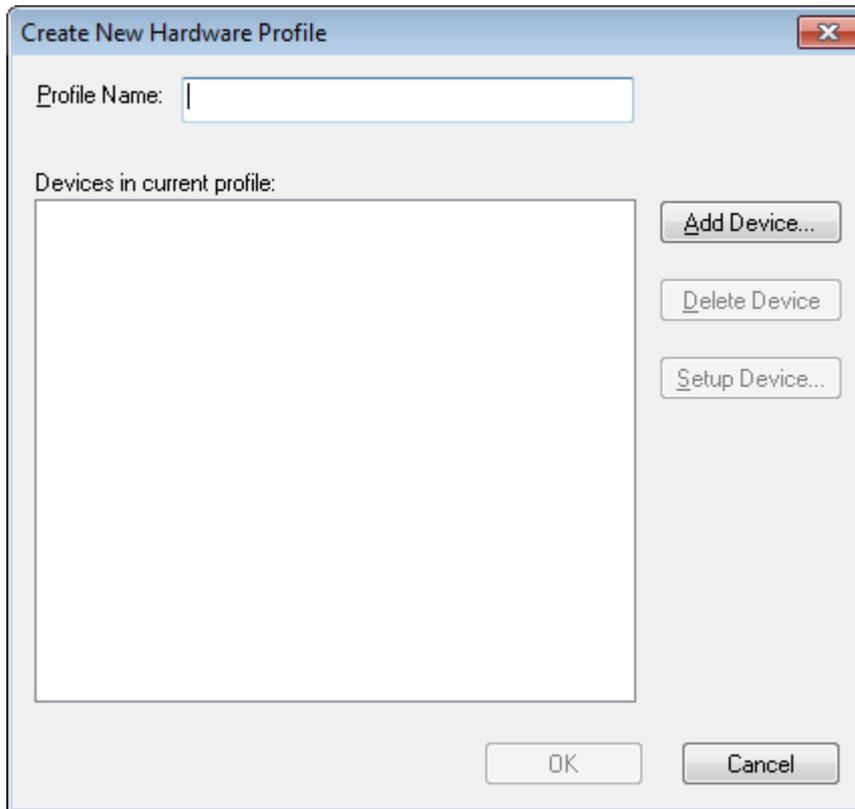
1. Dans la barre de navigation, sous **Configure**, double-cliquer sur **Hardware Configuration**.

Figure 5-1 Boîte de dialogue Hardware Configuration Editor



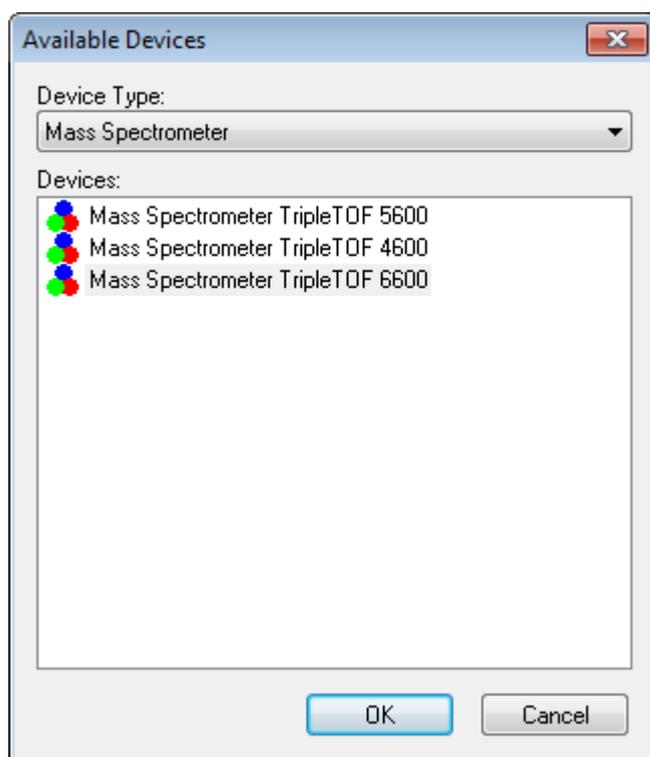
2. Dans Hardware Configuration Editor, cliquer sur **New Profile**.

Figure 5-2 Boîte de dialogue Create New Hardware Profile



3. Saisir un nom dans le champ **Profile Name**.
4. Cliquer sur **Add Device**.

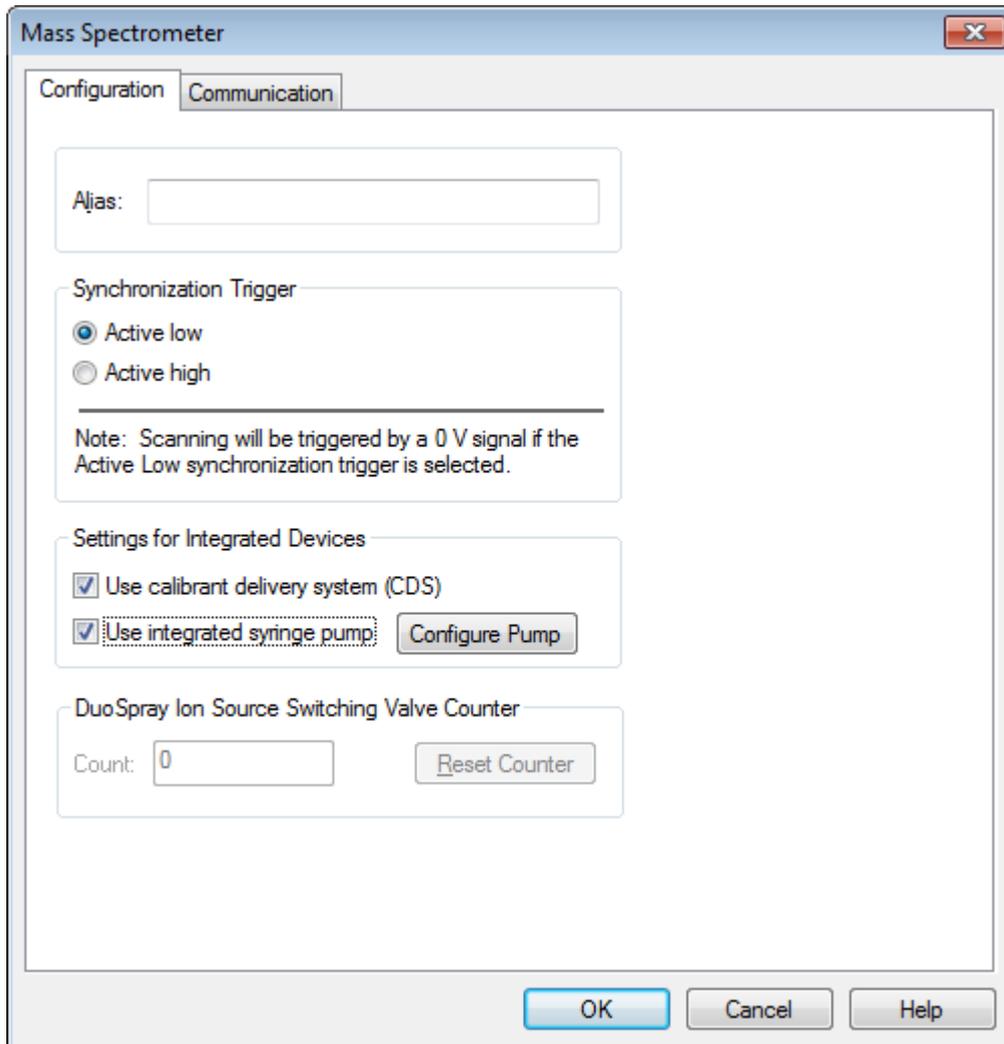
Figure 5-3 Boîte de dialogue Available Devices



Dans la boîte de dialogue Available Devices dans le champ **Device Type**, la valeur prédéfinie est **Mass Spectrometer**.

5. Dans la liste **Devices**, sélectionnez le bon spectromètre de masse, puis cliquez sur **OK** pour revenir à la boîte de dialogue Create New Hardware Profile.
6. Cliquez sur **Setup Devices**.
7. (Facultatif) Pour configurer les spectromètres de masse utilisant la pompe à seringue intégrée, dans l'onglet **Configuration**, sélectionnez la case **Use integrated syringe pump**.

Figure 5-4 Onglet Configuration avec CDS et pompe à seringue configurés



8. (Facultatif) Pour configurer le spectromètre de masse pour le CDS, dans l'onglet **Configuration**, sélectionnez **Use calibrant delivery system (CDS)** (Utiliser le système de distribution d'étalonnage [CDS]).
9. (Facultatif) Si nécessaire, sélectionnez des fonctions supplémentaires dans les onglets **Configuration** et **Communication**.
10. Cliquez sur **OK** pour revenir à Création d'un nouveau profil d'équipement.
11. Cliquez sur **Add Device**, puis ajoutez et configurez chaque appareil utilisé avec le spectromètre de masse. Consultez [Ajouter des périphériques à un profil de matériel à la page 39](#).
12. Cliquez sur **OK** dans la boîte de dialogue **Create New Hardware Profile**.
13. Cliquez sur le profil de matériel à activer dans **Hardware Configuration Editor**.
14. Cliquez sur **Activate Profile**.

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

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

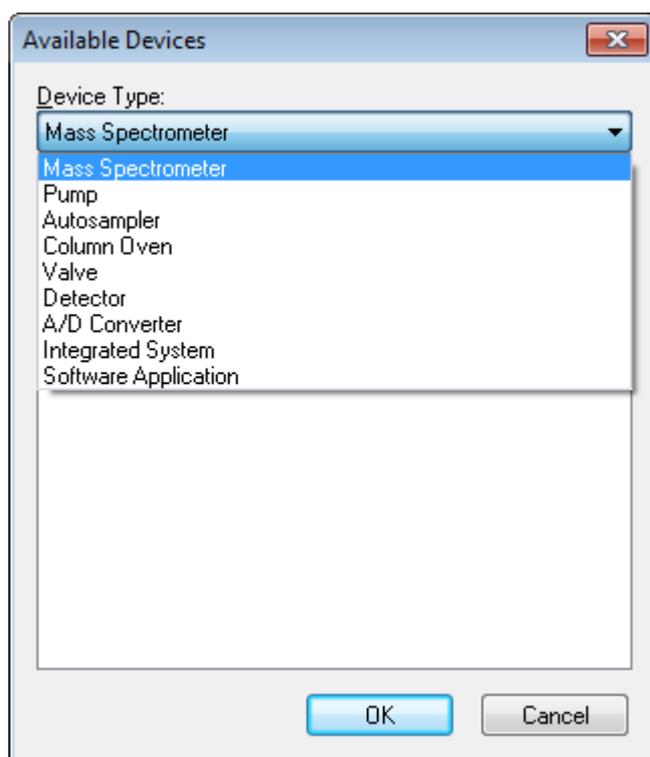
15. Cliquez sur **Close**.

Ajouter des périphériques à un profil de matériel

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 les périphériques connectés physiquement à l'ordinateur, configurez-les.

1. Ouvrez le Hardware Configuration Editor.
2. Dans **Hardware Profiles**, désactiver le profil d'équipement.
3. Cliquez sur **Edit Profile**.
4. Cliquez sur **Add Device**.
5. Dans la boîte de dialogue Available Devices, dans la liste **Device Type**, sélectionnez le périphérique, puis cliquez sur **OK**.

Figure 5-5 Boîte de dialogue Available Devices



6. Cliquez sur **OK**.

Instructions d'utilisation : profils de matériel et projets

7. Sélectionnez le périphérique dans la liste **Devices**, puis cliquez sur **OK**.
8. Cliquez sur **Setup Devices**.

Une boîte de dialogue contenant les valeurs de configuration de périphérique s'ouvre.

9. (Facultatif) Dans l'onglet Communication, dans le champ **Alias**, entrez un nom ou un autre identifiant pour le périphérique.

Remarque : Pour les périphériques utilisant une communication série, assurez-vous que le port série sélectionné correspond à celui auquel le périphérique est physiquement connecté.

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

- Si le périphérique utilise un **Serial Port** comme interface de communication, dans la liste **COM Port Number**, sélectionnez le port COM auquel le périphérique est connecté.
- Si le périphérique utilise **Ethernet** comme interface de communication, saisissez l'**IP Address** attribuée au périphérique par l'administrateur ou utilisez le **Host Name** correspondant à l'adresse.
- Si le périphérique utilise une **GPIB Board** 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**.
12. Répétez les étapes 4 à 11 pour chaque périphérique.
13. Cliquez sur **OK** dans la boîte de dialogue Create New Hardware Profile.
14. Pour activer un profil d'équipement, dans l'éditeur de configuration d'équipement, cliquez sur le profil d'équipement.
15. Cliquez sur **Activate Profile**.

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 de matériel à la page 41](#).

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

16. Cliquez sur **Close**.

Dépannage des problèmes liés à l'activation du profil de 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. L'activation d'un dispositif peut échouer à cause d'erreurs 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. Vérifier que le port COM affecté au périphérique est correct.
4. Vérifier que les paramètres de communication pour 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 toujours, contactez l'assistance technique.

Projets et sous-projets

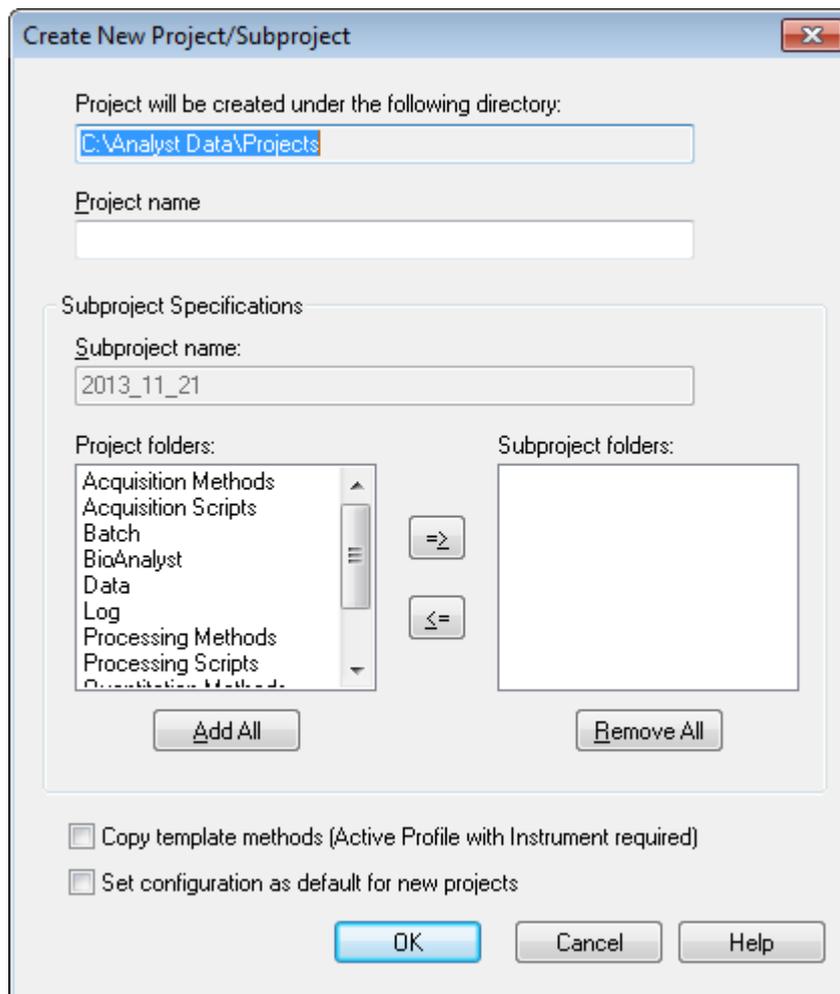
Avant de commencer une expérience, décidez de l'emplacement où stocker les fichiers liés à l'expérience. Utilisez des projets et sous-projets pour chaque expérience pour mieux gérer les données et comparer les résultats. Par exemple, utilisez des sous-projets pour stocker les résultats obtenus à certaines dates.

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 > Project > Create Project**.

Figure 5-6 Boîte de dialogue Create New Project/Subproject



Remarque : Il est impossible de créer un nouveau sous-projet dans un projet qui n'a pas été créé avec un sous-projet.

2. Saisissez un nom de projet dans le champ **Project name**.
3. (Facultatif) Pour utiliser les sous-projets, sélectionnez les dossiers concernés puis utilisez les flèches pour les déplacer dans **Subproject folders**.
4. (Si vous utilisez des sous-projets) Saisissez un nom pour le premier sous-projet dans le champ **Subproject name**, 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**.

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**, dans la liste **Project**, sélectionnez le projet.
2. Cliquez sur **Tools > Project > Create SubProject**.
3. Dans la case **Subproject name**, 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 > Project > Copy Subproject**.

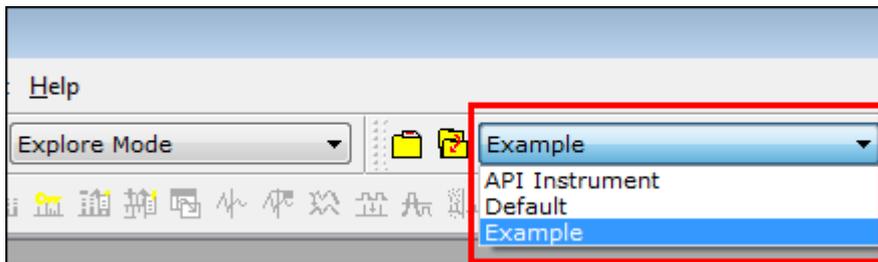
La boîte de dialogue Copy Subproject apparaît.

2. Cliquez sur **Browse** pour accéder à la source du sous-projet.
3. Cliquez sur **OK**.
4. Sélectionnez le sous-projet de la liste **Source Subproject**.
5. Cliquez sur **Browse** pour aller à la destination du sous-projet.
6. Tapez le nom dans le champ **Target Subproject**.
7. Cliquez sur **OK**.
8. Effectuer l'une des opérations suivantes :
 - Pour copier tous les dossiers et fichiers de **Subproject Source** dans **Subproject Destination**, sélectionnez en cochant **Copy Contents**.
 - Pour copier uniquement les dossiers dans la même structure dans **Subproject Destination**, s'assurer que **Copy Contents** est effacé.
9. Cliquez sur **Copy**.

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 5-7 Liste de projets



La liste de projets de ce croquis affiche les dossiers **API Instrument**, **Default** et **Example**.

Dossiers projet installé

Trois dossiers de projet sont installés avec le logiciel : **API Instrument**, **Default** et **Example**.

Dossier API Instrument

Le dossier API Instrument est unique et très important pour le bon fonctionnement du spectromètre de masse. Le dossier API Instrument contient les informations requises pour l'ajustement 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 réglage manuel à partir de la commande démarrage plutôt que Acquisition. 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 dossier Tuning Cache est automatiquement et régulièrement effacé.

Dossier Default

Le dossier Default contient des dossiers qui sont présents dans de nouveaux projets et sert de modèle pour les nouveaux projets.

Dossier Example

Le dossier Example contient des exemples de méthodes et de fichiers de données. Les utilisateurs peuvent s'exercer à travailler avec les modes Explore mode en utilisant les exemples de fichiers de données

Sauvegarder le dossier API Instrument

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

- Copiez le dossier API Instrument 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. Par exemple, le modèle API
Instrument_ *instrument* 3_010107

Récupérer le dossier API Instrument

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

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

Exécutez l'option **Verify Performance Only** à n'importe quel moment. Ne réglez l'instrument que si vous remarquez une perte de sensibilité ou de résolution. Pour de plus amples informations sur le réglage et l'étalonnage, consultez le *Guide d'utilisation avancée*.

Pour régler le système, utilisez les solutions suivantes, fournies avec le kit d'installation :

Pour le mode positif :

- Pour optimiser la haute résolution ou la haute sensibilité des ions produits en mode TOF MS, utilisez la solution d'ajustement.
- Pour l'étalonnage Q1, utilisez la solution PPG POS.

En mode négatif :

- Pour optimiser la haute résolution ou la haute sensibilité des ions produits en mode TOF MS, utilisez l'acide taurocholique.

Remarque : Après utilisation de l'acide taurocholique, nous recommandons de renouveler l'alignement du canal à l'aide de la solution POS PPG.

- Pour l'étalonnage Q1, utilisez la solution PPG POS.

Conseil ! Exécutez les tâches de maintenance régulièrement afin de garantir le fonctionnement optimal du spectromètre de masse.

Conditions préalables

- La nébulisation est stable et la solution de réglage est adaptée.
- Une imprimante est configurée.

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 de SCIEX. Voir la section [Ions d'étalonnage recommandés](#).
- Seringue étanche au gaz (1,0 ml recommandé)
- Tube d'échantillonnage PEEK rouge.

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**, double cliquez sur **Manual Tuning**.
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-cliquer 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). S'assurer 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

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

Tune and Calibrate

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 de paramètre actuelle quand les résultats du logiciel sont visualisés en mode interactif.

Les Instrument Optimization Decision Plots (parcelles sur les décisions de l'optimisation de l'instrumentation), en haut à droite du graphique, affichent en dynamique les courbes d'intensité face à la tension des paramètres actuellement en cours d'optimisation.

Récapitulatif des résultats

Le Results Summary est un enregistrement de toutes les modifications de paramètres sur l'instrument faites par l'assistant Instrument Optimization.

Figure 6-1 Récapitulatif des résultats

Results Summary

2014-02-24 at 17:00
Logged in as \
Instrument: TripleTOF 6600
Model #:
Serial #:
Instrument Optimization Ver: 2.9359.40
Instrument performance...

TOFMS High Resolution

Mass (Da)	Found At (Da)	Height (cps)	Area	Resolution	Error (ppm)
132.9049	132.9044	1.34E+04	5.38E+04	24 823	3.6
829.5393	829.5406	3.58E+03	2.41E+04	35 559	1.5

Product Ion High Resolution

Mass (Da)	Found At (Da)	Height (cps)	Area	Resolution	Error (ppm)
185.1285	185.1289	1.61E+03	7.38E+03	26 619	2.3
215.1390	215.1397	8.86E+02	4.09E+03	27 790	3.3
298.2125	298.2137	3.45E+03	1.66E+04	32 315	4.1
381.2496	381.2511	2.66E+03	1.42E+04	32 176	3.9
494.3337	494.3350	4.63E+03	2.79E+04	32 355	2.7
607.4178	607.4189	3.20E+03	2.06E+04	32 694	1.8

Help Next-> Finished

Instrument: TripleTOF 6600 Instrument Optimization Ver: 2.9359.40

Le Results Summary est automatiquement sauvegardé à l'emplacement suivant : <drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Data\Instrument Optimization\yyyy-mm-dd\results.doc, où la mention *yyyy-mm-dd* correspond à la date de création du rapport. Les utilisateurs peuvent imprimer le sommaire des résultats ou ouvrir un sommaire précédemment sauvegardé.

Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

7

Une méthode d'acquisition se compose d'expériences et de périodes. Utilisez l'Acquisition Method Editor pour créer une séquence de périodes et d'expériences pour l'instrument et les périphériques.

La méthode d'acquisition est la méthode destinée aux spectromètres de masse et aux appareils de chromatographie en phase liquide (LC). Les utilisateurs peuvent facilement créer une méthode d'acquisition à l'aide du Method Wizard (Assistant de méthode).

L'Acquisition Method Editor peut également être utilisé pour créer des méthodes d'acquisition et pour ajouter une séquence de périodes et d'expériences pour l'instrument et les périphériques.

Utilisez la fonction d'acquisition SWATH[®], qui se trouve à la fois dans le Method Wizard et dans l'Acquisition Method Editor, pour créer des méthodes d'acquisition SWATH[®]. De plus, les méthodes à largeur de fenêtre variable SWATH[®] peuvent être créées à l'aide du Method Wizard ou de l'Acquisition Method Editor. Pour plus d'informations, consultez le *Guide de l'utilisateur avancé*, l'aide d'Analyst[®], et l'aide du Method Wizard.

Nous recommandons que seuls les utilisateurs compétents en développement de méthode créent ou modifient les méthodes d'acquisition et de quantification. Consultez le *Guide du directeur de laboratoire* pour plus d'informations sur les rôles et la sécurité.

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. 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*.

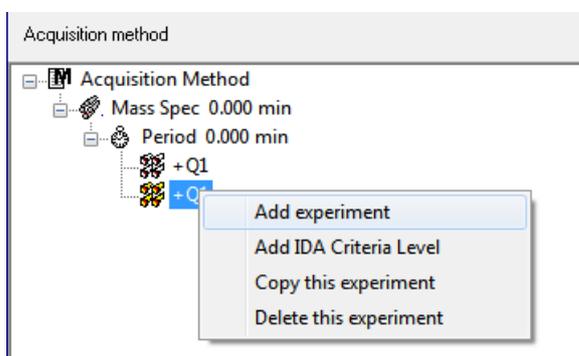
1. Vérifiez que le profil d'équipement contenant le spectromètre de masse et les périphériques sont activés.
2. Sur la barre de Navigation, sous **Acquire**, double cliquez sur **Build Acquisition Method**.
3. Dans l'onglet **Acquisition Method Properties**, sélectionnez Synchronisation Mode.
4. (Facultatif) Sélectionnez la case à cocher **Auto-Equilibration**, puis tapez le temps d'équilibrage requis, en minutes.
5. Dans le panneau **Acquisition method**, cliquez sur l'icône Mass Spec.
6. Dans l'onglet **MS**, sélectionnez Scan type.
7. Tapez les valeurs dans les champs prévus. Reportez-vous à [Paramètres à la page 54](#).
8. Dans l'onglet Advanced MS, tapez les valeurs dans les champs prévus.

9. Sous l'onglet MS, cliquez sur **Edit Parameters**.
10. Dans l'onglet Source/Gas, des valeurs spécifiques dans les champs sont requises.
11. Dans l'onglet Compound, 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 50](#) et [Ajouter une période à la page 50](#).
14. Cliquez sur **File > Save**.

Ajouter une expérience

1. Dans le volet Acquisition method, sur la période à laquelle l'expérience doit être ajoutée, cliquez avec le bouton droit de la souris, puis cliquez sur **Add experiment**.

Figure 7-1 Ajouter une 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, des critères IDA ou des périodes. Les utilisateurs ne peuvent ajouter une expérience qu'à la fin de la période.

2. Dans l'onglet MS, sélectionnez les paramètres adéquats.

Ajouter une période

- Dans le panneau Acquisition Method, cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'icône **Masse Spec**, puis cliquez sur **Add Period**.

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, 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 de la souris 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.

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**, double cliquez sur **Method Wizard**.

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).

Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

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**, cliquez sur **File > Open**, puis ouvrez la méthode créée à l'aide du **Method Wizard**.

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

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 des composés.

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.
- Deux modes de spectrométrie de masse en tandem (MS/MS) :
 - la spectrométrie de masse avec analyse d'ions produits.
 - spectrométrie de masse avec analyse d'ions précurseurs

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.

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.

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.

Spectrométrie 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.

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).

Spectrométrie de masse d'ions précurseurs

Dans un balayage d'ion précurseur, le système détecte les ions précurseurs qui génèrent un ion produit spécifique. L'instrument utilise Q1 en mode de résolution de masse pour balayer toute la plage de masses d'intérêt, pendant que la section TOF enregistre le spectre d'ion produit pour chaque ion précurseur. Le spectre de masse Q1 affiche tous les ions précurseurs qui ont été produits par l'ion produit d'intérêt.

À propos de l'acquisition de données spectrales

Les données spectrales peuvent être acquises selon l'un des modes décrits dans le [Tableau 7-1](#).

Les données spectrales peuvent être acquises à partir des types de balayage Q1 et Ion précurseur.

Tableau 7-1 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 de larges incréments (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.

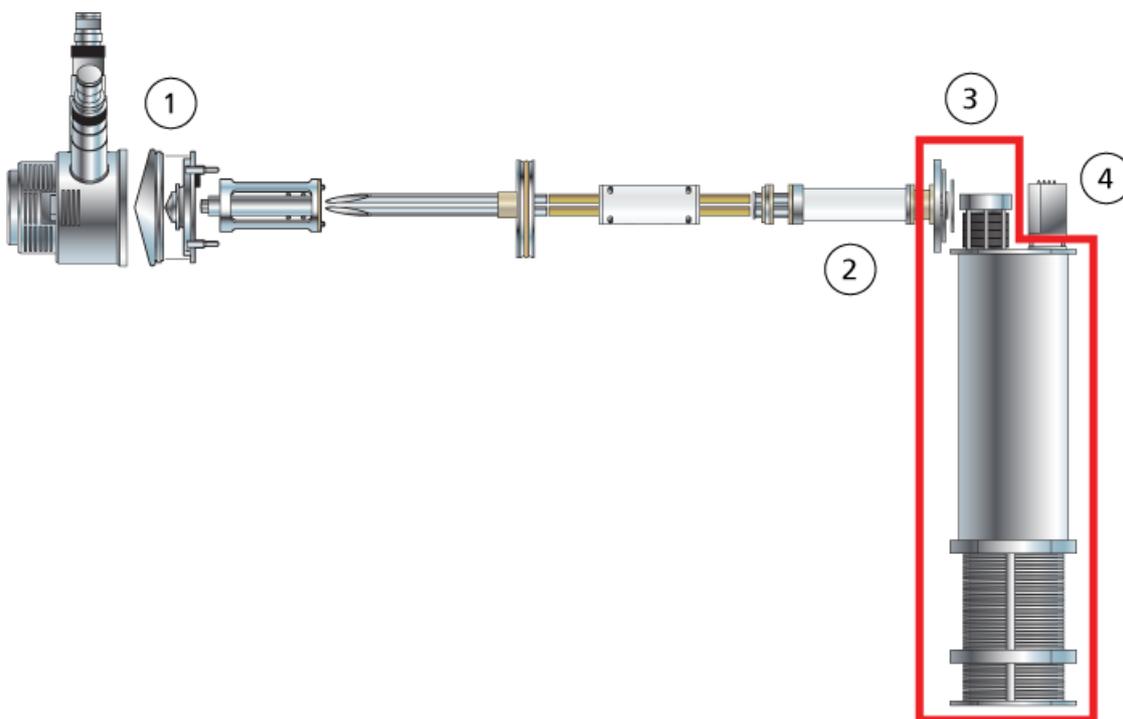
Paramètres

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

- Paramètres de source et de gaz : ces paramètres peuvent changer en fonction de 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 de résolution : ces paramètres ont un impact sur la résolution et l'étalonnage.
- 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 suivante montre l'emplacement des paramètres sur le passage de l'optique ionique.

Figure 7-2 Trajet optique des ions et paramètres



Emplacement	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type d'analyse
1	IonSpray Voltage Floating (ISVF)	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	Interface Heater Temperature (IHT)	Source et gaz	Le paramètre IHT contrôle la température du chauffage de l'interface NanoSpray® et est uniquement disponible si la source d'ions NanoSpray® et son interface 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

Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

Emplacement	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type d'analyse
1	Ion Source Gas 1 (GS1)	Source et gaz	Le paramètre GS1 règle le gaz nébuliseur pour les sondes TurbolonSpray [®] et APCI. Le paramètre GS1 contrôle le gaz nébuliseur pour la sonde TurbolonSpray [®] .	Tous
1	Ion Source Gas 2 (GS2)	Source et gaz	Le paramètre GS2 contrôle le gaz chauffant pour la sonde TurbolonSpray [®] . Le paramètre GS2 contrôle le gaz chauffant pour la sonde TurbolonSpray [®] et le gaz nébuliseur pour la sonde APCI.	Tous
1	Temperature (TEM)	Source et gaz	Le paramètre TEM contrôle la température du gaz chauffant pour la sonde TurbolonSpray [®] ou la température de la sonde APCI.	Tous
1	Curtain Gas (CUR)	Source et gaz	Le paramètre CUR contrôle le débit de gaz de l'interface Curtain Gas [™] . Le débit de Curtain Gas [™] est situé entre la plaque rideau et l'orifice. Elle prévient la contamination des optiques ioniques.	Tous
1	Declustering Potential (DP)	Composé	Le paramètre DP contrôle la tension de l'orifice, ce qui contrôle la capacité à défragmenter les ions entre l'orifice et le guide d'ions QJet [®] . Il est utilisé pour minimiser les groupements de solvant qui peuvent rester sur les ions échantillon après leur entrée dans la chambre à vide 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 alors possible. Utilisez la valeur prédéfinie et optimisez pour le composé.	Tous

Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

Emplacement	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type d'analyse
2	CAD Gas	Source et gaz	<p>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.</p> <p>Utilisez la valeur prédéfinie et optimisez pour le composé.</p>	Tous
2	Collision Energy (CE)	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>Utilisez la valeur prédéfinie et optimisez pour le composé.</p>	TOF MS, TOF MS/MS
2	Collision Energy Spread (CES)	Composé	<p>Le paramètre CES, en conjonction avec le paramètre CE, décide de l'application de trois énergies de collision discrètes appliquées à la masse de précurseur dans un balayage 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>Utilisez la valeur prédéfinie et optimisez pour le composé.</p>	TOF MS/MS

Instructions d'utilisation : méthodes d'acquisition

Emplacement	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type d'analyse
3	Ion Release Delay (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	Ion Release Width (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

ATTENTION : Risque d'endommagement du système. Si le connectés au spectromètre de masse ne sont pas contrôlés par le logiciel, ne laissez pas le spectromètre de masse sans surveillance pendant son fonctionnement. Le flux liquide provenant du peut déborder dans la source d'ions lorsque le spectromètre de masse passe en mode Veille.

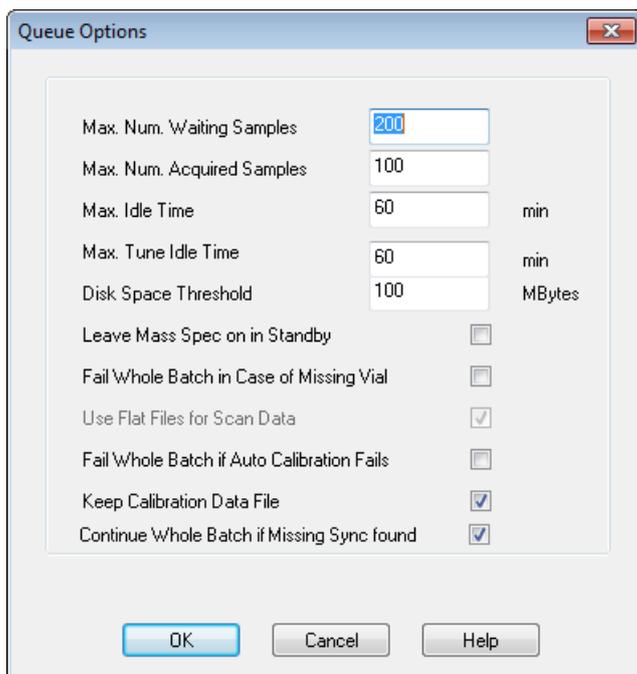
Régler les options de file d'attente

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 veille, les pompes LC et l'alimentation sur certaines instrumentations sont mises hors tension.

L'utilisateur peut modifier le temps d'attente après la fin de la dernière acquisition avant que le logiciel Version du logiciel® TF ne mette le spectromètre de masse en mode Standby. Pour plus d'informations sur les autres champs dans la boîte de dialogue Queue Options, consultez la rubrique Help.

1. Dans la barre de navigation, cliquez sur **Configure**.
2. Cliquer sur **Tools > Settings > Queue Options**.

Figure 8-1 Boîte de dialogue Queue Options



3. Dans le champ **Max. Num. Waiting Samples**, 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**, saisissez le temps d'attente après la fin de l'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** pour maintenir le spectromètre de masse allumé après la fin de l'analyse. Cette fonctionnalité permet aux chauffages et aux gaz de rester allumés même après le passage des appareils à l'état Idle afin de garder la source d'ions et l'entrée du spectromètre de masse libres de contaminants.
6. Cochez la case **Fail Whole Batch in Case of Missing Vial** 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** pour arrêter le lot si la calibration automatique échoue.
8. Cochez la case **Keep Calibration Data File** pour enregistrer le fichier de données de calibration dans un sous-dossier du dossier Data du projet soumettant les échantillons.

9. Cochez la case **Continue Whole Batch if Missing Sync found** 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.

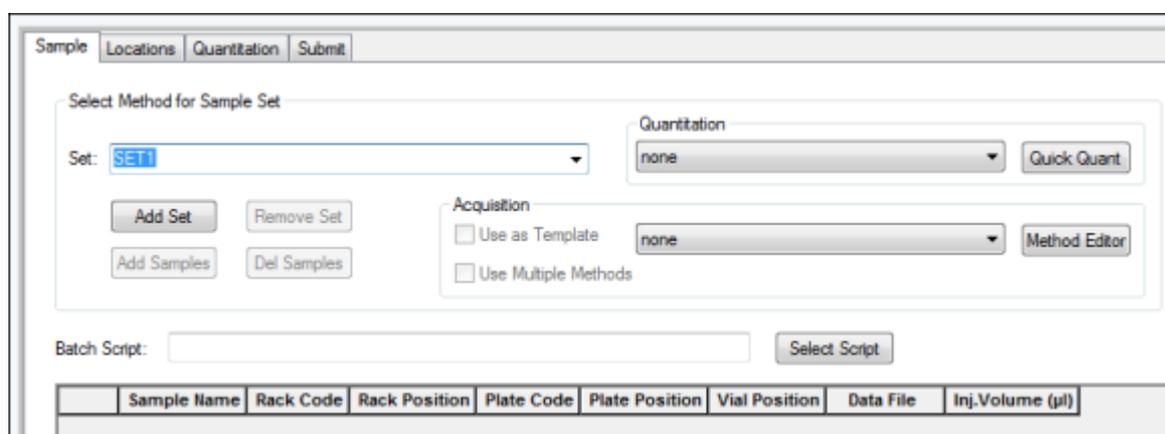
Ajouter des ensembles et des échantillons à un lot

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, consultez le *Guide de l'utilisateur expert*.

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

Figure 8-2 Boîte de dialogue Batch Editor



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

Figure 8-3 Boîte de dialogue Add Sample

The screenshot shows a dialog box titled "Add Sample". It is divided into three main sections. The first section, "Sample name", contains a "Prefix" text box with "Sample" entered, a "Sample number" checkbox which is checked, and a "Number of digits" text box with "3" entered. The second section, "Data file", contains a "Prefix" text box with "Data" entered, "Set name" and "Auto Increment" checkboxes both checked, and a "Sub Folder" text box next to a "Browse" button. The third section, "New samples", contains a "Number" text box with "1" entered. At the bottom of the dialog are three buttons: "OK", "Cancel", and "Help".

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 **Sample number**.
7. Si la case **Sample number** est sélectionnée, dans le champ **Number of digits**, 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**, dans **Prefix**, entrez un nom pour le fichier de données qui stockera les informations relatives à l'échantillon.
9. Sélectionnez **Set name** à utiliser comme partie intégrante du nom du fichier de données.
10. Sélectionnez **Auto Increment** pour incrémenter automatiquement les noms de fichiers de données.

Remarque : Les données de chaque échantillon peuvent être stockées dans le même fichier de données ou dans un fichier de données distinct. Les noms du fichier de données auront un suffixe numérique commençant par 1.

11. Saisissez un nom dans le champ **Sub Folder**.

Le classeur est stocké dans le dossier **Data** correspondant au projet actuel. Si le champ **Sub Folder** est laissé vide, le fichier de données est stocké dans le dossier **Data** et aucun sous-dossier n'est créé.

12. Dans la section **New samples**, dans le champ **Number**, entrez le nombre de nouveaux échantillons à ajouter.

13. Cliquez sur **OK**.

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

Conseil ! Fill Down et Auto Increment sont des options disponibles dans le menu contextuel après la sélection d'une colonne de tête unique ou de plusieurs lignes d'une colonne.

14. Dans l'onglet **Sample**, dans la section **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**. La colonne **Acquisition Method** s'affiche dans le tableau **Sample**. 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. Pour définir les emplacements des échantillons, effectuez l'une des opérations suivantes :

- [Réglez les emplacements de l'échantillon dans l'Éditeur de lot à la page 66](#)
- [Sélectionner les emplacements des flacons à l'aide de l'onglet Locations \(facultatif\) à la page 66](#)

17. Cliquez sur **Submit**.

Remarque : L'ordre des échantillons peut être modifié avant qu'ils ne soient envoyés vers la file d'attente. Pour modifier l'ordre des échantillons, sous l'onglet **Submit**, double-cliquez sur n'importe quel nombre à l'extrême gauche du tableau (une case floue est visible), puis faites-le glisser jusqu'au nouvel emplacement.

18. Si la section **Submit Status** 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 envoi, passez à l'étape [19](#).
- Si le message indique que le lot n'est pas prêt, apportez les changements comme indiqué par le message.

19. Après avoir confirmé que toutes les informations du lot sont correctes, cliquez sur **Submit**.

Le lot est ajouté à la file d'attente et peut être visualisé dans Queue Manager.

20. Enregistrer le fichier.

Soumettre un échantillon ou un groupe d'échantillons

Remarque : Analysez à nouveau l'échantillon en cas d'arrêt anormal lors de l'acquisition de l'échantillon. Si l'interruption anormale est due à une panne d'alimentation, la température du plateau de l'auto-échantillonneur n'est pas maintenue et l'intégrité des échantillons peut être compromise.

1. Sélectionnez un échantillon ou un groupe d'échantillons.
2. Cliquez sur l'onglet **Submit** sur le **Batch Editor**.
3. Si la section **Submit Status** 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 alors à l'étape suivante.
 - Si le message indique que le lot n'est pas prêt, apportez les changements comme indiqué par le message.
4. Cliquez sur **Submit**.

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 soient envoyés dans la **Queue**.

- Dans l'onglet **Submit**, 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.

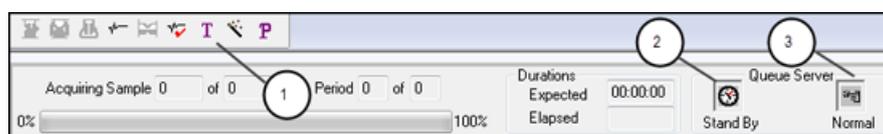
Acquérir les données

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

1. Assurez-vous que la température du four à colonne est atteinte.
2. Assurez-vous que l'icône  n'est pas enfoncée.
3. Dans la barre de navigation, cliquez sur **Acquire**.
4. Cliquez sur **View > Sample Queue**.

Tous les échantillons envoyés s'affichent lors de l'ouverture du Queue Manager.

Figure 8-4 Gestionnaire de file d'attente



Élément	Description
1	N'appuyez pas sur l'icône Reserve Instrument for Tuning (Réserver l'instrument pour l'ajustement).
2	La file d'attente doit être en mode Ready.
3	Le serveur de file d'attente doit être dans l'état Normal (Normal). Voir États de la file d'attente à la page 69 .

5. Cliquez sur **Acquire > Start Sample**.

Réglez 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](#)

1. Dans l'onglet **Sample**, dans la liste **Set**, 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 carrousel.
 - Dans la colonne **Rack Position (Position Rack)**, sélectionnez la position du carrousel 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 carrousel.
 - Dans la colonne **Vial Position (Position Flacons)**, sélectionnez la position des flacons dans la plaque ou le plateau.
3. Enregistrer le fichier.

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

1. Cliquez sur l'onglet **Locations** dans le **Batch Editor**
2. Sélectionnez le réglage dans la liste **Set**.
3. Sélectionnez l'auto-échantillonneur dans la liste **Autosampler**.
4. Dans l'espace associé au carrousel, cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez le type de carrousel.

Les plaques ou plateaux sont indiqués dans le carrousel.

5. Double-cliquez dans l'espace blanc étiqueté « type de carrousel ». Une disposition visuelle du carrousel d'échantillons apparaît.

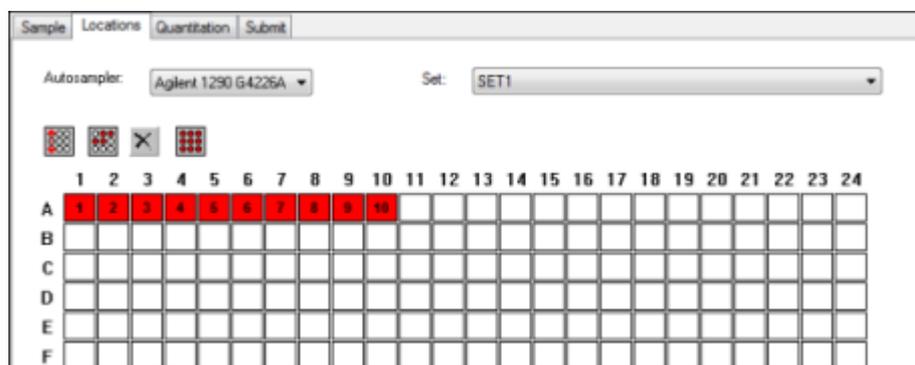
Le nombre exact d'espaces dans le carrousel pour l'auto-échantillonneur apparaît dans la représentation graphique du carrousel.

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

Les cercles indiquant les puits ou les flacons pour la plaque ou le plateau apparaissent.

Conseil ! Pour voir le numéro du flacon correspondant dans la représentation graphique, déplacez le curseur sur la position d'échantillon. Utilisez cette information pour confirmer que la position des flacons dans le logiciel correspond à la position des flacons dans l'auto-échantillonneur.

Figure 8-5 Onglet Locations



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

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

Si le bouton affiche une ligne horizontale rouge, le **Batch Editor** marque les échantillons par ligne. Si le bouton affiche une ligne verticale rouge, le **Batch Editor** marque les échantillons par colonne.

8. Cliquez sur les puits ou les flacons d'échantillon dans l'ordre d'analyse.

Conseil ! Cliquez à nouveau sur un puits ou un flacon sélectionné pour effacer.

Conseil ! Pour remplir automatiquement les échantillons, appuyez sur la touche **Shift** tout en cliquant sur le premier et le dernier flacons d'un jeu. 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**.
3. Cliquez sur **Acquire > Stop Sample**.

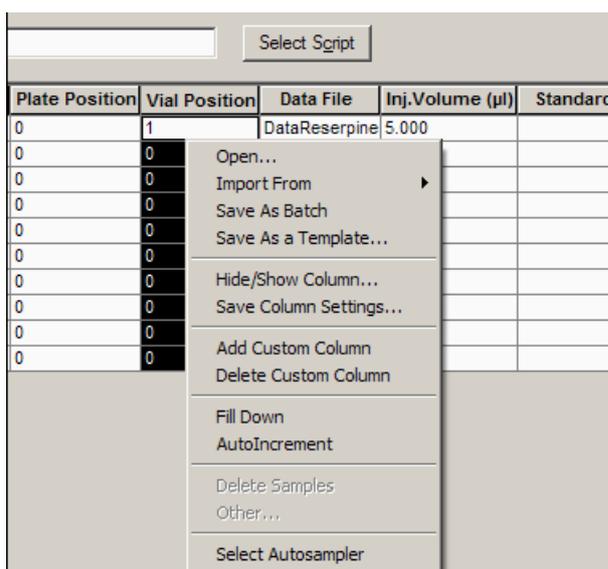
La file d'attente s'arrête après le balayage en et quand l'échantillon sélectionné se termine. L'état de l'échantillon dans la fenêtre **Queue Manager (Local)**, passe à **Terminated** et tous les autres échantillons de la file d'attente sont en mode **Waiting**.

4. Pour poursuivre le traitement du lot, cliquez sur **Acquire > Start Sample**.

Menu contextuel Batch Editor

Cliquez avec le bouton droit de la souris dans le tableau **Batch Editor** pour accéder aux options.

Figure 8-6 Menu contextuel du lot



Menu	Fonction
Open	Ouvre un fichier de séquence d'injections.
Import From	Importe un fichier.
Save As Batch	Enregistre le lot sous un nom différent.
Save As a Template	Enregistre le lot en tant que modèle.
Hide/Show Column	Masque ou affiche une colonne.
Save Column Settings	Enregistre les paramètres de colonne par lot.
Add Custom Column	Ajoute une colonne personnalisée.
Delete Custom Column	Supprime une colonne personnalisée.
Fill Down	Copie les mêmes données dans les cellules sélectionnées.

Menu	Fonction
AutoIncrement	Remplit les données automatiquement dans les cellules sélectionnées.
Delete Samples	Supprime la ligne sélectionnée.
Select Autosampler	Sélectionne un auto-échantillonneur.

États de la file d'attente et état du périphérique

Le **Queue Manager** 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.

Conseil ! Cliquez sur  pour voir la file d'attente.

États de la file d'attente

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

Figure 8-7 Serveur de file d'attente affichant un mode Normal

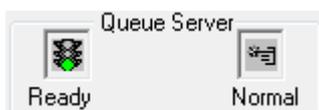
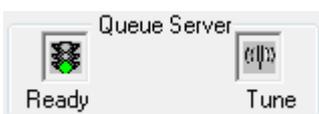
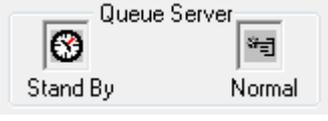
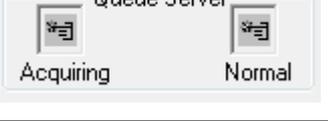


Figure 8-8 Serveur de file d'attente affichant un mode Réglage



La première icône indique l'état de la file d'attente. La deuxième icône indique si la file d'attente est en mode **Tune** ou en mode **Normal** (pour l'exécution des échantillons). Le [Tableau 8-1](#) décrit les icônes et les états de la file d'attente.

Tableau 8-1 États de la file d'attente

Icônes	Phase	Définition
 Queue Server Not Ready Normal	Not Ready	Le profil matériel est désactivé et la file d'attente n'accepte aucun des échantillons soumis.
 Queue Server Stand By Normal	Stand By	Le profil matériel a été activé, mais tous les périphériques sont inactifs. Les pompes ne sont pas en route et le gaz est coupé.
 Queue Server Warming Up Normal	Warming Up	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 .
 Queue Server Ready Normal	Ready	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.
 Queue Server Waiting Normal	Waiting	Le système lancera automatiquement l'acquisition lorsque l'échantillon suivant sera présenté.
 Queue Server PreRun Normal	PreRun	La méthode est téléchargée pour chaque périphérique avec un rééquilibrage. Cette phase a lieu avant l'acquisition de chaque échantillon dans un lot.
 Queue Server Acquiring Normal	Acquiring	La méthode fonctionne et l'acquisition des données a lieu.
 Queue Server Paused Normal	Paused	Le système a été mis en pause pendant l'acquisition.

Vue Instrumentation et icônes de l'état 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.

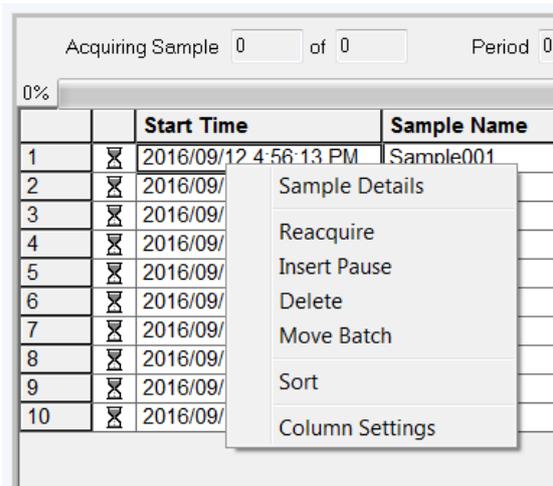
Tableau 8-2 Icônes d'état de l'instrument et du périphérique

Statut	Icône	Couleur d'arrière-plan	Description
En veille		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.
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 Queue

Cliquez avec le bouton droit de la souris dans le tableau Queue (File d'attente) pour accéder aux options.

Figure 8-9 Menu contextuel du gestionnaire de file d'attente



Menu	Fonction
Sample Details	Ouvre la boîte de dialogue Sample Details
Reacquire	Acquiert un nouvel échantillon.
Insert Pause	Insère une pause, en secondes, entre deux échantillons.
Delete	Supprime le lot ou les échantillons sélectionnés.
Move Batch	Déplace le lot dans la file d'attente.
Sort	Trie selon la colonne présélectionnée.
Column Settings	Modifie les paramètres de colonne.

Instructions d'utilisation : analyser et explorer les données

9

Utilisez les exemples de fichiers installés dans le dossier 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, consultez le *Guide de l'utilisateur avancé* :

- 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 **Show Last Scan**. S'il y a une case à cocher à côté de **Show Last Scan**, alors le spectre se met à jour en temps réel.

1. Sur la barre de Navigation, sous **Explore**, double-cliquer sur **Open Data File**.

La boîte de dialogue Select Sample s'affiche.

2. Dans la liste **Data Files**, naviguez vers le fichier de données à ouvrir, sélectionnez un échantillon, puis cliquez sur **OK**.

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** 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 : Si des échantillons ont été enregistrés dans des fichiers séparés, ouvrez chaque fichier individuellement.

Le [Tableau C-5 à la page 120](#) affiche les icônes de navigation utilisées dans cette procédure.

- Ouvrez un fichier de données contenant plusieurs échantillons, puis 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, sous **Sample**, 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.

Afficher les 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 9-1](#) affiche les fonctionnalités du logiciel disponibles lorsque l'utilisateur affiche les informations de fichier.

Remarque : Si les données sont acquises par plus d'un échantillon dans le même fichier .wiff, le volet des informations sur le fichier n'est pas actualisé automatiquement lorsque l'utilisateur fait défiler les échantillons. Fermez le volet informations, puis rouvrez-le pour afficher les détails de l'échantillon suivant dans le fichier .wiff.

- Cliquez sur **Explore > Show > Show File Information**.

Le volet des informations sur le fichier s'ouvre sous le graphique.

Conseil ! Pour créer une méthode d'acquisition à partir du volet **File information**, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le volet **File information**, puis cliquez sur **Save Acquisition Method**.

Tableau 9-1 Menu contextuel du volet Show File Information

Menu	Fonction
Copy	Copie les données sélectionnées.
Paste	Colle les données.
Select All	Sélectionne toutes les données dans le volet.
Save To File	Enregistre les données dans un fichier rtf.
Font	Modifie la police.
Save Acquisition Method	Enregistre la méthode d'acquisition dans un fichier dam.
Save Acquisition Method to CompoundDB	Ouvre la boîte de dialogue Specify Compound Information. Sélectionner l'identité et les poids moléculaires pour les enregistrer dans la base de données des composés.
Delete Pane	Supprime la fenêtre sélectionnée.

Afficher les données dans des tableaux

1. Ouvrir un fichier de données.
2. Cliquez sur **Explore > Show > Show List Data**.

Les données sont affichées dans une fenêtre sous le graphique.

Figure 9-1 Onglet Peak List

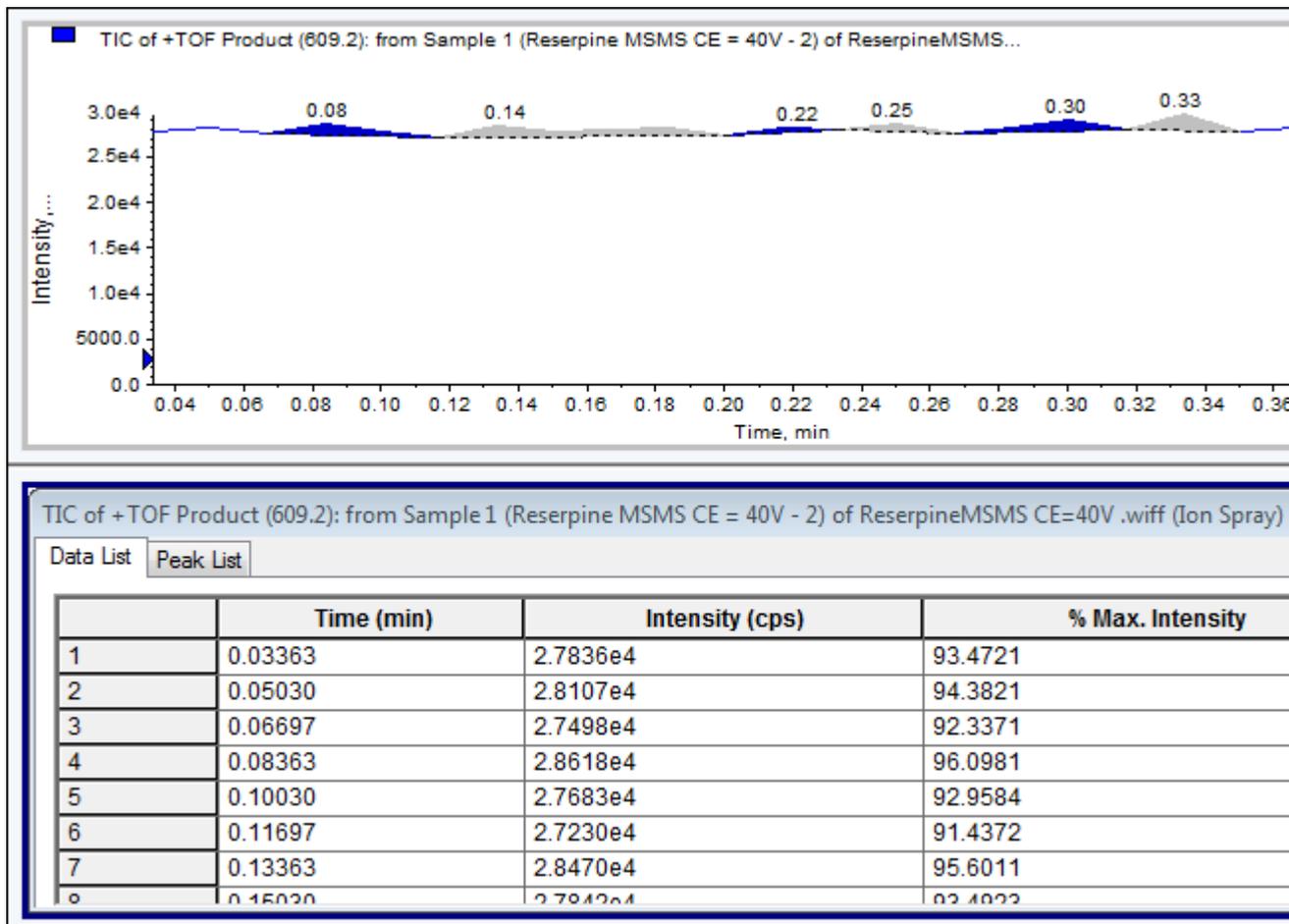


Tableau 9-2 Menu contextuel de l'onglet Spectral Peak List

Menu	Fonction
Column Options	Ouvre la boîte de dialogue Select Columns for Peak List .
Save As Text	Enregistre les données dans un fichier .txt.
Delete Pane	Supprime la fenêtre sélectionnée.

Tableau 9-3 Menu contextuel de l'onglet Chromatographic Peak List

Menu	Fonction
Show Peaks in Graph	Affiche les pics en deux couleurs sur le graphique.
IntelliQuan Parameters	Ouvre la boîte de dialogue IntelliQuan .

Tableau 9-3 Menu contextuel de l'onglet Chromatographic Peak List (Suite)

Menu	Fonction
Save As Text	Enregistre les données dans un fichier .txt.
Delete Pane	Supprime la fenêtre sélectionnée.

Afficher les données ADC

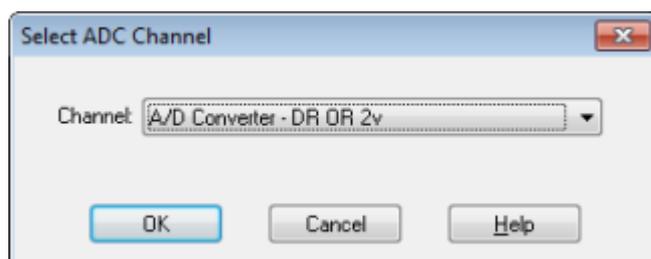
Les données CAN (convertisseur analogique/numérique) sont acquises par un détecteur secondaire (par exemple, à partir d'un détecteur UV au travers d'une carte CAN) et sont utiles pour la comparaison avec les données du spectromètre de masse. Pour obtenir des données CAN disponibles, acquérir simultanément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

1. Veiller à bien sélectionner le dossier **Example**.
2. Sur la barre de Navigation, sous **Explore**, double cliquez sur **Open Data File**.

Une fenêtre sur la sélection de l'échantillon s'ouvre.

3. Dans le champ **Data Files**, double-cliquer sur **Devices**, puis sur **Adc16chan.wiff**.
4. Dans la liste **Samples**, sélectionner un échantillon, puis cliquer sur **OK**.
5. Cliquer sur **Explore > Show > Show ADC Data**.

Figure 9-2 Boîte de dialogue Select ADC Channel



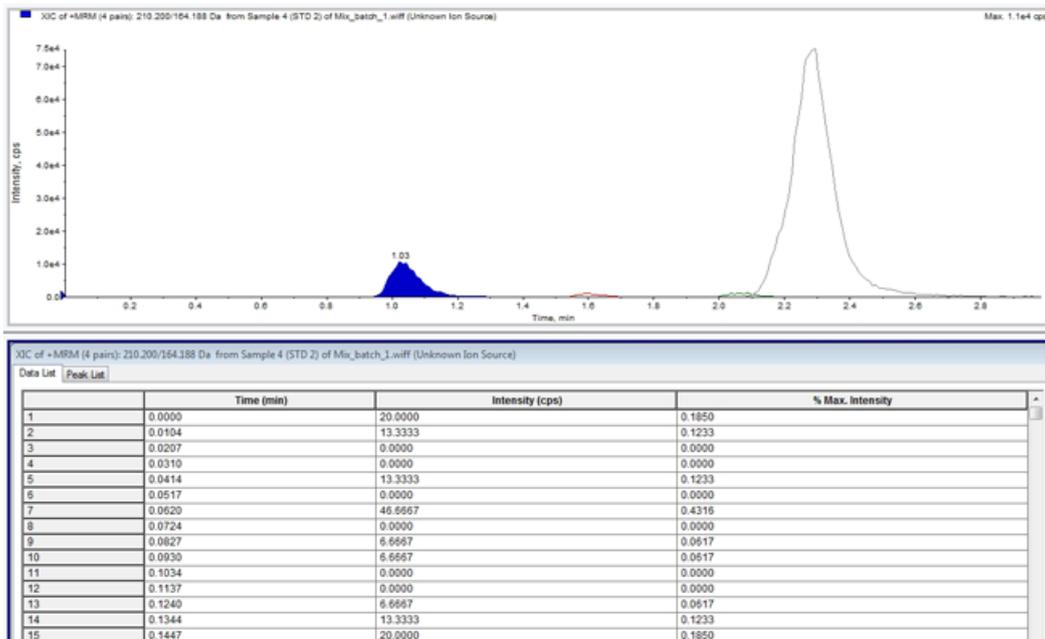
6. Dans la liste **Channel**, sélectionner un canal, puis cliquer sur **OK**.

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

Afficher les données quantitatives de base

1. Ouvrir un fichier de données.
2. Cliquez sur **Explore > Show > Show List Data**.

Figure 9-3 Données de la liste



3. Dans l'onglet Peak List, cliquez avec le bouton droit de la souris et sélectionnez **Show Peaks in Graph**.

Les pics s'affichent en deux couleurs.

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

Chromatogrammes

Un chromatogramme est une représentation graphique des données obtenues à partir de l'analyse d'un échantillon. Il trace l'intensité du signal le long d'un axe indiquant le temps ou le nombre de balayages. Pour plus d'informations sur la fonctionnalité logicielle disponible pour les chromatogrammes, consultez le [Tableau 9-6 à la page 87](#).

Le logiciel représente l'intensité, exprimée en coups par seconde (cps), sur l'axe des ordonnées en fonction du temps sur l'axe des abscisses. Les pics dépassant un seuil prédéfini sont marqués automatiquement. Dans le cas de la LC-MS, le chromatogramme est souvent présenté comme une fonction du temps. Le [Tableau 9-4](#) contient une description des types de chromatogramme.

Consultez le [Tableau 9-8 à la page 90](#) pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles.

Tableau 9-4 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 comme un TIC.</p>
Chromatogramme en ion extrait (XIC)	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.
Chromatogramme des pics de base (BPC)	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.
Chromatogramme de longueur d'onde total (TWC)	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.
Chromatogramme de longueur d'onde extraites (XWC)	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.
Détecteurs à barrettes de diodes (DAD)	Un détecteur d'UV qui surveille le spectre d'absorption des composés à élution à une ou plusieurs longueurs d'onde.

Montrer les TIC d'un spectre

- Cliquez sur **Explore > Show > Show TIC**.

Le TIC s'ouvre dans un nouveau volet.

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

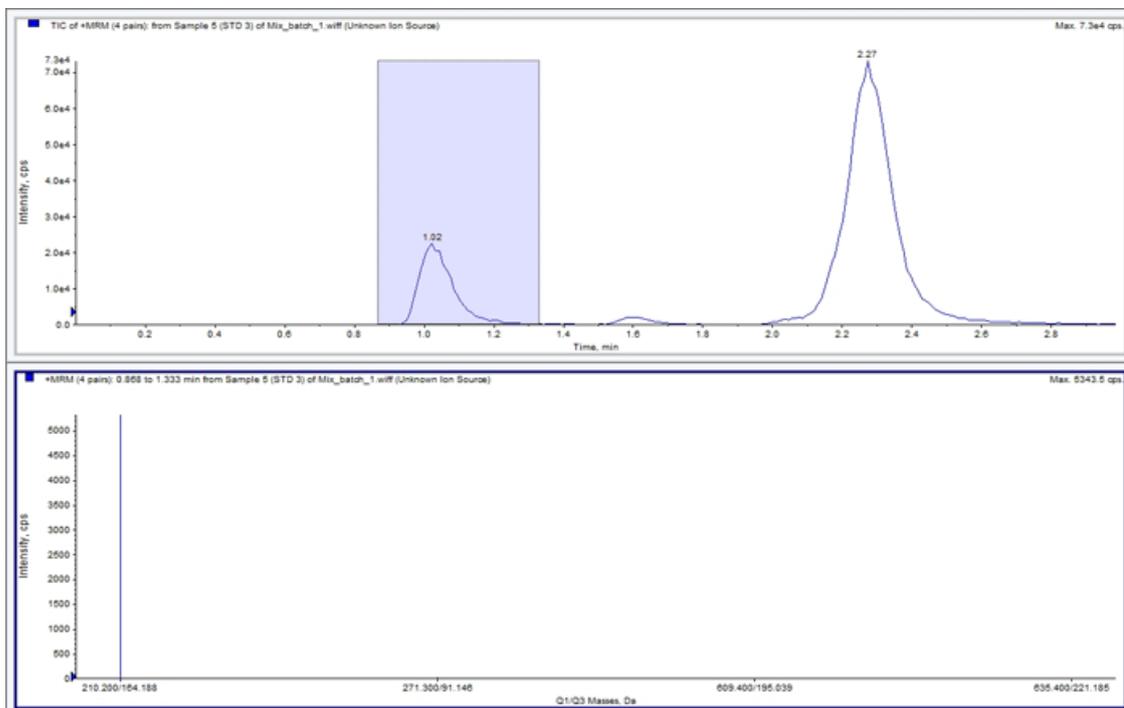
Afficher un spectre d'un TIC

1. Dans un volet contenant un TIC, sélectionnez une gamme.
2. Cliquez sur **Explore > Show > Show Spectrum**.

Le spectre s'ouvre dans un nouveau volet.

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

Figure 9-4 Exemple de TIC



À propos de la création de XIC

Vous pouvez générer des XIC uniquement à partir des chromatogrammes ou des spectres d'une seule période et d'une seule expérience. Pour obtenir un XIC à partir de données provenant de plusieurs périodes ou expériences, divisez les données en volets distincts en cliquant sur le triangle situé sous l'axe des X. Consultez le [Tableau 9-8 à la page 90](#) 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 9-5](#) contient un résumé des méthodes qui peuvent être utilisées avec des chromatogrammes et des spectres.

Tableau 9-5 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.
Masses de pics de base	Oui	Oui	Ne peut être utilisée qu'avec des chromatogrammes de pics de base (BPC). Utiliser la commande des masses de pics de base pour extraire des résultats sur les ions dans un XIC avec un tracé de couleur différente pour chaque masse. Si la sélection inclut plusieurs pics, le XIC obtenu aura alors un nombre égal de tracés colorés, un par 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

Générer un XIC en utilisant une plage sélectionnée

- Ouvrez un fichier de données contenant des spectres.
- 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.

- Cliquez sur **Explore > Extract Ions > Use Range**.

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.

Générer un XIC en utilisant le pic maximal

- Ouvrez un fichier de données contenant des spectres.

2. Sélectionnez une plage dans le spectre.

La sélection est indiquée en bleu.

3. Cliquez sur **Explore > Extract Ions > Use 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 > Extract Ions > Use Base Peak Masses**.

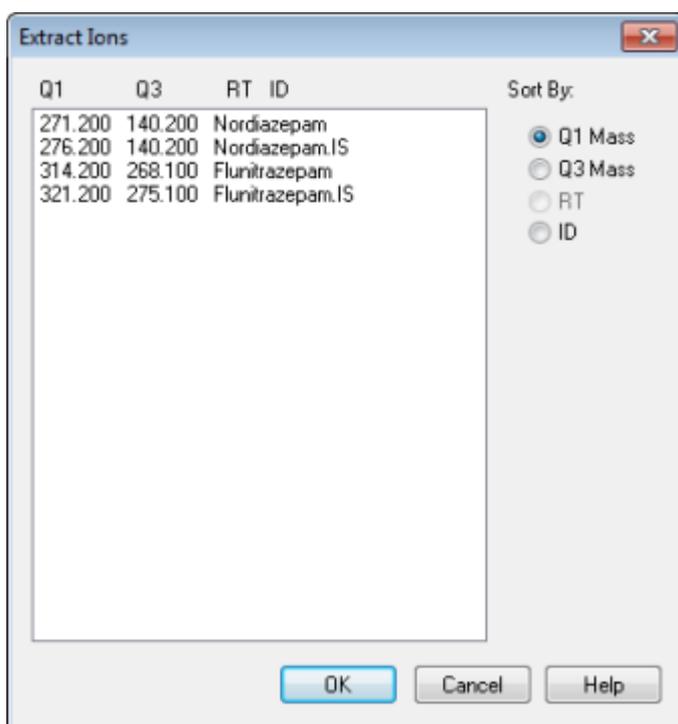
Un XIC de la sélection spécifiée s'ouvre sous le volet du spectre. L'information de l'expérience en haut du volet contient la gamme de masse et l'intensité maximale comptée par seconde.

Extraire des ions en sélectionnant les masses

1. Ouvrir un spectre ou un chromatogramme.

2. Cliquez sur **Explore > Extract Ions > Use Dialog**.

Figure 9-5 Boîte de dialogue Extract 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**, entrez la valeur de départ (valeur la plus basse) pour la gamme de masse.
- Dans le champ **Stop**, 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 des BPC

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

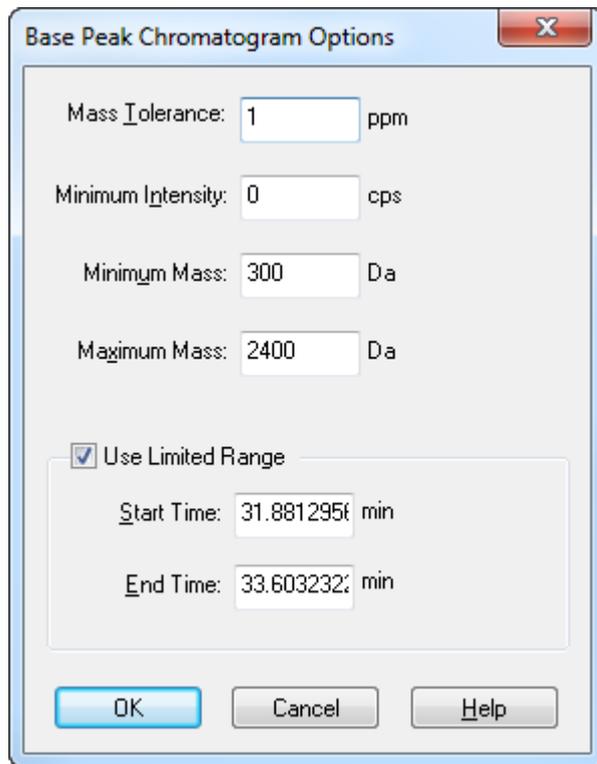
1. Ouvrir un fichier de données.
2. Sélectionnez une zone à l'intérieur d'un TIC.

La sélection est indiquée en bleu.

3. Cliquez sur **Explore > Show > Show Base Peak Chromatogram**.

Les sélections sont affichées dans les champs **Start Time** et **End Time**.

Figure 9-6 Options du chromatogramme des pics de base



4. Dans le champ **Mass Tolerance**, 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**, entrez l'intensité au-dessous de laquelle les pics seront ignorés par l'algorithme.
6. Dans le champ **Minimum Mass**, entrez la masse qui détermine le début de la plage du balayage.
7. Dans le champ **Maximum Mass**, 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** et procédez comme suit :
 - Dans le champ **Start Time**, entrez l'heure de commencement de l'expérience. la masse qui détermine la fin de la plage du balayage.
 - Dans le champ **End Time**, entrez l'heure de fin d'expérience.
9. Cliquez sur **OK**.

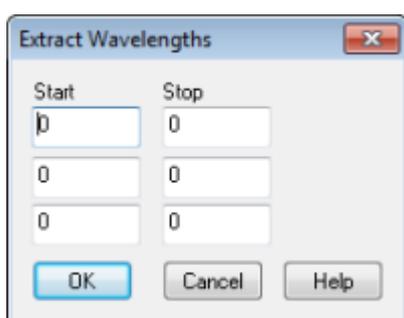
Le BPC est généré dans un nouveau volet.

Générer XWC

Un XWC est un chromatogramme de longueurs d'onde créé en mesurant les valeurs d'intensité à une certaine longueur d'onde ou en faisant la somme des absorbances pour une plage de longueurs d'onde. Jusqu'à trois plages peuvent être extraites d'un spectre DAD pour générer le XWC. Consultez le [Tableau 9-8 à la page 90](#) 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**.

Figure 9-7 Boîte de dialogue Extract Wavelength



3. Saisissez les valeurs **Start** et **Stop**.
4. Cliquez sur **OK**.

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

Données DAD

De la même manière que les données d'un spectromètre de masse, les données DAD peuvent être affichées sous forme de chromatogramme ou de spectre. L'utilisateur peut afficher le spectre DAD pour un point unique dans le temps ou pour une plage de temps sous forme de chromatogramme en longueur d'onde totale (TWC).

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 > Show > Show DAD Spectrum**.

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 > Show > Show Spectrum**.

Générer TWC

Un TWC est un chromatogramme d'utilisation moins fréquente. Il indique l'absorbance totale (mAU) en fonction du temps. Le TWC permet d'afficher un ensemble complet de données dans un même volet. Il représente la somme des absorbances de tous les ions dans un balayage tracé par rapport au temps dans un volet chromatographique. Si les données contiennent des résultats provenant de plusieurs expériences, créez des TWC individuels pour chaque expérience, et un autre TWC représentant la somme de toutes les expériences.

Le TWC indique l'absorbance totale (mAU) sur l'axe des Y tracée par rapport au temps sur l'axe des X. Consultez le [Tableau 9-8 à la page 90](#) 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 > Show > Show Spectrum**.

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

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

Ajuster le seuil

Le seuil est une ligne invisible tracée 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 comporte une poignée représentée par un triangle bleu sur la gauche de l'axe des Y. Cliquez sur le triangle bleu pour afficher une ligne pointillée qui 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 le triangle bleu vers le haut 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 > Set Threshold**. Dans la boîte de dialogue Threshold Options qui s'ouvre, tapez la valeur de seuil, puis cliquez sur **OK**.
 - Cliquez sur **Explore > Threshold**.

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

Conseil ! Pour afficher la valeur de seuil actuelle, déplacez le pointeur sur sa commande.

Volets Chromatogram

Tableau 9-6 Menu contextuel des volets Chromatogram

Menu	Fonction
List Data	Donne les points des données et intègre les pics trouvés dans les chromatogrammes.
Show Spectrum	Génère un nouveau volet contenant le spectre.
Show Contour Plot	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.
Extract 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.
Show Base Peak Chromatogram	Génère un nouveau volet contenant un chromatogramme de pic de base.
Show ADC Data	Génère un nouveau volet contenant le tracé des données ADC si elles ont été acquises.
Show UV Detector Data	Génère un nouveau volet contenant les traces de données UV si acquises.
Assistant arithmétique spectrale	Ouvre l'assistant pour l'arithmétique spectrale.
Save to Text File	Génère un fichier texte contenant les données dans un volet, qui peut être ouvert dans Microsoft Excel ou d'autres programmes.
Save Explore History	Enregistre les informations sur les modifications apportées aux paramètres de traitement, également appelés options de traitement, lorsqu'un fichier .wiff a été traité en mode Explore. L'historique du traitement est stocké dans un fichier avec une extension .eph (Explore Processing History).
Add Caption	Ajoute une légende au point du curseur dans le volet.
Add User Text	Ajoute une zone de texte au point du curseur dans le volet.
Set Subtract Range	Définit la plage à soustraire dans le volet.
Clear Subtract Range	Efface la plage à soustraire dans le volet.
Subtract Range Locked	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-réglées verrouillées.
Delete Pane	Supprime la fenêtre sélectionnée.

Volets Spectra

Tableau 9-7 Menu contextuel du volet Spectra

Menu	Fonction
List Data	Donne les points des données et intègre les chromatogrammes.
Show TIC	Génère un nouveau volet contenant les TIC.
Extract Ions (Use Range)	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)	Extrait les ions à l'aide du pic le plus intense dans la zone sélectionnée.
Save to Text File	Génère un fichier texte du volet, qui peut être ouvert dans Microsoft Excel ou d'autres programmes.
Save Explore History	Enregistre les informations sur les modifications apportées aux paramètres de traitement, également appelés options de traitement, lorsqu'un fichier .wiff a été traité en mode Explore. L'historique du traitement est stocké dans un fichier avec une extension .eph (Explore Processing History).
Add Caption	Ajoute une légende à l'emplacement du curseur dans le volet.
Add User Text	Ajoute une zone de texte à l'emplacement du curseur dans le volet.
Show Last Scan	Affiche une analyse avant la sélection.
Select Peaks For Label	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)
Abscissa (Time) (Abcisses [Temps])	Change l'affichage afin d'afficher les valeurs TOF sur l'axe des x.
Delete Pane	Supprime la fenêtre sélectionnée.
Add a Record	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.
Search Library	Recherche dans la bibliothèque sans contrainte ou avec contraintes précédemment enregistrées.
Set Search Constraints	Effectue une recherche dans la bibliothèque à l'aide de la boîte de dialogue Search Constraints .

Traitement des données graphiques

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.

Graphiques

Les mêmes données peuvent être examinés 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 un ou plusieurs volets disposés de manière à ce que tous les volets soient entièrement visibles et 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 dimensionnée au point que les volets soient plus petits que 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

Les données peuvent être comparées ou examinées de différentes manières. Il se peut également que les utilisateurs souhaitent conserver leurs données à des fins de comparaison avant l'exécution d'opérations de traitement comme le lissage ou la soustraction.

Une fenêtre contient 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 sont redimensionnés pour s'y adapter. Une fenêtre ne peut pas être plus petite que la taille minimum des volets.

Deux ou plusieurs fenêtres ou volets contenant des données semblables peuvent être reliés, par exemple, un spectre avec des plages de masses similaires. Lorsque l'utilisateur effectue un zoom sur un volet ou une fenêtre, le zoom s'applique simultanément à l'autre volet. Par exemple, l'utilisateur peut relier un XIC au BPC dont il a été extrait. Un zoom sur le BPC s'applique également au XIC, de sorte que les deux chromatogrammes s'affichent avec le même grossissement.

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

Tableau 9-8 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 > Duplicate Data > In New Window.	
Remettre un graphique à son échelle d'origine	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Explore > Home Graph.	
Déplacer un volet	<ul style="list-style-type: none"> • Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window > Move Pane. • 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 tandis que ce volet est déplacé indique sa nouvelle position. 	
Lier volets	<p>a. Avec deux graphes ouverts, cliquez sur l'un pour le rendre actif.</p> <p>b. Cliquez sur Explore > Link, puis cliquez sur l'autre volet.</p>	
Supprimer le lien	Fermer l'un des volets. Cliquez sur Explore > Remove Link.	
Supprimer un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window > Delete Pane.	
Verrouiller un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window > Lock Panes.	
Masquer un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window > Hide Pane.	

Tableau 9-8 Options de graphique (Suite)

Pour ce faire...	utilisez cette option de menu ou cliquez sur cette icône
Maximiser un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window > Maximize Pane .	
Organiser les volets en mosaïque	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window > Tile all Panes .	

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 : Prendre garde en effectuant 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.

Effectuer 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 > Home Graph**.

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 la maintenance

10

Nettoyez et maintenez régulièrement le système pour des performances optimales.



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. Ne retirez pas les capots. Le retrait des capots peut provoquer des blessures ou le dysfonctionnement du système. Il n'est pas nécessaire de retirer les capots pour procéder à la maintenance courante, à l'inspection ou au réglage. Contactez un technicien de service (FSE) SCIEX pour exécuter les réparations qui nécessitent de retirer les capots.



AVERTISSEMENT ! Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Déterminez si une décontamination est nécessaire avant de procéder au nettoyage ou à l'entretien. Le client doit décontaminer le système avant de procéder au nettoyage ou à l'entretien si des matières radioactives, des agents biologiques ou des produits chimiques toxiques ont été utilisés avec le système.

Calendrier recommandé de maintenance

Le [Tableau 10-1](#) fournit un programme recommandé pour le nettoyage et la maintenance du système.

Conseil ! Exécutez les tâches de maintenance régulièrement afin de garantir le fonctionnement optimal du spectromètre de masse.

Pour plus d'informations sur la maintenance de la source d'ions, consultez le *Guide de l'utilisateur* de la source d'ions.

Contactez un responsable de maintenance qualifié pour commander les consommables. Contacter un technicien de service SCIEX pour toute tâche de maintenance, de réparation et d'assistance.

Tableau 10-1 Tâches de maintenance

Composant	Fréquence	Tâche	Pour plus d'informations ...
Système			
Tubulure	Quotidienne	Inspectez la tubulure et les raccords pour vous assurer qu'ils sont bien fixés et qu'il n'y a aucune fuite.	Voir Précautions chimiques à la page 9 .

Tableau 10-1 Tâches de maintenance (Suite)

Composant	Fréquence	Tâche	Pour plus d'informations ...
Spectromètre de masse			
Plaque rideau	Quotidienne	Nettoyez	Voir Nettoyer la plaque rideau à la page 99 .
Plaque à orifice (avant)	Quotidienne	Nettoyez	Voir Nettoyer l'avant de la plaque à orifice à la page 100 .
Huile de pompe primaire	Hebdomadaire	Inspectez le niveau	Voir Vérifier le niveau d'huile de la pompe primaire à la page 103 .
Huile de pompe primaire	Tous les 6 à 12 mois	Remplacez	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.
Surfaces de l'instrument	Selon les besoins	Nettoyez	Voir Nettoyer les surfaces à la page 94 .
Bouteille de vidange de la source	Selon les besoins	Videz	Voir Vider le conteneur de trop-plein à la page 101 .
Plaque à orifice (avant et arrière)	Selon les besoins	Nettoyez	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.
Guide d'ions QJet® et lentille IQ0	Selon les besoins	Nettoyez	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.
Jeu de barreaux Q0 et lentilles IQ1	Selon les besoins	Nettoyez	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.
Huile de pompe primaire	Selon les besoins	Remplissez	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.
Filtre du ventilateur de refroidissement du spectromètre de masse	Selon les besoins	Remplacez	Remplacer les filtres à air des ventilateurs du spectromètre de masse à la page 104 .
Élément chauffant de l'interface	Selon les besoins	Remplacez	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.
Source d'ions			

Tableau 10-1 Tâches de maintenance (Suite)

Composant	Fréquence	Tâche	Pour plus d'informations ...
Électrodes TurbolonSpray® et APCI	Selon les besoins	Inspectez et remplacez	Consultez le <i>guide de fonctionnement</i> de la source d'ions.
Aiguille de décharge corona	Selon les besoins	Remplacez	Consultez le <i>guide de fonctionnement</i> de la source d'ions.
Élément chauffant Turbo	Selon les besoins	Remplacez	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.
Tubulure d'échantillonnage	Selon les besoins	Remplacez	Consultez le <i>guide de fonctionnement</i> de la source d'ions.

Pour les tâches « selon les besoins », suivez ces directives :

- 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 la plaque à orifice, 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. Contactez un responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service.

- 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. Contactez un responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service.

- Remplissez l'huile de la pompe primaire lorsqu'elle descend en dessous du niveau d'huile minimum.

Nettoyer les surfaces

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

ATTENTION : Risque d'endommagement du système. Utilisez uniquement les méthodes et matériaux de nettoyage recommandés pour éviter d'endommager l'équipement.

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

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



AVERTISSEMENT ! Risque sur surface chaude. Lorsque vous utilisez la source d'ions IonDrive™ Turbo V, laissez la source d'ions et l'interface refroidir pendant au moins 90 minutes avant de commencer les procédures de maintenance. Lorsque vous utilisez la source d'ions Turbo V™ ou DuoSpray™ laissez la source d'ions et l'interface refroidir pendant au moins 30 minutes avant de commencer les procédures de maintenance. Lorsque vous utilisez la source d'ions NanoSpray® laissez la source d'ions et l'interface refroidir pendant au moins 60 minutes avant de commencer les procédures de maintenance. Certaines surfaces de la source d'ions et de l'interface avec le vide deviennent chaudes pendant le fonctionnement.

Nettoyez l'avant du spectromètre de masse de manière classique pour :

- minimiser les temps d'arrêt du système,
- maintenir une sensibilité optimale,
- éviter un nettoyage plus important lors des visites d'entretien.

Lors d'une contamination, effectuez un premier nettoyage de routine. Nettoyez jusqu'à (et y compris) l'avant de la plaque à orifice. Si le nettoyage de routine ne résout pas les problèmes de sensibilité, un nettoyage complet sera peut-être nécessaire. Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.

Cette section fournit des instructions pour le nettoyage de routine sans interrompre le vide.

Remarque : Suivez l'ensemble des réglementations locales applicables. Pour obtenir des consignes de santé et de sécurité, consultez [Précautions chimiques à la page 9](#).

Symptômes de contamination

Le système peut être contaminé si l'un des éléments suivants est observé :

- Importante perte de sensibilité.
- Bruit de fond accru.
- Les pics supplémentaires qui ne font pas partie de l'échantillon sont affichés 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 les informations de commande et les demandes de renseignements. Les clients internationaux peuvent consulter le site sciex.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 ultra-pure). 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 1:1 d'acétonitrile et d'eau (préparation au jour le jour)
 - Solution à 1:1 d'acétonitrile et d'eau avec 0,1 % d'acide acétique (préparation au jour le jour)
- Bécher propre en verre de 1 l ou 500 ml pour préparer des solutions de nettoyage
- Bécher de 1 l pour récupérer le solvant utilisé
- Conteneur de déchets organiques
- Lingettes non pelucheuses. Voir [Outils et fournitures disponibles auprès du fabricant à la page 96](#).
- (En option) Écouvillons en polyester (poly)

Outils et fournitures disponibles auprès du fabricant

Description	Numéro de référence
Écouvillon en polyester (thermolié). Disponible également dans le kit de nettoyage.	1017396
Lingette non pelucheuse (11 cm x 21 cm). Disponible également dans le kit de nettoyage.	018027
Kit de nettoyage. Comprend les petits écouvillons en polyester, les lingettes non pelucheuses, l'outil de nettoyage du Q0, la brosse de nettoyage conique du guide d'ions QJet [®] et des sachets d'Alconox.	5020763

Bonnes pratiques de nettoyage



AVERTISSEMENT ! Risque sur surface chaude. Lorsque vous utilisez la source d'ions IonDrive™ Turbo V, laissez la source d'ions et l'interface refroidir pendant au moins 90 minutes avant de commencer les procédures de maintenance. Lorsque vous utilisez la source d'ions Turbo V™ ou DuoSpray™ laissez la source d'ions et l'interface refroidir pendant au moins 30 minutes avant de commencer les procédures de maintenance. Lorsque vous utilisez la source d'ions NanoSpray® laissez la source d'ions et l'interface refroidir pendant au moins 60 minutes avant de commencer les procédures de maintenance. Certaines surfaces de la source d'ions et de l'interface avec le vide deviennent chaudes pendant le fonctionnement.



AVERTISSEMENT ! Risque de toxicité chimique. Consultez les *fiches de données de sécurité* des produits chimiques et suivez toutes les procédures de sécurité recommandées lors de la manipulation, du stockage et de l'élimination des produits chimiques. Pour connaître les consignes de santé et de sécurité, consultez le *Guide de l'utilisateur du système*.



AVERTISSEMENT ! Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Déterminez si une décontamination est nécessaire avant de procéder au nettoyage ou à l'entretien. Le client doit décontaminer le système avant de procéder au nettoyage ou à l'entretien si des matières radioactives, des agents biologiques ou des produits chimiques toxiques ont été utilisés avec le système.



AVERTISSEMENT ! Risque pour l'environnement. Ne jetez pas les composants du système dans les déchetteries municipales. Suivez les réglementations locales lors de la mise au rebut des composants.

- Laissez la source d'ions refroidir avant de la retirer.
- Portez systématiquement des gants non poudrés (nitrile ou néoprène de préférence) pour les procédures de nettoyage.
- Après avoir nettoyé les composants du spectromètre de masse et avant de les remonter, enfiler une paire de gants propres et neufs.
- N'utilisez pas des produits de nettoyage autres que ceux spécifiés dans cette procédure.
- Si possible, préparez les solutions de nettoyage juste avant le nettoyage.
- Préparez et stockez toutes les solutions organiques et celles contenant de l'organique dans du verre très propre uniquement. N'utilisez jamais de bouteilles en plastique. Des contaminants peuvent s'échapper de ces bouteilles et contaminer le spectromètre de masse.
- Pour éviter de contaminer la solution de nettoyage, versez la solution sur la lingette ou sur l'écouvillon.

Informations relatives au service et à la maintenance

- Ne mettez 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 ! Entourez d'un chiffon l'écouvillon en polyester thermolié.

Figure 10-1 Exemple : pliage de la lingette



- Afin d'éviter toute contamination croisée, jetez la lingette ou l'écouvillon après le premier contact avec la surface.
- Les plus grandes pièces de l'interface de l'enceinte sous vide, comme la plaque rideau, peuvent nécessiter plusieurs nettoyages, utilisez plusieurs lingettes.
- Humidifiez la lingette ou l'écouvillon seulement lorsque vous utilisez de l'eau ou une 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 frottez pas la lingette sur l'ouverture. Essayez autour de l'ouverture pour éviter que les fibres de la lingette ne pénètrent dans le spectromètre de masse.
- N'introduisez pas la brosse dans l'orifice de la plaque rideau ou de la plaque à orifice.

Préparer le spectromètre de masse

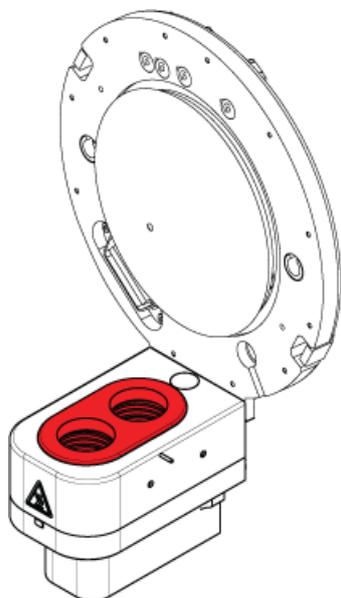
Remarque : Les spectromètres de masse équipés d'une source d'ions NanoSpray® peuvent nécessiter un nettoyage complet afin d'obtenir des résultats optimaux. Contactez un responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.



AVERTISSEMENT ! Risque sur surface chaude. Lorsque vous utilisez la source d'ions IonDrive™ Turbo V, laissez la source d'ions et l'interface refroidir pendant au moins 90 minutes avant de commencer les procédures de maintenance. Lorsque vous utilisez la source d'ions Turbo V™ ou DuoSpray™ laissez la source d'ions et l'interface refroidir pendant au moins 30 minutes avant de commencer les procédures de maintenance. Lorsque vous utilisez la source d'ions NanoSpray® laissez la source d'ions et l'interface refroidir pendant au moins 60 minutes avant de commencer les procédures de maintenance. Certaines surfaces de la source d'ions et de l'interface avec le vide deviennent chaudes pendant le fonctionnement.

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

Figure 10-2 Drain de la source sur l'interface de l'enceinte sous vide



1. Désactivez le profil de matériel.
2. Désactivez la source d'ions. Consultez le *guide de fonctionnement* de la source d'ions.

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

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. Vérifiez que le côté conique de la plaque rideau est tourné vers le haut.

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

1. Ôtez la plaque rideau de l'interface avec le vide, puis placez-la, côté conique tourné vers le haut, sur une surface propre et stable.

Remarque : Si le chauffage nano est installé, suivez les instructions du *Guide de l'opérateur* de la source d'ions pour le retirer et le nettoyer.

Informations relatives au service et à la maintenance

La plaque rideau est tenue en place par trois billes sur ressorts sur la plaque à orifice.

Conseil ! Si la plaque rideau ne se sépare pas immédiatement de la plaque à orifice, tournez légèrement la plaque rideau d'un quart de tour afin de la libérer des billes sur ressort.

- Humidifiez une lingette non pelucheuse avec de l'eau pure et nettoyez les deux côtés de la plaque rideau.

Remarque : Utilisez plusieurs lingettes si nécessaire.

- Répétez l'étape 2 avec la solution de nettoyage.
- Utilisez une lingette humide ou un petit écouvillon pour nettoyer l'ouverture.
- Attendez le séchage de la plaque rideau.
- Inspectez la plaque rideau pour vous assurer qu'elle est exempte de taches de solvant ou de peluches, éliminez 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

ATTENTION : Risque d'endommagement du système. Lors du nettoyage de la surface de la plaque à orifice, ne retirez pas le chauffage de l'interface. Le retrait fréquent du chauffage de l'interface peut entraîner une détérioration de celui-ci. La surface du chauffage d'interface peut être nettoyée régulièrement.

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

- Humidifiez une lingette non pelucheuse avec de l'eau, puis essuyez l'avant de la plaque à orifice, y compris le chauffage d'interface.
- Répétez l'étape 1 avec la solution de nettoyage.
- Attendez le séchage de la plaque à orifice.
- Inspectez la plaque à orifice pour vous assurer qu'elle est exempte de taches de solvant ou de peluches, éliminez les résidus avec une lingette propre, légèrement humide et non pelucheuse.

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

Remettez le spectromètre de masse en service

1. Installez la plaque rideau sur le spectromètre de masse.
2. Installez la source d'ions sur le spectromètre de masse. Consultez le *guide de fonctionnement de la source d'ions*.

Serrez la source d'ions en tournant ses loquets de verrouillage vers le bas en position de verrouillage.

3. Activez le profil de matériel.

Vider le conteneur de trop-plein



AVERTISSEMENT ! Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Déposez les matières dangereuses dans des conteneurs de déchets convenablement étiquetés et mettez-les au rebut conformément aux réglementations locales.

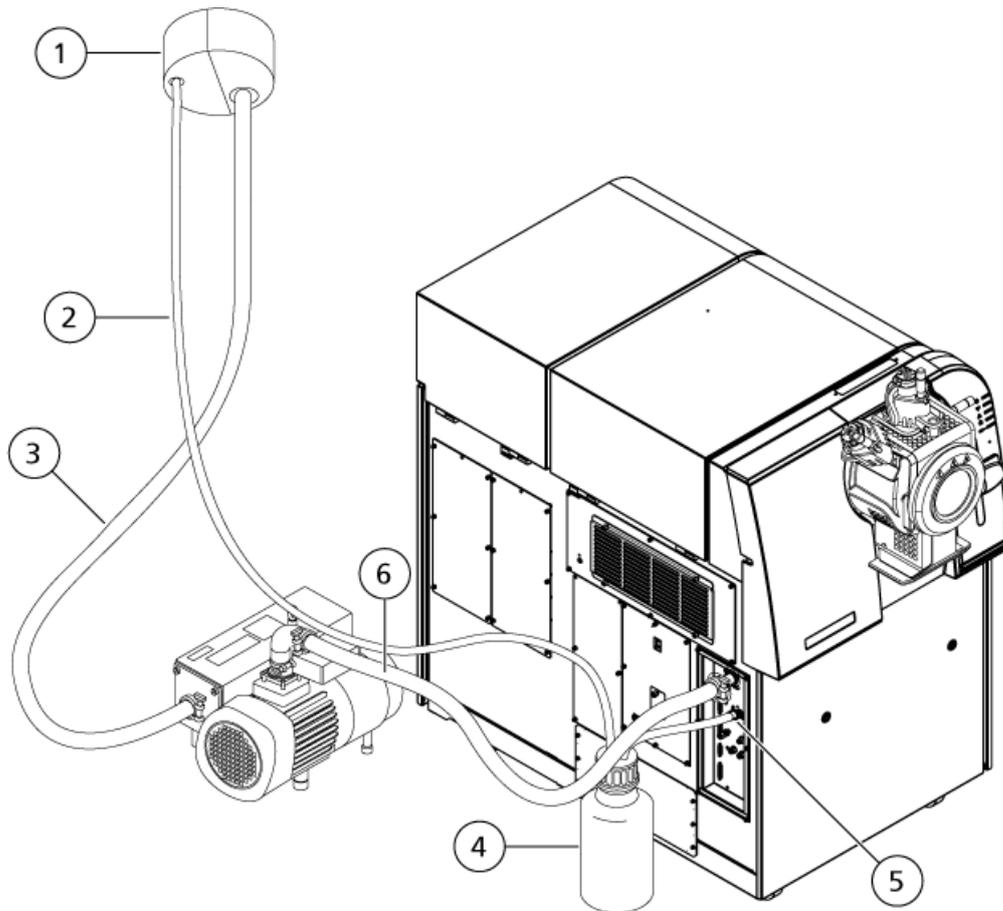


AVERTISSEMENT ! Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Veillez à évacuer les gaz d'échappement dans une hotte aspirante de laboratoire prévue à cet effet ou un système d'évacuation et assurez-vous que le tuyau de ventilation est maintenu en place par des pinces. Vérifiez que le laboratoire dispose d'un échange d'air approprié pour le travail effectué.

Inspectez régulièrement le conteneur de trop-plein de l'évacuation de la source et videz-le avant qu'il ne soit plein. Vérifiez également la présence de fuites sur la bouteille et les raccords, et serrez les raccordements ou remplacez des composants si nécessaire. Suivez les étapes de cette procédure pour vider la bouteille.

1. Désactivez la source d'ions. Consultez le *guide de fonctionnement* de la source d'ions.
2. Desserrez les colliers qui relient les tuyaux au capuchon du conteneur de trop-plein.

Figure 10-3 Conteneur de trop-plein



Élément	Description
1	Connexion à la ventilation.
2	Conduite de vidange de l'évacuation 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 po) de diamètre intérieur
4	Conteneur de trop-plein. Dans ce schéma, le conteneur de trop-plein bouché est indiqué à l'arrière du spectromètre de masse pour rendre visible les points de connexion. Le conteneur de trop-plein peut se trouver sur le côté du spectromètre de masse, logé dans son support. Assurez-vous que le conteneur est bien fixé afin d'empêcher les déversements.
5	Connexion au spectromètre de masse : 1,6 cm (0,625 po) de diamètre intérieur
6	Flexible d'entrée de dépression de la pompe primaire

Remarque : Les raccordements du flexible d'évacuation de la source sur le trop-plein, le spectromètre de masse et la ventilation du laboratoire sont fixés avec des colliers de serrage.

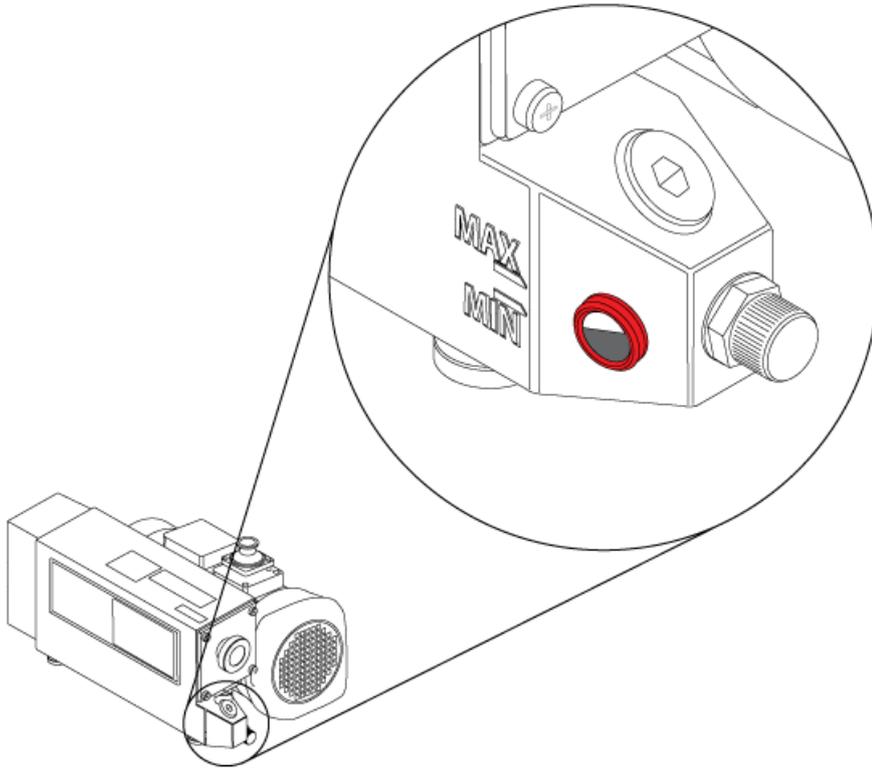
3. Détachez les tuyaux du capuchon.
4. Le cas échéant, soulevez la bouteille de vidange et retirez-la de son support.
5. Retirez le bouchon du conteneur de trop-plein.
6. Videz le conteneur de trop-plein, puis éliminez les déchets conformément aux procédures de laboratoire et aux réglementations locales concernant les déchets.
7. Remettez le capuchon sur le conteneur, puis replacez le conteneur dans son support.
8. Reliez les tuyaux au capuchon et fixez-les solidement à l'aide des colliers.

Vérifier le niveau d'huile de la pompe primaire

- Inspectez le regard en verre sur la pompe primaire pour vérifier que le niveau d'huile est supérieur au repère minimal.

Si le niveau d'huile est inférieur au repère minimal, contactez le responsable de maintenance qualifié (QMP) ou un technicien de service (FSE) SCIEX.

Figure 10-4 Regard en verre



Remplacer les filtres à air des ventilateurs du spectromètre de masse

Les ventilateurs du spectromètre de masse sont installés à gauche de l'appareil.

Procédures prérequis

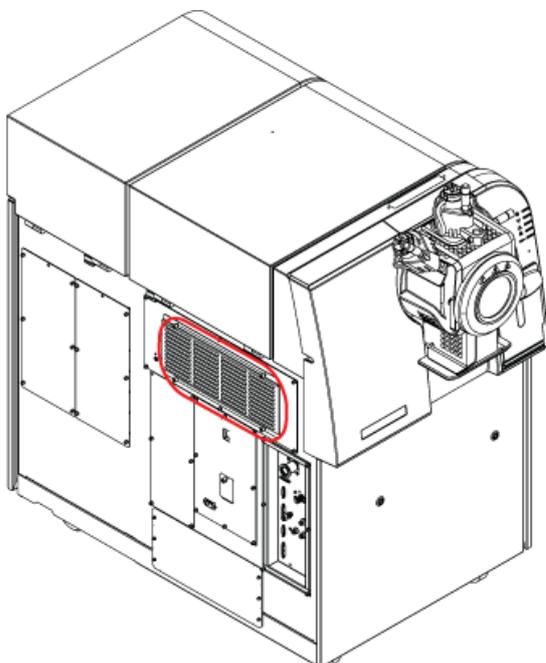
- Désactiver le système conformément à la procédure indiquée dans le *Guide de l'utilisateur du système*.



AVERTISSEMENT ! Risque pour l'environnement. Ne jetez pas les composants du système dans les déchetteries municipales. Suivez les réglementations locales lors de la mise au rebut des composants.

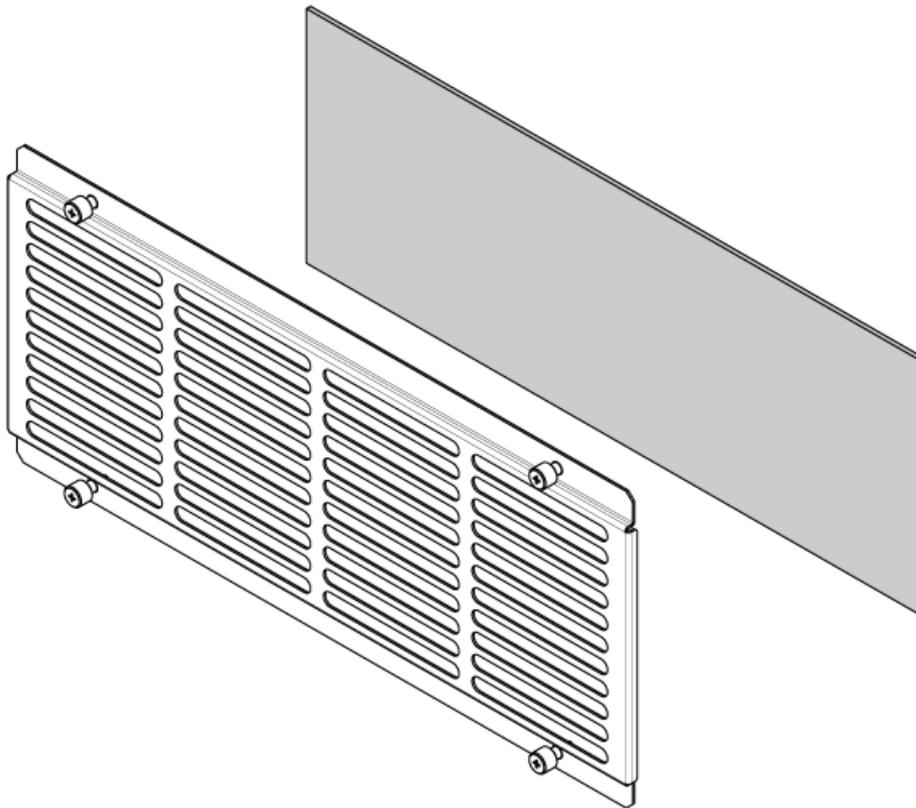
1. Retirer les quatre vis à serrage à main du capot du ventilateur.

Figure 10-5 Filtres des ventilateurs



2. Retirer le filtre, puis le remplacer par un neuf.

Figure 10-6 Filtre du ventilateur



Élément	Description
1	Capot du ventilateur
2	Filtre

3. Installer le capot du filtre.

Stockage et manutention



AVERTISSEMENT ! Risque pour l'environnement. Ne jetez pas les composants du système dans les déchetteries municipales. Suivez les réglementations locales lors de la mise au rebut des composants.

Si le spectromètre de masse doit être stocké pendant une période prolongée ou préparé pour son envoi, contactez un technicien de service SCIEX pour obtenir des informations relatives à sa mise hors service. Pour débrancher l'alimentation du spectromètre de masse, retirez la prise électrique de la prise secteur murale.

Remarque : La source d'ions et le spectromètre de masse doivent être transportés et stockés entre -30 °C et +60 °C (-22 °F et 140 °F). Stockez le système à une altitude ne dépassant pas 2 000 m (6 562 pieds) au-dessus du niveau de la mer.

Dépannage du spectromètre de masse

11

Cette section contient des informations pour le dépannage de problèmes courants sur le système. Certaines activités ne peuvent être effectuées que par un responsable de maintenance qualifié (QMP) formé par SCIEX dans le laboratoire. Pour un dépannage avancé, contactez un technicien de service SCIEX.

Tableau 11-1 Problèmes du système

Symptôme	Cause possible	Action corrective
Le guide d'ions QJet [®] est extrêmement sale ou est fréquemment sali.	Le débit du Curtain Gas [™] est trop faible.	Vérifiez le réglage du paramètre CUR et augmentez-le, le cas échéant.
Une panne du système s'est produite en raison de la pression à vide trop élevée.	<ol style="list-style-type: none">1. Le niveau d'huile de la pompe primaire est trop bas.2. Présence d'une fuite.3. La plaque à orifice installée n'est pas la bonne.	<ol style="list-style-type: none">1. Vérifiez le niveau d'huile de la pompe primaire, puis contactez le QMP local ou un technicien de service pour ajouter de l'huile.2. Rechercher les fuites et réparer.3. Installer la plaque à trou qui convient.
Une panne du système s'est produite en raison de la température trop élevée du module QPS Exciter.	<ol style="list-style-type: none">1. La température ambiante est trop élevée.	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.
Le logiciel Version du logiciel [®] TF indique que l'état du spectromètre de masse est sur Fault en raison de la source d'ions.	<ol style="list-style-type: none">1. La sonde n'est pas installée.2. La sonde n'est pas connectée correctement.	<ol style="list-style-type: none">1. Confirmez la panne dans le panneau Status de la page de détails de l'appareil.2. Installez la sonde. Consultez le <i>guide de fonctionnement</i> de la source d'ions.3. Retirez et remplacez la sonde. Serrez fermement l'anneau de retenue. Consultez le <i>guide de fonctionnement</i> de la source d'ions.

Tableau 11-1 Problèmes du système (Suite)

Symptôme	Cause possible	Action corrective
Le logiciel Version du logiciel [®] TF indique que la sonde APCI est en cours d'utilisation alors que la sonde TurbolonSpray [®] est installée.	Le fusible F3 a sauté.	Contactez un technicien de service.
La pulvérisation n'est pas uniforme.	L'électrode est bloquée.	Nettoyez ou remplacez l'électrode. Consultez le <i>guide de fonctionnement</i> de la source d'ions.
La sensibilité est réduite.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Les paramètres de la source d'ions ne sont pas optimisés. 2. Le spectromètre de masse n'est pas optimisé. 3. La plaque rideau est sale. 4. La plaque à orifice est sale. 5. Le guide d'ions QJet[®] ou la lentille IQ0 est sale. 6. La zone Q0 est sale. 7. La ligne de la seringue ou de l'échantillon fuit. 8. L'échantillon s'est dégradé ou a une faible concentration. 9. La sonde n'est pas installée correctement. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Optimisez les paramètres de la source d'ions. Consultez le système d'aide du logiciel Version du logiciel[®] TF. 2. Voir Nettoyer la plaque rideau à la page 99. 3. Consultez Nettoyer l'avant de la plaque à orifice à la page 100 ou contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local. 4. Nettoyer la zone Q0. Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service. 5. Inspectez la seringue ou la ligne d'échantillon pour identifier d'éventuelles fuites, puis réparez les fuites le cas échéant. Assurez-vous que les raccords sont de type et de taille adéquats. 6. Vérifiez la concentration de l'échantillon. Utilisez un échantillon récent. 7. Retirez et installez la sonde.

Tableau 11-1 Problèmes du système (Suite)

Symptôme	Cause possible	Action corrective
La sensibilité est réduite. (Suite)	<ol style="list-style-type: none"> 1. La source d'ions n'est pas installée correctement ou est en panne. 2. Il manque un ou plusieurs joints toriques sur l'interface avec le vide. 3. Il y a un problème au niveau du système LC ou des connexions. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Retirez et installez la source d'ions, en vous assurant que les loquets sont bien fixés. Si cela ne résout pas le problème, installez et optimisez une autre source d'ions. 2. Si les joints toriques sont sur la source d'ions, installez-les sur l'interface avec le vide. S'ils n'y sont pas, contactez un FSE. 3. Dépanner le système LC.
Les performances du spectromètre de masse se dégradent.	<ol style="list-style-type: none"> 1. La sonde n'est pas optimisée. 2. L'échantillon n'a pas été préparé correctement ou s'est dégradé. 3. Les raccords d'introduction de l'échantillon fuient. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Optimisez la sonde. Consultez le <i>guide de fonctionnement</i> de la source d'ions. 2. Vérifiez que l'échantillon a été préparé correctement. 3. Vérifiez que la taille et le type des raccords sont adéquats et assurez-vous qu'ils sont bien serrés. Ne serrez pas trop les raccords. Remplacez les raccords si les fuites persistent. 4. Installez et optimisez une autre source d'ions. 5. Si le problème persiste, contactez un technicien.
Production d'arcs électriques ou d'étincelles.	La position de l'aiguille de décharge par effet corona est incorrecte.	Tournez l'aiguille de décharge corona vers la plaque rideau et loin du flux du gaz chauffant. Consultez le <i>guide de fonctionnement</i> de la source d'ions.

Pour les ventes, une assistance technique ou une maintenance, contactez un technicien de service ou visitez le site Web SCIEX à l'adresse sciex.com pour obtenir les coordonnées.

Ions d'étalonnage recommandés

A

Les tableaux suivants répertorient les standard recommandés par SCIEX pour étalonner le système TripleTOF® 6600. Pour plus d'informations sur les solutions d'ajustement, reportez-vous à [Tune and Calibrate à la page 46](#).

Tableau A-1 Ions d'étalonnage positifs Q1 PPG

Masses								
59,04914	233,17472	442,33740	674,50484	906,67228	1196,88158	1545,13274	1952,42576	2242,63506

Tableau A-2 Ions d'étalonnage négatif Q1 PPG

Masses								
44,99819	411,25991	585,38549	933,63665	1165,80409	1572,09711	1863,30641	1979,39013	2211,55757

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) phosphazene	922,0098
Hexakis(1H,1H,5H-octafluoropentoxy) phosphazene	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
23	1352,9733	1371,0072	1335,9701	694,5205	1397,9715
24	1411,0152	1429,0490	1394,0119	723,5414	1456,0134
25	1469,0571	1487,0909	1452,0538	752,5624	1514,0553
26	1527,0989	1545,1327	1510,0956	781,5833	1572,0971
27	1585,1408	1603,1746	1568,1375	810,6042	1630,1390
28	1643,1826	1661,2165	1626,1794	839,6251	1688,1808
29	1701,2245	1719,2583	1684,2212	868,6461	1746,2227
30	1759,2664	1777,3002	1742,2631	897,6670	1804,2646
31	1817,3082	1835,3420	1800,3049	926,6879	1862,3064
32	1875,3501	1893,3839	1858,3468	955,7089	1920,3483
33	1933,3919	1951,4258	1916,3887	984,7298	1978,3901
34	1991,4338	2009,4676	1974,4305	1013,7507	2036,4320
35	2049,4757	2067,5095	2032,4724	1042,7717	2094,4739
36	2107,5175	2125,5513	2090,5142	1071,7926	2152,5157
37	2165,5594	2183,5932	2148,5561	1100,8135	2210,5576
38	2223,6012	2241,6351	2206,5980	1129,8344	2268,5994

Résérpine

Tableau B-2 Masses exactes de résérpine

 Résérpine (C₃₃H₄₀N₂O₉)

Description	Masse
Ion moléculaire C ₃₃ H ₄₁ N ₂ O ₉	609,28066
Fragment C ₂₃ H ₃₀ NO ₈	448,19659

Masses exactes et formules chimiques

Tableau B-2 Masses exactes de réserpine (Suite)

Description	Masse
Fragment $C_{23}H_{29}N_2O_4$	397,21218
Fragment $C_{22}H_{25}N_2O_3$	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

Tableau B-3 Masses exactes de l'acide taurocholique

Acide taurocholique ($C_{26}H_{45}NO_7S$)

Description	Masse
Ion moléculaire $C_{26}H_{44}NO_7S$	514,28440
Fragment $C_2H_3O_3S$	106,98084
Fragment $C_2H_6NO_3S$	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, consultez le *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 Subprojects 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 de l'éditeur des méthodes d'acquisition

Icône	Nom	Description
	Spectromètre de masse	Cliquer pour afficher l'onglet MS dans l'éditeur des méthodes d'acquisition.
	Période	Cliquez avec le bouton droit de la souris pour ajouter une expérience, ajouter un IDA Criteria Level ou supprimer la période.
	Autoéchantillonneur	Cliquer pour ouvrir l'onglet Autosampler Properties.
	Pompe à seringue	Cliquer pour ouvrir l'onglet Syringe Pump Properties.
	Four à colonne	Cliquer pour ouvrir l'onglet Column Oven Properties.
	Valve	Cliquer pour ouvrir l'onglet Valve Properties.
	DAD	Cliquer pour ouvrir l'éditeur de la méthode DAD. Consultez Données DAD à la page 85 .
	ADC	Cliquer pour ouvrir l'onglet ADC Properties. Consultez Afficher les données ADC à la page 77 .

Icônes de la barre d'outils

Tableau C-3 Icônes du mode Acquire

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.
	Insert Pause before Selected Sample(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'instrumentation en Standby.
	Prêt	Met l'instrumentation en mode Ready.

Tableau C-3 Icônes du mode Acquire (Suite)

Icône	Nom	Description
	Réserver Instrumentation pour réglage	Réserve le spectromètre de masse pour le réglage et l'étalonnage.
	Assistant Méthode	Démarre l' Method Wizard.
	Modificateur de la purge	Démarre la purge du modificateur de la pompe du modificateur.

Tableau C-4 Icônes du mode Tune and Calibrate

Icône	Nom	Description
	Étalonnage à partir d'un spectre	Ouvre la boîte de dialogue Mass Calibration Option et utilise le spectre actif pour étalonner le spectromètre de masse.
	Réglage manuel	Ouvre le Manual Tune Editor.
	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 l'instrument pour réglage	Réserve l'instrumentation pour le réglage et l'étalonnage.
	Purge Modifier	Cliquez pour nettoyer ou vider le modificateur de la pompe du modificateur.

Icônes de la barre d'outils

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.
	Aller à l'échantillon	Ouvre la boîte de dialogue Select Sample.
	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.
	Seuil	Ajuste le seuil
	Filtre pour le bruit	Affiche la boîte de dialogue Noise Filter Options, 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.

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

Icône	Nom	Description
	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.
	Étiquette 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.
	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.
	Afficher spectre DAD	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.

Icônes de la barre d'outils

Tableau C-6 Guide de référence rapide de la barre d'outils Explore : superposition des graphiques

Icône	Nom	Description
	Graphique Accueil	Cliquer dessus pour restaurer le graphique à l'échelle d'origine.
	Superposition	Cliquer dessus pour superposer des graphiques.
	Alternner les superpositions	Cliquer dessus pour alterner les graphiques superposés.
	Additionner des graphiques superposés	Cliquer dessus pour additionner des graphiques.

Tableau C-7 Guide de référence rapide de la barre d'outils Explore : Outil d'interprétation de la fragmentation

Icône	Nom	Description
	Afficher l'outil d'interprétation de la fragmentation	Cliquer pour ouvrir l'outil d'interprétation de la fragmentation qui calcule les fragments du clivage de liaisons simples non cycliques à partir d'un fichier .mol.

Tableau C-8 Icônes de navigation de la barre d'outils Explore

Icône	Nom	Fonction
	Ouvrir le fichier	Cliquer dessus pour ouvrir des fichiers.
	Afficher échantillon Suivant	Cliquer dessus pour accéder à l'échantillon suivant.
	Afficher échantillon précédent	Cliquer dessus pour accéder à l'échantillon précédent.
	Aller à Échantillon	Cliquer dessus pour ouvrir la boîte de dialogue Select Sample.
	Données de la liste	Cliquer dessus pour afficher les données sous forme de tableaux.
	Afficher TIC	Cliquer dessus pour générer un TIC à partir d'un spectre.

Tableau C-8 Icônes de navigation de la barre d'outils Explore (Suite)

Icône	Nom	Fonction
	Boîte de dialogue Utilisation Extraction	Cliquer dessus pour extraire des ions en sélectionnant des masses
	Afficher Chromatogramme de pics de base	Cliquer dessus pour générer un BPC.
	Afficher le spectre	Cliquer dessus pour générer un spectre à partir d'un TIC.
	Copier un graphique dans une nouvelle fenêtre	Cliquer dessus pour copier le graphique actif dans une nouvelle fenêtre.
	Enlever la référence	Cliquer dessus pour ouvrir la boîte de dialogue Baseline Subtract.
	Seuil	Cliquer dessus pour ajuster le seuil.
	Filtre pour le bruit	Cliquer sur la boîte de dialogue Options de filtre auditif pour définir la largeur minimale d'un pic. Les signaux en dessous de cette largeur minimale sont considérés comme du bruit.
	Afficher ADC	Cliquer dessus pour afficher les données CAN.
	Afficher le fichier Info	Cliquer dessus pour afficher les conditions expérimentales utilisées pour recueillir les données.
	Ajoutez des flèches	Cliquer dessus pour ajouter des flèches à l'axe des abscisses du graphique actif.
	Enlever toutes les flèches	Cliquer dessus pour supprimer des flèches de l'axe des abscisses du graphique actif.
	Décalage graphique	Cliquer pour compenser les légères différences pendant que les données du CAN et celles du spectromètre de masse sont enregistrées. Ceci est utile lors de la superposition des graphiques pour comparaison.
	Étiquette des pics	Cliquer dessus pour étiqueter tous les pics.
	Dérouler Sélection par	Cliquer dessus pour définir le facteur d'agrandissement pour une portion d'un graphique à afficher de manière plus détaillée.
	Effacer les pages	Cliquer dessus pour rendre son aspect normal à la sélection agrandie.
	Définir la sélection	Cliquer pour taper les points de départs et de fin pour une sélection. Ce qui permet d'avoir une sélection aussi précise qu'il est possible d'obtenir en mettant en évidence la zone avec le curseur.

Icônes de la barre d'outils

Tableau C-8 Icônes de navigation de la barre d'outils Explore (Suite)

Icône	Nom	Fonction
	Normaliser à Max	Cliquez pour mettre à l'échelle un graphique au maximum et ainsi la pic la plus intense est en taille maximum, visible ou pas.
	Afficher l'historique	Cliquer dessus pour afficher 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	Cliquer dessus pour ouvrir la base de données des composés.
	Définir les seuils	Cliquer dessus pour ajuster le seuil.
	Afficher tracé de contour	Cliquer pour afficher les données sélectionnées sous forme d'un graphique spectral ou d'un XIC. De plus, pour les données acquises par DAD, un tracé peut afficher des données sélectionnées soit en spectre DAD, soit en XWC.
	Afficher DAD TWC	Cliquer dessus pour générer un TWC du DAD.
	Afficher DAD Spectre	Cliquer dessus pour générer un spectre DAD.
	Extraire une longueur d'onde	Cliquer dessus pour extraire jusqu'à trois plages de longueurs d'onde d'un spectre DAD pour afficher le XWC.

Tableau C-9 Icônes de l'onglet Integration et de l'assistant de quantification

Icône	Nom	Description
	Définir les paramètres à partir de la zone de bruit de fond	Utilise le fond sélectionné.
	Sélectionner le pic	Utilise le pic sélectionné.
	Mode d'intégration manuelle	Pics manuellement intégrés.
	Afficher ou masquer les paramètres	Bascule entre les paramètres de recherche de pic, affichés et masqués.
	Afficher graphique actif	Affiche le chromatogramme de l'analyte uniquement.

Tableau C-9 Icônes de l'onglet Integration et de l'assistant de quantification (Suite)

Icône	Nom	Description
	Affiche l'analyte et l'IS	Affiche l'analyte et son chromatogramme (disponible uniquement lorsqu'un standard interne associé existe).
	Utilisation de la vue par défaut pour le graphique	Retourne vers la vue prédéfinie (afficher toutes les données) (si, par exemple, l'utilisateur a effectué un zoom sur un chromatogramme).

Tableau C-10 Icônes du tableau de résultats

Icône	Nom	Description
	Trier dans l'ordre croissant par sélection	Trie la colonne sélectionnée par ordre croissant 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.
	Afficher tous les échantillons	Affiche tous les échantillons dans le tableau de résultats.
	Supprimer Colonne de formule	Supprime la colonne de formule.
	Générateur de rapports	Ouvre le logiciel Reporter.

Tableau C-11 Icône Référence rapide : Mode Quantitate

Icône	Nom	Description
	Ajouter/Retirer des échantillons	Ajoute ou supprime des échantillons provenant du tableau de résultats.
	Exporter sous forme de texte	Enregistre le tableau de résultats dans un fichier texte.
	Modification de la méthode	Ouvre un fichier wiff.
	Examen de pic, Volet	Ouvre les pics dans un volet.
	Examen de pic, Fenêtre	Ouvre les pics dans une fenêtre

Icônes de la barre d'outils

Tableau C-11 Icône Référence rapide : Mode Quantité (Suite)

Icône	Nom	Description
	Étalonnage Volet	Ouvre la courbe d'étalonnage dans un volet.
	Étalonnage Fenêtre	Ouvre la courbe d'étalonnage dans une fenêtre.
	Afficher le premier pic	Montre le premier pic dans le volet ou la fenêtre.
	Afficher le dernier pic	Montre le dernier pic dans le volet ou la fenêtre.
	Afficher Registre d'audit	Affiche le registre d'audit du tableau de résultats.
	Effacer Registre d'audit	Libère le registre d'audit du Results Table. Cette fonctionnalité n'est pas disponible.
	Statistiques	Ouvre la fenêtre Statistics.
	Générateur de rapports	Ouvre le logiciel Reporter .

Glossaire des symboles

D

Remarque : Les symboles figurant dans le tableau suivant ne s'appliquent pas tous à chaque instrument.

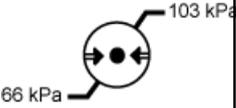
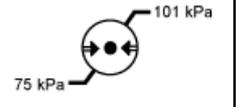
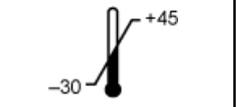
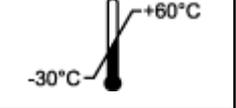
Symbole	Description
	Marque de conformité réglementaire pour l'Australie. Indique que les produits sont conformes aux exigences en matière de CEM de l'ACMA (Australian Communications Media Authority).
	Courant alternatif
A	Ampères (courant)
	Représentant agréé pour la Communauté européenne
	Risque biologique
	Marquage de conformité CE
	Marquage cCSAus. Indique une certification de sécurité électrique pour le marché canadien et américain.
	Numéro de référence
	Attention Remarque : Dans la documentation SCIEX, ce symbole signale un risque de blessure corporelle.

Glossaire des symboles

Symbole	Description
	Étiquette d'avertissement RoHS pour la Chine. Le produit d'information électronique contient certaines substances toxiques ou dangereuses. Le nombre au centre correspond à la date de la période d'utilisation sans risque pour l'environnement (EFUP) et indique le nombre d'années civiles durant lesquelles le produit peut être utilisé. À l'expiration de l'EFUP, le produit doit immédiatement être recyclé. Les flèches formant un cercle indiquent que le produit est recyclable. Le code de date mentionné sur l'étiquette ou le produit indique la date de fabrication.
	Logo RoHS pour la Chine. Ce dispositif ne contient pas de substances toxiques ou dangereuses ni d'éléments dépassant les valeurs de concentration maximales. Par ailleurs, il s'agit d'un produit sans risque pour l'environnement pouvant être recyclé et réutilisé.
	Consultez le mode d'emploi.
	Marquage TÜVus pour le TÜV Rheinland d'Amérique du Nord.
	Symbole Data Matrix pouvant être lu par un lecteur de codes-barres pour obtenir un identificateur de dispositif unique (UDI).
	Connexion Ethernet
	Risque d'explosion
	Risque d'incendie
	Risque d'exposition à des produits chimiques inflammables
	Fragile
	Fusible

Symbole	Description
Hz	Hertz
	Haute tension. Risque de choc électrique. Si le capot principal doit être retiré, contactez un représentant SCIEX afin de prévenir tout choc électrique.
	Risque sur surface chaude
	Dispositif de diagnostic in vitro
	Risque de rayonnement ionisant
	Conserver au sec. Ne pas exposer à la pluie. L'humidité relative ne doit pas dépasser 99 %.
	Conserver en position droite.
	Risque d'irradiation au laser
	Risque de levage
	Fabricant
	Risques liés aux pièces mobiles
	Risque de pincement
	Risque de gaz pressurisé

Glossaire des symboles

Symbole	Description
	Mise à la terre obligatoire
	Risque de perforation
	Risque de perforation
	Risque de réaction chimique
	Numéro de série
	Risque de toxicité chimique
	Transporter et stocker le système entre 66 kPa et 103 kPa.
	Transporter et stocker le système entre 75 kPa et 101 kPa.
	Transporter et stocker le système à une humidité relative comprise entre 10 % et 90 %.
	Transporter et stocker le système à une température comprise entre -30 °C et +45 °C.
	Transporter et stocker le système à une température comprise entre -30 °C et +60 °C.
	Connexion USB 2.0
	Connexion USB 3.0

Symbole	Description
	Risque de radiation ultraviolette
VA	Volts Ampères (alimentation)
V	Volts (tension)
	WEEE. Ne pas jeter cet équipement comme déchet municipal non trié. Risque pour l'environnement
W	Watts
	<i>aaaa-mm-jj</i> Date de fabrication

Glossaire des avertissements

E

Remarque : En cas de détachement d'une étiquette d'identification d'un composant, contactez un ingénieur service.

Étiquette	Traduction (le cas échéant)
FOR RESEARCH USE ONLY. NOT FOR USE IN DIAGNOSTIC PROCEDURES.	POUR UTILISATION À DES FINS DE RECHERCHE UNIQUEMENT. NE PAS UTILISER DANS DES PROCÉDURES DE DIAGNOSTIC.
IMPACT INDICATOR SENSITIVE PRODUCT WARNING	INDICATEUR D'IMPACT AVERTISSEMENT DE PRODUIT SENSIBLE Remarque : Si l'indicateur a été activé, ce conteneur a fait une chute ou a fait l'objet d'une mauvaise manipulation. Signaler l'incident sur le connaissance et vérifier l'absence de dommages. Toute réclamation pour des dommages liés à un choc nécessite une note écrite.
IMPORTANT! RECORD ANY VISIBLE CRATE DAMAGE INCLUDING TRIPPED "IMPACT INDICATOR" OR "TILT INDICATOR" ON THE WAYBILL BEFORE ACCEPTING SHIPMENT AND NOTIFY YOUR LOCAL AB SCIEX CUSTOMER SUPPORT ENGINEER IMMEDIATELY. DO NOT UNCRATE. CONTACT YOUR LOCAL CUSTOMER SUPPORT ENGINEER FOR UNCRATING AND INSTALLATION.	IMPORTANT ! ENREGISTRER SUR LE CONNAISSEMENT TOUT DOMMAGE VISIBLE SUR LA CAISSE PARMIS LESQUELS LES « INDICATEURS D'IMPACT » OU LES « INDICATEURS D'INCLINAISON » ACTIVÉS AVANT D'ACCEPTER LA LIVRAISON ET LES SIGNALER IMMÉDIATEMENT VOTRE TECHNICIEN D'ASSISTANCE À LA CLIENTÈLE AB SCIEX. NE PAS DÉBALLER. CONTACTER VOTRE TECHNICIEN D'ASSISTANCE À LA CLIENTÈLE POUR LE DÉBALLAGE ET L'INSTALLATION.
TIP & TELL	Indicateur d'inclinaison Remarque : Indique que le conteneur a été renversé ou a fait l'objet d'une mauvaise manipulation. Signaler l'incident sur le connaissance et vérifier l'absence de dommages. Toute réclamation pour un renversement nécessite une note écrite.

Étiquette	Traduction (le cas échéant)
<p>TiltWatch PLUS ShockWatch</p>	<p>Indicateur d'inclinaison</p> <hr/> <p>Remarque : Indique que le conteneur a été renversé ou a fait l'objet d'une mauvaise manipulation. Signaler l'incident sur le connaissance et vérifier l'absence de dommages. Toute réclamation pour un renversement nécessite une note écrite.</p> <hr/>
<p>WARNING: DO NOT OPERATE WITHOUT FIRST ENSURING BOTTLE CAP IS SECURED.</p>	<p>AVERTISSEMENT : NE PAS UTILISER L'APPAREIL AVANT D'AVOIR VÉRIFIÉ QUE LE BOUCHON DU FLACON EST CORRECTEMENT FIXÉ.</p> <hr/> <p>Remarque : Cet avertissement figure sur le conteneur de trop-plein de l'évacuation de la source.</p> <hr/>
<p>WARNING: NO USER SERVICEABLE PARTS INSIDE. REFER SERVICING TO QUALIFIED PERSONNEL.</p>	<p>AVERTISSEMENT: AUCUNE PIÈCE RÉPARABLE PAR L'UTILISATEUR À L'INTÉRIEUR. CONFIER L'ENTRETIEN À UN PERSONNEL QUALIFIÉ.</p> <hr/> <p>Remarque : Consulter le mode d'emploi.</p> <hr/>