

用于气相(GC)和气质联用(GC/MSD)系统的 Agilent MSD高效化学工作站

产品简介

简介

安捷伦质量选择检测器(MSD)高效化学工作站集成了气质联用(GC/MS)全部功能的32位应用软件,适用于与气质联用(GC/MS)分析、数据处理和报告生成等相关的全部任务。在Windows® 2000和Windows XP®平台支持下,MSD高效化学工作站软件可以控制多台气质联用系统和气相色谱仪,其

多部软件模块具有以下功能:

- 集成设备控制(包括GC、MSD和自动液体进样器的仪器控制)
- 数据分析(处理GC数据、MS数据和GC/MS联用的数据)
- 集成系统自动化
- 自定义报告生成
- 宏编程
- 用户定义软件安全性
- 软件认证工具

从样品引入到最终报告生成,MSD高效化学工作站集成并简化了分析过程,提供了最大限度提高实验室工作效率的工具(图1)。

由于增强了21 CFR part 11的法规遵循能力,Agilent MSD安全化学工作站(G 1732AA)数据处理,安全操作,审核跟踪和生成报告均达到了无与伦比的水平。

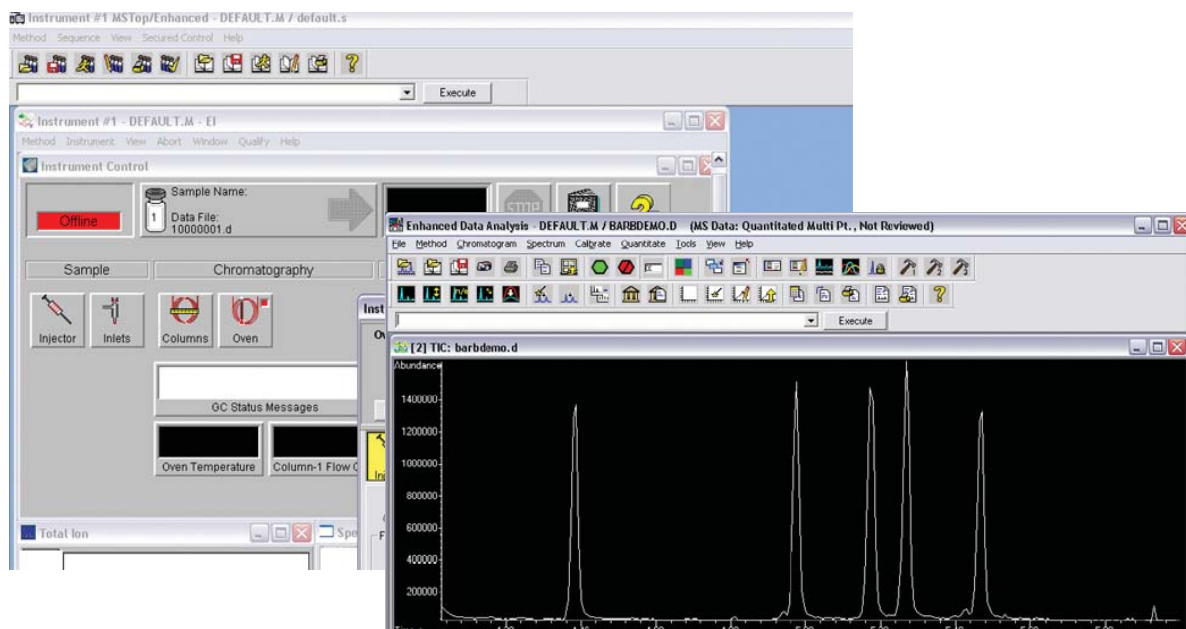


图1 MSD高效化学工作站软件包括多种应用——从样品引入到最终报告生成,其软件运行严密,以满足您的应用需求。

多台仪器、多用户操作机制

这个软件适用于可按特定需要指定管理者和能力水平不同的多用户实验室。可以保护方法以免被更改。对于多用户操作，维护任务往往被遗忘，软件中的早期维修反馈(EMF)将在达到某个使用水平时，提醒用户进行维护。而且，录像将演示如何完成维护任务。

这个软件是为自动化和高效操作而设计的。实验室信息管理系统(LIMS)，可以下载样品列表以生成自动进样器的进样序列。自动预运行和后运行程序将简化数据评价和预览的过程。用户报告也可以由系统生成。对于高级用户，系统提供一种宏编程语言用来定制自动化过程、改变菜单选择或完成其他用户定制操作。

这个软件具有英文和日文的界面及帮助系统，也提供中文版帮助系统。

高度的自动化程度

这个软件集成了简化超出向导功能和自动化能力的操作工具。需要大量数据输入的复杂任务也可以在高度的自动化功能下得以简化。

自动设置校准表(AutoQuant Setup)

自动定量设置(AutoQuant Setup)可以让用户在对本软件仅有最低程度的了解时，就能快速建立一个GC/MS的校准表。当选择自动定量设置时，系统按照总离子流图上的每个已积分的化合物逐个查找已选择的质谱(MS)数据库中化合物名称，并给出前四个匹配名称，作为可能的化合物名称。用户选择相关的化合物名或键入自定义名称，软件将自动选择目标离子和三个确认离子。添加化合物和校准编辑也很容易进行(图2)。

自动选择离子检测(SIM)方法

复杂的SIM方法难于手动设置。对每种化合物必须输入保留时间(RT)和离子。MSD高效化学工作站简化了这个过程，注射一个标准样品后，软件可以用保留时间、选择离子和鉴定离子比率创建一个SIM方法(图3)。

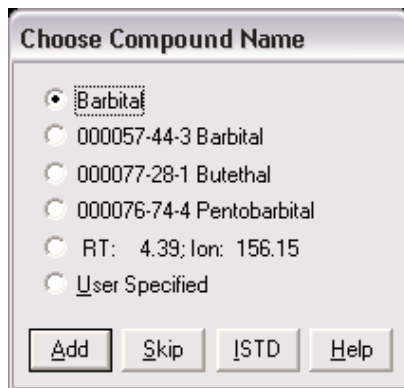


图2 自动定量设置(AutoQuant Setup)将很容易建立GC/MS校准表

保留时间锁定(RTL)

RTL方法将保持恒定的保留时间，使仪器在维护后或将一个方法移植到另一台仪器上时，不需要重新编辑方法的保留时间。因为保留时间是恒定的，我们可以创建保留时间和谱图的数据库来筛选化合物的种类。我们可以提供农药、多环芳烃、香料、脂肪酸甲

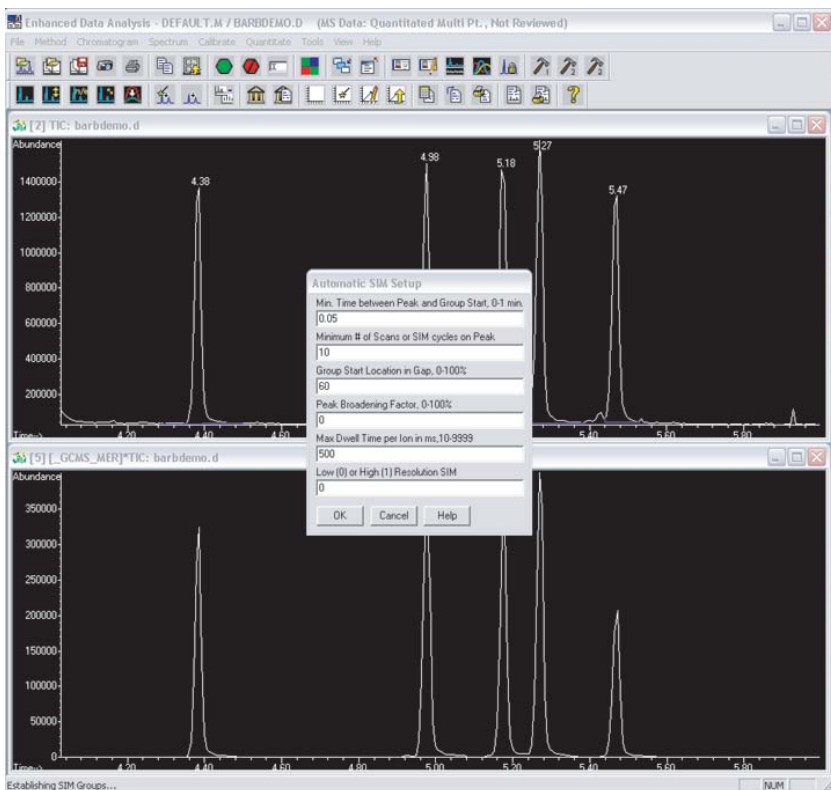


图3：“自动SIM设置”功能可以从某个定量方法中自动生成SIM采集方法

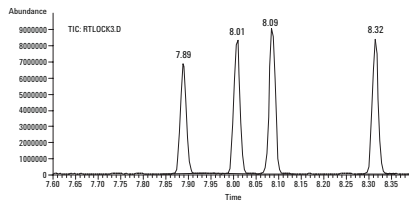
酯(FAME)、法定毒物和其它类型化合物的具有质谱和保留时间数据的保留时间数据库。用户也可以自己创建保留时间锁定数据库和方法用以共享。

保留时间锁定可以使用户在柱子截取以后，保持恒定的保留时间；也可以在两个系统上使用相同的色谱柱得到非常匹配的保留时间。通过调整进样口压力，一个给定系统的保留时间可以和其它系统的保留时间很匹配。下图显示了当柱子变化时，漂移的保留时间是如何被RTL固定的。

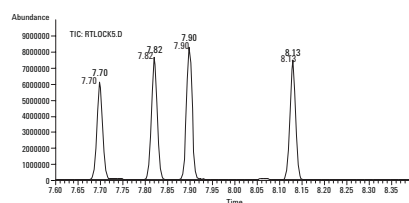
结果扫描

使用保留时间锁定可以在数据库中，对大量化合物进行快速扫描，而不用在某一个质谱库中对每一个峰进行检索。因为，采用保留

柱子截取前



柱子截取后



用RTL锁定后

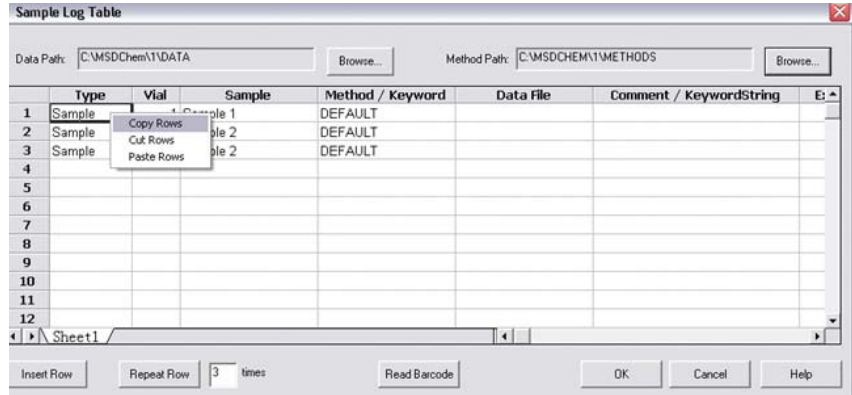
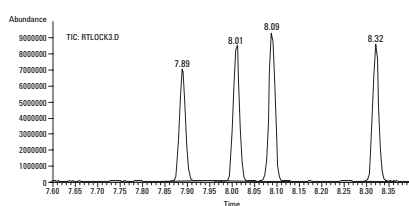


图4 新电子表格—类似样品记录表，可以很方便的创建或编辑大的序列；使用鼠标右键可以快速的进行复制、剪切和粘贴样品日志表中行的内容。

时间和质谱双重特征，化合物的鉴定具有较高的准确性。

智能序列

在滥用药物检测中，广泛的质控程序包含了对校准、色谱和质谱结果的大量测试和检查。MSD高效化学工作站软件系统，可以自动进行这些测试并且可以改变自动进样器的进样序列(图4)。

应用调谐软件

作为过去十几年中世界上最流行的GC/MS软件，安捷伦收到了世界各地用户的重要反馈。我们所提供的软件可以针对关键应用的特殊需求加以配置。也可以针对不同的模式如：普通强化定量、环境定量、药物定量和石油中的

芳香化合物进行定量。这些模式中的每一种也可以提供附加条目或针对这些应用的特定报告。

法规遵循

这个软件可以针对不同应用满足其高效和规范的要求。药物检测实验室可以基于以前的进样结果，使用智能序列进行自动进样；制药实验室可以增加服从21 CFR Part 11法规的软件包(安捷伦MSD安全化学工作站G1732AA)和安装认证/操作认证(IQ/OQ)服务。环境实验室可以使用自动调谐以满足DFTPP(十氟三苯磷)/BFB(4-溴氟苯)的要求，并对单个和多个样品生成质控(QC)报告。应用这一单个软件可以简化GC和GC/MS的实验室操作并降低成本。

环境方面应用:

- 服从DFTPP(十氟三苯磷)/BFB(4-溴氟苯)的自动调谐
- 农药和内分泌干扰剂保留时间锁定(RTL)谱图和保留时间(RT)数据库
- 多环芳烃化合物(PAH)保留时间锁定(RTL)谱图和保留时间(RT)数据库
- 挥发性有机化合物(VOC)保留时间锁定(RTL)谱图和保留时间(RT)数据库
- 多氯联苯(PCB)同系物保留时间锁定(RTL)谱图和保留时间(RT)数据库
- 美国国家环保局包括广泛鉴定化合物、多种样品分析、添加和其他质量控制的CLP报告

食品方面的应用

- 脂肪酸甲酯(FAME)保留时间锁定(RTL)谱图和保留时间(RT)数据库
- 香料的保留时间锁定(RTL)谱图和保留时间(RT)数据库
- 农药和内分泌干扰物保留时间锁定(RTL)谱图和保留时间(RT)数据库

滥用药物 / 法定药物方面的应用

- 法定毒物的保留时间锁定(RTL)谱图和保留时间(RT)数据库
- 智能序列

石油化学方面的应用

- 通过ASTM—D5769-95重整汽油分析

制药方面的应用

- 基于浓度的重量校准
- 可选的符合21 CFR Part 11法规软件(安捷伦MSD安全化学工作站, G1732AA)
- 可选的安装认证/操作认证/性能认证(IQ/OQ/PV)服务

仪器控制

- 每个数据系统可控多至两台GC/MS
- 可控多至四台GC检测器
- 既可以连接局域网也可以连接GP-IB 5973x设备
- 对于电子轰击源(EI)、正化学源(PCI)、负化学源(NCI)、DFTPP(十氟三苯磷)、BFB(4-溴氟苯)最大灵敏度的自动调谐
- 自动进样器批处理表可以作为文件下载
- 支持编码扫描操作
- 预运行和后运行宏指令可以作为序列的一部分
- 在药物定量模式下, 可以进行结果驱动取样
- 对起止事件进行时间设定以操作其它进样器或装置

定性分析

- 峰纯度软件可以识别重叠峰
- 基于概率匹配(PBM)的查寻算法是标准搜索引擎, 而NIST搜索是可选的。
- 可选的谱库包括: NIST02、Wiley 7th, PMW drug, 和 Stan pesticide.
- 分子结构式(可选)
- 对于农药和内分泌干扰物的保留时间和谱图数据库(可选)

定量分析

- 可以处理2000个以上化合物
- 12个校准水平
- 优化GC和优化MS积分器
- 广泛的曲线拟和, 包括: 线性曲线、二次曲线、平均响应因子、加权(有些可以选择强制过零点)
- 定量编辑器可以显示在单扫描情况下的萃取离子流图(EIC)、谱图、定量结果

自动化设置

- 目标化合物方法
- 自动SIM方法
- 保留时间锁定(RTL)

客户定制

- 屏幕上可以显示仪器关键部位的读数
- 可选下拉菜单条目
- 维修提示器提示进样器、泵油量的变化和其他项目维护
- 定制报告包含了文本和谱图
- 通过宏指令语言编辑对色谱和质谱数据进行处理, 实现过程自动化

用户定制的安全性

- 管理员和用户不同级别
- 可选的遵从21 CFR Part 11法规软件(安捷伦MSD安全化学工作站, G1732AA)

用户助手

- MS Basics计算机基础培训
- 基于不同版本的英文、日文、中文的在线帮助
- 维护过程的录像和文本
- 网站提供软件补丁
- 网站提供软件升级版本

如需详细信息

如果您想要了解更多有关我们产品和服务的信息, 请访问我们的网站: www.agilent.com/chem。

安捷伦科技公司对本文中可能有的错误、或与装置、性能即材料使用有关的内容而带来的意外伤害和问题不负任何责任。

本文内容如有变动, 恕不另行通知。

安捷伦科技©, 2004

中国印刷
2004年6月14日
5989-0812CECH