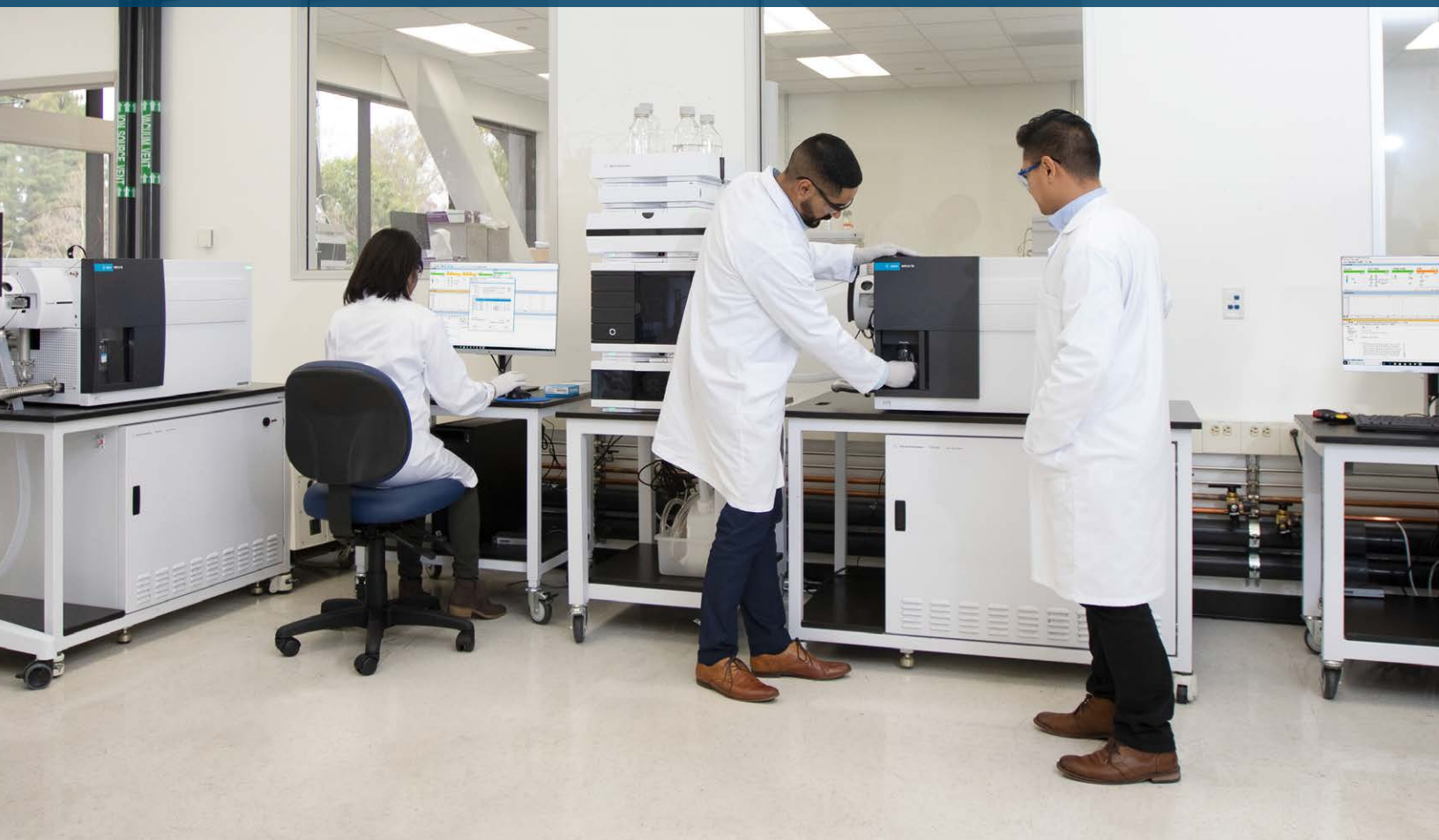


质谱仪器智能化进展





概述

为了让生活变得更轻松，全球对工具智能化的要求也越来越高。液质联用领域也同样致力于实现困难和挑战性任务的自动化，让质谱操作更加简单。这些进展延长了仪器的正常运行时间，简化了工作流程，并通过快速提供经过验证的结果节省了时间，最终降低了使用维护成本。

在本海报文集中，您将深入了解安捷伦 LC/MS 仪器产品组合的新一代成员。全新的 6475 三重四极杆液质联用系统 包括易于使用且先进的内置智能功能，非常适合常规分析。我们将展示新的智能功能如何提高分析性能和实验室分析效率，让您的日常操作省时省心。

目录

使用我们的智能优化工具加速方法

开发

3

用于 LC/MS/MS 方法开发、优化和 QA/QC 部署的端到端软件算法

在以惊人的速度处理样品的同时确保

可靠结果

7

用于保持三重四极杆 LC/MS 分析通量、正常运行时间和一致性的主动、迭代数据依赖型再进样逻辑

通过预防性监测大幅延长仪器正常运行

时间

11

利用 6475 三重四极杆液质联用系统的早期维护反馈 (EMF) 实时诊断监测功能进行加速寿命测试

使用我们的智能优化工具 加速方法开发



用于 LC/MS/MS 方法开发、优化和 QA/QC 部署的端到端软件算法

作者：Anding Fan, Vicky He, James Pyke, Erik Lopez,
Stephanie Aurand, Linfeng Wu 和 Patrick M. Batoon

前言

从头到尾开发三重四极杆 LC/MS (LC/TQ) 靶向方法是一个复杂、耗时且涉及众多步骤的流程。如果没有提前确定每种分析物的质谱参数，方法开发会变得更加困难，尤其是在分析物包含新型化合物的情况下。在这种情况下，需要进行手动优化和表征才能获得高效的 MRM 参数。

结合 MassHunter 12 软件使用全新 6475 三重四极杆液质联用系统，新增的智能工作流程可确保用户能够大幅提高操作效率，尤其适用于常规分析 QA/QC 实验室环境。这种效率提升可改善 LC/MS/MS 分析的诸多方面，比如助力实

现方法优化的自动化。MassHunter 12 包含内置的 21CFR 合规方法导向型智能优化工具，使用户能够以自动或半自动的方式优化 MRM 和离子源参数。

使用模块化的端到端工作流程方法，用户可以通过输入化学式信息，获得 (1) 每种化合物的优化 MRM 离子对和 (2) 整体方法的理想离子源参数。该算法的独特之处在于，能够利用 LC/TQ 的速度，在每种方法的基础上同时优化多种化合物，这与化合物逐一优化方法相比，前期方法开发时间显著缩短。

实验部分

将 LCMS 7 种分析物系统适用性标准品（盐酸阿米替林、邻苯二甲酸二乙酯、邻苯二甲酸二戊酯、邻苯二甲酸二己酯、邻苯二甲酸二辛酯、8-溴鸟苷水合物和 4-氯肉桂酸）中的中性分析物的化学式输入方法开发界面，自动计算潜在的 $[M+H]^+$ 或 $[M-H]^-$ 母离子。

优化工作流程的两个主要阶段采用无人值守的方式完成。首先是 MRM 优化：母离子碎裂电压、RT 测定（可选）子离子选择和 MRM 碰撞能量电压。然后是离子源优化：干燥气加热器、鞘气加热器、毛细管电压、雾化器压力、干燥气流速、鞘气流速和喷嘴电压。

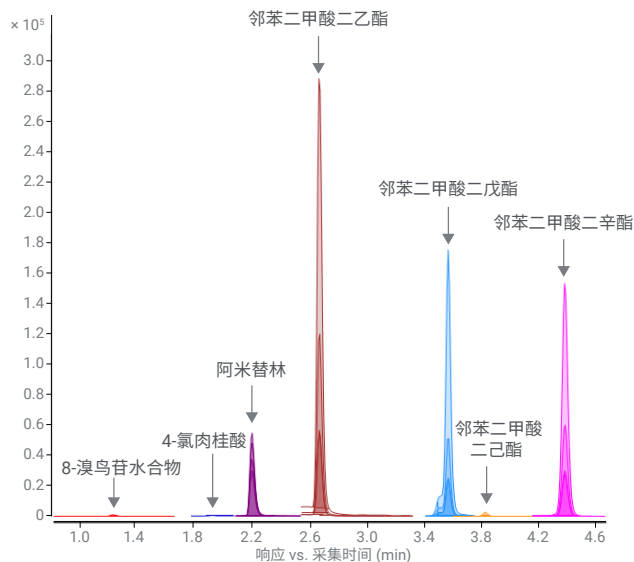
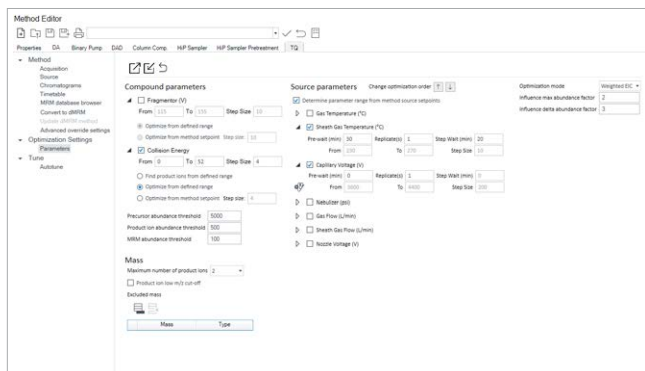


图 1：从头开始创建的全面优化的 7 种分析物混标色谱图

MassHunter 12 的智能优化工具支持全面的方法开发和参数验证



结果与讨论

端到端优化工作流程

全新的智能优化软件算法提供了一种完整的用户友好型工作流程方法，用于完成方法开发的繁琐任务。借助该方法，用户可以通过输入中性分析物化学式，从 CSV 导入现有的 MRM 列表，在现有方法中添加未表征的分析物或微调现有的 MRM 或离子源参数来新建方法。

通过方法编辑器中的“优化参数”页面选择要优化的化合物和离子源参数，可自定义用户输入范围和间隔。下图所示为优化工作流程的一个示例。



图 2：方法优化器用户界面从方法设置到获得结果的屏幕截图

结果与讨论

引导式优化工作流程

在这一工作流程中，优化主要分为两个步骤。

1. 对 MRM 的具体参数进行优化，找到每种分析物的理想离子对、碎裂电压、碰撞能量电压和保留时间分配（用于色谱柱进样）。然后工作流程将暂停，以便审查每种化合物的相关数据质量
2. 准备就绪后，将在“全局”基础上对离子源参数进行优化，尽可能加大总离子流（未加权 - 基于 TIC 的优化）或对优先分析物进行加权（加权 - 基于 EIC 的优化）

在整个优化过程中将对该方法进行逐步更新，以创建最终的方法。用户可以将离子对保存到化合物数据库中，以便未来应用到其他方法中。

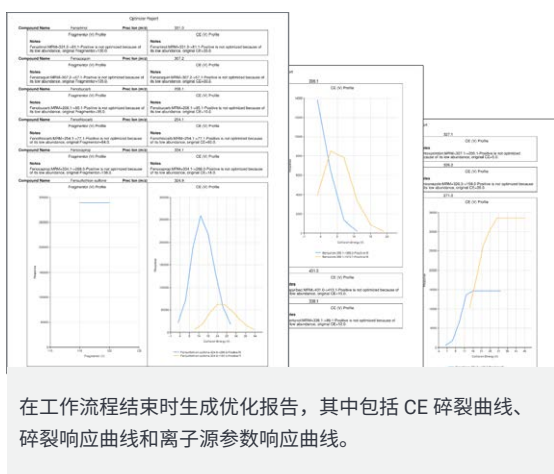


图 3：最终结果打印在优化报告中，作为方法修订版存储，并保存在化合物库中

自动优化工作流程

此工作流程将不间断地进行优化，用户可以依次优化多种方法。

与引导式优化一样，此工作流程也会为用户提供一种基于所选优化参数的最佳 MRM 离子对、碰撞能量和电压的方法。它还会为用户提供专门为该方法创建的经过调整的离子源设置。不同的是，它可以运行多种方法，而不是只能运行一种方法。

在此过程中，所有步骤都自动进行，并将从 MRM 立即过渡到离子源优化。用户将无法查看和更新结果或更改仪器设置。

可以立即将优化的化合物添加到化合物 MRM 库中，使用户在未来能够快速高效地构建方法。

Compound Name	CAS	Formula	Nominal Mass	Ion Species	Precursor	Product	Primary	Trigger	Polarity	Fragmentor	CE	Cell accelerator voltage (V)	RT (min)	RT Window (min)	Abundance	Duplicate
Edrophos, 9.53	17109-49-8	C ₁₄ H ₁₅ O ₃ P ₂ S ₂	310	(M+H) ⁺	311	209	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	90	24	5	9.529	0.95	17695.31	
Edrophos, 9.53	17109-49-8	C ₁₄ H ₁₅ O ₃ P ₂ S ₂	310	(M+H) ⁺	311	236.9	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	90	16	5	9.529	0.95	16488.83	
Edrophos, 9.53	17109-49-8	C ₁₄ H ₁₅ O ₃ P ₂ S ₂	310	(M+H) ⁺	311	37.1	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	90	44	5	9.529	0.95	7276.68	
Edrophos, 9.53	17109-49-8	C ₁₄ H ₁₅ O ₃ P ₂ S ₂	310	(M+H) ⁺	311	111	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	90	56	5	9.529	0.95	3842.04	
Edrophos, 10.70	17109-49-8	C ₁₄ H ₁₅ O ₃ P ₂ S ₂	310	(M+H) ⁺	311	109	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	90	40	5	10.702	1.07	26578.45	
Edrophos, 10.70	17109-49-8	C ₁₄ H ₁₅ O ₃ P ₂ S ₂	310	(M+H) ⁺	311	110.9	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	90	24	5	10.702	1.07	21216.48	
Edrophos, 10.70	17109-49-8	C ₁₄ H ₁₅ O ₃ P ₂ S ₂	310	(M+H) ⁺	311	77	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	90	56	5	10.702	1.07	18285.79	
Edrophos, 10.70	17109-49-8	C ₁₄ H ₁₅ O ₃ P ₂ S ₂	310	(M+H) ⁺	311	65.1	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	90	60	5	10.702	1.07	13732.15	
Bromoxynil (Brominal)	1689-84-5	C ₇ H ₉ Br ₂ N ₂ O	274.9	(M+H) ⁺	275.9	234	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	100	16	5	9.006	0.9	5178.98	
Bromoxynil (Brominal)	1689-84-5	C ₇ H ₉ Br ₂ N ₂ O	274.9	(M+H) ⁺	275.9	272	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	100	26	5	9.006	0.9	2222.52	
Bromoxynil (Brominal)	1689-84-5	C ₇ H ₉ Br ₂ N ₂ O	274.9	(M+H) ⁺	275.9	233.2	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	100	20	5	9.006	0.9	940.1	
Bromoxynil (Brominal)	1689-84-5	C ₇ H ₉ Br ₂ N ₂ O	274.9	(M+H) ⁺	275.9	73.6	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	100	80	5	9.006	0.9	171	
Etoazate	15323-91-1	C ₂₁ H ₃₃ F ₂ N ₂ O ₂	358.2	(M+H) ⁺	360.2	140.9	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	90	36	5	12.793	1.28	8657.08	
Etoazate	15323-91-1	C ₂₁ H ₃₃ F ₂ N ₂ O ₂	358.2	(M+H) ⁺	360.2	112.9	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	90	72	5	12.793	1.28	8897.01	
Etoazate	15323-91-1	C ₂₁ H ₃₃ F ₂ N ₂ O ₂	358.2	(M+H) ⁺	360.2	63.1	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	90	80	5	12.793	1.28	23170.94	
Etoazate	15323-91-1	C ₂₁ H ₃₃ F ₂ N ₂ O ₂	358.2	(M+H) ⁺	360.2	304.3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Positive	90	20	5	12.793	1.28	19679.16	

结论

配备 MassHunter 12 的全新 6475 三重四极杆液质联用系统包括内置于方法编辑器中的智能 MRM 和离子源优化工具。最终将生成包含全面优化的参数、MRM 离子对和保留时间分配的 dMRM 方法。

智能优化工具可用于 (1) 从头开始新建方法，(2) 向现有方法中添加新化合物，(3) 微调或验证现有方法的参数。

在工作流程结束后，用户可以检查优化结果。对方法的任何更改都将按照 21 CFR Part 11 法规认证要求以可审计的方式进行保存。

在以惊人的速度处理样品的同时确保可靠结果



用于保持三重四极杆 LC/MS 分析通量、正常运行时间和一致性的主动、迭代数据依赖型再进样逻辑

作者：Disha Shah, Emma E. Rennie, Lauren Seymour, Madhusudan Sharma, James S. Pyke 和 Patrick Batoon

前言

三重四极杆 LC/MS 测量通常涉及强调不间断连续操作的靶向、定量、大批量样品分析。这其中包括药物中污染物检测、食品中农药和兽药检测或大规模人群的生物分析物测定中 QA/QC 样品的连续处理。无论何种应用，都希望获得一致的结果、高样品通量并避免样品重新处理。

为了帮助获得高质量数据并实现高通量检测，配备 MassHunter 12 的 6475 三重四极杆液质联用系统提供了一种智能工作列表再进样逻辑功能 Intelligent Reflex。

在此，我们介绍了一种利用主动、即时数据处理算法的技术，它基于以下 Intelligent Reflex 应用场景，以数据依赖的方式进行评估和重新进样：

1. 检测是否存在来自上一个样品的交叉污染
2. 检测样品是否超出校准范围
3. 快速分析物筛查

实验部分

使用与 Infinity II 1290 HPLC 系统联用的 6475 三重四极杆 LC/MS 系统 (G6475A) 和 MassHunter 12 软件系统进行检测。

MassHunter 12 包含全新的 Intelligent Reflex 工作流程，使用户能够以数据依赖的方式自动添加样品或空白。在 MRM 模式下采集离子，确保在分析物洗脱时监测信号。我们创建了一个包含空白、样品和校准标样的工作列表，用于压力测试和演示所有三种 Intelligent Reflex 工作流程的数据依赖逻辑。

为每个工作流程创建特定的定量分析方法，并设置触发二次进样的分析物浓度阈值。在数据分析方法的异常值部分将 Intelligent Reflex 再进样命令定义为逻辑条件，其基于样品或空白的当前丰度或浓度测量结果。

使用统一的采集和 DA 分析参数来配置 Intelligent Reflex。这些参数用于创建演示和执行工作流程逻辑的工作列表。如果逻辑命令被激活，就会在工作列表中添加或插入一个新的进样并重复这一过程，直到满足通过条件为止。

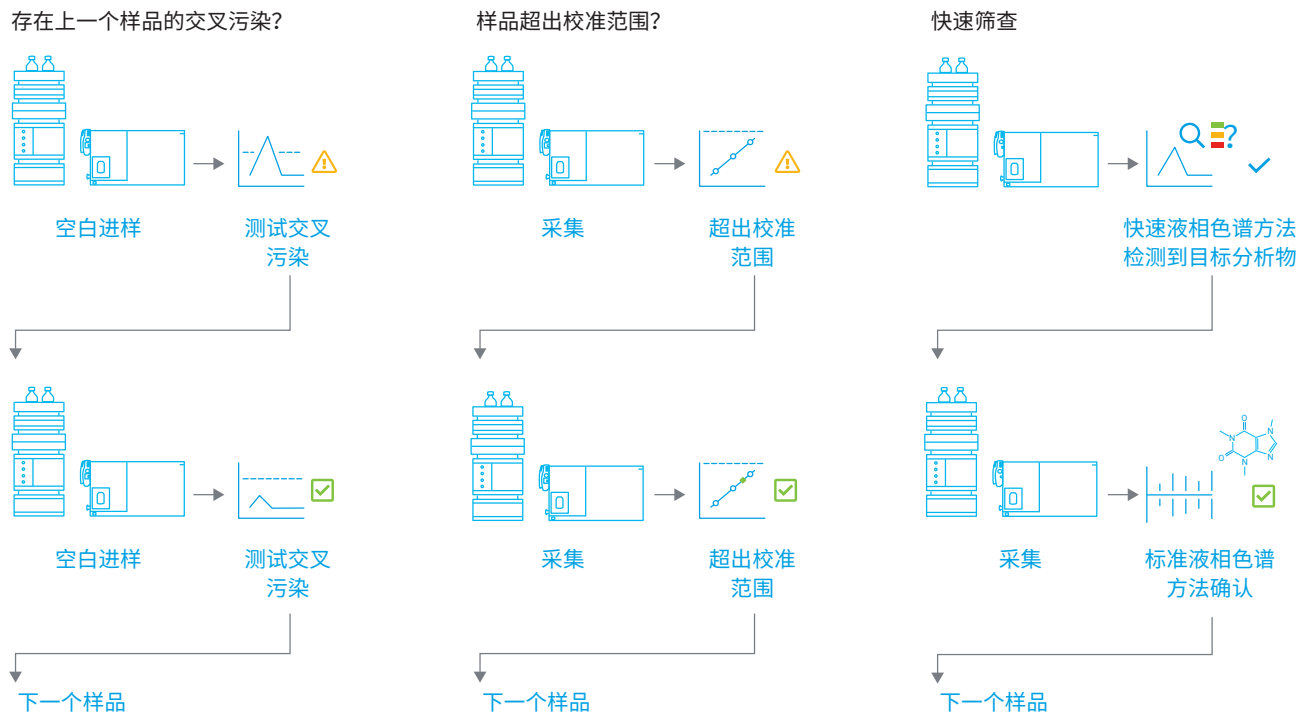


图 1: Intelligent Reflex 工作流程逻辑

结果与讨论

Intelligent Reflex 工作流程

MassHunter 12 Intelligent Reflex 工作流程在运行的工作列表中以数据依赖的方式评估和重新进样空白和样品。

Intelligent Reflex 工作流程：

- 通过自动化提高大批量样品分析的吞吐量
- 通过减少人工干预和样品重新处理，提高实验室分析效率
- 通过自动避免批次分析的交叉污染，节省宝贵的样品材料
- 自动生成组合报告

交叉污染 Intelligent Reflex 工作流程

样品残留或污染是一个非常常见的问题，清洗不充分、清洗瓶受到污染或柱上样品过载都可能导致这一问题。在空

白中检测到交叉污染超出异常值阈值，将触发工作流程插入多达 n 个空白。如果达到了用户定义的 n 最大值，还可以选择暂停工作列表，以防止样品污染。

超出校准范围 Intelligent Reflex 工作流程

在对分析物进行定量时，确保目标分析物浓度在校准曲线范围内至关重要。如果分析物浓度高于定量上限 (ULOQ)，则需要稀释样品或减少进样量，使浓度落在定量限以内。

在样品中检测到分析物超出校准范围，将触发插入/添加重新进样，以通过减小进样体积来达到预估浓度。图 3 显示了一个工作列表，其中检测到一种分析物浓度高于数据分析方法中设定的校准范围。在重新进样之前自动添加一个额外的空白，确保没有样品交叉污染。工作列表中会显示每个减少体积再进样的进样量。

	Status	Method	Data File	Sample Type	iReflex Type
1	Completed	ESDemo_MRM method.m	Blank_1.d	Blank	Carryover
2	Completed	ESDemo_MRM method.m	Blank_1-CarryoverBlank-001.d	Blank	Carryover
3	Completed	ESDemo_MRM method.m	Sample_1.d	Sample	No iReflex Workflow
4	Completed	ESDemo_MRM method.m	Sample_2.d	Sample	No iReflex Workflow
5	Completed	ESDemo_MRM method.m	Blank_2.d	Blank	Carryover
6	Completed	ESDemo_MRM method.m	Blank_2-CarryoverBlank-001.d	Blank	Carryover
7	Completed	ESDemo_MRM method.m	Blank_2-CarryoverBlank-002.d	Blank	Carryover
8	Completed	ESDemo_MRM method.m	Sample_3.d	Sample	No iReflex Workflow

图 2：在分析过程中检测到交叉污染时插入空白

	Status	Method	Data File	Sample Type	Inj Vol (µl)	iReflex Type	iReflex Acq. Method	Red. Inj. Vol.
1	Completed	Above cal range.m	Blank_before run.d	Blank	As Method	No iReflex Workflow	Above cal range.m	
2	Completed	Above cal range.m	QC_before run.d	QC	As Method			
3	Completed	Above cal range.m	sample outside cal range_5.d	Sample	3	Above Cal. Range Append	Above cal range.m	0.5
4	Completed	Above cal range.m	sample inside cal range_5.d	Sample	1	Above Cal. Range Append	Above cal range.m	0.5
5	Completed	Above cal range.m	sample outside cal range_5-Fi-Blank.d	Blank	As Method	No iReflex Workflow		
6	Completed	Above cal range.m	sample outside cal range_5-iReflex.d	Sample	0.5	No iReflex Workflow		

图 3：由于原始测量结果高于 ULOQ，添加进样量更低的重新进样

结果与讨论

快速筛查 Intelligent Reflex 工作流程

快速筛查方法通常用于提高样品通量。这些方法的时间较短，仅需几秒到几分钟，用于鉴定假定阳性样品，然后手动安排对其重新进样，并使用持续时间较长的确认方法进行分析。自动进行重新进样和分析假定阳性样品对于提高通量至关重要，使实验室能够分析更多样品中的更多目标物。

在快速筛查方法中检测到假定阳性样品后，此工作流程将插入或添加使用不同分析方法的重新进样，进行目标物确认。插入操作用于采用相同液相色谱方法的确认方法，而添加操作则用于使用不同液相色谱方法和/或色谱柱进行确认的情况。如果选择了插入操作，将在样品前后自动插入一个空白。

快速筛查 Intelligent Reflex 工作流程生成两个不同的数据批次；第一级批次由采用快速筛查方法的原始工作列表组成。第二级批次由重新进样的样品组成，这些样品使用不同、持续时间通常较长且全面的确认方法进行采集和分析。此外还提供了其他选项，用于根据每个独特的分析和实验室 SOP 定制这些工作流程：

- 自动生成通过第一级和第二级批次分析创建的组合报告
- 在添加每个第二级样品之前添加一个空白，或者只在第一个第二级样品之前添加一个空白
- 在向工作列表中添加了 n 次重新进样后添加一个 QC
- 在第一级分析完成后暂停工作列表以进行手动验证

	✓	Status	Method	Data File	Sample Type	iReflex Type	iReflex Acq. Method	Red. Inj. Vol.	First Tier Quant Method	Second Tier Quant Method
1	✓	Completed	FS1.m	BlankData_B1.d	Blank	No iReflex Workflow	FS3.m		Quant FS method 1.m	Quant FS method tier2.m
2	✓	Completed	FS1.m	QCData_Q1.d	QC					
3	✓	Completed	FS1.m	Sampledata_S1.d	Sample	Fast Screening Insert	FS3.m		Quant FS method 1.m	Quant FS method tier2.m
4	✓	Completed	FS1.m	Sampledata_S2.d	Sample	Fast Screening Insert	FS3.m		Quant FS method 1.m	Quant FS method tier2.m
5	✓	Completed iReflex	FS3.m	Sampledata_S2-iReflex-Blank.d	Blank	No iReflex Workflow				D:\Projects\Secondary injection\Methods\Quant FS method tier2.m
6	✓	Completed iReflex	FS3.m	Sampledata_S2-iReflex.d	Sample	No iReflex Workflow				D:\Projects\Secondary injection\Methods\Quant FS method tier2.m
7	✓	Completed iReflex	FS1.m	Sampledata_S2-Fi-Blank.d	Blank	No iReflex Workflow				D:\Projects\Secondary injection\Methods\Quant FS method tier2.m
8	✓	Completed	FS1.m	Sampledata_S3.d	Sample	Fast Screening Insert	FS3.m		Quant FS method 1.m	Quant FS method tier2.m
9	✓	Completed	FS1.m	BlankData_B2.d	Blank	No iReflex Workflow	FS3.m		Quant FS method 1.m	Quant FS method tier2.m

图 4：工作列表在检测到假定阳性后自动插入确认方法

全新 Agilent 6475 三重四极杆液质联用系统



explore.agilent.com/asms

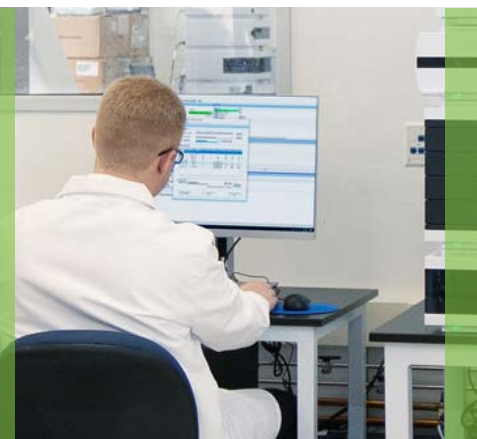
结论

配备 MassHunter 12 的 6475 三重四极杆液质联用系统提供了一种名为 Intelligent Reflex 的智能工作流程。

Intelligent Reflex 是一种智能自动化工作列表再进样逻辑工具，旨在大幅提高分析通量或确保样品处于允许的浓度范围内。

所示的三种 Intelligent Reflex 工作流程可以在一个工作列表中同时运行，确保样品检测遵循 SOP 指南。

通过预防性监测大幅延长仪器正常运行时间



利用 6475 三重四极杆液质联用系统的早期维护反馈 (EMF) 实时诊断监测功能进行加速寿命测试

作者：Michael B. Pastor, Ryan Rademacher 和 Patrick M. Batton

前言

三重四极杆液质联用系统作为日常靶向、大批量样品分析平台获得了广泛的认可。常规/靶向分析的主要考虑因素是仪器的稳定性，但由于关键离子光学元件的污损，仪器稳定性会随时间发生变化。虽然从数据分析的角度来看，纳入内标和测量丰度比有助于减少信号漂移，但它并不能作为仪器运行质量的关键指标。

为了帮助减少对仪器运行状况和寿命的担忧，全新 Agilent 6475 三重四极杆液质联用系统包含内置智能功能，可通过早期维护反馈 (EMF) 主动报告仪器运行状况。

EMF 报告与仪器维护相关的各个方面，例如“上一次调谐时间”、进样次数、分流阀切换次数、上一次前级泵油更换时间、上一次气体过滤器更换时间，以及关于检测器运行状况、雾化器堵塞、离子导入系统堵塞和喷雾稳定性状态的实时报告。

此处，我们展示了一个触发早期维护反馈 (EMF) 事件的用例，通过进样 10000 次加标牛尿样品来模拟仪器高负荷运行。我们专门选择了这种样品基质，因为其中包含可能导致检测出现问题的复杂内源性组分（盐、代谢物、脂肪、蛋白质等）。

这不是分析方法实例，本海报的主要意图在于强调早期维护反馈机制，测试仪器对严重基质积聚的响应，调谐参数的稳定性，以及在检测不合格时进行仪器调谐的恢复情况。

实验部分

用乙腈/水按照 1:1 的比例对牛尿进行稀释，并使用配备双进样器的 Infinity II 1290 HPLC 在交替进样模式下将其输送至系统，使用 90:10 乙腈/水 + 0.1% 甲酸进行等度洗脱。

为了产生足够的反压实现稳定的 HPLC 操作，并模拟使用 HPLC 分析柱，本研究使用 ZORBAX Extend-C18, 80 Å, 2.1 mm, 1.8 μm, 最大耐压 1200 bar 的 UHPLC 保护柱 (821725-107)，如图 1 所示。

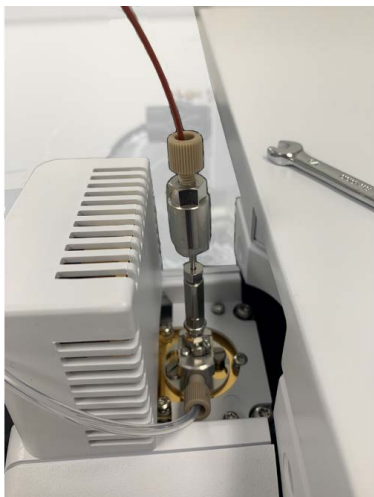


图 1：将 ZORBAX Extend-C18, 80 Å, 2.1 mm, 1.8 μm, 最大耐压 1200 bar 的 UHPLC 保护柱直接连接到雾化器，模拟样品通过色谱柱

记录各种分析物的 MRM 信号，确保离子到达检测器。该电流用于“老化”电子倍增器角管，就像处于标准/常规操作状态一样。

早期维护反馈 (EMF) 提供仪器状态的实时监测。EMF 智能功能集成于系统固件中，用于监测离子通道上的关键点位，例如离子导入系统堵塞、雾化器上的沉淀以及检测器的预估寿命。此外，仪器还自动监测常见的破坏性潜在维护事件，例如喷雾稳定性差和雾化器或离子导入系统发生的离子束堵塞事件。

在整个进样系列过程中，没有对雾化器、离子导入系统、离子源室和喷雾罩进行清洁或拆除。

实验后调查

在进样系列完成后，对离子源和脱溶剂组件进行检查，确定离子斑、盐积聚、广泛的基质沉积或潜在故障模式的区域。

绘制校验调谐过程中记录的调谐离子丰度图，用于评估基质效应随时间的变化。

与 1290 Infinity II 液相色谱仪联用的全新 Agilent 6475 三重四极杆液质联用系统



结果与讨论

实验前到实验后的物理属性

- 装有稀释基质（牛尿:乙腈/水 = 1:1）的样品瓶
- 每 1000 次进样的样品叠加 MRM TIC
- 10000 次进样后的质谱进样口。喷雾罩和毛细管盖受到严重污染，但离子导入系统的性能仍保持不变
- 拆下带有脱溶剂组件的截取锥。用蘸有 IPA 的棉签擦拭以突出显示离子导入系统后真空区域的基质污染（截取锥前面、截取锥背面、八极杆）

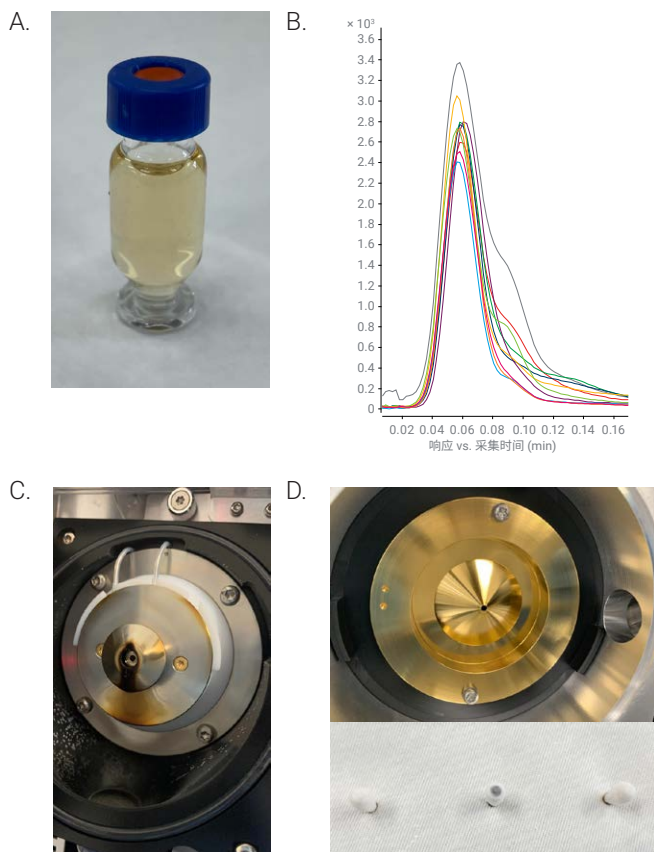


图 2：实验物理属性

随着基质组分在雾化室上积聚，调整离子容差

每 1000 次进样后进行一次校验调谐，不清洁雾化器或离子导入系统（图 3）。尽管前端污染严重，质量校准 (m/z 漂移) 和质谱峰宽 (FWHM) 在 10000 次进样中仍处于允许的误差范围内且保持稳定。当 $m/z < 1000$ 时，质量校准必须保持 ± 0.1 Da 的范围内，峰宽必须保持在 ± 0.14 Da 的范围内。在一系列进样过程中，仪器在第 6000 次进样时报告“超容差”事件；通过在下一系列进样之前运行自动调谐程序解决了这一问题。

在本次调查过程中，没有触发严重的早期维护反馈事件

早期维护反馈持续监测与高负荷常规分析应用相关的可解决问题的常见来源。在本次调查过程中，除了将“进样次数”阈值设置为 10000 次外，没有触发任何上述事件。

结果表明，尽管离子不断进行轰击，检测器的状态仍保持稳定，没有发生较大程度的变化，雾化器和离子导入系统未发生堵塞，喷雾稳定性保持一致。

检测器 EMV	正离子模式	负离子模式
开始	1212 V	1232 V
结束	1198 V	1232 V

每 1000 次进样的校验调谐结果

10000 次进样后的校验调谐报告如图 4 所示，结果为通过。正离子和负离子、MS1 和 MS2 以及各种扫描速度和峰宽的结果均显示于单页报告中（同时还提供了详细信息）。

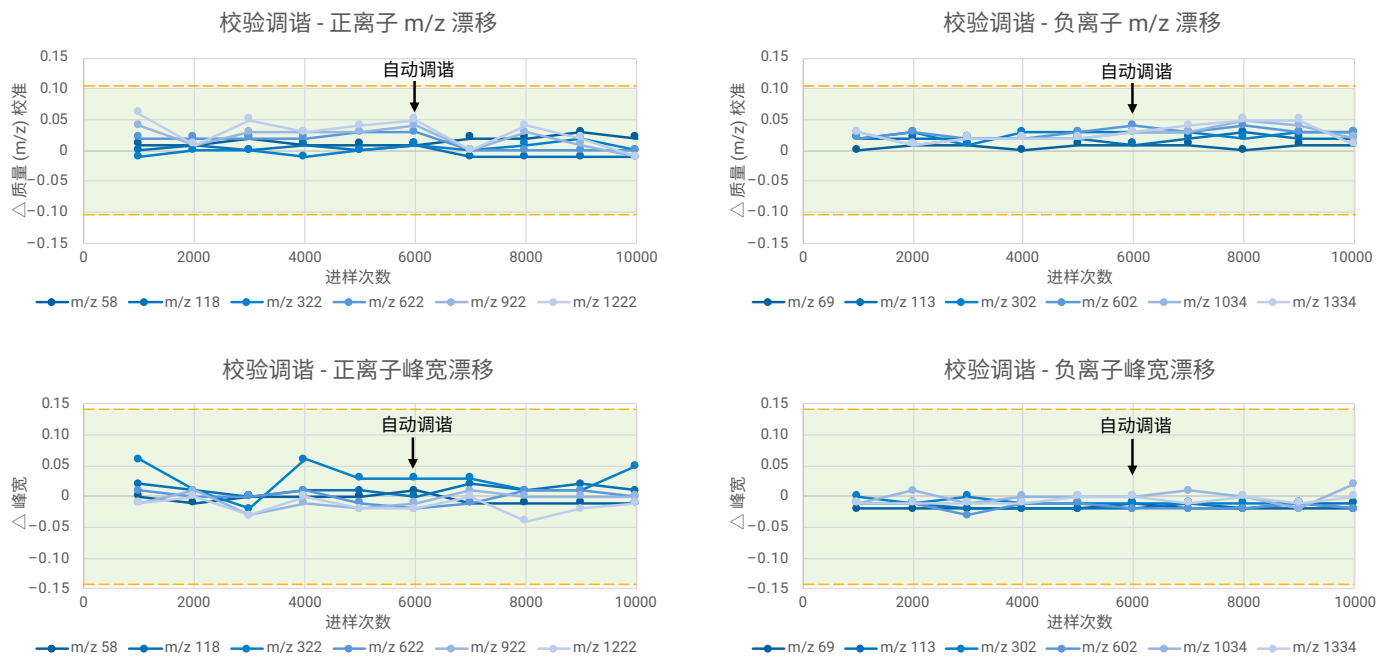


图 3：每 1000 次进样后进行的检验调谐容差结果

MS 校准调谐报告 - G6475A

仪器信息			
型号	G6475A	校准调谐日期	2022-09-25T16:08:07:00
序列号	S622225001	软件/固件版本	3.0.1424/8.1.34
离子源	AJS ESI	电离模式	ESI
上一次自动调谐日期	2022-08-29T11:36:41-07:00	上一次调谐执行者	系统 (系统)
真空压力	2.25E+0 [Torr]; 2.90E-5 [H] (Torr)	整体结果	通过

正离子模式			
MS1 峰宽 Unit, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS2 峰宽 Unit, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS1 峰宽 Narrow, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS2 峰宽 Narrow, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS1 峰宽 Wide, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS2 峰宽 Wide, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS1 峰宽 Widest, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS2 峰宽 Widest, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS2 扫描速度 快速	结果	通过	
MS2 扫描速度 超快速	结果	通过	
MS1 滞后系数	结果	通过	
MS2 滞后系数	结果	通过	
增益	结果	通过	

负离子模式			
MS1 峰宽 Unit, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS2 峰宽 Unit, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS1 峰宽 Narrow, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS2 峰宽 Narrow, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS1 峰宽 Wide, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS2 峰宽 Wide, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS1 峰宽 Widest, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS2 峰宽 Widest, 扫描速度 正常	结果	通过	
MS2 扫描速度 快速	结果	通过	
MS2 扫描速度 超快速	结果	通过	
MS1 滞后系数	结果	通过	
MS2 滞后系数	结果	通过	
增益	结果	通过	

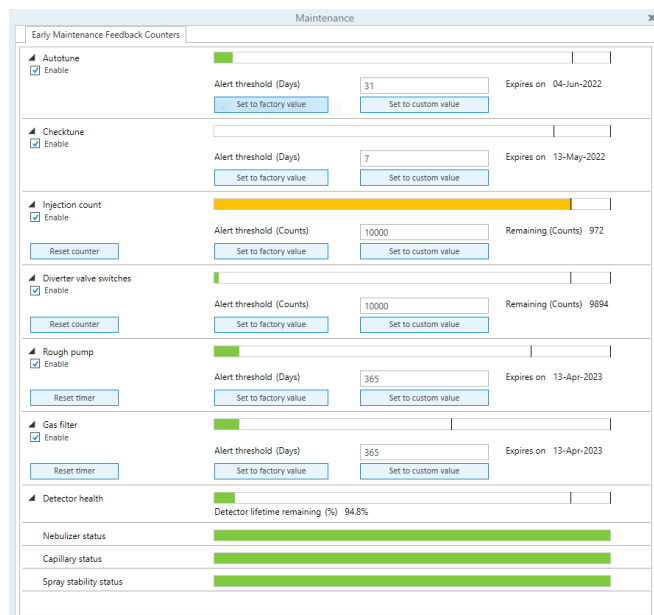


图 4：检验调谐报告结果表明所有参数均为通过（左），早期维护反馈让用户知道仪器已运行超过 10000 次进样（右）

结论

- 使用复杂基质（牛尿）样品证明了仪器在 10000 次进样运行中的稳定性
- 记录校验调谐结果，用于验证仪器的稳定性。每 1000 次进样后记录调谐离子质量校准和峰宽，结果处于良好性能的容差标准范围内
- 雾化器喷雾、离子导入系统毛细管和喷雾稳定性均未触发不良事件
- MRM 采集的持续离子轰击并没有使检测器发生明显老化

参考文献

1. 配备 ESI 离子源的 Agilent Ultivo 三重四极杆 LC/MS 系统的分析稳定性，安捷伦科技有限公司，2019，5994-0671ZHCN
2. Metzger, Benedikt; Willmann, Lucas; Simplify your Method Development using the Agilent 1260 Infinity Prime LC System and InfinityLab LC/MSD iQ（使用 Agilent 1260 Infinity Prime 液相色谱系统和 InfinityLab LC/MSD iQ 简化方法开发），安捷伦科技有限公司，2020，5994-2124EN
3. Sartain, Mark; Sosienski, Theresa; Yang, Dan-Hui Dorothy; Robustness of the Agilent Ultivo Triple Quadrupole LC/MS for Routine Analysis in Food Safety（Agilent Ultivo 三重四极杆 LC/MS 系统在食品安全性常规分析中的稳定性），安捷伦科技有限公司，2017，5991-8741EN

种类齐全的重四极杆液质联用系统

安捷伦三重四极杆液质联用系列产品可为各种应用提供强大的分析能力。这些解决方案的强大分析能力和出色性能将助您解决各种分析挑战。



Agilent Ultivo LC/TQ

紧凑、可叠放的 LC/TQ 在帮助您节省台面空间的同时保持了强大的性能

[了解更多信息](#)



Agilent 6475 LC/TQ

可信赖的稳定性能结合内置智能功能的优势

[了解更多信息](#)



Agilent 6495 LC/TQ

一款拥有超高灵敏度的液质联用系统，其可靠性足以应对严苛的分析挑战

[了解更多信息](#)

如需了解更多信息，请访问：

www.agilent.com/chem/6475

查找当地的安捷伦客户中心：

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线：

800-820-3278

400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

DE81574943

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2022
2022年10月24日，中国出版
5994-5410ZHCN