

ГХ-МС Agilent 7000E/7010C TripleQuadrupole

Руководство по концепциям



Примечания

© Agilent Technologies, Inc. 2022

Согласно законам США и международным законам об авторском праве запрещается воспроизведение любой части данного руководства в любой форме и любым способом (включая сохранение на электронных носителях, извлечение или перевод на иностранный язык) без предварительного письменного разрешения компании Agilent Technologies, Inc.

Номер руководства по каталогу

G7006-91008

Издание

Первое издание, июль 2022г.

Напечатано в США

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Blvd.
Santa Clara, CA 95051

Microsoft® и Windows® — охраняемые в США товарные знаки компании Microsoft Corporation.

Версия ПО

Это руководство действительно для программного обеспечения Agilent MassHunter Workstation — программы Data Acquisition для тройного квадрупольной серии 7000/7010 версии не ниже B.03.00 до тех пор, пока не будет заменено.

Гарантия

Материал представлен в документе «как есть» и может быть изменен в последующих изданиях без уведомления. Кроме того, в пределах, допустимых действующим законодательством, компания Agilent отказывается от всех явных или подразумеваемых гарантийных обязательств в отношении данного руководства и любой содержащейся в нем информации, в том числе от подразумеваемой гарантии товарной пригодности и гарантии пригодности для конкретной цели. Компания Agilent не несет ответственности за ошибки, случайные или косвенные убытки, связанные с поставкой и эффективным применением на практике данного документа и любой содержащейся в нем информации. Если между компанией Agilent и пользователем подписано отдельное соглашение, условия гарантии которого не соответствуют условиям гарантий, содержащимся в данном документе, то силу имеют условия отдельного соглашения.

Технологические лицензии

Аппаратура и (или) программное обеспечение, описанные в данном документе, поставляются по лицензии и могут использоваться или копироваться только в соответствии с условиями лицензии.

Ограничение прав

Ограничение прав Правительства США. Права на программное обеспечение и технические данные, предоставляемые федеральному правительству, включают только права, передаваемые в обычном порядке конечным пользователям. Agilent предоставляет стандартную коммерческую лицензию на программное обеспечение и технические данные в соответствии с FAR 12.211 (технические данные) и 12.212 (компьютерное программное обеспечение), а для Министерства обороны США — согласно DFARS 252.227-7015 (технические данные — коммерческие элементы) и DFARS 227.7202-3 (права, касающиеся коммерческого программного обеспечения или документации по компьютерному программному обеспечению).

Предупреждающие сообщения

ОСТОРОЖНО

Сообщение **ОСТОРОЖНО** указывает на опасность. Данное сообщение предназначено для привлечения внимания к процедуре, методике и т. п., которые при неправильном выполнении или несоблюдении рекомендаций могут привести к повреждению продукта или потере важных данных. Если в документе встречается сообщение **ОСТОРОЖНО**, не следует продолжать выполнение действий до тех пор, пока указанные условия не будут полностью выяснены и выполнены.

ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ

Сообщение **ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ** указывает на опасность. Данное сообщение предназначено для привлечения внимания к процедуре, методике и т. п., которые при неправильном выполнении или несоблюдении рекомендаций могут привести к травме или смерти. Если в документе встречается сообщение **ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ**, не следует продолжать выполнение действий до тех пор, пока указанные условия не будут полностью выяснены и выполнены.

В данном руководстве...

В руководстве по концепциям представлена «общая картина» скрытых процессов, происходящих внутри систем ГХ-МС Agilent Triple Quadrupole серии 7000/7010, которая поможет понять, каким образом работают оборудование и программное обеспечение.

1 «Обзор»

Узнайте, как системы Triple Quad серии 7000/7010 помогают вам выполнять вашу работу.

2 «Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполом и МС с одиночным квадруполом»

Познакомьтесь с основными понятиями, которые нужно знать, чтобы понять, как работают системы Triple Quad серии 7000/7010.

3 «Система Triple Quad и чувствительность»

Узнайте, как достигается высокая чувствительность систем Triple Quad серии 7000/7010.

4 «Программное обеспечение Agilent MassHunter Workstation – приложение Instrument Control для системы Triple Quad»

Познакомьтесь с основными понятиями, лежащими в основе разработки программного обеспечения Agilent MassHunter Workstation – приложения Instrument Control для тройного квадрупольного прибора.

Содержание

В данном руководстве... **3**

1 Обзор

Описание системы **8**

Помощь в областях применения **9**

Помощь в сборе данных **10**

Помощь в анализе данных **12**

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Принцип действия МС с одиночным квадруполем **16**

Конструкция масс-спектрометра с одиночным квадруполем **16**

Принцип работы масс-спектрометра с одиночным квадруполем **17**

Принцип действия МС с тройным квадруполем **23**

Конструкция систем Triple Quad серии 7000/7010 **23**

Инновационные усовершенствования систем Triple Quad серии 7000/7010 **24**

Принцип работы масс-спектрометра с тройным квадруполем **26**

3 Система Triple Quad и чувствительность

Как системы Triple Quad серии 7000/7010 улучшают чувствительность **30**

Чувствительность **30**

Снижение химического шума с помощью MRM **32**

Чувствительность и воспроизводимость систем Triple Quad серии 7000/7010 **34**

Как каждая составная часть системы улучшает чувствительность **39**

Технология обратной продувки капиллярного потока в
ГХ **39**

Источники ионов **39**

Источники ионов с ионизацией электронным
ударом **39**

Источник ионов с химической ионизацией **41**

Квадрупольные фильтры масс **43**

Предварительные и последующие фильтры **43**

Ячейка соударений **44**

Детектор **48**

Система откачки **49**

4 Программное обеспечение Agilent MassHunter Workstation –
приложение Instrument Control для системы Triple Quad

Описание **52**

Настройка **53**

Сбор данных **54**

1

Обзор

Описание системы	8
Помощь в областях применения	9
Помощь в сборе данных	10
Помощь в анализе данных	12

В этой главе дан обзор составных частей ГХ-МС Agilent Triple Quadrupole серии 7000/7010 и рассказывается, как они помогают выполнять работу.

Описание системы

МС Agilent Triple Quadrupole серии 7000/7010 — это автономный трехквадрупольный масс-спектрометр, используемый вместе с газовыми хроматографами Agilent серии 8890 и 9000. Особенности систем Triple Quad серии 7000/7010:

- Один турбомолекулярный вакуумный насос с делением потока.
- ротационный или дополнительный сухой спиральный форвакуумный насос;
- источник ионов с ионизацией электронным ударом с независимым нагревом в МС;
- два гиперболических квадрупольных фильтра массы с независимым подогревом в МС;
- одинарная гексапольная ячейка соударений;
- Электронный умножитель (детектор) с высокоэнергетическим динодом (ВЭД).
- интерфейс ГХ/МС с независимым подогревом в ГХ;

Данная конфигурация обладает преимуществами во многих областях применения. Данные интерпретируются с помощью программного обеспечения MassHunter Workstation, обеспечивающего количественный и качественный анализ получаемых данных.

Triple Quad серии 7000/7010 — это единственная объединенная система ГХ-МС с тройным квадруполем, оснащенная гексапольной ячейкой соударений, которая заполнена азотом и гелием для улучшения фрагментации ионов перед завершающей фильтрацией и количественным определением.

Помощь в областях применения

Объединенная система ГХ-МС Triple Quad серии 7000/7010 позволяет количественно определять следовые количества органических соединений в сложных матрицах. Такой тип количественного анализа находит применение в следующих областях:

- исследования безопасности пищевых продуктов;
- исследования окружающей среды;
- поиск новых лекарственных средств;
- токсикология;
- судебно-медицинская экспертиза;

В паре с ГХ Agilent 8890, 9000 или 7890 системы Triple Quad серии 7000/7010 обеспечивают точный воспроизводимый анализ целевых соединений в сложных матрицах. Благодаря этому достигаются:

- пределы обнаружения и количественное определение с точностью до фемтограммов;
- выборочный количественный анализ целевых веществ в пробах с высоким химическим фоном;
- улучшенные соотношения сигнал/шум (С/Ш) в сложных матрицах;
- возможность удовлетворения строгих нормативов в отношении аналитических ограничений проб в определенных областях применения;
- упрощенная работа с программным обеспечением для управления приборами и анализа данных Agilent.

Системы Triple Quad серии 7000/7010 обеспечивают высокую чувствительность анализа ГХ-МС/МС, необходимую во многих коммерческих и регулятивных областях применения.

Помощь в сборе данных

С помощью ПО рабочей станции MassHunter WorkStation Instrument Control, находясь в одном окне, можно выполнять следующие задачи.

Подготовка прибора

- Запуск и остановка приборов с помощью ПО
- Загрузка параметров в ГХ и Triple Quad в режиме реального времени для управления прибором.
- Оптимизация параметров МС в автоматическом или ручном режиме с помощью программ настройки Agilent и печать отчета об автонастройке.
- Контроль состояния прибора в реальном времени
- Просмотр в режиме реального времени хроматограмм и графиков параметров прибора (как ГХ, так и МС) и печать отчетов с графиками в режиме реального времени
- Просмотр линейных центроидных спектров пиков или спектров профиля в диапазоне масс для пика в реальном времени

Установка методов сбора данных

- Ввод в метод сбора данных и сохранение в нем значений параметров ГХ и Triple Quad.
- Выбор и маркировка общих ионных хроматограмм или извлеченных ионных хроматограмм для графического отображения в режиме реального времени.
- Установка временных сегментов для каждого типа сканирования и анализа, когда параметры изменяются в зависимости от сегмента времени или сканирование выполняется в пределах сегментов времени
- Печать отчета о методе сбора данных

Сбор данных

- Ввод сведений о пробе и программ (сценариев) предварительной или последующей обработки и выполнение анализа одной пробы в интерактивном режиме
- Ввод и автоматическое выполнение анализа отдельных проб и проб, упорядоченных в виде последовательности проб.
- Установка пред- или постсценариев для запуска между образцами в последовательности
- Создание и выполнение последовательности для оптимизации параметров сбора данных МС
- Печать отчета последовательности
- Просмотр событий системы, в том числе времени начала и остановки, событий в ходе выполнения анализа и ошибок
- Печать отчета о журнале событий

Чтобы узнать, как начать работать с ГХ-МС Agilent Triple Quadrupole, см. *Начальное руководство ГХ-МС Triple Quad серии 7000E/7010C*.

Чтобы узнать, как использовать ГХ-МС Agilent Triple Quadrupole с реальными пробами и данными, см. *Руководство по ознакомлению с ГХ-МС Triple Quad серии 7000E/7010C*.

Чтобы узнать, как выполнять отдельные задачи с помощью ГХ-МС, см. онлайн-справку.

Более подробная информация о ГХ Agilent представлена в пользовательской документации Agilent для применяемой модели ГХ.

Помощь в анализе данных

Программа количественного анализа

Компания Agilent разработала приложение для количественного анализа, позволяющее проводить исследования малых количеств вещества. Эта программа обладает следующими уникальными функциональными возможностями:

- импорт информации непосредственно из метода сбора данных;
- предоставление помощника аппроксимации кривой для проверки всех аппроксимаций и статистики по качеству кривой;
- интегрирование с помощью автоматического непараметрического интегратора, использующего передовой алгоритм, оптимизированный для данных тройного квадруполя;
- окно результатов серии, с помощью которого можно работать сразу с целой серией данных;
- автоматическое определение выбросов;
- предоставление предварительно настроенных шаблонов для составления основных отчетов и обеспечение возможности создания пользовательских отчетов в приложении Microsoft Excel.

О программе количественного анализа см. в документе *ПО Agilent MassHunter Workstation (руководство по ознакомлению с программой количественного анализа)* или в онлайн-справке.

Программа качественного анализа

Эта программа используется для быстрого просмотра качественных характеристик данных, таких как оптимальные переходы от материнского к дочернему иону, что используется при разработке метода.

Компания Agilent разработала приложение для качественного анализа с целью обработки больших объемов информации в одном центральном расположении. С помощью этой программы можно выполнять следующие операции с открытыми данными масс-спектрометра любого типа:

- извлекать хроматограммы;
- просматривать и извлекать спектры пиков;
- вычитать фон;
- интегрировать хроматограммы;
- проводить поиск соединений.

Можно настроить методы для автоматического выполнения изложенных выше и других задач при открытии файлов с данными.

О программе качественного анализа см. в документе *ПО Agilent MassHunter Workstation (руководство по ознакомлению с программой качественного анализа)* или в онлайн-справке.

1 **Обзор**
Помощь в анализе данных

2

Внутреннее устройство — сравнение МС с тройным квадруподем и МС с одиначным квадруподем

Принцип действия МС с одиначным квадруподем	16
Конструкция масс-спектрометра с одиначным квадруподем	16
Принцип работы масс-спектрометра с одиначным квадруподем	17
Принцип действия МС с тройным квадруподем	23
Конструкция систем Triple Quad серии 7000/7010	23
Инновационные усовершенствования систем Triple Quad серии 7000/7010	24
Принцип работы масс-спектрометра с тройным квадруподем	26

В этой главе объясняется внутреннее устройство систем Triple Quad серии 7000/7010. Основой для понимания работы тройного квадруподевого масс-спектрометра является знание принципа действия масс-спектрометра с одиначным квадруподем. Поэтому сначала мы объясним устройство масс-спектрометра с одиначным квадруподем.

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Принцип действия МС с одиночным квадруполем

Принцип действия МС с одиночным квадруполем

Для начала рассмотрим основные аспекты масс-спектрометра с одиночным квадруполем. Понимание принципа действия масс-спектрометра с одиночным квадруполем позволяет получить представление о характерных особенностях систем Triple Quad серии 7000/7010.

Конструкция масс-спектрометра с одиночным квадруполем

Масс-спектрометрия основывается на анализе ионов, перемещающихся в вакууме.

Ионизация образца происходит в источнике ионов, который схематически изображен на **Рис. 1** слева. В данном случае используется источник с ионизацией электронным ударом, который ионизирует пробу с помощью заряженной нити накала.

Ионы анализируются масс-анализатором (фильтром масс), который управляет движением ионов по мере их перемещения к детектору, где они преобразуются в фактические сигналы.

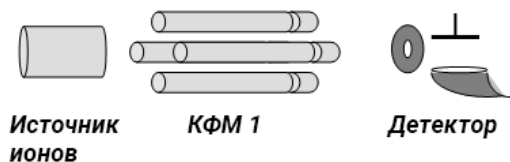


Рис. 1. Схематическое изображение масс-спектрометра с одиночным квадруполем

Квадруполюсные масс-анализаторы состоят из четырех параллельных стержней, на которые подается определенное напряжение постоянного тока и радиочастотное (РЧ) напряжение. Эти стержни отфильтровывают все ионы, кроме тех, которые имеют заданные отношения массы к заряду (m/z).

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Принцип работы масс-спектрометра с одиночным квадруполем

РЧ-напряжение прикладывается ко всем четырем стержням, но на отрицательных (–) стержнях оно сдвинуто по фазе на 180 градусов по сравнению с положительными (+) стержнями. Стержни маркированы знаками + и –, указывающими полярность напряжения постоянного тока, прикладываемого к ним.

В источнике образуются все ионы, способные генерироваться из пробы. Однако, когда прикладывается определенный набор напряжений, лишь ионы с определенным значением m/z могут пройти сквозь квадруполь и достичь детектора. При изменении напряжения ионы с другими значениями m/z будут проходить через фильтр. Полное сканирование МС достигается путем повышения прикладываемого к четырем стержням напряжения постоянного тока и радиочастотного напряжения по всему расширенному диапазону значений.

Принцип работы масс-спектрометра с одиночным квадруполем

Теорию масс-спектрометра с одиночным квадруполем можно объяснить на примере концептуальной модели. См. **Рис. 2**.



Рис. 2. Концептуальная модель масс-спектрометра с одиночным квадруполем

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Принцип работы масс-спектрометра с одиночным квадруполем

В данной модели:

- Все ионы, содержащиеся в пробе, формируются во внешнем источнике ионов и собираются в воронке. Шарики разных цветов и размеров представляют различные ионы с различными значениями m/z .
- Квадрупольный масс-анализатор представлен в виде подвижной ленты, которая служит для фильтрации ионов при их прохождении сквозь отверстия разных размеров. Ионы, находящиеся в воронке, проходят через масс-фильтр, попадая в детектор.
- Детектор представлен улавливающей воронкой, расположенной под фильтрующей лентой.

По мере продвижения ленты (анализатора) или изменения напряжений на стержнях ионы с различными значениями m/z отфильтровываются масс-спектрометром.

При последовательном увеличении в анализаторе значения m/z создается полный скан МС.

Если лента не движется, детектор продолжает контролировать одно и то же единственное значение m/z в течение всего периода сканирования. Такой тип анализа называют регистрацией выбранных ионов, или SIM. В этом режиме работы масс-спектрометр с одиночным квадруполем имеет наибольшую чувствительность.

Период сканирования выбирается (фиксируется) пользователем. Пользователь может задать время выдержки, чтобы сканировать определенный диапазон масс (например, m/z от 50 до 1 000), или оставить один выбранный ион (SIM), или перейти к нескольким выбранным ионам в течение периода сканирования. В режиме SIM квадрупольный фильтр масс не сканируется по всему диапазону. Прежде чем переходить к значениям для следующего SIM, устанавливаются необходимые напряжение постоянного тока и радиочастотное напряжение для фильтрации одной массы в течение заданного времени.

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Принцип работы масс-спектрометра с одиночным квадруполем

Одиночный квадруполь: SIM

Чтобы добиться наилучшей чувствительности или количественного измерения, одиночный квадруполь используется в режиме SIM (**Рис. 3**). Рабочий цикл представляет собой меру времени, фактически затраченного прибором на измерение сигналов. В режиме SIM одиночный квадруполь почти все время анализирует сигнал иона с определенным значением m/z . Это приводит к почти 100%-ному сбору данных в течение рабочего цикла.

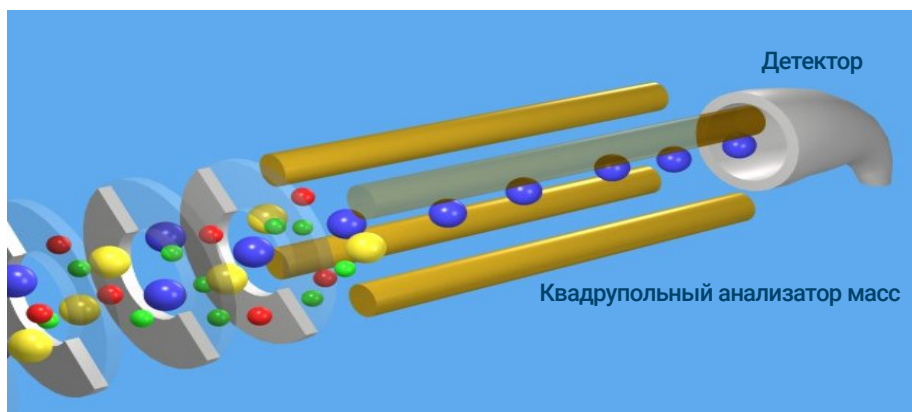


Рис. 3. Одиночный квадруполь: SIM

В этом примере:

- 1 Все ионы (+, – и нейтральные частицы) формируются в источнике ионов. Источники ионов Agilent состоят из ряда линз и узла отражателя, которые направляют ионный пучок в анализатор.
- 2 Ионная оптика направляет ионы на квадрупольный масс-анализатор.
- 3 Только ионы с конкретным значением m/z (представлены в виде голубых шариков на **Рис. 3**) попадают в детектор.
- 4 Детектор генерирует электрический сигнал, пропорциональный количеству пришедших ионов.

Данная система имеет ряд преимуществ:

- наилучшая чувствительность количественного определения;
- повышенная избирательность;
- улучшенная хроматографическая специфичность.

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Принцип работы масс-спектрометра с одиночным квадруполем

Одиночный квадруполь: полное сканирование МС

При полном сканировании МС квадруполь используется в качестве меняющегося со временем масс-фильтра, и сканирование выполняется пошаговым повышением напряжения постоянного тока и радиочастотного напряжения. Такой режим обеспечивает фильтрацию соответствующих ионов со значениями m/z на протяжении процесса получения масс-спектра. См. **Рис. 4**.

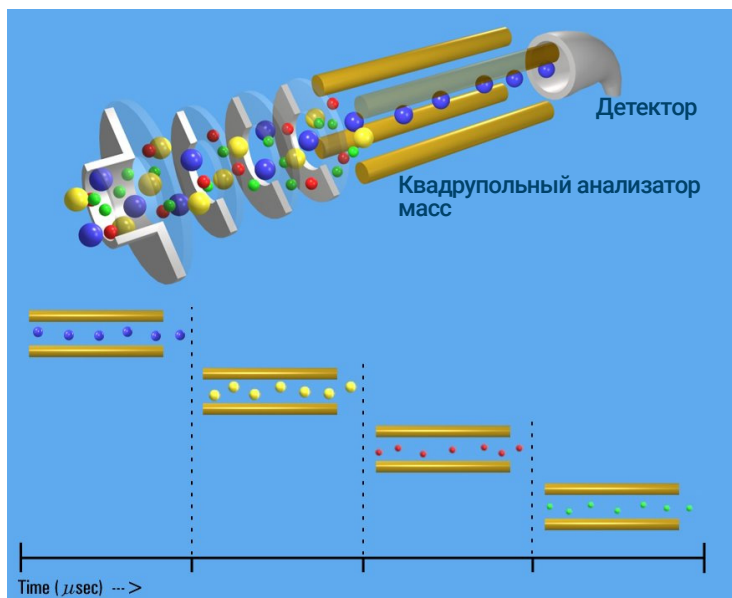


Рис. 4. Одиночный квадруполь: полное сканирование МС

Режим полного сканирования МС менее чувствителен, поскольку рабочий цикл для каждого значения m/z значительно меньше 100 процентов. Квадрупольный анализатор масс сканирует ионы последовательно, пропуская определенные значения m/z в выбранном диапазоне к детектору.

И все же полное сканирование МС является полезным режимом работы, поскольку выявляются все ионы, сформированные в источнике ионов. Благодаря этому химик-аналитик предупреждается о других соединениях, которые элюируются вместе с интересующими соединениями, и эта информация полезна для разработки методов сбора данных в режиме SIM.

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Принцип работы масс-спектрометра с одиночным квадруполем

Что такое фрагментарные ионы?

Полные сканирования прибором с одиночным квадруполем также можно использовать для исследования фрагментарных ионов. См. **Рис. 5**.

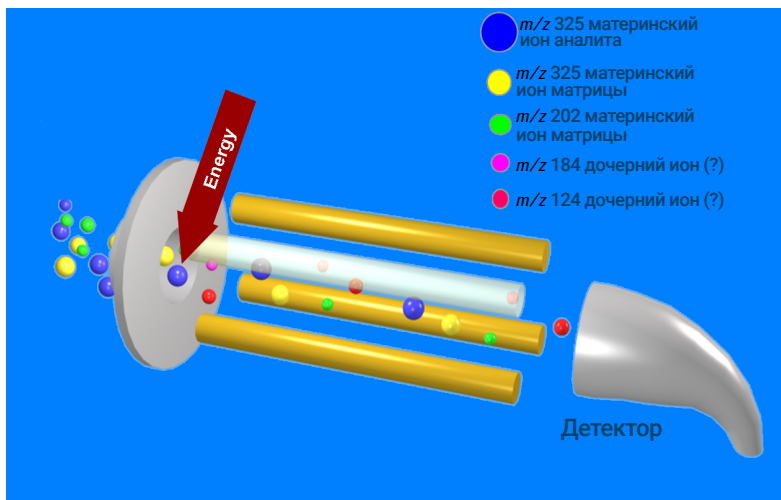


Рис. 5. Фрагментарные ионы, определяемые МС с одиночным квадруполем

На рисунке показано, что фрагментарные ионы, называемые также дочерними ионами, формируются путем фрагментации или распада материнских ионов. Материнские ионы, образуемые в источнике ионов, проходят через масс-анализатор без изменений, если к их движению не прикладывается дополнительная энергия в той области, где возможна фрагментация. Если ионы сталкиваются с молекулами газа и энергия поступательного движения достаточно высока, то в результате этих столкновений энергия поступательного движения преобразуется в молекулярные колебания, которые вызывают фрагментацию ионов. Это явление называют диссоциацией, индуцированной соударениями (CID).

Фрагментация, или CID, может осуществляться в области низкого давления между источником ионов и масс-анализатором. На выход источника ионов воздействует вакуум, создаваемый двухступенчатыми вакуумным насосом. В масс-спектрометре Agilent с одиночным квадруполем давление газа в области между источником ионов и квадруполем составляет примерно $10\text{--}20 \times 10^{-5}$ мм рт. ст., что значительно ниже атмосферного давления (760 мм рт. ст.). При нормальной работе ко всей этой области прикладывается напряжение, чтобы проходящие через нее ионы продолжали двигаться к масс-анализатору. Даже если эти ионы сталкиваются с молекулами газа в данной области, обычно их энергии недостаточно для фрагментации.

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Принцип работы масс-спектрометра с одиночным квадруполем

Однако по мере повышения напряжения энергия поступательного движения ионов возрастает. Поэтому, если ионы сталкиваются с молекулами газа (**Рис. 6**), происходит CID. Даже если эта фрагментация происходит не в месте формирования ионов, ее все равно относят к типу «CID в ионном источнике».

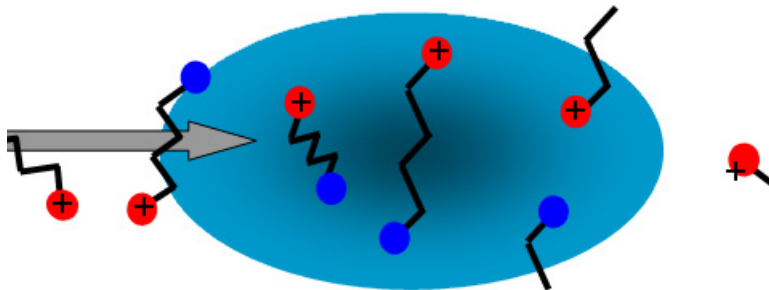


Рис. 6. Фрагментация ионов вследствие диссоциации, индуцированной соударениями

Масс-спектрометр с тройным квадруполем может выполнять анализ данных МС/МС с помощью фрагментации в ячейке соударений, как описано в следующем разделе.

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Принцип действия МС с тройным квадруполем

Принцип действия МС с тройным квадруполем

Предыдущий раздел, посвященный работе масс-спектрометра с одиночным квадруполем, помогает объяснить принципы действия масс-спектрометра с тройным квадруполем.

Конструкция систем Triple Quad серии 7000/7010

Масс-спектрометр с тройным квадруполем состоит из источника ионов с последующей ионной оптикой, направляющей ионы в первый квадруполю. Схема ныне действующих систем Triple Quad серии 7000/7010 показана на **Рис. 7**.

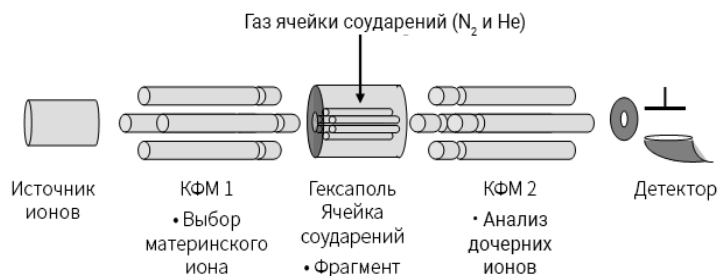


Рис. 7. Основные компоненты систем Triple Quad серии 7000/7010

Как и в МС с одиночным квадруполем, анализаторы состоят из четырех параллельных гиперболических стержней, посредством которых фильтруются выбранные ионы. После прохождения первого квадруполя отфильтрованные ионы попадают в ячейку соударений, где они фрагментируются. Ячейку соударений обычно называют вторым квадруполем, но в данном случае по своей геометрической форме она представляет собой гексаполь, наполненный смесью азота и гелия.

Дочерние ионы, формируемые в ячейке соударений, направляются в третий квадруполюс для второго этапа фильтрации, чтобы можно было изолировать и изучить несколько переходов материнских ионов в дочерние ионы.

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Инновационные усовершенствования систем Triple Quad серии 7000/7010

Инновационные усовершенствования систем Triple Quad серии 7000/7010

Ионы поступают в МС из ГХ. Одно из нескольких усовершенствований трехквадрупольных систем ГХ-МС Agilent серии 7000/7010 состоит в технологии обратной циркуляции, используемой в ГХ Agilent. Технология обратной циркуляции минимизирует унос неподвижной фазы из колонки и улучшает разделение пробы. Это приводит к меньшему разбавлению пробы при низких потоках и снижению химического шума с устранением ложных пиков в данных.

После разделения в ГХ компоненты пробы передаются в источник ионов, где формируются ионы. Доступные источники ионов электронным ударом (ЭУ) содержат двойные нити накала, которые можно регулировать по отдельности и выбирать для использования в зависимости от их рабочих характеристик. Конструкция с двойной нитью накала позволяет продолжать выполнение анализа с одной нитью накала, даже если другую нить необходимо заменить или очистить.

После того как проба ионизирована, отражатель направляет ионы через ряд линз в первый квадрупольный анализатор, где они фильтруются по отношению массы к заряду.

Ионы, прошедшие через первый квадрупольный анализатор, направляются в усовершенствованную ячейку соударений, где они фрагментируются. В системах Triple Quad серии 7000/7010 выходящий из квадруполя ионный пучок фокусируется путем добавления постфильтра, что гарантирует эффективную концентрацию ионов.

Ячейка соударений, по сути, представляет собой гексаполь, наполняемый потоком азота и гелия. Элементы конструкции инновационной ячейки соударений обеспечивают ускорение ионов в продольном направлении для высокоскоростного анализа МС/МС. Использование гелия в качестве гасящего газа в ячейке соударений снижает шум, создаваемый нейтральными частицами гелия, а также повышает эффективность процесса фрагментации. Добавление гелия в поток газа ячейки соударений стабилизирует ионы большой массы, улучшает управление процессом фрагментации и снижает создаваемый нейтральными частицами шум в данных.

Фрагментированные ионы, формируемые в ячейке соударений, направляются затем в предварительный фильтр, прежде чем они попадают в третий квадруполь. Аналогично постфильтру первого анализатора этот предварительный фильтр фокусирует ионный пучок в квадруполь. В третьем квадруполе происходит второй этап фильтрации.

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Инновационные усовершенствования систем Triple Quad серии 7000/7010

Наконец, прошедшие через третий квадруполь ионы обнаруживаются высокоэнергетическим детектором. Дальнейшее повышение чувствительности систем Triple Quad серии 7000/7010 достигается за счет трехосевого высокоэнергетического динода (ВЭД). В ВЭД используется внеосевая конфигурация, благодаря которой заряженные ионы отрываются от нейтральных частиц, которые удаляются с помощью турбонасоса.

Высокоэффективный турбонасос с разделением потока обеспечивает вакуум и эффективно удаляет газ-носитель и неионизированный материал, позволяя выполнять точный количественный анализ продукта.

Прошедшие через ВЭД ионы оцениваются количественно детектором с электронным умножителем. Благодаря нормализованной по усилению регулировке этого детектора обеспечивается постоянная чувствительность в течение всего срока службы электронного умножителя.

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Принцип работы масс-спектрометра с тройным квадруполем

Принцип работы масс-спектрометра с тройным квадруполем

Тройные квадруполи обеспечивают потенциальные возможности для МС/МС несколькими способами (см. **Рис. 8**).

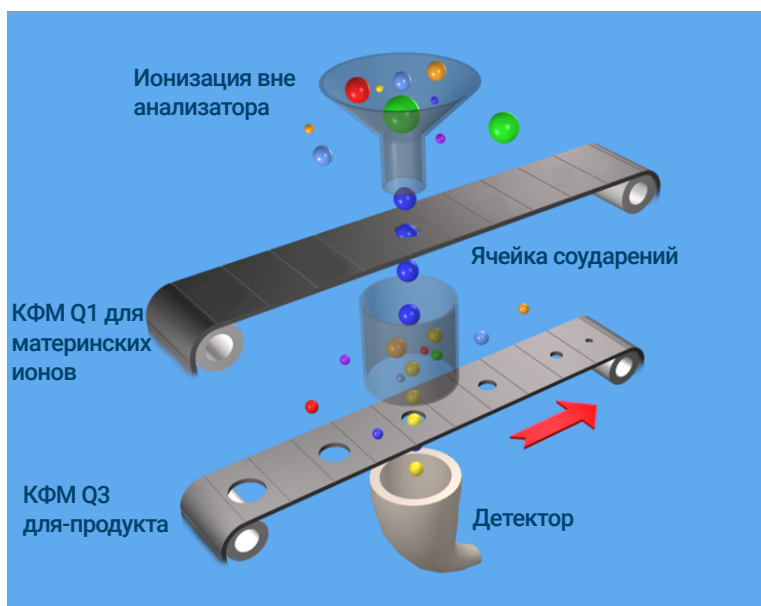


Рис. 8. Концептуальная модель масс-спектрометра с тройным квадруполем: с МС1 (квадруполем Q1) в режиме SIM для передачи одного материнского иона m/z и МС2 (квадруполем Q3) в режиме сканирования для анализа дочерних ионов.

Если представить квадруполюсный масс-анализатор в виде движущейся ленты, то ячейку соударений можно поместить между лентами, чтобы фрагментировать ионы. Первую ленту можно фиксировать, чтобы выбирать, какие материнские ионы пропускать в ячейку соударений. Можно использовать ячейки соударений различных типов.

Ячейкой может быть другой квадруполь, гексаполь (шесть стержней, как в системах Triple Quad серии 7000/7010), октуполь (восемь стержней) или даже волновод поперечной волны.

2 Внутреннее устройство — сравнение МС с тройным квадруполем и МС с одиночным квадруполем

Принцип работы масс-спектрометра с тройным квадруполем

Независимо от того, какая геометрия используется, в качестве газа ячейки соударений должен использоваться инертный, неактивный газ. Кроме того, прилагаемые к ячейке соударений напряжения должны отличаться от напряжений, прилагаемых к квадрупольям, чтобы движение всех ионов ускорялось настолько, что их энергии соударений было бы достаточно для фрагментации.

В примере на **Рис. 8** на стр. 26 материнский ион выбирается с помощью первого квадруполья и отправляется в ячейку соударений для фрагментации. Затем фрагменты сканируются при прохождении через третий квадруполь, и в результате получается скан дочерних ионов в режиме МС/МС. Поскольку фрагментные ионы являются фрагментами материнских ионов, они представляют собой части общей структуры материнской молекулы. Они выбираются третьим квадруполем в соответствии с их отношением m/z точно так же, как материнские ионы выбираются первым квадруполем. Таким способом тройной квадруполь обеспечивает повышенную чувствительность точного анализа целевых соединений.

Полное сканирование МС/МС (первая лента остается неподвижной, вторая лента движется) с использованием тройного квадрупольного МС — не самый чувствительный режим по той же причине, из-за которой полное сканирование МС с помощью одиночного квадруполья не является самым чувствительным режимом работы. Самый чувствительный режим работы прибора с тройным квадрупольным МС достигается фиксацией обеих лент и отслеживанием только определенного материнского иона и определенного дочернего иона. Этот режим называется мониторингом выбранных реакций, или SRM.

При нормальной работе прибор с тройным квадрупольным МС выполняет несколько SRM одних и тех же материнских ионов. Это называется мониторингом множественных реакций, или MRM.

2 Внутреннее устройство – сравнение МС с тройным квадруполом и МС с одиночным квадруполом

Принцип работы масс-спектрометра с тройным квадруполом

3

Система Triple Quad и ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ

Как системы Triple Quad серии 7000/7010 улучшают чувствительность	30
Чувствительность	30
Снижение химического шума с помощью MRM	32
Чувствительность и воспроизводимость систем Triple Quad серии 7000/7010	34
Как каждая составная часть системы улучшает чувствительность	39
Технология обратной продувки капиллярного потока в ГХ	39
Источники ионов	39
Квадрупольные фильтры масс	43
Предварительные и последующие фильтры	43
Ячейка соударений	44
Детектор	48
Система откачки	49

В этой главе показано, как системы Triple Quad серии 7000/7010 снижают химический и электронный шум и как каждая составная часть системы вносит свой вклад в улучшенную чувствительность прибора.

Как системы Triple Quad серии 7000/7010 улучшают чувствительность

Чувствительность — это рабочий показатель систем Triple Quad серии 7000/7010. Она выражается в соотношении сигнала к шуму (С/Ш). В трехкврупольных масс-спектрометрах проявляются несколько источников шума, в том числе химический и кластерный фоны, а также электроника.

Чувствительность

При разработке систем Triple Quad серии 7000/7010 чувствительности уделялось внимание на всех этапах создания оборудования, начиная источником ионов и заканчивая детектором. См. **Рис. 9**.

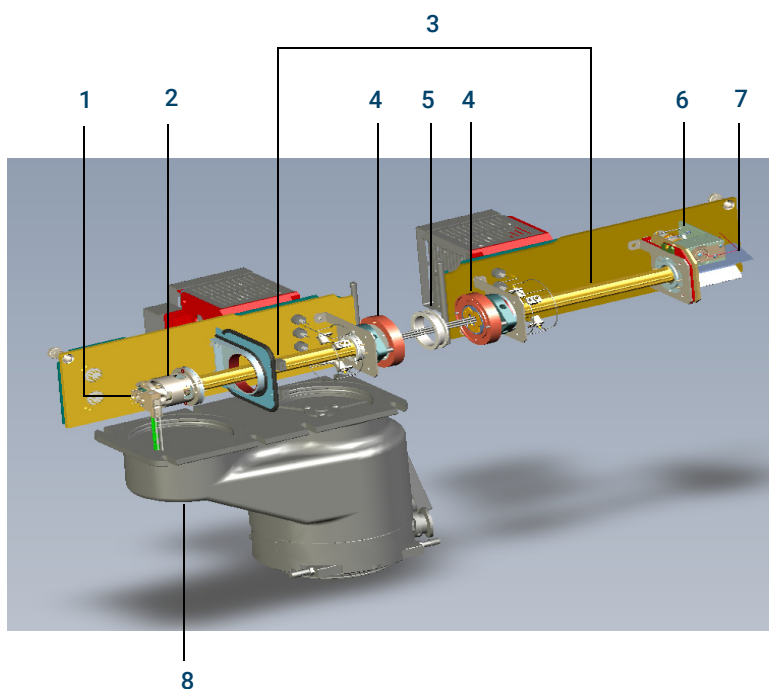


Рис. 9. Элементы конструкции, улучшающие чувствительность

Каким образом приборы Triple Quad серии 7000/7010 повышают чувствительность

- 1** В системы Triple Quad серии проба вводится из ГХ. Технология обратной продувки капиллярного потока обеспечивает улучшенное разделение пробы и снижение уноса фазы для повышения чистоты пробы.
- 2** Источники ионов с ионизацией электронным ударом содержат двойные нити накала, которые можно регулировать, оптимизируя ионизацию, и использовать на выбор.
- 3** В переднем и заднем анализаторах используются гиперболические квадруполи для оптимизации пропускания ионов и спектрального разрешения.
- 4** Пропускание ионов в ячейку соударений из нее улучшается за счет РЧ-сегментов квадруполя (предварительный и последующий фильтры).
- 5** Высокоэнергетическая ячейка соударений с линейным ускорением оптимизирует фрагментацию МС/МС, одновременно устраняя перекрестные помехи даже при очень коротких временах выдержки. Узел высокочастотного гексаполя малого диаметра помогает захватывать и фокусировать фрагментированные ионы. Используемый в качестве гасящего газа гелий способствует процессу фрагментации, одновременно снижая в данных шум, создаваемый нейтральными частицами.
- 6** Внеосевой динодный детектор со сжатием сигнала логарифмического усилителя обеспечивает высокое усиление, длительный срок службы и низкий шум. Благодаря этой конструкции нейтральные частицы минуют детектор без столкновения.
- 7** Длительный срок службы умножителя объясняется тем, что его поверхность бомбардируется только электронами, но ни в коем случае не ионами. Постоянная чувствительность в течение всего срока службы умножителя обеспечивается нормализованной по усилению регулировкой детектора.
- 8** Детектор предваряется вакуумной системой, которая содержит турбомолекулярный насос с разделением потока, эффективно устраняющий нейтральные материалы.

Снижение химического шума с помощью MRM

Мониторинг множественных реакций (MRM) осуществим только с помощью тройного квадрупольного МС. В этом режиме работы передний анализатор действует в режиме SIM, контролируя определенный ион. Предполагается, что после фильтрации в первом квадруполе проходят только ионы с одним отношением m/z (см. **Рис. 10**). После фрагментации в ячейке соударений в действие вступает третий квадруполь, который тоже работает в режиме SIM для определенных значений m/z , чтобы захватывать дочерние ионы, полученные из материнского иона. Третий график на **Рис. 10** показывает, насколько легко читаются данные, используемые для идентификации и количественного определения продукта.

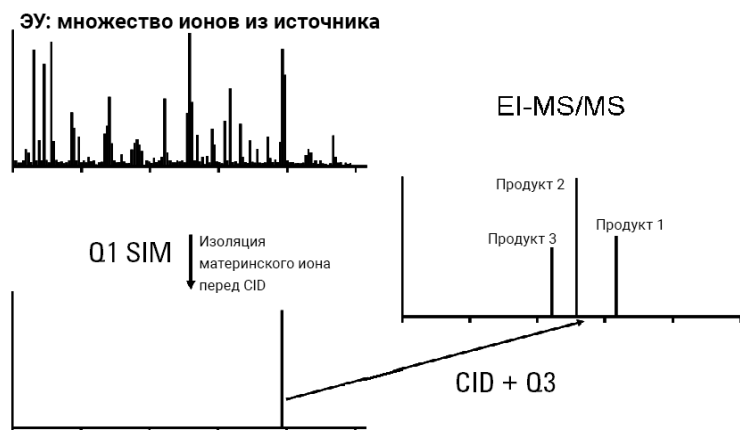


Рис. 10. Чувствительность в режиме MRM

3 Система Triple Quad и чувствительность

Снижение химического шума с помощью MRM

При преобразовании сигнала в процессе MRM системы Triple Quad серии 7000/7010 проходят через четыре этапа перехода (Рис. 11).

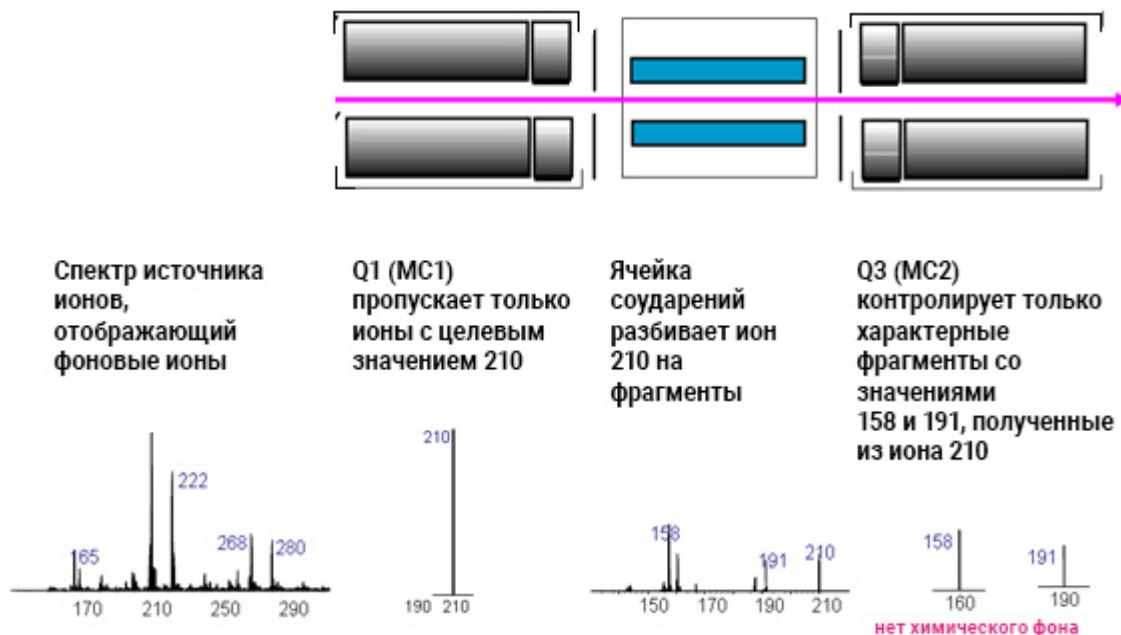


Рис. 11. Мониторинг множественных реакций (MRM)

Шаг 1 Крайний слева спектр представляет все, что ионизируется в источнике ионов. При количественном анализе веществ с низким уровнем содержания в грязной матрице трехквadrупольный ГХ-МС снижает химический шум сильнее, чем ГХ-МС с одиночным квадруполем.

Шаг 2 На этом этапе осуществляется предварительный выбор интересующего химического вещества с значением 210 m/z из попутно элюированных мешающих веществ, наблюдаемых в остальной части спектра. Второй спектр демонстрирует результат после прохождения первого квадруполя, или Q1 (MC1).

Шаг 3 После Q1 (MC1) в ячейке соударений формируются фрагментированные ионы. Соответствующий спектр MC/MC показан под ячейкой соударений.

3 Система Triple Quad и чувствительность

Чувствительность и воспроизводимость систем Triple Quad серии 7000/7010

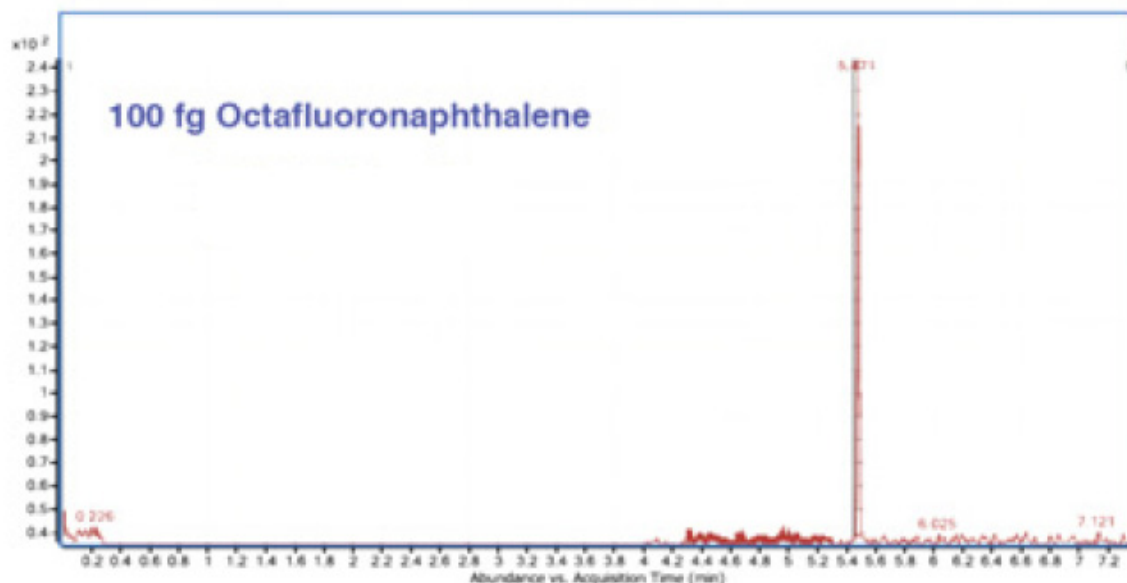
Шаг 4 Для пропускания через квадруполь Q3 (МС2) можно выбрать определенные фрагментированные ионы. Они отбираются для количественного анализа и подтверждения.

На втором этапе отбора с использованием квадруполя Q3 (МС2) удаляется основная часть химического фона. Обычно вероятность наличия мешающего изотопического соединения точно с такой же массой, что и у фрагментированного иона, крайне мала.

Чувствительность и воспроизводимость систем Triple Quad серии 7000/7010

На чувствительность данных МС влияют пределы обнаружения, разбавление пробы и загрязнение пробы. Улучшение чувствительности в МС достигается за счет повышенного уровня сигнала и снижения химического шума.

Согласно техническим характеристикам системы Triple Quad серии 7000/7010 обладают чувствительностью на уровне фемтограммов или долей фемтограммов в зависимости от модели прибора и измеряемого соединения. Это демонстрируется при установке прибора в учреждении заказчика. (См. **Рис.**).



Анализ пробы OFN объемом 100 фг в режиме MRM (272 → 222 m/z)

3 Система Triple Quad и чувствительность

Чувствительность и воспроизводимость систем Triple Quad серии 7000/7010

Анализ с использованием трехквадрупольного ГХ-МС полезен при определении количеств целевых соединений в сложных матрицах. Системы Triple Quad серии 7000/7010 позволяют улучшить анализ в сложных матрицах. На **Рис. 12** показана хроматограмма двух родственных соединений ПХБ (ПХБ 153 и ПХБ 138), введенных в колонку по 400 фг каждый. Количественный анализ перехода выполняется при $360 \rightarrow 290 m/z$, причем переход квалификатора измеряется при $360 \rightarrow 325 m/z$ в целях одновременного количественного анализа и подтверждения при самом низком пределе обнаружения. Полученные данные дают сильные сигналы на плоской базовой линии.

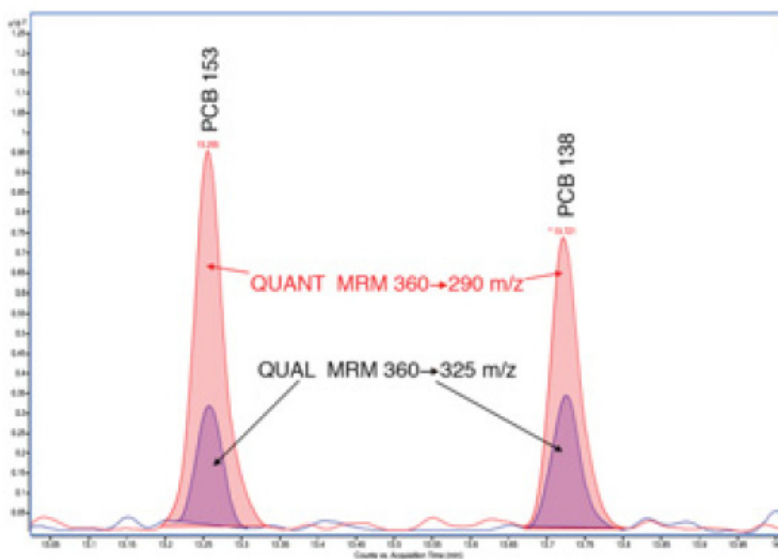


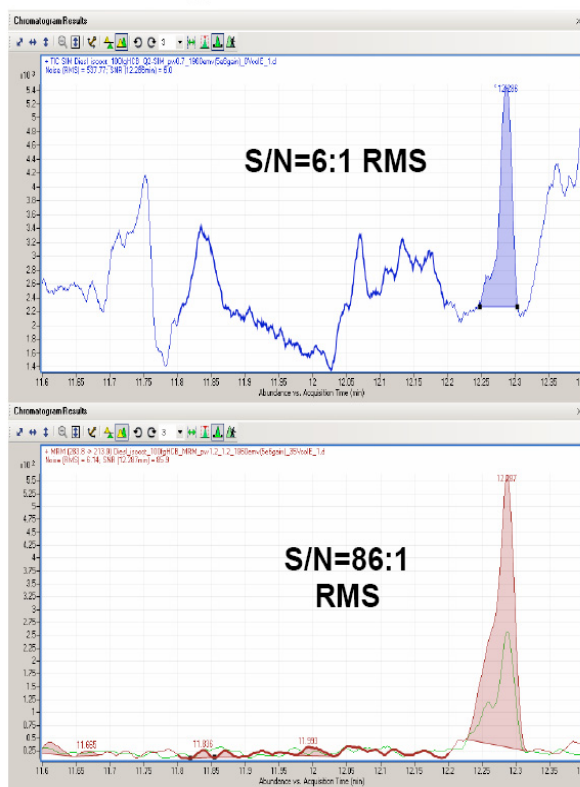
Рис. 12. Идентификация целевых ПХБ в сложных матрицах

3 Система Triple Quad и чувствительность

Чувствительность и воспроизводимость систем Triple Quad серии 7000/7010

Другим рабочим показателем систем Triple Quad серии 7000/7010 является высокая чувствительность на загрязненных пробах. На **Рис. 13** показан анализ содержания ГХБ в дизельном топливе. Данные, полученные в режиме SIM с одиночным квадруполем, демонстрируют низкое соотношение сигнал-шум (С/Ш) при наличии множества пиков и химического фонового шума. На втором графике анализ пробы в режиме определения среднеквадратического значения дал с/ш, равное 86:1, с количественным переходом 283,8→213,9 m/z . Эти результаты демонстрируют высокую чувствительность на «грязной» матрице.

300 fg HCB in Diesel



Одиночный MC:
SIM 283,8

MC/MC:
283,8→213,9

Рис. 13. Анализ ГХБ с помощью систем Triple Quad серии 7000/7010 в режиме MRM

3 Система Triple Quad и чувствительность

Чувствительность и воспроизводимость систем Triple Quad серии 7000/7010

Системы Triple Quad серии 7000/7010 дают четкие данные, помогающие оценить сложные пробы при низких уровнях. На **Рис. 14** показана хроматограмма нескольких родственных соединений ПХБ в экстракте мидии, измеренных при вводе в колонку 2 пг пробы. Полученные в результате данные дают сильные сигналы на плоской базовой линии, обеспечивающие недвусмысленную интерпретацию.

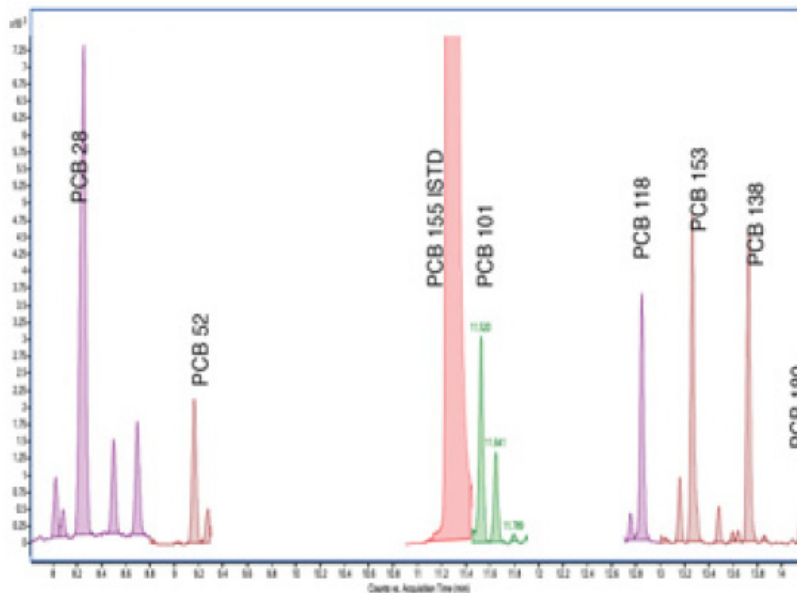


Рис. 14. Обнаружение нескольких ПХБ при низких пределах обнаружения

3 Система Triple Quad и чувствительность

Чувствительность и воспроизводимость систем Triple Quad серии 7000/7010

Воспроизводимость показывает, насколько хорошо согласуются данные от теста к тесту. На **Рис. 15** показаны результаты ГХ-МС, полученные при анализе в режиме MRM фосфорорганического инсектицида «Цианофос», введенного в чеснок в концентрации 0,5 частей на миллиард. Наложенные друг на друга результаты по пяти вводам пробы, показывающие количественный анализ перехода 243→109 m/z демонстрируют очень высокую воспроизводимость.

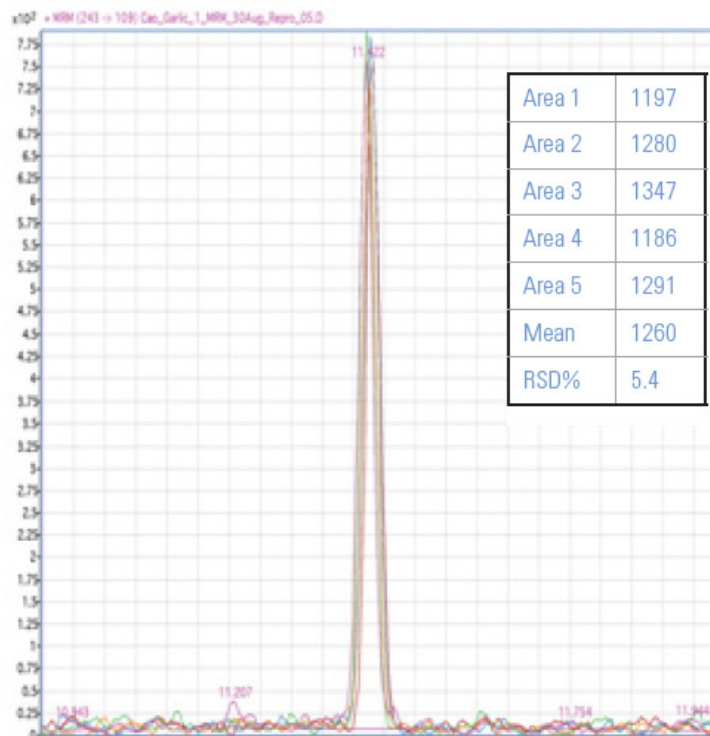


Рис. 15. Воспроизводимость данных в системах Triple Quad серии 7000/7010

Как каждая составная часть системы улучшает чувствительность

В этом разделе более подробно описывается, каким образом составные части систем Triple Quad серии 7000/7010 вносят свой вклад в снижение шума (**Рис. 9** на стр. 30).

Технология обратной продувки капиллярного потока в ГХ

Многие ГХ Agilent обеспечивают улучшенную передачу пробы благодаря технологии обратной циркуляции. С помощью обратной циркуляции из колонки удаляются элюированные на поздней стадии вещества, что приводит к уменьшению загрязнения пробы и создаваемого ими химического шума. Эта технология является неотъемлемой составляющей целостности и согласованности данных МС.

Источники ионов

В системах Triple Quad серии 7000/7010 используются те же самые методы внешней ионизации, что и в масс-спектрометре с одиночным квадруполом: ионизация методом электронного удара (ЭУ) и химическая ионизация (ХИ).

Источники ионов с ионизацией электронным ударом

Электронный удар является стандартным режимом ионизации для систем Triple Quad серии 7000/7010. Компоненты пробы, разделенные колонкой ГХ, поступают в источник через интерфейс ГХ-МС. Компоненты пробы ионизируются в ионизационной камере.

Нить накала, присоединенная к корпусу источника, испускает электроны в ионизационную камеру под воздействием магнитного поля. В результате взаимодействия этих электронов с молекулами пробы, происходит ионизация и фрагментация последних. Источники ионов, подходящие для систем Triple Quad серии 7000/7010 (см. **Рис. 16** на стр. 40 и **Рис. 19** на стр. 43 для ЭУ XTR), содержат две нити накала, что позволяет выбирать нить накала в зависимости от результатов регулировки.

3 Система Triple Quad и чувствительность

Источники ионов с ионизацией электронным ударом

После ионизации пробы отражатель направляет ионы в блок с электростатическими линзами. На отражатель подается положительное напряжение, которое толкает положительные ионы в расположенные друг за другом линзы. Там ионы концентрируются в плотных пучок и выталкиваются в анализатор. Вырезы на корпусе источника позволяют вакуумной системе откачивать ионы газа-носителя и неионизированный материал при входе пробы в квадруполь, снижая тем самым создаваемый нейтральными частицами шум и повышая чувствительность.

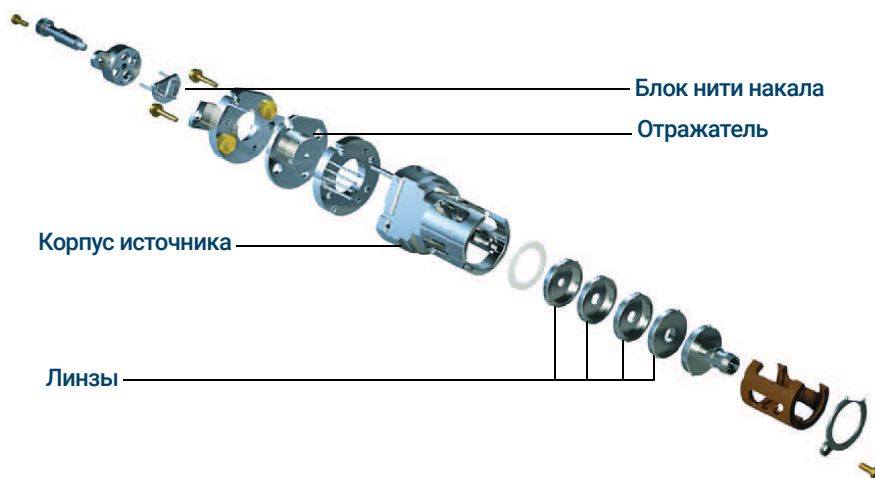


Рис. 16. Высокоэффективный источник ионов (HEIS) ЭУ

3 Система Triple Quad и чувствительность Источник ионов с химической ионизацией

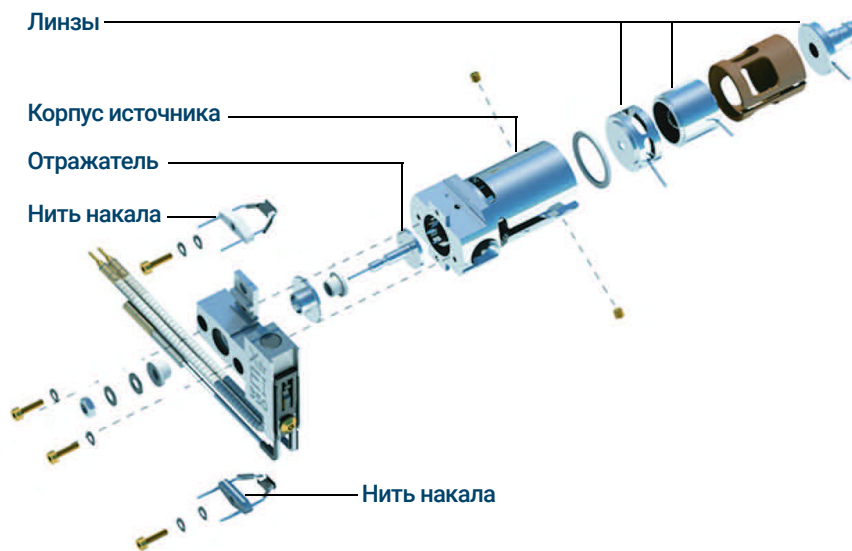


Рис. 17. Источник ионов с экстракционной линзой (XTR) ЭУ

Источник ионов с химической ионизацией

Системы Triple Quad серии 7000/7010 могут быть оборудованы дополнительным источником ионов с химической ионизацией (см. **Рис. 18** на стр. 42). При химической ионизации ионизационная камера заполняется большим количеством газа-реагента. Электроны из нити накала ионизируют многочисленные молекулы газа-реагента, который затем посредством большого количества химических реакций ионизирует молекулы пробы.

Химическая ионизация является «более мягким» методом ионизации. Она приводит к менее значительной фрагментации по сравнению с ионизацией электронным ударом, поэтому спектры ХИ обычно отличаются высокой интенсивностью молекулярного иона. По этой причине ХИ часто используется для определения молекулярной массы соединений.

3 Система Triple Quad и чувствительность

Источник ионов с химической ионизацией

В отличие от источников ионов с ионизацией электронным ударом, которые формируют только положительные ионы, источники ионов с химической ионизацией могут также использоваться для получения отрицательных ионов, поэтому они подходят для анализа соединений, которые плохо ионизируются или не ионизируются вообще в режиме положительной ионизации. В случае с группой проб отрицательная ХИ может обеспечить очень высокую чувствительность.

Источник ХИ, доступный для систем Triple Quad серии 7000/7010, может работать с широким диапазоном газов-реагентов, позволяя пользователю выбирать газ-реагент, обеспечивающий оптимальную чувствительность для определенной пробы.

На первый взгляд, источник ХИ похож на источник ЭУ ХТН. Однако источник ХИ имеет одну нить накала и значительно более мелкие отверстия в ионизационной камере. Его линзы также незначительно отличаются от линз источника ЭУ и не являются взаимозаменяемыми.

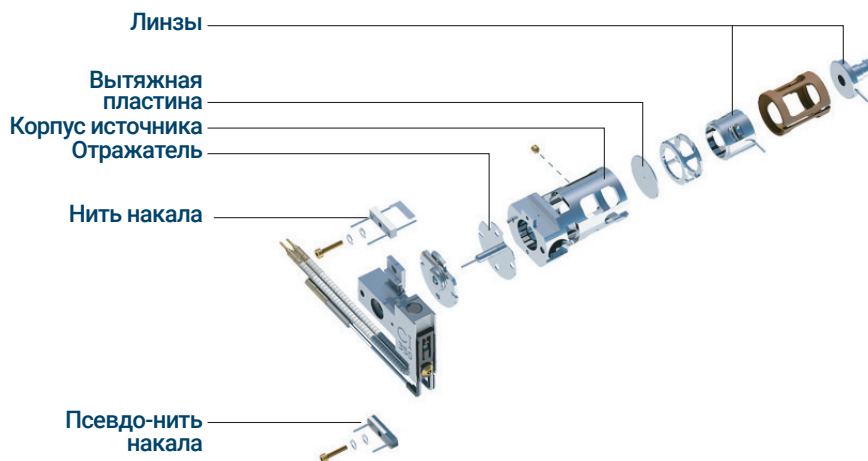


Рис. 18. Источник ионов ХИ

Квадрупольные фильтры масс

Квадруполи состоят из гиперболических стержней, которые оптимизируют пропускание ионов и спектральное разрешение. При такой конфигурации квадруполя потеря ионов меньше, чем в случае квадруполя с круглыми стержнями. Благодаря позолоченному кварцевому материалу анализатор может работать при высоких температурах и низком вакууме, избавляя от загрязнения, характерного для более низких температур.

Предварительные и последующие фильтры

Конечная часть узла квадруполя Q1 (МС1) тоже состоит из коротких гиперболических стержней, но прикладываемых к ним РЧ-напряжений достаточно лишь для направления ионов в ячейку соударений. Подобный набор стержней на выходе ячейки соударений является частью квадруполя Q3 (МС2). Эти короткие стержни, к которым прилагается только РЧ-напряжение, действуют в качестве предварительных и последующих фильтров для квадруполей, обеспечивая оптимальное пропускание ионов в ячейку соударений и из нее.

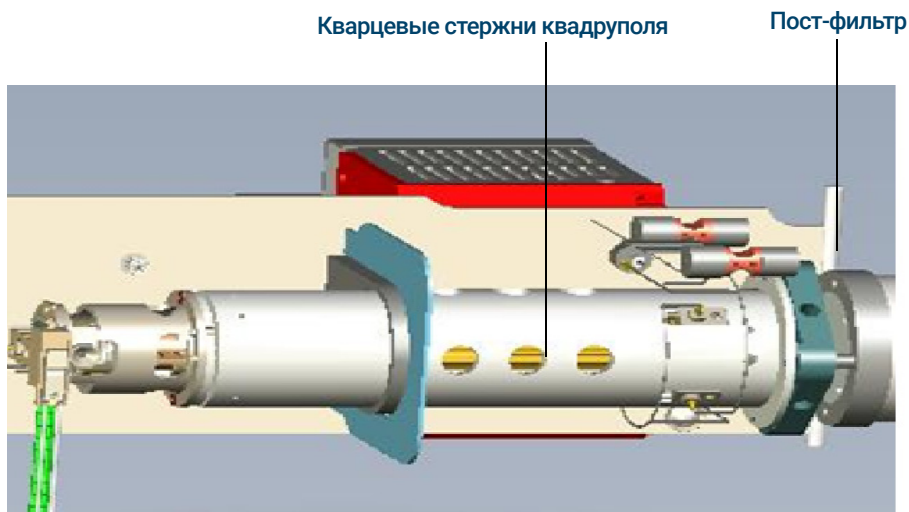


Рис. 19. Узел квадруполя Q1 (МС1)

Ячейка соударений

Что представляет собой ячейка соударений?

В ячейке соударений вместе собираются и фрагментируются материнские ионы, выбранные первым квадрупольным фильтром масс. Полученные дочерние ионы проходят во второй квадрупольный фильтр масс. В системах Triple Quad 7000/7010 ячейка соударений представляет собой гексапольный узел под высоким давлением, линейное ускорение в котором регулируется для оптимизации фрагментации МС/МС с одновременным устранением перекрестных помех даже при очень коротких временах выдержки (Рис. 20).

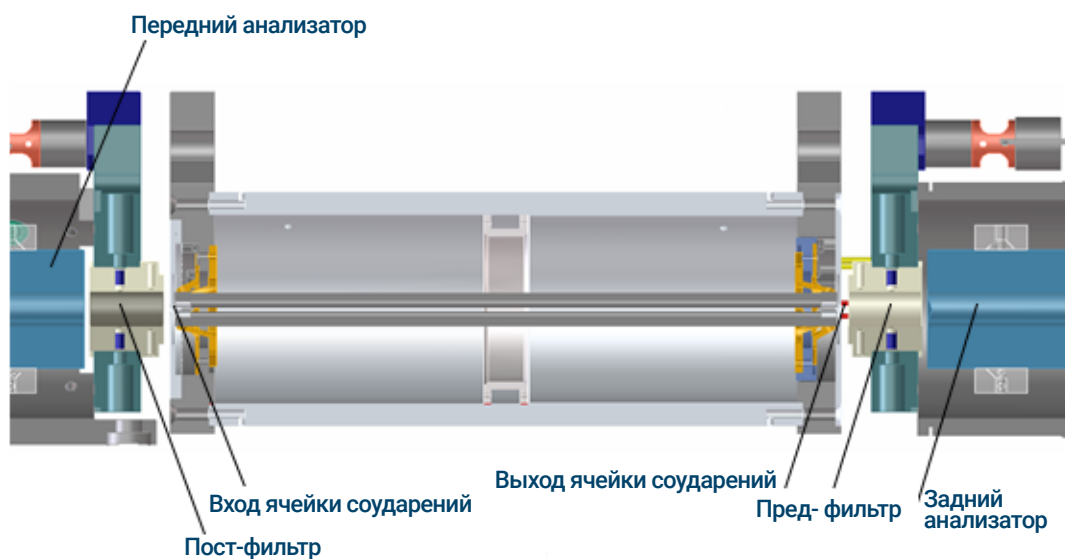


Рис. 20. Технология ячейки соударений обеспечивает более высокую чувствительность и более быстрые отклики без эффектов памяти или перекрестных помех

Составляющие этой повышенной чувствительности и ускоренного отклика:

- гексапольная ячейка соударений малого диаметра;
- высокочастотная гексапольная ячейка соударений;
- линейное осевое ускорение;
- ячейка соударений высокого давления;
- высокоскоростная цифровая электроника.

3 Система Triple Quad и чувствительность

Ячейка соударений

Ячейка соударений содержит азот и гелий. Компанией Agilent установлено, что гелий повышает управляемость процессом фрагментации, особенно в случае ионов высокой массы. Он добавлялся в поток азота для снижения создаваемого нейтральными частицами шума путем термализации метастабильных частиц, не позволяя им попадать в детектор. После этого гелий удаляется вакуумным насосом вместе с газом-носителем и нефрагментированными ионами пробы. Малый диаметр гексапольного узла помогает захватывать фрагментированные ионы.

Преимущества гексаполя

Геометрическая форма гексаполя обладает преимуществами в двух областях: ионной фокусировке и пропускании ионов (**Рис. 21**).

- Первое преимущество связано с фокусировкой ионов. Согласно исследованиям, квадруполь фокусирует ионы лучше гексаполя, а гексаполь лучше октополя. Следовательно, ионная фокусировка улучшается с уменьшением числа полюсов в фильтре.
- Второе преимущество касается пропускания ионов по всему широкому диапазону масс, или полосы пропускания m/z . В этом случае октополь лучше гексаполя, который лучше квадруполя.

Гексаполь был выбран в результате огромной работы по моделированию, имитации и экспериментированию, поскольку он позволял достичь наилучшего компромисса между фокусировкой квадруполя и пропусканием ионов октополя.

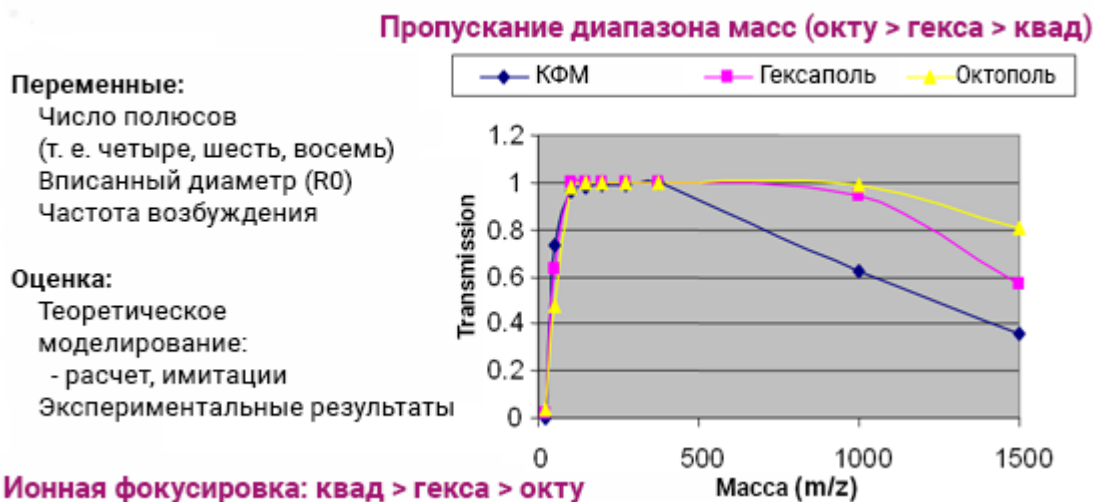


Рис. 21. Широкий диапазон пропускания ионов и повышенная эффективность пропускания, достигаемые с помощью гексаполя

3 Система Triple Quad и чувствительность Ячейка соударений

Конструкция ячейки соударений

Гексапольная ячейка соударений состоит из шести стержней с резистивным покрытием, используемых для создания разности потенциалов по всей длине ячейки соударений (Рис. 22).



Рис. 22. Конструкция ячейки соударений

Разность потенциалов присутствует всегда. Благодаря этому материнские ионы, поступающие из Q1 (MC1), или фрагментарные ионы, формируемые в ячейке соударений, пропускаются через ячейку и не могут двигаться беспорядочно.

Выметание ионов таким способом позволяет избежать проблем с перекрестными помехами, когда остаточные дочерние ионы из предыдущего эксперимента MRM могут вмешиваться в спектр ионов-продуктов последующего эксперимента MRM (см. Рис. 23). Напряжение энергии соударений накладывается на напряжение линейного ускорения для получения фрагментарных или дочерних ионов.

3 Система Triple Quad и чувствительность Ячейка соударений

Продолжительность продувки ячейки соударений

Низкий уровень перекрестных помех можно продемонстрировать, изучив, сколько времени занимает освобождение ячейки соударений от ионов (Рис. 23).

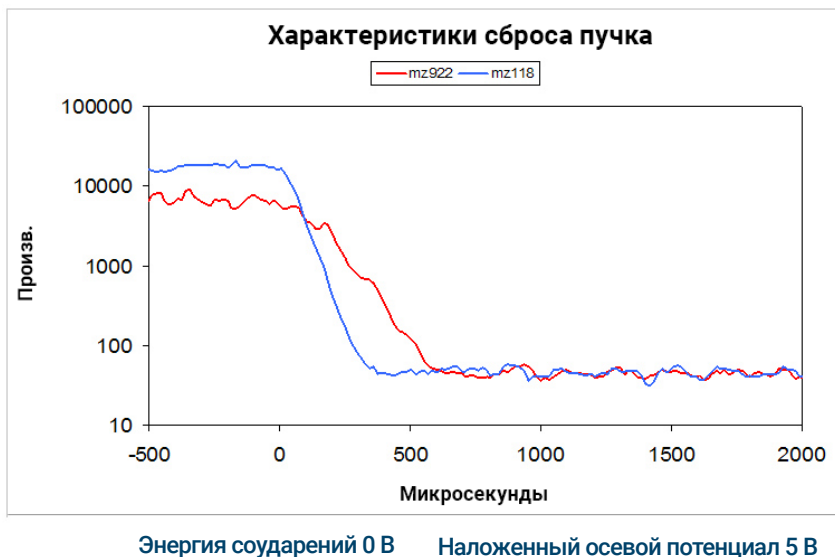


Рис. 23. Профиль очистки ячейки соударений (500 пг алпразолама, время выдержки 20 мс)

Этот рисунок иллюстрирует анализ пробы, обычно выполняемый с помощью ЖХ и трехквadrупольного МС. Эта модель полезна для показа того, что, чем выше масса соединения, движущегося через тройной квадруполь, тем больше времени требуется для опорожнения ячейки соударений. Например, с наложением линейного потенциала при m/z 922 для освобождения ячейки соударений требуется 600 мкс, тогда как при m/z 118 требуется всего лишь 350 мкс. Она также демонстрирует низкий уровень перекрестных помех, так как по оси Y используется логарифмический масштаб, что свидетельствует о полном очищении ячейки. Это означает, что задержки в 1 мс между сканированиями будет более чем достаточно для продувки всех ионов из ячейки соударений.

Детектор

Узел детектора — это уникальная разработка компании Agilent (Рис. 24). Он представляет собой высокоэнергетический динод с электронным умножителем.

Трехосевой детектор

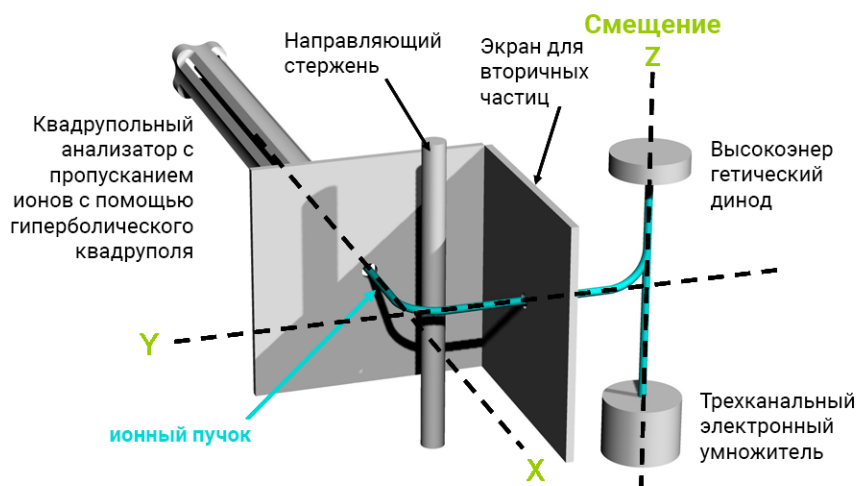


Рис. 24. Составные части детектора

Высокоэнергетический динод расположен не на центральной оси заднего квадрупольного анализатора. Такая ориентация снижает вероятность соударения нейтральных молекул с детектором и в то же время притягивает ионы с высокими разностями потенциала. Когда ионный пучок сталкивается с динодом, ионы преобразуются в электроны, прежде чем они столкнутся с умножителем. Эти электроны притягиваются рупором электронного умножителя, обладающим более высоким положительным зарядом. Благодаря внеосевой конструкции детектора нейтральные частицы минуют детектор и удаляются вакуумной системой.

Срок службы умножителя большой, так как электроны не сталкиваются с ним. Ионы никогда не достигают его поверхности. Благодаря нормализованной по усилению регулировке обеспечивается постоянная чувствительность в течение всего срока службы электронного умножителя. Отсюда согласованность результатов между разными масс-спектрометрами и лабораториями.

3 Система Triple Quad и чувствительность

Система откачки

Система откачки

Работу всей вакуумной системы обеспечивает один турбомолекулярный насос с разделением потока. Вакуум, достаточный для всего процесса, достигается разделением потока турбонасоса с целью многоэтапного создания вакуума. Вакуумная система удаляет молекулы газа-носителя и любые неионизированные или нефрагментированные молекулы пробы на выходе источника ионов из ячейки соударений и обоих анализаторов. Этот насос поддерживается одним механическим форвакуумным насосом (для предварительной откачки) (**Рис. 25**).

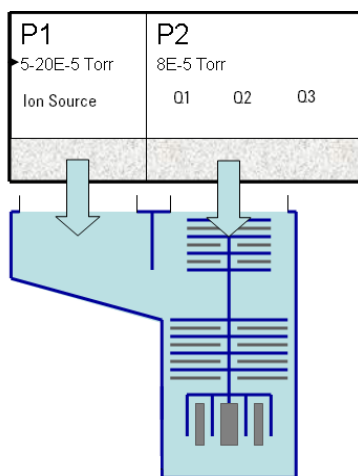


Рис. 25. Турбомолекулярный насос с делением потока

3 Система Triple Quad и чувствительность

Система откачки

4 Программное обеспечение Agilent MassHunter Workstation — приложение Instrument Control для системы Triple Quad

Описание	52
Настройка	53
Сбор данных	54

Этот раздел поможет понять замысел и работу программного обеспечения Agilent MassHunter Workstation для приложения GC/MS Instrument Control для системы Triple Quad серии 7000/7010.

4 Программное обеспечение Agilent MassHunter Workstation – приложение Instrument Control для системы Triple Quad

Описание

Описание

Характеристики программы управления приборами (Рис. 26):

- Отображение прибора во время работы с помощью графиков в реальном времени.
- Выполнение анализа нескольких проб с помощью таблицы последовательности, напоминающей интерфейс электронной таблицы.
- Управление и контроль параметров прибора.
- Настройка прибора.
- Установка параметров сбора данных для ГХ и Triple Quad.
- Слежение за хроматограммой и масс-спектрами в ходе анализа пробы.
- Установка последовательностей проб.

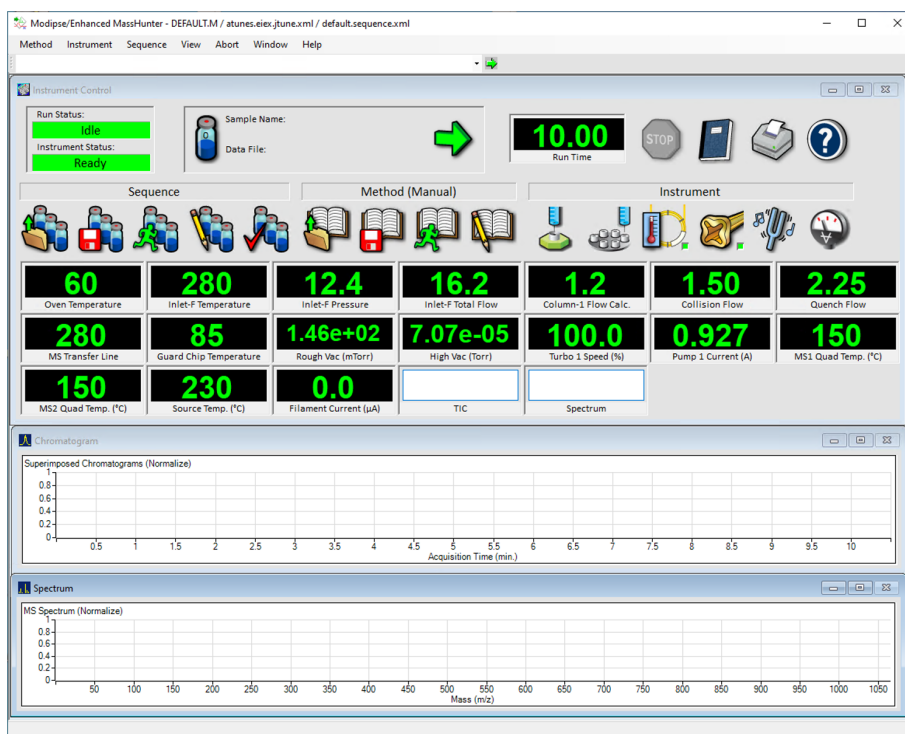


Рис. 26. Управление прибором

4 Программное обеспечение Agilent MassHunter Workstation – приложение Instrument Control для системы Triple Quad

Настройка

Настройка

Автонастройка

Автонастройку, занимающую около 8 минут, можно использовать, когда требуется всесторонняя настройка (Рис. 27). В этом режиме все выполняется автоматически. Смесь для настройки подается системой доставки калибранта (CDS), которая включается автоматически во время настройки.

Ручная настройка

Доступна ручная настройка задаваемых пользователем масс ионов с использованием шести соответствующих масс профиля.

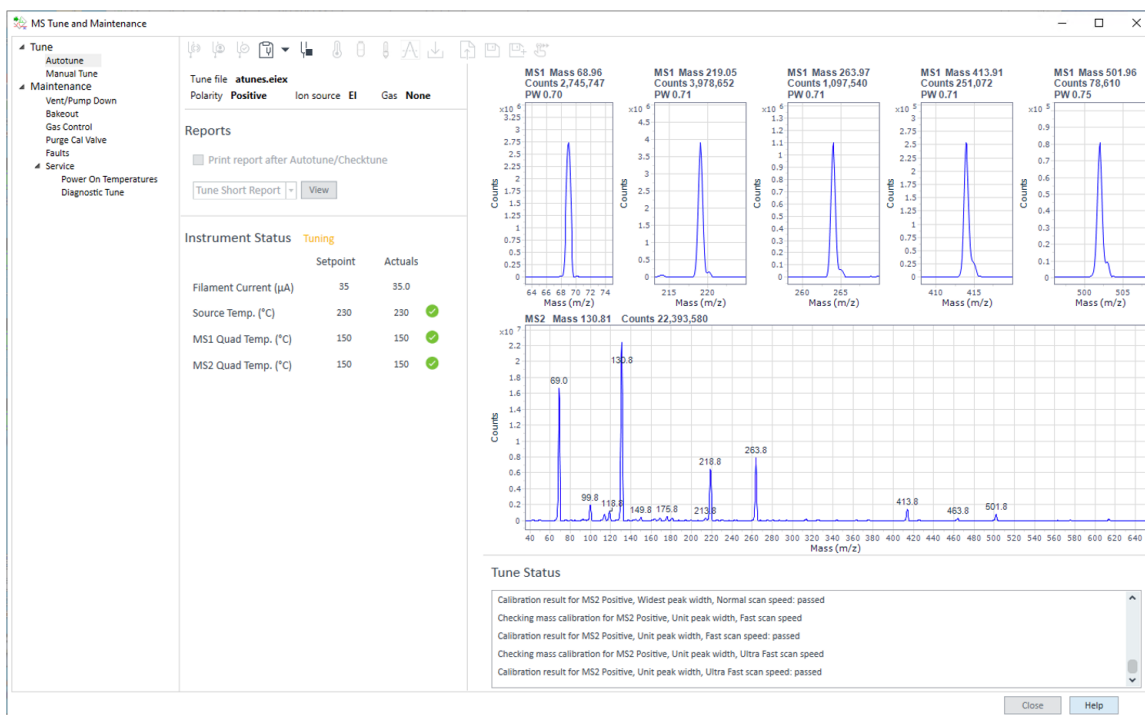


Рис. 27. Выполняется автонастройка

Отчеты о настройке

Предусмотрены также отчеты о настройке.

4 Программное обеспечение Agilent MassHunter Workstation – приложение Instrument Control для системы Triple Quad

Сбор данных

Сбор данных

Управление и контроль систем ГХ-МС Triple Quad серии 7000/7010 можно осуществлять с помощью панели управления прибором, представляющей собой окно, которое используется для доступа к параметрам сбора данных и спискам последовательностей (Рис. 28, Рис. 29 на стр. 55 и Рис. 30 на стр. 56).

Кроме того, на панели графиков в режиме реального времени можно отображать результаты ГХ и МС.

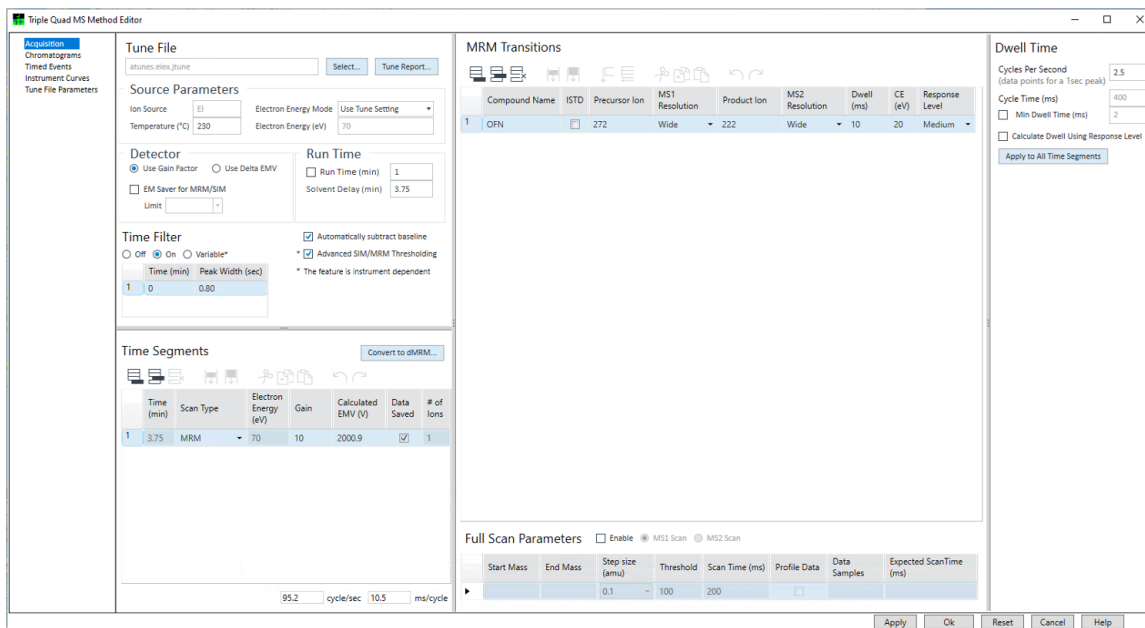


Рис. 28. Параметры сбора данных МС

4 Программное обеспечение Agilent MassHunter Workstation – приложение Instrument Control для системы Triple Quad

Сбор данных

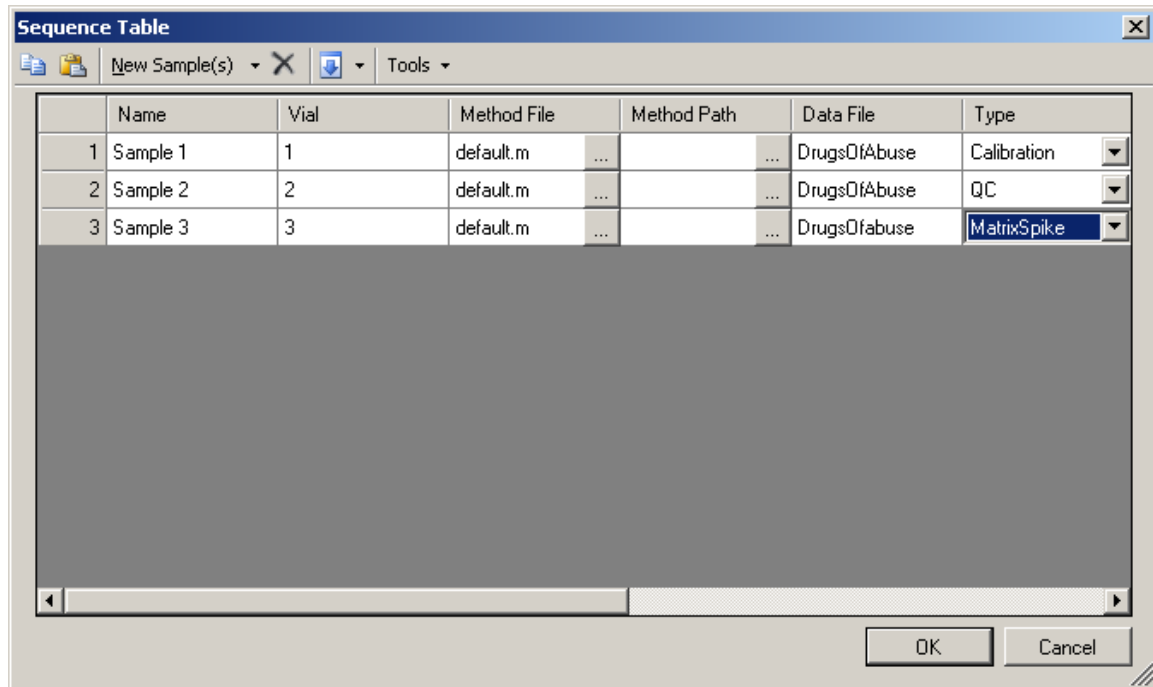


Рис. 29. Таблица последовательности

4 Программное обеспечение Agilent MassHunter Workstation – приложение Instrument Control для системы Triple Quad Сбор данных

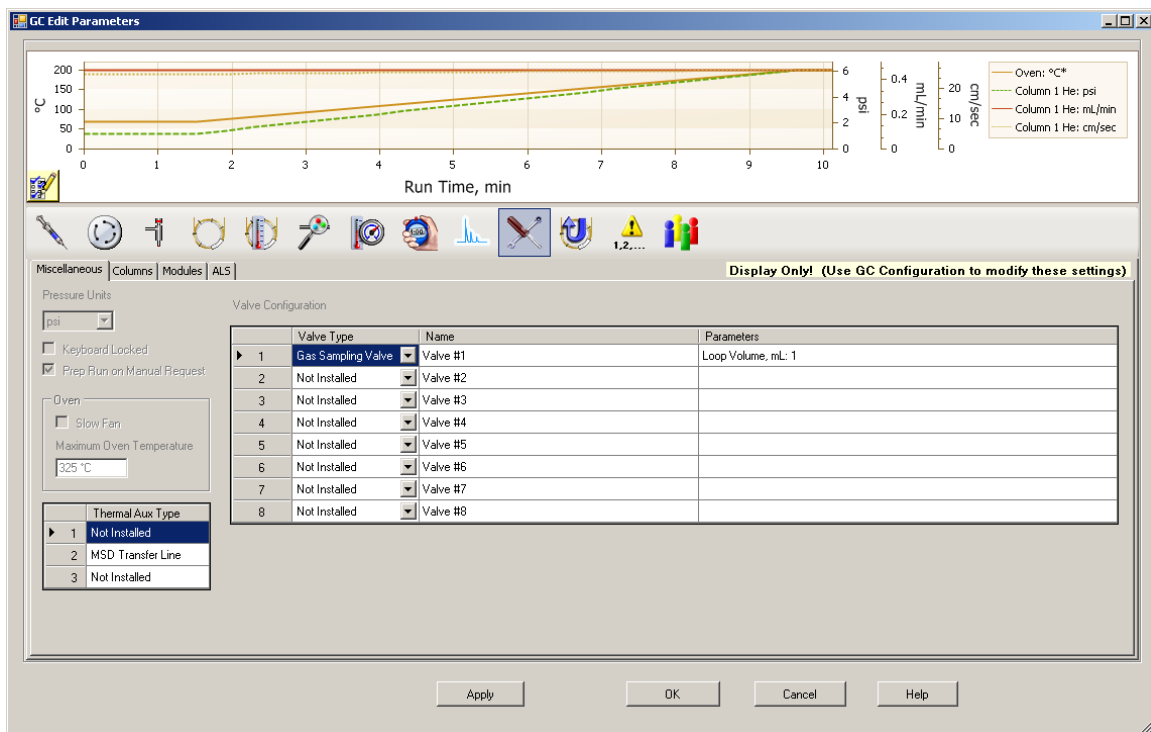


Рис. 30. Параметры сбора данных ГХ

www.agilent.com

© Agilent Technologies, Inc. 2022

Первое издание, июль 2022г.



G7006-91008

