

# Agilent série 6400 Système CPL/SM triple quadrupôle

## Guide de mise en route

Où trouver des informations 4

Mise en route 6

Étape 1. Démarrer le logiciel d'acquisition des données 7

Étape 2. Préparer les modules CPL 13

Étape 3. Préparer l'instrument à triple quadrupôle 17

Étape 4. Configurer et exécuter une méthode d'acquisition 21

Étape 5. Réviser les résultats avec le programme Analyse qualitative 29

Étape 6. Analyser les données avec le programme Analyse  
quantitative 29

Utilisez ce guide lors de la mise en marche de votre CPL/SM de la série 6400 et à triple quadrupôle Agilent et en tant que feuille de route pour vos informations d'utilisateur.

## Qu'est-ce que le système CPL/SM 6400 de la série à triple quadrupôle Agilent ?

Le système CPL/SM à triple quadrupôle Agilent est un système de chromatographie en phase liquide et un spectromètre de masse à triple quadrupôle qui exécute un SM/ SM à l'aide de trois ensembles de tiges parallèles (dans ce cas, quadrupôle, hexapôle, quadrupôle). Le premier quadrupôle sépare les ions en ions précurseurs fragmentés dans l'hexapôle en ions produits. Ces ions sont séparés par le second quadrupôle. Deux ou plusieurs ions précurseurs et leurs ions produits sont souvent surveillés en séquence en mode MRM (multiple reaction monitoring). Vous pouvez surveiller jusqu'à 4 000 transitions MRM à l'aide du MRM dynamique.

Grâce à la technologie iFunnel, les systèmes à triple quadrupôle Agilent 6490 et 6495 fournissent un échantillonnage des ions plus efficace dans le spectromètre de masse. La technologie iFunnel inclut la technologie Dual Offset Ion iFunnel ainsi que les technologies suivantes : Agilent Jet Stream et l'ensemble de désolvantation avec Hexabore Capillary.



**Agilent Technologies**

## Quoi de neuf dans l'acquisition des données

Les systèmes CPL/SM Agilent 6495, 6490 et 6460 à triple quadrupôle sont expédiés par défaut avec la technologie Agilent Jet Stream qui utilise une gaine de gaz surchauffé pour collimater la pulvérisation du nébuliseur qui augmente le nombre d'ions entrant dans le spectromètre de masse.

Vous pouvez configurer un système CPL/SM à triple quadrupôle Agilent avec les modules CPL Agilent 1100, 1200, 1260 ou 1290 Infinity .

De plus, Le système CPL/SM à triple quad Agilent est livré avec le Logiciel Agilent MassHunter Workstation, incluant trois principaux programmes :

- Acquisition des données : Vous pouvez, à partir d'un seul écran, régler le spectromètre de masse, contrôler et gérer les paramètres des instruments, configurer des méthodes d'acquisition et des listes de travail contenant plusieurs échantillons et contrôler des tracés en temps réel.
- Analyse quantitative : Vous pouvez, à partir d'un seul écran, configurer un lot de fichiers de données et quantifier, évaluer et requantifier les résultats. Cet écran vous donne accès à l'Éditeur de méthode pour la configuration et l'édition des méthodes de quantification.
- Analyse qualitative : Vous pouvez, à partir d'un seul écran extraire et intégrer des chromatogrammes, soustraire un arrière-plan, extraire des spectres de pics et comparer des données à partir de différents types de fichiers de données.

## Quoi de neuf dans l'acquisition des données

Le programme Acquisition des données pour le système 6400 de série à triple quadrupôle propose de nombreuses fonctions nouvelles dans cette révision.

### dans B.07.01

- Les modèles pris en charge sont 6410B, 6420A, 6430A, 6460A, 6460C, 6490A et 6495A.
- Agilent 6460A option 100 est pris en charge. Le système 6460A option 100 est un QQQ à double turbo qui utilise la source ESI standard au lieu de la source AJS ESI.
- Le chromatographe à fluide supercritique analytique Agilent 1260 Infinity est pris en charge.
- Agilent 1290 Multisampler est pris en charge.
- La CPL Agilent 1220 compacte est prise en charge.
- Agilent 35900E série 2 est pris en charge.
- Le bloc de vannes de la pompe Agilent est pris en charge.
- Le bloc de compartiments de colonnes Agilent est pris en charge.

## Quoi de neuf dans l'acquisition des données

- Le bloc HDR-DAD Agilent est pris en charge.
- La pompe quaternaire Agilent 1290 est prise en charge.
- Le VWD Agilent 1290 est pris en charge.
- Le thermostat multicolonne (MCT) Agilent 1290 est pris en charge.
- Le DAD Agilent 1290 est pris en charge.
- Le FS DAD Agilent 1290 Infinity II est pris en charge.
- La pompe binaire Agilent 1290 est prise en charge.
- Agilent 1260 Multisampler est pris en charge.
- Le HTS/HTC utilise le pilote RC.NET avec de nouvelles fonctionnalités de configuration de périphérique.

## Où trouver des informations

### Aide

**Appuyez sur F1** Pour obtenir de plus amples informations sur un volet, une fenêtre ou une boîte de dialogue, placez le curseur sur une partie du volet, de la fenêtre ou de la boîte de dialogue concernée et appuyez sur **F1**.

**Menu d'aide** Dans le menu d'aide, vous avez accès à l'aide "Comment faire" et à l'aide de référence.

### Documents

Vous pouvez ouvrir des guides d'installation/de mise à niveau depuis l'aide en ligne si ceux-ci sont installés à partir du disque d'installation Acquisition des données.

Vous pouvez ouvrir des guides d'installation/de mise à niveau à partir de l'écran d'accueil d'installation Acquisition des données.

Tous ces guides sont disponibles dans le disque d'installation du dossier **Manuels**. Certains de ces guides sont également intégrés à votre système au format papier.

**Guide d'installation** Ce guide est destiné à l'installation du matériel et du logiciel, la configuration de l'instrument et la vérification des performances.

**Guide de mise à niveau** Ce guide est destiné à la mise à niveau de votre logiciel MassHunter Workstation à partir d'une version précédente.

**Guide de maintenance** Utilisez ce guide pour pouvoir entretenir et réparer votre CPL/SM Agilent à triple quad.

**Guide de concepts - Perspective globale** Apprenez les informations de référence pour mieux comprendre l'utilisation du matériel et des logiciels.

#### **Guide de familiarisation de l'acquisition des données pour 6400 série à triple quad**

Faites les exercices pour apprendre à utiliser le matériel du CPL/SM à triple quad et le programme Acquisition des données pour le système 6400 série à triple quadrupôle.

**Guide de mise en route du logiciel Study Manager** Utilisez ce guide pour apprendre à utiliser le logiciel MassHunter Study Manager.

**Guide de mise en route du logiciel MassHunter Optimizer** Utilisez ce guide pour apprendre à utiliser le programme MassHunter Optimizer. Le programme MassHunter Optimizer permet d'optimiser automatiquement les paramètres d'acquisition des données pour le mode MRM (multiple-reaction monitoring) sur un instrument à triple quadrupôle pour chaque composé individuel analysé.

### **Guide de mise en route du logiciel MassHunter Data Acquisition Compliance**

Utilisez ce guide pour en savoir plus sur le programme MassHunter Data Acquisition Compliance.

**Guide de mise en route du logiciel MassHunter Quant Compliance** Utilisez ce guide pour en savoir plus sur le programme MassHunter Quant Compliance. *(Ce guide se trouve sur le disque Analyse quantitative.)*

**Guide de familiarisation Analyse qualitative** Faites les exercices pour apprendre à utiliser le programme Analyse qualitative *(Ce guide se trouve sur le disque Analyse qualitative.)*

Pour en savoir plus sur les nouveautés dans le programme Analyse qualitative, consultez le *Guide de familiarisation de l'analyse qualitative*.

**Guide de familiarisation Analyse quantitative** Faites les exercices pour apprendre à utiliser le programme Analyse quantitative. *(Ce guide se trouve sur le disque Analyse quantitative.)*

Pour en savoir plus sur les nouveautés dans le programme Analyse quantitative, consultez le *Guide de familiarisation de l'analyse quantitative*.

## **Formation**

**Guide de familiarisation** Utilisez les trois guides de familiarisation en savoir plus sur le logiciel.

**Guide de mise en route** Utilisez les guides de mise en route pour Study Manager, Optimizer et Compliance pour connaître ces programmes.

**Cours de formation** Visitez le site [www.chem.agilent.com](http://www.chem.agilent.com) pour consulter une liste des cours de formation pour le CPL/SM Agilent Triple Quad.

## Mise en route

### Installer le matériel et le logiciel du CPL/SM à triple quadrupôle

Utilisez le *Guide d'installation* pour installer le matériel et le logiciel et vérifier les performances.

### Configurer, exécuter et analyser les échantillons

La feuille de route ci-dessous vous montre les étapes à suivre pour la configuration et l'exécution d'un lot d'échantillons du début à la fin. Suivez les instructions sur les pages suivantes pour guider vos premiers pas et pour apprendre où rechercher les informations qui vous aideront dans chaque étape de cette procédure.

|  |  |   |
|--|--|---|
| <b>Commencez ici !</b>                                     | <b>1</b> Démarrer le logiciel Acquisition des données.     | <b>2</b> Préparer les modules CPL.<br>↓                         |
|  | <b>Configurer, exécuter et analyser les échantillons</b>   | <b>3</b> Préparer l'instrument à triple quadrupôle.<br>↓        |
| <b>6</b> Analyser les données avec l'analyse quantitative. | <b>5</b> Réviser les résultats avec l'analyse qualitative. | <b>4</b> Configurer et exécuter une méthode d'acquisition.<br>← |

## Étape 1. Démarrer le logiciel d'acquisition des données

Les instructions ci-dessous incluent les hypothèses suivantes :

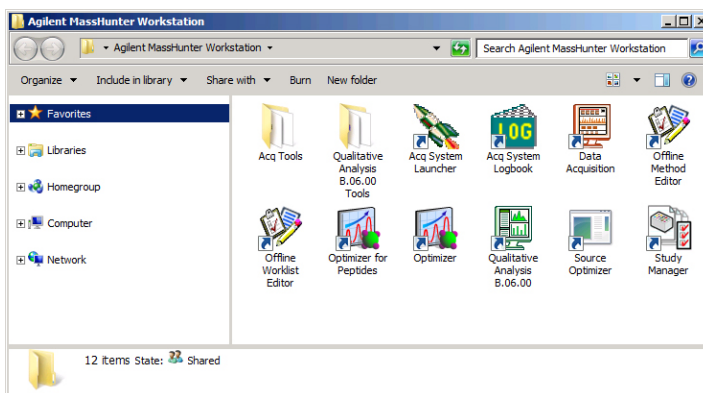
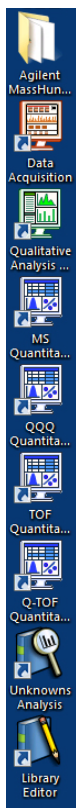
- Le matériel et le logiciel sont installés.
- L'instrument est configuré.

Utilisez les instructions du *Guide d'installation* pour configurer l'instrument pour la première fois et pour chaque modification de la configuration de la CPL.

Les modules de la CPL et le SM à triple quad sont activés, mais la pompe CPL ne fonctionne pas.

Après l'installation, toutes les icônes du logiciel Agilent MassHunter Workstation s'affichent sur votre bureau. Pour démarrer le programme Acquisition des données, double cliquez sur l'icône **Acquisition des données**.

La fenêtre Acquisition des données s'ouvre.



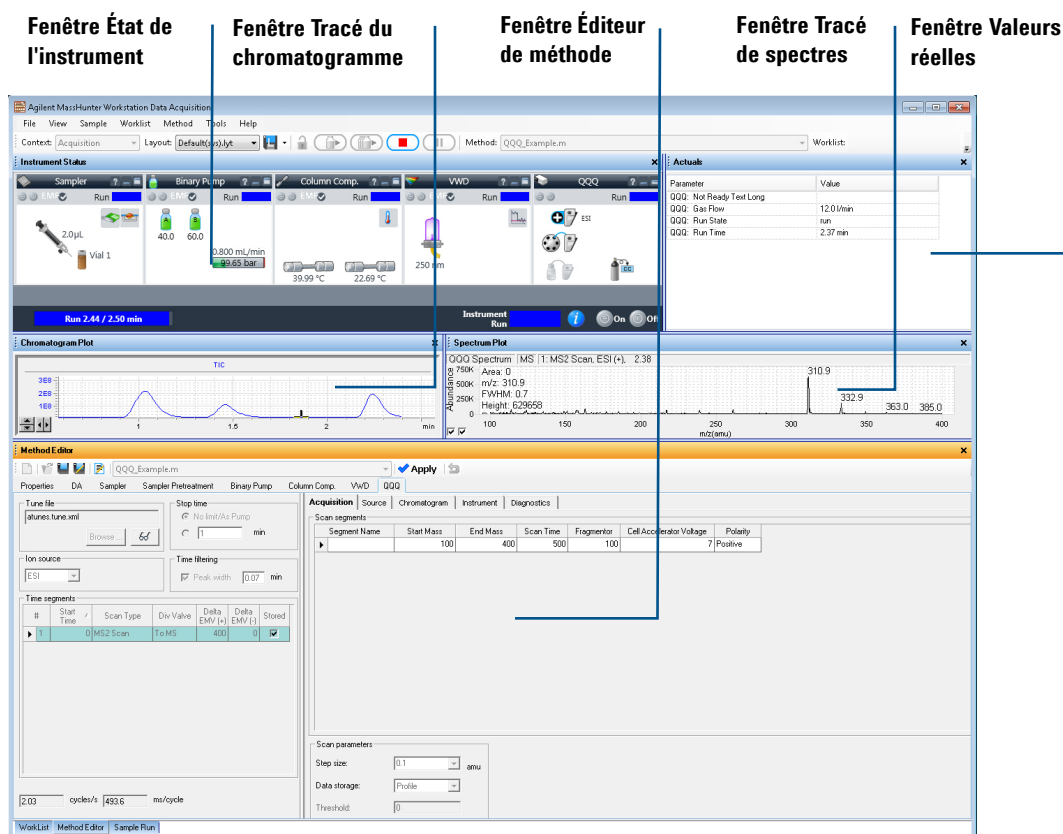
### NOTE

Lorsque l'acquisition des données s'ouvre, les moteurs du logiciel démarrent automatiquement. Si vous devez les redémarrer, cliquez avec le bouton droit sur l'icône **Acq System Launcher** dans la barre des tâches et cliquez sur **Démarrer les moteurs**.

Si vous avez récemment modifié les modules CPL, souvenez-vous de reconfigurer l'instrument. Consultez le *Guide d'installation* pour obtenir des instructions.

### Les fenêtres les plus utilisées

Lorsque vous démarrez le programme Acquisition des données, la fenêtre principale s'ouvre. La majorité de votre travail s'effectue dans les huit fenêtres de cette fenêtre principale. Ces fenêtres fournissent les outils de configuration des méthodes d'acquisition, exécutent les échantillons de manière interactive ou automatique, surveillent l'état de l'instrument, les exécutions et règlent l'instrument.



Les fenêtres Éditeur de méthode et Liste de travail sont dans les onglets suivants. Ces trois fenêtres « partagent » cet espace. Cliquez sur l'onglet pour basculer dans une fenêtre différente.

Figure 1 Fenêtre principale du programme Acquisition des données

**Afficher/masquer les fenêtres** Vous pouvez afficher à l'écran une fenêtre à la fois ou jusqu'à sept fenêtres. Vous ne pouvez jamais masquer toutes les fenêtres. Pour afficher ou masquer une fenêtre, cliquez sur les commandes dans le menu **Vue**. Vous pouvez également masquer une fenêtre en cliquant sur l'icône X dans le coin supérieur droit de la fenêtre.

Lorsque vous cliquez sur une fenêtre, le titre de la fenêtre active change de couleur. Appuyez sur **F1** pour obtenir de l'aide dans la fenêtre active. Vous pouvez également faire glisser les bords pour redimensionner la fenêtre. Si vous double-cliquez sur le titre de la fenêtre, la fenêtre « flotte » à l'extérieur de la fenêtre principale. Vous pouvez double-cliquer à nouveau sur la barre des titres pour « ancrer » la fenêtre. Vous pouvez également faire flotter et ancrer la fenêtre en cliquant avec le bouton droit sur le titre de la fenêtre et en cliquant sur **Flottante**.

**Fenêtre État de l'instrument** Cette fenêtre vous permet d'afficher l'état de chaque périphérique configuré avec l'instrument. **Erreur, Pas prêt, Pré-exécution, Post-exécution, Exécution, Injection, Inactif, Hors ligne** ou **Veille**. Vous définissez également des paramètres de contrôle et de configuration hors méthode avec l'instrument : **Activé Désactivé** ou **Veille**

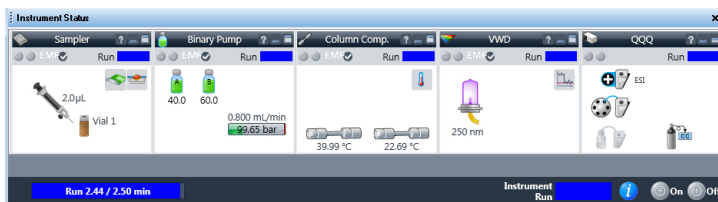
Cette fenêtre affiche l'état actuel de chaque périphérique sous forme de texte et par codage couleur :

**Tableau 1** Codage couleur dans la fenêtre État de l'instrument

| Couleur    | État                                       |
|------------|--|
| Rouge      | Erreur                                     |
| Jaune      | Pas prêt                                   |
| Violet     | Pré-exécution, post-exécution, en attente  |
| Bleu       | En cours d'exécution, en cours d'injection |
| Vert       | Inactif                                    |
| Gris foncé | Hors ligne                                 |
| Gris clair | Veille (par exemple, lampes éteintes)      |

## Mise en route

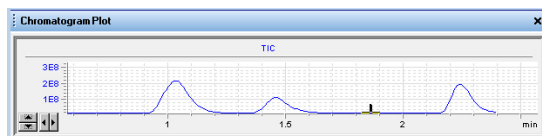
### Étape 1. Démarrer le logiciel d'acquisition des données



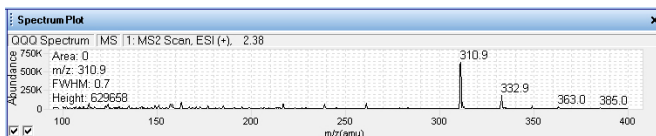
**Fenêtre Valeurs réelles** Cette fenêtre vous permet d'afficher la valeur actuelle des paramètres de l'instrument sélectionné. Pour de plus amples informations, reportez-vous à la section «Configuration pour afficher les valeurs de paramètres en temps réel (valeurs réelles)» à la page 15.

| Parameter                 | Value                  |
|---------------------------|------------------------|
| QQQ: Not Ready Text Long  |                        |
| QQQ: Not Ready Text Short |                        |
| QQQ: Gas Flow             | 5.0 l/min              |
| QQQ: Error State          | no_error               |
| QQQ: Instrument State     | background_acquisition |
| QQQ: Ion Mode             | AJS ESI                |


**Fenêtre Tracé du chromatogramme** Cette fenêtre vous permet de surveiller les tracés du chromatogramme en temps réel. Ces tracés peuvent être des signaux définis par l'utilisateur et/ou des paramètres de l'instrument. Sélectionnez les tracés dans l'onglet Chromatogramme de l'onglet QQQ dans la fenêtre Éditeur de méthode.

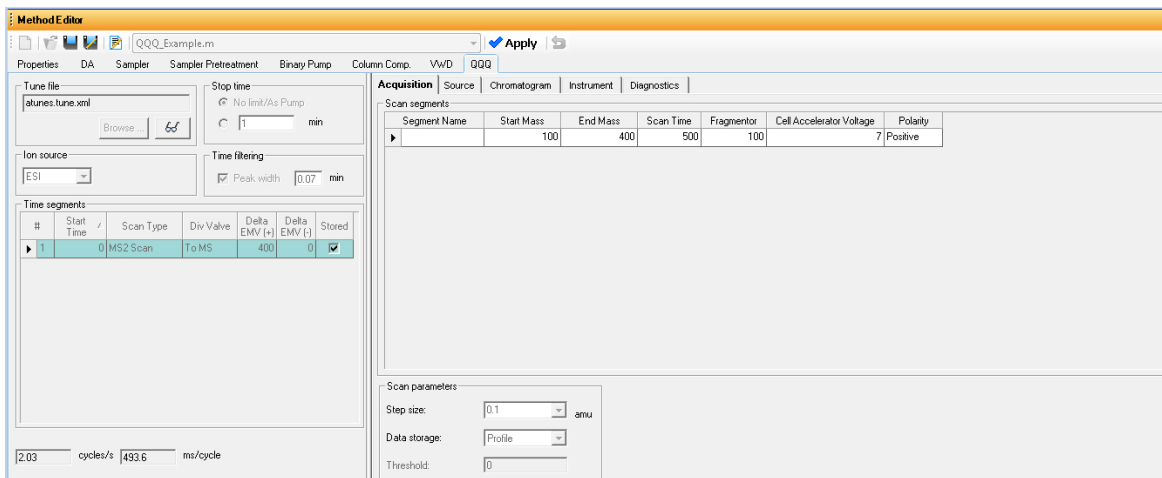


**Fenêtre Tracé de spectres** Cette fenêtre vous permet de surveiller le tracé de spectre en temps réel.

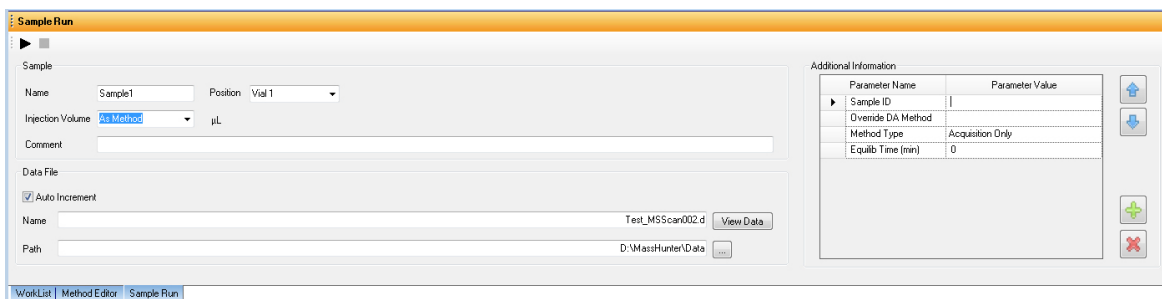


Étape 1. Démarrer le logiciel d'acquisition des données

**Fenêtre Éditeur de méthode** Cette fenêtre vous permet d'entrer des paramètres d'acquisition pour la méthode. Si vous cliquez sur le bouton , vous pouvez alors voir les valeurs de réglage dans la boîte de dialogue Paramètres de réglage.



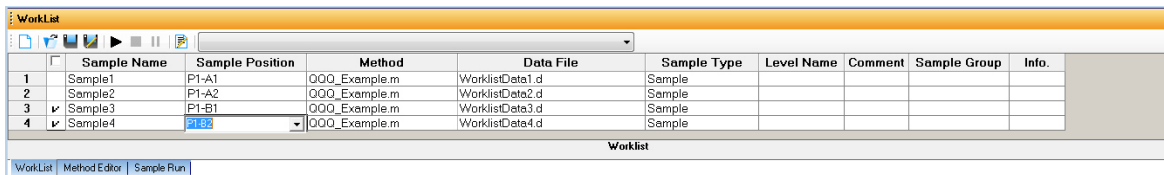
**Fenêtre Analyse des échantillons** Cette fenêtre vous permet d'entrer des informations sur les échantillons pour exécuter des échantillons individuels de façon interactive. Vous pouvez également démarrer une analyse des échantillons unique. Vous pouvez également spécifier une **méthode Remplacer l'AD** et sélectionner soit **Acquisition et AD** soit **AD seulement** pour le **Type de méthode**, puis, l'analyse des données est lancée comme partie de la méthode.



## Mise en route

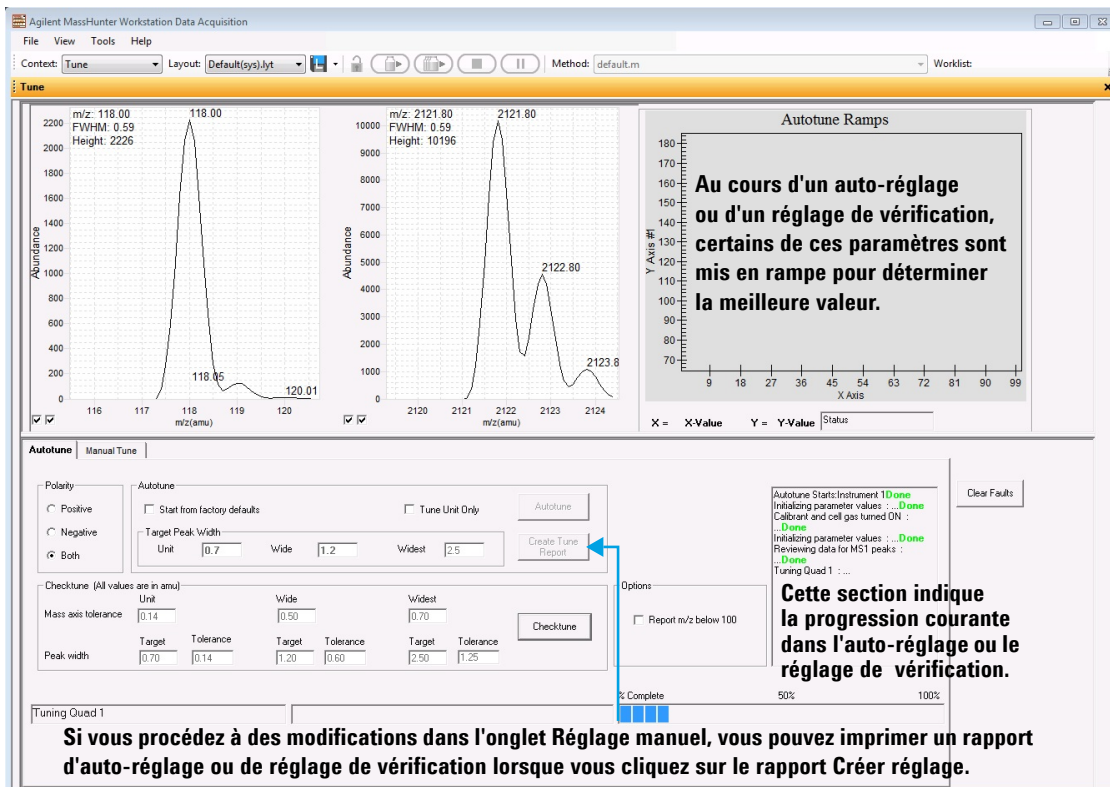
### Étape 1. Démarrer le logiciel d'acquisition des données

**Fenêtre Liste de travail** Cette fenêtre vous permet d'entrer des informations sur les échantillons pour plusieurs échantillons. Lorsque vous exécutez une liste de travail, les échantillons sont automatiquement exécutés dans l'ordre indiqué dans la liste de travail. Vous pouvez sélectionner d'exécuter **Acquisition seulement** ou **Acquisition et AD** ou encore **AD seulement** en sélectionnant une de ces options pour la **Partie de la méthode** à exécuter dans la boîte de dialogue Paramètres d'exécution de la liste de travail.



|   | Sample Name | Sample Position | Method        | Data File       | Sample Type | Level Name | Comment | Sample Group | Info. |
|---|-------------|-----------------|---------------|-----------------|-------------|------------|---------|--------------|-------|
| 1 | Sample1     | P1-A1           | 000_Example.m | WorklistData1.d | Sample      |            |         |              |       |
| 2 | Sample2     | P1-A2           | 000_Example.m | WorklistData2.d | Sample      |            |         |              |       |
| 3 | Sample3     | P1-B1           | 000_Example.m | WorklistData3.d | Sample      |            |         |              |       |
| 4 | Sample4     | P1-B2           | 000_Example.m | WorklistData4.d | Sample      |            |         |              |       |

**Fenêtre Réglage** Cette fenêtre vous permet de régler le spectromètre de masse. Vous pouvez utiliser un des algorithmes de réglage automatique ou vous pouvez régler l'instrument manuellement. Vous devez basculer au Contexte de réglage pour afficher cette fenêtre.



The screenshot displays the 'Tune' window in the Agilent MassHunter software. It features two mass spectra plots on the left, showing abundance versus m/z. The first plot shows a peak at m/z 118.00 with a height of 2226. The second plot shows a peak at m/z 2121.80 with a height of 10196. On the right, there is a plot titled 'Autotune Ramps' with a text overlay: 'Au cours d'un auto-réglage ou d'un réglage de vérification, certains de ces paramètres sont mis en rampe pour déterminer la meilleure valeur.' Below the plots, there are control panels for 'Autotune' and 'Manual Tune'. The 'Autotune' section includes options for Polarity (Positive, Negative, Both), a checkbox for 'Start from factory defaults', and a 'Tune Unit Only' checkbox. It also has a 'Target Peak Width' section with 'Unit' (0.7, 1.2, 2.5) and 'Wide' (1.2, 2.5) options. The 'Manual Tune' section includes 'Checktune' and 'Options' sections. A progress bar at the bottom indicates '% Complete' at 50%. A text box on the right states: 'Cette section indique la progression courante dans l'auto-réglage ou le réglage de vérification.'

**Si vous procédez à des modifications dans l'onglet Réglage manuel, vous pouvez imprimer un rapport d'auto-réglage ou de réglage de vérification lorsque vous cliquez sur le rapport Créer réglage.**

## Étape 2. Préparer les modules CPL

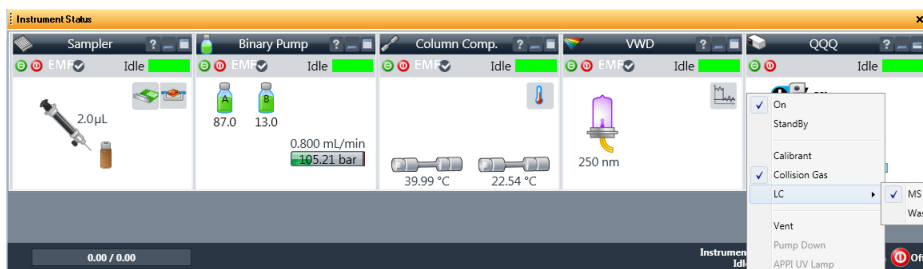
Lisez et suivez les instructions de l'*aide en ligne* pour chaque tâche de la liste de contrôle décrite dans les pages suivantes. Lors du conditionnement ou de l'équilibrage de la colonne, vous pouvez régler le SM triple quadrupôle.

### 1 Régler le flux CPL sur Déchet.

Lors de l'acquisition des données, éloigner le flux CPL de la source ionique du SM et vers les déchets.

Si la CPL est connectée à un VWD ou DAD, vous pouvez toujours surveiller les fluctuations d'un chromatogramme VWD ou DAD en temps réel avant une exécution.

- a Cliquez avec le bouton droit sur le périphérique **QQQ** dans la fenêtre État de l'instrument.



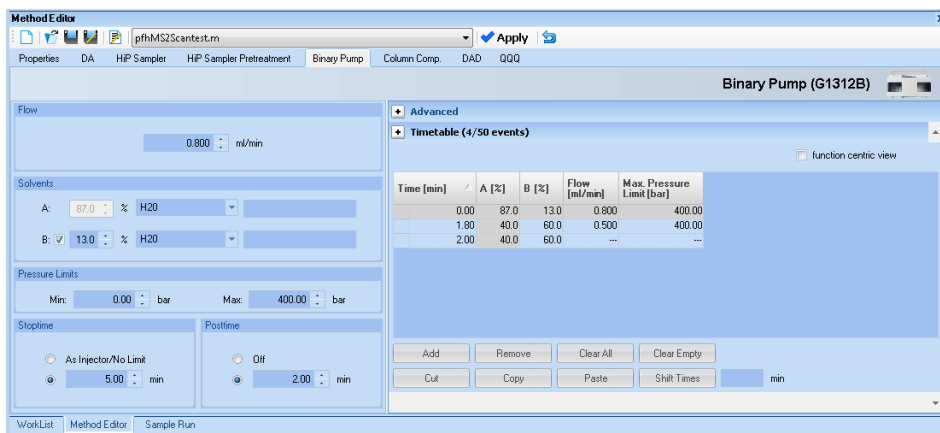
- b Cliquez sur **CPL > Déchet**.

### 2 Purger la pompe CPL.

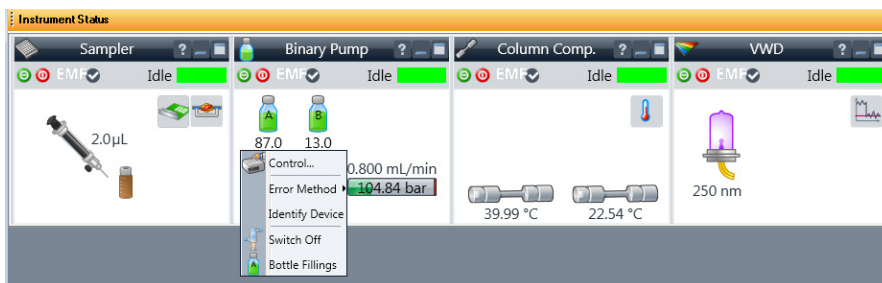
Suivez les instructions pour purger la pompe dans le *Guide utilisateur* pour votre pompe.

**3 Configurer pour conditionner ou équilibrer la colonne.**

- a** Entrez les paramètres CPL et cliquez sur bouton **Appliquer** dans la barre d'outils pour les télécharger dans la CPL.



- b** Cliquez avec le bouton droit sur un module de la CPL dans la fenêtre État de l'instrument pour modifier tous les paramètres de contrôle hors méthode, si nécessaire.

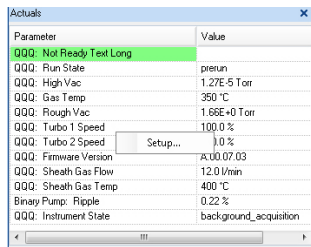


- c** Surveillez la ligne de base et ajustez le tracé pour vérifier que la colonne est équilibrée et que la ligne de base est stable. (Voir [étape 4](#) et [étape 5](#) à la page 15.)

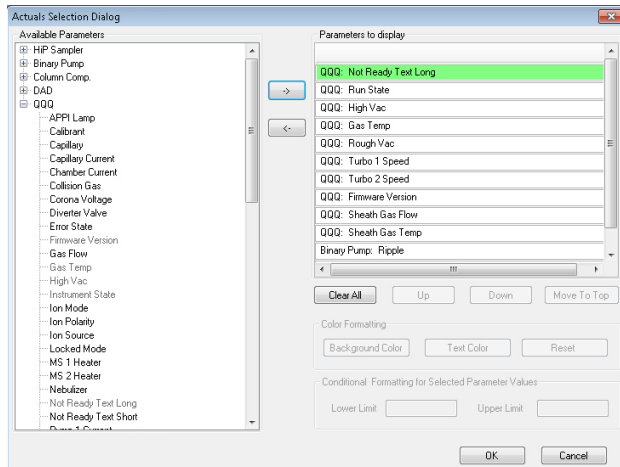
#### 4 Configuration pour afficher les valeurs de paramètres en temps réel (valeurs réelles).

Lors de la préparation d'une exécution, ou au cours d'une exécution, vous désirez voir les valeurs réelles des paramètres de l'instrument. Vous pouvez le faire dans la fenêtre État de l'instrument.

- a Cliquez avec le bouton droit sur la liste **Valeurs réelles** pour afficher la commande Configurer.



- b Cliquez sur **Configurer** pour permettre le contrôle de la liste des Valeurs réelles.

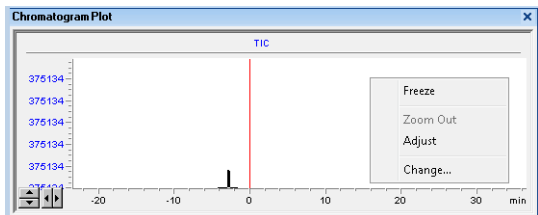


- c Ajouter toutes les valeurs de paramètres à contrôler et cliquez sur le bouton **OK**. Les paramètres que vous désirez contrôler incluent les valeurs du SM (notamment le chauffage et la pression sous vide) ou les valeurs de la CPL (notamment la pompe binaire, la colonne, le DAD, etc.). Vous pouvez définir l'arrière-plan et la couleur du texte pour chaque paramètre. Vous pouvez également définir une gamme de paramètres qui sont des nombres. Si la valeur du paramètre ne se trouve pas dans les limites entrées, l'arrière-plan du paramètre est défini sur rouge.

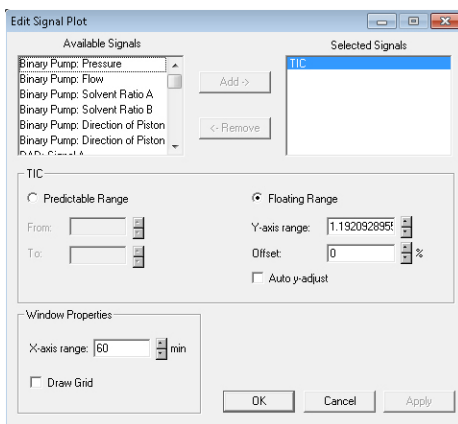
**5** Configurer les affichages de tracé en temps réel.

Lors du conditionnement de la colonne, définissez les affichages pour surveiller l'effluent.

- Cliquez avec le bouton droit sur le tracé du chromatogramme et cliquez sur **Modifier**.



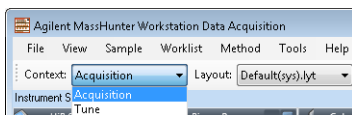
Dans la boîte de dialogue **Modifier le tracé du signal**, vous pouvez sélectionner le type d'affichage du signal.



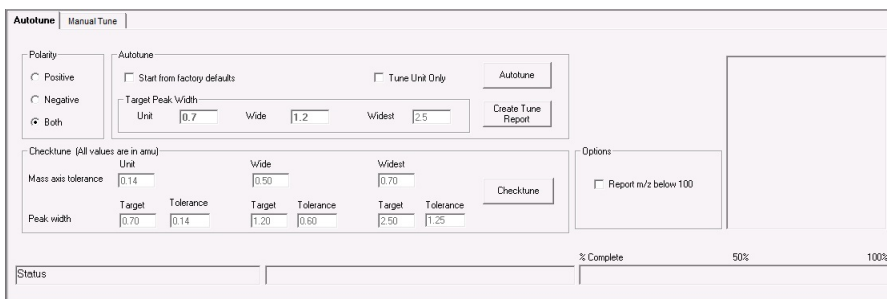
## Étape 3. Préparer l'instrument à triple quadrupôle

Procéder à un réglage de vérification, un auto-réglage ou à un réglage manuel

1 Dans la liste **Contexte** cliquez sur **Régler**.



Vous pouvez consulter la fenêtre État de l'instrument, la fenêtre Valeurs réelles et la fenêtre Réglage lorsque vous basculez vers le contexte Réglage. Cliquez sur **Régler** dans le menu **Vue** si la fenêtre Régler n'est pas visible.



2 Cliquez sur **Réglage de vérification** pour évaluer si les paramètres SM se trouvent dans les limites pour produire l'exactitude de masse et la résolution spécifiées. L'exécution du réglage de vérification prend environ 3 minutes pour chaque polarité.

Si le fichier de réglage actuel a été réglé avec l'Auto-réglage Numérisation rapide, l'algorithme de Réglage de la vérification ne vérifie que MS2. Si le fichier de réglage actuel a été réglé avec l'Auto-réglage, l'algorithme de Réglage de la vérification vérifie alors MS1 et MS2.

Si le fichier de réglage actuel a été réglé avec l'Auto-réglage Numérisation rapide, alors la case **Numérisation rapide** est cochée sur l'onglet Réglage manuel.

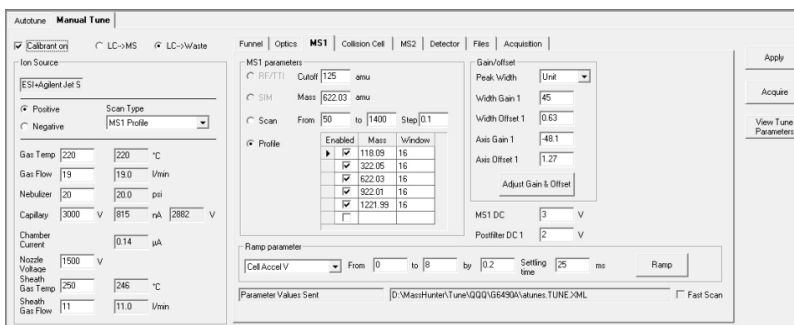
Procédez à un **Réglage de vérification** régulièrement.

Vous pouvez exécuter un **Réglage de vérification** avec les sources suivantes : ESI, AJS ESI, MMI et HPLC-Chip.

Si le **Réglage de vérification** réussit, passez à l'étape 5.

Si le **Réglage de vérification** échoue, vous pouvez alors essayer d'utiliser l'onglet Réglage manuel pour résoudre le problème. Voir l'étape suivante.

- 3 Essayez d'appliquer les modifications rapides suivantes pour que le réglage de vérification réussisse.
  - a Cliquez sur l'onglet **Réglage manuel**.
  - b Si l'échec de produit dans MS1, cliquez sur l'onglet **MS1**. Sélectionnez la **Largeur de pic** en fonction de la résolution qui a échoué dans le réglage de vérification. Vous pouvez sélectionner Unité, **Large** ou **Le plus large**. Puis, cliquez sur le bouton **Ajuster gain et décalage**.



- c Si l'échec se produit dans MS2, cliquez sur l'onglet **MS2**. Sélectionnez la **Largeur de pic** en fonction de la résolution qui a échoué dans le réglage de vérification. Puis, cliquez sur le bouton **Ajuster gain et décalage**.
  - d Si Ajuster gain et décalage réussit, enregistrez alors le fichier d'auto-réglage. Cliquez sur **Réglage manuel**. Puis, cliquez sur l'onglet **Fichiers** et cliquez sur **Enregistrer**.
  - e Cliquez sur l'onglet **Auto-réglage**.
  - f Cliquez sur le bouton **Réglage de vérification**.

Si le **Réglage de vérification** échoue, vous devez alors exécuter un auto-réglage, décrit ci-après :

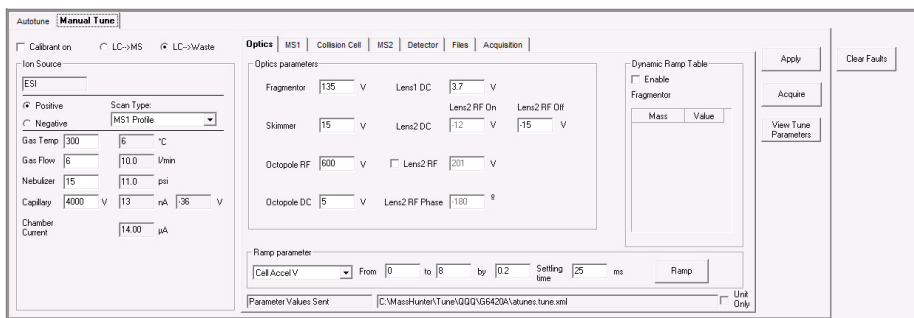
- 4 Cliquez sur **Auto-réglage** pour régler le SM automatiquement (environ 30 minutes pour chaque mode d'ionisation pour tous les modèles excepté le 6490 et le 6495. Les modèles 6490 et 6495 prennent environ 25 minutes par mode d'ionisation.) Le système change automatiquement les différents paramètres de réglage pour régler le SM. Vous ne procédez à un auto-réglage que lorsque cela est nécessaire.

Pour tous les instruments sauf le 6490 et le 6495, vous pouvez exécuter un **Auto-réglage** avec les sources suivantes : AJS ESI, MMI et HPLC-Chip. Avec les modèles 6490 et 6495, vous ne pouvez exécuter d'auto-réglage qu'avec la source AJS ESI.

Si l'**Auto-réglage** échoue, cochez la case **Démarrer avec les paramètres d'usine par défaut**. Si vous cliquez alors sur **Auto-réglage**, l'instrument est réglé en démarrant par les paramètres d'usine par défaut (environ 30 minutes par polarité pour tous les modèles, sauf le 6490 et le 6495. Les modèles 6490 et 6495 prennent environ 25 minutes par mode d'ionisation.)

Les rapports Réglage de vérification et Auto-réglage sont automatiquement générés une fois l'**Auto-réglage** terminé avec succès. En cas d'échec de l'auto-réglage, aucun rapport n'est imprimé. Vous pouvez vérifier la zone de progression en bas à droite de l'onglet Auto-réglage pour connaître les raisons de l'échec de l'auto-réglage. Vous pourrez alors soit résoudre le problème soit appeler le technicien de service Agilent et lui donner ces informations.

En cas d'échec de l'auto-réglage, ou si vous pensez que le SM à triple quadrupôle requiert l'entrée de valeurs personnalisées pour ses paramètres de réglage, vous pouvez régler manuellement l'instrument. Si vous ne parvenez pas à régler l'instrument avec succès, veuillez alors appeler le technicien de service Agilent.



- 5 *Accessoires en option.* Cliquez sur le bouton **Auto-réglage Numérisation rapide seulement** si vous voulez régler la Numérisation rapide. Vous ne passez à cette étape que si les résultats de l'auto-réglage sont acceptables.

L'acquisition de la Numérisation rapide n'est prise en charge que sur le modèle 6490 avec deux types de numérisation : **Numérisation MS2** et la numérisation **Ion produit**. L'auto-réglage Numérisation rapide ne se règle qu'avec la résolution **Large** (1,2), **Échantillons** défini sur 1 (sur l'onglet Réglage manuel > Acquisition) et la taille de l'étape doit être 0,2. Le temps de numérisation dans l'onglet Acquisition est généré automatiquement selon la taille de l'étape et la gamme de masse.

L'acquisition Numérisation rapide n'est pas prise en charge pour le modèle 6495. Vous atteignez un taux de numérisation plus rapide en augmentant la taille de l'étape à 0,3 *m/z*.

- 6 Dans la liste **Contexte** cliquez sur **Acquisition**.

### Basculer le flux CPL vers SM

- Une fois la colonne conditionnée et le réglage du SM à triple quad exécuté, basculez le flux de la CPL de **Déchet** à **SM**. Consultez «[Régler le flux CLP sur Déchet.](#)» à la page 13 pour savoir comment faire.

### Surveiller la ligne de base et les affichages des spectres du SM

Si vous ne surveillez pas la ligne de base de la CPL avec un VWD ou DAD, assurez-vous que la ligne de base Triple quadrupôle est stable et qu'aucun spectre d'intensité d'interférence n'apparaît.

Si vous surveillez la ligne de base de la CPL avec un VWD ou DAD, revenez aux valeurs par défaut des affichages Triple quad.

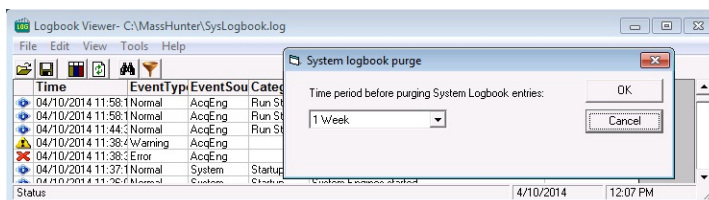
- 1 Cliquez avec le bouton droit sur le tracé du chromatogramme et cliquez sur **Modifier**.
- 2 Sélectionnez le signal du SM et cliquez sur **OK**.

### Afficher le journal de bord du système pour vérifier l'absence d'évènement et d'erreur

Lors de la préparation de l'instrument, vous pouvez rencontrer une erreur que vous souhaitez résoudre. Faites ceci à l'aide du Journal des événements du système

- Cliquez sur l'icône **Journal (LOG)** dans la barre d'outils de la fenêtre Acquisition des données et affichez les événements du journal.
- Ou, cliquez sur **Outils > Journal des événements du système**.
- Ou bien, cliquez avec le bouton droit sur l'icône **LOG** dans la barre des tâches du système. Cliquez d'abord sur **Activer notification**. Puis, cliquez avec le bouton droit sur l'icône LOG et cliquez sur **Configurer**. Le système peut vous informer de nouvelles erreurs et avertissements en affichant des messages depuis la barre des tâches.

Une fois le Journal des événements du système ouvert, sélectionnez la période de temps pour conserver les entrées du Journal des événements du système. Vous pouvez définir la valeur de 1 semaine à 1 an. Pour ce faire, cliquez sur **Outils > Purger les paramètres**. La boîte de dialogue **Purger du journal des événements du système** s'affiche.

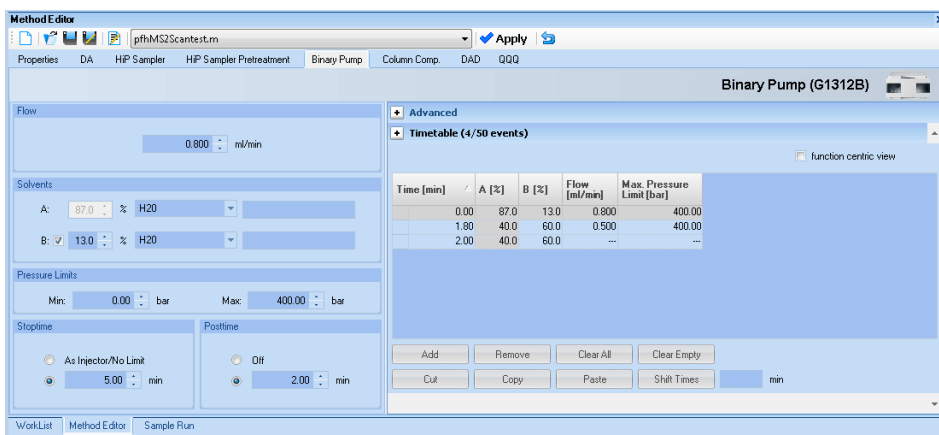


## Étape 4. Configurer et exécuter une méthode d'acquisition

Lisez et suivez les instructions dans l'*aide en ligne* pour chacune des tâches décrites dans les pages suivantes.

Faites également l'exercice 1 du *Guide de familiarisation* Acquisition des données pour en savoir plus sur la configuration et l'exécution d'une méthode d'acquisition.

- 1 Configurer la méthode :
  - a Entrez les valeurs et les paramètres pour chacun des onglets suivants.
  - b *Accessoires en option*. Si vous désirez télécharger les paramètres vers l'instrument, cliquez sur **Appliquer**.
  - c Pour enregistrer la méthode, cliquez sur **Méthode > Enregistrer sous**.
  - d Spécifiez la méthode et cliquez sur **OK**.
- 2 Saisissez les valeurs de tous les modules CPL configurés pour l'instrument.



### NOTE

Assurez-vous, lorsque vous saisissez les paramètres du SM sur la page suivante, que le fichier de réglage est bien celui que vous désirez utiliser avec l'acquisition;

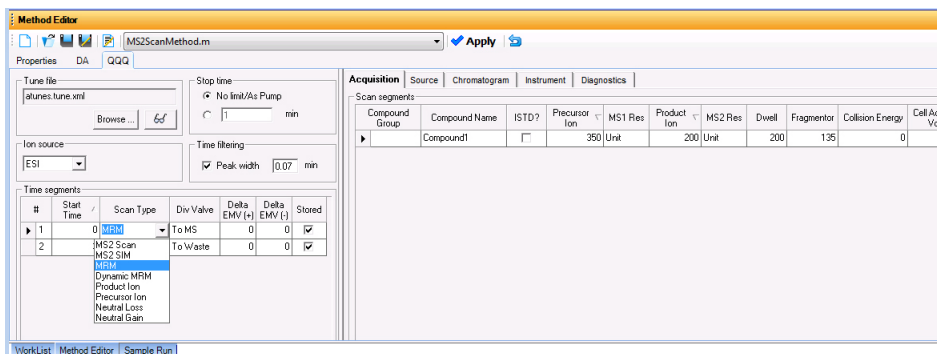
- 3 Entrez les valeurs des paramètres du triple quadrupôle.
  - a Sélectionnez le **Type de numérisation** dans la liste du tableau **Segments de temps**. Le tableau Numériser les segments est effacé lorsque vous modifiez

le **Type de numérisation**. Les paramètres disponibles à droite sont modifiés en fonction du **Type de numérisation**.

Si vous modifiez le **Type de numérisation** de **MRM** à **MRM dynamique** ou à **MRM déclenché**, vous pouvez copier et coller les transitions depuis le tableau **Segments de numérisation** initial vers le presse-papiers puis vers le nouveau tableau **Segments de numérisation**. Reportez-vous à l'*aide en ligne* pour obtenir de plus amples informations.

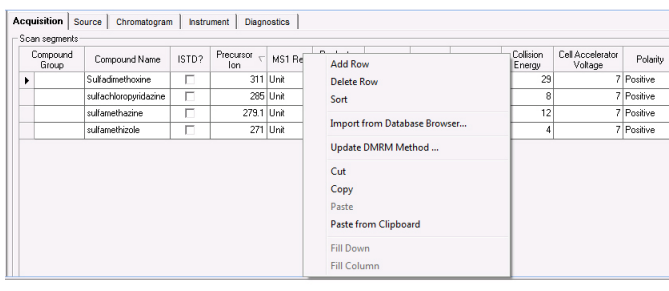
- b** Saisissez toute valeur d'**Acquisition** que vous désirez modifier. Vous pouvez entrer plusieurs **Segments de numérisation**.

Vous ne pouvez pas définir la tension du fragmenteur dans Acquisition si le type d'instrument est un Agilent 6490 ou un Agilent 6495. La valeur du fichier de réglage est toujours utilisée.



**4** Configuration pour modifier les paramètres du SM Triple quad avec des segments et des numérisations :

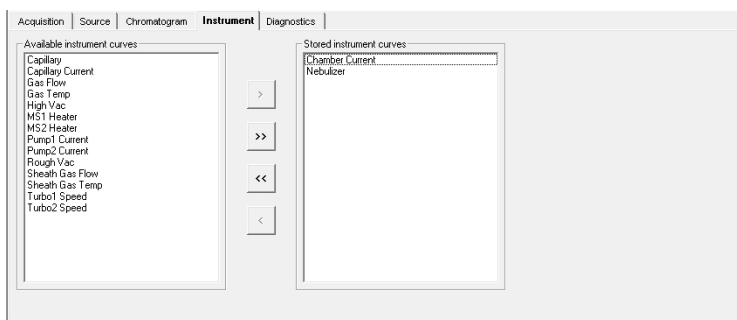
- a** Pour ajouter un segment, cliquez avec le bouton droit n'importe où dans la section **Segments de numérisation** pour afficher le menu contextuel Segments de numérisation et cliquez sur **Ajouter ligne**.
- b** Saisissez les paramètres pour chaque Segment de numérisation.



- 5 Définissez les signaux pour le tracé du chromatogramme :
- Cliquez sur l'onglet **Chromatogramme**.
  - Sélectionnez le **Type de chromatogramme** et entrez d'autres valeurs de tracé.

| Chromatogram      |        |                  |               |             |                 |        |         |
|-------------------|--------|------------------|---------------|-------------|-----------------|--------|---------|
| Chromatogram Type | Label  | Extracted Masses | Precursor Ion | Product Ion | Excluded Masses | Offset | Y-Range |
| TIC               | TIC    |                  |               |             |                 | 0      | 1E+07   |
| MRM               | MRM    |                  | 350           | 200         |                 | 0      | 1000    |
| EIC               | EIC    | 200              |               |             |                 | 0      | 1000    |
| MS1EIC            | MS1EIC |                  | 350           | 200         |                 | 0      | 1000    |
| MS2EIC            | MS2EIC |                  | 350           | 200         |                 | 0      | 1000    |
| BPC               | BPC    |                  |               | 200         |                 | 0      | 1000    |
| MS1BPC            | MS1BPC |                  |               | 200         | 200             | 0      | 1000    |
| MS2BPC            | MS2BPC |                  | 350           |             |                 | 0      | 1000    |

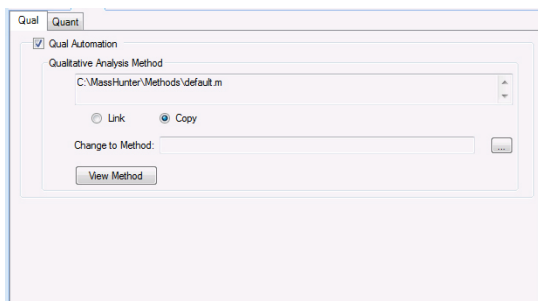
- 6 Configurez les **Courbes stockées de l'instrument** dans l'onglet Instrument. Dans le programme Analyse qualitative, affichez ces valeurs dans la fenêtre Valeurs réelles du SM pour les spectres actuels. Avec le Triple quadrupôle, les valeurs de la fenêtre Valeurs réelles du SM du programme Analyse qualitative sont les valeurs enregistrées dans l'onglet Instrument.
- Cliquez sur l'onglet **Instrument**.
  - Sélectionnez les **Courbes stockées de l'instrument**. Ces courbes peuvent être affichées dans la fenêtre Résultats du chromatogramme du programme Analyse qualitative. Les valeurs peuvent être affichées dans la fenêtre Valeurs réelles du SM.



- 7 Définissez les paramètres d'analyse des données (**AD**).

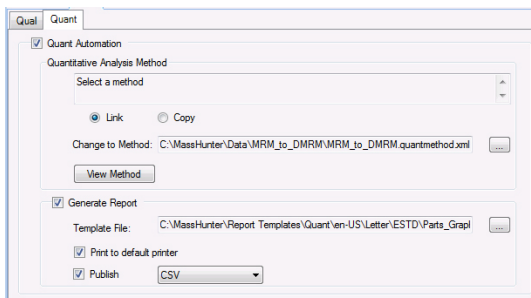
Une méthode peut contenir des paramètres d'analyse qualitative, d'analyse quantitative ou les deux. Une méthode d'Analyse des données est une méthode qui contient des paramètres d'acquisition des données avec soit la case **Automatisation qual** cochée dans l'onglet Qual soit la case **Automatisation quant** cochée dans l'onglet Quant.



- a Cliquez sur l'onglet **AD**.
- b *Accessoires en option.* Cochez la case **Automatisation qual**. Le nom de la méthode Analyse qualitative courante est affiché dans la zone. Si vous désirez modifier la méthode Analyse qualitative connectée, cliquez sur le bouton [...] pour sélectionner une autre méthode. Lorsque la méthode Acquisition des données est enregistrée, la méthode Analyse qualitative sélectionnée est copiée ou liée à la méthode Acquisition des données.

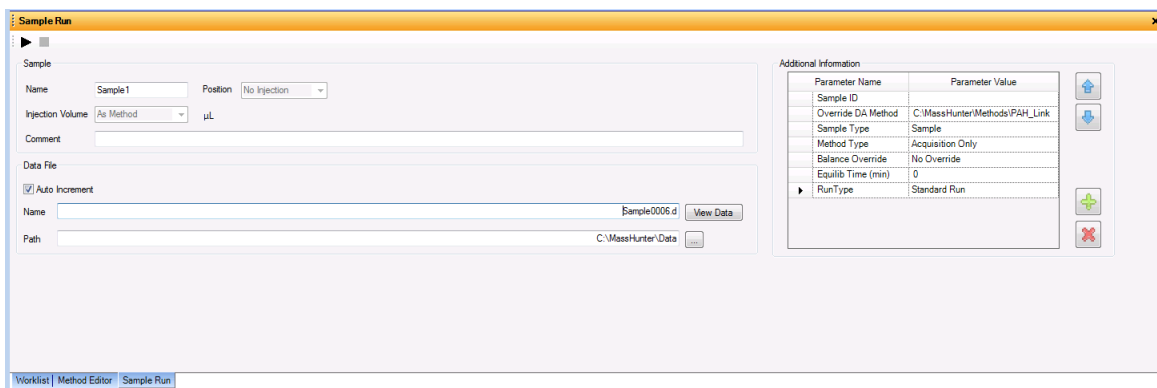


- c *Accessoires en option.* Cliquez sur l'onglet **Quant**. Cochez la case **Automatisation quant**. Le nom de la méthode Analyse quantitative courante est affiché dans la liste. Si vous désirez modifier la méthode Analyse quantitative connectée, cliquez sur le bouton [...] pour sélectionner une autre méthode. Lorsque la méthode Acquisition des données est enregistrée, la méthode Analyse quantitative sélectionnée est copiée ou liée à la méthode Acquisition des données.
- d *Accessoires en option.* Cochez la case **Générer rapport** dans l'onglet Quant. Puis, sélectionnez le **Fichier modèle** à utiliser. Si vous désirez imprimer le rapport, cochez la case **Imprimer vers l'imprimante par défaut**. Vous pouvez également cocher la case **Publier** pour créer un fichier CSV, TXT ou PDF.

Étape 4. Configurer et exécuter une méthode d'acquisition



- 8 Définissez les paramètres pour cette méthode.
  - a Cliquez sur l'onglet **Propriétés**.
  - b Cliquez sur le bouton  pour sélectionner le **Script pré-exécution**.
  - c Cliquez sur le bouton  pour sélectionner le **Script post-exécution**.
  - d Entrez la **Description** de cette méthode.
- 9 Enregistrez la méthode
  - a Cliquez sur **Méthode > Enregistrer sous** ou **Méthode > Enregistrer**.
  - b Si nécessaire, nommer la méthode et cliquez sur **OK**.
- 10 Configurer et exécuter des échantillons interactifs :
  - a Cliquez sur la fenêtre **Analyse des échantillons**. Elle se trouve par défaut dans les onglets des fenêtres **Liste de travail** et **Éditeur de méthode**.
  - b Entrez le **Nom de l'échantillon**, le **Nom du fichier de données**, le **Chemin d'accès** et d'autres valeurs.
  - c Entrez les **Informations supplémentaires**. Vous pouvez modifier la valeur des paramètres dans la liste **Informations supplémentaires**.



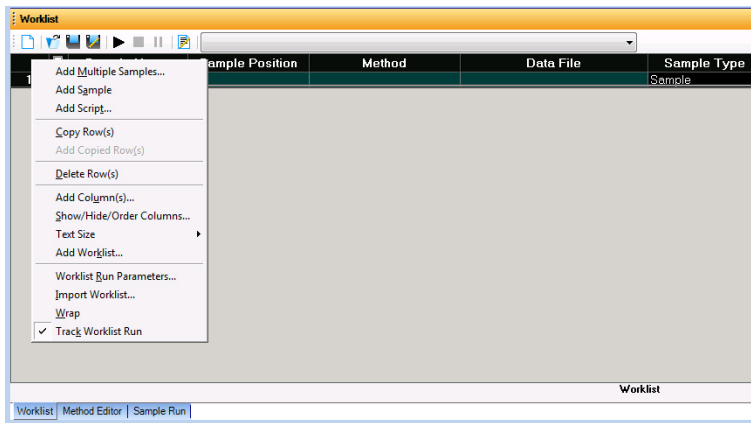
Vous pouvez exécuter une méthode d'analyse des données à partir de cette fenêtre, en sélectionnant **Acquisition et AD** ou **AD seulement** pour le **Type de méthode**. De plus, vous devez définir **Remplacer la méthode AD** pour indiquer la méthode Acquisition des données à exécuter. Vous devez toujours faire ceci.

- d Pour démarrer une analyse des échantillons unique, cliquez sur le bouton Exécuter (▶) dans la fenêtre Analyse des échantillons ou sur le bouton Exécuter (🔒▶), dans la barre d'outils principale.

Vous pouvez exécuter un seul échantillon en mode verrouillé ou déverrouillé. Lorsque le mode est verrouillé, personne ne peut modifier la méthode ni les paramètres de l'échantillon au cours d'une exécution. Vous pouvez également remplacer ce fichier de données dans le programme Acquisition des données. Le bouton Verrouiller (🔒) de la barre d'outils principale indique que le mode verrouillé est actif.

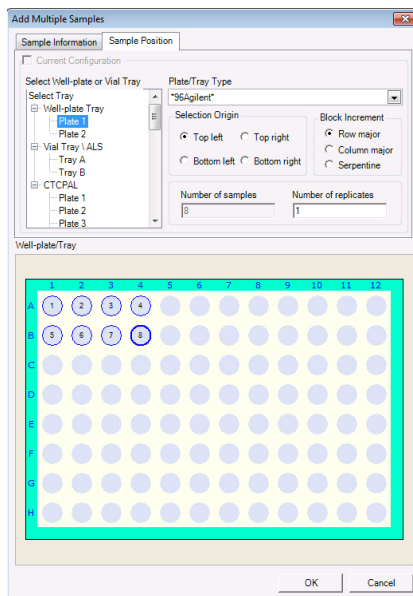
**11 Configurer et exécuter des listes de travail**



- a Cliquez sur l'onglet **Liste de travail** pour afficher la fenêtre Liste de travail. Si la fenêtre Liste de travail n'est pas visible, cliquez sur **Afficher > Liste de travail**.
- b Cliquez avec le bouton droit sur le coin supérieur gauche de la liste de travail.



- c Cliquez sur **Ajouter plusieurs échantillons**. La boîte de dialogue **Ajouter plusieurs échantillons** s'affiche.
- d Entrez toutes les informations dans l'onglet Informations sur les échantillons.
- e Cliquez sur l'onglet **Position des échantillons** pour spécifier les emplacements des flacons de l'échantillon (vérifiez que le type de support de l'échantillon spécifique a été configuré en cliquant avec le bouton droit sur l'image de l'appareil du passeur d'échantillons).

## Étape 4. Configurer et exécuter une méthode d'acquisition



- f** Spécifiez les emplacements et cliquez sur le bouton **OK**.
- g** Pour définir l'exécution de la liste de travail, cliquez avec le bouton droit dans le coin supérieur gauche et cliquez sur **Paramètres d'exécution de la liste de travail**.
- h** Cliquez sur l'onglet **Page 1**.
- i** Entrez les chemins 'accès pour la méthode et les fichiers de données.
- j** Cliquez sur l'onglet **Page 2**.
- k** Vérifiez les informations et cliquez sur le bouton **OK**.
- l** Pour démarrer la liste de travail, cliquez sur l'icône **Exécuter la liste de travail**, (  ), dans la barre d'outils principale ou sur le bouton Exécuter (  ) dans la fenêtre Liste de travail.

Exécutez une liste de travail en mode verrouillé ou déverrouillé. Lorsque le mode est verrouillé, personne ne peut modifier la méthode ni la liste de travail tandis que la liste de travail est en cours d'exécution.

## Mise en route

### Étape 4. Configurer et exécuter une méthode d'acquisition

#### NOTE

Pour utiliser une méthode d'acquisition avec une méthode AD différente par rapport à la méthode entrée dans la liste de travail, affichez la colonne nommée **Méthode Remplacer AD** dans la liste de travail en utilisant la boîte de dialogue **Afficher/Masquer/Classer les colonnes**. Dans cette colonne, entrez le nom d'une autre méthode contenant les paramètres AD à utiliser pour l'échantillon. La partie AD de cette méthode est utilisée à la place de la partie AD de la méthode courante.

Vous pouvez également entrer le nom de cette méthode dans la boîte de dialogue Ajouter plusieurs échantillons.

---

## Étape 5. Réviser les résultats avec le programme Analyse qualitative

Utilisez le programme Analyse qualitative pour suivre ces étapes et plus encore :

- Réviser les résultats pour le développement de la méthode d'acquisition
- Sélectionnez le précurseur et les ions produits les mieux appropriés pour les analyses MRM.
- Rechercher des composés
- Identifier des composés
- Procéder à une extraction des caractéristiques moléculaires

Faites les exercices dans le **Guide de familiarisation de l'analyse qualitative** pour vous aider à savoir comment utiliser le programme Analyse qualitative.

Faites l'exercice 1 de l'Acquisition des données pour le **Guide de familiarisation Triple Quad** pour vous aider à savoir comment utiliser le programme Analyse qualitative et développer des méthodes d'acquisition.

Reportez-vous également à l'*aide en ligne* sur le programme Analyse qualitative pour savoir comment procéder à plus d'opérations pour analyser vos données.

## Étape 6. Analyser les données avec le programme Analyse quantitative

Le programme Analyse quantitative constitue un autre outil prioritaire pour l'analyse et la création de rapports sur les résultats de la CPL/SM à triple quad.

- Faites les exercices dans le **Guide de familiarisation de l'analyse quantitative** pour vous aider à savoir comment acquérir des fichiers de données :
  - Définissez un lot et une méthode pour quantifier automatiquement un jeu d'échantillons.
  - Réviser les résultats en apprenant comment afficher et utiliser l'écran résultats du lot en un seul coup d'œil
  - Identifiez et utilisez des valeurs extrêmes pour modifier la méthode et requantifier les données à l'aide d'un meilleur ajustement de courbe d'étalonnage ou d'autres paramètres mieux appropriés

Reportez-vous également à l'*aide en ligne* sur le programme Analyse quantitative pour savoir comment procéder à plus d'opérations pour analyser vos données.

## **Dans ce guide**

Ce guide contient de brèves instructions pour vous aider dans la mise en marche de votre système CPL/SM Agilent à triple quadropole. Ce guide présente rapidement l'utilisation du programme d'Acquisition des données pour :

- Préparer l'instrument pour une exécution.
- Configuration des méthodes d'acquisition.
- Configurer et exécuter des listes de travail.

Microsoft®, Windows®, Windows 7® et Excel® sont des marques déposées de Microsoft Corporation aux États-Unis et/ou dans d'autres pays.

© Agilent Technologies, Inc. 2015

Révision A, février 2015



G3335-93182

Révision A0



**Agilent Technologies**