



# ***5975 inert MSD***

***JF Garnier***

*ingénieur d'applications GC-MS*

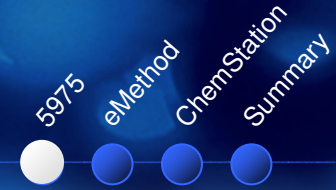
*Agilent Technologies*

*Europe*



**Agilent Technologies**

# Les Fonctionnalités du 5975

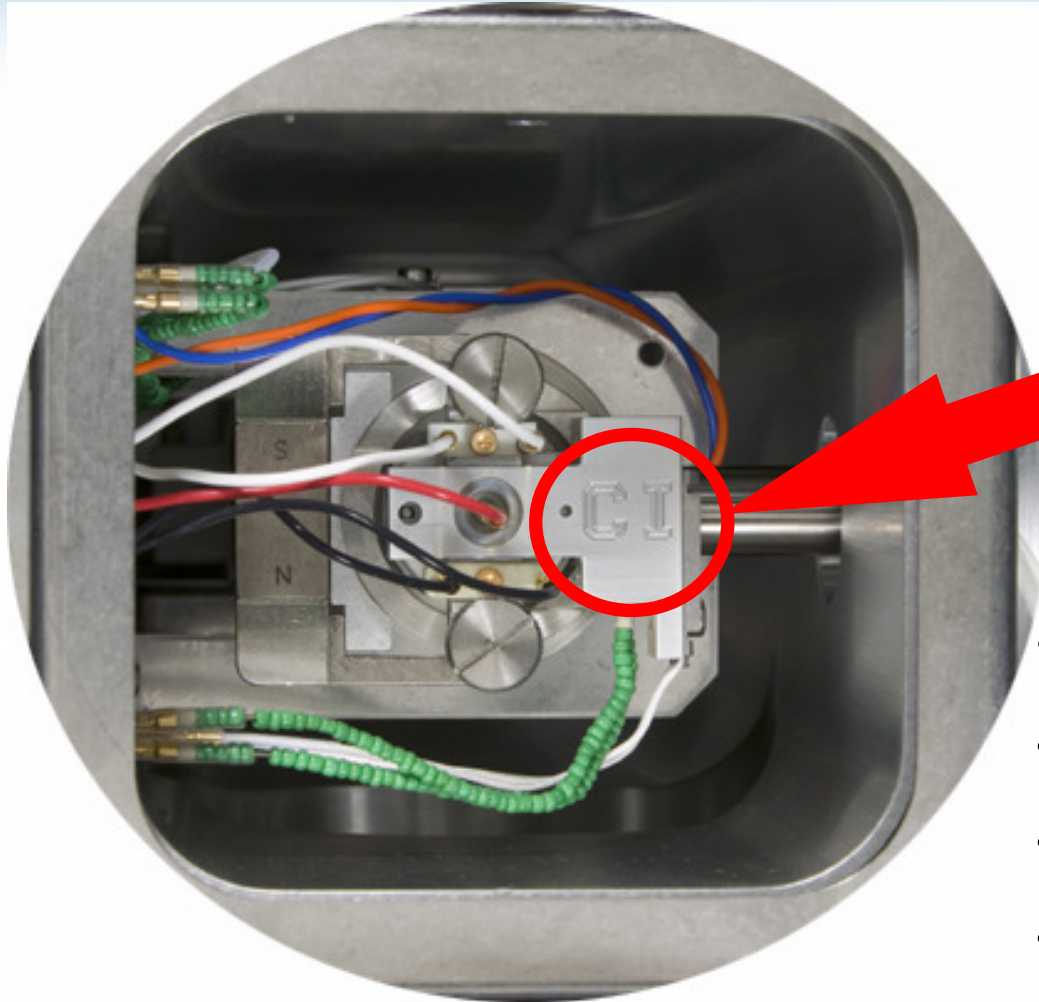


- ***Un nouveau Design***
- ***Un nouveau système de pompage***
- ***Une gamme de masse étendue***
- ***Le mode “AutoCI”***
- ***Une sensibilité accrue***
- ***“Synchronous SIM/Scan”***
- ***EI/CI sur une seule source***
- ***Contrôle du GC 6850***
- ***L’interface “QuickSwap”***



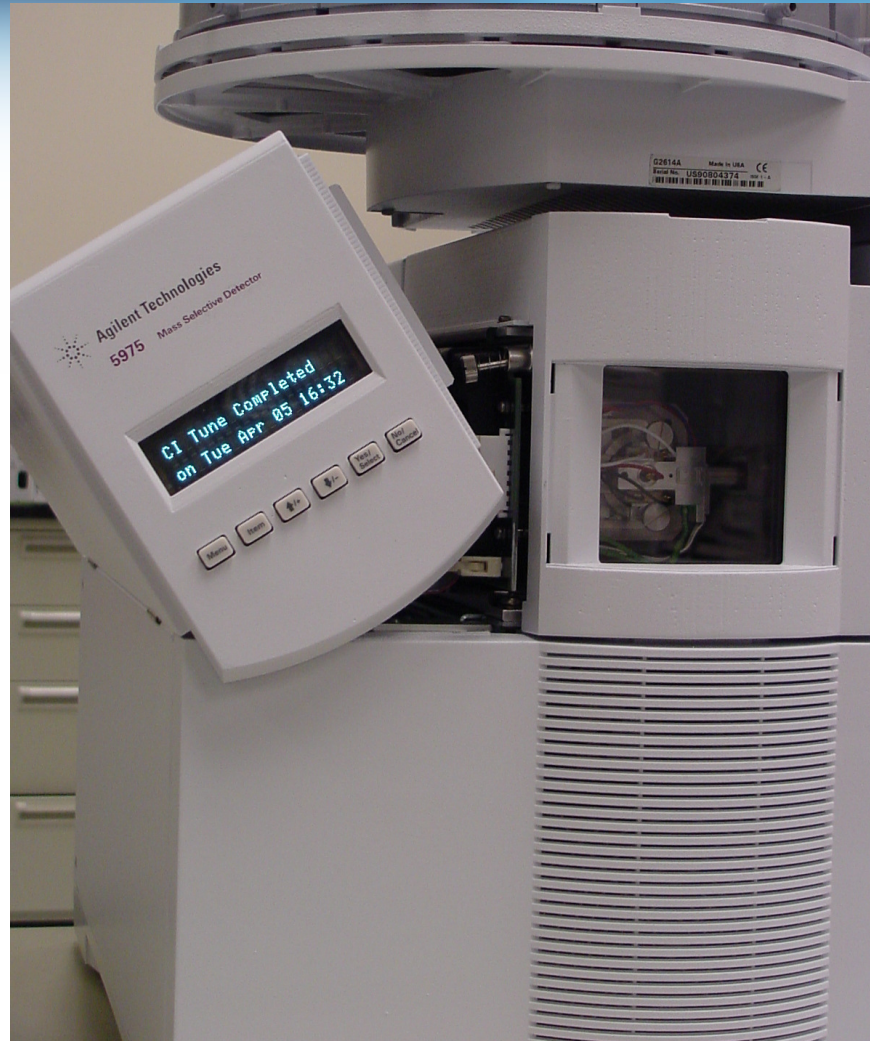
Agilent Technologies

# Visualisation de la source



- *Visualisation des Connections*
- *visualisation des Filaments*
- *Position de la colonne*
- *Identification de la source*

# Nouveau Design

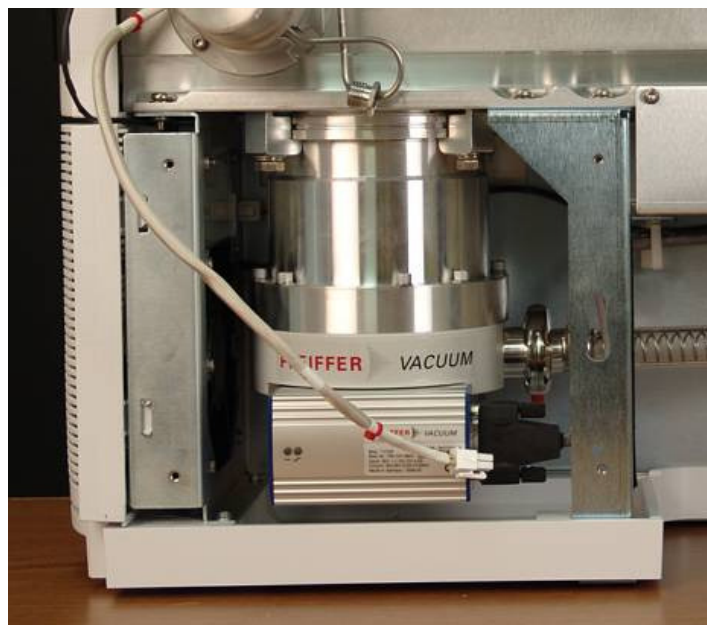


Accès facile à l'analyseur



Agilent Technologies

# Un nouveau système de pompage



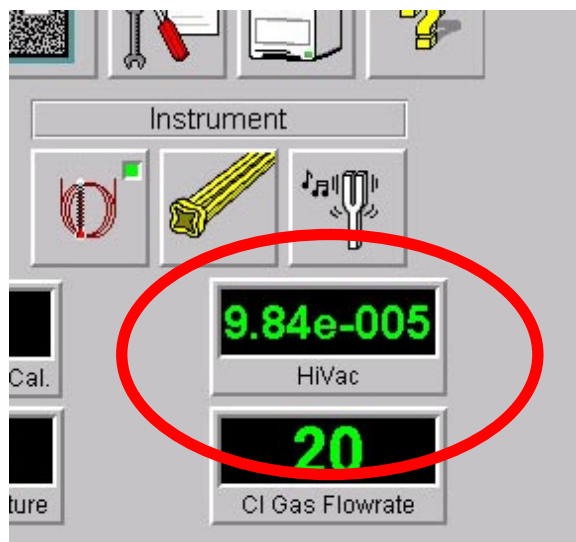
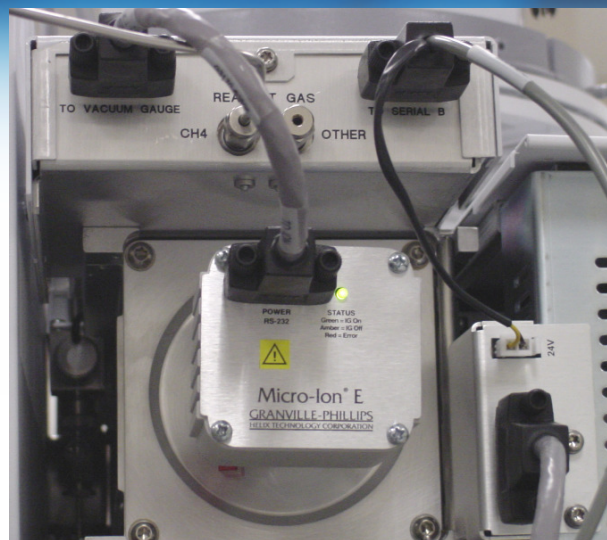
Une nouvelle gamme de pompe turbomoléculaire et de pompe primaire (encore plus performantes en He et H<sub>2</sub>)

- 70 L/sec pompe standard
- 262 L/sec pompe haute performance
- 2.5 m<sup>3</sup>/heure pompe primaire (67% plus de capacité que la précédente)



# Amélioration de la lecture du vide

- Nouvelle jauge à vide plus précise
- Lecture simplifiée

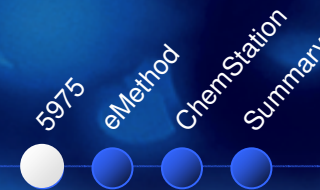


Logiciel



Panneau du MSD

# Une gamme de masse étendue



- **1.6 à 1050 m/z pour le 5975 inert MSD**

- Le quadrippôle a été modifié
- La carte électronique aussi

- **1.4 à 800 m/z pour tous les 5973 MSDs (pas d'upgrade possible)**

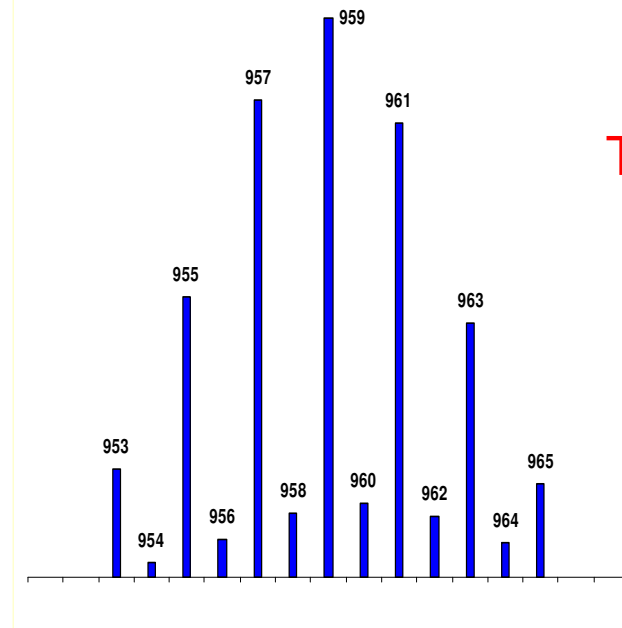
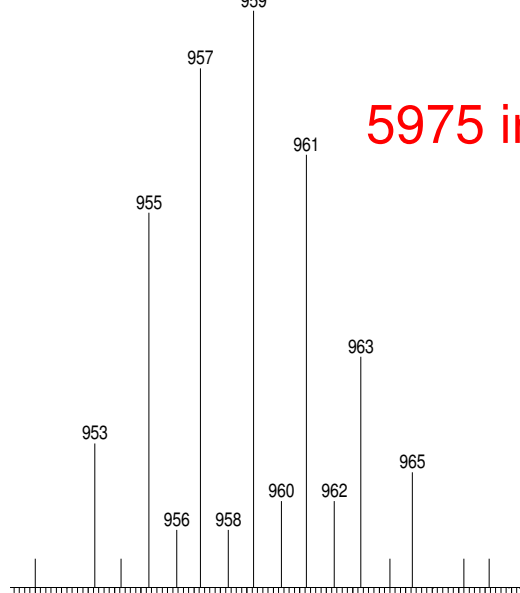
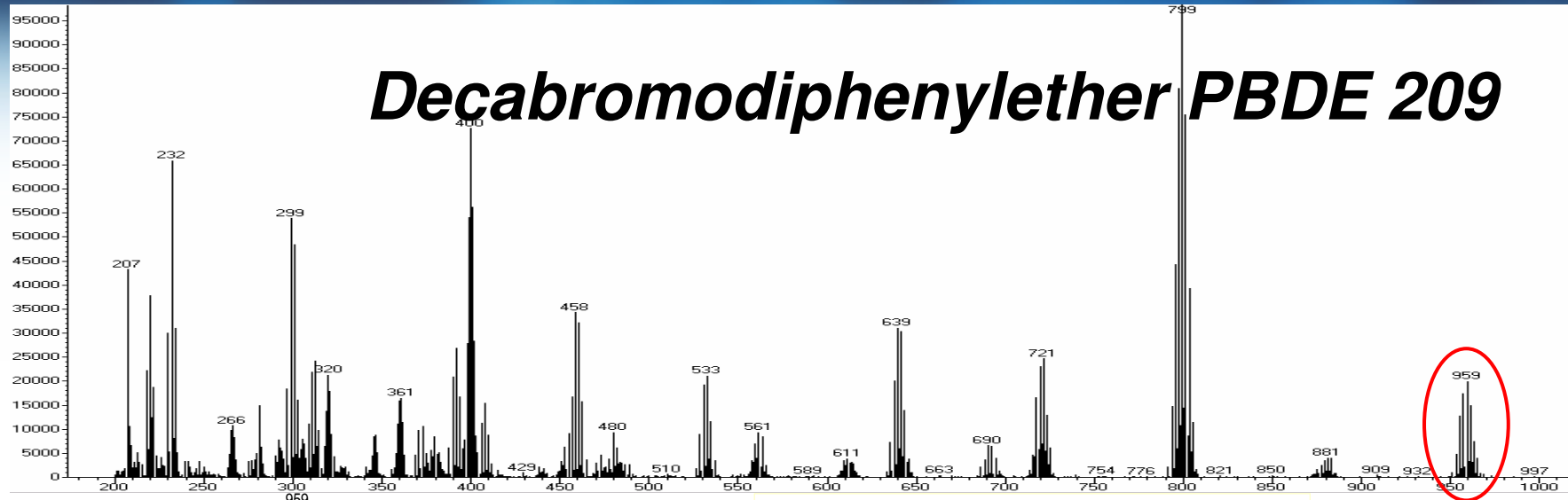


## “HIGH MASS KIT” :

- Permet une vérification de l'assignement en masse
- Corrige toute déviation éventuelle
- **Contenu:**
  - Echantillon test PFHT
  - Instructions

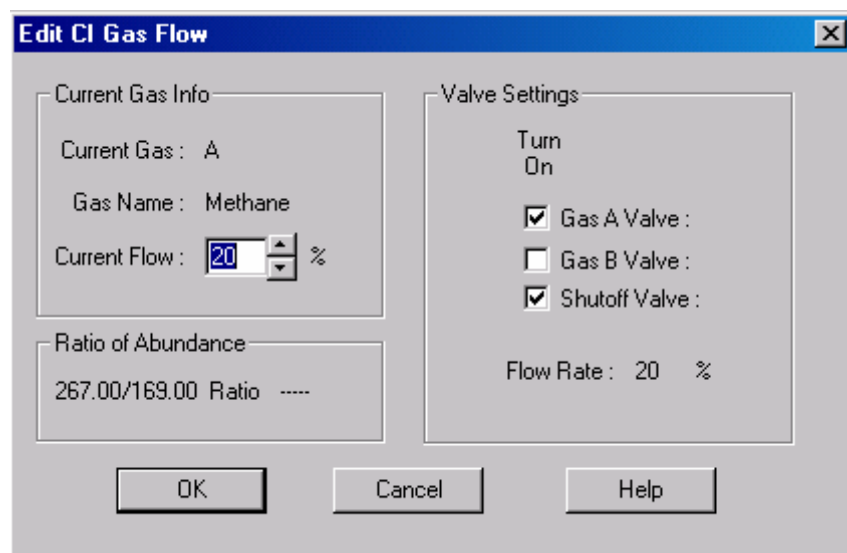


# Une gamme de masse étendue



# “AutoCI”

- AutoCI – Automatisation complète de l’ionisation chimique
  - Pas de contrôle manuel
  - La CI devient aussi simple que l’EI!

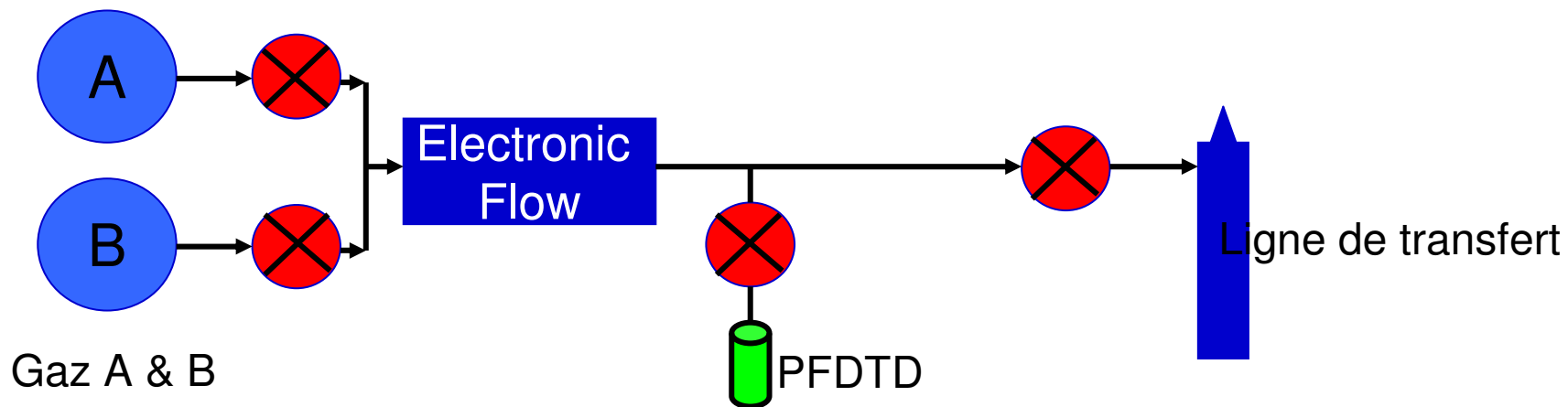


Nouvelle interface CI du 5975

Ancienne interface CI du 5973

# Deux Gaz réactants

- Deux gaz réactants (voie A et voie B)
- Débit de gaz ajusté automatiquement lors de l'autotune
  - **Compatible avec l'Ammoniac**
- Meilleure répétabilité
- Utilisation du PFDTD comme gaz de calibration

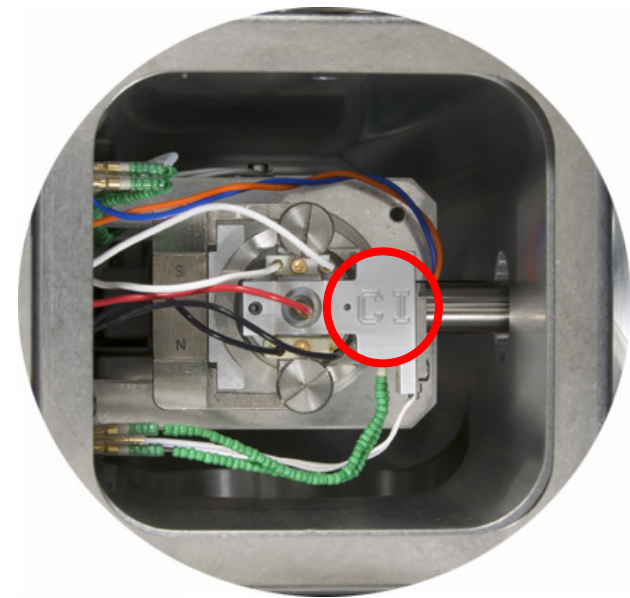


# EI/CI automatisés

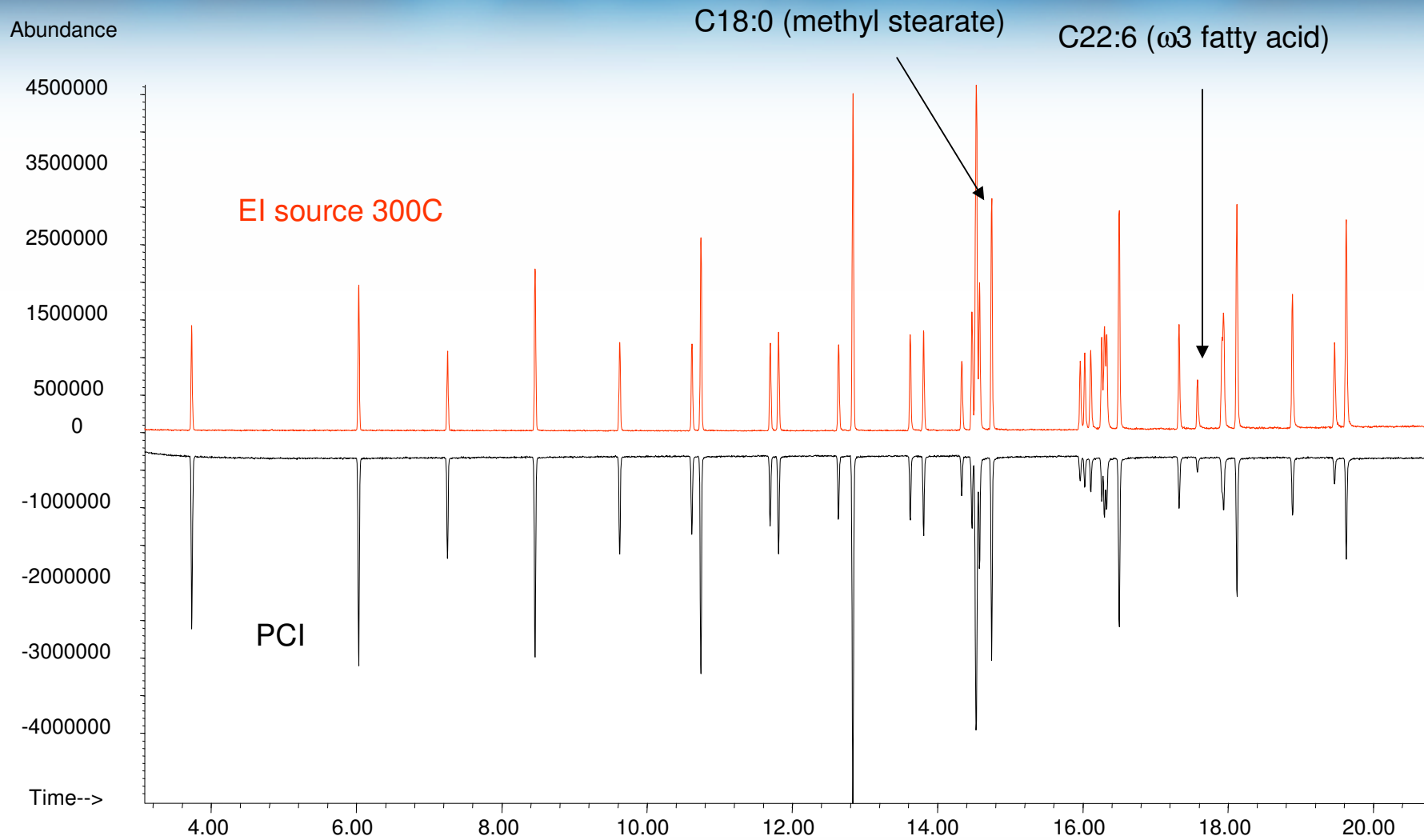
## Automatisation EI/CI sur une même source

**Mars 2004 avec le MSD 5973 Inerte :**  
Note d'application: "EI capability with the CI ion source" 5989-0595EN

**Juin 2005 avec le MSD 5975 Inerte :**  
La MSD ChemStation permet lors d'une séquence de passer automatiquement d'EI à CI

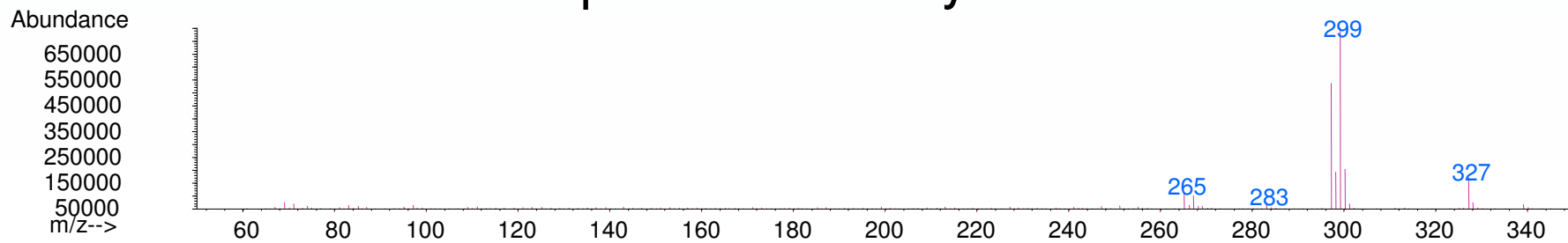


# IE sur la source CI – FAMES

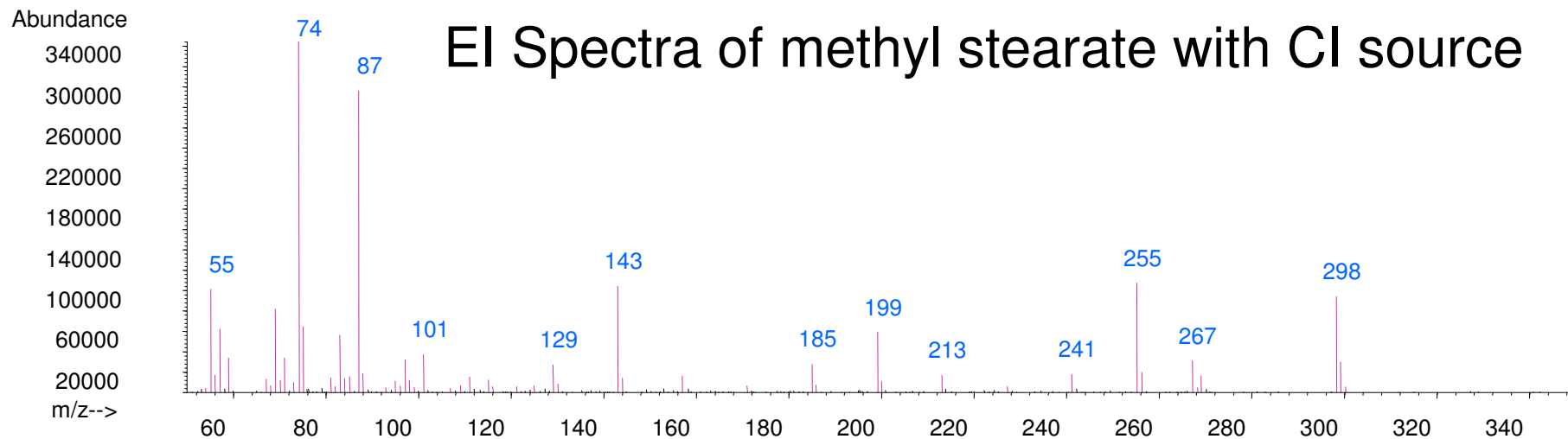


# IE sur la source CI – FAMES

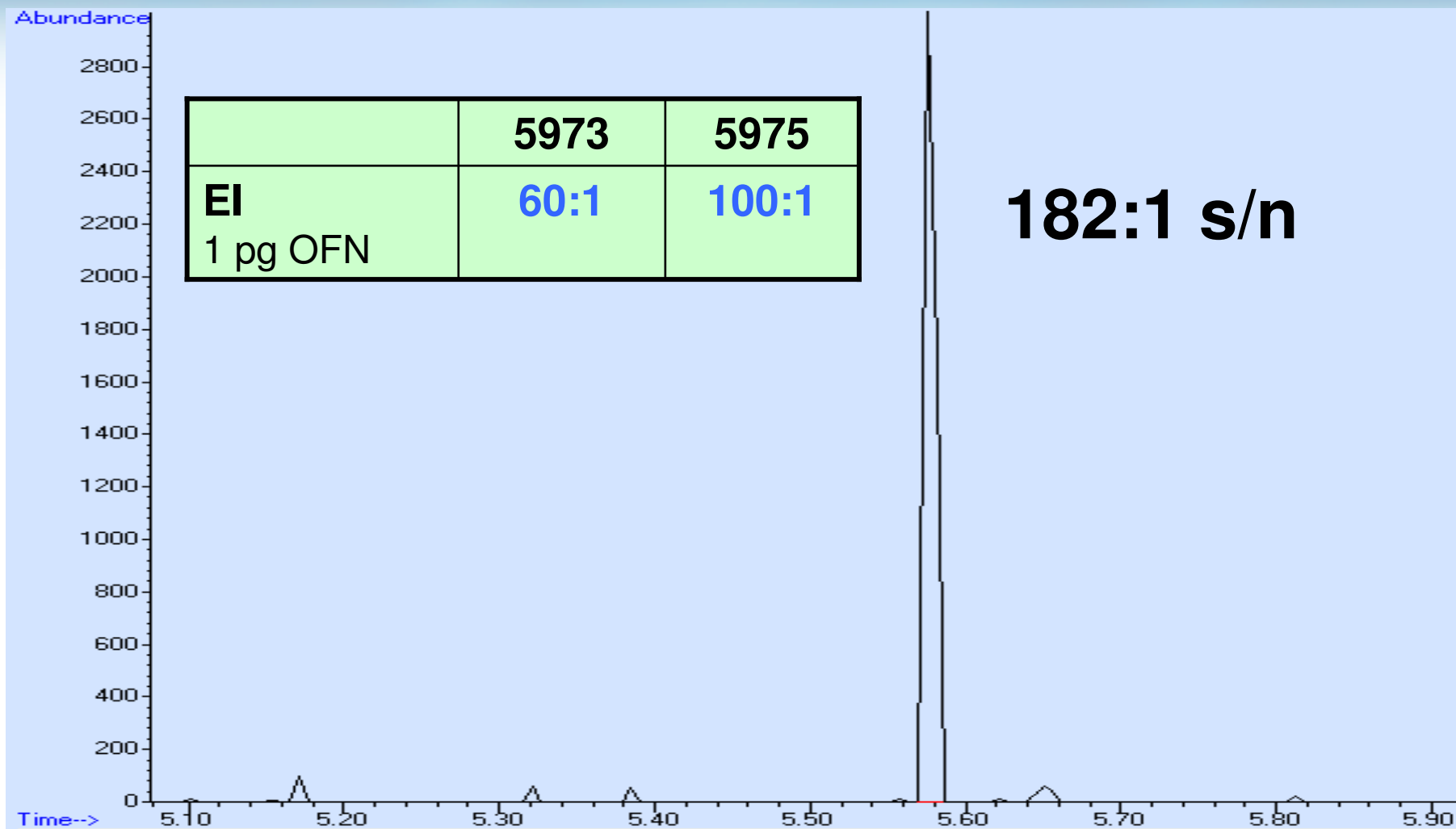
## PCI Spectra of methyl stearate



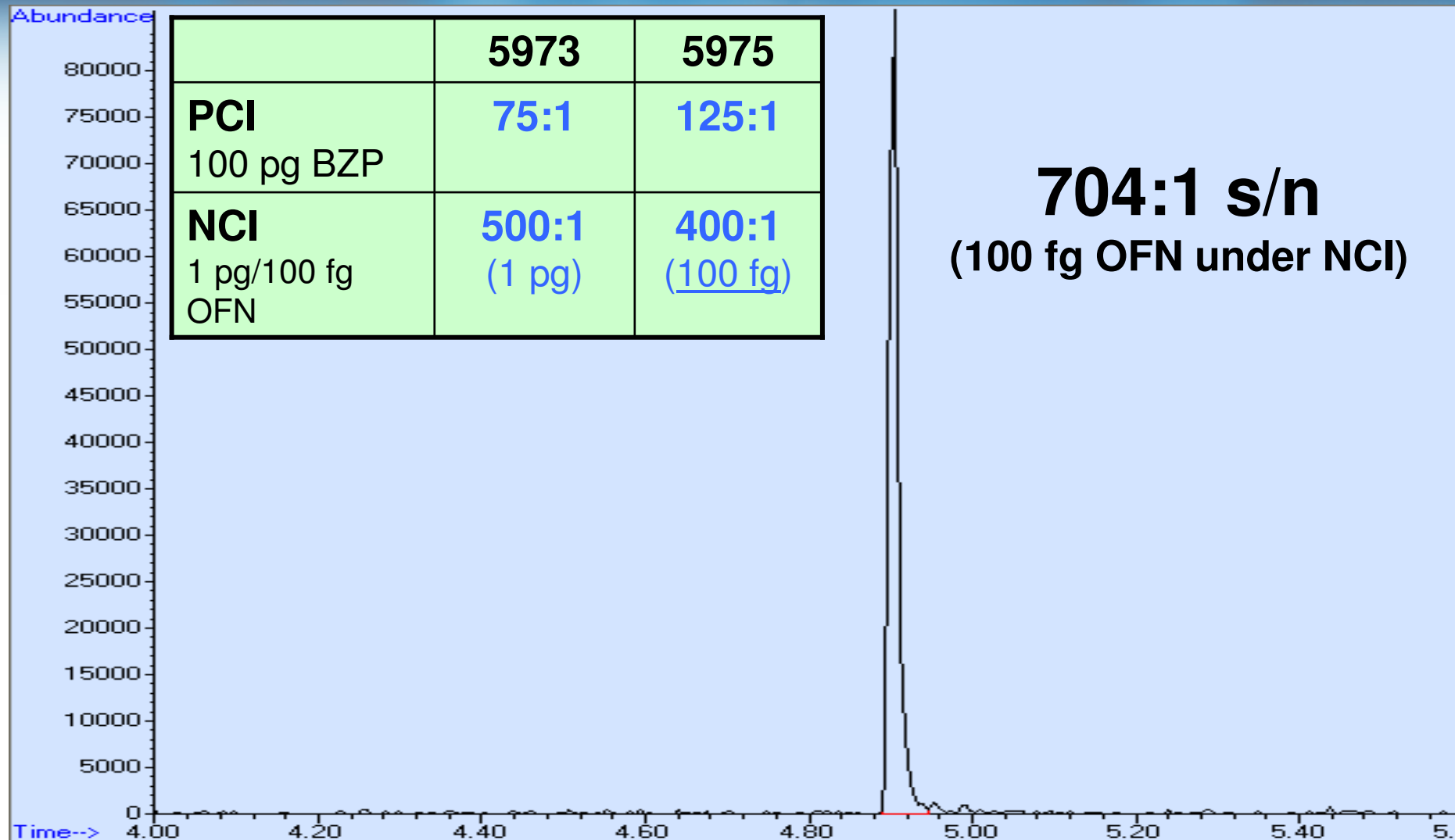
## EI Spectra of methyl stearate with CI source



# Nouvelles specifications – IE Scan



# Nouvelles specifications – CI Scan



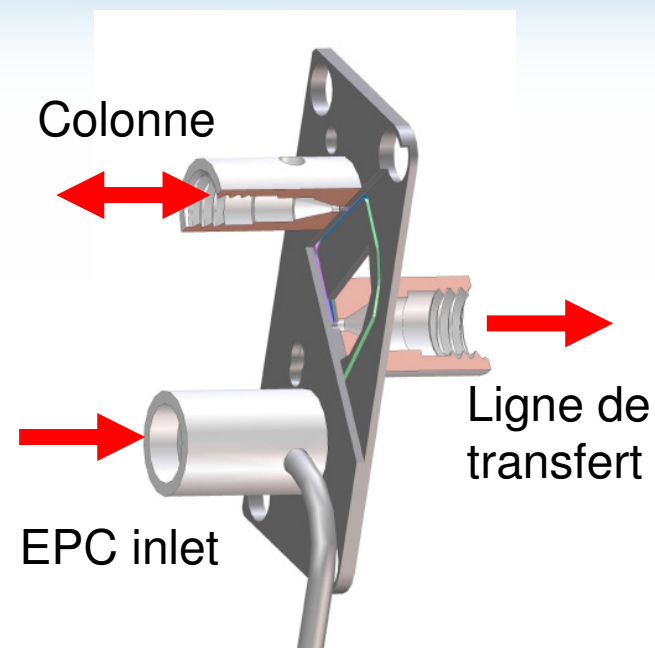
# 6850 GC: contrôle du GC via la MSD ChemStation

- **5973N (G2570A)**
- **5973 inerte**
- **5975 inerte**



# QuickSwap: interface MSD

- **Remplacer la colonne sans Vent**
- **Mode “Backflush”**
  - Maintenance de l’injecteur facilitée
  - Permet de sortir rapidement les “lourds”
- **Permet de maintenir un débit constant dans le MSD**

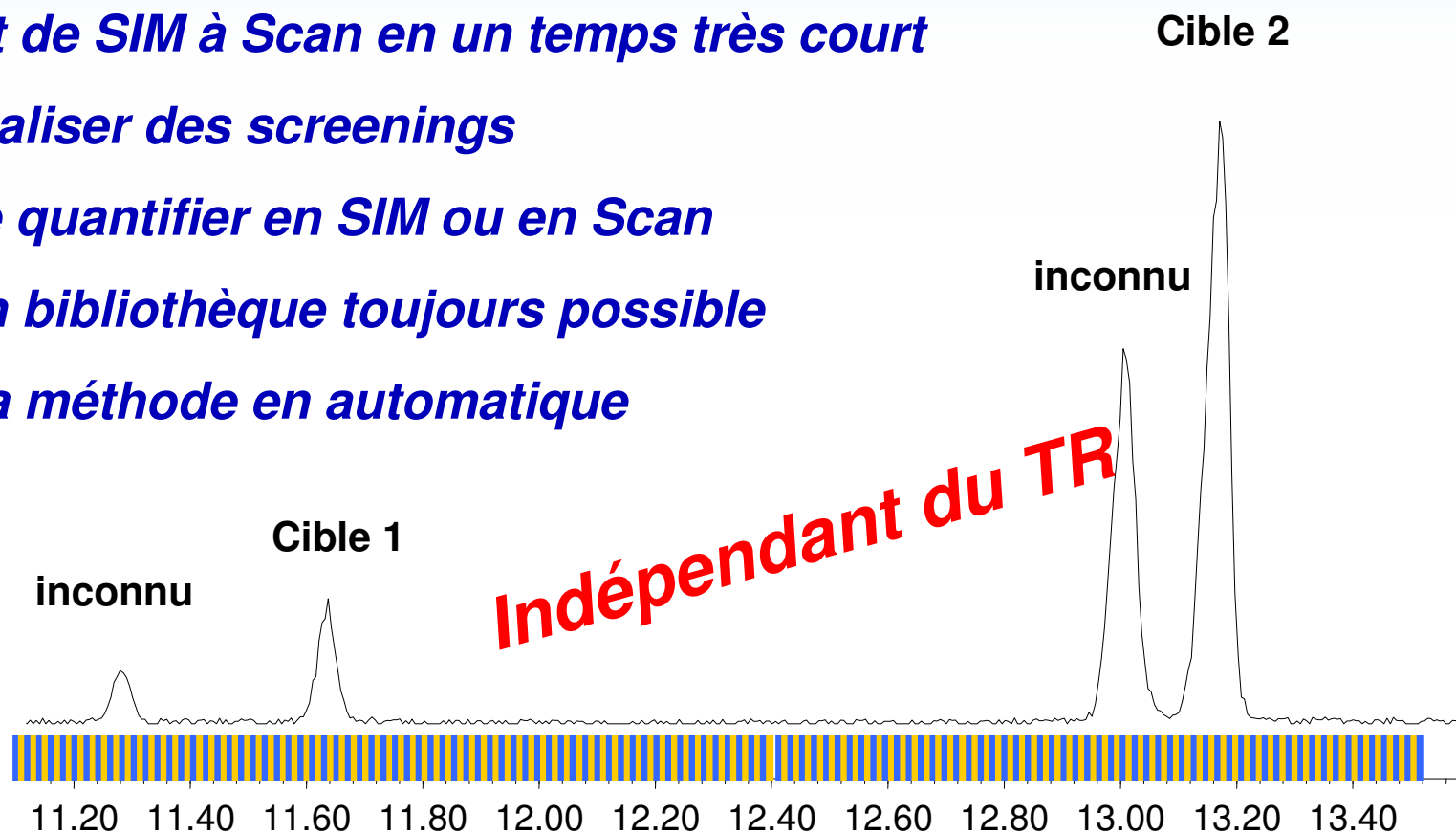


Technologie Microfluidique



# « Synchronous SIM/Scan » ...

- *Passage de SIM à Scan tout au long de l'acquisition*
- *Basculement de SIM à Scan en un temps très court*
- *Permet de réaliser des screenings*
- *Possibilité de quantifier en SIM ou en Scan*
- *Recherche en bibliothèque toujours possible*
- *Création de la méthode en automatique*



# Les données SIM/Scan

**Select Signals to Load**

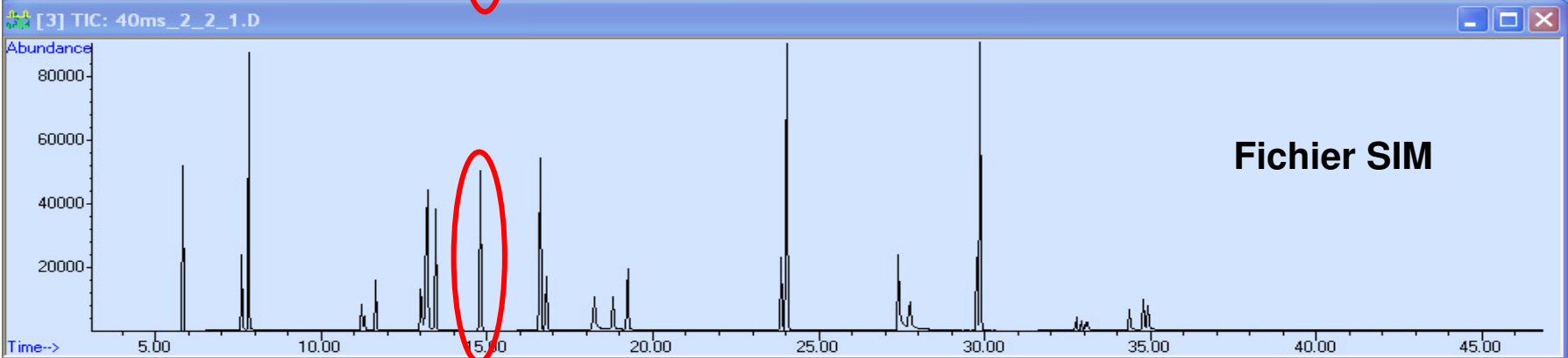
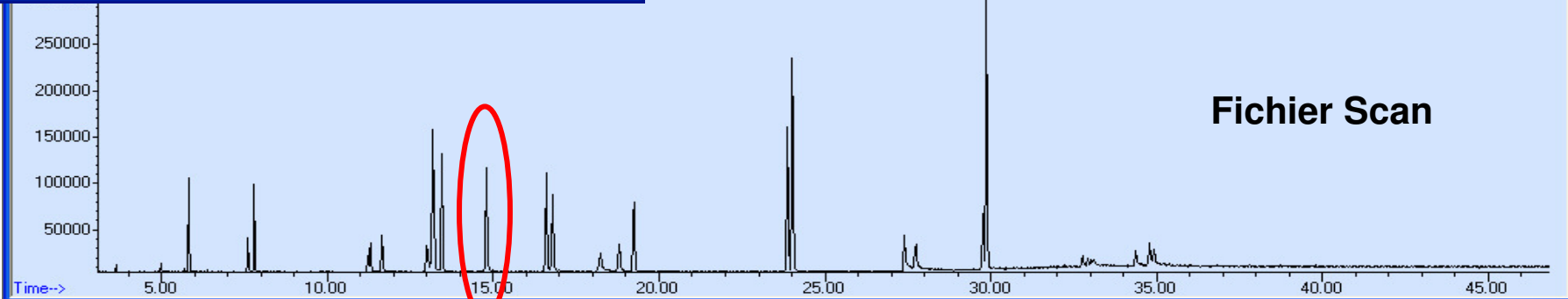
- DATA.MS
- DATASIM.MS

OK Cancel

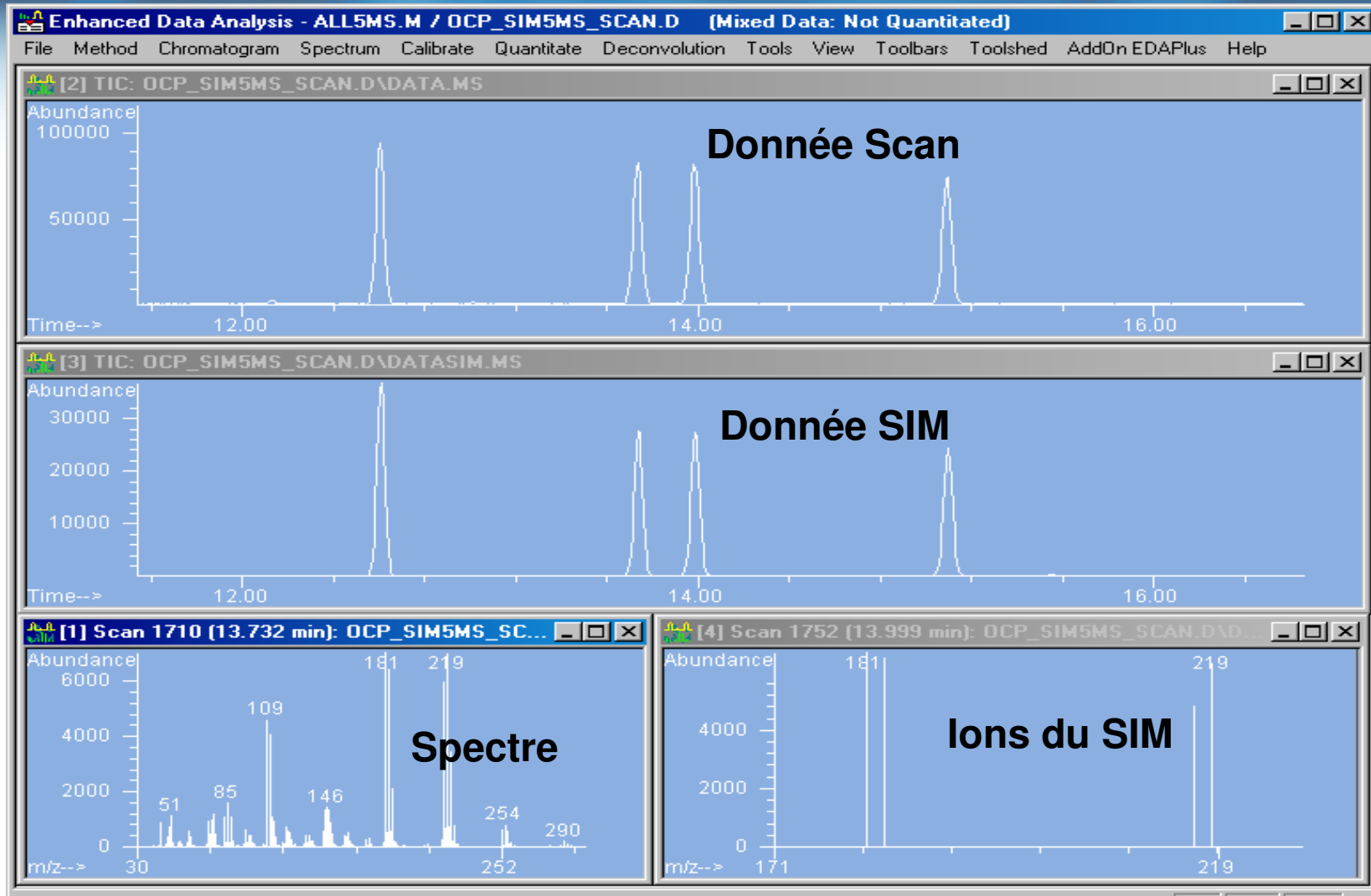
Data: Quantitated Multi Pt., Not Reviewed)

oolbars Help

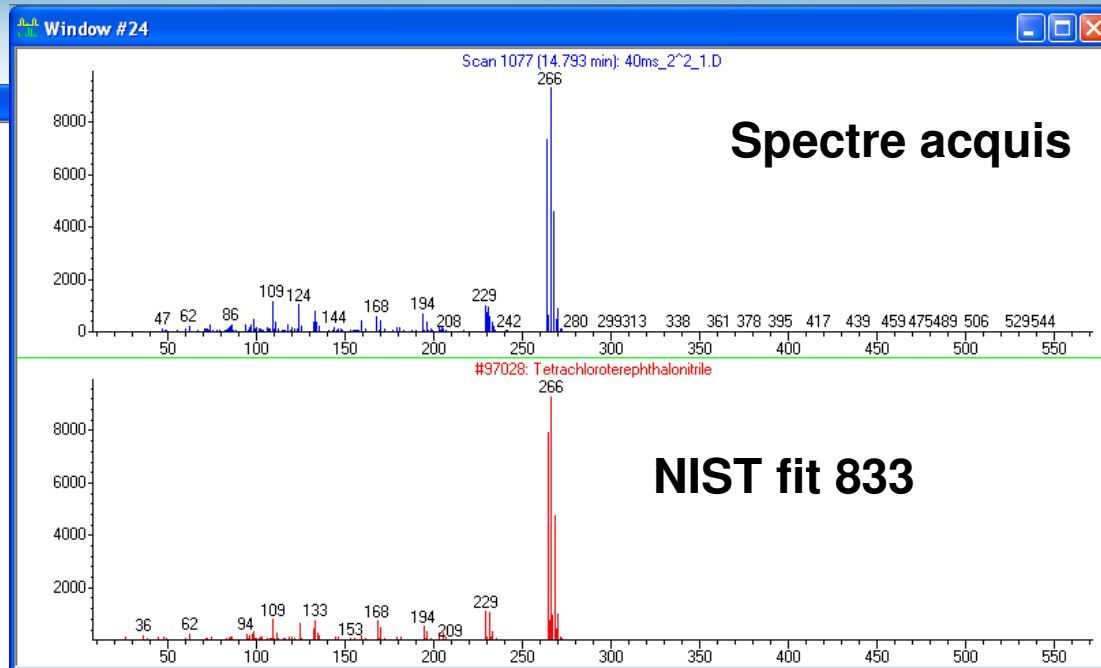
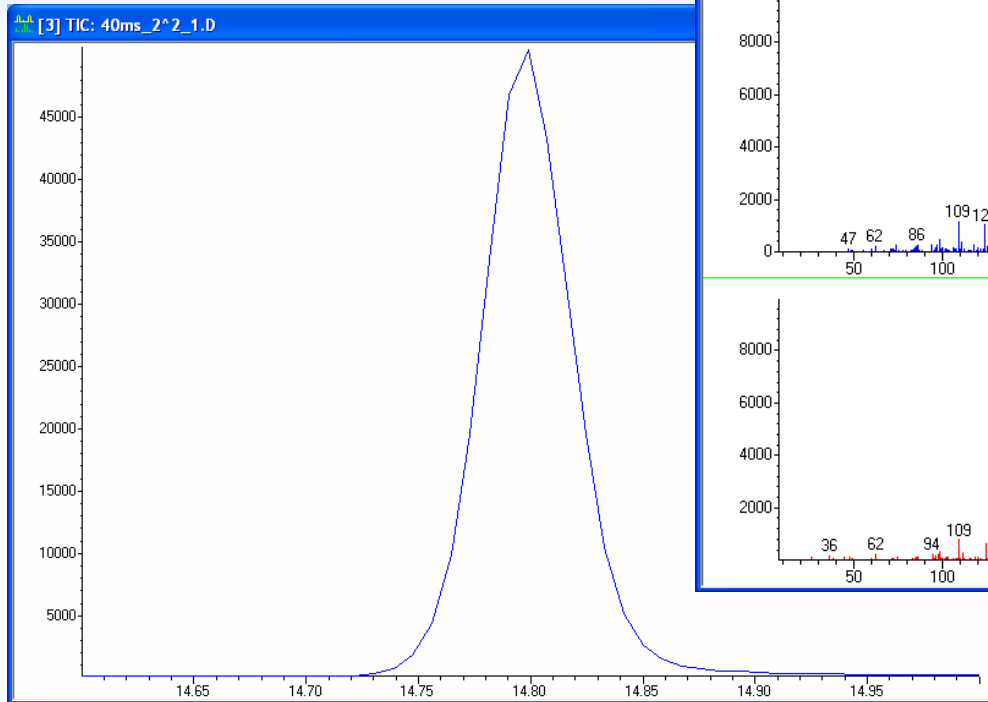
Execute



# Les données SIM/Scan



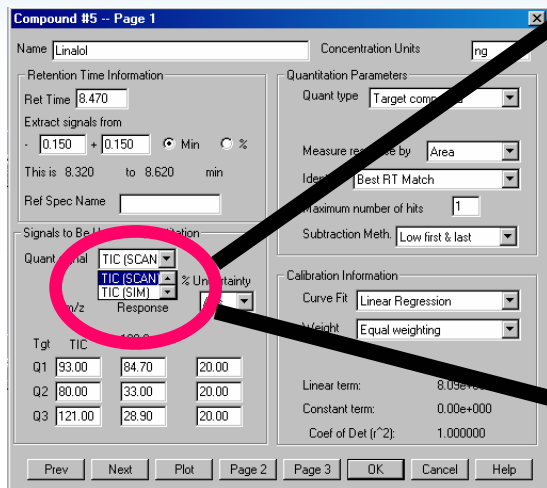
# Recherche en bibliothèque



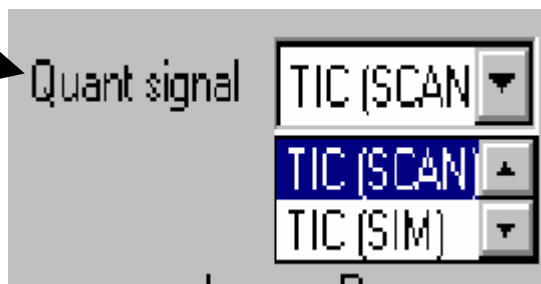
Tetrachlorophthalonitrile

Signal Scan d'un SIM/Scan

# Quantifier en SIM/Scan



« **TARGET ION** »  
du Scan ou du SIM

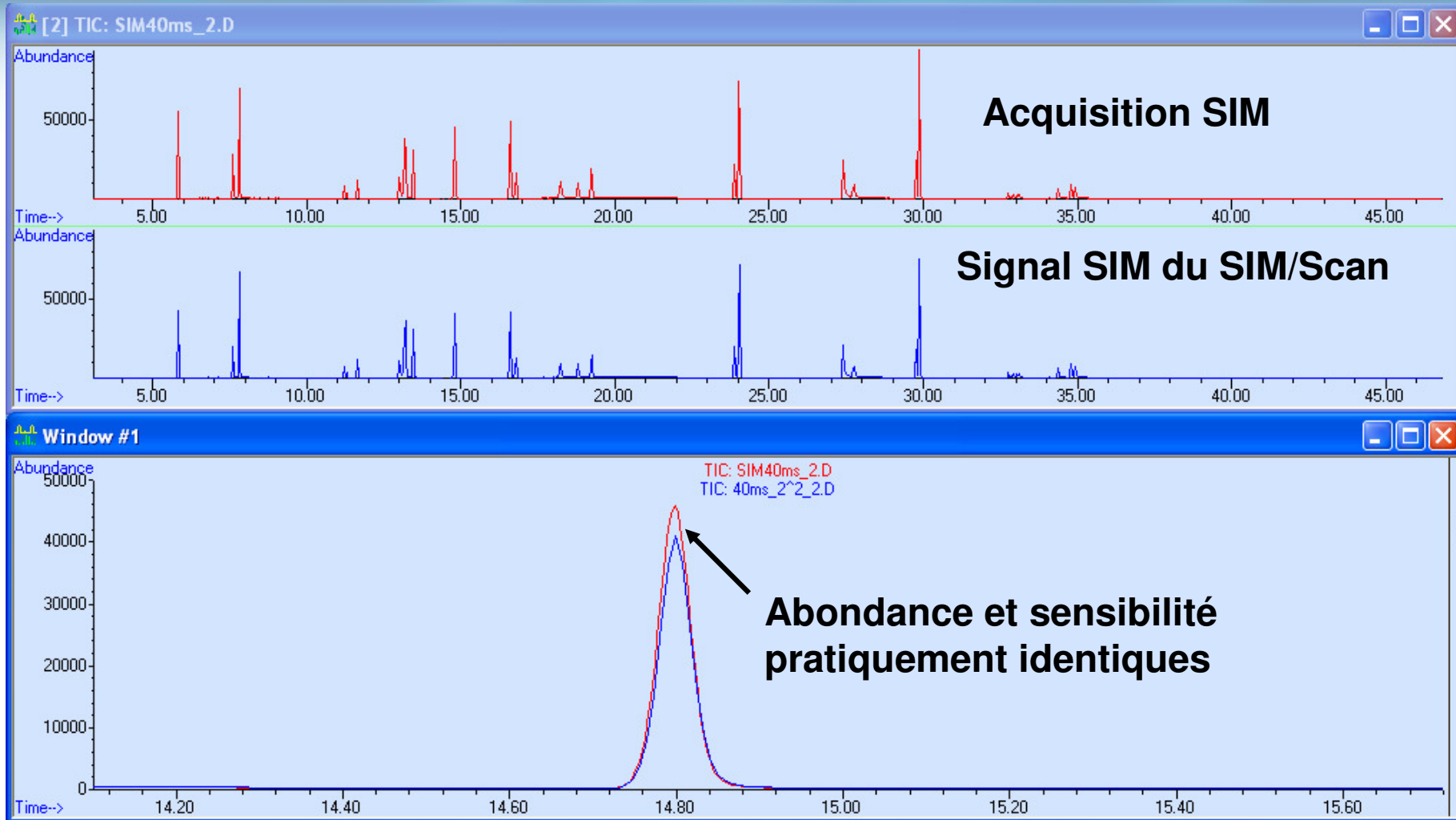


« **Total Ion Current** » du  
Scan ou du SIM

***Vous pouvez quantifier à volonté soit sur  
le signal Scan soit sur le signal SIM***

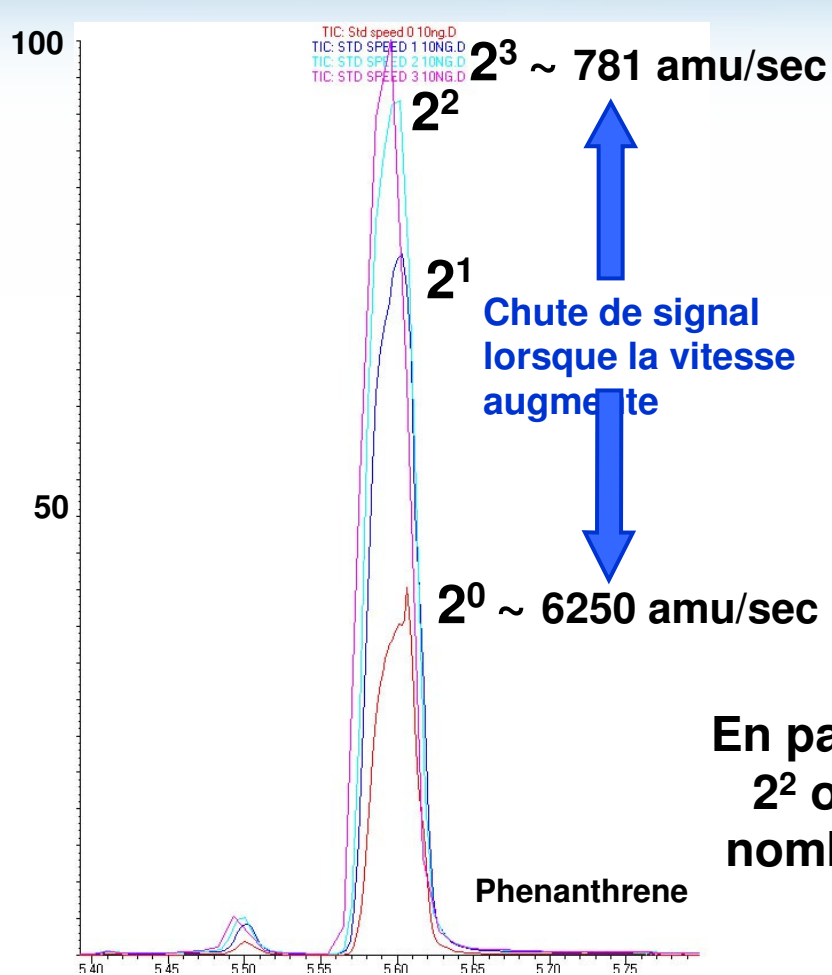


# Une sensibilité maintenue

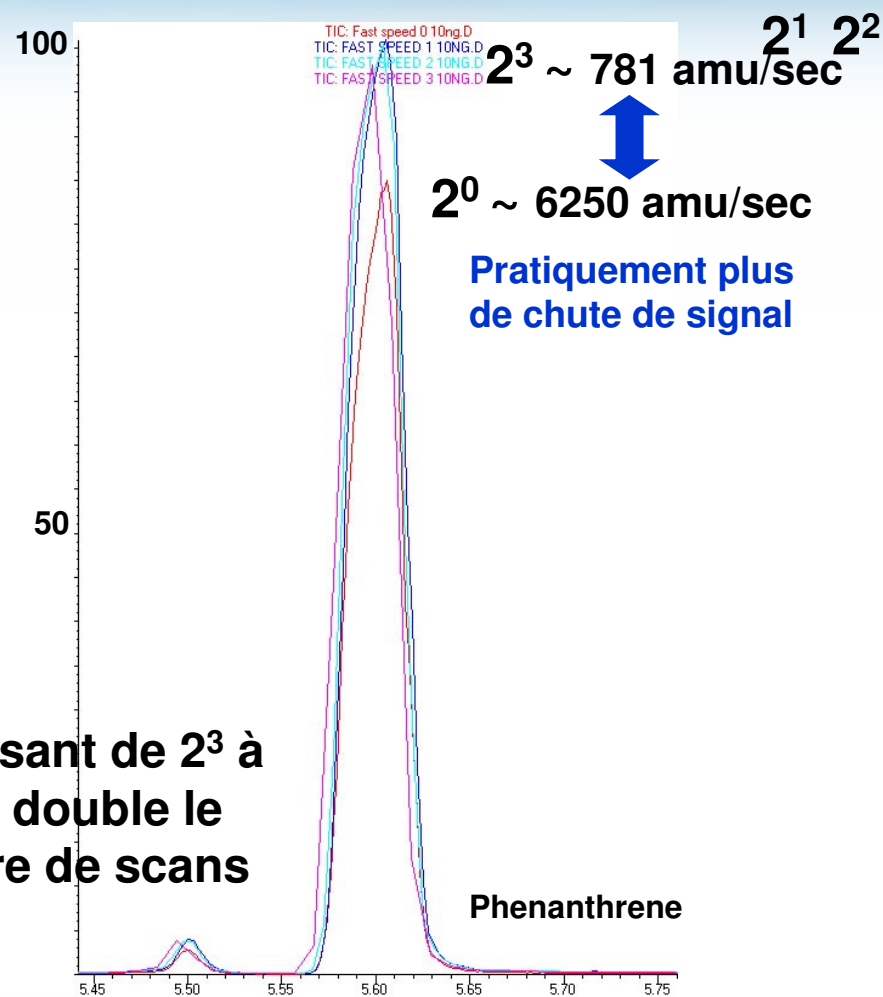


# Les changements...

## Standard Electronics



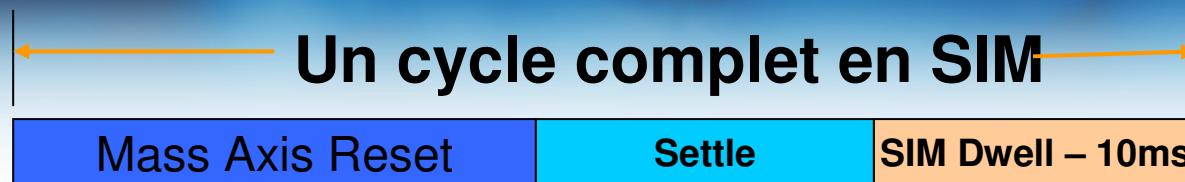
## Performance Electronics



En passant de  $2^3$  à  $2^2$  on double le nombre de scans



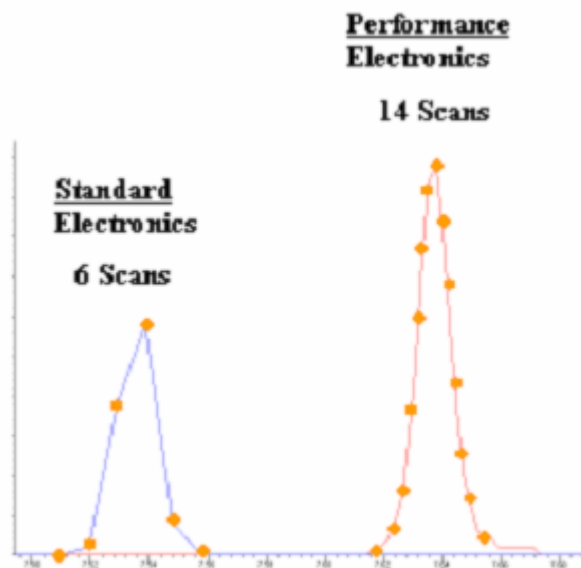
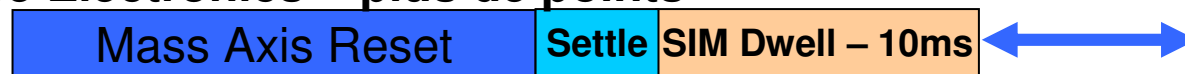
# Les changements...



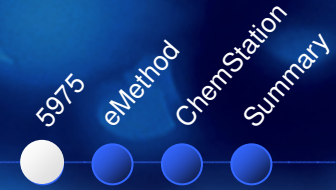
## Standard Electronics

Le cycle est raccourci de 20% = plus de cycles

## Performance Electronics = plus de points



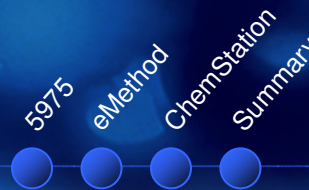
# ***Synchronous SIM/Scan – les points clés***



- ***La nouvelle carte d'acquisition permet une plus grande vitesse d'acquisition en scan***
- ***Le nouvel algorithme du SIM permet de prendre plus de points***
- ***L'option "Synchronous SIM/Scan" peut être implementée sur TOUTE la gamme 5973***
  - ***Upgrades: G1088A +/- G1088B + SW (D.02.00)***



# Exemple

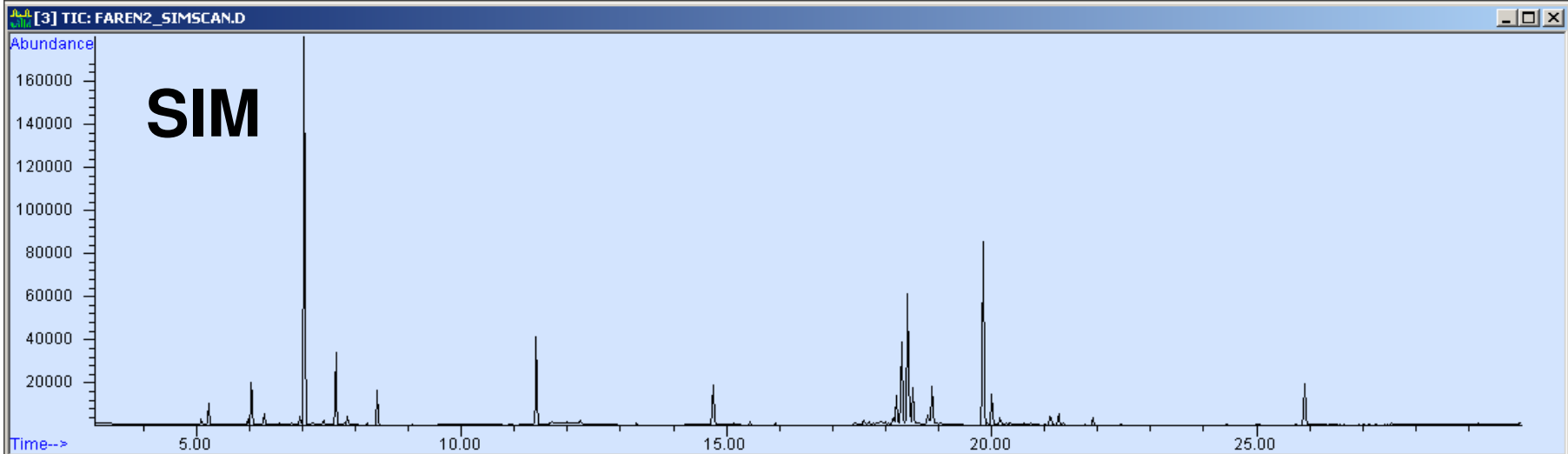
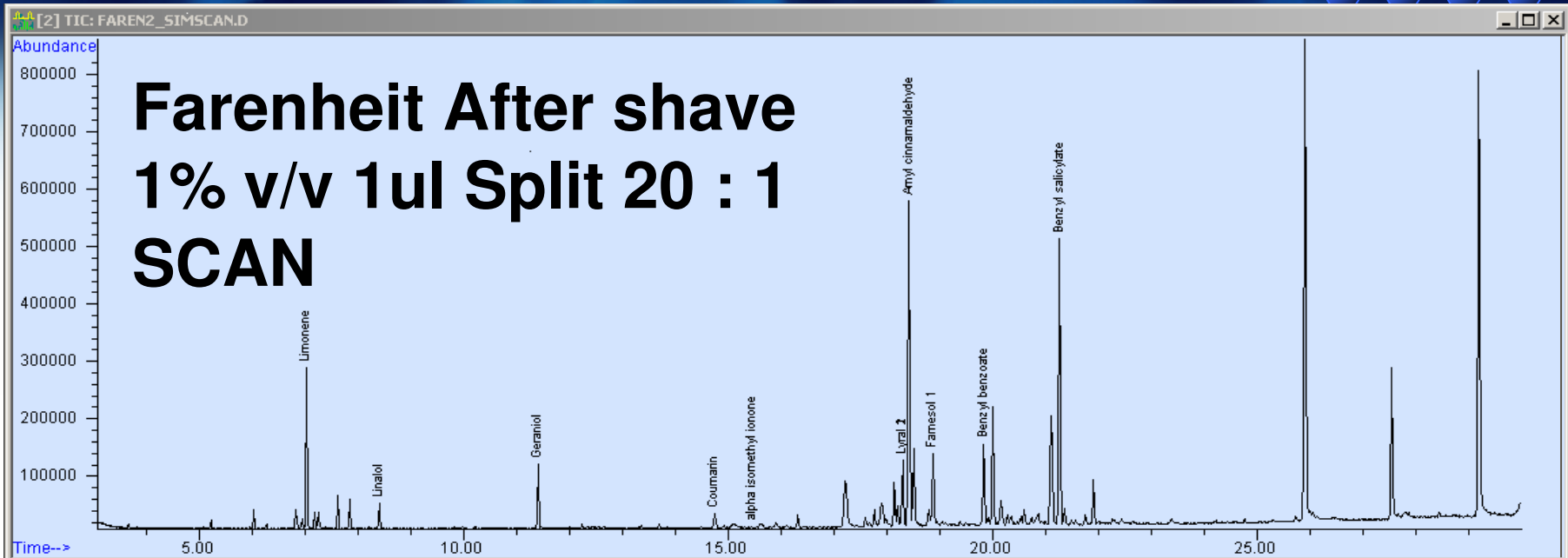


**• Analyse d'allergènes: méthode proposée pour le 5975 inerte, 26 composés cibles en mode SIM/Scan**

- Table de SIM construire avec la fonction AUTOSIM**
- Quantification sur le signal SIM**
- Confirmation sur le signal déconvolué (DRS)**



# Allergènes en SIM/Scan



# Allergènes en SIM/Scan avec le Kit de déconvolution du signal (DRS)

5975  
eMethod  
ChemStation  
Summary

## Match Factors

72 to 98

*Parfait pour la quantification de composés cibles mais aussi pour l'identification d'inconnus:*

- Donnée SIM pour la quantification
- Donnée Scan pour la confirmation

*Le SIM/Scan est donc une alternative à la MS/MS*

- La MS/MS ne permet pas de recherche en bibliothèque

Document - Microsoft Internet Explorer provided by Agilent Technologies, Inc.

File Edit View Favorites Tools Help

Back Forward Stop Home Search Favorites History

Links Customize Links Windows Hotmail WebPlanner Captura ELSA Google

Address C:\MSDCHEM\1\DATA\FAREN2\_SIMSCAN.D\FAREN2\_SIMSCAN.htm

**MSD Deconvolution Report**  
Sample Name: Farenheit After shave 1% 1ul split 20:1  
Data File: C:\MSDCHEM\1\DATA\FAREN2\_SIMSCAN.D  
Date/Time: 06:03:55 PM Wednesday, Apr 20 2005

The NIST library was searched for the components that were found in the AMDIS target library.

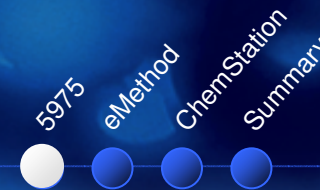
R.T.	Cas #	Compound Name	Agilent SIM QUANT Amount (ng)	Deconvolution process			
				AMDIS SCAN CONFIRMATION Match	R.T. Diff sec.	Reverse Match	Hit Num.
7.038	5989275	Limonene	0.07	98	-2.6	91	1
8.414	78706	Linalol	0.01	96	-3.8	90	1
12.252	111808	Methyl octine carbonate		87	-4.6	87	1
13.305	97530	Eugenol	0	76	-3.8	78	3
14.749	91645	Coumarin	0.01	91	-4.4	89	1
15.441	127515	alpha isomethyl ionone		72	-3.7	75	2
18.204	31906045	Lyril 1	0.03	94	-3.6	90	1
18.308	31906044	Lyril 2	0.03	95	-2.6	90	1
19.841	120514	Benzyl benzoate	0.02	79	-2.3	93	1
21.266	118581	Benzyl salicylate	0				

With courtesy of Chris Sandy and J-F Garnier



Agilent Technologies

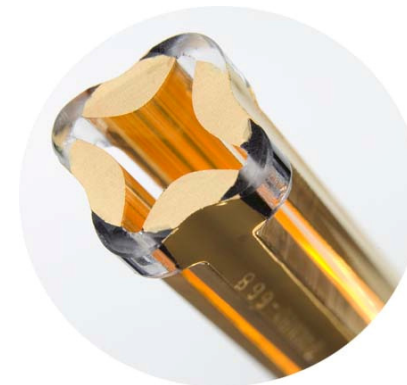
# Les “Plus” de la gamme MSDs



- **Une source “inerte” (meilleure réponse pour les composés dits actifs – 300 °C)**
- **Quadripôle Hyperbolique (résolution de 0.1 amu – stabilité de l’axe des masses de 0.1 amu sur 48 heures)**
- **Quadripôle chauffé (jusqu’à 200 °C)**
- **Un système d’IC unique (supporte l’ammoniaque)**
- **Accès simple à l’ensemble du système (maintenance facile)**



Agilent Technologies





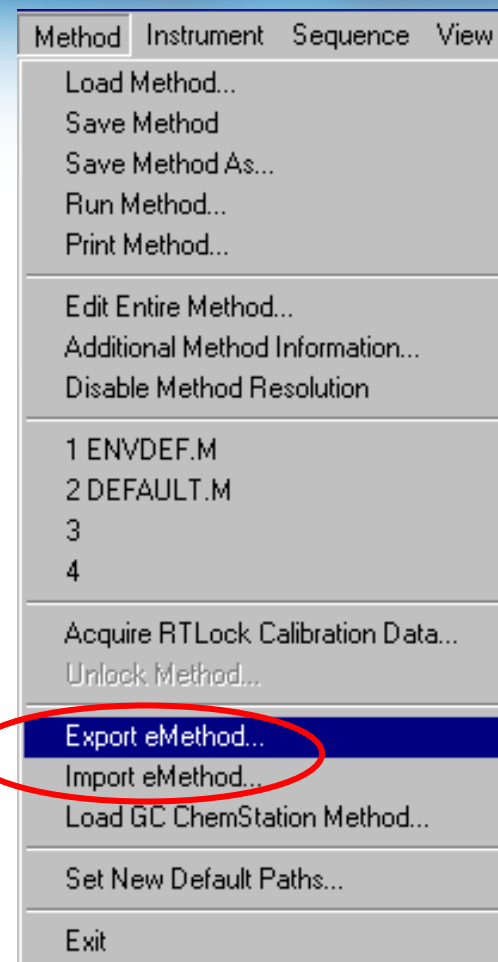
# *Introduction aux eMethods et aux évolutions de la MSD Chemstation*



Agilent Technologies

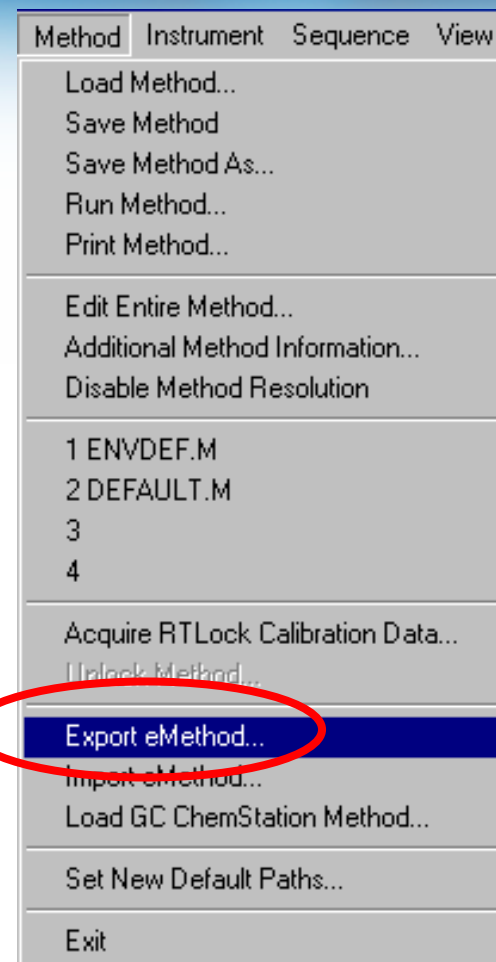
# Que sont les eMethods?

- **eMethods: Electronic methods.**
- **Comprese en un fichier tous les paramètres de la méthode:**
  - Pour les exporter sur un autre 5973
  - Pour les exporter sur un nouveau 5975 inerte

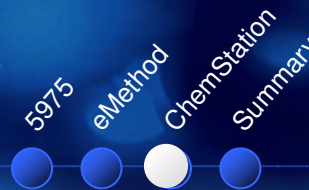


# Les avantages...

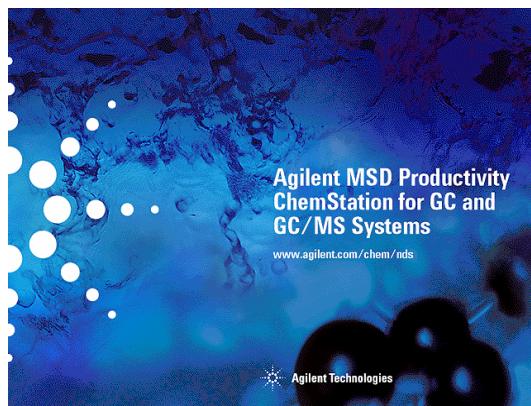
- **Mise en route du système simplifiée**
- **Transfert des méthodes d'un GCMS à autre facilement**
- **Télécharger directement votre méthode à partir du site internet d'Agilent**



# La MSD ChemStation



- **Contrôle deux GCMS**
- **Contrôle deux GC**
- **Retention time locking**
- **Custom reports**
- **eMethods**
- **Quatre configurations**
  - Enhanced mode
  - EnviroQuant
  - DrugQuant
  - Reformulated Gas



**Logiciel GCMS le plus vendu  
dans le monde**



**Agilent Technologies**

# L'instrument control...

CHS /Enhanced - DEFAULT.M / DEFAULT.S

Method Instrument Sequence View Abort Checkout Secured Control Window Help

Instrument Control

Idle Sample Name: 1 Data File: 0103004.d Run Time STOP Print Help Printer

Sequence Method Instrument

GC Status Messages

Oven Temperature: 70  
Inlet-F Temperature: 50  
Column-1 Flow Cal.:  
MS Source: 230  
MS Quad: 150  
Aux-2 Temperature: 280

Total Ion Spectrum

Select print sections Cancelled

# La séquence...

Sample Log Table

Data Path: C:\MSDCHEM\1\DATA Browse... Method Path: C:\msdchem\1\METHODS Browse...

	Type	Vial	Sample	Method / Keyword	Data File	Comment / KeywordString	Sample Amt	Multiplier	
1	Sample	1	Sample 1	DEFAULT			0.00000	1.00000	Nc
2	Sample			DEFAULT			0.00000	1.00000	Nc
3	Sample			DEFAULT			0.00000	1.00000	Nc
4									
5									
6									
7									
8									
9									
10									
11									
12									
13									
14									
15									
16									
17									
18									
19									
20									
21									
22									
23									
24									
25									

Context menu options:  
Copy  
Cut  
Paste  
Insert Row  
Delete Rows  
Fill Column & increment  
Fill Column, NO increment  
Repeat Row & increment  
Repeat Row, NO increment

Sheet1

Read Barcode OK Cancel Help

**Construisez rapidement  
votre séquence en  
quelques clicks de  
souris**

# Une nouvelle barre de navigation

The screenshot displays the 'Enhanced Data Analysis' software interface. The main window title is 'Enhanced Data Analysis - DEFAULT.M / EVALDEMO.D (MS Data: Quantitated Multi Pt., Not Reviewed)'. The menu bar includes 'File', 'Method', 'Chromatogram', 'Spectrum', 'Calibrate', 'Quantitate', 'Tools', 'View', 'Toolbars', and 'Help'. A toolbar with various icons is located below the menu bar. A file browser on the left side shows a directory tree with folders like 'clwb120.d', 'dlwb001.d', 'mlwb010.d', 'slwb001.d', 'tlwb001.d', 'bnalist.m', 'gcdata', 'voadata', 'voalist.m', 'fdwinw', 'GCMSsolution', 'HP', 'I386', 'INFONET', 'MSDChem', and 'evaldemo.d'. The main display area is divided into two panels. The top panel, titled '[2] TIC: evaldemo.d', shows a Total Ion Chromatogram (TIC) with four major peaks labeled at retention times 5.281, 6.431, 7.740, and 9.777. The y-axis is 'Abundance' ranging from 0 to 3,500,000. The x-axis is 'Time-->' ranging from 5.50 to 9.50. The bottom panel, titled '[1] Scan 177 (6.439 min): evaldemo.d', shows a mass spectrum for the peak at 6.439 minutes. The y-axis is 'Abundance' ranging from 0 to 700,000. The x-axis is 'm/z-->' ranging from 20 to 160. A red arrow points from the text 'Barre de navigation' to the file browser on the left.

Ready NUM SCRL

# L'intégration...

The screenshot displays the 'Enhanced Data Analysis' software interface. The main window shows a Total Ion Chromatogram (TIC) for 'evaldemo.d' with peaks labeled at retention times 5.281, 6.431, 7.740, and 9.777. A red circle highlights the 'Integrate' icon in the toolbar, with a red arrow pointing to the peak at 6.431 minutes. An 'Edit Integration Events' dialog box is open, showing a table of integration parameters for the selected peak.

**Enhanced Data Analysis - DEFAULT.M / EVALDEMO.D (MS Data: Quantitated Multi Pt., Not Reviewed)**

File Method Chromatogram Spectrum Calibrate Quantitate Tools View Toolbars Help

[2] TIC: evaldemo.d

Abundance

3500000  
3000000  
2500000  
2000000  
1500000  
1000000  
500000

5.281 6.431 7.740 9.777

Time--> 5.50 6.00 6.50 7.00 7.50 8.00 8.50 9.00 9.50

[1] Scan 177 (6.439 min): evaldemo.d

Abundance

700000  
600000  
500000  
400000  
300000  
200000  
100000  
0

m/z--> 20 30 40 50 60 70

Specify integration parameters for MS signal (autoint1.e)

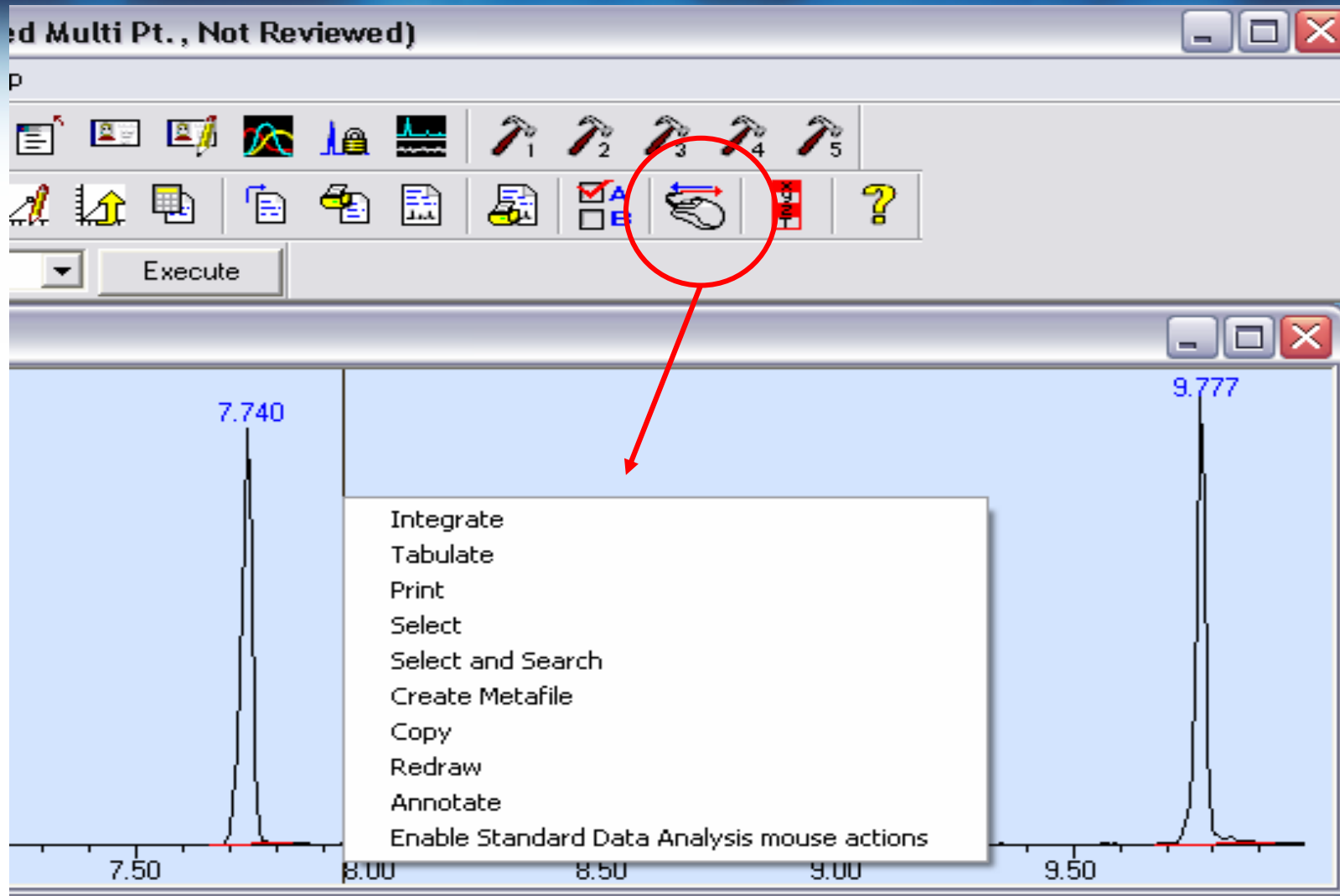
**Edit Integration Events**

Possible Events	Event	Value	Time
	Initial Area Reject	0	Initial

Integrator Event Name	Value	Time
Initial Area Reject	0	Initial
Initial Peak Width	0.019	Initial
Shoulder Detection	OFF	Initial
Initial Threshold	19.0	Initial

Apply Load Save Enter Delete OK Cancel Help

# De nouvelles fonctions souris...



# Une nouvelle table de SIM

Enhanced Data Analysis - DEFAULT.M / EVALDEMO.D (MS Data: Quantitated Multi Pt., Not Reviewed)

File Method Chromatogram Spectrum Calibrate Quantitate Tools View Toolbars Help

[2] TIC: evaldemo.d

Abundance

5.281

Time--> 5.50

**Sim Group Table**

	Start Time (min)	Default Dwell (ms)	Calc Cycles/Sec	Ion1	Ion2	Ion3	Ion4	Ion5	Ion6
1	0	100	8.3 74.1						
2									
3									
4									
5									
6									
7									
8									
9									
10									
11									
12									
13									

Number of SIM Groups: 1

Group # Ions

Fill down using increment 0

OK Cancel

# Le nouveau QEdit ...

Ligne de base

Rapports

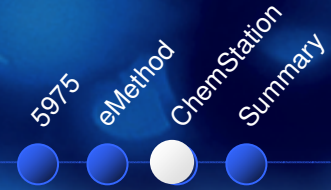
The screenshot displays the QEdit software interface for Enhanced Data Analysis. The main window shows a chromatogram with a prominent peak at 5.277 minutes. A context menu is open over the peak, with the option 'Show baseline in separate window' highlighted. A red arrow points from this menu item to a separate window showing the Total Ion Chromatogram (TIC) with the peak at 5.277 minutes clearly visible against a flat baseline.

Below the main window, a file tree shows the project structure, including folders for 'DATA', 'METHODS', and 'sequence'. A smaller window shows a mass spectrum for Scan 32 (5.278 min) with peaks at 43, 57, 71, and 85. Another window displays a table of peak data:

Ion	Exp%	Act%
57.05	100	100
71.15	66.90	65.81
43.05	59.20	57.98

On the left side, a 'Quick Qedit' panel is visible, with the 'Generate Report...' option highlighted. A red arrow points from this option to the 'Rapports' text.

# *Le Choix des bibliothèques*



- ***NIST05***

***Nouveau***

- ***Wiley 7<sup>th</sup> ed***

- ***Stan pesticide***

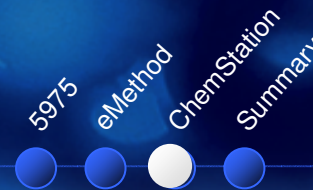
- ***Pfleger/Maurer/Weber MS Drug Library, 3<sup>rd</sup> ed***

- ***NIST Chemical Structures Library***



**Agilent Technologies**

# ***Autres options...***



- ***Deconvolution Reporting Software***
- ***Security ChemStation (21 CFR part 11)***
- ***Headspace software***
- ***RTL Pesticide Database : FAMES, Flavors, Volatiles Organics, Organotin derivatives, PCB congeners, Forensic toxicology***



# Résumé

- ***Des performances accrues et une fiabilité maintenue***
- ***Les nouvelles performances***
  - eMethods
  - AutoSIM et SIM/scan
  - Haute gamme de masse
  - CI automatisée
  - Sensibilité accrue
  - Évolutions logiciels



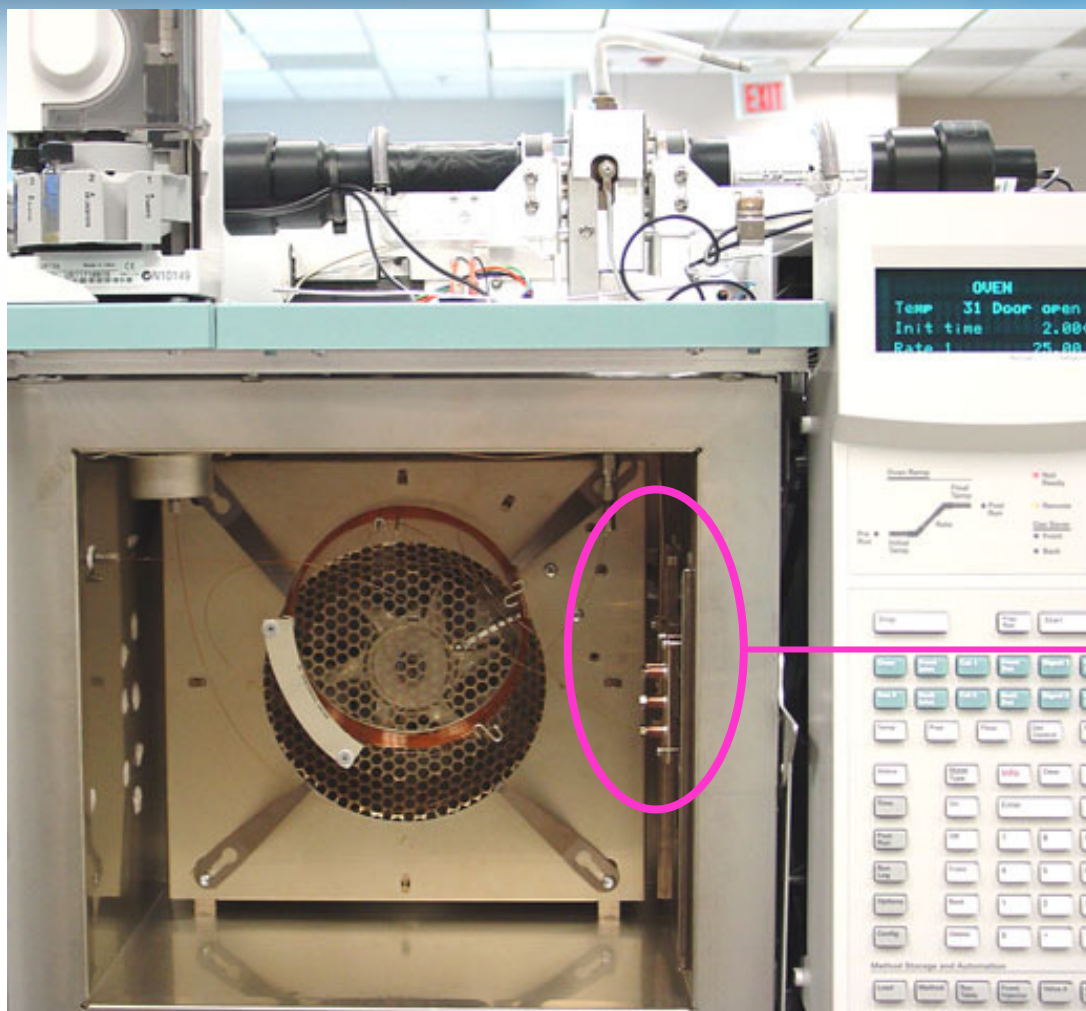


# *Les nouvelles technologies microfluidiques*



Agilent Technologies

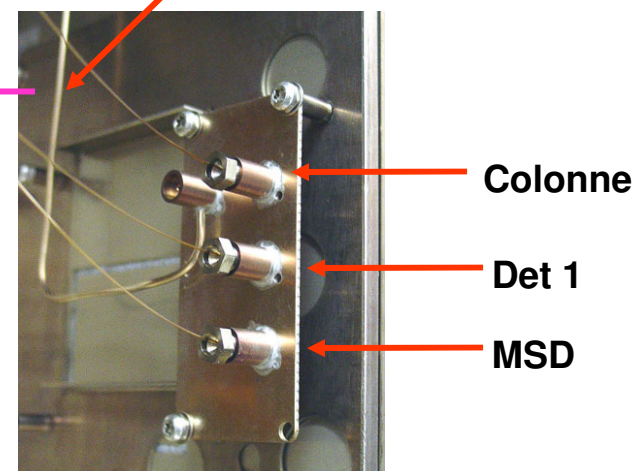
# Le “Microfluidic Splitter”



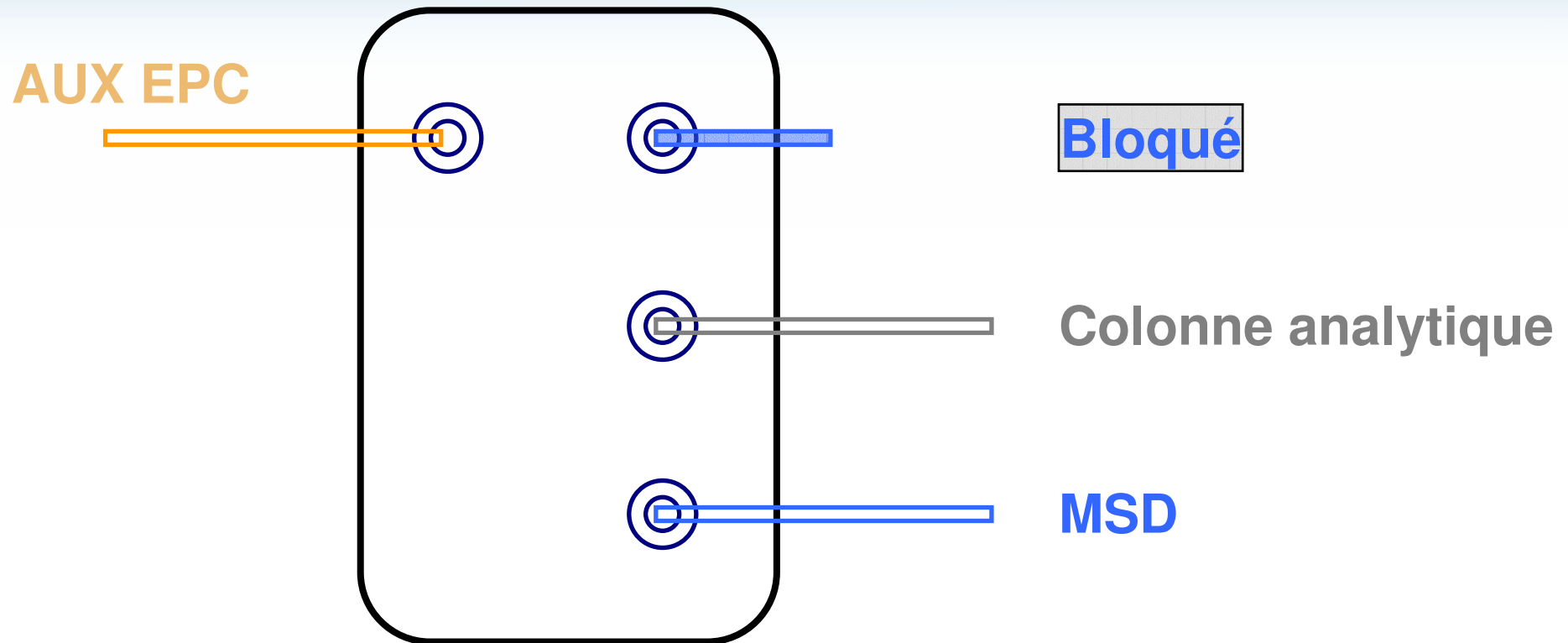
Le système microfluidique est totalement désactivé et supporte des température jusqu'à 350 C.

Utilise des ferrules métalliques pour supprimer les fuites

Makeup  
Aux EPC

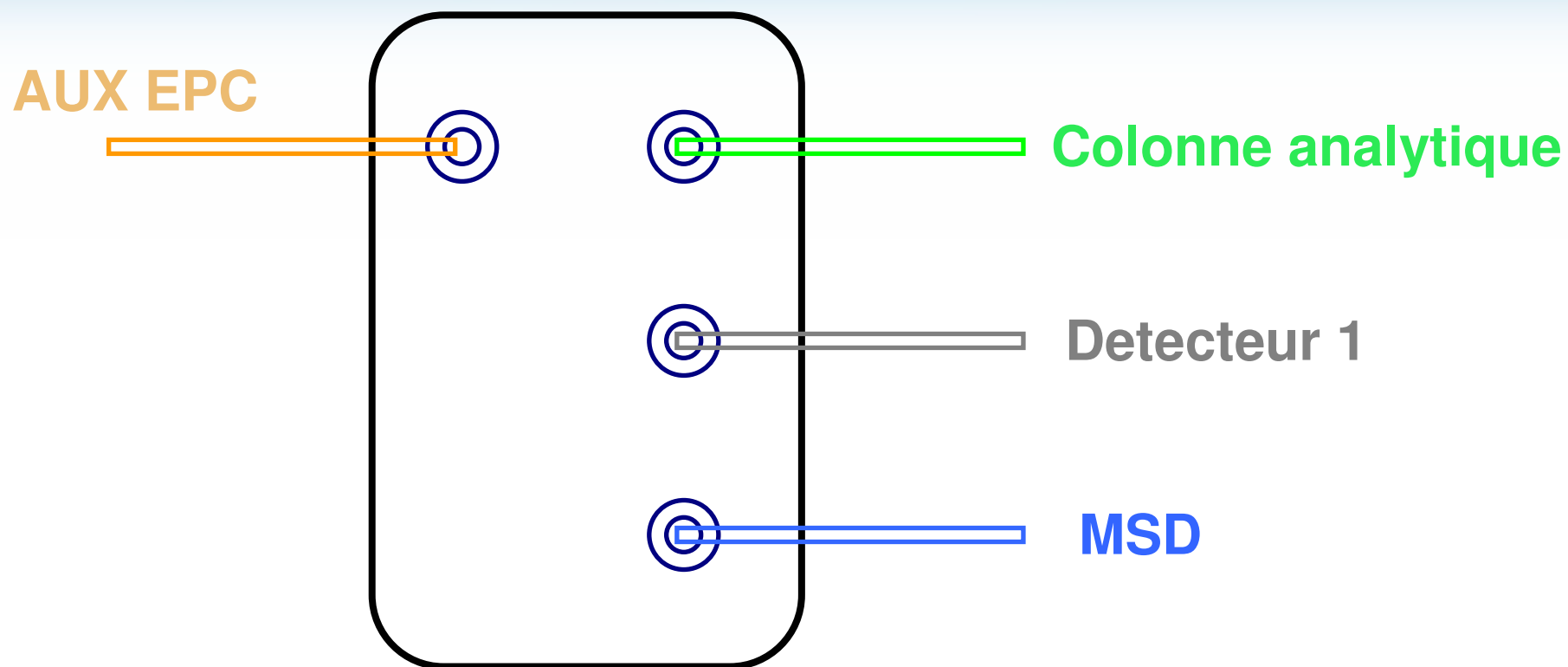


# Mode d'opération \* (1) une seule colonne



- \* Le débit de l'Aux EPC permet de changer de colonne sans Vent
- \* Le débit de l'Aux EPC permet de plus de réaliser la maintenance de l'injecteur sans faire rentrer d'air dans la colonne

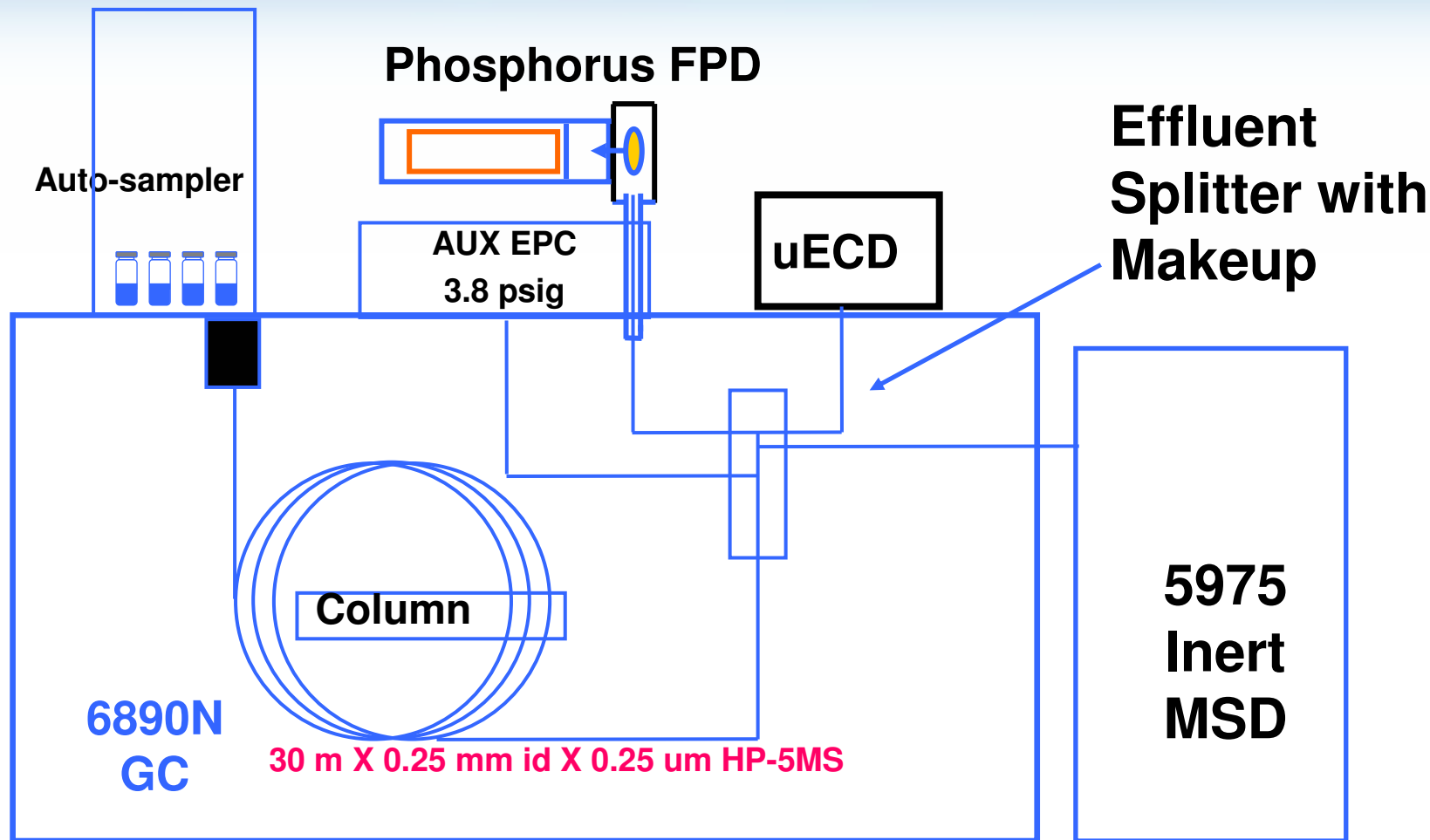
# Mode d'opération (2) Splitter



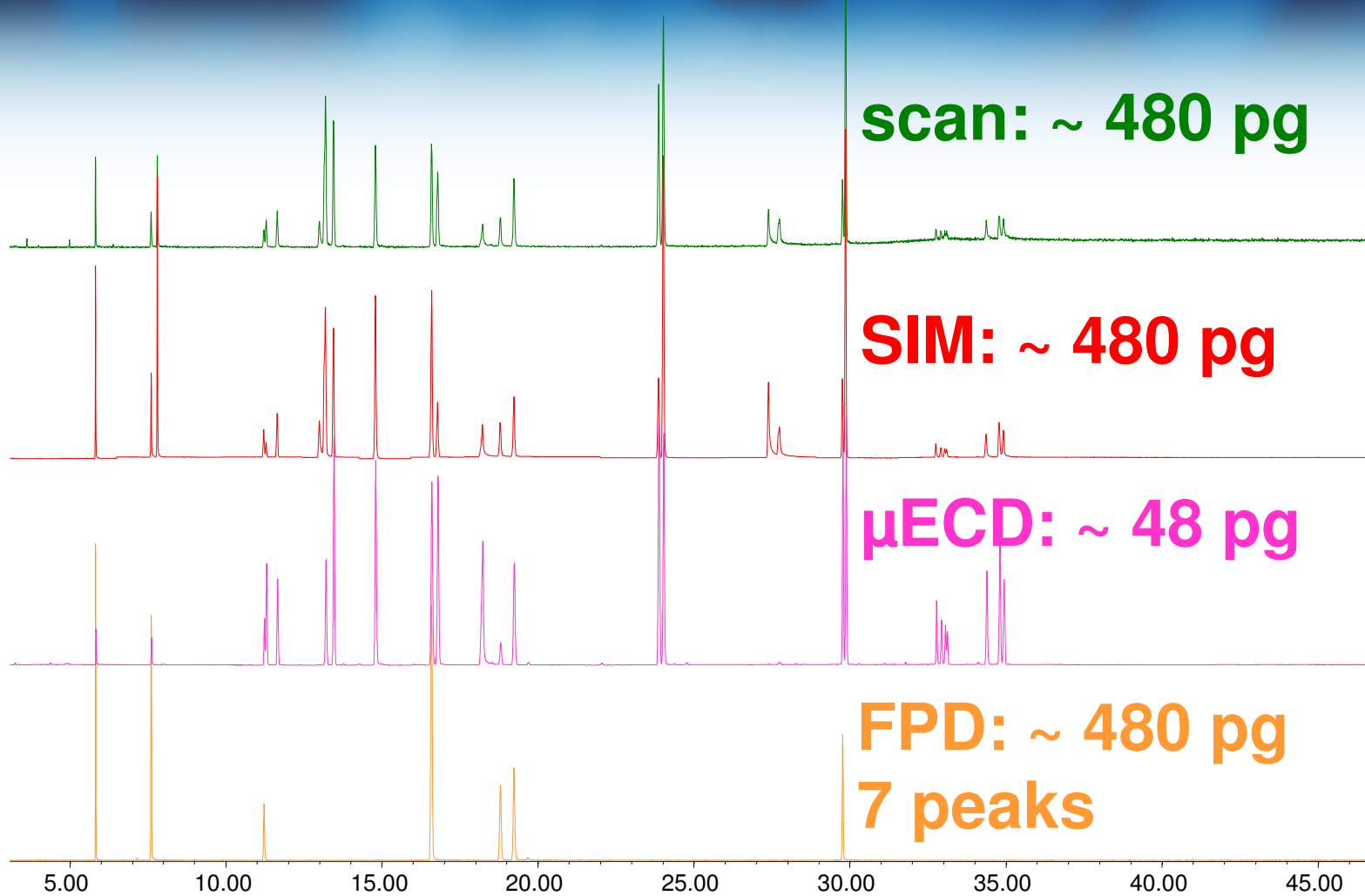
- \* Le débit de l'Aux EPC permet de changer de colonne sans Vent
- \* Le débit de l'Aux EPC permet de plus de réaliser la maintenance de l'injecteur sans faire rentrer d'air dans la colonne

# Exemple: analyse de pesticides

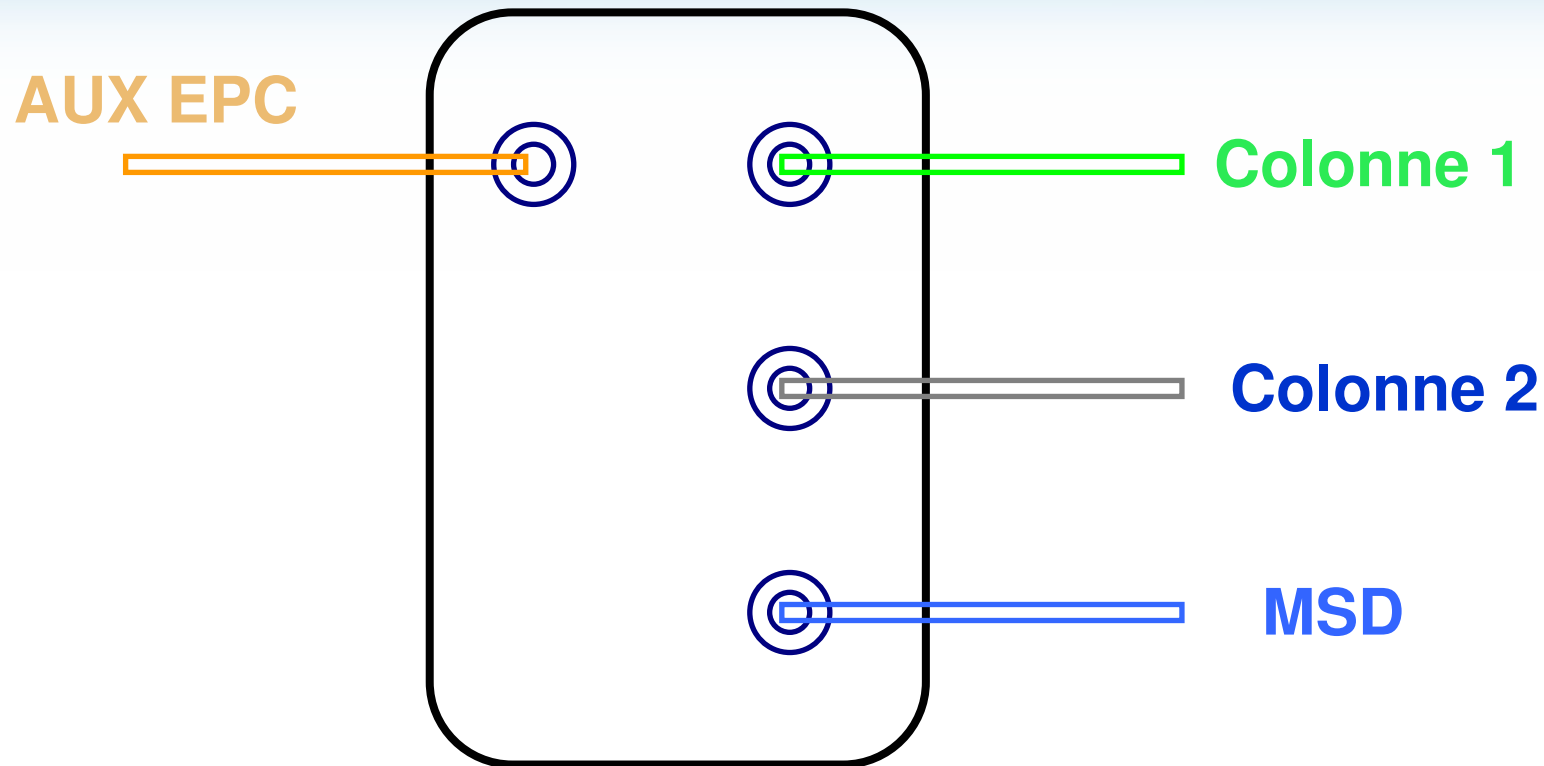
1X method with 10:10:1 split FPD:MSD:ECD



# Signaux: 5975 SIM/scan + 2 détecteurs spécifiques

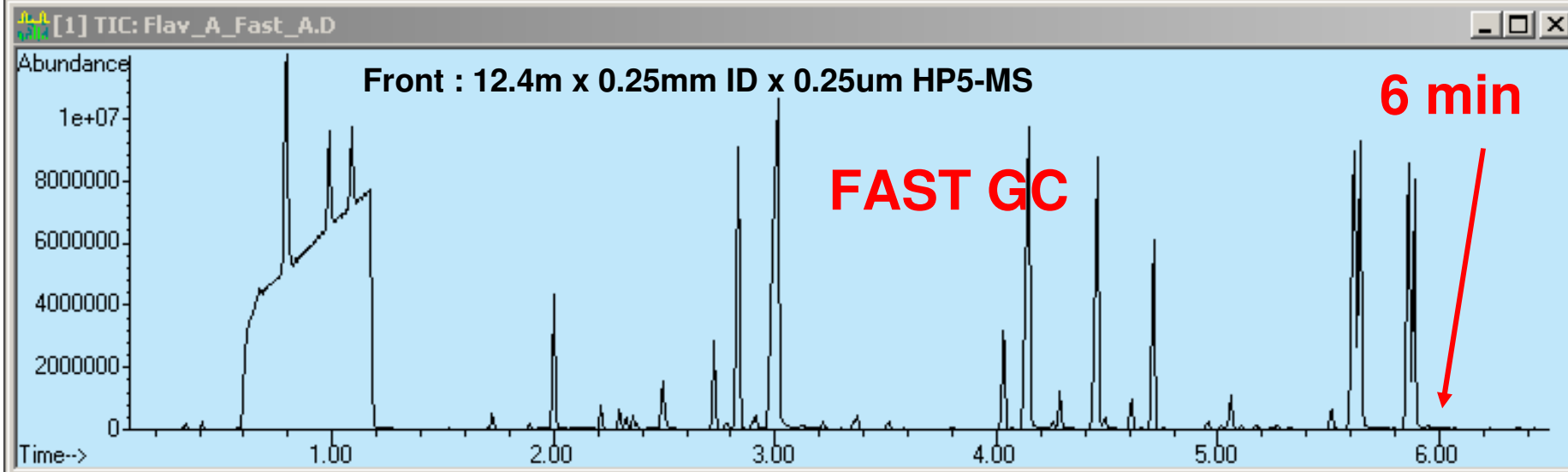
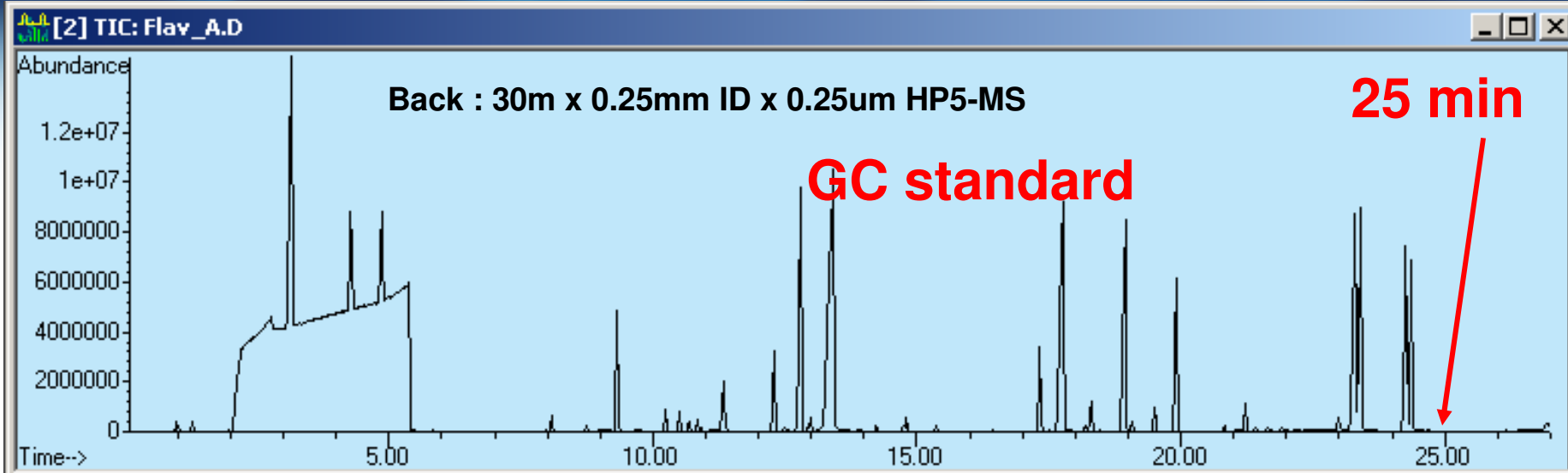


# Mode d'opération: (3) Deux colonnes



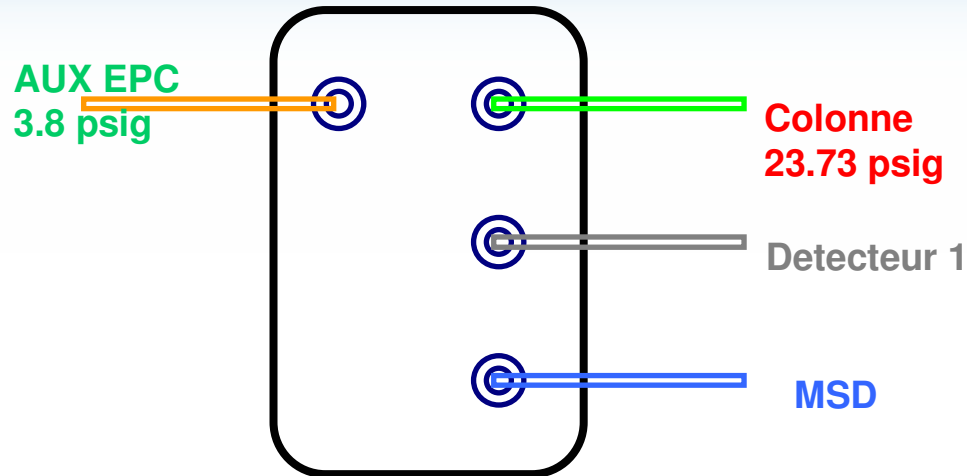
- \* Le débit de l'Aux EPC permet de changer de colonne sans Vent
- \* Le débit de l'Aux EPC permet de plus de réaliser la maintenance de l'injecteur sans faire rentrer d'air dans la colonne

# Configuration avec 2 colonnes

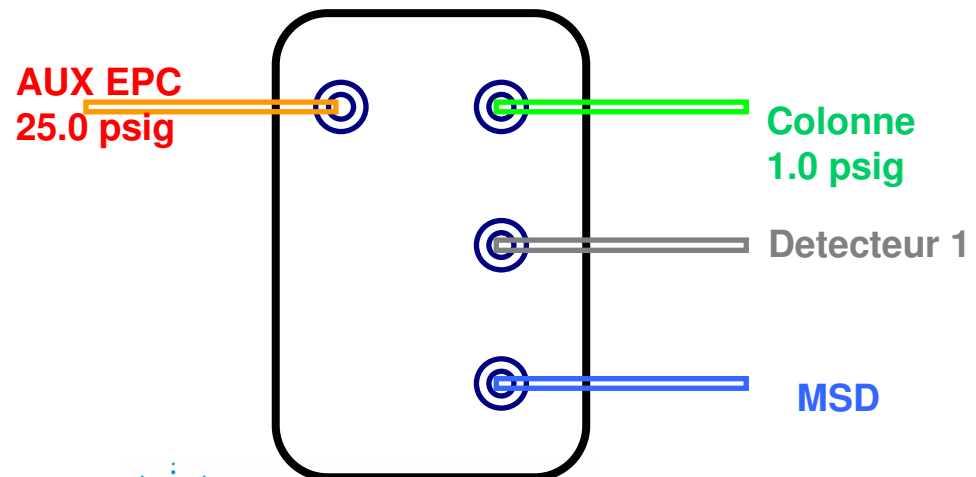


# Mode d'opération \* (4) Backflush

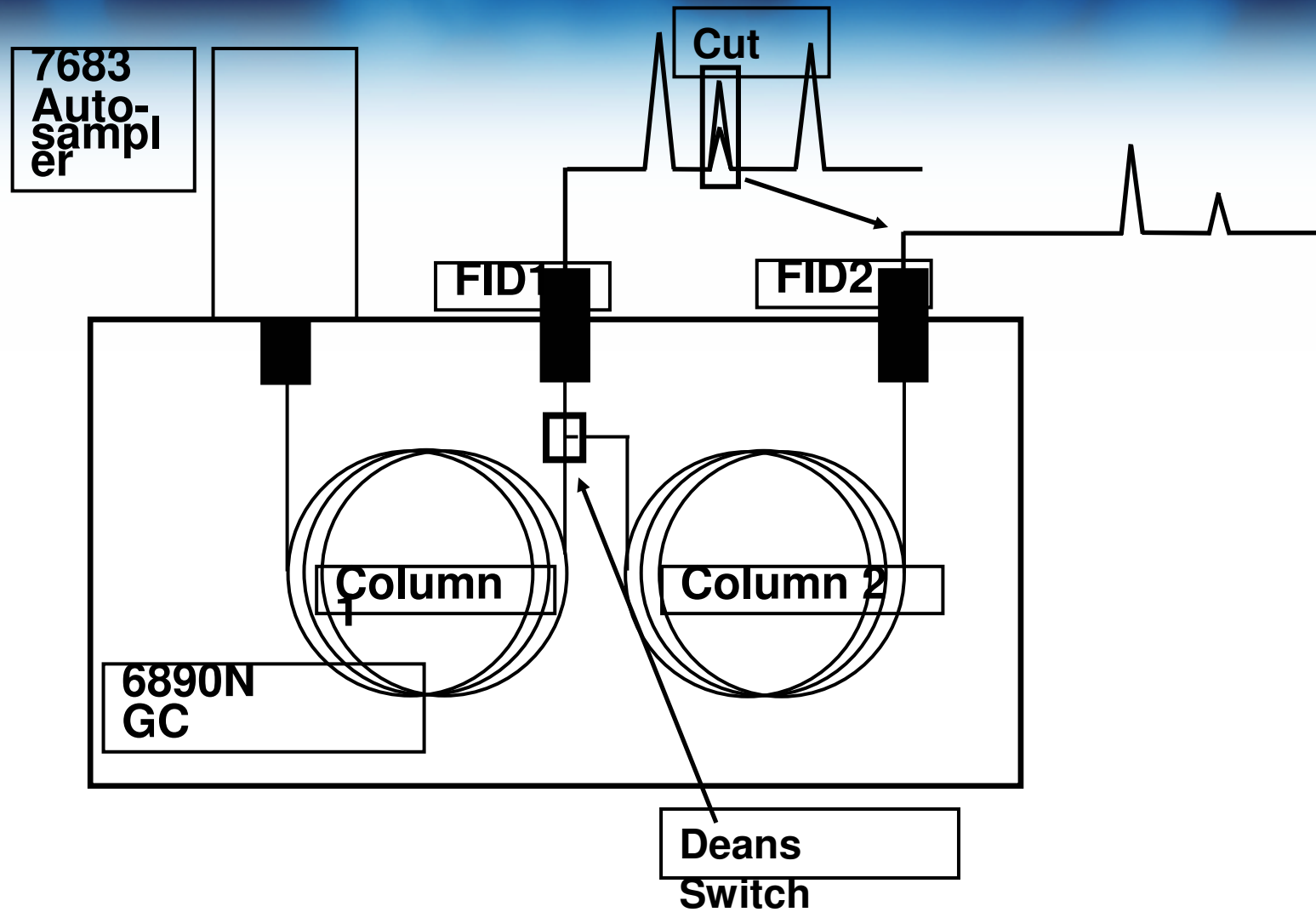
## Mode Splitter – acquisition des données



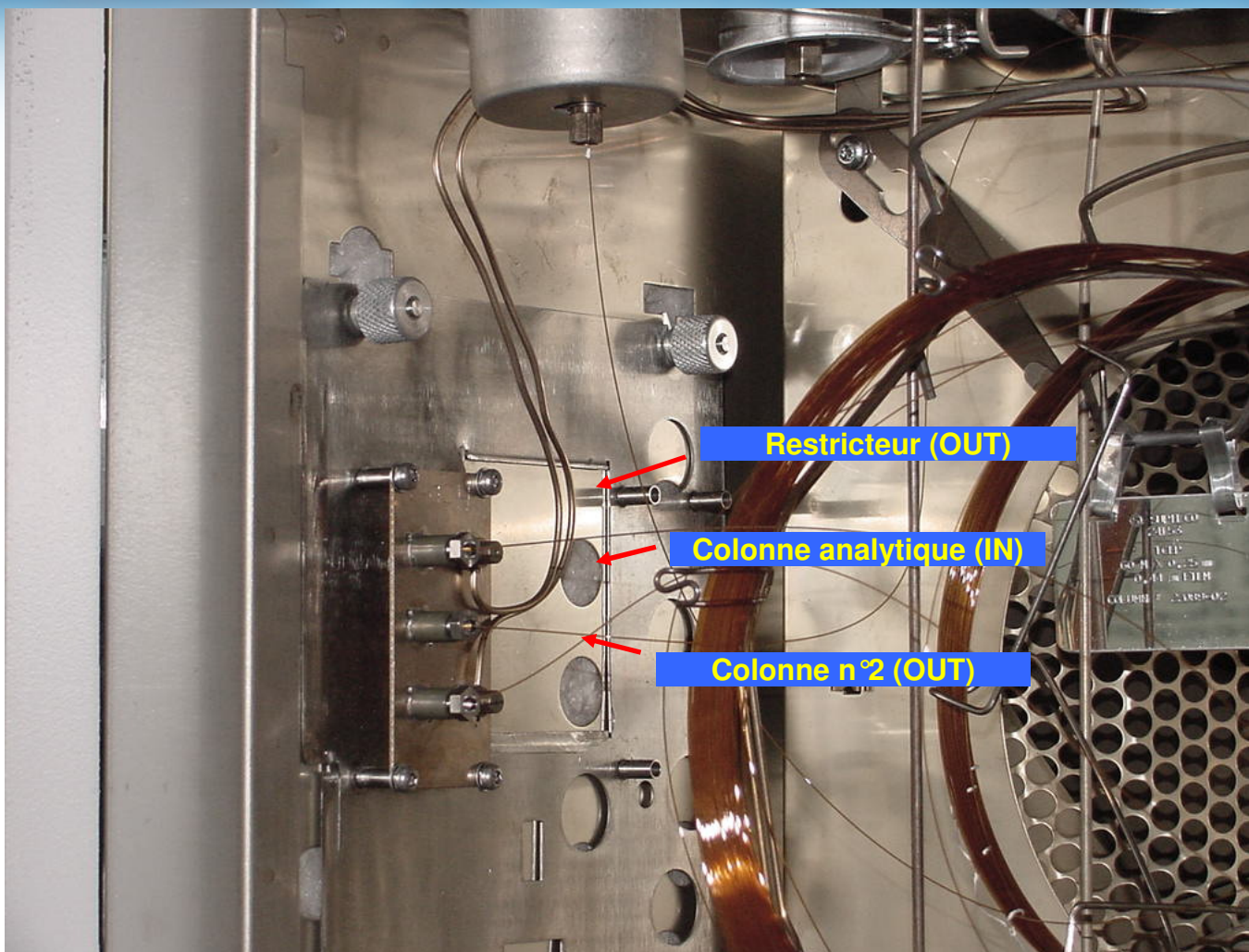
## Mode Backflush



# Le "Heart-Cutting" ou GC 2D



# Le Microfluidique Deans Switch



# Le calculateur

## • Pression/géométrie de colonne

Agilent Technologies Dean Switch Calculator

Method: 4,6-DMDBT in Diesel

Primary Detector Outlet Pressure: 14.6960 psi

Primary Detector: FID

Restrictor Flow: 3.000 ml/min

Restrictor Length: 0.768 m

Restrictor Diameter: 0.100 mm

Restrictor Holdup Time: 0.0036 min

Oven Temperature: 100 degC

Carrier Gas: Helium

Inlet Pressure: 75.100 psi

Pressure Units: psi

Inlet Split: Split

Desired Split Ratio: 10

Set Split Flow: 20.000 ml/min

Primary Flow: 2.000 ml/min

Primary Column Length: 15.00 m

Primary Column Diameter: 0.250 mm

Primary Column Type: HP-5, 0.25 um df

Shunt Restrictor Length: 0.500 m

Shunt Restrictor Diameter: 0.250 mm

Equivalent Restrictor Length: 1.000 m

Equivalent Restrictor Diameter: 0.250 mm

Secondary Detector Outlet Pressure: 14.6960 psi

Secondary Detector: FID

Secondary Flow: 3.000 ml/min

Secondary Column Length: 30.00 m

Secondary Column Diameter: 0.250 mm

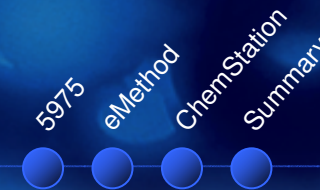
Secondary Column Type: Innowax, 0.25 um df

PCM: 32.23 psi

Test Release 5

Comment: Method to measure 4,6-dimethylbenzothiophene in diesel

# Wrap-up E-Seminar Questions



Thank you for attending today's Agilent e-Seminar.

Our e-Seminar schedule is expanding regularly.

Please check our web site frequently at:

**[www.agilent.com/chem](http://www.agilent.com/chem)**

If you would like to receive regular updates please update your  
account information under

**Stay current with e-notes**



Agilent Technologies