

Agilent 6200 系列 TOF 和 6500 系列 Q-TOF LC/MS 系统

快速入门指南

新增功能 4

在哪里可以获得信息 6

入门 8

第 1 步 . 启动数据采集软件 9

第 2 步 . 准备 LC 模块 16

第 3 步 . 准备 TOF 和 Q-TOF 仪器 20

第 4 步 . 设置并运行方法 37

第 5 步 . 通过定性分析查看结果并查找化合物 45

第 6 步 . 设置和运行定量分析 45

本指南提供有关使用 Agilent 6200 系列飞行时间和 6500 系列四极杆飞行时间 LC/MS 系统的入门指南，并可以作为您查看用户信息的路标。

什么是 Agilent 6200 系列 TOF LC/MS 系统？

Agilent TOF 是正交加速飞行时间质谱仪 (oa-TOF)。离子到达飞行时间腔体后，将被推入与其原始路径垂直的方向，这意味着为了将离子送入飞行管而施加的加速脉冲与离子进入质量分析器时的方向正交。这种几何结构可最大限度降低入口速度对飞行时间的影响，从而提高分辨率。

可以使用 Agilent 1200 LC、1260 或 1290 Infinity 或 1290 Infinity II LC 模块以及若干离子接口之一来设置 Agilent TOF LC/MS：



Agilent Technologies

什么是 Agilent 6500 系列 Q-TOF LC/MS 系统？

- ESI
- 双 ESI
- AJS ESI（Agilent 喷射流 ESI）
- 双 AJS ESI（双 Agilent 喷射流 ESI）
- HPLC-Chip
- APCI
- APPI
- 多模式
- 纳喷雾 (nanoESI)
- 双纳喷雾（双 nanoESI）
- MALDI
- GC-APCI

Agilent 6230 精确质量 TOF 支持 Agilent 喷射流 ESI。AJS ESI 源使用超热的鞘气瞄准雾化器喷雾，可大幅增加进入质谱仪的离子数量。

每个 Agilent 系统在药物研究、代谢组学和环境分析方面都具有优势 — 高通量样品筛选以及高灵敏度检测和准确的质量分配。

什么是 Agilent 6500 系列 Q-TOF LC/MS 系统？

Agilent Q-TOF LC/MS 是一个液相色谱仪四极杆飞行时间质谱仪，它使用四极杆、六极杆碰撞池和飞行时间分析器执行 MS/MS，以产生质谱图。四极杆将选择前级离子，它们在碰撞池中碎裂为产物离子，然后以垂直于原始路径的角度推入检测器。

您可以使用 Agilent 1200 LC、1260 或 1290 Infinity 或 1290 Infinity II 模块以及以下若干离子接口之一来设置 Agilent Q-TOF LC/MS：ESI、双 ESI、AJS ESI、双 AJS ESI、HPLC-Chip、APCI、APPI、多模式、纳喷雾、双纳喷雾、MALDI 和 GC-APCI。

可以使用 Agilent 喷射流 ESI 源 (AJS ESI) 设置 Agilent 6538 和 6540 UHD 精确质量 Q-TOF、Agilent 6550 iFunnel Q-TOF 以及 Agilent 6545 Q-TOF。该源使用超热的鞘气瞄准雾化器喷雾，可大幅增加进入质谱仪的离子数量。还可以使用双 AJS ESI 源设置 Agilent 6545 Q-TOF 和 Agilent 6550 iFunnel Q-TOF。

什么是 Agilent MassHunter Workstation 软件？

Agilent TOF 和 Q-TOF LC/MS 附带 Agilent MassHunter Workstation 软件，其中包括以下程序：

- 数据采集 — 可以从一个应用程序调谐质谱仪、控制和监测仪器参数、设置包含采集参数的方法和包含多个样品的工作单以及监测实时运行图谱。
- 定性分析 — 可以从一个应用程序设置用于提取和积分色谱图、提取峰质谱图以及比较不同类型数据文件的数据的方法。更重要的是，可以查找化合物并为之生成分子式。有关定性分析程序的详细信息，请参阅《定性分析熟悉指南》或定性分析程序的联机帮助。
- 定量分析 — 可以从一个应用程序设置一批数据文件并对结果进行定量分析、评估和重新定量分析（如果您希望如此）。有关定量分析程序的详细信息，请参阅《定量分析熟悉指南》或定量分析程序的联机帮助。

新增功能

在 B.06.01 中

- 支持 Agilent 6545 Q-TOF 质谱仪。
- 支持 Agilent 6550 iFunnel Q-TOF 质谱仪。
- 此发行版支持 Agilent 6540A、6540B、6538A、6530A、6530B 和 6520B 精确质量 Q-TOF 质谱仪。
- 不支持 Agilent 6560 离子淌度 Q-TOF 质谱仪。
- 6540B 和 6530B 能够在目标模式下以最高 50 质谱图 / 秒和 30 MS/MS 质谱图 / 秒的速率采集 MS 质谱图。
- 支持 Agilent 6230A 和 6224A 精确质量 TOF 质谱仪。
- 此发行版支持 Agilent 6230B。
- 不支持 Agilent 6220A。
- 支持 Agilent 1260 Infinity Analytical SFC（超临界流体色谱）。
- 支持 Agilent 1290 Multisampler。
- 支持 Agilent 1220 Compact LC。
- 支持 Agilent 35900E Series 2。
- 支持 Agilent Pump Valve Cluster。
- 支持 Agilent Column Compartment Cluster。
- 支持 Agilent HDR-DAD Cluster。
- 支持 MassHunter Walkup C.02.01。
- 6545 Q-TOF 质谱仪中支持 SWARM 自动调谐算法。
- 小分子自动调谐适用于 6545 Q-TOF 质谱仪。
- 可以在“仪器配置”对话框中恢复仪器配置。
- HTS/HTC 使用具有新设备配置功能的 RC.NET 驱动程序。
- 可以在“方法编辑器”窗口的“定量”选项卡中指定“定量”报告方法。

在 B.06.00 中

- 此发行版仅支持 Agilent 6560 离子淌度 Q-TOF 质谱仪。
- 包含 Agilent MassHunter IM-MS 浏览器，用于分析 IM-MS 数据。

有关对以前版本的更新列表，请参阅联机帮助。

在哪里可以获得信息

联机帮助

按 F1 要获得有关某个窗口或对话框的详细信息，请将光标放在相关窗口或对话框上，然后按 **F1** 键。在 Agilent MassHunter IM-MS 浏览器程序中，则可以单击 **帮助 > 目录**。

“帮助”菜单 通过“帮助”菜单访问“如何”帮助和参考帮助。

文档

安装后，可以从联机帮助的主页面查找这些指南。还可以在安装盘上的**手册**文件夹中找到大部分手册的 PDF 版本。

安装指南 本指南供 Agilent 客户工程师用于安装硬件和软件、配置仪器和验证性能。其中一个安装指南适用于 Q-TOF，另一个适用于 TOF。

概念指南 - 概览 学习背景信息以帮助您了解硬件和采集软件的操作。

TOF/Q-TOF 熟悉指南 通过完成练习，可以了解如何使用 TOF/Q-TOF LC/MS 硬件和采集软件。

维护指南 本指南有助于对您的 Agilent TOF LC/MS 或 Agilent Q-TOF LC/MS 进行维护和故障排除。

MassHunter Study Manager 快速入门指南 使用本指南可以了解如何使用 MassHunter Study Manager 软件。您可以在该产品安装盘上的**手册**文件夹中找到此手册的 PDF 版本。

MassHunter Data Acquisition Compliance 快速入门指南 通过本指南，可以了解 MassHunter Data Acquisition Compliance 软件。您可以在该产品安装盘上的**手册**文件夹中找到此手册的 PDF 版本。

MassHunter Quantitative Analysis Compliance 软件快速入门指南 通过本指南，可以了解 MassHunter Quantitative Analysis Compliance 软件。（*MassHunter 定量分析文档可以从 MassHunter 定量分析光盘安装。*）

定量分析熟悉指南 通过练习来了解如何使用定量分析程序。（*MassHunter 定量分析文档可以从 MassHunter 定量分析光盘安装。*）

LC/MS 定性分析熟悉指南 通过练习来了解如何使用定性分析程序。（*本指南位于定性分析光盘上。*）

MassHunter BioConfirm 软件快速入门指南 了解如何使用 BioConfirm 软件（*Agilent MassHunter BioConfirm 软件可单独购买。*）

MassHunter BioConfirm 熟悉指南 通过完成练习，可以了解如何使用 BioConfirm 软件（*Agilent MassHunter BioConfirm 软件可单独购买。*）

培训

熟悉指南 通过三个熟悉指南（数据采集、定性分析和定量分析），可以了解该软件。

快速入门指南 通过 Study Manager、Acquisition Compliance 和 Quantitative Analysis Compliance 的快速入门指南，可以了解这些程序。

报告设计器用户信息 DVD 观看影片并使用熟悉指南了解如何自定义 MassHunter 定性分析和 MassHunter 定量分析程序的报告。

培训课程 访问 www.chem.agilent.com 以查看针对 6200 系列 TOF 和 6500 系列 Q-TOF LC/MS 的培训课程列表。

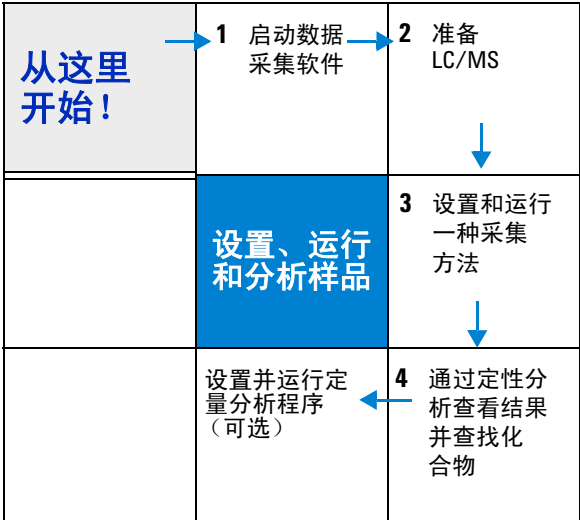
入门

安装 TOF 或 Q-TOF LC/MS 硬件和软件

使用仪器的《安装指南》安装硬件和软件并验证性能。

设置、运行和分析样品

下面的路线图显示了从开始到结束设置和运行一批样品的步骤。按照下一页面上的说明开始，并了解从哪里可以找到进行路线图中每一步的帮助信息。



第 1 步 . 启动数据采集软件

以下说明假定：

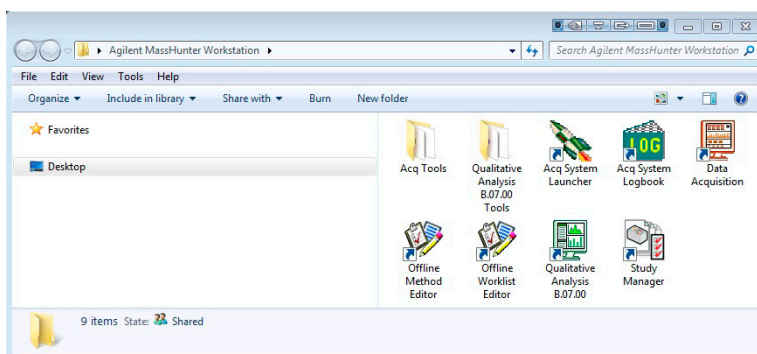
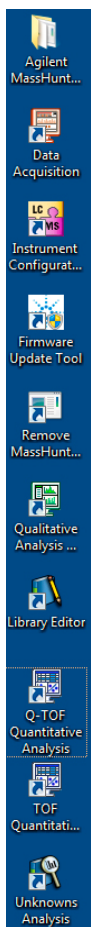
- 已经安装了硬件和软件。
- 已经配置了仪器。

首次配置该仪器及在任何时间更改 LC 配置时，请使用《安装指南》中的说明。

- LC 模块和 LC/MS 仪器已打开，但 LC 泵未运行。

安装完成后，您会在桌面上看到所有 Agilent MassHunter Workstation 软件图标。

- 要启动数据采集程序，请双击**数据采集**图标。



当数据采集打开时，软件引擎会自动启动。如果需要重新启动这些引擎，右键单击系统托盘中的“采集系统启动器”图标，然后单击**启动引擎**。

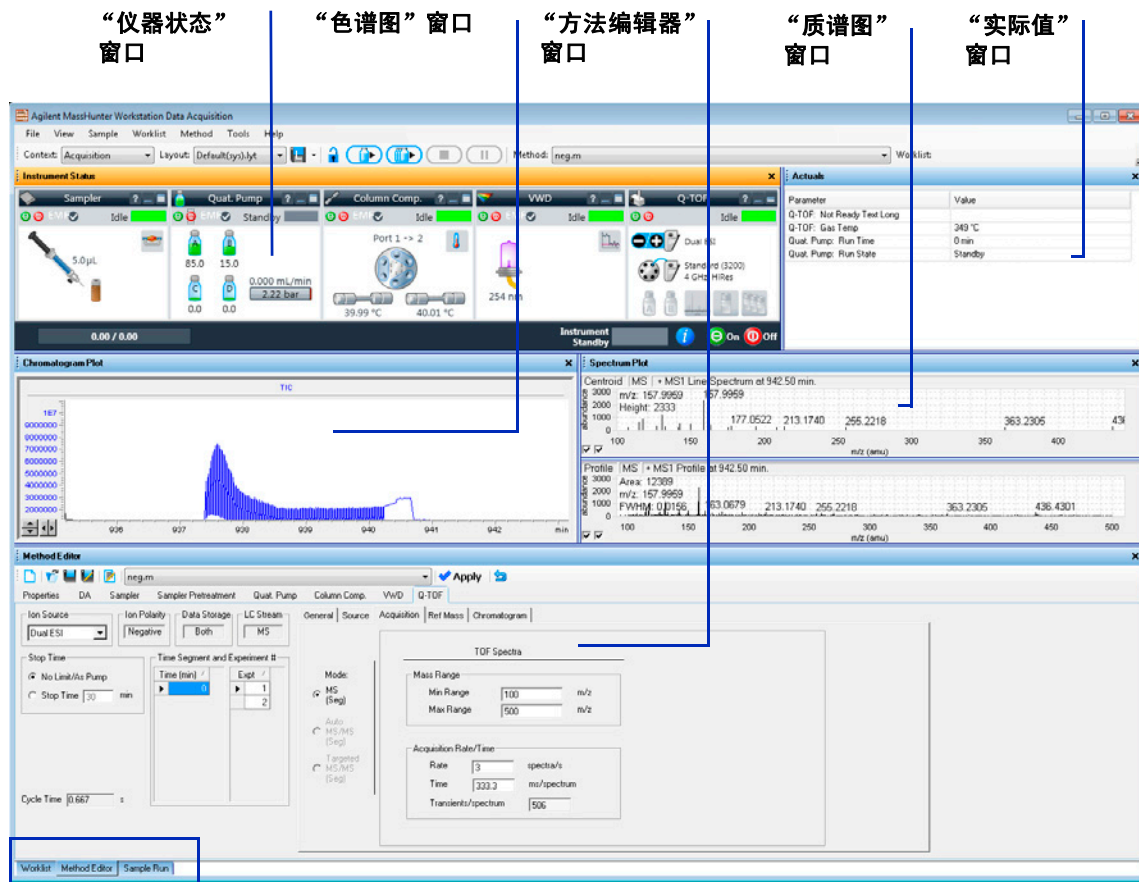
如果最近更改了 LC 模块，请记住重新配置该仪器。有关说明，请参阅**安装指南**。

1 入门

第 1 步. 启动数据采集软件

执行大部分操作的窗口

首次启动数据采集软件时，将显示主窗口。您将在此主窗口的不同窗口中执行大部分操作。这些窗口提供设置采集方法、以自动或交互方式运行样品、监测仪器状态和监测运行的工具。处于“调谐”上下文时，您将使用“调谐”窗口。



“方法编辑器”、“样品运行”和“工作单”窗口在此处变为选项卡式窗口。这三个窗口“共享”这一空间。单击该选项卡以切换到其他窗口。

图 1 数据采集软件的主窗口

显示 / 隐藏窗口 一次可以在屏幕上显示一个窗口或所有七个窗口。您无法将所有的窗口都隐藏。要显示或隐藏一个窗口，请单击**视图**菜单中的命令。您还可以通过单击窗口右上角的 **X** 图标隐藏该窗口。

当您单击窗口时，活动窗口的标题更改为不同颜色。按 **F1** 以获取活动窗口的帮助。还可以拖动窗口边框来调整窗口的大小。如果双击窗口的标题，窗口“浮动”在主窗口之外。可以再次双击标题栏以“停靠”窗口。还可以通过右键单击窗口标题并单击**浮动**浮动或停靠窗口。

“仪器状态”窗口 通过此窗口，可以查看配置有该仪器的每个设备的状态 - 打开、关闭或待机。您还可以为 **LC** 设备和 **MS** 仪器设置非方法控制和配置参数。

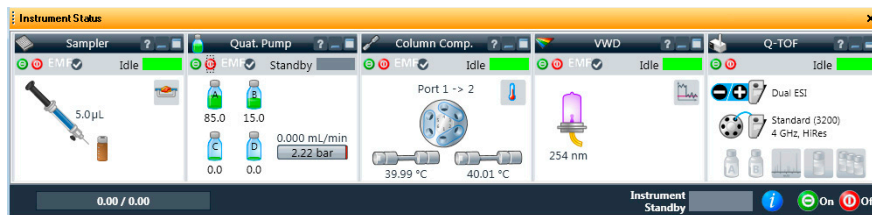
此窗口将每个设备的当前状态显示为文本及其颜色编码：

“仪器状态”窗口中的颜色编码

颜色	状态
红色	错误
黄色	未就绪
紫色	预运行、后运行
蓝色	运行、进样
绿色	空闲
深灰色	脱机
浅灰色	待机（例如，关灯）

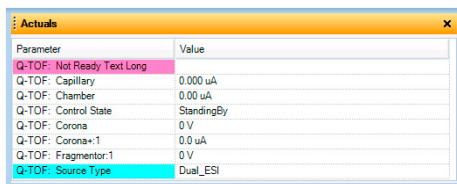
1 入门

第 1 步 . 启动数据采集软件

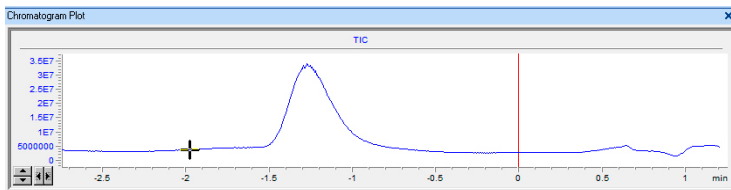


可以单击任何设备窗格的？按钮获得有关该窗口的帮助。

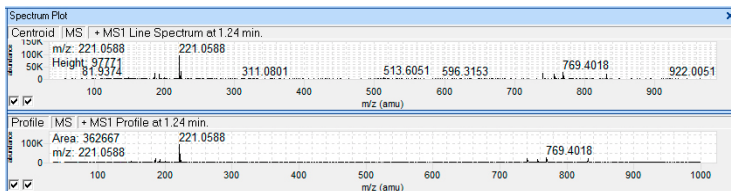
“实际值”窗口 在此窗口中，您可以查看所选仪器参数的当前值。



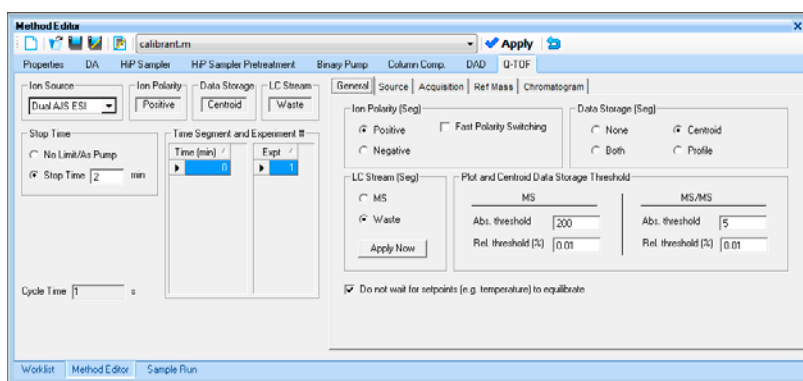
“色谱图”窗口 在此窗口中，您可以实时监测色谱图。这些谱图可以是用户定义的信号和 / 或仪器参数。



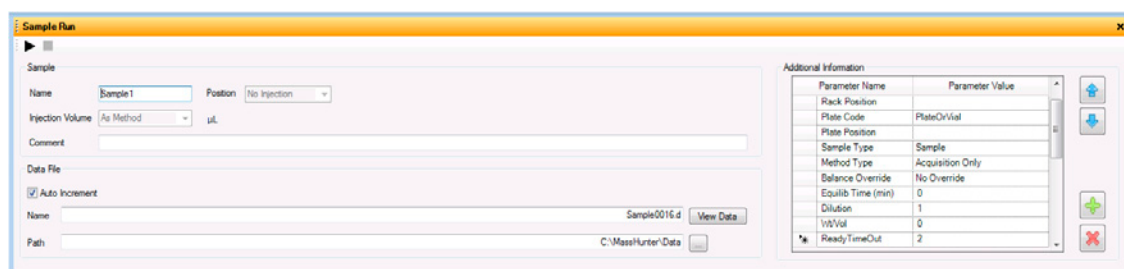
“质谱图”窗口 通过此窗口，可以实时监测质谱图。



“方法编辑器”窗口 在此窗口中，您可以输入方法的采集参数。



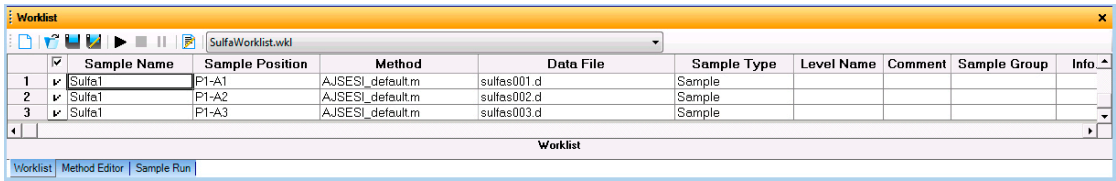
“样品运行”窗口 在此窗口输入样品信息，以通过交互的方式运行每个样品，然后可以开始运行一个样品。还可以指定覆盖 DA 方法，并针对方法类型选择采集和 DA 或仅 DA，然后再将数据分析作为方法的一部分来运行。



1 入门

第 1 步 . 启动数据采集软件

“工作单” 窗口 在此窗口中，您可以输入多个样品的样品信息。当您运行工作单时，自动按工作单中列出的顺序运行样品。您可以选择要运行**仅采集**、**采集和 DA** 还是**仅 DA**，方法是在“工作单运行参数”对话框中针对**要运行的方法**部分选择其中一个选项。



	Sample Name	Sample Position	Method	Data File	Sample Type	Level Name	Comment	Sample Group	Info
1	Sulfa1	P1-A1	AJSESI_default.m	sulfas001.d	Sample				
2	Sulfa1	P1-A2	AJSESI_default.m	sulfas002.d	Sample				
3	Sulfa1	P1-A3	AJSESI_default.m	sulfas003.d	Sample				

“调谐” 窗口 通过此窗口，可以调谐质谱仪。可以使用自动调谐算法或手动调谐仪器。手动调谐的结果可能不太理想；但是，如果执行手动调谐，Agilent 建议您仅手动调谐仪器的前部：离子源和光学器件 1。Agilent 不建议手动调谐碰撞池之后的参数。

还可以选择采集数据时使用的仪器模式，并校正仪器。如果您有 Agilent 6545 Q-TOF，则可以使用其他选项执行小分子自动调谐。

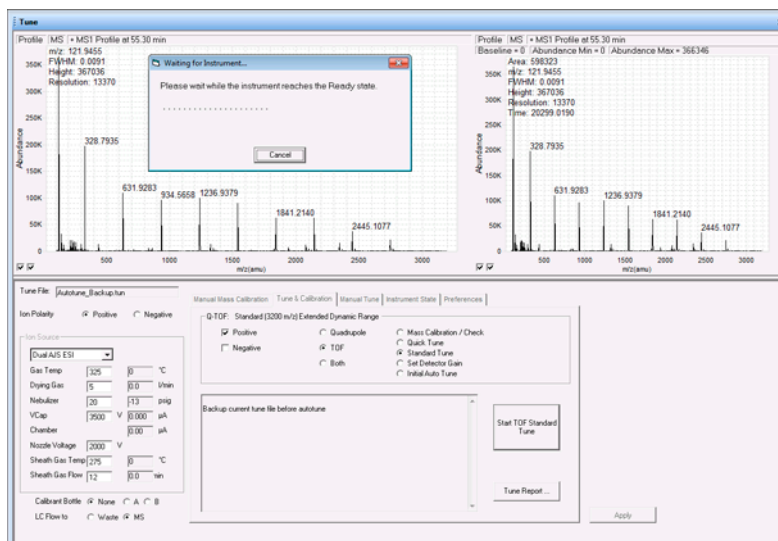


图 2 执行经典自动调谐的 Agilent 6530 Q-TOF 仪器“调谐”窗口

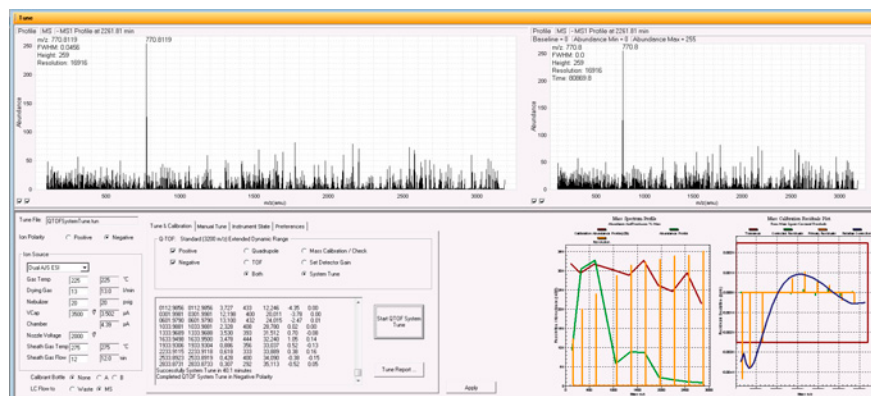


图 3 显示 SWARM 自动调谐的其他两个图形的 Agilent 6545 Q-TOF 仪器“调谐”窗口

第 2 步 . 准备 LC 模块

对于以下页面描述的清单中的每个任务，阅读并遵循联机帮助中的说明。

1 将“LC 流路”切换到“废液”。

当您调节色谱柱或使色谱柱平衡，可以调谐 TOF 或 Q-TOF MS。在此期间，您不希望泵流出物进入 TOF 或 Q-TOF MS，因此需要将 LC 流路的方向改为偏离 MS 离子源，并进入废液。

如果使 LC 连接到 VWD 或 DAD，在运行前您仍然可以监测 VWD 或 DAD 的实时色谱图的波动。

a 在“方法编辑器”窗口中，单击 TOF 或 Q-TOF 选项卡中的**常规**选项卡。

The screenshot shows the 'Advanced Parameters' tab in the 'Method Editor' window. The 'LC Stream (Seg)' section has 'Waste' selected. The 'Data Storage (Seg)' section has 'Both' selected. The 'Plot and Centroid Data Storage Threshold' section shows thresholds for MS and MS/MS.

MS		MS/MS	
Abs. threshold	200	Abs. threshold	5
Rel. threshold (%)	0.01	Rel. threshold (%)	0.01

b 在 **LC 流路（段）** 组框中，单击**废液**。

c 单击**立即应用**。此按钮仅将 LC 洗脱液的当前值发送到仪器。如果单击工具栏中的**应用**，则所有方法参数都将发送到仪器。

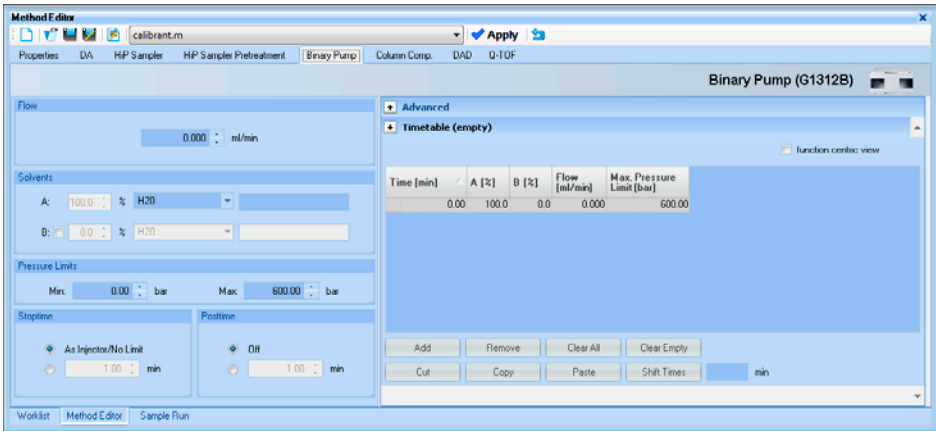
2 清洗 LC 泵。

按照您的泵的《用户指南》中的说明清洗泵。

3 调节色谱柱或使色谱柱平衡。

冲洗泵之后，便可进行设置以老化色谱柱或使色谱柱平衡。

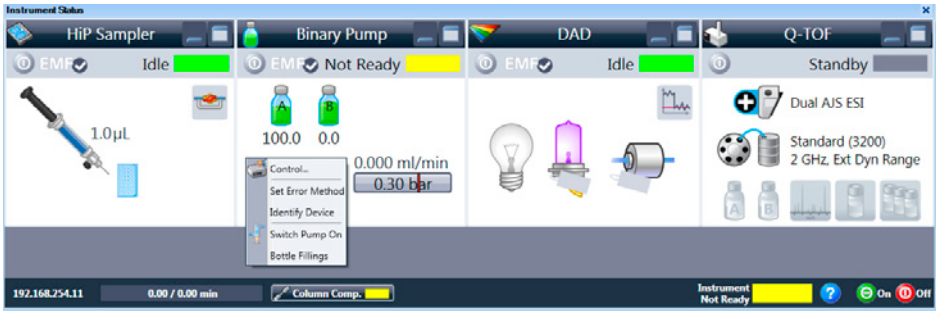
a 输入 LC 参数并单击**应用**以将其下载到 LC。



或者，要选择 LC 调节方法，请从“数据采集”窗口顶部或“方法编辑器”工具栏中的**方法**列表中选择一个方法，或从单击**方法 >** 打开时显示的列表选择一个方法。



b 如果需要，在“仪器状态”窗口中右键单击 LC 模块，以更改任何非方法控制参数。

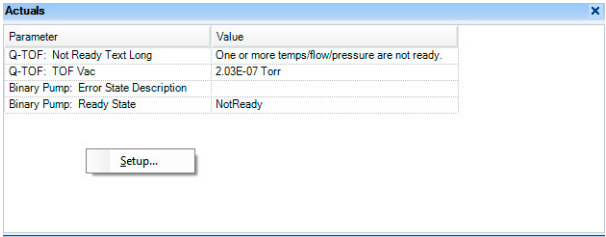


c 监测基线，并调整图谱，以确保该色谱柱平衡和基线稳定。（请参阅第 18 页的步骤 4 和 步骤 5。）

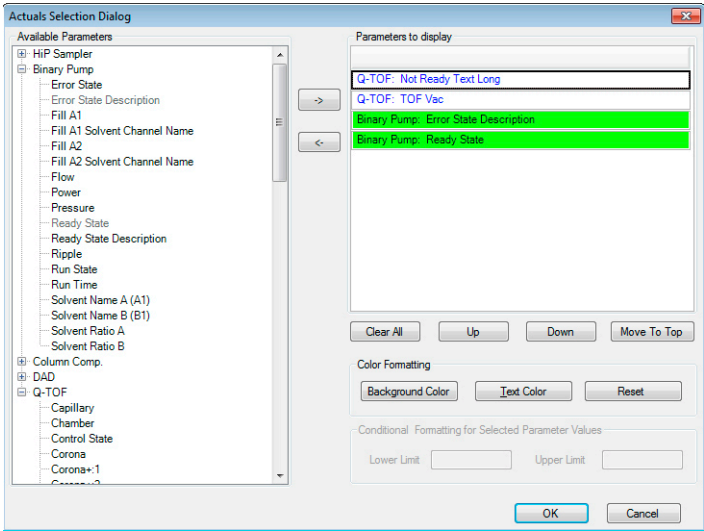
4 设置以查看实时参数值（实际值）。

在准备运行及在运行期间，您需要查看仪器参数的实际值。可以在“仪器状态”窗口中进行此操作。

a 右键单击“实际值”窗口以查看“设置”命令。

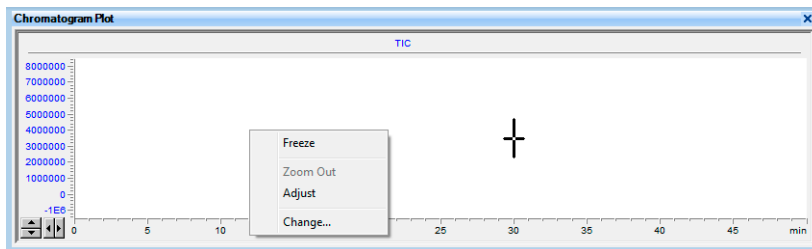


b 单击设置将显示可用于监测的实际值的列表。如果已配置 TOF 仪器，则会改为显示 TOF 仪器的实际值。

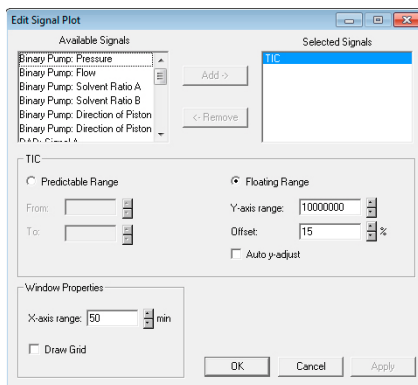


c 添加所有要监测的参数值。您可以自定义背景和文本颜色。还可以添加要使用的最小值和最大值；如果值不在给定范围内，该值的背景将在“实际值”窗口中设置为红色。

- d 单击**确定**。
- 5 设置实时图谱显示。
调节色谱柱时，您将设置要监测流出物的显示。
 - 右键单击“色谱图”窗口并单击**更改**。



在**编辑信号图谱**对话框中，可以选择多个显示信号并更改显示范围。



第 3 步 . 准备 TOF 和 Q-TOF 仪器

首次使用仪器时或在维护、检修或抽真空和重新启动后，需要对其进行调谐。标准使用情况下无需经常调谐。Agilent 不建议经常校正质量轴。

“调谐”窗口中的用户界面根据在“仪器状态”选项卡和“首选项”选项卡中所选选项以及所拥有的 TOF 或 Q-TOF 类型的不同而变化。在“首选项”选项卡中，可以选择是否显示“手动 TOF 质量校正”选项卡和“诊断”选项卡。对于 6550 Q-TOF，还可以选择是否使用“经典自动调谐”界面。

在“仪器状态”选项卡中，可以选择“质量范围”和模式。“调谐和校正”选项卡中的选项根据质量范围和模式的不同而变化。

如果您有 Agilent 6545 Q-TOF，则可以使用 SWARM 自动调谐。用户界面将显示可用于 SWARM 自动调谐的选项。如果您有 Agilent 6545 Q-TOF 并且选择低 (1700 m/z) 作为质量范围，则还可以使用小分子自动调谐选项。

如果要安装该仪器，请参阅《安装指南》了解有关首次调谐该仪器时如何操作的说明。以下说明描述了以前已调谐过的仪器的整个调谐过程，从校正 / 检查算法开始。

经典自动调谐

在运行设置检测器增益、标准调谐或初始调谐之前，必须将仪器模式设置为扩展动态范围，将质量范围设置为标准 (3200 m/z)。运行其中一种自动调谐之后，如果您希望通过不同的质量范围或“仪器模式”采集数据，请将这些值更改为合适的值以便进行分析。如果在完成自动调谐后在“仪器状态”选项卡中更改值，则必须再校正 TOF 或 Q-TOF。如果更改质量范围，则必须再校正 TOF 或 Q-TOF。

如果仪器模式为扩展动态范围，则只能使用所有自动调谐均支持的源运行初始调谐、标准调谐、设置检测器增益、四极杆调谐或初始四极杆调谐。如果选择了其他仪器模式或安装了其他源，这些按钮将呈灰色显示。

如果可以选择**狭缝板模式**，则强烈建议选择**高分辨率**，以便**狭缝板模式**获得最佳调谐结果。在执行**初始自动调谐**之前，必须对**狭缝板模式**选择**高分辨率**。

此外，如果**质量范围**设置为**标准 (3200 m/z)**，则只能运行**设置检测器增益**或**初始自动调谐**（针对 TOF 或 四极杆）。如果软件为 B.05.01 SP1 或更高版本，在对四极杆运行“初始调谐”后（质量范围设置为 3200 m/z ），则对于小分子应用程序，还将在 1700 m/z 范围内执行其他“四极杆调谐”，这样可以提高 < 300 m/z 的分子的检测性能。

SWARM 自动调谐

调谐 6545 Q-TOF 时，将使用称为 SWARM 的不同调谐算法。SWARM 的主要功能之一是能够找到部分参数的全局最佳值，因为有多参数是同时调谐的。

新的自动调谐在质谱仪的约束范围内同时使用粒子群优化 (PSO) 和简单算法。

- 对于熟知的参数，自动调谐使用单纯形算法使速度最大化。
- 对于未知行为，将使用 PSO。
- PSO 和单纯形算法可以在粗略和精细调整时间互换。
- 所有参数均限制在离子物理学的知识范围内，以限制搜索空间。

质谱法理论已构建到算法中，以便优化期间不会发生离子存储或离子阻断。有关详细信息，请参阅《概念指南》。

如果**仪器模式**为**扩展动态范围**，则只能使用所有自动调谐均支持的源运行**系统调谐**和**设置检测器增益**。如果选择了其他**仪器模式**或安装了其他源，这些按钮将呈灰色显示或没有这些按钮。

如果可以选择**狭缝板模式**，则强烈建议选择**高分辨率**，以便**狭缝板模式**获得最佳调谐结果。在执行**系统调谐**之前，必须对**狭缝板模式**选择**高分辨率**。

此外，如果**质量范围**设置为 3200 m/z ，则只能运行**设置检测器增益**或**系统调谐**（针对 TOF 或 四极杆）。

支持的源

表 1 所有自动调谐支持的源

仪器型号	所有自动调谐支持的源
6224 TOF	ESI、双 ESI
6230 TOF	ESI、双 ESI、 AJS ESI、双 AJS ESI
6520B Q-TOF	ESI、双 ESI
6530A、 6530B Q-TOF	ESI、双 ESI、 AJS ESI、双 AJS ESI
6538 Q-TOF	ESI、双 ESI
6540A、 6540B、 6545 Q-TOF	ESI、双 ESI、 AJS ESI、双 AJS ESI
6550	ESI、双 ESI、 AJS ESI、双 AJS ESI

对于 Agilent 6200 系列 TOF 和 6500 系列 Q-TOF

您可以通过所有仪器状态和以下源执行**质量校正 / 检查**以及**快速调谐**（如果可用）：

- ESI
- AJS ESI （Agilent 喷射流 ESI）
- 双 ESI
- 双 AJS ESI （双 Agilent 喷射流 ESI）
- 多模式
- APPI
- APCI

如果源为 nanoESI、双 nanoESI、HPLC-Chip、MALDI 或 GC-QTOF 源，则无法执行任何自动调谐。

快速极性切换

对于 Agilent Q-TOF 6545，如果快速极性切换已启用，则只能运行**质量校正 / 检查**自动调谐或**FPS 系统调谐**。对于 TOF 和其他 Q-TOF 仪器，只能运行**质量校正 / 检查**自动调谐或**FPS 初始自动调谐**。

稀释 ESI-L 调谐混合物

如果您的仪器是具有 Agilent 喷射流 ESI 源或双 AJS ESI 源的 Agilent 6550A、6545A、6540A 或 6530A，则自动调谐可能会失败，除非您稀释调谐混合物。

对于其他型号，可能需要在特定条件下稀释调谐混合物。在负离子模式调谐时，稀释调谐混合物以正确校正。在正离子模式调谐时，如果未获得正确校正，请稀释调谐混合物。稀释调谐混合物的说明包括在《安装指南》和联机帮助中。

Q-TOF

表 2 每种类型的调谐的调谐混合物稀释

调谐类型	具有双 AJS ESI 的 6530A 或 6540	6520B 或 具有双 ESI 的 6530
正离子 TOF 调谐	1:10 稀释调谐混合物	未稀释调谐混合物
负离子 TOF 调谐	1:40 稀释调谐混合物	未稀释调谐混合物
正离子极性切换调谐	未稀释调谐混合物	未稀释调谐混合物
负离子极性切换调谐	未稀释调谐混合物	未稀释调谐混合物
正离子四极杆调谐	未稀释调谐混合物	未稀释调谐混合物
负离子四极杆调谐	未稀释调谐混合物	未稀释调谐混合物

如果您的仪器是 G6538A，则可以使用未稀释调谐混合物。

如果您的仪器是 Agilent 6545A，则可以使用 1:10 稀释调谐混合物，以用于正负调谐中。

如果您的仪器是 Agilent 6550A，则可以通过清除首选项选项卡上的**始终仅执行快速校正**复选框来避免单独稀释。对于具有双 Agilent 喷射流 ESI 的 Agilent 6550A，可以使用 1:10 稀释调谐混合物进行正负调谐。如果清除该复选框，对于负模式无需执行其他稀释。

1 入门

第 3 步 . 准备 TOF 和 Q-TOF 仪器

具有双 Agilent 喷射流 ESI 的 G6530 在“正模式”下使用 1:10 稀释调谐混合物，在“负模式”下使用 1:40 稀释调谐混合物。有关详细信息，请参见联机帮助或《安装指南》。

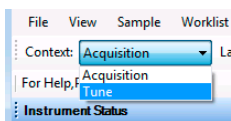
TOF

如果您的仪器是 6230 TOF，对于正负模式的 AJS ESI 或双 AJS ESI 源，必须对调谐混合物进行稀释。可以将 1:10 稀释用于正离子调谐，1:40 用于负离子调谐。对于 6224 TOF 上的双 ESI 源，不需要稀释调谐混合物；如果稀释了调谐混合物并用于正离子调谐，则会出现问题。

调谐 6545 Q-TOF 以外的 TOF 和 Q-TOF MS

经典自动调谐

- 1 在上下文列表中，选择调谐。



此时将显示“调谐”窗口。“调谐”上下文中提供“仪器状态”窗口、“实际值”窗口和“调谐”窗口。可以选择调谐 MS 的四极杆、TOF 或同时调谐这两个部件。

初始调谐适用于初始系统安装、移除 / 更换离子光学组件或质量分析器组件后或者标准调谐无法成功完成时。如果刚刚安装了该软件，并已根据《安装指南》中的说明完成了自动调谐，请跳至第 36 页上的“将 LC 流路切换到 MS”。

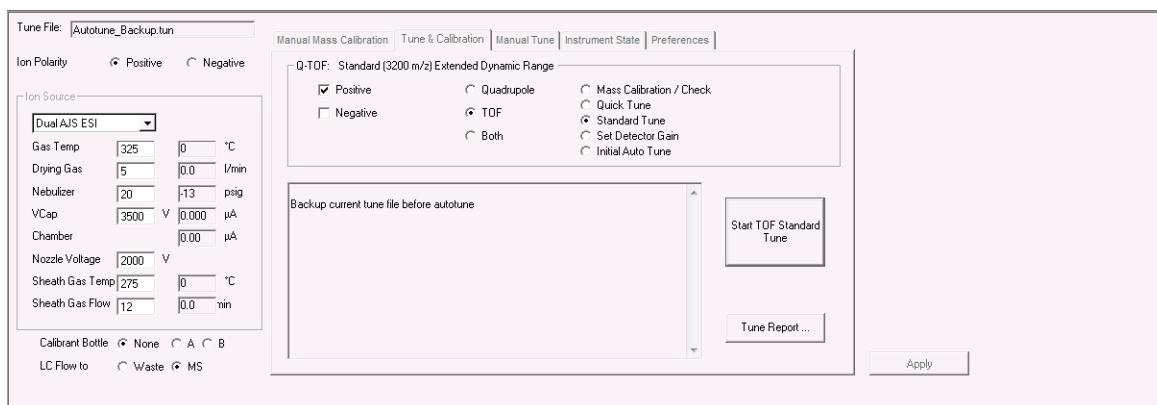


表 4 Agilent 6530 系列 Q-TOF 的“调谐和校正”选项卡

只有在配置了 Q-TOF 仪器之后，才能使用**四极杆**、**TOF** 和**两者**选项。

- 2 (可选) 单击**首选项**选项卡。
- 3 (可选) 选择是否希望系统自动调整校正离子的丰度。此功能仅适用于 6530A/B 型号。
这是一个高级功能，可能不需要更改此设置。
如果选中**调整丰度以实现最佳校正**复选框，当检测出校正质量超出 50-650K 的范围时，系统将自动调整碎裂电压以降低校正质量的丰度。如果碎裂电压无法调整到使丰度级别低于 650K，系统将指示您稀释校正液然后再次尝试校正或自动调谐。
- 4 (可选) 如果仪器是 G6550A iFunnel Q-TOF，请清除**始终仅执行快速校正**复选框。如果清除该复选框，对于负模式无需执行其他稀释。
- 5 (可选) 如果使用其他校正液进行正负自动调谐，请选中在**自动调谐之间暂停（交换校正液）**复选框。

- 6 如果您有 6550 Q-TOF 仪器并希望运行小分子应用程序，则必须在运行任何自动调谐过程之前设置**四极杆 AMU** 值。如果要运行小分子应用程序，还需要在“仪器状态”选项卡上选择**低 (1700 m/z)** 作为**质量范围**。
- a 单击**手动调谐**选项卡。
- b 单击“手动调谐”选项卡中的**四极杆**选项卡。
- c 如果要进行**正极性**调谐，请执行以下操作：单击**正极性**按钮。在**四极杆 AMU** 框中输入 100。单击**应用**按钮。在切换到负极性之前，必须单击**应用**才能保存新值。
- d 如果要在“负”极性中进行调谐，请执行以下操作：单击**负极性**按钮。在**四极杆 AMU** 框中输入 90。单击**应用**按钮。
- 7 单击**仪器状态**选项卡。
- 8 选择**质量范围**。
- 9 对**快速极性切换**选择**禁用**或**启用**。
- 10 如果可用，选择**狭缝板模式**。可以单击**高分辨率**或**高灵敏度**。如果选择任一选项，则可以运行**质量校正 / 检查**。强烈建议您对其他“自动调谐”算法的**狭缝板模式**选择**高分辨率**。在执行**初始自动调谐**之前，必须对**狭缝板模式**选择**高分辨率**。
- 11 选择模式。如果要拥有最多的可用调谐选项，请单击**扩展动态范围 (2 GHz)**。
- 12 单击**应用**。需要单击**应用**才能将这些更改发送到仪器。单击**应用**之后，**调谐和校正**选项卡中的选项才会更新。

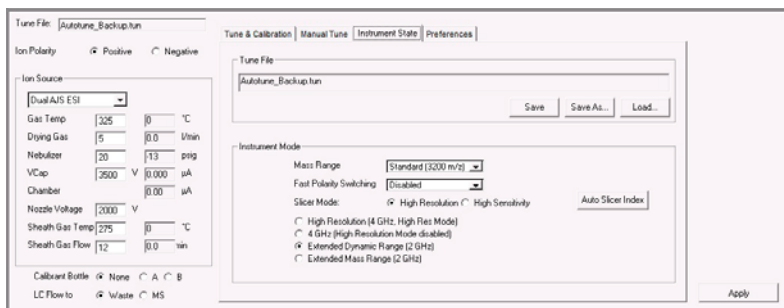


图 5 “仪器状态”选项卡

13 单击**调谐和校正**选项卡。

14 在“调谐和校正”选项卡上选中调谐时要使用的极性。可以选择**正**、**负**或**两者**。如果对**快速极性切换**选择**启用**，则无需选择极性。

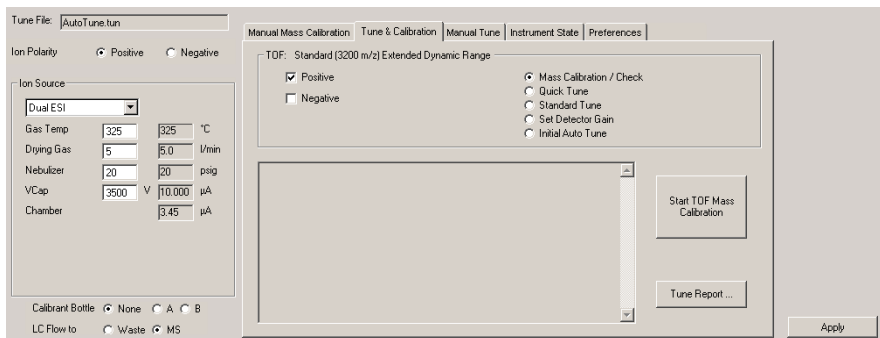


图 6 Agilent 6200 系列飞行时间“自动调谐”选项卡

15 如果有 Q-TOF 仪器，则可以单击要调谐**四极杆**、**TOF** 还是**两者**。软件将按正确顺序自动调谐仪器的部件，因此，如果要调谐两个部件，请单击**两者**。

如果要调谐具有双 AJS ESI 的 6530 或 6538、6540，请不要单击**两者**。您需要在调谐 TOF 和四极杆之间更改调谐混合物，因此可以首先调谐 TOF，然后调谐四极杆。

16 如果可用，请单击**质量校正 / 检查**以校正并检查质量校正和优化。然后，单击**开始 TOF 质量校正**或**开始检查四极杆和 TOF 质量校正**（对于 TOF 调谐，“质量校正 / 检查”可能需要几分钟才能完成。四极杆的**质量校正 / 检验**调谐也需要花费 2 到 5 分钟。）

如果系统在自动调谐之间暂停，以允许您更改校正液，请按照联机帮助和《安装指南》中的说明将调谐混合物更改为稀释调谐混合物，以用于下一步调谐。

如果 6538/6540 Q-TOF 仪器的任何校正离子的丰度均大于 480,000，或其他 Q-TOF 和 TOF 的丰度超过大约 650,000，则需要在稀释校正液之后重复**质量校正 / 检查**。Agilent 6550 Q-TOF 仪器始终使用 1:10 稀释。

如果**检查**调谐结果可接受,则可以跳到第 36 页上的“[将 LC 流路切换到 MS](#)”。

如果**检查**调谐结果不可接受,请继续执行**步骤 17**。

- 17** 如果在“仪器状态”选项卡上对**快速极性切换**选择**启用**,请单击 **FPS 初始自动调谐**。此选项和**质量校正 / 检查**是启用**快速极性切换**后唯一可用的选项。

如果“FPS 初始自动调谐”结果可接受,则可以跳到第 36 页上的“[将 LC 流路切换到 MS](#)”。如果调谐结果仍不可接受,请联系 Agilent 现场支持。

- 18** 如果可用,请单击**快速调谐**以使用有限的参数集自动调谐 MS。然后单击**开始 TOF 快速调谐** (“快速调谐”需要 7 到 10 分钟完成。)如果单击**四极杆**或**两者**作为仪器的部件进行调谐,则无法运行“快速调谐”。

如果系统在自动调谐之间暂停,以允许您更改校正液,请按照联机帮助和《安装指南》中的说明将调谐混合物更改为稀释调谐混合物,以用于下一步调谐。

如果 6538/6540 Q-TOF 仪器的任何校正离子的丰度均大于 480,000,或其他 Q-TOF 和 TOF 的丰度超过大约 650,000,则需要在稀释校正液之后重复**快速调谐**。对于 Agilent 6550,始终会稀释校正液,因此请不要重复**快速调谐**。

如果“快速调谐”结果可接受,则可以跳到第 36 页上的“[将 LC 流路切换到 MS](#)”。

如果“快速调谐”结果不可接受,请继续执行**步骤 19**。

- 19** 运行**标准调谐**以使用更多参数。对于仪器的 TOF 部件,该调谐需要 10 到 15 分钟,对于仪器的四极杆部件,需要 10 到 15 分钟。

运行**标准调谐**时,使用的源必须是所有自动调谐均支持的源。所有仪器的所有自动调谐均支持双 ESI 源。有关所有自动调谐均支持的源的完整列表,请参阅第 22 页上的“[所有自动调谐支持的源](#)”。

如果在“仪器状态”选项卡上选择**扩展动态范围**作为**仪器模式**，则只能运行“标准调谐”。

- a 单击**仪器状态**选项卡。
- b 对于**仪器模式**，单击**扩展动态范围**。
- c 对**快速极性切换**选择**禁用**。
- d 单击**应用**。
- e 单击**调谐和校正**选项卡。
- f 选择调谐时要使用的极性。
- g 单击**标准调谐**。
- h 单击**开始 TOF 标准调谐**或**开始 QTOF 标准调谐**。

运行**标准调谐**时，必须使用所有自动调谐均支持的源。所有仪器的所有自动调谐均支持双 ESI 源。有关所有自动调谐均支持的源的完整列表，请参阅第 22 页上的“**所有自动调谐支持的源**”。

如果系统在自动调谐之间暂停，以允许您更改校正液，请按照联机帮助和《安装指南》中的说明将调谐混合物更改为稀释调谐混合物，以用于下一步调谐。如果“标准调谐”结果可接受，请继续执行**步骤 20**。

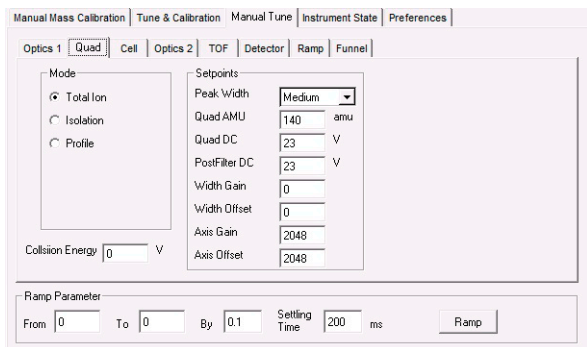
如果**标准调谐**产生的结果不可接受，则可以运行**初始自动调谐**。运行“初始自动调谐”之后，需要调整“碰撞池气体压力”。有关详细信息，请参阅联机帮助。如果此操作也无法产生可接受的结果，请联系 Agilent 现场支持。

仪器	初始调谐时间 (TOF)
Agilent 6538A、6540A 和 6550A Q-TOF	每个极性最多 60 分钟
其他 Q-TOF 仪器和 TOF 仪器	每个极性最多 30 分钟

对仪器的四极杆部件运行“初始调谐”大约需要 50 到 60 分钟。
如果要使用自定义调谐参数值，可以执行“手动调谐”。

1 入门

第 3 步 . 准备 TOF 和 Q-TOF 仪器



20 设置采集数据要使用的**质量范围**和**仪器模式**。

- 单击**仪器状态**选项卡。
- 选择适当的**质量范围**。
- 单击适当的**仪器模式**。
- 单击**应用**。
- 如果选择**低 (1700 m/z)** 并运行**四极杆调谐**或**初始四极杆调谐**（选择**标准 (3200 m/z)** 作为**质量范围**），则现在可以运行**四极杆调谐**以针对小分子进行优化。

21 如果更改了“质量范围”或“仪器模式”，请再校正并检查调谐参数。

单击**质量校正 / 检查**按钮、**快速调谐**按钮、**标准调谐**按钮和**初始调谐**按钮之后，将会执行校正。如果刚刚完成这些任务之一，并且以下任何情况为真，则只需再校正和检查：

- 在“仪器状态”选项卡中更改了**仪器模式**。
- 在“仪器状态”选项卡中更改了**质量范围**。

- 6538/6540 Q-TOF 仪器的峰值丰度超过大约 480,000，或其他 Q-TOF（6550 除外）和 TOF 仪器的峰值丰度超过大约 650,000。对于 Agilent 6550，始终使用 1:10 稀释。再校正之前，必须稀释调谐校正液。再校正可获得最佳质量准确度。
- a 单击**调谐和校正**选项卡。
- b 在该选项卡中选中所需极性。
- c 单击**质量校正 / 检查**选项。

调谐结束时，将自动生成调谐报告。

有关 TOF 和 Q-TOF MS 仪器的详细信息，请参见《概念指南》。

调谐 Agilent 6545 Q-TOF 质谱仪

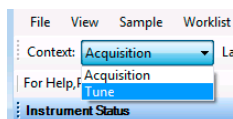
SWARM 自动调谐

Agilent 6545 Q-TOF 质谱仪使用 SWARM 自动调谐。此仪器的“调谐和校正”选项卡中的可用选项与其他仪器不同。

“系统调谐”是以所有缺省值开始并包括检测器调谐的“SWARM 初始自动调谐”。选择**标准 (3200 m/z)**作为**质量范围**时，可以执行“系统调谐”。系统调谐适用于初始系统安装、放空周期后、移除 / 更换离子光学组件或质量分析器组件后或者**质量校正 / 检查**或**传输调谐**无法成功完成时。

如果选择**低 (1700 m/z)**作为**质量范围**，则无法执行**系统调谐**。可以执行**传输调谐**，它不包括检测器调谐，并且与经典自动调谐中的**标准调谐**更加类似。应根据需要经常执行“传输调谐”（例如，分析其他样品类时）。最佳做法是从最后一次 Q-TOF 系统调谐或最后一次检测器调谐开始“传输调谐”，因为检测器和分离度参数不包括在这些调谐中。

- 1 在上下文列表中，选择**调谐**。



1 入门

第 3 步. 准备 TOF 和 Q-TOF 仪器

此时将显示“调谐”窗口。“调谐”上下文中提供“仪器状态”窗口、“实际值”窗口和“调谐”窗口。请注意，可以选择调谐质谱仪的四极杆、TOF 或同时调谐这两个部件。

如果刚刚安装了该软件，并已根据《安装指南》中的说明完成了自动调谐，请跳至第 36 页上的“将 LC 流路切换到 MS”。

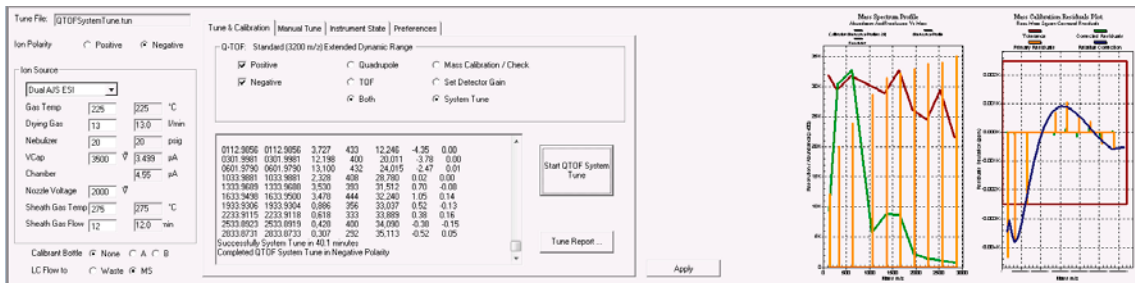


表 7 Agilent 6545 系列 Q-TOF 的“调谐和校正”选项卡

- 2 清除在自动调谐之间暂停（用于校正液交换）复选框。
- 3 单击仪器状态选项卡。
- 4 选择质量范围。如果您有 Agilent 6545 Q-TOF 并选择了低 (1700 m/z)，则“调谐和校正”选项卡中还提供其他“低质量”调谐选项。
- 5 对快速极性切换选择禁用或启用。
- 6 如果可用，选择狭缝板模式。可以单击高分辨率或高灵敏度。如果选择任一选项，则可以运行质量校正 / 检查。强烈建议您对其他“自动调谐”算法的狭缝板模式选择高分辨率。在执行系统调谐之前，必须对狭缝板模式选择高分辨率。
- 7 选择模式。如果要拥有最多的可用调谐选项，请单击扩展动态范围 (2 GHz)。
- 8 单击应用。需要单击应用才能将这些更改发送到仪器。单击应用之后，调谐和校正选项卡中的选项才会更新。

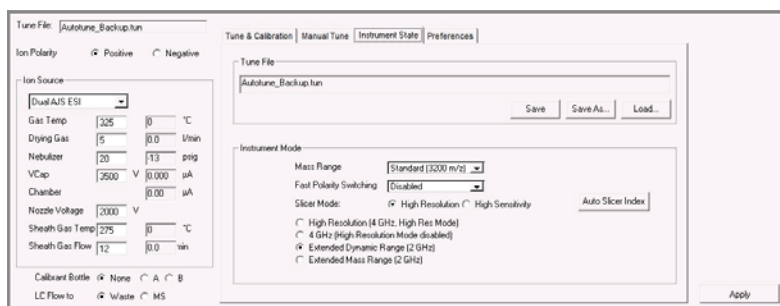


图 8 “仪器状态”选项卡

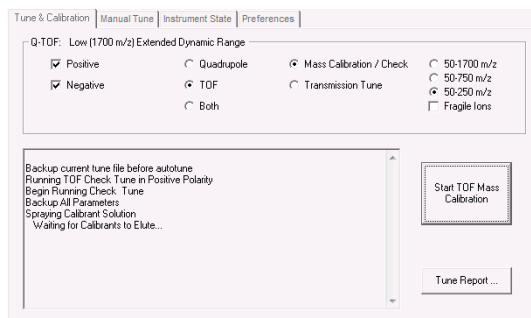
9 单击调谐和校正选项卡。

10 选择极性。可以选择正、负或两个复选框。如果对快速极性切换选择启用，这些复选框将不可用。

11 单击要调谐的 Q-TOF 部件。可以单击四极杆、TOF 或两者。如果对快速极性切换选择启用，这些复选框将不可用。

12 如果选择了低 (1700 m/z) 作为质量范围，则需要选择要执行的低质量自动调谐类型。如果单击四极杆或两者，将自动运行 50 - 1700 m/z 低质量自动调谐，您无法单击其他选项的任何一个。

13 如果单击 50 - 250 m/z 或 50 - 750 作为要执行的低质量自动调谐类型，请选中或清除易碎离子复选框。如果预期存在易碎分子，则建议选中此复选框。易碎分子的示例包括表现出不稳定特征的分子，如许多代谢物和多糖。



仅当选择“低 (1700 m/z)”作为“质量范围”并选择“扩展动态范围”模式时，此选项卡上的选项才可用。这两个选项均位于“仪器状态”选项卡上。

14 单击开始 TOF 质量校正或开始检查四极杆和 TOF 质量校正。

每个“检验”调谐的持续时间大约为 30 秒。

如果**检查**调谐结果可接受，则可以跳到第 36 页上的“[将 LC 流路切换到 MS](#)”。

如果**检查**调谐结果不可接受，请继续执行[步骤 15](#)。

15 如果可用，请单击传输调谐。单击开始 TOF 传输调谐或开始 QTOF 传输调谐。

每个**传输调谐**的持续时间大约为 6 到 10 分钟。由于这个过程很快，建议定期执行传输调谐。

小分子调谐旨在提高灵敏度，并且对指定窗口外的质量造成的分离度损失较小。如果获得的分离度对于应用程序来说不够，请在较高的 m/z 范围内执行调谐。与窗口大小较大的传输调谐相比， m/z 值高于特定质量窗口的离子将减少。

如果选中**易碎离子**复选框，碎裂电压将会降低，以使裂解最小化。与非易碎调谐选项相比，这会导致校正离子的信号降低，但应用程序中应观测到易碎离子的传输率增加。

如果**传输**调谐结果可接受，则可以跳到第 36 页上的“[将 LC 流路切换到 MS](#)”。

如果**传输**调谐结果不可接受，请继续执行[步骤 16](#)。

16 单击系统调谐。如果此选项不可用，请执行以下操作：

- a** 单击**仪器状态**选项卡。
- b** 选择**标准 (3200 m/z)** 作为**质量范围**。
- c** 单击**应用**。
- d** 单击**调谐和校正**选项卡。
- e** 单击**系统调谐**。

17 单击开始 TOF 系统调谐或开始 Q-TOF 系统调谐。

如果“系统调谐”结果不可接受，请与当地现场服务工程师联系。

校正质量轴

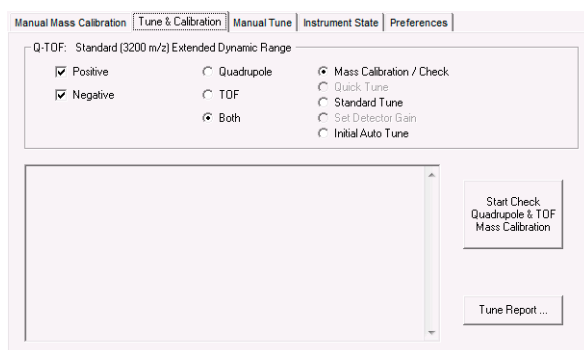
在校正过程中，会将包含已知质量的样品注入源，并测量已知质量的离子的实际飞行时间。这些时间和确切质量用于计算更新的校正系数。该过程可确保对未知样品进行准确的质量分配。Agilent 建议定期执行此操作。

单击**质量校正 / 检查**按钮、**快速调谐**按钮、**标准调谐**按钮或**初始自动调谐**按钮之后，将会执行“质量校正”。如果您有 6545，则单击**质量校正 / 检查**按钮、**传输调谐**按钮或**系统调谐**按钮之后，将会执行“质量校正”。如果出现以下情况，则只需再校正和检查调谐：

- 在“仪器状态”选项卡中更改了**仪器模式**。
- 在“仪器状态”选项卡中更改了**质量范围**。
- 更改了**狭缝板模式**。

1 在**组合栏**中，选择上下文组合框中的**调谐**。

2 单击**调谐和校正**选项卡。



3 选择**正**、**负**或**两者**。

4 单击**质量校正 / 检查**选项。

5 单击**开始检查四极杆和 TOF 质量校正**按钮或**开始 TOF 质量校正**按钮。

请注意，如果您有 6545 Q-TOF，并且单击选择了 **50 - 250 m/z** 选项，则会使用低于 100 m/z 的校正离子。

将 LC 流路切换到 MS

老化色谱柱并调谐 TOF 或 Q-TOF MS 之后，可将 LC 流路从“废液”切换到 MS。



- a 在上下文列表中，单击**采集**。从“调谐”上下文切换到“采集”上下文时，需要回答几个问题。
- b 确保在“方法编辑器”窗口中选择 TOF 或 Q-TOF 选项卡中的“常规”选项卡。
- c 在 **LC 流路（段）** 组框中，单击 **MS**。
- d 单击“常规”选项卡中的**立即应用**。

监测 MS 基线和谱图显示

- 如果未使用 VWD 或 DAD 监测 LC 基线，请确保 TOF 或 Q-TOF 基线稳定且未出现干扰强度光谱。
- 如果使用了 VWD 或 DAD 监测 LC 基线，请更改回缺省 TOF 或 Q-TOF 显示。
 - a 右键单击色谱图，然后单击**更改**。
 - b 选择 MS 信号，然后单击**确定**。

查看系统日志以了解是否存在事件和错误

当您准备该仪器时，可能会遇到错误，需要进行故障排除。可以通过“系统日志查看器”进行。

- 单击“数据采集”窗口工具栏中的**日志**图标，然后查看记录的事件。
- 或右键单击系统任务栏中的  图标。首先，单击**启用通知**。然后，右键单击日志图标，并单击**配置**。系统可以通过在任务栏显示消息来通知您新的错误和警告。

第 4 步 . 设置并运行方法

用于 TOF 和 Q-TOF 的 Agilent MassHunter Workstation 软件方法可包含采集参数、定性分析参数、定量分析参数或三者。

在数据采集方法中，可以指定是否运行定性分析方法以及是否运行定量分析自动处理。可以指定是否将定性分析方法和定量分析方法复制或链接到数据采集方法。

如果使用此 *.m* 方法运行工作单中的多个样品，则可以指定运行数据采集和数据分析还是只运行其中一项。如果运行数据采集程序中的单个样品，则会执行采集和数据分析。

选择在工作单中运行数据采集和数据分析后，如果选中“方法编辑器”窗口 DA 选项卡中的**定性自动处理**复选框或**定量自动处理**复选框，则数据分析将在采集之后自动执行。还可以运行仅产生原始数据的方法（仅采集），或采用仅包含定性分析参数或定量分析参数的方法（仅数据分析）重新处理数据。

在此步骤中，您将了解如何设置仅包含采集参数的方法、仅包含定性分析参数的方法以及同时包含采集参数和定性分析参数的方法。

对于以下页面描述的任务，阅读并遵循联机帮助中的说明。

设置包含采集参数的方法

完成《TOF/Q-TOF 熟悉指南》的练习 1 和练习 2，以了解如何设置和运行仅包含采集参数的方法。

在编辑或运行方法之前，在“调谐”窗口的“仪器状态”选项卡中设置选项。

- 为下面的每个选项卡输入值和设置。
- （可选）如果要下载设置到仪器，请单击工具栏中的**应用**。

1 入门

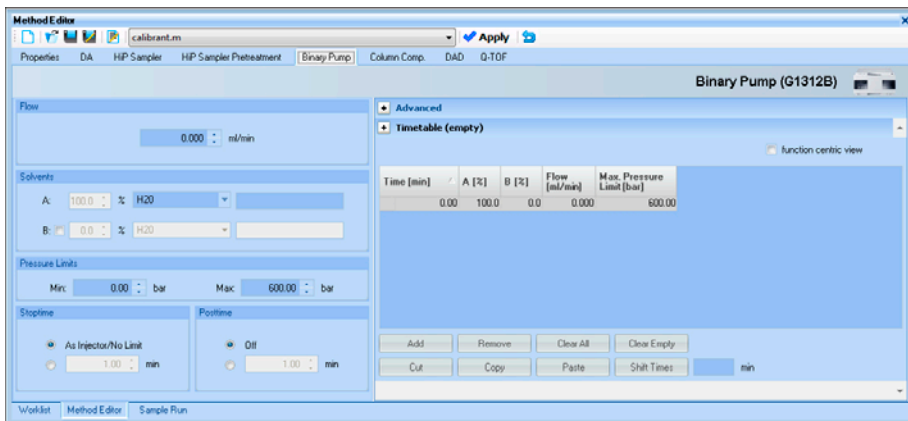
第 4 步 . 设置并运行方法

- 输入参数后，要保存方法，请单击**方法 > 保存或方法 > 另存为**。
- 在**方法**框中输入方法名称，然后单击**确定**。

1 在上下文列表中，单击**采集**。

2 输入 LC 参数值。

输入为仪器配置的所有 LC 模块的值。



3 设置以通过段和实验更改 TOF 和 Q-TOF 参数。

- a 单击“方法编辑器”窗口中的 **TOF** 或 **Q-TOF** 选项卡。
- b 要添加段，请右键单击**时间段**部分并单击**添加时间段**。时间段使用名称旁具有“(段)”的参数条目。这些参数可以针对每个时间段进行更改。
- c 要添加实验，请右键单击**实验 #**部分并单击**添加实验**。实验将使用名称旁具有“(实验)”的参数条目。这些参数可以针对每个实验进行更改。

Ion Source: Dual AJS ESI

Ion Polarity: Positive

Data Storage: Both

LC Stream: MS

Stop Time: ☒ No Limit/As Pump
☐ Stop Time: 30 min

Time (min)	Expt #
0	1
1.4	
1.9	

Cycle Time: 1 seconds

- d** 输入每个段和实验的参数。添加新的时间段时，选定时间段的参数将用作新时间段的缺省值。添加新的实验时，列表中最后一个实验的参数将用作新实验的缺省值。仅当您有离子淌度 Q-TOF 时才能使用“高级参数”选项卡。

General | Source | Acquisition | Ref Mass | Chromatogram | **Advanced Parameters**

Dual ESI (Seg)

Gas Temp: 300 °C | 0 °C

Drying Gas: 8 l/min | 0.0 l/min

Nebulizer: 35 psig | 13 psig

MS TOF (Expt)

Fragmentor: 175 V

OCT 1 RF Vpp: 750 V

Dual ESI (Expt)

VCap: 3500 V | Capillary: 0.000 μA

Chamber: 0.00 μA

有关您如何以及为何使用时间段和实验的说明，请参见《概念指南》第 3 章。

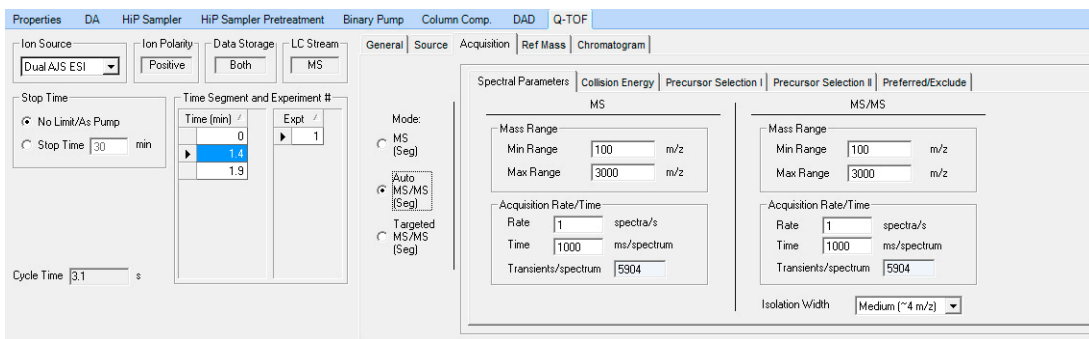
4 输入 TOF 或 Q-TOF 参数值:

- a 单击**常规**选项卡，然后输入要更改的任何常规参数。
- b 单击**源**选项卡，然后输入要更改的任何源值。
- c 单击**采集**选项卡。
- d 为 Q-TOF LC/MS 选择操作模式：**MS 模式**、**自动 MS/MS 模式**或**目标 MS/MS 模式**。如果已配置 TOF，则只能使用 **MS 模式**。

根据选择的模式，可以使用不同的参数。

要了解有关这些参数及其如何影响结果的详细信息，请参阅《概念指南》第 3 章或联机帮助。

- e 在“采集”选项卡中输入要更改的任何值。



- f 单击**参比质量**选项卡，以设置参比质量校正。

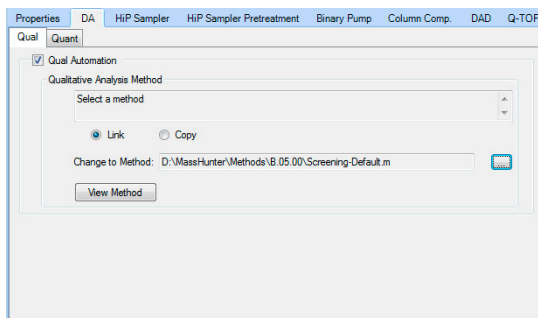
- g 单击**色谱图**选项卡，以设置运行期间要绘制的色谱图。

- h 单击**高级参数**选项卡，以设置离子淌度的参数。

5 设置数据分析参数。在 DA 选项卡中，可以指定定性分析参数和定量分析参数。要设置定性分析参数，请执行以下操作：


- a 单击“方法编辑器”中的 **DA** 选项卡。
- b 在“定性”选项卡中，选中**定性自动处理**复选框。
- c 单击**链接**或**复制**按钮，具体取决于您希望始终使用定性分析方法的最新版本还是希望复制当前定性分析方法并将其保存到数据采集方法中，以供将来使用。如果单击**复制**，则当保存数据采集方法时，**更改为方法框中输入的方法**将复制到数据采集方法中。

- d 单击  按钮以选择定性分析方法。



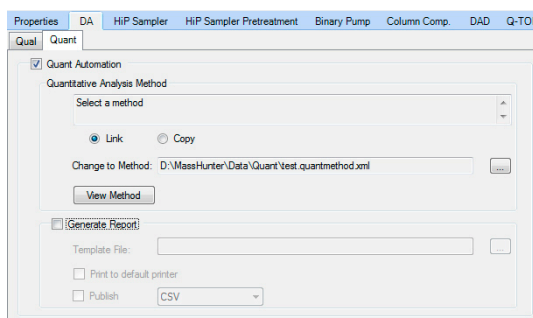
请参见有关定性分析程序的联机帮助，以了解如何设置定性分析程序的自动处理参数。

要设置定量分析参数，请执行以下操作：

- a 单击“方法编辑器”中的 **DA** 选项卡。
- a 单击**定量**选项卡。
- b 在“定量”选项卡中，选中**定量自动处理**复选框。
- c 单击**链接**或**复制**按钮，具体取决于您希望始终使用定量分析方法的最新版本还是希望复制当前定量分析方法并将其保存到数据采集方法中，以供将来使用。如果单击**复制**，则当保存数据采集方法时，**更改为方法**框中输入的方法将复制到数据采集方法中。
- d 单击  按钮以选择定量分析方法。
- e （可选）选中**生成报告**复选框。如果选中此复选框，则还需要选择要使用的**模板文件**以及要发送报告的位置。

1 入门

第 4 步 . 设置并运行方法



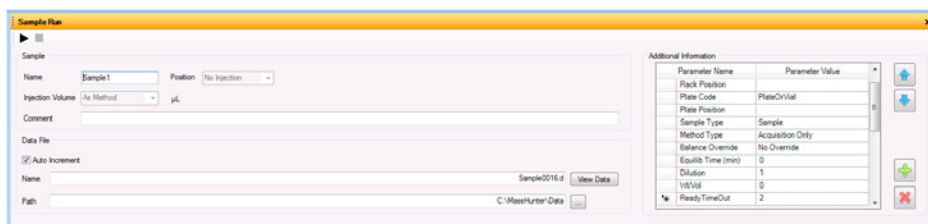
请参见有关定量分析程序的联机帮助，以了解如何设置定量分析程序的自动处理参数。

设置和运行交互式样品

- 1 单击**样品运行**窗口。
- 2 输入样品名称、数据文件名和路径等信息。
- 3 在**其他信息**列表中输入信息。您可以更改附加信息列表中的参数值。

可以从该窗口运行数据分析方法，方法是：对**方法类型**选择**采集和 DA** 或**仅 DA**。此外，必须设置**覆盖 DA 方法**，以指示要执行的 DA（数据分析）方法。

方法可以包含数据采集参数、数据分析参数或两者。“数据分析”方法是一种包含数据采集参数的方法，在“定性”选项卡上选中**定性自动处理**复选框，或在“定量”选项卡上选中**定量自动处理**复选框。



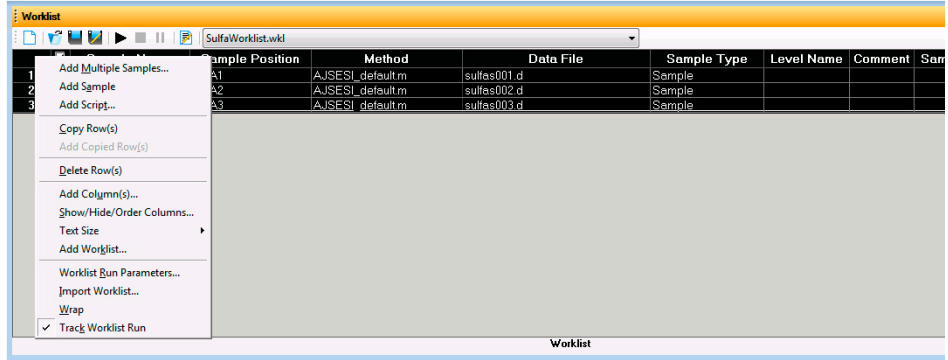
- 4 要启动单个样品运行，请单击“样品运行”工具栏中的“运行”按钮 (▶)，或主工具栏中的“运行”按钮



在锁定或解锁模式下，您可以运行单一样品。当模式锁定时，无法在运行期间更改方法或样品参数。您也不能在数据采集程序中覆盖此数据文件。主工具栏中的按钮 指示锁定模式处于打开状态。


还可以指定**覆盖 DA 方法**，并针对**方法类型**选择**采集和 DA** 或**仅 DA**，然后再将数据分析作为方法的一部分来运行。

设置和运行工作单

- 1 右键单击工作单左上角以显示以下菜单。



- 2 单击**添加多个样品**。
- 3 输入所有相关信息并单击**样品位置**选项卡，以指定样品瓶位置（确保已通过右键单击自动进样器设备图像配置特定样品盘类型）。
- 4 指定位置并单击**确定**。
- 5 要设置工作单运行，可右键单击左上角并单击**工作单运行参数**。此时将显示**工作单运行参数**对话框。
- 6 输入方法、覆盖 DA 方法和数据文件的路径，然后单击**确定**。
- 7 要开始运行，请单击主工具栏中的**运行工作单**图标  或单击“工作单”工具栏中的**开始工作单运行**按钮 。

可以在锁定或解除锁定模式下运行工作单。当模式被锁定时，无法在工作单运行时更改方法或工作单。主工具栏中的按钮  指示锁定模式处于打开状态。

要使用包含与在列表中输入的方法不同的 DA 方法的采集方法，通过使用**显示列 / 隐藏列 / 对列排序**对话框，在工作单中显示称为**覆盖 DA 方法**的列。

在该列中，输入包含您希望为该样品使用的 DA 参数的另一个方法的名称。使用此方法的 DA 部分，而不是当前方法的 DA 部分。

还可以在“添加多个样品”对话框中输入此方法的名称。

第 5 步 . 通过定性分析查看结果并查找化合物

使用定性分析程序执行这些步骤和更多步骤：

- 审查采集方法开发的结果
- 查找化合物
- 识别化合物
- 进行分子特征提取
- 导出结果
- 打印报告

请参阅联机帮助并完成《定性分析熟悉指南》中的练习，以帮助您了解如何使用定性分析程序来执行这些任务。

第 6 步 . 设置和运行定量分析

如果要对数据进行定量，请使用定量分析程序。

请参阅联机帮助和《定量分析熟悉指南》以了解如何执行更多步骤来分析数据。

本书内容

本书提供简短的说明来帮助您开始使用 Agilent 6200 系列 TOF 或 6500 系列 Q-TOF LC/MS 系统。通过本书，您可以快速了解如何使用 Agilent MassHunter Workstation 软件执行以下操作：

- 准备用于运行的仪器
- 设置采集方法
- 设置并运行工作单

Microsoft®、Windows®、Windows 7® 和 Excel® 是微软公司在美国和 / 或其他国家（或地区）的注册商标。

© Agilent Technologies, Inc. 2014

修订版 A，2014 年 12 月



G3335-97174



Agilent Technologies