

# Systemes Citrine

Guide de l'utilisateur du systeme



---

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



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

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



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



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

**Rx only.**

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

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

AB Sciex™ est utilisé sous licence.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



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



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

# Table des matières

---

<b>Chapitre 1 : Précautions et limites de fonctionnement</b> .....	<b>11</b>
Informations générales de sécurité .....	11
Symboles et conventions de la documentation .....	11
Conformité réglementaire .....	12
Canada .....	12
Europe .....	12
États-Unis .....	13
International .....	13
Précautions en matière d'alimentation électrique .....	14
Alimentation principale .....	14
Prise de terre de protection .....	14
Précautions en matière de produits chimiques .....	15
Fluides sûrs pour le système .....	16
Précautions relatives à la ventilation .....	17
Précautions physiques .....	18
Précautions pour l'environnement .....	18
Environnement électromagnétique .....	19
Mise hors service et mise au rebut .....	20
<b>Chapitre 2 : Utilisation et fonction</b> .....	<b>22</b>
Utilisation prévue .....	22
Restrictions d'utilisation .....	22
Description .....	22
Personnel qualifié .....	22
Consignes de contrôle qualité .....	22
Procédés de laboratoire .....	23
Échantillons de contrôle qualité .....	23
Standards internes .....	24
Références .....	24
Utilisation et modification de l'appareil .....	24
Conditions de laboratoire .....	25
Conditions environnementales sécurisées .....	25
Spécifications des performances .....	26
<b>Chapitre 3 : Procédures d'installation et exigences spéciales</b> .....	<b>27</b>
Régler la position de la pompe à seringue intégrée .....	27
Brancher la vanne de dérivation .....	31
Brancher la vanne de dérivation en mode Injection .....	32
Brancher la vanne de dérivation en mode dérivation .....	33
Installation de la source d'ions .....	35

---

Préparer l'installation.....	35
Installer la sonde.....	36
Brancher la conduite de la source d'ions.....	38
Installer la source d'ions sur le spectromètre de masse.....	39
<b>Chapitre 4 : Principes de fonctionnement.....</b>	<b>41</b>
Présentation du système.....	41
Présentation du spectromètre de masse.....	42
Présentation de la source d'ions.....	45
Présentation du logiciel Analyst MD.....	51
Principes de fonctionnement.....	57
Mode ESI.....	58
Mode APCI.....	59
Manipulation des données.....	59
Principes de fonctionnement - Logiciel.....	60
Fenêtre du logiciel Analyst MD.....	60
Modes du logiciel Analyst MD.....	61
Analyse quantitative.....	62
Intégration.....	63
Tableaux de résultats.....	63
Calibration Curves.....	63
Types de régression.....	64
<b>Chapitre 5 : Caractéristiques des performances et spécifications.....</b>	<b>65</b>
Spécifications du spectromètre de masse.....	65
<b>Chapitre 6 : Instructions d'utilisation : flux de travail des échantillons.....</b>	<b>68</b>
<b>Chapitre 7 : Instructions d'utilisation — Spectromètre de masse et source d'ions.....</b>	<b>75</b>
Démarrer le système.....	75
Optimisation de la source d'ions.....	76
Optimisation de la sonde TurbolonSpray.....	77
Optimisation de la sonde APCI.....	81
Conseils d'optimisation.....	86
Procédures d'étalonnage du spectromètre de masse.....	87
Réinitialiser le spectromètre de masse.....	87
Arrêter et ventiler le système.....	88
<b>Chapitre 8 : Instructions d'utilisation : Profils des matériels et projets.....</b>	<b>89</b>
Profils de matériel.....	89
Créer un profil de matériel.....	89
Ajouter des périphériques à un profil de matériel.....	94
Modification des périphériques dans un profil de matériel.....	96
Dépannage des problèmes liés à l'activation du profil de matériel.....	97
Projets et sous-projets.....	98
À propos des sous-projets.....	98

## Table des matières

---

Créer des projets et des sous-projets .....	99
Créer des sous-projets .....	100
Copier des sous-projets .....	101
Basculer entre les projets et sous-projets .....	101
Dossiers projet installé .....	102
<b>Chapitre 9 : Instructions d'utilisation — réglage et étalonnage .....</b>	<b>103</b>
À propos du réglage et de l'étalonnage .....	103
Sauvegarder le dossier API Instrument .....	104
Paramètres de sauvegarde de l'instrument .....	104
Restaurer les paramètres de l'instrument .....	104
Réglage et étalonnage automatiques .....	104
Vérifiez les performances de l'instrument .....	105
Boîte de dialogue Verifying or Adjusting Performance .....	107
Récapitulatif des résultats .....	107
Récupérer le dossier API Instrument .....	108
<b>Chapitre 10 : Instructions d'utilisation : Optimisation automatique .....</b>	<b>109</b>
À propos de l'optimisation automatique .....	110
Type d'introduction de l'échantillon .....	110
Réaliser une optimisation automatique pour un analyte à l'aide d'une perfusion .....	111
Confirmer la présence de composés .....	111
Procéder à une optimisation automatique MS et MS/MS à l'aide d'une perfusion avec un ion précurseur connu et un ion produit inconnu .....	113
Vérifiez les résultats de l'optimisation .....	117
Optimisation automatique pour un analyte à l'aide de la technique FIA .....	117
<b>Chapitre 11 : Instructions d'utilisation : Méthodes d'acquisition .....</b>	<b>124</b>
Créer une méthode d'acquisition en utilisant l'éditeur de méthode d'acquisition .....	124
À propos des méthodes LC .....	125
Créer des méthodes de spectromètres de masse .....	125
Ajouter ou retirer des périphériques des méthodes d'acquisition .....	132
Modifier les méthodes d'acquisition .....	138
Techniques de balayage .....	141
Types de balayage .....	141
Types de balayage en mode LIT .....	142
À propos de l'acquisition de données spectrales .....	143
<b>Chapitre 12 : Instructions d'utilisation : Lots .....</b>	<b>144</b>
Créer et envoyer des lots .....	144
Régler les options de file d'attente .....	144
Créer et soumettre un lot .....	146
Soumettre un échantillon ou un groupe d'échantillons .....	150
Changer l'ordre de l'échantillon .....	150
Sélectionner les emplacements des flacons à l'aide de l'onglet Locations (facultatif) .....	150
Définir les détails de quantification dans l'éditeur de lots (facultatif) .....	153

---

Équilibrer le système .....	153
Acquérir les données .....	154
Importer des fichiers de lot .....	154
Conseils pour l'Éditeur de lots et de méthode d'acquisition .....	156
Conseils de dépannage de lot .....	157
Arrêter l'acquisition d'échantillons .....	157
<b>Chapitre 13 : Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des données .....</b>	<b>158</b>
Aperçu des données spectrales et chromatographiques .....	158
Analyser les données .....	159
Ouvrir les fichiers de données .....	159
Naviguer entre les échantillons dans un fichier de données .....	160
Afficher les conditions expérimentales .....	160
Afficher les données dans des tableaux .....	160
Afficher les données quantitatives de base .....	162
Spectres .....	163
Chromatogrammes .....	163
Montrer les TIC d'un spectre .....	164
Afficher un spectre d'un TIC .....	165
XIC .....	166
BPC .....	169
Ajuster le seuil .....	170
Générer des TWC .....	171
Générer des XWC .....	171
Afficher données DAD .....	172
Show ADC Data .....	172
Traitement des données graphiques .....	173
Gestion des données .....	173
Effectuer un zoom avant sur un graphique .....	175
Marquer les graphiques .....	175
Superposer et additionner des spectres ou des chromatogrammes .....	177
Exécuter des soustractions de bruit de fond .....	178
Effectuer une soustraction du bruit de fond sur un spectre .....	178
Déverrouiller les plages .....	179
Algorithmes de lissage .....	180
Algorithme de lissage .....	180
Algorithme de lissage gaussien .....	180
Données lissées .....	181
Données lissées utilisant l'algorithme de lissage .....	181
Données lissées utilisant l'algorithme gaussien .....	182
Données du centroïde .....	182
Enregistrer et ouvrir les fichiers de données traités .....	184
Enregistrer un fichier de données traitées .....	184
Ouvrir un fichier de données traitées .....	185
Travailler avec les graphiques de contour .....	185
Afficher un graphique de contour .....	186
Sélectionner une zone dans un graphique de contour .....	186
Définir l'intensité et l'absorbance dans un graphique de contour .....	186

## Table des matières

---

Modifier les couleurs dans un graphique de contour .....	187
Interprétation de la fragmentation .....	187
Travailler avec l'outil d'interprétation de la fragmentation .....	187
Afficher les différences de formule pour les fragments .....	189
Bases de données de la bibliothèque .....	190
Basculer entre les bases de données existantes de la bibliothèque .....	190
Se connecter à une base de données locale de la bibliothèque .....	192
Se connecter à une base de données de la bibliothèque sur serveur .....	193
Travailler avec les enregistrements de la bibliothèque .....	195
Rechercher un spectre similaire .....	197
Conseils pour la recherche en bibliothèque .....	199
<b>Chapitre 14 : Instructions d'utilisation : Analyse et traitement des données</b>	
<b>quantitatives</b> .....	<b>201</b>
Analyse quantitative .....	201
Méthodes de quantification .....	202
Build Quantitation Method .....	202
Quantitation Wizard .....	202
Quick Quant .....	202
Méthodes de quantification et tableaux de résultats .....	202
Définir la mise en page des tableaux de résultats .....	208
Trier les données dans les tableaux de résultats .....	209
Examen des pics et intégration manuelle des pics .....	212
Examen des pics .....	213
Pics intégrés manuellement .....	217
Courbes d'étalonnage .....	218
Affichage des courbes d'étalonnage .....	219
Courbes d'étalonnage superposées .....	220
Statistique d'échantillon .....	221
Afficher les statistiques pour les standards et les CQ .....	221
Tracés métriques .....	222
Générer des tracés métriques .....	222
<b>Chapitre 15 : Logiciel Reporter</b> .....	<b>226</b>
Interface utilisateur du logiciel Analyst Reporter .....	227
Générer des rapports .....	229
<b>Chapitre 16 : Informations relatives au service et à la maintenance —</b>	
<b>Spectromètre de masse</b> .....	<b>231</b>
Calendrier de maintenance recommandé .....	231
Nettoyage des surfaces .....	234
Vider le conteneur de trop-plein .....	234
Nettoyer la façade .....	236
Symptômes de contamination .....	237
Matériel nécessaire (non fourni) .....	237
Bonnes pratiques de nettoyage .....	238
Préparez le spectromètre de masse .....	239

Nettoyer la plaque rideau .....	240
Nettoyer l'avant de la plaque à orifice .....	242
Remettre le spectromètre de masse en service .....	242
Stockage et manutention .....	242
Vérifiez le niveau d'huile de la pompe primaire .....	243
Entretien et maintenance — Source d'ions .....	243
IonDrive Turbo V .....	245
Retirer la source d'ions .....	246
Nettoyer les surfaces .....	247
Nettoyer la sonde .....	247
Retirer la sonde .....	248
Remplacer l'électrode .....	248
Remplacer l'aiguille de décharge par effet corona .....	250
Remplacer le tube d'échantillonnage .....	252
<b>Chapitre 17 : Dépannage du spectromètre de masse .....</b>	<b>253</b>
<b>Annexe A : Paramètres des systèmes de la série Citrine Paramètres du système .....</b>	<b>259</b>
<b>Annexe B : Paramètres de la source et tensions .....</b>	<b>265</b>
TurbolonSpray .....	265
Paramètres de la sonde APCI .....	266
Position de la sonde .....	266
Composition du solvant .....	266
<b>Annexe C : Étalonnage des ions et solutions .....</b>	<b>268</b>
<b>Annexe D : Icônes de la barre d'outils .....</b>	<b>270</b>
<b>Annexe E : Théorie de fonctionnement : source d'ions .....</b>	<b>280</b>
Mode d'ionisation par électronébulisation .....	280
Mode APCI .....	281
Région d'ionisation APCI .....	284
<b>Annexe F : Optimisation manuelle du composé .....</b>	<b>286</b>
À propos de l'optimisation manuelle du composé .....	287
À propos des types de balayage .....	287
Optimiser manuellement un analyte .....	287
Confirmer la présence de composés .....	288
Optimiser les paramètres de la MS .....	290
Déterminer les ions produits pour l'optimisation .....	291
Optimiser le potentiel de sortie de la cellule de collision pour chaque ion produit .....	293
Optimiser manuellement les paramètres de la source d'ions et de gaz .....	293
Préparer la source d'ions .....	294
Optimisez les paramètres de la source d'ions .....	294

## Table des matières

---

Paramètres avancés .....	295
Optimiser AF2 .....	295
À propos de la propagation de l'énergie de collision (CES) .....	295
<b>Annexe G : Menus contextuels .....</b>	<b>297</b>
Éditeur de lots .....	297
États de la file d'attente et état du périphérique .....	298
Statut de la file d'attente .....	298
Vue Instrumentation et icônes de l'état des périphériques .....	300
Ordre dans la file d'attente .....	301
Menu contextuel des volets de graphiques de contour .....	302
Afficher le menu contextuel du volet d'informations sur le fichier .....	302
Spectra Panes (Fenêtres spectrales) .....	303
Volet de chromatogramme .....	304
Tableau de résultats .....	305
Examen des pics .....	306
Courbe d'étalonnage .....	306
<b>Annexe H : Glossaire des symboles .....</b>	<b>308</b>
<b>Annexe I : Glossaire des avertissements .....</b>	<b>314</b>
<b>Nous contacter .....</b>	<b>316</b>
Formation destinée aux clients .....	316
Centre d'apprentissage en ligne .....	316
Assistance technique SCIEX .....	316
Cybersécurité .....	316
Documentation .....	316

# 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.**

---

## Précautions et limites de fonctionnement

---



**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.

### 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
  - CAN/CSA C22.2 N° 61010-2-101

### Europe

- **Dispositifs de diagnostic in vitro (IVD) :** Réglementation relative au diagnostic in vitro 2017/746
- **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 61326-2-6
  - 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
  - EN 61010-2-101
- **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 et 2015/863/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
  - CEI 61010-2-101

## 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
  - CEI 61010-2-101

## 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 la section : [Caractéristiques des performances et spécifications](#) ou 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.

---

### 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](https://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 la fréquence de réglage, consultez la section : [Matériel nécessaire \(non fourni\)](#).



---

**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 %
- 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.

---



---

**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.

---

## Précautions et limites de fonctionnement

---



**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 de surface chaude. Laisser la source d'ions IonDrive Turbo V refroidir pendant au moins 90 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 lié au levage. Utilisez un appareil de levage mécanique pour soulever et déplacer le spectromètre de masse. Si le spectromètre de masse doit être déplacé manuellement, six personnes au moins sont nécessaires pour le déplacer en toute sécurité. 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.**

---

**ATTENTION : contamination potentielle du système. Si vous utilisez un générateur de gaz, consulter la documentation accompagnant le générateur de gaz pour obtenir des informations du fabricant sur l'utilisation d'un générateur de gaz avec un compresseur. Par exemple, l'utilisation d'un générateur de gaz à l'aide d'un compresseur peut provoquer l'introduction d'hydrocarbures dans le spectromètre de masse, si ces derniers sont présents dans l'environnement.**

---

## 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).

**ATTENTION : Risque de résultat erroné. N'utilisez pas cet appareil à proximité de sources de rayonnements électromagnétiques intenses, telles que des sources intentionnelles de RF non blindées, car elles peuvent interférer avec son fonctionnement correct.**

---

## Précautions et limites de fonctionnement

---

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.

---

**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 manutention](#).

**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.

## Utilisation prévue

Le système Citrine est un système de chromatographie en phase liquide couplée à la spectrométrie de masse en tandem (LC-MS/MS), conçu pour identifier les composés inorganiques ou organiques dans des échantillons humains en ionisant le composé à l'étude et en séparant les ions ainsi obtenus au moyen d'un champ électrique en fonction de leur masse. Usage réservé au diagnostic *in vitro*.

## Restrictions d'utilisation

Le système Citrine est conçu pour être utilisé dans un environnement de laboratoire clinique par un personnel de laboratoire qualifié pour un usage professionnel exclusivement.

## Description

Le système Citrine comporte les composants suivants :

- Un spectromètre de masse Citrine QTRAP ou un spectromètre de masse Citrine Triple Quad avec une source d'ions IonDrive Turbo V qui utilise soit la sonde TurbolonSpray, soit la sonde d'ionisation chimique à pression atmosphérique (APCI), et des pompes primaires.
- Un ordinateur et un moniteur fournis par SCIEX, équipés du logiciel Analyst MD pour l'optimisation de l'instrument, le développement de la méthode d'acquisition, l'acquisition de données et le logiciel MultiQuant MD pour le traitement.

## 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.

## Consignes de contrôle qualité

Un laboratoire clinique utilisant un système Citrine doit respecter les procédures couvrant, entre autres, la formation des opérateurs, le développement et la validation d'analyses, ainsi que les audits externes de performance des analyses de laboratoire.

---

## Procédés de laboratoire

Les méthodes doivent être vérifiées avant leur mise en œuvre clinique pour la génération de résultats<sup>2,5</sup>. Vous devez également établir des procédures opérationnelles normalisées (SOP) pour les méthodes d'analyse afin de vous assurer que les processus préanalytique, analytique et postanalytique ne varient pas de leur utilisation prévue<sup>3</sup>. Par exemple prévoyez une SOP pour au moins :<sup>3,4</sup>

- Méthodes de prélèvement des échantillons
- Méthodes de préparation des échantillons
- Paramètres et conditions initiales de la chromatographie en phase liquide
- Conditions initiales de paramétrage et d'étalonnage du spectromètre de masse
- Maintenance de la chromatographie en phase liquide et de la spectrométrie de masse
- Méthodes d'acquisition du spectromètre de masse
- Méthodes de préparation des listes de lots d'échantillons
- Méthodes d'analyse de données
- Examen des données
- Diffusion des protocoles une fois les données analysées

Nous recommandons que les utilisateurs passent en revue manuellement tous les résultats d'intégration afin de garantir la qualité des données brutes ainsi que l'exactitude des intégrations de pics effectuées par le logiciel Analyst MD. L'examen des pics chromatographiques doit être effectué par un professionnel qualifié. Si le logiciel Analyst MD n'a pas correctement intégré un pic chromatographique, ce qui peut être dû à la présence de pics d'élution rapprochés, de pics divisés, de données bruitées ou d'un signal de fond élevé, les intégrations de pics doivent être corrigées selon les SOP établies par le laboratoire pour les méthodes d'analyse.

## Échantillons de contrôle qualité

Les échantillons de contrôle qualité (CQ) permettent d'obtenir des informations sur les performances de la méthode analytique et d'évaluer l'intégrité et la validité des échantillons inconnus analysés dans la série<sup>2</sup>. Les données des échantillons QC doivent faire l'objet d'une surveillance quotidienne. Il convient de respecter les consignes relatives à l'inclusion d'échantillons CQ dans une série d'analyses.

Les échantillons QC peuvent être obtenus dans le commerce avec la documentation appropriée ou à partir d'un mélange caractérisé d'échantillons de patients<sup>2</sup>. Nous recommandons qu'au moins deux échantillons CQ soient inclus par série d'analyses d'échantillons de patients<sup>1,2</sup>. Il convient de procéder à l'examen des données pour confirmer que les échantillons QC se trouvent dans les limites prédéfinies de la méthode d'analyse. Il se peut que les données acquises dans une série d'analyses où les échantillons QC figurent hors des limites prédéfinies soient non valides<sup>2</sup>. Consultez la procédure opérationnelle normalisée (SOP) du laboratoire.

### Standards internes

Les étalons internes sont des analytes qui sont des analogues structurellement similaires ou des analytes marqués par un isotope stable ajoutés à tous les types d'échantillon, à savoir, étalons, témoins, CQ et inconnus, à des concentrations constantes connues afin de faciliter la quantification<sup>3</sup>. L'intensité du signal des standards internes peut être vérifiée sur une série d'analyses pour confirmer l'intégrité de la méthode d'analyse et la validité d'un échantillon donné.

Les SOP doivent prévoir des critères d'évaluation pour les standards internes et les échantillons CQ. Les échantillons qui ne correspondent pas aux critères peuvent indiquer des problèmes liés aux performances de la méthode, du système ou de l'échantillon<sup>2,5</sup>. Il convient d'utiliser des standards internes (analytes marqués par un isotope) pour les mesures impliquant des décisions critiques. L'identification précoce de ces problèmes permet au laboratoire d'enquêter, de corriger et de répéter éventuellement l'analyse, si nécessaire<sup>2,5</sup>.

### Références

1. Guidance for Industry: Bioanalytical Method Validation; U.S. Department of Health and Human Services Food and Drug Administration; Center for Drug Evaluation (CDER) Centre for Veterinary Medicine (CVM), May 2001 BP
2. Standard CLSI C50–A–Vol. 27, No. 24—Mass Spectrometry in the Clinical Laboratory: General Principles and Guidance: Approved Guideline
3. ISO 17025:2005—Exigences générales concernant la compétence des laboratoires d'étalonnages et d'essais
4. ISO 15189:2012 Laboratoires de biologie médicale - Exigences concernant la qualité et la compétence
5. CLSI document C62-A: Liquid Chromatography-Mass Spectrometry Methods; Approved Guideline Volume 34 Number 16, October 2014

### 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.**

---



**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. Si le spectromètre de masse doit être déplacé manuellement, six personnes au moins sont nécessaires pour le déplacer en toute sécurité. 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.

Les conditions de garantie sont disponibles sur la page [sciex.com/warranty](https://sciex.com/warranty). La durée de vie prévue du système Citrine est de 7 ans à compter de la date de fabrication. Cette durée de vie peut être prolongée lorsque les procédures de maintenance planifiée sont effectuées.

## 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 :  $\pm 10$  % de la tension nominale

## Utilisation et fonction

---

- 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 15 °C à 30 °C (59 °F à 86 °F)

Au fil du temps, la température doit rester comprise dans une plage de 4 °C (7.2 °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

# Procédures d'installation et exigences spéciales

# 3

Un technicien de service SCIEX installe et configure le système.

Cette section traite des procédures permettant de connecter et de configurer le matériel et le logiciel du système. Consultez ces procédures si le système doit être déplacé, rebranché ou reconfiguré.



---

**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.**

---

Pour des informations sur l'installation du logiciel Analyst MD, consultez le document : *Guide d'installation du logiciel*.

## 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.**

---



---

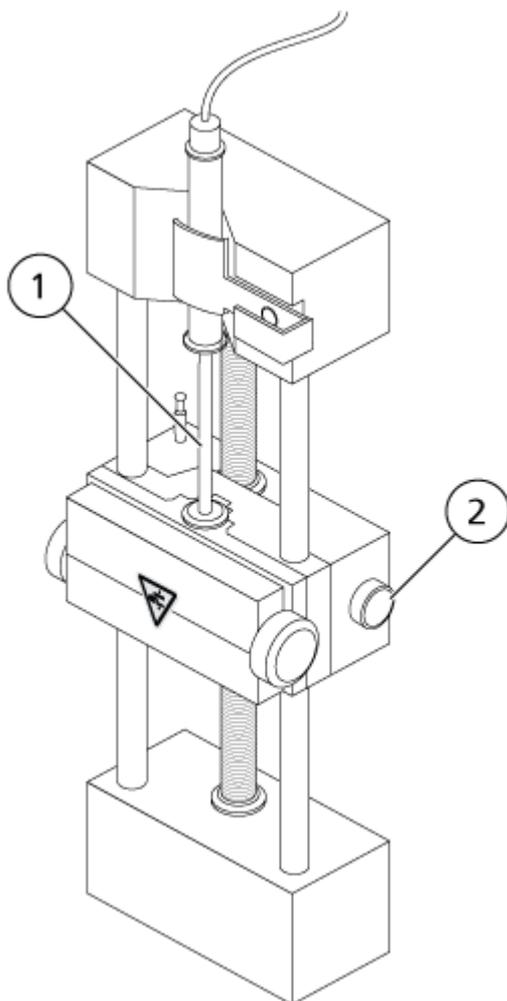
**AVERTISSEMENT ! Risque de perforation. S'assurer que la seringue est correctement installée dans la pompe à seringue et que l'arrêt automatique de la pompe à seringue est réglé correctement pour éviter d'endommager ou de casser la seringue en verre. Si la seringue se casse, suivre les procédures de 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: [Présentation du spectromètre de masse](#).

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

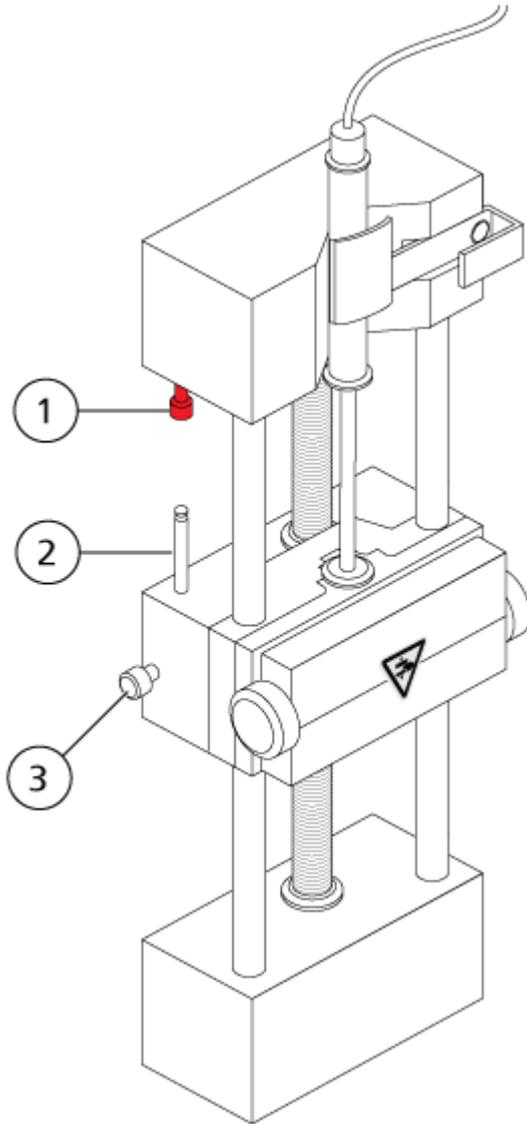
Illustration 3-1 : Descente de la seringue



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

3. Assurez-vous que l'extrémité de la seringue affleure la base et que l'axe de la seringue reste dans l'encoche.
4. 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.

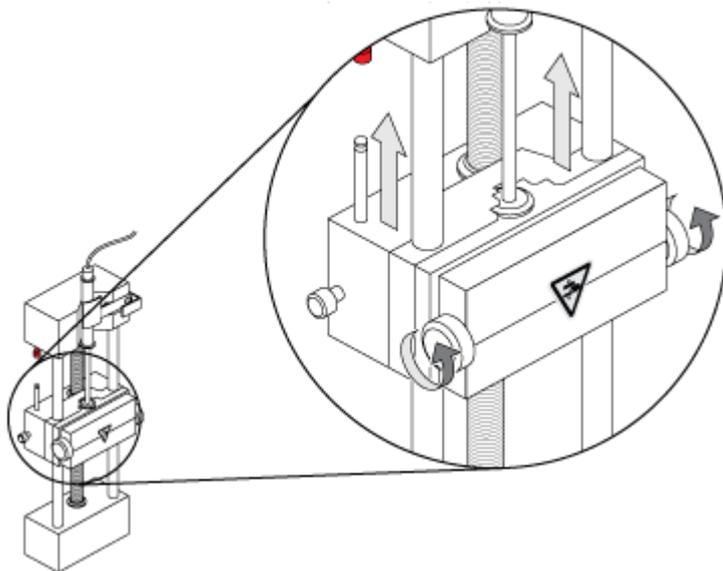
Illustration 3-2 : Arrêt automatique de la seringue



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.

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

**Illustration 3-3 : Vis de la pompe à seringue**



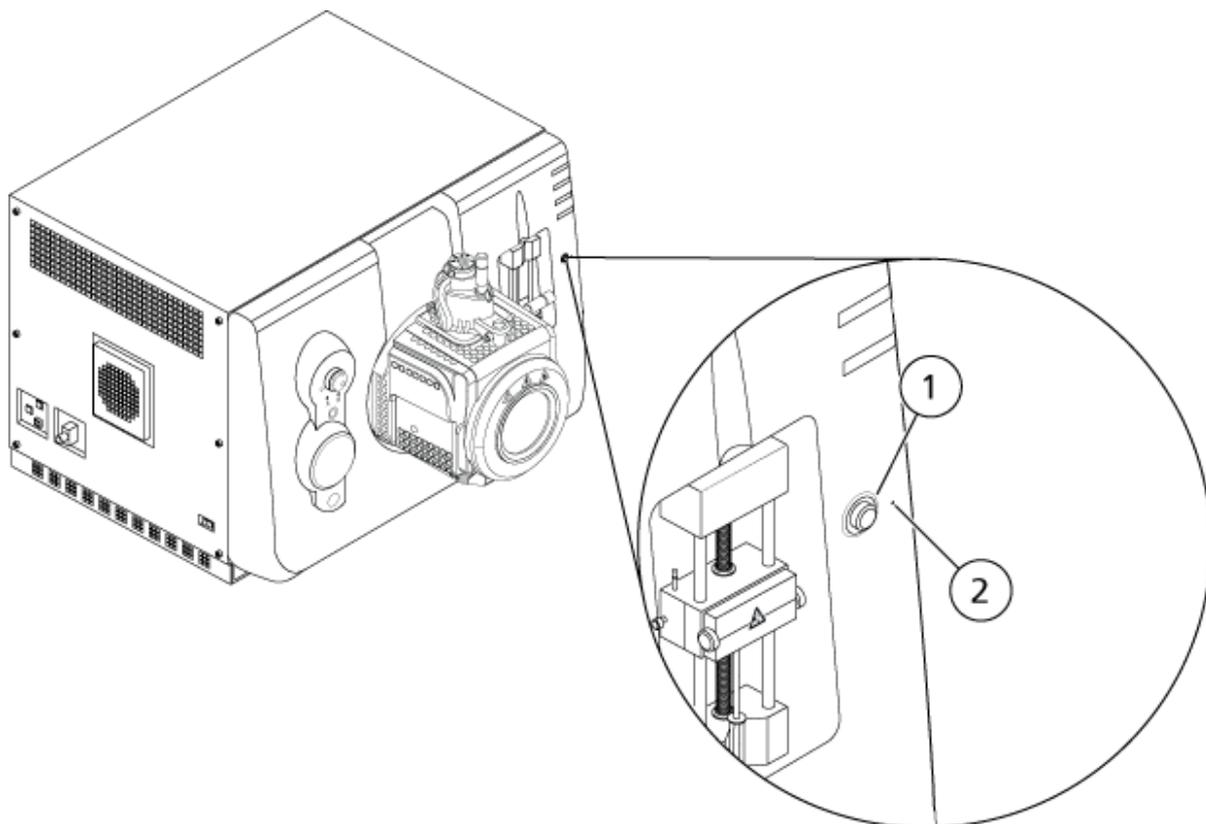
6. Assurez-vous que le spectromètre de masse et la pompe à seringue intégrée sont activés dans le logiciel.

---

**Remarque :** pour une utilisation manuelle ultérieure, une fois que le spectromètre de masse est à l'état Ready, lancez le flux en appuyant sur le bouton à droite de la seringue sur le spectromètre de masse. Le voyant qui se trouve à côté du bouton clignote lorsque la pompe à seringue est en cours d'utilisation. Le débit de la pompe à seringue peut également être contrôlé automatiquement par le logiciel Analyst MD

---

Illustration 3-4 : Voyant de pompe à seringue



Élément	Description
1	Bouton de mise sous tension et hors tension de la pompe à seringue
2	LED d'état de la pompe à seringue

7. Dans le logiciel Analyst MD , sur la barre de navigation bar, double-cliquez sur **Manual Tuning**.
8. Cliquez sur **Start Syringe**.
9. Pour arrêter la pompe à seringue, cliquez sur **Stop Syringe**.

## Brancher la vanne de dérivation

La vanne de dérivation intégrée, qui est située à côté de la source d'ions, peut être branchée en mode Injection ou Dérivation. Pour configurer la vanne, ouvrez l'onglet Configuration et assurez-vous que la case **Use integrated injector/diverter valve** est cochée. Consultez la section : [Ajouter des périphériques à un profil de matériel](#) .

**ATTENTION : Risque de résultat erroné. N'appuyez pas sur le bouton de la vanne de dérivation au cours d'une analyse. Cela peut produire des données incorrectes.**

## Brancher la vanne de dérivation en mode Injection

Lorsque la vanne est en position A, l'échantillon passe par la boucle externe. Lorsque la vanne passe en position B, l'échantillon est injecté.

Branchez la vanne en mode Injection.

**Illustration 3-5 : Vanne de dérivation – Mode Injection en position A**

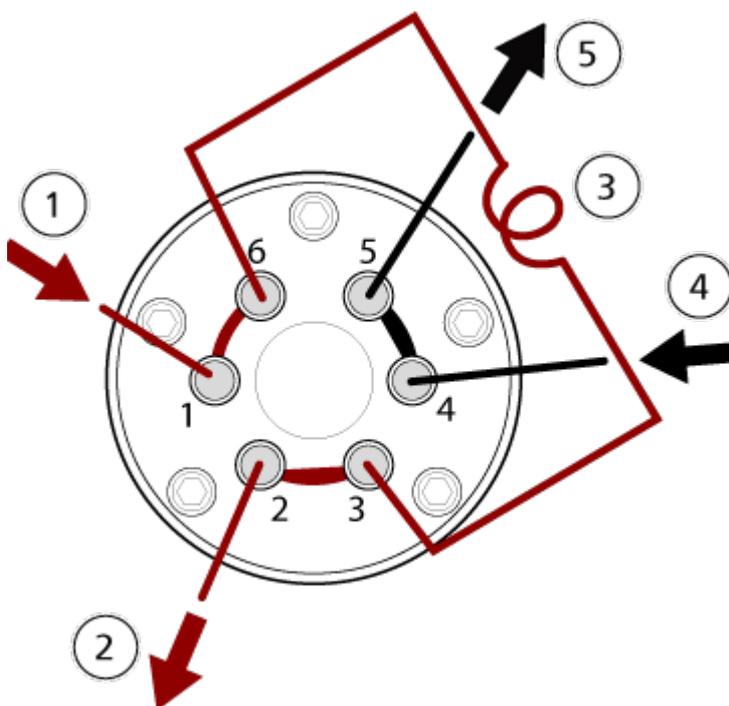
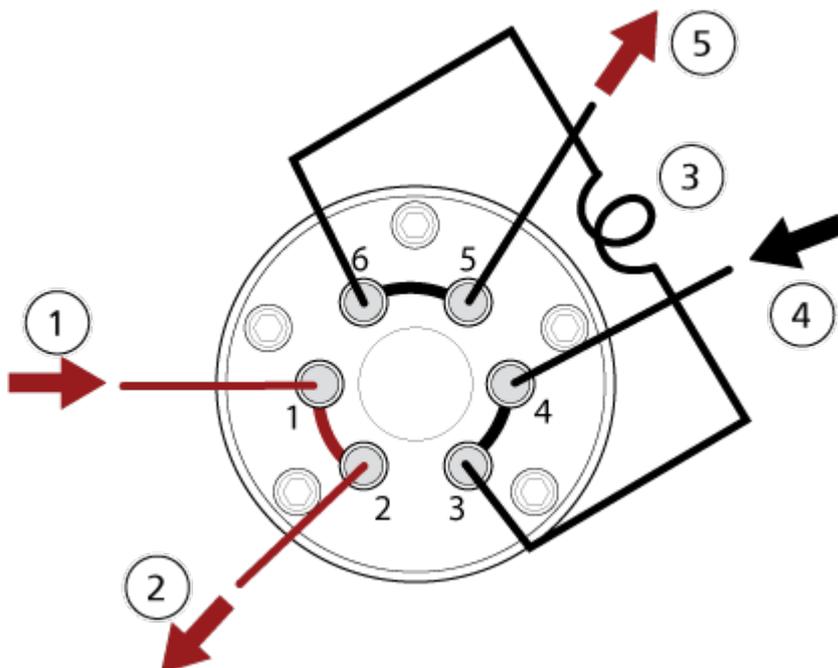


Illustration 3-6 : Vanne de dérivation – Mode Injection en position B



Élément	Description
1	Échantillon
2	Déchets éjectés
3	Boucle d'échantillon (ports 3 et 6)
4	Entrée de la phase mobile
5	Vers la colonne, ou vers le spectromètre de masse si aucune colonne n'est installée

## Brancher la vanne de dérivation en mode dérivation

Lorsque la vanne est en position A, le flux de l'échantillon est dirigé vers le spectromètre de masse. Lorsque la vanne commute en position B, le flux est dirigé vers les déchets.

Branchez la vanne en mode Dérivation.

Illustration 3-7 : Vanne de dérivation – Mode Dérivation en position A

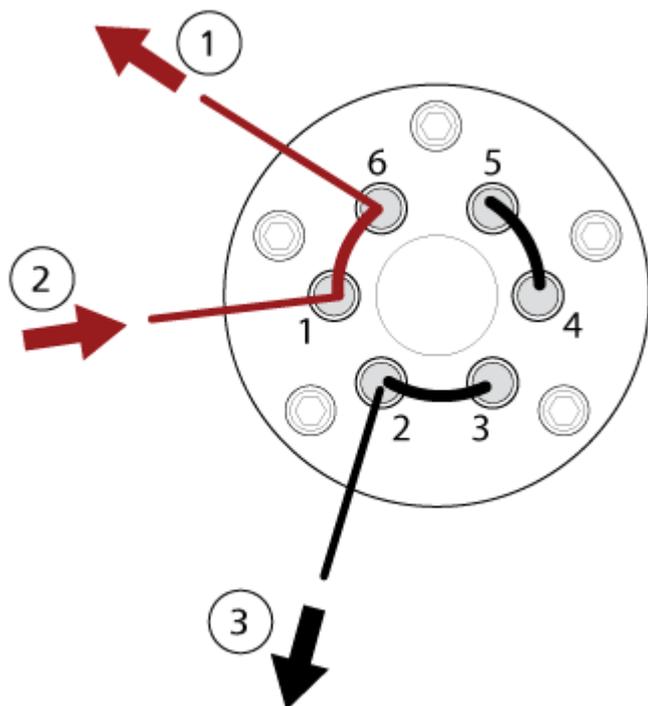
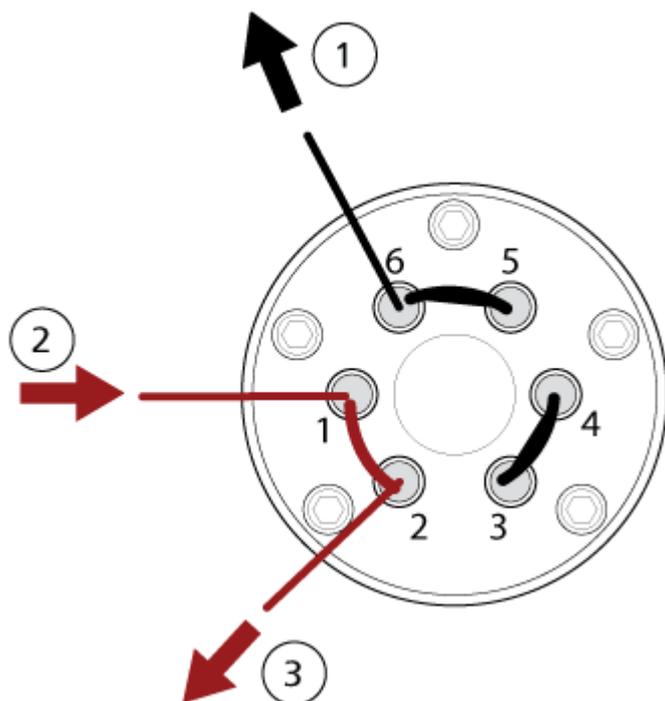


Illustration 3-8 : Vanne de dérivation – Mode Dérivation en position B



Élément	Description
1	Vers le spectromètre de masse

Élément	Description
2	Depuis la colonne
3	Déchets éjectés

## Installation de la source d'ions



**AVERTISSEMENT !** Risque de choc électrique. Installer la source d'ions sur le spectromètre de masse à la fin de cette procédure. Une haute tension est présente lorsque la source d'ions est installée.

**ATTENTION :** Risque d'endommagement du système. Ne pas soulever ou transporter la source d'ions d'une seule main. La source d'ions est conçue pour être soulevée ou transportée à deux mains, une de chaque côté du système.

La source d'ions est connectée à l'interface avec le vide et maintenue en place par deux loquets. L'intérieur de la source d'ions est visible à travers les fenêtres situées sur le côté et à l'avant de la source d'ions.

Quand la source d'ions est installée, le logiciel la reconnaît et affiche son identification.

Dans ce guide, le logiciel qui contrôle le spectromètre de masse est appelé logiciel de contrôle.

### Matériel nécessaire

- Source d'ions
- Tubulure PEEK rouge (orifice de 0,005 pouce)

## Préparer l'installation



**AVERTISSEMENT !** Risque de perforation. Être vigilant lors de la manipulation de l'électrode. La pointe de l'électrode est extrêmement acérée.

**Conseil !** Ne pas jeter l'emballage vide. Le garder pour stocker la source d'ions lorsqu'elle n'est pas utilisée.

Régalez l'écrou de l'électrode sur la sonde pour déplacer la pointe de l'électrode à l'intérieur du tube d'électrode. Voir les figures [Illustration 4-4](#) et [Illustration 4-5](#).

Pour garantir une stabilité et des performances optimales, la pointe de l'électrode doit s'étendre de 0,5 à 1,0 mm au-delà de l'extrémité de la sonde. Voir la section : [Optimiser la position de la sonde TurbolonSpray](#) ou [Optimiser la position de la sonde APCI](#).

## Installer la sonde



**AVERTISSEMENT !** Risque d'électrocution. Vérifier que la source d'ions est complètement débranchée du spectromètre de masse avant de continuer.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de perforation. Être vigilant lors de la manipulation de l'électrode. La pointe de l'électrode est extrêmement acérée.

---

**ATTENTION :** Risque d'endommagement du système. Ne pas laisser la pointe de l'électrode saillante ou l'aiguille de décharge par effet corona toucher une partie quelconque du boîtier de la source d'ions afin d'éviter d'endommager la sonde.

---

**ATTENTION :** Risque d'endommagement du système. Assurez-vous la pointe de l'aiguille de décharge par effet corona est éloignée de l'orifice si la sonde TurbolonSpray est utilisée.

---

<b>Procédures préalables</b>
------------------------------

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Retirer la source d'ions.</a></li></ul> |
|---|

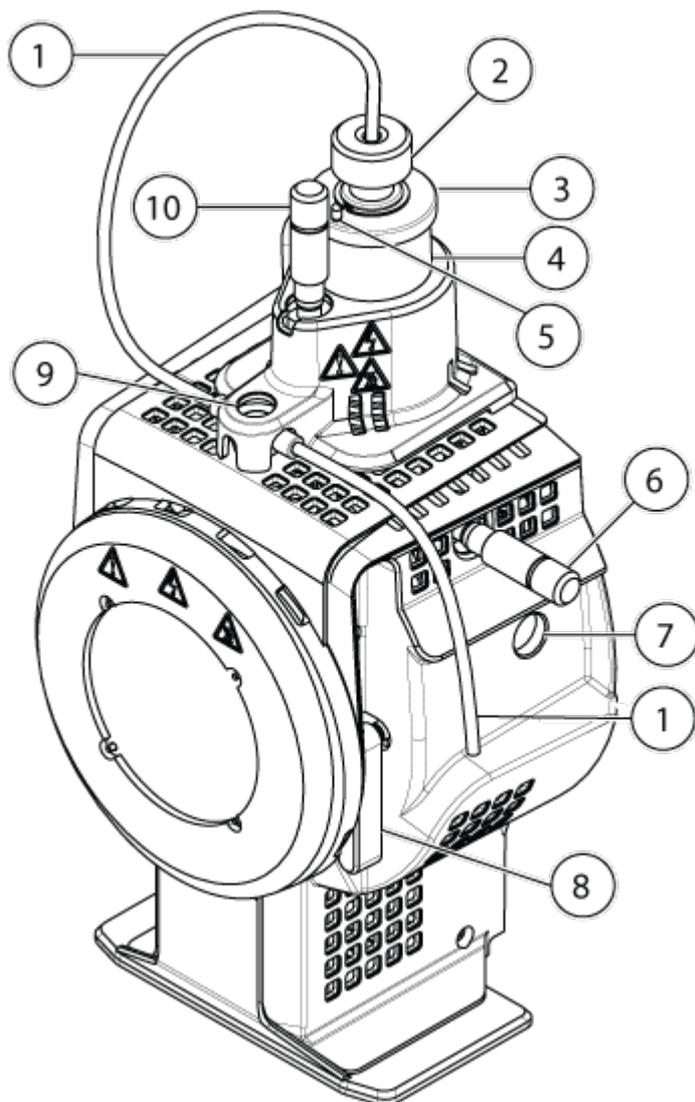
La sonde n'est pas préinstallée dans la source d'ions. Retirez toujours la source d'ions du spectromètre de masse avant d'échanger les sondes.

---

**Remarque :** Si la sonde n'est pas correctement installée dans la source d'ions, l'alimentation haute tension du spectromètre de masse et du système d'évacuation de la source est coupée.

---

Illustration 3-9 : Composants de la source d'ions



Élément	Description
1	Tube d'échantillonnage
2	Écrou d'ajustement de l'électrode
3	Anneau de retenue
4	Tour de la sonde
5	Vis de réglage de la position de l'aiguille de décharge par effet corona
6	Le micromètre est utilisé pour positionner la sonde sur l'axe horizontal pour la sensibilité du réglage de la source d'ions
7	Port de la fenêtre
8	Un des deux loquets de la source qui la fixent au spectromètre de masse

## Procédures d'installation et exigences spéciales

---

Élément	Description
9	Raccord de mise à la terre, situé sous le capot de la source d'ions
10	Micromètre utilisé pour positionner la sonde sur l'axe vertical pour le réglage de la sensibilité de la source d'ions.

1. Assurez-vous que la pointe de l'aiguille de décharge corona est dirigée à l'opposé de l'orifice de la plaque rideau. Consulter la section : [Régler la position de l'aiguille de décharge corona](#).
2. Insérer la sonde dans la tour. Alignez l'orifice de la sonde sur la vis de réglage de l'aiguille de décharge corona qui se trouve sur le dessus de la source d'ions. Voir la section : [Composants de la source d'ions](#).
3. Appuyez délicatement sur la sonde jusqu'à ce que les contacts s'engagent avec ceux de la tour.
4. Tournez l'anneau de retenue sur la sonde, appuyez dessus pour engager les filetages sur la sonde dans ceux de la tour, puis serrez-le complètement à la main.
5. Uniquement pour la sonde APCI, vérifiez que la pointe de l'aiguille de décharge par effet corona est orientée vers l'orifice de la plaque rideau. Consulter la section : [Régler la position de l'aiguille de décharge corona](#).

## Brancher la conduite de la source d'ions



**AVERTISSEMENT !** Risque de choc électrique. Ne pas oublier le raccord de mise à la terre. Le raccord de mise à la terre assure la mise à la terre entre le spectromètre de masse et le dispositif d'introduction de l'échantillon.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. S'assurer que l'écrou du tube d'échantillonnage est serré correctement avant de faire fonctionner cet équipement pour éviter les fuites.

---

Voir la section : [Composants de la source d'ions](#).

1. Insérez une conduite PEEK rouge de 30 cm dans l'écrou du tube d'échantillonnage.
2. Installez l'écrou du tube d'échantillonnage sur le port situé au-dessus de la sonde, puis serrez l'écrou du tube d'échantillonnage à la main jusqu'à ce qu'il soit bien ajusté.
3. Branchez l'autre extrémité du tube au raccord de mise à la terre sur la source d'ions.

## Installer la source d'ions sur le spectromètre de masse

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de choc électrique. Installer la sonde dans la source d'ions avant d'installer la source d'ions sur le spectromètre de masse.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de pincement. Lors de l'installation de la source d'ions, prenez garde à ne pas se pincer les doigts entre la source d'ions et l'interface avec le vide.

---

**ATTENTION :** Risque d'endommagement du système. Ne pas laisser la pointe de l'électrode saillante ou l'aiguille de décharge par effet corona toucher une partie quelconque du boîtier de la source d'ions afin d'éviter d'endommager la sonde.

---

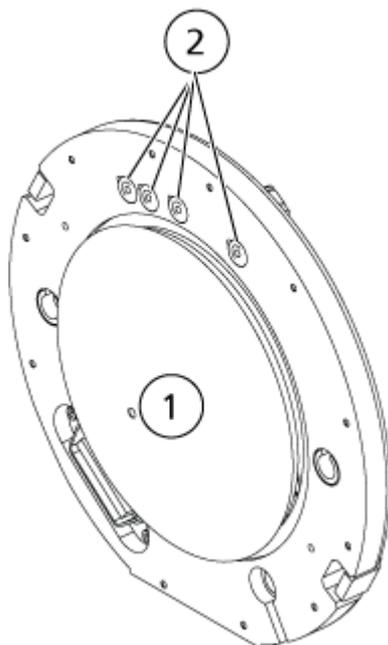
**Remarque :** Si la sonde n'est pas correctement installée dans la source d'ions, l'alimentation haute tension du spectromètre de masse et du système d'évacuation de la source est coupée.

---

### Conditions préalables

- Assurez-vous que tous les joints toriques sont présents sur l'interface de l'enceinte sous vide.

#### Illustration 3-10 : Joints toriques de l'interface avec le vide



Élément	Description
1	Plaque rideau
2	Joints toriques

- Assurez-vous que les loquets de la source d'ions qui se trouvent de chaque côté de la source d'ions sont orientés dans la position 12 h. Voir la section : [Composants de la source d'ions](#).
- Alignez la source d'ions sur l'interface de l'enceinte sous vide en veillant à ce que les broches de guidage de la source d'ions soient alignées sur les connecteurs de l'interface.
- Appuyez délicatement la source d'ions contre l'interface avec le vide, puis tournez les loquets de la source d'ions vers le bas de manière à verrouiller la source d'ions en position.  
Le spectromètre de masse reconnaît la source d'ions, puis affiche l'identifiant de cette dernière dans le logiciel de contrôle.
- Raccordez la conduite PEEK rouge du dispositif d'alimentation de l'échantillon à l'autre côté du raccord de mise à la terre sur la source d'ions.

Le système est conçu pour l'analyse de petites molécules dans des échantillons biologiques. En fonction des propriétés des analytes ou de la complexité de l'échantillon de départ, la préparation des échantillons peut inclure différents types d'extraction ou de filtration avant l'extraction des analytes de la solution. L'échantillon est séparé par une chromatographie en phase liquide. Les fractions obtenues sont ensuite introduites dans un spectromètre de masse pour une autre séparation fondée sur la masse moléculaire spécifique de chacun des composés.

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

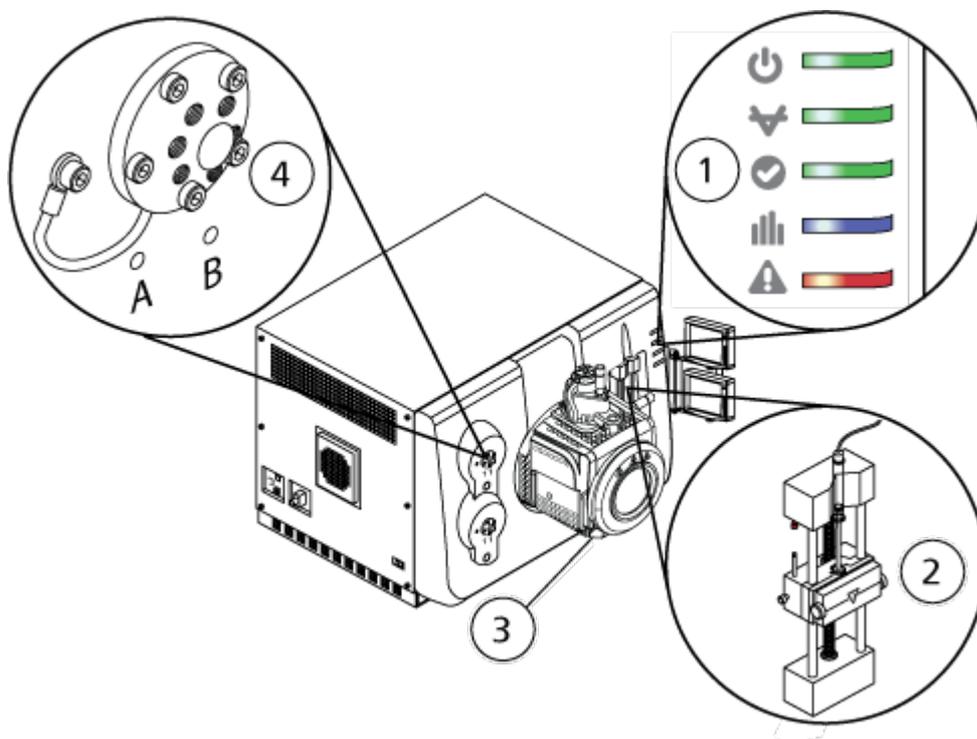
## Présentation du système

Le système Citrine comporte les composants suivants :

- Les systèmes Citrine QTRAP ou Citrine Triple Quad avec deux pompes primaires et une source d'air comprimé et d'azote
- Une source d'ions IonDrive Turbo V utilisant soit la sonde TurbolonSpray, soit la sonde d'ionisation chimique à pression atmosphérique (APCI).
- Ordinateur et moniteur fournis par SCIEX, équipés du logiciel Analyst MD Pour obtenir les caractéristiques techniques et les exigences relatives à l'ordinateur, consultez le document : *Guide d'installation du logiciel* pour le logiciel Analyst MD.

## Présentation du spectromètre de masse

Illustration 4-1 : Vue avant



Élément	Description	Matières premières	Consulter
1	Symboles du panneau	Plastique	<a href="#">Symboles du panneau.</a>
2	Pompe à seringue	Peinture sur acier (corps), acier inoxydable (rails), laiton, cuivre, étain, plomb (roulements)	<a href="#">Régler la position de la pompe à seringue intégrée</a>
3	Source d'ions	S/O	<a href="#">Présentation de la source d'ions</a>
4	Vanne de dérivation	Acier inoxydable	<a href="#">Brancher la vanne de dérivation.</a>

### Symboles du panneau

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

Tableau 4-1 : Symboles du panneau

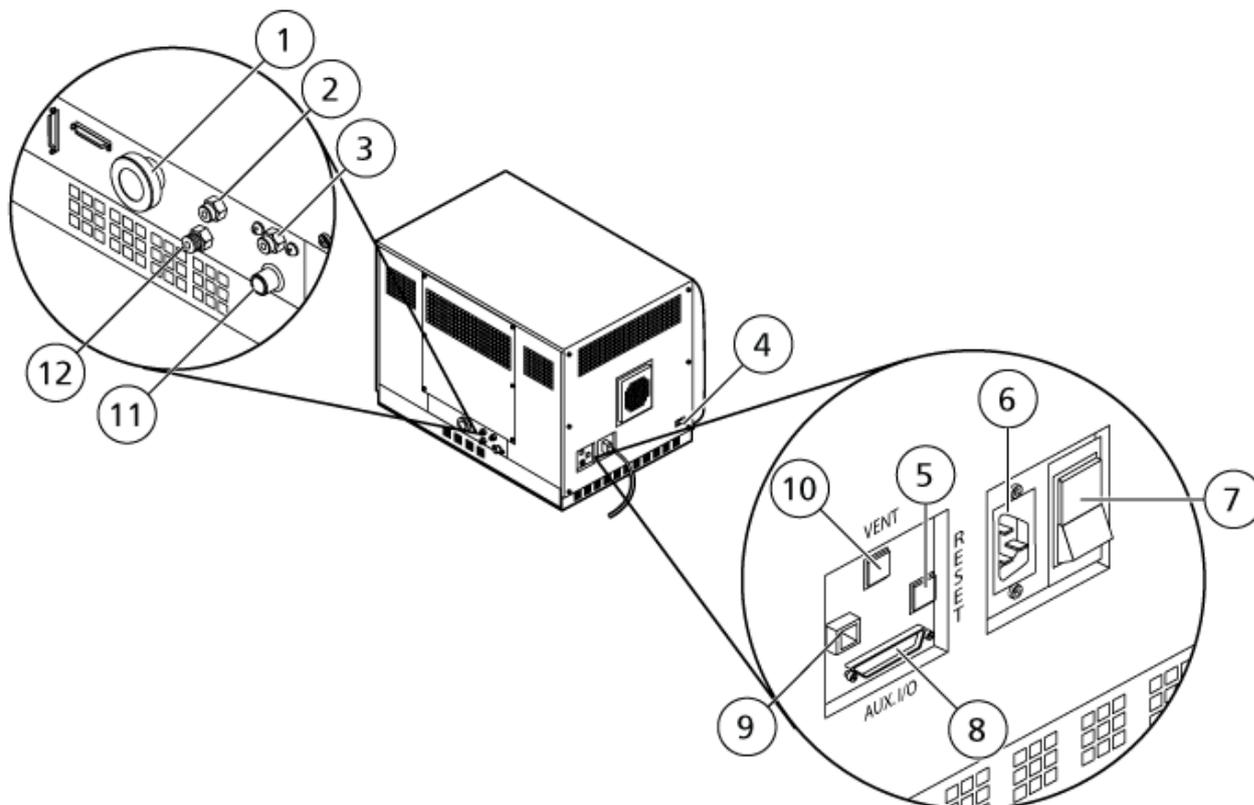
LED	Couleur	Nom	Description
	Vert	Puissance	Allumée lorsque le système est sous tension.
	Vert	Dépression	Allumée lorsque le niveau de vide de fonctionnement a été atteint. Clignote si le vide n'est pas au niveau correct (pendant l'arrêt et la ventilation de la pompe).
	Vert	Prêt	Allumée lorsque le système est sur Ready. Le système doit être à l'état Ready pour fonctionner.
	Bleu	Balayage	Clignote quand le système acquiert des données.
	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.

## Raccordements

La figure suivante indique l'emplacement des raccordements du spectromètre de masse, y compris les emplacements des boutons **RESET** et **VENT** ainsi que l'interrupteur du spectromètre de masse.

Illustration 4-2 : Vues latérale et arrière



Élément	Description	Matières premières	Pour plus d'informations
1	Connexion de la dépression de la pompe primaire	Aluminium (raccord flexible), acier plaqué zinc (collier de serrage)	Contactez un technicien de service. Ce raccord n'est pas réparable par l'utilisateur.
2	Alimentation en air (Gaz 1/Gaz 2)	Plastique	Consultez le <i>Guide d'aménagement sur site</i> .
3	Évacuation alimentation	Plastique	Consultez le document : <i>Guide de planification du site</i> .
4	Branchement de la communication de la source	Aluminium	Contactez un technicien de service.
5	Bouton <b>RESET</b>	Plastique	Consultez la section <a href="#">Réinitialiser le spectromètre de masse</a> .

Élément	Description	Matières premières	Pour plus d'informations
6	Branchement de l'alimentation principale	Aluminium/Plastique	Consulter la section : <a href="#">Démarrer le système</a> ou <a href="#">Arrêter et ventiler le système</a> .
7	Interrupteur du spectromètre de masse <ul style="list-style-type: none"> <li>• En haut = marche</li> <li>• En bas = arrêt</li> </ul>	Plastique	Consulter la section : <a href="#">Démarrer le système</a> ou <a href="#">Arrêter et ventiler le système</a> .
8	Connexion auxiliaire I/O	Tôle (plaqué zinc)	Consultez le document : <i>Guide d'installation des périphériques</i> .
9	Connexion Ethernet, pour relier le spectromètre de masse et l'ordinateur	Tôle (plaqué zinc)	Contactez un technicien de service.
10	Bouton <b>VENT</b>	Plastique	Consulter la section : <a href="#">Démarrer le système</a> ou <a href="#">Arrêter et ventiler le système</a> .
11	Déchets d'évacuation de la source, vers le conteneur de trop-plein d'évacuation de la source	Acier inoxydable	Consultez le document : <i>Guide de planification du site</i> .
12	Alimentation de gaz d'azote (alimentation Curtain Gas™, gaz CAD)	Acier inoxydable	Consultez le document : <i>Guide de planification du site</i> .

## Présentation de la source d'ions

La source d'ions IonDrive Turbo V peut être utilisée soit pour l'ionisation par électronébuliseur (ESI), soit pour l'ionisation chimique à pression atmosphérique (APCI).

La sonde TurbolonSpray est utilisée pour le fonctionnement en mode ESI. La sonde APCI est utilisée pour un fonctionnement en mode APCI.

La source d'ions IonDrive Turbo V a été conçue pour fournir plus de chaleur, une meilleure désolvatation et de meilleures ionisations, tout particulièrement à haut débit. Elle présente

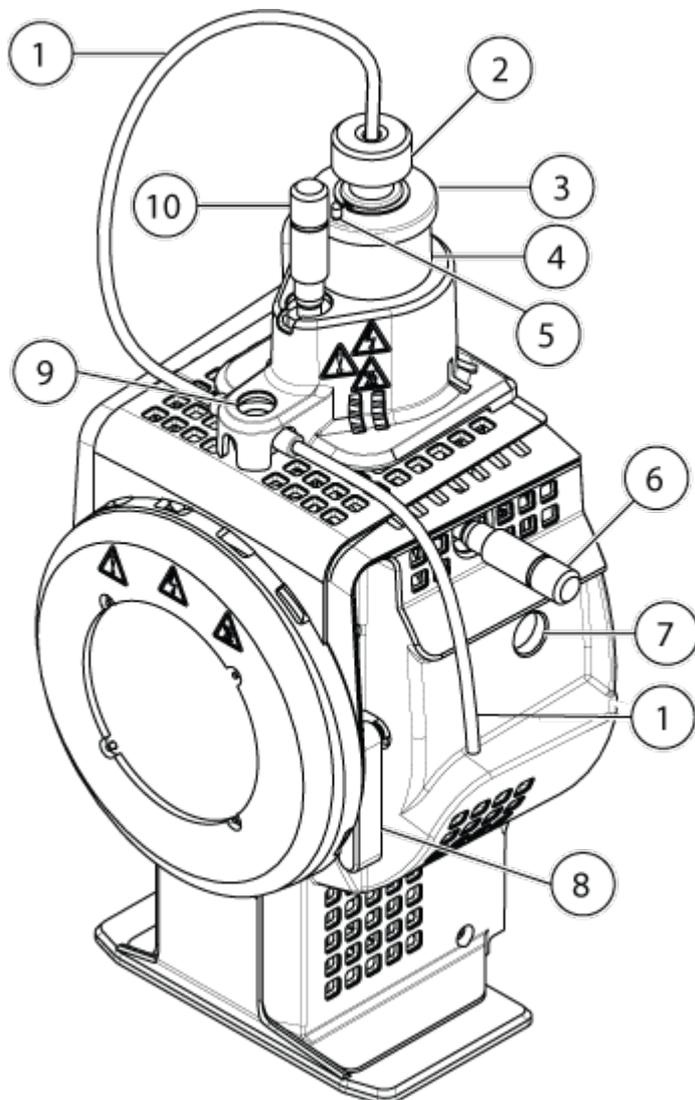
## Principes de fonctionnement

---

une augmentation du diamètre de chauffage pour améliorer l'ionisation, un plus grand point optimum et moins de variations de performance.

## Composants de la source d'ions

Illustration 4-3 : Composants de la source d'ions



Numéro	Description
1	Tube d'échantillonnage
2	Écrou d'ajustement de l'électrode
3	Anneau de retenue
4	Tour de la sonde
5	Vis de réglage de la position de l'aiguille de décharge par effet corona

Numéro	Description
6	Micromètre utilisé pour positionner la sonde sur l'axe horizontal pour la sensibilité du réglage de la source d'ions
7	Fenêtre latérale
8	Un des deux loquets de la source qui la fixent au spectromètre de masse
9	Raccord de mise à la terre. Il n'est pas visible au-dessous du capot de la source d'ions.
10	Micromètre utilisé pour positionner la sonde sur l'axe vertical pour le réglage de la sensibilité de la source d'ions

## Sondes

La sonde TurbolonSpray et la sonde APCI fournissent un éventail de possibilités pour tester les échantillons. Choisissez la sonde et la méthode les plus appropriées pour les composés dans l'échantillon.

**Tableau 4-2 : Spécifications de la source d'ions**

Caractéristique	Sonde TurbolonSpray	Sonde APCI
Plage de température	De la température ambiante à 750 °C en fonction du débit du liquide	De la température ambiante à 750 °C en fonction du débit du liquide
Entrée du débit de liquide	5 à 3 000 µl/min	200 à 3 000 µl/min
Gaz 1 de la source d'ions / Gaz 2 de la source d'ions	Consultez le document du spectromètre de masse : <i>Guide de planification du site</i>	

Le logiciel pour le spectromètre de masse identifie la sonde installée et permet les contrôles utilisateur correspondants. Toutes les données acquises en utilisant la source d'ions sont identifiées par une abréviation représentant la sonde utilisée pour acquérir les données (TIS pour la sonde TurbolonSpray et HN pour la sonde APCI).

### Sonde TurbolonSpray

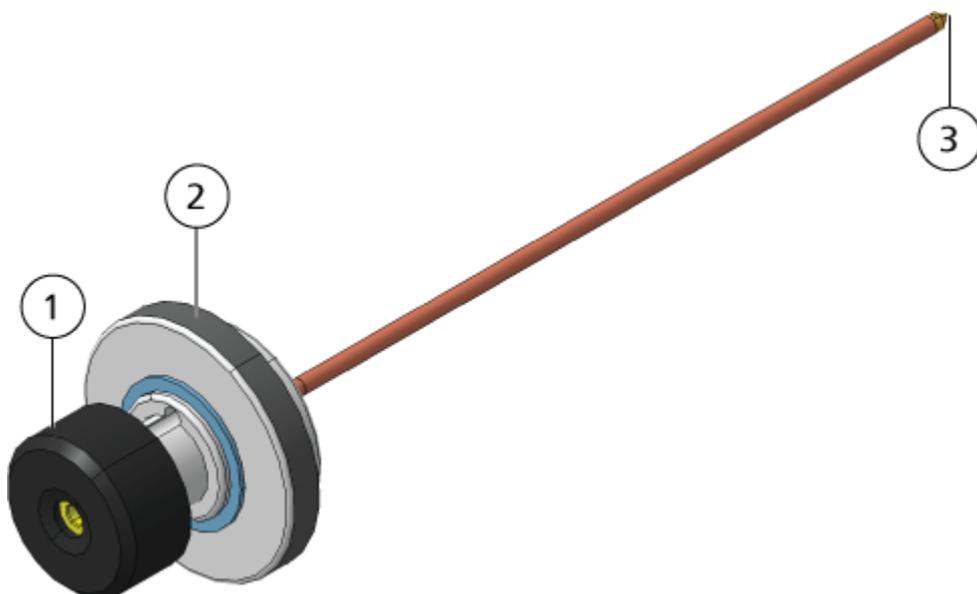
La sonde TurbolonSpray comprend un tube en acier inoxydable d'un diamètre extérieur (d.e.) de 300 µm (0,012 pouce). Elle est installée dans un emplacement central avec les deux chauffages turbo formant un angle de 45° de chaque côté. Les échantillons introduits à travers la sonde TurbolonSpray sont ionisés dans la conduite par l'application d'une haute tension (**IonSpray Voltage**). Ils sont ensuite nébulisés par un souffle d'air de grade zéro, chaud et sec, en provenance des chauffages turbo, créant ainsi un brouillard de petites gouttelettes hautement chargées. La combinaison de l'effluent de la Ion source d'ions et du gaz sec chauffé du turbo-nébuliseur est projetée à un angle de 90 degrés par rapport au trajet des ions. Consultez la section [Théorie de fonctionnement : source d'ions](#).

## Principes de fonctionnement



**AVERTISSEMENT ! Risque de perforation. Être vigilant lors de la manipulation de l'électrode. Les pointes des électrodes sont extrêmement acérées.**

Illustration 4-4 : Pièces de la sonde TurbolonSpray



Élément	Description
1	Écrou d'ajustement de l'électrode (collier noir) qui règle l'extension de la pointe de l'électrode
2	Anneau de retenue qui fixe la sonde à sa tour sur le boîtier de la source d'ions
3	Pointe de l'électrode à travers laquelle les échantillons sont nébulisés dans la zone d'introduction de l'échantillon de la source d'ions

### Sonde APCI

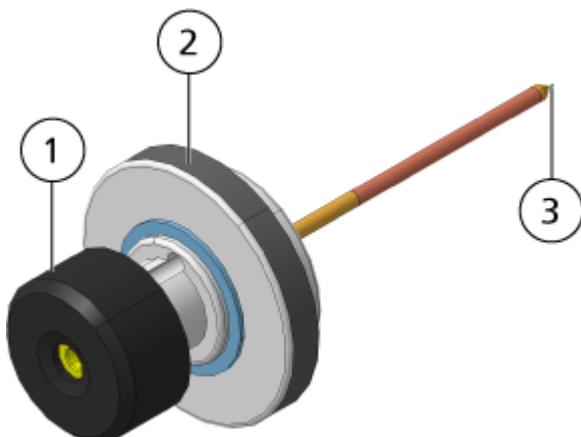
La sonde APCI comprend un tube d'acier inoxydable de 100 µm (0,004 pouce) de diamètre intérieur (d.i.), entouré d'un flux de gaz nébuliseur (Gaz 1). Le flux de l'échantillon liquide est pompé à travers le nébuliseur où il est nébulisé dans un tube en céramique contenant un chauffage. La paroi interne du tube en céramique peut être maintenue à une température de 100 à 750 °C, et est contrôlée par le capteur intégré dans le chauffage.

Un jet à haute vitesse de gaz nébuliseur circule autour de la pointe de l'électrode pour disperser l'échantillon en un brouillard de fines particules. Il se déplace à travers le chauffage en céramique de la vaporisation dans le milieu réactif de la source d'ions. Les molécules de l'échantillon sont alors ionisées grâce à l'aiguille de décharge par effet corona. Consulter la section : [Théorie de fonctionnement : source d'ions](#).



**AVERTISSEMENT ! Risque de perforation. Être vigilant lors de la manipulation de l'électrode. Les pointes des électrodes sont extrêmement acérées.**

Illustration 4-5 : Pièces de la sonde APCI



Élément	Description
1	Écrou de réglage de l'électrode (collier noir) de l'extension de la pointe de l'électrode
2	Anneau de retenue qui fixe la sonde à sa tour
3	Pointe de l'électrode à travers laquelle les échantillons sont nébulisés dans la zone d'introduction de l'échantillon de la source d'ions

## Connexions du gaz et électriques

Les raccordements de gaz et les branchements électriques haute et basse tension sont présents sur la plaque frontale de l'interface avec le vide et sont raccordés en interne à travers le logement de la source d'ions. Lorsque la source d'ions est installée sur le spectromètre de masse, tous les raccordements électriques et de gaz doivent être en place.

## Circuit de détection de la source d'ions

Un circuit de détection de la source d'ions désactive l'alimentation haute tension du spectromètre de masse et le système d'évacuation de la source dans les conditions suivantes :

- La source d'ions n'est pas installée ou est mal installée.
- Une sonde n'est pas installée.
- Le spectromètre de masse détecte une anomalie au niveau du gaz.
- Un chauffage turbo est défectueux.
- La source d'ions a surchauffé.

## Système d'évacuation de la source

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Vérifier que le système d'évacuation de la source est branché et en service afin d'éliminer en toute sécurité les vapeurs d'échantillon qui se dégagent de l'environnement du laboratoire. Les émissions provenant de l'appareil doivent être évacuées dans le système d'évacuation général du bâtiment et en aucun cas dans l'espace de travail du laboratoire. Pour connaître les exigences prescrites pour le système d'évacuation de la source, consultez le document : *Guide de planification du site*.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Ventilez le système d'évacuation de la source vers une hotte aspirante de laboratoire prévue à cet effet ou un système de ventilation externe afin d'éviter la diffusion de vapeurs dangereuses dans l'environnement du laboratoire.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Si un système LC est utilisé avec le spectromètre de masse, et si le système d'évacuation de la source ne fonctionne pas correctement, mettre le système LC hors tension jusqu'à ce que le système d'évacuation de la source soit rétabli.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque d'incendie. N'envoyez pas plus de 3 ml/min de solvant inflammable vers la source d'ions. Bien que les composants LC puissent fournir un débit jusqu'à 5 ml/min, le dépassement du débit maximum peut entraîner une accumulation de solvant dans la source d'ions. Ne pas utiliser la source d'ions si le système d'évacuation de la source n'est pas activé et en service lorsque la source d'ions et la sonde sont correctement installées.

---

**Remarque :** S'assurer que toute la tubulure d'évacuation est bien connectée pour réduire le risque d'évacuation de l'équipement dans la salle.

---

Une source d'ions produit des vapeurs d'échantillon et de solvant. Ces vapeurs représentent un danger potentiel pour l'environnement du laboratoire. Le système d'évacuation de la source est conçu pour éliminer en toute sécurité et gérer correctement les vapeurs d'échantillon et de solvant. Lorsque la source d'ions est installée, le spectromètre de masse ne fonctionne que si le système d'évacuation de la source fonctionne.

Un capteur de dépression installé dans le circuit de détection d'évacuation de la source mesure le vide dans la source. Si la dépression dans la source est supérieure au point de consigne alors que la sonde est installée, le système entre un défaut d'échappement, c'est-à-dire l'état Not Ready.

Un système d'évacuation en activité élimine les résidus de la source d'ions, y compris les gaz, le solvant, la vapeur d'échantillon, par un orifice de vidange sans provoquer de bruit chimique. L'orifice de vidange est raccordé à un conteneur de trop-plein par le biais d'une

---

chambre de vidange et d'une pompe d'évacuation de la source, et de là à un système de ventilation d'évacuation fourni par le client. Pour obtenir des informations sur les exigences en matière de ventilation pour le système d'évacuation de la source, consulter le document : *Guide de planification du site*.

---

**Remarque** : Inspectez régulièrement le système d'évacuation pour vérifier que la conduite est intacte et que l'évacuation ne se diffuse pas dans la pièce.

---

## Présentation du logiciel Analyst MD

Le logiciel Analyst MD fonctionne avec le spectromètre de masse, le système de chromatographie en phase liquide (LC) et le microprogramme associé pour contrôler le système et l'acquisition des données. Pendant le fonctionnement du système, les données acquises sont envoyées au logiciel Analyst MD pour y être affichées sous forme de spectres de masse complets, d'intensités d'ions simples ou multiples par rapport au temps ou de courant ionique total par rapport au temps.

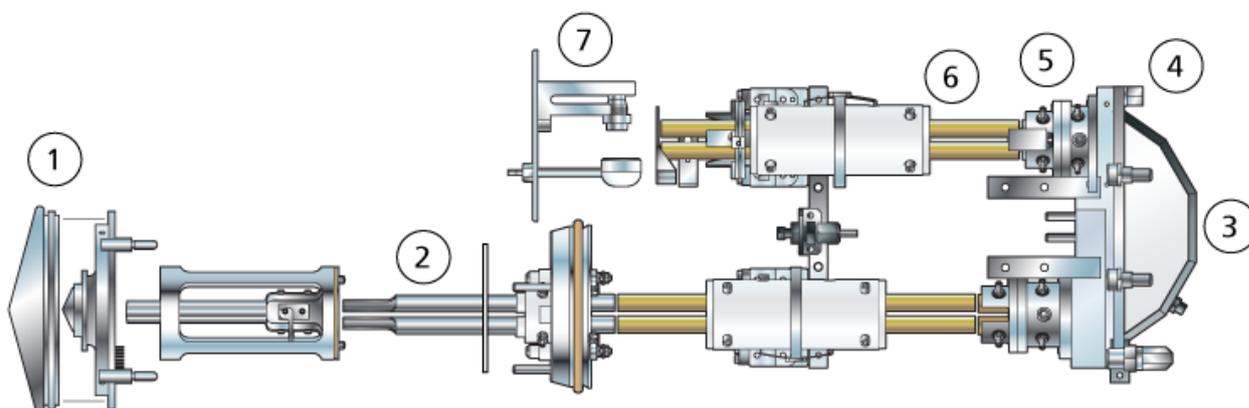
### Vues de données différentes Paramètres MS

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.

Illustration 4-6 : Trajet optique des ions et paramètres



Emplacement	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type de balayage
1	Ion Spray Voltage (IS)	Source et gaz	Le paramètre IS contrôle la tension appliquée à l'électrode dans la sonde ESI qui ionise l'échantillon dans la source d'ions. Le paramètre dépend de la polarité et affecte la stabilité de la nébulisation et la sensibilité. Le paramètre peut être dépendant du composé et doit être optimisé pour chaque composé.	Tous
1	Nebulizer Current (NC)	Source et gaz	Les paramètres NC contrôlent le courant appliqué sur l'aiguille de décharge par effet corona dans la sonde APCI. La décharge ionise les molécules de solvant qui à leur tour ionisent les molécules de l'échantillon.	Tous
1	Ion Source Gas 1 (GS1)	Source et gaz	Le paramètre GS1 contrôle le gaz nébuliseur pour les sondes ESI et APCI.	Tous
1	Ion Source Gas 2 (GS2)	Source et gaz	Le paramètre GS2 contrôle le gaz chauffant pour la sonde ESI.	Tous
1	Température (TEM)	Source et gaz	Le paramètre TEM contrôle la température du gaz chauffant pour les sondes ESI et 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 IonDrive 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	Entrance Potential (EP)	Composé	Le paramètre EP contrôle la différence potentielle entre la tension sur Q0 et la terre. Le potentiel d'entrée guide et oriente les ions vers la zone sous haute pression dans la région Q0.  Utiliser la valeur prédéfinie.	Tous

## Principes de fonctionnement

Emplacement	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type de balayage
2	Q0 Trapping	Composé	<p>Le paramètre du piégeage Q0 contrôle le stockage des ions dans la zone Q0. Il sert à accroître la sensibilité et le rapport cyclique en piégeant les ions dans la région Q0 pendant que les ions sont éjectés du piège à ions linéaire en fonction de leur masse. Utilisez un temps de remplissage fixe avec ce paramètre.</p> <p>Cochez ou décochez la fonctionnalité selon les exigences de l'expérience.</p> <p>Nous vous recommandons d'utiliser une durée de remplissage fixe de 20 ms ou plus.</p>	EMS, EPI, ER et MS/MS/MS
3	CAD Gas	Source et gaz	<p>Le paramètre de gaz CAD contrôle la pression du gaz CAD dans la cellule de collision pendant les balayages Q3, MS/MS et LIT. Pour les balayages Q3, le gaz de collision permet de concentrer les ions lors de leur passage dans la cellule de collision Q2. La valeur prédéfinie pour le paramètre de gaz CAD est en mode fixe. Pour les types de balayage MS/MS, le gaz CAD permet de fragmenter les ions précurseurs. Lorsque les ions précurseurs entrent en collision avec le gaz, ils se dissocient pour former des ions produits.</p> <p>Utilisez la valeur prédéfinie et optimisez pour le composé.</p>	Q3 MI, Q3 MS, MRM, Prec, NL, EMS, ER, EPI et MS/MS/MS

Emplacement	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type de balayage
3	Collision Energy (CE)	Composé	<p>Le paramètre CE contrôle la différence de potentiel entre la zone Q0 et la cellule de collision Q2. Il est utilisé uniquement dans les balayages MS/MS. Ce paramètre est la quantité d'énergie que les ions précurseurs reçoivent quand ils sont accélérés dans la cellule de collision Q2, où ils entrent en collision avec des molécules de gaz et se fragmentent.</p> <p>Utilisez la valeur prédéfinie et optimisez pour le composé.</p>	EPI, MS/MS/MS, MRM, MS2, Prec, NL et LIT
3	Collision Energy Spread (CES)	Composé	<p>Le paramètre CES, en conjonction avec le paramètre CE, décide de l'application de trois énergies de collision discrètes appliquées à la masse de précurseur dans un balayage Enhanced Product Ion (EPI) ou MS/MS/MS (MS3) lors de l'utilisation du CES. Lorsqu'une valeur de propagation de l'énergie de collision est saisie, CES s'active automatiquement.</p> <p>Utilisez la valeur prédéfinie et optimisez pour le composé.</p>	EPI et MS/MS/MS
3	Collision Cell Exit Potential (CXP)	Composé	<p>Le paramètre CXP n'est utilisé que dans les types de balayage Q3 et MS/MS. Ce paramètre transmet les ions dans le quadripôle Q3.</p> <p>Utilisez la valeur prédéfinie et optimisez pour le composé.</p>	Q3, MRM, MS2, Prec, NL
4	Q3 Entry Barrier	Composé	<p>Le paramètre Q3 Entry Barrier est utilisé pour transférer les ions de la cellule de collision Q2 au piège à ions linéaire.</p> <p>Utiliser la valeur prédéfinie.</p>	EMS, EPI, ER, et MS/MS/MS

## Principes de fonctionnement

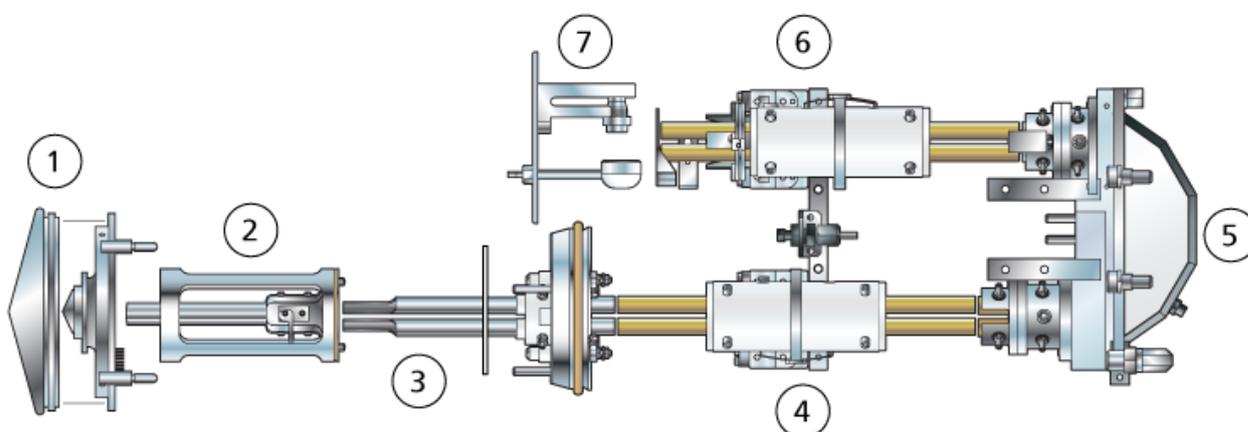
Emplacement	Paramètre	Type de paramètre	Utilisation	Type de balayage
5	MS/MS/MS Fragmentation Excitation Time	Composé	<p>Le paramètre de temps de fragmentation MS/MS/MS contrôle la durée d'application de l'énergie servant à l'excitation. Il est utilisé en combinaison avec l'énergie d'excitation pour fragmenter le second ion précurseur isolé.</p> <p>Utiliser la valeur prédéfinie.</p>	MS/MS/MS
6	Fixed LIT Fill Time	Composé	<p>Le paramètre de la durée de remplissage déterminé du LIT contrôle la durée de remplissage du LIT en ions.</p> <p>Utilisez la valeur prédéfinie et réglez-la pour obtenir la réponse du signal souhaitée en fonction de la concentration de l'échantillon.</p>	EMS, EPI, ER et MS/MS/MS
6	Dynamic Fill Time (DFT)	Composé	<p>Le paramètre DFT calcule de manière dynamique la durée de collecte des ions dans le piège à ions linéaire en fonction du signal d'ions entrant. Quand la DFT est activée, le signal est optimisé pour augmenter la sensibilité ou réduire au maximum la charge en espace.</p> <p>Cochez ou décochez la fonctionnalité basée sur l'expérience.</p> <p>Dans la boîte de dialogue <b>Tools &gt; Settings &gt; Method Options</b>, les réglages DFT sont optimisés pour la vitesse de balayage par défaut. Ces réglages sont également adaptés pour d'autres vitesses de balayage du LIT.</p>	EMS, EPI, ER et MS/MS/MS
7	CEM	Détecteur	<p>Le paramètre CEM contrôle la tension appliquée au détecteur. La tension contrôle la réponse du détecteur.</p>	Tous

## Principes de fonctionnement

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

Le spectromètre de masse dispose d'une série de filtres quadripolaires qui transmettent les ions en fonction de leur rapport masse sur charge  $m/z$ ). Le premier quadripôle de cette série est le guide d'ions IonDrive QJet situé entre la plaque à orifice et la zone Q0. Le guide d'ions IonDrive QJet ne filtre pas les ions, mais les focalise avant qu'ils n'entrent dans la zone Q0. Le guide d'ions IonDrive QJet permet de concentrer les ions dans la zone Q0. Dans la zone Q0, les ions sont encore concentrés avant d'entrer dans le quadripôle Q1.

**Illustration 4-7 : Trajectoire des ions**



Élément	Description
1	Plaque rideau et plaque à trou
2	Guide d'ions IonDrive QJet
3	Zone Q0
4	Quadripôle Q1
5	Cellule de collision Q2
6	Quadripôle Q3
7	Détecteur

Le quadripôle Q1 est un quadripôle filtrant qui trie les ions avant qu'ils n'entrent dans la cellule de collision Q2. Dans la cellule de collision Q2, l'énergie interne des ions est augmentée par les collisions des molécules de gaz jusqu'à ce que la rupture des liaisons moléculaires crée des ions produits. Cette technique permet aux utilisateurs de

## Principes de fonctionnement

---

concevoir des expériences qui mesurent le rapport  $m/z$  des ions produits pour déterminer la composition des ions parents.

Après le passage par la cellule de collision Q2, les ions entrent dans le quadripôle Q3 pour un filtrage supplémentaire, puis entrent dans le détecteur. Dans le détecteur, les ions créent un courant qui est converti en une impulsion de tension. Les impulsions de tension quittant le détecteur sont directement proportionnelles à la quantité d'ions entrant dans le détecteur. Le système surveille ces impulsions de tension, puis convertit les informations en signal. Le signal représente l'intensité de l'ion pour une valeur spécifique de  $m/z$  et le système affiche cette formation sous forme de spectre de masse.

La fonctionnalité du piège à ions linéaire (LIT) offre plusieurs modes de fonctionnement améliorés. Un facteur commun à ces modes améliorés réside dans le fait que les ions sont piégés dans la région quadripolaire de Q3, puis éjectés pour obtenir des données de spectre complètes. De nombreux spectres sont collectés sur une courte durée et sont considérablement plus intenses que ceux collectés dans un mode de fonctionnement quadripolaire standard comparable.

Pendant l'étape de collecte, les ions passent dans la cellule de collision Q2 où le gaz CAD concentre les ions en Q3. Le quadripôle Q3 fonctionne en appliquant uniquement la tension RF principale. Les ions ne peuvent pas passer à travers le quadripôle Q3 et sont renvoyés par une lentille de sortie à laquelle est appliquée une tension CC barrière. À la fin de la durée de remplissage, une durée définie par l'utilisateur ou déterminée par la fonction Dynamic Fill Tim, une tension CC barrière est appliquée à la lentille d'entrée de Q3 (IQ3). Ceci permet de confiner les ions collectés dans la zone Q3 et d'arrêter l'entrée d'ions supplémentaires. Les tensions CC barrières aux lentilles d'entrée et de sortie et la tension RF appliquée aux tiges du quadripôle enferment les ions dans la zone Q3.

Pendant la phase de balayage, la tension à la lentille de sortie et la tension RF auxiliaire sont incrémentées en même temps que la tension RF principale pour augmenter la résolution et la sensibilité par rapport aux types de balayage quadripolaires. Une fréquence CA auxiliaire est appliquée au quadripôle Q3. L'amplitude de la tension RF principale est incrémentée d'une valeur basse à une valeur élevée, ce qui amène les masses en résonance avec la fréquence CA auxiliaire de manière séquentielle. Quand les ions sont amenés en résonance avec la fréquence CA, ils acquièrent suffisamment de vitesse axiale pour franchir la barrière de la lentille de sortie et sont éjectés axialement vers le détecteur d'ions du spectromètre de masse. L'ensemble des données de spectre peut être acquis à partir des ions collectés dans la zone Q3 par balayage rapide de la tension RF principale.

Vous trouverez des informations sur les paramètres logiciels disponibles dans le document : *Aide*.

## Mode ESI

La technique ESI permet de générer des ions d'analytes en phase gazeuse dans un échantillon donné via l'application d'une haute tension sur l'effluent de l'échantillon par l'intermédiaire d'une aiguille. À l'aide du flux de gaz chauffé, cette technique produit des ions à charge unique et à charge multiple dans des conditions relativement douces. Elle est donc adaptée à un grand nombre de composés, notamment aux molécules de petite taille, comme les médicaments ou les pesticides, et aux molécules de grande taille, comme les peptides,

les protéines et autres biopolymères. La sensibilité dépend des propriétés chimiques de l'analyte, du débit du gaz, de la température, de la tension et de la composition de la phase mobile.

La technique ESI est suffisamment douce pour être utilisée avec des composés labiles comme les peptides, les protéines et les produits pharmaceutiques thermolabiles. Elle fonctionne avec des débits compris entre 5 µl/min et 3 000 µl/min, et elle vaporise les compositions de solvants 100 % aqueuses à 100 % organiques.

Consulter la section : [Mode d'ionisation par électronébulisation](#).

## Mode APCI

Le mode APCI convient pour :

- L'ionisation de composés qui ne forment pas aisément des ions dans une solution. Il s'agit généralement de composés non polaires.
- La création de spectres APCI simples pour des expériences LC-MS/MS.
- Les analyses à haut débit d'échantillons complexes et impurs. Ces analyses sont moins sensibles aux effets de suppression d'ions.
- L'introduction rapide de l'échantillon par une injection en flux avec ou sans colonne LC.

La technique APCI peut s'utiliser pour les composés volatils et thermiquement labiles avec une décomposition thermique minimale. La désolvatation et la vaporisation rapides des gouttelettes et de l'analyte minimisent la décomposition thermique et préservent l'identité moléculaire pour l'ionisation par l'aiguille de décharge par effet corona. Les tampons sont facilement tolérés par la source d'ions sans contamination importante et la vaporisation instantanée de l'effluent pulvérisé permet d'utiliser jusqu'à 100 % d'eau. La sonde peut accepter l'ensemble de l'effluent, sans partage, à des débits compris entre 200 et 3 000 µl/min (via une colonne à gros diamètre).

Consulter la section : [Mode APCI](#).

## Manipulation des données

### Logiciel Reporter

Le logiciel Analyst MD se charge de l'acquisition et du traitement des données et ne prend aucune décision clinique. Le logiciel Reporter étend les fonctionnalités de rapports disponibles dans le logiciel Analyst MD. Le logiciel Reporter peut être utilisé pour créer des rapports personnalisés.

### Logiciel MultiQuant MD

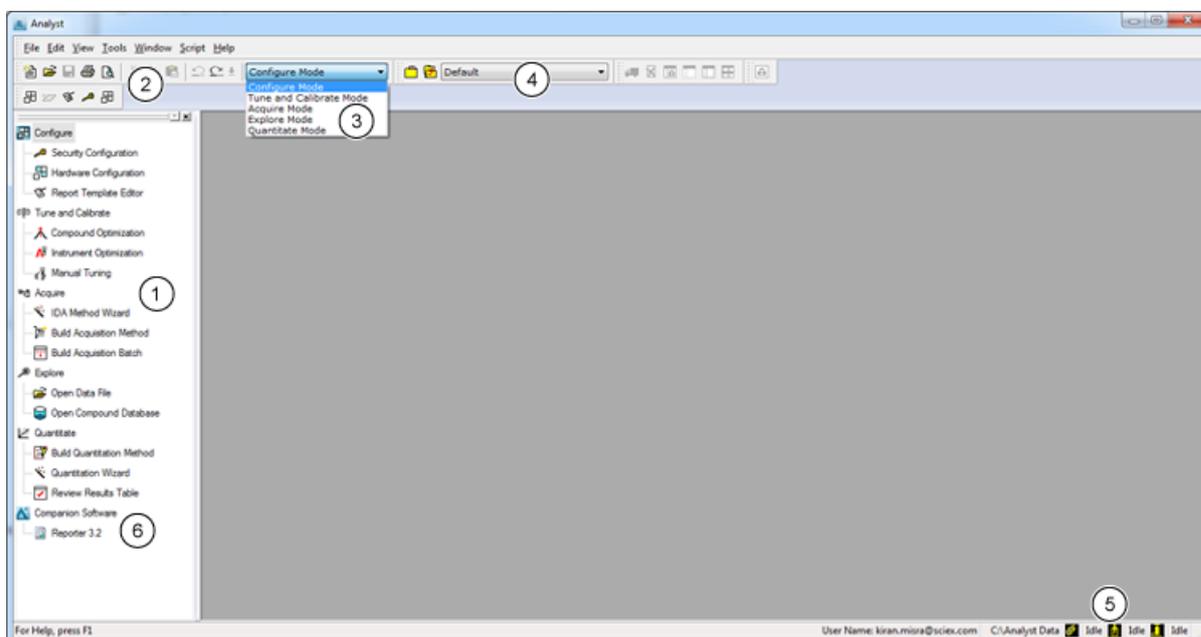
Le logiciel de traitement quantitatif de données MultiQuant MD permet de traiter simultanément plusieurs analytes et échantillons. Il est co-installé avec le logiciel Analyst MD. Le logiciel MultiQuant MD ne prend aucune décision clinique. Les fonctionnalités de rapports sont disponibles dans le logiciel MultiQuant MD et peuvent être utilisées pour créer des rapports personnalisés.

## Principes de fonctionnement - Logiciel

Cette section décrit les concepts utilisés dans le logiciel.

### Fenêtre du logiciel Analyst MD

Illustration 4-8 : Logiciel Analyst MD



Élément	Description
1	<p>Barre de navigation : elle permet d'accéder aux différents modes du logiciel. Les utilisateurs peuvent personnaliser certains éléments de la barre de navigation pour les adapter à leurs préférences. Par exemple, les utilisateurs peuvent la redimensionner, la déplacer ou la fixer. Pour masquer la barre de navigation, cliquez sur × dans le coin supérieur droit. Pour afficher la barre de navigation, cliquez sur <b>View &gt; Navigation Bar</b>.</p> <p>Le niveau supérieur de l'arborescence de navigation comporte une icône représentant chaque mode du logiciel. Double-cliquez sur l'icône correspondant à un mode particulier pour développer ou réduire l'arborescence. Ceci permet d'afficher ou de masquer les icônes correspondant à la fonctionnalité disponible dans le mode sélectionné.</p>
2	<p>Barre de menus : elle change en fonction du mode. Certaines options comme Cut, Copy et Paste sont les mêmes dans chaque mode. D'autres options sont propres à certains modes et indisponibles dans d'autres modes.</p>

Élément	Description
3	Liste des modes : cliquez pour changer de mode. Chaque mode dispose d'icônes différentes dans la barre d'outils.
4	Liste des projets : cliquez pour modifier le projet dans lequel des données sont enregistrées.
5	État de l'instrument et des périphériques : la barre d'état contient des informations sur les activités en cours. La couleur indique l'état de l'instrument : vert (Prêt), jaune (Inactif), rouge (Erreur) ou blanc (pas de poste de travail de l'instrument local). Une icône indique l'état d'un instrument distant. Double-cliquez sur une icône pour ouvrir la fenêtre Device status.
6	Companion Software : contient les logiciels associés et installés, qui sont ouverts dans le logiciel.

## Modes du logiciel Analyst MD

Le logiciel est divisé en modes qui sont des zones fonctionnelles discrètes dans lesquelles les utilisateurs peuvent réaliser une gamme d'activités liées à une tâche principale. Les utilisateurs peuvent accéder aux modes via la barre de navigation ou la liste Mode dans la barre d'outils et peuvent passer d'un mode à un autre sans perdre leur travail.

**Tableau 4-3 : Modes du logiciel Analyst MD**

Nom	Description
<b>Configure</b>	(Configurer) Utilisez ce mode pour configurer les dispositifs et les paramètres système. Définissez plusieurs options et paramètres du logiciel, notamment la configuration matérielle et les paramètres des modèles de rapport.
<b>Tune and Calibrate</b>	(Régler et étalonner) Utilisez ce mode pour définir des options permettant de régler des instruments pour garantir des résultats optimaux. Dans ce mode, les utilisateurs peuvent : <ul style="list-style-type: none"> <li>• procéder à l'optimisation de l'instrument,</li> <li>• effectuer un réglage manuel,</li> <li>• modifier l'apparence des vues graphiques, sélectionner les types d'informations affichées à l'ouverture du fichier, et définir des options de liaison et autres options d'apparence,</li> <li>• modifier les options de traitement.</li> </ul>

**Tableau 4-3 : Modes du logiciel Analyst MD (suite)**

Nom	Description
<b>Acquire</b>	(Acquérir)Utilisez ce mode pour définir les options permettant de choisir le mode d'acquisition des échantillons. Dans ce mode, les utilisateurs peuvent : <ul style="list-style-type: none"><li>• créer une méthode d'acquisition IDA à l'aide d'IDA Method Wizard,</li><li>• créer une méthode d'acquisition à l'aide d'Acquisition Method Editor,</li><li>• créer un lot à l'aide de Batch Editor,</li><li>• afficher la file d'attente à l'aide de Queue Manager,</li><li>• surveiller l'état de l'acquisition.</li></ul>
<b>Explore</b>	(Explorer)Utilisez ce mode pour effectuer une analyse qualitative des échantillons. Dans ce mode, les utilisateurs peuvent : <ul style="list-style-type: none"><li>• afficher un graphique,</li><li>• afficher un chromatogramme,</li><li>• afficher un spectre,</li><li>• afficher des données en temps réel lors de l'acquisition du lot.</li></ul>
<b>Quantitate</b>	(Quantifier)Utilisez ce mode pour analyser les données acquises et créer une méthode quantitative afin de générer un tableau de résultats. Le tableau de résultats permet d'examiner manuellement tous les pics de chacun des analytes et des standards internes dans un lot et de consulter les courbes d'étalonnage, les statistiques d'échantillon et les tracés métriques.

## Analyse quantitative

L'analyse quantitative est utilisée pour trouver la concentration d'une substance particulière dans un échantillon. En analysant un échantillon inconnu et en le comparant à des échantillons standard, c'est-à-dire des échantillons contenant la même substance de concentrations connues, le logiciel peut calculer la concentration de l'échantillon inconnu. Le processus implique la création d'une courbe d'étalonnage en utilisant la réponse du signal ou le ratio de réponse des standards puis en calculant les concentrations des échantillons inconnus. Les concentrations calculées de tous les échantillons sont ajoutées à un tableau de résultats.

L'analyse quantitative est le plus souvent réalisée avec une exploration de surveillance des réactions multiples (MRM). Dans une exploration MRM, un ion précurseur et un ion produit caractéristique sont utilisés pour définir une transition MRM hautement spécifique à l'analyte. La transition MRM, couplée au temps de rétention associé à l'analyte pendant la chromatographie liquide, fournit la spécificité nécessaire à la quantification.

La quantification est obtenue par l'utilisation de méthodes d'acquisition MRM LC-MS/MS validées, l'acquisition de courbes d'étalonnage et l'intégration ultérieure des pics associés

aux composés concernés. La relation établie par la courbe d'étalonnage entre la réponse du signal et la concentration est utilisée pour déterminer la quantité d'un analyte particulier dans un échantillon inconnu.

## Intégration

Pour les données LC-MS/MS, l'intégration fait référence à l'obtention de l'aire sous la courbe du pic associé à un composé spécifique. Avec une méthode qui spécifie les transitions, les temps de rétention prévus, les standards internes, les paramètres d'intégration et de régression, le logiciel est capable d'intégrer automatiquement les pics pour un ensemble donné d'échantillons.

## Tableaux de résultats

Les tableaux de résultats résumant la concentration calculée d'un analyte dans chaque échantillon inconnu d'après la courbe d'étalonnage. Les tableaux de résultats comprennent également les courbes d'étalonnage ainsi que les statistiques des résultats. L'utilisateur peut personnaliser le tableau de résultats et les afficher dans des présentations.

Les données provenant d'un tableau de résultats peuvent être exportées vers un fichier .txt pour être utilisées dans d'autres applications comme Microsoft Excel. L'utilisateur peut également exporter les données dans le tableau ou dans les colonnes visibles.

Nous recommandons aux utilisateurs de ne pas renommer les fichiers de données une fois les tableaux de résultats créés.

Pour des informations sur l'utilisation du menu contextuel Results Table, consultez la section : [Tableau de résultats](#).

## Calibration Curves

Une courbe d'étalonnage, également appelée courbe de concentration standard, est une méthode qui permet de déterminer la concentration d'une substance dans un échantillon inconnu en comparant cet échantillon inconnu à un jeu d'échantillons standard dont la concentration est connue. La courbe d'étalonnage est un tracé de la réponse de l'instrument (le signal analytique) aux modifications de la concentration de l'analyte (la substance à mesurer). L'opérateur prépare une série d'étalons sur une plage de concentrations proches de la concentration attendue de l'analyte dans l'échantillon inconnu.

Les références d'étalonnage sont utilisées pour construire les courbes d'étalonnage. Les lectures incorrectes ou manquantes de certains des échantillons d'étalonnage peuvent indiquer des problèmes au niveau de la série analytique. Suivez des méthodes acceptables trouvées dans la documentation publiée et les orientations des organismes de réglementation pour créer une courbe d'étalonnage. Exemples de bonnes pratiques de préparation des courbes d'étalonnage :

- préparer des références d'étalonnage dans une matrice à « blanc » dans laquelle l'analyte doit être mesuré ;
- générer une courbe d'étalonnage pour chaque analyte à mesurer ;

## Principes de fonctionnement

---

- s'assurer de la couverture de la plage de concentration attendue de l'analyte, y compris pour des échantillons typiques et atypiques ;
- utiliser six à huit standards pour générer la courbe.

Cette liste n'est pas complète et d'autres orientations doivent être utilisées pour déterminer les bonnes pratiques de développement d'une courbe d'étalonnage pour le laboratoire.

---

**Remarque** : Dans certaines procédures analytiques, des références d'étalonnage en un point sont utilisées. Les étalonnages en un point sont réalisés à l'aide d'une matrice d'échantillon témoin et d'une seule concentration de l'étalon. La relation entre la réponse de l'instrument et la concentration de l'analyte est déterminée par la droite créée entre ces deux points. Les méthodes d'acquisition et de quantification doivent être validées avant d'être acceptées dans le cadre de l'utilisation prévue.

---

## Types de régression

- Linéaire ( $y = mx + b$ )
- Linéaire passant par zéro ( $y = mx$ )
- Quadratique ( $y = a^2 + bx + c$ )

# Caractéristiques des performances et spécifications

# 5

Cette section comprend les spécifications et les caractéristiques du système Citrine Triple Quad MS/MS et système Citrine QTRAP MS/MS .

## Spécifications du spectromètre de masse

Tableau 5-1 : Spécifications du spectromètre de masse et de la pompe primaire

Sensibilité (mode MRM)	Résérpine 200 fg dans la colonne	Rapport S/B supérieur à 2000 CV inférieur à 5 %
Vitesse de balayage maximum	12 000 Da/s	
Vitesse maximum de balayage du piège à ions quadripolaire linéaire (QTRAP uniquement)	20 000 Da/s	
Changement de polarité	Minimum de 5 ms en mode MRM et en mode <i>Scheduled</i> MRM	
Temps de maintien MRM minimum	1 ms	
Plage de masses ( $m/z$ )	5 Da à 2 000 Da	
Interférence pour la résérpine 609/195	Moins de 0,5 % d'interférence est détectable avec un temps de maintien de 2 ms et un temps de pause inter-MRM de 3 ms	
Types de balayages	MS de balayage complet et MS des ions sélectionnés pour les balayages Q1 et Q3, le balayage des ions produits, le balayage des ions précurseurs, le balayage des pertes ou gains neutres, le balayage de suivi des réactions multiples (MRM) et les types de balayage MRM programmés. Pour les systèmes QTRAP uniquement, balayage MS amélioré, balayage amélioré des ions produits, balayage amélioré de la résolution, et balayage MS <sup>3</sup> .	
Plage dynamique	Cinq ordres d'amplitude	
<b>Poids</b>		

## Caractéristiques des performances et spécifications

**Tableau 5-1 : Spécifications du spectromètre de masse et de la pompe primaire (suite)**

Poids—spectromètre de masse	130 kg
Poids—pompe primaire	34 kg (75 livres) par pompe
<b>Dimensions</b>	
Spectromètre de masse (I × P × H)	79 cm × 79 cm × 59 cm
Pompe primaire (I × P × H)	12 pouces x 17 pouces x 9 pouces

**Tableau 5-2 : Spécifications de la sonde**

Paramètre	Sonde TurbolonSpray	Sonde APCI
Plage de températures de la source d'ions	Température de la sonde de la température ambiante à 750 °C en fonction du débit du liquide	Température de la sonde de la température ambiante à 750 °C en fonction du débit du liquide
Compatibilité du débit	5 µl/min à 3 ml/min	200 µl/min à 3 ml/min
	<b>ATTENTION : Risque d'endommagement du système. Ne dépassez pas le débit maximal. Le non-respect de cette instruction peut entraîner des performances erratiques ou l'endommagement du système.</b>	

**Tableau 5-3 : Spécifications électriques**

<b>Spectromètre de masse</b>	
Tension d'entrée nominale	200 à 240 V CA
Variations de tension d'entrée	± 10 % de la valeur nominale
Fréquence	50 Hz ou 60 Hz
Courant d'entrée maximum	10 A
Puissance d'entrée maximale	1 000 VA
<b>Pompe primaire (par pompe)</b>	
Tension d'entrée nominale	200 à 240 V CA

**Tableau 5-3 : Spécifications électriques (suite)**

Variations de tension d'entrée	±10 % de la valeur nominale
Fréquence	50 Hz ou 60 Hz
Courant d'entrée maximum	6 A
Puissance d'entrée maximale	1 200 VA
<b>Ordinateur</b>	
Tension d'entrée nominale	100 VCA à 240 VCA
Variations de tension d'entrée	±10 % de la valeur nominale
Fréquence	50 Hz ou 60 Hz
Courant d'entrée maximum	8 A (50 Hz), 6 A (60 Hz)
Puissance d'entrée maximale	460 W
<b>Moniteur</b>	
Tension d'entrée nominale	100 VCA à 240 VCA
Fréquence	50 Hz ou 60 Hz
Courant d'entrée maximum	2,5 A

# Instructions d'utilisation : flux de travail des échantillons

# 6

Tableau 6-1 : Configuration de l'instrument Flux de travail

Étape	Pour faire ceci	Chercher l'information dans	Qu'est ce que cela fait ?
1	Créer un profil de matériel.	<a href="#">Créer un profil de matériel</a>	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.	<a href="#">Créer des projets et des sous-projets</a>	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.	<a href="#">Vérifiez les performances de l'instrument</a>	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 6-2 : Exemple de flux de travail d'analyse de routine

Étape	Pour faire ceci	Chercher l'information dans	Qu'est ce que cela fait ?
1	Activer un profil de matériel applicable à la méthode.	<a href="#">Créer un profil de matériel</a>	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.

**Tableau 6-2 : Exemple de flux de travail d'analyse de routine (suite)**

<b>Étape</b>	<b>Pour faire ceci</b>	<b>Chercher l'information dans</b>	<b>Qu'est ce que cela fait ?</b>
2	Créer des projets pour stocker les données.	<a href="#">Créer des projets et des sous-projets</a>	L'utilisation des projets et des sous-projets simplifie la gestion des données et facilite la comparaison des résultats.
3	Créer et soumettez un lot.	<a href="#">Ajouter des ensembles et des échantillons à un lot et Soumettre un échantillon ou un groupe d'échantillons</a>	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.
4	Équilibrer le système.	<a href="#">Équilibrer le système</a>	Équilibrez le système avant de commencer l'acquisition des données. Un système non équilibré peut entraîner une mauvaise qualité de données.
5	Traiter les échantillons pour acquérir des données.	<a href="#">Acquérir les données</a>	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.
6	Analyser des données en mode Explore (facultatif).	<a href="#">Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des données</a>	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.

## Instructions d'utilisation : flux de travail des échantillons

**Tableau 6-2 : Exemple de flux de travail d'analyse de routine (suite)**

Étape	Pour faire ceci	Chercher l'information dans	Qu'est ce que cela fait ?
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Pour une analyse quantitative avec le logiciel MultiQuant MD, suivez les étapes 7 à 8. Le logiciel MultiQuant MD est recommandé pour les ensembles de données plus importants.</li> <li>• Pour une analyse quantitative avec le logiciel Analyst MD, suivez les étapes 9 à 10a.</li> <li>• Pour une analyse qualitative avec le logiciel Analyst MD, suivez les étapes 9 à 10b.</li> </ul>			
7	Analysez des données quantitatives dans le logiciel MultiQuant MD.	<i>Guide de référence du logiciel MultiQuant MD</i> : chapitres 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14	Générez et utilisez un tableau de résultats pour examiner manuellement tous les pics de chacun des analytes et les standard internes au sein d'un lot et pour consulter les courbes d'étalonnage, les statistiques d'échantillons et les tracés métriques.
8	Créez un rapport dans le logiciel MultiQuant MD.	<i>Guide de référence du logiciel MultiQuant MD</i> : Annexe C	Générer un rapport à l'aide des modèles de rapport fournis pour les résultats générés et examinés.
9	Analysez des données qualitatives (ou quantitatives) dans le logiciel Analyst MD.	<a href="#">Instructions d'utilisation : Analyse et traitement des données quantitatives</a>	Générez un tableau de résultats pour examiner manuellement tous les pics de chacun des analytes et les standards internes au sein d'un lot. Pour l'analyse quantitative, examinez également les courbes d'étalonnage, les statistiques d'échantillons et les tracés métriques.
10a	Créez un rapport dans le logiciel Reporter.	<a href="#">Générer des rapports</a>	Générez un rapport à l'aide des modèles de rapport fournis pour les résultats générés et examinés. Pour les rapports spécifiques à l'analyse qualitative, utilisez l'ensemble de modèles de rapport étiqueté pour la recherche en bibliothèque.

**Tableau 6-2 : Exemple de flux de travail d'analyse de routine (suite)**

Étape	Pour faire ceci	Chercher l'information dans	Qu'est ce que cela fait ?
10b	Sélectionnez une bibliothèque puis créez un rapport avec le logiciel Reporter.	<a href="#">Générer des rapports</a>	Sélectionnez la bibliothèque de spectres MS/MS appropriée pour les résultats, puis générer un rapport à l'aide des modèles de rapport fournis étiquetés pour la recherche en bibliothèque pour les résultats générés et examinés. Pour les rapports spécifiques à l'analyse qualitative, utiliser l'ensemble de modèles de rapport étiqueté pour la recherche en bibliothèque.

**Tableau 6-3 : Exemple de flux de travail du développeur de méthode**

Étape	Pour faire ceci	Chercher l'information dans	Qu'est ce que cela fait ?
1	Créer un profil de matériel.	<a href="#">Créer un profil de matériel</a>	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.	<a href="#">Créer des projets et des sous-projets</a>	L'utilisation des projets et des sous-projets simplifie la gestion des données et facilite la comparaison des résultats.
3	Optimiser automatiquement le composé  Ou Étape 4 - Optimiser manuellement le composé.	<a href="#">Instructions d'utilisation : Optimisation automatique</a>	Le logiciel optimise automatiquement le composé et les paramètres du spectromètre de masse pour les composés concernés.

## Instructions d'utilisation : flux de travail des échantillons

**Tableau 6-3 : Exemple de flux de travail du développeur de méthode (suite)**

Étape	Pour faire ceci	Chercher l'information dans	Qu'est ce que cela fait ?
4	Optimiser manuellement le composé.	<a href="#">Optimisation manuelle du composé</a>	L'utilisateur optimise manuellement le composé et les paramètres du spectromètre de masse pour les composés concernés. L'optimisation manuelle offre un plus grand contrôle aux utilisateurs expérimentés durant le processus d'optimisation.
5	Créer une méthode d'acquisition.	<a href="#">Instructions d'utilisation : Méthodes d'acquisition</a>	Pour analyser les échantillons, créez une méthode d'acquisition pour le spectromètre de masse et tout appareil de chromatographie en phase liquide (LC). Une méthode d'acquisition indique les périphériques à utiliser, le moment pour les utiliser pour l'acquisition des données ainsi que les paramètres associés.
6	Créez et soumettez un lot.	<a href="#">Ajouter des ensembles et des échantillons à un lot et Soumettre un échantillon ou un groupe d'échantillons</a>	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.
7	Équilibrer le système.	<a href="#">Équilibrer le système</a>	Équilibrez le système avant de commencer l'acquisition des données. Un système non équilibré peut entraîner une mauvaise qualité de données.
8	Traiter les échantillons pour acquérir des données.	<a href="#">Acquérir les données</a>	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.

**Tableau 6-3 : Exemple de flux de travail du développeur de méthode (suite)**

Étape	Pour faire ceci	Chercher l'information dans	Qu'est ce que cela fait ?
9	Analyser des données en mode Explore (facultatif).	<a href="#">Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des données</a>	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.
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Pour une analyse quantitative avec le logiciel MultiQuant MD, suivez les étapes <a href="#">10</a> à <a href="#">12</a>. Le logiciel MultiQuant MD est recommandé pour les ensembles de données plus importants.</li> <li>• Pour une analyse quantitative avec le logiciel Analyst MD, suivez les étapes <a href="#">13</a> à <a href="#">15</a>.</li> <li>• Pour l'analyse qualitative, contacter l'assistance.</li> <li>• Pour une analyse qualitative avec le logiciel Analyst MD, suivez les étapes <a href="#">14</a> à <a href="#">15</a>. Pour des conseils généraux, contactez l'assistance.</li> </ul>			
10	Créez une méthode quantitative dans le logiciel MultiQuant MD.	<i>Guide de référence du logiciel MultiQuant MD : éditeur de méthodes de quantification</i>	Utilisez les divers outils de création de méthodes quantitatives dans le logiciel pour analyser les données acquises et bâtir une méthode quantitative afin de produire un tableau de résultats.
11	Analysez des données quantitatives dans le logiciel MultiQuant MD.	<i>Guide de référence du logiciel MultiQuant MD : chapitres 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14</i>	Générez et utilisez un tableau de résultats pour examiner manuellement tous les pics de chacun des analytes et les standard internes au sein d'un lot et pour consulter les courbes d'étalonnage, les statistiques d'échantillons et les tracés métriques.
12	Créez un rapport dans le logiciel MultiQuant MD.	<i>Guide de référence du logiciel MultiQuant MD : Annexe C</i>	Générer un rapport à l'aide des modèles de rapport fournis pour les résultats générés et examinés.

Tableau 6-3 : Exemple de flux de travail du développeur de méthode (suite)

Étape	Pour faire ceci	Chercher l'information dans	Qu'est ce que cela fait ?
13	Créez une méthode quantitative dans le logiciel Analyst MD.	<i>Guide de référence du logiciel MultiQuant MD</i> : éditeur de méthodes de quantification	Utilisez les divers outils de création de méthodes quantitatives dans le logiciel pour analyser les données acquises et bâtir une méthode quantitative afin de produire un tableau de résultats.
14	Analysez des données qualitatives (ou quantitatives) dans le logiciel Analyst MD.	<a href="#">Instructions d'utilisation : Analyse et traitement des données quantitatives</a>	Générez un tableau de résultats pour examiner manuellement tous les pics de chacun des analytes et les standards internes au sein d'un lot. Pour l'analyse quantitative, examinez également les courbes d'étalonnage, les statistiques d'échantillons et les tracés métriques.
15	Créer un rapport dans Analyst Reporter.	<a href="#">Générer des rapports</a>	Générez un rapport à l'aide des modèles de rapport fournis pour les résultats générés et examinés. Pour les rapports spécifiques à l'analyse qualitative, utilisez l'ensemble de modèles de rapport étiqueté pour la recherche en bibliothèque.

# Instructions d'utilisation — Spectromètre de masse et source d'ions

# 7



**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.

**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](http://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 raccords du spectromètre de masse, du conteneur de trop-plein et de la ventilation.
- L'interrupteur du spectromètre de masse est hors tension et le câble d'alimentation secteur est raccordé 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. Mettez l'interrupteur du spectromètre de masse sous tension. Voir la figure : [Illustration 4-2](#).
2. Allumez l'ordinateur.
3. Ouvrez le logiciel de contrôle.

## Optimisation de la source d'ions



---

**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 d'incendie. N'envoyez pas plus de 3 ml/min de solvant inflammable vers la source d'ions. Bien que les composants LC puissent fournir un débit jusqu'à 5 ml/min, le dépassement du débit maximum peut entraîner une accumulation de solvant dans la source d'ions. Ne pas utiliser la source d'ions si le système d'évacuation de la source n'est pas activé et en service lorsque la source d'ions et la sonde sont correctement installées.

---



---

**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.

---

Optimiser la source d'ions chaque fois que l'analyte, son débit ou la composition de la phase mobile change.

Lors de l'optimisation des paramètres dépendant de la source d'ions, il faut introduire l'échantillon à un débit utilisé pendant l'analyse de l'échantillon avec soit l'analyse par injection en flux continu (FIA), soit le dispositif de perfusion en T. Avant d'optimiser les paramètres dépendant de la source d'ions, il faut optimiser la position de la source d'ions.

Plusieurs paramètres influent sur les performances de la source. Optimisez les performances tout en injectant un composé connu et en surveillant le signal de l'ion reconnu. Réglez le micromètre, et les paramètres du gaz et de la tension pour optimiser le rapport signal/bruit et la stabilité du signal.

Consulter la section : [Optimisation de la sonde TurbolonSpray](#) ou [Optimisation de la sonde APCI](#).

## Optimisation de la sonde TurbolonSpray



**AVERTISSEMENT !** Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Vérifier que le système d'évacuation de la source est branché et en service, et que le laboratoire dispose d'une bonne ventilation générale. Une ventilation adéquate dans le laboratoire est indispensable pour un contrôle des émissions de solvants et d'échantillons et pour l'utilisation du système en toute sécurité.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque d'incendie. N'envoyez pas plus de 3 ml/min de solvant inflammable vers la source d'ions. Bien que les composants LC puissent fournir un débit jusqu'à 5 ml/min, le dépassement du débit maximum peut entraîner une accumulation de solvant dans la source d'ions. Ne pas utiliser la source d'ions si le système d'évacuation de la source n'est pas activé et en service lorsque la source d'ions et la sonde sont correctement installées.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. S'assurer que l'électrode dépasse au-delà de la pointe de la sonde pour éviter que des vapeurs dangereuses s'échappent de la source. L'électrode ne doit pas être encastrée dans la sonde.

---

**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.

---

**Remarque :** Pour maintenir le système propre et garantir un fonctionnement optimal, réglez la position de la sonde lors de la modification du débit.

---

**Conseil !** Il est plus facile d'optimiser le signal et le rapport signal-bruit avec une analyse par injection en flux continu qu'avec des injections sur colonne.

---

**Remarque :** Si la tension **IonSpray Voltage** est trop élevée, une décharge corona peut se produire. Une décharge corona est visible sous la forme d'une brillance bleue à l'extrémité de la sonde. Elle entraîne une diminution de la sensibilité et de la stabilité du signal.

---

## Débit et température de la source d'ions

Le débit d'introduction de l'échantillon et la composition du solvant ont une incidence sur la température optimale de la sonde TurbolonSpray. Un débit ou un contenu aqueux supérieur nécessite une température optimale supérieure.

La sonde TurbolonSpray est souvent utilisée avec des débits d'échantillon compris entre 5 µl/min et 1 000 µl/min. La chaleur est utilisée pour augmenter la vitesse d'évaporation, ce qui améliore l'efficacité de l'ionisation et augmente la sensibilité. Les débits de solvant

hautement organique extrêmement faibles n'exigent généralement pas des températures accrues. Consultez la section [Paramètres de la source et tensions](#).

### Méthode

Le flux d'échantillon liquide est acheminé vers la source d'ions par une pompe LC ou par une pompe à seringue. S'il est acheminé par une pompe LC, l'échantillon peut être injecté directement dans la phase mobile par une analyse par injection en flux continu (FIA) ou par un dispositif de perfusion en T, via une pompe à seringue ou une colonne de séparation avec un injecteur en boucle ou un auto-échantillonneur. S'il est introduit par une pompe à seringue, l'échantillon est alors injecté directement dans la source d'ions. L'optimisation de la perfusion ne peut être utilisée que pour l'optimisation de la trajectoire des ions et la sélection fragmentaire MS/MS.

### Préparer le système

Pour créer une méthode optimisée pour un composé, consultez la section : [Optimisation manuelle du composé](#).

1. Ouvrez le logiciel de contrôle.
2. Dans la barre Navigation, sous le mode **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Manual Tuning**.
3. Ouvrez une méthode précédemment optimisée ou créez une méthode basée sur les composés.
4. Si la source d'ions a eu le temps de refroidir, procédez comme suit.
  - a. Réglez la température de la source d'ions sur 450.
  - b. Laissez la source d'ions chauffer pendant 30 minutes.

Les 30 minutes de préchauffage empêchent la condensation des vapeurs de solvant dans la sonde froide.

5. Lancez la circulation du solvant et l'injection de l'échantillon.

### Définir les conditions de démarrage

1. Dans le Tune Method Editor, veillez à sélectionner le bon **Scan Type** et vérifiez que les paramètres de composés appropriés sont sélectionnés.
2. Saisissez une valeur de départ pour **Ion Source Gas 1**.  
Pour les pompes LC, utilisez une valeur comprise entre 40 et 60 pour Gaz 1.
3. Saisissez une valeur de départ pour **Ion Source Gas 2 (GS2)**.  
Pour les pompes LC, utilisez une valeur comprise entre 30 et 50 pour Gaz 2.

---

**Remarque :** Le gaz 2 est utilisé avec les débits élevés typiques avec un système LC et conjointement avec l'augmentation de la température.

---

4. Entrez 20 dans le champ **Curtain Gas (CUR)**.

5. Lancez l'acquisition.

## Optimiser la position de la sonde TurbolonSpray



**AVERTISSEMENT !** Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. S'assurer que l'électrode dépasse au-delà de la pointe de la sonde pour éviter que des vapeurs dangereuses s'échappent de la source. L'électrode ne doit pas être encastrée dans la sonde.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de perforation. Être vigilant lors de la manipulation de l'électrode. La pointe de l'électrode est extrêmement acérée.

---

Après l'optimisation de la sonde, il convient d'effectuer quelques réglages mineurs. Si la sonde est retirée ou si l'analyte, le débit ou la composition des solvants change, répétez alors la procédure d'optimisation.

Voir la section : [Composants de la source d'ions](#).

1. Regarder à travers la fenêtre de la source d'ions pour visualiser la position de la sonde.
2. Surveiller le signal ou le rapport signal/bruit des analytes dans le logiciel de contrôle.
3. Utilisez le micromètre de l'axe horizontal pour régler la position de la sonde par petits incréments afin d'obtenir le meilleur signal ou rapport signal/bruit possible.  
La sonde peut être optimisée légèrement de l'un ou l'autre côté de l'ouverture.

**Conseil !** Ajustez les réglages du micromètre de l'axe horizontal pour éloigner le liquide de pulvérisation de la sonde TurbolonSpray de l'orifice afin d'éviter la contamination de ce dernier, d'éviter le perçage du flux de gaz de l'interface Curtain Gas, ce qui peut créer un signal instable, et d'éviter un court-circuit électrique dû à la présence du liquide.

---

4. Utilisez le micromètre de l'axe vertical pour régler la position de la sonde par petits incréments afin d'obtenir le meilleur signal ou rapport signal/bruit possible.

**Remarque :** La position verticale de la sonde dépend du débit. Lorsque le débit est plus faible, la sonde doit être plus près de l'orifice. Lorsque le débit est plus élevé, la sonde doit être placée plus loin de l'orifice.

---

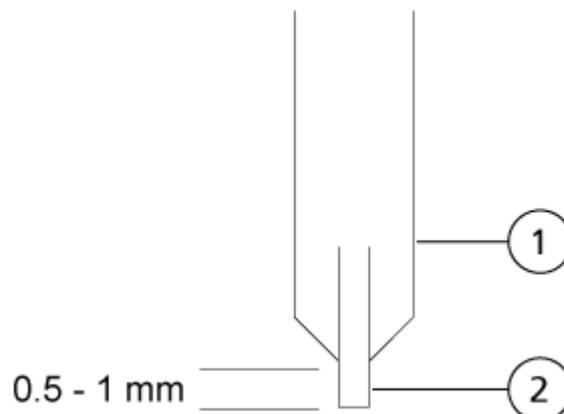
5. Régler l'écrou d'ajustement de l'électrode noir sur la sonde pour déplacer le tube de l'électrode à l'intérieur ou à l'extérieur de la sonde (pour ajuster la proéminence).

**Remarque :** La pointe de l'électrode doit ressortir de 0,5 mm à 1,0 mm par rapport à l'extrémité de la sonde.

---

Le réglage optimal pour la pointe de l'électrode dépend du composé. La distance sur laquelle ressort la pointe de l'électrode affecte la forme du cône de pulvérisation qui, à son tour, a une incidence sur la sensibilité du spectromètre de masse.

Illustration 7-1 : Réglage de l'extension de la pointe de l'électrode



Élément	Description
1	Sonde
2	Électrode

## Optimiser les paramètres source et gaz et la tension

Optimisez le gaz 1 de la source d'ions (gaz nébuliseur) de façon à obtenir la meilleure stabilité et la meilleure sensibilité du signal. Le gaz 2 de la source d'ions (gaz chauffant) aide à l'évaporation des solvants, ce qui contribue à renforcer l'ionisation de l'échantillon.

Une température trop élevée peut provoquer la vaporisation du solvant à la pointe de la sonde TurbolonSpray, surtout si la sonde dépasse trop, ce qui provoque une instabilité du signal et un bruit de fond chimique élevé. De même, un débit de gaz chauffant important peut produire un signal bruyant ou instable.

---

**Remarque :** Si la tension **IonSpray Voltage** est trop élevée, une décharge corona peut se produire. Une décharge corona est visible sous la forme d'une brillance bleue à l'extrémité de la sonde. Elle entraîne une diminution de la sensibilité et de la stabilité du signal.

---

1. Réglez les paramètres Gaz 1 de la source d'ions et Gaz 2 de la source d'ions par incréments de 5 pour obtenir le meilleur signal ou rapport signal/bruit.

---

**Remarque :** Le gaz 2 de la source d'ions est utilisé avec les débits élevés typiques avec un système LC et conjointement avec l'augmentation de la température.

---

2. Augmentez le débit du gaz de l'interface Curtain Gas jusqu'à ce que le signal commence à diminuer.

**Remarque :** Pour éviter toute contamination, utiliser la valeur la plus élevée possible pour le débit de gaz pour l'interface Curtain Gas qui ne diminue pas la sensibilité. Ne pas régler le débit à des valeurs inférieures à celles du tableau : [Tableau 7-1](#). Ceci permet d'éviter la pénétration du flux de gaz de l'interface Curtain Gas, susceptible de produire un signal bruyant, d'empêcher la contamination de l'orifice et d'augmenter le rapport signal-bruit global.

**Tableau 7-1 : Valeurs des paramètres CUR**

Spectromètre de masse	Valeur de départ
Systèmes Citrine	30

- Réglez la tension de pulvérisation **IonSpray Voltage (IS)** par incréments de 500 V pour maximiser le rapport signal/bruit.

### Optimiser la température du chauffage turbo

La température optimale du chauffage est dépendante des composés, du débit et de la composition de la phase mobile. Plus le débit et la composition aqueuse sont élevés, plus la température est optimisée.

Lors de l'optimisation de la température de la source, assurez-vous que la source d'ions s'équilibre au nouveau réglage de la température.

Ajustez la température de la source d'ions par incréments de 50 à 100 °C pour obtenir le meilleur signal ou le meilleur rapport signal/bruit.

### Optimisation de la sonde APCI



**AVERTISSEMENT !** Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. Vérifier que le système d'évacuation de la source est branché et en service, et que le laboratoire dispose d'une bonne ventilation générale. Une ventilation adéquate dans le laboratoire est indispensable pour un contrôle des émissions de solvants et d'échantillons et pour l'utilisation du système en toute sécurité.



**AVERTISSEMENT !** Risque d'incendie. N'envoyez pas plus de 3 ml/min de solvant inflammable vers la source d'ions. Bien que les composants LC puissent fournir un débit jusqu'à 5 ml/min, le dépassement du débit maximum peut entraîner une accumulation de solvant dans la source d'ions. Ne pas utiliser la source d'ions si le système d'évacuation de la source n'est pas activé et en service lorsque la source d'ions et la sonde sont correctement installées.



**AVERTISSEMENT !** Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. S'assurer que l'électrode dépasse au-delà de la pointe de la sonde pour éviter que des vapeurs dangereuses s'échappent de la source. L'électrode ne doit pas être encastrée dans la sonde.

**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.

---

**Remarque :** Le débit minimum pris en charge par la sonde APCI est de 200 µl/min. Pour la liste complète des paramètres de la sonde APCI, consultez la section : [Paramètres de la sonde APCI](#).

---

**Conseil !** Il est plus facile d'optimiser le signal et le rapport signal-bruit avec une analyse par injection en flux continu qu'avec des injections sur colonne.

---

**Remarque :** Lors de l'utilisation de la sonde APCI, assurez-vous que l'aiguille de décharge par effet corona est orientée vers l'orifice.

---

### Préparer le système

Pour créer une méthode optimisée pour un composé, consultez la section : [Optimisation manuelle du composé](#).

1. Ouvrez le logiciel de contrôle.
2. Dans la barre Navigation, sous le mode **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Manual Tuning**.
3. Ouvrez une méthode précédemment optimisée ou créez une méthode basée sur les composés.
4. Si la source d'ions a eu le temps de refroidir, procédez comme suit.
  - a. Réglez la température de la source d'ions sur 450.
  - b. Laissez la source d'ions chauffer pendant 30 minutes.

Les 30 minutes de préchauffage empêchent la condensation des vapeurs de solvant dans la sonde froide.

5. Lancez la circulation du solvant et l'injection de l'échantillon.

### Définir les conditions de démarrage

1. Dans le Tune Method Editor, veillez à sélectionner le bon **Scan Type** et vérifiez que les paramètres de composés appropriés sont sélectionnés.
2. Entrez 30 dans le champ **Ion Source Gas 1 (GS1)**.
3. Entrez 20 dans le champ **Curtain Gas (CUR)**.
4. Entrez 1 dans le champ **Nebulizer Current (NC)**.
5. Dans l'onglet Compound, dans le champ **Declustering potential (DP)**, saisissez 100.
6. Lancez l'acquisition.

## Optimiser les paramètres de la source et du gaz

1. Régler le gaz 1 de la source d'ions par incréments de cinq pour obtenir le meilleur signal ou le meilleur rapport signal/bruit.
2. Augmenter le débit du gaz de l'interface Curtain Gas jusqu'à ce que le signal commence à diminuer.

**Remarque :** Pour éviter toute contamination, utiliser la valeur la plus élevée possible pour le débit de gaz pour l'interface Curtain Gas qui ne diminue pas la sensibilité. Ne pas régler le débit à des valeurs inférieures à celles du tableau : [Tableau 7-2](#). Ceci permet d'éviter la pénétration du flux de gaz de l'interface Curtain Gas, susceptible de produire un signal bruyant, d'empêcher la contamination de l'orifice et d'augmenter le rapport signal-bruit global.

**Tableau 7-2 : Valeurs des paramètres CUR**

Spectromètre de masse	Valeur de départ
Systèmes Citrine	30

## Régler la position de l'aiguille de décharge corona



**AVERTISSEMENT !** Risque d'électrocution. Suivez cette procédure pour éviter tout contact avec les hautes tensions appliquées à l'aiguille de décharge corona, à la plaque rideau et aux chauffages Turbo.

### Matériel nécessaire

- Tournevis plat isolé

Lors de l'utilisation de la sonde APCI, assurez-vous que l'aiguille de décharge corona est orientée vers l'orifice. Lorsque vous utilisez la sonde TurbolonSpray, assurez-vous que l'aiguille de décharge corona est éloignée de l'orifice.

1. Utiliser un tournevis plat isolé pour tourner la vis de réglage de l'aiguille de décharge par effet corona sur le haut de l'aiguille.
2. Regarder à travers la fenêtre en verre pour s'assurer que l'aiguille est alignée sur la pointe en face de l'orifice.

## Optimiser la position de la sonde APCI



**AVERTISSEMENT !** Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. S'assurer que l'électrode dépasse au-delà de la pointe de la sonde pour éviter que des vapeurs dangereuses s'échappent de la source. L'électrode ne doit pas être encastrée dans la sonde.

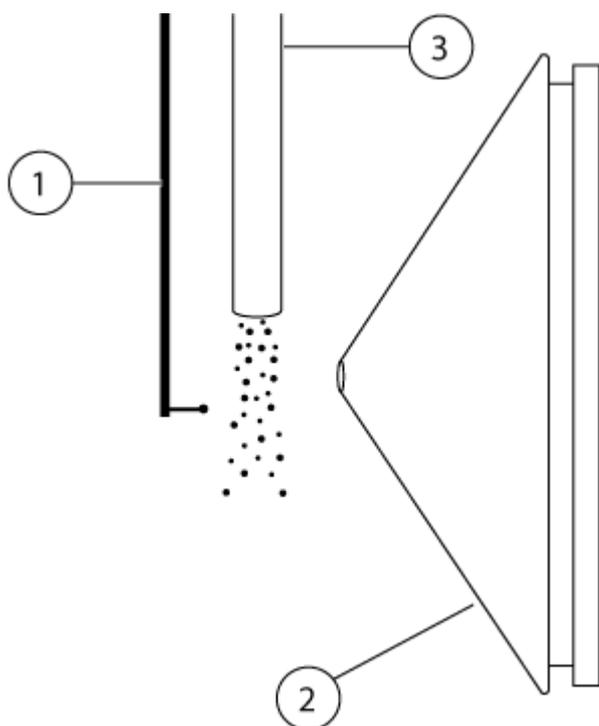


**AVERTISSEMENT ! Risque de perforation. Être vigilant lors de la manipulation de l'électrode. La pointe de l'électrode est extrêmement acérée.**

S'assurer que l'orifice de la plaque rideau reste exempt à tout moment de solvant ou de gouttelettes de solvant.

La position de la buse du pulvérisateur affecte la sensibilité et la stabilité du signal. Ne réglez la position de la sonde que par petits incréments. Lorsque le débit est faible, placer la sonde plus près de l'orifice. Pour les débits élevés, éloigner la sonde de l'orifice. Après l'optimisation de la sonde, il convient d'effectuer quelques réglages mineurs. Si la sonde est retirée ou si l'analyte, le débit ou la composition du solvant change, répétez alors la procédure d'optimisation.

**Illustration 7-2 : Position de la buse du nébuliseur**



Élément	Description
1	Aiguille de décharge par effet corona
2	Plaque rideau
3	Sonde APCI

1. Utilisez les réglages du micromètre sur les axes horizontal et vertical précédents ou réglez-les sur 5 comme position de départ.

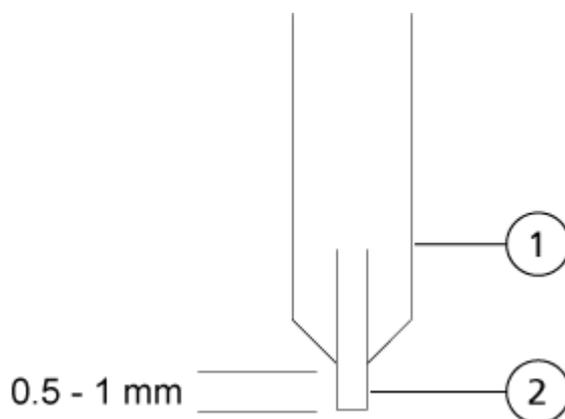
**Remarque :** Pour éviter la dégradation des performances du spectromètre de masse, ne pas pulvériser directement dans l'ouverture.

2. Surveillez le signal ou le rapport signal/bruit des analytes dans le logiciel de contrôle.
3. Utilisez le micromètre de l'axe horizontal pour régler la sonde par petits incréments afin d'obtenir le meilleur signal ou rapport signal/bruit possible.
4. Utilisez le micromètre de l'axe vertical pour régler la position de la sonde par petits incréments afin d'obtenir le meilleur signal ou rapport signal/bruit possible.
5. Réglez l'écrou d'ajustement de l'électrode noire sur la sonde pour déplacer le tube de l'électrode dans la sonde (et en affiner la proéminence).

**Remarque :** La pointe de l'électrode doit ressortir de 0,5 mm à 1,0 mm par rapport à l'extrémité de la sonde.

Le réglage optimal pour la pointe de l'électrode dépend du composé. La distance sur laquelle ressort la pointe de l'électrode affecte la forme du cône de pulvérisation qui, à son tour, a une incidence sur la sensibilité du spectromètre de masse.

### Illustration 7-3 : Réglage de l'extension de la pointe de l'électrode



Élément	Description
1	Sonde
2	Électrode

## Optimiser le courant de nébulisation

La source d'ions est contrôlée par le courant, et non par la tension. Sélectionnez le courant approprié pour la méthode d'acquisition, quelle que soit la position choisie de la source d'ions.

Commencer avec une valeur du courant de nébulisation égale à 3 puis augmenter ou diminuer cette valeur de manière à obtenir le meilleur signal ou le meilleur rapport signal/bruit.

Le courant de nébulisation appliqué à l'aiguille de décharge corona s'optimise généralement entre 1 et 5  $\mu\text{A}$ , quelle que soit la polarité. Si aucun changement dans le signal n'est constaté lorsque le courant est augmenté, alors laissez le courant à la valeur la plus basse fournissant le meilleur signal ou le meilleur rapport signal/bruit.

### Optimiser la température de la sonde APCI

La quantité et le type de solvant influent sur la température optimale de la sonde APCI. À un débit élevé, la température optimale augmente.

---

**Remarque :** Lorsque la source d'ions est activée, son chauffage exige 1 à 2 minutes pour devenir rouge, indiquant que la source est en phase de préchauffage.

---

Ajustez la température de la source d'ions par incréments de 50 à 100 °C pour obtenir le meilleur signal ou le meilleur rapport signal/bruit.

### Conseils d'optimisation

L'optimisation de la source d'ions réduit au maximum le besoin de nettoyage des composants de la source d'ions et de l'interface avec le vide.

- Utilisez la plus haute température possible lors de l'optimisation des composés. Une température de 700 °C est courante pour de nombreux composés. Des températures élevées contribuent à maintenir une source d'ions propre et à réduire le bruit de fond.
- Utilisez la valeur la plus élevée possible pour le débit du gaz de l'interface Curtain Gas sans perte de sensibilité. Cela permet de :
  - Prévenir toute pénétration du flux de gaz de l'interface Curtain Gas, susceptible de produire un signal bruiteux.
  - Éviter la contamination de l'orifice.
  - Augmenter globalement le rapport signal/bruit.
- Ajustez les réglages du micromètre de l'axe horizontal pour diriger le liquide de pulvérisation de la sonde de manière à l'éloigner de l'ouverture pour :
  - Éviter la contamination de l'orifice.
  - Prévenir le perçage du flux de gaz de l'interface Curtain Gas, susceptible de créer un signal instable.
  - Éviter un court-circuit électrique dû à la présence de liquide.

Pour cela, utiliser le micromètre vertical afin de relever la sonde.

- Utiliser la plus faible tension du IonSpray possible sans perte du signal. Concentrez-vous sur le rapport signal/bruit, et pas seulement sur le signal.

## Procédures d'étalonnage du spectromètre de masse

L'étalonnage de masse peut changer au fil du temps. Vérifiez régulièrement l'étalonnage des masses. À l'installation, le système fait l'objet d'un étalonnage des masses et la résolution des pics spectraux est optimisée à une résolution unitaire et à haute résolution, en modes positif et négatif, afin d'obtenir la meilleure sensibilité et les meilleures performances du spectromètre de masse. L'étalonnage des masses garantit que les signaux issus des composés ionisés sont enregistrés à leurs vraies valeurs  $m/z$ .<sup>1</sup> L'échelle  $m/z$  est étalonnée à l'aide des composés de masse et de pureté connues. Durant l'optimisation de la résolution, la largeur et la forme des pics sont ajustées. La résolution des spectres de masse est représentée comme  $(m/z)/\text{Width}$ , où Width correspond à la largeur d'un pic spectral à une valeur  $m/z$  donnée.<sup>1</sup> La largeur du pic est en général mesurée en des points où l'intensité est la moitié de la hauteur du pic.

---

**Remarque** : lorsque la résolution augmente, la sensibilité diminue. Il est important de trouver un équilibre entre les exigences en matière de sensibilité et en matière de résolution.

---

Le module Instrument Optimization du logiciel Analyst MD est utilisé pour étalonner les masses et optimiser la résolution. Vérifiez l'étalonnage des masses et la résolution une fois par semaine ou après avoir nettoyé l'instrument afin de s'assurer que le système fonctionne correctement. En général, l'étalonnage et la résolution pour un spectromètre de masse à triple quadripôle est stable pendant trois à six mois à moins que le système ne perde du vide. Si le système perd son dispositif à dépression, vérifiez l'étalonnage et la résolution avant de l'utiliser. Voir la section : [Instructions d'utilisation — réglage et étalonnage](#).

---

**ATTENTION** : Risque de résultat erroné. Assurez-vous que le système est étalonné. Si le système n'est pas étalonné correctement, une masse pourrait alors être identifiée de manière incorrecte ou la quantification pourrait être inexacte.

---

Consultez les sections : [Précautions et limites de fonctionnement](#) et [Étalonnage des ions et solutions](#).

## Réinitialiser le spectromètre de masse

1. Arrêtez tous les balayages en cours, puis coupez le débit d'échantillon vers le spectromètre de masse.
2. Fermez le logiciel de contrôle.
3. Appuyez, en le maintenant enfoncé, sur le bouton **Reset** pendant cinq secondes. Un déclic se fait entendre lorsque le relais est activé. Après environ 3 minutes, le spectromètre de masse atteint la pression de fonctionnement.

---

<sup>1</sup> Standard CLSI C50–A–Vol. 27, No. 24 — Mass Spectrometry in the Clinical Laboratory: General Principles and Guidance: Approved Guideline.

## Arrêter et ventiler le 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.

---

**ATTENTION : Risque d'endommagement du système. N'éteignez pas les pompes primaires jusqu'à ce que les turbo-pompes soient arrêtées.**

---

**Remarque** : si l'alimentation en gaz doit être déconnectée, relâchez d'abord la pression dans les lignes de gaz.

---

**Conseil !** Si le spectromètre de masse n'est pas utilisé pendant un certain temps, laissez-le en 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. Quittez le logiciel.
4. (Si nécessaire) Suivez ces étapes pour ventiler le système :

---

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

---

- a. Appuyez sur le bouton **Vent** et maintenez-le enfoncé pendant trois secondes. Le voyant de vide commence à clignoter plus rapidement que pendant l'arrêt de la pompe. La turbo-pompe ralentit progressivement.
  - b. Laissez le système ventiler pendant 15 minutes.
5. Éteignez l'interrupteur du spectromètre de masse.
  6. Débranchez le câble d'alimentation secteur du spectromètre de masse de la prise d'alimentation secteur.
  7. (En cas de ventilation du système) Débranchez le câble d'alimentation secteur de la pompe primaire de la prise d'alimentation secteur.

## 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 *Guide d'installation du logiciel Analyst MD*.

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.

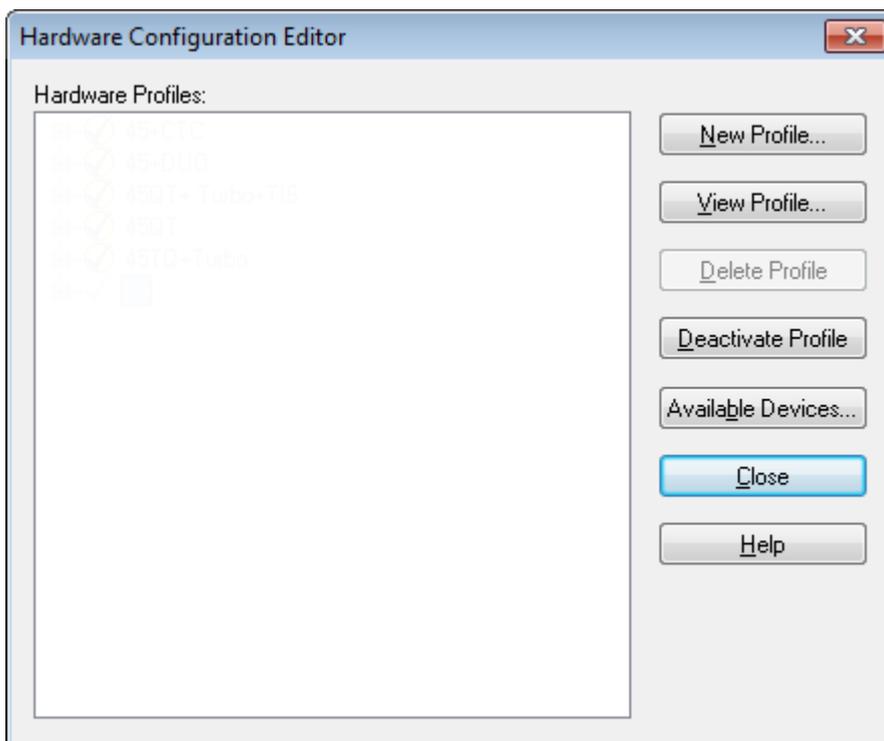
Chaque profil d'équipement doit inclure un spectromètre de masse. Avant de créer une méthode d'acquisition, assurez-vous que tous les périphériques à utiliser dans la méthode sont inclus dans le profil de matériel. Seuls les périphériques configurés dans le profil matériel actif et sélectionnés dans 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 pour créer des 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.

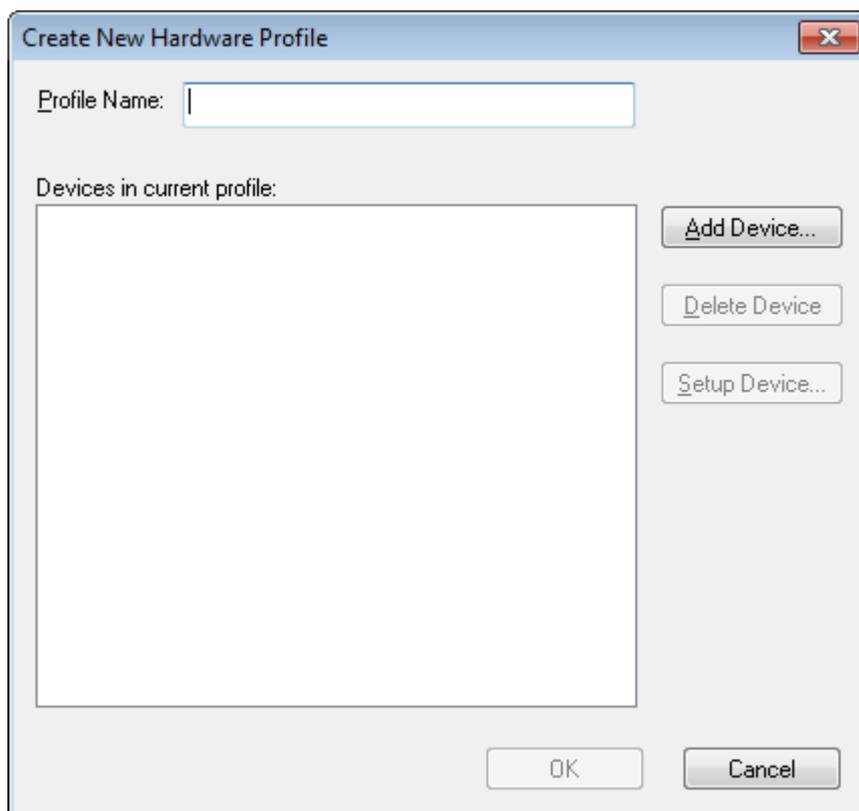
1. Dans la barre de navigation, sous **Configure**, double-cliquez sur **Hardware Configuration**.

**Illustration 8-1 : Boîte de dialogue Hardware Configuration Editor (Éditeur de configuration du matériel)**



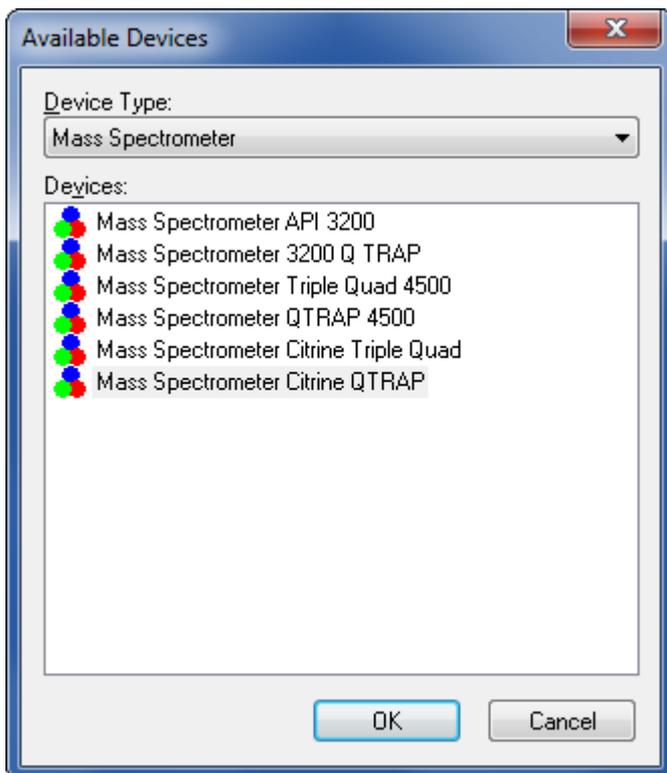
2. Cliquez sur **New Profile**.

Illustration 8-2 : Boîte de dialogue Create New Hardware Profile



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

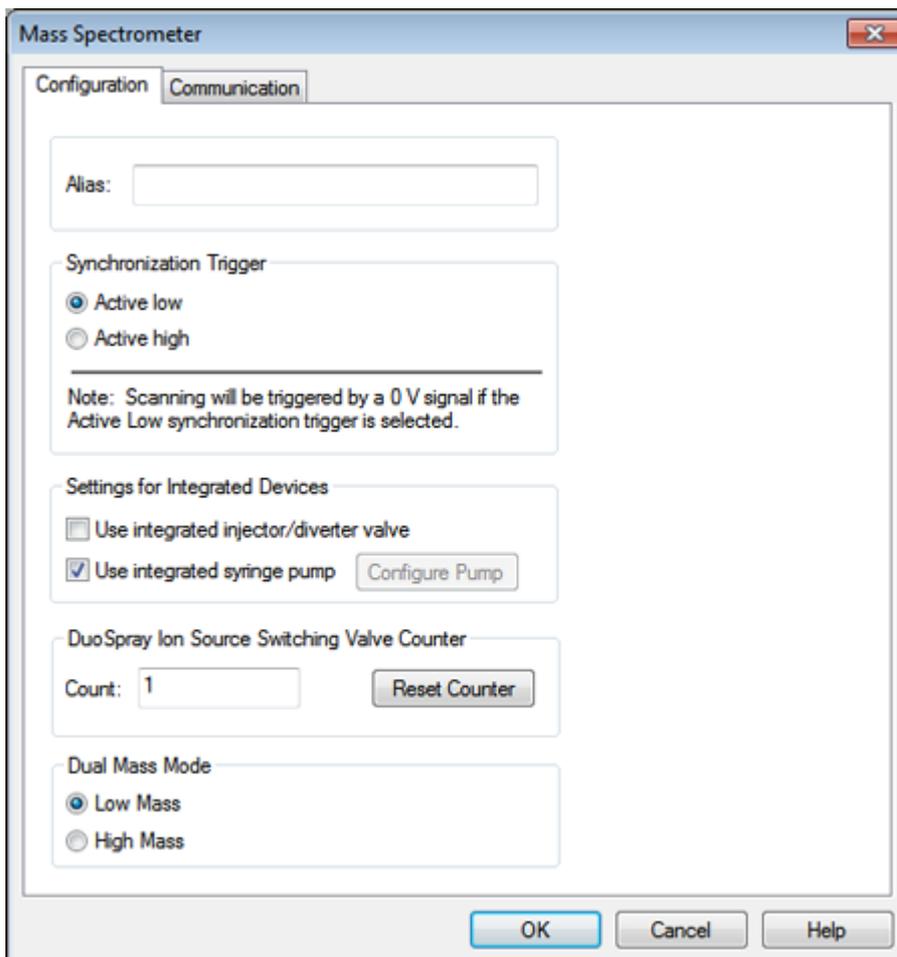
Illustration 8-3 : Boîte de dialogue Available Devices



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. Sur l'onglet Configuration, dans la section Dual Mass Mode, sélectionnez l'une des options suivantes :
8. (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 8-4 : Onglet Configuration avec pompe à seringue configurée



9. (Facultatif) Pour configurer le spectromètre de masse pour la vanne de dérivation, dans l'onglet Configuration, sélectionnez **Use integrated injector/diverter valve**.
10. (Facultatif) Si nécessaire, sélectionnez des fonctions supplémentaires dans les onglets Configuration et Communication.
11. Cliquez sur **OK**.
12. 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](#) .
13. Cliquez sur **OK** dans la boîte de dialogue Create New Hardware Profile.
14. Cliquez sur le profil de matériel à activer dans Hardware Configuration Editor.
15. 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.

---

16. Cliquez sur **Close**.

**Remarque :** Le mode de fonctionnement actuel du profil matériel actif peut être consulté dans la boîte de dialogue Detailed Status pour l'appareil en double-cliquant sur l'icône de spectromètre de masse dans la section inférieure droite de la fenêtre du logiciel Analyst MD.

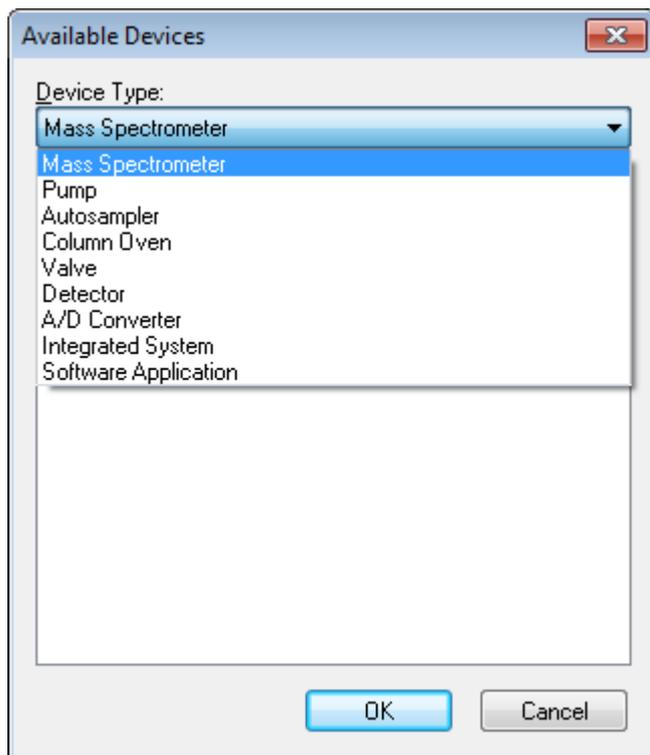
---

## 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 8-5 : 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.

## Instructions d'utilisation : Profils des matériels et projets

---

- 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 le document : *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.

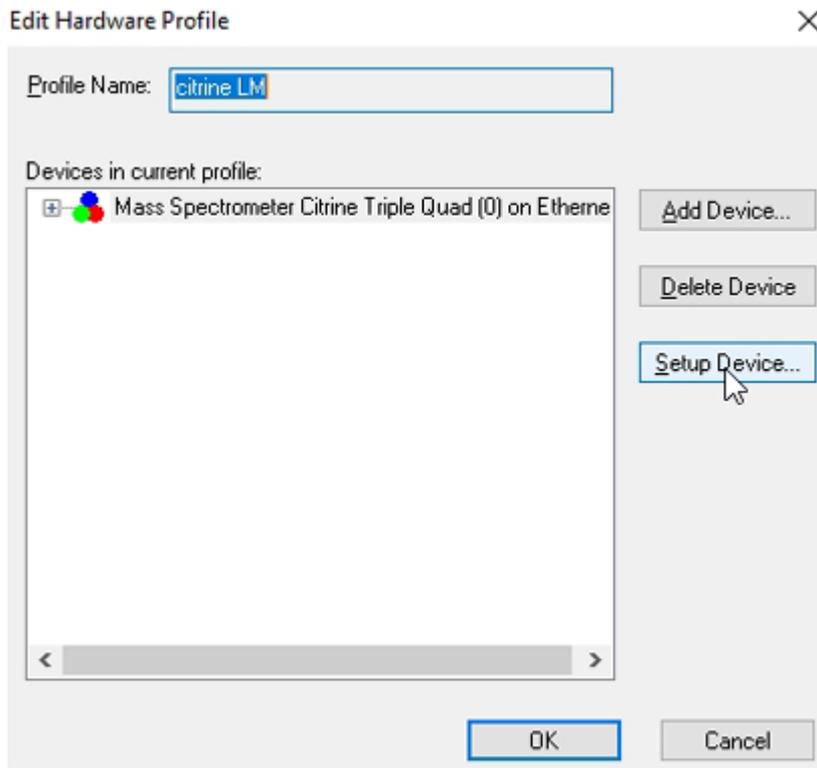
---

15. Cliquez sur **Close**.

## Modification des périphériques dans un profil de matériel

1. Ouvrez le Hardware Configuration Editor.
2. Dans la liste **Hardware Profiles**, désactivez le profil de matériel.
3. Cliquez sur **Edit Profile**.
4. Sélectionnez le périphérique applicable, puis cliquez sur **Setup Device**.  
La boîte de dialogue de configuration du périphérique apparaît.

Illustration 8-6 : Boîte de dialogue Available Devices



5. Modifiez la configuration puis cliquez sur **OK**.
6. Cliquez sur **OK**.
7. Cliquez sur **Activate Profile**.  
La coche devient verte. Si un x rouge s'affiche, alors il y a un problème avec l'activation du profil d'équipement. Pour plus d'informations, 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.

---

8. 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.

## Instructions d'utilisation : Profils des matériels et projets

---

2. Vérifiez que le périphérique est connecté au secteur et sous tension.
3. Vérifiez que le port COM ou l'adresse IP affecté au périphérique est correct.

---

**Conseil !** Sur les ordinateurs équipés de deux ports série intégrés, le premier port de la carte d'extension de port série est généralement COM3, même si le câble indique P1.

---

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](https://sciex.com/request-support).

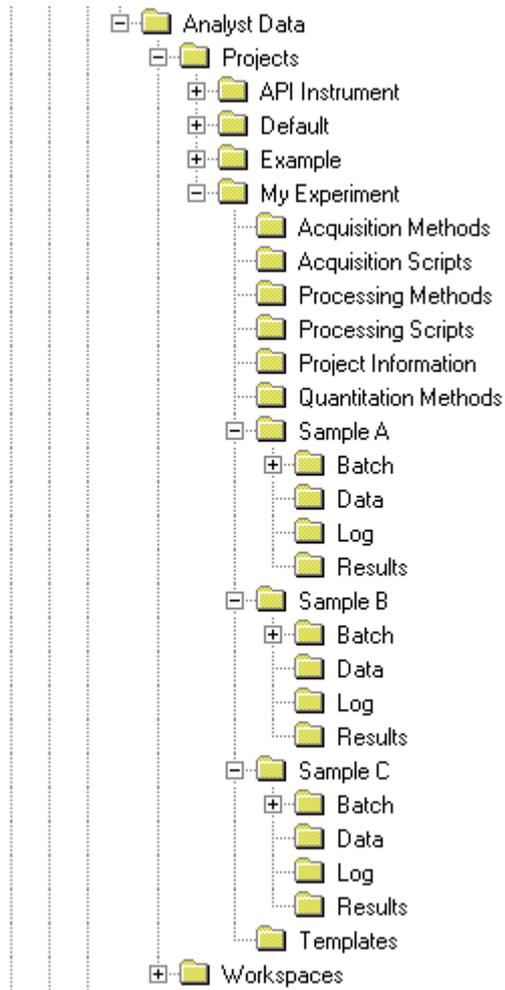
## Projets et sous-projets

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.

### À propos des sous-projets

Un sous-projet contient un sous-ensemble des dossiers contenus dans le projet. Tous les sous-projets doivent contenir les mêmes dossiers. Les sous-projets peuvent être très utiles pour l'organisation des données. Par exemple, si différents laboratoires analysent des échantillons de divers composés en utilisant la même méthode d'acquisition, alors les sous-projets peuvent être utilisés pour stocker les résultats de chaque laboratoire, tandis que le dossier de la méthode d'acquisition est stocké dans le dossier de projet. Ainsi, la méthode d'acquisition serait disponible pour une utilisation avec un sous-projet ou laboratoire. Sinon, si les échantillons sont analysés sur une période de plusieurs semaines, les résultats de chaque jour peuvent être stockés dans un sous-projet différent.

Illustration 8-7 : Exemple d'arborescence de projets et de sous-projets

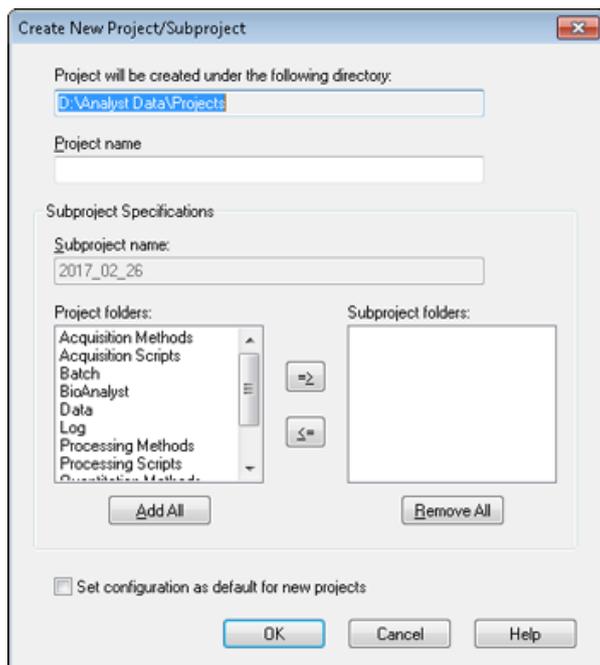


## Créer des projets et des sous-projets

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 8-8 : 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

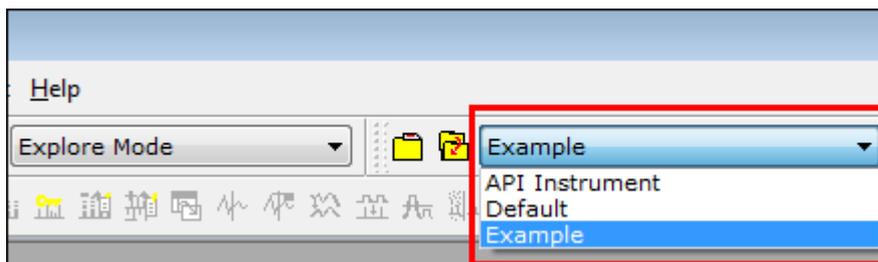
Un sous-projet peut être copié à partir d'un autre projet ayant des sous-projets existants. Si les sous-projets copiés contiennent des dossiers qui existent aussi dans le dossier du projet de destination, alors le logiciel utilise les dossiers au niveau du projet.

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 8-9 : 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` ou `Quantitate` en utilisant les exemples de fichiers de données. Les fichiers d'exemple sont triés dans des sous-dossiers par type de spectromètre de masse et par la zone d'application.

# Instructions d'utilisation — réglage et étalonnage

# 9

Exécutez l'option **Verify instrument performance** toutes les semaines ou après un nettoyage du spectromètre de masse pour vérifier que le système fonctionne correctement. En général, l'étalonnage et la résolution des systèmes quadripolaires triples sont conservés trois à six mois, sauf en cas de perte de dépression du système. Pour les systèmes QTRAP, la résolution doit aussi être conservée pendant trois à six mois, mais le système doit être étalonné environ une fois par mois. Si le système perd son vide, vérifiez l'étalonnage et la résolution avant de l'utiliser. Pour plus d'informations sur le réglage et l'étalonnage, consultez les documents : *Guide de l'utilisateur avancé* et *Didacticiel du réglage manuel*.

**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. Voir la section : [Étalonnage des ions et solutions](#).
- Série de seringues étanches au gaz de 5 ml, 1 ml ou 250 µl.
- Tube d'échantillonnage PEEK rouge.

## À propos du réglage et de l'étalonnage

Le réglage de l'instrument est le processus d'optimisation de la résolution et des paramètres de l'instrument, pour obtenir la meilleure sensibilité et les meilleures performances du spectromètre de masse. L'optimisation de la résolution implique le réglage de la largeur et de la forme des pics. Vous pouvez régler et étalonner l'instrument automatiquement ou manuellement.

**ATTENTION : Risque d'erreur d'étalonnage. Si la température varie de plus de 2 °C, la résolution et l'étalonnage de la masse peuvent être affectés.**

**Conseil !** Nettoyez la zone Q0 régulièrement afin de limiter l'impact de la charge (perte importante de sensibilité des ions d'intérêt sur une courte durée) sur les quadripôles. Contactez le responsable de maintenance qualifié (QMP) ou un technicien de service.

---

**Réglage automatique :** le logiciel effectue l'optimisation de la résolution et l'étalonnage de la masse à l'aide de l'assistant d'optimisation de l'instrument. Pour les instruments LIT, des optimisations MS3 sont également effectuées.

**Réglage manuel :** la plupart des étalonnages et des optimisations de résolution de l'instrument peuvent être réalisées manuellement.

## 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_instrument model3_010107`.

## Paramètres de sauvegarde de l'instrument

1. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Instrument Optimization**.
2. Cliquez sur **File > Backup Instrument Settings Files** dans la boîte de dialogue Instrument Optimization.
3. Saisissez un nom de fichier, puis cliquez sur **Save**.
4. Cliquez sur **Exit**.

## Restaurer les paramètres de l'instrument

1. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Instrument Optimization**.
2. Cliquez sur **File > Restore Instrument Settings Files** dans la boîte de dialogue Instrument Optimization.
3. Accédez aux paramètres de l'instrument à restaurer, puis cliquez sur **Open**.
4. Cliquez sur **Exit**.

## Réglage et étalonnage automatiques

Instrument Optimization est un logiciel d'ajustement automatique d'instrument qui ajuste les modes quadripôle et LIT, et procède à l'étalonnage de masse. Pour le mode Quadropole, il règle les décalages de résolution. Pour le mode LIT, il optimise AF3 et EXB. Pour MS3, ce

paramètre ajuste les coefficients d'excitation et d'isolement. Sélectionnez l'une des options de contrôle des performances de l'instrument :

- **Verify instrument performance** : teste les performances de l'instrument, mais laisse les réglages de l'instrument inchangés. Un rapport est généré à la fin du test. Vous pouvez utiliser cette option sur une base hebdomadaire pour vérifier les performances de l'instrument.
- **Adjust mass calibration only** : vérifie et ajuste automatiquement l'étalonnage de masse. Si l'étalonnage de masse a changé, le logiciel le corrige. Cette option peut être utilisée sur une base hebdomadaire pour les instruments LIT ou sur une base mensuelle pour vérifier et ajuster l'étalonnage de masse, si nécessaire.
- **Adjust instrument settings** : vérifie et ajuste les réglages de l'instrument et l'étalonnage de masse. Les réglages actuels de l'instrument sont mis à jour vers des réglages optimaux. Utilisez cette option si les performances de l'appareil sont faibles ou si la forme du pic est mauvaise. Seuls les utilisateurs expérimentés doivent régler les paramètres de l'instrument.

---

**Remarque** : Les anciennes méthodes LIT doivent être mises à jour avec les nouveaux paramètres. Basculer la vitesse LIT dans l'onglet Advanced MS, puis enregistrer la méthode.

---

- **Reset selected scan modes to default values and adjust instrument settings** : réinitialise les valeurs prédéfinies en usine pour l'instrument. Sélectionner cette option si une composante majeure de l'instrument est remplacée ou après la première installation. Seuls les techniciens doivent utiliser cette fonction.

Sauvegardez les paramètres actuels de l'instrument au cas où ils devraient être restaurés ultérieurement. L'emplacement prédéfini pour les paramètres de l'instrument est <drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Optimization\Instrument Settings Backups\User Created Backups.

## Vérifiez les performances de l'instrument

Utilisez cette procédure pour vérifier ou ajuster les performances du spectromètre de masse. Pour des informations sur l'utilisation des autres options de contrôle des performances de l'instrument, consultez le document : *Aide*.

### Conditions préalables

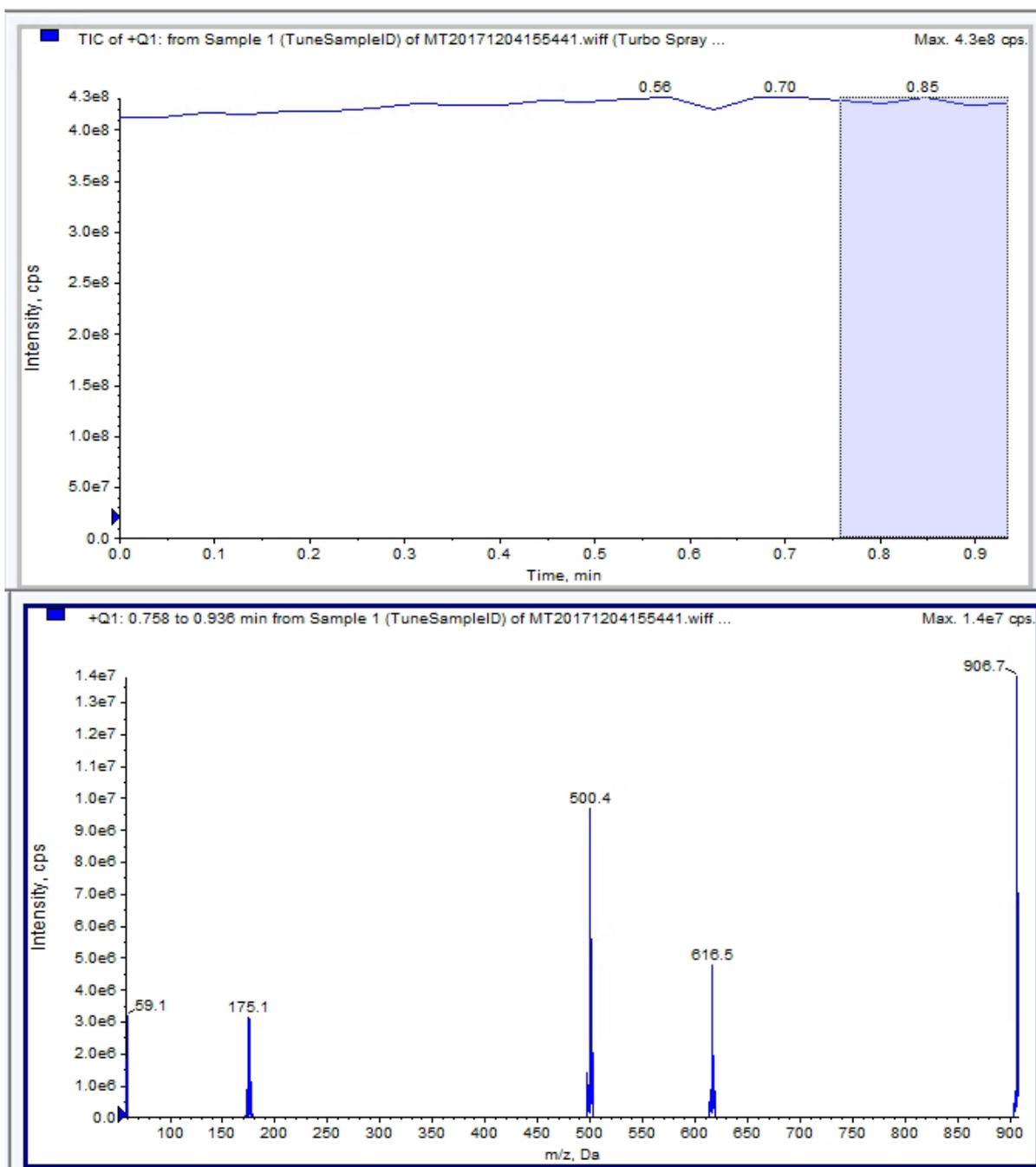
- La pompe à seringue est activée dans le profil de matériel. Si la pompe à seringue n'est pas activée, modifiez le profil de matériel. Consulter la section : [Ajouter des périphériques à un profil de matériel](#) .
- Le dossier API Instrument est sélectionné.

1. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Manual Tuning**.

## Instructions d'utilisation — réglage et étalonnage

2. Démarrez la pompe à seringue, saisissez **5** dans le champ **Duration**, puis exécutez une méthode d'étalonnage. Confirmez que le chromatogramme en courant ionique total (TIC) est stable et que les pics d'intérêt sont présents dans le spectre.

**Illustration 9-1 : Exemple d'un TIC stable et de pics d'intérêt**



3. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Instrument Optimization**.  
La boîte de dialogue Instrument Optimization s'ouvre.

4. Cliquez sur **Verify instrument performance**.
5. Cliquez sur **Next**.
6. Cliquez sur **Approved Tuning**.
7. Cliquez sur **Next**.
8. Sélectionnez une **Tuning Solution** dans la liste.  
En fonction de la solution choisie, différents modes sont disponibles:
  - a. Cliquez sur une polarité.
  - b. (Si disponible) Cliquez sur **Q1** et **Q3** dans la section Quad.
  - c. (Si disponible) Cliquez sur les vitesses de balayage demandées.
  - d. (Si disponible) Cliquez sur les vitesses de balayage dans la section LIT.
  - e. (Si disponible) Cliquez sur **Excitation** dans la section MS/MS/MS.
9. Cliquez sur **Next**.
10. Si la page Select a mode apparaît, sélectionnez **Automatic**.
11. Cliquez sur **Next**.
12. Cliquez sur **GO**.  
L'écran Verifying or Adjusting Performance s'ouvre. Une fois le processus terminé, l'écran Results Summary s'ouvre. Pour plus d'informations, consultez le document *Aide*.
13. (Le cas échéant, selon les options sélectionnées) Lorsque vous y êtes invité, modifiez les solutions pour différents types de balayages et polarités.

## 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.

Le récapitulatif des résultats indique les emplacements des fichiers de sauvegarde des paramètres d'instruments et des données, ainsi qu'un enregistrement successif de toutes les modifications et tous les résultats pendant l'optimisation.

Le récapitulatif des résultats comporte également un rapport de vérification. Ce rapport contient un instantané du spectre de masse pour chaque masse concernée afin de vérifier les modes de balayage. Le spectre est étiqueté avec la masse ciblée, l'emplacement où la masse a été trouvée, son décalage, la largeur et l'intensité du pic. Le spectre peut être utilisé comme un enregistrement visuel sur la forme du pic sur la performance du mode de balayage. Un tableau récapitulatif des résultats suit les spectres.

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.

## 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 : Optimisation automatique

# 10

Pour ajuster les paramètres de l'instrument pour des composés particuliers, les étapes suivantes sont recommandées. Le mélange de quatre composés est utilisé pour illustrer les étapes de la procédure. L'utilisateur devra appliquer la même procédure lors de l'utilisation des composés appropriés pour le dosage d'intérêt.

Cette section décrit comment :

- Optimiser automatiquement l'analyte à l'aide de l'assistant Compound Optimization ;
- Sélectionner une analyse par perfusion ou par injection en flux continu (FIA) ;
- Optimiser les paramètres :
  - En cas d'analyse par perfusion, utilisez une méthode de perfusion afin d'optimiser les paramètres dépendant du composé.
  - En cas d'analyse FIA, utilisez la FIA afin d'optimiser les paramètres dépendant de la source d'ions et du composé.

Cette procédure utilise le minoxidil, le tolbutamide, la réserpine et la rescinnamine comme exemples de composés. D'autres composés peuvent être utilisés, mais les méthodes doivent être ajustées en conséquence.

L'utilisateur peut également optimiser les composés manuellement. Consultez le document : *Guide de l'utilisateur du système* pour le spectromètre de masse.

## Conditions préalables

- Le spectromètre de masse est réglé et étalonné.
- (Pour l'analyse FIA) Un modèle de méthode d'acquisition est disponible.
- (Pour l'analyse FIA) Une pompe LC et un auto-échantillonneur sont raccordés et configurés dans le profil matériel.
- L'ensemble des périphériques nécessaires, y compris, le cas échéant, les composants LC, sont configurés dans le profil matériel.

### Matériel nécessaire

- Une seringue, de préférence de 1 ml.
- (Pour l'analyse FIA) Phase mobile : solution 1:1 d'acétonitrile et d'eau + 2 mM d'acétate d'ammonium + 0,1 % d'acide formique.

---

**Remarque :** L'utilisateur peut choisir une autre phase mobile en fonction des propriétés expérimentales du composé.

---

- Une pompe LC et un auto-échantillonneur.
- (Pour l'analyse FIA) Flacons d'auto-échantillonneur.

## À propos de l'optimisation automatique

L'optimisation automatique vérifie d'abord la présence des composés. Les tensions des différents paramètres de trajectoire d'ions augmentent ou diminuent progressivement afin de définir l'intensité maximale du signal du balayage Q1 pour chaque ion. Un fichier texte est généré et affiché au cours du processus d'optimisation. Ce fichier enregistre les expériences réalisées ainsi que la valeur optimale pour chaque paramètre. Un dossier contenant toutes les expériences réalisées est également généré. Il est possible d'y accéder en ouvrant le dossier contenant le fichier de données en mode Explore. Pour chaque expérience réalisée, une méthode d'acquisition est également générée et enregistrée dans le dossier Acquisition Method.

Au cours du processus d'optimisation, sélectionnez la manière dont l'ion précurseur et les ions produits correspondants sont choisis.

## Type d'introduction de l'échantillon

### Adaptateur

La perfusion est le flux continu d'échantillon à faible débit dans la source d'ions en utilisant une pompe à seringue. Au cours du processus d'optimisation de la perfusion, le logiciel peut sélectionner les ions précurseurs et produits et effectuer une optimisation du potentiel de défragmentation, de l'énergie de collision et du potentiel de sortie de la cellule de collision. Les tensions des différents paramètres de trajectoire d'ions augmentent ou diminuent progressivement afin d'obtenir l'intensité maximale du signal des ions précurseurs et produits.

Utilisez l'optimisation de la perfusion pour optimiser les paramètres dépendant du composé uniquement à des débits beaucoup plus faibles que ceux utilisés lors de l'analyse LC-MS/MS.

### FIA

La technique FIA consiste en l'injection d'un échantillon par l'auto-échantillonneur dans le spectromètre de masse avec un système LC. Au cours du processus d'optimisation par FIA, des injections d'échantillons multiples sont réalisées pour différents paramètres dépendants

de la source d'ions ou du composé modifiés au cours des injections. L'optimisation des composés par FIA optimise les paramètres par le biais de séries d'expériences en boucle. Un paramètre dépendant du composé est optimisé en premier, suivi par le paramètre suivant dépendant du composé. La FIA optimise les paramètres dépendant de la source d'ions en réalisant une injection pour chaque valeur.

Les paramètres du composé doivent être réduits à l'aide de deux cycles FIA supplémentaires au minimum.

Utilisez l'optimisation par FIA pour optimiser à la fois les paramètres dépendants du composé et de la source par un système LC à des débits plus élevés.

**Tableau 10-1 : Différences entre les méthodes d'introduction de l'échantillon**

Méthode	Appareils requis	Paramètres	Plage de débit normale
Adaptateur	Pompe à seringue	Dépendant du composé	5 µl/min à 25 µl/min
FIA	Une pompe LC et un auto-échantillonneur	Dépendant de la source d'ions et du composé	25 µl/min à 1000 µl/min

Un fichier texte est généré et affiché au cours de l'optimisation. Ce fichier enregistre les expériences réalisées ainsi que les valeurs optimales correspondant à chaque paramètre. Un dossier contenant l'ensemble des fichiers de données est également généré. Pour chaque expérience réalisée, une méthode d'acquisition est également générée et enregistrée dans le dossier `Acquisition Methods`.

## Réaliser une optimisation automatique pour un analyte à l'aide d'une perfusion

Utilisez cette procédure pour réaliser l'optimisation automatique MS/MS à l'aide d'une perfusion avec un ion précurseur connu et un ion produit inconnu.

### Confirmer la présence de composés

Confirmez la présence de composés d'intérêt avant de continuer l'optimisation automatique.

1. Dans le logiciel Analyst MD, créez un projet.
2. Activez le profil de matériel.
3. Préparer l'échantillon:
  - a. Aspirez la solution de composé dans une seringue et retirez l'air de la seringue.
  - b. Utilisez la tubulure avec le raccord spécial pour brancher la seringue au spectromètre de masse.
  - c. Installez la seringue dans la pompe à seringue intégrée.
4. Perfusez le composé en solution à un débit de 5 à 10 µl/min.

## Instructions d'utilisation : Optimisation automatique

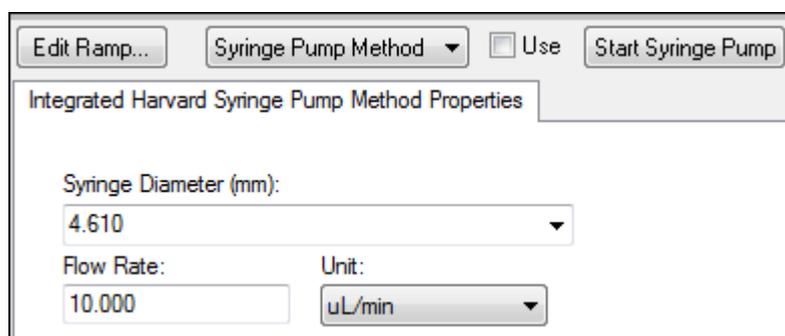
---

5. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Manual Tuning**.
6. Dans le champ comportant les listes de méthodes, cliquez sur **Syringe Pump Method**.
7. Dans l'onglet Syringe Pump Method Properties, entrez les valeurs de paramètre appropriées. Consultez le tableau : [Tableau 10-2](#).

**Tableau 10-2 : Onglet Syringe Pump Method Properties**

Paramètre	Valeur typique
Syringe Diameter	Fonction du type de seringue : 4,61 mm pour une seringue de 1 ml
Flow Rate	5 à 10
Unit	µl/min

**Illustration 10-1 : Onglet Syringe Pump Method Properties**

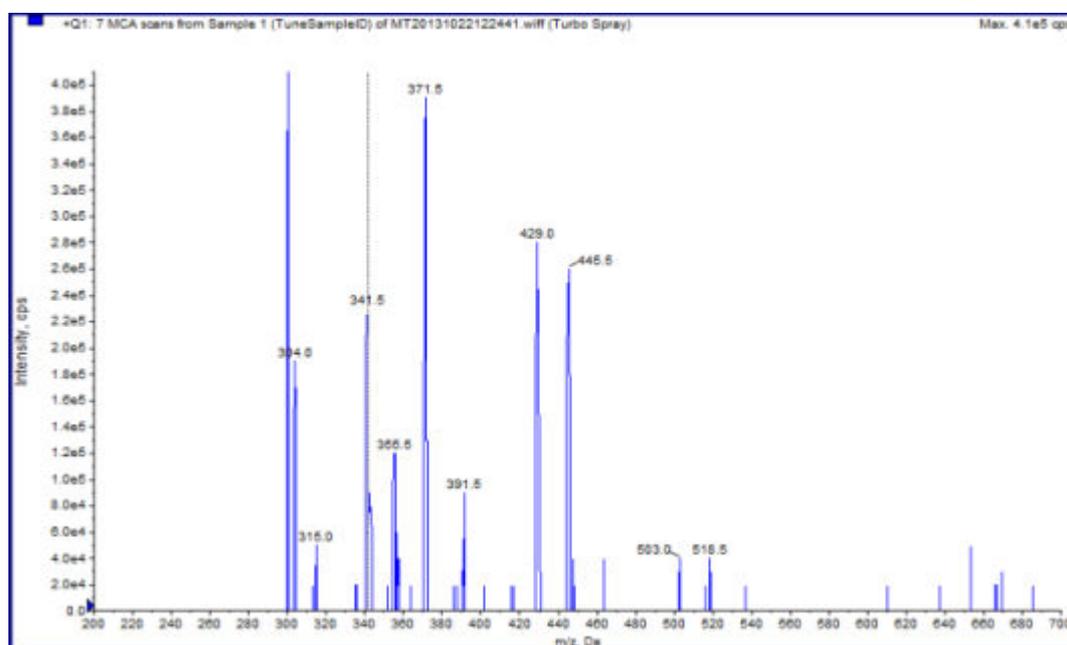


8. Cliquez sur **Start Syringe Pump**.
9. Cliquez sur **MS Method** (Méthode MS) dans la liste de méthodes.
10. Cliquez sur **Start**.
11. Attendez qu'un TIC régulier apparaisse sur la gauche ainsi que des pics sur la droite. Cliquez ensuite sur **Stop**.
12. Cochez la case **MCA**.
13. Saisissez 10 dans le champ **Cycles**.
14. Cliquez sur **Start**.

Une fois les dix balayages terminés, le graphique affiche les masses des quatre composés comme ions.

**Remarque :** Les intensités des composés doivent être beaucoup plus élevées que les plus petits pics de bruit, mais pas au point de ne pouvoir en visualiser aucun. Dans le premier cas, il est possible que le pic ne soit pas un composé réel. Dans le second cas, la concentration sera peut-être trop élevée pour que le logiciel effectue une optimisation correcte.

### Illustration 10-2 : Ions du composé



## Procéder à une optimisation automatique MS et MS/MS à l'aide d'une perfusion avec un ion précurseur connu et un ion produit inconnu

L'optimisation automatique pour l'analyse MS/MS optimise certains paramètres dépendant du composé pour une transition MRM (Surveillance des réactions multiples) ou plusieurs. Le logiciel trouve l'ion d'intérêt, puis optimise les paramètres dépendant du composé afin d'obtenir la sensibilité maximale pour le composé. Le logiciel intensifie la CE, puis sélectionne les fragments les plus intenses qui sont conformes à l'ensemble des critères de sélection des ions produits.

Si le signal du balayage Q1 initial est trop élevé, le logiciel tente alors de réduire le CEM afin de maintenir les ions dans la plage du détecteur. Si le signal demeure trop élevé après la réduction du CEM, le processus s'interrompt et un message d'erreur apparaît. Vous devez diluer la solution, puis redémarrer l'optimisation. N'oubliez pas de vidanger le tube de perfusion.

Les paramètres de la dernière optimisation quantitative sont stockés.

## Instructions d'utilisation : Optimisation automatique

---

1. Assurez-vous que la bonne concentration de solution est installée dans la pompe à seringue et que cette dernière a bien été démarrée.  
La pompe à seringue doit être démarrée dans la fenêtre Manual Tune avant de commencer l'optimisation du composé.  
Si une pompe à seringue intégrée est disponible et a été démarrée, son voyant d'état clignote.
2. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Compound Optimization**.  
La page Instrument Settings apparaît.
3. Dans la section Inlet, cliquez sur **Infusion**.
4. Cliquez sur **MS/MS Analysis** dans la section Mass Spectrometer.
5. Cliquez sur **Next**.  
La page Ions to use in MS/MS Analysis apparaît.
6. Sélectionnez les valeurs de paramètres appropriées. Consultez le tableau : [Tableau 10-3](#).

**Tableau 10-3 : Exemples de paramètres à utiliser dans la page MS/MS Analysis**

Paramètre	Valeur
<b>MW Ion: Search Window</b>	2.500
<b>Resolution</b>	Unité
<b>Polarity</b>	Positive ou négative, selon les propriétés du composé ciblé
<b>Product Ion</b>	Auto Select
<b>Resolution</b>	Unité

---

**Remarque :** l'algorithme d'optimisation recherche le pic le plus intense dans la fenêtre de recherche indiquée. Si le pic le plus intense figurant dans cette fenêtre n'est pas la masse d'intérêt, le logiciel optimisera le mauvais ion.

---

7. Cliquez sur **Criteria** à côté de l'option **Auto Select**.  
La boîte de dialogue Product Ion Auto Selection Criteria apparaît.
8. Saisissez les valeurs de paramètres appropriées. Consultez le tableau : [Tableau 10-4](#).

Tableau 10-4 : Exemples de paramètres de la boîte de dialogue Product Ion Auto Selection Criteria

Paramètre	Valeur	Description
<b>From the Most Intense (peaks)</b>	3	<p>Nombre de pics des fragments à optimiser. L'algorithme génère un spectre de balayage des ions produits tout en incrémentant la CE en mode MCA. Dans cet exemple, l'algorithme prend les trois ions-fragments les plus intenses du spectre puis poursuit l'optimisation MS/MS sur ces fragments uniquement.</p> <p>Pour les composés inconnus, sélectionnez plus de pics.</p>
<b>Build final method using (most intense peaks)</b>	2	<p>Nombre d'ions-fragments par ion précurseur (composé cible) à inclure automatiquement dans la méthode d'acquisition. Le nombre spécifié définit le nombre de transitions MRM à inclure pour chaque composé cible dans la méthode. L'ordre de préférence est basée sur l'intensité de l'ion-fragment.</p> <p>La meilleure valeur de départ est de deux plutôt que de un, car en règle générale deux ions produits sont nécessaires pour la quantification. Vous pouvez commencer par définir la valeur sur trois en cas de problème avec l'un des deux meilleurs. Vous pouvez revenir en arrière, le troisième sera déjà identifié.</p> <p>Pour les composés inconnus, sélectionnez plus de pics à utiliser en cas d'interférences.</p>
<b>Exclude Product Ions within <math>\pm</math> (Da of Precursor Ion <math>m/z</math>)</b>	20	<p>La valeur Da qui définit la plage d'exclusion autour de l'ion précurseur. Les ions-fragments compris dans cette plage ne sont pas sélectionnés pour l'optimisation MRM. Par exemple, si l'utilisateur tape <math>\pm 5</math> Da pour un ion précurseur dont la valeur <math>m/z</math> est de 500, alors tous les ions-fragments de valeur <math>m/z</math> comprise entre 495 et 505 sont exclus. Cela empêche l'optimisation de l'ion précurseur en tant qu'ion produit.</p>
<b>Min. Mass for Product Ion (Da)</b>	60 000	<p>Masse de fragment la plus faible à prendre en compte pour l'optimisation. Utilisez cette option pour augmenter ou réduire la taille de la fenêtre contenant les ions-fragments à prendre en considération pour la masse du précurseur.</p>

**Tableau 10-4 : Exemples de paramètres de la boîte de dialogue Product Ion Auto Selection Criteria (suite)**

Paramètre	Valeur	Description
Threshold for Product Ion (cps)	100 000	Nombre minimal de comptes pour un ion produit à prendre en compte.

9. Cliquez sur **OK** pour enregistrer les modifications dans les critères de sélection,
10. Cliquez sur **Next**.  
La boîte de dialogue Target Components (Composés cibles) s'ouvre.
11. Saisissez les valeurs de paramètres appropriées. Consultez le tableau : [Tableau 10-5](#).

**Remarque :** le nom du composé doit être unique pour chaque composé ou transition.

**Tableau 10-5 : Exemples de paramètres de la boîte de dialogue Target Compounds**

Composé cible	Champ	Valeur
Résérpine	Nom du composé	Résérpine
	MW (Da) <sup>2</sup>	609,3
	Non. Charges (Nombre de charges)	1
Minoxidil	Nom du composé	Minoxidil
	MW (Da) <sup>2</sup>	210,2
	Non. Charges (Nombre de charges)	1
Tolbutamide	Nom du composé	Tolbutamide
	MW (Da) <sup>2</sup>	271,1
	Non. Charges (Nombre de charges)	1
Rescinnamine (IS)	Nom du composé	Rescinnamine
	MW (Da) <sup>2</sup>	635,3
	Non. Charges (Nombre de charges)	1

12. Cliquez sur **Finish** pour démarrer le processus d'optimisation.

Deux fenêtres apparaissent : une fenêtre de fichier texte et une fenêtre d'acquisition. L'utilisateur devra peut-être réduire l'une des deux pour voir la seconde. L'expérience

<sup>2</sup> Saisissez la masse ionique exacte.

en cours de réalisation s'affiche dans la partie supérieure de la fenêtre d'acquisition. L'axe des x représente le paramètre en cours d'optimisation pour chaque expérience. La fenêtre du fichier texte est mise à jour dès la génération de résultats.

Une fois l'optimisation terminée, un fichier d'acquisition MRM est créé et nommé *<compound>\_QOpt\_FinalMRM\_Pos.dam*, où *<compound>* est le premier composé de la page Target Components.

### Vérifiez les résultats de l'optimisation

Une fois l'optimisation terminée, les paramètres optimisés sont enregistrés dans une méthode d'acquisition. Les fichiers dam et wiff générés pendant le processus d'optimisation sont enregistrés respectivement dans le dossier *Acquisition Methods* et dans un sous-dossier du dossier *Data*, dans le projet. Le nom du sous-dossier est généré en utilisant le nom du composé ainsi que la date.

1. À l'issue de l'optimisation, imprimer le fichier texte contenant les paramètres optimisés pour chaque composé.
2. Cliquez sur **File > Open** puis sélectionnez le fichier *Reserpine\_QOpt\_FinalMRM.POS.dam*.
3. Comparez les valeurs figurant dans le fichier texte à celles du fichier dam.
4. Vérifiez le contenu des dossiers suivants :
  - **Data** : contrôlez tous les cycles réalisés pendant l'optimisation. Comparez un fichier wiff avec la valeur optimisée dans la méthode ou les paramètres imprimés.
  - **Acquisition Method** : fichier *Reserpine\_QOpt\_FinalMRM.POS.dam* et autres fichiers dam créés pendant l'optimisation.
  - **Log** : fichier de rapport (rtf) affiché au cours du processus d'optimisation.

## Optimisation automatique pour un analyte à l'aide de la technique FIA

### Conditions préalables

- Identifiez les ions pour les composés et enregistrez la méthode d'acquisition de base.
- Ajoutez un auto-échantillonneur et une pompe LC à la méthode d'acquisition de base. L'utilisation de la FIA pour une optimisation nécessite que ces dispositifs soient actifs dans le profil de matériel.
- Créez une méthode d'acquisition LC-MS/MS à partir du fichier *Reserpine\_QOpt\_FinalMRM.POS.dam*, puis nommez-la .

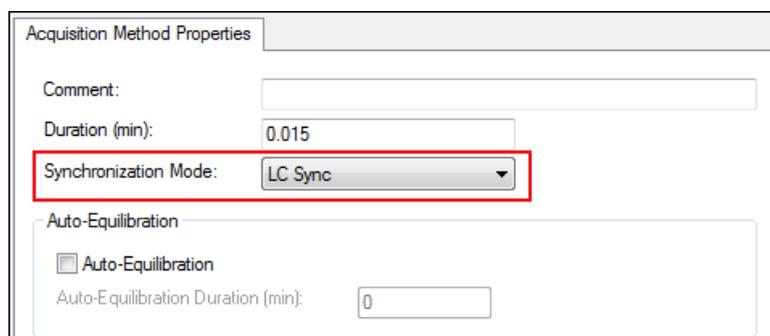
## Instructions d'utilisation : Optimisation automatique

**Remarque** : bien que vous puissiez utiliser la technique FIA pour optimiser les paramètres dépendant du composé, ce n'est en général pas la solution adoptée en raison du nombre de cycles nécessaires pour obtenir les valeurs de paramètres optimales.

1. Placez une dilution formée d'un mélange de quatre composés dans un auto-échantillonneur.  
Vous devez avoir assez d'échantillon pour passer en revue chaque variable de chaque paramètre et qu'il reste de l'échantillon. Par exemple, si vous réglez la température sur 300, 400 ou 500 °C et que le volume d'injection est de 10 µl, vous devez disposer de plus de 30 µl (injection de 3 × 10 µl).
2. Veillez à ce que **LC Sync** soit sélectionné dans la méthode.

**Remarque** : en mode LC Sync, le spectromètre de masse est coordonné avec le système LC afin de garantir une acquisition correcte des données.

### Illustration 10-3 : Méthode d'acquisition avec sélection de LC Sync



The screenshot shows the 'Acquisition Method Properties' dialog box. The 'Synchronization Mode' dropdown menu is highlighted with a red box and is set to 'LC Sync'. Other visible fields include 'Duration (min): 0.015' and 'Auto-Equilibration Duration (min): 0'.

3. Vérifiez que les paramètres de la source d'ions et du gaz sont définis sur des niveaux raisonnables pour empêcher la contamination du spectromètre de masse pendant l'optimisation. Voir la section : [Optimisation de la source d'ions](#).
4. Réglez le micromètre horizontal sur 5.
5. Réglez le micromètre vertical sur la source d'ions de manière à ce qu'il corresponde à votre débit. Pour commencer, utilisez les paramètres dans le tableau suivant.

**Tableau 10-6 : Paramètres verticaux de la source d'ions**

Flow rate (Débit)	Paramètres verticaux initiaux
1 µl/min à 20 µl/min	10 mm
20 µl/min à 250 µl/min	5 mm
250 µl/min à 500 µl/min	2 mm
500 + µL/min	0 mm

6. Définissez les valeurs du système LC et utilisez par exemple un volume d'injection de 10 µl pour l'auto-échantillonneur. Utilisez la même concentration ou une concentration inférieure pour l'expérience de perfusion.

Les pompes LC doivent être configurées pour une analyse isocratique sans colonne. Les durées MS et LC doivent être identiques afin de recueillir les données exactes.

Le débit et le pourcentage de phases mobiles utilisés doivent être fonction de la colonne LC utilisée, de la chromatographie générale et de la phase de concentration mobile approximative à laquelle vos composés d'intérêt éluent.

7. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Compound Optimization**.  
La page Instrument Settings apparaît.
8. Selon le système LC utilisé, entrez les valeurs de paramètre appropriées. Consultez le tableau : [Tableau 10-7](#).

**Tableau 10-7 : Exemple de paramètres de réglages de l'instrument**

Paramètre	Valeur
Inlet	FIA
Rack Code	Spécificité de l'échantillonneur automatique
Rack Position	Spécificité de l'échantillonneur automatique
Injection Volume	10 µl (exemple de volume)
Mass Spectrometer	Analyse MS/MS

9. Sélectionnez la méthode d'acquisition par défaut appropriée.
10. Cliquez sur **Next**.
11. Vérifiez que la case **Int. Std.** n'est pas cochée.  
La sélection de cette case indique quelle MRM correspond aux standards internes. Celles-ci ne sont pas optimisées au cours du processus d'optimisation.
12. Dans le groupe Resolution, sélectionnez **Unit** dans les champs **Q1 Resolution** et **Q3 Resolution**.

Illustration 10-4 : Champs de Résolution Q1 et Q3

FIA Target Compounds

These target compounds will be optimized. You may change the compound name. Please specify which one of them are used as internal standards.

	Compound Name	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Int. Std.	Vial Pos.
1	Compound 609.300-195.00	609.300	195.000	<input type="checkbox"/>	1
2	Compound 210.200-164.20	210.200	164.200	<input type="checkbox"/>	1
3	Compound 271.100-91.100	271.100	91.100	<input type="checkbox"/>	1
4	Compound 635.300-221.20	635.300	221.200	<input type="checkbox"/>	1

Note: All compounds identified as I.S. (internal standard) will not be used to determine optimum Source / Gas Parameter conditions.

Resolution

Q1 Resolution:

Q3 Resolution:

< Back   Next >   Cancel   Help

13. Cliquez sur **Next**.
14. Sur la page FIA Source Parameters, inscrivez les nombres inférieurs ou supérieurs à la valeur d'origine mais conformes aux spécifications.

**Remarque :** Pour que le système reste propre, vérifiez que les valeurs ne soient pas trop basses. Pour les paramètres qui peuvent être utilisés comme point de départ, consultez le tableau : [Tableau 10-8](#).

**Conseil !** Tapez les valeurs avant de cocher la case.

Tableau 10-8 : Exemple de paramètres pour la page FIA Source Parameters

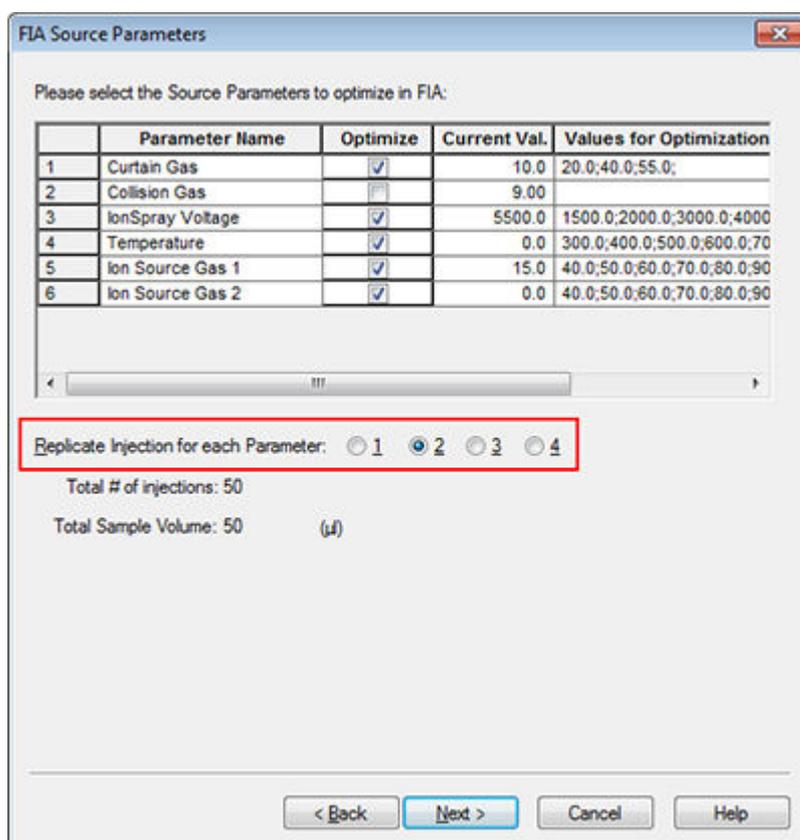
Paramètre	Sélectionner la case à cocher Optimize ?	Valeurs pour l'optimisation
<b>Curtain Gas</b>	Oui	20 ; 40 ; 55
<b>Collision Gas</b>	Non	—
<b>IonSpray Voltage</b>	Oui	1 500 ; 2 000 ; 3 000 ; 4 000 ; 5 000
<b>Temperature</b>	Oui	300 ; 400 ; 500 ; 600 ; 700

Tableau 10-8 : Exemple de paramètres pour la page FIA Source Parameters (suite)

Paramètre	Sélectionner la case à cocher Optimize ?	Valeurs pour l'optimisation
Ion Source Gas 1	Oui	40 ; 50 ; 60 ; 70 ; 80 ; 90
Ion Source Gas 2	Oui	40 ; 50 ; 60 ; 70 ; 80 ; 90

15. Sélectionnez **1** ou **2** à côté de **Replicate Injection for each Parameter**. Le nombre total d'injections et le volume total de l'échantillon sont calculés en fonction des spécifications de cette boîte de dialogue. Notez le volume total d'échantillon nécessaire. Le volume d'échantillon augmente avec le nombre de variables pour chaque paramètre qui est optimisé car chaque variable est une méthode distincte.

Illustration 10-5 : Exemple de champ Replicate Injection for each Parameter



16. Cliquez sur **Next**.
17. Sur la page FIA Compound Parameters, pour chaque analyte, utilisez les exemples de valeurs de paramètre fournis comme point de départ. Consultez le tableau : [Tableau 10-9](#).

**Remarque** : Les valeurs dans le tableau suivant sont des valeurs suggérées. Pour plus d'informations, consultez le document *Aide*.

## Instructions d'utilisation : Optimisation automatique

---

Tableau 10-9 : Exemple de page FIA Compound Parameters

Paramètre	Sélectionner la case à cocher Optimize ?	Valeurs pour l'optimisation
Declustering Potential	Oui	60 ; 80 ; 100 ; 120 ; 200
Entrance Potential	Non	—
Collision Energy	Oui	20 ; 30 ; 40 ; 50 ; 70 ; 80 ; 100
Collision Cell Exit Potential	Oui	2 ; 4 ; 6 ; 8 ; 10 ; 12

Le nombre total d'injections et le volume dépendant de l'échantillon se mettent à jour automatiquement. Contrairement aux paramètres de source d'ions qui nécessitent une injection par valeur par réplicat, les paramètres dépendant du composé nécessitent seulement une injection par paramètre. Une expérience en boucle est réalisée pour chaque paramètre. Les valeurs alternent balayage après balayage pour une injection.

---

**Remarque :** Ne spécifiez pas trop de valeurs. Cela empêcherait une évaluation correcte du paramètre.

---

18. Dans la liste Compound, passez à un autre composé et entrez les paramètres à optimiser.
19. Répétez l'étape 18 jusqu'à ce que tous les paramètres de tous les composés soient indiqués.
20. Entrez la durée de l'optimisation dans le champ **Mass Spec. Duration**.

---

**Remarque :** cette valeur doit correspondre au moins à la durée minimale nécessaire pour chaque injection.

---

Illustration 10-6 : Exemple de champ Mass Spec. Champ Duration (Durée)

Please select the Compound Parameters to optimize by FIA:

Compound:  MRM: 609.300 - 195.000

	Parameter Name	Optimize	Current Val.	Values for Optimization
1	Declustering Potential	<input checked="" type="checkbox"/>	120.0	60.0;80.0;100.0;120.0;200.
2	Entrance Potential	<input type="checkbox"/>	10.0	
3	Collision Energy	<input checked="" type="checkbox"/>	30.0	20.0;30.0;40.0;50.0;70.0;80
4	Collision Cell Ext Potential	<input checked="" type="checkbox"/>	15.0	2.0;4.0;6.0;8.0;10.0;12.0;

Total # of Injections: 53  
 Total Sample Volume: 53 (µl)  
 Mass Spec. Duration: 1.5 (min)

< Back Finish Cancel Help

21. Cliquez sur **Finish** pour démarrer le processus d'optimisation.

Le logiciel optimise les paramètres définis dépendant de la source d'ions et du composé afin d'obtenir la sensibilité maximale pour la transition MRM du composé. Quand le logiciel effectue l'optimisation, il crée un rapport **Compound Optimization**.

22. Pour obtenir des paramètres optimisés, répétez ce processus.

---

**Remarque** : en règle générale, les paramètres de source d'ions et de gaz doivent être réduits à l'aide d'un cycle FIA ou plus.

---

23. Ouvrir la méthode FIA optimisée finale dénommée \*\_FIA\_sample\_1.

---

**Remarque** : le logiciel génère plusieurs méthodes d'acquisition.

---

24. Enregistrer cette méthode sous un nom plus simple.

# Instructions d'utilisation : Méthodes d'acquisition

# 11

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.

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-Equilibration**, 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..**

### À propos des méthodes LC

Créer une méthode d'acquisition au moyen d'un périphérique, tel qu'un système LC implique de définir les paramètres de fonctionnement de ce périphérique. Si une nouvelle méthode d'acquisition est créée à partir d'un fichier existant, toutes ou certaines des méthodes de périphériques peuvent être utilisées dans la méthode d'acquisition.

### Créer des méthodes de spectromètres de masse

Utilisez Acquisition Method Editor pour créer une méthode d'acquisition du spectromètre de masse. Les champs et options disponibles varient selon le type de spectromètre de masse configuré et le type de balayage sélectionné. Acquisition Method Editor valide les réglages à mesure de la saisie des paramètres.

Créez l'une des méthodes suivantes et utilisez-la dans pour acquérir des données. Consultez la section [Créer et soumettre un lot](#)

- [Créer une méthode d'acquisition à l'aide d'un type de balayage Q1 MS](#)
- [Créer une méthode d'acquisition à l'aide d'un type de balayage Q1 MI](#)
- [Créer une méthode d'acquisition à l'aide d'un type de balayage MRM](#)

### Créer une méthode d'acquisition à l'aide d'un type de balayage Q1 MS

Utilisez la procédure suivante pour créer une méthode à l'aide du balayage Q1 MS. L'intensité d'ionisation est renvoyée pour chaque masse demandée dans la plage de balayage.

Conditions préalables
<ul style="list-style-type: none"><li>• Veillez à ce que le profil de matériel contenant le spectromètre de masse et la pompe à seringue soit actif.</li><li>• Veiller à sélectionner le projet approprié sur la barre d'outils du logiciel.</li></ul>



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

L'Acquisition Method Editor s'ouvre avec un modèle de méthode basé sur le profil de matériel actif.

2. Dans le volet Acquisition method, cliquez sur **Acquisition Method**.

## Instructions d'utilisation : Méthodes d'acquisition

3. Sous l'onglet Acquisition Method Properties, dans la liste **Synchronization Mode**, veillez à bien sélectionner **No Sync**. Pour plus d'informations sur les modes de synchronisation, consultez le document : *Aide*.
4. Dans le volet Acquisition Method, cliquez sur l'icône **Mass Spec**.
5. Dans l'onglet MS, dans la liste **Scan type**, sélectionnez **Q1 MS (Q1)**.
6. Dans la section Polarity, cliquez sur **Positive**.
7. Décochez les cases **Center/Width** et **Parameter Range** si elles sont sélectionnées.
8. Dans le tableau des plages de masses, saisissez les valeurs affichées dans le tableau suivant.

Illustration 11-1 : Valeurs des paramètres de l'onglet MS

MS Advanced MS

Experiment: 1

Scan type: Q1 MS (Q1)

Center / Width

Parameter Range

Import List

Period Summary

Duration: 0.000 (min) Delay Time: 0 (sec)

Cycles: 1 Cycle: 0.0000 (sec)

Scheduled Ionization

Start Time 0 (min) Stop Time 0 (min)

Polarity

Positive

Negative

MCA

Total Scan Time (includes pauses): 0.0000 (sec)

Edit Parameters...

	Start (Da)	Stop (Da)	Time (sec)
1			

Tableau 11-1 : Valeurs des paramètres de l'onglet MS

Champ	Exemple de valeur
Start (Da)	200
Stop (Da)	700
Time (sec)	2,5
Scan rate (Da/s)	200
Duration (min)	3

9. Sur l'onglet Advanced MS, le **Scan mode** est défini sur **Profile** et la **Step size** est de 0,1.

**Illustration 11-2 : Onglet Advanced MS**

MS	Advanced MS
Scan mode:	Profile ▼
Step size:	0.1 (Da)
Resolution Q1:	Unit ▼
Intensity threshold (total count):	0
Settling time:	0 (ms)
Pause between mass ranges:	5.007 (ms)

Dans cet exemple, le quadripôle (Q1) balaye une plage de 500 Da par incréments de 0,1 Da. Il y a ainsi 5 000 incréments dans la plage de masses. Si le balayage prend 2,5 secondes, le temps de résidence est de 0,5 ms par incréments. C'est généralement la vitesse de balayage la plus rapide pour Q1 ou Q3 avec une procédure d'étalonnage standard. Il est important de tenir compte de l'étalonnage de masse s'il faut analyser Q1 ou Q3 plus rapidement.

**Remarque :** L'incrément et la durée du balayage contrôlent le temps de résidence par incréments pour le balayage. Le temps de résidence représente la durée consacrée à l'acquisition du signal à chaque incréments du balayage.

10. Sous l'onglet MS, cliquez sur **Editer Paramètres**.  
La boîte de dialogue Parameter Table apparaît.
11. Sous l'onglet Source/Gas, saisissez les valeurs suivantes :

**Tableau 11-2 : Paramètres de l'onglet Source/Gas**

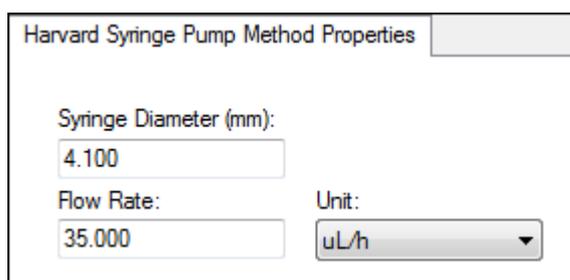
Paramètres de la source et du gaz	Valeur typique
Curtain Gas (CUR)	35
IonSpray Voltage (IS)	5 000
Temperature (TEM)	0
Ion Source Gas 1 (GS1)	20
Ion Source Gas 2 (GS2)	0

## Instructions d'utilisation : Méthodes d'acquisition

---

12. Cliquez sur l'onglet Compound, puis réglez **Declustering Potential (DP)** sur 90 et laissez **Entrance Potential (EP)** sur 10.  
Une valeur de 90 n'est peut-être pas optimale pour le spectromètre de masse, mais c'est un bon DP pour commencer.
13. Cliquez sur **OK**.
14. Dans le volet Acquisition Method, cliquez sur l'icône **Harvard Syringe Pump** ou **Integrated Syringe Pump**.

### Illustration 11-3 : Onglet Harvard Syringe Pump Method Properties



Harvard Syringe Pump Method Properties

Syringe Diameter (mm):  
4.100

Flow Rate: 35.000      Unit: uL/h

15. Modifiez la méthode de la pompe à seringue pour inclure **Syringe Diameter**, **Flow Rate** et **Unit**.
16. Enregistrer la méthode d'acquisition.  
Étapes suivantes : utilisez la méthode d'acquisition pour acquérir les données de l'analyse préliminaire. Pour la création et l'envoi de lots, voir la section : [Créer et soumettre un lot](#).

## Créer une méthode d'acquisition à l'aide d'un type de balayage Q1 MI

Utilisez la procédure suivante pour créer une méthode à l'aide du balayage Q1 MI. L'intensité d'ionisation est renvoyée uniquement pour les masses spécifiées.

### Conditions préalables

- Veillez à ce que le profil de matériel contenant le spectromètre de masse et la pompe à seringue soit actif.
- Veiller à sélectionner le projet approprié sur la barre d'outils du logiciel.

1. Dans la barre de navigation, sous **Acquire**, double-cliquez sur **Build Acquisition Method**.  
Method Editor s'ouvre avec un modèle de méthode basé sur le profil de matériel actif.
2. Dans le volet Acquisition method, cliquez sur **Acquisition Method**.
3. Sous l'onglet Acquisition Method Properties, dans la liste **Synchronization Mode**, veillez à bien sélectionner **No Sync**. Pour plus d'informations sur les modes de synchronisation, consultez le document : *Aide*.

4. Dans le volet Acquisition Method, cliquez sur l'icône **Mass Spec**.
5. Dans l'onglet MS, dans la liste **Scan type**, sélectionnez **Q1 Multiple Ions (Q1 MI)**.
6. Dans la section Polarity, cliquez sur **Positive**.
7. Dans le tableau des plages de masses, saisissez les valeurs affichées dans le tableau suivant.

**Illustration 11-4 : Valeurs des paramètres de l'onglet MS**

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window. Key elements include:

- Experiment:** 1
- Scan type:** Q1 Multiple Ions (Q1 MI)
- Polarity:** Positive (selected)
- Period Summary:**
  - Duration: 0.000 (min)
  - Delay Time: 0 (sec)
  - Cycles: 1
  - Cycle: 0.0000 (sec)
  - Scheduled Ionization:
  - Start Time: 0 (min)
  - Stop Time: 0 (min)
- Table:**

	Q1 Mass (Da)	Dwell Time (msec)
1		
- Total Scan Time (includes pauses):** 0.0000 (sec)
- Edit Parameters...** button

**Tableau 11-3 : Valeurs des paramètres de l'onglet MS**

Champ	Valeur
<b>Q1 Mass (Da)</b>	609
<b>Time (msec)</b>	100

8. Cliquez sur **Edit Parameters**.  
La boîte de dialogue Parameter table apparaît.
9. Sous l'onglet Source/Gas, saisissez les valeurs suivantes :

**Tableau 11-4 : Paramètres de l'onglet Source/Gas**

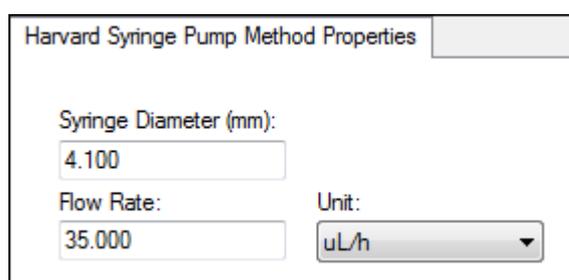
Paramètres de la source et du gaz	Valeur typique
<b>Curtain Gas (CUR)</b>	35
<b>IonSpray Voltage (IS)</b>	5 000
<b>Temperature (TEM)</b>	0
<b>Ion Source Gas 1 (GS1)</b>	20

Tableau 11-4 : Paramètres de l'onglet Source/Gas (suite)

Paramètres de la source et du gaz	Valeur typique
Ion Source Gas 2 (GS2)	0

10. Cliquez sur l'onglet Compound, puis réglez **Declustering Potential (DP)** sur 90 et laissez **Entrance Potential (EP)** sur 10.  
Une valeur de 90 n'est peut-être pas optimale pour le spectromètre de masse, mais c'est un bon DP pour commencer.
11. Cliquez sur **OK**.
12. Dans le volet Acquisition Method, cliquez sur l'icône **Harvard Syringe Pump** ou **Integrated Syringe Pump**.

Illustration 11-5 : Onglet Harvard Syringe Pump Method Properties



Harvard Syringe Pump Method Properties

Syringe Diameter (mm):  
4.100

Flow Rate: 35.000 Unit: uL/h

13. Modifiez la méthode de la pompe à seringue pour inclure **Syringe Diameter**, **Flow Rate** et **Unit**.
14. **Save** la méthode d'acquisition.  
Étapes suivantes : créez et soumettez un lot contenant la méthode d'acquisition. Pour la création et l'envoi de lots, voir la section : [Créer et soumettre un lot](#).

## Créer une méthode d'acquisition à l'aide d'un type de balayage MRM

Utilisez la procédure suivante pour créer une méthode à l'aide du balayage MRM. Ce type de balayage est utilisé dans les applications quantitatives. Un balayage MRM peut être utilisé pour déterminer la quantité du composé dans un échantillon. Il est utilisé dans l'analyse pharmacocinétique et de plus en plus dans les marchés appliqués et les applications de dépistage.

### Conditions préalables

- Veillez à ce que le profil de matériel contenant le spectromètre de masse et la pompe à seringue soit actif.
- Veiller à sélectionner le projet approprié sur la barre d'outils du logiciel.

1. Dans la barre de navigation, sous **Acquire**, double-cliquez sur **Build Acquisition Method**.  
L'Acquisition Method Editor s'ouvre avec un modèle de méthode basé sur le profil de matériel actif.
2. Dans le volet Acquisition method, cliquez sur **Acquisition Method**.
3. Sous l'onglet Acquisition Method Properties, dans la liste **Synchronization Mode**, veillez à bien sélectionner **No Sync**. Pour plus d'informations sur les modes de synchronisation, consultez le document : *Aide*.
4. Dans le volet Acquisition Method, cliquez sur l'icône **Mass Spec**.
5. Dans l'onglet MS, dans la liste **Scan type**, sélectionnez **MRM (MRM)**.
6. Dans la section Polarity, cliquez sur **Positive**.
7. Dans le tableau des plages de masses, saisissez les valeurs affichées dans le tableau suivant.

Illustration 11-6 : Type de balayage MRM

Tableau 11-5 : Plage de masses et temps de résidence

Masse Q1 (Da)	Masse Q3 (Da)	Time (msec)
609	397,2	100

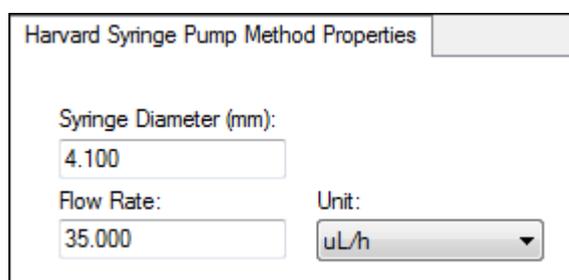
8. Sous l'onglet MS, cliquez sur **Edit Parameters**.  
La boîte de dialogue Parameter Table apparaît.
9. Sous l'onglet Source/Gas, saisissez les valeurs suivantes :

Tableau 11-6 : Paramètres de l'onglet Source/Gas

Paramètres de la source et du gaz	Valeur typique
Curtain Gas (CUR)	35
IonSpray Voltage (IS)	5 000
Temperature (TEM)	0
Ion Source Gas 1 (GS1)	20
Ion Source Gas 2 (GS2)	0

10. Sous l'onglet Compound, réglez **Declustering Potential (DP)** sur 90 et laissez **Entrance Potential (EP)** sur 45.
11. Cliquez sur **OK**.
12. Dans le volet Acquisition Method, cliquez sur l'icône **Harvard Syringe Pump**.

Illustration 11-7 : Onglet Harvard Syringe Pump Method Properties



13. Sous l'onglet Syringe Pump, modifiez la méthode de la pompe à seringue pour inclure **Syringe Diameter, Flow Rate et Unit**.
14. **Save** la méthode d'acquisition.

Étapes suivantes : créez et soumettez un lot contenant la méthode d'acquisition. Pour la création et l'envoi de lots, voir la section : [Créer et soumettre un lot](#).

## Ajouter ou retirer des périphériques des méthodes d'acquisition

Utilisez Acquisition Method Editor pour personnaliser la méthode d'acquisition en ajoutant ou en retirant des méthodes de périphériques LC. Si l'icône du périphérique souhaité n'est pas dans le volet Acquisition Method Browser, ajoutez le périphérique uniquement s'il est inclus dans le profil de matériel actif.

---

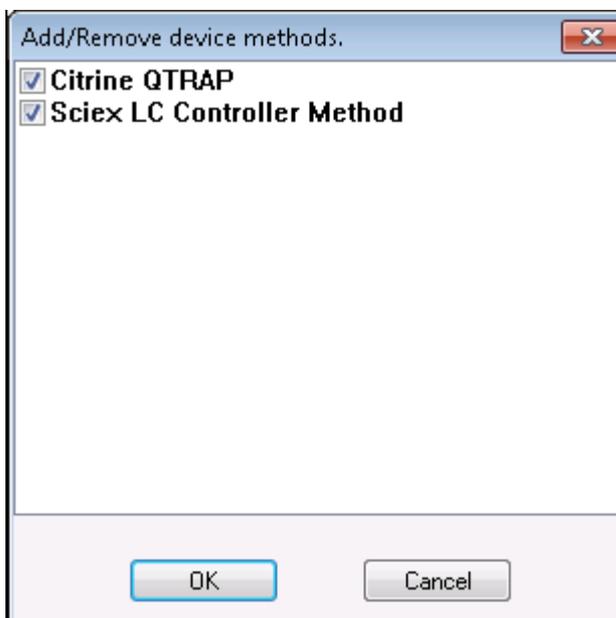
**Remarque** : Les paramètres disponibles pour les périphériques LC varient selon le fabricant.

---

## Ajouter ou retirer un périphérique LC

1. Avec un fichier de méthode ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, cliquez avec le bouton droit de la souris sur **Acquisition Method**, puis cliquez sur **Add/Remove Device Method**.

Illustration 11-8 : Boîte de dialogue Add/Remove Device Method



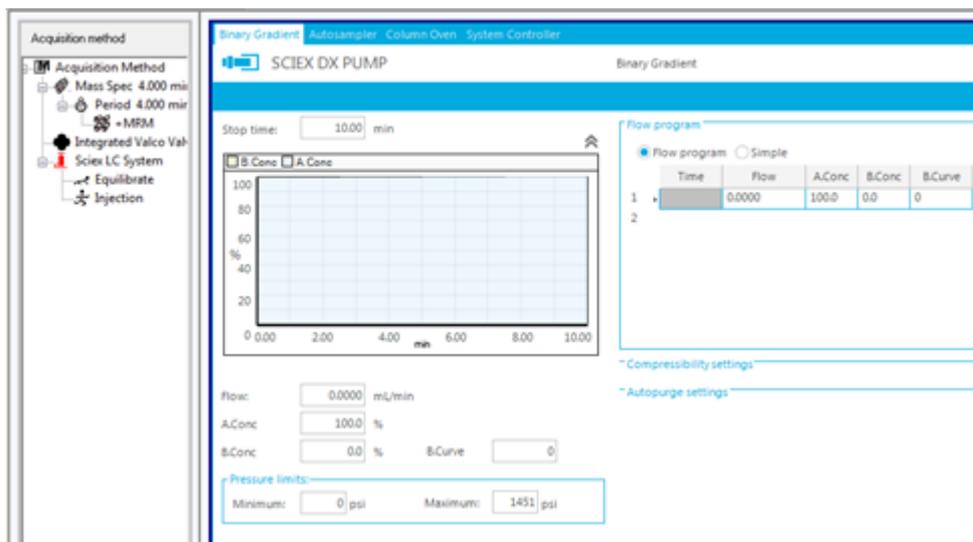
2. Cocher ou décocher les cases près de la méthode de périphérique pour ajouter ou retirer celle-ci.
3. Cliquer sur **OK**.
4. Si un appareil LC est sélectionné, dans l'onglet **Acquisition Method Properties**, sélectionnez **LC sync** pour le mode **Synchronization**.

## Modifier les propriétés de la pompe LC

Modifiez chaque périphérique de la méthode pour qu'il fonctionne correctement avec votre méthode.

1. Avec un fichier de méthode ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, cliquez sur l'icône de l'appareil LC. L'onglet LC Pump Gradient s'ouvre dans le volet Acquisition Method Editor.

Illustration 11-9 : Paramètres de la pompe SCIEX DX



2. Modifiez la méthode de la pompe LC selon les exigences des expériences.
3. Enregistrez la méthode.

### Définir les propriétés de l'auto-échantillonneur

1. Avec un fichier de méthode ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, cliquez sur le dispositif **Autosampler**. L'onglet Autosampler Properties apparaît dans le volet Acquisition Method Editor.

Illustration 11-10 : Paramètres de l'auto-échantillonneur SCIEX DX



2. Si nécessaire, modifier les détails concernant l'injection et le nettoyage.
3. Enregistrez la méthode.

### Définir les propriétés du four à colonne

1. Avec un fichier de méthode ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, cliquez sur le dispositif **Column Oven**. L'onglet Column Oven Properties s'ouvre dans le volet Acquisition Method Editor.

Illustration 11-11 : Paramètres du four à colonne SCIEX DX



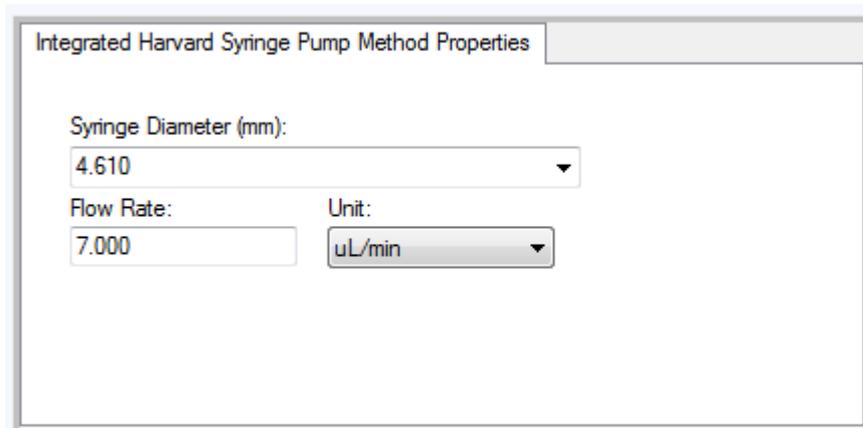
2. Entrer la température du four à colonne ou des compartiments du four à colonne en degrés Celsius.
3. Enregistrez le fichier.

## Configurer la pompe à seringue intégrée

Cette procédure est destinée à la pompe à seringue intégrée.

1. Vérifiez que la pompe à seringue intégrée est bien sélectionnée dans le profil de matériel du dispositif.
2. Cliquez sur l'icône **Syringe Pump** dans le volet Acquisition method. L'onglet Syringe Pump Method Properties apparaît dans Acquisition Method Editor.

Illustration 11-12 : Onglet Syringe Pump Properties



3. Saisissez le diamètre de la seringue dans le champ **Syringe Diameter (mm)**.
4. Tapez le débit dans le champ **Flow Rate**.
5. Sélectionnez les unités de débit de la liste **Unit**.

## Définir les propriétés de la vanne de dérivation

La vanne d'inversion peut être utilisée comme une vanne de dérivation ou d'injection.

## Instructions d'utilisation : Méthodes d'acquisition

1. Avec un fichier de méthode ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, cliquez sur l'icône **Valve**.  
L'onglet Valve Properties s'ouvre dans Acquisition Method Editor.

**Illustration 11-13 : Vanne Falco intégrée**

The screenshot shows the 'Acquisition method' tree on the left with 'Integrated Valco Valve' selected. The 'Integrated Valco Valve Method Properties' dialog is open on the right. It features a 'Valve Type' dropdown set to 'Diverter', a 'Change Position Names' dropdown, and a 'Position Name for Step0' dropdown set to 'A'. Below these are instructions on synchronization modes. A table with 20 rows and 3 columns (Step, Total Time (mi), Position) is present, with the first column numbered 1-20. 'Add Entry' and 'Remove Entry' buttons are at the bottom right.

	Total Time (mi)	Position
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18		
19		
20		

2. Modifiez les noms de position prédéfinis, si nécessaire.

La vanne d'inversion est parfois utilisée pour basculer le flux de solvant vers l'évacuation ou vers une colonne différente. Les noms de positions prédéfinis sont A et B.

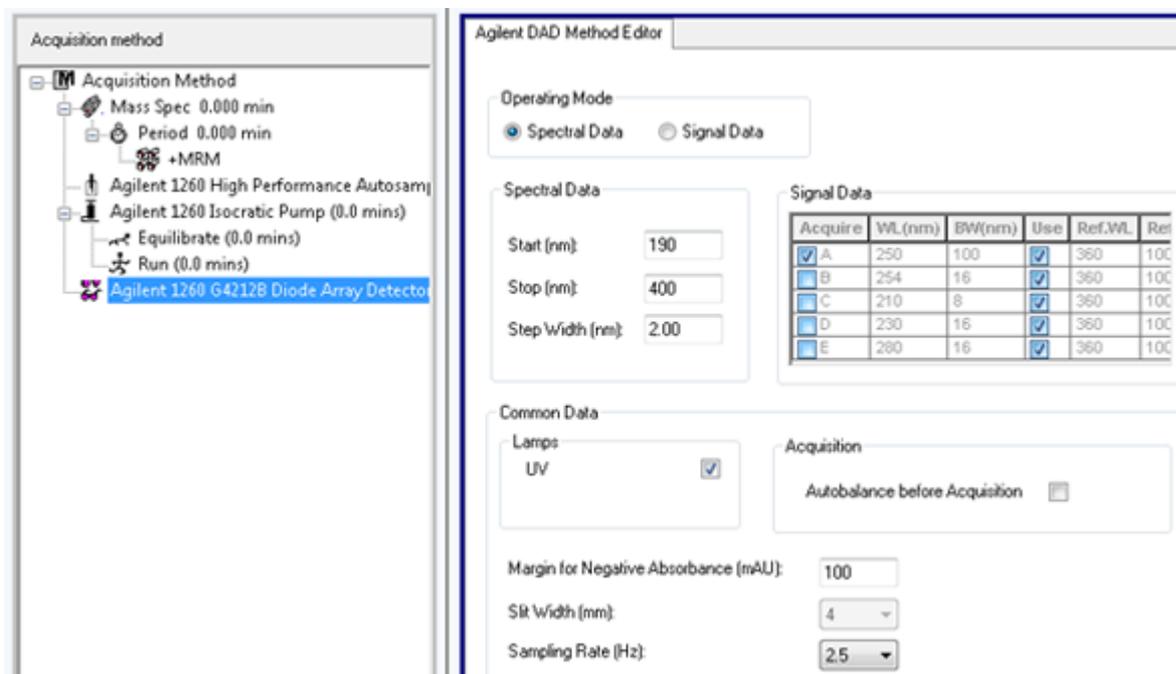
- Dans la liste **Change Position Names**, sélectionnez une position.

- Dans la liste **Change Position Names**, renommez les noms de position prédéfinis A et B en Inject et Divert ou en Column et Waste selon la manière dont la valve est installée.
3. Dans la colonne **Total Time (min)** , cliquez sur une cellule, puis entrez la durée totale durant laquelle la vanne restera dans cette position.
  4. Dans la colonne **Position**, cliquez sur une cellule, puis dans la liste **Position**, sélectionnez la position de la vanne.
  5. Répétez les étapes 3 et 4 pour chaque changement de vanne requis durant l'acquisition.
  6. Enregistrez le fichier.

### Définir les propriétés du détecteur à barrettes de diodes

1. Avec un fichier de méthode ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, cliquer sur l'icône **Diode Array Detector (DAD)**.  
L'onglet DAD Method Editor s'ouvre dans le volet Acquisition Method Editor.

**Illustration 11-14 : Onglet DAD Method Editor**

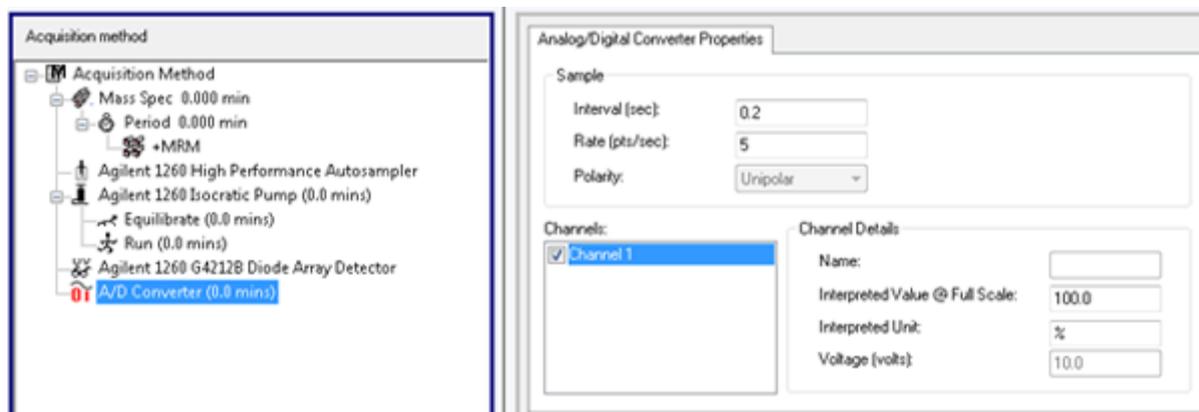


2. Effectuer l'une des opérations suivantes :
  - Pour balayer une à cinq longueurs d'onde, dans la section **Operating Mode**, cliquer sur **Signal Data**, puis modifier les exigences de données.
  - Pour balayer une plage de longueurs d'onde, dans la section **Operating Mode**, cliquer sur **Spectral Data**, puis modifier les exigences de données.
3. Enregistrer le fichier.

## Définir les propriétés du convertisseur analogique-numérique

1. Avec un fichier de méthode ouvert dans Acquisition Method Editor, dans le volet Acquisition method, cliquer sur l'icône **Analog to Digital Converter (ADC)**. L'onglet Analog/Digital Converter Properties s'ouvre dans le volet Acquisition Method Editor.

Illustration 11-15 : Onglet Analog to Digital Converter Properties



2. Dans la section **Sample**, dans le champ **Rate (pts/sec)**, inscrire le débit.

---

**Remarque** : L'intervalle et le débit sont proportionnels. Lorsque l'utilisateur modifie le débit, le logiciel calcule automatiquement l'intervalle.

---

3. Pour définir les détails du canal, procéder comme suit :
  - Dans le champ **Channels**, cliquer sur le nom du canal, puis cocher la case en regard du nom pour l'inclure dans la méthode.
  - Dans le champ **Interpreted Value @ Full Scale**, entrer la valeur appropriée.
  - Dans le champ **Interpreted Unit**, entrer l'unité appropriée.

Le nombre de canaux disponibles est indiqué lors du paramétrage du convertisseur analogique-numérique dans le profil matériel.

4. Enregistrer le fichier.

## Modifier les méthodes d'acquisition

En mode Acquire, les utilisateurs peuvent ajouter ou supprimer des périodes et des expériences dans les méthodes d'acquisition existantes.

### Périodes

Une période peut contenir une ou plusieurs expériences en boucle. Dans une méthode d'acquisition à périodes multiples, les expériences sont effectuées pendant une durée spécifiée, puis le logiciel passe à un autre ensemble d'expériences. Les périodes sont utiles quand le temps d'élution des composés au cours d'une analyse LC est connu. Le

spectromètre de masse peut réaliser différentes expériences en fonction du moment où les composés sont élués pour obtenir autant d'informations que possible au cours de la même analyse.

La figure suivante affiche une méthode à trois périodes.

**Illustration 11-16 : Exemple d'expérience à périodes multiples**

The screenshot shows the 'Acquisition method' tree on the left and the 'MS Advanced MS' configuration window on the right. The tree lists three periods: 3.008 min, 2.000 min, and 1.000 min, each with associated MS2 scans. The configuration window shows 'Scan type: Product Ion (MS2)', 'Scan rate: 200 (Da/s)', and 'Polarity: Positive'. A 'Period Summary' table is visible:

	Start (Da)	Stop (Da)	Time (sec)
1	70.000	400.000	1.6505
2			

Other parameters include 'Experiment: 1', 'Scan rate: 200 (Da/s)', 'Polarity: Positive', 'MCA: [unchecked]', 'Number of scans to sum: 1', 'Product ID: 609 300 (Da)', and 'Total Scan Time (includes pauses): 1.6555 (sec)'.

## Expériences

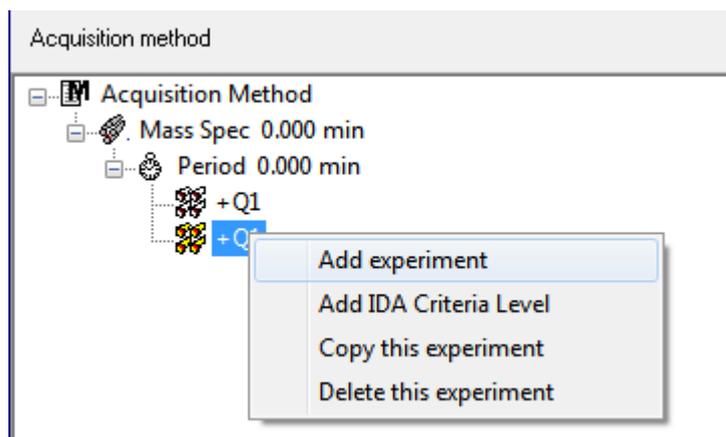
Une expérience comporte les paramètres du spectromètre de masse et le type de balayage pendant un balayage MS. Un ensemble de balayages MS réalisés pendant une durée spécifique est appelé une période. Une méthode d'acquisition dans laquelle les paramètres et les actions MS sont les mêmes pendant toute sa durée est appelée méthode à une seule période et une seule expérience.

Dans les expériences en boucle, les paramètres MS sont modifiés balayage par balayage. Par exemple, si l'échantillon contient deux composés, A et B, les utilisateurs pourraient vouloir boucler une expérience MS/MS du composé A avec une expérience MS/MS du composé B pour obtenir des informations sur les deux composés au cours de la même analyse. La méthode du spectromètre de masse alternera entre les deux types de balayage. D'autres exemples d'expériences en boucle incluent l'alternance entre les modes positif et négatif au cours d'une analyse et les méthodes d'acquisition dépendante de l'information (IDA).

## 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 11-17 : 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.

### 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.

### 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.

---

## Techniques de balayage

**MS** : dans les balayages MS, également dénommés balayages MS simples, les ions sont séparés en fonction de leur rapport masse sur charge ( $m/z$ ). Un balayage MS simple peut être utilisé pour déterminer le poids moléculaire d'un composé. Le balayage MS simple peut également être considéré comme un balayage de référence. Le balayage MS ne fournit aucune information sur la composition chimique des ions autre que la masse. Effectuez des balayages MS/MS ou MS/MS/MS pour obtenir plus d'informations sur les ions.

**MS/MS** : les balayages MS/MS sont utilisés pour déterminer des informations structurales.

- Pour les explorations MS/MS sur les systèmes à triple quadripôle, les ions sélectionnés entrent dans la cellule de collision Q2 où ils sont activés par collision pour se fragmenter et produire des ions produits caractéristiques.
- Pour les balayages MS/MS sur les systèmes QTRAP, une fragmentation des ions précurseurs peut se produire dans la cellule de collision Q2 ou le piège à ions linéaire.

Quand une quantité suffisante d'énergie est utilisée, l'ion précurseur se fragmente pour produire des ions caractéristiques.

**MS/MS/MS** : les balayages MS/MS/MS du système (LIT) de piège à ions linéaire produisent une séquence de plus que les balayages MS/MS. Un fragment qui est produit dans la cellule de collision est fragmenté plus loin dans le LIT pour donner plus d'informations sur la structure moléculaire de l'ion.

## Types de balayage

Les instruments à triple quadripôle possèdent des capacités de surveillance des réactions multiples (MRM) à haute sensibilité requises pour des expériences de quantification. En outre, ils possèdent des types de balayage spécifiques tels que les balayages à ion précurseur et à perte de neutre qui permettent une recherche avancée sur les composants des échantillons.

**Q1 MS (Q1)** : un type de balayage complet avec le premier quadripôle (Q1). L'intensité d'ionisation est renvoyée pour chaque masse dans la plage du balayage.

**Q1 Multiple Ions (Q1 MI)** : un type de balayage sélectif avec le quadripôle Q1. L'intensité d'ionisation est renvoyée pour les masses spécifiées uniquement.

**Q3 MS (Q3)** : un type de balayage complet avec le troisième quadripôle (Q3). L'intensité d'ionisation est renvoyée pour chaque masse dans la plage du balayage.

**Q3 Multiple Ions (Q3 MI)** : un type de balayage sélectif avec le quadripôle Q3. L'intensité d'ionisation est renvoyée pour les masses spécifiées uniquement.

**MRM (MRM)** : un balayage MS/MS dans lequel un ion défini par l'utilisateur est isolé dans le quadripôle Q1, puis fragmenté dans la cellule de collision Q2. Le quadripôle Q3 est alors utilisé pour isoler un ion fragment défini par l'utilisateur et enregistré par le détecteur. Ce type de balayage est principalement utilisé pour la quantification.

## Instructions d'utilisation : Méthodes d'acquisition

---

**Product Ion (MS2)** : un balayage MS/MS complet dans lequel le quadripôle Q1 est utilisé pour isoler et transmettre un ion précurseur spécifique et le quadripôle Q3 balaye une gamme de masses définie. Ce type de balayage est utilisé pour identifier tous les ions fragments d'un ion précurseur particulier.

**Precursor Ion (Prec)** : un balayage MS/MS où le quadripôle Q3 est réglé sur une valeur  $m/z$  spécifiée de manière à transmettre un ion produit spécifique et le quadripôle Q1 balaye une gamme de masses. Ce type de balayage est utilisé pour confirmer la présence d'un ion précurseur ou, plus couramment, pour identifier les composés partageant un ion produit commun.

**Neutral Loss (NL)** : un balayage MS/MS dans lequel les quadripôles Q1 et Q3 balayent une gamme de masses, avec un écart d'une masse fixe. Une réponse est observée si l'ion choisi par le quadripôle Q1 se fragmente en perdant la perte de neutre, la masse fixe, spécifiée. Ce type de balayage est utilisé pour confirmer la présence d'un ion précurseur ou, plus couramment, pour identifier les composés partageant une perte de neutre commune.

## Types de balayage en mode LIT

Le balayage en mode LIT utilise le quadripôle Q3 comme piège à ions quadripolaire linéaire. Les ions sont piégés et stockés dans le quadripôle Q3 avant d'être analysés, ce qui donne une sensibilité accrue. De plus, l'analyse MS/MS/MS peut être effectuée dans le piège à ions quadripolaire linéaire, fournissant plus d'informations sur l'échantillon. Les types de balayage en mode LIT sont généralement utilisés pour des mesures qualitatives.

**Enhanced MS (EMS)** : les ions sont scannés dans le quadripôle Q1 puis recueillis dans le piège à ions linéaire. Les ions sont balayés hors du quadripôle Q3 pour produire des spectres de type MS unique.

**Enhanced Product Ion (EPI)** : cette analyse est utilisée pour obtenir un spectre MS/MS de grande qualité pour un ion spécifique. La fragmentation se fait dans la cellule de collision Q2 et fournit ainsi le spectre MS/MS riche en informations typique de la fragmentation par dissociation après collision (CAD). Dans ce mode de balayage, l'ion précurseur à fragmenter est sélectionné d'abord dans le quadripôle Q1 avec une fourchette de masse de 1 à 4 Da, tous les autres ions étant filtrés. L'ion précurseur est fragmenté par les gaz CAD dans la cellule de collision Q2. Les ions fragmentés générés sont capturés dans la trappe à ions linéaire puis balayés à l'une des trois vitesses de balayage en fonction de la résolution de l'ion.

Pour des expériences IDA, le champ **Product Of** est défini à 30 Da par défaut et cette valeur ne doit pas être changée.

**Enhanced Resolution (ER)** : ce balayage est similaire au balayage EMS si ce n'est qu'une petite plage de masse de 30 Da autour de la masse du précurseur est balayée hors du piège à ions quadripolaire linéaire à la plus faible vitesse de balayage pour produire une fenêtre étroite de la meilleure résolution du spectre.

**MS/MS/MS (MS3)** : un ion précurseur est sélectionné par le quadripôle Q1 et fragmenté avec une dissociation après collision dans la cellule de collision Q2. Les ions produits en résultant sont tous transmis à la trappe à ions linéaire où un ion simple est produit puis isolé. L'ion isolé est davantage fragmenté dans la trappe à linéaire et l'ion qui en résulte est balayé

hors de cette trappe à l'une des trois vitesses de balayage. Comme avec n'importe quelle technique de dissociation après collision (CID) intégrée au piège, il y a une faible ablation de masse lors de la seconde étape MS/MS car le fragment avec la masse la plus basse et un précurseur doivent être stables simultanément dans le piège. Pour les systèmes QTRAP, cela entraîne une perte en ions inférieurs à 28 pour cent de la masse de l'ion précurseur durant les expériences MS3. Ce phénomène est souvent appelé la règle du tiers en moins.

### 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 11-7](#).

**Tableau 11-7 : 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 masses de 100 Da à 200 Da avec un incrément de 0,1 Da, le spectromètre de masse balaye de 99,95 à 100,05 (enregistrée en tant que valeur 100), de 100,95 à 101,05 (enregistrée en tant que valeur 101)... 199,95 à 200,05 (enregistrée en tant que valeur 200).
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.
Centroid	Le spectromètre de masse balaye en mode de profil, mais crée un centroïde des données, remplaçant le pic trouvé avec le centre de gravité pondéré par l'intensité de chaque pic. Les données centroïdes ont l'avantage de réduire sensiblement la taille du fichier. L'inconvénient est que l'information sur la forme du pic est perdue et, si des données ont été recueillies en tant que centroïde elle ne peuvent pas être modifiées. Nous recommandons l'utilisation d'un mode Profil et la création d'un centroïde des données après l'acquisition.

---

**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 (facultatif)
- Informations de quantification (facultatif)
- Données personnalisées sur l'échantillon (facultatif)
- des informations sur l'ensemble

## Créer et envoyer des lots

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

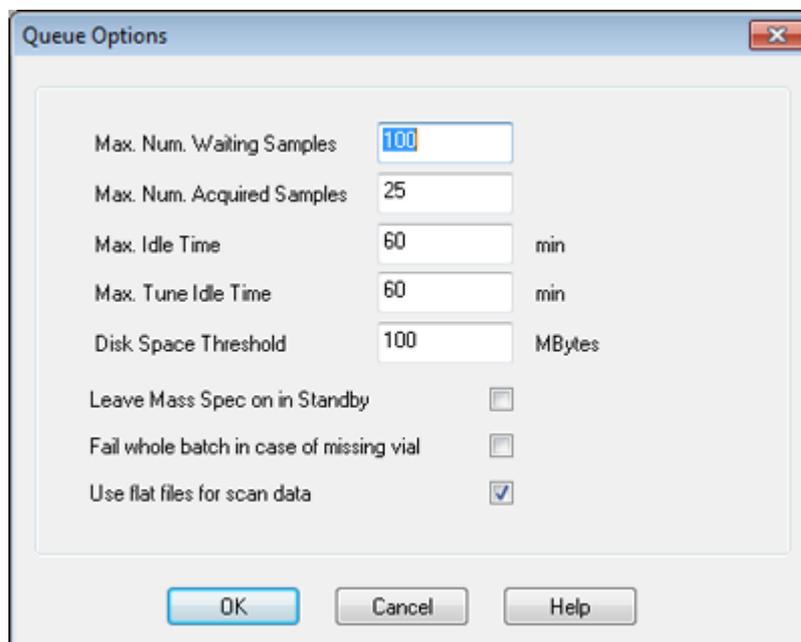
## Régler les options de file d'attente

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 **Configurer**.
2. Cliquez sur **Tools > Settings > Queue Options**.

**Illustration 12-1 : 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.

## Créer et soumettre un lot

Utilisez ce flux de travail pour créer un lot.

Ne pas utiliser la méthode Quick Quant automatiquement générée pour réaliser la quantification si le paramètre Quick Quant est utilisé pour stocker des types d'échantillon et des concentrations dans le fichier de données. Cette méthode de quantification n'utilise pas de paramètres spécifiques au composé et à l'échantillon optimisés pour la sélection des pics.

## Ajouter des ensembles et des échantillons à un lot

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

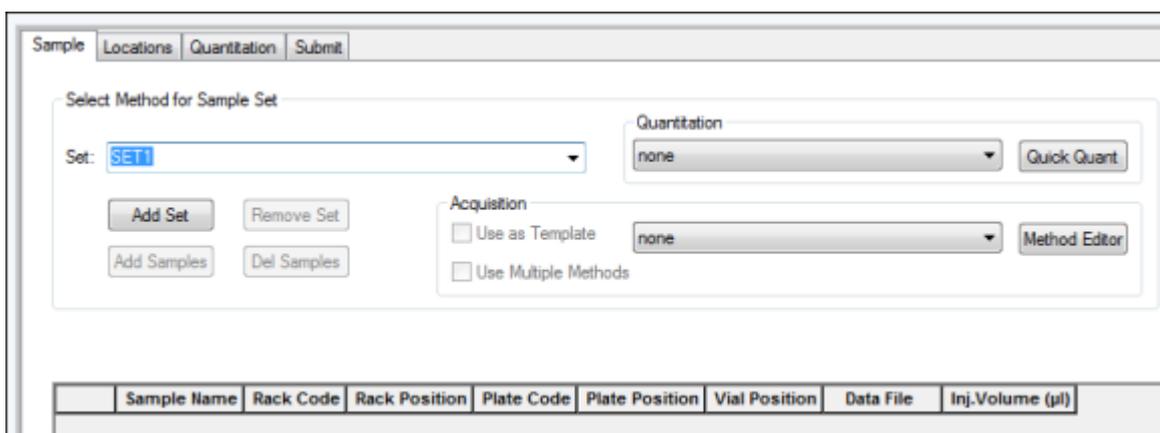
---

**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 **Acquiere**, double-cliquez sur **Build Acquisition Batch**.

### Illustration 12-2 : 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 12-3 : Boîte de dialogue Add Sample

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.

Lorsque le spectromètre de masse est utilisé comme dispositif de diagnostic *in vitro*, il est recommandé d'acquérir un seul échantillon par fichier 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**.

## Instructions d'utilisation : Lots

---

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

12. Dans la section `New samples`, dans le champ **Number**, entrez le nombre de nouveaux échantillons à ajouter.
13. Cliquez sur **OK**.  
Le tableau des échantillons complète les noms des échantillons et les noms des fichiers de données.

---

**Conseil ! Fill Down et Auto Increment** sont des options disponibles dans le menu contextuel après la sélection d'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. Dans l'onglet **Sample**, dans la liste **Set**, sélectionnez le réglage.
16. 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.

---

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

---

17. Sinon, pour utiliser l'onglet Locations pour sélectionner les emplacements des flacons, consultez la section : [Sélectionner les emplacements des flacons à l'aide de l'onglet Locations \(facultatif\)](#).
18. (Facultatif) Utilisez les procédures de la section : [Tableau 12-1](#) selon les besoins.

**Tableau 12-1 : Conseils relatifs à l'Éditeur de lot**

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Modifier toutes les valeurs d'une colonne simultanément	<p>Cliquez sur un en-tête de colonne, puis cliquez avec le bouton droit de la souris. Dans le menu, sélectionnez les commandes <b>Auto Increment</b> et <b>Fill Down</b> pour modifier les valeurs de la colonne.</p> <p>Cette fonctionnalité s'applique également pour plusieurs cellules de la même colonne.</p>
Modifier une méthode d'acquisition existante	<p>Sélectionnez la méthode, puis cliquez sur <b>Method Editor</b> dans la liste. Pour créer une nouvelle méthode d'acquisition, sélectionnez <b>None</b> dans la liste, puis cliquez sur <b>Method Editor</b>. Seuls les utilisateurs expérimentés doivent utiliser cette fonction.</p> <p>N'utilisez pas cette fonction si l'option <b>Use Multiple Methods</b> est sélectionnée.</p>
Appliquer une méthode de quantification créé précédemment	<p>Sélectionnez la méthode dans la liste <b>Quantitation</b>.</p>
Sélectionner plus d'un puits ou flacon simultanément	<p>Maintenez la touche <b>Shift</b> enfoncée, puis cliquez sur le premier et le dernier puits ou flacon dans la page.</p>

19. (Facultatif) Pour définir les détails de quantification avant d'envoyer le lot, consultez la section : [Définir les détails de quantification dans l'éditeur de lots \(facultatif\)](#).
20. 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.

---

21. 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 [22](#).

## Instructions d'utilisation : Lots

---

- Si le message indique que le lot n'est pas prêt, apportez les changements comme indiqué par le message.
22. 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.
  23. 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**.

## Changer l'ordre de l'échantillon

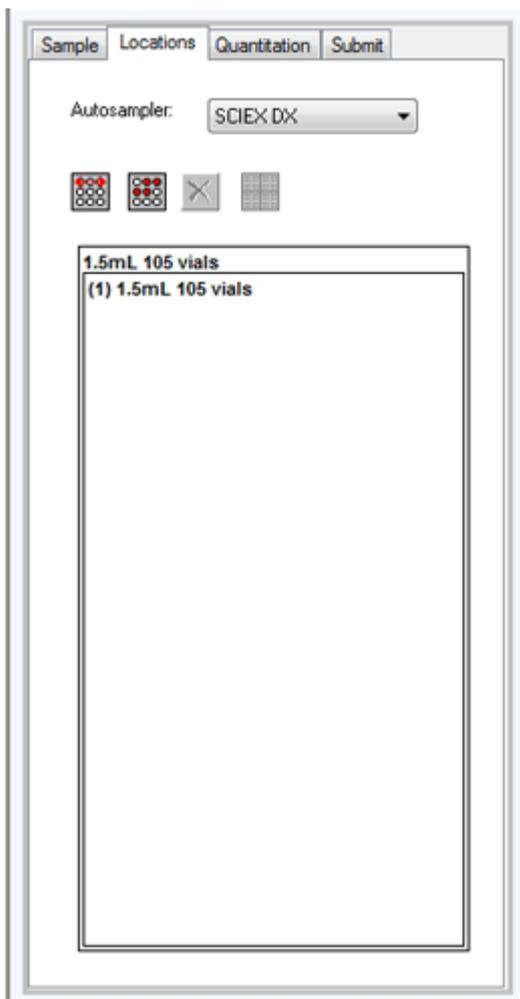
L'ordre des échantillons peut être modifié avant qu'ils ne soient envoyés dans la **Queue**.

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.

## 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.

### Illustration 12-4 : Emplacement visuel de l'échantillon



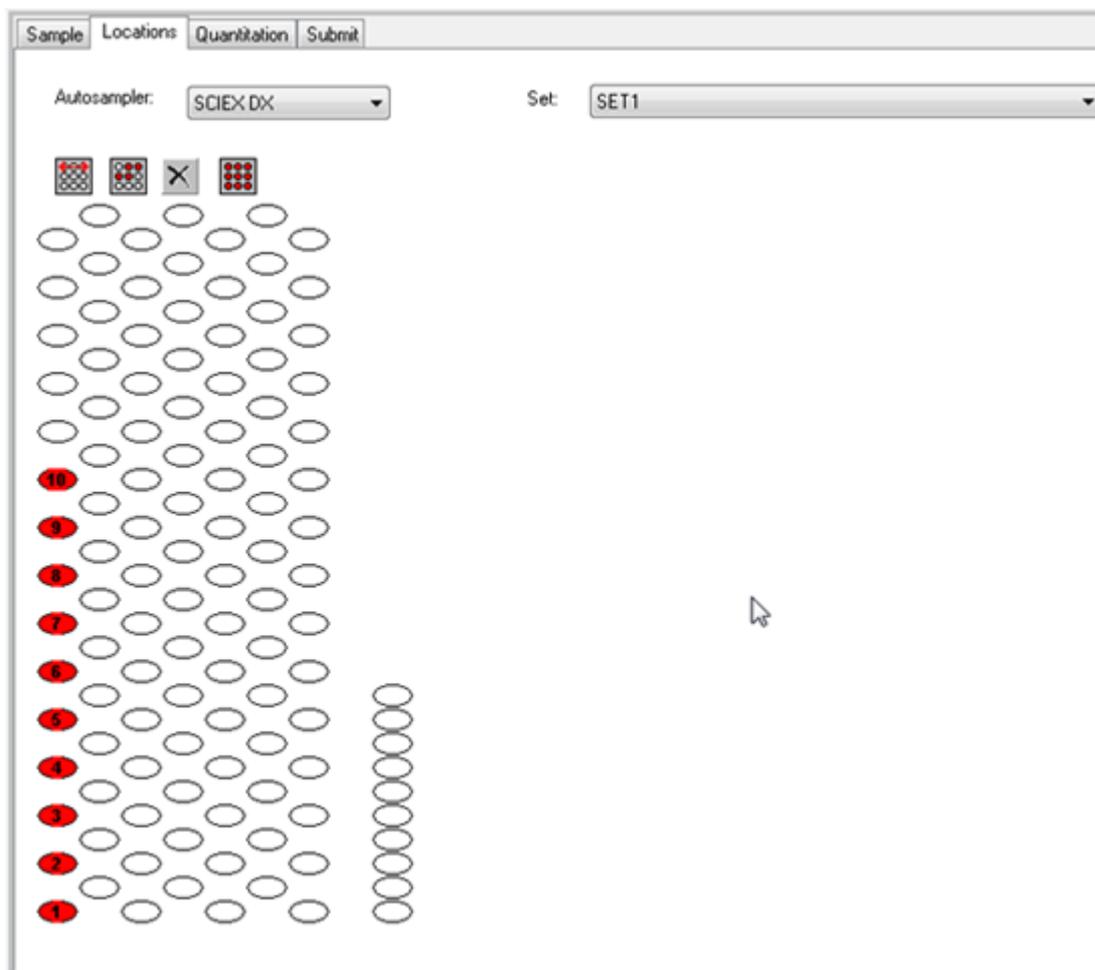
6. Double-cliquer sur l'un des rectangles.  
Les cercles indiquant les puits ou les flacons pour la plaque ou le plateau apparaissent.

---

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

---

Illustration 12-5 : Onglet Locations



---

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

---

7. Pour choisir de marquer les échantillons par ligne ou colonne, cliquez sur le bouton de sélection **Row/Column selection**.  
Si le bouton affiche une ligne horizontale rouge, le Batch Editor marque les échantillons par ligne. Si le bouton affiche une ligne verticale rouge, le Batch Editor marque les échantillons par colonne.
8. Cliquez sur les 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.

---

---

## Définir les détails de quantification dans l'éditeur de lots (facultatif)

Si une méthode de quantification est utilisée avec un lot et que l'utilisateur ne veut pas sélectionner les détails de quantification après l'acquisition, les détails de quantification (type d'échantillon, concentration de l'échantillon) doivent être définis avant l'envoi du lot.

Les colonnes **Internal Standard** et **Standard** appropriées s'affichent dans l'onglet Quantitation, selon la méthode de quantification sélectionnée dans l'onglet Sample.

1. Avec un fichier de lot ouvert dans la fenêtre Batch Editor, cliquez sur l'onglet Quantitation.
2. Sélectionnez l'ensemble contenant les échantillons.
3. Sélectionnez une option dans les champs **Quant Type**, **Dilution Factor** et **Weight/Volume** pour tous les échantillons de la liste dans la cellule.
4. (Au besoin) Dans la colonne **Analyte**, saisissez la concentration d'analytes.
5. (Au besoin) Dans la colonne **Internal Standard**, saisissez la concentration de standards internes.
6. Répétez cette procédure pour chaque ensemble du lot.

## Équilibrer le système

Équilibrez le système avant de soumettre un lot. L'équilibrage chauffe et prépare le spectromètre de masse pour l'échantillon ou le lot suivant.

1. Cliquez sur **Equilibrate** ().  
La boîte de dialogue Equilibrate apparaît.
2. Sélectionnez la méthode d'acquisition utilisée pour le lot soumis.
3. Indiquez le temps d'équilibrage en minutes dans le champ **Time (min)**.
4. Cliquez sur **OK**. Le système démarre l'équilibrage.  
Une fois l'équilibrage terminé, le système passe à l'état Ready.

---

**Conseil !** Si l'équilibrage ne se termine pas comme prévu ou si l'état du système ne passe pas à Ready une fois l'équilibrage terminé, assurez-vous que :

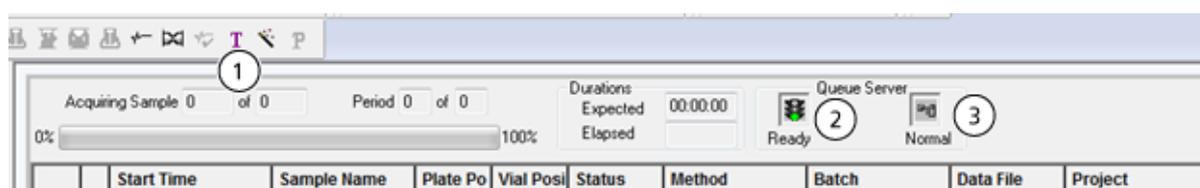
- le profil de matériel activé est adapté à la méthode d'acquisition ;
  - le système LC est allumé ;
  - le système LC a bien établi la communication avec le logiciel.
-

## 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 actionnés.
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 12-6 : Gestionnaire de file d'attente



Élément	Description
1	N'appuyez pas sur l'icône <b>Reserve Instrument for Tuning</b> (Réserver instrumentation pour réglage).
2	L'état de la file d'attente doit être Ready.
3	L'état <b>Queue Server</b> doit être Normal. Consultez la section <a href="#">Statut de la file d'attente</a> .

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

**Remarque :** Nous recommandons d'analyser de nouveau l'échantillon si un arrêt anormal survient pendant l'acquisition de l'échantillon.

## Importer des fichiers de lot

Il est possible d'importer un fichier texte contenant les informations du lot au lieu de créer un lot dans Batch Editor. Si tous les détails de l'échantillon se trouvent dans un tableur, il est plus rapide de réorganiser et d'importer ces données dans le tableur que de les saisir manuellement dans Batch Editor.

Avant d'importer les informations du lot depuis un fichier texte, vérifiez que les données contenues dans ce fichier sont organisées et formatées correctement. En particulier, les en-têtes de colonne de la feuille de calcul doivent correspondre aux en-têtes de colonne de Batch Editor. Pour vous assurer que le fichier texte contient les en-têtes adéquats, créez un

lot à l'aide de Batch Editor, exportez-le au format texte, saisissez les valeurs appropriées dans un tableur, puis réimportez le fichier dans Batch Editor.

Pour des exemples de fichiers correctement mis en forme, consultez le dossier Batch du projet Example.

Les informations d'un fichier de lot peuvent également être exportées puis utilisées par d'autres applications, comme Microsoft Excel, Microsoft Access et certains logiciels de système de gestion d'informations de laboratoire LIMS.

### Créer un lot dans un fichier texte

Conditions préalables
Veillez à ce que le profil matériel actif contienne tous les périphériques qui seront utilisés pour acquérir les échantillons.

Afin d'assurer que le fichier texte contient les en-têtes adéquats, créez un lot à l'aide de Batch Editor (Éditeur de lots), exportez-le dans un fichier texte, saisissez les valeurs appropriées dans un tableur, puis importez à nouveau le fichier dans Batch Editor (Éditeur de lots). Un lot ne peut être exporté que s'il contient au moins un ensemble d'au moins un échantillon. Le fichier texte enregistré peut ensuite servir de modèle.

1. Dans Batch Editor, créez un lot avec un seul ensemble et un seul échantillon.
2. Cliquez sur **File > Export..**  
La boîte de dialogue Save As s'ouvre.
3. Dans le champ **File name**, entrez le nom à utiliser pour le fichier texte, puis cliquez sur **Save**.
4. Ouvrez le fichier texte dans un tableur comme Excel.
5. Saisissez ou copiez et collez les détails des échantillons : un échantillon par ligne, les détails étant placés sous les en-têtes correspondants.

---

**Remarque :** ne supprimez aucune colonne. Les colonnes de la feuille de calcul doivent correspondre aux colonnes dans Batch Editor (Éditeur de lots).

---

6. Enregistrez le fichier texte modifié en tant que fichier .txt ou .csv, puis fermez le tableur. Le fichier texte est maintenant prêt à être importé dans Batch Editor (Éditeur de lots).

### Importer un lot depuis un fichier texte

1. Dans le Batch Editor, sous l'onglet Sample, effectuez un clic droit puis cliquez sur **Import From > File**.  
La boîte de dialogue Open s'ouvre.
2. Cliquez sur le fichier texte requis, puis cliquez sur **Open**.  
En cas d'utilisation d'un auto-échantillonneur, la boîte de dialogue Select Autosampler s'ouvre.

## Instructions d'utilisation : Lots

---

**Remarque :** Si le fichier texte enregistré n'est pas visible dans la liste **Files of type**, sélectionnez **Microsoft Text Driver (\*.txt; \*.csv)**. Les fichiers portant l'extension .txt apparaissent dans le champ.

---

3. Dans la liste d'auto-échantillonneurs, sélectionnez l'auto-échantillonneur puis cliquez sur **OK**.  
Le tableau d'échantillons se remplit avec les détails extraits du fichier texte.
4. Envoyez le lot.

## Conseils pour l'Éditeur de lots et de méthode d'acquisition

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Modifier les valeurs du tableau	(Par exemple, pour changer le nom d'un échantillon) Cliquez dans une cellule, puis saisissez la nouvelle valeur.
Modifier toutes les valeurs d'une colonne simultanément	Cliquez sur un en-tête de colonne, puis cliquez avec le bouton droit de la souris. Dans le menu qui s'affiche, sélectionnez les commandes <b>Auto Increment</b> et <b>Fill Down</b> pour modifier les valeurs de la colonne.  Cette fonctionnalité s'applique également pour plusieurs cellules de la même colonne.
Modifier une méthode d'acquisition existante	Sélectionnez la méthode dans la liste, puis cliquez sur <b>Method Editor</b> . Pour créer une nouvelle méthode d'acquisition, sélectionnez <b>None</b> dans la liste, puis cliquez sur <b>Method Editor</b> . Seuls les utilisateurs expérimentés doivent utiliser cette fonction.  Ne pas utiliser cette fonction en cas d'utilisation de l'option <b>Multiple Methods</b> .
Appliquer une méthode de quantification créé précédemment	Sélectionnez la méthode dans le menu <b>Quantitation</b> .
Sélectionner plus d'un puits ou flacon simultanément	Appuyez sur la touche <b>Shift</b> , puis cliquez sur le premier et le dernier puits (ou flacon) dans la plage à sélectionner.

Pour des informations sur l'utilisation du menu contextuel Batch Editor, consultez la section : [Éditeur de lots](#).

## Conseils de dépannage de lot

Symptôme	Cause possible	Mesure corrective
Dans le logiciel Analyst MD, éditeur de lots, la colonne du volume d'injection (ul) apparaît sous la forme -1.	La méthode d'acquisition n'est pas sélectionnée dans le lot.	Sélectionnez la méthode d'acquisition adéquate pour le lot.
	L'appareil LC dans la méthode d'acquisition sélectionnée ne correspond pas à l'appareil LC activé dans le profil de matériel.	Ouvrez et examinez la méthode d'acquisition prévue. Corrigez les informations relatives à l'appareil LC, puis enregistrez la méthode.
	Le profil de matériel activé ne contient pas d'appareil LC ou contient un appareil LC différent.	Ouvrez le Hardware Configuration Editor, puis désactivez le profil de matériel. Modifiez le profil de matériel, corrigez les informations relatives à l'appareil LC, puis activez le profil de matériel.

## 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.

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

# Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des données

# 13

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

## Aperçu des données spectrales et chromatographiques

Les données spectrales apportent des informations spécifiques à la masse d'un composé. Un chromatogramme donne un aperçu général des données, dépendant généralement du temps si l'utilisateur utilise une colonne LC, mais ne transmet aucune information sur les composantes d'un pic. Toutefois, un spectre permet de se concentrer sur un pic en particulier et de connaître la masse moléculaire du composé correspondant, qui peut être utilisée pour obtenir des informations plus spécifiques. Par exemple, si un chromatogramme n'affiche qu'un seul pic, celui-ci peut représenter plusieurs composés, c'est-à-dire différentes masses. Un spectre illustre toutes les masses constituant un pic, notamment l'intensité de chaque masse.

Les données chromatographiques peuvent varier en durée et en intensité en cas de modification des conditions chromatographiques dans un échantillon donné. L'intensité spectrale peut changer, mais les masses sont fixes parce que la masse d'un composé ne varie pas.

Il existe deux façons de générer des données spectrales :

- Si un seul balayage est acquis, les données sont par défaut représentées sous forme d'un spectre.

- À partir d'un chromatogramme.

Un spectre typique est affiché avec la masse moléculaire, marquée du rapport masse/charge ( $m/z$ ), sur l'axe des X. L'intensité est représentée sur l'axe des Y.

## Analyser les données

Lorsqu'un fichier de données est ouvert, différents volets apparaissent dans la fenêtre selon le type d'expérience réalisée. Le logiciel stocke des données dans des fichiers portant l'extension wiff. Les fichiers .wiff peuvent contenir des données pour plusieurs échantillons. Outre les fichiers wiff, le logiciel peut ouvrir les fichiers txt. Toutefois, les fichiers txt contiennent des données pour un seul échantillon.

Les informations contenues dans un fichier de données peuvent être visualisées sous forme de tableau ou de graphique. Les données graphiques sont présentées sous forme de chromatogramme ou de spectre. Dans les deux cas, les données peuvent apparaître sous forme de tableau de points de données et plusieurs opérations de tri peuvent être effectuées sur les données.

Les utilisateurs peuvent ouvrir des fichiers contenant des données existantes ou des données en cours d'acquisition. Ils peuvent également afficher toutes les données relatives aux expériences sous forme de tableau. Le volet Table se compose de deux onglets, l'onglet Data List et l'onglet Peak List. L'onglet Data List contient les informations relatives aux expériences, comme la durée de l'acquisition et l'intensité du balayage. L'onglet Peak List affiche des informations relatives aux pics telles que la hauteur du pic, la surface du pic et le type de ligne de base.

Si les données contiennent des résultats provenant de plusieurs expériences, les utilisateurs peuvent créer des TIC (chromatogrammes en courant ionique total) individuels pour chaque expérience et un autre TIC représentant la somme de toutes les expériences.

Le TIC prédéfini représentant la somme de toutes les expériences est représenté avec un outil de fractionnement sous le centre de l'axe des abscisses.

## 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.

## 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 D-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**.

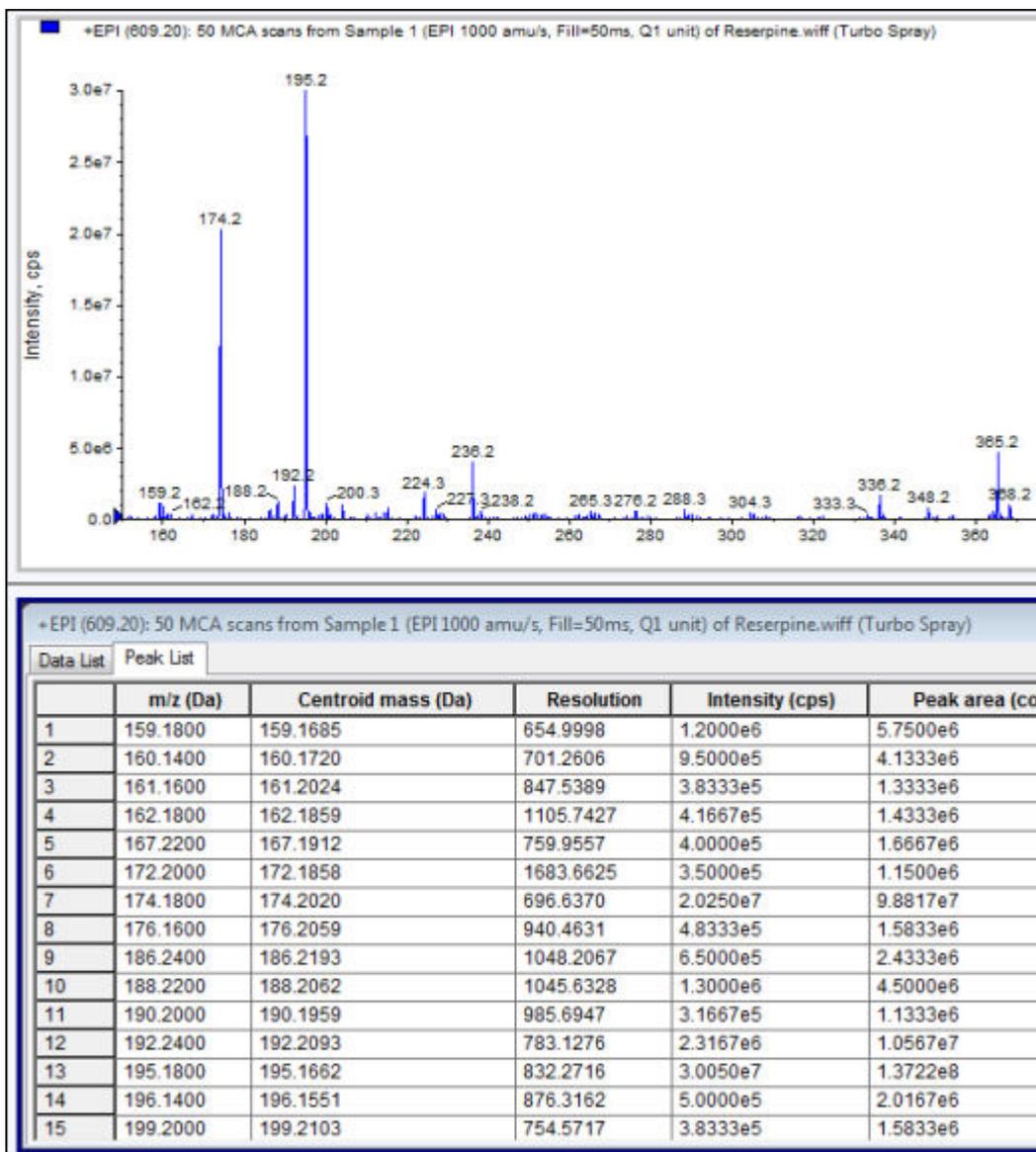
---

## 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 13-1 : Onglet Peak List (systèmes QTRAP)**



**Tableau 13-1 : Menu contextuel pour l'onglet Spectral Peak List**

Menu	Fonction
<b>Column Options</b>	(Options de colonne) Ouvre la boîte de dialogue <b>Select Columns for Peak List</b> .
<b>Save As Text</b>	(Enregistrer comme texte) Enregistre les données comme fichier .txt.

## Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des données

Tableau 13-1 : Menu contextuel pour l'onglet Spectral Peak List (suite)

Menu	Fonction
Delete Pane	(Supprimer le volet)Supprime le volet sélectionné.

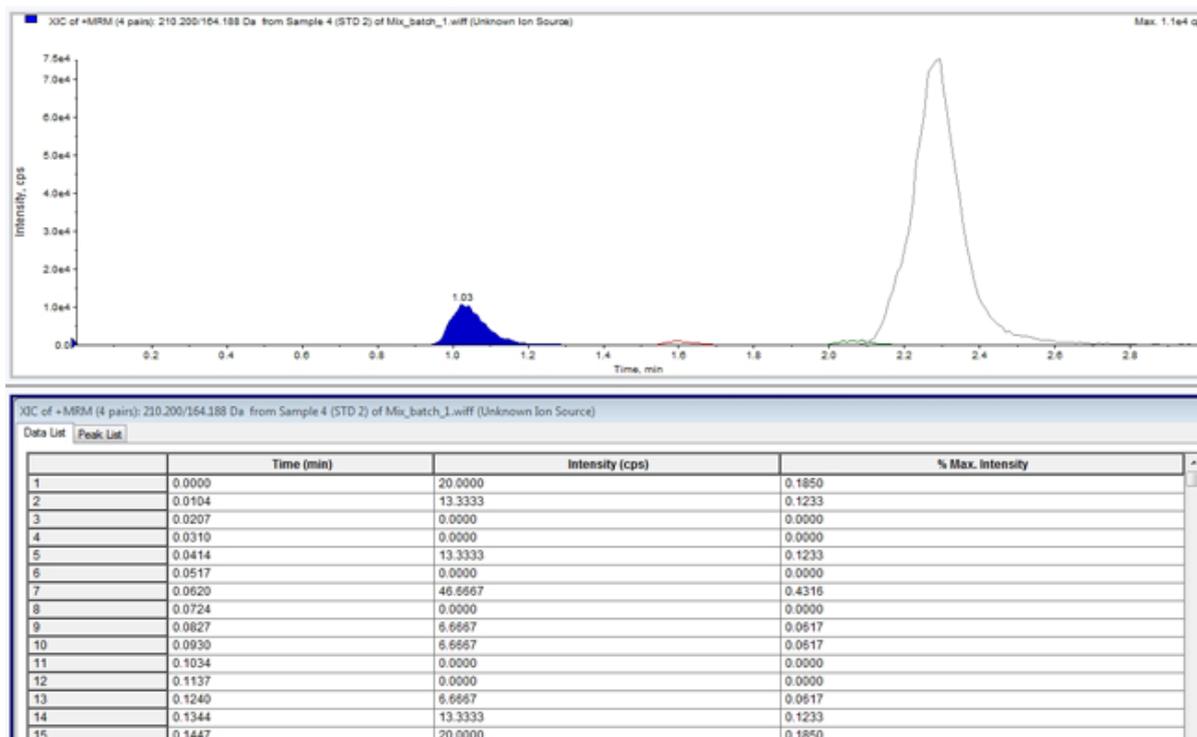
Tableau 13-2 : Menu contextuel pour l'onglet Chromatographic Peak List

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 <b>IntelliQuan</b> .
Save As Text	(Enregistrer comme texte) Enregistre les données comme fichier txt.
Delete Pane	(Supprimer le volet)Supprime le volet sélectionné.

## Afficher les données quantitatives de base

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

Illustration 13-2 : 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**.

## Spectres

Un spectre désigne les données obtenues directement à partir du spectromètre de masse et représente normalement le nombre d'ions détectés avec des rapports masse/charge ( $m/z$ ) donnés. Il s'affiche sous forme de graphique avec les rapports  $m/z$  sur l'axe des abscisses et l'intensité (cps) représentée sur l'axe des ordonnées. Pour plus d'informations sur l'utilisation des spectres, consultez le [Tableau G-4](#).

Pour ce qui est des données MS/MS, l'intensité est associée à deux masses, la masse de l'ion précurseur (Q1) et la ou les masses des ions produits (Q3).

## 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 13-3](#).

Pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles, consultez le tableau : [Tableau 13-5](#).

Tableau 13-3 : Types de chromatogrammes

Types de chromatogrammes	Objectif
Chromatogramme en courant ionique total (TIC)	<p>Un chromatogramme généré par le tracé de l'intensité de tous les ions dans un balayage, en fonction du temps ou du nombre de balayages.</p> <p>Lorsqu'un fichier de données est ouvert, il est pré-réglé pour s'ouvrir comme un TIC. Si l'expérience contient un seul balayage, il est représenté comme un spectre.</p> <p>Si la case <b>MCA</b> est sélectionnée au cours de l'acquisition d'un fichier de données, alors le fichier s'ouvre au spectre de masse. Si la case <b>MCA</b> n'est pas sélectionnée, alors le fichier de données s'ouvre avec le TIC.</p>
Chromatogramme des ions extraits (XIC)	<p>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.</p>
Chromatogramme des pics de base (BPC)	<p>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.</p>
Chromatogramme en longueur d'onde totale (TWC)	<p>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.</p>
Chromatogramme de longueurs d'onde extraites (XWC)	<p>Un sous-ensemble de TWC. Un XWC montre la valeur de l'absorbance pour une longueur d'onde unique ou la somme des absorbances pour une gamme de longueurs d'onde.</p>
Détecteur à barrettes de diodes (DAD)	<p>Un chromatogramme qui représente le spectre d'absorption des composés à élution à une ou plusieurs longueurs d'onde.</p>

## Montrer les TIC d'un spectre

Pour voir un exemple de fichier de données, vérifiez que le projet `Example` est sélectionné.

Pour voir un spectre LIT, ouvrez le dossier `LIT` puis ouvrez le fichier `Reserpine.wiff`.

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 \(Fenêtres spectrales\)](#).

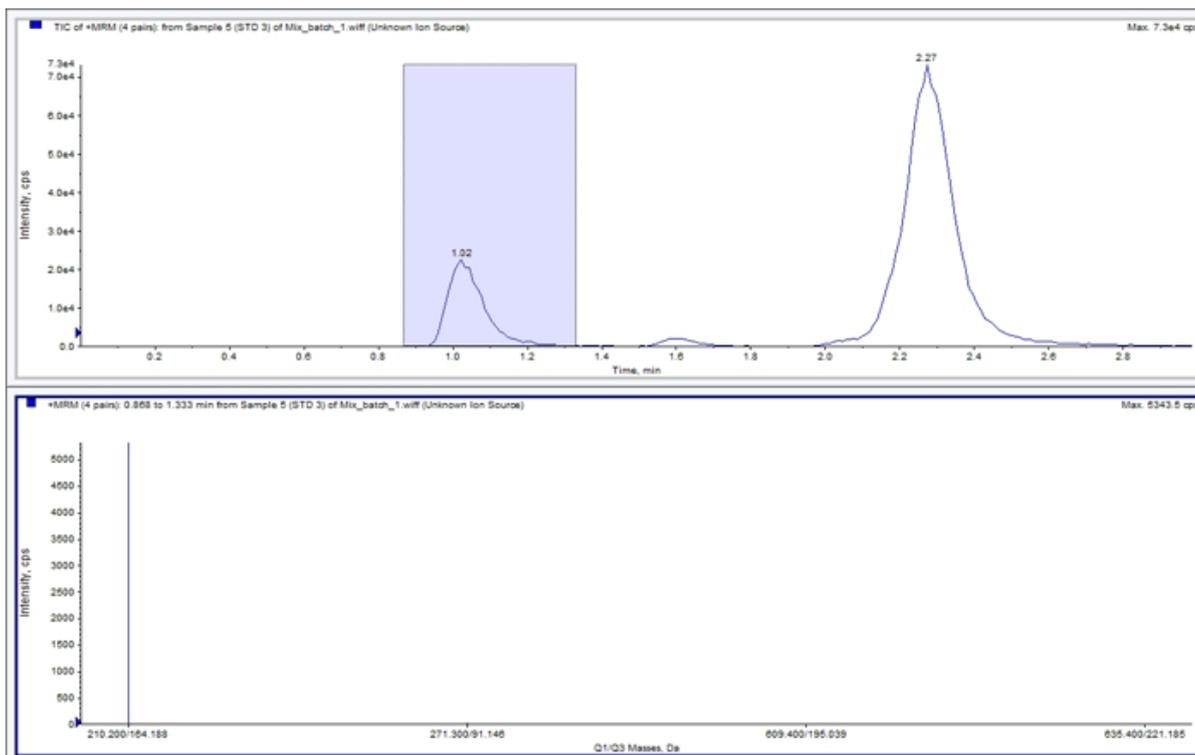
1. Dans un volet contenant un TIC, sélectionnez une gamme.
2. Cliquez sur **Explore > Show > Show Spectrum..**  
Le spectre s'ouvre dans un nouveau volet.

---

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

---

### Illustration 13-3 : Exemple de TIC



## XIC

Un XIC est un chromatogramme d'ions extraits créé en prenant les valeurs de l'intensité pour une valeur de la masse isolée, discrète, ou une plage de masses à partir d'une série de balayages spectraux des masses. Il indique le comportement d'une masse donnée, ou d'une plage de masse, en fonction du temps. L'intensité de l'ion, ou la somme des intensités de tous les ions dans une plage donnée, est représentée dans un volet chromatographique.

### 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 13-5](#).

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 13-4 : Récapitulatif des méthodes pour générer un XIC**

<b>Méthode</b>	<b>Utiliser avec un chromatogramme</b>	<b>Utiliser avec un spectre</b>	<b>Extraction</b>
Selected range	Non	Oui	Extrait les ions d'une zone sélectionnée dans un spectre.
Maximum	Non	Oui	Extrait les ions d'une zone sélectionnée dans un spectre à l'aide du pic le plus intense dans la zone sélectionnée. Cette option crée un XIC en utilisant la masse maximale de la gamme spectrale sélectionnée.
Base peak masses	Oui	Oui	Ne peut être utilisée qu'avec des chromatogrammes de pics de base (BPC). Utilisez la commande <b>Use Base Peak Masses</b> 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**

- Ouvrez un fichier de données contenant des spectres.
- Sélectionnez une plage en pressant sur le bouton gauche de la souris au début de la plage, faites glisser le curseur jusqu'à la fin de la plage puis relâchez le bouton gauche de la souris.  
La sélection apparaît en bleu.
- Cliquez sur **Explore > Extract Ions > Use Range..**  
Un XIC de la sélection s'ouvre dans un volet sous le volet du spectre. L'information de l'expérience en haut du volet contient la gamme de masse et l'intensité maximale comptée par seconde.

### **Générer un XIC en utilisant le pic maximal**

- Ouvrez un fichier de données contenant des spectres.

## Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des données

---

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.

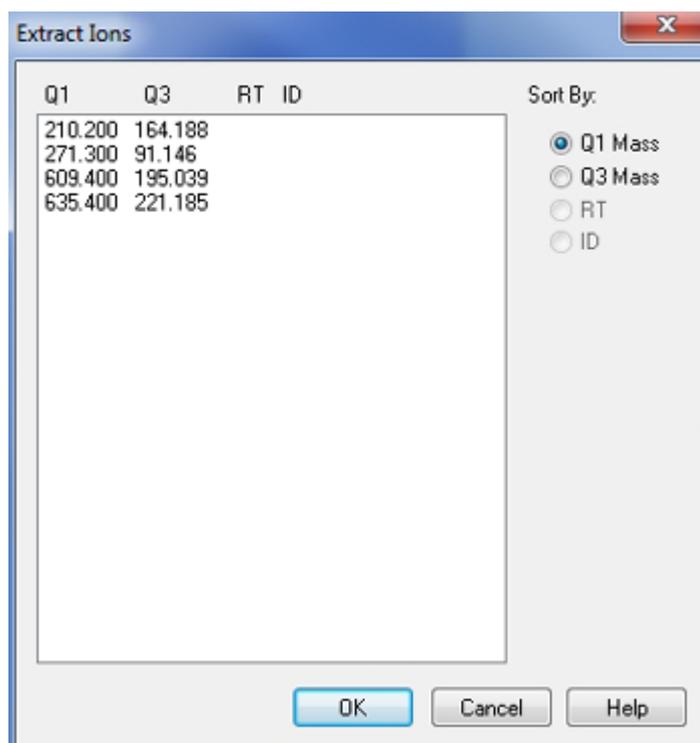
### Générer un XIC à l'aide des masses du pic de base

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 13-4 : Boîte de dialogue Extract Ions



3. Entrez les valeurs pour chaque XIC à créer.

- 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.

## BPC

Un BPC révèle l'intensité de l'ion le plus intense de chaque balayage en fonction du nombre de balayages ou du temps de rétention. Il est particulièrement utile quand le TIC est tellement dominé par le bruit qu'il existe un grand décalage et que les pics chromatographiques sont difficiles à distinguer. Il permet également de différencier les composants en coélution. Les BPC sont créés uniquement à partir des données de période unique et d'expérience unique.

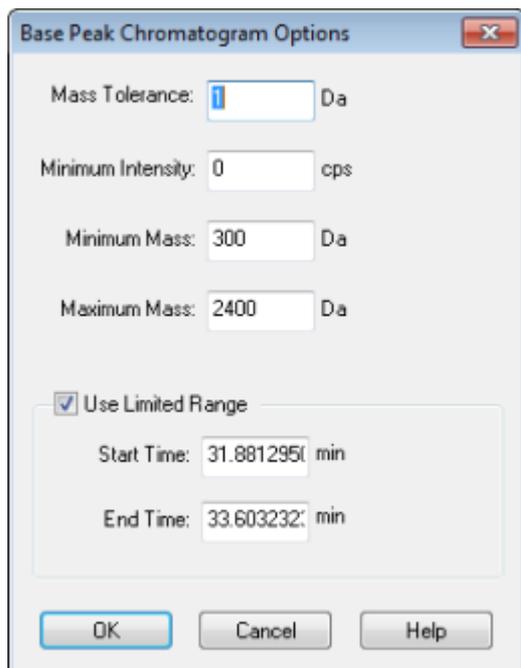
Le graphique utilise deux couleurs alternant à chaque fois que la masse du pic de base change. Les changements de couleur sont conservés quand les données sont manipulées par défilement ou par zoom. Pour plus d'informations sur la sélection des couleurs utilisées dans le graphique, consultez le document : *Aide*.

## 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 13-5 : 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.

## 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 augmenter le seuil, faites glisser le triangle bleu vers le haut de l'axe des Y.
  - Pour diminuer le seuil, faire 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.

---

## 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 13-5](#).

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**.

---

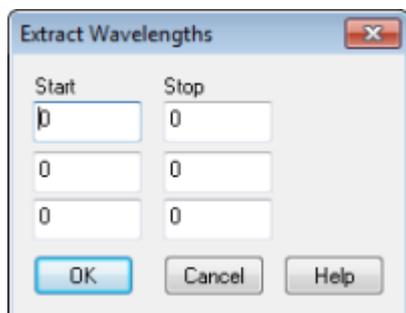
## Générer des XWC

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 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 13-5](#).

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 13-6 : 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..**

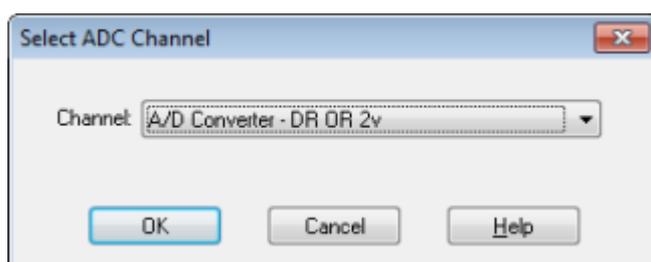
---

## 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 13-7 : 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.

## 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.

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

## Gestion des données

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

**Tableau 13-5 : 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 <b>Explore &gt; Duplicate Data &gt; In New Window..</b>	

Tableau 13-5 : Options de graphique (suite)

Pour faire ceci	Utiliser cette option de menu	ou cliquer sur cette icône
Remettre un graphique à son échelle d'origine	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur <b>Explore &gt; Home Graph..</b>	
Déplacer un volet	<ul style="list-style-type: none"> <li>Sélectionnez le graphique. Cliquez sur <b>Window &gt; Move Pane..</b></li> <li>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.</li> </ul> <p>Une flèche à quatre pointes est affichée lorsque le curseur est sur la limite de la fenêtre active ou le volet.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>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.</li> <li>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.</li> <li>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.</li> </ul>	
Lier volets	<ol style="list-style-type: none"> <li>Avec deux graphes ouverts, cliquez sur l'un pour le rendre actif.</li> <li>Cliquez sur <b>Explore &gt; Link</b>, puis cliquez sur l'autre volet.</li> </ol>	
Supprimer le lien	Fermer l'un des volets. Cliquez sur <b>Explore &gt; Remove Link..</b>	
Supprimer un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur <b>Window &gt; Delete Pane..</b>	
Verrouiller un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur <b>Window &gt; Lock Panes..</b>	
Masquer un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur <b>Window &gt; Hide Pane..</b>	

Tableau 13-5 : Options de graphique (suite)

Pour faire ceci	Utiliser cette option de menu	ou cliquer sur cette icône
Maximiser un volet	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur <b>Window</b> > <b>Maximize Pane..</b>	
Tile panes	Sélectionnez le graphique. Cliquez sur <b>Window</b> > <b>Tile all Panes..</b>	

## Effectuer un zoom avant sur un graphique

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

### Effectuez un zoom avant sur l'axe des y

- 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.

---

- 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

- 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.
- 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**.

---

## Marquer les graphiques

Le style prédéfini des étiquettes de graphiques et de chromatogrammes peut être personnalisé. Sélectionnez la police à utiliser pour les étiquettes de pics et d'axes, ainsi

que les couleurs à utiliser pour les tracés. Ajoutez des étiquettes d'axe ainsi que le type d'étiquette et la précision sur les pics.

### Ajouter des légendes à un graphique

Utiliser des légendes pour étiqueter les pics d'intérêt ou les points significatifs du graphique. Une légende placée près d'un pic suit le pic lorsqu'il effectue un zoom avant ou arrière. Les légendes restent aussi avec l'échantillon original lorsque l'utilisateur navigue parmi les échantillons dans un fichier de données. Une légende contient une ligne de texte avec un maximum de 128 caractères.

1. Cliquer avec le bouton droit de la souris sur le spectre, puis cliquer sur **Add Caption**.  
La boîte de dialogue Add Caption s'ouvre.
2. Dans la zone **Caption**, saisir le texte.
3. Pour changer la taille et le style de la légende, cliquer sur **Font**.
4. Pour placer la légende, cliquer sur **OK**.

---

**Conseil !** Pour déplacer la légende, faites-la glisser. La légende reste à la même place par rapport aux axes des abscisses et des ordonnées lorsque le pic effectue un zoom avant ou arrière. Pour modifier ou supprimer la légende, cliquer avec le bouton droit de la souris sur la légende, puis cliquer sur la commande appropriée.

---

### Ajouter du texte à un graphique

Utiliser du texte pour ajouter plusieurs lignes d'informations à un graphique. Contrairement aux légendes qui sont associées à un pic donné et se déplacent avec lorsque l'utilisateur effectue un zoom sur le graphique, les étiquettes de texte restent à leur emplacement initial lorsque l'utilisateur effectue un zoom. Elles ne restent pas avec l'échantillon d'origine lorsque l'utilisateur navigue parmi les échantillons dans un fichier de données.

1. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le graphique, puis cliquez sur **Add User Text**.  
La boîte de dialogue Add User Text s'ouvre.
2. Saisissez le texte dans le champ **User Text**.
3. Pour centrer le texte, sélectionner la case à cocher **Center Text**.
4. Pour changer la taille et le style de la légende, cliquer sur **Font**.
5. Pour insérer le texte, cliquer sur **OK**.

---

**Conseil !** Pour déplacer le texte, faites-le glisser. Pour modifier ou supprimer le texte, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le texte, puis sélectionnez la commande appropriée.

---

## Superposer et additionner des spectres ou des chromatogrammes

Superposer les graphiques créés avec des méthodes similaires pour comparer visuellement au moins deux ensembles de données. Chaque spectre individuel se différencie par la couleur de son tracé. Pour les données de balayage complet, cela permet à l'utilisateur de visualiser les différences entre plusieurs spectres d'échantillon.

Après avoir superposé plusieurs graphiques, additionner les graphiques pour obtenir un nouveau tracé. Chaque point du nouveau tracé correspond à la somme des points des graphiques. L'addition de plusieurs superpositions d'un type de données similaire peut faciliter et accélérer les opérations de traitement suivantes. Par exemple, l'utilisateur peut superposer plusieurs XIC, les additionner, puis lisser la superposition obtenue afin de supprimer le bruit.

L'addition des superpositions est similaire à la génération d'un TIC, avec l'avantage de pouvoir choisir les graphiques à superposer. Par exemple, si l'utilisateur examine dix expériences, le TIC ajouterait les dix expériences. Si les superpositions sont additionnées, l'utilisateur a la possibilité de n'ajouter que neuf des dix graphiques superposés. Cette fonction est utile lorsque les données recueillies lors de la première expérience ne correspondent qu'à du bruit.

### Superposer des graphiques

Deux ou plusieurs ensembles de données peuvent être comparés visuellement en superposant des graphiques créés par des méthodes similaires. Chaque spectre individuel se différencie par la couleur de son tracé. Pour les données de balayage complet, ceci permet aux utilisateurs de visualiser les différences entre plusieurs spectres d'échantillon.

Si un ou plusieurs volets sont choisis, chaque XIC s'ouvre dans un volet distinct.

---

**Conseil !** Pour superposer moins de quatre graphiques dans le même volet, appuyez sur la touche **Ctrl**, cliquez avec le bouton droit de la souris sur un volet, puis cliquez sur **Appearance Options**. Dans la boîte de dialogue Appearance Options, sous l'onglet Multiple Graph Options, sélectionnez **Yes** pour les champs **Overlay Multiple Panes** correspondant à **Spectrum** et **Chromatogram**.

---

1. Sélectionnez le premier volet à superposer.
2. Cliquez sur **Explore > Overlay**.
3. Cliquez dans le second volet.

Les graphiques sont alors superposés et les deux tracés portent une couleur différente.

---

**Conseil !** Pour afficher une liste des graphiques superposés codés par couleur, effectuez un clic droit sur la barre de titre du volet.

---

### Alterner les graphiques superposés

1. Sélectionner un volet qui contient des graphiques superposés.

2. Cliquer sur **Explore > Cycle Overlays**.

L'affichage change de sorte que le prochain graphique de la séquence apparaisse au premier plan.

### Sum Overlays

1. Superposer les graphiques à additionner.
2. Cliquez sur **Explore > Sum Overlays**.  
Les graphiques superposés sont additionnés.

**Tableau 13-6 : Guide de référence rapide de la barre d'outils Explore : superposition des graphiques**

Icône	Nom	Fonction
	Home Graph	Cliquez dessus pour restaurer le graphique à l'échelle d'origine.
	Overlay	Cliquez dessus pour superposer des graphiques.
	Cycle Overlays	Cliquez dessus pour alterner les graphiques superposés.
	Sum Overlays	Cliquez dessus pour additionner des graphiques.

## Exécuter des soustractions de bruit de fond

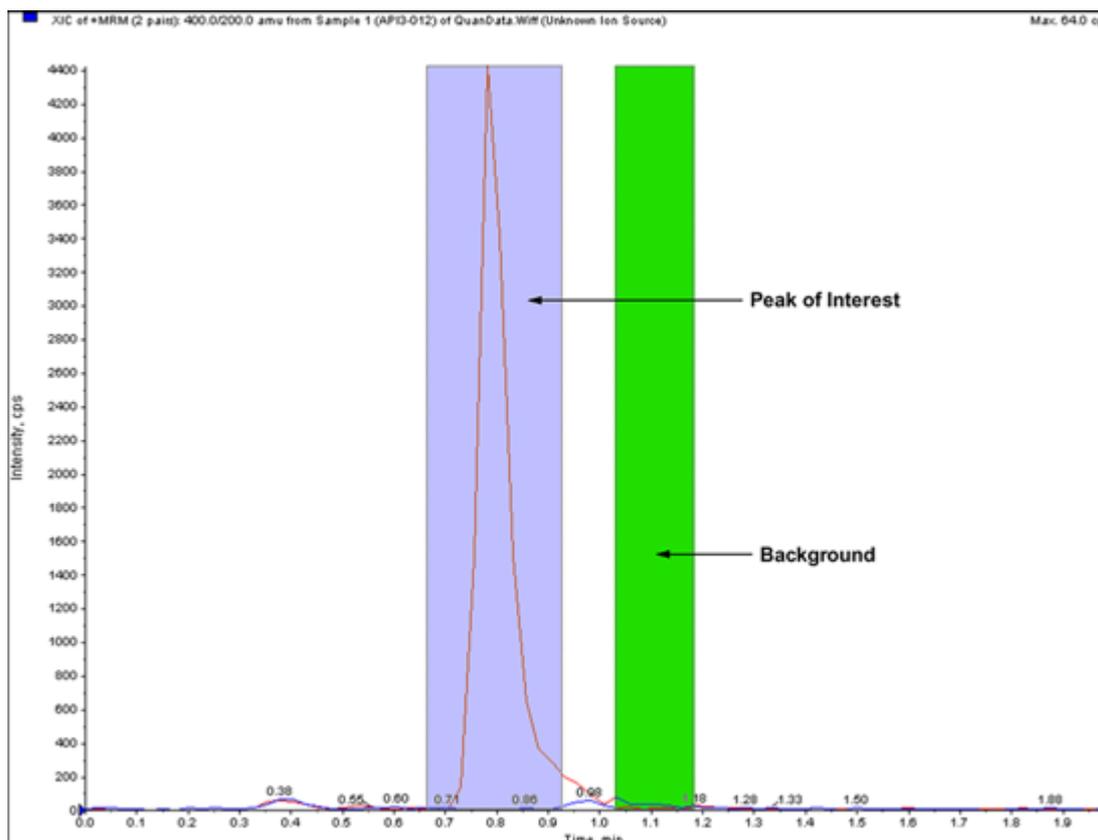
La soustraction du bruit de fond réduit la quantité de bruit dans un spectre en soustrayant une ou deux plages contenant du bruit d'une plage qui contient un pic. Déplacer chaque plage indépendamment ou la verrouiller, puis la déplacer en tant qu'entité unique à l'intérieur du graphique. La soustraction de bruit de fond verrouillée est un paramètre prédéfini.

**Background Subtract** : utiliser la soustraction du bruit de fond pour isoler un pic d'intérêt. Mettre en surbrillance, puis soustraire du pic jusqu'à deux plages sélectionnées. Verrouiller les plages, puis les déplacer à l'intérieur du graphique pour optimiser l'isolement du pic ou pour isoler un autre pic.

## Effectuer une soustraction du bruit de fond sur un spectre

1. Ouvrir un fichier de données.
2. Sélectionner une plage de bruit de fond.

Illustration 13-8 : Plage de bruit de fond sélectionnée



3. Maintenir enfoncée la touche **Shift**, puis sélectionner une autre plage de bruit de fond.
4. Pour définir la plage à soustraire, cliquer sur **Explore > Background Subtract > Set Subtract Range**.
5. Sélectionner le pic d'intérêt.
6. Cliquer sur **Explore > Background Subtract > Perform Background Subtract**.  
Le bruit de fond est soustrait du pic et un nouveau spectre est généré.
7. Pour isoler un autre pic, faire glisser les plages verrouillées dans le chromatogramme et répéter la soustraction du bruit de fond.

---

**Remarque :** Pour effacer la zone de soustraction du bruit de fond, cliquer sur **Explore > Background Subtract > Clear Subtract Range**.

---

8. Pour sauvegarder le spectre après soustraction du bruit de fond en tant que fichier de données traitées, cliquer sur **File > Save**.

## Déverrouiller les plages

La plage de soustraction sélectionnée est définie sur verrouillée.

- Cliquer sur **Explore > Background Subtract > Subtract Range Locked**.

Les plages sont déverrouillées et chacune d'elles peut être déplacée indépendamment.

**Tableau 13-7 : Guide de référence rapide de la barre d'outils Explore : Soustraction du bruit de fond**

Icône	Nom	Fonction
	Perform Background Subtract	Cliquer pour exécuter une soustraction du bruit de fond une fois les plages de bruit de fond sélectionnées.
	Subtract Range Locked	Cliquer dessus pour verrouiller des plages de bruit de fond sélectionnées. Déverrouiller les plages de bruit de fond pour déplacer chaque plage indépendamment.

## Algorithmes de lissage

Le lissage d'un ensemble de données efface les variations locales qui sont probablement dues au bruit. Plusieurs cycles de lissage peuvent être appliqués aux données, mais seul le lissage le plus récent peut être annulé. La fonction lissage n'est pas disponible pour les spectres MI/MRM. Choisir l'algorithme de lissage ou l'algorithme de lissage par filtre gaussien comme méthode de lissage prédéfinie.

### Algorithme de lissage

Quand cet algorithme est utilisé pour lisser les données, la valeur de pondération est définie pour trois points de données : le point de données actuel, le point de données précédent et le point de données suivant. L'algorithme de lissage multiplie les points de données par les valeurs de pondération attribuées, ajoute ces valeurs, puis divise le total obtenu par la somme des valeurs de pondération des points. Il s'agit d'un lissage plus doux que l'algorithme gaussien, et il faut compter un certain temps pour lisser les données fortement bruitées.

### Algorithme de lissage gaussien

Le lissage gaussien implique de remplacer chaque point de données par la moyenne pondérée d'un certain nombre de points de données situés de part et d'autre du point. La pondération de chaque nouveau point de données est calculée sur la base d'une courbe de Gauss. C'est un lissage plus grossier que l'algorithme de lissage, mais il est utile pour lisser les données fortement bruitées.

L'utilisateur a défini deux valeurs à l'aide de la méthode de lissage gaussien :

**Gaussian filter width (% of minimal distance between points)** : cette valeur indique la largeur utilisée pour calculer la pondération de points voisins. La largeur apparaît en pourcentage de la distance entre deux points du balayage, où la distance prédéfinie de 100 % permet une distribution aussi large que la distance entre les points de données.

**Limit of Gaussian filter (number of minimal distance between points)** : cette valeur correspond aux limites de la courbe de Gauss, exprimées en multiples de la distance entre les points. Par exemple, une valeur prédéfinie de 10 crée une courbe de Gauss qui tronque les largeurs de points de données supérieures à dix de chaque côté du centre.

## Données lissées

Vous pouvez choisir la méthode de lissage du logiciel Analyst MD ou la méthode de lissage gaussien.

---

**Conseil !** Pour annuler le lissage, cliquez sur **Edit > Undo**. Le logiciel permet d'annuler la dernière action réalisée.

---

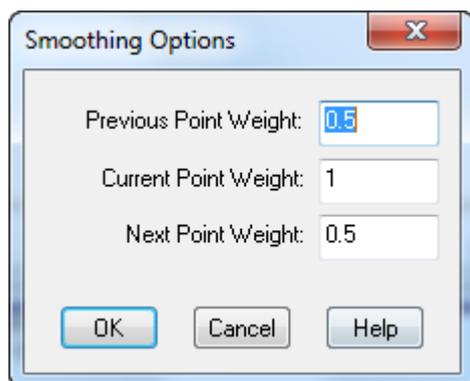
## Données lissées utilisant l'algorithme de lissage

**Conseil !** Pour annuler le lissage, cliquer sur **Edit > Undo**. Le logiciel prend en charge un niveau d'annulation.

---

1. Sélectionner un volet contenant un chromatogramme ou un spectre.
2. Cliquer sur **Explore > Smooth**.  
La boîte de dialogue Smoothing Options s'ouvre.

### Illustration 13-9 : Boîte de dialogue Smoothing Options

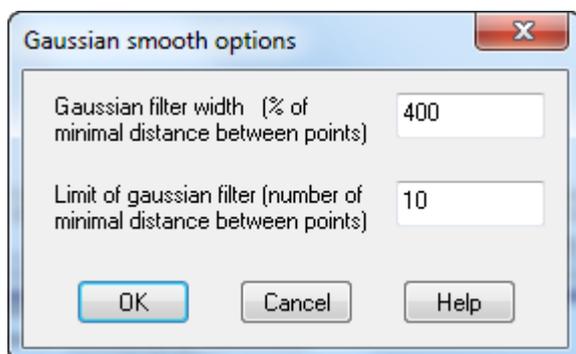


3. Dans le champ **Previous Point Weight**, saisir le facteur de pondération à appliquer au point de données précédent.
4. Dans le champ **Current Point Weight**, saisir le facteur de pondération à appliquer au point de données central.
5. Dans le champ **Next Point Weight**, saisir le facteur de pondération à appliquer au point de données suivant.
6. Cliquer sur **OK**.  
L'ensemble de données lissé remplace l'ensemble de données actuel dans le volet.

## Données lissées utilisant l'algorithme gaussien

1. Sélectionner un volet contenant un chromatogramme ou un spectre.
2. Cliquer sur **Explore > Gaussian Smooth**.  
La boîte de dialogue Gaussian smooth options apparaît.

Illustration 13-10 : Boîte de dialogue Gaussian smooth options



3. Dans le champ **Gaussian filter width**, saisir la largeur utilisée pour trouver la pondération des points voisins en pourcentage de la distance entre deux points.
4. Dans le champ **Limit of gaussian filter**, saisir la limite de la courbe de Gauss, exprimée en multiples de la distance entre les points.
5. Pour lisser les données, cliquer sur **OK**.  
L'ensemble de données lissé remplace l'ensemble de données actuel dans le volet.

Tableau 13-8 : Guide de référence rapide de la barre de données Explore : Lissage de données

Icône	Nom	Fonction
	Smooth	Cliquer dessus pour lisser les données à l'aide de l'algorithme de lissage.
	Gaussian smooth	Cliquer dessus pour lisser les données à l'aide du lissage gaussien.

## Données du centroïde

La création d'un centroïde convertit les valeurs de distribution des pics en une seule valeur de rapport  $m/z$  et d'intensité représentant le pic. La création d'un centroïde pour les données recueillies en mode profil simplifie les données et réduit la taille du fichier. La création d'un centroïde fournit des mesures de pics plus précises et réduit la quantité de données, mais elle supprime également les informations sur la forme du pic.

L'algorithme de création de centroïde convertit les pics en valeurs uniques en ayant recours à une moyenne pondérée d'intensité pour calculer le centre de gravité du pic. Le résultat de l'algorithme est une liste de pics avec des paramètres, comme le montre le tableau : [Tableau 13-9](#).

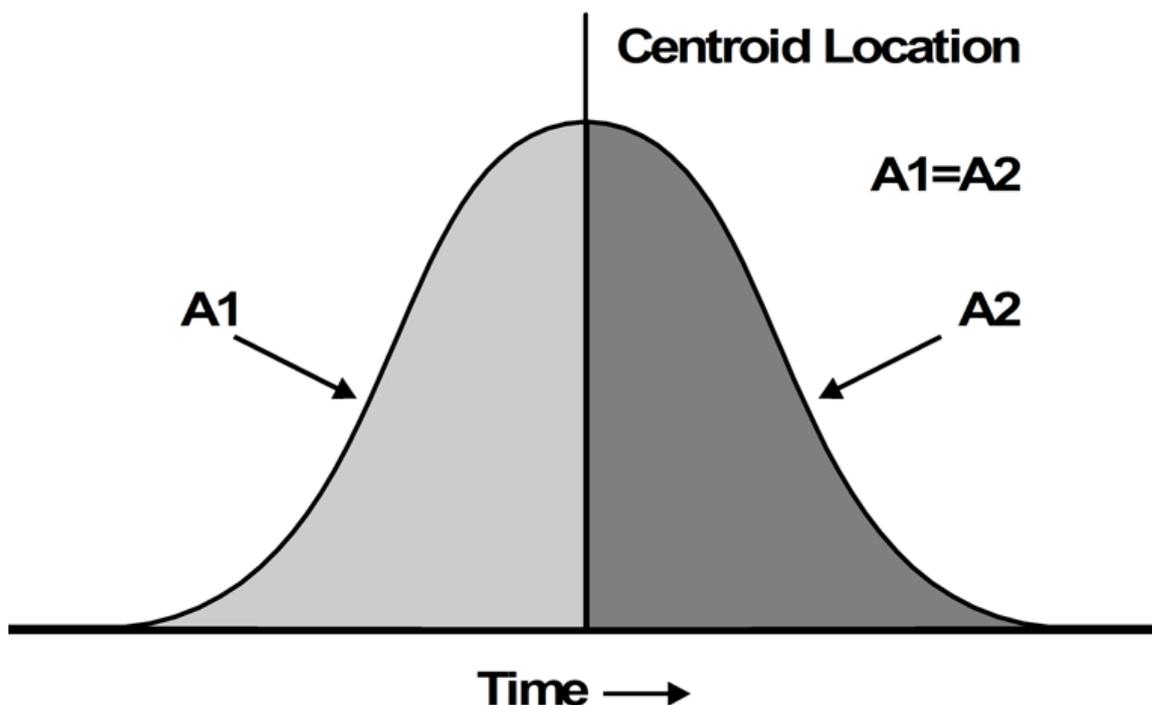
**Tableau 13-9 : Paramètres de pics**

Paramètre	Définition
Centroid value	Valeur des données centroïdées en unités de masse ou de temps
Intensity	Intensité de chaque pic en cps
Width	Largeur du pic centroïdée en uma.

Un centroïde des données est automatiquement créé lorsque les données sont ajoutées à une bibliothèque ou lorsqu'une recherche est effectuée.

1. Sélectionnez un volet contenant un spectre.  
La création d'un centroïde des données modifie l'aspect du graphique existant. Pour comparer les résultats avec les données originales, effectuer une copie du graphique avant de créer un centroïde.
2. Cliquez sur **Explore > Centroid**.  
Les données sont centroïdées.

Illustration 13-11 : Emplacement du centroïde d'analyte



Icône	Nom	Fonction
	Centroid	Cliquer dessus pour créer un centroïde de données.

## Enregistrer et ouvrir les fichiers de données traités

Les utilisateurs peuvent enregistrer les données traitées, telles que les présentations et légendes spécifiques, qu'ils peuvent à nouveau ouvrir uniquement en mode Explore. Ces fichiers contiennent également des informations pertinentes sur l'historique et sont similaires aux fichiers de données, sauf qu'ils ne contiendront que les données du volet actif dans Explorer. Ces fichiers portent l'extension pdt et sont stockés dans le dossier de données du projet actuel.

### Enregistrer un fichier de données traitées

1. Sélectionnez le volet de données à enregistrer.
2. Cliquez sur **File > Save Processed Data File**.
3. Dans le champ **File name**, saisissez un nom.

4. Cliquez sur **Save**.

## Ouvrir un fichier de données traitées

1. En mode Explore, cliquer sur **File > Open Processed Data File**.  
La boîte de dialogue Load Processed Data File s'ouvre.
2. Sélectionnez un fichier, puis cliquez sur **Open**.

## Travailler avec les graphiques de contour

Un graphique de contour est un graphique à code couleur d'un ensemble de données utilisant les couleurs pour représenter une troisième dimension dans le graphique. Dans le graphique de contour d'un TIC, l'axe des abscisses représente le temps de rétention ou le nombre de balayages, tandis que l'axe des ordonnées représente la masse et la couleur représente l'intensité des données à ce point. Dans le graphique de contour d'un TWC pour des données DAD, l'axe des abscisses représente le temps de rétention ou le nombre de balayages tandis que l'axe des ordonnées représente la longueur d'onde et la couleur représente l'absorbance. Un graphique de contour est un outil post-acquisition qui ne fonctionne pas pour une acquisition de balayage en temps réel.

---

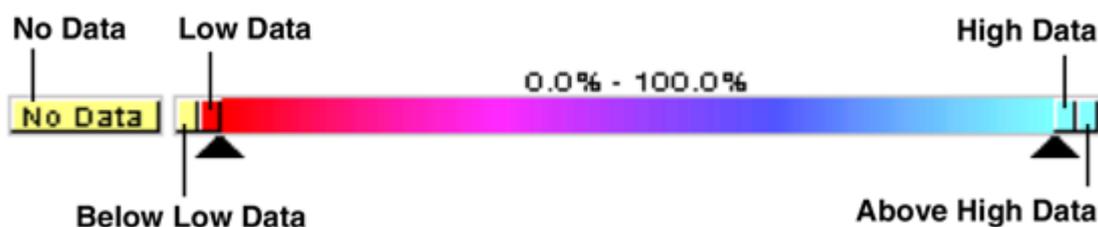
**Remarque** : Un graphique de contour ne prend pas en charge les balayages MI ou MRM, mais prend en charge les balayages DAD.

---

La couleur est le troisième axe dans les graphiques de contour et elle représente l'intensité ou l'absorbance. Modifiez les valeurs d'absorbance ou d'intensité haute et basse dans un graphique de contour à l'aide des triangles de contrôle sur la barre de couleur située au-dessus du graphique de contour. Les paramètres de pourcentage au-dessus du volet Contour Plot indiquent les valeurs des curseurs bas et haut. Les valeurs réelles sont basées sur un pourcentage de l'absorbance ou de l'intensité maximale à l'intérieur de la zone sélectionnée. La valeur apparaît dans l'angle supérieur droit du volet Contour Plot.

Les commandes illustrées dans la [Illustration 13-12](#) permettent de modifier les couleurs d'un graphique de contour.

### Illustration 13-12 : Boutons contrôlant les couleurs du graphique de contour



Définissez les couleurs d'un graphique de contour pour offrir un meilleur contraste et afficher les spécifications des données selon les exigences. Par exemple, régler l'intensité ou la longueur d'onde et changer la couleur des valeurs des données Below Low Data et Above High Data permet d'éliminer le bruit de fond dans les graphiques de contour.

Les boutons Below Low Data et Above High Data permettent de rétrécir et de développer la barre de couleur si les commandes du curseur sont déplacées. Lorsque les couleurs du graphique de contour sont modifiées, les nouvelles couleurs deviennent les couleurs prédéfinies pour tous les graphiques suivants.

### Afficher un graphique de contour

Les utilisateurs ne peuvent afficher un graphique de contour à partir de graphiques TIC, XIC, TWC ou XWC qu'après l'acquisition. Les TIC et les XIC sont disponibles pour tous les fichiers de données wiff. Les TWC et XWC sont disponibles uniquement pour les données acquises par un DAD.

1. En mode **Explore**, ouvrir un fichier de données sous forme de graphique TIC, XIC, TWC ou XWC.
2. Mettre en surbrillance la plage à visualiser dans le graphique de contour. Si aucune sélection n'est effectuée, la plage complète s'affiche alors.
3. Cliquer sur **Explore > Show > Show Contour Plot**.  
Un graphique de contour de la zone sélectionnée s'ouvre dans un volet séparé.

### Sélectionner une zone dans un graphique de contour

Les utilisateurs peuvent effectuer un zoom avant dans une sélection particulière ou voir le spectre de masse correspondant à cette sélection.

Effectuer l'une des opérations suivantes :

- Pour sélectionner une zone standard dans un cadre, faire glisser le pointeur pour créer un cadre autour d'une zone du graphique de contour.
- Pour effectuer une sélection verticale, appuyer sur Ctrl et faire glisser le pointeur verticalement.
- Pour effectuer une sélection horizontale, appuyer sur la barre d'espace et faire glisser le pointeur horizontalement.

### Définir l'intensité et l'absorbance dans un graphique de contour

Effectuer l'une des opérations suivantes :

- Pour définir la valeur d'intensité/absorbance faible dans le graphique de contour, faire glisser le curseur triangulaire gauche dans la barre de couleur au-dessus du graphique de contour jusqu'à l'emplacement souhaité.

Le graphique de contour adapte automatiquement la couleur des valeurs inférieures au réglage pour indiquer qu'elles sont en dehors de la plage.

- Pour définir la valeur d'intensité/absorbance élevée dans le graphique de contour, faire glisser le curseur triangulaire droit dans la barre de couleur au-dessus du graphique de contour jusqu'à l'emplacement souhaité.

Le graphique de contour adapte automatiquement la couleur des valeurs supérieures au réglage pour indiquer qu'elles sont en dehors de la plage.

### Modifier les couleurs dans un graphique de contour

1. Dans le volet Contour Plot, cliquez sur l'un des boutons de couleur.  
La boîte de dialogue Color s'ouvre.
2. Cliquez sur une couleur, puis sur **OK**.

Le graphique change alors pour tenir compte de la modification de couleur.

---

**Conseil !** Utilisez la palette **Define Custom Colors** pour créer des couleurs personnalisées à utiliser dans un graphique de contour.

---

### Interprétation de la fragmentation

L'outil Fragment Interpretation aide l'utilisateur à interpréter les données MS/MS. L'outil Fragment Interpretation génère une liste de masses de fragment théoriques à partir du clivage des liaisons simples non cycliques d'une structure moléculaire. La structure moléculaire peut être créée dans un programme de dessin tiers, puis enregistrée en tant que fichier mol. L'outil peut alors faire correspondre la liste théorique avec les pics du spectre de masse actuel. L'interprétation de la fragmentation met en évidence les fragments théoriques dans la liste des fragments et compare les masses de fragment aux pics du spectre de masse. Les pics se situant au-dessus du seuil d'intensité et dans la fourchette de tolérance de masse définie par l'utilisateur (2 Da maximum) pour les masses de fragment sont considérés comme des concordances et apparaissent en gras dans la liste des fragments.

---

**Remarque :** L'outil Fragment Interpretation ne peut pas être utilisé pour les types de balayage suivants :

- Ion précurseur
- Perte neutre
- Q1 ions multiples
- Q3 ions multiples
- Suivi de réactions multiples (MRM)

---

### Travailler avec l'outil d'interprétation de la fragmentation

Si plusieurs volets de spectre sont affichés, l'outil d'interprétation de la fragmentation se connecte au spectre actif. Si le fichier de données contient plus d'un échantillon, l'outil d'interprétation de la fragmentation se connecte au spectre actif.

L'outil calcule automatiquement les fragments du clivage des liaisons simples non cycliques à partir d'un fichier mol. Quand l'outil d'interprétation de la fragmentation est connecté à un spectre, les fragments théoriques en caractère gras indiquent un pic du spectre correspondant au seuil d'intensité et à la tolérance de masse définis.

Quand une liaison simple non cyclique est sélectionnée dans la structure moléculaire, l'outil d'interprétation de la fragmentation met en évidence les deux fragments créés lors du clivage de la liaison et affiche ensuite les pics correspondants dans le spectre auquel il est connecté.

### Connecter l'outil d'interprétation de la fragmentation à un spectre

Si un spectre est ouvert lorsque l'outil d'interprétation de la fragmentation est ouvert, le panneau actif se lie alors automatiquement au spectre ouvert.

1. Cliquer sur **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Cliquer sur le bouton de connexion situé en bas à droite du volet Fragment Interpretation.  
Le pointeur prend l'aspect de l'outil de connexion.
3. Cliquez sur le graphique spectral à connecter à l'outil d'interprétation de la fragmentation.

L'indicateur de connexion du graphique en bas à gauche contient le nom du graphique connecté au volet Fragment Interpretation. La connexion est rompue lors de la fermeture du graphique ou du volet Fragment Interpretation. Si le fichier .wiff connecté possède plus d'un échantillon, le volet d'interprétation de la fragmentation se met à jour automatiquement à mesure que l'utilisateur fait défiler les échantillons.

### Relier les fragments aux pics

1. Cliquez sur **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Avec un fichier .mol dans le volet d'interprétation de la fragmentation, sélectionnez une cellule dans la **Fragment List** qui s'affiche en gras.

Dans le spectre, le logiciel met en surbrillance le pic spectral correspondant dans la couleur sélectionnée sous l'onglet **Options**. Dans la structure moléculaire, la liaison est mise en évidence.

En cliquant sur une ligne qui a plus d'un fragment correspondant, le pic spectral qui s'approche le plus de sa masse monoisotopique est mis en surbrillance dans le spectre de masse, dans la couleur définie sous l'onglet **Options**.

### Sélectionner une liaison dans une structure moléculaire

1. Cliquez sur **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Avec un fichier mol ouvert dans le volet Fragment Interpretation, cliquer sur une liaison simple non cyclique dans la structure moléculaire.

Les deux fragments obtenus s'affichent en surbrillance dans la liste des fragments. La masse des deux fragments s'affiche de chaque côté de la liaison.

Si un spectre est connecté, l'outil d'interprétation de la fragmentation affiche tous les pics correspondants dans le graphique. Si un fragment dans la liste est sélectionné et que le fragment est mis en correspondance avec un pic, la fenêtre Fragment Interpretation effectue alors un zoom avant sur ce pic.

## Afficher les isotopes

L'outil d'interprétation de la fragmentation peut afficher la distribution isotopique théorique pour un pic correspondant à un fragment de la liste des fragments.

1. Cliquez sur **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Dans le volet Fragment Interpretation, cliquer sur l'onglet **Options**.
3. Cocher la case **Show Isotopes**.
4. Cliquer sur **Apply**.
5. Dans la liste **Fragment list**, sélectionner un fragment qui correspond à un pic. La distribution isotopique pour les pics correspondants s'affiche dans le spectre.

## Afficher les différences de formule pour les fragments

La différence de formule et de masse monoisotopique entre deux fragments hypothétiques liés peut apparaître dans le logiciel. La différence de formule est affichée lorsque deux pics sont sélectionnés. La différence de formule et de masse monoisotopique s'affiche quand deux fragments ou deux liaisons simples non cycliques sont sélectionnés.

### Afficher une différence de formule dans un spectre

1. Cliquer sur un pic de fragment.
2. Appuyer sur **Shift**, puis cliquer sur un autre pic de fragment.  
Si la différence de formule est égale à un fragment de la liste des fragments, le fragment apparaît en surbrillance dans la liste. Sinon, la différence de formule entre les fragments correspondants des pics s'affiche dans une boîte de message.

### Afficher une différence de formule dans la liste des fragments

1. Cliquer sur le numéro de ligne correspondant à un fragment.
2. Appuyer sur **Shift**, puis cliquer sur un autre pic de fragment.  
La différence de formule et de masse monoisotopique s'affiche dans une boîte de message si les fragments sont liés.

### Afficher une différence de formule dans une structure moléculaire

1. Cliquer sur une liaison simple non cyclique. Le fragment par défaut (parmi les deux fragments en surbrillance) est sélectionné. Pour sélectionner l'autre fragment de la liaison rompue, appuyer sur **Ctrl**, puis cliquer sur la liaison.
2. Sélectionner une seconde liaison non cyclique. Pour sélectionner le fragment par défaut, appuyer sur **Shift**, puis cliquer sur la liaison. Pour sélectionner l'autre fragment de la liaison rompue, appuyer sur **Ctrl+Shift**, puis cliquer sur la liaison.  
L'interprétation de la fragmentation calcule la différence de formule et de masse monoisotopique entre le fragment sélectionné à l'étape 1 et le fragment sélectionné à l'étape 2, si les fragments sont liés. La différence de formule et de masse monoisotopique s'affiche dans une boîte de message.

## Bases de données de la bibliothèque

La fonction Library Search compare des spectres inconnus à des spectres MS connus présents dans la base de données de la bibliothèque et génère une liste de concordances possibles.

La fonction Library Search permet d'effectuer les tâches suivantes :

- comparer les contenus de la bibliothèque à un spectre inconnu,
- ajouter des enregistrements à la bibliothèque,
- modifier les enregistrements existants.

Les données de la bibliothèque sont stockées dans les emplacements suivants :

- MS Access sur une base de données locale
- MS SQL Server

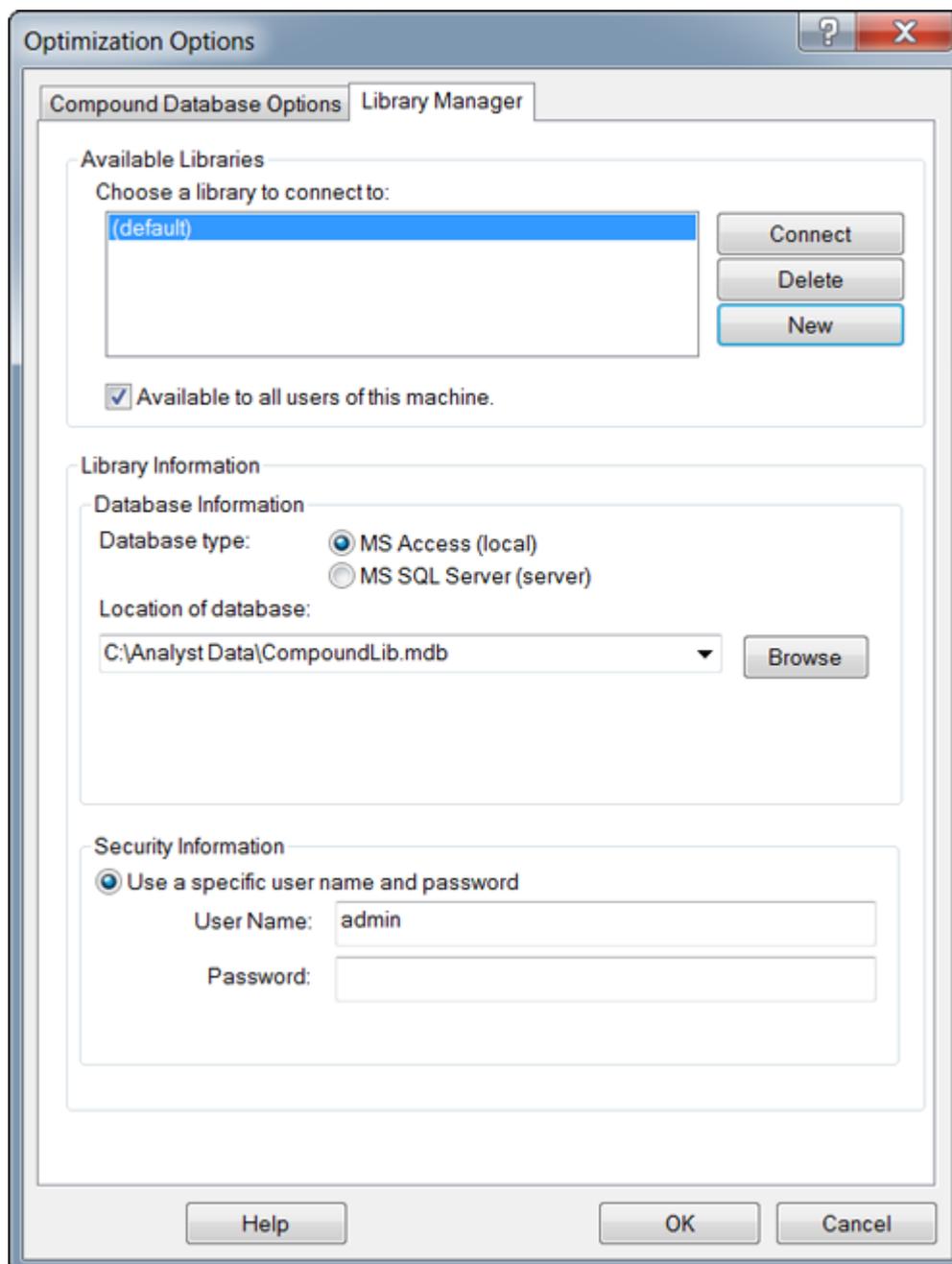
Avant d'utiliser la fonction Library Search, déterminez où sont stockées les données de la bibliothèque, puis connectez l'ordinateur à cet emplacement. Les bases de données de la bibliothèque peuvent être stockées localement sur l'ordinateur ou sur un serveur accessible par un réseau.

## Basculer entre les bases de données existantes de la bibliothèque

Les utilisateurs peuvent se connecter à n'importe quelle base de données ayant des alias déjà configurés.

1. Cliquez sur **Tools > Settings > Optimization Options**.  
La boîte de dialogue Optimization Options s'ouvre.
2. Cliquez sur l'onglet Library Manager.

Illustration 13-13 : Onglet Library Manager



3. Dans la section **Available Libraries**, cliquer sur l'alias de la base de données à laquelle se connecter, puis cliquer sur **Connect**.
4. Pour que d'autres utilisateurs puissent accéder à la base de données, cocher la case **Available to all users of this machine**.
5. Cliquer sur **OK**.

## Se connecter à une base de données locale de la bibliothèque.

1. Cliquez sur **Tools > Settings > Optimization Options**.  
La boîte de dialogue Optimization Options s'ouvre.
2. Cliquez sur l'onglet Library Manager.
3. Dans la section **Available Libraries**, cliquez sur **New**.

Illustration 13-14 : Boîte de dialogue Add Library

The screenshot shows the 'Add Library' dialog box with the following fields and options:

- Library Information:** A text input field for 'Enter a Name for the Library'.
- Database Information:** Radio buttons for 'MS Access (local)' (selected) and 'MS SQL Server (server)'. A text input field for 'Enter the location of the database:' with a 'Browse' button.
- Security Information:** Radio button for 'Use a specific user name and password' (selected). Text input fields for 'User Name:' and 'Password:'.
- Buttons:** 'Save' and 'Cancel' at the bottom.

4. Saisissez le nom de la bibliothèque.
5. Dans la section **Database Information**, sélectionner **MS Access (local)**.
6. Saisir l'emplacement de la base de données.

7. Dans la section **Security Information**, le cas échéant, entrez le nom d'utilisateur et le mot de passe requis pour accéder à la base de données.
8. Cliquez sur **Save**.

## Se connecter à une base de données de la bibliothèque sur serveur

1. Cliquez sur **Tools > Settings > Optimization Options**.  
La boîte de dialogue Optimization Options s'ouvre.
2. Cliquez sur l'onglet Library Manager.
3. Dans la section **Available Libraries**, cliquez sur **New**.
4. Saisissez le nom de la bibliothèque.
5. Dans la section **Database Information**, sélectionner **MS SQL Server (server)**.

Illustration 13-15 : Boîte de dialogue Add Library

**Add Library**

Library Information

Enter a Name for the Library

Database Information

Database type:  MS Access (local)  
 MS SQL Server (server)

Enter the name of the database server:

Refresh

Enter the name of the database on the server:

Security Information

Use Windows integrated security  
 Use a specific user name and password

User Name:

Password:

Save Cancel

6. Saisir le nom du serveur de la base de données.
7. Saisir le nom de la base de données.
8. Effectuez l'une des opérations suivantes dans la section **Security Information** :
  - Si un nom d'utilisateur et un mot de passe spécifiques sont requis pour accéder à cette base de données, entrez le nom d'utilisateur et le mot de passe.
  - Pour utiliser la sécurité Windows, sélectionnez l'option **Use Windows integrated security**.
9. Cliquez sur **Save**.

## Travailler avec les enregistrements de la bibliothèque

En cas de recherche sans contraintes dans le contenu de la bibliothèque, tous les enregistrements sont répertoriés. En cas de recherche avec contraintes dans le contenu de la bibliothèque, seuls les enregistrements correspondant aux contraintes spécifiées sont répertoriés. Le nombre d'enregistrements affichés dépend du nombre de contraintes sélectionnées. Si beaucoup de contraintes sont sélectionnées, peu d'enregistrements sont répertoriés.

### Afficher tous les enregistrements de la bibliothèque

Cliquer sur **Explore > Library Search > List**.

La boîte de dialogue Librarian s'ouvre avec tous les enregistrements de la base de données.

### Rechercher des enregistrements de la bibliothèque avec contraintes

1. Cliquer sur **Explore > Library Search > List With Constraints**.

Illustration 13-16 : Boîte de dialogue List Constraints

The screenshot shows a dialog box titled "List Constraints". At the top right is a close button (X). Below the title bar is a section labeled "Conditions". It contains three input fields: "Field Name:" with a dropdown menu showing "Formula", "Relation:" with a dropdown menu showing "Contains", and "Value:" with an empty text box. Below these fields is a large empty rectangular area. To the right of this area are several buttons: "Add", "Modify", "Remove", "Group", "Ungroup", and "Or". Below the "Conditions" section are two tables. The first table is labeled "Elements Included:" and has columns "Element", "Min.", and "Max.". It contains three rows with numbers 1, 2, and 3 in the "Element" column. The second table is labeled "Excluded:" and has a column "Element". It also contains three rows with numbers 1, 2, and 3 in the "Element" column. To the right of these tables are buttons for "Help", "Cancel", and "List".

## Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des données

---

2. Dans la liste **Field name**, sélectionner un champ pour lequel l'utilisateur veut appliquer une contrainte.
3. Dans la liste **Relation**, sélectionner la relation (opérateur) qui s'applique au nom du champ.
4. Dans le champ **Value**, saisir la valeur du nom du champ en fonction de la relation.
5. Pour ajouter la contrainte sélectionnée à la liste de **Conditions**, cliquer sur **Add**.
6. Continuer d'ajouter autant de contraintes que nécessaire à la liste de conditions.
7. L'association de contraintes distinctes au sein de la liste de **Conditions** permet de créer des conditions plus spécifiques qui améliorent la recherche.
  - Pour regrouper des contraintes, sélectionner les contraintes et cliquer sur **Group**.
  - Pour séparer les contraintes groupées, cliquer sur le groupe, puis sur **Ungroup**.
8. Pour modifier la relation entre les contraintes, cliquer sur la relation, puis sur **And** ou **Or**.
9. Pour exclure les composés contenant un certain nombre d'atomes d'éléments spécifiques, sélectionner ou saisir les éléments dans le tableau **Elements Included**, puis saisir un nombre minimum et maximum d'atomes pour chaque élément.

---

**Remarque :** Les symboles des éléments sont sensibles à la casse. Par exemple, l'hydrogène a pour symbole H, et non h, et le sodium Na, et non NA ou na.

---

10. Pour exclure les composés contenant certains éléments, sélectionner ou saisir les éléments dans le tableau **Excluded**.
11. Pour rechercher les composés répondant à vos critères, cliquer sur **List**. Les enregistrements correspondant à toutes vos contraintes s'affichent dans le tableau **Records**. Les contraintes de recherche sont sauvegardées.

### Ajouter un enregistrement à la bibliothèque.

1. Cliquer avec le bouton droit de la souris sur un spectre actif, puis cliquer sur **Add a Record**.

Le spectre sera automatiquement centroïdé s'il ne l'est pas déjà.  
La boîte de dialogue **Add a Record** s'ouvre avec les données du spectre.
2. Dans l'onglet **Mass Spectral Information**, saisir un nom dans le champ **Compound Name**. Le nom du composé est obligatoire et doit identifier de manière unique le composé dans la bibliothèque.
3. Modifier les autres champs souhaités. De nombreux champs sont remplis automatiquement à partir des données associées au spectre.
4. Cliquer sur l'onglet **General Information**, modifier les champs selon les besoins, puis cliquer sur **OK**.

## Rechercher un spectre similaire

Les utilisateurs peuvent chercher dans la bibliothèque un spectre (et des informations sur son composé lié) qui correspond (ou est similaire) au spectre actif. Les recherches peuvent être effectuées avec ou sans contraintes. Lorsque des recherches sont effectuées avec contraintes, seuls les enregistrements qui répondent à tous les critères sont répertoriés. Les résultats s'affichent dans une liste classée. Le premier élément de la liste est celui qui correspond le mieux au spectre actif. Les entrées situées plus loin dans la liste correspondent moins bien.

Plus l'utilisateur sélectionne de contraintes, plus la liste devient précise et plus les résultats sont pertinents et limités. Une fois qu'un ensemble de contraintes est défini, il s'applique à toutes les recherches suivantes, sauf s'il est modifié.

Seuls les pics au-dessus du seuil sont utilisés dans la recherche. Lors de la sélection des contraintes de recherche, des pics peuvent être ajoutés ou retirés du spectre actif. Par exemple, si un pic est considéré comme un pic de bruit de fond, il ne doit pas être utilisé dans la recherche, car il pourrait fausser les résultats.

Lorsque des recherches sont effectuées sans contraintes, une liste plus importante de spectres suggérés est obtenue, car la bibliothèque trouve moins de concordances spécifiques aux données spectrales.

## Rechercher un spectre similaire

1. Cliquer avec le bouton droit de la souris sur un spectre actif, puis cliquer sur **Search With Constraints**.  
Le logiciel centroïde automatiquement le spectre si nécessaire.

Illustration 13-17 : Boîte de dialogue Search Constraints

Search Constraints

Maximum Number of Match:

Preselect Constraints:

Mass Tolerance

Intensity Factor

1st Precursor m/z

Collision Energy

2nd Precursor m/z

Excitation Energy

Retention Time

Record Contains UV Spectrum

Record Contains Molecular Structure

Preset Tolerance:

+/-  Da

+/-

+/-  Da

+/-

+/-  Da

+/-

+/-  min

Result Sorted by:

Comment Contains:

Keyword Contains:

Compound Name

Formula

Compound Class

CAS Number

Default Search Cancel Apply Peak Constraints >> Help

2. Dans le champ **Maximum Number of Match**, inscrire le nombre maximum de composés que la recherche doit retourner.
3. Dans la section **Preselect Constraints**, cocher les cases correspondant aux contraintes à appliquer.
4. Pour chaque contrainte sélectionnée, saisir la tolérance dans la section **Preset Tolerance**.

5. Si nécessaire, sélectionner une méthode de tri des enregistrements à partir de la liste **Result Sorted by**.
6. Si nécessaire, saisir du texte dans le champ **Comment Contains**.
7. Si nécessaire, saisir du texte dans le champ **Keyword Contains**.
8. Pour appliquer des contraintes de pics en ajoutant ou en retirant des pics, cliquer sur **Peak Constraints**.  
Le tableau **Peaks Included** s'ouvre.
9. Pour ajouter des pics à la liste dans laquelle effectuer la recherche, cliquer sur **Add**, puis saisir le rapport  $m/z$  et l'intensité correspondante dans la cellule vide.
10. Pour retirer des pics de sorte qu'ils ne soient pas inclus dans la recherche, sélectionner les pics à exclure de la recherche, puis cliquer sur **Remove**.
11. Cliquer sur **Search** pour enregistrer les contraintes et lancer la recherche.

### Afficher un composé à partir des résultats de recherche

Si plusieurs spectres correspondent au spectre inconnu, alors d'autres spectres peuvent être visualisés et comparés à l'inconnu.

1. Dans la boîte de dialogue Search Results, dans la liste des composés, sélectionner le numéro de ligne du composé.
2. Cliquer sur le volet du spectre de l'un des composés connus.  
Le spectre du composé sélectionné s'ouvre.

### Conseils pour la recherche en bibliothèque

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Recherches dans la bibliothèque : regrouper les conditions	Sélectionnez les conditions à regrouper, puis cliquez sur <b>Group</b> . Cette fonction se comporte comme des parenthèses dans une formule.
Recherches dans la bibliothèque : effectuer une recherche sans contraintes	Cliquez avec le bouton droit de la souris sur un spectre actif, puis cliquez sur <b>Search Library</b> . La boîte de dialogue Search Results apparaît.
Requêtes spécifiques au tableau : afficher de nouveau le tableau entier	Cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans le tableau de résultats, puis cliquez sur <b>Query &gt; Show All</b> . Les requêtes peuvent être réappliquées ou modifiées.  Il est recommandé à l'utilisateur de valider toutes les requêtes utilisées pour analyser les données dans un tableau de résultats.

## Instructions d'utilisation : Analyser et explorer des données

---

Pour faire ceci	Procédez comme suit
Intégration des pics : pour examiner les pics	<p>Pour examiner tous les pics, assurez-vous que tous les échantillons sont répertoriés dans le tableau de résultats.</p> <p>La fenêtre Peak Review contient les pics répertoriés dans le tableau des résultats. Si certains échantillons sont masqués dans le tableau (par exemple si une requête a été appliquée), ils sont également masqués dans l'examen des pics.</p> <p>Il est recommandé à l'utilisateur de valider toutes les requêtes utilisées pour analyser les données dans un tableau de résultats.</p>
Intégration des pics : Pour accéder à la première pic du lot	<p>Cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans le volet Peak Review, puis cliquez sur <b>Show First Page</b>. Pour accéder au dernier pic du lot, cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où dans le volet Peak Review, puis cliquez sur <b>Show Last Page</b>.</p>
Pour examiner les courbes d'étalonnage,	<p>Cliquez avec le bouton droit de la souris n'importe où sur la courbe, cliquez sur <b>Active Plot</b> et sélectionnez la courbe à tracer par-dessus.</p>
Examen des statistiques de l'échantillon : examiner un pic individuel	<p>Cochez la case <b>Display the Data Set(s)</b> , puis, dans la colonne <b>Data Point</b>, double-cliquez sur le point de données qui représente le pic. Le logiciel affiche la fenêtre Peak Review avec le pic sélectionné.</p>
Tableaux de résultats : restaurer le tableau de résultats à son ordre initial	<p>Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau de résultats, puis cliquez sur <b>Sort &gt; Sort By Index</b>.</p>
Méthodes d'acquisition : créer une méthode d'acquisition à partir du volet d'informations sur le fichier	<p>Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le volet d'informations sur le fichier, puis cliquez sur <b>Save Acquisition Method</b>.</p>

# Instructions d'utilisation : Analyse et traitement des données quantitatives

# 14

Cette section décrit comment utiliser le logiciel Analyst MD pour analyser et traiter des données quantitatives. Il est également possible de traiter les données à l'aide du logiciel MultiQuant MD. Nous recommandons d'utiliser le logiciel MultiQuant MD pour quantifier des données. Consultez la documentation fournie avec le logiciel MultiQuant MD.

Utilisez les exemples de fichiers trouvés dans le dossier `Example` (Exemple) pour apprendre à sélectionner des échantillons pour une quantification, des requêtes préréglées et créer des requêtes spécifiques aux tableaux, et comment analyser les données acquises. Pour plus d'informations sur les rubriques suivantes, reportez-vous au document : *Guide de l'utilisateur expert*.

Il est recommandé à l'utilisateur de valider toutes les requêtes utilisées pour analyser les données dans un Results Table.

- Parcelles métriques
- Mise en page d'un tableau des résultats

## Analyse quantitative

L'analyse quantitative est utilisée pour trouver la concentration d'une substance particulière dans un échantillon. En analysant un échantillon inconnu et en le comparant à des échantillons standard, c'est-à-dire des échantillons contenant la même substance de concentrations connues, le logiciel peut calculer la concentration de l'échantillon inconnu. Le processus implique la création d'une courbe d'étalonnage en utilisant la réponse du signal ou le ratio de réponse des standards puis en calculant les concentrations des échantillons inconnus. Les concentrations calculées de tous les échantillons sont ajoutées à un tableau de résultats.

L'analyse quantitative est le plus souvent réalisée avec une exploration de surveillance des réactions multiples (MRM). Dans une exploration MRM, un ion précurseur et un ion produit caractéristique sont utilisés pour définir une transition MRM hautement spécifique à l'analyte. La transition MRM, couplée au temps de rétention associé à l'analyte pendant la chromatographie liquide, fournit la spécificité nécessaire à la quantification.

La quantification est obtenue par l'utilisation de méthodes d'acquisition MRM LC-MS/MS validées, l'acquisition de courbes d'étalonnage et l'intégration ultérieure des pics associés aux composés concernés. La relation établie par la courbe d'étalonnage entre la réponse du signal et la concentration est utilisée pour déterminer la quantité d'un analyte particulier dans un échantillon inconnu.

## Méthodes de quantification

La méthode de quantification est un ensemble de paramètres utilisés pour générer les pics dans un échantillon. La méthode de quantification peut inclure des paramètres utilisés pour localiser et intégrer des pics, générer des courbes standard et calculer les concentrations inconnues. Une méthode de quantification précédemment enregistrée peut être sélectionnée à partir du menu **Quantitation** dans le lot.

Trois outils peuvent être utilisés pour créer une méthode de quantification : Quantitation Wizard, Build Quantitation Method et Quick Quant.

### Build Quantitation Method

La fonctionnalité Build Quantitation Method ne permet pas de générer un tableau de résultats de quantification bien que la méthode puisse être utilisée par la suite dans le Quantitation Wizard pour créer un tableau de résultats. L'outil Build Quantitation Method peut aussi servir à modifier des méthodes de quantification existantes. C'est la façon la plus souple de créer une méthode de quantification. Reportez-vous à la section : [Créer une méthode avec l'éditeur de méthode de quantification](#).

### Quantitation Wizard

Le Quantitation Wizard génère un tableau de résultats en même temps que la méthode de quantification. Par ailleurs, la méthode de quantification existante peut être utilisée pour quantifier différents ensembles de données.

### Quick Quant

Quick Quant n'est pas recommandé pour la quantification des résultats.

Quick Quant (Quantification rapide) fait partie de Batch Editor. Utilisez Quick Quant pour ajouter des concentrations de composés avant d'acquérir des données. Puisqu'aucun échantillon n'a été acquis, il est impossible de sélectionner un échantillon représentatif ou de vérifier des pics. Avec cette fonction, seuls les composants de la méthode sont définis.

N'utilisez pas la méthode Quick Quant automatiquement générée pour réaliser la quantification si le paramètre Quick Quant est utilisé pour stocker les types d'échantillons et les concentrations dans le fichier de données. Cette méthode de quantification n'utilise pas de paramètres spécifiques au composé et à l'échantillon optimisés pour la sélection des pics.

Pour utiliser une méthode de quantification précédemment enregistrée, sélectionnez-la depuis le menu **Quantitation** dans le lot. Pour consulter les instructions de création d'un lot, consultez la section : [Créer et soumettre un lot](#).

## Méthodes de quantification et tableaux de résultats

Pour les procédures suivantes, utilisez les données d'échantillon installées dans le dossier `Example/Triple Quad`. Le dossier contient les fichiers de données, `Mix_Batch_1` et `Mix_Batch_2`. Ces fichiers d'échantillons sont utilisés pour démontrer l'utilité de ces tracés

métriques pour isoler les échantillons difficiles. Les ions analysés ont été la réserpine (609.3 /195,0 ), le minoxidil (210,2 /164,2 ), le tolbutamide (271.1 /91.1 ) et la rescinnamine (635.3 /221,2 ), qui est la standard interne. Mix\_Batch\_1 ne contient aucune erreur, mais Mix\_Batch\_2 contient un échantillon CQ auquel le standard interne a été ajouté deux fois (échantillon QC2).

### Créer une méthode avec l'éditeur de méthode de quantification

---

**Remarque** : Nous recommandons à l'utilisateur de valider toutes les requêtes utilisées pour analyser les données dans un tableau de résultats.

---

#### Conditions préalables

- Sélectionnez le projet ou sous-projet contenant les données à quantifier. Consultez la section [Basculer entre les projets et sous-projets](#)

1. Assurez-vous que le projet `Example` est sélectionné.
2. Dans la barre de navigation, sous **Quantitate**, double-cliquez sur **Build Quantitation Method**.  
La boîte de dialogue Select Sample s'ouvre.
3. Double-cliquez sur le dossier **Triple Quad** dans la liste **Data Files**.
4. Sélectionner **Mix\_Batch\_2.wiff**.  
Les échantillons présents dans le fichier de données sélectionné sont affichés dans la liste **Samples**.

---

**Remarque** : Si le champ **Compound ID** a été rempli pour les échantillons et les standards internes dans la méthode d'acquisition, puis dans le tableau Internal Standards, lorsqu'une valeur est sélectionnée dans le champ **Q1/Q3**, le champ **Name** est automatiquement renseigné.

---

5. Sélectionnez un échantillon présentant un signal détectable pour sélectionner les paramètres d'intégration adaptés à la totalité du lot, puis cliquez sur **OK**.
6. Dans le tableau Internal Standards, sélectionnez **Name** dans la colonne **rescinnamine**. Dans la colonne **Q1/Q3**, sélectionnez **635.3/221.2**.
7. Dans le tableau Analytes faire ce qui suit :
  - a. Dans la colonne **Name**, sélectionnez **minoxidol** pour les masses de la colonne **Q1/Q3** de **tolbutamide**, **210.2/164.188** pour **271.3/91.146** et **reserpine** pour **609.4/195.039**.
  - b. Dans la colonne **Internal Standard**, depuis la liste, sélectionnez **rescinnamine** comme standard interne à associer à chaque analyte.
  - c. Supprimez **635.4/221.185** de la colonne **Q1/Q3** dans le tableau Analytes.

## Instructions d'utilisation : Analyse et traitement des données quantitatives

---

**Remarque** : Si le champ **Compound ID** a été rempli pour les échantillons et les standard internes dans la méthode d'acquisition puis dans le tableau des Analytes, les champs **Name** et **Q1/Q3** sont automatiquement renseignés.

---

- Ouvrez l'onglet Integration.  
Les paramètres d'intégration prédéfinis sont adaptés à la plupart des pics.
- Si l'intégration n'est pas adaptée, modifiez l'algorithme. Consultez la section [Pics intégrés manuellement](#).
- Cliquez sur **Show or Hide Parameters** () pour afficher les algorithmes d'intégration supplémentaires.
- Ouvrez l'onglet Calibration .  
Les paramètres prédéfinis sont adaptés à ces échantillons. L'utilisateur peut modifier l'ajustement, la pondération et le paramètre de régression selon les applications spécifiques.
- Enregistrez la méthode de quantification.  
La nouvelle méthode peut être utilisée à la création d'un lot dans Batch Editor ou lorsque le Quantitation Wizard est utilisé pour générer un Results Table.

---

**Conseil !** La méthode de quantification ne peut être utilisée dans le projet en cours à moins qu'elle ne soit copiée vers un autre projet. Pour cela, cliquez sur **Tools > Project > Copy Data**. Pour être disponible, tout nouveau projet doit d'abord être créé et sélectionné.

---

## Créer un tableau de résultats en utilisant l'assistant de quantification

---

**Remarque** : Nous recommandons à l'utilisateur de valider toutes les requêtes utilisées pour analyser les données dans un tableau de résultats.

---

### Conditions préalables

- Sélectionnez le projet ou sous-projet contenant les données à quantifier. Consultez la section [Basculer entre les projets et sous-projets](#)

- Dans la barre de navigation, sous **Quantitate**, double-cliquez sur **Quantitation Wizard**. La page Create Quantitation Set - Select Samples s'ouvre.
- Dans les listes **Available Data Files** (fichiers de données), double-cliquez sur le **Triple Quad** dossier
- Sélectionnez **Mix\_batch\_2. wiff**.
- Cliquez sur **Add All**.

**Remarque** : nous recommandons aux utilisateurs de ne pas traiter ou rapporter les résultats des échantillons dont l'acquisition s'est arrêtée anormalement ou de façon imprévue.

---

5. Cliquez sur **Next**.  
La page Create Quantitation Set - Select Settings & Query s'ouvre.
  6. Cliquez sur **Select Existing: Query** dans la section **Default Query**.
  7. Sélectionnez **Accuracy 15%** dans la liste **Query**.
- 

**Remarque** : Pour créer une requête en même temps, consultez la section : [Créer une requête standard \(En option\)](#).

---

**Remarque** : L'utilisateur est responsable de l'évaluation et de la validation de la requête à utiliser pour les différentes applications.

---

8. Cliquez sur **Next**.  
La page Create Quantitation Set - Select Method s'ouvre.
  9. Cliquez sur **Choose Existing Method**.
  10. Sélectionnez **PK Data\_Mix.qmf** dans la liste **Method**.
  11. Cliquez sur **Finish**.  
Le Results Table s'ouvre.
- 

**Conseil !** Pour ajouter ou enlever des échantillons dans le Results Table, cliquez sur **Tools > Results Table > Add/Remove Samples**.

---

12. Examinez le type d'échantillon, la concentration réelle, l'intégration des pics, les courbes d'étalonnage, le volet de statistiques, le tracé métrique pour le standard interne et les autres informations relatives à la quantification des données.
  13. Enregistrez le tableau de résultats.
- 

**Remarque** : nous recommandons aux utilisateurs de ne pas modifier les noms des fichiers de données (.wiff) si un tableau de résultats comprend des échantillons de ces fichiers.

---

**Conseil !** Vous pouvez créer des rapports sous le bon format à partir d'un tableau de résultats en utilisant le logiciel Reporter. Si un modèle Reporter contenant une requête est utilisé, nous recommandons à l'utilisateur de valider les résultats. Consultez la section [Logiciel Reporter](#).

---

### Créer une requête standard (En option)

Les utilisateurs avancés peuvent créer une requête et une requête standard de nombreuses façons. L'exemple suivant en est une. Pour plus d'informations sur la création de requêtes, consultez le document *Aide*.

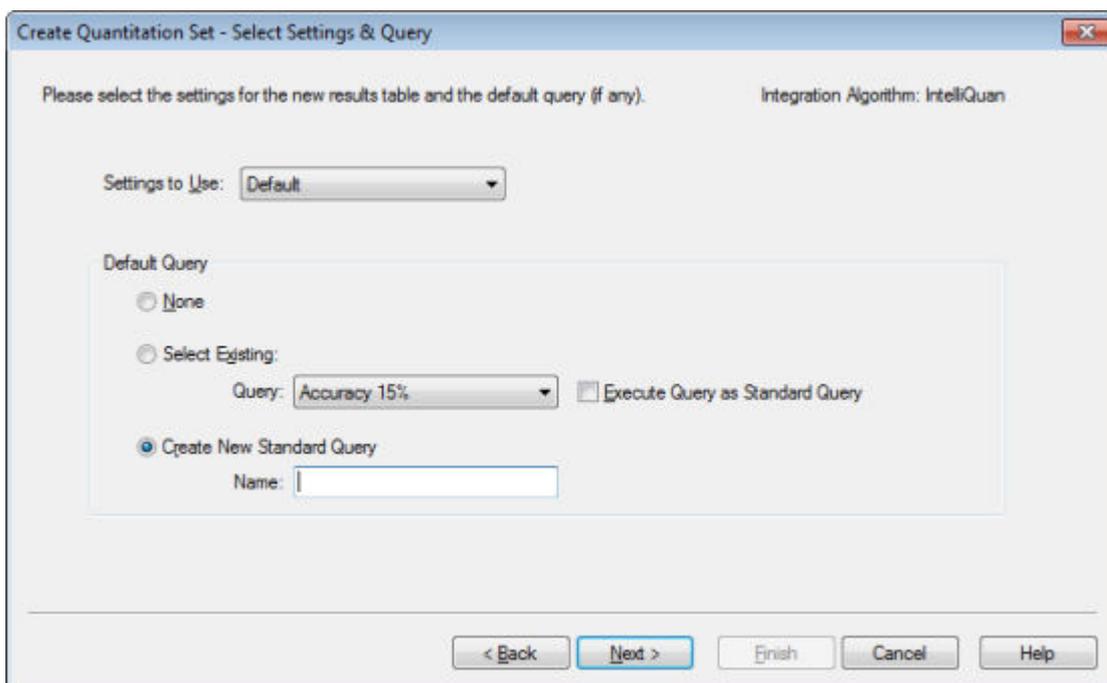
## Instructions d'utilisation : Analyse et traitement des données quantitatives

---

Il est recommandé à l'utilisateur de valider toutes les requêtes utilisées pour analyser les données dans un **Results Table**.

1. Dans la barre de navigation, sous **Quantitate**, double-cliquez sur **Quantitation Wizard**. La page Create Quantitation Set - Select Samples s'ouvre.
2. Sélectionnez les échantillons à utiliser dans le cadre de l'ensemble de quantification.
3. Cliquez sur **Next**. La page Select Settings & Query apparaît.
4. Dans la section **Default Query**, sélectionnez **Create New Standard Query**.
5. Tapez un nom de requête.

### Illustration 14-1 : Créer un lot de quantification : Sélectionner la Page Settings & Query (Requête et paramètres)



6. Cliquez sur **Next**.

**Illustration 14-2 : Créer un lot de quantification : Créer une Page Default Query (Requête par défaut)**

Please specify the concentrations/sample names and the corresponding allowed accuracy variations (in percent). You can leave any of the "variation" fields empty as desired.

Maximum Allowed Accuracy Variation for QCs (%)

Concentration	Max. Variation
4.000000	
40.000000	
400.000000	
4000.000000	
12000.000000	

Maximum Allowed Accuracy Variation for Standards (%)

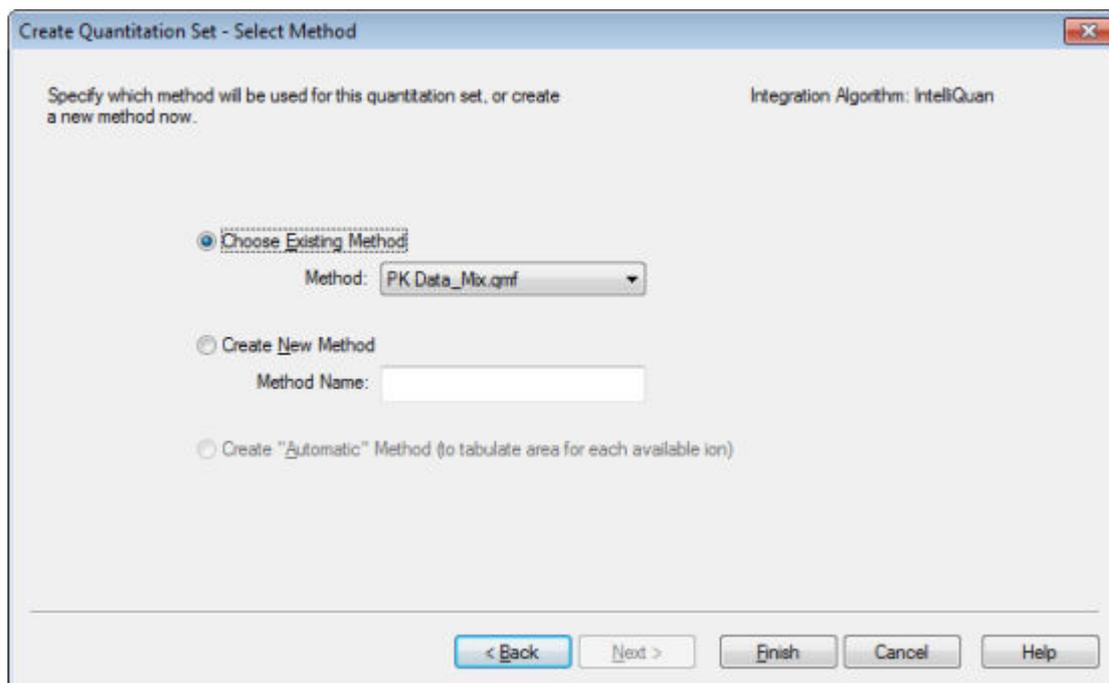
Concentration	Max. Variation
0.120000	
0.240000	
0.490000	
0.980000	
1.950000	
3.910000	
7.810000	
15.630000	
31.250000	
62.500000	
125.000000	

Query By Name

< Back Next > Finish Cancel Help

7. Dans le tableau **Maximum Allowed Accuracy Variation for QCs (%)** , dans la colonne **Max. Variation**, saisissez le pourcentage de variation maximal possible pour chaque QC (par exemple, 5 est  $\pm 5\%$ ) sur la même ligne que la concentration correspondante. Si les concentrations n'ont pas été définies au cours de l'acquisition, elles ne sont pas affichées. Dans ce cas, saisissez-les dans la colonne **Concentration**.
8. Dans le tableau **Maximum Allowed Accuracy Variation for Standards (%)** , dans la colonne **Max. Variation**, saisissez le pourcentage de variation maximal possible pour chaque standard (par exemple, 10 est  $\pm 10\%$ ) sur la même ligne que la concentration correspondante. Si les concentrations n'ont pas été définies au cours de l'acquisition, elles ne sont pas affichées. Saisissez les concentrations dans la colonne **Concentration**.
9. Cliquez sur **Next**.

**Illustration 14-3 : Créer un lot de quantification : Sélectionner la page Method (Méthode)**



10. Sélectionnez ou créez une méthode.
11. Cliquez sur **Finish**.  
La requête est utilisée comme une requête standard. Les résultats de la requête apparaissent sous la forme d'une entrée Pass ou Fail dans la colonne **Standard Query Status** du tableau de résultats.

---

**Conseil !** Pour retourner à la vue générale, cliquez avec le bouton droit de la souris, puis cliquez sur **Full**.

---

## Définir la mise en page des tableaux de résultats

Des vues prédéfinies du tableau de résultats sont disponibles.

Cliquer avec le bouton droit de la souris dans le tableau de résultats, puis cliquer sur l'un des éléments suivants :

- Pour afficher la présentation complète, cliquer sur **Full**.  
Tous les analytes sont affichés.
- Pour afficher la mise en page résumée, cliquer sur **Summary**, puis cliquer sur le nom d'un champ.
- Pour afficher la présentation par analyte, cliquer sur **Analyte**, puis cliquer sur un analyte s'il en existe plusieurs.

- Pour afficher la présentation par groupe d'analytes, cliquer sur **Analyte Group**, puis cliquer sur un groupe d'analytes.

---

**Conseil !** Un nouveau groupe d'analytes doit d'abord être créé. Pour ce faire, cliquer avec le bouton droit de la souris dans le tableau de résultats, puis cliquer sur **Analyte Group > New**.

---

**Conseil !** Pour retourner à la vue générale, cliquer avec le bouton droit de la souris, puis cliquer sur **Full**.

---

Le tableau s'affiche avec la mise en page sélectionnée.

### Trier les données dans les tableaux de résultats

Les données d'un tableau de résultats peuvent être triées selon les méthodes suivantes :

- Trier rapidement le tableau sur une à trois colonnes à l'aide de l'un des boutons Sort. Ce critère de tri ne peut pas être enregistré.
- Créer un tri spécifique au tableau pour enregistrer les critères de tri avec le tableau actuel. Les tris spécifiques au tableau permettent à l'utilisateur de trier le tableau actuel sur une à trois colonnes et d'enregistrer les critères utilisés avec ce tableau.
- Utiliser un tri prédéfini créé antérieurement. L'utilisateur peut créer et enregistrer un tri, puis l'appliquer ultérieurement à un tableau de résultats.

---

**Conseil !** Pour enregistrer un tri ou tout autre paramètre du tableau, cliquer avec le bouton droit de la souris dans le tableau, puis cliquer sur **Table Settings > Export To New Table Settings**. Le tri et les autres paramètres peuvent être utilisés dans le projet actuel. Pour utiliser les paramètres du tableau dans un projet différent, il suffit de les copier dans un autre projet. Cliquer sur **Tools > Project > Copy Data**. Pour être disponible, tout nouveau projet doit d'abord être créé et sélectionné.

---

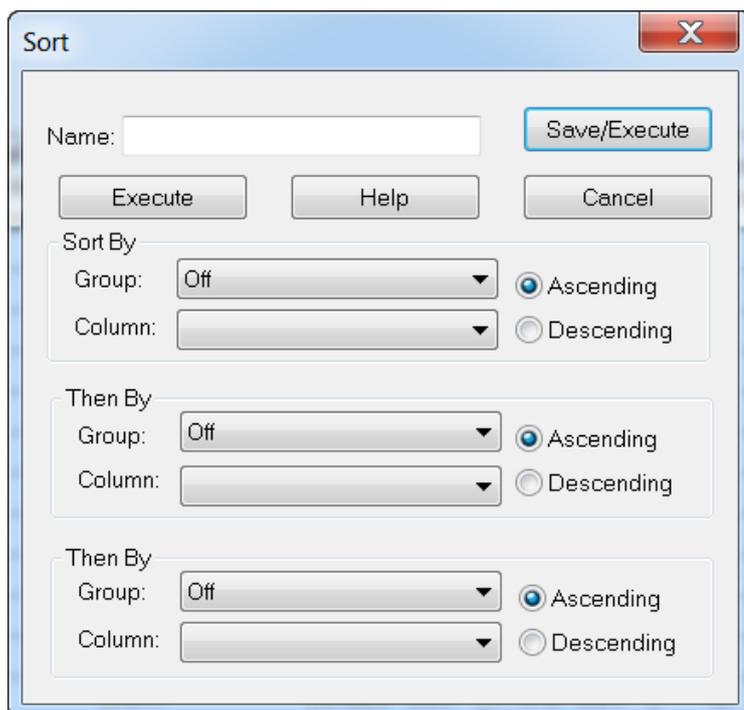
### Trier un tableau de résultats

1. Sélectionner jusqu'à trois colonnes dans le tableau de résultats dans l'ordre de tri souhaité.
2. Effectuer l'une des opérations suivantes :
  - Pour trier par ordre croissant, cliquer sur **A-Z**.
  - Pour trier par ordre décroissant, cliquer sur **Z-A**.

### Trier un tableau de résultats et enregistrer les critères de tri

1. Cliquer avec le bouton droit de la souris dans le tableau de résultats, puis cliquer sur **Sort > New**.

Illustration 14-4 : Boîte de dialogue Sort

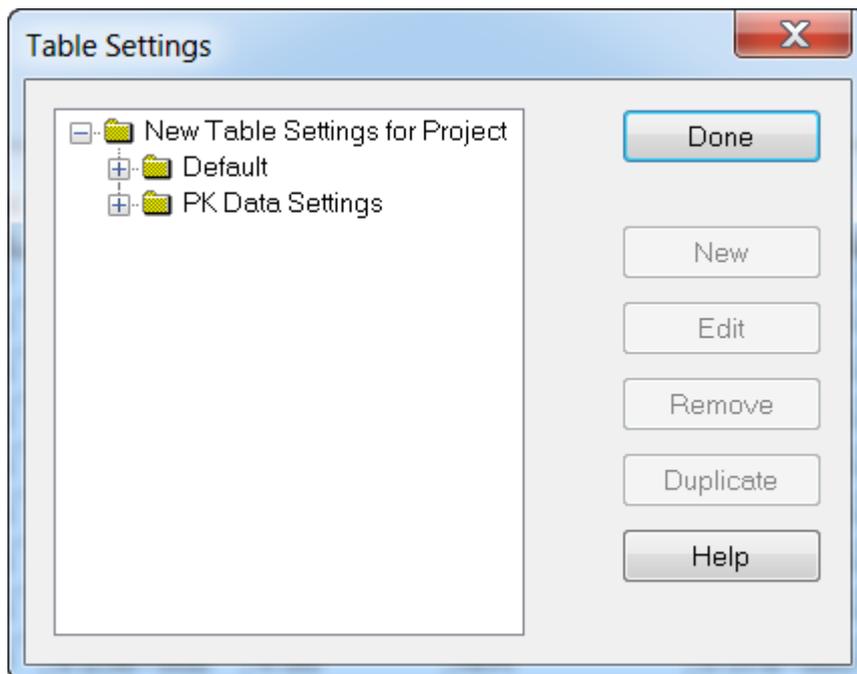


2. Dans le champ **Name**, saisissez le nom du nouveau tri.
3. Pour chaque règle de tri, effectuez les actions suivantes dans les sections **Sort By** et **Then By** :
  - Dans la liste **Group**, sélectionnez le type de colonne de tri.
  - Dans la liste **Column**, sélectionnez la colonne de tri.
  - Sélectionnez l'ordre de tri : **Ascending** ou **Descending**.
4. Effectuer l'une des opérations suivantes :
  - Pour effectuer le tri, enregistrer les critères de tri puis fermer la boîte de dialogue **Sort**, cliquer sur **Save/Execute**.
  - Pour effectuer le tri et fermer la boîte de dialogue **Sort** sans enregistrer les critères de tri, cliquer sur **Execute**.

## Enregistrer les critères de tri par défaut pour les prochains tableaux de résultats

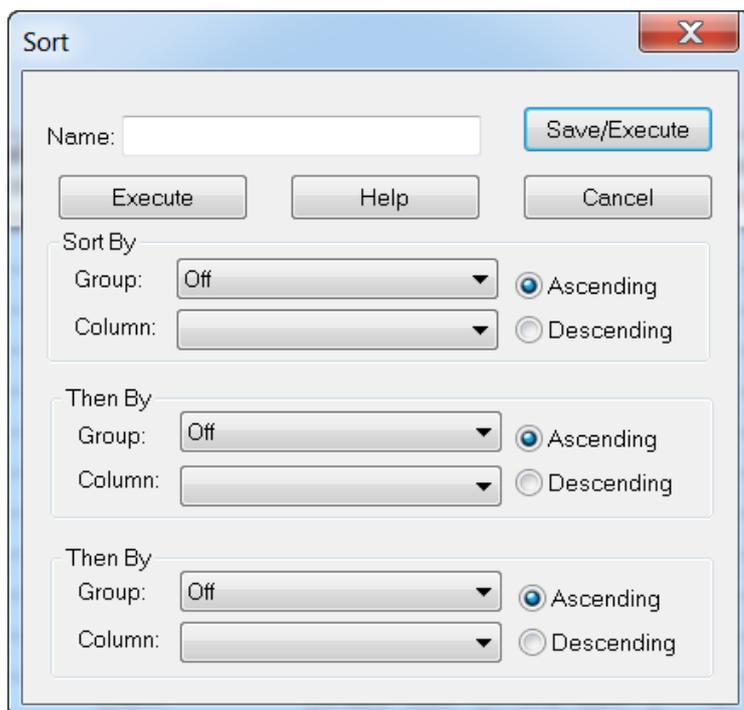
1. Cliquer sur **Tools > Settings > New Quantitation Results Table Settings**.

Illustration 14-5 : Boîte de dialogue Table Settings



2. Développer le dossier **Table Settings** et double-cliquer sur le dossier **Default**.
3. À partir du dossier **Default** développé, sélectionner le dossier **Sorts**, puis cliquer sur **New**.

Illustration 14-6 : Boîte de dialogue de tri



4. Dans le champ **Name**, saisissez le nom du nouveau tri.
5. Pour chaque règle de tri, effectuez les actions suivantes dans les sections **Sort By** et **Then By** :
  - Dans la liste **Group**, sélectionnez le type de colonne de tri.
  - Dans la liste **Column**, sélectionnez la colonne de tri.
  - Sélectionnez l'ordre de tri : **Ascending** ou **Descending**.
6. Pour enregistrer les critères et fermer la boîte de dialogue **Sort**, cliquer sur **OK**.
7. Pour fermer la boîte de dialogue **Table Settings**, cliquer sur **Done**.

### Trier un tableau de résultats à l'aide des critères de tri prédéfinis

- Cliquer avec le bouton droit de la souris dans le tableau de résultats, cliquer sur **Sort**, puis sélectionner le nom du tri.

## Examen des pics et intégration manuelle des pics

Utilisez l'examen des pics pour étudier les pics que le logiciel a identifiés, puis redéfinissez le pic ou les points de début et de fin si nécessaire.

Après l'identification des analytes et des standard internes que le logiciel doit trouver, il recherche les pics dans les échantillons. Quand il identifie un pic apparaissent les

chromatogrammes pour chaque analyte et standard interne dans Créer Méthode de quantification: Définir intégration dans la page de l'Assistant Standard ou sur l'onglet Intégration de l'Éditeur complet de méthode. L'utilisateur peut confirmer les pics trouvés ou modifier la méthode de quantification, mieux les définir. Nous recommandons aux utilisateurs de revoir manuellement l'ensemble des résultats d'intégration.

Pour des informations sur l'utilisation du menu contextuel Peak Review, consultez la section : [Examen des pics](#).

### Examen des pics

Pendant l'examen des pics, l'utilisateur peut vouloir en afficher un dans son intégralité ou revoir le niveau de référence pour savoir dans quelle mesure le logiciel a bien trouvé les points de début et de fin de ce pic. Utilisez la fonction d'agrandissement automatique pour faire l'un ou l'autre.

Pour aider le logiciel à trouver un pic, définir ses points de début et de fin exacts et ceux de l'arrière-plan manuellement. Ces modifications s'appliquent uniquement à un pic à moins que la méthode globale n'ait été mise à jour.

---

**Remarque** : nous recommandons que les résultats intégrés manuellement soient validés.

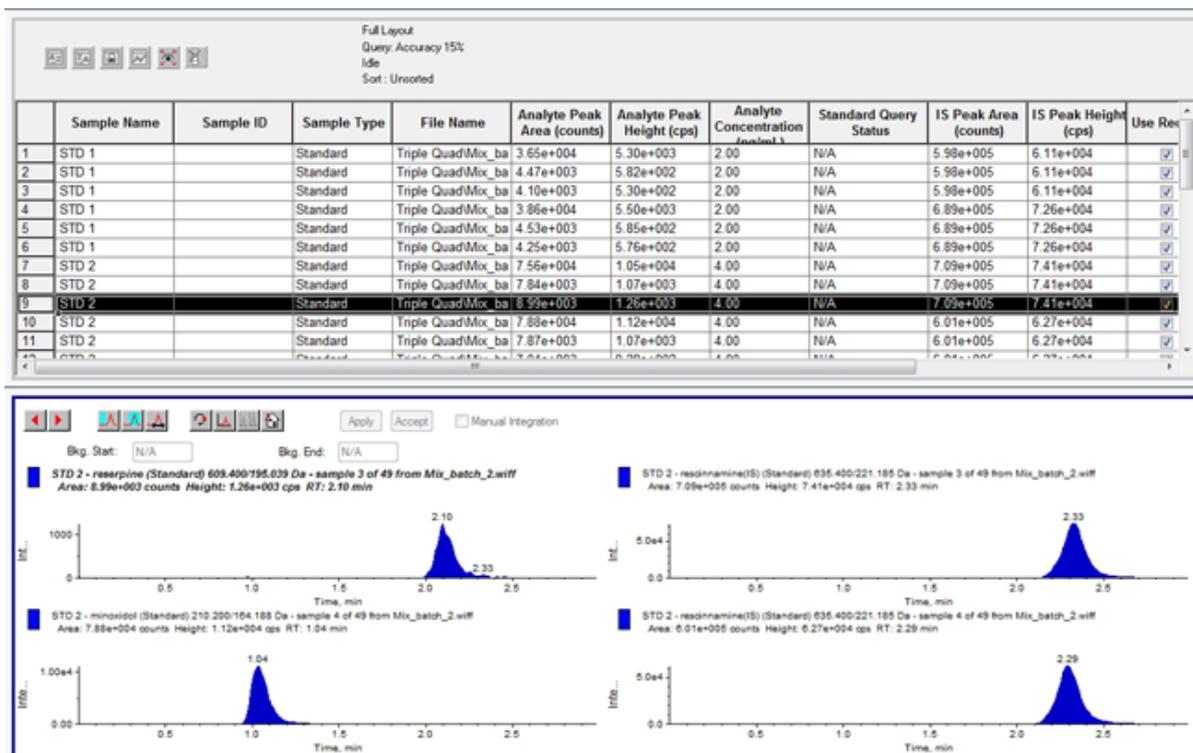
---

**Conseil !** Pour examiner un pic individuel, cliquez avec le bouton droit de la souris sur un point de la courbe, puis cliquez sur **Show Peak**. Le logiciel ouvre la fenêtre Peak Review (Examen des pics) avec le pic sélectionné.

---

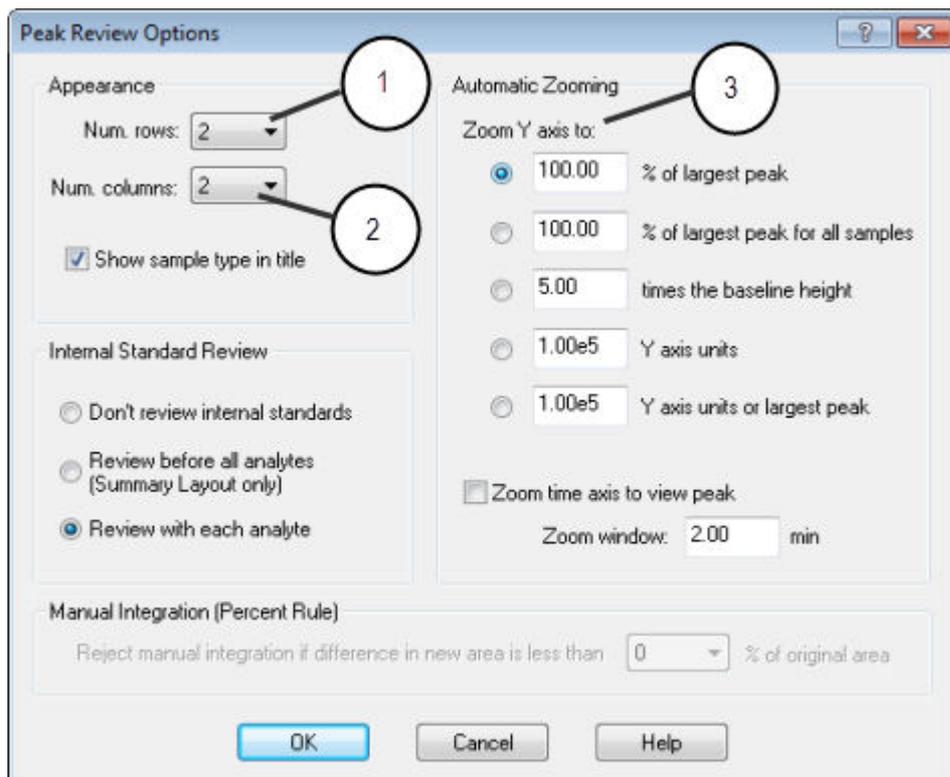
1. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le tableau de résultats, puis cliquez sur **Analyte**.
2. Sélectionnez un analyte.
3. Cliquez sur **Tools > Peak Review > Pane..**  
Les pics sont affichés sous le Results Table avec seulement celles figurant dans le Results Table.

## Illustration 14-7 : Examen des pics



4. Cliquez avec le bouton droit sur la fenêtre puis sur **Options**. La boîte de dialogue Peak Review Options apparaît.
5. Dans la section **Appearance**, remplacez **Num. rows** par **1** et **Num. columns** par **2**.
6. Dans la section **Automatic Zooming**, cliquez sur **Zoom Y axis to: 100% of largest peak** pour afficher le pic entier.

Illustration 14-8 : Boîte de dialogue Options Examen des Pics

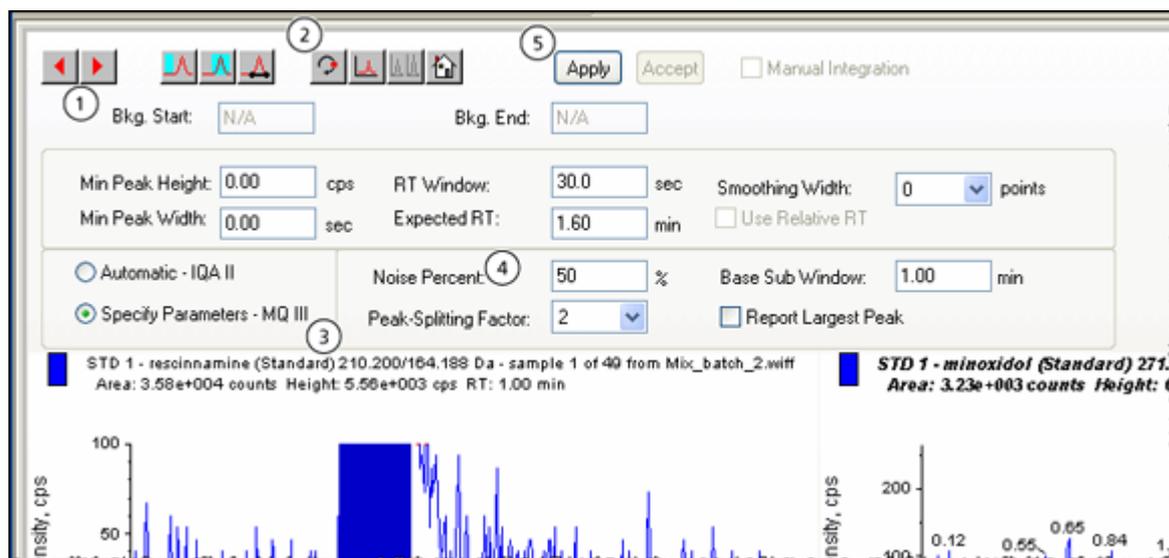


Élément	Définition
1	Nombre de lignes
2	Nombre de colonnes
3	<b>Zoom Y-axis to 100 % of largest peak</b> pour afficher le pic entier

7. Cliquez sur **OK**.
8. Pour se déplacer à travers les pics, cliquez sur la flèche droite. Voir la figure : [Illustration 14-9](#).
9. Allez à la deuxième injection de standard 3.  
Dans cet exemple, le pic peut être intégré plus près de la ligne de base en sélectionnant l'option **Specify Parameters**.

**Conseil !** Pour accéder à un pic spécifique dans la fenêtre Peak Review, sélectionnez la ligne correspondante dans le tableau de résultats.

Illustration 14-9 : Volet Examen des pics



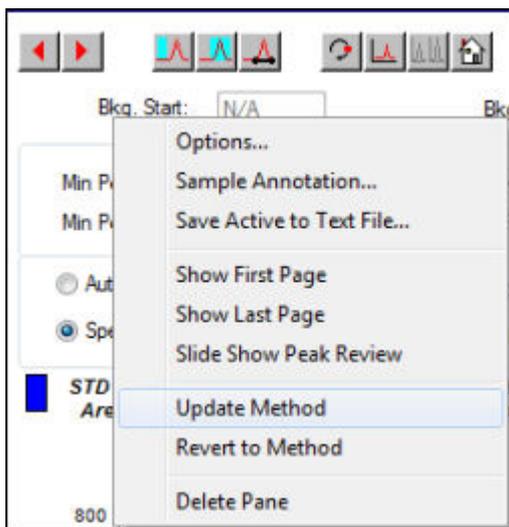
Élément	Définition
1	Flèches : cliquez pour vous déplacer à travers les pics.
2	<b>Show or Hide Parameters</b> : cliquez pour afficher les paramètres d'intégration.
3	Paramètres d'intégration : cliquez sur cette option pour modifier les paramètres.
4	<b>Noise Percentage</b> : saisissez un pourcentage de bruit.
5	<b>Apply</b> : cliquez pour intégrer les paramètres.

10. Cliquez deux fois sur **Show or Hide Parameters**.
11. Cliquez sur **Specify Parameters - MQ III**.
12. Modifiez la valeur **Noise Percent**.
13. Cliquez sur **Apply**.  
La pic est intégrée plus près de la ligne de base.
14. Si la modification n'améliore pas l'intégration des pics, alors réglez **Noise Percent** jusqu'à ce que la valeur optimale soit atteinte.

**Remarque** : L'option **Update Method** ne met à jour que les valeurs de l'algorithme pour cet analyte spécifique (ou ces standard internes) et non pas pour tous les analytes.

15. Pour mettre à jour l'algorithme pour toutes pics, cliquez avec le bouton droit de la souris sur la fenêtre puis cliquez sur **Update Method**.

Illustration 14-10 : Update Method



## Pics intégrés manuellement

L'intégration manuelle des pics doit être effectuée en dernier lieu, afin de limiter la variabilité d'une personne à l'autre. Intégrez manuellement les pics seulement si tous les pics n'ont pas été trouvés après le réglage et la mise à jour des paramètres de l'algorithme. Nous recommandons aux utilisateurs de valider les résultats pour déterminer si l'intégration manuelle est acceptable pour les applications spécifiques.

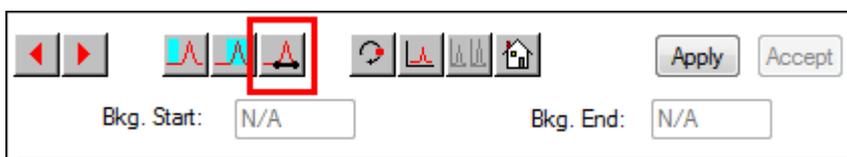
---

**Remarque** : Les pics intégrés manuellement, ou les cas où l'algorithme n'a été modifié que pour ce pic, sont identifiés dans la colonne **Record Modified** (enregistrement modifié) dans le Results Table, comme des pics comportant des modifications de paramètres de l'algorithme pour un échantillon qui n'ont pas été appliquées à tout le groupe d'analytes.

---

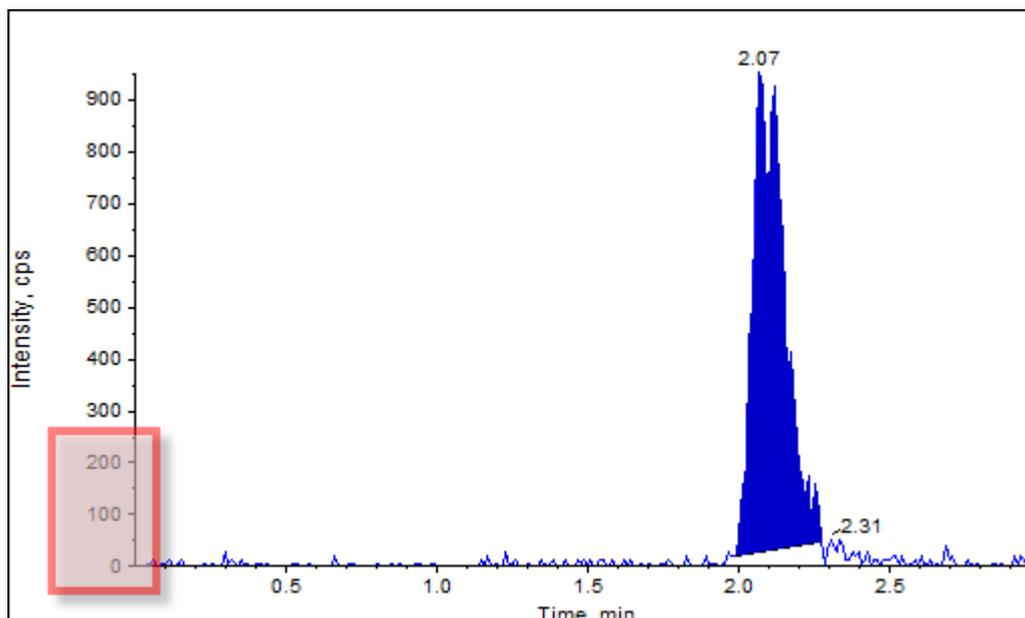
1. Dans le volet **Peak Review**, cliquez sur **Manual Integration Mode**.

Illustration 14-11 : Fenêtre d'examen des pics : mode d'intégration manuelle



2. Effectuez un zoom avant sur les 10% bas du pic.

**Illustration 14-12 : Fenêtre d'Examen des Pics : Effectuez un zoom avant sur un Pic**



3. Déplacez la croix à l'endroit où vous souhaitez définir le début du pic, puis faites glisser la croix jusqu'à l'endroit où vous souhaitez définir la fin du pic.  
Le logiciel ombrage la zone délimitée à la base et côtés du pic. Les paramètres du pic sont gris car ils ne sont plus applicables, parce que le pic a été dessiné manuellement.
4. Effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Pour que ce changement soit définitif, cliquez sur **Accept**.
  - Pour annuler les modifications, décochez la case **Manual Integration**.

---

**Conseil !** Si un pic a été préalablement sélectionné comme valide, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le pic puis cliquez sur **Revert to Method**.

---

## Courbes d'étalonnage

Utilisez les courbes d'étalonnage pour trouver la concentration calculée d'échantillons, y compris les échantillons de contrôle qualité (CQ). Les échantillons CQ sont ajoutés à un groupe pour estimer la qualité des données et la précision des standards dans le lot. Les échantillons CQ sont connus comme concentrations d'analyte, mais sont traités comme ne l'étant pas pour comparer les concentrations mesurées aux valeurs réelles.

La courbe d'étalonnage est générée par le tracé de la concentration de la standard par rapport à la superficie ou la hauteur. Si vous utilisez un standard interne, le ratio de la concentration standard, ou des standard internes, est représenté par rapport au ratio de la hauteur ou de la surface de pic standard à la hauteur ou la surface du pic des standard internes. La superficie ou la hauteur d'un échantillon est ensuite appliquée à cette courbe pour trouver la concentration de l'échantillon, comme indiqué dans le tableau de

résultats. Une équation de régression est générée par cette courbe d'étalonnage en fonction de la régression qui a été spécifiée. L'équation de régression est utilisée pour calculer la concentration des échantillons inconnus.

La régression linéaire est recommandée pour la courbe d'étalonnage.

Nous recommandons à l'utilisateur de ne pas signaler les valeurs quantitatives situées en dehors de la plage de concentrations couverte par la courbe d'étalonnage.

Pour des informations sur l'utilisation du menu contextuel Calibration Curve, consultez la section : [Courbe d'étalonnage](#).

### Affichage des courbes d'étalonnage

L'utilisateur peut afficher la courbe d'étalonnage et modifier les options de régression dans un tableau de résultats. Si deux ou plusieurs tableaux de résultats sont ouverts, les courbes d'étalonnage peuvent alors être superposées. Pour superposer des courbes, la méthode utilisée pour créer les tableaux doit être la même.

Tracez la courbe d'étalonnage pour voir la courbe de régression. La colonne **Calculated Concentration** dans le Results Table reflète les modifications résultant de l'ajustement de la courbe aux points de l'étalon.

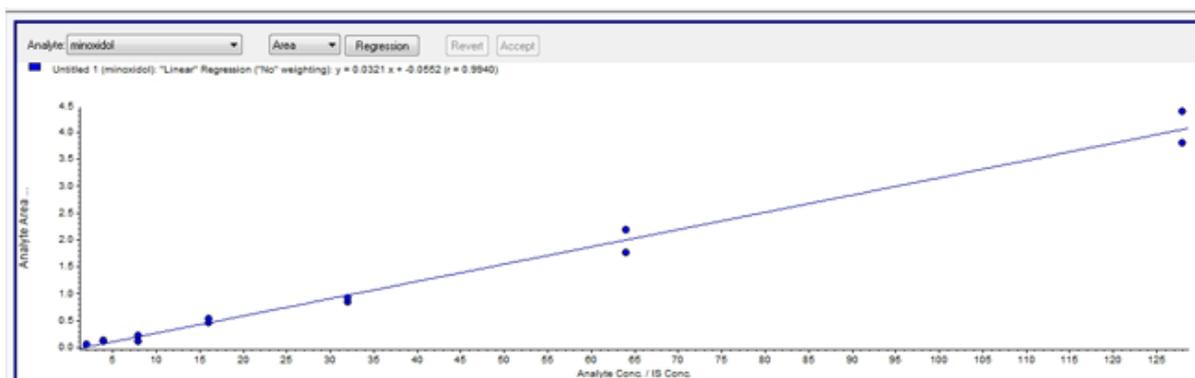
---

**Remarque** : cette option est disponible uniquement lorsque le tableau de résultats est ouvert.

---

1. Ouvrez un tableau de résultats.
2. Cliquez sur **Tools > Calibration > Pane..**  
Le volet de la courbe d'étalonnage apparaît.

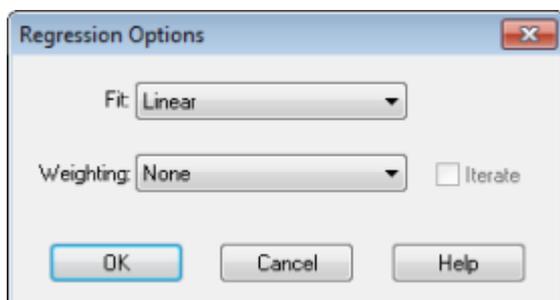
#### Illustration 14-13 : Courbe d'étalonnage



3. S'il y a plus d'un analyte, alors suivez les étapes suivantes pour afficher la courbe d'étalonnage pour un autre analyte :
  - a. Sélectionnez un analyte dans la liste **Analyte**.
  - b. Si demandé, sélectionnez dans la liste suivante **Area** ou **Height**.

4. Pour modifier les options de régression pour la courbe d'étalonnage, procédez de la manière suivante :
  - a. Cliquez sur **Regression**.

**Illustration 14-14 : Boîte de dialogue Regression Options**



- b. Sélectionnez **Linear** dans la liste **Fit**.
  - c. Sélectionnez **1 / x** dans la liste **Weighting**.
  - d. Cliquez sur **OK**.

La courbe d'étalonnage s'ouvre. L'utilisateur peut consulter les pics individuellement sur la courbe ou exclure des points de la courbe pour obtenir une meilleure courbe.

5. Si nécessaire, répétez ces étapes pour créer une courbe plus appropriée.
6. Pour enregistrer les modifications, cliquez sur **Accept**.

## Courbes d'étalonnage superposées

---

**Conseil !** Pour examiner la courbe d'un tableau plus attentivement, cliquez avec le bouton droit de la souris sur la courbe, puis cliquez sur **Active Plot**. Sélectionnez la courbe à tracer par dessus.

---

1. Avec deux ou plusieurs Results Tables ouverts, affichez une courbe d'étalonnage pour chacun des tableaux.
2. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur la courbe d'étalonnage et cliquez sur **Overlay**.

**Illustration 14-15 : Boîte de dialogue Overlay (Superposer)**



3. Sélectionner les tableaux à superposer avec la courbe actuelle.
4. Cliquez sur **OK**.  
Le logiciel trace les courbes de tous les tableaux sélectionnés sur le même graphique.

## Statistique d'échantillon

Utilisez la fenêtre Statistics pour afficher les statistiques des échantillons, généralement pour les standards et les contrôles qualité (CQ). Les données de chaque lot disponible dans le tableau de résultats s'ouvrent sous la forme d'un tableau dans la grille et une ligne de données est affichée pour chaque concentration standard ou CQ.

Nous recommandons d'inclure les statistiques des lots dans les rapports pour s'assurer de la validité des résultats.

### Afficher les statistiques pour les standards et les CQ

Lorsque plusieurs Results Table sont ouverts, des informations statistiques sur les standards et les CQ de lots supplémentaires peuvent s'afficher dans la fenêtre Statistics. Ceci facilite la comparaison des résultats entre les lots et l'identification des tendances dans les standards ou les CQ.

1. Ouvrez un tableau de résultats.
2. Cliquez sur **Tools > Statistics..**
3. Sélectionnez **Concentration** dans la liste **Statistics Metric**.
4. Sélectionnez un analyte dans le champ **Analyte Name**.
5. Sélectionnez **Standard** dans le champ **Sample Type**.  
Les résultats s'affichent.
6. Examinez les colonnes **%CV** et **Accuracy**.  
La colonne **%CV** indique le coefficient de variance entre les mesures d'un paramètre unique, par exemple la surface. La colonne **Accuracy** indique la proximité entre le point du tracé et la valeur interpolée.

7. Si nécessaire, cochez la case **Display Low/High values** , puis examinez les valeurs **High**, **Low** et **Mean** pour chaque ligne de la grille. Chaque ligne représente les standards qui ont le même niveau de concentration.
8. Sélectionnez un autre analyte.  
Les résultats s'affichent par analyte.
9. Pour vérifier les variations de contrôle qualité (CQ) à un même niveau de concentration, sélectionnez **QC** dans le champ **Sample Type**.

## Tracés métriques

Un tracé métrique illustre graphiquement les données contenues dans une colonne du tableau de résultats ayant été tracées par rapport à l'axe des abscisses ou des ordonnées ; ou les données contenues dans deux colonnes tracées l'une par rapport à l'autre. Cette section décrit comment générer et utiliser les tracés métriques.

L'utilisateur trouvera également quelques tracés métriques prédéfinis :

- Int\_Std\_Response (pour trouver l'échantillon posant problème)
- Analyte\_Area versus Height (pour vérifier le comportement de la chromatographie)
- Profil PK (concentration par rapport au temps, à exécuter après la requête d'échantillon)

## Générer des tracés métriques

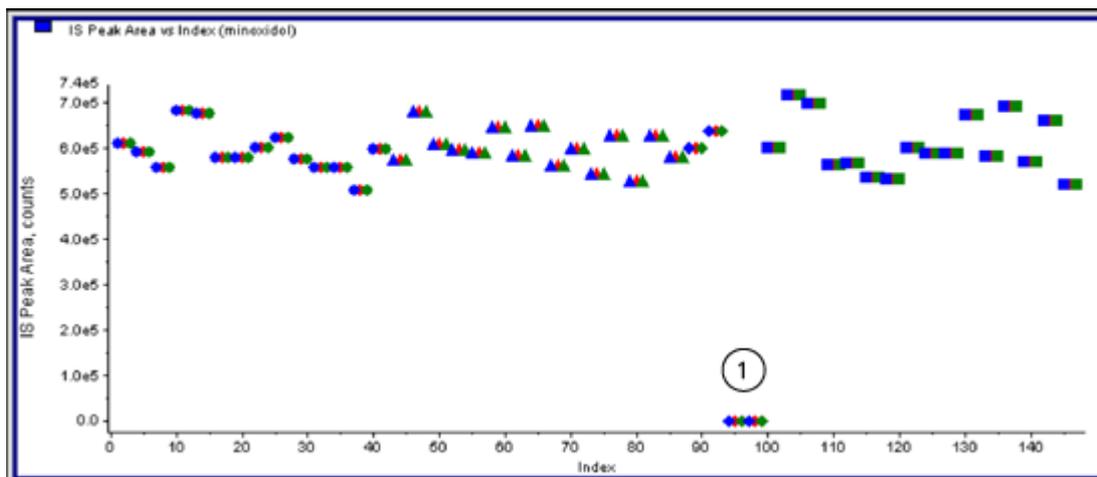
Utiliser des tracés métriques pour tracer une colonne donnée telle que Analyte Peak Area, Accuracy ou Calculated Concentration à partir du tableau de résultats. Deux champs du tableau de résultats peuvent également être tracés l'un par rapport à l'autre, puis le tracé utilisé pour rechercher les points situés en dehors de la plage normale. Les tracés métriques sont souvent utilisés avec les requêtes. Pour plus d'informations sur les requêtes, consultez le document *Aide*.

Pour générer des tracés métriques, procédez comme suit :

- Utiliser le bouton Plot pour effectuer le tracé d'une ou plusieurs colonnes du tableau de résultats actuel sans enregistrer les critères de traçage.
- Créez un tracé spécifique du tableau pour enregistrer les critères avec le tableau actuel.
- Créez un tracé global pour enregistrer les critères de traçage à utiliser avec de prochains tableaux de résultats.

Les CQ, inconnus, témoins, double témoins ou solvants n'apparaissent pas sur la courbe d'étalonnage, mais il est possible de générer des tracés numériques les concernant.

Illustration 14-16 : Exemple de tracé métrique



Élément	Description
1	Doubles témoins

## Générer un tracé métrique temporaire

- Effectuer l'une des opérations suivantes avec un tableau de résultats ouvert :
  - Pour tracer les données sur l'axe des ordonnées, l'axe des abscisses servant de référence, cliquer sur l'en-tête de la colonne des données à tracer.
  - Pour effectuer un tracé des données à partir de la première colonne sélectionnée sur l'axe des abscisses et la deuxième colonne sélectionnée sur l'axe des ordonnées, sélectionner deux colonnes en appuyant sur la touche **Ctrl**, puis en cliquant sur les en-têtes des colonnes.
- Au-dessus du tableau de résultats, cliquer sur l'icône **Metric Plot by Selection**. Consulter le [Tableau D-9](#).  
Le tracé métrique s'ouvre.
- Cliquer avec le bouton droit de la souris dans le volet du tracé, puis cliquer sur **Data Legend** pour afficher une explication des couleurs utilisées dans le tracé.
- Cliquer avec le bouton droit de la souris sur le volet du tracé, puis cliquer sur **Point Legend** pour afficher une explication des symboles utilisés sur le tracé.

## Générer un tracé métrique et enregistrer les critères de traçage

- Ouvrir le tableau de résultats concerné.
- Cliquer avec le bouton droit de la souris dans le tableau de résultats, puis cliquer sur **Metric Plot > New**.

Illustration 14-17 : Boîte de dialogue Metric Plot

Metric Plot

Name:

Save/Execute

Cancel

Execute

Help

X Axis

Group: Index

Column:

Y Axis

Group: Index

Column:

Show

Regression: None

Weighting: None

None

Percent Deviation

Standard Deviation

Percent: 50

Multiplier: 2

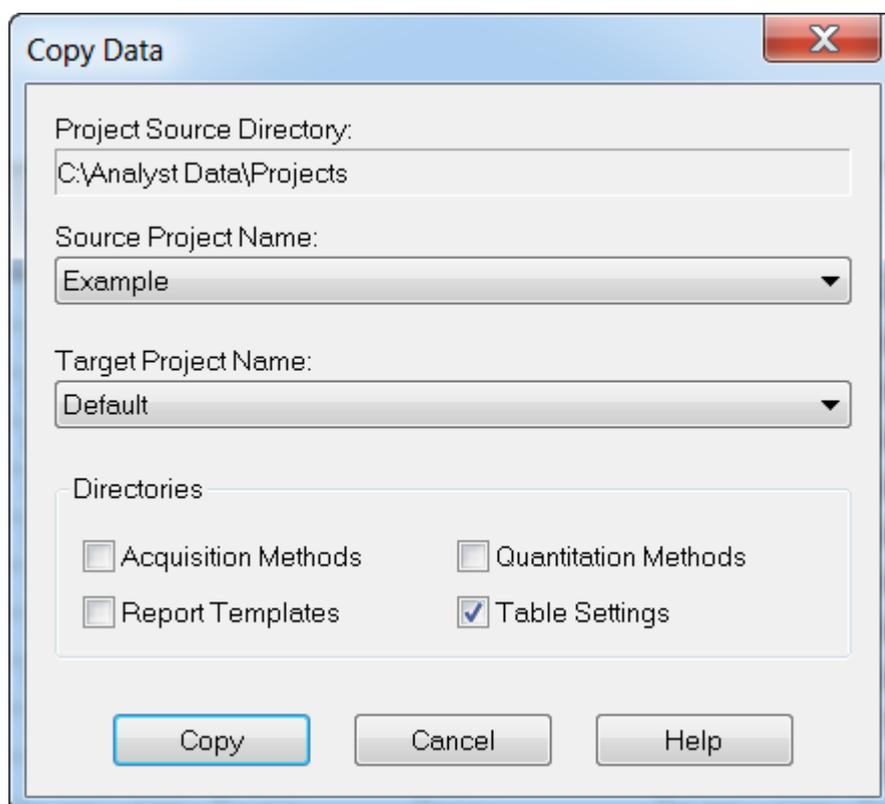
3. Dans le champ **Name**, saisir le nom du nouveau critère de traçage.
4. Dans la section **X-Axis**, dans la liste **Group**, sélectionner **Index** et laisser la liste **Column** vide pour tracer un champ sur l'axe des ordonnées en utilisant l'axe des abscisses comme référence.
5. Pour tracer deux colonnes l'une par rapport à l'autre, dans la section **Y-axis**, dans la liste **Group**, sélectionner **Internal Standard**, puis, dans la liste **Column**, sélectionner **IS Peak Area**.
6. Si nécessaire, dans la liste **Regression**, sélectionner le type de régression à utiliser, puis sélectionner les paramètres de régression appropriés.
7. Pour générer le tracé et enregistrer les critères de traçage, cliquer sur **Save/Execute**. Le tracé métrique s'ouvre. Pour plus d'informations, se reporter à la [Illustration 14-16](#).
8. Cliquer avec le bouton droit de la souris dans le volet du tracé, puis cliquer sur **Data Legend** pour afficher une explication des couleurs utilisées dans le tracé.

9. Cliquer avec le bouton droit de la souris sur le volet du tracé, puis cliquer sur **Point Legend** pour afficher une explication des symboles utilisés sur le tracé.  
Ce groupe de critères est désormais disponible pour les tracés futurs de ce tableau de résultats dans le menu contextuel du tableau de résultats. Les utilisateurs peuvent également modifier les critères de traçage.
10. Pour afficher l'échantillon posant problème, essayer de tracer la concentration de l'inconnu par rapport au temps ou de tracer la surface de standard interne par rapport à la référence.

### Enregistrer les critères de traçage par défaut pour les prochains tableaux de résultats

1. Cliquer avec le bouton droit de la souris dans le tableau de résultats, puis cliquer sur **Table Settings > Export To New Table Settings**.  
Ceci permet d'exporter les paramètres du tableau à partir du fichier rdb afin qu'ils puissent être réutilisés dans d'autres analyses de quantification au sein du projet.
2. Pour exporter les paramètres du tableau vers un autre projet, cliquer sur **Tools > Project > Copy Data**.

Illustration 14-18 : Boîte de dialogue Copy Data



Le logiciel Reporter étend les fonctionnalités d'établissement de rapports disponibles dans le logiciel Analyst MD.

---

**ATTENTION : Risque de résultats erronés. Pour éviter les résultats incorrects :**

- **Validez toutes les requêtes Reporter avant de les utiliser.**
- **Validez les résultats en cas d'utilisation d'un modèle Reporter modifié ou d'un modèle contenant une requête.**
- **Vérifiez que la validation est complète sur les modèles Reporter.**

---

Le logiciel Reporter peut être utilisé pour créer des rapports personnalisés avec Microsoft Word et Excel (2013, 2016, ou Office 365). Le logiciel Reporter comporte les caractéristiques suivantes :

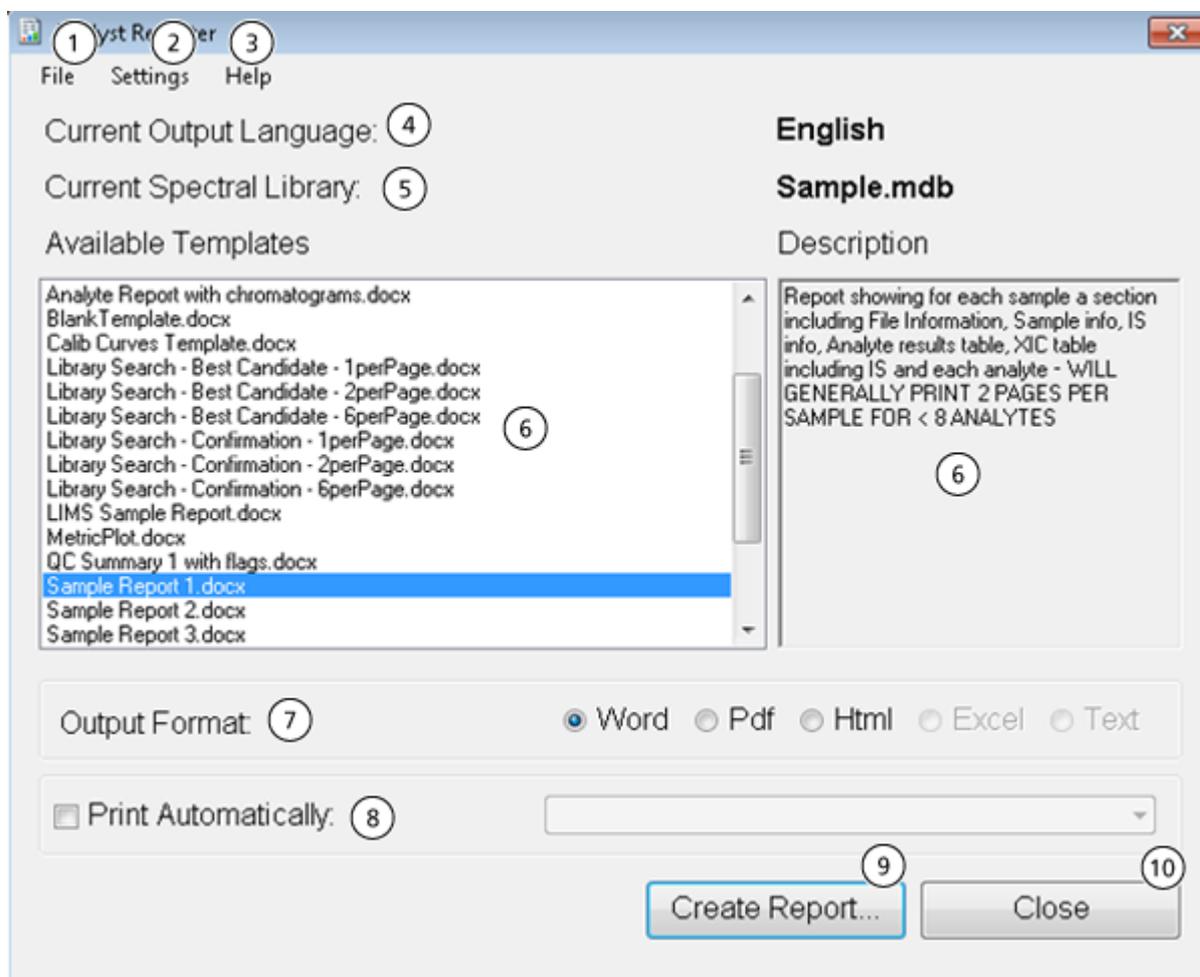
- Offre divers rapports qui utilisent les données disponibles dans un tableau de résultats, dans les informations sur le fichier et dans les fenêtres d'examen de pics quantitatifs.
- Offre divers rapports présentant les résultats de la recherche dans la bibliothèque MS/MS. L'utilisateur peut configurer le logiciel Reporter pour effectuer des recherches dans n'importe quelle bibliothèque spectrale MS/MS utilisant le format du logiciel Analyst MD (mdb).
- Utilise des modèles Microsoft Word pour fournir les informations sur le format nécessaires lors de la génération de rapports. Ces modèles peuvent être créés ou modifiés pour fournir des formats de rapports personnalisés. Vous trouverez des informations sur la création ou la modification de l'éditeur de modèle de rapport dans le document : *Aide*.
- Contient un modèle de départ vierge qui peut être utilisé dans l'environnement d'édition du logiciel Reporter pour concevoir des modèles de rapport répondant à la plupart des exigences en termes de rapport.
- Imprime automatiquement, exporte au format Adobe Portable Document Format (PDF) et transmet les résultats par e-mail.
- Génère des rapports à partir d'applications logicielles personnalisées qui utilisent les bibliothèques de programmation disponibles du logiciel Analyst MD.

Le logiciel Reporter peut être utilisé comme suit :

- Dans le logiciel Analyst MD pour générer manuellement un rapport ou un ensemble de rapports.
- Par des applications qui n'utilisent pas le logiciel Analyst MD.

# Interface utilisateur du logiciel Analyst Reporter

Illustration 15-1 : Analyst Reporter



Élément	Option	Description
1	File > Exit	Quitte le programme et libère toutes les ressources.

Élément	Option	Description
2	<b>Settings &gt; Select Output Language</b>	Définit le dictionnaire de langue à utiliser pour remplacer les balises de langue dans un modèle de rapport. Les modèles qui contiennent des balises de langue peuvent être utilisés pour générer des rapports dans n'importe quelle langue. Les balises de langue sont remplacées par un texte d'une balise correspondante dans le fichier de dictionnaire de la langue sélectionnée. Ces fichiers de dictionnaire se trouvent dans le dossier : C:\Program Files\AB SCIEX\AnalystReporter\Resources\Languages pour les systèmes d'exploitation Windows 7, 32 bits ou C:\Program Files (x86)\AB SCIEX\AnalystReporter\Resources\Languages pour les systèmes d'exploitation Windows 7, 64 bits ou Windows 10, 64 bits.
2	<b>Settings &gt; Select Library</b>	Accédez à une bibliothèque spectrale. Cette bibliothèque sera utilisée afin de comparer et d'évaluer les données MS/MS à partir des tableaux de résultats qui contiennent des données provenant de types de balayage MS/MS déclenchés par la méthode d'acquisition dépendante de l'information (IDA).
2	<b>Settings &gt; Select Template Folder</b>	Définit le dossier à partir duquel les modèles disponibles seront lus. Pour revenir au dossier du modèle par défaut, sélectionnez l'option <b>Default</b> .
3	<b>Help &gt; About</b>	Affiche les informations relatives à la version du logiciel Reporter actuellement installée.
4	<b>Current Output Language</b>	Affiche le dictionnaire de langue actuellement sélectionné utilisé pour remplacer les balises de langue à l'intérieur d'un modèle de rapport. Pour sélectionner un dictionnaire de langue, cliquez sur <b>Settings &gt; Select Output Language</b> .
5	<b>Current Spectral Library</b>	Affiche la bibliothèque spectrale actuellement sélectionnée. Pour sélectionner une bibliothèque spectrale, cliquez sur <b>Settings &gt; Select Library</b> .
6	<b>Available Templates et Description</b>	Affiche une liste des modèles de rapport disponibles. Sélectionnez un modèle pour en afficher la description. Pour modifier le dossier depuis lequel les modèles disponibles sont lus, sélectionner <b>Settings &gt; Select Template Folder &gt; Browse..</b>

Élément	Option	Description
7	<b>Output Format</b>	<p>Affiche les formats de sortie qui sont pris en charge par le logiciel Reporter. Seuls les formats compatibles avec le modèle de rapport sélectionné peuvent être sélectionnés.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Word</b> : un document Microsoft Word (docx) est généré. Ce document peut être consulté dans Microsoft Word 2010 et les versions ultérieures.</li> <li>• <b>PDF</b> : un rapport est créé directement au format PDF.</li> <li>• <b>HTML</b> : Microsoft Word est utilisé pour générer un fichier HTML. Les fichiers image associés sont enregistrés dans un dossier portant le même nom que le fichier HTML.</li> <li>• <b>Excel</b> : un fichier au format texte brut (csv) est généré. Les modèles de rapport qui contiennent des valeurs séparées par des virgules peuvent être ouverts dans Microsoft Excel, où chaque valeur sera affichée dans une cellule différente. Seuls les modèles marqués comme étant compatibles au texte peuvent être utilisés pour ce format de sortie.</li> <li>• <b>Text</b>: un document texte brut (.txt) est généré. Seuls les modèles marqués comme étant compatibles avec le texte peuvent être utilisés pour ce format de sortie.</li> </ul>
8	<b>Print Automatically</b>	Le rapport une fois créé est imprimé sur l'imprimante sélectionnée. Sélectionner n'importe quelle imprimante disponible.
9	<b>Create Report</b>	Crée le rapport au format de sortie sélectionné à l'aide du modèle de rapport sélectionné.
10	<b>Close</b>	Quitte le programme et libère toutes les ressources.

## Générer des rapports

Le logiciel Reporter extrait les données numériques du tableau des résultats ainsi que les informations de l'échantillon et du graphique du fichier .wiff.

1. Ouvrez un **Results Table**.
2. Sous **Companion Software**, double-cliquez sur **Reporter**.  
La **Analyst Reporter** apparaît.
3. Dans le champ **Available Templates**, sélectionnez le modèle de rapport correspondant.
4. Cliquez sur le format de sortie **PDF**.

L'option Word est présélectionnée et le rapport est automatiquement enregistré dans le dossier de résultats du projet en cours. Si le format de sortie PDF n'est pas sélectionné, le rapport est créé et ouvert dans Word ou imprimé tel que sélectionné, mais n'est pas enregistré. Ceci vous permet de modifier un rapport dans Word avant de sauvegarder le rapport original.

5. Facultatif pour un processus de recherche (qualitative) dans la bibliothèque lorsqu'un tableau de résultats contenant des données provenant de types de balayage MS/MS déclenchés par la méthode d'acquisition de l'information (IDA) est utilisé : cliquez sur **Settings > Select Library**, accédez à la base de données de la bibliothèque MS/MS applicable (au format mdb), puis cliquez sur **Open**.
6. (Facultatif) Cochez la case **Print Automatically** pour imprimer automatiquement les rapports sur une imprimante présélectionnée.  
L'imprimante par défaut définie dans Windows est utilisée à moins qu'une autre imprimante ne soit sélectionnée. Le logiciel Reporter conserve l'imprimante sélectionnée entre les opérations. Si l'imprimante est configurée sur un pilote d'imprimante PDF, le logiciel Reporter génère alors automatiquement des versions de fichier PDF des rapports créés.
7. Cliquez sur **Create Report**.  
L'écran affiche divers indicateurs de progression lorsque le logiciel ouvre le modèle et le remplit avec les données du tableau des résultats. La génération de certains rapports peut prendre quelques secondes, tandis que d'autres peuvent prendre plus de temps. Un ensemble volumineux de données contenant de nombreuses transitions MRM ou un nombre important de graphiques peut produire des rapports de plusieurs centaines de pages dont la génération peut prendre plusieurs heures.

# Informations relatives au service et à la maintenance — Spectromètre de masse

# 16

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 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.

- Composés testés

## Informations relatives au service et à la maintenance — Spectromètre de masse

- 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 plus d'informations sur la fréquence de réglage, consultez la section: [Étalonnage des ions et solutions](#).

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 16-1 : Tâches de maintenance du spectromètre de masse**

Composant	Fréquence	Tâche	Pour plus d'informations
Système	Quotidienne	Recherchez des fuites éventuelles	Voir la section : <a href="#">Précautions en matière de produits chimiques</a> .
Plaque rideau	Quotidienne	Nettoyer	Voir la section : <a href="#">Nettoyer la plaque rideau</a> .
Huile de pompe primaire	Une fois par semaine	Inspectez le niveau	Voir la section : <a href="#">Vérifiez le niveau d'huile de la pompe primaire</a> . 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 2 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 : <a href="#">Nettoyer l'avant de la plaque à orifice</a> .
Plaque à trou (avant et arrière)	Selon les besoins	Nettoyer	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.
Filtre à air du spectromètre de masse	Selon les besoins	Remplacer	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.
IonDrive QJet Guide d'ions et lentille IQ0	Selon les besoins	Nettoyer	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.

**Tableau 16-1 : Tâches de maintenance du spectromètre de masse (suite)**

<b>Composant</b>	<b>Fréquence</b>	<b>Tâche</b>	<b>Pour plus d'informations</b>
Jeu de barreaux Q0 et lentilles IQ1	Selon les besoins	Nettoyer	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.
Surfaces de l'instrumentation	Selon les besoins	Nettoyer	Voir la section : <a href="#">Nettoyage des surfaces</a> .
Conteneur de trop-plein	Selon les besoins	Vider	Voir la section : <a href="#">Vider le conteneur de trop-plein</a> .
Élément chauffant de l'interface	Selon les besoins	Remplacer	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.

**Tableau 16-2 : Tâches de maintenance de la source d'ions**

<b>Composant</b>	<b>Fréquence</b>	<b>Tâche</b>	<b>Pour plus d'informations</b>
Sondes TurbolonSpray et APCI	Selon les besoins	Examiner et remplacer	Consultez les sections : <a href="#">Retirer la sonde</a> et <a href="#">Installer la sonde</a> .
Électrodes pour sondes TurbolonSpray et APCI	Selon les besoins	Examiner et remplacer	Voir la section : <a href="#">Remplacer l'électrode</a> .
Aiguille de décharge corona	Selon les besoins	Remplacer	Voir la section : <a href="#">Remplacer l'aiguille de décharge par effet corona</a> .
Élément chauffant Turbo	Selon les besoins	Remplacer	Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.
Tube d'échantillonnage	Selon les besoins	Remplacer	Voir la section: <a href="#">Brancher la conduite de la source d'ions</a> .

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 IonDrive 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.

## Vider le conteneur de trop-plein



**AVERTISSEMENT !** Risque de surface chaude. Laisser la source d'ions IonDrive Turbo V refroidir pendant au moins 90 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.

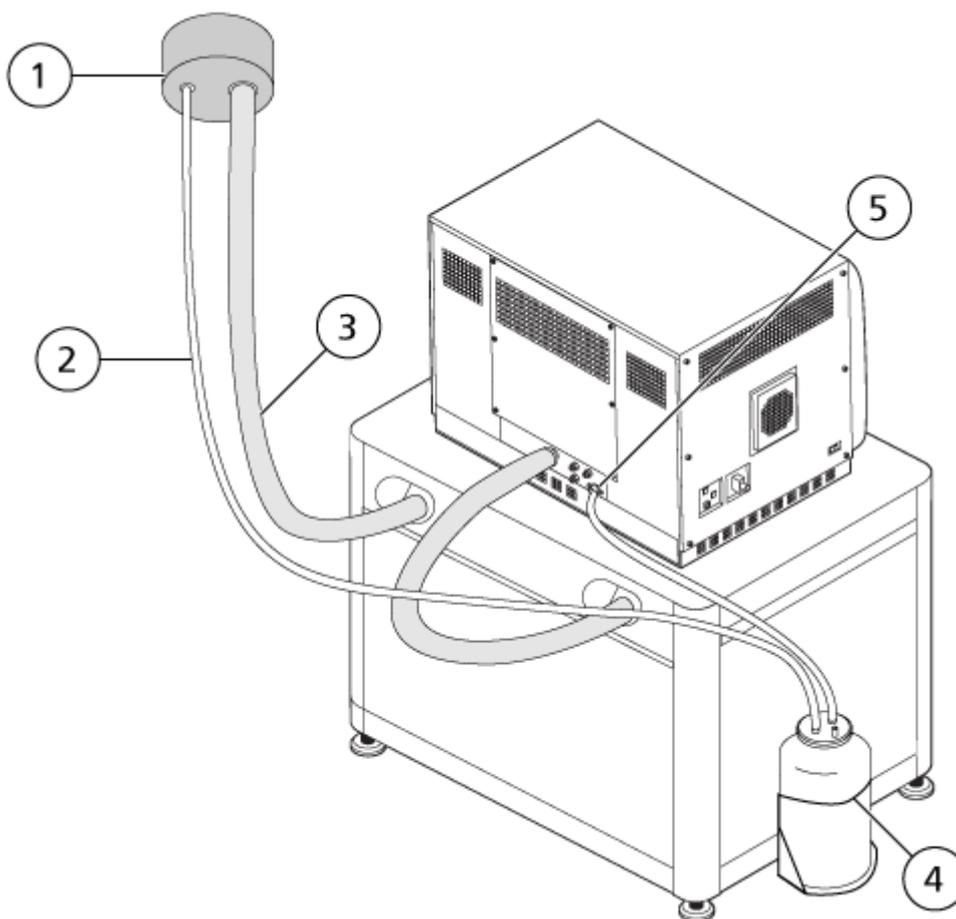
---

**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.
2. Desserrez les colliers qui relient les tuyaux au capuchon du conteneur de trop-plein.

**Illustration 16-1 : 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)

Élément	Description
4	Conteneur de trop-plein Assurez-vous que le conteneur est bien fixé afin d'empêcher les déversements.
5	Connexion d'évacuation de la source au spectromètre de masse : di de 1,6 cm (0,625 po)

---

**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. Enlevez le conteneur de trop-plein 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.

## 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 IonDrive Turbo V refroidir pendant au moins 90 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. Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.

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

**Remarque** : suivez l'ensemble des réglementations locales applicables. Pour 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 (non fourni)

**Remarque** : Pour les informations de commande et les demandes de renseignements concernant les consommables, consultez le *Guide des pièces et des équipements des gammes d'instruments MD*. Contactez un technicien de service local ou visitez le site [sciex.com](http://sciex.com) pour plus d'informations.

---

- 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) Écouillons en polyester (poly)

## Outils et fournitures disponibles auprès du fabricant

---

**Remarque :** Pour les numéros de référence, consulter le document *Guide des pièces et des équipements*.

---

- Écouvillon en polyester, thermolié. Disponible également dans le kit de nettoyage.
- Lingette non pelucheuse (11 cm x 21 cm). Disponible également dans le kit de nettoyage.
- 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 IonDrive QJet conique, la brosse de nettoyage Q0 et de l'Alconox.

## Bonnes pratiques de nettoyage

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de surface chaude. Laisser la source d'ions IonDrive Turbo V refroidir pendant au moins 90 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 16-2 : 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



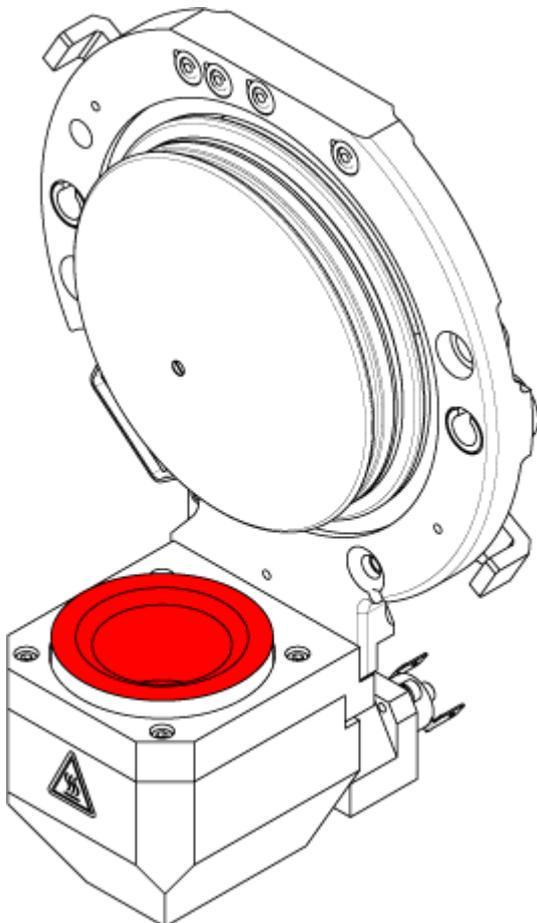
---

**AVERTISSEMENT !** Risque de surface chaude. Laisser la source d'ions IonDrive Turbo V refroidir pendant au moins 90 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 16-3 : Drain de la source sur l'interface avec le vide



1. Désactivez le profil de matériel. Consultez le document : *Guide de l'utilisateur du logiciel*.
2. Retirez la source d'ions. Consultez la section : [Retirer la source d'ions](#).  
Lorsque la source d'ions n'est pas utilisée, rangez-la pour la protéger contre les détériorations et maintenir son bon fonctionnement.

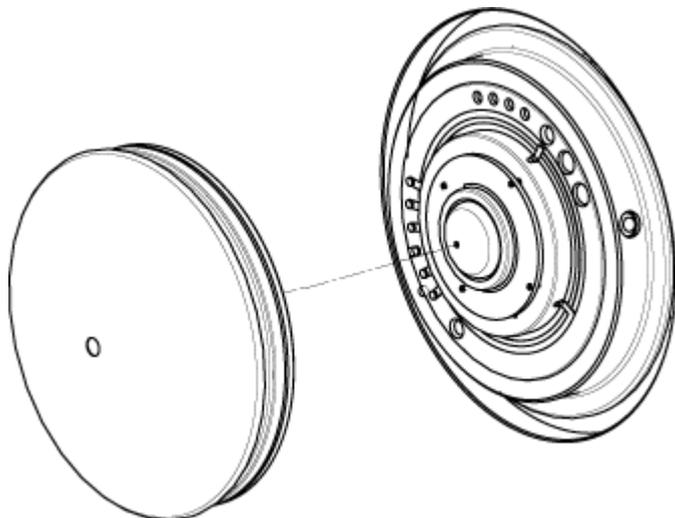
## Nettoyer la plaque rideau

**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 16-4 : 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. Voir [Installer la source d'ions sur le spectromètre de masse](#).  
Serrez la source d'ions en tournant ses loquets de verrouillage vers le bas en position de verrouillage.
3. Si le spectromètre de masse est connecté au système LC, restaurez toutes les connexions au système LC.
4. Activez le profil de matériel. Consultez le document : *Guide de l'utilisateur du logiciel*.

## 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, retirez 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  $-30\text{ °C}$  et  $+60\text{ °C}$  ( $-22\text{ °F}$  à  $140\text{ °F}$ ) 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.

---

## 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.

## Entretien et maintenance — Source d'ions

Les avertissements suivants s'appliquent à toutes les procédures de maintenance de cette section.



**AVERTISSEMENT !** Risque de surface chaude. Laisser la source d'ions IonDrive Turbo V refroidir pendant au moins 90 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 d'incendie et de toxicité chimique. Garder les liquides inflammables à distance des flammes et des étincelles et les utiliser uniquement avec des hottes aspirantes ou dans des enceintes de sécurité.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de toxicité chimique. Portez un équipement de protection individuelle comprenant une blouse de laboratoire, des gants et des lunettes de sécurité pour éviter toute exposition de la peau ou des yeux.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de rayonnement ionisant, risque biologique ou risque de toxicité chimique. En cas de déversement de produit chimique, consultez les fiches de données de sécurité du produit pour connaître des instructions spécifiques. S'assurer que le système est en veille avant de nettoyer un déversement près de la source d'ions. Utiliser un équipement de protection personnelle approprié et des tissus absorbants pour contenir le déversement et le mettre au rebut conformément aux réglementations locales.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de choc électrique. Éviter tout contact avec les hautes tensions appliquées à la source d'ions durant le fonctionnement. Mettre le système en veille avant de régler le tube d'échantillonnage ou tout autre équipement à proximité de 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.

---

**ATTENTION :** Risque d'endommagement du système. Ne pas soulever ou transporter la source d'ions d'une seule main. La source d'ions est conçue pour être soulevée ou transportée à deux mains, une de chaque côté du système.

---

Cette section décrit les procédures de maintenance générale de la source d'ions. Pour déterminer la fréquence de nettoyage ou de maintenance de la source d'ions, considérez ce qui suit :

- Composés testés
- Propreté des échantillons et techniques de préparation d'échantillon
- Temps d'inactivité d'une sonde contenant un échantillon
- Temps d'exécution global du système

Ces facteurs peuvent entraîner des changements dans le rendement de la source d'ions, qui est l'indicateur de la nécessité d'un entretien.

Vérifiez que la source d'ions installée est hermétiquement raccordée au spectromètre de masse et qu'il n'y a aucune trace de fuites de gaz. Inspectez régulièrement la source d'ions et ses raccords à la recherche de fuites. Nettoyer les composants de la source d'ions régulièrement pour préserver l'état de bon fonctionnement de celle-ci.

---

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

---

### Matériel nécessaire

- Clé plate 1/4"
- Tournevis plat
- Méthanol de qualité LC-MS
- Eau désionisée qualité LC-MS
- Lunettes de sécurité
- Masque de respiration et filtre
- Gants sans poudre, nitrile ou néoprène recommandé
- Blouse de laboratoire

## IonDrive Turbo V

Les surfaces de la source d'ions chauffent pendant le fonctionnement. Les figures suivantes illustrent les surfaces qui refroidissent (bleu et gris) et celles qui restent chaudes pendant une période de temps prolongée (rouge). Ne pas toucher les surfaces indiquées en rouge lors de l'utilisation ou du retrait de la source d'ions.

**Illustration 16-5 : Hot Surfaces: ESI Mode (Red=Hot, Gray=Warm, Blue=Handle with Care)**

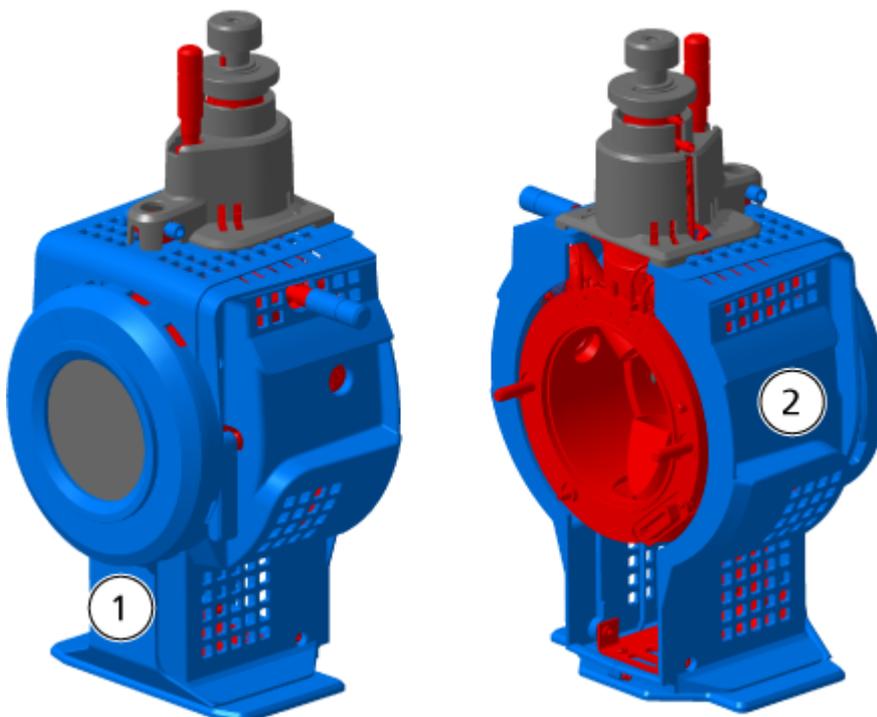
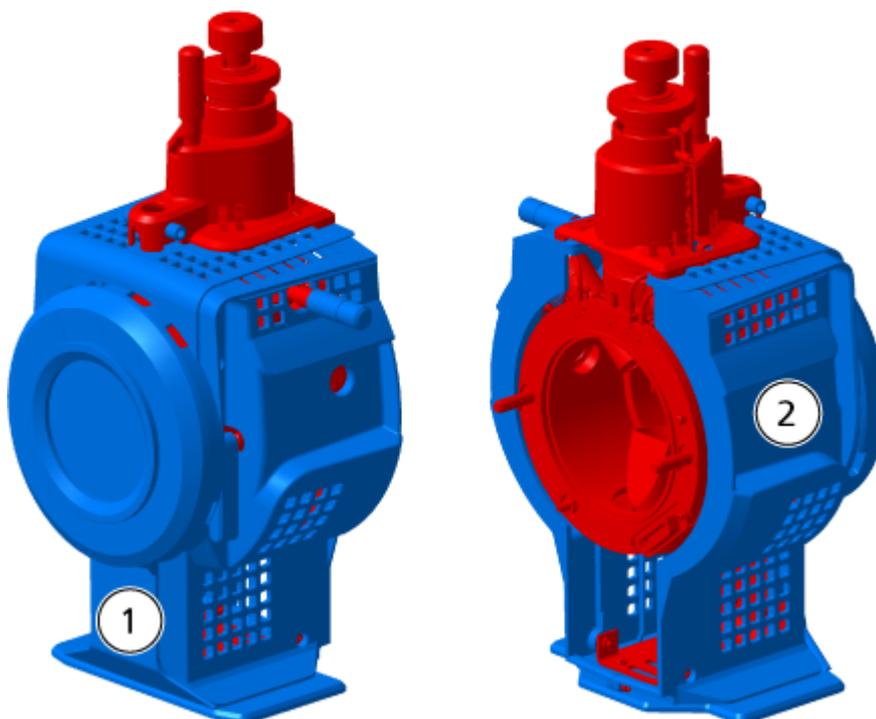


Illustration 16-6 : Hot Surfaces: APCI Mode (Red=Hot, Blue=Handle with Care)



Numéro	Description
1	Avant
2	Précédent

## Retirer la source d'ions

**Remarque** : L'azote continue à circuler à un débit de 5,3 l/min lorsque le spectromètre de masse est hors tension ou que la source d'ions est retirée du système. Pour limiter la consommation d'azote gazeux et maintenir le spectromètre de masse propre lorsqu'il n'est pas utilisé, laissez la source d'ions dessus et le système sous tension.

La source d'ions peut être retirée rapidement et facilement sans outils. Toujours retirer la source d'ions du spectromètre de masse avant d'effectuer tout entretien sur celle-ci ou d'échanger les sondes.

1. Arrêter toutes les analyses électroniques en cours.
2. Mettez le flux d'échantillon hors tension.
3. Réglez la température de la source d'ions sur 0 dans le champ **Temperature**, si les chauffages sont utilisés.
4. Laissez la source d'ions refroidir pendant au moins 90 minutes.
5. Débranchez le tube d'échantillonnage de la prise de mise à la terre.

6. Tourner vers le haut les deux loquets de la source d'ions à la position de 12 heures afin de dégager cette dernière.
7. Éloignez délicatement la source d'ions de l'interface de dépression.

---

**Remarque :** Veillez à ne pas perdre les joints toriques installés sur l'interface avec le vide.

---

8. Placer la source d'ions dans un endroit propre et sûr.

## Nettoyer les surfaces



---

**AVERTISSEMENT !** Risque d'électrocution. Vérifier que la source d'ions est complètement débranchée du spectromètre de masse avant de continuer.

---

Nettoyez les surfaces de la source d'ions après un déversement ou si elles sont sales.

Procédures prérequis
<ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Retirer la source d'ions</a></li></ul>



Nettoyez les surfaces de la source d'ions avec un chiffon doux humide.

## Nettoyer la sonde

Rincez régulièrement la source d'ions, quel que soit le type de composé échantillonné. Pour ce faire, configurer une méthode dans le logiciel contrôleur, en particulier pour réaliser une opération de rinçage.

1. Passez à une phase mobile composée à 1:1 d'eau et d'acétonitrile ou à 1:1 d'eau et de méthanol.
2. Réglez la position de la sonde de manière à ce qu'elle soit aussi éloignée que possible de l'orifice.
3. Dans le logiciel contrôleur, procéder comme suit :
  - a. Créez une méthode MS.
  - b. Réglez la température de la source d'ions entre 500 et 600 °C.
  - c. Réglez le gaz 1 et le gaz 2 de la source d'ions sur au moins 40.
  - d. Réglez le débit du gaz de l'interface Curtain Gas sur la valeur la plus élevée.
4. Attendre que le point de consigne de la température soit atteint.
5. Assurez-vous que la sonde et le tube d'échantillonnage sont bien rincés.

## Retirer la sonde



**AVERTISSEMENT !** Risque d'électrocution. Retirez la source d'ions du spectromètre de masse avant de commencer cette procédure. Respecter toutes les pratiques de sécurité des travaux d'électricité.

---

**ATTENTION :** Risque d'endommagement du système. Ne pas laisser la pointe de l'électrode saillante ou l'aiguille de décharge par effet corona toucher une partie quelconque du boîtier de la source d'ions afin d'éviter d'endommager la sonde.

---

### Procédures préalables

- [Retirer la source d'ions.](#)

La sonde peut être retirée rapidement et facilement sans outils. Retirez systématiquement la source d'ions du spectromètre de masse avant de changer les sondes ou d'effectuer des travaux d'entretien sur la sonde.

1. Desserrez l'écrou du tube d'échantillonnage, puis débranchez le tube d'échantillonnage de la sonde.
2. Desserrez l'anneau de retenue qui fixe la sonde au boîtier de la source d'ions.
3. Tirez délicatement la sonde vers le haut de la tour.
4. Mettez la sonde sur une surface propre.

## Remplacer l'électrode



**AVERTISSEMENT !** Risque d'électrocution. Retirez la source d'ions du spectromètre de masse avant de commencer cette procédure. Respecter toutes les pratiques de sécurité des travaux d'électricité.

---



**AVERTISSEMENT !** Risque de perforation. Être vigilant lors de la manipulation de l'électrode. La pointe de l'électrode est extrêmement acérée.

---

### Procédures préalables

- [Retirer la source d'ions.](#)
- [Retirer la sonde.](#)

La sonde contient une électrode. Remplacez l'électrode en cas de diminution des performances.

---

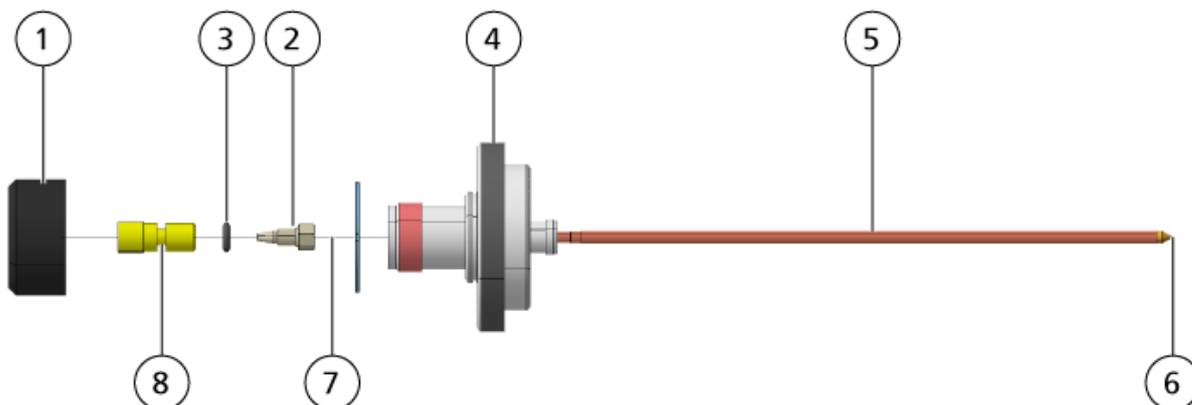
**Remarque :** Après avoir remplacé l'électrode, évaluez l'effet du changement sur les performances du système.

---

Cette procédure s'applique aux deux sondes.

1. Retirez l'écrou de réglage de l'électrode, puis retirez l'électrode.
2. Tout en maintenant la sonde pointe vers le bas de sorte que le ressort reste à l'intérieur de la sonde, installer un raccord de tubulure d'échantillonnage dans le raccord PEEK et le serrer complètement à la main.

**Illustration 16-7 : Sonde, vue agrandie**



Élément	Description
1	Écrou d'ajustement de l'électrode
2	Écrou de retenue de 1/4"
3	Ressort
4	Anneau de retenue
5	Tube nébuliseur
6	Pointe de l'électrode
7	Tube de l'électrode
8	Raccord PEEK

3. Retirez le raccord PEEK et le tube électrode qui y est fixé de la sonde.
4. Retirez le raccord de tube d'échantillonnage du raccord PEEK.
5. Utilisez la clé plate de 1/4" pour retirer l'écrou de retenue fixant le tube électrode au raccord PEEK.
6. Retirez le tube électrode de l'écrou de retenue.
7. Insérez le nouveau tube électrode dans l'écrou de retenue, puis dans le raccord PEEK. Veillez à ce que le tube électrode soit inséré le plus loin possible dans le raccord PEEK. S'il y a un vide entre le tube électrode et son logement dans le raccord, un volume inerte risque de se produire.

8. Resserer l'écrou de retenue.  
Ne croisez pas le filetage et ne resserrez pas trop l'écrou de retenue sous peine d'entraîner une fuite du tube.
9. Assurez-vous que le ressort est toujours à l'intérieur de la sonde, puis serrez l'écrou de retenue de l'électrode.
10. Alignez le tube électrode sur l'orifice étroit du tube nébuliseur, puis insérez le raccord PEEK et le tube électrode fixé dans la sonde. Veillez à ne pas tordre le tube électrode.
11. Installez, puis serrez l'écrou de réglage de l'électrode.
12. Installez la sonde. Voir la section : [Installer la sonde](#).
13. Installez la source d'ions sur le spectromètre de masse. Consulter la section : [Installation de la source d'ions](#).
14. Raccordez le tube d'échantillonnage. Voir la section : [Brancher la conduite de la source d'ions](#).
15. Réglez l'extension de la pointe de l'électrode. Consulter la section : [Optimiser la position de la sonde TurbolonSpray](#) ou [Optimiser la position de la sonde APCI](#).

## Remplacer l'aiguille de décharge par effet corona



**AVERTISSEMENT ! Risque d'électrocution. Retirez la source d'ions du spectromètre de masse avant de commencer cette procédure. Respecter toutes les pratiques de sécurité des travaux d'électricité.**

---



**AVERTISSEMENT ! Risque de perforation. Manipuler l'aiguille avec précaution. La pointe de l'aiguille est extrêmement acérée.**

---

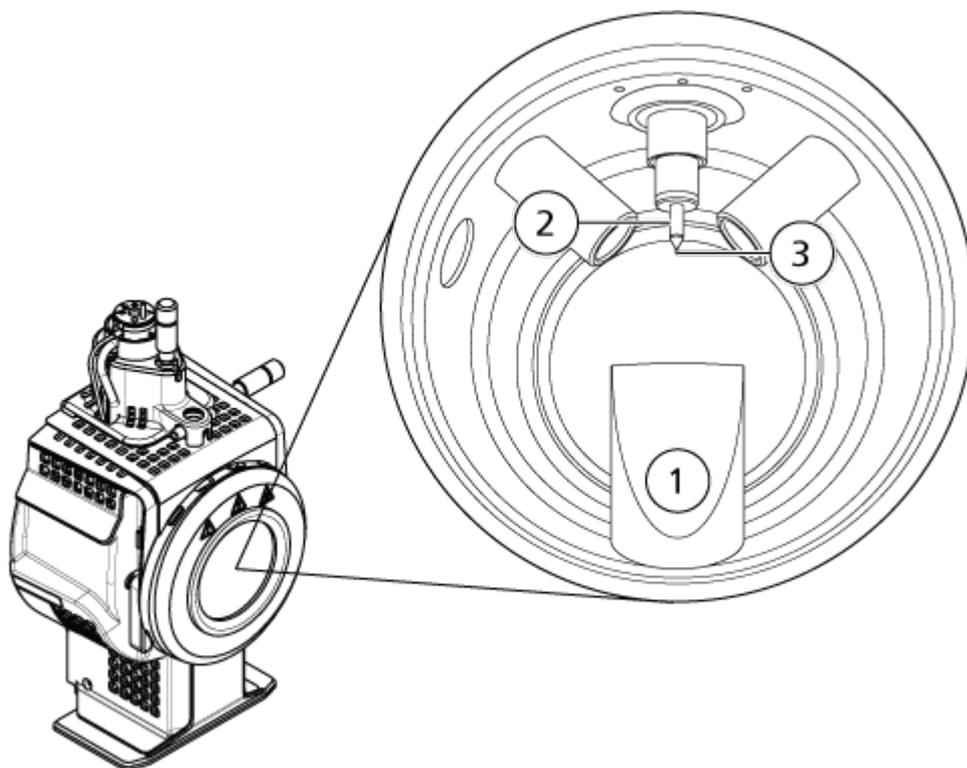
Procédures préalables
<ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="#">Retirer la source d'ions</a>.</li><li>• <a href="#">Retirer la sonde</a>.</li></ul>



Si la pointe de l'aiguille de décharge corona est corrodée, elle pourrait ne pas pouvoir être retirée à la main. Dans ce cas, couper la pointe de l'aiguille pour la retirer, puis remplacer l'intégralité de l'aiguille de décharge corona.

1. Faites pivoter la source d'ions de telle sorte que le côté ouvert soit accessible.

Illustration 16-8 : Aiguille de décharge corona



Élément	Description
1	Cheminée d'évacuation
2	Manchon en céramique
3	Pointe d'aiguille de décharge corona

2. Tout en tenant la vis de réglage de l'aiguille de décharge par effet corona entre le pouce et l'index d'une main et l'aiguille de décharge par effet corona avec l'autre main, tournez la pointe de l'aiguille de décharge par effet corona dans le sens contraire des aiguilles d'une montre afin de desserrer puis de retirer délicatement la pointe. Voir la section : [Composants de la source d'ions](#).
3. Tirez doucement l'aiguille de décharge par effet corona vers le bas à travers la cheminée d'évacuation pour l'enlever.
4. Insérez la nouvelle aiguille par l'échappement dans le manchon en céramique aussi loin que possible.
5. Tout en tenant une pointe neuve entre le pouce et l'index d'une main et la vis de réglage de l'aiguille de décharge corona de l'autre main, tournez la pointe de l'aiguille de décharge corona dans le sens des aiguilles d'une montre afin de mettre en place la pointe.

6. Insérez la sonde, puis installez la source d'ions sur le spectromètre de masse. Consulter la section : [Installation de la source d'ions](#).

## Remplacer le tube d'échantillonnage



**AVERTISSEMENT ! Risque d'électrocution. Retirez la source d'ions du spectromètre de masse avant de commencer cette procédure. Respecter toutes les pratiques de sécurité des travaux d'électricité.**

---

### Procédures préalables

- Arrêtez le flux de l'échantillon et vérifiez que tout gaz résiduel a été éliminé à travers le système d'évacuation de la source.
- Retirez la source d'ions. Consultez la section [Retirer la source d'ions](#).

Utiliser la procédure suivante pour remplacer le tube d'échantillonnage s'il bloque.

1. Débranchez le tube d'échantillonnage de la sonde et du raccord de mise à la terre.
2. Remplacez la tubulure d'échantillonnage par une tubulure de longueur appropriée découpée à l'aide d'un coupe-tube adapté. Voir la section : [Brancher la conduite de la source d'ions](#).
3. Installez la source d'ions. Consulter la section : [Installation de la source d'ions](#).
4. Commencez à assurer le versement de l'échantillon.

# Dépannage du spectromètre de masse

# 17

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 17-1 : Problèmes du système**

Symptôme	Cause possible	Mesure corrective
Le guide d'ions IonDrive 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.	<ol style="list-style-type: none"><li>1. le niveau d'huile est trop bas.</li><li>2. Présence d'une fuite.</li><li>3. La plaque à orifice installée n'est pas la bonne.</li></ol>	<ol style="list-style-type: none"><li>1. 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 : <a href="#">Vérifiez le niveau d'huile de la pompe primaire.</a></li><li>2. Recherchez les fuites et réparez-les.</li><li>3. Installez la plaque à trou qui convient.</li></ol>
Une panne du système s'est produite en raison de la température trop élevée du module QPS Exciter.	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Le filtre à air du spectromètre de masse est obstrué.</li><li>2. La température ambiante est trop élevée.</li></ol>	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Contactez le responsable de maintenance qualifié ou un technicien de service local.</li><li>2. Pour connaître les spécifications de température ambiante, consultez le <i>Guide de planification du site</i> du système.</li></ol>

## Dépannage du spectromètre de masse

---

Tableau 17-1 : 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.	<ol style="list-style-type: none"><li>1. La sonde n'est pas installée.</li><li>2. La sonde n'est pas connectée correctement.</li></ol>	<p>Confirmez la panne dans le panneau Status de la page de détails de l'appareil.</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Installez la sonde. Voir la section : <a href="#">Installer la sonde</a>.</li><li>2. Retirez puis installez la sonde. Serrez fermement l'anneau de retenue. Consultez les sections : <a href="#">Retirer la sonde</a> et <a href="#">Installer la sonde</a>.</li></ol>
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. Voir la section : <a href="#">Remplacer l'électrode</a> .
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. Consultez les document : <i>Guide de l'utilisateur du logiciel</i> ou <i>Aide</i> .

Tableau 17-1 : Problèmes du système (suite)

Symptôme	Cause possible	Mesure corrective
Les performances du spectromètre de masse se dégradent.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Les conditions de la source d'ions ne sont pas optimisées.</li> <li>2. L'échantillon n'a pas été préparé correctement ou s'est dégradé.</li> <li>3. Les raccords d'introduction de l'échantillon fuient.</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Optimisez les conditions de la source d'ions. Voir la section : <a href="#">Optimiser la position de la sonde TurbolonSpray</a> ou <a href="#">Optimiser la position de la sonde APCI</a>.</li> <li>2. Vérifiez que l'échantillon a été préparé correctement.</li> <li>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.</li> <li>4. Installez et optimisez une autre source d'ions.</li> <li>5. Si le problème persiste, contactez un technicien.</li> </ol>
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. Voir la section : <a href="#">Régler la position de l'aiguille de décharge corona</a> .

Tableau 17-2 : Problèmes de sensibilité

Cause possible	Mesure corrective
<b>La sensibilité a diminué</b>	
Les paramètres de la source d'ions ne sont pas optimisés.	Optimisez les paramètres de la source d'ions.
Le spectromètre de masse n'est pas optimisé.	Utilisez l'assistant Instrument Optimization pour optimiser le spectromètre de masse.

## Dépannage du spectromètre de masse

Tableau 17-2 : Problèmes de sensibilité (suite)

Cause possible	Mesure corrective
La plaque rideau est sale.	Nettoyez la plaque rideau. Consultez la section <a href="#">Nettoyer la plaque rideau</a> .
La plaque à orifice est sale.	Voir la section : <a href="#">Nettoyer l'avant de la plaque à orifice</a> Contactez le responsable de maintenance qualifié ou le technicien de service local.
Le guide d'ions IonDrive QJet ou la lentille IQ0 est sale.	Nettoyez le guide d'ions IonDrive 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.
La ligne de la seringue ou de l'échantillon a une fuite.	Inspectez la seringue ou la ligne d'échantillon pour identifier d'éventuelles fuites, puis réparez les fuites le cas échéant. Assurez-vous que les raccords sont de type et de taille adéquats.
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. Voir la section : <a href="#">Remplacer l'électrode</a> .
<b>Le signal est absent ou instable</b>	

Tableau 17-2 : Problèmes de sensibilité (suite)

Cause possible	Mesure corrective
La tubulure est bloquée.	Remplacez le tube d'échantillonnage. Voir la section : <a href="#">Brancher la conduite de la source d'ions</a> .

Tableau 17-3 : Problèmes de bruit de fond

Cause possible	Mesure corrective
La <b>Temperature (TEM)</b> , la tension IonSpray (IS) ou le débit de gaz chauffant (GS2) est trop élevé.	Optimisez les paramètres de la source d'ions. Voir la section : <a href="#">Optimisation de la sonde TurbolonSpray</a> ou <a href="#">Optimisation de la sonde APCI</a> .
La ligne de la seringue ou de l'échantillon est sale.	Nettoyez ou remplacez la ligne de la seringue ou de l'échantillon.
La plaque rideau est sale.	Nettoyez la plaque rideau. Voir la section : <a href="#">Nettoyer la plaque rideau</a> .
La plaque à orifice est sale.	Nettoyez l'avant de la plaque à orifice. Voir la section : <a href="#">Nettoyer l'avant de la plaque à orifice</a> .
Le guide d'ions IonDrive 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 17-3 : Problèmes de bruit de fond (suite)**

Cause possible	Mesure corrective
La source d'ions est contaminée.	<p>Nettoyez ou remplacez les composants de la source d'ions, puis conditionnez la source d'ions et l'avant du système :</p> <ol style="list-style-type: none"><li data-bbox="842 495 1406 600">1. Déplacez la sonde à la position la plus éloignée de l'orifice, verticalement et horizontalement.</li><li data-bbox="842 622 1385 728">2. (Logiciel Analyst MD) Assurez-vous que le chauffage de l'interface est en marche.</li><li data-bbox="842 750 1417 855">3. Infusez ou injectez un mélange à 50:50 de méthanol et d'eau avec un débit de pompe de 1 ml/min.</li><li data-bbox="842 878 1396 1012">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.</li><li data-bbox="842 1034 1369 1102">5. Réglez le débit du gaz de l'interface Curtain Gas sur 45 ou 50.</li><li data-bbox="842 1124 1412 1229">6. Faites fonctionner pendant au moins 2 heures ou de préférence toute la nuit pour un résultat optimal.</li></ol>

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](http://sciex.com) pour obtenir les coordonnées.

# Paramètres des systèmes de la série Citrine

## Paramètres du système

# A

Les systèmes Citrine utilisent la source d'ions IonDrive Turbo V

La première valeur indiquée sous chaque type d'analyse est la valeur prédéfinie. La plage de valeurs représente la plage accessible pour chaque paramètre.

**Tableau A-1 : Paramètres des systèmes de la série Citrine Paramètres du système**

Identifiant du paramètre	Code d'accès	Polarité positive			Polarité négative		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20	20	20	20	20	20
		20 à 55	20 à 55	20 à 55	20 à 55	20 à 55	20 à 55
CAD <sup>3 4</sup>	CAD	0	6	Med.	0	6	Med.
		S/O	S/O	Low, Medium, High	S/O	S/O	Low, Medium, High

<sup>3</sup> Citrine QTRAP MS/MS, Faible masse (LM)

<sup>4</sup> Citrine QTRAP MS/MS, Masse élevée (HM)

## Paramètres des systèmes de la série Citrine Paramètres du système

Tableau A-1 : Paramètres des systèmes de la série Citrine Paramètres du système (suite)

Identifiant du paramètre	Code d'accès	Polarité positive			Polarité négative		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CAD <sup>5 6</sup>	CAD	0 S/O	6 S/O	9 0 à 12	0 S/O	6 S/O	9 0 à 12
IS	IS	5 500 V 0 à 5500	5 500 V 0 à 5500	5 500 V 0 à 5500	-4 500 -4500 à 0	-4 500 -4500 à 0	-4 500 -4500 à 0
NC <sup>7</sup>	NC	3 0 à 5	3 0 à 5	3 0 à 5	-3 -5 à 0	-3 -5 à 0	-3 -5 à 0
TEM	TEM	0 0 à 750					
OU (DP = OR)	DP	100 0 à 300	100 0 à 300	100 0 à 300	-100 -300 à 0	-100 -300 à 0	-100 -300 à 0
Q0 (EP = -Q0)	EP	10 2 à 15	10 2 à 15	10 2 à 15	-10 -15 à -2	-10 -15 à -2	-10 -15 à -2

<sup>5</sup> Citrine Triple Quad MS/MS, Faible masse (LM)

<sup>6</sup> Citrine Triple Quad MS/MS, Masse élevée (HM)

<sup>7</sup> Sonde APCI

**Tableau A-1 : Paramètres des systèmes de la série Citrine Paramètres du système (suite)**

Identifiant du paramètre	Code d'accès	Polarité positive			Polarité négative		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
IQ1 (IQ1 = Q0 + ajustement)	IQ1	Q0 + (- 0,5) -0,1 à -2	Q0 + (- 0,5) -0,1 à -2	Q0 + (- 0,5) -0,1 à -2	Q0 + 0.5 0,1 à 2	Q0 + 0.5 0,1 à 2	Q0 + 0.5 0,1 à 2
ST (ST = Q0 + ajustement)	ST	Q0 + (-8) - 12 à - 5	Q0 + (-8) - 12 à - 5	Q0 + (-8) -12 à -5	Q0 + 8 5 à 12	Q0 + 8 5 à 12	Q0 + 8 5 à 12
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0 à 3	S/O	1 0 à 3	-1 -3 à -0	S/O	-1 -3 à -0
IQ2 (IQ2 = Q0 + ajustement)	IQ2	Q0 + (- 10) -30 à -8	Q0 + (- 10) -30 à -8	Q0 + (- 10) -30 à -8	Q0 + 10 8 à 30	Q0 + 10 8 à 30	Q0 + 10 8 à 30
RO2	RO2	-20 S/O	-20 S/O	S/O	20 S/O	20 S/O	S/O
RO2 (CE = Q0 - RO2)	CE	S/O	S/O	30 5 à 180	S/O	S/O	-30 -180 à -5

## Paramètres des systèmes de la série Citrine Paramètres du système

Tableau A-1 : Paramètres des systèmes de la série Citrine Paramètres du système (suite)

Identifiant du paramètre	Code d'accès	Polarité positive			Polarité négative		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
ST3 (ST3 = RO2 + ajustement)	ST3	RO2 – 10 –30 à –5	S/O	S/O	RO2 + (10) 5 à 30	S/O	S/O
ST3 (CXP = RO2 – ST3)	CXP	S/O	15 0 à 55	15 0 à 55	S/O	–15 –55 à 0	–15 –55 à 0
RO3	RO3	–50 S/O	S/O	S/O	50 S/O	S/O	S/O
RO3 (IE3 = RO2 – RO3)	IE3	S/O	1 0 à 5	1 0 à 5	S/O	–1 –5 à 0	–1 –5 à 0
CEM	CEM	1 700 0 à 3 300	1 700 0 à 3 300	1 700 0 à 3 300	1 700 0 à 3 300	1 700 0 à 3 300	1 700 0 à 3 300
GS1	GS1	20 0 à 90	20 0 à 90	20 0 à 90	20 0 à 90	20 0 à 90	20 0 à 90

**Paramètres des systèmes de la série Citrine Paramètres du système**

**Tableau A-1 : Paramètres des systèmes de la série Citrine Paramètres du système (suite)**

Identifiant du paramètre	Code d'accès	Polarité positive			Polarité négative		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
GS2	GS2	0 0 à 90	0 0 à 90	0 0 à 90	0 0 à 90	0 0 à 90	0 0 à 90

**Tableau A-2 : Paramètres des systèmes Citrine pour les types de balayage LIT uniquement**

Identifiant du paramètre	Code d'accès	Polarité positive	Polarité négative
CAD	CAD	Élevé Low, Medium, High	Élevé Low, Medium, High
AF2 <sup>8</sup>	AF2	0,1 0 à 1	0,1 0 à 1
AF3	AF3	En fonction du rapport masse-vitesse 0 à 10	En fonction du rapport masse-vitesse 0 à 10
EXB	EXB	En fonction du rapport masse-vitesse -165 à 0	En fonction du rapport masse-vitesse 0 à 165

<sup>8</sup> MS/MS/MS uniquement

## Paramètres des systèmes de la série Citrine Paramètres du système

---

Tableau A-2 : Paramètres des systèmes Citrine pour les types de balayage LIT uniquement (suite)

Identifiant du paramètre	Code d'accès	Polarité positive	Polarité négative
CES	CES	0 0 à 50	0 0 à 50
ROS (Q0 - ROS)	CE	10 5 à 180	-10 -5 à -180

# Paramètres de la source et tensions

# B

## TurbolonSpray

Le tableau suivant indique les conditions de fonctionnement recommandées pour la sonde TurbolonSpray à trois débits différents. Pour chaque débit, le débit du gaz de l'interface Curtain Gas doit être aussi élevé que possible. La composition du solvant utilisé pour l'optimisation était un mélange à 1:1 d'eau et d'acétonitrile. Ces conditions représentent un point de départ pour l'optimisation de la sonde. Par un processus itératif, optimiser les paramètres en utilisant l'analyse des injections de flux de manière à obtenir le meilleur signal ou rapport signal/bruit possible pour le composé d'intérêt.

**Tableau B-1 : Optimisation des paramètres pour la sonde TurbolonSpray**

Paramètres	Valeurs typiques			Plage de fonctionnement
	Bas	Medium	Élevé	
Débit LC	5 à 50 µl/min	200 µl/min	1 000 µl/min	5 à 3 000 µl/min
Gaz 1 de la source d'ions (gaz nébuliseur)	20 à 40 psi	40 à 60 psi	40 à 60 psi	0 à 90 psi
Gaz 2 de la source d'ions (gaz chauffant)	0 psi	50 psi	50 psi	0 à 90 psi
<b>IonSpray Voltage</b>	5 500 V	5 500 V	5 500 V	5 500 V
Alimentation en gaz de l'interface Curtain Gas	30 psi	30 psi	30 psi	20 à 50 psi
Température de la source d'ions <sup>9</sup>	Température ambiante à 200 °C	200 à 650 °C	400 à 750 °C	Jusqu'à 750 °C
Potentiel de défragmentation (DP) <sup>10</sup>	Positif : 70 V Négatif : -70 V	Positif : 70 V Négatif : -70 V	Positif : 100 V Négatif : -100 V	Positif : 0 à V Négatif : V à 0 V

<sup>9</sup> Les valeurs de température optimales dépendent de la composition du composé et de la phase mobile. Une teneur aqueuse plus élevée nécessite une température plus élevée. La valeur zéro (0) signifie qu'aucune température n'est appliquée.

<sup>10</sup> Les valeurs DP dépendent du composé.

## Paramètres de la source et tensions

Tableau B-1 : Optimisation des paramètres pour la sonde TurbolonSpray (suite)

Paramètres	Valeurs typiques			Plage de fonctionnement
	Bas	Medium	Élevé	
Réglage du micromètre horizontal de la sonde	3 à 8	3 à 8	3 à 8	0 à 10

## Paramètres de la sonde APCI

Tableau B-2 : Paramètre d'optimisation de la sonde APCI

Paramètre	Valeur typique	Plage de fonctionnement
Débit LC	1 000 µl/min	200 à 3 000 µl/min
Gaz 1 de la source d'ions (gaz nébuliseur)	30 psi	0 à 90 psi
Alimentation en gaz de l'interface Curtain Gas	30 psi	20 à 50 psi
Température de la source d'ions <sup>11</sup>	400 °C	100 à 750 °C
Courant de nébulisation	Positif : 3 µA Négatif : -3 µA	Positif : de 0 mA à 5 µA Négatif : de -5 mA à 0 µA
Potentiel de défragmentation (DP)	Positif : 60 V Négatif : -60 V	Positif : 0 à 300 V Négatif : -300 V à 0 V
Réglage du micromètre vertical de la sonde	5	Échelle : de 0 à 13

## Position de la sonde

La position de la sonde peut affecter la sensibilité de l'analyse. Pour plus d'informations sur l'optimisation de la position de la sonde, consultez la section : [Optimisation de la source d'ions](#).

## Composition du solvant

La concentration standard de formate d'ammonium ou d'acétate d'ammonium est de 2 mmol/l à 10 mmol/l pour les ions positifs et de 2 mmol/l à 50 mmol/l pour les ions négatifs. La concentration des acides organiques est comprise entre 0,1 et 0,5 % par volume pour la sonde TurbolonSpray et entre 0,1 et 1,0 % par volume pour la sonde APCI.

<sup>11</sup> Les valeurs de température dépendent du composé.

Solvants habituellement utilisés :

- Acétonitrile
- Méthanol
- Propanol
- Eau

Modificateurs couramment utilisés :

- Acide acétique
- Acide formique
- Formiate d'ammonium
- Acétate d'ammonium

Les modificateurs suivants ne sont pas fréquemment utilisés, car ils compliquent le spectre avec leurs mélanges d'ions et leurs combinaisons en grappes. Ils peuvent également atténuer la puissance du signal ionique des composés cibles.

- Triéthylamine (TEA)
- Phosphate de sodium
- Acide trifluoroacétique (TFA)
- Sulfate dodécyl de sodium

# Étalonnage des ions et solutions

# C

**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.**

**Tableau C-1 : Fréquence de réglage**

Étalonnage			Optimisation de la résolution	
Type de balayage	Fréquence	Manuel/Automatique	Fréquence	Manuel/Automatique
Q1 et Q3	3 à 6 mois	Les deux	3 à 6 mois	Les deux
LIT	Toutes les 2 semaines, comme requis	Les deux	3 à 6 mois	Automatique uniquement

**Tableau C-2 : Suggested Tuning Solutions for the Citrine Series of Instruments**

Système	Q1 et Q3		LIT
	Positive	Négative	Positive et négative
Citrine Triple Quad MS/MS system	POS PPG, 2e-7 M	NEG PPG, 3e-5 M	S/O
Citrine QTRAP MS/MS system	POS PPG, 2e-7 M	NEG PPG, 3e-5 M	ES Tuning Solution (1:100 dilution)

Tableau C-3 : Q1 and Q3 Scans for Citrine Series Systems

Polarité	Masses							
<b>Faible masse</b>								
Positive	59,05	175,133	500,38	616,464	906,673	1080,799	1196,883	S/O
Négative	44,998	585,385	933,636	1223,845	S/O	S/O	S/O	S/O
<b>Masse élevée</b>								
Positive	59,05	175,133	500,38	616,464	906,673	1 254,925	1 545,134	1 952,427
Négative	44,998	411,259	585,385	933,636	1223,845	1572,097	1863,306	1 979,389

Tableau C-4 : LIT Scans for the Citrine QTRAP LC-MS/MS System

Polarité	Masses				
<b>Faible masse</b>					
Positive	118,087	322,049	622,029	922,01	S/O
Négative	112,985	431,982	601,978	S/O	S/O
<b>Masse élevée</b>					
Positive	118,087	322,049	622,029	922,01	1 521,972
Négative	112,987	431,982	601,978	1 033,988	1 633,949

# Icônes de la barre d'outils

# D

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

**Tableau D-1 : Icônes de la barre d'outils**

Icône	Nom	Description
	<b>New Subproject</b>	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.
	<b>Copy Subproject</b>	Copie un dossier de 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 D-2 : Icônes de l'éditeur des méthodes d'acquisition**

Icône	Nom	Description
	<b>Mass Spec</b>	Affiche l'onglet MS dans l'éditeur Acquisition Method (Méthode d'acquisition).
	<b>Period</b>	Ajoute une expérience, un <b>IDA Criteria Level</b> ou supprime la période.
	<b>Autosampler</b>	Ouvre l'onglet Autosampler Properties (Propriétés de l'auto-échantillonneur).
	<b>Syringe Pump</b>	Ouvre l'onglet Syringe Pump Properties (Propriétés de la pompe à seringue).
	<b>Column Oven</b>	Ouvre l'onglet Column Oven Properties (Propriétés du four à colonne)
	<b>Valve</b>	Ouvre l'onglet Valve Properties (Propriétés de la soupape).
	<b>DAD</b>	Ouvre le DAD Method Editor (Éditeur de la méthode DAD). Consulter la section : <a href="#">Afficher données DAD</a> .
	<b>ADC</b>	Ouvre l'onglet ADC Properties (propriétés de ADC). Consulter la section : <a href="#">Show ADC Data</a> .

Tableau D-3 : Icônes du mode Acquisition

Icône	Nom	Description
	<b>View Queue</b>	Affiche la file d'attente d'échantillons.
	<b>Instrument Queue</b>	Affiche un poste d'instrument à distance.
	<b>Status for Remote Instrument</b>	Affiche le statut d'un instrument à distance.
	<b>Start Sample</b>	Démarre l'échantillon dans la file d'attente.
	<b>Stop Sample</b>	Arrête l'échantillon dans la file d'attente.
	<b>Abort Sample</b>	Interrompt une acquisition d'échantillons au milieu de son traitement.
	<b>Stop Queue</b>	Arrête la file d'attente avant d'avoir terminé le traitement de tous les échantillons.
	<b>Equilibrate</b>	Sélectionne la méthode utilisée pour équilibrer les appareils. Cette méthode doit être la même que la méthode qui a été utilisée avec le premier échantillon dans la file d'attente.
	<b>Standby</b>	Place l'instrument à l'état <b>Standby</b> .
	<b>Ready</b>	Place l'instrument à l'état <b>Ready</b> .
	<b>Reserve Instrument for Tuning</b>	Réserve le spectromètre de masse pour le réglage et l'étalonnage.
	<b>IDA Method Wizard</b>	Démarre l' <b>IDA Method Wizard</b> .

Icône	Nom	Description
	<b>Calibrate from spectrum</b>	Ouvre la boîte de dialogue Mass Calibration Option et utilise le spectre actif pour étalonner le spectromètre de masse.
	<b>Manual Tune</b>	Ouvre le Manual Tune Editor (éditeur de réglage manuel).

## Icônes de la barre d'outils

Icône	Nom	Description
	<b>Compound Optimization</b>	Optimise un composé en utilisant la perfusion par FIA.
	<b>Instrument Optimization</b>	Vérifie la performance de l'instrument, ajuste l'étalonnage de masse ou ajuste les paramètres du spectromètre de masse.
	<b>View Queue</b>	Affiche la file d'attente d'échantillons.
	<b>Instrument Queue</b>	Affiche un instrument à distance.
	<b>Status for Remote Instrument</b>	Affiche le statut d'un instrument à distance.
	<b>Reserve Instrument for Tuning</b>	Réserve l'instrumentation pour le réglage et l'étalonnage.
	<b>IDA Method Wizard</b>	Démarre l'IDA Method Wizard.

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

Icône	Nom	Description
	<b>Open Data File</b>	Ouvre les fichiers.
	<b>Show Next Sample</b>	Va à l'échantillon suivant.
	<b>Show Previous Sample</b>	Va à l'échantillon précédent.
	<b>Go To Sample</b>	Ouvre la boîte de dialogue Select Sample.
	<b>List Data</b>	Affiche les données dans des tableaux.
	<b>Show TIC</b>	Génère un TIC à partir d'un spectre.
	<b>Extract Using Dialog</b>	Extrait des ions en sélectionnant les masses
	<b>Show Base Peak Chromatogram</b>	Génère un BPC
	<b>Show Spectrum</b>	Génère un spectre à partir d'un TIC

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

Icône	Nom	Description
	<b>Copy Graph to new Window</b>	Copie le graphique actif dans une nouvelle fenêtre
	<b>Baseline Subtract</b>	Ouvre la boîte de dialogue Baseline Subtract.
	<b>Threshold</b>	Ajuste le seuil
	<b>Noise Filter</b>	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.
	<b>Show ADC</b>	Affiche les données CAN.
	<b>Show Auxiliary Traces</b>	Ouvre la boîte de dialogue Select Auxiliary Trace Channel
	<b>Show File Info</b>	Affiche les conditions de l'expérience dans la collecte des données.
	<b>Add arrows</b>	Ajoute des flèches à l'axe des X du graphique actif.
	<b>Remove all arrows</b>	Enlève des flèches de l'axe des X du graphique actif.
	<b>Offset Graph</b>	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.
	<b>Force Peak Labels</b>	Étiquette tous les pics.
	<b>Expand Selection By</b>	Définit le facteur d'expansion pour une portion d'un graphique pour être affiché de manière plus détaillée.
	<b>Clear ranges</b>	Remet la sélection étendue à son affichage normal.
	<b>Set Selection</b>	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.
	<b>Normalize To Max</b>	Agrandit un graphique au maximum, de sorte que le pic le plus intense soit à pleine échelle, qu'il soit visible ou non.

## Icônes de la barre d'outils

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

Icône	Nom	Description
	<b>Show History</b>	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.
	<b>Open Compound Database</b>	Ouvre la base de données des composés.
	<b>Set Threshold</b>	Ajuste le seuil
	<b>Show Contour Plot</b>	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.
	<b>Show DAD TWC</b>	Génère un TWC du spectre DAD.
	<b>Show DAD Spectrum</b>	Génère un spectre DAD.
	<b>Extract Wavelength</b>	L'utilisateur peut extraire jusqu'à trois plages de longueurs d'onde d'un spectre DAD pour afficher le XWC.

**Tableau D-5 : Guide de référence rapide de la barre d'outils Explore : superposition des graphiques**

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

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

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

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

Icône	Nom	Fonction
	<b>Open File</b>	Ouvre les fichiers.
	<b>Show Next Sample</b>	Navigue jusqu'à l'échantillon suivant.
	<b>Show Previous Sample</b>	Navigue jusqu'à l'échantillon précédent.
	<b>GoTo Sample</b>	Ouvre la boîte de dialogue Sélectionnez un échantillon
	<b>List Data</b>	Affiche les données dans des tableaux.
	<b>Show TIC</b>	Génère un TIC à partir d'un spectre.
	<b>Extract Using Dialog</b>	Cliquez dessus pour extraire des ions en sélectionnant des masses
	<b>Show Base Peak Chromatogram</b>	Génère un BPC
	<b>Show Spectrum</b>	Génère un spectre à partir d'un TIC
	<b>Copy Graph to new Window</b>	Copie le graphique actif dans une nouvelle fenêtre
	<b>Baseline Subtract</b>	Ouvre la boîte de dialogue Baseline Subtract.
	<b>Threshold</b>	Ajuste le seuil
	<b>Noise Filter</b>	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.
	<b>Show ADC</b>	Affiche les données CAN.

## Icônes de la barre d'outils

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

Icône	Nom	Fonction
	<b>Show Auxiliary Traces</b>	Ouvre la boîte de dialogue Select Auxiliary Trace Channel
	<b>Show File Info</b>	Affiche les conditions de l'expérience dans la collecte des données.
	<b>Add arrows</b>	Ajoute des flèches à l'axe des X du graphique actif.
	<b>Remove all arrows</b>	Enlève des flèches de l'axe des X du graphique actif.
	<b>Offset Graph</b>	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.
	<b>Force Peak Labels</b>	Étiquette toutes les pics
	<b>Expand Selection By</b>	Définit le facteur d'expansion pour une portion d'un graphique à afficher de manière plus détaillée.
	<b>Clear ranges</b>	Remet la sélection étendue à son affichage normal.
	<b>Set Selection</b>	Définit les points de départ et de fin pour une sélection. Ce qui permet d'avoir une sélection aussi précise qu'il est possible d'obtenir en mettant en évidence la zone avec le curseur.
	<b>Normalize to Max</b>	Met à l'échelle un graphique au maximum et ainsi le pic la plus intense est en taille maximum, visible ou pas.
	<b>Show History</b>	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.
	<b>Open Compound Database</b>	Ouvre la base de données des composés.
	<b>Set Threshold</b>	Ajuste le seuil

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

Icône	Nom	Fonction
	<b>Show Contour Plot</b>	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.
	<b>Show DAD TWC</b>	Génère un TWC du DAD.
	<b>Show DAD Spectrum</b>	Génère un spectre DAD.
	<b>Extract Wavelength</b>	L'utilisateur peut extraire jusqu'à trois plages de longueurs d'onde d'un spectre DAD pour afficher le XWC.

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

Icône	Nom	Description
	<b>Set parameters from Background Region</b>	Utilise le fond sélectionné.
	<b>Select Peak</b>	Utilise le pic sélectionné.
	<b>Manual Integration Mode</b>	Pics manuellement intégrés.
	<b>Show or Hide Parameters</b>	Affiche ou masque les paramètres de recherche de pics.
	<b>Show Active Graph</b>	Affiche le chromatogramme de l'analyte uniquement.
	<b>Show Both Analyte and IS</b>	Affiche l'analyte et son chromatogramme. Disponible uniquement lorsqu'un standard interne associé existe.
	<b>Use Default View for Graph</b>	Retourne vers la vue prédéfinie, afficher toutes les données, si, par exemple, l'utilisateur a effectué un zoom sur un chromatogramme.

## Icônes de la barre d'outils

**Tableau D-9 : Icônes du tableau de résultats**

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

**Tableau D-10 : Icône Référence rapide : Mode Quantitatif**

Icône	Nom	Description
	<b>Add/Remove Samples</b>	Ajoute ou supprime des échantillons provenant du Results Table (Tableau de résultats).
	<b>Export as Text</b>	Enregistre le tableau de résultats dans un fichier texte.
	<b>Modify Method</b>	Ouvre un fichier wiff.
	<b>Peak Review - Pane</b>	Ouvre les pics dans un volet.
	<b>Peak Review - Window</b>	Ouvre les pics dans une fenêtre
	<b>Calibration - Pane</b>	Ouvre la courbe d'étalonnage dans un volet.
	<b>Calibration - Window</b>	Ouvre la courbe d'étalonnage dans une fenêtre.
	<b>Show First Peak</b>	Montre le premier pic dans le volet ou la fenêtre.

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

Icône	Nom	Description
	<b>Show Last Peak</b>	Montre le dernier pic dans le volet ou la fenêtre.
	<b>Show Audit Trail</b>	Affiche le registre d'audit du tableau de résultats.
	<b>Clear Audit Trail</b>	Libère le registre d'audit du Results Table. Cette fonctionnalité n'est pas disponible.
	<b>Statistics</b>	Ouvre la fenêtre Statistics.
	<b>Report Generator</b>	Ouvre le logiciel Reporter.

Tableau D-11 : Icônes du mode Acquisition

Icône	Nom	Fonction
	<b>Start Sample</b>	Cliquer pour démarrer l'échantillon dans la file d'attente.
	<b>Stop Sample</b>	Cliquer pour arrêter l'échantillon dans la file d'attente.
	<b>Equilibrate</b>	Cliquer 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 qui a été utilisée avec le premier échantillon dans la file d'attente.

# Théorie de fonctionnement : source d'ions

# E

## Mode d'ionisation par électronébulisation

La sonde est centrée entre les deux chaufferettes Turbo situées à un angle de 45 degrés de chaque côté de la sonde. La combinaison de la pulvérisation et du gaz sec chauffé provenant du chauffage turbo est projetée selon un angle de 90 degrés par rapport à l'orifice de la plaque rideau.

Seuls les composés qui ionisent dans le solvant liquide peuvent être générés en ions en phase gazeuse dans la source. L'efficacité et la vitesse de production des ions dépendent de l'énergie de solvatation des ions spécifiques. Les ions dont l'énergie de solvatation est basse sont plus sujets à l'évaporation que ceux dont l'énergie de solvatation est supérieure.

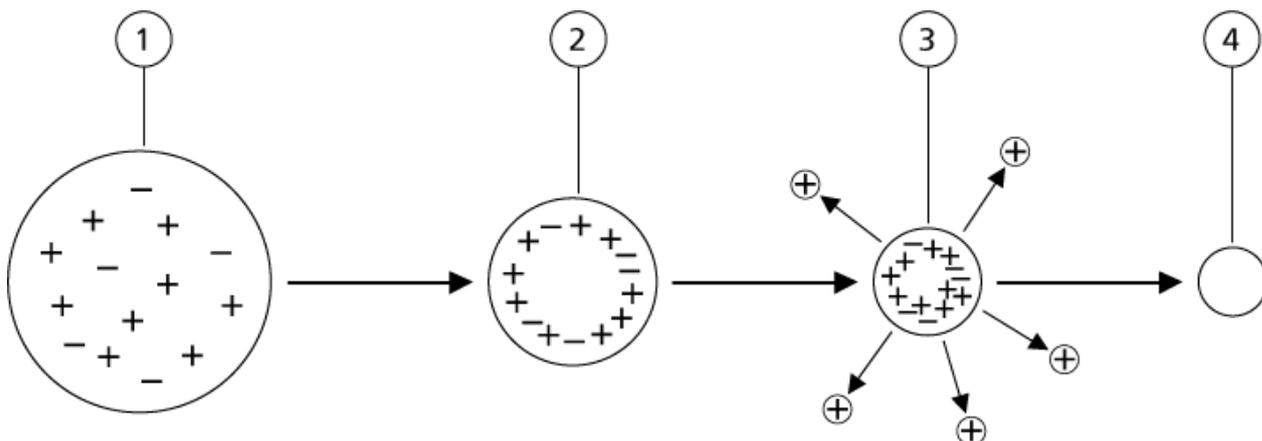
L'interaction entre l'**IonSpray Voltage** et les chauffages Turbo contribue à concentrer le flux et augmente la vitesse d'évaporation des gouttelettes, entraînant alors l'intensification du signal d'ionisation. Le gaz chauffé augmente l'efficacité de l'évaporation des ions, ce qui entraîne une augmentation de la sensibilité et un meilleur contrôle du flux de l'échantillon.

Une grande vitesse de débit de gaz nébuliseur sépare les gouttelettes du flux de l'échantillon liquide dans l'admission de la **IonSpray Voltage**. En utilisant la haute tension variable appliquée au nébuliseur, la source d'ions applique une charge nette à chaque gouttelette ; cette charge facilite la dispersion des gouttelettes. Les ions à polarité simple sont attirés de préférence dans les gouttelettes par la haute tension à mesure qu'ils sont séparés du flux liquide. Cependant, cette séparation est incomplète et chaque gouttelette contient de nombreux ions à double polarité. Les ions à polarité simple sont prédominants dans chaque gouttelette et la différence entre le nombre d'ions chargés positivement ou négativement donne la charge nette. Seuls les ions en excès de la polarité prédominante sont disponibles pour leur évaporation et seule une fraction de ces ions s'évapore effectivement.

La sonde peut générer des ions à charges multiples à partir des composés comportant des sites de charges multiples, comme les peptides et les oligonucléotides. Cela est utile lors de l'analyse d'espèces à haut poids moléculaire, dans lesquelles les charges multiples produisent des ions dont le rapport masse/charge ( $m/z$ ) est compris dans la plage de masse du spectromètre de masse. Cela permet de déterminer le poids moléculaire de routine des composés en kilodaltons (kDa).

Chaque gouttelette chargée contient un solvant et des ions positifs et négatifs, mais avec une polarité dominante. Voir la figure : [Illustration E-1](#). Comme un vecteur conducteur, les charges en excès restent à la surface du précipité. À mesure que le solvant s'évapore, le champ électrique à la surface du précipité de gouttes augmente en raison de la réduction du rayon du précipité.

## Illustration E-1 : Évaporation des ions



Élément	Description
1	Le précipité de gouttes contient des ions des deux polarités, dont une dominante.
2	À mesure que le solvant s'évapore, le champ électrique augmente et les ions se déplacent à la surface.
3	À certaines valeurs de champ critiques, des ions sont émis par les gouttelettes.
4	Les résidus non volatils restent sous forme de particule sèche.

Si le précipité contient un excès d'ions et que suffisamment de solvant s'en évapore, un champ critique est atteint pour chaque ion émis de la surface. Finalement, le solvant s'évaporera du précipité laissant une particule sèche composée de matière non volatile de la solution de l'échantillon.

Les énergies de solvation pour la plupart des molécules organiques étant inconnues, les sensibilités de tout ion organique à l'évaporation ionique sont difficiles à prédire. L'importance de l'énergie de solvation est évidente parce que les agents tensioactifs concentrés à la surface du liquide peuvent être détectés très finement.

## Mode APCI

Les incompatibilités qu'impliquait par le passé l'association de la chromatographie en phase liquide avec la spectrométrie de masse étaient dues aux difficultés observées lors de la conversion des molécules relativement non volatiles de la solution liquide en gaz moléculaire sans provoquer de décomposition excessive. Le processus de la sonde APCI de nébulisation douce de l'échantillon dans un précipité de gouttelettes finement dispersées dans un tube chauffé en céramique permet une vaporisation rapide de l'échantillon de sorte que les molécules de ce dernier ne se décomposent pas.

La figure suivante montre la réaction du flux du processus APCI pour les ions positifs réactifs, les hydrates de proton,  $H_3O^+[H_2O]_n$ .



et du solvant dispersées finement sont soumises à une vaporisation rapide avec une décomposition thermique minimale. La vaporisation douce préserve l'identité moléculaire de l'échantillon.

Les molécules de l'échantillon et du solvant en phase gazeuse passent dans le boîtier de la source d'ions où l'ionisation par APCI est induite par une aiguille de décharge corona raccordée à l'extrémité du tube en céramique. Les molécules de l'échantillon sont ionisées par les collisions avec les ions réactifs qui sont créés par l'ionisation des molécules de solvant en phase mobile. Les molécules de solvant vaporisées s'ionisent pour produire les ions réactifs  $[X+H]^+$  en polarité positive et  $[X-H]^-$  en polarité négative. Voir la figure : [Illustration E-3](#). Ce sont ces ions réactifs qui produisent des ions d'échantillonnage stables quand ils entrent en collision avec les molécules de l'échantillon.

**Illustration E-3 : Ionisation chimique à pression atmosphérique**

Élément	Description
1	Échantillon
2	Les ions primaires sont créés dans les environs de l'aiguille de décharge par effet corona
3	L'ionisation produit surtout des ions de solvant
4	Les ions réactifs réagissent aux molécules de l'échantillon, formant des groupements
5	Plaque rideau
6	Interface

x = molécules de solvant ; M = molécules de l'échantillon

Les molécules de l'échantillon sont ionisées par un processus de transfert de protons en polarité positive ou par transfert d'électrons ou de protons en polarité négative. L'énergie du processus d'ionisation APCI naît essentiellement de la collision du fait de la pression atmosphérique relativement élevée de la source d'ions.

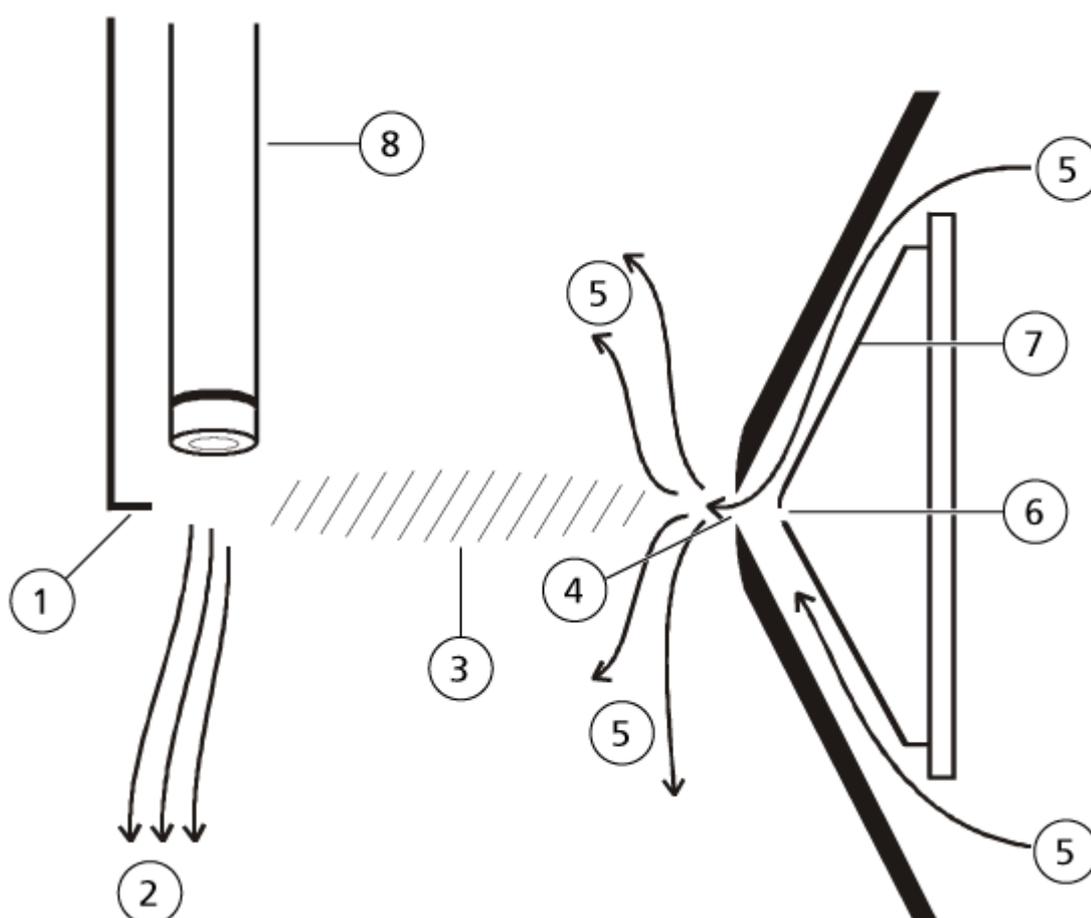
Pour les applications en phase inverse, les ions réactifs se composent de molécules de solvants protonées en polarité positive et d'ions oxygène solvatés en polarité négative. Avec une thermodynamique favorable, l'ajout des modificateurs change la composition des ions réactifs. Par exemple, l'ajout de tampons ou de modificateurs d'acétate peut faire de l'ion d'acétate  $[CH_3COO]^-$  le réactif primaire en polarité négative. Les modificateurs d'ammonium pourraient faire de l'ammoniac protoné  $[NH_4]^+$  le réactif primaire en polarité positive.

Par les collisions, une distribution en équilibre de certains ions, p. ex. des ions en groupement d'eau protonée, est préservée. La probabilité d'une fragmentation prématurée de l'échantillon d'ions dans la source d'ions est faible en raison de l'influence modératrice des groupes de solvant sur les ions réactifs et la pression relativement forte des gaz de la source d'ions. En conséquence, le processus d'ionisation donne des ions moléculaires produits principalement pour l'analyse de masse dans le spectromètre de masse.

## Région d'ionisation APCI

La figure suivante indique l'emplacement général du réacteur ion-molécule de la sonde APCI. Les lignes inclinées indiquent un réacteur sans paroi. Un courant d'ions de décharge corona à démarrage automatique dans la plage du microampère est créé consécutivement au champ électrique entre l'aiguille de décharge et la plaque rideau. Les ions primaires, p. ex.  $N_2^+$  et  $O_2^+$ , sont formés par la perte d'électrons provenant du plasma à proximité immédiate de la pointe de l'aiguille de décharge. L'énergie de ces électrons est modérée par un certain nombre de collisions avec les molécules de gaz avant d'atteindre une énergie où leur courbe d'efficacité d'ionisation leur permet d'ioniser efficacement des molécules neutres.

Illustration E-4 : Région d'ionisation APCI



Élément	Description
1	Pointe de l'aiguille de décharge
2	Débit de l'échantillon
3	Réacteur sans paroi
4	Ouverture de la plaque rideau

Élément	Description
5	Gaz pour l'interface Curtain Gas
6	Orifice
7	Plaque à orifice
8	Tube en céramique

Les ions primaires, à leur tour, génèrent des ions intermédiaires qui conduisent à la formation de l'échantillon d'ions. Les ions de la polarité choisie dérivent sous l'influence du champ électrique dans le sens de la plaque rideau et à travers le rideau de gaz dans l'analyseur de masse. L'ensemble du processus de formation des ions naît essentiellement de phénomènes de collision du fait de la pression atmosphérique relativement élevée de la sonde APCI. Sauf dans la proximité immédiate de la pointe de l'aiguille de décharge où la force du champ électrique est plus grande, l'énergie impartie à un ion par le champ électrique est faible en comparaison avec l'énergie thermique de cet ion.

Par les collisions, une distribution égale de certains ions (p. ex. des ions en grappe d'eau protonée) est préservée. Tout excédent d'énergie qu'un ion peut acquérir pendant le processus de réaction ion-molécule est thermalisé. Par la stabilisation des collisions, bon nombre des ions produits sont fixes, même si de nombreuses collisions se sont succédées. La formation des ions produits et des ions réactifs est régie par des conditions d'équilibre à une pression atmosphérique de fonctionnement de 760 Torr.

La sonde APCI fonctionne comme un réacteur sans paroi, car les ions qui passent de la source d'ions vers la chambre à vide, puis finalement dans le détecteur, n'entrent jamais en collision avec la paroi. Ils entrent uniquement en collision avec d'autres molécules. Les ions sont également formés en dehors de la source d'ions désignée. Ils ne sont toutefois pas détectés et sont finalement neutralisés en interagissant avec la surface de la paroi.

La température de la sonde est un facteur important intervenant dans le fonctionnement de la sonde APCI. Pour préserver l'identité moléculaire, la température doit être suffisamment élevée pour assurer une évaporation rapide. À une assez haute température de fonctionnement, les gouttelettes s'évaporent rapidement pour que les molécules organiques soient désorbées des précipités avec un minimum de dégradation thermique. Si, toutefois, le réglage de la température est trop bas, le processus d'évaporation est plus lent et une pyrolyse, ou décomposition, peut se produire avant la fin de l'évaporation. Le fonctionnement de la sonde APCI à des températures supérieures à la température optimale peut provoquer la décomposition thermique de l'échantillon.

# Optimisation manuelle du composé **F**

L'utilisateur doit contrôler manuellement l'auto-échantillonneur et la vanne d'injection car ces dispositifs ne peuvent pas être contrôlés par le biais du système en mode Tune and Calibrate.

## Conditions préalables

- Le spectromètre de masse est réglé et étalonné.
- Les conditions pour une séparation LC sont connues.
- L'ensemble des périphériques requis, y compris la pompe à seringue, le cas échéant, et les composants LC sont dans le profil de matériel.

## Matériel nécessaire

Pour ajuster les paramètres de l'instrument pour des composés particuliers, les solutions suivantes sont recommandées. Le mélange de quatre composés est utilisé pour illustrer les étapes de la procédure. L'utilisateur doit appliquer la même procédure lors de l'utilisation de composés appropriés pour le test d'intérêt.

- Phase mobile : 1:1 acétonitrile:eau + 2 mM d'acétate d'ammonium + 0,1 % d'acide formique.
- Une pompe LC et un auto-échantillonneur.
- Des flacons pour auto-échantillonneur.
- Mélange de quatre composés (50 ng/ml) : réserpine, minoxidil, tolbutamide et rescinnamine. La solution peut être utilisée pour la perfusion et l'analyse par injection en flux continu (FIA). La concentration dépend du système utilisé. Utilisez une solution composée de 49,9 % d'acétonitrile, de 50 % d'eau désionisée et de 0,1 % d'acide formique comme diluant. Il est possible de remplacer certains composés par d'autres dans la mesure où leurs masses moléculaires sont connues et qu'on peut raisonnablement envisager leur ionisation par la source d'ions

**Tableau F-1 : Composés et  $m/z$  valeurs**

Composé	$m/z$ Valeur
Minoxidil	210,2
Tolbutamide	271,1
Réserpine	609,3

Tableau F-1 : Composés et *m/z* valeurs (suite)

Composé	<i>m/z</i> Valeur
Rescinnamine	635,3

## À propos de l'optimisation manuelle du composé

L'optimisation manuelle du composé est utilisée pour optimiser les paramètres dépendants du composé et de la source d'ions pour un analyte. Quand un utilisateur optimise manuellement un analyte, une méthode d'acquisition MS est créée en mode Tune and Calibrate. En fonction de la méthode d'introduction de l'échantillon choisie, une méthode LC peut être ajoutée à la méthode d'acquisition pour pouvoir utiliser la perfusion ou la LC.

L'optimisation pour obtenir le meilleur signal ne donne pas toujours les meilleurs rapports signal/bruit. Le bruit peut évoluer avec le signal pour certains paramètres et doit être vérifié pendant l'optimisation si le but est de maximiser le rapport signal/bruit.

Lors de l'optimisation des paramètres dépendant de la source d'ions, il faut introduire l'échantillon aux débits utilisés pendant l'analyse de l'échantillon avec soit l'analyse par injection en flux continu (FIA), soit le dispositif de perfusion en T. Le paramètre de gaz CAD est le seul paramètre dépendant du composé indiqué dans l'onglet Source/Gas et peut être facilement optimisé lors de la perfusion de l'analyte.

Avant d'optimiser les paramètres dépendant de la source d'ions, il faut optimiser la position de la source d'ions. Voir la section : [Optimisation de la source d'ions](#).

## À propos des types de balayage

Pour cet exemple, utilisez les types de balayage Q1 MS, Q1 MI, Ion produit et MRM. Le type de balayage Q1 MS est utilisé pour confirmer la présence de composés d'intérêt. Le balayage Q1 MI est utilisé pour optimiser les tensions de la MS ou de la cellule précollision. Le type de balayage Product Ion (Ion produit) est utilisé pour déterminer les ions produits de chaque composé. Le type de balayage MRM est utilisé pour optimiser l'énergie de collision (CE) et le potentiel de sortie de la cellule de collision (CXP) de chaque ion produit ou fragment. Les méthodes créées dans cette section peuvent être utilisées pour des analyses quantitatives ou qualitatives.

## Optimiser manuellement un analyte

Après la création de la méthode d'acquisition, il est possible d'optimiser les paramètres dépendants du composé en utilisant la fonction **Edit Ramp** ou en modifiant manuellement les paramètres dans Tune Method Editor. Les paramètres dépendant de la source d'ions peuvent uniquement être optimisés par l'ajustement manuel des paramètres dans Tune Method Editor. Selon le type de balayage utilisé, les paramètres pouvant être optimisés diffèrent.

## Optimisation manuelle du composé

---

Suivez les procédures dans l'ordre indiqué :

1. [Confirmer la présence de composés](#)
2. [Optimiser les paramètres de la MS](#)
3. [Déterminer les ions produits pour l'optimisation](#)
4. [Optimiser le potentiel de sortie de la cellule de collision pour chaque ion produit](#)

## Confirmer la présence de composés

1. Créez un projet.
2. Activez le profil de matériel.
3. Préparer l'échantillon:
  - a. Aspirez la solution de composé dans une seringue et retirez l'air de la seringue.
  - b. Utilisez la tubulure avec le raccord spécial pour brancher la seringue au spectromètre de masse.
  - c. Installez la seringue dans la pompe à seringue intégrée.
4. Perfusez le composé en solution à un débit de 5 à 10 µl/min.
5. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Manual Tuning**.
6. Dans le champ comportant les listes de méthodes, cliquez sur **Syringe Pump Method**.
7. Sous l'onglet Syringe Pump Method Properties, saisissez les valeurs des paramètres figurant dans le tableau suivant.

**Tableau F-2 : Onglet Syringe Pump Method Properties**

Paramètre	Valeur
<b>Syringe Diameter</b>	Dépend de la seringue. 4,610 mm pour une seringue de 1,0 ml
<b>Flow Rate</b>	10
<b>Unit</b>	µl/min

Illustration F-1 : Onglet Syringe Pump Method Properties

8. Cliquez sur **Start Syringe Pump**.
9. Sélectionnez **MS Method** à partir de la liste des méthodes.
10. Sous l'onglet MS, saisissez les valeurs des paramètres figurant dans le tableau suivant.

Tableau F-3 : Onglet MS

Paramètre	Valeur
<b>Scan type</b>	Q1 MS (Q1)
<b>Start (Da)</b>	200
<b>Stop (Da)</b>	700
<b>Scan rate (Da/s)</b>	200
<b>Duration (min)</b>	3

11. Cliquez sur **Start**.
12. Attendez jusqu'à ce qu'un TIC régulier apparaisse sur la gauche ainsi que des pics sur la droite, puis cliquez sur **Stop**.
13. Cochez la case **MCA**.
14. Saisissez 10 dans le champ **Cycles**.
15. Cliquez sur **Start**.  
Après dix balayages, les masses des quatre composés sont affichées comme des ions.

---

**Conseil !** Si le volet du chromatogramme d'ions précédent ou prévu est masqué, sélectionnez la fenêtre à afficher depuis le menu **Window**.

---

**Remarque :** les intensités des ions des composés peuvent montrer un écart important. Pour faciliter le déplacement d'une solution à une concentration supérieure ou inférieure selon les besoins au cours de l'optimisation, ayez plusieurs niveaux de concentration préparés avant de commencer l'optimisation.

---

## Optimisation manuelle du composé

---

16. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le volet spectral situé en bas à droite puis cliquez sur **Open File**.
17. Repérez les composés d'intérêt, puis notez les valeurs  $m/z$  des pics les plus élevés. Ces valeurs ne doivent pas différer de plus de 0,1 à 0,2 Da par rapport à la valeur  $m/z$  attendue. Pour la procédure suivante, utilisez les valeurs  $m/z$ .

## Optimiser les paramètres de la MS

Le DP est la différence entre l'orifice et la terre. Plus la différence de potentiel est élevée, plus la quantité de défragmentation est importante.

Le paramètre DP a un effet significatif sur le signal de l'analyte. Les valeurs DP types s'étendent de 20 V à 150 V. Une valeur DP trop basse peut entraîner une intensité des ions plus basse et de potentielles interférences venant des fragments. Une valeur DP trop élevée peut entraîner une fragmentation de l'analyte dans la source. En général, le DP doit être réglé sur la valeur qui donne l'intensité la plus élevée.

Le paramètre EP contrôle le potentiel d'entrée qui guide et concentre les ions dans la zone à haute pression Q0. Il est généralement paramétré à 10 V pour les ions positifs ou -10 V pour les ions négatifs. L'EP a peu d'effet sur l'optimisation des composés et peut généralement être laissé aux valeurs par défaut sans qu'il n'y ait d'incidence sur les limites de détection de l'analyte.

1. Retournez au Tune Method Editor et changez la méthode pour le balayage de type **Q1 Multiple Ions (Q1 MI)**.
2. Dans le tableau des masses, entrez les valeurs de paramètre appropriées. Consultez le tableau suivant.

**Tableau F-4 : Paramètres du tableau des masses - Q1 Ions Multiples (Q1 MI)**

Composé	Masse de Q1	Temps
Résérpine	609,3	1
Minoxidil	210,2	1
Tolbutamide	271,1	1
Rescinnamine	635,3	1

Commencer avec la réserpine pour un cas simple. Répéter le processus d'optimisation manuelle pour les composés restants.

3. Cliquez sur **Edit Ramp**.
4. Sélectionnez **Declustering Potential (DP)** dans la boîte de dialogue Ramp Parameter Settings.

---

**Remarque :** Démarrez avec le paramètre DP, puis optimisez les autres paramètres dans l'ordre dans lequel ils sont affichés dans la boîte de dialogue. Les paramètres peuvent ne pas être optimisés correctement s'ils sont optimisés dans le désordre.

---

- Saisissez les valeurs requises dans **Stop**, **Start** et **Step**.

---

**Conseil !** Les valeurs existantes sont de bons points de départ. Utilisez la fonction **Edit Ramp** pour remplacer ces valeurs par d'autres plus performantes.

---

- Cliquez sur **OK**.
- Cliquez sur **Start**.
- Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le volet XIC situé en bas à droite puis cliquez sur **Open File** pour agrandir l'affichage de XIC.
- Contrôlez les XIC.

---

**Remarque :** la valeur qui donne le meilleur signal par seconde pour l'ion à l'étude est la valeur optimale.

---

- Noter la valeur optimale pour l'ion à l'étude.
- Déplacez le curseur vers le tableau des masses, cliquez avec le bouton droit de la souris puis ajoutez le paramètre venant d'être optimisé.  
Une colonne est ajoutée au tableau.
- Ajoutez la valeur optimisée sur la ligne appropriée.
- Recommencez ces étapes pour chaque masse de la méthode d'acquisition jusqu'à l'obtention d'une liste des valeurs optimales pour toutes les masses.
- Recommencez ces étapes pour optimiser les autres paramètres spécifiques à la MS.

**Tableau F-5 : Paramètres spécifiques MS**

Paramètre	Commentaire
<b>DP</b>	Définissez le DP à la valeur fournissant l'intensité la plus élevée.
<b>EP</b>	Optimisez rarement ce paramètre, celui-ci ayant un effet plus petit.
<b>CEP</b>	Sélectionnez la valeur CEP avec l'intensité la plus grande.

## Déterminer les ions produits pour l'optimisation

C'est l'énergie de collision (CE) qui contrôle la quantité d'énergie que les ions précurseurs reçoivent quand ils sont accélérés dans la cellule de collision.

Exécuter cette procédure, un composé après l'autre, en utilisant les valeurs optimisées spécifiques de la MS obtenues précédemment. Les ions produits fournissent la masse Q3 des transitions MRM.

Dans cet exemple, le composé réserpine est utilisé.

- Dans Tune Method Editor, fermez les panneaux XIC.
- Cliquez sur **Product Ion (MS2)** dans le champ **Scan type**.

## Optimisation manuelle du composé

---

3. Sous l'onglet Compound, saisissez la valeur optimale notée dans la section : [Optimiser les paramètres de la MS](#).
4. Sous l'onglet MS, dans le champ **Product Of**, entrez 609,4.  
Cette valeur correspond à la mesure de masse pour la réserpine notée dans la section : [Confirmer la présence de composés](#).
5. Vérifiez que la case **Center / Width** n'est pas cochée.
6. Dans le tableau des masses, entrez les valeurs **Start**, **Stop** et **Time** appropriées.  
Consultez le tableau : [Tableau F-6](#).

**Tableau F-6 : Paramètres du tableau des masses (balayage des ions produits)**

Champ	Valeur
Start (Da)	100
Stop (Da)	650
Time (sec)	2

7. Cliquez sur **Edit Ramp**.  
La boîte de dialogue Ramp Parameter Settings s'affiche.
8. Sélectionnez **Collision Energy** puis saisissez les valeurs **Start**, **Stop** et **Step** requises.

---

**Remarque :** Les valeurs existantes sont de bons points de départ. Utilisez la fonction **Edit Ramp** pour remplacer ces valeurs par d'autres plus performantes.

---

9. Cliquez sur **OK**.
10. Cochez la case **MCA**.
11. Cliquez sur **Start**.
12. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le volet XIC situé en bas à droite, puis cliquez sur **Open File**.
13. Sélectionnez les ions produits ayant l'intensité la plus élevée et notez la valeur  $m/z$  de l'ion produit jusqu'à la première décimale, par exemple 195,1.  
Nous recommandons d'optimiser deux ou trois ions produits pour chaque composé. Les transitions supplémentaires peuvent servir de confirmation ou pour éviter d'optimiser de nouveau un composé en cas d'interférence.

---

**Remarque :** vérifiez que les pics les plus élevés sélectionnés pour l'optimisation ne représentent pas une perte fréquente de l'ion précurseur, comme l'eau ou le dioxyde de carbone. Vérifiez également que la masse de l'ion produit n'est pas trop faible, sous peine d'interférences pour cette transition dans les échantillons réels ou les agrégats dans la phase mobile lors de l'analyse sur colonne.

---

14. Répétez cette procédure pour les composés restants.

## Optimiser le potentiel de sortie de la cellule de collision pour chaque ion produit

1. Dans Tune Method Editor, fermez les panneaux XIC.
2. Ouvrir la méthode précédemment enregistrée.
3. Dans le tableau des masses, vérifiez les valeurs  $m/z$  Q1 et Q3 pour le composé.
4. Cliquez sur l'onglet **Compound**, puis entrez les valeurs optimales pour le DP et la CE notées à la section : [Optimiser les paramètres de la MS](#).
5. Cliquez sur **Edit Ramp**.
6. Sélectionnez **Collision Cell Exit Potential (CXP)** dans la boîte de dialogue Ramp Parameter Settings.
7. Saisissez les valeurs requises dans **Stop**, **Start** et **Step**.

---

**Conseil !** Les valeurs existantes sont de bons points de départ. Utilisez la fonction **Edit Ramp** pour remplacer ces valeurs par d'autres plus performantes.

---

8. Cliquez sur **OK**.
9. Cliquez sur **Start**.
10. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le volet XIC situé en bas à droite, puis cliquez sur **Open File**.
11. Notez la valeur optimale pour l'ion à l'étude.  
la valeur qui donne le meilleur signal est la valeur optimale.
12. Dans le tableau des masses, cliquez avec le bouton droit de la souris, puis sélectionnez le paramètre venant d'être optimisé.  
Cela ajoute une colonne au tableau.
13. Recommencez si d'autres ions produits ont été contrôlés.
14. Ajoutez les valeurs optimisées sur la ligne appropriée.
15. Enregistrez la méthode.
16. Répétez cette procédure pour tous les autres composés précédemment optimisés.

## Optimiser manuellement les paramètres de la source d'ions et de gaz

Les réglages de la source d'ions et du gaz doivent être correctement définis pour éviter la contamination du spectromètre de masse et pour s'assurer que les composés d'intérêt ont été placés en phase gazeuse en tant qu'ions de manière optimale.

---

**Remarque :** les réglages optimaux de la source d'ions et du gaz sont liés au débit et à la composition du solvant.

---

## Optimisation manuelle du composé

---

Les réglages de la source d'ions et de gaz doivent être ajustés quand les conditions de LC changent sensiblement.

Pour optimiser les paramètres de la source d'ions et de gaz, installez une pompe à seringue comprenant les composés d'intérêt, puis raccordez la tubulure d'échantillonnage par un T au dispositif LC. La commande de la pompe LC peut être manuelle ou s'effectuer par le biais du logiciel.

Les réglages de la source d'ions et de gaz peuvent également être optimisés manuellement en utilisant un auto-échantillonneur pour injecter manuellement le composé d'intérêt tout en modifiant les paramètres par réglage manuel pour trouver les réglages optimaux.

## Préparer la source d'ions

1. Réglez le micromètre horizontal sur 5.
2. Réglez le micromètre vertical sur la source d'ions de manière à ce qu'il corresponde à votre débit.

Utilisez les paramètres dans le tableau suivant.

**Tableau F-7 : Paramètres verticaux de la source d'ions Turbo V**

Débit	Paramètres verticaux initiaux
1 à 20 µl/min	10
20 à 250 µl/min	5
250 à 500 µl/min	2
500 µl/min et plus	0

Selon le type d'exécution de l'optimisation, il peut être nécessaire de configurer un profil de matériel avec les pompes LC.

Consultez la section [Optimisation de la source d'ions](#).

## Optimisez les paramètres de la source d'ions

Les paramètres de la source d'ions sont optimisés pour obtenir un meilleur rapport signal/bruit pour le composé à l'étude. Le débit de gaz de l'interface Curtain Gas est optimisé au réglage le plus haut sans perdre de sensibilité. Voir la section : [Optimisation de la source d'ions](#).

Utilisez la procédure suivante pour optimiser le paramètre **Curtain Gas (CUR)**. La principale fonction de ce paramètre est d'empêcher la contamination de l'optique ionique. Le paramètre CUR doit toujours être maintenu aussi élevé que possible sans perte de sensibilité. La valeur dépend du type de spectromètre de masse et de source d'ions.

Ne réglez pas le paramètre en dessous de la valeur de départ.

1. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate**, double-cliquez sur **Manual Tuning**.

2. Cliquez sur **File > Open..**
3. Dans la liste **Files**, cliquez sur la méthode d'acquisition utilisée pour optimiser le paramètre du composé puis cliquez sur **OK**.  
La méthode s'ouvre dans Tune Method Editor.
4. Ouvrez l'onglet Source/Gas.
5. Utilisez le guide de la source d'ions et du débit de gaz pour régler tous les paramètres de la source d'ions et de gaz, afin qu'ils correspondent au débit.
6. Choisissez une durée d'exécution suffisamment longue pour permettre d'ajuster de nombreux paramètres. La durée de départ recommandée est de 15 minutes.
7. Cliquez sur **Start**.  
Les données s'affichent dans des panneaux situés sous Tune Method Editor.
8. Notez le signal du pic d'intérêt.
9. Dans le champ **Curtain Gas (CUR)**, augmentez la valeur de cinq unités.
10. Continuez à augmenter la valeur **Curtain Gas (CUR)** jusqu'à trouver la valeur la plus élevée sans perte de sensibilité.  
Comme pour la plupart des réglages Source/Gas, si deux valeurs donnent le même résultat, utilisez la valeur la plus élevée.
11. Recommencez ces étapes pour les autres paramètres Source/Gas.  
Lors de l'optimisation de ces paramètres, cherchez la valeur qui donne la valeur signal/bruit la plus élevée.

## Paramètres avancés

Les paramètres suivants ne doivent être optimisés que par un opérateur expérimenté.

### Optimiser AF2

Le paramètre AF2 contrôle la fragmentation du deuxième ion précurseur au cours d'un balayage MS3. La quantité d'énergie d'excitation utilisée dépend du composé et de la quantité voulue de fragmentation.

1. Pour les modes ion positif et ion négatif, incrémentez **AF2** comme suit : 70 mV à 300 mV avec une valeur de **Step** de 10 mV. La plage autorisée s'étend de 0 à 1 000 mV.
2. Sélectionner la valeur AF2 qui donne la meilleure quantité de fragmentation.

### À propos de la propagation de l'énergie de collision (CES)

Une fonction unique du spectromètre de masse QTRAP est la possibilité de réaliser des expériences AutoFrag. Un spectre composite peut être obtenu en remplissant le piège à ions linéaire provenant de trois énergies de collision différentes, ce qui élimine la nécessité d'optimiser l'énergie de collision.

Sous les paramètres dépendant du composé en mode Enhanced Product Ion (EPI) et MS3 experiments, le champ Collision energy spread (CES) permet aux utilisateurs de spécifier

## Optimisation manuelle du composé

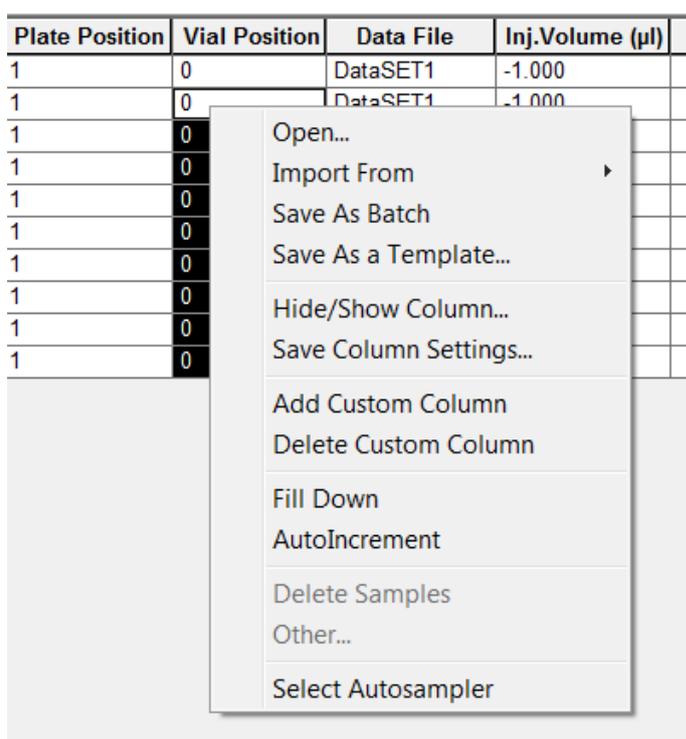
---

la différence des énergies de collision qui sera appliquée lors de l'expérience. Par exemple, avec une valeur CE de 30 et une valeur CES de 15, les énergies de collision utilisées sont de valeur 15, 30 et 45.

## Éditeur de lots

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

Illustration G-1 : Menu contextuel du lot



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

## Menus contextuels

---

Menu	Fonction
<b>Save Column Settings</b>	(Enregistrer les paramètres de colonne)Enregistre les paramètres de colonne du lot.
<b>Add Custom Column</b>	(Ajouter une colonne personnalisée)Ajoute une colonne personnalisée.
<b>Delete Custom Column</b>	(Supprimer une colonne personnalisée) Supprime une colonne personnalisée.
<b>Fill Down</b>	(Remplir vers le bas)Copie les mêmes données dans les cellules sélectionnées.
<b>AutoIncrement</b>	(Incrémement automatique)Incrémte automatiquement les données dans les cellules sélectionnées.
<b>Delete Samples</b>	(Supprimer les échantillons)Supprime la ligne sélectionnée.
<b>Select Autosampler</b>	(Sélectionner l'auto-échantillonneur)Sélectionne un auto-échantillonneur.

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

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

---

**Conseil !** Cliquez sur **View Queue** () pour afficher la file d'attente.

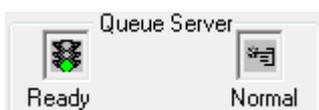
---

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

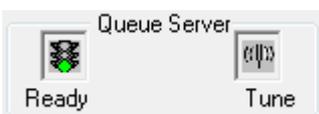
### Statut de la file d'attente

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

**Illustration G-2 : Serveur de file d'attente affichant un mode Normal**



**Illustration G-3 : 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 G-1](#).

**Tableau G-1 : Statut de la file d'attente**

Icônes	Phase	Définition
 Queue Server  Normal Not Ready	<b>Not Ready</b>	Le profil matériel est désactivé et la file d'attente n'accepte aucun des échantillons soumis.
 Queue Server  Normal Stand By	<b>Stand By</b>	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  Normal Warming Up	<b>Warming Up</b>	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 <b>Ready</b> .
 Queue Server  Normal Ready	<b>Ready</b>	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  Normal Waiting	<b>Waiting</b>	Le système lancera automatiquement l'acquisition lorsque l'échantillon suivant sera présenté.
 Queue Server  Normal PreRun	<b>PreRun</b>	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  Normal Acquiring	<b>Acquiring</b>	La méthode fonctionne et l'acquisition des données a lieu.
 Queue Server  Normal Paused	<b>Paused</b>	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.

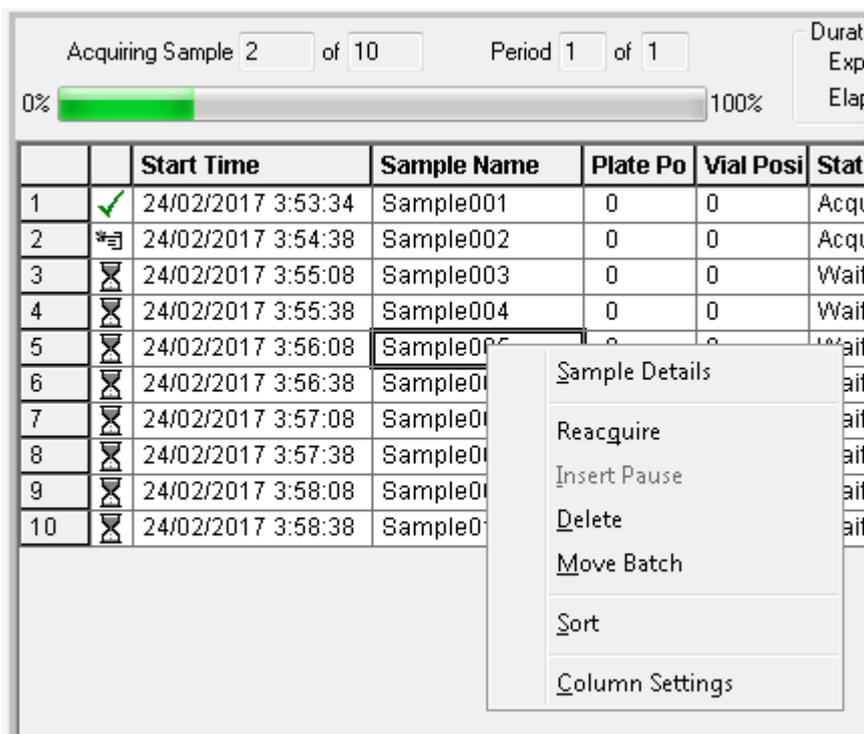
**Tableau G-2 : Icônes d'état de l'instrument et du périphérique**

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.
Équilibrage		Vert ou jaune	Le périphérique est équilibré.
En attente		Vert	Le périphérique est en attente d'un ordre du logiciel ou d'un autre périphérique, ou de quelque action de la part de l'opérateur.
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.

## Ordre dans la file d'attente

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

Illustration G-4 : Menu contextuel du gestionnaire de file d'attente



Menu	Fonction
<b>Sample Details</b>	(Détails de l'échantillon)Ouvre la boîte de dialogue Sample Details.
<b>Reacquire</b>	(Acquérir à nouveau)Acquiert à nouveau un échantillon.
<b>Insert Pause</b>	(Insérer une pause)Insère une pause, en secondes, entre deux échantillons. Cette fonction n'est pas disponible dans cette version du logiciel.
<b>Delete</b>	(Supprimer)Supprime le lot ou les échantillons sélectionnés.
<b>Move Batch</b>	(Déplacer le lot)Déplace le lot dans la file d'attente.
<b>Sort</b>	(Trier)Trie selon la colonne présélectionnée.
<b>Column Settings</b>	(Paramètres de colonne)Modifie les paramètres de colonne.

## Menu contextuel des volets de graphiques de contour

Menu	Fonction
Show DAD Spectrum	Ouvre un nouveau volet affichant le spectre DAD.
Extract Wavelengths (Use Range)	Extrait jusqu'à trois plages de longueurs d'onde d'un spectre DAD pour afficher le XWC.
Extract Wavelengths (Use Maximum)	Extrait des plages de longueurs d'onde à l'aide des longueurs d'onde maximales.
Zoom to selection	Effectue un zoom avant sur la zone sélectionnée.
Add User Text	Ajoute une zone de texte à l'emplacement du curseur.
Undo Zoom	Restaure le graphique à son échelle d'origine.
Delete Pane	Supprime le volet sélectionné.
Show Cross-Hair	Affiche la croix (nm/min).

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

Tableau G-3 : 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.

Tableau G-3 : Afficher le menu contextuel du volet d'informations sur le fichier (suite)

Menu	Fonction
<b>Save Acquisition Method to CompoundDB</b>	(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.
<b>Delete Pane</b>	(Supprimer le volet)Supprime le volet sélectionné.

## Spectra Panes (Fenêtres spectrales)

Tableau G-4 : Menu contextuel des Spectra Panes (Fenêtres spectrales)

Menu	Fonction
<b>List Data</b>	Donne les points des données et intègre les chromatogrammes.
<b>Show TIC</b>	Génère un nouveau volet contenant les TIC.
<b>Extract Ions (Use Range)</b>	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.
<b>Extract Ions (Use Maximum)</b>	Extrait les ions à l'aide du pic le plus intense dans la zone sélectionnée.
<b>Save to Text File</b>	Génère un fichier texte du volet, qui peut être ouvert dans Microsoft Excel ou d'autres programmes.
<b>Save Explore History</b>	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).
<b>Add Caption</b>	Ajoute une légende à l'emplacement du curseur dans le volet.
<b>Add User Text</b>	Ajoute une zone de texte à l'emplacement du curseur dans le volet.
<b>Show Last Scan</b>	Affiche une analyse avant la sélection.
<b>Select Peaks For Label</b>	Dans cette boîte de dialogue, sélectionnez les paramètres pour réduire l'étiquetage des pics.
<b>Delete Pane</b>	Supprime la fenêtre sélectionnée.

## Menus contextuels

---

**Tableau G-4 : Menu contextuel des Spectra Panes (Fenêtres spectrales) (suite)**

Menu	Fonction
<b>Add a Record</b>	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.
<b>Search Library</b>	Recherche dans la bibliothèque sans contrainte ou avec contraintes précédemment enregistrées.
<b>Set Search Constraints</b>	Effectue une recherche dans la bibliothèque à l'aide de la boîte de dialogue Search Constraints.

## Volet de chromatogramme

**Tableau G-5 : Menu contextuel du volet de chromatogramme**

Menu	Fonction
<b>List Data</b>	Donne les points des données et intègre les pics trouvés dans les chromatogrammes.
<b>Show Spectrum</b>	Génère un nouveau volet contenant le spectre.
<b>Show Contour Plot</b>	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.
<b>Extract Ions</b>	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.
<b>Show Base Peak Chromatogram</b>	Génère un nouveau volet contenant un chromatogramme de pic de base.
<b>Show ADC Data</b>	Génère un nouveau volet contenant le tracé des données ADC si elles ont été acquises.
<b>Show Auxiliary Traces</b>	Ouvre la boîte de dialogue Select Auxiliary Trace Channel.
<b>Show UV Detector Data</b>	Génère un nouveau volet contenant les traces de données UV si acquises.
<b>Save to Text File</b>	Génère un fichier texte contenant les données dans un volet, qui peut être ouvert dans Microsoft Excel ou d'autres programmes.
<b>Save Explore History</b>	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).

Tableau G-5 : Menu contextuel du volet de chromatogramme (suite)

Menu	Fonction
<b>Add Caption</b>	Ajoute une légende à l'emplacement du curseur dans le volet.
<b>Add User Text</b>	Ajoute une zone de texte à l'emplacement du curseur dans le volet.
<b>Set Subtract Range</b>	Définit la plage à soustraire dans le volet.
<b>Clear Subtract Range</b>	Efface la plage à soustraire dans le volet.
<b>Subtract Range Locked</b>	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.
<b>Delete Pane</b>	Supprime la fenêtre sélectionnée.

## 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 G-6 : Menu contextuel du tableau de résultats

Menu	Fonction
<b>Full</b>	(Plein) Affiche toutes les colonnes.
<b>Summary</b>	(Résumé) Affiche des colonnes spécifiques.
<b>Analyte</b>	(Analyte) Affiche un analyte spécifique.
<b>Analyte Group</b>	(Groupe d'analytes) Crée un groupe d'analytes.
<b>Sample Type</b>	(Type d'échantillon) Affiche des échantillons d'un type spécifique ou tous les échantillons.
<b>Add Formula Column</b>	(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.
<b>Table Settings</b>	(Paramètres du tableau) Modifie ou sélectionne un paramètre du tableau.
<b>Query</b>	(Requête) Crée ou sélectionne une requête.  Nous recommandons à l'utilisateur de valider toutes les requêtes utilisées pour analyser les données dans un tableau de résultats.
<b>Sort</b>	(Trier) Crée un tri simple ou par index.
<b>Metric Plot</b>	(Tracé métrique) Crée un tracé métrique.

## Menus contextuels

---

**Tableau G-6 : Menu contextuel du tableau de résultats (suite)**

Menu	Fonction
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 G-7](#).

**Tableau G-7 : Menu contextuel Peak Review (Examen des pics)**

Menu	Fonction
Options	(Options) Ouvre la boîte de dialogue Peak Review Options.
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 G-8 : Menu contextuel de la courbe d'étalonnage

Menu	Fonction
<b>Exclude (Include)</b>	(Exclure (Inclure)) Cliquez avec le bouton droit de la souris sur un point et cliquez sur <b>Exclude</b> pour exclure le point de la courbe. Cliquez sur un point avec le bouton droit de la souris puis cliquez sur <b>Include</b> pour inclure le point.
<b>Exclude All Analytes (Include All Analytes)</b>	(Exclure tous les analytes (Inclure tous les analytes)) Cliquez avec le bouton droit de la souris sur un point et cliquez sur <b>Exclude All Analytes</b> pour exclure tous les analytes de la courbe. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur un point et cliquez sur <b>Include All Analytes</b> pour inclure les points.
<b>Show Peak</b>	(Afficher le pic) Passe en revue un pic individuel.
<b>Overlay</b>	(Superposer) Superpose deux graphiques.
<b>Active Plot</b>	(Tracé actif) Détermine quel tracé est actif.
<b>Legend</b>	(Légende) Affiche la légende du graphique.
<b>Log Scale X Axis*</b>	(Échelle logarithmique axe des X) Utilise une échelle logarithmique pour l'axe des X.
<b>Log Scale Y Axis*</b>	(Échelle logarithmique axe des Y) Utilise une échelle logarithmique pour l'axe des Y.
<b>Delete Pane</b>	(Supprimer le volet) Supprime le volet actif.
<b>Home Graph</b>	(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 <b>Log Scale Y Axis</b> , versus <b>Log Scale X</b> , et pas uniquement sur un seul axe.	

# Glossaire des symboles

# H

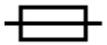
**Remarque** : les symboles figurant dans le tableau suivant ne s'appliquent pas tous à chaque instrument.

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. <b>Remarque</b> : Dans la documentation SCIEX, ce symbole signale un risque de blessure corporelle.

Symbole	Description
	<p>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.</p>
	<p>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.</p>
	<p>Consulter le mode d'emploi.</p>
	<p>Risque d'écrasement</p>
	<p>Marquage cTUVus pour le TUV Rheinland d'Amérique du Nord</p>
	<p>Symbole Data Matrix pouvant être lu par un lecteur de codes-barres pour obtenir un identificateur de dispositif unique (UDI)</p>
	<p>Risque pour l'environnement</p>
	<p>Connexion Ethernet</p>
	<p>Risque d'explosion</p>

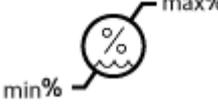
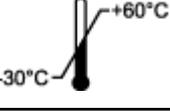
## Glossaire des symboles

---

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 SCIEIX 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 ( <b>min</b> ) et maximale ( <b>max</b> ) 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

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

Étiquette	Traduction (le cas échéant)
EN61326—1, EN61326—2-6, CLASS A, GROUP 1, ISM-IVD EQUIPMENT	ÉQUIPEMENT EN61326—1, EN61326—2-6, CLASSE A, GROUPE 1, ISM-IVD
IMPACT INDICATOR SENSITIVE PRODUCT WARNING	INDICATEUR D'IMPACT AVERTISSEMENT DE PRODUIT SENSIBLE  <b>Remarque</b> : si l'indicateur a été activé, ce conteneur a fait une chute ou a fait l'objet d'une mauvaise manipulation. Signaler l'incident sur le connaissance et vérifier l'absence de dommages. Toute réclamation pour des dommages liés à un choc nécessite une note écrite.
IMPORTANT! RECORD ANY VISIBLE CRATE DAMAGE INCLUDING TRIPPED "IMPACT INDICATOR" OR "TILT INDICATOR" ON THE WAYBILL BEFORE ACCEPTING SHIPMENT AND NOTIFY YOUR LOCAL AB SCIEX CUSTOMER SUPPORT ENGINEER IMMEDIATELY.  DO NOT UNCRATE. CONTACT YOUR LOCAL CUSTOMER SUPPORT ENGINEER FOR UNCRATING AND INSTALLATION.	IMPORTANT ! ENREGISTRER SUR LE CONNAISSEMENT TOUT DOMMAGE VISIBLE SUR LA CAISSE PARMIS LESQUELS LES « INDICATEURS D'IMPACT » OU LES « INDICATEURS D'INCLINAISON » ACTIVÉS AVANT D'ACCEPTER LA LIVRAISON ET LES SIGNALER IMMÉDIATEMENT VOTRE TECHNICIEN D'ASSISTANCE À LA CLIENTÈLE AB SCIEX.  NE PAS DÉBALLER. CONTACTER VOTRE TECHNICIEN D'ASSISTANCE À LA CLIENTÈLE POUR LE DÉBALLAGE ET L'INSTALLATION.
MINIMUM OF SIX PERSONS REQUIRED TO SAFELY LIFT THIS EQUIPMENT	SIX PERSONNES AU MINIMUM SONT REQUISES POUR SOULEVER CET ÉQUIPEMENT EN TOUTE SÉCURITÉ.  <b>Remarque</b> : Consulter le mode d'emploi.

Étiquette	Traduction (le cas échéant)
TIP & TELL	<p>Indicateur d'inclinaison</p> <hr/> <p><b>Remarque</b> : 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.</p> <hr/>
TiltWatch PLUS ShockWatch	<p>Indicateur d'inclinaison</p> <hr/> <p><b>Remarque</b> : 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.</p> <hr/>
WARNING: DO NOT OPERATE WITHOUT FIRST ENSURING BOTTLE CAP IS SECURED.	<p>AVERTISSEMENT : NE PAS UTILISER L'APPAREIL AVANT D'AVOIR VÉRIFIÉ QUE LE BOUCHON DU FLACON EST CORRECTEMENT FIXÉ.</p> <hr/> <p><b>Remarque</b> : cet avertissement figure sur le conteneur de trop-plein de l'évacuation de la source.</p> <hr/>
WARNING: NO USER SERVICEABLE PARTS INSIDE. REFER SERVICING TO QUALIFIED PERSONNEL.	<p>AVERTISSEMENT : AUCUNE PIÈCE RÉPARABLE PAR L'UTILISATEUR À L'INTÉRIEUR. CONFIER L'ENTRETIEN À UN PERSONNEL QUALIFIÉ.</p> <hr/> <p><b>Remarque</b> : Consulter le mode d'emploi.</p> <hr/>

# Nous contacter

---

## Formation destinée aux clients

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

## Centre d'apprentissage en ligne

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

## Assistance technique SCIEX

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

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

## Cybersécurité

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

## Documentation

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

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

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

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

---

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

---