

巨研科技股份有限公司 Great Engineering Technology Corporation



Agilent GC/MS 化學工作站 中文操作手冊

> Rev. GET_GCMSD_2002A October 2002



ー、GC/MSD 開機	M-4
ニ、GC/MSD 關機	M-7
三、儀器系統設定	M-8
四、Edit entire Method(編輯完整方法)	A-1
五、Sample Information(注射樣品)	A-21
六、Data Analysis (檢量線製作)	B-1
七、設定 Library 及 Structure	C-1
八、常用耗材表	D-1

一、GC/MSD 開機

- 1. 將氣體鋼瓶打開,並調至適當壓力
- PC Power →ON 並進入 NT 操作介面,此時 NT 系統中會有一 CAG Bootp server 程式會自動產生,切勿關閉。



3. GC Power →ON (於 GC 主體正面左下角處) 並使 GC 測試完畢

4. MSD Power →ON (於 MSD 面板下方處)

6890 Series		
ALS tower		
6890 Series ALS tray		
59864B High Vacuum Gauge Controller		
Cl gas flow module EI/PCl and EI/PCI/NCl MSDs only		
5973N Mass Selective Detector		
5973N MSD control panel		
6890 Plus Gas Chromatograph		
	MSD Power	GC Power

5. 待 GC 及 MSD 開機並自我測試完畢後,於 NT 系統桌面點選 MSD on-line 程 式 或於卓面 Start\Programs\MSD ChemStation\Instrument #1\Instrument

進入程式	۰	//	
My Computer Windows NT Explorer			
Network Network Neighborhood	Accessories Accessories Startup Command Prompt Internet Explorer Outlook Express Windows NT Explorer Administrative Tools (Common) HP ChemStations		
Programs	HP LO Libraries MSD ChemStation Startup		
Vogenity Vog	Le Vxipnp	 Batch Summary Report Config EnvForms RptManager Software Status Tune Report 	
Shut Down	er l		11:04 AM

6. 進入後畫面如下,此畫面為 GC/MSD 之主畫面,但 MSD 尚未抽真空。

instrument #1 - DEFAULT.M - [Instrument Control]	
Method Instrument View Abort Window Quality Help	<u>– 61 ×</u>
Sample Name:	
Sample Chromatography Detectors	
Injector Inlets Columns Oven Aux MS	
GC Status Messages 🔨 Total Ion	
Oven Temperature Column-1 Flow Cal. Spectrum	
Welcome to the Enhanced Chemistation MS Instrument' Full	
	M-5
	OF



 MSD 抽真空需於 View 中選取 Diagnostics/Vacuum Control.. 如下圖,進入 後再於 Vacuum 中選取 Pump Down,如此便完成開機程序。

二、GC/MSD 關機

1. GC/MSD 欲關機需作洩真空,於 Instrument Control 中選擇 View 內 Diagnostics/Vaccum Control。

🐻 Instrument #1 - TEST0907.M - [Instrument Control]	_ 8 ×
Method Instrument View Abort Window Qualify Help	_ & ×
Iop Instrument Control Data Analysis (offline) Diagnostics/Vacuum Control	
Sample Detectors	
Injector Inlets Columns Oven	
GC Status Messages 🔨 Total Ion	
Oven Temperature Column-1 Flow Cal. Spectrum	

 進入 Diagnostics 畫面中選取 Vaccum 內 Vent,即完成洩真空,大約 30~50 Min 便完成洩真空狀態。

没 Instrumer	nt #1 Diagnostics - A	TUNE	.U			₽ ×
File <u>S</u> tatus	Vacuum Diagnostics	Logs	⊻iew	Stop/ <u>A</u> bort	Help	
	Vacuum <u>S</u> tatus					
	Pump Down					
3	Vent					
	Purge <u>C</u> al Valve					
		1				
	Purge <u>C</u> al Valve					

- 3. 當完成洩真空(Vent cycle),便可將 PC 軟體關閉(其中含 MSD Chemstation、 CAG Bootp Server),如此便可將 PC 關閉。
- 4. PC 關閉後,將 GC、MSD Power 關閉。
- 5. 鋼瓶關閉。如此便完成關機程序。
- PS:一般 MSD,若非必要可讓 MSD 持續抽真空,處於待機狀態,除非有數日 不使用才會將其關閉,因一般開機約為 2~4 hr(甚至更久),而關機約 1hr。

三、GC/MSD 儀器狀況確認

當 GC/MSD 開機 Pump Down 完成後,何時才可開始 Run?一般抽真空約 2~4 小時後,儀器便處於可以分析狀態,但還需先做 Tune 以調整儀器狀態,另 外最好也做儀器狀態之確認。

A. 如何做 Tune

- 1. 於 GC/MSD 軟體中之 Instrument Control 畫面,選取 Qualify\Checkout Tune 執行即可
- 😻 Instrument #1 TEST0907.M:: [Instrument Control] _ 8 × Method Instrument View Abort Mindow Qualify Help _ 🖻 🗵 eckout Tune 😁 Sample Nami Evaluation Data File: 10000001.d 1 View Tunes. Sensitivity Check Software Validation Installation Checklist Sample Chrom Detectors Eamiliarization Checklist 0 Yes ⊣ĭ Ø Injector Columns Aux Inlets Oven GC Status Messages 🛛 🔺 💌 Total Ion Oven Temperature Column-1 Flow Cal. Spectrum
- 2. 待數分鐘後,會自動產生Tune Report,即完成Tune。



B. 儀器狀態之確認(Tune Evaluation)

- 1. 於 GC/MSD 軟體中之 Instrument Control 畫面,選取 Qualify\ Tune Evaluation 執行即可
- 2. 待數分鐘後,會自動產生 Report,即完成 Tune Evaluation。

🐼 Instrument #1 - TEST0907.M - [Instrumen]	t Control]	
Method Instrument View Abort	Qualify Help	
Sample Name:	Checkout Tune	
Offline Data File:	View Tunes	
Sample Chrom	Software Validation Installation Checklist Eamiliarization Checklist	Detectors
Injector Inlets Columns Over) *	Aux MS
GC Statu	s Messages 🛛 🔨	Total Ion
Oven Temperature	Column-1 Flow Cal.	Spectrum

System Verification – 7	Fune (Detector Optimization) Portion	
Instrument Name : 68900	GC 5973MSD	
DC Polarity : Positi	ve	
Filament :1		
BasePeak should be 69 or 219		ok
Position of mass 69	69.00	ok
Position of mass 219	219.00	ok
Position of mass 502	502.00	ok
Position of isotope mass 70	70.00	ok
Position of isotope mass 220	220.00	ok
Position of isotope mass 503	503.00	ok
Ratio of mass 70 to mass 69 $(0.5 - 1.6 \%)$	1.14	ok
Ratio of mass 220 to mass 219 (3.2 – 5.4 %) 4.40	ok
Ratio of mass 503 to mass 502 (7.9 – 12.3 9	%) 10.11	ok
Ratio of 219 to 69 should be > 40 % and is	88.69	ok
Ratio of 502 to 69 should be > 2.4 % and is	6.74	ok
Mass 69 Precursor (<= 3 %)	0.14	ok
Mass 219 Precursor (<= 6 %)	0.28	ok
Mass 502 Precursor (<= 12 %)	0.45	ok
Testing for a leak in the system		
Ratio of 18 to 69 (< 20 %)	1.12	ok
Ratio of 28 to 69 (< 10 %)	0.65	ok
Electron Multiplier Voltage	1012	ok
Tune portion of System Verification passe	d	

C. 手動檢查儀器狀況(Diagnostics)

一般而言,在開完機抽真空(Pump Down)時,最難判斷何時可做 Tune 及儀 器況態是否可 Run Sample,除從 Ion Gauge 可見其真空度(<5.0 *10⁻⁵mtorr)或 Foreline Pressure 外,但是乎很難判斷是否有漏氣現象。而 Chemstation 在其軟體 中可提供自我診斷功能(Diagnostics),能簡單判斷系統中是否有漏氣及污染,以 下便簡單介紹如何使用。

1. 於 Instrument Control 中之 View 選取 Diagnostics/Vaccum Control。

Instrument #1 - TEST0907 M - Instrument Control		
Method Instant View Aport Window Qualify He	sip	
Iop Offline Data Analysis (offline) Diagnostics/Vacuum Control Manual Tyne	Run Time	

2. 進入 Diagnostics 畫面,選取 Diagnostics\ Edit MS Params。



3. 進入 Edit Parameters 畫面中選取 MoreParams 內之 AcqParams。

lie E	Exec <u>u</u> te	<u>C</u> alibrate	MoreParams Vie <u>w</u>				
		$ \rightarrow $	Acg Params Temperatures Ramp Params	Ion Pol Emission EleEnergy	POS	MassGain MassOffs AmuGain AmuOffs	0 0 1300 100
				Repe <u>l</u> ler IonFocus	29.96	DC Pol	POS
				EntLens EntOffs	0.0 25.10	<u>E</u> MVolts	1200
				Zones-	- or cit		
				Emission(I	0.0 to 315. 	2): 34.6	F

4. 於 Acquisition & Display Param 畫面中,可選擇所欲查看之 Mass(1~3 最多為3個)、Scan Range 等等。

File Execute Calibrate MoreParams View Acg Params Ion Pol POS MassGain 0 Imment Imment 0 0 0 Wid213 DC Pol POS Masses Acquisition & Display Param X Masses Masses Acquisition & Display Param X Masses Masses Acquisition & Display Param X Masses Masses Acquisition & Display Param X Masses 0.0 POS Masses Acquisition & Display Param X Masses 0.0 POS Masses Acquisition & Display Param X Masses 0.0 POS Masses 0.0 Masses Masses & Display Param X Masses 0.0 Embendu DOPEN Masses Masses Scan Range Errom 100 Ion 700.00 Profile Display Abundance C Agelative Percent C Agelative Percent C Figed From 0 To To </th <th>📲 Edit Parameters, HP5973N - ATUNE.U</th> <th></th> <th>_ @ ×</th>	📲 Edit Parameters, HP5973N - ATUNE.U		_ @ ×
Emission(0.0 to 315.2): 34.6 Emission(0.0 to 315.2): 34.6 Image: Scale in the state in t	File Execute <u>C</u> alibrate <u>MoreParams</u> View Acg Params <u>T</u> emperatures <u>B</u> amp Params	Ion Pol POS MassGain 0 MassOffs 0 AmuGain 100 Filament 1 Vid219 000 For POS 000 Filament 29.96 IonFocus 90.2 EntLens 0.0 EntOffs 25.10 PFTBA 0PEN	Image: Second state sta
Prof Scan Ramp Stop MSOff OK Cancel Help Scale Factor 1.00 0K Cancel Help		Emission(0.0 to 315.2): 34.6	Scale Abundance ○ Autoset ○ Absolute ○ Belative ○ Percent ○ Fixed From 0 To[1000000
	Prof Scan Ramp Stop MSOff	OK Cancel Help	Scale Factor 1.00 OK Cancel Help

一般常見污染離子如下表所示。

Mass(es)	Compound General Classification	Potential Source
18, 28, 32, 40, 44	Air	H2O, N2, O2, Ar, CO2
18	Cleaning solvents	Water
31		Methanol
77		Benzene or Xylenes
91, 92		Toluene
105, 106		Xylenes
43, 58		Acetone
85		Freons
73, 147, 207 , 222, 281, 295, 355, 429	Dimethylpolysiloxane	Septum or column bleec
41, 43, 55, 57, 71, 85, 99	Hydrocarbons	Fingerprints or pump oil
149	Phthalates	Plasticizers in tubing, vials, caps, samples

舉例說明,欲查看系統是否有漏氣,可觀察空氣離子,一般常用為 N₂(28) 及 O₂(32),操作方式於 Acquisition & Display Param 畫面中, Mass1 填入 69、Mass2 填入 28、Mass3 填入 32,並於 Scan Range 填入 From 10 To 70, 再於 Edit Parameters 畫面中選取 Scan 即可。當 Ion 28 與 32 呈現 4:1 比例 即可能為漏氣。

under State (1995) Edit Parameters, HP59	973N - ATUNE.U			_ 🗆 🗙	<u> </u>
Eile Execute Calibrate M Instrument access is not allow	<u>ed.</u> <u>⊌top</u> <u>MS⊡ff</u>	Ion Pol POS Emission EleEnergy Filament 23.96 IonFocus 90.2 EntLens 0.0 EntOffs 25.10 PFTBA OPEN Zones Emission(0.0 to 315.	MassGain MassOffs AmuGain AmuGifs Wid219 DC Pol HED EMVolts 2): 34.6	0 0 1300 100 0.000 POS 0N 1200	Masses Acquisition & Display Param X Masses Acquisition Samples 2'N 3 Mass 1 28:00 Samples 2'N 3 Mass 2 28:00 Averages 3 Mass 3 32:00 Averages 3 Window 5:0 Threshold 100 Scan Range Abundance Absolute Profile Display Abundance Absolute Belative Erecent Figed From 0 Figed From 0 To 10000000 Scale Fagtor 1:00 United for the second secon

 以自我診斷功能(Diagnostics)並配合上表,便能簡單判斷系統中是否有漏氣 及污染。





Agilent GC/MS 化學工作站 編輯完整方法

四、Edit entire Method(编輯完整方法)

一般來說以新使用者而言,編輯一個新的方法,由 Edit entire Method(編輯 完整方法)進入,可完整的編輯方法。所謂方法(chemstation 之定義)包括:Method Information <u>方法資訊</u>、Instrument/Acquisition <u>儀器控制/資料收集</u>、Data Analysis <u>資料分析</u>,以下便一一介紹。

在 Instrument Control 中,進入 Method\Edit entire Method, 然後首畫面便 如下圖,其後依指示一一編輯即可。

Method Instrument #1 - TEST0907.M - El - [Instrument #1 - TEST0907.M - El - [Instrument]]	ment Control] _ ♂ × Qualify Help _ ♂ ×
<u>B</u> un Load Save	Run Time
Edit Entire Method	
Additional Methon Information	praphy Detectors
1 D:\MSDCHEM\1\\\\THODS\TEST0907.M 2 d:\MSDchem\1\ME\\'DDS\DEFAULT.M 3 4 Egit GC Statu: Oven Temp\\ature	S Messages Arr Total Ion
Method Sequence View Secured Control Edit Method Check method sector I method Check method sector I method I	T0907.M / DEFAULT.S Lep Dons to edit: thod Information (方法資訊) trument¼Acquisition (儀器控制/資料收集) a Analysis (資料分析) Cancel 且ep

上述畫面按 OK 即進入下一畫面 Method Information,此畫面可對方法作註 解,及設定相關資料收集分析,如下圖所示。

<mark>≧ ∰</mark> Instrument 1 <mark>€ M</mark> ethod <u>S</u> equer	t1 MSTop/Enhanced - TEST0907.M / DEFAULT.S
	Method Information
	Method <u>C</u> omments: (方法註解)
	This is the default method
	所產生之 Data 可存於方法
	□ Save Copy of Method With Data 中,但其檔案會很大,若非
	GLP 場址建議不使用
	Method Sections To Run:
	Pr <u>e</u> -Run Cmd/Macro:
此雨部分	☑ Data Acquisition (資料收集)
一定要選	✓ Data Analysis (資料分析)
	Post-Run Cmd/Macro:
	OK Cancel <u>H</u> elp
	未詳盡部分請參閱 Help ←

設定完畢按 OK 即進入注射設定(Inlet and Injection Parameters),此畫面可對樣品注射口、注射來源及位置作相關資料設定,如下圖所示。

	Control]
Method Instrument View Abort Window Qualify Help	
Offline Sample Name: Data File: 10000001.d Run Time	
Sample Chromatography	Detectors
Injector Inlets Inlets Inlets Inlets Inlets Inlet and Injection Parameters Sample Inlet GC Injection Source Manu	eters ×
GC Status Injection Location Injection Location Rear Oven Temperature OK	el Help

- 樣品注射口(Sample Inlet) : 可選擇 GC 或 Other/None
- 注射來源(Injection Source): 可選擇 GC ALS(GC 自動注射器)、Manual(手動注射)、 Valve/Immediate Start(閥或其他可立即啟動儀器)、 External Device(其他儀器)。
- 注射位置(Injection Location):可選擇 Front(前方注射口注射)、Rear(後方注射口注射) 或 Dual(前、後雙方注射口一起注射)

Use MS : 左方打勾表示使用 MSD,未打勾表示不使用 MSD

按 OK 即進入儀器設定最重要的地方,其中有自動注射器、閥、注射口、管柱、 升溫程式、訊號、輔助儀器、單元啟動關閉及單元選擇相關設定,如下圖所示。

Edit Ove	n Parame	eters (1	義器言	殳定)						
	Instrument Edit 0)ven: (6890)								×
動注射器設定 🗲	Oven Temp	Temperature (°C) 757 (°C) 758 (°C) 769 (°C) 760 (°C)	- r - r							
設定	[PIOT]	Ó		200		400	600	<u> </u>	800	Time (min.)
时口設定 ◀)		3	\mathbb{O}	~	h.		g	N.20
所管柱設定 ◀━	Injector Valv	res Inlets	Colu	imns (Dyen D	etectors	Signals	Aux I	Runtime	Options .
品程式設定 ▲ ——	Oven					<u>0</u> ve	en Configuratio			
■器設定 ◀	Setp I On	oint*C:	50				Maximum	*C: 300		
虚設定▲	^	ctual 'C:					Jumpianon mi	n. µ 3.6		
山儀哭恐完	Oven Ramp Initial	*C/min Ne	ext*C H ज्ञा	old min 0.00	Run Time 999 99	<u>C</u> ry	o Configuratio	n		
	Ramp 1	0.00	0	0.00			Quick Coolin	q On		Apply
└ 白 期 開 闭 衣 上 ◀	Ramp 2 Ramp 3	0.00	0	0.00			*C, A	mbient		ОК
℃選擇設定 ◀	Ramp-4	0.00	Q	0.00		r	Timeout Det	ection On		
	Ramp 6	0.00	0	0.00			min			
	Post Run		50	0.00	999.99		Fault Detecti	on On		Help

以下數頁為儀器設定最為重要部分,其中包含有: Injector(自動注射器設 定)、Valve(閥之設定)、Inlets(注射口設定)、Columns(分析管柱設定)、Oven(升 溫程式設定)、Detectors(偵測器設定)、Signals(訊號設定)、Aux(輔助儀器設定)、 Runtime(單元啟動關閉設定)、Options(單元選擇設定)等等,並非所有設備均可設 定,如未加購閥之設備則無法設定閥且會出現反白。一般而言,若有兩組注射口(或 偵測器)設備,前方定義為Front,後方定義為Back,所以在設定儀器參數時,需謹 慎確實設定相關設備,如前面注射口搭配前面之偵測器,則管柱設定時便要由前面 注射口接至前面偵測器,且須由前面注射口施打樣品。其餘相關單元設定需注意部 分,將於下面幾頁詳述。















Mackand 若無閥、MSD、AED 則可不必設定

Runtime	き 単元/	咨動關閉語	受定			
nstrument Edit F	Runtime: (6890)					×
lOven Temp	emperature (°C) 1200 (°C) 1200 (°C)					
Plot	└── 50 <i>-</i> ,,_ 0	1	2 3	4	5	Time (min.
Injector Valv) × -j ves Inlets	Columns Oven	v =Ø= Detectors Sign	als Aux	C Runtime	Options
<u>T</u> ime (min) 5.00	Speci <u>f</u> ier ! Front det 💌	Parameter (-) Polarity	<u>S</u> etpo	pint	•	
0.00 5.00	Front det Front det	(-) Polarity (-) Polarity	On Off			
						Apply OK
					-	Cancel
	ear All D <u>e</u> l	ete	Replace	Add		<u>H</u> elp

Options 附加設定(一般以原始設定即可)				
strument Edit Options: (6890)	×			
Oven Temp Q 200 9 200 9 9 150 100 9 50 0 1	2 3 4 5 Time (min.			
Injector Valves H Goumns Oven Detectors Signals Aux Runtime Options				
Pressure Units	Column Companyation			
©psi Char CkPa	Curve Detector to Use			
Lock Keyboard Keep instrument's keyboard locked after method is loaded?	1 C Front C Back OK			
CYes CNo	Leip			

當 Instrument 設定完畢後,按 OK 到另一畫面,如下圖。此畫面為設定收集 GC 其他偵測器訊號,若以 MSD 為偵測器則不用選取。

🔀 Instrument #1 - TEST0907.M - [Instrument Control]	
Method Instrument View Abort Window Quality Help Offline I Data File: 10000001.d I I Run Tir	
Sample Chromatography	Detectors
→ Injector Inlets Columns Ove Signal 1 以 MSD 為偵測 器 不用 選取 Oven Temperature OK	Signal 2 Signal 2 Attr: 0 2^ Offset: 10 % Time: 50 min

按OK 到另一畫面 MS Tune File,此畫面為設定方法所使用之 Tune File,一般 選擇 atune.u 即可。

決 Instrument #1 - TEST	0907.M - [Instrument Control]		
<u> M</u> ethod Instrument <u>V</u>	iew <u>A</u> bort <u>W</u> indow <u>Q</u> ualify <u>H</u> elp		
Offline	Sample Name: Data File: 10000001.d	Run Time	
Sample	Chromatography	Det	ectors
Injector	Columns Oven MS Tun Oven Pati GC Status Me Oven Temperature C	e File c (MSDchem\1\5973N\ c dtune.u bfb.u dtpp.u ncich4.u Cancel <u>H</u> elp	

設定 Tune File 完畢後按 OK 到 MS SIM/Scan Parameter 設定,如下圖所示。

EM Voltage : 可選擇絕對(Abs)—為 Tune 完後所得之 EM Voltage 之值 或相對(Rel) — Tune 之 EM Voltage 值可再增加其值。

Solvent Delay:設定 MSD EM 開啟時間。例如設 3.00 min 為避免 EM 受大量 Solvent 衝擊導致 EM 損害。

Acq. Mode: 可設定 MSD 以 Scan 或 SIM 型式操作

其他如 Real Time Plot 為設定所欲觀察之 MS 參數

MS SIM/Scan Parameters	×
MS Instrument Parameters	Real Time Plot
Sample Inlet: GC	Time Window: 10 min. MS Window 1
Tune File:	Plot Type: Total Y-Scale: 0 to 2000000
EM ⊻oltage: 🔲 Rel 🛫 = 1200	MS Window 2
Solvent Delay: 3.00 min.	Plot Type: Spectrum
Acq. Mode: Scan	Y-Scale: 0 to 100000
Edit Scan Params Zou OK Car	nes <u>I</u> imed Events
Limits are whole values between -1200 and 1800.	
欲選擇 Scan Mode 如下圖所示,其中:	
Saan Mada	
A. Scan Woue	

Scanning Mass Range : 可設定 Scan Group 及 MS 之 Scan 範圍。 Threshold and Sampling Rates:可設定 Threshold(一般為 100~150)及 Sampling Rate(一般為 1~3,但 Scans/Sec 要大於 2.00)

Plotting:設定所欲觀察之 MS 參數

Scanning Mass Range Threshold and Sampling Rates Plotting	Scanning Mass Range Threshold and Sampling Rates Plotting
Start Time Start at (minutes) Mass (amu) Scan Group 1 IZ 200 550.0 Scan Group 3 II Scan Gro	Threshold Samping Rate (counts) 2 Scan Group 1 2 Scan Group 3
Summary of Settings Group Start Time Low Mass High Mass Threshold Samples Scans/Sec Pk 1 3.00 50.00 150 2 2.34 Low to High mass range must be in ascending order from 1.6 - 800.0.	Summary of Settings Group Start Time Low Mass High Mass Threshold Samples Scans/Sec Pg 1 3.00 50.00 550.00 150 2 2.94
Close Heb	Close Help

B. SIM Mode

MS SIM/Scan Parameters	
MS Instrument Parameters Sample Inlet: GC Tune File: atune.u EM ⊻oltage: 0 Rel▼ = 1200 Solvent Delag: 3.00 min. Acq. Mode SIM	Beal Time Plot Time Window: 10 MS Window 1 Plot Type: Total Y-Scale: 0 to 2000000 MS Window 2 Plot Type: None Y-Scale: 0 to 100000
OK Cancel Edit SIM Parameters 1 Group 1 Start Time: 3.00 Cycles/Sec = 8.33 Edit Ion Add/Modify Ion m/z Dwell (msec) 74.10 100 YES	Help Group Start Time 1 3.00 Add New Group Delete Group(s) Directions To edit a Group, just select it from the above list box. To add a Group, press "Add New Group", then start editing the fields on the
	single or multiple selection from the list above , then press "Delete Group(s)". Help

Group:可設定50個群組

Resolution:可設定高或低;設Low Resolution 其 Peak Width 在 0.7~0.9 amu, 但其靈敏度會降低,設High Resolution 其 Peak Width 一般為 0.5 amu,其靈敏度會較佳。

Edit Ion:可設定所欲觀察之 Ion,每個群組可設定 30 個 Ion

Dwel1:與選擇之 Ion 數目有關, 一般 3 個 Ion 以下可設 100, 若 3 個 Ion 以上, 可設定 30~50 之間, Ion 數目愈多則 Dwell 值欲小。 設定 MS SIM/Scan Parameter 完畢後按 OK 到 Select Report 設定,可依所需 選擇報告型式(如 Percent、LibSearch.....),如下圖所示。

🌺 Instrument #1 - TE	T0907.M - [Instrument Control] - EI - [Instrument Control]	
Method Instrument	<u>V</u> iew <u>A</u> bort <u>W</u> indow <u>Q</u> ualify <u>H</u> elp	
Offline	Sample Name: Data File: 10000001.d	2
Sample	Chromatography Detectors	
Injector	Columns Oven Select Reports	
	Percent Report	
	☑ LibSearch Report	
	GC Status Mess 🔲 Quant Report	
	Custom Report	
	OK Cancel Help	

設定完一系列的報告格式後,便要儲存方法,如下圖所示。

2	🔒 İnstr	ument #1 k	(STop/	Enhanced - TEST0907.M / DEFAULT.S	
M	<u>M</u> ethod	<u>S</u> equence	⊻iew	Secured Control Help	
				Caus Mathed As	
				2446 WELLION V2	
				D:\MSDCHEM\1\METHODS\	
				TEST0907.M	
				OK Cancel Help	

以上各項設定為編輯完整方法之設定,若欲知深入介紹可進入相關 Help,或詢問相關工程師。





Agilent GC/MS 化學工作站 注射様品設定

五、Sample Information (注射樣品)

當編輯方法完畢後,再來便是樣品注射之相關設定,一般而言,樣品施打可分為手動注射(Manual)及自動注射(HP GC Injector),以下便就此兩種不同方式做其 樣品注射之介紹

A. 手動注射(Manual)

方法設定為手動注射時(方法之相關設定可參閱編輯方法),注射前需設定相關 條件,包括有操作者名稱(Operator Name)、樣品之檔案名稱(Data filename)、樣 品名稱(Sample name)、註解(Comment)等等設定,以下便一一說明。

 首先於 Instrument Control 中選擇 Sample Info.,畫面如下,填入操作者姓 名(Operator Name),而 Data file Name 為施打樣品所儲存的位置及檔案名稱, 另外可填入樣品名稱(Sample Name)及相關資訊(Misc. Info.)等等。

Method Instrument #1 - TEST0907.M	Accurisition - Sample Information	_ & × _ & ×
Injector	Disk Space: 2936.82 Mbytes free on drive D: Data File Path: D:\MSDCHEM\1\DATA\ Operator Name: 	

2. 如此便完成注射樣品前之樣品設定(Sample Information);待準備就緒後(系統 呈現 Ready)便可注射樣品,注射前於相同畫面下按 <u>Start Run</u>,然後便可注射 所設定之樣品,再於 GC 面板上按 Start,即開始收集所設定方法之資料了,如 此便完成樣品之手動(Manual)注射。 欲使用自動注射器(HP GC Injector)時,需具備自動注射器且須於方法中確實 選擇自動注射器(HP GC Injector),至於如何設定自動注射器,可參閱編輯方法篇。 一般自動注射器為使用作大數量樣品注射,故常設定連續(Sequence)注射,以下便 簡易說明連續(Sequence)注射設定。

 一般較常用連續(Sequence)注射部分有:載入(Load)、儲存(Save)、編輯連續 注射參數表(Edit sample log table)、載入及施打連續注射(Load and Run Sequence)等等,以下便就其相關性作介紹。

Start Instrument #1 MSTop.	- TEST0907	🥢 9:55 AM
Lestrument #1 MCTon/Enhanced - TEST/19/7 M		
Method Sequence View Secured Control Help		
<u>B</u> un		
Load Save		
Edit Sample Log Table		
Load and Run Seguence Print Sequence		
1 dt\MSDchem\1\SEQUENCE\DEFAULT.S 2 3 4		
Simulate Sequence Position and Run <u>Vi</u> ew Sequence Log Vie <u>w</u> Sequence Quality Log Print Sequence Log		
Import Sequence Information from <u>C</u> SV file <u>M</u> ore		

先由 MS Top/Enhanced 中進入 Sequence Control,其中: Load:載入連續注射檔案 Save:儲存連續注射檔案 Edit sample log table:編輯連續注射參數表 Load and run sequence:載入及施打連續注射 進入編輯連續注射參數表(Edit sample log table)後,畫面如下,填入型 式(Type)、樣品編號(Vial)、樣品檔案名稱(Data File)、使用方法(Method) 及樣品名稱(Sample Name),其餘設定規則可參閱 Help;另外若欲填入更多資 訊可進入 More。

Instrument #1 MSTon	JEnhanced - TEST0907 M / Default «
Aethod Sequence View	Secured Control Help
Torriod Codrovice Trovi	
	Sample Log Table for Default.s (on line 1 of 3)
	Ling Type Vial Data File Method Sample Name
	1) Sample 1 DEFAULT Sample 1
	2] Sample 1 DEFAULT Sample 2
	3) Sample I DEFAULI Sample 2
	I Type Vial Data File Method Sample Name I
	Miscellaneous Information Expected Barcode
	Repeat Cut Copy Paste Read OK Cancel Help More
	Use the arrow keys to select entry

Type:可填入 sample、Blank、Calibration、QC、Keyword、Rearsamp、Raer Cal 等等,相關詳細設定可按 Help 查看。

Vial:為施打樣品編號,若有 Tray 可編輯 1~100 瓶。

Data File:填入樣品檔案名稱,最多8個位元。

Method:所欲 Run 之方法。

Sample Name: 樣品名稱。

其餘設定可參閱 Help

 當上述編輯連續注射參數表(Edit sample log table)完畢後,於 Sequence 中選取 Save,將所設定的條件儲存;爾後便可依所設定之檔名重新載入(Load)設定。

Bun Bun Load. Save Edit Sample Log Table Edit Sample Log Table Load and Run Seguence Print Sequence 1 d:\MSDchem\1\SEQUENCE\DEFAULT.S 2 2 3 4 4	Instrument #1 MSTop/Enhanced - TEST0907.M /	- 6 ×
Load Save Edit Sample Log Table Load and Run Seguence Print Sequence 1 d'\MSDchem\1\SEQUENCE\DEFAULT.S 2 3 4	<u>Bun</u>	
Save Edit Sample Log Table Load and Run Seguence Print Sequence 1 d:\MSDchem\1\SEQUENCE\DEFAULT.S 2 3 4	Load	
Edit Sample Log Table Load and Run Seguence Print Sequence 1 d:\MSDchem\1\SEQUENCE\DEFAULT.S 2 3 4	Save	
Load and Run Seguence Print Sequence 1 d:\MSDchem\1\SEQUENCE\DEFAULT.S 2 3 4	Edit Sample Log Table	
Print Sequence 1 d:\MSDchem\1\SEQUENCE\DEFAULT.S 2 3 4	Load and Run Seguence	
1 d:\MSDchem\1\SEQUENCE\DEFAULT.S 2 3 4	Print Sequence	
	1 d:\MSDchem\1\SEQUENCE\DEFAULT.S	
4	3	
	4	
Sjmulate Sequence	Simulate Sequence	
Position and Run	Position and Run	
View Sequence Quality Log	View Sequence Quality Log	
Print Sequence Log	Print Sequence Log	
Import Sequence Information from <u>C</u> SV file	Import Sequence Information from <u>C</u> SV file	
More	More	

4. 當連續注射設定完畢後,施打樣品於 Sequence 中按 Run,如下圖所示。此畫面 可設定是否為 Run 方法(Full Method)或是資料重新處理(Reprocessing Only)、 及備考(Sequence Comment)、操作者(Operator Name)、資料目錄(Data File Directory)等等。其餘部分可參閱 More 或 Help。

Start Sequence Default.s Last Modified: Mon Sep 17 11:31:50 2001									
Method Sections To Run On A Barcode Mismatch									
Full Method		Inject <u>A</u> nyway							
© <u>R</u> eprocessing Only		O <u>D</u> on't Inject							
☑ Overwrite Existing Data Files									
Sequence <u>C</u> omment:									
Ogerator Name:									
Data File Directory: d:\MSDchem\1\DATA\									
R <u>u</u> n Sequence	ОК	Cancel <u>H</u> elp <u>N</u>	<u>/</u> ore>>						
Run the method as specified in the Method Information dialog box									

5. 步驟4設定完畢後,按 Run Sequence 便開始執行連續注射。以上各項設定為 常用連續注射之設定,若欲知深入介紹可進入相關 Help,或詢問相關工程師。







六、GC/MS 檢量線製作:

一般資料收集(Data Acqcuisition)完後會產生其相關資料檔案(Data file),化學工作站 (Chemstation)提供一資料處理的程式,能算出其樣品濃度或所欲了解的資訊,但首先便需製作 檢量線,當然一個方法只能一有一個檢量線程式,所以在作檢量線之前,必先確認此方法再做 適當的檢量線。以下便以最常用之外標準檢量線(ESTD)及內標準檢量線(ISTD)做簡單介紹。

A.首先為進入資料分析(Data Analysis)畫面,由 View 中選擇 Data Analysis 進入主畫面,如下 圖



B.其資料處理主畫面如下圖,以下便以化學工作站(Chemstation)之展示(msdemo)檔案為例,分別作外標準檢量線(ESTD)及內標準檢量線(ISTD)介紹。



外標準檢量線(ESTD)

 進入資料分析畫面後,便需載入所屬標準品之資料檔案,以本例而言其檢量線之標準品 Demo 檔案在 C:\Hpchem\msdemo\estdhi,low,med.d 中,所以便需由 File 進入 Load Signal 後,選擇其標準品檔案(C:\Hpchem\ msdemo \estdhi,low,med.d),如下圖所示。



PS 1:作檢量線之前需確定之前是否有做過檢量線,若有則需刪除所屬方法名稱之延伸名 res 檔,否則可能無法做出檢量線,以本例則需刪除 test.res 檔,可以於尋找中尋找*.res 檔, 再找尋方法名稱刪除即可。

PS 2 :	對於滑鼠操作N	AS 軟體之用法,	如下表所示

滑鼠動作	操作於譜圖(Chromatographic)	操作於斷片圖(Spectra)
右鍵連按兩下	得到所欲知 peak 之斷片圖	做 Spectrum 比對 (do library search)
ナ 碑	平均所欲知 peak 之斷片圖(average	可將比對出結構圖貼於譜圖
石姚汝住旭戈	spectra)	(Chromatographic)上,但須有結構資料庫
左鍵按住拖曳	放大所欲知 peak 譜圖	放大斷片圖(Spectra)
	(Chromatographic)	
左鍵連按兩下	縮小(恢復)peak 譜圖	縮小(恢復)斷片圖(Spectra)
	(Chromatographic)	
左右建同時按	可做相關註解	可做相關註解、做檢量線之 tgt,Q1,Q2 定位

 作檢量線之前,請先確認此方法是否之前有做過檢量線,若有將其 res 延伸檔刪除(以本例 則刪除 TEST.res 檔),然後再於 File 中 Load Data File 選取 c:\hpchem\msdemo\estdlow.d 檔,如下圖。



3. Load Data 後,便於 Chromatogram 中點選 AutoIntegrate 做積分



 4. 做完積分後,於 Calibrate 中選取 Set Up Quantitation,於 Quantitation Database Globals 中填入所欲設定之參數後點選 OK,其後便進入 Edit Compounds 畫面,點選 Insert Above 便可進入 Quant Setup 作檢量線,如下圖。



5. 於 Quant Setup 中,選擇 R.T. 6.12 Peak 右鍵連續按兩下,便如下圖所示。本**步驟最重要** 部分為設定 R.T.,需確實於 Quant Setup 中看見 R.T.有時間。



6. 設定 R.T.後,便要做 Mass Spectrum(斷片)平均;其做法為於 Peak 底端右鍵拖曳放開即可, 本步驟為減少 Mass Tilting(傾斜)作用。



7. 做完 Mass Spectrum(斷片)平均後,便要做定量,首先選取目標離子(Tgt),其次再選取特 性離子(Q1、Q2....);選取 Tgt、Q1、Q2....等離子斷片時,需將瞄準器(中)對準離子斷片, 並同時按滑鼠左右鍵即可。



3. 選取 Tgt、Q1...後,如下圖所示,可於 Quant Setup 中看見 Tgt Mass (283.75)、Q1 Mass (285.75)
 和 Ratio (80.92)等數據,即表示設定完成。完成設定後按 Save。



9. 接上按 Save 後,於時間 6.12 peak 中會出現 十符號,表示已完成第一個化合物之設定, 而第二、三....等等化合物,則依步驟 5~8 依序設定即可。



10. 完成所屬化合物設定後(以本例為 A,B 兩化合物),按 Exit 跳出即進入 Edit Compounds, 於此畫面中可見您所設定的化合物,然後按 Exit 即可。



 接上跳出(Exit)後,進入 Calibrate 中選取 Updata,進入畫面選擇 Updata One Level,按 OK 後出現 File has not been quantitated. Quantitate now?訊息,選擇是 Y 即欲做檢量線,然 後便進入 Updata Calibration,於畫面中選擇 Add New Level,填入 Level ID(指檢量線之 第幾個濃度,本例為第一點濃度)及 Cmpd Conc.(化合物濃度為 1),設定完後按 Do Updata,便進入 Edit Compounds。



12. 接上於 Edit Compounds 畫面中,選擇 View 進入 Compound#1—Page1 畫面,選擇 Page 3 鈕可見 A Compound 之 Conc.(濃度)及 Response(面積)値,於同畫面下按 Next 可見 B Compound(Compound#2—Page3 畫面)之 Conc.(濃度)及 Response(面積)値,如此便可確 定化合物 A,B 完成檢量線之設定。另外亦可選擇 Plot 鈕見其檢量線畫面。

Not Reviewed MS Mode: ESTDMED D Quantitated using Method Characterization Spectrum Calibrate Quart	lulti Pt. Cal : TEST.M titate Tools View Help		
C IIC: ESTDMED.D Abundance 00000	Compound #1 Page 1 Name A Compound Retention Time Information Ret Time 6.120 Extract signals from - 0.500 + 0.500	Concentration Units Quantitation Parameters Quant type Target compound Measure response by Area Ident by Meets qualifiers, Best RT Maximum number of hits 9 Subtraction Extend Area Quant Calibration Information Curve Eit Linear Regression Weight Equal weighting Linear term: 1.20e+007 Constant term: 0.00e+000 Coef of Det (r^2): 0.000 Page OK Cancel L	
Not Reviewed MS Mode: ESTDMED D Quantitated using N	ulti Pt Colo Wiew Halm		
Prev Next Plot Page 1 Page 2	Conc Response	Compound #2: B Compound (Page 3) Lvi ID 1 1.000 14065404 I 1.000 I 4065404 IIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIII	Lvl ID Conc Response Image: Concentration of the system of th
Not Reviewed MS Mode: ESTDMED D Quantitated using N File Method Chromatogram Spectrum Celipte Quantitated using N Provide Spectrum Celipte Quantitated using N Abundance 00000 6.12 00000 6.12 0 00000 File B Composition 00000 File B Composition 00000 0 0.5 00000 0 0.5 00000 0 0.5 00000 0 0.5 00000 0 0.5 00000 0 0.5 00000 0 0.5 00000 0 0.5 00000 0 0.5 00000 0 0.5 00000 140 0.5 0000000000 140 0.6 000000000000000000000000000000000000	the Pt Col : TEST M the Tools Yiew Help nd Tot nae 56404.00000000 it: Linear Print Print	Compour P Compound (Page 2) Lv11/ <u>Conc</u> Response 1.000 14066404 IIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIIII	Lvi ID Conc Response

13. 確認 A,B Compound 均有 Conc.(濃度)及 Response(面積)值後,便可選擇 OK 再按 Exit 跳出。上述步驟為第一點檢量線之製作,而第二點製作先於 File\Load Data File 中選取 estdmed.d 作為本例之第二點濃度,然後再按 OK。



14. Load Data 後,便於 Chromatogram 中點選 AutoIntegrate 做積分(如上述步驟 3),然後於 Calibrate 中選取 Updata 進入 Select Updata Option 選擇 Updata One Level,進入 Updata Calibration 畫面選擇 Add New Level 並填入 Level ID(第幾點檢量線)及 Cmpd Conc.(化合物 濃度),本例為填入 Level ID 為 2、Cmpd Conc.為 2,然後按 Do Updata,進入 Edit Compound 畫面,再以步驟 12 檢查是否設定正確。



15. 第三點濃度接續步驟 13~14 即可,惟本例第三點濃度為選取 estdhi.d, Level ID 為 3,濃 度為 4,然後按 Do Updata,進入 Edit Compound 畫面,再以步驟 12 檢查是否設定正確。



16. 檢量線設定完畢後,載入 estdlow.d(假設 estdlow.d,濃度 l ng 為未知樣品)資料並檢測其報告,選擇 Quantitate 中 Calculate,結果如下圖,便可見其相關物質之濃度單位、濃度値及物質名稱等等。



內標準檢量線(ISTD)

所謂內標準品檢量線為一組檢量樣品中加入標準品,此標準品必須與其他樣品不同,且 其濃度必須一定,例如三種不同濃度之檢量標準品,其內標準品的濃度必須是相同的。以本例 而言其檢量線之標準品 Demo 檔案在 C:\Hpchem\msdemo\sistdhi,low,med,unk.d 中,所以便需 由 File 進入 Load Signal 後,選擇其標準品檔案(C:\Hpchem\ msdemo \sistdhi,low,med,unk.d), 如下圖所示。

Ris Mot Reviewed MS Mode: EVALDEMO.D Not Qu	antitated : TEST.M ate: Quantitate: Tools: View.	Heln			
File Method Quromatogram Spectrum Calib. Load Data File Interface Interface	tte Quantitate Iools ⊻iew Load Data File File <u>N</u> ame: estdlow.d File Name	Help Sample Name	Directories:	X	
Printer Setup Print Abori 1. CAHPCHEM/2/DATA/EVALDEMO.D 2. CAHPCHEM/MSDEMO/SISTDHI.D 3. CAHPCHEM/MSDEMO/CISTDHI.D Exit 00000	cistdlow.d 0.1 cistdlow.d 0.1 cistdunk.d un drupgdemo.d dru estdlow.d r estdlow.d r estdlow.d r estdlow.d r sistdlow.d r sistdlow.d r sistdlow.d r sistdlow.d r sistdlow.d r sistdlow.d c sistdlow.d c sistdlow.d r sistdlow.d c sistdlow.d c s	I ng terphenyi J ng terphenyi known sample ug demo sample ng tirphenyimethane, ng tirphenyimethane, ng tirphenyimethane, I ng tirphenyimethane, I ng tirphenyimethane, I ng tirphenyimethane, I ng tirphenyimethane, I ng tirphenyimethane, I ng tirphenyimethane, I ny tirphenyimethane, I ny tirphenyimethane, I ny tirphenyimethane, I	c:\ bpchem 2perpage.m 2perpage.m alkdemo.d barbdemo.d barbdemo.d bbr2050.m bfb524.d bfb524.m bfb524.m bfb524.m cistdhi.d cistdhw.d Drives: c: [WIN98SE]		

一般而言,分析者須了解內標準品在譜圖的時間(R.T.),倘若不確定則可以於 Tools 中選 擇 Overlay Chromatograms..,然後選擇 TIC Mode 便進入 Select Files for TIC Overlay 畫面, 選擇欲疊圖檔案(sistdlow,med,hi.d)在按 Process,如下圖所示。如此便可確認內標準品為 R.T. 6.12 min(三種不同濃度之檢量標準品,其內標準品的濃度是相同的)。



 如同 ESTD 外標準檢量線所述,作檢量線之前,請先確認此方法是否之前有做過檢量線, 若有將其 res 延伸檔刪除(以本例則刪除 TEST.res 檔),然後再於 File 中 Load Data File 選 取 c:\hpchem\msdemo\sistdlow.d 檔,如下圖。



 Load Data 後,便於 Chromatogram 中點選 AutoIntegrate 做積分,其後可參閱 ESTD 外標準 檢量線之 4~16 步驟,包括設定 R.T.、斷片平均、定量及儲存(Save),惟於 Quant Setup 中 需注意加註 ISTD(R.T.=6.12 為內標準品),其 ISTD 濃度為 1 ng。



- 3. 接上設定完後,如下圖所示,R.T.=6.120 為 ISTD 其欄位有 * 號,其後檢查是否有 Conc.(濃 南) P
 - 度), Respounse(面積)值。



 設定完第一點(Level 1)後,便可加入第二點(Level 2),其檔案為 sistdmed.d,依 Load Data、 AutoIntegrate、然後於 Calibrate 中選取 Updata 進入 Select Updata Option 選擇 Updata One Level,進入 Updata Calibration 畫面選擇 Add New Level 並填入 Level ID(第幾點檢量線) 及 Cmpd Conc.(化合物濃度),本例為填入 Level ID 為 2、Cmpd Conc.為 2、ISTD Conc. 為 1,然後按 Do Updata,進入 Edit Compound 畫面,再以步驟 3 檢查是否設定正確。



5. 第三點濃度接續步驟 4 即可,惟本例第三點濃度爲選取 sistdhi.d, Level ID 爲 3,濃度爲 4、 ISTD Conc.爲 1,然後按 Do Updata,進入 Edit Compound 畫面,再檢查是否設定正確。



 檢量線設定完畢後,載入 sistdunk.d(未知樣品濃度為 4 ng)資料並檢測其報告,選擇 Quantitate 中 Calculate,結果如下圖,便可見其相關物質之濃度單位、濃度値及物質名稱 等等。



 上述便是簡易之檢量線設定,其中只有較常用之外標準品與內標準品檢量線製作說明,但 檢量線之製作並非只有此兩種,其餘未說明部分請自己參考使用,若有未詳述或不明白地 方,可電詢相關工程師。



🕌 Enhance	d Data Analysis	- TESTO	907.M 7 EV	VALDEMO.D	(MS Data: N	ot Quantita	ted)			_ 8 ×
<u>F</u> ile <u>M</u> ethod	<u>C</u> hromatogram	Spectrum	Cali <u>b</u> rate	<u>Q</u> uantitate <u>T</u> oo	ls <u>V</u> iew <u>H</u> elj	p				
6 6	00	-								
						▼ Exe	cute			
Aut Window	#24									
Abundance				Avera <u>c</u>	e of 6.399 to 6	.456 min.: eva	ldemo.d			
- - 5000 -										194
0+ m/z>	28 32	39 44 	51 57 - ¹¹ 6	76 - 63 69	85 89	98 102	<u>111</u> 115	122 128 	139 	150
Abundance				#1	23843: Naphth	alene, 2-ether	iyl-			
										154
5000 -										
	27 32	39 43	51 56	64 71 7; 	7 81 89	98 102 11	07111 ¹¹⁵	128 124 ₁ 	139143	
PBM Searc	h Results: D:\D	atabase\	Nist98.I		×			211	Nanhth	alene 2
Rank Nan 1 Nap 2 Bipł 3 Bioł	ne hthalene, 2-ethen henvl henvl	yl-		Ref No. M 123843 19 123836 19 123838 19	W Qual ▲ 54 87 54 81 54 76 ▼	98 102	111115 111115 111115 11115	122 128 122 128 1 124 1	\bigcirc	

Agilent GC/MS 化學工作站 設定Library & Structure

七、設定 Library 及 Structure

MSD 因可做圖譜比對,故於定性中深受各方喜愛,但作 Library Search 需購 買 Library 軟體,一般常見軟體有:NIST 及 Wiley 等等 library,於裝機過程中工 程師會設定相關 Library,但時日一久常有找不到 Library 或 Structure,以下便就 Library 及 Structure 設定作簡介。

A. 設定 Library

1. 首先進入 Data Analysis,可由 Instrument Control 中選取 Data Analysis 進 入或於桌面點選 Data Analysis,如下圖。

Method Instrument #1 - TEST0907.M - [Instrument Control]	
Diagnostics/Vacuum Control Run Time Image: Control Control	
Sample Detectors	
Injector Inlets Image: Columns Image: Columns Image: Columns Image: Columns Image: Columns	
GC Status Messages 🔨 Total Ion	
Oven Temperature Column-1 Flow Cal. Spectrum	



2. 進入後畫面如下,設定 Library 需進入 Spectrum 內 Select Library。

🕌 Enhanced Data Analys	sis - TEST0907.M / EVALDEM	0.D (MS Data: Not Quantitated)	
<u>File Method</u> Chromatogram	Spectrum Calibrate Quantitate	e <u>T</u> ools <u>V</u> iew <u>H</u> elp	
	<u>Add</u> Subtract		
	Tabulate	Execute	
👫 [2] TIC: evaldemo.d	Edit Strategy		
Abundance	Edjt Library		
3000000	Library Search Report		
3000000 -	NIST Output		
2000000	Change Spectral Display		
1000000 -			

 選擇 Select Library 便進入 Library Search Parameters,如下圖所示,以此 為例其 Library 為 Demo.l,若有購買相關 Library 並 Install,此時同時按 Shift ?(於電腦鍵盤中)可進入另一畫面,點選所屬 Database,本例為點選 Nist98.l 再按 OK。

월 Enhanced Data Analysis - TEST0907.M / EVALDEMO.D (MS Data: Not Qu File Method Chromatogram Spectrum Calibrate Quantitate Tools View Help	iantitated)
	Execute
Abundance	×⊔_
3000000 2000000 1000000 2000000 1000000 2000000 1000000 20000000 20000000 20000000 20000000 20000000 20000000 20000000 20000000 200000000	xt Library uality < 0 0 1 1 elp
Enhanced Data Analysis - TEST0907.M / EVALDEMO.D (MS Data: Not File Method Chromatogram Spectrum Calibrate Quantitate Tools View Help File Bai O O T File ?	nplitated) @ × 月時按 Shift ? Execute
#* [2] TIC: evaldemo.d	Browse for Poider
Abundance Library Search Parameters X 3000000 Search Library Search Next Library 3000000 Order Name If Match Quality <	Select Library
	OK Cancel

4. 選擇設定完畢便完成 Library 設定,請記得需儲存於方法中。

B. 設定 Structure

Enhanced Data Analysis - TEST0907.M / EVALDEMO.D	(MS Data: Not Quantitated)
	EasylD GEdt Quart Result Edt.Non Target Peaks
And [2] TIC: evaldemo.d	Align GC
3000000 -	He⊻iew Peak Punty Results ⊵creener RTLock Setup
2000000	
Time> 6.00 7.00	

1. 於 View 中選擇 Parametric Retrieval。

2. 進入畫面如下所示,按 Cancel。

Enhanced Standalone Data Analysis - Parametric Retrieval Mode	_ B ×
Eile Spectrum Library Betrieve Structures Options View Help	
Search Parameters	
Library D:\Database\Nist98.	
Number of Hits to Retrieve 10	
Search Parameters	
Chem. Name Dodecane Melting Point 20 to 0	
CAS Number 112403 Boiling Point 210 220	
Mol. Eormula C12H26	
Mol. Weight 160.0 to 180.0 Ion Search	
Entry Number 1 to 8 Mass 57 Abund. 90 to 100 %	
Misc. Info. evaluation Mass 71 Abund. 60 to 70 %	
Company ID HP Mass 85 Abund. 40 to 50 %	
Search Cancel Help	

3. 選擇 Structures 中 Select Structure Database,畫面如下。

🔮 Enhanced Standalone Data Analysis - Parametric Retrieval Mode	_ 8 ×
File Spectrum Library Fletriever Structures Options View Help	
Set Structure Parameters	

4. 進入 Chemical Structure Databases 畫面,以滑鼠點選 d:\database\demo.l 並將 其移除(**Remove from List**)。

A Enhanced Standalone Data Analysis - Parametric Retrieval Mode	_ 8 ×
Eile <u>S</u> pectrum Library <u>R</u> etrieve Stru <u>c</u> tures <u>O</u> ptions ⊻iew <u>H</u> elp	
Chemical Structure Databases	
Order File Name Directory	
Carlst subset.sdb d:\database\demo.l OK	
Cancel	
Move to Top Remove from List Add New File	

移除完畢再於畫面下方(Add New File)加入新的 database,選擇 Molstruc 目錄並進入選擇 Struct98.sdb。

Chemical Structure Databases
Order File Name Directory
Cancel
Help
Move to tob Tesupactuonitast A Sourceast test.
Chemical Structure Database Select ? ×
Look jn: 🔄 Database 🔽 💽 🔂
Sector and the sector
File game:
rijes of gipe: [US Databases("SDB)
Chemical Structure Databases
Order File Name Directory
OK
Cancel
ныр
Chemical Structure Database Select ? ×
Look jn: 💌 Molstruc 💌 💌 📰 🖽
File game: **
Cancel

 選擇 Struct98.sdb 並按 Open 及回到 Chemical Structure Databases 畫面,此 時便可見到新的 Structure database,如此便完成設定程序,切記需 Save Method。

🕌 Enhanced Standalone Da	ıta Analysis - Parametric Retrieval Mode	×
<u>File Spectrum Library R</u> etriev	ve Stru <u>c</u> tures <u>O</u> ptions <u>V</u> iew <u>H</u> elp	
26 0 0		
	Chemical Structure Databases	
	Order File Name Directory	
	1st struct98.sdb d:\database\molstruc OK	
	Cancel	
	Move to Top Bemove from List Add New File	

GC-MSD 常用耗材表

品名	編號	建議購買數 量(包)	備考	重要性
氣體純化器	RMSH-2(見圖一)	建議備份一組	視氣體純度及使用 量而更換之	必備
Column nut(GC)	5181-8830(見圖二)	一包兩個	裝管柱時使用(GC)	必備
Column nut(GC)	05988-20066(見圖二)	一包兩個	裝管柱時使用 (MSD)	必備
	5062-3516(見圖二)	一包十個	適用於 0.2 column	必備
Ferrul(for GC inlet)	5181-3323(見圖二)	一包十個	適用於 0.25 column	必備
	5062-3514(見圖二)	一包十個	適用於 0.32 column	必備
	5062-3508(見圖二)	一包十個	適用於 0.2 column	必備
Earmal(for MS interface)	5062-3508(見圖二)	一包十個	適用於 0.25 column	必備
r entul(tor wis interface)	5062-3506(見圖二)	一包十個	適用於 0.32 column	必備
	5181-3308(見圖二)	一包十個	No hole	必備
Column cutter	5181-8836(見圖三)	一包一個	裝置管柱時使用	必備
Liner	參考表一		視使用情形定期更 換之	必備
O-ring	5180-4168	一包十二個	與 liner 一起更換	必備
Septum(長效型)	5183-4757	一包五十個	每次注射約 30~50 次更換	必備
Merlin Microseal septum	5182-3442(見圖四)	一組	建議更換此型	必備
PFTBA	05971-60571	一瓶	Tune standard	必備
Mechanical pump oil	6040-0834	一瓶	建議半年更換一次	必備
Diffusion pump oil	6040-0809	二瓶	油質變深色時更換	必備
Filomont	G1099-60053 (5973)	二個	Filament 燒斷時	必備
1'1141115111	05972 -60053 (5972)	二個	Filament 燒斷時	必備





巨研科技股份有限公司 Great Engineering Technology Corporation

be cleaned easily.	
DESCRIPTION	HP PART NO.
High Pressure starter kit	5182-3442
Replacement Microseal only	5182-3444
Replacement Nut only	5182-3445

	deactivated, low pres drop, 870uL	split	5183-4647
H	deactivated, 900uL	splitless	5181-3316
	deactivated, 2mm ID, 250uL	direct	5181-8818
	gen purpose, 870uL	split/splitless	5183-4711
	deactivated, 900uL	splitless	5062-3587
\leftarrow	deactivated, 800uL	splitless	5181-3315
	1.5mm ID, 140uL	direct	18740-80200
	2mm ID, 250uL	direct	18740-80220
	4mm ID, glass wool, 990uL	split	19251-60540
	empty pin & cup, 800uL	split manual	18740-80190
	packed pin & cup, 800uL	split manual	18740-60840
	表一		



Г



巨研科技股份有限公司 Great Engineering Tech. Corp.

總公司: 802高雄市苓雅區中正一路372號11F之1 Tel:07-7112205 Fax:07-7114647

台北分公司: 105 台北市民權東路六段 123 巷 28 號 5F-4 Tel:02-8792-9396 Fax:02-8792-4610