

Agilent GC/MSD eMethod 使用说明



安捷伦科技(中国)有限公司



主要内容

1.	e	Method 介绍	3
2.	女	口何使用 eMethod 进行数据采集	4
-	2.1	在采集软件上调用 eMethod	4
	2.2	对采集方法进行保留时间锁定	6
3.	女	口何使用 eMethod 更新化合物定量表	6



1. eMethod 介绍

气相色谱-单四极杆质谱联用仪(GC/MSD)作为化学分析实验室的一种常规检测 设备,已广泛应用于日常分析工作当中。近年来有越来越多颁布的国家或者行业标准 推荐使用 GC/MSD 作为化合物的分析手段。当用户遵循这些法规进行分析实验时,众 多化合物的方法参数编辑将占用大量的时间和精力。为提高用户的工作效率,安捷伦 科技公司依托其 GC/MSD 硬件的先进性能,并结合其质谱软件的独特功能,将部分常 用的 GC/MSD 国家和行业标准分析方法进行编辑,生成了安捷伦 GC/MSD 质谱软件 可直接使用的 e-Method (电子方法)。

e-Method_FIN GBT_23204-2008 Search						
Share with 🔻 New folder						
Name	Туре 🔻					
) GBT_23204-2008-A.M	File folder					
퉬 GBT_23204-2008-B.M	File folder					
퉬 GBT_23204-2008-C.M	File folder					
퉬 GBT_23204-2008-D.M	File folder					
퉬 GBT_23204-2008-E.M	File folder					
퉬 GBT_23204-2008-F.M	File folder					
GBT_23204-2008-A_SIM.quantmethod	XML Document					
GBT_23204-2008-B_SIM.quantmethod	XML Document					
GBT_23204-2008-C_SIM.quantmethod	XML Document					
GBT_23204-2008-D_SIM.quantmethod	XML Document					
GBT_23204-2008-E_SIM.quantmethod	XML Document					
GBT_23204-2008-F_SIM.quantmethod	XML Document					
🔁 方法说明-GBT_23204-2008	Adobe Acrobat Document					

在每一个标准的 e-Method 文件夹中包含以下内容(见上图):

1. ***.M 文件:此为 Chemstation 和 MassHunter 采集软件均可直接调用的方法,此格式的方法文件中包含气相色谱和质谱选择离子监测 SIM 模式的采集参数;同时还存有 Chemstation 和 MassHunter 数据分析软件均可直接使用的目标化合物单点定量表。



2. ***.quantmethod.xml 文件:此为 MassHunter 定量分析软件可直接使用的目标化合物单点定量方法文件。

3.***.pdf 文件:此文档中包含了对该标准的方法参数设置的一些说明。

此外,您还将了解如何使用安捷伦独有的保留时间锁定(RTL)功能进行目标化合物 保留时间的快速准确定位。

2. 如何使用 eMethod 进行数据采集

2.1 在采集软件上调用 eMethod

打开采集软件后,即可直接调用所下载的***.M方法文件。



若用户的仪器硬件配置与***.M 方法文件中默认配置有所不同,会出现以下对话框。"方法解析报告"中提供配置的差异信息,此时无需其他操作,直接关掉此对话框即可。

1	□ 方法解析报告			0
	该方法的以下部分与 GC 配置不一致:			
	条目 ALS	方法	GC	
	前进样器 存在 后进样器 存在	是否	是否	
		是	台	
	歴行日 1 类型 冷阱 存在	₩₩ 进样口 是	SS 进样口 否	



接下来逐一检查气相部分的参数设置。如果当前方法的色谱柱使用温度上限低于 原先方法中的色谱柱温度上限,则"柱箱"处会出现黄色提醒(见下图),此时只需将 "最高柱箱温度"更改为当前色谱柱的最大值即可。

ALS		〇 色谱柱	位	「図 辅助加热器	P	@ 事件	信号	》 配置	11 就绪状:	态 GC 计算器		
	实际值 ☑ 柱箱温度开启							。速 ³ 。C/r	≨ nin	值 ° C	保持时间 min	运行时间 min
40	40 ° C 70 ° C				•	▶ (初始值)				40	1	1
亚御时间	衡时间 0.2 min 高柱箱温度 400 ° C					梯度	1		30	130	0	4
0.2						梯度	2		5	250	0	28
最高柱和						梯度 3			10	300	5	38
400												
	覆盖色谱柱嵌大值: 300 °C											

完成气相部分的参数检查后,点击下方的"确定"确认对当前采集方法的调用。

随后进入质谱参数编辑界面检查质谱参数设置。主要检查调谐文件的调用路径是 否正确,下图为 MassHunter 软件的质谱参数界面,可点击"浏览"检查。

EM 设置推荐使用"增益因子"模式,增益因子默认值为1,可根据化合物实际响应强度适当增减,常用设置范围为0.5-10。

调谐文件			口に行け回る)	10.00
atune. u	ু ঈ	览(B)	(X)	10.00 min
调谐类型	EI		溶剂延迟	8.00 min
调谐 EMV	1247		检测器设置	
CI 气体阀		1	💽 痕里离子检测	
CI 流量		*	EM 设置	増益因子 💦 🔻
	实际值 设定值	·	增益因子	1.000
离子源	230 230	ī用 (A)	应用的 EM 电压(/) 1343
MS 四极杆	150 150		💽 EM 保护器	
			限值	总限值 1e8 (缺省)
米集类型	SIM	•		

检查完质谱参数后,同样点击下方的"确定"即可在当前仪器软件上完成对采集方 法的调用,最后记得保存方法。



2.2 对采集方法进行保留时间锁定

在使用采集方法分析样品之前,需要在用户的仪器上对采集方法进行微调,使化 合物的保留时间和标准文本中的参考值一致。安捷伦的 Chemstation 和 MassHunter 软 件都带有保留时间锁定(RTL)功能,能够将化合物的保留时间快速准确地锁定到特 定数值。

详细的保留时间锁定(RTL)功能介绍,以及如何在 Chemstation 和 MassHunter 软件上进行 RTL 操作请参见"保留时间锁定 RTL-操作说明"文件。

3. 如何使用 eMethod 更新化合物定量表

在每一个 eMethod 中都存有 Chemstation 和 MassHunter 软件可直接使用的目标化 合物单点定量表。而进行实际样品定量分析前,用户需要在仪器上采集不同校正浓度 的样品数据以进行化合物定量表的更新。

关于如何在 Chemstation 数据分析软件和 MassHunter 定量软件上进行化合物定量 表的更新操作,可参考相关的软件使用说明。

安捷伦公司对本文档可能存在的错误及其后果不承担任何法律责任,我们会适时推出新版本的说明文档,恕不另行通知。