

TripleTOF Système 5600/5600+

Guide de l'utilisateur du système



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.

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

AB Sciex™ est utilisé sous licence.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.

Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

Table des matières

Chapitre 1 : Précautions et limites de fonctionnement	7
Informations générales de sécurité	7
Symboles et conventions de la documentation	7
Conformité réglementaire	8
Australie et Nouvelle Zélande	8
Canada	8
Europe	8
États-Unis	9
International	9
Précautions en matière d'alimentation électrique	10
Alimentation principale	10
Prise de terre de protection	10
Précautions en matière de produits chimiques	11
Fluides sûrs pour le système	12
Précautions relatives à la ventilation	13
Précautions physiques	14
Précautions pour l'environnement	14
Environnement électromagnétique	15
Mise hors service et mise au rebut	16
Personnel qualifié	17
Conditions de laboratoire	17
Conditions environnementales sécurisées	17
Spécifications des performances	17
Utilisation et modification de l'appareil	17
 Chapitre 2 : Principes de fonctionnement	 19
Présentation du système	19
Présentation du matériel	19
Symboles du panneau	23
Principes de fonctionnement	24
Manipulation des données	25
 Chapitre 3 : Instructions d'utilisation	 26
Démarrer le système	26
Désactivation du système	27
Régler la position de la pompe à seringue intégrée	28
Réinitialiser la pompe à seringue	31
 Chapitre 4 : Instructions d'utilisation : flux de travail des échantillons	 33

Table des matières

Chapitre 5 : Instructions d'utilisation : Profils des matériels et projets	37
Profils de matériel	37
Créer un profil de matériel	37
Ajouter des périphériques à un profil de matériel	42
Dépannage des problèmes liés à l'activation du profil de matériel	44
Projets et sous-projets	44
Créer des projets et des sous-projets	44
Créer des sous-projets	46
Copier des sous-projets	46
Basculer entre les projets et sous-projets	46
Dossiers projet installé	47
Sauvegarder le dossier API Instrument	48
Récupérer le dossier API Instrument	48
 Chapitre 6 : Instructions d'utilisation – Réglage et calibration	 49
Optimiser le spectromètre de masse	50
Boîte de dialogue Verifying or Adjusting Performance	50
Récapitulatif des résultats	51
 Chapitre 7 : Instructions d'utilisation : Méthodes d'acquisition	 52
Créer une méthode d'acquisition en utilisant l'éditeur de méthode d'acquisition	52
Ajouter une expérience	53
Ajouter une période	54
Copier une expérience dans une période	54
Copier une expérience dans une période	54
Créer une méthode d'acquisition à l'aide de l'assistant de méthode	54
Techniques de balayage	55
Spectrométrie de masse simple	55
Spectrométrie de masse simple à base quadripolaire	55
Spectrométrie de masse simple à temps de vol	56
Spectrométrie de masse en tandem	56
Spectrométrie de masse d'ions produits	56
Spectrométrie de masse d'ions précurseurs	56
À propos de l'acquisition de données spectrales	56
Paramètres MS	57
 Chapitre 8 : Instructions d'utilisation : Lots	 62
Régler les options de file d'attente	62
Ajouter des ensembles et des échantillons à un lot	64
Soumettre un échantillon ou un groupe d'échantillons	67
Configurer l'étalonnage de l'échantillon	67
Changer l'ordre de l'échantillon	68
Acquérir les données	68
Régler les emplacements de l'échantillon dans l'Éditeur de lot	69
Sélectionner les emplacements des flacons à l'aide de l'onglet Locations (facultatif)	69

Arrêter l'acquisition d'échantillons	70
États de la file d'attente et état du périphérique	71
Statut de la file d'attente	71
Vue Instrumentation et icônes de l'état des périphériques	72
Chapitre 9 : Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des données	74
Ouvrir les fichiers de données	74
Naviguer entre les échantillons dans un fichier de données	75
Afficher les conditions expérimentales	75
Afficher les données dans des tableaux	76
Show ADC Data	77
Afficher les données quantitatives de base	78
Chromatogrammes	78
Montrer les TIC d'un spectre	79
Afficher un spectre d'un TIC	80
Générer des XIC	81
Générer un XIC à l'aide d'une plage sélectionnée	82
Générer un XIC en utilisant le pic maximal	82
Générer un XIC à l'aide des masses du pic de base	83
Extraire des ions en sélectionnant les masses	83
Générer des BPC	84
Générer des XWC	85
Afficher données DAD	86
Générer des TWC	86
Ajuster le seuil	87
Traitement des données graphiques	87
Graphiques	88
Gestion des données	88
Effectuez un zoom avant sur l'axe des y	90
Effectuer un zoom avant sur l'axe des x	90
Chapitre 10 : Informations relatives à l'entretien et à la maintenance	91
Calendrier de maintenance recommandé	91
Nettoyage des surfaces	94
Nettoyer la façade	94
Symptômes de contamination	95
Matériel nécessaire	95
Bonnes pratiques de nettoyage	96
Préparez le spectromètre de masse	97
Nettoyer la plaque rideau	98
Nettoyer l'avant de la plaque à orifice	100
Remettre le spectromètre de masse en service	100
Vider le conteneur de trop-plein	100
Vérifiez 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

Chapitre 11 : Dépannage du spectromètre de masse	107
Annexe A : Ions d'étalonnage recommandés	113
Annexe B : Masses exactes et formules chimiques	116
Annexe C : Icônes de la barre d'outils	119
Annexe D : Menus contextuels	130
Éditeur de lots	130
Ordre dans la file d'attente	131
Afficher le menu contextuel du volet d'informations sur le fichier	132
Volet de chromatogramme	132
Spectra Panes (Fenêtres spectrales)	133
Tableau de résultats	135
Examen des pics	135
Courbe d'étalonnage	136
Annexe E : Glossaire des symboles	138
Annexe F : Glossaire des avertissements	144
Nous contacter	146
Formation destinée aux clients	146
Centre d'apprentissage en ligne	146
Assistance technique SCIEX	146
Cybersécurité	146
Documentation	146

Précautions et limites de fonctionnement

1

Remarque : avant d'utiliser le système, lire 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 avertissements associés du système, ainsi que les précautions à prendre pour minimiser les risques.

Outre cette section, pour obtenir des informations sur les symboles et conventions utilisés dans l'environnement du laboratoire, sur le système et dans le présent document : [Glossaire des symboles](#). Pour les exigences de site, y compris les exigences en matière d'alimentation secteur, d'évacuation à la source, de ventilation, d'air comprimé, d'azote et de pompe de dégrossissage, consulter le *Guide d'aménagement sur site*.

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, les fiches de données de sécurité (FDS) du fabricant relatives aux produits chimiques ainsi que les informations figurant sur l'étiquette du produit. Les 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.

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 ! Un avertissement indique une action qui pourrait causer des blessures si les précautions nécessaires ne sont pas suivies.

ATTENTION : attention signifie une opération susceptible d'endommager le système ou de conduire à une perte ou une altération 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.

Conformité réglementaire

Ce système est conforme aux réglementations et aux normes figurant dans cette section. Pour les références datées, consultez la *déclaration de conformité* fournie avec le système et les composants individuels du système. 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). Consulter la section : [Interférence électromagnétique](#)
- **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. Consulter la section : [Interférence électromagnétique](#).
- **Sécurité :**
 - CAN/CSA C22.2 N° 61010-1
 - CAN/CSA C22.2 N° 61010-2-061

Europe

- **Compatibilité électromagnétique (CEM) :** directive 2014/30/UE relative à la compatibilité électromagnétique telle que mise en œuvre dans les normes suivantes :
 - EN 61326-1

- EN 55011 (Classe A)

Consulter la section : [Compatibilité électromagnétique](#)

- **Sécurité** : Directives sur les basses tensions 2014/35/UE 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. Consulter la section : [Déchets d'équipements électriques et électroniques](#)
- **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)
- **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 61000-3-3

Consulter la section : [Compatibilité électromagnétique](#).

- **Sécurité** :

- CEI 61010-1
- CEI 61010-2-061

Précautions en matière d'alimentation électrique



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. Ne pas retirer 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. Contacter 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 document : *Guide de planification du site*.

Alimentation principale

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 du personnel qualifié. Assurez-vous que toutes les installations sont conformes aux réglementations en vigueur et aux normes de sécurité.



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



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. Utiliser exclusivement les câbles d'alimentation secteur fournis avec le système. Ne pas utiliser de câbles d'alimentation secteur 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 de protection

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



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. Ne débranchez pas délibérément la prise de terre de protection. Toute interruption de la mise à la terre engendre un risque de choc électrique.



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. S'assurer qu'un câble de mise à la terre relie la boucle de l'échantillon à 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 en matière de produits chimiques



AVERTISSEMENT ! Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Déterminer si une décontamination est nécessaire avant de procéder au nettoyage ou à l'entretien. Si des matériaux radioactifs, des agents biologiques ou des substances chimiques toxiques ont été utilisés avec le système, le client doit décontaminer de ce dernier avant d'en effectuer le nettoyage ou la maintenance.



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



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

- Déterminez quels sont les produits chimiques qui peuvent avoir été utilisés dans le système avant les opérations de service et son entretien régulier. Pour les précautions en matière de santé et de sécurité à suivre avec les produits chimiques, consultez le document : *Fiche de données de sécurité*. Pour des informations concernant le stockage, consultez le document : *Certificat d'analyse*. Pour trouver une *fiche de données de sécurité* ou un *certificat d'analyse* SCIEX, accédez au site sciex.com/tech-regulatory.
- Portez toujours l'équipement de protection individuelle attribué, y compris des gants sans poudre, des lunettes de sécurité et une blouse de laboratoire.

Remarque : Il est recommandé de porter des gants en nitrile ou en néoprène.

- Travaillez dans un endroit bien aéré ou doté d'une hotte aspirante.
- 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. Il existe un risque potentiel de blessure corporelle si les procédures adéquates de manipulation et d'élimination des produits chimiques ne sont pas respectées.

Précautions et limites de fonctionnement

- 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 déchets pour recueillir les déversements chimiques éventuels.

Fluides sûrs pour le système

Les liquides suivants peuvent être utilisés en toute sécurité avec le système. Pour plus d'informations sur les solutions de nettoyage sans risque, consultez la section : [Matériel nécessaire](#).



ATTENTION : Risque d'endommagement du système. N'utilisez pas un autre liquide avant d'avoir reçu la confirmation de sa nature inoffensive de la part de SCIEX. Cette liste n'est pas exhaustive.

Remarque : utilisez uniquement des nouveaux solvants de qualité LC-MS fraîchement préparés ou supérieure pour les phases mobiles LC.

• Solvants organiques

- Acétonitrile de qualité LC-MS ; jusqu'à 100 %
- Méthanol de qualité LC-MS ; jusqu'à 100 %
- Isopropanol de qualité LC-MS ; jusqu'à 100 %
- Eau de qualité LC-MS ou supérieure ; jusqu'à 100 %
- Acétonitrile ; jusqu'à 100 %
- Méthanol ; jusqu'à 100 %
- Isopropanol, jusqu'à 100 %
- Eau DDI ; jusqu'à 100 %
- Tétrahydrofurane ; jusqu'à 100 %
- Toluène et autres solvants aromatiques ; jusqu'à 100 %
- Hexanes ; jusqu'à 100 %

• Tampons

- Acétate d'ammonium ; moins de 100 mM
- Formate d'ammonium ; moins de 100 mM

- Phosphate, moins de 1 %
- **Acides et bases**
 - Acide formique ; moins de 1 %
 - Acide acétique ; moins de 1 %
 - Acide trifluoroacétique (TFA) ; moins de 1 %
 - Acide heptafluorobutyrique (HFBA) ; moins de 1 %
 - Ammoniaque/Hydroxyde d'ammonium ; moins de 1 %
 - Acide phosphorique ; moins de 1 %
 - Triméthylamine ; moins de 1 %
 - Triéthylamine ; moins de 1 %

Précautions relatives à la ventilation

L'évacuation des fumées et l'élimination des déchets doivent être conformes à toutes les règles fédérales, 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. Vérifier 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. Veiller à évacuer les gaz d'échappement dans une hotte aspirante de laboratoire prévue à cet effet ou un système d'évacuation et s'assurer que le tuyau de ventilation est maintenu en place par des pinces. Vérifier 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. Examinez la tubulure d'évacuation régulièrement 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.

Précautions et limites de fonctionnement



AVERTISSEMENT ! Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. N'utilisez pas 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 SCIEX. Tout matériau toxique ou nocif introduit dans l'appareil sera présent dans les émissions de la source. La pièce devrait être ventilée pour évacuer les émissions provenant de l'équipement. Éliminez les objets tranchants conformément aux procédures de sécurité établies par le laboratoire.

Précautions physiques



AVERTISSEMENT ! Risque lié au levage. Utilisez un appareil de levage mécanique pour soulever et déplacer le spectromètre de masse. Respectez les procédures de levage sécurisé en vigueur. Nous vous recommandons d'utiliser un service de déménagement professionnel. Pour les poids des composants du système, consultez le *Guide d'aménagement sur site*.

Précautions pour l'environnement

Utilisation 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 document : *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, respecter 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.



AVERTISSEMENT ! Risque pour l'environnement. Suivez les procédures établies pour la mise au rebut des déchets biologiquement dangereux, toxiques, radioactifs et électroniques. Le client est responsable de la mise au rebut des substances dangereuses, y compris produits chimiques, huiles usagées et composants électriques, conformément aux lois et aux réglementations locales.

ATTENTION : écart de masse potentiel. Maintenez une température ambiante stable. Si la température change de plus de 2 °C par heure, la résolution et l'étalonnage de 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.

Interférence électromagnétique

Équipement de groupe 1 : Cet équipement est classé comme équipement industriel, scientifique et médical (ISM) qui pourrait utiliser de l'énergie RF pour les opérations internes.

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.

Précautions et limites de fonctionnement

ATTENTION : Interférences radios potentielles. L'équipement n'est pas destiné à être utilisé dans les environnements résidentiels et peut ne pas fournir la protection adaptée à ce type d'environnements.

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

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

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

Mise hors service et mise au rebut



AVERTISSEMENT ! Risque pour l'environnement. Suivez les procédures établies pour la mise au rebut des déchets biologiquement dangereux, toxiques, radioactifs et électroniques. Le client est responsable de la mise au rebut des substances dangereuses, y compris produits chimiques, huiles usagées et composants électriques, conformément aux lois et aux réglementations locales.

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 la section: [Stockage et maintenance](#).

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 pas jeter 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 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 le service 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. SCIEX pourrait ne pas couvrir les dommages causés à un système sous garantie s'il est entretenu par un personnel non agréé par SCIEX.

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 environnementales sécurisées

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

- À l'intérieur
- Altitude : jusqu'à 2 000 m (6 560 pieds) au-dessus du niveau de la mer
- Température ambiante : entre 5 °C (41 °F) et 40 °C (104 °F)
- Humidité relative : entre 20 % et 80 %, sans condensation.
- 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 2

Spécifications des performances

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

- Température ambiante de 18 °C à 26 °C (64 °F à 79 °F)

Au fil du temps, la température doit rester comprise dans une plage de 2 °C (3.6 °F), 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 écarts de masse dans le spectre.

- Humidité relative de 20 à 80 %, sans condensation

Utilisation et modification de l'appareil



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

Précautions et limites de fonctionnement



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. Ne pas retirer 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. Contacter un technicien de service (FSE) SCIEX pour exécuter les réparations qui nécessitent de retirer les capots.



AVERTISSEMENT ! Risque de blessure corporelle. Utiliser 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.



AVERTISSEMENT ! Risque lié au levage. Utilisez un appareil de levage mécanique pour soulever et déplacer le spectromètre de masse. Respectez les procédures de levage sécurisé en vigueur. Nous vous recommandons d'utiliser un service de déménagement professionnel. Pour les poids des composants du système, consultez le *Guide d'aménagement sur site*.



AVERTISSEMENT ! Risque d'écrasement. Portez des chaussures de protection lorsque vous déplacez des objets lourds.

Utilisez le système à l'intérieur dans un laboratoire conforme aux conditions environnementales recommandées dans le document *Guide de planification du site* du spectromètre de masse.

Si le système est utilisé dans un environnement ou d'une manière non prévu(e) par le fabricant, les performances et la protection fournies par l'équipement peuvent être compromises.

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

Le système est conçu pour l'analyse qualitative et quantitative d'espèces chimiques.

Cette section comporte des informations sur le spectromètre de masse. Pour une présentation de la source d'ions, consultez le document : *Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray*.

Pour plus d'informations sur l'ordinateur et le logiciel, consultez le document : *Guide d'installation du logiciel* pour le logiciel.

Présentation du système

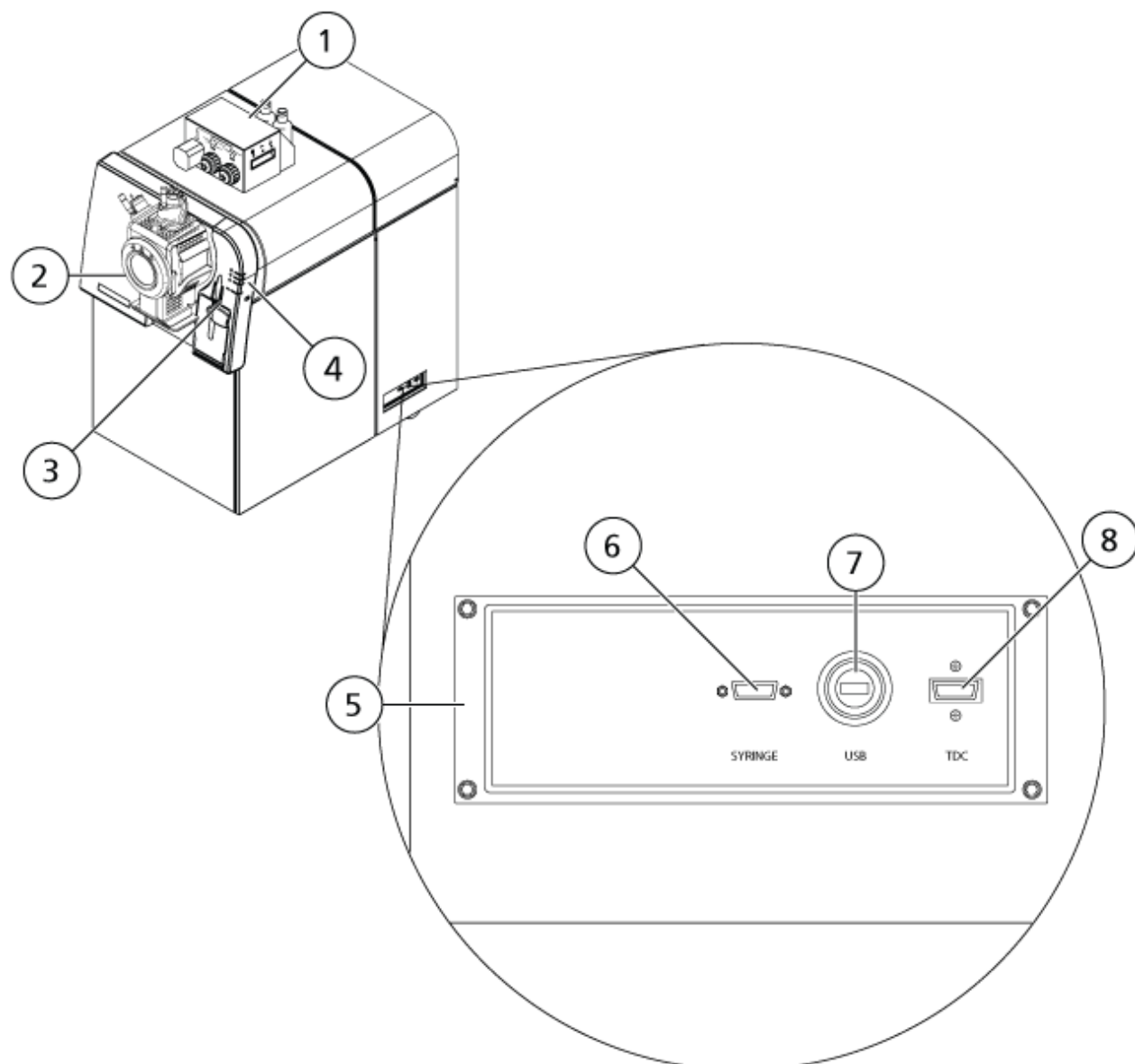
Le système TripleTOF 5600/5600+ comporte les composants suivants :

- Un spectromètre de masse TripleTOF 5600/5600+ avec une pompe primaire.
- Une source d'ions DuoSpray. Consultez le document : *Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray*.
- Un ordinateur et un écran fournis par SCIEX avec le logiciel Analyst TF. Pour obtenir les caractéristiques techniques et les exigences relatives à l'ordinateur, consultez le document : *Guide d'installation du logiciel* pour le logiciel Analyst TF.
- Le système d'administration de solution d'étalonnage (CDS) en option

Présentation du matériel

Les [Illustration 2-1](#) et [Illustration 2-2](#) affichent les composants du spectromètre de masse et ses connexions.

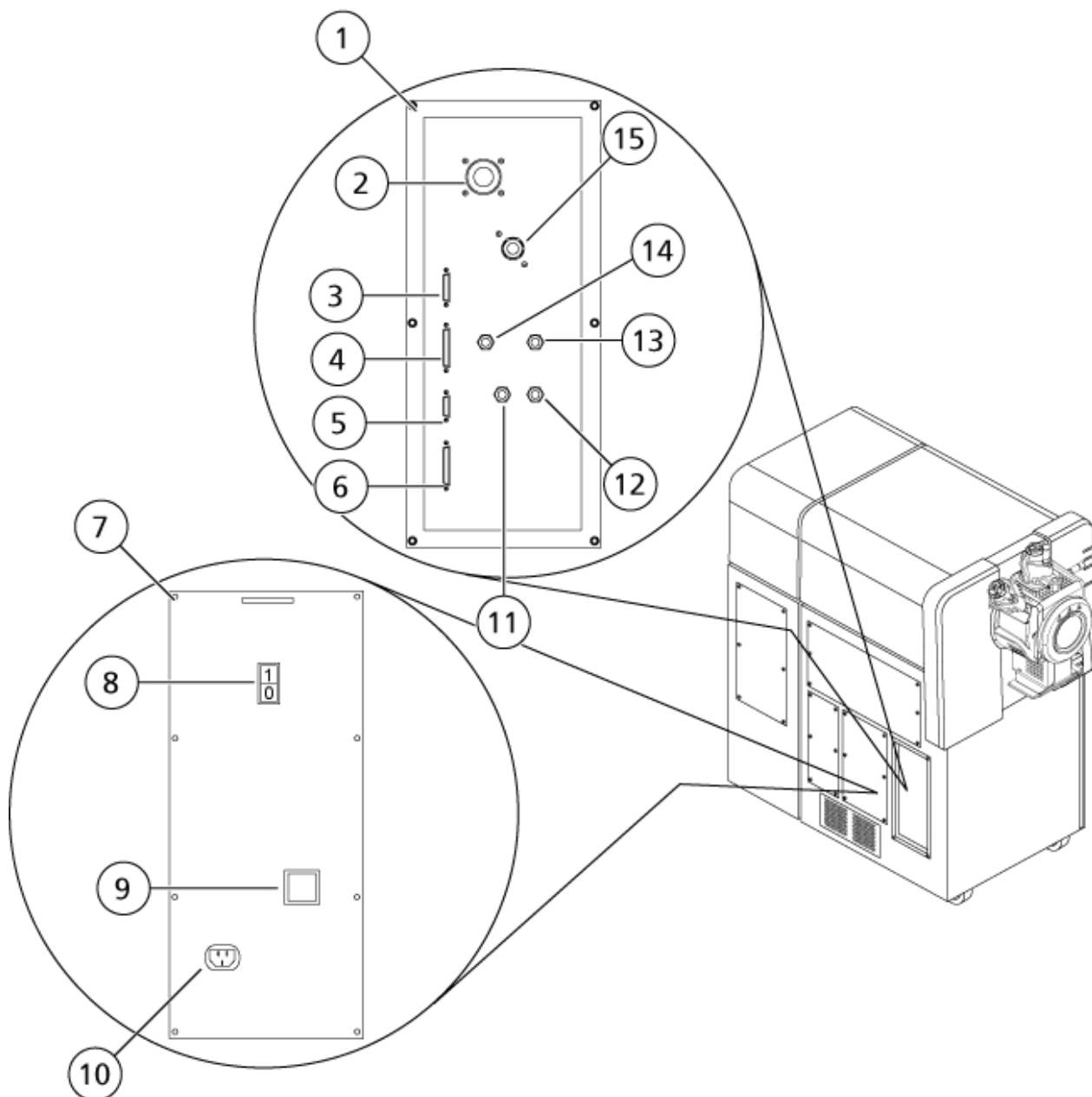
Illustration 2-1 : Vue avant et latérale droite



Numéro	Description	Pour plus d'informations...
1	CDS facultatif	Consultez le <i>Guide de l'opérateur du système d'administration de la solution d'étalonnage</i> .
2	Source d'ions DuoSpray	Voir le <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray pour systèmes TripleTOF</i> .
3	Pompe à seringue	Voir Régler la position de la pompe à seringue intégrée .

Numéro	Description	Pour plus d'informations...
4	LED (diodes électroluminescentes) d'état du spectromètre de masse	Voir Symboles du panneau .
5	Cloisons de communications	Contactez un technicien de service SCIEX.
6	Câble de connexion de série (RS-232) pour la pompe à seringue	Contactez un technicien de service.
7	Câble de connexion USB pour la carte USB-GPIB	Contactez un technicien de service.
8	Câble de connexion InfiniBand pour la carte TDC	Contactez un technicien de service.

Illustration 2-2 : Affichage du côté gauche



Numéro	Description	Pour plus d'informations...
1	Cloison de gaz et de dépression	Contactez un technicien de service.
2	Connexion de la dépression de la pompe primaire	Contactez un technicien de service.
3	Connexion de contrôle d'étalonnage	Consultez le <i>Guide de l'opérateur du système d'administration de la solution d'étalonnage</i> .

Numéro	Description	Pour plus d'informations...
4	Connexion auxiliaire IO Le signal de démarrage facultatif du système LC se connecte à ce port.	Contactez un technicien de service.
5	Connexion de contrôle externe. Ce port est conçu pour une utilisation ultérieure.	Contactez un technicien de service.
6	Connexion des sources. Quelques sources d'ions se connectent à ce port.	Contactez un technicien de service.
7	Panneau de distribution de l'alimentation.	Contactez un technicien de service.
8	Commutateur de l'appareil.	Voir Démarrer le système .
9	Couverture du disjoncteur.	Voir Démarrer le système . Utilisez le commutateur plutôt que le disjoncteur pour désactiver le système.
10	Branchement de l'alimentation principale	Voir Démarrer le système .
11	Connexion d'alimentation du Curtain Gas (azote)	Contactez un technicien de service.
12	Connexion d'alimentation des Gaz 1 et Gaz 2 (zéro).	Contactez un technicien de service.
13	Connexion d'alimentation du gaz d'évacuation de la source (air grade zero ou azote).	Contactez un technicien de service.
14	Connexion d'alimentation du gaz CAD (azote).	Contactez un technicien de service.
15	Connexion des déchets d'évacuation de la source.	Contactez un technicien de service.

Symboles du panneau

Le tableau suivant décrit les voyants d'état du spectromètre de masse.

Tableau 2-1 : Symboles du panneau

LED	Couleur	Nom	Description
	Vert	Puissance	Allumée lorsque le système est sous tension.

Tableau 2-1 : Symboles du panneau (suite)

LED	Couleur	Nom	Description
	Vert	Dépression	Allumée lorsque le niveau de vide de fonctionnement a été atteint. Clignote si le vide n'est pas au niveau correct (pendant l'arrêt et la ventilation de la pompe).
	Vert	Prêt	Allumée lorsque le système est sur Ready. Le système doit être à l'état Ready pour fonctionner.
	Rouge	Défaillance	Allumée lorsque le système détecte une défaillance du système.

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 de fonctionnement est atteint, ce voyant reste allumé.

Principes de fonctionnement

Le Spectromètre de masse mesure le rapport masse/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 5600/5600+ dispose d'une série de filtres quadripôles qui sélectionnent ou transmettent des ions en fonction de leur rapport masse/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.
- 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 permet de déterminer la composition des

ions parents 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 successivement en fonction de leur rapport m/z . Dans le détecteur, les ions créent un courant qui est converti en une impulsion de tension. Les impulsions de tension 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.

Manipulation des données

Le logiciel Analyst TF nécessite un ordinateur fonctionnant avec le système d'exploitation Windows 7 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 Analyst TF pour être affichées sous forme de spectres de masse complets, de chromatogramme d'ions, de spectres d'ions ou de courant ionique total par rapport au temps.



AVERTISSEMENT ! Risque de blessure corporelle. Suivre 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. Vérifier que le système peut être débranché de la prise d'alimentation secteur en cas d'urgence. Ne pas bloquer la prise de l'alimentation secteur.



AVERTISSEMENT ! Risque lié au levage. Ne déplacez pas le système sans consulter d'abord un technicien de service. Risque de blessure ou de dommage sur le système. Si le système doit être déplacé, contactez un technicien de service.

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

Conditions préalables

- Les exigences spécifiées dans le *Guide de planification du 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 SCIEX 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 raccordements 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 200 à 240 V c.a.
- Le câble Ethernet est connecté à la fois au spectromètre de masse et à l'ordinateur.

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 [Illustration 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 [Illustration 2-2](#).
5. Allumez l'ordinateur.
6. Ouvrez le logiciel de contrôle.

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.

Instructions d'utilisation

Conseil ! Si le spectromètre de masse n'est pas utilisé pendant un certain temps, laissez-le en veille avec la source d'ions en place. Si le spectromètre de masse doit être éteint, suivez alors ces instructions.

1. Terminez ou interrompez tous les examens en cours.

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

2. Arrêtez le débit de l'échantillon vers le système.
3. Dans le logiciel Analyst TF désactivez le profil du matériel, 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 : Laissez la source d'ions installée pour assurer un bon refroidissement.

- a. Mettez la pompe primaire hors tension.
 - b. Attendez que le système ventile. Cela prend de 15 à 25 minutes.
7. Retirez le capot de l'interrupteur du disjoncteur sur le côté gauche du spectromètre de masse puis désactivez le disjoncteur. Voir [Illustration 2-2](#).
 8. Installez le capot de l'interrupteur du disjoncteur et serrez à fond la vis de fixation de 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



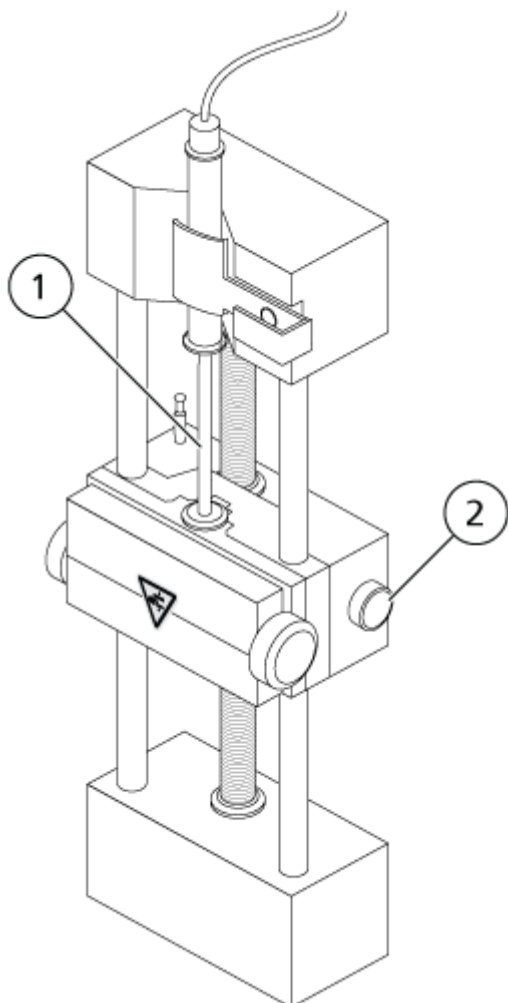
AVERTISSEMENT ! Risque de perforation. Prendre des précautions lors de la manipulation de la seringue. La pointe de la seringue est extrêmement acérée.



AVERTISSEMENT ! Risque de perforation. S'assurer 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, suivre les procédures de sécurité établies pour la mise au rebut des objets tranchants.

Pour connaître l'emplacement de la pompe à seringue sur le spectromètre de masse, reportez-vous à la figure: [Illustration 2-1](#).

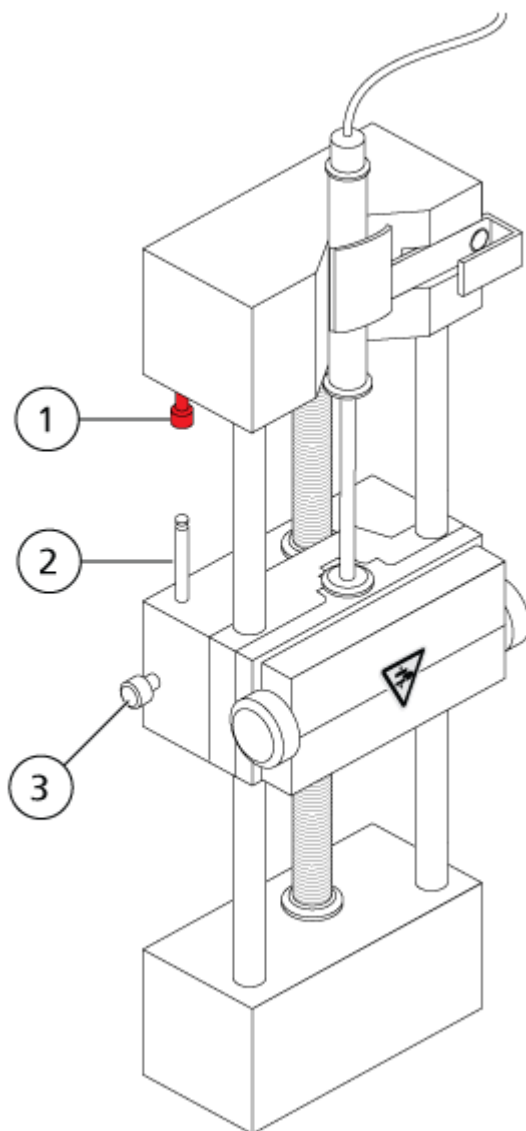
1. Appuyez sur le bouton Release sur le côté droit de la pompe à seringue pour abaisser la base et insérer la seringue.

Illustration 3-1 : Descente de la seringue

Élément	Description
1	Piston de la seringue
2	Relâcher le bouton. 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.

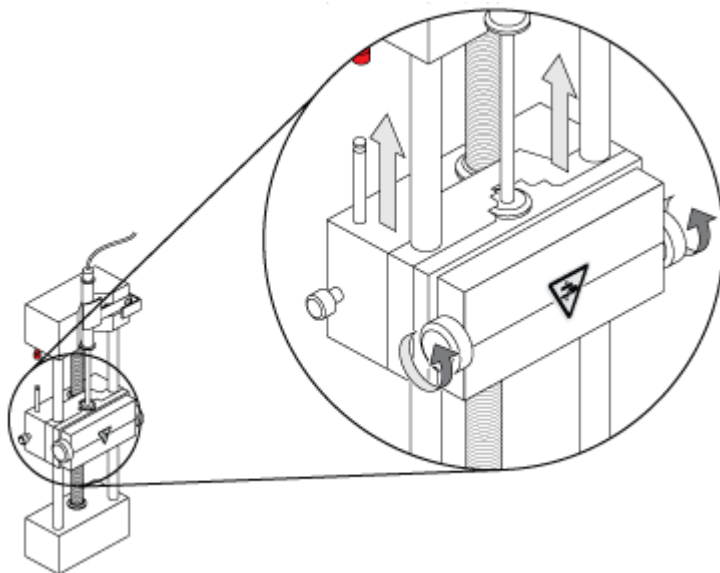
Illustration 3-2 : Arrêt automatique de la seringue



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

4. Tourner les vis de la pompe à seringue pour mettre la seringue en sécurité.

Illustration 3-3 : Vis de la pompe à seringue



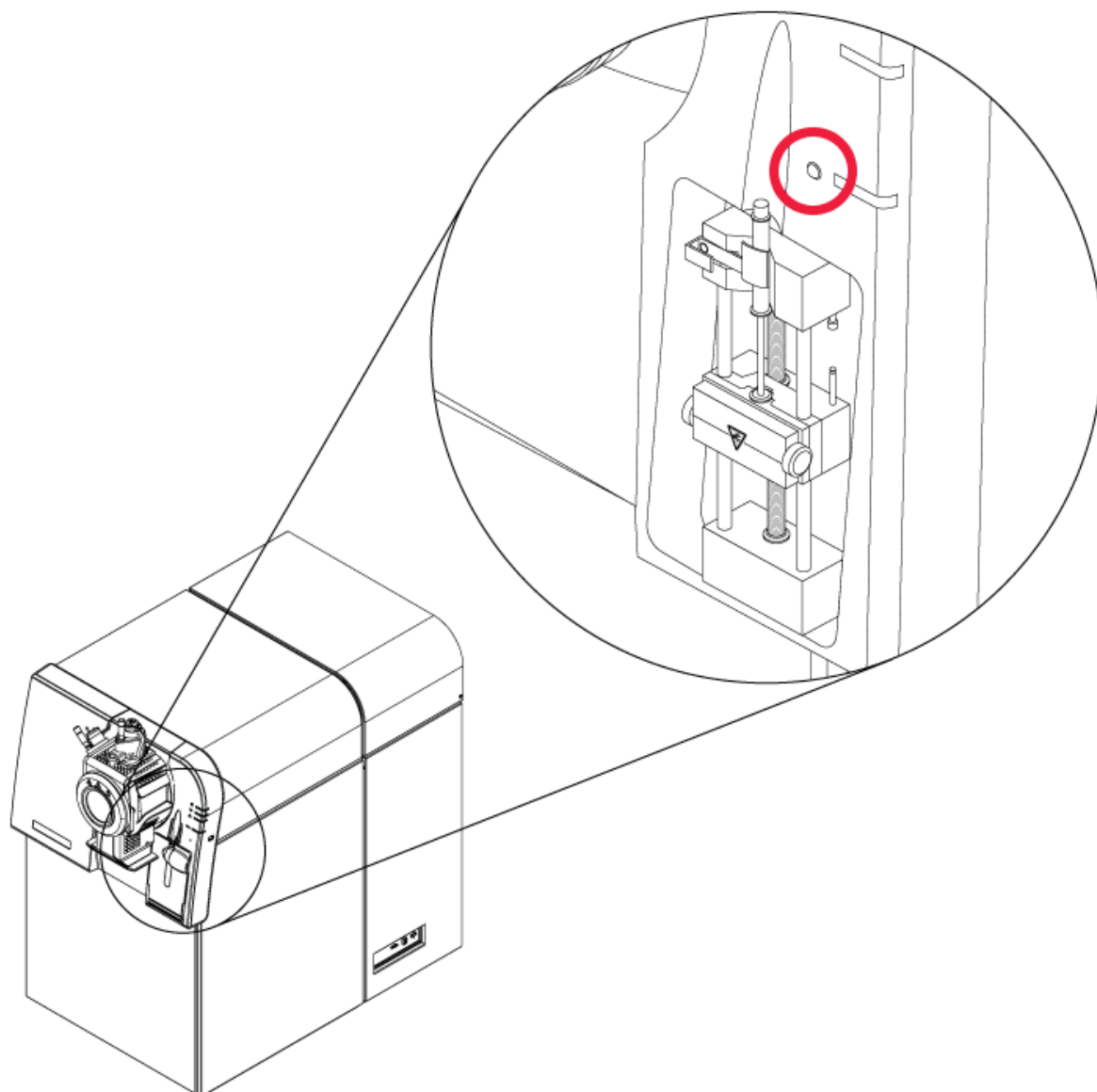
5. Assurez-vous que le spectromètre de masse et la pompe à seringue intégrée sont activés dans le logiciel.
6. Dans le logiciel Analyst TF , sur la barre de navigation bar, double-cliquez sur **Manual Tuning**.
7. Cliquez sur **Start Syringe**.
8. Pour arrêter la pompe à seringue, cliquez sur **Stop Syringe**.

Réinitialiser la pompe à seringue

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

Utilisez un trombone ou un outil similaire pour appuyer sur le bouton de réinitialisation illustré dans la [Illustration 3-4](#).

Illustration 3-4 : Bouton de réinitialisation



Instructions d'utilisation : flux de travail des échantillons

4

Tableau 4-1 : Configuration de l'instrument

Étape	Pour faire ceci...	Chercher l'information dans...	Qu'est ce que cela fait ?
1	Créer un profil de matériel.	Créer un profil de matériel	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	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	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 faire ceci...	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	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	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	Créez et soumettez un lot.	Ajouter des ensembles et des échantillons à un lot et Soumettre un échantillon ou un groupe d'échantillons	Après avoir créé une méthode d'acquisition, traitez 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 faire ceci...	Chercher l'information dans...	Qu'est ce que cela fait ?
4	Traiter les échantillons pour acquérir des données.	Acquérir les données	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. —OU—	Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des données	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.

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

Étape	Pour faire ceci...	Chercher l'information dans...	Qu'est ce que cela fait ?
6	Analyser les données et imprimer les rapports à l'aide du logiciel Companion.	MultiQuant/PeakView	Utiliser les logiciels MultiQuant ou PeakView pour analyser les données. Pour de plus amples informations, reportez-vous à la documentation fournie avec le logiciel.

Tableau 4-3 : Flux de travaux de l'utilisateur expérimenté

Étape	Pour faire ceci...	Chercher l'information dans...
1	Procéder à l'étalonnage de masse de l'instrument.	Didacticiel de l'étalonnage de la masse : - Sur les systèmes d'exploitation Windows 7 : cliquez sur Start > All Program > SCIEX > Analyst TF > Software Guides. - Sur les systèmes d'exploitation Windows 10 : cliquez sur Start > SCIEX Analyst TF > Analyst TF Documentation, puis double-cliquez sur le dossier Software Guides.
2	Optimisez le spectromètre de masse.	Didacticiel de l'optimisation manuelle : - Sur les systèmes d'exploitation Windows 7 : cliquez sur Start > All Program > SCIEX > Analyst TF > Software Guides. - Sur les systèmes d'exploitation Windows 10 : cliquez sur Start > SCIEX Analyst TF > Analyst TF Documentation, puis double-cliquez sur le dossier Software Guides.

Instructions d'utilisation : Profils des matériels et projets

5

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 configurés, 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 :

- Réaliser les connexions physiques. Pour plus d'informations sur la réalisation des connexions physiques aux périphériques, consultez le document : *Guide d'installation des périphériques*.
- Configuration du logiciel pour communiquer avec les périphériques. Pour obtenir la liste des périphériques pris en charge, consultez le document : *Guide d'installation du logiciel* pour le logiciel Analyst TF.

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.

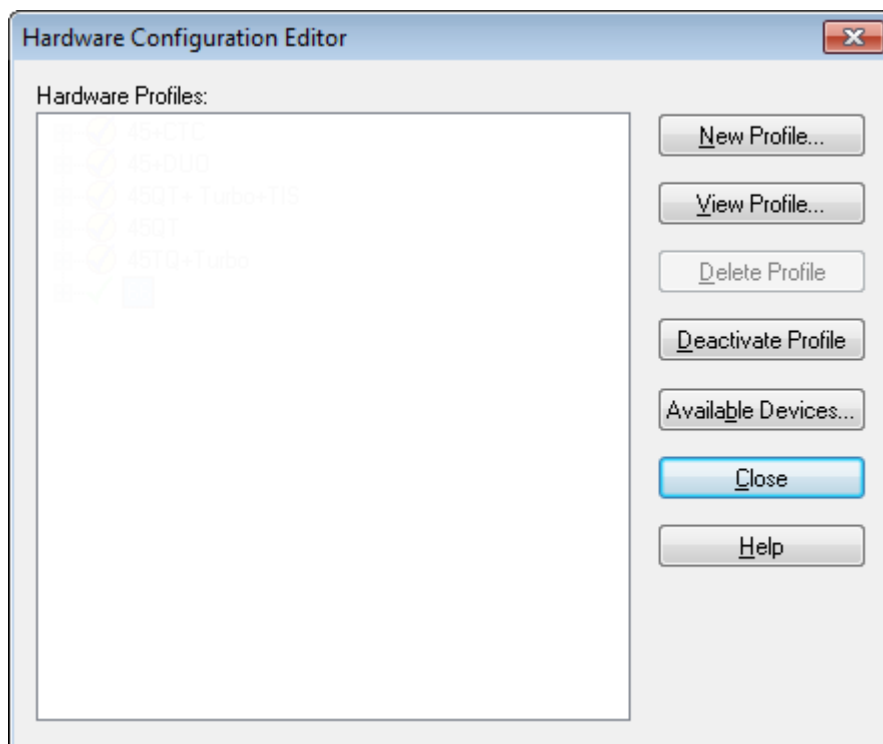
Chaque profil d'équipement doit inclure un spectromètre de masse. Avant de créer une méthode d'acquisition, assurez-vous que tous les périphériques à utiliser dans la méthode sont inclus dans le profil de matériel, y compris la pompe à seringue. Seuls les périphériques configurés dans le profil matériel 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 dans les méthodes d'acquisition.

Créer un profil de matériel

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

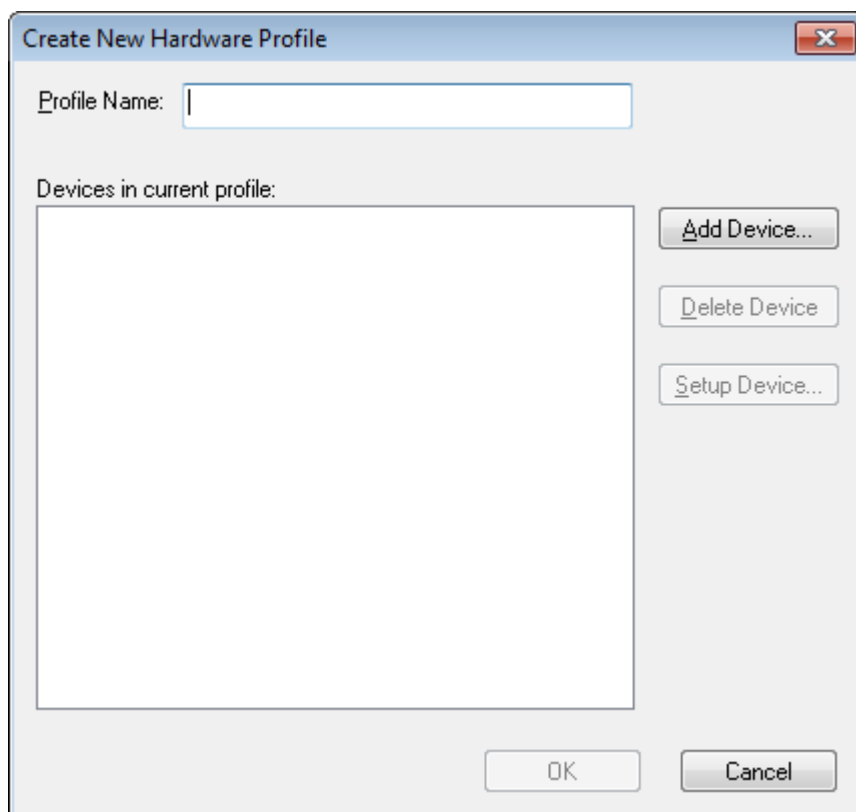
1. Dans la barre de navigation, sous **Configure**, double-cliquez sur **Hardware Configuration**.

Illustration 5-1 : Boîte de dialogue Hardware Configuration Editor (Éditeur de configuration du matériel)



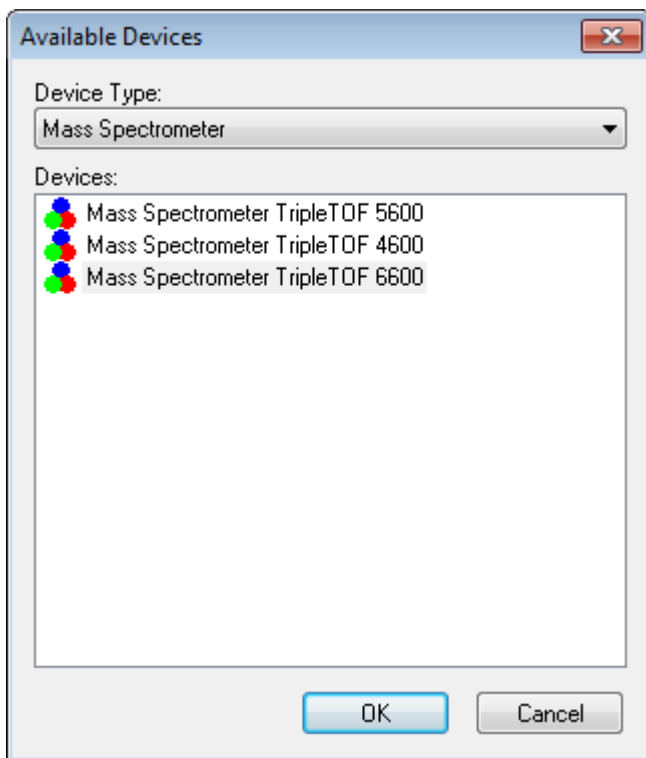
2. Cliquez sur **New Profile**.

Illustration 5-2 : Boîte de dialogue Create New Hardware Profile



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

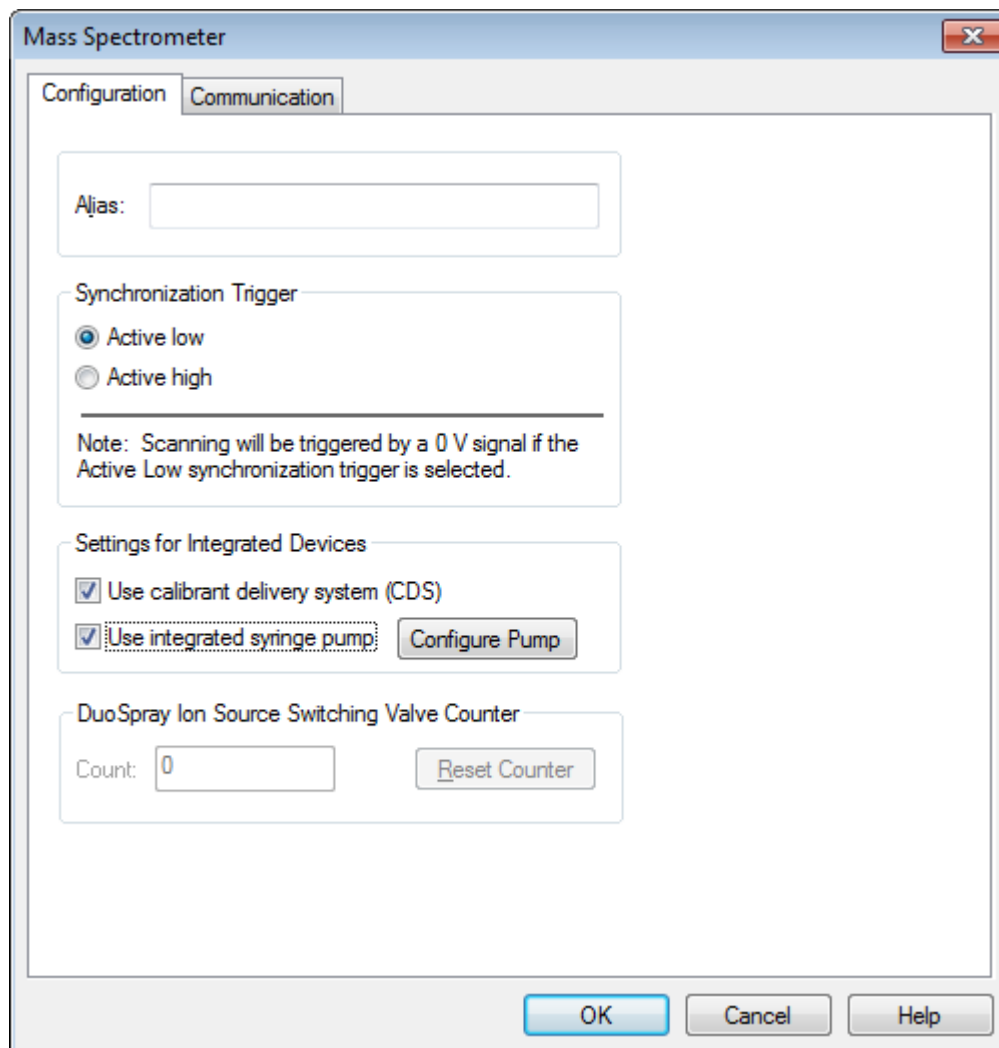
Illustration 5-3 : Boîte de dialogue Available Devices



Dans la boîte de dialogue Available Devices, **Mass Spectrometer** est la valeur par défaut pour le champ **Device Type**.

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

Illustration 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)**.
9. (Facultatif) Si nécessaire, sélectionnez des fonctions supplémentaires dans les onglets Configuration et Communication.
10. Cliquez sur **OK**.
11. Dans la boîte de dialogue Create New Hardware Profile, cliquez sur **Add Device** puis ajoutez et configurez chaque périphérique qui est utilisé avec le spectromètre de masse. Consultez la section [Ajouter des périphériques à un profil de matériel](#).
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 coche devient verte. Si un × rouge s'affiche, alors il y a un problème avec l'activation du profil de 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**. Le profil actif est automatiquement désactivé.

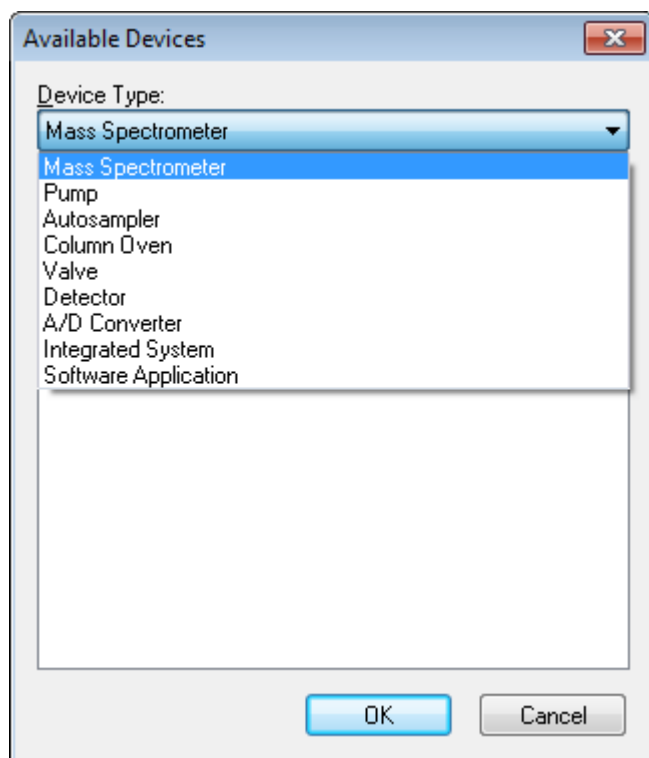
15. Cliquez sur **Close**.

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. Les périphériques doivent être connectés physiquement à l'ordinateur avant de pouvoir être configurés. Pour plus d'informations, reportez-vous au document : *Guide de configuration des périphériques*.

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

Illustration 5-5 : Boîte de dialogue Available Devices



6. Cliquez sur **OK**.

7. Sélectionnez le périphérique dans la liste **Devices**, puis cliquez sur **OK**.
8. Cliquez sur **Setup Device**.
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 la configuration, cliquez sur **OK**.
12. Répéter étape 4 après étape 11 pour chaque périphérique.
13. Cliquez sur **OK** dans la boîte de dialogue Create New Hardware Profile.
14. Pour activer le profil matériel, procédez de la manière suivante :
 - a. Dans Hardware Configuration Editor (Éditeur de configuration du d'équipement), cliquez sur profil d'équipement.
 - b. Cliquez sur **Activate Profile**.

La coche devient verte. Si un × rouge s'affiche, alors il y a un problème avec l'activation du profil de matériel. Pour plus d'informations, consultez la section : [Dépannage des problèmes liés à l'activation du profil de matériel](#).

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

15. 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 apparaît pour indiquer quel appareil du profil n'a pas été activé. 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. Vérifiez que le périphérique est connecté au secteur et sous tension.
3. Vérifiez que le port COM affecté au périphérique est correct.
4. Vérifiez que les paramètres de communication pour le périphérique, par exemple les réglages du micro-interrupteur, sont définis correctement et correspondent aux paramètres de l'onglet Communication.
5. Mettez le périphérique hors tension.
6. Attendez 10 secondes.
7. Mettez le périphérique sous tension.
Attendez que toutes les activités de mise sous tension des périphériques soient terminées avant d'essayer d'activer le nouveau profil matériel. Certains périphériques nécessitent 30 secondes ou plus pour réaliser les opérations de mise sous tension.
8. Activez le profil de matériel.
9. Si le problème persiste, supprimez le profil qui pose problème, puis créez-en un nouveau.
10. Si le problème persiste, passez à sciex.com/request-support.

Projets et sous-projets

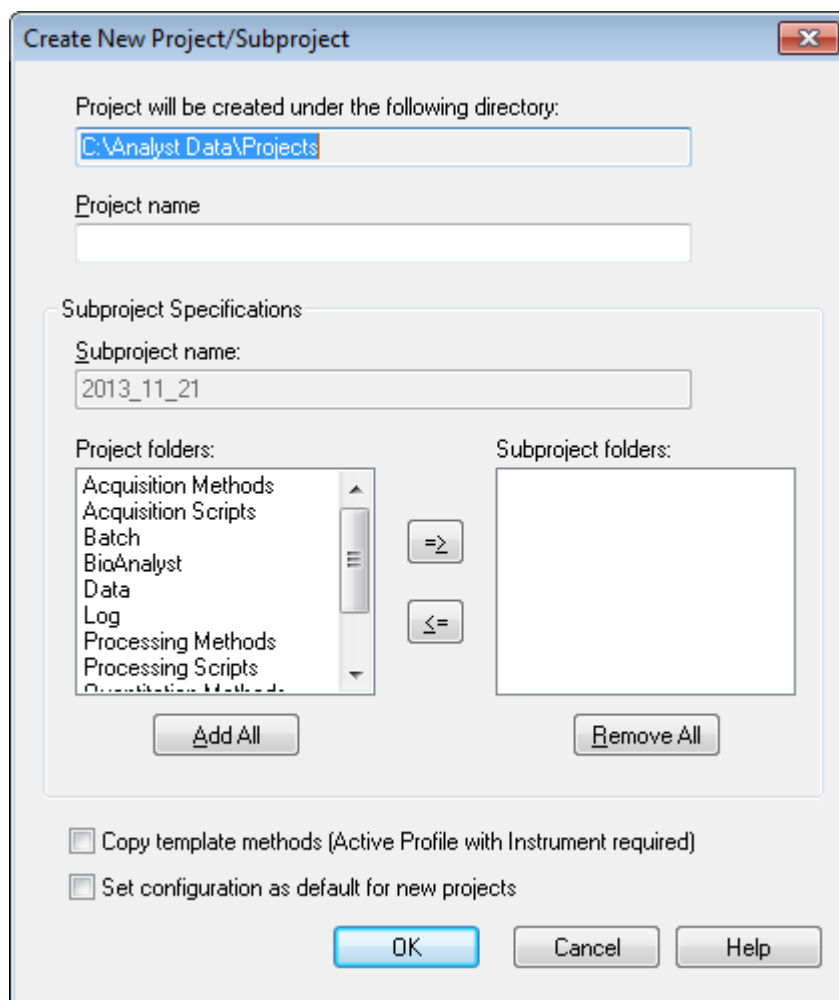
Avant de commencer une expérience, décidez de l'emplacement où stocker les fichiers liés à l'expérience. Utilisez des projets et sous-projets pour chaque expérience pour mieux gérer les données et comparer les résultats. Par exemple, utilisez des sous-projets pour stocker les résultats obtenus à certaines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

Créer des projets et des sous-projets

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

1. Cliquez sur **Tools > Project > Create Project..**

Illustration 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) Procédez de la manière suivante pour utiliser les sous-projets :
 - a. Sélectionnez les dossiers concernés puis utilisez les boutons fléchés pour les déplacer dans la liste **Subproject folders**.
 - b. Dans le champ **Subproject name**, saisissez un nom pour le premier sous-projet ou utilisez la date existante.
4. (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.
5. 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

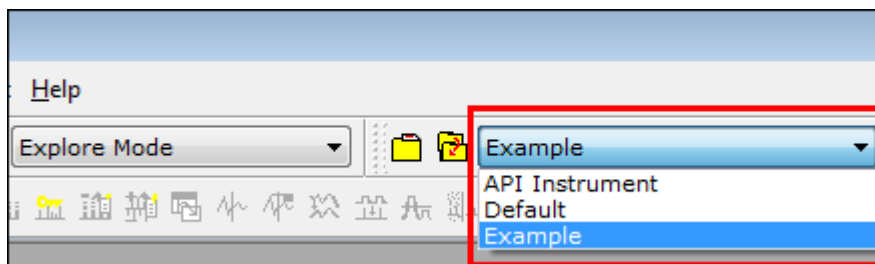
Un sous-projet peut être copié à partir d'un autre projet ayant des sous-projets existants. Si les sous-projets copiés contiennent des dossiers qui existent aussi dans le dossier du projet de destination, alors le logiciel utilise les dossiers au niveau du projet.

1. Cliquez sur **Tools > Project > Copy Subproject**.
La boîte de dialogue Copy Subproject apparaît.
2. Cliquez sur **Browse** pour naviguer jusqu'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 naviguer jusqu'à la destination du sous-projet.
6. Tapez le nom dans le champ **Target Subproject**.
7. Cliquez sur **OK**.
8. Effectuez 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**, assurez-vous que la case **Copy Contents** ne soit pas cochée.
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.

Illustration 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. Ces informations incluent :

- Fichiers de paramètres
- Fichiers de références
- Fichiers de données des instruments contenant des informations sur l'étalonnage et sur la résolution
- Méthodes d'acquisition utilisées pendant l'ajustement automatique

Le dossier API Instrument contient également des fichiers de données pour les ajustements manuels réalisés avec le bouton **Start** plutôt qu'avec le bouton **Acquire**. Ces fichiers de données sont automatiquement enregistrés dans le dossier `API Instrument\Tuning Cache` et nommés par la date et l'heure auxquelles 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 à un autre emplacement, de préférence sur un autre ordinateur, puis renommez-le. Utilisez la date et une référence à un spectromètre de masse pour donner un nom au dossier, s'il y a plusieurs spectromètres de masse. Par exemple, `API Instrument_QT6500plus3_010121`

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`.

Instructions d'utilisation – Réglage et calibration

6

Exécutez l'option **Verify Performance Only** à tout moment. Mais, ne réglez l'instrument que si vous constatez une perte de sensibilité ou de résolution. Pour plus d'informations sur le réglage et l'étalonnage, consultez le *Guide de l'utilisateur avancé*.

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 de réglage.
- 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 pulvérisation 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.
- Seringue étanche au gaz (1 ml recommandé)
- Tube d'échantillonnage PEEK rouge.
- (Facultatif) Pompe à seringue, si vous utilisez un système sans pompe à seringue intégrée.

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**, double-cliquez sur **Instrument Optimization**.
La boîte de dialogue Instrument Optimization 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 : Vérifiez que la position correcte de la vanne de la solution d'étalonnage est sélectionnée dans Reference Table Editor pour le tableau de référence choisi. Le CDS peut sélectionner jusqu'à quatre types de position, de A à D.

7. Cliquez sur **GO**.
L'écran **Verifying or Adjusting Performance** apparaît. Une fois le processus terminé, l'écran **Results Summary** s'ouvre. Pour plus d'informations, consultez l'aide.

Boîte de dialogue Verifying or Adjusting Performance

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

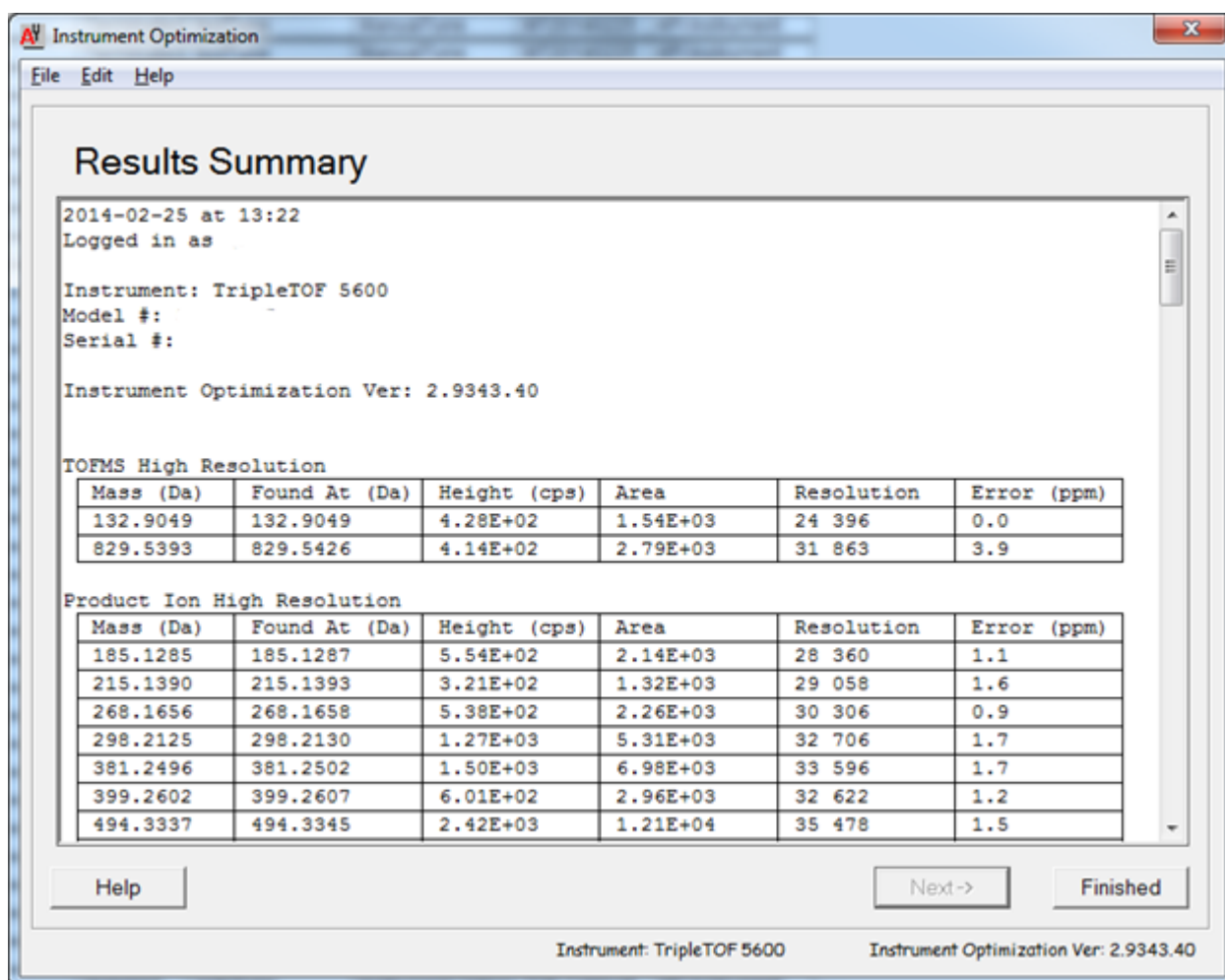
Le graphique Current Spectrum affiche le spectre du balayage en cours, le balayage optimal sélectionné par le logiciel ou le balayage à la valeur de paramètre actuelle quand les résultats du logiciel sont visualisés en mode interactif.

Instrument Optimization Decision Plots, en haut à droite du graphique, affiche dynamiquement les courbes intensité sur 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.

Illustration 6-1 : Récapitulatif des résultats : système TripleTOF 5600



Le récapitulatif des résultats est enregistré automatiquement à l'emplacement suivant: <drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Data\Instrument Optimization\yyyy-mm-dd\results.pdf, où *aaaa-mm-jj* est 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 le spectromètre de masse et tout périphérique dans le profil de matériel actif.

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 fonctionnalité d'acquisition SWATH, disponible à la fois dans le Method Wizard et dans l'Acquisition Method Editor pour créer des méthodes d'acquisition SWATH. 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 TF 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. Pour plus d'informations sur les rôles et la sécurité, consultez le document : *Guide du directeur de laboratoire*.

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 document : *Guide d'installation des périphériques*.

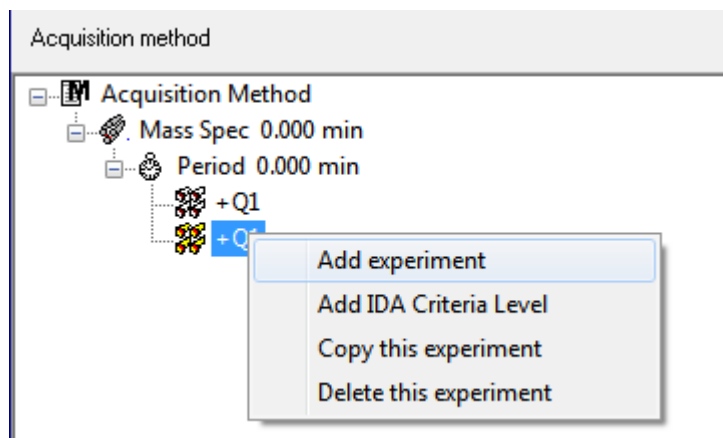
1. Vérifiez que le profil d'équipement contenant le spectromètre de masse et les périphériques sont activés.
2. Dans la barre de navigation, sous **Acquire**, double-cliquez sur **Build Acquisition Method**.
3. Sélectionnez un **Synchronization Mode** sous l'onglet Acquisition Method Properties.

4. (Facultatif) Cochez la case **Auto-Equilibrage**, puis entrez le temps d'équilibrage requis, en minutes.
5. Dans le volet Acquisition Method, cliquez sur l'icône **Mass Spec**.
6. Sous l'onglet MS, sélectionnez un **Scan type**.
7. Saisissez des valeurs dans les autres champs selon les besoins.
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. Sous l'onglet Compound, spécifiez des valeurs dans les champs selon les besoins.
12. Cliquez sur **OK**.
13. Cliquez sur l'icône d'un périphérique, puis sélectionnez les paramètres pour ce périphérique.
14. Ajoutez d'autres périodes et expériences. Consultez les sections : [Ajouter une expérience](#) et [Ajouter une période](#).
15. 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**.

Illustration 7-1 : Add Experiment



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. Sous 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. Ouvrez 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

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

Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'expérience, puis cliquez sur **Copy this experiment**.

Une copie de l'expérience est ajoutée en dessous de la dernière expérience créée.

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).
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

Vous trouverez une description des modes dans lesquels des données spectrales peuvent être acquises dans le tableau : [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
Profile	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).
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 MS

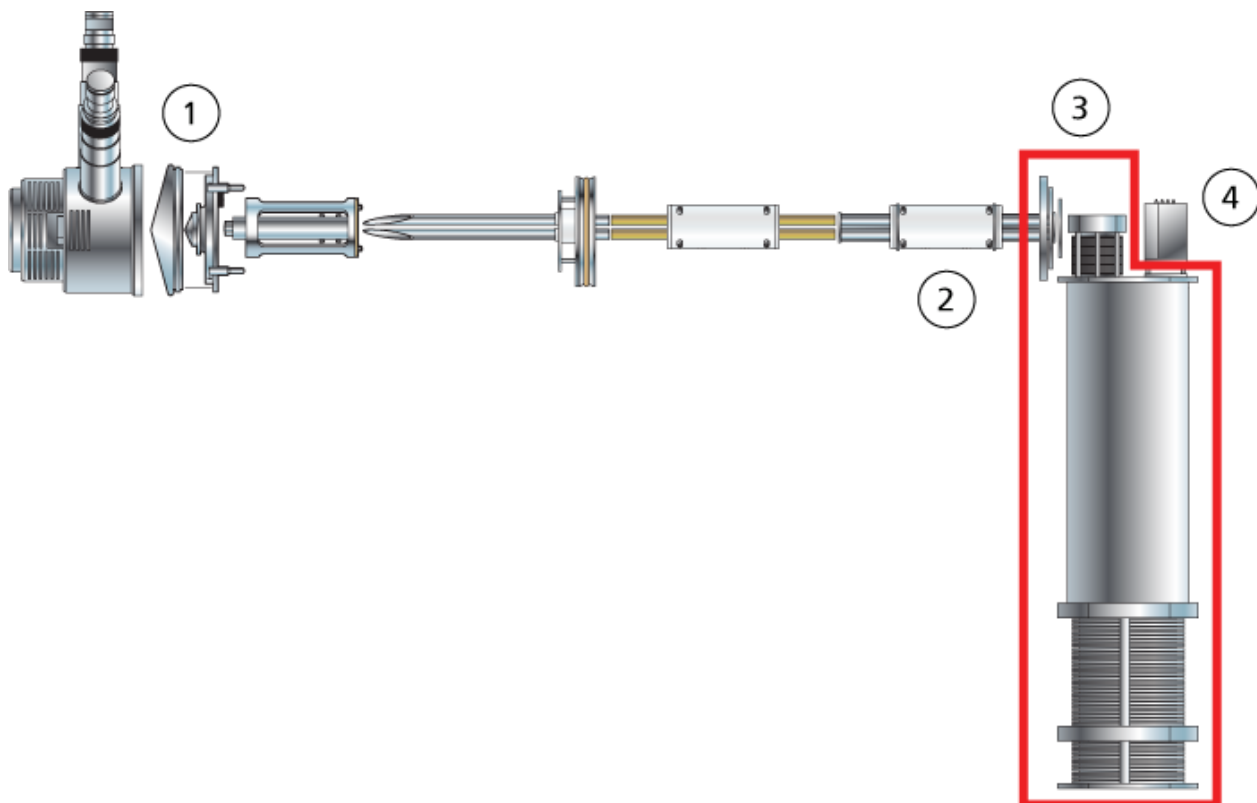
Les paramètres de fonctionnement sont les réglages des paramètres du spectromètre de masse (SM) en cours d'utilisation.

Les paramètres des composés et les paramètres de source et de gaz sont conservés avec la méthode. Les paramètres de résolution et de détecteur dépendent du spectromètre de masse. Ils sont conservés comme données de l'instrument. Si le mode Tune and Calibrate est utilisé pour créer une méthode, les paramètres de travail peuvent être optimisés pour obtenir les meilleures performances de l'instrument. Il est également possible d'incrémenter chaque paramètre, à tour de rôle, tout en relançant l'expérience.

- 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.

Les paramètres dans le tableau sont applicables à la source d'ions fournie avec le système. Pour obtenir des informations sur les autres sources d'ions, voir le *Guide de l'opérateur* fourni avec la source d'ions. La figure suivante montre l'emplacement des paramètres sur le passage de l'optique ionique.

Illustration 7-2 : Trajet optique des ions et paramètres



Emplacement	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type de balayage
1	Ion Spray 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	Ion Source Gas 1 (GS1)	Source et gaz	Le paramètre GS1 contrôle le gaz nébuliseur pour la sonde ESI.	Tous
1	Ion Source Gas 2 (GS2)	Source et gaz	Le paramètre GS 2 règle le gaz chauffant pour la sonde ESI et le gaz nébuliseur pour la sonde APCI.	Tous
1	Température (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

Emplacement	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type de balayage
1	Curtain gas (CUR)	Source et gaz	Le paramètre CUR contrôle le débit du gaz pour l'interface Curtain Gas. Le flux 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 permet de 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
2	CAD Gas	Source et gaz	Le paramètre CAD règle la pression du gaz CAD dans la cellule de collision. Le gaz de collision permet de concentrer les ions lors de leur passage dans la cellule de collision ; le pré réglage pour le paramètre CAD est en mode fixe. Pour les types de balayage MS/MS, le gaz CAD permet de fragmenter les ions précurseurs. Lorsque les ions précurseurs entrent en collision avec le gaz, ils se dissocient pour former des ions produits. Utilisez la valeur prédéfinie et optimisez pour le composé.	Tous

Emplacement	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type de balayage
2	Collision Energy (CE)	Composé	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. Utilisez la valeur prédéfinie et optimisez pour le composé.	TOF MS, TOF MS/MS
2	Collision Energy Spread (CES)	Composé	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 Product Ion 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. Utilisez la valeur prédéfinie et optimisez pour le composé.	TOF MS/MS

Emplacement	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type de balayage
3	Délai de libération des ions (IRD)	Composé	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. 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.	MS/MS uniquement, Enhanced (Amélioré)
3	Largeur de libération des ions (IRW)	Composé	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. 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.	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 système LC raccordé au spectromètre de masse n'est pas contrôlé par le logiciel, ne laissez pas le spectromètre de masse sans surveillance pendant son fonctionnement. Le flux liquide provenant du système LC peut déborder dans la source d'ions lorsque le spectromètre de masse passe à l'état de veille.

Un lot est un ensemble d'informations sur les échantillons à analyser. En général, les échantillons sont regroupés en lots pour simplifier l'envoi. Le regroupement des échantillons dans un ensemble réduit également la quantité de données qui doivent être inscrites manuellement. Un ensemble peut être constitué d'un ou de plusieurs échantillons. Tous les ensembles d'un lot utilisent le même profil matériel. Cependant, les échantillons d'un ensemble peuvent avoir des méthodes d'acquisition différentes. Un lot ne peut être envoyé que depuis un ordinateur d'acquisition.

Les lots incluent les informations suivantes :

- des informations sur l'échantillon comme le nom, l'ID et des commentaires
- des informations sur le carrousel de l'auto-échantillonneur, la position des flacons et le volume d'injection
- les méthodes d'acquisition
- les méthodes de traitement ou le script de traitement (facultatif)
- Informations de quantification (facultatif)
- Données personnalisées sur l'échantillon (facultatif)
- des informations sur l'ensemble

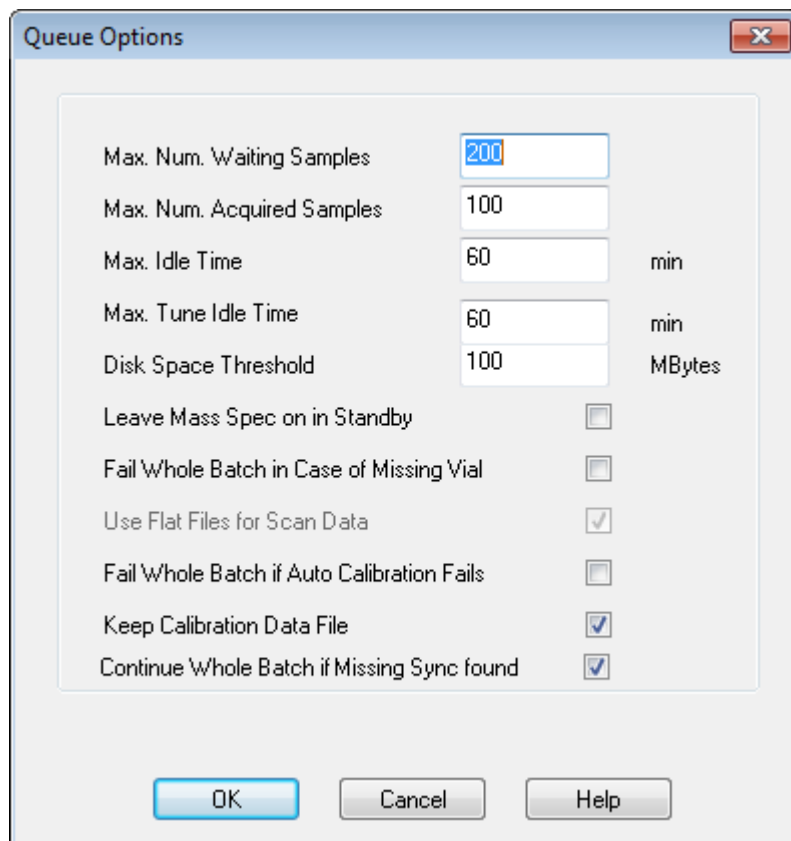
Régler les options de file d'attente

Le logiciel passe un par un sur les différents éléments de la liste d'échantillons dans la file d'attente et acquiert chaque échantillon avec la méthode d'acquisition sélectionnée. Une fois tous les échantillons acquis, l'acquisition s'arrête et le spectromètre de masse passe en veille une fois que le **Max. Idle Time** défini dans les options de file d'attente est écoulé. En veille, les pompes LC s'arrêtent et l'alimentation est mise hors tension sur certains instruments.

L'utilisateur peut modifier la durée entre l'acquisition du dernier échantillon et la modification à l'état de veille. Pour plus d'informations sur les autres champs dans la boîte de dialogue Queue Options, consultez le document : *Aide*.

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

Illustration 8-1 : Boîte de dialogue Queue Options (Options de la file d'attente)



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 que le logiciel attendra après la fin de l'acquisition avant de passer en 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 tout le lot en échec s'il manque un flacon.

Instructions d'utilisation : Lots

Si la case n'est pas cochée, seul l'échantillon en cours est mis en échec et le logiciel passe à l'échantillon suivant.

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 document : *Guide de l'utilisateur expert*.

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

Illustration 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.

Illustration 8-3 : Boîte de dialogue Add Sample

The 'Add Sample' dialog box contains the following fields and options:

- Sample name:**
 - Prefix:
 - Sample number: ☒
 - Number of digits:
- Data file:**
 - Prefix:
 - Set name: ☒
 - Auto Increment: ☒
 - Sub Folder:
- New samples:**
 - Number:

Buttons: OK, Cancel, 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, cochez 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 section **Data file**, dans le champ **Prefix**, entrez un nom pour le fichier de données qui stockera les informations relatives à l'échantillon.
9. Cochez la case **Set name** pour utiliser le nom de l'ensemble comme partie intégrante du nom du fichier de données.
10. Cochez la case **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.

Instructions d'utilisation : Lots

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'un en-tête de colonne unique ou de plusieurs lignes dans 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, cochez la case **Use Multiple Methods**. La colonne **Acquisition Method** apparaît dans le tableau Sample. Sélectionnez la méthode d'acquisition pour chaque échantillon dans cette colonne.

15. Pour modifier les volumes d'injection depuis les volumes indiqués dans la méthode, dans la colonne **Inj. Volume (µL)**, saisissez le volume d'injection pour chaque échantillon.
16. Pour définir les emplacements des échantillons, effectuez l'une des opérations suivantes :
 - [Régler les emplacements de l'échantillon dans l'Éditeur de lot](#)
 - [Sélectionner les emplacements des flacons à l'aide de l'onglet Locations \(facultatif\)](#)
17. Ouvrez l'onglet 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. Enregistrez le fichier.

Soumettre un échantillon ou un groupe d'échantillons

Remarque : Analyser à nouveau l'échantillon en cas d'interruption anormale pendant 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. Ouvrez l'onglet Submit dans le Batch Editor.
3. Si le groupe 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 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**.

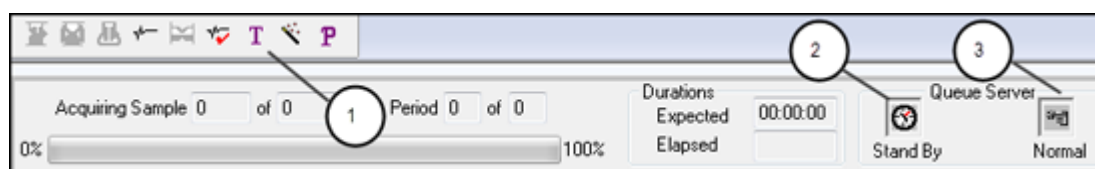
Dans l'onglet Submit, double-cliquez sur un des nombres à l'extrême gauche du tableau (une case floue est visible), puis faites-les glisser vers le nouvel emplacement.

Acquérir les données

Le logiciel 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 veille, l'acquisition de l'échantillon démarre automatiquement.

1. Assurez-vous que la température du four à colonne est atteinte.
2. Veillez à ce que l'icône **Reserve Instrument for Tuning** () ne soit pas actionnée.
3. Dans la barre de navigation, cliquez sur **Acquire**.
4. Cliquez sur **View > Sample Queue**..
Le Queue Manager apparaît avec tous les échantillons envoyés.

Illustration 8-4 : Gestionnaire de file d'attente



Élément	Description
1	N'appuyez pas sur l'icône Reserve Instrument for Tuning (Réserver instrumentation pour réglage).
2	L'état de la file d'attente doit être Ready.

Élément	Description
3	L'état Queue Server doit être Normal. Consultez la section Statut de la file d'attente .

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

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

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

1. Sous l'onglet Sample, dans la liste **Set**, sélectionnez l'ensemble.
2. Pour chaque échantillon dans l'ensemble, faites ce qui suit si nécessaire:
 - Dans la colonne **Rack Code**, sélectionnez le type de carrousel.
 - Dans la colonne **Rack Position**, sélectionnez la position du carrousel dans l'auto-échantillonneur.
 - Dans la colonne **Plate Code**, sélectionnez le type de plaque.
 - Dans la colonne **Plate Position**, sélectionnez la position de la plaque sur le carrousel.
 - Dans la colonne **Vial Position**, sélectionnez la position du flacon dans la plaque ou le plateau.
3. Enregistrez le fichier.

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

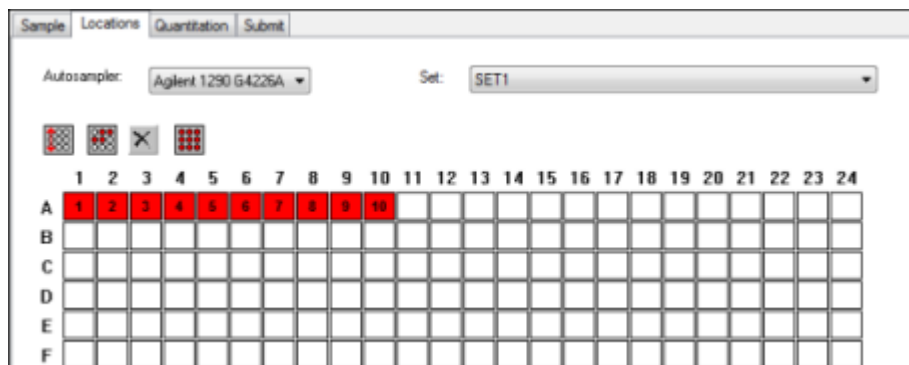
1. Dans le Batch Editor, cliquez sur Locations.
2. Dans la liste **Set**, sélectionnez le réglage.
3. Sélectionnez l'auto-échantillonneur dans la liste **Autosampler**.
4. Dans l'espace associé au carrousel, cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez le type de carrousel.
Les plaques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

Instructions d'utilisation : Lots

- 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.

Illustration 8-5 : Onglet Locations



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

- 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.
- Cliquez sur les flacons ou puits d'échantillons dans l'ordre dans lequel ils doivent être analysés.

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

Conseil ! Pour remplir automatiquement les échantillons, appuyez sur **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

Lorsque l'acquisition d'un échantillon est arrêtée, le logiciel termine le balayage en cours avant d'arrêter l'acquisition.

- Dans Queue Manager, cliquez sur l'échantillon dans la file d'attente après le point où l'acquisition devrait s'arrêter.
- Dans la barre de navigation, cliquez sur **Acquire**.

3. Cliquez sur **Acquire > Stop Sample..**
L'acquisition s'arrête après que le balayage actuel dans l'échantillon sélectionné a été acquis. L'état de l'échantillon dans la fenêtre **Queue Manager (Local)** passe à **Terminated** et tous les échantillons suivants dans la file d'attente sont en mode **Waiting**.
4. Pour poursuivre le traitement du lot, cliquez sur **Acquire > Start Sample**.

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 **View Queue** () pour afficher la file d'attente.

Pour des informations sur l'utilisation du menu contextuel Queue, consultez la section : [Ordre dans la file d'attente](#).

Statut de la file d'attente

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

Illustration 8-6 : Serveur de file d'attente affichant un mode Normal

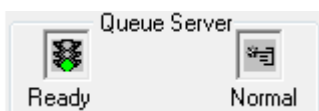
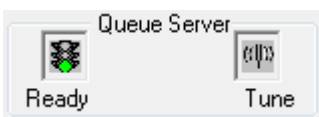


Illustration 8-7 : Serveur de file d'attente affichant un mode Réglage



La première icône indique l'état de la file d'attente. La deuxième icône indique si la file d'attente est en mode réglage (tuning) ou en mode Normal (pour l'exécution des échantillons). Vous trouverez des descriptions des icônes et des états de la file d'attente dans le tableau : [Tableau 8-1](#).

Tableau 8-1 : Statut de la file d'attente

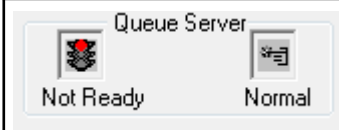
Icônes	Phase	Définition
	Not Ready	Le profil matériel est désactivé et la file d'attente n'accepte aucun des échantillons soumis.

Tableau 8-1 : Statut de la file d'attente (suite)

Icônes	Phase	Définition
 Queue Server Stand By	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	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	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	Waiting	Le système lancera automatiquement l'acquisition lorsque l'échantillon suivant sera présenté.
 Queue Server PreRun	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	Acquiring	La méthode fonctionne et l'acquisition des données a lieu.
 Queue Server Paused	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 s'assurer que la pression de celle-ci soit adéquate ou afficher le statut détaillé du spectromètre de masse pour surveiller 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 s'ouvre.

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

État	Icône	Couleur d'arrière-plan	Description
Inoccupé		Vert ou jaune	Le périphérique n'est pas en fonction. Si l'arrière-plan est de couleur jaune, le périphérique doit être équilibré avant qu'il ne soit prêt à fonctionner. Si la couleur d'arrière-plan est verte, le périphérique est prêt à fonctionner.
Équilibration		Vert ou jaune	Le périphérique est équilibrer.
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.
Exécution en cours		Vert	Le périphérique est en train d'analyser un lot.
Abandon en cours		Vert	Le périphérique abandonne une exécution.
Téléchargement en cours		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'une étude.

Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des 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, reportez-vous au document : *Guide de l'utilisateur expert*.

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

Ouvrir les fichiers de données

Conseil ! Pour désactiver la mise à jour automatique sur le spectre de masse, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le spectre de masse, puis cliquez sur **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-cliquez 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.

Vous trouverez des descriptions des icônes de navigation utilisées dans cette procédure dans le tableau : [Tableau C-4](#).

Ouvrez un fichier de données contenant plusieurs échantillons, puis effectuez l'une des opérations suivantes :

- Pour passer à l'échantillon suivant dans le fichiers de données, cliquez sur l'icône **Show Next Sample** ()
- Pour passer à un échantillon non séquentiel, cliquez sur l'icône **Go to Sample** ()
- Dans la boîte de dialogue Select Sample, dans la liste **Sample**, sélectionnez l'échantillon à afficher.
- Pour passer à l'échantillon précédent dans le fichiers de données, cliquez sur l'icône **Show Previous Sample** ()

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 les détails de la méthode d'acquisition utilisée : méthode d'acquisition MS c'est-à-dire nombre de périodes, expériences et cycles, y compris les méthodes de paramètres de l'instrumentation et méthode de l'appareillage LC, y compris le débit de la pompe LC. En plus, elles contiennent aussi les tableaux d'étalonnage de résolution de masse utilisés pour l'acquisition d'échantillons. Pour la fonctionnalité logicielle disponible quand l'utilisateur affiche les informations du fichier, consultez la section : [Afficher le menu contextuel du volet d'informations sur le 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 File information apparaît 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**.

Afficher les données dans des tableaux

1. Ouvrez un fichier de données.
2. Cliquez sur **Explore > Show > Show List Data..**
Les données sont affichées dans une fenêtre sous le graphique.

Illustration 9-1 : Onglet Peak List (systèmes TripleTOF)

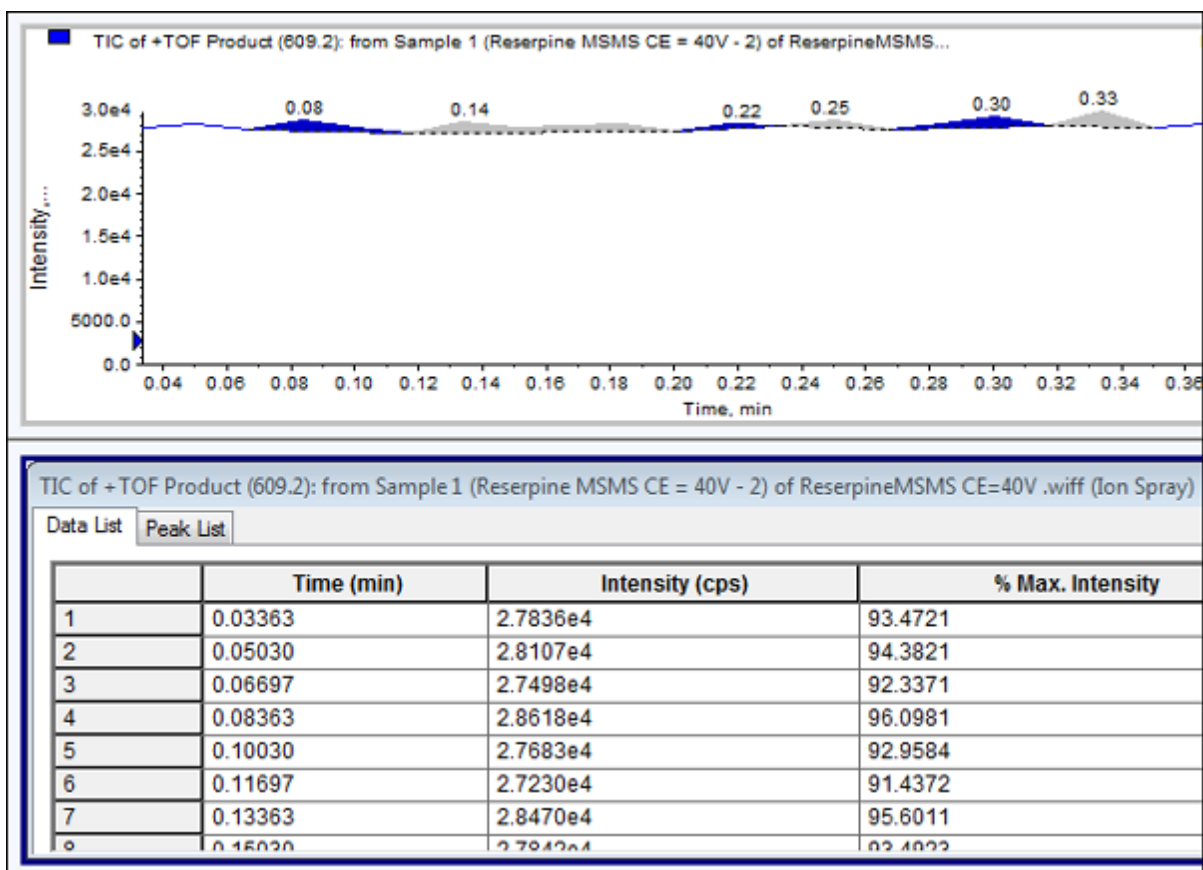


Tableau 9-1 : Menu contextuel pour l'onglet Spectral Peak List

Menu	Fonction
Column Options	(Options de colonne) Ouvre la boîte de dialogue Select Columns for Peak List .
Save As Text	(Enregistrer comme texte) Enregistre les données comme fichier .txt.
Delete Pane	(Supprimer le volet) Supprime le volet sélectionné.

Tableau 9-2 : Menu contextuel pour l'onglet Chromatographic Peak List

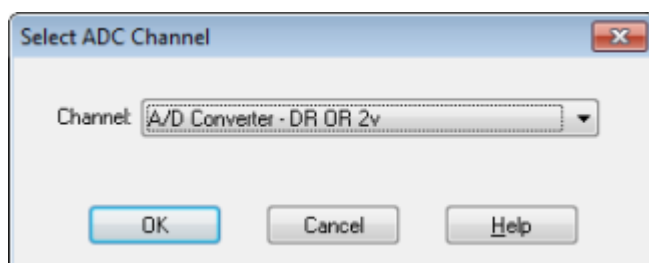
Menu	Fonction
Show Peaks in Graph	(Afficher les pics dans le graphique) Affiche les pics de deux couleurs dans le graphique.
IntelliQuan Parameters	(Paramètres IntelliQuan) Ouvre la boîte de dialogue IntelliQuan .
Save As Text	(Enregistrer comme texte) Enregistre les données comme fichier txt.
Delete Pane	(Supprimer le volet) Supprime le volet sélectionné.

Show ADC Data

Les données du convertisseur analogique/numérique (CAN) sont acquises par un détecteur secondaire, par exemple, à partir d'un détecteur UV au travers d'une carte CAN, et sont utiles pour la comparaison avec les données du spectromètre de masse. Pour que les données CAN soient disponibles, procédez simultanément à leur acquisition et à celle des données du spectromètre de masse. Les deux types de données sont alors sauvegardés dans le même fichier.

1. Veillez à ce que le dossier du projet où sont stockées les données ADC soit sélectionné. Par exemple, cliquez sur le dossier **Example**.
2. Dans la barre de navigation, sous **Explore**, double-cliquez sur **Open Data File**. La boîte de dialogue Select Sample apparaît.
3. Dans le champ **Data Files**, double-cliquez sur le sous-dossier de données (le cas échéant), puis cliquez sur le fichier de données à ouvrir. Par exemple, dans le dossier **Example**, double-cliquez sur **Devices** puis cliquez sur **Adc16chan.wiff**.
4. Dans la liste **Samples**, sélectionnez un échantillon, puis cliquez sur **OK**.
5. Cliquez sur **Explore > Show > Show ADC Data**.

Illustration 9-2 : Boîte de dialogue Select ADC Channel

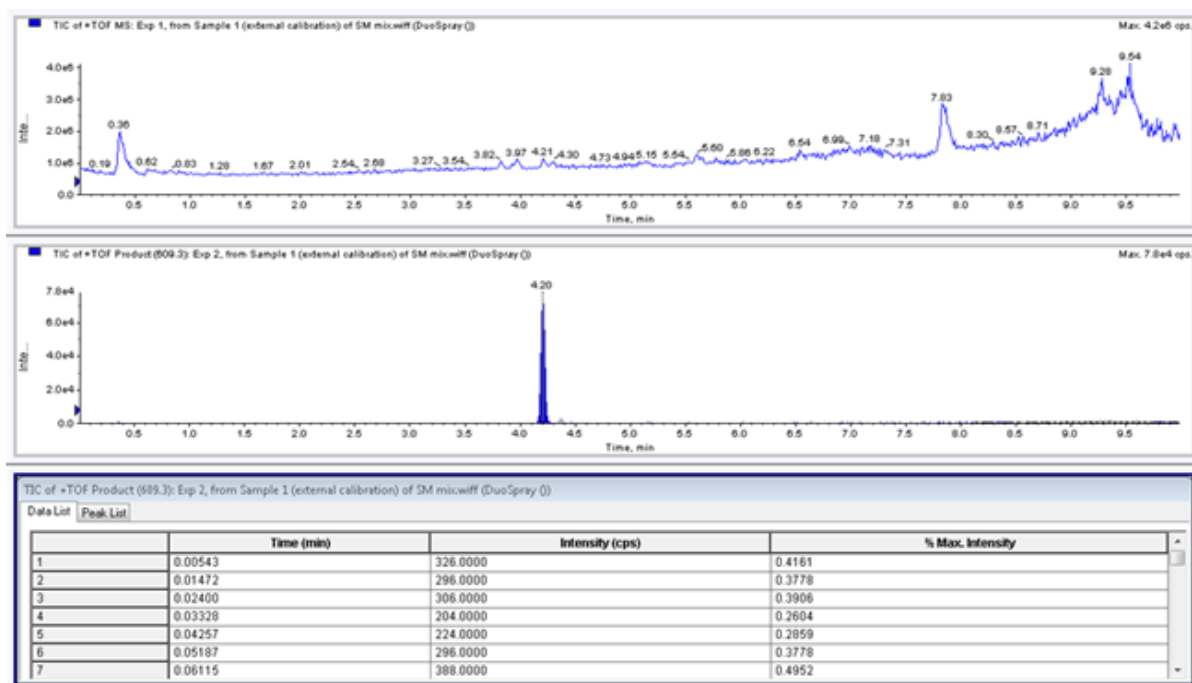


6. Dans la liste **Channel**, sélectionnez un canal, puis cliquez sur **OK**. Les données du CAN s'affichent dans un nouveau volet situé sous le volet actif.

Afficher les données quantitatives de base

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

Illustration 9-3 : List Data



3. Sous 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 **Analyst 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 les fonctionnalités logicielles disponibles pour les chromatogrammes et sur l'utilisation du menu contextuel des volets de chromatogrammes, consultez la section : [Volet de chromatogramme](#).

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. Vous trouverez une description des types de chromatogrammes dans le tableau : [Tableau 9-3](#).

Pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles, consultez le tableau : [Tableau 9-5](#).

Tableau 9-3 : Types de chromatogrammes

Types de chromatogrammes	Objectif
Chromatogramme en courant ionique total (TIC)	Une chromatogramme généré par le tracé de l'intensité de tous les ions dans un balayage, en fonction du temps ou du nombre de balayages. Lorsqu'un fichier de données est ouvert, il est préreglé pour s'ouvrir comme un TIC. Si l'expérience contient un seul balayage, il est représenté comme un spectre. Si la case MCA est sélectionnée au cours de l'acquisition d'un fichier de données, alors le fichier s'ouvre au spectre de masse. Si la case MCA n'est pas sélectionnée, alors le fichier de données s'ouvre avec le TIC.
Chromatogramme des ions extraits (XIC)	Un chromatogramme 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)	Un chromatogramme affichant l'ion doté de l'intensité la plus forte sur un balayage par rapport au nombre de balayages ou à leur durée.
Chromatogramme en longueur d'onde totale (TWC)	Un chromatogramme créé en additionnant toutes les valeurs d'absorbance dans la plage de longueurs d'onde acquise, puis en représentant les valeurs en fonction du temps. Elle se compose de la somme des absorbances de tous les ions dans un balayage tracé face au temps dans une fenêtre chromatographique.
Chromatogramme de longueurs 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.
Détecteur à barrettes de diodes (DAD)	Un chromatogramme qui représente 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**.

Pour des informations sur l'utilisation du menu contextuel **Spectra Panes**, consultez la section : [Spectra Panes \(Fenêtres spectrales\)](#)

Afficher un spectre d'un TIC

Un TIC est créé en additionnant la valeur d'intensité de tous les ions d'une série de balayages de masse. Utilisez le TIC pour afficher un ensemble de données complet dans une même fenêtre. Il représente la somme des intensités de tous les ions dans un balayage en fonction du temps dans un volet chromatographique. Si les données contiennent des résultats de plusieurs expériences, il est possible de créer un TIC pour chaque expérience sous le TIC qui représente la somme de toutes les expériences.

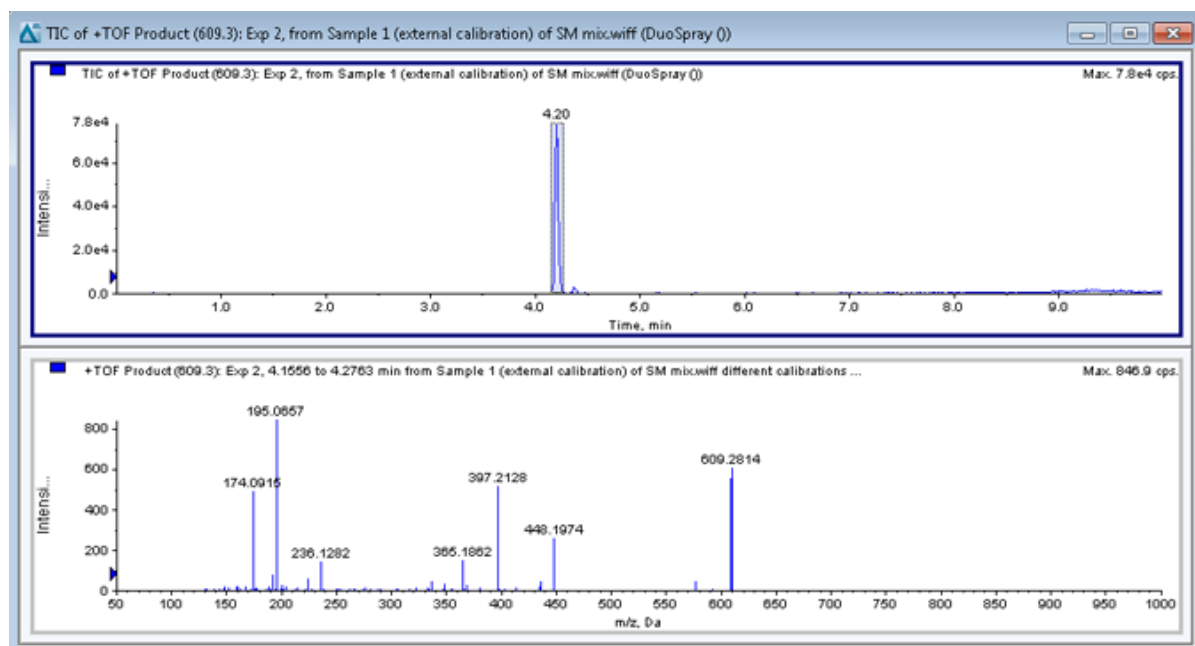
Lorsqu'un fichier de données est ouvert, il est pré-réglé pour apparaître comme un TIC. Toutefois, si l'expérience contient un seul balayage, il est représenté sous forme de spectre. Si l'utilisateur coche la case **MCA** avant l'acquisition du fichier de données, le fichier s'ouvre au spectre de masse. Si la case **MCA** n'est pas cochée, le fichier de données s'ouvre avec le TIC.

Pour des informations sur l'utilisation du menu contextuel Spectra Panes, consultez la section : [Spectra Panes \(Fenêtres spectrales\)](#).

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.

Illustration 9-4 : Exemple de TIC



Générer des 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. Pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles, consultez le tableau : [Tableau 9-5](#).

Il existe plusieurs méthodes d'extraction des ions pour générer un XIC, en fonction des données chromatographiques ou spectrales utilisées. Vous trouverez un récapitulatif des méthodes pouvant être utilisées avec des chromatogrammes et des spectres dans le tableau suivant.

Tableau 9-4 : Récapitulatif des méthodes pour générer un XIC

Méthode	Utiliser avec un chromatogramme	Utiliser avec un spectre	Extraction
Selected range	Non	Oui	Extrait les ions d'une zone sélectionnée dans un spectre.

Tableau 9-4 : Récapitulatif des méthodes pour générer un XIC (suite)

Méthode	Utiliser avec un chromatogramme	Utiliser avec un spectre	Extraction
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.
Base peak masses	Oui	Oui	Ne peut être utilisée qu'avec des chromatogrammes de pics de base (BPC). Utilisez la commande Use Base Peak Masses pour extraire des résultats d'ions dans un XIC avec un tracé de couleur différente pour chaque masse. Si la sélection inclut plusieurs pics, le XIC obtenu aura alors un nombre égal de tracés colorés, un par masse.
Specified masses	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 à l'aide d'une plage sélectionnée

1. Ouvrez un fichier de données contenant des spectres.
2. Sélectionnez une plage en pressant sur le bouton gauche de la souris au début de la plage, faites glisser le curseur jusqu'à la fin de la plage puis relâchez le bouton gauche de la souris.
La sélection apparaît en bleu.
3. 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

1. Ouvrez un fichier de données contenant des spectres.
2. Sélectionnez une plage dans le spectre.

La sélection apparaît en bleu.

3. Cliquez sur **Explore > Extract Ions > Use Maximum..**
Un XIC du pic maximum 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.

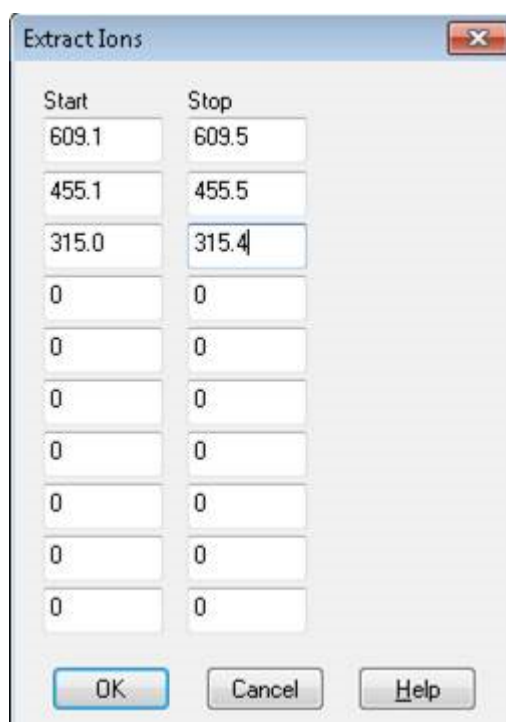
Générer un XIC à l'aide des masses du pic de base

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 apparaît 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..**

Illustration 9-5 : Boîte de dialogue Extract Ions



3. Entrez les valeurs pour chaque XIC à créer.

Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des données

- 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.

Remarque : Si une valeur d'arrêt n'est pas saisie, alors la plage est définie par la valeur de démarrage.

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. Ouvrez un fichier de données.
2. Sélectionner une zone à l'intérieur d'un TIC.
La sélection apparaît en bleu.
3. Cliquez sur **Explore > Show > Show Base Peak Chromatogram..**
Les sélections sont affichées dans les champs **Start Time** et **End Time**.

Illustration 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**, entrer l'intensité au-dessous de laquelle les pics seront ignorés par l'algorithme.
6. Dans le champ **Minimum Mass**, entrez la masse au début de la plage du balayage.
7. Dans le champ **Maximum Mass**, entrez la masse à la fin de la plage du balayage.
8. Pour définir les heures de début et de fin, cochez la case **Use Limited Range** et procédez comme suit :
 - Dans le champ **Start Time**, saisissez l'heure de début de la plage d'expérience ciblée.
 - Dans le champ **End Time**, saisissez l'heure de fin de la plage d'expérience ciblée.
9. Cliquez sur **OK**.
Le BPC est généré dans un nouveau volet.

Générer des XWC

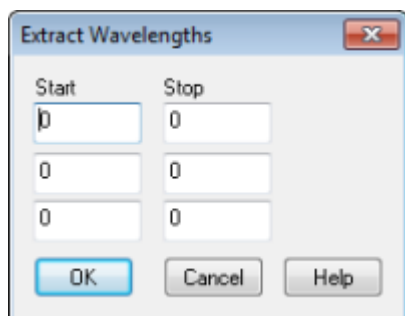
Un XWC est un chromatogramme de longueurs d'onde créé en mesurant les valeurs d'intensité à une certaine longueur d'onde ou en prenant la somme des absorbances pour

Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des données

une plage de longueurs d'onde. Jusqu'à trois plages peuvent être extraites d'un spectre DAD pour générer le XWC. Pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles, consultez le tableau : [Tableau 9-5](#).

1. Ouvrez un fichier de données qui contient un spectre DAD.
2. Cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans le volet, puis cliquez sur **Extract Wavelengths**.

Illustration 9-7 : Boîte de dialogue Extract Wavelength (Extraire longueurs d'onde)



3. Saisissez les valeurs **Start** et **Stop**.
4. Cliquez sur **OK**.
Le XWC s'ouvre dans un volet sous le spectre DAD.

Afficher 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. Ouvrez 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 DAD TWC..**

Générer des 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 chromatogramme. Si les données contiennent des résultats de plusieurs expériences, il est possible de créer un TWC pour chaque expérience sous le TWC qui représente 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. Pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles, consultez le tableau : [Tableau 9-5](#).

1. Ouvrez un fichier de données qui contient un spectre DAD.
2. Cliquez sur **Explore > Show > Show DAD TWC**.
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. Ouvrez un fichier de données.
2. Effectuez 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 affichée, 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.

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 données graphiques peuvent être examinées de différentes manières. Cette section fournit des informations et des procédures pour utiliser certaines des fonctionnalités les plus couramment utilisées.

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

Gestion des données

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

Tableau 9-5 : Options de graphique

Pour faire ceci	Utiliser cette option de menu	Ou cliquer 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..	

Tableau 9-5 : Options de graphique (suite)

Pour faire ceci	Utiliser cette option de menu	Ou cliquer sur cette icône
Déplacer un volet	- Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window > Move Pane.. - Sélectionner le volet ou la fenêtre, puis le faire glisser vers la nouvelle position. Cette position peut être dans la même fenêtre ou dans une autre fenêtre. Une flèche à quatre pointes est affichée lorsque le curseur est sur la limite de la fenêtre active ou le volet. - 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	a. Avec deux graphes ouverts, cliquez sur l'un pour le rendre actif. b. Cliquez sur Explore > Link, puis cliquez sur l'autre volet.	
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..	
Maximiser un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur Window > Maximize Pane..	
Tile panes	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 : Prenez garde en effectuant un zoom avant sur la ligne de base. Si l'agrandissement est trop important, la boîte d'agrandissement se ferme.

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

Conseil ! Pour restaurer l'échelle d'origine de l'axe des Y sur le graphique, double cliquez sur l'un des axes. Pour restaurer l'échelle d'origine du graphique entier, cliquez sur **Explore > Home Graph**.

Effectuer un zoom avant sur l'axe des x

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

Conseil ! Pour restaurer l'échelle d'origine de l'axe des X sur le graphique, double cliquez sur l'axe des X. Pour restaurer l'échelle d'origine du graphique entier, cliquez sur **Explore > Home Graph**.

Informations relatives à l'entretien et à la maintenance

10

Nettoyez et maintenez régulièrement le système pour des performances optimales.



AVERTISSEMENT ! Risque de choc électrique. Ne pas retirer 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. Contacter 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. Déterminer si une décontamination est nécessaire avant de procéder au nettoyage ou à l'entretien. Si des matériaux radioactifs, des agents biologiques ou des substances chimiques toxiques ont été utilisés avec le système, le client doit décontaminer de ce dernier avant d'en effectuer le nettoyage ou la maintenance.

Calendrier de maintenance recommandé

Les tableaux suivants fournissent un programme recommandé pour le nettoyage et la maintenance du système.

Conseil ! Exécutez les tâches de maintenance régulièrement afin de garantir un fonctionnement optimal du système.

- Effectuez régulièrement des tests de fuite de gaz et des inspections de maintenance générale pour vous assurer que le système fonctionne en toute sécurité.
- Nettoyez le système régulièrement pour le maintenir en bon état de fonctionnement.
- Lors de la maintenance du système, examinez soigneusement les pièces du système d'alimentation de gaz externe, notamment les tubulures raccordées à l'équipement, afin de confirmer que leur état est satisfaisant. Remplacez toute tubulure fissurée, endommagée ou pliée.

Pour des informations sur le maintien de la source d'ions, consulter le document : *Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray*.

Pour déterminer la fréquence de nettoyage ou de maintenance du spectromètre de masse et de la source d'ions, considérez les facteurs suivants. Ces facteurs peuvent entraîner des changements dans le rendement du spectromètre de masse, indiquant la nécessité d'un entretien.

Informations relatives à l'entretien et à la maintenance

- Composés testés
- Propreté des échantillons et méthodes de préparation d'échantillon
- Durée d'exposition de la sonde à l'échantillon
- Temps d'exécution global du système

Pour commander des éléments consommables et pour connaître les besoins de base en matière d'entretien et de maintenance, contactez un QMP ou consultez le document : *Guide des pièces et de l'équipement*. Contactez un technicien de service SCIEX pour toutes les autres exigences de service et de maintenance.

Tableau 10-1 : Tâches de maintenance du spectromètre de masse

Composant	Fréquence	Tâche	Pour plus d'informations
Système	Quotidienne	Recherchez des fuites éventuelles	Voir la section : Précautions en matière de produits chimiques .
Plaque rideau	Quotidienne	Nettoyer	Voir la section : Nettoyer la plaque rideau .
Huile de pompe primaire	Une fois par semaine	Inspectez le niveau	Voir la section : Vérifiez le niveau d'huile de la pompe primaire . Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local pour ajouter de l'huile, si nécessaire.
Huile de pompe primaire	Tous les 3 ans ou selon les besoins.	Remplacer	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.
Huile de pompe primaire	Selon les besoins	Refill (Remplissage)	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.
Plaque à orifice (avant)	Selon les besoins	Nettoyer	Voir la section : Nettoyer l'avant de la plaque à orifice .
Plaque à trou (avant et arrière)	Selon les besoins	Nettoyer	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.
QJet	Selon les besoins	Nettoyer	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.
Jeu de barreaux Q0 et lentilles IQ1	Selon les besoins	Nettoyer	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.

Tableau 10-1 : Tâches de maintenance du spectromètre de masse (suite)

Composant	Fréquence	Tâche	Pour plus d'informations
Surfaces de l'instrumentation	Selon les besoins	Nettoyer	Voir la section : Nettoyage des surfaces .
Conteneur de trop-plein	Selon les besoins	Vider	Voir la section : Vider le conteneur de trop-plein .
Élément chauffant de l'interface	Selon les besoins	Remplacer	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.

Tableau 10-2 : Tâches de maintenance de la source d'ions

Composant	Fréquence	Tâche	Pour plus d'informations
Sondes TurbolonSpray et APCI	Selon les besoins	Examiner et remplacer	Consultez le <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray</i> .
Électrodes pour sondes TurbolonSpray et APCI	Selon les besoins	Examiner et remplacer	Consultez le document : <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray</i> <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions</i> .
Aiguille de décharge corona	Selon les besoins	Remplacer	Consultez le document : <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray</i> <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions</i> .
Chauffage Turbo	Selon les besoins	Remplacer	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.
Tube d'échantillonnage	Selon les besoins	Remplacer	Consultez le <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray</i> .

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

- Nettoyez les surfaces du spectromètre de masse après un déversement ou si elles sont sales.
- Vider la bouteille de vidange de la source avant qu'elle ne soit pleine.
- Nettoyer la plaque à orifice, le guide d'ions QJet et la zone Q0 si la sensibilité du système baisse.

Conseil ! Nettoyez la zone Q0 régulièrement afin de minimiser l'impact de la charge (une 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.
- Inspectez régulièrement tous les raccords d'évacuation afin de veiller au maintien de l'intégrité, et à ce que toute l'évacuation quitte le laboratoire du client.

Nettoyage des surfaces

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

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

1. Essuyez les surfaces extérieures avec un chiffon doux humidifié à l'eau tiède et savonneuse.
2. Essuyez les surfaces externes avec un chiffon doux imbibé d'eau pour éliminer tout résidu de savon.

Nettoyer la façade

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



AVERTISSEMENT ! Risque de surface chaude. Laisser la source d'ions DuoSpray refroidir pendant au moins 30 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. Nettoyer jusqu'à et y compris l'avant de la plaque à trou. Si le nettoyage de routine ne résout pas les problèmes de sensibilité, un nettoyage complet sera peut-être nécessaire.

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

Remarque : suivez l'ensemble des réglementations locales applicables. Pour connaître les consignes de santé et de sécurité, se reporter à la section : [Précautions en matière de produits chimiques](#).

Symptômes de contamination

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

- importante perte de sensibilité ;
- bruit de fond accru ;
- pics supplémentaires qui ne font pas partie de l'échantillon dans les méthodes à balayage complet ou à balayage d'exploration.

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

Matériel nécessaire

Remarque : les clients basés aux États-Unis peuvent composer le +1 877 740 2129 pour les informations de commande et les demandes de renseignements. Les clients internationaux peuvent consulter le site sciex.com/contact-us.

- Gants sans poudre, nitrile ou néoprène recommandé
- Lunettes de sécurité
- Blouse de laboratoire.
- Eau fraîche de qualité LC-MS. De l'eau ancienne peut contenir des éléments susceptibles de contaminer le spectromètre de masse.
- Méthanol, isopropanol (2-propanol) ou acétonitrile de qualité LC-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 la section : [Outils et fournitures disponibles auprès du fabricant](#).
- (En option) Écouvillons en polyester (poly)

Outils et fournitures disponibles auprès du fabricant

Tableau 10-3 :

Description	Part Number
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 le petit écouvillon en polyester, les lingettes non pelucheuses, l'outil de nettoyage Q0, la brosse de nettoyage du guide d'ions QJet conique et de l'Alconox.	5020763

Bonnes pratiques de nettoyage



AVERTISSEMENT ! Risque de surface chaude. Laisser la source d'ions DuoSpray refroidir pendant au moins 30 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. Consulter les fiches de données de sécurité des produits chimiques et suivre toutes les procédures de sécurité recommandées lors de la manipulation, du stockage et de la mise au rebut des produits chimiques.



AVERTISSEMENT ! Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Déterminer si une décontamination est nécessaire avant de procéder au nettoyage ou à l'entretien. Si des matériaux radioactifs, des agents biologiques ou des substances chimiques toxiques ont été utilisés avec le système, le client doit décontaminer de ce dernier avant d'en effectuer le nettoyage ou la maintenance.



AVERTISSEMENT ! Risque pour l'environnement. Ne pas jeter les composants du système dans les déchetteries municipales. Suivre 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 sans poudre, 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.
- 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.

Illustration 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.
- Au besoin, effectuez plusieurs nettoyages en utilisant plusieurs lingettes pour les éléments volumineux de l'interface avec le vide, comme la plaque rideau.
- 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.

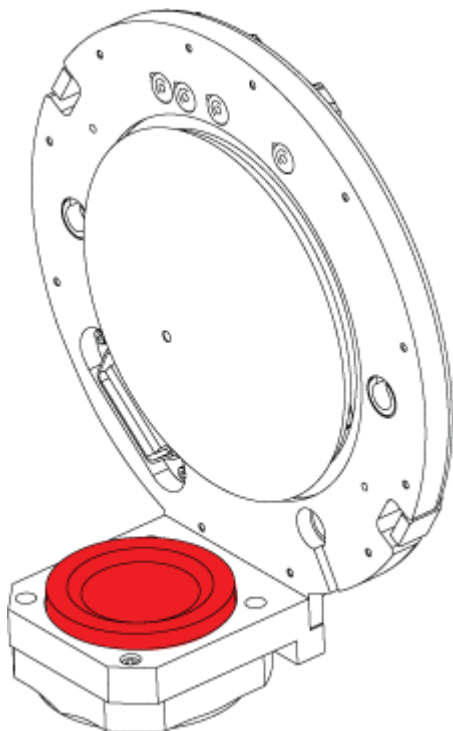
Préparez le spectromètre de masse



AVERTISSEMENT ! Risque de surface chaude. Laissez la source d'ions DuoSpray refroidir pendant au moins 30 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.

Illustration 10-2 : Drain de la source sur l'interface avec le vide



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 le technicien de service local.

1. Désactivez le profil de matériel. Consultez le document : *Guide de l'utilisateur du logiciel*.
2. Retirez la source d'ions. Consultez le document de la source d'ions : *Guide de l'opérateur*.

Lorsque la source d'ions n'est pas utilisée, rangez-la pour la protéger contre les détériorations et maintenir son bon fonctionnement.

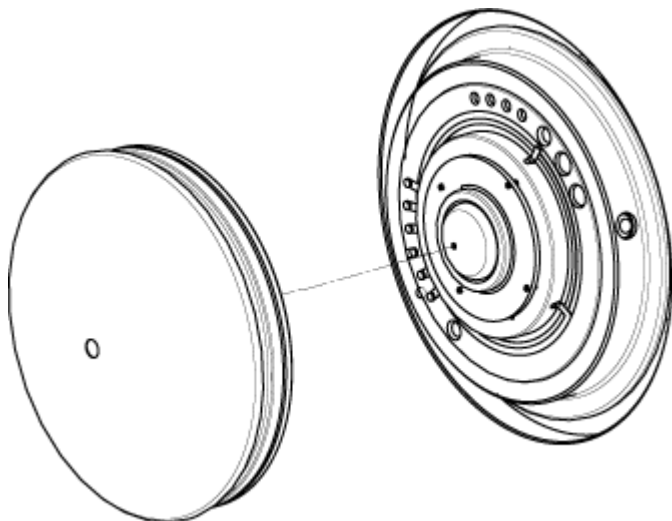
Nettoyer la plaque rideau

ATTENTION : Risque d'endommagement du système. Ne posez pas 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. Pour éviter tout dommage, n'introduisez pas de câble ou de brosse métallique dans l'orifice de la plaque rideau, de la plaque à orifice ou du chauffage de l'interface.

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

Illustration 10-3 : Retrait de la plaque rideau



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, de moins d'un quart de tour, afin de la libérer des billes sur ressort.

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

Remarque : Utilisez plusieurs lingettes si nécessaire.

3. Répétez l'étape 2 avec la solution de nettoyage.
4. Utilisez une lingette humide ou un petit écouvillon pour nettoyer l'ouverture.
5. Attendez le séchage de la plaque rideau.
6. 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 tâches 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. Pour éviter tout dommage, n'introduisez pas de câble ou de brosse métallique dans l'orifice de la plaque rideau, de la plaque à orifice ou du chauffage de l'interface.

1. Humidifiez une lingette non pelucheuse avec de l'eau de qualité LC-MS, puis essuyez l'avant de la plaque à orifice, y compris le chauffage d'interface.
 2. Répétez l'étape 1 avec la solution de nettoyage.
 3. Attendez le séchage de la plaque à orifice.
 4. 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 tâches ou films persistants indiquent la présence d'un solvant contaminé.

Remettre le spectromètre de masse en service

1. Installez la plaque rideau.
2. Installez la source d'ions sur le spectromètre de masse. Consultez le document de la source d'ions : *Guide de l'opérateur*.
Serrez la source d'ions en tournant ses loquets de verrouillage vers le bas en position de verrouillage.
3. Activez le profil de matériel. Consultez le document : *Guide de l'utilisateur du logiciel*.

Vider le conteneur de trop-plein



AVERTISSEMENT ! Risque de surface chaude. Laisser la source d'ions DuoSpray refroidir pendant au moins 30 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 rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Déposer les matières dangereuses dans des conteneurs de déchets convenablement étiquetés et les mettre au rebut conformément aux réglementations locales.



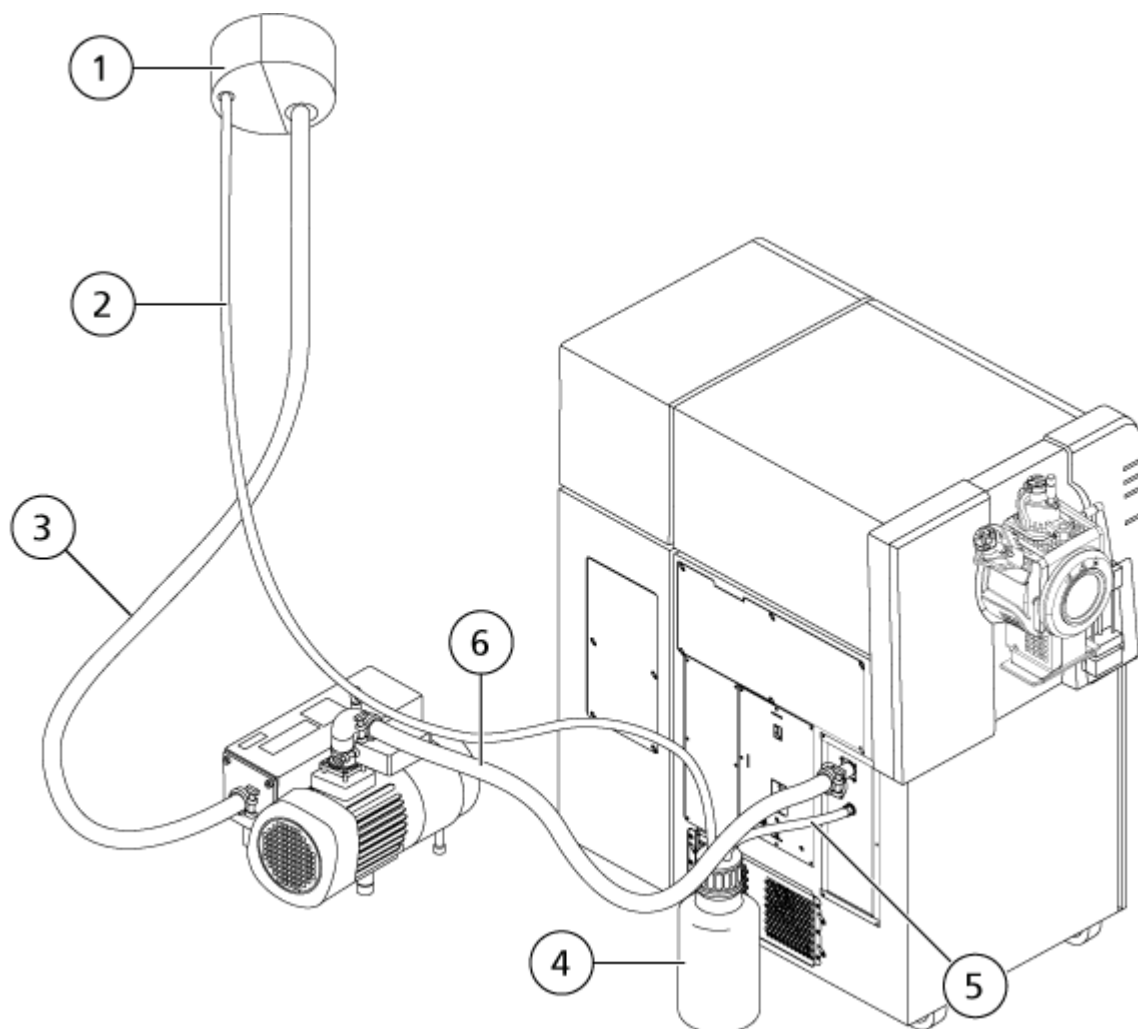
AVERTISSEMENT ! Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Veiller à évacuer les gaz d'échappement dans une hotte aspirante de laboratoire prévue à cet effet ou un système d'évacuation et s'assurer que le tuyau de ventilation est maintenu en place par des pinces.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

Remarque : Vérifiez que la ligne des déchets de la source n'est pas pliée, fléchie ou tordue.

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. Retirez la source d'ions. Consultez le document : *Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray*.
2. Desserrez les colliers qui relient les tuyaux au capuchon du conteneur de trop-plein.

Illustration 10-4 : Conteneur de trop-plein



Élément	Description
1	Connexion à la ventilation.
2	Tubulure d'évacuation de la source : diamètre intérieur (di) de 2,5 cm (1,0 po)
3	Tuyau d'évacuation de la pompe primaire : diamètre intérieur de 3,2 cm (1,25 po)
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.

Élément	Description
5	Connexion d'évacuation de la source au spectromètre de masse : di de 1,6 cm (0,625 po)
6	Flexible d'entrée de vide 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.

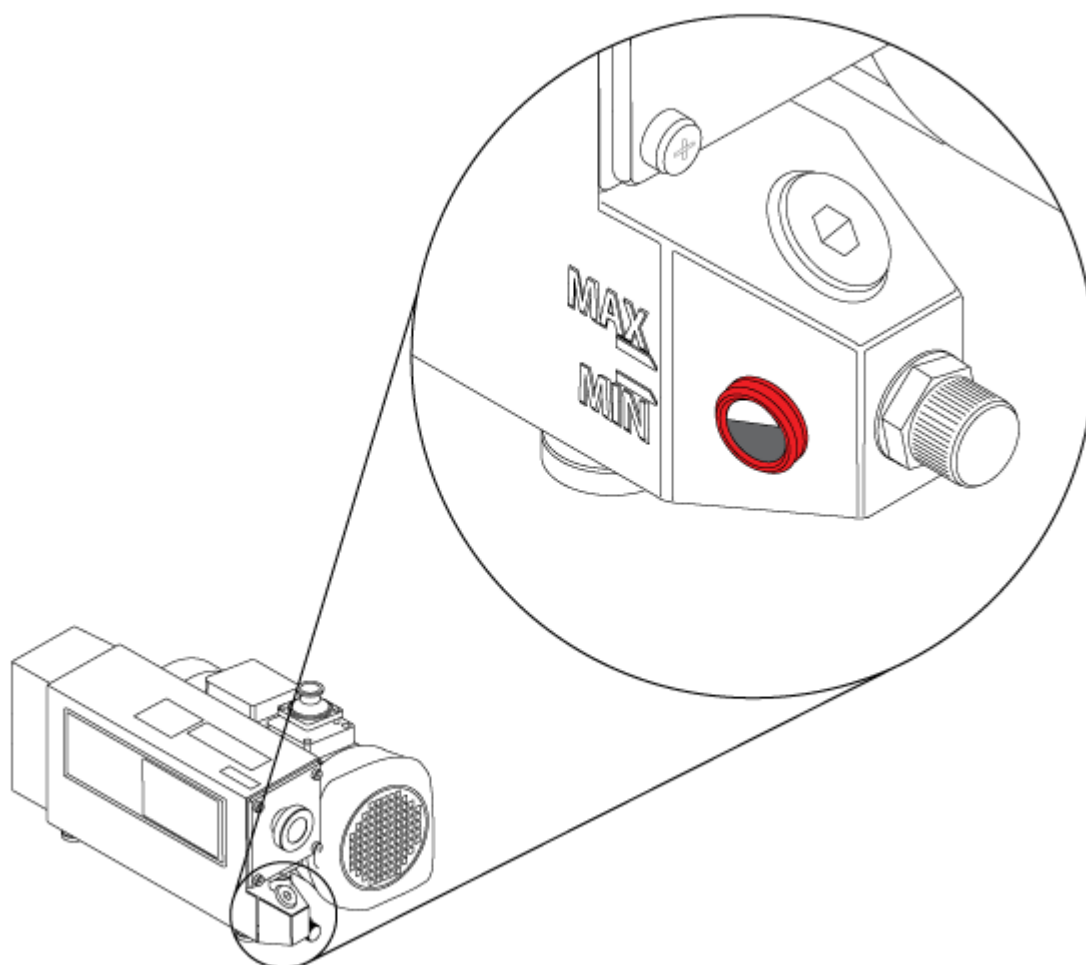
3. Le cas échéant, soulevez la bouteille de vidange et retirez-la de son support.
4. Détachez les tuyaux du capuchon.
5. Retirez le bouchon du conteneur de trop-plein.
6. Videz le conteneur de trop-plein, puis éliminez les déchets conformément aux procédures de laboratoire et aux réglementations locales 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.

Vérifiez 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.

Illustration 10-5 : 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.

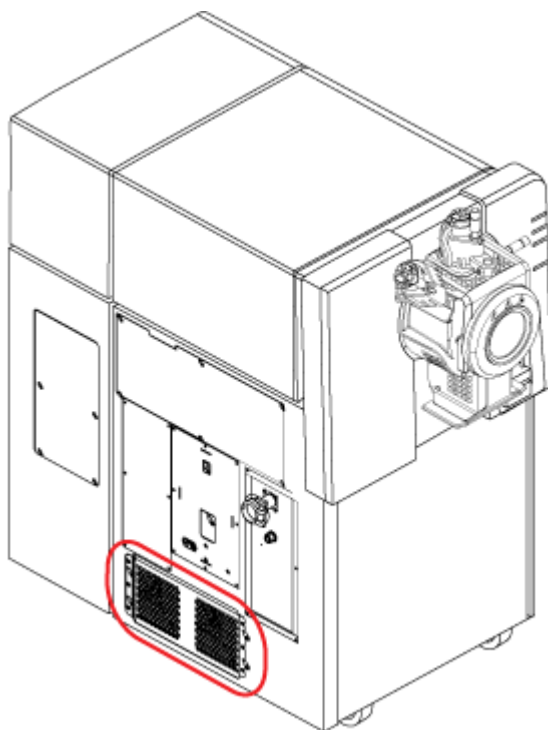
Procédures préalables
• Désactivez le système conformément à la procédure indiquée dans le <i>Guide de l'utilisateur du système</i>.



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

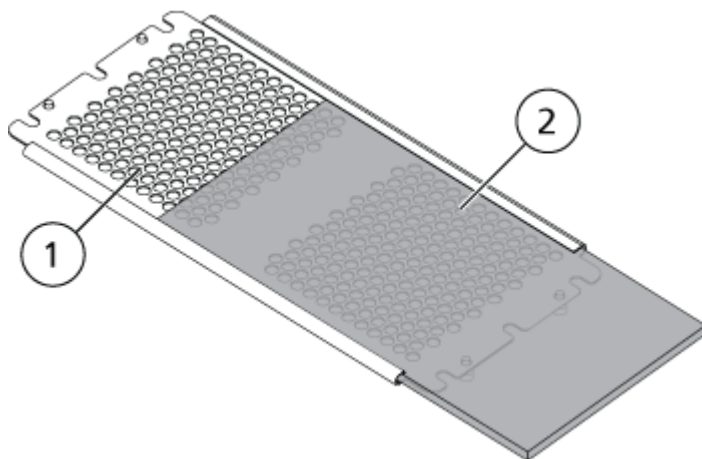
1. Retirer les quatre vis à serrage à main du capot du ventilateur.

Illustration 10-6 : Filtres des ventilateurs



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

Illustration 10-7 : Filtre du ventilateur



Informations relatives à l'entretien et à la maintenance

Élément	Description
1	Capot du ventilateur
2	Filtre

3. Installer le capot du filtre.

Stockage et manutention



AVERTISSEMENT ! Risque pour l'environnement. Ne pas jeter les composants du système dans les déchetteries municipales. Suivre 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, retirer la prise électrique de la prise secteur murale.

Remarque : La source d'ions et le spectromètre de masse doivent être transportés et stockés à une température comprise entre -30 °C et $+60\text{ °C}$ (-22 °F à 140 °F) et à une humidité inférieure ou égale à 99 %, sans condensation. 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	Mesure corrective
Le guide d'ions QJet est extrêmement sale ou est fréquemment sali.	Le débit du gaz de l'interface Curtain Gas est trop faible.	Vérifiez le réglage du gaz de l'interface Curtain Gas et augmentez-le si nécessaire.
Une défaillance du système s'est produite en raison de la dépression trop élevée.	- le niveau d'huile est trop bas. - Présence d'une fuite. - La plaque à orifice installée n'est pas la bonne.	- vérifiez le niveau d'huile dans le pompe primaire, puis contactez un responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local pour ajouter de l'huile. Voir la section : Vérifiez le niveau d'huile de la pompe primaire. - Recherchez les fuites et réparez-les. - Installez la plaque à trou qui convient.
Une panne du système s'est produite en raison de la température trop élevée du module QPS Exciter.	La température ambiante est trop élevée.	- Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local. - Pour connaître les spécifications de température ambiante, consultez le <i>Guide de planification du site</i> du système.

Tableau 11-1 : Problèmes du système (suite)

Symptôme	Cause possible	Mesure corrective
Le logiciel de contrôle signale un état de panne du spectromètre de masse due à la source d'ions.	1. La sonde n'est pas installée. 2. La sonde n'est pas connectée correctement.	Confirmez la panne dans le panneau Status de la page de détails de l'appareil. 1. Installez la sonde. Consultez le <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray</i> <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions</i>. 2. Retirez puis installez la sonde. Serrez fermement l'anneau de retenue. Consultez le <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray</i> <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions</i>.
Le logiciel de contrôle indique que la sonde APCI est en cours d'utilisation alors que c'est la sonde TurbolonSpray qui 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 l'opérateur de la source d'ions DuoSpray</i> <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions</i> .
Le chauffage de l'interface n'est pas prêt.	Le chauffage de l'interface est défectueux.	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.
La résolution du spectromètre de masse est mauvaise.	Le spectromètre de masse n'est pas réglé.	Utilisez l'assistant Instrument Optimization pour optimiser le spectromètre de masse. Reportez-vous au <i>Guide de l'utilisateur du logiciel</i> ou au système d'aide.

Tableau 11-1 : Problèmes du système (suite)

Symptôme	Cause possible	Mesure corrective
Les performances du spectromètre de masse se dégradent.	1. Les conditions de la source d'ions ne sont pas optimisées. 2. L'échantillon n'a pas été préparé correctement ou s'est dégradé. 3. Les raccords d'introduction de l'échantillon fuient.	1. Optimisez les conditions de la source d'ions. Consultez le <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray</i> <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions</i>. 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.	Si la sonde TurbolonSpray est utilisée, tournez l'aiguille de décharge par effet corona vers la plaque rideau, et à l'écart du flux de gaz chauffant. Consultez le <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray</i> <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions</i> .

Tableau 11-2 : Problèmes de sensibilité

Cause possible	Mesure corrective
La sensibilité a diminué	
Les paramètres de la source d'ions ne sont pas optimisés.	Optimisez les paramètres de la source d'ions.

Tableau 11-2 : Problèmes de sensibilité (suite)

Cause possible	Mesure corrective
Le spectromètre de masse n'est pas optimisé.	Utilisez l'assistant Instrument Optimization pour optimiser le spectromètre de masse.
La plaque rideau est sale.	Nettoyez la plaque rideau. Consultez la section Nettoyer la plaque rideau .
La plaque à orifice est sale.	Voir la section : Nettoyer l'avant de la plaque à orifice Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.
Le guide d'ions QJet ou la lentille IQ0 est sale.	Nettoyez le guide d'ions QJet et la lentille IQ0. Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.
La zone Q0 est sale.	Testez la contamination de la zone Q0. Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.
L'échantillon s'est dégradé ou a une faible concentration.	Vérifiez la concentration de l'échantillon. Utilisez un échantillon récent.
La sonde n'est pas installée correctement.	Retirez et installez la sonde.
La source d'ions n'est pas installée correctement ou est en panne.	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.
Il manque un ou plusieurs joints toriques sur l'interface avec le vide.	Si les joints toriques sont sur la source d'ions, installez-les sur l'interface avec le vide. S'ils sont absents, remplacez-les.
Il y a un problème au niveau du système LC ou des connexions.	Dépannez le système LC.
Le potentiel de défragmentation n'est pas optimisé.	Optimisez le potentiel de défragmentation.
L'électrode est sale ou bloquée.	Remplacez l'électrode. Consultez le <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray</i> <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions</i> .
Le signal est absent ou instable	
La tubulure est bloquée.	Remplacez le tube d'échantillonnage.

Tableau 11-3 : Problèmes de bruit de fond

Cause possible	Mesure corrective
La Temperature (TEM) , la tension IonSpray (IS) ou le débit de gaz chauffant (GS2) est trop élevé.	Optimisez les paramètres de la source d'ions. Consultez le <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions DuoSpray</i> <i>Guide de l'opérateur de la source d'ions</i> .
La plaque rideau est sale.	Nettoyez la plaque rideau. Voir la section : Nettoyer la plaque rideau .
La plaque à orifice est sale.	Nettoyez l'avant de la plaque à orifice. Voir la section : Nettoyer l'avant de la plaque à orifice .
Le guide d'ions QJet ou la lentille IQ0 est sale.	Procédez à un nettoyage complet des composants de la façade du spectromètre de masse. Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.
La zone Q0 est sale.	Nettoyez la région Q0. Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service.
La phase mobile est contaminée.	Remplacez la phase mobile.

Tableau 11-3 : Problèmes de bruit de fond (suite)

Cause possible	Mesure corrective
La source d'ions est contaminée.	Nettoyez ou remplacez les composants de la source d'ions, puis conditionnez la source d'ions et l'avant du système : 1. Déplacez la sonde à la position la plus éloignée de l'orifice, verticalement et horizontalement. 2. (Logiciel Analyst TF) Assurez-vous que le chauffage de l'interface est en marche. 3. Infusez ou injectez un mélange à 50:50 de méthanol et d'eau avec un débit de pompe de 1 ml/min. 4. Dans le logiciel de commande, réglez la température sur 650, le gaz 1 de la source d'ions sur 60 et le gaz 2 de la source d'ions sur 60. 5. Réglez le débit du gaz de l'interface Curtain Gas sur 45 ou 50. 6. Faites fonctionner pendant au moins 2 heures ou de préférence toute la nuit pour un résultat optimal.

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

ATTENTION : Risque de résultat erroné. N'utilisez pas de solutions ayant dépassé la date limite d'utilisation ou n'ayant pas été stockées à la température de stockage préconisée.

Les tableaux suivants répertorient les standards recommandés par SCIEX pour étalonner le système TripleTOF 5600/5600+. Pour plus d'informations sur les solutions d'ajustement, reportez-vous à [Instructions d'utilisation – Réglage et calibration](#).

Tableau A-1 : Ions d'étalonnage positifs Q1 PPG

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

Tableau A-2 : Ions d'étalonnage négatif Q1 PPG

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

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

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

Ions d'étalonnage recommandés

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

MSMS (clomipramine)	Masses
C ₃ H ₈ N	58,0651
C ₅ H ₁₂ N	86,0964
C ₁₆ H ₁₄ N	220,1121
C ₁₄ H ₁₀ NCI	227,0496
C ₁₇ H ₁₇ N	235,1356
C ₁₅ H ₁₃ NCI	242,0731
C ₁₇ H ₁₇ CIN	270,1044
C ₁₉ H ₂₃ CIN 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 du système d'exploitation	125,0067
C ₁₀ H ₈ NON	158,06114
C ₁₇ H ₁₃ N ₂ O ₂	277,0983
C ₂₃ H ₂ ON ₂ du système d'exploitation 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 NON	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 $M = H[OC_3H_6]_nOH$, tandis que les fragments MSMS d'ions positifs ont 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	76,05242	94,08624	59,04914	56,06003	121,05061
2	134,09428	152,12810	117,09100	85,08096	179,09247
3	192,13614	210,16996	175,13286	114,10189	237,13433
4	250,17800	268,21182	233,17472	143,12282	295,17619
5	308,21986	326,25368	291,21658	172,14375	353,21805
6	366,26172	384,29554	349,25844	201,16468	411,25991
7	424,30358	442,33740	407,30030	230,18561	469,30177
8	482,34544	500,37926	465,34216	259,20654	527,34363
9	540,38730	558,42112	523,38402	288,22747	585,38549
10	598,42916	616,46298	581,42588	317,24840	643,42735
11	656,47102	674,50484	639,46774	346,26933	701,46921
12	714,51288	732,54670	697,50960	375,29026	759,51107
13	772,55474	790,58856	755,55146	404,31119	817,55293
14	830,59660	848,63042	813,59332	433,33212	875,59479
15	888,63846	906,67228	871,63518	462,35305	933,63665
16	946,68032	964,71414	929,67704	491,37398	991,67851
17	1004,72218	1022,75600	987,71890	520,39491	1049,72037

Tableau B-1 : Masses exactes du PPG (suite)

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

Résérpine

Tableau B-2 : Masses exactes de résérpine (C₃₃H₄₀N₂O₉)

Description	Masse
Ion moléculaire C ₃₃ H ₄₁ N ₂ O ₉	609,28066
Fragment C ₂₃ H ₃₀ NON ₈	448,19659
Fragment C ₂₃ H ₂₉ N ₂ O ₄	397,21218
Fragment C ₂₂ H ₂₅ N ₂ O ₃	365,18597
Fragment C ₁₃ H ₁₈ NON ₃	236,12812
Fragment C ₁₀ H ₁₁ O ₄	195,06519
Fragment C ₁₁ H ₁₂ NON	174,09134

Acide taurocholique

Tableau B-3 : Masses exactes de l'acide taurocholique (C₂₆H₄₅NON₇A)

Description	Masse
Ion moléculaire C ₂₆ H ₄₄ NON ₇ A	514,28440
Fragment C ₂ H ₃ O ₃ A	106,98084
Fragment C ₂ H ₆ NON ₃ A	124,00739
Fragment SO ₃	79,95736

Masses exactes et formules chimiques

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

Peptide ALILTLVS

Tableau B-5 : Masse de l'extrait du peptide ALILTLVS

Nom	Séquence	Masse	État de charge
Ion précurseur	ALILTLVS	829,5393	1+
b8	ALILTLVS	811,5288	1+
b7	ALILTLV	724,4967	1+
b7-18	ALILTLV	706,4862	1+
b6-18	ALILTLV	607,4178	1+
y5	LTLVS	532,3341	1+
b5	ALILT	512,3443	1+
b5-18	ALILT	494,3337	1+
b4	ALIL	411,2966	1+
b3	ALI	298,2125	1+
Fragment interne y b	IL ou LI	227,1754	1+
Fragment interne y b	LT ou TL	215,139	1+
b2	AL	185,1285	1+
a2	AL	157,1335	1+
Ions immonium	I ou L	86,09643	1+

Icônes de la barre d'outils

C

Pour les icônes supplémentaires de la barre d'outils, consultez le *Guide de l'utilisateur avancé*.

Tableau C-1 : Icônes de la barre d'outils

Icône	Nom	Description
	New Subproject	Créer un sous-projet Les sous-projets peuvent uniquement être créés plus tard dans le processus si le projet a été initialement créé avec des sous-projets.
	Copy Subproject	Copie un dossier du 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 Acquisition Method

Icône	Nom	Description
	Mass Spec	Affiche l'onglet MS dans l'éditeur Acquisition Method.
	Period	Ajoute une expérience, un IDA Criteria Level ou supprime la période.
	Autosampler	Ouvre l'onglet Autosampler Properties.
	Syringe Pump	Ouvre l'onglet Syringe Pump Properties .
	Column Oven	Ouvre l'onglet Column Oven Properties.
	Valve	Ouvre l'onglet Valve Properties.
	DAD	Ouvre l'éditeur DAD Method. Consultez la section Afficher données DAD .
	ADC	Ouvre l'onglet ADC Properties. Consultez la section Show ADC Data .

Icônes de la barre d'outils

Tableau C-3 : Icônes du mode Acquisition

Icône	Nom	Description
	View Queue	Affiche la file d'attente d'échantillons.
	Instrument Queue	Affiche un poste d'instrument à distance.
	Status for Remote Instrument	Affiche le statut d'un instrument à distance.
	Start Sample	Démarre l'échantillon dans la file d'attente.
	Stop Sample	Arrête l'échantillon dans la file d'attente.
	Abort Sample	Interrompt une acquisition d'échantillons au milieu de son traitement.
	Stop Queue	Arrête la file d'attente avant d'avoir terminé le traitement de tous les échantillons.
	Pause Sample Now	Insère une pause dans la file d'attente.
	Insert Pause before Selected Sample(s)	Insère une pause avant un échantillon spécifique.
	Continue Sample	Continue l'acquisition de l'échantillon.
	Next Period	Démarre une nouvelle période.
	Extend Period	Étend la période en cours.
	Next Sample	Arrête l'acquisition de l'échantillon actuel et commence l'acquisition de l'échantillon suivant.
	Equilibrate	Sélectionne la méthode utilisée pour équilibrer les appareils. Cette méthode doit être la même que celle utilisée avec le premier échantillon dans la file d'attente.
	Standby	Met l'instrument dans l'état Standby .
	Ready	Met l'instrument dans l'état Ready .

Tableau C-3 : Icônes du mode Acquisition (suite)

Icône	Nom	Description
	Reserve Instrument for Tuning	Réserve le spectromètre de masse pour le réglage et l'étalonnage.
	Method Wizard	Démarre l' Method Wizard .
	Purge Modifier	Démarre la purge du modificateur de la pompe du modificateur.

Icône	Nom	Description
	Calibrate from spectrum	Ouvre la boîte de dialogue Mass Calibration Option et utilise le spectre actif pour étalonner le spectromètre de masse.
	Manual Tune	Ouvre l'éditeur Manual Tune.
	Instrument Optimization	Vérifie la performance de l'instrument, ajuste l'étalonnage de masse ou ajuste les paramètres du spectromètre de masse.
	View Queue	Affiche la file d'attente d'échantillons.
	Instrument Queue	Affiche un instrument à distance.
	Status for Remote Instrument	Affiche le statut d'un instrument à distance.
	Reserve Instrument for Tuning	Réserve l'instrumentation pour le réglage et l'étalonnage.
	Purge Modifier	Cliquez pour nettoyer ou vider le modificateur de la pompe du modificateur.

Tableau C-4 : Référence exploration rapide: chromatogrammes et spectre

Icône	Nom	Description
	Open Data File	Ouvre les fichiers.
	Show Next Sample	Va à l'échantillon suivant.

Icônes de la barre d'outils

Tableau C-4 : Référence exploration rapide: chromatogrammes et spectre (suite)

Icône	Nom	Description
	Show Previous Sample	Va à l'échantillon précédent.
	Go To Sample	Ouvre la boîte de dialogue Select Sample.
	List Data	Affiche les données dans les tableaux.
	Show TIC	Génère un TIC à partir d'un spectre.
	Extract Using Dialog	Extrait des ions en sélectionnant les masses
	Show Base Peak Chromatogram	Génère un BPC
	Show Spectrum	Génère un spectre à partir d'un TIC
	Copy Graph to new Window	Copie le graphique actif dans une nouvelle fenêtre
	Baseline Subtract	Ouvre la boîte de dialogue Baseline Subtract.
	Threshold	Ajuste le seuil
	Noise Filter	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.
	Show ADC	Affiche les données CAN.
	Show File Info	Affiche les conditions de l'expérience dans la collecte des données.
	Add arrows	Ajoute des flèches à l'axe des X du graphique actif.
	Remove all arrows	Enlève des flèches de l'axe des X du graphique actif.

Tableau C-4 : Référence exploration rapide: chromatogrammes et spectre (suite)

Icône	Nom	Description
	Offset Graph	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.
	Force Peak Labels	Étiquette tous les pics.
	Expand Selection By	Définit le facteur d'expansion pour une portion d'un graphique pour être affiché de manière plus détaillée.
	Clear ranges	Remet la sélection étendue à son affichage normal.
	Set Selection	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.
	Normalize To Max	Agrandit un graphique au maximum, de sorte que le pic le plus intense soit à pleine échelle, qu'il soit visible ou non.
	Show History	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.
	Open Compound Database	Ouvre la base de données des composés.
	Set Threshold	Ajuste le seuil
	Show Contour Plot	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.
	Show DAD TWC	Génère un TWC du spectre DAD.
	Show DAD Spectrum	Génère un spectre DAD.
	Extract Wavelength	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-5 : Guide de référence rapide de la barre d'outils Explore : superposition des graphiques

Icône	Nom	Description
	Home Graph	Restaure le graphique à son échelle d'origine.
	Overlay	Superpose des graphiques.
	Cycle Overlays	Alterne les graphiques superposés.
	Sum Overlays	Additionne les graphiques.

Tableau C-6 : Guide de référence rapide de la barre d'outils Explore : Outil d'interprétation de la fragmentation

Icône	Nom	Description
	Show Fragment Interpretation Tool	Ouvre l'outil Fragmentation Interpretation qui calcule les fragments du clivage de liaisons simples non cycliques provenant d'un fichier .mol.

Tableau C-7 : Icônes de navigation de la barre d'outils Explore

Icône	Nom	Fonction
	Open File	Ouvre les fichiers.
	Show Next Sample	Accède à l'échantillon suivant.
	Show Previous Sample	Accède a à l'échantillon précédent.
	GoTo Sample	Ouvre la boîte de dialogue Select Sample.
	List Data	Affiche les données dans les tableaux.
	Show TIC	Génère un TIC à partir d'un spectre.
	Extract Using Dialog	Cliquez dessus pour extraire des ions en sélectionnant des masses

Tableau C-7 : Icônes de navigation de la barre d'outils Explore (suite)

Icône	Nom	Fonction
	Show Base Peak Chromatogram	Génère un BPC
	Show Spectrum	Génère un spectre à partir d'un TIC
	Copy Graph to new Window	Copie le graphique actif dans une nouvelle fenêtre
	Baseline Subtract	Ouvre la boîte de dialogue Baseline Subtract.
	Threshold	Ajuste le seuil
	Noise Filter	Ouvre la boîte de dialogue Noise Filter Options qui définit la largeur minimum d'un pic. Les signaux en dessous de cette largeur minimale sont considérés comme du bruit.
	Show ADC	Affiche les données CAN.
	Show File Info	Affiche les conditions de l'expérience dans la collecte des données.
	Add arrows	Ajoute des flèches à l'axe des X du graphique actif.
	Remove all arrows	Enlève des flèches de l'axe des X du graphique actif.
	Offset Graph	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.
	Force Peak Labels	Étiquette toutes les pics
	Expand Selection By	Définit le facteur d'expansion d'une portion d'un graphique à afficher de manière plus détaillée.
	Clear ranges	Remet la sélection étendue à son affichage normal.
	Set Selection	Définit les points de début et de fin d'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-7 : Icônes de navigation de la barre d'outils Explore (suite)

Icône	Nom	Fonction
	Normalize to Max	Met un graphique à l'échelle maximum et ainsi le pic le plus intense à sa taille maximum, visible ou pas.
	Show History	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.
	Open Compound Database	Ouvre la base de données des composés.
	Set Threshold	Ajuste le seuil
	Show Contour Plot	Affiche les données sélectionnées soit en graphique spectral soit en XIC. De plus, pour les données acquises par DAD, un tracé peut afficher des données sélectionnées soit en spectre DAD, soit en XWC.
	Show DAD TWC	Génère un TWC du DAD.
	Show DAD Spectrum	Génère un spectre DAD.
	Extract Wavelength	L'utilisateur peut extraire jusqu'à trois plages de longueurs d'onde d'un spectre DAD pour afficher le XWC.

Tableau C-8 : Icônes de l'onglet Integration et de l'assistant de quantification

Icône	Nom	Description
	Set parameters from Background Region	Utilise le fond sélectionné.
	Select Peak	Utilise le pic sélectionné.
	Manual Integration Mode	Pics manuellement intégrés.
	Show or Hide Parameters	Affiche ou masque les paramètres de détection des pics.

Tableau C-8 : Icônes de l'onglet Integration et de l'assistant de quantification (suite)

Icône	Nom	Description
	Show Active Graph	Affiche le chromatogramme de l'analyte uniquement.
	Show Both Analyte and IS	Affiche l'analyte et son chromatogramme. Disponible uniquement lorsqu'un standard interne associé existe.
	Use Default View for Graph	Rétablit la vue prédéfinie, affiche toutes les données si, par exemple, l'utilisateur a effectué un zoom sur un chromatogramme.

Tableau C-9 : Icônes du tableau de résultats

Icône	Nom	Description
	Sort Ascending by Selection	Trie la colonne sélectionnée par ordre croissant.
	Sort Descending by Selection	Trie la colonne sélectionnée par ordre décroissant.
	Lock Or Unlock Column	Verrouille ou déverrouille la colonne sélectionnée. Une colonne verrouillée ne peut pas être déplacé.
	Metric Plot By Selection	Crée un tracé métrique à partir de la colonne sélectionnée.
	Show all Samples	Affiche tous les échantillons dans le Results Table.
	Delete Formula Column	Supprime la colonne de formule.
	Report Generator	Ouvre le logiciel Reporter.

Tableau C-10 : Icône Référence rapide : Mode Quantitatif

Icône	Nom	Description
	Add/Remove Samples	Ajoute ou supprime des échantillons provenant du Results Table (Tableau de résultats).
	Export as Text	Enregistre le tableau de résultats dans un fichier texte.

Icônes de la barre d'outils

Tableau C-10 : Icône Référence rapide : Mode Quantitatif (suite)

Icône	Nom	Description
	Modify Method	Ouvre un fichier wiff.
	Peak Review - Pane	Ouvre les pics dans un volet.
	Peak Review - Window	Ouvre les pics dans une fenêtre
	Calibration - Pane	Ouvre la courbe d'étalonnage dans un volet.
	Calibration - Window	Ouvre la courbe d'étalonnage dans une fenêtre.
	Show First Peak	Montre le premier pic dans le volet ou la fenêtre.
	Show Last Peak	Montre le dernier pic dans le volet ou la fenêtre.
	Show Audit Trail	Affiche le registre d'audit du tableau de résultats.
	Clear Audit Trail	Libère le registre d'audit du Results Table. Cette fonctionnalité n'est pas disponible.
	Statistics	Ouvre la fenêtre Statistics.
	Report Generator	Ouvre le logiciel Reporter.

Tableau C-11 : Icônes du mode Acquisition

Icône	Nom	Fonction
	Start Sample	Cliquez pour démarrer l'échantillon dans la file d'attente.
	Stop Sample	Cliquez pour arrêter l'échantillon dans la file d'attente.

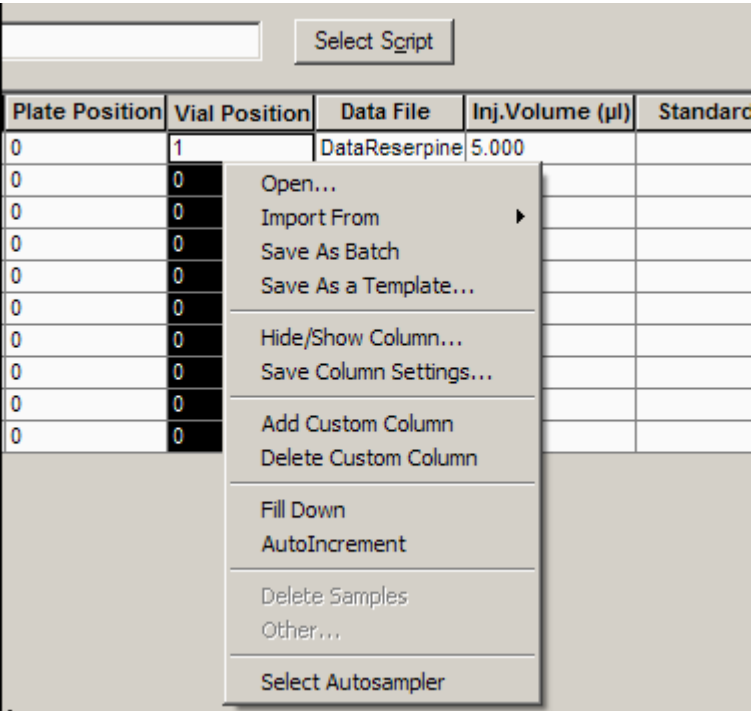
Tableau C-11 : Icônes du mode Acquisition (suite)

Icône	Nom	Fonction
	Equilibrate	Cliquez pour sélectionner une méthode à utiliser pour équilibrer le spectromètre de masse qui comprend la source d'ions, la colonne LC, le cas échéant, et n'importe quel périphérique. Cette méthode doit être la même que celle utilisée avec le premier échantillon dans la file d'attente.

Éditeur de lots

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

Illustration D-1 : Menu contextuel du lot



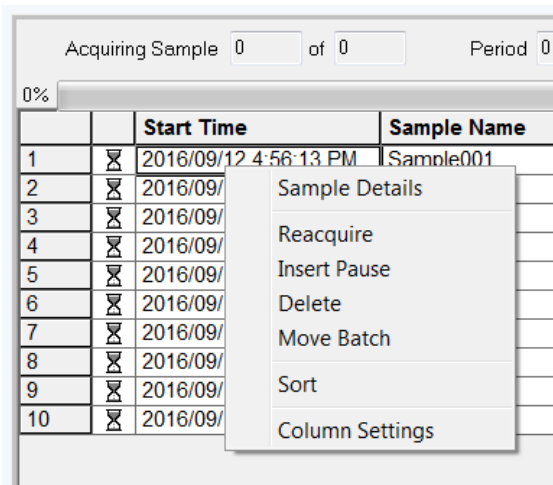
Menu	Fonction
Open	(Ouvrir)Ouvre un fichier de lots.
Import From	(Importer depuis)Importe un lot depuis un fichier.
Save As Batch	(Enregistrer comme lot)Enregistre le lot avec un nom différent.
Save As a Template	(Enregistrer comme modèle)Enregistre le lot comme un modèle.
Hide/Show Column	(Afficher/masquer la colonne)Affiche ou masque une colonne.
Save Column Settings	(Enregistrer les paramètres de colonne)Enregistre les paramètres de colonne du lot.

Menu	Fonction
Add Custom Column	(Ajouter une colonne personnalisée)Ajoute une colonne personnalisée.
Delete Custom Column	(Supprimer une colonne personnalisée) Supprime une colonne personnalisée.
Fill Down	(Remplir vers le bas)Copie les mêmes données dans les cellules sélectionnées.
AutoIncrement	(Incrémentation automatique)Incrémmente automatiquement les données dans les cellules sélectionnées.
Delete Samples	(Supprimer les échantillons)Supprime la ligne sélectionnée.
Select Autosampler	(Sélectionner l'auto-échantillonneur)Sélectionne un auto-échantillonneur.

Ordre dans la file d'attente

Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau Queue pour accéder aux options.

Illustration D-2 : Menu contextuel du gestionnaire de file d'attente



Menu	Fonction
Sample Details	(Détails de l'échantillon)Ouvre la boîte de dialogue Sample Details.
Reacquire	(Acquérir à nouveau)Acquiert à nouveau un échantillon.
Insert Pause	(Insérer une pause)Insère une pause, en secondes, entre deux échantillons.
Delete	(Supprimer)Supprime le lot ou les échantillons sélectionnés.

Menu	Fonction
Move Batch	(Déplacer le lot)Déplace le lot dans la file d'attente.
Sort	(Trier)Trie selon la colonne présélectionnée.
Column Settings	(Paramètres de colonne)Modifie les paramètres de colonne.

Afficher le menu contextuel du volet d'informations sur le fichier

Tableau D-1 : Afficher le menu contextuel du volet d'informations sur le fichier

Menu	Fonction
Copy	(Copier)Copie les données sélectionnées.
Paste	(Coller)Colle les données.
Select All	(Sélectionner tout)Sélectionne toutes les données dans le volet.
Save To File	(Enregistrer dans le fichier)Enregistre les données dans un fichier rtf.
Font	(Police)Modifie la police.
Save Acquisition Method	(Enregistrer la méthode d'acquisition)Enregistre la méthode d'acquisition dans un fichier dam.
Save Acquisition Method to CompoundDB	(Enregistrer la méthode d'acquisition dans 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	(Supprimer le volet)Supprime le volet sélectionné.

Volet de chromatogramme

Tableau D-2 : Menu contextuel du volet de chromatogramme

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.

Tableau D-2 : Menu contextuel du volet de chromatogramme (suite)

Menu	Fonction
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.
Spectral Arithmetic Wizard	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 (historique d'exploration du traitement).
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.
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 préréglées verrouillées.
Delete Pane	Supprime la fenêtre sélectionnée.

Spectra Panes (Fenêtres spectrales)

Tableau D-3 : Menu contextuel des Spectra Panes (Fenêtres spectrales)

Menu	Fonction
List Data	Donne les points des données et intègre les chromatogrammes.
Show TIC	Génère un nouveau volet contenant les TIC.

Tableau D-3 : Menu contextuel des Spectra Panes (Fenêtres spectrales) (suite)

Menu	Fonction
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 (historique d'exploration du traitement).
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	Ouvre la boîte de dialogue Re-Calibrate TOF (Étalonner à nouveau TOF)
Abscissa (Time)	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.

Tableau de résultats

Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le Results Table pour accéder aux options décrites dans le tableau suivant.

Tableau D-4 : Menu contextuel du tableau de résultats

Menu	Fonction
Full	(Plein) Affiche toutes les colonnes.
Summary	(Résumé) Affiche des colonnes spécifiques.
Analyte	(Analyte) Affiche un analyte spécifique.
Analyte Group	(Groupe d'analytes) Crée un groupe d'analytes.
Sample Type	(Type d'échantillon) Affiche des échantillons d'un type spécifique ou tous les échantillons.
Add Formula Column	(Ajouter une colonne de formule) Ajoute une colonne de formule. Si une colonne de formule est utilisée, il est recommandé à l'utilisateur de valider les résultats.
Table Settings	(Paramètres du tableau) Modifie ou sélectionne un paramètre du tableau.
Query	(Requête) Crée ou sélectionne une requête.
Sort	(Trier) Crée un tri simple ou par index.
Metric Plot	(Tracé métrique) Crée un tracé métrique.
Delete Pane	(Supprimer le volet) Supprime le volet actif.
Fill Down	(Remplir vers le bas) Copie les mêmes données dans les cellules sélectionnées.
Add Custom Column	(Ajouter une colonne personnalisée) Ajoute une colonne personnalisée.
Delete Custom Column	(Supprimer une colonne personnalisée) Supprime la colonne personnalisée sélectionnée.

Examen des pics

Cliquez avec le bouton droit de la souris sur la fenêtre ou le volet **Peak Review** pour accéder aux options indiquées dans [Tableau D-5](#).

Tableau D-5 : Menu contextuel Peak Review (Examen des pics)

Menu	Fonction
Options	(Options) Ouvre la boîte de dialogue Peak Review Options.

Tableau D-5 : Menu contextuel Peak Review (Examen des pics) (suite)

Menu	Fonction
Sample Annotation	(Annotation de l'échantillon) Ouvre la boîte de dialogue Sample Annotation.
Save Active to Text File	(Enregistrer actif vers fichier texte) Enregistre le pic sélectionné comme fichier texte.
Show First Page	(Afficher la première page) Passe au premier échantillon.
Show Last Page	(Afficher la dernière page) Passe au dernier échantillon.
Slide Show Peak Review	(Diaporama examen des pics) Ouvre le diaporama.
Update Method	(Mettre à jour la méthode) Met à jour l'algorithme pour tous les pics.
Revert to Method	(Retourner à la méthode) Sélectionne un nouveau pic à partir de la méthode de quantification actuelle.
Delete Pane	(Supprimer le volet) Supprime le volet actif.

Courbe d'étalonnage

Cliquez avec le bouton droit de la souris sur la fenêtre ou le volet Calibration pour accéder aux options décrites dans le tableau suivant.

Tableau D-6 : Menu contextuel de la courbe d'étalonnage

Menu	Fonction
Exclude (Include)	(Exclure (Inclure)) Cliquez avec le bouton droit de la souris sur un point et cliquez sur Exclude pour exclure le point de la courbe. Cliquez sur un point avec le bouton droit de la souris puis cliquez sur Include pour inclure le point.
Exclude All Analytes (Include All Analytes)	(Exclure tous les analytes (Inclure tous les analytes)) Cliquez avec le bouton droit de la souris sur un point et cliquez sur Exclude All Analytes pour exclure tous les analytes de la courbe. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur un point et cliquez sur Include All Analytes pour inclure les points.
Show Peak	(Afficher le pic) Passe en revue un pic individuel.
Overlay	(Superposer) Superpose deux graphiques.
Active Plot	(Tracé actif) Détermine quel tracé est actif.
Legend	(Légende) Affiche la légende du graphique.

Tableau D-6 : Menu contextuel de la courbe d'étalonnage (suite)

Menu	Fonction
Log Scale X Axis*	(Échelle logarithmique axe des X) Utilise une échelle logarithmique pour l'axe des X.
Log Scale Y Axis*	(Échelle logarithmique axe des Y) Utilise une échelle logarithmique pour l'axe des Y.
Delete Pane	(Supprimer le volet) Supprime le volet actif.
Home Graph	(Initialiser le graphique) Remet le graphique à l'échelle d'origine
* Une échelle logarithmique organise les points de données en présentation plus pratique pour que l'effet de tous les points puisse être contrôlé simultanément. Pour cet affichage, sélectionnez Log Scale Y Axis , versus Log Scale X , et pas uniquement sur un seul axe.	

Glossaire des symboles

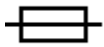
E

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 le produit est conforme aux exigences en matière de CEM de l'ACMA (Australian Communications Media Authority).
	Courant alternatif
A	Ampères (courant)
	Risque d'asphyxie
	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 du catalogue
	Attention. Consultez les instructions pour des informations sur un danger éventuel. Remarque : Dans la documentation SCIEEX, ce symbole signale un risque de blessure corporelle.

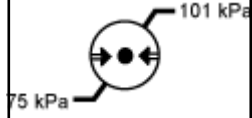
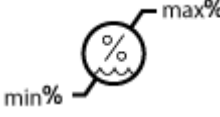
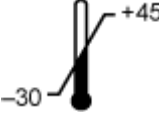
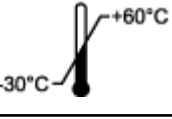
Symbole	Description
	Étiquette d'avertissement RoHS pour la Chine. Le produit d'information électronique contient certaines substances toxiques ou dangereuses. Le nombre au centre correspond à la date de la période d'utilisation sans risque pour l'environnement (EFUP) et indique le nombre d'années civiles 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.
	Consulter le mode d'emploi.
	Risque d'écrasement
	Marquage cTUVus pour le TUV 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)
	Risque pour l'environnement
	Connexion Ethernet
	Risque d'explosion

Glossaire des symboles

Symbole	Description
	Risque de blessure oculaire
	Risque d'incendie
	Risque d'exposition à des produits chimiques inflammables
	Fragile
	Fusible
Hz	Hertz
	Symbole international de sécurité « Caution, risk of electric shock (ISO 3864) », également nommé symbole de haute tension Si le capot principal doit être retiré, contacter un représentant SCIEX afin de prévenir tout choc électrique.
	Risque de 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 %.

Symbole	Description
	Conserver en position droite.
	Risque de lacération ou de coupure
	Risque d'irradiation au laser
	Risque lié au levage
	Risque magnétique
	Fabricant
	Danger provenant des pièces mobiles
	Risque lié au stimulateur cardiaque. Pas d'accès aux personnes porteuses de stimulateurs cardiaques.
	Risque de pincement
	Risque de gaz pressurisé
	Mise à la terre obligatoire
	Risque de perforation

Glossaire des symboles

Symbole	Description
	Risque de réaction chimique
	Numéro de série
	Risque de toxicité chimique
	Transporter et stocker le système à une pression comprise entre 66 kPa et 103 kPa.
	Transporter et stocker le système à une pression comprise entre 75 kPa et 101 kPa.
	Transporter et stocker le système dans les limites minimale (min) et maximale (max) spécifiées d'humidité relative, sans condensation.
	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
	Risque de radiation ultraviolette
	Marque d'évaluation de la conformité au Royaume-Uni
VA	Volts Ampères (alimentation)

Symbole	Description
V	Volts (tension)
	DEEE. Ne jetez pas cet équipement comme déchet municipal non trié. Risque pour l'environnement
W	Watts
	<i>aaaa-mm-jj</i> Date de fabrication

Glossaire des avertissements

F

Remarque : En cas de détachement d'une étiquette d'identification d'un composant, contactez un technicien de service (FSE).

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 CONNAISSMENT 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.

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

Nous contacter

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

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

Assistance technique SCIEX

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

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

Cybersécurité

Pour obtenir les informations les plus récentes sur la cybersécurité des produits SCIEX, consultez la page sciex.com/productsecurity.

Documentation

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

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

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

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

Les dernières versions de la documentation sont disponibles sur le site Web SCIEX, à l'adresse sciex.com/customer-documents.

Remarque : Pour demander une version imprimée gratuite de ce document, contacter sciex.com/contact-us.
