

Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 系统

MassHunter

用户指南



声明

文档信息

文档编号：D0034025 Rev. A
版本：06/2023

版权所有

© Agilent Technologies, Inc. 2023

根据美国和国际版权法，未经 Agilent Technologies, Inc. 事先同意和书面许可，不得以任何形式、任何方式（包括存储为电子版、修改或翻译成外文）复制本手册的任何部分。

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn, Germany

担保说明

本档内容按“原样”提供，在将来的版本中如有更改，恕不另行通知。此外，在适用法律允许的最大范围内，Agilent 对本手册以及此处包含的任何信息不作任何明示或暗示担保，包括但不限于适销性和针对某一特殊用途的适用性的暗示担保。对于因提供、使用或执行本手册或此处包含的任何信息而产生的错误，或造成的偶然或必然的损失，Agilent 不承担任何责任。如果 Agilent 与用户签订了单独的书面协议，其中涉及本档内容的担保条款与这些条款冲突，则以协议中的担保条款为准。

技术许可

本档中所述的硬件和 / 或软件是根据许可提供的，只能根据此类许可的条款进行使用或复制。

权力限制说明

美国政府受限权利。授予联邦政府的软件和技术数据权利仅包括通常提供给最终用户的那些权利。Agilent 根据 FAR12.211（技术数据）和 12.212（计算机软件）和（对于国防部）DFARS252.227-7015（技术数据一商品）以及 DFARS 227.7202-3（商业计算机软件或计算机软件文档中的权利）来提供软件和技术数据方面的此常规商业许可。

安全声明

小心

小心提示表示危险。提醒您注意某个操作步骤、某项操作或类似问题，如果执行不当或未遵照提示操作，可能会损坏产品或丢失重要数据。不要忽视**小心**提示，直到完全理解和符合所指出的条件。

警告

“警告”声明表示存在危险。提醒您注意某个操作步骤、某项操作或类似问题，如果执行不当或未遵照提示操作，可能会导致人身伤害或死亡。除非已完全理解并符合所指出的条件，否则请不要忽视**“警告”**声明而继续进行操作。

内容提要

本手册介绍了适用于 MassHunter Acquisition（用于 TOF/QTOF 和 TQ 或高端质谱仪）的 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案。

1 简介

本章介绍 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案的产品。

2 2D-LC 的概念

本章介绍 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案的概念。

3 兼容性矩阵

本章提供有关硬件、固件和操作系统的安装和执行准备条件的信息。

4 安装

本章介绍 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案的硬件和软件安装。2D-LC 仪器可与本文档中所述的软件一起使用。安装说明适用于标准中心切割、多重中心切割、高分辨率采样和全切割 2D-LC 模式。

5 2D-LC 数据采集

本章提供有关 MassHunter Workstation 中的 2D-LC 数据采集的信息。

6 方法参数

本章提供有关方法参数的背景信息。它有助于在标准中心切割、多重中心切割、高分辨率采样和全切割 2D-LC 模式下优化 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案中的方法。

7 主动溶剂调制 (ASM) 方法开发

本章提供如何在使用主动溶剂调制 (ASM) 时开发方法的信息。

8 运行系统

本章介绍如何使用基于驱动程序的 2D-LC 解决方案在标准中心切割、多重中心切割、高分辨率采样和全切割 2D-LC 模式下运行 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案。

9 数据分析

本章提供有关如何使用软件分析 2D-LC 数据的信息。

10 故障排除和诊断

本章概述故障排除和诊断功能以及不同的用户界面。

11 故障信息

本章介绍错误消息的含义，并提供有关可能原因的信息，以及如何从错误条件中恢复的建议操作。

12 维护

本章介绍 2D-LC 解决方案的维护。

13 维护所需部件

本章提供解决方案所需部件材料的相关信息。

14 理论背景

本章介绍 2D-LC 的理论背景，并描述了 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案的系统组件（软件和硬件）。

15 传统校验

本章介绍基于驱动程序的 2D-LC 解决方案在标准中心切割、多重中心切割、高分辨率采样和全切割 2D-LC 模式下 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案的传统校验。

16 附录

本章提供有关安全、法律和网络的补充信息。

目录

- 1 简介 9
 - 1290 Infinity II 2D-LC 系统简介 10
 - 与 2D-LC 有关的术语 13
- 2 2D-LC 的概念 14
 - 2D-LC 的概念 15
 - 中心切割 2D-LC (LC-LC) 18
 - 多重中心切割和高分辨率采样 2D-LC 19
 - 全切割 2D-LC (LCxLC) 31
 - 触发 2D-LC 33
 - 主动溶剂调制 (ASM) 36
- 3 兼容性矩阵 46
 - MassHunter Workstation 数据采集 47
 - 支持的驱动程序 51
 - 支持的固件 52
- 4 安装 53
 - 1290 Infinity II 2D-LC 系统的硬件安装 54
 - 1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统的硬件安装 88
 - 许可 2D-LC 仪器 118
 - Agilent MassHunter Workstation 中的 2D-LC 软件安装和配置 121
 - 重要的客户网络链接 135
- 5 2D-LC 数据采集 136
 - MassHunter Workstation 中的 2D-LC 数据采集 137
 - 2D-LC 在线帮助 155
 - 重要的客户网络链接 156

- 6 方法参数 157
 - 2D-LC 方法编辑器 158
 - 设置 2D-LC 方法参数 159
 - 预览 (2D-LC) 187
 - 以图形方式设置基于峰的实验 200
 - 以图形方式设置 2D 梯度 205
 - 使用图形用户界面设置二维梯度 207
 - 附加信息 209

- 7 主动溶剂调制 (ASM) 方法开发 217
 - 主动溶剂调制 (ASM) 方法开发 218
 - 方法参数 219
 - 使用 ASM 毛细管优化稀释 220
 - 优化样品定量环冲洗 221
 - 将 ASM 阶段包含到 2D 梯度中 222
 - 通过方法设置优化稀释 223

- 8 运行系统 224
 - 用于开始系统运行的入门程序 225
 - 准备 2D-LC 系统 226
 - 配置 2D-LC 系统 227
 - 校验程序 229
 - 准备实验 231
 - 运行实验 233

- 9 数据分析 248
 - 用于 MassHunter 的 2D-LC 数据分析/数据评估 249
 - GC Image 基本信息 276

- 10 故障排除和诊断 294
 - 模块指示器和测试功能概述 295
 - 用户界面 296
 - Agilent Lab Advisor 软件 297
 - Lab Advisor 仪器控制 299

	Lab Advisor 服务和诊断	305
	故障排除的基本原理	312
	完成故障排除的建议测试	322
11	故障信息	323
	错误消息是什么	324
	一般错误消息	325
	模块特定错误消息	331
12	维护	335
	维护简介	336
	警告和小心	337
	维护概述	339
	清洁模块	340
	校正泄漏	341
	更换阀头	342
	更换阀头的部件	348
	更换 Infinity 阀驱动器的保险丝	351
13	维护所需部件	353
	1290 Infinity II 2D-LC 系统的部件	354
	1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统的部件	380
14	理论背景	406
	2D-LC 的理论基础	407
	² D 作为检测器	415
	成功模式组合	417
	溶剂洗脱模式	418
	实际问题	423
15	传统校验	425
	校验程序	426

准备实验 428

运行实验 430

16 附录 465

常规安全信息 466

废弃电子电气设备 (WEEE) 指令 472

无线电干扰 473

声音发射 474

毛细管编码指南 475

溶剂信息 477

补充信息 478

Agilent Technologies 网站 479

1

简介

1290 Infinity II 2D-LC 系统简介 10

产品说明 10

功能 11

与 2D-LC 有关的术语 13

本章介绍 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案的产品。

1290 Infinity II 2D-LC 系统简介

产品说明

1290 Infinity II 2D-LC 系统是一款创新型解决方案，可完成大多数复杂的分离，分析复杂的样品，同时简化复杂的工作流程。从分离少量共洗脱化合物到最复杂的混合物，使用 Agilent 2D-LC 解决方案，可以选择 2D-LC 模式，如使用高分辨率采样的（多重）中心切割和全切割 2D-LC 模式。

某些样品完全无法在一个维度上解析，或者无法在短时间内达到足够好的效果，对这些样品进行不相关分离可为许多行业的广泛应用带来益处。全切割 2D-LC 为复杂的样品或样品矩阵提供无与伦比的峰容量。2D-LC 可用于对样品脱盐以进行盐敏分离或使基于缓冲液的分离与 MS 兼容。在许多情况下，可以应用 2D-LC 来简化工作流程，方法是以一次 2D 分析代替多次 1D 分离或通过 2D-LC 代替脱机馏分，从而实现更快速、更可靠且完全自动化的工作流程。

独特的 Agilent 2D-LC 软件十分易于使用，无论是希望在几分钟内创建和查看 2D-LC 分析的初学者，还是使用最先进的方法开发和数据分析功能的专家，都能轻松使用 2D-LC。

功能

Agilent InfinityLab 2D-LC 解决方案提供以下主要功能：

- Agilent 2D-LC 基于 1290 Infinity II 系统，提供 UHPLC 性能、快速梯度、高灵敏度和出色的耐用性。
- 专用 2D-LC 阀使用完全对称的流路，实现可重复的保留时间和峰面积。
- 多种模块在两个维上都可使用。通过 UIB II 支持第三方检测器，包括使用兼容检测器进行数据分析。
- 强大的 Agilent 2D-LC 软件可用于 OpenLab CDS、MassHunter 和 ChemStation。只需点击几下即可轻松设置分析：从 1D 分析开始，选择要提高分辨率的点，然后绘制第二维梯度。
- Agilent 2D-LC 仪器控制完全自动化，无需繁琐的手动阀编程。使用 Agilent 多重中心切割阀，可以实现第一维和第二维分离的完全独立，一次快速并行的分析可实现多达 12 个切片的最高存储容量。
- 可为灵活分析短切片至宽峰提供高分辨率采样，同时保持第一维分离。通过分析完整的峰，可以实现具有高度重复性的定量分析。
- 一次运行可任意组合多重中心切割和高分辨率采样。
- 可采用图形或数字方式编辑的迁移梯度将可用的 2D 分离空间最大化，以实现最高峰容量和最快分析。
- 专用冲洗梯度可实现快速分析并最大程度地减少交叉污染。
- 对于具有高度重复性的分析，可在基于时间的模式下定义切片；对于可变保留时间或未知样品，可在基于峰的模式下定义切片。即使在基于峰的模式下，第一维和第二维检测器也都能提供完整的色谱图。
- 动态峰存储将基于时间和基于峰的方法相结合，以处理使用参比化合物的生物制药等的第一维保留时间的偏移。
- 通过按顺序注入来自多个样品定量环的切片，多重进样可以加速此类分析。
- 智能峰存储可以优化运行，实现尽可能多的切片数量和最短的运行时间。
- 可将多种第一维和第二维溶剂和梯度与可选 Agilent 主动溶剂调制技术相结合，完成多重中心切割和高分辨率采样测量。通过降低第一维溶剂效应，可以优化第二维分离并提高灵敏度。
- 通过以交互方式自动冲洗两个维度的流路和所有样品定量环，可以为运行准备 2D-LC 系统。
- 可在面板中监测 2D 运行的进度，包括驻留阀样品定量环中的切片存储及其分析。

简介

1290 Infinity II 2D-LC 系统简介

- 可将 2D-LC 系统与分析馏分收集相结合。
- 使用可选阀在 1D 和 2D 分离之间轻松切换。

GC Image 软件

- Agilent 提供用于 UV 和单四极杆或 (Q-)TOF 和 QQQ 检测的 GC Image LC x LC Edition Software。

该软件用于可视化 2D 数据，并为全切割 2D-LC 数据提供尖端的数据分析，包括定性和定量结果以及统计分析。

LabAdvisor

- 诊断测试有助于对 2D-LC 系统进行故障排除。

与 2D-LC 有关的术语

术语	定义
2D-LC	二维液相色谱
1D	一维 1D-LC 是经典的（一维）色谱，可提供一维数据。通常，您甚至不会考虑一维世界的维度。
¹ D	第一维 例如， ¹ D 色谱柱是用于第一维的色谱柱，而 ¹ D 色谱图是为第一维采集的色谱图。
2D	二维 2D-LC 是二维色谱，可提供二维数据。 二维数据是具有第一维和第二维的数据。 例如，2D 结果可以在每个维度上具有色谱图和峰。2D 峰在每个维度上都有一个保留时间。2D 峰是二维等高线图上的峰。
² D	第二维 例如， ² D 泵是安装在第二维中的泵。 ² D 保留时间是第二维色谱图中的保留时间，或者是二维峰中第二维的加权平均保留时间。 ² D 峰是 ² D 切片色谱图中的峰。
2D 化合物	二维化合物，具有包含 ¹ D 保留时间和 ² D 保留时间的二维峰。
LCxLC	全切割 2D-LC
LC-LC	中心切割 2D-LC
MHC	多重中心切割
高分辨率	高分辨率采样

2

2D-LC 的概念

2D-LC 的概念	15
中心切割 2D-LC (LC-LC)	18
多重中心切割和高分辨率采样 2D-LC	19
中心切割 2D-LC 的原理	22
全切割 2D-LC (LCxLC)	31
触发 2D-LC	33
峰触发的概念	33
时间触发的概念	35
主动溶剂调制 (ASM)	36
主动溶剂调制 (ASM) 简介	36
操作原理	39
了解 ASM 因子	43
全切割 2D-LC 和主动溶剂调制	45

本章介绍 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案的概念。

2D-LC 的概念

在 2D-LC 系统中， 1^{D} 泵会生成 1^{D} 梯度。自动进样器将进样并通过 1^{D} 色谱柱将其分离。 2^{D} -LC 阀（进样器）将第一维连接到第二维，并在中间存储样品峰。这些样品峰被重新注入第二维，使用 2^{D} 色谱柱分离，同时使用 2^{D} 检测器分析。

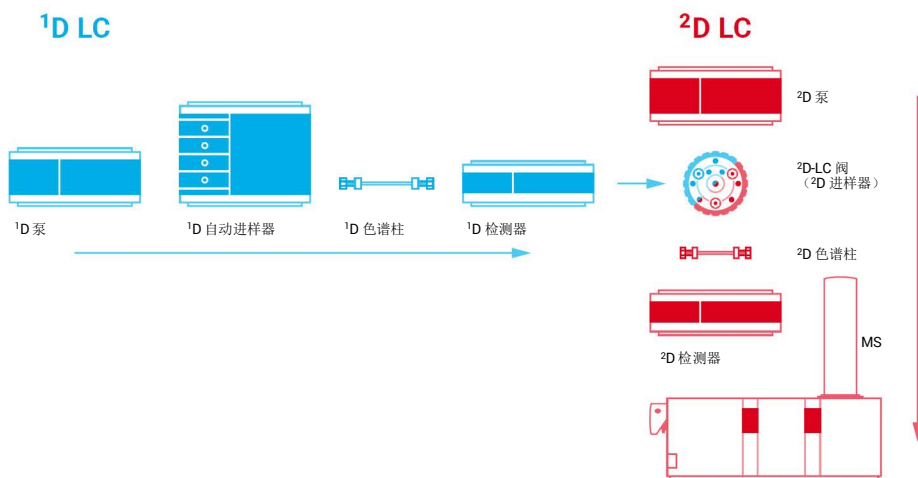


图 1 2D-LC 的概念

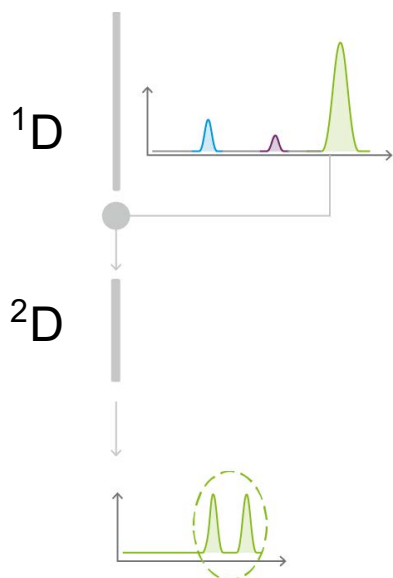


图2 中心切割 2D-LC 原理的概念图

在 2D-LC 中，存在以下概念：

- 全切割 2D-LC (LC×LC)
在 LC×LC 中，将第一维的洗脱液全部注入第二维的色谱柱。
- 中心切割 2D-LC (LC-LC)
在 LC-LC 中，仅将第一维的部分洗脱液注入第二维的色谱柱。

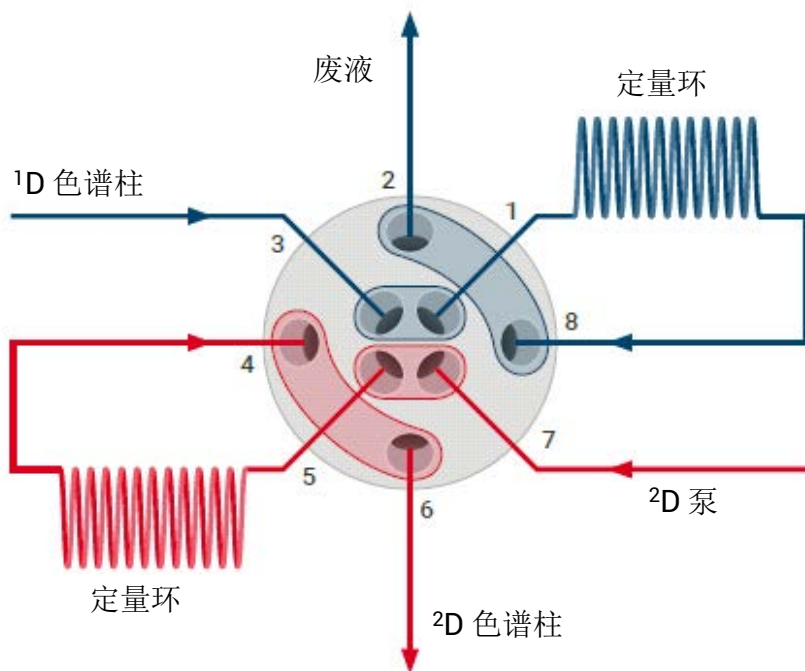


图3 标准 2D-LC 阀 (G4236A)，带两个定量环 (顺流)

中心切割 2D-LC (LC-LC)

以下是 LC-LC 的特性：

- 仅将 ¹D 色谱柱的部分流出物（仅从 ¹D 色谱柱流出的目标峰）注入 ²D 色谱柱。
- 将来自第一维的峰作为整体进行采样，所采取的方法具有较低的流速且梯度的运行时间通常比收集时间更长，从而提高分离效率。
- 通常，²D 色谱柱使用分离效率更高的较长色谱柱。

注意

如果要分析的样品已知，或为提高实验（制药、方法开发等）的可信度，首选中心切割 2D-LC (LC-LC) 方法。

注意

可对从第一维色谱柱洗脱的多个峰进行采样并在第二维进行分析，但第二维的运行时间必须与两个第一维峰之间的保留时间相匹配。**始终要完成已开始的第二维分析！**因此，如果在第二维分析运行期间进行采样，从第一维洗脱的第二个峰可能会丢失。

多重中心切割和高分辨率采样 2D-LC

通常来说，**中心切割**的第二维度梯度时间比采用**全切割**技术的梯度时间长得多。标准中心切割技术的缺点是无法在第二维度梯度仍在运行时对峰进行采样。在此处显示的示例中，第二维度的梯度正在分析第一个峰（紫色），而第二个和第三个峰（灰色和黄色）是从第一维度色谱柱洗脱的。第4个峰（绿色）从第一维度洗脱时，第二维度已经做好准备；可以分析该峰了。随着第二维度再次被占用，无法分析第5个峰（蓝色）。

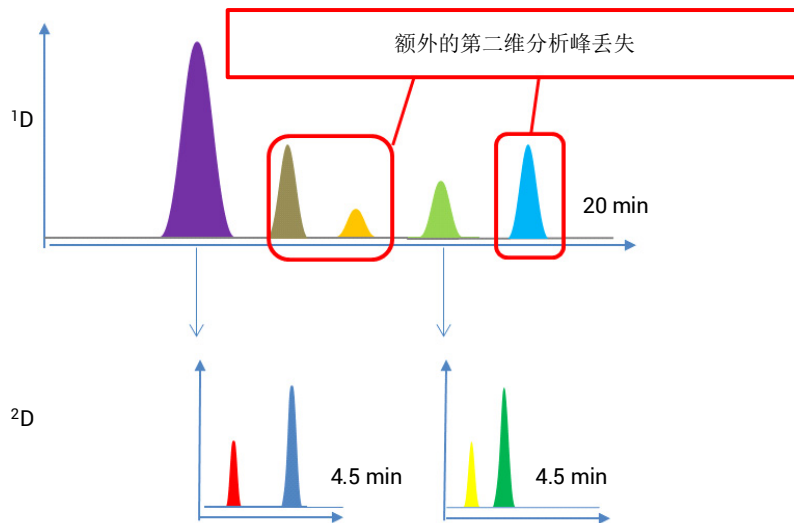


图 4 示例：单中心切割中丢失峰

使用名为**多重中心切割 2D-LC**的设置即可解决此问题。此处，2D-LC 阀上的采样定量环换作配备 6 个定量环的 6 位/14 通选择阀。在该配置中，可以剪切和存储峰，之后在第二维度空闲时进行分析。

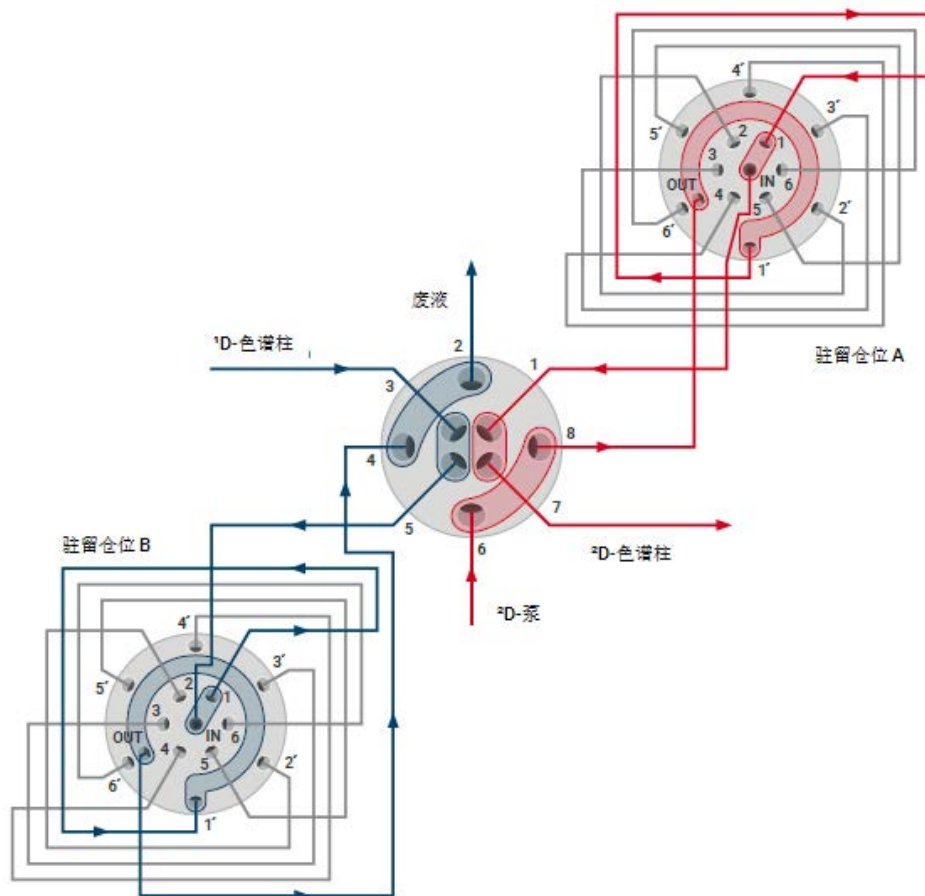


图5 标准 2D-LC 阀 (G4236A), MHC 1300 bar (逆流)

在运行过程中剪切和存储的峰在第二维度是连续分析的，即便在第一维度仍在运行时仍是如此。为避免交叉污染，将以单个多重中心切割阀存放的相反顺序对峰进行分析。

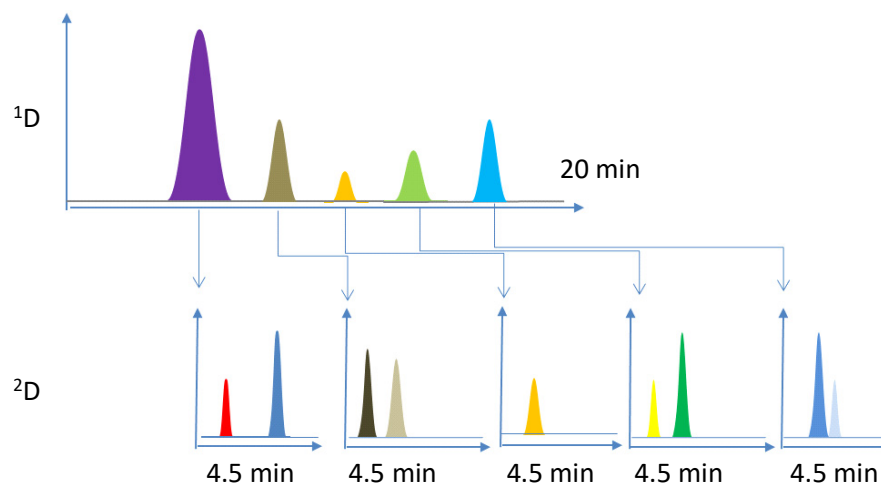


图 6 示例：具有多个切片的多重中心切割实验

中心切割 2D-LC 的原理

多重中心切割 - 原理

多重中心切割 - 原理

多重中心切割 2D-LC 是一个复杂的工作流程，采用特殊的算法，基于不同的标准来填充样品定量环并分析存储的切片。第 22 页的[多重中心切割 - 原理](#)说明多重中心切割算法的原理，遵循以下原则：

- 尽快完成 $2D$ 分析。只要第二维空闲，来自第一维的任何下一个切片都会被直接传输到第二维并进行分析。这意味着：
 - 第一个 $1D$ 切片始终直接在第二维中分析。
 - 如果第二维空闲，当采集到一个 $1D$ 切片时，它也将被直接分析。
- 如果第二维被占用，则下一个 $1D$ 切片将存储在下一样品定量环中。
- 如果第一维中的所有样品定量环都被占用，峰会丢失。
- 切换到其他驻留仓位之前，始终对峰驻留仓位进行完整分析。
- 分析新的驻留仓位之前，运行一个冲洗梯度以避免污染。
- 以倒序对存储的切片进行分析以避免污染。

采用多重中心切割的基于峰的模式

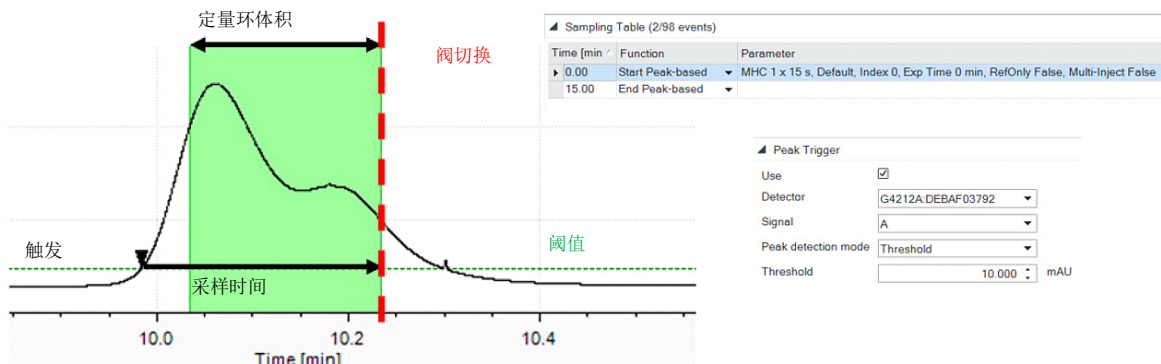


图 7 基于峰的模式

在基于峰的模式下，三个参数确定峰的存储方式：

- 1 触发，表明是否由于参比信号（如果可用）超过高级设置中定义的阈值或斜率等原因而检测到峰。
- 2 通过切换阀来存储切片。如果检测到峰结束（信号下降至低于阈值或斜率），或如果超过可设置的切片长度，会发生这种情况。定义切片长度的目的是延迟存储，以便存储峰的已定义部分（通常是其中心）。
- 3 用于存储峰的绿色区域的宽度 t 是固定值，使用 $t=V/F$ 由第一维的定量环体积 V 和流速 F 计算得出。

注意

请注意，如果采样时间短于定量环体积对应的时间，峰存储甚至可能在峰触发之前就开始。在这种情况下，绿色区域将从触发三角的左侧开始。

采用多重中心切割的基于时间的模式

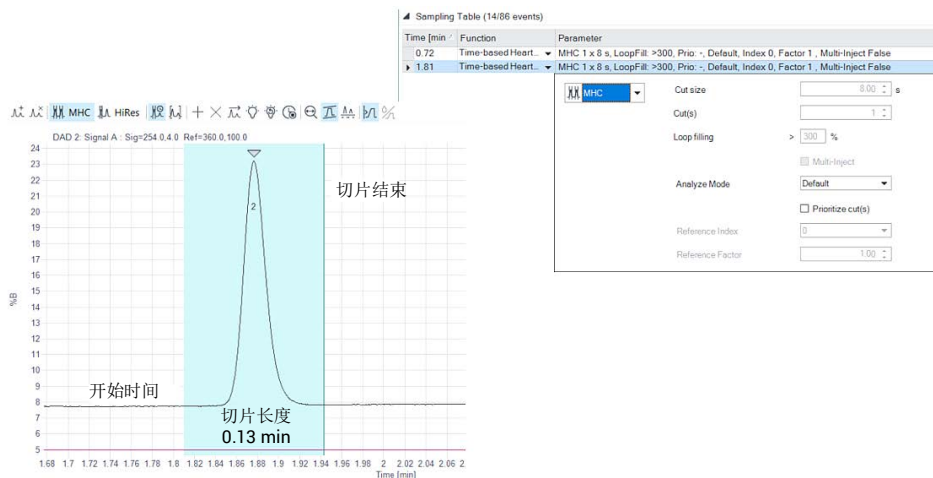


图 8 基于时间的 MHC 模式

基于时间意味着中心切割时间在时间表中定义。该时间表可根据参比色谱图中的峰的第一维保留时间建立。采样表中给定的时间对应于参比色谱图中的切片存储的开始时间。切片长度是固定的，由 $t=V/F$ 计算得出。通过在“切片结束”时切换阀来存储切片。最终，仅切片结束与方法 and 仪器控制相关。切片结束在预览中显示为右侧的加强线。如果要移动切片，则可借助鼠标以图形的方式移动栏，或在采样表中更改开始时间。

您可以在第 157 页的[方法参数](#)一章找到更多信息。

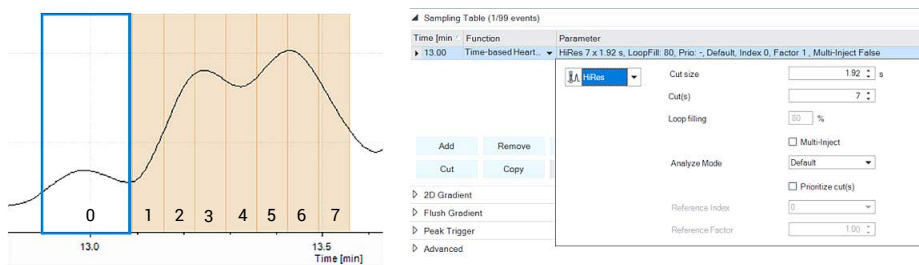
在 MHC 中，放置单个切片的间隔有几秒钟的限制。此限制主要取决于 2D-LC 阀所需的切换时间。如果要生成相邻切片，则必须使用高分辨率模式，请参阅第 25 页的[高分辨率采样 - 峰存储原理](#)。在多重中心切割中，定量环应过量填充 (>100%)。还请注意，切片长度与流速有关。如果 1D 流速发生变化，阀切换时间会保持恒定，同时峰开始时间发生改变。请注意，变动的流速使得来自已调用参比色谱图的参比信号失效。

高分辨率采样 - 峰存储原理

在高分辨率采样模式下，多重中心切割 (MHC) 阀在存储峰前后切换。这将产生以下后果：

- 每个连续切片的定量环存储相同的样品体积。
- 不得将第一个和最后一个定量环用于存储。
- 可以减少从 ¹D 到 ²D 的溶剂传输。
- 切片编号 5 无法完全存储在样品定量环中。否则，切片 6 将部分进入传输毛细管，由此丢失或损坏切片 5。
- 切片 5 部分停留在传输线中，并在 ²D 中立即进行分析。
- 要将切片 6 存储到样品定量环中，首先需要将切片从 2D-LC 阀传输至驻留阀。

高分辨率采样的峰存储示例



高分辨率采样的峰存储示例

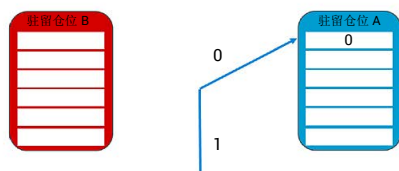


图 9 高分辨率存储原理

在高分辨率采样中，第一个定量环是旁路位置。当为第一个切片切换到第二个定量环时，未知内含物可能会存储在第一个定量环中，这在解除存储程序后必须进行冲洗。

- MHC 阀在存储切片 1、2、3、4、5 之前切换。

2D-LC 的概念

多重中心切割和高分辨率采样 2D-LC

- 切片 5 无法完全存储在样品定量环中，否则，切片 6 将部分进入传输毛细管，由此丢失或损坏切片 5。

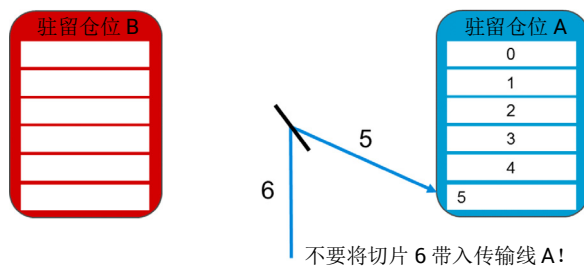
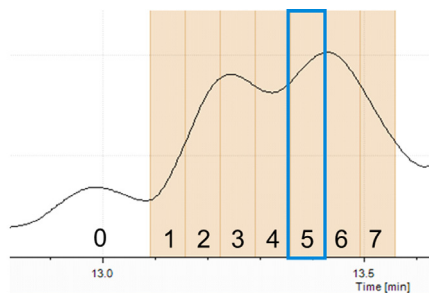


图 10 高分辨率存储原理

- 切片 5 部分停留在传输线中，并在 2D 中立即进行分析。

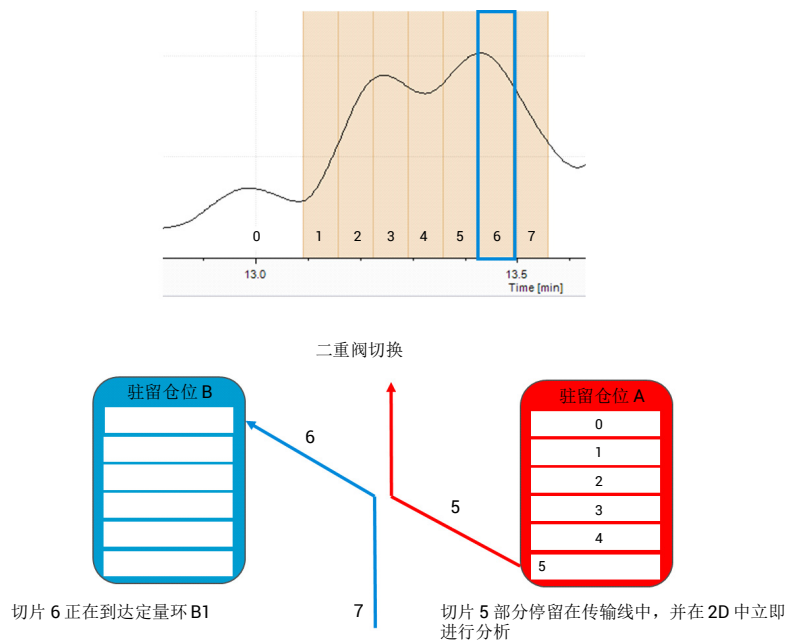


图 11 高分辨率存储原理，部分切片在传输线中

2D-LC 的概念

多重中心切割和高分辨率采样 2D-LC

- 要将切片 6 存储到样品定量环中，首先需要将切片从 2D-LC 阀传输至驻留阀。

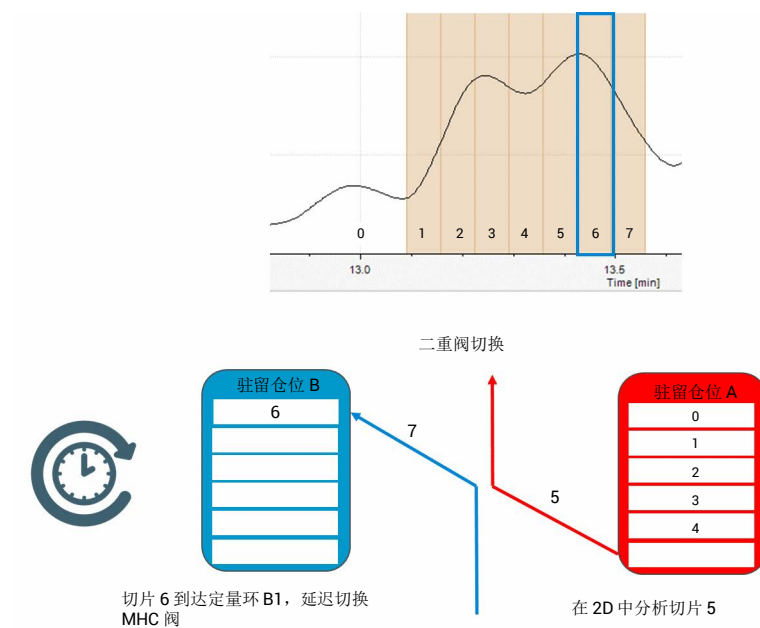


图 12 高分辨率存储原理，2D-LC 阀和驻留阀

2D-LC 的概念

多重中心切割和高分辨率采样 2D-LC

- 切片 7 将存储在定量环 B2 中

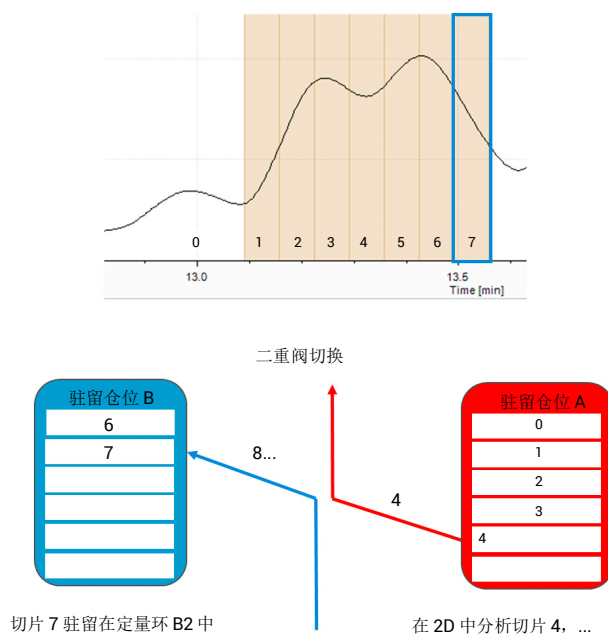


图 13 高分辨率存储原理，切片 7 存储在定量环 B2 中

- 当其他驻留仓位运行分析时，流路需要最后一个定量环。在分析过程中，使用²D 梯度基底溶剂填充定量环。

高分辨率采样（基于时间的模式）

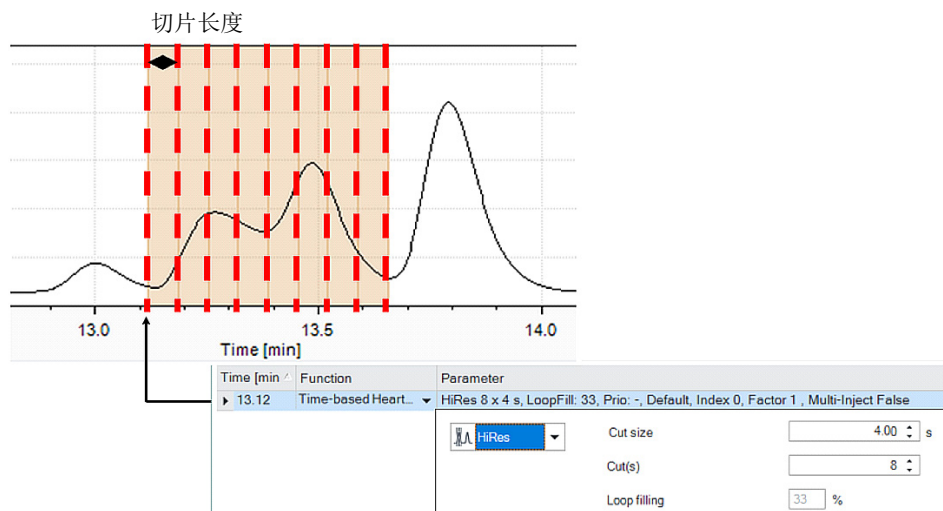


图 14 色谱图和采样表中高分辨率采样的比较

对于高分辨率采样，可以设置（开始）时间、切片长度（以秒为单位）以及某个峰或某个范围的切片数量。采样时间应小于填充一个样品定量环（低于 80% 的定量环填充）所需的时间。由于抛物线流速剖面，超过 80% 的填充将导致样品进入废液。

最小切片长度由 2D-LC 阀和驻留阀之间的传输体积给定。驻留仓位的最后一个切片存储在传输毛细管中，因此切换到第二个驻留仓位会将该峰带到第二维。如果选择了小于该传输体积的体积，则两个切片会在同一毛细管内，导致分辨率和可重复性损失。

注意

由于引入了基于驱动程序的 2D-LC 解决方案，现在也可以使用基于峰模式的高分辨率了。

全切割 2D-LC (LCxLC)

在全切割 2D-LC (也称作 LC×LC) 中, 使用通过切换阀进行交替的两个容量相同的定量环, 将第一维度的洗脱液全部注入第二维度的色谱柱。以第一维装满第一个定量环时, 将以第二维分析第二个定量环中的内含物; 之后, 切换阀会将第二个定量环切换到第一维进行采样, 将第一个定量环切换到第二维进行分析。

第二维的梯度分析小于或等于第一维的切片时间:

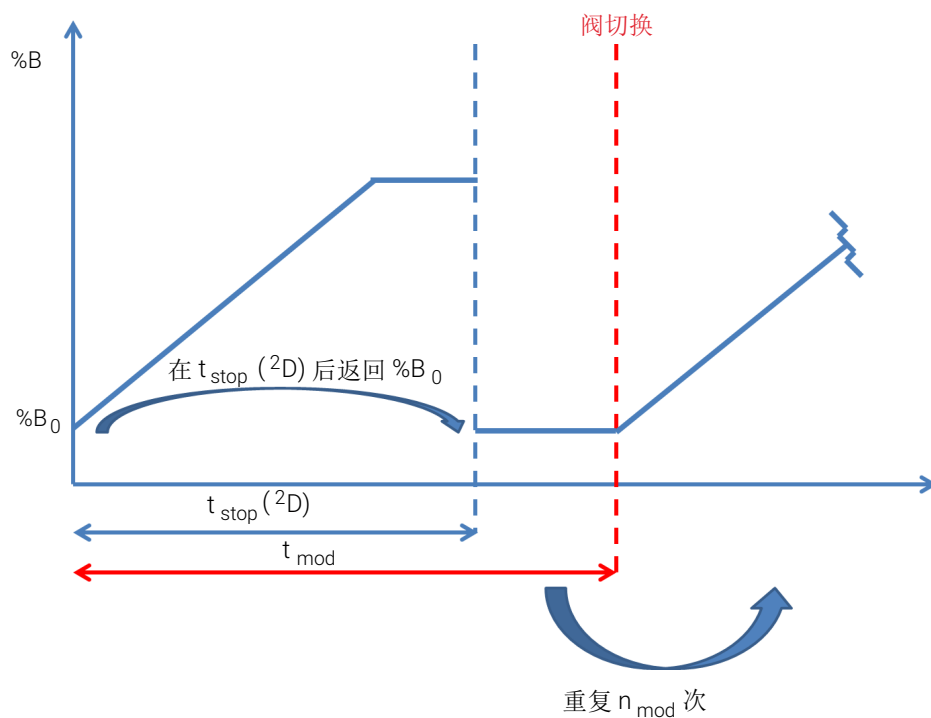


图 15 LCxLC 的特性

标准 LCxLC

在标准 LCxLC 中，通过切换调制阀，可交替使用两个采样定量环，将第一维的洗脱液全部注入第二维的色谱柱。从第一维分离的开始到结束，会重复进行此过程。

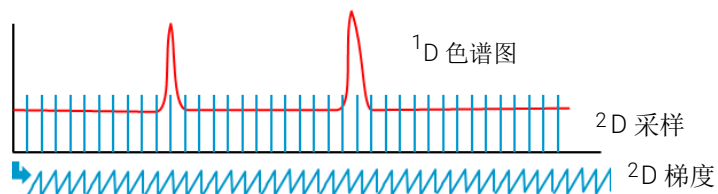


图 16 标准 LCxLC 的原理

触发 2D-LC

峰触发的概念

峰触发的 LC-LC

将超过给定水平的第一维的一个或多个峰注入^{2D}色谱柱。将会忽略在第二维梯度时间内从^{1D}色谱柱洗脱的更多峰。

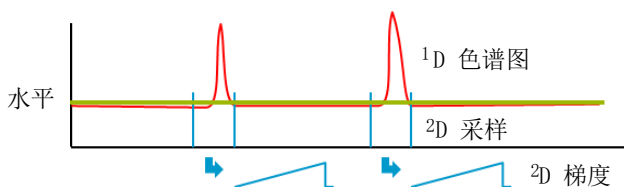


图 17 峰触发的 LC-LC 的原理

峰触发的相关参数

峰触发的概念

在高级设置（类似于积分器设置）中通过阈值和/或斜率完成触发，请参阅第 180 页的使用峰触发。

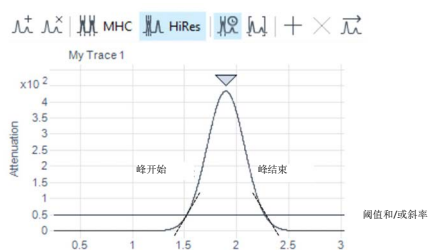


图 18 峰触发方法

Peak Trigger	
Use	<input checked="" type="checkbox"/>
Detector	G4212B.DE00000008
Signal	A
Peak detection mode	Threshold
Threshold	5.000 mAU
Up Slope	1.00 mAU/s
Down Slope	1.00 mAU/s
Upper Threshold	2000.000 mAU

阀在以下条件下切换（以先到者为准）：

- 如果采样时间已过，或

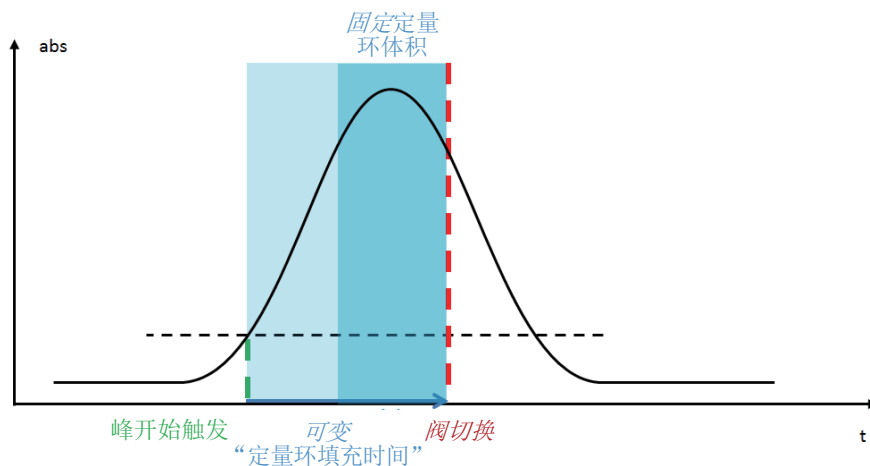


图 19 峰触发概念（采样时间已过）

- 如果信号低于阈值或斜率。

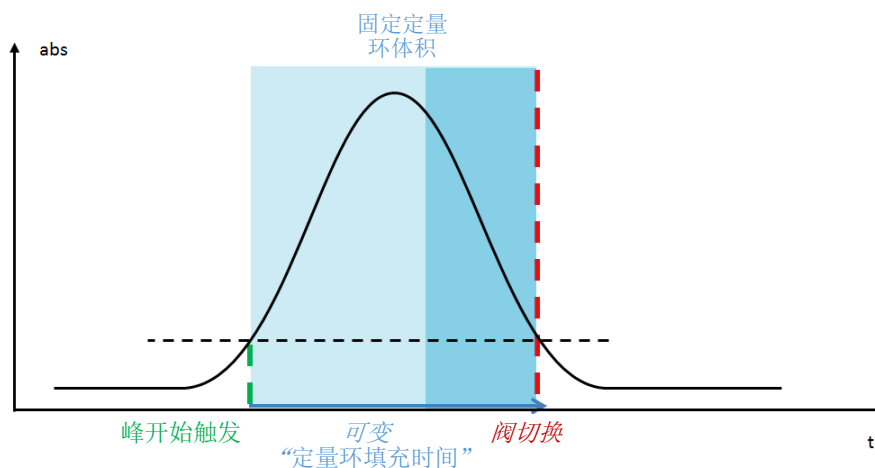


图 20 峰触发概念（信号低于阈值或斜率）

注意

与 ChemStation 中的 2D-LC 附加软件相比，在基于驱动程序的 2D-LC 解决方案中，只有 LCxLC 中的时间触发模式可用。

时间触发的概念

时间触发的 LC-LC

将给定时间范围内的第一维的一个或多个部分注入²D 色谱柱。

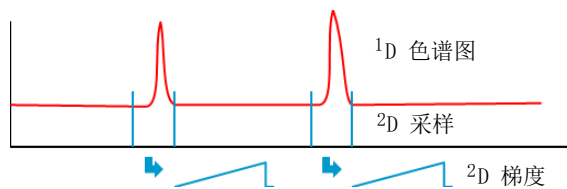


图 21 时间触发的 LC-LC 的原理

主动溶剂调制 (ASM)

主动溶剂调制 (ASM) 简介

在传统 2D-LC 中，将样品定量环中的 ¹D 溶剂注入第二维色谱柱。如果 ¹D 溶剂相对于 ²D 色谱柱的洗脱强度较高，则可能会对第二维的分离产生损害。这可能会导致毫无保留的洗脱、较宽和扭曲的峰以及分离损失（请参见第 38 页的图 24）。

主动溶剂调制 (ASM) 会在样品定量环内含物（样品和 ¹D 溶剂）到达 ²D 色谱柱前，使用低浓度的 ²D 溶剂对其进行稀释，从而改进第二维的分离（请参见第 38 页的图 25）。

不同 ASM 毛细管可针对不同的应用优化稀释（请参见第 43 页的[了解 ASM 因子](#)）。

ASM 解决方案主要设计用于 2D-LC 模式多重中心切割和高分辨率采样。2D-LC 阀 ASM 可以向下兼容标准 2D-LC 阀 G4236A。如果不需要 ASM 或用于全切割 2D-LC，则可以禁用 ASM 功能。

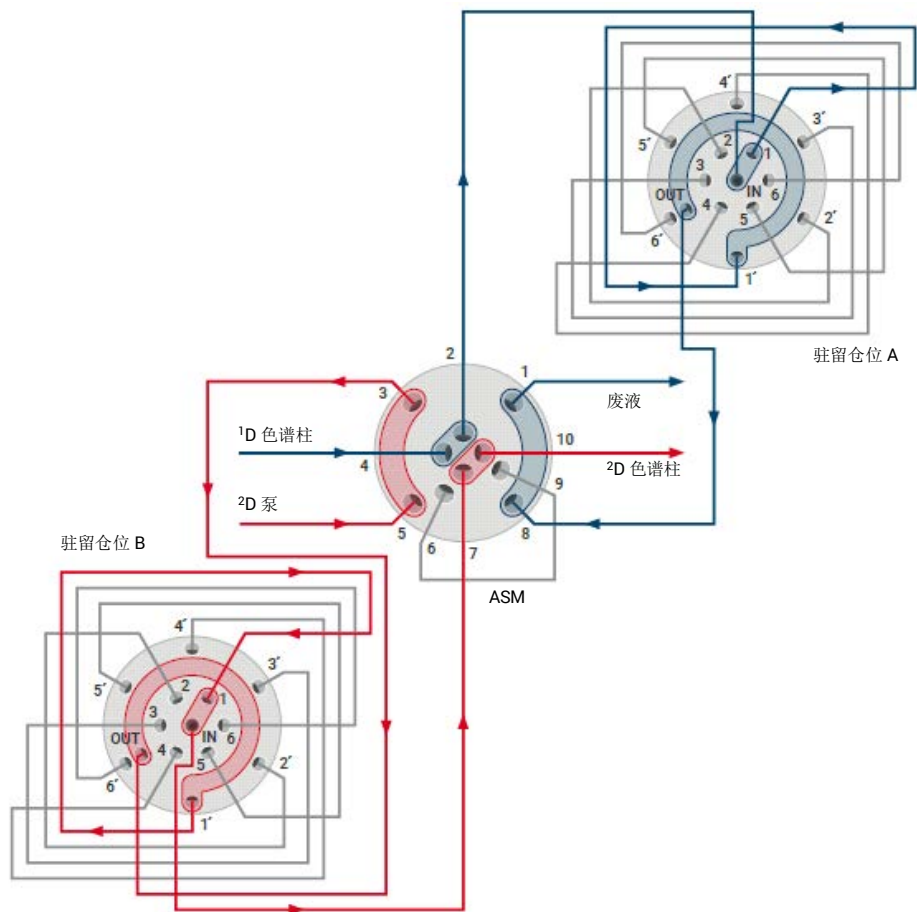


图 22 示意图：ASM 2D-LC 阀 (G4243A)，MHC（逆流）

示例：在¹D 中使用 HILIC 且在²D 中使用反相的 ASM

在本例中，HILIC 分离在第一维运行，反相分离在第二维运行。如果样品切片被传输到第二维，则 40 μ L 的高浓度有机溶剂将被带到反相色谱柱。¹

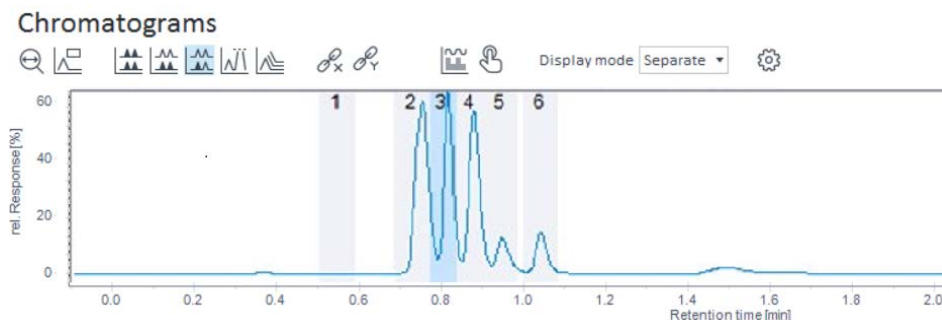


图 23 在¹D 中通过使用高浓度的有机溶剂组成的 HILIC 分离来分析农药

使用传统阀的 2D 分辨率

¹D 溶剂的高洗脱强度导致分离不良，左侧²D 色谱图出现较宽和扭曲的峰。

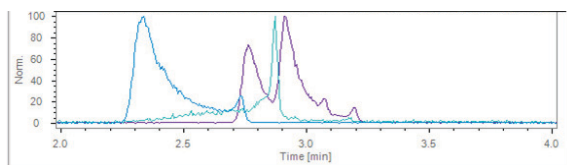


图 24 在²D 中使用反相分离对切片 3 进行传统分析

使用 ASM 阀的 2D 分辨率

在右侧 2D 色谱图中，使用 2D-LC 阀 ASM 代替传统 2D-LC 阀。峰被解析，且灵敏度提高。

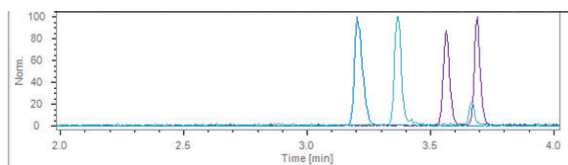


图 25 在²D 中使用反相分离对切片 3 进行 ASM 分析

¹ 农药的¹D 分析使用：¹D: Zorbax RX-SIL (150 x 2.1 mm 内径, 5 μ m), A = 10 mM NH₄Ac (在 H₂O 中); B = ACN, 梯度: 5 min 内 100% 至 95% 乙腈, 500 μ L/min. 带 40 μ L 定量环的 MHC。²D: Bonus RP (50 x 2.1 mm, 1.8 μ m), H₂O/乙腈梯度 (0.2% 甲酸), 低浓度的溶剂 3% 乙腈, 400 μ L/min, 来自传统 2D-LC 的 EIC (未稀释)

操作原理

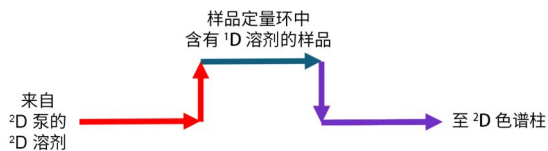


图 26 流路中的样品定量环的操作原理 (示意图)

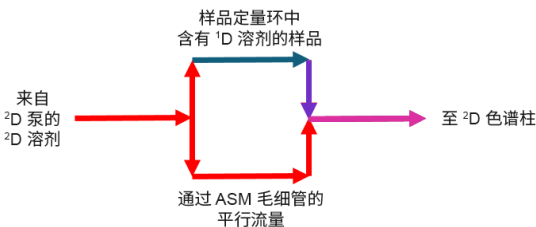


图 27 平行流路中的样品定量环和 ASM 毛细管的操作原理 (示意图)

样品定量环中的¹D溶剂被²D泵中的²D溶剂部分通过ASM毛细管引入平行流量会以较弱的²D溶剂大幅稀释¹D溶剂。这些溶剂条件使样品集中在²D色谱柱的顶部，从而实现良好的分离。^{*}

^{*}红色：来自²D泵的²D溶剂，蓝色：样品定量环中含有¹D溶剂的样品

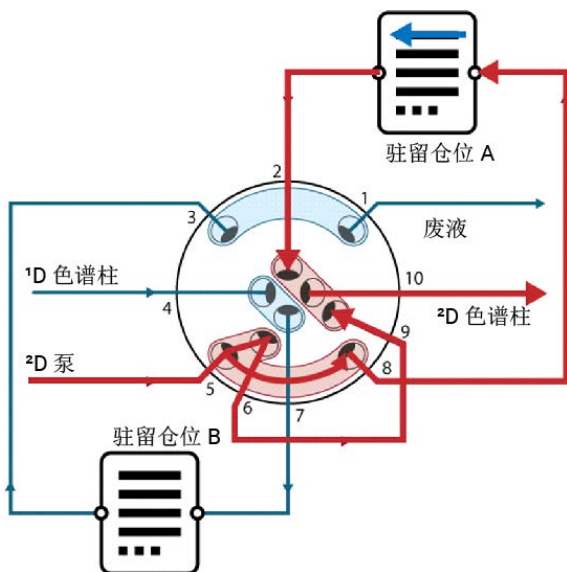


图 28 平行流路中的样品定量环和 ASM 毛细管的操作原理

2D-LC 的概念

主动溶剂调制 (ASM)

这是同一流路在 2D-LC 阀 ASM 内的情况。来自 2D 泵的流量在阀口 10 处分流。一部分穿过驻留仓位 A 中的样品定量环，携带存储的样品切片和 1D 溶剂。 2D 溶剂的另一部分流经阀口 9 和 6 之间的 ASM 毛细管。流量在阀口 5 合流， 1D 溶剂在到达 2D 色谱柱头之前被稀释。

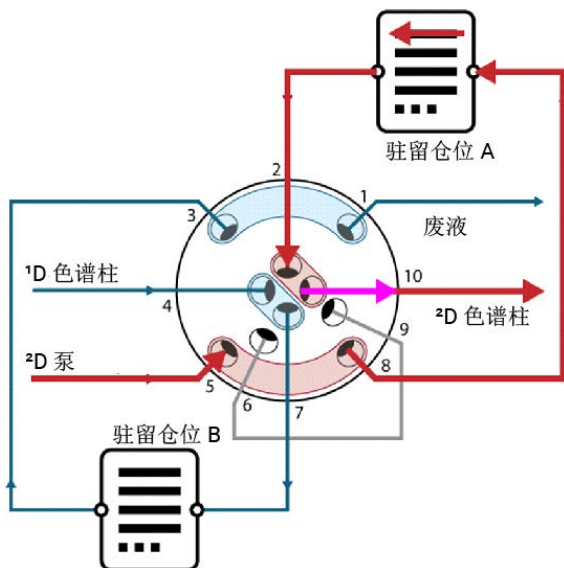


图 29 样品定量环流路的操作原理

完成 ASM 阶段（可设置的方法参数）后，分析梯度开始。与带永久旁路的稀释不同的是，ASM 毛细管不再处于流路中，因此仅可通过样品定量环实现快速的 2D 梯度。

2D-LC 的概念

主动溶剂调制 (ASM)

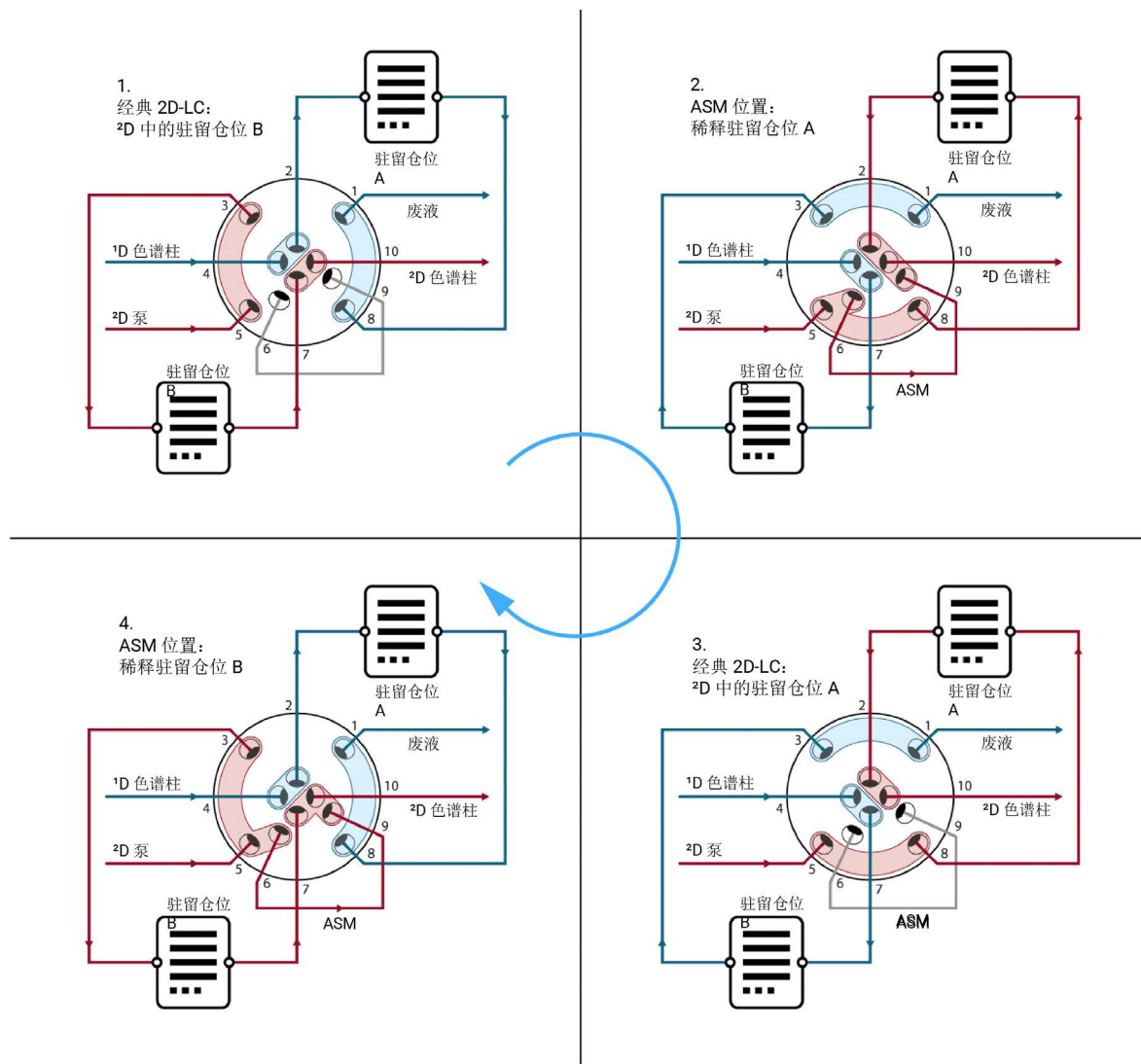


图 30 ASM 阀的切换周期 (逆流模式)

表 1 软件 (SW) 中的切换周期位置名称

- 1 经典 2D-LC:
²D 中的驻留仓位 B

Position Names	
Valve Position	Description
Position 1	Port 1 -> 8
Position 2	Port 1 -> 8 ASM
Position 3	Port 1 -> 3 -> 8 ASM
Position 4	Port 1 -> 3 ASM
Position 5	Port 1 -> 3

- 2 ASM 位置:
稀释驻留仓位 A

Position Names	
Valve Position	Description
Position 1	Port 1 -> 8
Position 2	Port 1 -> 8 ASM
Position 3	Port 1 -> 3 -> 8 ASM
Position 4	Port 1 -> 3 ASM
Position 5	Port 1 -> 3

- 4 ASM 位置:
稀释驻留仓位 B

Position Names	
Valve Position	Description
Position 1	Port 1 -> 8
Position 2	Port 1 -> 8 ASM
Position 3	Port 1 -> 3 -> 8 ASM
Position 4	Port 1 -> 3 ASM
Position 5	Port 1 -> 3

- 3 经典 2D-LC:
²D 中的驻留仓位 A

Position Names	
Valve Position	Description
Position 1	Port 1 -> 8
Position 2	Port 1 -> 8 ASM
Position 3	Port 1 -> 3 -> 8 ASM
Position 4	Port 1 -> 3 ASM
Position 5	Port 1 -> 3

ASM 阀的完整切换周期有 4 个位置。与标准 2D-LC 阀 G4236A 的位置 1 和 3 相同。ASM 阀在第 2 步和第 4 步有两个额外的位置。在这两个步骤中，ASM 毛细管在第二维，并分别稀释驻留仓位 A 和 B 中的溶剂。

注意

用户界面中的位置 3 (阀口 1 > 3 > 8 ASM) 可用于冲洗 ASM 阀中的所有管路。

了解 ASM 因子

ASM 的原理是，使用 ²D 溶剂稀释 ¹D 样品定量环溶剂。

通过样品定量环和 ASM 毛细管得到溶剂的平行流量，ASM 解决方案可以实现稀释。

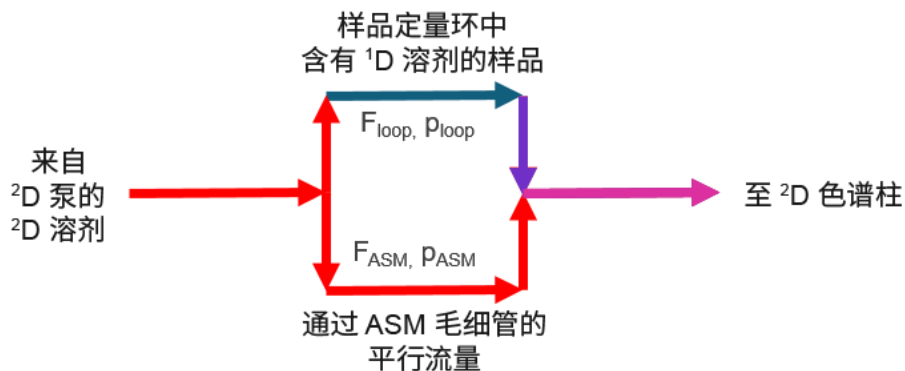


图 31 主动溶剂调制的原理 (示意图)

这些平行毛细管可以达到的流速 F 取决于所用毛细管的不同背压 p 。毛细管的背压取决于毛细管长度 l 、半径 r 的 4 次方和溶剂粘度 η 。

$$p = \frac{8\eta l F}{\pi r^4} \quad \text{Hagen-Poiseuille 方程}$$

Hagen-Poiseuille 方程描述了这些参数之间的关系。

不同的 ASM 毛细管长度对以下参数有影响：

- 毛细管背压
- 稀释因子
- 不同应用的最佳稀释度

分流比和 ASM 因子的计算示例。

与短毛细管相比，较长的毛细管会产生更高的背压，从而降低流量。

示例：

如果阀口 7 和 3 之间（2D-LC 阀至样品定量环并返回）的毛细管背压是阀口 9 和 6 之间的 ASM 毛细管背压的两倍，则流经 ASM 毛细管的溶剂量将为两倍。

这将以约 3 的因子（被称为 ASM 因子）对样品定量环中的 ¹D 溶剂进行稀释。

注意

使用 ASM 毛细管工具包会导致以下情况：

- ASM 分支和传输分支中的毛细管内径相同。
- 两条传输毛细管的长度相等。
- $ID_{loop} = 0.35 \text{ mm}$ 和 $ID_{capillaries} = 0.12 \text{ mm}$ 之间的差异很大。因此，定量环的背压可以忽略不计（这是因为 Hagen-Poiseuille 方程中为半径的 4 次方）。
- 平行流路中的溶剂组成及其粘度是不可预测的。

在 ASM 毛细管工具包的建议配置中（请参见以上注释），可以简化分流比和 ASM 因子计算的公式，如下所示：

$$Split\ ratio = \frac{l_{ASM}}{(2l_{tc1,2})}$$

l_{ASM} = ASM 毛细管的长度

$l_{tc1,2}$ = 传输毛细管 1 或 2 的长度

$$ASM\ factor = 1 + \left(\frac{1}{Split\ ratio} \right)$$

注意

软件计算的 ASM 因子不应视为一个固定数字，而是一个指导值，具体取决于方法开发。

全切割 2D-LC 和主动溶剂调制

还可将 ASM 阀用于改进全切割 2D-LC 分析，但它主要针对多重中心切割和高分辨率采样分析进行了优化。

ASM 阶段有助于调制周期。保持调制时间恒定，减少周期分离阶段的可用时间。否则，增加调制时间可能需要降低 ¹D 流速，来填充相同的样品定量环体积。这将改变 ¹D 色谱。

ASM 解决方案需要 2D-LC 阀至多重中心切割阀之间的毛细管的背压。因此，不得将全切割 2D-LC 样品定量环直接安装在 ASM 阀上。此外，全切割 2D-LC 样品定量环有标准配件，不适合 ASM 阀的 M4 阀口。

请注意，ASM 阀需要的切换数量是标准 2D-LC 阀的两倍。全切割 2D-LC 经常切换阀，因此不建议与 ASM 一起使用。

注意

定子和转子密封垫都需要定期维护。ASM 阀的磨损很大程度上取决于方法参数，例如压力和溶剂（例如高浓度缓冲液），因此建议使用 LabAdvisor 定期检查阀。

3

兼容性矩阵

MassHunter Workstation 数据采集 47

支持的操作系统 48

可用语言 48

常规软件要求 48

PC 要求 49

许可证 50

支持的驱动程序 51

支持的固件 52

本章提供有关硬件、固件和操作系统的安装和执行准备条件的信息。

MassHunter Workstation 数据采集

建议使用 MassHunter Workstation 数据采集的以下版本：

- 适用于 Q-TOF/TOF 的 MassHunter Workstation 数据采集 11（或更高版本）
- 适用于 TQ 的 MassHunter Workstation 数据采集 12（或更高版本）

可以使用基于 Agilent 驱动程序的 2D-LC 解决方案控制 MassHunter Workstation 数据采集和高端 LC/MS 仪器。有关支持的 LC 模块，请参阅 CDS 文档文件夹中的 CDS_requirements。

该软件已成功通过 12 个 LC 模块的测试。请注意，复杂的系统可能会增加 MassHunter 的内存消耗，这可能会降低系统稳定性。尽管不太可能发生，但仍建议注意以下事项：

- 定期重启 MassHunter Workstation 软件，例如，对于复杂系统，每周重启一次或多次
- 在 MassHunter 仪器的脱机副本中执行数据分析、报告和在线帮助的阅读
- 在开始新任务之前保存数据
- 避免运行期间进行过多交互，如编辑方法、更改信号图谱设置等。

注意

更新到 MassHunter Workstation 11 或 12 需要重建 PC 镜像。

注意

网络化工作站不支持文件拆分离器。

支持的操作系统

支持的操作系统与相应的 Agilent MassHunter CDS 版本支持的系统相同：

- Windows 10 专业版 Semi-Annual Channel (64 位) [1909 或更高版本]
- Windows 10 企业版 LTSC 版本 (64 位) [1809 或更高版本] Agilent 不提供
- Windows 11 专业版 (或专业工作站版) General Availability Channel: 21H2 或更高版本
- Microsoft Office 365 或 Excel 2016 32 位/Excel 2019 32 位

有关详细信息，请参阅 Agilent MassHunter CDS 版本的文档，如《MassHunter Workstation Requirements Guide》或《MassHunter Workstation Installation Guide》。

可用语言

嵌入式 Agilent 2D-LC 软件提供英文版本，并已使用英文版本的操作系统和 CDS 进行测试。

注意

并非所有 CDS 都支持所有可用语言。有关更多详细信息，请参见相应的 CDS 文档。

常规软件要求

表 2 常规软件要求

组件	详细信息
.NET Framework	<ul style="list-style-type: none"> • 在 Windows 8.1、Windows 10 或 Windows 11 上运行的系统必须启用 .NET 3.5.1，以及 • NET 4.7.2 或更高版本 (如果需要，将会通过 MassHunter 安装程序自动安装)
网页浏览器	<ul style="list-style-type: none"> • Google Chrome 40 或更高版本 • Edge
反病毒软件 ¹	<ul style="list-style-type: none"> • Microsoft Windows Defender

¹ 列出的反病毒软件已经过测试，与本文中描述的 MassHunter 软件兼容。虽然其他第三方反病毒解决方案也可能兼容，但它们尚未经过测试，因此无法保证兼容性。

PC 要求

Agilent MassHunter Workstation 的推荐 PC 技术指标如下所示。

表 3 经测试的推荐适用于 TOF/Q-TOF 的工作站和网络化工作站的硬件配置

项目	适用于除 6546 以外的所有 LC/Q-TOF	仅适用于 6546
说明	标准的支持 MassHunter 的计算机	大容量的支持 MassHunter 的计算机
处理器速度 (CPU)	Intel Xeon W-2123, 4 核, 3.6 GHz	Intel Xeon W-2235, 6 核, 3.8 GHz
物理内存 (RAM)	32 GB	64 GB
硬盘	1 TB M.2 NVMe SSD - 主要 (C:\) 启动。 4 TB x 2 RAID1 (4 TB) - 数据 (D:\)	1 TB M.2 NVMe SSD - 主要 (C:\) 启动。 6 TB x 4 RAID10 (12 TB) - 数据 (D:\)
图形分辨率	1920 x 1080	1920 x 1080
USB 端口 ¹ 下载。	安装时需要 1 个 USB 端口	安装时需要 1 个 USB 端口
LAN 卡 - House LAN 卡 - instrument ²	集成 Intel I217LM PCIe GbE 控制器 集成 Intel I217LM PCIe GbE 控制器	1 个集成 Intel I217LM PCIe GbE 控制器 1 个 Intel Ethernet 210-T1 PCIe

¹ 如果有 USB 端口，则可以通过网络复制安装媒介或从 <https://agilent.subscribenet.com>

² 需要第二个 LAN 接口将仪器的数据流量与局域网隔离开。

现有的使用 Agilent 捆绑 Z4 G4 PC 的 MassHunter Workstation 仅支持在工作站配置中运行的 MassHunter Workstation 12.0。

表 4 工作站的最低硬件配置

项目	适用于所有 TQ 系统
说明	Hewlett-Packard Z4 G4 Minitower
处理器速度 (CPU)	Intel Xeon W-2123 (3.6 GHz, 8.25 MB 缓存, 4 核)
物理内存 (RAM)	16 GB (2 x 8 GB) DDR4 2666 DIMM ECC 寄存器内存
硬盘	2 个 500 GB 7200 RPM SATA 6G 硬盘驱动器 (RAID 1)
图形分辨率	1920 x 1080
USB 端口 ¹ 下载	安装时需要 1 个 USB 端口
LAN 卡 ²	2 个集成 Intel I219 和 I210 PCIe GbE

¹ 如果有 USB 端口, 则可以通过网络复制安装媒介或从 <https://agilent.subscribenet.com>

² 需要第二个 LAN 接口将仪器的数据流量与局域网隔离开。

有关更多 Windows 10 和 Windows 11 的配置和网络要求, 请参阅《Agilent MassHunter Workstation Requirements Guide》。

许可证

默认情况下, 使用的色谱数据系统需要一个或多个许可证。

有关许可证的更多信息, 请参阅相应软件的文档。这些文档描述了如何在软件的控制面板中生成和安装许可证。通常, 每个销售订单都包含相应的许可证授权代码和/或许可证。此外, 您还需要一个 USB 硬件加密锁来激活 2D-LC 解决方案。

有关详细信息, 请参见第 119 页的[使用许可证加密锁激活 2D-LC 系统驱动程序](#)。

支持的驱动程序

表 5 支持的驱动程序

固件	色谱数据系统版本	LC & CE Driver 版本
A.07.02	MassHunter Workstation	3.5 (或更高版本)
B.07.35	11 (TOF/QTOF) (或更高版本)	
C.07.30	MassHunter Workstation	
D.07.35	12 (TQ) (或更高版本)	
	OpenLab CDS 2.7 (或更高版本)	

支持的固件

使用文件夹 Firmware 中的 Agilent 2D-LC 软件 USB 闪存驱动器中提供的固件。
Agilent 2D-LC 软件已经通过以下固件版本的测试：

表 6 支持的固件

设备	固件
Agilent 1100 系列、1200 系列和 1200 Infinity	A.07.02
Agilent 1200 系列、1200 Infinity 和 1120 Compact LC	B.07.35
Agilent 1200 Infinity 支持的模块	C.07.30
Agilent 1290 Infinity II 模块	D.07.35
Agilent 高端 LC/MS 仪器，如 G6546A	最新固件 ¹

¹ 建议的 LCMS 固件：一直使用由驱动程序包提供的最新固件安装包。

注意

- Agilent 为所谓的“固件集合”发布 LC 固件更新。
- 所有 Agilent LC 仪器固件集合的设计经过测试，真正严格地向下兼容已安装的软件库 (CDS)。
- 每个集合中的最新模块固件与同一个集合中的所有其他模块的固件完全兼容，可以互用。
- Agilent 始终建议使用固件集合的最新模块固件版本，避免互用问题。
- 通常，Agilent 始终建议使 LC 仪器固件保持最新状态。
- 不要将不同集合中的固件版本混用。Agilent 不保证使用较旧或较新版本的混合固件版本能够运行。

注意

可在以下链接中找到和下载固件：

<https://www.agilent.com/en-us/firmwareDownload?whid=69761>

或者，请参阅第 310 页的[更换模块固件](#)。

4

安装

1290 Infinity II 2D-LC 系统的硬件安装	54
交付清单	54
选项	55
仪器设置建议	59
1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统的硬件安装	88
交付清单	88
选项	92
Bio 2D-LC 系统的建议	95
许可 2D-LC 仪器	118
使用许可证加密锁激活 2D-LC 系统驱动程序	119
Agilent MassHunter Workstation 中的 2D-LC 软件安装和配置	121
附加信息	123
启动配置对话框	125
配置 HPLC 仪器	127
配置 2D-LC 组合	128
配置设备用户界面	131
重要的客户网络链接	135

本章介绍 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案的硬件和软件安装。2D-LC 仪器可与本文档中所述的软件一起使用。安装说明适用于标准中心切割、多重中心切割、高分辨率采样和全切割 2D-LC 模式。

注意

2D-LC 解决方案仅支持 2D-LC 阀位于外部阀驱动装置中的仪器设置，请参见第 59 页的常规信息。

1290 Infinity II 2D-LC 系统的硬件安装

交付清单

条目	部件号	说明
1	G4243-90000 📄	Agilent G4243A 2D-LC ASM 阀指南技术说明
2	5067-4266 📄	2D-LC ASM 阀头, 1300 bar
3	G4236-68000 📄	2D-LC 轻松入门工具包 (旧系统) 内部部件, 不可订购
4	G4236-68100 📄	适用于 ESZ 服务的 2D-LC 轻松入门工具包 内部部件, 不可订购
5	G1680-63721 📄	网络 LAN 交换机
6	5500-1300 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 85 mm M/M
7	5500-1301 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 170 mm M/M
8	5500-1302 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 340 mm M/M
9	5500-1303 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 680 mm M/M
10	5500-1376 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 170 mm M/M
11	5067-6171 📄	毛细管工具包 2D-LC, Infinity Classic (可选) 内部部件, 不可订购
12	5067-6585 📄	毛细管工具包 2D-LC, 1290 Infinity II 内部部件, 不可订购

毛细管工具包 2D-LC，1290 Infinity II 包含以下部件：

#	部件号	说明
2	5043-0269 	连接适配器 用于 Agilent 1290 阀驱动器 (G1170A)
1	5067-4608 	不锈钢毛细管 0.17 mm x 280 mm SX/S
2	5067-4651 	不锈钢毛细管 0.12 mm x 280 mm SL/SX
1	5067-4669 	不锈钢毛细管 0.12 mm x 600 mm S/SL
1	5067-4670 	不锈钢毛细管 0.17 mm ID 600 mm pre-swaged
1	5500-1217 	不锈钢毛细管 0.17 mm x 900 mm SI/SX
1	5500-1227 	不锈钢毛细管 0.17 mm x 150 mm SL-SL
1	5500-1240 	不锈钢毛细管 0.17 mm x 105 mm SL/SL
2	5500-1245 	不锈钢毛细管 0.17 mm x 400 mm SI/SI
2	5500-1251 	不锈钢毛细管 0.12 mm x 400 mm SL/SL

注意

根据仪器的设置，设置仪器可能需要额外的部件和毛细管。这些部件单独订购或与其他部件一起装运，例如 2D-LC 或 MHC 阀。以下的仪器设置部分中描述了其来源及功能。

选项

注意

Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 系统必须包含 Agilent Infinity II 高速泵 G7120A、Agilent Infinity II Bio 高速泵 G7132A 或 Agilent 1290 Infinity 二元泵 G4220A 来作为 ²D 泵。

这是实现以下目标的前提：

- 同步阀切换
- 在 ²D 色谱柱上运行快速梯度

表 7 推荐的硬件配置概述

功能	功能元素	部件号	模块	注释
泵		G7120A	90 Infinity II 高速泵	
		G7132A	1290 Infinity II 生物惰性高速泵	
		G7112B	1260 Infinity II 二元泵	
		G7111B	1290 Infinity II 四元泵	
		G7104A	1290 Infinity II 多功能泵	
		G7104C	1260 Infinity II 多功能泵	
		G4220A/B	1290 Infinity 二元泵	
		G4204A	1290 Infinity 四元泵	
		G1312B	1260 Infinity 二元泵	
进样器		G7129B	1290 Infinity II 样品瓶进样器	
		G7167B/ G7137A	1290 Infinity II Multisampler/ 1290 Infinity II 生物惰性 Multisampler	
¹ D 柱温箱		G7116B	1290 Infinity II 大容量柱温箱	
		G1316C	1290 Infinity 柱温箱	
检测器		G7117A/B/C	1260/1290 Infinity II 二极管阵列检测器	将 ¹ D 流速调整到流通池压力规格。另请参阅有关压力释放工具包的注释。建议用于多重中心切割和高分辨率采样，作为峰触发或用于监测。对全切割 2D-LC 可选。 ¹ D 流通池需要 60 bar 的最低压力稳定性（这不包含 FLD 和 RID 检测器）。
		G7114A/B	1260/1290 Infinity II 可变波长检测器	
		G7115A	1260 Infinity II 二极管阵列检测器 WR	
		G7165A	1260 Infinity II 多波长检测器	

注意

对于 ¹D/²D 切换或基于时间的分析，可能还需要在第一维使用质谱仪。有关更多详细信息，请参阅第 77 页的[额外功能的可选仪器设置](#)。

注意

目前，非 CAN 检测器，如 MSD 和 ELSD，只能由 LC 和 CE 驱动程序配置为第二维检测器。

表 7 推荐的硬件配置概述

功能	功能元素	部件号	模块	注释
	阀驱动器	G1170A	1290 Infinity 阀驱动器	
接口	2D-LC 阀	G4236A	2D-LC 阀工具包, 标准	包含 2D-LC 阀头
		G4243A	2D-LC 阀工具包, ASM	包含 2D-LC 阀头, 支持主动溶剂调制 (ASM) 功能
	MHC 阀	G4236A#007 G4243A#007	多重中心切割工具包	包含两个 MHC 阀头
G4242A		2D-LC 多重中心切割升级工具包	将 MHC 阀升级至现有 2D-LC 系统的工具包	
	压力释放工具包 (PRK)	G4236-60010	压力释放工具包	如果使用 ¹ D 检测器, 则必须提供。该工具包可防止压力脉冲并保护检测器流通池!

表 7 推荐的硬件配置概述

功能	功能元素	部件号	模块	注释
泵		G7120A	1290 Infinity II 高速泵	需要 1290 Infinity 或 Infinity II 二元泵。
		G7132A	1290 Infinity II 生物惰性高速泵	
		G4220A	Infinity 1290 二元泵	
² D	柱温箱	G7116B	1290 Infinity II 大容量柱温箱	可选：如果 ¹ D 和 ² D 之间的温差较大，可选第二柱温箱。其中任何一个模块都受支持，其他模块或旧模块也受支持。
		G1316C	1290 Infinity 柱温箱	
检测器		G7117A/B/C	1260/1290 Infinity II 二极管阵列检测器	
		G7114A/B	1260/1290 Infinity II 可变波长检测器	
		G7115A	1260 Infinity II 二极管阵列检测器 WR	
		G7165A	1260 Infinity II 多波长检测器	
		G1321B	1260 Infinity FLD	
		G4260A	1260 Infinity ELSD	
		G7102A	1290 Infinity II ELSD	
			Agilent 单四极杆检测器 LC/MSD 高端质谱仪，如 TOF/QTOF 或 TQ	

注意

可以通过 UIB2 G1390A 模数转换器连接第三方检测器。但这些第三方模块在 CDS 中的功能有限。

注意

由于可能会产生拖尾，建议不要将 G7117A/B 和 G4212A/B 流通池用于 WCX 和低盐 SEC。

注意

要使用 UV 检测器（例如 VWD、DAD WR 或 LSS）分析光敏样品，请选择合适的流通池和低光强度。这对于第一维中的检测器尤其重要。

仪器设置建议

常规信息

InfinityLab 2D-LC 解决方案提供多个特制模板，同时仍可支持 InfinityLab 系列和 1200 系列 Infinity 模块的灵活 HPLC 组合。与 Agilent 质谱仪组合使用时，2D-LC 解决方案的 HPLC 部分需要双堆叠配置。对于 2D-LC，始终首选双堆叠配置。在左侧堆叠上，模块从下到上的顺序是：两个维度的泵，然后是样品瓶进样器或 Multisampler。

进样器必须放置在泵的顶部。右侧堆叠由一到两个柱温箱和一到两个标准 UV 检测器组成。

根据使用的溶剂数量，两部分堆叠都允许将溶剂盒放置在顶部。

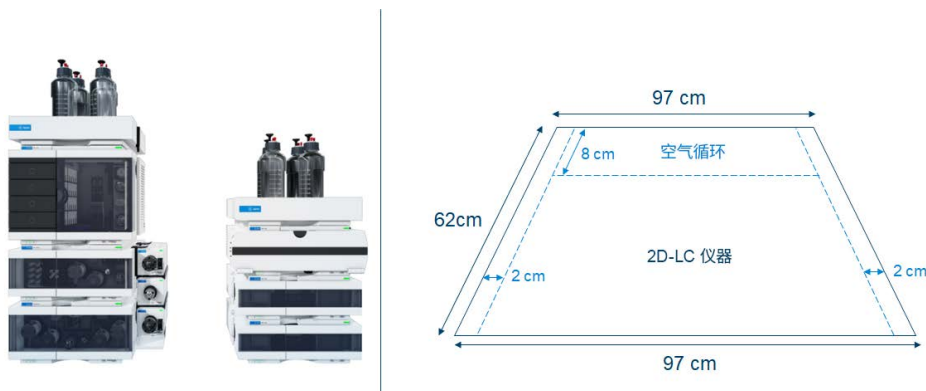


图 32 左侧：1290 Infinity II 2D-LC 系统的建议堆叠配置。
右侧：1290 Infinity II 2D-LC 系统的工作台空间要求。

注意

2D-LC 的双堆叠配置需要至少 97 x 62 cm (24.4 x 38.2 英寸) 的自由垂直工作台空间。2.5 cm 两侧 (1.0 英寸) 的空间和后部约 8 cm (3.1 英寸) 的空间保留用于空气循环和电路连接。

2D-LC 阀和可选 MHC 驻留仓位的安装

连接外部阀驱动器

对于包含至少一台 1260 Infinity II 或 1290 Infinity II 泵的 InfinityLab 2D-LC 仪器，使用阀夹工具包 IF II (5067-5685) 将阀驱动器连接至该泵，而阀驱动器通过连接适配器 (5043-0269) 互连。2D-LC 阀和 MHC 驻留仓位（如果选择）安装在外部阀驱动器 (G1170A) 上。

#	固定器/连接器	连接	部件号
3	1290 Infinity 阀驱动器（必须单独购买）	承载阀	G1170A
1	夹具导轨工具包 IF II（随 G1170A 交付）	顶部阀至泵	5067-5685
2	连接适配器（随 MHC 驻留仓位交付）	在 G1170A 驱动器之间	5043-0269

对于 SHC 配置，2D-LC 阀 (G4236A) 连接至堆叠的上部泵。如果使用 MHC 配置，上部 MHC 驻留仓位将连接至上部泵。

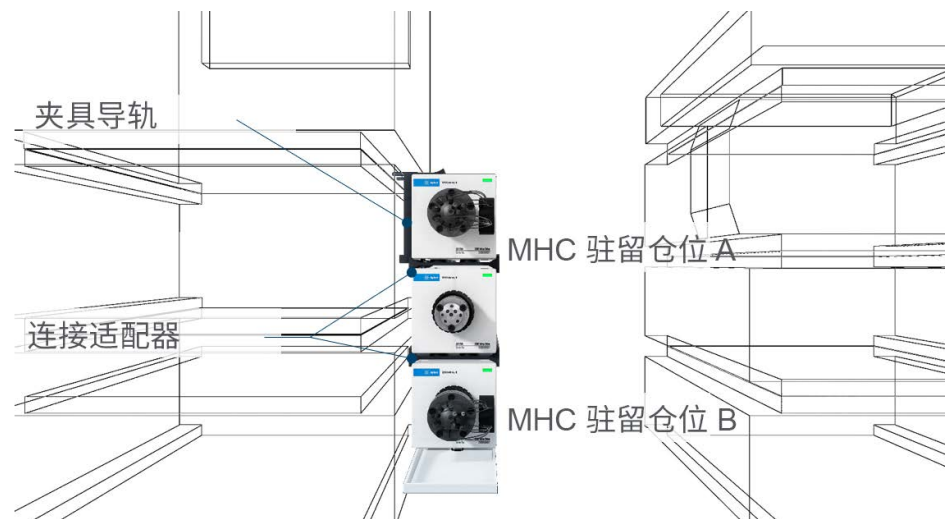


图 33 2D-LC 阀和 MHC 驻留仓位（可选）的安装和附件示意图



- 1 将夹具导轨安装在 Infinity II 泵的右侧：主体外壳上有圆形凹陷的标记。使用尖头螺丝刀打一个小孔，并用 3 个自切自攻螺钉拧紧夹具导轨。
- 2 将阀头安装在 G1170A 外部阀驱动器上。
- 3 夹紧第一个外部阀驱动器，将 MHC 阀置于顶部。
- 4 将连接适配器连接到其他每个外部阀驱动器，并根据第 60 页的图 33 中所示的位置进行安装。
- 5 将带传感器的漏液样品盘安装在最下面的外部阀驱动器下方。
- 6 安装压力释放工具包，请参见第 86 页的[安装压力释放工具包](#)。

阀配置

Agilent InfinityLab 2D-LC 解决方案提供两种通用阀配置，以便确定仪器使用的 2D-LC 模式。单中心切割 (SHC) 配置可提供单中心切割和全切割 2D-LC，而多重中心切割 (MHC) 配置还可额外提供多重中心切割和高分辨率采样 2D-LC。此外，主动溶剂调制阀 (G4243A) 仅适用于 MHC 配置。可在可选硬件配置中找到所有可用 2D-LC 模式的概述。(第 56 页的表 7)

所有其他 LC 模块 (参比) 的堆叠设置仍然有效，因为这些设置独立于阀配置。

表 8 取决于 2D-LC 系统阀配置的 2D-LC 模式概览

阀	SHC 配置	MHC 配置
		
2D-LC 阀, 标准	✓	✓
2D-LC 阀, 主动溶剂调制 (ASM)	X	✓
操作模式	SHC 配置	MHC 配置
全切割 (LCxLC)	✓	✓
单中心切割	✓	✓
多重中心切割	X	✓
高分辨率采样	X	✓

单中心切割配置

专门用于单中心切割和全切割 2D-LC 实验的 2D-LC 仪器仅需标准 2D-LC 阀 (G4236A)。该阀可以方便地连接到安装的任何 Infinity II 泵上。SHC 配置无需传输毛细管 (6a/6b)，因为 MHC 驻留仓位未安装。

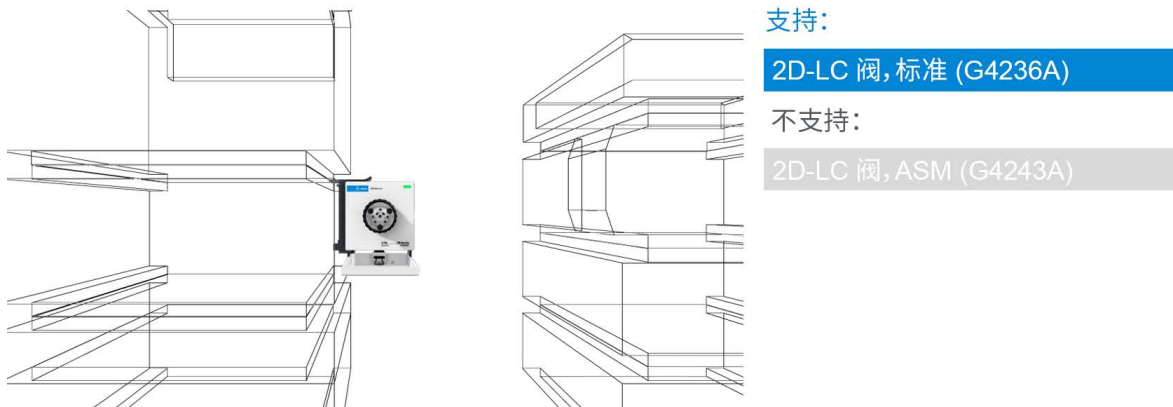


图 34 带支撑阀的单中心切割 (SHC) 配置示意图技术原因导致单中心切割设置不支持 ASM 阀 (G4243A)。

多重中心切割配置

用于多重中心切割或高分辨率采样 2D-LC 的 2D-LC 仪器需要额外的 MHC 驻留仓位。对于 MHC 配置，支持标准 2D-LC 阀 (G4236A) 和 ASM 阀头 (G4243A)。这些阀可以方便地连接到堆块中的任何 Infinity II 泵。根据使用的阀头，必须安装不同的传输毛细管 (6a/6b)。安装时，请遵循以下指南。

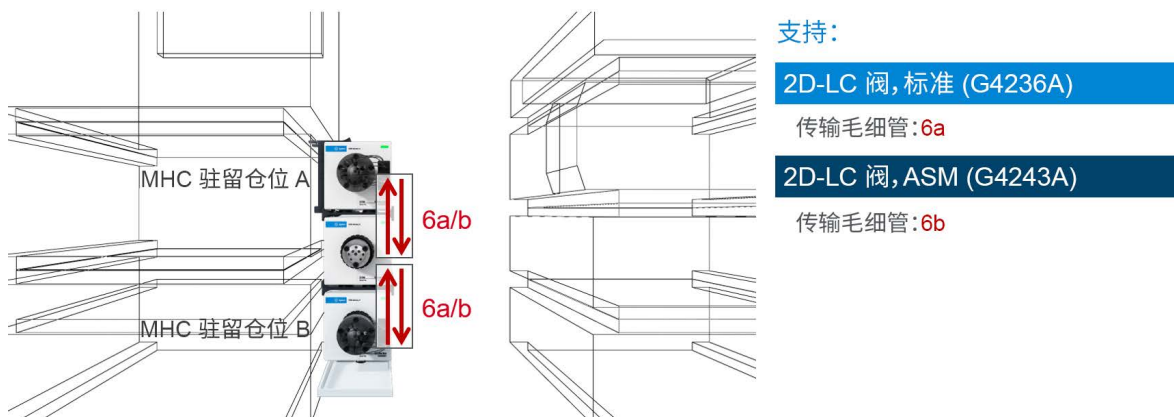


图 35 带支撑阀和传输毛细管的多重中心切割 (MHC) 配置示意图

建议的堆叠设置

InfinityLab 2D-LC 解决方案以三种可变形式提供三种基本堆叠设置，具体取决于所使用的柱温箱概念。通过用于第一和第二维的泵来区分基本堆叠配置。在第二维中，必须使用 1290 Infinity 或 1290 Infinity II 高速泵。Agilent 1290 Infinity 泵始终安装在底部。毛细管工具包涵盖所有推荐的配置。以下配置优化了系统流路，确保最小延迟和扩散体积：

表 9 支持的仪器配置以及支持的 LC 泵列表。数量参考建议的堆叠设置。

#	¹ D 泵	支持的 ² D 泵
1	1290 Infinity II/1260 Infinity II Prime LC 1260 Infinity II 多功能泵 (G7104C) Agilent 1260 Infinity II Bio 多功能泵 (G7131C) 1290 Infinity II 多功能泵 (G7104A) Agilent 1290 Infinity II Bio 多功能泵 (G7131A) 1290 Infinity II 高速泵 (G7120A) Agilent 1290 Infinity II Bio 高速泵 (G7132A)	1290 Infinity/1290 Infinity II 1290 Infinity II 高速泵 (G7120A) Agilent 1290 Infinity II Bio 高速泵 (G7132A) 1290 Infinity 二元泵 (G4220A) 请参见 第 72 页的图 39
2	1290 Infinity 1290 Infinity 四元泵 (G4204A) 1290 Infinity 二元泵 (G4220A)	1290 Infinity II 1290 Infinity II 高速泵 (G7120A) 请参见 第 74 页的图 40
3	1260 Infinity 二元/1260 Infinity II 二元 1260 Infinity II 二元泵 (G7112B) 1260 Infinity 二元泵 (G1312B)	1290 Infinity II 1290 Infinity II 高速泵 (G7120A) 请参见 第 75 页的图 41

注意

本指南仅涵盖至少包含一个 Infinity II 泵模块的设置！必须将仅包含 1200 Infinity 系列模块的设置与相应的毛细管工具包一起安装。

此设置中提到的连接如下：

- 顺流方向的采用单中心切割配置的标准 2D-LC 阀 (G4236A)
请参阅第 67 页的图 36。
- 逆流方向的采用多重中心切割配置的 ASM 2D-LC 阀 (G4243A) 或标准 2D-LC 阀 (G4236A)
请参阅第 70 页的图 38。

在说明表中，使用括号说明与阀口的连接，例如 ASM 阀 (2) = ASM 阀，阀口 2。

如果希望连接 2D-LC 阀的方向与这些建议的 2D-LC 设置不同，请按照 LC 驱动程序在线帮助中的 **2D-LC 阀拓扑** 下显示的示意图进行操作。

连接 2D-LC 阀, 标准 (G4236A)

2D-LC 阀的毛细管连接取决于实现的是顺流还是逆流配置。标准 2D-LC 阀可同时实现顺流和逆流操作。本章中的示意图显示的是顺流方向。

如果要以其他方向连接 2D-LC 阀, 请按照 LC 驱动程序在线帮助中的 **2D-LC 阀拓扑** 下显示的示意图进行操作。

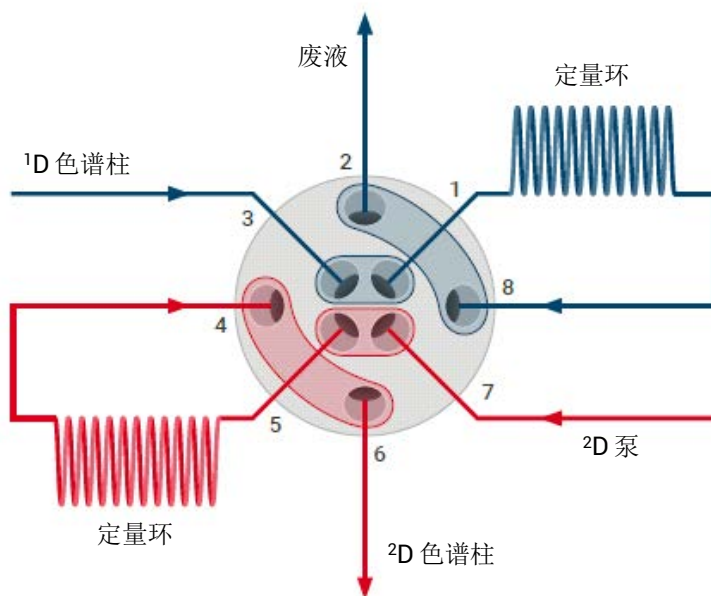


图 36 示意图: 标准 2D-LC 阀 (G4236A) (顺流)。

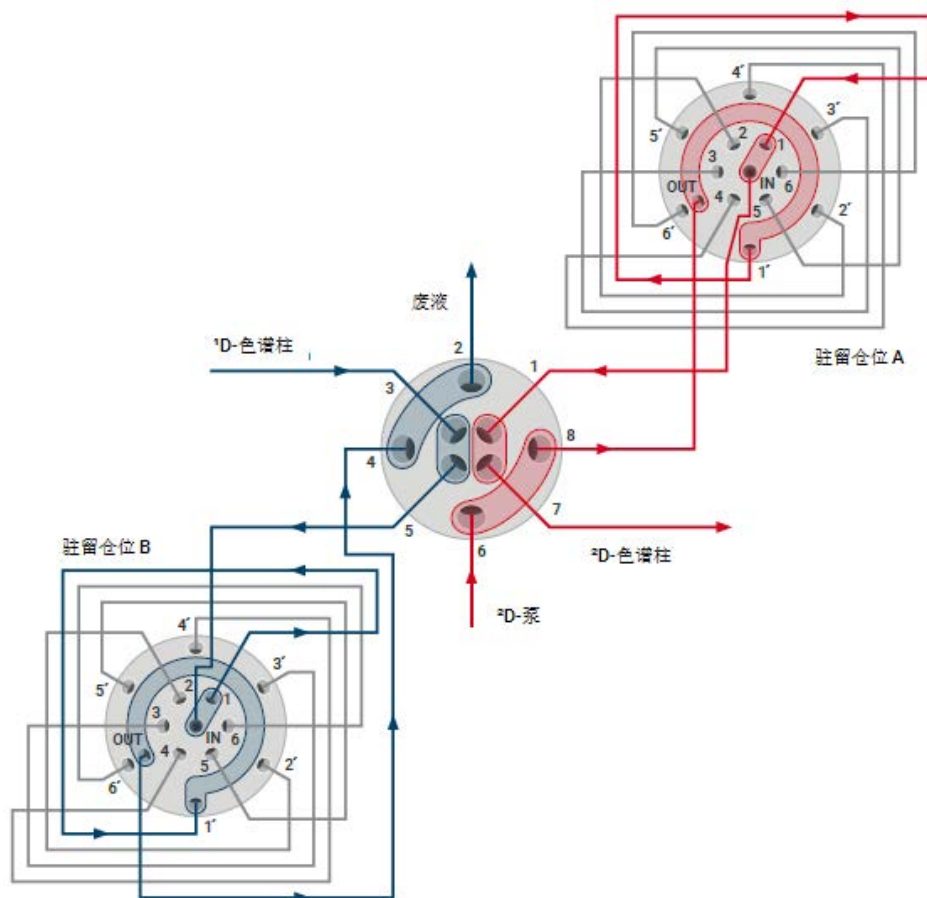


图 37 标准 2D-LC 阀 (G4236A), MHC 1300 bar (逆流)

端口	毛细管编号	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
1	6a	至 MHC 阀 (OUT) 的传输毛细管, 驻留仓位 A	0.12 x 170	5500-1270	不锈钢毛细管 0.12x170 S/M
2	11	废液管	0.7 x 自切	0890-1713	柔性软管 0.8/1.61 mm PTFE WT (随 UV 检测器交付)
3	5	从压力释放工具包; 从 ¹ D 色谱柱, ¹ D 检测器	0.17 x 105 0.12 x 500	5500-1240 5500-1157	不锈钢毛细管 0.17x105 SL/SL 不锈钢毛细管 0.12x500 SL/S
4	6a	至 MHC 阀 (IN) 的传输毛细管, 驻留仓位 B	0.12 x 170	5500-1270	不锈钢毛细管 0.12x170 S/M
5	6a	至 MHC 阀 (OUT) 的传输毛细管, 驻留仓位 B	0.12 x 170	5500-1270	不锈钢毛细管 0.12x170 S/M
6	7	至 ² D 色谱柱	0.12 x 400	5500-1251	不锈钢毛细管 0.12x400 SL/SL
7	9	从 ² D 泵	0.17 x 280	5067-4608	不锈钢毛细管 0.17x280 SX/S
8	6a	至 MHC 阀 (IN) 的传输毛细管, 驻留仓位 A	0.12 x 170	5500-1270	不锈钢毛细管 0.12x170 S/M

连接 2D-LC 阀, ASM (G4243A)

与标准 2D-LC 阀 (G4236A) 不同的是, 当使用 ASM 模式时, Agilent 建议为 ASM 2D-LC 阀 (G4243A) 使用逆流配置。本节介绍 ASM 阀逆流配置的设置。有关顺流设置, 请参阅 2D-LC 软件中 ASM 2D-LC 阀的顺流配置。您可以在 OpenLab ChemStation 的 **Instrument > 2D-LC Configuration** 下或 OpenLab CDS 和 MassHunter 中 LC 驱动程序在线帮助的 **2D-LC 阀拓扑** 下找到 **Valve topology** 配置屏幕。

2D-LC 系统的安装取决于您使用的模块以及上文所述的 2D-LC 模式。连接方案在 2D-LC 配置的图形用户界面中显示为 **2D-LC 阀拓扑**：

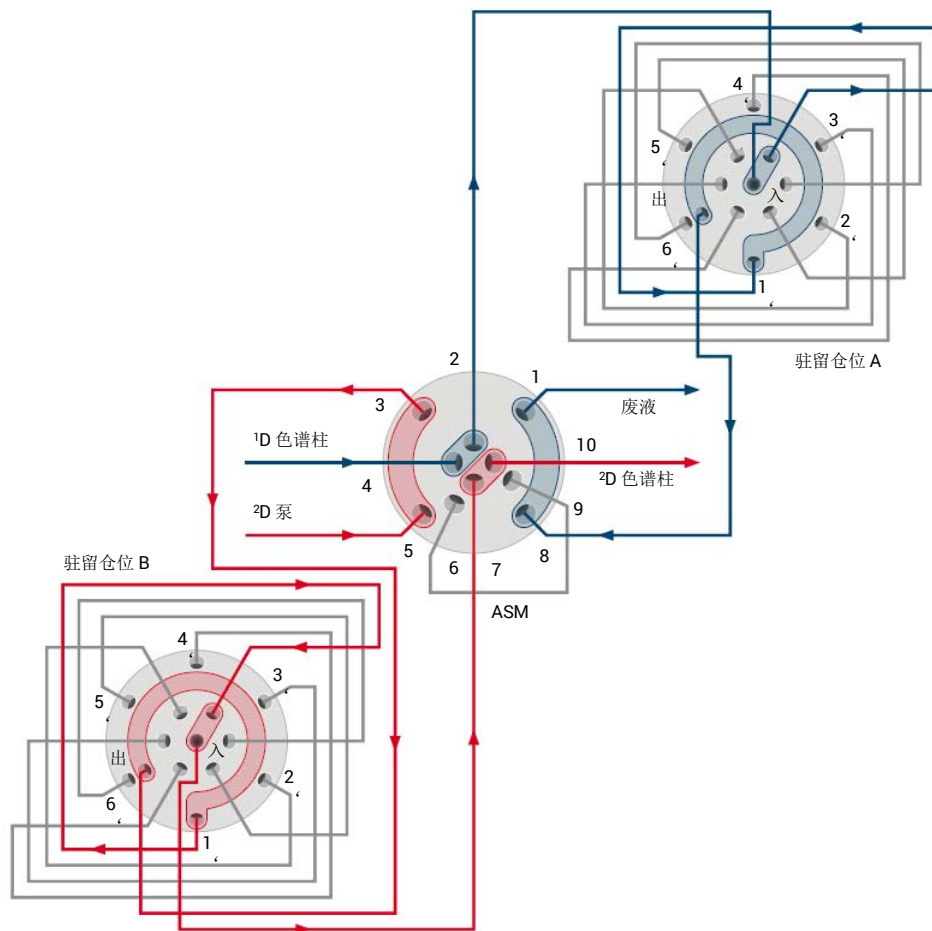


图 38 示意图：ASM 2D-LC 阀 (G4243A) (逆流)

注意

与上图所示的示例相反，对于具有不同对称性的 1200 bar MHC 阀，连接为“OUT/IN”。

端口	毛细管编号	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
1	11	废液管	0.7 x 自切	0890-1713	柔性软管 0.8/1.61 mm PTFE WT (随 UV 检测器交付)
2	6b	至 MHC 阀 (IN) 的传输毛细管, 驻留仓位 A	0.12 x 170	5500-1376	不锈钢毛细管 0.12x170 M/M
3	6b	自 MHC 阀 (OUT) 的传输毛细管, 驻留仓位 B	0.12 x 170	5500-1376	不锈钢毛细管 0.12x170 M/M
4	5 F3	从压力释放工具包; 从 ¹ D 色谱柱, ¹ D 检测器	0.17 x 105 0.12 x 500	5500-1240 5500-1157	不锈钢毛细管 0.17x105 SL/SL 不锈钢毛细管 0.12x500 SL/S
5	9	从 ² D 泵	0.17 x 280	5067-4608	不锈钢毛细管 0.17x280 SX/S
6	ASM1-4	至 ASM 毛细管的出口	0.12 x L		请参见下面的列表
7	6b	至 MHC 阀 (IN) 的传输毛细管, 驻留仓位 B	0.12 x 170	5500-1376	不锈钢毛细管 0.12x170 M/M
8	6b	自 MHC 阀 (OUT) 的传输毛细管, 驻留仓位 A	0.12 x 170	5500-1376	不锈钢毛细管 0.12x170 M/M
9	ASM1-4	自 ASM 毛细管的入口	0.12 x L		请参见下面的列表
10	7	至 ² D 色谱柱	0.12 x 400	5500-1251	不锈钢毛细管 0.12x400 SL/SL

应使用的 ASM 毛细管取决于 ASM 因子，这最适合您的应用。您可以从以下毛细管中选择：

表 10 可用的 ASM 毛细管和特性

毛细管 部件号	长度 (mm)	内径 (mm)	体积 (μL)	ASM 因子	分流比 (定量环： ASM)
5500-1300	85	0.12	0.96	5	1:4
5500-1301	170	0.12	1.9	3	1:2
5500-1302	340	0.12	3.8	2	1:1
5500-1303	680	0.12	7.7	1.5	1:0.5

通过 ASM 毛细管的流量
ASM 因子

ASM 背压

#1

自动进样器

1^D 泵

1290 Infinity II 高速泵
1290 Infinity II 多功能泵
1260 Infinity II 多功能泵

2^D 泵

1290 Infinity II 高速泵
1290 Infinity 二元泵

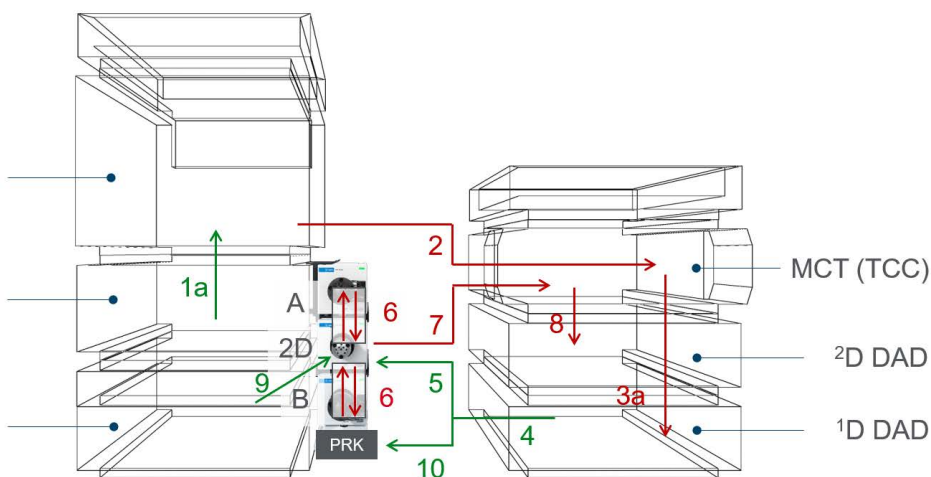


图 39 堆叠设置 #1: 如果两个泵都是 Infinity II 模块或 2^D 泵是 1290 Infinity 二元泵, 建议使用该设置。

毛细管 编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
1a	1	¹ D 泵 (顶部) 到自动进样器	0.17 x 400	5500-1245	不锈钢毛细管 0.17x400 SI/SI
2	1	自动进样器到 ¹ D 色谱柱 (在 MCT 中)	0.12 x 600	5067-4669	不锈钢毛细管 0.12x600 S/SL
3a	1	¹ D 色谱柱到 ¹ D DAD	0.12 x 400	5500-1251	不锈钢毛细管 0.12x400 SL/SL
4	1	¹ D DAD 到 PRK 的三通	0.17 x 400	5500-1245	不锈钢毛细管 0.17x400 SI/SI
5	1	PRK 的三通至标准 2D-LC 阀 (阀口 3) /ASM 阀 (阀口 4)	0.17 x 105	5500-1240	不锈钢毛细管 0.17x105 SL/SL
6a	4	2D-LC 阀 (1) - 驻留仓位 (IN) - 驻留仓位 (OUT) - 2D-LC 阀 (8) 2D-LC 阀 (5) - 驻留仓位 (IN) - 驻留仓位 (OUT) - 2D-LC 阀 (4)	0.12 x 170	5500-1270	不锈钢毛细管 0.12x170 S/M
6b	4	ASM 阀 (7) - 驻留仓位 (IN) - 驻留仓位 (OUT) - ASM 阀 (3) ASM 阀 (2) - 驻留仓位 (IN) - 驻留仓位 (OUT) - ASM 阀 (8)	0.12 x 170	5500-1376	不锈钢毛细管 0.12x170 M/M (随 2D-LC 阀工具包交付, ASM)
7	1	2D-LC 阀 (6)/ASM 阀 (10) 到 ² D 色谱柱 (在 MCT 中)	0.12 x 400	5500-1251	不锈钢毛细管 0.12x400 SL/SL
8	1	² D 色谱柱 (在 MCT 中) 到 ² D DAD	0.12 x 280	5067-4651	不锈钢毛细管 0.12x280 SL/SX
9	1	² D 泵到 2D-LC 阀 (7)/ASM 阀 (5)	0.17 x 280	5067-4608	不锈钢毛细管 0.17x280 SX/S
10	1	PRK 的三通至阻尼毛细管	0.17 x 150	5500-1227	不锈钢毛细管 0.17x150 SL/SL
11	1	废液管	0.7 x 自切	0890-1713	柔性软管 0.8/1.61mm PTFE WT (随 UV 检测器交付)

#2

自动进样器

²D 泵

1290 Infinity II 高速泵

¹D 泵

1290 Infinity 四元泵

1290 Infinity 二元泵

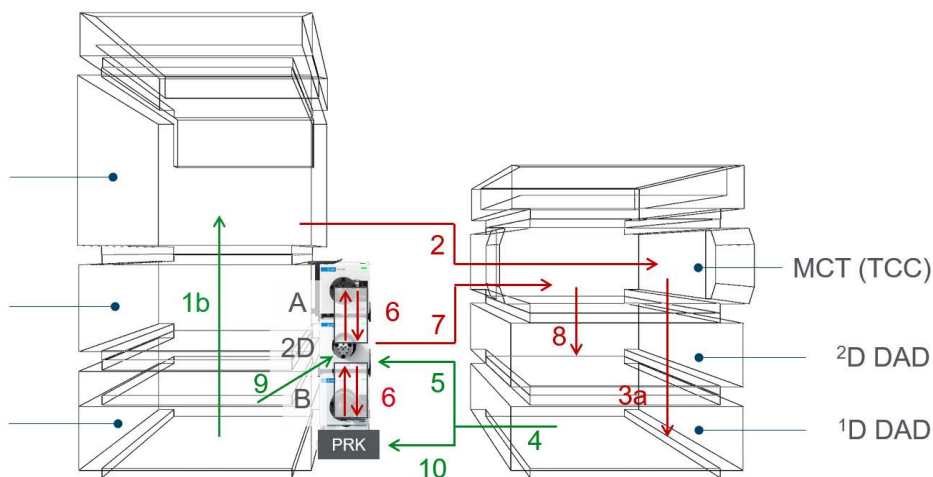


图 40 堆叠设置 #2: 如果 ¹D 泵是 1290 Infinity 二元泵或 1290 Infinity 四元泵, 建议使用该设置。

毛细管编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
1b	1	¹ D 泵 (底部) 至进样器	0.17 x 600	5067-4670	不锈钢毛细管 0.17x600 S/SH
2	1	自动进样器到 ¹ D 色谱柱 (在 MCT 中)	0.12 x 600	5067-4669	不锈钢毛细管 0.12x600 S/SL
3a	1	¹ D 色谱柱到 ¹ D DAD	0.12 x 400	5500-1251	不锈钢毛细管 0.12x400 SL/SL
4	1	¹ D DAD 到 PRK 的三通	0.17 x 400	5500-1245	不锈钢毛细管 0.17x400 SI/SI
5	1	PRK 的三通至标准 2D-LC 阀 (阀口 3) /ASM 阀 (阀口 4)	0.17 x 105	5500-1240	不锈钢毛细管 0.17x105 SL/SL
6a	4	2D-LC 阀 (1) - 驻留仓位 (IN) - 驻留仓位 (OUT) - 2D-LC 阀 (8) 2D-LC 阀 (5) - 驻留仓位 (IN) - 驻留仓位 (OUT) - 2D-LC 阀 (4)	0.12 x 170	5500-1270	不锈钢毛细管 0.12x170 S/M

毛细管编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
6b	4	ASM 阀 (7) - 驻留仓位 (IN) - 驻留仓位 (OUT) - ASM 阀 (3) ASM 阀 (2) - 驻留仓位 (IN) - 驻留仓位 (OUT) - ASM 阀 (8)	0.12 x 170	5500-1376	不锈钢毛细管 0.12x170 M/M (随 2D-LC 阀工具包交付, ASM)
7	1	2D-LC 阀 (6)/ASM 阀 (10) 到 ² D 色谱柱 (在 MCT 中)	0.12 x 400	5500-1251	不锈钢毛细管 0.12x400 SL/SL
8	1	² D 色谱柱 (在 MCT 中) 到 ² D DAD	0.12 x 280	5067-4651	不锈钢毛细管 0.12x280 SL/SX
9	1	² D 泵到 2D-LC 阀 (7)/ASM 阀 (5)	0.17 x 280	5067-4608	不锈钢毛细管 0.17x280 SX/S
10	1	PRK 的三通至阻尼毛细管	0.17 x 150	5500-1227	不锈钢毛细管 0.17x150 SL/SL
11	1	废液管	0.7 x 自切	0890-1713	柔性软管 0.8/1.61mm PTFE WT (随 UV 检测器交付)

#3

自动进样器

²D 泵

1290 Infinity II 高速泵

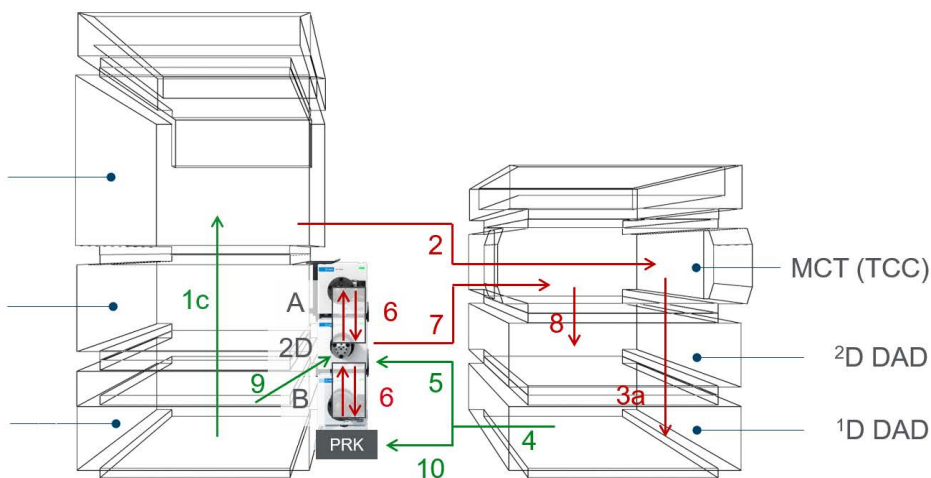
¹D 泵1260 Infinity 二元泵
1260 Infinity II 二元泵

图 41 堆叠设置 #3: 如果 ¹D 泵是 1260 Infinity 或 1260 Infinity II 二元泵, 建议使用该设置。

毛细管 编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
1c	1	¹ D 泵 (底部) 至进样器	0.17 x 900	5500-1217	不锈钢毛细管 0.17x900 SI/SX
2	1	自动进样器到 ¹ D 色谱柱 (在 MCT 中)	0.12 x 600	5067-4669	不锈钢毛细管 0.12x600 S/SL
3a	1	¹ D 色谱柱到 ¹ D DAD	0.12 x 400	5500-1251	不锈钢毛细管 0.12x400 SL/SL
4	1	¹ D DAD 到 PRK 的三通	0.17 x 400	5500-1245	不锈钢毛细管 0.17x400 SI/SI
5	1	PRK 的三通至标准 2D-LC 阀 (阀口 3) /ASM 阀 (阀口 4)	0.17 x 105	5500-1240	不锈钢毛细管 0.17x105 SL/SL
6a	4	2D-LC 阀 (1) - 驻留仓位 (IN) - 驻留仓位 (OUT) - 2D-LC 阀 (8) 2D-LC 阀 (5) - 驻留 仓位 (IN) - 驻留仓位 (OUT) - 2D-LC 阀 (4)	0.12 x 170	5500-1270	不锈钢毛细管 0.12x170 S/M
6b	4	ASM 阀 (7) - 驻留仓位 (IN) - 驻留仓位 (OUT) - ASM 阀 (3) ASM 阀 (2) - 驻留仓位 (IN) - 驻留仓位 (OUT) - ASM 阀 (8)	0.12 x 170	5500-1376	不锈钢毛细管 0.12x170 M/M (随 2D-LC 阀工具 包交付, ASM)
7	1	2D-LC 阀 (6)/ASM 阀 (10) 到 ² D 色谱柱 (在 MCT 中)	0.12 x 400	5500-1251	不锈钢毛细管 0.12x400 SL/SL
8	1	² D 色谱柱 (在 MCT 中) 到 ² D DAD	0.12 x 280	5067-4651	不锈钢毛细管 0.12x280 SL/SX
9	1	² D 泵到 2D-LC 阀 (7)/ASM 阀 (5)	0.17 x 280	5067-4608	不锈钢毛细管 0.17x280 SX/S
10	1	PRK 的三通至阻尼毛细管	0.17 x 150	5500-1227	不锈钢毛细管 0.17x150 SL/SL
11	1	废液管	0.7 x 自切	0890-1713	柔性软管 0.8/1.61mm PTFE WT (随 UV 检测 器交付)

额外功能的可选仪器设置

可以使用额外阀升级标准堆叠设置，增加额外的功能。第 65 页的表 9 概述了标准 2D-LC 仪器的所有受支持的修改。建议一次仅修改一处，以确保仪器的正确操作。标准堆叠设置使用包含 ^1D 和 ^2D 色谱柱的柱温箱。

表 11 列出支持的标准 2D-LC 仪器配置修改

可选柱温箱概念	注释	页面
A ^1D MCT/TCC 装载柱切换阀	如果使用 6 位/14 通或 8 位/18 通 InfinityLab 快速切换阀，则需要额外购买两个转接头 (2xG1316-87326，必须单独购买)。	请参见第 78 页的图 42
B 包含单独 ^1D 和 ^2D MCT/TCC 的设置		请参见第 79 页的图 43
C 在集成式柱温箱 (ICC) 中装载 ^1D 色谱柱的设置	应为色谱柱入口的 Quick Connect 快速连接接头或全新 0.12x280mm Quick Connect 快速连接接头组件 (5067-5960) 使用较长的毛细管 (5500-1170) (必须单独购买)。	请参见第 80 页的图 44
D 使用 MS 分流阀设置		请参见第 81 页的图 45
E 设置 $^1\text{D}/^2\text{D}$ 切换阀	如果使用 ^1D 和 ^2D 检测器；不支持修改 A-C。	请参见第 83 页的图 46
F $^1\text{D}/^2\text{D}$ 切换阀，不带 ^1D 检测器	对于没有 ^1D 检测器的设置，例如某些 LCxLC 设置或使用 QQQ 质谱仪作为 ^2D 检测器的设置；不支持修改 A-C。	请参见第 84 页的图 47
G 单中心切割配置为单样品定量环设置	对于该设置，必须使用 2D-LC 标准的阀口 4 和阀口 5 来连接单定量环，同时将旁路毛细管安装在其他位置 (阀口 1 和 8) (有关示例，请参见应用 G4245A ProtA-SEC 工具包)。	请参见第 84 页的图 47

A

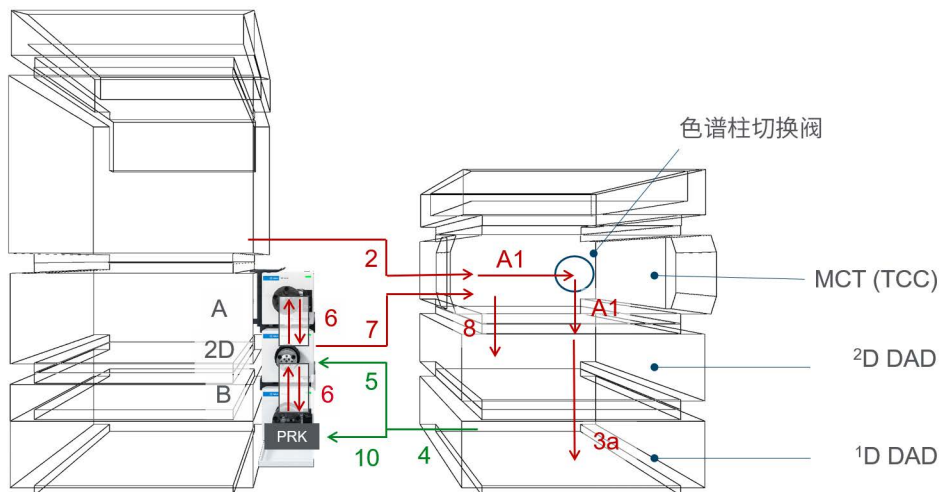


图 42 设置 A: 如果使用了柱切换阀 (例如, 6 位/14 通 InfinityLab 快速切换阀), 建议使用该设置。对于 InfinityLab 2 位/6 通快速切换阀, 无需转接头 A1。

毛细管编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
A1	2	转接头: 毛细管 2 至柱切换阀 (阀口 “IN”) /转接头柱切换阀 (阀口 “OUT”) 至毛细管 3a	0.12 x 75	G1316-87326	不锈钢毛细管 0.12x75mm, f/m, ns 0.8 (必须单独购买)。

对于所有其他毛细管/连接, 请参阅第 72 页的图 39、第 74 页的图 40 和第 75 页的图 41。

注意

仅当使用了 6 位/14 通 InfinityLab 快速切换阀或 (例如) 8 位/18 通 InfinityLab 快速切换阀时, 才需安装柱切换阀的。

B

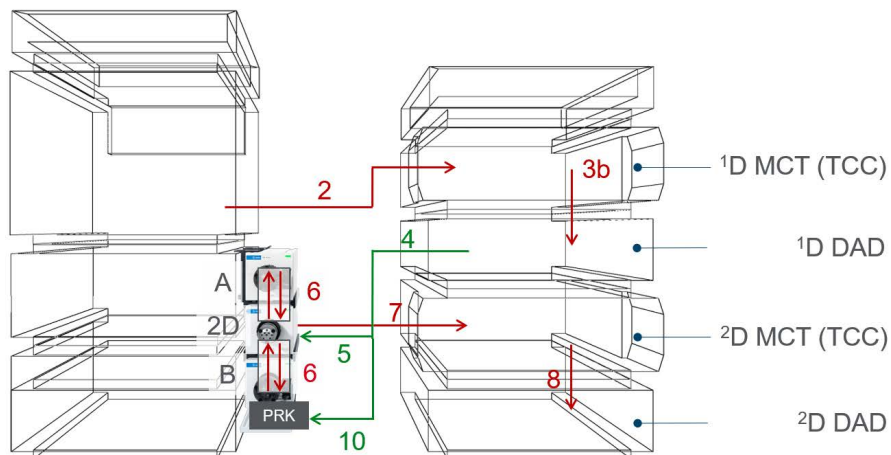


图 43 设置 B: 如果仪器包含用于 ¹D 和 ²D 色谱柱的单独 MCT/TCC, 建议使用该设置。

毛细管编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
3b	1	¹ D 色谱柱到 ¹ D DAD	0.12 x 280	5067-4651	不锈钢毛细管 0.12x280 SL/SX
8	1	² D 色谱柱 (在 ² D MCT 中) 至 ² D DAD	0.12 x 280	5067-4651	不锈钢毛细管 0.12x280 SL/SX (2D-LC 毛细管工具包的部件)

对于所有其他毛细管/连接, 请参阅第 72 页的图 39、第 74 页的图 40 和第 75 页的图 41。

C

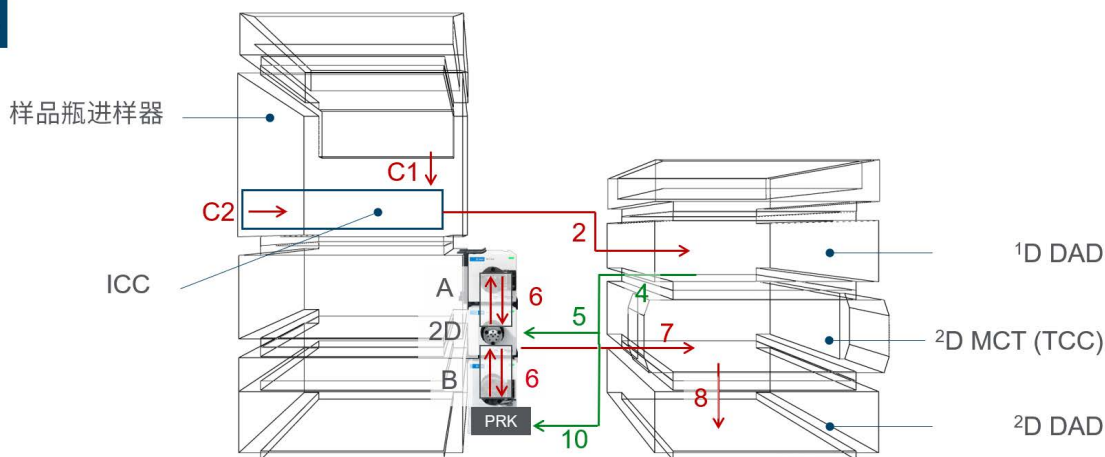


图 44 设置 C: 如果在集成式柱温箱 (ICC) 中装载了 ¹D 色谱柱, 建议使用该设置。

毛细管编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
C1	1	进样阀至 ICC	0.12 x 105	5500-1238	不锈钢毛细管 0.12x105 SL/SL (随 ICC 一起提供)
C2	1	热交换器出口至色谱柱 (InfinityLab Quick Connect 快速连接接头)	0.12 x 280	5500-1170	不锈钢毛细管 0.12x280 (必须单独购买)
8	1	² D 色谱柱 (在 ² D MCT 中) 至 ² D DAD	0.12 x 280	5067-4651	不锈钢毛细管 0.12x280 SL/SX (2D-LC 毛细管工具包的部件)

对于所有其他毛细管/连接, 请参阅第 72 页的图 39、第 74 页的图 40 和第 75 页的图 41。

基于驱动程序的 2D-LC 解决方案仅允许将特定阀配置为分流阀, 例如, 可将其用作有效的脱盐工具。

有关支持的阀列表, 请参阅第 65 页的表 9

以下部分提供了更多信息：

- 第 157 页的方法参数
- 第 224 页的运行系统

条目	部件号	说明
1	G4231A 	2 位/6 通阀头，800 bar
2	G4231C 	2 位/6 通阀头，1300 bar
3	G4232C 	2 位/10 通阀头，800 bar
4	G4232D 	2 位/10 通阀头，1300 bar

D

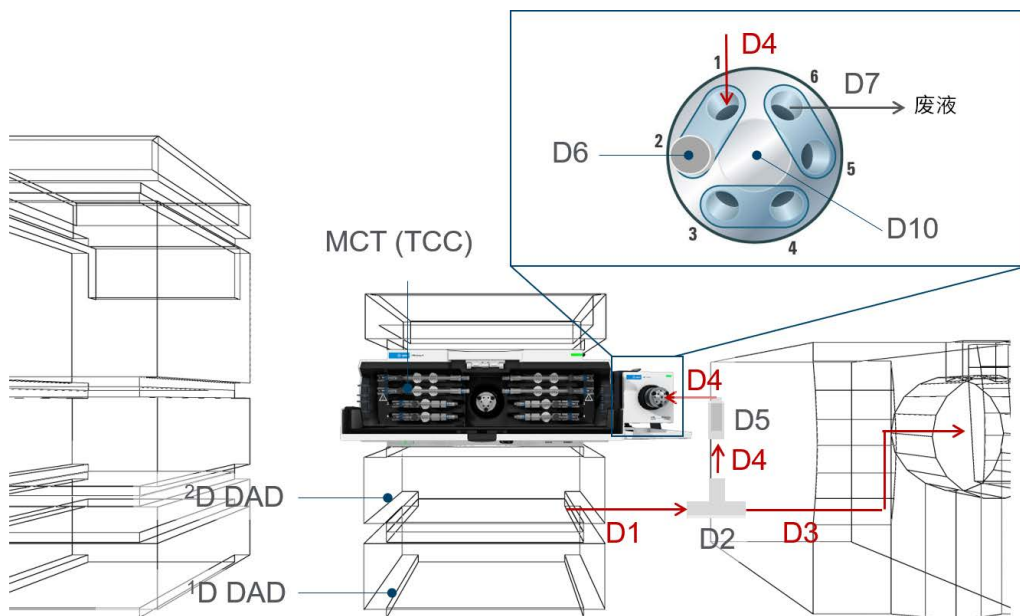


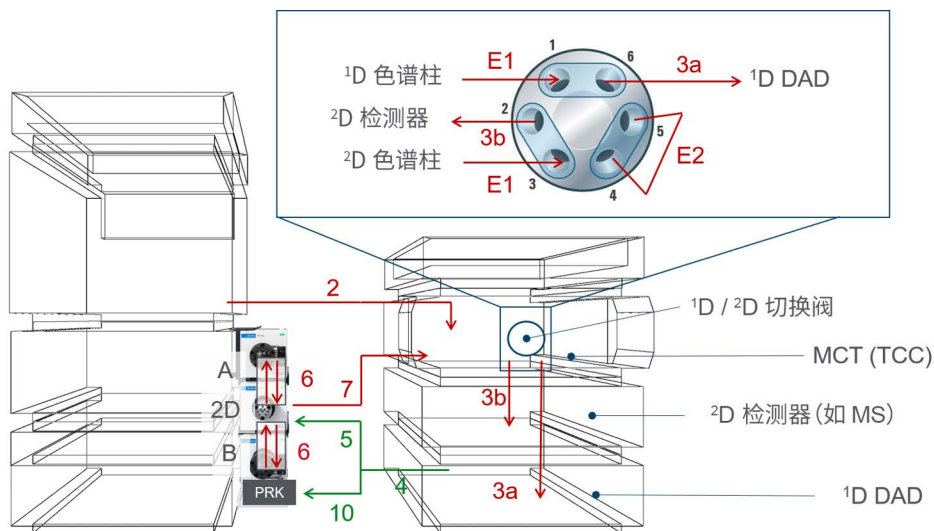
图 45 设置 D: MS 分流阀的建议设置

毛细管编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
D1	1	从 ² D 检测器至三通的毛细管	0.12 x 400	5067-4606	不锈钢毛细管 0.12x400 S/SH
D2	1	三通		0100-0969	1/16 英寸三通，不锈钢，低死体积
D3	1	从 MS 至三通的毛细管 (自切)	0.12 x 400	0890-1915	毛细管 PEEK， 0.12x1250
D4	2	三通至减压阀；减压阀至分流阀	0.3 x 80	5500-1228	不锈钢毛细管 0.3x80 SL/SL
D5	1	减压阀		G4212-60022	减压阀
D6	1	堵头		01080-83202	1/16 英寸不锈钢堵头
D7	1	分流阀至废液		5062-2462	PTFE 管线 0.7 mmx5 m
D8	1	PEEK 接头		5063-6591	手紧式 PEEK 接头 1/16 英寸
D9	1	连接至 MCT 的阀驱动器的阀支架		5067-6138	阀支架工具包右 -IF-II-G
D10	1	分流阀		G4231A G4231C G4232A G4232C	2 位/6 通，800bar 2 位/6 通，1300bar 2 位/10 通，800bar 2 位/10 通，1300bar

对于所有其他毛细管/连接，请参阅第 72 页的图 39、第 74 页的图 40 和第 75 页的图 41。

使用 ¹D/²D 切换阀可以排除仪器的 ²D 流路来运行 ¹D 和 ²D 实验，例如，在将一台质谱仪同时用于 ¹D 和 ²D 实验时，这会非常有用。支持两种基本设置（设置 E 和 F）。¹D/²D 切换阀的建议设置不支持使用 ICC 柱温箱、柱切换阀或使用单独的 ¹D 和 ²D MCT/TCC！要运行 1D 实验，必须禁用 ²D 模式。这必须在 2D-LC 方法编辑器的用户界面中完成，请参阅第 160 页的[关闭](#)。

E

图 46 设置 E: ¹D/²D 切换阀的建议设置

毛细管编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
3a	1	MCT/TCC 至 ¹ D DAD	0.12 x 400	5500-1251	不锈钢毛细管 0.12x400 SL/SL
8	1	¹ D MCT/TCC 至 ¹ D DAD	0.12 x 280	5067-4651	不锈钢毛细管 0.12x280 SL/SX
E1	2	¹ D 色谱柱至 ¹ D/ ² D 切换阀 (1); ² D 色谱柱至 ¹ D/ ² D 切换阀 (3)	0.12 x 120	5067-4652	不锈钢毛细管 0.12x120 SX/SX
E2	1	连接毛细管 ¹ D/ ² D 切换阀 (4) 至 (5)	0.12 x 90	5067-4649	不锈钢毛细管 0.12x90 SX/S

对于所有其他毛细管/连接, 请参阅第 72 页的图 39、第 74 页的图 40 和第 75 页的图 41。

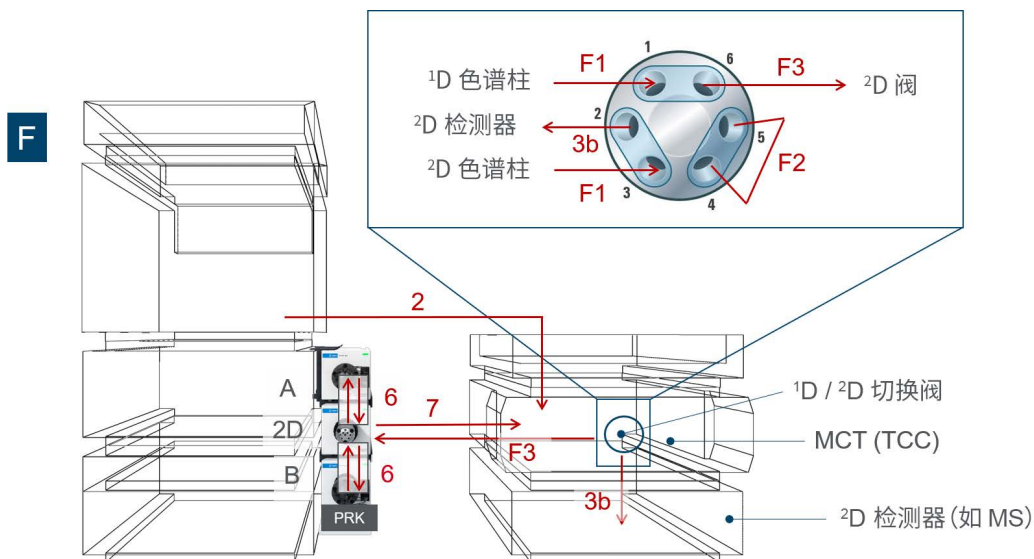


图 47 设置 F: 无 ¹D 检测器的 ¹D/²D 切换阀的建议设置。

毛细管编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
3b	1	¹ D/ ² D 切换阀 (2) 至 ² D DAD	0.12 x 280	5067-4651	不锈钢毛细管 0.12x280 SL/SX
F1	2	¹ D 色谱柱至 ¹ D/ ² D 切换阀 (1); ² D 色谱柱至 ¹ D/ ² D 切换阀 (3)	0.12 x 120	5067-4652	不锈钢毛细管 0.12x120 SX/SX
F2	1	连接 ¹ D/ ² D 切换阀阀口 (4) 至 (5)	0.12 x 90	5067-4649	不锈钢毛细管 0.12x90 SX/S
F3	1	MCT/TCC 至 2D-LC 阀 (6)/ASM 阀 (4)	0.12 x 500	5500-1157	不锈钢毛细管 0.12x500 SL/S

对于所有其他毛细管/连接, 请参阅第 72 页的图 39、第 74 页的图 40 和第 75 页的图 41。

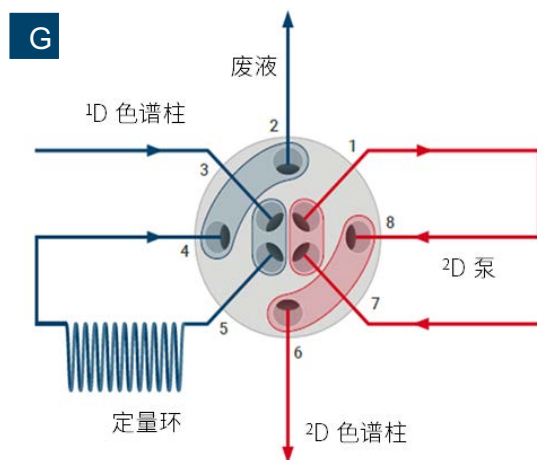


图 48 设置 G。单中心切割配置为单样品定量环设置

毛细管 编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
1	1	旁路毛细管 (OUT)	0.12 x 105	5500-1238	不锈钢毛细管, 0.12x105 SL/SL
2	1	废液管	0.7 x 自切	0890-1713	柔性软管 0.8/1.61mm PTFE WT (随 UV 检测器交付)
3	1	从压力释放工具包; 从 1D 色谱柱, 1D 检测器	0.17 x 105 0.12 x 500	5500-1240 5500-1157	不锈钢毛细管 0.17x105 SL/SL 不锈钢毛细管 0.12x500 SL/S
4		样品定量环 (IN)		5004-0036	180 μL 定量环 2D-LC 作为示例
5		样品定量环 (OUT)		5004-0036	180 μL 定量环 2D-LC 作为示例
6	1	至 2D 色谱柱	0.12 x 400	5500-1251	不锈钢毛细管 0.12x400 SL/SL
7	1	从 2D 泵	0.17 x 280	5067-4608	不锈钢毛细管 0.17x280 SX/S
8		旁路毛细管 (IN)	0.12 x 105	5500-1238	不锈钢毛细管, 0.12x105 SL/SL

对于所有其他毛细管/连接, 请参阅第 72 页的图 39、第 74 页的图 40 和第 75 页的图 41。

注意

如果在软件配置中选择了双定量环设置 (请参阅第 128 页的**配置 2D-LC 组合**) , 在阀口 1 和 8 处安装镜面对称的样品定量环, 在位置 4 和 5 处安装旁路毛细管。

安装压力释放工具包

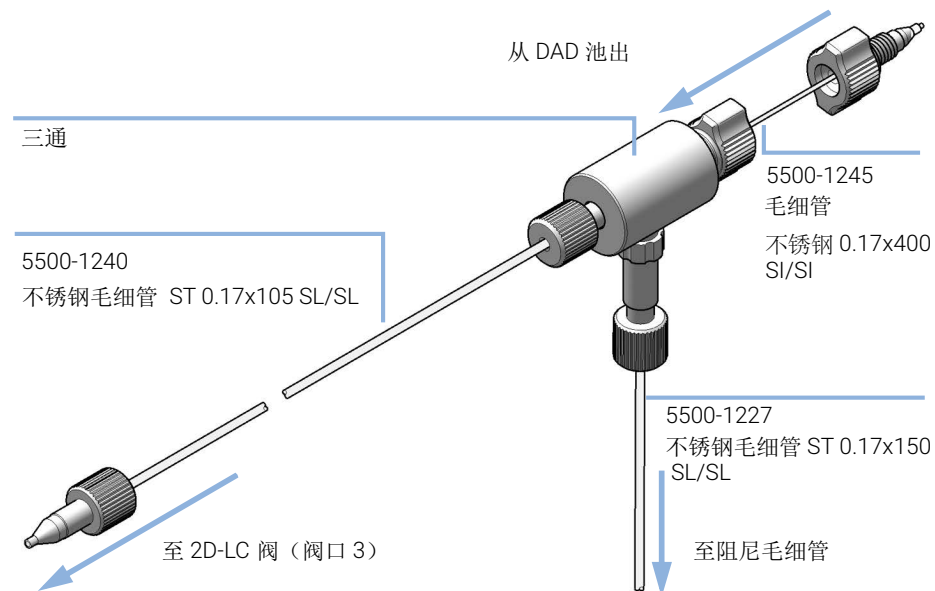
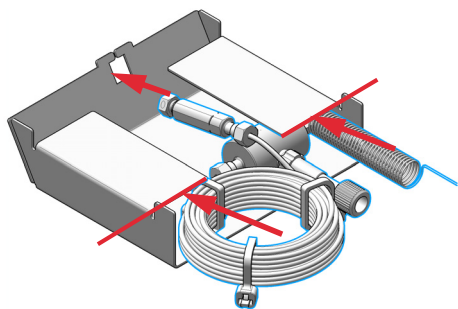


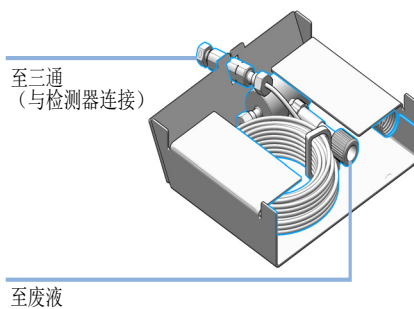
图 49 连接到压力释放工具包

所需的部件:	#	部件号	说明
	1	G4236-60010	2D-LC 压力释放工具包

1 将泄压阀组件推入框架中。

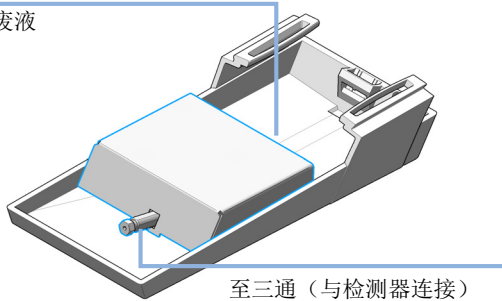


2 注意正确的方向。



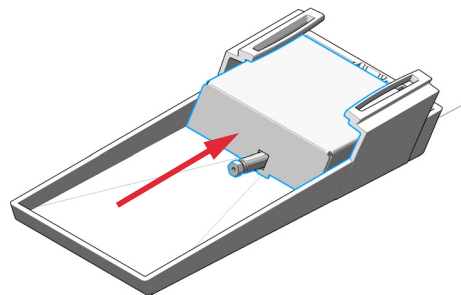
3 将压力释放组件插入漏液样品盘，方向如图所示。

至废液



至三通 (与检测器连接)

4 将压力释放组件推到正确位置。



5 连接三通，请参见第 86 页的图 49。

安装阀头和连接毛细管

有关如何安装阀头和连接毛细管的说明，请参见第 345 页的更换阀头 (G1170A)。

1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统的硬件安装

交付清单



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

InfinityLab Bio 2D-LC ASM 阀工具包 (G5643B) 包含以下部件：

#	部件号	说明
1	5005-0078	Agilent InfinityLab Bio 2D-LC ASM 阀
1	5190-6895	2D-LC 入门样品，1 x 2 mL
2	G5642-64000	不锈钢生物兼容性 MHC 定量环组件
1	699968-301	Poroshell 120 Bonus-RP，3.0 x 50 mm，2.7 μm
1	G4236-64000	2D-LC 轻松入门 USB 资料盘工具包
1	5005-0077	InfinityLab Bio 2D-LC 毛细管工具包
1	G2453-85060	甲酸-试剂级 5 mL (5 cc)
1	685775-902	Poroshell SB-C18，2.1 x 100 mm，2.7 μm
1	G1680-63721	网络 LAN 交换机
1		本地化电源线

InfinityLab Bio 2D-LC 毛细管工具包 (5005-0077) 包含以下部件：

#	部件号	说明
3	5500-1603 📄	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 mm x 400 mm
1	5004-0031 📄	毛细管 MP35N 0.12 mm x 600 mm
2	G7116-60071 📄	Bio Quick Connect 快速连接热交换器标准流速
2	5500-1578 📄	Quick Connect 快速连接毛细管 MP35N 0.12 mm x 105 mm
2	5500-1597 📄	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12 mm x 400 mm
1	5500-1599 📄	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 mm x 105 mm
1	5500-1600 📄	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 mm x 150 mm
1	5500-1596 📄	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12 mm x 280 mm
2	5067-5965 📄	InfinityLab Quick Connect LC 接头
20	5067-5966 📄	InfinityLab Quick Turn 接头
1	0890-1713 📄	PTFE 管线，内径/外径 0.8/1.6 mm
1	5063-6591 📄	PEEK 接头，每包 10 个

不锈钢生物兼容性 MHC 定量环组件 (G5642-64000) 包含以下部件：

部件号	说明
5043-0269 📄	连接适配器 用于 G1170A
5067-4273 📄	6 色谱柱选择阀头，1300 bar
5004-0027 📄	毛细管 MP35N 0.35 mm x 420 mm M/M 40 μ L (6x) 预装在 6 色谱柱选择器上

注意

根据仪器的设置，安装可能需要额外的部件和毛细管。这些部件单独订购或与其他组件一起装运。在下面的仪器设置部分或 2D-LC 用户手册或 Bio LC 设备手册中介绍了其来源及功能。

Bio 材料

对于 1290 Infinity II Bio LC 系统，Agilent Technologies 在流路中使用了最高质量的材料（也称为接触流动相的部件）。生命科学家更喜欢这些材料，因为它们因对生物样品表现出最佳惰性而著称，并确保在较宽的 pH 范围内对常见样品和溶剂表现出最佳的兼容性。为了在非常高的压力下进行色谱分析，同时保持惰性，整个系统使用金属合金 MP35N 代替不锈钢。

MP35N 是一种无磁性的镍钴铬钼合金，具有优异的抗硫酸盐化、抗氧化、耐盐溶液和大多数无机酸性能。其优越的特性确保了可靠的性能，即使在 UHPLC 条件下也是如此。

Bio 部件识别**小心**

生物惰性部件由 PEEK 或其他低压额定材料制成，不能承受 600 bar 以上的高压。

生物惰性部件与 1290 Infinity II Bio LC 模块不兼容。

- ✓ 对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 Bio /生物兼容性部件。
- ✓ 生物惰性模块只能使用生物惰性部件。
- ✓ 请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

注意

不锈钢包覆的 PEEK 毛细管（生物惰性）的安装需要特殊处理。有关更多详细说明，请参阅技术说明不锈钢包层 PEEK 毛细管的安装。(G5611-90120)。

在 1290 Infinity II Bio LC 系统中使用 Bio 毛细管的重要提示

小心

基于硝酸的程序，并且/或者流路中有不锈钢。

部件损坏。

金属离子可能会被引入原本不含金属离子的流路。

- ✓ 不要对 1290 Infinity II Bio LC 系统使用基于硝酸的程序。
- ✓ 不要安装包括生物兼容性和常规不锈钢模块、部件或毛细管的混合系统。

注意

《使用 Agilent LC 系统的最佳实践》技术说明包含对 1290 Infinity II Bio 模块的安装、操作和维护程序的建议。

bio 阀的维护间隔可能会根据操作模式和使用的溶剂不同（例如高缓冲液浓度的溶剂）而有所不同。

注意

为确保 Agilent 1290 Infinity II Bio LC 系统的最佳生物兼容性，请注意以下几点：

- 不要在流路中包含非 Bio 标准模块或部件
- 不要使用任何未标记为 Agilent “Bio” 的部件

有关 bio、生物兼容性和生物惰性材料的溶剂兼容性，请参阅 Bio LC 用户手册中“有关溶剂/材料兼容性的常规信息”。

注意

不要在 1290 Infinity II Bio LC 系统中使用不锈钢毛细管。注意毛细管 PTFE 管上的橙色条纹。

为避免盐析出和堵塞，请注意以下几点：

- 配制溶剂时，不得超过或接近缓冲盐的溶解度极限
- 不要使用包含高浓度（超过 60 %）乙腈的超过 50 mM 的缓冲盐

关于接头的重要注意事项

Poroshell 和 AdvanceBio PEEK 内衬色谱柱

- 在安装过程中，必须小心避免损坏带有 PEEK 内衬的色谱柱。压缩和旋转的共同作用可能会导致内部损坏。不推荐使用没有密封垫圈的接头（例如 PEEK 手紧接头）。
- 使用 Agilent 不锈钢包覆 PEEK 毛细管（1260 生物惰性溶液）或带 Quick Turn 或 Quick Connect 快速连接接头的 MP35N 毛细管（1290 生物兼容性溶液）。
- 对生物惰性仪器设置选择最佳接头和毛细管
www.agilent.com/chem/bioinertfittings
- 对不锈钢系统选择最佳接头和毛细管
www.agilent.com/chem/fittings

选项

注意

1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统必须包含一个 Agilent Infinity II Bio 高速泵 (G7132A) 作为 ²D 泵。

这是实现以下目标的前提：

- 支持 2D-LC 功能
- 在 ²D 色谱柱上运行快速梯度

表 12 推荐的 bio 硬件配置概述

功能	功能元素	部件号	模块	注释
¹ D	泵	G7131A	1290 Infinity II Bio 多功能泵	
		G7131C	1260 Infinity II Bio 多功能泵	
		G7132A	1290 Infinity II 生物惰性高速泵	
		G5654A	1260 Infinity II 生物惰性四元泵	
	进样器	G7137A	1290 Infinity II Bio Multisampler	
		G5668A	1260 Infinity II 生物惰性 Multisampler	
	柱温箱	G7116A	1260 Infinity II 大容量柱温箱	柱温箱在流路中需要生物兼容性部件。 G7116A 限制为只能使用最高 800 bar 的阀。
		G7116B	1290 Infinity II 大容量柱温箱	
	检测器	G7165A	1260 Infinity II 多波长检测器	检测器在流路中需要生物兼容性部件。 将 ¹ D 流速调整到流通池压力规格。另请参阅有关压力释放工具包的注释。
		G7115A	1260 Infinity II 二极管阵列检测器 WR	
G7114A		1260 Infinity II 可变波长检测器		
G7114B		1290 Infinity II 可变波长检测器		
G7117A		1290 Infinity II 二极管阵列检测器 FS		
G7117B		1290 Infinity II 二极管阵列检测器		
接口	阀驱动器	G1170A	1290 Infinity II 阀驱动器	
	Bio 2D-LC 阀	G5643B	InfinityLab Bio 2D-LC ASM 阀工具包	有关流路，请参阅第 103 页的连接不带 MHC 的 Bio 2D-LC ASM 阀或第 105 页的连接带 MHC 的 Bio 2D-LC ASM 阀。
	MHC 阀		InfinityLab Bio 多重中心切割阀	这些阀包含在 G5643B 中。不锈钢阀和生物兼容性毛细管。
	压力释放工具包 (PRK)	G4236-60010	压力释放工具包	如果使用 ¹ D 检测器，则必须提供。该工具包可防止压力脉冲并保护检测器流通池！

表 12 推荐的 bio 硬件配置概述

功能	功能元素	部件号	模块	注释
2D	泵	G7132A	1290 Infinity II 生物惰性高速泵	需要 1290 Infinity II Bio 高速泵。
	柱温箱	G7116A G7116B	1260 Infinity II 大容量柱温箱 1290 Infinity II 大容量柱温箱	如果 ¹ D 和 ² D 之间的温差较大，建议使用 Bio 2D-LC 系统中的第二柱温箱。其中任何一个模块都受支持，其他模块或旧的 bio 模块也受支持。 在流路中需要生物兼容性部件。 G7116A 限制为只能使用最高 800 bar 的阀。
检测器		G7117A	1290 Infinity II 二极管阵列检测器 FS	在流路中需要生物兼容性部件。
		G7117B	1290 Infinity II 二极管阵列检测器	
		G7117C	1260 Infinity II 二极管阵列检测器 HS	
		G7114A	1260 Infinity II 可变波长检测器	
		G7114B	1290 Infinity II 可变波长检测器	
		G7115A	1260 Infinity II 二极管阵列检测器 WR	
		G7165A	1260 Infinity II 多波长检测器	
		G7121B	1260 Infinity II 荧光检测器光谱	
		Agilent 单四极杆检测器 LC/MSD 高端质谱仪，如 TOF/QTOF 或 TQ		

注意

可以通过 UIB2 G1390A 模数转换器连接第三方检测器。但这些第三方模块在 CDS 中的功能有限。

注意

由于可能会产生拖尾，建议不要将 G7117A/B 和 G4212A/B 流通池用于 WCX 和低盐 SEC。

注意

要使用 UV 检测器（例如 VWD、DAD WR 或 LSS）分析光敏样品，请选择合适的流通池和低光强度。这对于第一维中的检测器尤其重要。

Bio 2D-LC 系统的建议

常规信息

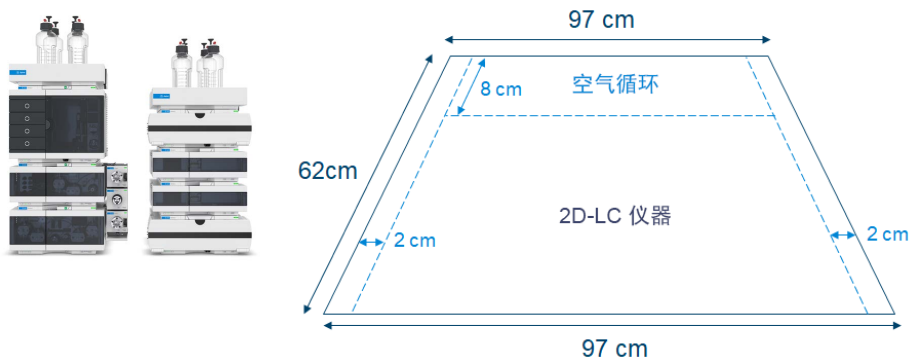
1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统有多种形式，仍然可以实现 Agilent 1290/1260 Infinity II Bio LC 系统和 Agilent 1260 Infinity 生物惰性 LC 的 HPLC 灵活组合。对于生物兼容的 2D-LC 系统，需要双堆叠配置。在左侧堆叠上，模块从下到上的顺序是：两个维度的 bio 泵，然后是 bio 自动进样器。

进样器必须放置在泵的顶部。建议对右侧堆叠使用两个柱温箱，以便更灵活地应对温差较大和不同色谱柱尺寸的情况，并灵活的使用一个或两个标准 UV 检测器。

两部分堆叠都允许将溶剂盒放置在顶部。

表 13 建议的堆叠配置和所需的工作台空间

1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统的建议堆叠配置 1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统的工作台空间要求



注意

Bio 2D-LC 的双堆叠配置需要至少 97 x 62 cm (24.4 x 38.2 英寸) 的自由垂直工作台空间。2.5 cm 两侧 (1.0 英寸) 的空间和后部约 8 cm (3.1 英寸) 的空间保留用于空气循环和电路连接。

Bio 2D-LC ASM 阀和可选 MHC 驻留仓位的安装

连接外部阀驱动器

对于包含 1260 Infinity II 或 1290 Infinity II 系列中至少一个 bio 泵的 2D-LC 仪器，阀驱动器通过夹具导轨工具包-IF-II (5067-5685) 连接到该泵，而阀驱动器通过连接适配器 (5043-0269) 互连。Bio 2D-LC 阀和 MHC 驻留仓位安装在外部阀驱动器 (G1170A) 上。

#	固定器/连接器	连接	部件号
3	1290 Infinity 阀驱动器 (必须单独购买)	承载阀	G1170A
1	夹具导轨工具包 IF II (随 G1170A 交付)	顶部阀至泵	5067-5685
2	连接适配器 (随 MHC 驻留仓位交付)	在 G1170A 驱动器之间	5043-0269

对于 SHC 配置，Bio 2D-LC ASM 阀 (G5643B) 连接至堆叠的上部泵。在 MHC 配置中，上部 MHC 驻留仓位将连接至上部泵。

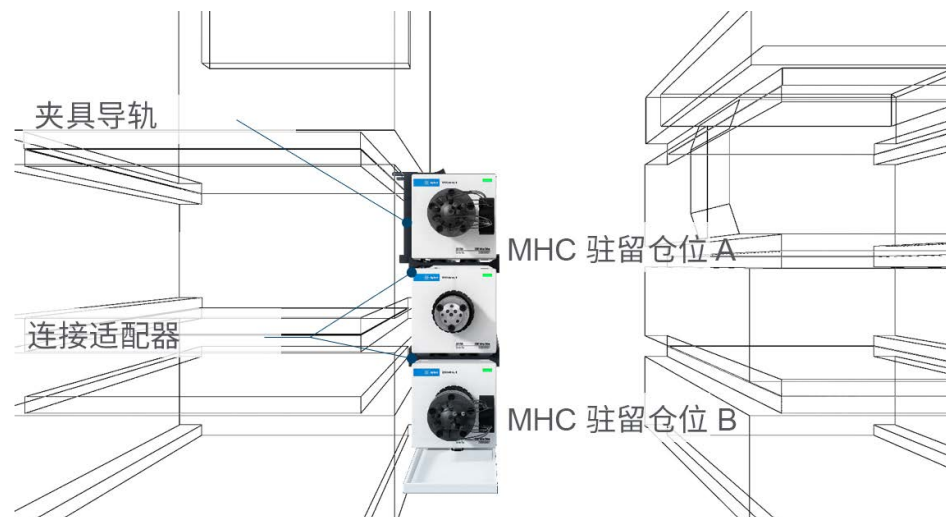


图 50 Bio 2D-LC 阀和 MHC 驻留仓位 (可选) 的安装和附件示意图

- 1 将夹具导轨安装在 Infinity II 泵的右侧：主体外壳上有圆形凹陷的标记。使用尖头螺丝刀打一个小孔，并用三个自切自攻螺钉拧紧夹具导轨。
- 2 将阀头安装在 G1170A 外部阀驱动器上。
- 3 夹紧第一个外部阀驱动器，将 MHC 阀置于顶部。
- 4 将连接适配器连接到其他每个外部阀驱动器，并根据第 96 页的图 50 中的位置进行安装。
- 5 将带传感器的漏液样品盘安装在最下面的外部阀驱动器下方。
- 6 安装压力释放工具包，请参阅第 114 页的[安装压力释放工具包](#)。

阀配置





对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

Agilent 1290 Infinity II Bio LC 系统提供两种通用阀配置，以便确定仪器使用的 2D-LC 模式。单中心切割 (SHC) 配置可提供单中心切割和全切割 2D-LC，而多重中心切割 (MHC) 配置还可提供多重中心切割和高分辨率采样 2D-LC。主动溶剂调制阀可用于 SHC 和 MHC 配置。可在硬件配置（第 102 页的[推荐的 Bio 堆叠设置](#)）中找到推荐的 Bio 2D-LC 模式的概览。

所有其他 LC 模块（参比）的堆叠设置仍然有效，因为这些设置独立于阀配置。

表 14 取决于 Bio 2D-LC 系统阀配置的 2D-LC 模式概览

阀	带 ASM 阀的 SHC 配置	MHC 配置
		
Bio 2D-LC 阀， 主动溶剂调制 (ASM)	✓	✓
操作模式	带 ASM 阀的 SHC 配置	MHC 配置
全切割 (LCxLC)	✓	✓
单中心切割	✓	✓
多重中心切割	X	✓
高分辨率采样	X	✓

单中心切割配置



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

专门用于单中心切割和全切割 2D-LC 实验的生物兼容的 2D-LC 系统需要 2D-LC ASM 阀。该阀可以方便地连接到安装的任何 Infinity II 泵上。对于 SHC 配置，无需传输毛细管，因为 MHC 驻留仓位未安装。

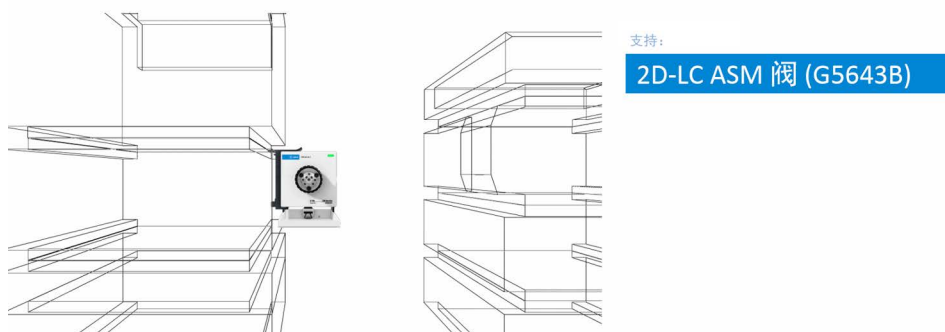


图 51 含支持的阀的单中心切割 (SHC) 配置示意图

注意

对于 Bio 2D-LC 设置（带 ASM 阀的单中心切割 (SHC)），需要 LC driver 3.5。

注意

由于磨损增加，在 SHC 或 MHC 配置中不建议对全切割运行使用 ASM 功能。

多重中心切割配置



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

用于多重中心切割或高分辨率采样 2D-LC 的生物兼容的 2D-LC 系统需要额外的 Bio MHC 驻留仓位。对于 MHC 配置，支持 Bio ASM 阀头。该阀可以方便地连接到堆叠中的任何 bio 泵。要安装在阀头上，必须按如下方式安装传输 bio 毛细管。

注意

使用样品定量环的不锈钢 Bio MHC 阀 (G5642-64000) 具有内侧涂有生物兼容性涂层的定子以及用于保护敏感生物样品的 PEEK 转子。

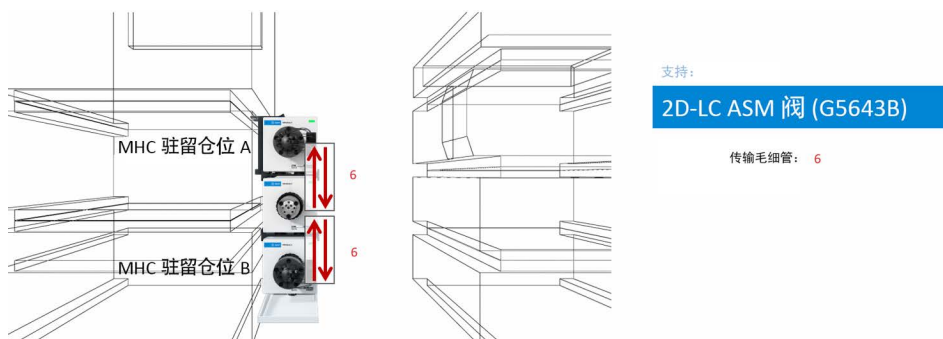


图 52 含支持的 bio 阀和 bio 传输毛细管的多重中心切割 (MHC) 配置示意图

推荐的 Bio 堆叠设置

1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统支持两种基本堆叠设置。通过用于第一和第二维的泵来区分基本堆叠配置。在第二维中，必须使用 1290 Infinity II Bio 高速泵。这些泵始终安装在底部。其他方案取决于所使用的柱温箱概念。bio 毛细管工具包涵盖所有推荐的配置。以下配置可确保最小延迟和扩散体积，从而优化了系统流路：

表 15 支持的仪器配置以及支持的 Bio LC 泵列表。数字表示建议的 bio 堆叠设置

#	¹ D 泵	支持的 ² D 泵
1	1290 Infinity II/1260 Infinity II Prime LC Agilent 1260 Infinity II Bio 多功能泵 (G7131C) Agilent 1290 Infinity II Bio 多功能泵 (G7131A) Agilent 1290 Infinity II Bio 高速泵 (G7132A)	1290 Infinity II Agilent 1290 Infinity II Bio 高速泵 (G7132A)
2	1260 Infinity II 二元泵 Agilent 1260 Infinity II 生物惰性四元泵 (G5654A)	1290 Infinity II Agilent 1290 Infinity II Bio 高速泵 (G7132A)

注意

本指南仅涵盖使用 Agilent 1290 Infinity II 系列 bio 泵的设置。使用 1200 Infinity 系列的其他 bio 模块的设置可能需要额外的 bio 毛细管。

此设置中提到的连接如下：

- 采用单中心切割配置的 Bio 2D-LC ASM 阀的顺流方向
请参阅第 103 页的图 53。
- 采用多重中心切割配置的 Bio 2D-LC ASM 阀的逆流方向
请参阅第 106 页的图 54。

如果希望连接 Bio 2D-LC 阀的方向与这些建议的 2D-LC 设置不同，请按照 LC 驱动程序在线帮助中的 **2D-LC 阀拓扑** 下显示的示意图进行操作。

连接不带 MHC 的 Bio 2D-LC ASM 阀



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

2D-LC 阀的毛细管连接取决于使用的是顺流配置还是逆流配置。对于 Bio ASM 阀，可同时使用顺流操作和逆流操作。本章中的示意图显示的是顺流方向。

如果要以其他方向连接 Bio ASM 阀，请按照 LC 驱动程序在线帮助中的 **2D-LC 阀拓扑** 下显示的示意图进行操作。

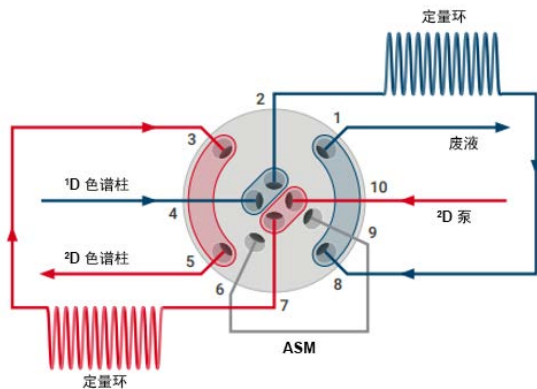


图 53 示意图：Bio 2D-LC ASM 阀，不带 MHC（顺流）

注意

要使用单定量环设置的 ASM 功能，建议安装传输毛细管。

注意

不带 MHC 的 Bio 2D-LC ASM 阀需要 LC driver 3.5。

端口	毛细管 编号	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
1		废液管	0.7 x 自切	0890-1713	柔性软管 0.8/1.61 mm PTFE WT (随 UV 检测器交付)
2		样品定量环 (蓝色) (IN)	0.35 x 831	5004-0028	毛细管 MP35N 0.35x831 M/M 80 µL 见端口 8 (这是一个示例, 可以用任何其他样品定量环代替)
3		样品定量环 (红色) (OUT)	0.35 x 831	5004-0028	毛细管 MP35N 0.35x831 M/M 80 µL 见端口 7 (这是一个示例, 可以用任何其他样品定量环代替)
4		从压力释放工具包; 从 ¹ D 色谱柱, ¹ D 检测器	0.12 x 170	5500-1603	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17x400 M/M
5		至 ² D 色谱柱 (热交换 器)	0.12 x 170	5500-1597	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12x400 M/M
6		ASM 毛细管, 如 ASM f-3	0.12 x 170	5004-0022	毛细管 MP35N 0.12x170 M/M 见端 口 9
7		样品定量环 (红色) (IN)	0.35 x 831	5004-0028	毛细管 MP35N 0.35x831 M/M 80 µL 见端口 3 (这是一个示例, 可以用任何其他样品定量环代替)
8		样品定量环 (蓝色) (OUT)	0.35 x 831	5004-0028	毛细管 MP35N 0.35x831 M/M 80 µL 见端口 2 (这是一个示例, 可以用任何其他样品定量环代替)
9		ASM 毛细管, 如 ASM f-3	0.12 x 170	5004-0022	毛细管 MP35N 0.12x170 M/M 见端 口 6
10		从 ² D 泵	0.17 x 400	5500-1603	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17x400

连接带 MHC 的 Bio 2D-LC ASM 阀



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

与 SHC 配置中的 Bio 2D-LC ASM 阀相比，Agilent 建议对 MHC 配置中的 Bio 2D-LC ASM 阀使用逆流设置。这一部分介绍 Bio 2D-LC ASM 阀的逆流配置设置。有关顺流设置，请参阅 2D-LC 软件中 ASM 2D-LC 阀的顺流配置。您可以在 OpenLab ChemStation 的**仪器 > 2D-LC 配置**下或 OpenLab CDS 和 MassHunter 中 LC 驱动程序在线帮助的**2D-LC 阀拓扑**下找到**阀拓扑**配置屏幕。

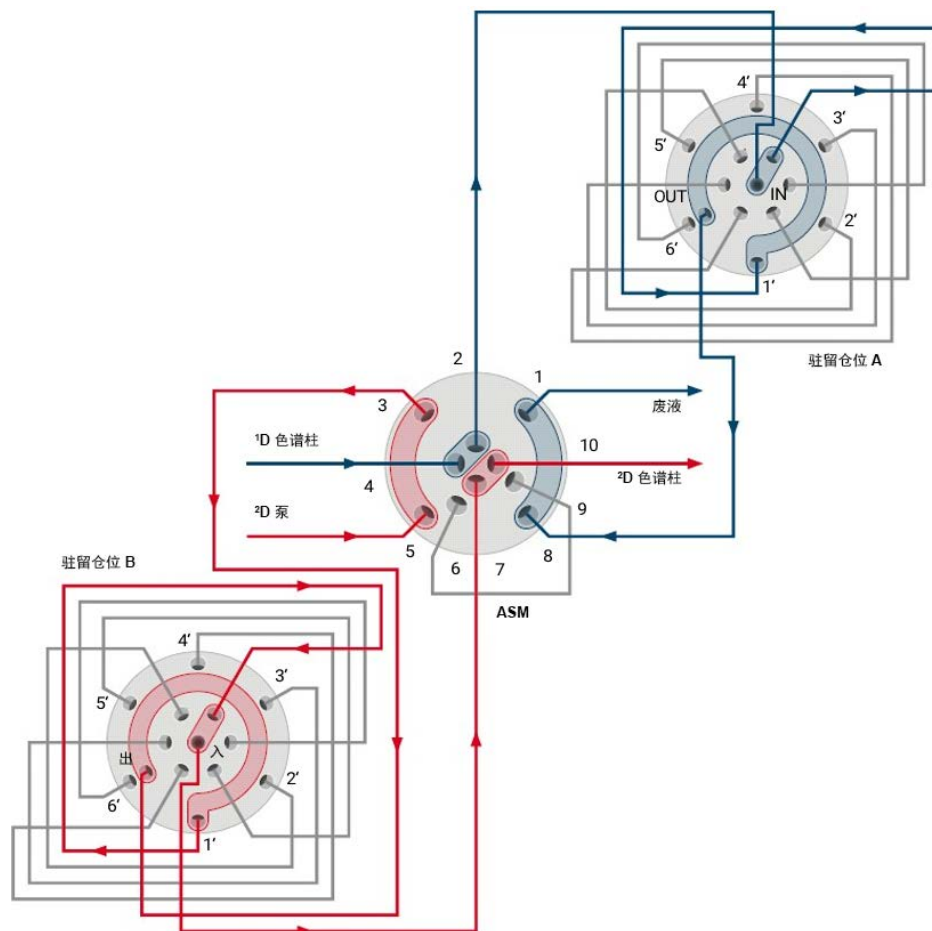


图 54 示意图: Bio 2D-LC ASM 阀 (逆流)

注意

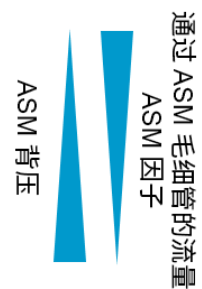
与上图所示的示例相反，对于具有不同对称性的 1200 bar MHC 阀，连接为“OUT/IN”。

端口	毛细管编号	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
1	11	废液管	0.7 x 自切	0890-1713	柔性软管 0.8/1.61 mm PTFE WT (随 UV 检测器交付)
2	6	Bio 传输毛细管至 MHC 阀 (IN), 驻留仓位 A	0.12 x 170	5004-0020	毛细管 MP35N 0.12x170 M/M
3	6	从 MHC 阀 (OUT) 的 Bio 传输毛细管, 驻留仓位 B	0.12 x 170	5004-0020	毛细管 MP35N 0.12x170 M/M
4	5 F3	从压力释放工具包; 从 ¹ D 色谱柱, ¹ D 检测器	0.17 x 400	5500-1603	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17x400 M/M
5	9	从 ² D 泵	0.17 x 400	5500-1603	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17x400 M/M
6	ASM1-4	出口至 Bio ASM 毛细管	0.12 x L		请参见下面的列表
7	6	Bio 传输毛细管至 MHC 阀 (IN), 驻留仓位 B	0.12 x 170	5004-0020	毛细管 MP35N 0.12x170 M/M
8	6	从 MHC 阀 (OUT) 的 Bio 传输毛细管, 驻留仓位 A	0.12 x 170	5004-0020	毛细管 MP35N 0.12x170 M/M
9	ASM1-4	从 Bio ASM 毛细管的入口	0.12 x L		请参见下面的列表
10	7	至 ² D 色谱柱	0.12 x 400	5500-1597	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12x400 M/M

应使用的 Bio ASM 毛细管 (MP35N) 取决于最适合您的应用的 ASM 因子。您可以从以下毛细管中选择：

表 16 可用的 ASM 毛细管和特性

Bio 毛细管 部件号	长度 (mm)	内径 (mm)	体积 (μL)	ASM 因子	分流比 (定量环： ASM)
5004-0021	85	0.12	0.96	5	1:4
5004-0022	170	0.12	1.9	3	1:2
5004-0023	340	0.12	3.8	2	1:1
5004-0024	680	0.12	7.7	1.5	1:0.5



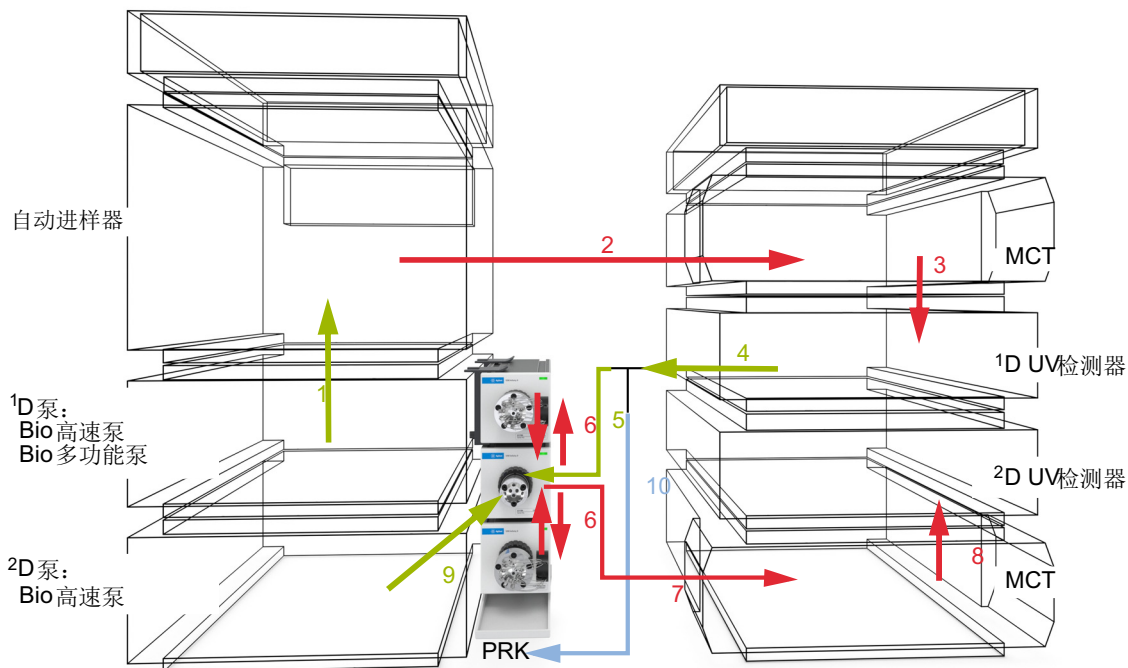


图 55 如果两个 Bio 泵都是 Infinity II 模块或²D 泵是 1290 Infinity Bio 高速泵，推荐使用的设置。

毛细管 编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
1	1	¹ D 泵 (顶部) 到自动进样器	0.17 x 400	5500-1603	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 x 400 M/M
2	1	自动进样器至 Bio Quick-Connect 快速连接热 交换器标准流量 (MCT1)	0.12 x 600	5004-0031	毛细管 MP35N 0.12 x 600
	1	Bio Quick-Connect 快速连接 热交换器标准流量至 ¹ D 色谱 柱 (在 MCT1 中)	0.12 x 105	5500-1578	Quick-Connect 快速连接毛细 管 MP35N 0.12x105 M/M
3	1	¹ D 色谱柱至 ¹ D 检测器	0.12 x 400	5500-1597	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12 x 400 M/M

毛细管 编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
4	1	¹ D 检测器至 PRK 的三通	0.17 x 105	5500-1599	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 x 105 M/M
5	1	PRK 的三通至 Bio 2D-LC ASM 阀 (端口 4)	0.17 x 400	5500-1603	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 x 400 M/M
6	4	Bio 2D-LC ASM 阀 (端口 7) - 驻留仓位 (IN), 驻留仓位 (Out) - Bio 2D-LC ASM 阀 (端口 3) Bio 2D-LC ASM 阀 (端口 2) - 驻留仓位 (IN), 驻留仓位 (OUT) - Bio 2D-LC ASM 阀 (端口 8)	0.12 x 170	5500-1376	不锈钢毛细管 0.12 x 170 M/M (随 2D-LC 阀工具包交付, ASM)
7	1	Bio 2D-LC ASM 阀 (端口 10) 至 Bio Quick-Connect 快速连接热交换器标准流量	0.12 x 400	5500-1597	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12 x 400 M/M
	1	(MCT1 或 2) Bio Quick-Connect 快速连接 热交换器标准流量至 2D 色谱 柱 (在 MCT1 或 2 中)	0.12 x 105	5500-1578	Quick-Connect 快速连接毛细 管 MP35N 0.12 x 105 M/M
8	1	² D 色谱柱 (在 MCT 1 或 2 中) 至 ² D 检测器	0.12 x 280	5500-1596	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12 x 280 M/M
9	1	² D 泵至 Bio 2D-LC ASM 阀 (端口 5)	0.17 x 400	5500-1603	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 x 400 M/M
10	1	PRK 的三通接头至阻尼毛细 管	0.17 x 150	5500-1600	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 x 150
	1	Bio 2D-LC ASM 阀 (端口 1) 至废液 (未显示)	0.7 x 自切	0890-1713	柔性软管 0.8/1.61 mm

注意

InfinityLab Quick Turn 接头需要此表中指定的毛细管。

额外功能的可选仪器设置



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

基于驱动程序的 Bio 2D-LC 解决方案仅允许将特定阀配置为分流阀，例如可将其用作有效的脱盐工具。

以下部分提供了更多信息：

- 第 157 页的[方法参数](#)
- 第 224 页的[运行系统](#)

表 17 支持的阀

说明	部件号
2 位/6 通阀头，600 bar，生物惰性	5067-4148
2 位/10 通阀，bio 1300 bar，PEEK，MP35N	5067-6682

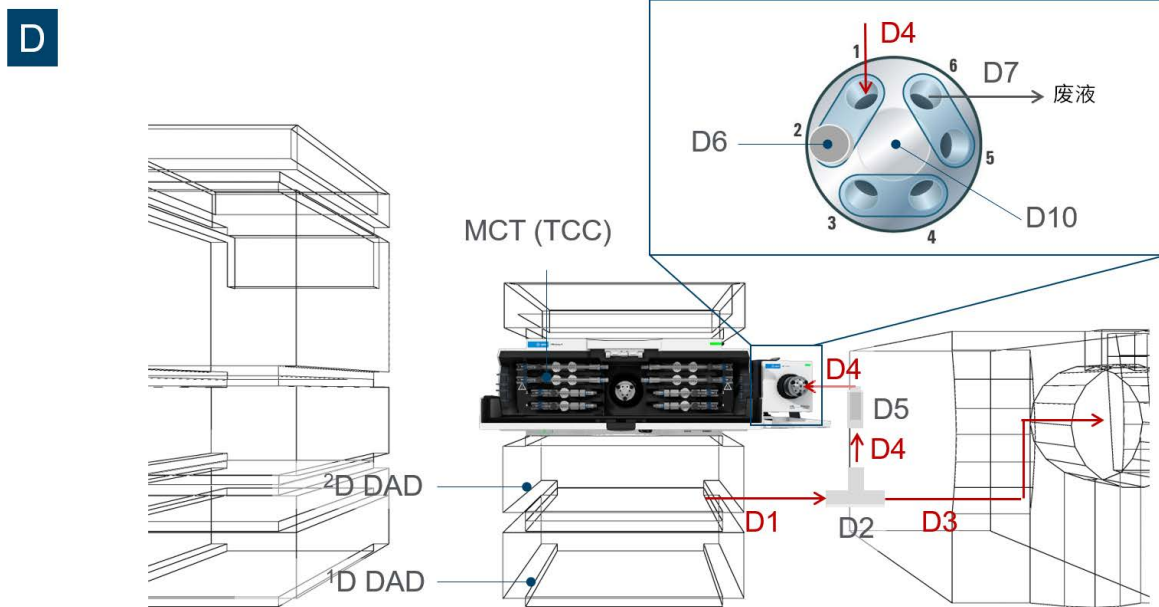


图 56 MS分流阀的建议设置

表 18 可用毛细管

毛细管编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
D1	1	从 2D 检测器至三通的毛细管	0.12 x 400	5500-1597	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12x400
D2	1	三通 (PEEK 包括接头)		5022-2144	1/16 英寸三通, 不锈钢, 低死体积
D3	1	从 MS 至三通的毛细管 (自切)	0.12 x 400	0890-1915	毛细管 PEEK, 0.12x1250
D4	2	三通至减压阀; 减压阀至分流阀	0.3 x 80	5500-1473	毛细管 MP35N 0.3x80 SL/SL
D5	1	减压阀		G4212-60022	减压阀
D6	1	堵头		5043-0277	死堵头, 长型 10-32

表 18 可用毛细管

毛细管 编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
D7	1	分流阀至废液 (废液管)		0890-1713	柔性软管 0.8/1.61mm PTFE WT
D8	1	PEEK 接头		5063-6591	手紧式 PEEK 接头 1/16 英寸
D9	1	连接至 MCT 的阀驱动器的 阀支架		5067-6138	阀支架工具包右-IF-II-G
D10	1	分流阀		G5631A	2 位/6 通阀头, 600 bar, 生物惰性
				G5641A	2 位/10 通阀, bio 1300 bar, PEEK, MP35N

对于所有其他毛细管/连接, 请参阅:

- 第 72 页的图 39,
- 第 74 页的图 40 和
- 第 75 页的图 41。

注意

要在基于驱动器的 2D-LC 解决方案中被识别为分流阀, 分流阀必须安装在外部阀驱动器 (G1170A) 中。

安装压力释放工具包



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

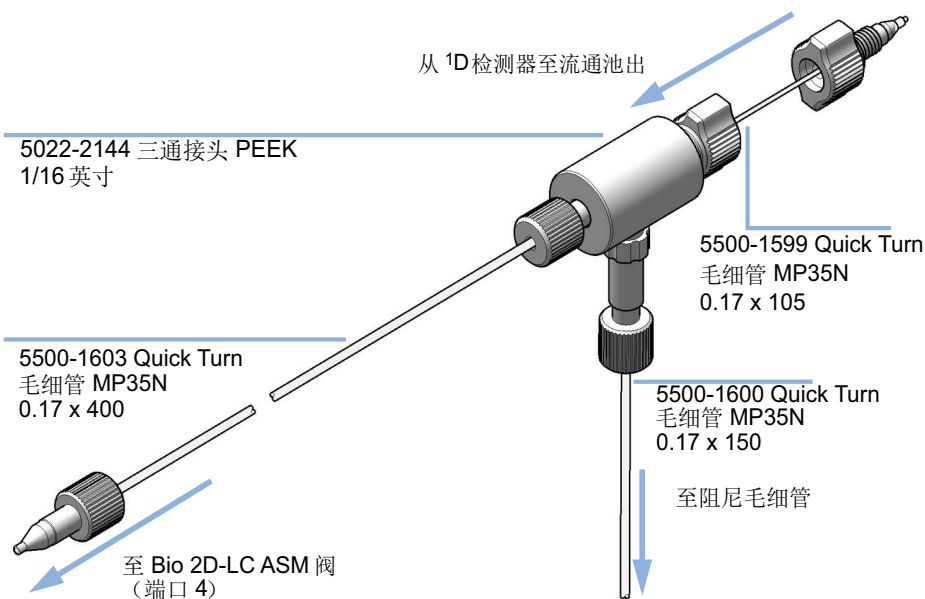


图 57 连接到压力释放工具包

所需的部件:

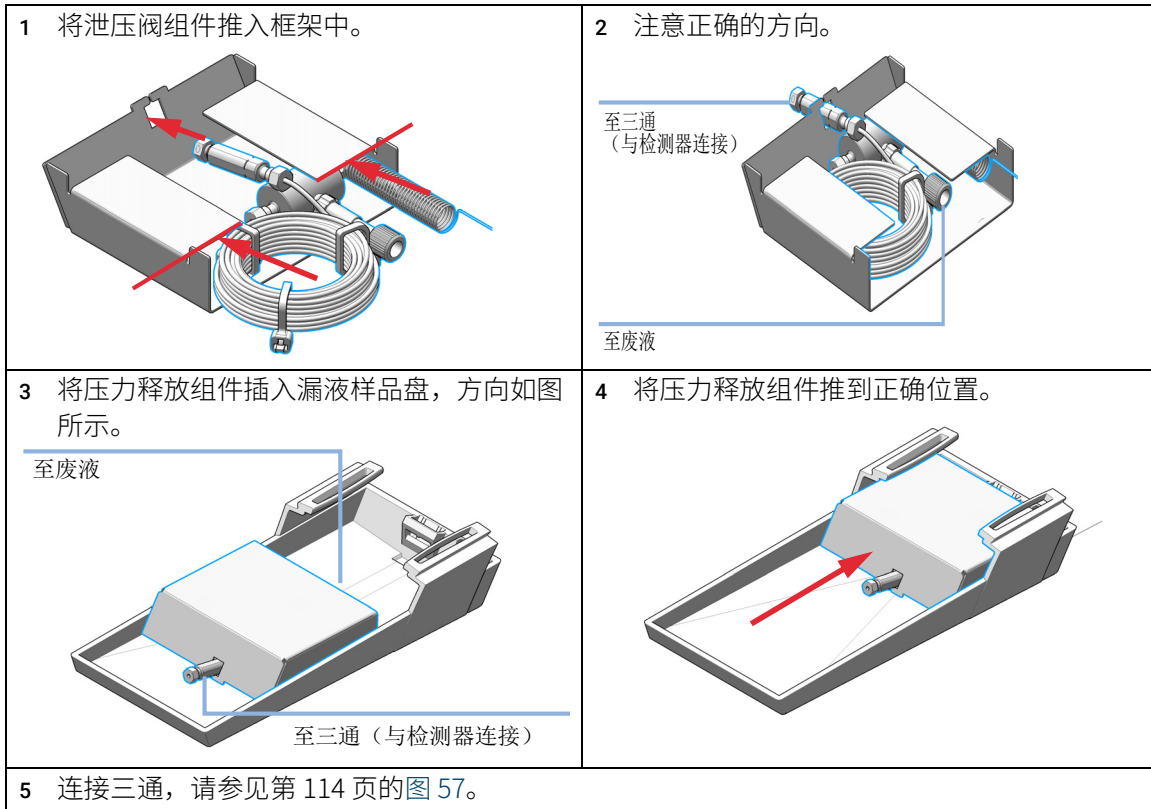
#	部件号	说明
1	G4236-60010	2D-LC 压力释放工具包

注意

对于 bio 2D-LC 系统，包括一个 PEEK 三通接头，应更换它以实现完全的生物兼容性。

注意

在流路中使用 PEEK 三通接头时，此时的压力限制为 600 bar。



安装阀头和连接毛细管

有关如何安装阀头和连接毛细管的说明，请参阅用户手册。

注意

有关具有额外功能的可选仪器设置，请参阅 2D-LC 用户手册或标准快速安装指南，其中提供了概述。

生物兼容性和生物惰性系统建议

- 确保所有物品（接头、毛细管、在线过滤器、色谱柱等）符合生物惰性或生物兼容性要求。
 - 请注意，即使是推荐用于生物应用的色谱柱也可能有不锈钢外壳，可能会将铁以及其他金属离子引入流路。流路中的这些物质可能会导致磷酸化核苷酸等敏感样品的吸收。在这种情况下，请使用带有 PEEK 内衬的色谱柱。
- 将系统用于含盐的溶剂或样品后，请用大量的水进行冲洗，以避免盐结晶造成堵塞。
- 如果压力降至 20 bar 以下，则无法保证 1290 泵在分析期间的可靠运行。为了得到最佳的结果，压力应持续不低于 50 bar。因此，在使用产生低背压的色谱柱（<50 bar，例如带有 1290 LC 系统的 SEC 色谱柱）时，请在泵和进样器之间安装限流毛细管，以便达到不低于 50 bar 的压力。
- 如果安装了多重清洗选件，请每天用水冲洗 Multisampler（请参阅《使用 Agilent LC 系统的最佳实践技术说明》）

小心

Agilent 生物惰性和生物 LC 系统不应受到钝化或类似程序的影响

这可能导致系统内表面出现不可逆损坏

- ✓ 请勿对生物惰性和生物兼容性系统执行钝化或类似程序。

冲洗程序

- ✓ 使用含盐流动相时，请定期执行此程序。要从流路和与溶剂接触的表面上去除盐沉积物，请定期重复该程序。每周至少重复一次该程序，或者在较长的待机或关闭时间之前重复该程序。如何准备关闭系统，请参阅 Bio LC 用户手册中的“关闭系统”部分。
- ✓ 对于从含盐流动相切换到反相应用（或任何使用高含量有机物运行的应用），必须使用该程序，因为这个切换过程会产生盐沉淀物。
 - 使用推荐的储存溶剂冲洗色谱柱，确保该溶剂与当前流动相相同且不会产生沉淀。
 - 使用联管替换色谱柱，使用装有室温 HPLC 等级水的新瓶子替换含盐溶剂瓶。
 - 使用无绒纸巾清洁瓶子头部组件，以尽可能减少剩余的盐溶液进入新水瓶所带来的交叉污染。
 - 自动进样器：用水冲洗至少 15 min。此方法可去除所有管路中的盐残留物，包括多重清洗选件的洗针和针座反冲洗。目视检查针/针座/清洗口是否有盐残留物，如有必要，手动清洁针/针座/清洗口。
 - 单独冲洗每个泵入缓冲液的泵通道，以 5 mL/min 的流量冲洗至少 10 min。
 - 用水冲洗整个系统流路，以 2 mL/min 的流量冲洗至少 10 min。在此步骤中，每 1 min 切换一次进样阀和色谱柱选择阀（如果安装）的位置。重复此步骤，直到每个位置都已至少选择五次。
 - 为尽量减少盐交叉污染，请用新的溶剂瓶替换水。

许可 2D-LC 仪器

要使用基于驱动程序的 2D-LC 解决方案，您需要以下许可证：

- MassHunter 许可证，以及
- 2D-LC USB 硬件加密锁

使用许可证加密锁激活 2D-LC 系统驱动程序

从 Agilent 购买基于 Agilent 驱动程序的 2D-LC 软件时，您将收到一个 U 盘，其中包括 2D-LC 加密锁许可证。要运行系统并使用其功能，必须激活²D 泵。为此，将物理设备连接到 2D-LC 泵背面的 USB 端口。这将激活并启用 LC 驱动程序中的 2D-LC 采集功能，并允许在 CDS 中使用 Agilent 2D-LC 软件。

所需的部件：

说明

USB 加密锁

此加密锁是非常重要的软件许可证。Agilent 不会更换丢失或损坏的加密锁。请将其存放在安全的地方。记下使用此加密锁激活的模块的序列号。



所需的硬件：

²D 泵必须是 1290 Infinity I 或 II 二元泵的设计。

激活 LC 驱动程序中的 Agilent 2D-LC 采集功能

- 1 关闭模块电源。
- 2 在此模块背面将 USB 加密锁插入²D 泵。
- 3 打开模块电源。
- 4 重新启动后，2D-LC 许可证将被激活，您可以取下 USB 加密锁并将其存放在安全的地方。

注意

更换主板后，重新激活 2D-LC 许可证需要加密锁。

注意

将 2D-LC 驱动程序连接到仪器时，它会检查许可证是否可用。如果没有许可证可用，驱动程序将保持脱机状态。将鼠标悬停在 CDS 面板中的 2D-LC 用户界面时，所显示的工具提示中会出现以下文本：**没有可用的 2D-LC 许可证。**

停用许可证（LabAdvisor 中的停用步骤）

要停用 2D-LC 泵上的许可证（例如，您希望在其他 2D-LC 泵上使用该许可证），必须使用 LabAdvisor 诊断软件。

- 1 将 USB 加密锁插入 2D 泵的后部。
- 2 在 **仪器控制 > 泵 > 特殊命令 > 许可证加密锁** 下停用许可证。
- 3 取下泵后部的 USB 加密锁，并将其放在安全的地方。

有关更多信息，请参阅第 297 页的 [Agilent Lab Advisor 软件](#)。

Agilent MassHunter Workstation 中的 2D-LC 软件安装和配置

先决条件

必须先安装兼容的 CDS。有关详细信息，请参阅相应的 CDS 文档。

观察您的计算机是否满足要求，例如：硬件 CPU、内存、硬盘空间和软件，检查 Windows 设置。

请检查您的 Windows 操作系统是否支持 2D-LC 解决方案。有关详细信息，请参阅第 48 页的[支持的操作系统](#)部分。

建议使用 “Agilent MassHunter Workstation Requirements Guide.pdf” (D0026036) 和 “Windows 10 Professional for MassHunter Workstation.pdf” (部件号 G3336-90036) 作为安装指南。

- 设置计算机系统
- 检查 PC 网卡配置
- 准备安装
- 要确保安装了最新的关键更新和安全修复程序，请运行 Windows 更新。
- 继续之前，请确保 Windows 更新已完成。

注意

- 如果您是从 MassHunter 10.x 版本升级，请先卸载 MassHunter 10.x 版本。
- 确保 PC 上没有安装其他 MassHunter，否则需要重建镜像。
- 在第一次安装版本之前，请确保**所有 Windows 更新**都已完成，否则您可能需要重建镜像。
- 决定安装类型。对于 2D-LC，使用不合规工作站。**此决定是永久性的，只能通过重建镜像来更改。**

注意

不建议将高于版本 10 的 MassHunter Workstation 和带有 2D-LC 附加软件的 ChemStation 安装在一台 PC 上。

注意

对于 2D-LC 设置，只有 MassHunter 工作站才可运行。网络化工作站不支持 2D-LC，因为它不支持 **2D-LC 文件拆分自动化**。

- 1 安装数据采集程序。
- 2 安装定量分析程序。
- 3 安装定量分析程序。
- [可选] 4 安装 Microsoft Excel。
- 5 安装适用于数据采集的 Service Pack。
- 6 安装定量分析报告。
- [可选] 7 为 MassHunter 配置 Excel。

注意

此配置是必需的，以避免以后出现任何问题。通常，CDS 会安装一个驱动程序，但该驱动程序可能不是最新的，可能需要在下一步更新驱动程序。

- 8 要更新 MassHunter 的 LC & CE Drivers，请按照 MassHunter 安装文档中的说明进行操作。
- 9 如果已安装 CDS：
请参阅第 46 页的兼容性矩阵，检查以下组件是否与 2D-LC 解决方案兼容：
 - 软件
 - LC 驱动程序
 - 固件
- 10 安装 Lab Advisor 诊断软件并更新整个 LC 系统的固件，请参见第 310 页的[更换模块固件](#)。
有关所需的最低固件集合，请参见第 52 页的[支持的固件](#)。

附加信息

安装和用户指南

使用相应的快速入门手册来熟悉 LC/MS 仪器，以及使用该仪器的第一步：

- Agilent 6400 Series Triple Quadrupole LC/MS Quick Start Guide
- Agilent 6200 Series TOF and 6500 Series Q-TOF LC/MS Quick Start Guide

快速入门手册还包含一份详细的文档列表，可帮助您进一步熟悉 MassHunter 软件。

注意

相应的资源应用程序中提供了这些指南：

- TOF and Q-TOF Resources
- TQ LCMS Resources
- LCMS Data Analysis Resources

完整列表可从 www.agilent.com 获取。

培训

使用资源应用程序中的材料来学习使用 MassHunter Workstation 软件，以及学习、维护和排除 LC/MS 仪器的故障。

访问 www.agilent.com 查看 LC/MS 仪器的培训课程列表。

使用 LC 系统的最佳实践

技术说明《使用 Agilent LC 系统的最佳实践》（部件号：SD-29000194 版本 B）介绍使用 Agilent LC 的最佳实践，如每日和每周任务。

在线帮助

- 要获取有关某个窗口或对话框的详细信息，请将光标放在目标窗口或对话框上，然后按 **F1** 键。
- 在 Agilent MassHunter IM-MS Browser 程序中，单击**帮助** > **目录**。从**帮助**菜单，访问**操作方法**帮助并参考帮助。

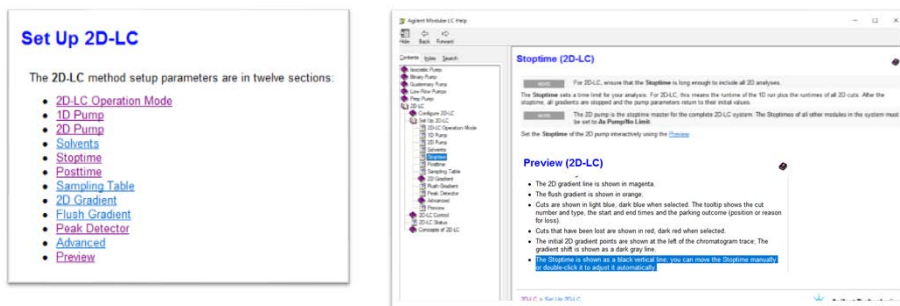


图 58 2D-LC 的模块化 LC 帮助

启动配置对话框

先决条件

2D-LC 硬件已正确设置，系统配置、项目设置和大多数仪器设置（如 IP 地址）已定义。

- 1 打开控制面板。
- 2 双击**配置仪器**工具。



或

右键单击并选择**配置仪器**。

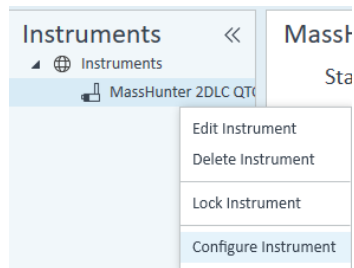


图 59 控制面板的“配置仪器”视图

- 3 如果尚未定义，请选择模块/模块包，并将 **Agilent 1100/1200/1260/1290 LC** 添加为 Agilent 系统。

连接信息会显示以下默认 IP 地址：

- 192.168.254.12，用于高端质谱仪
- 192.168.254.11，用于 LC 仪器

4 要配置仪器，请使用“仪器配置”对话框：

[可选]

- a 要更改仪器的名称，请键入新的**仪器名称**。
- b 要配置 LC 仪器，单击**设备配置...**。

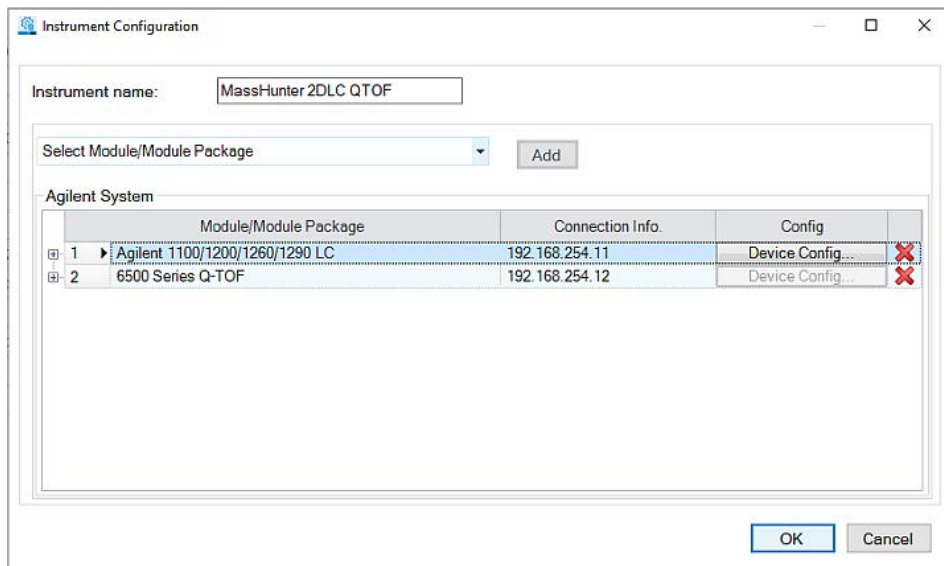


图 60 以 Q-TOF 为例的 MassHunter 仪器配置窗口

将打开**自动配置**对话框。

配置 HPLC 仪器

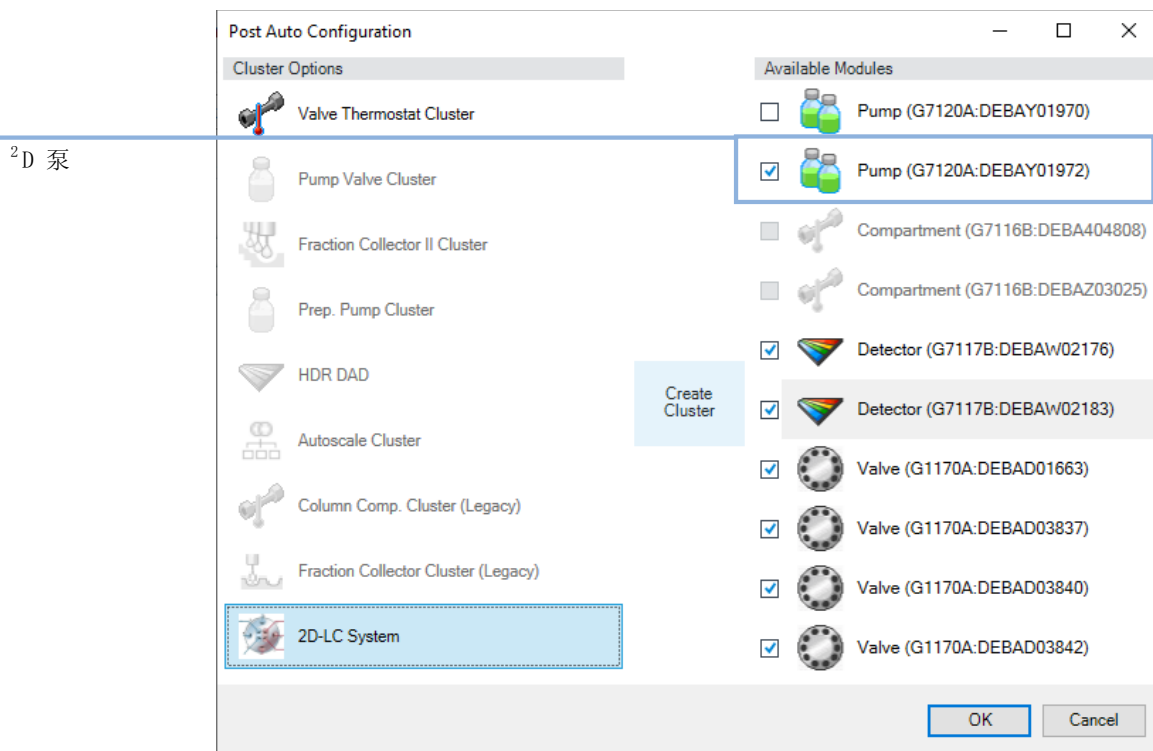


图 61 完整 2D-LC 解决方案的自动配置窗口，带两个 MHC 阀和一个分流阀。

- 1 选中/选择组合选项中的 2D-LC 系统。
- 2 如果安装了两个二元泵（例如 G4220A/B、G7120A 或 G7132A），则取消选中可用模块中的 1D 泵。
- 3 要创建组合，单击创建组合按钮。
2D-LC 组合配置窗口打开。

配置 2D-LC 组合

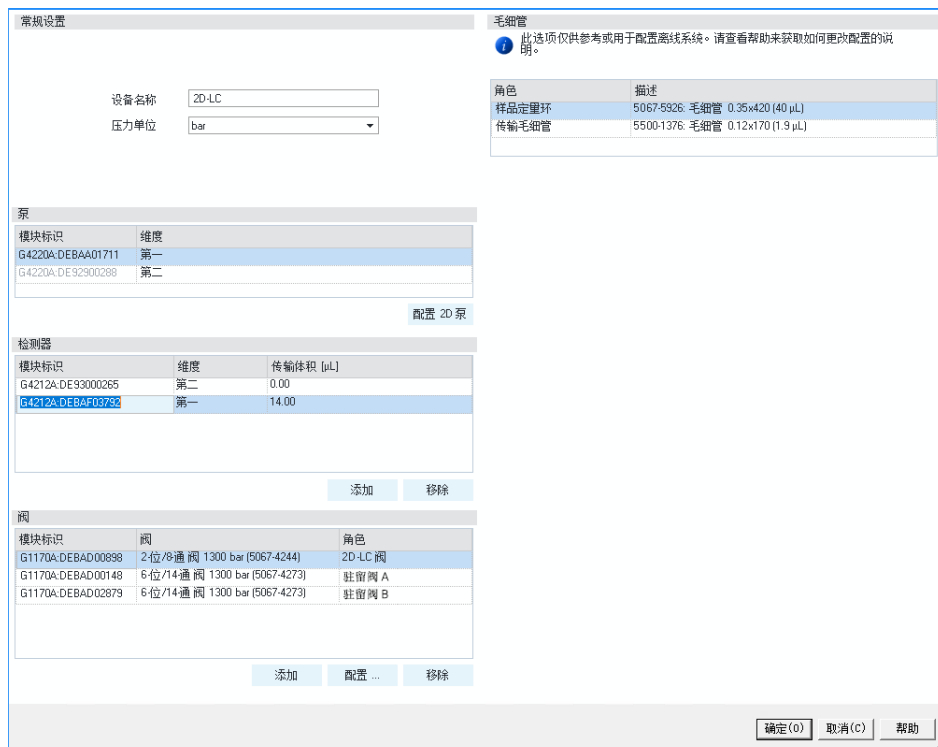


图 62 2D-LC 组合配置 (适用于 ASM 阀、MHC 阀和分流阀)

2D-LC 软件配置窗口允许：

- 验证 ¹D 和 ²D 泵配置
- 配置 ²D 泵
- 添加并选择 ¹D 和 ²D 检测器，并定义传输体积
- 配置不同的阀，如 2D-LC 阀头、MHC 驻留仓位（如果有多个阀头可用）和分流阀
- 毛细管连接，如样品定量环、传输和 ASM 毛细管
- 定义 ASM 因子（如果 ASM 阀可用）

注意

“2D-LC 组合配置”窗口的外观可能会有所不同，具体取决于安装的设备设置类型。例如，对于单样品定量环设置，将显示一个额外的复选框。

- [可选]
- 1 要更改设备名称、连接设置和压力单位，请填写相应字段。
 - 2 要验证正确的 ¹D 和 ²D 泵配置，请检查泵设置。

注意

如果有不同的泵可用，可以通过下拉菜单将它们选择为 ¹D 泵。

注意

此操作不会重命名您的泵。在仪器配置中的初始仪器设置期间，输入描述性命名。

有关详细信息，请参阅第 127 页的[配置 HPLC 仪器](#)。

配置 2D 泵按钮允许配置 ²D 泵，例如，溶剂类型。

- 3 在“检测器”下，选择 ¹D 和 ²D 检测器。

注意

此操作不会重命名检测器。在仪器配置中的初始仪器设置期间，输入描述性命名，请参阅第 127 页的[配置 HPLC 仪器](#)。

如有必要，可以配置和选择两个以上的检测器，例如，一个 UV 检测器和一个 ELSD 检测器。

传输体积的 ¹D 设置决定峰的 ¹D 检测和 2D-LC 阀切换之间的时间，具体取决于硬件设置。对于带两个 DAD 的标准 2D-LC，传输体积约为 14 μ L。

要计算体积，将检测器流通池体积的一半加上检测器流通池和 2D-LC 阀之间的体积。

注意

可使用以下选项通过实验更精确地验证传输体积（¹D 检测器到 2D-LC 阀）：

- 在第一个样品峰上运行基于时间的高分辨率实验（多个切片）。然后，具有最高丰度的切片将与峰的顶点对应。如果峰向前或向后移动，则可计算体积差异并调整传输体积。
- 或者，断开连接至 2D-LC 阀的传输毛细管，并将其连接至 ¹D 检测器的入口。然后将检测器串联起来，通过峰的偏移量可以计算出传输体积。

注意

每个维最多支持四个 CAN 检测器。

注意

并非所有待配置的检测器都会自动显示在配置窗口中。如果要配置更多检测器，必须使用添加按钮手动进行配置。请遵循以下格式：首先是模块编号，后跟冒号，然后是序列号，例如 G1390B:US12345678。

检测器输入格式必须正确以避免以后出现问题。

注意

检测器表必须至少包含一个检测器。例如，对于只有一个高端质谱仪的 2D-LC 系统，必须手动输入信息 G6546A:SN1234567。不允许设置未配置 ²D 检测器的系统。

注意

对于使用高端质谱仪作为另一个检测器的 MassHunter 工作流程，检测器通常在此处不可见。在数据评估的文件拆分期间定义传输体积（延迟），请参阅第 249 页的[文件拆分自动化](#)。

4 验证阀。根据安装的 2D-LC 阀，标准 2D-LC (G4236A)、ASM 2D-LC 阀 (G4243A) 或 Bio ASM 2D-LC 阀 (G5643B) 将自动出现。

[可选] **a** 如果您的系统包含多重中心切割驻留仓位，请指定对应于驻留仓位 A 或 B 的阀头。

[可选] **b** 如果系统包含分流阀，请在此处指定该阀的作用。您可以在方法中定义进一步的分流阀设置，请参见第 175 页的[指定分流阀的切换时间](#)。

5 验证毛细管。通过单击已安装的毛细管来选择。检查传输毛细管的定量环尺寸和长度是否正确。如果使用了 ASM 2D-LC 阀，定义用于定义分流比的 ASM 毛细管，请参见第 36 页的[主动溶剂调制 \(ASM\) 简介](#)。

- 定义**样品定量环**，例如，默认 40 μ L 样品定量环部件号 5067-5926（用于 MHC）或部件号 5067-5425（用于 SHC）。
- 定义**传输毛细管**，例如，默认毛细管 0.12x170 (1.9 μ L) 部件号 5500-1270（用于标准阀）或毛细管 0.12x170 (1.9 μ L) 部件号 5500-1376（用于 ASM 阀）。
- 定义**ASM 毛细管**，例如，默认毛细管 0.12x170 (1.9 μ L) 部件号 5500-1301（用于 ASM 阀），ASM 因子 3。

注意

ASM 毛细管的选择决定 ASM 因子，请参见第 36 页的[主动溶剂调制 \(ASM\) 简介](#)。因此，ASM 因子值不能在以后的采集方法中修改。

注意

允许使用通用毛细管，但必须先在 Lab Advisor 中配置，然后才能显示在此处，请参见第 302 页的[2D-LC 毛细管配置工具](#)。

6 要完成，离开“2D-LC 组合配置”，转到下一个窗口，请单击**确定**。

配置设备用户界面

1 定义模块名称（设备名称）。

例如，可能的选项如下：

- 进样器
- 单元泵（补偿泵）
- ¹D 二元泵
- 2D-LC
- ¹D MCT
- ²D MCT
- ¹D DAD
- ²D DAD

示例请参见第 132 页的图 63。

2 建议更改柱温箱和检测器的顺序。使用箭头。

注意

出于方法兼容性原因，应遵循建议的模块顺序。

有意义的顺序有助于面板概览和信号命名（例如，在定性分析中，更左边的检测器将命名为信号 1，例如 DAD1）。

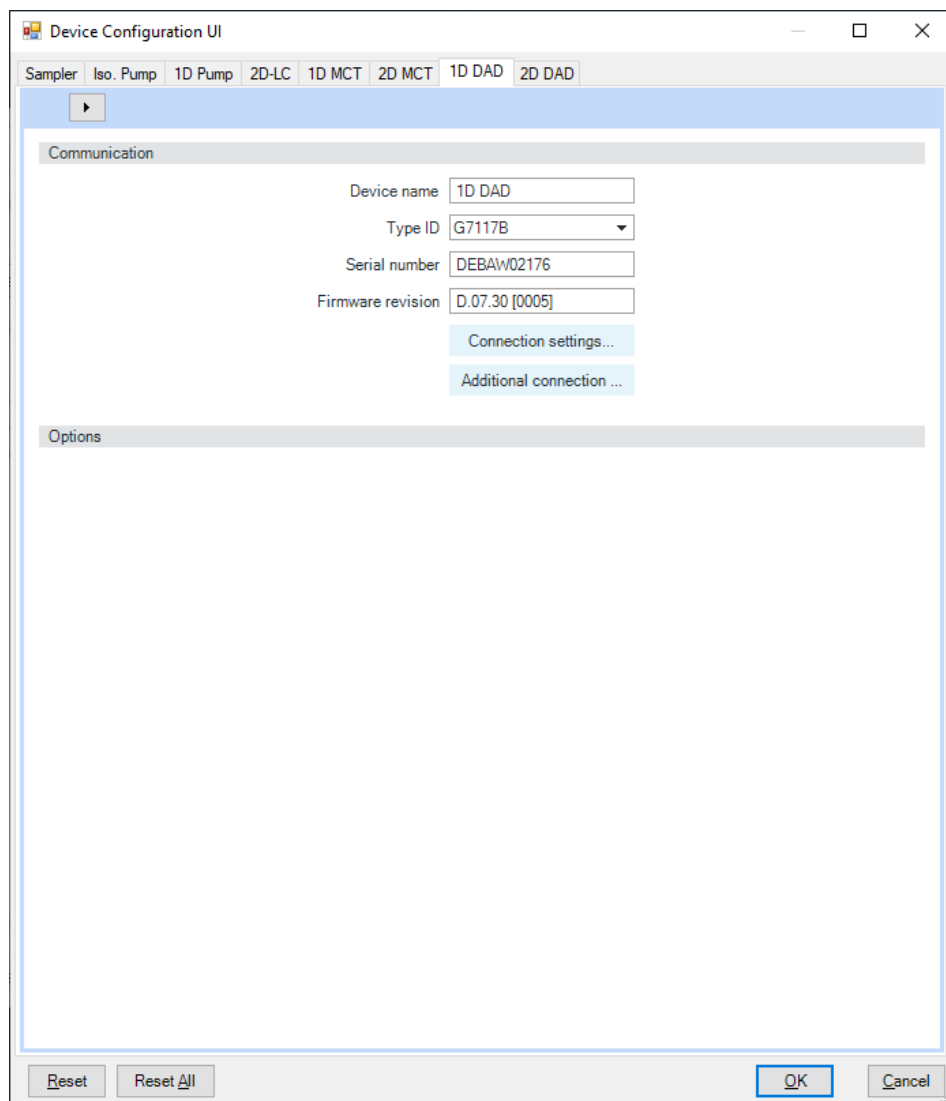


图 63 在设备配置中的 1D 检测器的命名



图 64 面板中模块用户界面的排列

- 3 为了提高每个检测器的数据采集频率，建议将¹D 和²D 检测器都连接到 LAN。要为 LAN 通信配置第二个检测器，您必须在用户界面中选择检测器，然后单击**附加连接...**。然后，输入第二个 LAN 地址并选中**使用辅助连接**。

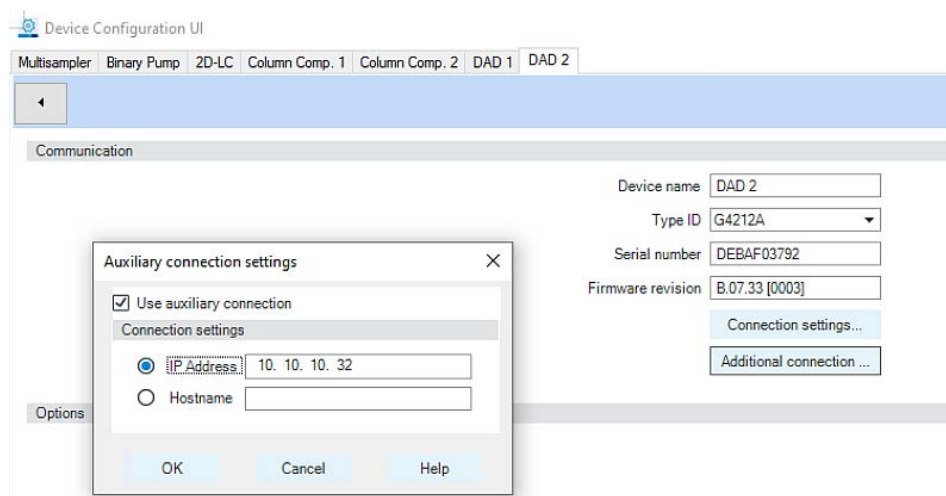


图 65 设置第二台检测器的另一个 LAN 连接

注意

对于带两个检测器的运行良好的 2D-LC 系统，您需要一台额外的设备，如集线器或交换机，或至少在您的 PC 中安装第二块 LAN 卡。

- 4 配置完成后，单击**确定**。

- 5 如果仪器配置成功，单击“确定”。

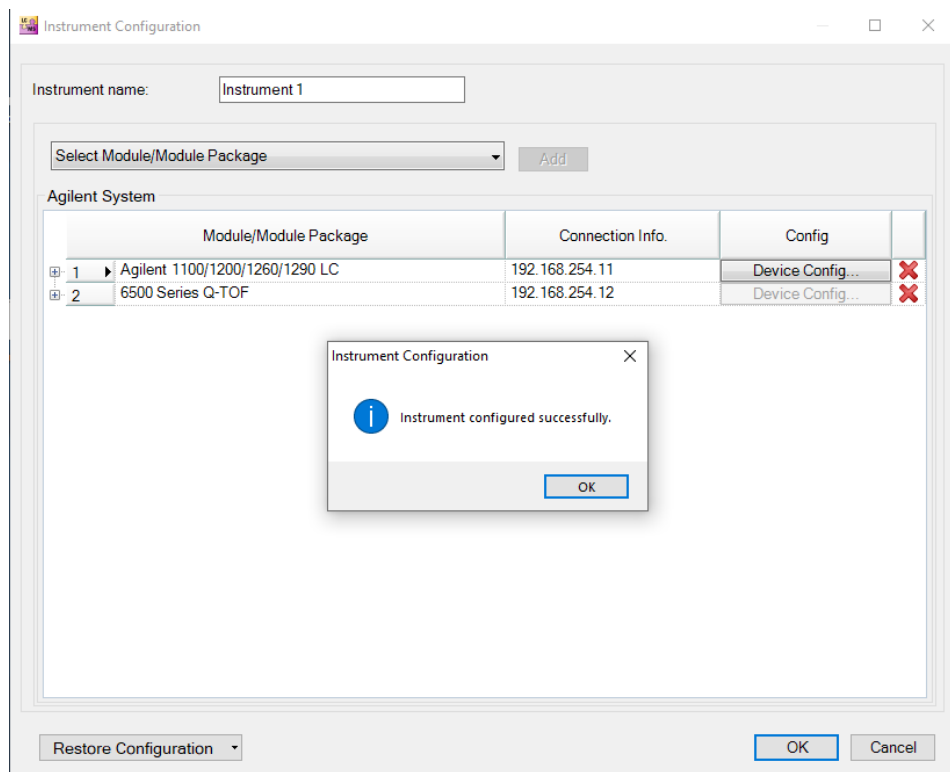


图 66 2D-LC Q-TOF 仪器的成功仪器配置

注意

如果以后要更改 2D-LC 组合配置，请右键单击 CDS 面板中的 2D-LC 用户界面。

重要的客户网络链接

- 如要访问安捷伦培训中心，请访问<https://www.agilent.com/chem/training>，了解可选培训方式，包括在线、课堂和现场教授。培训专家可以直接与您合作，帮助您确定最佳选项。
- 要进入 **Agilent 资源中心** 网页，请访问 <https://www.agilent.com.cn/zh-cn/agilentresources>。包含以下信息主题：
 - 样品前处理和容器
 - 化学标准品
 - 分析
 - 服务与支持
 - 应用工作流程
- **Agilent 社区** 是获取答案、与其他人就应用程序和 Agilent 产品展开协作及查找 Agilent Technologies 相关深度文档和视频的最佳位置。请访问 <https://community.agilent.com/welcome>
- 您可以搜索 **Agilent YouTube** 频道，观看有关仪器特定准备要求的视频，网址是 <https://www.youtube.com/user/agilent>
- 需要拨打服务电话？请访问：<https://www.agilent.com/zh-cn/service/laboratory-services/maintenance-repair>

5

2D-LC 数据采集

MassHunter Workstation 中的 2D-LC 数据采集	137
启动数据采集软件	137
MassHunter Workstation 中的 2D-LC 概述	139
仪器状态	140
2D-LC 用户界面	141
2D-LC 用户界面中的 2D-LC 阀在线监视器	148
方法编辑器窗口	150
样品运行窗口	150
工作列表窗口	150
调谐窗口	150
仪器详细信息	151
MassHunter Workstation 中的日志	153
2D-LC 在线帮助	155
重要的客户网络链接	156

本章提供有关 MassHunter Workstation 中的 2D-LC 数据采集的信息。

MassHunter Workstation 中的 2D-LC 数据采集

启动数据采集软件


所需的准备:


要启动仪器，您需要:

- 一台配置好的仪器
- 一个与仪器关联的 CDS 项目
- “仪器用户”、“仪器管理员”或“所有”角色（如果选择了身份验证）拥有的**运行仪器**的权限

1 要开始数据采集，双击 **MassHunter 2DLC QTOF（联机）** 图标 

或

要开始数据采集，双击**控制面板**图标 

并单击仪器菜单中的  按钮。

首次启动数据采集软件时，会显示主窗口。



图 67 MassHunter Workstation 软件的启动屏幕

由于 MassHunter 采集软件对不同的中高端质谱系统使用相同的 LC 驱动程序，因此此处只是显示的 2D-LC Q-TOF 与 2D-LC TQ 的设置窗口及 UI 元素稍有不同。

在此主窗口下的各种窗口内，您可以完成几乎所有工作。这些窗口提供了执行以下操作的工具：

- 设置采集方法
- 交互式或自动运行样品
- 监控仪器状态和运行情况

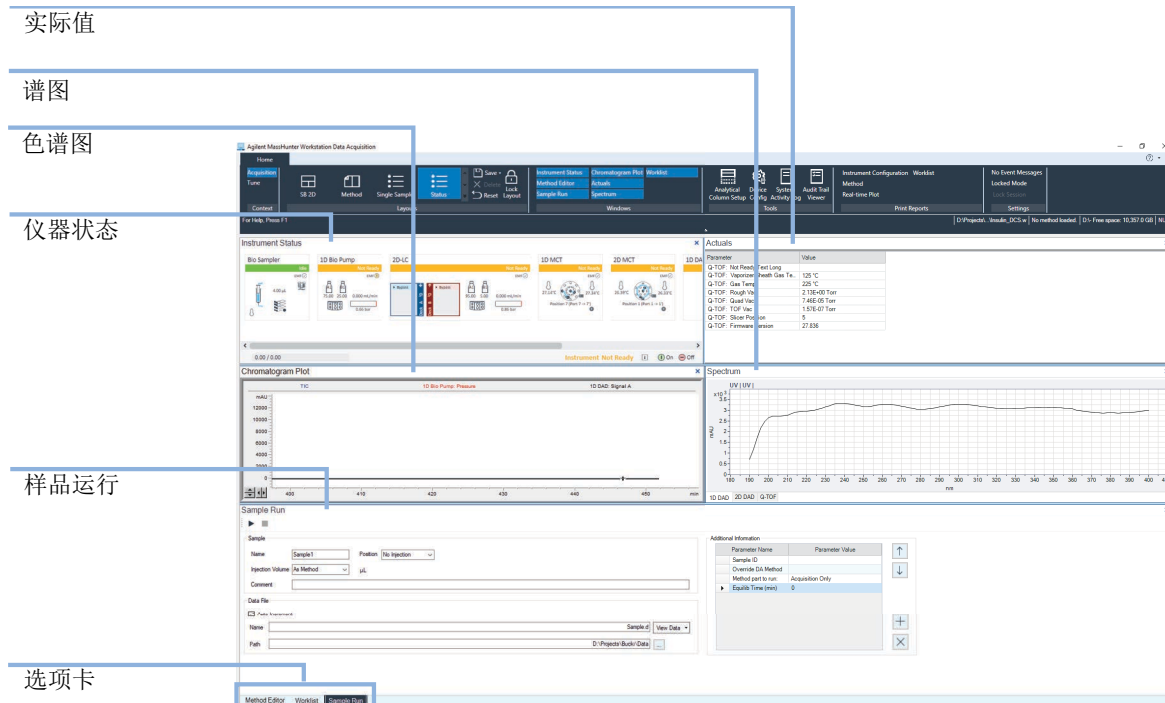


图 68 以 2D-LC Q-TOF 系统为例的 MassHunter Workstation 数据采集各窗口概述（要切换到不同的窗口，请单击选项卡下的选项）

注意

有关 Q-TOF 问题的进一步帮助，请参阅《Agilent 6200 Series TOF and 6500 Series Q-TOF LC/MS Quick Start Guide》。

MassHunter Workstation 中的 2D-LC 概述

面板是常用的仪器控制用户界面元素。

驱动程序负责插入 CDS 软件的硬件相关功能。例如，这些功能包括如下：

- 仪器配置
- 仪器控制
- 方法参数
- 仪器状态显示

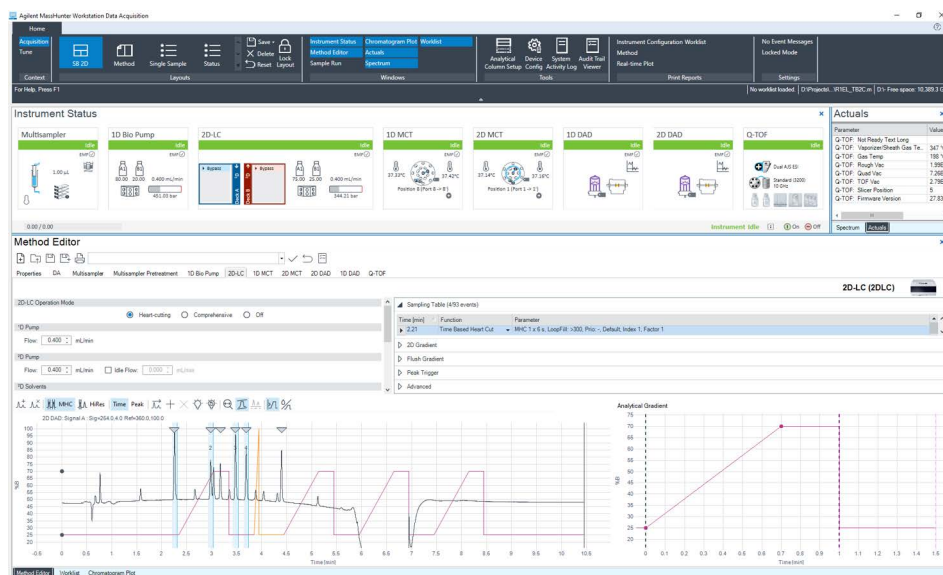


图 69 以 2D-LC Q-TOF 系统为例的主窗口、特定的 2D-LC UI 和 2D-LC 方法编辑器

仪器状态

仪器状态窗口显示使用仪器配置的每台设备的状态。状态的可能值如下图所示。您还可以为 LC 设备和 MS 仪器设置非方法控制和配置参数。



图 70 完整 2D-LC 解决方案的仪器状态

每台设备都有一个快捷菜单。此窗口以文本和颜色编码的形式显示每台设备的状态：



图 71 状态的颜色编码

2D-LC 用户界面

仪器状态窗口显示每台设备的当前状态。在本例中，2D-LC 设备未就绪。您可以单击任何设备窗格中的该按钮以获取有关该设备的帮助。将鼠标悬停在上方时，图标和信息框将变得可见。在此例中，二元泵的驱动器关闭。单击用户界面中的绿色**开启**按钮将激活泵。

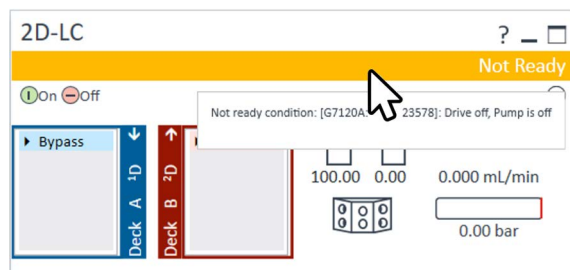


图 72 2D-LC 帮助信息

2D-LC 用户界面中的附加信息

仪器面板可以提供一些附加设置和信息。

在 2D-LC 用户界面的完整视图中，可以看到一个实际值框。将鼠标悬停在面板上方并单击界面右上角的方形，可以显示此附加视图。然后，还会显示几个仪器信号，如流量和压力等。再次单击右上角可以撤消步骤，该框将消失。

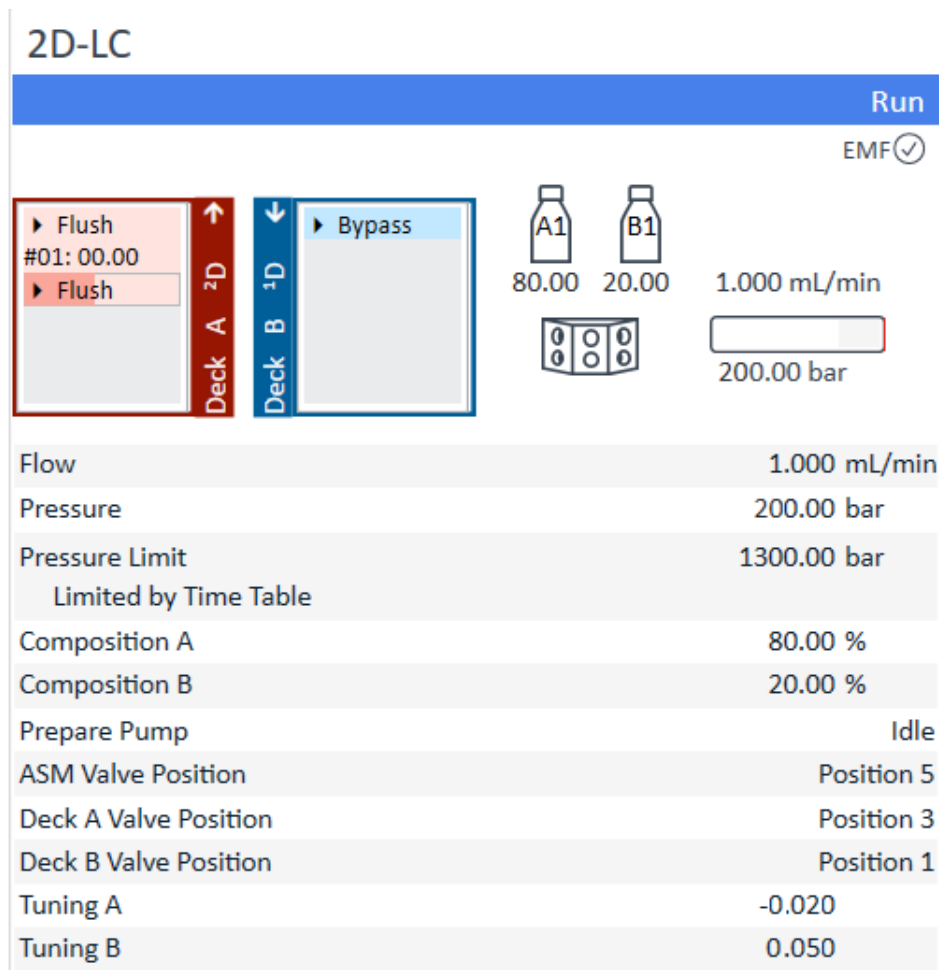


图 73 2D-LC 用户界面的完整视图

流量	当前溶剂流速（以 mL/min 为单位）。
压力	当前泵压力（单位为 bar、psi 或 MPa）
压力限值	当前最大压力限值。
组成 A:B	当前溶剂组成。安装溶剂选择阀后，通道将显示在图形中。
准备泵	该信息表示当前泵状态。
2D-LC 阀位置	该信息表示当前 2D-LC 阀状态。在当前设置中，安装了 ASM 阀（位置 1-5），请参阅第 69 页的 连接 2D-LC 阀，ASM (G4243A)
驻留阀 A 位置	该信息表示当前 MHC 阀状态驻留仓位 A（位置 1-6）
驻留阀 B 位置	该信息表示当前 MHC 阀状态驻留仓位 B（位置 1-6）
分流阀位置	该信息表示当前阀位置（位置 1 → 进入 MSD，位置 2 → 进入废液）。
调谐	该信号表示泵驱动器保持当前系统状态所需的当前工作量。

注意

有关更多信息，请参阅泵用户手册。

上下文菜单提供了更多信息和设置选项。例如，您拥有修改中的模块控制和毛细管设置的访问权限。要使上下文菜单可见，必须在用户界面中单击鼠标右键。在此视图中，有若干与硬件相关的功能，例如：

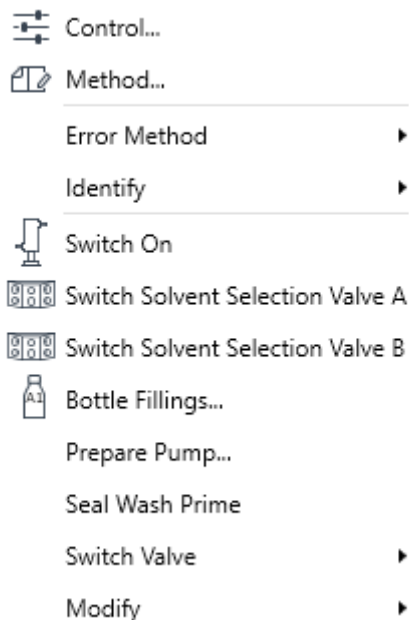


图 74 2D-LC 组合的上下文菜单/控制界面

控制	显示泵的“控制”对话框。
方法	泵的“方法设置”对话框仅在 OpenLab 中可见。在 MassHunter 概念中，可在 方法编辑器 选项卡中找到该设置。
设置错误方法	设置在当前硬件中可用的方法出错时将调用的方法。
识别设备	致使模块前面的 LED 闪烁数秒钟。
开启/关闭泵	切换泵的状态，开启或关闭。
切换溶剂选择阀 A	使您能够将通道 A 的溶剂进样口管路从入口管路 1 切换到 2。

切换溶剂选择阀 B 使您能够将通道 B 的溶剂进样口管路从入口管路 1 切换到 2。

瓶填充 显示“瓶填充”对话框。

准备泵 使您能够控制清洗、调节或流路注入功能。

- 清洗：

清洗 LC 泵。使用新的或不同的溶剂填充系统。按照泵用户指南中的泵清洗说明进行操作。

- 调节：

调节或平衡色谱柱。清洗完泵后，进行设置，从而调节或平衡色谱柱。

- 在“方法编辑器”菜单中输入 LC 参数，然后单击“应用”将方法参数下载到 LC 或，
- 要选择 LC 调节方法，请从“数据采集”窗口顶部的“方法”列表中选择一种。

注意

调节也可用于去除微气泡。对于此操作，必须使用合理的流速（例如 1.5 mL/min）、组成设置（例如 A: 50 % B: 50%）和背压 (>200 bar)，确保有效去除所有泵头上的气泡。有关更多信息，请按照技术说明《使用 Agilent LC 系统的最佳实践》中的说明进行操作。

- 注入：

如果调节 15 min 无法排出泵头中的空气，则注入功能会有所帮助。该模块会同时启动所有泵驱动器，以高速吸取 20 倍的溶剂，并将其分配到自动吹扫阀的废液位置。注入功能会对阀和转子密封垫施加压力。因此，使用注射器强行注入泵头或试图修理泵头之前，这只能作为最后的处理办法。

冲洗样品定量环 使用梯度开始条件冲洗所有 2D 样品定量环，并使用方法中定义的冲洗梯度来冲洗 2D 流路。

注意

在冲洗过程中的阀切换期间，少量 1D 溶剂将被传输到第二维的路径中。

密封垫清洗流路注入 使您能够在更换密封垫清洗溶剂后重新填充密封垫清洗管路。

- 切换阀** 允许选择不同的阀（例如 ASM 阀）以及更改阀位置
- 修改** 使您能够配置/修改 2D-LC 毛细管和传输体积。
- 修改毛细管** 显示“修改毛细管”对话框。在此窗口中，您可以配置样品定量环、传输毛细管和 ASM 毛细管，请参阅第 128 页的配置 2D-LC 组合。

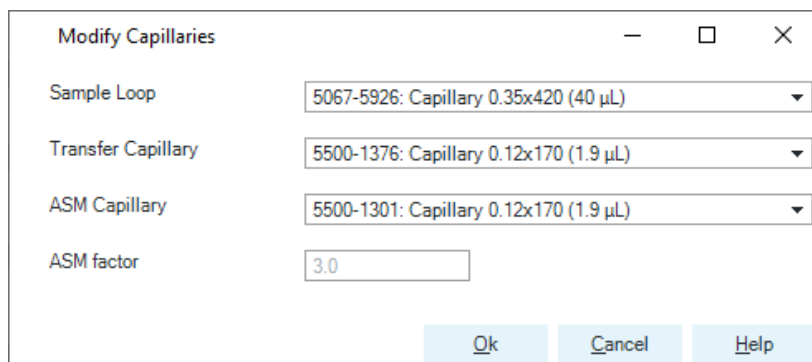


图 75 “修改毛细管”窗口允许配置样品定量环、传输毛细管和 ASM 毛细管

- 修改传输体积** 显示“修改传输体积”对话框。在此窗口中，您可以配置¹D 检测器和²D 检测器的传输体积。

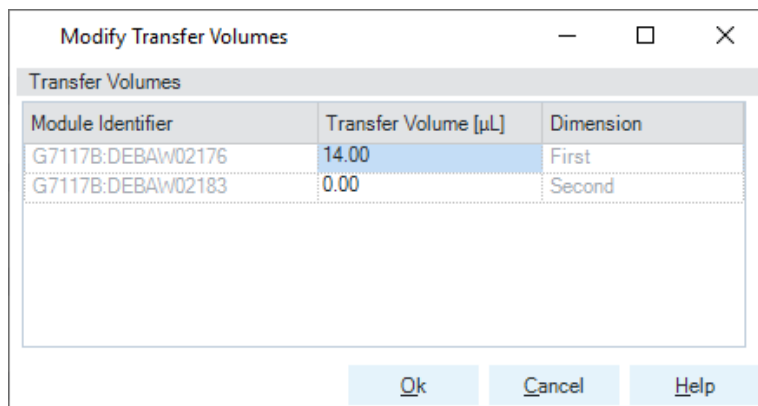


图 76 “修改传输体积”窗口允许配置传输体积

传输体积 ¹D 检测器

传输体积的 ¹D 设置决定峰的 ¹D 检测和 2D-LC 阀切换之间的时间，具体取决于硬件设置。对于带两个 DAD 的标准 2D-LC，传输体积约为 14 μL 。要计算体积，必须将检测器流通池体积的一半加上检测器流通池和 2D-LC 阀之间的体积。

注意

如果安装了第二个 ¹D 检测器，则必须在参比色谱图的信号选择中输入第一维体积的两个检测器之间的传输体积，请参阅第 157 页的[方法参数](#)。

²D 检测器传输体积

²D 检测器的传输体积由 2D-LC 阀和二维检测器流通池之间的体积定义。

注意

对于仅将高端质谱仪作为额外的第二检测器的 MassHunter 工作流程，您必须在数据评估中定义此传输体积（延迟）。

2D-LC 用户界面中的 2D-LC 阀在线监视器

在线监视器显示 2D-LC 阀的状态。以下各图显示了一些示例，以便您可以在操作过程中随时看到正在发生的情况。

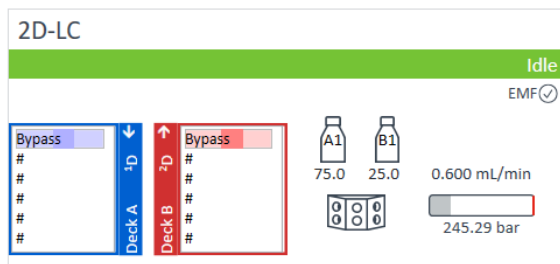


图 77 无采样/存储的切片，流动相通过每个驻留仓位的定量环（由旁路指示）

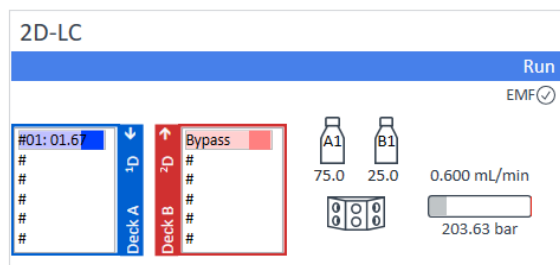


图 78 由蓝色光束移动指示中心切割采样/存储，切片编号和时间（以分钟为单位）

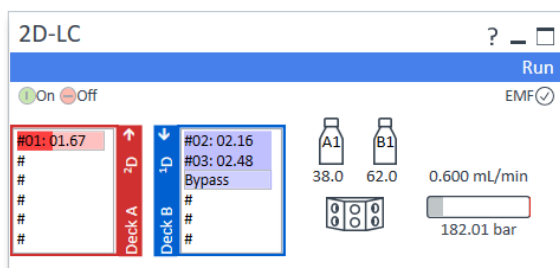


图 79 由红色光束移动指示²D 分析

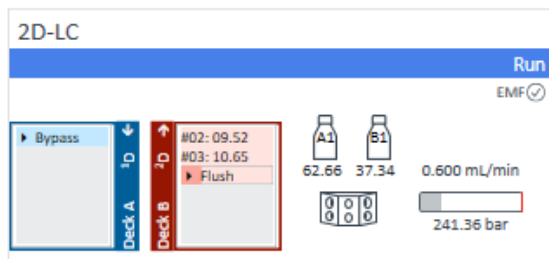


图 80 由红色光束移动指示冲洗

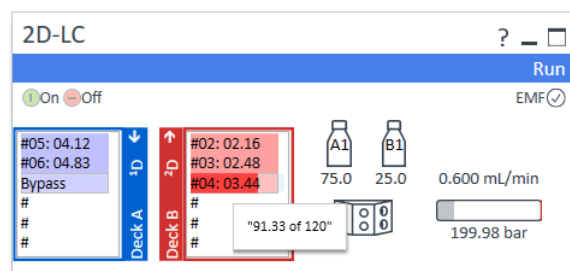


图 81 悬停在分析定量环上指示经过的时间和剩余时间（以秒为单位）

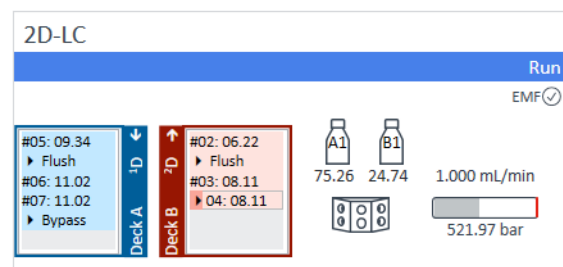


图 82 高分辨率系列提供相同的存储时间（此处的切片 3 和 4 以及 6 和 7）

方法编辑器窗口

在“方法编辑器”窗口中，输入方法的采集参数，请参阅第 157 页的[方法参数](#)。

注意

要将方法编辑器从用户界面分离，双击“方法编辑器”栏。然后，您可以放大窗口，获得全屏视图以进行编程。

样品运行窗口

在“样品运行”窗口中，输入样品信息以交互式运行单个样品，并且可以启动单个样品运行。

工作列表窗口

通过“工作列表”窗口，可以输入多个样品的样品信息。

运行工作列表时，样品将按照工作列表中列出的顺序自动运行。

将工厂脚本添加到工作列表时，可以向工作列表添加一个或多个调谐操作。

调谐窗口

在“调谐”窗口中，可以对质谱仪进行调谐。您可以使用其中一种自动调谐算法，也可以对仪器进行手动调谐。手动调谐可能导致次优调谐；但如果执行手动调谐，Agilent 建议您仅手动调谐仪器的前部：离子源和光学元件 1。Agilent 不建议您对碰撞池之后的参数进行手动调谐。

仪器详细信息

在某些情况下，可能需要检查各种详细信息，如固件和驱动程序版本。

使用以下选项来获取这些信息：

- 第 151 页的使用模块列表获取仪器详细信息
- 第 152 页的使用仪器配置报告获取仪器详细信息

注意

如果需要升级，请参阅第 46 页的兼容性矩阵或联系您的 Agilent 销售代表。

使用模块列表获取仪器详细信息

- 1 启动数据采集程序。
- 2 单击面板右下角的 **i** 图标。



图 83 面板的“仪器信息”视图

将显示“模块列表”屏幕。

Vendor	Name	Part Number	Serialnumber	Firmware Revision	Connection Info	Driver Version	Additional Information
Agilent	Sampler	G7129B	DEBA90XXXX	D.07.33 [0003]	192.168.254.11	3.3.36	ERI Class : 0
Agilent	Iso. Pump	G7110B	DEBA20XXXX	D.07.33 [0003]	192.168.254.11	3.3.36	ERI Class : 0
Agilent	Binary Pump 1	G7120A	DEBAV0XXXX	B.07.33 [0003]	192.168.254.11	3.3.36	Access Point
Agilent	2D-LC	2DLC	DEBAV0XXXX		192.168.254.11	3.3.36	
	Pump	G7120A	DEBAV0XXXX	B.07.33 [0003]			
	TwoDimLCValve	G1170A	DEBAD0XXXX	D.07.33 [0003]			
	ParkDeckValve A	G1170A	DEBAD0XXXX	B.07.33 [0003]			
	ParkDeckValve B	G1170A	DEBAD0XXXX	B.07.33 [0003]			
	Diverter Valve	G1170A	DEBAD0XXXX	D.07.33 [0003]			
Agilent	Column Comp. 1	G7116B	DEBA40XXXX	D.07.33 [0003]	192.168.254.11	3.3.36	Slave Firmware: C.07.30 [0001]
Agilent	Column Comp. 2	G7116B	DEBA20XXXX	B.07.33 [0003]	192.168.254.11	3.3.36	Slave Firmware: C.07.30 [0001]
Agilent	DAD 1	G7117B	DEBAW0XXXX	D.07.33 [0003]	192.168.254.11	3.3.36	ERI Class : 0
Agilent	DAD 2	G7117B	DEBAW0XXXX	D.07.33 [0003]	192.168.254.11	3.3.36	ERI Class : 0
Agilent	Q-TOF	G6550A	SG1335XXXX	14.808	192.168.254.12	10.2.40	

图 84 以 2D-LC Q-TOF 系统为例的“仪器模块列表”视图

- 3 单击打印或关闭。

使用仪器配置报告获取仪器详细信息

- 1 启动数据采集程序。
- 2 从打印报告版面选择“仪器配置”。

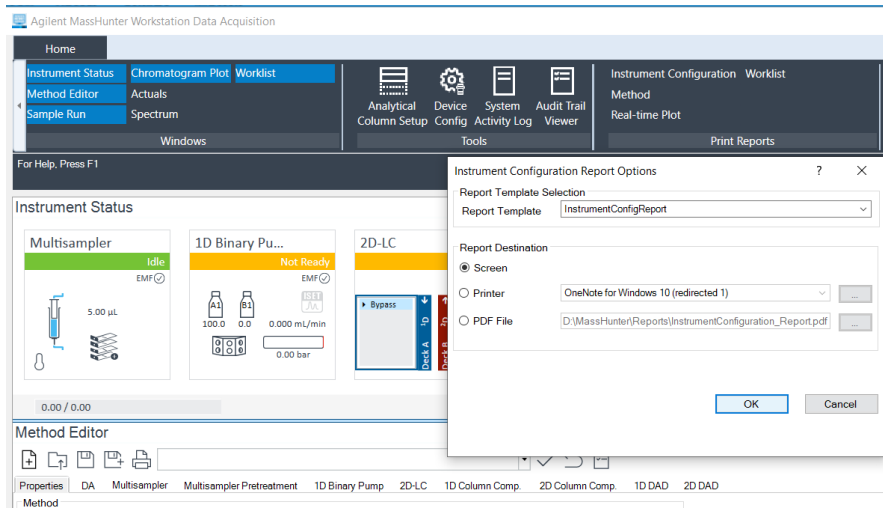


图 85 以 2D-LC Q-TOF 系统为例的“仪器配置报告选项”视图

- 3 单击屏幕。
- 4 单击确定。

Instrument Configuration Report



Instrument : Instrument 1
 Configuration Date : 11/9/2020 06:19:26 PM
 Configured By : AGILENT\ Instrument 1

Device Information

Name	Model	Serial No	Host Name Or IP	Com Port	Firmware Version
Q-TOF	G6550A	SG1335XXXX	192.168.254.12		14.808
Agilent 1100/1200/1260/1290 LC			192.168.254.11		
Sampler	G7129B	DEBA9XXXX	192.168.254.11		D.07.33 [0003]
Iso. Pump	G7110B	DEBAYXXXX	192.168.254.11		D.07.33 [0003]
Binary Pump 1	G7120A	DEBAYXXXX	192.168.254.11		B.07.33 [0003]
2D-LC	2DLC	DEBAYXXXX	192.168.254.11		
Binary Pump	G7120A	DEBAYXXXX			B.07.33 [0003]
Valve	G1170A	DEBADXXXX			D.07.33 [0003]
Valve	G1170A	DEBADXXXX			B.07.33 [0003]
Valve	G1170A	DEBADXXXX			B.07.33 [0003]
Valve	G1170A	DEBADXXXX			D.07.33 [0003]
Column Comp. 1	G7116B	DEBA4XXXX	192.168.254.11		D.07.33 [0003]
Column Comp. 2	G7116B	DEBAZXXXX	192.168.254.11		B.07.33 [0003]
DAD 1	G7117B	DEBAWXXXX	192.168.254.11		D.07.33 [0003]
DAD 2	G7117B	DEBAWXXXX	192.168.254.11		D.07.33 [0003]

图 86 以 2D-LC Q-TOF 系统为例的显示模块详细概览的“仪器配置报告”视图

MassHunter Workstation 中的日志

有时需要检查 InfinityLab LC/MSD 仪器中发生的进程。因此，有一个记录进程的日志文件。此日志文件为系统分析提供了重要数据。

查看日志

- 1 通过控制面板启动数据采集。
- 2 从“工具”版面中选择“系统活动日志”将启动“日志查看器”程序。

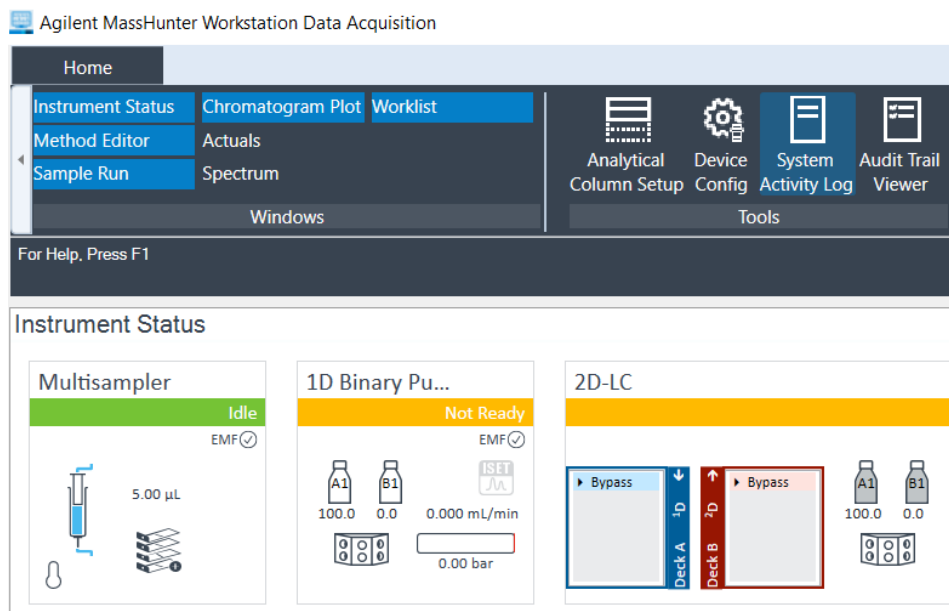


图 87 MassHunter Workstation 数据采集的系统日志查看器

配置日志通知

如果收到过多对您来说无用的日志通知，可以更改显示的通知类型。

- 1 单击任务栏中的**过滤器**。
- 2 选择要显示的通知类型。

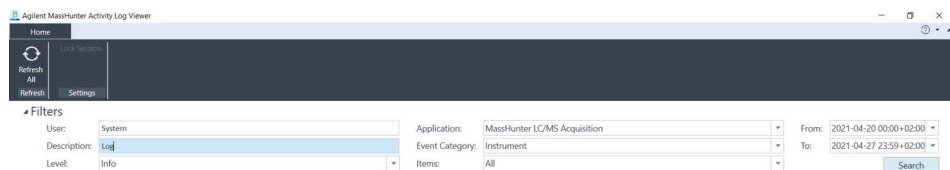


图 88 活动日志查看器

- 3 单击**检索**。

2D-LC 在线帮助

- 1 要获取有关某个窗口或对话框的详细信息，请将光标放在目标窗口或对话框上，然后按 **F1** 键。
- 2 从帮助菜单，访问“操作方法”帮助并参考帮助。

重要的客户网络链接

- 如要访问安捷伦培训中心，请访问<https://www.agilent.com/chem/training>，了解可选培训方式，包括在线、课堂和现场教授。培训专家可以直接与您合作，帮助您确定最佳选项。
- 要进入 **Agilent 资源中心**网页，请访问 <https://www.agilent.com.cn/zh-cn/agilentresources>。包含以下信息主题：
 - 样品前处理和容器
 - 化学标准品
 - 分析
 - 服务与支持
 - 应用工作流程
- **Agilent 社区**是获取答案、与其他人就应用程序和 Agilent 产品展开协作及查找 Agilent Technologies 相关深度文档和视频的最佳位置。请访问 <https://community.agilent.com/welcome>
- 您可以搜索 **Agilent YouTube** 频道，观看有关仪器特定准备要求的视频，网址是 <https://www.youtube.com/user/agilent>
- 需要拨打服务电话？请访问：<https://www.agilent.com/zh-cn/service/laboratory-services/maintenance-repair>

6

方法参数

2D-LC 方法编辑器	158
设置 2D-LC 方法参数	159
2D LC 操作模式	159
定义 1D 泵流量	161
定义 2D 泵流量	162
定义 2D 溶剂	163
定义停止时间	164
定义后运行时间	165
编辑采样表	166
定义 2D 梯度	172
使用冲洗梯度	179
使用峰触发	180
使用高级 2D 泵设置	185
预览 (2D-LC)	187
进一步的图解说明	194
以图形方式设置基于峰的实验	200
以图形方式设置 2D 梯度	205
使用图形用户界面设置二维梯度	207
附加信息	209
多重进样	209
动态峰存储	211

本章提供有关方法参数的背景信息。它有助于在标准中心切割、多重中心切割、高分辨率采样和全切割 2D-LC 模式下优化 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案中的方法。

2D-LC 方法编辑器

“方法设置”对话框用于编辑 2D-LC 特定的方法参数。

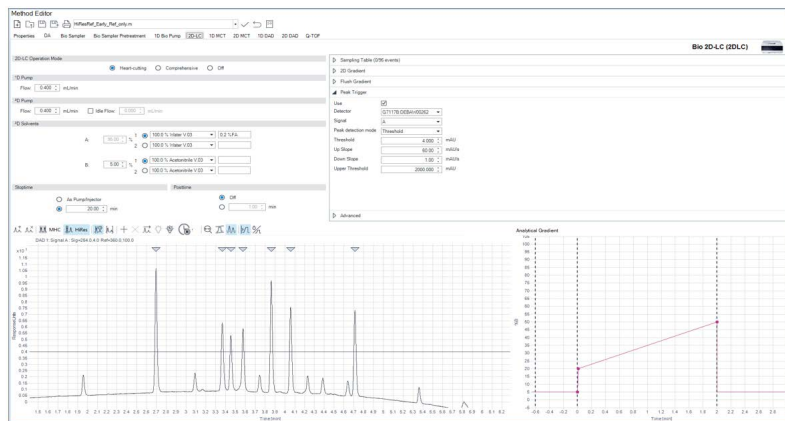


图 89 2D-LC 方法设置

可以设置以下方法参数：

- 2D-LC 操作模式，请参见第 159 页的 2D LC 操作模式
- 溶剂，请参见第 163 页的定义 2D 溶剂
- 流量设置，请参见第 162 页的定义 2D 泵流量
- 停止时间，请参见第 164 页的定义停止时间
- 后运行时间，请参见第 165 页的定义后运行时间
- 采样表，请参见第 166 页的编辑采样表
- 2D 梯度，请参见第 172 页的定义 2D 梯度
- 冲洗梯度，请参见第 179 页的使用冲洗梯度
- 峰检测器操作值，请参见第 180 页的使用峰触发
- 高级，请参见第 185 页的使用高级 2D 泵设置
- 参比色谱图，请参见第 187 页的预览 (2D-LC)
- 分析或冲洗梯度预览，请参见第 207 页的使用图形用户界面设置二维梯度

注意

要获取更多信息，在软件中，按 F1 启动软件的在线帮助。

设置 2D-LC 方法参数

2D LC 操作模式

设置模式有以下后果：

中心切割 (LC-LC)

中心切割模式涵盖两个 2D-LC 应用中心切割 (LC-LC) 和高分辨率采样 (**高分辨率**)。选择中心切割模式后，您可以稍后在软件中定义是否要使用一种或另一种模式，甚至同时使用两种模式。

在中心切割模式中，¹D 的相关体积被剪掉，并使用 ²D 泵进样到 ²D 色谱柱。峰触发或时间窗口定义要在 ²D 色谱柱上进样的体积。开始中心切割时，定量环将填充目标峰。然后，²D 上的进样开始运行 ²D 泵的梯度。

有关设置此模式的详细信息，请参见第 18 页的**中心切割 2D-LC (LC-LC)**。

与使用连续流通原理的中心切割相比，在高分辨率采样 (**高分辨率**) 模式下，多重中心切割 (**MHC**) 阀在存储峰前后切换。

设置实验时，请记住以下一般注意事项：

- 每个连续切片的定量环存储相同的样品体积。
- 不得将第一个和最后一个定量环用于存储。
- 可以减少从 ¹D 到 ²D 的溶剂传输。
- 切片编号 5 无法完全存储在样品定量环中。否则，切片 6 将部分进入传输毛细管，由此丢失或损坏切片 5。切片 5 部分停留在传输线中，并在 ²D 中立即进行分析。
- 要将切片 6 存储到样品定量环中，首先需要将切片从 2D-LC 阀传输至驻留阀。必须在 2D-LC 系统的配置中定义此新体积。

有关设置此模式的详细信息，请参见第 25 页的**高分辨率采样 - 峰存储原理**。

全切割 2D-LC (LCxLC)

如果已选择全切割 2D-LC，¹D 的整个体积将被进样（使用 ²D 泵）到 ²D 色谱柱。交替使用两个相同的定量环，其中一个定量环填充在 ¹D 中，其他定量环的体积用 ²D 色谱柱分离。

调制时间反映 ²D 中的一个进样周期的持续时间。此后，将重复溶剂组成梯度。参数“调制时间”仅用于全切割模式。²D 梯度停止时间反映 ²D 梯度的最大持续时间；最小值为 0.01 min。在此时间之后，将恢复梯度前的百分比 B 值（或时间 = 0.0 时的时间表条目）。在全切割 2D-LC 模式下，梯度在达到调制时间时停止。

关闭

将模式设为**关闭**后，2D-LC 功能将被禁用。2D-LC 仪器用作标准 1D-LC 仪器，使您能够执行 ¹D 运行。

定义¹D 泵流量

- 1 设置¹D 泵流量（对于 LC-LC 建议的范围为：0 – 1.0 mL/min 对于 LCxLC 为：0 – 0.2 mL/min）。

此设置定义 2D-LC 激活时使用的第一维中的流量。

2D-LC 用户界面中“流量”参数的任何更改都会自动与¹D 泵的方法用户界面同步。

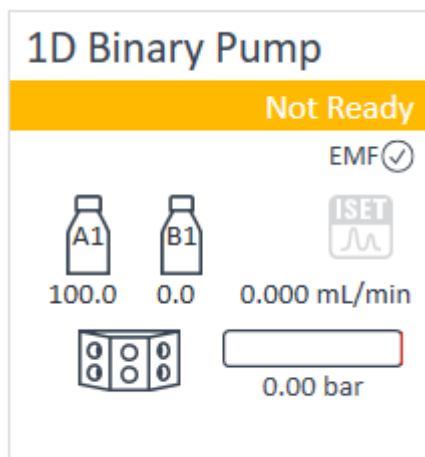


图 90 ¹D 泵的方法用户界面

注意

必须在标准泵方法用户界面中完成溶剂的选择。

注意

推荐的最大¹D 流量为 1 mL/min！但这可能会变为更小的值，具体取决于使用哪种 2D-LC 操作模式（例如 LCxLC），或为了保护所使用的流通池免受损坏（请参阅流通池压力限值）。

定义²D 泵流量

- 1 设置²D 泵流量（范围 0 – 5.0 mL/min）。

此设置定义 2D-LC 激活时使用的第二维的流量（模式不等于**关闭**的²D 时间段内）。

- 2 要设置和使用空闲流量，选中**空闲流量**复选框。

定义空闲流量的字段被激活。

该字段中的设置定义 2D-LC 模式处于**关闭**（范围 0 – 5.0 mL/min）且未分析切片时使用的第二维的流量。

注意

如果未选中**空闲流量**，则在不进行²D 分析时也会使用²D 流量。

The screenshot shows two sections for pump flow rate settings. The first section is for the 1D Pump, with a 'Flow' field set to 0.400 mL/min. The second section is for the 2D Pump, with a 'Flow' field set to 1.000 mL/min, an unchecked 'Idle Flow' checkbox, and an 'Idle Flow' field set to 0.000 mL/min.

图 91 ¹D 泵和²D 泵的流量设置界面

定义²D 溶剂

- 1 将溶剂 B 的百分比设为 0 – 100 % 的任意值，步进值为 0.01 %。

2D Solvents

A: %

1 100.0 % Water V.03

2 100.0 % Water V.03

B: %

1 100.0 % Acetonitrile V.03

2 100.0 % Acetonitrile V.03

图 92 2D-LC 溶剂设置

溶剂 A 始终提供剩余体积百分比。例如，如果溶剂 B 的比率被设为 20 %，则在使用 %A = 100 - %B 计算后，溶剂 A 被自动设为 80 %。所选溶剂的名称及其溶剂通道 (A1: ... 或 A2: ... 和 B1: ... 或 B2: ...) 显示在相应文本字段中。

- 2 对于每个溶剂，单击向下箭头，然后从下拉列表中选择已校准的溶剂。也可以在相邻字段中输入附加信息 (例如，关于缓冲液的信息)。

定义停止时间

²D 泵停止时间设置 2D-LC 测量的时间限制。这指的是 1D 运行的运行时间加上所有 2D 切片的运行时间。停止时间之后，所有梯度都将停止，并且泵参数将返回到其初始值。

要设置停止时间，请选中单选按钮并填写**停止时间**字段。

注意

对于基于驱动程序的 2D-LC 解决方案，确保停止时间足够完成所有 ²D 分析。当切片保持存储时，运行时间不会自动延长。

注意

²D 泵是整个 2D-LC 系统的停止时间主控设备。系统中所有其他模块的停止时间必须设为**与泵/进样器一致**，应将停止时间模式设为**与进样器一致/无限制的** ¹D 泵模块除外。

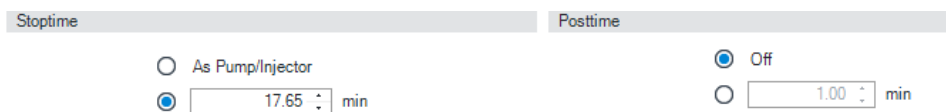


图 93 停止时间和后运行时间设置

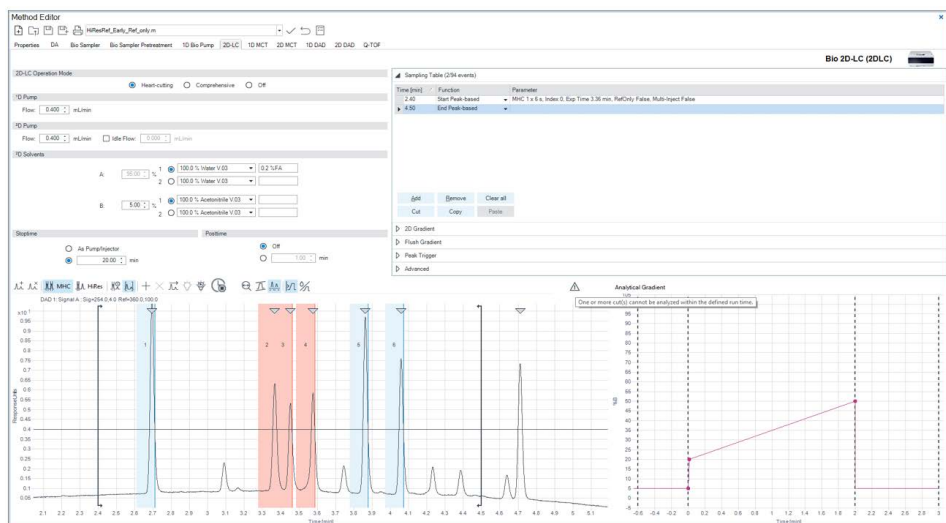


图 94 如果停止时间不足以完成 ²D 运行，则会弹出一个通知三角

注意

如果色谱图预览中弹出警告（三角），可将鼠标悬停在该标志上，从而获得更多详细信息。很可能是²D 泵的停止时间不足以分析所有²D 切片（参见上图）。要获得正确的停止时间校准，单击停止图标或双击参比色谱图中的灰色停止时间标记。此操作会延长停止时间至有效值。

定义后运行时间

要在溶剂组成改变后（例如，在梯度洗脱之后），使色谱柱达到平衡，使用后运行时间。

仪器在后运行时间内保持后运行状态，从而延迟下一次分析的开始。

- 1 选中**后运行时间**单选按钮。

输入字段变得可编辑。

- 2 在输入字段中指定后运行时间。

限值：0.01 – 99999 min。

Stoptime	Posttime
<input type="radio"/> As Pump/Injector	<input checked="" type="radio"/> Off
<input checked="" type="radio"/> <input type="text" value="17.65"/> min	<input type="radio"/> <input type="text" value="1.00"/> min

图 95 停止时间和后运行时间设置

编辑采样表

采样表的内容指定所选 2D-LC 模式的激活时间（在第一维的运行时间内）。

1 要手动定义和编辑采样表，请单击以下按钮之一：

- 添加
- 移除
- 清除全部
- 剪切
- 复制
- 暂停

例如，当使用**添加**按钮时，将生成单次切片存储事件。在此事件行中，您可以定义不同的参数，如时间、功能和参数。通常，要基于时间填充采样表，使用参比色谱图中的**全部送样**功能，该功能根据峰检测器设置生成切片。

Sampling Table (5/95 events)		
Time [min]	Function	Parameter
1.00	Start Peak-based	HiRes 1 x 2 s, Index 1, Exp Time 1.5 min, RefOnly False, Multi-Inject False
3.00	End Peak-based	
6.00	Time-based Heart Cut	HiRes 5 x 2 s, Prio: -, Default, Index 1, Factor 1, Multi-Inject False
9.00	Time-based Heart Cut	MHC 1 x 2 s, Prio: -, Default, Index 1, Factor 1, Multi-Inject False
11.00	Time-based Heart Cut	HiRes 3 x 2 s, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject True

Add	Remove	Clear all
Cut	Copy	Paste

图 96 基于峰和多重中心切割事件的采样表

表 19 采样表说明

类型	说明
时间	定义切片的开始时间。
功能	<p>定义采样模式。</p> <p>要选择其他可选模式，请单击向下箭头：</p> <ul style="list-style-type: none"> 基于时间的中心切割 在采样表中定义基于时间的中心切割运行（MHC 或高分辨率）。 基于时间的全切割 在采样表中定义基于时间的全切割运行 (LCxLC)。 开始基于色谱峰 在采样表中定义基于峰的中心切割运行（MHC 或高分辨率）的开始时间。将在预览中显示一个括号，用于标记基于峰的区域的时间。 结束基于色谱峰 在采样表中定义基于峰的中心切割运行（MHC 或高分辨率）的结束时间。将在预览中显示一个括号，用于标记基于峰的区域的时间。

注意

采样表中选定的功能必须与 2D-LC 操作模式（中心切割或全切割）匹配，以避免任何冲突。

2 在“采样表”中，单击**参数**单元格。

定义基于峰的中心切割的参数

- 1 要在多重中心切割 (MHC) 和基于峰的高分辨率采样 (高分辨率) 之间切换, 请单击向下箭头。

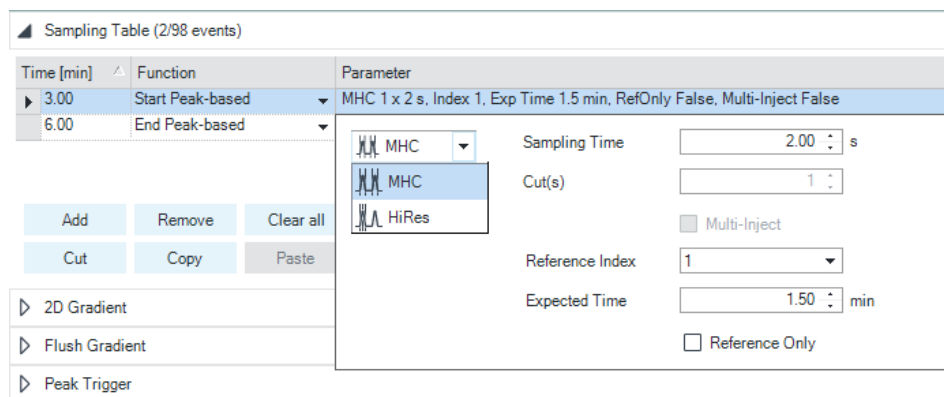


图 97 基于峰的 MHC 和高分辨率事件的采样表

采样时间 (MHC)	如果峰检测器未检测到任何峰结束, 采样时间是以秒为单位的最大切片长度(t)。由定量环体积 (V)/1D 流速 (F) 计算得出, $t=V/F$
切片长度 (高分辨率)	以秒为单位的切片长度 (t) 由定量环体积 (V)/ ¹ D 流速 (F) 计算得出, $t=V/F$ 。 在 MHC 模式下, 将自动计算样品定量环的切片长度。因此, 该字段不可用, 且无法更改切片的编号。 默认情况下, 在高分辨率模式下, 对 80% 的样品定量环填充自动计算切片长度。该计算反映毛细管样品夹层的抛物线流量峰状图, 无法将样品定量环填充到 100%。要为连续切片获得每个定量环的相同样品体积, 可以更改高分辨率中的切片长度值。 $t=(V*80\%)/F = 40 \mu\text{L 样品定量环} * 0.8/0.6 \text{ mL/min } ^1\text{D 流量} = 3.2 \text{ s}$
切片数	在 MHC 模式下, 只允许一个切片。因此, 切片数量不可用。 在高分辨率模式下, 您希望获得连续切片。因此, 可以更改切片的数量。最大切片数量为 10。
定量环填充	定量环填充因子不可用。 在 MHC 模式下, 填充因子为只读, 无法更改。 在高分辨率模式下, 填充因子为只读, 但取决于切片长度值。
多重进样	多重进样允许将高分辨率组定义为一次进样, 这意味着在使用单个 ² D 梯度进行分析之前, 定量环的内含物将被传输到 ² D 色谱柱。

参比索引	定义内部 RT 标准 (IRTS) 的参比索引值, 这是使用动态峰存储所必需的, 请参见第 211 页的动态峰存储。
预期时间	定义内部 RT 标准 (IRTS) 的预期时间。
仅供参比的信号	如果选中该复选框, 则不会在第二维中分析 IRTS。IRTS 仅在第一维中检测, 时间偏移被应用到所有后续基于时间的切片。

定义基于时间的中心切割的参数

- 1 要在多重中心切割 (MHC) 和高分辨率采样 (高分辨率) 之间切换, 请单击向下箭头。

The image displays two side-by-side parameter configuration panels. The left panel is for 'HiRes' and the right panel is for 'MHC'. Both panels include fields for 'Cut size', 'Cut(s)', 'Loop filling', 'Analyze Mode', 'Reference Index', and 'Reference Factor'. The 'HiRes' panel has a 'Cut size' of 2.00 s, 'Cut(s)' of 5, 'Loop filling' of 50%, and 'Reference Index' of 1. The 'MHC' panel has a 'Cut size' of 6.00 s, 'Cut(s)' of 1, 'Loop filling' of > 300%, and 'Reference Index' of 0. Below these panels is a 'Sampling Table (5/93 events)' window. The table lists events at 0.90, 1.52, 5.10, 5.50, and 5.83 minutes with functions like 'Time-based Heart Cut', 'Start Peak-based', and 'End Peak-based'. A parameter dialog box is open over the table, showing settings for 'MHC' (Cut size: 6.00 s, Loop filling: > 300%, etc.) and 'HiRes'.

图 98 高分辨率采样 (高分辨率) 设置和多重中心切割 (MHC) 设置的采样表中的参数窗口

注意

如果在参比色谱图中使用优化功能, 可以自动更改采样表中的分析模式

注意

可以在单个 2D-LC 运行中将 MHC 和高分辨率分析相结合。

2 要选择分析模式，请单击向下箭头并从下拉列表中打开。

- 选择默认值：
尽快分析切片。
- 选择延迟：
分析将会延迟，直至经过一定的时间空档。
- 选择忽略：
切片尚未分析。

注意

如果在参比色谱图中使用优化功能，可以自动更改采样表中的分析模式。

3 要指定一个或多个切片的分析优先级，选中**指定切片优先级**复选框。

定义基于时间的全切割的参数

基于时间的全切割的参数

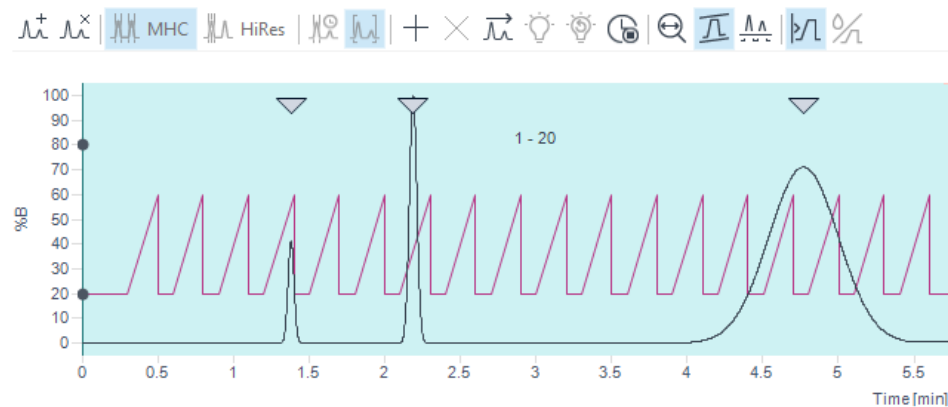


图 99 全切割预览，调制时间为 0.3 min (= 20 个周期)

- 1 输入系统创建等间距切片的绝对时间范围。

Sampling Table (1/97 events)		
Time [min]	Function	Parameter
1.20	Time Based Comprehensive	Comprehensive Range, stop sampling at 10.00 min

图 100 采样表时间范围设置

在给定时间开始全切割运行。
调制时间决定切片长度。

- 2 输入全切割测量的停止时间。

Comprehensive Range, stop sampling at 10.00 min		
	<input checked="" type="checkbox"/> Stop at	10.00 min

图 101 全切割范围设置

例如，全切割范围在 10.0 min 时停止。
停止时间应与 ²D 泵的停止时间一致。

注意

在全切割中，冲洗梯度的功能不可用。

注意

如果采样表为空，则不会执行任何 2D-LC 操作。

定义²D 梯度

2D 梯度窗口概述为第二维运行优化梯度方法所需的所有重要设置。

指定梯度阶段

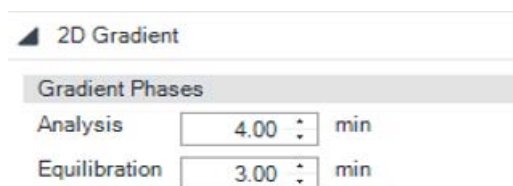


图 102 “2D 梯度阶段”视图

- 1 在**分析**字段中指定单个切片的²D 运行的持续时间（以分钟为单位）。
- 2 要稳定系统以用于下一次²D 运行，请在**平衡**字段中指定平衡时间（以分钟为单位）。

分析时间和平衡时间的总和即为 2D-LC 周期时间，该时间将显示在调制（2D-LC²D 梯度）部分中。

²D 梯度阶段中的值与屏幕右下角的分析梯度显示同步。

注意

第一行中的不同启动条件可能会导致阶跃梯度和 RI 效应（不同液相的密度差异可能会产生基线干扰，导致不同的 DAD 检测）。

注意

在全切割模式下选择参数时，务必考虑调制时间和定量环填充状态。要将内含物完全传输到第二维，不得超过 80 % 的填充状态。

使用定量环冲洗和主动溶剂调制 (ASM)

如果 2D-LC 仪器配备 G4236A 2D-LC ASM 阀，此方法开发功能有助于在样品定量环中找到¹D 溶剂的最佳稀释度。在最低的周期时间内，ASM 可以获得最佳的²D 分辨率。

2D-LC 方法参数的 ASM 设置允许打开和关闭 ASM 功能的使用。

- 如果此选项处于关闭状态，则其将作为标准 2D-LC 阀运行，无需稀释。
- 如果此选项处于启用状态，用户可以设置希望在 ASM 阶段期间冲洗样品定量环的频率。

Loop flushing & Active Solvent Modulation (ASM)

Flush sample loop times (0.04 min)

Use ASM ASM Factor 5.5

图 103 定量环冲洗和主动溶剂调制设置

1 要使用 ASM，选中 **ASM** 复选框。

注意

要对 ASM 阶段进行目视验证，可以查看分析梯度图。从中，您可以查看 ASM 阶段在²D 运行开始之前的影响。使用 ASM 时的梯度会增加周期/调制时间。

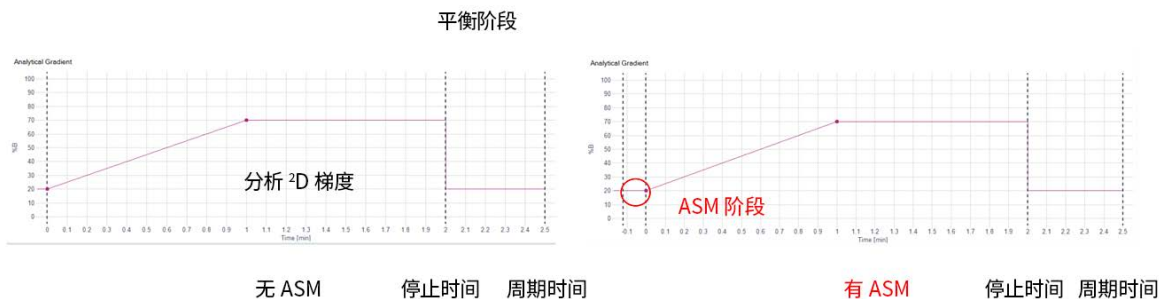


图 104 有和没有 ASM 阶段的分析梯度比较

此操作会激活主动溶剂调制。

ASM 因子是一个只读值，无法更改。

注意

要更改 ASM 因子，必须在 2D-LC 用户界面中安装和配置新的 ASM 毛细管，请参见第 302 页的 [2D-LC 毛细管配置工具](#)。

有四种不同的 ASM 毛细管可用。您可以找到有关安装和配置不同 ASM 毛细管以优化结果的更多信息，请参见第 69 页的 [连接 2D-LC 阀，ASM \(G4243A\)](#)。

2 在冲洗样品定量环字段中，指定冲洗样品定量环的次数。

计算并显示总冲洗时间。

注意

通常，冲洗样品定量环三次已经足够，这是建议的默认值。更少的次数可能也足够，并且可以在优化期间进行验证。用户界面显示冲洗所需的时间。

注意

使用主动溶剂调制 (ASM) 时，阀周期有四次切换，该数量是标准 2D-LC 阀的两倍。每次进样进行更多切换会影响转子密封垫的使用寿命，必须遵照维护间隔进行维护。

调制

调制部分显示 2D-LC 周期/调制时间，即“梯度阶段”部分指定的分析时间和平衡时间之和。

调制时间还取决于仪器内置的样品定量环，请参见第 59 页的 [仪器设置建议](#)。这些值是只读的，无法编辑。

中心切割

Modulation		
Cycle/Modulation time:	7	min
Loop volume	180	

周期/调制时间 周期时间反映第二维 LC-LC 进样周期的持续时间。此后，将重复下一个切片的溶剂组成梯度。

定量环体积 定量环体积表示已配置的样品定量环体积。

注意

中心切割中的定量环填充信息显示在采样表中。

全切割

Modulation	
Cycle/Modulation time:	1.50 min
Loop volume:	40 μ L
Loop filling:	27 %

周期/调制时间

调制时间反映第二维 LCxLC 进样周期的持续时间。此后，将重复溶剂组成梯度。

定量环体积

定量环体积表示已配置样品定量环体积。

定量环填充

定量环填充表示实际的定量环填充值。

注意

如果 LCxLC 的定量环填充小于 20 % 或大于 80 %，则将显示通知三角。

注意

由进样量填充的 2D 色谱柱体积的最佳百分比（样品定量环的定量环填充 (%)）小于 10 %。

指定分流阀的切换时间

分流阀可用于在每次 ²D 分析开始时，自动将来自 ¹D 流动相的盐或缓冲液分流至废液。

只有在 2D-LC 组合配置中包含分流阀时，此部分才会激活。

Diverter Valve

Use Diverter Valve

Switch time min

图 105 已安装的分流阀视图

- 1 要打开分流阀的切换，选中**使用分流阀**复选框。

切换时间字段变为激活状态。

- 2 在**切换时间**字段中指定切换时间。

阀将在 ²D 分析开始后的指定时间切换至检测器，²D 分析完成后，会重新切换至废液。

为分析梯度设置梯度时间表

使用此部分设置 2D 分析的洗脱液梯度时间表。

1 在 **时间 [min]** 字段中指定溶剂组成的变化时间。

注意

初始起始组成在 2D 溶剂表中定义。

2 在 **B[%]** 字段中指定通道 B 在指定时间输送的溶剂百分比。

通道 A 通常输送剩余的量， $\%A = (100 - \%B)$ 。不同设定值的溶剂组成呈线性方式变化。

3 要删除**迁移**框的勾选标记，首先选择单个分析梯度事件，然后清除**梯度迁移 1D 时间**表中的相应设置。

4 要手动定义和编辑**分析梯度**，请单击以下按钮之一：

- 添加
- 移除
- 清除全部
- 剪切
- 复制
- 粘贴

Analytical Gradient		
Time [min]	B [%]	Shift
0.00	11.0	<input type="checkbox"/>
0.01	25.0	<input type="checkbox"/>
9.00	75.0	<input type="checkbox"/>

Add	Remove	Clear All
Cut	Copy	Paste

图 106 “分析梯度” 表格视图

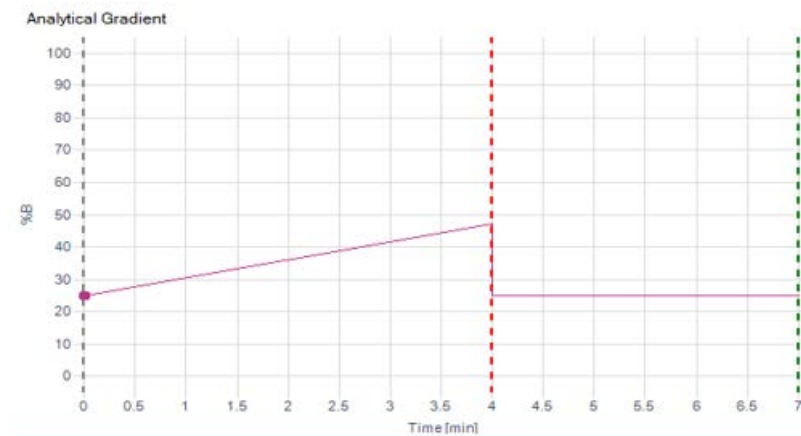
例如，单击**添加**按钮，生成单个分析梯度事件，其中可以定义更改时间和溶剂组成。

注意

要目视验证分析梯度，可以查看“分析梯度图”。

注意

也可以在预览中以图形方式设置分析梯度。分析梯度显示为紫色。



在 ¹D 的运行时间内修改 ²D 梯度中的溶剂组成

使用此部分在第一维的运行时间内修改 ²D 梯度中的溶剂组成。对于已在“迁移”列中标记的**分析梯度**表中的每个设定值，您可以将梯度迁移设置为嵌套梯度。梯度迁移用于将 ²D 梯度组成与 ¹D 梯度组成对齐。

使用表格设置已迁移的 ²D 梯度

- 1 要设置迁移梯度，选择**分析梯度**表中的相应行。
- 2 在**时间 [min]** 字段中指定溶剂组成的变化时间。
不同设定值的迁移梯度组成呈线性方式变化。在指定时间更改溶剂组成。时间轴与 ²D 泵的停止时间有关，超过停止时间 ²D 的时间将被忽略。
- 3 在**B[%]** 字段指定 0 - 100 % 的百分比 B 范围。
在指定时间更改溶剂组成。通道 A 通常输送剩余的量， $\%A = (100 - \%B)$ 。不同设定值的溶剂组成呈线性方式变化。

注意

第一行中的不同启动条件可能会导致阶跃梯度和 RI 效应（不同液相的密度差异可能会产生基线干扰，导致不同的 DAD 检测）。

注意

“分析梯度”窗口中选中的“迁移”复选框只能通过移除“梯度迁移 ¹D 时间”窗口中的相应事件来停用。

4 要手动定义和编辑已迁移的²D 梯度，请单击以下按钮之一：

- 添加
- 移除
- 清除全部
- 剪切
- 复制
- 粘贴

Gradient Shift 1D Time	
Time [min]	B [%]
0.00	25.0
1.00	50.0

Add	Remove	Clear All
Cut	Copy	Paste

图 107 梯度迁移¹D 时间表

例如，单击**添加**按钮，生成单个梯度迁移事件，其中可以定义更改时间和溶剂组成。

注意

也可以在预览中以图形方式设置²D 梯度迁移。

使用冲洗梯度

冲洗梯度可用于冲洗传输毛细管和样品定量环。您可以选择使用分析梯度，也可设置自定义冲洗梯度。如果需要冲洗，系统会自动计算。如果选择**使用自定义梯度**选项，请指定**梯度持续时间**。**平衡**时间与“梯度阶段”部分中设定的时间相同。

要将分析梯度用作冲洗梯度，选中**使用分析梯度作为冲洗梯度**单选按钮。

或

要自定义冲洗梯度，选中**自定义冲洗梯度**单选按钮，然后使用表格设置自定义梯度：

a 在**持续时间**字段中指定持续时间。

平衡值为只读，并在“梯度阶段”设置中定义，请参阅第 172 页的**指定梯度阶段**。

b 在**时间 [min]** 字段中指定溶剂组成的变化时间。

c 指定通道 B 在指定时间输送的溶剂百分比。

通道 A 通常输送剩余的量， $\%A = (100 - \%B)$ 。不同设定值的溶剂组成呈线性方式变化。

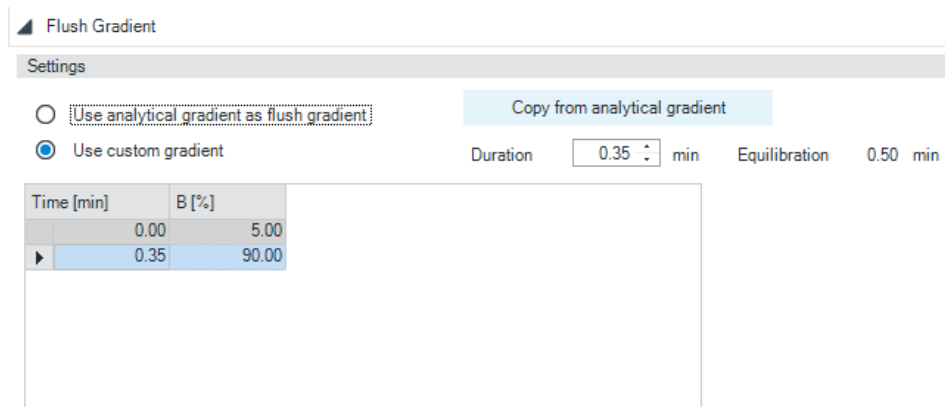


图 108 “冲洗梯度” 表格视图

注意

冲洗梯度仅用于中心切割模式。如果选择了全切割，则此功能不可用。

注意

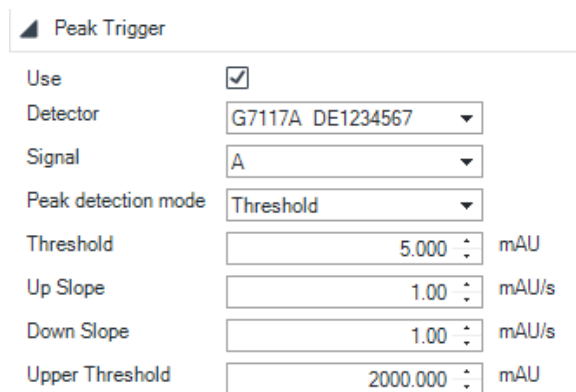
也可以在预览中以图形方式设置**冲洗梯度**。**冲洗梯度**显示为橙色。

使用峰触发

在基于时间的模式下设置峰触发

如果选中使用复选框，则峰检测设置用于在预览用户界面中查找和标记参比色谱图的¹D峰。这意味着，首先必须调用仪器的已知¹D参比色谱图，然后将其用于检测完整2D-LC分析的样品峰的正确位置。

找到的切片在参比色谱图预览中以灰色三角显示，请参见参比色谱图。



The image shows a software configuration window titled "Peak Trigger". It contains several settings:

- Use:** A checked checkbox.
- Detector:** A dropdown menu showing "G7117A DE1234567".
- Signal:** A dropdown menu showing "A".
- Peak detection mode:** A dropdown menu showing "Threshold".
- Threshold:** A numeric input field with "5.000" and "mAU" units.
- Up Slope:** A numeric input field with "1.00" and "mAU/s" units.
- Down Slope:** A numeric input field with "1.00" and "mAU/s" units.
- Upper Threshold:** A numeric input field with "2000.000" and "mAU" units.

图 109 “峰触发”视图

在基于峰的模式下设置峰触发

如果选中使用复选框，则峰触发设置用于从第一维触发切片的采样和存储。这意味着，必须通过该方法预定义目标区域（请参见采样表）。如果¹D 检测器中出现峰且达到阈值（或斜率），则 2D-LC 调节器开始采样，然后在第二维中存储并分析所找到的峰。

- 1 要启用/禁用¹D 检测器的峰触发，选中**使用**复选框。

▲ Peak Trigger

Use	<input checked="" type="checkbox"/>	
Detector	G7117A DE1234567	▼
Signal	A	▼
Peak detection mode	Threshold	▼
Threshold	5.000	↑ ↓ mAU
Up Slope	1.00	↑ ↓ mAU/s
Down Slope	1.00	↑ ↓ mAU/s
Upper Threshold	2000.000	↑ ↓ mAU

图 110 “峰触发” 视图

在基于时间的模式下，根据**峰触发**设置，可以在调用的参比色谱图的预览中标记峰。

在基于峰的模式下，**峰触发**设置可用于在线峰触发 2D-LC 操作。

- 2 从下拉列表中选择峰触发**检测器**。
- 3 从**峰检测模式**下拉列表中选择基于峰的模式信号。
- 4 从**峰检测模式**下拉列表中选择**阈值**、**斜率**或**阈值和斜率**。

[可选]

- a 设置**阈值**。

在**阈值**模式下，2D-LC 阀在检测器信号的阈值上触发。阈值以 mAU 值的形式给定。当 UV 信号上升至高于该值，出现一定延迟时，2D-LC 阀会触

发并切换以切割馏分。当 UV 信号下降至低于该值或切片长度已过时，2D-LC 阀将切换到下一个位置。

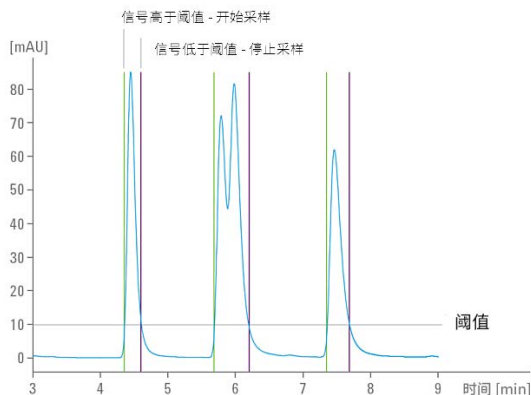


图 111 具有阈值线的色谱图

[可选]

b 或设置斜率。

在斜率模式下，2D-LC 阀在检测器信号的斜率上触发。可以在相应字段中指定上升斜率和下降斜率的适当值。该值以 mAU/秒的形式给定。当上升斜率超过给定值时，2D-LC 阀切换。当斜率超过最小值，然后上升至高于下降斜率值或切片长度已过时，切割结束。

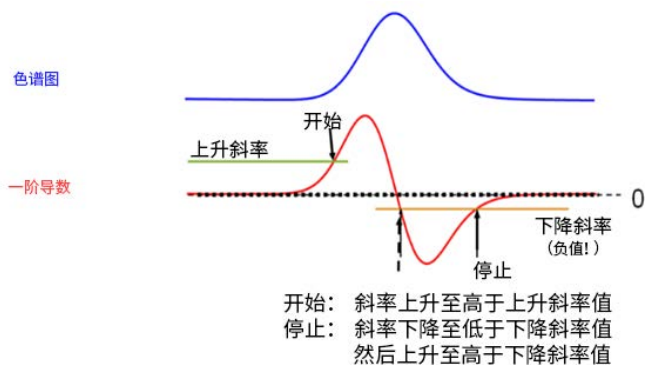


图 112 触发检测器斜率的示例

[可选]

c 或设置**阈值和斜率**。

在**阈值和斜率**模式下，当达到相应的阈值和斜率值时，触发 2D-LC 切割（峰储存）。如果检测器信号超过**阈值**和**上升斜率**值，则切割馏分开始。如果检测器信号低于**阈值**或**下降斜率**值，通过将阀切换到下一个位置，2D-LC 阀停止切割馏分。

对于更复杂的问题，如两个叠加的峰，可以将斜率和阈值收集相结合。两个峰将被分成两个切片，其值约为两个最大值之间的局部最小值。

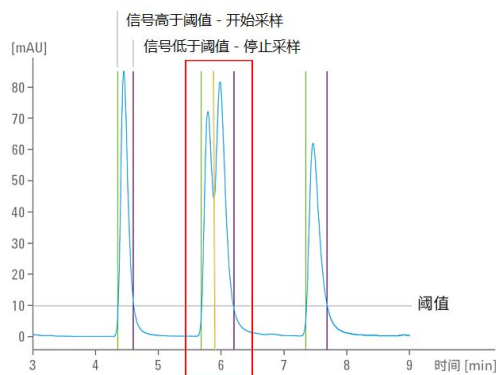


图 113 具有阈值和斜率设置的色谱图

- 阈值

此方法仅基于阈值检测峰。峰的高度触发峰切割。默认值为 20.000 mAu

- 上升斜率

此方法仅基于上升斜率值检测峰。上升峰的斜率触发峰切割。斜率值基于信号的一阶导数。默认值为 1.00 mAu/s。

- 下降斜率

此方法仅基于下降斜率值检测峰。下降峰的斜率触发峰切割。斜率值基于信号的一阶导数。默认值为 1.00 mAu/s。

- 阈值上限

此方法仅基于阈值上限检测峰。该峰高可以在即使饱和信号要求关闭收集时仍确保收集不关闭。当 UV 信号超过阈值上限时，将禁用斜率收集。默认值为 2000.000 mAu。

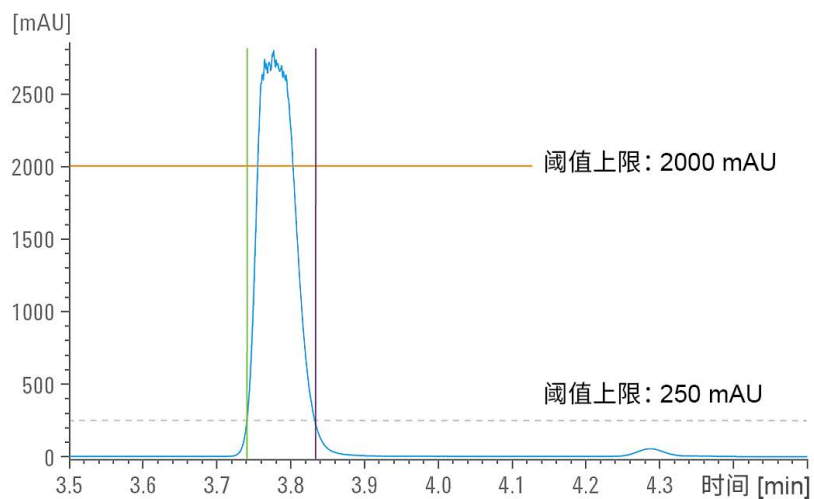


图 114 具有阈值上限和下限的色谱图

注意

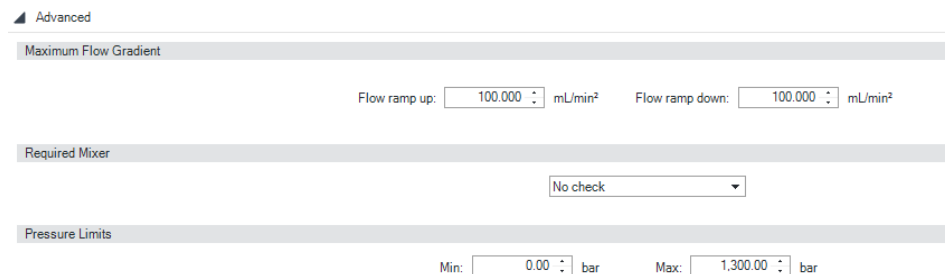
2D-LC 阀切换可以是：

- 如果采样时间/切片长度已过（采样时间控制切片位置），或
- 如果信号低于阈值或斜率（基于峰）

以先到者为准

使用高级²D 泵设置

高级设置将打开高级²D 泵设置的泵方法视图。



Advanced

Maximum Flow Gradient

Flow ramp up: mL/min² Flow ramp down: mL/min²

Required Mixer

Pressure Limits

Min: bar Max: bar

图 115 高级²D 泵设置

使用表格设置额外的²D 泵参数：

1 设置最大流量梯度。

您可以为溶剂流量的变化速率设定一个限值，以保护您的分析柱。

对于 G4220A/B 二元泵和 G7120A 高速泵，可为**流量升高速率**和**流量降低速率**设置单独的值。

[可选] **2 选择所需的混合器。**

如果分析需要混合器，

- 单击向下箭头，并
- 从下拉列表中选择所需的混合器。

如果分析不需要混合器，

- 从下拉列表中选择**未选择**。

注意

如选择专用混合器，当所检测到的混合器不同（或检测到没有混合器）时，泵将停留在“未就绪”状态。

[可选] 3 为泵设置最大和最小**压力限值**。

注意

建议使用默认设置。仅在出于重要且有效的原因时才更改这些设置。

- **最大值**是指最大压力限值，达到此值时泵将自行关闭。
此最大压力限值可以保护系统，防止压力过大。
- **最小值**是指最小压力限值，达到此值时泵将自行关闭。当某个溶剂容器为空时，就会出现这种情况。
最小压力限值可以保护系统，防止泵送空气造成的损坏。

注意

有关更多详细信息，尤其是压力限值，请参见泵用户手册。

预览 (2D-LC)

“预览”面板在一个或两个窗口中显示调用的参比色谱图和 2D-LC 梯度轮廓图：

- 始终可见的主窗口会在整个运行过程中显示参比色谱图和 2D 梯度轮廓图的检测器信号。借助工具栏，还可使用该窗口来交互地编辑切片。
- 可以打开和关闭的右侧窗口会显示 2D 梯度轮廓图和冲洗梯度轮廓图。

两个梯度轮廓图均可通过交互方式进行编辑。“预览”将会与 2D 方法参数同步，以便您在“预览”中进行的更改同样在参数中进行更新，反之亦然。

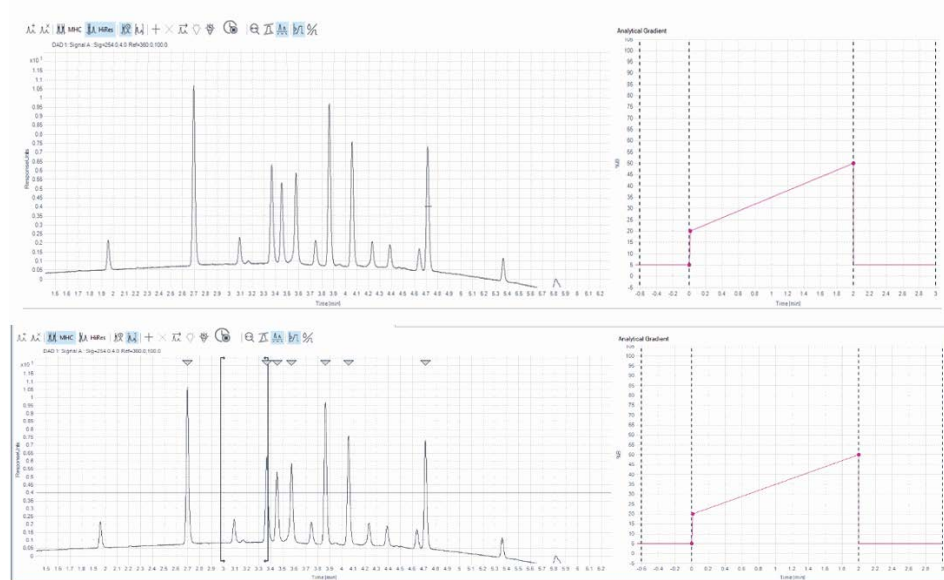


图 116 包含调用的参比色谱图（顶部）和在调用的参比色谱图中带有阈值设置以及检测到的峰（底部）的预览面板

为了以图形方式编辑和修改²D方法参数，工具栏提供了以下工具：



显示数据文件选择框，使您能够在后续步骤中选择¹D数据文件。

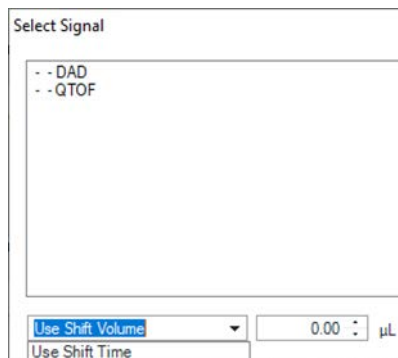
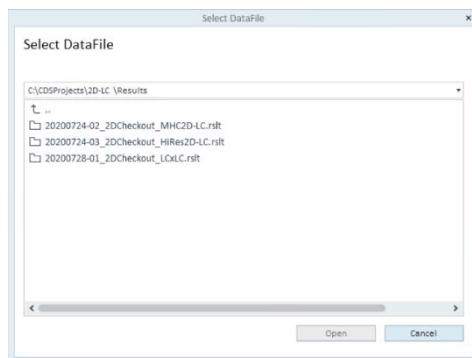


图 117 选择下拉菜单以选择偏移体积或偏移时间

最后，调用可用于在预览中显示¹D 参比色谱图的数据文件。

将参比信号上传到方法屏幕有助于说明将会获取的切片的色谱图位置。

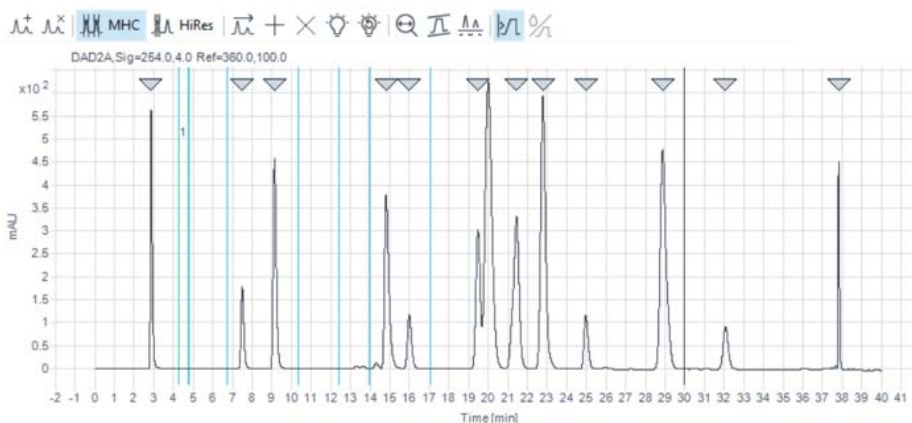


图 118 预览窗口中的已调用¹D 色谱图

注意

要正确切割峰，必须保持相应条件，例如低于其值时就记录参比色谱图的流量等。

注意

如果进一步使用¹D 检测器作为参比色谱图，则必须校正这些检测器的传输体积。为此，输入偏移体积或偏移时间。

如果仅配置了一个¹D 检测器，则 2D-LC 组合已定义了传输体积，因此无需在此进行校正。

注意

使用偏移时间/偏移体积，可在阀的切割时间和检测时间之间进行校正。如果 2D-LC 组合中定义的传输体积不适合 2D-LC 组合中调用的参比色谱图，则可能需要进行此校正（参阅 2D-LC 组合页面）。可切换¹D/²D 设置就是一个例子，其中¹D 质谱数据用作参比色谱图。

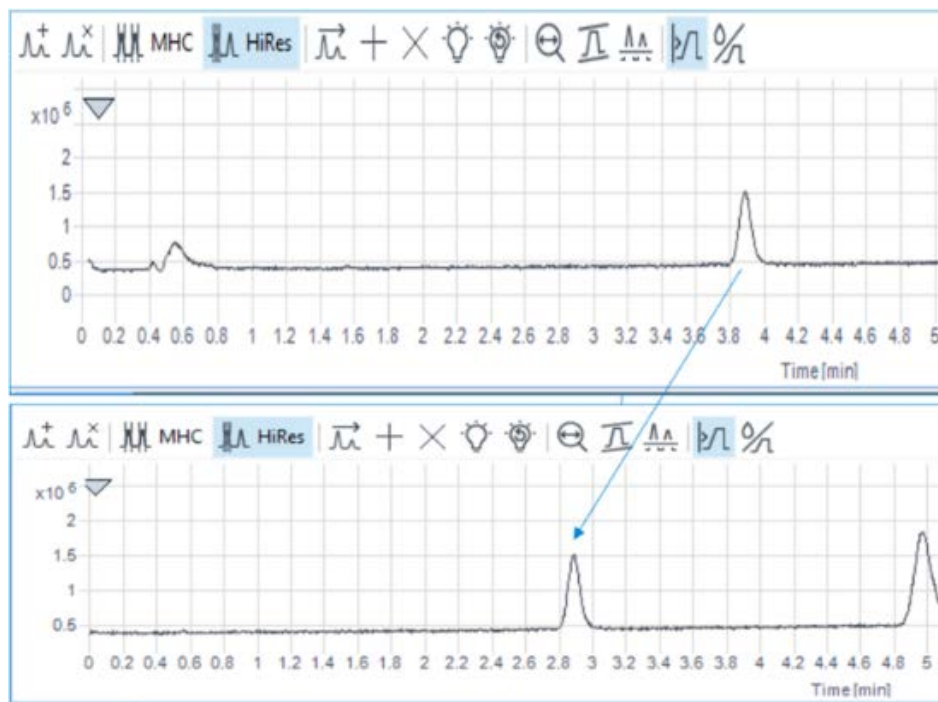


图 119 示例：偏移体积设为 0 μL 的已调用 Q-TOF 信号与偏移体积设为 -100 μL



此工具从预览中移除当前参比色谱图。



此工具切换到多重中心切割模式 (**MHC**)。此工具仅在 2D-LC 操作模式下选择中心切割时才能使用。此功能与“添加/删除”或“全部送样”功能一起使用。



此工具将切换到高分辨率采样模式 (**高分辨率**)。此工具仅在 2D-LC 操作模式下选择中心切割时才能使用。此功能与“添加/删除”或“全部送样”功能一起使用。



此工具切换到基于峰的模式。



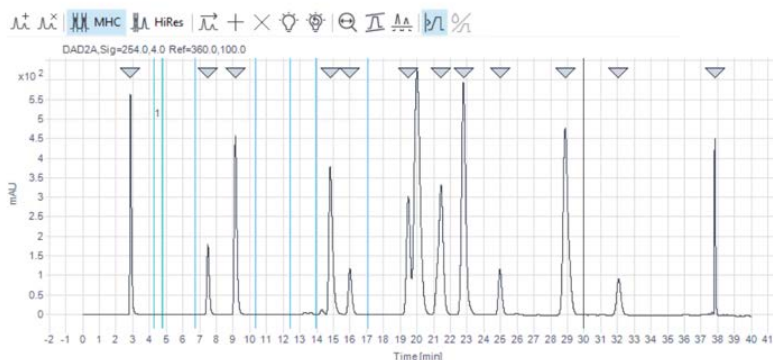
此工具切换到基于时间的模式。

注意

在一次 2D 运行中，现在可以将 **MHC** 和**高分辨率**模式相结合。



根据选择的 **MHC** 或**高分辨率**模式，使用此工具将使用当前峰触发参数自动对整个色谱图进行采样，并将所有检测到的切片输入采样表。此工具仅在选中“峰触发”部分中的“使用”框时才能使用。在参比色谱图中，灰色三角显示所有检测到的峰。



此工具使您能够手动添加单个切片。单个切片将显示在参比色谱图和采样表中。

注意

双击 + 工具可永久激活此功能。重复双击 + 工具可取消此激活。



要从参比色谱图和采样表中移除单个切片，请标记单个切片，然后单击工具。

注意

添加或移除切片的另一种方法是，右键单击鼠标以添加切片或删除选定切片。也可以在键盘上标记切片或画一条线，并按键盘上的 Del 键。



此功能使您能够优化切片存储，以便在可用的时间分析最高的数量。采样表会更新以显示哪些切片已经分配了延迟分析。智能峰存储优化了参比信号中所有基于时间的峰的存储。

优化目标：

- 捕获尽可能多的峰，如有必要，延长运行时间
- 尽可能快地分析峰。

如果仍有一些峰无法存储，用户可以在采样表中定义重要峰（优先处理）。

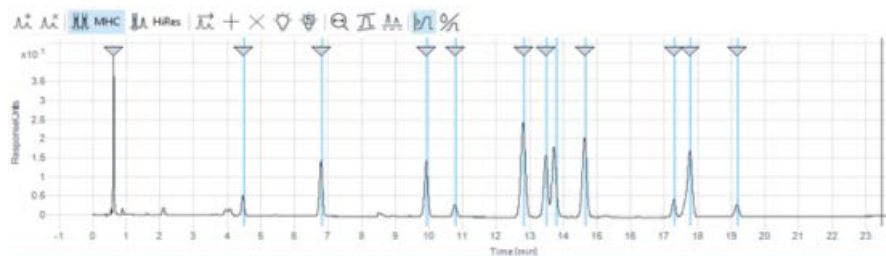


图 120 2D 运行优化已完成，所有峰（蓝色）均已分析，与下面未优化的图进行比较。



此工具将重置当前优化，禁用智能存储，但将保留运行时扩展。



此工具将停止时间调整为实际运行时间。双击预览中的垂直停止线可以完成相同的任务。



此工具将所有缩放的图形重置为其正常放大率。缩小。放大时，按鼠标左键并拖动到要放大的选定区域。

注意

要逐步缩小，使用鼠标左键双击一次。



此工具可切换打开或关闭显示预览中的梯度。此功能在一次完整运行中可以叠加梯度概览。有关在预览中手动更改梯度设置的信息，请参阅第 176 页的为分析梯度设置梯度时间表。

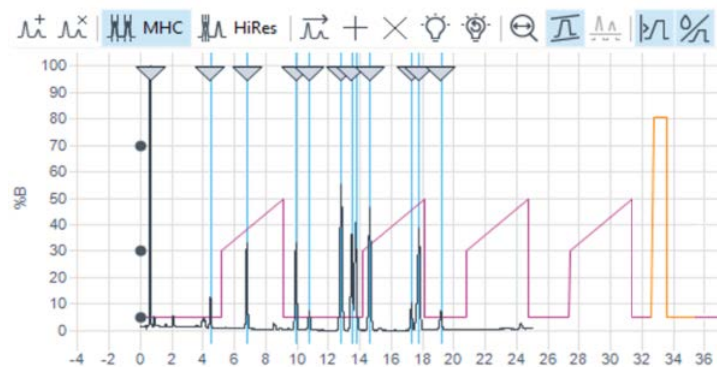


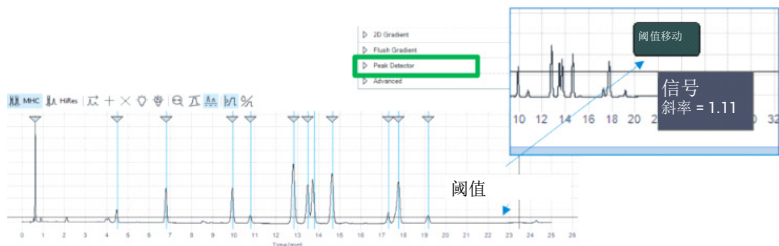
图 121 显示预览，以紫色显示分析²D 梯度，以橙色显示冲洗。

注意

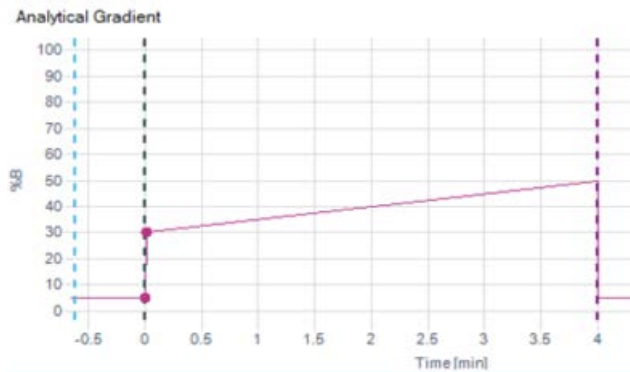
如果在主窗口中激活了²D 梯度视图，Y 轴将显示 %B。



此工具切换预览中光标位置的阈值和斜率值显示。此工具仅在主面板中的梯度预览处于禁用状态时才能使用。要在预览中手动更改阈值设置，请参阅下文。



使用此工具来切换预览右侧²D 分析梯度面板的显示。



要在右侧面板中的分析梯度和冲洗梯度之间切换，单击此工具。



此工具在将分析梯度用作冲洗梯度时不可用。

进一步的图解说明

2D-LC 预览窗口的进一步的图解说明：

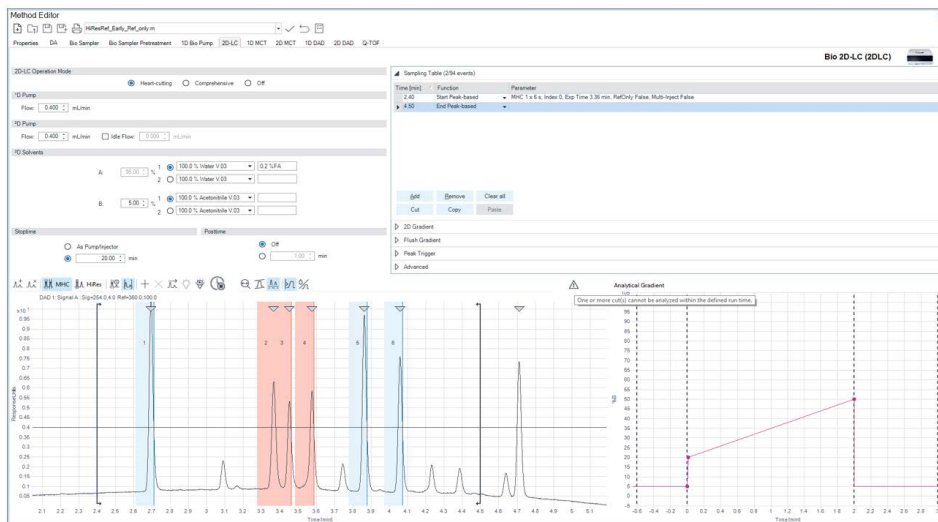


灰色三角说明峰触发设置检测到参比色谱图中的哪些峰。要添加或删除切片，双击预览中的灰色三角。



预览中的灰线标记停止时间。

在以下示例中，**停止时间**太短，无法分析所有切片。因此，必须将停止时间更改为 57 min，如 ²D 梯度所示。例如，使用优化工具或双击标记当前停止时间的灰线（绿色箭头）。然后，软件会自动调整并占用停止时间。警报图标将消失（除非有其他错误）。

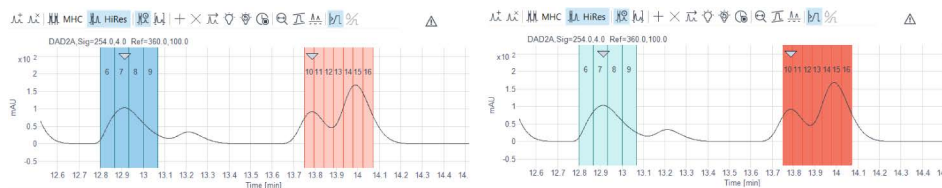


注意

将鼠标悬停在警报图标上，可以查看所出现的问题。

标记的切片

标记的切片显示为深蓝色条（可分析）或深红色条（无法分析）。



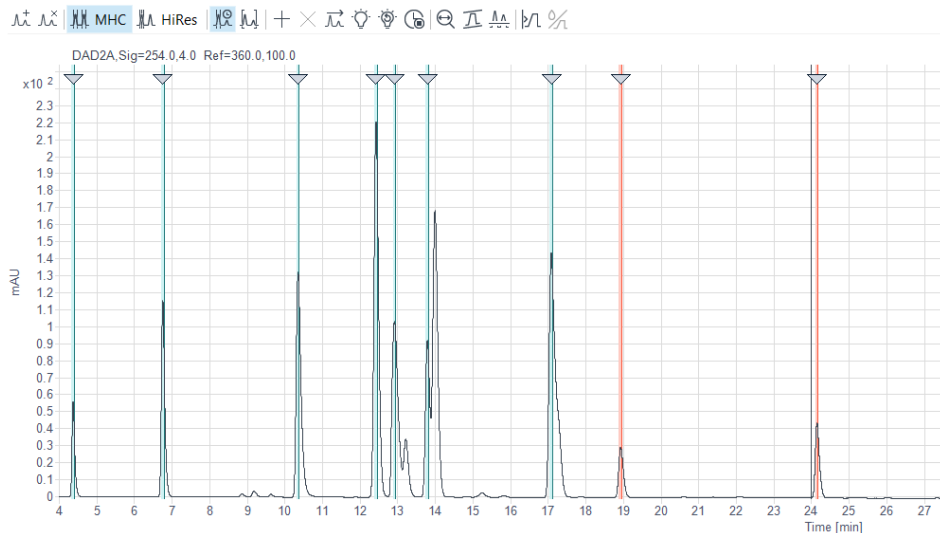


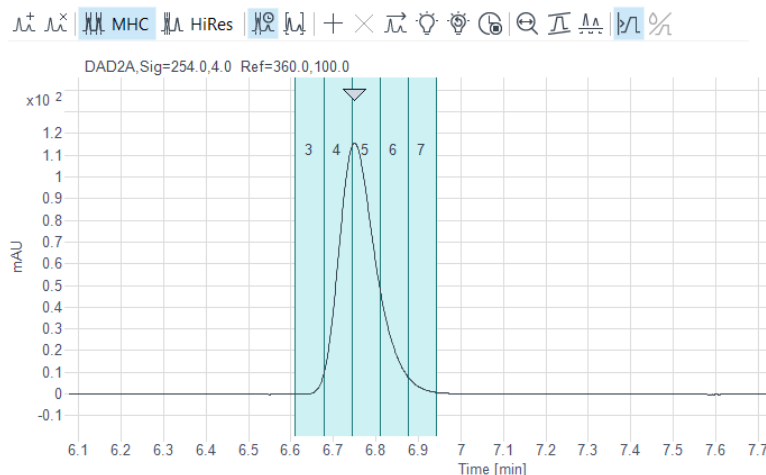
图 122 用红色标记丢失峰的色谱图

MHC 切片 (基于时间)

此功能使用连续流路原理。切片显示为浅绿色条。条形图右边缘的暗线表示 2D-LC 阀的切换时间和存储峰的结束。可以标记切片并将其移动到预览窗口中的其他位置。

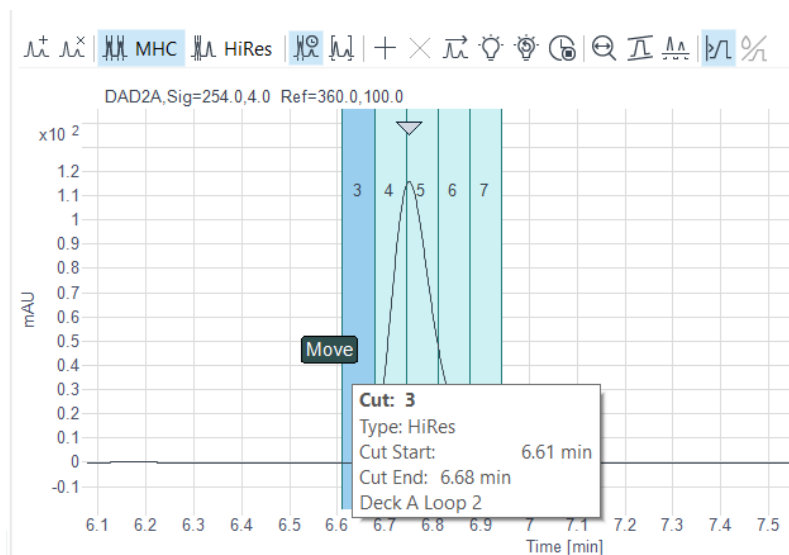
高分辨率切片 (基于时间)

高分辨率切片 (基于时间) 显示并标记为浅绿色条。根据峰宽的不同, 切片可从 2 个切片到最多 10 个切片。与 MHC 相比, 高分辨率切片有两根暗线, 一根在左侧, 一根在条的突出侧, 这反映存储峰前后的切换。左边的暗线定义了一个高分辨率采样事件的开始时间。



MHC 切片/高分辨率切片 (基于峰) 以蓝色条图形显示。
将鼠标悬停在这些条上可以看到移动 高分辨率采样的选项。

移动切片



您可以执行以下操作:

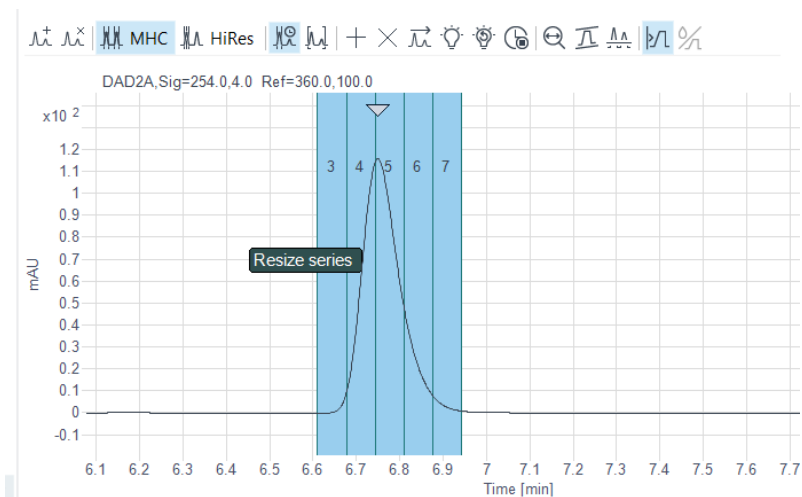
- 增加或减少切片长度
- 抓取突出显示的切片并移动到其他时间
采样表占用新的时间

调整高分辨率系列的大小

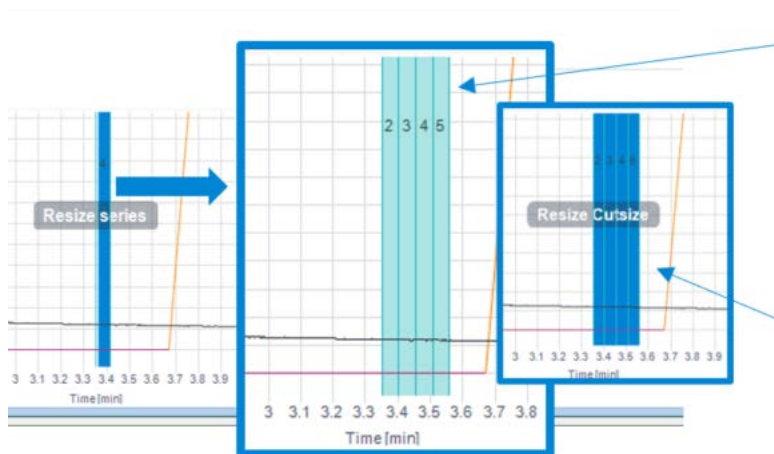
将鼠标悬停在这些条上，可以选择增加或减少切片序列（由绿色突出显示项表示）。

您可以通过以下方式调整大小：

- 单击突出显示的系列并沿边拖动



- 拖动其中一条内边



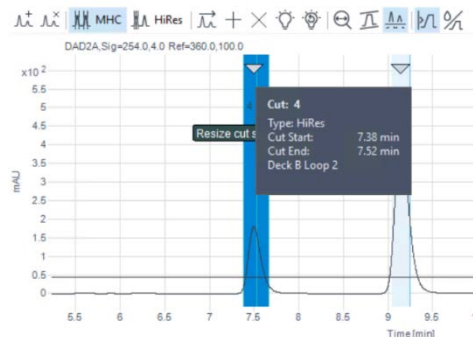
注意

对于高分辨率，也可以在采样表中进行切片长度和切片数量的这些更改。

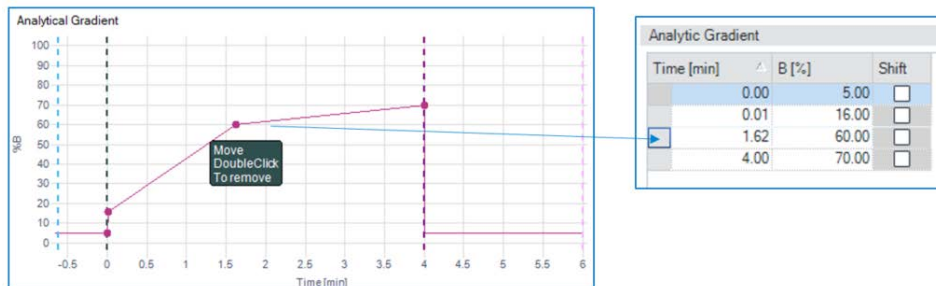
对于高分辨率，即使编程了多个切片，也并不意味着执行了所有切片。如果第二次达到阈值，则终止采样。

切片信息

将鼠标悬停在突出显示条上可以提供更多的切片信息，如切片编号、切片的开始和结束时间，以及切片存储的驻留仓位和定量环。还指示了²D 梯度/即分析时间。

以图形方式设置
²D 梯度

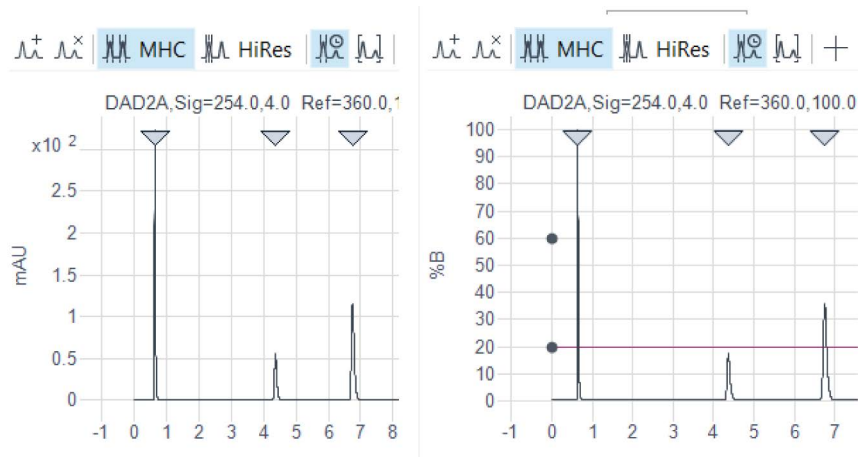
分析梯度预览中的初始²D 梯度，双击紫色线添加一个紫色球，可以将其四处移动以更改初始梯度。通过移动相应的线，可在预览中调整分析和平衡时间。表会进行相应更新。



注意

要添加另一个梯度点，双击紫色线。

激活²D 梯度视图会使 Y 轴名称显示为 %B。

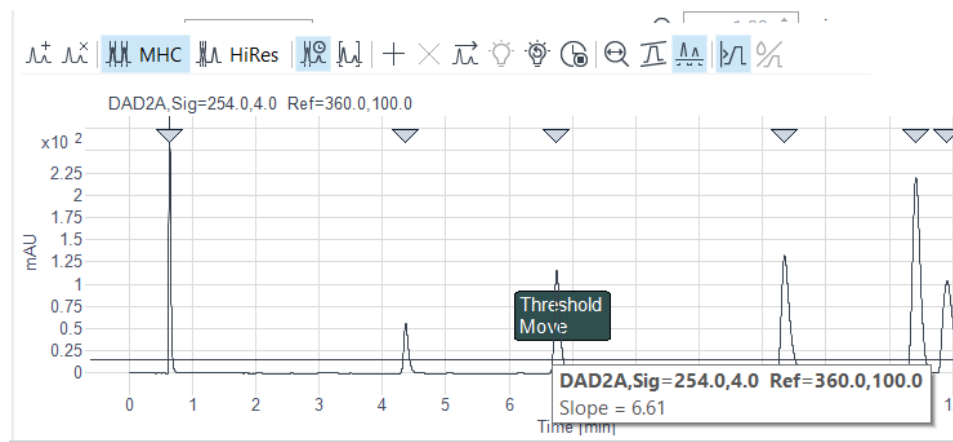


阈值

如果阈值被激活，您可以抓取这条线并上下移动以调整阈值。

该方法还会更新峰触发设置。

如果将光标悬停在阈值线上，斜率也会在与峰信号的交点处显示。



以图形方式设置基于峰的实验

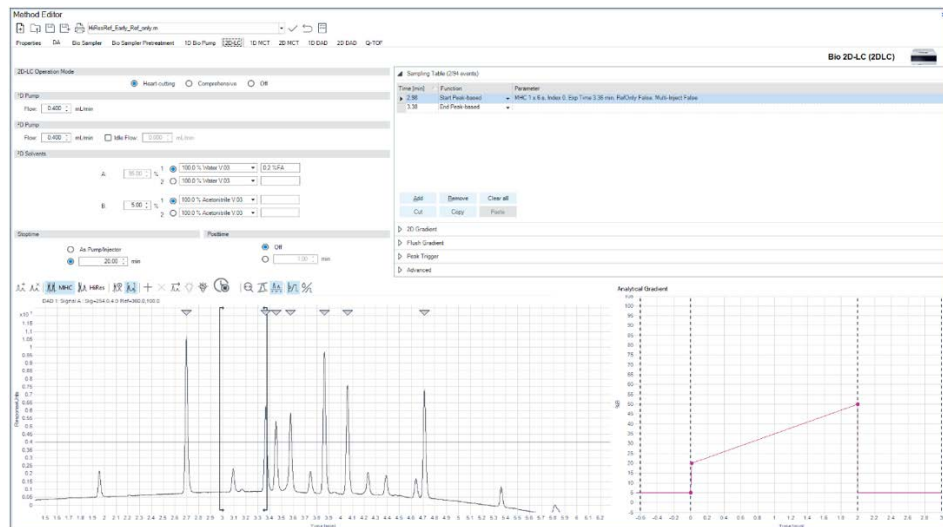


图 123 预测的基于峰的实验

在基于峰的模式下，¹D 检测器根据 UV 阈值（或斜率）触发切片采样/存储。当检测器出现一个峰时，将会达到阈值（= 峰开始），2D-LC 调节器开始采样。可以定义采样时间，该时间确定基于峰的切片的最大采样时间。如果在采样时间结束之前检测到峰结束，则停止采样。首先出现的事件将定义基于峰的采样时间。通过抓取开始和结束括号并在预览中移动，或通过调整采样表中的时间，可以调整基于峰的区域。

1 将色谱图上传到预览。

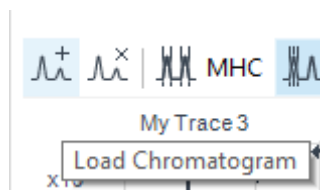



图 124 调用色谱图

- 2 定义 UV 阈值并标记阈值符号  以便显示。
- 3 选择用于触发的**检测器和信号**。
在本例中，选择了 G7117A 和信号 A。

▲ Peak Trigger

Use	<input checked="" type="checkbox"/>
Detector	G7117A DE1234567 ▼
Signal	A ▼
Peak detection mode	Threshold ▼
Threshold	5.000 mAU
Up Slope	1.00 mAU/s
Down Slope	1.00 mAU/s
Upper Threshold	2000.000 mAU

图 125 “峰触发”视图

- 4 选择 MHC 或高分辨率。

该图标对应于基于峰的操作。在此示例中，选择了 MHC。

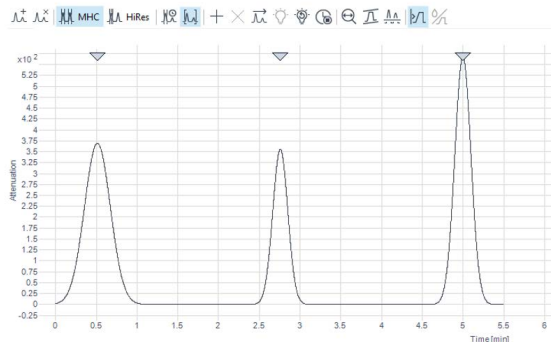


图 126 MHC 色谱图

5 双击色谱图上方的某个灰色三角。

此时会出现一个括号，用于标记基于峰的区域（基于峰的起点和终点），这会在采样表中采用。

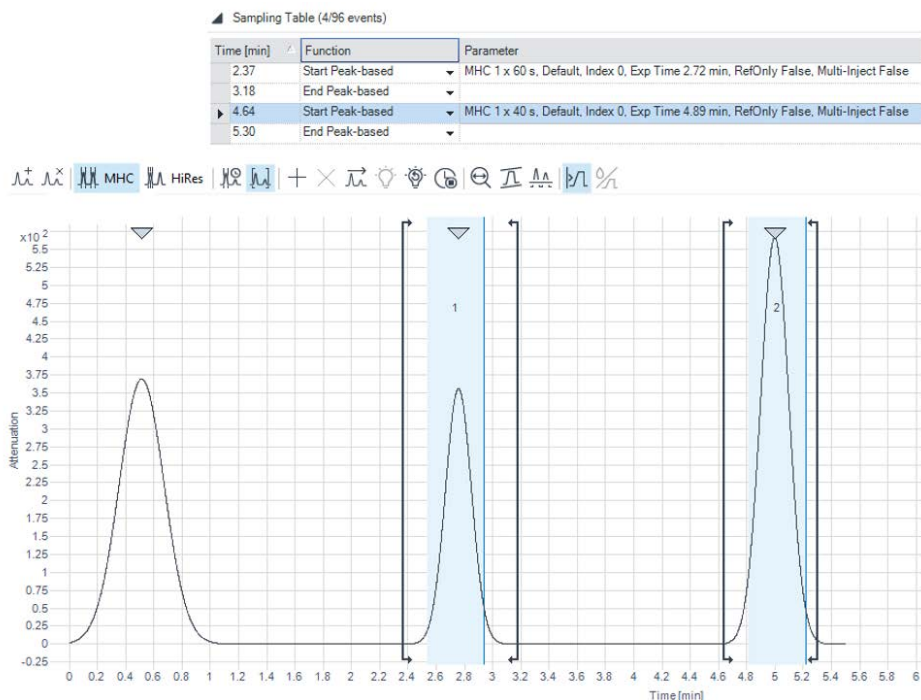


图 127 基于峰的模式下的两个选定峰和相应的基于峰的采样表

注意

要在预览中生成基于峰的事件，还可以使用“添加”图标或在预览中的某个位置单击右键，然后按添加切片。

在采样表中，可以添加基于峰的事件开始和结束，请参见第 180 页的[使用峰触发](#)。

要调整基于峰的区域，可以通过抓取开始和结束括号并在预览中移动，或通过调整采样表中的时间。

以图形方式设置基于峰的分析

- 6 如果某些突出显示项为红色，则悬停在警告三角会提示您必须调整停止时间。要调整停止时间，必须单击并按下停止时间按钮。然后，延长停止时间，以确保可以对所有预测的切片进行 2D 分析。

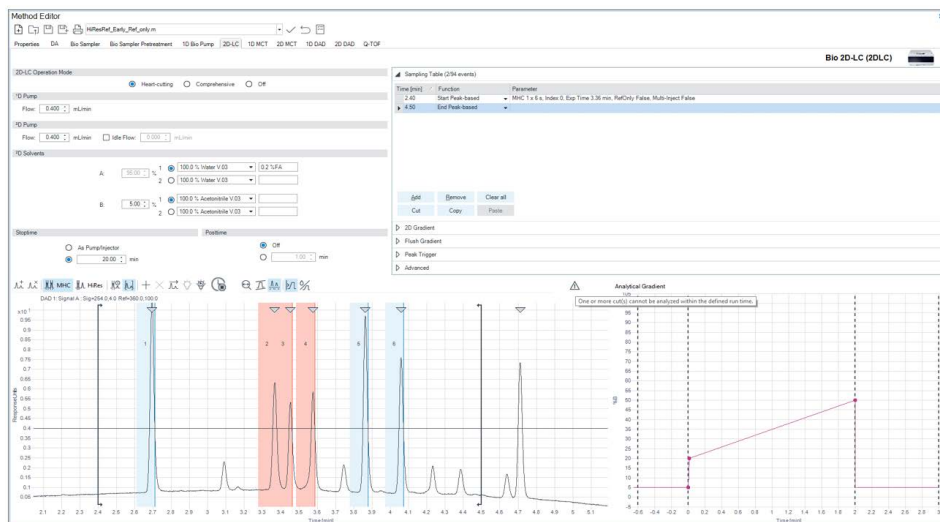


图 128 切片 3、4 和 5 以红色显示。提示无法在定义的运行时间内分析一个或多个切片的警告三角。

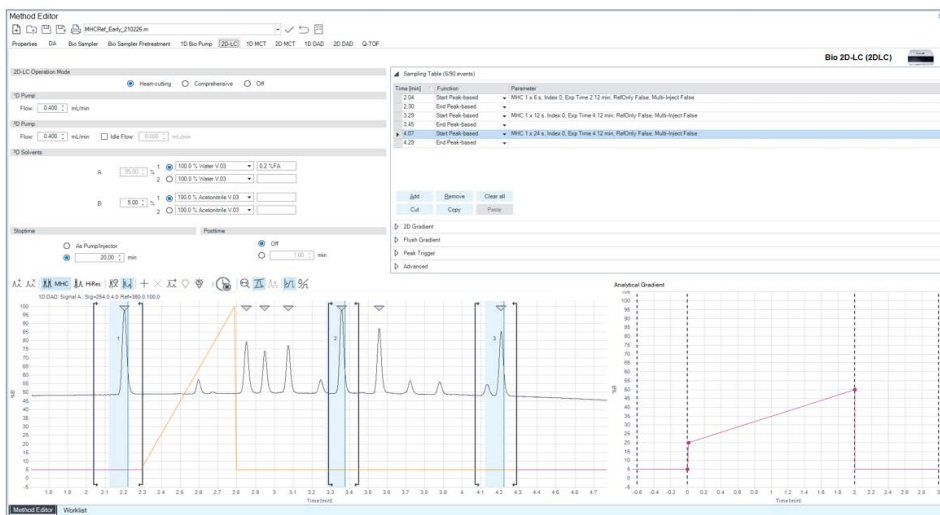


图 129 示例：MHC 模式下带 3 个基于峰的区域的上色谱图

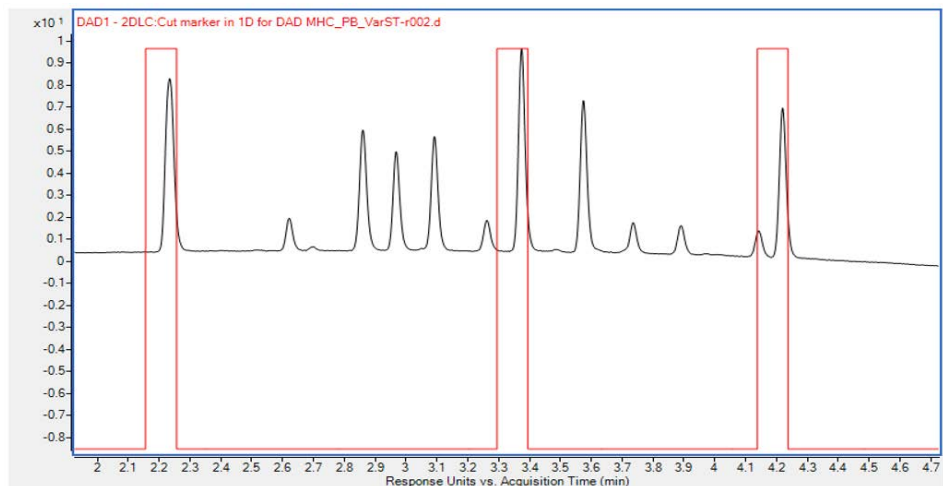


图 130 示例：显示 MassHunter Qual 1D 色谱图中显示的结果 + 切片标记

注意

本示例基于预测。对于结果未知的实验，如果不知道会发生什么，则必须在停止时间的基础上增加额外的时间。

以图形方式设置 2D 梯度

- 1 在分析梯度预览中调用初始 2D 梯度。
- 2 要更改初始梯度，双击紫色线。

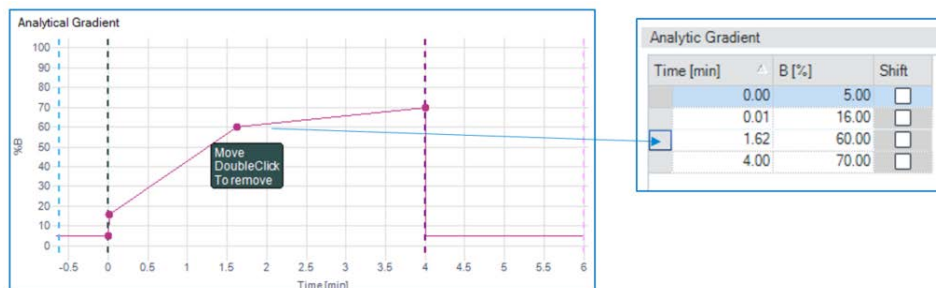


图 131 分析梯度

这会将一个梯度点添加到线（紫色点）。该梯度点可以移动。要添加另一个梯度点，再次双击紫色线。

要调整分析和平衡时间，移动相应的线。所有这些都将被表相应更新。

- 3 要使 Y 轴名称显示为 %B，激活 2D 梯度视图。

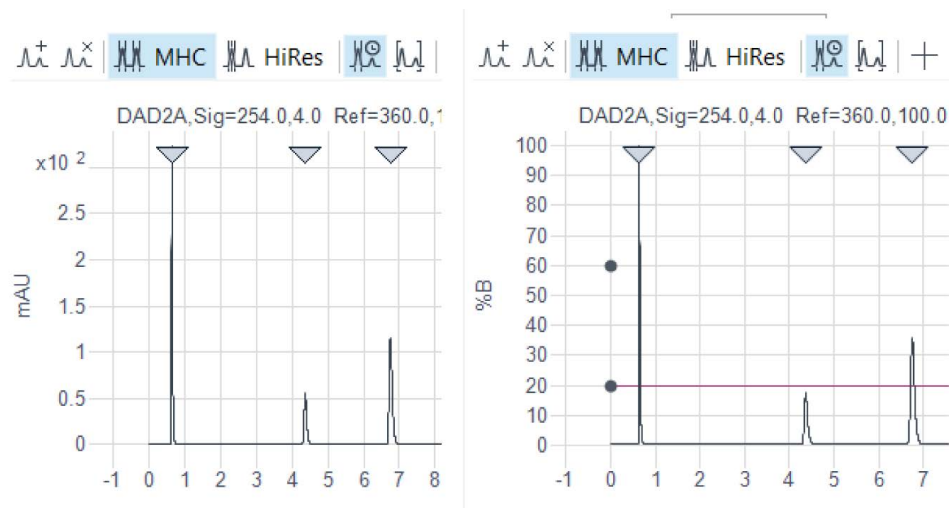


图 132 更改坐标轴的标签

4 单击 。

这将激活阈值线。要调整阈值，抓取本线并上下移动。这会更新峰触发设置。如果将光标悬停在阈值线上，斜率也会在与峰信号的交点处显示。

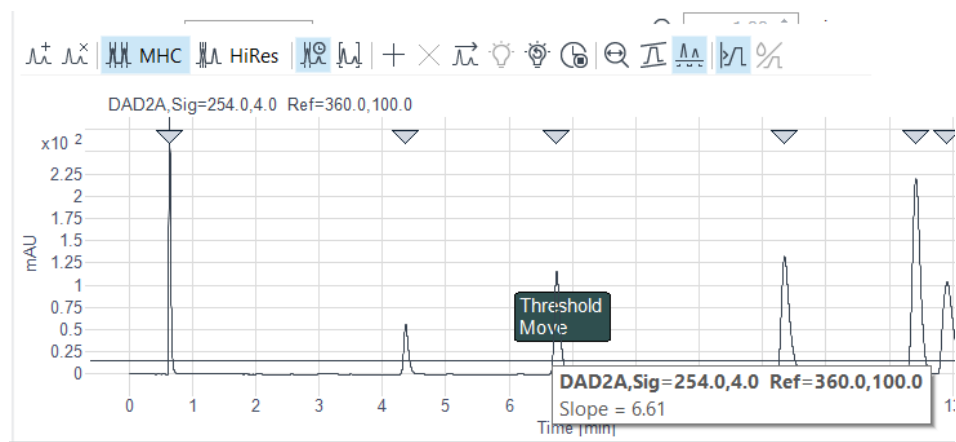


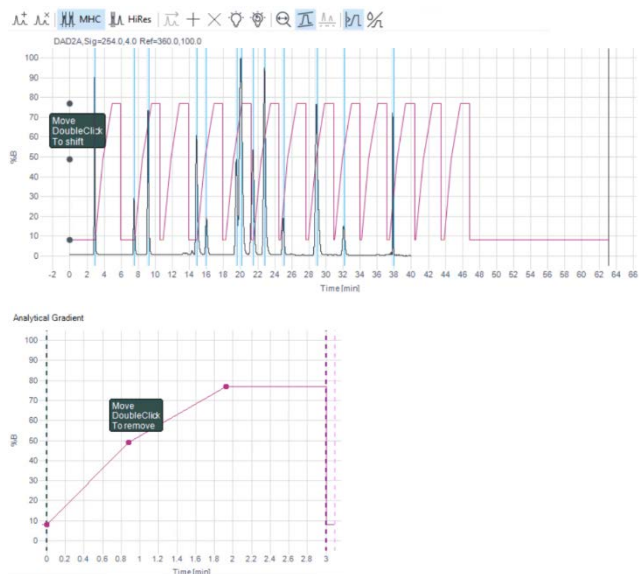
图 133 在预览中显示阈值

使用图形用户界面设置二维梯度

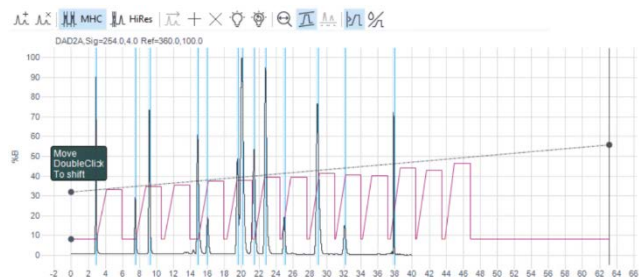
用户可以采用图形方式设置 2D 梯度，包括初始组成 (%B) 值、2D 停止时间和调制（重复）时间。

分析梯度

可以采用图形方式更改或调整**分析梯度**的值。在预览中，使用鼠标选择一个黑色项目符号，并上下移动该项目符号。这些更改将自动更新表中的**分析梯度**设置。通过双击**分析梯度**窗口中的线，可以设置更多的定位点，从而更好地调整分析梯度。



梯度迁移^{1D}时间 (已迁移的^{2D}梯度) 还可以采用图形方式完成迁移梯度的设置。如果双击预览窗口中的某个黑色项目符号，将会得到一条虚线，表示已迁移的^{2D}梯度。通过上下移动项目符号，可以将已迁移的^{2D}梯度与^{1D}运行中的其他溶剂组成对齐。通过再次双击虚线，可以设置更多的定位点，从而更好地调整迁移梯度。这些更改将自动更新表中的**梯度迁移^{1D}时间**设置。

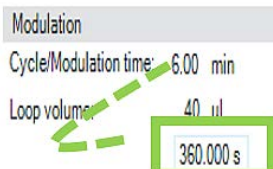


注意

在高分辨率系列中，禁止迁移梯度，但允许从高分辨率系列迁移到系列。

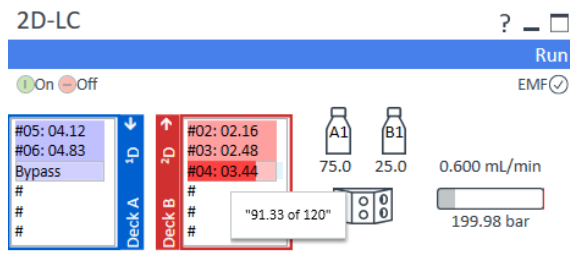
更多调制信息

将鼠标悬停在周期时间和/或 ASM 冲洗时间会显示实际时间（以秒为单位）：三位数（对于全切割模式）。



2D-LC 阀在线监视的更多信息

悬停在分析定量环上指示经过的时间和剩余时间（以秒为单位）。有关在线的更多信息，请参见第 148 页的 2D-LC 用户界面中的 2D-LC 阀在线监视器。



附加信息

多重进样

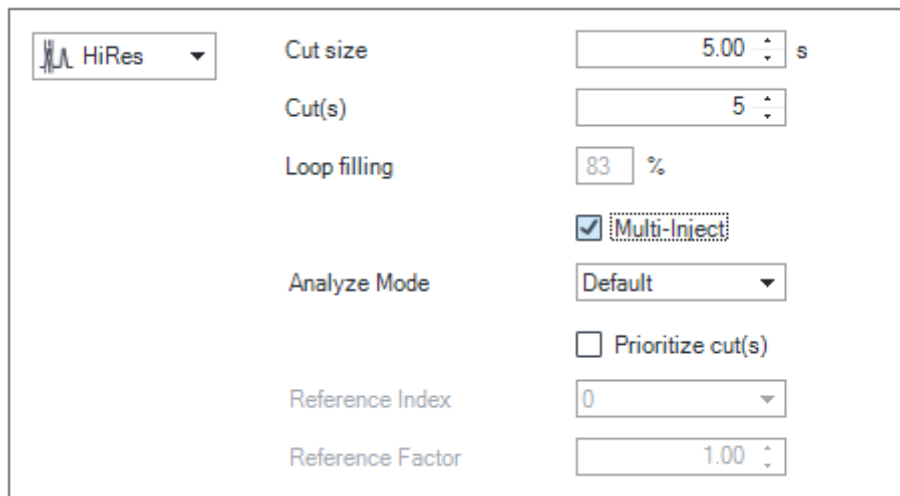
要对不适合当前安装的采样定量环（例如，40 μL 体积）的广泛 1D 区域进行进样，高分辨率是首选的方法。需要考虑，此方法会增加 2D 周期的数量。多重进样允许将高分辨率组定义为一次进样，这意味着在使用单个 2D 梯度进行分析之前，定量环的内含物将被传输到 2D 色谱柱。

注意

高分辨率切片组的最大数量（即时间表中，可以为一个高分辨率条目输入的切片数量）最多为 10，无论是否是多重进样。如果驻留仓位再次空闲，则可以确定地将新组的 5 个高分辨率切片再次存储在那里，其他一切都取决于进一步的时间安排。

- 1 要一次进样一个高分辨率组，选择“多重进样”。

在将单个 2D 梯度用于分析之前，定量环的内含物被传输到 2D 色谱柱。



HiRes	Cut size	5.00 s
	Cut(s)	5
	Loop filling	83 %
	Analyze Mode	Default
		<input type="checkbox"/> Prioritize cut(s)
	Reference Index	0
	Reference Factor	1.00

图 134 用于高分辨率采样的多重进样

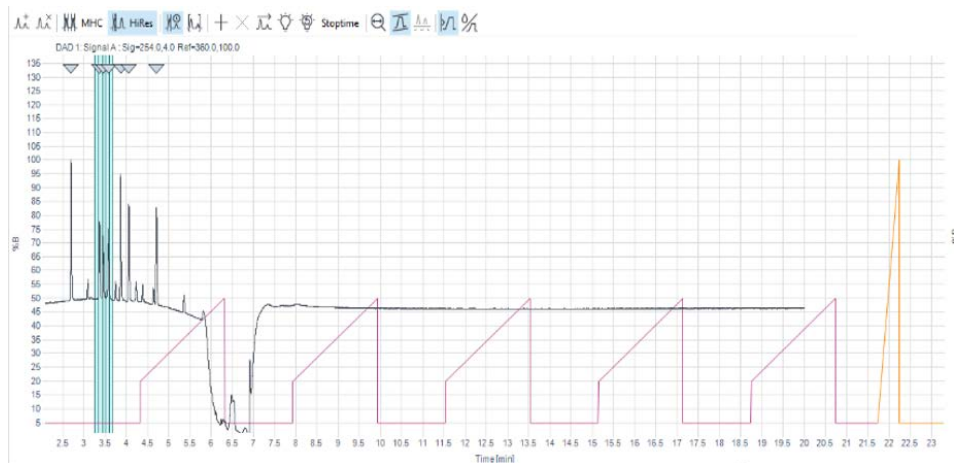


图 135 示例：具有 5 个分析梯度的高分辨率采样（5 个切片）

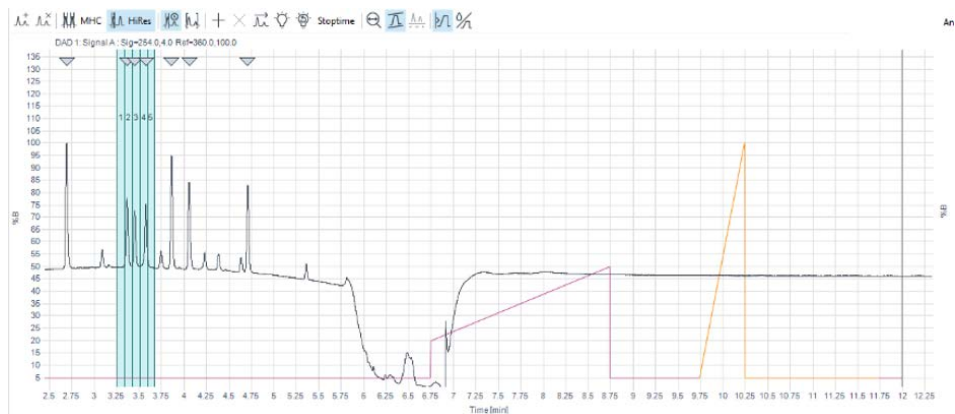


图 136 示例：高分辨率采样（5 个切片），所有切片只有一个分析梯度

注意

多重进样类似于从较大样品定量环的进样。大进样体积会对²D 分离造成不利影响。为了获得良好的²D 保留，可以考虑从低百分比的 B 开始并应用 ASM。因此，对于基于体积的等度分离，不建议使用多重进样，例如，SEC。

动态峰存储

在某些情况下，参数的微小变化会影响保留时间 (RT) 机制的变化。例如，这可能发生在某些类型的分析物（如肽）上。为补偿对基于时间的 (M)HC 2D-LC 实验的此类影响，解决方案使用动态峰存储。“动态峰存储”使用内部 RT 标准 (IRTS)，这通过基于峰的模式进行检测。如果该 IRTS 的“预期时间”提前或推迟，则与 IRTS 相关的后续基于时间的切片将会相应调整。

为中心切割模式设置 IRTS 实验

- 1 将色谱图上传到预览中。
- 2 定义 UV 阈值（峰触发），以预测采样的预期 IRTS，请参见“如何设置基于峰的实验”。
- 3 定义期望 IRTS 的基于峰的区域（基于开始和结束峰）。

通过采样表或通过预览用户界面中选择图标“基于色谱峰加上 MHC 或高分辨率”，并双击目标峰 (IRTS) 的三角，可以立即完成此操作，请参见“如何设置基于峰的实验”。

- 4 如果需要，通过抓取开始和结束括号并在预览中移动，或通过调整采样表中的时间，可以调整基于峰的区域。

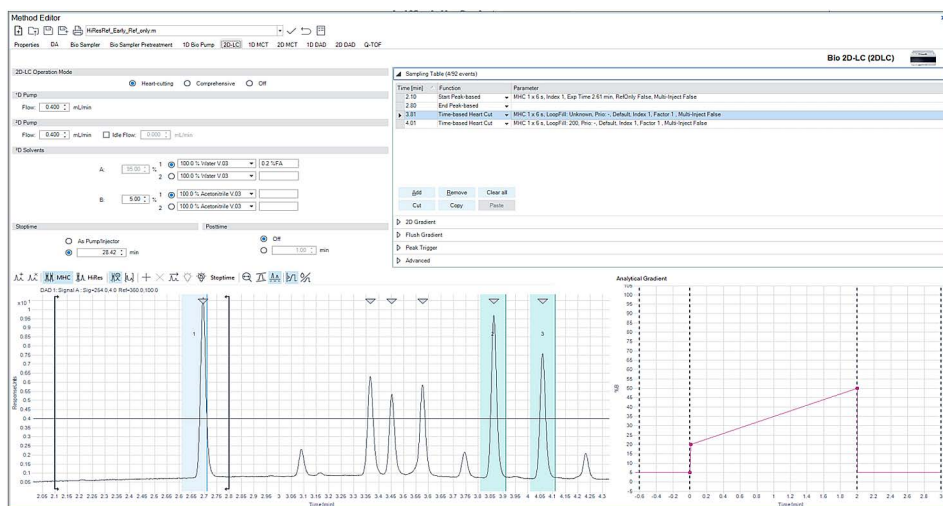


图 137 基于峰的中心切割实验

- 5 在采样表中验证 IRTS 的预期时间，该时间对应于预览中的峰开始触发（阈值线和峰前沿的交点）。然后，定义 IRTS 的参比索引值，之后显示在采样表中。对于本例中的第一个 IRTS，值为 1。

The screenshot shows a configuration window for MHC. It includes the following fields and controls:

- MHC**: A dropdown menu with a peak icon.
- Sampling Time**: A numeric input field with a spinner, set to 6.00 s.
- Cut(s)**: A numeric input field with a spinner, set to 1.
- Multi-Inject**: An unchecked checkbox.
- Reference Index**: A dropdown menu with a blue highlight, set to 1.
- Expected Time**: A numeric input field with a spinner, set to 2.67 min.
- Reference Only**: An unchecked checkbox.

图 138 定义为基于峰的 MHC 的 IRTS 参数

注意

除非选中字段“仅参比”，否则 IRTS 将进行 2D 分析。然后，检测到 IRTS，将时间偏移应用于所有后续基于时间的切片，但不会分析 IRTS。

注意

如果在定义 IRTS 后更改阈值，则需要更新预期时间，这可通过双击基于峰的开始括号完成。

注意

已定义区域中的第一个峰始终用作参比峰，如果选择**仅参比**，则无论范围内有多少峰，都不会存储峰。

- 6 如果已为 IRTS 定义了参比索引，则所有后续基于时间的切片将自动获得参比索引值，并通过此索引链接到 IRTS。

MHC	Cut size	2.40 s
	Cut(s)	1
	Loop filling	Unknown
		<input type="checkbox"/> Multi-Inject
	Analyze Mode	Default
		<input type="checkbox"/> Prioritize cut(s)
	Reference Index	1
	Reference Factor	2.00

图 139 基于时间的切片，带参比索引 1 和参比因子 2

参比因子的标准值 1 适用于简单的线性偏移。为了更精确地确定参比因子，应通过实验确定（例如，如果因子为 2，偏移 1 min 将使基于时间的峰偏移 2 min）。

动态峰存储设置示例

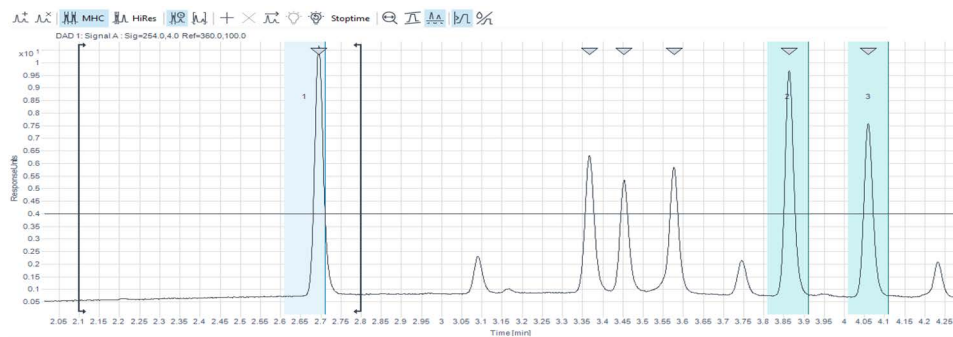


图 140 动态切片偏移设置的示例图片

表 20 IRTS

开始基于色谱峰:	2.10 min
结束基于色谱峰:	2.80 min
预期时间:	2.67 min

IRTS 的最大偏移是 0.57 min。这意味着，基于峰的区域（括号）的结束在 2.80 min，可将参比 IRTS 的下一个基于时间的切片放置在 $2.8 + 0.57 = 3.37$ min。

注意

如果基于时间的切片偏移的前沿并进入基于峰的区域（括号），将无法使用动态切片偏移。

如何借助 IRTS 和动态切片偏移来补偿运行期间出现的波动的示例如下。

下面的色谱图显示了从 MassHunter Qual 获得的结果。顶部 1D 色谱图显示了该方法所依据的原始参比色谱图。中间的 1D 色谱图显示 RT 偏移。

下面的切片标记图像显示基于时间的切片被相应地动态偏移。

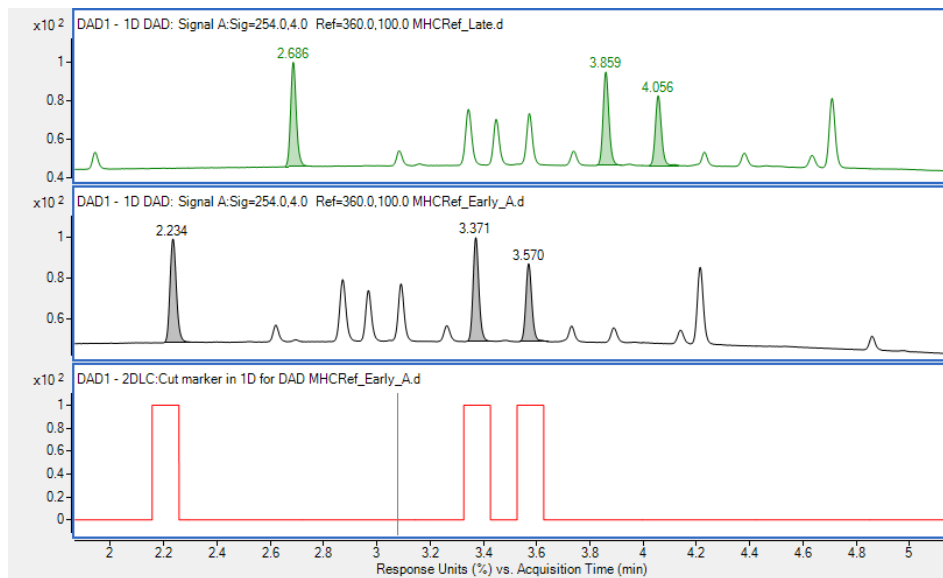


图 141 系统补偿 IRTS (2.686 min) 偏移到更早的 RT (2.234 min)

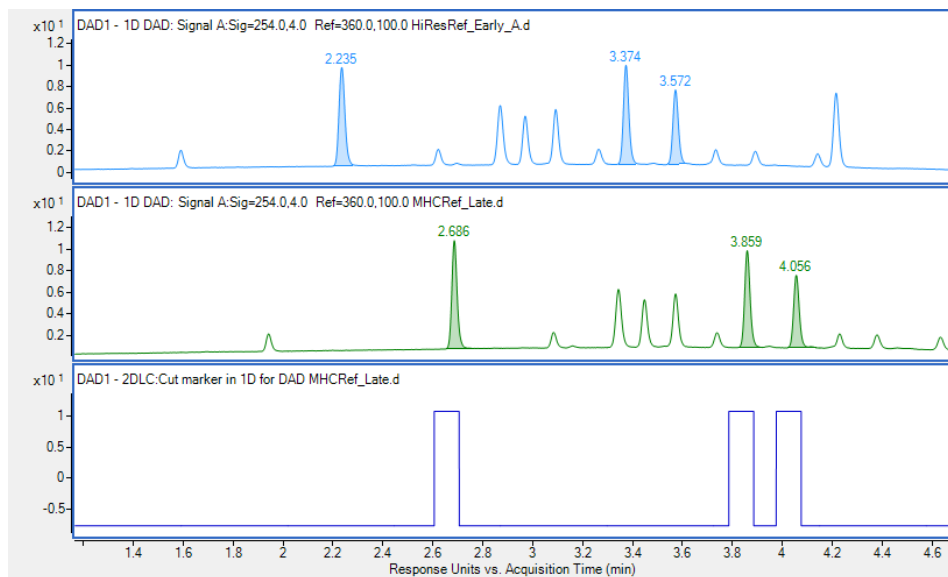


图 142 系统补偿 IRTS (2.235 min) 偏移到延迟的 RT (2.686 min)

调制 将鼠标悬停在周期和/或 ASM 冲洗时间会显示实际时间（以秒为单位）：3 位数（对于全切割模式）



图 143 调制

注意

为避免将精确调制时间 (LCxLC) 传输到第三方数据分析系统时出现舍入误差，请使用三位小数。

2D-LC 阀 悬停在分析定量环上指示经过的时间和剩余时间（以秒为单位）。

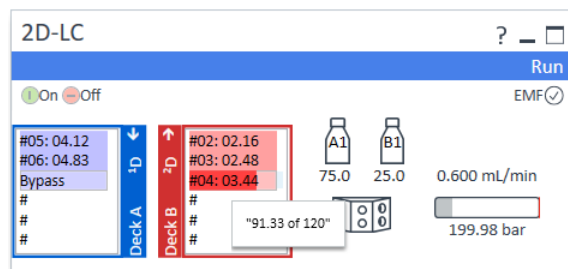


图 144 用户界面中的 2D-LC 在线监视器

7

主动溶剂调制 (ASM) 方法开发

主动溶剂调制 (ASM) 方法开发 218

方法参数 219

使用 ASM 毛细管优化稀释 220

优化样品定量环冲洗 221

将 ASM 阶段包含到 2D 梯度中 222

通过方法设置优化稀释 223

本章提供如何在使用主动溶剂调制 (ASM) 时开发方法的信息。

主动溶剂调制 (ASM) 方法开发

ASM 方法开发有助于找到 1D 溶剂在样品定量环中的最佳稀释，从而以最低的周期时间获得最佳 2D 分辨率。

打开 ASM 功能（请参见第 219 页的方法参数）后，按照以下顺序执行步骤：

- 第 220 页的使用 ASM 毛细管优化稀释
- 第 221 页的优化样品定量环冲洗
- 第 222 页的将 ASM 阶段包含到 2D 梯度中
- 第 223 页的通过方法设置优化稀释

方法参数

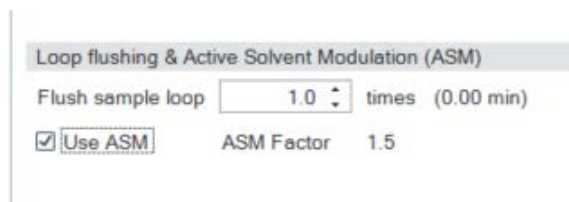


图 145 定量环冲洗和主动溶剂调制 (ASM)

2D-LC 方法参数的高级设置允许打开和关闭 ASM 功能的使用。

- 如果此选项处于关闭状态，则其将作为标准 2D-LC 阀运行，无需稀释。
- 如果此选项处于启用状态，用户可以设置希望在 ASM 阶段期间冲洗样品定量环的频率。

使用 ASM 毛细管优化稀释

提供四种不同的 ASM 毛细管选择以实现最佳结果。更长和更短的毛细管会分别减少和增加 1D 溶剂在样品定量环中的稀释。安装和配置不同的 ASM 毛细管，有关优化结果，请参见第 69 页的[连接 2D-LC 阀，ASM \(G4243A\)](#)。

表 21 可用的 ASM 毛细管和特性

毛细管 部件号	长度 (mm)	内径 (mm)	体积 (μL)	ASM 因子	分流比 (定量环： ASM)
5500-1300	85	0.12	0.96	5	1:4
5500-1301	170	0.12	1.9	3	1:2
5500-1302	340	0.12	3.8	2	1:1
5500-1303	680	0.12	7.7	1.5	1:0.5

ASM 背压

通过 ASM 毛细管的流量
ASM 因子

优化样品定量环冲洗

在软件中激活 ASM 并将冲洗样品定量环设为 3.0 次。



图 146 定量环冲洗和主动溶剂调制 (ASM)

注意

通常，冲洗样品定量环 3 次已经足够，这是建议的默认值。更少的次数可能也足够，并且可以在优化期间进行验证。用户界面显示冲洗所需的时间。

将 ASM 阶段包含到 2D 梯度中

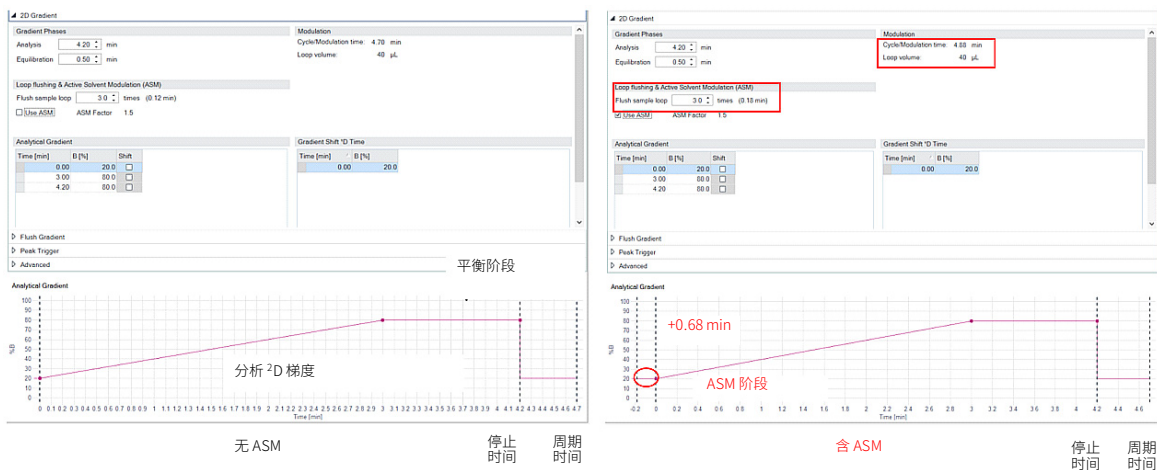


图 147 2D 梯度表编程 (示例)

ASM 阶段的稀释需要时间。这就是 ASM 阶段偏移分析梯度开始的原因。

例如，与没有 ASM 的 2D 梯度相比，ASM 阶段 0.68 min（基于所选 ASM 毛细管、冲洗因子和 2D 流速）一直会偏移 0.68 min。

- 梯度更晚结束
 - 2D 周期时间相应增加
 - 使用 ASM 自动添加 ASM 阶段
 - 在实际梯度和 ASM 阶段发生之前，由软件完成
- 本规则还适用于迁移梯度步骤（如果适用）。

通过方法设置优化稀释

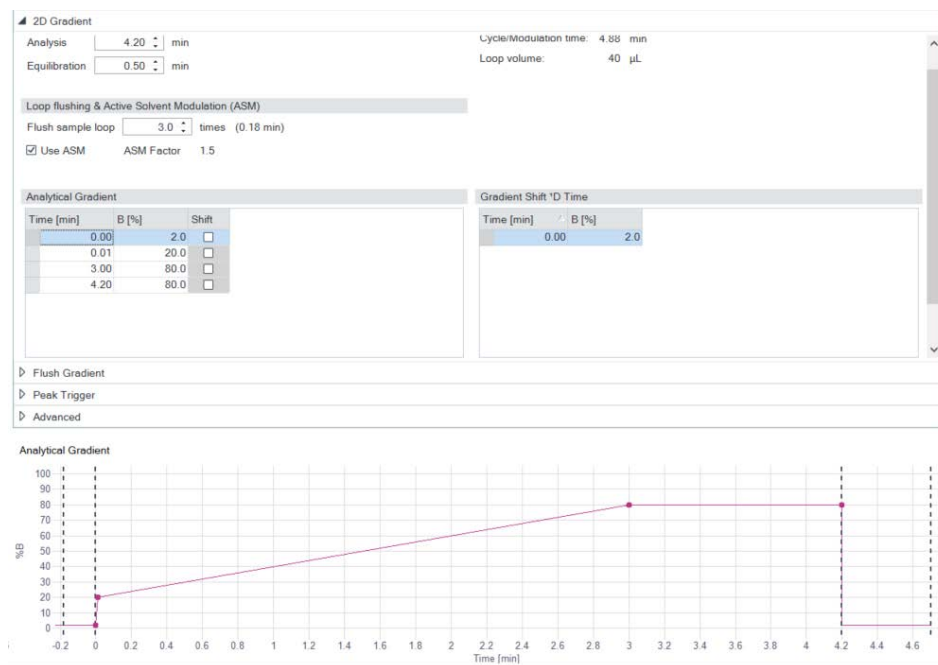


图 148 为 ASM 和色谱柱平衡阶段使用更小的 B 百分比来优化分离 (示例)

为了优化分离，与原始梯度相比，ASM 阶段和色谱柱平衡阶段可使用较低的 B 百分比，以增加²D 色谱柱之前的稀释度。

例如，如果原始分析梯度在 20 % B 开始，您可以使用 ASM 阶段（例如 2 % B），通过更改梯度开始条件并添加一行到 ASM 阶段的 2D 梯度表，在 ASM 阶段更大幅度地稀释¹D 溶剂。分析梯度的起点不变。平衡阶段的溶剂组成自动减少至开始条件。

应用具有小切片长度的高分辨率采样。小切片长度减少从¹D 传输到²D 的溶剂体积，这可进一步提高溶剂兼容性和 2D 分辨率。

8

运行系统

用于开始系统运行的入门程序	225
准备 2D-LC 系统	226
配置 2D-LC 系统	227
校验程序	229
准备实验	231
运行实验	233
运行多重中心切割 (2D-LC) 的校验程序	233
运行高分辨率 (LC-LC) 的校验程序	238
运行全切割 (LCxLC) 的校验程序	243

本章介绍如何使用基于驱动程序的 2D-LC 解决方案在标准中心切割、多重中心切割、高分辨率采样和全切割 2D-LC 模式下运行 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案。

用于开始系统运行的入门程序

入门程序说明系统的 2D-LC 功能，并支持用户启动特定分析任务的方法。入门程序将指导用户完成最重要的设置和分析功能。

可以使用 UV 检测器和质谱仪测定入门程序提供的样品。分析入门样品的方法与完整包装一起交付，以确保入门和校验程序顺利完成。使用给定的方法，峰将在第一维叠加，并在第二维分离。

Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案与所有所需部件一起交付，以完成（多重）中心切割和全切割 2D-LC 的完整入门程序。

注意

对于建议的 Infinity II 系统配置，Agilent 2D-LC 软件数据介质提供了系统准备和校验运行的方法。此处无法显示所有可能的配置。因此，如有必要，将这些方法用于其他配置和模块。

准备 2D-LC 系统

为 LC 准备 2D-LC 系统

要进行良好的准备，请参阅 HPLC 良好实验室规范的帮助说明和建议。

- 1 调节 Agilent HPLC 仪器，使系统保持稳定。
- 2 有关更多详细信息，请参见《使用 Agilent LC 系统的最佳实践》(SD-29000194 版本 B)，或每个模块的用户手册。

为 MS 准备 2D-LC 系统

离子源参数取决于所用流动相的组成和流速。因此，在确定 LC 条件后，重新调整质谱仪通常很必要。

- 1 执行自动调谐。
- 2 要在开始实验之前清洁源并冲洗 LC/流体管路，使用 LC-MS 级溶剂和试剂。
该措施可确保达到最佳灵敏度，提高重现性，并避免许多常见问题。
- 3 检查其他参数，如源温度、干燥气温度和气体流量。
在分析过程中很少可调整此类参数，应在开始分析前进行优化。
- 4 有关 LC-MS 的更多详细信息，请参阅相应模块的用户手册、用户指南和说明等文档。

配置 2D-LC 系统

先决条件

此简介针对基于驱动程序的 2D-LC 解决方案。2D-LC 软件至少需要以下 CDS 版本：

- 适用于 QTOF/TOF 的 MassHunter Workstation 11（或更高版本）
- 适用于 TQ 的 MassHunter Workstation 12（或更高版本）

有关固件和驱动程序等更多详细信息，请参阅第 46 页的[兼容性矩阵](#)。

配置 2D-LC 硬件

专注于 2D-LC 阀和毛细管连接。

- 1 要了解 2D-LC 阀口的正确管路，请参见第 67 页的[连接 2D-LC 阀，标准 \(G4236A\)](#)、第 69 页的[连接 2D-LC 阀，ASM \(G4243A\)](#)或 2D-LC 在线帮助。
2D-LC 阀的建议管路在采用单定量环的 2D-LC 设置与采用多重中心切割 (MHC) 阀的 2D-LC 设置，以及顺流与逆流模式下有所不同。

表 22 2D-LC 模式的硬件设置

2D-LC 模式	硬件设置
标准中心切割	<ul style="list-style-type: none"> • 带一个单定量环的 2D-LC 阀 • 带两个单定量环的 2D-LC 阀 • 带两个 MHC 阀的 2D-LC 阀（每个阀有六个样品定量环） • 带两个 MHC 阀的 2D-LC ASM 阀（每个阀有六个样品定量环）
MHC 或高分辨率	<ul style="list-style-type: none"> • 带两个 MHC 阀的 2D-LC 阀（每个阀有六个样品定量环） • 带两个 MHC 阀的 2D-LC ASM 阀（每个阀有六个样品定量环）
全切割	<ul style="list-style-type: none"> • 带两个单定量环的 2D-LC 阀和带两个 MHC 阀的 2D-LC 阀（每个带六个样品定量环） • 带两个 MHC 阀的 2D-LC ASM 阀（每个阀有六个样品定量环）

注意

40 µL 样品定量环是数据介质方法中的默认设置的一部分。

注意

带单定量环设置的 2D-LC 阀仅用于特殊应用，例如 Bio ProtA-Sec 工具包。有关更多信息，请参见 Bio 应用文档。

注意

Agilent 2D-LC 软件数据介质上提供了建议系统配置的准备和校验运行方法。此处无法显示所有可能的配置。因此，如有必要，将这些方法用于其他配置和模块。

配置 2D-LC 软件

- 1 将 2D-LC 解决方案配置为 **2D-LC 组合**，请参阅第 128 页的[配置 2D-LC 组合](#)。
- 2 要检查单个组件是否选择正确，如样品定量环、传输毛细管和 ASM 毛细管（如适用），请使用上下文菜单功能**修改**。
如果必要，校正选择。
- 3 调用给定参比方法。

注意

如果要调用并使用 1D 方法而不是 2D 方法，请务必禁用 2D-LC 模式。

注意

Agilent 2D-LC 软件数据介质上提供了建议 Infinity II 系统配置的系统准备和校验运行方法。

如果使用其他配置和模块，则需要对方法进行调整。

- 4 开始运行前，检查方法中的模式（中心切割或全切割）和所有其他重要参数。

注意

除了泵之外，所有其他装置应将泵设为停止时间。

校验程序

校验程序需要 2D-LC 入门样品，1 x 2 mL (5190-6895)，这包含以下组分。

表 23 5190-6895 的组分

分析物	CAS#
阿特拉津	001912-24-9
二丁基阿特拉津	006190-65-4
绿麦隆	015545-48-9
敌草隆	000330-54-1
环嗪酮	051235-04-2
利谷隆	000330-55-2
吡啶草胺	067129-08-2
甲基苯噻隆	018691-97-9
溴谷隆	003060-89-7
甲氧隆	019937-59-8
硝苯地平	021829-25-4
尼莫地平	066085-59-4
扑草净	007287-19-6
另丁津	007286-69-3
特丁津	005915-41-3
去乙基特丁津	030125-63-4

此处描述的方法参数已针对以下硬件配置进行了优化。

表 24 优化方法参数的硬件配置

	¹ D	2D-LC	² D
LC	ALS	通用驱动器，带 2D-LC ASM 阀和两 个 MHC 阀	泵
	泵		
	MCT	MCT	
	UV 检测器	UV 检测器	
LC-MS			高端质谱仪

准备实验

所需的部件:	部件号	说明
	5190-6895 📄	2D-LC 入门样品, 1 x 2 mL
	G2453-85060 📄	甲酸-试剂级 5 mL (5 cc)
	685775-902 📄	Poroshell SB-C18, 2.1 x 100 mm, 2.7 μ m 在用于 ESZ 服务的 ¹ D 中
	699968-301 📄	Poroshell 120 Bonus-RP, 3.0 x 50 mm, 2.7 μ m 在用于 ESZ 服务的 ² D 中

所需的硬件: 可提供各种硬件配置, 请参见第 55 页的选项。

所需的准备: 请注意, 用于以下流动相的溶剂可用:

- 1D:
 - A = 水 + 0.2 % 甲酸-试剂级 5 mL (5 cc) (G2453-85060)
 - B = 甲醇
- 2D:
 - A = 水 + 0.2 % 甲酸-试剂级 5 mL (5 cc) (G2453-85060)
 - B = 乙腈

注意

建议对旧色谱柱使用传统设置, 对新色谱柱使用轻松入门工具包。

为标准 LC 准备 1.2 mL 样品 (1:10)

- 1 要制备 1080 μ L 稀释溶剂, 将 216 μ L 甲醇添加到 864 μ L 流动相 A。1080 μ L 稀释溶剂 (流动相 A 中的 20 % 甲醇) 已准备好。
或
要制备 3600 μ L 稀释溶剂, 将 720 μ L 甲醇添加到 2880 μ L 流动相 A。3600 μ L 稀释溶剂 (流动相 A 中的 20 % 甲醇) 已准备好。
- 2 要制备 1.2 mL 样品 (1:10), 将 120 μ L 2D-LC 入门样品添加到 1080 μ L 稀释溶剂。
或

要制备 4.0 mL 样品 (1:10)，将 400 μL 2D-LC 入门样品添加到 3600 μL 稀释溶剂。

使用 1:100 的比例稀释 2D-LC 入门样品

1 100 μL 2D-LC 样品 (1:10) + 900 μL 稀释溶剂 = 1000 μL (1:100)

使用 1:1000 的比例稀释 2D-LC 入门样品

1 100 μL 2D-LC 样品 (1:100) + 900 μL 稀释溶剂 = 1000 μL (1:1000)

注意

对于 2D-LC 附加软件解决方案，请参阅《附加软件用户指南》。

运行实验

运行多重中心切割 (2D-LC) 的校验程序

要运行校验，可提供各种硬件配置，请参见第 56 页的表 7。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 230 页的表 24。

以下参数已针对此标准配置进行了优化。您的系统使用的参数可能略有偏差。运行实验，然后编辑或优化设置的方法。

表 25 用于 MHC 2D-LC 的¹D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
¹D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	Poroshell SB-C18, 2.1 x 100 mm, 2.7 μm (685775-902)
柱温箱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 泵	
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	甲醇
流速	0.5 mL/min
流动相梯度:	0 min - 45 % B 7 min - 54 % B 8 min - 90 % B
自动进样器	
进样量	2 μL 用于标准 LC 1:10 0.5 μL 正模式用于 LCMS, 1:100 或 1:1000, 具体取决于使用的 LCMS
进样针清洗	在冲洗口中, 10 s, 乙腈/水 (50/50) 或者甲醇/水 (50/50)
停止时间	与泵一致/无限制

表 25 用于 MHC 2D-LC 的 ¹D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
¹D 检测器 (DAD)	
二极管阵列检测器信号 A	254 nm, 4 nm BW; Ref 360 nm, 100 nm BW 信号峰宽 20 Hz
停止时间	停止时间与泵一致/无限制
峰触发	
峰检测模式	阈值
阈值	100 mAU 对于包含 1:10 样品的 UV 系统, 相应地调整其他样品的阈值

表 26 用于多重中心切割的 ²D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
2D-LC 阀	
	MHC, 带 40 μ L 样品, 传输毛细管, ASM 因子数
²D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	Poroshell 120 Bonus-RP, 3.0 x 50 mm, 2.7 μ m (699968-301)
柱温箱温度	40 $^{\circ}$ C
停止时间	与泵一致/无限制
²D 泵	
操作模式	中心切割 (基于峰)
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	乙腈
流速	1 mL/min
空闲流量	未使用
停止时间	10 min (如果 2D 中的峰不清除, 将不会自动延长)
后运行时间	3 min

表 26 用于多重中心切割的²D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
采样表	2.7 min, 开始基于色谱峰, MHC 采样时间: 6 s 3.7 min, 结束基于色谱峰 切片时间 (MHC) 可以略有差别, 具体取决于配置和使用的硬件。
² D 周期时间	分析 1.50 min, 平衡 0.70 min
² D 梯度	0 min - 10 % B 迁移 7 min - 30 % B 1.50 min - 60 % B
冲洗梯度	0 min - 10 % B 0.05 min - 80 % B 0.8 min - 80 % B 持续时间: 0.8 min, 平衡: 0.7 min
²D 检测器 (DAD)	
二极管阵列	254 nm, 4 nm BW; Ref 360 nm, 100 nm BW 信号峰宽 80 Hz
停止时间	与泵一致/无限制

表 27 ²D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
离子源	大气压电喷雾 (双 AJS ESI) ¹
离子模式	双 AJS ESI
离子极性	正
存储模式	两种, 首选棒状图
LCMS 流	MS
采集模式	采集模式 MS1 最小范围 (m/z) 50, 最大范围 (m/z) 500, 扫描速率 (质谱图/秒) ³
仪器参数	离子源参数
气体温度	250 °C

表 27 ²D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
气体流量	11 L/min
雾化器	40 psig
鞘气温度	350 °C
鞘气流速	12 L/min
扫描段	1
扫描源参数	
Vcap	3500 V
喷嘴电压	300 V
裂解电压	120
锥孔电压1	45
八级杆参比峰	750
参比质量	
参比质量已启用	已启用
使用瓶 A 参比雾化器	是
参比雾化器	0 psig
自动重新校正	
平均扫描数	1
检测窗口 (ppm)	100 ppm
最小高度	1000 计数
参比质量	
	正
	121.05087300
	922.00979800
色谱图	

表 27 ²D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
	色谱图类型标签偏移 Y 范围
	TIC TIC 1510000000
	TIC TIC 1510000000
停止时间	与泵一致/无限制

¹ 对于双 AJS ESI 之外的离子源，可能需要调整流速

表 28 ²D (LC-MS) 中的建议条件 - SQ MS

参数	值
ESI 源参数	类似于高端 MS 参数
峰宽	0.06 min
扫描	100 – 500 m/z 使用正离子模式
驻留时间	200 ms

- 1 从 2D-LC 数据介质调用方法**多重中心切割校验**，并修改多重中心切割配置的设置。
- 2 使用以甲醇/水 (20/80; v/v) 和 0.1 % 甲酸稀释的 2D-LC 入门样品，1 x 2 mL (5190-6895)、1:10 (仅 UV 校验)、1:100 (LCMS 校验) 或 1:1000 (LCMS 校验) 运行方法。
- 3 如果必要，后续编辑或优化该方法。

运行高分辨率 (LC-LC) 的校验程序

要运行校验，可提供各种硬件配置，请参见第 56 页的表 7。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 230 页的表 24。

以下参数已针对此标准配置进行了优化。您的系统使用的参数可能略有偏差。运行实验，然后编辑或优化设置的方法。

表 29 用于高分辨率 2D-LC 的 ¹D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
¹D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	Poroshell SB-C18, 2.1 x 100 mm, 2.7 μm (685775-902)
柱温箱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 泵	
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	甲醇
流速	0.5 mL/min
流动相梯度:	0 min - 45 % B 7 min - 54 % B 8 min - 90 % B 10 min - 90 % B 10.1 min - 45 % B
自动进样器	
进样量	2 μL 用于标准 LC 1:10 0.5 μL 正模式用于 LCMS, 1:100 或 1:1000, 具体取决于使用的 LCMS
进样针清洗	在冲洗口中, 10 s, 乙腈/水 (50/50) 或者甲醇/水 (50/50)
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 检测器 (DAD)	
二极管阵列检测器信号 A	254 nm, 4 nm BW; 参比 360 nm, 100 nm BW 信号峰宽 20 Hz
停止时间	停止时间与泵一致/无限制

表 29 用于高分辨率 2D-LC 的 ¹D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
峰触发	
峰检测模式	阈值
阈值	100 mAU

表 30 用于高分辨率 2D-LC 的 ²D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
2D-LC 阀	
	MHC, 带 40 μ L 样品, 传输毛细管, ASM 因子数
²D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	Poroshell 120 Bonus-RP, 3.0 x 50 mm, 2.7 μ m (699968-301)
柱温箱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
²D 泵	
操作模式	中心切割 (基于时间)
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	乙腈
流速	1 mL/min
空闲流量	未使用
停止时间	18 min (如果 2D 中的峰不清除, 将不会自动延长)
后运行时间	关闭
采样表	3.22 min, 基于时间的中心切割, 高分辨率 5 x 3.8 s。定量环填充 79 % 切片时间 (高分辨率) 可以略有差别, 具体取决于配置和使用的硬件。
² D 周期时间:	分析 1.50 min, 平衡 0.70 min

表 30 用于高分辨率 2D-LC 的 ²D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
² D 梯度:	0 min - 10 % B 迁移 7 min - 30 % B 1.50 min - 60 % B
冲洗梯度	0 min - 10 % B 0.05 min - 80 % B 0.8 min - 80 % B 持续时间: 0.8 min, 平衡: 0.7 min
²D 检测器 (DAD)	
二极管阵列	254 nm, 4 nm BW; Ref 360 nm, 100 nm BW 信号峰宽 80 Hz
停止时间	与泵一致/无限制

表 31 ²D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
离子源	大气压电喷雾 (双 AJS ESI) ¹
离子模式	双 AJS ESI
离子极性	正
存储模式	两种, 首选棒状图
LCMS 流	MS
采集模式	采集模式 MS1 最小范围 (m/z) 50, 最大范围 (m/z) 500, 扫描速率 (质谱图/秒) ³
仪器参数	离子源参数
气体温度	250 °C
气体流量	11 L/min
雾化器	40 psig
鞘气温度	350 °C
鞘气流速	12 L/min

表 31 ²D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
扫描段	1
	扫描源参数
Vcap	3500 V
喷嘴电压	300 V
裂解电压	120
锥孔电压1	45
八级杆参比峰	750
	参比质量
参比质量已启用	已启用
使用瓶 A 参比雾化器	是
参比雾化器	0 psig
	自动重新校正
平均扫描数	1
检测窗口 (ppm)	100 ppm
最小高度	1000 计数
	参比质量
	正
	121.05087300
	922.00979800
	色谱图
	色谱图类型标签偏移 Y 范围
	TIC TIC 1510000000
	TIC TIC 1510000000
停止时间	与泵一致/无限制

¹ 对于双 AJS ESI 之外的离子源, 可能需要调整流速

表 32 2D (LC-MS) 中的建议条件 - SQ MS

参数	值
ESI 源参数	类似于高端 MS 参数
峰宽	0.06 min
扫描	100 – 500 m/z 使用正离子模式
驻留时间	200 ms

- 1 从 2D-LC 数据介质调用方法**高分辨率校验**并修改多重中心切割配置的设置。
- 2 使用以甲醇/水 (20/80; v/v) 和 0.1 % 甲酸稀释的 2D-LC 入门样品, 1 x 2 mL (5190-6895)、1:10 (仅 UV 校验)、1:100 (LCMS 校验) 或 1:1000 (LCMS 校验) 运行方法。
- 3 如果必要, 后续编辑或优化该方法。

运行全切割 (LCxLC) 的校验程序

要运行校验，可提供各种硬件配置，请参见第 56 页的表 7。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 230 页的表 24。

为了获得最佳灵敏度，在全切割模式下，通常在质谱仪之前分流 LC 流量，尤其对于 LC/MS 应用。

以下参数已针对此标准配置进行了优化。您的系统使用的参数可能略有偏差。运行实验，然后编辑或优化设置的方法。

表 33 MS 无源分流器设置示例 (比率 1:2)

说明 (PN)	用途
三通、不锈钢、1/16 英寸、低死体积 (0100-0969)	三通
不锈钢毛细管 340 x 0.12 ps-ns (5067-4659)	连接到三通的 ² D 检测器
不锈钢毛细管 0.075 mm x 500 mm，长套管 (5500-1205)	连接到三通的另一端的 LCMS 源入口
不锈钢毛细管 0.075 mm x 250 mm，长套管 (5500-1206)	三通的剩余连接用作废液毛细管

表 34 用于全切割 2D-LC 的 ¹D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
¹D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	Poroshell SB-C18, 2.1 x 100 mm, 2.7 μm (685775-902)
柱温箱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 泵	
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	甲醇
流速	0.1 mL/min
停止时间	40 min
后运行时间	10 min

表 34 用于全切割 2D-LC 的 ¹D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
流动相梯度:	0 min - 40 % B 34 min - 60 % B 34.5 min - 90 % B 40 min - 90 % B
自动进样器	
进样量	2 μ L 用于标准 LC 0.5 μ L 正模式用于 LCMS
进样针清洗	在冲洗口中, 10 s, 甲醇/水 (50/50)
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 检测器 (DAD)	
二极管阵列检测器信号 A	254 nm, 4 nm BW; Ref 360 nm, 100 nm BW 信号峰宽 20 Hz
停止时间	停止时间与泵一致/无限制

表 35 用于全切割 2D-LC 的 ²D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
2D-LC 阀	
	带 40 μ L 样品定量环 (或带 60 μ L 样品定量环) 的 2D-LC 阀
²D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	Poroshell 120 Bonus-RP, 3.0 x 50 mm, 2.7 μ m (699968-301)
柱温箱温度	50 $^{\circ}$ C
停止时间	与泵一致/无限制
²D 泵	
操作模式	全切割
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	乙腈

表 35 用于全切割 2D-LC 的 ²D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
流速	2.5 mL/min
空闲流量	0.3 mL/min
停止时间	40 min
后运行时间	10 min
采样表	在 5 min 时开始，在 40 min s 时停止。定量环填充 80 %
² D 周期时间	分析 0.25 min（如果使用 60 μL 样品定量环，则为 0.35 min），平衡 0.10 min
² D 梯度：	0 min - 5 % B 0.25 min（如果使用 60 μL 样品定量环，则为 0.35 min） - 95 % B
²D 检测器 (DAD)	
二极管阵列	254 nm, 4 nm BW; Ref 360 nm, 100 nm BW 信号峰宽 80 Hz
停止时间	与泵一致/无限制

表 36 ²D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
离子源	大气压电喷雾（双 AJS ESI）
离子模式	双 AJS ESI
离子极性	正
存储模式	两种，首选棒状图
LCMS 流	MS
采集模式	采集模式 MS1 最小范围 (m/z) 50，最大范围 (m/z) 500，扫描速率（质谱图/秒） 3

为避免高流速导致 LC/MS 出现问题，应将第二维色谱柱的流出物分流。建议的分流比是 1:2。

表 36 2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
仪器参数	离子源参数
气体温度	250 °C
气体流量	11 L/min
雾化器	40 psig
鞘气温度	350 °C
鞘气流速	12 L/min
扫描段	1
	扫描源参数
Vcap	3500 V
喷嘴电压	300 V
裂解电压	120
锥孔电压1	45
八级杆参比峰	750
	参比质量
参比质量已启用	已启用
使用瓶 A 参比雾化器	是
参比雾化器	0 psig
	自动重新校正
平均扫描数	1
检测窗口 (ppm)	100 ppm
最小高度	1000 计数
	参比质量
	正

为避免高流速导致 LC/MS 出现问题，应将第二维色谱柱的流出物分流。建议的分流比是 1:2。

表 36 ²D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
	121.05087300
	922.00979800
	色谱图
	色谱图类型标签偏移 Y 范围
	TIC TIC 1510000000
	TIC TIC 1510000000
停止时间	与泵一致/无限制
为避免高流速导致 LC/MS 出现问题，应将第二维色谱柱的流出物分流。建议的分流比是 1:2。	

表 37 ²D (LC-MS) 中的建议条件 - SQ MS

参数	值
ESI 源参数	类似于高端 MS 参数
峰宽	0.06 min
扫描	100 – 500 m/z 使用正离子模式
驻留时间	200 ms

- 1 从 2D-LC 数据介质调用方法**全切割校验**，并修改**全切割配置**的设置。
- 2 使用以甲醇/水 (20/80; v/v) 和 0.1 % 甲酸稀释的 2D-LC 入门样品，1 x 2 mL (5190-6895)、1:10 (仅 UV 校验)、1:100 (LCMS 校验) 或 1:1000 (LCMS 校验) 运行方法。
- 3 如果必要，后续编辑或优化该方法。

9

数据分析

用于 MassHunter 的 2D-LC 数据分析/数据评估 249

MassHunter Acquisition 中的预设值 249

MassHunter Qualitative Analysis 软件 253

MassHunter 定量分析软件 273

GC Image 基本信息 276

概述 279

安装 279

使用 GCImage 软件 280

研究在 2D 中使用不同梯度的影响 287

本章提供有关如何使用软件分析 2D-LC 数据的信息。

用于 MassHunter 的 2D-LC 数据分析/数据评估

MassHunter Acquisition 中的预设值

为了更好地分析多重中心切割或高分辨率采样的数据，需要在数据采集中采取额外的选择步骤。此操作将正确排序生成的 2D 切片，这有助于以后的显示和数据分析。

可以使用 GC Image LCxLC Edition Software 显示和分析全切割 2D-LC 分析。

有关详细信息，请参见

- 第 276 页的 GC Image 基本信息
- 在线帮助 GC Image LCxLC Edition Software
- www.gcimage.com

文件拆分自动化

要在每次 2D-LC 分析后自动生成正确的切片序列，在方法编辑器中启动 2D-LC 文件拆分自动化功能。

Method Editor

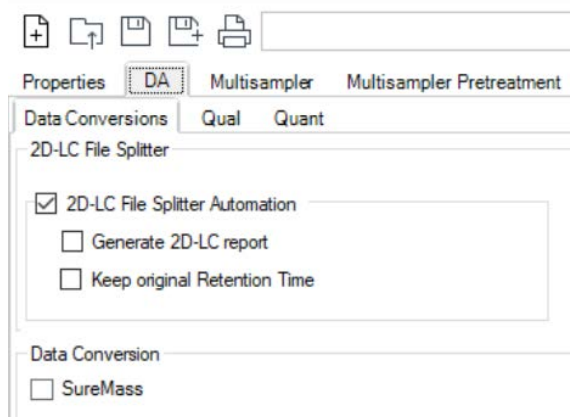


图 149 MassHunter Acquisition 中的方法编辑器

- 1 选中方法编辑器 > DA 中的 2D-LC 文件自动拆分复选框。
该选择将在每次 2D-LC 测量后自动生成正确的切片序列。

- [可选] 2 选中**生成 2D-LC 报告**复选框。
该选择将生成专门的 pdf 2D-LC 报告，其数据文件夹包含切片信息。
- [可选] 3 选中**保留原始保留时间**复选框。
该选择将保留 ¹D 运行的保留时间的信息。
- 4 对于单个样品运行
除了为您需要的单个样品运行启动文件拆分过程之外。
- 在“要运行的方法部分”中：
必须选择“采集和 DA”。

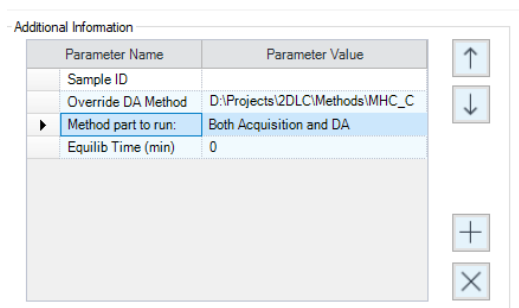


图 150 单个样品运行的“附加信息”视图

- 在“覆盖 DA 方法”中：
定义激活了文件自动拆分的采集方法的存储路径。

注意

2D-LC 文件自动拆分限于第二维中的两个检测器（UV 和 MS 检测器）。如果配置了超过两个第二维检测器，则使用延迟（传输体积）最短的 UV 检测器来拆分。

数据分析

用于 MassHunter 的 2D-LC 数据分析/数据评估

如果忘记激活 DA:

使用 DA 重处理工具重新运行样品/工作列表。

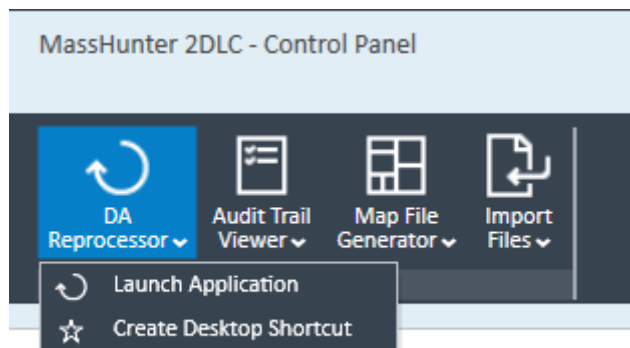


图 151 控制面板中的“DA 重处理器”视图

此功能随采集软件自动安装，可在**控制面板**（**工具**选项下）中找到
另外，也可通过“脱机实用程序” DVD 获取该功能。

MassHunter 2D-LC 文件结构

来自 MassHunter Acquisition 的 2D-LC 结果具有专门数据结构。在以下示例中，2D-LC 数据将由 LC/MS UV-QTOF 仪器分析，并使用 MassHunter Qualitative Analysis Software 10.0 来评估。

- 2D-LC_File.d** 此文件存储²D 运行的完整信息，例如，MS 和 UV 信号。
- 2D-LC Folder_Cuts** 此文件夹将会存储并按切片编号和切片时间的正确顺序来列出所有切片，例如，Filename – Cut01 at 2.31 min.d。

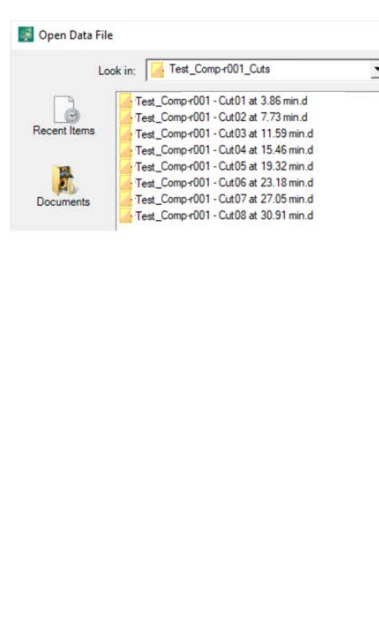
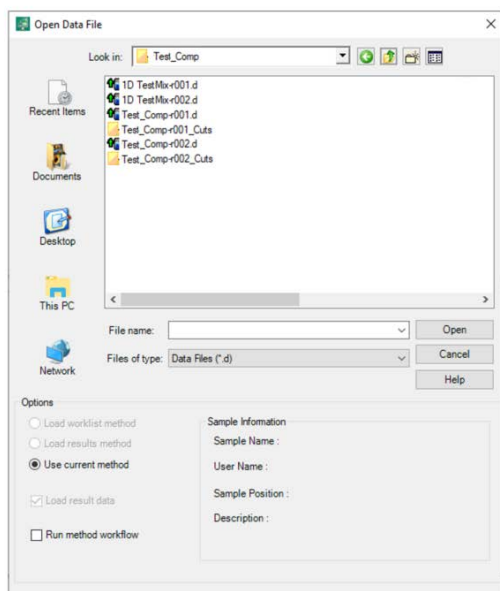


图 152 带父级数据文件和相应文件夹（带切片）的 MassHunter 的文件结构

注意

数据文件将切片信息存储为 cuts.csv，将文件拆分日志文件存储为 FSsplitterlog.txt。

注意

为避免 DA 处理中出现问题，对于 MassHunter 11 Workstation，请勿设置包含空格的项目名称或文件名。

MassHunter Qualitative Analysis 软件

Masshunter 数据分析软件通常会以您习惯的方式处理²D 数据。还可在 2D-LC 数据上执行识别化合物或设置和运行定性分析方法的任务。然而，为了更容易地开始使用²D 数据，我们列出了一些不同的工作流程作为示例。

在本例中，2D-LC 仪器配备了 2 个 UV 检测器（¹D 和 ²D）、2D-LC 阀（带 MHC）和 1 个第二维 Q-TOF 检测器。调用默认方法。

工作流程¹D UV 数据提取 – 可选方案 1

- 1 打开数据文件 2D-LC file.d，在本例中是 Test_Comp r001.d。
将显示 2D TIC-chromatograms 的字符串。

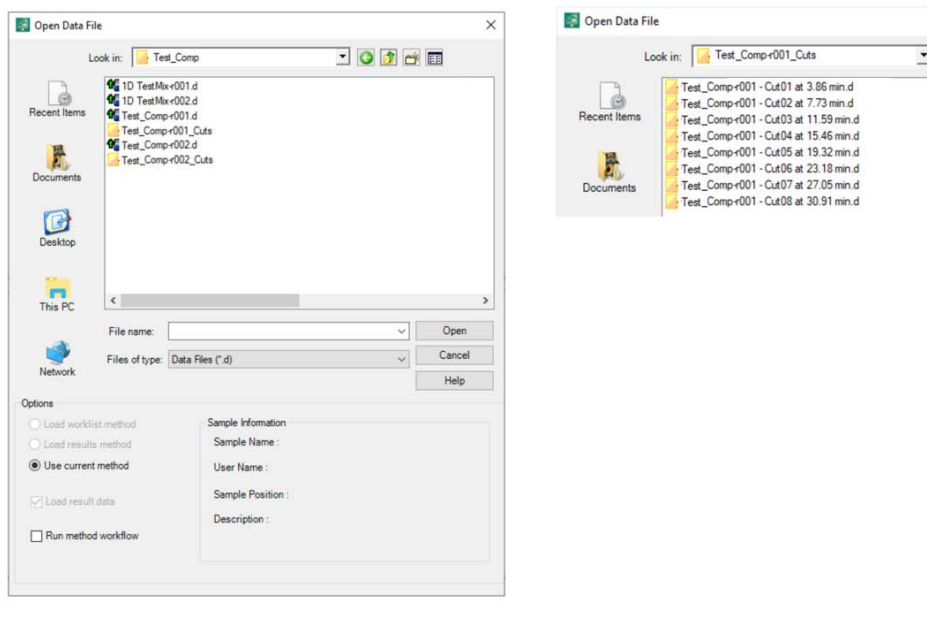


图 153 “打开数据文件”视图

- 2 右键单击**色谱图结果**，然后选择**提取 > 其他色谱图 > DAD 1**。

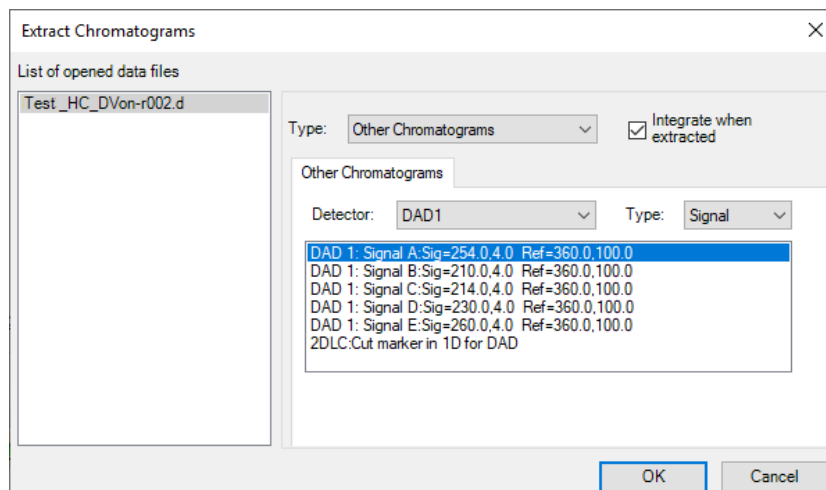


图 154 “提取色谱图”视图

- 3 右键单击**色谱图结果**和**提取 > 其他色谱图 > 1D 中 DAD 的 2DLC 切片标记**。

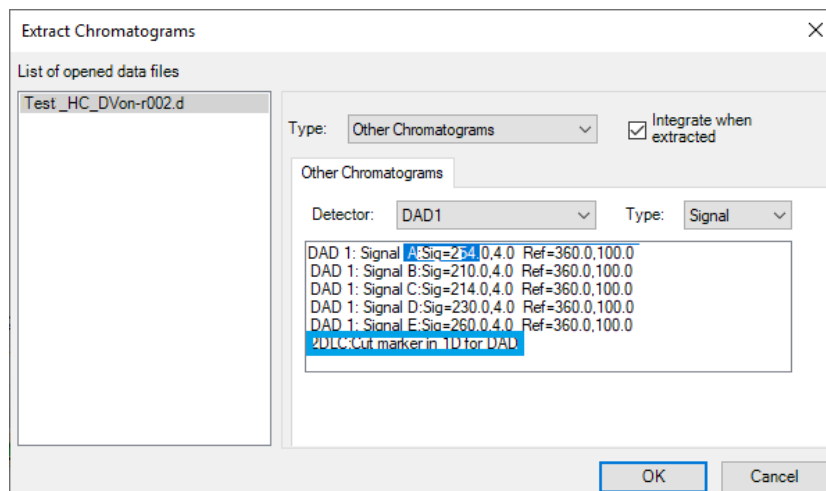


图 155 具有选定的 2DLC 切片标记的“提取色谱图”视图

可以使用“方法自动化工作流程”自动完成。

注意

默认情况下，选择 Agile2 积分器来集成 UV 色谱图。要集成切片标记，必须使用“通用”积分器。因此，指定时间对应于 DA 生成的切片信号。

- 4 标记 DAD 1 和切片标记并按显示突出显示的信号按钮。

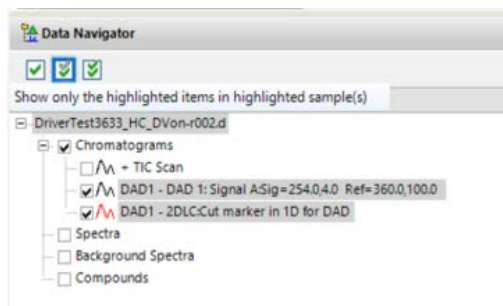


图 156 “数据导航器”视图

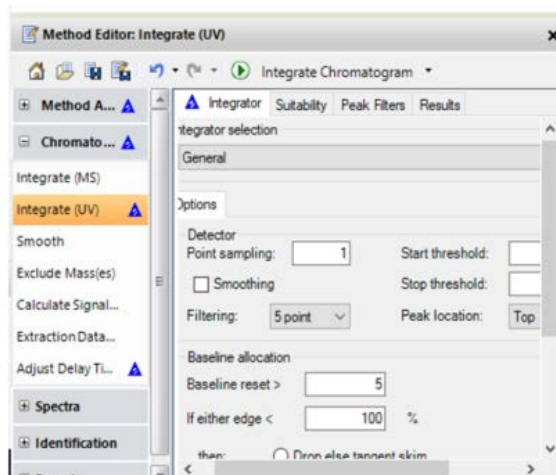


图 157 方法编辑器积分 (UV)

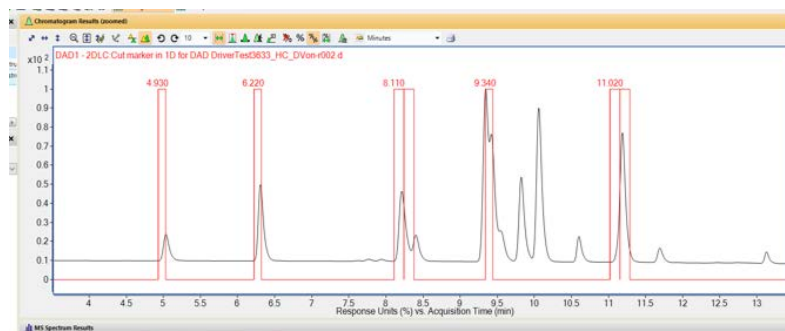


图 158 ¹D 信号叠加，带切片标记

工作流程 1D UV 数据提取 – 可选方案 2

- 1 打开数据文件 2D-LC file.d，在本例中是 Test_Comp r001.d。
将显示 2D TIC-chromatograms 的字符串。

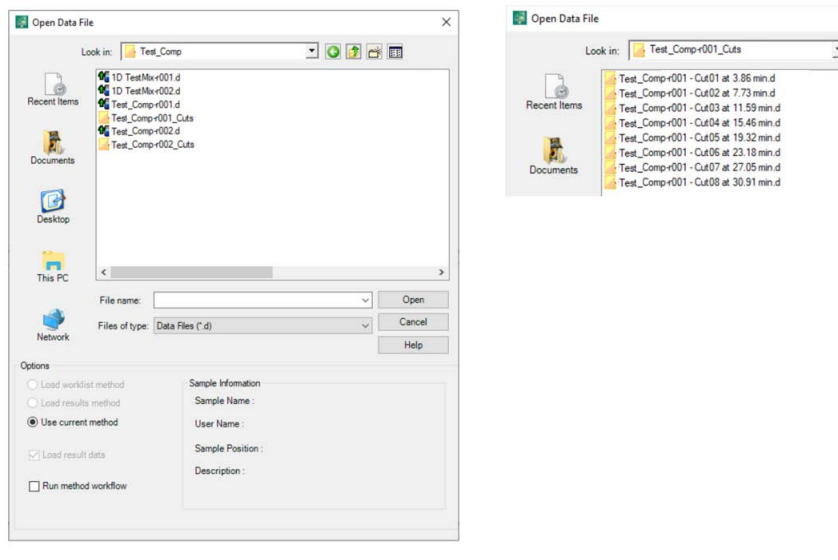


图 159 “打开数据文件”视图

- 2 转至“操作”并选择提取所有非 MS 色谱图。

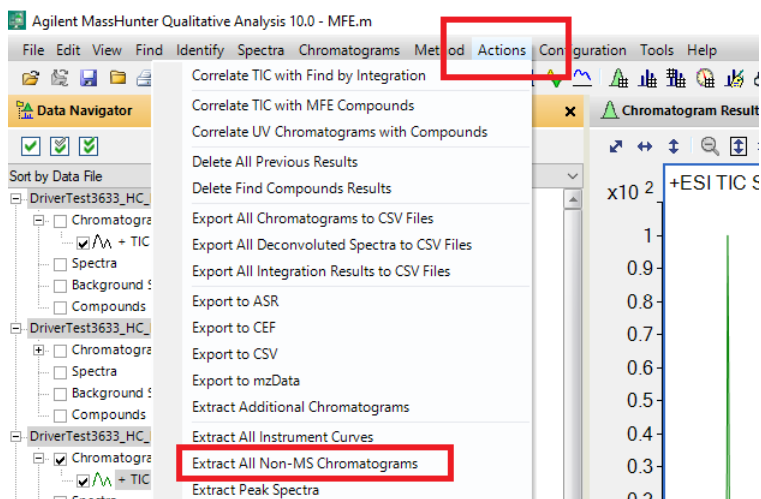


图 160 提取所有非 MS 色谱图的“操作”菜单视图

- 3 标记 DAD 1 和切片标记并按显示突出显示的信号按钮。

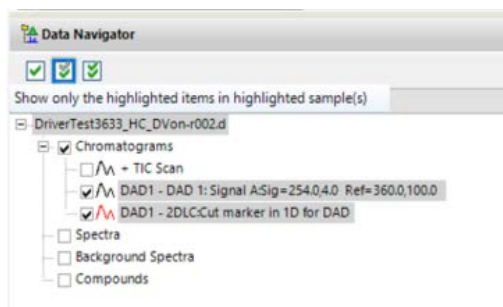


图 161 “数据导航器”视图

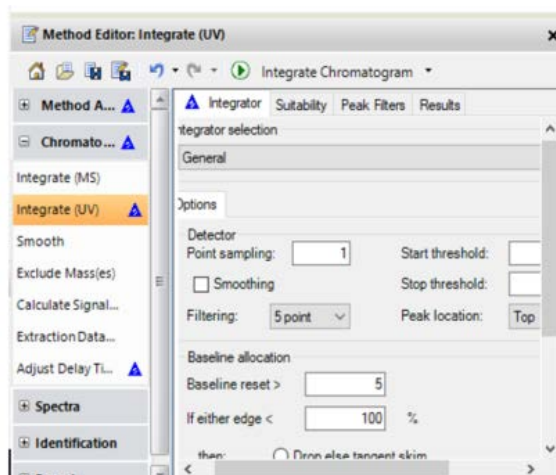


图 162 方法编辑器积分 (UV)

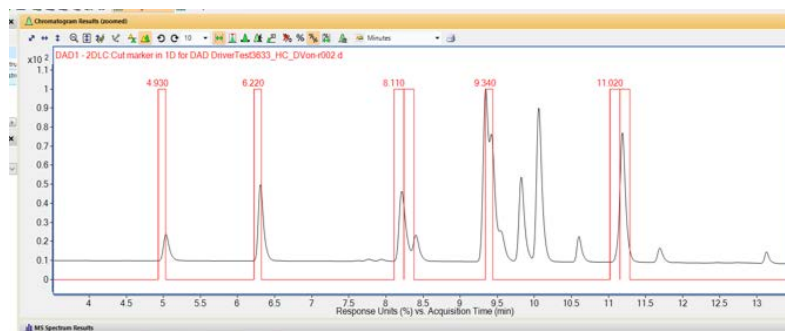


图 163 ¹D 信号叠加，带切片标记

工作流程²D MS 数据

1 从切片文件夹打开“提取的 2D 切片”。

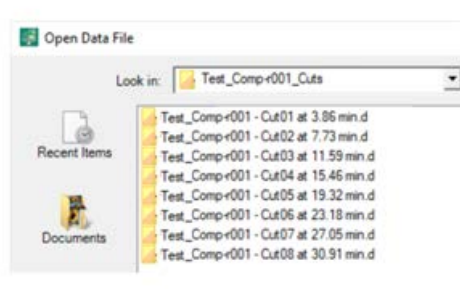


图 164 “打开数据文件”视图

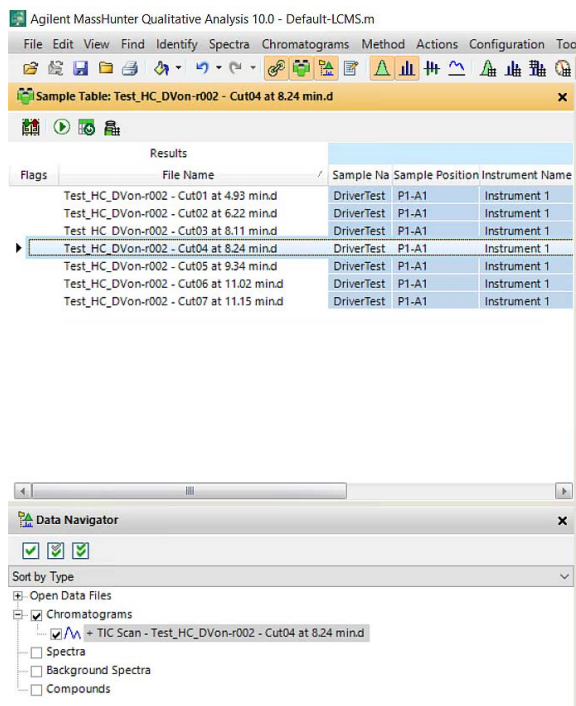


图 165 选择色谱图

²D TIC 色谱图显示在样品表中。

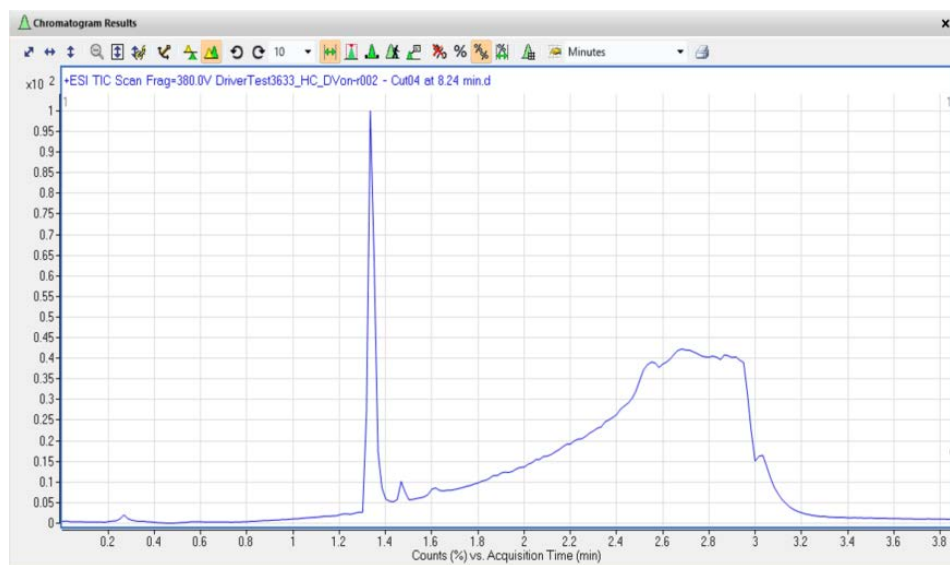


图 166 色谱图结果

2 以与 ¹D 数据相同的方式使用 ²D MS 数据，例如，ESI 提取。

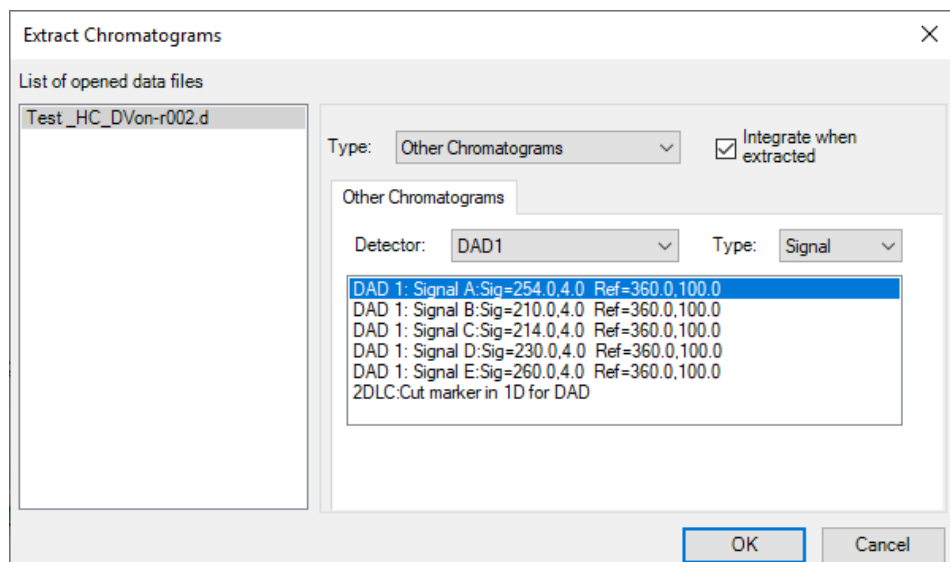


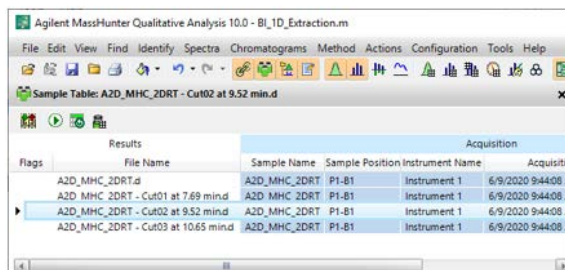
图 167 “提取色谱图”视图

注意

出于提取目的，只能突出显示样品表中的一个切片；突出显示多个运行会导致 Qual 出现错误。

工作流程比较 2D UV 和 MS 数据 - 可选方案 1

- 1 调用 2D-LC 实验。
- 2 标记采样表中的单个切片。



Flags	File Name	Sample Name	Sample Position	Instrument Name	Acquisition
	A2D_MHC_2DRT.d	A2D_MHC_2DRT	P1-B1	Instrument 1	6/9/2020 9:44:06 A
	A2D_MHC_2DRT - Cut01 at 7.69 min.d	A2D_MHC_2DRT	P1-B1	Instrument 1	6/9/2020 9:44:06 A
	A2D_MHC_2DRT - Cut02 at 9.52 min.d	A2D_MHC_2DRT	P1-B1	Instrument 1	6/9/2020 9:44:06 A
	A2D_MHC_2DRT - Cut03 at 10.65 min.d	A2D_MHC_2DRT	P1-B1	Instrument 1	6/9/2020 9:44:06 A

图 168 采样表

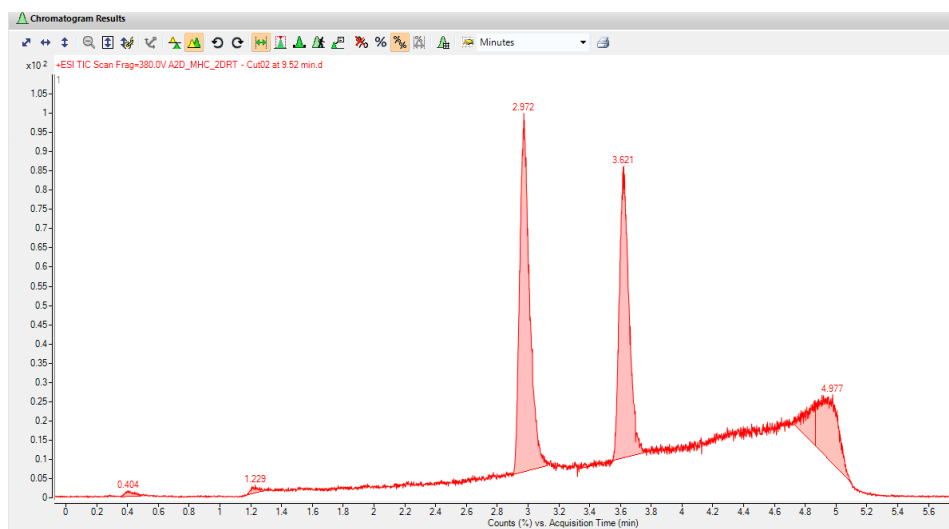


图 169 色谱图结果

- 3 右键单击**色谱图结果和提取 > 其他色谱图 > 2D DAD 信号**（名称中带有“切片”的信号）。

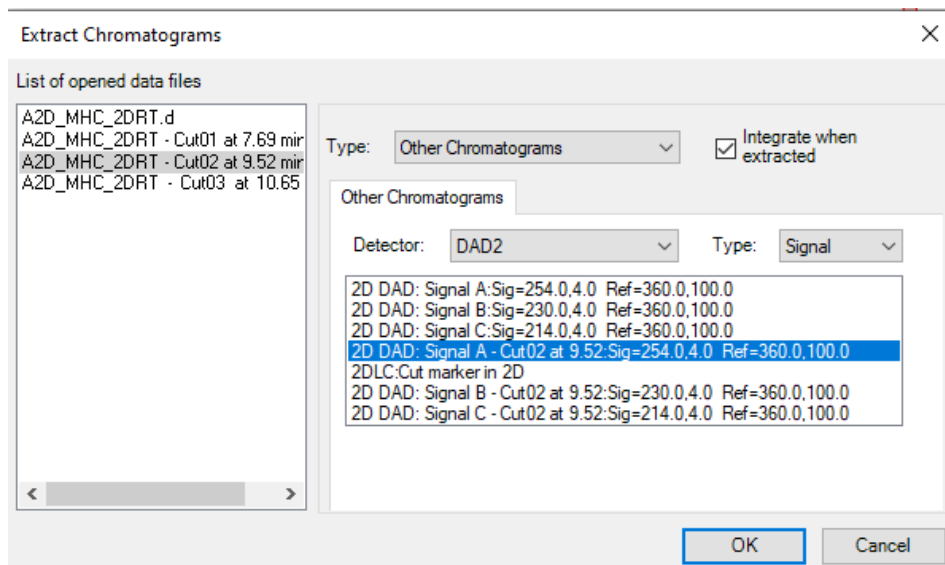


图 170 色谱图结果 Cut02 at 9.52

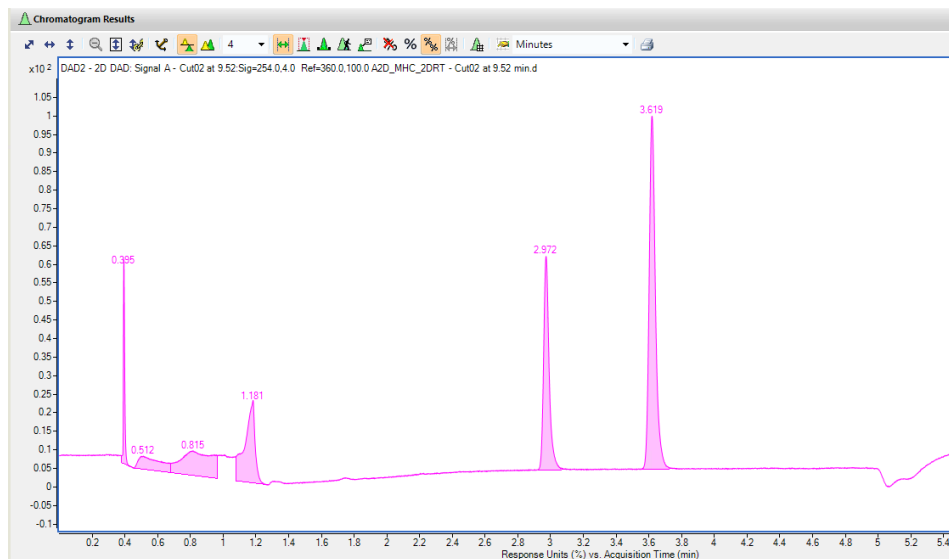


图 171 提取色谱图 2D DAD 信号 A Cut at 9.52

4 您可能希望使用 2D-LC 切片标记重复，这会标明何时已分析每个切片。

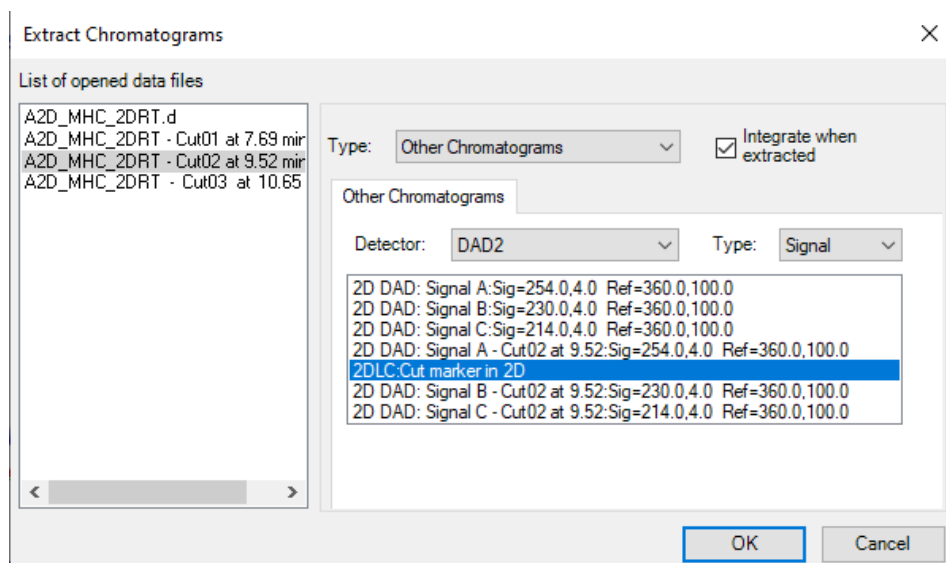


图 172 提取色谱图 2DLC:Cut marker in 2D

注意

这不能自动执行，因为 DAD 跟踪的名称中有切片编号；因此，切片 #3 不包含任何名称为切片 #2 的数据。

注意

¹D 中的切片标记显示获取切片的时间。只有在方法编辑器设置中保留每个切片的保留时间时，²D 中的切片标记才有意义。然后，您可以验证哪个切片属于哪个色谱图。

5 现在可以将 DAD 数据与 MS 跟踪进行比较。

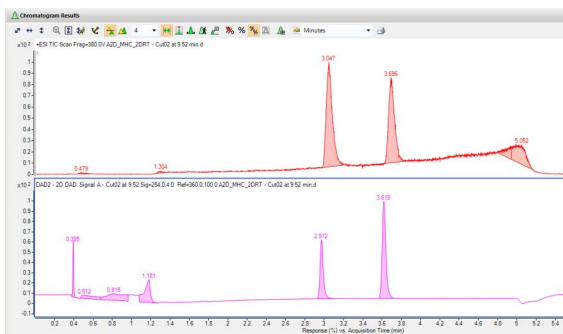


图 173 DAD 信号与 MS 信号

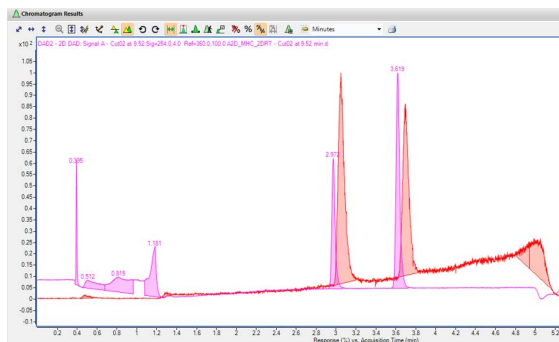


图 174 DAD 信号叠加 MS 信号

[可选] 6 如果希望偏移色谱图以对齐 UV 和 MS 跟踪，使用调整延迟时间。

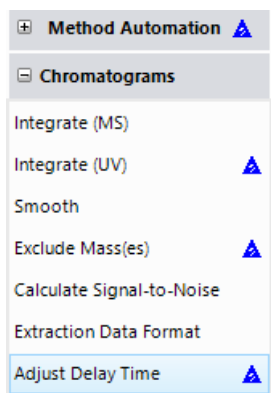


图 175 调整延迟时间

7 然后，将输入 MS1 和 DAD2 的保留时间。

Use Delay	Detector	Retention Time (min)	Time Delay (min)	Delete
<input checked="" type="checkbox"/>	MS1	3.047	0.000	X
<input type="checkbox"/>	DAD1	0.000	0.000	X
<input checked="" type="checkbox"/>	DAD2	2.972	0.000	X

Calculate delay from RT

图 176 Peak1 的保留时间值 (MS RT 3.047 min 和 DAD2 2.972 min)

8 按从 RT 计算延迟按钮，计算的延迟时间为 0.075 min。

Adjust Delay Time in Data

Use Delay	Detector	Retention Time (min)	Time Delay (min)	Delete
<input checked="" type="checkbox"/>	MS1	3.047	0.075	X
<input type="checkbox"/>	DAD1	0.000	0.000	X
<input checked="" type="checkbox"/>	DAD2	2.972	0.000	X

Calculate delay from RT

图 177 延迟时间计算

9 按播放按钮调整数据中的延迟时间以对齐色谱图。

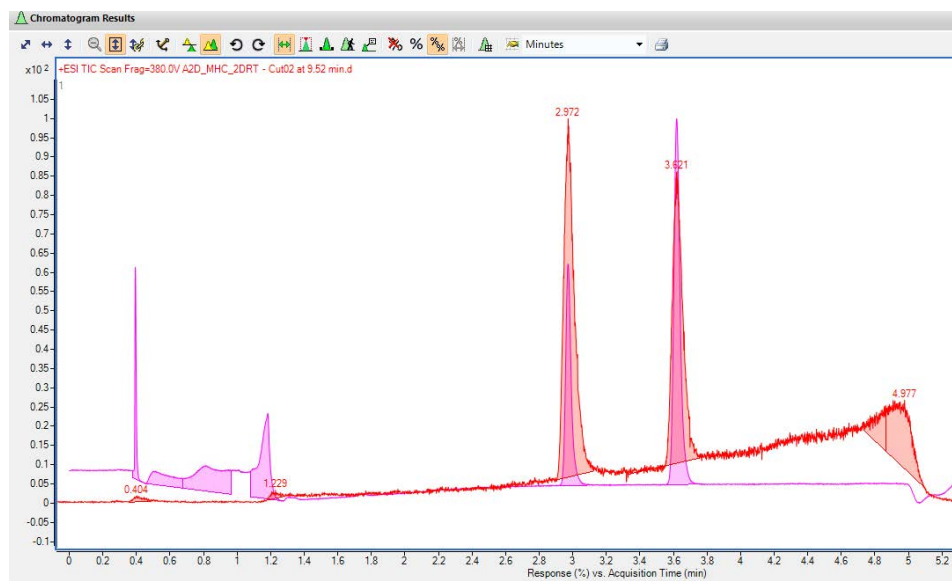


图 178 已对齐的两个色谱图的叠加

工作流程比较²D UV 和 MS – 可选方案 2

1 从 2D-LC 高分辨率实验调用八个高分辨率切片。

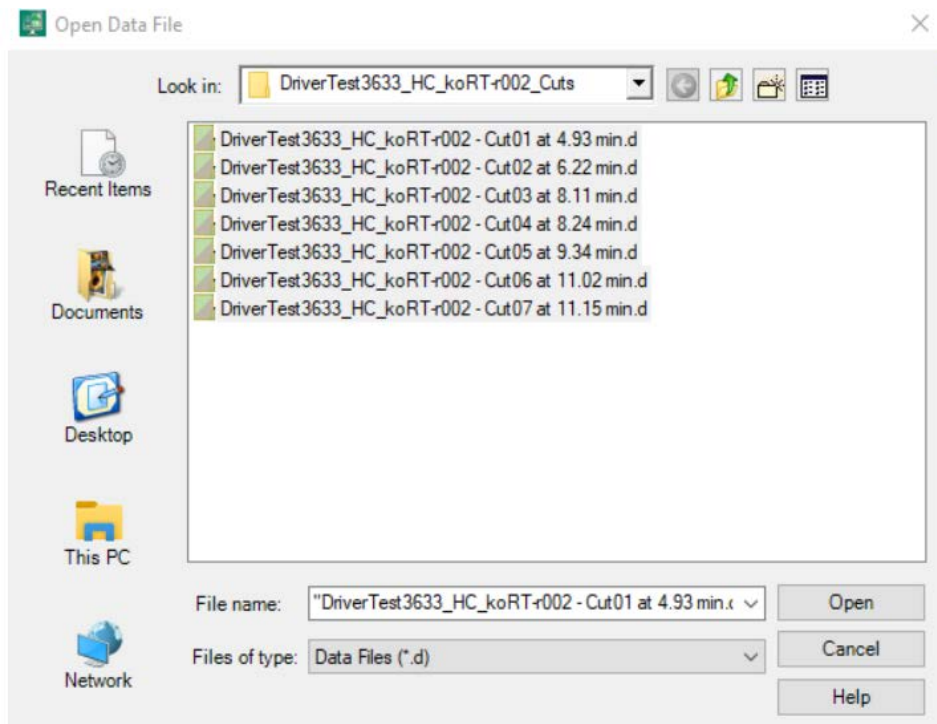


图 179 包含八个高分辨率切片的结果的文件

Results		Acquisition			
Flags	File Name	Sample Name	Sample Position	Instrument Name	Acqui
	DriverTest3633_quant2-r001.d	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04
	DriverTest3633_quant2-r001 - Cut01 at 9.18 min.d	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04
	DriverTest3633_quant2-r001 - Cut02 at 9.25 min.d	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04
	DriverTest3633_quant2-r001 - Cut03 at 9.31 min.d	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04
	DriverTest3633_quant2-r001 - Cut04 at 9.38 min.d	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04
	DriverTest3633_quant2-r001 - Cut05 at 9.45 min.d	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04
	DriverTest3633_quant2-r001 - Cut06 at 9.51 min.d	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04
	DriverTest3633_quant2-r001 - Cut07 at 9.58 min.d	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04
	DriverTest3633_quant2-r001 - Cut08 at 9.65 min.d	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04

图 180 高分辨率切片的样品表

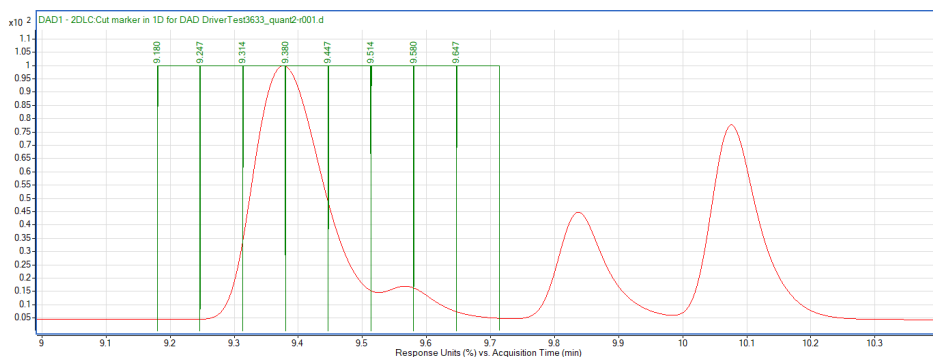


图 181 高分辨率实验

- 2 要跨所有切片提取同一 EIC，突出显示 EIC 并使用使用突出显示的色谱图 > 从数据文件提取功能。

Sample Table: DriverTest3633_quant2-r001 - Cut03 at 9.31 min.d

Flags	Results	Acquisition			
File Name	Sample Name	Sample Position	Instrument Name	Acqui	
DriverTest3633_quant2-r001.d	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04	
DriverTest3633_quant2-r001 - Cut01 at 9.18 mind	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04	
DriverTest3633_quant2-r001 - Cut02 at 9.25 mind	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04	
▶ DriverTest3633_quant2-r001 - Cut03 at 9.31 mind	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04	
DriverTest3633_quant2-r001 - Cut04 at 9.38 mind	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04	
DriverTest3633_quant2-r001 - Cut05 at 9.45 mind	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04	
DriverTest3633_quant2-r001 - Cut06 at 9.51 mind	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04	
DriverTest3633_quant2-r001 - Cut07 at 9.58 mind	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04	
DriverTest3633_quant2-r001 - Cut08 at 9.65 mind	DriverTest3633_quant2	P1-A1	Instrument 1	11/11/2020 2:04	

Data Navigator

Sort by Type

- Open Data Files
 - DriverTest3633_quant2-r001 - Cut03 at 9.31 mind
- Chromatograms
 - + TIC Scan - DriverTest3633_quant2-r001 - Cut03 at 9.31 mind
 - + EIC(213.08468) Scan - DriverTest3633_quant2-r001 - Cut03 at 9.31 mind
 - + EIC(242.14866) Scan - DriverTest3633_quant2-r001 - Cut03 at 9.31 mind
 - + EIC(259.01311) Scan - DriverTest3633_quant2-r001 - Cut03 at 9.31 mind
- Spectra
 - + Scan (rt: 1.530-1.576 min) - DriverTest3633_quant2-r001 - Cut03 at 9.31 mind
 - + Scan (rt: 1.603-1.669 min) - DriverTest3633_quant2-r001 - Cut03 at 9.31 mind
 - + Scan (rt: 1.769-1.832 min) - DriverTest3633_quant2-r001 - Cut03 at 9.31 mind
- Background Spectra
- Compounds

图 182 从单个切片提取的 EIC 色谱图

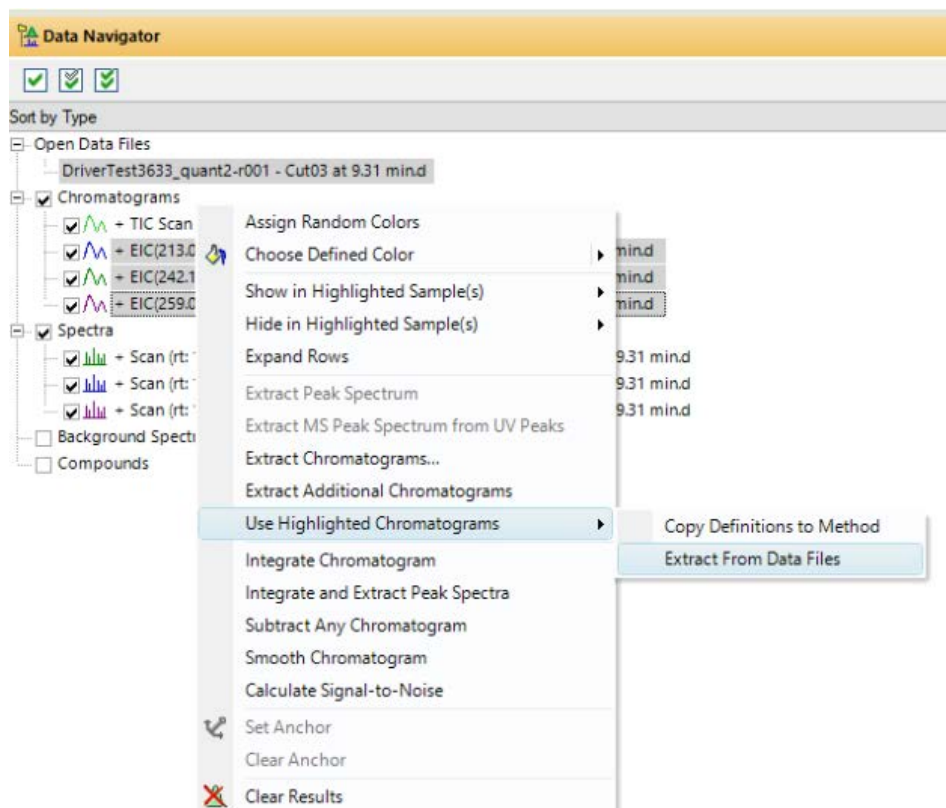


图 183 使用突出显示的色谱图 > 从数据文件提取功能

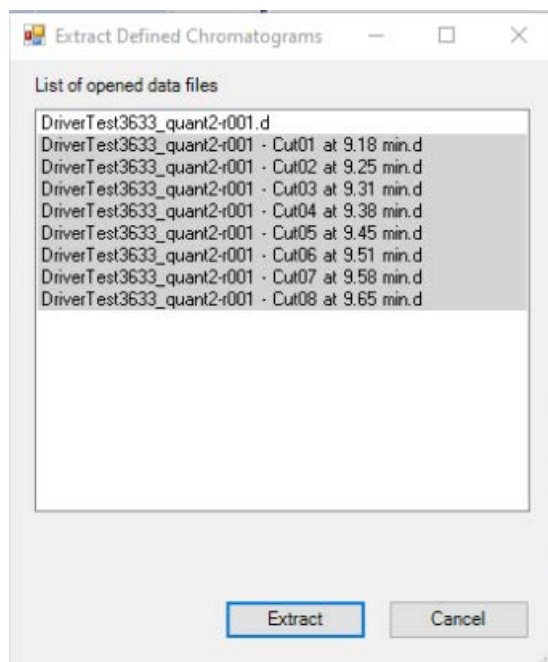


图 184 从所有高分辨率切片提取的 EIC 色谱图

注意

还可通过右键单击突出显示的 EIC 数据或通过**色谱图**菜单来访问使用突出显示的色谱图从数据文件提取功能。

- 3 标记采样表中的所有切片。与¹D 数据一样，在“操作”下，选择提取所有非 MS 色谱图。

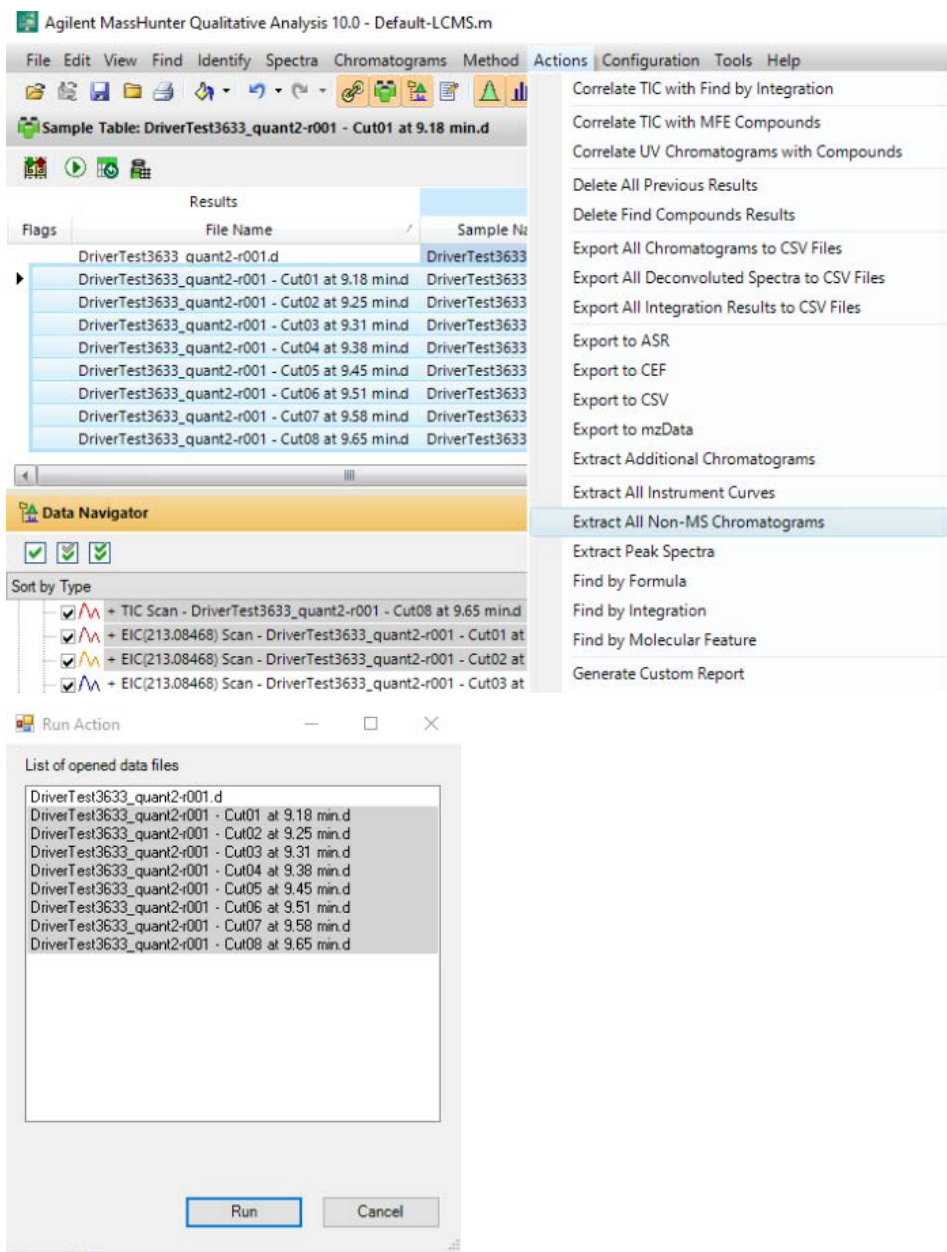


图 185 选定的切片

4 在数据导航器中，突出显示要比较的数据，并单击显示突出显示的信号。

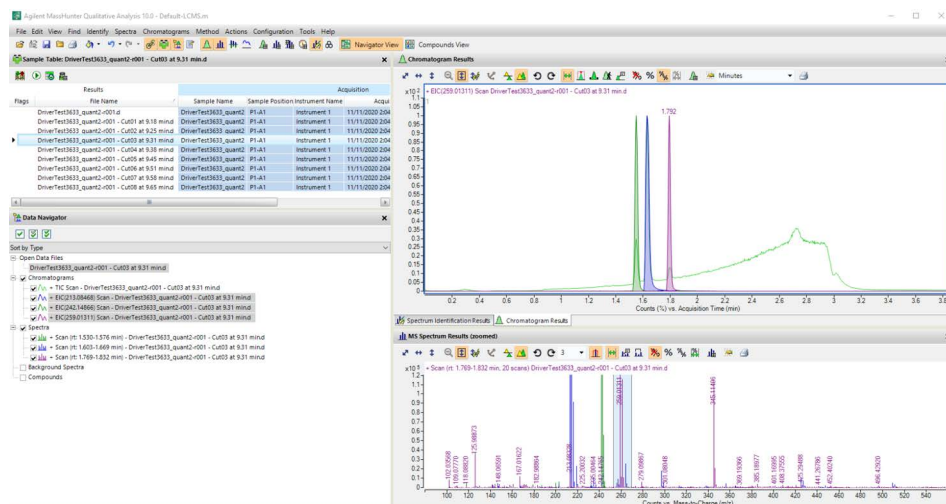


图 186 比较提取的 EIC 色谱图

2D 数据格式：保留原始 RT

如果选中**保留原始 RT** 复选框，则显示的数据相对于 1^D 时间尺度，即当分析它们时显示。这意味着，保留来自采集方法的 DA 的原始保留时间，请参见第 249 页的 MassHunter Acquisition 中的预设值。

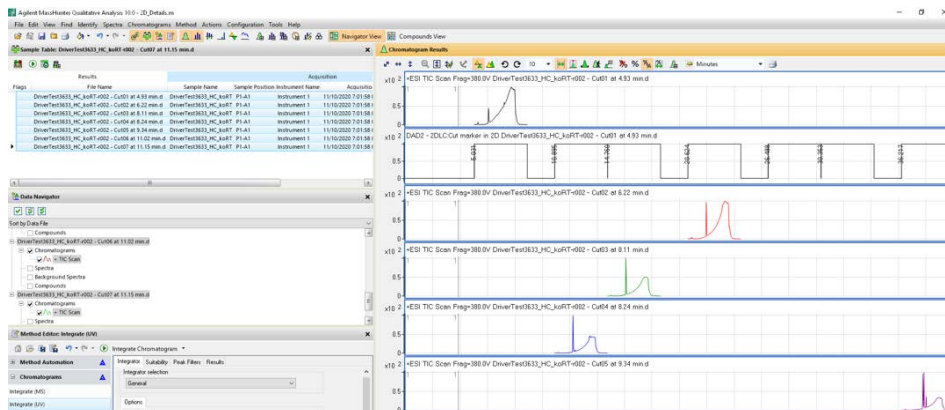


图 187 保留原始保留时间的色谱图结果示例

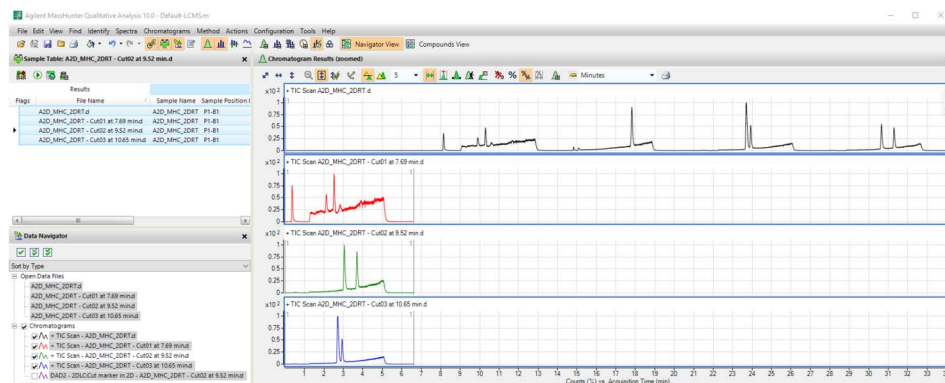


图 188 无原始保留时间的色谱图结果示例

MassHunter 定量分析软件

在 MH Quant 和 GC Image 软件中均可对高分辨率采样结果进行定量数据分析。本节将介绍 MH Quant 处理方法。

1 创建批处理文件。

选择父数据文件。定量目标可以是 ²D UV 信号或提取的离子色谱图 (EIC)，这可稍后在定量方法中定义。

2 定义定量方法中的定量因子。

在完整的高分辨率 ²D 信号中，同一化合物以 ²D 周期时间为保留时间间隔多次出现。因此，化合物的实际响应由所有切片上化合物的各个峰响应的总和来表示。为了使用总和峰响应方法，需要将相应切片的各个峰定义为一个独特的化合物。所有此类化合物都被归入同一 **Compound Group (化合物组)** 中。然后定义一个模拟总和化合物，并分配给同一 **Compound Group (化合物组)**。对于这种总和化合物，从 **Compound Math (化合物计算)** 列的下拉列表中选择 **Response Sum (响应总和)**。请查看第 273 页的图 189，这是使用 DAD2 信号为化合物 prometryn 设置定量因子的示例。

样品								
名称	数据文件	类型	级别	采集方法文件	采集日期时间			
100FD	100FD.d	Cal		EasyStart_HiRe...	11/11/2021 3:1...			
定量离子								
名称	化合物组	信号类型	信号类型	RT	化合物计算	扫描	类型	产物离子
prometryn-cut4	1	DAD 2: Signal A	DAD	9.98		MS1 Scan	目标化合物	0.0
prometryn-cut3	1	DAD 2: Signal A	DAD	12.13		MS1 Scan	目标化合物	0.0
prometryn-cut2	1	DAD 2: Signal A	DAD	14.38		MS1 Scan	目标化合物	0.0
prometryn-cut1	1	DAD 2: Signal A	DAD	16.58		MS1 Scan	目标化合物	0.0
prometryn-Sum	1	DAD 2: Signal A	DAD	14.38	响应总和	MS1 Scan	目标化合物	0.0

图 189 MH Quant 方法中的定量离子设置，基于 2D DAD 信号。在 ²D DAD 信号通道中，5 个切片中有 4 个切片出现了化合物 prometryn (在其各自的 RT 处)。prometryn-Sum 是总和化合物，其响应是各单个化合物的总和。

如果需要基于 MS 进行定量，请选择 MS 作为 **Signal Type (信号类型)**，并在 **Product Ion (产物离子)** 栏中定义目标离子的值，如第 273 页的图 190 所示。

定量离子								
名称	化合物组	化合物计算	信号类型	RT	类型	扫描	产物离子	
prometryn-MS-cut5	2		MS	7.83	目标化合物	MS1 扫描		242.1
prometryn-MS-cut4	2		MS	10.03	目标化合物	MS1 扫描		242.1
prometryn-MS-cut3	2		MS	12.23	目标化合物	MS1 扫描		242.1
prometryn-MS-cut2	2		MS	14.42	目标化合物	MS1 扫描		242.1
prometryn-MS-cut1	2		MS	16.62	目标化合物	MS1 扫描		242.1
prometryn-MS-Sum	2	响应总和	MS	14.38	目标化合物	MS1 扫描		242.1

图 190 MH Quant 方法中的定量离子设置，基于 ²D MS 信号。

3 在定量方法中设置其他参数。

与创建常用 MH Quant 方法类似，在创建此类方法时也需要注意其他方法参数，例如多级校正浓度、保留时间设置窗口、MS 提取窗口等。请参见第 274 页的图 191，其中提供了一些例子。

prometryn-Sum		1 0.0	
校正 A			
级别	浓度	响应	启用
1	0.0020		<input checked="" type="checkbox"/>
2	0.0050		<input checked="" type="checkbox"/>
3	0.0100		<input checked="" type="checkbox"/>
4	0.0200		<input checked="" type="checkbox"/>
5	0.1000		<input checked="" type="checkbox"/>

定量离子 B					
名称	类型	RT	左侧 RT 变化量	右侧 RT 变化量	RT 变化量单位
prometryn-cut4	目标化合物	9.98	2.000	2.000	百分比
prometryn-cut3	目标化合物	12.13	2.000	2.000	百分比
prometryn-cut2	目标化合物	14.38	2.000	2.000	百分比
prometryn-cut1	目标化合物	16.58	2.000	2.000	百分比
prometryn-Sum	目标化合物	14.38	2.000	2.000	百分比

定量离子 C					
名称	类型	提取左侧 m/z	产物离子	提取右侧 m/z	MZ 提取窗口单位
prometryn-cut4	目标化合物	100.00	242.1	200.00	PPM
prometryn-cut3	目标化合物	100.00	242.1	200.00	PPM
prometryn-cut2	目标化合物	100.00	242.1	200.00	PPM
prometryn-cut1	目标化合物	100.00	242.1	200.00	PPM
prometryn-Sum	目标化合物	100.00	242.1	200.00	PPM

图 191 其他定量方法参数设置。(A) 浓度级别 (B) RT 窗口 (C) MS 提取窗口

4 验证和分析

验证方法以确保没有错误或警告。保存方法并分析整个批次。

5 查看结果

在结果窗口中，总和的化合物将显示为多个积分峰。检查各个峰并根据需要调整积分。选择并调整合适的校正曲线拟合。

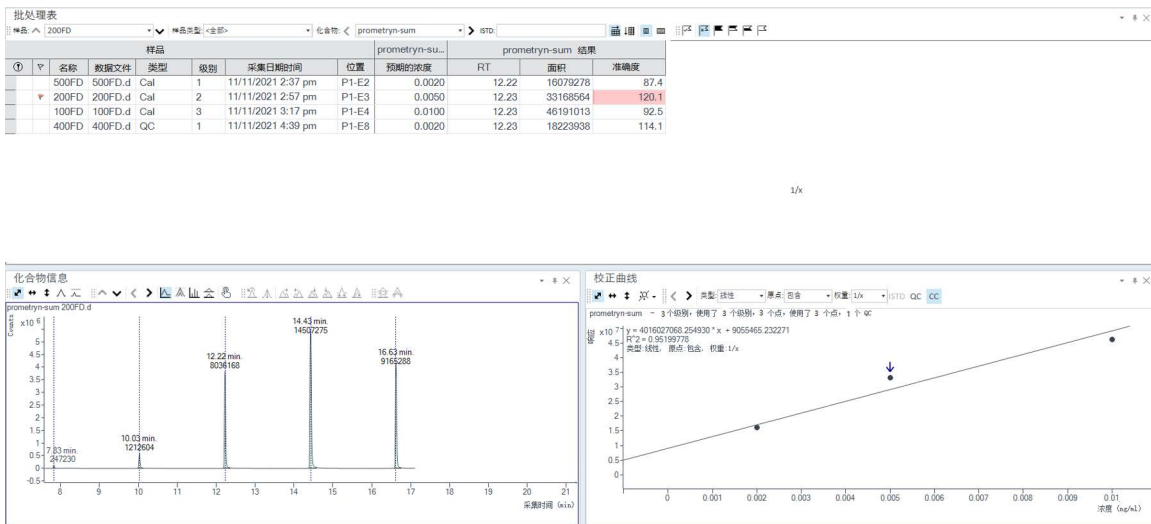


图 192 结果窗口包括 Batch Table (批处理表) (上)、Compound Information (化合物信息) (左下) 和 Calibration Curve (校正曲线) (右下)。

GC Image 基本信息

通常，采用全切割二维液相色谱法分析非常复杂的样品。从第一维共洗脱的化合物通常会在第二维进一步分离。使用 Agilent OpenLab 2D-LC 软件，始终会采集一个跨二维分析运行时间的大型数据文件。举例说明，26 种多酚标准化合物混合物的二维分析显示在一维数据分析显示屏中（第 276 页的图 193）。特别是可以使用 Agilent MassHunter 定性和定量分析软件对中心切割数据进行分析。

但为便于进行数据分析和更好地显示 MassHunter Workstation 采集的全切割 2D-LC 数据，建议使用专用软件。Agilent 建议使用美国内布拉斯加州 GC Image LLC 公司的 GC Image LCxLC Edition Software。可从 www.GCImage.com 下载试用版以及在线手册。Agilent 2D-LC 数据文件也包括 UV 光谱和质谱数据，可直接导入。该软件具有调制时间信息，能够提取数据并隔离每个第二维运行。数据将在保留时间的二维显示中重新建立。这可以显示为化合物峰的彩色二维图（第 277 页的图 194）。完成基线校正后，可通过 2D-LC 数据分析软件固有的峰检测算法自动检测峰（第 277 页的图 195）。由于第三维是峰的强度，因此可以绘制数据的三维图（第 278 页的图 196）。通过给定的数据集，可以进行进一步的定性和定量数据分析。

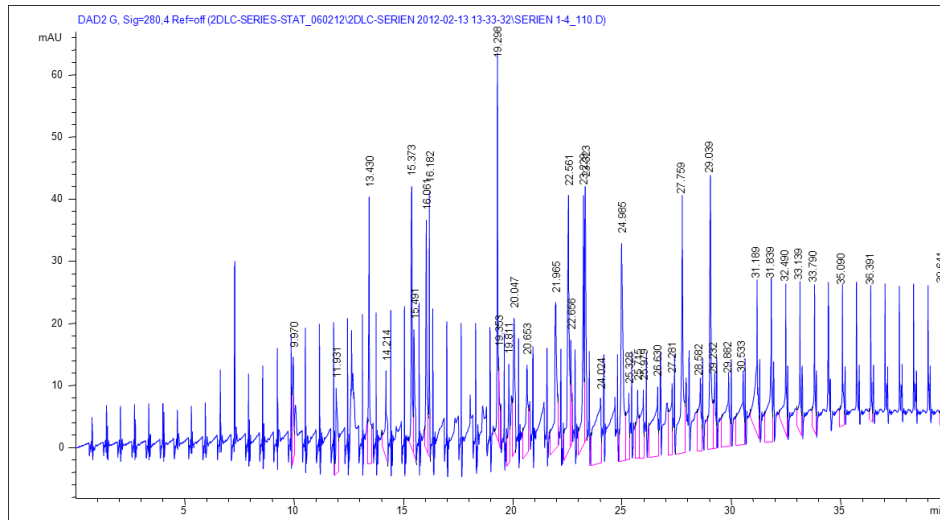


图 193 使用一维数据分析软件显示二维 LC 数据

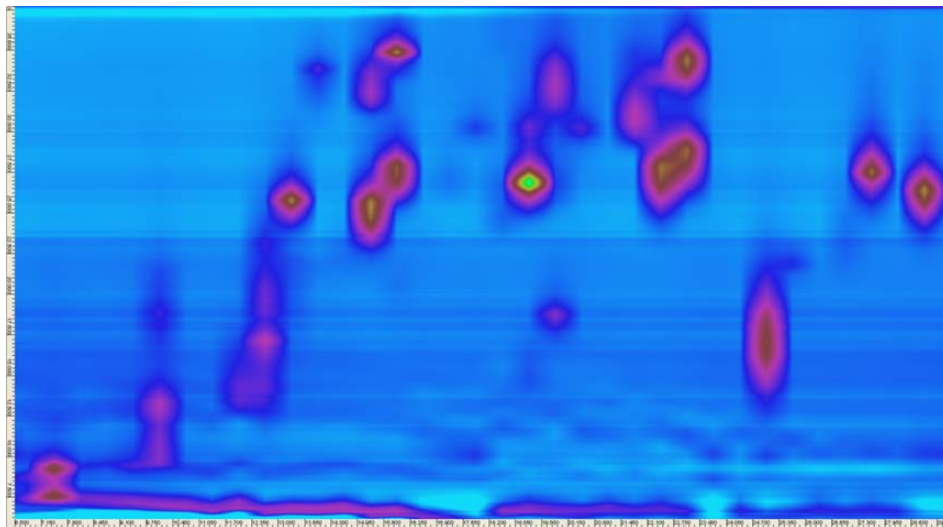


图 194 经优化的 26 种多酚化合物分离的 2D-LC 图

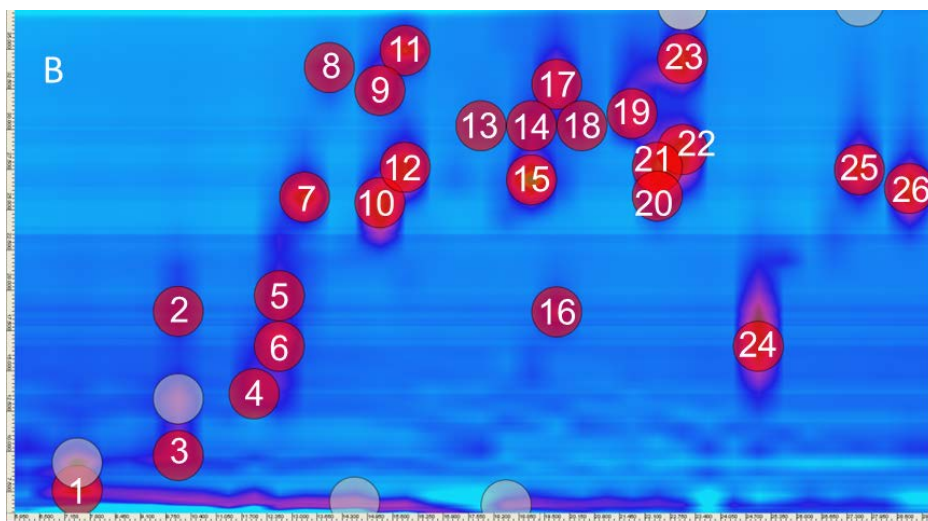


图 195 基线校正后并具有软件检测峰注释的 2DLC 图

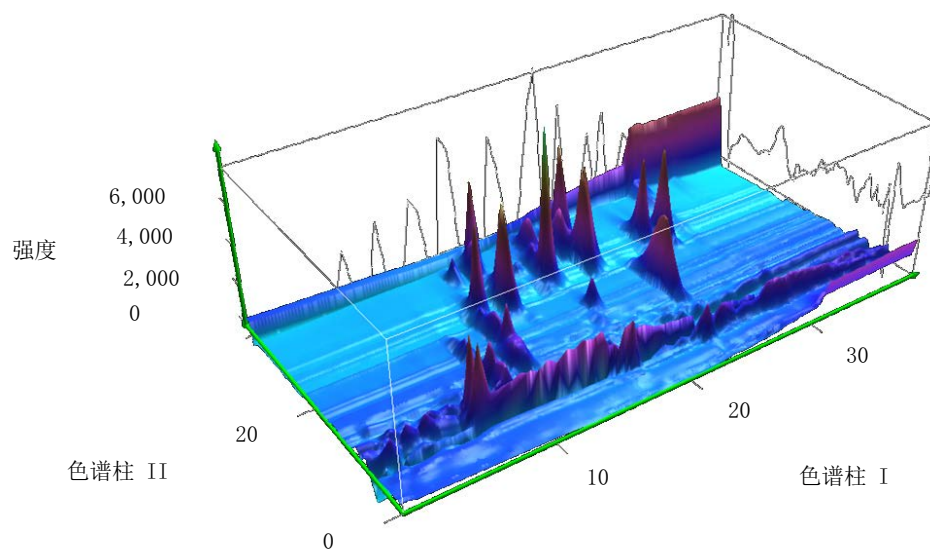


图 196 26 种化合物标准混合物分离的三维显示。第一维的分离需要 40 分钟，第二维的分离需要 39 秒。背面显示了生成的第一维色谱图，并给出了哪些峰正在共洗脱并在第二维分离。

概述

GC Image LC x LC Edition (简称 GC Image) 是一款用于全切割二维液相色谱图可视化和数据分析的软件:

- M8700AA GC Image LCxLC Edition, 用于 UV 和单四极杆测量
- M8710AA GC Image LCxLC-HRMS Edition, 用于 UV 和/或高分辨率 MS 测量 (Q-TOF)

安装

所需的部件:

说明

说明

含软件的 CD

许可证加密锁 (Wibu 密钥)

激活码

- 1 CD 包含两个可执行文件: LCxLC2.9-MPr3-64bit.exe (或更高版本), LCxLC2.9-MPr3-HRMS-64bit.exe (或更高版本)。选择适当的操作系统版本。相应版本可用于仅 UV 检测。
- 2 双击选定的可执行文件并按照屏幕上的说明进行操作。
- 3 使用 USB 密钥激活软件。插入 USB 加密锁并等待。驱动程序将自动安装。
- 4 在 Windows 开始菜单中激活 R2.9 (或更高版本)。
- 5 输入软件附带的激活码。

使用 GCImage 软件

GCImage 是一款功能强大的专业软件，具有许多复杂的功能，用于显示、数据分析、化合物识别、谱库检索、工作流程自动化、报告等。

成功使用本软件的基本知识如下：

- 导入 2D ChemStation 数据文件
- 设置调制周期
- 选择颜色图
- 在显示屏中导航
- 在显示屏中导航
- 检测峰 (Blobs)

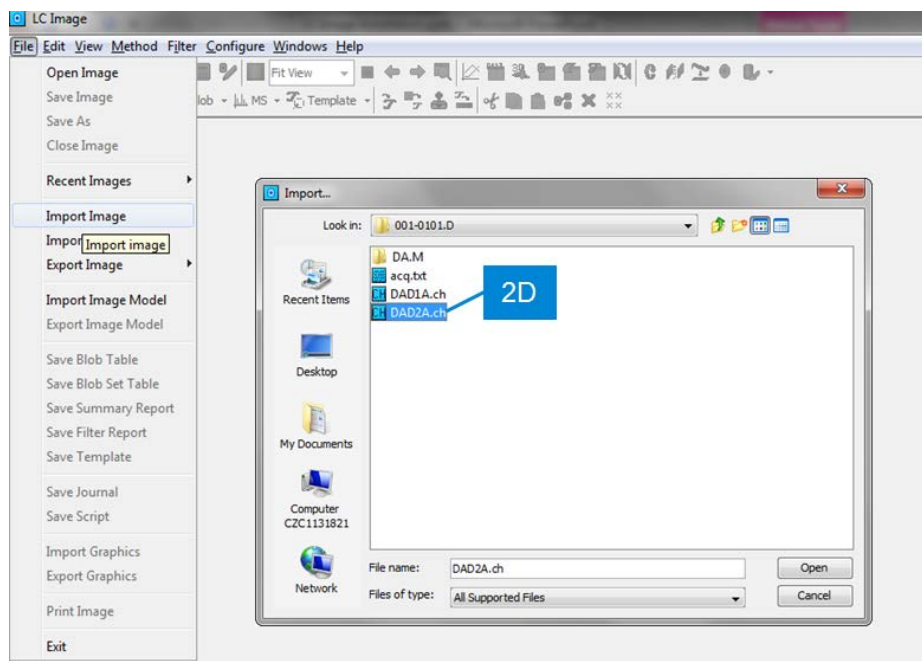
所需的准备： 使用 GCImage 软件时，需要始终插入 USB 加密锁。如果没有，系统会提示您插入。

基本知识

1 启动 GCImage

GCImage 选择性地提供了密码保护的用户管理系统。如果不需要，只需单击基于 Windows 用户帐户的“使用系统身份登录”。

2 从二维检测器导入 UV 信号。



Confidentiality Label
December 15, 2014
31

图 197 导入 UV 信号

注意

较新的 2D-LC OpenLab 或 MassHunter 文件类型与较旧的 GC Image 软件版本不兼容。因此，在某些情况下，有必要将文件类型更改为 AIA 格式 (.cdf)，以便您可以使用可用的软件打开它。

3 导入参数

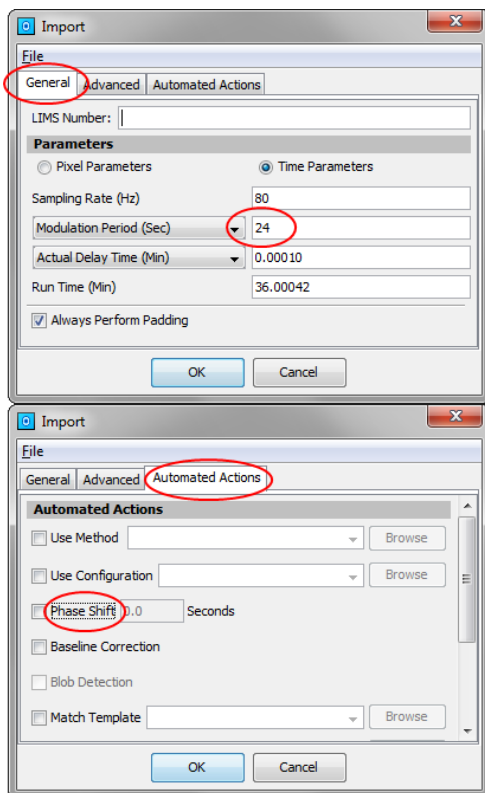


图 198 导入参数

4 适配视图

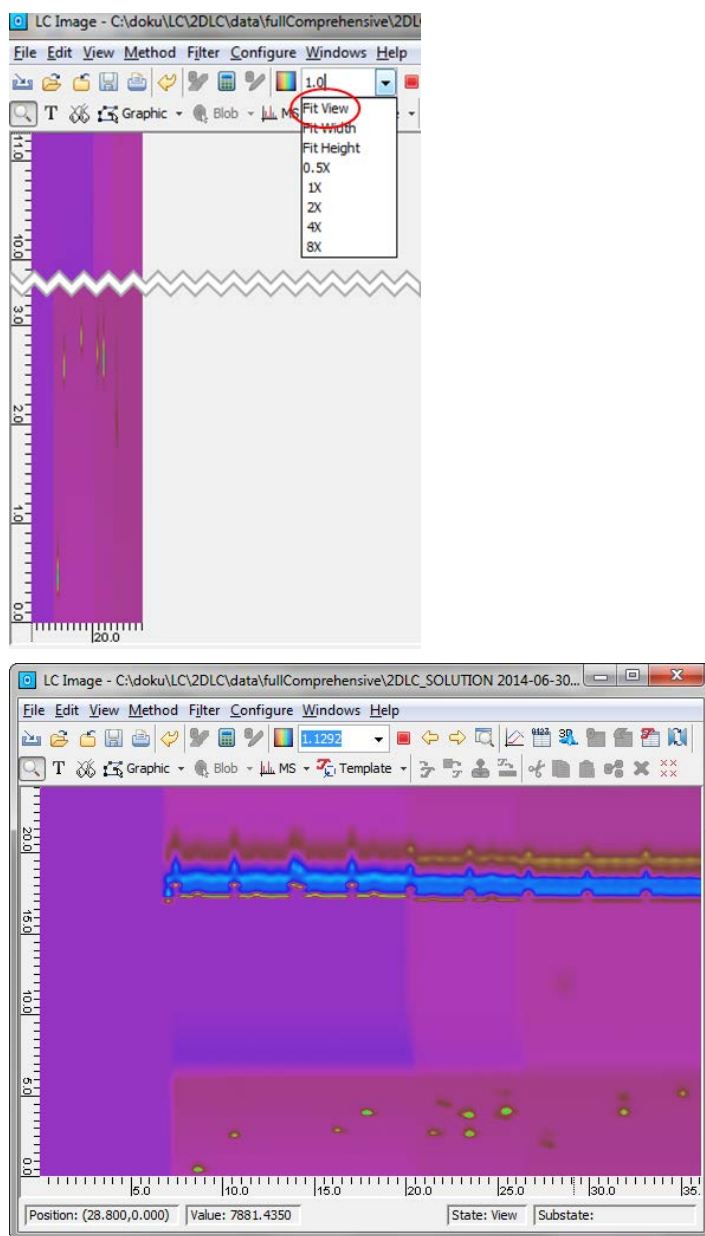


图 199 适配视图

5 校正基线

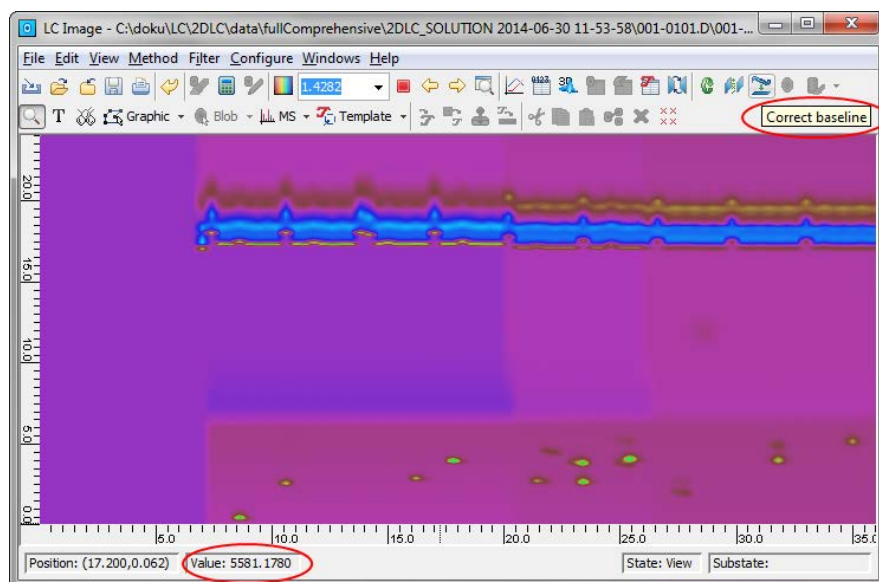


图 200 基线校正

6 偏移阶段

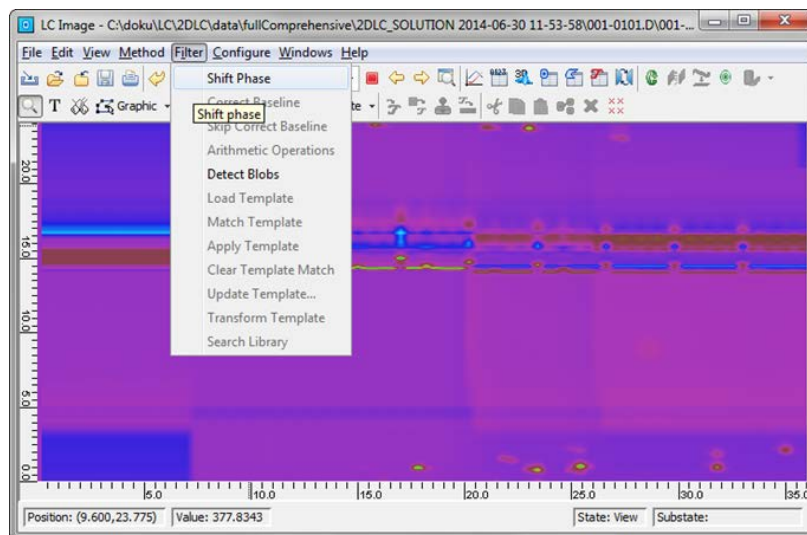


图 201 偏移阶段

- 7 使用鼠标右键并在显示屏上拖动，放大目标区域
- 8 调整颜色：LC Image 为优化色阶提供了完善的可能性。使用设置来提高对比度。

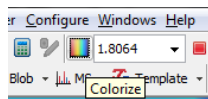


图 202 着色

- 9 选择数据范围。

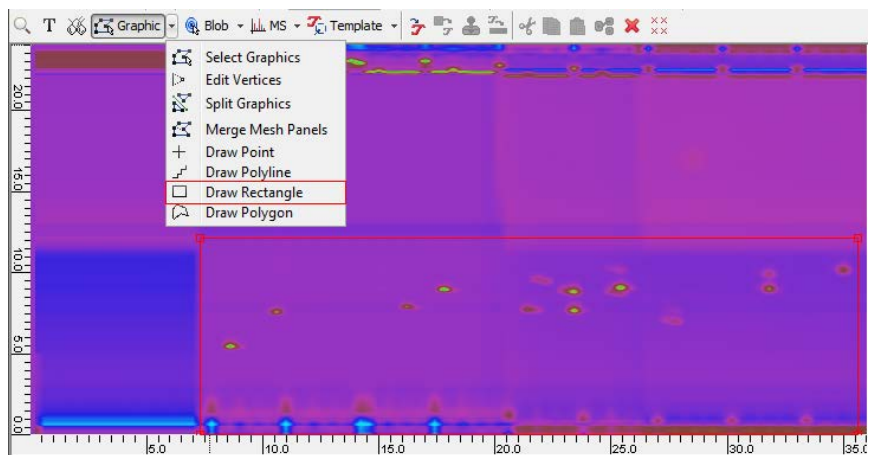


图 203 数据范围选择

- 10 通过单击“Show 3D perspective”按钮或相应的菜单项，您可以轻松创建可自定义的 3D 图。

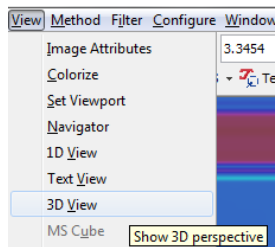


图 204 “3D 视图”选项

11 查看单个 2D 色谱图

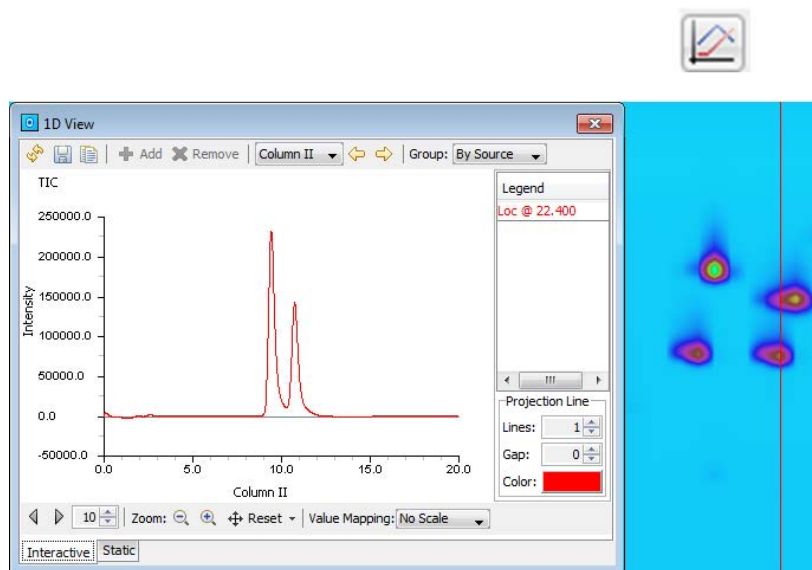


图 205 “色谱图”视图

12 选择 Blob

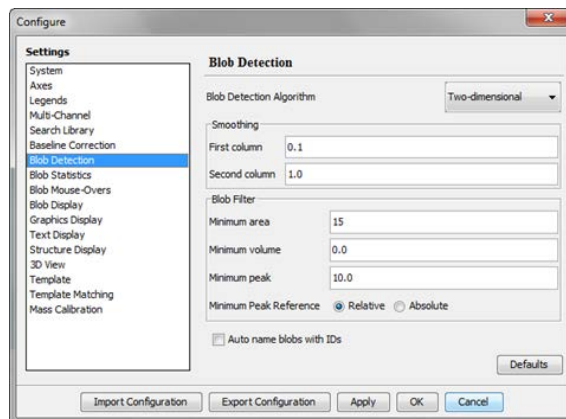


图 206 Blob 检测

MS 数据

- 1 导入 MS 数据：MS 数据的导入功能与 UV 分析非常相似。此外，您还可以筛选到感兴趣的特定质量范围（“范围限制”）。

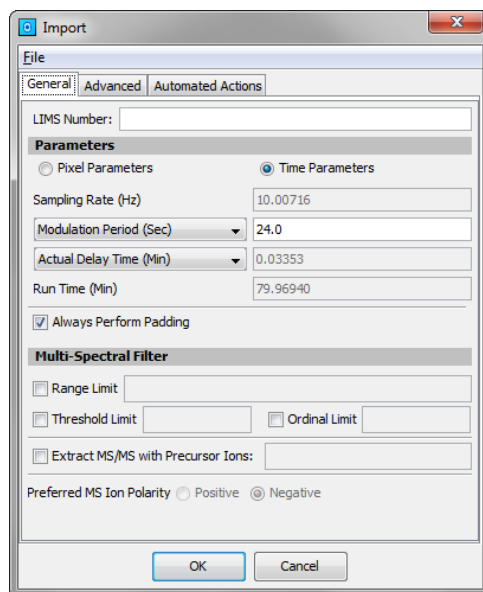


图 207 导入 MS 数据

- 2 通过单击“Show 1D view”，您可以显示该 2D 切片的 TIC。
- 3 单击 2D 视图中的数据点或 blobs，可以显示相应绘图的 MS 光谱。

研究在²D 中使用不同梯度的影响

将分离系统与第一维和第二维的相关分离机制（如 RPxRP）相结合时，不相关性受到限制。因此，只有一部分可用的二维分离空间将被占用。在这种情况下，可以使用第二维中的迁移梯度来扩大可访问的二维分离空间。

- 1 为了研究在第二维中使用不同梯度的效果，在整个运行过程中，使用 5 – 95 % B 重复的相同第二维梯度首先运行全切割 2D-LC 分离。

应在校验运行期间设置¹D 泵方法（请参见下图）：

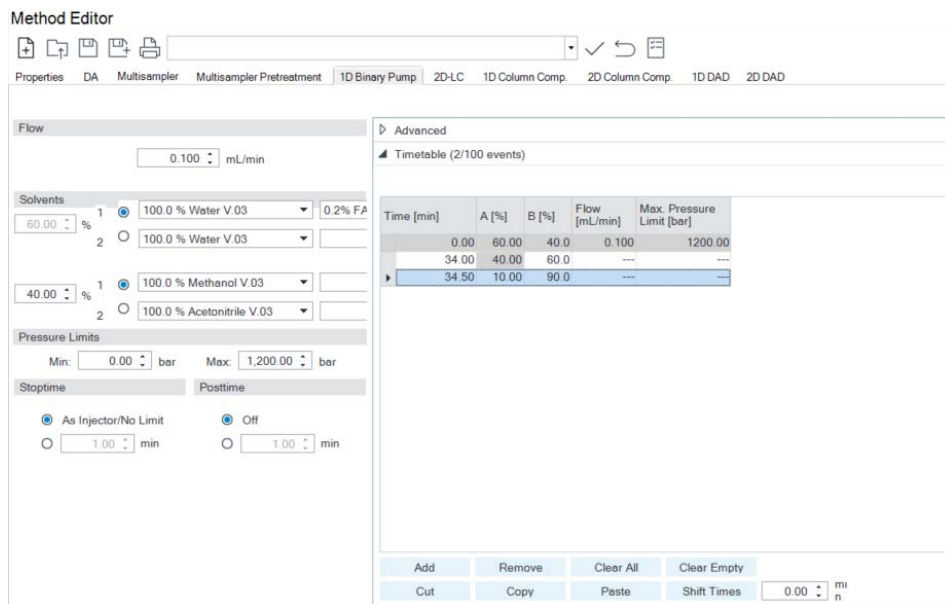


图 208 1D 二元泵方法

- 2 在 2D-LC 系统²D 泵中, 使用 5 – 95 % B 的重复梯度设置²D 泵和调制方法, 如下所示:

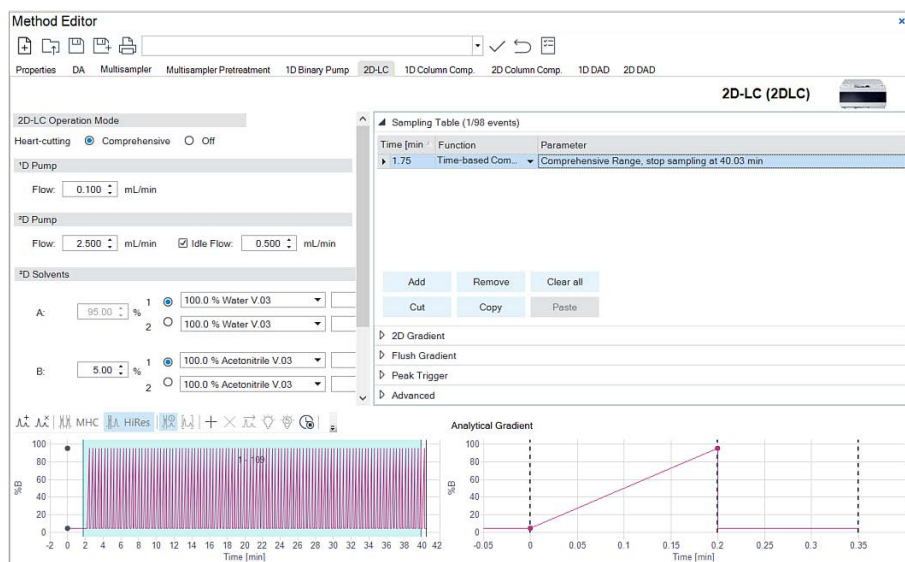


图 209 2D-LC 调制方法属性

3 运行全切割 2D-LC 分析。

由此得出的分离应看起如下所示：

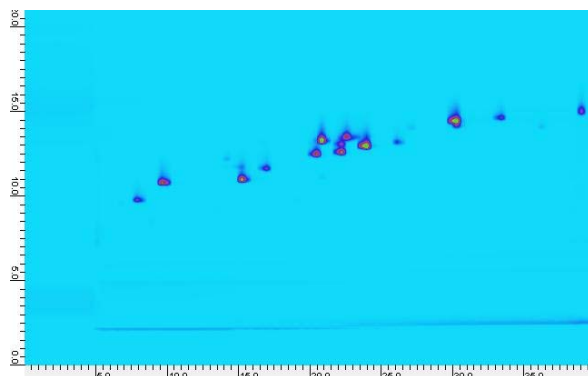


图 210 示例：全切割 2D-LC 分析后的分离

注意

注意峰如何围绕对角线分布，表明第一维和第二维中存在的相关分离机制。

- 4 为改进²D中的分离，可以使用更缓的²D梯度（例如，25 – 75 % B）。此²D方法的设置如下所示（这仅用于说明；您无需运行此方法！）：

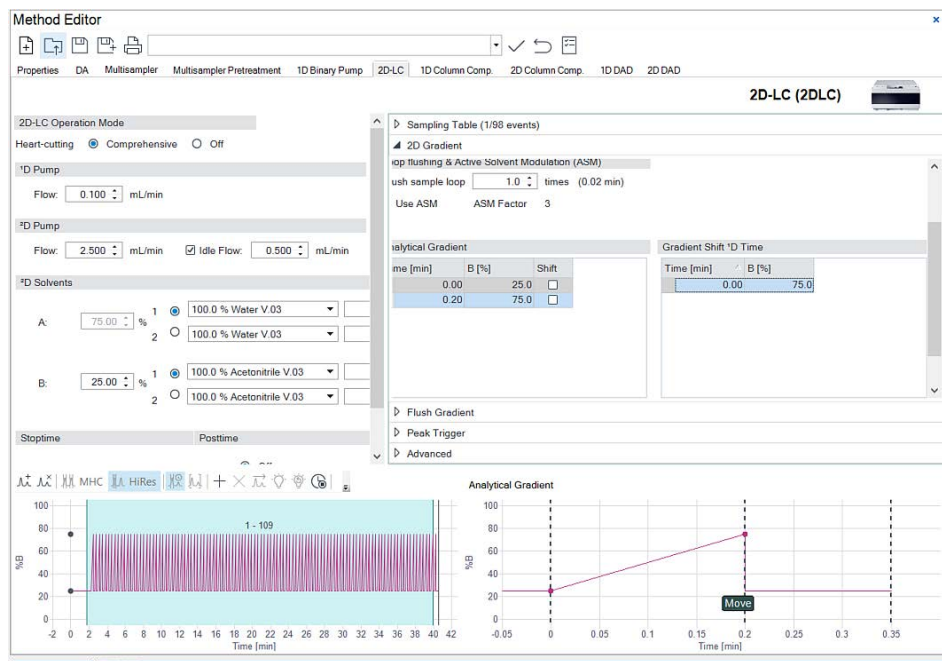


图 211 方法设置缓梯度以改善²D分离

在第二维中使用 25 – 75 % B 的重复梯度产生的分离如下所示：

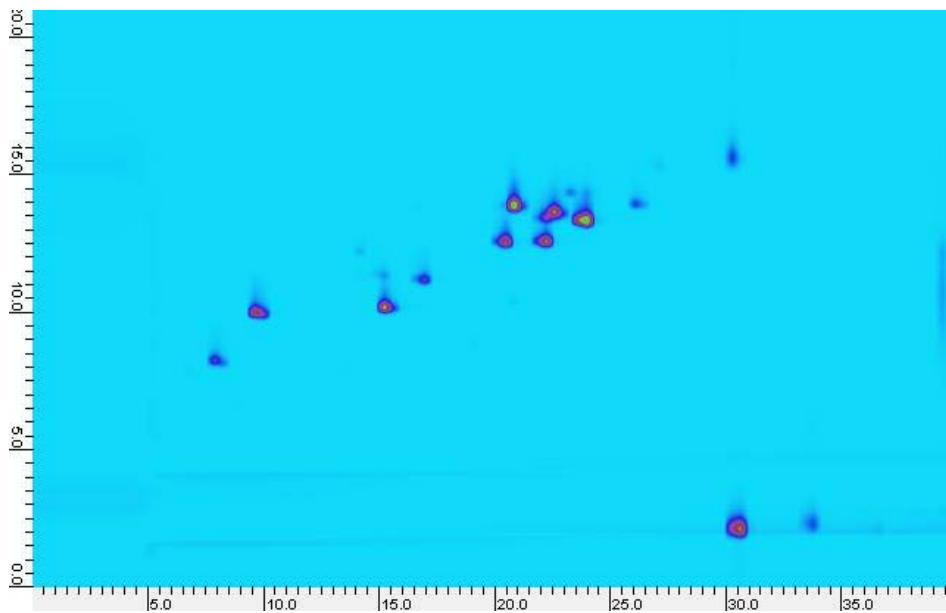


图 212 在第二维中重复梯度产生的分离

注意

注意与使用 5 – 95 % B 的重复梯度相比，峰在第二维上的间隔稍微更大。还请注意，从第一维色谱柱上洗脱的最后一个峰没有在一个调制周期内从第二维色谱柱上洗脱（wrap-around；请参见标记区域）。

为了能够在第二维中使用更缓的梯度来进一步改进分离，并避免 wrap-around 发生，可以在第二维中使用连续迁移梯度（如在校验运行期间所做的那样）。

- 5 将在整个运行期间重复的同一第二维梯度（5 – 95 % 和 25 – 75 % B）所产生的分离与在校验运行中使用连续迁移的第二维梯度获得的分离进行比较。

注意

注意当使用迁移梯度时，峰如何更广泛地分布在二维分离空间中（可访问的二维分离空间被放大）。另外，注意使用连续迁移的第二维梯度对同一第一维峰的连续馏分的第二维保留时间的影响。

- 6 除了第二维中使用连续迁移梯度（如在校验运行期间所做的那样）之外，还可以逐步迁移第二维梯度。为此，使阀和定量环配置以及 1D 泵方法保持相

同。在仪器 > 设置 2D-LC 中，使用逐步迁移梯度设置 2D 泵和调制方法，如下所示：

The screenshot displays the 'Method Editor' window for a 2D-LC method. The '2D-LC Operation Mode' is set to 'Comprehensive'. The '1D Pump' flow is 0.100 mL/min. The '2D Pump' flow is 2.500 mL/min, with an 'Idle Flow' of 0.500 mL/min. The '2D Solvents' are configured as follows:

- A:** 75.00% (1) 100.0% Water V.03, 2) 100.0% Water V.03
- B:** 25.00% (1) 100.0% Acetonitrile V.03, 2) 100.0% Acetonitrile V.03

The 'Stop/Posttime' is set to 40.53 min. The 'Analytical Gradient' table is shown below:

Time [min]	B [%]	Shift
0.00	25.0	<input checked="" type="checkbox"/>
0.20	75.0	<input type="checkbox"/>

The 'Gradient Shift 1D Time' table is also visible:

Time [min]	B [%]
0.00	25.0
19.00	25.0
19.10	40.0
28.00	40.0
28.10	50.0

At the bottom, two plots are shown: a chromatogram on the left and an 'Analytical Gradient' plot on the right. The chromatogram shows a series of peaks between 18 and 30 minutes, with a label '1 - 109'. The 'Analytical Gradient' plot shows a step-wise increase in solvent composition B [%] from 25% to 75% at 0.20 minutes.

图 213 逐步迁移梯度的方法

7 使用第二维中的逐步迁移梯度运行全切割 2D-LC 分析。

由此得出的分离应看起如下所示：

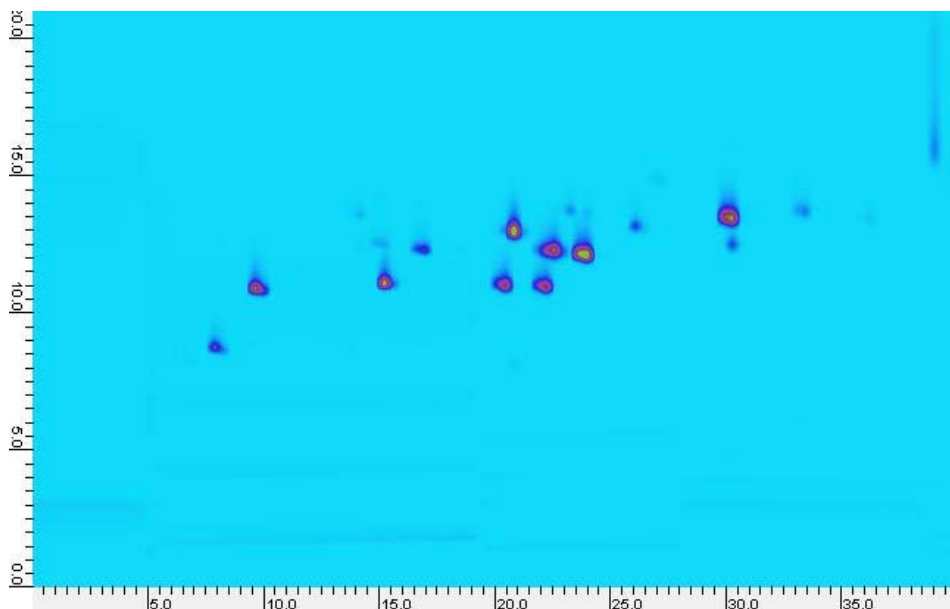


图 214 在第二维中逐步迁移梯度产生的分离

注意

注意同一第一维峰的连续馏分如何拥有与第二维完全相同的保留时间，因为它们经历的第二维梯度完全相同（与在第二维中使用连续迁移梯度相反，这会导致第一维峰的连续馏分经历稍微不同的第二维梯度）。但要小心谨慎！只有在没有峰从第一维色谱柱洗脱时执行第二维梯度的逐步迁移，才会出现这种情况。

如果产生的分离与上面显示的分离不同：由于使用了另一个第一维泵，您的峰可能会显示不同的第一维保留时间（在上面显示的分离中，在第一维中使用了二元泵）。检查在分离过程中，当峰从第一维色谱柱洗脱时，是否执行了第二维梯度的逐步迁移，并了解这对相同第一维峰的连续馏分的第二维保留时间的影响！

模块指示器和测试功能概述	295
用户界面	296
Agilent Lab Advisor 软件	297
Lab Advisor 软件中集成的 2D-LC 功能	298
Lab Advisor 仪器控制	299
2D-LC 硬件许可证处理	299
2D-LC 毛细管配置工具	302
2D-LC 组合的仪器控制	303
Lab Advisor 服务和诊断	305
解除 2D-LC 组合	305
² D 泵的泵头泄漏测试	306
² D 泵的泵泄漏率测试	307
² D 泵的系统压力测试	308
2D-LC 毛细管泄漏测试	309
更换模块固件	310
故障排除的基本原理	312
压力太高	315
压力太低	316
峰面积和峰高相关	317
保留时间相关	318
信号线性缺失	319
信号漂移	320
信号噪声	321
完成故障排除的建议测试	322

本章概述故障排除和诊断功能以及不同的用户界面。

模块指示器和测试功能概述

有关模块指示器和测试功能的概述，请参阅系统中安装的模块手册。

用户界面

- 根据用户界面的不同，可用测试和屏幕/报告可能会有所不同。
- 故障排除和诊断的首选工具应为 Agilent Lab Advisor 软件，请参阅第 297 页的 [Agilent Lab Advisor 软件](#)。
- 当前 Agilent OpenLab ChemStation、Agilent OpenLab CDS 和 Agilent MassHunter 软件不包括任何维护/测试功能。
- 这些程序中使用的屏幕截图基于 Agilent Lab Advisor 软件。

Agilent Lab Advisor 软件

Agilent Lab Advisor 软件（基本许可证，随 Agilent LC 泵一起提供）是独立产品，可以带也可以不带色谱数据系统使用。Agilent Lab Advisor 可提供所有已连接的分析仪器和仪器状态的详细系统概述、早期维护反馈计数器 (EMF)、仪器配置信息和诊断测试，从而有助于实验室管理高质量的色谱结果。通过按下按钮，就可以生成详细的诊断报告。用户可根据要求将此报告发送给 Agilent 以完成显著改进的故障排除和修复过程。

Agilent Lab Advisor 软件有两种版本：

- Lab Advisor 基础版
- Lab Advisor 高级版

Lab Advisor 基础版包括每个 Agilent 1200 Infinity 系列和 Agilent InfinityLab LC 系列仪器。

Lab Advisor 高级版功能可通过购买许可证密钥进行解锁，它包括仪器实际状态的实时监测、所有各种仪器信号以及状态机。此外，可将所有诊断测试结果、校正结果和采集的信号数据上传至共享网络文件夹。Lab Advisor 高级版中包含的查看客户端允许调用和检查上传的数据，不论这些数据是在何种仪器上生成的。这对于需要跟踪其分析系统的仪器历史记录的内部支持团队和用户而言，数据共享是个理想的工具。

可选的 Agilent 维护向导附加元件提供了易用的分步式多媒体指南，可用于在 Agilent 1200 Infinity LC 系列仪器上执行预防性维护。

Agilent Lab Advisor 软件提供的测试与诊断功能可能与本手册中的描述有所不同。有关详细信息，请参阅 Agilent Lab Advisor 软件的帮助文件。

Lab Advisor 软件中集成的 2D-LC 功能

本节列出可用于从 2D-LC 系统获取更多详细信息的特殊功能。有关诊断缓冲区、模块信息、清洗泵等更多详细信息，请查看每个模块的手册或 Lab Advisor 在线帮助。

注意

某些功能仅在安装了基于驱动程序的 2D-LC 解决方案的硬件加密锁许可证并处于活动状态时可用。

Lab Advisor 仪器控制

2D-LC 硬件许可证处理

- 适用于:** 在 2D-LC 仪器的 ²D 泵中安装/卸载 USB 硬件加密锁，以执行以下操作：
- 验证许可证状态
 - 验证 USB 加密锁的安装是否正确
 - 取消激活当前模块上的许可证，例如将许可证转移到其他泵模块
- 所需的部件:** **说明**
USB 加密锁
- 所需的软件:** Agilent Lab Advisor 软件 (2.17 或更高版本)
- 所需的准备:** **阅读以下内容:**
- 随 Agilent Lab Advisor 在线帮助提供的文档
 - 2D-LC 手册
- 要遵守的程序:**
- 关闭当前采集客户端窗口
 - 从 CDS 的控制面板关闭仪器连接

注意

²D 泵必须是 1290 Infinity I、II 或 1290 Infinity II 生物兼容性二元泵。

安装 2D-LC 硬件许可证

- 1 安装 USB 加密锁和许可证，有关详细信息，请参阅第 118 页的许可 2D-LC 仪器。
- 2 要使用 2D-LC 解决方案，请注意以下情况：
 - 2D-LC 许可证处于活动状态：

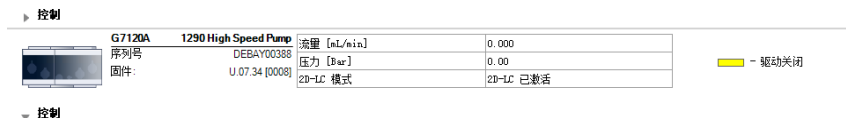


图 215 2D-LC 模式处于活动状态

- 已安装硬件加密锁
- ²D 泵配置为 2D-LC 组合
- 2D-LC 解决方案（如果可以使用）
- 2D-LC 许可证处于禁用状态：

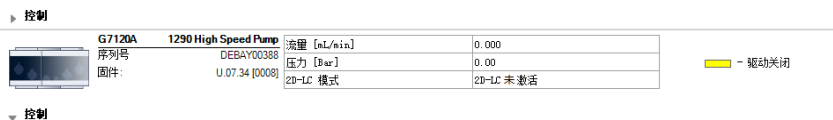


图 216 2D-LC 模式处于禁用状态

- 已安装硬件加密锁
- ²D 泵可识别加密锁
- 色谱数据系统 (CDS) 中未配置 ²D 泵。

要使用 2D-LC 解决方案，首先配置 2D-LC 组合，请参阅第 128 页的[配置 2D-LC 组合](#)。

移除 2D-LC 许可证并将其传输回 USB 加密锁

- 1 将 USB 加密锁插入 2D 泵 USB 插口。
- 2 在 Lab Advisor 软件中，选择**仪器控制 > 2D 泵 > 控制部分 > 特殊命令**。
- 3 单击**移除 2D-LC 许可证**按钮。



图 217 2D-LC 许可证加密锁状态信息 2D-LC 许可证已使用

该操作将产生以下后果：

- 2D-LC 许可证被传输回 USB 加密锁
- 系统上不再提供 2D-LC 解决方案

2D-LC 毛细管配置工具

默认情况下，Agilent Lab Advisor 的**配置工具**仅存储标准毛细管。要向 2D-LC 仪器添加 2D-LC 专用毛细管（例如，样品定量环、传输毛细管或 ASM 毛细管），必须配置这些毛细管。

适用于： 2D-LC 专用毛细管的安装

所需的部件： **说明**
2D-LC 设置所需的所有毛细管

所需的软件： Agilent Lab Advisor 软件（2.17 或更高版本）

所需的准备： **阅读以下内容：**

- 随 Agilent Lab Advisor 在线帮助提供的文档
- 2D-LC 手册

注意所有毛细管均已安装且其技术指标可用。

1 在 Agilent Lab Advisor 中，选择**仪器控制 > 2D 泵 > 控制 > 配置**。

编辑通用毛细管功能可用。

2 在字段中输入**通用样品定量环**、**通用传输毛细管**和**通用 ASM 毛细管**的特定参数**长度 [mm]** 和**直径 [mm]**。

The screenshot shows a configuration window titled '配置' (Configuration) with a sub-section '编辑通用毛细管' (Edit Generic Capillary). It contains a table with three columns: 'Length [mm]', 'Diameter [mm]', and 'Volume [uL]'. There are three rows, each with a checked checkbox and a text label: 'Generic Sample Loop: 0.00x0 (0 uL)', 'Generic Transfer Capillary: 0.00x0 (0 uL)', and 'Generic ASM Capillary: 0.00x0 (0 uL)'. Each row has three input fields, all containing the value '0'. Below the table is an 'ASM 因子:' (ASM Factor) field and a 'Send' button.

	Length [mm]	Diameter [mm]	Volume [uL]
<input checked="" type="checkbox"/> Generic Sample Loop: 0.00x0 (0 uL)	0	0	0
<input checked="" type="checkbox"/> Generic Transfer Capillary: 0.00x0 (0 uL)	0	0	0
<input checked="" type="checkbox"/> Generic ASM Capillary: 0.00x0 (0 uL)	0	0	0

ASM 因子: Send

图 218 2D-LC 通用毛细管配置

自动计算指定毛细管的体积 [μL]。

3 单击“发送”。

配置工具将参数发送到 2D-LC 系统。

毛细管现在显示在色谱数据系统的**修改毛细管**选择列表中。

2D-LC 组合的仪器控制

适用于： 控制 2 D 泵和 2D-LC 阀的行为。

所需的软件： Agilent Lab Advisor 软件（2.17 或更高版本）

所需的准备： 阅读以下内容：

- 随 Agilent Lab Advisor 在线帮助提供的文档
- 2D-LC 手册

要遵守的程序：

- 关闭当前采集客户端窗口
- 从 CDS 的控制面板关闭仪器连接

注意

要使用 2 D 泵的仪器控制，2D-LC 硬件许可证必须处于活动状态。

- 1 选择 2 D 泵（2D-LC 组合）的**仪器控制**。
- 2 根据要求更改 2 D 泵的设置。
- 3 要识别阀，从**阀**下拉列表选择阀。

可进行以下仪器设置：

- 一个 2D-LC 阀
- 三个阀：
 - 一个 2D-LC 阀
 - 两个 MHC 阀

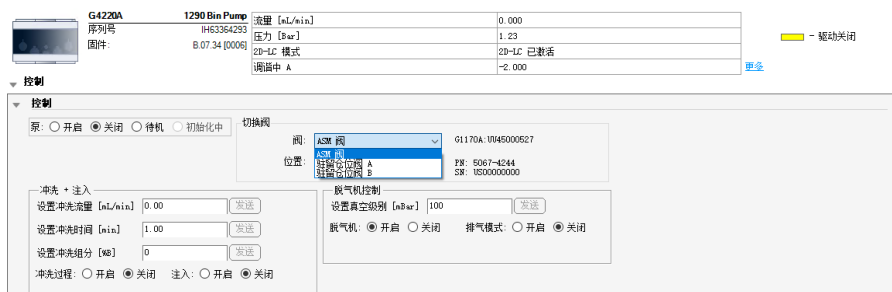


图 219 示例：带一个 2D-LC ASM 阀和两个 MHC 阀的 2D-LC 仪器

4 要切换阀的位置，从下拉列表选择所需位置。

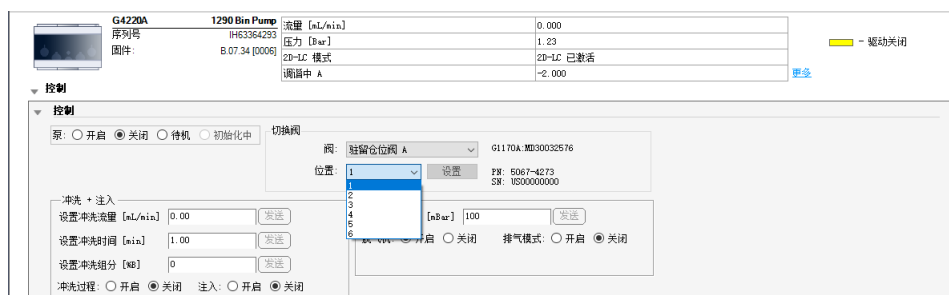


图 220 示例：带一个选定 MHC 阀的 2D-LC 仪器（驻留仓位 A）

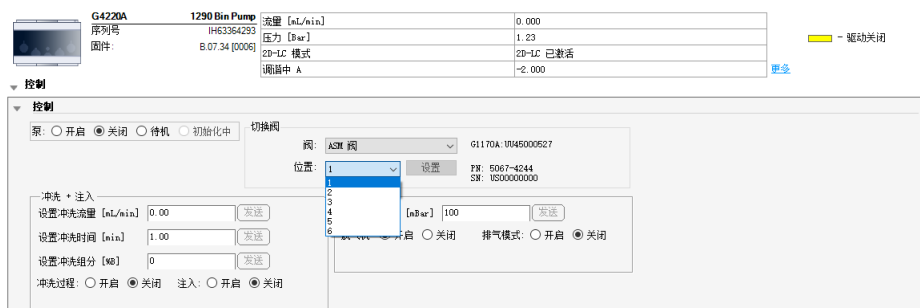


图 221 示例：带一个选定 ASM 阀的 2D-LC 仪器

Lab Advisor 服务和诊断

解除 2D-LC 组合

此工具允许删除 LC 设备的组合配置数据，例如 ²D 泵和 2D-LC 阀之间的链接。

适用于： 更换组合组件之一。

所需的软件： Agilent Lab Advisor 软件（2.17 或更高版本）

所需的准备： 阅读以下内容：

- 随 Agilent Lab Advisor 在线帮助提供的文档
- 2D-LC 手册

要遵守的程序：

- 关闭当前采集客户端窗口
- 从 CDS 的控制面板关闭仪器连接

- 1 从菜单中选择**服务和诊断**。
- 2 选择 ²D 泵。
- 3 选择**解除固件组合**。
- 4 要**清除组合配置数据**，按**运行**按钮。

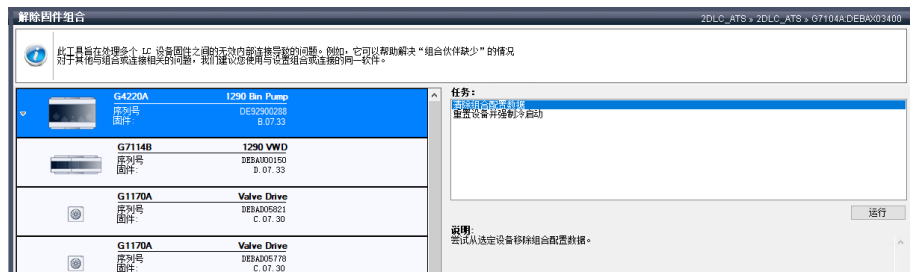


图 222 2D-LC 1290 二元泵的解除固件组合

注意

要重新建立两个模块之间的链接，请重新执行**自动配置**并进行组合选择。

2D 泵的泵头泄漏测试

测试确定单个泵头的泄漏。

此 2D-LC 测试仪适合基于驱动程序的 2D-LC 解决方案。

适用于： 诊断 2D 泵。

所需的软件： Agilent Lab Advisor 软件（2.17 或更高版本）

所需的准备： 阅读以下内容：

- 随 Agilent Lab Advisor 在线帮助提供的文档
- 2D-LC 手册

要遵守的程序：

- 关闭当前采集客户端窗口
- 从 CDS 的控制面板关闭仪器连接

1 从菜单中选择**服务和诊断**。

2 选择 2D 泵。

3 选择**泵头泄漏测试**。



图 223 2D-LC 1290 二元泵的泵头泄漏测试

4 按**运行**按钮并按照软件中的说明进行操作。

2D 泵的泵泄漏率测试

本测试确定用于组件级诊断的主泵体和副泵体中的泄漏率。

此 2D-LC 测试仅适合基于驱动程序的 2D-LC 解决方案。

适用于： 诊断 ²D 泵。

所需的软件： Agilent Lab Advisor 软件（2.17 或更高版本）

所需的准备： 阅读以下内容：

- 随 Agilent Lab Advisor 在线帮助提供的文档
- 2D-LC 手册

要遵守的程序：

- 关闭当前采集客户端窗口
- 从 CDS 的控制面板关闭仪器连接

1 从菜单中选择**服务和诊断**。

2 选择 ²D 泵。

3 选择**泵泄漏率测试**。

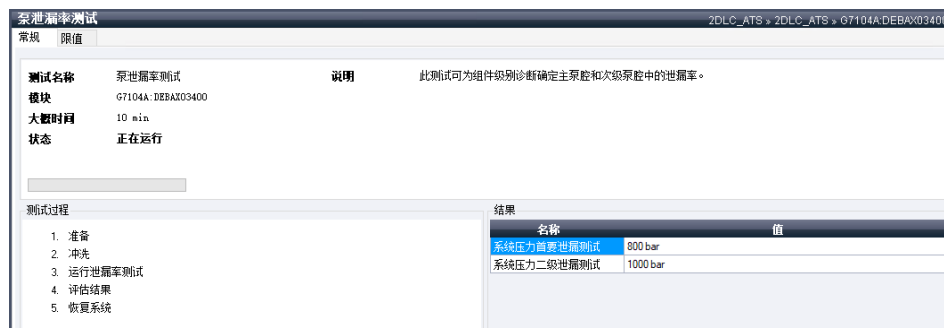


图 224 2D-LC 1290 二元泵的泵泄漏率测试

4 按**运行按钮**并按照软件中的说明进行操作。

2D 泵的系统压力测试

本测试确定泵和堵头之间的密封性。

此 2D-LC 测试仪适合基于驱动程序的 2D-LC 解决方案。

适用于： 系统流路泄漏。

所需的工具： **说明**
扳手，1/4 - 1/5 英寸

所需的部件： **说明**
堵头

所需的软件： Agilent Lab Advisor 软件（2.17 或更高版本）

所需的准备： **阅读以下内容：**

- 随 Agilent Lab Advisor 在线帮助提供的文档
- 2D-LC 手册

要遵守的程序：

- 关闭当前采集客户端窗口
- 从 CDS 的控制面板关闭仪器连接

1 从菜单中选择**服务和诊断**。

2 选择²D 泵。

3 选择**系统压力测试**。

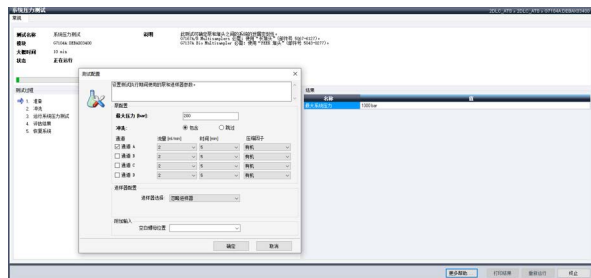


图 225 2D-LC 1290 二元泵的系统压力测试

4 按**运行**按钮并按照软件中的说明进行操作。

2D-LC 毛细管泄漏测试

2D-LC 泵与第二维流路的 ²D 泵之间的泄漏和密封性检查。

此 2D-LC 测试仅适合基于驱动程序的 2D-LC 解决方案。

- 适用于:** 2D-LC 阀泄漏。
- 所需的工具:** **说明**
扳手, 1/4 - 1/5 英寸
- 所需的部件:** **说明**
堵头
- 所需的软件:** Agilent LabAdvisor 软件 (2.18 或更高版本)
- 所需的准备:** **阅读以下内容:**
- 随 Agilent Lab Advisor 在线帮助提供的文档
 - 2D-LC 手册
- 要遵守的程序:**
- 关闭当前采集客户端窗口
 - 从 CDS 的控制面板关闭仪器连接
- 1 从菜单中选择**服务和诊断**。
 - 2 选择²D 泵。
 - 3 选择**2D-LC 毛细管泄漏测试**。
 - 4 按**运行按钮**并按照软件中的说明进行操作。

更换模块固件

适用于：**可能需要安装较新的固件**

- 如果新版本解决了旧版本的问题，或
- 使所有系统保持在相同（经过验证的）版本上。

可能需要安装旧固件

- 使所有系统保持在相同（经过验证的）版本上或
- 如果将具有更新固件的新模块添加到系统或
- 如果第三方控制软件需要特殊版本。

所需的工具：**说明**

Agilent Lab Advisor 软件

所需的部件：**# 说明**

- | # | 说明 |
|---|------------------------|
| 1 | 来自 Agilent 网站的固件、工具和文档 |

所需的准备：**阅读以下内容：**

- 随 Agilent Lab Advisor 在线帮助提供的文档
- 2D-LC 手册

要遵守的程序：

- 关闭当前采集客户端窗口
- 从 CDS 的控制面板关闭仪器连接

注意

不要将不同固件集中的固件文件混用。

要升级/降级模块固件，请执行以下步骤：

- 1 从 Agilent 网站下载所需的模块固件、最新的 Lab Advisor 软件和文档。
<http://www.agilent.com/en-us/firmwareDownload?whid=69761>
- 2 用于将固件调用到模块中
 - a 选择硬盘上存储固件包的文件夹。

- b 将 Lab Advisor 软件连接到 2D-LC 仪器。



图 226 固件更新

- c 按**锁定**按钮。
系统已锁定。
- d 为驻留固件和主固件选择所需的固件版本。
- e 要更新仪器的固件，按**更新**按钮。
这需要一些时间。

注意

在此过程中，请勿断开设备和 PC 的电源。

注意

为避免出现问题，仅选择所连接模块的固件文件，并避免额外安装 LC Companion。

故障排除的基本原理

故障排除关键概念 - 各个击破

以下故障排除概念举例说明了如何处理 2D-LC 色谱中的问题。

以下大多数说明也可用于排除和检测标准 LC 问题。

故障排除的基本原理应始终是，逐步解决 2D-LC 问题。第一步，确认错误原因是否在于：

- 应用方法，还是
- 2D-LC 仪器

有关排除问题原因的建议方法，请参见下图。所有示例均使用下表中所述的符号。

表 38 故障排除决策树中所用符号的说明

符号	说明
	显示并描述 2D-LC 系统中的问题。指示导致问题解决方案的一系列操作和决策的起点。
	说明用户必须识别观察的含义。然后，用户必须做出要采取的进一步故障排除方法的决定。
	如图所示，用户必须采取行动继续，并做出下一个决定或得出解决方法。

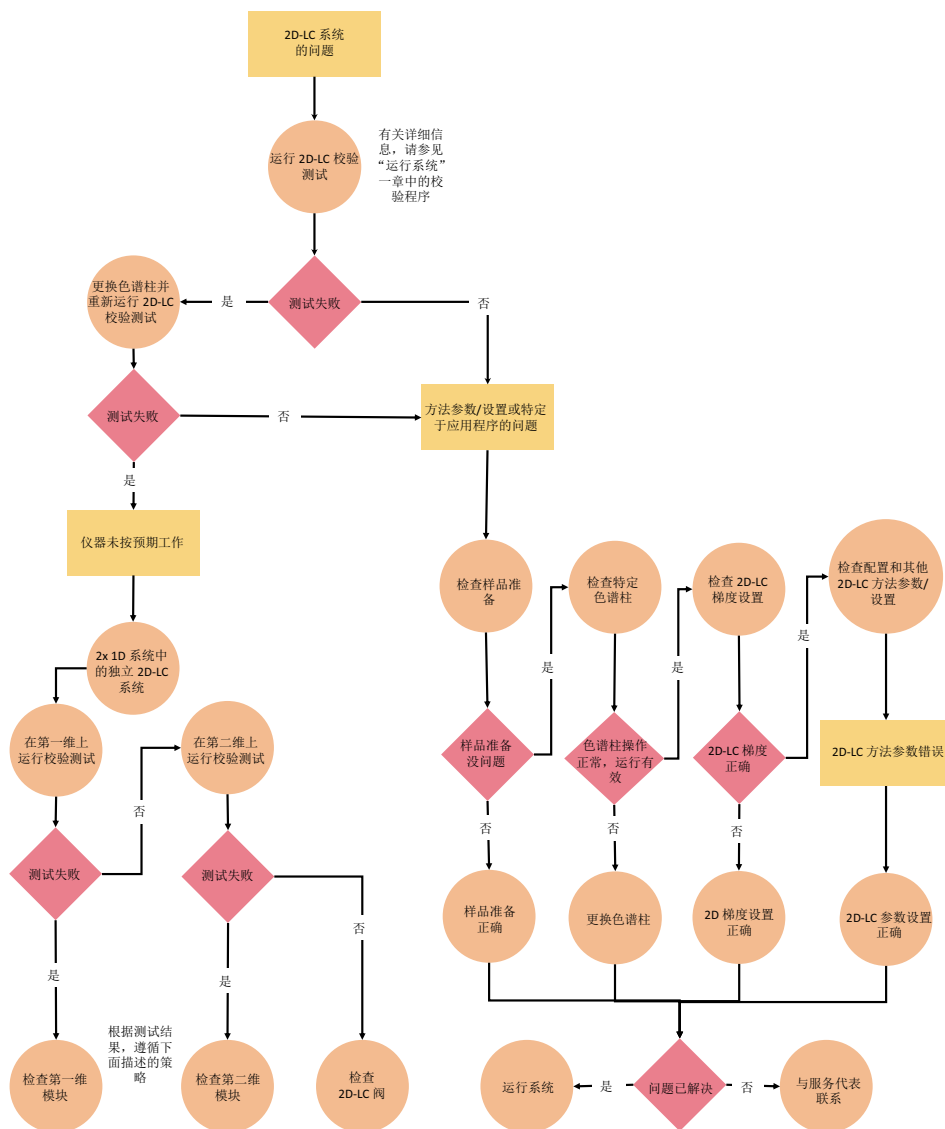


图 227 示例：确定应用方法或仪器是导致 2D-LC 色谱法问题的根本原因的策略

排除应用方法不是问题原因后，可以开始在 2D-LC 仪器硬件中查找问题的根本原因。

下面列出了常见的 HPLC 硬件问题，以及每个问题各自的故障排除程序的位置：

- 第 315 页的压力太高
- 第 316 页的压力太低
- 第 317 页的峰面积和峰高相关
- 第 318 页的保留时间相关
- 第 319 页的信号线性缺失
- 第 320 页的信号漂移
- 第 321 页的信号噪声

压力太高

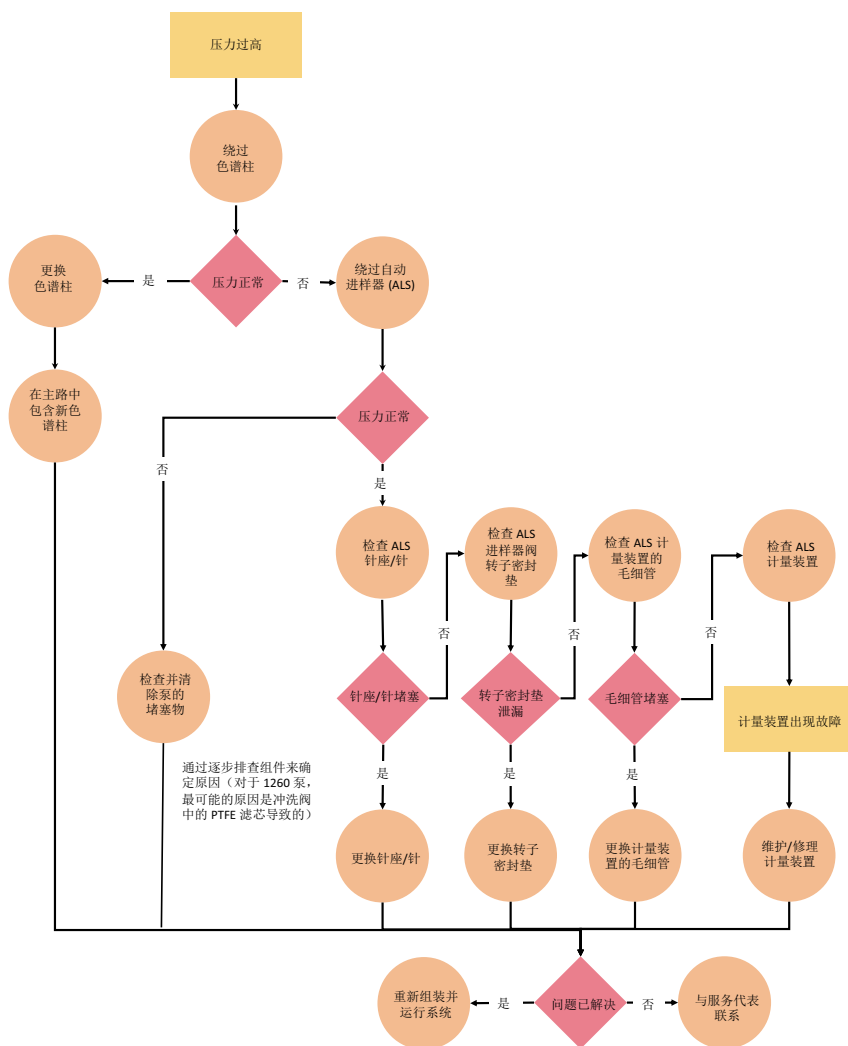


图 228 示例：消除 2D-LC 仪器中压力太高相关问题的策略

压力太低

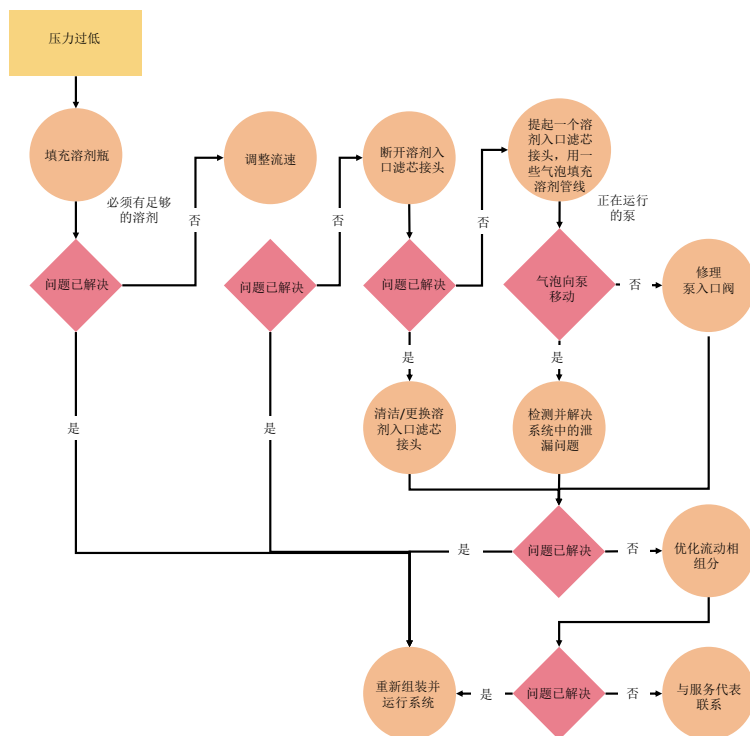


图 229 示例：消除 2D-LC 仪器中压力太低相关问题的策略

峰面积和峰高相关

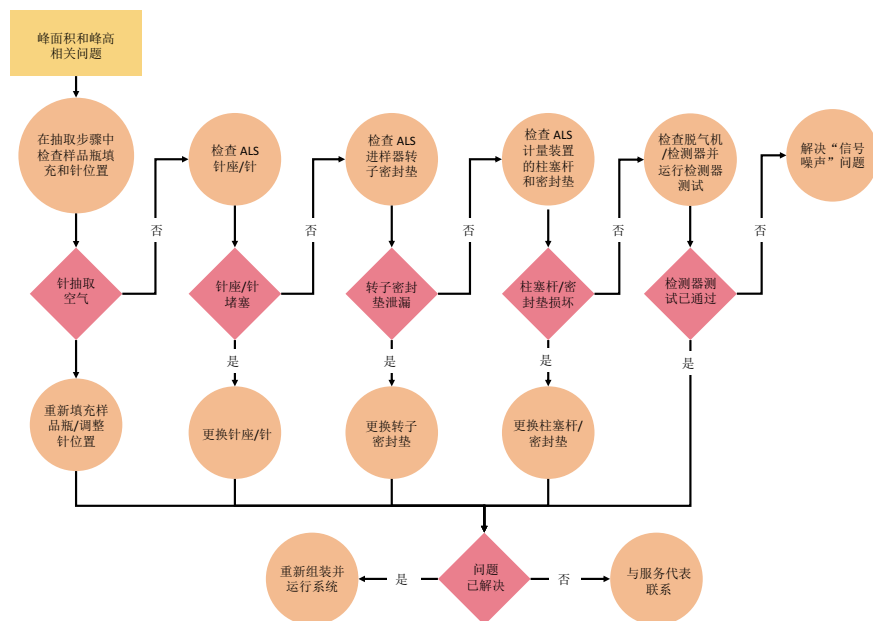


图 230 示例：消除 2D-LC 仪器中峰问题相关问题的策略

保留时间相关

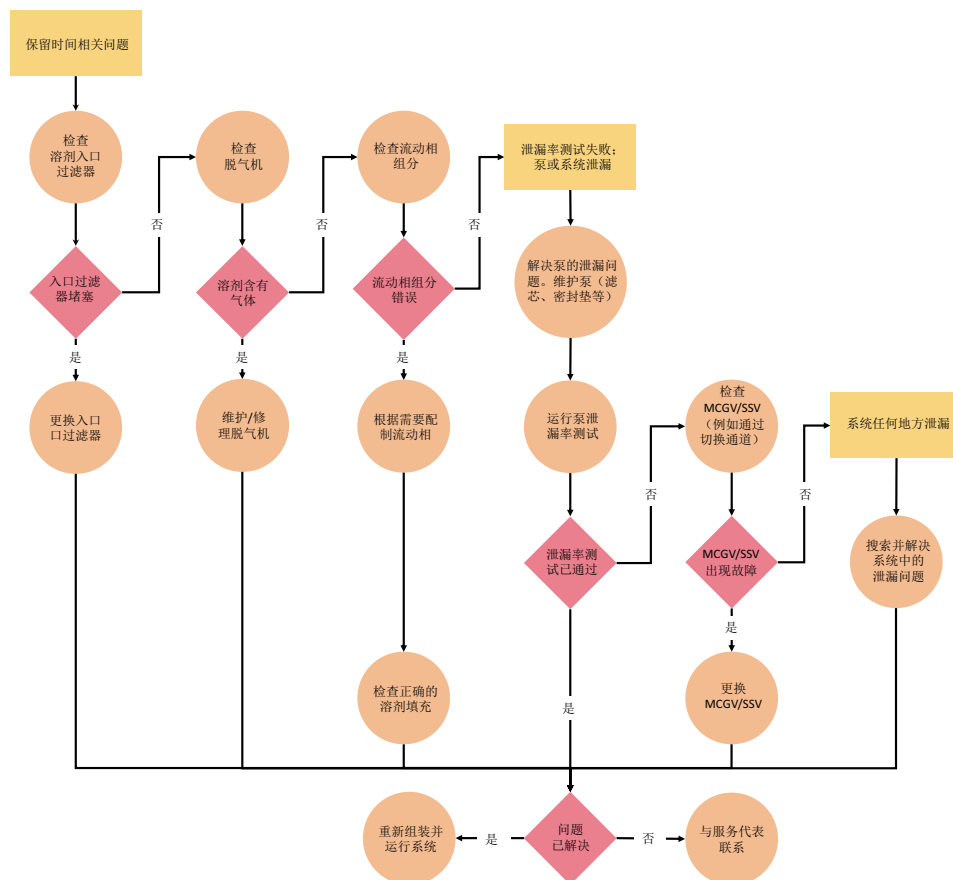


图 231 示例：消除 2D-LC 仪器中保留时间相关问题的策略

信号线性缺失

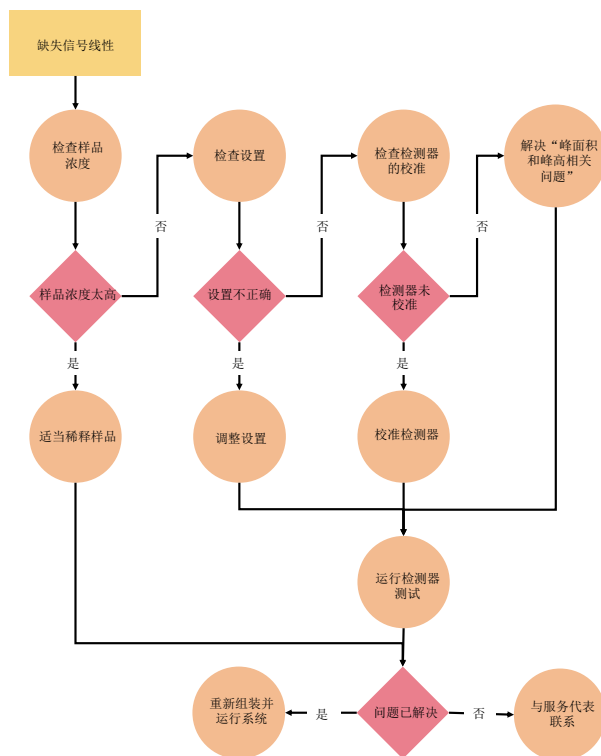


图 232 示例：消除 2D-LC 仪器中缺失信号线性相关问题的策略

信号漂移

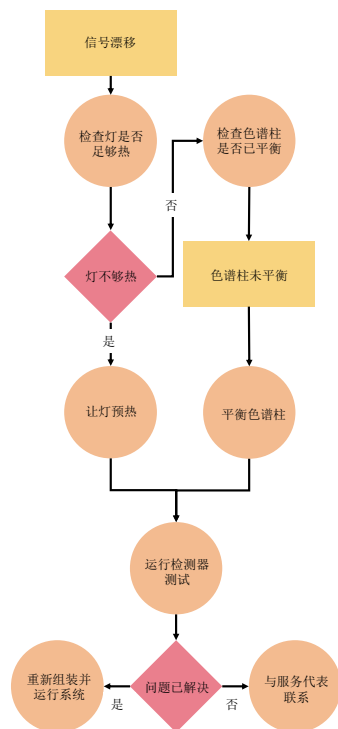


图 233 示例：消除 2D-LC 仪器中信号漂移相关问题的策略

信号噪声

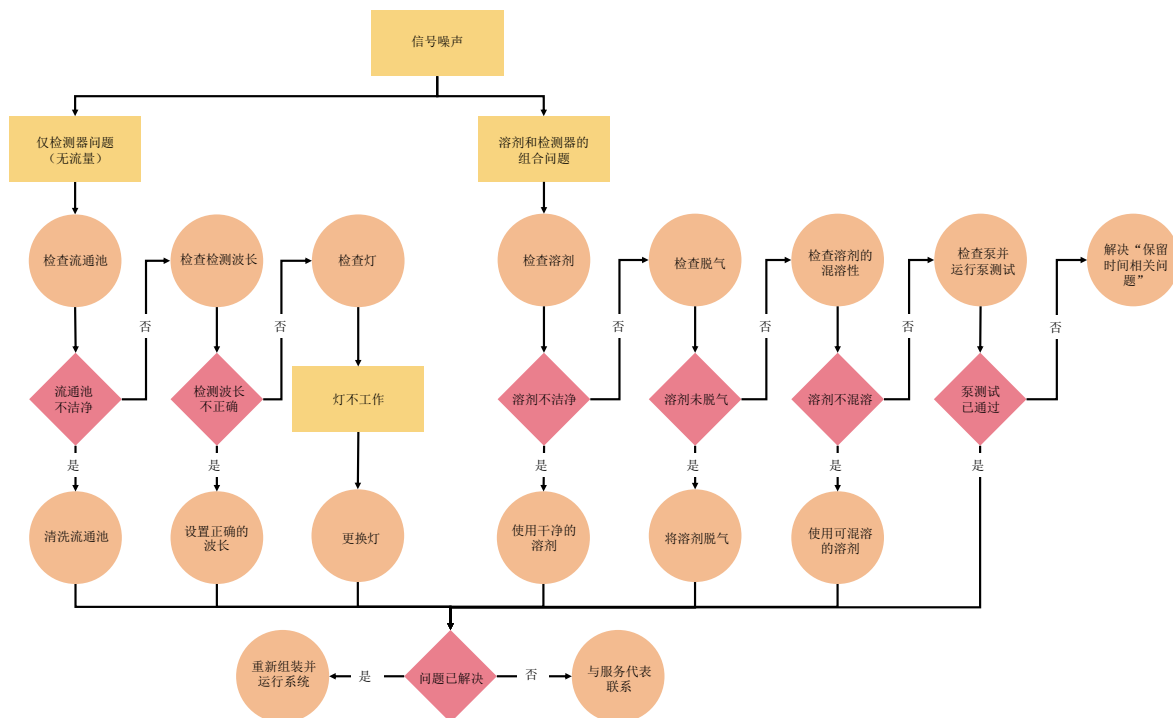


图 234 示例：消除 2D-LC 仪器中信号噪声相关问题的策略

完成故障排除的建议测试

下表显示完成故障排除的最重要测试。

- 有关更多详细信息，请参见：
 - 各模块特定手册中的维护信息。
 - 《故障排除指南》海报 5994-0709EN。
 - 《使用 Agilent LC 系统的最佳实践》 01200-90090。
- 如需更多帮助，请联系您当地的 Agilent Technologies 服务代表。

表 39 2D-LC 系统故障排除的建议测试

泵	柱温箱	自动进样器	阀	检测器	2D-LC 仪器
压力测试 泄漏测试	柱温箱测试 压力测试 (如果存在 柱阀)	压力测试 进标样或进 不同的体积 样品或空白	切换阀位置 /检查压力 读数 压力测试 毛细管泄漏 测试 (仅适 用于 2D-LC 阀)	灯强度测试 波长校正 此外，还有 针对检测器 的测试。	运行校验 对于 2D-LC 仪器 <ul style="list-style-type: none"> • 1D-LC 部 件压力 测试 • 2D-LC 部 件压力 测试

泵特性

- 泵波动
(1260
泵)
- 调谐
(1290
泵)

11

故障信息

错误消息是什么 324

一般错误消息 325

超时 325

关闭 325

远程超时 326

丢失 CAN 组件 327

泄漏传感器短路 327

泄漏传感器断路 328

补偿传感器断路 328

补偿传感器短路 329

风扇故障 329

泄漏 330

模块特定错误消息 331

初始化阀失败 331

阀切换失败 332

阀标签故障 332

压力组合组件缺失 333

位置组合组件缺失 333

外部阀进入驻留模式 334

本章介绍错误消息的含义，并提供有关可能原因的信息，以及如何从错误条件中恢复的建议操作。

错误消息是什么

当发生电子、机械或液压（流路）故障时，用户界面中会显示错误消息，在继续分析之前需要引起注意（例如，需要维修或更换耗材）。发生此类故障时，模块前面的红色状态指示灯会亮起，并在模块日志中写入一个条目。

如果在方法运行之外发生错误，则不会将此错误通知其他模块。如果它发生在方法运行中，所有连接的模块都会收到通知，所有 LED 将变为红色，运行将停止。根据模块类型，此停止的实现方式不同。例如，对于泵，出于安全原因将停止流量。对于检测器，灯将保持点亮以避免平衡时间。根据错误类型，只有在解决了错误后，例如泄漏的液体已干燥，才能开始下一个运行。可以通过在用户界面中打开系统来恢复可能是单一时间事件的错误。

发生泄漏时进行特殊处理。由于泄漏是一个潜在的安全问题，并且可能发生在除所观察的模块之外的模块中，因此泄漏总是会导致所有模块关闭，即使在方法运行之外也是如此。

在所有情况下，错误传播都是通过 CAN 总线或通过 APG/ERI 远程电缆完成的（请参见 APG/ERI 接口的文档）。

一般错误消息

常规故障信息对所有 Agilent 系列 HPLC 模块通用，也可能在其他模块上显示。

超时

错误 ID 0062

超出超时阈值。

可能原因	建议
1 分析成功完成，超时功能按要求关闭了模块。	检查日志以了解未就绪状态的发生和根源。在需要时重新开始分析。
2 在序列或多次进样运行期间存在未就绪状态，时间长于超时阈值。	检查日志以了解未就绪状态的发生和根源。在需要时重新开始分析。

关闭

错误 ID 0063

外部仪器在远程线路上产生了关闭信号。

该模块持续监控远程输入连接器的状态信号。远程连接器 pin 4 上的低信号输入会生成错误消息。

可能原因	建议
1 在与系统的 CAN 连接的另一个模块中检测到泄漏。	在重新启动模块之前解决外部仪器中的泄漏问题。
2 在与系统远程连接的外部仪器中检测到泄漏。	在重新启动模块之前解决外部仪器中的泄漏问题。

可能原因	建议
3 在与系统远程连接的外部仪器中关闭。	检查外部仪器是否处于关闭状态。
4 脱气机未能产生足够的真空进行溶剂脱气。	检查真空脱气机是否存在错误状态。请参阅脱气机或内置脱气机的泵的 维修手册 。

远程超时

错误 ID 0070

远程输入上仍存在未就绪状态。开始分析时，系统预计所有未就绪状态（例如，检测器平衡期间的未就绪状态）将在分析开始后一分钟内切换到运行状态。如果一分钟后远程线路上仍存在未就绪状态，则会生成错误消息。

可能原因	建议
1 连接到远程线路的其中一台仪器处于未就绪状态。	确保显示未就绪状态的仪器安装正确，并正确设置以进行分析。
2 远程电缆有故障。	更换远程电缆。
3 仪器中有故障的组件显示未就绪状态。	检查仪器是否有故障（请参阅仪器文档）。

丢失 CAN 组件

错误 ID 0071

在分析过程中，系统中一个或多个模块之间的内部同步或通信失败。

系统处理器持续监控系统配置。如果一个或多个模块不再被识别为连接到系统，则会生成错误消息。

可能原因	建议
1 CAN 电缆断开。	<ul style="list-style-type: none">• 确保所有 CAN 电缆连接正确。• 确保所有 CAN 电缆安装正确。
2 CAN 电缆有故障。	更换 CAN 电缆。
3 另一个模块中的主板有故障。	关闭系统。重启系统，确定系统无法识别哪个或哪些模块。

泄漏传感器短路

错误 ID 0082

模块中的泄漏传感器出现故障（短路）。

通过泄漏传感器的电流取决于温度。当溶剂冷却泄漏传感器时检测到泄漏，导致泄漏传感器电流在定义的限值内变化。如果电流增加到超过上限值，则会生成错误消息。

可能原因	建议
1 泄漏传感器有故障。	请与 Agilent 服务代表联系。
2 泄漏传感器布线不正确，被金属组件夹住。	请与 Agilent 服务代表联系。

泄漏传感器断路

错误 ID 0083

模块中的泄漏传感器出现故障（断路）。

通过泄漏传感器的电流取决于温度。当溶剂冷却泄漏传感器时检测到泄漏，导致泄漏传感器电流在定义的限值内变化。如果电流超出下限值，则会生成错误消息。

可能原因	建议
1 泄漏传感器未连接到主板。	请与您的 Agilent 服务代表联系。
2 泄漏传感器有故障。	请与您的 Agilent 服务代表联系。
3 泄漏传感器布线不正确，被金属组件夹住。	请与您的 Agilent 服务代表联系。

补偿传感器断路

错误 ID 0081

模块主板上的室温补偿传感器 (NTC) 出现故障（断路）。

主板上的温度补偿传感器 (NTC) 中的电阻取决于室温。泄漏电路利用电阻变化对环境温度变化进行补偿。如果传感器两端的电阻增加到超过上限值，则会生成错误消息。

可能原因	建议
1 主板出现故障。	请与您的 Agilent 服务代表联系。

补偿传感器短路

错误 ID 0080

模块主板上的室温补偿传感器 (NTC) 出现故障（断路）。

主板上的温度补偿传感器 (NTC) 中的电阻取决于室温。泄漏电路利用电阻变化对环境温度变化进行补偿。如果电阻低于下限值，会生成错误消息。

可能原因	建议
1 主板出现故障。	请与您的 Agilent 服务代表联系。

风扇故障

错误 ID 0068

模块中的冷却风扇出现故障。

主板使用风扇轴上的霍尔传感器监测风扇转速。如果风扇转速在一定时间内低于某个限值，则会生成错误消息。

根据模块的不同，组件（例如检测器中的灯）将关闭，以确保模块内部不会过热。

可能原因	建议
1 风扇电缆已断开连接。	请与 Agilent 服务代表联系。
2 风扇出现故障。	请与您的 Agilent 服务代表联系。
3 主板出现故障。	请与您的 Agilent 服务代表联系。

泄漏

错误 ID 0064

模块内检测到泄漏。

泄漏算法使用来自两个温度传感器（泄漏传感器和板载温度补偿传感器）的信号来确定是否存在泄漏。当发生泄漏时，泄漏传感器会被溶剂冷却。这会改变由主板上的泄漏传感器电路检测到的泄漏传感器的电阻。

可能原因	建议
1 接头松动。	确保所有接头紧固。
2 毛细管破裂。	更换破裂的毛细管。

模块特定错误消息

有关更多模块特定错误，请参见相关模块的手册。

初始化阀失败

错误 ID 24000

在初始化过程中，阀驱动器电机会根据安装的阀头移动到一些特殊位置。此过程中的故障意味着，无法正确执行移动或传感器未正确检测到移动。

可能原因	建议
1 机械问题。阀驱动器电机或阀头的摩擦过高或堵塞。	<ul style="list-style-type: none">• 检查阀头是否安装正确。• 如有可能，通过安装其他阀头来确定故障源。• 请与您的 Agilent 服务代表联系。
2 阀驱动器电机上的故障传感器。	<ul style="list-style-type: none">• 检查阀头是否安装正确。• 如有可能，通过安装其他阀头来确定故障源。• 请与您的 Agilent 服务代表联系。

阀切换失败

错误 ID 24001

阀驱动器无法正确操作阀头。机械原因导致或无法正确检测运动。

可能原因	建议
1 机械问题。阀驱动器电机或阀头的摩擦过高或堵塞。	<ul style="list-style-type: none"> • 检查阀头是否安装正确。 • 如有可能，通过安装其他阀头来确定故障源。 • 请与您的 Agilent 服务代表联系。
2 阀驱动器电机上的故障传感器。	<ul style="list-style-type: none"> • 检查阀头是否安装正确。 • 如有可能，通过安装其他阀头来确定故障源。 • 请与您的 Agilent 服务代表联系。

阀标签故障

错误 ID 24006

阀驱动器识别的阀头与上次初始化时识别的阀头不同。

可能原因	建议
1 如果阀驱动器仍然通电，更换阀头（热塞）。	更换阀头。非常重要的一点是，在安装新阀头之后或之前，关闭阀至少 10 s。

注意

阀驱动器的软电源关闭。

在每次要重新启动阀驱动器时，需要关闭阀驱动器至少 10 秒钟。

压力组合组件缺失

从阀驱动器到定义的压力组合组件的连接断开。

可能原因	建议
1 通信问题。	检查模块的 CAN 电缆连接。
2 配置不匹配。	检查阀配置以及是否存在定义的压力组合组件，必要时纠正。

位置组合组件缺失

可能原因	建议
1 通信问题。	检查模块的 CAN 电缆连接。
2 配置不匹配。	<ul style="list-style-type: none">检查阀配置以及是否存在定义的位置组合组件，必要时纠正。如果模块被移至另一个 LC 堆叠，在 Lab Advisor 的“服务和诊断”部分执行解除固件组合。

外部阀进入驻留模式

错误 ID 状态指示灯闪烁

阀驱动器无法正确操作

可能原因	建议
1 通信问题	<ul style="list-style-type: none">• 检查模块的 CAN 电缆连接。• 检查托管的模块是否存在。
2 配置不匹配	<ul style="list-style-type: none">• 检查整个堆叠上的固件是否在同一固件集合之外。• 检查是否没有超过每个主机模块 3 个托管模块的限制。• 检查变光开关设置是否正确。• 检查整个堆叠上的固件是否必须是最新版本。

12

维护

维护简介	336
警告和小心	337
维护概述	339
清洁模块	340
校正泄漏	341
校正泄漏 (G7116B)	341
校正泄漏 (G1170A)	341
更换阀头	342
更换阀头 (G7116B)	342
更换阀头 (G1170A)	345
更换阀头的部件	348
更换 Infinity 阀驱动器的保险丝	351

本章介绍 2D-LC 解决方案的维护。

维护简介

2D-LC 解决方案的设计便于维护。如果模块位于系统堆叠中，可从前端完成频率最高的维护。例如针、针座、转子密封垫、阀头的维护或热交换器的更换。

警告和小心

警告

人身伤害或产品损坏

对于由于不正确地使用产品、未经授权对产品进行更改、调整或修改、未能遵照 Agilent 产品用户指南中的操作过程或产品的使用违反适用的法律、法规或规定所造成的所有损害，Agilent 概不负责。

- ✓ 只能按照 Agilent 产品用户指南中说明的方法来使用 Agilent 产品。

警告

电击

在模块盖打开时，维修模块可能会造成人身伤害（如电击危险）。

- ✓ 不要取下模块盖。
- ✓ 只有经过认证的人员才能在模块内部进行维修。

警告

尖锐的金属边缘

仪器零件上的尖锐边缘可能会造成伤害。

- ✓ 为避免人员受伤，在接触尖锐的金属区域时请千万小心。

警告

有毒、易燃及有害溶剂、样品及试剂

处理溶剂、样品和试剂可能会危害健康安全。

- ✓ 处理这些物质时，请严格遵循溶剂供应商提供的材料处理和安全数据表中的相应安全规程（例如，戴上护目镜、安全手套，穿上防护衣）。
- ✓ 应将物质减至分析所需的最小量。
- ✓ 切勿在爆炸性环境中操作仪器。

警告

热交换器温度较高

柱温箱有两个热交换器组件，可能温度较高。

- ✓ 在开始维修之前让它们冷却。

小心

外部设备的安全标准

- ✓ 如果将外部设备连接到仪器，请确保仅使用根据适用于外部设备类型的安全标准测试和批准的附件装置。

维护概述

以下几页介绍了无需打开主盖即可完成的维护程序（简单维修）。

表 40 维护程序

程序	典型频率	注释
清洁模块	如果需要	
校正泄漏	如果出现泄漏	检查是否出现泄漏
维护柱切换阀	如果阀出现泄漏	
更换阀头	如果阀性能显示有泄漏或磨损的迹象	
更换阀头的部件	如果泄漏传感器出现故障	
更换 Infinity 阀驱动器的保险丝	当保险丝出现故障时	
更换模块固件	如果需要	

清洁模块

为保持模块箱干净，应使用软布蘸少量水或温和洗涤剂的水溶液进行清洗。避免使用有机溶剂进行清洁。它们会损坏塑料部件。

警告

液体滴入模块的电子室可能会导致电击危险并损坏模块

- ✓ 清洁时请勿使用过湿的布。
- ✓ 在打开流路中的任何连接之前排空所有溶剂管线。

注意

如果模块表面需要消毒，可以使用 70 % 异丙醇和 30 % 水的溶液。

校正泄漏

校正泄漏 (G7116B)

适用于： 在热交换器或毛细管连接处或色谱柱切换阀处发生泄漏时。

所需的工具： **说明**

纸巾

吸管

扳手，1/4 – 5/16 英寸
(用于毛细管连接)

- 1 取下门。
- 2 使用吸管和纸巾擦干泄漏传感器区域。
- 3 观察毛细管连接和色谱柱切换阀是否泄漏，必要时进行纠正。
- 4 重新安装门。

校正泄漏 (G1170A)

适用于： 如果毛细管连接或阀出现泄漏。

所需的工具： **说明**

纸巾

吸管

扳手，1/4 – 5/16 英寸
(用于毛细管连接)

- 1 使用吸管和纸巾擦干泄漏传感器区域。
- 2 观察毛细管连接和阀有无泄漏，必要时校正。

更换阀头

更换阀头 (G7116B)

提供了几个可选购的阀头，它们安装和更换都很方便。

所需的部件：

说明

安捷伦快速切换阀头

小心

阀驱动包含敏感光学部件，需要防尘和防止其它污染。若这些部件遭污染，可能会降低阀头选择的精确性，从而使测量结果发生偏差。

- ✓ 运行和存储时请务必安装阀头。为保护阀驱动，可使用模拟阀头（运输锁工具包 (G1316-67001) 的一部分）替代实际工作阀头。切勿接触阀驱动内部部件。

小心

柱损坏或测量结果偏差

将阀切换到错误位置可能会使柱损坏，或使测量结果发生偏差。

- ✓ 使叶片与凹槽配合可确保将阀切换到正确位置。

小心

阀损坏

在高压侧使用低压阀可能会使阀损坏。

- ✓ 当使用多个柱温箱作为方法开发解决方案的一部分时，请确保高压阀头连接到自动进样器，低压阀头连接到检测器。

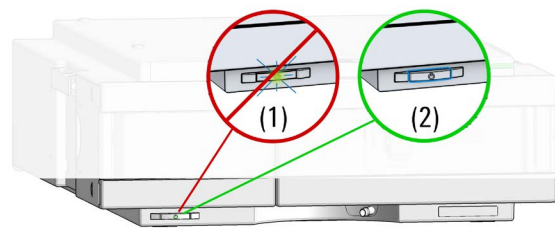
警告

有毒、易燃及有害溶剂、样品及试剂

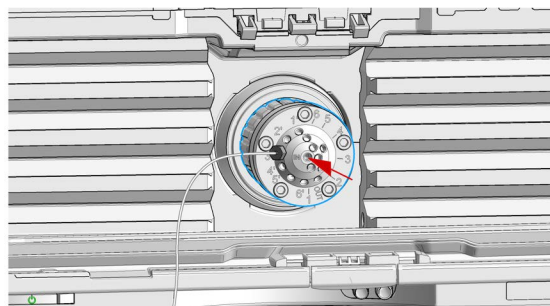
处理溶剂、样品和试剂可能会危害健康安全。

- ✓ 从阀头取出溶剂时，确保溶剂不会从接头滴出。
- ✓ 处理这些物质时，请严格遵循溶剂供应商提供的材料处理和安全数据表中的相应安全规程（例如，戴上护目镜、安全手套，穿上防护服）。

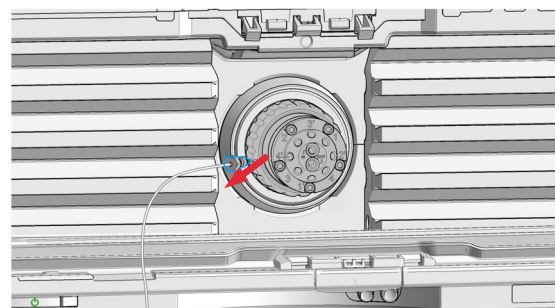
1 关闭模块。



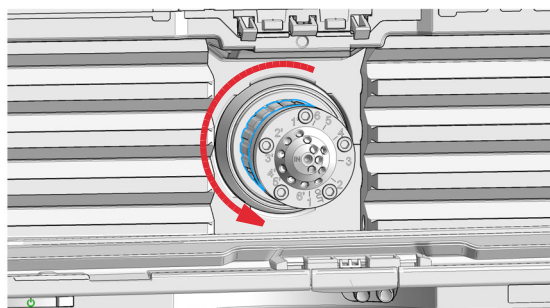
2 拉动阀头，让其到达外部位置。



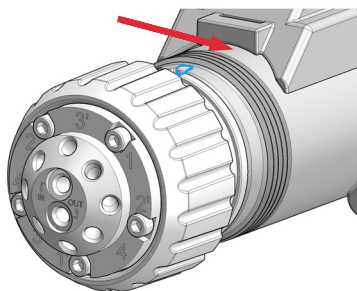
3 将所有毛细管接头从阀头拆下。



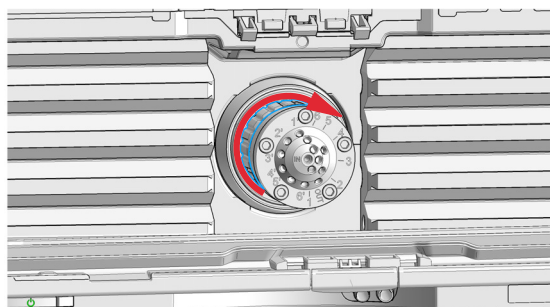
4 拧下螺母并取下阀头。



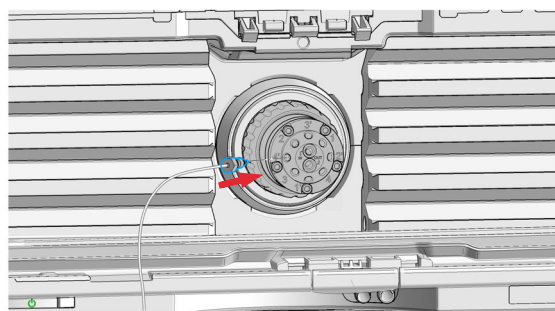
5 将新的阀头安装到阀驱动装置中，使得叶片与槽贴合。



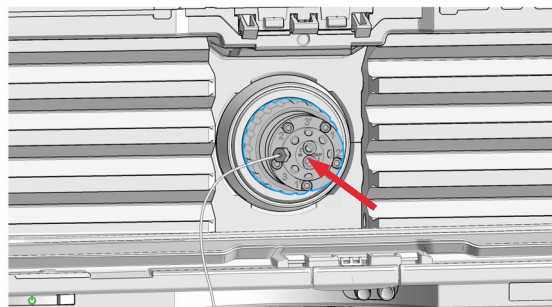
6 使用联管螺母，将阀头拧到阀驱动装置。



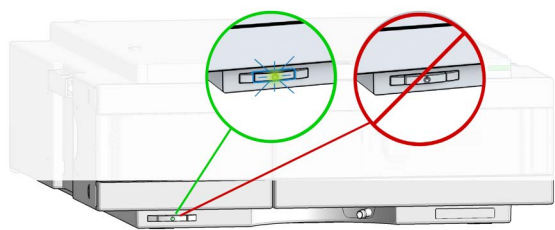
7 将所有必需的毛细管接头安装到阀。



8 推动阀头，直到其咬合，并保持在后部位置。



9 打开模块。



更换阀头 (G1170A)

以下程序仅显示安装。要拆下阀，请按照说明的相反顺序执行操作。

注意

以下程序举例说明了阀头的安装。有关正确的毛细管连接，请参见 GUI 中的阀拓扑。

小心

阀驱动包含敏感光学部件，需要防尘和防止其它污染。若这些部件遭污染，可能会降低阀口选择的精确性，从而使测量结果发生偏差。

- ✓ 运行和存储时请务必安装阀头。为保护阀驱动，可使用模拟阀头替代实际工作阀头。切勿接触阀驱动内部部件。

注意

为了正确安装阀头，外销（红色）必须完全安装到阀驱动器轴（红色）的外槽中。只有当阀头上的两个销（绿色和蓝色）安装到阀驱动器执行器轴上的相应凹槽中时，才能正确安装。它们的匹配取决于销和槽的直径。

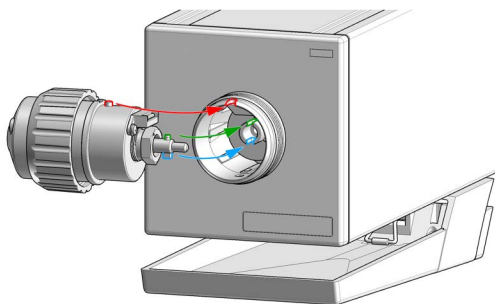
注意

在模块初始化期间，阀标记读卡器会从阀头 RFID 标记上读取阀头属性。如果在模块打开期间更换阀头，不会更新阀属性。如果仪器不知道已安装阀的属性，阀口位置的选择可能失败。

注意

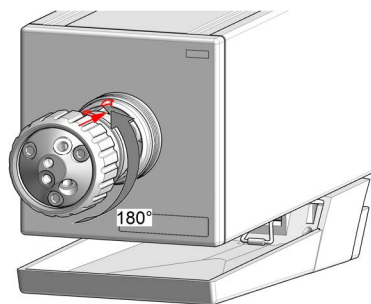
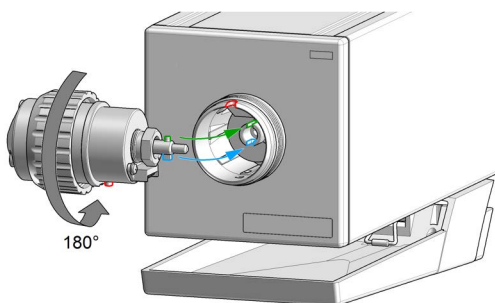
为正确识别阀，关闭模块电源至少 10 秒。

1 将阀头插入阀轴。

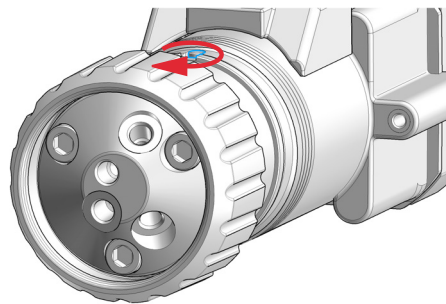


或

如果外销无法装入外槽，则必须转动阀头，直到感觉到两个销卡入槽中。现在，在不断转动阀头直到销插入凹槽时，您应该会感觉到来自阀驱动器的额外阻力。



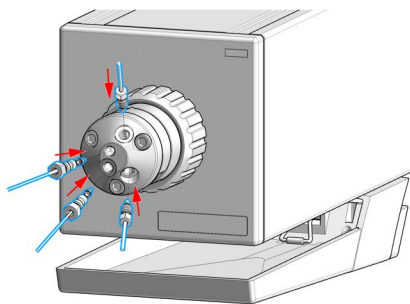
2 当外销锁定在槽中时，手动将螺母拧到阀头上。



注意

使用 5043-1767 阀拆卸工具紧固螺母。

3 将所有必需的毛细管接头安装到阀。



4 打开模块电源或重启模块电源，以便在模块初始化期间识别阀头。

更换阀头的部件



生物惰性模块仅使用生物惰性部件！



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

适用于： 如果阀出现泄漏。

所需的工具： **说明**

六角扳手，9/64 英寸
六角扳手，3/32 英寸
扳手，1/4 英寸
六角螺丝刀 SW-6.35 带狭槽
六角螺丝刀 SW-4 带狭槽

- 1 从端口移除毛细管。
- 2 每次对每个定子螺丝都拧松两圈。从定子头上取下螺栓。
- 3 卸下定子头（如果可以，卸下定子面）。
- 4 卸下定子环。
- 5 取下转子密封圈（如果绝缘密封圈受损或污染，也将其取下）。
- 6 （如果需要）安装新的绝缘密封圈。确保环内的金属弹簧面向阀体。

- 7 安装新的转子密封圈。
- 8 更换定子片。确保定子片与阀体紧密结合。
- 9 将新的（如果需要）定子面正确放置在定子头上。重新安装定子头。
- 10 在定子头插上定子螺丝。每次轮换把三个螺丝上紧两圈，直到定子头被固定为止。
- 11 将泵毛细管重新连接至阀端口。

小心

系统压力测试使用不当会损坏阀。

- ✓ 始终为测试选择适当的压力限值。请勿超出压敏元件的最大压力，例如，如果安装了 800 bar 快速切换阀头，则将最大压力设置为 800 bar。

12 执行**系统压力测试**，以确保阀保持密闭。

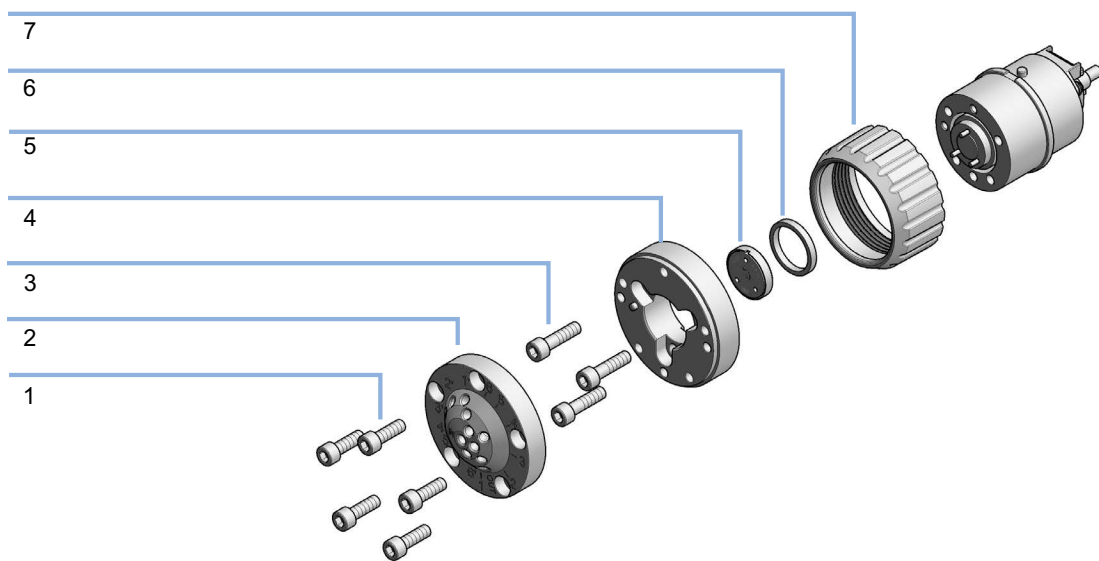


图 235 阀头部件（示例）

1	定子螺丝
2	定子头组件
3	定子环螺丝（不可用）
4	定子环（仅用于维修）
5	转子密封垫
6	轴承环
7	扳手螺母（仅用于维修）

注意


第 350 页的图 235 以 6 柱选择阀为例介绍阀头的部件更换。这些阀的实际外观可能与图示有所差异，并且可能并不包含所有图示部件。此外，并非所有类型的阀都可以获得所有备件。

更换 Infinity 阀驱动器的保险丝

适用于： 如果流量模块无反应。

所需的工具： 说明
螺丝刀

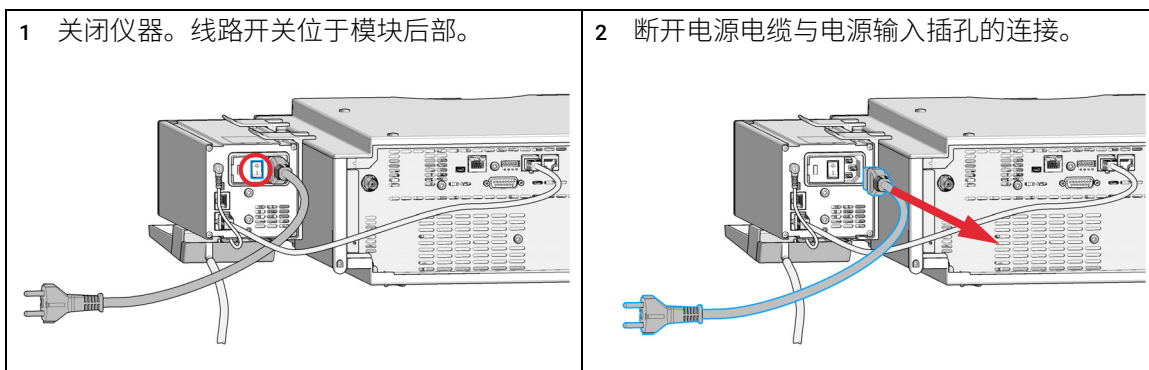
所需的部件：

#	部件号	说明
2	2110-1486 	保险丝，2 AT250 V

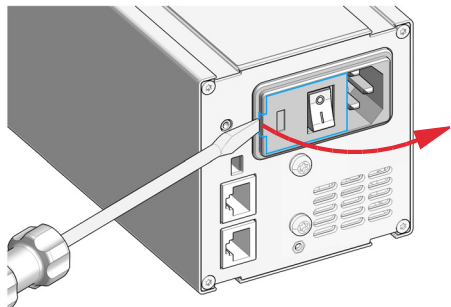
警告

电击

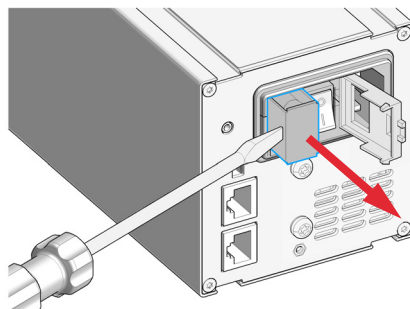
- ✓ 更换保险丝或试图打开电源输入插座的舱口之前，断开模块与主电源的连接。
- ✓ 在关闭电源输入插座之前，切勿重新连接主电源。



3 要检修保险丝盒，使用平头螺丝刀轻轻提起电源插座的塑料外壳。

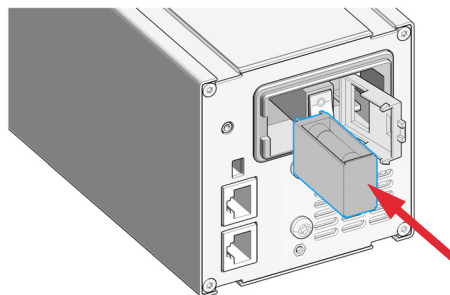


4 如图所示，拉出保险丝盒。

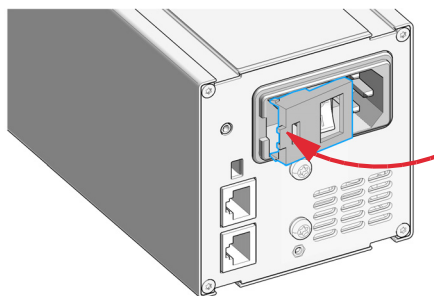


5 更换出现故障的保险丝。

6 滑入保险丝抽屉并推动，直至其紧密配合。



7 最后，关闭保险丝抽屉外壳，将仪器重新连接至电源线并通电。



1290 Infinity II 2D-LC 系统的部件	354
2D-LC 定量环	354
2D-LC 毛细管	355
ASM 毛细管	357
压力释放工具包	357
2D-LC 轻松入门工具包	358
阀驱动器部件	359
Infinity II 阀驱动器部件	360
阀头部件	362
阀选项概述 (适用于 2D-LC)	364
MS 分流阀	368
阀选项概述 (适用于 G7116B)	370
额外加热器设备	372
配件和耗材 (适用于 G7116B)	374
InfinityLab Quick Connect 快速连接接头和 Quick Turn 接头	376
毛细管工具包	379
1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统的部件	380
生物兼容性毛细管的显著特征	380
接头	383
Bio 2D-LC 定量环	384
Bio 2D-LC 毛细管	384
压力释放工具包	388
阀选项概述 (适用于 Bio 2D-LC)	389
各种 Bio-LC 模块的其他生物兼容性备件概述	394
1290 Infinity II Bio LC 色谱柱的选择	404

本章提供解决方案所需部件材料的相关信息。

1290 Infinity II 2D-LC 系统的部件

2D-LC 定量环

用于标准 2D-LC 的 2D-LC 定量环

部件号	说明
5067-5440 📄	2D-LC 校正定量环工具包 内部部件号，不可订购
5067-5446 📄	定量环外壳工具包
5067-5424 📄	20 μL 2D-LC 定量环
5067-5425 📄	40 μL 2D-LC 定量环
5067-5437 📄	60 μL 2D-LC 定量环
5067-5426 📄	80 μL 2D-LC 定量环
5004-0036 📄	180 μL 2D-LC 定量环
5500-1238 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 105 mm SL/SL (旁路毛细管)

用于 MHC 阀接头 M4 的 2D-LC 定量环

部件号	说明
5067-6643 📄	不锈钢毛细管 0.35 x 104 mm, M/M, 10
5067-6644 📄	不锈钢毛细管 0.35 x 208 mm, M/M, 20 μL
5067-5926 📄	不锈钢毛细管 0.35 x 420 mm, M/M, 40 μL
5067-6645 📄	不锈钢毛细管 0.35 x 831 mm, M/M, 80 μL

部件号	说明
5067-6646 E	不锈钢毛细管 0.35 x 1247 mm, M/M, 120 µL
5067-6647 E	不锈钢毛细管 0.35 x 1870 mm, M/M, 180 µL
5067-6141 E	不锈钢堵头, 用于 M4 端口
5023-2504 E	六角螺丝刀, 带开口, SW-4

2D-LC 毛细管

1200 Infinity 系列 2D-LC 毛细管工具包

部件号	说明
5021-1820 E	柔性毛细管, 0.12 mm x 105 mm, 无接头
G1316-87321 E	毛细管柱热交换器, 长度为 105 mm, 内径为 0.17 mm
5021-1822 E	毛细管, 0.12 mm x 280 mm
5021-1823 E	不锈钢毛细管柱-检测器(400 mm 长, 0.12 mm 内径)。
5021-1819 E	不锈钢毛细管 0.17 mm x 400 mm S/S
5065-9964 E	不锈钢毛细管 0.12 mm x 500 mm
5067-4609 E	不锈钢毛细管 0.17 mm x 500 mm SX/-
5067-4669 E	不锈钢毛细管 0.12 mm x 600 mm S/SL
01078-87305 E	毛细管, 0.17 mm x 80 cm, 公接头
5065-4454 E	长连接螺钉, 前后密封垫圈 一包 10 个
G1316-60005 E	低扩散热交换器双组件

维护所需部件

1290 Infinity II 2D-LC 系统的部件

部件号	说明
G7116-60015 📄	标准快速连接热交换器
5500-1188 📄	Quick Turn 不锈钢毛细管 0.12 mm x 105 mm，长套筒

InfinityLab 2D-LC 毛细管工具包（旧系统）

部件号	说明
5067-4651 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 280 mm SL/SX
5067-4669 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 600 mm S/SL
5500-1245 📄	不锈钢毛细管 0.17 mm x 400 mm SI/SI
5500-1251 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 400 mm SL/SL
5500-1240 📄	不锈钢毛细管 0.17 mm x 105 mm SL/SL
5500-1227 📄	不锈钢毛细管 0.17 mm x 150 mm SL-SL
5500-1217 📄	不锈钢毛细管 0.17 mm x 900 mm SI/SX
5067-4608 📄	不锈钢毛细管 0.17 mm x 280 mm SX/S
5067-4670 📄	不锈钢毛细管 0.17 mm ID 600 mm pre-swaged

ASM 毛细管

ASM 阀毛细管备用工具包

部件号	说明
5500-1300 	不锈钢毛细管 0.12 mm x 85 mm M/M (ASM 因子 5)
5500-1301 	不锈钢毛细管 0.12 mm x 170 mm M/M (ASM 因子 3)
5500-1302 	不锈钢毛细管 0.12 mm x 340 mm M/M (ASM 因子 2)
5500-1303 	不锈钢毛细管 0.12 mm x 680 mm M/M (ASM 因子 1.5)
5500-1376 	不锈钢毛细管 0.12 mm x 170 mm M/M (传输毛细管)

压力释放工具包

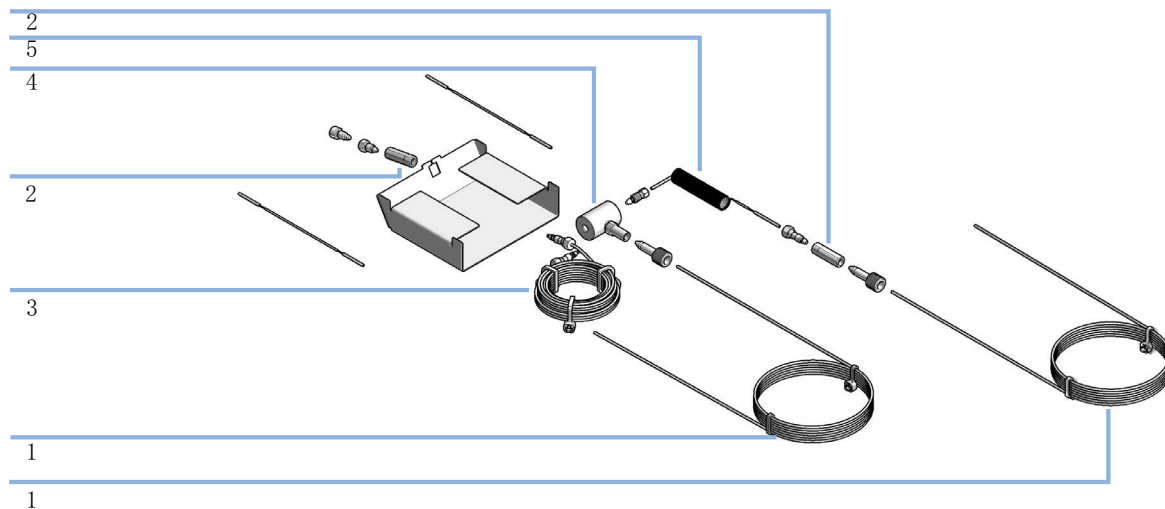


图 236 压力释放工具包, 部件

维护所需部件

1290 Infinity II 2D-LC 系统的部件

条目	部件号	说明
	G4236-60010 📄	2D-LC 压力释放工具包
	0100-0969 📄	三通、不锈钢、1/16 英寸、低死体积 未显示
1	5021-1816 📄	毛细管 内径 0.17 mm, 105 mm 长
2	5022-2184 📄	两通,零死体积通用两通,无接头
3	G7167-87307 📄	500 µL 定量环扩展
4	G4212-60022 📄	压力释放阀
5	5067-5939 📄	分流器-毛细管 0.05-ID L-1000 mm

2D-LC 轻松入门工具包

适用于 ESZ 服务的 2D-LC 轻松入门工具包 (G4236-68100) 不可订购的内部部件号

条目	部件号	说明
1	5190-6895 📄	2D-LC 入门样品, 1 x 2 mL
2	G2453-85060 📄	甲酸-试剂级 5 mL (5 cc)
3	685775-902 📄	Poroshell SB-C18, 2.1 x 100 mm, 2.7 µm
4	699968-301 📄	Poroshell 120 Bonus-RP, 3.0 x 50 mm, 2.7 µm

2D-LC 轻松入门工具包 (旧系统) (G4236-68000) 不可订购的内部部件号

维护所需部件

1290 Infinity II 2D-LC 系统的部件

部件号	说明
5190-6895 📄	2D-LC 入门样品, 1 x 2 mL
G2453-85060 📄	甲酸-试剂级 5 mL (5 cc)
858700-902 📄	RRHD SB-C18, 2.1x100 mm, 1.8 µm, 1200 bar
857768-901 📄	RRHD Bonus-RP, 2.1x50 mm, 1.8 µm, 1200 bar
959757-302 📄	RRHD Eclipse Plus C18, 3.0x50 mm, 1.8 µm

阀驱动器部件

条目	部件号	说明
1	5043-0275 📄	导向夹 用于将阀固定到导轨组件
2	5067-4792 📄	泄漏传感器组件 外部泄漏传感器
3	5043-0271 📄	接漏盘支架
4	5043-0270 📄	接漏盘
5	5068-0106 📄	螺母扳手
	2110-1486 📄	保险丝, 2 AT250 V
6	5067-4634 📄	导轨阀组件
7	5067-1510 📄	用于色谱柱固定架的导轨组件

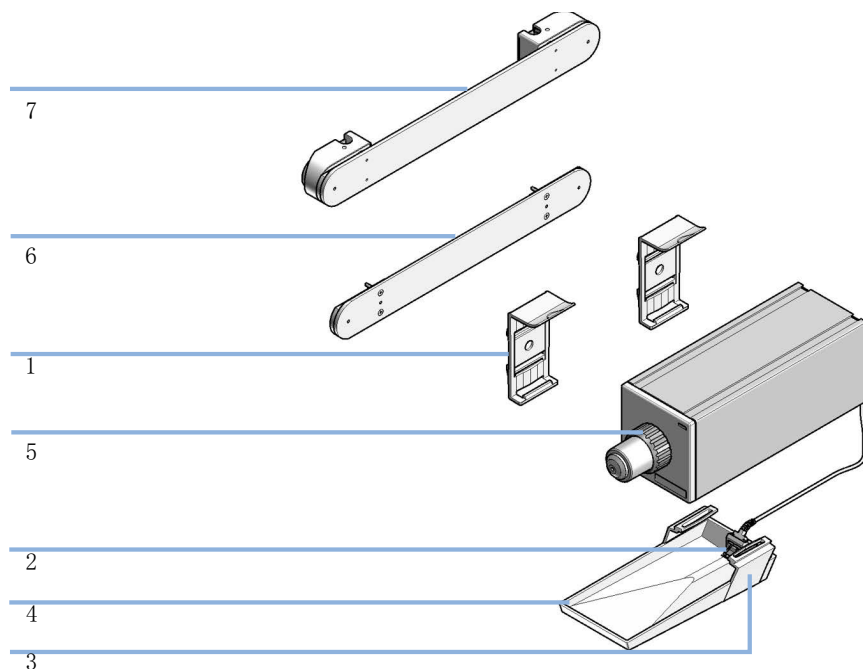







图 237 1290 Infinity 阀驱动器部件

Infinity II 阀驱动器部件

条目	部件号	说明
1	5067-6138 📄	阀支架工具包右-IF-II-G 适用于 G7116A/B
	5067-6139 📄	阀支架工具包左-IF-II-G 适用于 G7116A/B (未显示)
2	5067-5685 📄	夹具导轨工具包-IF-II
3	5067-4792 📄	泄漏传感器组件 外部泄漏面
4	5043-0271 📄	接漏盘支架
5	5043-0270 📄	接漏盘

条目	部件号	说明
6	2110-1486 	保险丝, 2 AT250 V
7	5063-6527 	管线, 硅橡胶, 1.2 m, 内径/外径 6/9 mm
8	5181-1519 	CAN 电缆, Agilent 模块到模块, 1 m
9	5500-1156 	T 形管接头内径 6.4
10	5043-0269 	连接适配器 适用于 G1170A (多个阀驱动器可与连接适配器连接)

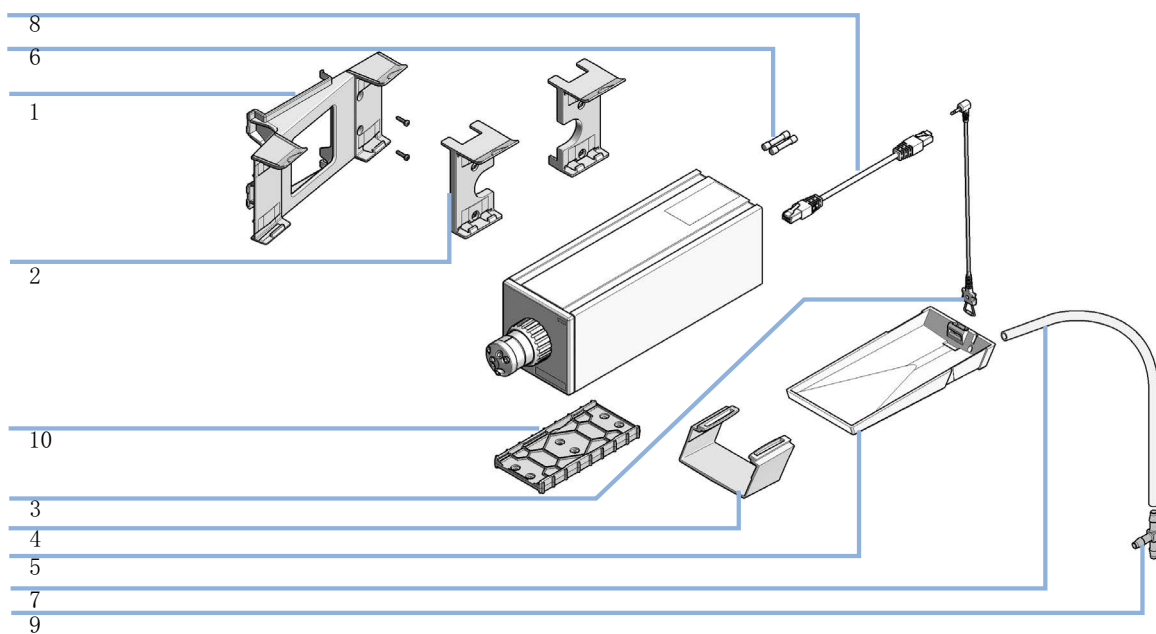


图 238 1290 Infinity II 阀驱动器部件

阀头部件

注意

下图以 12 位/13 通选择器阀为例介绍阀头的部件更换。这些阀的实际外观可能与图示有所差异，并且可能并不包含所有图示部件。此外，并非所有类型的阀都可以获得所有备件。

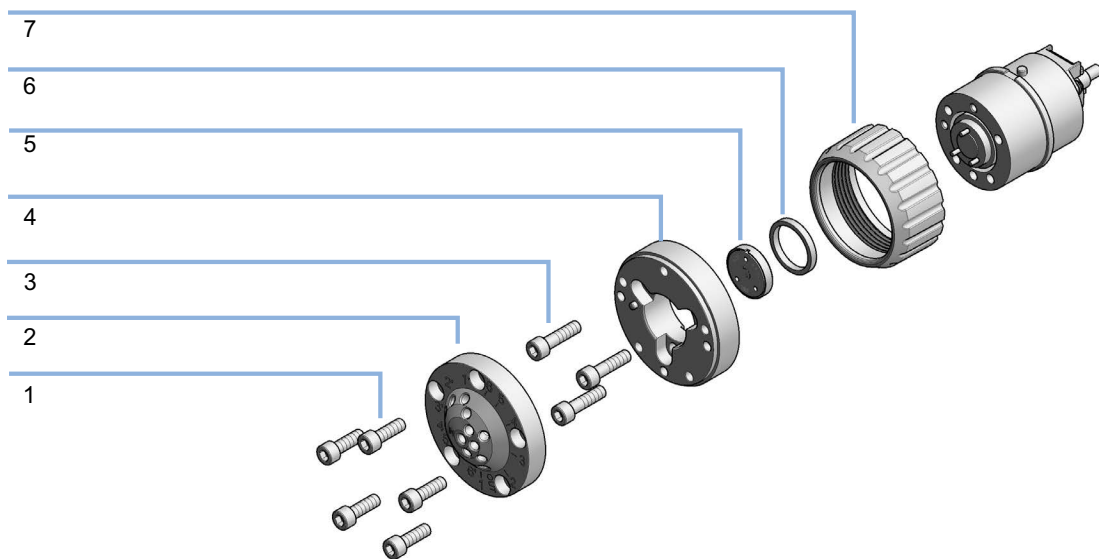


图 239 阀头部件（示例）

- | | |
|---|-------------|
| 1 | 定子螺丝 |
| 2 | 定子头组件 |
| 3 | 定子环螺丝（不可用） |
| 4 | 定子环（仅用于维修） |
| 5 | 转子密封垫 |
| 6 | 轴承环 |
| 7 | 扳手螺母（仅用于维修） |

技术指标

表 41 技术指标

最大压力:	1300 bar
液体接触:	不锈钢, PEEK
连接:	连接 10-32 公螺纹和 M4 接头

工具

用于额外接头的工具

部件号	说明
8710-2462 📄	六角起子, 3/32 英寸
5023-2504 📄	六角螺丝刀, 带开口, SW-4 用于 M4 接头
5067-6141 📄	不锈钢堵头, 用于 M4 端口 用于堵塞未使用的阀口
5067-6127 📄	不锈钢长堵头

阀选项概述（适用于 2D-LC）

1300 bar InfnitLab Quick Change 阀向后兼容 1200 bar 阀。






注意

定子的使用寿命取决于 2D-LC 阀承受的应力。因此，在维护期间需要对表面进行目视检查，这点非常重要。如果在检查过程中发现划痕或严重磨损，则必须更换定子。

G4136A 2D-LC 阀工具包，标准

#	部件号	说明
1	5067-4244 	2D-LC 阀头，1300 bar
1	5067-5440 	2D-LC 校正定量环工具包
1	5067-6171 	毛细管工具包 2D-LC，Infinity Classic（可选） 内部部件，不可订购
1	G4236-68100 	适用于 ESZ 服务的 2D-LC 轻松入门工具包 内部部件，不可订购
2		多重中心切割阀
1	5067-6585 	毛细管工具包 2D-LC，1290 Infinity II 内部部件，不可订购
1	G1680-63721 	网络 LAN 交换机

5067-4244 2D-LC 阀头，1300 bar

#	部件号	说明
3	1535-4857 	定子螺丝，一包 10 个
1	1535-4045 	轴承环
1	5068-0214 	转子密封垫 (VHP)
1	5068-0120 	定子环
1	5068-0115 	定子

G4243A 2D-LC 阀工具包, ASM

#	部件号	说明
1	5067-4266 📄	2D-LC ASM 阀头, 1300 bar
1	G4236-68100 📄	适用于 ESZ 服务的 2D-LC 轻松入门工具包内部部件, 不可订购
1	G1680-63721 📄	网络 LAN 交换机
1	5500-1300 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 85 mm M/M
1	5500-1301 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 170 mm M/M
1	5500-1302 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 340 mm M/M
1	5500-1303 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 680 mm M/M
4	5500-1376 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 170 mm M/M (传输毛细管)

5067-4266 2D-LC ASM 阀头, 1300 bar

部件号	说明
5068-0019 📄	定子螺丝
5068-0257 📄	轴承环
5068-0240 📄	转子密封垫 (VHP)
5068-0239 📄	定子
5023-3150 📄	ZDV Union M4 (不包含)

维护所需部件

1290 Infinity II 2D-LC 系统的部件

多重中心切割阀

#	部件号	说明
1	5067-4273 📄	6 色谱柱选择阀头， 1300 bar
6	5067-5926 📄	不锈钢毛细管 0.35 x 420 mm， M/M 40 µL
2	5500-1270 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 170 mm S/M (传输毛细管)
1	5043-0269 📄	连接适配器

5067-4273 6 色谱柱选择阀头， 1300 bar

#	部件号	说明
5	5068-0089 📄	定子螺丝
1	1535-4045 📄	轴承环
1	5068-0242 📄	转子密封垫 (PEEK)
1	5068-0241 📄	定子头

废弃阀头

以下 1200 bar 阀头已无法订购：

5067-4214 2D-LC 阀 1200 bar (旧系统)

部件号	说明
5068-0186 📄	转子密封垫 (Vespel)
5068-0115 📄	定子
1535-4857 📄	定子螺丝， 一包 10 个
1535-4045 📄	轴承环

维护所需部件

1290 Infinity II 2D-LC 系统的部件

多重中心切割阀（旧系统）

#	部件号	说明
1	5067-4142 📄	6 色谱柱选择器阀头 (1200 bar)
6	5067-5926 📄	不锈钢毛细管 0.35 x 420 mm, M/M 40 µL
1	5974-0197 📄	毛细管外标签
2	5067-5113 📄	不锈钢毛细管 0.17 mm x 250 mm SL/M
2	5067-6188 📄	不锈钢毛细管 0.17 mm x 500 mm SL/M

5067-4142 6 色谱柱柱选择阀 1200 bar（旧系统）

部件号	说明
5068-0077 📄	定子头
5068-0067 📄	转子密封垫 (Vespel)
5068-0089 📄	定子螺丝
1535-4045 📄	轴承环

MS 分流阀

G4231A 2 位/6 通阀头，800 bar

部件号	说明
5067-4282 📄	2 位/6 通阀头，800 bar
5067-4730 📄	2/10 毛细管工具包 0.17 mm
5067-4249 📄	2/6 毛细管工具包 0.12 mm，包括 QC-HEX
5067-4250 📄	2/6 毛细管工具包 0.12 mm，包括 LD-HEX
5067-6597 📄	2/6 毛细管工具包 0.17 mm，包括 QC-HEX

可选分流阀（2 位/6 通，PEEK 转子密封垫）

部件号	说明
5067-4137 📄	2 位/6 通阀头，600 bar
5067-4282 📄	2 位/6 通阀头，800 bar
0101-1409 📄	转子密封垫 (PEEK)

可选分流阀（2 位/10 通，PEEK 转子密封垫）

部件号	说明
5067-4145 📄	2 位/10 通阀头，600 bar
5067-4283 📄	2 位/10 通阀头，800 bar
0101-1415 📄	转子密封垫 (PEEK)

维护所需部件

1290 Infinity II 2D-LC 系统的部件

可选分流阀 (2 位/6 通, Vespel 转子密封垫)

部件号	说明
5067-4117 📄	2 位/ 6 通超高压阀头, 1200 bar
5068-0008 📄	转子密封垫 (Vespel)

可选分流阀 (2 位/10 通, Vespel 转子密封垫)

部件号	说明
5067-4118 📄	2 位/ 10 通超高压阀头, 1200 bar
5068-0012 📄	转子密封垫 (Vespel)

MS 分流阀设置的额外部件

部件号	说明
G4212-60022 📄	压力释放阀
5067-4606 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 400 mm SX/-
0890-1915 📄	PK 毛细管 0.13 mm x 150 cm
5500-1228 📄	不锈钢毛细管 0.3 mm x 80 mm SL-SL
5063-6591 📄	PEEK 接头, 每包 10 个
0100-0969 📄	三通、不锈钢、1/16 英寸、低死体积
5067-6127 📄	不锈钢长堵头
5062-2462 📄	PTFE 管线 0.7 mm x 5 m, 1.6 mm 外径

阀选项概述（适用于 G7116B）

阀选项概览 (G7116B)

表 42 G7116B 的更换件标准阀头

阀头	转子密封垫	定子头	定子螺丝	定子环
5067-4233 8 位/18 通阀 1300 bar	5068-0200 (PEEK)	5068-0199	5068-0089	不适用
5067-4241 2 位/6 通阀 1300 bar	5068-0207 (PEEK)	5068-0006	1535-4857	5068-0120
5067-4240 2 位/10 通阀 1300 bar	5068-0205 (PEEK)	5068-0011	5068-0019	不适用
5067-4273 6 位/14 通阀 1300 bar	5068-0242 (PEEK)	5068-0241	5068-0089	不适用
5067-4284 6 位/14 通阀 800 bar	5068-0298 (PEEK)	5068-0241	5068-0089	不适用
5067-6682 2 位/10 通阀, Bio 1300 bar	5068-0205 (PEEK)	5068-0286	5068-0019	不适用
5067-4237 8 位/9 通阀 1300 bar	5068-0202 (PEEK)	5068-0001	1535-4857	5068-0120

废弃阀头

以下 1200 bar 阀头已无法订购：

表 43 G7116B 的更换件废弃阀头

阀头	转子密封垫	定子头	定子螺丝	定子环
5067-4121 8 位/9 通阀 1200 bar	5068-0002 (Vespel)	5068-0001	1535-4857	5068-0127
5067-4117 2 位/6 通阀 1200 bar	5068-0008 (Vespel)	5068-0006	1535-4857	5068-0127
5067-4118 2 位/10 通阀 1200 bar	5068-0012 (Vespel)	5068-0011	5068-0019	不适用
5067-4142 6 位/14 通阀 1200 bar	5068-0067 (Vespel)	5068-0077	5068-0089	不适用

额外加热器设备

表 44 热交换器概述

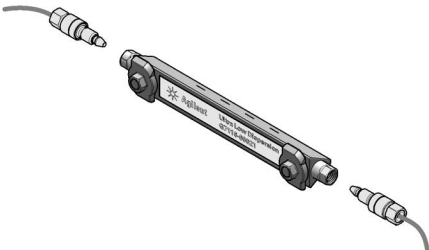
流速	0.075 mm 毛细管内径	0.12 mm 毛细管内径
< 2 mL/min	超低扩散 G7116-60021 (内部体积: 1.0 μ L)	标准流量 G7116-60015 (内部体积: 1.6 μ L)
> 2 mL/min		高流量 G7116-60031 (内部体积: 3.0 μ L)

有关详细信息，请参见第 373 页的表 45。

额外加热器设备（适用于 G7116B）

空白加热器组件，无毛细管和接头：

表 45 InfinityLab Quick Connect 快速连接热交换器

项目	说明
	标准快速连接热交换器 (G7116-60015)
	Quick Connect 快速连接热交换器超低扩散 (G7116-60021) <div style="background-color: #cccccc; padding: 5px; margin-top: 10px; text-align: center;"> 注意 </div> 使用 InfinityLab Quick Turn 接头连接到 Quick Connect 快速连接热交换器超低扩散。
	Quick Connect 快速连接热交换器高流量 (G7116-60031)

配件和耗材（适用于 G7116B）

G7116-68705 附件工具包（适用于 G7116B）

附件工具包（适用于 G7116B）包含安装和维护所需的附件和工具。

部件号	说明
5181-1516 E	CAN 电缆, Agilent 模块到模块, 0.5 m
5063-6527 E	管线, 硅橡胶, 1.2 m, 内径/外径 6/9 mm
5500-1191 E	InfinityLab Quick Turn 不锈钢毛细管 0.12 mm x 280 mm, 长套筒
5067-5966 E	InfinityLab Quick Turn 接头
5067-5957 E	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接组件 0.12 mm x 105 mm
G7116-60015 E	标准快速连接热交换器
G7116-68003 E	色谱柱支架, 薄板型, 一包 2 个 (作为 G7116-60015 的一部分提供)
5043-0915 E	接头安装工具
G7116-60006 E	分隔器组件 MCT
5022-2184 E	两通, 零死体积通用两通, 无接头 双排液接头

维护所需部件

1290 Infinity II 2D-LC 系统的部件

可用耗材 (适用于 G7116B)

部件号	说明
G7116-68003 [E]	色谱柱支架，薄板型，一包 2 个
G7116-68004 [E]	色谱柱支架夹，一包 2 个
5500-1191 [E]	InfinityLab Quick Turn 不锈钢毛细管 0.12 mm x 280 mm，长套筒 从色谱柱出口到 DAD 的毛细管，无接头。
G7116-60006 [E]	分隔器组件 MCT 用于分隔左右加热器元件之间的不同温度区
5067-5917 [E]	InfinityLab 色谱柱识别标签 空白色谱柱 ID 标签（需要色谱柱 ID 标签读取器工具包）
G7116-60013 [E]	InfinityLab 热平衡装置

编号工具包

部件号	说明
5067-6654 [E]	编号工具包 1-8 彩色 红色、蓝色、绿色、青色、黄色、黑色、白色和灰色的 色谱柱信息

InfinityLab Quick Connect 快速连接接头和 Quick Turn 接头

有关更多信息，请查看耗材目录或第 135 页的[重要的客户网络链接](#)。

InfinityLab Quick Connect 快速连接接头

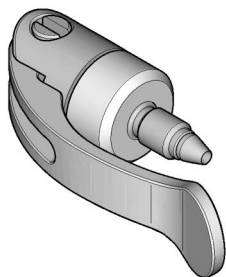


图 240 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头

部件号	说明
5067-5965 E	InfinityLab Quick Connect LC 接头 (不带预装毛细管的接头)
5043-0924 E	用于 Quick Connect 快速连接接头/Quick Turn 接头的前端密封垫圈
5067-5961 E	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.075 mm x 105 mm
5067-6163 E	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.075 mm x 150 mm
5067-6164 E	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接组件 0.075 mm x 220 mm
5067-6165 E	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.075 mm x 280 mm
5067-5957 E	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接组件 0.12 mm x 105 mm
5067-5958 E	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.12 mm x 150 mm

部件号	说明
5067-5959 📄	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.12 mm x 220 mm
5067-5960 📄	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.12 mm x 280 mm
5067-6166 📄	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.17 mm x 105 mm
5067-6167 📄	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.17 mm x 150 mm
5067-6168 📄	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.17 mm x 220 mm
5067-6169 📄	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.17 mm x 280 mm

InfinityLab Quick Connect 快速连接接头更换毛细管

部件号	说明
5500-1174 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.075 mm x 105 mm
5500-1175 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.075 mm x 150 mm
5500-1176 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.075 mm x 220 mm
5500-1177 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.075 mm x 250 mm
5500-1178 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.075 mm x 280 mm
5500-1173 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.12 mm x 105 mm
5500-1172 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.12 mm x 150 mm
5500-1171 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.12 mm x 220 mm
5500-1170 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.12 mm x 280 mm

部件号	说明
5500-1179 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.12 mm x 400 mm
5500-1180 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.12 mm x 500 mm
5500-1181 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.17 mm x 105 mm
5500-1182 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.17 mm x 150 mm
5500-1183 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.17 mm x 220 mm
5500-1230 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.17 mm x 280 mm
5500-1231 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.17 mm x 500 mm
5500-1259 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.25 mm x 150 mm
5500-1260 📄	InfinityLab 不锈钢毛细管 0.25 mm x 400 mm

InfinityLab Quick Turn 接头

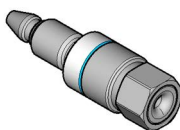


图 241 InfinityLab Quick Turn 接头

部件号	说明
5067-5966 📄	InfinityLab Quick Turn 接头
5043-0924 📄	用于 Quick Connect 快速连接接头/Quick Turn 接头的前端密封垫圈

毛细管工具包

注意

有关更多毛细管工具包，请查看《Agilent 1290 Infinity 阀驱动器和阀头用户手册》或网页。

表 46 通用毛细管工具包

部件号	连接	数量
不锈钢毛细管 0.12 mm x 340 mm S/SX (5067-4647)	自动进样器至阀	1
不锈钢毛细管 0.17 mm x 700 mm S/SX (5067-4648)	² D 泵至阀	1
不锈钢毛细管 0.12 mm x 90 mm S/SX (5067-4649)	阀至热交换器	2
不锈钢毛细管 0.12 mm x 150 mm SL/SX (5067-4650)	短色谱柱至阀	2
不锈钢毛细管 0.12 mm x 280 mm SL/SX (5067-4651)	长色谱柱至阀	2
不锈钢毛细管 0.12 mm x 120 mm SX/SX (5067-4652)	阀至阀	1
不锈钢毛细管 0.12 mm x 200 mm S/SX (5067-4653)	阀至检测器	1
废液管线, 2 m (0890-1713)	阀至废液	2 m
废液管, FEP, 外径 1.6 mm, 内径 0.8 mm (G1375-87326) (包含 M4 PEEK 接头)	阀至废液	1
塑料接头 (0100-1259)		4
袋子 - 塑料 (9222-0518)		1

1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统的部件


生物兼容性毛细管的显著特征



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

识别生物兼容性毛细管：

- 生物兼容性毛细管采用 MP35N 材料制成
- 毛细管看起来与标准不锈钢毛细管差不多
- MP35N 毛细管在 PTFE 管上标有橙色条纹
- PTFE 管的另一种颜色表示内径

 橙色 + 黑色：MP35N 0.075 mm 毛细管

 橙色 + 红色：MP35N 0.12 mm 毛细管

 橙色 + 绿色：MP35N 0.17 mm 毛细管

 橙色 + 蓝色：MP35N 0.25 mm 毛细管

图 242 生物兼容性毛细管的颜色代码


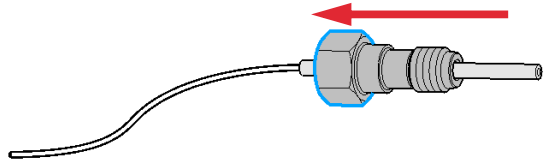
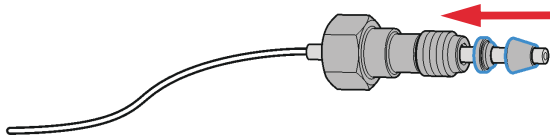
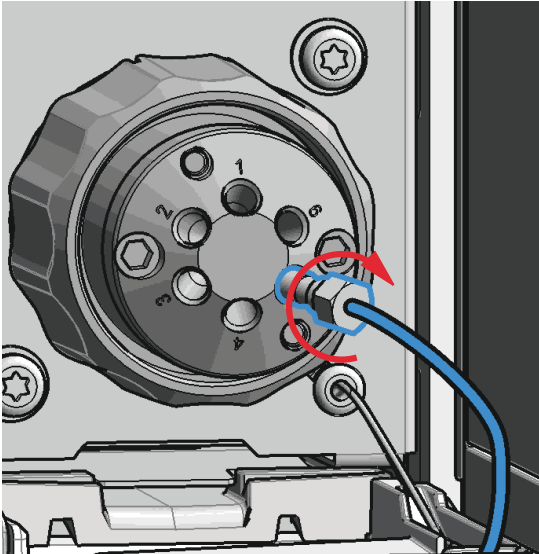
为确保正确安装毛细管连接，选择正确的接头很重要，请参阅第 475 页的毛细管说明的语法。

小心

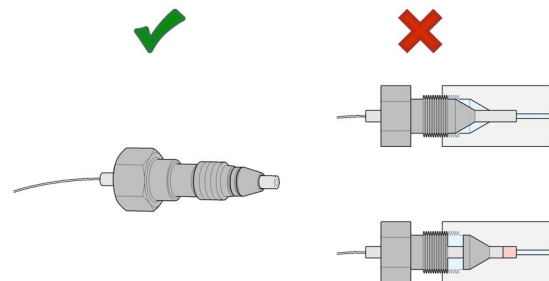
MP35N 比不锈钢硬。

镀金密封垫圈损坏。

- ✓ 切勿过度拧紧毛细管（用手拧紧 + 使用扳手拧不动为止 + 用扳手转动 ¼ 圈）。

<p>1 为您将使用的接头选择足够长的螺母。</p> 	<p>2 将螺母滑过管线或毛细管的末端。</p> 
<p>3 小心地在螺母后面滑动套圈组件，然后用手拧紧组件，同时确保管线完全固定在末端接头的底部。</p> 	<p>4 使用色谱柱或进样阀轻轻拧紧接头，将密封垫圈固定到管线或毛细管上。</p>  <p>注意 不要过度拧紧。过度拧紧会缩短接头的使用寿命。</p>

- 5 拧松螺母，确认密封垫圈正确固定于管线或毛细管。



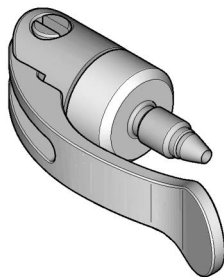
注意

一旦首次将Swagelock接头用于柱或进样阀上时，密封垫圈的位置将永久确定。如果更换为其他的色谱柱或进样阀，接头可能会泄漏，或因谱带增宽而导致分离质量下降。

接头

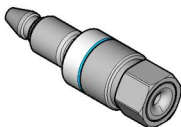
注意

InfinityLab Quick Connect 快速连接接头



InfinityLab Quick Connect 快速连接接头是用于 UHPLC 的真正“手紧式”可重复使用的接头，无泄漏至 1300 bar。（不需要工具）每次只需用手指按下压杆即可确保连接恰到好处。该接头与色谱柱入口（按下压杆相当于扳手转动一整圈）匹配。

InfinityLab Quick Turn 接头



使用 InfinityLab Quick Turn 接头，可实现手紧式连接（无泄漏至 400 bar），或 UHPLC 连接（使用安装工具部件号 5043-0915 无泄漏至 800 bar，使用扳手转动四分之一圈后为 1300 bar）。弹簧式设计保证了零死体积，使其成为色谱柱出口和检测器连接的理想选择。

有关详细信息，请参阅“Agilent InfinityLab：建立出色的连接 — 轻松自如，体验更可靠的接头”

(<https://www.agilent.com/en/products/liquid-chromatography/lc-supplies/capillaries-fittings/infinitylab-fittings/agilent-infinitylab-fittings-video>)。

Bio 2D-LC 定量环



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

用于 SHC 和 MHC 阀接头 M4 的 Bio 定量环

部件号	说明
5004-0025 📄	毛细管 MP35N 0.35 mm x 104 mm M/M 10 µL
5004-0026 📄	毛细管 MP35N 0.35 mm x 208 mm M/M 20 µL
5004-0027 📄	毛细管 MP35N 0.35 mm x 420 mm M/M 40 µL
5004-0028 📄	毛细管 MP35N 0.35 mm x 831 mm M/M 80 µL
5004-0029 📄	毛细管 MP35N 0.35 mm x 1247 mm M/M 120 µL
5004-0030 📄	毛细管 MP35N 0.35 mm x 1870 mm M/M 180 µL

Bio 2D-LC 毛细管



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

InfinityLab Bio 2D-LC 毛细管工具包 (5005-0077)

#	部件号	说明
3	5500-1603 	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 mm x 400 mm
1	5004-0031 	毛细管 MP35N 0.12 mm x 600 mm
2	G7116-60071 	Bio Quick Connect 快速连接热交换器标准流速
2	5500-1578 	Quick Connect 快速连接毛细管 MP35N 0.12 mm x 105 mm
2	5500-1597 	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12 mm x 400 mm
1	5500-1599 	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 mm x 105 mm
1	5500-1600 	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 mm x 150 mm
1	5500-1596 	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12 mm x 280 mm
2	5067-5965 	InfinityLab Quick Connect LC 接头
20	5067-5966 	InfinityLab Quick Turn 接头
1	0890-1713 	PTFE 管线，内径/外径 0.8/1.6 mm
1	5063-6591 	PEEK 接头，每包 10 个

注意

InfinityLab Quick Connect 快速连接接头是用于 UHPLC 的真正“手紧式”可重复使用的接头，无泄漏至 1300 bar。

不需要工具。每次只需用手指按下压杆即可实现完美连接。该接头非常适合色谱柱入口（注意：按下压杆相当于扳手转动一整圈）。






使用 InfinityLab Quick Turn 接头，可实现手紧式连接（无泄漏至 400 bar），或 UHPLC 连接（使用接头安装工具 (5043-0915) 无泄漏至 800 bar，使用扳手转动四分之一圈后为 1300 bar）。弹簧式设计保证了零死体积，使其成为色谱柱出口和检测器连接的理想选择。

其他生物兼容性毛细管



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

部件号	说明
5500-1596 📄	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12 mm x 280 mm 用于短色谱柱
5500-1598 📄	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12 mm x 500 mm 用于长色谱柱
5500-1597 📄	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12 mm x 400 mm
5500-1599 📄	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 mm x 105 mm
5500-1603 📄	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.17 mm x 400 mm
5500-1578 📄	Quick Connect 快速连接毛细管 MP35N 0.12 mm x 105 mm
5500-1279 📄	毛细管 MP35N 0.12 mm x 500 mm SI/SI
5500-1419 📄	毛细管 MP35N 0.17 mm x 500 mm, SI/SI
5004-0031 📄	毛细管 MP35N 0.12 mm x 600 mm
5500-1376 📄	不锈钢毛细管 0.12 mm x 170 mm M/M
5500-1227 📄	不锈钢毛细管 0.17 mm x 150 mm SL-SL
5500-1283 📄	毛细管 MP35N 0.25 mm x 80 mm 压力传感器至出口过 滤器、泵头和多功能阀
5500-1284 📄	毛细管 MP35N 0.17 mm x 120 mm SI/SX

部件号	说明
5004-0041 	毛细管 MP35N 0.17 x 130 mm SI/SX
5005-0046 	毛细管 MP35N 0.12 mm x 2 m
5500-1593 	Quick Turn 接头毛细管 MP35N 0.12 mm x 105 mm
5067-5966 	InfinityLab Quick Turn 接头
5043-0277 	死堵头，长型 10-32，PEEK

注意

InfinityLab Quick Turn 接头需要此表中指定的毛细管。

注意

InfinityLab Quick Connect 快速连接接头是用于 UHPLC 的真正“手紧式”可重复使用的接头，无泄漏至 1300 bar。

不需要工具。每次只需用手指按下压杆即可实现完美连接。该接头非常适合色谱柱入口（注意：按下压杆相当于扳手转动一整圈）。

使用 InfinityLab Quick Turn 接头，可实现手紧式连接（无泄漏至 400 bar），或 UHPLC 连接（使用接头安装工具 (5043-0915) 无泄漏至 800 bar，使用扳手转动四分之一圈后为 1300 bar）。弹簧式设计保证了零死体积，使其成为色谱柱出口和检测器连接的理想选择。

压力释放工具包

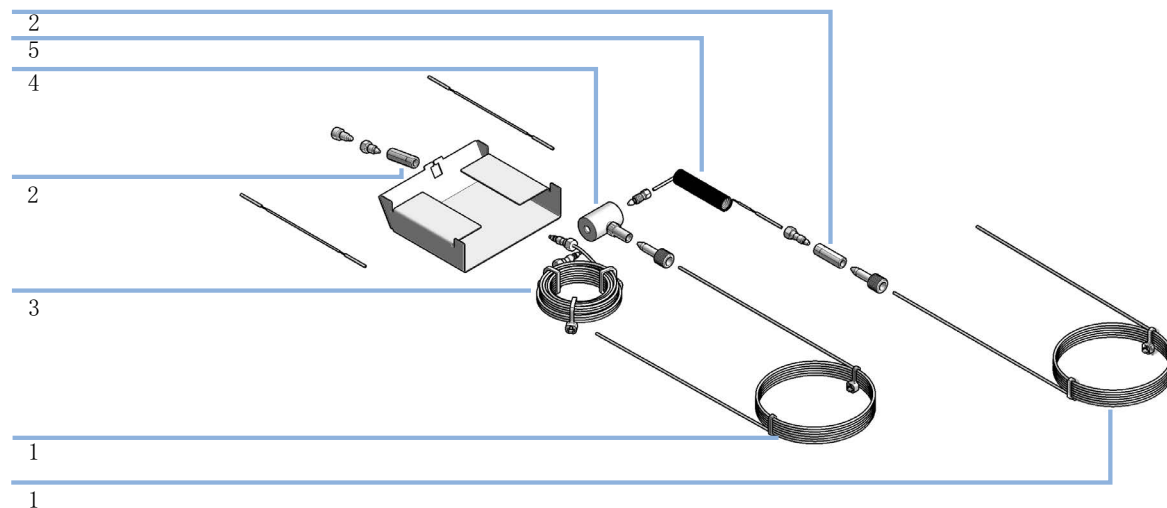


图 243 压力释放工具包，部件

条目	部件号	说明
	G4236-60010 📄	2D-LC 压力释放工具包
	0100-0969 📄	三通、不锈钢、1/16 英寸、低死体积 未显示
1	5021-1816 📄	毛细管 内径 0.17 mm, 105 mm 长
2	5022-2184 📄	两通,零死体积通用两通,无接头
3	G7167-87307 📄	500 μ L 定量环扩展
4	G4212-60022 📄	压力释放阀
5	5067-5939 📄	分流器-毛细管 0.05-ID L-1000 mm
	5022-2144 📄	T 形接头, PEEK, 1/16 英寸, 0.57 μ L 吹扫体积

阀选项概述（适用于 Bio 2D-LC）

Bio 2D-LC 阀工具包 ASM



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

InfinityLab Bio 2D-LC ASM 阀工具包 (G5643B)

部件号	说明
5005-0078 E	Agilent InfinityLab Bio 2D-LC ASM 阀
5190-6895 E	2D-LC 入门样品，1 x 2 mL
G5642-64000 E	不锈钢生物兼容性 MHC 定量环组件
699968-301 E	Poroshell 120 Bonus-RP，3.0 x 50 mm，2.7 μm
G4236-64000 E	2D-LC 轻松入门 USB 资料盘工具包
5005-0077 E	InfinityLab Bio 2D-LC 毛细管工具包
G2453-85060 E	甲酸-试剂级 5 mL (5 cc)
685775-902 E	Poroshell SB-C18，2.1 x 100 mm，2.7 μm
G1680-63721 E	网络 LAN 交换机
	本地化电源线

注意

包含 Bio 2D-LC ASM 阀的 InfinityLab Bio 2D LC ASM 阀工具包 (G5643B) 取代了包含 2D-LC 阀（部件号：5067-4266）的 InfinityLab Bio 2D LC ASM 阀工具包 (G5643A)。

Bio 2D-LC ASM 阀头 (1300 bar)



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

Agilent InfinityLab Bio 2D-LC ASM 阀 (5005-0078)

部件号	说明
5320-0017 📄	Bio 2D-LC ASM 阀头，1300 bar
5004-0021 📄	毛细管 MP35N 0.12 mm x 85 mm M4/M4 (ASM 因子 5)
5004-0022 📄	毛细管 MP35N 0.12 mm x 170 mm M4/M4 (ASM 因子 3)
5004-0023 📄	毛细管 MP35N 0.12 mm x 340 mm M4/M4 (ASM 因子 2)
5004-0024 📄	毛细管 MP35N 0.12 mm x 680 mm M4/M4 (ASM 因子 1.5)
5004-0020 📄	毛细管 MP35N 0.12 mm x 170 mm M4/M4 (传输毛细管)
0890-1713 📄	PTFE 管线，内径/外径 0.8/1.6 mm
5005-0064 📄	堵头，生物兼容，MP35N，用于 M4 端口 (不包含)
0100-2441 📄	带接头的 ZDV Union PEEK (不包含)

ASM 阀头 Bio



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

#	部件号	说明
1	5068-0257	轴承环
1	5068-0240	转子密封垫 (VHP)
5	5068-0019	定子螺丝
1	5299-0005	定子 5-10 PD CF 1300 bar BIO

多重中心切割阀



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

#	部件号	说明
1	5067-4273	6 色谱柱选择阀头，1300 bar
6	5004-0027	毛细管 MP35N 0.35 mm x 420 mm M/M 40 µL 传输毛细管
1	5043-0269	连接适配器

注意

该 MHC 阀的当前版本使用生物兼容性样品定量环和生物兼容性阀头。

2 位/10 通阀 Bio (1300 bar)



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

2 位/10 通阀，bio 1300 bar (G5641A) PEEK，MP35N

部件号	说明
5067-6682 📄	2 位/10 通 bio 阀头，1300 bar
5068-0286 📄	定子 MP35N
5068-0205 📄	转子密封垫 (PEEK)
5068-0019 📄	定子螺丝
5013-0002 📄	Bio 2/10 毛细管工具包 1300 bar (可单独订购)

12 位/13 通选择器阀头，生物惰性 (210 bar)







生物惰性模块仅使用生物惰性部件！

维护所需部件

压力释放工具包

12 位/13 通选择器阀头，210 bar，生物惰性 (5067-4159))






#	部件号	说明
4	5068-0059 	定子螺丝
1	1535-4045 	轴承环
1	0101-1288 	重建工具包 (转子密封垫和定子面)
1	5068-0097 	生物惰性定子头

2 位/6 通阀，生物惰性 (600 bar)

生物惰性模块仅使用生物惰性部件！



2 位/6 通阀头，600 bar，生物惰性 (5067-4148)

部件号	说明
5068-0060 	生物惰性定子头
0101-1409 	转子密封垫 (PEEK)
0100-1851 	定子面，陶瓷
1535-4045 	轴承环
5068-0020 	定子螺丝，每包 10 个

4 色谱柱选择器阀，生物惰性 (600 bar)



生物惰性模块仅使用生物惰性部件！

4 色谱柱选择器阀头，600 bar，生物惰性 (5067-4134)

#	部件号	说明
1	5068-0045	生物惰性转子密封垫，PEEK
1	5068-0044	生物惰性定子头
1	5068-0093	定子面组件
5	5068-0059	定子螺丝
1	1534-4045	轴承环





各种Bio-LC 模块的其他生物兼容性备件概述

1290 Infinity II Bio 高速泵 (G7132A) 生物兼容性部件



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

1290 Infinity II Bio 高速泵 (G7132A) 生物兼容性部件

部件号	说明
G7132-60002 	生物兼容性毛细管 MP35N 0.17 mm x 300 mm 吹扫阀至 Jet Weaver
5500-1421 	生物兼容性毛细管 MP35N 0.25 mm x 130 mm 吹扫阀至压力传感器
5500-1420 	生物兼容性毛细管 MP35N 0.25 mm x 250 mm 吹扫阀至泵头组件通道 A 和 B
5500-1419 	毛细管 MP35N 0.17 mm x 500 mm, SI/SI Jet Weaver 至 Multisampler (标准 Bio-LC 设置)





有关更多 bio 泵部件，请参阅用户手册。

1290 Infinity II Bio 多功能泵 (G7131A/C) 生物兼容性部件



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

1290 Infinity II Bio 多功能泵 (G7131A/C) 生物兼容性部件

部件号	说明
G7131-20009 	生物兼容性密封垫
G7131-60004 	生物兼容性全能出口过滤器
5500-1283 	毛细管 MP35N 0.25 mm x 80 mm 压力传感器至出口过 滤器、泵头和多功能阀 例如泵头至压力传感器
5500-1419 	毛细管 MP35N 0.17 mm x 500 mm, SI/SI 冲洗阀/Jet Weaver 至 Multisampler

部件号	说明
5500-1284 📄	毛细管 MP35N 0.17 mm x 120 mm SI/SX 多功能阀内部连接
5004-0041 📄	毛细管 MP35N 0.17 x 130 mm SI/SX 至/从 Jet Weaver
0905-1731 📄	生物惰性清洗密封垫
5320-0048 📄	生物兼容性泵出口过滤器滤芯，每包 2 个
5065-4445 📄	带有 PharMed 管的蠕动泵
5720-0020 📄	1290 Infinity II Bio 在线过滤器工具包

有关更多 bio 泵部件，请参阅用户手册。

1290 Infinity II Bio Multisampler (G7137A) 生物兼容性部件



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

1290 Infinity II Bio Multisampler (G7137A) 生物兼容性部件

部件号	说明
G7137-87201 📄	生物兼容性针座
G7137-87012 📄	生物兼容性高压针座组件 0.12 mm
5320-0010 📄	转子密封垫 1300 bar (PEEK)
G7137-20003 📄	1290 Bio 计量装置柱塞杆密封垫，2 mm，40 µL

维护所需部件

压力释放工具包

部件号	说明
5065-4445 E	蠕动泵滤芯
5067-6739 E	2 位/6 通进样阀 Bio 1300 bar
5068-0281 E	定子面, MP35N
G7137-60300 E	样品定量环 MP35N 20 μ L, 右侧 (红色/橙色编码)
G7137-60400 E	样品定量环 MP35N 40 μ L, 右侧 (绿色/橙色编码)
G7137-60500 E	样品定量环 MP35N 100 μ L, 右侧 (蓝色/橙色编码)

标准

部件号	说明
5500-1278 E	毛细管 MP35N 0.17 mm x 100 mm SL/SL 分析头至进样阀
5500-1279 E	毛细管 MP35N 0.12 mm x 500 mm SI/SI 进样阀至 MCT 中的 Quick Connect 快速连接热交换器
5500-1419 E	毛细管 MP35N 0.17 mm x 500 mm, SI/SI Jet Weaver 至 Multisampler

多重清洗

部件号	说明
5500-1278 E	毛细管 MP35N 0.17 mm x 100 mm SL/SL 分析头至进样阀
5500-1280 E	毛细管 MP35N 0.17 mm x 250 mm SL-SL 冲洗头至进样阀

部件号	说明
5500-1279 E	毛细管 MP35N 0.12 mm x 500 mm SI/SI 进样阀至 MCT 中的 Quick Connect 快速连接热交换器 (标准 Bio-LC 设置)
5500-1419 E	毛细管 MP35N 0.17 mm x 500 mm, SI/SI Jet Weaver 至 Multisampler (标准 Bio-LC 设置)

有关更多进样器部件，请参阅用户手册。

1260 Infinity II Bio Multisampler (G5668A) 生物惰性部件



生物惰性模块仅使用生物惰性部件！

1260 Infinity II Bio Multisampler (G5668A) 生物惰性部件

部件号	说明
G5668-87200 E	Bio 进样器针
5068-0209 E	转子密封垫 (PEEK)
G5668-87017 E	Bio 针座内径 0.17
G5668-60500 E	生物惰性样品定量环 100 μ L
5067-4263 E	2 位/6 通生物惰性进样阀 600 bar
5068-0060 E	生物惰性定子头
G5611-60500 E	毛细管 400 x 0.17 mm, 钛 (生物惰性) 泵至进样器 (标准 Bio-LC 设置)

部件号	说明
G5611-60502 E	毛细管 Ti 0.17 mm x 900 mm, L (生物惰性) 泵至恒温自动进样器 (标准 Bio-LC 设置)
5043-0277 E	死堵头, 长型 10-32, PEEK

注意

安装不锈钢包覆的 PEEK 毛细管 (生物惰性) 时要谨慎。与普通 LC 毛细管相比, 这些毛细管需要特别注意并使用不同的处理方式。有关详细说明, 请参阅技术说明《不锈钢包覆的 PEEK 毛细管 (G5611-90120) 的安装》

标准

部件号	说明
5500-1278 E	毛细管 MP35N 0.17 mm x 100 mm SL/SL 分析头至进样阀
5500-1256 E	毛细管 Ti 0.17 mm x 100 mm SL/SL
5500-1279 E	毛细管 MP35N 0.12 mm x 500 mm SI/SI 进样阀至 MCT 中的 Quick Connect 快速连接热交换器
5500-1419 E	毛细管 MP35N 0.17 mm x 500 mm, SI/SI Jet Weaver 至 Multisampler

多重清洗

部件号	说明
5500-1278 E	毛细管 MP35N 0.17 mm x 100 mm SL/SL 分析头至进样阀
5500-1280 E	毛细管 MP35N 0.17 mm x 250 mm SL-SL 冲洗头至进样阀
5500-1279 E	毛细管 MP35N 0.12 mm x 500 mm SI/SI 进样阀至 MCT 中的 Quick Connect 快速连接热交换器 (标准 Bio-LC 设置)
5500-1419 E	毛细管 MP35N 0.17 mm x 500 mm, SI/SI Jet Weaver 至 Multisampler (标准 Bio-LC 设置)

维护所需部件

压力释放工具包

部件号	说明
5500-1257 E	毛细管 Ti 0.17 mm x 250 mm SL/SL 进样阀至冲洗泵头
5500-1256 E	毛细管 Ti 0.17 mm x 100 mm SL/SL

有关更多进样器部件，请参阅用户手册。

1260/1290 Infinity II MCT (G7116A/B) 生物兼容性部件



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

1260/1290 Infinity II MCT (G7116A/B) 生物兼容性部件

部件号	说明
G7116-60071 E	Bio Quick Connect 快速连接热交换器标准流速 1.6 μ L
G7116-60081 E	Quick Connect Bio 快速连接热交换器，高流速 3.0 μ L
G7116-60091 E	Quick Connect 快速连接 Bio 热交换器超低扩散 1.0 μ L

有关更多 bio MCT 部件，请参阅用户手册。

1260/1290 Infinity II MCT (G7116A) 生物惰性部件



生物惰性模块仅使用生物惰性部件！

1260/1290 Infinity II MCT (G7116A) 生物惰性部件

部件号	说明
G7116-60009 🔗	生物惰性 Quick Connect 快速连接热交换器 标准流量

有关更多 bio MCT 部件，请参阅用户手册。

1260/1290 Infinity II DAD (G7117A/B) 生物兼容性部件



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

1260/1290 Infinity II DAD (G7117A/B) 生物兼容性部件

部件号	说明
G7117-60020 🔗	最大光强卡套流通池 LSS (10 mm, V(σ) 1.0 μL) MP35N, PEEK, 熔融石英
G7117-60101 🔗	光阑

注意

光阑与其他最大光强卡套流通池不兼容。

对于可能会发生**光降解的光敏样品**的分析，应安装光阑组件。有关更多详细信息，请查看《Agilent InfinityLab LC 系列二极管阵列检测器用户手册》。

1260/1290 Infinity II DAD (G7117A/B) 生物惰性部件

生物惰性模块仅使用生物惰性部件！

**BIO
INERT**

1260/1290 Infinity II DAD (G7117A/B) 生物惰性部件

部件号	说明
G5615-60018 ☒	最大光强滤芯池生物惰性 (10 mm, V(σ) 1.0 μL) 包括长 1.5 m，内径 0.18 mm 的 PEEK 毛细管 (0890-1763) 和每包 10 个的 PEEK 接头 (5063-6591)


有关更多检测器部件，请参阅用户手册。

1260 Infinity II DAD (G7115A)/1260 Infinity II MWD (G7165A) 生物惰性部件

生物惰性模块仅使用生物惰性部件！

**BIO
INERT**

1260 Infinity II DAD (G7115A)/1260 Infinity II MWD (G7165A) 生物惰性部件

部件号	说明
G5615-60022 	标准流通池生物惰性，10 mm、13 μ L、120 bar (12 MPa)，适用于 MWD/DAD，包括 0890-1763 – 0.18 x 1500 mm PEEK 毛细管和 5063-6591 – PEEK 接头



有关更多检测器部件，请参阅用户手册。

1260/1290 Infinity II VWD (G7114A/B) 生物兼容性部件



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

1260/1290 Infinity II VWD (G7114A/B) 生物兼容性部件

部件号	说明
G1314-60189 	Bio 微量流通池 VWD，3 mm，流通池体积 2 μ L，蓝宝石，MP35N
G1314-60188 	Bio 标准流通池 VWD，10 mm，流通池体积 14 μ L，蓝宝石，MP35N


有关更多检测器部件，请参阅用户手册。

1290 Infinity II FLD (G7121A) 生物惰性部件



生物惰性模块仅使用生物惰性部件！

1290 Infinity II FLD (G7121A) 生物惰性部件

部件号	说明
G5615-60005 	生物惰性流通池，8 μ L，20 bar (pH 1–12)，包括毛细管工具包流通池 BIO (G5615-68755)和 PEEK 接头

有关更多检测器部件，请参阅用户手册。

1290 Infinity II Bio LC 色谱柱的选择



对于 1290 Infinity II Bio LC 模块，只能使用 bio/生物兼容性部件。
请勿混用 1260 Infinity II 生物惰性 LC 模块和 1290 Infinity II Bio LC 模块的部件。

部件号	说明
653750-902 E	AdvanceBio 肽谱分析 120 Å, 2.1 mm x 150 mm, 2.7 µm 肽谱分析 (反相色谱法)。
PL1912-1502 E	PLRP-S 1000 Å, 2.1 mm x 50 mm, 5 µm 肽、蛋白质和蛋白质复合物的分析制备分离 (反相色谱法)
PL1980-3201PK E	AdvanceBio SEC 200 Å, 2.1 mm x 150 mm, 1.9 µm, PEEK 聚合和碎片分析 (体积排阻色谱法)

其他信息：

- 653750-902 (AdvanceBio 肽谱分析, 2.1 x 150 mm) 是一种用于高分辨率肽图谱的常规不锈钢色谱柱。它在以下 2D-LC 应用《使用 4D-LC/MS 对单克隆抗体电荷异构体进行全自动化表征》中用作示例。
- PL1912-1502 (PLRP-S 1000Å, 2.1 x 50 mm) 也是常规不锈钢色谱柱, 但也有 PEEK 内衬版本 (PL1912-1502PK)。它在以下 2D-LC 应用《使用 2D-LC 和天然 MS 对抗体-药物偶联物 (ADC) 进行表征》中用作示例。

有关更多应用详情, 请查看 2D-LC 应用的应用查找器

<https://www.agilent.com/en/promotions/applicationfinder>

2D-LC 的理论基础 407

不相关性 408

分辨率 409

峰容量 412

2D 作为检测器 415

成功模式组合 417

溶剂洗脱模式 418

实际问题 423

本章介绍 2D-LC 的理论背景，并描述了 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案的系统组件（软件和硬件）。

2D-LC 的理论基础

在 2D-LC 中，来自色谱系统（第一维）的馏分传输到第二色谱分离系统（第二维）。因此，2D-LC 基于对一个样品应用两个独立的液相分离系统。2D-LC 主要用于提高分辨率和灵敏度或缩短分析时间。

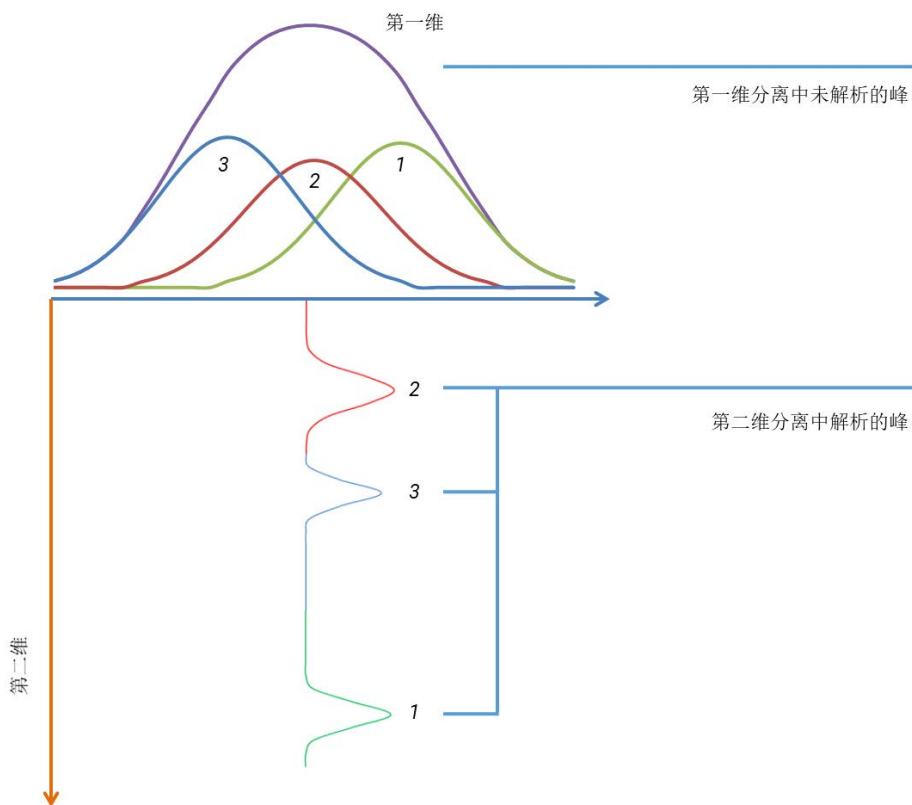


图 244 不相关第一维和第二维的峰容量之间的关系

与 1D-LC 相比，2D-LC 最重要的优点是提高分辨率，这在处理复杂样品时尤为重要。

有关 1D-LC 和 2D-LC 之间主要差异的概述，请参阅以下主题：

- 第 408 页的**不相关性**，
- 第 409 页的**分辨率**和
- 第 412 页的**峰容量**

存在以下不同的 2D-LC 方法：

- 中心切割 (LC-LC)
仅第一维流出物的相关部分被传输到第二维。
- 全切割 (LCxLC)
整个第一维的流出物依次传输到第二维。

不相关性

2D-LC 分离能力取决于，不同分离阶段的两种选择性机制必须尽可能不同。如果机制完全不同且相互独立，则这两种分离称为**不相关**。

选择性机制之间的任何相关性都会使不相关性降级，同时降低 2D-LC 系统的效率。

有关实现最大不相关性的策略，请参阅第 417 页的表 48 和第 421 页的表 49。

分辨率

色谱分离可根据 HPLC 柱的物理参数进行优化，如粒径、孔径、颗粒形态、色谱柱长度和直径、溶剂速度和温度。此外，可以考虑分离的热力学，并且可以控制溶质、固定相和流动相的性质（有机溶剂百分比、离子强度和 pH），以实现尽可能短的保留和最高的选择性。

1D-LC 分辨率 (R_s) 可以描述为三个参数的函数：

- 色谱柱效率或理论塔板数 (N)，
- 选择性 (α)，
- 保留因子 (k)。

$$R_s = \frac{\sqrt{N}}{4} \left[\frac{\alpha - 1}{\alpha} \right] \left[\frac{k'_2}{k'_2 + 1} \right]$$

图 245 分辨率方程

这意味着，选择合适的流动相和固定相性质以及温度对于实现成功分离至关重要。

一维分离中的分辨率通常通过以下方式测量：

$$R = \frac{\Delta t}{4\sigma}$$

R = 分辨率

Δt = 两种组分的最大保留时间差

σ = 两个高斯峰的平均标准偏差

该公式的以下结果在实践中非常重要：

- $R > 1.5$
峰被完全基线解析
- $R > 1$
保留时间的差异大于峰展宽，所以峰间距足以观察不同的组分区域
- $R < 0.5$
峰完全融合

2D-LC 在 2D-LC 中，分离行为更为复杂，如下所述。

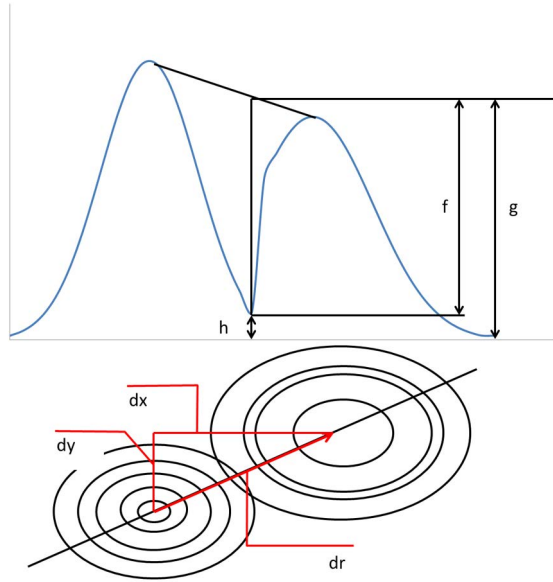


图 246 ²D 分辨率测量示意图：分辨率切片（顶部）和二维等高线图（底部）

等高线图中两个点之间的距离可通过毕达哥拉斯表达式计算：

$$dr = \sqrt{dx^2 + dy^2}$$

对于沿每个维度轴的分辨率，适用：

$$R_1 = \frac{dy}{4\sigma_1}$$

和

$$R_2 = \frac{dx}{4\sigma_2}$$

因此，对于二维，分辨率可计算如下：

$$R_{2D} = \frac{dr}{4\sigma} = \sqrt{\left(\frac{dx}{4\sigma}\right)^2 + \left(\frac{dy}{4\sigma}\right)^2}$$

图 247 ²D 分辨率（毕达哥拉斯关系）

或者， σ 由 σ_1 和 σ_2 的平均值近似，使用易于测量的峰谷比 ($P = f/g$)，并假设峰为高斯：

$$Rs = \sqrt{-\frac{1}{2} \ln\left(\frac{1-P}{2}\right)}$$

图 248 2D 分辨率 (峰谷比关系)

表 47 定义

符号	含义
R	分辨率
Δt	两种组分的最大保留时间差
σ	两个高斯峰的平均标准偏差
dr	平面上两个点之间的距离
P	峰谷比
f	峰谷振幅之间的差值，h 和 g
h	峰谷
g	平均峰最大值

峰容量

峰容量可能会以不同的方式定义：

- 可在可用分离空间（**几何定义**）内解析的最大峰数，或
- 色谱图总面积与任何区域分辨率所需面积之比（**一般定义**）

几何定义 峰容量可定义为可在可用分离空间中解析的最大峰数。因此，峰容量 n_c 与理论塔板数 N 有关：

$$n_c = PN^{1/2}$$

（ P 取决于保留时间范围）

实际上，色谱图上的峰通常不是随机分布的，而是叠加。换句话说：实际上，峰不会均匀地填满可用的分离空间。这就是 1D-LC 中样品的可检测组分数量相对较少的原因所在。

2D-LC 分离为增加 n_c 提供另一种可能性：不相关保留机制产生分离面。因此，2D-LC 中的峰容量是单个色谱柱峰容量的乘积。由于第一维和第二维的峰加宽，2D-LC 中的组分在保留平面上呈现为二维椭圆。

如何计算 n_c 取决于以下方法：

- 对于全切割 2D-LC：

$$n_c = \frac{L_1 L_2}{ab} = n_{c1} n_{c2}$$

L = 维度的分隔空间

Ab = 在分离面上包围椭圆的矩形面积

- 对于中心切割 2D-LC：

$$n_c = \sum_{i=1}^k n_{ci}$$

一般定义 或者，峰容量可定义为色谱图总面积 A 与任何区域分辨率所需面积 A_0 的比率：

$$n_{c,alternat} = \frac{A}{A_0}$$

以这种方式定义的 n_c 与几何定义相关系数为：

$$n_c = \frac{\pi}{4} n_{c,alternat} \approx 0.79 n_{c,alternat}$$

2D-LC 中的峰容量限制

在理想情况下（**不相关性**），总峰容量 ($n_{c,2D}$) 应等于第一维和第二维分离 (1n_c 和 2n_c) 的单个峰容量的乘积

$$n_{c,2D} = {}^1n_c \times {}^2n_c$$

实际上，峰容量的增加与峰值解析能力的增加并不成正比。

可能的原因是：

- 在 1D-LC 中，单组分峰的基线宽度 $x_0 = 6\sigma$ ，最大值两侧的组分自由空间 x_0 单位是确保基线解析峰所必需的。
- 在 2D-LC 中，单组分区为 $A_0 = 2\pi r^2$ ，组分自由空间面积为 $\pi(2r)^2$ 。
- 因此：对于一维中的每两个无组分宽度，二维中需要四个无组分区。

2D-LC 结论

1D-LC 不适用于复杂混合物的分离，因为与待观察的峰数相比，可观察的峰数太少。一个理论模型（叠加的统计模型 = SMO）与现实世界的观察、预测结果很好地关联，可以看作色谱峰的总峰容量的最大部分是 37 % 个，甚至只有 18 % 个是单峰。这意味着，分离含有大量组分的复杂样品需要极高的峰容量，这是非常难以实现的。

与 1D-LC 分离相比，预测 2D-LC 中可观察到的峰数量非常复杂。例如，在给定的峰容量和成分数量下，两个分离轴的纵横比会影响两个分离的效果。

从实用的角度来看，应该比较 1D-LC 和 2D-LC 之间的性能，考虑以下几个方面：

- 峰容量
- 实验色谱图中观察到的峰数

理想的 2D 峰容量

2D-LC 中的一个主要问题是， 2D 采样流程导致的 1D 分辨率损失。决定性因素是：

- 2D 分离的梯度时间不得超过 1D 分离的采样间隔
- 二维空间中一对峰的分辨率与第一维和第二维的分辨率有关，即毕达哥拉斯平均值（请参见第 410 页的图 247）

2D 色谱图只是显示在第二色谱柱上获得的一系列连续色谱图的一种方式，第二色谱柱和检测器只是第一色谱柱中的一种独特类型的化学选择性检测器（请参见第 415 页的 2D 作为检测器）。第二色谱柱上观察到的峰宽与 1D 中使用的采样时间无关。

这导致了两种极端情况，即组分混合物的行为：

- 将未溶解的混合物注入第二色谱柱，第二色谱柱完美分离分析物

$R_{s,2D}$ 与 1D 采样速率无关

- 将部分溶解的混合物注入第二色谱柱中，分析物在第二色谱柱上共同洗脱。
 $R_{s,2D}$ 非常依赖于第一维采样速率。

这表明，确定 1D 流出物的采样频率非常重要，以避免分辨率损失。

注意

理想 2D 峰容量的理论极限由 Murphy-Schure-Foley 准则（M-S-F 采样准则）定义。根据该标准，必须在第一维峰 8σ 宽度范围内对流出物进行至少 3 - 4 次采样。

2^D 作为检测器

从功能上讲，2D-LC 的 2^D 操作就像一个化学敏感检测器，用于检测从 1^D 色谱柱上洗脱的峰。由此，可将 2D-LC 理解为三步流程：

- 1^D 分离 (1)
- 1^D 采样 (2)
- 2^D 分离和检测 (3)

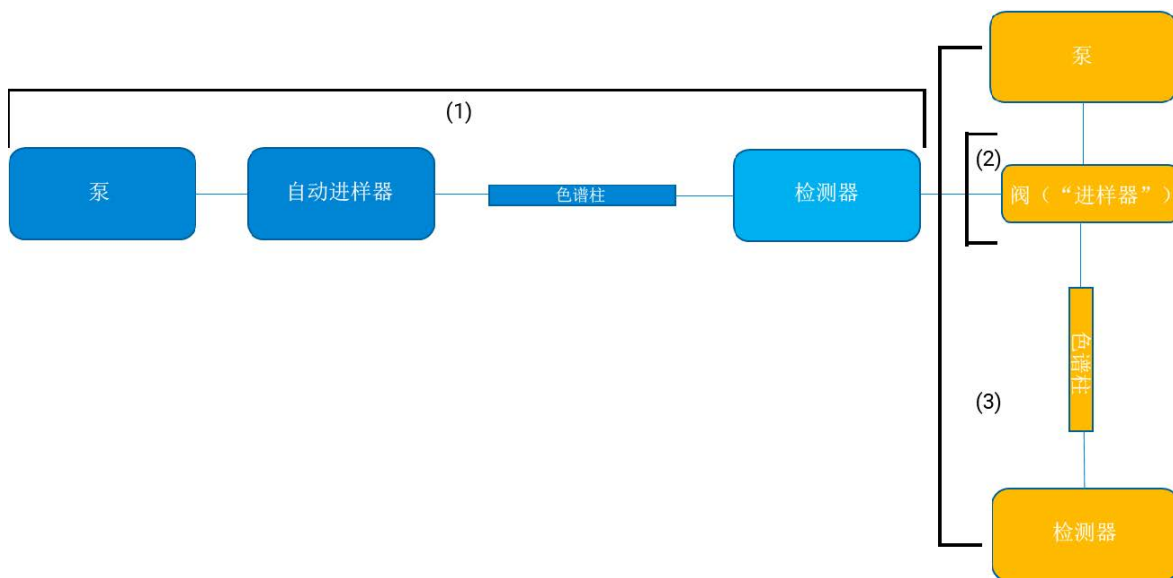


图 249 2D-LC 仪器图

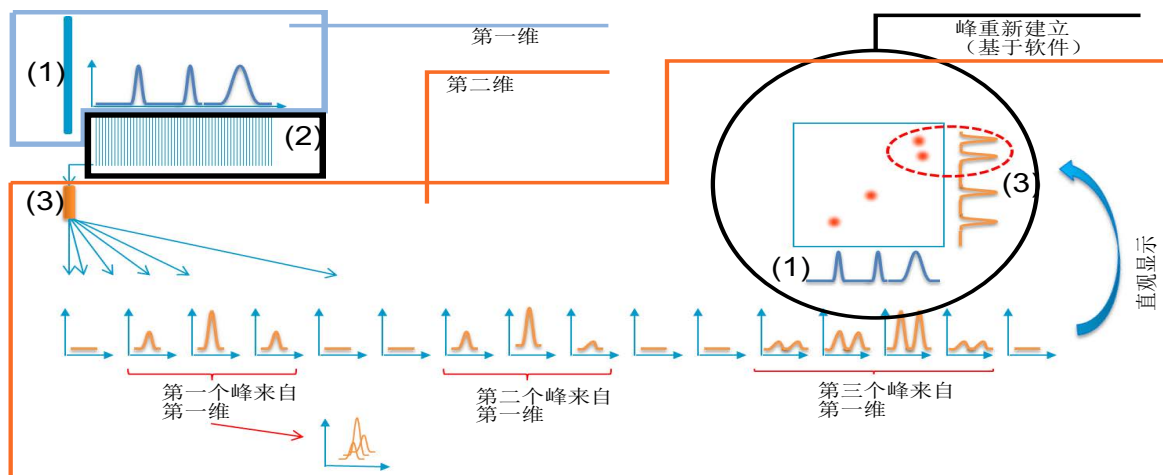


图 250 2D-LC 的原理 (LCxLC 示例)：第一色谱柱的流出物 (1) 被采样 (2) 并进样到第二色谱柱 (3)。检测到第二色谱柱分离的峰并重新建立。

- | | |
|-----|-------|
| (1) | 第一维分离 |
| (2) | 第一维采样 |
| (3) | 第二维分离 |

成功模式组合

2D-LC 分离越有效，两级中涉及的选择性机制就越不同。完全不同的独立机制被称为不相关机制。选择性机制之间的任何相关性都会使不相关性降级，同时降低 2D-LC 系统的效率。

因此，选择固定相和流动相的最佳组合是改进 2D-LC 方法的主要问题。第 417 页的表 48 总结了正相 (NP)、反相 (RP)、离子交换 (IEC) 和尺寸排除色谱 (SEC) 组合用于 2D-LC 操作的优缺点。

表 48 2D-LC (LCxLC) 的模式组合

组合	不相关性	峰容量	应用程序	注释
RP x RP	1	++ ²	肽组学、代谢组学、药物、食品、化妆品	可混溶溶剂，应用最广泛，速度快，在两个维上都有梯度洗脱
IEC 和 RP	+ ³	-	蛋白质组学、肽组学	
SEC 和 RP	+	4 ₋	聚合物、蛋白质组学	
NP 和 RP	+		聚合物、药物、油	溶剂不兼容，应用受限
亲和与 RP	+	-	蛋白质组学	
SEC 和 NP	+	-	聚合物	
SEC 和 IEC	+	-	蛋白质组学	

¹ 不相关性，取决于色谱柱的选择或流动相的选择

² 非常好

³ 好

⁴ 不太好

溶剂洗脱模式

第 421 页的表 49 专注于洗脱模式对 2D 分离的影响。

2D 分离通常采用以下洗脱模式：

- 梯度

在完整的第一维分离过程中，将重复第二维分离的溶剂 A 与溶剂 B 的标准梯度

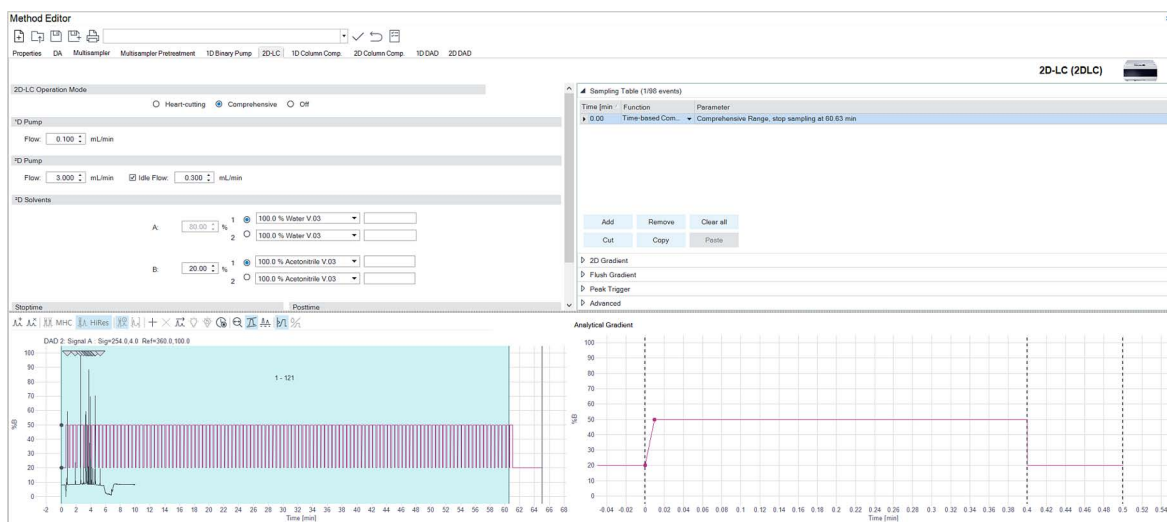


图 251 标准梯度模式

- 迁移梯度

从每个²D分离到下一个二维分离，各个²D梯度的开始-%B和结束-%B值将以定义的方式增加。此外，梯度范围可以从每个²D梯度增加到下一个。

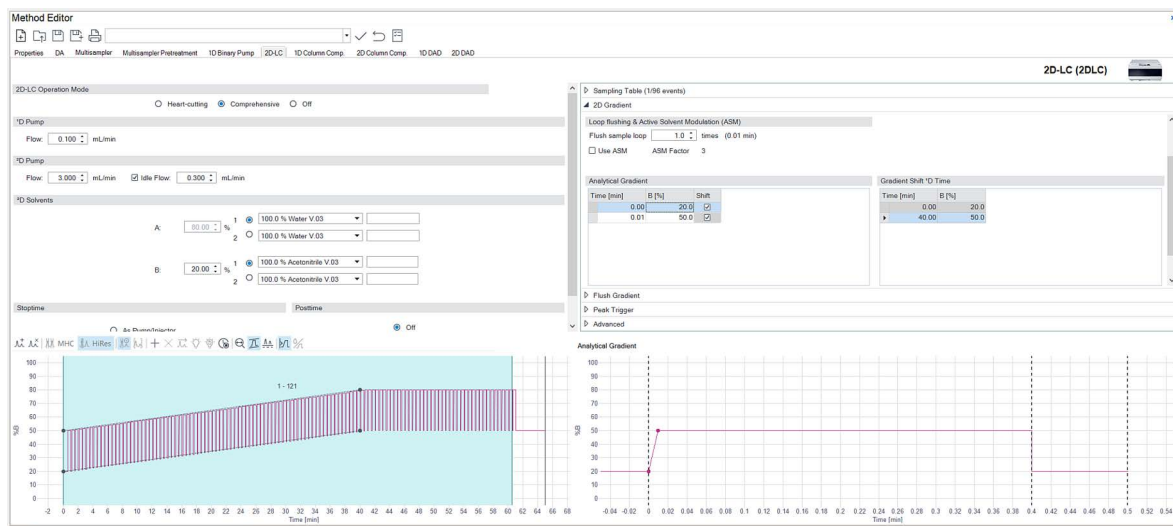


图 252 开始-%B 增加的迁移梯度模式

- 等度
所有第二维分离将在等度模式下进行。

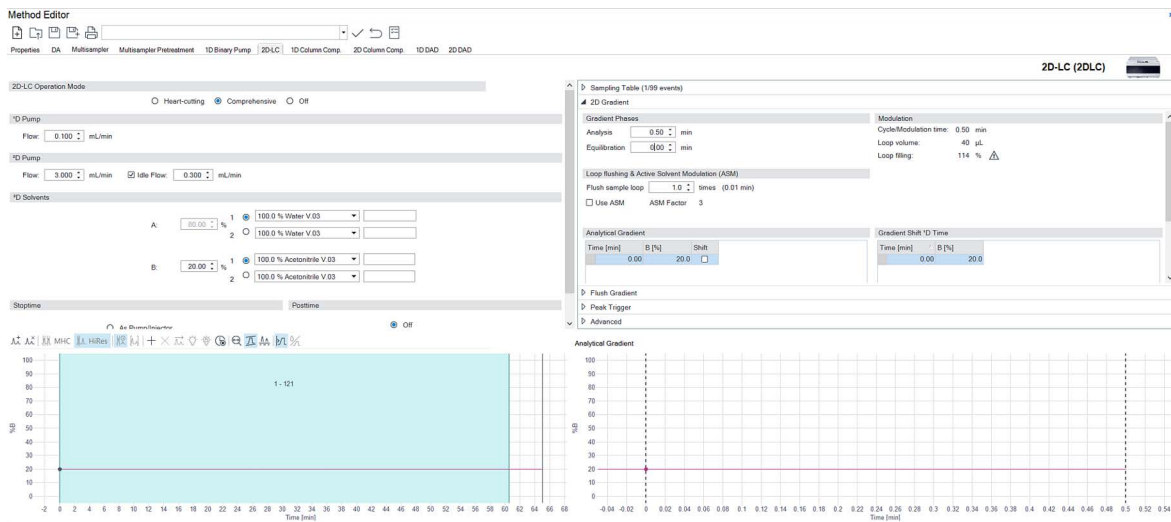


图 253 等度模式

- 递进等度

在每个²D分离中使用近似等度条件，每个连续运行的溶剂强度略微增加。
在²D分离过程中，²D泵送系统的洗脱液成分呈缓梯度。

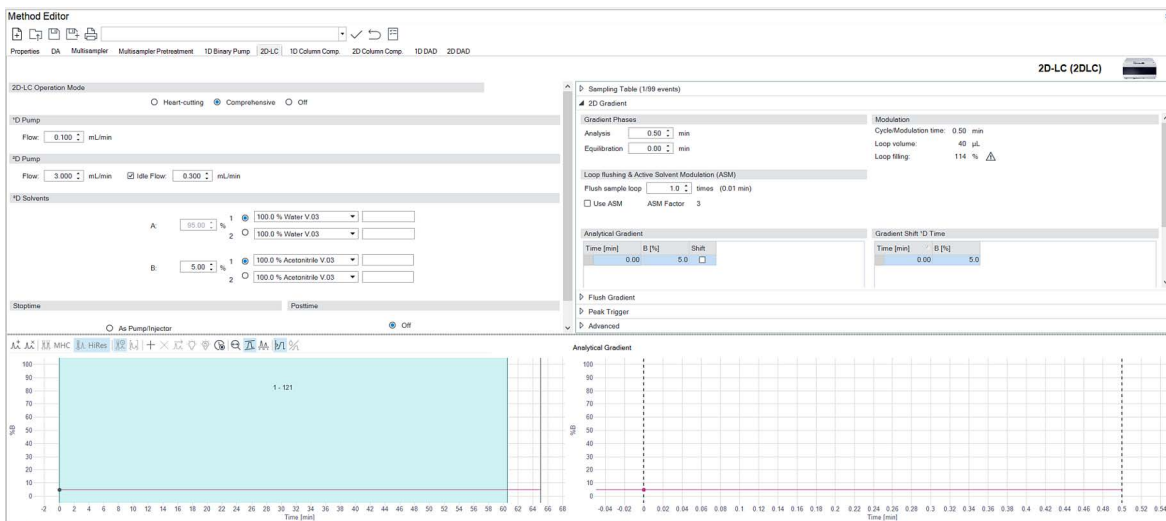


图 254 递进等度模式

表 49 ²D 中的不同洗脱模式 (优点和缺点)

标准	梯度/迁移梯度	等度/递进等度
峰容量	优	劣
样品多样性 (复杂样品)	优	劣
基线性能 (灵敏度)	劣 (溶剂梯度引起的基线漂 移)	优
压力应力 (色谱柱使用寿命!)	劣 (在每个第二维梯度中发生 较大变化)	优 (压力不随等度变化, 随前 进等度而逐渐变化)

Agilent 2D-LC 采集软件可轻松提供所有模式。

每种模式都有优点和缺点。在 2D-LC 的所有应用中，没有任何一种模式优于另一种模式。

2D 中的迁移梯度洗脱模式的影响

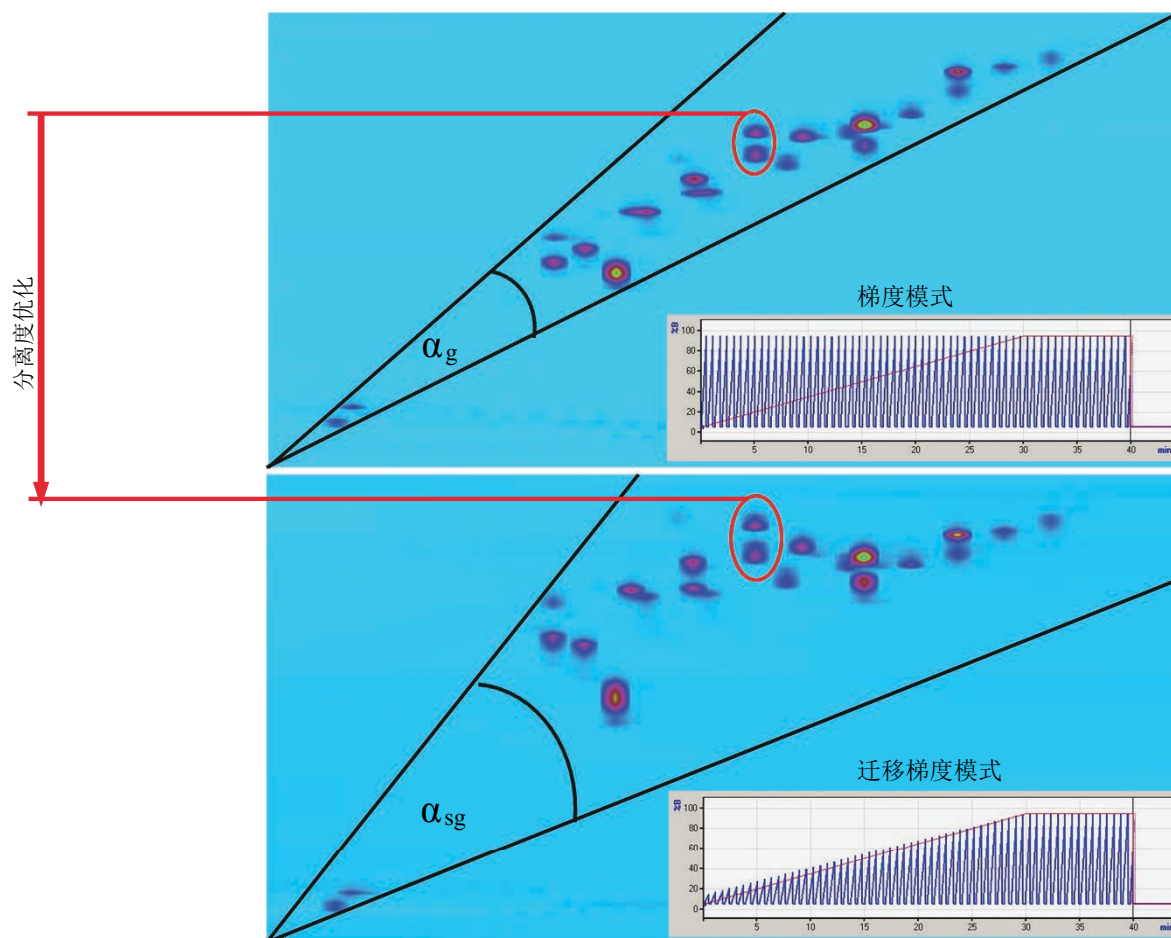


图 255 2D 梯度模式与等度模式的比较及其对分辨率的影响

在迁移梯度模式中实现的 $\alpha\sigma_{sg}$ 大于标准梯度洗脱模式中实现的 α_g 。这可改进峰检测和分离。

请参见 D. Li 和 O. J. Schmitz 的 “Use of Shift Gradient in the Second Dimension to Improve the Separation Space in Comprehensive Twodimensional Liquid Chromatography”, *Anal. Bioanal.Chem.*405, 6511-6517 (2013)

实际问题

下表概述使用 2D-LC 时必须考虑的实际问题。

表 50 2D-LC 中的实际问题

问题	理论基础	注释
第一维色谱柱直径的选择	对每个第二色谱柱运行的最佳第一维流速和进样到第二维色谱柱的样品含量之间的权衡有影响	
两个维度的色谱柱直径比率	导致显著的分析物稀释效应	
分析方法的目标	所选的参数取决于对分析非常重要的因素： <ul style="list-style-type: none"> • 分离尽可能多的成分，或 • 专注于特定成分的分辨率和定量 	第二维分离中的梯度洗脱比等度洗脱提供更好的峰容量。
选择固定相和色谱柱规格	对于两个维度中的 RPLC，第二维色谱柱的保留率必须远远高于第一维色谱柱的保留率，因为： <ul style="list-style-type: none"> • 将会收集相对较大体积的样品并将其进样到第二色谱柱 • 为了尽量减少峰展宽，样品应集中在第二色谱柱的入口 	梯度洗脱是实现峰聚焦的最佳机制。

根据理论，在大多数情况下，应遵循以下实现最佳 2D-LC 的方法：

- 方法

在全切割 2D-LC 中，无需直接进行¹第一维的 UV 检测，因此可以使用乙腈或甲醇以外的其他洗脱液。这意味着，可在第一维中使用非传统有机溶剂。

注意

在使用任何非传统有机溶剂时，应注意这些溶剂仍与所用仪器兼容。如有疑问，请参阅模块文档或致电 Agilent。

¹ 对于第二维分离的峰和时间触发的操作（可选择使用 Agilent 1290 Infinity 2D-LC 解决方案），则在第一维色谱柱和调制阀之间需要一个 UV 检测器。

- 仪器
使用能够产生高流速的极低延迟体积梯度泵送系统，以实现梯度延迟极小的快速二维梯度（如 Agilent 1290 Infinity LC），这点非常重要。
- 色谱柱
由于合适的相位选择相对较少，因此很难实现完全不相关性。
- 检测方法
与质谱相比，基于 DAD 的 UV 检测速度更快、成本更低且具有更高的重现性，因此质谱通过将分离空间扩展到 MS 域，从而提供额外的峰容量增加。建议使用高灵敏度 UV 检测器，因为在二维分离时会稀释第一维的峰，配备 60 mm 流通池的 Agilent 1260 或 1290 Infinity 二极管阵列检测器是理想的二维检测器。
- 数据分析
2D-LC 数据比较复杂。建议使用专用软件。

校验程序	426
准备实验	428
运行实验	430
运行标准中心切割 2D-LC (LC-LC 的校验程序	430
运行多重中心切割 (2D-LC 的校验程序	436
运行高分辨率 (LC-LC 的校验程序	442
运行全切割 (LCxLC 的校验程序	447
运行 ASM 多重中心切割 (MHC) 的校验程序	453
运行 ASM 全切割 (ASM 关闭) 的校验程序	459

本章介绍基于驱动程序的 2D-LC 解决方案在标准中心切割、多重中心切割、高分辨率采样和全切割 2D-LC 模式下 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案的传统校验。

校验程序

校验程序需要 2D-LC 入门样品，1 x 2 mL (5190-6895)，这包含以下组分。

表 51 5190-6895 的组分

分析物	CAS#
阿特拉津	001912-24-9
二丁基阿特拉津	006190-65-4
绿麦隆	015545-48-9
敌草隆	000330-54-1
环嗪酮	051235-04-2
利谷隆	000330-55-2
吡唑草胺	067129-08-2
甲基苯噻隆	018691-97-9
溴谷隆	003060-89-7
甲氧隆	019937-59-8
硝苯地平	021829-25-4
尼莫地平	066085-59-4
扑草净	007287-19-6
另丁津	007286-69-3
特丁津	005915-41-3
去乙基特丁津	030125-63-4

此处描述的方法参数已针对以下硬件配置进行了优化。

表 52 优化方法参数的硬件配置

	¹ D	2D-LC	² D
LC	ALS	通用驱动器，带 2D-LC ASM 阀和两 个 MHC 阀	
	泵		泵
	MCT		MCT
	UV 检测器		UV 检测器
LC-MS			高端质谱仪

准备实验

所需的部件:	部件号	说明
	5190-6895 📄	2D-LC 入门样品, 1 x 2 mL
	G2453-85060 📄	甲酸-试剂级 5 mL (5 cc)
	858700-902 📄	RRHD SB-C18, 2.1x100 mm, 1.8 μm, 1200 bar 在 ¹ D 中
	857768-901 📄	RRHD Bonus-RP, 2.1x50 mm, 1.8 μm, 1200 bar 在中心切割 (LC-LC) 和高分辨率 (高分辨率) 的 ² D 中
	959757-302 📄	RRHD Eclipse Plus C18, 3.0x50 mm, 1.8 μm 在全切割 2D-LC (LCXLC) 的 ² D 中

所需的硬件: 可提供各种硬件配置, 请参见第 55 页的选项。

所需的准备: 请注意, 用于以下流动相的溶剂可用:

- 1D:
 - A = 水 + 0.2 % 甲酸-试剂级 5 mL (5 cc) (G2453-85060)
 - B = 甲醇
- 2D:
 - A = 水 + 0.2 % 甲酸-试剂级 5 mL (5 cc) (G2453-85060)
 - B = 乙腈

注意

建议对旧色谱柱使用传统设置, 对新色谱柱使用轻松入门工具包。

为标准 LC 准备 1.2 mL 样品 (1:10)

1 要制备 1080 μL 稀释溶剂，将 216 μL 甲醇添加到 864 μL 流动相 A。1080 μL 稀释溶剂（流动相 A 中的 20 % 甲醇）已准备好。

或

要制备 3600 μL 稀释溶剂，将 720 μL 甲醇添加到 2880 μL 流动相 A。3600 μL 稀释溶剂（流动相 A 中的 20 % 甲醇）已准备好。

2 要制备 1.2 mL 样品 (1:10)，将 120 μL 2D-LC 入门样品添加到 1080 μL 稀释溶剂。

或

要制备 4.0 mL 样品 (1:10)，将 400 μL 2D-LC 入门样品添加到 3600 μL 稀释溶剂。

使用 1:100 的比例稀释 2D-LC 入门样品

1 100 μL 2D-LC 样品 (1:10) + 900 μL 稀释溶剂 = 1000 μL (1:100)

使用 1:1000 的比例稀释 2D-LC 入门样品

1 100 μL 2D-LC 样品 (1:100) + 900 μL 稀释溶剂 = 1000 μL (1:1000)

注意

对于 2D-LC 附加软件解决方案，请参阅《附加软件用户指南》。

运行实验

运行标准中心切割 2D-LC (LC-LC) 的校验程序

要运行校验，可提供各种硬件配置，请参见第 56 页的表 7。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 427 页的表 52。

以下参数已针对此标准配置进行了优化。您的系统使用的参数可能略有偏差。运行实验，然后编辑或优化设置的方法。

表 53 用于 SHC 2D-LC 的 1D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
¹D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	RRHD SB-C18, 2.1x 100 mm, 1.8 μm, 1200 bar (858700-902)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 泵	
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	甲醇
流速	0.6 mL/min
后运行时间	6 min
流动相梯度:	20 % B 0.00 min 100 % B 50 min
自动进样器	
进样量	2 μL 用于标准 LC 1:10 0.5 μL 正模式用于 LCMS, 1:100 或 1:1000, 具体取决于使用的 LCMS
进样针清洗	在冲洗口中, 10 s, 乙腈/水 (50/50)
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 检测器 (DAD)	

表 53 用于 SHC 2D-LC 的 1D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
二极管阵列检测器信号 A	254 nm, 带宽 4 nm
参比波长	360 nm
参比带宽	100 nm
峰宽	20 Hz
停止时间	停止时间与泵一致/无限制

表 54 用于标准中心切割的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
2D-LC 阀	
	SHC 或 MHC, 带 40 μ L 样品, 传输毛细管, ASM 因子数
²D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	RRHD Bonus-RP, 2.1x 50 mm, 1.8 μ m, 1200 bar (857768-901)
色谱柱温度	40 $^{\circ}$ C
停止时间	与泵一致/无限制
²D 泵	
	中心切割 (基于时间或峰)
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	甲醇
流速	1.0 mL/min
空闲流量	未使用
停止时间	40 min (如果 2D 中的峰不清除, 将不会自动延长)
后运行时间	6 min

表 54 用于标准中心切割的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值																														
采样表	开始 4.35 min, 需要最少 3 个切片 (基于时间或基于峰), 切片长度 4.0																														
<table border="1"> <caption>Sampling Table (9/91 events)</caption> <thead> <tr> <th>Time [min]</th> <th>Function</th> <th>Parameter</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>4.35</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>6.72</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>10.32</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>12.39</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>12.88</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>13.75</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>17.05</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>18.89</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>24.11</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> </tbody> </table>		Time [min]	Function	Parameter	4.35	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	6.72	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	10.32	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	12.39	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	12.88	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	13.75	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	17.05	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	18.89	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	24.11	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False
Time [min]	Function	Parameter																													
4.35	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
6.72	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
10.32	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
12.39	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
12.88	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
13.75	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
17.05	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
18.89	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
24.11	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													

图 256 基于时间

Time [min]	Function	Parameter
3.00	Start Peak-based	MHC 1 x 9 s, Default, Index 0, Exp Time 0 min, RefOnly False, Multi-Inject False
20.00	End Peak-based	

图 257 基于峰

切片时间 (SHC) 可以略有差别, 具体取决于配置和使用的硬件。

2D 梯度:	分析 1.25 min, 平衡 0.50 min
	分析梯度 - 迁移梯度迁移 1D:
	10 % B 0.00 min - 30 % B 20 min
	60 % B 1.25 min
冲洗梯度	未使用
²D 检测器 (DAD)	
二极管阵列	254 nm, 带宽 4 nm
参比波长	360 nm
参比带宽	100 nm

表 54 用于标准中心切割的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
峰宽	80 Hz
停止时间	与泵一致/无限制

表 55 ²D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
离子源	大气压电喷雾 (双 AJS ESI) ¹
离子模式	双 AJS ESI
离子极性	正
存储模式	两种, 首选棒状图
LCMS 流	MS
采集模式	采集模式 MS1 最小范围 (m/z) 50, 最大范围 (m/z) 500, 扫描速率 (质谱图/秒) ³
仪器参数	离子源参数
气体温度	250 °C
气体流量	11 L/min
雾化器	40 psig
鞘气温度	350 °C
鞘气流速	12 L/min
扫描段	1
	扫描源参数
Vcap	3500 V
喷嘴电压	300 V
裂解电压	120
锥孔电压1	45
八级杆参比峰	750

表 55 2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
	参比质量
参比质量已启用	已启用
使用瓶 A 参比雾化器	是
参比雾化器	0 psig
	自动重新校正
平均扫描数	1
检测窗口 (ppm)	100 ppm
最小高度	1000 计数
	参比质量
	正
	121.05087300
	922.00979800
	色谱图
	色谱图类型标签偏移 Y 范围
	TIC TIC 1510000000
	TIC TIC 1510000000
停止时间	与泵一致/无限制

¹ 对于双 AJS ESI 之外的离子源，可能需要调整流速

表 56 2D (LC-MS) 中的建议条件 - SQ MS

参数	值
ESI 源参数	类似于高端 MS 参数
峰宽	0.06 min
扫描	100 – 500 m/z 使用正离子模式
驻留时间	200 ms

- 1 从 2D-LC 数据介质调用方法**标准中心切割校验**，并修改标准中心切割配置的设置。
- 2 使用以甲醇/水 (20/80; v/v) 和 0.1 % 甲酸稀释的 2D-LC 入门样品，1 x 2 mL (5190-6895)、1:10 (仅 UV 校验)、1:100 (LCMS 校验) 或 1:1000 (LCMS 校验) 运行方法。
- 3 如果必要，后续编辑或优化该方法。

运行多重中心切割 (2D-LC) 的校验程序

要运行校验，可提供各种硬件配置，请参见第 56 页的表 7。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 427 页的表 52。

以下参数已针对此标准配置进行了优化。您的系统使用的参数可能略有偏差。运行实验，然后编辑或优化设置的方法。

表 57 用于 MHC 和 高分辨率 2D-LC 的 1D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
¹D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	RRHD SB-C18, 2.1x 100 mm, 1.8 μm, 1200 bar (858700-902)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 泵	
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	甲醇
流速	0.6 mL/min
后运行时间	6 min
流动相梯度:	20 % B 0.00 min 100 % B 50 min
自动进样器	
进样量	2 μL用于标准 LC 1:10 0.5 μL 正模式用于 LCMS, 1:100 或 1:1000, 具体取决于使用的 LCMS
进样针清洗	在冲洗口中, 10 s, 乙腈/水 (50/50)
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 检测器 (DAD)	
二极管阵列检测器信号 A	254 nm, 带宽 4 nm
参比波长	360 nm
参比带宽	100 nm

表 57 用于 MHC 和 高分辨率 2D-LC 的 1D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
峰宽	20 Hz
停止时间	停止时间与泵一致/无限制

表 58 用于多重中心切割的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
2D-LC 阀	
	MHC, 带 40 μ L 样品, 传输毛细管, ASM 因子数
²D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	RRHD Bonus-RP, 2.1x 50 mm, 1.8 μ m, 1200 bar (857768-901)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
²D 泵	
	中心切割 (基于时间或峰)
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	乙腈
流速	1 mL/min
空闲流量	未使用
停止时间	40 min (如果 2D 中的峰不清除, 将不会自动延长)
后运行时间	6 min

表 58 用于多重中心切割的 2D (HPLC) 中的建议条件

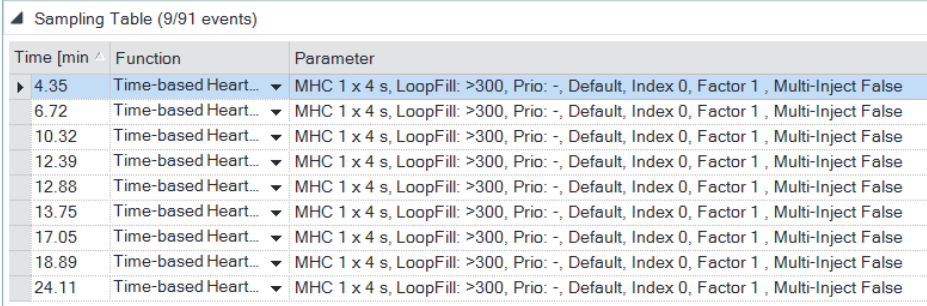
参数	值																														
采样表	开始 4.35 min, 至少需要 5 个切片 (基于时间或基于峰), 切片长度 4.0																														
 <table border="1"> <caption>Sampling Table (9/91 events)</caption> <thead> <tr> <th>Time [min]</th> <th>Function</th> <th>Parameter</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>4.35</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>6.72</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>10.32</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>12.39</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>12.88</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>13.75</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>17.05</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>18.89</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>24.11</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> </tbody> </table>		Time [min]	Function	Parameter	4.35	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	6.72	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	10.32	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	12.39	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	12.88	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	13.75	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	17.05	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	18.89	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	24.11	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False
Time [min]	Function	Parameter																													
4.35	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
6.72	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
10.32	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
12.39	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
12.88	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
13.75	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
17.05	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
18.89	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
24.11	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													

图 258 基于时间

Time [min]	Function	Parameter
3.00	Start Peak-based	MHC 1 x 9 s, Default, Index 0, Exp Time 0 min, RefOnly False, Multi-Inject False
20.00	End Peak-based	

图 259 基于峰

切片时间 (MHC) 可以略有差别, 具体取决于配置和使用的硬件。

2D 梯度:	分析 1.25 min, 平衡 0.50 min	
	分析梯度 -	迁移梯度迁移 1D:
	10 % B 0.00 min -	30 % B 20 min
	60 % B 1.25 min	
冲洗梯度	未使用	
	²D 检测器 (DAD)	
二极管阵列	254 nm, 带宽 4 nm	
参比波长	360 nm	
参比带宽	100 nm	

表 58 用于多重中心切割的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
峰宽	80 Hz
停止时间	与泵一致/无限制

表 59 ²D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
离子源	大气压电喷雾 (双 AJS ESI) ¹
离子模式	双 AJS ESI
离子极性	正
存储模式	两种, 首选棒状图
LCMS 流	MS
采集模式	采集模式 MS1 最小范围 (m/z) 50, 最大范围 (m/z) 500, 扫描速率 (质谱图/秒) ³
仪器参数	离子源参数
气体温度	250 °C
气体流量	11 L/min
雾化器	40 psig
鞘气温度	350 °C
鞘气流速	12 L/min
扫描段	1
	扫描源参数
Vcap	3500 V
喷嘴电压	300 V
裂解电压	120
锥孔电压1	45
八级杆参比峰	750

表 59 2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
	参比质量
参比质量已启用	已启用
使用瓶 A 参比雾化器	是
参比雾化器	0 psig
	自动重新校正
平均扫描数	1
检测窗口 (ppm)	100 ppm
最小高度	1000 计数
	参比质量
	正
	121.05087300
	922.00979800
	色谱图
	色谱图类型标签偏移 Y 范围
	TIC TIC 1510000000
	TIC TIC 1510000000
停止时间	与泵一致/无限制

¹ 对于双 AJS ESI 之外的离子源，可能需要调整流速

表 60 2D (LC-MS) 中的建议条件 - SQ MS

参数	值
ESI 源参数	类似于高端 MS 参数
峰宽	0.06 min
扫描	100 – 500 m/z 使用正离子模式
驻留时间	200 ms

- 1 从 2D-LC 数据介质调用方法**多重中心切割校验**，并修改多重中心切割配置的设置。
- 2 使用以甲醇/水 (20/80; v/v) 和 0.1 % 甲酸稀释的 2D-LC 入门样品，1 x 2 mL (5190-6895)、1:10 (仅 UV 校验)、1:100 (LCMS 校验) 或 1:1000 (LCMS 校验) 运行方法。
- 3 如果必要，后续编辑或优化该方法。

运行高分辨率 (LC-LC) 的校验程序

要运行校验，可提供各种硬件配置，请参见第 56 页的表 7。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 427 页的表 52。

以下参数已针对此标准配置进行了优化。您的系统使用的参数可能略有偏差。运行实验，然后编辑或优化设置的方法。

表 61 用于 MHC 和 高分辨率 2D-LC 的 1D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
¹D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	RRHD SB-C18, 2.1x 100 mm, 1.8 μm, 1200 bar (858700-902)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 泵	
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	甲醇
流速	0.6 mL/min
后运行时间	6 min
流动相梯度:	20 % B 0.00 min 100 % B 50 min
自动进样器	
进样量	2 μL用于标准 LC 1:10 0.5 μL 正模式用于 LCMS, 1:100 或 1:1000, 具体取决于使用的 LCMS
进样针清洗	在冲洗口中, 10 s, 乙腈/水 (50/50)
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 检测器 (DAD)	
二极管阵列检测器信号 A	254 nm, 带宽 4 nm
参比波长	360 nm
参比带宽	100 nm

表 61 用于 MHC 和 高分辨率 2D-LC 的 1D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
峰宽	20 Hz
停止时间	停止时间与泵一致/无限制

表 62 用于高分辨率的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
2D-LC 阀	
	MHC, 带 40 μ L 样品, 传输毛细管, ASM 因子数
²D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	RRHD Bonus-RP, 2.1x 50 mm, 1.8 μ m, 1200 bar (857768-901)
色谱柱温度	40 $^{\circ}$ C
停止时间	与泵一致/无限制
²D 泵	
	中心切割 (基于时间)
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	乙腈
流速	1 mL/min
空闲流量	未使用
停止时间	40 min (如果 2D 中的峰不清除, 将不会自动延长)
后运行时间	6 min
采样表	开始 4.28 min, 需要最少 6 个 (2*3) 高分辨率 切片, 切片长度 3.2

Time [min]	Function	Parameter
4.28	Time-based Heart...	HiRes 3 x 3.2 s, LoopFill: 80, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False
12.22	Time-based Heart...	HiRes 9 x 3.2 s, LoopFill: 80, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False

图 260 高分辨率

切片时间 (高分辨率) 可以略有差别, 具体取决于配置和使用的硬件。

表 62 用于高分辨率的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
2D 梯度:	分析 1.25 min, 平衡 0.50 min
	分析梯度 - 迁移梯度迁移 1D:
	10 % B 30 % B 20 min 0.00 min -
	60 % B 1.25 min
冲洗梯度	80 % B 0.00 min + 2 * 色谱柱死体积 约对应于 0.21 min
²D 检测器 (DAD)	
二极管阵列	254 nm, 带宽 4 nm
参比波长	360 nm
参比带宽	100 nm
峰宽	80 Hz
停止时间	与泵一致/无限制

表 63 ²D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
离子源	大气压电喷雾 (双 AJS ESI) ¹
离子模式	双 AJS ESI
离子极性	正
存储模式	两种, 首选棒状图
LCMS 流	MS
采集模式	采集模式 MS1 最小范围 (m/z) 50, 最大范围 (m/z) 500, 扫描速率 (质谱图/秒) ³

表 63 2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
仪器参数	离子源参数
气体温度	250 °C
气体流量	11 L/min
雾化器	40 psig
鞘气温度	350 °C
鞘气流速	12 L/min
扫描段	1
	扫描源参数
Vcap	3500 V
喷嘴电压	300 V
裂解电压	120
锥孔电压1	45
八级杆参比峰	750
	参比质量
参比质量已启用	已启用
使用瓶 A 参比雾化器	是
参比雾化器	0 psig
	自动重新校正
平均扫描数	1
检测窗口 (ppm)	100 ppm
最小高度	1000 计数
	参比质量
	正
	121.05087300

表 63 2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
	922.00979800
	色谱图
	色谱图类型标签偏移 Y 范围
	TIC TIC 1510000000
	TIC TIC 1510000000
停止时间	与泵一致/无限制

¹ 对于双 AJS ESI 之外的离子源，可能需要调整流速

表 64 2D (LC-MS) 中的建议条件 - SQ MS

参数	值
ESI 源参数	类似于高端 MS 参数
峰宽	0.06 min
扫描	100 – 500 m/z 使用正离子模式
驻留时间	200 ms

- 1 从 2D-LC 数据介质调用方法**高分辨率校验**并修改多重中心切割配置的设置。
- 2 使用以甲醇/水 (20/80; v/v) 和 0.1 % 甲酸稀释的 2D-LC 入门样品，1 x 2 mL (5190-6895)、1:10 (仅 UV 校验)、1:100 (LCMS 校验) 或 1:1000 (LCMS 校验) 运行方法。
- 3 如果必要，后续编辑或优化该方法。

运行全切割 (LCxLC) 的校验程序

要运行校验，可提供各种硬件配置，请参见第 56 页的表 7。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 427 页的表 52。

为了获得最佳灵敏度，在全切割模式下，通常在质谱仪之前分流 LC 流量，尤其对于 LC/MS 应用。

以下参数已针对此标准配置进行了优化。您的系统使用的参数可能略有偏差。运行实验，然后编辑或优化设置的方法。

表 65 MS 无源分流器设置示例 (比率 1:2)

说明 (PN)	用途
三通、不锈钢、1/16 英寸、低死体积 (0100-0969)	三通
不锈钢毛细管 340 x 0.12 ps-ns (5067-4659)	连接到三通的 ² D 检测器
不锈钢毛细管 0.075 mm x 500 mm，长套管 (5500-1205)	连接到三通的另一端的 LCMS 源入口
不锈钢毛细管 0.075 mm x 250 mm，长套管 (5500-1206)	三通的剩余连接用作废液毛细管

表 66 用于全切割 2D-LC 的 1D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
¹D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	RRHD SB-C18, 2.1 x 100 mm, 1.8 μm, 1200 bar (858700-902)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 泵	
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	甲醇
流速	0.1 mL/min
停止时间	40 min
后运行时间	10 min
流动相梯度:	40 % B 0.00 min

表 66 用于全切割 2D-LC 的 1D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
	60 % B 34 min
	90 % B 34.5 min
	自动进样器
进样量	2 μ L 用于标准 LC 0.5 μ L 正模式用于 LCMS
进样针清洗	在冲洗口中, 10 s, 乙腈/水 (50/50)
停止时间	与泵一致/无限制
	¹D 检测器 (DAD)
二极管阵列检测器信号 A	254 nm, 带宽 4 nm
参比波长	360 nm
参比带宽	100 nm
峰宽	20 Hz
停止时间	停止时间与泵一致/无限制

表 67 用于全切割 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
	2D-LC 阀
	MHC, 带 40 μ L 样品, 传输毛细管, ASM 因子数
	²D 柱温箱 (MCT)
色谱柱	RRHD Eclipse Plus C18, 3.0 x 50 mm, 1.8 μ m (959757-302)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
	²D 泵

表 67 用于全切割 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
	全切割
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	乙腈
流速	2.5 mL/min
空闲流量	未使用
停止时间	约 43 min (如果 2D 中的峰不消除, 将不会自动延长)
后运行时间	6 min
采样表	开始 5 min, 停止于 40 min

Sampling Table (1/99 events)		
Time [min]	Function	Parameter
5.00	Time-based Com...	Comprehensive Range, stop sampling at 40.00 min

图 261 全切割

2D 梯度:	分析 0.2 min, 平衡 0.15 min	
	分析梯度 -	迁移梯度迁移 1D:
	25 % B 0.00 min	25 % B 5 min 50 % B 40 min
	50 % B 0.2 min	50 % B 5 min 75 % B 40 min
	²D 检测器 (DAD)	
二极管阵列	254 nm, 带宽 4 nm	
参比波长	360 nm	
参比带宽	100 nm	
峰宽	80 Hz	
停止时间	与泵一致/无限制	

表 68 ²D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
离子源	大气压电喷雾 (双 AJS ESI)
离子模式	双 AJS ESI
离子极性	正
存储模式	两种, 首选棒状图
LCMS 流	MS
采集模式	采集模式 MS1 最小范围 (m/z) 50, 最大范围 (m/z) 500, 扫描速率 (质谱图/秒) 3
仪器参数	离子源参数
气体温度	250 °C
气体流量	11 L/min
雾化器	40 psig
鞘气温度	350 °C
鞘气流速	12 L/min
扫描段	1
	扫描源参数
Vcap	3500 V
喷嘴电压	300 V
裂解电压	120
锥孔电压1	45
八级杆参比峰	750
	参比质量
参比质量已启用	已启用
使用瓶 A 参比雾化器	是

为避免高流速导致 LC/MS 出现问题, 应将第二维色谱柱的流出物分流。建议的分流比是 1:2。

表 68 2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
参比雾化器	0 psig
	自动重新校正
平均扫描数	1
检测窗口 (ppm)	100 ppm
最小高度	1000 计数
	参比质量
	正
	121.05087300
	922.00979800
	色谱图
	色谱图类型标签偏移 Y 范围
	TIC TIC 1510000000
	TIC TIC 1510000000
停止时间	与泵一致/无限制

为避免高流速导致 LC/MS 出现问题，应将第二维色谱柱的流出物分流。建议的分流比是 1:2。

表 69 2D (LC-MS) 中的建议条件 - SQ MS

参数	值
ESI 源参数	类似于高端 MS 参数
峰宽	0.06 min
扫描	100 – 500 m/z 使用正离子模式
驻留时间	200 ms

- 1 从 2D-LC 数据介质调用方法**全切割校验**，并修改**全切割配置**的设置。
- 2 使用以甲醇/水 (20/80; v/v) 和 0.1 % 甲酸稀释的 2D-LC 入门样品，1 x 2 mL (5190-6895)、1:10 (仅 UV 校验)、1:100 (LCMS 校验) 或 1:1000 (LCMS 校验) 运行方法。
- 3 如果必要，后续编辑或优化该方法。

运行 ASM 多重中心切割 (MHC) 的校验程序

要运行校验，可提供各种硬件配置，请参见第 56 页的表 7。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 427 页的表 52。

以下参数已针对此标准配置进行了优化。您的系统使用的参数可能略有偏差。运行实验，然后编辑或优化设置的方法。

表 70 1D (HPLC) 中的建议条件，ASM MHC

参数	值
¹D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	RRHD SB-C18, 2.1 x 100 mm, 1.8 μm, 1200 bar (858700-902)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 泵	
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	甲醇
流速	0.6 mL/min
停止时间	40 min
后运行时间	6 min
流动相梯度:	45 % B 0.00 min
	54 % B 6.00 min
	80 % B 7.00 min
自动进样器	
进样量	2 μL 用于标准 LC 0.5 μL 正模式用于 LCMS
进样针清洗	在冲洗口中, 10 s, 乙腈/水 (50/50)
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 检测器 (DAD)	
二极管阵列检测器信号 A	254 nm, 带宽 4 nm

表 70 1D (HPLC) 中的建议条件, ASM MHC

参数	值
参比波长	360 nm
参比带宽	100 nm
峰宽	20 Hz
停止时间	停止时间与泵一致/无限制

表 71 用于 ASM MHC 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
	2D-LC 阀
	MHC, 带 40 μ L 样品, 传输毛细管, ASM 因子 3
	²D 柱温箱 (MCT)
色谱柱	RRHD Bonus-RP, 2.1 x 50 mm, 1.8 μ m, 1200 bar (857768-901)
色谱柱温度	40 $^{\circ}$ C
停止时间	与泵一致/无限制
	²D 泵

表 71 用于 ASM MHC 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

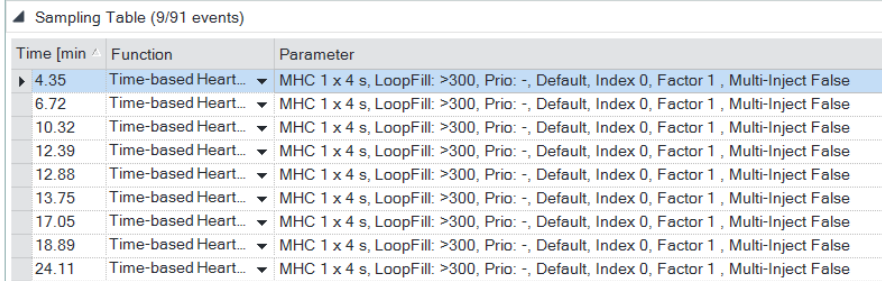
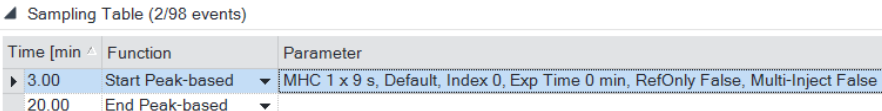
参数	值																														
采样表	开始 4.35 min, 需要最少 5 个切片 (基于时间或基于峰), 切片长度 4.0																														
	 <p>▲ Sampling Table (9/91 events)</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Time [min]</th> <th>Function</th> <th>Parameter</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>4.35</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>6.72</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>10.32</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>12.39</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>12.88</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>13.75</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>17.05</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>18.89</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> <tr> <td>24.11</td> <td>Time-based Heart...</td> <td>MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False</td> </tr> </tbody> </table>	Time [min]	Function	Parameter	4.35	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	6.72	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	10.32	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	12.39	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	12.88	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	13.75	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	17.05	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	18.89	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False	24.11	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False
Time [min]	Function	Parameter																													
4.35	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
6.72	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
10.32	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
12.39	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
12.88	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
13.75	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
17.05	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
18.89	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													
24.11	Time-based Heart...	MHC 1 x 4 s, LoopFill: >300, Prio: -, Default, Index 0, Factor 1, Multi-Inject False																													

图 262 基于时间



▲ Sampling Table (2/98 events)

Time [min]	Function	Parameter
3.00	Start Peak-based	MHC 1 x 9 s, Default, Index 0, Exp Time 0 min, RefOnly False, Multi-Inject False
20.00	End Peak-based	

图 263 基于峰

切片时间 (MHC) 可以略有差别, 具体取决于配置和使用的硬件。

流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	乙腈
流速	1.0 mL/min
停止时间	约 40 min (如果 2D 中的峰不清除, 将不会自动延长)
后运行时间	6 min
2D 梯度	分析 1.50 min 平衡 0.50 min 周期时间 2.12, ASM 打开且 ASM 因子为 3
	分析梯度 - 迁移梯度迁移 1D:
	3 % B 0.00 min
	3 % B 0.37 min
	10 % B
	0.38 min 30 % B 6 min
	60 % B 1.62

表 71 用于 ASM MHC 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
2D 检测器 (DAD)	
二极管阵列	254 nm, 带宽 4 nm
参比波长	360 nm
参比带宽	100 nm
峰宽	80 Hz
停止时间	与泵一致/无限制

表 72 2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
离子源	大气压电喷雾 (双 AJS ESI) ¹
离子模式	双 AJS ESI
离子极性	正
存储模式	两种, 首选棒状图
LCMS 流	MS
采集模式	采集模式 MS1 最小范围 (m/z) 50, 最大范围 (m/z) 500, 扫描速率 (质谱图/秒) ³
仪器参数	离子源参数
气体温度	250 °C
气体流量	11 L/min
雾化器	40 psig
鞘气温度	350 °C
鞘气流速	12 L/min
扫描段	1
	扫描源参数
Vcap	3500 V

表 72 ²D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
喷嘴电压	300 V
裂解电压	120
锥孔电压1	45
八级杆参比峰	750
参比质量	
参比质量已启用	已启用
使用瓶 A 参比雾化器	是
参比雾化器	0 psig
自动重新校正	
平均扫描数	1
检测窗口 (ppm)	100 ppm
最小高度	1000 计数
参比质量	
	正
	121.05087300
	922.00979800
色谱图	
	色谱图类型标签偏移 Y 范围
	TIC TIC 1510000000
	TIC TIC 1510000000
停止时间	与泵一致/无限制

¹ 对于双 AJS ESI 之外的离子源，可能需要调整流速

表 73 2D (LC-MS) 中的建议条件 - SQ MS

参数	值
ESI 源参数	类似于高端 MS 参数
峰宽	0.06 min
扫描	100 – 500 m/z 使用正离子模式
驻留时间	200 ms

注意**调整 ASM 分流比**

为优化采用最高分辨率（强稀释）或最低周期时间（弱稀释）方法的 ASM 分流比，提供不同的 ASM 毛细管。

校验方法使用 ASM 因子 3，请参见第 43 页的[了解 ASM 因子](#)。

- 1 从 2D-LC 数据介质调用方法 **ASM 多重中心切割校验**，并修改多重中心切割配置的设置。
- 2 使用以甲醇/水 (20/80; v/v) 和 0.1 % 甲酸稀释的 2D-LC 入门样品，1 x 2 mL (5190-6895)、1:10（仅 UV 校验）、1:100 (LCMS 校验) 或 1:1000 (LCMS 校验) 运行方法。
- 3 如果必要，后续编辑或优化该方法。

运行 ASM 全切割（ASM 关闭）的校验程序

要运行校验，可提供各种硬件配置，请参见第 56 页的表 7。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 427 页的表 52。

为了获得最佳灵敏度，在全切割模式下，通常在质谱仪之前分流 LC 流量，尤其对于 LC/MS 应用。以下参数已针对此标准配置进行了优化。您的系统使用的参数可能略有偏差。在 **ASM 关闭** 的情况下运行实验，然后编辑或优化设置的方法。

表 74 MS 无源分流器设置示例（比率 1:2）

说明 (PN)	用途
三通、不锈钢、1/16 英寸、低死体积 (0100-0969)	三通
不锈钢毛细管 340x0.12 ps-ns (5067-4659)	连接到三通的 ² D 检测器
不锈钢毛细管 0.075 mm x 500 mm，长套管 (5500-1205)	连接到三通的另一端的 LCMS 源入口
不锈钢毛细管 0.075 mm x 250 mm，长套管 (5500-1206)	三通的剩余连接用作废液毛细管

表 75 1D (HPLC) 中的建议条件，ASM 全切割

参数	值
¹D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	RRHD SB-C18, 2.1 x 100 mm, 1.8 μm, 1200 bar (858700-902)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
¹D 泵	
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	甲醇
流速	0.1 mL/min
停止时间	40 min
后运行时间	6 min
流动相梯度:	20 % B 0.00 min
	100 % B 50 min

表 75 1D (HPLC) 中的建议条件, ASM 全切割

参数	值
	80 % B 7.00 min
	自动进样器
进样量	2 μ L 用于标准 LC 0.5 μ L 正模式用于 LCMS
进样针清洗	在冲洗口中, 10 s, 乙腈/水 (50/50)
停止时间	与泵一致/无限制
	¹D 检测器 (DAD)
二极管阵列检测器信号 A	254 nm, 带宽 4 nm
参比波长	360 nm
参比带宽	100 nm
峰宽	20 Hz
停止时间	停止时间与泵一致/无限制

表 76 用于 ASM 全切割 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
	2D-LC 阀
	MHC, 带 40 μ L 样品, 传输毛细管, ASM 因子数
	²D 柱温箱 (MCT)
色谱柱	RRHD Eclipse Plus C18, 3.0 x 50 mm, 1.8 μ m (959757-302)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
	²D 泵

表 76 用于 ASM 全切割 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

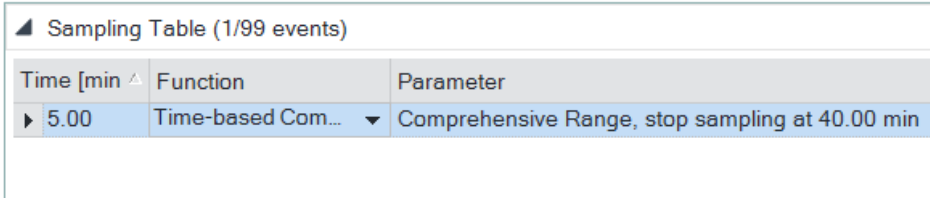
参数	值						
	全切割						
	 <p>▲ Sampling Table (1/99 events)</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Time [min]</th> <th>Function</th> <th>Parameter</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>▶ 5.00</td> <td>Time-based Com...</td> <td>Comprehensive Range, stop sampling at 40.00 min</td> </tr> </tbody> </table>	Time [min]	Function	Parameter	▶ 5.00	Time-based Com...	Comprehensive Range, stop sampling at 40.00 min
Time [min]	Function	Parameter					
▶ 5.00	Time-based Com...	Comprehensive Range, stop sampling at 40.00 min					
	图 264 全切割						
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸						
流动相 B	甲醇						
流速	2.5 mL/min						
停止时间	40 min (如果 2D 中的峰不清除, 将不会自动延长)						
后运行时间	6 min						
2D 梯度	分析 0.2 min 平衡 0.1 min ASM 关闭						
	分析梯度 - 迁移梯度迁移 1D						
	25 % B 0.00 min 25 % B 5 min						
	50 % B 40 min 50 % B 5 min						
	50 % B 0.20 min						
	75 % B 40 min						
	²D 检测器 (DAD)						
二极管阵列	254 nm, 带宽 4 nm						
参比波长	360 nm						
参比带宽	100 nm						
峰宽	80 Hz						
停止时间	与泵一致/无限制						

表 77 ^2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
离子源	大气压电喷雾 (双 AJS ESI)
离子模式	双 AJS ESI
离子极性	正
存储模式	两种, 首选棒状图
LCMS 流	MS
采集模式	采集模式 MS1 最小范围 (m/z) 50, 最大范围 (m/z) 500, 扫描速率 (质谱图/秒) 3
仪器参数	离子源参数
气体温度	250 °C
气体流量	11 L/min
雾化器	40 psig
鞘气温度	350 °C
鞘气流速	12 L/min
扫描段	1
	扫描源参数
Vcap	3500 V
喷嘴电压	300 V
裂解电压	120
锥孔电压1	45
八级杆参比峰	750
	参比质量
参比质量已启用	已启用
使用瓶 A 参比雾化器	是

为避免高流速导致 LC/MS 出现问题, 应将第二维色谱柱的流出物分流。建议的分流比是 1:2。

表 77 2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
参比雾化器	0 psig
	自动重新校正
平均扫描数	1
检测窗口 (ppm)	100 ppm
最小高度	1000 计数
	参比质量
	正
	121.05087300
	922.00979800
	色谱图
	色谱图类型标签偏移 Y 范围
	TIC TIC 1510000000
	TIC TIC 1510000000
停止时间	与泵一致/无限制

为避免高流速导致 LC/MS 出现问题，应将第二维色谱柱的流出物分流。建议的分流比是 1:2。

表 78 2D (LC-MS) 中的建议条件 - SQ MS

参数	值
ESI 源参数	类似于高端 MS 参数
峰宽	0.06 min
扫描	100 – 500 m/z 使用正离子模式
驻留时间	200 ms

注意

不建议将主动 ASM 用于全切割应用，因为切换周期较多会导致阀的磨损急剧增加。

- 1 从 2D-LC 数据介质调用方法 **ASM 全切割校验**，并修改配置的设置。
- 2 使用以甲醇/水 (20/80; v/v) 和 0.1 % 甲酸稀释的 2D-LC 入门样品，1 x 2 mL (5190-6895)、1:10 (仅 UV 校验)、1:100 (LCMS 校验) 或 1:1000 (LCMS 校验) 运行方法。
- 3 如果必要，后续编辑或优化该方法。

常规安全信息	466
常规安全信息	466
安全标准	466
总则	466
通电前	467
将仪器接地	467
切勿在易爆环境中操作	467
切勿拆下仪器机盖	468
切勿改装仪器	468
如果发生损坏	468
溶剂	469
安全标志	470
废弃电子电气设备 (WEEE) 指令	472
无线电干扰	473
声音发射	474
毛细管编码指南	475
毛细管说明的语法	475
颜色编码注解一览表	476
溶剂信息	477
补充信息	478
Agilent Technologies 网站	479

本章提供有关安全、法律和网络的补充信息。

常规安全信息

常规安全信息

在本仪器的操作、服务和维修的各个阶段中，必须遵循下面的一般安全预防措施。如果未遵循这些预防措施或本手册其他部分给出的特定警告，则会违反有关仪器的设计、制造商和用途方面的安全标准。Agilent Technologies 对客户由于不遵守这些规范所造成的损失不承担任何责任。

警告

确保正确使用设备。

设备提供的保护功能可能会受到损害。

✓ 建议该仪器的操作员按照本手册中指定的方式使用该设备。

安全标准

此设备属于安全类别 I 的仪器（随附保护接地端），并根据国际安全标准进行生产和测试。

总则

请勿按照制造商未指定的任何方式使用此产品。如果按照操作说明中未指定的方式使用此产品，则产品的保护功能可能会受到损害。

通电前

警告

电压范围、频率或布线错误

人身伤害或仪器损坏

- ✓ 验证配电的电压范围和频率是否与单个仪器的电源规格相匹配。
- ✓ 为保证功能正常及符合安全规定或 EMC 规定，切勿使用不是由 Agilent Technologies 提供的电缆。
- ✓ 在接通电源前，确保连接所有设备。

注意

请留意在第 470 页的安全标志下介绍的仪器的外部标识。

将仪器接地

警告

接地装置缺失

电击

- ✓ 如果您的产品具有接地型电源插头，则必须将仪器的底盘和盖连接到接地装置，从而最大程度地降低电击危险。
- ✓ 必须将接地插销牢固地连接到电源插座的接地（安全接地）端。对保护（接地）导体的任何干扰或者断开保护接地端都将导致潜在的电击危险，可能引起严重的人身伤害。

切勿在易爆环境中操作

警告

存在易燃气体或烟雾

爆炸危险

- ✓ 请勿在存在易燃气体或烟雾的环境中操作仪器。

切勿拆下仪器机盖

警告

已卸下仪器盖

电击

- ✓ 切勿卸下仪器盖
 - ✓ 只允许 Agilent 授权人员卸下仪器盖。务必在卸下仪器盖之前断开电源电缆和任何外部电路。
-

切勿改装仪器

不要在产品上安装替换部件或对产品进行任何未经授权的改装。将产品返还至 Agilent 销售和服务部进行保养和维修，确保安全功能得到维护。

如果发生损坏

警告

模块损坏

人身伤害（例如电击、中毒）

- ✓ 仪器一旦出现损坏或故障迹象，应立即停止操作并防止意外操作，等待合格的维修人员进行修理。
-

溶剂

警告

有毒、易燃及有害溶剂、样品及试剂

处理溶剂、样品和试剂可能会危害健康安全。

- ✓ 处理这些物质时，请严格遵循溶剂供应商提供的材料处理和安全数据表中的相应安全规程（例如，戴上护目镜、安全手套，穿上防护衣）。
- ✓ 切勿使用自燃温度低于 200 °C (392 °F) 的溶剂。切勿使用沸点低于 56 °C (133 °F) 的溶剂。
- ✓ 避免高蒸汽浓度。保持溶剂温度至少低于所用溶剂的沸点 40 °C (72 °F)。这包括样品室中的溶剂温度。对于溶剂甲醇和乙醇，保持溶剂温度至少低于沸点 25 °C (45 °F)。
- ✓ 切勿在爆炸性环境中操作仪器。
- ✓ 切勿使用易燃级别 IIC（根据 IEC 60079-20-1）的溶剂，例如二硫化碳。
- ✓ 应将物质减至分析所需的最小量。
- ✓ 不要超过溶剂架中允许的最大溶剂体积 (8 L)。所用溶剂瓶的最大体积不得超过溶剂架使用指南中规定的体积。
- ✓ 将废液瓶接地。
- ✓ 定期检查废液瓶的填充水平。废液瓶剩余可用体积必须足够大，能够收集废液。
- ✓ 要最大程度地保证安全，应定期检查管线的安装是否正确。

注意




有关详细信息，请参见溶剂架的使用指南。溶剂架附带指南的印刷副本，电子副本可从 Agilent 信息中心或通过 Internet 获得。

安全标志

表 79 标志

	对于标有此标志的设备，用户应参阅说明手册，以免对操作人员造成伤害及仪器受到损坏。
	表示危险电压。
	表示受保护的接地端。
	如果存在较热表面，并且用户不应在加热后接触该表面，则仪器上会标有此标志。
	样品冷却装置采用的是蒸汽压缩制冷系统设计。含有《京都议定书》中所述的含氟温室气体（制冷剂）。有关制冷剂、装载容量、二氧化碳当量 (CDE) 及全球变暖潜能值 (GWP) 的说明，请见仪器标签。
	可燃材料 对于使用可燃制冷剂的样品恒温器，请查阅 Agilent 信息中心/用户手册，然后再尝试安装或维修该设备。必须遵守所有安全预防措施。
	确认所生产的产品符合所有适用的欧共体指令。欧洲符合性声明可通过以下网站获得： http://regulations.corporate.agilent.com/DoC/search.htm
	生产日期。
	电源标志表示开/关。 当电源开关位于“关闭”位置时，仪器电源并未完全切断。
	起搏器 磁铁会影响起搏器和植入式心脏除颤器的功能。起搏器可能会切换至测试模式，从而导致发病。心脏除颤器可能会停止工作。如果佩戴这些设备，请保证距离磁铁至少 55 mm。警告其他佩戴这些设备的人不要距离磁铁过近。

表 79 标志

	<p>磁场</p> <p>磁铁会产生影响范围很广的强磁场。磁场会损坏电视机、笔记本和计算机硬盘、信用卡和银行卡、数据存储介质、机械表、助听器和扬声器。如果有可能会被强磁场破坏的设备或物体，请将磁铁放在距离这些设备和物体至少 25 mm 的位置。</p>
	表示挤压或压碎危险。
	表示刺穿或切割危险。

警告**警告**

关于可能造成人身伤害或死亡的情况警告您。

- ✓ 除非您已充分理解并满足了指定的条件，否则请勿超越警告范围进行工作。

小心**小心**

关于可能造成数据丢失或损害设备的情况警告您。

- ✓ 除非您已充分理解并满足了指定的条件，否则请勿超越小心范围进行工作。

废弃电子电气设备 (WEEE) 指令

本产品符合欧洲 WEEE 指令标识要求。此附加标签说明不得将此电气/电子产品丢弃在家庭垃圾中。



注意

切勿丢弃在家庭垃圾中

要退回不需要的产品，请与 Agilent 的当地办事处联系，或访问 <https://www.agilent.com> 以了解详细信息。

无线电干扰

为保证功能正常及符合安全规定或 EMC 规定，切勿使用不是由安捷伦科技提供的电缆。

测试和测量

如果使用未屏蔽电缆对仪器进行测试和测量，或在仪器开放情况下进行测量，用户应确保在操作条件下仍能满足无线电干扰的限制。

声音发射

声压

声压 $L_p < 70 \text{ dB(A)}$ (依照 DIN EN ISO 7779)

毛细管编码指南

毛细管说明的语法

下表提供了找到毛细管正确技术指标的指南。在所有毛细管上，尺寸均以内径 (mm)、长度 (mm) 和体积 (μL) (如适用) 表示。当您收到毛细管时，这些缩写会印在包装上。

使用指南： 该接头编码为 “SPF”，即 Swagelok、PEEK、Fingertight 的首字母缩写。

表 80 毛细管编码指南

类型		材料		左/右接头	
类型指示主要功能，如定量环或连接毛细管。		材料表示使用哪种原材料。		左/右接头表示毛细管两端使用的接头。	
值	说明	值	说明	值	说明
毛细管	连接毛细管	ST	不锈钢	W	Swagelok + 0.8 mm 端口内径
定量环	定量环毛细管	Ti	钛	S	Swagelok + 1.6 mm 端口内径
针座	自动进样器针座	PK	PEEK	M	公制 M4 + 0.8 mm 端口内径
管线	管线	FS/PK	PEEK 涂层熔融石英 ¹	E	公制 M3 + 1.6 mm 端口内径
热交换器	热交换器	PK/ST	不锈钢涂层 PEEK ²	U	Swagelok 接头
		PFFE	PTFE	L	长
		FS	熔融石英	X	超长
		MP35N	镍钴铬钼合金	H	长头
				G	小头 SW 4
		N	小头 SW 5		
		F	手紧		
		V	1200 bar		
		B	Bio		
		P	PEEK		
		I	中等		

¹ 与溶剂接触的熔融石英

² 不锈钢涂层 PEEK

颜色编码注解一览表

毛细管的颜色可帮助您快速确定毛细管内径。

表 81 Agilent 毛细管颜色编码注解

以 mm 为单位的内径		颜色代码
0.015		 橙色
0.025		 黄色
0.05		 米色
0.075		 黑色
0.075	MP35N	 黑色带橙色条纹
0.1		 紫色
0.12		 红色
0.12	MP35N	 红色带橙色条纹
0.17		 绿色
0.17	MP35N	 绿色带橙色条纹
0.20/0.25		 蓝色
0.20/0.25	MP35N	 蓝色带橙色条纹
0.3		 灰色
0.50		骨白

注意

当您转向更小体积、高效率的色谱柱时，您需要使用窄内径管线，而不是用于传统 HPLC 仪器的内径更宽的管线。

溶剂信息

遵守以下关于溶剂使用的建议。

- 棕色玻璃器皿可以避免藻类生长。
- 避免使用以下钢腐蚀性溶剂：
 - 碱金属卤化物及其相应的酸溶液（例如，碘化锂、氯化钾等），
 - 高浓度无机酸，如硫酸和硝酸，尤其是在较高温度下（如果色谱方法允许，使用对不锈钢腐蚀性较小的磷酸或磷酸盐缓冲液代替），
 - 形成自由基和/或酸的卤化溶剂或混合物，例如：
$$2\text{CHCl}_3 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{COCl}_2 + 2\text{HCl}$$
如果干燥过程中去除了稳定酒精，这种反应很快与干燥的氯仿发生，其中不锈钢可能起到催化剂的作用，
 - 应通过吸附过氧化物的干燥氧化铝过滤色谱级醚（可能含有过氧化物）（例如，THF、二氧六环、二异丙基醚），
 - 含有强络合剂（如 EDTA）的溶剂，
 - 四氯化碳与 2-丙醇或四氢呋喃的混合物。
- 避免使用二甲基甲酰胺 (DMF)。用于泄漏传感器的聚偏氟乙烯 (PVDF) 不耐 DMF。

补充信息

补充信息可从以下途径获取：

- 软件 DVD 的文件夹 Documents：
 - 文档 Primer 2D-LC 5991-2359EN.pdf 介绍了二维液相色谱的原理、实际实施和应用。
- 驱动程序 CD 的 Documents 文件夹：
 - 软件状态公告 (SSB)
SSB 定期更新。请访问我们的网站获取最新版本：
<https://www.agilent.com/cs/library/support/Patches/SSBs/M84xx.html>
 - 软件发布公告 (SRB)
SRB 是 SSB 的摘录，列出了此版本已解决的问题。
- 固件和固件文档可从以下位置下载：
<https://www.agilent.com/en-us/firmwareDownload?whid=69761>。
- 按软件用户界面的 **F1** 查看在线帮助，获取有关特定软件功能的更多信息。
- 有关应用的更多信息，请访问 InfinityLab Application Finder
<https://www.agilent.com/en/promotions/applicationfinder?s=learnmore>。
- 有关 Agilent 硬件和软件的更多信息，请访问 Agilent 网站：
<http://www.agilent.com>。

Agilent Technologies 网站

有关产品和服务的最新信息，请通过 Internet 访问我们的全球网站：

<https://www.agilent.com>

内容提要

该手册包括以下内容：

- 简介
- 安装
- 配置
- 使用
- 数据分析
- 安全和相关信息

www.agilent.com

© Agilent Technologies Inc. 2023

版本：06/2023

文档编号：D0034025 Rev. A

