

## Agilent ChemStation 版本

### 适用于 InfinityLab LC/MSD 系列和 6100 系列 LC/MS

#### 快速入门指南

从哪里获得更多信息	1
启动 ChemStation 版本程序	3
配置图	4
ChemStation 版本视图	5
基本操作	17
解卷积	22
操作提示	24
故障排除提示	26

在有新文件替换之前，本手册适用于 OpenLab CDS ChemStation 版本软件版本 C.01.08 及更高版本。

## 从哪里获得更多信息

**联机帮助** 使用联机帮助可深入了解超越本快速入门指南所述范围的信息。联机帮助可通过下列方式显示：

- 单击工具栏上的**帮助**按钮。
- 从**帮助**菜单选择**帮助主题**。
- 在大多数对话框中单击**帮助**按钮可以显示特定任务的帮助。



Agilent Technologies

## C.01.08 的新增功能

**用户指南** 除了此快速入门指南以外，还可以在安装后从资源应用程序中获取以下指南。

- 《Agilent ChemStation 版本入门指南》
- 《Agilent InfinityLab LC/MSD 系列和 6100 系列 LC/MS 概念指南》
- 《Agilent InfinityLab LC/MSD 系列系统安装指南》
- 《Agilent InfinityLab LC/MSD 系列和 6100 系列 LC/MS 维护指南》

安装后，打开 **LC-MSD 资源** 应用程序可访问 MSD 特定的用户指南和培训材料。单击 **应用程序启动 > 所有程序 > Agilent Technologies > OpenLAB CDS 文档** 可访问您的系统对应的其他用户指南。

**入门** 从资源应用程序中，可获取用于了解质量选择检测器的自定进度培训模块和 ChemStation 版本软件。

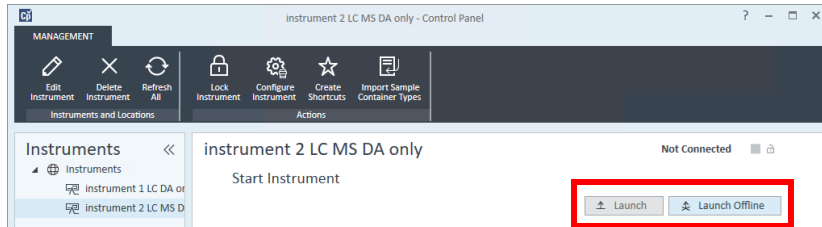
## C.01.08 的新增功能

- 现在可通过“控制面板”启动 ChemStation 版本程序。
- 不再支持 Agilent I/O Libraries 套件。必须从 Keysight Technologies 处获得 I/O Libraries 套件。
- 支持 InfinityLab LC/MSD 系列仪器。
- 改进的用户界面。
- 增强了对 LC/MSD 数据的智能报告支持。

## 启动 ChemStation 版本程序



- 1 单击桌面上的**控制面板**图标以打开**控制面板**。
- 2 单击**启动**。

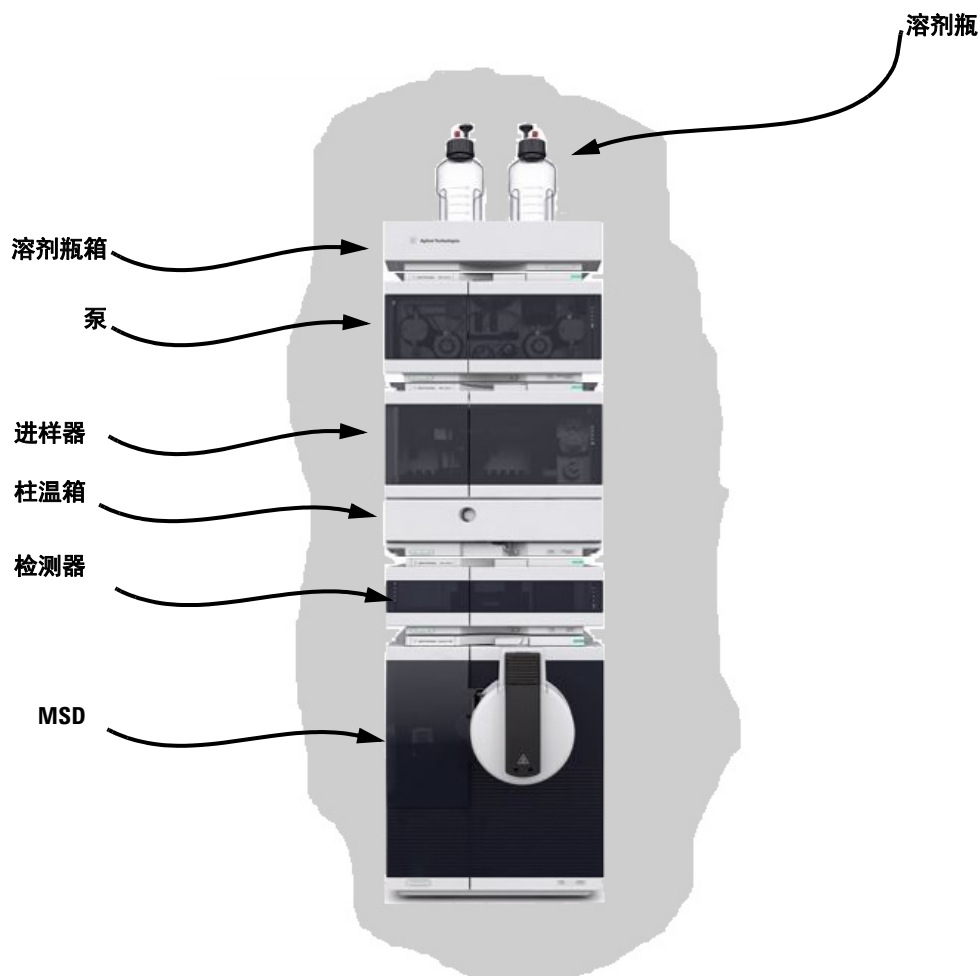


## 配置图

配备 1100/1200/1260/1290 系列 LC 的 InfinityLab LC/MSD 系列

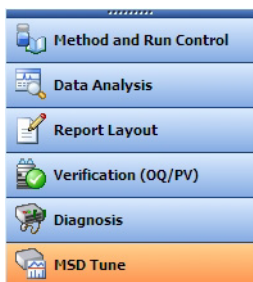
## 配置图

配备 1100/1200/1260/1290 系列 LC 的 InfinityLab LC/MSD 系列



## ChemStation 版本视图

ChemStation 版本软件包含多个视图。单击屏幕左下角的其中一个视图按钮或从视图菜单可以切换到其他视图。



**“方法和运行控制”视图** 用于设置方法并调整仪器参数，以便一次性或按自动序列进样和采集数据。详细信息请参阅下一页。

**“数据分析”视图** 用于对色谱和光谱执行各种数据处理任务，例如积分、定量、检测峰纯度、解卷积和生成报告。有关详细信息，请参见第 9 页。

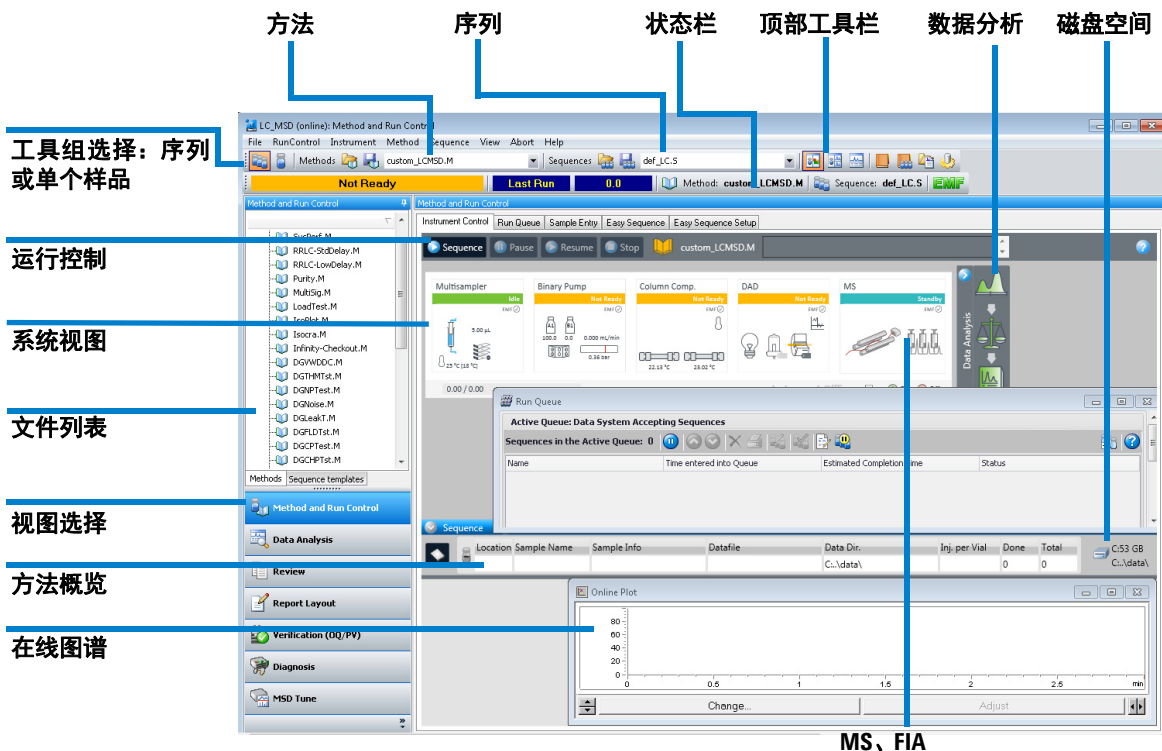
**“报告版面”视图** 用于设计自定义的报告模板，以呈现化学工作站所产生的数据。有关详细信息，请参见第 12 页。

**“认证 (OQ/PV)”视图** 供 Agilent 服务工程师用来测定系统是否按可预计的方式运行。此视图有助于遵循优良实验室规范 (GLP)，某些政府机构可能会做如此要求。有关详细信息，请参见第 13 页。

**“诊断”视图** 用于运行测试，以诊断仪器问题并获取解决这些问题的信息。早期维护预报 (EMF) 功能可以在问题发生前提醒您对系统进行维护。有关详细信息，请参见第 15 页。

**“MSD 调谐”视图** 可以在此视图中自动校正 MSD，也可以手动设置特定类型分子的 MS 参数。有关详细信息，请参见第 16 页。

## “方法和运行控制” 视图



### 注意

“方法和运行控制”的用户界面可在安装过程中以两种方法配置。有关安装和配置的信息，请参见《Agilent InfinityLab LC/MSD 系列系统安装指南》。

如果您的仪器配置为经典用户界面，请参见 ChemStation 联机帮助和资源应用程序上的以下手册：

- 快速入门指南
- 入门指南
- 概念指南

状态和运行工具  
栏：“仪器控  
制”选项卡

右键单击“方法”图标可查看以下命令：  
“运行时选项表”、“方法信息”、“编辑完整方法”、“方法审计跟踪”、“打印方法”和“帮助”。



系统视图

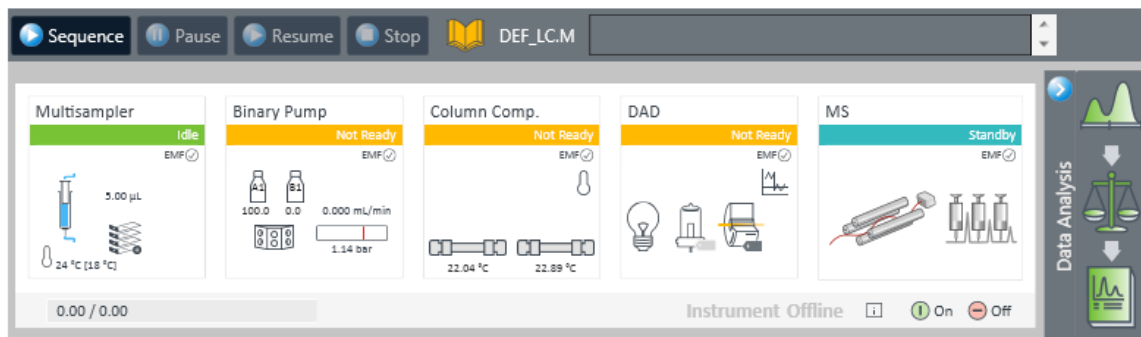
系统视图的每个图标都表示系统中的一个组件或模块。如果要编辑方法参数或打开特定组件的联机帮助，请单击图标。

进样器

泵和溶剂

色谱柱

检测器

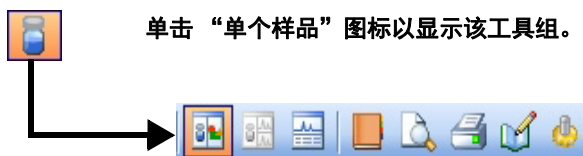


## ChemStation 版本视图

### “方法和运行控制” 视图

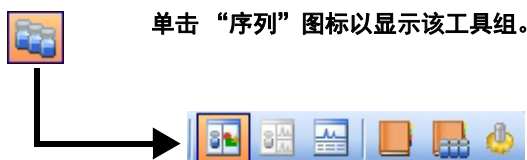
#### 单个样品 工具组

这一工具组用于处理方法并对单个样品进行分析。将光标移至按钮上方可以查看相关说明。



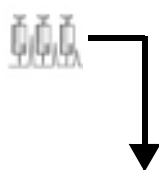
#### 序列 工具组

这一工具组可用于对序列进行处理并对多个样品进行自动分析。将光标移至按钮上方可以查看相关说明。



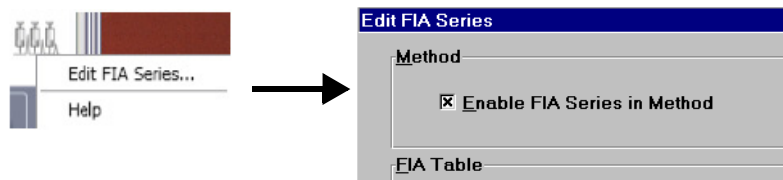
#### 流动注射 分析 (FIA)

此工具组可用于将多个样品不经过色谱柱直接注入检测器。结果会发送到单个数据文件。FIA 可以用于方法开发或用于不需要色谱分离的应用。



要从系统视图启用 FIA:

- 单击 FIA 图标。
- 选择编辑 FIA 系列。
- 选中在方法中启用 FIA 系列选项并编辑“FIA 表”。



## “数据分析”视图

导航工具

光标工具

文件列表

工具组选择

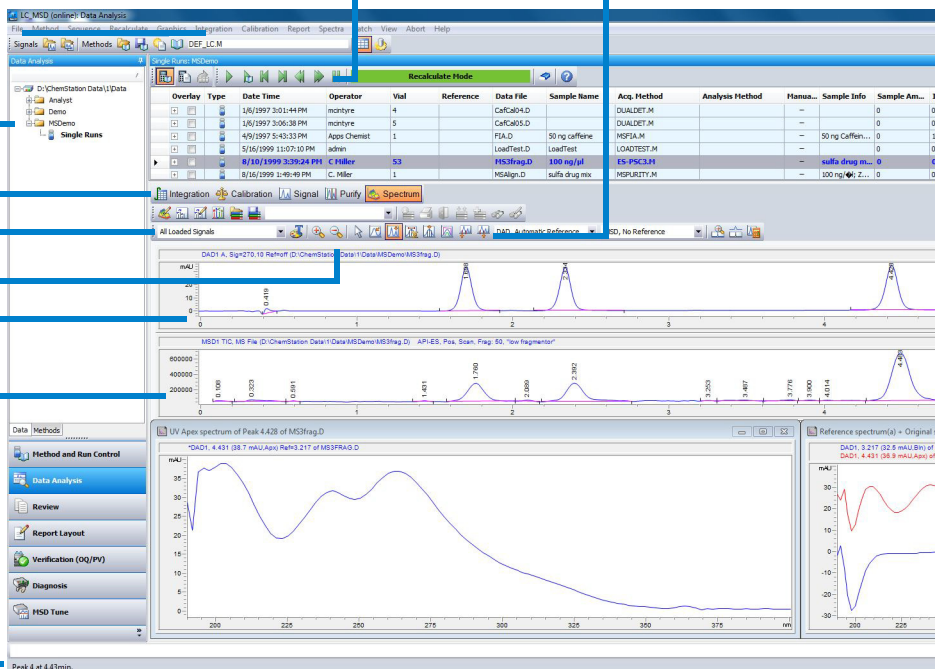
信号视图选择

显示图形工具

DAD 信号

LC/MS 信号

命令行



“数据分析”视图中可用的各个工具组在下面几页介绍。将光标移至按钮上方可查看相关说明。

## ChemStation 版本视图

### “数据分析”视图

**常用工具组** 这一工具组始终显示在“数据分析”视图中。



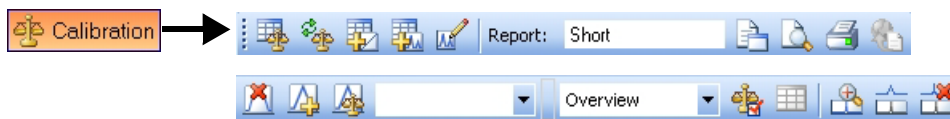
**图形工具组** 用于处理图形显示。



**积分工具组** 用于对色谱图执行积分和报告任务。



**校正工具组** 用于定量时执行校正任务。



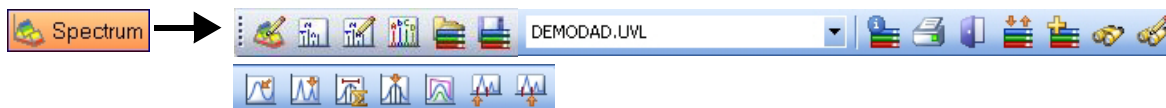
**信号工具组** 用于以图形方式处理 UV 或 MS 信号。



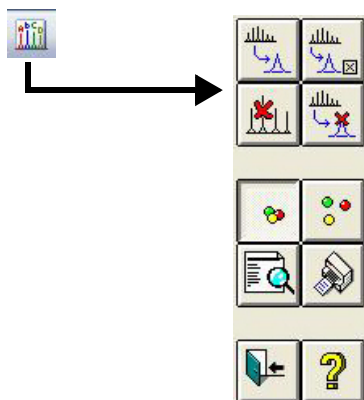
**纯度工具组** 用于以图形方式处理纯度数据。



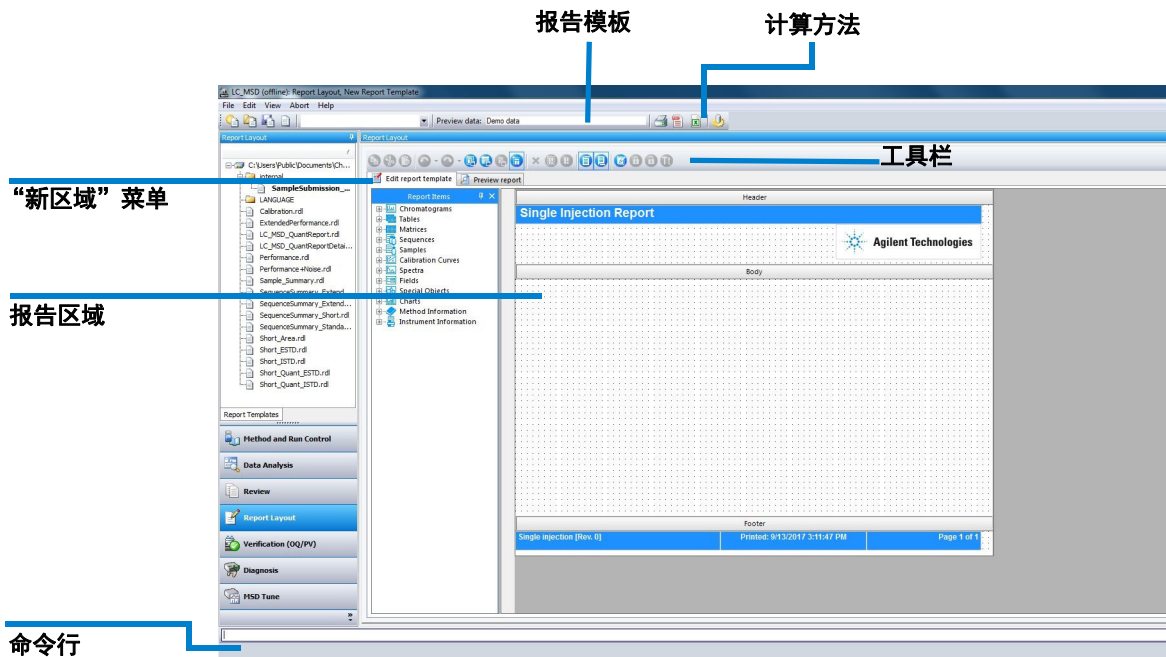
**光谱工具组** 用于执行光谱处理任务。



**解卷积工具组** 用于将质谱从多电荷离子转换为计算分子量。

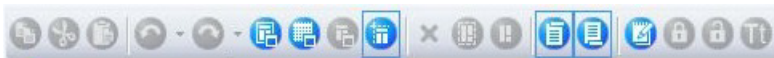


## “报告版面” 视图



### 报告版面

**工具组** 这一工具组显示在“报告版面”视图中。将光标移至按钮上方可以查看相关说明。



#### 提示

- 根据联机帮助中的说明编辑或创建报告版面。
- 要测试报告版面，可以从下拉列表框中选择一种计算方法，以定义结果的计算方式。
- 调用数据文件。结果会调用到使用选定计算方法的报告模板中。
- 选择文件 / 添加到报告版面，将完成的报告模板添加到可用的报告版面列表。现在，您便可以在方法中使用自定义的报告。

## “认证 (OQ/PV)” 视图



Agilent 服务工程师可以利用“认证 (OQ/PV)”视图，根据预定义的性能标准来测试分析仪器和化学工作站软件是否运行正常。

**操作验证 (OQ)** “操作验证”是指设备相关的系统或子系统，按计划在整个代表性或预期的操作范围内执行的认证（有记录）。

## ChemStation 版本视图

### “认证 (OQ/PV)” 视图

**性能认证 (PV)** “性能认证”是指处理以及（或）所有与处理相关的系统，按计划在所有预期的操作范围内执行的认证（有记录）。

**系统视图** 系统视图的每个图标都表示系统中的一个组件或模块。

**认证工具栏** 从视图菜单选择**显示顶部工具栏**，便会显示“认证”工具栏。将光标移至按钮上方可以查看相关说明。



**可用测试** 化学工作站软件附带以下认证测试，可供 Agilent 服务工程师使用。有关这些测试的详细信息，请参见联机帮助。

- VWD 波长准确度
- 强度
- 钬
- 温度准确度
- 噪音、流量和温度
- DAD 波长准确度
- 进样器精度
- 检测器线性 / 交叉污染
- 进样器线性
- 梯度组成

## “诊断”视图

**任务选择菜单**

**仪器面板**

**变量显示**

**视图选择**

**命令行**

**症状**

**可能的原因**

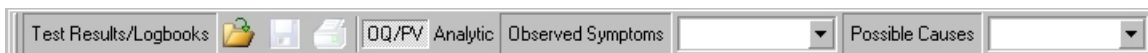
**原因信息簿**

MSD Generic Information

Product No.	66136A	Serial No.	US50650497
P/N Rev. SerialCard	3.02.46	MSD On Time	0.00 h
Manufacturing Date	03/10/2005	Instrument Button	Show
LAN Address	192.168.254.12	Source Button	Show

这一视图可用于在系统上进行诊断和维护操作。

**“诊断”工具栏** 从视图菜单选择显示顶部工具栏，便会显示“诊断”工具栏。将光标移至按钮上方可以查看相关说明。



## “MSD 调谐” 视图



### MSD 调谐工具组

这一工具组显示在“MSD 调谐”视图中。



调用 MSD 调谐文件。



保存当前调谐文件。



生成轮廓图并扫描报告。



自动调谐 MSD 并打印调谐报告。



校正质心轴。



更改雾化室参数。





编辑用于手动调谐的 MSD 参数。



采集多次扫描并将结果发送到数据文件。

## 基本操作

### 启动和关闭系统

任务	说明	注释
启动系统	<ol style="list-style-type: none"> <li>1 在“方法和运行控制”视图中，单击系统状态栏上的  按钮。如果系统当前空闲，将光标移至按钮上方时，按钮会变成绿色。</li> <li>2 设置 LC 条件（泵、柱温箱和检测器）。</li> <li>3 根据联机帮助中 <b>MSD 雾化室对话框</b> 主题的描述，设置 MSD 雾化室条件。</li> </ol> <p>系统预热需要 15 分钟。</p>	<p>此步骤假定系统是在真空条件下，并且 LC 和 MSD 连接正确。同时还假定液体流路的设置正确。</p>
将系统置于待机模式	<ol style="list-style-type: none"> <li>1 使用纯流动相冲洗系统，以确保流路中没有缓冲液。这可以防止雾化气发生堵塞。雾化气发生堵塞可能会引起高背压，进而损坏 LC 流通池。 比较好的方法是使用不带缓冲液的流动相（如 50:50 水 / 乙腈）冲洗流路（包括色谱柱）5 至 10 分钟。</li> <li>2 单击系统状态栏上的  按钮。将所有模块设置为待机模式（在系统视图中标为灰色）。</li> </ol>	<p>整夜或是很长一段时间不打算分析样品时，请将系统置于待机模式。当 MSD 处于待机状态时，雾化气和干燥气会保持较低的流量。</p> <p>MSD 处于待机状态时：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 雾化气压力为 20 psi，</li> <li>• 干燥气流速为 3 L/min，</li> <li>• 干燥气温度为 300 °C，</li> <li>• APCI 汽化室（如果有）温度为 325 °C</li> <li>• MS 流选择阀设置为 <b>LC 到废液口</b>。</li> </ul> <p>对于 Agilent Jet Stream 源：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 鞘气温度为 100 °C</li> <li>• 鞘气流速为 2.2 L/min</li> </ul>

## 调谐 MSD

使用 MSD 作为 LC 的检测器时，质谱将与 LC 色谱图中的每个数据点相关联。要获得高质量且准确的质谱，可优化 MSD：

- 使灵敏度达到最高
- 保持可接受的分辨率
- 确保准确的质量数确定

调谐是指调整 MSD 参数以达到上述目标的过程。优化 MSD 参数后，必须将它们保存至调谐文件 (.tun) 中。该调谐文件随后要在采集样品数据所使用的方法中指定。

不需要经常进行自动或手动调谐。MSD 在调谐之后很稳定。只需一个月、最快一周后再进行调谐。

启动真空后，等待 4 个小时，然后再调谐 MSD 或对其进行操作。分析器需要约 11 个小时才能达到热平衡。在 MSD 达到热平衡之前创建的调谐文件或采集的数据可能会出现错误的质量分配和其他不准确的情况。

任务	说明	注释
使用自动调谐	<ol style="list-style-type: none"><li>1 在“MSD 调谐”视图中，从调谐菜单选择自动调谐或单击自动调谐工具栏按钮。</li><li>2 查看调谐完成后自动打印的调谐报告。</li></ol>	使用自动调谐以自动调整 MSD 的性能。

任务	说明	注释
使用检验调谐	<ol style="list-style-type: none"> <li>1 从调谐菜单选择<b>检验调谐</b>。</li> <li>2 查看“检验调谐”报告。如果值超出可接受的范围，建议进行调整。</li> </ol>	使用“检验调谐”快速确定 MSD 是否已正确调谐。它会对调谐质量执行一次轮廓图扫描，并将峰宽和质量轴与目标值进行比较。
使用手动调谐	<ol style="list-style-type: none"> <li>1 从调谐菜单选择<b>手动调谐</b>。</li> <li>2 设置所需的质量分辨率（调整宽度增益和宽度补偿）。</li> <li>3 校正质心轴（调整质量增益和质量补偿）。</li> <li>4 通过源离子光学（碰撞诱导解离、截取锥、透镜 1、透镜 2 和八极杆峰）优化离子传输。</li> <li>5 调整信号强度（设置光圈并调整倍增器增益）。</li> </ol> <p>碰撞诱导解离和增益是方法参数。碰撞诱导解离会影响离子传输和解离，有关详细信息，请参见联机帮助。</p>	<p>“手动调谐”适用于以下情况：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 为达到最大灵敏度必须牺牲部分分辨率时</li> <li>• 要专门对很小的质量（&lt;150 amu）进行调谐时</li> <li>• 要使用标准调谐液以外的化合物进行调谐时</li> </ul>

## 采集 MSD 数据

### 采集模式

有三种数据采集模式：






- 对单个样品运行某种方法
- 对多个样品运行某个序列
- 运行 FIA 系列

采集数据时请注意以下事项：

- 所有这三种采集模式均要求使用适当的方法。
- 样品可以手动进样，也可以使用 ALS 进样。
- 始终从软件开始运行。
- 一个 FIA 方法无法用于序列，但多个 FIA 方法可以按顺序运行。

## 编辑方法并开始运行






知道要使用的采集模式后，必须设置相应的方法。方法可以在“方法和运行控制”视图中设置。




说明	注释
1 单击工具栏上的  按钮，激活单个样品工具组。	
2 选择 <b>方法 / 调用方法</b> 或单击工具栏上的  按钮并从列表中选择方法，以调用一个方法。	
3 单击  按钮开始编辑方法。也可以先从 <b>方法</b> 菜单选择 <b>编辑完整方法</b> ，或右键单击运行控制栏中的  图标。	
4 选择要编辑的方法部分（选择所有部分以熟悉可用的方法参数），然后单击“确定”。	显示一系列对话框，让您设置方法和仪器参数。
5 添加您希望显示在报告中的方法注释。	有关各个可用项的说明信息，请单击任一方法对话框的 <b>帮助</b> 按钮。
6 设置仪器参数，例如泵、进样器、DAD 或 VWD、柱温箱、MS 信号和 MS 雾化室。	
7 设置“数据分析”参数，例如信号详细信息、积分事件、报告参数、仪器曲线、校正曲线、校正表和离子参数。	
8 填写“运行时选项表”。	
9 使用不同的名称保存该方法。选择 <b>方法 / 方法另存为</b> 或单击工具栏上的  按钮。	如果您熟悉可用选项，可以使用系统视图菜单快速访问特定的方法参数。
10 准备好运行后，单击 <b>开始</b> 按钮。	

## 解卷积

解卷积是指将质谱从多电荷离子转换为计算分子量的可选过程（需要额外的许可证）。

### 对质谱解卷积

说明	注释
1 在“数据分析”视图中，调用电喷雾 MS 数据文件。TIC 随即显示。	
2 生成您要解卷积的 MS 质谱图（选择光谱任务工具组并使用光谱选择工具来选取目标质谱图）。	这些操作是对全扫描模式下采集的数据执行的。
3 单击 <b>进入解卷积工具</b> 按钮以设置解卷积显示区域。 	
4 显示质谱图时，单击 <b>标记离子</b> 按钮以找到要在解卷积中使用的质量。 	
5 检查已找到的离子。噪音非常多的数据或未分辨区域中的数据通常需要特殊的设置才能找到离子。	您可以使用 <b>离子标签选项</b> 按钮来优化找到的离子组。 
6 单击 <b>编辑解卷积参数</b> 按钮以更改其中任何参数。 	
7 单击 <b>运行解卷积</b> 按钮开始解卷积过程。 	解卷积完成后，窗口右上方会显示组分。电荷状态则显示在右下方的窗口中。

说明	注释
<p>8 从“组分”列表中选择特定的组分以查看单个组分或多组组分。</p>	<p>(可选) 单击<b>预览解卷积报告</b>按钮</p> <p>或单击<b>打印报告</b>按钮。</p>  
<p>9 (可选) 从“组分列表”框中选择组分，然后单击<b>删除组分</b>按钮。</p> <p>10 重复该过程。</p>	 <p>这一操作将从原始质谱图中删除选定成份的峰。然后可以使用该新质谱图，继续（前面的）步骤 4。</p>

## 解卷积报告

解卷积报告包含每个选定组分的摘要信息，以及组分中每个峰如何构成组分分子量的详细信息。在报告的第一部分中，按照百分比相对丰度将成分分级，这有助于估计不纯物的百分比。

即使数据与高斯曲线完全拟和，但由于存在其他错误（例如质心轴指定的错误或未分辨的化学不纯物），实际分子量可能还是与计算的分子量不同。

解卷积软件是可选软件，并且是 ChemStation 版本 C.01.xx 或 M8363AA (ChemStation C.0x) 生物分析软件包的组成部分。

## 操作提示

- 请**定期**备份数据和方法，避免因文件意外覆盖、删除或者磁盘驱动器发生了硬件问题而导致数据丢失。
- 在整夜或很长一段时间不打算分析样品时，请将系统置于待机模式。
- 验证所使用的调谐文件是否适用于样品。
- 将调谐报告另存为 **PDF** 文件或者将该报告作为维护日志的一部分进行打印。
- 定期维护系统可以减少问题的发生。请记录维护情况。
- 使用“诊断”视图中的“维护工作日志”和 **EMF** 功能，有助于您追踪需要维护的时间并记录联机维护情况。
- 每天或每次轮班前冲洗样品路径并清洗雾化室、毛细管末端和雾化挡板。每周检查前极真空泵液位。
- 雾化室出口软管必须连接到**仅**用于源的实验室出口。该出口软管必须与前极真空泵的出口软管分离。否则，泵排气可能转移至雾化室出口，并产生化学噪音。
- 必须对样品进行过滤。如果没有使用色谱柱，则它们应该不含盐且不含清洁剂。
- 如果提供了 UV 检测器，将其与 **MSD** 串联。尝试使用低色散管线使色谱峰展宽最小化。

- 为了使谱带展宽最小化，请确保所有管线连接都没有死体积。必要时，使用零死体积 (ZDV) 接头。
- 有关何时使用 SIM、压缩扫描和全扫描采集模式，请参见下表。

任务	模式
采集含大分子量，多电荷分析物样品的电喷雾数据。	全扫描
分析含未知组分（小分子）的混合物。	扫描
分析含含量未知的已知组分（定量）的混合物。	扫描或 SIM
鉴定混合物中低浓度已知化合物。	SIM
在 1.0-MHz MSD 系统（LC/MSD 和 LC/MSD XT）上使用快速色谱，但不会丢失峰。	快速扫描

## 故障排除提示

### 无峰

- ✓ 验证是否存在来自雾化气的喷雾。
- ✓ 验证毛细管电压是否设置正确。
- ✓ 在 APCI 模式下，确认已安装电晕针。  
在 APCI 模式下，确认电晕电流设置为 2  $\mu\text{A}$  或更高，并且电晕电压介于 1500 和 5000 V 之间。
- ✓ 验证 MS 系统是否调谐正确。
- ✓ 验证 MS 真空压力是否在正常范围内。
- ✓ 检查干燥气的流速和温度。
- ✓ 验证碰撞诱导解离是否设置正确。
- ✓ 检查是否有任何错误消息指示电子元件故障。
- ✓ 验证瓶中是否有足够的样品。

### 质量准确度低

- ✓ 重新校正质心轴。
- ✓ 验证用于调谐的离子是否分布在样品离子的质量范围内并显示强烈而稳定的信号。

### 信号微弱

- ✓ 检查溶液的化学成分。验证正在使用的溶剂是否适用于样品。混合样品可能存在一个或多个组分的信号抑制。
- ✓ 验证样品是否新鲜并存储正确。
- ✓ 验证 MS 系统是否调谐正确。
- ✓ 检查雾化气状态。
- ✓ 清洗毛细管入口。
- ✓ 检查毛细管是否损坏和污染。

- ✓ 验证雾化室是否设置正确，例如干燥气加热器和雾化气压力。

### 信号不稳定

- ✓ 验证干燥气的流速和温度对于正在使用的溶剂流量是否合适。
- ✓ 验证溶剂是否已彻底脱气。**切勿**对蛋白质样品使用超声波脱气。
- ✓ 验证 LC 背压稳定；背压稳定表示溶剂流量稳定。

### 质谱噪音大

- ✓ 使用适当的滤质器值。
- ✓ 检查喷雾的形状。雾化气可能已损害或设置不正确。
- ✓ 验证干燥气的流速和温度对于正在使用的溶剂流量是否合适。
- ✓ 验证溶剂是否已彻底脱气。**切勿**对蛋白质样品使用超声波脱气。
- ✓ 验证 LC 背压稳定；背压稳定表示溶剂流量稳定。
- ✓ 如果使用水作为流动相的一部分，则验证水已进行去离子处理 (>18M $\Omega$ )。

### 雾化气出口出现液滴、无喷雾

- ✓ 验证雾化气体压力的设置足够高，可应对所使用的 LC 流量。
- ✓ 检查雾化气中针的位置。
- ✓ 中止溶剂流量并卸下雾化气组件。使用放大镜检查雾化气末端是否损坏。

### 无流量

- ✓ 验证 LC 泵已打开且对应的瓶内装有足够的溶剂。
- ✓ 验证溶剂供应管路不存在气泡。如果需要，请清洗相应的泵通道。
- ✓ 查看是否有 LC 错误消息。
- ✓ 检查是否堵塞。修复或更换堵塞的组件。
- ✓ 检查是否泄露。
- ✓ 验证 MS 流选择器阀是否设置为 **LC 至 MSD**。

### 不想要的解离

- ✓ 碰撞诱导解离设置过高。
- ✓ 电离引起解离（APCI 与电喷雾）。
- ✓ APCI 温度过高。



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

## 内容提要

本书包含：

- 从哪里获得更多信息
- C.01.08 的新增功能
- 启动 ChemStation 版本程序
- 配置图
- ChemStation 版本视图
- 基本操作
- 操作提示
- 故障排除提示

© Agilent Technologies, Inc. 2017

美国印刷  
版本 A, 2017 年 10 月



G1960-97114



**Agilent Technologies**