新手快速入门之如何使用 CDS 软件编辑 LCMS 采集方法?

刘炜

(富美实(上海)化学技术有限公司,上海 200000)

上一节我们学习了如何在 CDS 软件中进行 GCMS 方法参数的编辑,本节中主要学习 如何进行 LCMS 采集方法编辑。LCMS 是由 HPLC 和 MS 两个部分组成,因此参数编辑也 是独立的,HPLC 采集方法设置在之前的章节中已经介绍过,这里就不再叙述,有需要了 解的小伙伴可移步该系列之前发布的文章。

1 点击 Aq 界面上方菜单栏方法 Method, 进入方法参数编辑页面



3一开始进入属性界面

在该界面只有一处可编辑,那就是描述栏,HPLC 参数界面没有柱子信息这一模块,因此除了在这个框内你可以备注一些该方法的注意事项,还可以备注液相色谱柱的尺寸,型号等等。

Acquisition Method – Untitled 🗗 🗗 🗠 🕒 🗘 🕁 🖅		
General Location	Versi	on Show Audit Trail
Properties Description		
▲ Instrument Setup		
SQ. Quat-Pump		
Sampler		
Column Comp.		
DAD		

4 质谱采集参数设置

主要分为两部分,分别是全扫描监测(Scan)和选择离子监测(SIM)。在全扫描模式下,需要进行扫描范围设置,比如设置 100~1000,那 m/z 在这个范围内的所有物质都会

被检测,最后出来的图谱上会有很多峰。同时在 SCAN 模式下可以进样正离子模式扫描和 负离子模式扫描,选择哪种模式根据化合物的性质,比如碱性物质一般选择正离子模式, 流动相中加入甲酸/乙酸;酸性物质一般用负离子模式,流动相中加入甲酸铵或者乙酸铵。 如果你对化合物一无所知,那可以两种模式同时进行扫描,哪种模式下化合物响应高,出 峰好,那就选择这种模式。

łĥ¤e+ (5	⊥⊥ ≞-														
General Properties	•	Method Acquisition Source	Ion	source Time filter v	ESI vindow (m	nin)	 ESI 0.07 		Stop time) As pump/N) Limit (min)	limit	Tune	file atun Fast scan	es.tune	~	
SQ Quat. Pump Sampler	ŀ	Chromatograms Timetable Tune	Ac	quisitio	n Para	ime	eters	F) (î								
Column Comp. DAD				Time 🔺	Scan typ	e 🔺	Polarity	Compound/ nan	Segment	Mass range start (m/z)	Mass range end (m/z)	Scan/Dwell time (ms)	Detector gain factor	Frag (V)	Threshold	
			►		Scan	•	Positive 🔻			100	700	500	1	100	0	
					Scan	•	Negative 🝷			100	300	500	1	100	0	7,
				Targeted po	ints per se	econd	(Hz) 1		Step si	ize 0.1						
			Esti	mated cycle	time (ms/	cycle)	1008		Data st	torage Cent	roid ¥					
			Esti	mated max s	can speed	(Da/s	s) 1200		SIM %	0					Ľ	

在 Time filter window 时间过滤窗口中,默认是 0.02,可以不用改动。Mass range (m/z) 范围根据所作化合物分子量来设定,将其包括在内即可,但要考虑是否会出现 2M+1 的情况,范围可以设宽一点。扫描时间 scan time,默认 500ms。Frag 裂解电压值初始 70V,建议默认。

5 在离子源参数设置中

需要对干燥气温度、干燥气流速、雾化器压力以及毛细管电压进行设置,在设置的时候需要根据实际走样情况来进行微调优化,这里没有一个固定的值,需要自己去判断优化, 当然也可以直接使用默认值进行分析。

귀엽요 뛰	∄⊥⊥ ≞∙		r							
General Properties Instrument Setup	 Method Acquisition Source 	Ion source ESI v Time filter window (min)	ESI 0.07	Stop time As	pump/No limit nit (min)	Tune file	atunes.tune	v		
SQ Quat. Pump Sampler Column Comp.	Chromatograms Timetable I Tune	Source Parameters	Setpoint	Actuals		F	Positive Setpoint	Negative Setpoint	Actuals	
DAD		Gas Temperature (°C)	350	300	Capillary Voltage (V)	[4000	3500		
		Gas Flow (L/min)	11.0	11	Capillary Current (nA)				5142	
		Nebulizer (psi)	25	15	Chamber Current (µA)				0.14	

6 时间表设置

在这里可以自由设置时间来控制质谱切换阀的流路位置,这个功能的好处就是可以根据化合物出峰保留时间,将容易污染仪器的组分切到废液流路中来降低质谱被污染的概率, 比如溶剂峰,在 GCMS 中我们常常设置溶剂延迟时间,那么在 LCMS 中,我们通过这个功能也相当于设置了一些溶剂延迟时间。

	≞ ⊥⊥ Æ•	
 General Properties Instrument Setup 	 Method Acquisition Source 	Ion source ESI Stop time As pump/No limit Tune file atunes.tune Image: Time filter window (min) 0.07 O Limit (min) 1 Fast scan
SQ Chromatograms Timetable Sampler Column Comp. DAD	Timetable	
	0 Diverter ▼ To MS ▼ Post-run diverter position To MS ▼	

文中未提到的部分基本上都是默认参数,也不需要我们做什么调整,以上这些模块中的方法参数都设置完成后,选择另存为方法,在弹出的对话框内选择保存路径并输入方法 名称即可。本节内容到此结束,以上内容均出自个人经验,叙述不全或者有误的地方还请 各位老师给予纠正与补充。下一节内容介绍如何使用 CDS 软件编辑序列来进行样品运行。