Agilent GC 和 GC/MSD 系统的 MSD Productivity 化学工作站

产品简介

Agilent MSD Productivity 化学工作站是 32 位集成的 GC/MS 软件，具有与 GC/MS 数据采集、数据分析和编制报告有关的各项功能。MSD Productivity 化学工作站软件操作系统为 Windows® 2000 和 Windows XP®，它可控制多台 GC/MS 和 GC，并具有如下功能：

- 仪器集成控制（包括 GC、MSD、自动进样器和顶空进样器）
- 数据分析（包括 GC、MS 和 GC-MS 数据）
- 集成自动控制
- 电子方法
- AutoSIM 和同步 SIM/Scan 功能
- 自定义用户报告
- 宏程序
- 用户自定义安全性能
- 软件认证工具

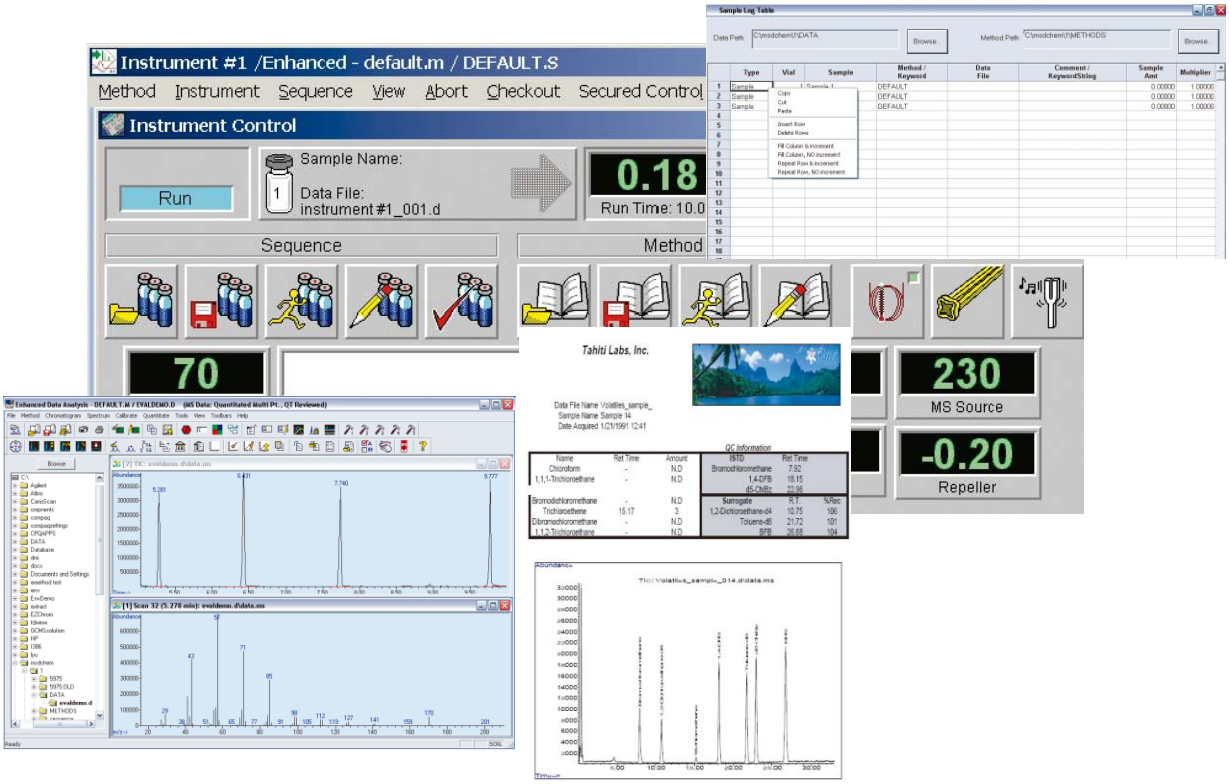


图 1.　MSD Productivity 化学工作站集多个应用软件于一体 — 从样品导入到最终报告 — 软件操作充分满足应用的需要

Agilent Technologies

多仪器、多用户操作

MSD 化学工作站软件最多可支持 4 台仪器（最多 2 台 MSD），也适用于多用户实验室，可自定义实验室主管和操作者的作业级别，使方法得到安全保护以防被修改。

集成自动控制

该软件可实现自动化和高效运行。它可以置入实验室信息管理系统（LIMS）样品列表，以建立自动进样器的进样序列，自动预运行和后运行步骤简化了数据评价和检查步骤。建立的自定义用户报告能够与方法一起，加载到 LIMS 系统。专业用户可使用宏程序语言自动处理、改变菜单选项或优化其它用户自定义选项。

电子方法（eMethod）

eMethods 是电子方法的简称—是一种从安捷伦获得成套的应用方法或用户共享和传送自己的应用方法的便捷途径（参见图 2）。

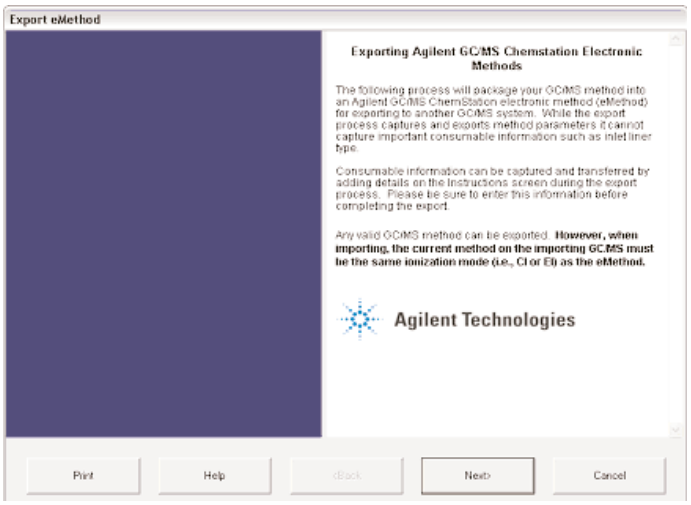


图 2.　eMethod 能够大大提高实验室效率

eMethod 能够很方便地将方法打包，在 Agilent 5973 系列和 5975 inert MSD 仪器之间转移方法。

还可以从安捷伦网站上下载新的安捷伦电子方法，置入到您的安捷伦 5975 inert MSD 或 5973 系列 MSD 上，并接收整个方法而不会出现任何手动编辑错误。

选择离子检测（SIM）的自动设置

手动设置复杂的 SIM 方法很麻烦，每个化合物的保留时间（RT）和选择离子都要逐一输入。

AutoSIM 的设置简化了这一过程，它建立的 SIM 方法包括保留时间、选择离子和由标样给定的选择离子丰度比率等各项参数（见图 4）。

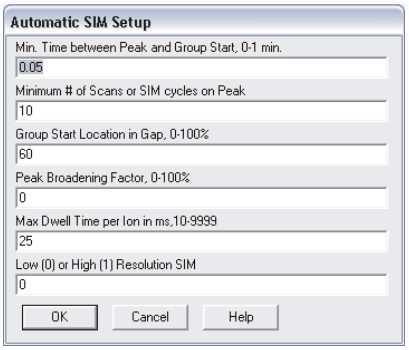


图 4.　AutoSIM 设置自动将从任一现有的全扫描方法创建 SIM 方法

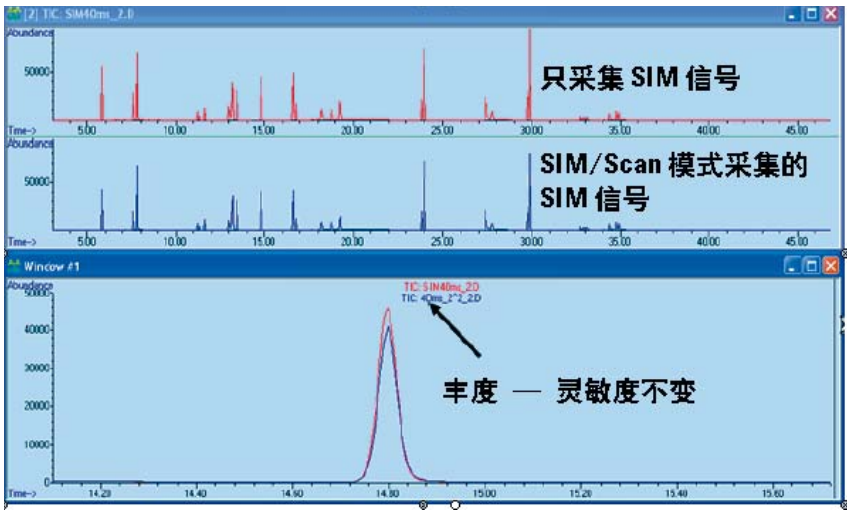


图 3.　同步 SIM/Scan 模式在单独一次运行中同步采集选择离子和全扫描（SIM/Scan）数据

同步 SIM/Scan

同步 SIM/Scan 功能是在一次运行中可同步采集选择离子检测/全扫描（SIM/Scan）数据的采集模式（见图 3）。

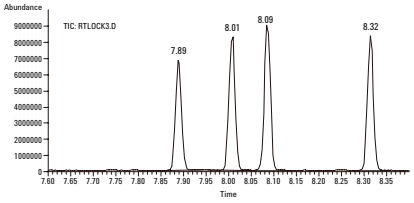
安捷伦的同步 SIM/Scan 模式使 SIM 和全扫描通过一次进样即可完成，提高了工作效率。

保留时间锁定（RTL）

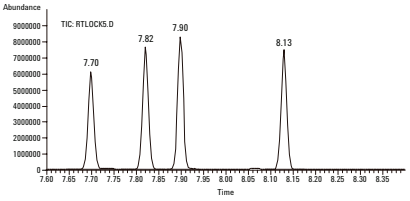
RTL 方法可保持保留时间不变，因此在仪器维护后或向另一台仪器传送方法时不用再编辑方法的保留时间。

通过调整进样口压力，使给定系统的保留时间与另一系统完全吻合。由图可见当色谱柱改变后保留时间的飘移可以调整。

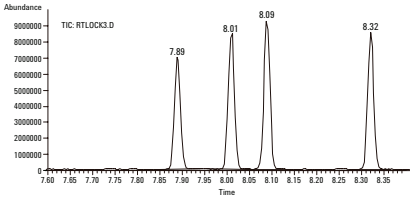
色谱柱截取前



色谱柱截取后



RTL 重新锁定后



结果筛选器

保留时间锁定可以在数据库中筛选大量化合物，不必对照光谱库查询每个峰。采用保留时间和特征光谱同时定性，使定性准确度更高。

校准表的自动设置（AutoQuant Setup）

用户只需略微了解一些软件知识，进一针标样，即可通过 AutoQuant Setup 快速建立 GC/MS 校准表（见图 5）。

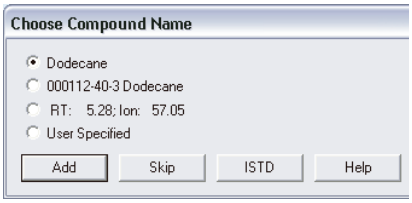


图 5. AutoQuant Setup 快速建立 GC/MS 校准表

药物分析模式中的智能排序功能

在滥用药物测试中，强大的质量控制程序包括对校准、色谱和光谱结果进行检查。MSD Productivity 化学工作站软件能够自动进行这些检查工作，并自动改变自动进样序列。

四种应用模式：增强模式、EnviroQuant、DrugQuant、汽油中的芳烃（AIG）

安捷伦 Productivity 化学工作站能够配置四种模式：增强定量、EnviroQuant、DrugQuant、检测汽油中的芳烃（AIG），每一种模式都会对应这些应用生成附加的记录或报告。

中文和日文版

除了英文版外，增强模式的 MSD Productivity 化学工作站软件和在线帮助以及硬件和软件手册都有日文版和简体中文版。

法规遵循

该软件满足不同应用领域的分析效率和法规要求。药物测试实验室可以基于先前的进样结果实行智能排序，实现自动进样。制药分析实验室可以添加 21 CFR Part 11 法规遵循软件包（Agilent MSD Security 化学工作站，G1732AA）和安装验证（IQ）/操作认证（OQ）服务。环境分析实验室可以使用自动调谐满足 DFTPP/BFB 指标、单一样品和多样品质控报告。使用可控制 GC 和 GC/MS 单个软件简化实验室操作，降低成本。

系统要求

MSD Productivity 化学工作站支持以 LAN 连接的 5973/5975 系列 MSD 和 6850/6890 GC、以 GPIB 卡连接的 5973A MSD 和 6890A GC、7683 系列自动进样器，以及 G1888 网络化顶空进样器。

PC 机的最低要求：Pentium® Ⅲ 计算机 1.0 GHZ 或更高，128 MB 内存，20 GB 硬盘，光驱，SVGA 彩色显示器，声卡和喇叭或耳机（用于观看 AVI 文件），鼠标。

支持的操作系统：Windows® 2000 专业版 SP4 和 Windows XP 专业版 SP2。

环境应用

- 自动调谐，符合 DFTPP/BFB 的要求
- 农药和内分泌干扰物保留时间锁定（RTL）谱图和保留时间（RT）数据库
- 多环芳烃（PAH）保留时间锁定（RTL）谱图和保留时间（RT）数据库
- 挥发性有机化合物（VOC）保留时间锁定（RTL）谱图和保留时间（RT）数据库
- 多氯联苯（PCB）同系物保留时间锁定（RTL）谱图和保留时间（RT）数据库
- 类似美国环保署（USEPA）CLP 报告，包括初步鉴定化合物、多样品、加标和其它质控报告

食品应用

- 脂肪酸甲酯（FAME）保留时间锁定（RTL）谱图和保留时间（RT）数据库
- 香料保留时间锁定（RTL）谱图和保留时间（RT）数据库
- 农药和内分泌干扰物保留时间锁定（RTL）谱图和保留时间（RT）数据库

滥用药物/法医应用

- 法医毒理学保留时间锁定（RTL）谱图和保留时间（RT）数据库
- 智能排序

石化应用

- 用 ASTM-D5769-95 法进行重整汽油分析

制药应用

- 基于浓度的加权校正
- 可选择 21 CFR Part 11 法规遵循软件（Agilent MSD Security 化学工作站，G1732AA）
- 可选择安装验证（IQ）/操作认证（OQ）/性能验证（PV）服务

仪器控制

- 可控制最多 4 台仪器（最多 2 台 MSD）
- 同时连接到使用 LAN 和 GP-IB 的仪器上
- 自动调谐，满足 EI、PCI、NCI、DFTPP、BFB 要求，达到最大灵敏度
- 从 LIMS 下载样品表
- 支持条码识别
- 预运行和后运行宏可以成为序列的一部分

定性分析

- 峰纯度软件能够检测重叠峰
- 带有 NIST 检索的 PBM 检索运算法（可选）
- 可选谱库包括 NIST05、Wiley 7th、PMW 药物和 Stan 农药库
- 分子结构（可选）
- 农药和内分泌干扰物的保留时间（RT）和谱图数据库（可选）

定量分析

- 达到 2000 个化合物以上
- 二十个校正水平
- GC-优化和 MS-优化积分仪
- 多种校正曲线拟合类型：线性、二次曲线、平均响应因子、权重
- 定量编辑器在一个显示屏上显示 EIC、谱图及定量结果。

自动化设置

- eMethod
- AutoSIM 设置
- AutoQuant 设置
- RTL

用户自定义

- 主要仪器读数的屏幕监视窗口
- 下拉菜单项目
- 进样器和其它项目的维护提示
- 自定义用户报告包括文本和图谱
- 用宏程序语言实现自动控制

用户帮助

- 英文、日文和简体中文版的在线帮助和手册
- 维护录像和手册
- 网站上可下载软件补丁

可选软件

解卷积报告软件（G1716AA） 应用于目标化合物分析，将 AgieInt MSD Productivity 化学工作站、NIST AMDIS_32 和 NIST 质谱检索程序的运行结果综合起来，给出一份简明报告。

用于 MSD（G2923AA）的顶空控制软件 通过 MSD Productivity 化学工作站提供顶空进样的集成软件控制

MSD Security 化学工作站（G1732AA） 对于遵循 FDA 21 CFR Part 11 的实验室，该软件系统保护实验室的数据采集、数据处理和产生 GC/MS 数据报告的安全性。

如需详细信息

如需了解有关我们的产品和服务的详细信息，请访问我们的网站：www.agilent.com/chem/cn。

Pentium® 是 Intel 公司的美国注册商标。
Windows® 是 Microsoft 公司的美国注册商标。

安捷伦对于本文中的错误或与设备、性能或本品的使用有关的意外损坏或由此造成的损坏不负任何责任。

本出版物的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技公司版权所有，2005

中国印刷
2005 年 9 月 8 日
5989-3014CHCN