ChemStation Agilent G1701DA pour CPG/DDM

Mise en route

Agilent Technologies

Avertissements

© Agilent Technologies, Inc.2006

Aucune partie de ce manuel ne peut être reproduite sous quelque forme et par quelque moyen que ce soit (y compris enregistrement et archivage électroniques ou traduction dans une autre langue) sans l'accord préalable et écrit de Agilent Technologies, Inc. dans le cadre des lois nationales et internationales sur le copyright et la propriété intellectuelle.

Numéro de référence du manuel

G1701-93061

Édition

Juin 2006
Agilent Technologies, Inc.
Imprimé aux États-Unis
5301 Stevens Creek Boulevard

Santa Clara, CA 95052

Garantie

Toutes les informations de ce document sont fournies "en l'état", et peuvent être modifiées sans préavis dans des éditions à venir. De plus, dans toute la mesure autorisée par les lois applicables, Agilent décline toute garantie expresse ou implicite en ce qui concerne ce manuel et toute information qu'il contient y compris – mais sans que cela soit limitatif – tout type de garantie implicite de valeur marchande et d'adéquation à une application particulière. Agilent ne saurait être tenu pour responsable en ce qui concerne les erreurs ou les dommages fortuits ou consécutifs à la fourniture, l'utilisation ou l'exploitation de ce document ou de toute information qu'il contient. Si Agilent et l'utilisateur sont liés par un contrat écrit séparé dont les termes de garantie concernant ce document sont en conflit avec les termes ci-dessus, les termes de la garantie du contrat séparé auront priorité.

Signalisation de sécurité

ATTENTION

Une mention **ATTENTION** signale un danger. Elle attire l'attention sur une procédure, une méthode ou autre dont l'exécution incorrecte ou le non-respect peut endommager le produit ou provoquer la perte de données importantes. Ne poursuivez pas au-delà d'une mention **ATTENTION** sans avoir bien compris et vérifié les conditions indiquées.

DANGER

La mention DANGER signale un risque corporel. Elle attire l'attention sur une procédure, une manipulation ou action similaire qui, si elle n'est pas exécutée correctement ou n'est pas respectée, risque d'entraîner des blessures corporelles voire la mort. Ne poursuivez pas au-delà d'une mention DANGER sans avoir bien compris et vérifié les conditions indiquées.

Sommaire

1 Guide de référence rapide de la ChemStation pour CPG/DDM

Contenu de ce manuel 6

Où trouver de l'aide 7

Nouveautés de cette version 14

Matériel 15

Vues ChemStation 18

Opérations courantes sur la ChemStation 28

Messages d'erreur et maintenance corrective 51

2 Maîtrise de la quantification

Quantification 58

Base de données de quantification 61

Didacticiel – Utilisation de la fonction AutoQuant Setup 69

3 Utilisation des rapports personnalisés

Rapports personnalisés 86

Création d'un modèle de rapport 88

Personnalisation de rapports 92

Sélection de cellules, de lignes et de colonnes 98

Impression de rapports 100

Création d'une base de données de rapports personnalisés 103

Sélection de plusieurs fichiers de données 107

Affichage et impression de graphiques 109

Boutons de la barre d'outils du programme Custom Reports 110

1
Guide de référence rapide de la ChemStation pour CPG/DDM

Contenu de ce manuel 6
Où trouver de l'aide 7
Nouveautés de cette version 14
Matériel 15
Vues ChemStation 18
Opérations courantes sur la ChemStation 28
Messages d'erreur et maintenance corrective 51

Contenu de ce manuel

Ce manuel donne un aperçu des éléments fournis avec votre système. Il est conçu pour vous aider à vous familiariser avec le système CPG/DDM.

Dans les pages suivantes, vous trouverez :

- des informations sur les aides complémentaires dont vous disposez ;
- des photos de votre matériel avec l'identification des principales pièces ;
- l'ensemble des barres d'outils du logiciel ChemStation pour CPG/DDM ;
- les procédures à suivre pour les opérations les plus courantes de la ChemStation ;
- un résumé du calendrier de maintenance ;
- une section contenant des conseils d'utilisation, les messages d'erreur et des conseils de dépannage ;
- une présentation des principes de la quantification avec la ChemStation pour CPG/DDM ainsi qu'un didacticiel vous montrant comment utiliser la fonction AutoQuant ;
- un guide de référence rapide sur l'utilisation du programme Custom Reports.

Pour plus d'informations, reportez-vous à l'aide en ligne ainsi qu'aux manuels électroniques et aux clips vidéo gravés sur votre CD-ROM ou DVD-ROM

Où trouver de l'aide

Votre système s'accompagne d'une large gamme de documents de référence, notamment des manuels imprimés, des fichiers d'aide en ligne et des manuels électroniques sur CD-ROM ou DVD-ROM.

Chaque matériel s'accompagne d'un CD-ROM ou DVD-ROM contenant une multitude de documents de référence et de clips vidéo décrivant comment utiliser l'équipement, l'entretenir et résoudre ses éventuels problèmes.

Ces documents de référence technique comprennent des informations détaillées sur les sujets suivants :

- Utilisation du matériel
- Maintenance du matériel
- Diagnostic et maintenance corrective du matériel

Les fichiers d'aide en ligne contiennent des instructions très complètes ainsi que des didacticiels sur l'utilisation de la ChemStation pour CPG/DDM : améliorations (Enhanced), aromatiques dans l'essence (Aromatics in Gasoline), analyses pharmaceutiques (Drug Analysis) et d'environnement (Environmental). Les sujets suivants y sont traités :

Data Analysis - Traitement des données

- Traitement des données
- Commandes et fonctions
- Utilisation et écriture des macros
- Glossaire des termes utilisés

Configuration du système DDM

- Configuration des instruments
- Configuration d'une carte GPIB
- Diagnostic du réseau
- Informations PC type de MSDCHEM.INI

Commande de l'intrument

- Utilisation des commandes de l'instrument
- Utilisation des méthodes
- Utilisation des séquences
- Traitement des données
- Utilisation du traitement par lots
- Réglage (étalonnage) du DDM
- Diagnostic des problèmes du DDM
- Contrôles de sécurité
- Gestionnaire de rapports
- Commandes et fonctions
- Utilisation et écriture des macros
- Glossaire des termes utilisés

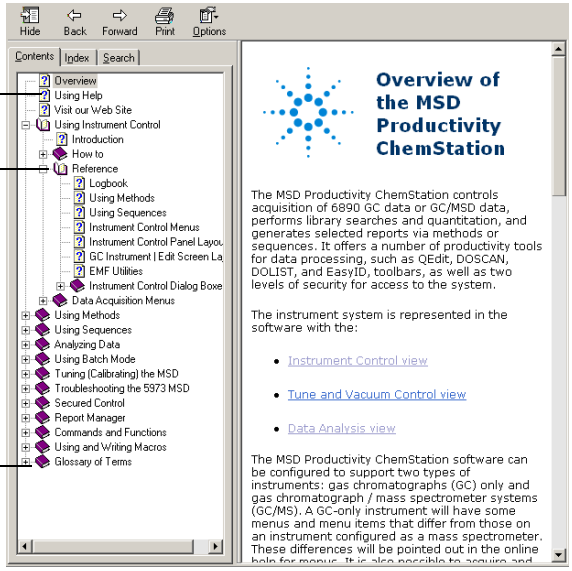
Les documents imprimés sont conçus pour vous aider à vous familiariser avec le logiciel. Ils comprennent les éléments suivants :

- Guide de référence rapide de la ChemStation pour CPG/DDM (ce document)
- Liste de vérification de la préparation du site
- Liste de vérification de l'installation matérielle
- Manuel d'utilisation du matériel
- Analyse de médicaments - mise en route

Utilisation des fichiers d'aide en ligne

Les fichiers d'aide en ligne contiennent des informations très complètes et des didacticiels sur la commande de l'instrument, l'acquisition de données, le traitement des données, les méthodes, la gestion des séquences, le réglage, le dépannage et l'utilisation des commandes et des variables du système.

Pour accéder à l'aide en ligne, sélectionnez les rubriques d'aide **Help** dans le menu d'aide Help d'une fenêtre, ou cliquez sur le bouton d'aide d'une boîte de dialogue.



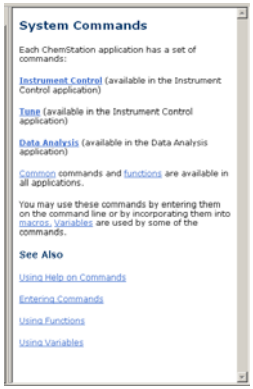
Icônes de l'Aide

Désigne un manuel contenant d'autres rubriques d'aide. Pour l'ouvrir, sélectionnez-le puis double-cliquez.

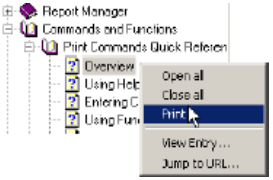
Signale un manuel de rubriques d'aide ouvert. Pour fermer un manuel ouvert, sélectionnez-le puis double-cliquez.

Signale une rubrique d'aide. Pour accéder à une rubrique, sélectionnez-la puis double-cliquez.

Option	Description
Hide/Show	Masquer/Afficher - Masque ou affiche la liste des rubriques d'aide.
Back	En arrière - Permet de revenir à la rubrique d'aide précédente.
Print	Imprimer - Imprime le livre ou la rubrique d'aide en cours.
Contents	Sommaire - Affiche la liste des rubriques d'aide (illustrée ci-contre).
Index	Permet d'utiliser des mots-clés pour parcourir l'index à la recherche d'une rubrique donnée.
Search	Rechercher - Permet de saisir un mot ou un groupe de mots, puis affiche une liste de toutes les rubriques d'aide contenant le ou les mots spécifiés.
Options	Permet de modifier certaines options de l'aide, telles que l'affichage des onglets.



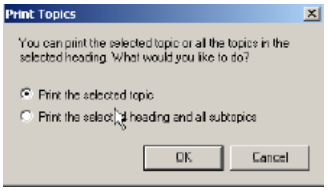
Impression d'une rubrique d'aide :



1 Sélectionnez la rubrique à imprimer (par exemple, **Overview**).

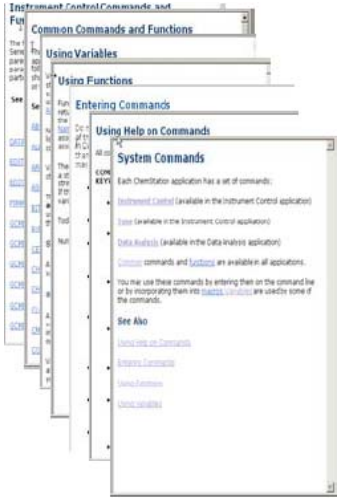
2 Cliquez avec le bouton droit de la souris et sélectionnez **Print**...

3 Sélectionnez **Print the selected topic**, puis cliquez sur **OK**.

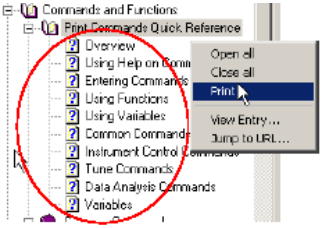


4 Vérifiez l'imprimante sélectionnée et cliquez sur **Print**.

5 Les informations figurant dans cette rubrique s'impriment. Les rubriques qui lui sont associées ne s'impriment pas.



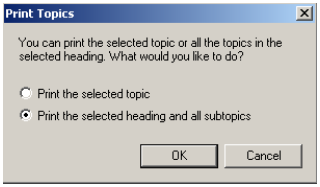
Impression simultanée de toutes les sous-rubriques d'un titre :



1 Sélectionnez la rubrique à imprimer (par exemple, **Print Commands Quick Reference**).

2 Cliquez avec le bouton droit de la souris et sélectionnez **Print**...

3 Sélectionnez **Print the selected heading and all subtopics**, puis cliquez sur **OK**.



4 Vérifiez l'imprimante sélectionnée et cliquez sur **Print**.

5 Les informations de TOUTES les rubriques du titre sélectionné s'impriment. Dans notre exemple, toutes les rubriques figurant sous **Print Commands Quick Reference** s'imprimeraient (soit environ 26 pages de texte).

NOTE

Si votre pointeur est placé sur une rubrique donnée sous ce titre (par exemple, **Tune Commands**) et que vous sélectionnez **Print the selected heading and all subtopics**, vous obtiendrez une copie de toutes les sous-rubriques, pas seulement de celles situées sous la rubrique en question.

Manuels de référence technique sur CD-ROM ou DVD-ROM

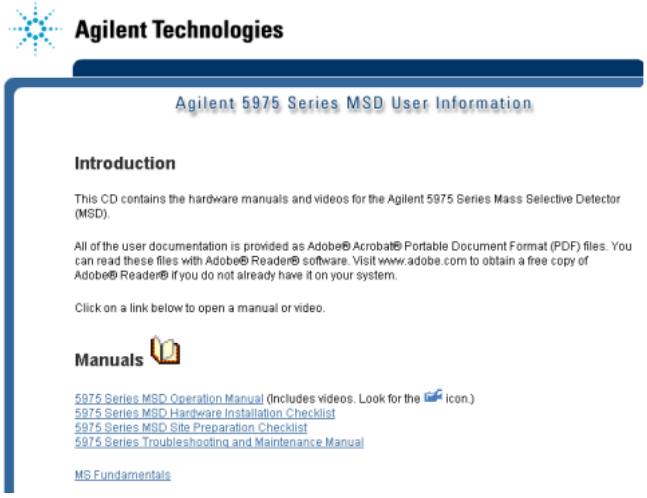
Chaque matériel s'accompagne d'un CD-ROM ou DVD-ROM contenant une multitude de documents de référence et de clips vidéo décrivant comment utiliser l'équipement, l'entretenir et résoudre ses éventuels problèmes.

Utilisation des manuels du CD-ROM ou DVD-ROM

1 Les manuels du CD-ROM ou DVD-ROM sont enregistrés au format PDF (lisible sous Acrobat d'Adobe). Les clips vidéo sont incorporés aux manuels PDF (QuickTime peut être requis) mais peuvent aussi être visualisés directement depuis le CD-ROM ou DVD-ROM à l'aide de Microsoft Media Player.

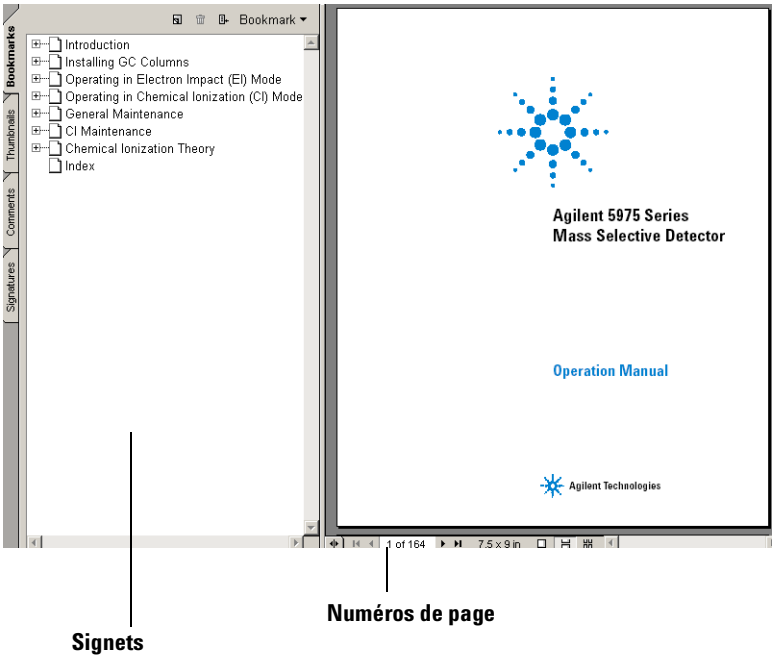
- Si vous ne possédez pas Adobe Acrobat Reader, vous pouvez le télécharger gratuitement depuis le site Adobe.fr.
- Si vous ne possédez pas QuickTime, vous pouvez le télécharger gratuitement à l'adresse Apple.com/quicktime.

2 Insérez le CD-ROM ou DVD-ROM dans le lecteur. Vous verrez apparaître un menu d'introduction répertoriant tous les manuels contenus sur ce CD-ROM ou DVD-ROM, comme illustré ci-dessous :

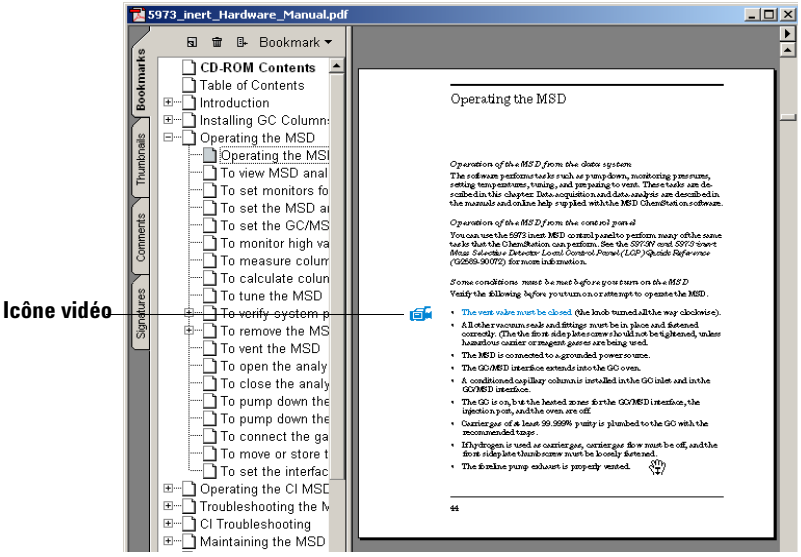


Exemple d'ouverture d'un menu sur un CD-ROM ou DVD-ROM d'infromation

3 Placez le pointeur sur l'un des manuels répertoriés. Lorsqu'il se transforme en **main**, cliquez avec le bouton gauche de la souris pour sélectionner ce manuel. La première page du manuel et les signets s'affichent.



4 Cliquez sur l'un des **signets** dans la colonne de gauche (par exemple, **Operating the MSD**) pour afficher la page correspondante.



Icône vidéo

5 L'icône **vidéo** identifie les sections contenant des clips vidéo. Cliquez sur cette icône pour voir comment effectuer la procédure de maintenance. Cliquez avec le bouton gauche de la souris pour lancer le clip vidéo. Celui-ci s'arrêtera automatiquement une fois terminé. Néanmoins, vous pouvez aussi appuyer sur la touche [Echap] pour l'interrompre à tout moment.

1 **Vent the MSD. See page 64.**

6 Lorsque vous déplacez votre pointeur sur une référence croisée, il se transforme pour indiquer que le texte est lié électroniquement à la page indiquée. Cliquez sur la référence croisée pour afficher cette page. Cliquez avec le bouton droit de la souris pour *revenir* à la page précédente.

7 Vous pouvez imprimer une page donnée ou un groupe de pages. Sélectionnez **Print**, puis entrez les pages à imprimer en vous servant des numéros de page figurant en bas de l'écran.

Nouveautés de cette version

Pour afficher une description de toutes les modifications apportées à cette version du logiciel, vous pouvez avoir recours à l'une des deux méthodes suivantes :

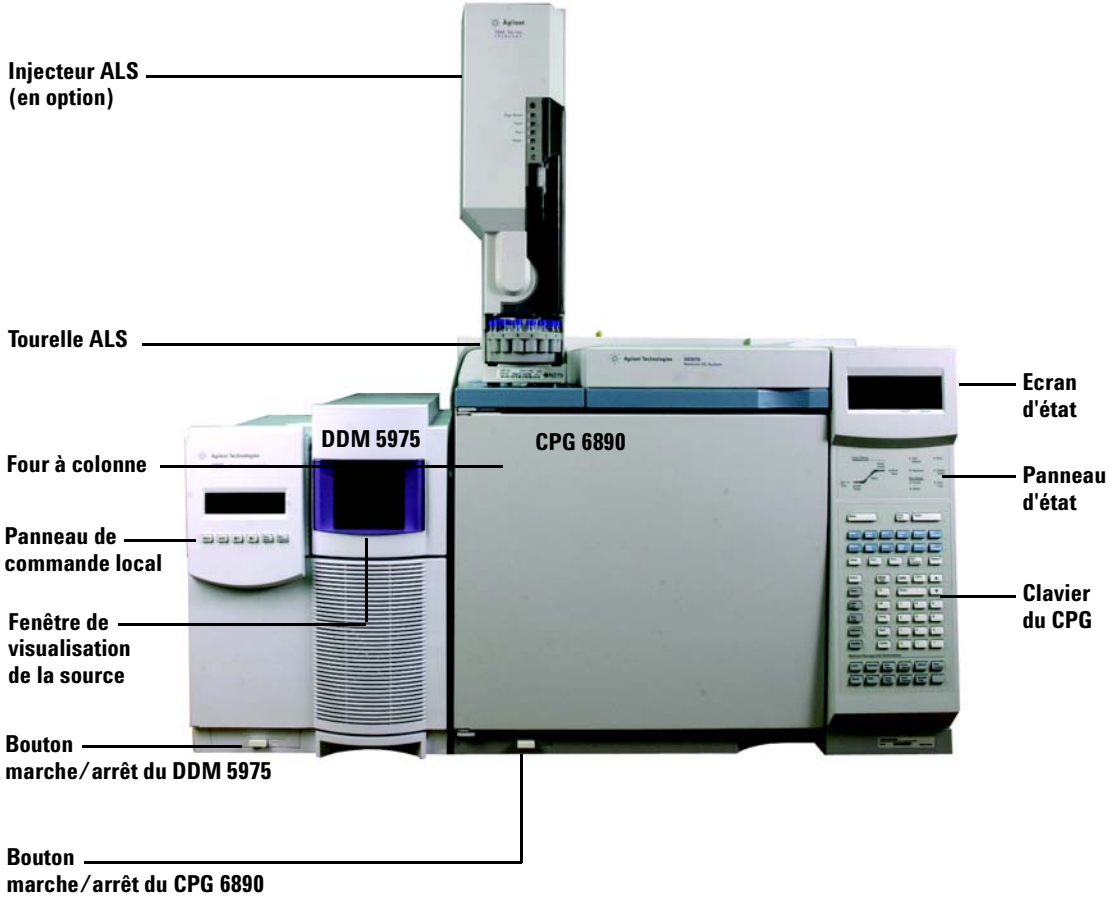
- Une fois la configuration initiale terminée, un message s'affiche vous demandant si vous voulez afficher immédiatement le fichier Readme (“Do you want to view the Readme file now”). Choisissez “Yes”.
- Dans l'écran de traitement des données Data Analysis ou de commande Instrument Control, sélectionnez **Help/View Revisions Readme File**.

Un fichier texte apparaît dans une fenêtre contextuelle. Vous pouvez le parcourir et le lire en ligne, y faire des recherches ou le copier.

Sélectionnez **File/Exit** pour revenir à l'application.

Matériel

DDM série 5975 avec un CPG 6890

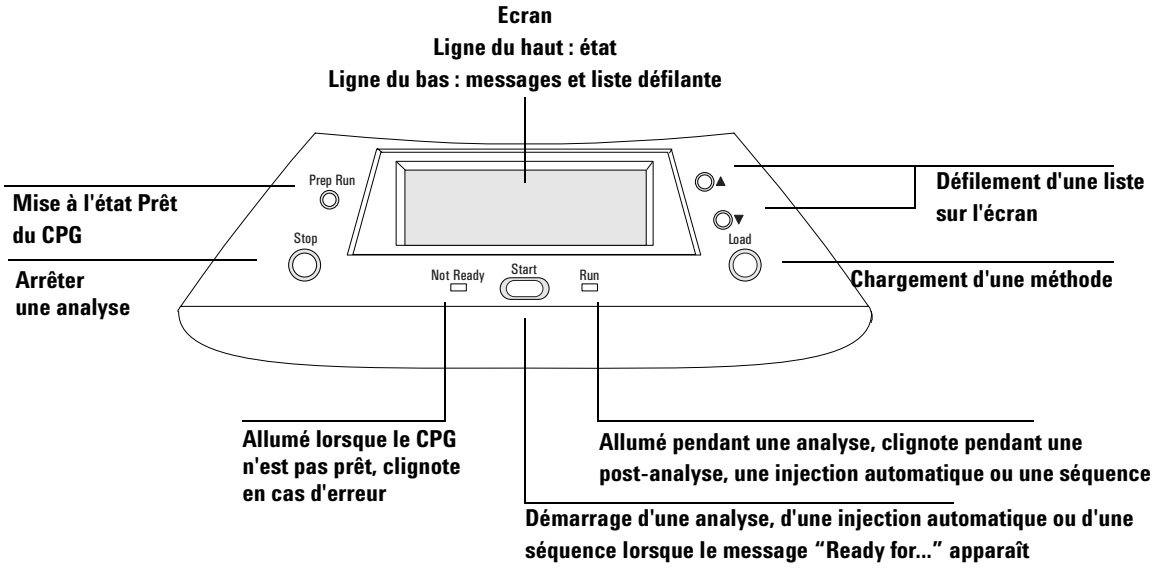


Clavier et écran du CPG 6850

Le logiciel ChemStation pour CPG/DDM permet de commander le CPG 6850. Vous pouvez ainsi l'utiliser à la place du clavier du CPG pour programmer l'instrument. Cependant, il vous faudra parfois utiliser le clavier pour exécuter rapidement l'une des tâches ci-dessous.

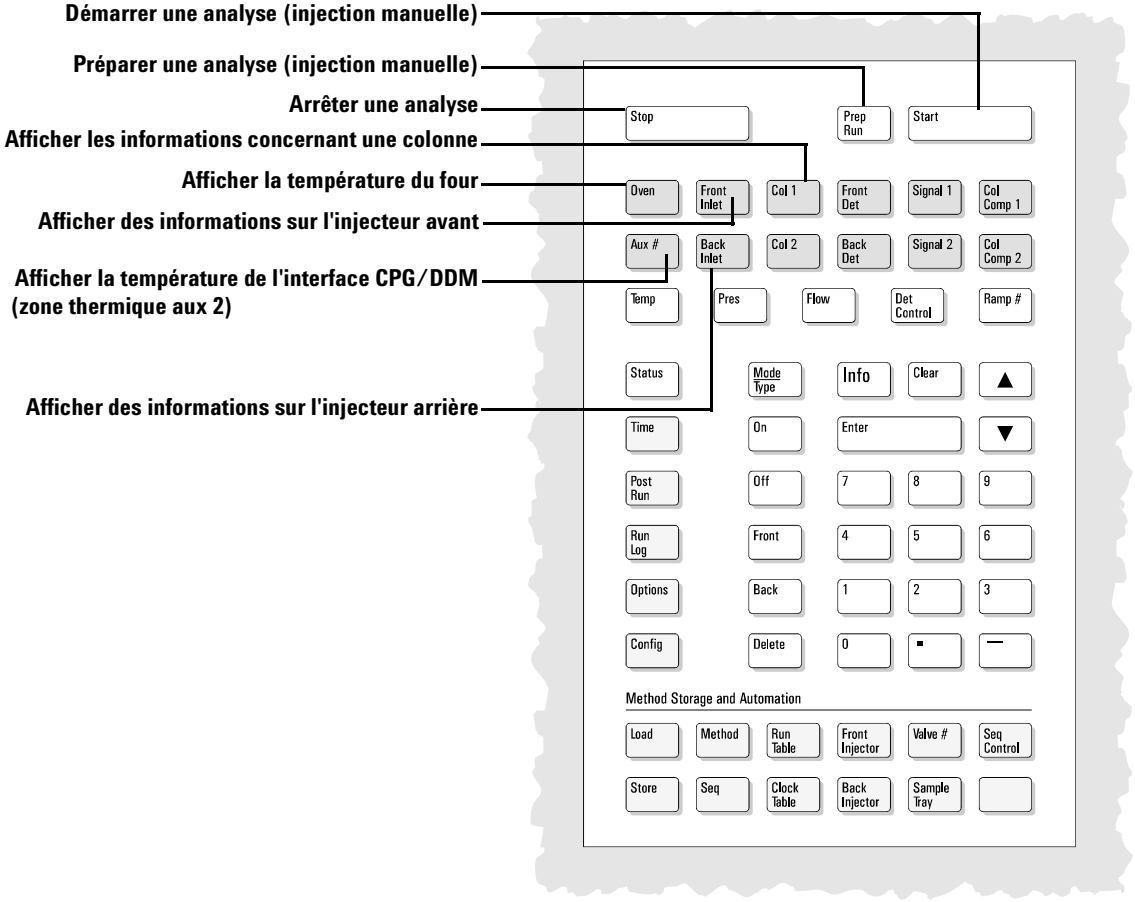
Selon la configuration définie par le module de commande ou la ChemStation pour CPG/DDM, l'écran défilant peut afficher les éléments suivants au cours d'une analyse :

- Température du four
- Pression d'injection
- Vitesse de débit de colonne
- Signal brut du détecteur
- Messages
- Informations de séquence
- Temps d'analyse



Clavier du CPG 6890

Le logiciel ChemStation pour CPG/DDM permet de commander le CPG 6890. Vous pouvez ainsi l'utiliser à la place du clavier du CPG pour programmer l'instrument. Cependant, il vous faudra parfois utiliser le clavier pour exécuter rapidement l'une des tâches ci-dessous.

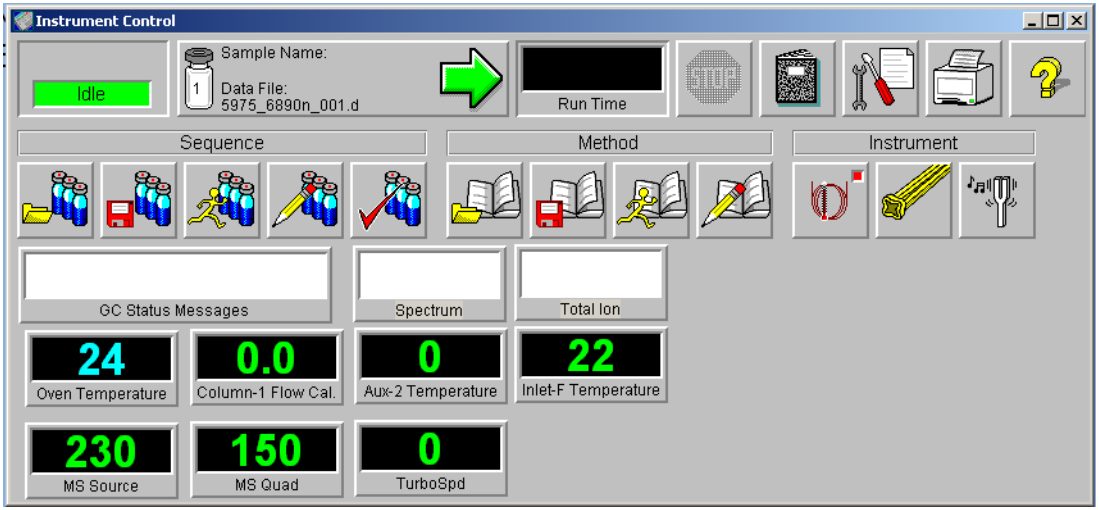


Vues ChemStation

Instrument Control View

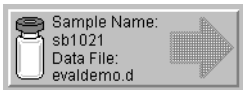
Vue de commande de l'instrument - Cette vue s'affiche lorsque vous démarrez la ChemStation pour CPG/DDM. Elle permet de définir et de contrôler les paramètres de l'instrument. Si vous êtes dans un autre écran, sélectionnez **View/Instrument Control** lorsque vous êtes prêt à configurer le système pour l'acquisition de données.

NOTE Voir l'aide en ligne pour plus de détails sur les menus, les boutons ou les fenêtres utilisés dans le logiciel.



Acquisition Status Indicator
Voyant d'état des acquisitions - Affiche l'état de l'analyse en cours.

Run Time
Temps d'analyse - Indique le temps restant jusqu'à la fin d'une analyse.



Start Run
Démarrer l'analyse - Affiche le nom de l'échantillon et du fichier de données de l'analyse prête à démarrer.

Stop
Le panneau Stop est rouge lorsqu'une analyse est en cours, gris dans le cas contraire. Utilisez ce bouton pour arrêter le système lorsqu'il est en mode PreRun, Run ou PostRun (préanalyse, analyse, postanalyse). Si le système est en mode analyse, il passera en mode postanalyse. S'il est en mode postanalyse, il passera en mode d'attente Idle.

Logbook
Journal - Affiche le menu contextuel du fichier-journal.

Maintenance Due
Maintenance requise - Affiche la boîte de dialogue Select early maintenance feedback (EMF) action.

Print
Imprimer - Affiche une boîte de dialogue contenant des éléments imprimables tels qu'un fichier-journal des séquences, la séquence en cours, les paramètres de l'instrument, les paramètres de traitement des données et les paramètres détaillés de traitement des données.

Help
Aide - Affiche l'aide relative à l'écran Instrument Control et donne accès au reste du système d'aide.

Load Sequence
Ouvrir une séquence - Ouvre la boîte de dialogue correspondante.

Save Sequence
Enregister une séquence - Ouvre la boîte de dialogue correspondante.

Run Sequence
Exécuter un séquence - Ouvre la boîte de dialogue correspondante.

Edit Sequence
Éditer une séquence - Ouvre la boîte de dialogue de la table d'échantillons Sample Log Table.

Simulate Sequence
Simuler une Séquence - Permet de tester une séquence.

Load Method
Ouvre la boîte de dialogue Load Method.

Save Method
Enregistre la méthode en cours.

Run Method
Ouvre la boîte de dialogue Start Run.

Edit Method
Permet de modifier la méthode en cours.

GC Parameters
Permet de modifier les paramètres du CPG et les moniteurs du CPG.

MS Parameters
Permet de modifier les paramètres d'acquisition SM et les moniteurs SM.

Tune parameters
Permet de régler le DDM.

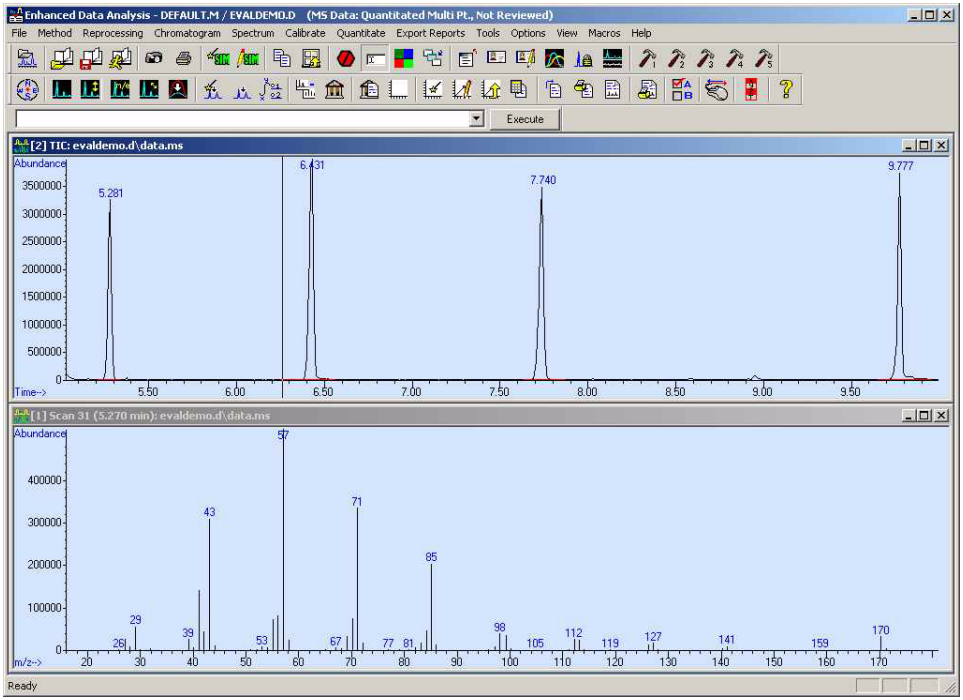
Ecran Data Analysis

L'écran Data Analysis s'affiche lorsque vous démarrez une session de traitement des données ou lorsque vous sélectionnez **View/Data Analysis (offline)** dans l'écran Instrument Control. Il permet d'exécuter des tâches telles que les suivantes :

- Définition des paramètres d'intégration
- Etalonnage d'une méthode
- Quantification des données
- Personnalisation et impression de rapports

Le traitement des données contient aussi divers outils de productivité comme QEdit, DOSCAN, DOLIST, EasyID et des barres d'outils. En outre, il existe un didacticiel sur l'utilisation de la quantification.

NOTE Voir l'aide en ligne pour plus de détails sur les menus, les boutons ou les fenêtres utilisés dans le logiciel.



Boutons de la barre d'outils Data Analysis

Load Data File
Charge le fichier de données sélectionné (.D) et affiche le chromatogramme du courant ionique total (CIT) pour ce fichier.

Load Method
Permet de choisir le fichier méthode (*.M) à charger dans une arborescence.

Save Method
Permet d'enregistrer toute modification apportée à la méthode en cours.

Run Method
Exécute uniquement la partie Traitement des données de la méthode en cours. Vous devez choisir le nom du fichier de sortie à imprimer. Ce fichier de sortie indique le nom du fichier dans lequel sera stocké le document. Celui-ci est stocké dans un format lisible par l'imprimante, non par le programme que vous utilisez pour imprimer.

Snapshot
Affiche les données acquises jusqu'à ce que l'instantané soit activé. Cette fonction n'est pas disponible pour les données uniquement CPG.

Print
Imprimer - Permet d'imprimer la fenêtre sélectionnée, le CIT et le spectre, ou la méthode en cours.

Generate AutoSIM Method
Produire une méthode AutoSIM - Ouvre la boîte de dialogue de préparation d'une méthode fragmentométrique automatique.

Edit SIM Parameters
Permet de modifier les paramètres SIM dans la table de groupe SIM.

Copy
Copier - Permet de copier la fenêtre sélectionnée dans le Presse-papiers.

Reset Windows
Réinitialiser les fenêtres - Restaure la position par défaut des fenêtres de graphiques.

Abort
Abandonner - Interrompt une commande ou une macro.

Command Line
Ligne de commande - Active ou désactive l'affichage de la ligne de commande.

Edit Colors
Éditer les couleurs - Permet de régler les couleurs des différents éléments d'affichage dans l'écran de traitement des données Data Analysis.

Iconize/Restore Graphics
Réduire/restaurer les graphiques - Permet de réduire ("iconiser") et de restaurer les fenêtres de graphiques affichées.

Close Screen Reports
Fermer les fenêtres de rapports - Referme toutes les fenêtres de rapports ouvertes.

EasyID
Permet de mettre à jour les temps de rétention attendus et les rapports d'ions des données SM dans une base de données de quantification existante en fonction des différents composés.

QEdit
Permet d'afficher et de modifier les résultats de la quantification après qu'un fichier de données a été quantifié.

Peak Purity
Pureté de pic - Permet de détecter des recouvrements de pics (pics à plusieurs composantes) dans un chromatogramme (CPG/SM uniquement).

Retention Time Lock
Verrouillage des temps de rétention - Permet d'accéder à l'écran RTLock Setup utilisé pour définir les paramètres de cette fonction.

Signal-to-Noise
Rapport signal/bruit - Permet d'effectuer un contrôle de ce rapport, puis de d'afficher ou d'imprimer les mesures.

CUSTOM TOOL 1
OUTIL PERSONNALISÉ 5 - Permet d'exécuter une macro personnalisée. Cette macro doit d'abord être créée, puis nommée CUSTOMTOOL1. Voir l'aide en ligne pour plus de détails sur l'utilisation et la création de macros ainsi que sur les commandes de l'écran Data Analysis.

CUSTOM TOOL 2
OUTIL PERSONNALISÉ 5 - Permet d'exécuter une macro personnalisée. Cette macro doit d'abord être créée, puis nommée CUSTOMTOOL2. Voir l'aide en ligne pour plus de détails sur l'utilisation et la création de macros ainsi que sur les commandes de l'écran Data Analysis.

CUSTOM TOOL 3
OUTIL PERSONNALISÉ 5 - Permet d'exécuter une macro personnalisée. Cette macro doit d'abord être créée, puis nommée CUSTOMTOOL3. Voir l'aide en ligne pour plus de détails sur l'utilisation et la création de macros ainsi que sur les commandes de l'écran Data Analysis.

CUSTOM TOOL 4
OUTIL PERSONNALISÉ 5 - Permet d'exécuter une macro personnalisée. Cette macro doit d'abord être créée, puis nommée CUSTOMTOOL4. Voir l'aide en ligne pour plus de détails sur l'utilisation et la création de macros ainsi que sur les commandes de l'écran Data Analysis.

CUSTOM TOOL 5
OUTIL PERSONNALISÉ 5 - Permet d'exécuter une macro personnalisée. Cette macro doit d'abord être créée, puis nommée CUSTOMTOOL5. Voir l'aide en ligne pour plus de détails sur l'utilisation et la création de macros ainsi que sur les commandes de l'écran Data Analysis.

Hide/Show Navigation
Masquer/afficher l'arborescence - Permet d'afficher ou de masquer le volet de navigation.

Draw Chromatogram
Dessiner le chromatogramme - Retrace le chromatogramme d'origine du fichier de données en cours sans libellés ni marques d'intégration.

Scale Chromatogram
Mettre le chromatogramme à l'échelle - Redimensionne le chromatogramme sélectionné en fonction des facteurs d'échelle spécifiés.

Ion Chromatograms
Fragmentogrammes - Extrait et affiche des "chromatogrammes d'ions extraits" (CIE) du chromatogramme du courant ionique total (CIT) relatif au fichier de données en cours (CPG/SM uniquement).

Merged Format
Supperposition - Provoque l'affichage superposé des CIE (CPG/SM uniquement).

Overlay Chromatograms
Recouvrement de chromatogrammes - Permet de sélectionner plusieurs chromatogrammes et de les afficher en mode superposé.

AutoIntegrate
Intégrer automatiquement - Tente de trouver les meilleurs paramètres d'intégration pour le chromatogramme en cours, puis intègre ce dernier. Cette action n'est pas autorisée si l'intégrateur RTE est défini dans la méthode.

Integrate
Intégrer - Intègre le chromatogramme en cours à l'aide des paramètres définis pour l'intégrateur sélectionné.

Integration Parameters
Paramètres d'intégration - Ouvre une boîte de dialogue permettant de modifier les paramètres ou les événements de l'intégrateur sélectionné.

Subtract
Soustrire - Soustrait un spectre d'un autre et affiche la différence.

Select Library
Choisir une bibliothèque - Affiche la boîte de dialogue Library Search Parameters dans laquelle vous pouvez sélectionner les bibliothèques à utiliser pour des recherches PBM du spectre sélectionné.

Library Search Report
Rapport de recherche en bibliothèque - Intègre le CIT en cours, parcourt la bibliothèque sélectionnée à la recherche de correspondances pour chaque pic et génère un rapport.

Set Up Quant
Définir la quantification - Permet de définir une base de données de quantification en spécifiant des valeurs globales et en entrant des composés.

AutoQuant
Permet de créer une base de données de quantification de manière semi-automatique.

Edit Compounds
Modifier les composés - Permet de visualiser et de modifier les informations de la base de données en fonction des différents composés.

Update Calibration
Mise à jour de l'étalonnage - Permet d'ajouter, de supprimer ou de modifier un niveau d'étalonnage dans la base de données de quantification sélectionnée.

Calculate Quant Report
Calculer le rapport de quantification - Quantifie le fichier en cours et génère un rapport de quantification.

Generate Quant Report
Élaborer le rapport de quantification - Génère un rapport de quantification pour un fichier déjà quantifié.

Print Quant Report
Imprimer le rapport de quantification - Imprime le rapport de quantification.

Custom Reports
Rapports personnalisés - Lance le logiciel de personnalisation des rapports. Si la méthode ne possède pas de base de données de quantification, ou si aucun fichier de données n'est chargé, vous pouvez utiliser des valeurs par défaut.

Print Custom Report
Imprimer le rapport personnalisé - Imprime le modèle de rapport personnalisé spécifié par la méthode, à l'aide du fichier de données en cours.

Data Analysis Options
Options de traitement des données - Ouvre la boîte de dialogue de sélection Select DA Options.

Switch Data Analysis Mouse Actions
Permute entre les actions traditionnelles du menu contextuel accessible par clic droit et de nouvelles options.

Show/Hide Stack (Variable Watch)
Permet d'afficher ou de masquer la fenêtre de registres (surveillance variable).

Online Help
Affiche l'aide en ligne de la ChemStation pour CPG/DDM.

Opérations courantes sur la ChemStation

Mise sous vide (démarrage) du DDM

1 Avant de procéder à la mise en pompage, vérifiez que votre système remplit toutes les conditions suivantes :

- ❒ La vanne d'évent est fermée (le bouton est tourné à fond dans le sens des aiguilles d'une montre).
- ❒ Tous les autres joints d'étanchéité et raccords sont en place et correctement fixés (la vis de la plaque latérale avant *ne doit pas être serrée).*
- ❒ Le DDM est relié à une source d'alimentation mise à la terre.
- ❒ L'interface CPG/DDM se prolonge jusque dans le four du CPG.
- ❒ Une colonne capillaire conditionnée est installée dans le port d'injection du CPG et dans l'interface CPG/DDM.
- ❒ Le CPG est allumé, mais les zones chauffées de l'interface CPG/DDM, le port d'injection et le four sont éteints.
- ❒ Un gaz vecteur d'une pureté minimale de 99,999 % est raccordé au CPG avec les pièges recommandés.
- ❒ Si vous utilisez de l'hydrogène comme gaz vecteur, veillez à ce que son débit soit arrêté et à ce que la vis moletée avant de la plaque latérale ne soit pas trop serrée.
- ❒ Les effluents de la pompe primaire sont rejetés de manière appropriée.

DANGER **Vérifiez que votre DDM remplit TOUTES les conditions mentionnées ci-dessus. Le non-respect de cette consigne peut être à l'origine de blessures corporelles.**

2 Sélectionnez **View/Tune and Vacuum Control**.

3 Sélectionnez **Vacuum/Pump Down**.

4 À l'invite du logiciel, mettre le DDM en marche (interrupteur d'alimentation).

5 Engagez la plaque latérale dans le système d'entrée en exerçant une pression de la main.

6 Ouvrez le menu de commande de l'instrument.

7 Appuyez légèrement sur le panneau latéral afin de garantir une parfaite étanchéité.

La pompe primaire émet alors un gargouillement qui devrait cesser au bout d'une minute. Si ce bruit persiste, il y a une fuite d'air *importante* dans le système probablement au niveau de la plaque latérale, de l'écrou de colonne de l'interface ou de la vanne de mise à l'air.

8 Une fois la communication avec le PC établie, cliquez sur **OK**. En 10 à 15 minutes, la pompe à diffusion doit être chaude, ou la pompe turbo avoir atteint 80 % de sa vitesse. Au final, la pompe turbo doit atteindre au moins 95 %.

ATTENTION Si ces conditions ne sont pas remplies, la pompe primaire sera arrêtée. Vous devez alors redémarrer le DDM. Si le DDM ne se met pas correctement en pompage, consultez l'aide en ligne pour obtenir des informations sur la résolution des problèmes de fuites d'air et autres problèmes de vide.

9 Lorsque vous y êtes invité, démarrez le chauffage de l'interface CPG/DDM et le four du CPG. Cliquez sur **OK** lorsque c'est fait. Le logiciel active alors les chauffages de la source et du filtre de masse (quad). Les consignes de température sont enregistrées dans le fichier d'autoréglage (*.u) en cours.

ATTENTION N'activez aucune zone chauffée du CPG en l'absence de gaz vecteur. Faire chauffer une colonne sans débit de gaz vecteur la détériore.

10 Lorsque le message **Ok to run** s'affiche, attendez deux heures que le DDM atteigne l'équilibre thermique.

ATTENTION Les données acquises avant que le DDM n'ait atteint l'équilibre thermique risquent de ne pas être reproductibles.

ATTENTION Si vous utilisez un gaz toxique, comme de l'ammoniac, serrez les vis de la plaque latérale du DDM. Ne les serrez pas avant d'avoir atteint le vide : vous risqueriez d'endommager le joint et de provoquer une fuite.

Mise à l'air (arrêt) du DDM

1. Si votre DDM 5975 est équipé d'un contrôleur de jauge à vide, sélectionnez **Vacuum/Turn Vacuum Gauge on/off** dans l'écran Tune and Vacuum Control. Sur le DDM 5973, vérifiez que votre contrôleur de jauge externe est hors tension.
2. Mettez la jauge hors tension.
3. Avant de mettre un DDM 5973 CI à l'air, appuyez sur le bouton [Gas Off]. Cette action a pour effet de couper le flux de gaz réactif et de fermer le robinet d'isolement.

DANGER **Sur un DDM 5973 CI, le voyant Gas Off doit être allumé lors de la mise à l'air du DDM.**

4. Dans l'écran Tune and Vacuum Control, sélectionnez **Vacuum Menu/Vent**. Suivre les instructions qui s'affichent.

DANGER **Si vous utilisez de l'hydrogène comme gaz vecteur, veillez à ce que son débit soit arrêté avant de mettre le DDM hors tension. Si la pompe primaire est à l'arrêt, l'hydrogène s'accumule dans le DDM et une explosion risque de se produire. Lisez le Guide de sécurité (G3170-90010) sur le gaz vecteur hydrogène compris dans votre manuel avant de faire fonctionner le DDM avec le gaz vecteur hydrogène.**

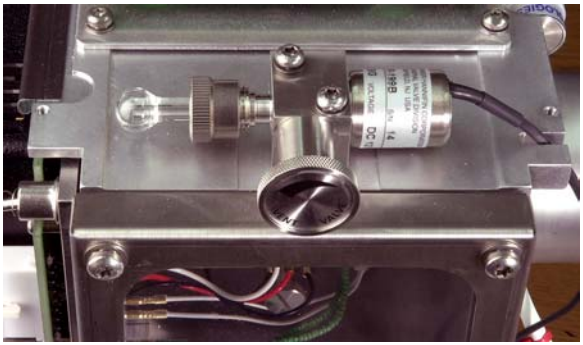
ATTENTION Vérifiez que le four du CPG et l'interface CPG/DDM sont froids avant d'arrêter le débit du gaz vecteur.

5 Lorsque vous y êtes invité, mettez le DDM hors tension.

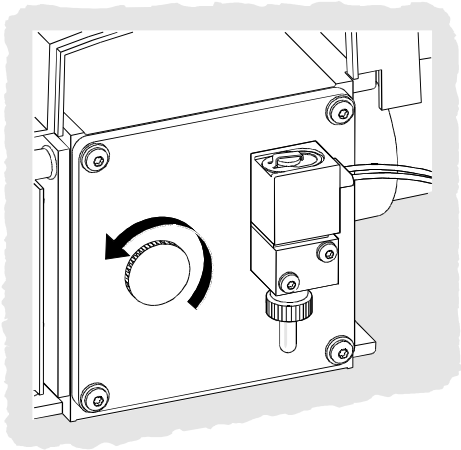
6 Débranchez le cordon d'alimentation du DDM.

7 Retirez le capot de l'analyseur (5973) ou celui de la fenêtre de visualisation de la source (5975).

8 Tournez le bouton de la vanne d'évent dans le sens contraire des aiguilles d'une montre de trois quart de tour seulement ou jusqu'à ce que vous entendiez le sifflement de l'air entrant dans la chambre de l'analyseur.



Vanne d'évent du 5975



Vanne d'évent du 5973

ATTENTION Ne tournez pas le bouton trop loin : le joint torique risquerait de se déloger. Ne pas oublier de revisser le bouton avant de remettre l'enceinte sous vide.

DANGER **Laissez refroidir l'analyseur (température ambiante) avant de le toucher.**

ATTENTION Il est recommandé de toujours porter les gants propres fournis avec l'appareil lors de la manipulation des pièces qui se logent à l'intérieur de la chambre de l'analyseur.

Réglage du DDM

Il est recommandé de procéder régulièrement au réglage du DDM afin de maintenir ses performances à un niveau optimal. Le réglage consiste à ajuster les paramètres du DDM de manière à ce que l'instrument réponde à certains critères de fonctionnement. La fréquence de ces réglages dépend du nombre et du type d'échantillons que vous analysez ainsi que de l'état général de votre système.

NOTE Réglez toujours le DDM en utilisant une température de four du CPG, un débit de colonne et une température d'analyseur identiques à ceux qui seront utilisés pour l'acquisition de données.

Conservez les rapports de réglage dans un classeur afin de pouvoir comparer facilement plusieurs rapports successifs.

Réglage du DDM

Dans l'écran Instrument Control :

1 Cliquez sur l'icône **Tune Parameters** (affiche uniquement les deux premiers menus répertoriés à l'étape 2) ou sélectionnez **View/Tune and Vacuum Control**.

2 Dans le menu Tune, sélectionnez l'une des options suivantes selon les performances requises par votre application.

- **Tune MSD**
  Réglage DDM - Permet d'obtenir une sensibilité maximale sur toute la gamme de balayage.
- **QuickTune**
  Réglage rapide - Ajuste la largeur de pic, l'attribution des masses et l'abondance sans changer les rapports ioniques.
- **Autotune (Atune.U)**
  Autoréglage - Permet d'obtenir une réponse maximale sur toute la gamme de balayage.
- **Low Mass Autotune (Lomass.U)**
  Autoréglage à basse masse - Optimise le réglage pour le bas de la plage de masse.
- **Standard Spectra Tune (Stune.U)**
  Réglage spectral normalisé - Permet d'obtenir une réponse standard sur toute la gamme de balayage. Cette option peut diminuer la sensibilité.
- **DFTPP Tune (DFTPP.U)**
  Réglage BFB - Règle spécifiquement pour la méthode EPA 625.
- **BFB Tune (BFB.U)**
  Réglage BFB - Règle spécifiquement pour la méthode EPA 624.
- **Tune Wizard. . .**
  Assistant de réglage - Affiche une série de boîtes de dialogue vous permettant de définir les ratios d'abondance cibles et d'ajuster les critères de réglage. Cette option est utilisée pour le réglage cible.

- **Air and Water Check**
  Contrôle air et eau - Effectue une mesure standard et génère un rapport standard des niveaux d'air (azote *m/z* 28) et d'eau (*m/z* 18) relativement au pic *m/z* 69 du PFTBA . Utilisez cette option pour vérifier l'absence de fuites. L'abondance de *m/z* 28 doit être inférieure à celle de *m/z* 18, et chacune d'elle doit être inférieure à 5 % de *m/z* 69.
- **Tune Evaluation**
  Évaluation du réglage - Evalue le fichier de réglage en cours.

3 Consultez le rapport de réglage.

4 Pour afficher l'historique des résultats de réglage, sélectionnez **File/View Tunes**.

Utilisation du réglage manuel

Le réglage manuel permet de définir de manière interactive les paramètres du DDM, tels que les tensions des lentilles et les masses de réglage, en fonction des besoins de votre analyse. Ce type de réglage offre souvent une sensibilité supérieure à celle du réglage automatique.

Le réglage manuel permet de configurer une rampe de paramètres individuels et de spécifier la gamme ainsi que le pas de rampe. Les résultats de la rampe sont affichés avec indication sur le tracé de la valeur optimale du paramètre.

Vous pouvez acquérir deux types de données en mode de réglage manuel : des balayages de masses (tracent l'abondance et la forme de pic des masses de réglage) et des balayages de spectres (tracent le signal sur la gamme de masses complète).

Pour plus d'informations sur le réglage manuel, reportez-vous à l'aide en ligne.

Acquisition des données

Configuration du CPG pour son utilisation avec le DDM

Dans l'écran de commande Instrument Control :

1. Dans le menu Instrument, sélectionnez **Inlet/Injection Types.** Sélectionnez le dispositif d'injection approprié, puis cochez la case **Use MS**. Cliquez sur **OK**.
2. Dans le menu Instrument, sélectionnez **Edit GC Parameters**.
3. Cliquez sur **Aux**. Vérifiez que vous utilisez le canal auxiliaire 2, que l'élément chauffant est activé et réglé sur la température souhaitée et que le type sélectionné est *MSD*.
4. Cliquez sur **Columns**. Vérifiez que le détecteur est *MSD* et que *Vacuum* est sélectionné pour l'option Outlet psi. Cliquez sur **OK**.

Injection d'un échantillon à l'aide du passeur d'échantillons

Dans l'écran de commande Instrument Control :

1. Placez le flacon contenant l'échantillon dans le plateau du passeur d'échantillons.
2. Cliquez sur l'icône **Run Method** ou sélectionnez **Method/Run Method**.
3. Lorsque la boîte de dialogue Start Run s'affiche, entrez les informations sur l'échantillon :
   - ❒ Indiquez un chemin de données spécifique à l'échantillon.
   - ❒ Indiquez un nom de fichier de données spécifique à l'échantillon.
   - ❒ Entrez le numéro de position du flacon d'échantillon dans le champ **Vial**.
   - ❒ (Facultatif) Renseignez les champs **Operator Name**, **Sample Name** et **Misc Info** pour documenter l'injection.
   - ❒ Vérifiez que l'option *Data Acquisition* est sélectionnée. Sélectionnez l'option **Data Analysis** si vous voulez générer l'un des rapports spécifiés dans la méthode.

4 Cliquez sur **Run Method** pour démarrer l'analyse.

ATTENTION

Ne vous servez *pas* du bouton **Start** du CPG pour lancer une analyse lorsque le passeur d'échantillons est utilisé.

Injection manuelle d'un échantillon

Dans l'écran de commande Instrument Control :

1 Dans le menu Instrument, sélectionnez **Inlet/Injection Types**.

2 Dans la boîte de dialogue Inlet and Injection Parameters, sélectionnez **Manual** comme dispositif d'injection.

3 Sur le clavier du CPG, appuyez sur [Prep Run]. Cette action annule le débit de l'économiseur de gaz, amène le débit de l'injecteur à sa valeur de consigne et ferme la vanne de purge (pour injection sans division uniquement).

4 Sélectionnez **Method/Run Method**.

5 Lorsque la boîte de dialogue Start Run s'affiche, entrez les informations sur l'échantillon comme décrit ci-dessous :

- ❒ Indiquez un chemin de données spécifique à l'échantillon.
- ❒ Indiquez un nom de fichier de données spécifique à l'échantillon.
- ❒ (Facultatif) Renseignez les champs **Operator Name**, **Sample Name** et **Misc Info** pour documenter l'injection.
- ❒ Vérifiez que l'option *Data Acquisition* est sélectionnée.
- ❒ (Facultatif) Sélectionnez l'option **Data Analysis** si vous voulez générer l'un des rapports spécifiés dans la méthode.

6 Cliquez sur **Run Method** pour démarrer l'analyse. Si les températures sont stables, la boîte de dialogue Prepare To Inject s'affiche. Dans le cas contraire, le message **Waiting for GC ready** s'affiche.

7 Une fois que les températures du CPG se sont stabilisées (6890 GC - le voyant Pre Run du CPG est allumé, 6850 GC - le

voyant Not Ready est éteint), injectez l'échantillon et appuyez sur le bouton [Start] du CPG.

ATTENTION N'injectez pas l'échantillon si le CPG n'est pas prêt. Vous risqueriez d'obtenir des résultats erronés.

Édition de la méthode entière

Dans la vue de commande "Instrument Control", sélectionner **Method/Edit Entire Method**. La boîte de dialogue d'édition de la méthode permet de sélectionner chacune des parties à éditer :

- Method Information - Informations générales sur la méthode
- Instrument/Acquisition - Toutes les boîtes de dialogue CPG et SM concernées sont affichées pour la saisie.
- Data Analysis - Traitement des données

En cliquant sur **OK**, les boîtes de dialogue des sections sélectionnées s'affichent au fur et à mesure de l'avancement de la saisie.

À l'invite de l'enregistrement de la méthode, on peut entrer au besoin un nom différent. Si un modèle de rapport personnalisé a été spécifié comme type de rapport, le système invite l'utilisateur à indiquer s'il souhaite enregistrer avec le fichier de données une copie du rapport généré.

Préparation d'une séquence

La préparation d'une séquence consiste à définir le Sample Log Table, un journal des échantillons. Chaque ligne du journal contient des informations concernant l'analyse d'un échantillon (un flacon, s'il s'agit d'un échantillonneur automatique).

1. Si la Sample Log Table n'est pas déjà ouverte, sélectionnez **Sequence / Edit Sequence** ou cliquez sur le bouton **Edit Sequence** de l'écran de commande de l'instrument.
2. Cliquez sur une ligne de vide de la table. Cliquez ensuite sur la flèche de la boîte intitulée **Type** et sélectionnez le type d'échantillon ou que vous allez analyser.

3 À l'aide de la touche de tabulation ou de la souris, allez au champ du flacon **Vial** et saisissez son numéro.

4 Allez au champ **Method** et saisissez le nom de la méthode à utiliser avec l'échantillon en cours. (Pour lister les méthodes, cliquez sur le bouton **?** de ce même champ.)

5 Indiquez les noms du fichier **Data File** et de l'échantillon **Sample**, ajoutez un commentaire **Comment** ainsi que le code-barres attendu **Expected Barcode**.

6 Remplissez tout autre champ utile relatif à votre échantillon.

NOTE Les champs qui apparaissent à l'écran dépendent du **Type** d'échantillon sélectionné.

7 Une fois que vous avez terminé, cliquez sur OK.

Pour ajouter le contenu d'une autre séquence à la séquence en cours , sélectionnez **Sequence/Additional Sequence Options...** puis **Append Sequence**.

Traitement des données du SM

Vous pouvez charger un fichier de données depuis le **Navigation panel** ou en sélectionnant **Load Data File** dans l'écran de traitement des données Data Analysis.

Ouverture d'un fichier de données

Pour charger un fichier de données dans l'écran de traitement Data Analysis :

1 Cliquez sur l'icône **Load Data File** ou sélectionnez **Load Data File** dans le menu File.

2 Sélectionnez un fichier de données (double-cliquez sur un nom de fichier ou entrez un nom, puis cliquez sur **OK**). Le

chromatogramme correspondant au fichier de données est chargé et s'affiche dans la fenêtre [2].

ATTENTION Un fichier de données doit être chargé pour que vous puissiez exécuter les tâches décrites dans cette section.

Intégration d'un chromatogramme

1. Si l'intégrateur que vous souhaitez utiliser n'est pas sélectionné, ouvrez le menu Chromatogram et cliquez sur **Select Integrator**. Choisissez un intégrateur, puis cliquez sur **OK**.
2. Sélectionnez **Chromatogram/Integrate**.
3. (Facultatif) Sélectionnez **Chromatogram/Integration Results**. Un rapport contenant les résultats sous forme tabulaire s'affiche. Lorsque vous avez fini de consulter les résultats, cliquez sur **Close**.

Sélection d'un spectre

NOTE Si un menu s'affiche lorsque vous cliquez avec le bouton droit de la souris dans la fenêtre [1] ou [2], utilisez le bouton **Switch Data Analysis Mouse Actions** pour basculer entre les modes de clic droit.

Faites un double-clic avec le bouton *droit* de la souris sur le temps qui vous intéresse dans le chromatogramme. Le spectre apparaît dans la fenêtre [1].

Zoom avant

1 Placez le pointeur dans l'un des coins de la zone à agrandir dans un chromatogramme ou un spectre.
2 Cliquez sur le bouton *gauche* de la souris et maintenez-le enfoncé tout en faisant glisser la souris pour sélectionner la zone à agrandir.
3 Relâchez le bouton de la souris. La zone sélectionnée est agrandie aux dimensions de la fenêtre.

Zoom arrière

1 Placez le pointeur de la souris à un endroit quelconque de la fenêtre agrandie.
2 Faites un double-clic avec le bouton *gauche* de la souris.

Moyenne de spectres

1 Placez le pointeur dans le chromatogramme au début de la gamme dont vous souhaitez calculer la moyenne.
2 Cliquez avec le bouton *droit* de la souris tout en la faisant glisser jusqu'à la fin de la gamme dont vous souhaitez calculer la moyenne.
3 Relâchez le bouton de la souris. La moyenne des spectres contenus dans la gamme sélectionnée est effectuée et le spectre ainsi obtenu est affiché dans la fenêtre [1].

Addition de deux spectres

1 Sélectionnez un spectre (double-cliquez avec le bouton *droit* de la souris dans le chromatogramme).
2 Sélectionnez un second spectre (double-cliquez avec le bouton *droit* de la souris dans le chromatogramme).
3 Sélectionnez **Spectrum/Add**. Les deux spectres sont additionnés et le spectre résultant s'affiche dans la fenêtre [1].

Soustraction de deux spectres

1 Sélectionnez un spectre (double-cliquez avec le bouton *droit* de la souris dans le chromatogramme).

2 Sélectionnez le spectre à soustraire (double-cliquez avec le bouton *droit* de la souris dans le chromatogramme).

3 Sélectionnez **Spectrum/Subtract**.

Le spectre sélectionné à l'étape 2 est soustrait du spectre sélectionné à l'étape 1 et le spectre résultant s'affiche dans la fenêtre [1].

Soustraction de spectres du bruit de fond

1 Sélectionnez un spectre ou faites la moyenne d'une gamme de spectres à soustraire du fichier de données.

2 Sélectionnez **File/Subtract Background (BSB)**. Le système exécute les tâches suivantes :

- Le spectre sélectionné est soustrait de chaque balayage dans le fichier de données en cours.
- Les données soustraites sont stockées dans un sous-répertoire BSB figurant dans le même répertoire que le fichier de données.
- Le fichier de données soustrait devient le fichier de données en cours et s'affiche dans la fenêtre [2].

Affichage/masquage des menus étendus

Dans l'écran de traitement des données Data Analysis, sélectionnez **Options/Show Extended Menus**. Les éléments de menus supplémentaires seront inclus dans les listes déroulantes existantes.

Affichage des menus de Macros

Dans l'écran de traitement des données Data Analysis, sélectionnez **Options/Show Macro Menus**. Une sélection de **Macro Menus** s'affiche alors dans la barre de sélection de menus.

Affichage de plusieurs fichiers de données sur l'écran

Dans l'écran de traitement des données Data Analysis, sélectionnez **View/Analyze Multiple Data Files...**. On peut y afficher jusqu'à 9 chromatogrammes simultanément. Pour retourner à l'écran de traitement de données standard, sélectionnez **View/Return to Data Analysis**.

Affichage de plusieurs spectres sur l'écran

Dans l'écran de traitement des données Data Analysis, sélectionnez **View/Analyze Multiple Spectra...**. Cela permet d'afficher plusieurs spectres simultanément. Pour retourner à l'écran de traitement de données standard, sélectionnez **View/Return to Data Analysis**.

Utilisation des bibliothèques de spectres

Sélection d'une bibliothèque

1 Dans l'écran de traitement des données Data Analysis, sélectionnez **Spectrum/Select Library**.

2 Dans la boîte de dialogue **Library Search Parameters**, entrez le nom de la bibliothèque sur la première ligne.

   Vous pouvez entrer jusqu'à deux bibliothèques supplémentaires pour la recherche. La recherche dans ces bibliothèques supplémentaires n'est possible que si un composé présentant la qualité de correspondance spécifiée a été trouvé.

Intégration des pics et recherche en bibliothèque

Pour intégrer un chromatogramme de courant ionique total et élaborer automatiquement un rapport de recherche en bibliothèque pour chaque pic détecté, procédez comme suit.

1 Dans l'écran de traitement des données Data Analysis, ouvrez un fichier de données. Le chromatogramme de courant ionique total s'affiche.

2 Sélectionnez **Spectrum/Library Search Report**.

3 Lorsque la boîte de dialogue **Library Search Report Options** s'affiche, sélectionnez les options souhaitées pour le rapport de recherche en bibliothèque :
   - Sélectionnez **Summary** ou **Detailed** pour déterminer le format du rapport.
   - Sélectionnez une ou plusieurs destinations (**Screen**, **Printer** et **File**).
   - Sélectionnez un **Integration Parameter File**. Laissez le champ vide pour une intégration automatique à l'aide de l'intégrateur de ChemStation pour CPG/DDM.
   - Sélectionnez le spectre à utiliser au niveau de chaque pic (**Apex, Apex - Start of Peak, Apex - Background at time ou Peak Average**).
4 Cliquez sur **OK** pour lancer la recherche.

   Le chromatogramme est intégré et un spectre de chaque pic est recherché. Les résultats de l'intégration apparaissent à l'écran. Le rapport de recherche en bibliothèque est envoyé vers les destinations sélectionnées à l'étape 3.
5 Sélectionnez **Chromatogram/Integration Results** pour afficher la table des résultats d'intégration.

Recherche sur un spectre unique

1 Dans l'écran de traitement des données Data Analysis, ouvrez un fichier de données.
2 Sélectionnez un **spectre**.
3 Faites un double-clic avec le bouton droit de la souris dans la fenêtre contenant le spectre.

NOTE Si un menu s'affiche lorsque vous cliquez avec le bouton droit de la souris dans la fenêtre [1] ou [2], utilisez le bouton **Switch Data Analysis Mouse Actions** pour basculer entre les modes de clic droit.

Une fois la recherche terminée, les résultats apparaissent à l'écran. Le spectre correspondant au composé inconnu, le spectre de référence que vous avez sélectionné dans la liste des éléments trouvés et, le cas échéant, la structure chimique du composé de référence s'affichent.

4 Affichage des autres données spectrales :

- Cliquez sur un autre composé dans la liste des éléments trouvés pour afficher un autre spectre de référence.
- Cochez la case **Difference** pour afficher la différence entre le spectre inconnu et le spectre de référence.

5 Affichage des autres informations :

- Cliquez sur **Statistics** pour afficher des informations concernant la qualité de chaque élément de la liste.
- Cliquez sur **Text** pour afficher les informations d'en-tête enregistrées dans la bibliothèque correspondant au spectre de référence sélectionné.

6 Cliquez sur **Print** pour imprimer une copie des spectres affichés.

7 Cliquez sur **Done** pour effacer les résultats de la recherche de l'écran.

Utilisation du verrouillage des temps de rétention

Le verrouillage des temps de rétention est une procédure qui évalue les caractéristiques d'une méthode donnée (colonne, points de consigne de débit, paramètres de four) de sorte que tout changement effectué au niveau de la colonne, qui affecterait normalement les temps de rétention, est annulé. Cette procédure implique de collecter des données pour un composé (dont le temps de rétention souhaité est connu) à différentes pressions d'entrée situées aux alentours du point de consigne de la méthode en cours (20 %, 10 %, pression nominale, +10 %, +20 %). Les cinq analyses résultantes sont ensuite évaluées et une courbe pression/temps de rétention est générée pour caractériser l'instrument correspondant. A partir de cette courbe, une pression théorique entraînant l'élution du composé verrouillé au moment souhaité peut être calculée et mémorisée de sorte que la méthode puisse s'exécuter à cette pression.

Verrouillage d'une méthode SM

1. Dans l'écran Instrument Control, chargez la méthode à verrouiller. Modifiez les paramètres de la méthode, si besoin est.
2. Pour des injections ALS, placez le flacon en position 1.
3. Sélectionnez **Method/Acquire RTLock Calibration Data**. Cette option démarre la collecte des fichiers d'étalonnage de verrouillage TR.
4. La pression nominale sera évaluée pour la gamme d'étalonnage de 20 %, 10 %, +10 % et +20 %, et cinq analyses seront automatiquement effectuées. Le système affiche un message vous indiquant que les cinq analyses vont être effectuées. S'il existe des données d'étalonnage antérieures, ce message vous le précise également. Les cinq fichiers de données sont stockés dans le répertoire de la méthode, dans un dossier nommé RTLOCK, avec les noms RTLOCK1 à RTLOCK5.
5. Après la collecte des données, une nouvelle session de traitement des données démarre et l'analyse nominale (RTLOCK3.D) est chargée. Sélectionnez le pic (cliquez avec le bouton droit de la souris tout en la faisant glisser) à utiliser pour les calculs d'étalonnage du verrouillage TR.
6. Le spectre du pic sélectionné s'affiche. Cliquez sur **Yes** pour que le logiciel localise automatiquement le pic du composé verrouillé dans les quatre autres analyses. Le logiciel effectue à présent des comparaisons de spectres et détermine les ajustements de courbes. Les cinq pics sélectionnés s'affichent.
7. L'équation de courbe (basée sur le temps de rétention en fonction des valeurs de pression) s'affiche et le système vous demande si vous souhaitez continuer. Cliquez sur **Yes**.
8. Entrez ensuite le temps de rétention de verrouillage à utiliser et cliquez sur **OK**.
9. Cliquez sur **Yes** pour enregistrer dans la méthode les informations sur la pression de verrouillage. Entrez le nom du composé à utiliser pour le verrouillage et cliquez sur **OK**.

10 La système vous donne à présent la possibilité de supprimer les fichiers de données d'étalonnage (RTLOCK1.D - RTLOCK5.D). Choisissez **Yes** ou **No**. La méthode est désormais verrouillée.

Chaque fois qu'une méthode verrouillée est chargée dans l'écran Instrument Control, la barre de titre indique que cette méthode est verrouillée et spécifie le composé utilisé pour le verrouillage. La pression (instruments en ligne uniquement) est réglée sur la pression verrouillée.

NOTE Lorsqu'une méthode verrouillée est exécutée, la pression est rétablie à la valeur de pression verrouillée MÊME si vous avez effectué des changements à l'aide du clavier du CPG ou à partir de l'écran Instrument Control.

Calendrier de maintenance

Les opérations de maintenance sont décrites dans les manuels de référence techniques fournis avec votre système. La fréquence à laquelle il convient d'effectuer ces opérations de maintenance varie selon les systèmes. Tenez un journal des opérations de maintenance réalisées.

Quotidienne

- ❒ Contrôlez le septum et remplacez-le si nécessaire.
- ❒ Contrôlez l'étanchéité des inserts du port d'injection.
- ❒ Contrôlez l'étanchéité des écrous de colonne.

Hebdomadaire

- ❒ Contrôlez le niveau du liquide de la pompe primaire.
- ❒ Changez les inserts et les joints toriques du port d'injection.

Mensuelle

- ❒ Nettoyez le piège de l'orifice de l'injecteur avec/sans division.
- ❒ Vérifiez qu'il n'y a pas de fuites (injecteur, branchements de la colonne).

Trimestrielle

- ❒ Remplacez les bouteilles de gaz (lorsque la pression est inférieure à 500 psig).

Semestrielle

- ❒ Remplacez le liquide de la pompe primaire.
- ❒ Vérifiez le flacon d'étalonnage et remplacez-le si nécessaire.

Annuelle

- ❒ Vérifiez le liquide de la pompe à diffusion et remplacez-le si nécessaire.
- ❒ Remettez en état ou remplacez les pièges et filtres chimiques internes et externes sur le CPG.

Selon les besoins

- ❒ Réglez le DDM.
- ❒ Nettoyez la source.
- ❒ Remplacez le piège de gaz vecteur.
- ❒ Remplacez les pièces usées (filaments, EM, etc.).
- ❒ Remplacez la colonne.
- ❒ Lubrifiez les joints.

Avertissements de sécurité

DANGER

Ne procédez pas aux opérations de maintenance lorsque le DDM est sous tension ou connecté à sa source d'alimentation, sauf mention contraire dans la documentation fournie avec le DDM.

L'interface CPG/DDM peut être sous tension et à une température dangereusement élevée, même lorsque le DDM est hors tension. Une fois éteinte, l'interface CPG/DDM se refroidit très lentement. Vérifiez que toutes les pièces ont refroidi avant de les manipuler.

Soyez vigilant lorsque vous travaillez à l'arrière du CPG. Pendant les cycles de refroidissement du four, le CPG évacue des gaz chauds susceptibles d'occasionner des brûlures.

Si vous analysez des produits chimiques toxiques ou utilisez des solvants toxiques, utilisez un tuyau pour évacuer les gaz émis par la pompe primaire hors du laboratoire. Remarquez que le piège fourni avec les pompes primaires standard ne retient que l'huile de pompe primaire, il ne piège ni ne filtre les produits toxiques.

Lorsque vous remplacez le liquide de la pompe, mettez des gants résistant aux substances chimiques et des lunettes de protection. Éviter de toucher directement le fluide.

L'isolation des injecteurs, des détecteurs, du boîtier de vanne et des buses est faite de fibres céramiques réfractaires (RCF). Évitez d'inhaler les particules de RCF. Aérez votre espace de travail, portez des manches longues, des gants, des lunettes de protection et un respirateur jetable. Jetez les isolants dans un sac en plastique hermétiquement fermé. Après avoir manipulé des RCF, lavez-vous les mains à l'eau froide et au savon.

Conseils d'utilisation

- ❒ Sauvegardez *régulièrement* vos données et vos méthodes.
- ❒ Assurez-vous que le fichier de réglage que vous utilisez est adapté à vos échantillons.
- ❒ Conservez les rapports de réglage dans un classeur afin de pouvoir les consulter ultérieurement.
- ❒ Effectuez la maintenance du système conformément au calendrier indiqué dans la documentation technique du CPG et du DDM. Conservez une trace de toutes les opérations de maintenance réalisées.
- ❒ Lors de la mis à l'air du DDM, profitez du fait que le CPG est froid pour effectuer des opérations de maintenance telles que remplacer les inserts de l'injecteur, les septa, etc.
- ❒ Après la mise en pompage, attendez *au moins 2 heures* que le DDM atteigne l'équilibre thermique avant de procéder à un réglage ou à une acquisition de données.
- ❒ En général, la sensibilité optimale s'obtient à des débits de colonne de 1,2 ml/min ou moins.
- ❒ Lors de l'injection de volumes supérieurs à un microlitre, utilisez le mode pulsé sans division et augmentez la température initiale du four de 10 à 20 °C.
- ❒ Pour les injections **sans** division, le mode pulsé produit un transfert d'échantillons plus quantitatif dans la colonne. Une pression d'impulsion égale au double de la pression d'entrée initiale est courante.
- ❒ Dans la plupart des cas, le mode **Constant Flow** produit la séparation la plus efficace.
- ❒ Lorsque votre colonne est neuve, vérifiez que les écrous sont toujours bien étanches après les premiers cycles de températures du four.
- ❒ Utilisez les touches [Config Status] sur le clavier du CPG 6890 pour définir les trois éléments d'affichage auxquels vous accordez le plus d'importance (**time**

remaining, **oven temp**, etc.). Ces éléments restent alors visibles en permanence, quel que soit l'écran ChemStation activé.

- Rincez et remplissez à nouveau des flacons de rinçage du passeur d'échantillons. Évitez de remplir excessivement les flacons.
- Consultez le tableau suivant pour savoir quand utiliser les modes d'acquisition SIM ou Scan.

Tâche	Mode
Analyser un mélange contenant des composés inconnus.	Scan ou Scan et SIM
Analyser un mélange contenant des composés connus en quantités inconnues (quantification).	Scan ou SIM ou Scan et SIM
Identifier quelques composés connus présents à des niveaux faibles à l'intérieur d'un mélange.	SIM

- Lorsque vous choisissez des masses pour le mode SIM, utilisez la masse exacte imprimée dans le rapport de tabulation et non la masse nominale figurant sur l'affichage du spectre. Vous obtiendrez ainsi des données plus précises.
- Lors d'une analyse SIM, utilisez le mode à faible résolution sauf si vous cherchez à déterminer les rapports de masse en uma. Une résolution faible offre une sensibilité et une répétabilité optimales.
- Choisissez la gamme de balayage la plus étroite possible pour obtenir de bons résultats de recherche en bibliothèque. Il en résulte davantage de spectres à travers le pic et une meilleure quantification.

Messages d'erreur et maintenance corrective

Messages d'erreur

Un problème dans votre DDM provoque parfois l'apparition d'un message d'erreur dans le logiciel ChemStation pour CPG/DDM. Certains messages d'erreur apparaissent uniquement pendant le réglage. D'autres s'affichent pendant le réglage ou la commande de l'instrument.

Il peut arriver qu'un simple code numérique s'affiche à la place du message. Ce code peut représenter un ou plusieurs messages d'erreur.

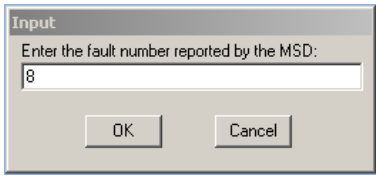
Conversion d'un code d'erreur en message d'erreur SM :

1 Notez le code numérique.

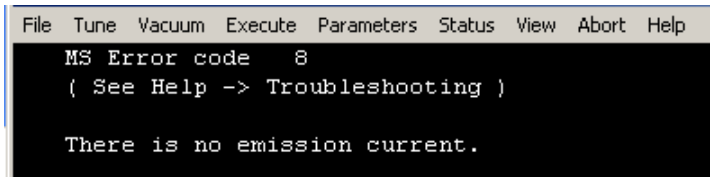
2 Dans l'écran Instrument Control, sélectionnez **View/Tune and Vacuum Control**.

3 Sélectionnez **Status/MS Error Codes**.

4 Entrez le code numérique de l'erreur dans la zone prévue à cet effet, puis cliquez sur **OK**.



Le(s) message(s) d'erreur correspondant(s) s'affiche(nt).



Conseils de dépannage

Erreur LAN du DDM

Le DDM est allumé, mais le message “Server not found! Check LAN Connection (vérifier les connexions LAN)

Ce message est normal lors de la mise sous tension du DDM. Il signifie que la ChemStation pour CPG/DDM n'a pas encore établi de connexion avec le DDM. Si le message clignote encore après le lancement de la mise en pompage, trois causes sont possibles :

- Une coupure de courant temporaire a interrompu les communications.
- La connexion entre le DDM et la ChemStation pour CPG/DDM et/ou le service Agilent Bootp et/ou le commutateur/hub est défectueuse.
- Les adresses MAC et IP du DDM sont mal configurées dans le service Agilent Bootp pour le réseau local.

Élévation de la ligne de base

- Ressuage de colonne
- Autre contamination

Pression de la pompe primaire ou de l'enceinte à vide trop élevée

- Débit de colonne excessif
- Fuite d'air
- Niveau de liquide de la pompe à diffusion trop bas
- Contamination du liquide de la pompe à diffusion
- Niveau d'huile de la pompe primaire trop bas
- Contamination de l'huile de pompe primaire
- Tuyau flexible de circuit primaire pincé (ce qui entraîne une pression d'enceinte à vide trop élevée mais une pression de pompe primaire trop faible)

Bruit de fond élevé dans les spectres de masse

- Fuite d'air
- Pression de la pompe primaire ou de l'enceinte à vide trop élevée
- Autre contamination

Ions à *m/z* 18, 28, 32 et 44

- Mise à l'air récente du détecteur (air et eau résiduels)
- Fuite d'air

Isotopes manquants ou rapports isotopiques incorrects

- Réglage incorrect
- Source encrassée
- Bruit de fond élevé
- Tension du multiplicateur d'électrons trop élevée
- Tension du repousseur trop élevée
- Vitesse de balayage élevée (mode Scan)
- Temps de résidence faible (mode SIM)
- Pics trop larges ou trop étroits
- Inversion des conducteurs du repousseur et de focalisation d'ions

Absence de pics

- Concentration d'échantillon incorrecte
- Absence d'analytes
- Seringue manquante ou mal installée (ALS uniquement)
- Flacon d'échantillon vide
- Injection en mode avec division au lieu du mode sans division

Traînées de pics

- Sites actifs dans le trajet de l'échantillon
- Injection trop importante
- Port d'injection trop froid
- Débit de colonne trop faible
- Interface CPG/DDM ou source ionique trop froide

Pics avec sommets plats

- Temps de délai du solvant trop court
- Échelle d'affichage erronée
- Injection trop importante
- Tension du multiplicateur d'électrons trop élevée

Pics avec sommets dédoublés

- Mauvaise technique d'injection
- Injection trop importante

Largeurs de pic incohérentes

- Réglage incorrect
- Pas de PFTBA dans le flacon d'étalonnage
- Défaillance de la vanne d'étalonnage
- Source encrassée
- Multiplicateur d'électrons usé
- Le DDM n'a pas eu suffisamment de temps pour atteindre l'équilibre thermique
- Variations importantes de la température du laboratoire

Mauvaise répétabilité

- Aiguille de seringue sale
- Fuite au niveau du port d'injection
- Insert du port d'injection et quantité injectée incompatibles
- Raccords des colonnes desserrés
- Variations de pression, de débit de colonne et de température
- Source encrassée
- Raccords desserrés dans l'analyseur
- Boucle de masse

Sensibilité faible

- Réglage incorrect
- Le fichier de réglage ne correspond pas au type d'analyse
- Températures incorrectes
- Concentration d'échantillon incorrecte
- Fuite au niveau du port d'injection
- Rapport de division incorrect
- Temps de purge trop court en mode sans division
- Pression trop élevée dans le DDM
- Source encrassée
- Fuite d'air
- Fonctionnement défectueux du détecteur
- Filament défectueux
- Polarité du filtre de masse incorrecte

Dérive du temps de rétention

- La colonne a été raccourcie (TR plus court)
- Colonne vétuste (TR plus court)
- Sites actifs dans le trajet de l'échantillon (TR plus long)

- Débit de colonne réduit (TR plus long)
- Fuite au niveau du port d'injection (TR plus long)
- Modification de la température du four (augmentation = TR plus court,
  diminution = TR plus long)

Pour plus d'informations, reportez-vous à la rubrique relative au dépannage du DDM dans l'aide en ligne.

2
Maîtrise de la quantification

Quantification 58
Contenu de ce chapitre 58
Introduction 58
Comment la quantification fonctionne-t-elle dans la ChemStation pour CPG/DDM ? 59
Base de données de quantification 61
Introduction 61
Comment créer manuellement une base de données de quantification ? 63
Comment la fonction AutoQuant Setup fonctionne-t-elle ? 68
Didacticiel – Utilisation de la fonction AutoQuant Setup 69
Procédure : utilisation de la fonction AutoQuant Setup pour créer une base de données de quantification 70

Quantification

Contenu de ce chapitre

Ce chapitre vous présente les principales étapes nécessaires à la création d'une base de données de quantification. Celles-ci constituent un point de départ pour se familiariser avec le logiciel.

Une fois que vous avez bien compris la procédure, effectuez les étapes du didacticiel présenté à la fin de ce chapitre, puis essayez de créer une base de données de quantification à l'aide de vos propres fichiers de données. Consultez l'aide en ligne pour obtenir plus d'informations sur ces fonctions et leur utilisation.

Introduction

A quoi sert la quantification ?

La quantification sert à déterminer la quantité d'un composé dans un échantillon.

Quand la quantification a-t-elle lieu ?

La quantification a lieu pendant la dernière phase de l'analyse d'un échantillon (une fois le composé identifié).

Comment la quantification est-elle réalisée ?

La quantification est réalisée en comparant la réponse d'une quantité inconnue de composé (les données extraites d'une analyse) à celle d'une quantité mesurée de composé (stockée dans la base de données de quantification).

Nous reviendrons plus tard sur la base de données de quantification.

Comment la quantification fonctionne-t-elle dans la ChemStation pour CPG/DDM ?

Vous trouverez ci-dessous une description très générale de la manière dont la ChemStation détermine la quantité d'un composé dans un échantillon. Il s'agit d'un processus en deux phases.

Phase 1 - Acquisition des données

La première phase consiste en l'*acquisition des données*, brièvement exposée ci-dessous.

En termes simplifiés, lorsque vous placez un échantillon inconnu dans le CPG/MSD, il est chauffé, pressurisé et séparé en composants individuels avant de traverser un détecteur de la ChemStation. Toutes ces opérations s'effectuent conformément à la méthode que vous avez définie.

Le détecteur décèle le profil unique de chaque composé, puis la ChemStation le compare à des profils connus stockés dans la bibliothèque associée à votre méthode. Si elle trouve une correspondance, elle le signale.

Par conséquent, si le profil de l'un des composés présents dans votre échantillon correspond au profil de xxx stocké dans la bibliothèque associée à votre profil, la ChemStation peut en conclure qu'elle a trouvé xxx dans votre échantillon.

La création de la phase d'acquisition des données de la méthode est un processus hautement spécialisé qui dépasse le cadre de ce document. Pour plus d'informations sur la création de méthodes, reportez-vous à l'aide en ligne.

Dans le didacticiel à la fin de ce document, nous utiliserons la méthode par défaut, le fichier de données de démonstration et la bibliothèque de spectres de démonstration fournis avec votre ChemStation pour expliquer la fonction AutoQuant Setup.

Phase 2 - Quantification des données

La seconde phase du processus consiste à déterminer la quantité d'un composé dans l'échantillon. C'est ce que l'on appelle la *quantification des données*. Celle-ci est brièvement décrite ci-dessous, puis développée dans le Didacticiel – Utilisation de la fonction AutoQuant Setup page 69.

Pour déterminer la quantité d'un composé dans un échantillon, la ChemStation doit pouvoir comparer ce qu'elle trouve (la quantité inconnue de xxx) à une quantité connue de xxx de manière à calculer un ratio et à fournir une réponse.

C'est à ce niveau qu'intervient la base de données de quantification.

Outre les profils des composés connus (également stockés dans la bibliothèque), la base de données de quantification contient des informations telles que les suivantes :

- La manière dont le composé répond à des quantités données (par exemple, 10 ppb)
- L'ion cible du composé
- Les ions qualifiants de l'ion cible

Ainsi, une fois que le logiciel *a identifié* le composé (en effectuant une comparaison avec la bibliothèque), il est en mesure d'en déterminer *la quantité* en comparant la réponse de l'instrument pour l'échantillon inconnu à celle répertoriée dans la base de données de quantification.

Par exemple, si l'entrée de la base de données de quantification représente 10 ppb et si la quantité trouvée dans votre échantillon correspond au double, vous devez avoir 20 ppb.

NOTE Il s'agit d'une description très simplifiée du processus. Néanmoins, cette discussion a uniquement pour but de présenter les principes fondamentaux de l'acquisition de données et de la quantification sans entrer dans le détail.

Pour créer la base de données de quantification, reportez-vous au Didacticiel – Utilisation de la fonction AutoQuant Setup page 69.

Base de données de quantification

Introduction

Qu'est-ce qu'une base de données de quantification ?

La base de données de quantification répertorie les informations significatives concernant chaque composé que vous recherchez.

Quels types de données doivent figurer dans une base de données de quantification ?

Pour chaque composé à quantifier, la base de données de quantification doit inclure les éléments suivants :

- Une entrée qui identifie le composé que vous recherchez, avec notamment les informations suivantes :
  - Temps de rétention
  - Paramètres de quantification
  - Critères de sélection d'identification
  - Méthode pour le calcul des ratios d'ions qualifiants
  - Gamme acceptable pour la réponse relative
  - Traitement mathématique appliqué aux données d'étalonnage pour un composé donné
  - Points de données utilisés dans la courbe d'étalonnage
- Une entrée qui identifie l'ion cible (en général, l'ion du pic principal) dans le composé que vous recherchez.
- Deux ou plusieurs entrées pour les ions qui qualifient de façon supplémentaire la présence du composé. (Par exemple, ces ions apparaissent toujours avec l'ion du pic du composé et toujours dans le même rapport avec ce dernier.)
- Tout étalon interne que vous utiliserez.

Cette procédure peut paraître compliquée, mais la fonction AutoQuant Setup se charge d'identifier automatiquement ces ions à votre place. Reportez-vous à la section Comment utiliser la fonction AutoQuant pour créer une base de données de configuration ? page 66 pour plus de détails.

Quelle est la taille de la base de données de quantification ?

Pour quantifier un seul composé, la base de données de quantification peut ne comporter que trois entrées :

- L'ion du pic principal du composé
- Deux ions supplémentaires qualifiant la présence de cet ion de pic

De nombreux utilisateurs choisissent d'ajouter un étalon interne comme entrée supplémentaire.

La taille de la base de données de quantification augmente en fonction du nombre de composés cibles à quantifier et du nombre de points de données définis dans la courbe d'étalonnage.

Comment créer une base de données de quantification ?

On distingue deux méthodes pour ajouter des composés à la base de données de quantification :

- Manuellement
- Semi-automatiquement à l'aide de la fonction AutoQuant Setup

Ces deux méthodes sont décrites ci-après.

Comment créer manuellement une base de données de quantification ?

Cette section fournit un aperçu des étapes à suivre pour créer manuellement une base de données de quantification.

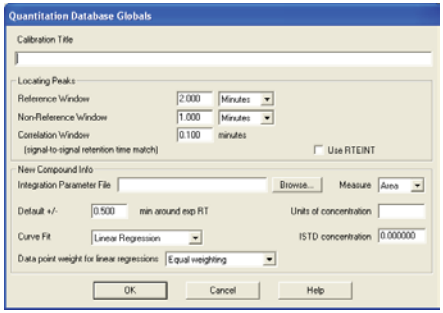
Pour créer manuellement une base de données de quantification, les utilisateurs doivent examiner visuellement le chromatogramme et sélectionner séparément tous les composés, ions cibles et ions qualifiants qui les intéressent. Ils doivent ensuite leur attribuer un nom et les enregistrer dans la base de données de quantification. (Ces actions correspondent aux étapes 2 à 8 de la section Aperçu de la procédure à suivre pour créer manuellement une base de données de quantification page 64.)

Juste après la section sur la création manuelle d'une base de données de quantification, une autre section explique comment créer une base de données de quantification à l'aide de la fonction AutoQuant Setup. Celle-ci est un processus semi-automatique au cours duquel le logiciel analyse le chromatogramme et sélectionne les composés, ions cibles et ions qualifiants en fonction de leur abondance et de la bibliothèque spécifiée par l'utilisateur.

Une fois de plus, ces deux sections ne comprennent que des informations générales. Pour des instructions détaillées sur la création d'une base de données de quantification à l'aide de la fonction AutoQuant, reportez-vous au Didacticiel – Utilisation de la fonction AutoQuant Setup page 69.

Aperçu de la procédure à suivre pour créer manuellement une base de données de quantification

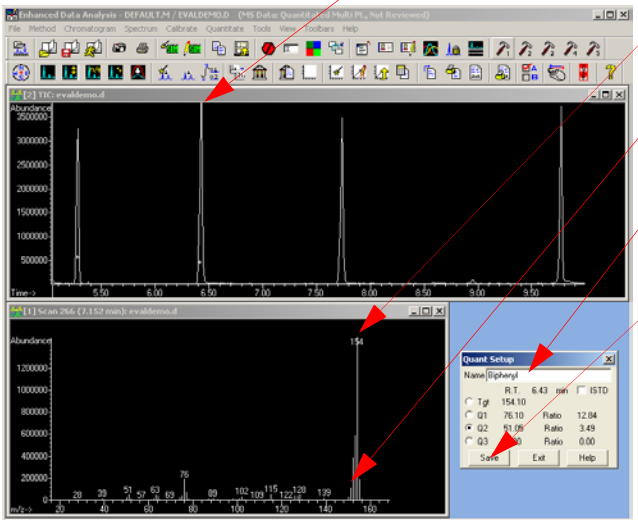
Pour créer manuellement une base de données de quantification, procédez comme suit :



1 Chargez un fichier de données contenant un standard mesuré du composé à étalonner, puis entrez sur la page Quantitation Globals les informations communes à tous les composés que vous allez ajouter à la base de données de quantification. Cliquez sur **OK** lorsque vous avez terminé. (Sélectionnez **Calibrate/Set Up Quantitation...** pour accéder à la page **Quantitation Database Globals**).

2 Vérifiez manuellement le chromatogramme généré par le fichier de données de l'échantillon mesuré.

3 Sélectionnez séparément chaque composé en cliquant sur son pic dans le chromatogramme.



4 Dans le spectre affiché, sélectionnez un ion cible.

5 Sélectionnez des ions qualifiants pour ce composé.

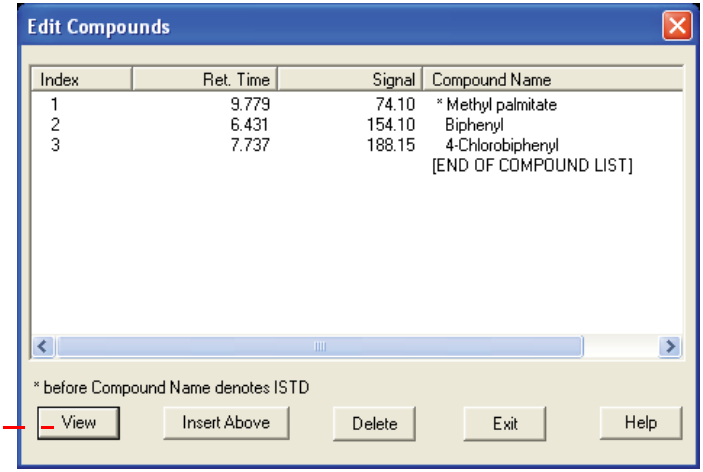
6 Nommez le composé, et si ce dernier est votre étalon interne, cochez la case qui l'identifie en tant que tel.

7 Enregistrez le profil spectral de ce composé dans la base de données de quantification.

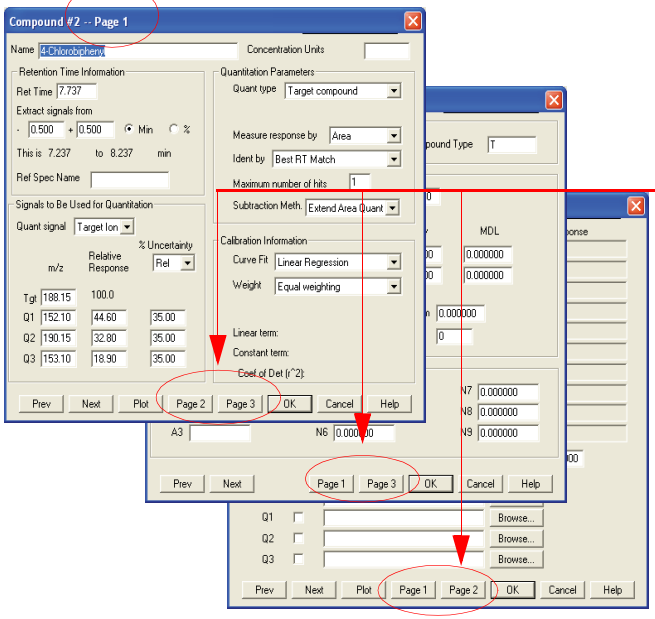
8 Répétez les étapes 2 à 7 pour tous les composés à ajouter à la base de données de quantification.

9 Une fois que vous avez ajouté tous les composés souhaités, sélectionnez

Calibrate/Edit Compound... pour afficher une liste complète des entrées effectuées dans la base de données de quantification (dans la fenêtre **Edit Compounds**).



10 Dans la fenêtre **Edit Compounds**, vous pouvez sìélectionner n'importe quel composé et cliquer sur **View** pour afficher la première page de données enregistrées pour ce composé.



Trois pages d'informations sont disponibles pour chaque composé. Elles sont enregistrées en tant que pages 1, 2 et 3 de l'entrée de la base de données de quantification.

Utilisez les boutons correspondant aux pages pour passer d'un écran à un autre.

Les données spectrales et les informations que vous avez entrées dans l'écran Quantification Database Globals sont transférées vers ces pages.

Pour terminer le processus, modifiez *manuellement* les différents écrans des composés (pages 1, 2 et 3) pour chaque entrée de la base de données de quantification.

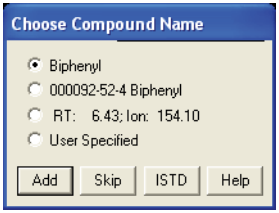
Comment utiliser la fonction AutoQuant pour créer une base de données de configuration ?

Dans le processus manuel, vous deviez examiner vous-même le chromatogramme et sélectionner, nommer et enregistrer séparément chaque composé et ion à inclure dans la base de données de quantification. La fonction AutoQuant Setup, en revanche, est un processus semi-automatique au cours duquel le logiciel analyse le fichier de données et identifie automatiquement les composés, ions cibles et ions qualifiants en fonction de leur abondance et de la bibliothèque spécifiée par l'utilisateur.

Aperçu de la procédure à suivre pour créer une base de données de quantification à l'aide de la fonction AutoQuant

Pour créer une base de données de quantification à l'aide de la fonction AutoQuant Setup, procédez comme suit :

1. La première étape est la même que pour le processus manuel. Pour plus d'informations, reportez-vous à la section Aperçu de la procédure à suivre pour créer manuellement une base de données de quantification page 64.
2. Les étapes 2 à 8 du processus manuel impliquaient de sélectionner manuellement les composés et les ions. Avec AutoQuant, en revanche, ces étapes sont entièrement automatisées, comme décrit ci-dessous. Une fois que vous avez rempli l'écran **Database Globals** et cliqué sur **OK** (à l'étape 1), le logiciel commence automatiquement à rechercher des pics significatifs dans le fichier de données. Pour chaque pic trouvé, il compare les données à celle de la bibliothèque spécifiée et affiche le composé sur un écran similaire au suivant :

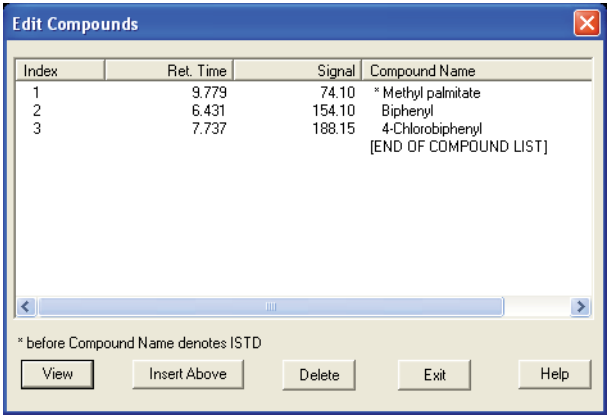


Dans cet écran :

Add	Ajoute ce *composé*, son *ion cible* et *trois ions qualifiants* à votre base de données de quantification.
Skip	Entraîne l'affichage du composé suivant trouvé dans le fichier de données.
ISTD	Ajoute ce composé à la base de données de quantification et l'identifie comme étalon interne.

NOTE L'étalon interne doit précéder les composés. Il est indiqué par un astérisque dans la liste d'entrées.

3 Une fois que tous les composés trouvés dans le fichier de données sont affichés, un message vous demande si vous souhaitez procéder à la quantification (**Do you want to Quantitate Now?**). Si vous choisissez **Yes**, vous verrez apparaître un écran d'étalonnage, puis la boîte de dialogue **Edit Compound Screen** contenant votre base de données de quantification achevée (ce qui équivaut à l'étape 9 du processus manuel).



Dans l'écran **Edit Compounds**, vous pouvez sélectionner n'importe quel composé et cliquer sur **View** pour afficher la

page 1 des données enregistrées pour ce composé, comme décrit à l'étape 10 du processus manuel.

Comment la fonction AutoQuant Setup fonctionne-t-elle ?

AutoQuant Setup identifie les composés contenus dans votre fichier de données à l'aide de la bibliothèque spectrale spécifiée et choisit l'ion cible ainsi que les ions qualifiants pour chaque composé en fonction de leur abondance dans le composé. Une fois que vous avez accepté les choix, AutoQuant Setup remplit automatiquement les entrées nécessaires dans votre base de données de quantification.

Condition préalable : pour pouvoir utiliser la fonction AutoQuant Setup, vous devez disposer d'une bibliothèque incluant vos composés cibles et votre standard d'étalonnage ne doit pas contenir de composés co-élués.

Didacticiel – Utilisation de la fonction AutoQuant Setup

Ce didacticiel vous montre pas à pas comment utiliser la fonction AutoQuant Setup pour créer une base de données de quantification. Il a pour objectif d'illustrer la rapidité avec laquelle la fonction AutoQuant Setup permet de créer et d'utiliser une base de données de quantification. L'exercice vous prendra environ 5 minutes.

Au cours de ce didacticiel, vous allez créer une méthode contenant une base de données de quantification permettant d'identifier et de quantifier du biphényle, du chlorobiphényle et du palmitate de méthyle.

Pour ce faire, vous allez :

1. Charger la méthode par défaut **DEFAULT.M** fournie avec votre ChemStation.
2. Charger le fichier de données de démonstration **EVALDEMO.D** fourni avec votre ChemStation.
3. Utiliser la bibliothèque spectrale de démonstration **DEMO.L** fournie avec votre ChemStation.
4. Utiliser la fonction AutoQuant Setup pour créer une base de données de quantification avec les composés suivants :
   - Dodécane
   - Biphényle
   - Chlorobiphényle
   - Palmitate de méthyle

La méthode et la base de données de quantification résultantes permettront d'identifier et de quantifier du biphényle, du chlorobiphényle et du palmitate de méthyle.

Procédure : utilisation de la fonction AutoQuant Setup pour créer une base de données de quantification

1 Faites une copie des fichiers **DEFAULT.M** et **EVALDEMO.D** avant de les utiliser pour ce didacticiel.

2 Dans l'écran *Data Analysis,* chargez les deux fichiers suivants :

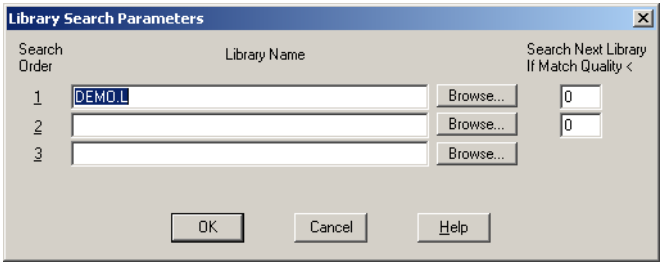
La méthode de démonstration **C:\MSDCHEM\1\METHODS\DEFAULT.M**

Le fichier de données de démonstration **C:\MSDCHEM\1\DATA\EVALDEMO.D**

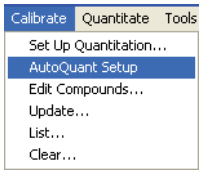
Lorsque vous créerez votre propre base de données de quantification, ce fichier de données sera extrait de l'analyse de votre échantillon étalonné.

3 Sélectionnez **Spectrum/Select Library** ou cliquez sur l'icône correspondante.

Choisissez **DEMO.L .**



4 Sélectionnez **Calibrate/AutoQuant Setup** ou cliquez sur l'icône correspondante.



5 Lorsque la boîte de dialogue **Quantitation Database Globals** s'ouvre, celle-ci contient toujours les informations par défaut (indépendamment de ce qui était affiché auparavant). Vous pouvez les modifier en fonction de votre méthode.

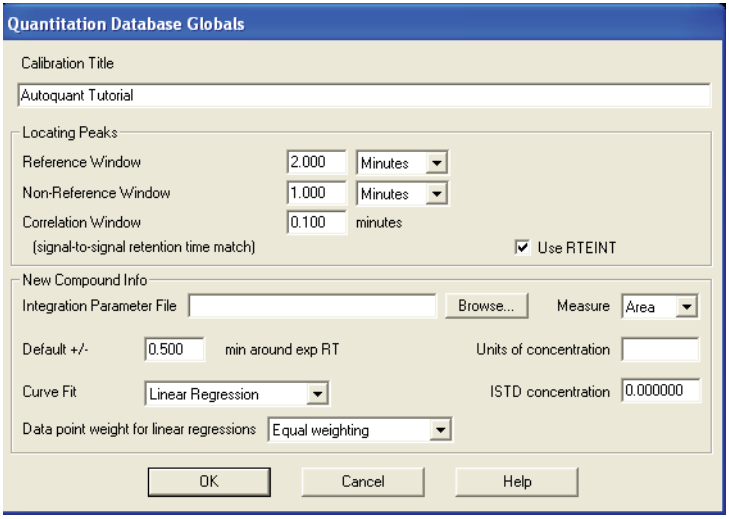
Cet écran est appelé “globals” (valeurs globales) car les données qu'il contient sont des informations communes à tous les composés et sont automatiquement remplies pour chaque composé ajouté à la base de données de quantification.

6 Pour ce didacticiel, entrez les informations suivantes lorsque la boîte de dialogue **Quantitation Database Globals** s'affiche :

a Dans le champ **Calibration Title**, entrez **AutoQuant Tutorial**. Cette ligne apparaîtra dans le titre de chaque rapport quantitatif.

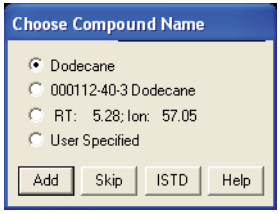
b Cochez la case **Use RTEINT** pour utiliser l'intégrateur RTE.

c Cliquez sur **OK**.



Une fois que vous avez cliqué sur **OK**, le logiciel commence à rechercher des pics significatifs dans le fichier de données. Lorsqu'il trouve le premier pic, il le compare à la bibliothèque spécifiée (à l'étape 3) et affiche le nom du premier composé trouvé dans la bibliothèque. A mesure que les composés s'affichent, vous déterminerez ce que vous voulez faire de chacun d'eux.

7 Dans notre exemple, le premier composé trouvé est le dodécane. Trois actions sont possibles avec ce composé :



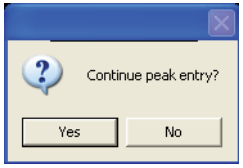
Add Ajoute ce *composé*, son *ion cible* et *trois ions qualifiants* à votre base de données de quantification.

Skip Entraîne l'affichage du composé suivant trouvé dans le fichier de données.

ISTD Ajoute ce composé à la base de données de quantification et l'identifie comme étalon interne.

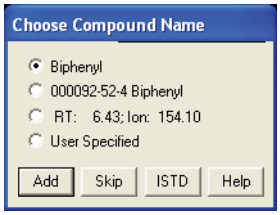
Lorsque la boîte de dialogue **Choose Compound Name** relative au dodécane s'affiche, cliquez sur **Skip**. Pour les besoins de l'exercice, nous allons ignorer pour l'instant ce composé. Nous exécuterons une nouvelle fois ce processus à une étape ultérieure et ajouterons alors ce composé à la base de données de quantification.

Lorsque la boîte de dialogue **Continue peak entry?** s'affiche, cliquez sur **Yes.**

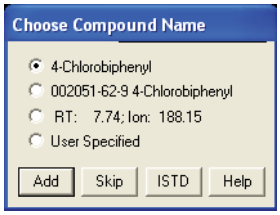


(Si vous cliquez sur **No**, la boîte de dialogue **Quantitate now?** s'affiche, comme illustré à l'étape 11.)

8 Le biphényle apparaît ensuite (parce qu'il est élué après le dodécane dans cet échantillon). Conservez le nom par défaut et cliquez sur **Add** pour ajouter ce composé à la base de données de quantification.

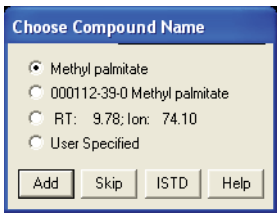


9 Le 4-chlorobiphényle apparaît ensuite. Conservez le nom par défaut et cliquez sur **Add**.



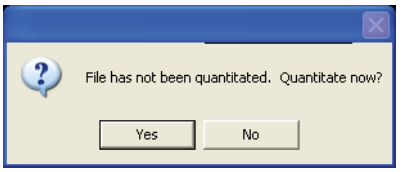
10 Le palmitate de méthyle apparaît ensuite.

Pour le désigner comme étalon interne, cliquez sur **ISTD**. Pour les besoins de cet exercice, nous identifierons le palmitate de méthyle comme étalon interne. Un étalon interne est un composé que l'on injecte dans chaque échantillon analysé pour servir de facteur de normalisation et de base de comparaison.



Lorsque vous cliquez sur **ISTD**, ce composé est ajouté à la base de données de quantification et placé *en haut de la liste des composés dans la base de données de quantification*. Cela est important car les étalons internes doivent précéder dans la base de données tous les composés qui seront quantifiés par rapport à eux.

11 Lorsque le logiciel affiche un message vous demandant si vous voulez quantifier maintenant (**Quantitate now?**), cliquez sur Yes. Cliquez sur **Yes**.



Une fois le fichier quantifié, la boîte de dialogue de mise à jour de l'étalonnage **Update Calibration** s'affiche.

12 Sélectionnez **Add Level** (indiquez un nouvel ID d'étalonnage) et entrez les informations suivante :

New Level ID = 50
Il s'agit d'un libellé descriptif uniquement.

Compound Concentration = 50
La concentration préparée du composé.

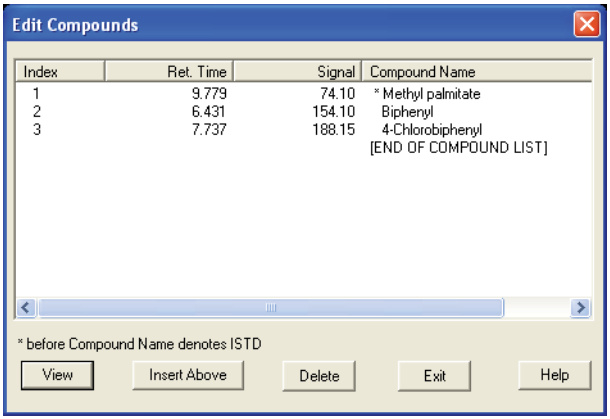
ISTD Concentration = 50
La concentration préparée de l'étalon interne.

Cliquez ensuite sur **Do Update**.

13 La boîte de dialogue **Edit Compounds** s'affiche avec la liste complète de tous les composés dans votre base de données de quantification. Notez les règles suivantes :

- Le palmitate de méthyle (le composé que vous avez désigné comme étalon interne) a été déplacé en haut de la liste (même s'il a été élué après deux autres composés du groupe) et un astérisque a été ajouté à côté de son nom.
- L'*astérisque* (*) indique qu'il s'agit d'un étalon interne.

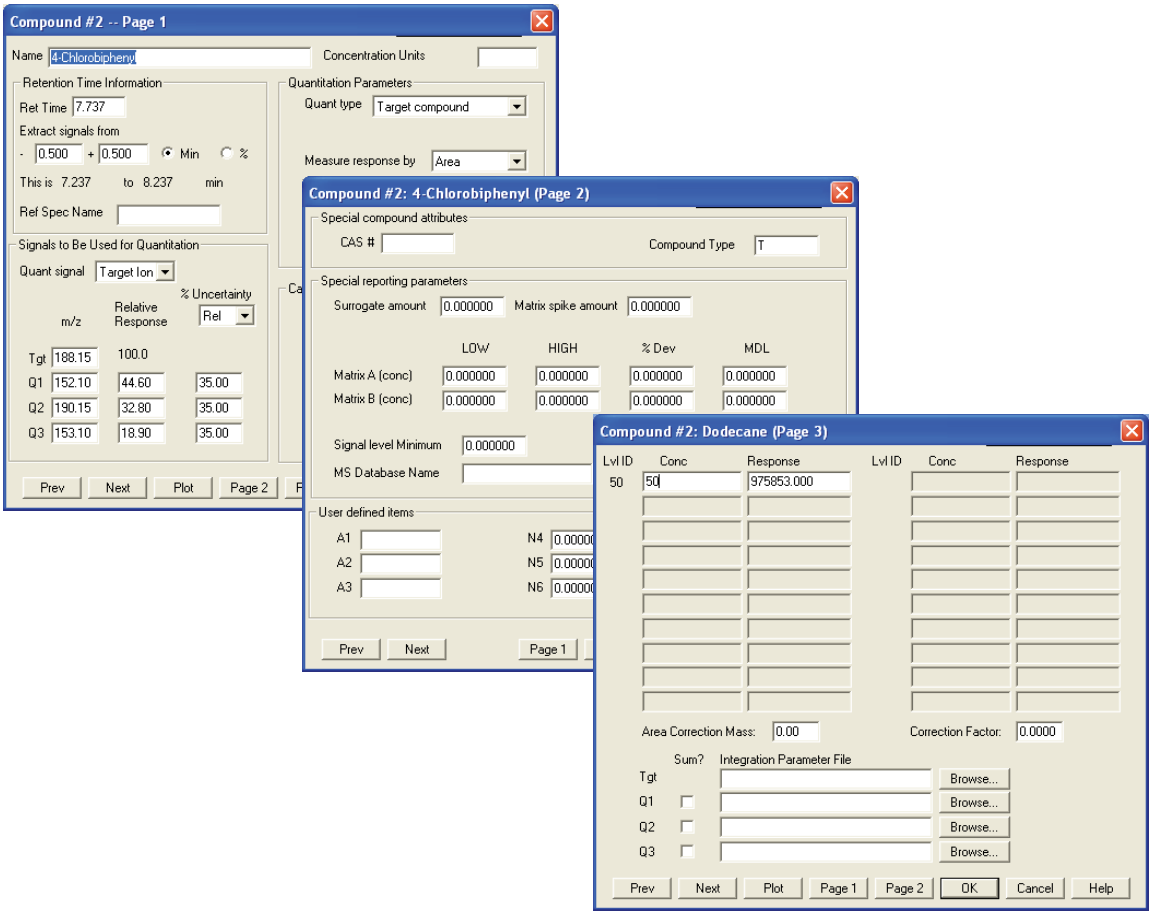
- L'étalon interne *doit précéder* les composés qui s'y rapportent. Hormis cette exigence, l'ordre n'importe pas dans la base de données de quantification.



14 Les entrées de cette base de données de quantification à un niveau sont désormais achevées.

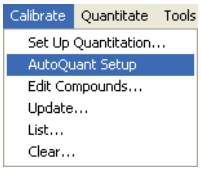
Sélectionnez un composé quelconque sur la liste et cliquez sur **View** pour examiner les paramètres de ce composé (pages 1, 2, et 3). Cliquez sur **OK** ou **Cancel** pour retourner au dialogue d'édition **Edit Compounds**.

15 Cliquez sur **Exit** pour fermer la boîte de dialogue.

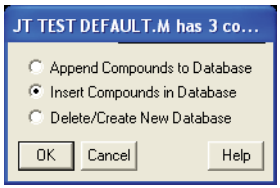

Compound #2 -- Page 1
Name 4-Chlorobiphenyl
Concentration Units
Retention Time Information
Ret Time 7.737
Extract signals from
- 0.500 + 0.500 Min %
This is 7.237 to 8.237 min
Ref Spec Name
Quantitation Parameters
Quant type Target compound
Measure response by Area
Signals to Be Used for Quantitation
Quant signal Target Ion
m/z
Relative Response
% Uncertainty Rel
Tgt 188.15 100.0
Q1 152.10 44.60 35.00
Q2 190.15 32.80 35.00
Q3 153.10 18.90 35.00
Prev Next Plot Page 2
Compound #2: 4-Chlorobiphenyl (Page 2)
Special compound attributes
CAS #
Compound Type T
Special reporting parameters
Surrogate amount 0.000000
Matrix spike amount 0.000000
LOW HIGH % Dev MDL
Matrix A (conc) 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
Matrix B (conc) 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
Signal level Minimum 0.000000
MS Database Name
User defined items
A1
A2
A3
Prev Next Page 1
Compound #2: Dodecane (Page 3)
Lvl ID Conc Response Lvl ID Conc Response
50 50 975853.000
Area Correction Mass: 0.00
Correction Factor: 0.0000
Sum? Integration Parameter File
Tgt
Q1
Q2
Q3
Browse...
Prev Next Plot Page 1 Page 2 OK Cancel Help

16 A présent, nous allons revenir en arrière et ajouter le composé que nous avions ignoré à l'étape 7.

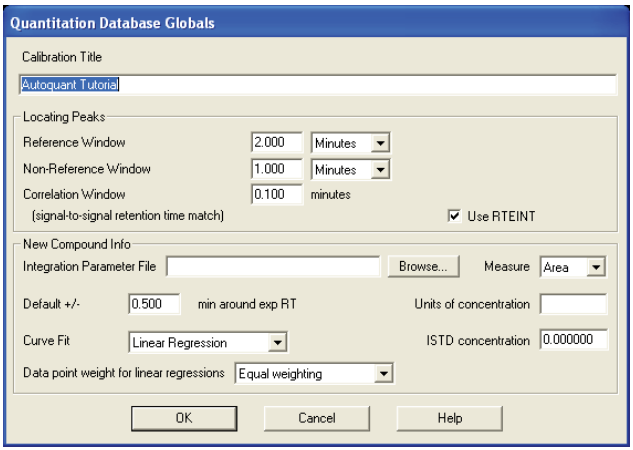
Pour insérer ce composé dans la base de données de quantification, sélectionnez **Calibrate/AutoQuant Setup** ou cliquez sur l'icône correspondante.



17 Sélectionnez **Insert Compounds in Database** et cliquez sur **OK**.



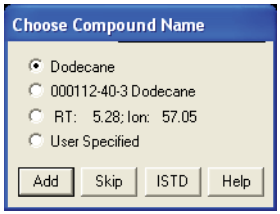
18 Lorsque la boîte de dialogue **Quantitation Database Globals** s'affiche, ne modifiez pas les paramètres.



Cliquez sur **OK**. Le logiciel relance le processus d'identification des mêmes pics.

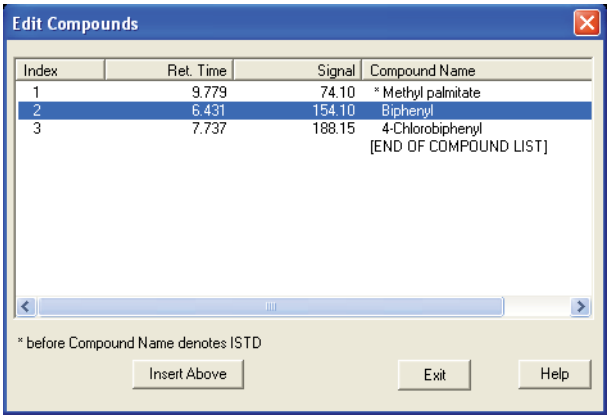
La boîte de dialogue **Choose Compound Name** s'affiche.

19 Lorsque le dodécane apparaît dans la boîte de dialogue, conservez le nom par défaut et cliquez sur **Add**.



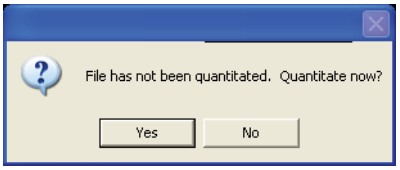
La boîte de dialogue **Edit Compounds** s'affiche.

20 Sélectionnez un point d'insertion en vous positionnant sur biphényle et en cliquant sur **Insert Above**.



21 La boîte de dialogue **Choose Compounds** s'affiche pour les autres composés. Pour chacun des trois composés restants dans ce fichier de données, cliquez sur **Skip** lorsque le système vous demande de choisir un nom de composé et sur **Yes** pour poursuivre l'entrée des pics (**Continue Peak Entry**).

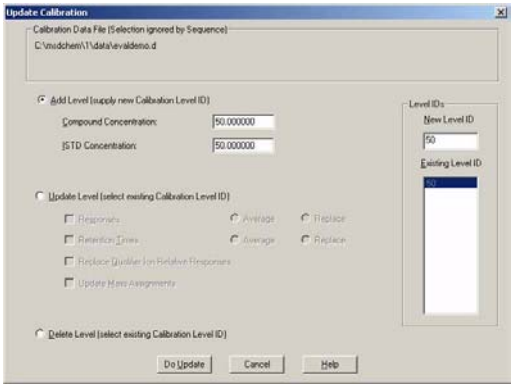
22 Lorsque le système vous demande si vous voulez quantifier la base de données, cliquez sur **Yes**.



23 Lorsque la boîte de dialogue **Update Calibration** s'affiche, sélectionnez : **Recalibrate** (dans la liste déroulante), **Replace** (dans la liste déroulante) pour les champs Responses et Retention Times.

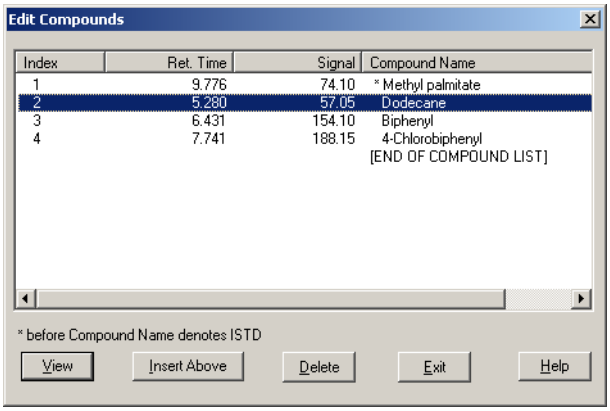
L'option Recalibrate (Réétalonner) met à jour l'ensemble des valeurs de réponse de l'instrument et des temps de rétention pour l'identificateur de niveau spécifié avec les valeurs trouvées dans le fichier de données chargé. Toutes les autres entrées indiquées pour le composé sont rétablies.

Cliquez sur **Do Update**.



24 Lorsque la boîte de dialogue **Edit Compounds** s'affiche, cliquez sur **View** et examinez la page 3 pour chacun des quatre

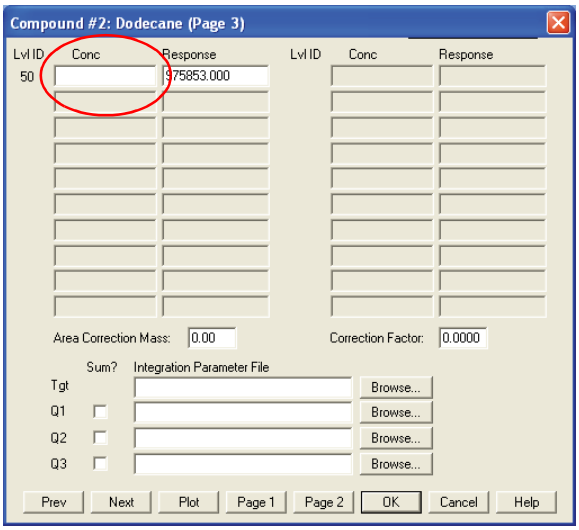
composés présents dans la base de données de quantification.



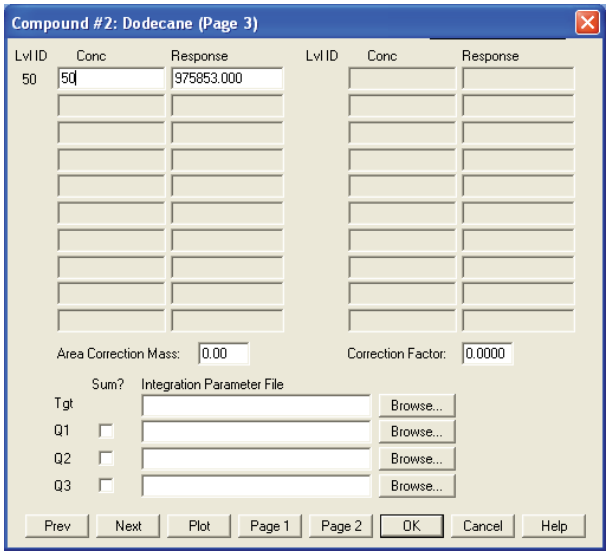
Notez que le dodécane, que vous venez d'ajouter, n'a pas de valeur de concentration.

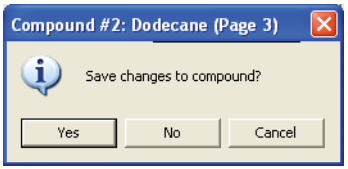
Cliquez sur **Prev** ou **Next** pour examiner la page 3 des autres composés. Les autres ont une valeur de concentration de 50.

Celle-ci a été entrée globalement lors de la création initiale de ce niveau (à l'étape 12).



25 Entrez **50** dans le champ de la concentration du niveau 50. Cliquez sur **OK** puis sur **Yes** pour enregistrer les modifications.

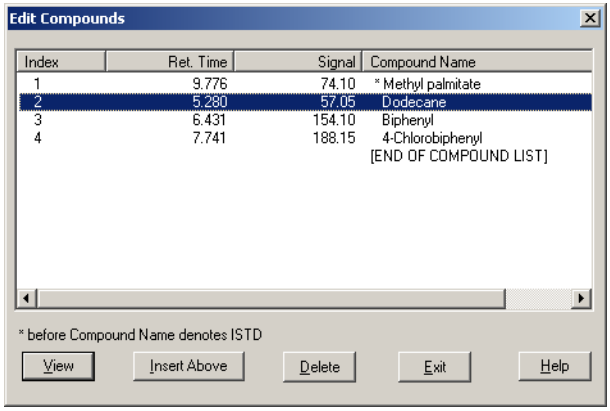




26 Vous êtes désormais revenu à l'écran **Edit Compounds**. Votre base de données de quantification a été mise à jour. Elle est prête à être utilisée.

Cliquez sur **Exit** pour terminer le processus.

Vous venez de créer une méthode contenant une base de données de quantification capable d'identifier et de quantifier du biphényle, du dodécane, du chlorobiphényle et du palmitate de méthyle.



Maintenant que vous avez effectué les étapes de ce didacticiel, vous pouvez aisément créer votre propre base de données de quantification à l'aide des composés de votre choix.

NOTE

Pour des instructions plus approfondies sur la manière d'utiliser votre ChemStation pour CPG/DDM, consultez l'aide en ligne.

Pour des informations complètes sur l'utilisation, la maintenance et le dépannage de votre matériel, reportez-vous au CD-ROM ou DVD-ROM fourni avec votre instrument.

3
Utilisation des rapports personnalisés

Rapports personnalisés 86
Création d'un modèle de rapport 88
Personnalisation de rapports 92
Sélection de cellules, de lignes et de colonnes 98
Impression de rapports 100
Création d'une base de données de rapports personnalisés 103
Sélection de plusieurs fichiers de données 107
Affichage et impression de graphiques 109
Boutons de la barre d'outils du programme Custom Reports 110

Rapports personnalisés

Généralités

Le programme Custom Reports vous permet de transférer des résultats quantitatifs de l'écran de traitement des données Data Analysis vers un tableur où vous pouvez créer vos propres rapports personnalisés.

Vous pouvez également créer des bases de données de rapports personnalisés à partir de plusieurs échantillons, puis afficher et imprimer des représentations graphiques des données.

Une fois qu'un modèle de rapport ou qu'une base de données a été créé(e) et associé(e) à une méthode, vous pouvez automatiquement imprimer le rapport ou mettre à jour la base de données à chaque exécution de la méthode.

Vous pouvez uniquement utiliser des rapports personnalisés sur des données quantifiées.

Mise en route

Ce chapitre vous présente les principales étapes nécessaires à la création d'un modèle ou d'une base de données de rapports personnalisés. Celles-ci constituent un point de départ pour se familiariser avec le logiciel Customs Reports.

Une fois que vous maîtrisez ces opérations de base, explorez le logiciel de votre propre chef. Essayez les fonctions de modification ou de mise en forme. Consultez l'aide en ligne pour obtenir plus d'informations sur ces fonctions et leur utilisation.

Lancement du programme Custom Reports

Dans l'écran Data Analysis, sélectionnez **Quantitate/Custom Reports** ou cliquez sur l'icône correspondante.

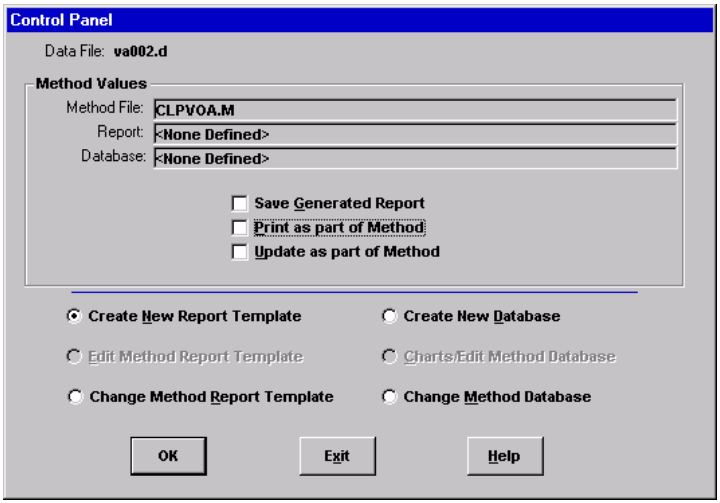
Si la méthode en cours n'a pas de base de données de quantification ou si aucun fichier de données n'a été chargé, le système vous demande si vous voulez utiliser les valeurs par défaut.

Cliquez sur **OK**. Dans la boîte de dialogue **Custom Reports Paper Size** qui s'affiche, sélectionnez la taille de papier souhaitée et cliquez sur **OK**.

Création d'un modèle de rapport

Quelques secondes après le lancement du logiciel Custom Reports, le Control Panel (illustré ci-dessous) s'affiche.

1 Sélectionnez **Create New Report Template** et cliquez sur **OK**.



Create New Report Template	Permet de créer un modèle de rapport personnalisé à l'aide du Report Wizard.
Edit Method Report Template	Permet de modifier le modèle de rapport personnalisé.
Change Method Report Template	Permet de sélectionner le modèle de rapport à utiliser avec la méthode.
Create New Database	Permet de créer une base de données de rapports personnalisés à l'aide du Database Wizard.
Chart/Edit Method Database	Permet d'afficher des graphiques et de modifier la base de données de rapports personnalisés.
Change Method Database	Permet de sélectionner la base de données à utiliser avec la méthode.

2 Dans le Report Wizard qui s'affiche, sélectionnez un élément dans la liste **Report Contents** à droite. A gauche, le volet **Possible Items for Report** répertorie l'ensemble des éléments que vous pouvez sélectionner pour le modèle de rapport. A droite, le volet **Report Contents** répertorie les éléments que vous avez sélectionnés.

3 Sélectionnez un élément dans la liste **Possible Items for Report** à gauche.

4 Faites un double clic sur l'élément sélectionné ou cliquez sur **Add**. L'élément sélectionné est ajouté sous l'élément en surbrillance dans le volet de droite.

5 Répétez les étapes 1–4 afin d'ajouter le reste des éléments de votre modèle de rapport. Vous pouvez cliquer sur **Remove** pour supprimer des éléments de la liste **Report Contents** à droite.

6 Faites défiler vers le bas la liste **Possible Items for Report** à gauche : vous verrez des éléments graphiques que vous pouvez ajouter à votre modèle de rapport. Les éléments Global situés sous Graphics sont ajoutés dans la section **Reports Content Header**, les éléments Compound dans les sections **All Compounds**.

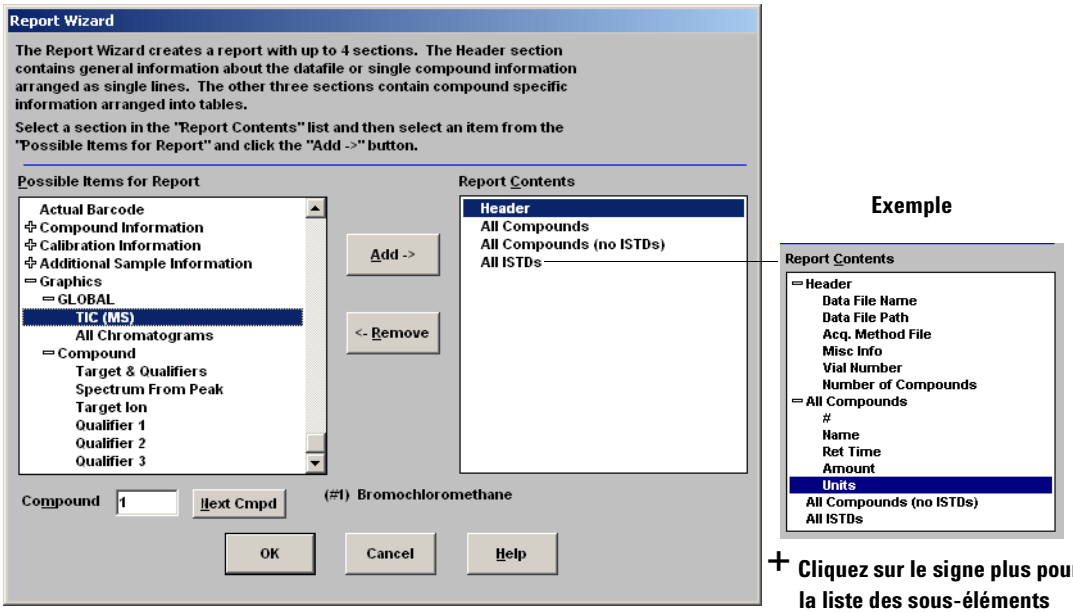
7 Cliquez sur **OK** lorsque vous avez terminé de sélectionner des éléments de rapport à l'aide du Report Wizard.

Un modèle de rapport est créé en fonction de vos sélections.

8 La feuille Custom Reports Sheet1 (illustrée ci-après) s'affiche. Vous pouvez alors sélectionner **File/Save** ou cliquer sur l'icône **Save** pour enregistrer le modèle de rapport.

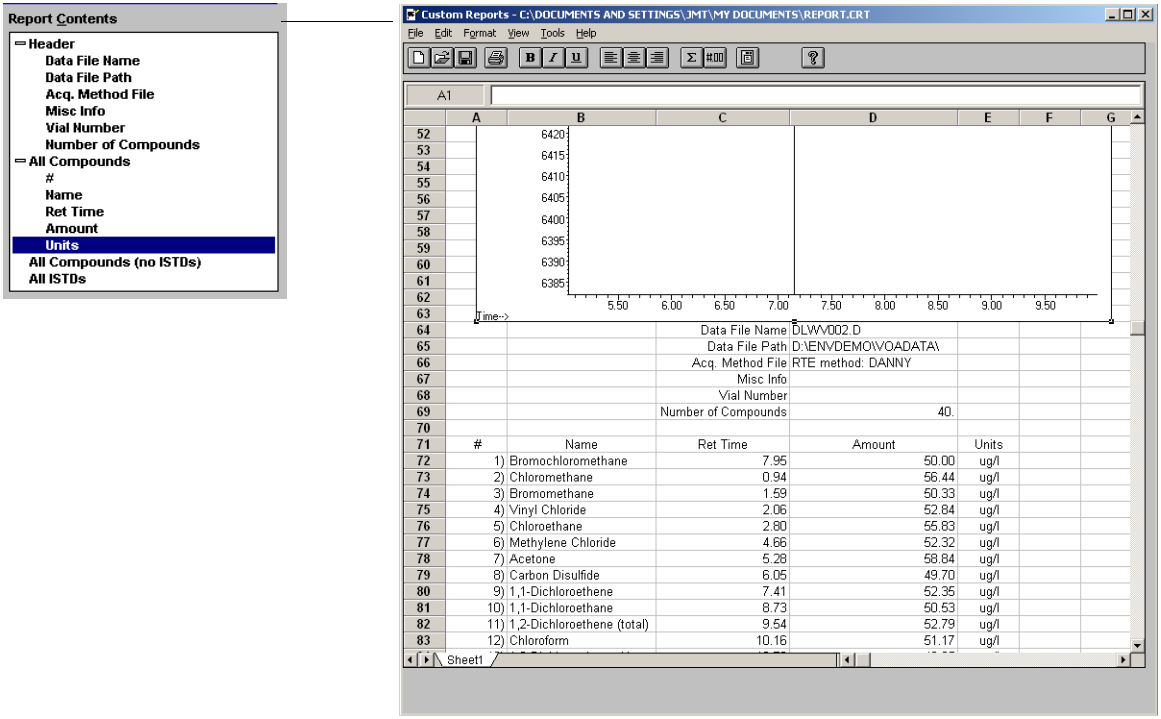
9 La boîte de dialogue **Link with Method** s'affiche ensuite. Elle vous permet de sélectionner ce modèle comme modèle par défaut pour la méthode et de l'imprimer automatiquement à chaque exécution de la méthode.

10 Sélectionnez **File/Exit** pour quitter le programme Custom Reports.



+ Cliquez sur le signe plus pour ouvri la liste des sous-éléments

- Cliquez sur le signe moins pour ferr la liste des sous-éléments


Report Contents
Header
Data File Name
Data File Path
Acq. Method File
Misc Info
Vial Number
Number of Compounds
All Compounds
#
Name
Ret Time
Amount
Units
All Compounds (no ISTDs)
All ISTDs
Custom Reports - C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\JMT\MY DOCUMENTS\REPORT.CRT
File Edit Format View Tools Help
A1
Time-->
Data File Name DLWV002.D
Data File Path D:\ENVDEMO\VOADATA\
Acq. Method File RTE method: DANNY
Misc Info
Vial Number
Number of Compounds 40.
Name Ret Time Amount Units
1) Bromochloromethane 7.95 50.00 ug/l
2) Chloromethane 0.94 56.44 ug/l
3) Bromomethane 1.59 50.33 ug/l
4) Vinyl Chloride 2.06 52.84 ug/l
5) Chloroethane 2.80 55.83 ug/l
6) Methylene Chloride 4.66 52.32 ug/l
7) Acetone 5.28 58.84 ug/l
8) Carbon Disulfide 6.05 49.70 ug/l
9) 1,1-Dichloroethene 7.41 52.35 ug/l
10) 1,1-Dichloroethane 8.73 50.53 ug/l
11) 1,2-Dichloroethene (total) 9.54 52.79 ug/l
12) Chloroform 10.16 51.17 ug/l
Sheet1

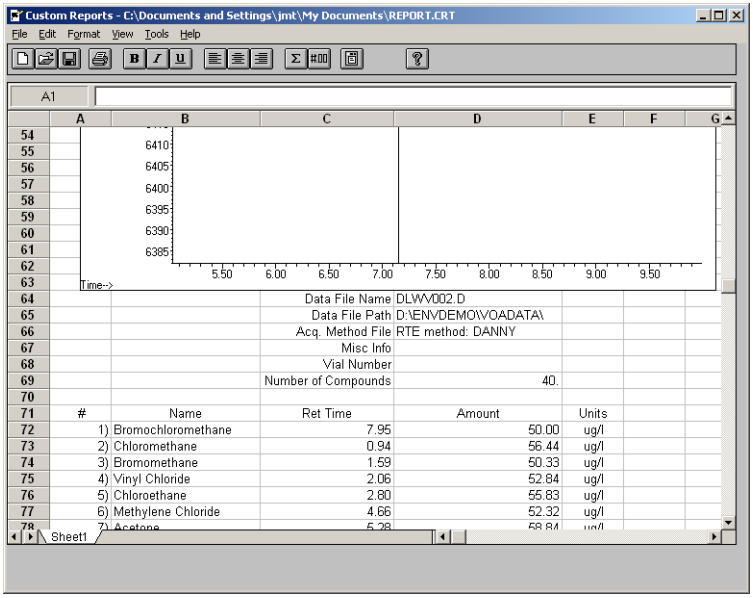
Personnalisation de rapports

Modification d'un rapport

1 Sélectionnez **Quantitate/Custom Reports** ou cliquez sur l'icône **Custom Report**. Le Control Panel s'affiche. Sélectionnez **Edit Method Report Template** <report.CRT>. La boîte de dialogue Report under Method Values s'affiche (*<report.CRT>* étant le nom du modèle de rapport à modifier).

Si le nom du rapport à modifier ne s'affiche pas, sélectionnez **Change Method Report Template** dans le Control Panel et sélectionnez le rapport souhaité. Lorsque le Control Panel s'affiche de nouveau, sélectionnez **Edit Method Report Template**.

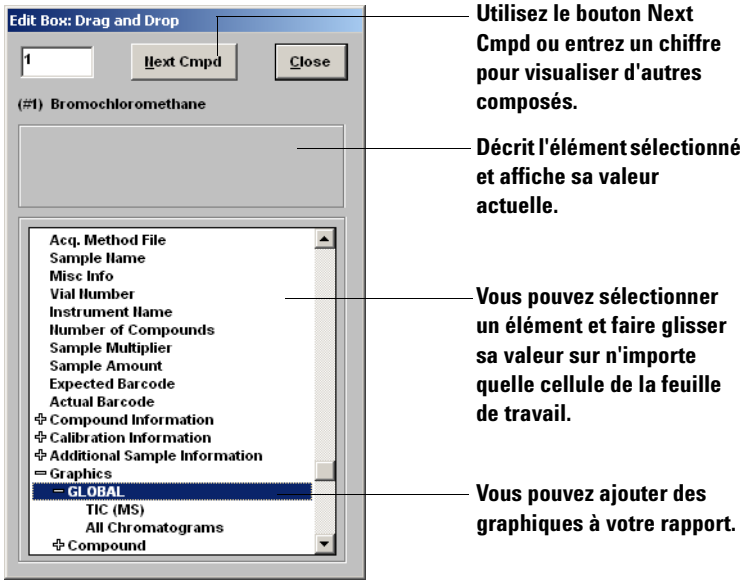
Cliquez sur **OK** pour afficher le modèle de rapport *<report.CRT>* .



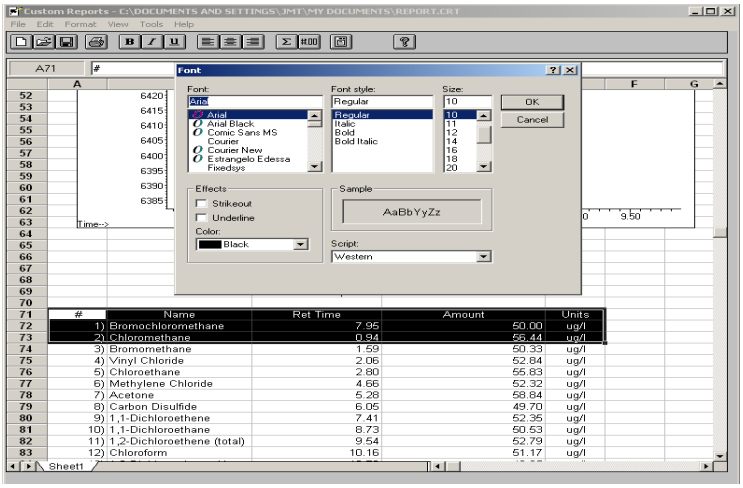
2 Vous pouvez effectuer des modifications dans n'importe quelle cellule de la feuille de travail. Pour ce faire, vous pouvez utiliser la boîte de dialogue **Edit Box** (illustrée ci-dessous). Il est conseillé d'enregistrer le rapport régulièrement afin d'éviter toute perte de vos modifications.

3 Pour accéder à cette boîte de dialogue, sélectionnez **View/Edit Box** ou cliquez sur l'icône **Edit Box** dans la barre d'outils.

4 Une fois vos modifications terminées, enregistrez le modèle de rapport.



Mise en forme d'un rapport



Lorsque vous créez un modèle de rapport, le logiciel le met automatiquement en forme. Vous pouvez personnaliser le format du rapport à l'aide du menu Format, de la souris ou de la barre d'outils. Toute modification de la mise en forme est enregistrée en même temps que le modèle de rapport.

1 Sélectionnez les cellules à formater.

2 Choisissez un format à l'aide de l'une des trois méthodes suivantes :
   - Sélectionnez un élément dans le menu Format. Dans la boîte de dialogue qui s'affiche, effectuez vos sélections et cliquez sur **OK**.
   - Cliquez sur un bouton de mise en forme dans la barre d'outils (par exemple, Gras ou Aligné à gauche).
   - Ajustez la largeur de la colonne ou la hauteur de la ligne (voir plus bas).

3 Continuez jusqu'à ce que vous soyez satisfait de la mise en forme.

4 Enregistrez régulièrement le rapport pour éviter de perdre vos mises en forme. Lorsque vous avez terminé, enregistrez le modèle de rapport.

Modification de la hauteur de ligne ou de la largeur de colonne

Modification de la hauteur de ligne

1 Placez le pointeur près de la bordure inférieure de la cellule contenant le numéro de ligne, à l'endroit où il change de forme.

2 Cliquez et faites glisser le pointeur vers le haut ou vers le bas jusqu'à ce que vous obteniez la hauteur de ligne souhaitée.

Modification de la largeur de colonne

1 Placez le pointeur au niveau de la lettre de colonne, à l'endroit où il change de forme.

2 Cliquez et faites glisser le pointeur vers la droite et vers la gauche jusqu'à ce que vous obteniez la largeur de colonne souhaitée.

Définition d'une même hauteur pour plusieurs lignes

1 Cliquez et faites glisser le pointeur sur les numéros de ligne pour sélectionner plusieurs lignes.

2 Ajustez la hauteur d'une ligne : toutes les autres adoptent la même hauteur.

Définition d'une même largeur pour plusieurs colonnes

1 Cliquez et faites glisser le pointeur sur les lettres de colonne pour sélectionner plusieurs colonnes.

2 Ajustez la largeur d'une colonne : toutes les autres adoptent la même largeur.

Enregistrement d'un rapport

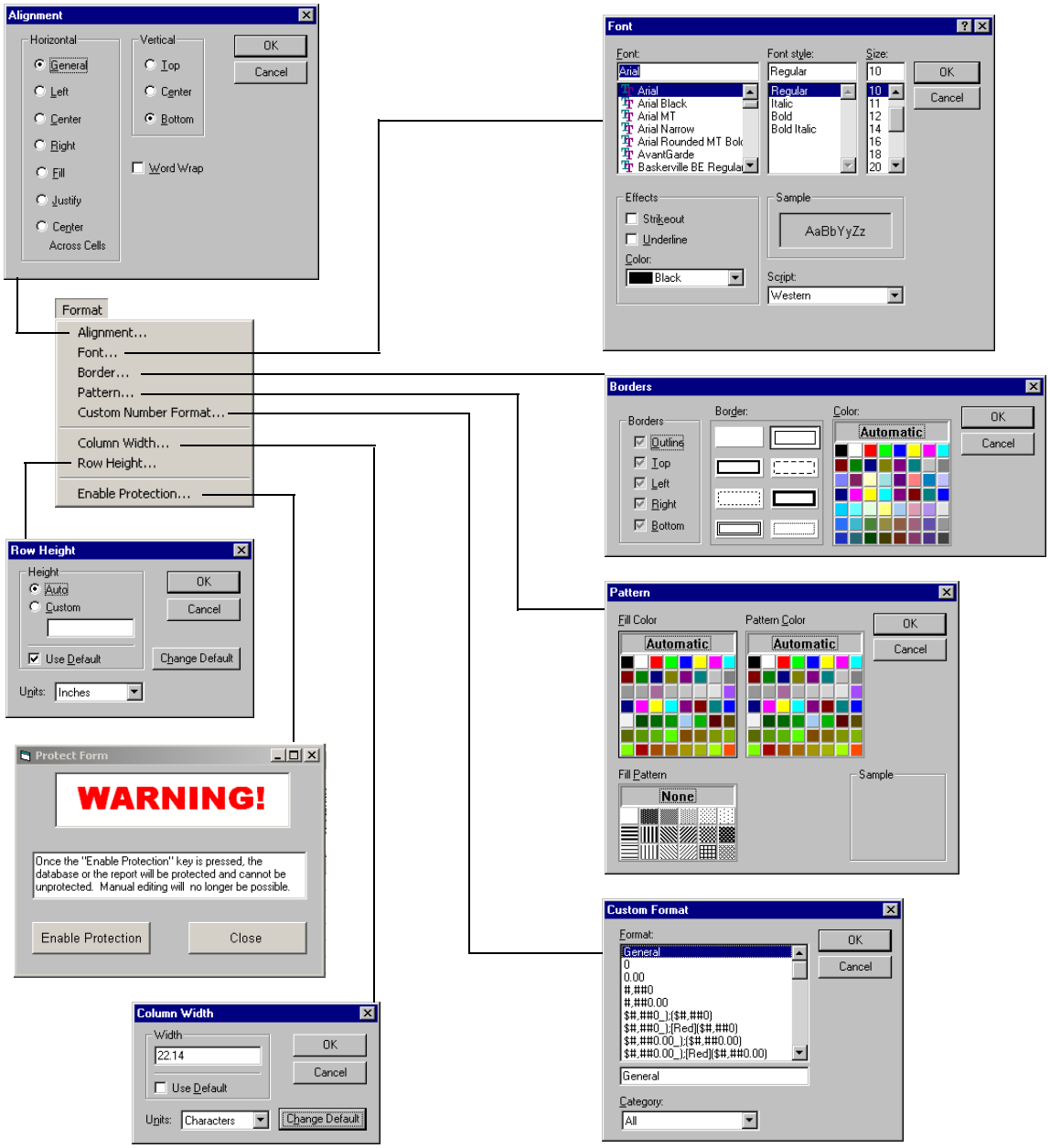
1 Sélectionnez **File/Save** ou cliquez sur **Save** dans la barre d'outils.

2 Entrez un nom de fichier (*sans* l'extension .CRT), puis cliquez sur **Save**. La boîte de dialogue **Link with Method** s'affiche. Elle vous permet de sélectionner ce modèle comme modèle par défaut pour la méthode et de l'imprimer automatiquement à chaque exécution de la méthode.

3 Cochez ou désélectionnez les cases appropriées, puis cliquez sur **OK**.

4 Sélectionnez **File/Exit** ou cliquez sur le bouton de fermeture **Close** dans la barre de titre pour quitter le programme Custom Reports.

Menu Format


Alignment
Horizontal
General
Left
Center
Right
Fill
Justify
Center Across Cells
Vertical
Top
Center
Bottom
Word Wrap
OK
Cancel
Font
Font:
Arial
Arial Black
Arial MT
Arial Narrow
Arial Rounded MT Bol
AvantGarde
Baskerville BE Regular
Font style:
Regular
Italic
Bold
Bold Italic
Size:
10
11
12
14
16
18
20
Effects
Strikeout
Underline
Color:
Black
Sample
AaBbYyZz
Script:
Western
Format
Alignment...
Font...
Border...
Pattern...
Custom Number Format...
Column Width...
Row Height...
Enable Protection...
Borders
Borders
Outline
Top
Left
Right
Bottom
Border:
Color:
Automatic
Row Height
Height
Auto
Custom
Use Default
Change Default
Units:
Inches
Pattern
Fill Color
Automatic
Pattern Color
Automatic
Fill Pattern
None
Sample
Protect Form
WARNING!
Once the "Enable Protection" key is pressed, the database or the report will be protected and cannot be unprotected. Manual editing will no longer be possible.
Enable Protection
Close
Column Width
Width
22.14
Use Default
Units:
Characters
Change Default
Custom Format
Format:
General
0
0.00
#,##0
#,##0.00
$#,##0_);($#,##0)
$#,##0_);[Red]($#,##0)
$#,##0.00_);($#,##0.00)
$#,##0.00_);[Red]($#,##0.00)
General
Category:
All

Sélection de cellules, de lignes et de colonnes

Sélection d'un groupe de cellules

Cliquez et faites glisser le pointeur sur la feuille de calcul pour sélectionner un groupe de cellules donné.

Sélection d'une ligne ou d'une colonne

Cliquez sur le numéro de la ligne ou la lettre de la colonne.

Sélection de plusieurs lignes ou colonnes

Cliquez et faites glisser le pointeur sur les numéros de ligne ou les lettres de colonne.

Sélection de plusieurs cellules discontinues

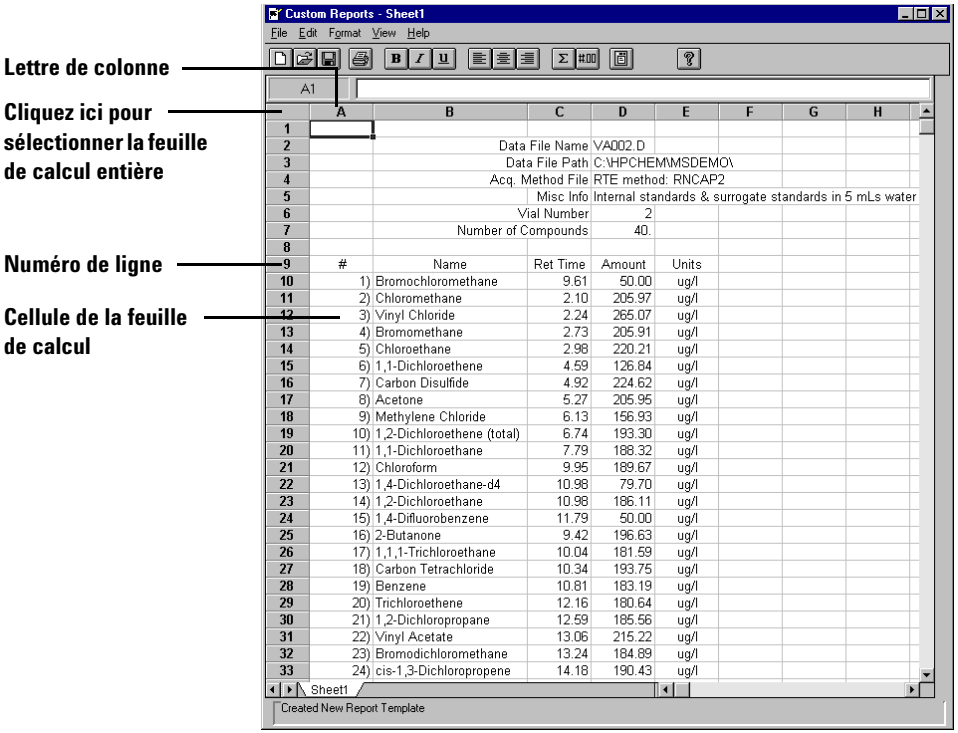
Cliquez sur les cellules tout en maintenant la touche [Ctrl] enfoncée.

Sélection de plusieurs lignes ou colonnes discontinues

Cliquez sur les numéros de ligne ou les lettres de colonne tout en maintenant la touche [Ctrl] enfoncée.

Sélection de plusieurs éléments continus

Cliquez sur le premier élément (cellule, colonne ou ligne) à sélectionner, appuyez sur la touche [Maj], puis cliquez sur le dernier élément du groupe tout en maintenant cette touche enfoncée. Tous les éléments compris entre le premier et le dernier élément sont sélectionnés.


Lettre de colonne
Cliquez ici pour sélectionner la feuille de calcul entière
Numéro de ligne
Cellule de la feuille de calcul
Custom Reports - Sheet1
File Edit Format View Help
A1
Data File Name VA002.D
Data File Path C:\HPCHEM\MSDEMO\
Acq. Method File RTE method: RNCAP2
Misc Info Internal standards & surrogate standards in 5 mLs water
Vial Number 2
Number of Compounds 40.
Name Ret Time Amount Units
1) Bromochloromethane 9.61 50.00 ug/l
2) Chloromethane 2.10 205.97 ug/l
3) Vinyl Chloride 2.24 265.07 ug/l
4) Bromomethane 2.73 205.91 ug/l
5) Chloroethane 2.98 220.21 ug/l
6) 1,1-Dichloroethene 4.59 126.84 ug/l
7) Carbon Disulfide 4.92 224.62 ug/l
8) Acetone 5.27 205.95 ug/l
9) Methylene Chloride 6.13 156.93 ug/l
10) 1,2-Dichloroethene (total) 6.74 193.30 ug/l
11) 1,1-Dichloroethane 7.79 188.32 ug/l
12) Chloroform 9.95 189.67 ug/l
13) 1,4-Dichloroethane-d4 10.98 79.70 ug/l
14) 1,2-Dichloroethane 10.98 186.11 ug/l
15) 1,4-Difluorobenzene 11.79 50.00 ug/l
16) 2-Butanone 9.42 196.63 ug/l
17) 1,1,1-Trichloroethane 10.04 181.59 ug/l
18) Carbon Tetrachloride 10.34 193.75 ug/l
19) Benzene 10.81 183.19 ug/l
20) Trichloroethene 12.16 180.64 ug/l
21) 1,2-Dichloropropane 12.59 185.56 ug/l
22) Vinyl Acetate 13.06 215.22 ug/l
23) Bromodichloromethane 13.24 184.89 ug/l
24) cis-1,3-Dichloropropene 14.18 190.43 ug/l
Sheet1
Created New Report Template

Impression de rapports

Création (ou chargement) d'un modèle de rapport

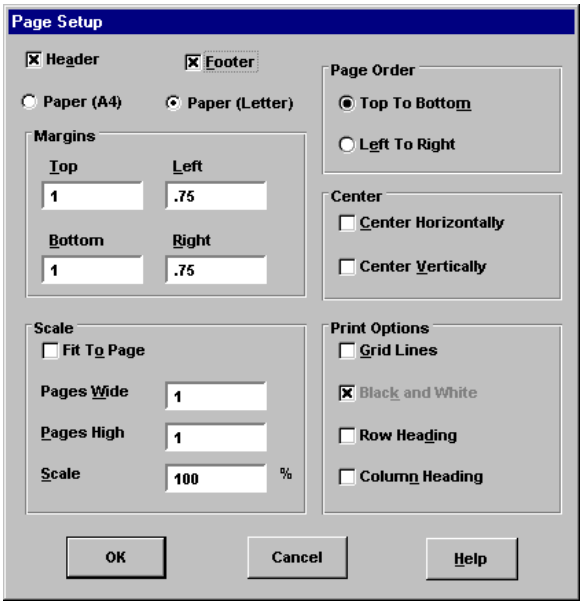
Aperçu avant impression d'un rapport

1. Sélectionnez **File/Print Preview** Le rapport s'affiche dans une fenêtre d'aperçu qui vous montre comment il se présentera lorsqu'il sera imprimé.
2. Cliquez sur **Next Page** et **Prev Page** pour passer d'une page à une autre.
3. Cliquez sur **Print**. La fenêtre d'aperçu se ferme et le rapport est imprimé.

Impression d'un rapport

1. Sélectionnez **File/Print** ou cliquez sur **Print** dans la barre d'outils. La boîte de dialogue **Print** s'affiche.
2. Sélectionnez les options d'impression (pages à imprimer, nombre de copies et qualité d'impression), puis cliquez sur **OK**.

Utilisez la boîte de dialogue **File/Page Setup** pour définir la mise en page (cliquez sur **Help** pour plus de détails).



Impression automatique de rapports

On distingue deux façons de configurer des rapports pour qu'ils s'impriment automatiquement lors de l'exécution d'une méthode :

- Créez (ou chargez) le modèle de rapport, puis sélectionnez **Print as part of Method** dans la section Method Values du Control Panel.
- Lorsque vous enregistrez un modèle de rapport, la boîte de dialogue **Link With Method** s'affiche. Sélectionnez **Print Report as part of the Run Method** et cliquez sur **OK**.

Impression automatique de plusieurs rapports

1 Créez (ou chargez) un modèle de rapport

2 Sélectionnez **File/Multiple File Select**. La boîte de dialogue **Multiple File Select** s'affiche.

3 Sélectionnez le répertoire contenant vos fichiers de données (si ce n'est déjà fait).

4 Sélectionnez les fichiers de données à imprimer.

- Sélectionnez un nom de fichier de données.
- Faites un double clic sur le fichier sélectionné (ou cliquez sur la flèche droite).
- Répétez l'opération jusqu'à ce que l'ensemble des fichiers de données soient répertoriés dans la section **Files Selected for Processing**.

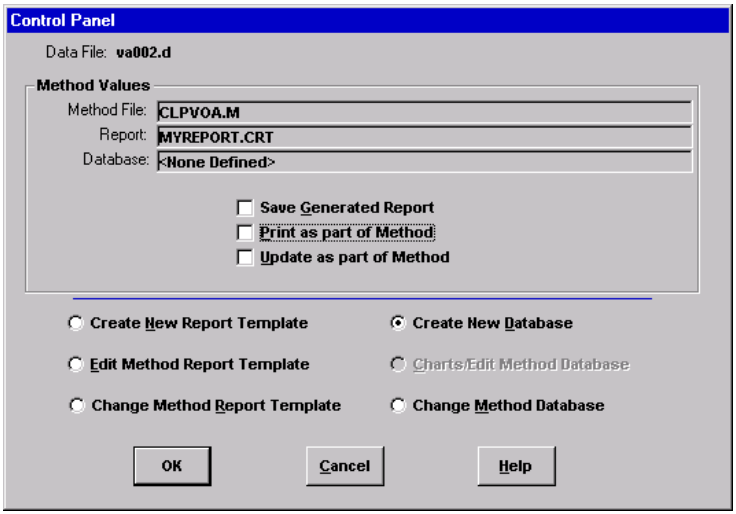
NOTE Vous pouvez sélectionner des fichiers séparément ou utiliser les techniques de sélection standard de Windows pour sélectionner des groupes de fichiers.

5 Cliquez sur **OK**. Les fichiers de données s'impriment dans l'ordre indiqué, à l'aide du modèle de rapport sélectionné.

Création d'une base de données de rapports personnalisés

Avant de commencer

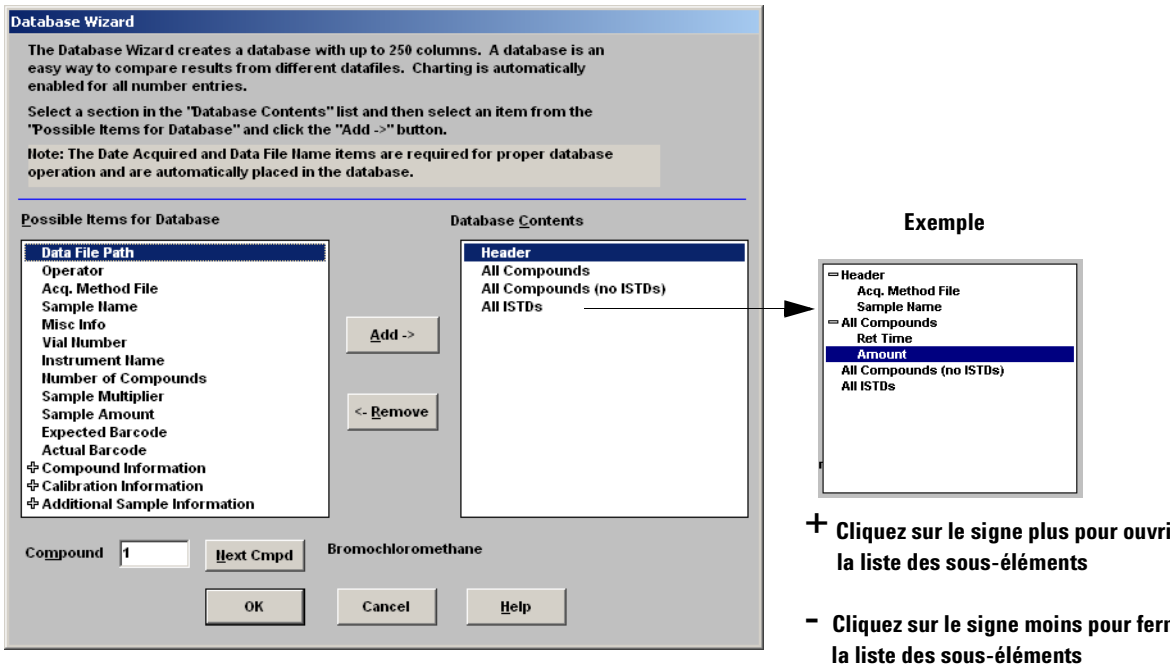
- Dans l'écran Data Analysis, sélectionnez **Quantitate/Custom Reports**.
- Si la méthode en cours n'a pas de base de données de quantification ou si aucun fichier de données n'a été chargé, le système vous demande si vous voulez utiliser les valeurs par défaut. Cliquez sur **Yes**. Le **Control Panel** (illustré ci-dessous) s'affiche.



Procédure de création d'une base de données

1. Sélectionnez **Create New Database** dans le Control Panel, puis cliquez sur **OK**.
2. L'assistant **Database Wizard** s'affiche. Sur la gauche, le volet **Possible Items for Database** répertorie tous les éléments que vous pouvez sélectionner comme contenu de la base de données de rapports personnalisés. Sur la droite, le volet **Database Contents** répertorie tous les éléments sélectionnés

qui seront inclus dans la base de données de rapports personnalisés.



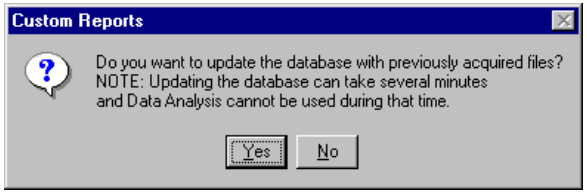
a Sélectionnez une section dans la liste **Database Contents** à droite.

b Sélectionnez un élément dans la liste **Possible Items for Database** à gauche.

c Faites un double clic sur l'élément sélectionné ou cliquez sur **Add**. L'élément sélectionné est ajouté sous l'élément en surbrillance dans le volet de droite.

d Lorsque vous avez terminé, cliquez sur **OK**.

Lorsque vous cliquez sur **OK** dans le Database Wizard, le message suivant s'affiche :

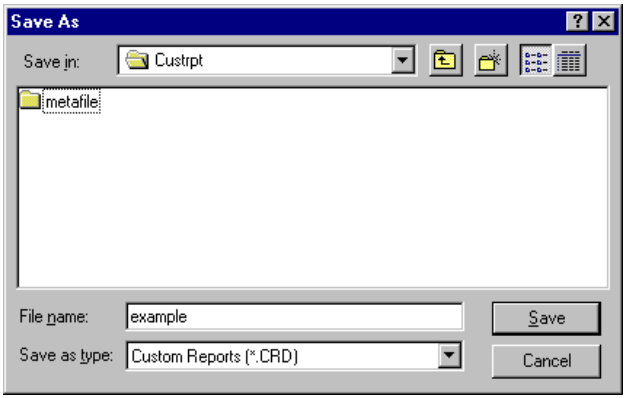


Si vous ne voulez pas mettre à jour la base de données, cliquez sur **No**. Le **Control Panel** s'affiche.

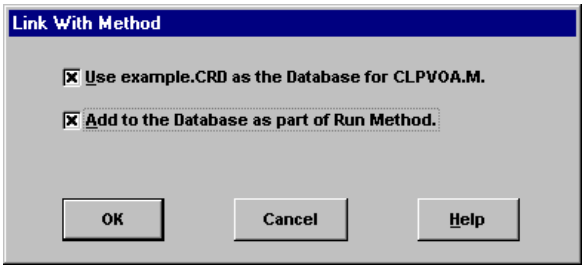
3 Si vous voulez mettre à jour la base de données :

- Cliquez sur **Yes**. La boîte de dialogue **Multiple File Select** s'affiche. Sélectionnez les fichiers de données à ajouter à la base de données, puis cliquez sur **OK**.

4 Dans la boîte de dialogue **Save As** qui s'affiche, entrez un nom de fichier puis cliquez sur **Save**.



5 Lorsque la boîte de dialogue **Link With Method** s'affiche, activez ou désactivez les cases appropriées, puis cliquez sur **OK**. La base de données est mise à jour.



Sélection de plusieurs fichiers de données

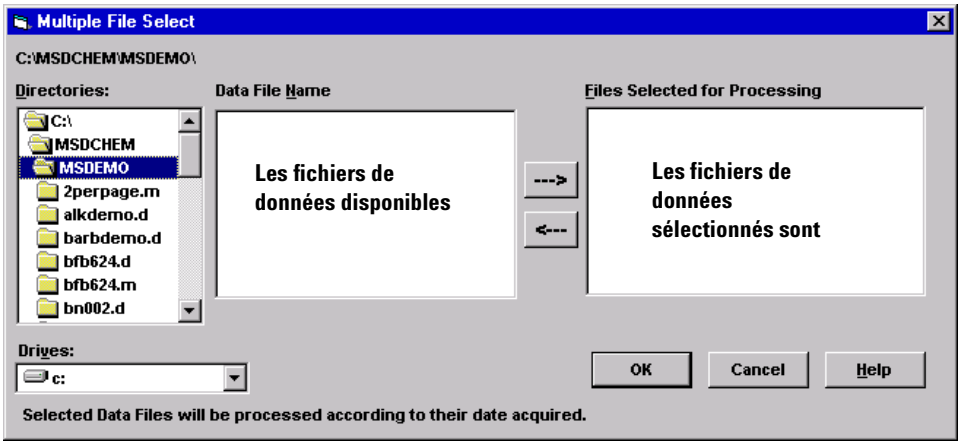
Utilisez la boîte de dialogue Multiple File Select pour imprimer plusieurs rapports ou pour charger plusieurs fichiers de données précédemment acquis dans une base de données.

Pour accéder à cette boîte de dialogue, sélectionnez **File/Multiple File Select**.

1 Sélectionnez le répertoire contenant les fichiers de données.

2 Sélectionnez les fichiers de données à utiliser dans la zone **Data File Name** et cliquez sur la flèche droite (ou faites un double clic sur un nom de fichier).

3 Cliquez sur **OK** pour traiter les fichiers de données sélectionnés.



Sélection de deux ou plusieurs fichiers consécutifs

Cliquez sur le premier fichier à sélectionner, puis faites glisser la souris jusqu'au dernier fichier du groupe.

Ou

Cliquez sur le premier fichier à sélectionner. Tout en maintenant la touche [Maj] enfoncée, cliquez sur le dernier fichier du groupe.

Sélection de deux ou plusieurs éléments non consécutifs

Cliquez sur chaque fichier tout en maintenant la touche [Ctrl] enfoncée.

Annulation d'une sélection

Cliquez sur le fichier sélectionné tout en maintenant la touche [Ctrl] enfoncée.

Pour les rapports

Les fichiers de données sélectionnés s'impriment à l'aide du modèle de rapport sélectionné. Les rapports s'impriment dans l'ordre des fichiers répertoriés.

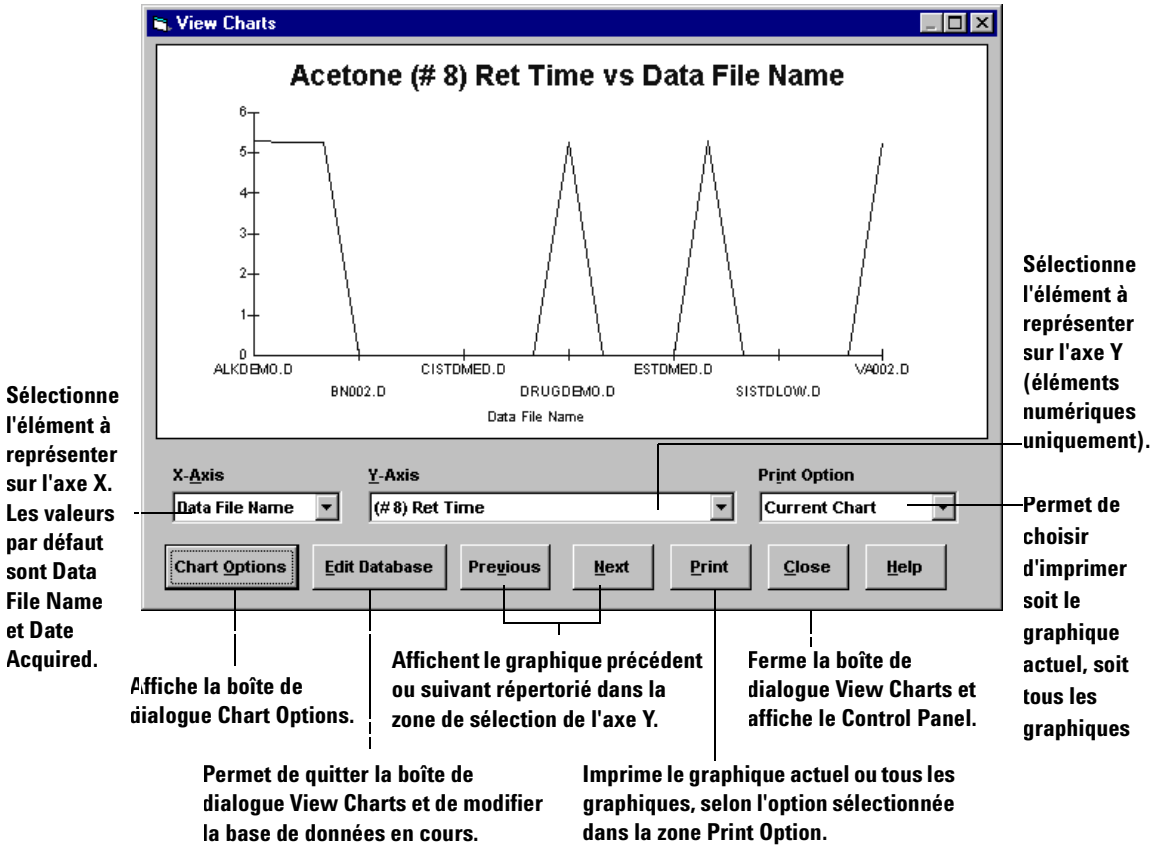
Pour les bases de données

Les fichiers de données sélectionnés sont chargés dans la base de données en cours. Les fichiers sont automatiquement triés par ordre chronologique, en fonction de la date d'acquisition, lorsqu'ils sont ajoutés à la base de données.

Affichage et impression de graphiques

La boîte de dialogue ci-dessous s'affiche lorsque vous sélectionnez **Charts/Edit Method Database** dans le Control Panel, lorsque vous cliquez sur **Charts** dans la barre d'outils des rapports personnalisés ou lorsque vous choisissez **Charts/View Charts**. Utilisez-la pour afficher et imprimer des graphiques des informations contenues dans une base de données.

NOTE Cliquez sur le graphique pour afficher la boîte de dialogue **Individual Chart Options**.



Boutons de la barre d'outils du programme Custom Reports

Affiche le Control Panel.

Ouvre un fichier de modèle (.crt) ou de base de données (.crd) de rapports personnalisés.

Enregistre un rapport ou une base de données et affiche la boîte de dialogue Link With Method.

Imprime un rapport ou une base de données.

Applique au texte sélectionné l'attribut gras (ou l'enlève).

Applique au texte sélectionné l'attribut italique (ou l'enlève).

Applique au texte sélectionné l'attribut souligné (ou l'enlève).

Aligne à gauche le contenu des cellules sélectionnées.

Centre le contenu des cellules sélectionnées entre leurs marges droite et gauche.

Aligne à droite le contenu des cellules sélectionnées.

Insère dans la cellule sélectionnée une formule correspondant à la somme des cellules situées au-dessus.

Affiche la boîte de dialogue Custom Format.

Affiche la boîte de dialogue Edit Box: Drag & Drop.

Affiche la boîte de dialogue View Charts. Ce bouton est uniquement disponible pour les bases de données.

Affiche le sommaire de l'aide en ligne.

Agilent Technologies

© Agilent Technologies, Inc.

Imprimé aux États-Unis, juin 2006

G1701-93061