Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 系统

OpenLab CDS

用户指南



声明

文档信息

文档编号：D0034023 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

本文档内容按“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，包括但不仅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，其中涉及本文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

本文档中所述的硬件和 / 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 — 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 OpenLab CDS 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 OpenLab CDS 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

OpenLab CDS 47
支持的驱动程序 52
支持的固件 53

4 安装 54

1290 Infinity II 2D-LC 系统的硬件安装 55
1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统的硬件安装 92
许可 2D-LC 仪器 121
Agilent OpenLab CDS Workstation 中的 2D-LC 软件安装 124
Agilent OpenLab Data Analysis 软件中的 Agilent 2D-LC 软件安装和配置 129
方法导入 142
重要的客户网络链接 143

5 2D-LC 数据采集 144

OpenLab CDS 中的 2D-LC 数据采集 145

2D-LC 在线帮助 167
重要的客户网络链接 168

6 方法参数 169

2D-LC 方法编辑器 170
设置 2D-LC 方法参数 171
预览 (2D-LC) 202
以图形方式设置基于峰的实验 215
以图形方式设置 ^{2}D 梯度 220
使用图形用户界面设置二维梯度 222
附加信息 224

7 主动溶剂调制 (ASM) 方法开发 232

主动溶剂调制 (ASM) 方法开发 233
方法参数 234
使用 ASM 毛细管优化稀释 235
优化样品定量环冲洗 236
将 ASM 阶段包含到 ^{2}D 梯度中 237
通过方法设置优化稀释 238

8 运行系统 239

用于开始系统运行的入门程序 240
准备 2D-LC 系统 241
配置 2D-LC 系统 242
校验程序 244
准备实验 246
运行实验 248

9 数据分析 264

OpenLab 2D-LC 数据分析软件 265
GC Image 基本信息 336

10 故障排除和诊断 356

模块指示器和测试功能概述 357

用户界面 358
Agilent Lab Advisor 软件 359
Lab Advisor 仪器控制 361
Lab Advisor 服务和诊断 367
故障排除的基本原理 374
完成故障排除的建议测试 384

11 故障信息 385

错误消息是什么 386
一般错误消息 387
模块特定错误消息 392

12 维护 396

维护简介 397
警告和小心 398
维护概述 400
清洁模块 401
校正泄漏 402
更换阀头 403
更换阀头的部件 409
更换 Infinity 阀驱动器的保险丝 412

13 维护所需部件 414

1290 Infinity II 2D-LC 系统的部件 415
1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统的部件 441

14 理论背景 469

2D-LC 的理论基础 470
2D 作为检测器 478
成功模式组合 480
溶剂洗脱模式 481
实际问题 486

15 传统校验 488

校验程序 489
准备实验 491
运行实验 493

16 附录 528

常规安全信息 529
废弃电子电气设备 (WEEE) 指令 535
无线电干扰 536
声音发射 537
毛细管编码指南 538
用于 OpenLab 的 2D-LC 方法导入插件 541
溶剂信息 547
补充信息 548
Agilent Technologies 网站 549

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。

- 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 峰是二维等高线图中的峰。
^{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。2D-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。

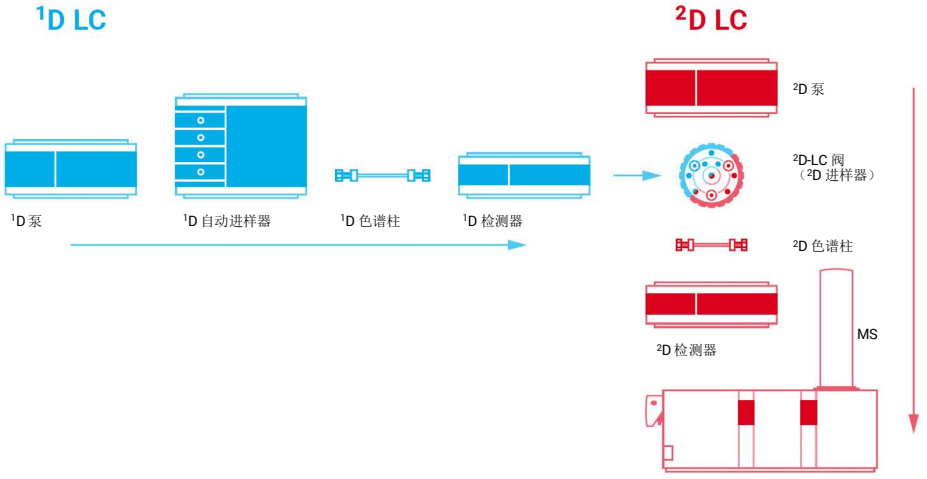


图 1　　2D-LC 的概念

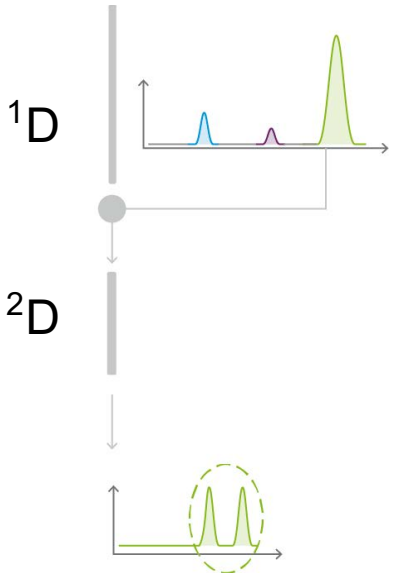


图 2　　中心切割 2D-LC 原理的概念图

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。

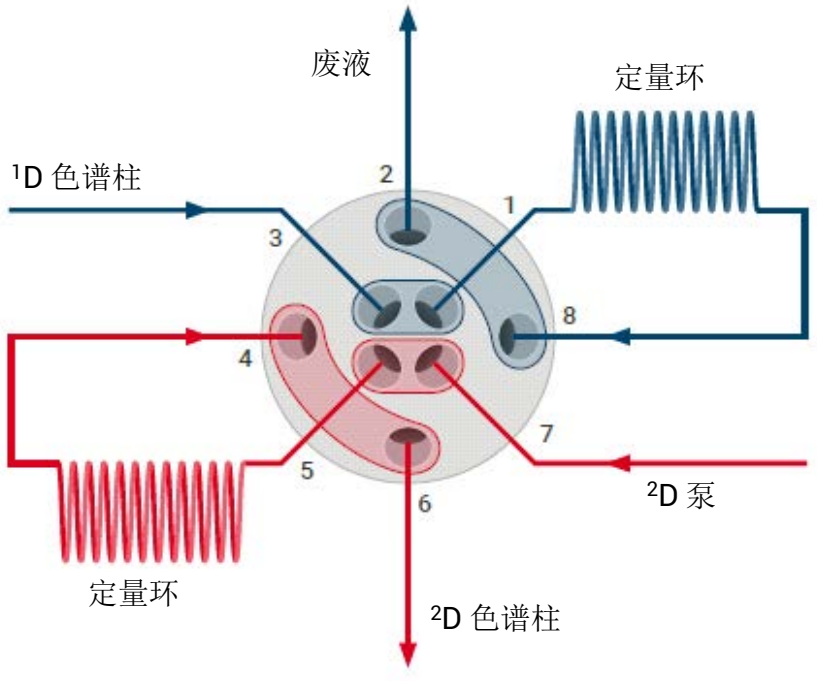


图 3　　标准 2D-LC 阀 (G4236A)，带两个定量环（顺流）

中心切割 2D-LC (LC-LC)

以下是 LC-LC 的特性：

- 仅将 ^{1}D 色谱柱的部分流出物（仅从 ^{1}D 色谱柱流出的目标峰）注入 ^{2}D 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，^{2}D 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）。

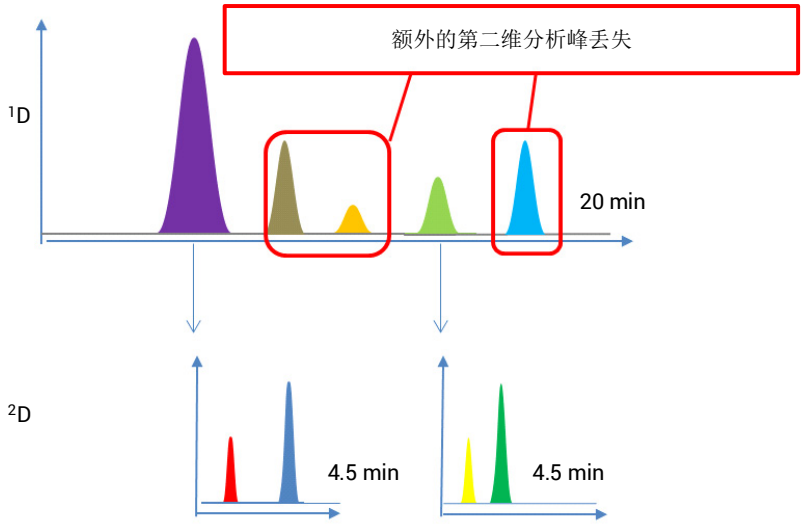


图 4　　示例：单中心切割中丢失峰

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。

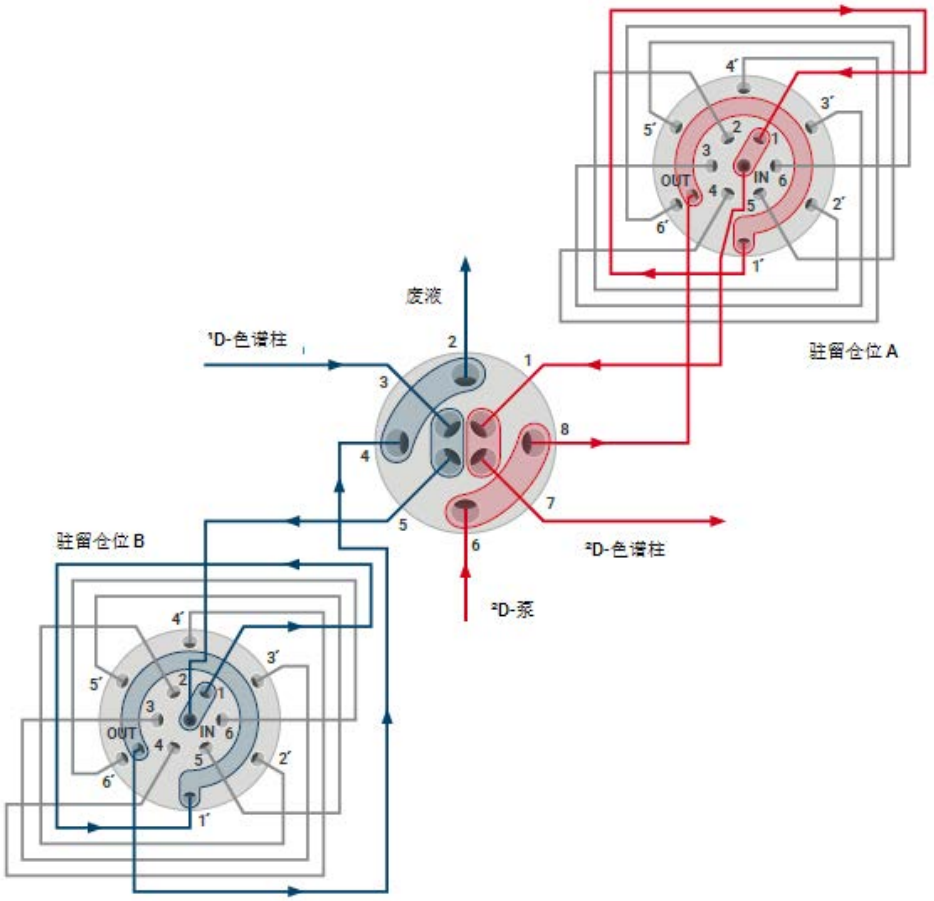


图 5　　标准 2D-LC 阀 (G4236A)，MHC 1300 bar（逆流）

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。

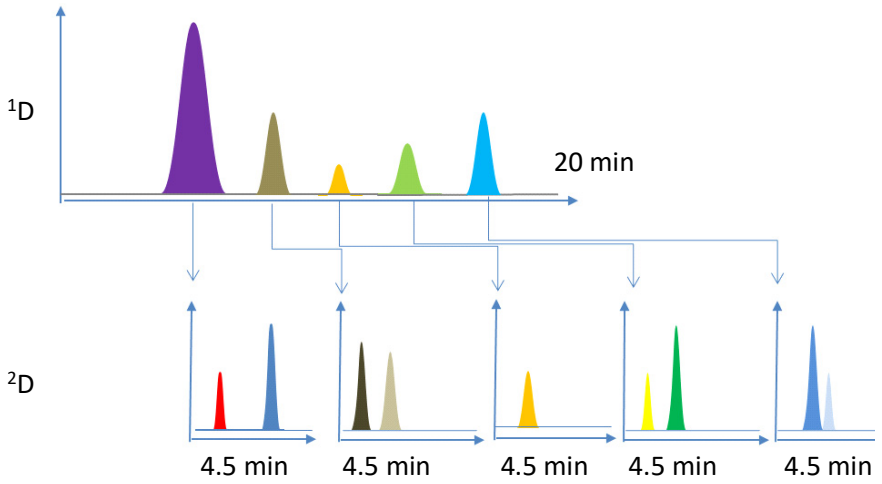


图 6　　示例：具有多个切片的多重中心切割实验

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 ^{2}D 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 ^{1}D 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 ^{1}D 切片时，它也将被直接分析。
- 如果第二维被占用，则下一个 ^{1}D 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

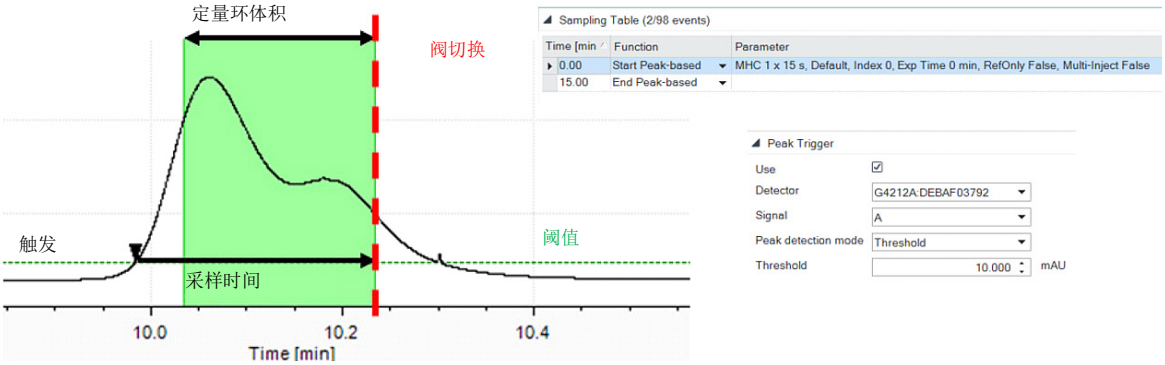


图 7　　基于峰的模式

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

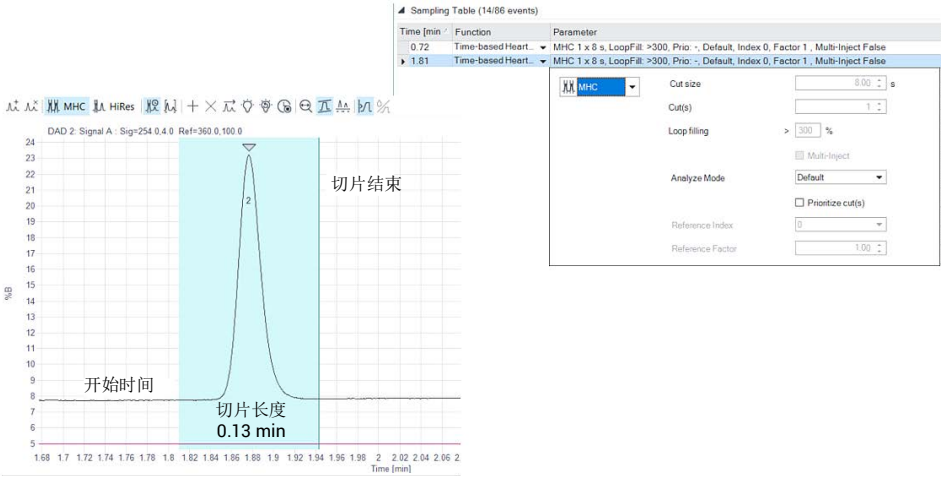


图 8　　基于时间的 MHC 模式

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，仅切片结束与方法和仪器控制相关。切片结束在预览中显示为栏右侧的加强线。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 169 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 ^{1}D 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。

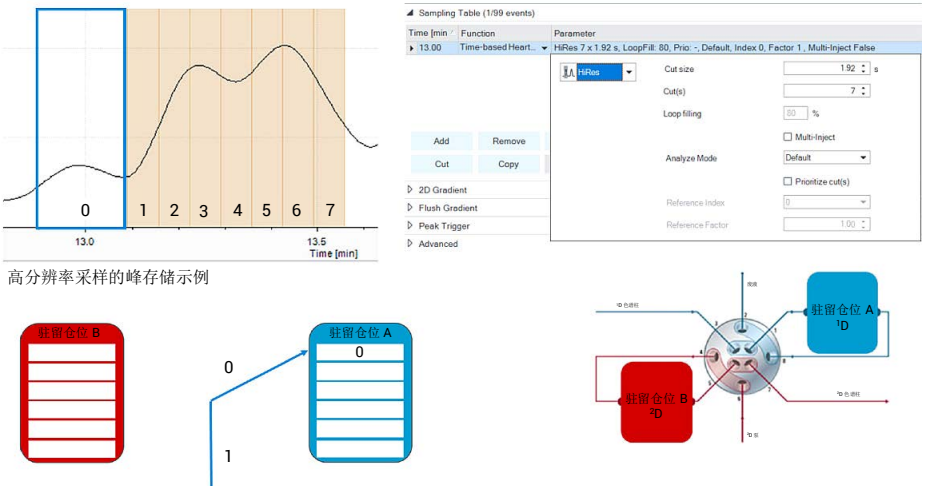
高分辨率采样 - 峰存储原理

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 ^{1}D 到 ^{2}D 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 ^{2}D 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。

- 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。

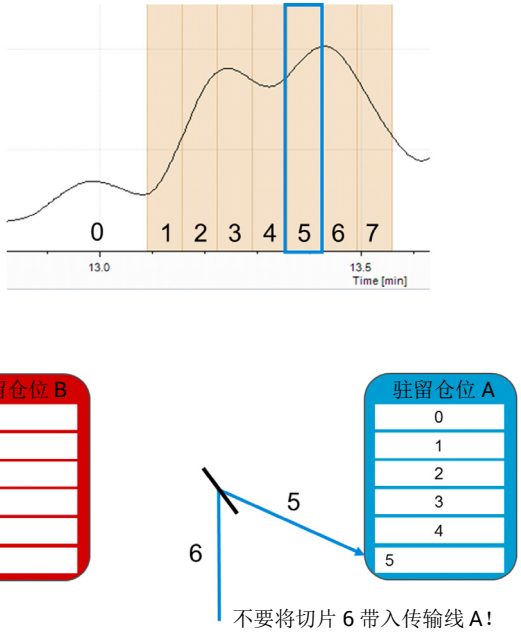


图 10　高分辨率存储原理

- 切片 5 部分停留在传输线中，并在 ^{2}D 中立即进行分析。

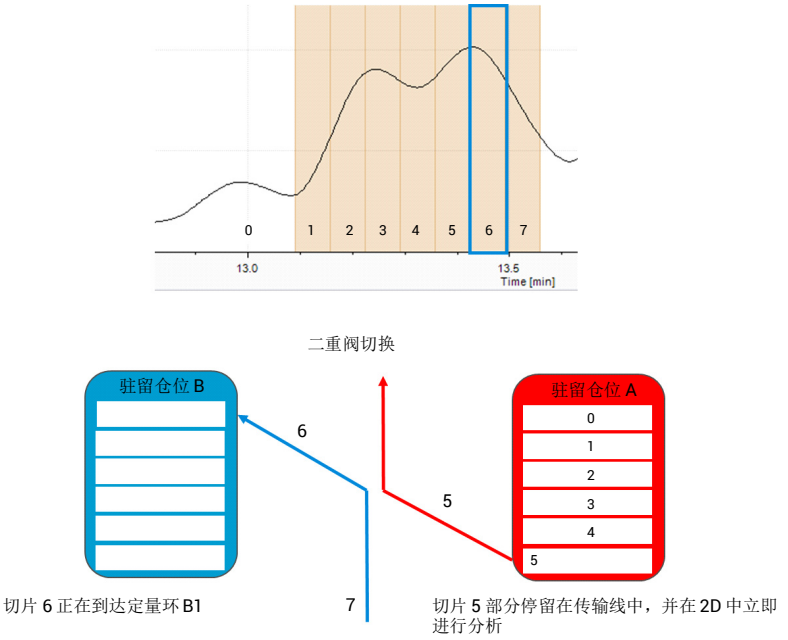


图 11　高分辨率存储原理，部分切片在传输线中

- 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。

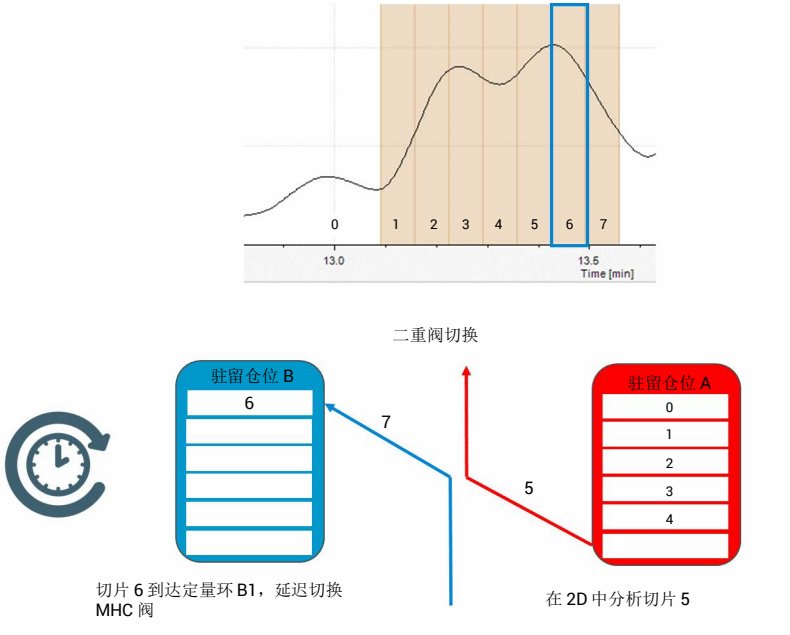


图 12　高分辨率存储原理，2D-LC 阀和驻留阀

- 切片 7 将存储在定量环 B2 中

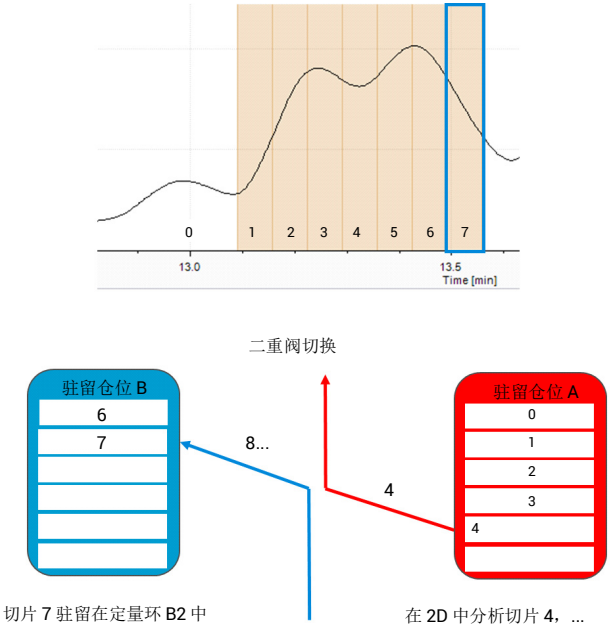


图 13　高分辨率存储原理，切片 7 存储在定量环 B2 中

- 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 ^{2}D 梯度基底溶剂填充定量环。

高分辨率采样（基于时间的模式）

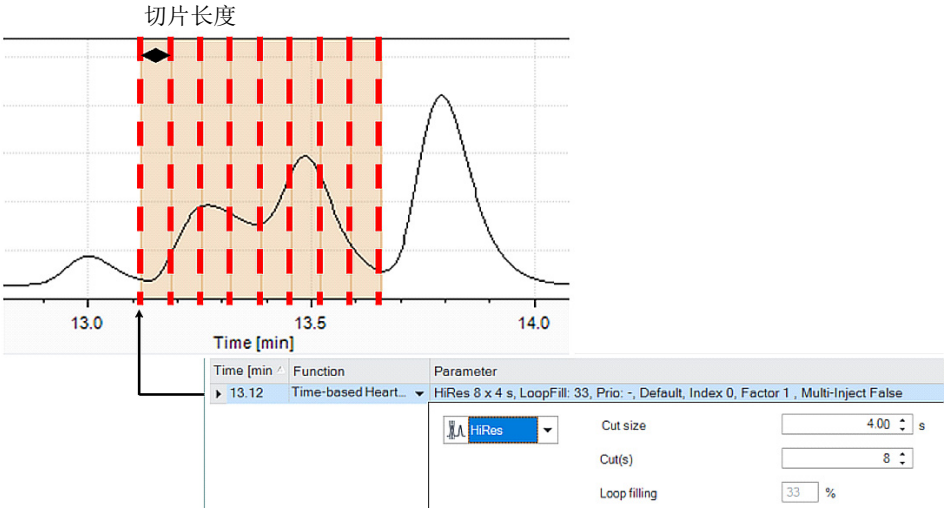


图 14　色谱图和采样表中高分辨率采样的比较

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：

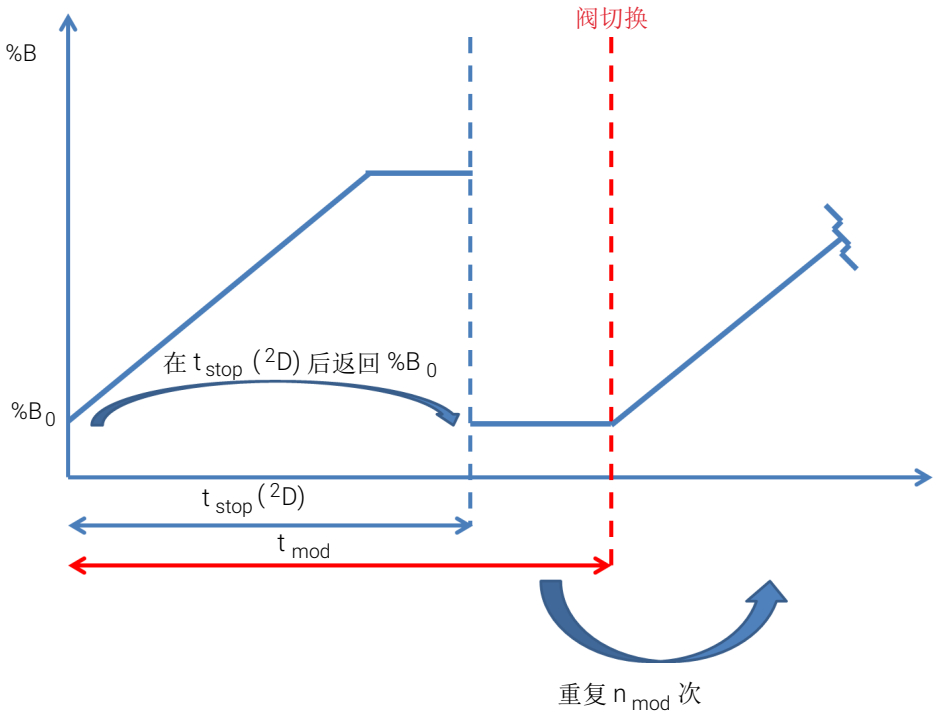


图 15　LCxLC 的特性

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。

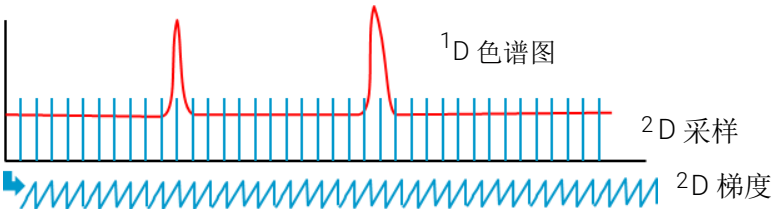


图 16　标准 LCxLC 的原理

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 ^{2}D 色谱柱。将会忽略在第二维梯度时间内从 ^{1}D 色谱柱洗脱的更多峰。

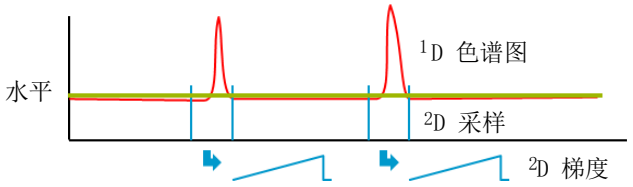
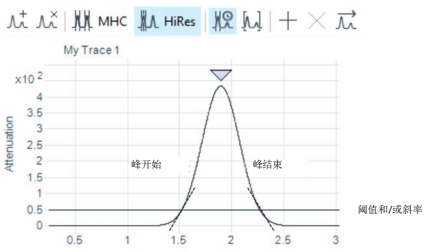


图 17　峰触发的 LC-LC 的原理

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 195 页的使用峰触发。



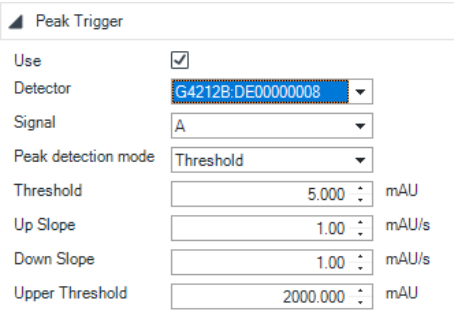


图 18　峰触发方法

阀在以下条件下切换（以先到者为准）：

- 如果**采样时间**已过，或

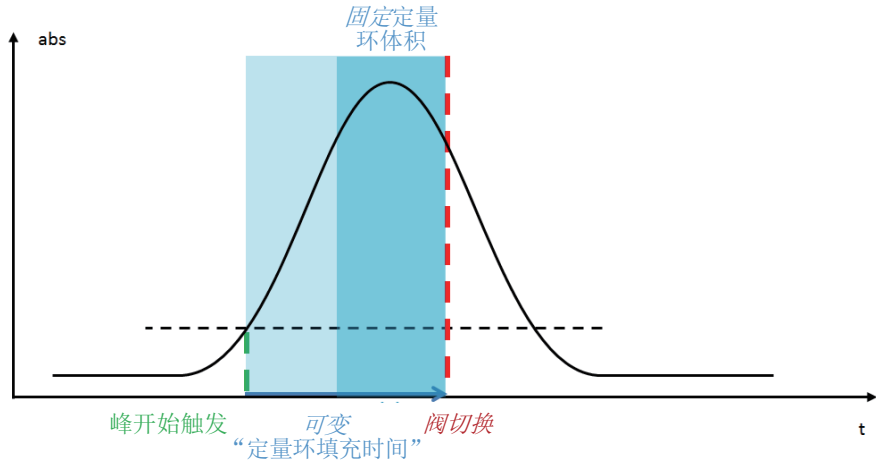


图 19　峰触发概念（采样时间已过）

- 如果信号低于阈值或斜率。

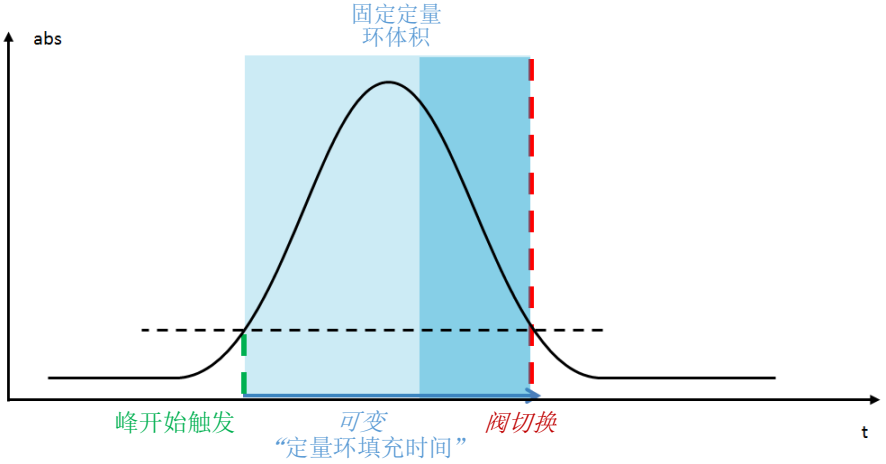


图 20　峰触发概念（信号低于阈值或斜率）

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 ^{2}D 色谱柱。

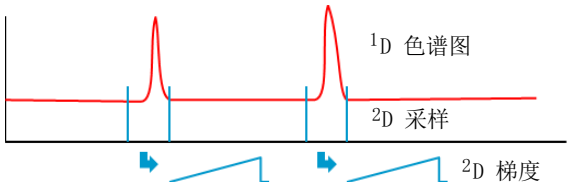


图 21　时间触发的 LC-LC 的原理

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 ^{1}D 溶剂注入第二维色谱柱。如果 ^{1}D 溶剂相对于 ^{2}D 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 ^{1}D 溶剂）到达 ^{2}D 色谱柱前，使用低浓度的 ^{2}D 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。

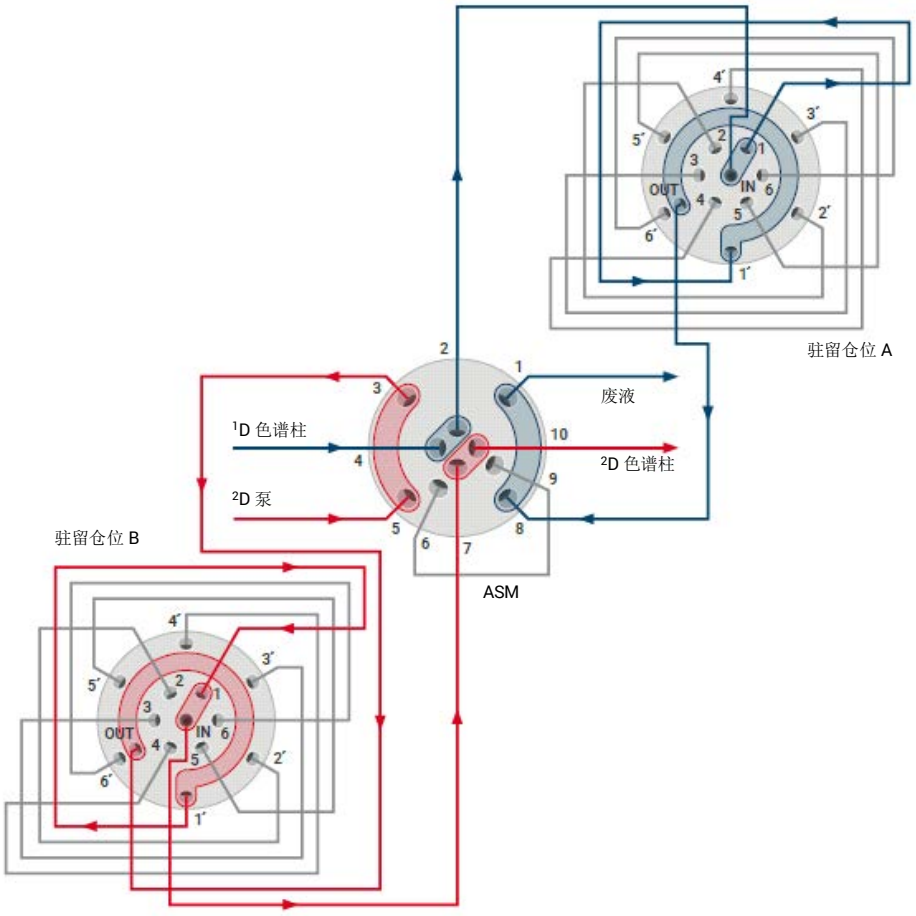


图 22　示意图：ASM 2D-LC 阀 (G4243A)，MHC（逆流）

示例：在 ^{1}D 中使用 HILIC 且在 ^{2}D 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 µL 的高浓度有机溶剂将被带到反相色谱柱。[1]

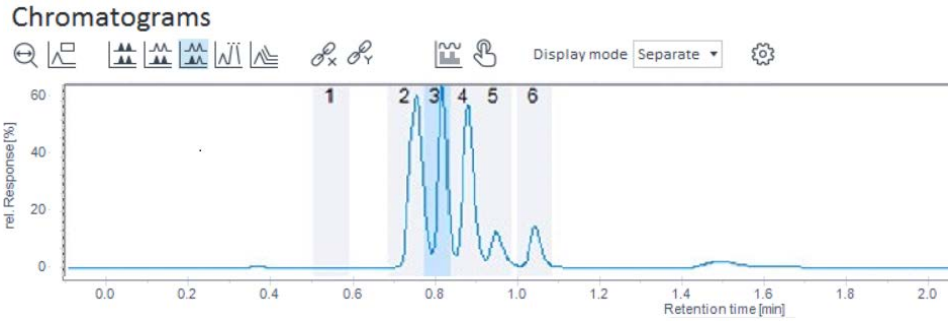


图 23　在 ^{1}D 中通过使用高浓度的有机溶剂组成的 HILIC 分离来分析农药

使用传统阀的 2D 分辨率

^{1}D 溶剂的高洗脱强度导致分离不良，左侧 ^{2}D 色谱图出现较宽和扭曲的峰。

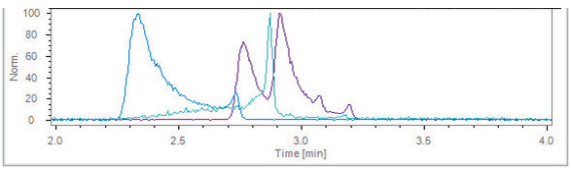


图 24　在 ^{2}D 中使用反相分离对切片 3 进行传统分析

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。

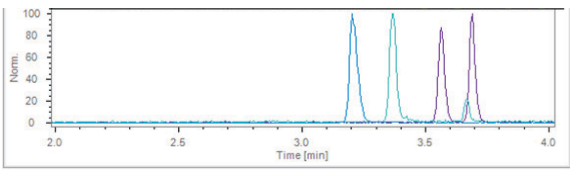


图 25　在 ^{2}D 中使用反相分离对切片 3 进行 ASM 分析

[1] 农药的 ^{1}D 分析使用：^{1}D：Zorbax RX-SIL（150 x 2.1 mm 内径，5 µm），A = 10 mM NH_4Ac（在 H_2O 中）；B = ACN，梯度：5 min 内 100% 至 95% 乙腈，500 µL/min。带 40 µL 定量环的 MHC。^{2}D：Bonus RP（50 x 2.1 mm，1.8 µm），H_2O/乙腈梯度（0.2% 甲酸），低浓度的溶剂 3% 乙腈，400 µL/min，来自传统 2D-LC 的 EIC（未稀释）

操作原理

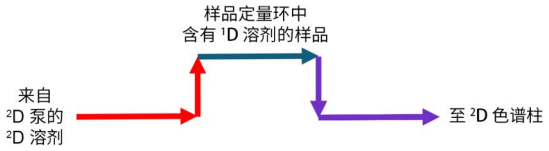


图 26 流路中的样品定量环的操作原理（示意图）

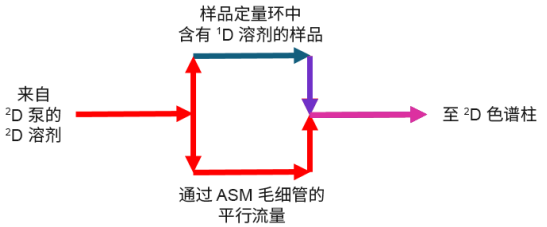


图 27 平行流路中的样品定量环和 ASM 毛细管的操作原理（示意图）

样品定量环中的 ^{1}D 溶剂被 ^{2}D 泵中的 ^{2}D 溶剂部分稀释。*

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

*红色：来自 ^{2}D 泵的 ^{2}D 溶剂，蓝色：样品定量环中含有 ^{1}D 溶剂的样品

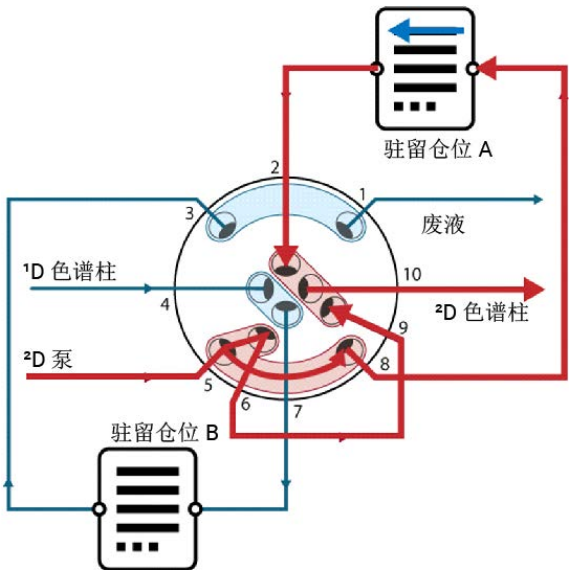


图 28 平行流路中的样品定量环和 ASM 毛细管的操作原理

这是同一流路在 2D-LC 阀 ASM 内的情况。来自 ^{2}D 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 ^{1}D 溶剂。^{2}D 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，^{1}D 溶剂在到达 ^{2}D 色谱柱头之前被稀释。

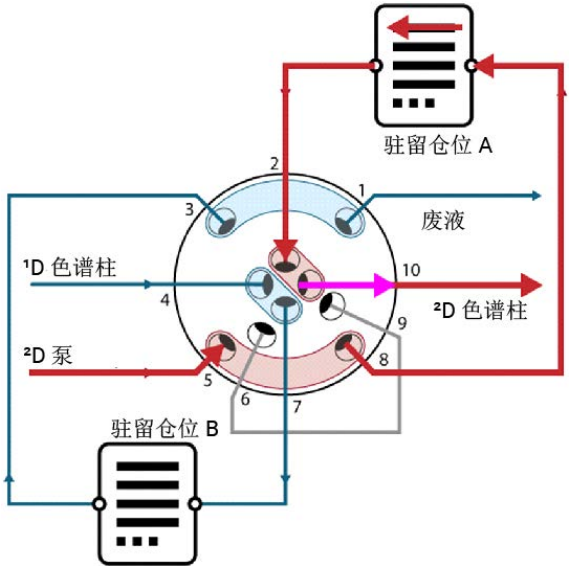


图 29　样品定量环流路的操作原理

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 ^{2}D 梯度。

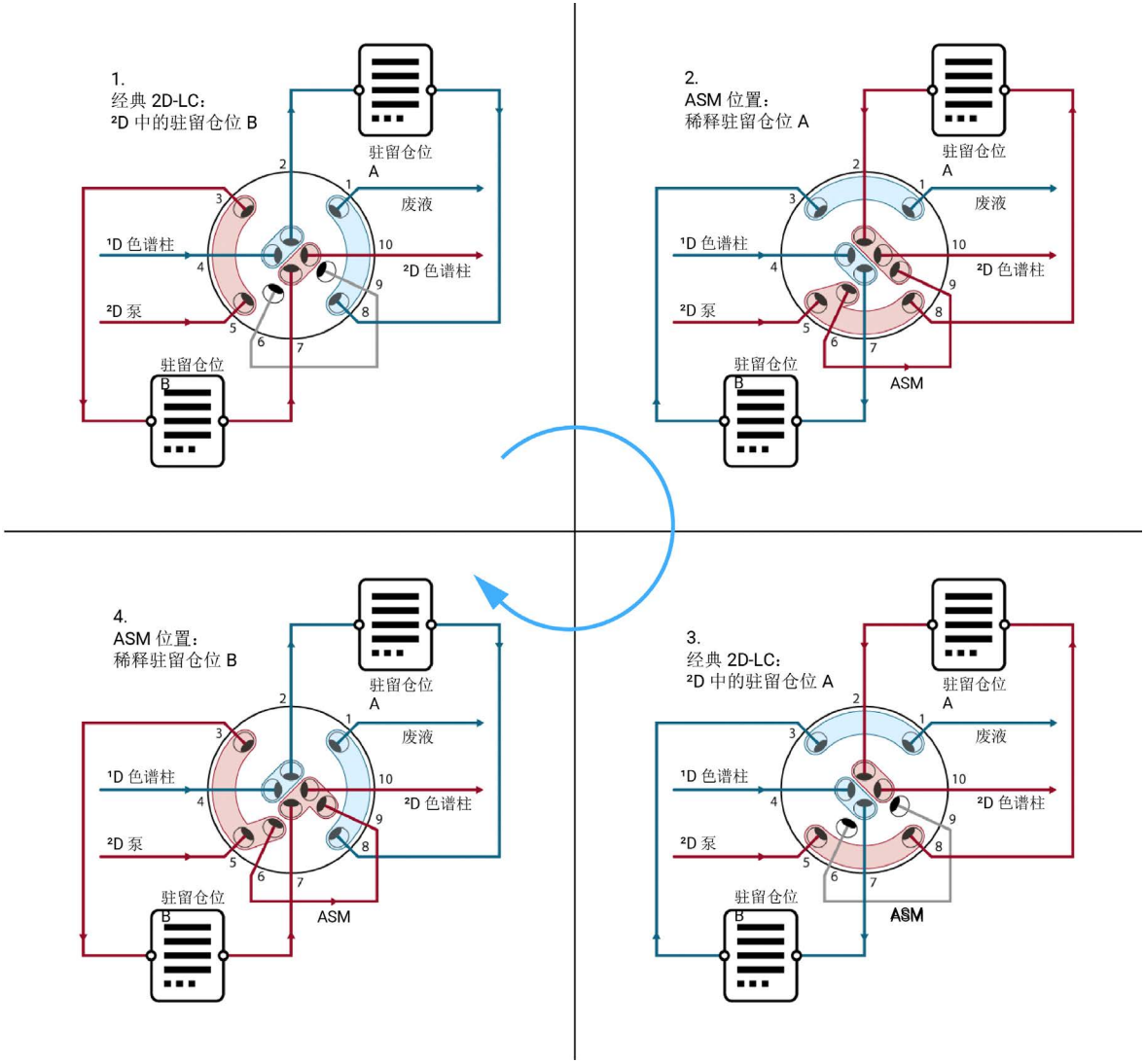


图 30　ASM 阀的切换周期（逆流模式）

表 1 软件（SW）中的切换周期位置名称

1 经典 2D-LC：
^{2}D 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：
^{2}D 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 ^{2}D 溶剂稀释 ^{1}D 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。

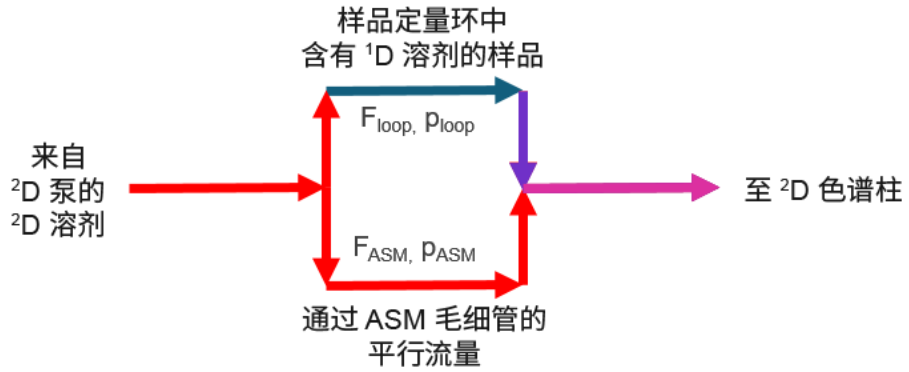


图 31　主动溶剂调制的原理（示意图）

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。

$$p = \frac{8\eta l F}{\pi r^4}$$ 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 ^{1}D 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 mm 和 $ID_{capillaries}$ = 0.12 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 ^{1}D 流速，来填充相同的样品定量环体积。这将改变 ^{1}D 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

OpenLab CDS 47
支持的操作系统 48
可用语言 49
PC 要求 49
许可证 51
支持的驱动程序 52
支持的固件 53

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。

OpenLab CDS

建议使用以下 OpenLab CDS 版本：

- Agilent OpenLab CDS 2.7
- Agilent 2D-LC Software for OpenLab 1.1

注意

更新 Agilent 2D-LC 软件时，务必使用正确的版本。有关所需软件版本的详细信息，请参阅第 48 页的 Agilent 2D-LC Software 与 Agilent OpenLab CDS 的兼容性部分。

Agilent 2D-LC Software for OpenLab 1.1 支持所有 OpenLab CDS 2.7 配置：

- Workstation（文件系统，可选保护 CDS 存储路径）
- Workstation Plus（使用 Content Management）
- 客户端/服务器系统（使用 OpenLab Server、OpenLab ECM XT 或 OpenLab ECM 3.x）

注意

适用于 OpenLab CDS 的 Agilent 2D-LC 软件可满足 GLP 和 21 CFR 第 11 部分合规性要求。

使用 Agilent 1290 Infinity II 2D-LC 解决方案的单四极杆功能需要 OpenLab CDS M8432AA 的 MS 许可证，这进一步需要 M8413AA 许可证来进行光谱数据评估。

该软件已成功通过 12 个 LC 模块的测试。请注意，复杂的系统会增加 OpenLab CDS 的内存消耗，这可能会降低系统稳定性。为了降低出现问题的可能性，请

- 定期重启 OpenLab CDS，例如，对于复杂系统，每周重启一次或多次
- 在 OpenLab CDS 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。

Agilent 2D-LC Software 与 Agilent OpenLab CDS 的兼容性

表 2 Agilent 2D-LC Software 与 Agilent OpenLab CDS 的兼容性

Agilent 2D-LC Software	Agilent OpenLab CDS
1.1 版本仅兼容：	2.7 版本
1.0 版本仅兼容：	2.6 版本

- 如果计算机上安装了 Agilent 2D-LC Software 1.0 版本，则用户可以直接将其升级到 1.1
- 如果用户拥有 Agilent 2D-LC Software 1.0 版本的许可证，则该许可证对 1.1 版本仍然有效
- 1.0 版本的所有 2D 数据和 2D-LC 处理方法与 1.1 版本兼容

支持的操作系统

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

- Windows 11 专业版（64 位）[21H2]
- Windows 10 专业版（64 位）[21H1]，或更高版本

有关详细信息，请参阅 Agilent OpenLab CDS 要求文档。

可用语言

用户界面以如下语言的操作系统语言显示：

- 英语
- 中文
- 日语
- 巴西葡萄牙语
- 俄语（仅限 Agilent 2D-LC Software 1.0，安装于 OpenLab CDS 2.6 Workstation）

如果正确配置了操作系统区域设置，则西欧语言操作系统也支持英语 OpenLab CDS 软件。

注意

仅英语、中文、日语和巴西葡萄牙语操作系统语言支持 Test Services (QualA)。

支持未本地化的仪器驱动程序，在运行本地化版本的 OpenLab CDS 时，驱动程序将以英文显示。

注意

非 Agilent 驱动程序可能需要自定义的区域设置。请参阅驱动程序文档中的本地化声明。

PC 要求

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

建议用于 OpenLab CDS 的 PC （经 Agilent 测试，适用于 Win 10 （64 位））：

- 使用文件系统存储的 OpenLab CDS Workstation：HP Z2 G5 工作站：Intel Core i5 9500 3.0 GHz，8 GB RAM + 可选添加 8 GB，
- 使用 Content Management 的 OpenLab CDS Workstation：HP Z2 G4 工作站：Intel Core i5 9500 3.6 GHz，16 GB RAM。

表 3 工作站的最低硬件配置

类型	OpenLab CDS Workstation	OpenLab CDS WS Plus
建议的 Agilent 原装捆绑 PC	小型机 HP Z2 G5	HP Workstation HP Z4 G4
处理器速度 (CPU)	3.0 GHz 或更高， 4 核	3.6 GHz 或更高， 4 核
物理内存 (RAM)	最多 2 个仪器点 • 8 GB 3 个或更多仪器点 • 16 GB	16 GB
	请注意，至少为 Windows 操作系统保留 4 GB。	
硬盘配置[1]	最低 1 x 500 GB 7200 RPM SATA 驱动器 建议使用 SSD 驱动器以获得更好的性能	至少 2 个 500 GB 或 1 TB 7200 RPM SATA 驱动器[1]建议使用 SSD 驱动器以获得更好的性能
图形分辨率	最低 1600 x 900；建议 1920 x 1080	
RS-232 端口	需要 1 串行端口，用于仍使用 RS-232 通信的所选仪器。 有关详细信息，请参见仪器规格。	
USB 端口	通过提供的媒介进行安装需要 使用 USB 2	
LAN 网卡	100 MB/1 GB LAN，用于仪器控制 需要第 2 个 LAN 网卡，用于实验室内网连接。	
Win 11	Microsoft 对 Win 11 有特定的芯片组要求。有关详细信息，请参考 Microsoft 相关资料。	

[1] 如果计算机上有磁盘阵列控制器，建议 RAID1 使用 2 x 1 TB

有关更多详细信息，请参见软件文档中的相应建议和说明。

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。

OpenLab CDS 使用 FlexNet Publisher (v. 11.12)，以分发和跟踪许可证授权。该软件连同 OpenLab CDS 组件一起安装。

有关许可证的更多信息，例如，如何通过 SubscribeNet 生成许可证文件，以及如何在控制面板中安装许可证，请参见相应软件的文档。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 Agilent 2D-LC 解决方案。

有关详细信息，请参见第 122 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 4 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 B.07.35 C.07.30 D.07.35	MassHunter Workstation 11 (TOF/QTOF)（或更高版本） MassHunter Workstation 12 (TQ)（或更高版本） OpenLab CDS 2.7（或更高版本）	3.5（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 5 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 LC/MS 单四极杆仪器，如 G6106A	最新固件[1] 有关仪器及其与 OpenLab CDS 兼容性的详细信息，请参阅第 62 页的表 7。

[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 372 页的更换模块固件。

4 安装

1290 Infinity II 2D-LC 系统的硬件安装 55
交付清单 55
选项 57
仪器设置建议 63
1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统的硬件安装 92
交付清单 92
选项 96
Bio 2D-LC 系统的建议 99
许可 2D-LC 仪器 121
使用许可证加密锁激活 2D-LC 系统驱动程序 122
Agilent OpenLab CDS Workstation 中的 2D-LC 软件安装 124
OpenLab Help & Learning 125
Agilent OpenLab Data Analysis 软件中的 Agilent 2D-LC 软件安装和配置 129
启动配置对话框 133
配置 HPLC 仪器 135
配置 2D-LC 组合 136
配置设备用户界面 139
方法导入 142
重要的客户网络链接 143

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 63 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 ^{2}D 泵。

这是实现以下目标的前提：

- 同步阀切换
- 在 ^{2}D 色谱柱上运行快速梯度

表 6 推荐的硬件配置概述

功能	功能元素	部件号	模块	注释
^{1}D	泵	G7120A	1290 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	
	柱温箱	G7116B	1290 Infinity II 高容量柱温箱	
		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 ^{1}D/^{2}D 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 81 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 6 推荐的硬件配置概述

功能	功能元素	部件号	模块	注释
接口	阀驱动器	G1170A	1290 Infinity 阀驱动器	
	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 6 推荐的硬件配置概述

功能	功能元素	部件号	模块	注释
^{2}D	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	
	柱温箱	G7116B	1290 Infinity II 高容量柱温箱	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	

表 6 推荐的硬件配置概述

功能	功能元素	部件号	模块	注释
				注意 有关兼容的质谱仪的概览，请参阅第 62 页的表 7。 **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。

Agilent LC/MS 单四极杆 6100 系列

以下 Agilent LC/MS 仪器可通过 OpenLab CDS 和 ChemStation 进行控制。

表 7 可通过 OpenLab CDS 和 ChemStation 控制的 Agilent LC/MS 仪器

产品编号	说明	兼容性声明
61xxA	LC/MS 系列	仅受 ChemStation 支持
G6160A	InfinityLab LC/MSD iQ	仅受 OpenLab CDS 支持
61xxB	LC/MS 系列	受 ChemStation 支持 要获得 OpenLab CDS 的支持，仪器需要更新智能卡 61x0B 可通过升级工具包 (G2735N) 升级至 61x0C 61x5B 可通过升级工具包 (G4934C) 升级至 61x5C
G6150B	MS 模块	仅受 ChemStation 支持
G6120C G6125C G6130C G6135C	MS 模块 LC/MSD MS 模块 LC/MSD XT	仅受 OpenLab CDS 支持 调谐需要 ESI 或 AJS 源
离子源		
G1947B G1971B	APCI APPI（光电离）	
G1948B	ESI	
G1958B	Agilent Jet Stream，适用于单四极杆	
G1978B	多模式源	

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。

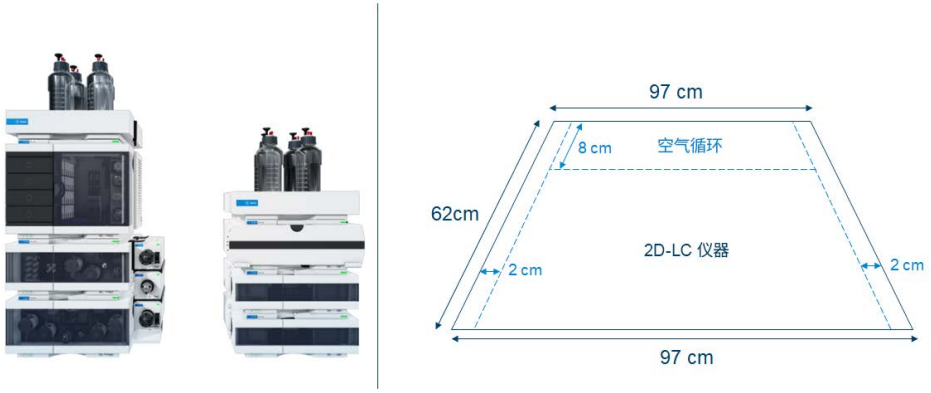


图 32　左侧：1290 Infinity II 2D-LC 系统的建议堆叠配置。右侧：1290 Infinity II 2D-LC 系统的工作台空间要求。

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。

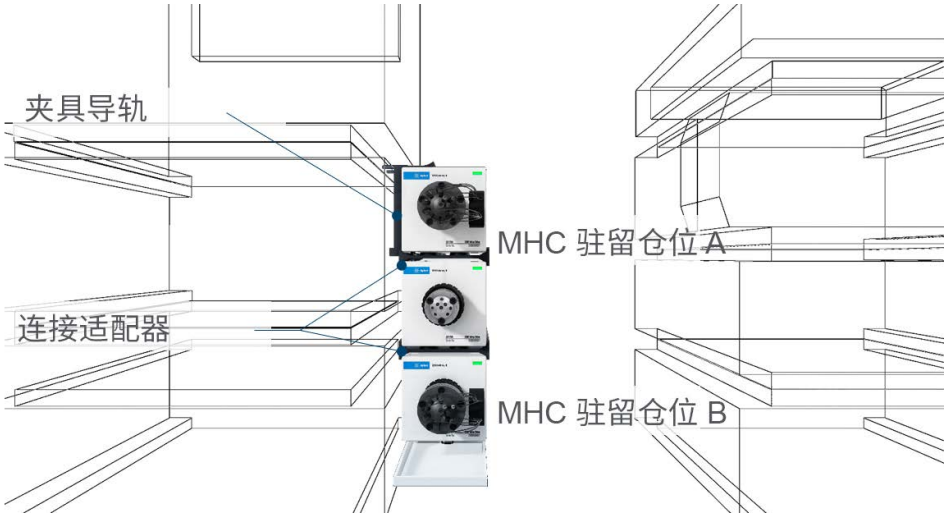


图 33　2D-LC 阀和 MHC 驻留仓位（可选）的安装和附件示意图

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 64 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 90 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 58 页的表 6)

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。

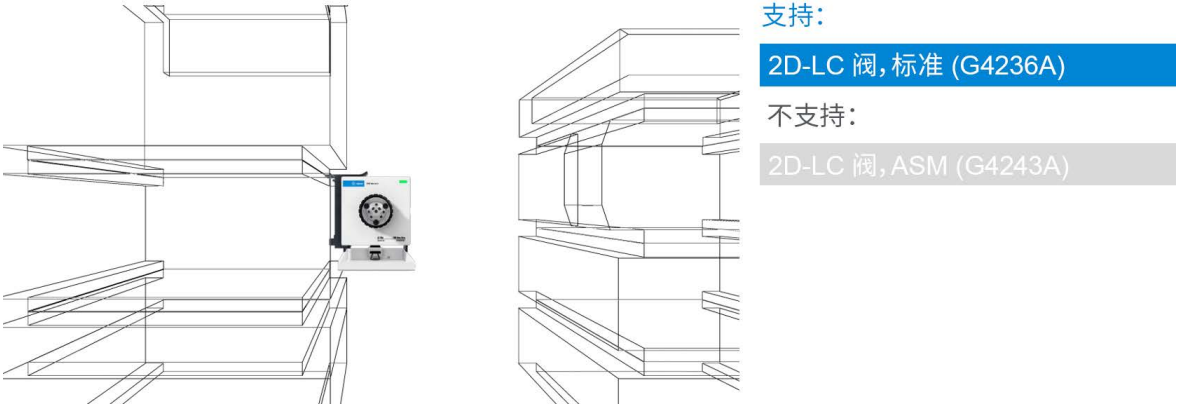


图 34　带支撑阀的单中心切割 (SHC) 配置示意图技术原因导致单中心切割设置不支持 ASM 阀 (G4243A)。

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。

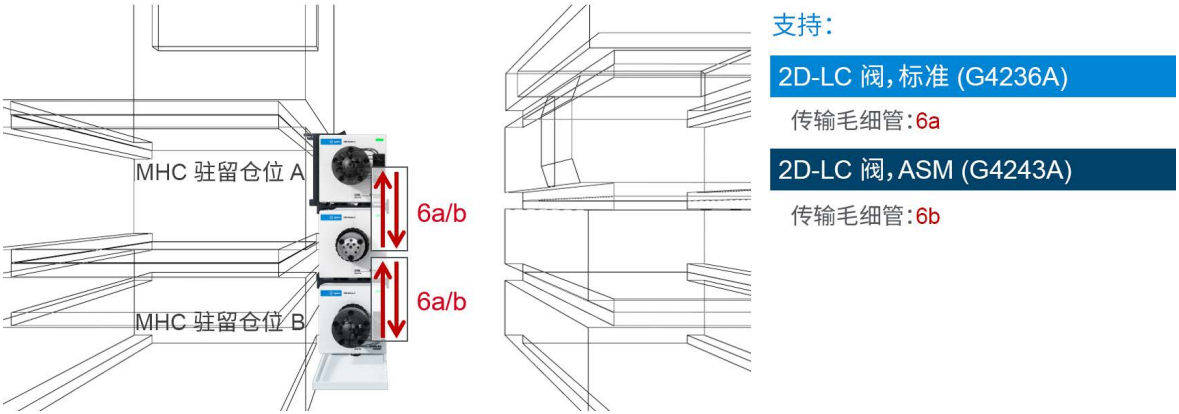


图 35　带支撑阀和传输毛细管的多重中心切割 (MHC) 配置示意图

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 76 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 78 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 79 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 71 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 74 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。

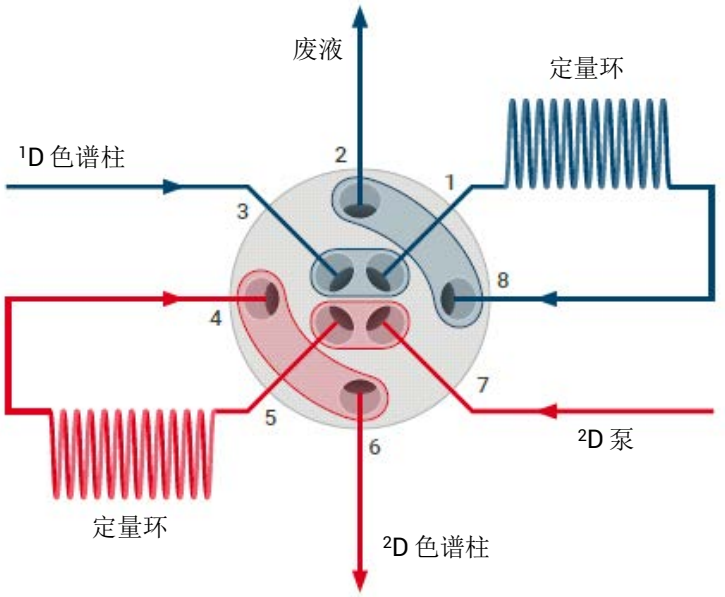


图 36　示意图：标准 2D-LC 阀 (G4236A)（顺流）

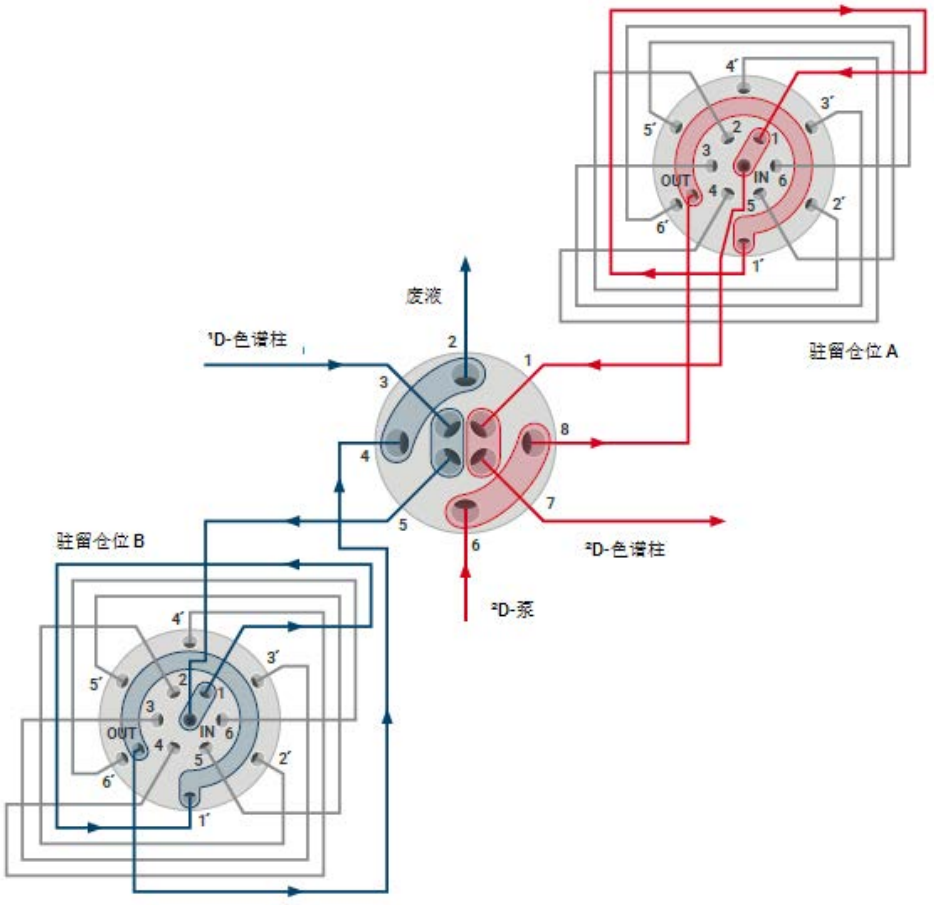


图 37　标准 2D-LC 阀 (G4236A)，MHC 1300 bar（逆流）

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 0.8/1.61mm 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**：

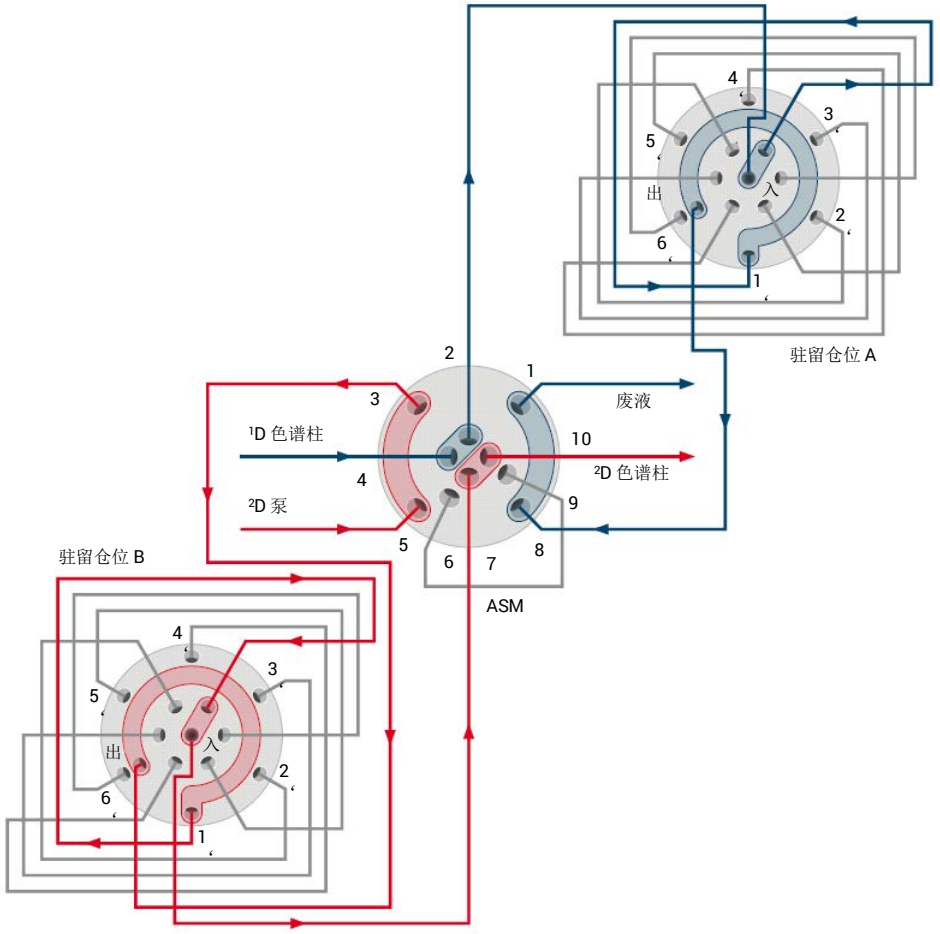


图 38　示意图：ASM 2D-LC 阀 (G4243A)（逆流）

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 0.8/1.61mm 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

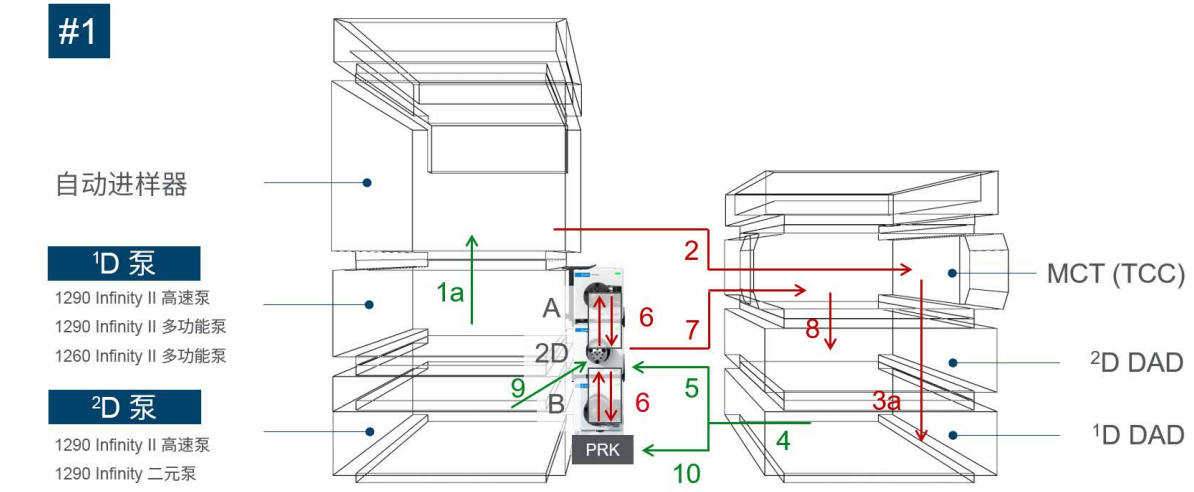


图 39 堆叠设置 #1：如果两个泵都是 Infinity II 模块或 2D 泵是 1290 Infinity 二元泵，建议使用该设置。

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）

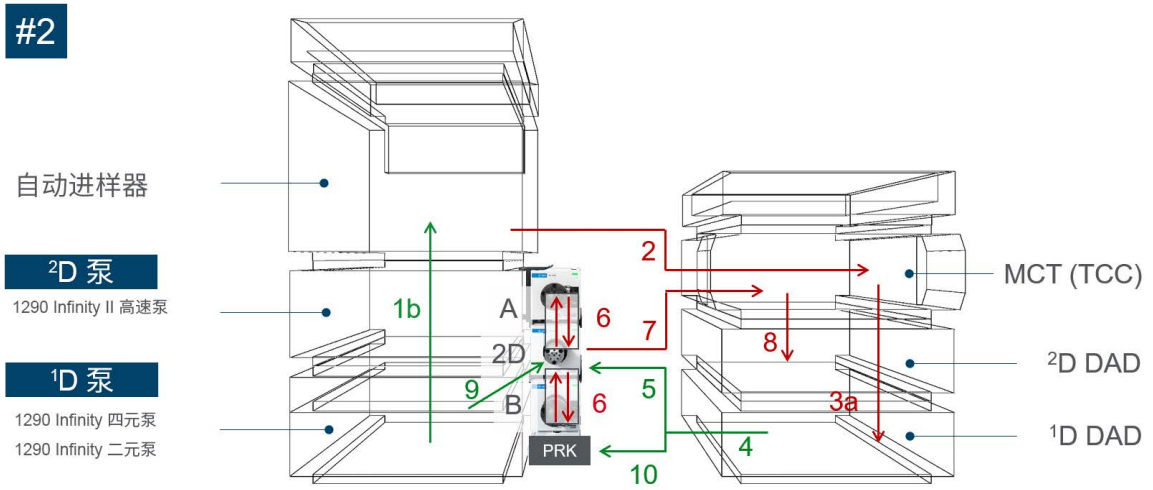


图 40　堆叠设置 #2：如果 1D 泵是 1290 Infinity 二元泵或 1290 Infinity 四元泵，建议使用该设置。

毛细管编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
1b	1	1D 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 1D 色谱柱（在 MCT 中）	0.12 x 600	5067-4669	不锈钢毛细管 0.12x600 S/SL
3a	1	1D 色谱柱到 1D DAD	0.12 x 400	5500-1251	不锈钢毛细管 0.12x400 SL/SL
4	1	1D 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）

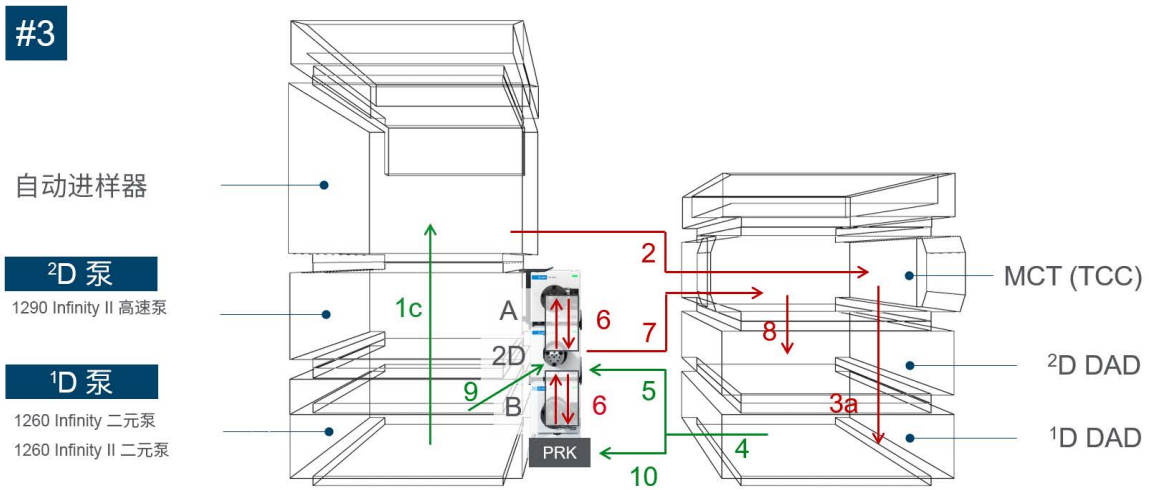


图 41　堆叠设置 #3：如果 ^{1}D 泵是 1260 Infinity 或 1260 Infinity II 二元泵，建议使用该设置。

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 69 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 ^{1}D 和 ^{2}D 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	^{1}D 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 82 页的图 42
B	包含单独 ^{1}D 和 ^{2}D MCT/TCC 的设置		请参见第 83 页的图 43
C	在集成式柱温箱 (ICC) 中装载 ^{1}D 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 84 页的图 44
D	使用 MS 分流阀设置		请参见第 85 页的图 45
E	设置 ^{1}D/^{2}D 切换阀	如果使用 ^{1}D 和 ^{2}D 检测器；不支持修改 A-C。	请参见第 87 页的图 46
F	^{1}D/^{2}D 切换阀，不带 ^{1}D 检测器	对于没有 ^{1}D 检测器的设置，例如某些 LCxLC 设置或使用 QQQ 质谱仪作为 ^{2}D 检测器的设置；不支持修改 A-C。	请参见第 88 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 88 页的图 47

A

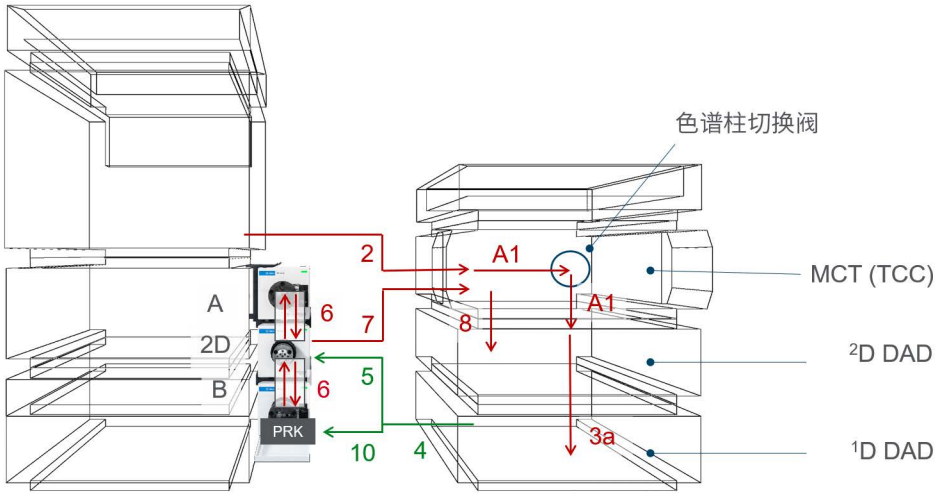


图 42 设置 A：如果使用了柱切换阀（例如，6 位/14 通 InfinityLab 快速切换阀），建议使用该设置。对于 InfinityLab 2 位/6 通快速切换阀，无需转接头 A1。

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 76 页的图 39、第 78 页的图 40 和第 79 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

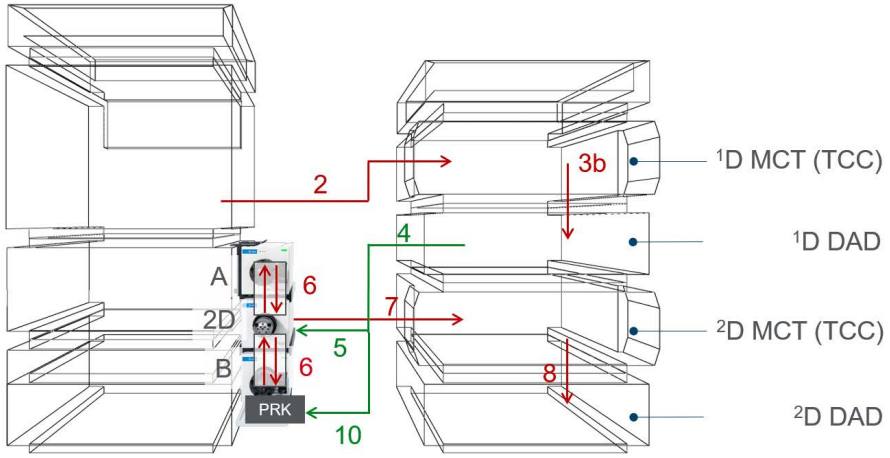


图 43 设置 B：如果仪器包含用于 ¹D 和 ²D 色谱柱的单独 MCT/TCC，建议使用该设置。

毛细管编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
3b	1	¹D 色谱柱到 ¹D DAD	0.12 x 280	5067-4651	不锈钢毛细管 0.12x280 SL/SX
8	1	²D 色谱柱（在 ²D MCT 中）至 ²D 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 76 页的图 39、第 78 页的图 40 和第 79 页的图 41。

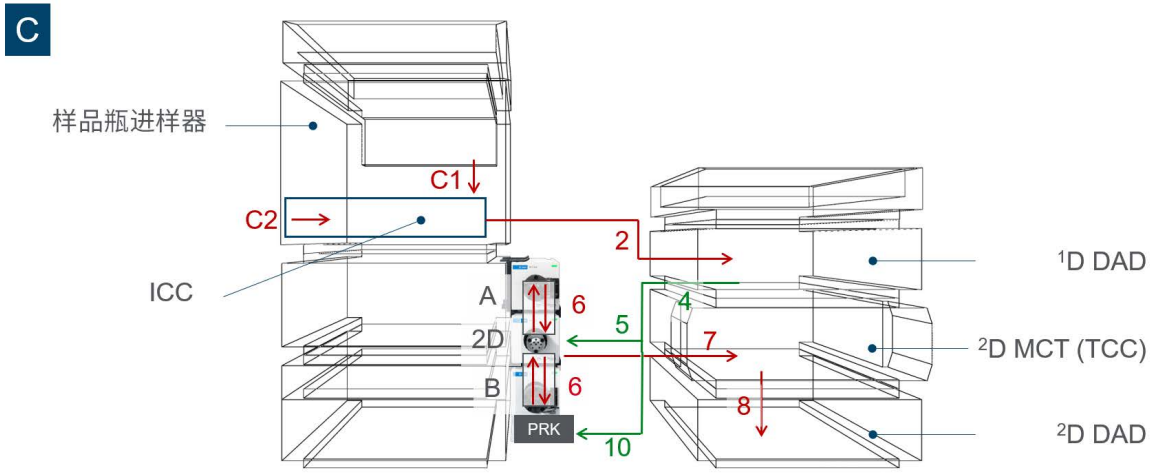


图 44 设置 C：如果在集成式柱温箱 (ICC) 中装载了 1D 色谱柱，建议使用该设置。

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	2D 色谱柱（在 2D MCT 中）至 2D 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 76 页的图 39、第 78 页的图 40 和第 79 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 69 页的表 9

以下部分提供了更多信息：

- 第 169 页的方法参数
- 第 239 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

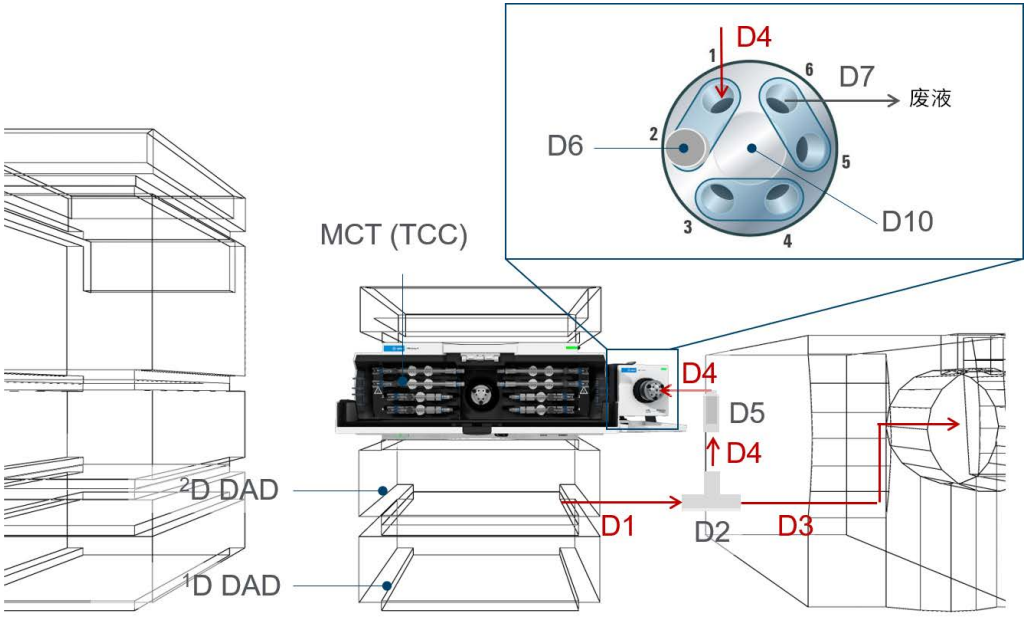


图 45　设置 D：MS 分流阀的建议设置

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 mm x 5m
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 76 页的图 39、第 78 页的图 40 和第 79 页的图 41。					

使用 ^{1}D/^{2}D 切换阀可以排除仪器的 ^{2}D 流路来运行 ^{1}D 和 ^{2}D 实验，例如，在将一台质谱仪同时用于 ^{1}D 和 ^{2}D 实验时，这会非常有用。支持两种基本设置（设置 E 和 F）。^{1}D/^{2}D 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 ^{1}D 和 ^{2}D MCT/TCC！要运行 1D 实验，必须禁用 ^{2}D 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 172 页的关闭。

E

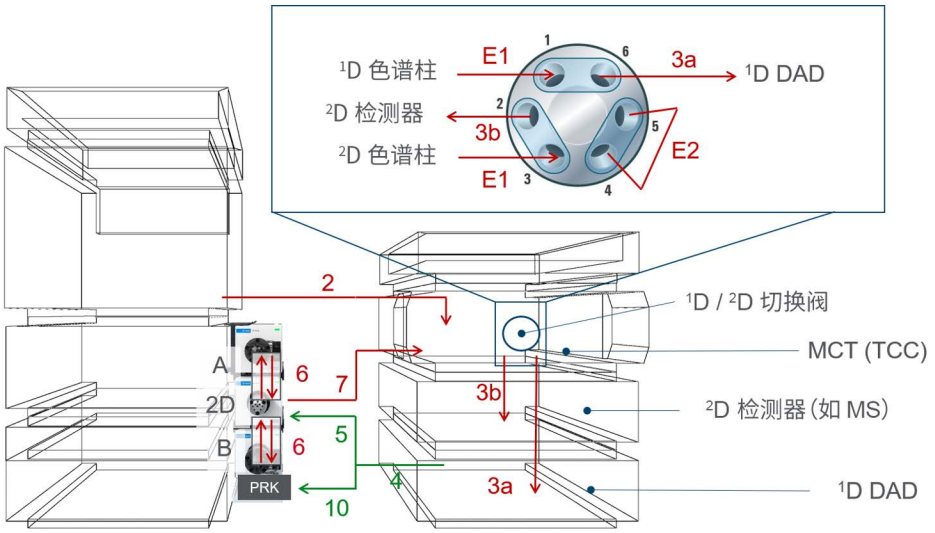


图 46　设置 E：^{1}D/^{2}D 切换阀的建议设置

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 76 页的图 39、第 78 页的图 40 和第 79 页的图 41。					

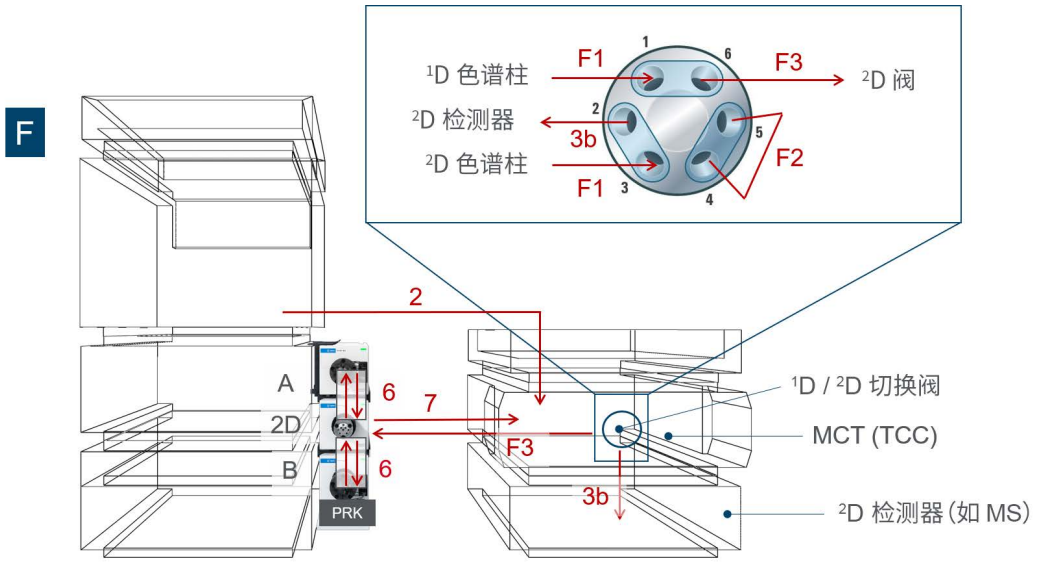


图 47　设置 F：无 ^{1}D 检测器的 ^{1}D/^{2}D 切换阀的建议设置。

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 76 页的图 39、第 78 页的图 40 和第 79 页的图 41。

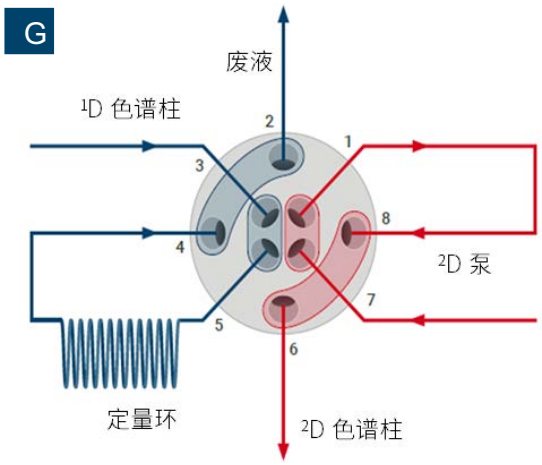


图 48　设置 G。单中心切割配置为单样品定量环设置

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 76 页的图 39、第 78 页的图 40 和第 79 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 136 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

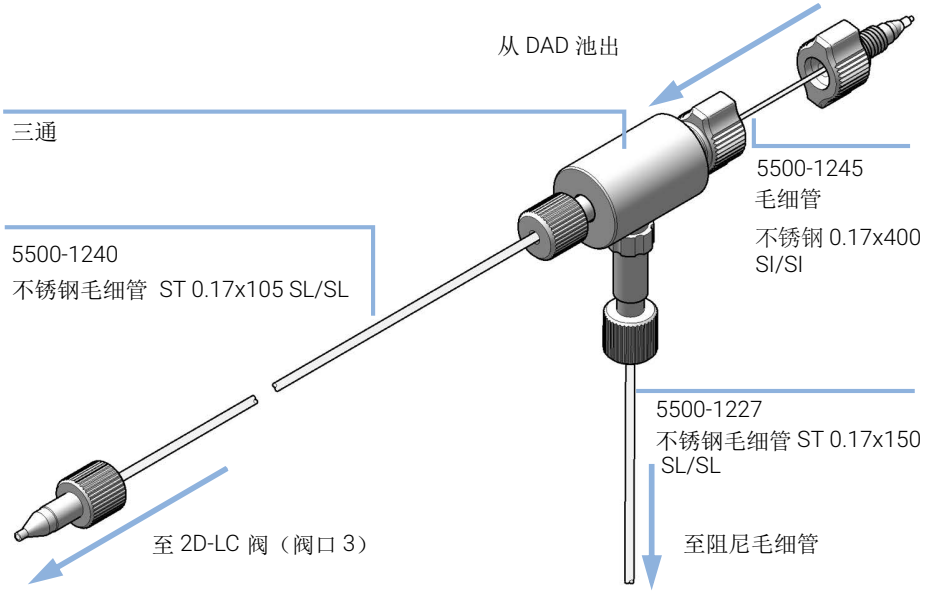
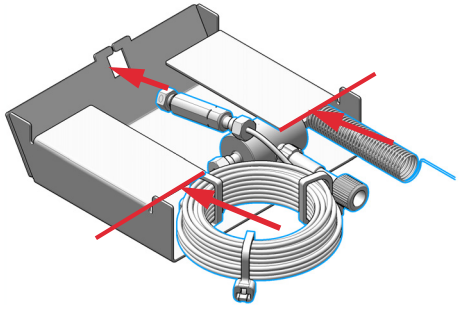
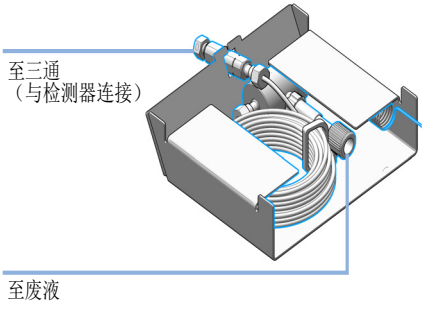
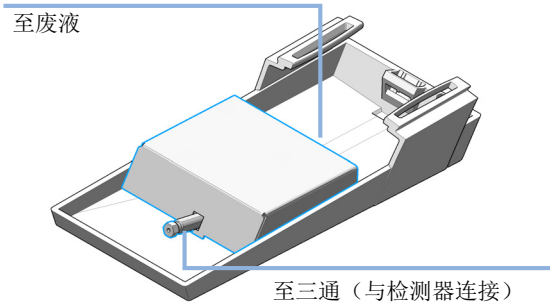
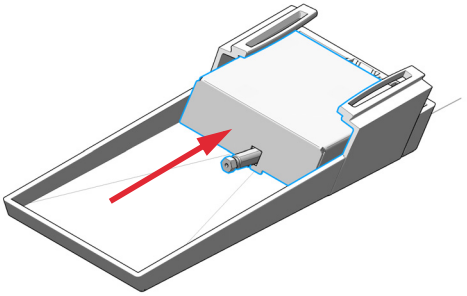


图 49　连接到压力释放工具包

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。  	**4** 将压力释放组件推到正确位置。 
5 连接三通，请参见第 90 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 406 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 µL (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

BIO 与 BIO INERT

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 ^{2}D 泵。

这是实现以下目标的前提：

- 支持 2D-LC 功能
- 在 ^{2}D 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 高容量柱温箱	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 高容量柱温箱	
	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 106 页的连接不带 MHC 的 Bio 2D-LC ASM 阀或第 108 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
^{2}D	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	1260 Infinity II 高容量柱温箱	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。
		G7116B	1290 Infinity II 高容量柱温箱	
	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

有关兼容的质谱仪的概览，请参阅第 62 页的 Agilent LC/MS 单四极杆 6100 系列。

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

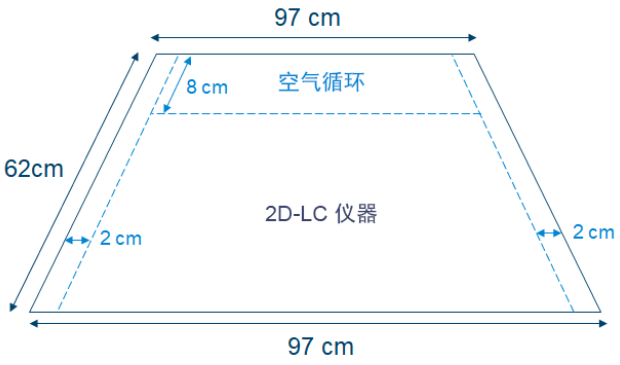
常规信息

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。

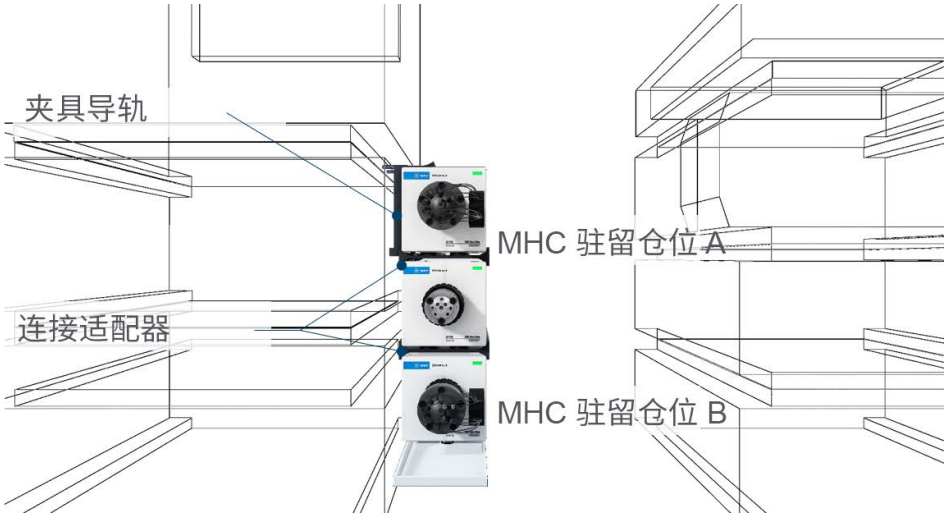


图 50　Bio 2D-LC 阀和 MHC 驻留仓位（可选）的安装和附件示意图

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 100 页的图 50 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，请参阅第 117 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 105 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

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。

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。

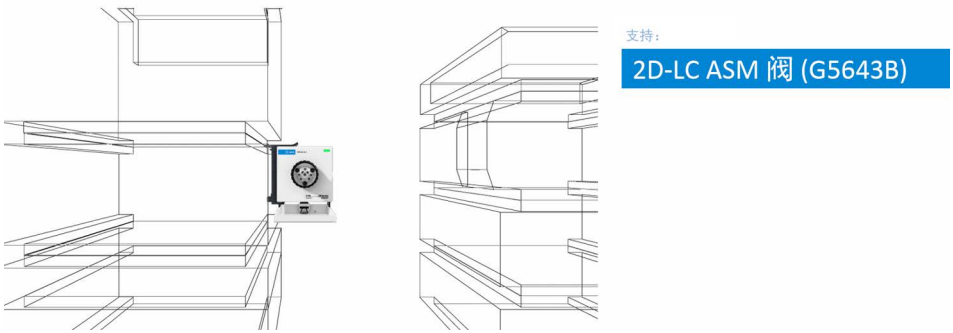


图 51　含支持的阀的单中心切割 (SHC) 配置示意图

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

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。

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。

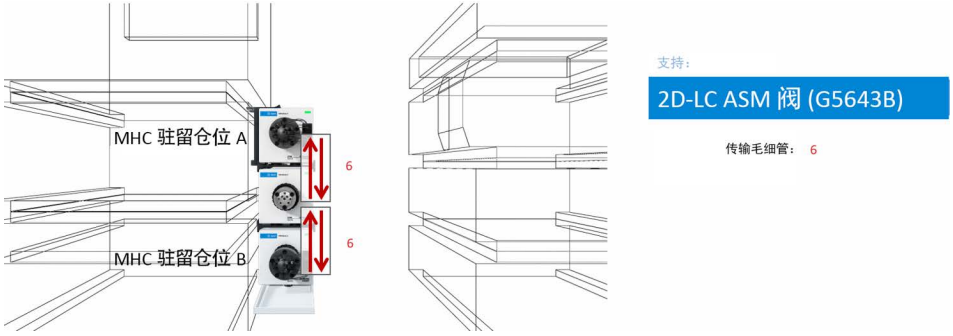


图 52　含支持的 bio 阀和 bio 传输毛细管的多重中心切割 (MHC) 配置示意图

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 106 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 109 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

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。

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。

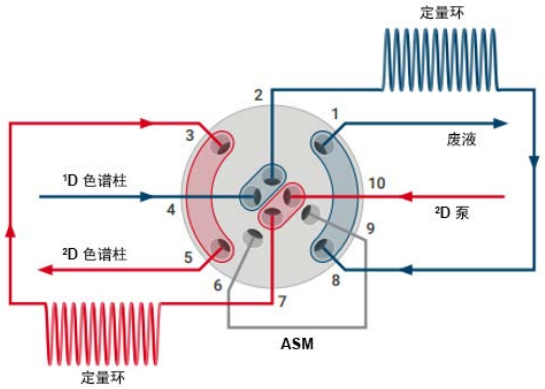


图 53　示意图：Bio 2D-LC ASM 阀，不带 MHC （顺流）

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。

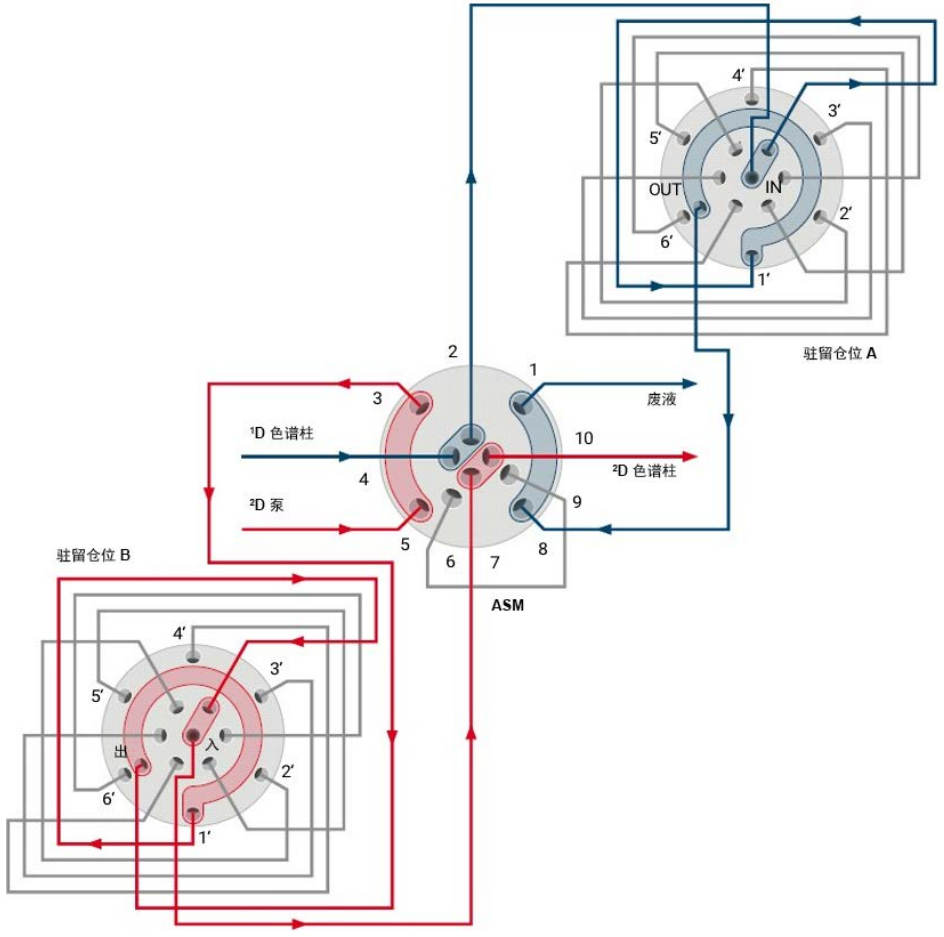


图 54　示意图：Bio 2D-LC ASM 阀（逆流）

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	017 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



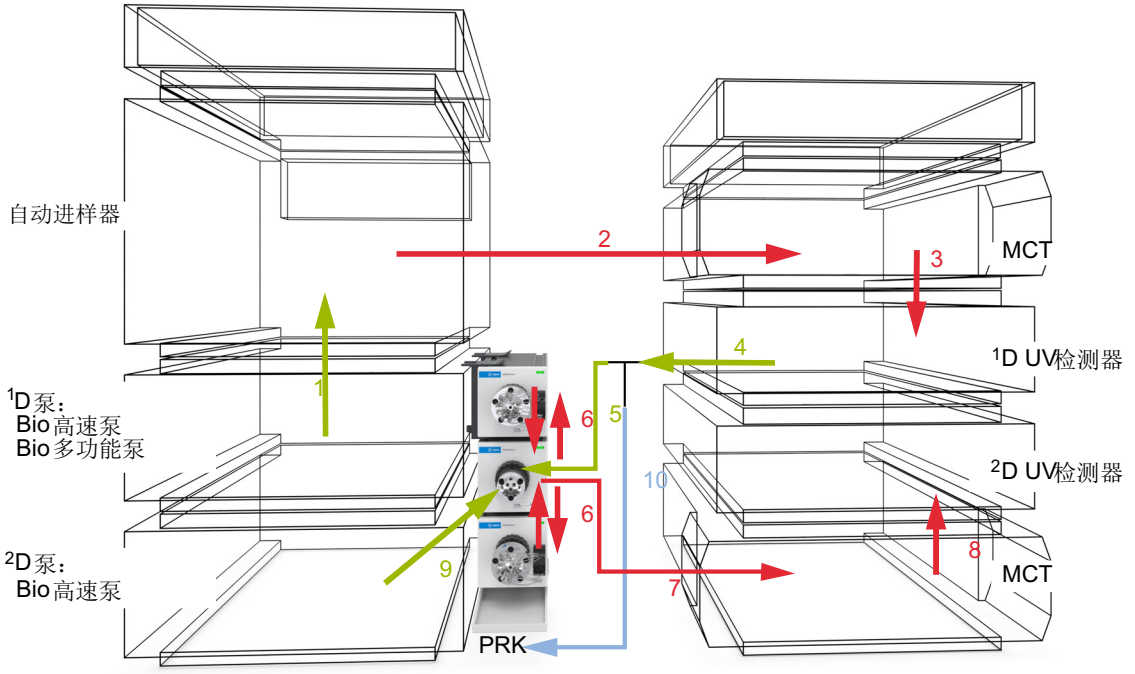


图 55　如果两个 Bio 泵都是 Infinity II 模块或 2D 泵是 1290 Infinity Bio高速泵，推荐使用的设置。

毛细管编号	#	连接	内径 x 长度 [mm]	部件号	说明
1	1	1D 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	0.12 x 600	5004-0031	毛细管 MP35N 0.12 x 600
	1	交换器标准流量 (MCT1)	0.12 x 105	5500-1578	Quick-Connect 快速连接毛细管 MP35N 0.12x105 M/M
		Bio Quick-Connect 快速连接热交换器标准流量至 1D 色谱柱（在 MCT1 中）			
3	1	1D 色谱柱至 1D 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（MCT1 或 2）	0.12 x 400	5500-1597	Quick Turn 毛细管 MP35N 0.12 x 400 M/M
	1	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 169 页的方法参数
- 第 239 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

D

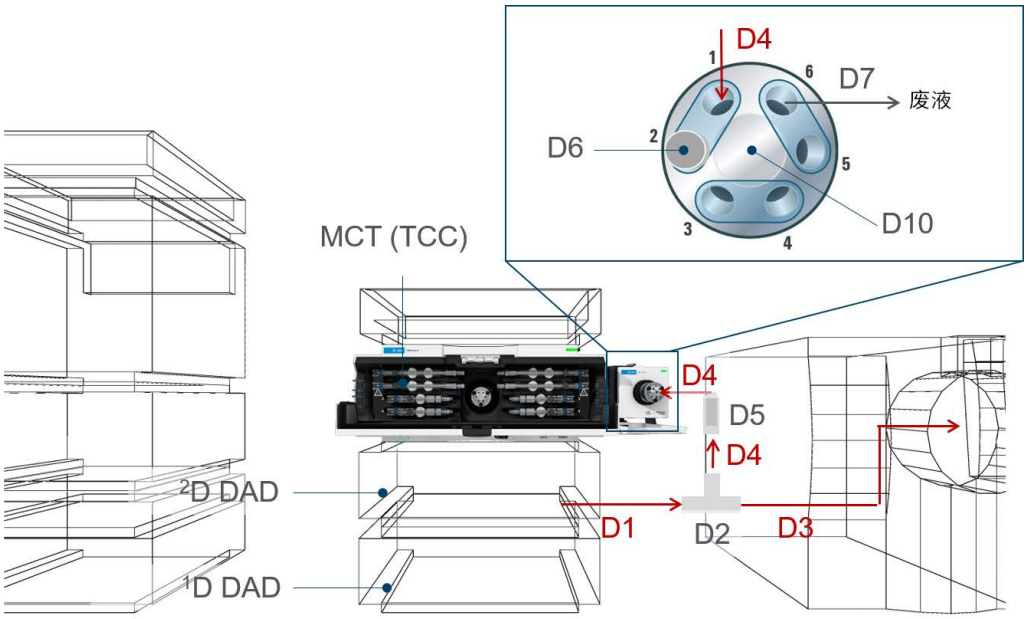


图 56　MS 分流阀的建议设置

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 76 页的图 39，
- 第 78 页的图 40 和
- 第 79 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

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。

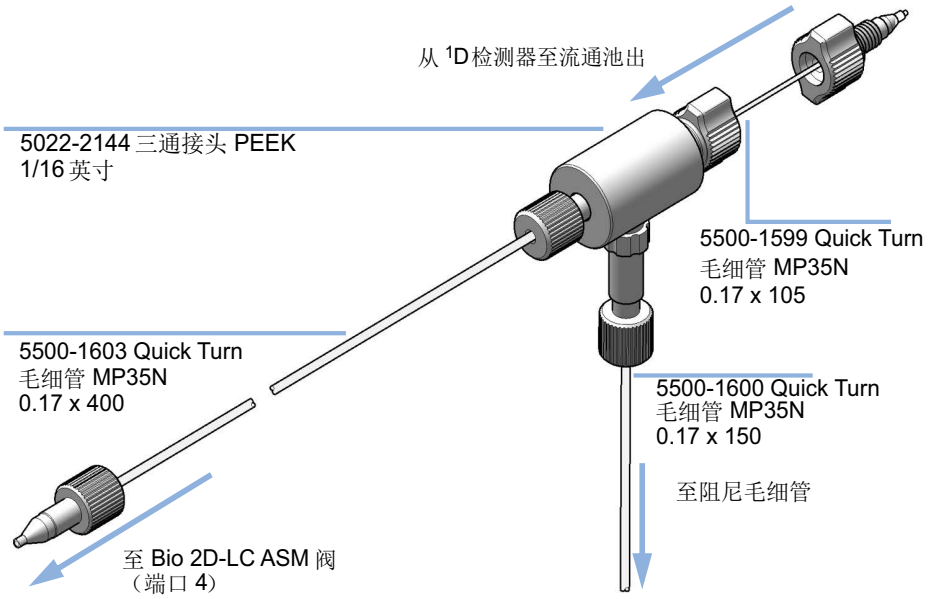


图 57　连接到压力释放工具包

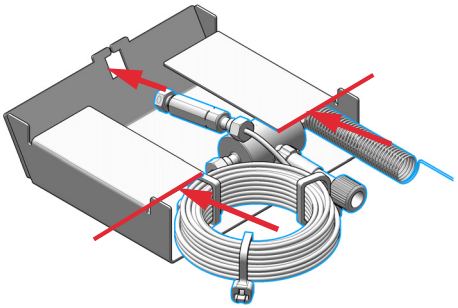
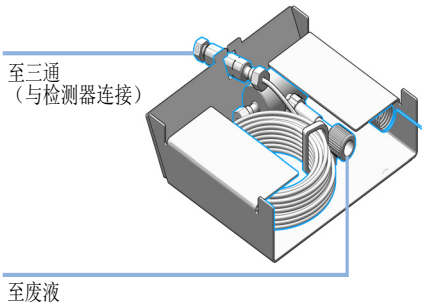
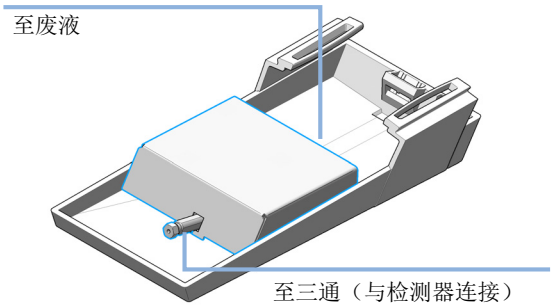
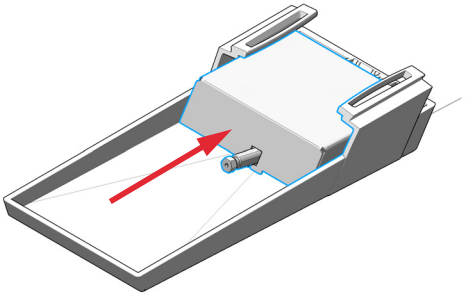
所需的部件：

#	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。

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。 	4 将压力释放组件推到正确位置。 
5 连接三通，请参见第 117 页的图 57。	

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：

- DA 插件许可证，以及
- 2D-LC USB 硬件加密锁

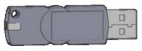
有关详细信息，请参阅 OpenLab CDS 文档。

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 ^{2}D 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： ^{2}D 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 ^{2}D 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 359 页的 Agilent Lab Advisor 软件。

Agilent OpenLab CDS Workstation 中的 2D-LC 软件安装

先决条件

- 必须更新操作系统并准备好使用准备工具。
- 提供完整安装 OpenLab CDS 软件和 LC 驱动程序所需的许可证。

准备

1 有关详细信息，请参见《OpenLab CDS 要求指南》。

2 运行 System Preparation Tool。

安装

1 运行安装向导，包括软件验证。

2 安装后：设置帐户来启用自动打印。

[可选] 3 提高离线机器的性能。

获取许可证

1 通过 SubscribeNet 获取许可证。

2 安装许可证。

配置

1 身份验证。

2 项目，包括审计跟踪设置。

有关详细信息，请参见《OpenLab CDS 工作站安装和配置》(CDS_WorkstationGuide.pdf) 中的“安装工作流程概述”一节。该手册位于安装媒介上的 CDS doc 文件夹中，中文版本可从 **SubscribeNet** 获取。

注意

有关详细的升级安装过程，请参阅安装介质上 Setup\Docs\EN 下的《OpenLab CDS 工作站安装和配置指南》(CDS_WorkstationGuide.pdf（该手册的中文版本可从 **SubscribeNet** 获取）) 第 9 章“升级 OpenLab CDS”（第 93 页）。

OpenLab Help & Learning

OpenLab CDS 包含一整套适用于您系统的手册、视频、入门课程、用户应用和方法开发工具。

启动 OpenLab Help & Learning

执行以下操作之一：

F1	要获取有关某个窗格、窗口或对话框的详细信息，请将光标放在目标窗格、窗口或对话框上，然后按 F1 键。将打开 OpenLab Help and Learning。
?	单击程序标题中的此按钮可打开 OpenLab Help and Learning，其中包括基本任务、用户界面和参考信息。
	单击桌面上的此图标。您也可以单击**开始** > **所有程序** > **Agilent Technologies** > **OpenLab Help and Learning**。

课程

单击**入门教程**下的**课程**中的某个主题，即可访问交互式课程。每个课程都包含针对 OpenLab CDS 的强大、交互式、按需培训模块。您可以随时按照自己的节奏轻松学习该功能。这些模块将引导您完成使用 OpenLab CDS 软件的详细步骤。



图 58　开始 LC/MS 交互式课程

操作方法

在 **OpenLab Help & Learning** 的**操作方法**下，您可以看到数百个主题，其中包含详细的分步说明，可以指导您完成日常任务。带有播放按钮的主题包括软件演示视频。



图 59　Help and Learning 的操作方法部分

安装

要在使用 OpenLab CDS 软件之外的 PC 上安装 OpenLab CDS Help and Learning 材料，请选择 OpenLab CDS 软件安装盘的**文档** > **仅安装 OpenLab Help and Learning**。

Help and Learning 的**入门教程**下包含的内容是为 OpenLab CDS 提供的强大的交互式按需培训工具。这有助于您随时按照自己的节奏轻松学习该新功能。这些模块将引导您完成使用 Agilent InfinityLab LC/MSD 系列和 6100 系列 LC/MS 软件的详细步骤。

在 Help and Learning 的**操作方法**下，您可以看到数百个主题，其中包含详细的分步说明，可以指导您完成日常任务。带有播放按钮的主题包括软件演示视频。

有关系统安装和现场准备的详细信息，请参见：

- Agilent OpenLab Data CDS 要求指南
- Agilent OpenLab CDS 工作站指南
- Agilent OpenLab CDS 客户端和 AIC 指南
- OpenLab CDS 教程系列：

  https://www.youtube.com/watch?v=RL6Im4bKBlEan-dlist=PLThrdl2ragolKzO3h-k_y3lWy_UpkW5aQandindex=27

Agilent OpenLab Data Analysis 软件中的 Agilent 2D-LC 软件安装和配置

先决条件

- 必须安装兼容的 CDS。有关详细信息，请参见 OpenLab CDS 文档 (CDS_WorkstationGuide.pdf)
- 完整安装 2D-LC 软件所需的许可证

安装软件

1 从数据介质上的文件夹 \OpenLab\Install 中选择数据分析软件。

2 双击 Agilent.OpenLab.2D-LCSoftware.msi。

3 按照软件安装程序提供的说明进行操作，直到完成**选择 Shared Service 主机名**步骤，并输入相关信息，例如 `localhost` 作为**主机名**。

[可选] 4 提供内部用户的名称和密码（如有必要）。

5 要完成注册，单击**注册**按钮。

将显示**注册结果**窗口。

6 要确认，单击**确定**。



图 60　DA 安装期间的“共享服务器主机名”视图，注册成功

注意 首先，将 CDS 升级到最新版本，以便升级最新的 2D-LC 软件版本。有关升级 CDS，请参阅安装盘上提供的《OpenLab CDS 工作站安装及配置指南》(CDS_WorkStationGuide.pdf) 中的说明。

注意 2D-LC Data Analysis 附加软件 1.1 版本与 OpenLab CDS 2.6 不兼容。

注意 Data Analysis OpenLab 2D-LC Software 1.0 版本的许可证也适用于 1.1 版本。

注意 OpenLab CDS 2.6 中的 2D-LC 处理方法和 2D-LC Data Analysis 附加软件 1.0 处理的 结果集与用于 OpenLab CDS 2.7 的新版本 2D-LC 附加软件 1.1 兼容。

将 2D-LC 许可证添加到系统中

1 启动桌面上的控制面板快捷方式。

或

导航到**开始** > **所有程序** > **Agilent Technologies** > **OpenLab Shared Services** 并单击**控制面板**。

2 在导航窗格中，导航到**管理** > **许可证**。

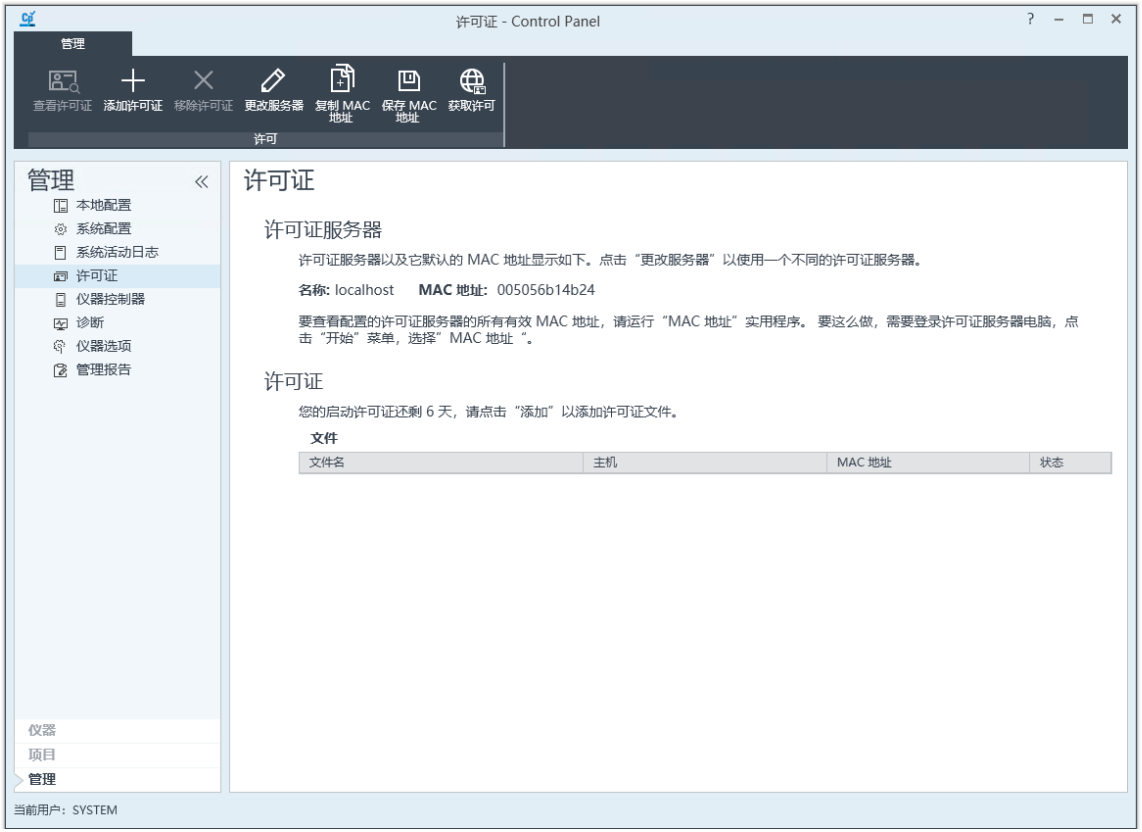


图 61 许可证控制面板

3 在功能区中，单击**添加许可证**。

4 要安装许可证，使用许可证文件选项浏览到并打开在 SubscribeNet 的许可证生成过程中保存的许可证文件 (.lic)。

或

选择许可证“测试”选项，并将接收到的文本文件中的许可证文本复制到提供的字段中。

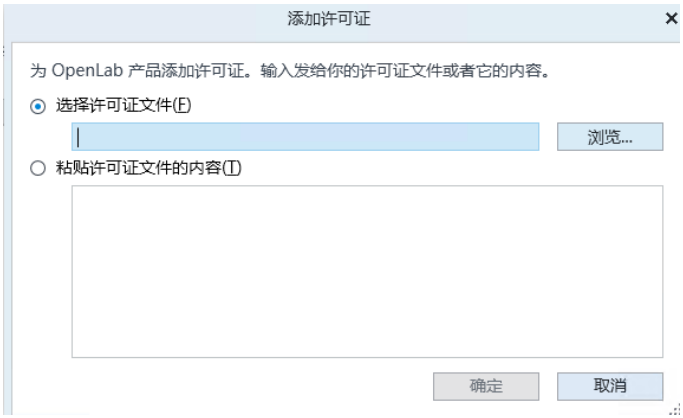


图 62 “添加许可证”视图

5 单击**确定**。

控制面板中的“管理”界面现在将显示安装的许可证状态。

注意 要让任何许可证立即生效，必须完全重启。

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已定义。

1 打开控制面板。

2 双击**配置仪器**。



或

右键单击并选择**配置仪器**。



图 63 控制面板的“配置仪器”视图

将打开“仪器配置”。

3 选择**自动配置**。

将打开**自动配置**对话框。

4 定义 Agilent LC 系统的正确 IP 地址。LC 仪器的默认 IP 地址是 192.168.254.11。

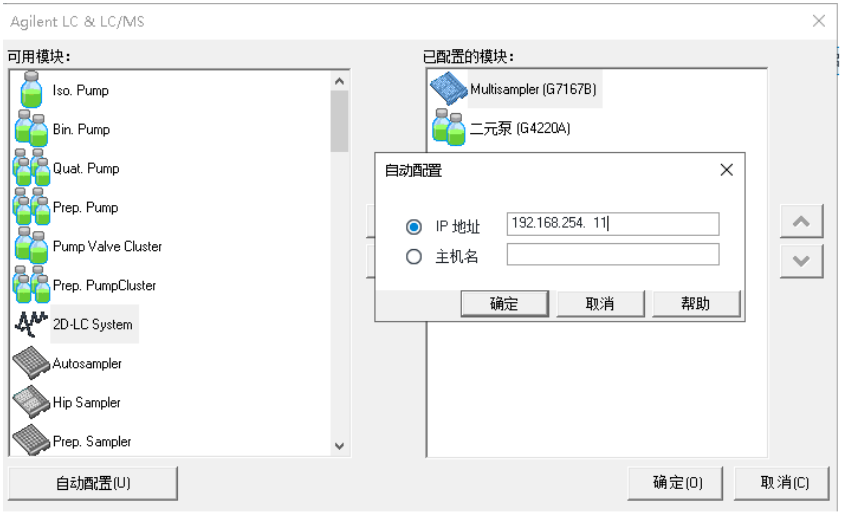
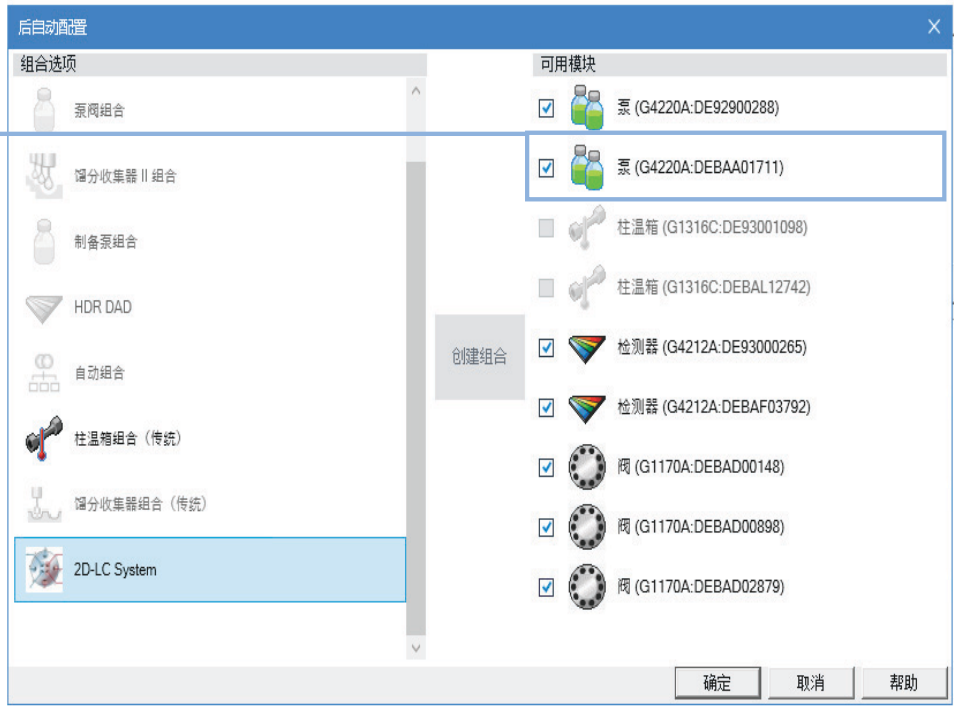


图 64　使用默认 IP 地址的配置和自动配置

5 单击**确定**。

将打开**后自动配置**对话框。

配置 HPLC 仪器



^{2}D 泵

图 65　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 ^{1}D 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

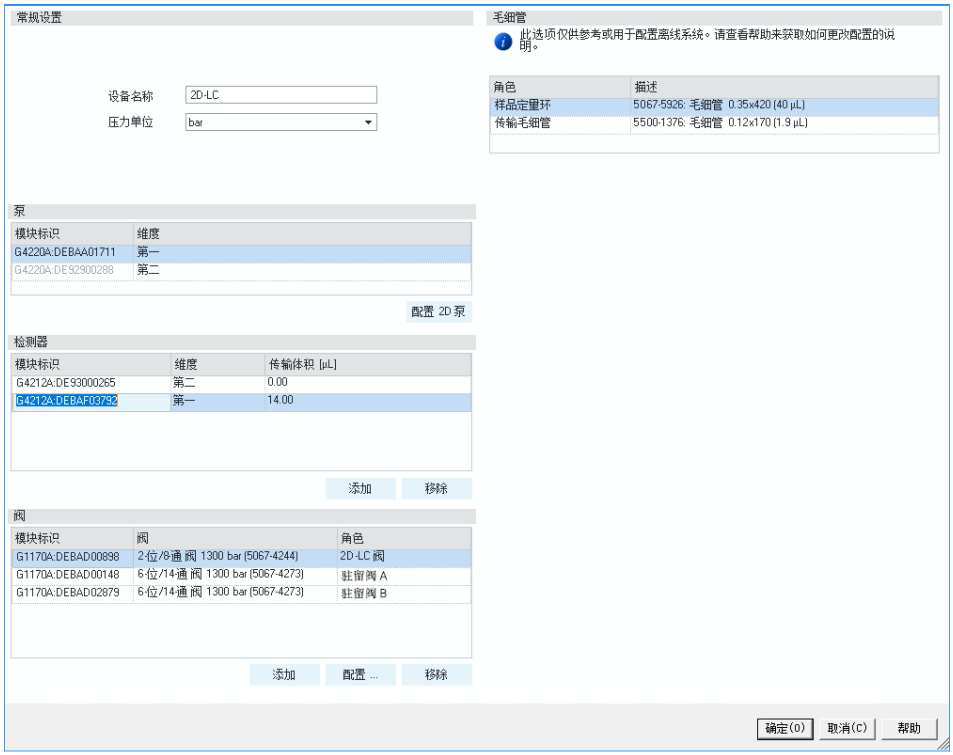


图 66　2D-LC 组合配置（适用于 ASM 阀、MHC 阀和分流阀）

2D-LC 软件配置窗口允许：

- 验证 ^{1}D 和 ^{2}D 泵配置
- 配置 ^{2}D 泵
- 添加并选择 ^{1}D 和 ^{2}D 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 ^{1}D 和 ^{2}D 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 ^{1}D 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 135 页的配置 HPLC 仪器。

配置 2D 泵按钮允许配置 ^{2}D 泵，例如，溶剂类型。

3 在“检测器”下，选择 ^{1}D 和 ^{2}D 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 135 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，LC/MS 单四极杆。

传输体积的 ^{1}D 设置决定峰的 ^{1}D 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，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。

^{2}D 检测器的传输体积由 2D-LC 阀和第二维检测器流通池之间的体积定义。该结果用于 2D-LC Openlab DA 插件中的延迟计算。样品定量环和检测器之间的 ^{2}D 偏移确保切片色谱图的开始和结束正确对齐/显示。

注意 **可使用以下选项通过实验更精确地验证传输体积（^{1}D 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 ^{1}D 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 有关传输量和传输时间的详细信息，请参阅第 157 页的第一维传输体积的分析验证和第 158 页的第二维死体积（传输时间）的分析或图形测定。

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。请验证 2D-LC 配置屏幕中的检测器信息是否与仪表板中的模块信息 **[i]** 匹配。

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 SQ 检测器的 2D-LC 系统，必须手动输入信息 G6135C:SN12345678 或 LC/MSD iQ:识别目标化合物识别目标化合物SN12345678。不允许设置未配置 ^{2}D 检测器的系统。

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 189 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 µL 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 µL) 部件号 5500-1270（用于标准阀）或毛细管 0.12x170 (1.9 µL) 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 µL) 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 364 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
- ^{1}D 二元泵
- 2D-LC
- ^{1}D MCT
- ^{2}D MCT
- ^{1}D DAD
- ^{2}D DAD

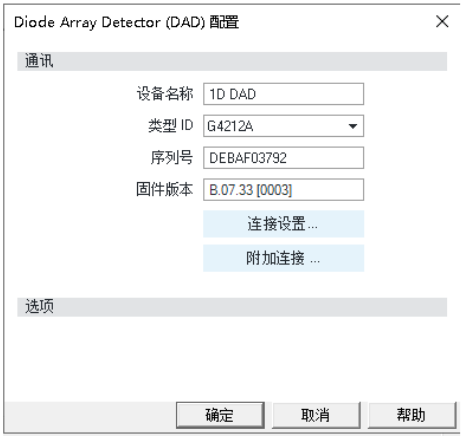


图 67 ^{1}D DAD 配置（示例）

2 要更改柱温箱和检测器的顺序，使用右侧的箭头。

注意

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）。

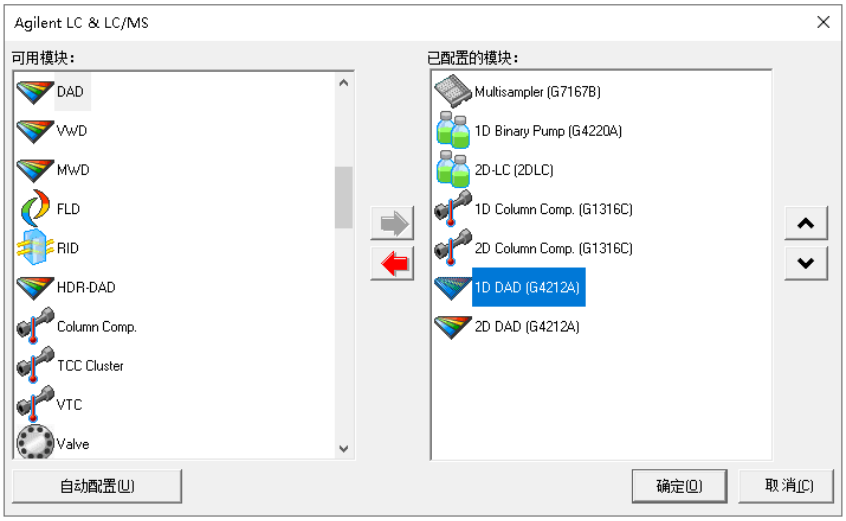


图 68　在设备配置中的 ^{1}D 检测器的命名



图 69　面板中模块用户界面的排列

注意

出于方法兼容性的原因，应遵循建议的模块顺序，特别是在有相同类型的模块的情况下。

3 为了提高每个检测器的数据采集频率，建议将 ^{1}D 和 ^{2}D 检测器都连接到 LAN。要为 LAN 通信配置第二个检测器，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”。

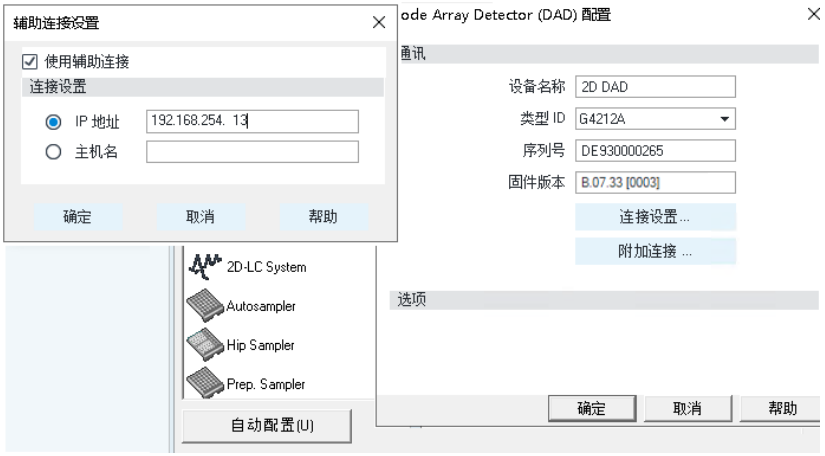


图 70　设置第二台检测器的另一个 LAN 连接

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 仪器配置成功后，单击**确定**。

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。

方法导入

有关如何将方法从 2D-LC ChemStation 传输到 OpenLab CDS 的信息，请参阅第 541 页的用于 OpenLab 的 2D-LC 方法导入插件。

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

OpenLab CDS 中的 2D-LC 数据采集 145
启动 Data Acquisition 软件 145
OpenLab CDS 中的 2D-LC 概述 147
仪器状态 149
2D-LC 用户界面 150
第一维传输体积的分析验证 157
第二维死体积（传输时间）的分析或图形测定 158
2D-LC 用户界面中的 2D-LC 阀在线监视器 159
仪器详细信息 161
仪器日志信息 163
2D-LC 在线帮助 167
重要的客户网络链接 168

本章提供有关 OpenLab CDS 中的 2D-LC 数据采集的信息。

OpenLab CDS 中的 2D-LC 数据采集

启动 Data Acquisition 软件

先决条件

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 2D-LC OpenLab（联机）图标 

或

要开始数据采集，双击“控制面板”图标 

，然后单击控制面板的仪器菜单中的“启动”按钮 

。

首次启动数据采集软件时，会显示主窗口。



图 71 OpenLab CDS 软件的启动屏幕

主应用程序窗口包含两部分：(1) 功能区和 (2) 工作区。主工作区窗口如下图所示。

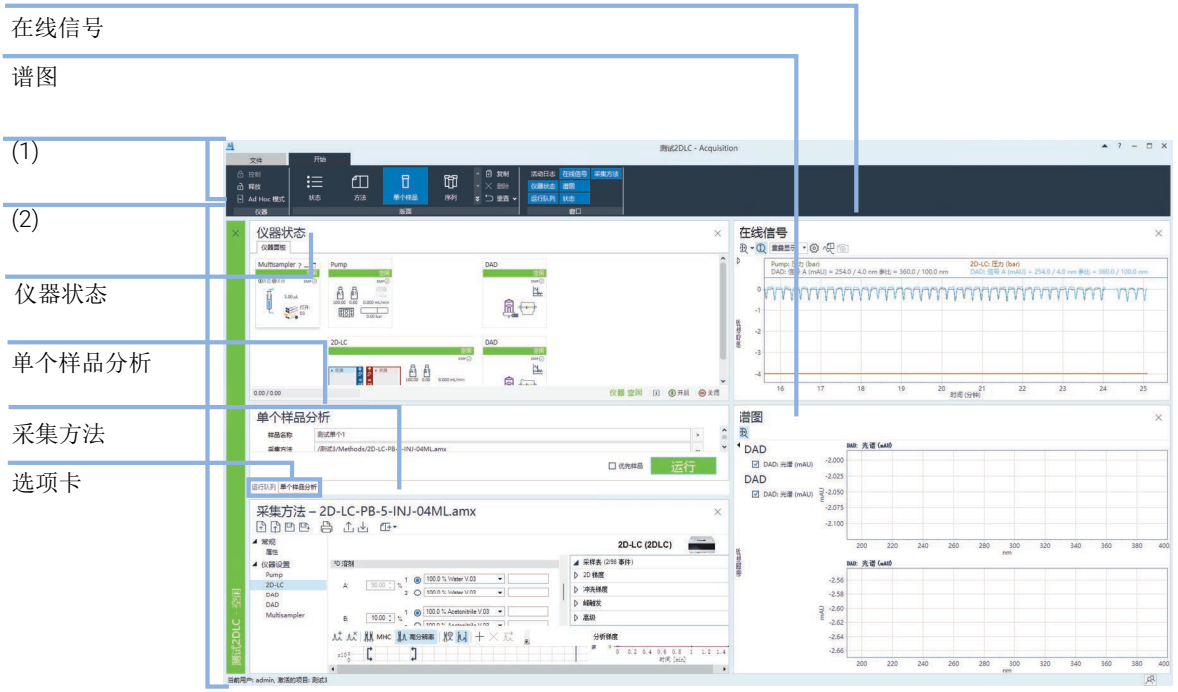


图 72 Agilent OpenLab CDS Acquisition 各窗口概览

OpenLab CDS 中的 2D-LC 概述

功能区

“功能区”在程序顶部，有三个组：

- 仪器
- 版面
- 窗口

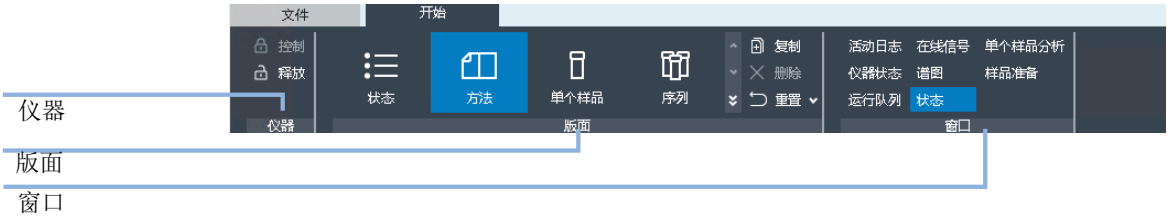


图 73　OpenLab CDS 功能区视图

仪器　使用此组中的按钮来获取和释放仪器的控制。通常无需更改此选项。

版面　**选择此组中的版面以自动显示任务通常需要的窗口。例如，如果单击“方法”按钮，将自动显示编辑方法时所需的窗口。有四种默认版面可供选择。版面包含关于每个采集窗口的大小和位置的信息。每个版面都有一个始终可见的不同窗口。每个版面都有一组默认情况下可见的不同窗口。可以复制版面并修改副本。**

- **状态**版面 - **仪器状态**窗口始终可见。
- **方法**版面 - **采集方法**窗口始终可见。
- **单个样品**版面 - **单个样品分析**窗口始终可见。
- **序列**版面 - **序列**窗口始终可见。

窗口　可以显示或隐藏选定版面中的某些窗口。当前显示的窗口使用蓝色背景。

在“方法”版面中，默认情况下会显示这些窗口。您可以单击这些按钮来隐藏或显示这些窗口。

- **采集方法**

  始终显示，因此不在**窗口**部分中列出
- **仪器状态**
- **在线信号**
- **状态**

工作区

工作区被划分为多个窗口。

- 采集方法
- 仪器状态
- 在线信号
- 光谱

采集方法 在“采集方法”窗口中，可以编辑方法。此窗口中的用户界面根据使用的仪器类型而变化。有关现有 2D-LC 方法或要生成的新 2D-LC 方法的 2D-LC 参数的更多信息，请参阅第 169 页的方法参数。

注意

有关 Agilent OpenLab CDS 的 LC/MS 的更多信息，请参阅《适用于 InfinityLab LC/MSD 系列和 6100 系列 LC/MS 的 Agilent OpenLab CDS 快速入门手册》或 G1960-90106_InfinityLAB_LCMSD_Installation_OpenLAB.pdf。

仪器状态

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



图 74　　带 UV 检测的完整 2D-LC 解决方案的仪器状态

每个模块都有一个快捷菜单。此窗口以文本和颜色编码的形式显示每个模块的状态：



图 75　　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。



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 76 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 73 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 77　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。

  a 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，

  b 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流路中。

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 136 页的配置 2D-LC 组合。

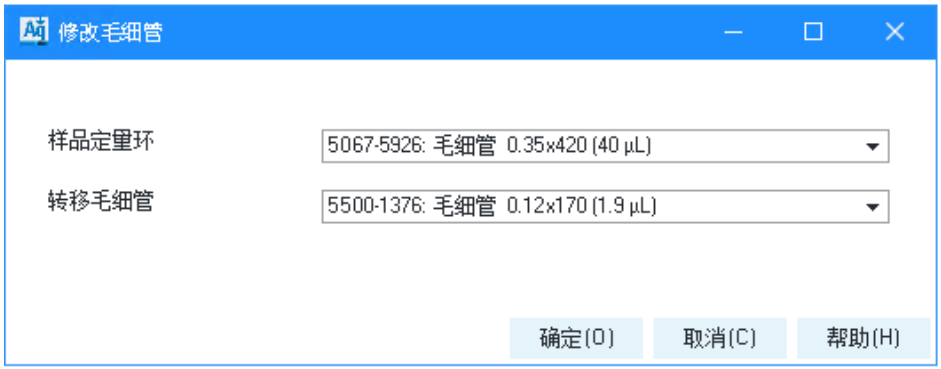


图 78 “修改毛细管”窗口允许配置样品定量环、传输毛细管和 ASM 毛细管

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 ^{1}D 检测器和 ^{2}D 检测器的传输体积。



图 79 “修改传输体积”窗口允许配置传输体积

传输体积 ^{1}D 检测器

传输体积的 ^{1}D 设置决定峰的 ^{1}D 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 ^{1}D 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 169 页的方法参数。

传输体积 ^{2}D 检测器

^{2}D 检测器的传输体积可由 2D-LC 阀和第二维检测器流通池之间的体积定义。这是 OpenLab CDS 2D-LC 中延迟计算的结果集。样品定量环和检测器之间的 ^{2}D 偏移确保切片色谱图的开始和结束正确对齐/显示。

第一维传输体积的分析验证

1. 计算传输体积 = ½检测器体积 + 到 2D-LC 阀的毛细管体积。
2. 在配置窗口中输入计算的传输体积。
3. 设置使用反相高效液相色谱 (RP-HPLC)，带已定义的峰（如咖啡因）的 ^{1}D 方法。请参见数据介质上的方法。
4. 使用咖啡因标准品进行实验，并调用相应的 ^{1}D 参比色谱图。
5. 定义在咖啡因峰上进行 3 或 5 个切片的 2D-LC 高分辨率实验。
6. 使用新的 2D 参数重复分析，并检查参比色谱图的峰顶点的最大值是否对应于分析的高分辨率切片。如有必要，减去或加上理论值（参比色谱图）和实际值（进样结果）之间的差值来校正传输体积。

^{1}D 传输体积计算

流速 0.1 mL/min -> 1.67 µL/s

预估传输体积 = 14 µL

理论咖啡因峰顶点（参比色谱图）-> RT 0.97 min

检测的咖啡因峰顶点（进样结果）-> RT 1.00 min

延迟时间 = 理论时间 - 测量时间 = 1.0 min - 0.97 min = 0.03 min -> 1.8 s

差值体积 = 流速 * 延迟时间 = 1.67 µL/s * 1.8 s = 3 µL

分析结果 = 理论传输体积 + 差值体积 = 14 µL + 3 µL = 17 µL

第二维死体积（传输时间）的分析或图形测定

液相色谱系统 (V_0) 的死体积对应于必须在 ^{2}D 样品定量环和 ^{2}D 检测器之间穿过的完全不保留化合物的体积。它包括粒子内体积（色谱柱驻留的孔隙）和空隙体积（色谱柱颗粒之间的体积），以及样品定量环和检测器之间的导管和任何其他组件的体积。

可以通过不同的方式来确定死体积：

- 粗略估计时，使用 ^{2}D 色谱柱的 V_0 并计算传输时间
- 例如，对于反相，可以使用尿嘧啶进行不保留峰实验，确定峰的保留时间 (RT)，从而确定 V_0F
- 在第二维定义阀切换和检测器检测之间的压力脉冲 (RT) 的时间延迟。
- 等高线图中切片偏移 (RT) 的图形测定

$V_0 = Rt \times f$

计算

其中：

V_0	死体积
Rt	保留时间
f	流速

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。

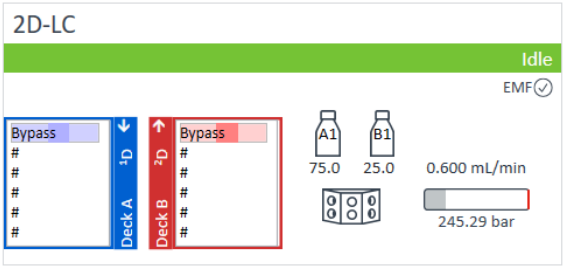


图 80 无采样/存储的切片，流动相通过每个驻留仓位的定量环（由旁路指示）

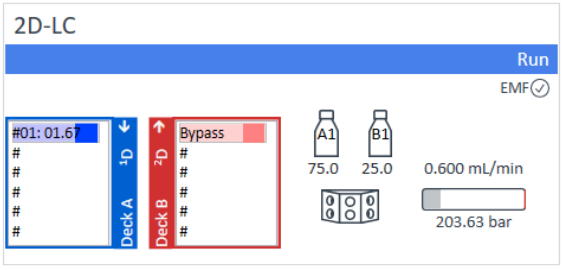


图 81 由蓝色光束移动指示中心切割采样/存储，切片编号和时间（以分钟为单位）

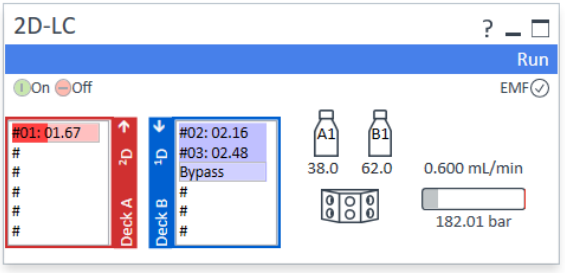


图 82 由红色光束移动指示 ^{2}D 分析

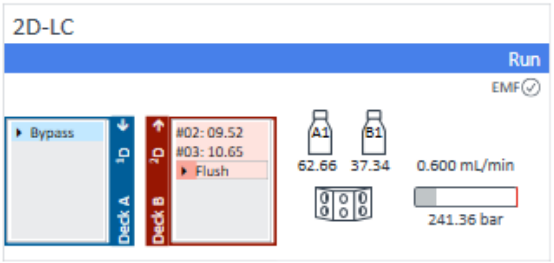


图 83　由红色光束移动指示冲洗

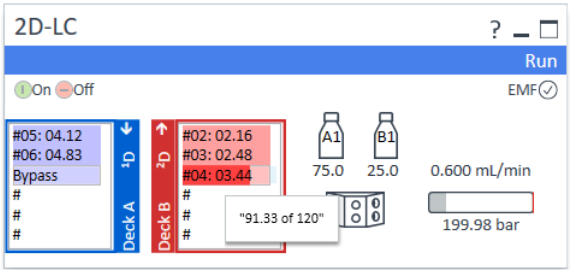


图 84　悬停在分析定量环上指示经过的时间和剩余时间（以秒为单位）

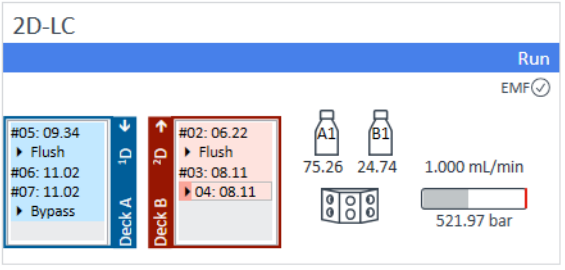


图 85　高分辨率系列提供相同的存储时间（此处的切片 3 和 4 以及 6 和 7）

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 161 页的使用模块列表获取仪器详细信息

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 86 “仪器状态”视图

将显示“模块列表”屏幕。



图 87　　用于详细概述模块的“模块列表”视图

3　单击**打印**或**关闭**。

仪器日志信息

InfinityLab LC/MSD 仪器的进程会记录到文件中。在某些情况下，可能需要检查各种日志文件，如活动日志文件或安装日志文件。

使用以下选项来获取这些信息：

- OpenLab CDS 中的活动日志
- OpenLab CDS 中的日志
- OpenLab CDS 中的系统报告

显示 OpenLab CDS 中的活动日志

1 通过控制面板启动数据采集。

2 查看功能区中的窗口菜单。

3 要启动“日志查看器”程序，选择“窗口”版面的**活动日志**。

将显示**活动日志**窗口。

配置日志通知

要将日志通知减少到有用的数量，可以过滤要显示的通知类型。

1 单击任务栏中的**筛选**。

2 选择要显示的通知类型。

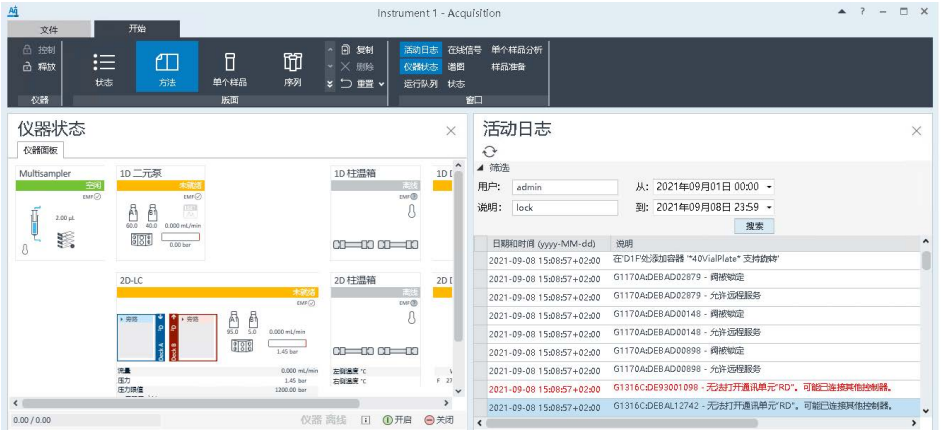


图 88 带有仪器状态和活动日志的 OpenLab Acquisition 视图

仪器活动日志记录所有仪器活动，包括日期/时间、用户和活动。活动日志在一页上显示最新的 1000 个项目。如果项目数量超过 1000 个，日志将继续到另一页。日期范围将始终显示最近几周的日期范围。

当用户在 CDS 系统上留下足迹时，活动日志会将其记录下来，并保存在 Shared Services 数据库中。

运行状态条目包括多个事件，如：

- 开始和结束运行时
- 开始和结束进样
- 提交样品进行处理时
- 将运行或关闭方法添加到运行队列时
- 将单个样品分析提交到运行队列时

可以在活动日志中找到的其他活动包括仪器信息，如直接控制信息，包括硬件警告和错误等。将方法上传或下载到仪器时也会显示。

OpenLab CDS 中的日志

1 导航到**控制面板** > **管理** > **诊断**。

2 在**本地日志文件**下，单击**选择全部**。

3 单击**保存日志**。

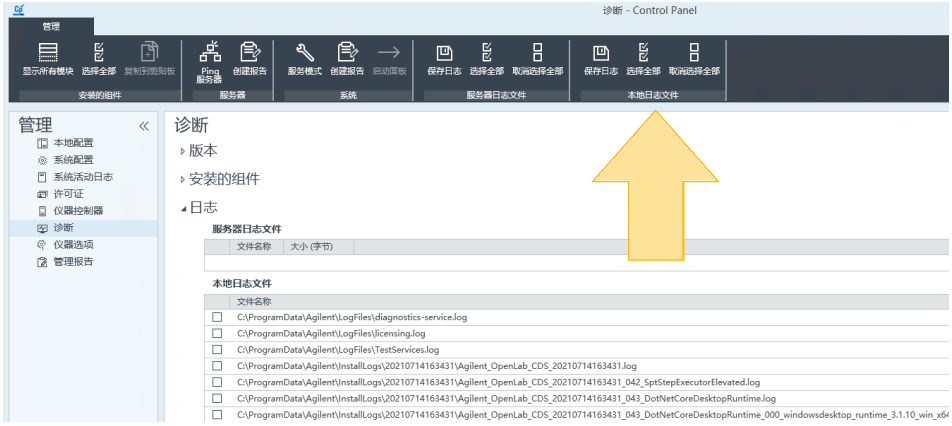


图 89　控制面板的“诊断”视图

打开**另存为**窗口，将选定的应用程序日志文件另存为 zip 文件。

在 OpenLab CDS 中创建系统报告

1 导航到**控制面板** > **管理** > **管理报告**并选择**系统报告**。



图 90　控制面板的“管理报告”视图

2 要将报告导出为 PDF、Excel 或 Word，单击**创建报告**。

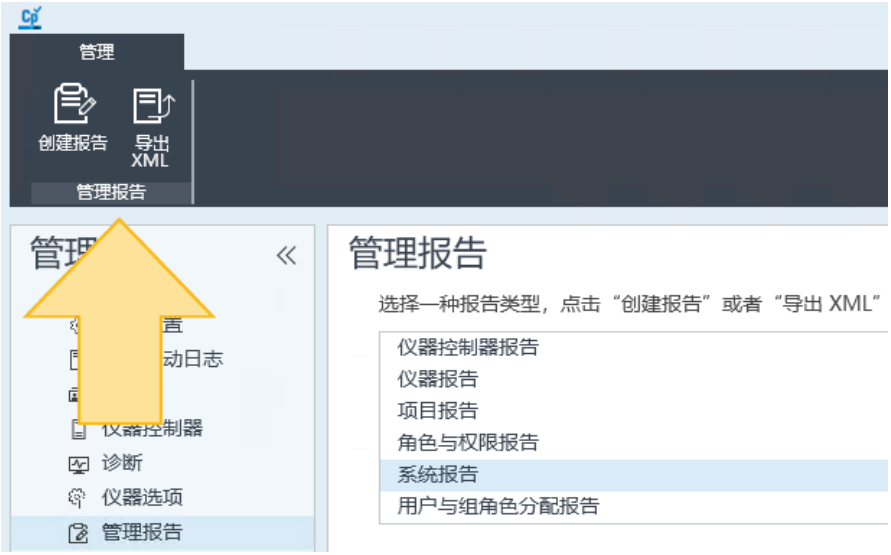


图 91　控制面板的“管理报告”视图

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 170

设置 2D-LC 方法参数 171

2D LC 操作模式 171
定义 ^{1}D 泵流量 173
定义 ^{2}D 泵流量 174
定义 ^{2}D 溶剂 175
定义停止时间 176
定义后运行时间 177
编辑采样表 178
定义 ^{2}D 梯度 185
使用冲洗梯度 194
使用峰触发 195
使用高级 ^{2}D 泵设置 200

预览 (2D-LC) 202

进一步的图解说明 209

以图形方式设置基于峰的实验 215

以图形方式设置 ^{2}D 梯度 220

使用图形用户界面设置二维梯度 222

附加信息 224

多重进样 224
动态峰存储 226

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。

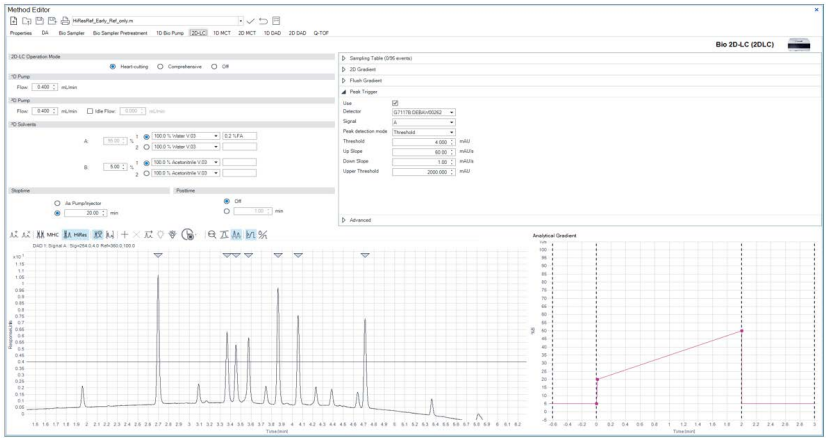


图 92　2D-LC 方法设置

可以设置以下方法参数：

- 2D-LC 操作模式，请参见 第 171 页的 2D LC 操作模式
- 溶剂，请参见 第 175 页的定义 ^{2}D 溶剂
- 流量设置，请参见 第 174 页的定义 ^{2}D 泵流量
- 停止时间，请参见 第 176 页的定义停止时间
- 后运行时间，请参见 第 177 页的定义后运行时间
- 采样表，请参见 第 178 页的编辑采样表
- 2D 梯度，请参见 第 185 页的定义 ^{2}D 梯度
- 冲洗梯度，请参见 第 194 页的使用冲洗梯度
- 峰检测器操作值，请参见 第 195 页的使用峰触发
- 高级，请参见 第 200 页的使用高级 ^{2}D 泵设置
- 参比色谱图，请参见 第 202 页的预览 (2D-LC)
- 分析或冲洗梯度预览，请参见 第 222 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，^{1}D 的相关体积被剪掉，并使用 ^{2}D 泵进样到 ^{2}D 色谱柱。峰触发或时间窗口定义要在 ^{2}D 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，^{2}D 上的进样开始运行 ^{2}D 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 ^{1}D 到 ^{2}D 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 ^{2}D 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，^{1}D 的整个体积将被进样（使用 ^{2}D 泵）到 ^{2}D 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 ^{1}D 中，其他定量环的体积用 ^{2}D 色谱柱分离。

调制时间反映 ^{2}D 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。^{2}D 梯度停止时间反映 ^{2}D 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 ^{1}D 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。

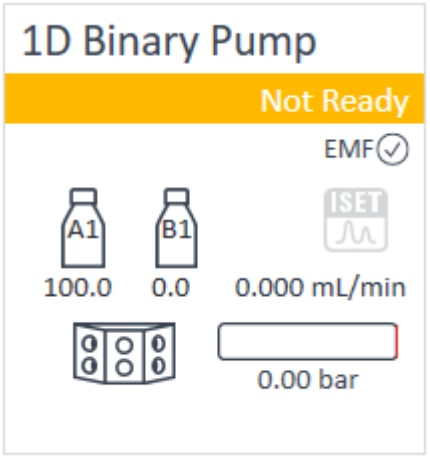


图 93 1D 泵的方法用户界面

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 ^{2}D 泵流量

1 设置 **^{2}D 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 ^{2}D 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 ^{2}D 分析时也会使用 ^{2}D 流量。

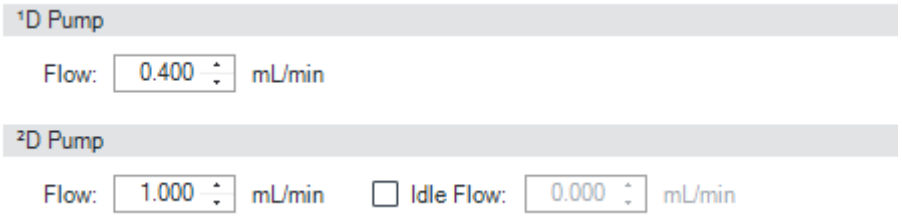


图 94 ^{1}D 泵和 ^{2}D 泵的流量设置界面

定义 ^{2}D 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 %。

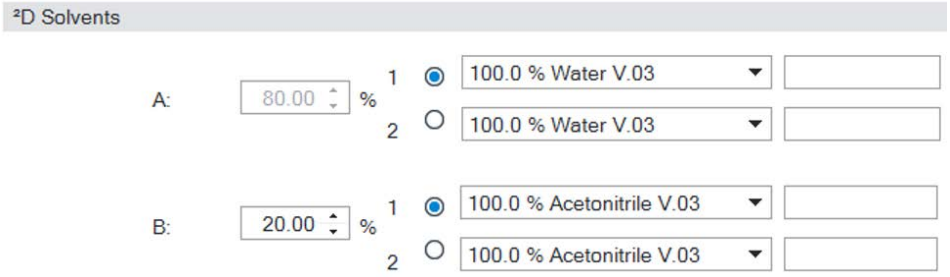


图 95　2D-LC 溶剂设置

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

^{2}D 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 ^{2}D 分析。当切片保持存储时，运行时间不会自动延长。

注意

^{2}D 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 ^{1}D 泵模块除外。

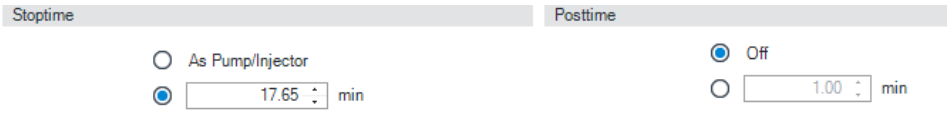


图 96　停止时间和后运行时间设置

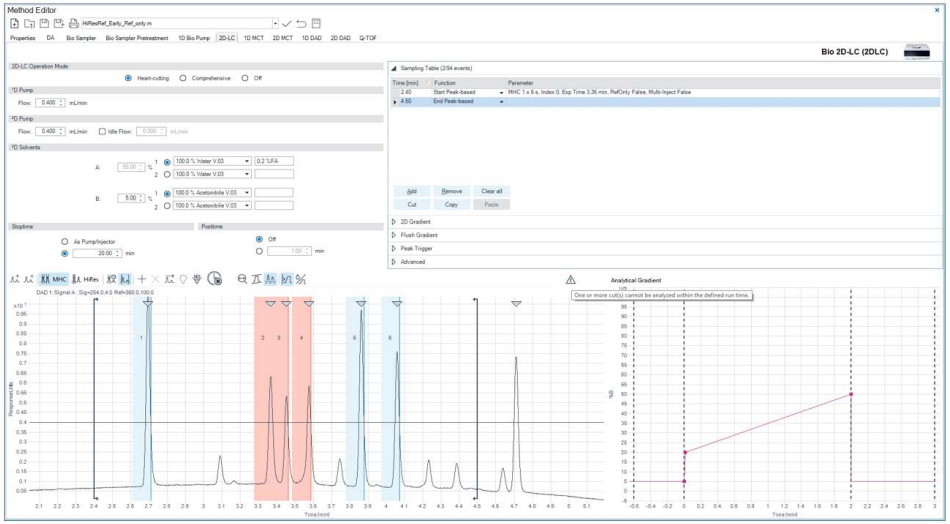


图 97　如果停止时间不足以完成 ^{2}D 运行，则会弹出一个通知三角

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 ^{2}D 泵的停止时间不足以分析所有 ^{2}D 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。

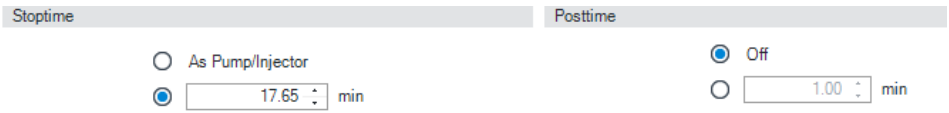


图 98　停止时间和后运行时间设置

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。

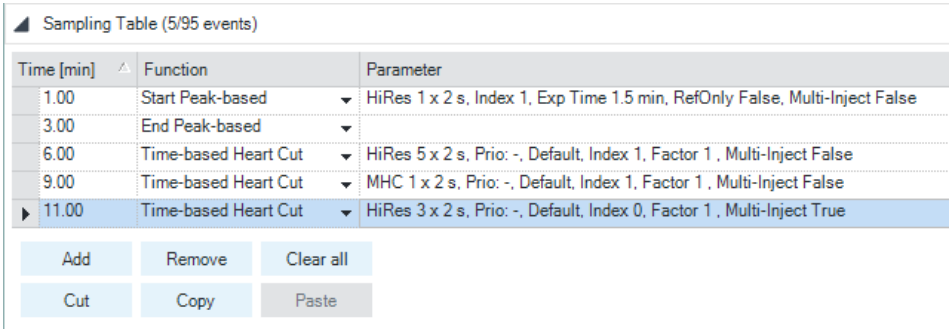


图 99　基于峰和多重中心切割事件的采样表

表 19 采样表说明

类型	说明
时间	定义切片的开始时间。
功能	定义采样模式。 **要选择其他可选模式，请单击向下箭头：** • **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开始时间。 • **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结束时间。 **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。

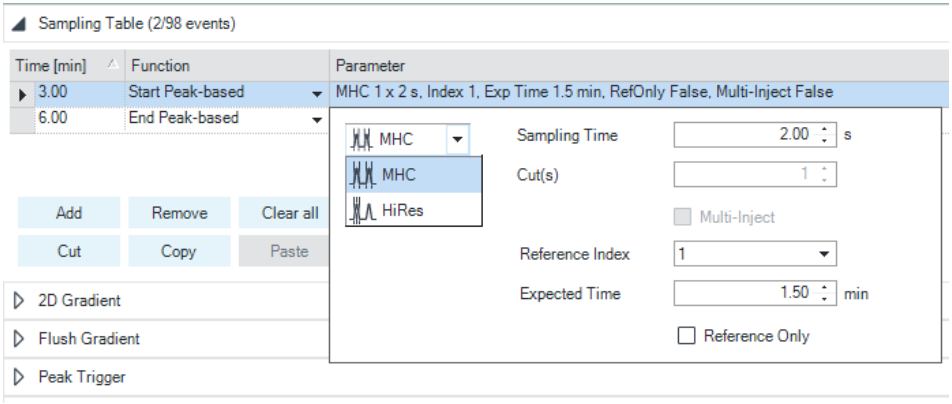


图 100　基于峰的 MHC 和高分辨率事件的采样表

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 µL 样品定量环 * 0.8/0.6 mL/min ^{1}D 流量 = 3.2 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 226 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。

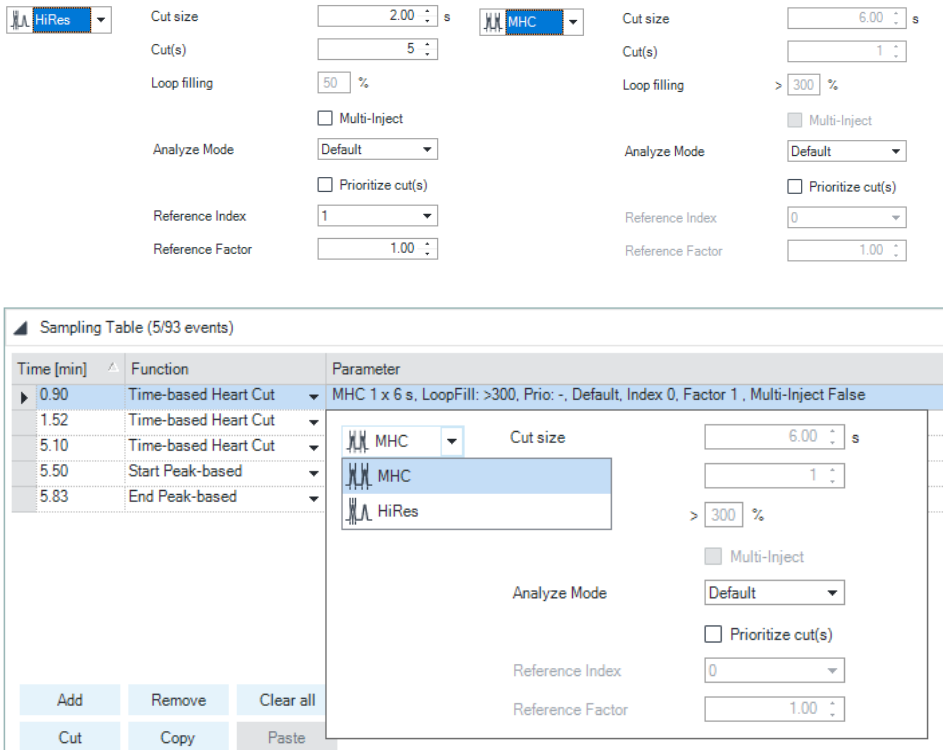


图 101 高分辨率采样 (高分辨率) 设置和多重中心切割 (MHC) 设置的采样表中的参数窗口

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

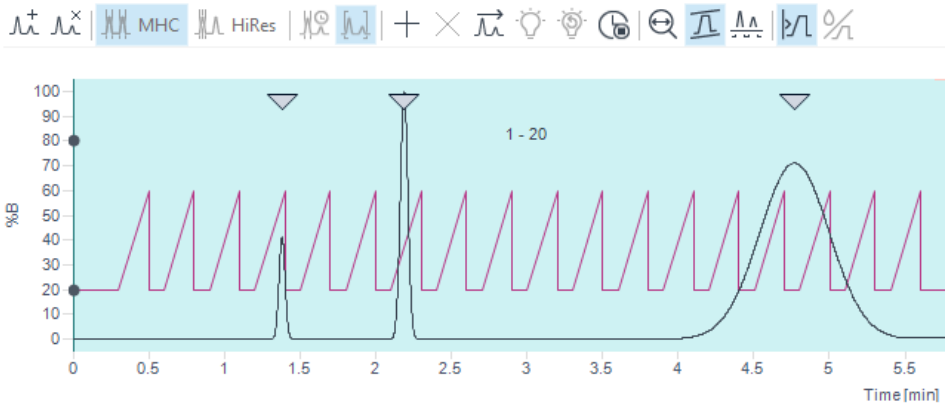


图 102　全切割预览，调制时间为 0.3 min（= 20 个周期）

1 输入系统创建等间距切片的绝对时间范围。



图 103　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。

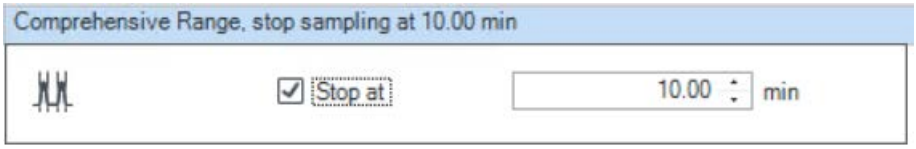


图 104 全切割范围设置

例如，全切割范围在 10.0 min 时停止。

停止时间应与 ^{2}D 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 ^{2}D 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

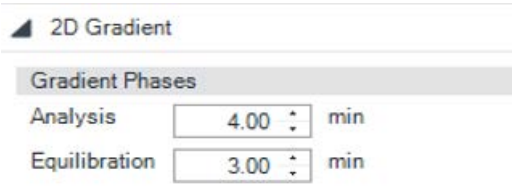


图 105　“2D 梯度阶段”视图

1 在**分析**字段中指定单个切片的 ^{2}D 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 ^{2}D 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-LC ^{2}D 梯度）部分中。

^{2}D 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 ^{1}D 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 ^{2}D 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。

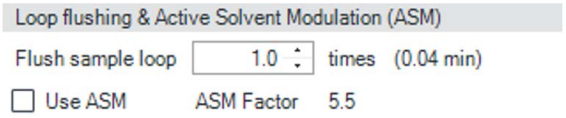


图 106　定量环冲洗和主动溶剂调制设置

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 ^{2}D 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。

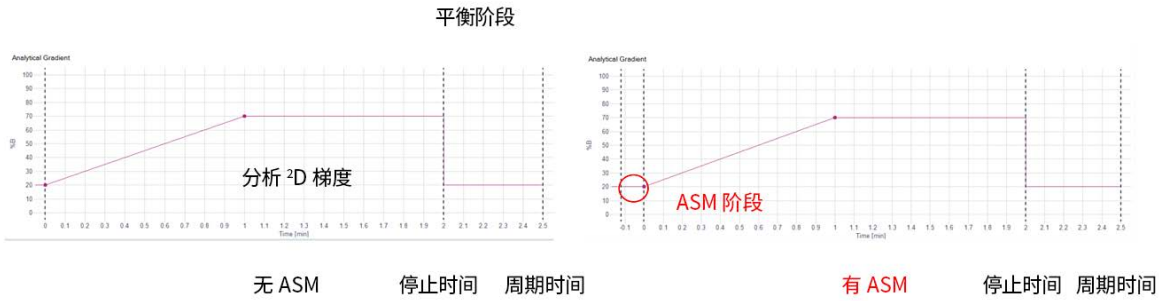


图 107　有和没有 ASM 阶段的分析梯度比较

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 364 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 73 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，请参阅第 63 页的仪器设置建议。这些值是只读的，无法编辑。

中心切割



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



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的样品定量环体积。

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 ^{2}D 分析开始时，自动将来自 ^{1}D 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。



图 108　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 ^{2}D 分析开始后的指定时间切换至检测器，^{2}D 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 ^{2}D 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 ^{2}D 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 ^{1}D 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**

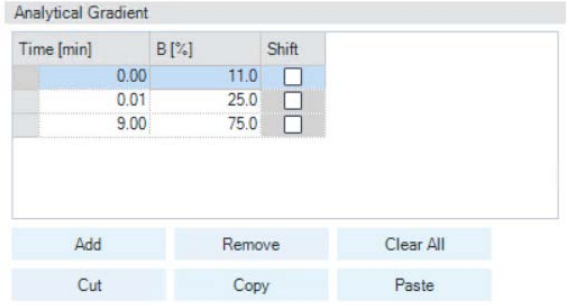


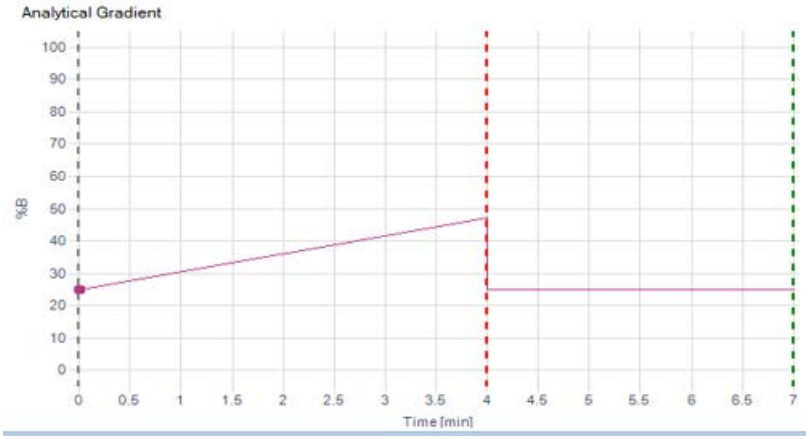
图 109 “分析梯度”表格视图

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 ^{1}D 的运行时间内修改 ^{2}D 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 ^{2}D 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 ^{2}D 梯度组成与 ^{1} D 梯度组成对齐。

使用表格设置已迁移的 ^{2}D 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 ^{2}D 泵的停止时间有关，超过停止时间 ^{2}D 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 ^{1}D 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 ^{2}D 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**

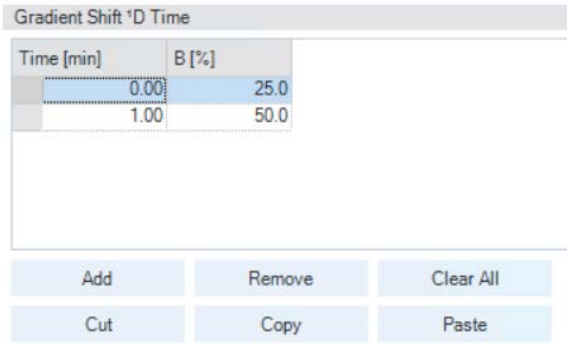


图 110 梯度迁移 ^{1}D 时间表

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 ^{2}D 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 185 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。

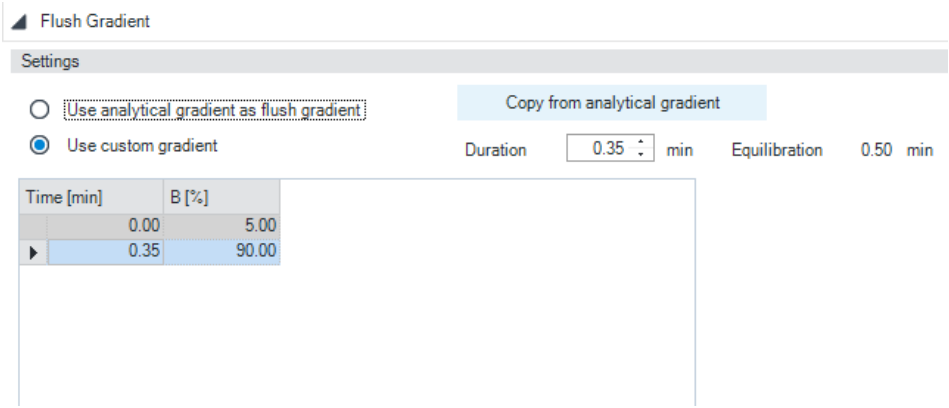


图 111　“冲洗梯度”表格视图

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 ^{1}D 峰。这意味着，首先必须调用仪器的已知 ^{1}D 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。

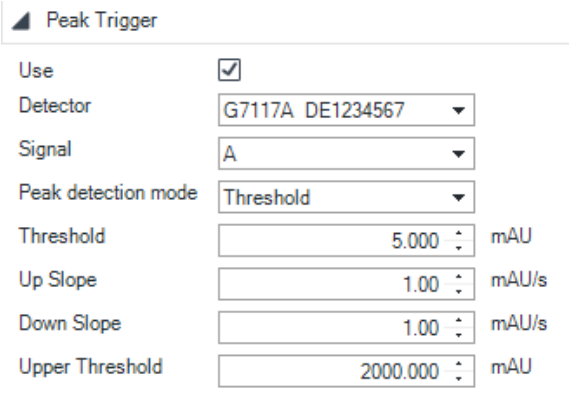


图 112 “峰触发”视图

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 [1]D 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 [1]D 检测器的峰触发，选中**使用**复选框。

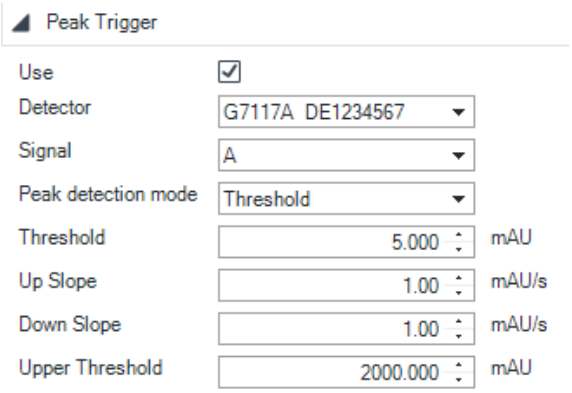


图 113 “峰触发”视图

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的信号。

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。

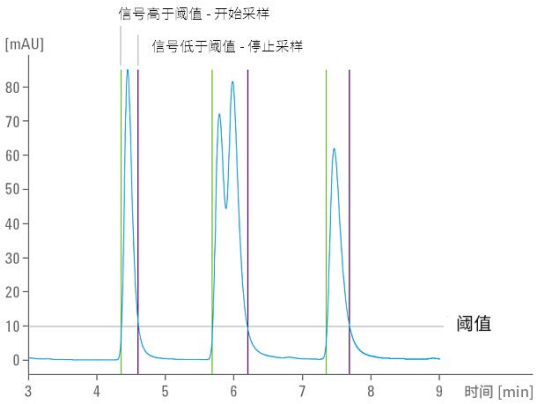


图 114　具有阈值线的色谱图

[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。

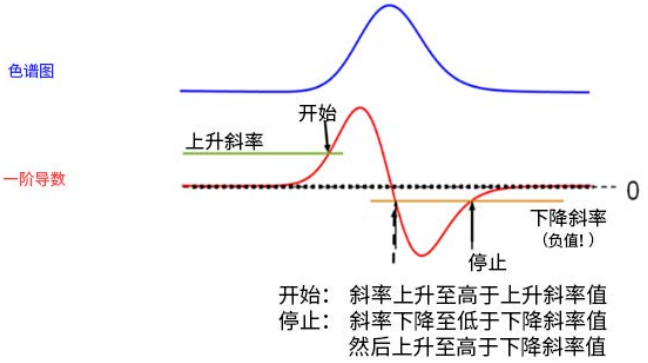


图 115　触发检测器斜率的示例

[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。

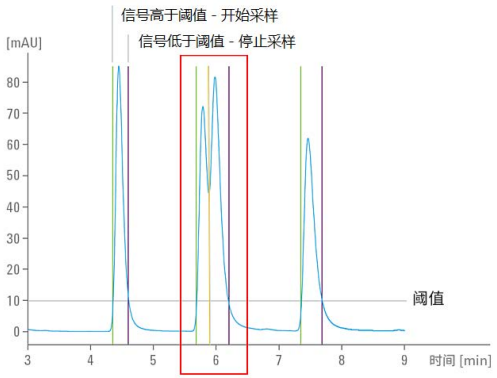


图 116 具有阈值和斜率设置的色谱图

- 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。

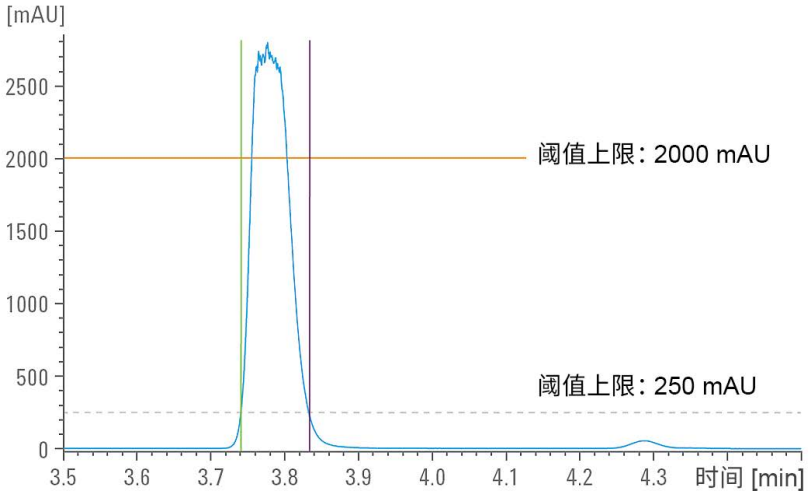


图 117　具有阈值上限和下限的色谱图

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 ^{2}D 泵设置

高级设置将打开**高级** ^{2}D 泵设置的泵方法视图。

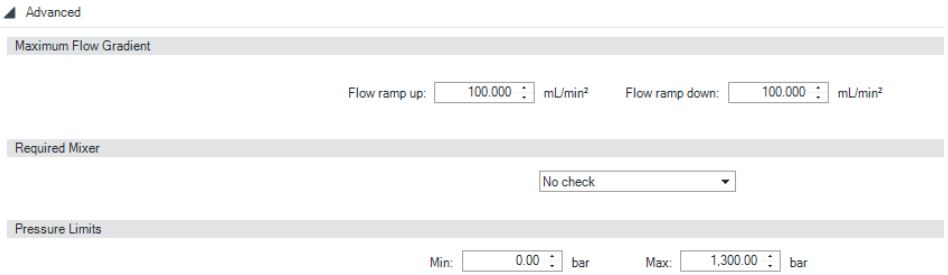


图 118　高级 ^{2}D 泵设置

使用表格设置额外的 ^{2}D 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 ^{2}D 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 ^{2}D 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 ^{2}D 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。

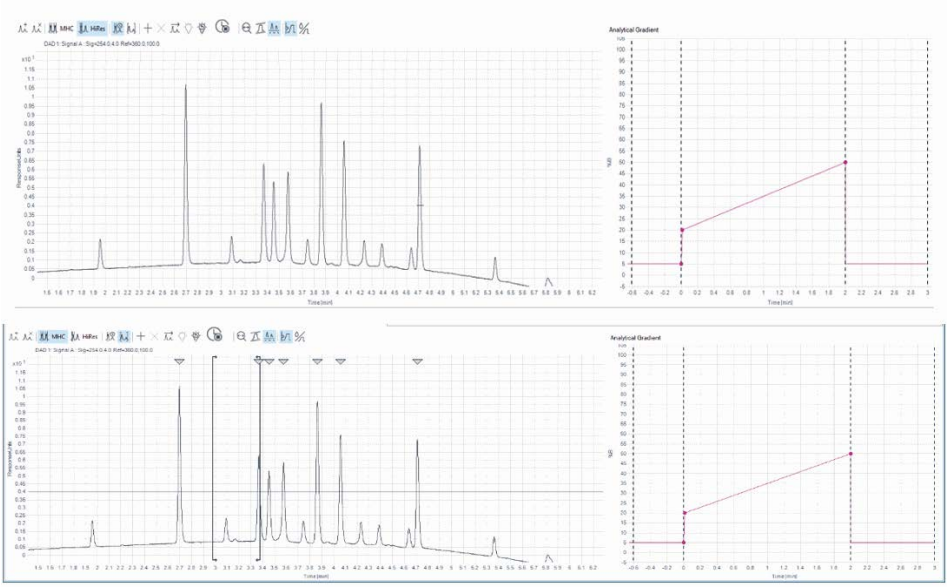


图 119　包含调用的参比色谱图（顶部）和在调用的参比色谱图中带有阈值设置以及检测到的峰（底部）的预览面板

为了以图形方式编辑和修改 ^{2}D 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 ^{1}D 数据文件。



图 120　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 ^{1}D 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。

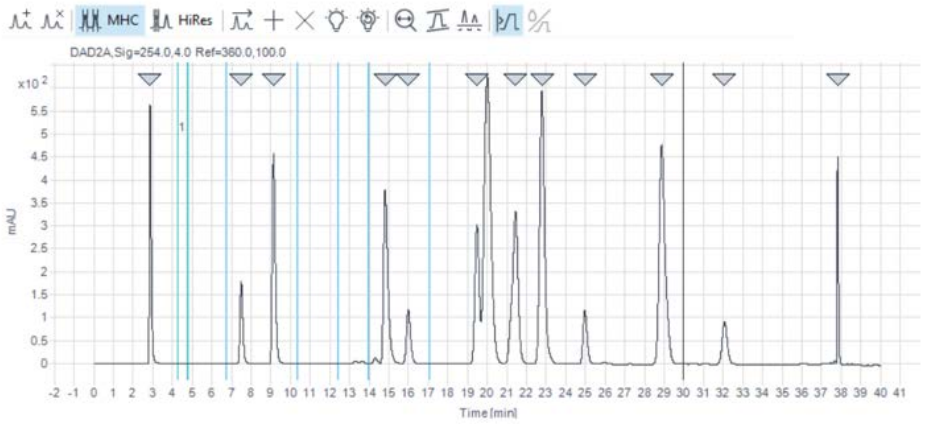


图 121　预览窗口中的已调用 ^{1}D 色谱图

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 ^{1}D 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 ^{1}D 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 ^{1}D/^{2}D 设置就是一个例子，其中 ^{1}D 质谱数据用作参比色谱图。

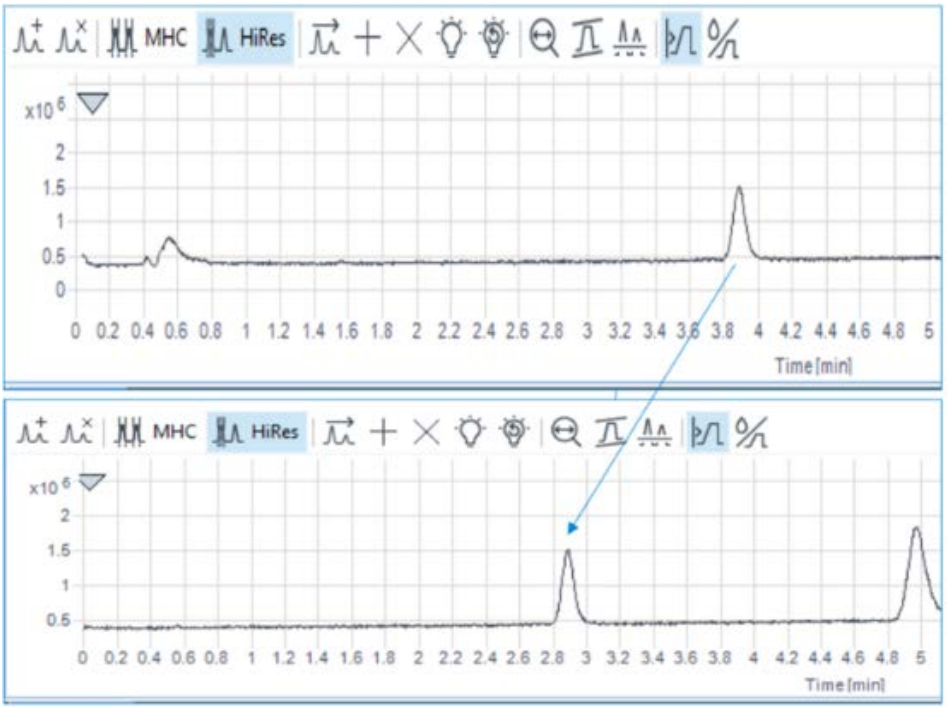


图 122　示例：偏移体积设为 0 µL 的已调用 Q-TOF 信号与偏移体积设为 -100 µL



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。



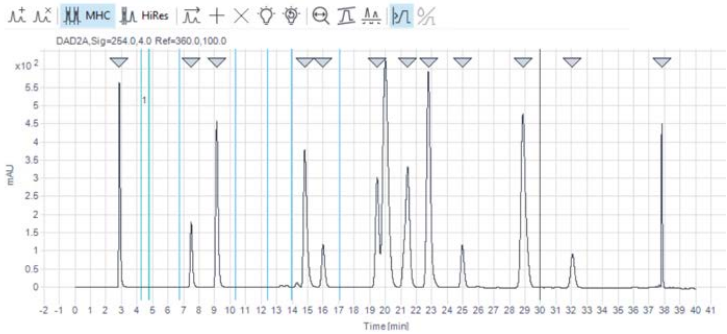
此工具切换到基于峰的模式。



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）。

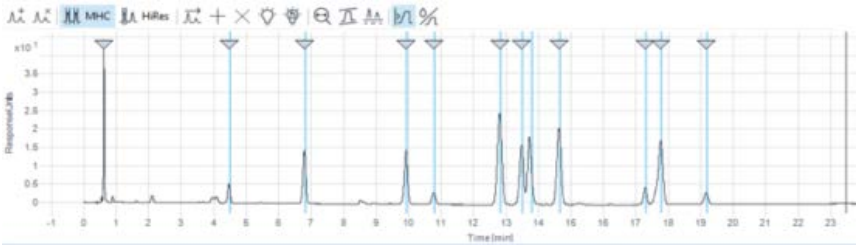


图 123　2D 运行优化已完成，所有峰（蓝色）均已分析，与下面未优化的图进行比较。

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 190 页的为分析梯度设置梯度时间表。

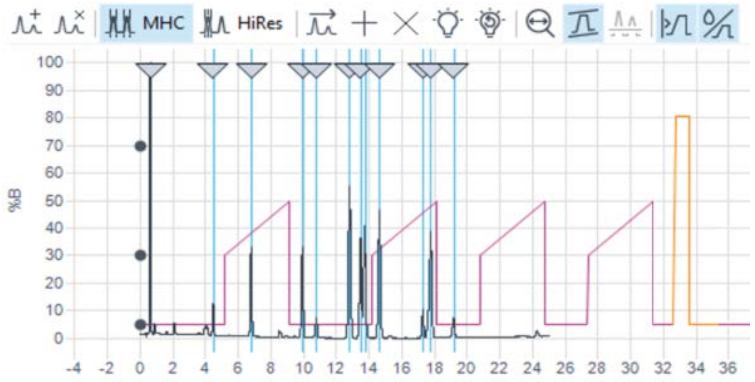
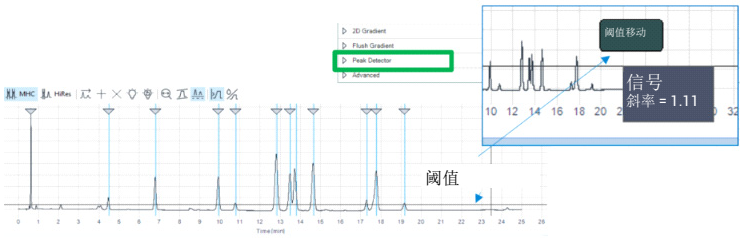


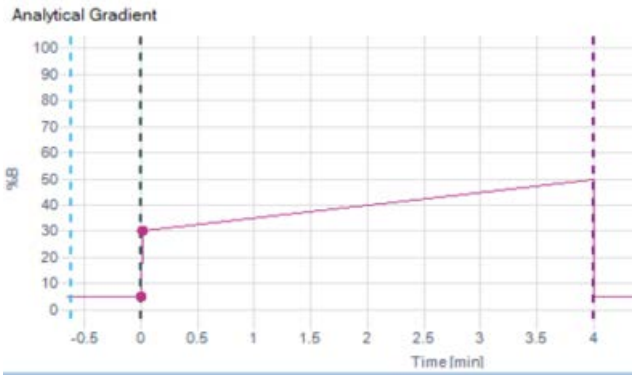
图 124　显示预览，以紫色显示分析 2D 梯度，以橙色显示冲洗。

注意 如果在主窗口中激活了 ^{2}D 梯度视图，Y 轴将显示 %B。

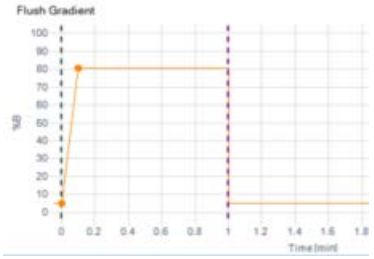
此工具切换预览中光标位置的阈值和斜率值显示。此工具仅在主面板中的梯度预览处于禁用状态时才能使用。要在预览中手动更改阈值设置，请参阅下文。



使用此工具来切换预览右侧 ^{2}D 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。



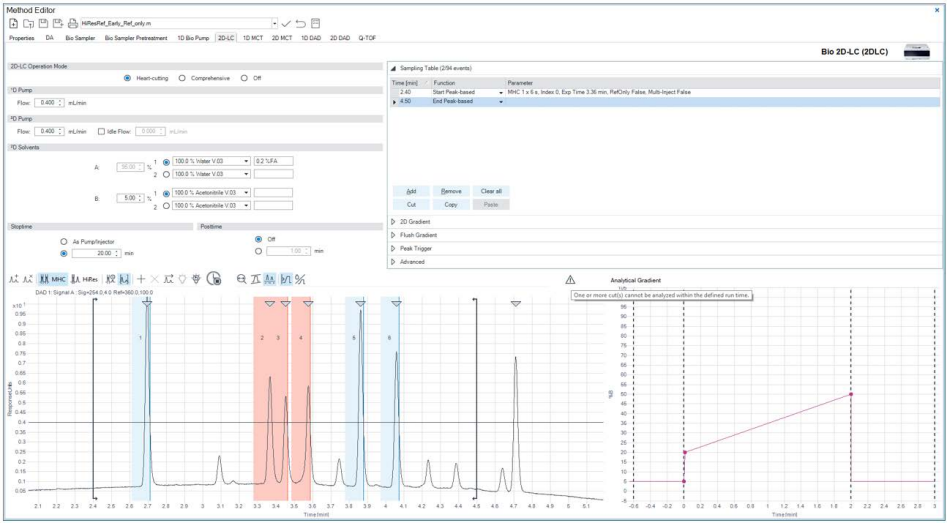
此工具在将分析梯度用作冲洗梯度时不可用。

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。要添加或移除切片，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 ^{2}D 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）。

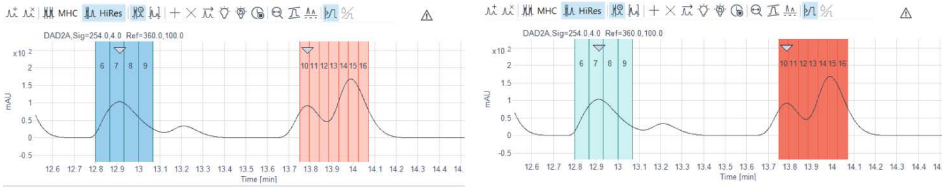


注意

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）。



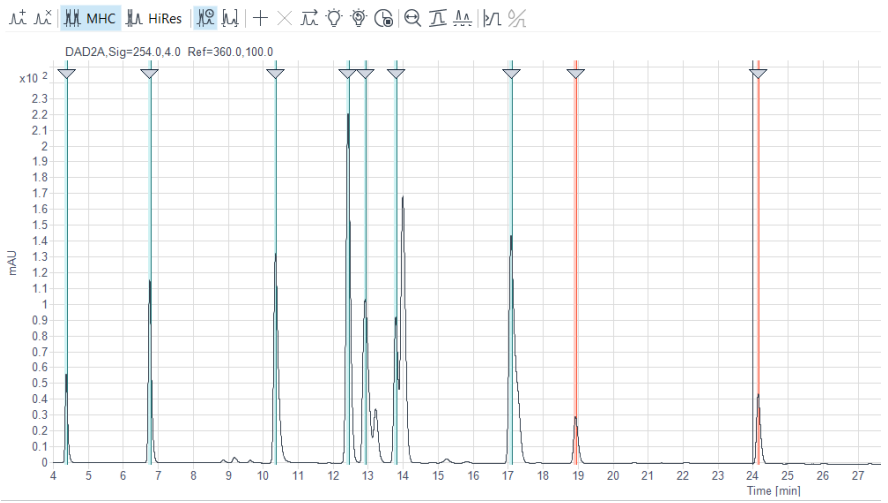


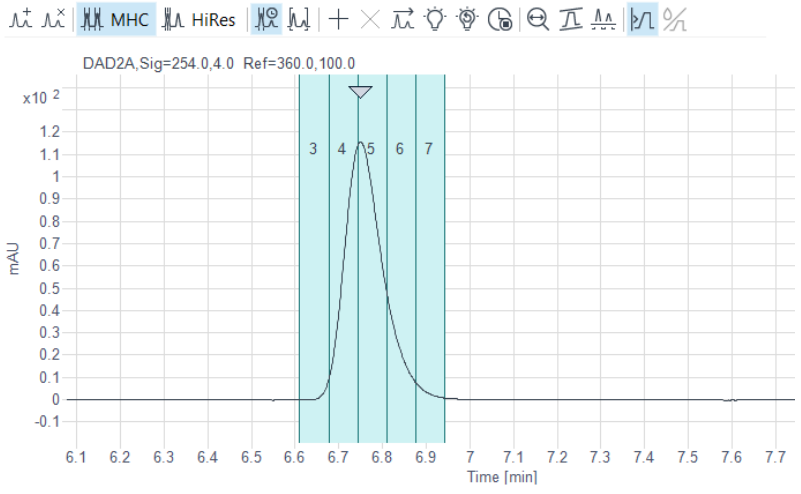
图 125　用红色标记丢失峰的色谱图

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）

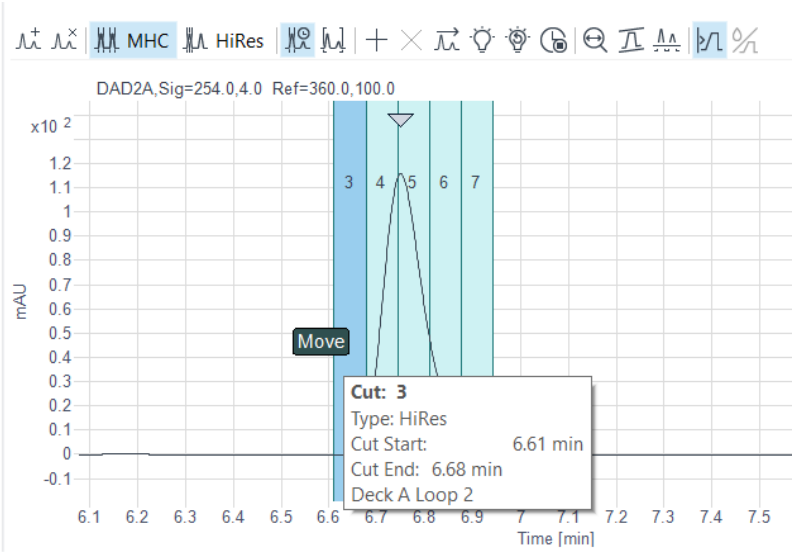
高分辨率切片（基于时间）显示并标记为浅绿色条。根据峰宽的不同，切片可从 2 个切片到最多 10 个切片。与 MHC 相比，高分辨率切片有两根暗线，一根在左侧，一根在条的突出侧，这反映存储峰前后的切换。左边的暗线定义了一个高分辨率采样事件的开始时间。



MHC 切片/高分辨率切片（基于峰）

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

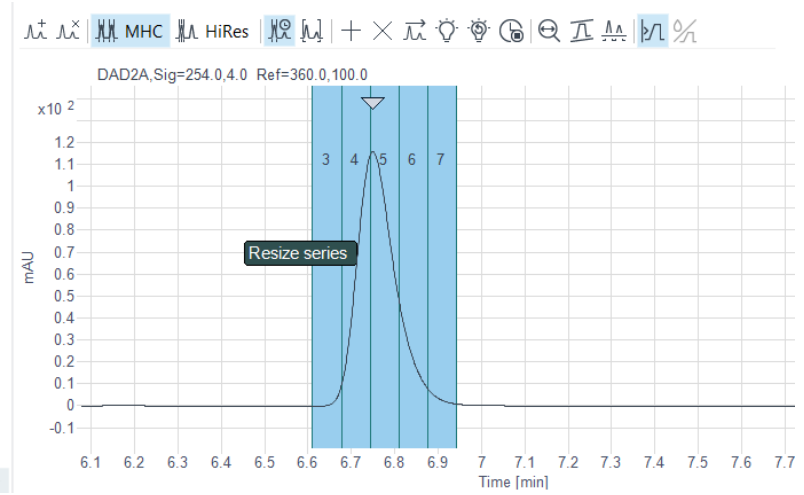
  采样表占用新的时间

调整高分辨率系列的大小

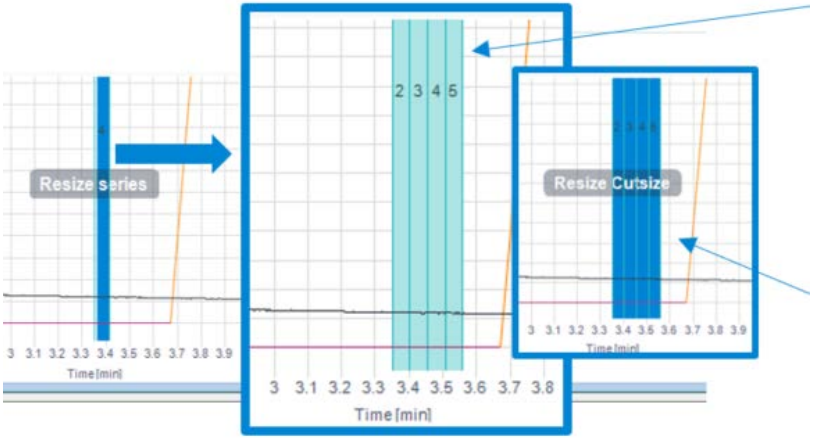
将鼠标悬停在这些条上，可以选择增加或减少切片序列（由绿色突出显示项表示）。

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



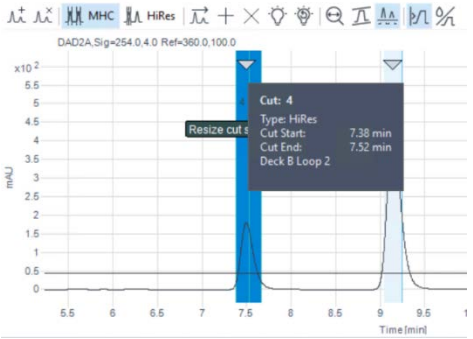
注意

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。

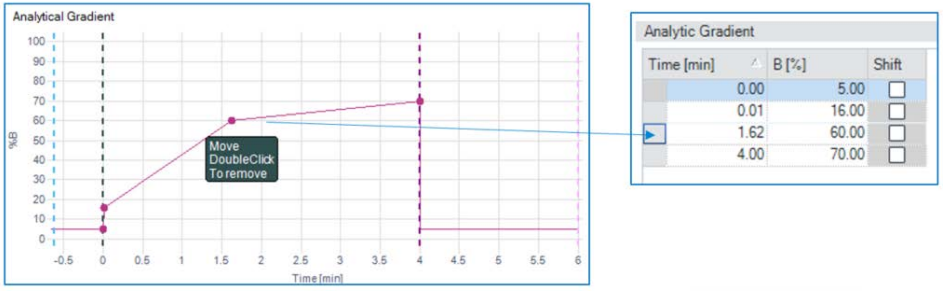
切片信息

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 ^{2}D 梯度/即分析时间。



以图形方式设置 ^{2}D 梯度

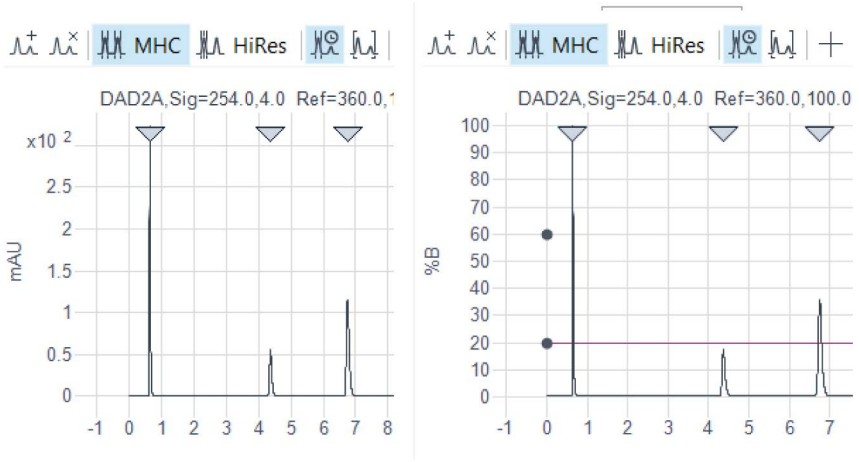
分析梯度预览中的初始 ^{2}D 梯度，双击紫色线添加一个紫色球，可以将其四处移动以更改初始梯度。通过移动相应的线，可在预览中调整分析和平衡时间。表会进行相应更新。



注意

要添加另一个梯度点，双击紫色线。

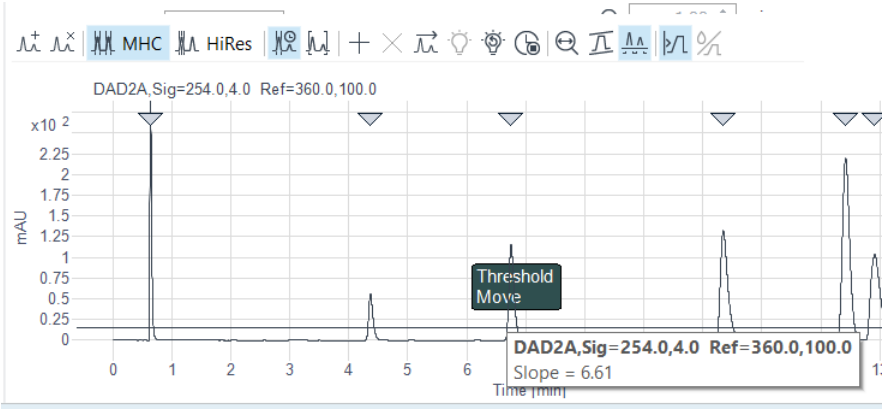
激活 ^{2}D 梯度视图会使 Y 轴名称显示为 %B。





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

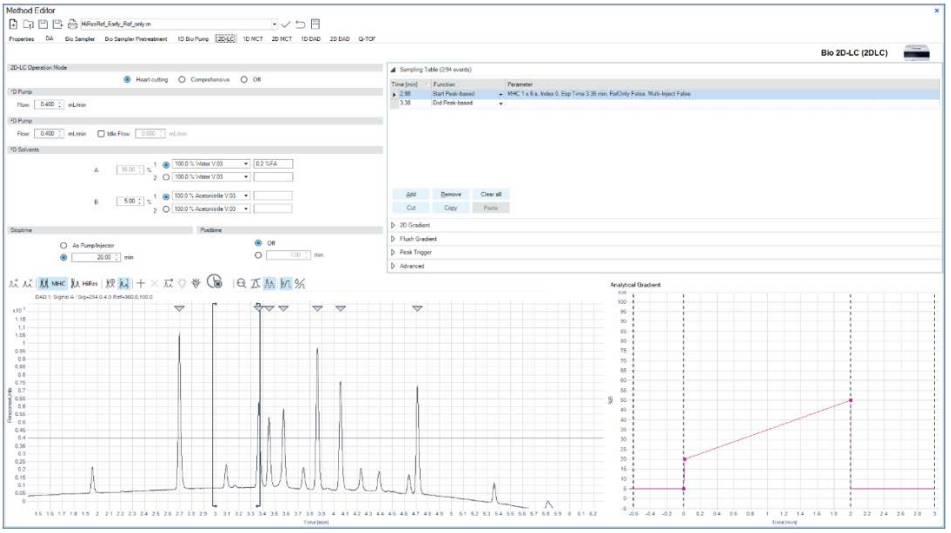


图 126　预测的基于峰的实验

在基于峰的模式下，[1]D 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。

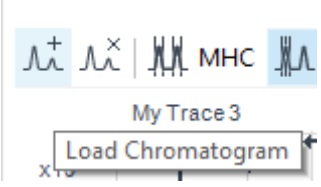


图 127　调用色谱图

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。

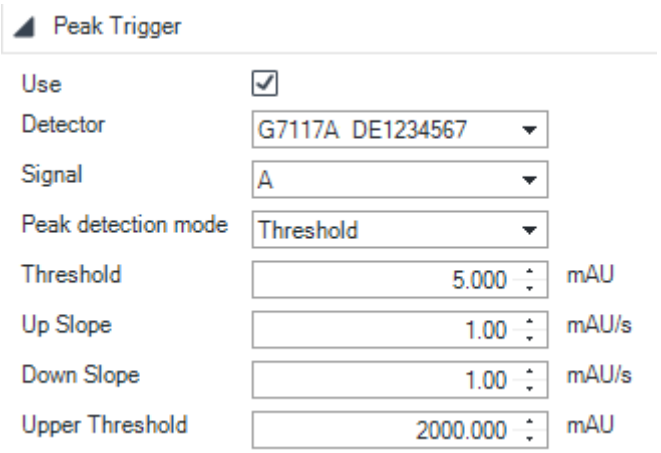


图 128 “峰触发”视图

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**。

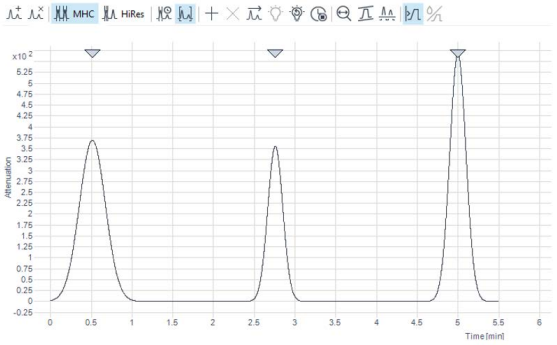


图 129 MHC 色谱图

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。

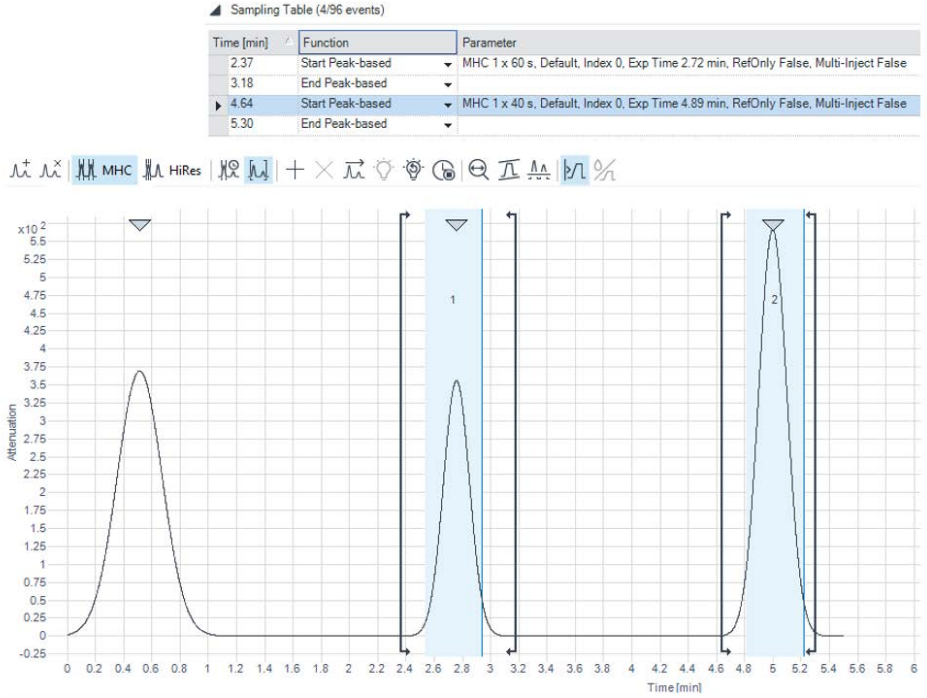


图 130　基于峰的模式下的两个选定峰和相应的基于峰的采样表

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 195 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。

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 ^{2}D 分析。

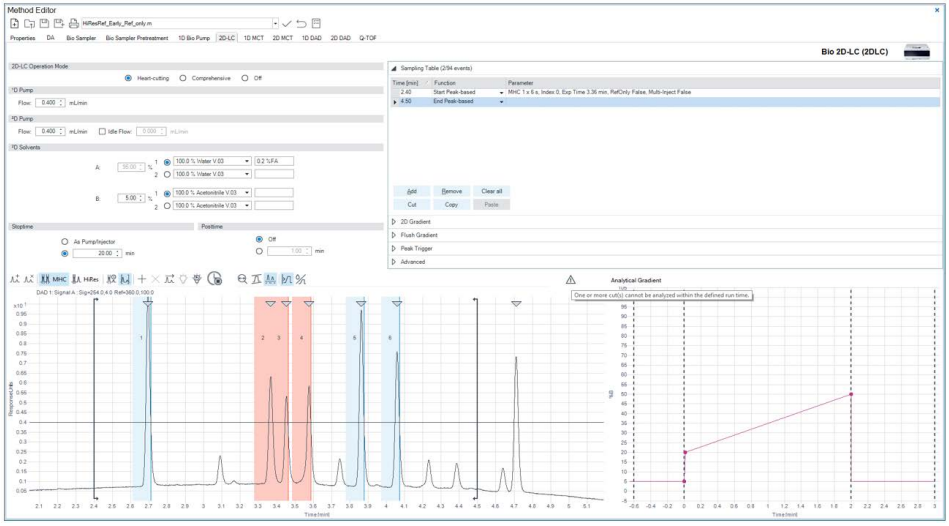


图 131　切片 3、4 和 5 以红色显示。提示无法在定义的运行时间内分析一个或多个切片的警告三角。

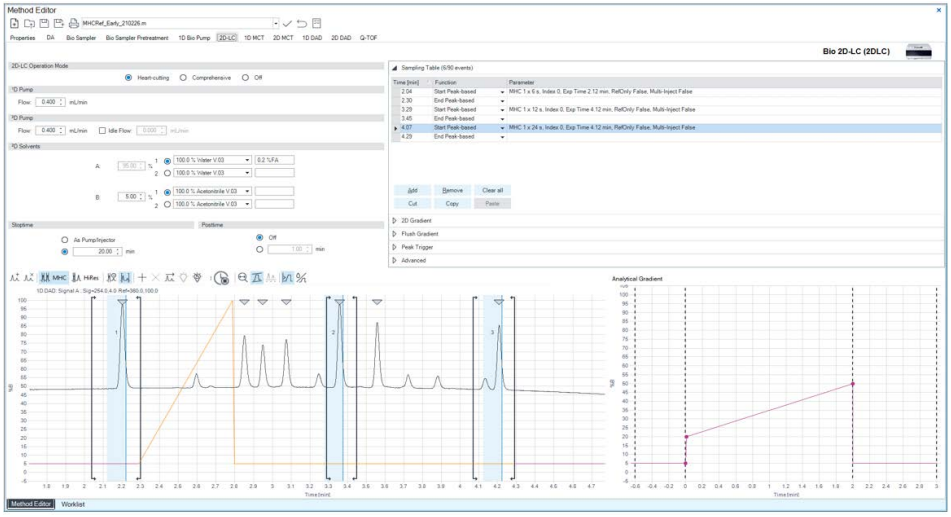


图 132　示例：MHC 模式下带 3 个基于峰的区域的已上传色谱图

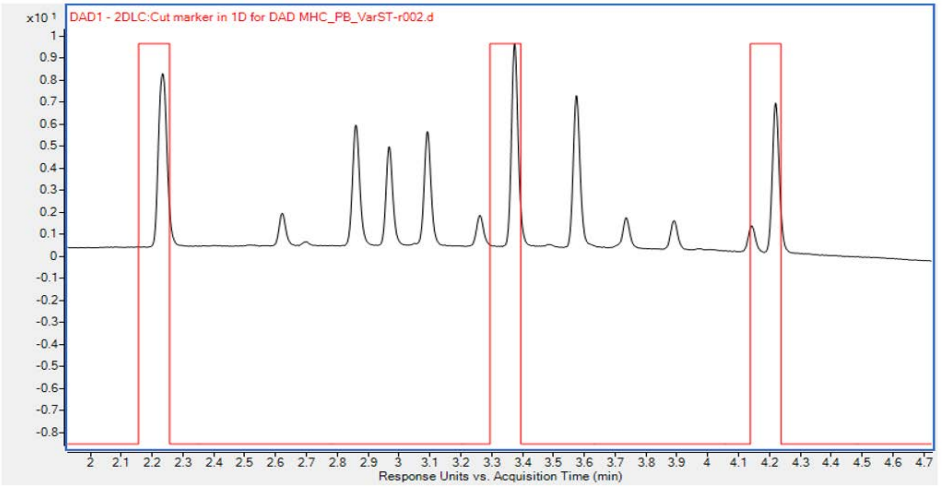


图 133　示例：显示 MassHunter Qual 1D 色谱图中显示的结果 + 切片标记

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 ^{2}D 梯度

1 在分析梯度预览中调用初始 ^{2}D 梯度。

2 要更改初始梯度，双击紫色线。

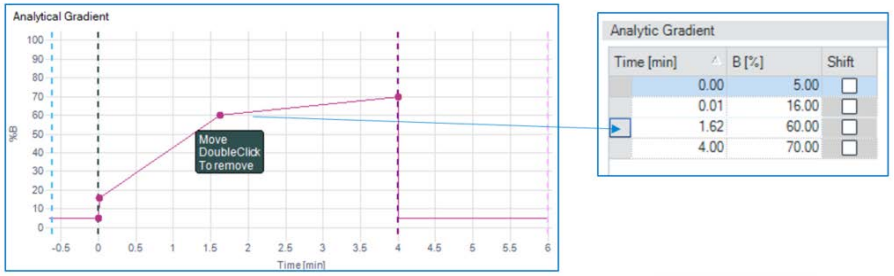


图 134　分析梯度

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 ^{2}D 梯度视图。

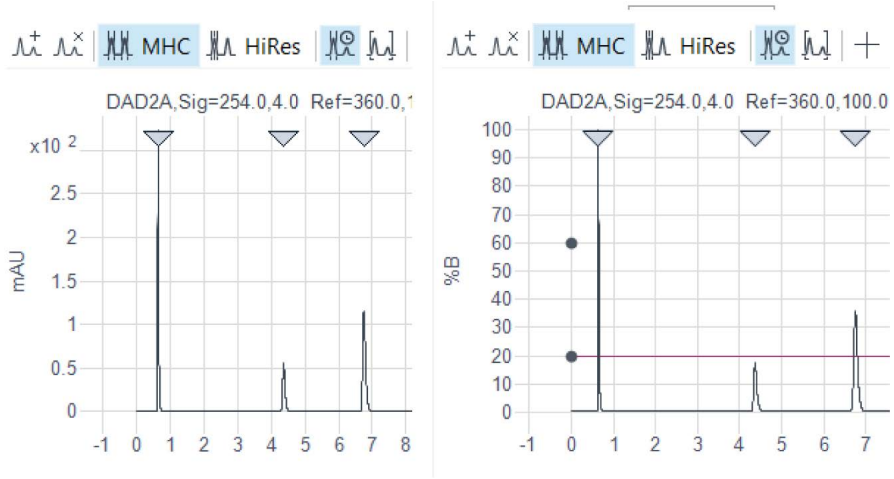


图 135　更改坐标轴的标签

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。

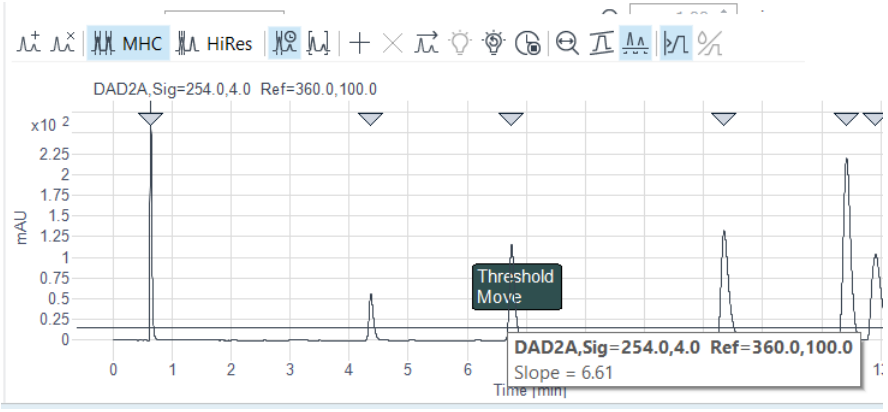


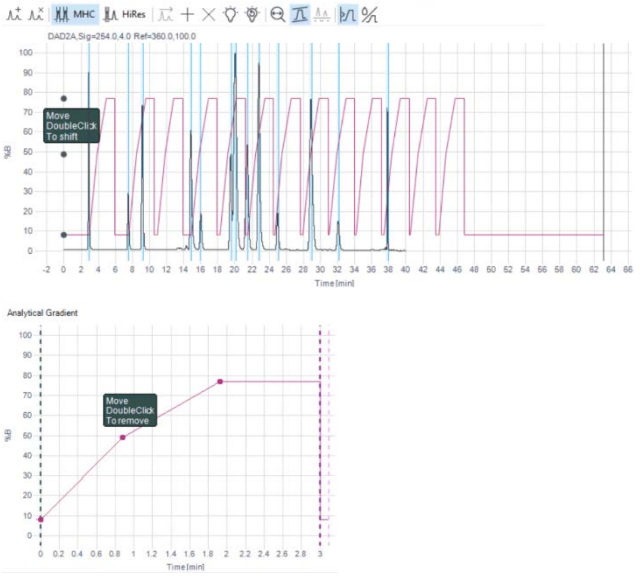
图 136　在预览中显示阈值

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 ^{2}D 梯度，包括初始组成 (%B) 值、^{2}D 停止时间和调制（重复）时间。

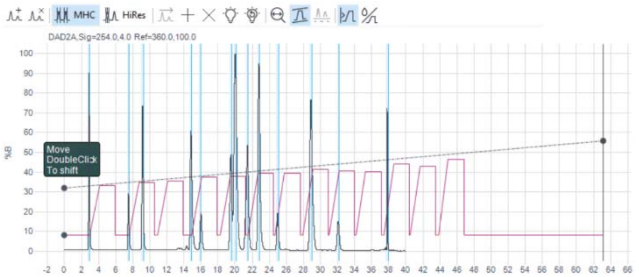
分析梯度

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 ^{1}D 时间（已迁移的 ^{2}D 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 ^{2}D 梯度。通过上下移动项目符号，可以将已迁移的 ^{2}D 梯度与 ^{1}D 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 ^{1}D 时间**设置。

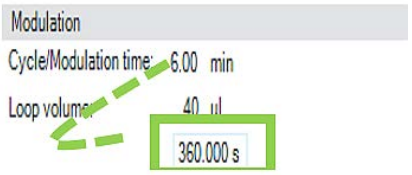


注意

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。

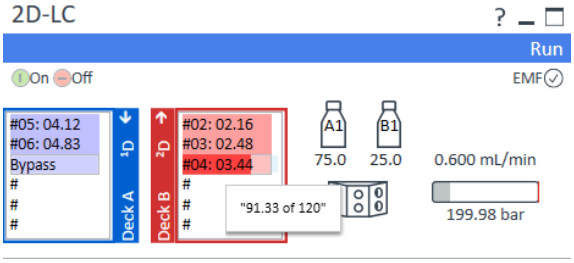
更多调制信息

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 159 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 ^{2}D 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 ^{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。

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 ^{2}D 梯度用于分析之前，定量环的内含物被传输到 ^{2}D 色谱柱。

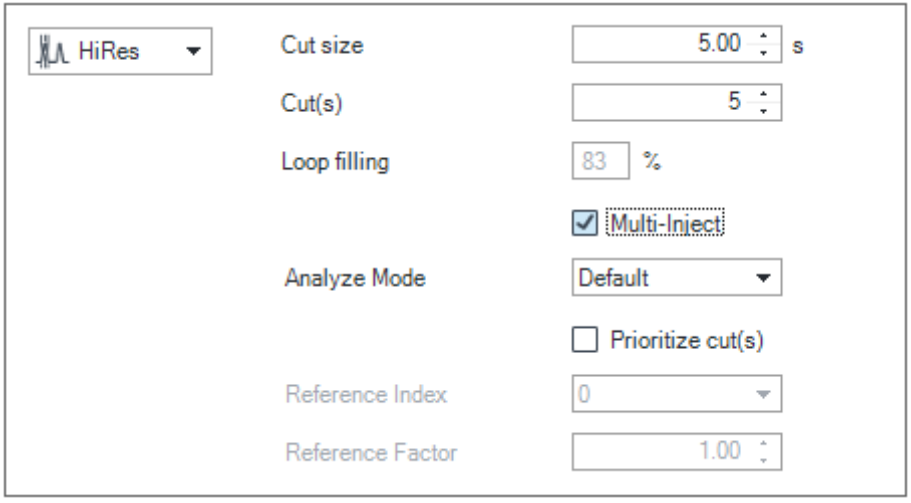


图 137　用于高分辨率采样的多重进样

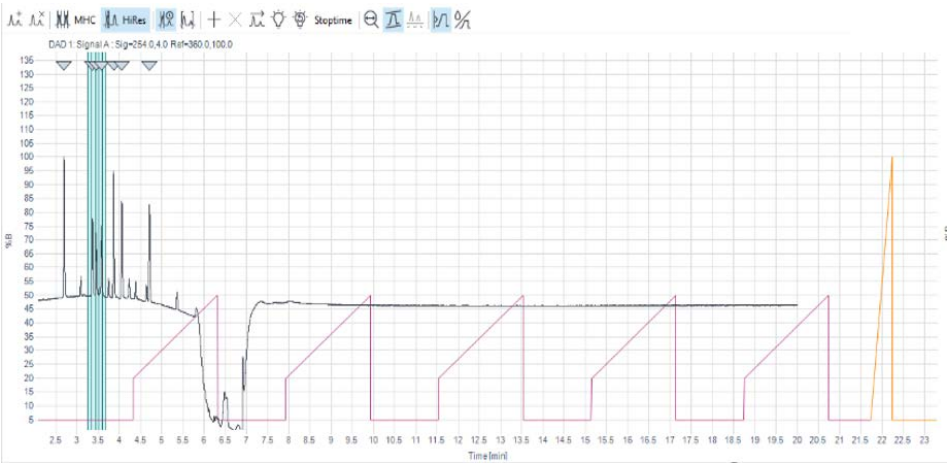


图 138　示例：具有 5 个分析梯度的高分辨率采样（5 个切片）

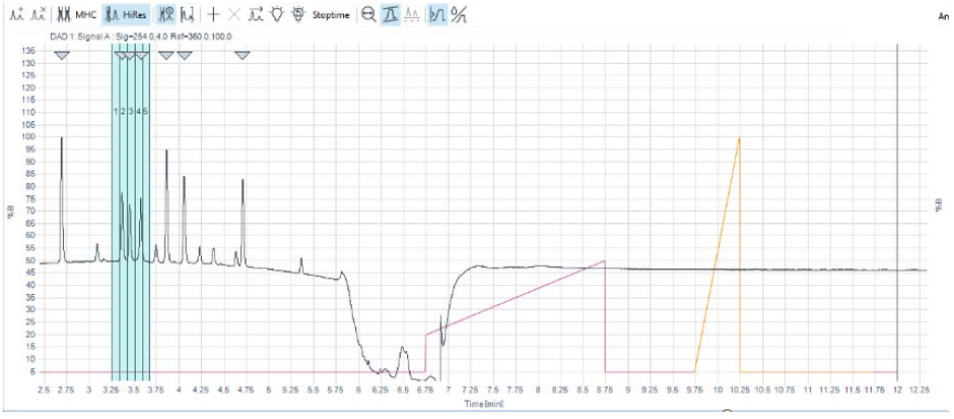


图 139　示例：高分辨率采样（5 个切片），所有切片只有一个分析梯度

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 ^{2}D 分离造成不利影响。为了获得良好的 ^{2}D 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）。

通过采样表或通过在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。

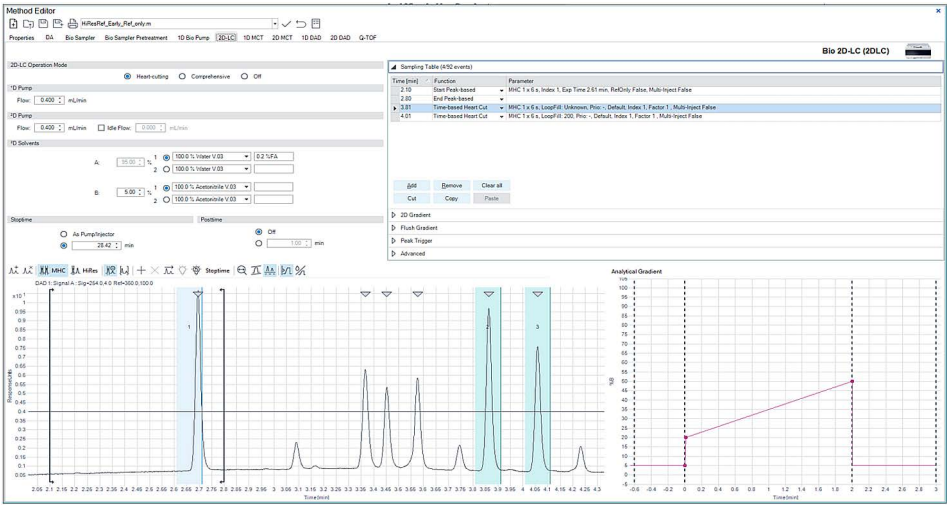


图 140　基于峰的中心切割实验

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。

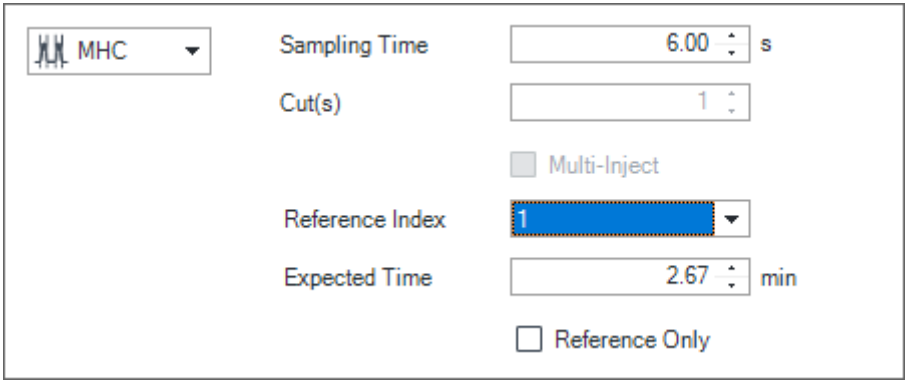


图 141　定义为基于峰的 MHC 的 IRTS 参数

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。

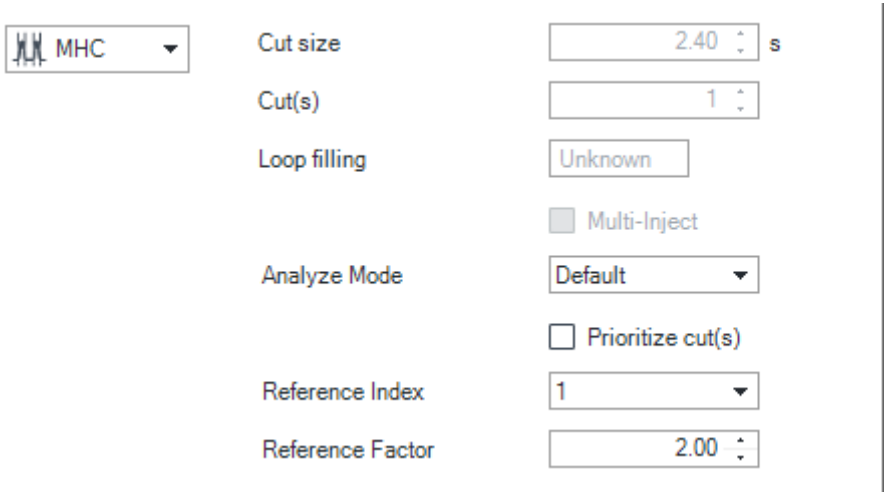


图 142　基于时间的切片，带参比索引 1 和参比因子 2

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

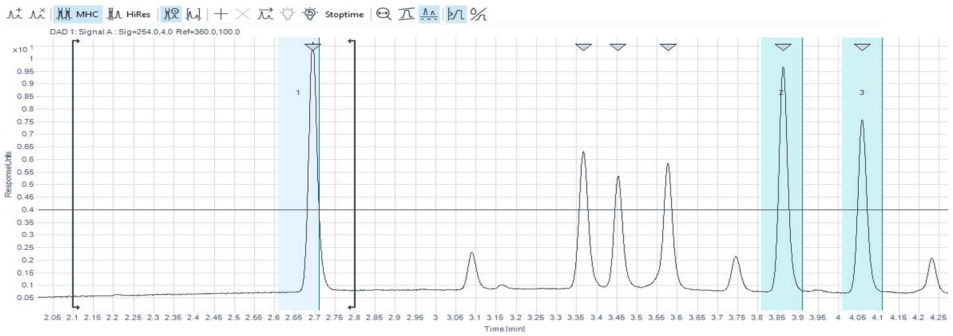


图 143　动态切片偏移设置的示例图片

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到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。

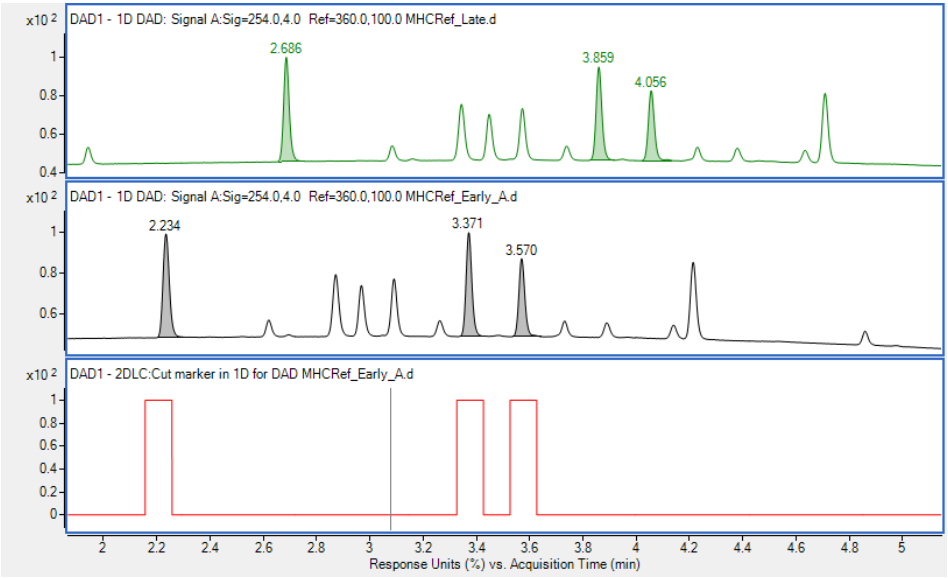


图 144 系统补偿 IRTS (2.686 min) 偏移到更早的的 RT (2.234 min)

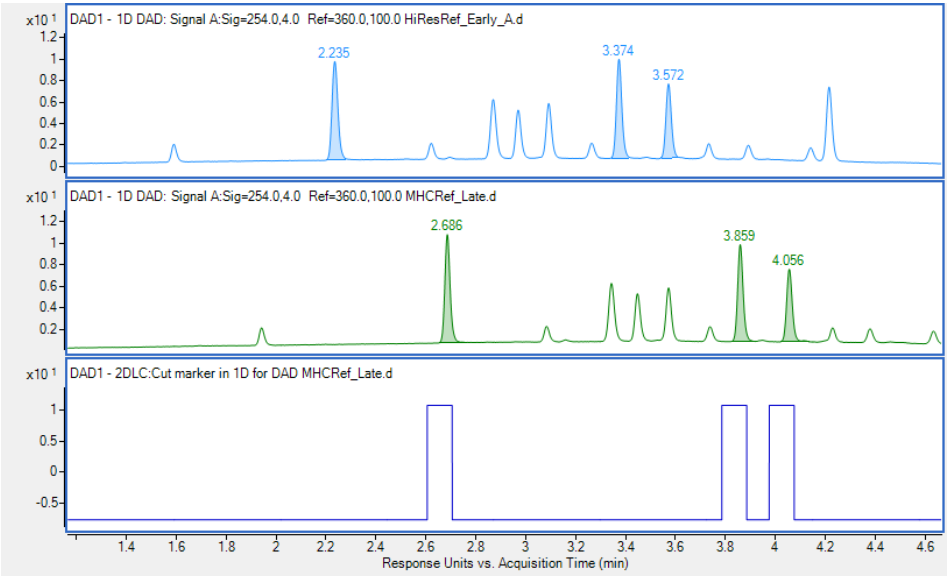


图 145 系统补偿 IRTS (2.235 min) 偏移到延迟的 RT (2.686 min)

调制
信息

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 146　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
在线监视

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）。

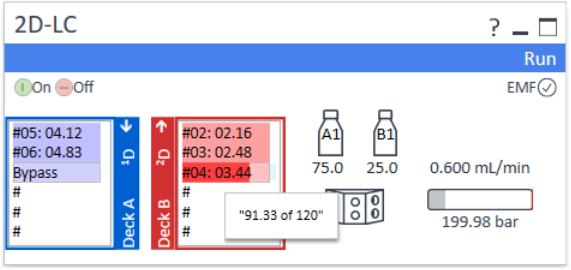


图 147　用户界面中的 2D-LC 在线监视器

7 主动溶剂调制 (ASM) 方法开发

主动溶剂调制 (ASM) 方法开发 233
方法参数 234
使用 ASM 毛细管优化稀释 235
优化样品定量环冲洗 236
将 ASM 阶段包含到 ^{2}D 梯度中 237
通过方法设置优化稀释 238

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 234 页的方法参数）后，按照以下顺序执行步骤：

- 第 235 页的使用 ASM 毛细管优化稀释
- 第 236 页的优化样品定量环冲洗
- 第 237 页的将 ASM 阶段包含到 ^{2}D 梯度中
- 第 238 页的通过方法设置优化稀释

方法参数



图 148　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 73 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



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 149　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 ^{2}D 梯度中

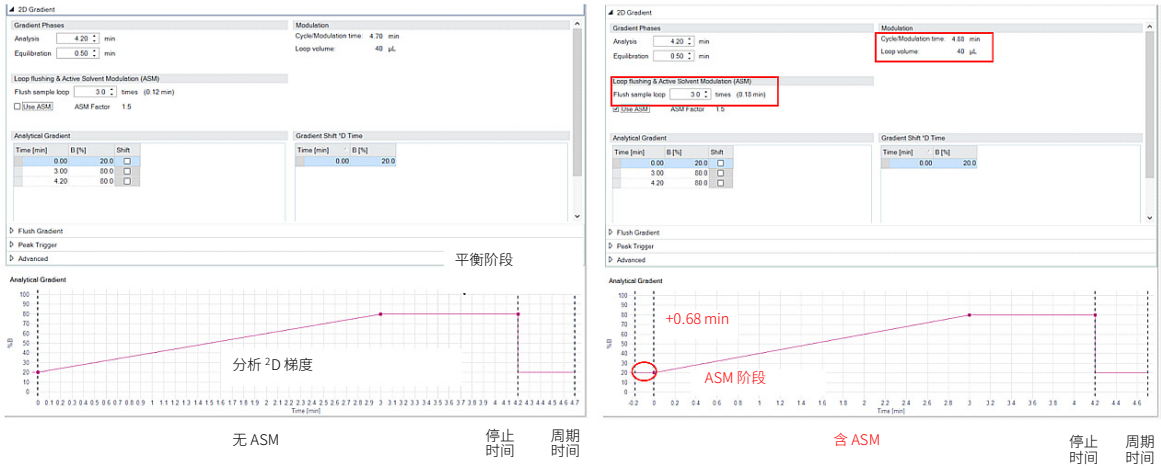


图 150 ^{2}D 梯度表编程（示例）

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

- 梯度更晚结束
- ^{2}D 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

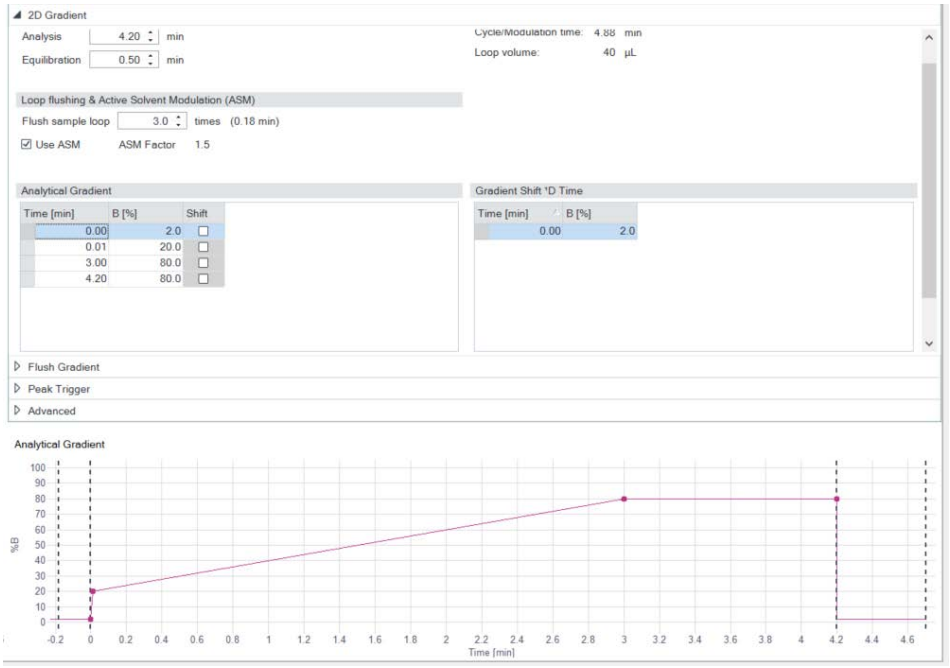


图 151　为 ASM 和色谱柱平衡阶段使用更小的 B 百分比来优化分离（示例）

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 ^{2}D 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 ^{1}D 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 ^{1}D 传输到 ^{2}D 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 240
准备 2D-LC 系统 241
配置 2D-LC 系统 242
校验程序 244
准备实验 246
运行实验 248
运行多重中心切割 (2D-LC) 的校验程序 248
运行高分辨率 (LC-LC) 的校验程序 254
运行全切割 (LCxLC) 的校验程序 259

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：

- Agilent OpenLab CDS 2.7

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 71 页的连接 2D-LC 阀，标准 (G4236A)、第 73 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	• 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	• 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	• 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 136 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 24 优化方法参数的硬件配置

	1D	2D-LC	2D
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 µm 在用于 ESZ 服务的 ^{1}D 中
699968-301	Poroshell 120 Bonus-RP，3.0 x 50 mm， 2.7 µm 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 57 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）已制备好。

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）已制备好。

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 58 页的表 6。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 245 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 ^{1}D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
^{1}D 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
^{1}D 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
^{1}D 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 ^{2}D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
2D-LC 阀	
	MHC，带 40 µL 样品，传输毛细管，ASM 因子数
^{2}D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	Poroshell 120 Bonus-RP， 3.0 x 50 mm， 2.7 µm (699968-301)
柱温箱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
^{2}D 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
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

表 26 用于多重中心切割的 ^{2}D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
^{2}D 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 ^{2}D (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

表 27 ^{2}D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
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 28 ^{2}D (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 58 页的表 6。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 245 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 ^{1}D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
^{1}D 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
^{1}D 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
^{1}D 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 ^{1}D (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 ^{2}D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
2D-LC 阀	
	MHC，带 40 µL 样品，传输毛细管，ASM 因子数
^{2}D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	Poroshell 120 Bonus-RP， 3.0 x 50 mm， 2.7 µm (699968-301)
柱温箱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
^{2}D 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
^{2}D 梯度:	0 min - 10 % B 迁移 7 min - 30 % B 1.50 min - 60 % B

表 30 用于高分辨率 2D-LC 的 ^{2}D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
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
^{2}D 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 ^{2}D (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

表 31 2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
	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 ^{2}D (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 58 页的表 6。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 245 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 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 mmx500 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 mmx250 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 ^{1}D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
^{1}D 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
^{1}D 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:	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 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，甲醇/水 (50/50)
停止时间	与泵一致/无限制
^{1}D 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 ^{2}D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
2D-LC 阀	
	带 40 µL 样品定量环（或带 60 µL 样品定量环）的 2D-LC 阀
^{2}D 柱温箱 (MCT)	
色谱柱	Poroshell 120 Bonus-RP， 3.0 x 50 mm， 2.7 µm (699968-301)
柱温箱温度	50 °C
停止时间	与泵一致/无限制
^{2}D 泵	
操作模式	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	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
^{2}D 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 ^{2}D (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
参比雾化器	0 psig
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 ^{2}D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
	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 37 ^{2}D (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

OpenLab 2D-LC 数据分析软件 265
导入 2D-LC ChemStation 数据 266
Data Analysis 元素 266
信号对齐 302
报告 311
2D-LC 的简单数据分析工作流程 317
GC Image 基本信息 336
概述 339
安装 340
使用 GCImage 软件 341
研究在 ^{2}D 中使用不同梯度的影响 349

本章提供有关如何使用软件分析 2D-LC 数据的信息。

OpenLab 2D-LC 数据分析软件

OpenLab 软件有几个可作为单独程序运行的主要组件。OpenLab Data Analysis 可以处理和查看采集的数据。此处执行的典型任务列表包括检查色谱、积分峰、提取光谱、识别目标化合物、定量目标化合物和生成报告。

浏览此 Data Analysis 工作流程示例时，首先需要启动软件。可以以几种不同的方式来启动。启动 Data Analysis 的一种方法是，直接从控制面板项目启动。



图 152　控制面板中的“项目”视图

另一种无需打开控制面板的方法是，使用桌面快捷方式。桌面快捷方式最初是通过“控制面板”创建的，一旦创建，只需双击图标即可访问给定项目的 Data Analysis。



启动 Data Analysis 的第三种方法是，从数据采集运行队列启动。在这种情况下，您可以选择要查看的进样，它们将在 Data Analysis 启动时自动调用。

导入 2D-LC ChemStation 数据

可以导入使用 ChemStation 2D-LC 附加软件采集的原始数据。可以通过导入包含所需的 .drvml 文件的 .D 文件夹来导入单个或多个进样。在数据分析中，可根据这些原始数据文件创建新的结果集。

前提条件

- 这些数据是使用 ChemStation 2D-LC 附加软件 A.01.02 或更高版本记录的。
- 这些数据存储在您的本地文件系统中。

注意

可能是在 OpenLab 2.x 上，无法正确识别某些数据中的采样位置和 1D/2D 色谱图。

注意

建议在安装了 OpenLab 2D-LC 数据分析软件的系统上查看 2D-LC ChemStation 数据。

Data Analysis 元素

此处显示 Data Analysis 的基本版面。

OpenLab Data Analysis 用户界面被分为三个主要区域：

- 功能区

  托管大多数可用的菜单项
- 导航窗格

  用于选择方法和数据
- 工作区

  您的主工作区将根据所在的视图（数据选择、数据处理、报告）以及在导航窗格中选择的内容而变化。工作区是用户界面上显示各种窗口元素的区域。窗口可有特定的工具栏。

您还可以更改视图。您可以选择数据选择、数据处理或报告。

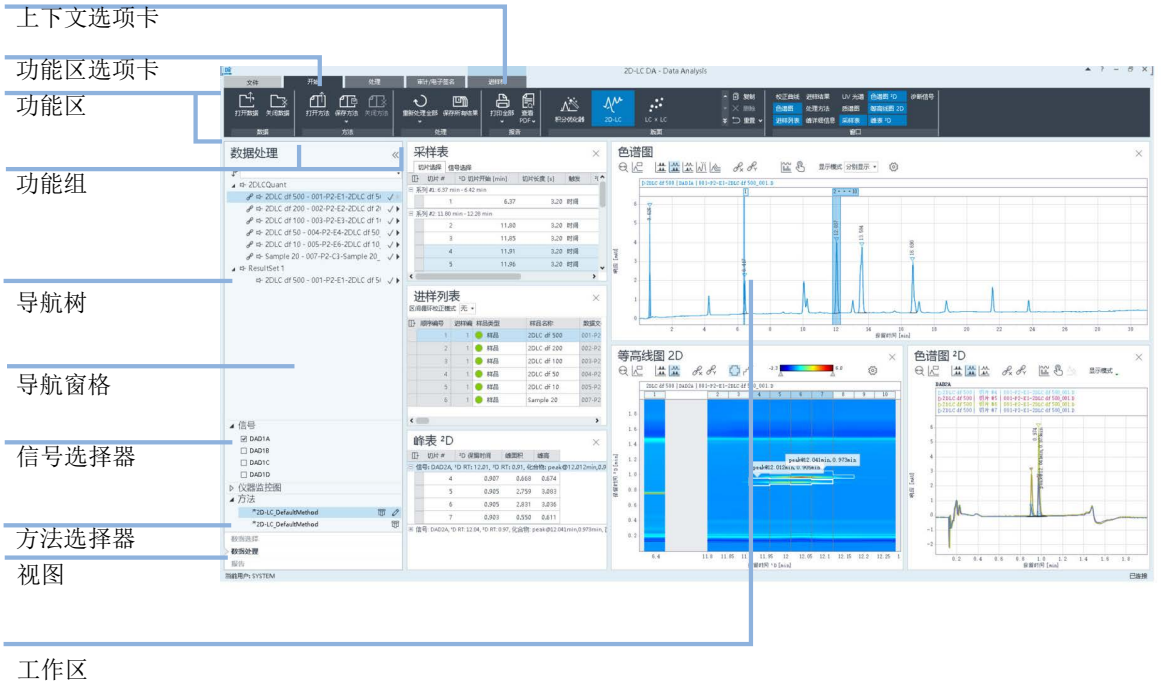


图 153　Data Analysis 元素概述

注意

以前 2D-LC 软件版本的所有 2D 数据和 2D-LC 处理方法都与当前版本兼容。

自定义工作区

在 OpenLab Data Analysis 中，可以更改所有窗口的可见性、位置和大小。如果更改版面，应用程序会记住新版面。下次启动应用程序时，您所做的更改仍将处于活动状态。

要显示或隐藏窗口

1 要隐藏窗口，请单击窗口右上角的叉号。另外还可单击**窗口**功能组中与此窗口相对应的按钮。

2 要显示窗口，请单击**窗口**功能组中与此窗口相对应的按钮。

3 要显示选项卡式窗口，请找到显示所需选项卡的窗口，然后选择该选项卡。

要调整窗口大小

1 将鼠标指向两个窗口之间。

2 当光标变为双向箭头后，拖曳光标以移动分割线。

2D-LC 版面

应用程序为不同的用户任务提供了多个预配置的版面。版面定义了工作区显示的窗口及其定位的方式。您可调整这些版面，或将其再次设置为出厂默认设置。对于 2D-LC，使用**多重中心切割**版面 (**2D-LC**) 和**全切割版面** (**LCxLC**)。

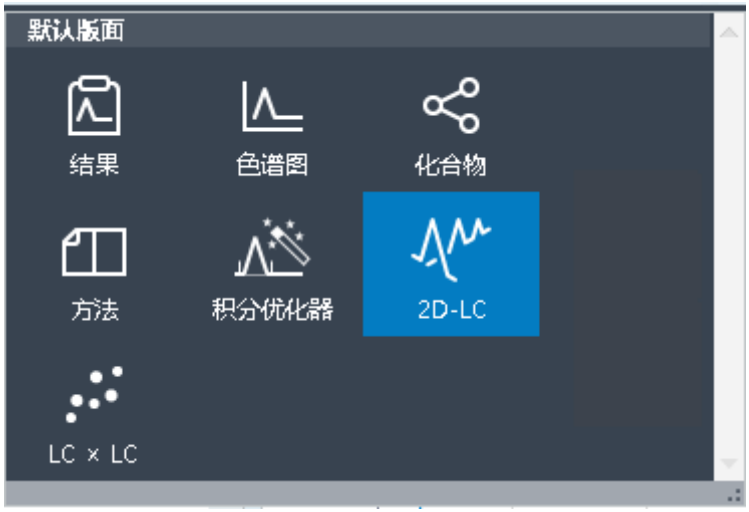


图 154　默认版面

窗口

您的主工作区将根据所在的视图（数据选择、数据处理、报告）以及在导航窗格中选择的内容而变化。工作区是用户界面上显示各种窗口元素的区域。所有以蓝色突出显示的项目都显示在工作区中。



图 155　导航窗格

在下一页中，我们将浏览并说明 2D-LC 数据分析中的不同窗口选择选项。

帮助信息 OpenLab 2D-LC Software

对于 2D-LC 软件，可参考详细的帮助，请参阅

- 第 125 页的 OpenLab Help & Learning，或者
- **https://openlab.help.agilent.com/**

色谱图 (^{1}D)

对于 2D-LC 数据，此窗口显示第一维的信号。采集 2D 信号（“切片”）的时间范围已加了注释。

色谱图窗口中各个切片的外观取决于切片类型：

- **多重中心切割 (MHC)**

  在**色谱图**窗口中，每个切片均以右侧的边框突出显示。左侧没有边框。这说明流量连续通过相应的样品环，直到切换 2D-LC 阀为止。

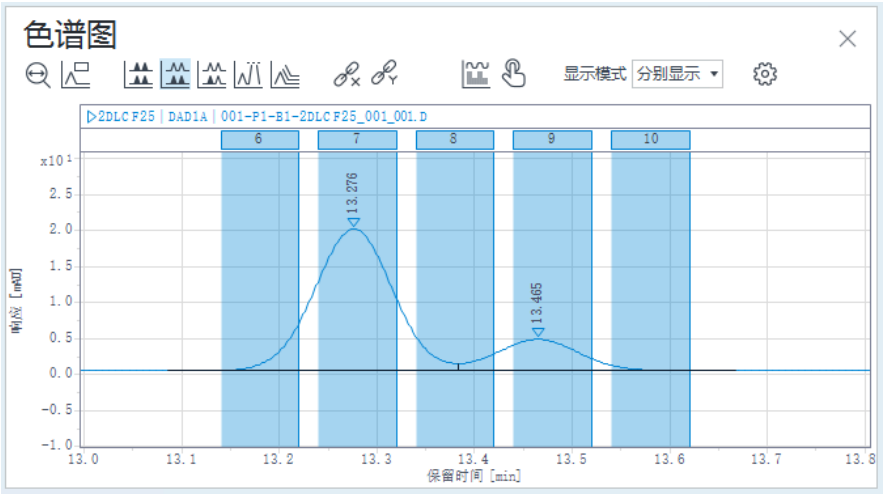


图 156　MHC 色谱图示例

- **高分辨率采样 (高分辨率) 和全切割 2D-LC**

  与“多重中心切割”相反，这些切片在左侧和右侧均带有边框。这说明 2D-LC 阀已切换为开始填充样品环，并且切换为停止。

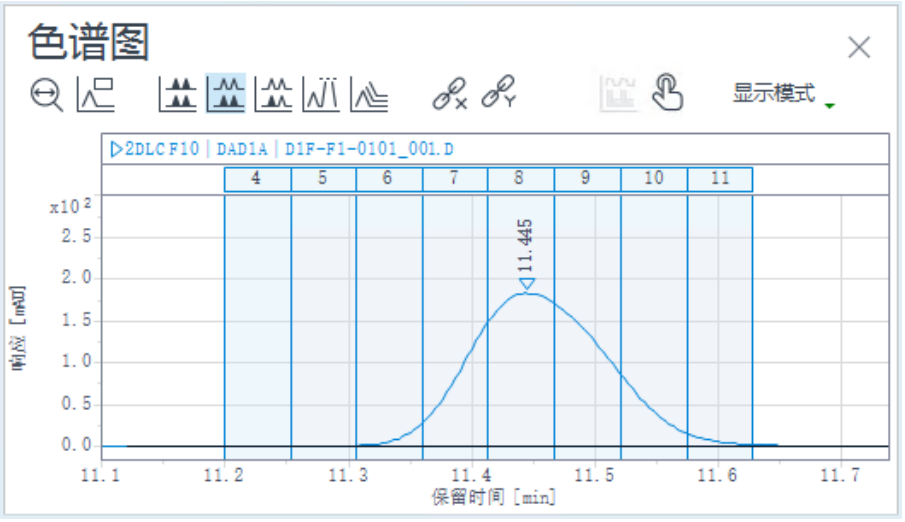


图 157　高分辨率色谱图示例

注意

对于使用 2D-LC ChemStation 附加软件采集的全切割 2D-LC 数据，第一维信号没有可用信息。在**色谱图**窗口中没有显示切片注释。

进样列表

进样列表窗口显示了数据选择树中所有进样的部分所选项目：

- 如果选择了一个**结果集**，则窗口会列出该结果集的所有进样。默认情况下会选中进样的复选框。只能调用整个结果集，不支持调用部分结果集。
- 如果选择了一个包含**单个进样**的文件夹，则窗口会列出此文件夹中的所有单个进样。默认情况下会清除进样的复选框。您可根据需要选择单个进样。

可用进样的详细信息将以表格的方式显示。您可调整表格中的排序方法、选择显示的列或筛选列出的进样。版面将在各个工作区修改后自动保存。如果使用用户名和密码登录 Data Analysis，将专门保存该用户的已更改版面。

仪器名称列显示了已经采集了数据的仪器的名称。仪器名称适用于使用 OpenLab CDS 2.6 或更高版本采集和保存的数据。可能不适用于更早版本的数据。

调用所选数据时，应用程序将切换到**处理数据**视图并将结果集和进样添加到可用数据。

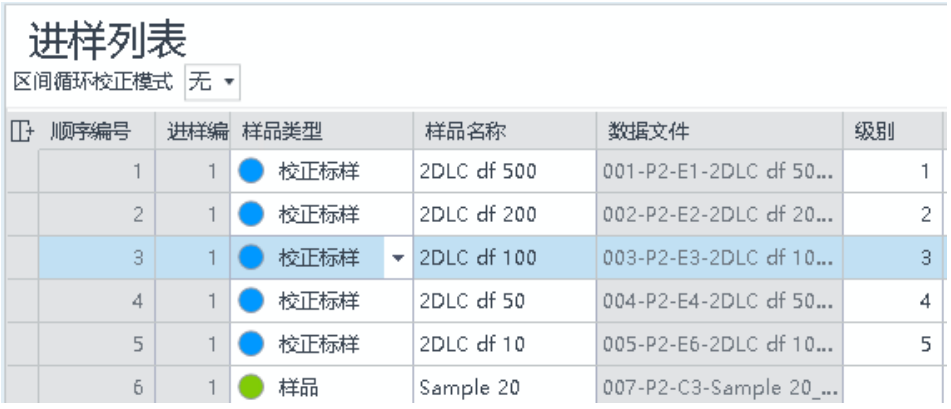


图 158　进样列表示例

采样表 - 切片选择选项卡

采样表窗口的**切片选择**选项卡显示第一维的切片详情，然后在第二维对其进行进一步分析。如果数据包含多个进样或一系列连续切片，则切片按各自的名称排列。单独的**中心切割**部分包含多重中心切割进样的所有切片。

要展开或折叠某个部分，单击 ⊞ 或 ⊟ 图标，或右键单击某个部分，然后从上下文菜单中选择**展开**或**折叠**。



图 159　采样表示例

该表格中的每行均代表一个切片。包含以下可用列：

切片 #　切片编号

切片长度 [s]　将第一维的切片调用到样品定量环中的时间段。

^{1}D 切片开始 [min]　第一维中的切片的开始时间。

^{2}D 运行开始 [min]　第二维中运行的开始时间。

驻留仓位　存储样品的驻留仓位。

定量环　存储样品的定量环。

触发　执行切片的模式。这可以是基于时间或基于峰的操作。

丢失原因 切片丢失的原因。
即使未在列选择器中选择列，也会列出丢失的切片和丢失原因。

多重进样 如果在多重进样模式中采集了高分辨率数据：连续进样切片的切片编号范围。
即使未在列选择器中选择列，也会显示切片编号范围。

采样表 - ^{2}D 信号选择选项卡

采样表的“信号选择”选项卡显示进样的所有可用 ^{2}D 检测器信号。如果选择了多个进样、切片系列或切片，使用树状结构可以单独选择每个级别上的信号。

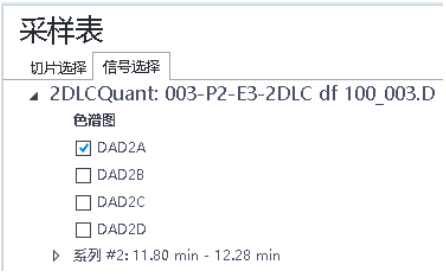


图 160 示例：采样表中的信号选择

注意 导航窗格的**信号选择**区域显示所有 ^{1}D 检测器信号。

峰表 ^{2}D

^{2}D 峰表窗口列出所选 ^{2}D 信号的选定切片的所有峰。

要访问以选择所有色谱柱，单击图标  。

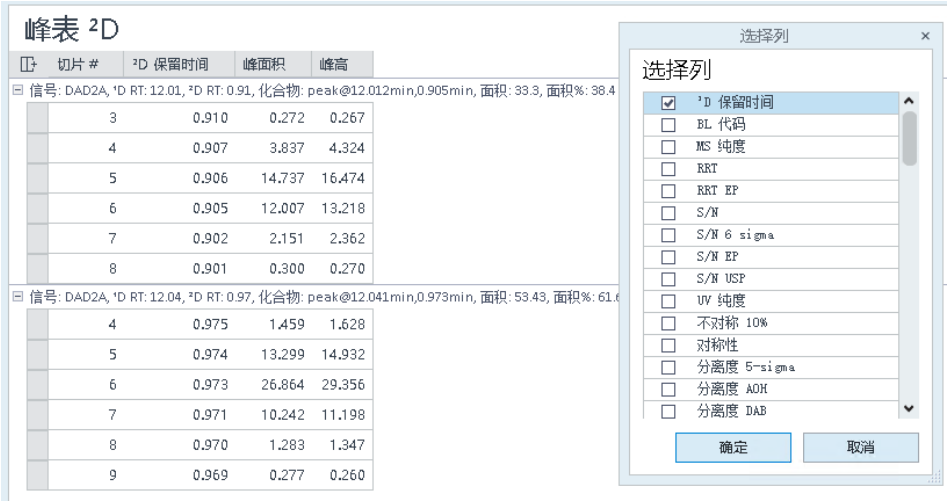


图 161　峰表 ^{2}D

峰详细信息

该窗口显示的是色谱图中所选峰的详细信息。窗口标题显示的是样品名称、数据文件名称和信号。峰详细信息包括时间、面积、高度和化合物名称。放大峰，以便轻松查看其外观。

如果您计算了系统适用性值，切线和峰宽将显示在峰详细信息中。显示的峰宽是从上到下的：50 %、10 %、5 % 和 5 sigma。

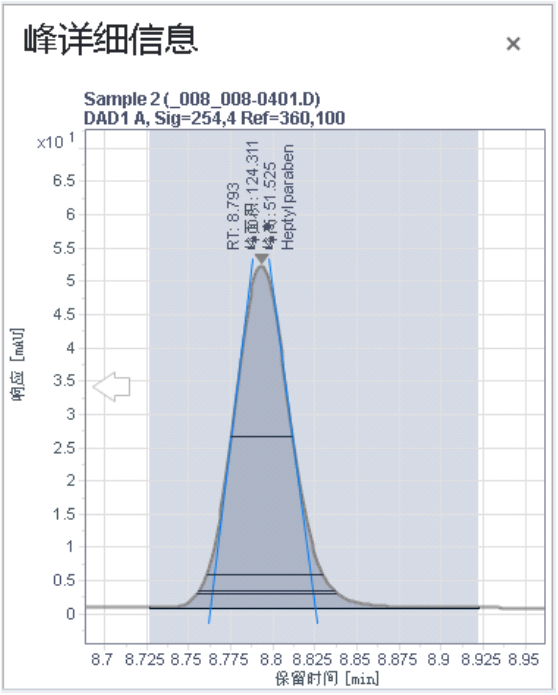


图 162　带系统适用性注释的峰详细信息

使用峰左右两侧的箭头可以导航至色谱图中的上一个或下一个峰。选择的峰与其他窗口中的选择同步。

色谱图 ^{2}D

色谱图 ^{2}D窗口显示使用第二维检测器分析过的切片的信号。

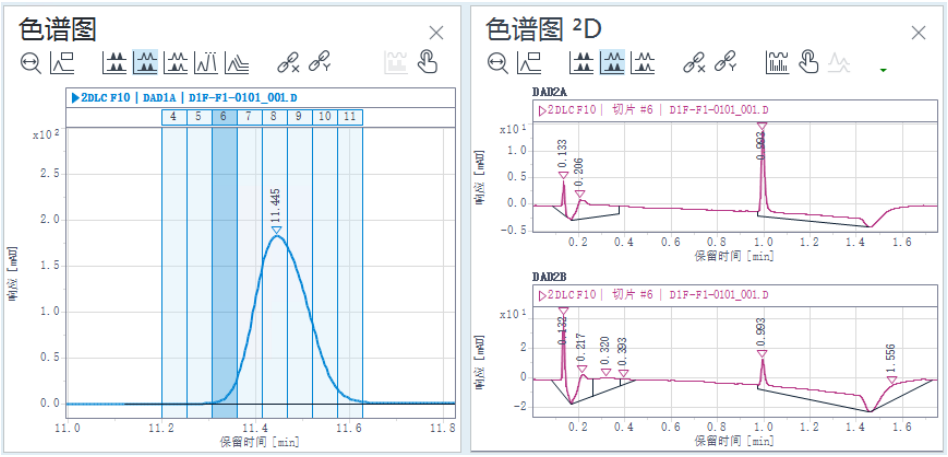


图 163　示例：色谱图 (^{1}D) 和色谱图 ^{2}D 之间的关联

您在 ^{1}D 色谱图中使用的所有显示模式在 ^{2}D 色谱图中也可用。此外，^{2}D 色谱图使您能够**按切片编号**显示单独的窗格

信号颜色 如果在单独的面板中按信号名称查看 ^{2}D 信号，每个切片将以特有的颜色显示。特定切片在所有信号中都有相同的颜色。

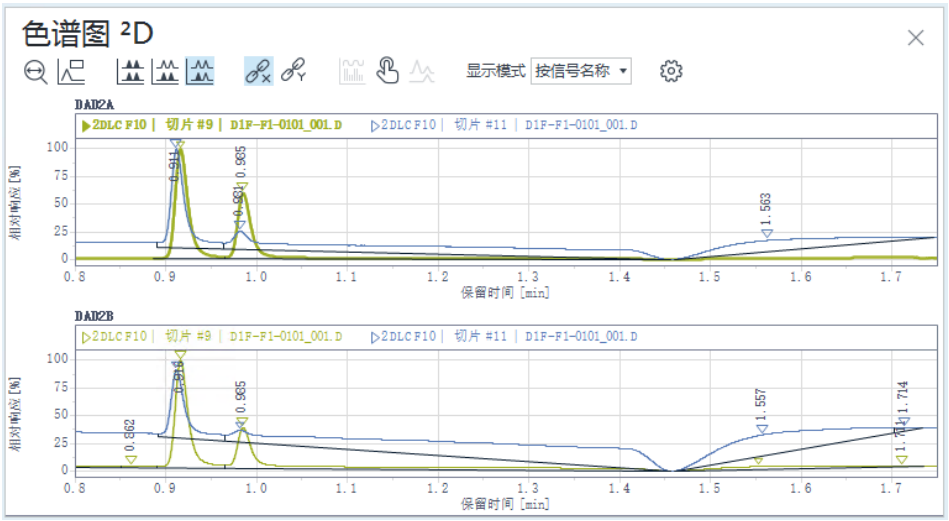


图 164 按信号名称显示模式下的色谱图 ^{2}D

如果按切片编号查看 ^{2}D 信号，则不同的信号将以同一（切片特定）颜色的不同着色显示。

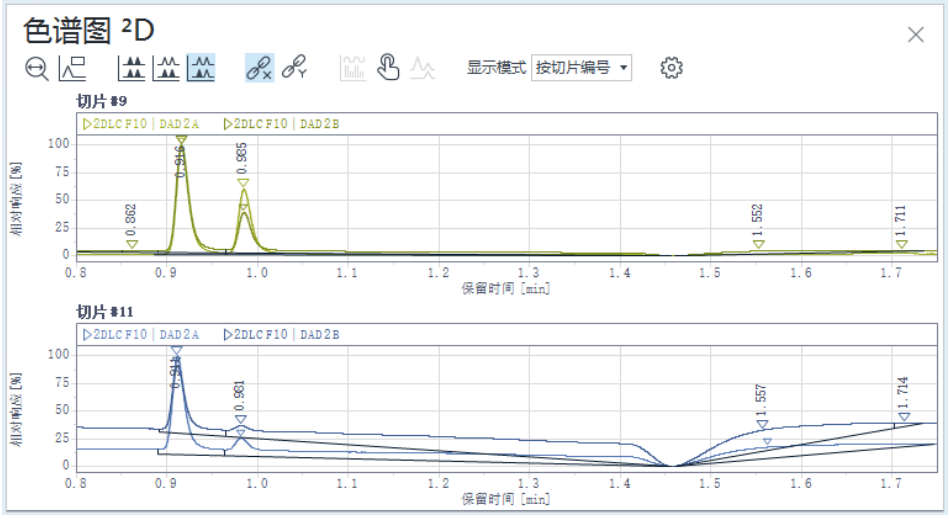


图 165 按切片编号显示模式下的色谱图 ^{2}D

“等高线图 2D”窗口

等高线图显示了来自第一维和第二维的检测器响应：

- X 轴显示第一维的保留时间。
- Y 轴显示第二维的保留时间。
- 颜色反映了第二维的检测器响应。

注意

要使用滑块更改颜色信息，请先选择相关信号标题。

Data Analysis 中 2D-LC Software 1.1 或更高版本附加软件的等高线图功能

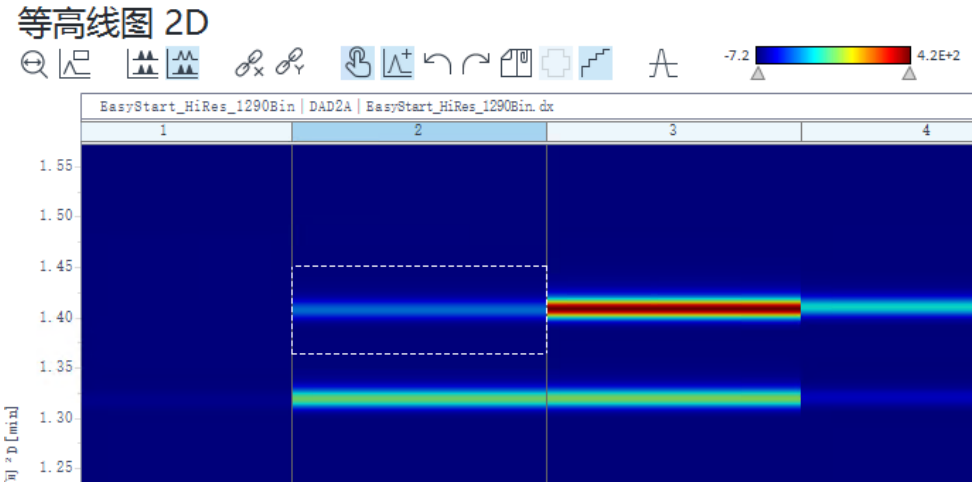


图 166　等高线图 2D 概述

	启用/停用手动积分
	启用/停用 2D 峰创建
	撤销/恢复手动积分步骤
	将手动积分校正复制到关联的处理方法中
	显示 2D 峰区域
	禁用/启用插值
	启用/停用纯度视图

等高线图 2D 属性

要访问其他显示选项（如切片注释和化合物标签），单击图标 。



图 167　等高线图 2D 属性

注意

颜色图设置 **Jet** 适用于黑白打印机。

等高线图 2D 上下文菜单

可以通过右键单击区域来访问上下文菜单



图 168　等高线图 2D 上下文菜单

等高线图 2D 中的切片显示

在 x 轴上，切片或一系列切片会偏移，调整其间隙大小可提高可见性。等高线图的外观取决于数据类型。

- **高分辨率采样**：X 轴上显示了不同系列之间的间隙。X 轴量程是不连续的。

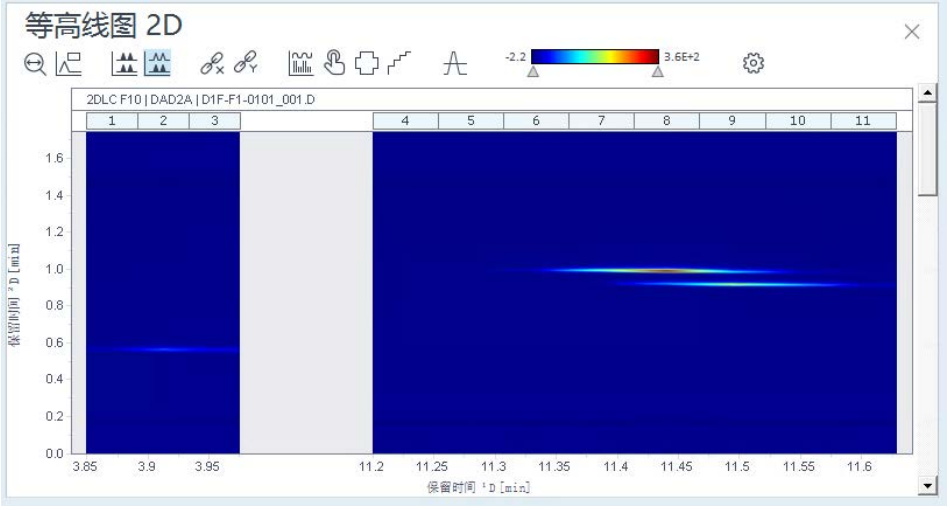


图 169　示例：高分辨率等高线图 2D

对于多重进样系列，分析梯度的所有切片在等高线图中显示为一个单个切片。切片注释显示多重进样中包含的切片编号的范围。工具提示显示**高分辨率（多重进样）**。

- **多重中心切割**：每个切片由间隙分隔。如果空间允许，x 轴量程可以是连续的。

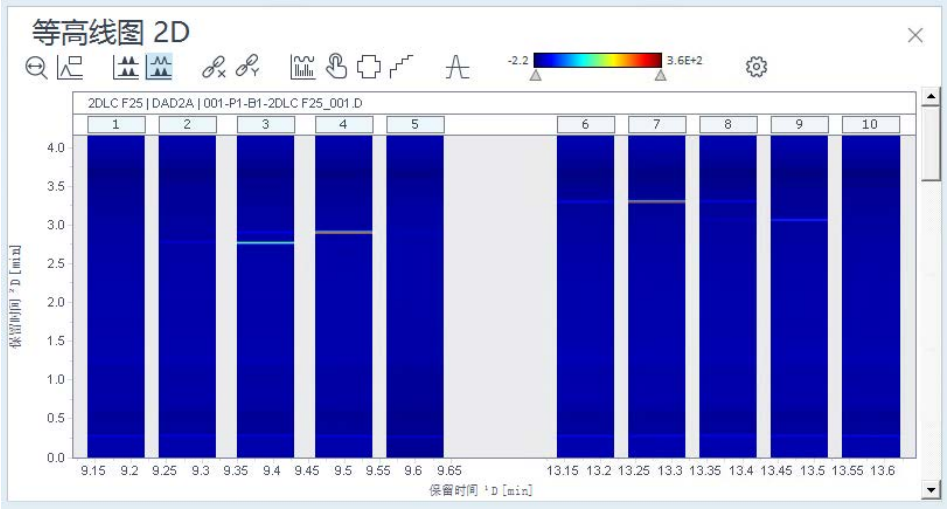


图 170　示例：多重中心切割等高线图 2D

- **全切割**：切片之间没有间隙。

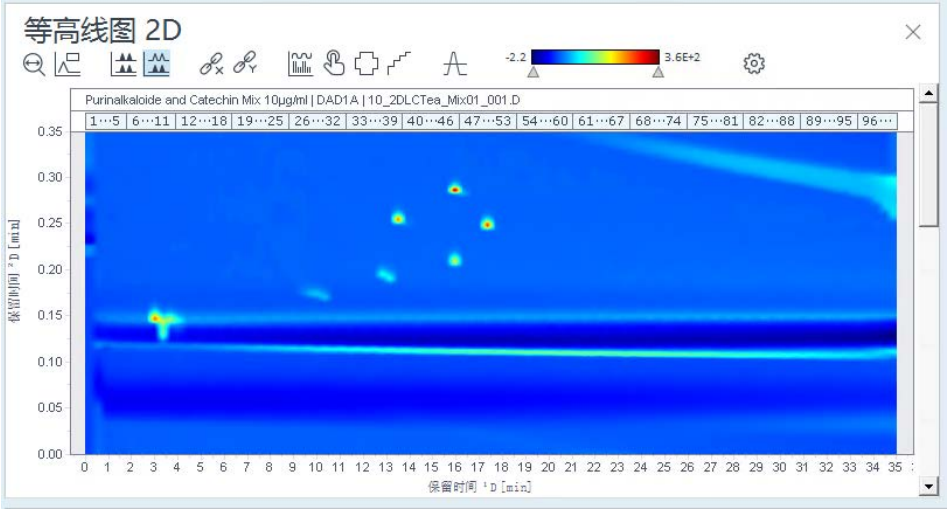


图 171　示例：全切割等高线图 2D

在 2D-LC 中进行手动积分

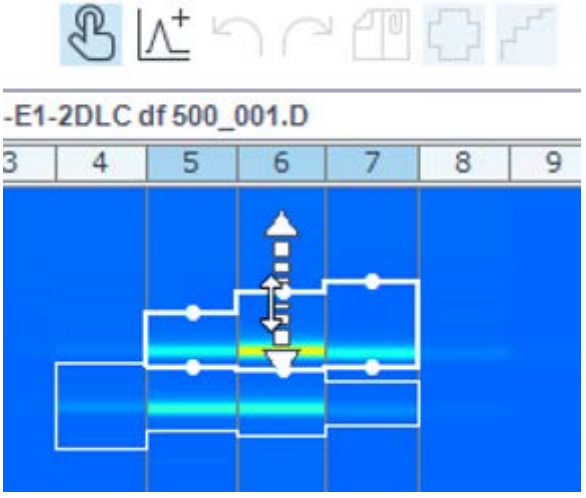


图 172　单个切片的手动积分

1 要以交互方式更改 ^{2}D 色谱图的积分，请单击色谱图 ^{2}D 工具栏中的“手动积分”图标 。

手动积分工具与第一维中的手动积分相同。

添加/删除 2D 峰

添加 2D 峰

1 要激活 2D 峰创建工具，请单击等高线图 2D 工具栏中的 。

只有在启用手动积分时，该图标才可见。

2 将鼠标移到等高线图 2D 中要创建新峰的区域上。单击并将鼠标拖到新峰的区域上。

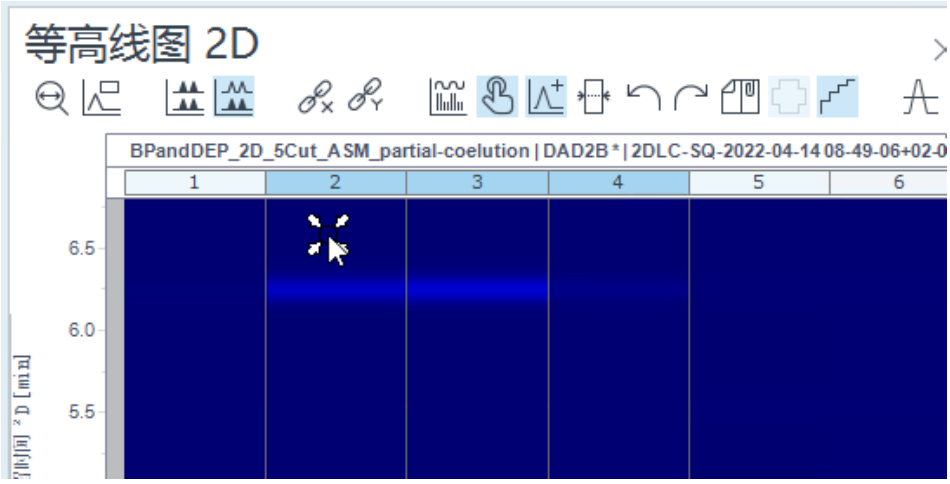


图 173 如何定义新的 2D 峰

请注意，一次只能使用一个切片。

删除 2D 峰

1 右键单击等高线图 2D 中的 2D 峰，然后选择**删除峰**。

或

或者，在色谱图 ^{2}D 中启用手动积分，并删除该处的 ^{2}D 峰。

等高线图 2D 中不再突出显示峰区域。相应的 ^{2}D 峰将从 ^{2}D 色谱图中删除。

分裂 2D 峰

1 选择要分裂的 2D 峰。

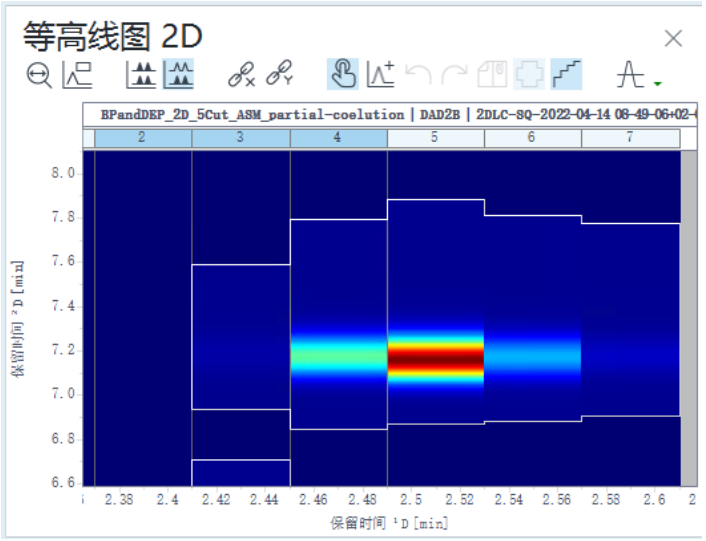


图 174 预选要分离的切片

仅选择包含至少两个切片的 2D 峰。

2 右键单击相关 2D 峰，然后从界面菜单中选择**分裂已选 2D 峰**。

对于每个切片，都会创建一个单独的 2D 峰。每个 2D 峰都标有一个星号。

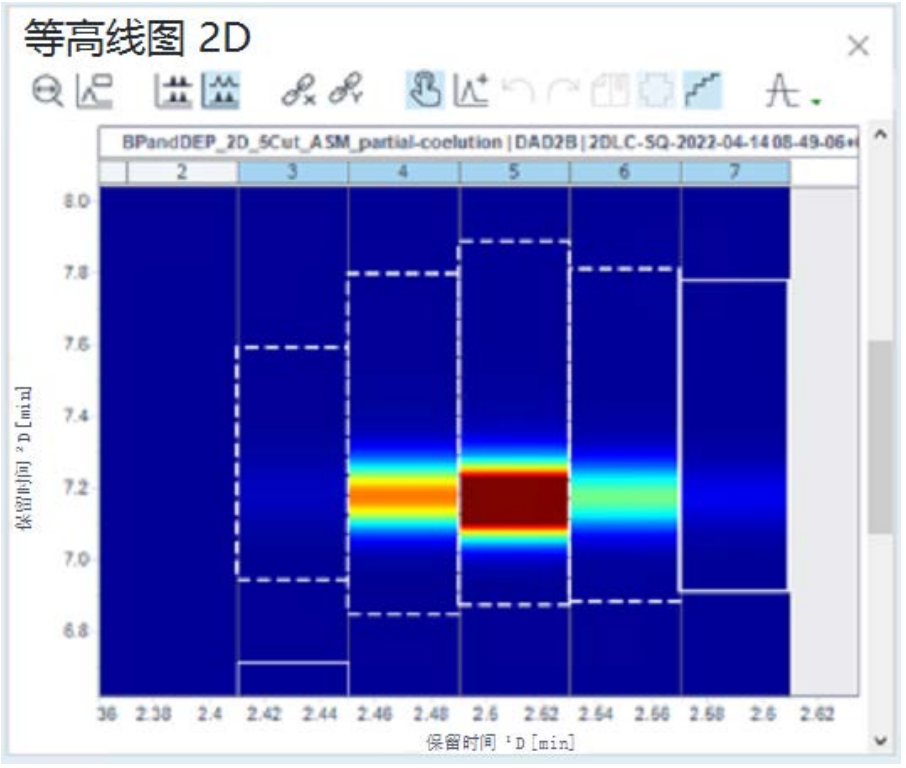


图 175　2D 峰分裂的结果

合并不同切片中的 2D 峰

1 单击第一个 ^{2}D 或 2D 峰。然后按住 Ctrl 键，同时单击要合并到一个 2D 峰的其他峰。

注意

所有选定的峰必须属于同一切片系列的不同的相邻切片。只有全切割 2D-LC 数据或高分辨率数据才支持合并峰。

除最后一个峰外，单击的峰都以虚线轮廓显示。

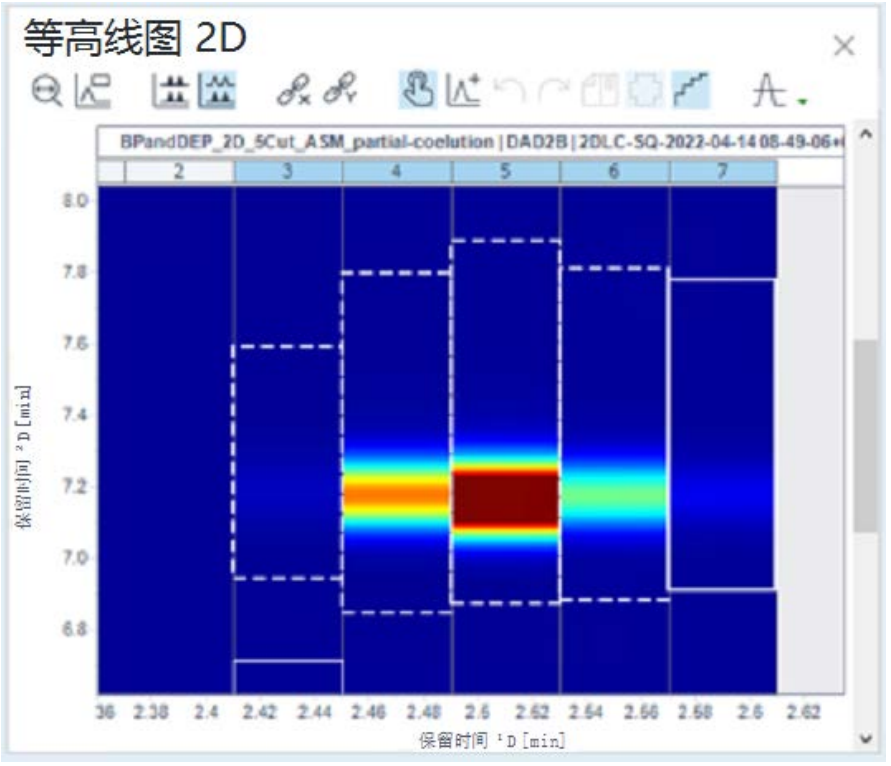


图 176 预选要合并的几个切片

2 右键单击等高线图 2D，然后从界面菜单中选择**合并已选 2D 峰**。

合并的峰在其右上角显示一个星号。

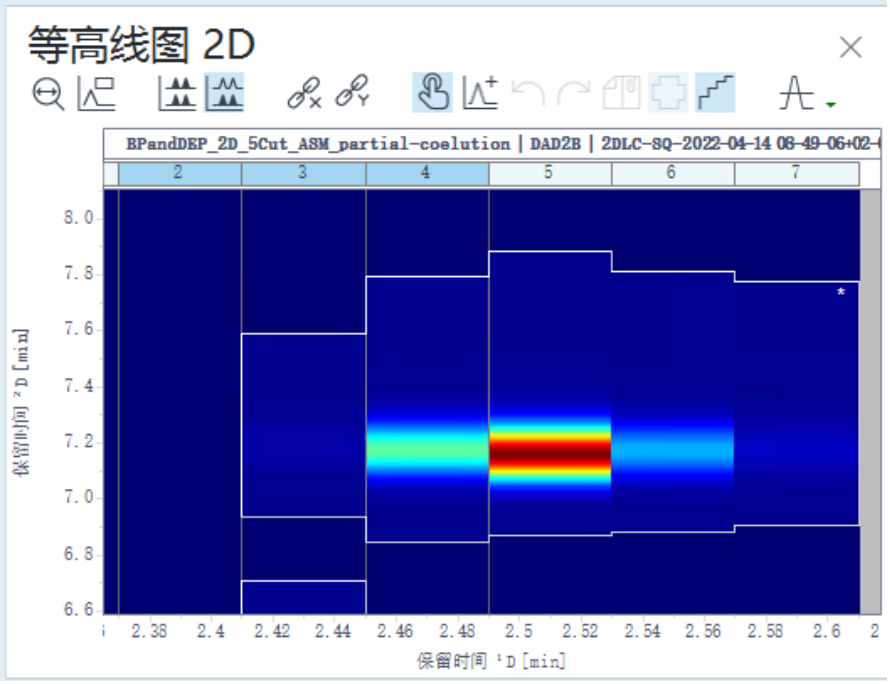


图 177　2D 峰合并过程的最终结果

处理方法

处理方法（.pmx 文件）定义了数据处理的步骤和参数

2D-LC 的处理方法包括的参数可以执行以下操作：

- 对齐信号
- 添加 2D 空白扣除
- UV 杂质 2D/纯度视图
- 在 2D-LC 中进行自定义计算
- 积分
- 识别
- 色谱图提取
- 光谱提取
- 校正
- 自动报告生成

要在 Data Analysis 中重新处理数据，将此方法关联到特定的进样。每个进样都可有自己的关联方法。

调用未处理的 2D-LC 数据时，将弹出**新建处理方法**对话框。使用默认 2D-LC 处理方法。该方法专门用于 2D-LC 数据。



图 178　“处理方法”对话框

进样结果

进样结果表显示了所选进样的 1D 和 2D（二维）峰的计算结果。

注意

各个 ^{2}D 峰（来自第二维的峰）的计算结果显示在 ^{2}D 峰表中

Data Analysis 可以导入和显示 OpenLab ChemStation 采集的原始数据。数据处理遵循 OpenLab Data Analysis 中选定的处理方法。无法导入 ChemStation 的处理结果。有关可用值和报告参数的详细信息，请参见在线帮助中的“OpenLab CDS 中使用的字段”。

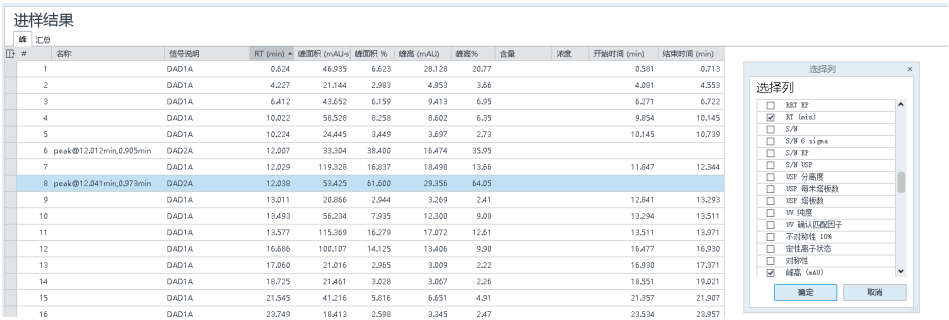


图 179　“进样结果”表

要查找化合物的**含量**和**浓度**，选择进样树或**进样列表**窗口的相关样品。使用**选择列**图标以显示您的目标列。要将数据导出到剪切板或 *.csv 文件，右键单击表格。

UV 杂质检查

杂质检查评估的是该峰是纯峰，还是含有杂质。该评估基于对峰洗脱期间所记录的光谱的对比。应用基线校正后，会将峰顶点的光谱与峰中记录的所有有效光谱进行对比。应用程序将计算体现光谱相似度的匹配因子。

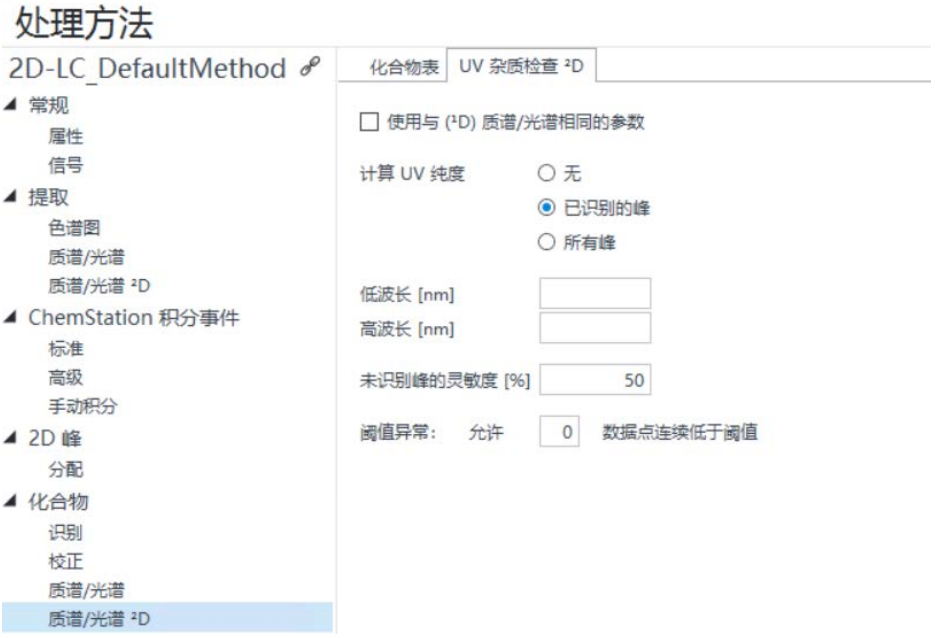


图 180　处理方法中的 UV 杂质检查 ^{2}D

纯度视图

色谱图 ^{2}D

1 在“色谱图 ^{2}D”窗口中，单击 ⚙ 以打开“色谱图 ^{2}D 属性”对话框。

2 选择“注释”页面。

3 选择“显示 UV/MS 纯度检查结果注释”复选框。

显示 UV/MS 纯度检查结果

1 在“等高线图 2D”窗口中，单击 以显示 UV 纯度检查的结果。

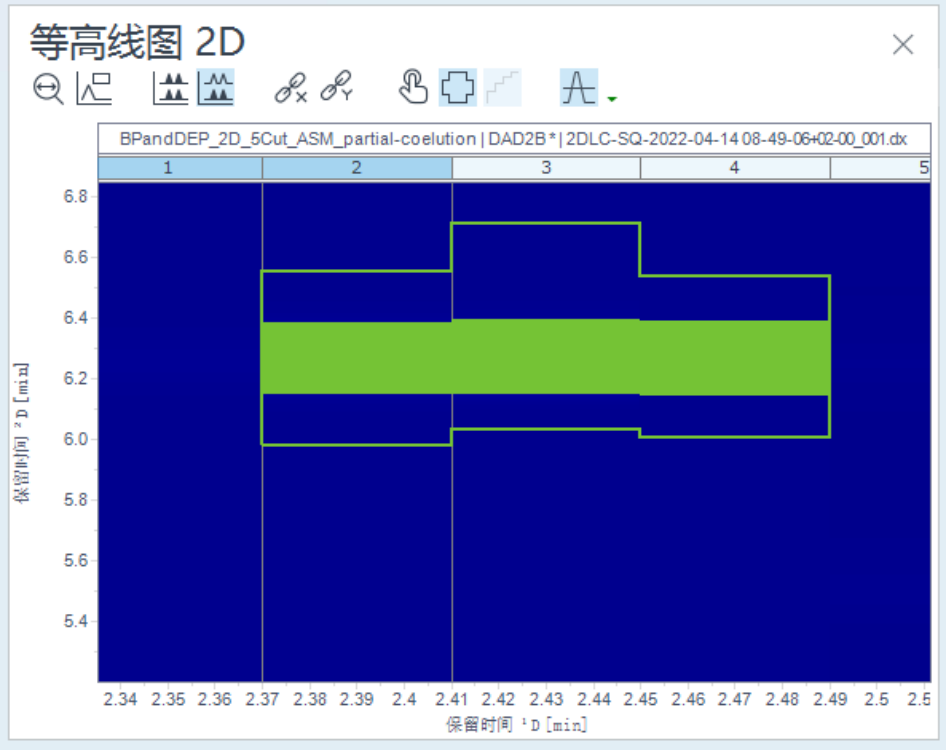


图 181 等高线图显示了没有 UV 杂质的纯 2D 峰

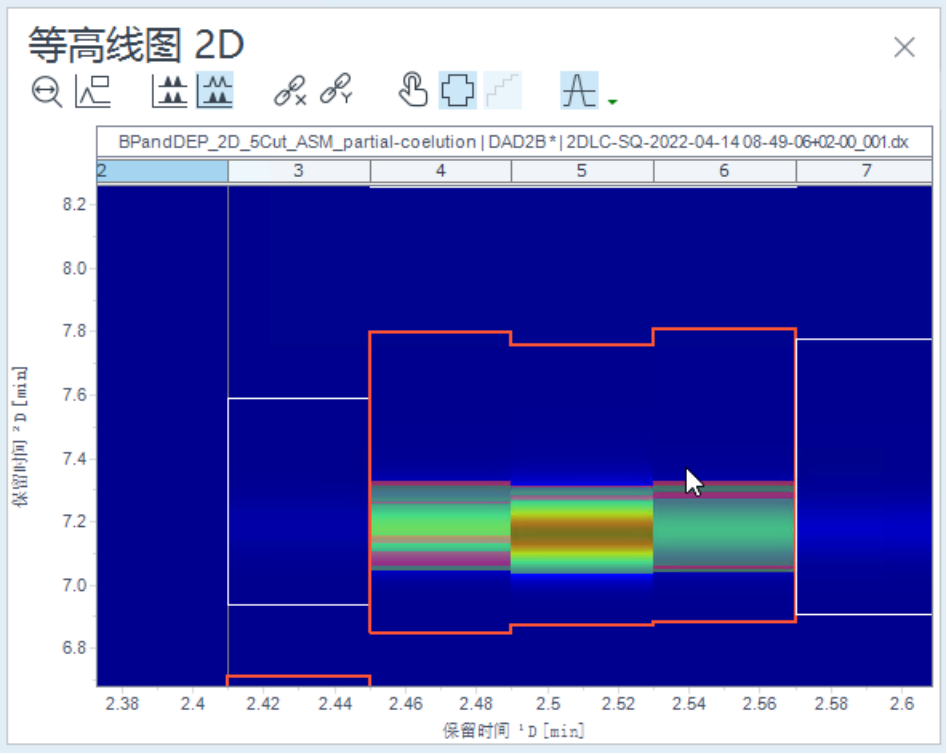


图 182　等高线图显示了 2D 峰的各个 ^{2}D 峰的 UV 杂质

峰表 ^{2}D

1 在“峰表 ^{2}D”窗口中，使用 列选择器显示 UV 纯度列。

峰表 ²D

切片 #	²D 保留时间	峰面积	峰高	UV 纯度
信号: DAD2A, ¹D RT: 2.42, ²D RT: 0.29, 化合物: -, 面积: 2281.51, 面积%: 1.92				
信号: DAD2A, ¹D RT: 2.42, ²D RT: 10.69, 化合物: -, 面积: 16.7, 面积%: 0.01				
信号: DAD2A, ¹D RT: 2.42, ²D RT: 6.26, 化合物: -, 面积: 2091.18, 面积%: 1.76				
1	6.268	54.596	6.556	990.69
2	6.259	801.746	93.733	999.95
3	6.260	961.085	113.599	999.86
4	6.265	230.253	26.503	999.33
5	6.268	43.497	4.751	987.75
信号: DAD2A, ¹D RT: 2.42, ²D RT: 9.71, 化合物: -, 面积: 5333.5, 面积%: 4.49				
1	9.700	1223.580	85.587	997.55
2	9.700	1282.652	90.114	997.95
3	9.701	1239.666	88.936	997.68
4	9.700	1182.122	87.072	997.12
5	9.830	108.925	34.380	1000.00
6	9.833	81.802	28.956	1000.00
7	9.944	214.759	26.327	1000.00
信号: DAD2A, ¹D RT: 2.43, ²D RT: 0.74, 化合物: -, 面积: 164.62, 面积%: 0.14				
信号: DAD2A, ¹D RT: 2.43, ²D RT: 1.59, 化合物: -, 面积: 95.59, 面积%: 0.08				
信号: DAD2A, ¹D RT: 2.43, ²D RT: 10.08, 化合物: -, 面积: 3.46, 面积%: 0				

图 183　峰表 ^{2}D 显示了 2D 峰的各个 ^{2}D 峰的 UV 纯度值

UV 光谱

该窗口显示提取的集中进样和锁定进样（如有）的 UV 光谱。与所选峰相关的光谱将突出显示（粗线和粗体字）。选择**采样表**窗口的**信号选择**选项卡中的相应复选框可以显示或隐藏特定光谱。多个光谱的显示方式取决于所选的显示模式。

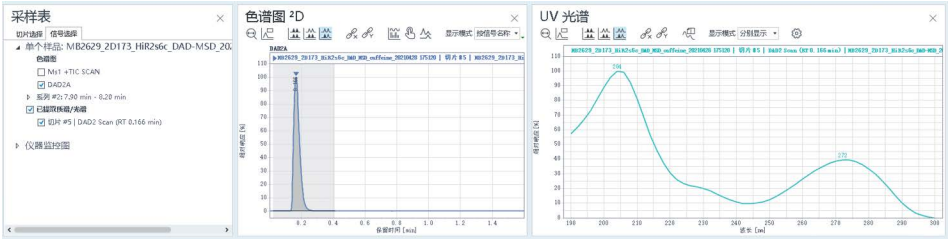


图 184　示例：选定 ^{2}D 峰的 UV 光谱

质谱图

该窗口显示的是在特定保留时间或平均时间范围内采集的质谱图。质谱图处于棒状图或轮廓图模式，具体取决于采集方法中的设置。质谱图的背景可能会被扣除。质谱类型（峰顶点或平均值）和背景扣除取决于处理方法中的设置。已选质谱与已选峰相关（例如，在**色谱图**窗口中）。



图 185　质谱图，棒状图模式

“诊断信号”窗口

出于诊断目的，^{2}D 检测器的全长色谱图显示在**诊断信号**窗口中。还会显示在整个运行时间内连续记录的第二维的仪器监控图（例如，流量、压力、溶剂比率）。将显示切片范围并用其切片编号进行注释。诊断信号中的每个切片部分都对应一个 ^{2}D 色谱图。还显示冲洗时段，并在切片注释标题中用 **F** 标记。

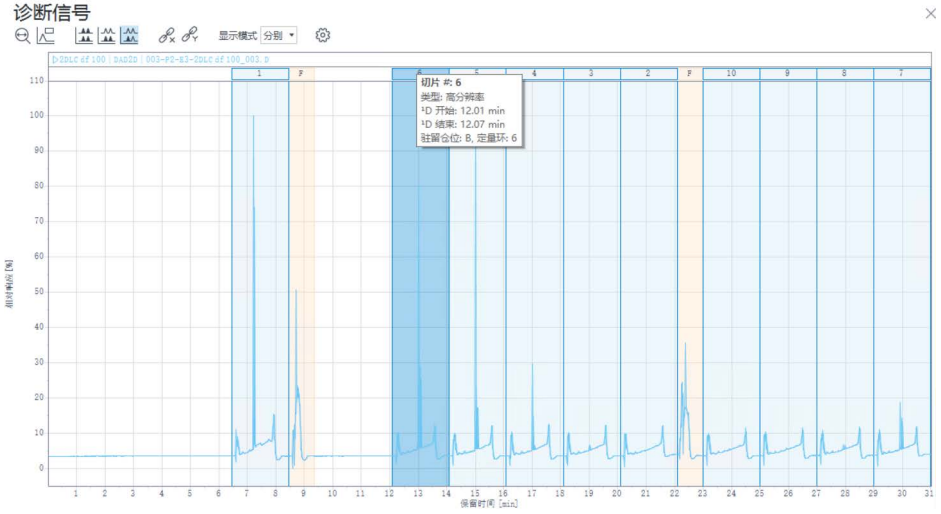


图 186　诊断信号：检测器响应

查看和比较信号

默认情况下，诊断信号在单个图形中单独绘制。在**采样表**的**信号选择**选项卡中选择信号，您还可以在其中找到**仪器监控图**部分。

为了更便于比较信号，可调整面板的显示模式和缩放。

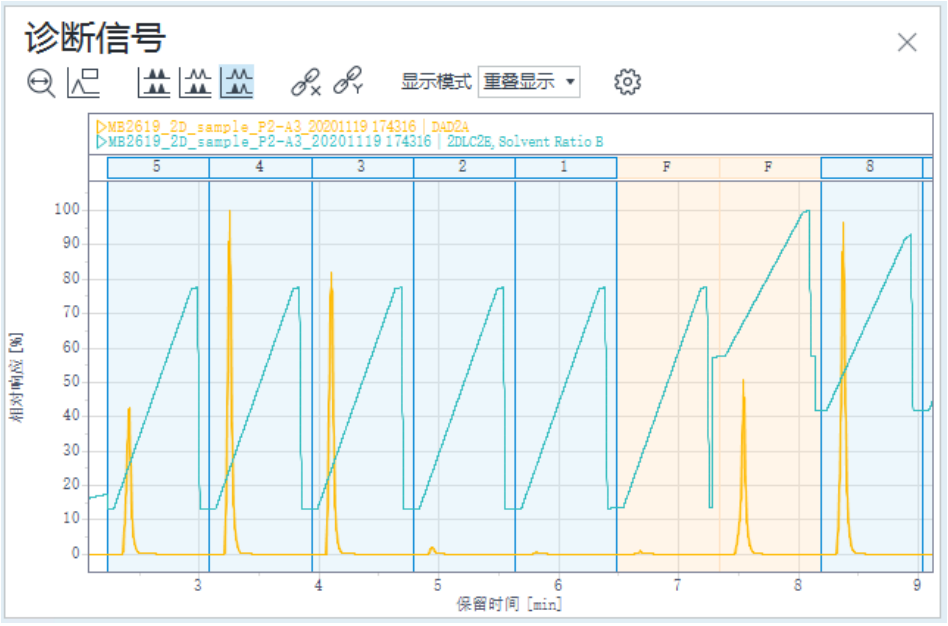


图 187　诊断信号：检测器响应和溶剂比率

信号对齐

对齐两个维度的信号

在 2D-LC 中，信号对齐包括：

- 对齐来自同一维的多个检测器的信号，确保峰在所有检测器中都有相同的保留时间
- 在第二维的切片时间偏移，确保获得正确的切片色谱图

注意

信号对齐会影响保留时间。因此，建议首先在处理方法中精确设置信号对齐，然后重新处理数据。这可确保在所有窗口都应用了偏移，且使用了正确的信息，尤其对于 ^{2} 运行时间短的全切割模式 (LCxLC)。例如，设置（定时）积分事件、预期化合物保留时间或任何其他基于时间的操作。如果在设置了保留时间后修改信号对齐设置，相应地检查并调整保留时间设置。

包含传输时间的 2D-LC 流路图

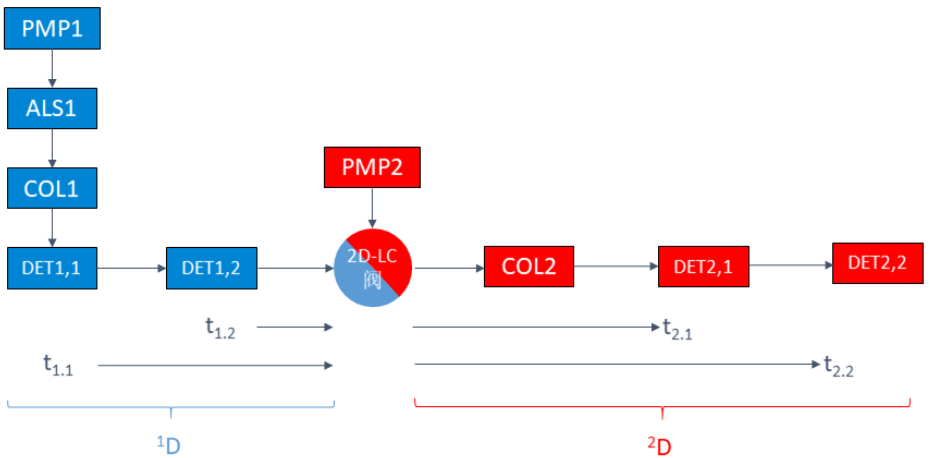


图 188　包含传输时间的 2D-LC 流路图

2D-LC 系统可能在每个维中包含多个检测器。在第一维中，也可能根本没有检测器。

举例说明，上图（第 302 页的图 188）所示的系统在每个维中有两个检测器。洗脱液由第一维色谱柱 COL1 分离，到达第一维的第一个检测器 DET1,1，一段时间后到达第二个 1D 检测器 DET1,2。洗脱液被进一步送至 2D-LC 阀，切片在该阀中存储。2D-LC 阀（以及可选连接的多重中心切割阀）作为第二维的进样器运

行。通过切换 2D-LC 阀，会将切片注入第二维流路。此时 ^{2}D 运行开始；它定义第二维保留时间的零。来自第二维泵 PMP2 的流量将该切片送至第二维色谱柱 COL2，在此处可进一步分离。流量继续流向检测器。首先到达第一个 ^{2}D 检测器 DET2,1，稍后到达第二个 ^{2}D 检测器 DET2,2。

上图（第 302 页的图 188）包括每个检测器和 2D-LC 阀之间测量的传输时间 t：

表 38　传输时间

传输时间	流路
$t_{1.1}$	在第一个 ^{1}D 检测器和 2D-LC 阀之间
$t_{1.2}$	在第二个 ^{1}D 检测器和 2D-LC 阀之间
$t_{2.1}$	在 2D-LC 阀和第一个 ^{2}D 检测器之间
$t_{2.2}$	在 2D-LC 阀和第二个 ^{2}D 检测器之间

这些时间 t 对应于传输体积 V，可通过乘以适当的流速 F 进行转换：

$$V = F \cdot t$$

您可以在 2D-LC 配置中设置这些传输体积。它们用于计算传输时间，并在检测器检测到信号后切换阀。默认情况下，第一维中的传输时间 $t_{1,2}$ 的传输体积的计算方法是：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。

检查 ^{2}D 色谱柱的**系统适用性**值时：使用传输时间作为您在色谱柱参数中输入的**死体积时间**（请参见在线帮助中的“检查色谱柱性能”或检查传输体积计算，请参见第 157 页的第一维传输体积的分析验证）。

2D-LC 阀和第一个 ^{2}D 检测器之间的偏移

对于 2D-LC 数据分析，需要至第一个 ^{2}D 检测器的传输时间，从而进行额外校正：在 2D-LC 中，可按顺序进样存储在不同样品定量环中的多个切片。因此，^{2}D 检测器可以看到一系列 ^{2}D 色谱图。



图 189　连续 ^{2}D 检测器信号（“诊断信号”）

然后，将一系列 ^{2}D 切片色谱图拆分为单独的色谱图。

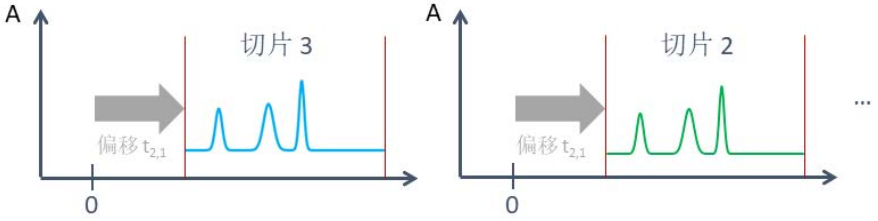


图 190　使用第一个 ^{2}D 检测器传输时间切割 ^{2}D 色谱图

垂直线对应 2D-LC 阀切换，并标记 ^{2}D 色谱图的开始和结束。需要第一个 ^{2}D 检测器的传输时间来补偿此偏移。请注意，偏移包含在 ^{2}D 色谱图的保留时间内。因此，第二维保留时间的定义与第一维的相同，即进样（通过 2D-LC 阀）和（第二维）流路中的第一个检测器之间的时间。但是，保留时间零和第一个 ^{2}D 检测器传输时间之间没有数据可用。

使用正确的传输时间对于正确切割色谱图至关重要。由于至第一个 ^{2}D 检测器的传输时间错误，色谱图切割错误，同时可能包含来自不同样品定量环的洗脱液。

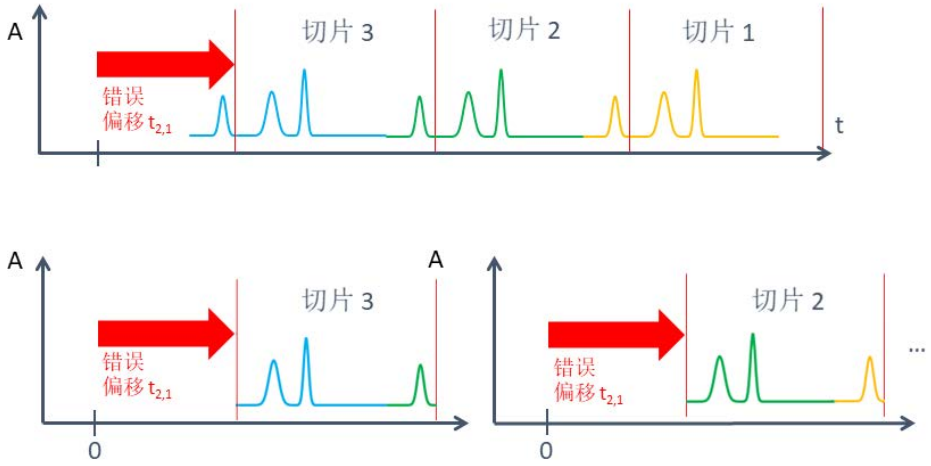


图 191　传输时间错误的情况下错误的信号切割

至第一个 ^{2}D 检测器的错误传输时间也会影响等高线图：

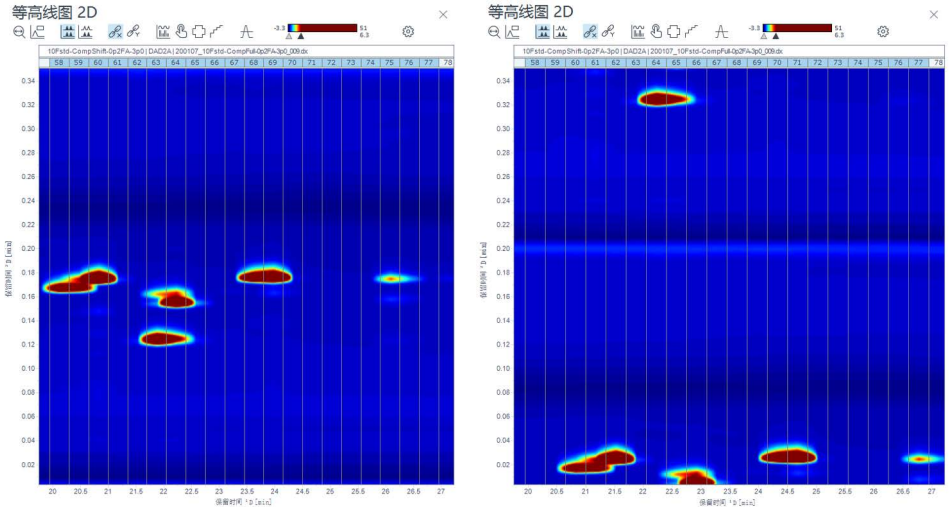


图 192　左图：使用正确的传输时间对齐的信号；右图：未对齐。

多个检测器之间的偏移

与一维测量相同，两个检测器之间的偏移会产生信号偏移。这既适用于第一维，又适用于第二维。

要在多个检测器中获得相同化合物的相同保留时间，必须通过将第二个检测器和其他检测器的色谱图向左偏移来对齐这些信号。这意味着在任何一个维度上，都要为流路中的第一个检测器定义保留时间。偏移是检测器传输时间之间的差值，例如，$d_1 = t_{1,1} - t_{1,2}$（请参阅第 302 页的包含传输时间的 2D-LC 流路图）。

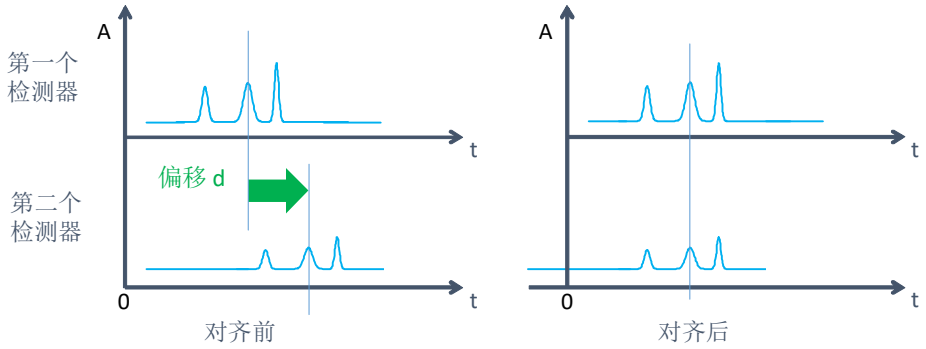


图 193　使用检测器之间的传输时间进行信号对齐

上图适用于 ^{1}D 信号和全 ^{2}D 信号。当第二个检测器的信号向左偏移时，第二个检测器的信号以相应的负时间开始。在 2D-LC 中，这仅对全 ^{2}D 可见，它显示在**诊断信号**窗口中。单个切片始终从第一个 ^{2}D 检测器延迟开始，并在切片长度时间过后结束。

关于仪器配置中的传输体积

在仪器配置中，提供传输体积：

检测器

模块标识	维度	传输体积 [µL]
G1314C:DE93000265	第一	20.00
G4212A:DEBAF03792	第一	14.00
G4212A:DE12345678	第二	201.00
G6135C:DE1234567	第二	214.00

添加 移除

图 194　2D-LC 系统中检测器传输时间的配置

默认情况下，此检测器表仅列出基于 CAN 的检测器。如果已连接了 MSD 或 ELSD 检测器，则必须将这些检测器及其传输体积手动添加到检测器表中。

注意

确保使用准确的模块标识符（检测器名称和序列号，用冒号分隔）。否则，将无法识别检测器模块，并且在处理方法中，**数据延迟 (min)** 将显示为 **N/A**。在这种情况下，您必须在处理方法中手动对齐信号（请参阅在线帮助中的“手动对齐信号”）。

除其他外，相同的检测器也列在**常规** > **信号** > **对齐**下的处理方法中。

传输体积和传输时间

在处理方法中，**数据延迟 (min)** 对应于仪器配置中的检测器传输体积除以相应的泵流量。因此，延迟时间可以看作是传输时间。



图 195　处理方法和仪器配置中的检测器

在处理方法中，列出了与此方法关联的数据中使用的所有检测器。如果未关联该方法，并且已从具有不同传输体积的不同仪器配置调用了不同的数据，则处理方法中的表在**延迟时间 (min)** 下显示**各种**。

与常规 (1D) 数据分析的差异

在常规 (1D) 数据分析中，仅需要在信号对齐中指定两个检测器之间的延迟（保留时间差）。对于第一个 ^{1}D 检测器，该值始终为零。**在 2D-LC 中**，将测量从检测器到 2D-LC 阀的第一维中的传输时间。

使用信号数据自动对齐信号

先决条件

- 如果项目执行方法批准，则方法状态必须是**通用**。有关详细信息，请参见在线帮助中的“方法批准”。
- 使用 OpenLab CDS 2.6 版或更高版本采集的数据。
- 方法已关联到通过相关仪器配置采集的数据。

注意

如果编辑未关联的方法，并且已从具有不同传输体积的不同仪器配置调用了不同的数据，则处理方法中的表在**延迟时间 (min)** 下显示**各种**。然后，不建议进行手动信号对齐，因为各种延迟将被相同的手动延迟所取代。

1 导航到处理方法的**常规** > **信号**节点。

2 选择**对齐**选项卡。

3 选择**使用信号数据**。

系统计算的数据延迟将在表中以只读信息的形式显示，适用于 ^{1}D 检测器和 ^{2}D 检测器。在重新处理时，**数据延迟 (min)** 下显示的值将应用于所有关联的进样。

手动对齐信号

此功能可以手动为第一维和第二维检测器提供延迟时间。

先决条件

- 您知道每个维度中所有检测器的传输时间。

注意

与纯 1D 数据分析的信号对齐不同，您还需要知道所有检测器的**传输时间**。第一维的传输时间是从 ^{1}D 检测器到 2D-LC 阀测量的。请参阅第 302 页的图 188。

1 导航到处理方法的**常规** > **信号**节点。

2 选择**对齐**选项卡。

3 选择**使用手动延迟**。

4 选中相关检测器的**使用手动延迟**复选框。

如果方法未关联到任何进样，则该方法将列出所有已调用进样的所有检测器。

5 对于要对齐信号的每个维度：

- 在**手动延迟 (min)** 下输入已知的**传输时间**。
- 输入所有检测器检测到的峰的保留时间。

注意

在**第一**维中，流路中的第一个 ^{1}D 检测器的传输时间比第二个 ^{1}D 检测器长。

在**第二**维中，第一个 ^{2}D 检测器的传输时间比第二个 ^{2}D 检测器短。

请参阅第 302 页的包含传输时间的 2D-LC 流路图。

在有各种数据延迟值的情况下，不建议进行手动信号对齐，因为它会将相同的延迟应用于不同的仪器配置。

注意

如果您将此方法重新用于具有不同检测器配置的进样，应特别注意！

报告

导入默认报告模板

创建项目时，报告模板的默认文件夹为 < 项目名称 > > 报告模板。必须将默认模板导入此目录才能访问它们。

1 在**数据选择**视图的**导入/导出**选项卡中，选择**导入默认模板**。



图 196　Data Analysis 中的“报告模板”视图

OpenLab Data Analysis 提供了默认报告模板。如果需要，可以复制和修改这些模板。这是默认报告模板的列表。如果从 OpenLab 2.0 升级，您将在报告目录中看到一个新文件夹，在此调用这些新的模板，从而不会覆盖您对旧报告模板所做的任何更改。现在，它们已被添加到系统中，可以开始使用。

当前，以下 2D-LC 默认模板可用：

- 2D-LC 序列总结报告
- 2D-LC 单次进样化合物报告
- 2D-LC 序列校正报告

“报告”视图中有两个窗口：

- 报告编辑器
- 报告预览

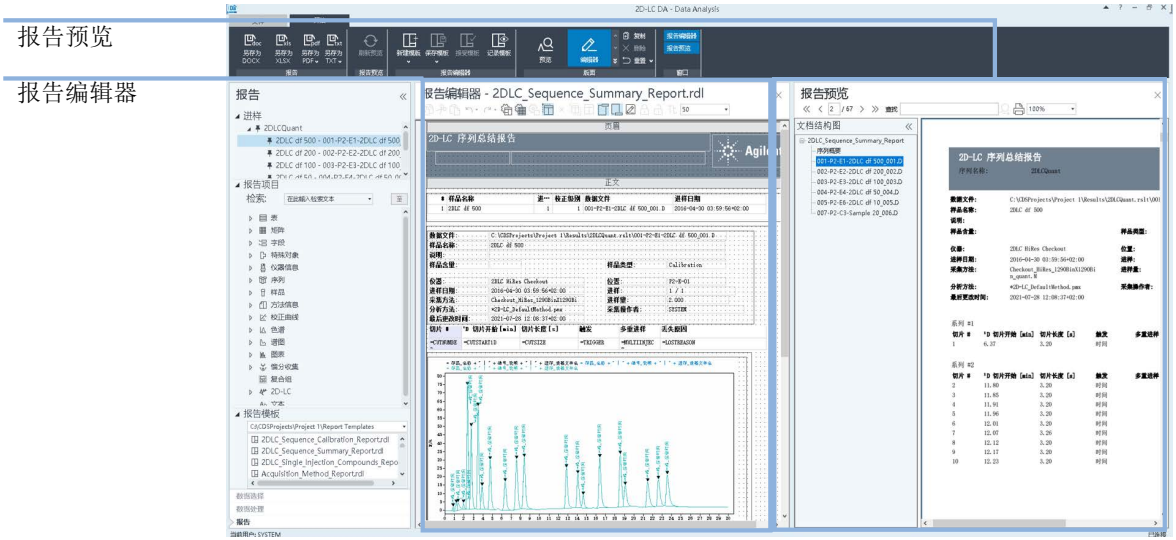


图 197　报告视图

2 要预览报告：

a 确保您的数据已调用并位于进样树中。如果只查看一个进样，确保已选中该进样。

b 选择要使用的报告模板。

c 选择**刷新预览**。

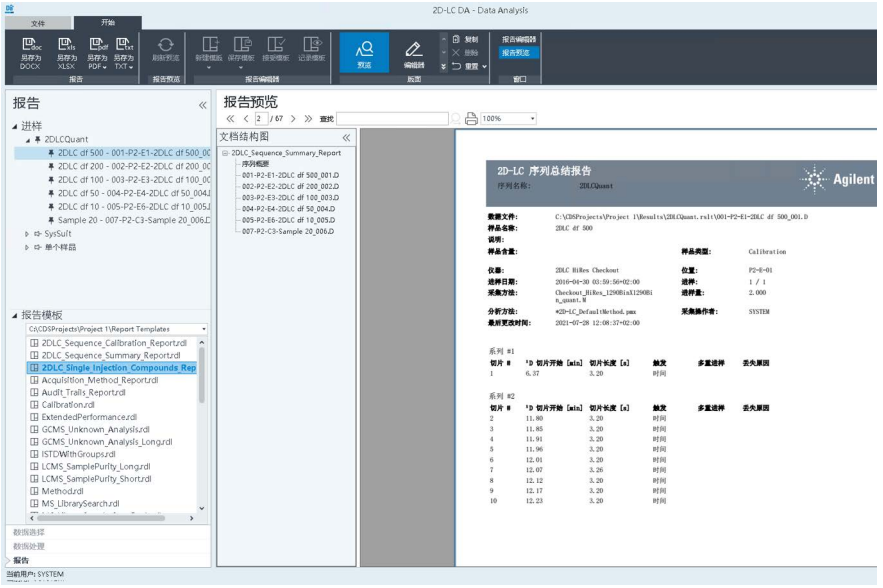




图 198 报告预览示例

或

如果没有默认模板以您想要的方式显示您想要的信息，可以随时修改它们或创建自己的模板。

d 从**功能区窗格**中选择**编辑器**按钮，查看所有报告项目并使用**报告模板**。

功能区窗格位于**报告**视图的顶部。此功能区提供对新建报告模板等功能的基于工具的访问。在导航窗格中，您可以看到当前在 OpenLab Data Analysis 中可用的报告模板列表（如果已导航到适当的路径）。

e 从**进样树**中选择要使用的进样。

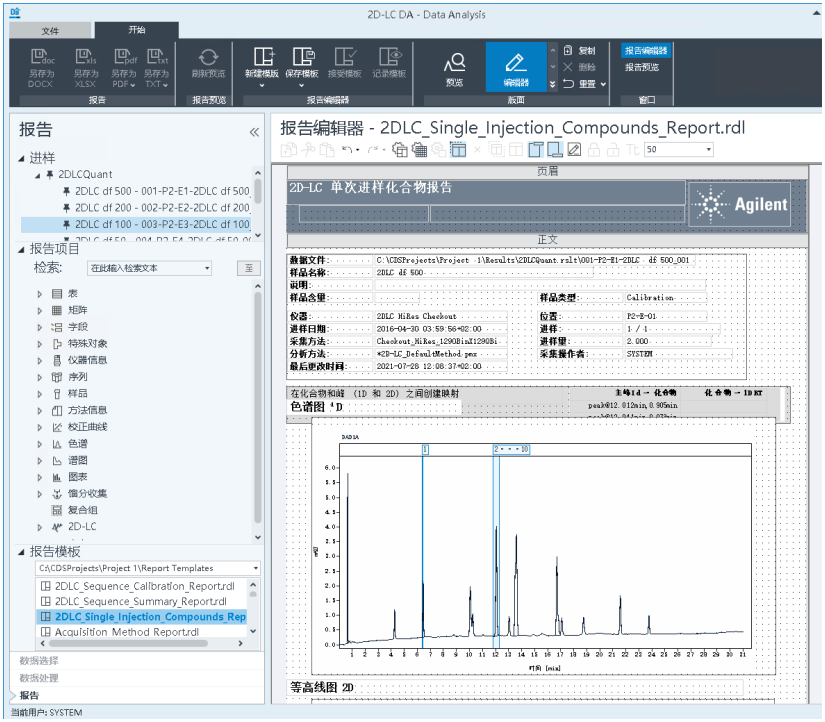
报告项目部分显示可添加到报告中的所有报告项目。

f 从**报告模板**部分中，选择要修改的**报告模板**。

在**功能区窗格**下方和**编辑器工作区**顶部，您将看到可用于报告的所有**报告编辑器工具**。

g 单击**刷新**。

您将在“编辑器工作区”中看到报告显示。



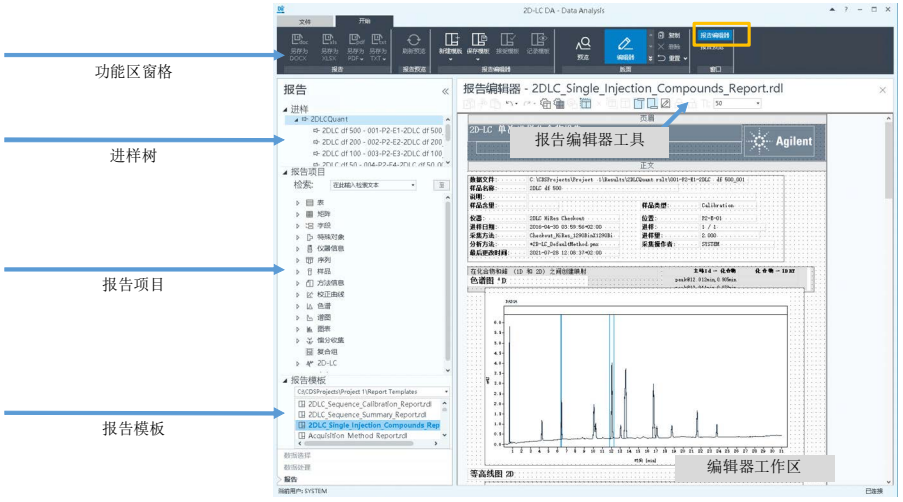


图 199　报告工作区示例

打开并编辑报告模板

通常，可以对现有模板进行微小的修改，从而创建报告模板。这不仅速度更快，还可让您通过查看已经准备好的示例进行学习。

1 要调用模板，双击模板名称。

2 单击**编辑器工作区**中的项目。

您将看到所选项目周围出现一个灰色框，还有四角和侧线中间显示的熟悉控制手柄。

3 要调整对象的大小，选择控制手柄并拖动。

或

选择边界框上的任何其他位置，可以使用移动光标单击项目并将其拖动到新位置。

或

要查看和修改选项的所有方面，右键单击边界框，然后选择**属性**。

预览报告

添加内容并对报告进行更改后，最好经常预览报告，以查看添加的内容是否符合预期。

1 要打开预览，可以选择“报告预览报告”按钮。

报告将使用默认打印机的特性呈现到预览界面中。

保存模板

一旦对报告感到满意，就需要保存所做的更改。

1 如果要覆盖同名的现有模板，选择**保存模板**。

或

如果要为模板指定新名称，选择**模板另存为**。

模板将保存在项目的默认模板目录中。

2D-LC 的简单数据分析工作流程

2D-LC 数据分析的典型工作流程包括以下步骤：

- 第 318 页的应用处理方法
- 第 320 页的优化积分结果
- 第 323 页的分配 2D 峰
- 第 326 页的识别化合物
- 第 328 页的校正化合物
- 第 331 页的重新处理并保存处理方法更改
- 第 331 页的检查结果并纠正任何问题
- 第 332 页的保存数据分析结果
- 第 333 页的创建报告

以下程序显示了高分辨率样品的简单两种化合物校正/定量工作流程。

应用处理方法

1 双击图标。



2 要调用结果集的数据，选择正确的结果集，然后双击**调用数据**。

或

要调用单个样品数据文件，请选择文件和进样（复选框）并双击**调用数据**。



图 200　数据处理视图

首次将进样调用到数据分析中时，必须选择处理方法。

3 选择 2D-LC 方法，单击**关联且处理**。

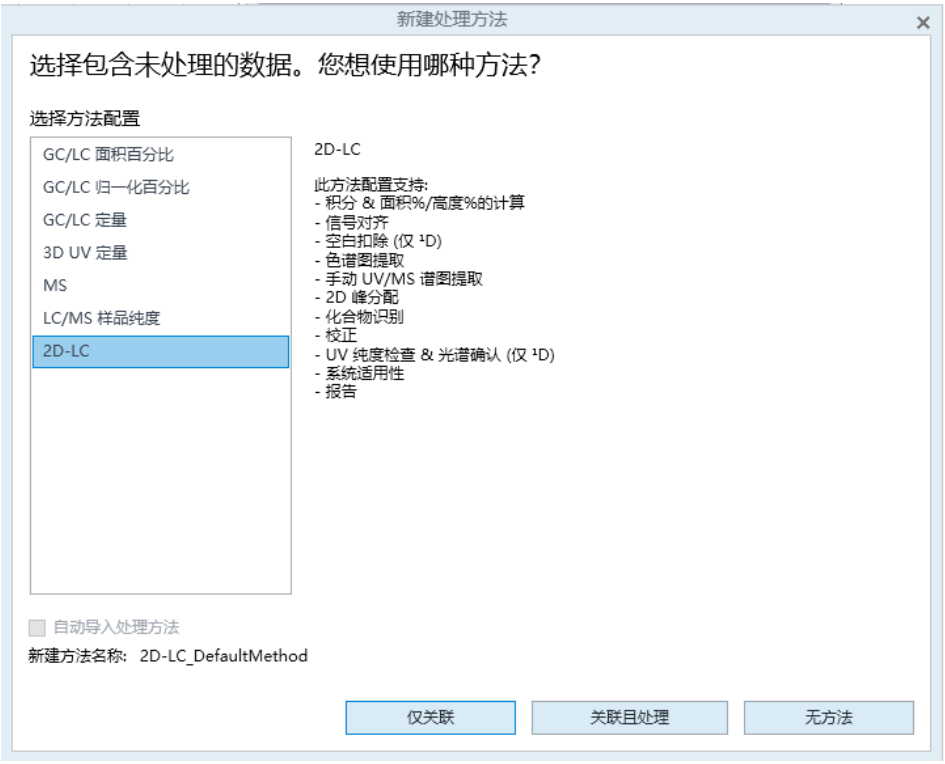


图 201 “新建处理方法”视图

此方法类型具有 2D-LC 分析所需的所有功能。

优化积分结果

1 在功能区栏中选择 2D-LC 版面。

在本例中，这是**高分辨率采样多重中心切割 2D-LC** 版面。

2 定义**进样列表**。

a 定义**样品名称**（例如 **2DLC df 100**），**样品类型**（**校正标样**），以及校正**级别**（例如，调用校正样品的校正级别为 **3**），参见下图。

b 定义**样品名称**（例如 **Sample 20**），调用样品的**样品类型**（**样品**）。

进样列表

区间循环校正模式 无

顺序编号	进样编	样品类型	样品名称	数据文件	级别
1	1	校正标样	2DLC df 500	001-P2-E1-2DLC df 50...	1
2	1	校正标样	2DLC df 200	002-P2-E2-2DLC df 20...	2
3	1	校正标样	2DLC df 100	003-P2-E3-2DLC df 10...	3
4	1	校正标样	2DLC df 50	004-P2-E4-2DLC df 50...	4
5	1	校正标样	2DLC df 10	005-P2-E6-2DLC df 10...	5
6	1	样品	Sample 20	007-P2-C3-Sample 20_...	

图 202　进样列表示例

3 编辑处理方法。

在**积分事件**下，可以编辑或查看非化合物特定的所有参数，例如，斜率灵敏度、最小峰高或最小峰面积。对于“标准”节点中的参数，您可设置给定信号的值，也可设定所有信号的全局参数。可右键单击参数表旁的区域添加定时事件。

优化 2D 信号的积分结果

在进行第二维的校正之前，必须检查序列积分结果的质量，尤其是校正样品。例如，第二维中的化合物不应拆分为两个主峰。检查积分的最佳选择始终是，使用等高线图。

1 单击等高线图中的图标（显示 2D 峰区域）查看峰的积分位置。

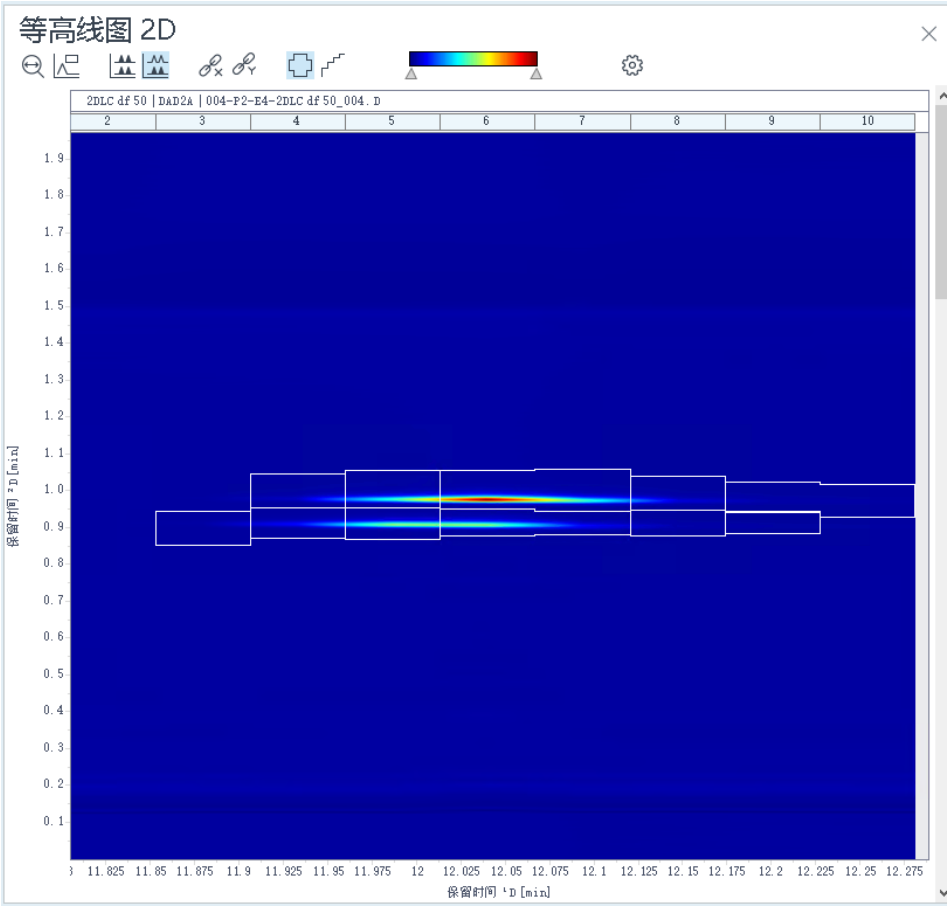


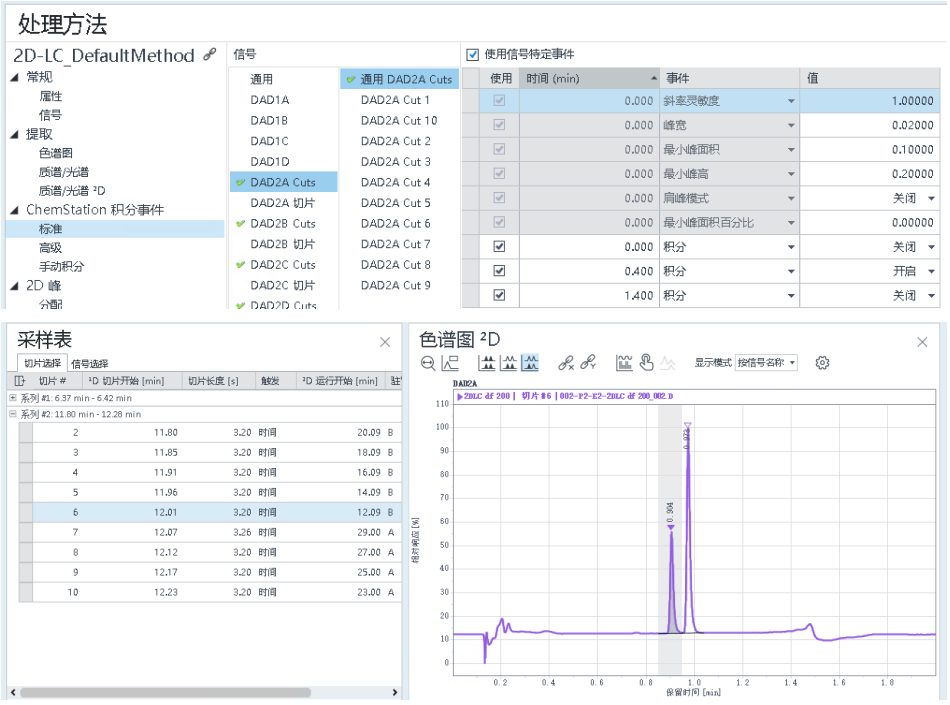
图 203　示例：具有未完全检测到的峰的等高线图 2D

在这种情况下，减小最小峰面积和最小峰高可改善 ^{2}D 中较低校正样品的积分结果。

添加了停止和开始积分器的积分设置点（开/关），以消除开始时不相关的峰。这将专注于目标峰，忽略其他峰信息。

2 要检查当前积分设置的质量，请重新处理数据。

重新处理后，应对所有目标峰进行积分和识别。



示例：具有完全积分的 ²D 峰的 ²D 色谱图

分配 2D 峰

在 2D 峰下，可以编辑或查看所有 2D 峰分配参数。

1 分配峰。

峰分配基于绝对保留时间窗口和相对保留时间窗口的百分比。峰分配的目的是将基本 ^{2}D 峰和所有相邻的 ^{2}D 峰打包成一个 2D 峰。

可以设置以下 2D 峰分配参数：

- **^{2}D 保留时间窗口**

  此参数允许指定用于关联相邻切片色谱图的 ^{2}D 峰（来自第二维的峰）以形成一个 2D 峰（二维峰）的保留时间窗口。

- **梯度迁移会导致预期 ^{2}D 保留时间发生偏移**

  如果 2D 数据是通过使用定义了“迁移梯度”的采集方法采集的，则保留时间预计会从切片到切片偏移。在此处，您可以设置要在相邻切片色谱图的 ^{2}D 峰中考虑的系统绝对和相对时间偏移。

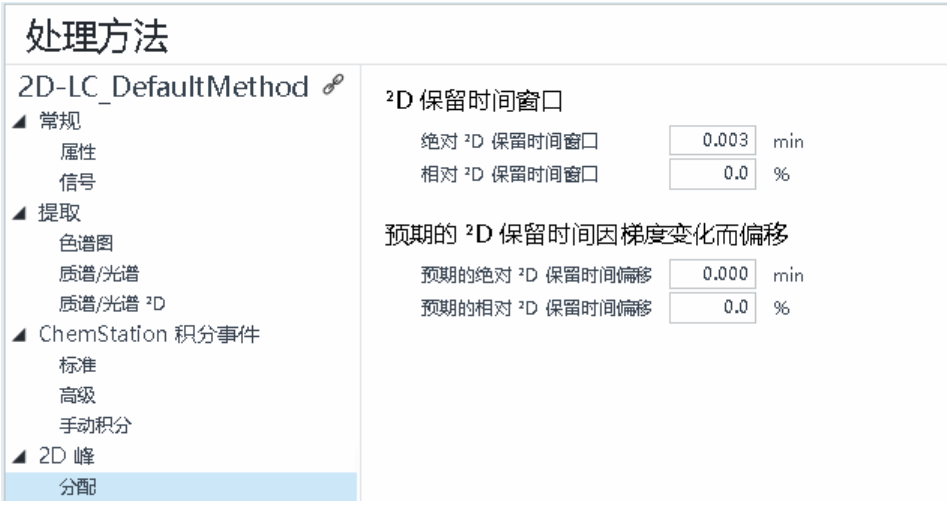


图 204　峰分配参数

注意

峰分配仅适用于整个流量传输到第二维的切片系列。

2 通常从最高的未分配 ^{2}D 峰开始，将绝对保留时间和相对保留时间窗口内相邻的左右切片的所有 ^{2}D 峰分配给同一 ^{2}D 峰。保留时间窗口在 **2D 峰** > **分配**下的处理方法中定义。分配的结果是具有计算出的 ^{1}D 和 ^{2}D 保留时间的二维峰，这是峰/化合物识别所必需的。

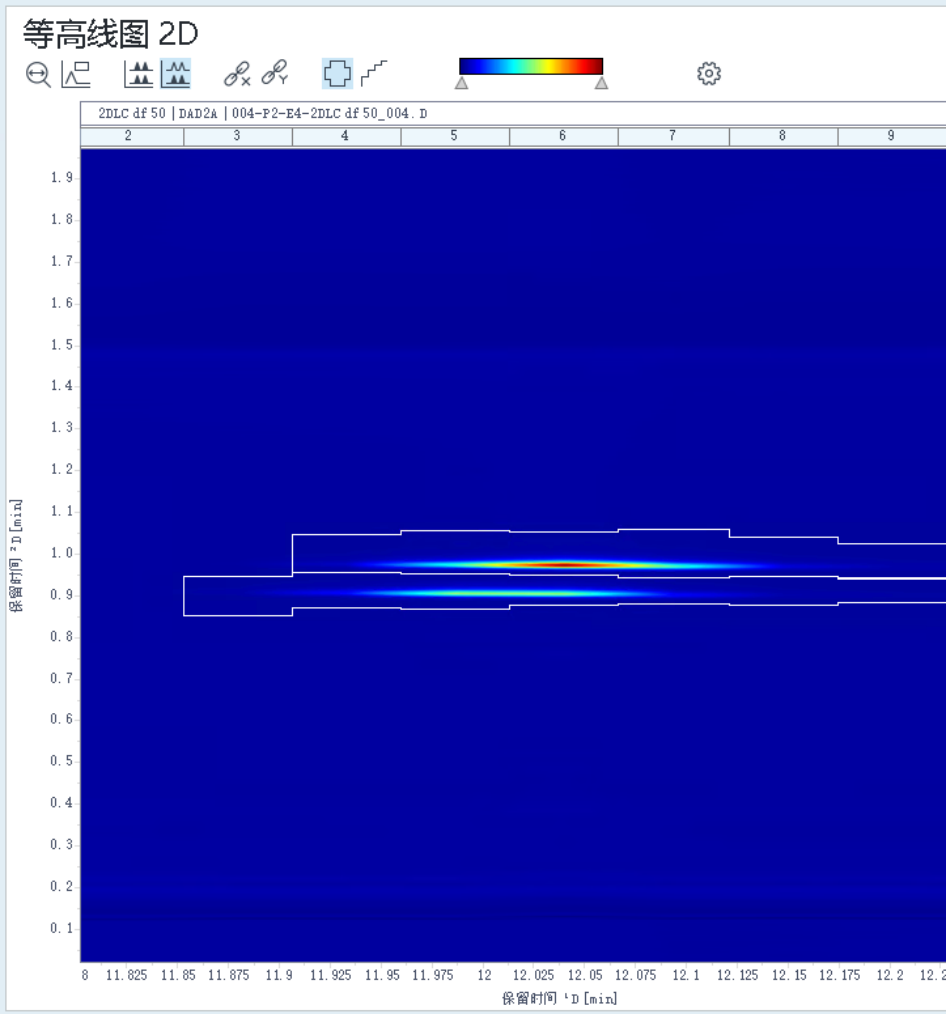


图 205　示例：具有完全检测到的 2D 峰的等高线图 2D

将绝对 ^{2}D 保留时间窗口更改为更高的值将获得预期成功。请参见下面的等高线图。软件将其识别为一个 2D 峰的区域被边框包围。

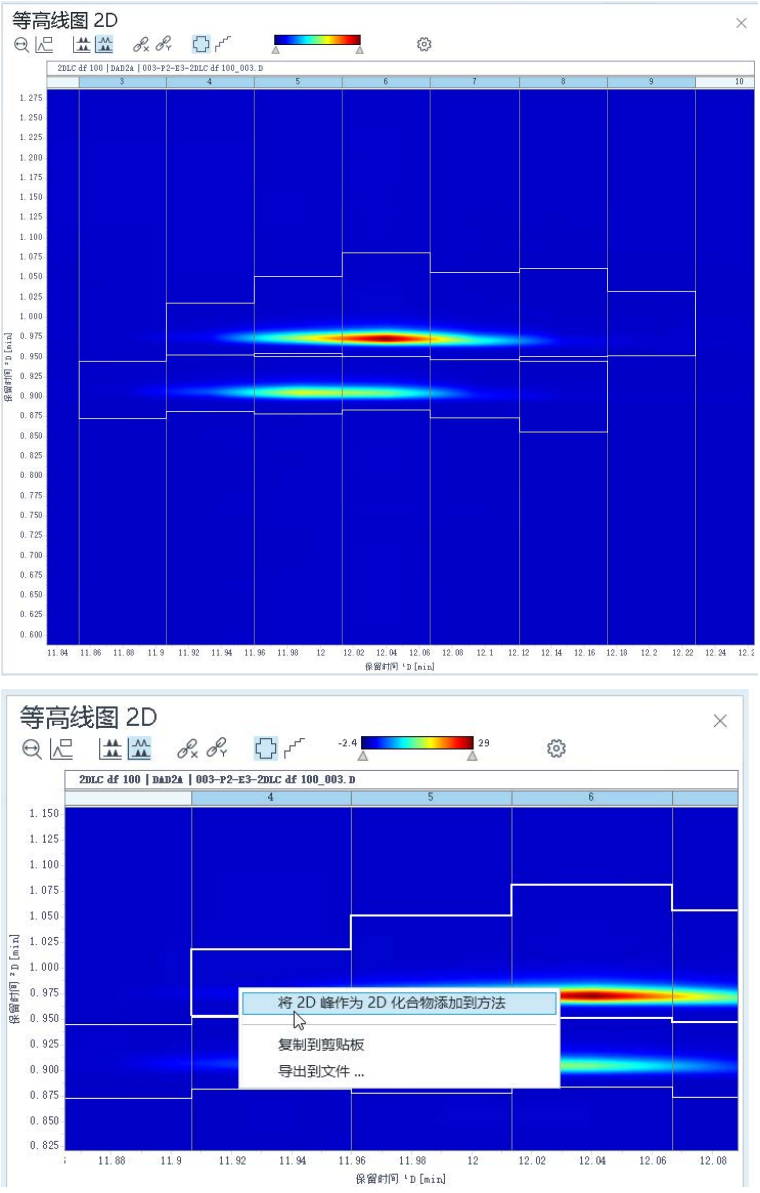


图 206　在等高线图 2D 中将 2D 峰作为 2D 化合物添加到方法

识别化合物

在化合物下，可编辑或查看化合物表及其中的所有化合物特定的参数，例如化合物名称、预期 ^{1}D 和 ^{2}D 保留时间或 ^{1}D 和 ^{2}D 保留时间窗口，以及校正信息。

1 将 2D 峰作为 2D 化合物添加至处理方法。

2 在等高线图中，选择要添加的 2D 峰区域。

3 右键单击选定的 2D 峰区域，然后选择**将 2D 峰作为 2D 化合物添加到方法**。

2D 化合物将添加到所选方法的化合物表中。

4 键入每个化合物的正确名称，只需键入自动指定的通用名称即可。

在化合物表中，化合物参数的设置如下：

表 39 化合物参数

名称：	化合物名称
信号：	您选择峰的 2D 信号
预期^{1}D RT：	所选峰在第一维中的预期保留时间
绝对 RT 窗口 ^{1}D (min)：	峰在第一维中的预期保留时间周围以分钟为单位的窗口（设为 0）
相对 RT 窗口 ^{1}D (%)：	峰在第一维中的预期保留时间周围以百分比 (%) 为单位的窗口（设为 1）
预期^{2}D RT：	所选峰在第二维中的预期保留时间
绝对 RT 窗口 ^{2}D (min)：	峰在第二维中的预期保留时间周围以分钟为单位的窗口（设为 0）
相对 RT 窗口 ^{2}D (%)：	峰在第二维中的预期保留时间周围以百分比 (%) 为单位的窗口（设为 1）

2D 化合物

在本例中，在化合物表中添加了两个 2D 化合物。



图 207　化合物表示例

注意

图标  表示它是外标，2D 化合物。

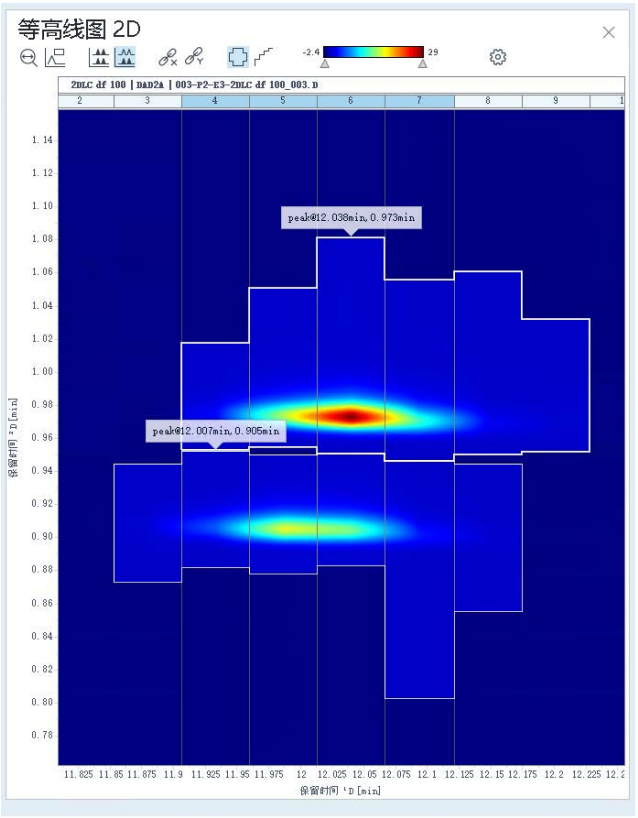


图 208　等高线图 2D 中的 2D 化合物

校正化合物

例如，可以使用化合物特定校正（ESTD、ISTD）进行定量。

对二维峰进行二维化合物校正和定量的方式与对常规一维峰进行的常规一维化合物校正和定量的方式相同。

在本例中，使用了外标，级别数为 5。

1 在**化合物表**下，编辑或查看包含所有化合物特定参数和校正信息的化合物表。

a 要标记校正曲线的 X 轴，采用**含量单位**。

注意

含量单位也显示在**进样结果表**中。

b 例如，要在**进样结果**窗口中显示所需浓度和浓度单位，采用**浓度单位**。

此操作将乘积因子和稀释因子应用于要计算浓度的含量。

c 将每种化合物的含量单位和浓度单位添加到**化合物表**中。

化合物表 | 常规

#	类型	名称	信号	含量单位	浓度单
1		peak@12.007min,0.905min	DAD2A	ng/ul	ng/ul
2		peak@12.038min,0.973min	DAD2A	ng/ul	ng/ul

图 209　化合物表中的信号、含量和浓度单位

2 填充校正级别。

注意 此级别的校正标样中的化合物含量。仅当选择了“曲线”作为定量模式时可编辑此列。

a 添加每个化合物的级别含量。

注意 校正级别的数量定义了使用多少个点（含量、响应）计算校正曲线。可通过处理相应校正样品来定义各个级别。

对于每个化合物，校正曲线均可显示用于计算平均值的平均校正点和单个点。

级别 1	级别 2	级别 3	级别 4	级别 5
2.000000000	5.000000000	10.000000000	20.000000000	100.0000
2.000000000	5.000000000	10.000000000	20.000000000	100|0000

图 210 化合物表中的浓度级别

化合物表中的一些附加化合物参数如下所示：

曲线模型：	为校正曲线定义计算模型。该列只在您选择了“模式”列中的“曲线”时才可使用。
响应：	选择校正和定量化合物所用的“响应值”为“峰面积”、“峰面积%”、“峰高”或“峰高%”。
乘积因子：	特定化合物或定制时间组的乘积因子。结合“进样列表”窗口中的乘积因子和稀释因子，它可用于修正浓度。
参比校正：	如要使用其他化合物的校正曲线，请使用响应校正因子。
模式：	定义化合物是通过使用固定的响应因子（手动因子）对应于校正曲线（曲线）进行定量，还是对应于其他化合物（参比）的校正曲线进行定量。
曲线参比：	选择要使用其校正曲线进行定量的化合物。
手动因子：	手动因子值。仅当选择了“手动因子”作为定量模式时可编辑此列。 **适用于以下含量计算：** • 在 ESTD 校正中：含量 = 手动因子 * 响应值 • 在 ISTD 校正中：含量 = 手动因子 * ISTD 含量 * 响应值 / ISTD 响应值
加权方法：	您可以选择校正点加权的方法。

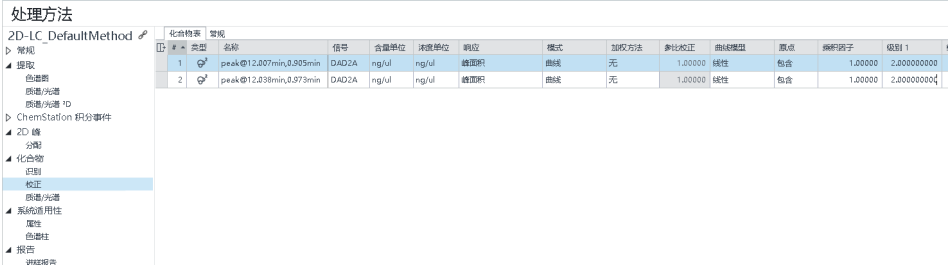


图 211　化合物表

重新处理并保存处理方法更改

1 使用指定的方法处理数据。

积分现已完成，化合物已添加到处理方法中。

2 全部重新处理，查看是否存在方法不一致。

更新后的方法可以保存在结果集中，可在必要时将其用于更新主方法。

检查结果并纠正任何问题

1 通过选择进样结果，可以显示面积、高度、定量含量和方法中定义的各种系统适用性结果。再次检查延迟和死体积时间也是有利的。



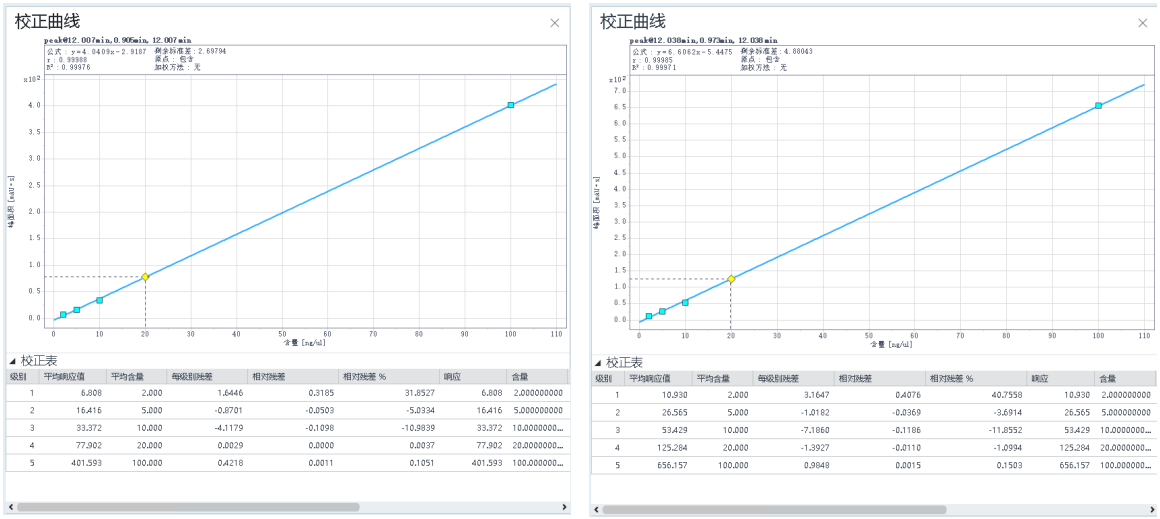


图 212　进样结果及其校正曲线

保存数据分析结果

重新处理后，新结果不会自动与方法一起保存。文件旁边的勾选标记表示结果已修改，但未保存到数据文件中。

1 检查结果。

注意

这应由经验丰富的分析师来完成。

2 确定一切看起来正常。

3 保存结果。

勾选标记已清除。

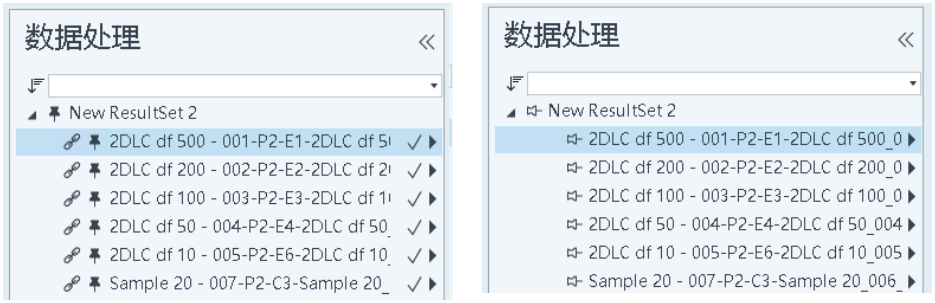


图 213 带和不带固定标记的数据处理

创建报告

在处理方法的进样报告下，选择应用程序生成单个进样报告所用的报告模板。此外，还必须指定目标和文件格式。如果需要，还可以选择生成第二份报告。必须为第二个报告提供相同的参数集。

在报告部分中定义参数

1 从项目设置时指定的**报告模板**文件夹中的所有可用报告模板中选择所需的报告模板。

2 要定义**报告输出类型**，选择以下选项之一：

- 无

  不生成报告（默认设置）

- 打印机

  报告将发送到系统的默认打印机

- 文件

  在这里，报告保存在结果集中每个进样的数据文件夹中。您可以选择以下文件格式之一作为输出：

  - PDF
  - XLSX
  - DOCX
  - TXT
  - CSV



图 214　处理方法中的报告选项



2D-LC 序列总结报告

序列名称: 2DLCQuant

Agilent

数据文件:	C:\CDSProjects\Project 1\Results\2DLCQuant.rslt\005-P2-E6-2DLC df 10_005.D		
样品名称:	2DLC df 10		
说明:			
样品含量:		**样品类型:**	Calibration
仪器:	2DLC HiRes Checkout	**位置:**	P2-E-06
进样日期:	2016-04-30 06:20:18+02:00	**进样:**	1 / 1
采集方法:	Checkout_HiRes_1290BinX1290Bin_quant.M	**进样量:**	2.000
分析方法:	*2D-LC_DefaultMethod.pmx	**采集操作者:**	SYSTEM
最后更改时间:	2021-09-06 17:30:42+02:00		

系列 #1

切片 #	1D 切片开始 [min]	切片长度 [s]	触发	多重进样	丢失原因
1	6.37	3.20	时间		

系列 #2

切片 #	1D 切片开始 [min]	切片长度 [s]	触发	多重进样	丢失原因
2	11.80	3.20	时间		
3	11.85	3.20	时间		
4	11.91	3.20	时间		
5	11.96	3.20	时间		
6	12.01	3.20	时间		
7	12.07	3.25	时间		
8	12.12	3.20	时间		
9	12.17	3.20	时间		
10	12.23	3.20	时间		

图 215 报告（示例）

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 336 页的图 216）。可以使用 Agilent 2D-LC Software for OpenLab CDS 分析 OpenLab 数据。

但为进行高级数据分析、统计分析和更好地以 3D 形式显示大多数全切割 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 337 页的图 217）。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 337 页的图 218）。由于第三维是峰的强度，因此可以绘制数据的三维图（第 338 页的图 219）。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。

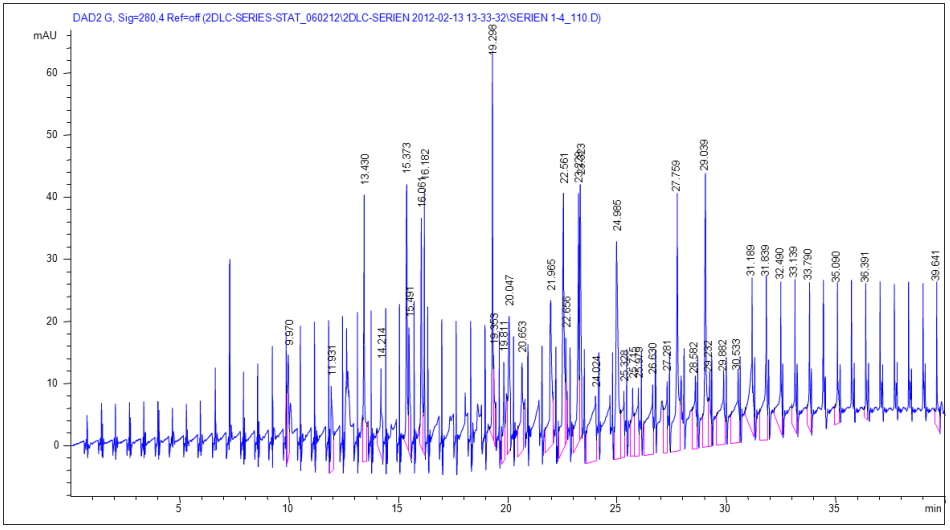


图 216　使用一维数据分析软件显示二维 LC 数据

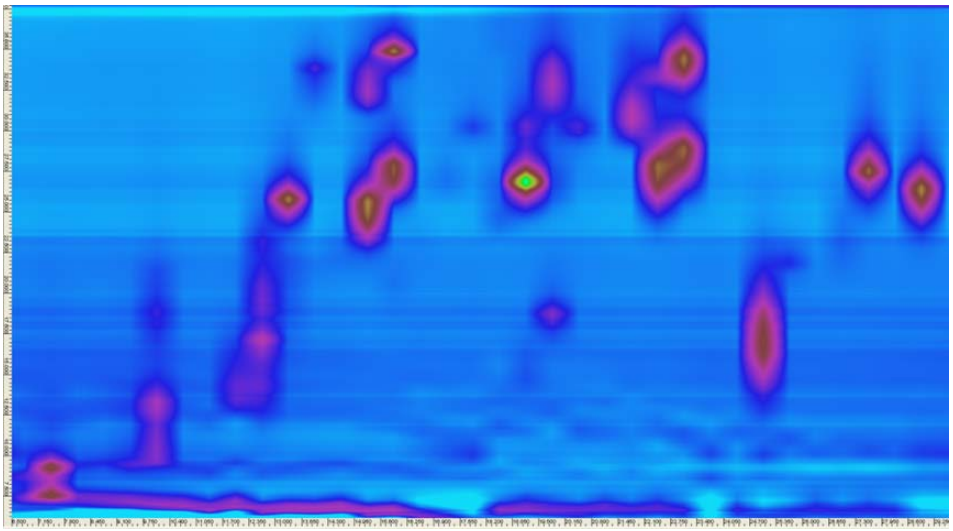


图 217　经优化的 26 种多酚化合物分离的 2D-LC 图

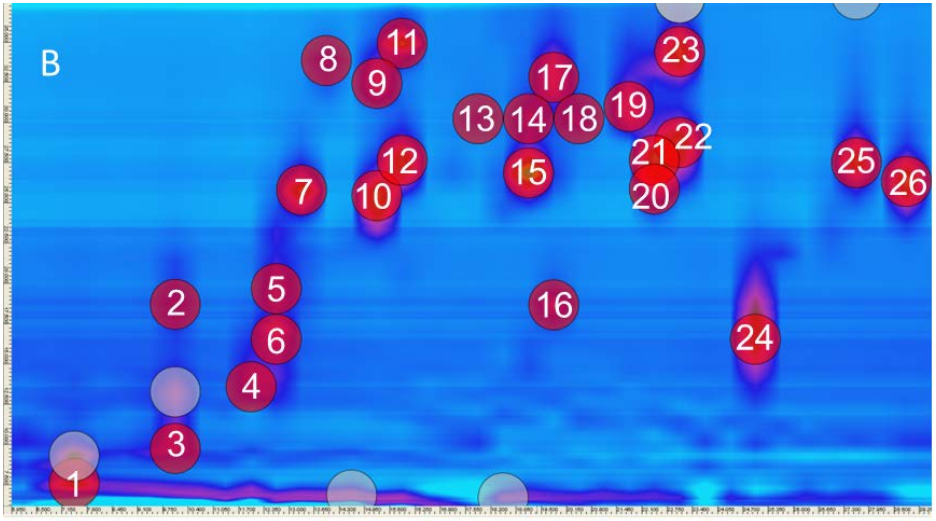


图 218　基线校正后并具有软件检测峰注释的 2DLC 图

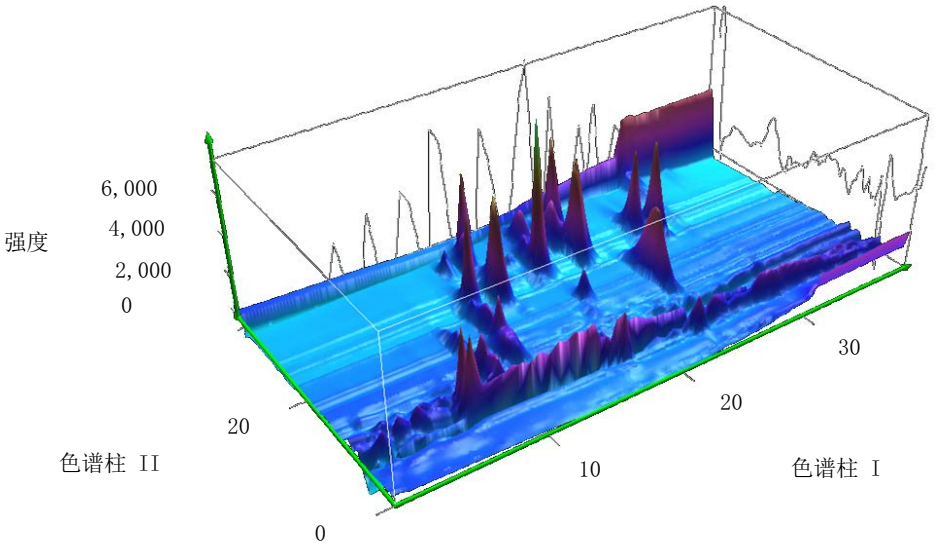


图 219　26 种化合物标准混合物分离的三维显示。第一维的分离需要 40 分钟，第二维的分离需要 39 秒。背面显示了生成的第一维色谱图，并给出了哪些峰正在共洗脱并在第二维分离。

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 LCImage

LCImage 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 从第二维检测器导入 UV 信号。

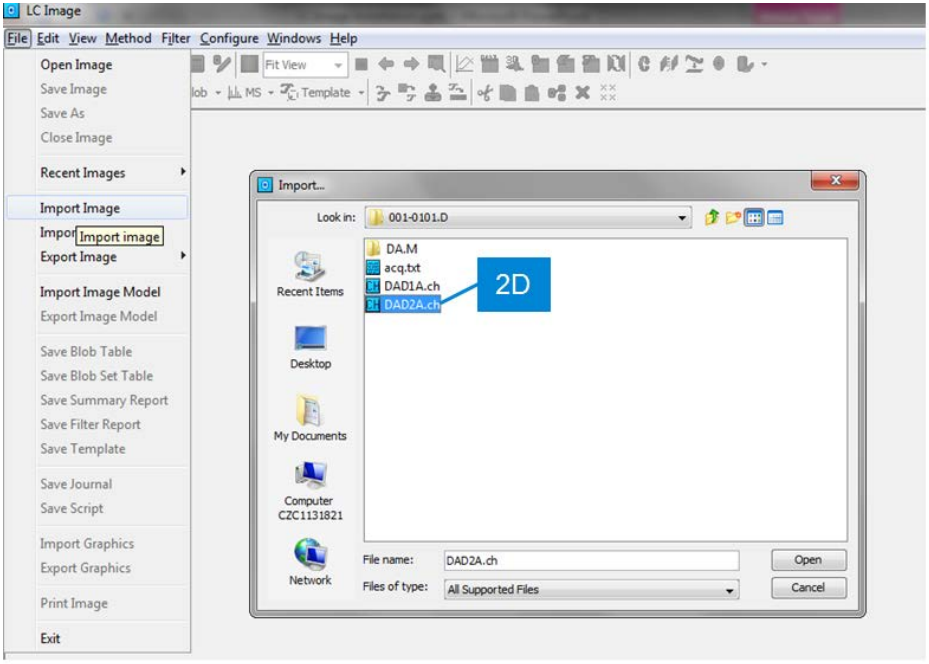


图 220 导入 UV 信号

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

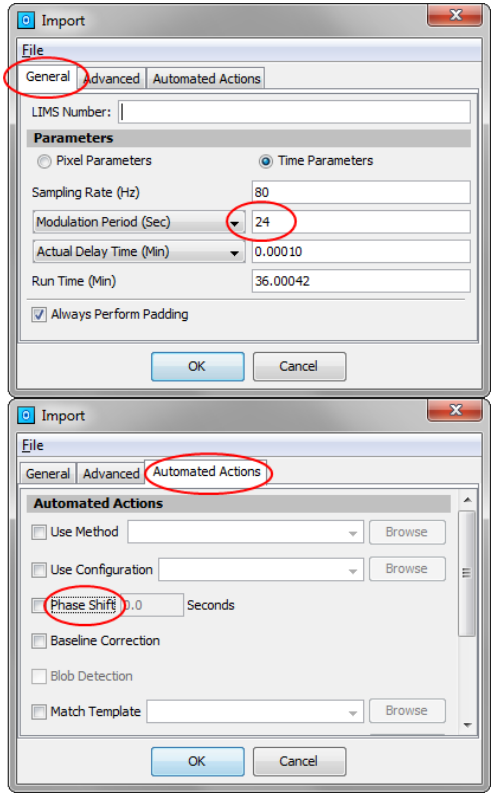
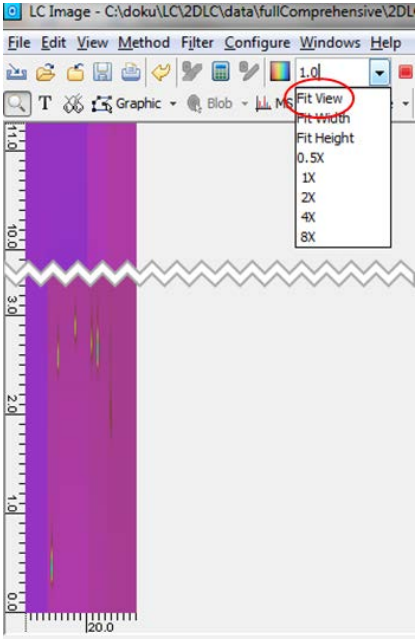


图 221　导入参数

4 适配视图



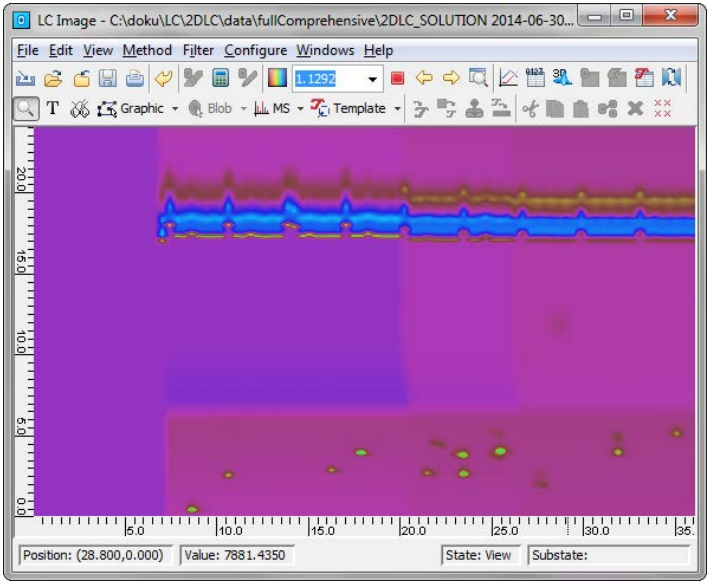


图 222　适配视图

5 校正基线

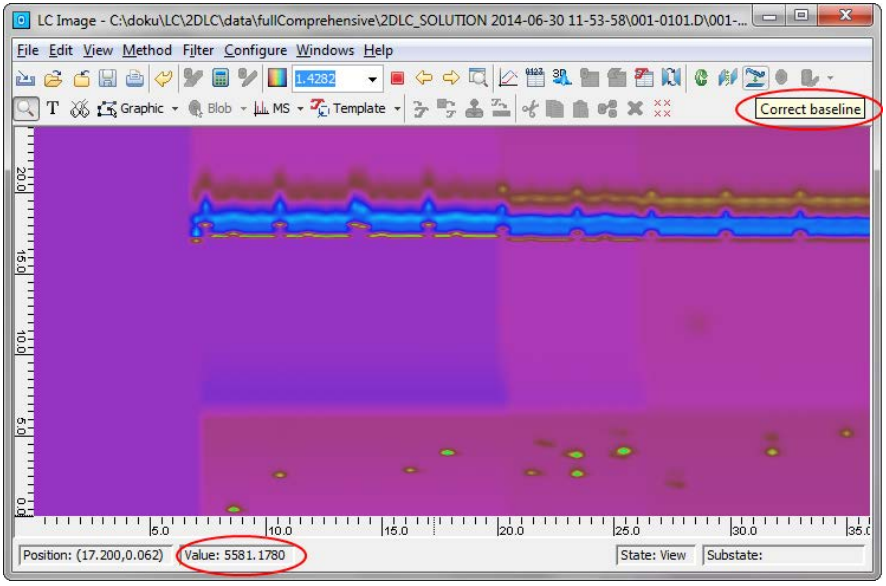


图 223 基线校正

6 偏移阶段

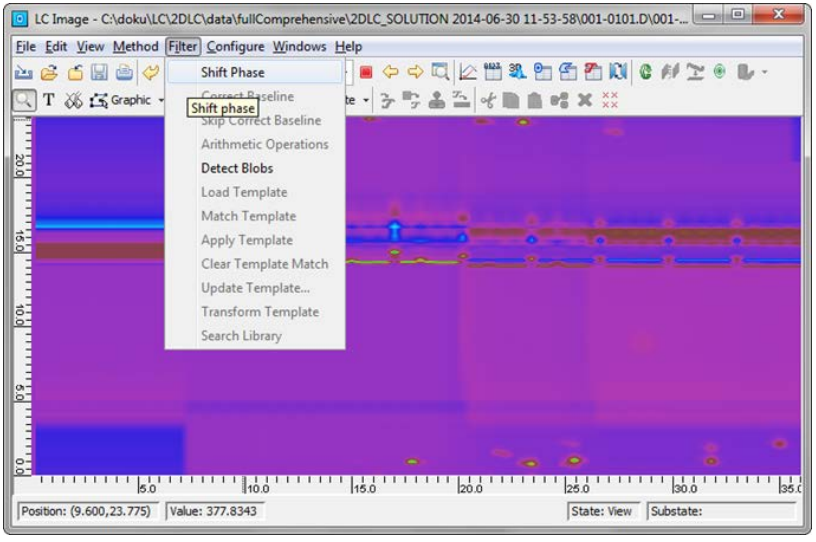


图 224 偏移阶段

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。

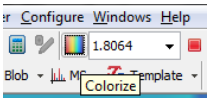


图 225　着色

9 选择数据范围。

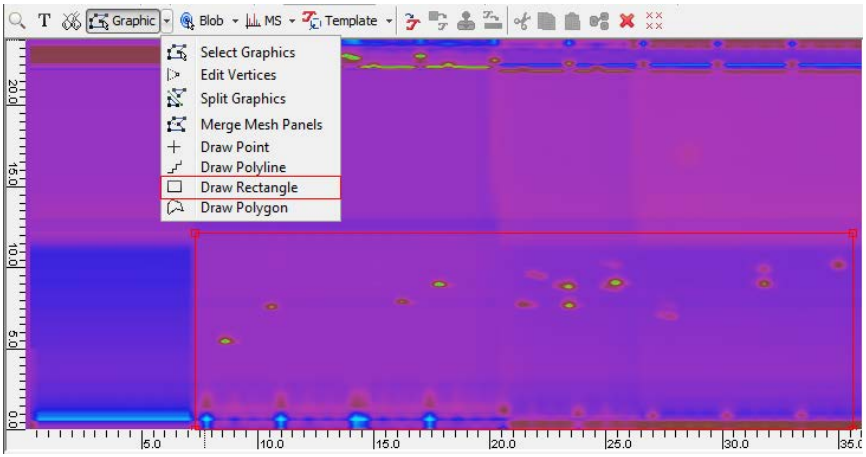


图 226　数据范围选择

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。

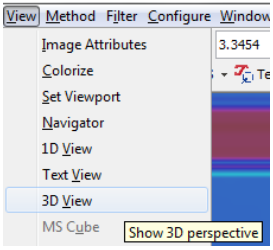


图 227　“3D 视图”选项

11 查看单个 2D 色谱图

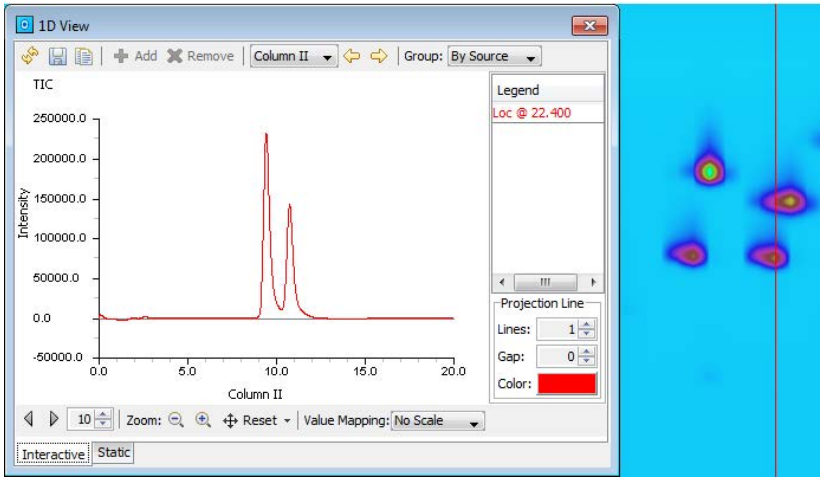


图 228 “色谱图”视图

12 选择 Blob

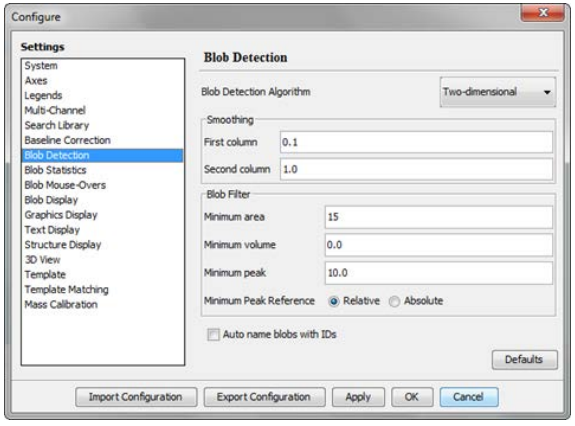


图 229 Blob 检测

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”）。

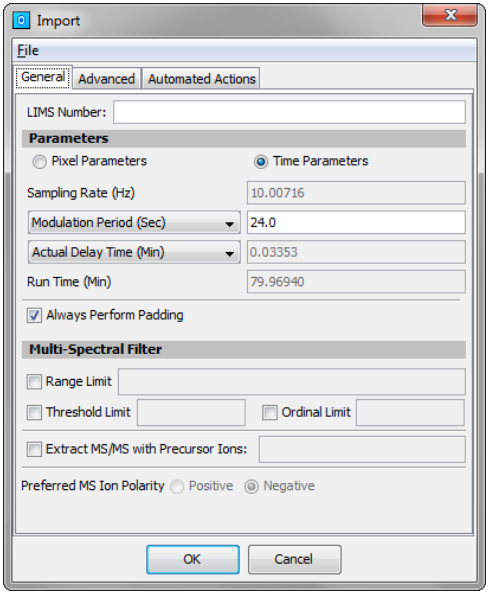


图 230　导入 MS 数据

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 ^{2}D 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 ^{1}D 泵方法（请参见下图）：

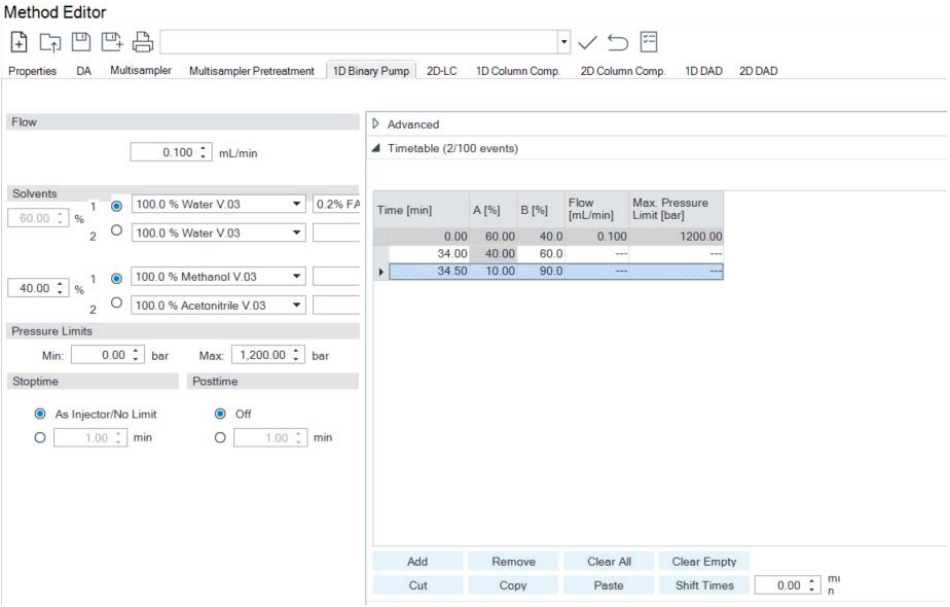


图 231　1D 二元泵方法

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

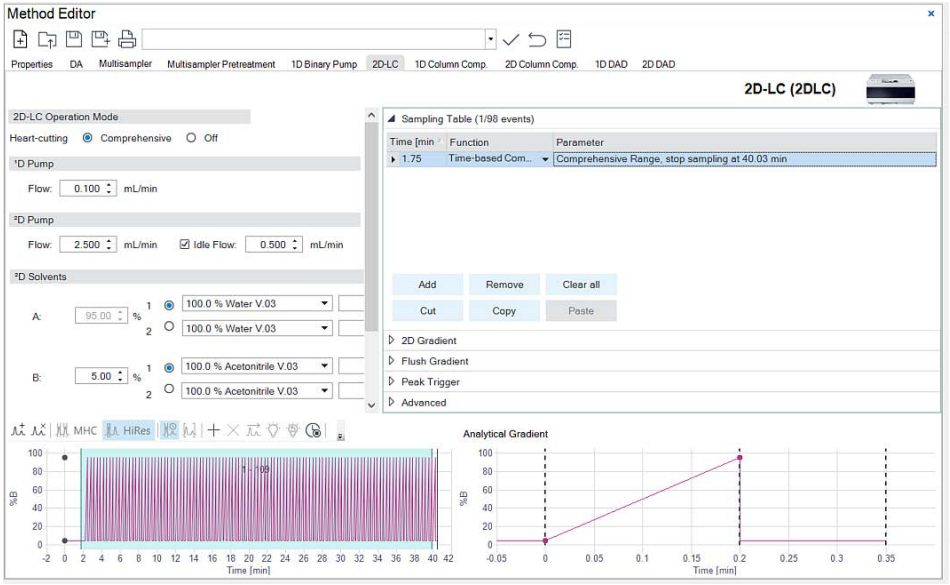


图 232　2D-LC 调制方法属性

3 运行全切割 2D-LC 分析。

由此得出的分离应看起如下所示：

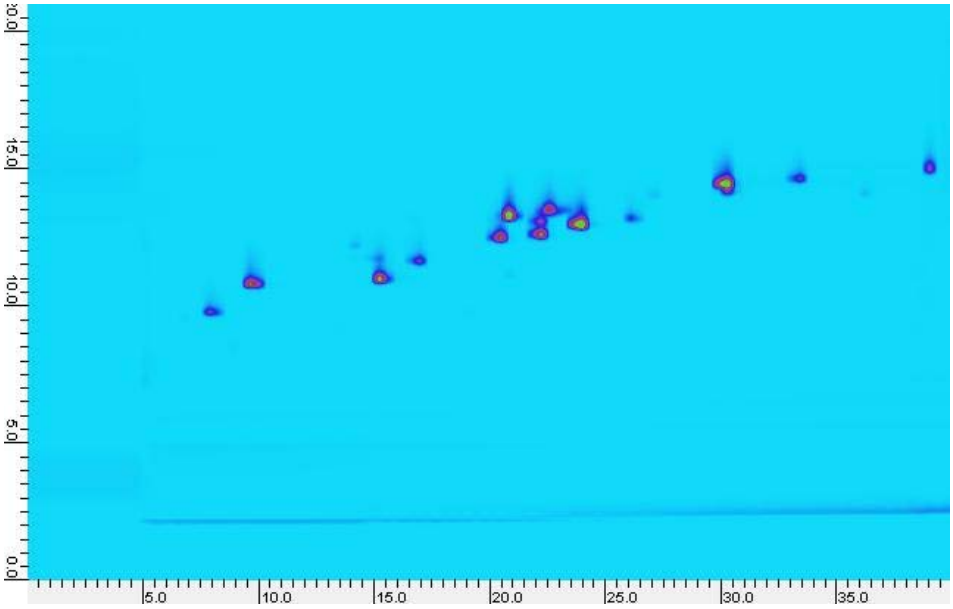


图 233　示例：全切割 2D-LC 分析后的分离

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

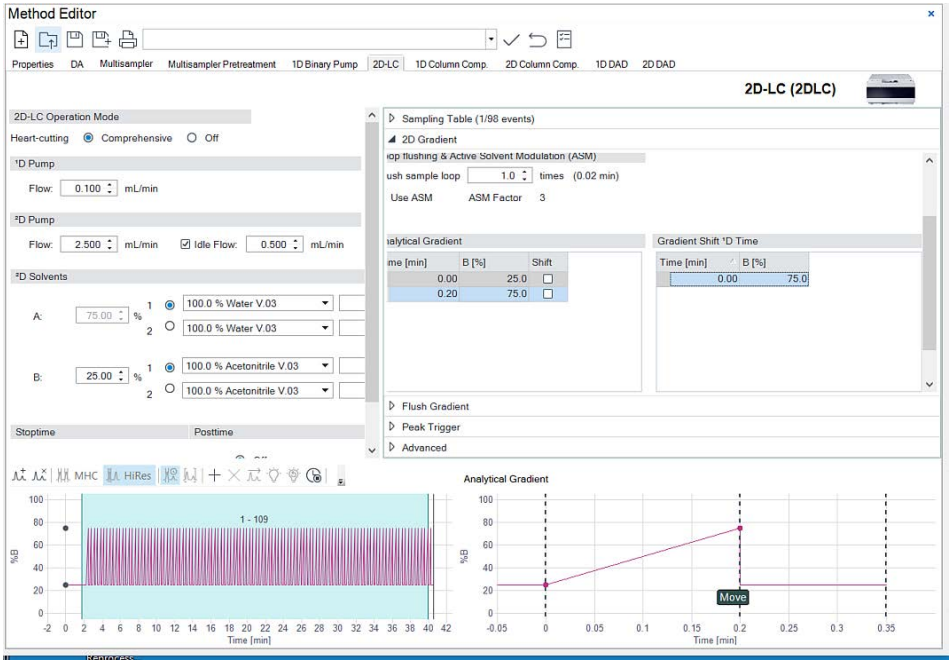


图 234　方法设置缓梯度以改善 ^{2}D 分离

在第二维中使用 25 – 75 % B 的重复梯度产生的分离如下所示：

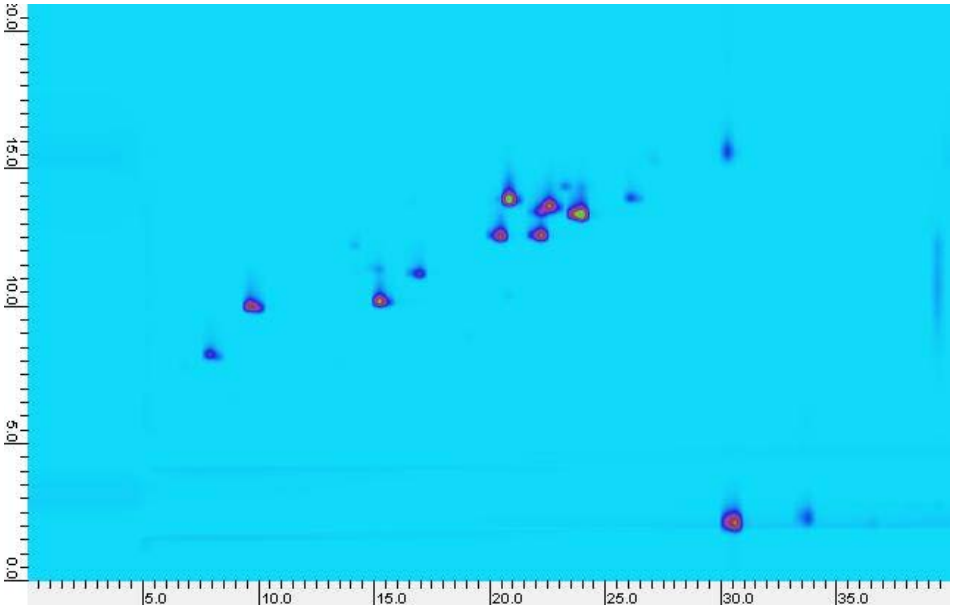


图 235　在第二维中重复梯度产生的分离

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）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 ^{2}D 泵和调制方法，如下所示：

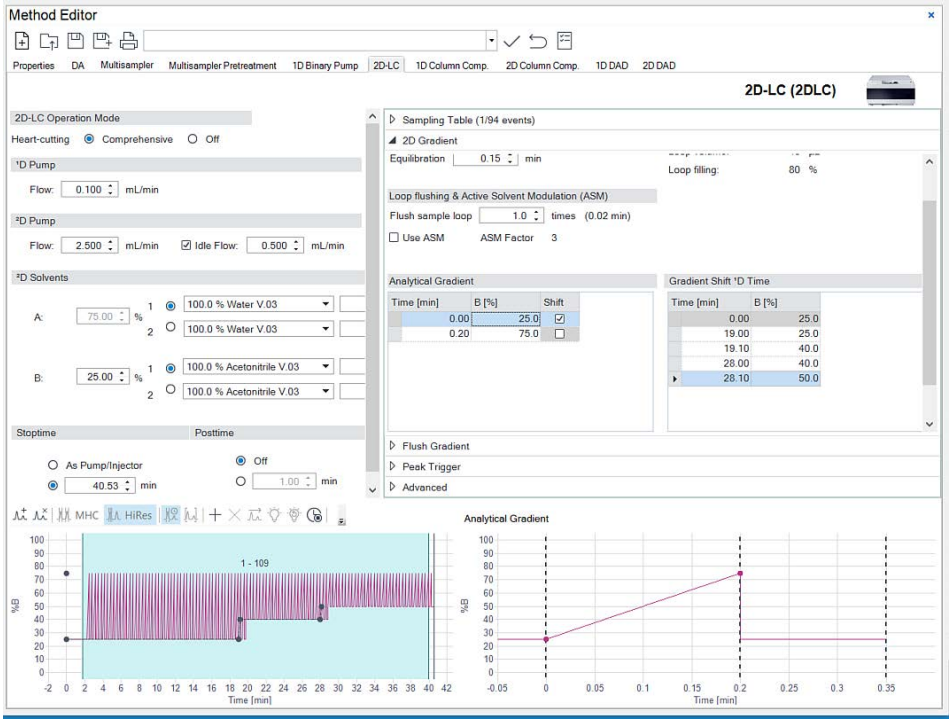


图 236　逐步迁移梯度的方法

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：

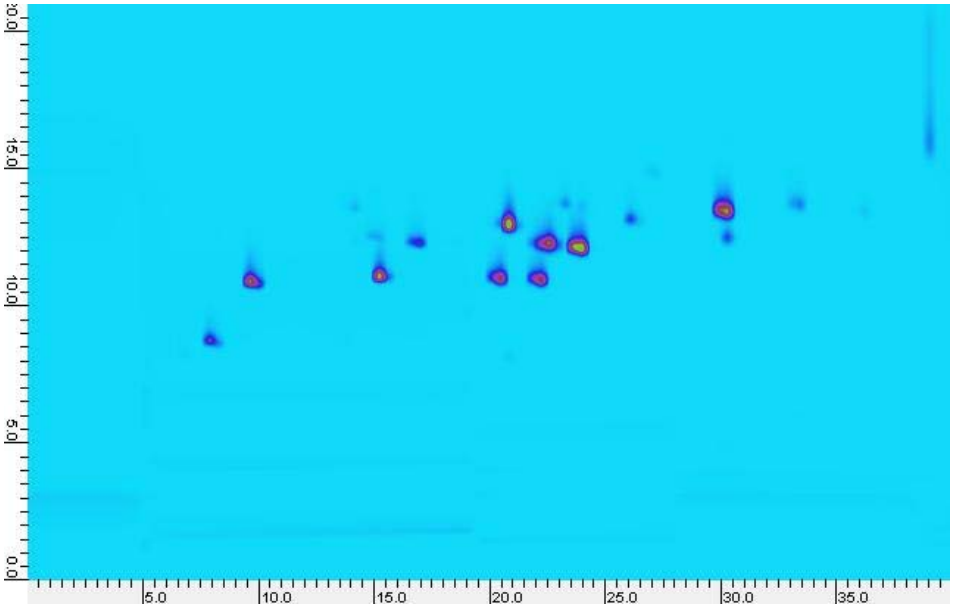


图 237　在第二维中逐步迁移梯度产生的分离

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！

10 故障排除和诊断

模块指示器和测试功能概述 357
用户界面 358
Agilent Lab Advisor 软件 359
Lab Advisor 软件中集成的 2D-LC 功能 360
Lab Advisor 仪器控制 361
2D-LC 硬件许可证处理 361
2D-LC 毛细管配置工具 364
2D-LC 组合的仪器控制 365
Lab Advisor 服务和诊断 367
解除 2D-LC 组合 367
²D 泵的泵头泄漏测试 368
²D 泵的泵泄漏率测试 369
²D 泵的系统压力测试 370
2D-LC 毛细管泄漏测试 371
更换模块固件 372
故障排除的基本原理 374
压力太高 377
压力太低 378
峰面积和峰高相关 379
保留时间相关 380
信号线性缺失 381
信号漂移 382
信号噪声 383
完成故障排除的建议测试 384

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 359 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 ^{2}D 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 ^{2}D 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 121 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：

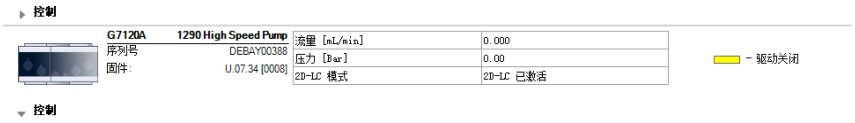


图 238 2D-LC 模式处于活动状态

  - 已安装硬件加密锁
  - ^{2}D 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：

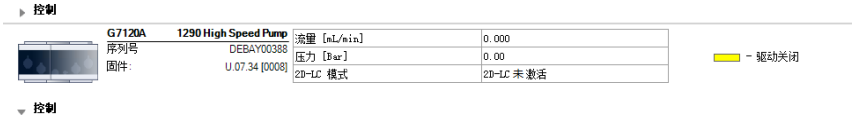


图 239 2D-LC 模式处于禁用状态

  - 已安装硬件加密锁
  - ^{2}D 泵可识别加密锁
  - 色谱数据系统 (CDS) 中**未**配置 ^{2}D 泵。

    要使用 2D-LC 解决方案，首先配置 2D-LC 组合，请参阅第 136 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 240　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]**。

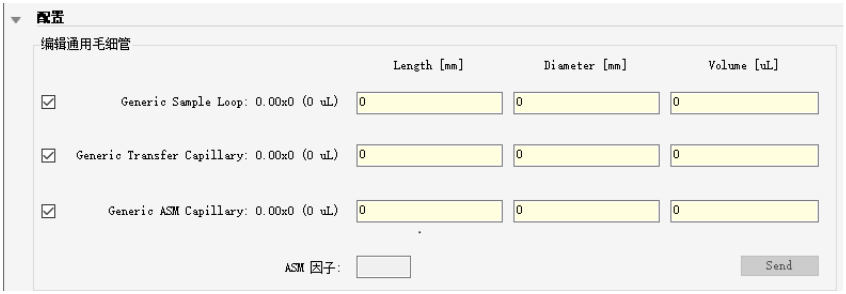


图 241　2D-LC 通用毛细管配置

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 242 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 243　示例：带一个选定 MHC 阀的 2D-LC 仪器（驻留仓位 A）

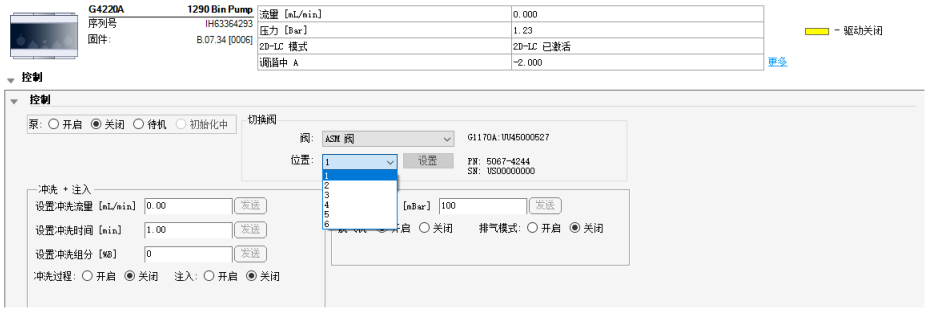


图 244　示例：带一个选定 ASM 阀的 2D-LC 仪器

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。

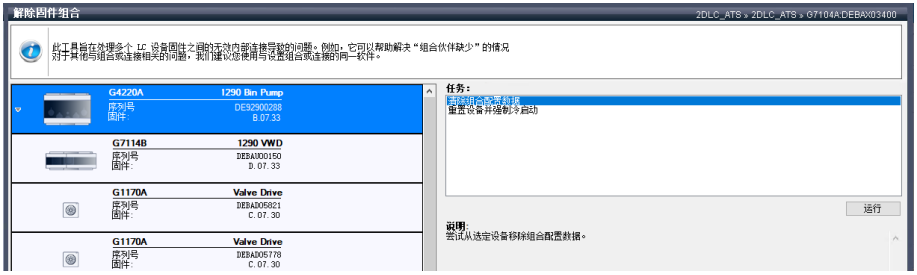


图 245　2D-LC 1290 二元泵的解除固件组合

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。

^{2}D 泵的泵头泄漏测试

测试确定单个泵头的泄漏。

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 ^{2}D 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 ^{2}D 泵。

3 选择**泵头泄漏测试**。



图 246　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。

^{2}D 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 ^{2}D 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 ^{2}D 泵。

3 选择**泵泄漏率测试**。

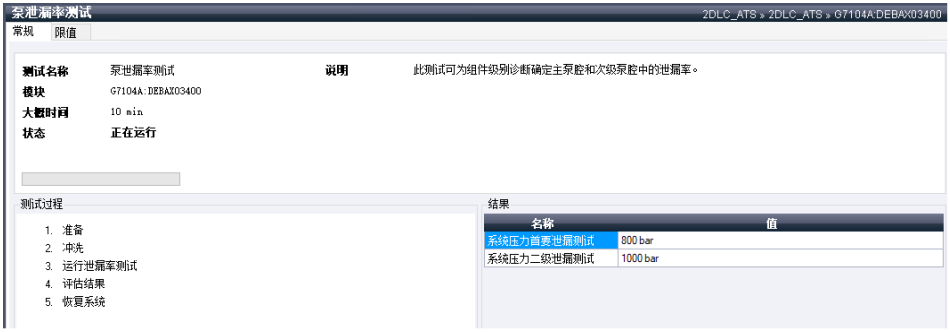


图 247　2D-LC 1290 二元泵的泵泄漏率测试

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 测试仅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**。

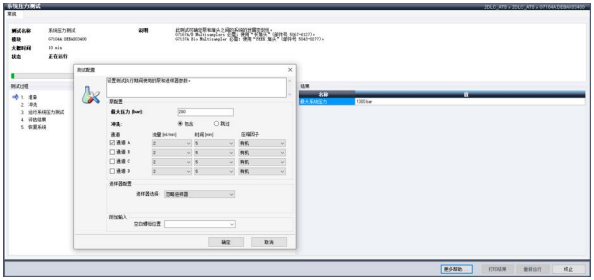


图 248 2D-LC 1290 二元泵的系统压力测试

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 ^{2}D 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 ^{2}D 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
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 不要将不同固件集合中的固件文件混用。

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 249 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 40 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。

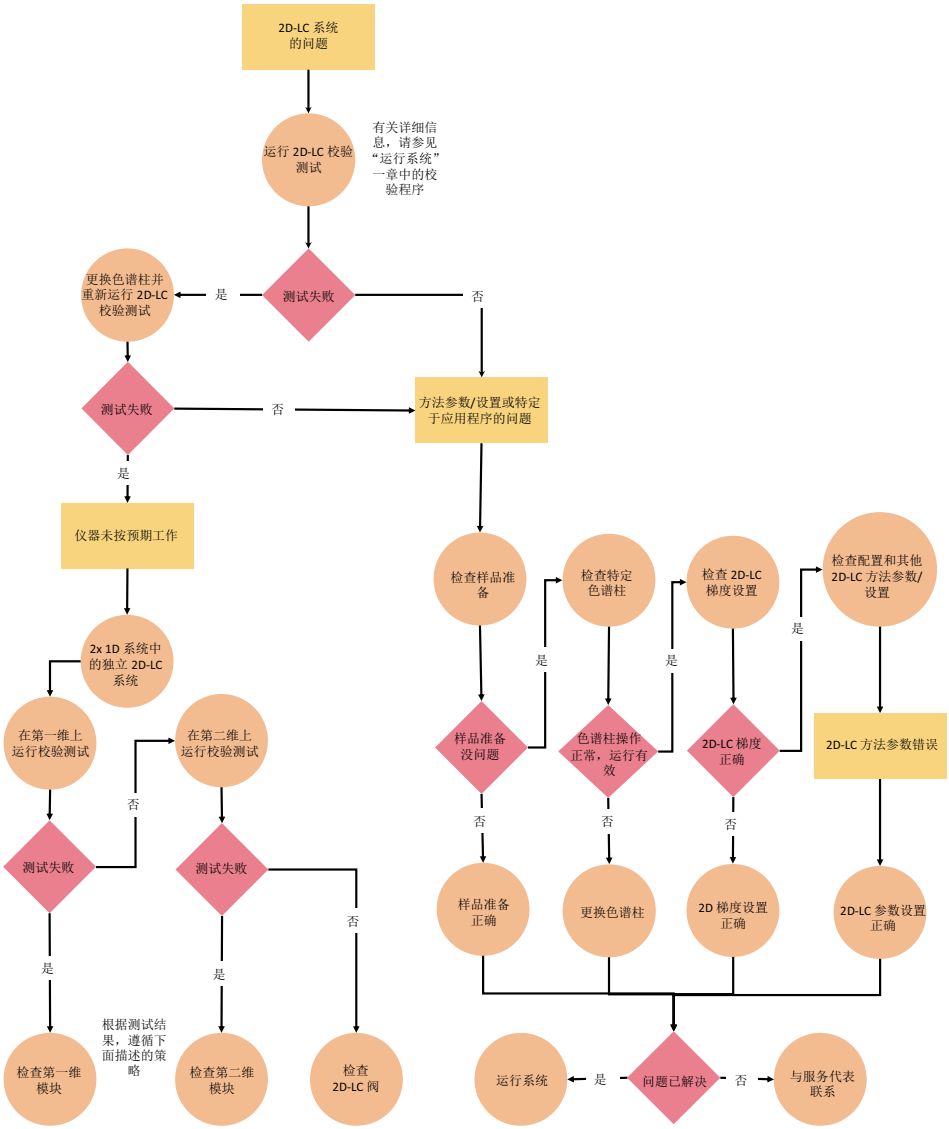


图 250　示例：确定应用方法或仪器是导致 2D-LC 色谱法问题的根本原因的策略

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 377 页的压力太高
- 第 378 页的压力太低
- 第 379 页的峰面积和峰高相关
- 第 380 页的保留时间相关
- 第 381 页的信号线性缺失
- 第 382 页的信号漂移
- 第 383 页的信号噪声

压力太高

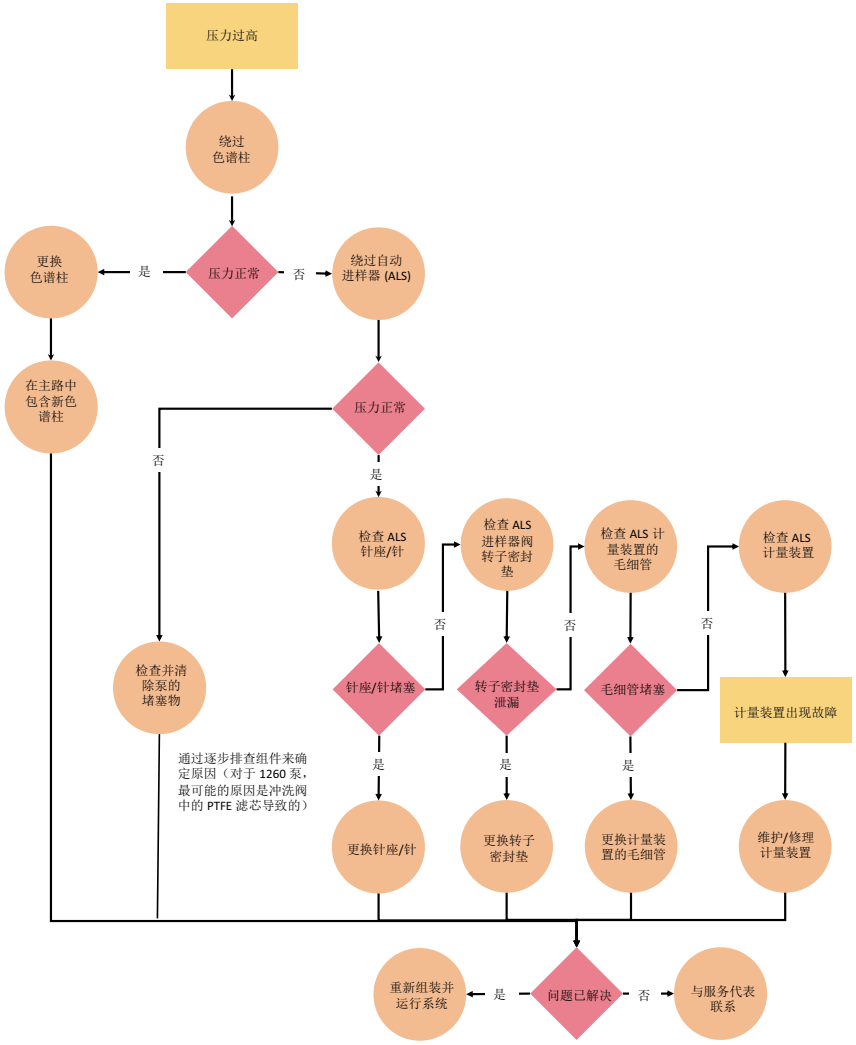


图 251　示例：消除 2D-LC 仪器中压力太高相关问题的策略

压力太低

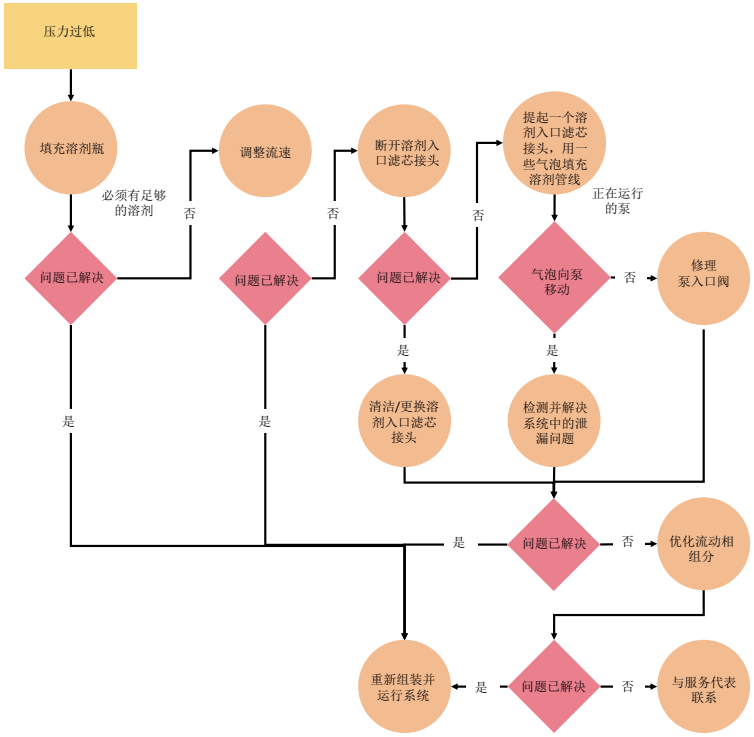


图 252　示例：消除 2D-LC 仪器中压力太低相关问题的策略

峰面积和峰高相关

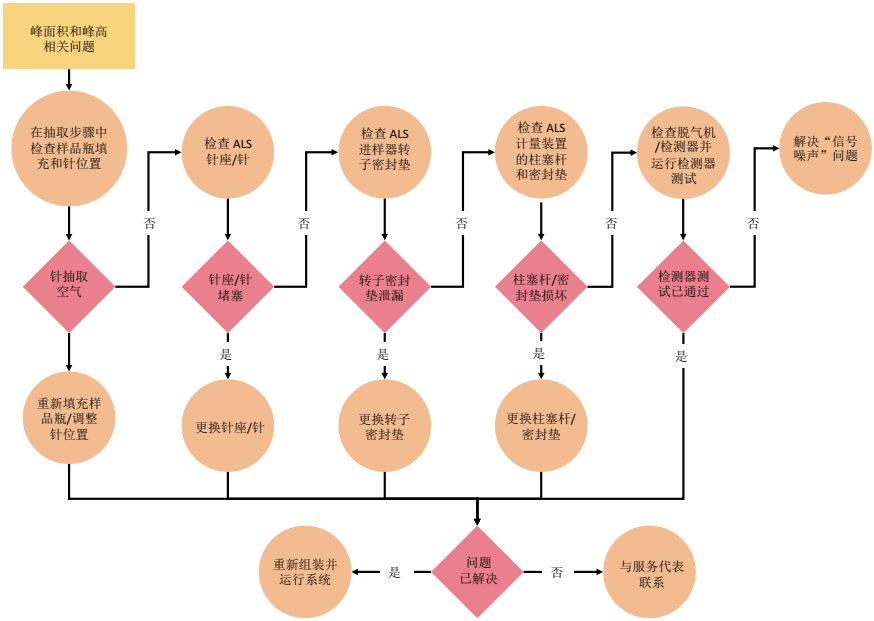


图 253　示例：消除 2D-LC 仪器中峰问题相关问题的策略

保留时间相关

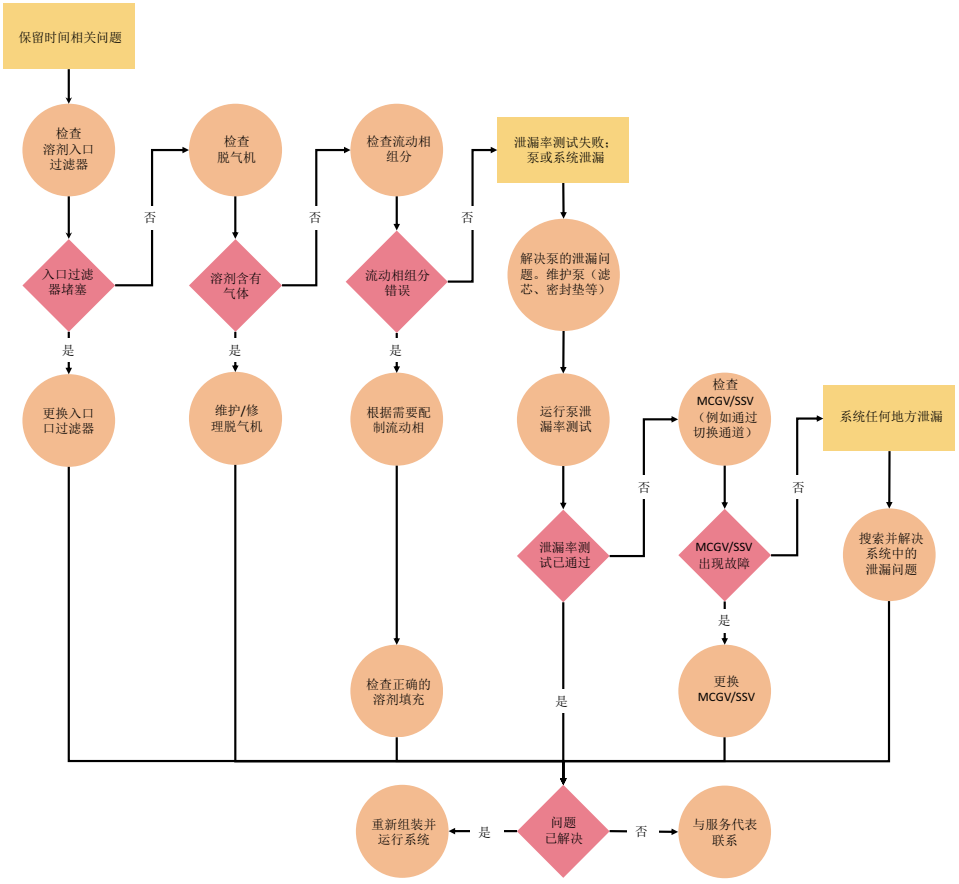


图 254　示例：消除 2D-LC 仪器中保留时间相关问题的策略

信号线性缺失

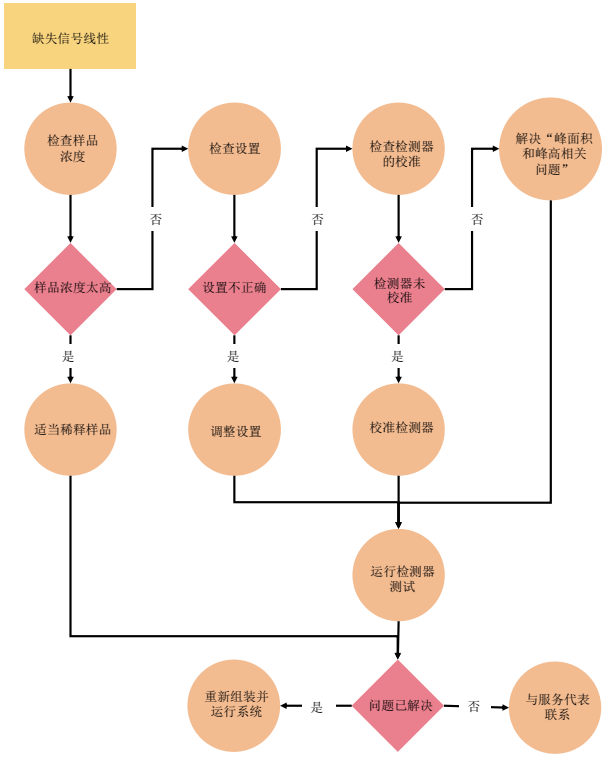


图 255　示例：消除 2D-LC 仪器中缺失信号线性相关问题的策略

信号漂移

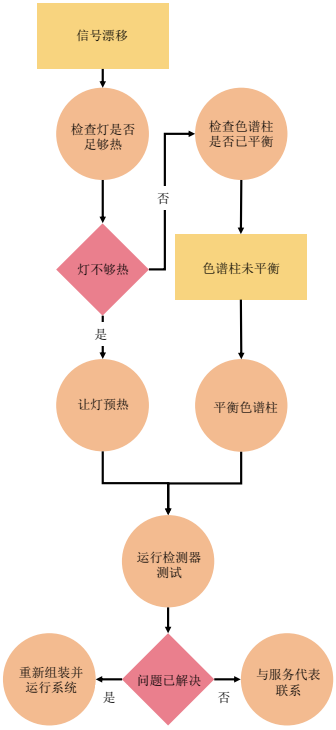


图 256　示例：消除 2D-LC 仪器中信号漂移相关问题的策略

信号噪声

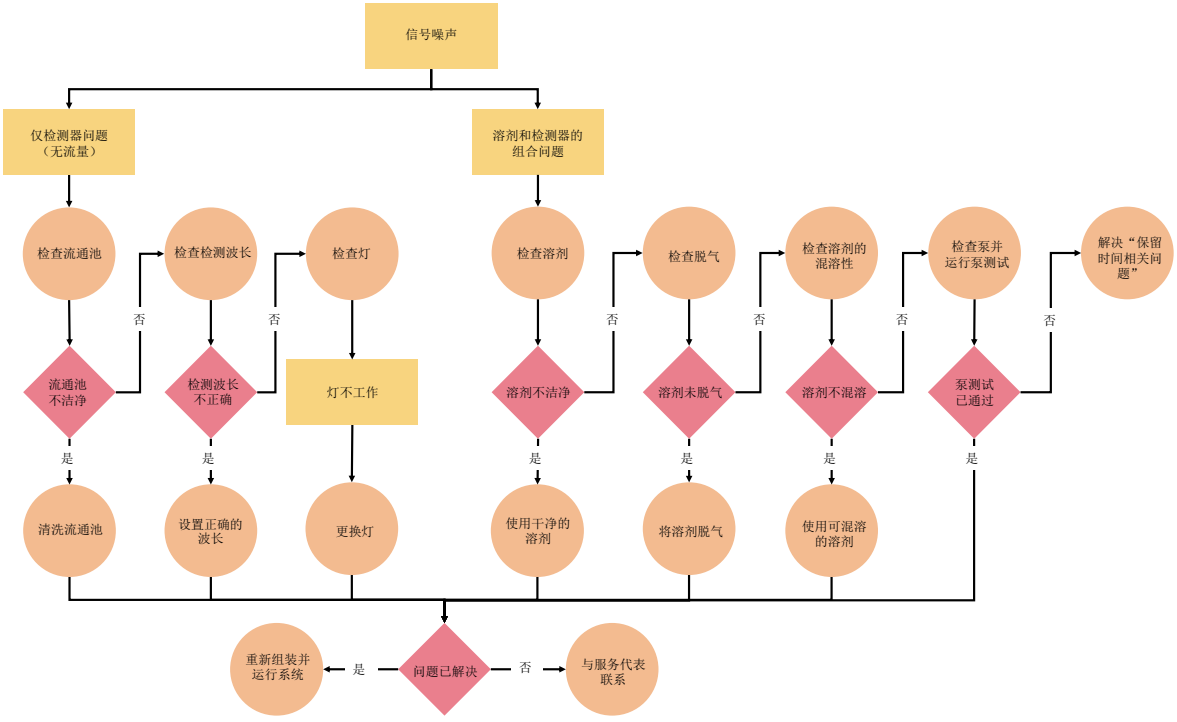


图 257　示例：消除 2D-LC 仪器中信号噪声相关问题的策略

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 41　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** • 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 386

一般错误消息 387

超时 387
关闭 387
远程超时 388
丢失 CAN 组件 388
泄漏传感器短路 389
泄漏传感器断路 389
补偿传感器断路 390
补偿传感器短路 390
风扇故障 391
泄漏 391

模块特定错误消息 392

初始化阀失败 392
阀切换失败 393
阀标签故障 393
压力组合组件缺失 394
位置组合组件缺失 394
外部阀进入驻留模式 395

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。	• 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。	• 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。	• 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。	• 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。	• 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。	• 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	• 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	• 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 397
警告和小心 398
维护概述 400
清洁模块 401
校正泄漏 402
校正泄漏 (G7116B) 402
校正泄漏 (G1170A) 402
更换阀头 403
更换阀头 (G7116B) 403
更换阀头 (G1170A) 406
更换阀头的部件 409
更换 Infinity 阀驱动器的保险丝 412

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 42 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（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。**

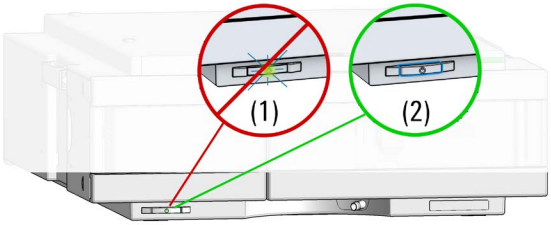
警告

有毒、易燃及有害溶剂、样品及试剂

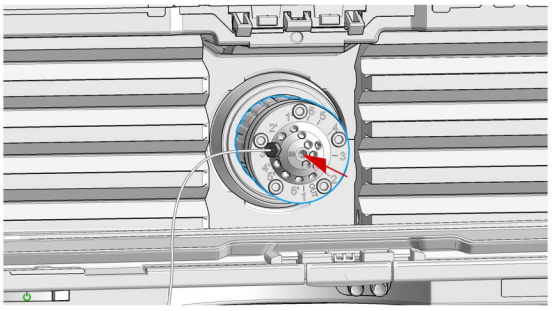
处理溶剂、样品和试剂可能会危害健康安全。

- ✓ **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，穿上防护衣）。**

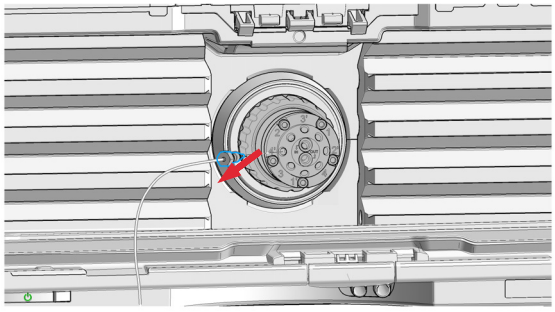
1 关闭模块。



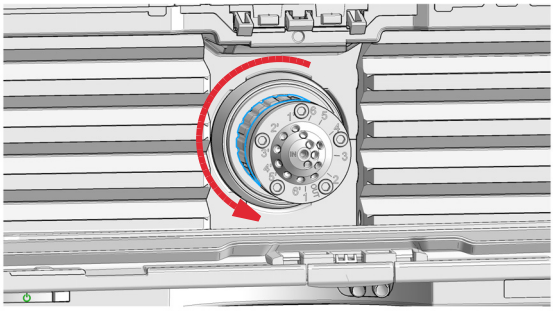
2 拉动阀头，让其到达外部位置。



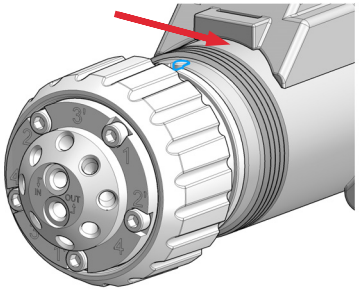
3 将所有毛细管接头从阀头拆下。



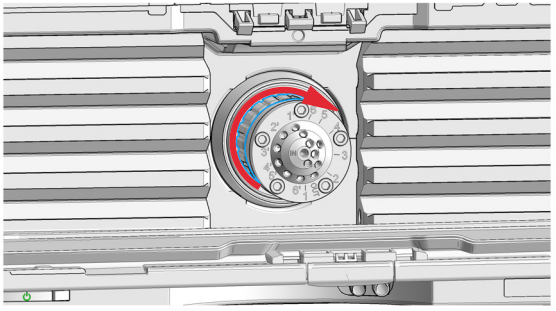
4 拧下螺母并取下阀头。

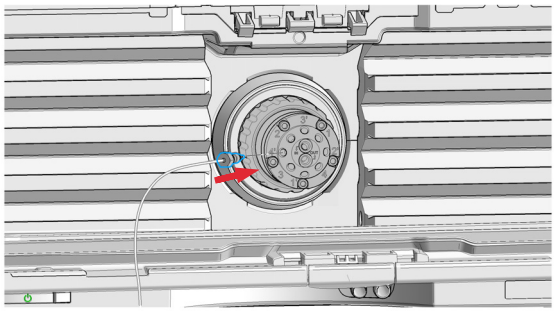
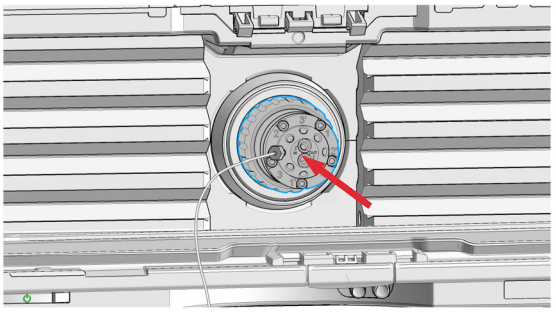
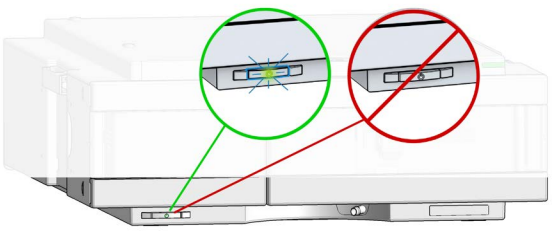


5 将新的阀头安装到阀驱动装置中，使得叶片与槽贴合。



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。**

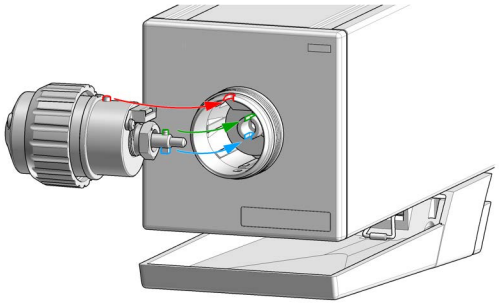
✓ **运行和存储时请务必安装阀头。为保护阀驱动，可使用模拟阀头替代实际工作阀头。切勿接触阀驱动内部部件。**

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。

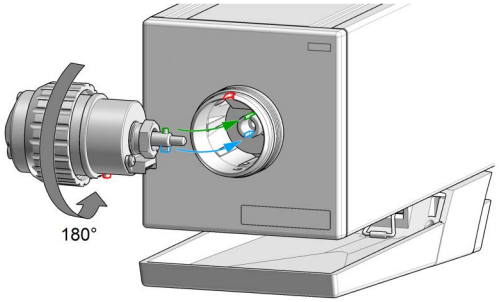
注意 为正确识别阀，关闭模块电源至少 10 秒。

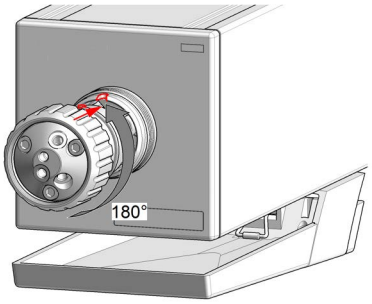
1 将阀头插入阀轴。



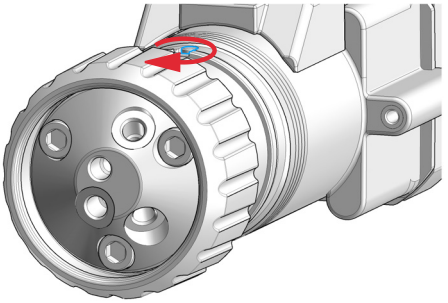
或

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。



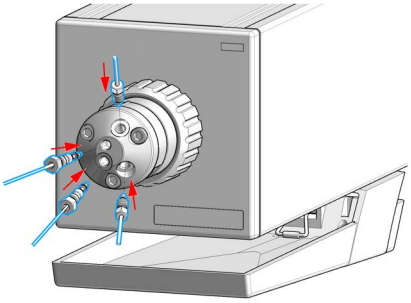


2 当外销锁定在槽中时，手动将螺母拧到阀头上。



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。

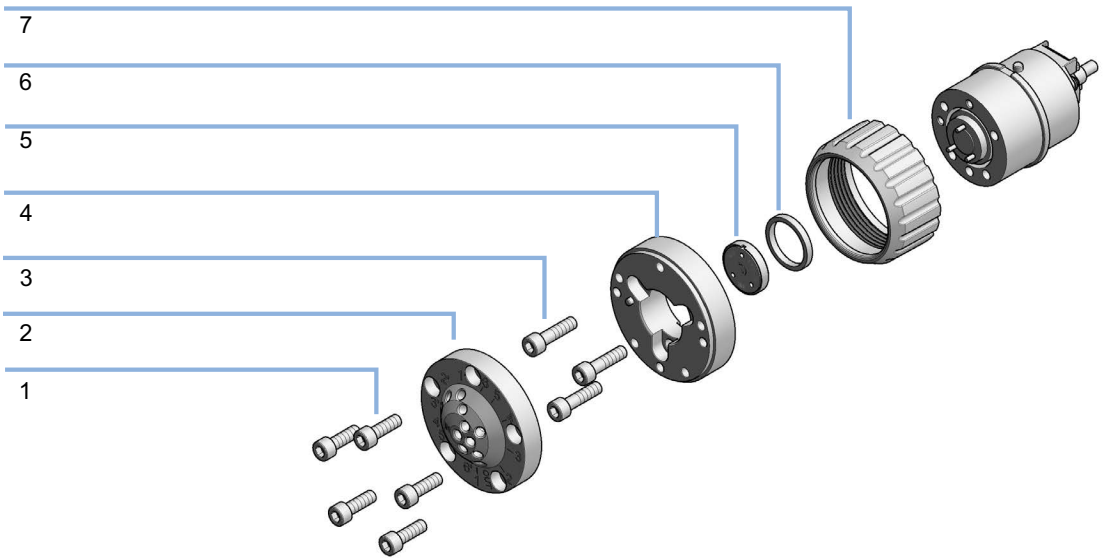


图 258 阀头部件（示例）

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 410 页的图 258 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

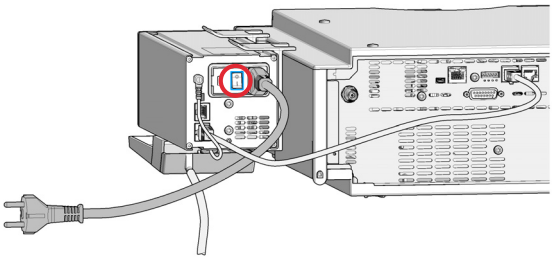
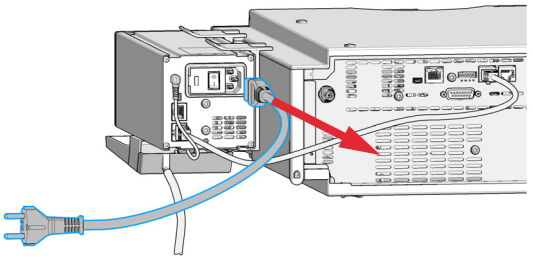
所需的部件：

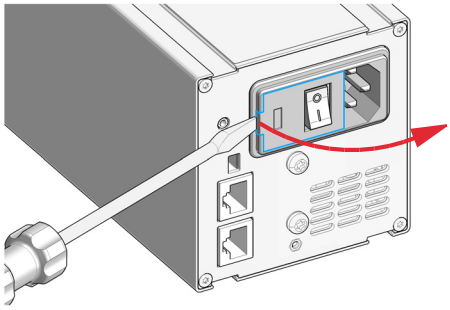
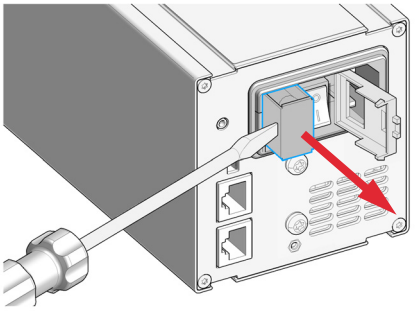
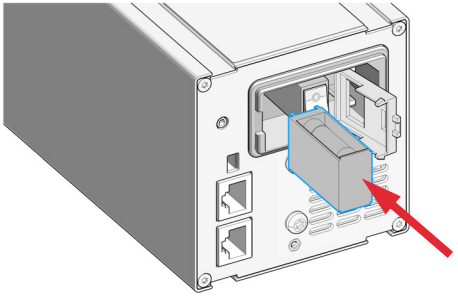
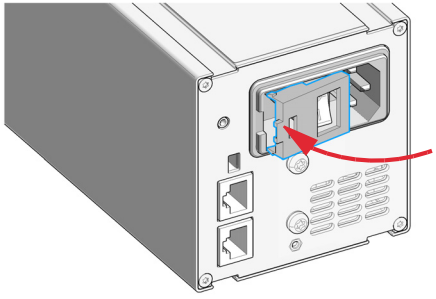
#	部件号	说明
2	2110-1486	保险丝，2 AT250 V

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。**

1 关闭仪器。线路开关位于模块后部。	2 断开电源电缆与电源输入插孔的连接。
	

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。 	

13 维护所需部件

1290 Infinity II 2D-LC 系统的部件 415
2D-LC 定量环 415
2D-LC 毛细管 416
ASM 毛细管 418
压力释放工具包 418
2D-LC 轻松入门工具包 419
阀驱动器部件 420
Infinity II 阀驱动器部件 421
阀头部件 423
阀选项概述（适用于 2D-LC） 425
MS 分流阀 429
阀选项概述（适用于 G7116B） 431
额外加热器设备 433
配件和耗材（适用于 G7116B） 435
InfinityLab Quick Connect 快速连接接头和 Quick Turn 接头 437
毛细管工具包 440
1290 Infinity II Bio 2D-LC 系统的部件 441
生物兼容性毛细管的显著特征 441
接头 444
Bio 2D-LC 定量环 445
Bio 2D-LC 毛细管 445
压力释放工具包 449
阀选项概述（适用于 Bio 2D-LC） 450
各种Bio-LC 模块的其他生物兼容性备件概述 457
1290 Infinity II Bio LC 色谱柱的选择 468

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	不锈钢毛细管 0.35 x 1247 mm，M/M， 120 µL
5067-6647	不锈钢毛细管 0.35 x 1870 mm，M/M， 180 µL
5067-6141	不锈钢堵头，用于 M4 端口
5023-2504	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	柔性毛细管，0.12 mm x 105 mm，无接头
G1316-87321	毛细管柱热交换器，长度为 105 mm，内径为 0.17 mm
5021-1822	毛细管，0.12 mm x 280 mm
5021-1823	不锈钢毛细管柱-检测器400 mm 长，0.12 mm 内径）。
5021-1819	不锈钢毛细管 0.17 mm x 400 mm S/S
5065-9964	不锈钢毛细管 0.12 mm x 500 mm
5067-4609	不锈钢毛细管 0.17 mm x 500 mm SX/-
5067-4669	不锈钢毛细管 0.12 mm x 600 mm S/SL
01078-87305	毛细管，0.17 mm x 80 cm，公接头
5065-4454	长连接螺钉，前后密封垫圈 一包 10 个
G1316-60005	低扩散热交换器双组件

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

压力释放工具包

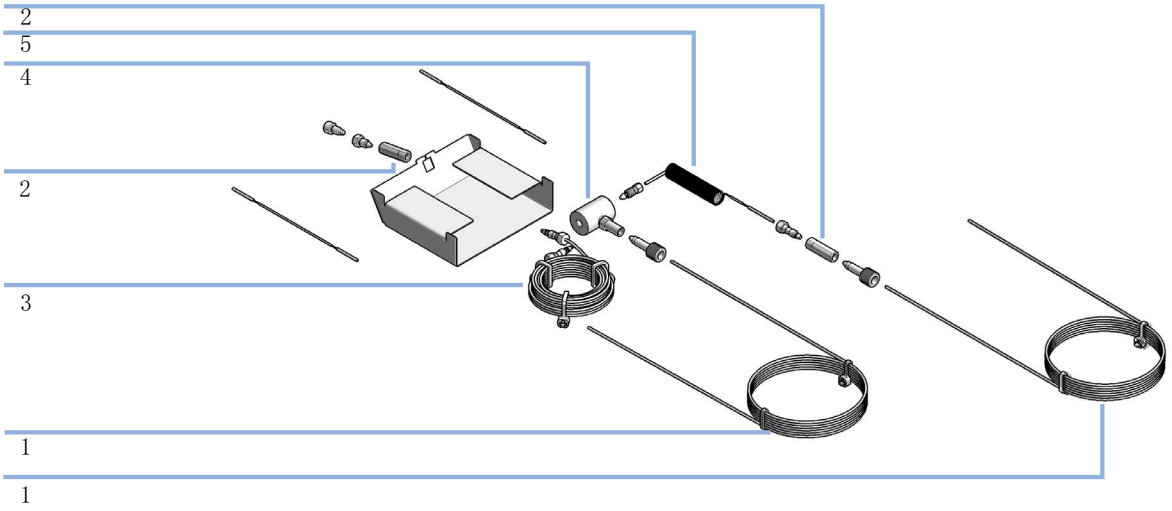


图 259　压力释放工具包，部件

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 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
	5022-2144	T-connector, PEEK, 1/16 in, 0.57 µL swept volume

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

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

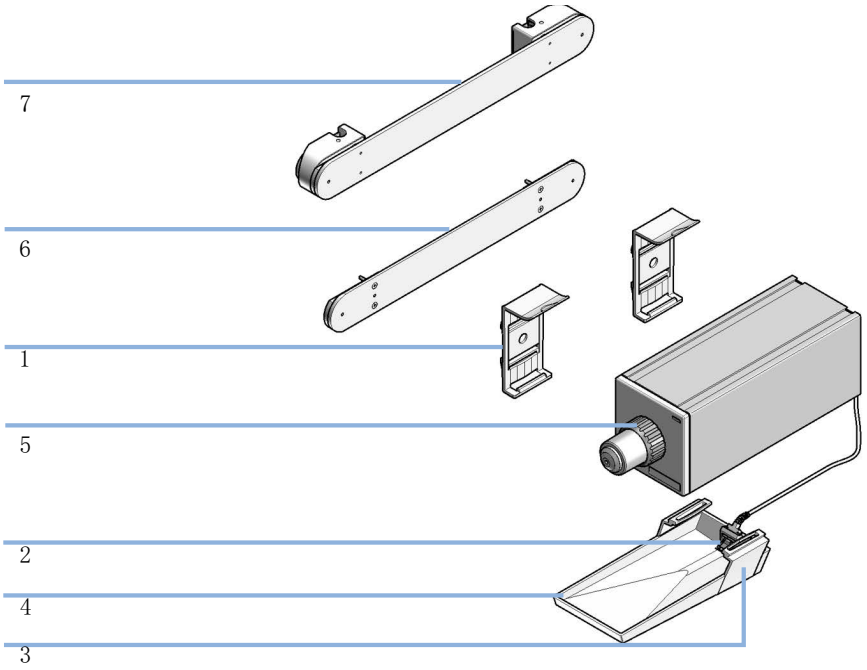


图 260 1290 Infinity 阀驱动器部件

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	三通管接头内径 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）

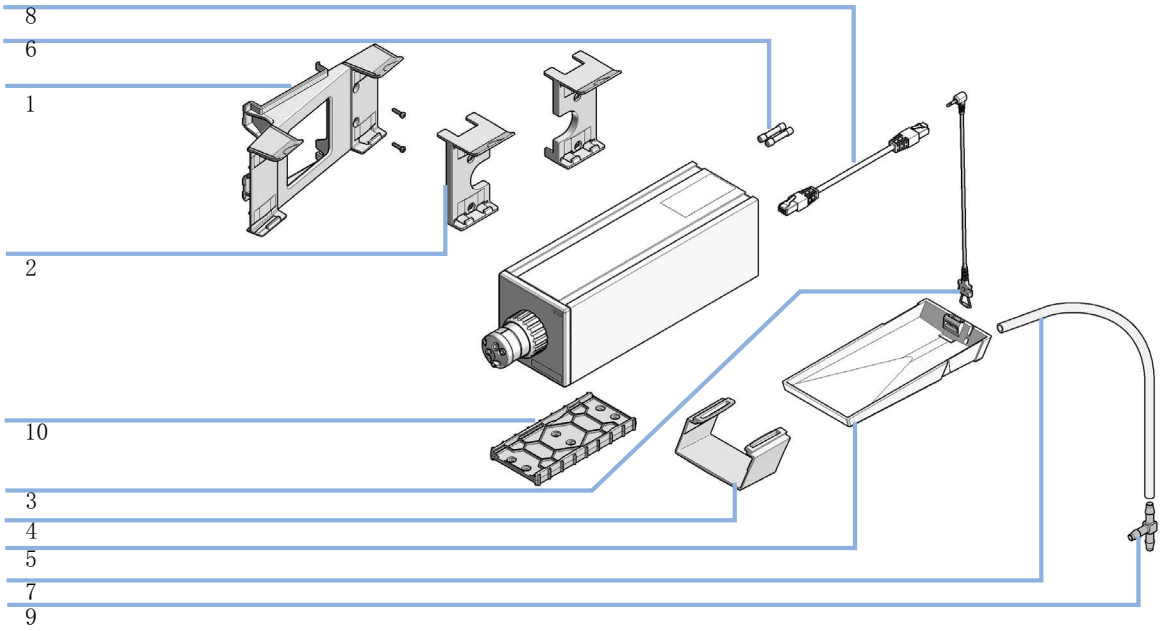


图 261　1290 Infinity II 阀驱动器部件

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。

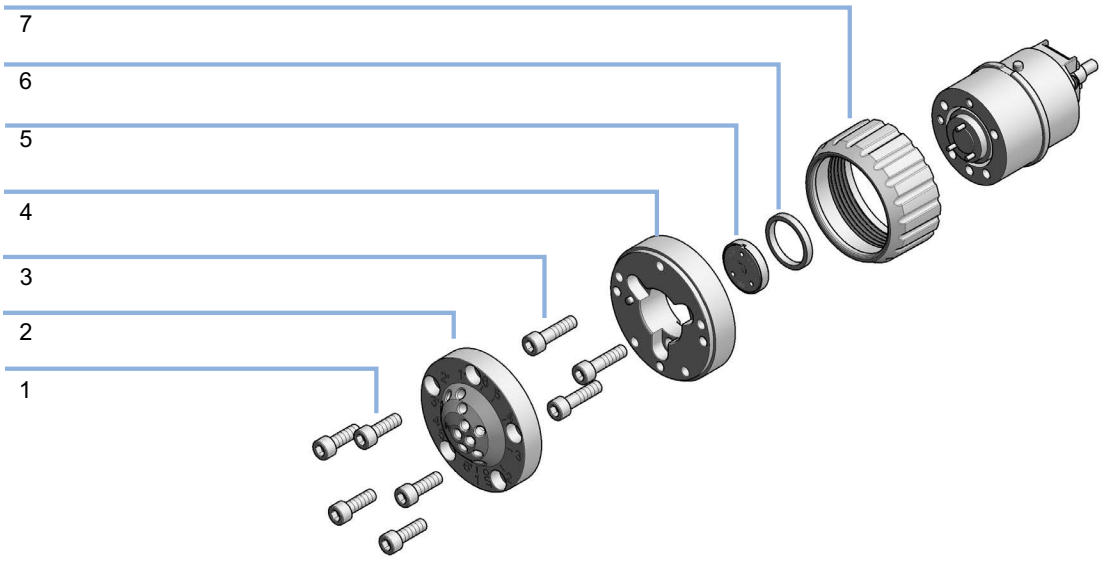


图 262　阀头部件（示例）

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 43 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 InfinitLab 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）

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

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)

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 44 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 45 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 46 热交换器概述

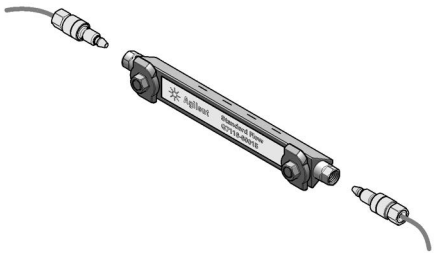
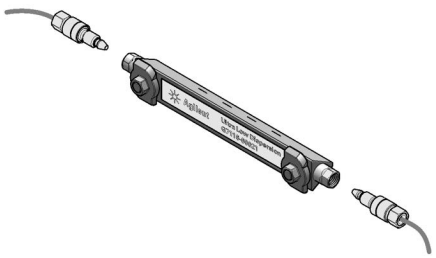
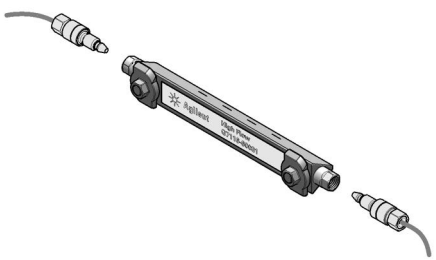
流速	0.075 mm 毛细管内径	0.12 mm 毛细管内径
< 2 mL/min	**超低扩散** G7116-60021 （内部体积：1.0 µL）	**标准流量** G7116-60015 （内部体积：1.6 µL）
> 2 mL/min		**高流量** G7116-60031 （内部体积：3.0 µL）

有关详细信息，请参见第 434 页的表 47。

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 47 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) **注意** **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	CAN 电缆，Agilent 模块到模块， 0.5 m
5063-6527	管线，硅橡胶，1.2 m，内径/外径 6/9 mm
5500-1191	InfinityLab Quick Turn 不锈钢毛细管 0.12 mm x 280 mm，长套筒
5067-5966	InfinityLab Quick Turn 接头
5067-5957	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接组件 0.12 mm x 105 mm
G7116-60015	标准快速连接热交换器
G7116-68003	色谱柱支架，薄板型，一包 2 个（作为 G7116-60015 的一部分提供）
5043-0915	接头安装工具
G7116-60006	分隔器组件 MCT
5022-2184	两通,零死体积通用两通,无接头
	双排液接头

可用耗材（适用于 G7116B）

部件号	说明
G7116-68003	色谱柱支架，薄板型，一包 2 个
G7116-68004	色谱柱支架夹，一包 2 个
5500-1191	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	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	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	InfinityLab 热平衡装置

编号工具包

部件号	说明
5067-6654	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 143 页的重要的客户网络链接。

InfinityLab Quick Connect 快速连接接头

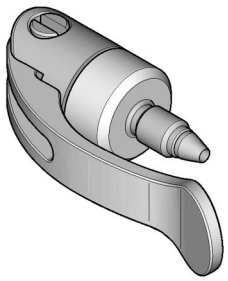


图 263 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头

部件号	说明
5067-5965	InfinityLab Quick Connect LC 接头 （不带预装毛细管的接头）
5043-0924	用于 Quick Connect 快速连接接头/Quick Turn 接头的前端密封垫圈
5067-5961	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.075 mm x 105 mm
5067-6163	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.075 mm x 150 mm
5067-6164	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接组件 0.075 mm x 220 mm
5067-6165	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接接头组件 0.075 mm x 280 mm
5067-5957	不锈钢 InfinityLab Quick Connect 快速连接组件 0.12 mm x 105 mm
5067-5958	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

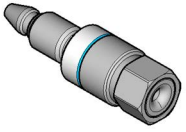


图 264 InfinityLab Quick Turn 接头

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 48 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

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。

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



图 265　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 538 页的毛细管说明的语法。

小心

MP35N 比不锈钢硬。

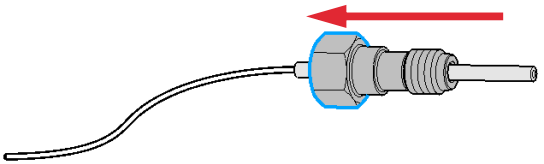
镀金密封垫圈损坏。

✓ **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）。**

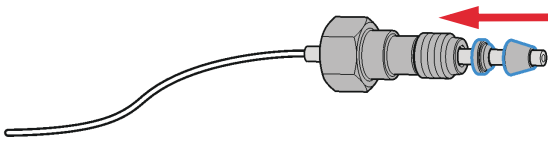
1 为您将使用的接头选择足够长的螺母。



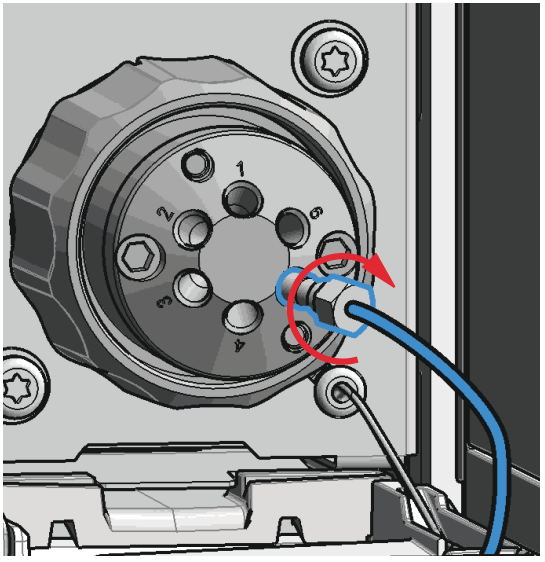
2 将螺母滑过管线或毛细管的末端。



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。

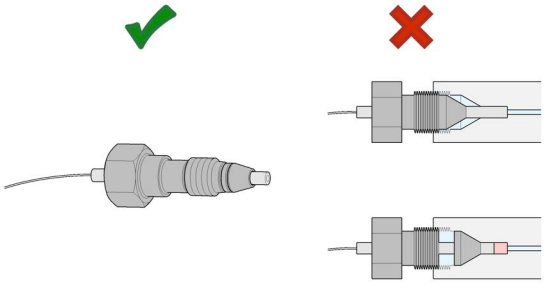


4 使用色谱柱或进样阀轻轻拧紧接头，将密封垫圈固定到管线或毛细管上。



注意

不要过度拧紧。过度拧紧会缩短接头的使用寿命。

5 拧松螺母，确认密封垫圈正确固定于管线或毛细管。 	

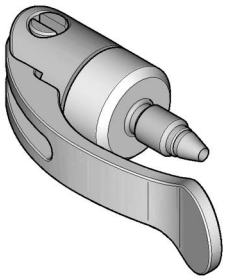
注意

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

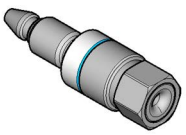
注意

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

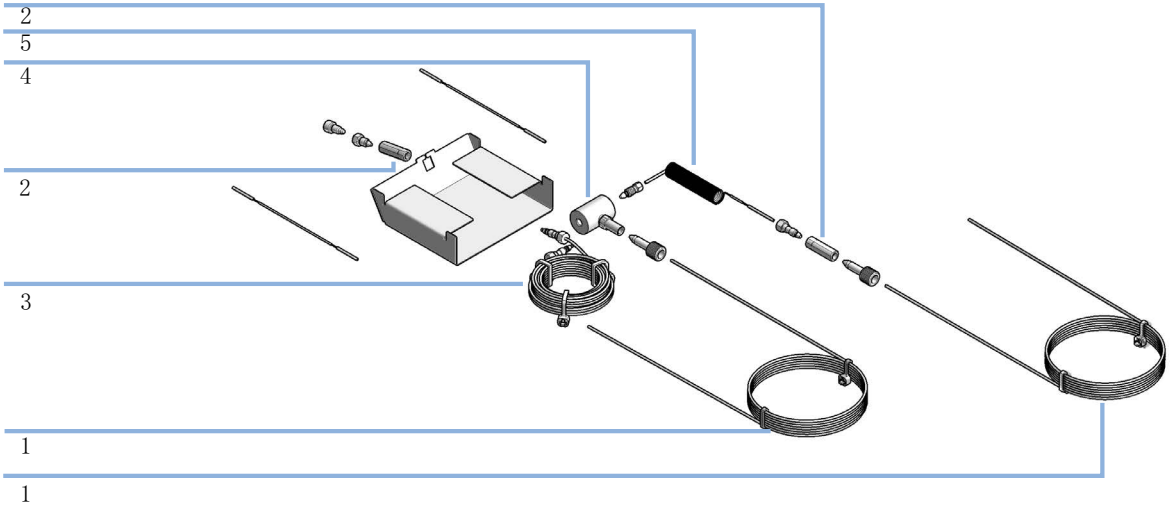


图 266　压力释放工具包，部件

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 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
	5022-2144	T 形接头，PEEK，1/16 英寸，0.57 µL 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	Agilent InfinityLab Bio 2D-LC ASM 阀
5190-6895	2D-LC 入门样品，1 x 2 mL
G5642-64000	不锈钢生物兼容性 MHC 定量环组件
699968-301	Poroshell 120 Bonus-RP，3.0 x 50 mm， 2.7 µm
G4236-64000	2D-LC 轻松入门 USB 资料盘工具包
5005-0077	InfinityLab Bio 2D-LC 毛细管工具包
G2453-85060	甲酸-试剂级 5 mL (5 cc)
685775-902	Poroshell SB-C18，2.1 x 100 mm， 2.7 µm
G1680-63721	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！

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
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
5065-4445	蠕动泵滤芯
5067-6739	2 位/6 通进样阀 Bio 1300 bar
5068-0281	定子面，MP35N
G7137-60300	样品定量环 MP35N 20 µL，右侧（红色/橙色编码）
G7137-60400	样品定量环 MP35N 40 µL，右侧（绿色/橙色编码）
G7137-60500	样品定量环 MP35N 100 µL，右侧（蓝色/橙色编码）

标准

部件号	说明
5500-1278	毛细管 MP35N 0.17 mm x 100 mm SL/SL 分析头至进样阀
5500-1279	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	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	毛细管 MP35N 0.17 mm x 100 mm SL/SL 分析头至进样阀
5500-1280	毛细管 MP35N 0.17 mm x 250 mm SL-SL 冲洗头至进样阀
5500-1279	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	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	Bio 进样器针
5068-0209	转子密封垫 (PEEK)
G5668-87017	Bio 针座内径 0.17
G5668-60500	生物惰性样品定量环 100 µL
5067-4263	2 位/6 通生物惰性进样阀 600 bar
5068-0060	生物惰性定子头
G5611-60500	毛细管 400 x 0.17 mm，钛（生物惰性） 泵至进样器（标准 Bio-LC 设置）
G5611-60502	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	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	毛细管 MP35N 0.17 mm x 100 mm SL/SL 分析头至进样阀
5500-1256	毛细管 Ti 0.17 mm x 100 mm SL/SL
5500-1279	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	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	毛细管 MP35N 0.17 mm x 100 mm SL/SL 分析头至进样阀
5500-1280	毛细管 MP35N 0.17 mm x 250 mm SL-SL 冲洗头至进样阀
5500-1279	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	毛细管 MP35N 0.17 mm x 500 mm, SI/SI Jet Weaver 至 Multisampler（标准 Bio-LC 设置）
5500-1257	毛细管 Ti 0.17 mm x 250 mm SL/SL 进样阀至冲洗泵头
5500-1256	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	Bio Quick Connect 快速连接热交换器标准流速 1.6 µL
G7116-60081	Quick Connect Bio 快速连接热交换器，高流速 3.0 µL
G7116-60091	Quick Connect 快速连接 Bio 热交换器超低扩散 1.0 µL

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！

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！

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 µL、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 µL，蓝宝石，MP35N
G1314-60188	Bio 标准流通池 VWD，10 mm，流通池体积 14 µL，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 µL，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	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	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	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

14 理论背景

2D-LC 的理论基础 470
不相关性 471
分辨率 472
峰容量 475
^{2}D 作为检测器 478
成功模式组合 480
溶剂洗脱模式 481
实际问题 486

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。

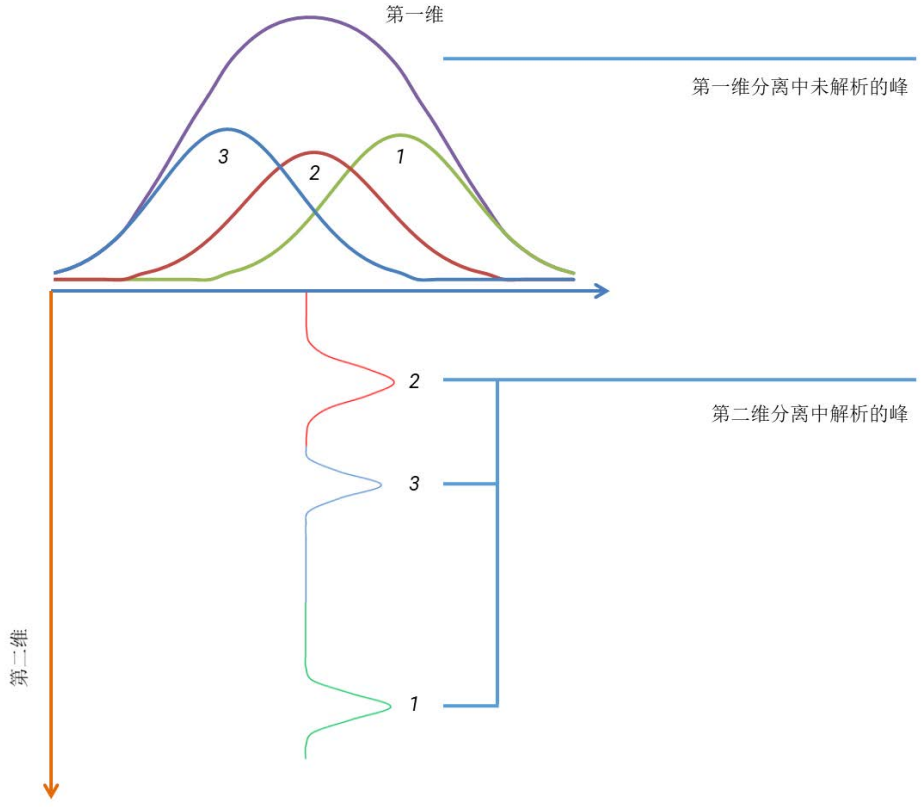


图 267　不相关第一维和第二维的峰容量之间的关系

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 471 页的不相关性，
- 第 472 页的分辨率和
- 第 475 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 480 页的表 50 和第 484 页的表 51。

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 268 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。

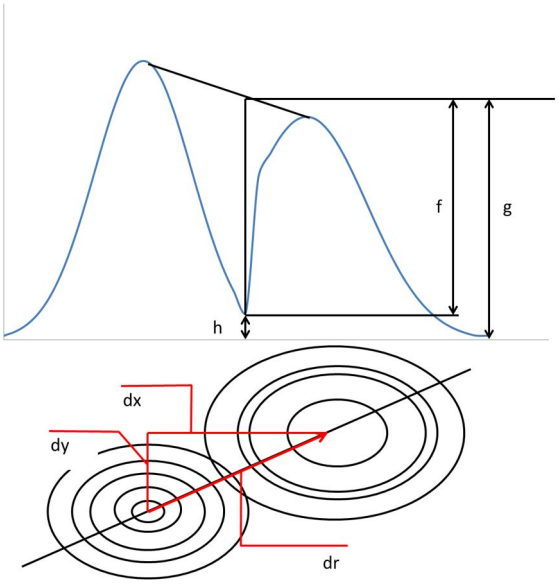


图 269 ^{2}D 分辨率测量示意图：分辨率切片（顶部）和二维等高线图（底部）

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

$$R_2 = \frac{dy}{4\sigma_2}$$

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 270 ^{2}D 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 271　^{2}D 分辨率（峰谷比关系）

表 49　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：

$$n_c = \mathrm{P}N^{1/2}$$

（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：

$$n_c = \sum_{i=i}^{k} n_{ci}$$

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，单组分区域为 $A_0 = 2\pi r^2$，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域。

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 ^{2}D 峰容量

2D-LC 中的一个主要问题是，^{2}D 采样流程导致的 ^{1}D 分辨率损失。决定性因素是：

- ^{2}D 分离的梯度时间不得超过 ^{1}D 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 473 页的图 270）

^{2}D 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 478 页的2D 作为检测器）。第二色谱柱上观察到的峰宽与 ^{1}D 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 ^{1}D 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 ^{1}D 流出物的采样频率非常重要，以避免分辨率损失。

注意

理想 ^{2}D 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)

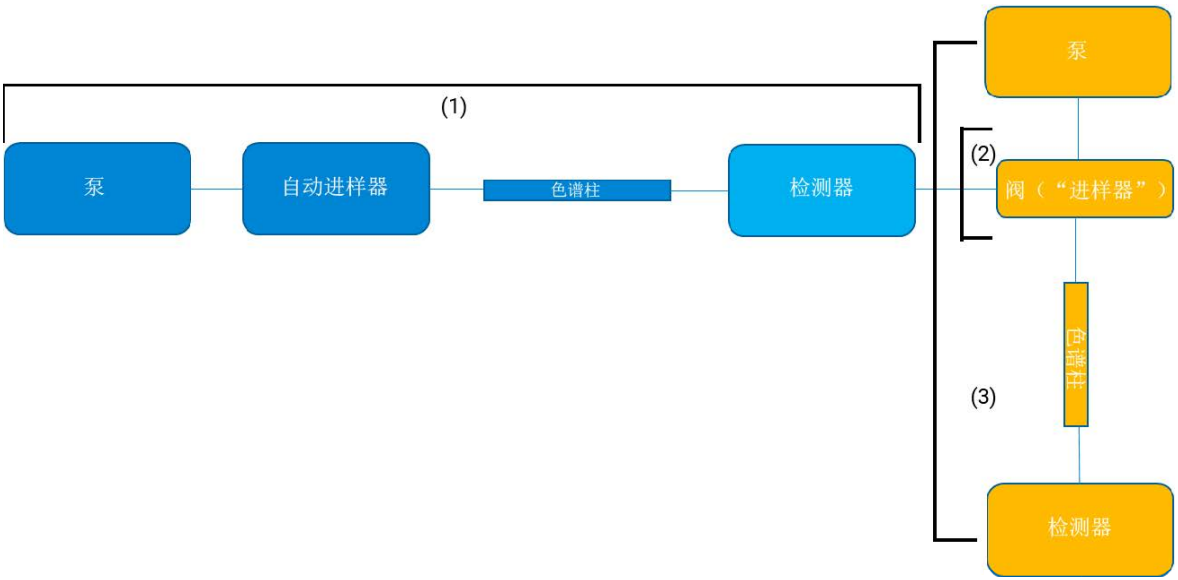


图 272　2D-LC 仪器图

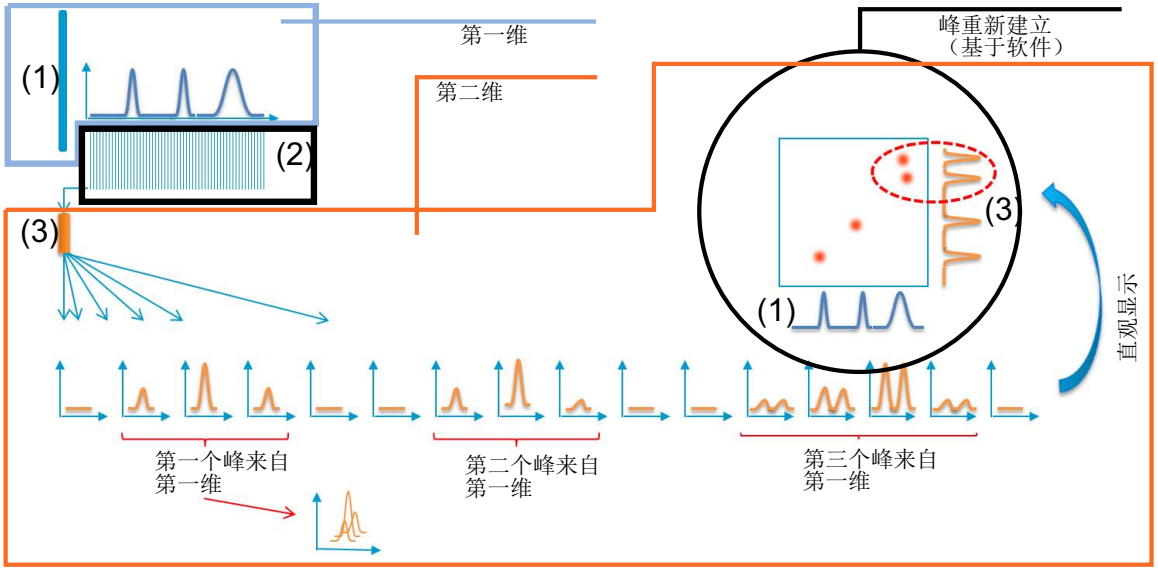


图 273　2D-LC 的原理（LCxLC 示例）：第一色谱柱的流出物 (1) 被采样 (2) 并进样到第二色谱柱 (3)。检测到第二色谱柱分离的峰并重新建立。

(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 480 页的表 50 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 50　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 484 页的表 51 专注于洗脱模式对 ^{2}D 分离的影响。

^{2}D 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

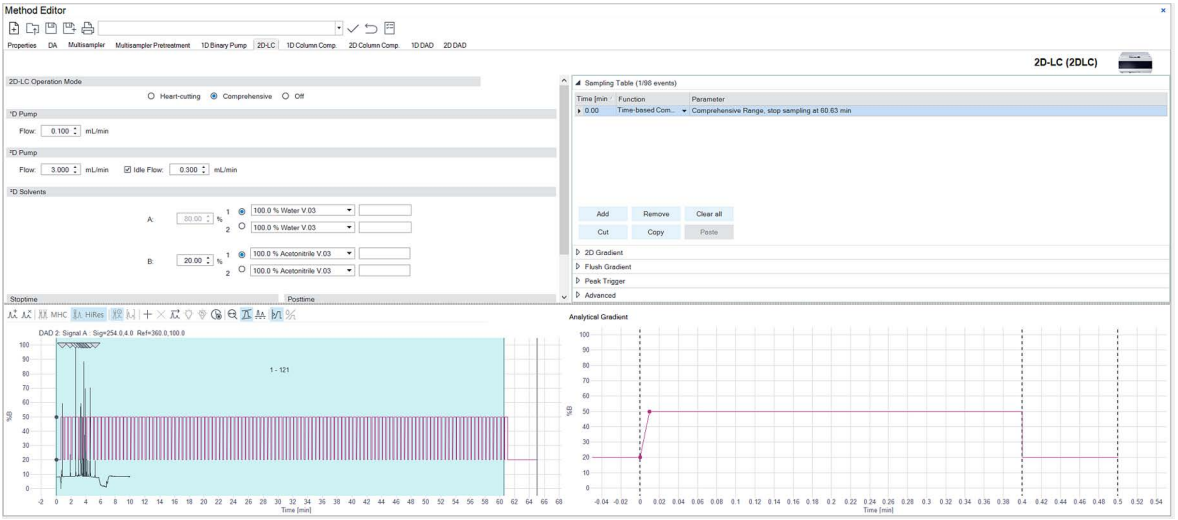


图 274　标准梯度模式

- 迁移梯度

  从每个 ^{2}D 分离到下一个二维分离，各个 ^{2}D 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 ^{2}D 梯度增加到下一个。

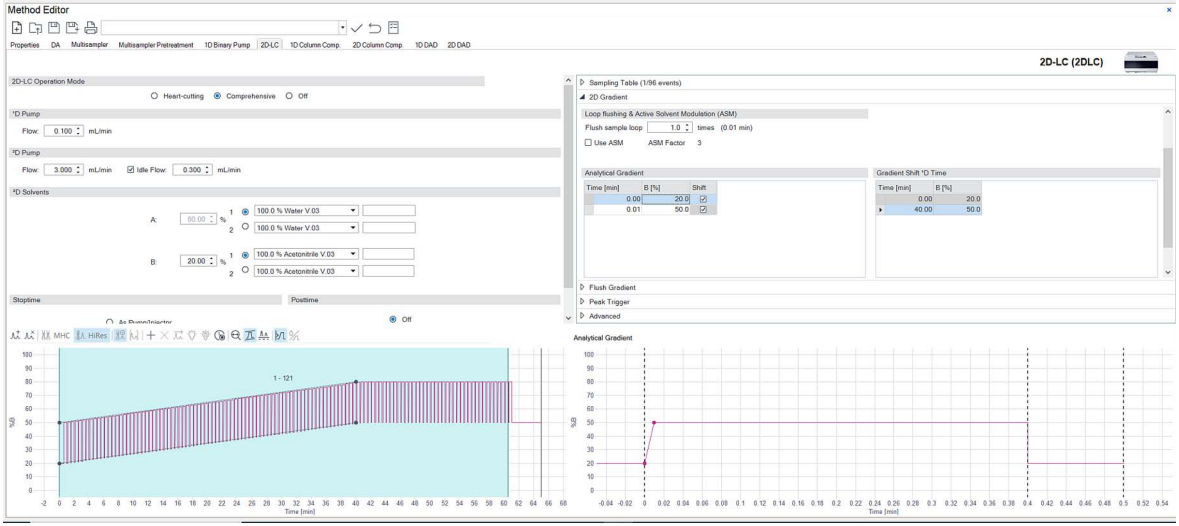


图 275　开始-%B 增加的迁移梯度模式

- 等度

  所有第二维分离将在等度模式下进行。

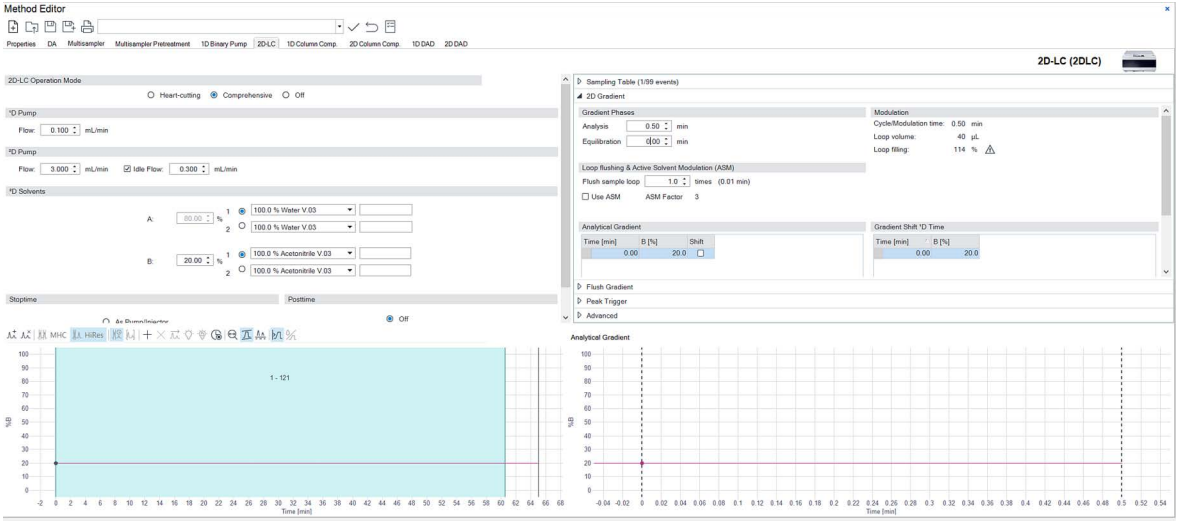


图 276　等度模式

- 递进等度

  在每个 ^{2}D 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 ^{2}D 分离过程中，^{2}D 泵送系统的洗脱液成分呈缓梯度。

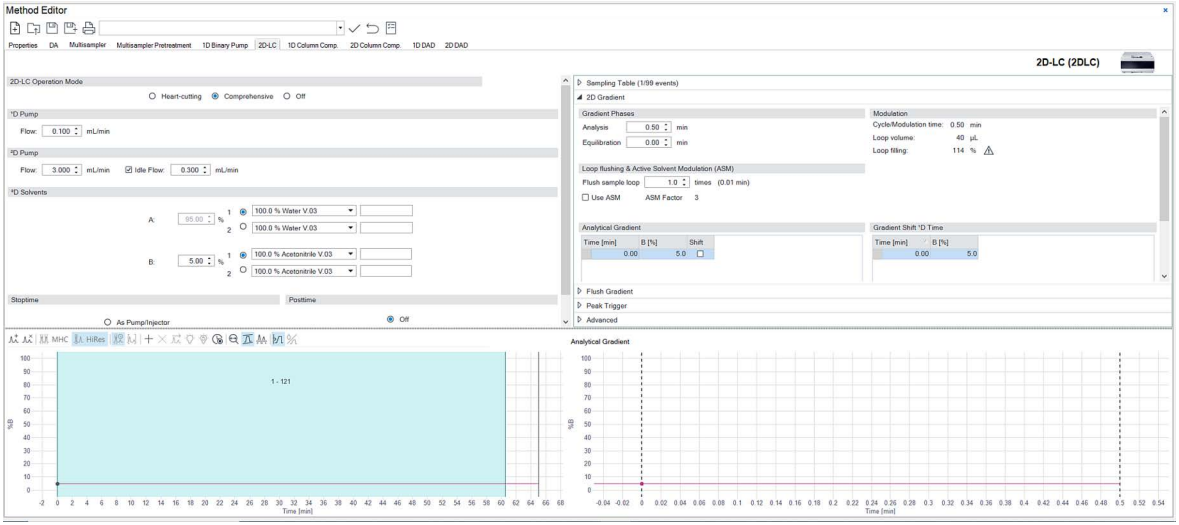


图 277　递进等度模式

表 51　^{2}D 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。

^{2}D 中的迁移梯度洗脱模式的影响

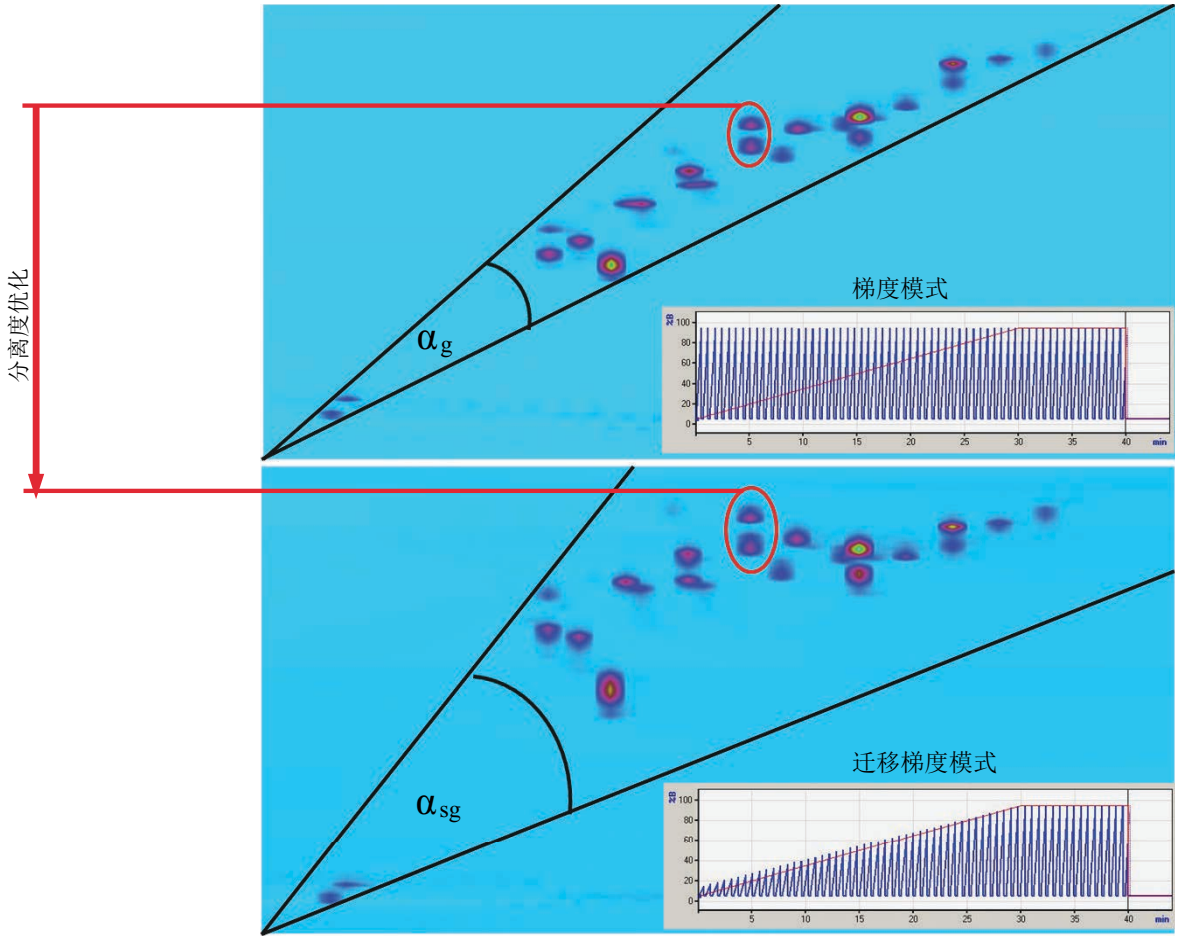


图 278 ^{2}D 梯度模式与等度模式的比较及其对分辨率的影响

在迁移梯度模式中实现的 $\alpha\sigma\gamma_{sg}$ 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 52 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	第二维分离中的梯度洗脱比等度洗脱提供更好的峰容量。 梯度洗脱是实现峰聚焦的最佳机制。
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：** • 分离尽可能多的成分，或 • 专注于特定成分的分辨率和定量	
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：** • 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	

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第二维梯度（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，因为在第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第二维检测器。

- 数据分析

  2D-LC 数据比较复杂。建议使用专用软件。

15 传统校验

校验程序 489
准备实验 491
运行实验 493
运行标准中心切割 2D-LC (LC-LC) 的校验程序 493
运行多重中心切割 (2D-LC) 的校验程序 499
运行高分辨率 (LC-LC) 的校验程序 505
运行全切割 (LCxLC) 的校验程序 510
运行 ASM 多重中心切割 (MHC) 的校验程序 516
运行 ASM 全切割（ASM 关闭）的校验程序 522

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 53　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 54 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 57 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）已制备好。

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）已制备好。

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 58 页的表 6。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 490 页的表 54。

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 55 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 55 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 56 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 µL 样品，传输毛细管，ASM 因子数
	^{2}D 柱温箱 (MCT)
色谱柱	RRHD Bonus-RP，2.1x 50 mm， 1.8 µm， 1200 bar (857768-901)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
	^{2}D 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 56 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

Sampling Table (9/91 events)

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 279 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 280 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 - 60 % B 1.25 min	30 % B 20 min
冲洗梯度	未使用	
	^{2}D 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 56 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 57 ^{2}D (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 57 ^{2}D (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 58 ^{2}D (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 58 页的表 6。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 490 页的表 54。

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 59 用于 MHC 和 高分辨率 2D-LC 的 1D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
	^{1}D 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
	^{1}D 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
	^{1}D 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 59 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 60 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 µL 样品，传输毛细管，ASM 因子数
	^{2}D 柱温箱 (MCT)
色谱柱	RRHD Bonus-RP，2.1x 50 mm， 1.8 µm， 1200 bar (857768-901)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
	^{2}D 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 60 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	

Sampling Table (9/91 events)

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 281 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 282 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	
	^{2}D 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 60 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 61 ^{2}D (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 61 ^{2}D (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 62 ^{2}D (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 58 页的表 6。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 490 页的表 54。

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 63 用于 MHC 和 高分辨率 2D-LC 的 1D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
	^{1}D 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
	^{1}D 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
	^{1}D 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 63 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 64 用于高分辨率的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
	2D-LC 阀
	MHC，带 40 µL 样品，传输毛细管，ASM 因子数
	^{2}D 柱温箱 (MCT)
色谱柱	RRHD Bonus-RP，2.1x 50 mm， 1.8 µm， 1200 bar (857768-901)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
	^{2}D 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

Sampling Table (2/98 events)

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 283 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 64 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
	^{2}D 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 65 ^{2}D (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 65 ^{2}D (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 65 ^{2}D (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 66 ^{2}D (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 58 页的表 6。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 490 页的表 54。

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 67 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 68 用于全切割 2D-LC 的 1D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
	^{1}D 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
	^{1}D 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
	60 % B 34 min
	90 % B 34.5 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
	^{1}D 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 69 用于全切割 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

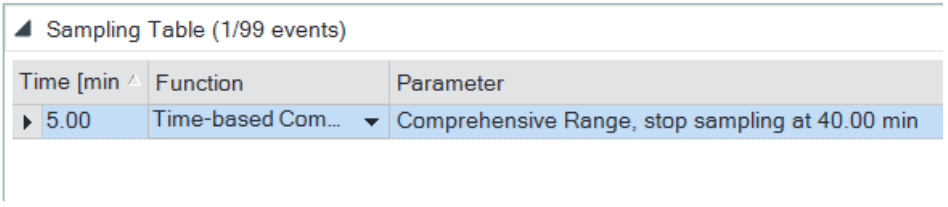
参数	值
	2D-LC 阀
	MHC，带 40 µL 样品，传输毛细管，ASM 因子数
	^{2}D 柱温箱 (MCT)
色谱柱	RRHD Eclipse Plus C18，3.0x 50 mm， 1.8 µm (959757-302)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
	^{2}D 泵
	全切割
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	乙腈
流速	2.5 mL/min
空闲流量	未使用
停止时间	约 43 min（如果 2D 中的峰不清除，将不会自动延长）
后运行时间	6 min
采样表	开始 5 min，停止于 40 min
	
	图 284 全切割
2D 梯度：	分析 0.2 min，平衡 0.15 min
	分析梯度 - 迁移梯度迁移 1D：
	25 % B 25 % B 5 min 0.00 min 50 % B 40 min

表 69 用于全切割 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
	50 % B 0.2 min 50 % B 5 min 75 % B40 min
	^{2}D 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 70 ^{2}D (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
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 70 ^{2}D (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
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 70 2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
	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 71 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 58 页的表 6。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 490 页的表 54。

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 72 1D (HPLC) 中的建议条件，ASM MHC

参数	值
	^{1}D 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
	^{1}D 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
	^{1}D 检测器 (DAD)
二极管阵列检测器信号 A	254 nm，带宽 4 nm

表 72 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 73 用于 ASM MHC 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
	2D-LC 阀
	MHC，带 40 µL 样品，传输毛细管，ASM 因子 3
	^{2}D 柱温箱 (MCT)
色谱柱	RRHD Bonus-RP，2.1x 50 mm， 1.8 µm， 1200 bar (857768-901)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
	^{2}D 泵

表 73 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

Sampling Table (9/91 events)

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 285 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 286 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：

表 73 用于 ASM MHC 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
	3 % B 0.00 min 3 % B 0.37 min 10 % B 0.38 min 30 % B 6 min 60 % B 1.62
	^{2}D 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 74 ^{2}D (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

表 74 2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
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
	色谱图类型标签偏移 Y 范围
	TIC TIC 1510000000

表 74 2D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
	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 75 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 58 页的表 6。此处无法显示所有选项。作为示例，此处使用了第 490 页的表 54。

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 76 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 77 1D (HPLC) 中的建议条件，ASM 全切割

参数	值
	^{1}D 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
	^{1}D 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
	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

表 77 1D (HPLC) 中的建议条件，ASM 全切割

参数	值
	^{1}D 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 78 用于 ASM 全切割 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

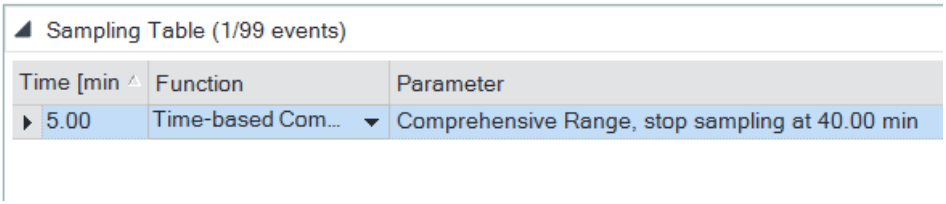
参数	值
	2D-LC 阀
	MHC，带 40 µL 样品，传输毛细管，ASM 因子数
	^{2}D 柱温箱 (MCT)
色谱柱	RRHD Eclipse Plus C18，3.0x 50 mm， 1.8 µm (959757-302)
色谱柱温度	40 °C
停止时间	与泵一致/无限制
	^{2}D 泵
	全切割  **图 287 全切割**
流动相 A	水 + 0.2 % 甲酸
流动相 B	甲醇

表 78 用于 ASM 全切割 2D-LC 的 2D (HPLC) 中的建议条件

参数	值
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 25 % B 5 min 0.00 min 50 % B 40 min 50 % B 5 min 50 % B 0.20 min 75 % B 40 min
	^{2}D 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 79 ^{2}D (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
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 79 ^{2}D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
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
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
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 79 ^{2}D (LC-MS) 中的建议条件

参数	值
	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 80 ^{2}D (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。

16 附录

常规安全信息 529
常规安全信息 529
安全标准 529
总则 529
通电前 530
将仪器接地 530
切勿在易爆环境中操作 530
切勿拆下仪器机盖 531
切勿改装仪器 531
如果发生损坏 531
溶剂 532
安全标志 533
废弃电子电气设备 (WEEE) 指令 535
无线电干扰 536
声音发射 537
毛细管编码指南 538
毛细管说明的语法 538
颜色编码注解一览表 539
用于 OpenLab 的 2D-LC 方法导入插件 541
前提条件 541
用于 OpenLab 的 2D-LC 方法导入插件 541
2D-LC 方法导入插件的功能 541
兼容性矩阵 542
安装 2D-LC 方法导入插件 544
导入 2D-LC ChemStation 采集方法 544
溶剂信息 547
补充信息 548
Agilent Technologies 网站 549

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 533 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 81 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 81 标志

	磁场 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。
	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 Lp <70 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 82　毛细管编码指南

类型 **类型指示主要功能，如定量环或连接毛细管。**		**材料** **材料表示使用哪种原材料。**		**左/右接头** **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

表 82 毛细管编码指南

类型 类型指示主要功能，如定量环或连接毛细管。		材料 材料表示使用哪种原材料。		左/右接头 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
				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 83 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

表 83 Agilent 毛细管颜色编码注解

以 mm 为单位的内径			颜色代码
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。

用于 OpenLab 的 2D-LC 方法导入插件

前提条件

- 在 PC 上安装 2D-LC Software for OpenLab CDS（最低版本：2D-LC Software for OpenLab CDS 1.1 和 OpenLab CDS 2.7）。
- 在软件中连接并配置 2D-LC 系统，请参阅此《用户指南》中的“安装”一章。
- 存储 2D-LC ChemStation 数据的备份副本，并将数据传输到安装了 OpenLab CDS 2.7 的计算机。

用于 OpenLab 的 2D-LC 方法导入插件

该插件在 2D-LC 软件安装媒介上可用。

有关缺陷修复的信息，请参阅文件夹 \OpenLab\Docs\EN 中的附加文档软件状态公告 (SSB) 和软件发布公告 (SRB)。

2D-LC 方法导入插件的功能

- 使用方法导入插件体验无缝的方法转移。
- 将您的仪器方法加速转移到 OpenLab CDS 平台。

兼容性矩阵

兼容性矩阵提供有关硬件、固件和操作系统的安装和执行准备条件的信息。确认仪器型号和硬件是否通过 OpenLab CDS 的硬件和软件验证。检查安装媒介上的文档。

支持的操作系统

支持以下操作系统：

- Windows 10（32 位/64 位）
- Windows 11（64 位）

支持的 LC & CE Driver

此版本的 Agilent 2D-LC Software 支持：

- LC & CE Driver 3.5 版本

Agilent LC & CE Driver 已针对 Windows 默认字体大小 (100 %) 进行了优化。如果字体较大，则可能需要增加窗口大小，否则可能会导致截断。

支持的色谱数据系统

支持 OpenLab CDS 和 Agilent 2D-LC 软件的以下组合：

表 84　支持的色谱数据系统

色谱数据系统	版本
OpenLab CDS	2.7
2D-LC 软件	1.1

推荐的固件

使用 2D-LC 软件 1.1 版的以下固件版本：

表 85 推荐的固件

仪器	推荐的固件
Agilent 1100 系列、1200 系列和 1200 Infinity	A.07.01 或更高版本
Agilent 1200 系列、1200 Infinity 和 1120 Compact LC	B.07.35 或更高版本
Agilent 1200 Infinity 支持的模块	C.07.30 或更高版本
Agilent 1260/1290 Infinity II 模块	D.07.35 或更高版本

注意 该堆叠中的所有模块都需要在 A/B/C/D.07.01 集合中进行固件更新，而不仅仅是新模块，例如，因为馏分收集器使用新的检测器功能。

固件兼容性

如果您需要版本号低于兼容版本的固件版本，我们保证此较新固件与早期固件版本 100 % 向后兼容。因此，不会对您的 CDS 产生影响。固件更新不需要重新认证 LC 模块/系统。请参阅 **https://www.agilent.com** 上提供的固件发布文档中的固件兼容性声明。

注意 有关详细信息，请参阅 LC 和 CE 驱动程序以及 CDS 的相应发布说明。

安装 2D-LC 方法导入插件

1 浏览并导航到 2D-LC Software for OpenLab CDS 数据媒介上的文件夹 \OpenLab\MethodImport。

2 双击安装文件夹中的 **Agilent2D-LCMethodImportPlugInForOpenLab.msi**。

3 接受许可协议中的条款，单击**安装**，然后按照软件安装过程提供的说明进行操作。

4 要确认安装，请单击**完成**。

在**开始** > **设置** > **应用程序** > **应用程序和功能**下，您将找到有关新安装的应用程序的信息。

导入 2D-LC ChemStation 采集方法

1 确保您希望转移的 ChemStation 采集方法在以下任一位置可用：

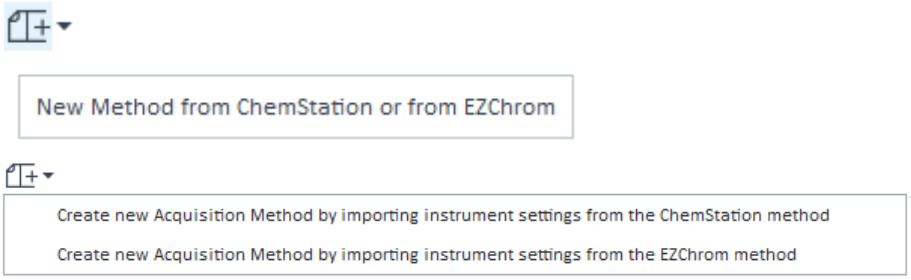
- 在从 ChemStation 复制方法文件的 USB 驱动器上，
- 在安装 OpenLab CDS 的计算机的文件系统中的文件夹中。

2 从 OpenLab CDS 控制面板配置 2D-LC 仪器。为确保迁移所有采集参数，请确保配置与 ChemStation 中仪器的原始配置完全匹配。否则，OpenLab CDS 会根据当前仪器配置调整采集方法。有关详细信息，请参阅在线帮助中的“方法解析工作原理”。

3 通过控制面板启动仪器。

4 导航到 OpenLab CDS Acquisition。

5 通过左上角的**文件**选项卡导入方法，或通过符号直接在方法采集窗口中导入。



6 选择**从 ChemStation 新建方法**。

7 显示**选择目录**对话框时，使用它导航到您的方法所在的 USB 驱动器或计算机文件系统，然后打开所需的方法文件 (**.M**)。

文件已导入。

注意 如果 OpenLab CDS 中的仪器配置与 ChemStation 中的仪器配置不同，则会触发方法解析，必须选择所需的选项。有关如何导入 ChemStation 方法和方法解析的信息，请阅读在线帮助。

注意 如果其中一个传输的参数无效，则所有参数将设置为目标系统提供的默认值。

注意 在第 545 页的方法迁移的限制和所需的手动操作中列出的情况下，参数不会完全传输到 OpenLab CDS。在任何情况下，建议始终检查方法参数。验证迁移方法的运行是否创建了匹配的结果。

注意 任何警告信息都可在活动日志中找到。

方法迁移的限制和所需的手动操作

与用于 ChemStation 的 2D-LC 软件相比，新 OpenLab CDS 平台中的功能实现存在一些差异，用户必须了解这些差异。无法传输新平台不支持的功能，例如动态运行时间扩展。

以下部分列出了主要差异:

- 如上所述，新系统及其配置应与原始系统匹配。如果 ChemStation 仪器中没有匹配的模块，则会为 OpenLab 驱动程序设置默认方法参数。注意方法解析错误和警告，并检查您迁移的方法。还要检查日志/活动日志，了解有关方法迁移的错误、警告和提示。
- OpenLab CDS 不支持**运行时间扩展**。

  在 ChemStation 生成的基于峰的方法中，运行时间会自动扩展以分析所有存储的切片。在 OpenLab CDS 中，用户必须计算和设置迁移的基于峰的方法的运行时间。例如，可根据参考测量值来估计运行时间，从而进行此计算。

  对于基于时间的方法，OpenLab CDS 可以验证和计算运行时间。

- **冲洗梯度**：在 ChemStation 中，冲洗梯度的持续时间可以设置为 ^{2}D 色谱柱体积的函数。该信息在 OpenLab CDS 中不可用，因此需要手动设置持续时间，以便时间足以冲洗和平衡 ^{2}D 色谱柱。

  将分析梯度的初始溶剂组成设置为冲洗梯度的初始溶剂组成。

  用户还需要验证溶剂组成。
- **迁移梯度**：迁移梯度的定义和行为已经改变。在 OpenLab CDS 中，上下起点与时间零点相关。因此，如果方法已迁移，第一个迁移梯度时间点将设置为 0，而不改变组成。由于此自动设置将改变斜率，建议用户在迁移方法后对迁移梯度进行验证。

  在传输迁移梯度之前，将弹出以下消息：**对于新的 2D-LC 软件，该方法中的迁移梯度略有修改。如果方法运行得到预期结果，请进行验证。**
- 不支持将 ChemStation 方法的 MSD 部分导入 OpenLab CDS。**MSD 方法参数**使用默认设置进行初始化。在 OpenLab 中，MSD 只能设置为第二维检测器。
- 仅在 ^{1}D 中支持**外部溶剂选择阀**（泵阀组合 (PVC)）。第二维中使用 PVC 的 ChemStation 方法无法映射到 OpenLab CDS 驱动程序中的 ^{2}D 泵。因此，^{2}D 泵驱动程序将使用默认方法参数。
- **峰检测器信号**将默认设置为信号 A。如果它应为不同的信号，建议用户手动调整。

  必须手动选择峰检测器。
- **基于峰的全切割 2D-LC (LCxLC)** 在用于 OpenLab CDS 的 2D-LC 软件中不可用，因此无法迁移此类方法。

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：

    $2CHCl_3 + O_2 \rightarrow 2COCl_2 + 2HCl$

    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：
    - OpenLab CDS：**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 : D0034023 Rev. A

Agilent