



Agilent 6400 Series Triple Quadrupole LC/MS

คู่มือการใช้งาน MassHunter Software



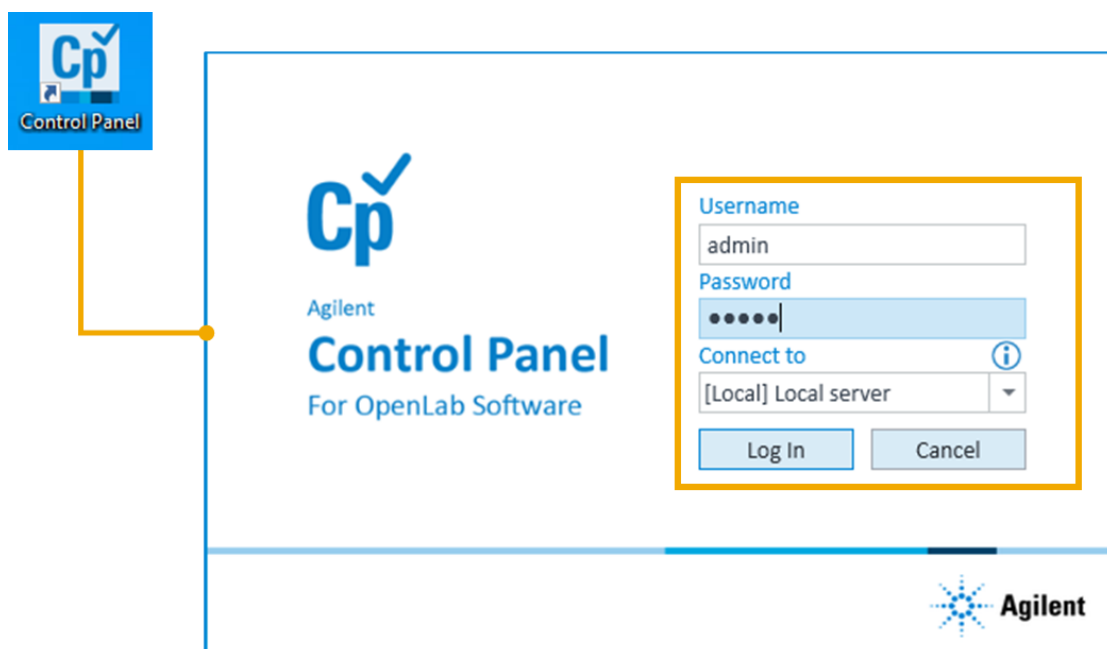


ขั้นตอนการเปิดเครื่อง

1. เปิดคอมพิวเตอร์
USER NAME: _____
PASSWORD: 3000hanover
2. เปิดก๊าซไนโตรเจน
 - Nitrogen for Source: Nitrogen generator or Liquid Nitrogen
(Flow 30-50 L/min, Pressure 80 – 100 psi)
 - Nitrogen for CID: Nitrogen Tank 99.999% (Pressure 30 psi)
3. เปิดสวิตช์เครื่องมือ LC/MS TQ
4. รอเวลาประมาณ 4 ชม.
5. เปิดสวิตช์เครื่องมือ LC
6. รอเวลาประมาณ 2 นาที

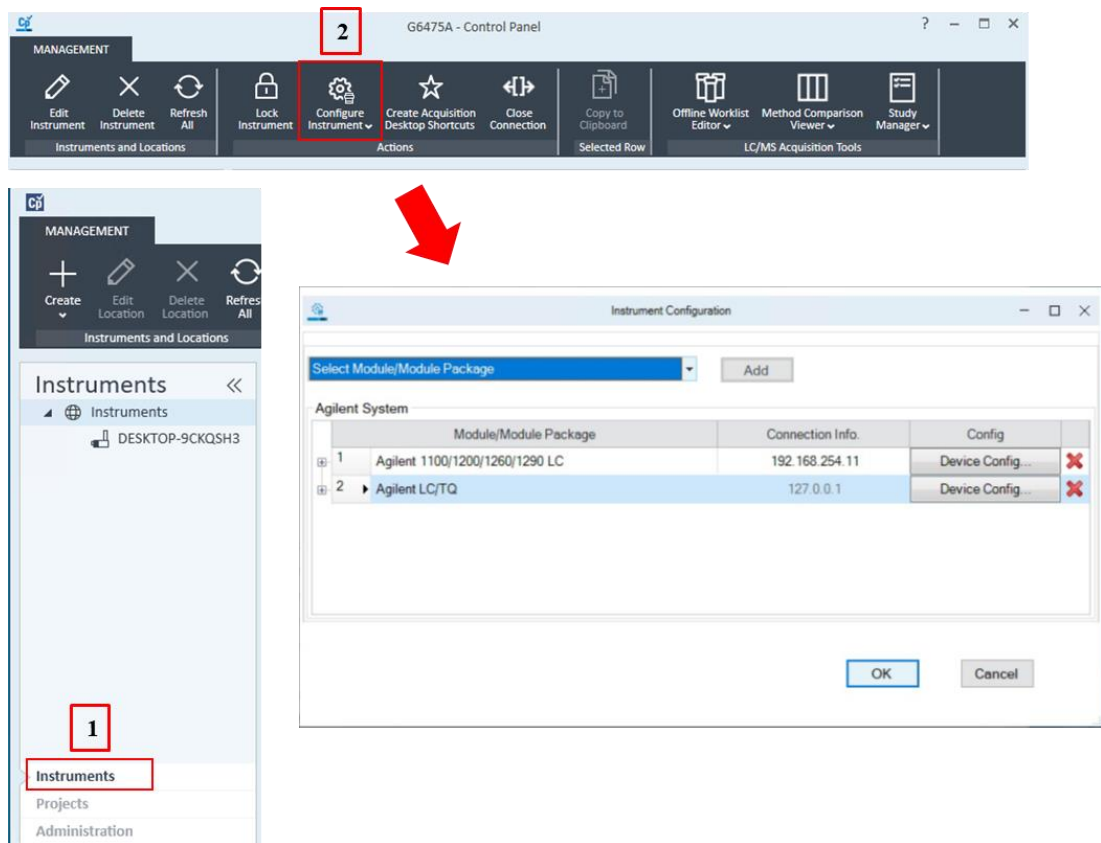
การเข้าถึงโปรแกรม MassHunter

1. Double click ที่ Control Panel icon
2. Login ด้วย user Admin



การ Configure เครื่องมือ

1. Click Instrument tab
2. เลือก Configure Instrument และทำการตรวจสอบการ Config ตรงตามเครื่อง HPLC ที่ใช้งาน



2

G6475A - Control Panel

MANAGEMENT

Edit Instrument Delete Instrument Refresh All Lock Instrument **Configure Instrument** Create Acquisition Desktop Shortcuts Close Connection Copy to Clipboard Offline Worklist Editor Method Comparison Viewer Study Manager

Instruments and Locations Actions Selected Row LC/MS Acquisition Tools

1

MANAGEMENT

Create Edit Location Delete Location Refresh All

Instruments and Locations

Instruments

DESKTOP-9CKQSH3

Instruments Projects Administration

Instrument Configuration

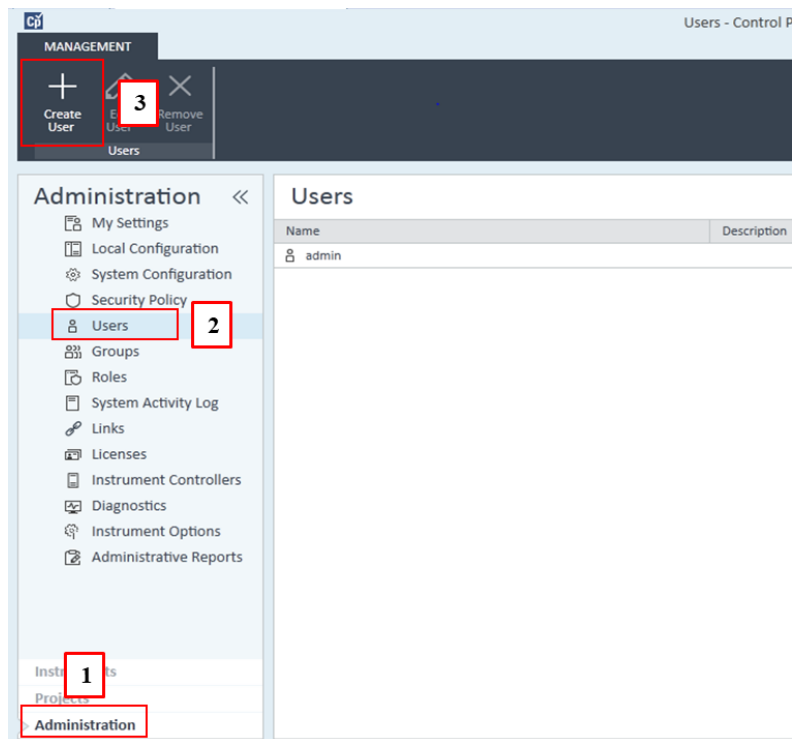
Select Module/Module Package Add

Agilent System			
	Module/Module Package	Connection Info.	Config
1	Agilent 1100/1200/1260/1290 LC	192.168.254.11	Device Config... ✖
2	Agilent LC/TQ	127.0.0.1	Device Config... ✖

OK Cancel

การตั้ง User name และ Password

1. Click Administration > User > Create จากนั้นทำการใส่ข้อมูล ตามรูปด้านล่าง



Create User

Name (ID): Username for login

Description:

General

Group Membership

Role Membership

Password: Create Password

Confirm password: Confirm Password

Full name: Operator name in report

Email:

Contact Information:

☒ User must change password at next logon ← Unmark

☐ User cannot change password

☐ Password never expires ← Mark

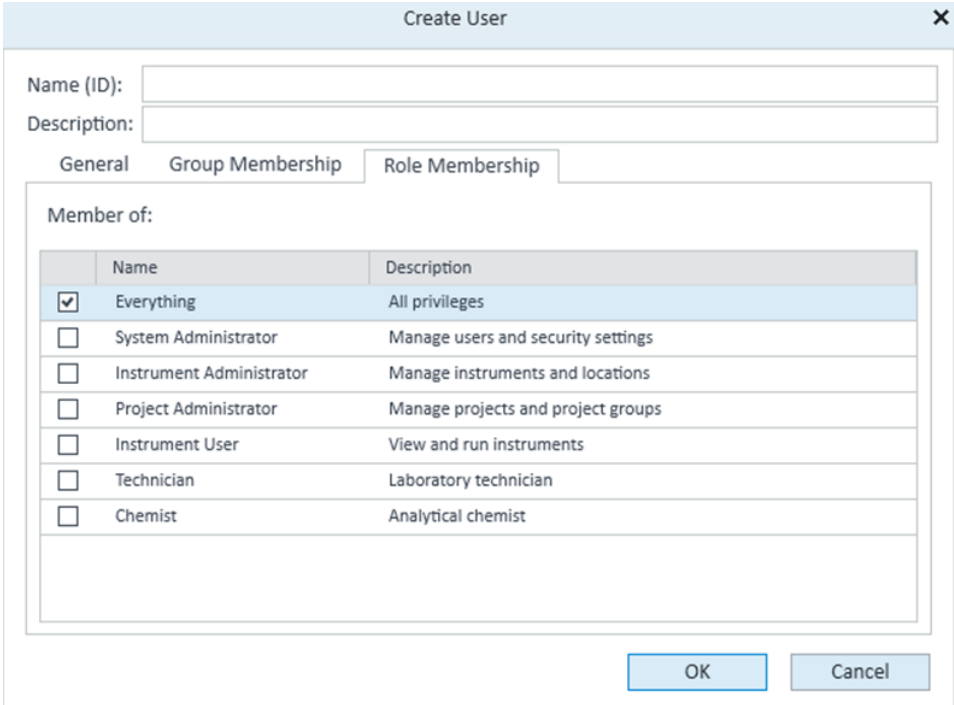
☐ Account is disabled

☐ Account is locked out

OK

Cancel

- Click tab Role membership > mark เลือก role ที่สอดคล้องกับ user



Create User

Name (ID):

Description:

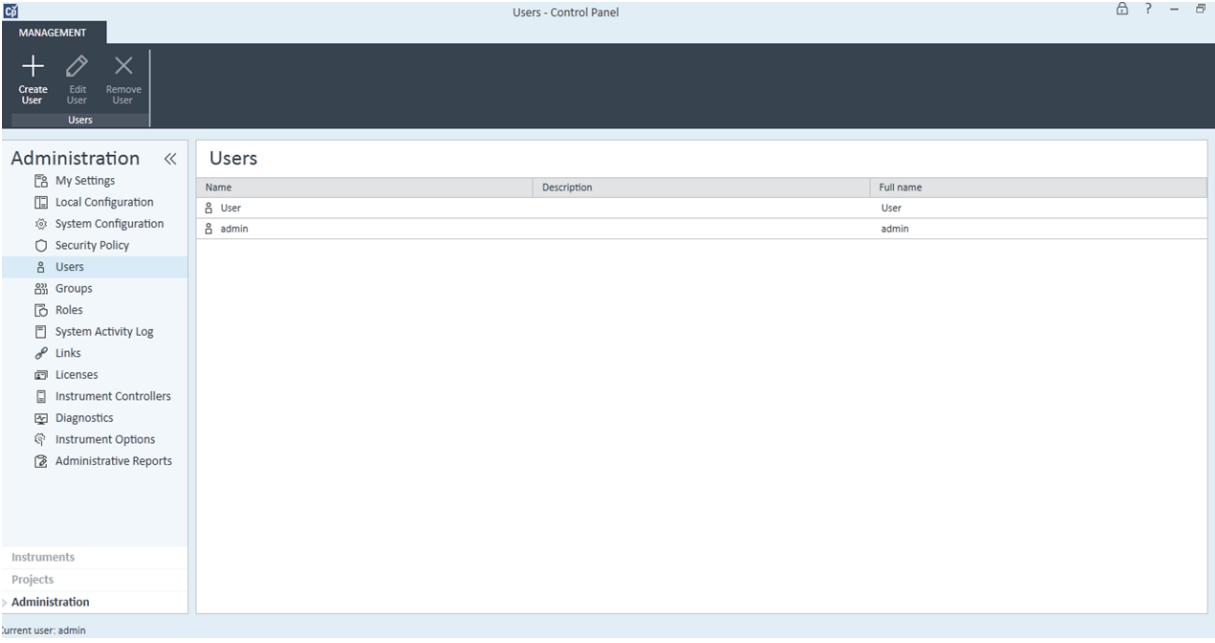
General Group Membership **Role Membership**

Member of:

	Name	Description
☒	Everything	All privileges
☐	System Administrator	Manage users and security settings
☐	Instrument Administrator	Manage instruments and locations
☐	Project Administrator	Manage projects and project groups
☐	Instrument User	View and run instruments
☐	Technician	Laboratory technician
☐	Chemist	Analytical chemist

OK Cancel

- Click Ok จะปรากฏหน้าต่างดังรูป



MANAGEMENT Users - Control Panel

Create User Edit User Remove User

Administration

- My Settings
- Local Configuration
- System Configuration
- Security Policy
- Users**
- Groups
- Roles
- System Activity Log
- Links
- Licenses
- Instrument Controllers
- Diagnostics
- Instrument Options
- Administrative Reports

Users

Name	Description	Full name
User		User
admin		admin

Instruments

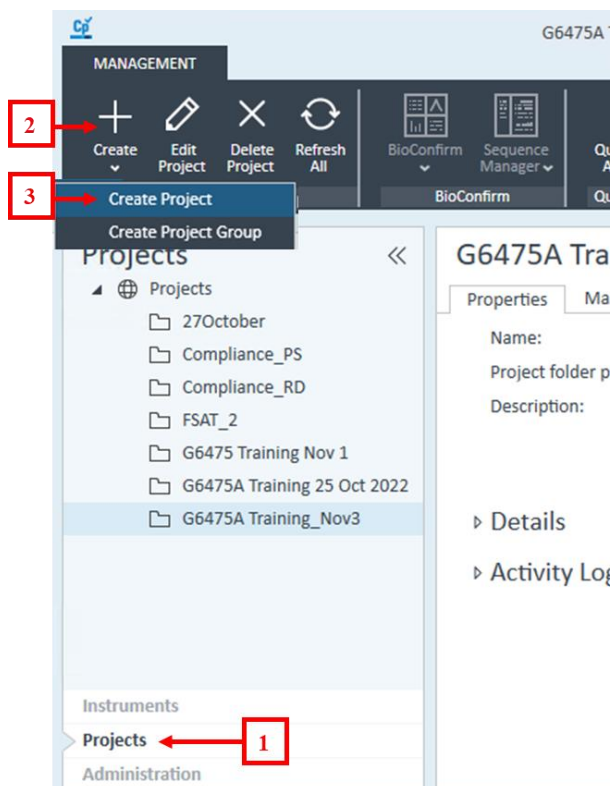
Projects

> Administration

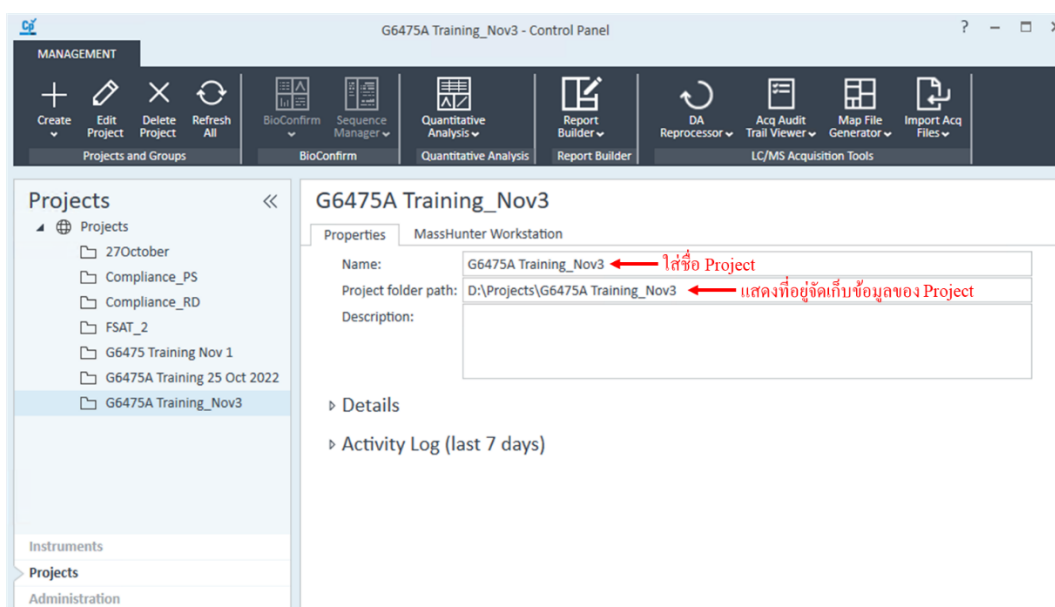
Current user: admin

ขั้นตอนการสร้าง Project และกำหนด Path เก็บข้อมูล

1. Click Projects > Create > Create Project ดังรูป

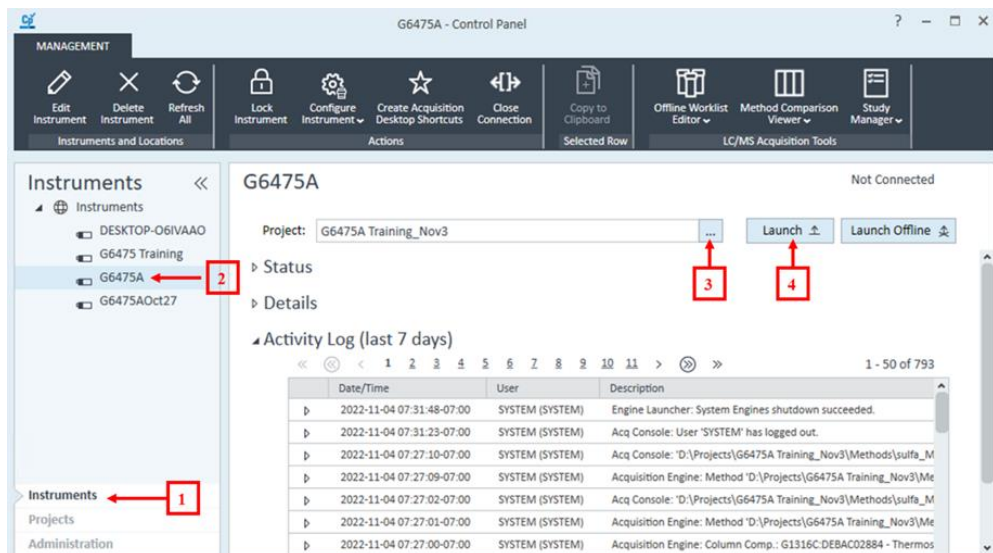


2. ทำการใส่ข้อมูล ดังรูปด้านล่าง และ click OK

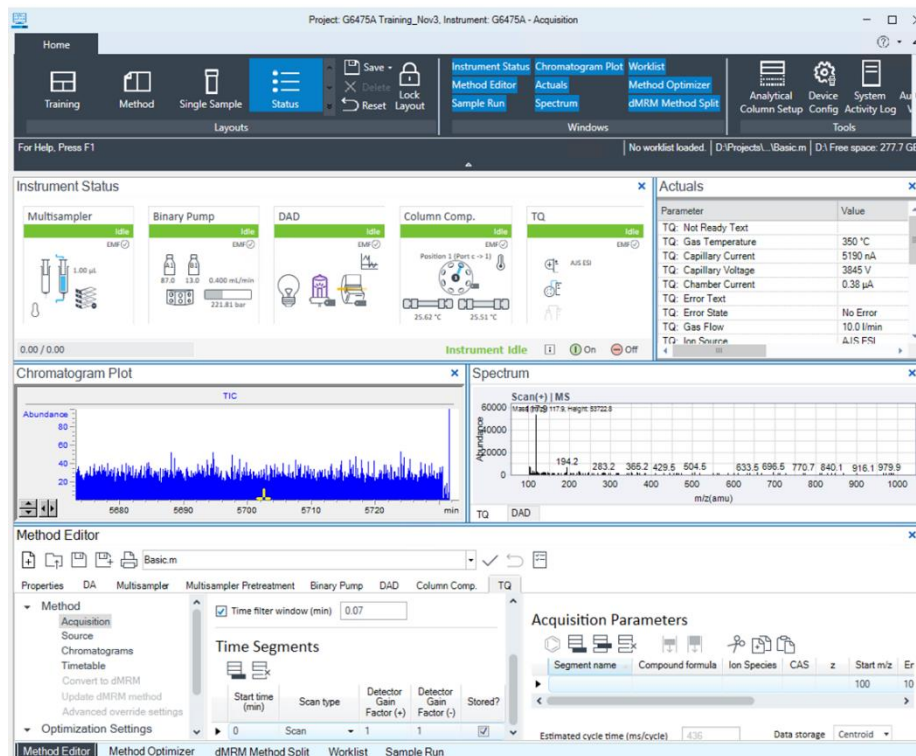


การ Launch Data Acquisition

1. จากรูปด้านล่างเลือกหัวข้อ Instrument จากนั้นเลือกเครื่อง LC-TQ ที่จะรัน แล้วเลือก Project และกด Launch



2. จะปรากฏหน้าต่าง Acquisition ดังรูป



การ Tuning QQQ MS

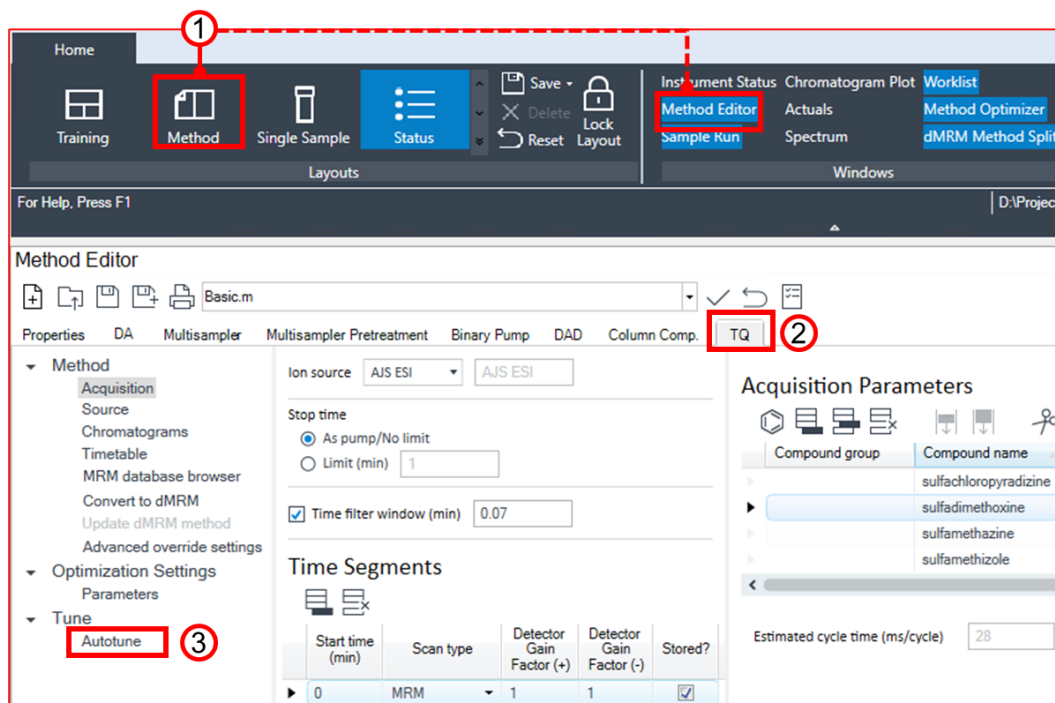
บรรจุสาร tuning calibrant ลงในขวด (ตามรายละเอียดด้านล่าง)

Model	ESI	AJS	APCI	APPI	MMI
6400 Series TQ	ES-L	ES-L	APCI-L	APCI-L	MMI-L
PN	G1969-85000	G1969-85000	G1969-85010	G1969-85010	G1969-85010

Checktune

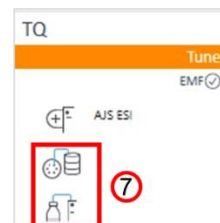
เป็นการเทียบหรือยืนยันว่า Mass axis และ peak width อยู่ในค่าที่กำหนดไว้

1. เลือก Method หรือเลือก Method Editor Window
2. Click ที่ TQ tab
3. Click ที่ Autotune ที่อยู่ข้างล่างหัวข้อ Tune เพื่อไปที่หน้าต่าง Tune

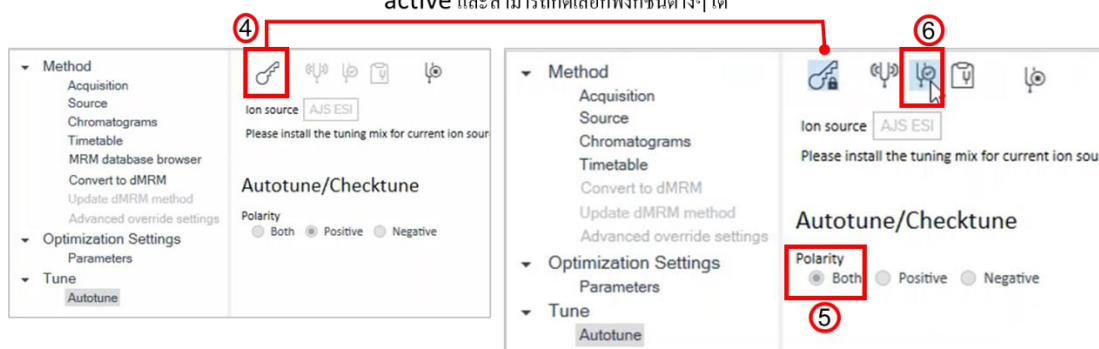


4. Click ที่ไอคอน Key เพื่อทำการ lock tune control ทำให้เครื่อง TQ อยู่ในสถานะ Tune
5. เลือก polarity ที่ต้องการจะวิเคราะห์ : Positive หรือ Negative หรือ Both

6. Click ที่ไอคอน Checktune เพื่อเริ่มทำการ Checktune
7. จะสังเกตเห็นว่า Calibrant จะเปลี่ยนเป็น On โดยอัตโนมัติ และ LC Flow จะไปที่ Waste



เมื่อกด lock tune control แล้ว tuning options จะเปลี่ยนเป็น active และสามารถเลือกฟังก์ชันต่างๆ ได้



8. รอจน Checktune complete จะมีไฟล์ pdf ของ MS Checktune Report ปรากฏขึ้นดังตัวอย่างด้านล่าง

MS Checktune Report - G6475A

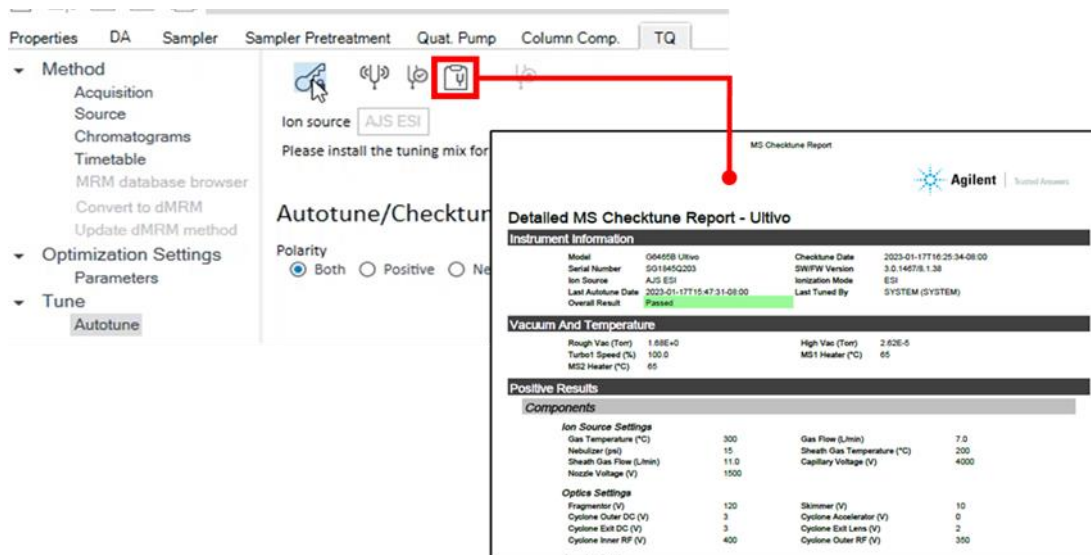
Instrument Information

Model	G6475A	Checktune Date	2022-11-08T15:08:34-08:00
Serial Number	SG2222S002	SW/FW Version	3.0.1463/8.1.38
Ion Source	AJS ESI	Ionization Mode	ESI
Last Autotune Date	2022-11-08T11:26:26-08:00	Last Tuned By	SYSTEM (SYSTEM)
Vacuum Pressure	1.87E+0 [R] (Torr); 3.75E-5 [H] (Torr)	Overall Result	Passed

Positive Ion Mode

MS1 Peak Width Unit, Scan Speed Normal	Result	Passed
MS2 Peak Width Unit, Scan Speed Normal	Result	Passed
MS1 Peak Width Narrow, Scan Speed Normal	Result	Passed
MS2 Peak Width Narrow, Scan Speed Normal	Result	Passed
MS1 Peak Width Wide, Scan Speed Normal	Result	Passed
MS2 Peak Width Wide, Scan Speed Normal	Result	Passed
MS1 Peak Width Widest, Scan Speed Normal	Result	Passed
MS2 Peak Width Widest, Scan Speed Normal	Result	Passed
MS2 Scan Speed Fast	Result	Passed
MS2 Scan Speed Ultra	Result	Passed
MS1 Lag Factor	Result	Passed
MS2 Lag Factor	Result	Passed
Gain	Result	Passed

9. หลังจากที่เราทำการ Checktune เสร็จแล้ว สามารถดู Detail MS Checktune Report ได้ โดยไปที่ไอคอน Generate Detailed Report ดังแสดงด้านล่าง

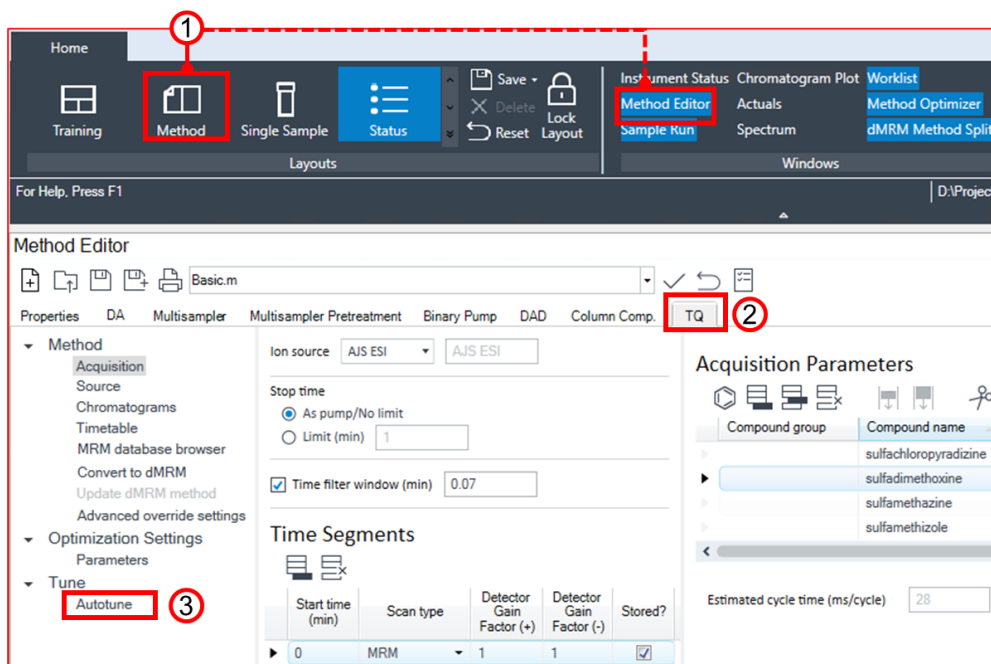


The screenshot shows the 'MS Checktune Report - Ultivo' window. The report includes the following sections:

- Instrument Information:**
 - Model: 004558 Ultivo
 - Serial Number: 50118452203
 - Ion Source: AJS ESI
 - Last Autotune Date: 2023-01-17T15:47:31-08:00
 - Overall Result: Passed
 - Checktune Date: 2023-01-17T16:25:34-08:00
 - SW/PS Version: 3.0.14675.1.38
 - Ionization Mode: ESI
 - Last Tuned By: SYSTEM (SYSTEM)
- Vacuum And Temperature:**
 - Rough Vac (Torr): 1.88E+0
 - Turbol1 Speed (%): 100.0
 - MS2 Heater (°C): 65
 - High Vac (Torr): 2.62E-5
 - MS1 Heater (°C): 65
- Positive Results:**
 - Components:**
 - Ion Source Settings:**
 - Gas Temperature (°C): 300
 - Nebulizer (psi): 15
 - Sheath Gas Flow (L/min): 11.0
 - Nicote Voltage (V): 1500
 - Optics Settings:**
 - Fragmentor (V): 120
 - Cyclone Outer DC (V): 3
 - Cyclone Exit DC (V): 3
 - Cyclone Inner RF (V): 400
 - Gas Flow (L/min): 7.0
 - Sheath Gas Temperature (°C): 200
 - Capillary Voltage (V): 4000
 - Skimmer (V): 10
 - Cyclone Accelerator (V): 0
 - Cyclone Exit Lens (V): 2
 - Cyclone Outer RF (V): 300

Autotune

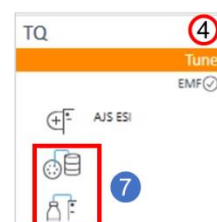
1. เลือก Method หรือเลือก Method Editor Window
2. Click ที่ TQ tab
3. Click ที่ Autotune ที่อยู่ข้างล่างหัวข้อ Tune เพื่อไปที่หน้าต่าง Tune



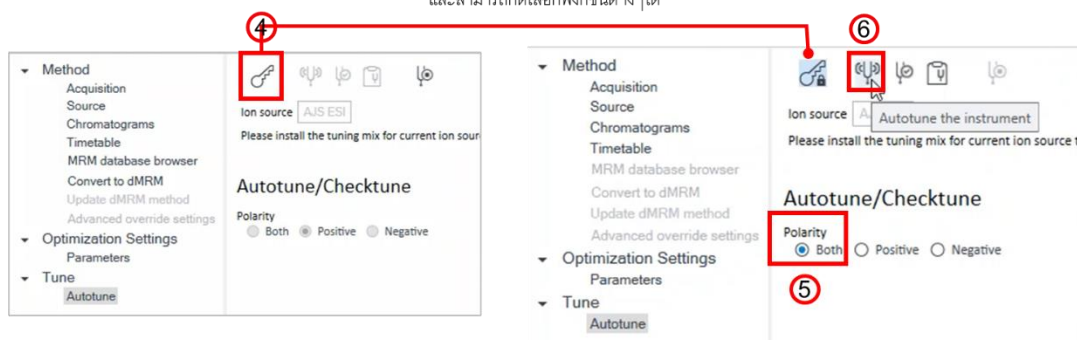
The screenshot shows the 'Method Editor' window. The 'TQ' tab is selected in the top toolbar. The 'Autotune' button is highlighted in the 'Tune' section. The 'Acquisition Parameters' section shows the following settings:

- Compound group:** sulfachloropyridazine, sulfadimethoxine, sulfamethazine, sulfamethizole
- Estimated cycle time (ms/cycle):** 28

4. Click ที่ไอคอน Key เพื่อทำการ lock tune control ทำให้เครื่อง TQ อยู่ในสถานะ Tune
5. เลือก polarity ที่ต้องการจะวิเคราะห์ : Positive หรือ Negative หรือ Both
6. Click ที่ไอคอน Autotune เพื่อเริ่มทำการ Autotune
7. จะสังเกตเห็นว่า Calibrant จะเปลี่ยนเป็น On โดยอัตโนมัติ และ LC Flow จะไปที่ Waste



เมื่อกด lock tune control แล้ว tuning options จะเปลี่ยนเป็น active และสามารถกดเลือกฟังก์ชันต่างๆได้



8. รอจน Autotune complete จะมีไฟล์ pdf ของ MS Autotune Report ปรากฏขึ้นดังตัวอย่าง
9. Autotune file จะถูกจัดเก็บโดยอัตโนมัติ

D:\MassHunter\Tune\QQQ\G64xx\atunes.TUNE.XML

MS Autotune Report - G6475A

Instrument Information

Model	G6475A	Autotune Date	2022-11-08T11:26:26-08:00
Serial Number	SG22225002	SW/FW Version	3.0.1463/8.1.38
Ion Source	AJS ESI	Ionization Mode	ESI
Last Tuned By	SYSTEM (SYSTEM)	Overall Result	Passed

Vacuum And Temperature

Rough Vac (Torr)	1.91E+0	High Vac (Torr)	3.81E-5
Turbo1 Speed (%)	100.0	Turbo2 Speed (%)	100.0
MS1 Heater (°C)	100	MS2 Heater (°C)	100

Positive Ion Mode

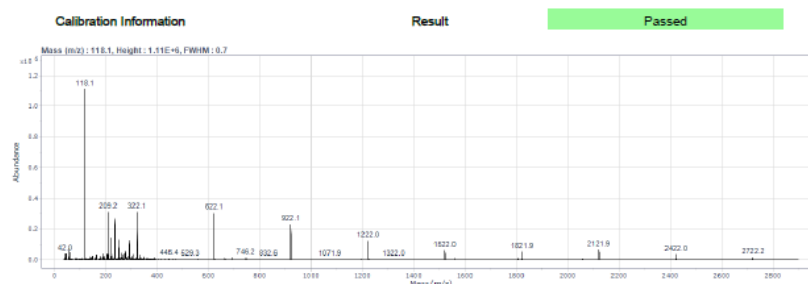
Detector Settings

HED Standard (kV)	-10	EMV Standard (V)	1201
HED Large Molecule (kV)	-20	EMV Large Molecule (V)	1117

MS1 Peak Width Unit, Scan Speed Normal

Calibration Information		Result	
Mass Calibration Results		Passed	
Theoretical (m/z)	Mass Delta(m/z)	Width Delta(m/z)	Abundance
58.07	0.00	0.00	9.35E+5
118.09	0.01	-0.01	2.01E+6
322.05	0.00	0.00	4.87E+5
622.03	0.01	-0.01	5.68E+5
922.01	0.00	0.00	4.79E+5
1221.99	0.00	0.00	2.82E+5
1521.97	0.01	0.00	1.42E+5
1821.95	0.00	0.00	5.92E+4
2121.93	0.00	-0.01	4.32E+4

MS2 Peak Width Unit, Scan Speed Normal



Checktune vs Autotune

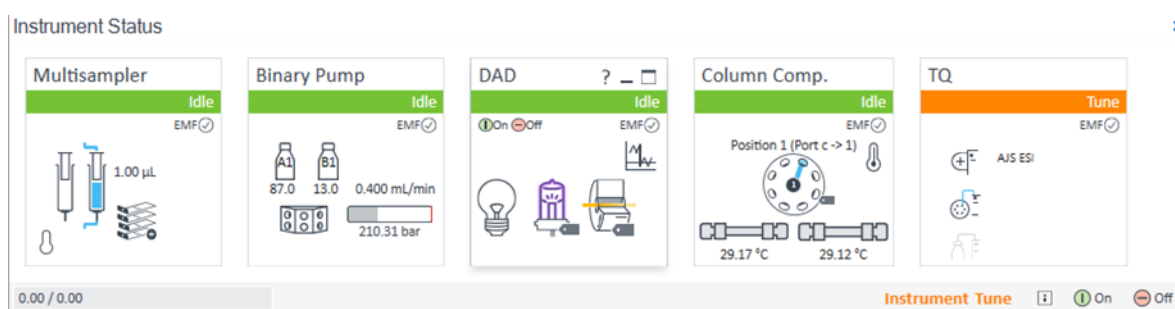
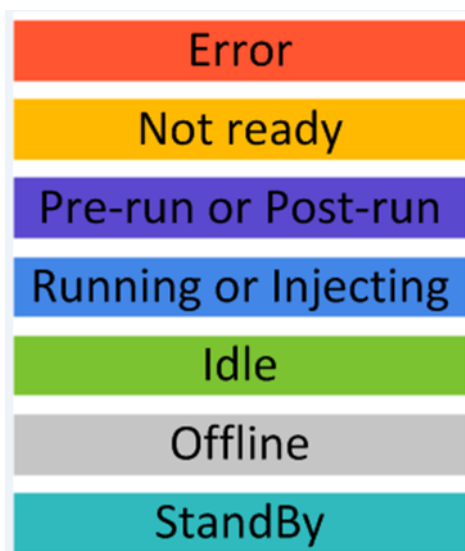
Checktune Weekly

- Routine use only requires resolution and mass axis verification for polarity and resolution modes.
- Checktune checks all three resolution modes.
- Checktune checks current tune file, but does not change it. No need to save Tune file.

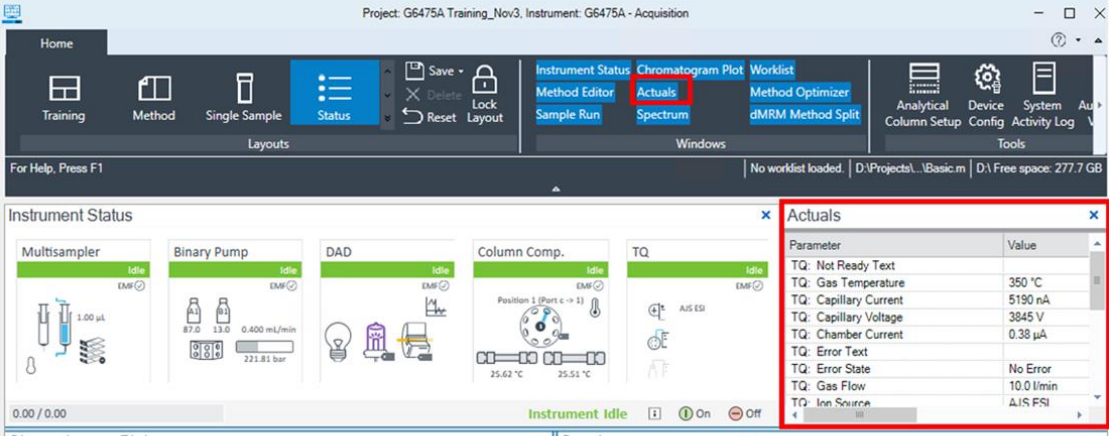
Autotune Monthly/Quarterly

- Autotune in both polarities to optimize ion transmission and update EM voltage.

Instrument Status สัญญาณไฟแสดงสถานะการทำงานของเครื่อง



Instrument Actuals สำหรับ Mass Spectrometer



Project: G6475A Training_Nov3, Instrument: G6475A - Acquisition

Home | Training | Method | Single Sample | Status | Save | Delete | Lock Layout | Reset | Instrument Status | Chromatogram Plot | Worklist | Method Editor | Sample Run | Spectrum | Method Optimizer | dMRM Method Split | Analytical Column Setup | Device Config | System Activity Log | Tools

For Help, Press F1 | No worklist loaded. | D:\Projects\...Basic.m | D:\ Free space: 277.7 GB

Instrument Status

Multisampler: Idle, 1.00 µl
Binary Pump: Idle, 87.0, 13.0, 0.400 mL/min, 221.81 bar
DAD: Idle
Column Comp.: Idle, Position 1 (Part c -> 1), 25.62 °C, 25.51 °C
TQ: Idle, AJS ESI

Actuals

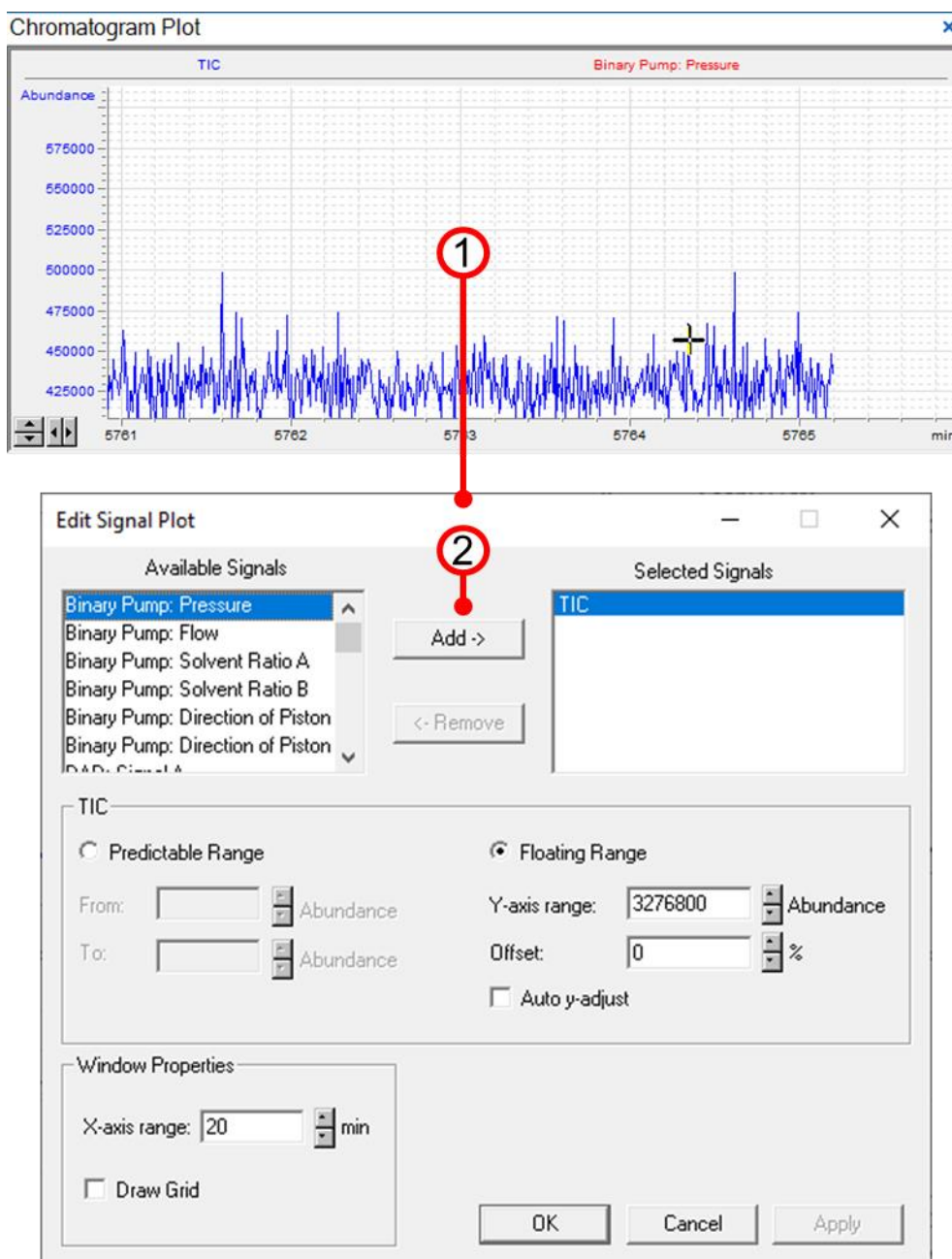
Parameter	Value
TQ: Not Ready Text	
TQ: Gas Temperature	350 °C
TQ: Capillary Current	5190 nA
TQ: Capillary Voltage	3845 V
TQ: Chamber Current	0.38 µA
TQ: Error Text	
TQ: Error State	No Error
TQ: Gas Flow	10.0 l/min
TQ: Ion Source	AJS ESI

Actuals

Parameter	Value
TQ: Not Ready Text	
TQ: Gas Temperature	350 °C
TQ: Capillary Current	5195 nA
TQ: Capillary Voltage	3845 V
TQ: Chamber Current	0.41 µA
TQ: Error Text	
TQ: Error State	No Error
TQ: Gas Flow	10.0 l/min
TQ: Ion Source	AJS ESI
TQ: Ion Polarity	Positive
TQ: Ion Mode	ESI
TQ: Turbo1 Speed	100.0 %
TQ: Turbo2 Speed	100.0 %
TQ: Rough Vac	1.79E+0 Torr
TQ: High Vac	3.69E-5 Torr
Binary Pump: Ripple	-2.65 %

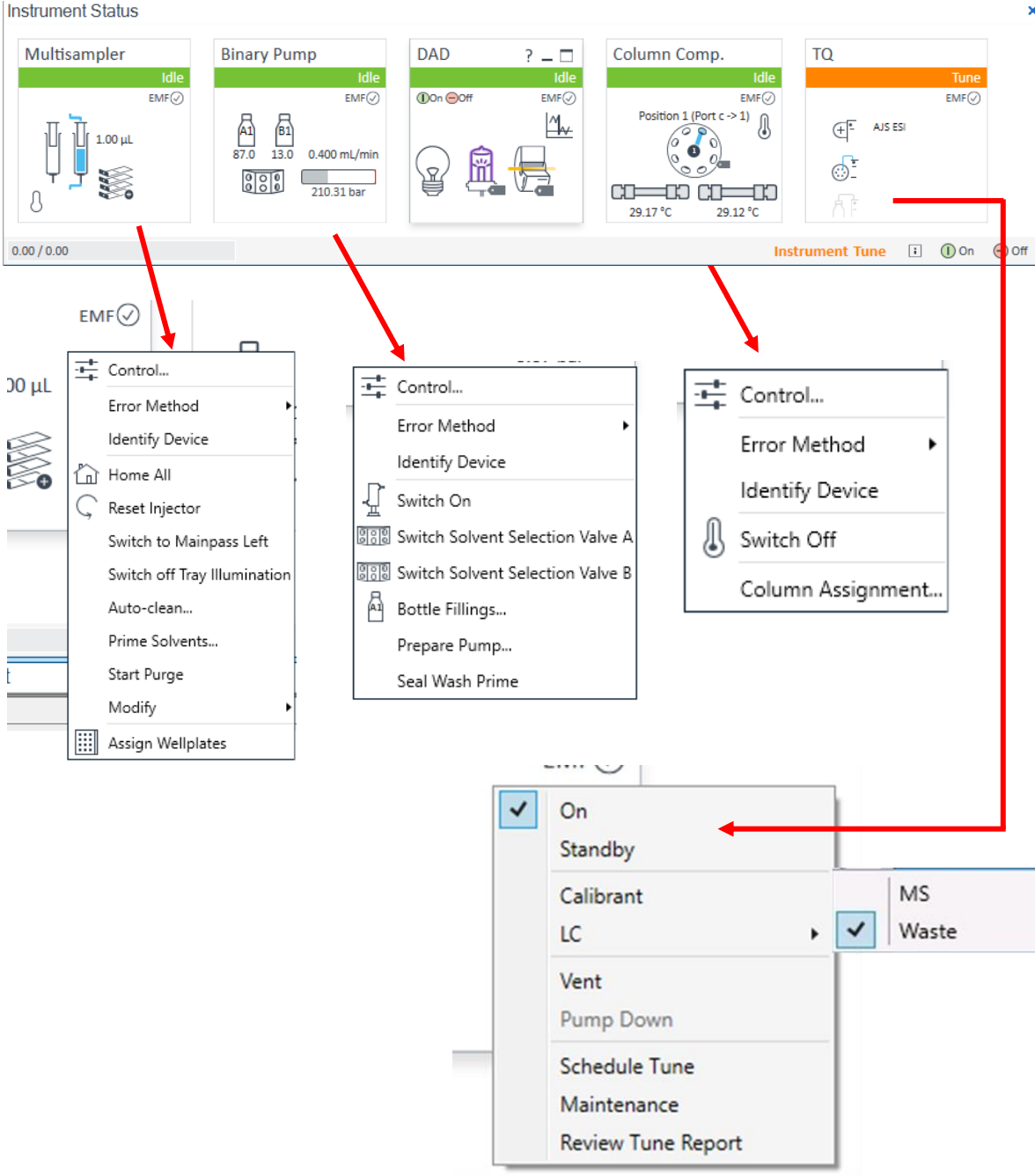
Real-Time Plot

- สามารถเพิ่ม-ลด สัญญาณที่ต้องการแสดงที่หน้า Real-Time Plot ได้ รวมถึงการปรับสเกลของแกนต่างๆ โดยคลิกขวา และเลือก Change จากนั้นทำการแก้ไขที่ Edit Signal Plot



Instrument Control

- คลิกขวาใน module ที่ต้องการ จะแสดง Quick access เพื่อเลือกใช้งานได้



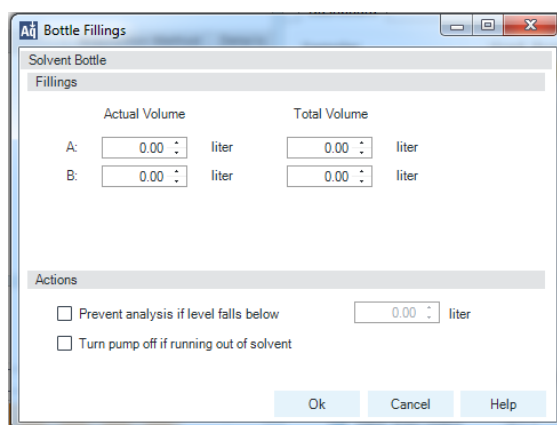
The screenshot displays the 'Instrument Status' window with five modules: Multisampler, Binary Pump, DAD, Column Comp., and TQ. Each module has a status indicator (Idle or Tune) and an EMF checkmark. A red line highlights the 'Instrument Tune' button at the bottom right, which is currently set to 'On'. Below the main window, three context menus are shown, each corresponding to a module's quick access options:

- Multisampler Context Menu:**
 - Control...
 - Error Method
 - Identify Device
 - Home All
 - Reset Injector
 - Switch to Mainpass Left
 - Switch off Tray Illumination
 - Auto-clean...
 - Prime Solvents...
 - Start Purge
 - Modify
 - Assign Wellplates
- Binary Pump Context Menu:**
 - Control...
 - Error Method
 - Identify Device
 - Switch On
 - Switch Solvent Selection Valve A
 - Switch Solvent Selection Valve B
 - Bottle Fillings...
 - Prepare Pump...
 - Seal Wash Prime
- Column Comp. Context Menu:**
 - Control...
 - Error Method
 - Identify Device
 - Switch Off
 - Column Assignment...

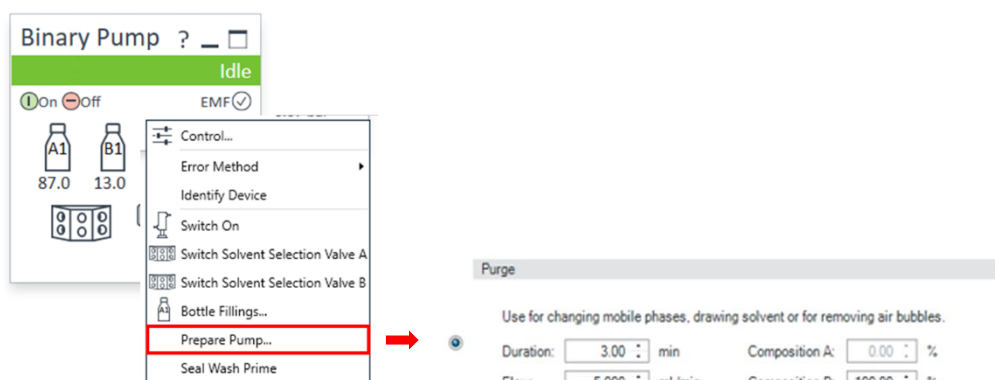
At the bottom, a detailed 'Instrument Tune' menu is shown, with the 'On' option selected. The 'Waste' option is also highlighted in the 'MS' section.

Purge Mobile phase (สำหรับ Auto-purge Valve)

1. เตรียม mobile phase บรรจุลงขวดให้เรียบร้อย
2. ทำการ Purge mobile phase
3. Click ขวา ที่ Pump module และเลือก Bottle Fillings จะได้หน้าต่าง Bottle Fillings ดังรูป



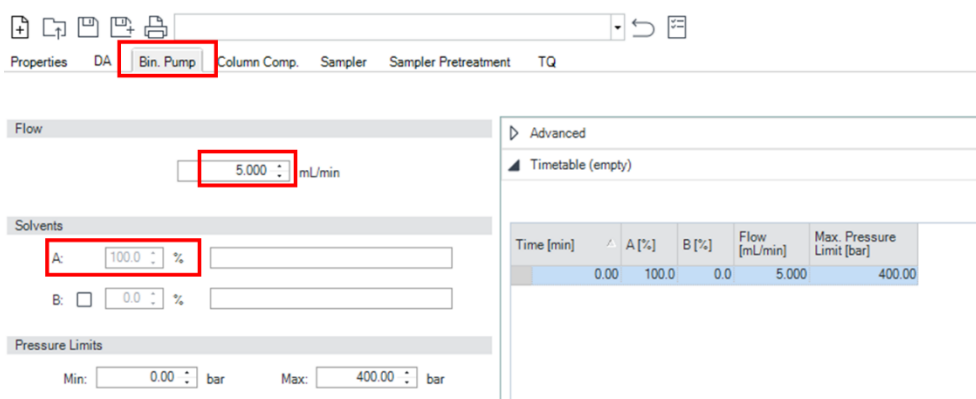
4. ในช่อง Actual Volume ให้เติมปริมาตรของตัวทำละลายที่บรรจุอยู่จริงในขวดนั้น ๆ
5. ในช่อง Total Volume ให้ใส่ตัวเลขความจุของขวดบรรจุตัวทำละลาย
6. ทำเครื่องหมาย/ หัวข้อ Prevent analysis If level falls below และกำหนดปริมาตรต่ำสุด ที่ให้ Pump ทำงาน
7. ทำเครื่องหมาย / หัวข้อ Turn pump off if running out of solvent จากนั้น click OK
8. คลิกขวาที่ หน้าต่าง Pump แล้วเลือกหัวข้อ Prepare pump และตั้งค่าดังรูปสำหรับ Purge สาย



9. ทำการ Purge Line A ก่อน โดยพิมพ์ช่อง Line B เป็น 0% จากนั้น Line A จะขึ้น 100%
10. กรอก Duration เป็น 5 นาที และปรับ Flow rate เป็น 5 ml/min แล้วเลือก Ok
11. ทำการ Purge จนแน่ใจว่าไม่มีฟองอากาศ ใน Line A
12. คลิกขวาที่ Pump แล้วเลือกหัวข้อ Switch Solvent Selection Valve เพื่อสลับระหว่าง A1-A2 หรือ B1-B2
13. หลังจากนั้น เปลี่ยนเป็น Composition B = 100 % สำหรับ Purge สาย B
14. ทำซ้ำตามข้อ 10-11 จนครบทุก Line

Purge Mobile phase (สำหรับ Manual-purge Valve)

1. คลายปุ่ม Purge valve ที่ Pump โดยหมุนทวนเข็มนาฬิกา
2. เลือก Pump ที่ Method Editor Tab



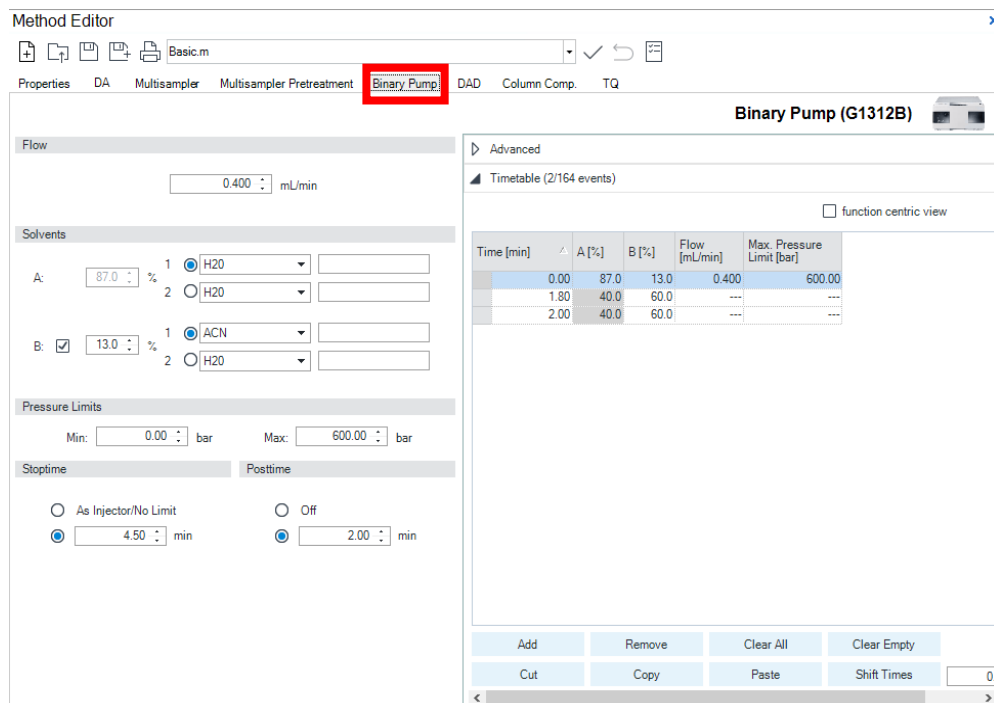
Time [min]	A [%]	B [%]	Flow [mL/min]	Max. Pressure Limit [bar]
0.00	100.0	0.0	5.000	400.00

3. เลือก A : 100% , Flow 5 ml/min
4. ใช้ mouse กดปุ่มขวาที่ pump บริเวณ instrument status pane
5. เลือก Switch Pump On
6. ตรวจสอบแน่ใจว่า mobile phase สาย A ไม่มีฟองอากาศ
7. ทำซ้ำ mobile phase สาย B
8. Off Pump

การสร้าง Acquisition Method

1. การตั้งค่า Pump

เลือก Pump ที่ Method Editor pane

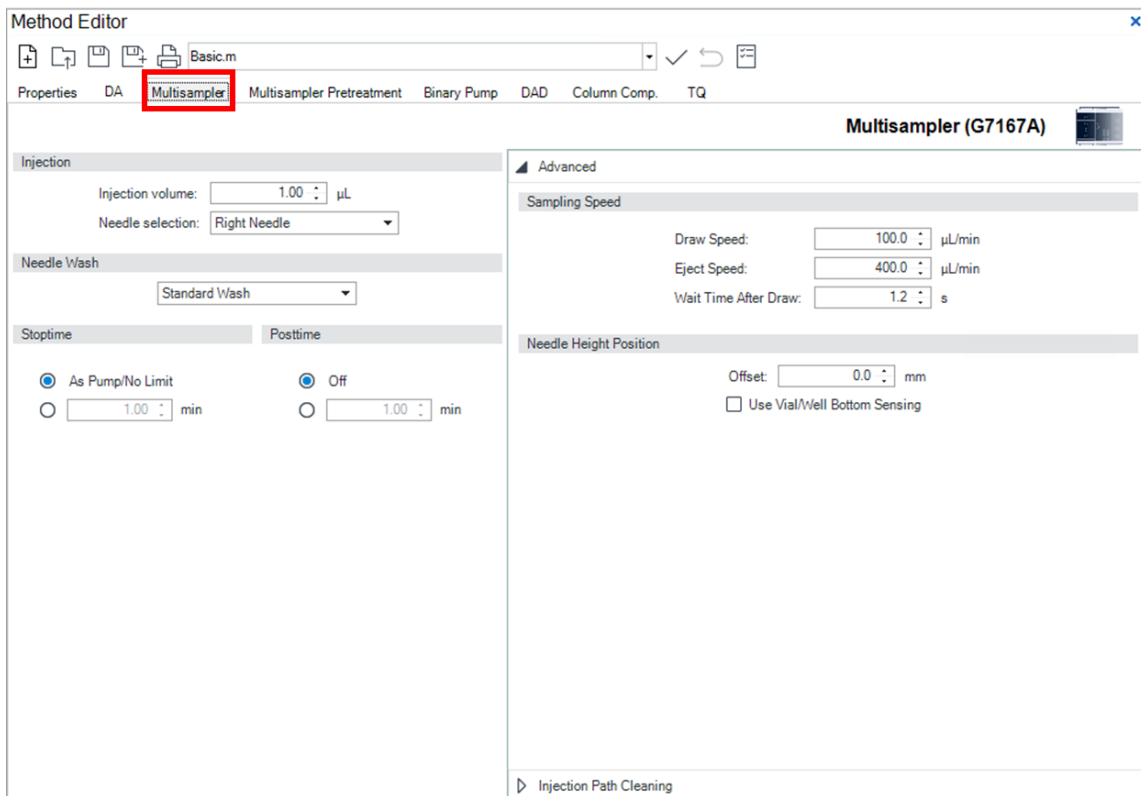


- เลือก Set up Pump แล้วทำการตั้งค่าตัวแปรที่ต้องการให้เหมาะสมกับงานที่วิเคราะห์
- Flow : อัตราการไหลของ Solvent โดยช่วงของ flow rate คือ 0.0 - 5.00 ml/min โดยมีอัตราการเพิ่มทีละ 0.001 และขีดจำกัดความดันสูงสุด (upper pressure limit) ที่ 1300 bar
- Solvents : ใช้กำหนดส่วนประกอบของ Solvent หรือ Mobile Phase สำหรับการวิเคราะห์ ซึ่งอาจจะเป็นแบบ Isocratic Analysis (ส่วนประกอบของ Mobile Phase คงที่) หรือ Gradient Elution Analysis (ส่วนประกอบของ mobile phase มีการเปลี่ยนแปลง) โดยให้ กำหนด % ของ solvent ใน channel B ซึ่งสามารถกำหนดค่าได้ตั้งแต่ 0-100% ส่วน channel A จะเป็น % ที่เหลืออยู่ : 100 - (%B)
นอกจากนี้ยังสามารถสั่ง ON และ OFF channel จาก channel scrollbar และ ใส่ชื่อของ solvent ใน

channel นั้นๆ ใน text box (ถ้าทำการวิเคราะห์แบบ Reversed Phase ควรใส่ Water ใน channel A ขวดสีชา)

- Stop Time : เป็นการกำหนดเวลาที่ต้องการให้หยุดทำการวิเคราะห์ ซึ่งหลังจากนี้ ระบบจะกลับเข้าสู่สถานะเริ่มต้น ค่าของ stop time มีตั้งแต่ 0.0 - 99999 นาที หรือ no limit
- Post Time : เป็นการตั้งช่วงเวลารอให้คอลัมน์เข้าสู่สถานะสมดุลอีกครั้ง ก่อนจะทำการวิเคราะห์ตัวอย่างตัวถัดไป โดยเฉพาะอย่างยิ่งเมื่อทำการวิเคราะห์แบบ Gradient Elution Analysis
- Pressure Limits: Min (ความดันต่ำสุด) ตั้งไว้ที่ 0 bar
Max (ความดันสูงสุด) ตั้งค่าไว้ที่แรงดันสูงสุดตามใบรับประกันของคอลัมน์ระบุไว้
- Timetable : ใช้เมื่อต้องการปรับเปลี่ยนค่า Flow rate, Pressure limit และ/หรือ ปรับอัตราส่วนผสมของ Mobile Phase สำหรับการ run แบบ Gradient
- Click ที่ Add เพื่อเพิ่มแถวใน Timetable ที่ Timetable แต่ละแถวนั้น ในช่อง
 - Time : ให้ระบุเวลา (นาที)
 - Function : ให้เลือก Change Solvent Composition, Change Flow, Change Max Pressure Limit
 - Parameter : จะแปรเปลี่ยนตาม Function ที่เลือกไว้ ให้ระบุค่าที่ต้องการได้เลย

2. การตั้งค่า Sampler



- ระบุปริมาตรสารตัวอย่างที่ต้องการในช่อง Inject volume (µL)
- ทำการเลือกวิธีการฉีดสารตัวอย่างตามความเหมาะสมกับงาน วิธีการฉีดสารตัวอย่างมีให้เลือกดังนี้
 - Standard Injection ใช้สำหรับการ Inject แบบทั่วไป
 - Enable with Needle Wash เป็นการสั่งให้ล้างปลาย Needle หลังจากดูดตัวอย่างเข้าไปไว้ใน Sample loop (ก่อนฉีดตัวอย่างเข้าระบบ) โดยจะต้องกำหนดสามารถเลือกได้ 2 แบบ คือ
 - Wash Vial โดย ระบุตำแหน่งของ Vial ที่มี Solvent สำหรับล้างบรรจุอยู่ ในช่อง Location (Wash Vial ที่ใช้ควรเป็นแบบไม่มี septum)
 - Flush port โดยจะทำการดึง Needle wash solution จากขวดมาล้างเข็ม ที่บริเวณฐานล่างซึ่งสามารถกำหนดเวลาเพื่อชะล้างลง waste

3. การตั้งค่า Column compartment

Properties DA Multisampler Multisampler Pretreatment Binary Pump DAD **Column Comp.** TQ

Column Comp. (G1316C)

Temperature

Left:

☐ Not Controlled

☒ 60.0 °C

☐ As Detector Cell

Right:

☐ Not Controlled

☒ 60.0 °C

☐ As Detector Cell

☐ Combined

Valve

Position 1 (Port c -> 1)

Stoptime **Posttime**

☒ As Pump/Injector ☐ Off

☐ 1.00 min ☐ 1.00 min

Advanced

Enable Analysis

☒ when front door open

Left:

☐ With any temperature

☒ When temperature is within ± 0.8 °C

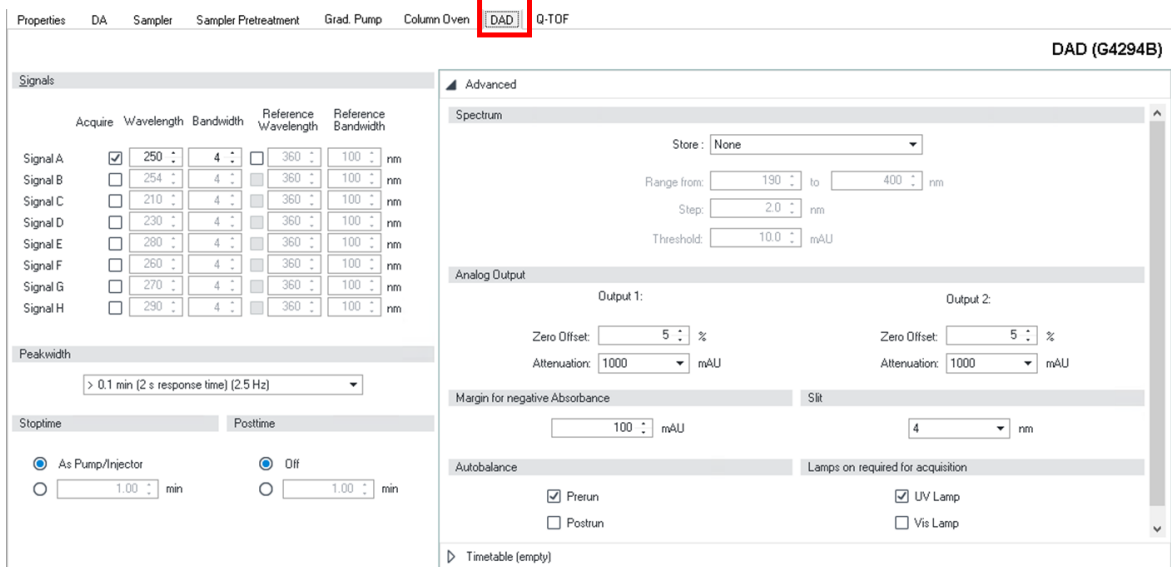
Right:

☐ With any temperature

☒ When temperature is within ± 0.8 °C

- Not Control หากไม่ต้องการควบคุมอุณหภูมิคอลัมน์ให้คงที่
- หากต้องการควบคุมอุณหภูมิให้คงที่ให้ระบุอุณหภูมิที่ต้องการได้เลยทั้ง Left/Right
- Timetable เพื่อตั้งโปรแกรมการปรับอุณหภูมิ/ช่วงเวลา โดยการ Click ที่ Add เพื่อสร้างโปรแกรม
- ข้อเสนอแนะ ขณะทำการวิเคราะห์ ควรปิดฝาส่วนเครื่องมือไว้เสมอ เพื่อให้อุณหภูมิของคอลัมน์คงที่

4. การตั้งค่า DAD



ทำการตั้งค่าตัวแปรที่ต้องการให้เหมาะสมกับงานที่วิเคราะห์

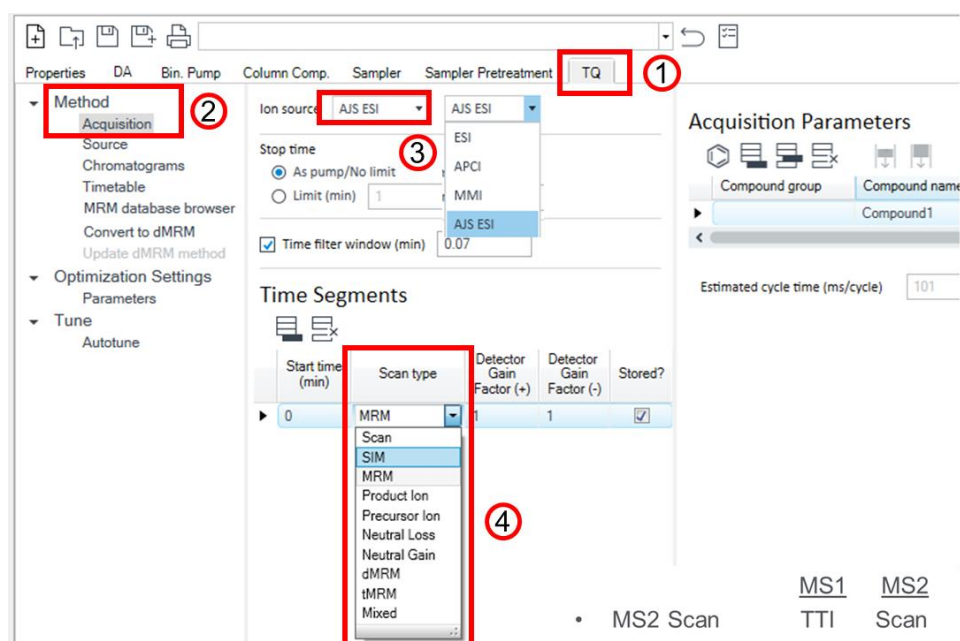
- Use Signal A, B, C,... ทำการเลือกสัญญาณที่ต้องการ
- Wave length... ระบุความยาวคลื่นที่ต้องการ (190 – 950 nm)
- Band width... ระบุความกว้างของสัญญาณที่ต้องการ หากไม่ทราบให้ใส่ค่า 8
- Reference Wavelength และ Reference Bandwidth... สัญญาณอ้างอิงเพื่อเช็คค่า Baseline ที่อาจเปลี่ยนแปลง (ไม่ควรเลือกใช้ หากไม่ทราบค่า)

Advanced Function

- Spectrum เมื่อต้องการบันทึกข้อมูลสเปกตรัม ควรเลือก Store...All, หากไม่ต้องการให้เลือก None
- Range From...to... กำหนดช่วงความยาวคลื่นที่ต้องการเก็บบันทึกเป็นสเปกตรัม
- Step... กำหนดระยะห่างความยาวคลื่นที่ต้องการเก็บบันทึกเป็นสเปกตรัม
- ส่วนค่าอื่นๆ ให้คงเดิมไว้ (ตามที่เห็นในรูปด้านบน) ไม่ต้องเปลี่ยนแปลง
- หากต้องการบันทึกสัญญาณที่ความยาวคลื่นมากกว่า 400 nm ต้องใช้ Vis Lamp ร่วมด้วย
- ข้อเสนอแนะ ควรเปิด lamp เป็นเวลา 20 นาที (Warm up) ก่อนใช้งานจริง

5. การตั้งค่า MS TQ

1. เลือก Tab TQ ที่ Method Editor pane
2. Click ที่ Acquisition
3. เลือก Source ที่ Ion source ให้ถูกต้อง เช่น ESI, APCI, MMI, ...
4. ใส่ Stop Time ที่ต้องการ หรือเลือก No Limit/As Pump
5. เลือก Scan Type ที่ต้องการ เช่น Scan, MRM, Product ion, ...



	MS1	MS2
• MS2 Scan	TTI	Scan
• MS2 SIM	TTI	SIM
• MRM	SIM	SIM
• Dynamic MRM	SIM	SIM
• Product Ion	SIM	Scan
• Precursor Ion	Scan	SIM
• Neutral Loss	m/z	m/z - n
• Neutral Gain	m/z	m/z + n

Scan type

Scan

Acquisition Parameters

Segment name	Compound formula	Ion Species	CAS	z	Start m/z	End m/z	Scan time (ms)	Fragmentor (V)	Polarity
					100	1000	500	135	Positive

Estimated cycle time (ms/cycle)

Estimated max scan speed (Da/s)

Data storage

Threshold

กรณี **Scan (MS mode)** ให้ Start / End Mass และ Polarity ที่ต้องการใน Acquisition Tab

Scan type

Product Ion

Acquisition Parameters

Segment name	Compound formula	Ion Species	CAS	z	Precursor m/z	MS1 res	Start m/z	End m/z	Scan time (ms)	Fragmentor (V)	CE (V)	Polarity
					350.0	Unit	100	1000	500	135	20	Positive

Estimated cycle time (ms/cycle)

Estimated max scan speed (Da/s)

Data storage

Threshold

กรณี **Product Ion Scan (MS/MS mode)** ให้ Precursor Ion , MS2 From/to , Collision Energy และ Polarity ที่ต้องการใน Acquisition Tab

Scan type

MRM

Acquisition Parameters

Compound group	Compound name	Compound formula	Ion Species	ISTD?	Precursor m/z	MS1 res	Product m/z	MS2 res	Dwell (ms)	Fragmentor
	Sulfachloropyridazine	C10H9ClN4O2S	(M+H)+	☐	285.0	Unit	108.0	Unit	100	100
	Sulfachloropyridazine	C10H9ClN4O2S	(M+H)+	☐	285.0	Unit	155.9	Unit	100	100
	Sulfadimethoxine	C12H14N4O4S	(M+H)+	☐	311.1	Unit	92.0	Unit	100	130
	Sulfadimethoxine	C12H14N4O4S	(M+H)+	☐	311.1	Unit	108.0	Unit	100	123
	Sulfadimethoxine	C12H14N4O4S	(M+H)+	☐	311.1	Unit	156.0	Unit	100	123
	Sulfamethazine	C12H14N4O2S	(M+H)+	☐	279.1	Unit	124.0	Unit	100	123
	Sulfamethazine	C12H14N4O2S	(M+H)+	☐	279.1	Unit	186.0	Unit	100	123
	Sulfamethizole	C9H10N4O2S2	(M+H)+	☐	271.0	Unit	91.9	Unit	100	100
	Sulfamethizole	C9H10N4O2S2	(M+H)+	☐	271.0	Unit	155.9	Unit	100	100

Estimated cycle time (ms/cycle)

กรณี **MRM (MS/MS mode)** ให้ Compound name, Precursor Ion ,Product Ion, Collision Energy และ Polarity ที่ต้องการใน Acquisition Tab

กรณี **dynamic MRM (MS/MS mode)** สามารถได้ RT เฉพาะของแต่ละสาร เหมาะสำหรับงานวิเคราะห์ที่มีจำนวน MRM มาก ซึ่งสามารถสร้าง Method dMRM จาก MRM โดยทำการคลิกที่ Update dMRM method แล้วทำการเลือก Data file ได้ โดย Software จะทำการสร้าง Method ให้โดยอัตโนมัติ

Method Editor

Properties DA Multisampler M

Method

- Acquisition
- Source
- Chromatograms
- Timetable
- MRM database browser
- Convert to dMRM**
- Update dMRM method
- Advanced override settings

Acquisition Parameters

cursor m/z	MS1 res	Product m/z	MS2 res	RT (min)	RT window (min)	Fragmentor (V)	CAV (V)	CE (V)	Average dwell (ms)	Polarity
.1	Unit	152.2	Unit	0	1	105	2	12	17.36	Positive
.1	Unit	137.2	Unit	0	1	105	2	24	17.36	Positive
.1	Unit	174.1	Unit	0	1	125	3	16	17.36	Positive
.1	Unit	68.0	Unit	0	1	125	3	40	17.36	Positive
.1	Unit	165.1	Unit	0	1	80	2	20	17.36	Positive
.1	Unit	123.1	Unit	0	1	80	2	30	17.36	Positive
.1	Unit	169.1	Unit	0	1	105	2	32	17.36	Positive
.1	Unit	97.0	Unit	0	1	105	2	40	17.36	Positive
.0	Unit	198.8	Unit	0	1	70	5	0	17.36	Positive
.0	Unit	125.0	Unit	0	1	70	5	16	17.36	Positive
.1	Unit	69.0	Unit	0	1	115	2	16	17.36	Positive

Method Editor

Properties DA Multisampler Multisampler Pretreatment Binary Pump DAD Column Comp. TQ

Method

- Acquisition
- Source
- Chromatograms
- Timetable
- MRM database browser
- Update dMRM method**
- Advanced override settings
- Optimization Settings
 - Parameters
- Tune
 - Autotune

Select MassHunter TQ data file or Quant report folder

D:\Projects\G6475A Training_Nov3\Data\Pesticides_TestMix_MRM.d

Add additional compounds/transitions

☒ Add new compound/transition

Peak abundance threshold: 50

Cycle time (ms): 500

dMRM/tMRM Retention Time Options

☒ Update retention time

☒ Update retention time window

RT window threshold: 10 Percent

Scale factor: 3

tMRM Trigger Options

☐ Update threshold

☒ Update trigger window

Height percent: 10

Scale factor: 1

Retention time ☒ Retention time ☐ FWHM

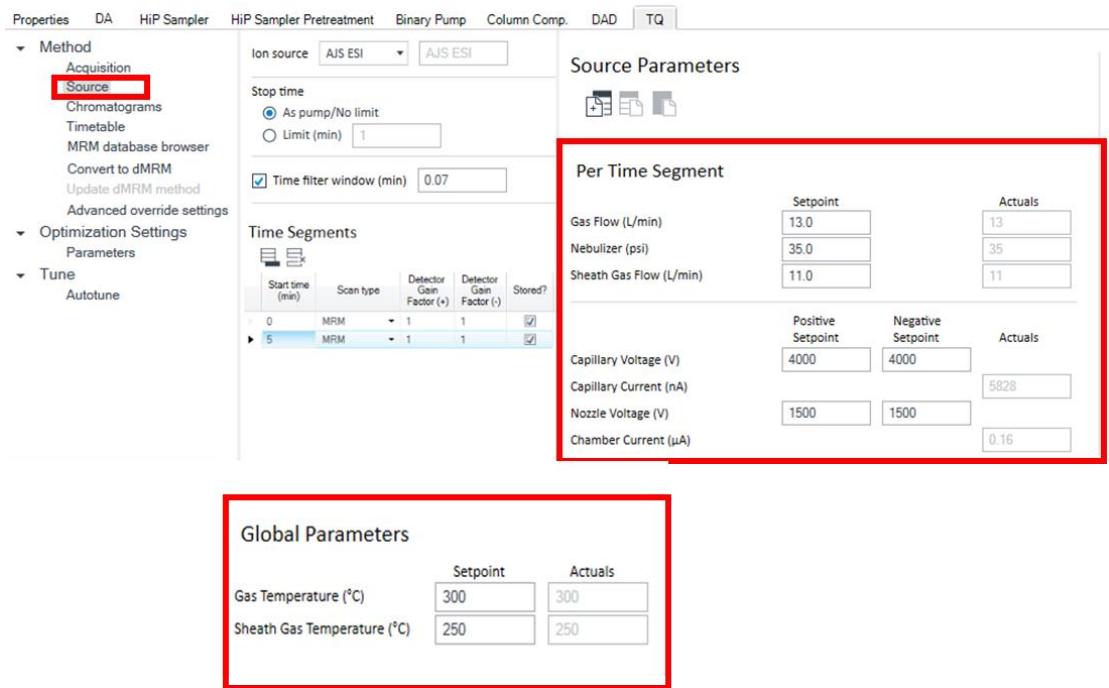
Absolute value (min): 0.5

Percent value: 0

Scale factor: 1

Restore Defaults Update

6. ที่ Source Tab : เลือกใส่ Source parameter ที่ต้องการ เช่น Drying gas Temperature, Gas flow, Nebulizer pressure , Capillary Voltage. กรณี Jet Stream source ต้องใส่ Sheath gas temp/flow



Source Parameters

Per Time Segment

	Setpoint	Actuals
Gas Flow (L/min)	13.0	13
Nebulizer (psi)	35.0	35
Sheath Gas Flow (L/min)	11.0	11

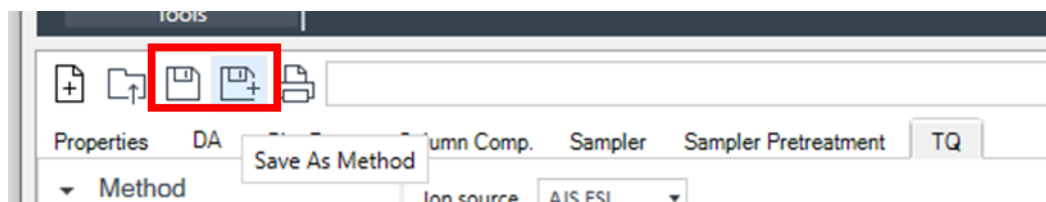
	Positive Setpoint	Negative Setpoint	Actuals
Capillary Voltage (V)	4000	4000	
Capillary Current (nA)			5828
Nozzle Voltage (V)	1500	1500	
Chamber Current (µA)			0.16

Global Parameters

	Setpoint	Actuals
Gas Temperature (°C)	300	300
Sheath Gas Temperature (°C)	250	250

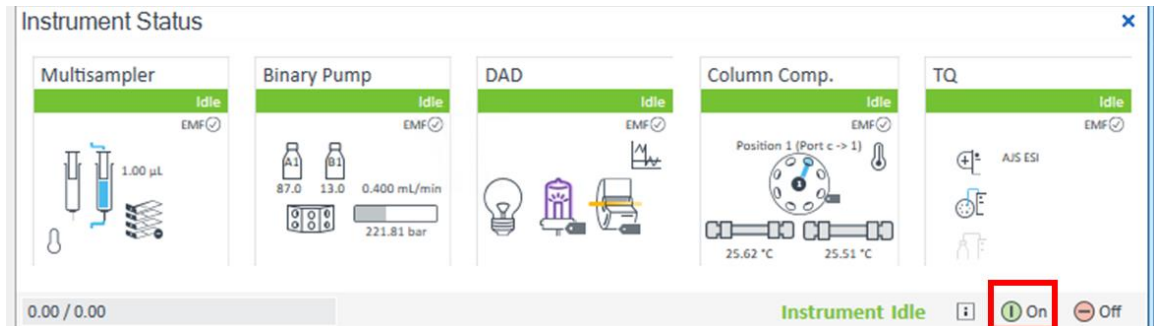
6. Save Method

1. เลือก Method ที่ Menu Bar
2. เลือก Save as เพื่อใส่ชื่อที่ต้องการ หรือ Save เพื่อทับ Method เดิม

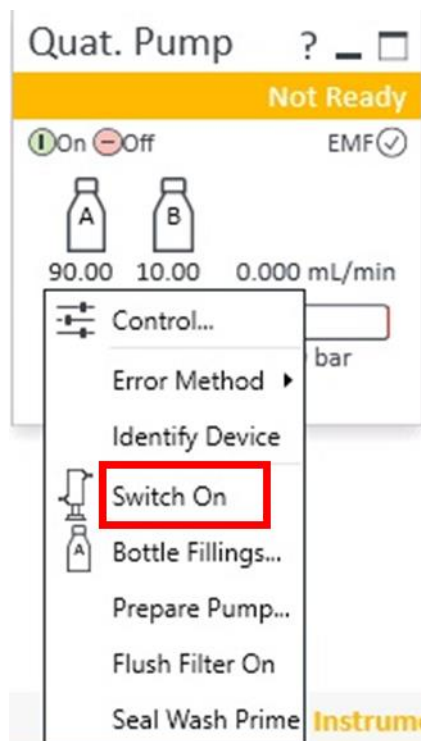


การ On Module

1. ใช้ mouse กด ที่ ON บริเวณ instrument status pane (ด้านขวา)



2. หรือ ใช้ mouse กดปุ่มขวาที่ module บริเวณ instrument status pane เลือก Switch On เช่น



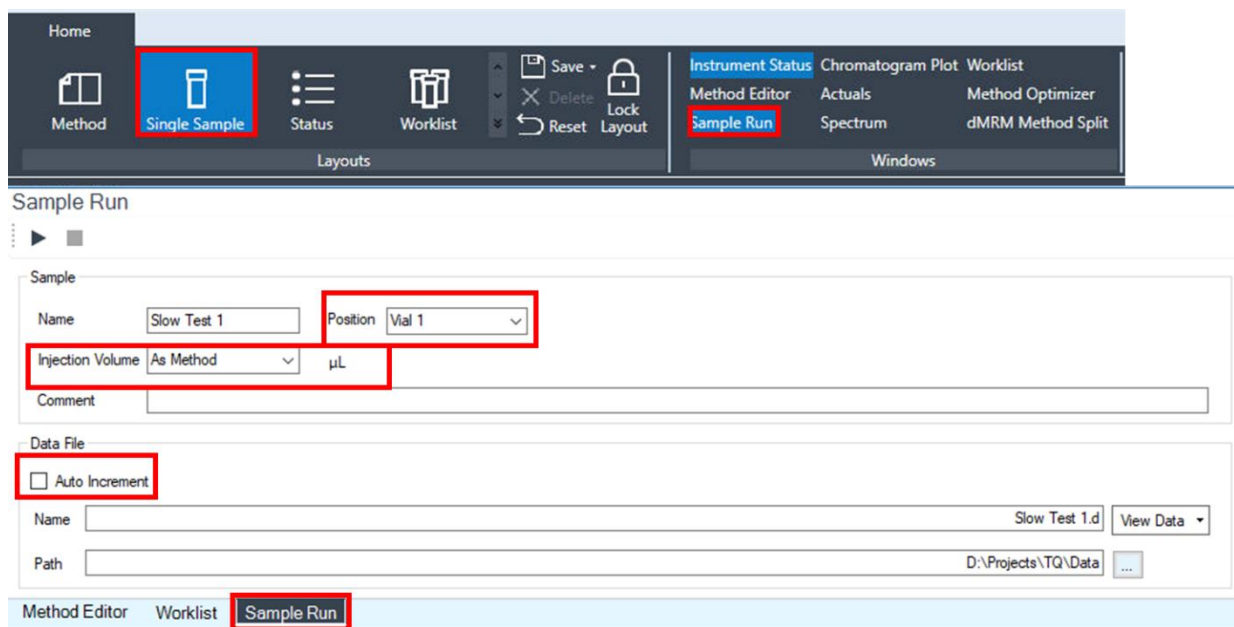
การฉีดสาร

การฉีดสาร (injection) มี 2 วิธี

1. Sample Run (Single Run การฉีดสาร 1 ขวด)
2. Worklist Run (การฉีดสาร ตั้งแต่ 1 ขวด ขึ้นไป)

Sample Run (Single Run การฉีดสาร 1 ขวด)

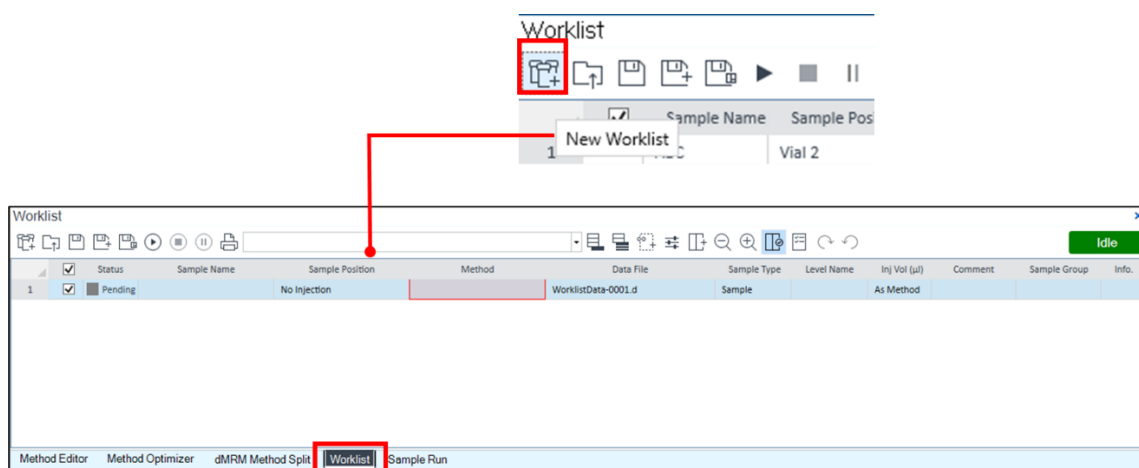
1. บรรจุ สารในขวด มากกว่า 1/3 ของขวด ใส่ลงในภาควัดตัวอย่าง
2. เลือก Sample Run Tab
3. ตั้งค่า Sample Name , ตำแหน่งขวดสารที่จะฉีด (Position) , Data file Name และ Path



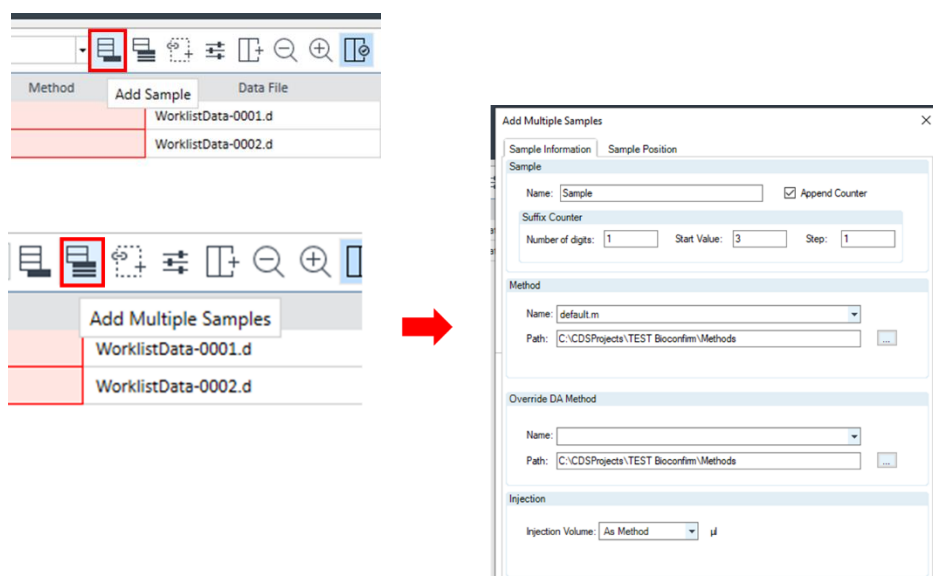
4. กด  เพื่อฉีดสารที่ต้องการ

Worklist Run (การฉีดสาร ตั้งแต่ 1 ขวด ขึ้นไป)

1. บรรจุ สารในขวด มากกว่า 1/3 ของขวด ใส่ลงในภาคว่าง
2. เลือก Worklist Tab

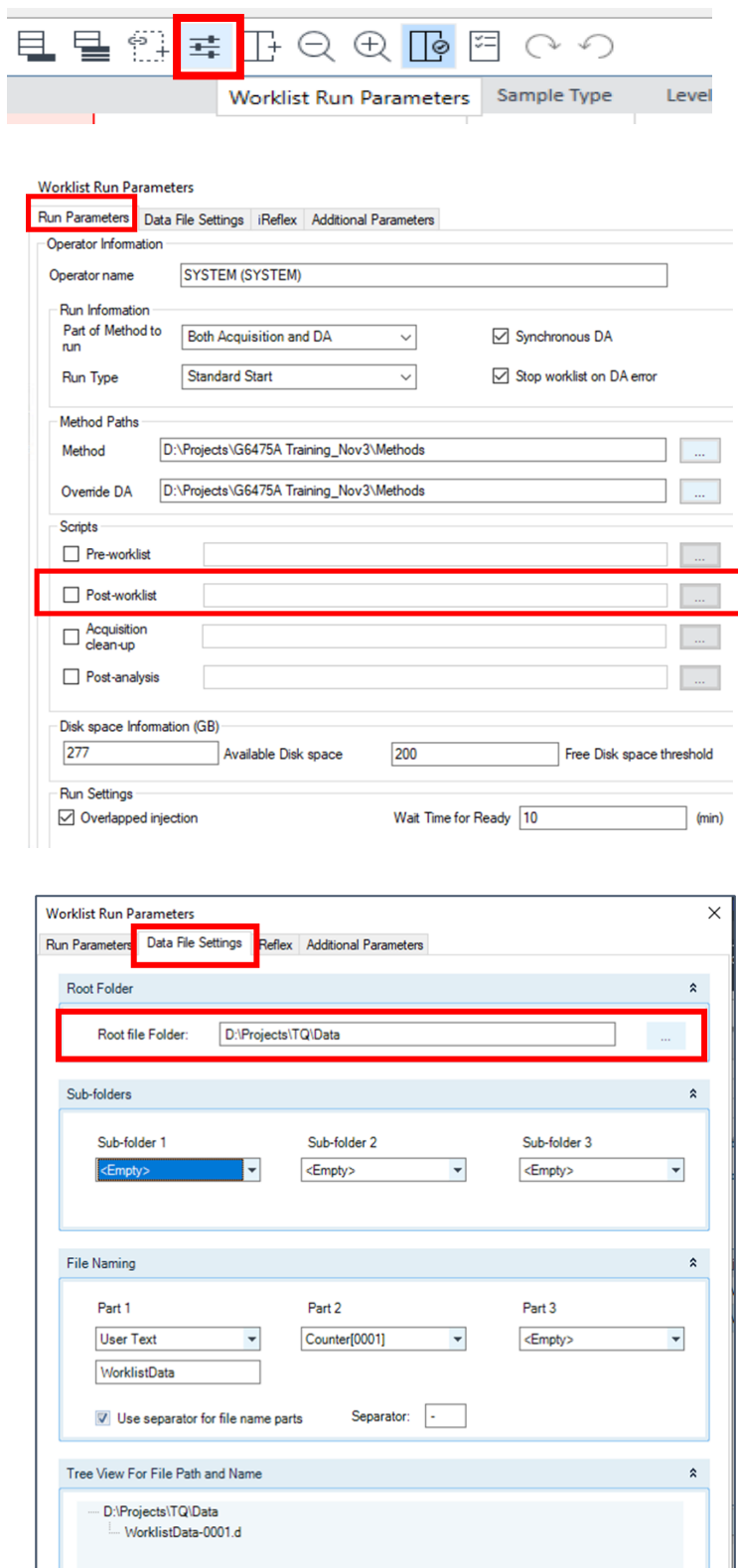


3. ที่ตาราง worklist ตั้งค่า Sample Name , ตำแหน่งขวดสารที่จะฉีด (Sample Position) , Method, Data file และ Sample type
4. สามารถเพิ่มบรรทัด กดปุ่มขวาที่ หมายเลข ซ้ายสุด เลือก Add sample หรือ Add Multiple Sample



กรณี เลือก Add multiple Sample ต้องได้ Method Name, Data file และ Sample Position ที่ต้องการ

5. การปรับตั้งค่า Worklist Run Parameter สามารถเข้าได้จาก เมนู Worklist ดังภาพต่อไปนี้



The image shows two screenshots of the Agilent Worklist Run Parameters dialog box. The first screenshot shows the 'Run Parameters' tab with the 'Post-worklist' checkbox highlighted. The second screenshot shows the 'Data File Settings' tab with the 'Root file Folder' highlighted.

Worklist Run Parameters

Run Parameters | Data File Settings | iReflex | Additional Parameters

Operator Information

Operator name: SYSTEM (SYSTEM)

Run Information

Part of Method to run: Both Acquisition and DA (dropdown) ☒ Synchronous DA

Run Type: Standard Start (dropdown) ☒ Stop worklist on DA error

Method Paths

Method: D:\Projects\G6475A Training_Nov3\Methods (dropdown)

Override DA: D:\Projects\G6475A Training_Nov3\Methods (dropdown)

Scripts

☐ Pre-worklist (dropdown)

☐ Post-worklist (dropdown)

☐ Acquisition clean-up (dropdown)

☐ Post-analysis (dropdown)

Disk space Information (GB)

277 Available Disk space 200 Free Disk space threshold

Run Settings

☒ Overlapped injection Wait Time for Ready 10 (min)

Worklist Run Parameters

Run Parameters | **Data File Settings** | iReflex | Additional Parameters

Root Folder

Root file Folder: D:\Projects\TQ\Data (dropdown)

Sub-folders

Sub-folder 1: <Empty> (dropdown) Sub-folder 2: <Empty> (dropdown) Sub-folder 3: <Empty> (dropdown)

File Naming

Part 1: User Text (dropdown) Part 2: Counter[0001] (dropdown) Part 3: <Empty> (dropdown)

WorklistData

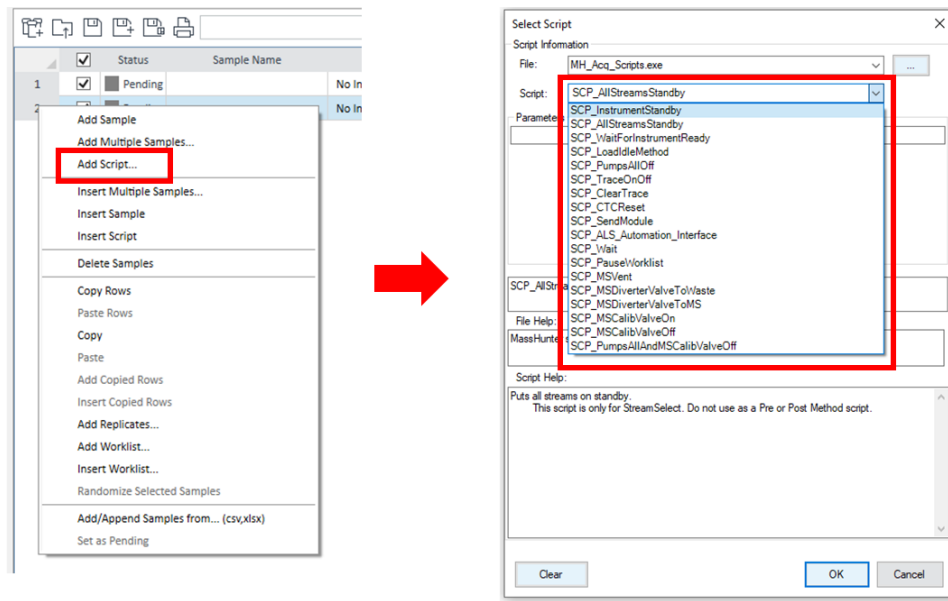
☒ Use separator for file name parts Separator: -

Tree View For File Path and Name

D:\Projects\TQ\Data

WorklistData-0001.d

6. การตั้งค่า Post Worklist สามารถทำได้โดยคลิกขวาที่ตาราง worklist จากนั้นคลิก Add Script แล้วเลือกคำสั่ง Script ที่ต้องการ เช่น SCP_InstrumentStandby เพื่อให้เครื่องอยู่ในโหมด Standby หลังจาก Run worklist เสร็จ เป็นต้น และที่ worklist table จะปรากฏดังภาพด้านล่าง



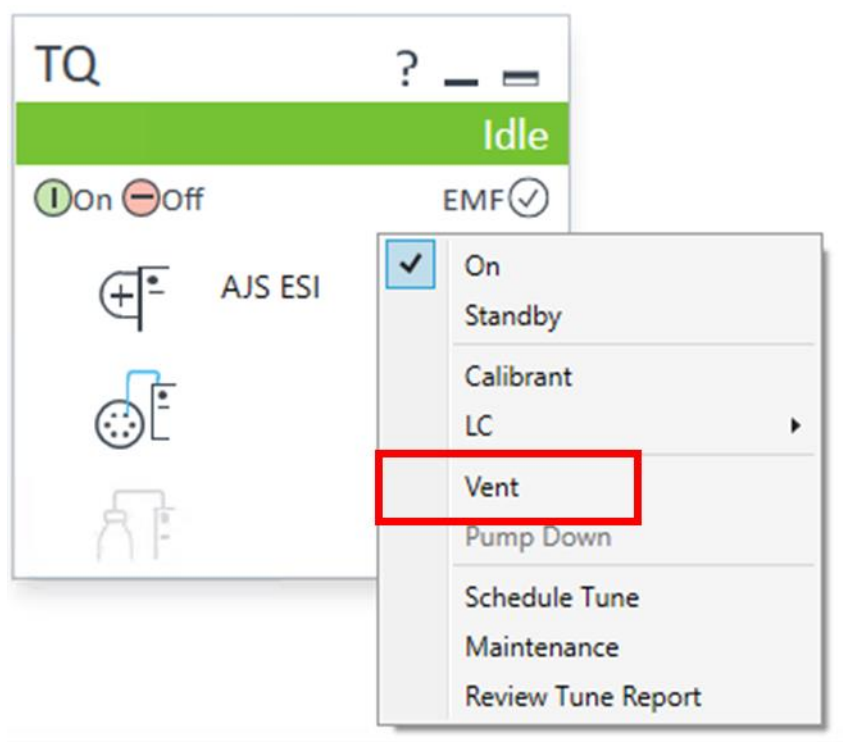
	✓	Status	Sample Name	Sample Position	Method	Data File	Sample Type
1	✓	Pending	AAA	P1-A1	default.m	WorklistData-0001.d	Sample
2	✓	Pending	AAA	P1-A1	default.m	WorklistData-0002.d	Sample
3	✓	Pending	AAA	P1-A1	default.m	WorklistData-0003.d	Sample
4	✓	Pending	AAA	P1-A1	default.m	WorklistData-0004.d	Sample
5	✓	Pending	AAA	P1-A1	default.m	WorklistData-0005.d	Sample
6	✓	Pending	AAA	P1-A1	default.m	WorklistData-0006.d	Sample
7	✓	Pending	AAA	P1-A1	default.m	WorklistData-0007.d	Sample
8	✓	Pending	AAA	P1-A1	default.m	WorklistData-0008.d	Sample
9	✓	Pending	SCP_InstrumentStandby(){MH_Acq_Scripts.exe}				

7. หลังจากทำการตั้งค่า Worklist เสร็จเรียบร้อยแล้ว ให้ทำการบันทึก Worklist ดังภาพต่อไปนี้



ขั้นตอนการปิดเครื่อง

1. ล้าง Column (อย่าเก็บ Column ในน้ำเกิน 50%)
2. ล้าง HPLC tubing (อย่าเก็บน้ำ, กรด หรือ buffer ไว้ใน HPLC tubing และ ขวด Mobile phase)
3. ใช้ mouse กดปุ่มขวาที่ TQ module บริเวณ instrument status pane แล้วเลือก Vent

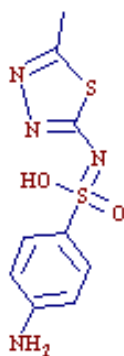


4. รอจน software แสดง vent complete และ ปิดเครื่องได้ ประมาณ 30 นาที
5. ปิดหน้าต่าง Acquisition
6. Click ที่ไอคอน Close Connection  ที่หน้า Control panel จากนั้นปิด software
7. ปิดคอมพิวเตอร์
8. ปิดสวิทช์เครื่องมือ LC และ MSD QQQ
9. ปิดก๊าซไนโตรเจนทั้งสองส่วน

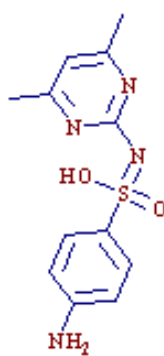
ตัวอย่างการวิเคราะห์ Sulfa Drug Mixture

สิ่งที่ต้องเตรียม

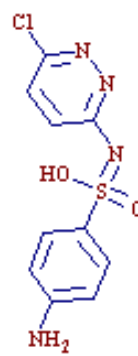
1. Water HPLC Grade
2. Acetonitrile HPLC Grade
3. Formic acid
4. Column: Zorbax SB-C18 2.1 mm x 3.0 mm x 3.5 um (p/n: 873700-902)
5. Electrospray Demo Sample: (p/n: 59987-20033) ประกอบด้วย



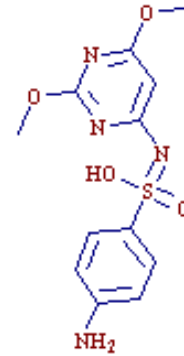
Sulfamethizole



Sulfamethazine



Sulfachloropyridazine



Sulfadimethoxine

Name	Formula	Ion	m/z
sulfamethizole	C ₉ H ₁₀ N ₄ O ₂ S ₂	(M+H) ⁺	271.03179
sulfamethazine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₂ S	(M+H) ⁺	279.09102
sulfachloropyridazine	C ₁₀ H ₉ ClN ₄ O ₂ S	(M+H) ⁺	285.02075
sulfadimethoxine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S	(M+H) ⁺	311.08085

สร้าง Method โดยมีรายละเอียดดังนี้

Table 1 LC parameters for sulfa drug mix

Parameter	Value for all instruments
PUMP	
• Flowrate	600 µL/min
• Solvent A	Water with 0.1% Formic Acid
• Solvent B	Acetonitrile with 0.1% Formic Acid
• Gradient (minutes - %B)	Initial Conditions: 90% Channel A and 10% Channel B 0 minutes - 10% B 5.0 minutes - 90% B
• Stop Time	5 minutes
• Post Time	3 minutes
INJECTOR	
• Inj. Vol.	1 µL
• Injection	Standard
• Draw Position	3.0 mm
UV DETECTOR	
• Ch A	272 nm (100 nm BW on DAD)
• REF A (DAD only)	360 nm (100 nm BW)
COL THERM	
• Temp	40° C

កម្រិត Scan type = MS2Scan

Table 3 MS parameters for sulfa drug mix

Parameter	Value	
• Inlet	ESI (positive polarity)	ESI (positive polarity) with Agilent Jet Stream Technology
• Gas Temp	350 °C	350 °C
• Scan Type	MS2Scan	MS2Scan
• Nebulizer	50 psi	35 psi (nitrogen)
• Dry Gas	12 L/min	10 L/min
• Range	100 to 400	100 to 400
• Sheath Gas Temperature	not applicable	400 °C
• Sheath Gas Flow	not applicable	12 L/min
• Nozzle Voltage	not applicable	0 V
• Capillary voltage positive	4000 V	4000 V
• Delta EMV pos	400 V	200 V

កម្រិត Scan type = Product Ion Scan

Acquisition Parameters

Ion source: AJS ESI

Stop time: ☐ As pump/No limit ☐ Limit (min): 1

☒ Time filter window (min): 0.07

Time Segments

Start time (min)	Scan type	Detector Gain Factor (+)	Detector Gain Factor (-)	Stored?
0	Product Ion	1	1	☒

Estimated cycle time (ms/cycle): 1047

Estimated max scan speed (Da/s): 1041

Data storage: Centroid

Threshold: 0

កម្រិត Scan type = MRM

Acquisition Parameters

Ion source: AJS ESI

Stop time: ☐ As pump/No limit ☐ Limit (min): 1

☒ Time filter window (min): 0.07

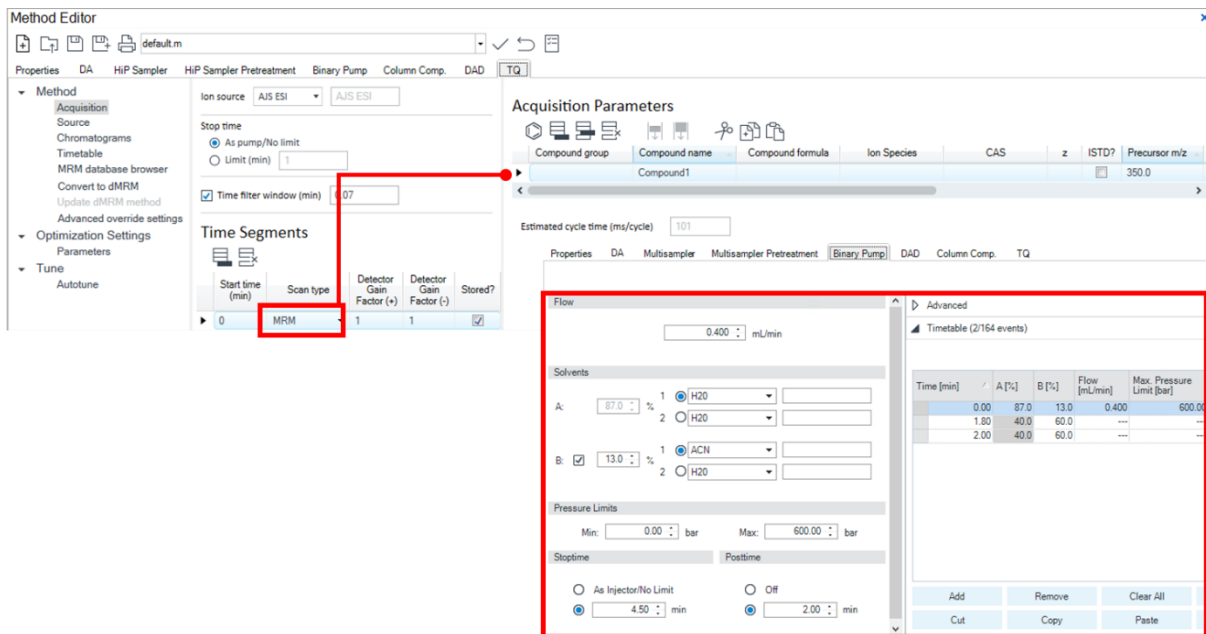
Time Segments

Start time (min)	Scan type	Detector Gain Factor (+)	Detector Gain Factor (-)	Stored?
0	MRM	1	1	☒

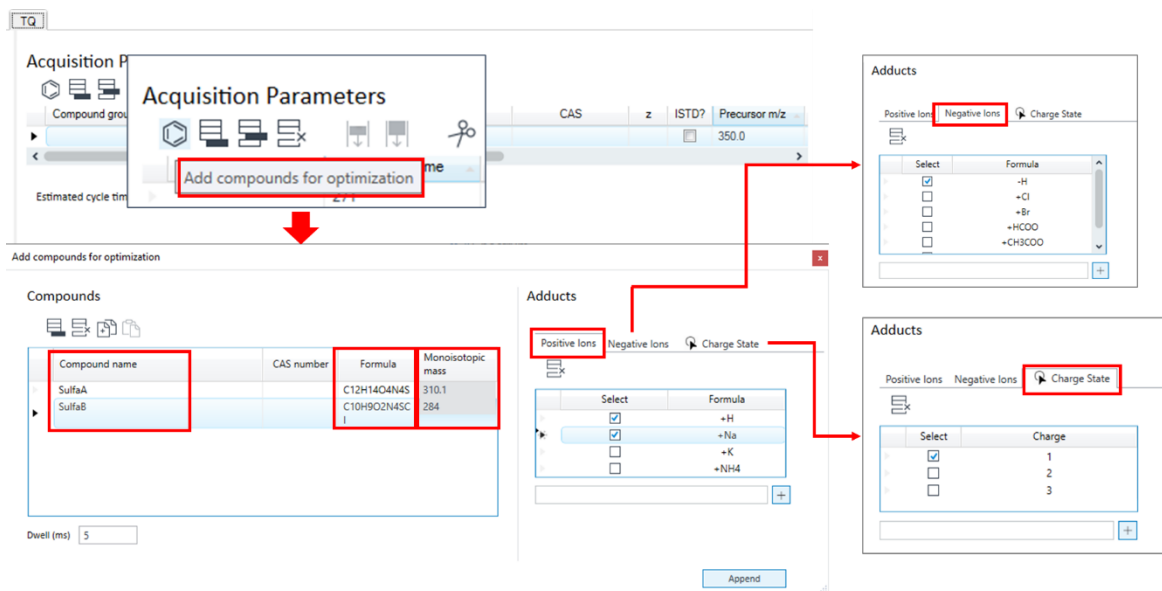
Estimated cycle time (ms/cycle): 205

การใช้งาน Method Optimizer

1. ก่อนที่จะเริ่มรัน Method Optimizer ให้ทำการ Set up basic MRM method รวมทั้ง LC condition ก่อน ดังแสดง



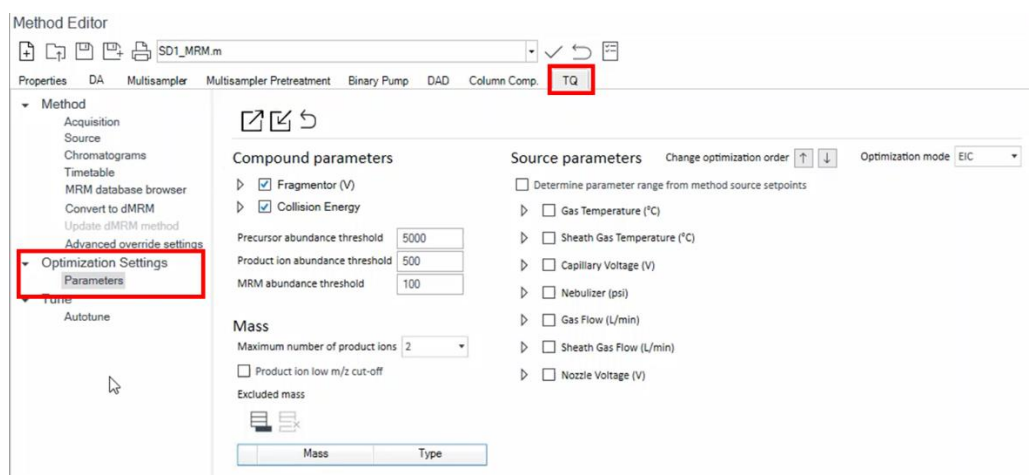
2. เพิ่ม Compound ที่จะทำการ Optimization หา MRM acquisition parameters โดยคลิกที่ไอคอน Add Compound for Optimization  จากนั้น กรอกรายละเอียดต่างๆ ได้แก่ Compound name, Formula หรือ Monoisotopic mass, Positive ion หรือ Negative ion, และ Charge State



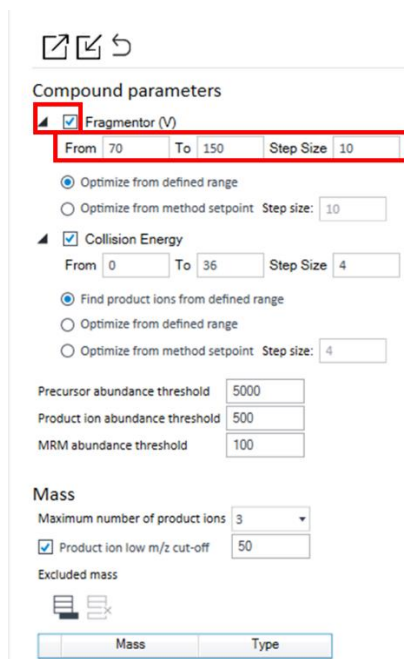
3. Save MRM method



4. ไปที่ Optimization Settings > Parameters บน TQ tab ใน Method Editor เพื่อ Set up parameters ที่ต้องการทำ Optimization



5. กำหนด Compound parameters โดยคลิกเลือกที่หัวข้อ Parameters (Fragmentor และ/หรือ Collision Energy) ที่ต้องการ Optimize รวมทั้งกำหนดช่วงและ Step Size



6. กำหนด Source parameters โดยคลิกเลือกที่หัวข้อ Parameters ที่ต้องการ Optimize เช่น Gas Temperature, Sheath Gas Temperature, Capillary Voltage และ Nebulizer เป็นต้น รวมทั้งกำหนดช่วงและ Step Size

Source parameters Change optimization order ↑ ↓

☐ Determine parameter range from method source setpoints

☒ Gas Temperature (°C)

Pre-wait (min) 30 Replicate(s) 1 Step Wait (min) 20

From 300 To 350 Step Size 10

☒ Sheath Gas Temperature (°C)

Pre-wait (min) 30 Replicate(s) 1 Step Wait (min) 20

From 350 To 400 Step Size 10

☒ Capillary Voltage (V)

Pre-wait (min) 0 Replicate(s) 1 Step Wait (min) 0

From 3600 To 4400 Step Size 200

☒ Nebulizer (psi)

Pre-wait (min) 0 Replicate(s) 1 Step Wait (min) 0

From 33 To 37 Step Size 1

☒ Gas Flow (L/min)

Pre-wait (min) 0 Replicate(s) 1 Step Wait (min) 0

From 9 To 11 Step Size 0.5

☒ Sheath Gas Flow (L/min)

Pre-wait (min) 0 Replicate(s) 1 Step Wait (min) 0

From 9.5 To 12 Step Size 0.5

☐ Nozzle Voltage (V)

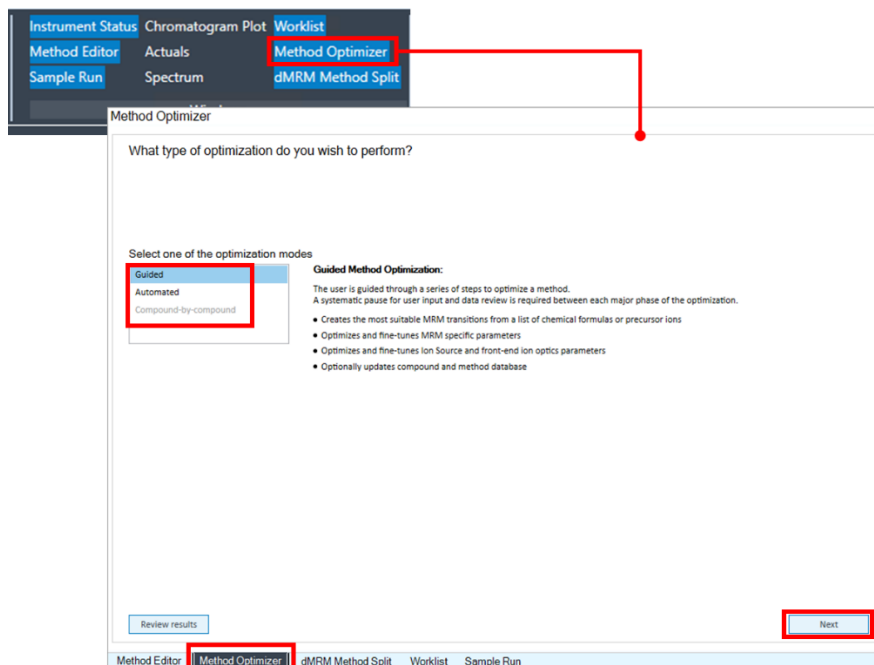
Pre-wait (min) 0 Replicate(s) 1 Step Wait (min) 0

From 0 To 500 Step Size 100

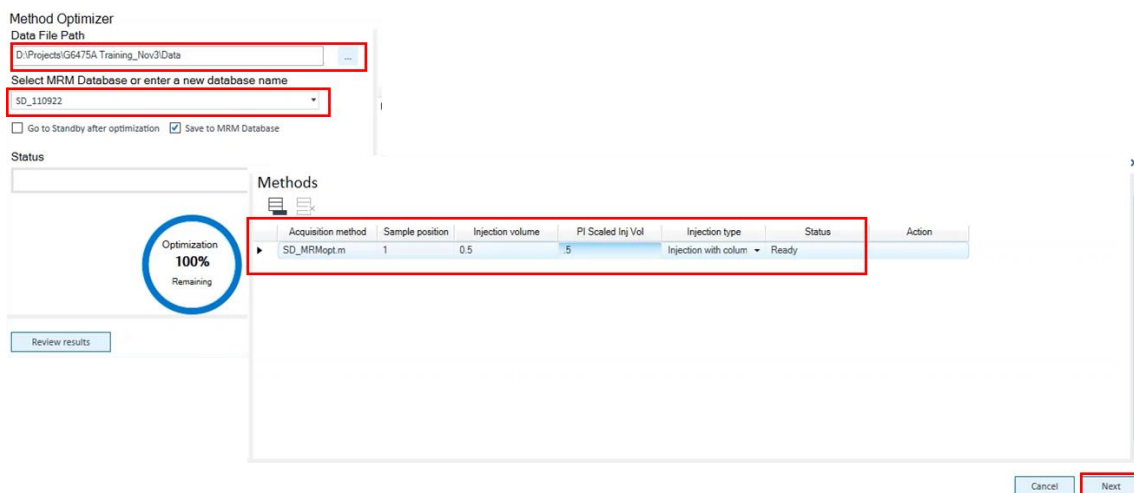
Recommend range สำหรับการทำ Optimization

Type	Pre-Wait (min)	Replicates	Step Wait (min)	From	To	Step Size
Capillary	0	1	0	1000	6000	500
Nozzle Voltage	0	1	0	0	2000	500
Drying Gas Temp	20	2	10	150	350	50
Drying Gas Flow	0	1	0	Non-funnel 10	Non-funnel 13	1
				Funnel 17	Funnel 20	
Sheath Gas Temp	20	2	10	150	400	50
Sheath Gas Flow	0	1	0	10	12	1
Nebulizer	0	1	0	25	60	5

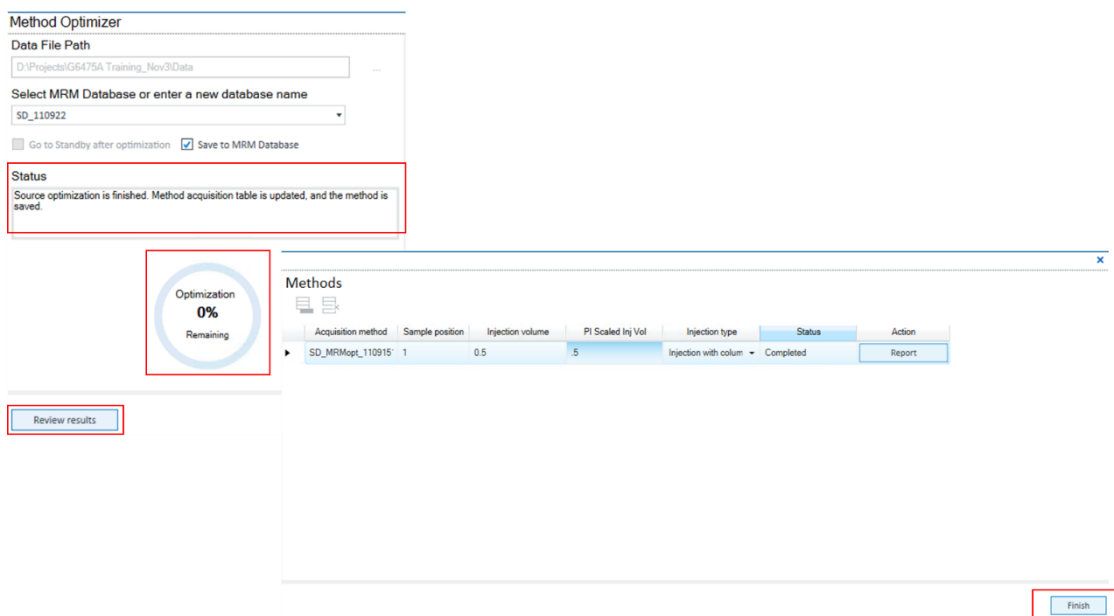
7. Click ที่ Method Optimizer tab จากนั้นเลือก optimization modes โดย
- Automated เป็นการ Run Compound and Source Optimization แบบอัตโนมัติ
 - Guided เป็นการ Run Compound และ/หรือ Source Optimization
- จากนั้นกด Next



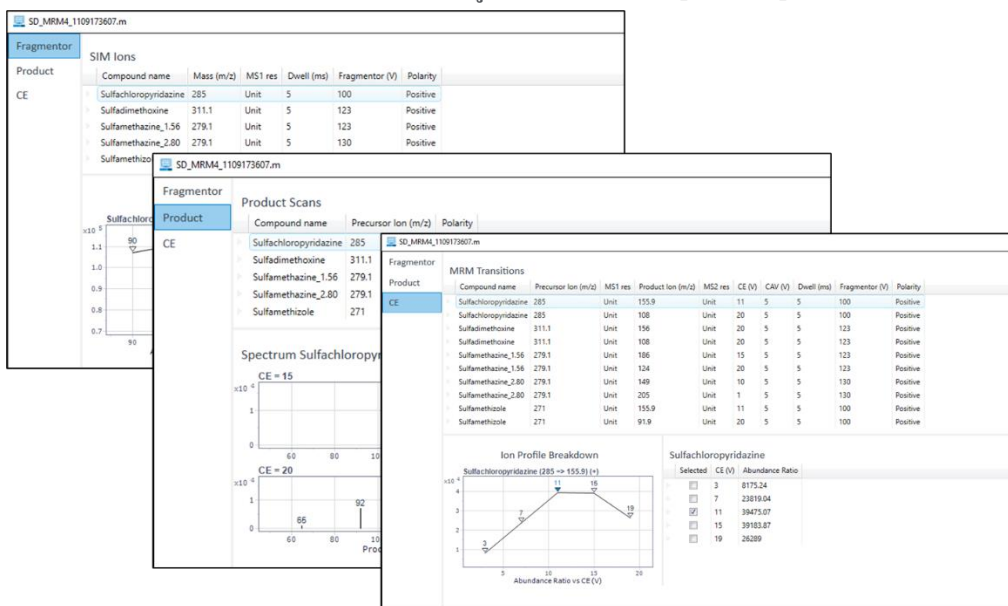
8. ระบุ Data File Path, MRM database name, Acquisition method, Sample position, Injection volume และ Injection type จากนั้นกด Next



9. เมื่อทำการวิเคราะห์เสร็จสิ้น ซึ่งสามารถสังเกตได้จาก Status และ Optimization Remaining = 0% เครื่องจะทำการแสดงผลดังแสดงในรูปด้านล่าง
- Compound and source parameters ที่ได้จากการ optimized จะถูก save ไปที่ method
 - ในกรณีที่คลิกเลือก Save to MRM Database ถ้า Optimized compounds จะถูกอัปเดตที่ database ด้วย



- Click ที่ Review results เพื่อดูรายละเอียด Compound Optimization



- Click Finish เพื่อออกจาก Method Optimizer

- ตัวอย่าง Optimizer report



- Method Optimizer จะสร้างไฟล์เดอร์ชื่อ *method name_datetime* ใน Data path ที่กำหนดไว้ใน Method Optimizer

Method Optimizer

Data File Path

D:\Projects\G6475A Training_Nov3\Data

SD_MRMopt_1109151737

Name

CpdOpt_1109151739

SrcOpt_1109154631

CpdOptResultsDataReview.xml

SD_MRMopt_1109151737.m_Report.pdf

SrcOptResultsDataReview.xml

SD_MRMopt_1109151737 > SrcOpt_1109154631

Name

CapillaryP3600_1.d

CapillaryP3800_1.d

CapillaryP4000_1.d

CapillaryP4200_1.d

CapillaryP4400_1.d

SD_MRMopt_1109151737 > CpdOpt_1109151739

Name

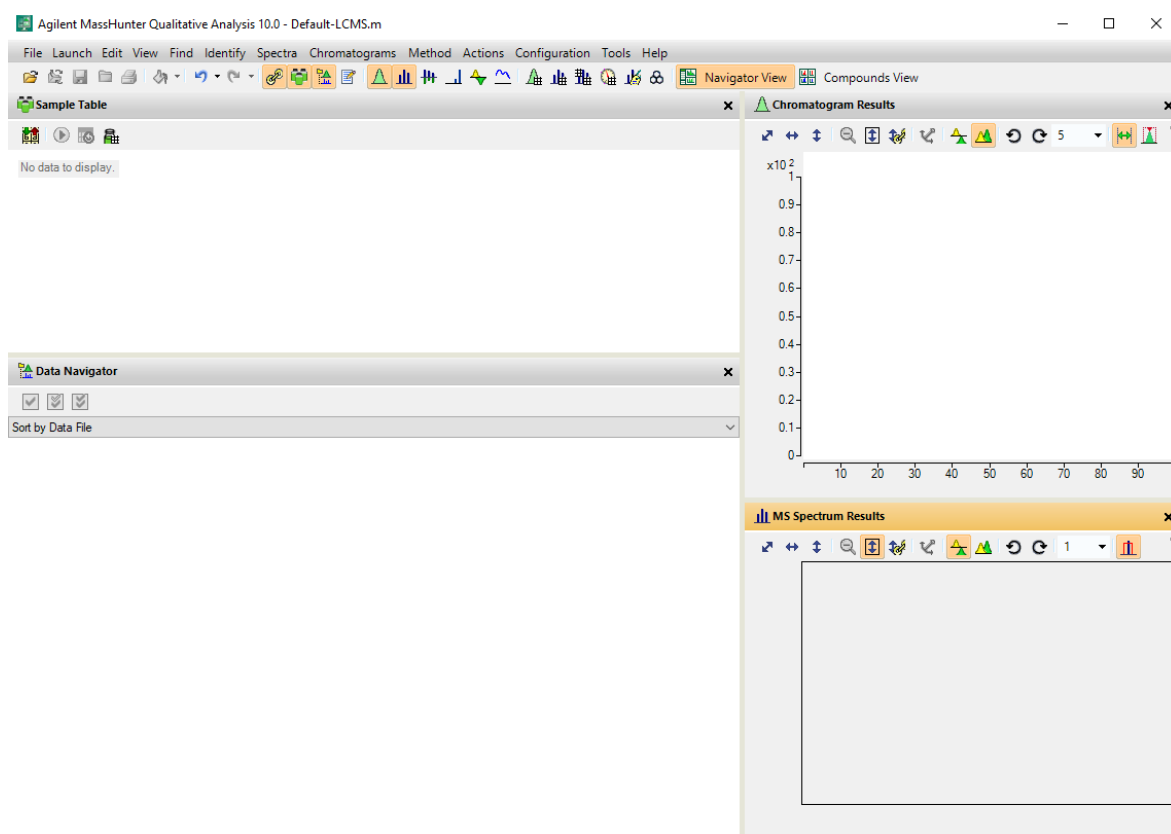
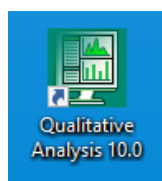
FineCE_01.d

FineFrag_01.d

PI_01.d

Survey_01.d

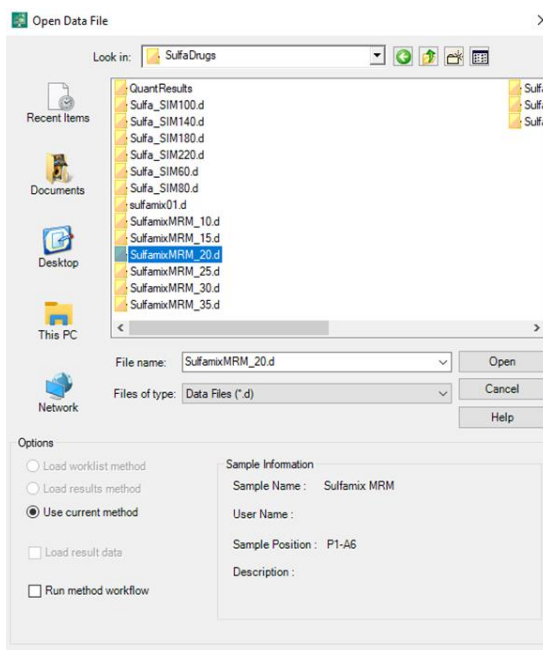
Agilent MassHunter Qualitative Analysis software



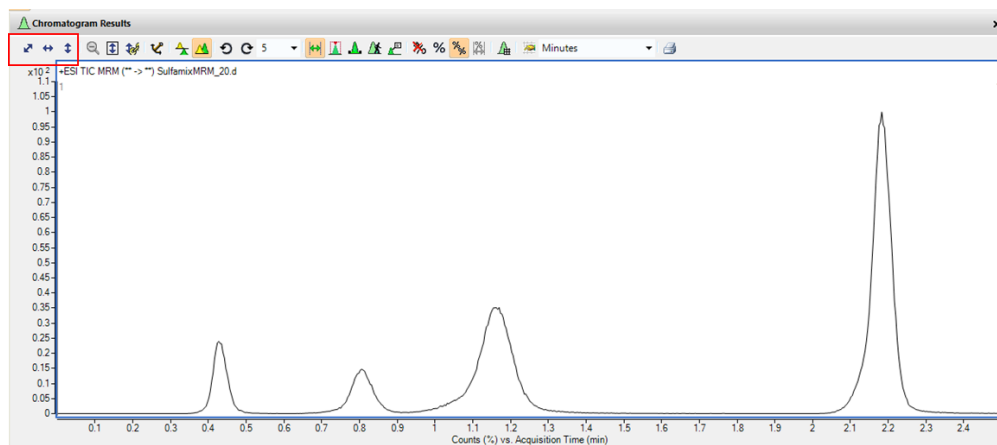
หลังจากติดตั้งซอฟต์แวร์ Mass Hunter Qualitative แล้ว จะพบไอคอน ที่หน้าจอกอมพิวเตอร์ การเริ่มต้นใช้งาน Mass Hunter Qualitative Analysis ให้เลือกคลิกไอคอนดังกล่าว จะปรากฏหน้าต่างการใช้งานซอฟต์แวร์

ขั้นตอนการเปิดไฟล์ข้อมูลต่างๆ เพื่อใช้งาน

1. คลิก File > Open Data File หรือ คลิกที่ ไอคอน  เพื่อเปิดไฟล์
2. เลือก data file(s) ที่ต้องการเปิด
3. คลิกเลือก Load results method หรือใช้ Use current method จาก Options ซึ่ง Use current method จะเป็นค่าเริ่มต้น



4. คลิก Open เพื่อเปิด data file



การขยายขนาดของ chromatograms และ spectra โดยการขยายแนวแกน x และ y

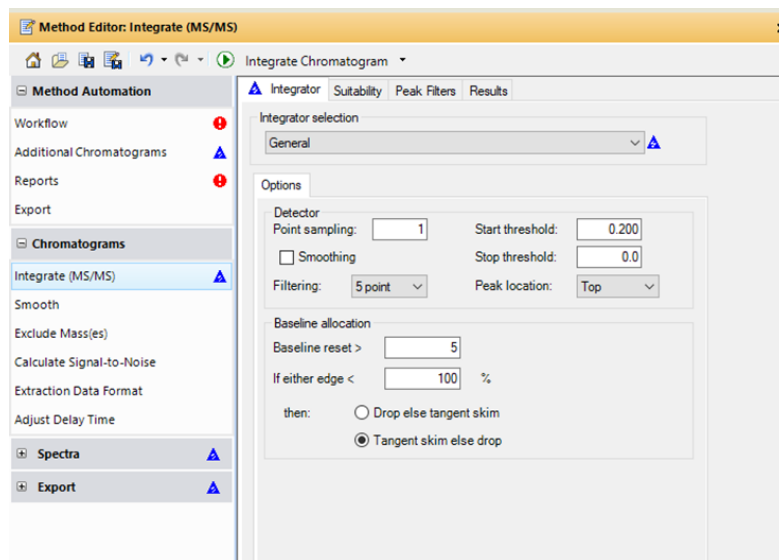
- คลิกและลาก เม้าท์ปุ่มขวา ให้ครอบคลุมพื้นที่ที่ต้องการขยาย จะแสดงผลการเลือกขยายเป็นกรอบสีเหลี่ยม สามารถทำซ้ำได้ตามต้องการ
- คลิก  บน toolbar เพื่อให้ Chromatogram อยู่ในโหมด Autoscale y-axis หลังจากทำการขยายแล้ว
- คลิกและลาก เม้าท์ปุ่มขวา บนสเกล ของแกน x เพื่อเป็นการขยายสเกลของแกน ให้กว้าง หรือ ลดลงได้
- คลิกและลาก เม้าท์ปุ่มขวา บนสเกล ของแกน y เพื่อเป็นการขยายสเกลของแกน ให้กว้าง หรือ ลดลงได้

To zoom out

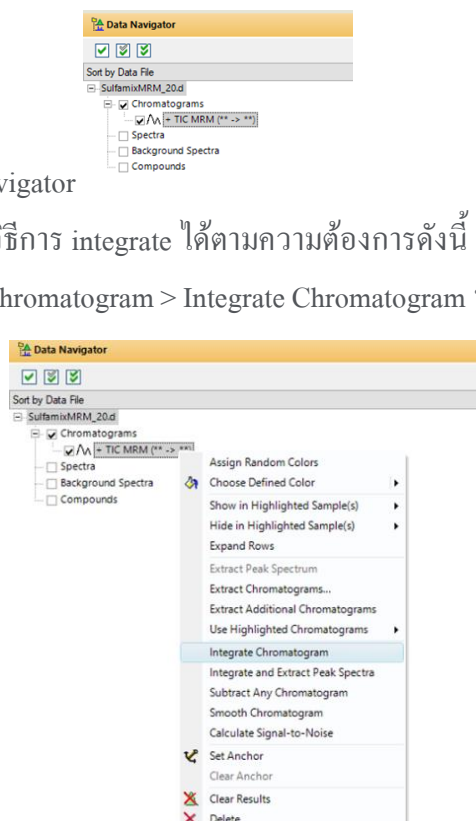
- คลิก  เพื่อ zoom out ให้รูปกลับมาที่โหมด autoscale ทั้ง x-axis และ y-axis
- คลิก  เพื่อ zoom out ให้รูปกลับมาที่โหมด autoscale ในแกน x
- คลิก  เพื่อ zoom out ให้รูปกลับมาที่โหมด autoscale ในแกน y
- คลิก  เพื่อยกเลิกการขยายครั้งล่าสุด
- Double-click ที่แกน x ให้แกนกลับมาที่โหมด autoscale ในแกน x
- Double-click ที่แกน y ให้แกนกลับมาที่โหมด autoscale ในแกน y

การหาพื้นที่ใต้พีคของ chromatogram

1. เปิดไฟล์ที่ต้องการ
2. ตั้งค่าต่างๆ ที่ใช้ในการ integrate โดยไปที่ Method Editor Explorer ดังรูป จะปรากฏเมนูต่างๆ ที่ใช้ตั้งค่าการ integrate



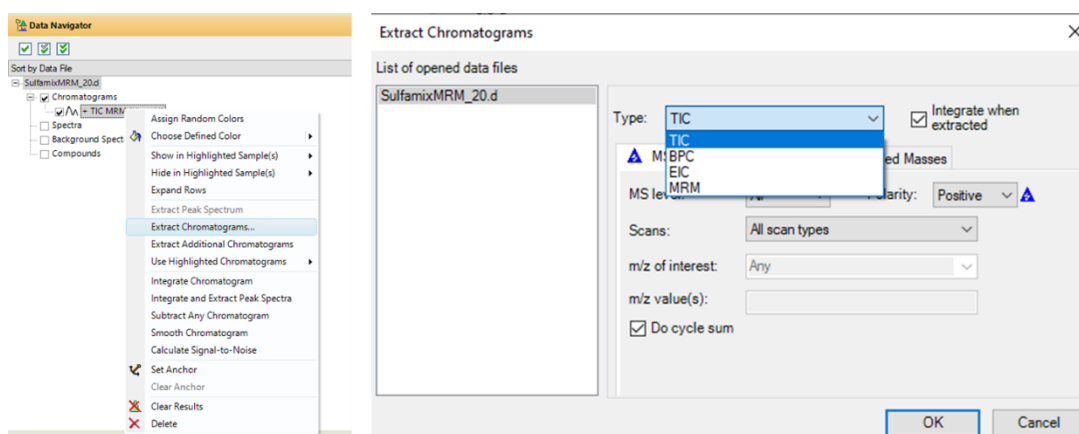
3. เลือก Chromatogram ที่ต้องการ จาก Data Navigator
4. Mass Hunter Qualitative ทำให้สามารถเลือกวิธีการ integrate ได้ตามความต้องการดังนี้
 - o เลือกจาก Chromatograms Menu ที่ Chromatogram > Integrate Chromatogram หรือ Integrate and Extract Peak Spectra



- เลือกจาก Chromatogram Results Shortcut Menu โดยคลิกขวาที่หน้าต่าง
Chromatogram Results > Integrate Chromatogram หรือ Integrate and Extract Peak Spectra
- เลือกจาก Data Navigator User Chromatograms Shortcut Menu โดยคลิกขวาที่
Chromatogram ที่ได้เลือกไว้ > Integrate Chromatogram หรือ Integrate and Extract Peak Spectra
- เลือกจาก Method Editor toolbar โดยคลิก  เพื่อ integrate ตามที่ได้ตั้งค่าไว้
 - Chromatogram > Integrate (MS)
 - Chromatogram > Integrate (MS/MS)

Extract a chromatogram

1. คลิก File > Open Data File หรือ คลิกที่ ไอคอน  เพื่อเปิดไฟล์
2. เลือก Chromatogram ที่ต้องการ Extract จากนั้น จะพบหน้าต่างการ Extract Chromatogram ขึ้น (หากต้องการ Extract Chromatogram จำนวนมาก สามารถทำได้โดยการ คลิก ctrl แล้วเลือกไฟล์ ที่เปิดขึ้นใน Data Navigator ซึ่งหากเลือกไฟล์เหล่านั้นแล้ว จะปรากฏอยู่ในช่อง List of opened data files)



3. เลือกชนิดของ Chromatogram ที่ต้องการ Extract ซึ่งจะมี TIC, BPC, EIC, MRM ให้เลือก ขึ้นกับชนิดของ ไฟล์ที่เปิดว่าทำการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค Mass spectrometry แบบใด
4. เลือกให้ทำการ Integrate อย่างอัตโนมัติได้ โดยการเช็คเลือก ที่ ช่อง Integrate when extracted

5. สามารถเลือก mass หรือ m/z ที่ต้องการ extract ได้ โดยเติมในช่อง m/z value
6. คลิก OK เพื่อให้แสดงผลการ Extract

Extract a chromatogram สำหรับไอออนแต่ละไอออน

1. คลิก File > Open Data File หรือ คลิกที่ ไอคอน  เพื่อเปิดไฟล์
2. เลือก Chromatogram ที่ต้องการ Extract จากนั้น จะพบหน้าต่างการ Extract Chromatogram ขึ้น
3. เลือกชนิดของ chromatogram เป็น MRM จากนั้นในช่อง MS level จะถูกตั้งค่าเป็น MS/MS อย่างอัตโนมัติ และช่อง Scans จะถูกตั้งค่าเป็น Multiple reaction monitor
4. ในช่อง Transition ให้เลือก All หรือหากไม่ต้องการเลือกทั้งหมด ให้เลือกเฉพาะที่ต้องการได้
5. คลิก OK เพื่อให้แสดงผลการ Extract

การบันทึก method parameters

การบันทึก method parameters สามารถทำได้ใน หน้าต่าง the Method Editor

บันทึกเป็น current method:

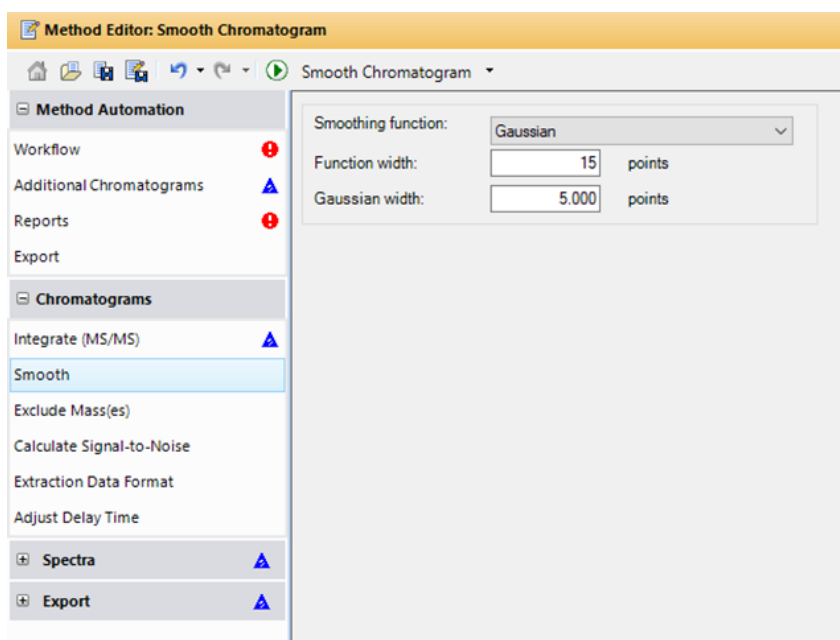
- คลิก Method > Save Method.
- คลิก Save Method ใน Method Editor shortcut menu.
- คลิก Save Method จาก the Method Editor toolbar.

สร้าง method ใหม่:

1. เปิดหน้าต่าง Save Method
 - คลิก Method > Save Method As.
 - คลิก Save Method ใน the Method Editor shortcut menu หาก default method ถูกโหลดขึ้นมา หากไม่ได้โหลด default method ให้บันทึกเป็น current method.
2. ตั้งชื่อ method
3. คลิก Save Qualitative Analysis และ Acquisition Method parameters.
4. คลิก Save เพื่อบันทึก

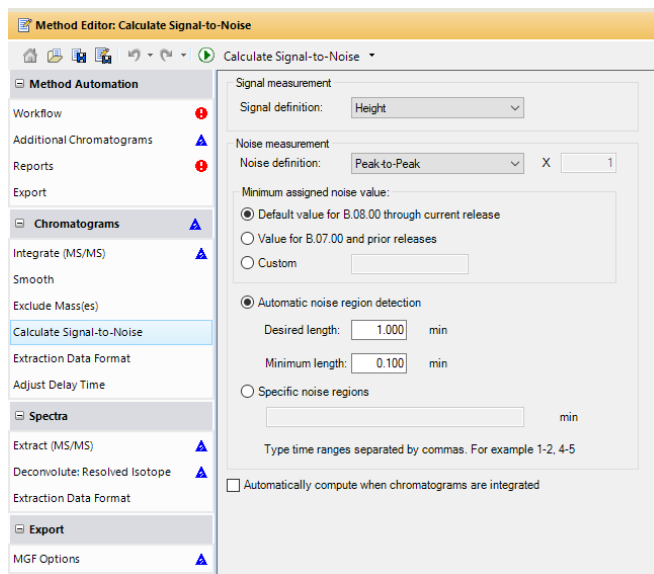
Smooth a chromatogram

1. คลิก File > Open Data File หรือ คลิกที่ ไอคอน  เพื่อเปิดไฟล์
2. เลือก Chromatogram > Smooth chromatogram จาก แท็บเมนู หรือ หน้าต่าง Method Editor
3. เลือกตั้งค่าการ smoothing ที่ต้องการ จาก Method Editor



4. จากหน้าต่าง Data Navigator ให้ highlight chromatogram ที่ต้องการ smooth.
5. คลิก  เพื่อทำการ Smooth chromatogram.
6. หากต้องการบันทึกการตั้งค่าการ smooth ไว้ใน method ให้บันทึก Save method parameters

Calculate signal-to-noise

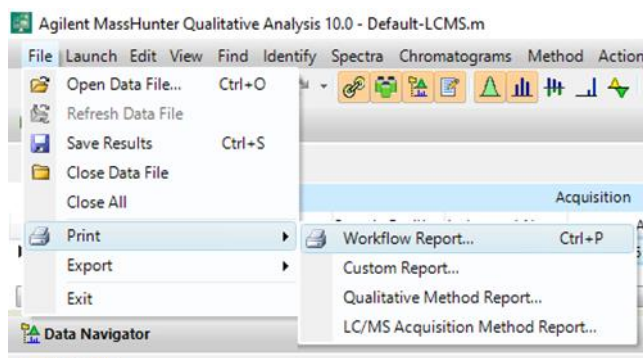


1. คลิก File > Open Data File หรือ คลิกที่ ไอคอน  เพื่อเปิดไฟล์
2. จาก Method Explorer Box > Chromatogram > Calculate Signal-to-Noise (ดังรูป). สามารถกำหนดระยะที่ของสัญญาณ (Noise) ได้ รวมถึงชนิดของสัญญาณที่ต้องการได้อีกด้วย
3. สามารถกำหนดระยะของสัญญาณ Noise ได้หลายระยะ โดยอาศัย commas เช่น 1-2, 4-5 เป็นต้น
4. คลิก  เพื่อ คำนวณค่า signal to noise
5. หากต้องการบันทึกการกำหนดค่าต่างๆในวิธี ให้ Save method parameters.

การเลือกตัวอย่างพิมพ์รายงาน

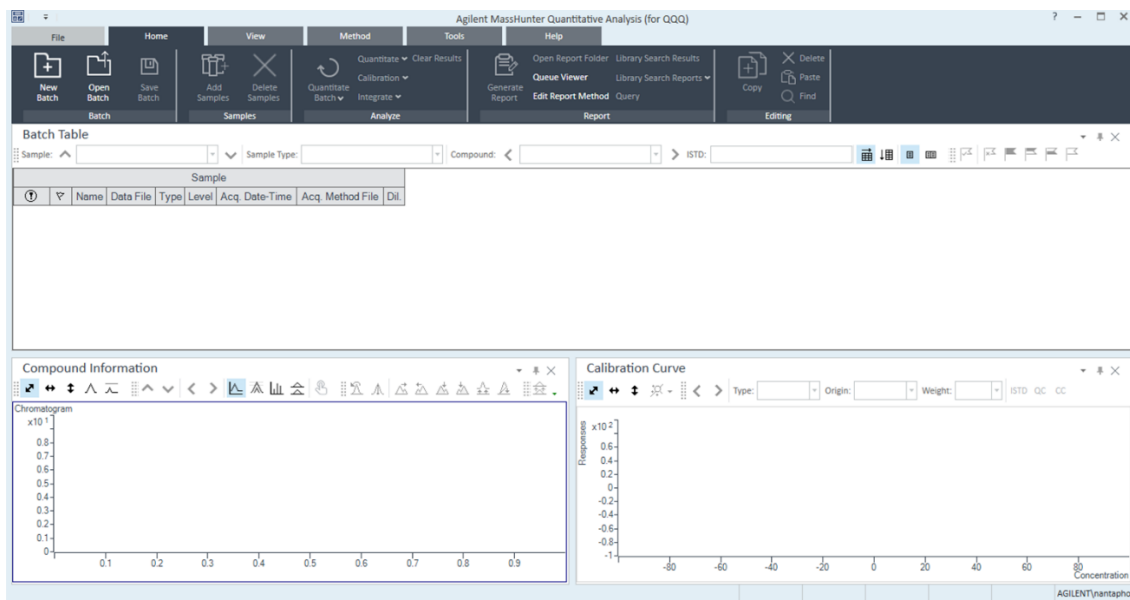
1. คลิก File > Open Data File หรือ คลิกที่ ไอคอน  เพื่อเปิดไฟล์
2. เลือก General » Common Reporting Options Overview จาก Method Editor
3. (หากต้องการ) ต้องเปลี่ยน folder หากต้องการใช้ report templates ที่มีขนาดกระดาษของรายงานแตกต่างไปจากเดิม เช่น เดิม MassHunter\Report Templates\Qual\en-US\Letter เป็น folder ที่มีขนาด letter ต้องเปลี่ยนเป็น folder ที่ MassHunter\Report Templates\Qual\en-US\A4 เป็น A4

4. (หากต้องการ) เลือก report template ที่ต้องการ
 1. Analysis Report
 2. Compound Report
 3. Qualitative Method Report
 4. Acquisition Method Report
5. คลิก File > Print เพื่อทำการพิมพ์รายงานตามรูปแบบที่ต้องการ



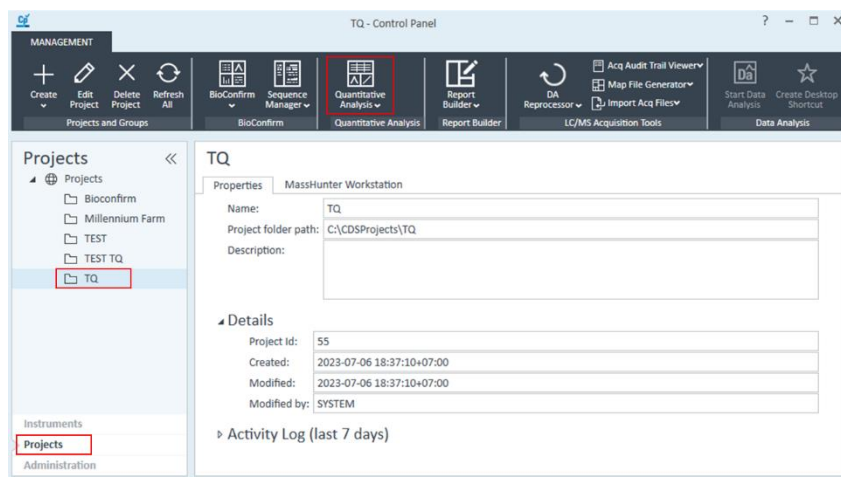
6. หากต้องการบันทึกการกำหนดค่าต่างๆในวิธี ให้ Save method parameters.

Agilent MassHunter Quantitative Analysis software



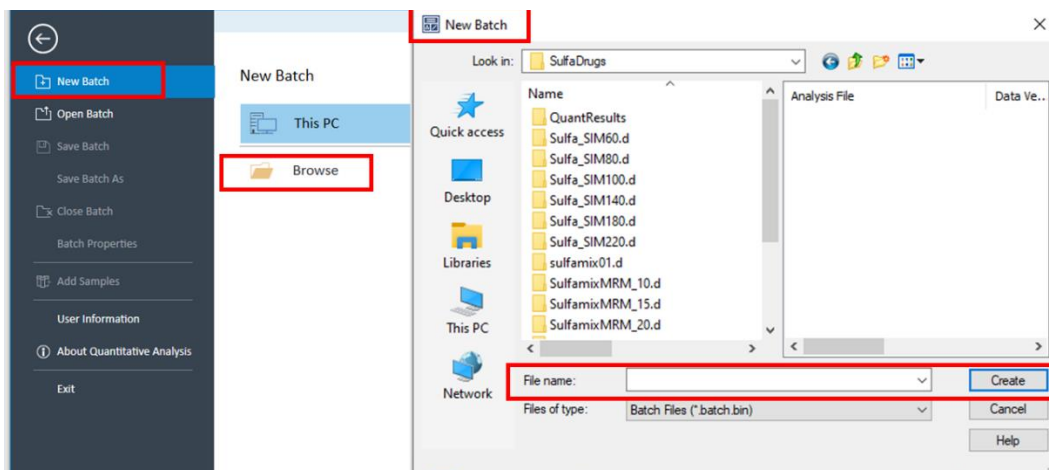
หลังจากติดตั้งซอฟต์แวร์ Mass Hunter Quantitative Analysis แล้ว จะพบไอคอน ที่หน้าจอคอมพิวเตอร์การเริ่มต้นใช้งาน MassHunter Qualitative Analysis ให้เลือกคลิกไอคอนดังกล่าวจะปรากฏหน้าต่างการใช้งานซอฟต์แวร์ โดยที่การประมวลผลเชิงปริมาณจะต้องสร้าง Calibration curve และ คำนวณเป็นชุดตัวอย่าง (Batch) แล้วนำไปคำนวณด้วยวิธีการคำนวณผล (Quantitation Method)

อีกวิธีสำหรับการเข้า MassHunter Qualitative Analysis สามารถทำได้โดยไปที่หน้า Control Panel < ไปที่ Project tab < เลือก Project < กดที่ Qualitative Analysis icon

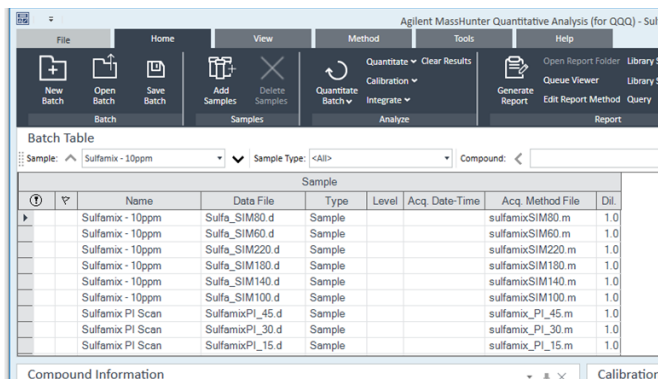
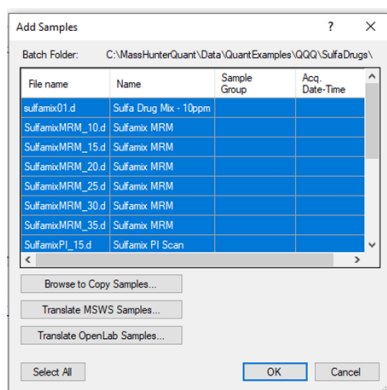


การสร้าง Batch

1. เลือก File > New Batch จะปรากฏหน้าต่าง New Batch ขึ้นมา เพื่อให้สร้าง ชื่อ Batch ใหม่ โดยที่หน้าต่างนี้ ให้ไปที่ช่อง File name แล้วพิมพ์ชื่อ ที่ต้องการ จากนั้น คลิก Create

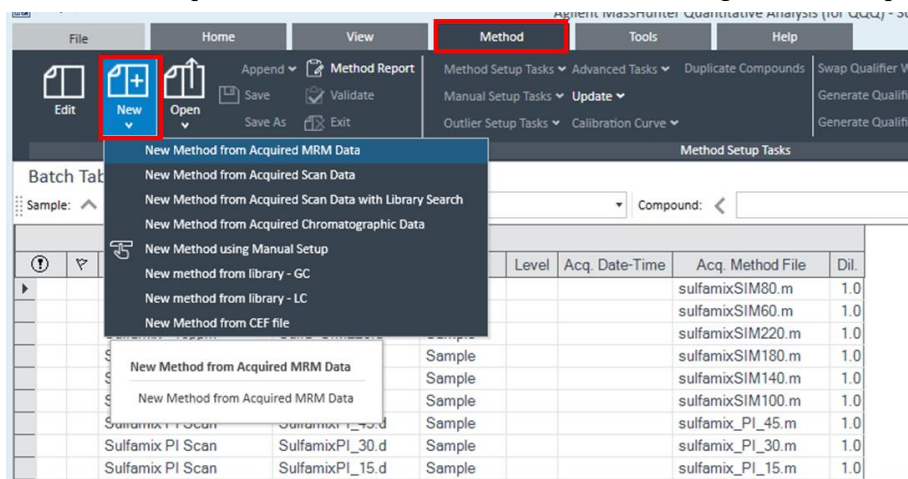


2. จากนั้น จะปรากฏ หน้าต่าง Add Samples ขึ้นมา ให้เลือก Data file ที่ต้องการใช้ใน Batch โดยหากต้องการเลือก หลาย Data File ให้ใช้การกดแป้นพิมพ์ที่ Shift หรือ Ctrl เพื่อช่วยในการเลือก หรือ Select All

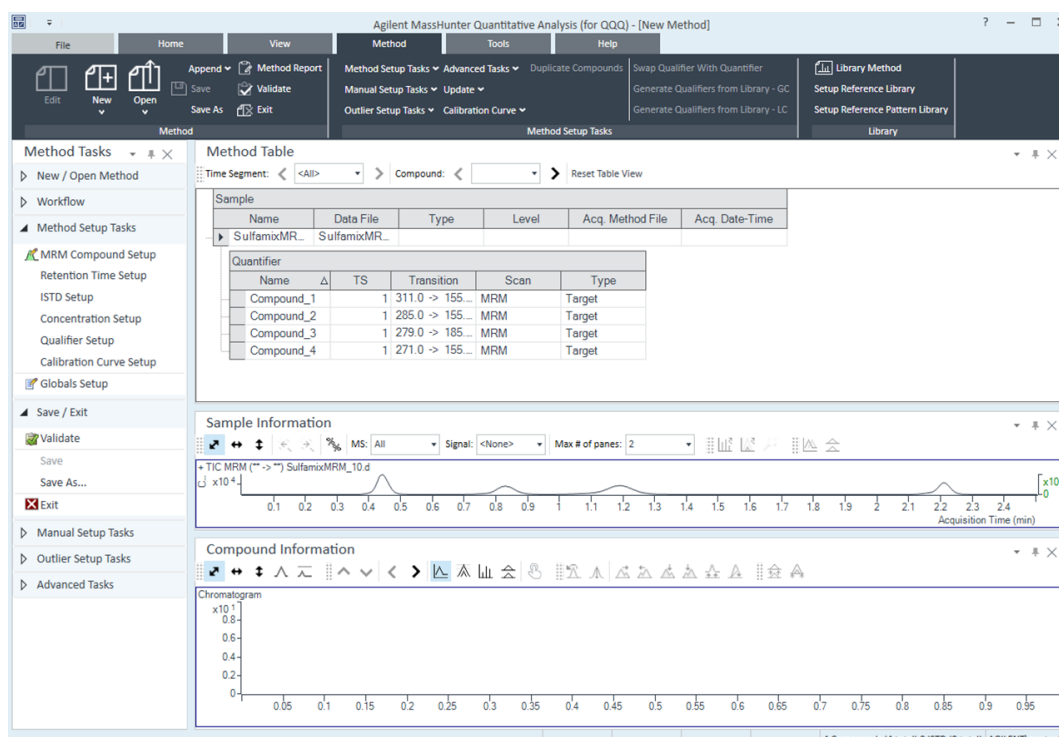


การสร้างวิธีการคำนวณหาปริมาณ (Quantitation Method)

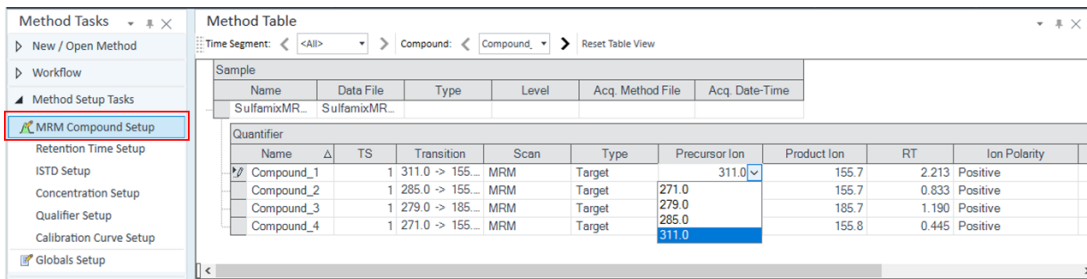
1. เลือกเมนู Method > New > เลือก New method from Acquired MRM Data หรือ เลือก New method from Acquired Scan Data หรือ เลือก New Method using Manual Setup



2. เมื่อเลือก Method ได้แล้ว จะปรากฏหน้าต่างเพื่อเลือกไฟล์ที่จะนำมาสร้างวิธีการคำนวณ โดยหลักในการเลือกจะเลือกไฟล์ที่เป็นสารมาตรฐานที่มีความเข้มข้นสูงสุด ทั้งนี้ เพื่อความชัดเจนของข้อมูลที่ใช้ในการกำหนดค่าต่างๆ
3. หลังจากเลือกไฟล์ที่ต้องการแล้วจะปรากฏหน้าต่างในการตั้งค่าต่างๆ ซึ่งจะมีหัวข้อแยกตามลำดับตาม Navigator Menu (Method Tasks)



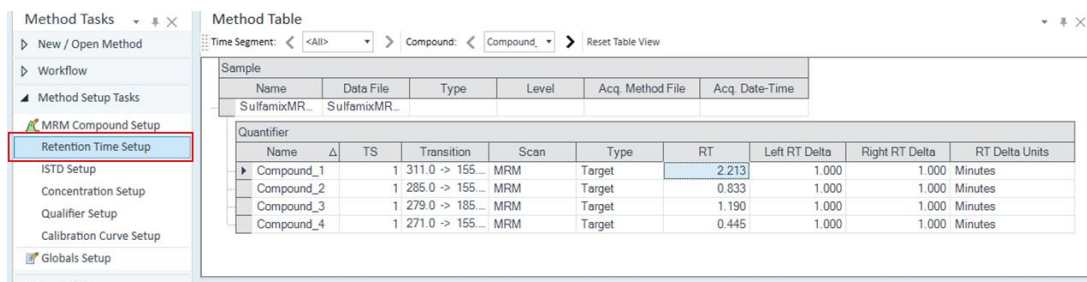
4. คลิกเลือก MRM Compound Setup จาก Method Setup Task เพื่อทำการตั้งค่า MRM โดยโปรแกรมจะเลือก Precursor Ion, Product Ion, ชนิดของ Ion (Type) ให้อัตโนมัติ โดยจะเลือกจากค่าสัญญาณ (Response) ณ เวลา RT นั้นๆ ที่มีค่าสัญญาณสูงสุด แต่หากต้องการเลือก Ion ใหม่ สามารถทำได้ โดยคลิกเลือก จาก List Ion ที่ทำการตรวจวัดทั้งหมดได้



Sample	Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
SulfamixMR...	SulfamixMR...					

Quantifier	Name	Δ	TS	Transition	Scan	Type	Precursor Ion	Product Ion	RT	Ion Polarity
Compound_1	1	311.0	->	155...	MRM	Target	311.0	155.7	2.213	Positive
Compound_2	1	285.0	->	155...	MRM	Target	271.0	155.7	0.833	Positive
Compound_3	1	279.0	->	185...	MRM	Target	279.0	185.7	1.190	Positive
Compound_4	1	271.0	->	155...	MRM	Target	285.0	155.8	0.445	Positive

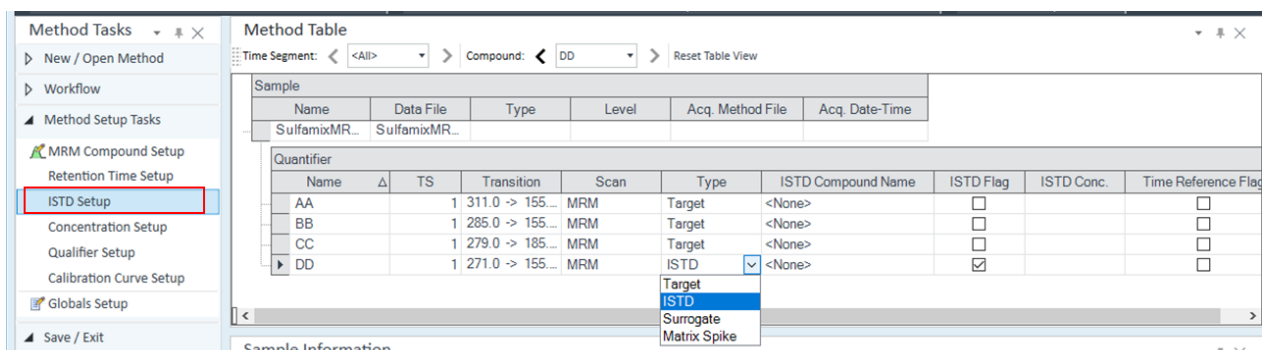
5. คลิกเลือก Retention Time Setup จาก Method Setup Tasks เพื่อทำการตั้งค่า Retention Time โปรแกรมจะทำการเลือกให้โดยอัตโนมัติ ซึ่งหากพบว่า RT ที่โปรแกรมเลือกให้ไม่ถูกต้อง ผู้ใช้สามารถแก้ไขให้ถูกต้องได้ โดยดับเบิลคลิกที่ช่อง RT ของ สารที่ต้องการแก้ไข ซึ่ง Chromatogram จะแสดงภาพ ณ RT ที่ได้เลือกไว้ตามข้อมูลที่ได้จาก Data file นั้นๆ

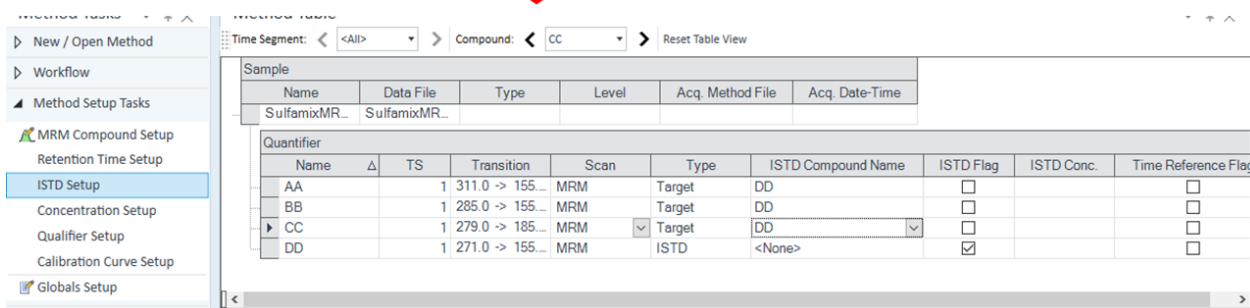


Sample	Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
SulfamixMR...	SulfamixMR...					

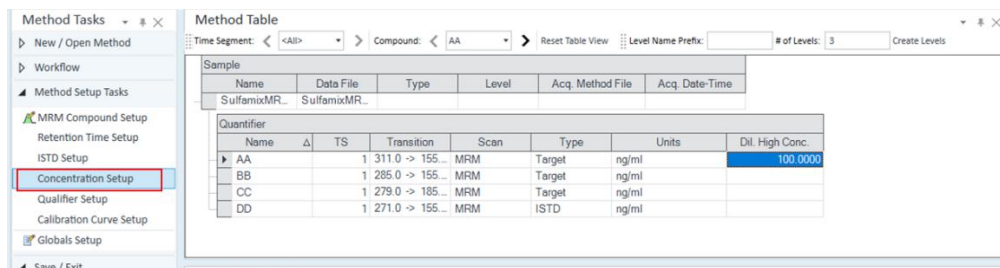
Quantifier	Name	Δ	TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
Compound_1	1	311.0	->	155...	MRM	Target	2.213	1.000	1.000	Minutes
Compound_2	1	285.0	->	155...	MRM	Target	0.833	1.000	1.000	Minutes
Compound_3	1	279.0	->	185...	MRM	Target	1.190	1.000	1.000	Minutes
Compound_4	1	271.0	->	155...	MRM	Target	0.445	1.000	1.000	Minutes

6. ในกรณีคำนวณแบบใช้ ISTD ให้คลิกเลือก ISTD Setup จาก Method Setup Tasks เพื่อทำการตั้งค่า Internal Standard (ISTD) หากยังไม่ได้มีการกำหนดสารที่เป็น ISTD ตั้งแต่การตั้งค่า ใน Acquisition Method สามารถตั้งค่าได้ที่เมนูนี้ โดยเลือกชนิด (Type) ของ Internal Compound เป็น ISTD จากนั้นคลิก Check Box ใน ISTD Flag และ Type ใน Compound อื่นๆ เลือกเป็น Target จากนั้นระบุชื่อสารที่จะใช้เป็น ISTD ที่ต้องการใช้คำนวณด้วย และใส่ความเข้มข้นของ ISTD

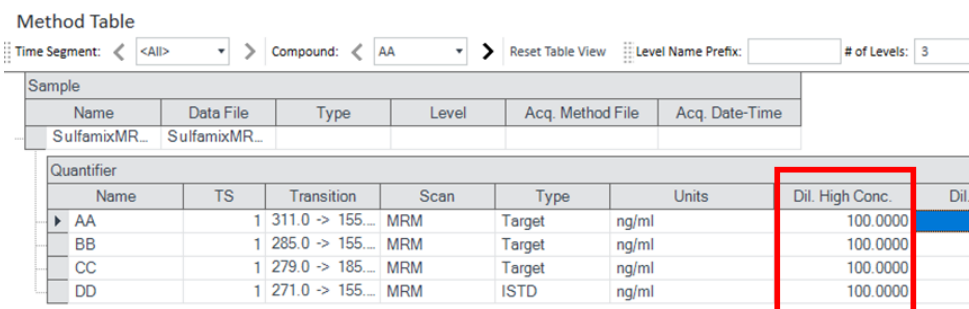




7. คลิกเลือก Concentration Setup จาก Method Setup Tasks เพื่อทำการตั้งค่า ความเข้มข้นของสารมาตรฐาน (Concentration Setup) เพื่อสร้าง Calibration curve โดย



a. ใส่ค่าความเข้มข้นที่สูงที่สุดลงในช่อง Dil. High Conc.



- b. ใส่ค่าอัตราส่วนการเจือจางของสารแต่ละลำดับ เช่น ความเข้มข้นลำดับดังนี้ 100, 50, 25 ดังนั้นการกรอกค่าอัตราส่วนการเจือจาง จะเป็น 1:2 เป็นต้น

Method table

Time Segment: < All > Compound: AA Reset Table View Level Name Prefix: # of Levels: 3 Create Levels

Sample						
Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time	
SulfamixMR...	SulfamixMR...					

Quantifier							
Name	TS	Transition	Scan	Type	Units	Dil. High Conc.	Dil. Pattern
AA	1	311.0 -> 155...	MRM	Target	ng/ml	100.0000	1:2
BB	1	285.0 -> 155...	MRM	Target	ng/ml	100.0000	1:2
CC	1	279.0 -> 185...	MRM	Target	ng/ml	100.0000	1:2
DD	1	271.0 -> 155...	MRM	ISTD	ng/ml	100.0000	1:2

- c. ใส่จำนวน Calibration level ที่ช่อง Create Level และคลิก Create Levels

Method table

Time Segment: < All > Compound: AA Reset Table View Level Name Prefix: # of Levels: 3 Create Levels

Sample						
Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time	

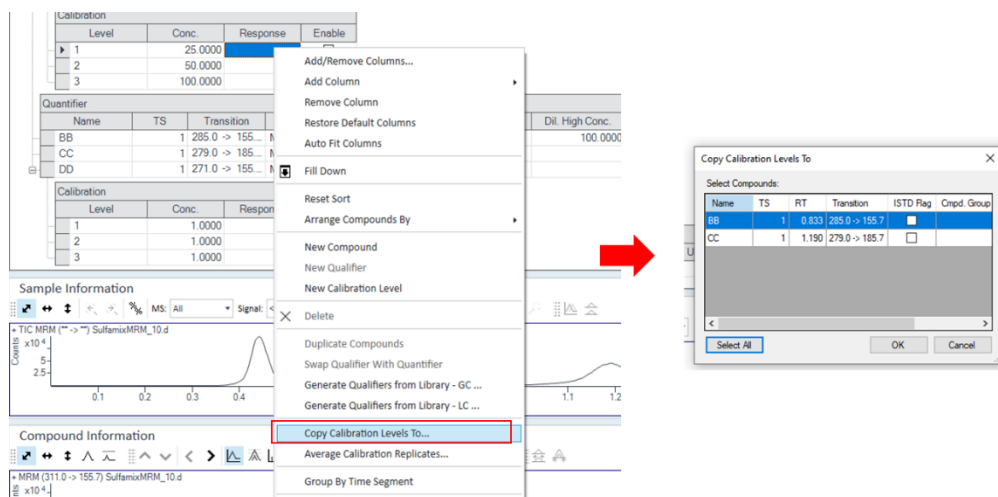
- d. หากต้องการกำหนดค่า Dil. High Conc. เหมือนกันทุกๆ Compound หรือ Dil. Pattern สามารถคลิกขวาที่ช่องที่ได้กรอกค่าไว้แล้ว เลือก Fill Down

Quantifier							
Name	TS	Transition	Scan	Type	Units	Dil. High Conc.	
BB	1	285.0 -> 155...	MRM	Target	ng/ml	100.0000	
CC	1	279.0 -> 185...	MRM	Target	ng/ml		
DD	1	271.0 -> 155...	MRM	ISTD	ng/ml		

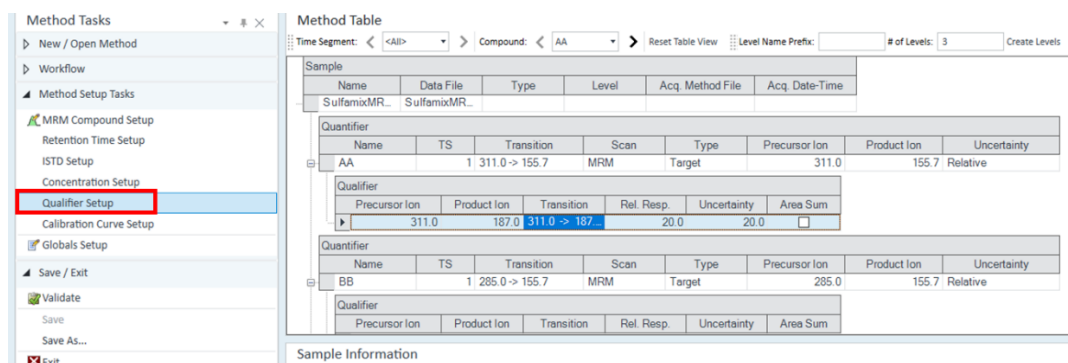
Calibration			
Level	Conc.	Response	Enable
1	1.0000		☒
2	1.0000		☒

Remove Column
Restore Default Columns
Auto Fit Columns
Fill Down
Reset Sort
Arrange Compounds By
...

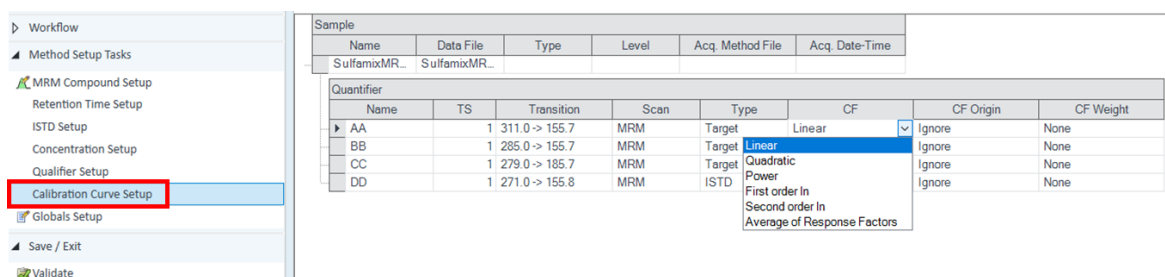
- e. หากต้องการกำหนดการตั้ง Concentration Level ให้เหมือนกันทุก Compound หรือ บาง Compound สามารถเลือกทำได้โดยคลิกขวาที่ชื่อ Compound นั้นๆ เลือก Copy Calibration Level to จะปรากฏชื่อ Compound ทั้งหมดขึ้นมา ให้เลือก Compound ที่จะใช้ค่าเดียวกันและมีความเข้มข้น ตรงกับ Compound ที่ได้กำหนดไว้แล้ว



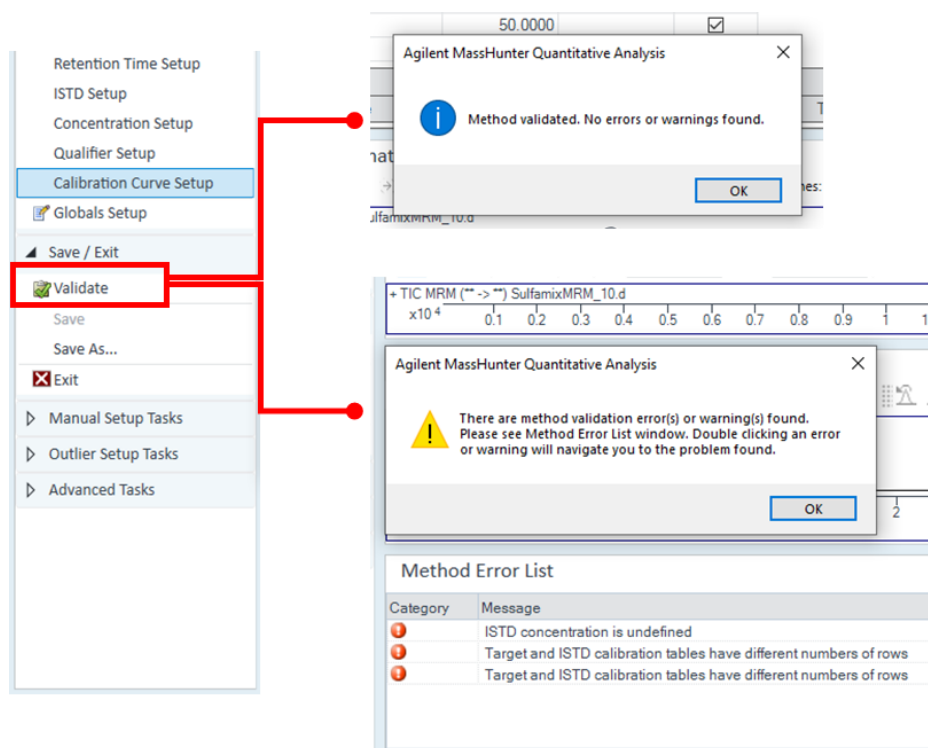
8. คลิกเลือก Qualifier Setup จาก Method Setup Tasks เพื่อทำการตั้งค่า Qualifier Ion โดยค่าต่างๆ ที่ปรากฏเครื่องจะเลือกให้อัตโนมัติ แต่หากต้องการเปลี่ยนแปลงสามารถทำได้คลิกที่ช่องที่ต้องการแก้ไข แล้วทำการแก้ไขตามต้องการ



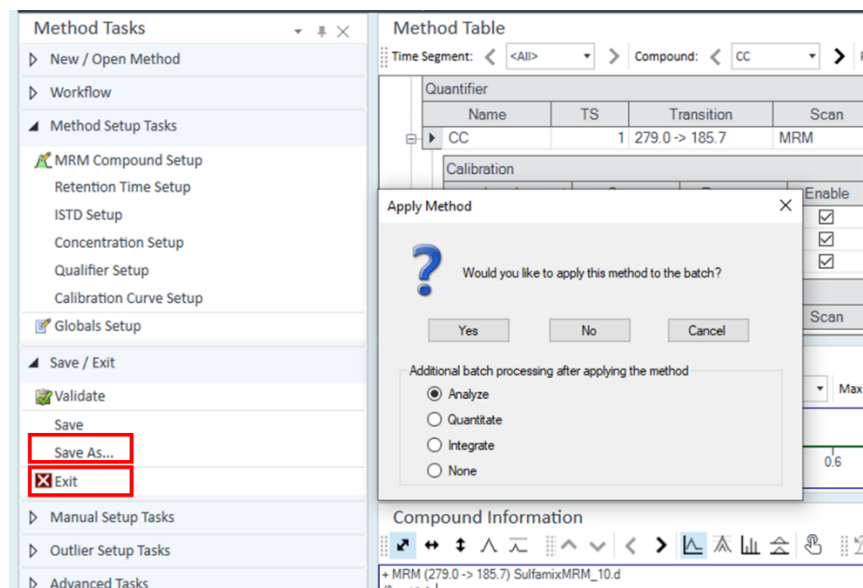
9. คลิกเลือก Calibration Curve Setup จาก Method Setup Tasks เพื่อทำการตั้งค่ากราฟมาตรฐาน (Calibration Curve Setup) เป็นการตั้งค่าชนิดของ Calibration Curve ซึ่งสามารถแก้ไขได้ โดยเลือกจาก Drop down list ที่แสดงในตาราง



10. เมื่อทำการตั้งค่าและตรวจสอบค่าพารามิเตอร์ต่างๆ เรียบร้อยแล้ว ให้ทำการ Validate เพื่อตรวจสอบความถูกต้องในการตั้งค่าได้ ซึ่งจะปรากฏหน้าต่างข้อความ หลังจาก คลิก Validate ดังนี้ หากพบข้อผิดพลาด จะปรากฏตำแหน่งที่เกิดข้อผิดพลาด ใน Method Error List เมื่อคลิกข้อความที่เกิดข้อผิดพลาด จะทำให้กลับไปแก้ไข ณ จุดที่ผิดพลาดได้ทันที

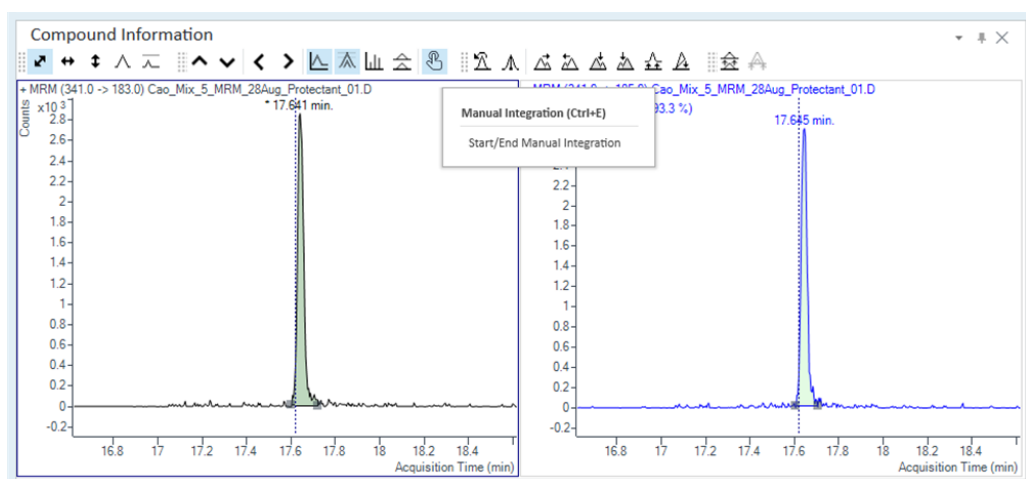


11. เมื่อไม่พบข้อผิดพลาดแล้ว Save As เพื่อบันทึกการตั้งค่าต่างๆใน method จากนั้นคลิก Exit จะปรากฏหน้าต่างขึ้นมาเพื่อถามว่า ต้องการใช้ Method ดังกล่าวนี้นใน Batch ที่ได้สร้างขึ้นมาแล้วหรือไม่ หากต้องการ ให้คลิก “Yes” หาก ไม่ต้องการ ให้คลิก “No” หากต้องการใช้ method (คลิก “Yes”) คลิกที่ “Analyze” เพื่อให้ได้ผลการคำนวณตามวิธีที่ต้องการ

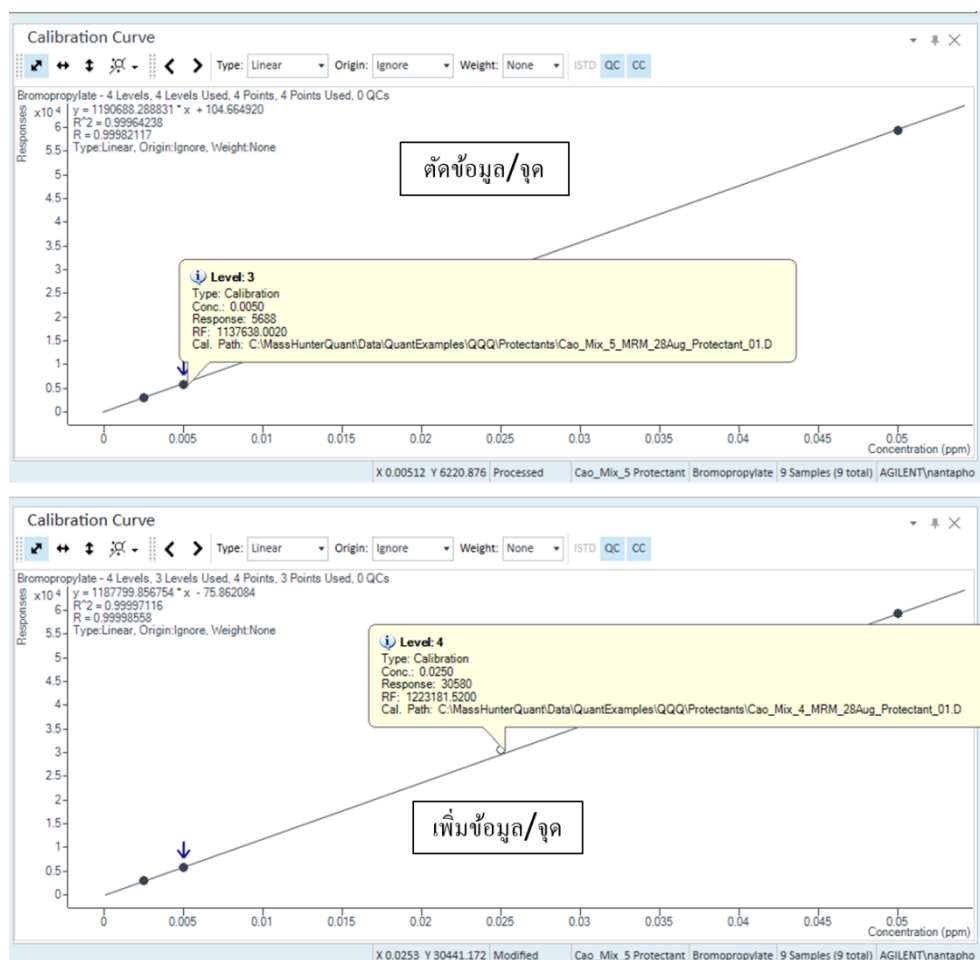


12. เมื่อได้ผลการคำนวณแล้ว หากต้องการแก้ไข แบบ Manual สามารถทำได้ ดังนี้

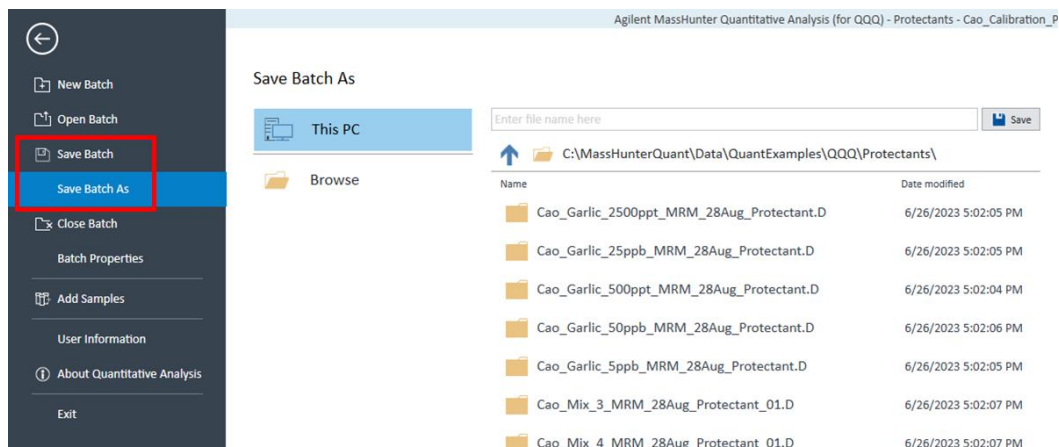
- Manual Integrate ให้คลิกเลือกไอคอน  เพื่อทำการ Integrate แบบ Manual โดยการลากเส้นเอง หากทำการ Integrate แล้วจะปรากฏเครื่องหมาย ☒ ในคอลัมน์ MI (Manual Integrate)



- เลือกตัดข้อมูลที่นำมาใช้สร้าง Calibration Curve หากต้องการตัดข้อมูล หรือ จุดใดบนกราฟ ให้เลื่อนเมาส์ ไปทำจุดนั้น จะปรากฏเครื่องหมาย ✕ บริเวณจุดนั้น จากนั้นให้คลิกที่จุด จะพบว่า จากจุดสี่ทึบ จะกลายเป็นจุดโปร่ง และสมการเส้นตรงก็จะเปลี่ยนไป สามารถเพิ่มข้อมูลที่เคยตัดออกไปแล้ว ให้กลับมาที่กราฟได้อีก โดยทำเช่นเดียว แต่จะปรากฏเครื่องหมาย ✓ บริเวณจุดที่ต้องการ

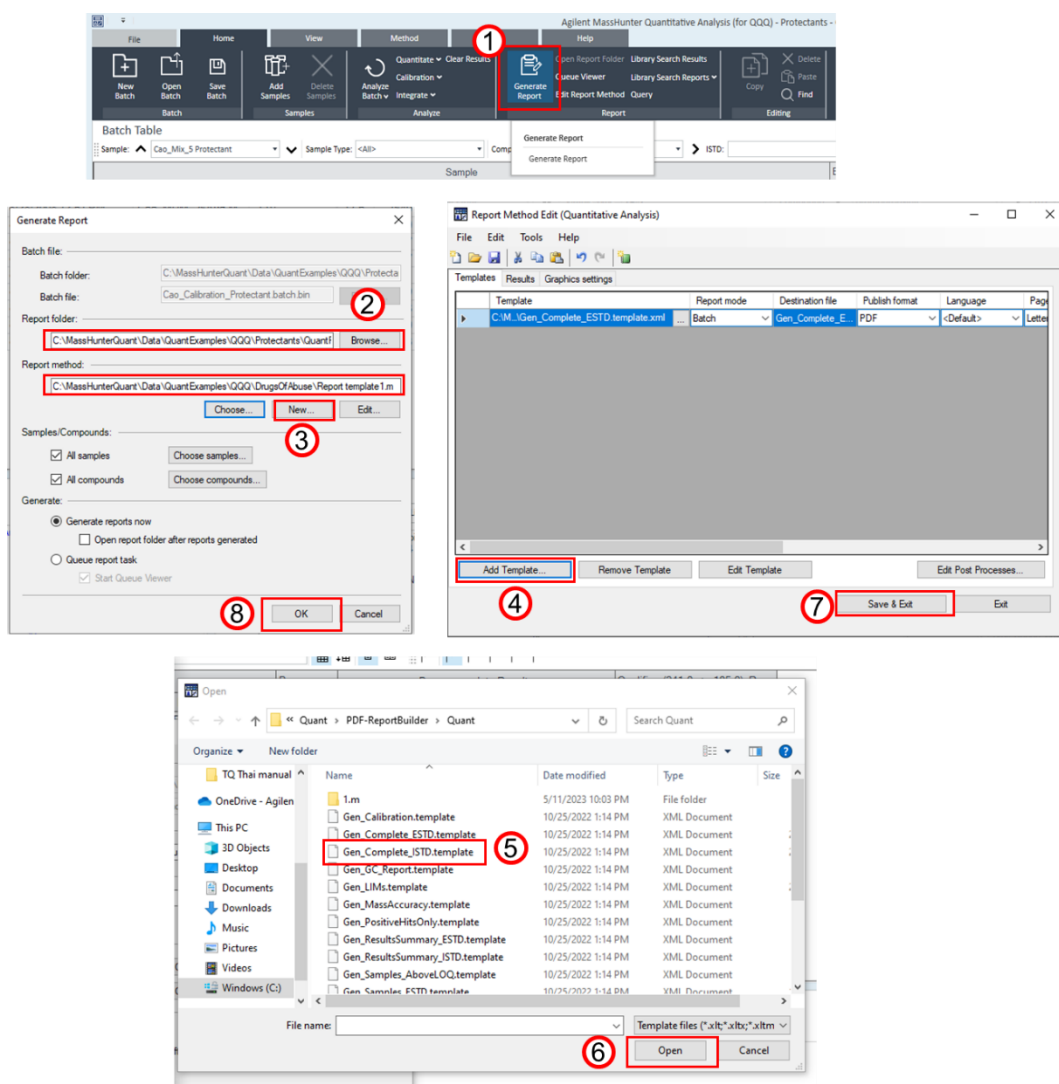


13. เมื่อได้ผลการคำนวณเรียบร้อยแล้วสามารถบันทึกได้โดยเลือกเมนู File > Save Batch หรือ Save Batch As



การพิมพ์รายงาน (Report)

1. Click ที่ Generate Report
2. จะปรากฏหน้าต่างเพื่อให้เลือกระบุ Report folder และ Report method
3. ในกรณีที่ มี Report method แล้วกด Choose เพื่อเลือก Report method ในกรณีที่ ยังไม่มีให้กด New เพื่อสร้าง Report method หรือกด Edit เพื่อแก้ไข
4. ในกรณีที่ กด New จะมีหน้าต่างปรากฏขึ้น จากนั้นกด Add Template เพื่อเลือก Report template ที่ต้องการ หลังจากนั้นกด Save & Exit
5. จากนั้นคลิก OK โดย Report จะถูกสร้างขึ้นและเก็บใน folder path ที่ระบุไว้



คู่มือการบำรุงรักษาและการแก้ไขปัญหา

เครื่อง LCMS QQQ G6400 series เบื้องต้น



Overview



Startup and Shutdown



Calibrant Delivery
System and Divert
Valve



Sources



Nebulizer



Corona Needle



Ion Transfer Capillary



High Pressure Ion
Funnel



Desolvation Assembly
and Ion Optics



Rough Pump



Tools and Parts

คู่มือนี้ ใช้สำหรับ การบำรุงรักษา และแก้ปัญหาเบื้องต้นสำหรับเครื่อง LC MSD QQQ G6400 Series สุดท้ายแล้ว ถ้าไม่สามารถหาคำตอบของปัญหาได้ กรุณาติดต่อ บริษัทเอจีเลนต์ เทคโนโลยีส์ จำกัด โทร 026376363

อุปกรณ์ที่ต้องใช้

- Screwdriver/ Torx (ไขควง)
- Wrench (ประแจปากตาย)
- Multimeter
- อุปกรณ์ที่มากับเครื่อง เช่น กล้องส่อง Nebulizer
- ผ้า lint-free cloth
- Cotton swab
- กระดาษทรายสีเทา 4000 หรือ 8000 grit
- ถุงมือ (powder free)

Tools needed



Clean powder-free nitrile gloves



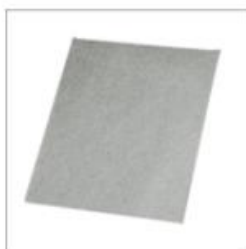
Clean lint-free cloth



Clean wash bottle



LC/MS-grade water



4000 grit abrasive paper



LC/MS-grade isopropanol

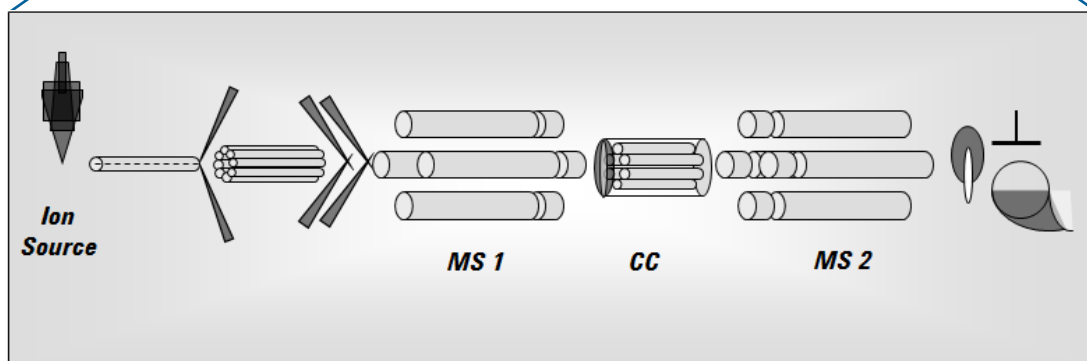
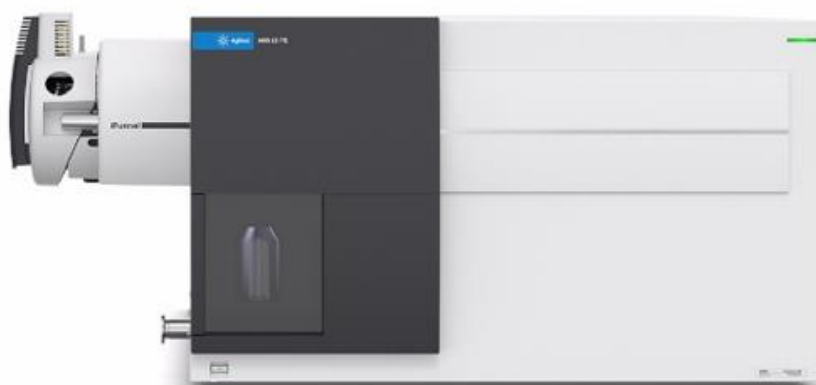


Torx screwdriver



open-end wrench

LCMS TQ

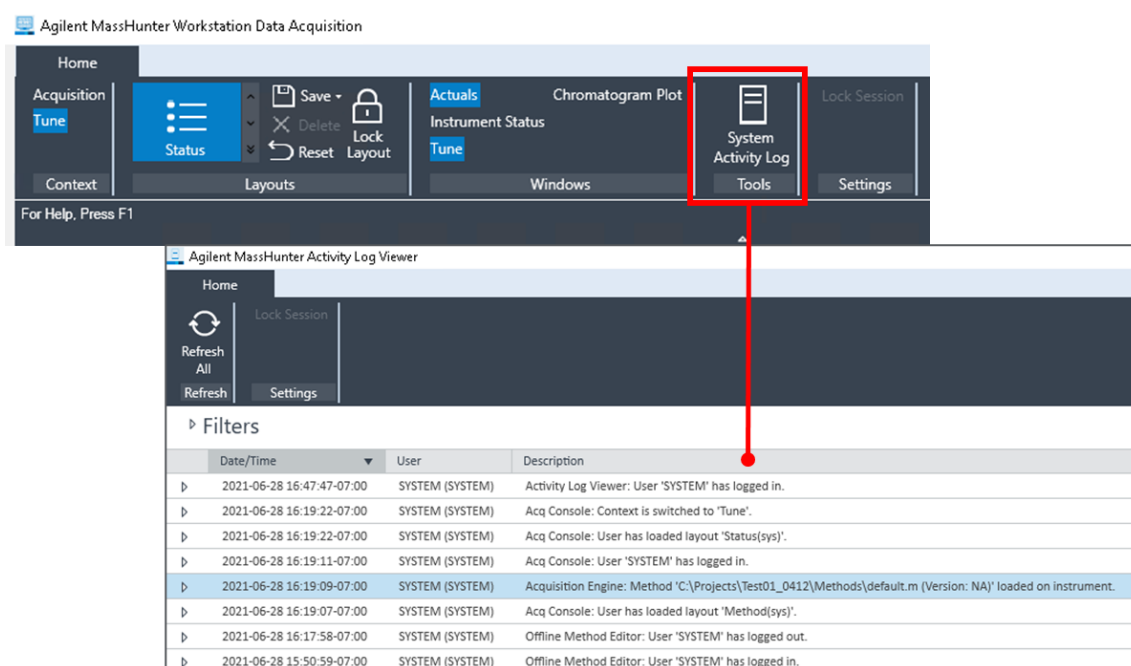


Error Message

Mass Hunter Software จะบอกข้อมูล เกี่ยวกับปัญหาของเครื่องอัตโนมัติ เมื่อมีการตรวจพบ การทำงานผิดปกติที่เกิดขึ้นใน Log book และจะแสดงสถานะเป็นสีแดง

Error

วิธีเปิด Activity Log



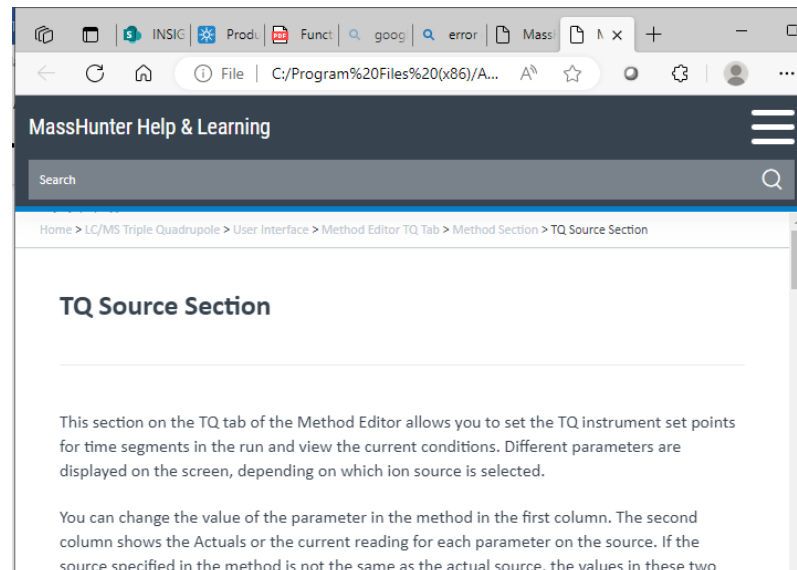
The screenshot shows the Agilent MassHunter Workstation Data Acquisition interface. In the top right corner, the 'System Activity Log' icon is highlighted with a red box. A red arrow points from this icon to the 'Agilent MassHunter Activity Log Viewer' window. The window displays a table of activity logs with columns for Date/Time, User, and Description.

Date/Time	User	Description
2021-06-28 16:47:07:00	SYSTEM (SYSTEM)	Activity Log Viewer: User 'SYSTEM' has logged in.
2021-06-28 16:19:22:07:00	SYSTEM (SYSTEM)	Acq Console: Context is switched to 'Tune'.
2021-06-28 16:19:22:07:00	SYSTEM (SYSTEM)	Acq Console: User has loaded layout 'Status(sys)'.
2021-06-28 16:19:11:07:00	SYSTEM (SYSTEM)	Acq Console: User 'SYSTEM' has logged in.
2021-06-28 16:19:09:07:00	SYSTEM (SYSTEM)	Acquisition Engine: Method 'C:\Projects\Test01_0412\Methods\default.m (Version: NA)' loaded on instrument.
2021-06-28 16:19:07:07:00	SYSTEM (SYSTEM)	Acq Console: User has loaded layout 'Method(sys)'.
2021-06-28 16:17:58:07:00	SYSTEM (SYSTEM)	Offline Method Editor: User 'SYSTEM' has logged out.
2021-06-28 15:50:59:07:00	SYSTEM (SYSTEM)	Offline Method Editor: User 'SYSTEM' has logged in.

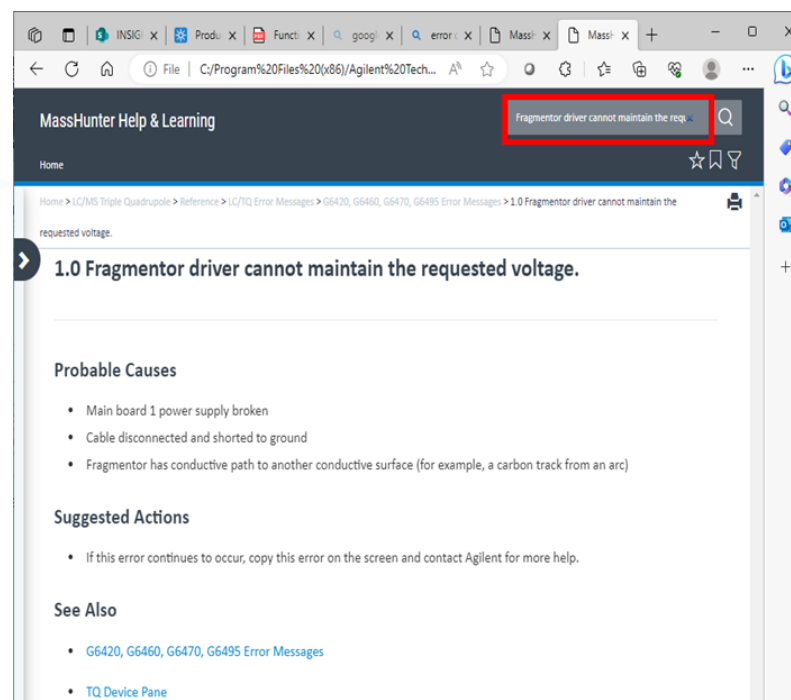
สังเกต วันที่ (Time) , ชนิด (Even Type) , รายละเอียด (Description)

ตัวช่วย (Help)

ใน MassHunter software จะมีวิธีแนะนำการใช้เครื่องมือ และ วิธีการแก้ปัญหาเบื้องต้น โดยกด F1 เพื่อแสดงหน้าต่าง MassHunter Help & Learning ดังแสดง



ในกรณีเครื่องเกิดปัญหาและแสดง error ให้พิมพ์ error ที่เกิดขึ้นในแถบ Search ดังตัวอย่าง ข้างล่าง “Fragmentor driver cannot maintain the requested voltage” software จะแนะนำวิธีแก้ปัญหาเบื้องต้นให้



ตารางการบำรุงรักษาเครื่อง LC-MSD

เวลา	รายละเอียด
ทุกวัน	ตรวจสอบ รายละเอียดใน Method
	ตรวจสอบปริมาณ และระดับความดันของแก๊ส N2
	ตรวจสอบ และ ทำความสะอาด Spray chamber และ nebulizer (Ion source)
	ตรวจสอบ และ ทิ้งสารละลายในขวด waste
ทุกสัปดาห์	ตรวจสอบการรั่วของท่อแก๊ส
	ตรวจสอบน้ำมันในชุดกรองของ rotary pump
ทุกเดือน	ตรวจสอบ ระดับ น้ำมัน และ สีของน้ำมันใน rotary pump
	เปลี่ยน corona needle
	ตรวจสอบ oil mist filter
ทุกหกเดือนถึง หนึ่งปี	ตรวจสอบ และ ทำความสะอาด capillary
	เปลี่ยนน้ำมันใน rotary pump
	เปลี่ยน N2 gas filter
ทุกหนึ่งปี	เปลี่ยน oil mist filter
	ตรวจสอบ และ ทำความสะอาด skimer
ตามต้องการ	ตรวจสอบ และ ทำความสะอาด HED dinode
	เปลี่ยน electron multiplier

หมายเหตุ: ตารางนี้ออกแบบให้เหมาะสมกับลักษณะงาน ที่เปิดใช้งานเป็นประจำทุกวัน ลูกค้าสามารถที่จะปรับให้สอดคล้องกับงานของตนได้

การทำความสะอาด Spray chamber แบบทุกวัน

1. ให้เครื่อง LC/MSD QQQ อยู่ในสถานะ Standby mode
2. เปิด spray chamber



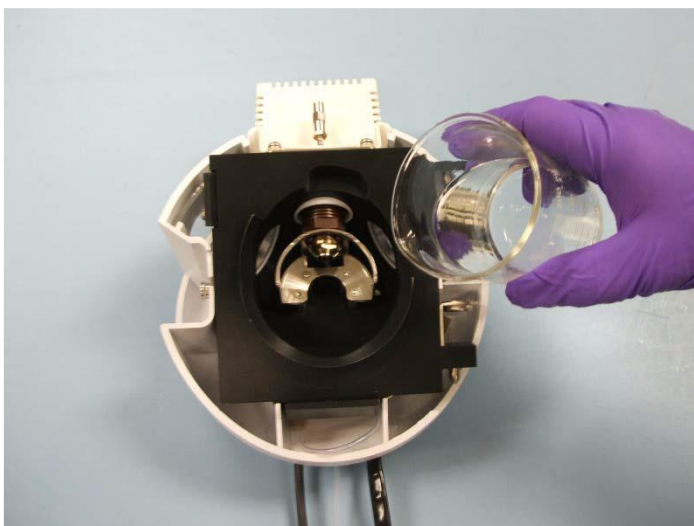
3. ถอด electro spray nebulizer
4. เช็ด spray shield ด้วยผ้า lint-free cloth ชุบ IPA ผสม น้ำ
5. ทำความสะอาด (rinse) ด้วย IPA ผสม น้ำ



6. อย่าฉีด IPA ผสม น้ำ เข้าตรง capillary
7. ใส่ electro spray nebulizer
8. ปิด spray chamber

การทำความสะอาด Spray chamber แบบสปัดหัว

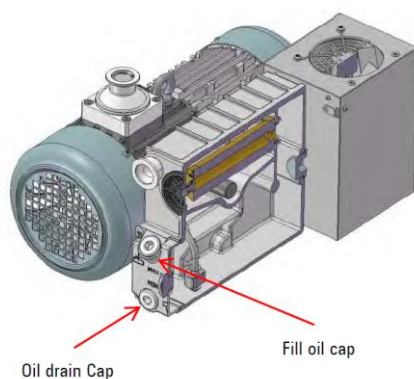
1. ให้เครื่อง LC/MS QQQ อยู่ในสถานะ Standby mode
2. ถอด electro spray nebulizer
3. ถอด spray chamber
4. ถอด spray shield และ stainless parts
5. ใส่ spray chamber ด้วย IPA ผสม น้ำ



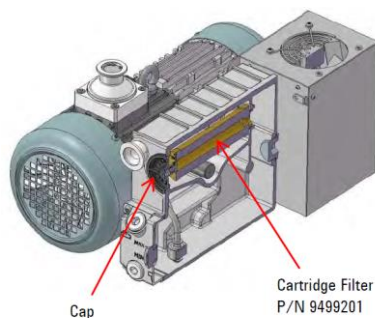
6. เช็ด spray chamber ด้วยผ้า lint-free cloth หรือ cotton swab ชุบ IPA ผสม น้ำ
7. ทำความสะอาด (rinse) ด้วย IPA ผสม น้ำ
8. ใช้กระดาษทรายสีเทา 4000 หรือ 8000 grit ขัด spray shield และ stainless parts
9. ล้างด้วยน้ำสะอาด และ sonicate ด้วย IPA ผสม น้ำ
10. ประกอบ spray shield และ stainless parts
11. ประกอบ spray chamber
12. ปิด spray chamber

การเปลี่ยน น้ำมัน Rough pump (สำหรับรุ่น MS40+)

1. ปิด LCMS-QQQ คู่มือปิดในคู่มือการใช้เครื่อง
2. รอจน Rough pump เย็นตัวลง
3. ถอด Oil drain Cap และ Fill oil cap ออก ให้น้ำมันไหลออกให้หมด



4. ปิด Oil drain Cap และเติมน้ำมัน จนเกือบเต็มระดับ maximum (ห้ามเกิน)
5. ปิด Fill oil cap ด้านบน
6. ถอดเปลี่ยน Air filter



7. เปิด LC/MSD QQQ คู่มือเปิดในคู่มือการใช้เครื่อง

