



四極桿式質譜儀
與 TargetLynx 定量軟體
操作手冊

目錄

I.	建立專案資料夾 Project 與樣品清單(Sample List)	2
1.	建立專案資料夾 Project	2
2.	建立樣品清單 Sample List	5
II.	切換專案資料夾 Project 與樣品清單(Sample List)	9
1.	切換專案資料夾 Project	9
2.	切換樣品清單 Sample List	12
III.	樣品分析	14
1.	建立儀器方法	14
2.	準備質譜儀系統-MS Tune	15
3.	平衡液相層析系統-Inlet	19
4.	編輯樣品清單	23
5.	執行樣品清單	28
IV.	數據處理	30
1.	建立定量數據處理方法-TargetLynx	30
2.	數據處理	38
3.	閱覽數據	39
V.	列印報告	44
1.	編輯報告格式	44
2.	輸出報告	46
VI.	附錄一、儀器方法設定	48
1.	Inlet File – 泵浦設定	48
2.	Inlet File – 自動注射器設定	51
3.	Inlet File – 管柱設定	54
4.	MS File –質譜儀紀錄模式設定	56
5.	MS Tune File –離子化介面設定	62
VII.	附錄二、數據處理方法設定	63
1.	層析峰命名設定	63
2.	檢量線設定	63
3.	層析峰積分設定	65
4.	定量與定性離子對設定	66
5.	法規閾值設定	67

I. 建立專案資料夾 Project 與樣品清單(Sample List)

1. 登入並建立專案資料夾 Project



A. 執行 MassLynx 軟體。

B. 輸入使用者的帳號與密碼

The image shows the "MassLynx Login" dialog box. It has a blue header with the "Waters Laboratory Informatics" logo and a background image of a molecular structure. The main area is white and contains the following fields: "Logon Name" with the value "GLPuser", "Password" with masked characters, "Domain" with the value "MM2737", and "Role" with the value "Regulated". There are "OK" and "Cancel" buttons on the right.

MassLynx Login

Waters Laboratory Informatics

Type a logon name and password to log in.

Logon Name: GLPuser

Password: ●●●●●●

Domain: MM2737

Role: Regulated

OK

Cancel

C. 登入後跳出提示畫面

The image shows the "Group Warning" dialog box. It has a blue header with the text "Group Warning". The main area is white and contains an information icon (a lowercase 'i' in a circle) followed by the text "WARNING" and "You must adhere to SOP 23456.". There is an "OK" button at the bottom.

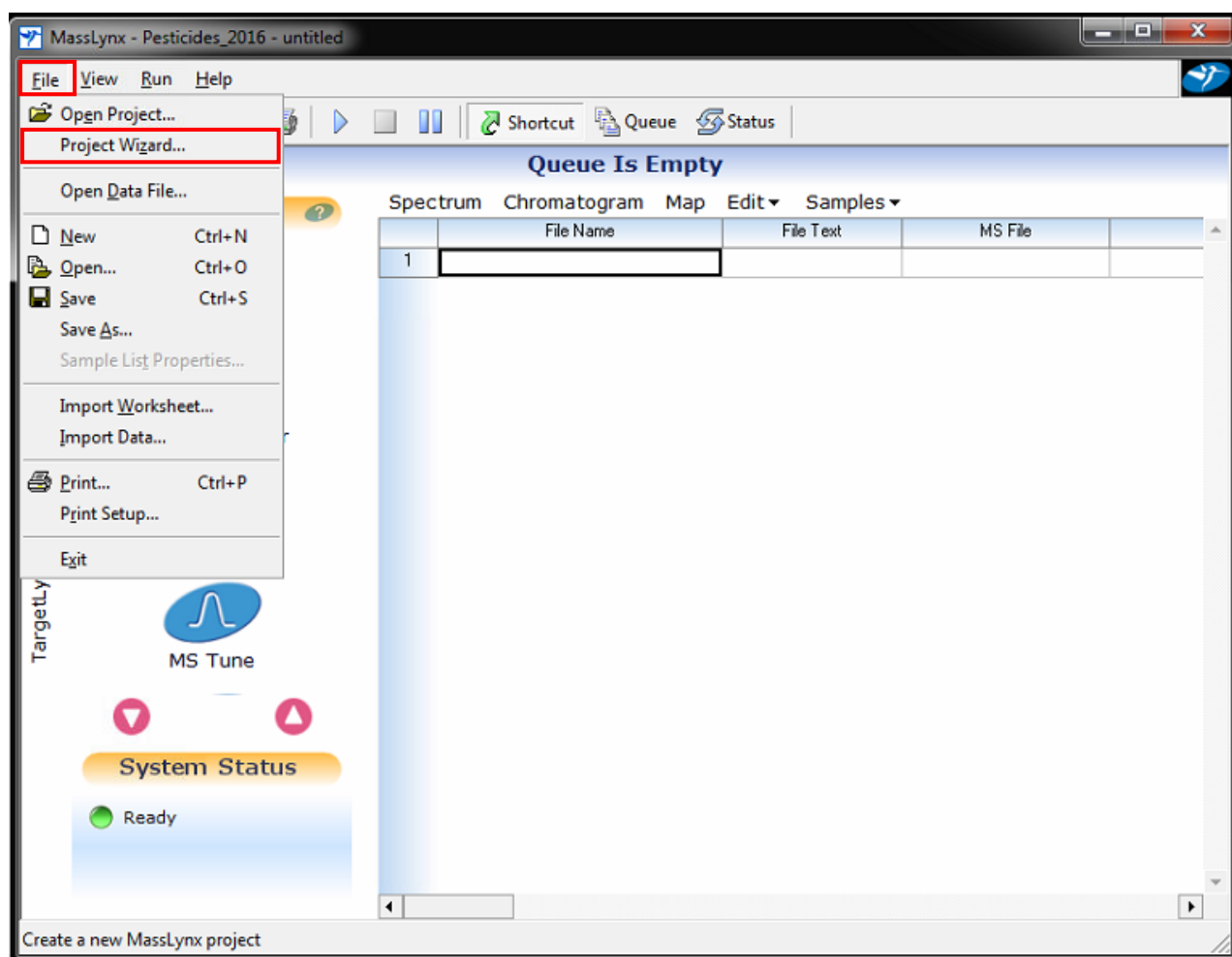
Group Warning

WARNING

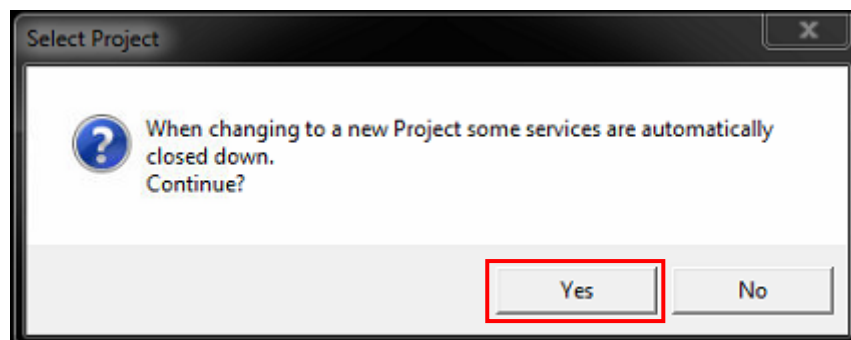
You must adhere to SOP 23456.

OK

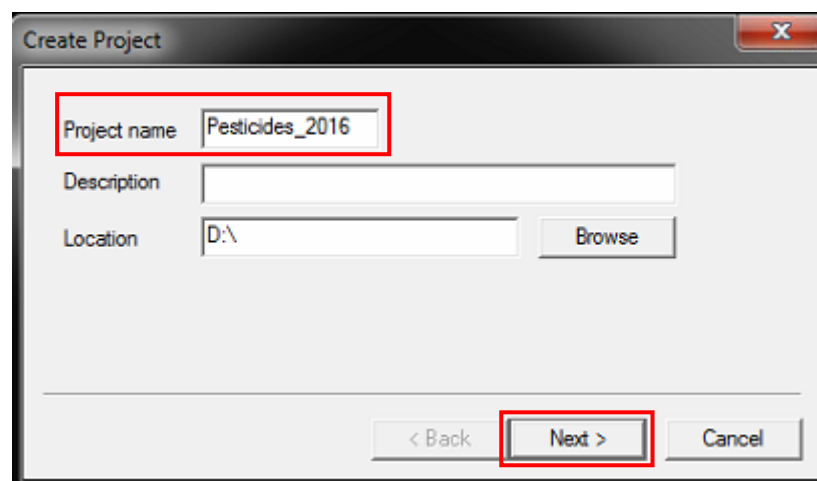
D. 選擇 File > Project Wizard 。



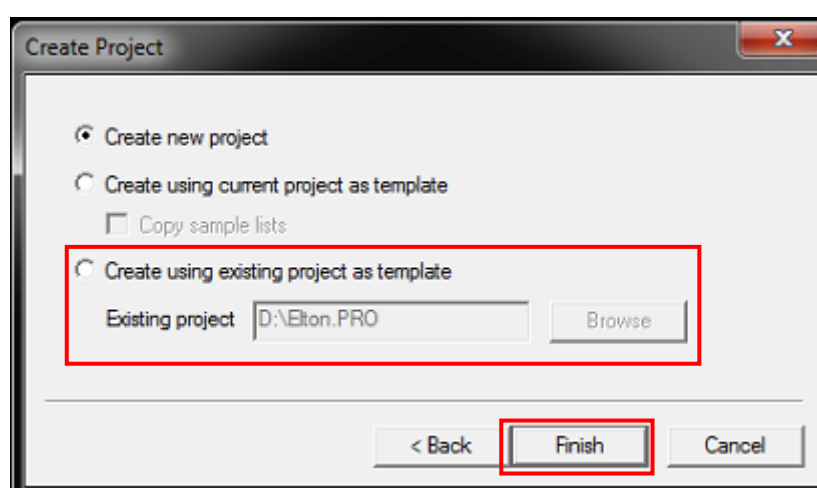
E. 按下 Yes



F. 在 Project name 輸入專案資料夾名稱後，按下 Next

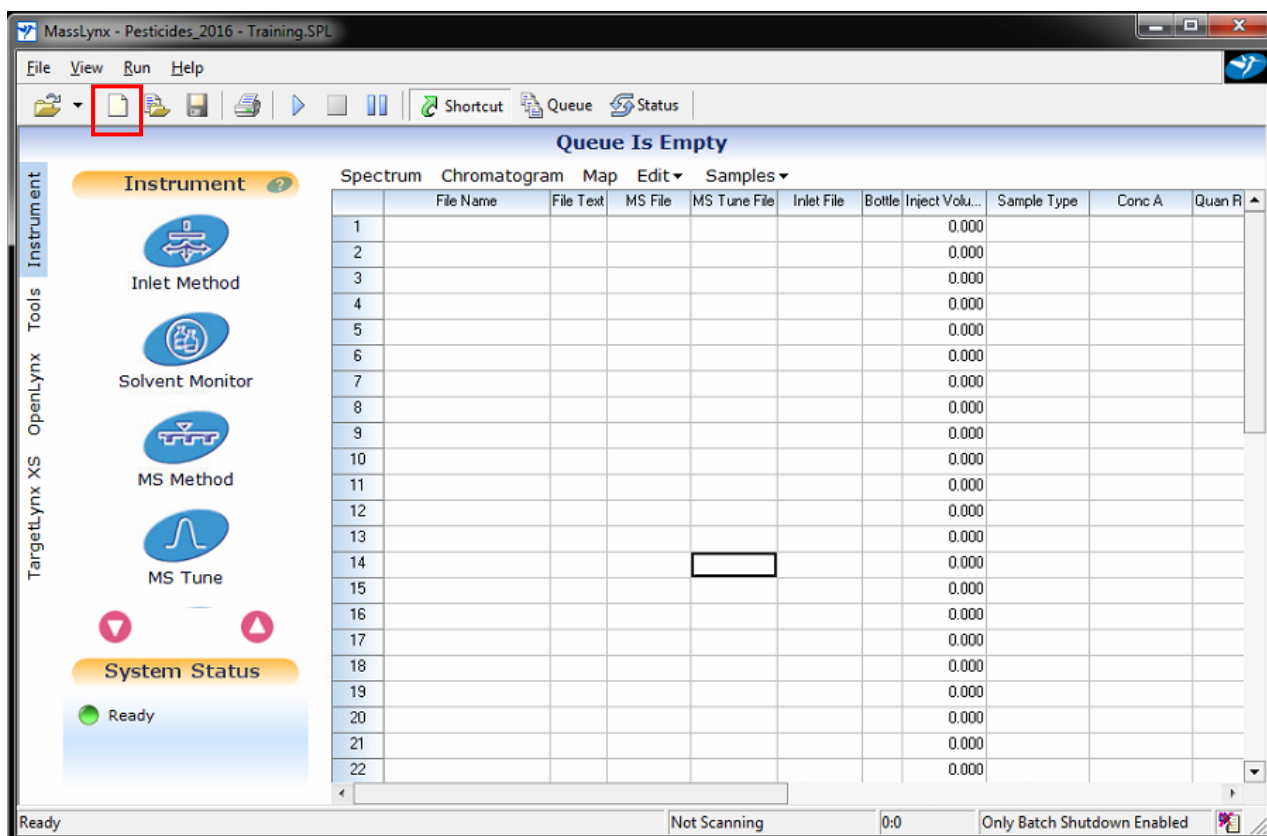


G. 選擇 Create use the **default** project as template，按下 Finish.

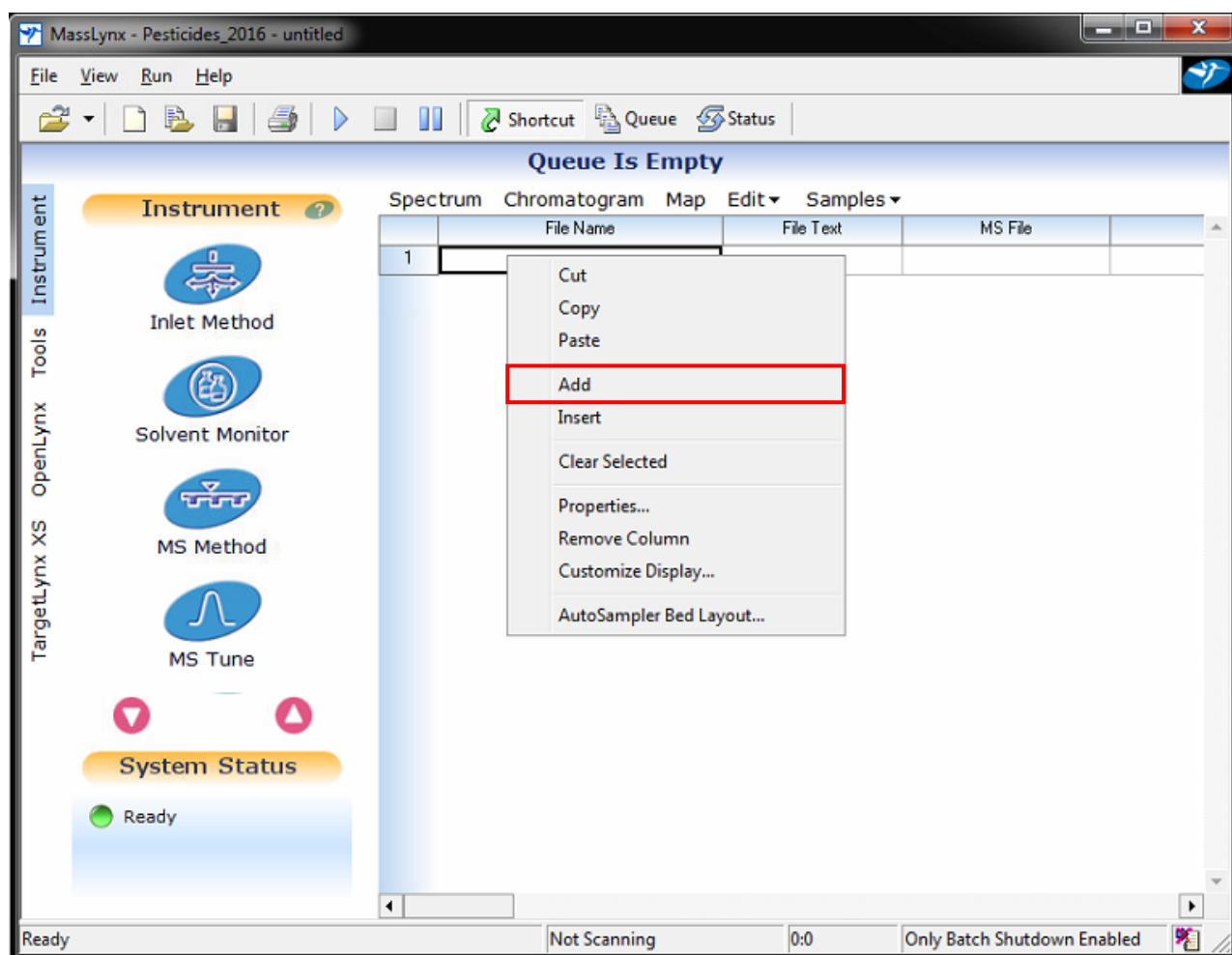


2. 建立樣品清單 Sample List

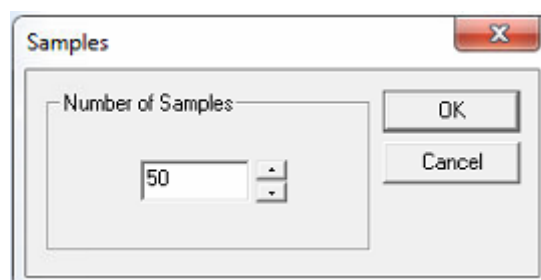
A. 按下  按鈕，建立新的樣品清單。



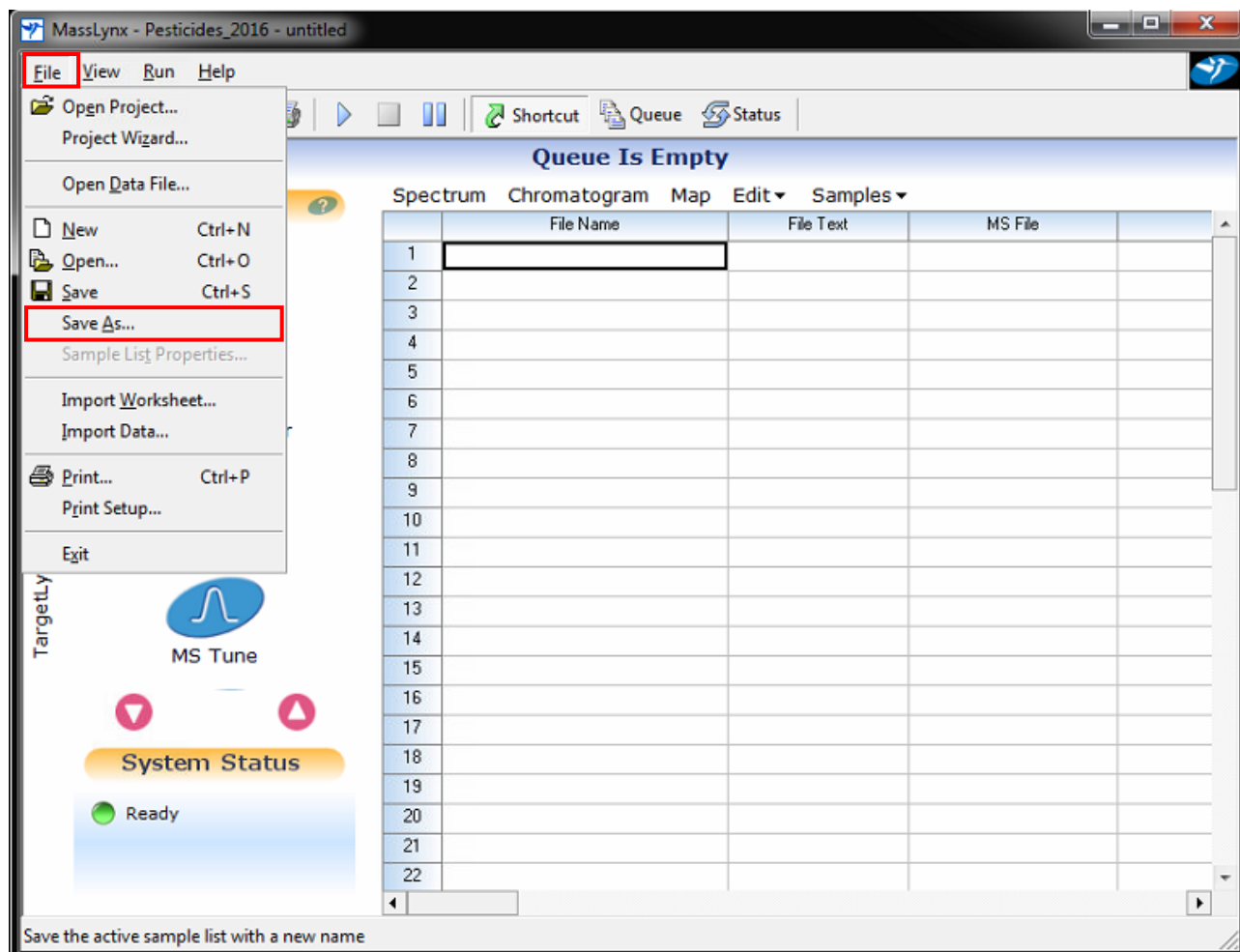
B. 在表格空白欄位處，按下滑鼠右鍵，選擇 Add。



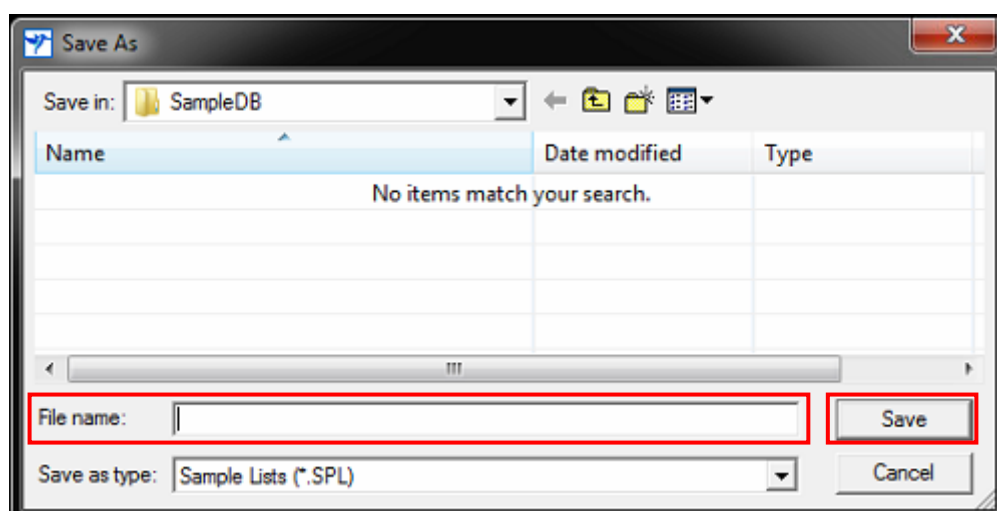
C. 輸入想增加的 Sample List 表格列數，按下 OK。



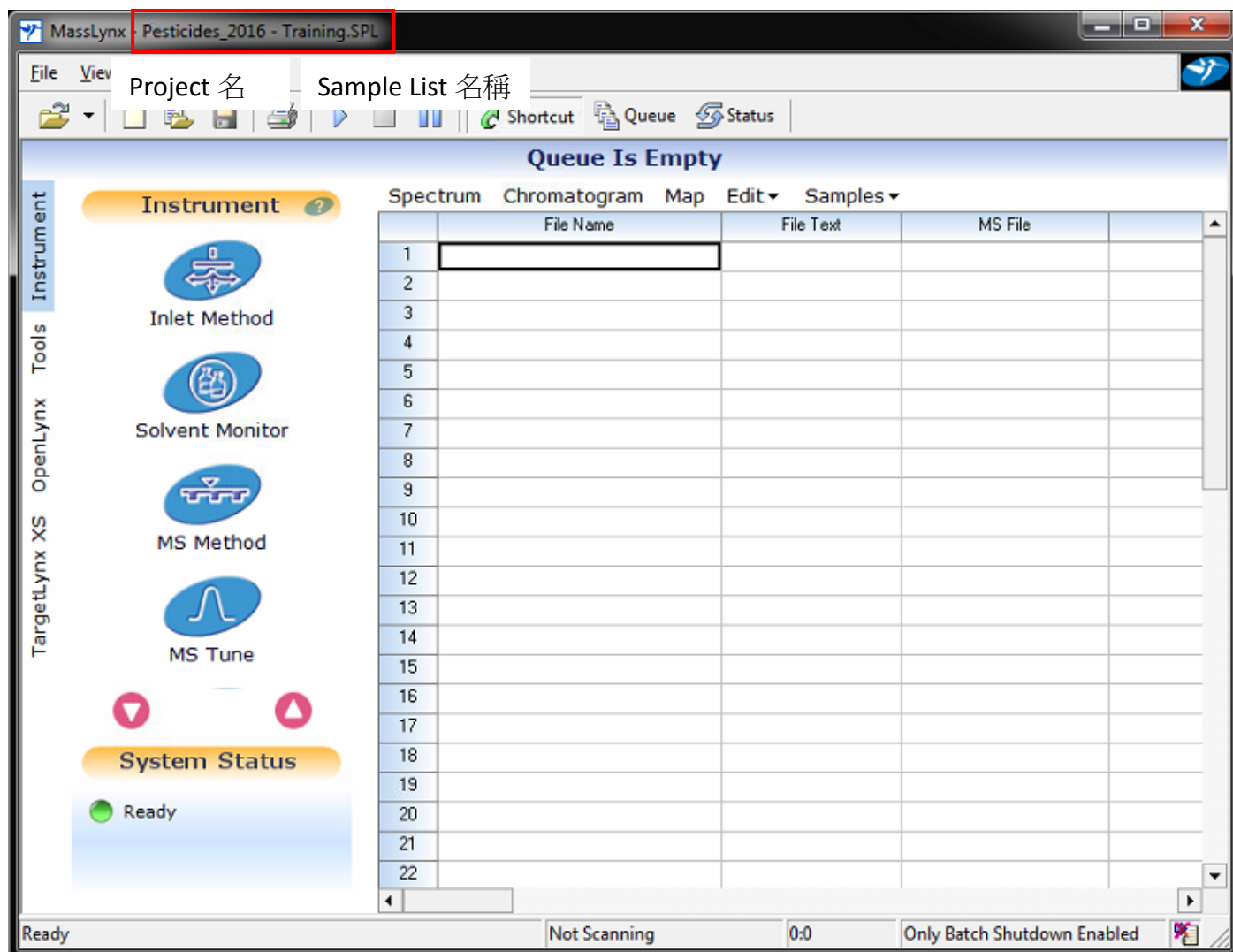
D. 選擇 File > Save as，以儲存樣品清單名稱。



E. 輸入樣品清單名稱後，按下 Save。



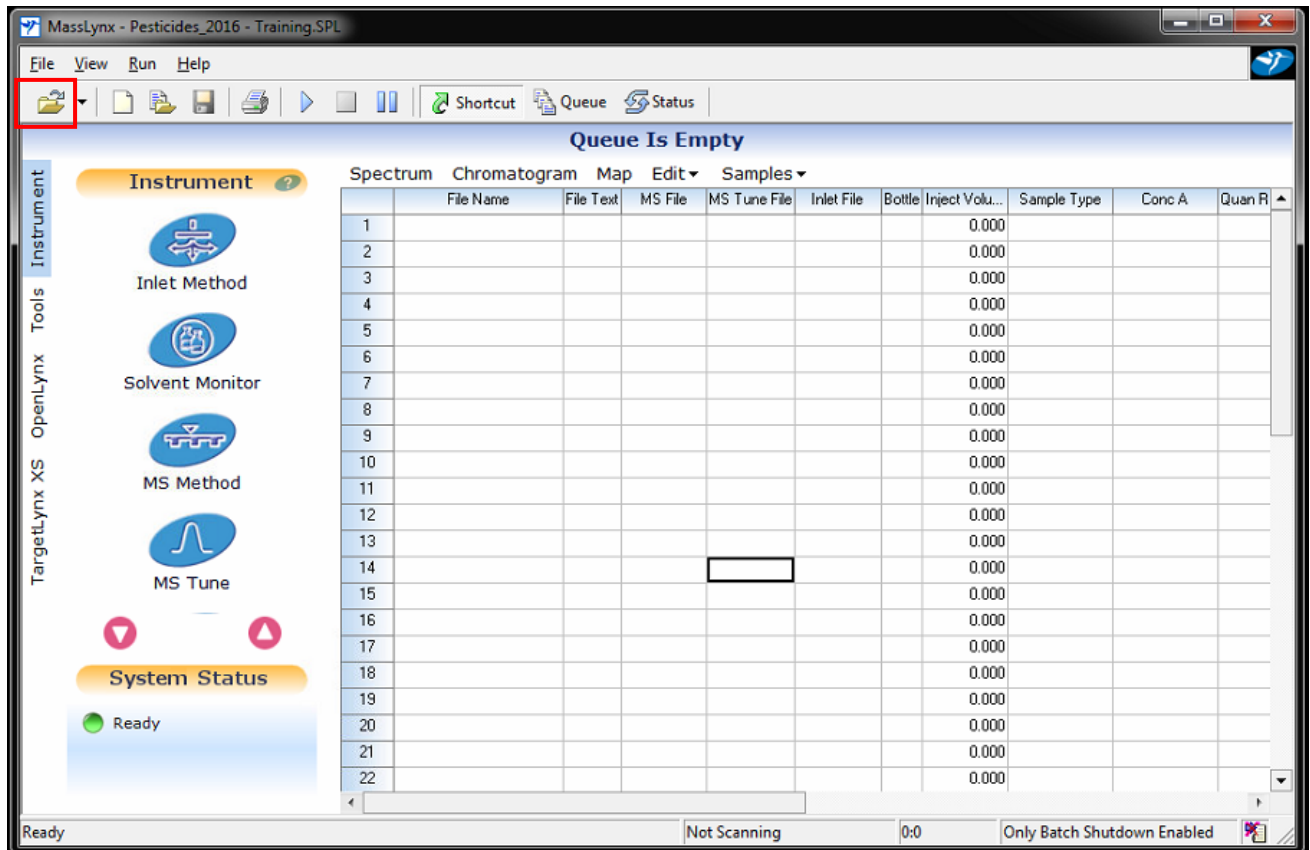
F. 視窗上出現 Project 與 Sample List 名稱即建立完成。



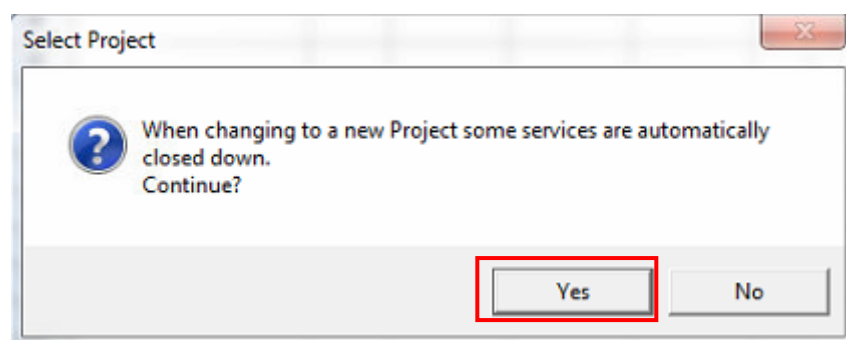
II. 切換專案資料夾 Project 與樣品清單(Sample List)

1. 切換專案資料夾 Project

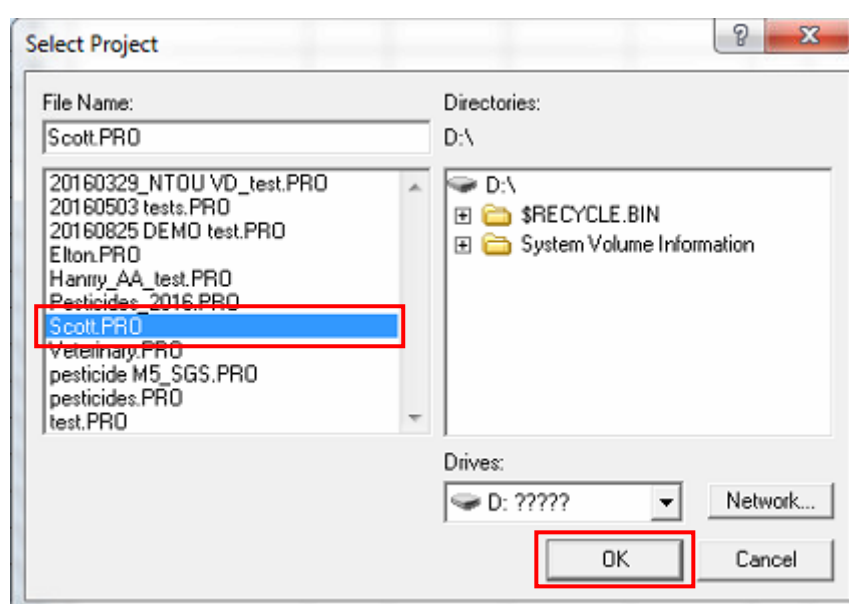
A. 點選  按鈕。



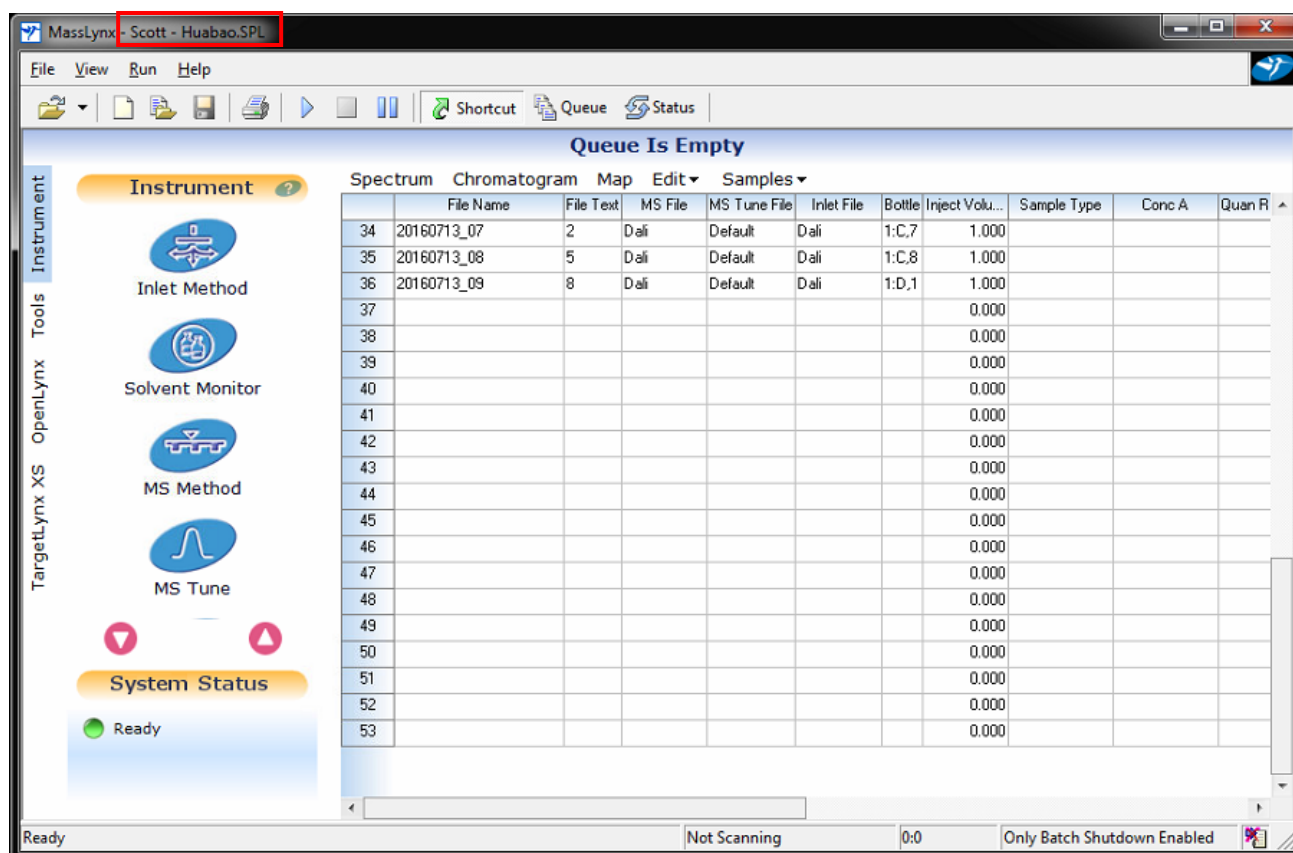
B. 按下 Yes 。



C. 在左側選擇專案資料夾，按下 OK 。

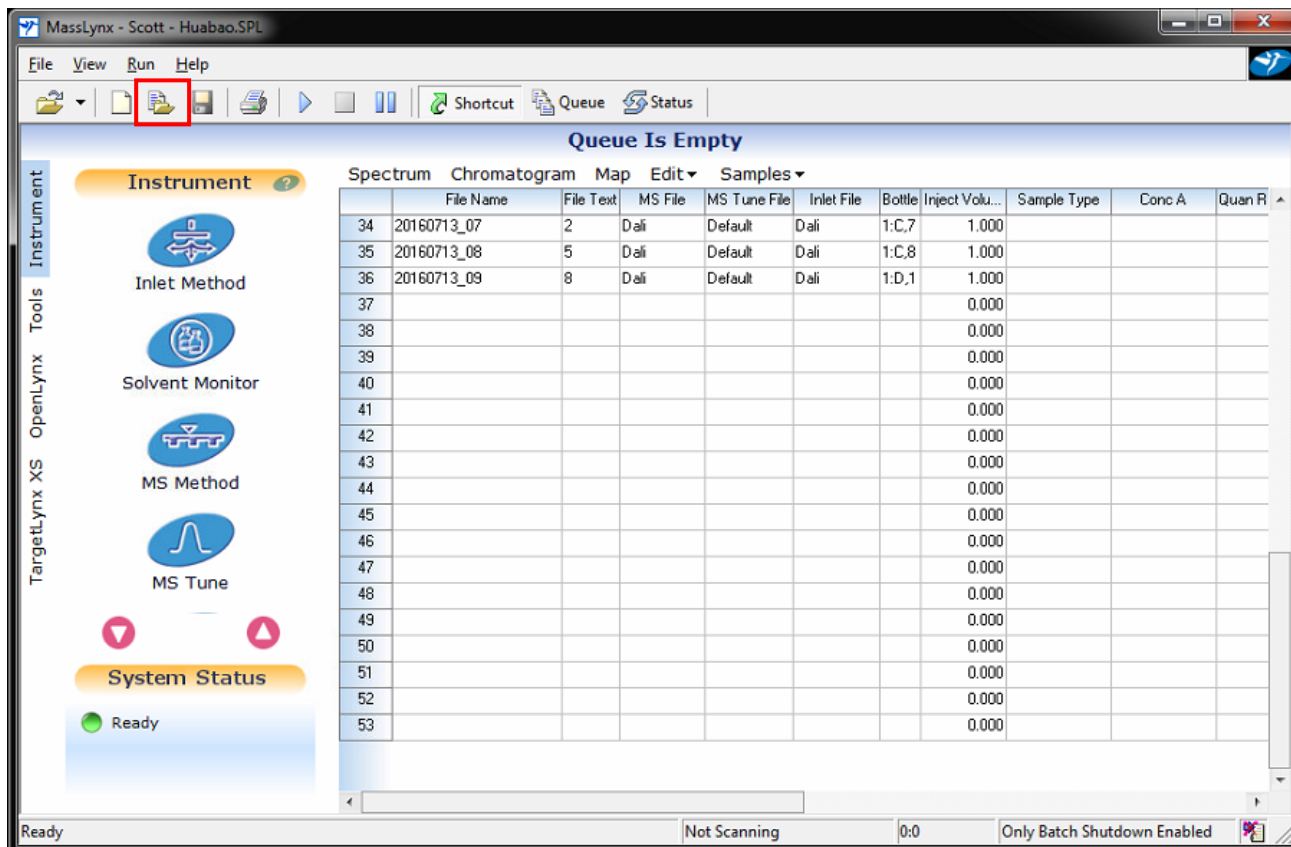


D. 軟體開啟專案資料夾後，會自動開啟此資料夾最後一次執行的樣品清單。

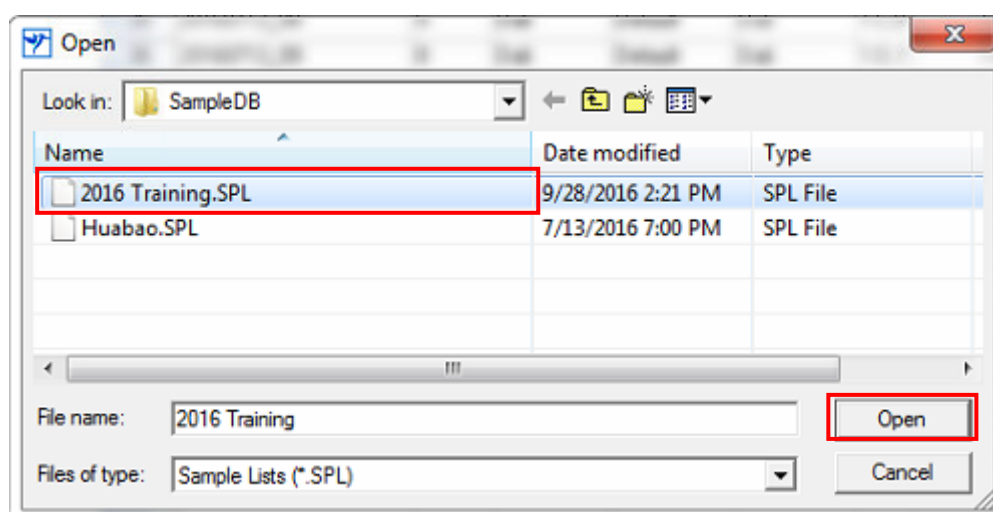


2. 切換樣品清單 Sample List

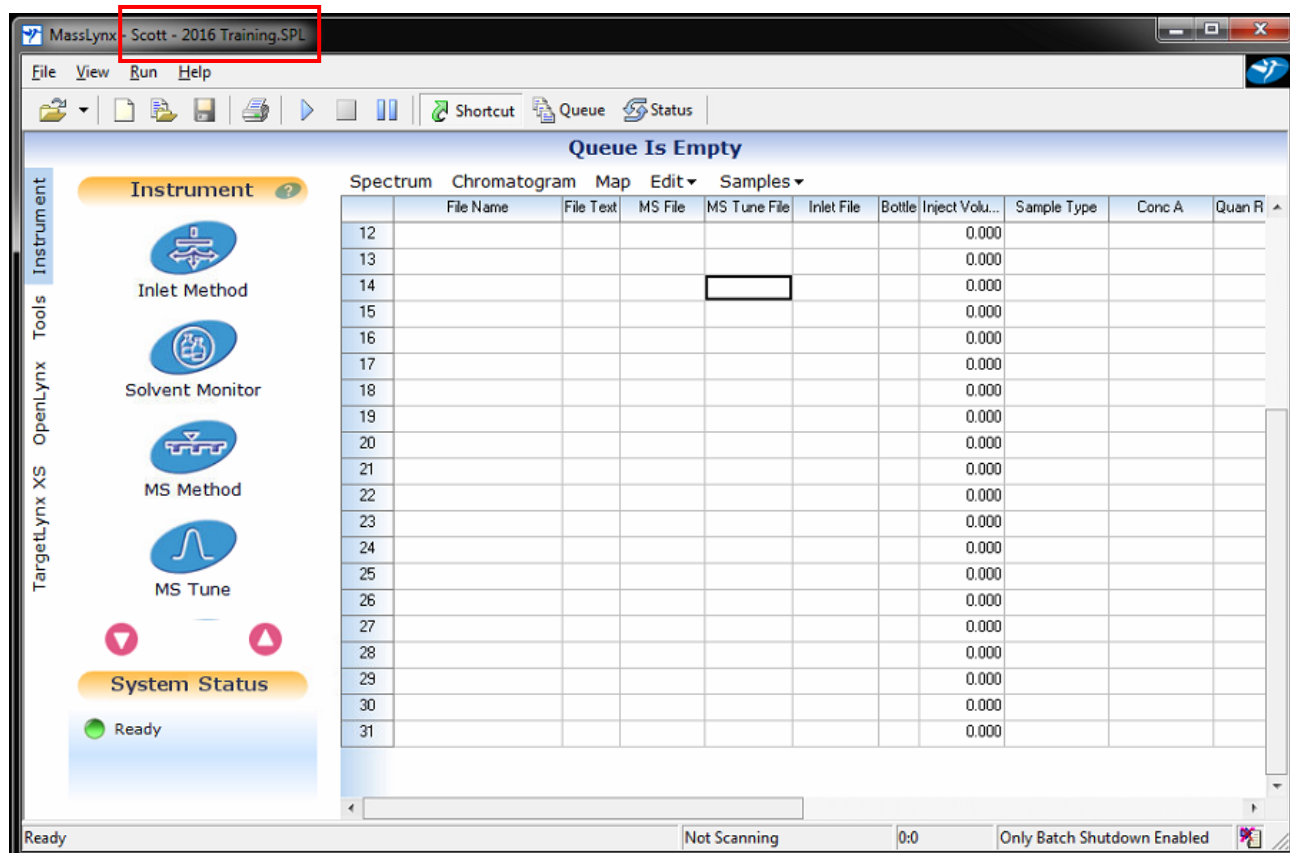
E. 點選  按鈕。



F. 選擇樣品清單，按下 Open。



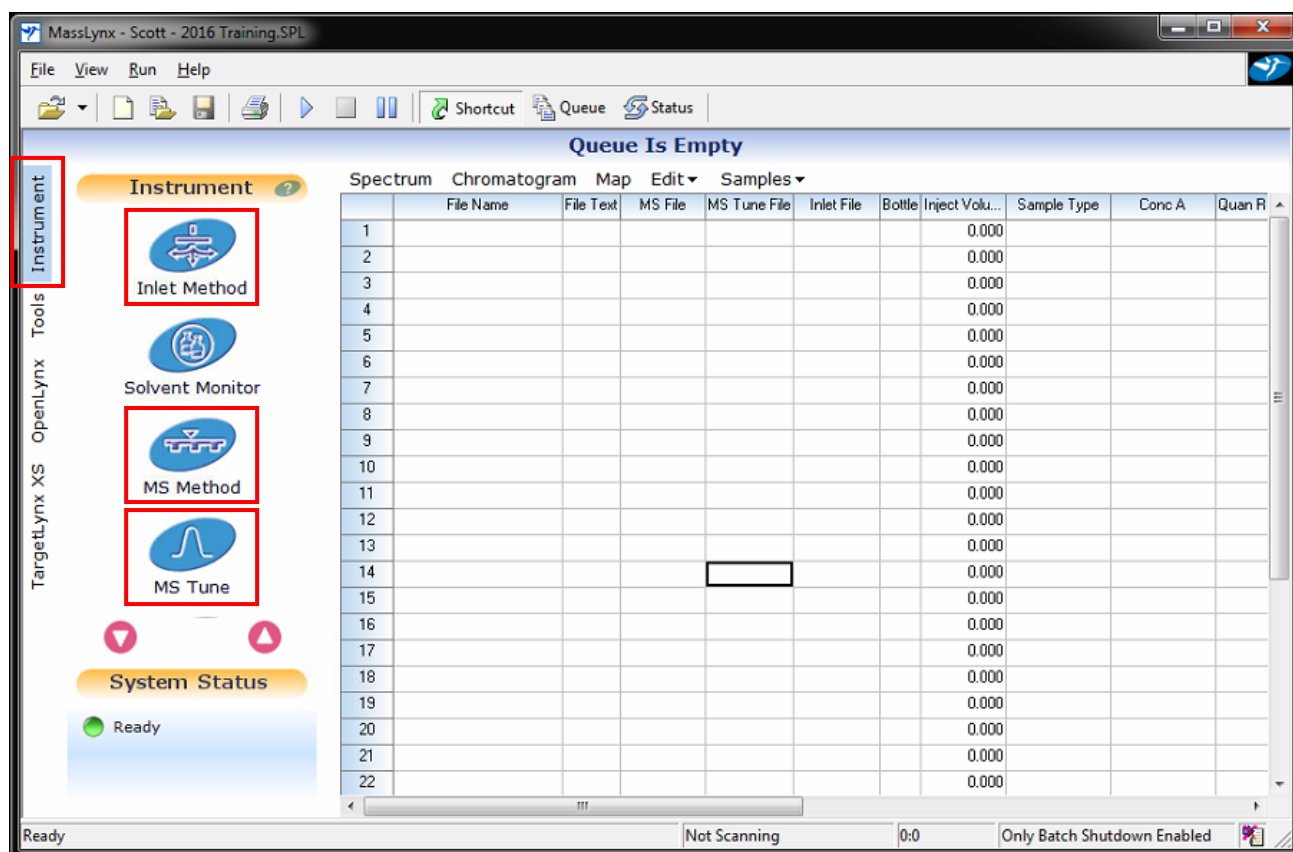
G. 樣品清單開啟成功



III. 樣品分析

1. 建立儀器方法

A. 點選軟體畫面左側 Instrument 分頁。

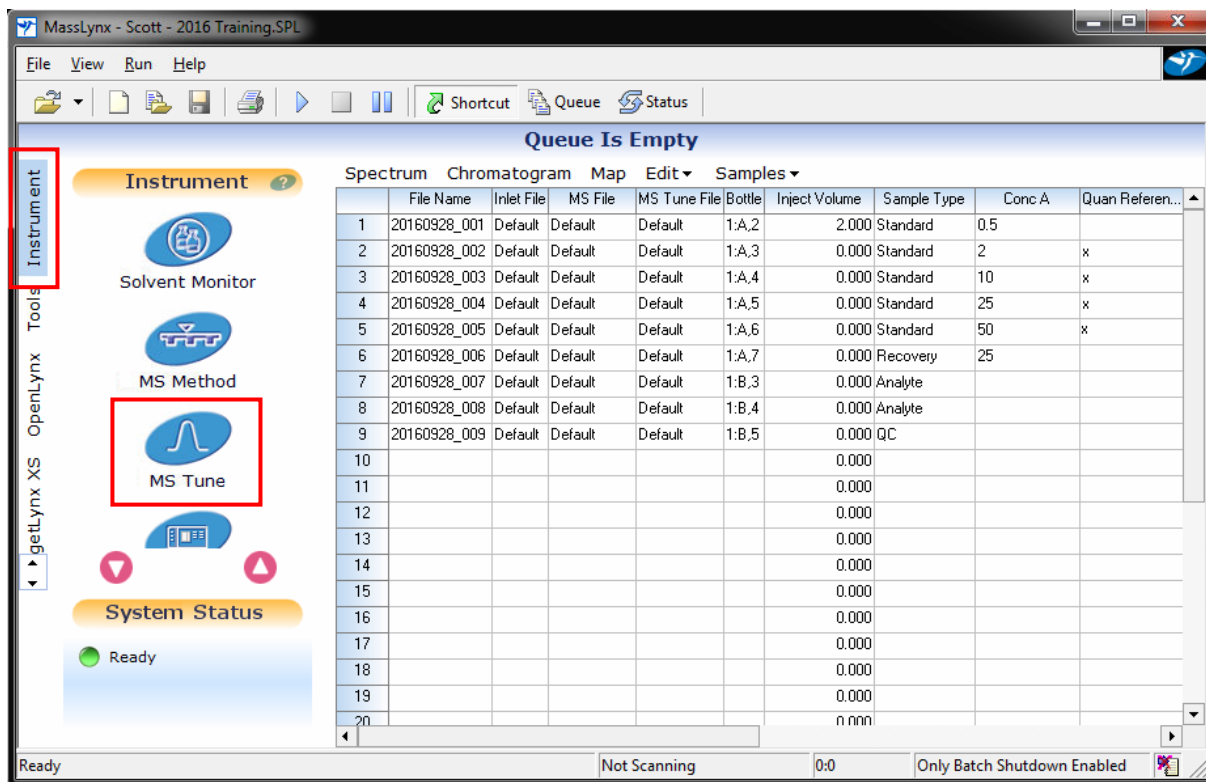


B. 儀器方法總共有以下三種，請參考[附錄一、儀器方法設定](#)，依序設定完成。

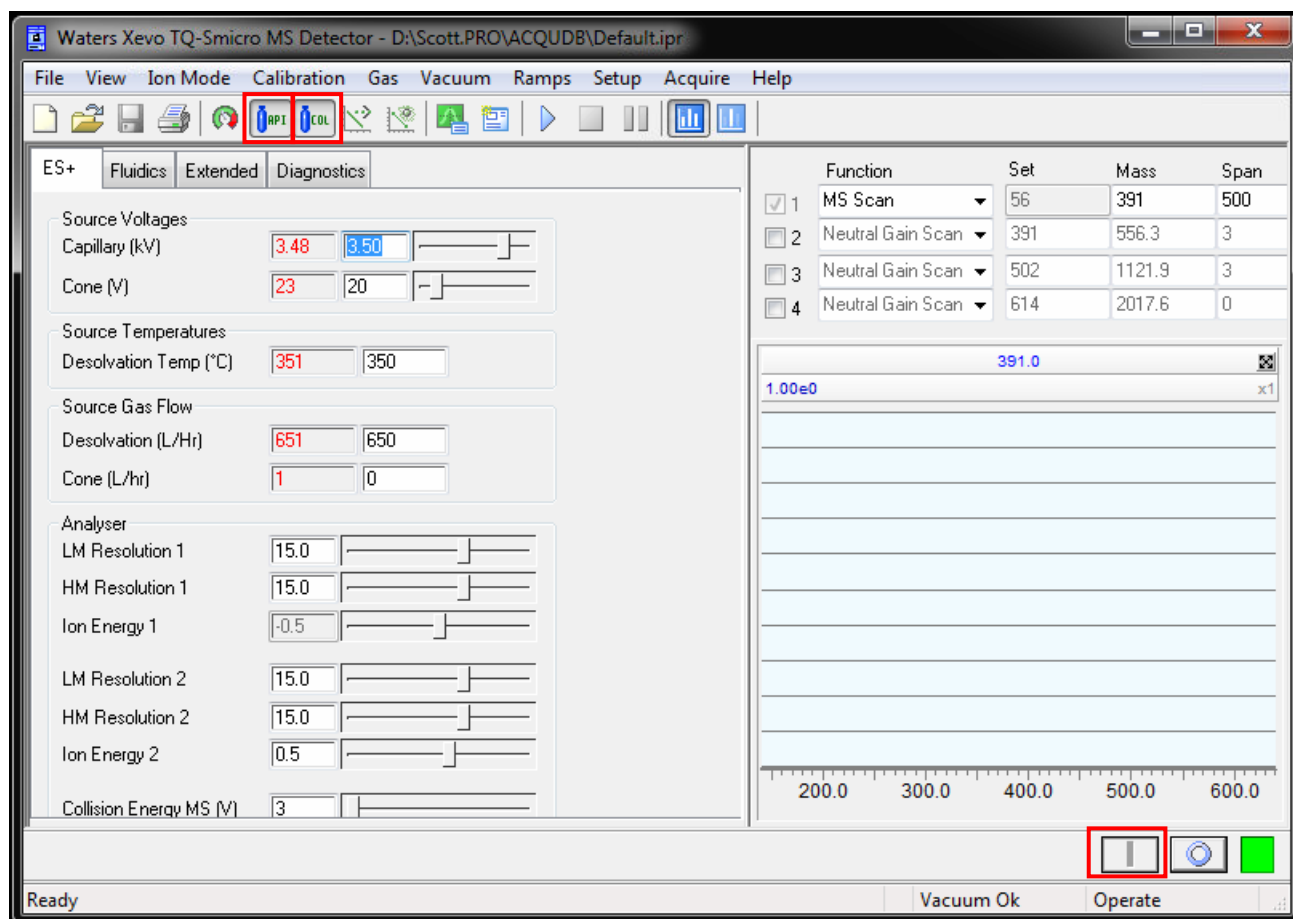
儀器方法種類	液相層析系統	質譜儀-數據紀錄	質譜儀-大氣游離法
設定按鈕圖示	 Inlet Method	 MS Method	 MS Tune

2. 準備質譜儀系統-MS Tune

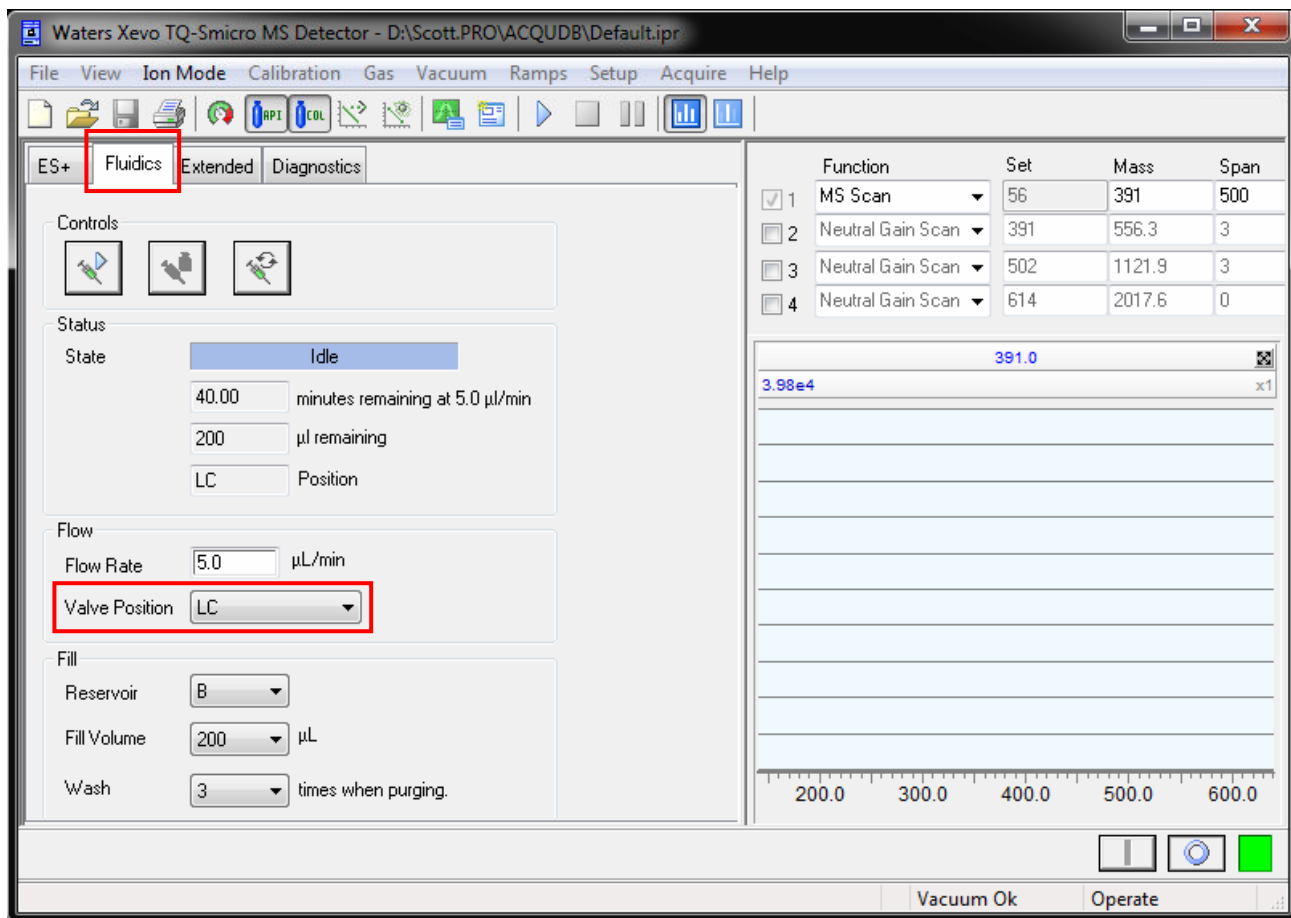
A. 點選左側 Instrument 分頁裡的 MS Tune，出現  視窗。



- B. 點選  按鈕，開啟氮氣，檢查 Desolvation(L/Hr) 與 Cone(L/Hr)有達到設定值。點選  按鈕，開啟氬氣。點選  按鈕，開啟電壓，檢查 Capillary (kV)、Cone (V)與 Desolvation Temp (°C)有達到設定值。



C. 切換到 Fluidics 分頁，將 Valve Position 轉換成 LC。

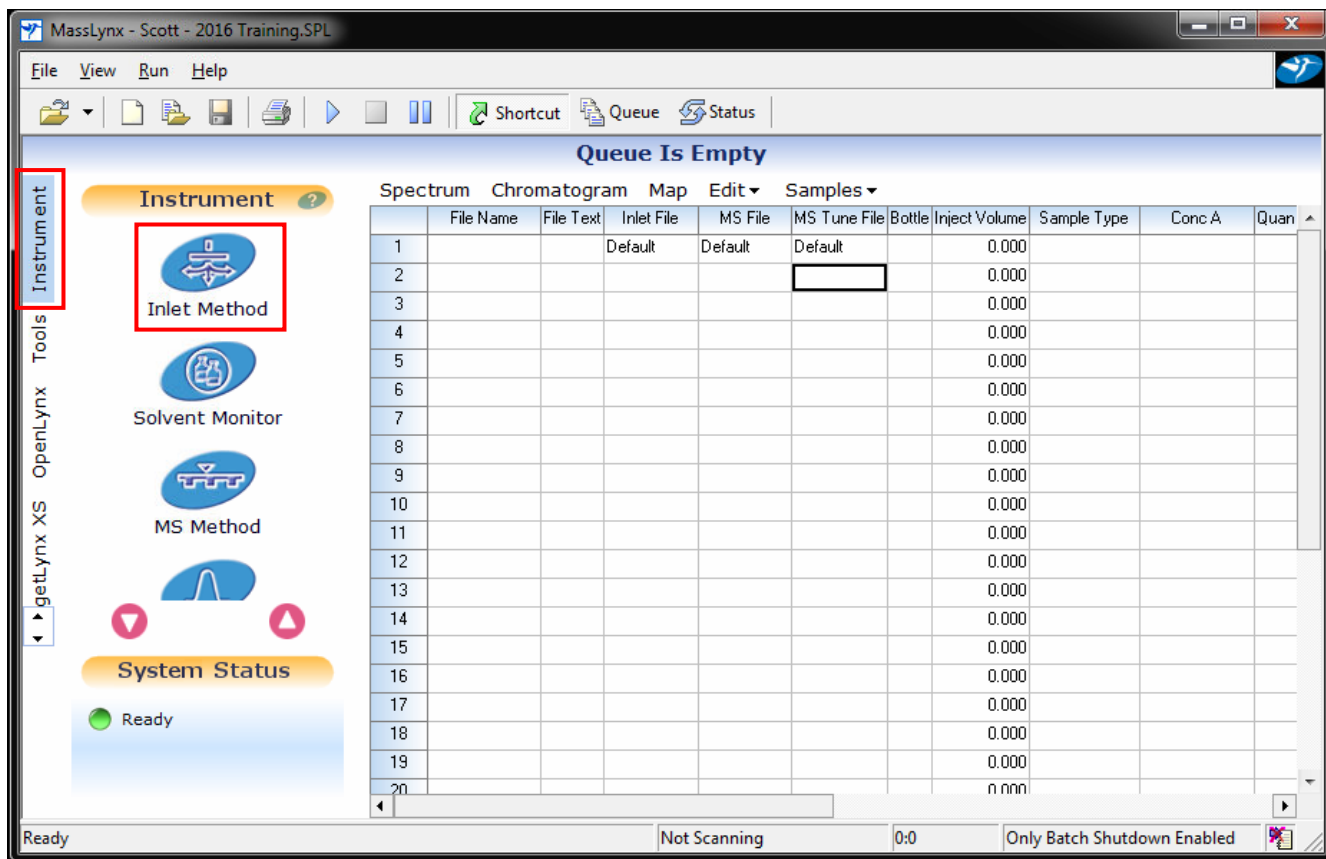


其他功能說明:

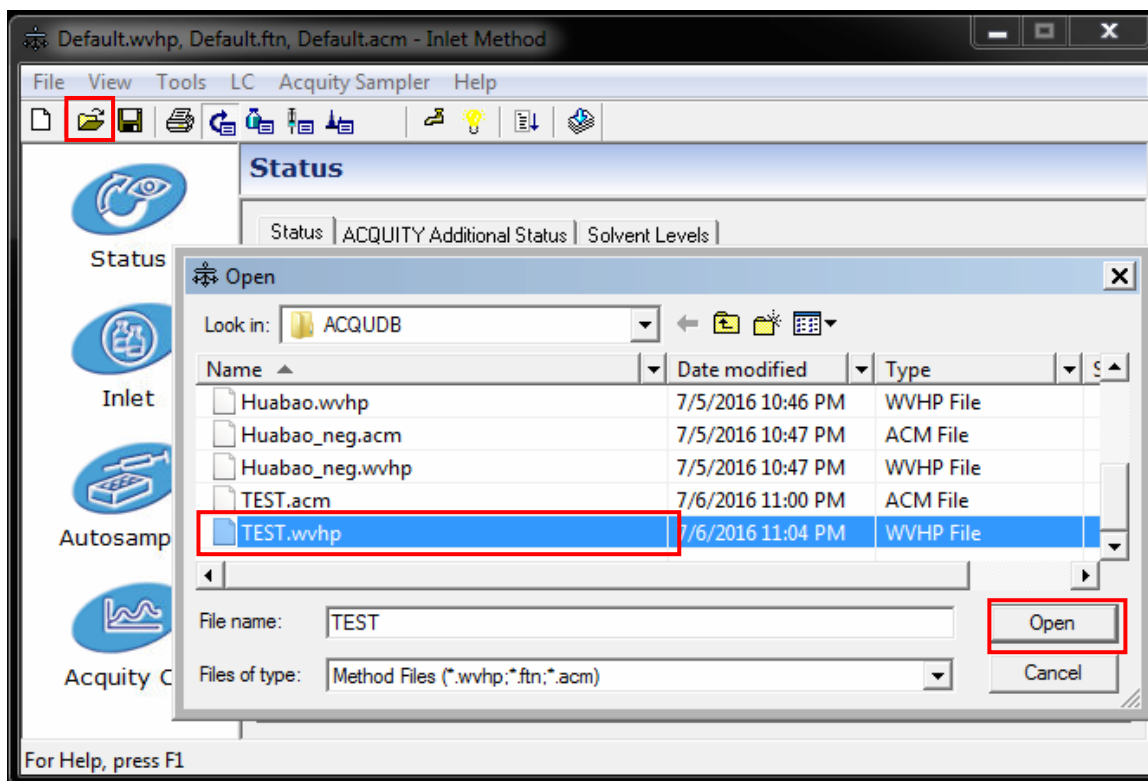
	質譜儀內建 Syringe 推送樣品
	質譜儀內建 Syringe 裝填樣品
	質譜儀內建 Syringe 清洗置換
Flow Rate	質譜儀內建 Syringe 直接進樣流速
Valve Position	質譜儀流路轉閥: Infusion - 只有質譜儀內建 Syringe 推送樣品電噴灑 Combine- 質譜儀內建 Syringe 推送樣品, 並與移動相溶液結合後才電噴灑。移動相溶液流速, 需在 Console 畫面設定 (p.23)。 LC- 將層析系統導入電噴灑 Waste- 將層析系統導入廢液管
Reservoir	質譜儀內建 Syringe 要抽取樣品的位置
Wash	 按鈕的清洗次數

3. 平衡液相層析系統-Inlet

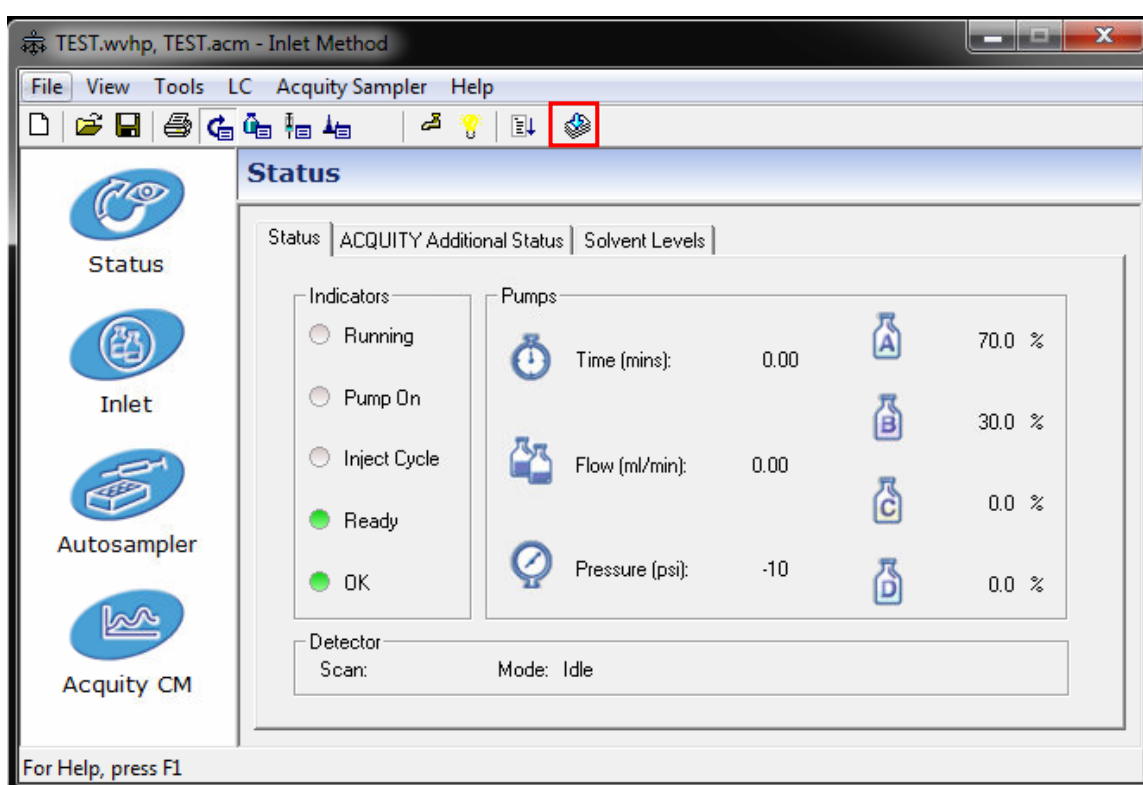
A. 點選左側 Instrument 分頁裡的 Inlet Method，出現  視窗。



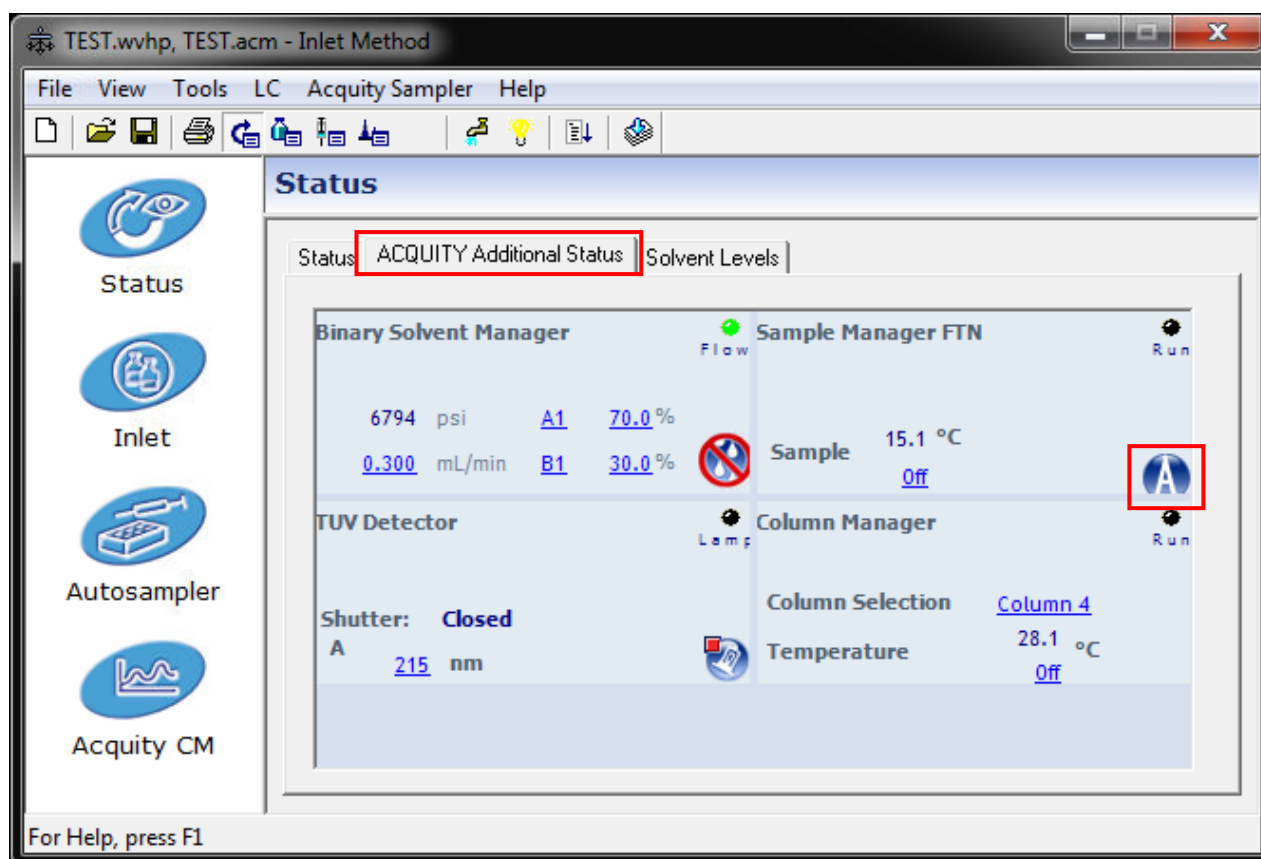
- B. 點選  視窗中的 ，選擇液相層析方法，按下 Open 開啟。



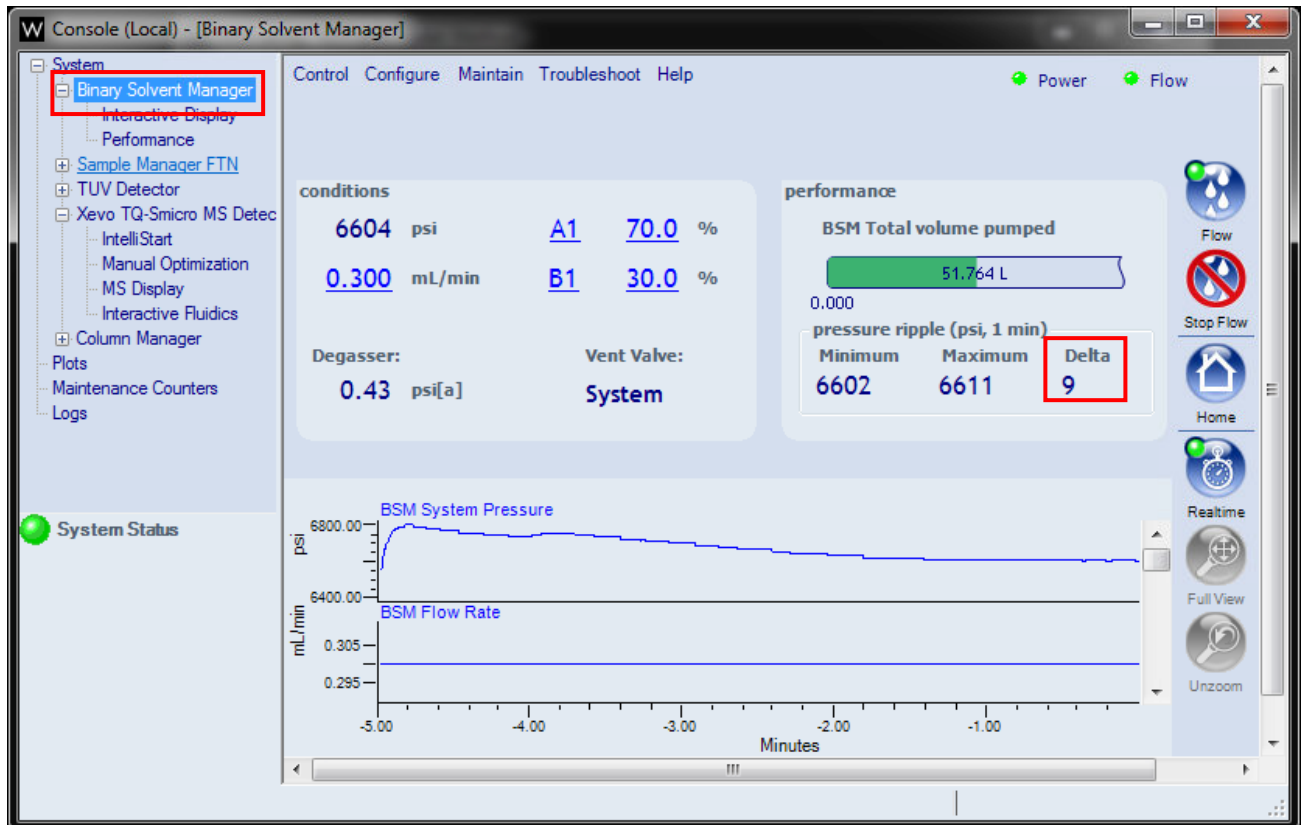
- C. 按下  按鈕，執行流速與移動相起始比例。



D. 切換到 ACQUITY Additional Status 分頁，點選  按鈕。

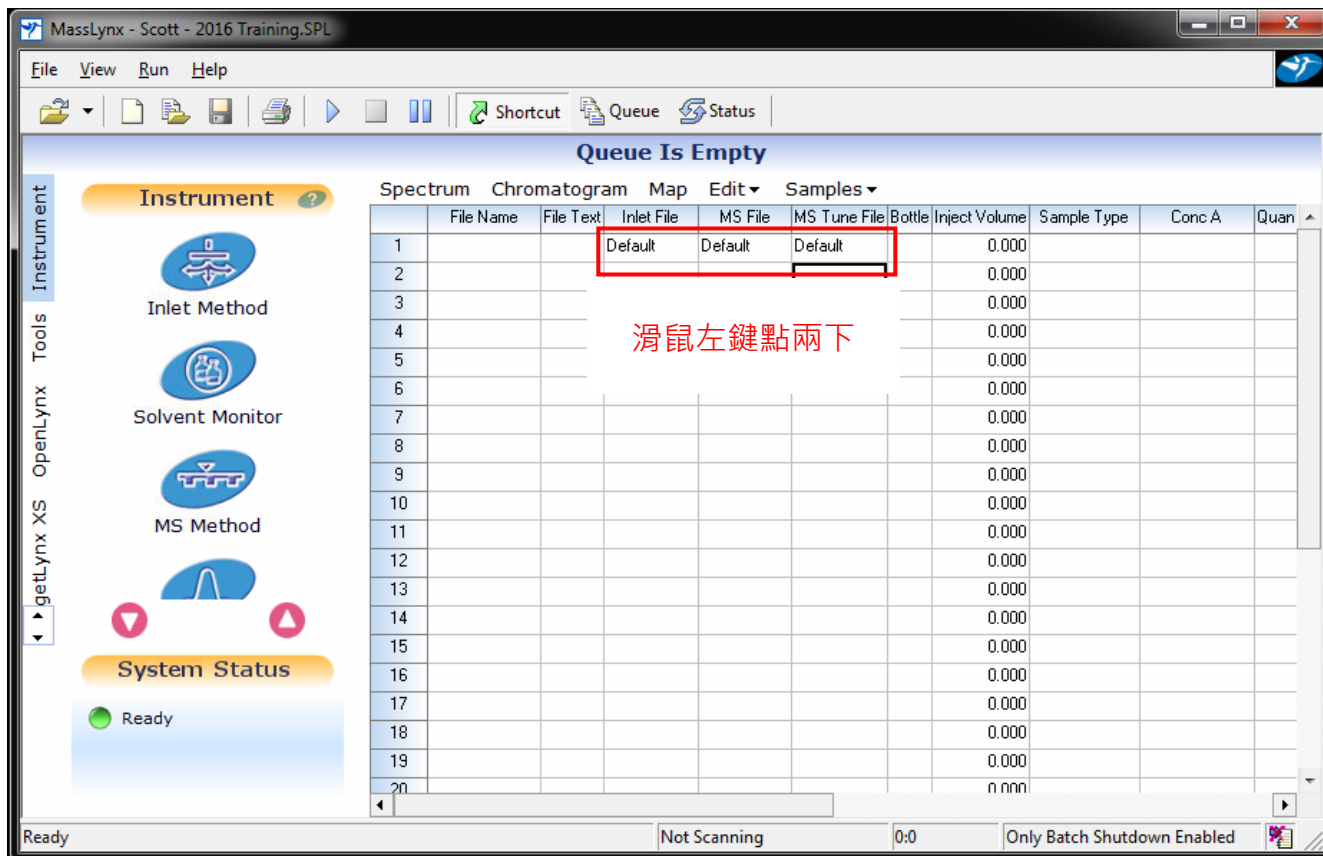


- E. 出現  視窗，點選左側泵浦選項，確認壓力差值 Delta 小於 50psi，即代表液相層析系統平衡穩定。

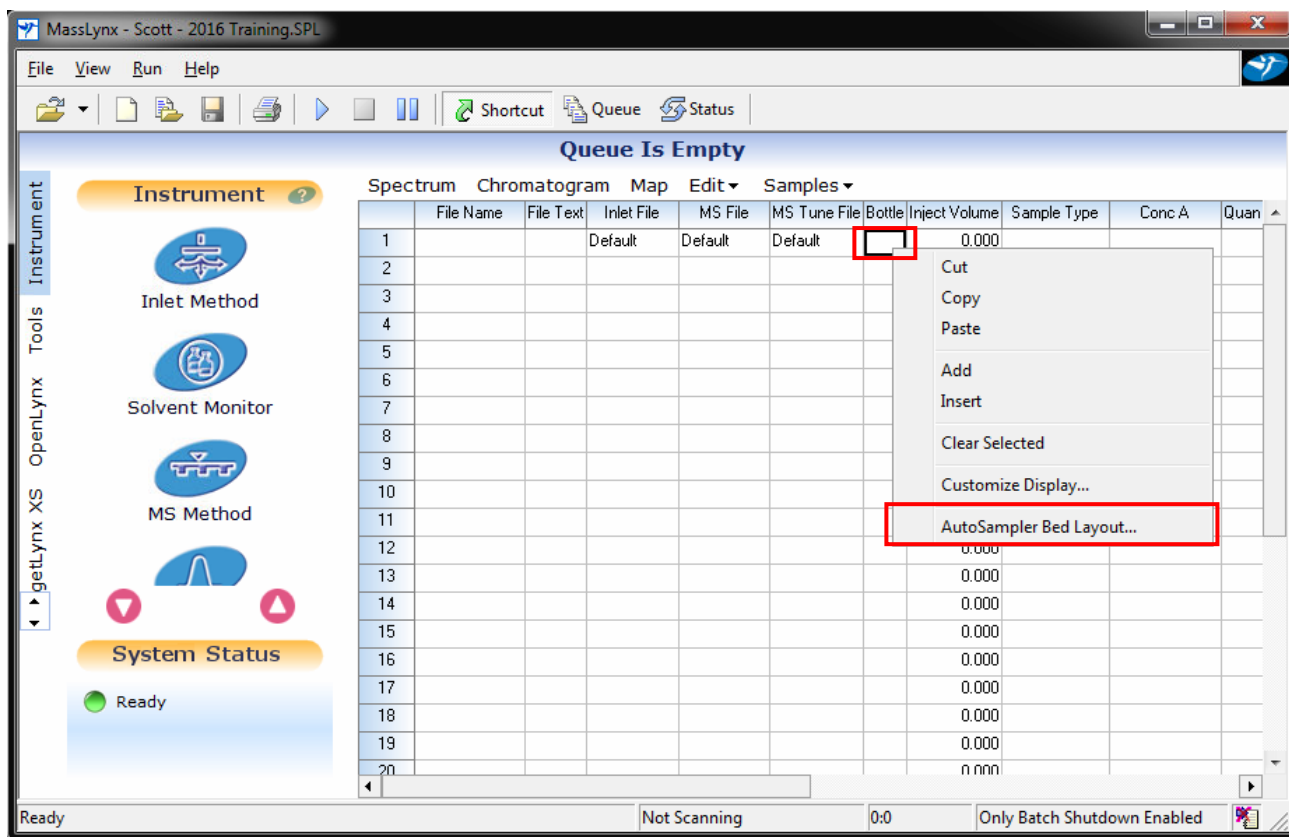


4. 編輯樣品清單

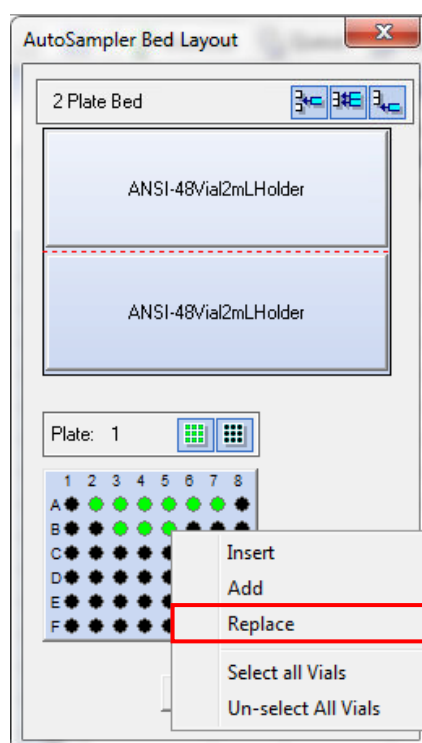
- A. 分別在 Inlet File、MS File、MS Tune File 欄位點滑鼠左鍵兩下，即可選擇儀器方法。



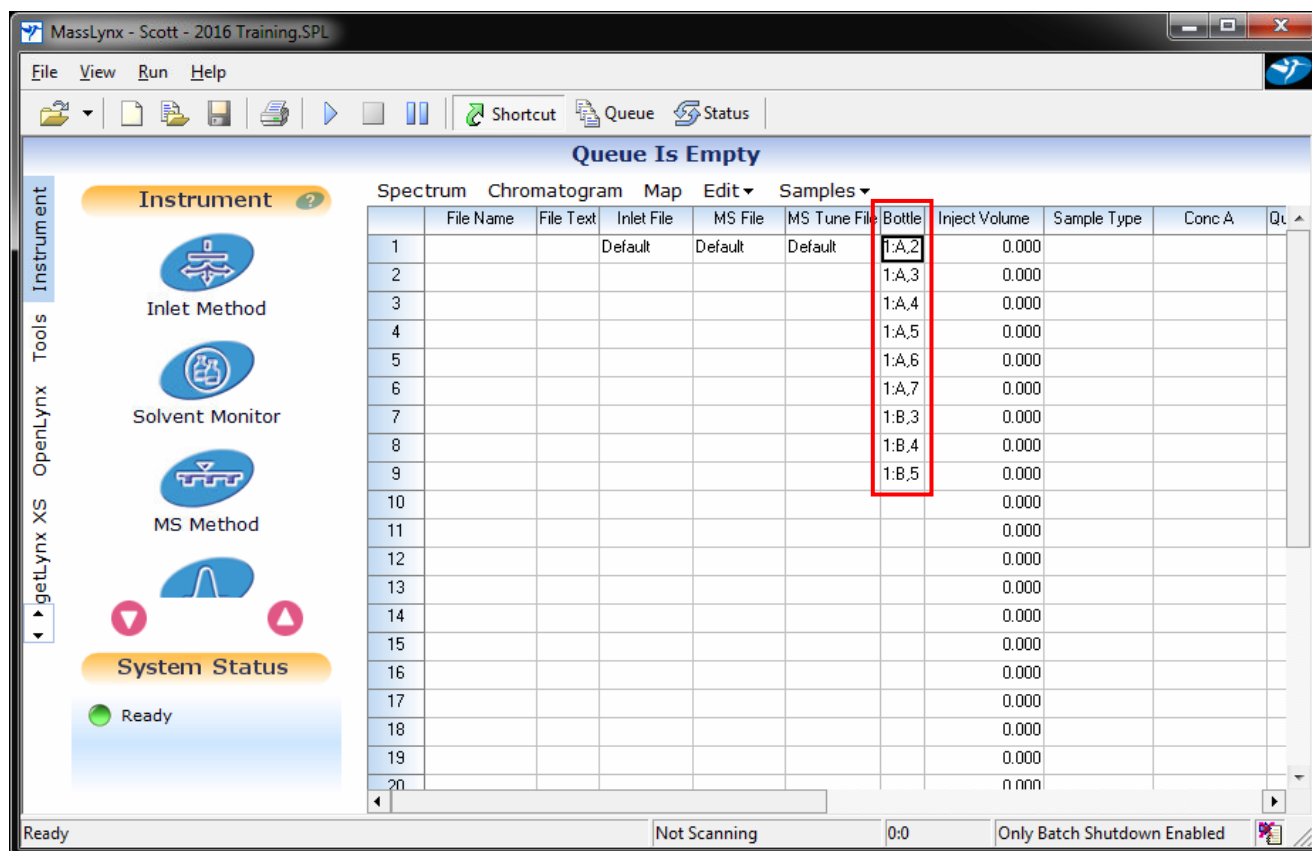
B. 在 Bottle 欄位按下滑鼠右鍵，選擇 Auto Sampler Bed Layout。



C. 在樣品盤示意圖點選樣品位置，按下滑鼠右鍵，選擇 Replace。



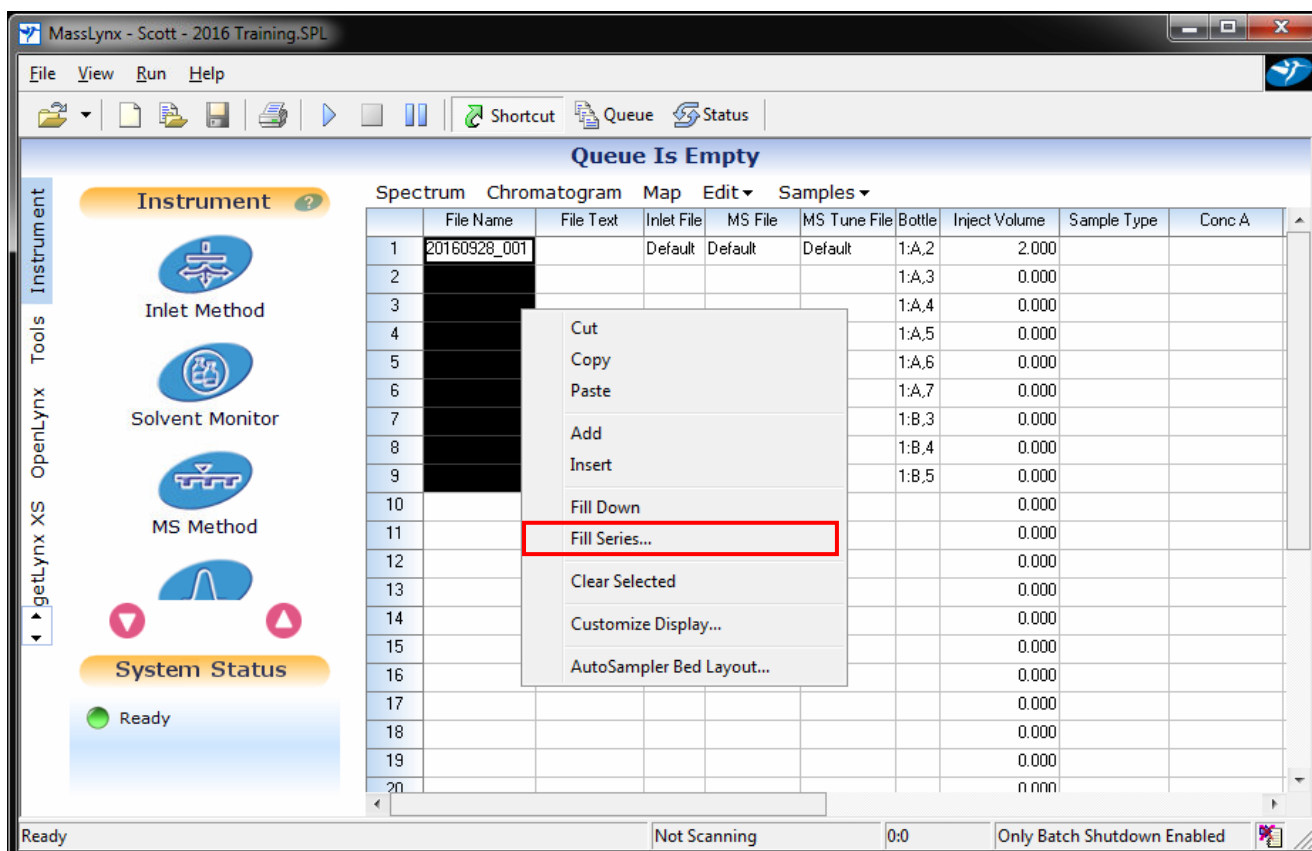
D. 樣品位置自動填入樣品清單中



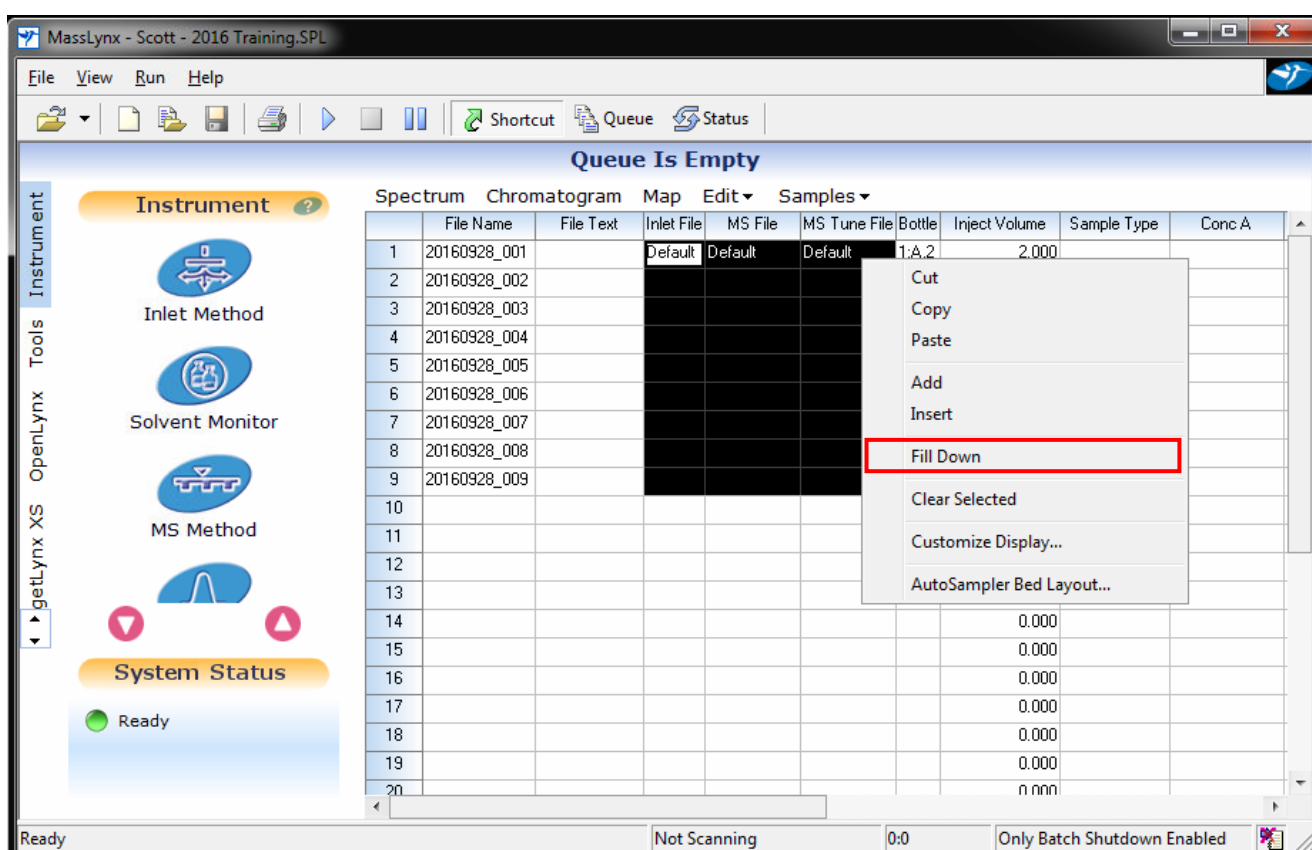
E. 輸入其他欄位，欄位說明如下表

欄位名稱	填入內容
File Name	樣品檔案名稱，建議以不會重複的流水編號命名。例如:20160928_001、20160928_002...等。
File Text	樣品註解資訊。
Injection Volume	樣品注射體積(μL)。
Sample Type	檔案類型。標準品選擇 Standard；樣品選擇 Analyte；品管標準品選擇 QC；回收率樣品選擇 Recovery。
Conc A/Conc B	標準品濃度或回收率樣品期望濃度。
Quan Reference	填入 x，此檔案會列入 TargetLynx 計算標準 ion ratio。

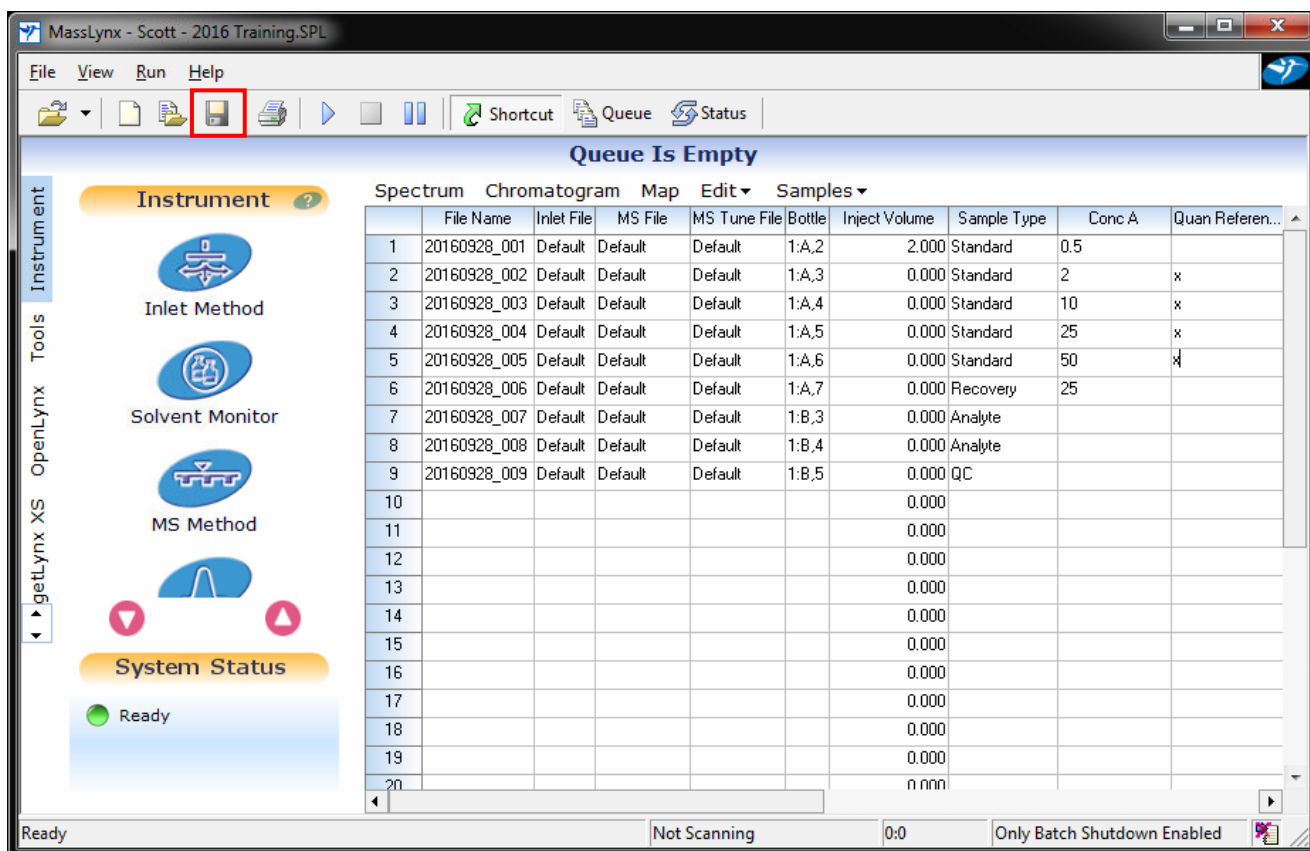
F. 滑鼠左鍵按住下拉，選擇 Fill Series，可連續編號。



G. 滑鼠左鍵按住下拉，選擇 Fill Down，可連續編號。



H. 樣品清單填寫完畢後，按下  按鈕，儲存樣品清單內容。



MassLynx - Scott - 2016 Training.SPL

File View Run Help

Queue Is Empty

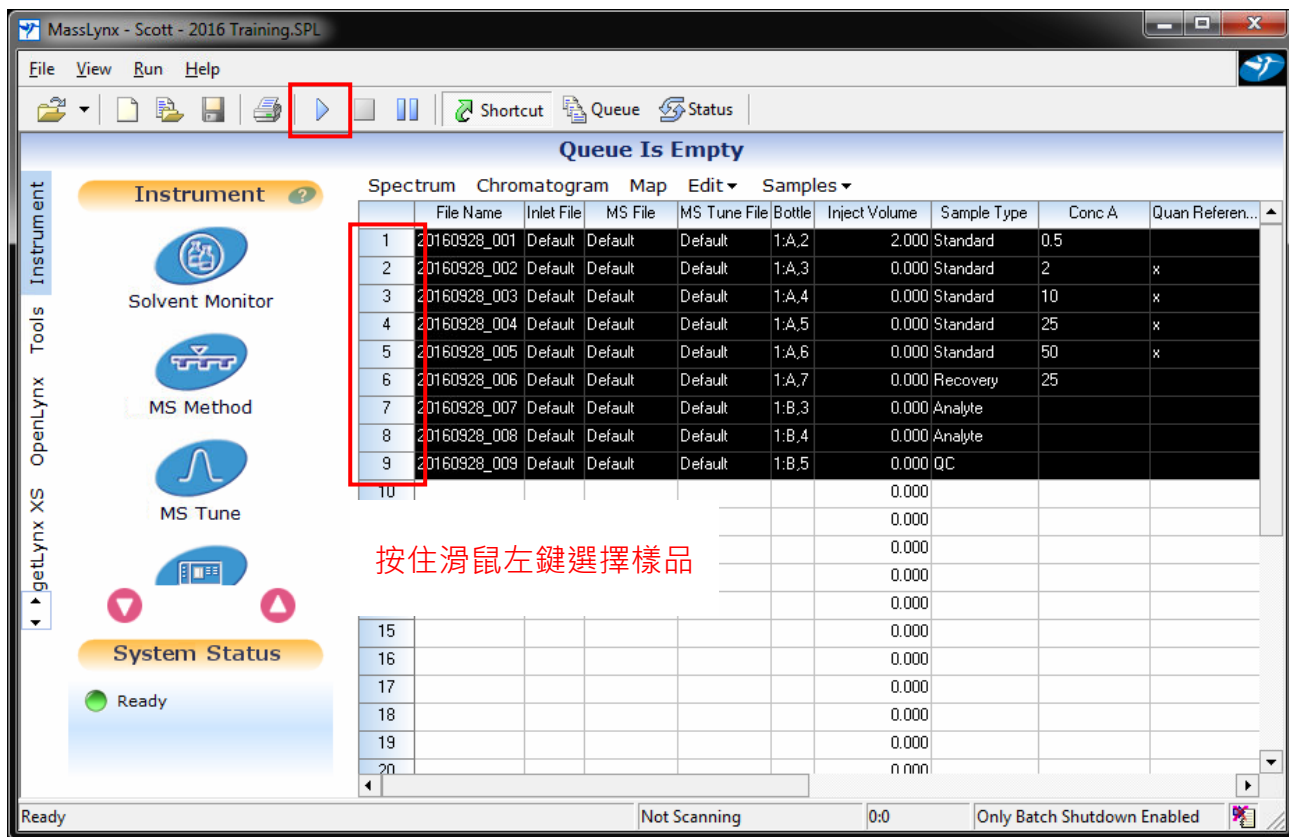
Spectrum Chromatogram Map Edit Samples

	File Name	Inlet File	MS File	MS Tune File	Bottle	Inject Volume	Sample Type	Conc A	Quan Referen...
1	20160928_001	Default	Default	Default	1:A,2	2.000	Standard	0.5	
2	20160928_002	Default	Default	Default	1:A,3	0.000	Standard	2	x
3	20160928_003	Default	Default	Default	1:A,4	0.000	Standard	10	x
4	20160928_004	Default	Default	Default	1:A,5	0.000	Standard	25	x
5	20160928_005	Default	Default	Default	1:A,6	0.000	Standard	50	x
6	20160928_006	Default	Default	Default	1:A,7	0.000	Recovery	25	
7	20160928_007	Default	Default	Default	1:B,3	0.000	Analyte		
8	20160928_008	Default	Default	Default	1:B,4	0.000	Analyte		
9	20160928_009	Default	Default	Default	1:B,5	0.000	QC		
10						0.000			
11						0.000			
12						0.000			
13						0.000			
14						0.000			
15						0.000			
16						0.000			
17						0.000			
18						0.000			
19						0.000			
20						n n n n			

Ready Not Scanning 0:0 Only Batch Shutdown Enabled

5. 執行樣品清單

A. 按住滑鼠左鍵選擇樣品，點選  按鈕。



MassLynx - Scott - 2016 Training.SPL

File View Run Help

Queue Is Empty

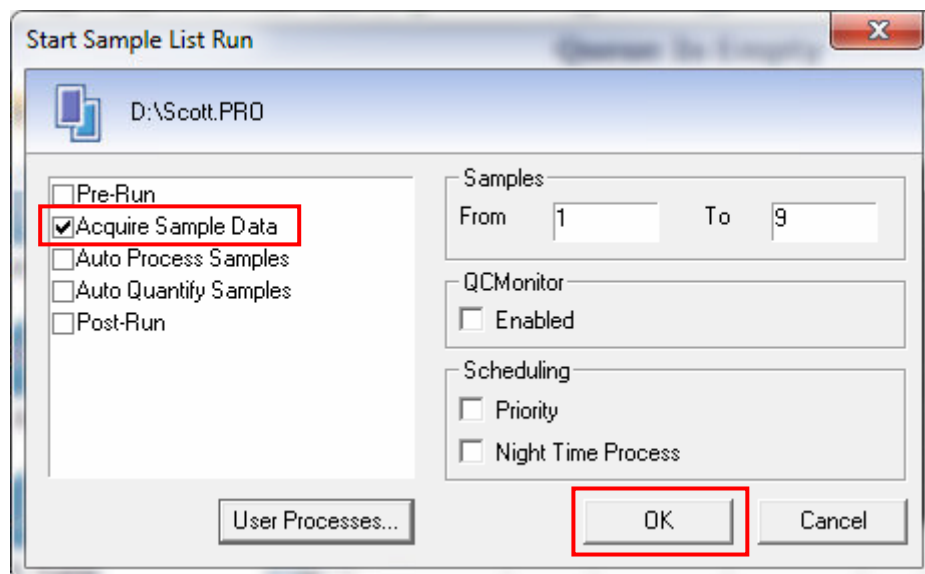
Spectrum Chromatogram Map Edit Samples

	File Name	Inlet File	MS File	MS Tune File	Bottle	Inject Volume	Sample Type	Conc A	Quan Referen...
1	20160928_001	Default	Default	Default	1:A,2	2.000	Standard	0.5	
2	20160928_002	Default	Default	Default	1:A,3	0.000	Standard	2	x
3	20160928_003	Default	Default	Default	1:A,4	0.000	Standard	10	x
4	20160928_004	Default	Default	Default	1:A,5	0.000	Standard	25	x
5	20160928_005	Default	Default	Default	1:A,6	0.000	Standard	50	x
6	20160928_006	Default	Default	Default	1:A,7	0.000	Recovery	25	
7	20160928_007	Default	Default	Default	1:B,3	0.000	Analyte		
8	20160928_008	Default	Default	Default	1:B,4	0.000	Analyte		
9	20160928_009	Default	Default	Default	1:B,5	0.000	QC		
10						0.000			
						0.000			
						0.000			
						0.000			
						0.000			
15						0.000			
16						0.000			
17						0.000			
18						0.000			
19						0.000			
20						0.000			

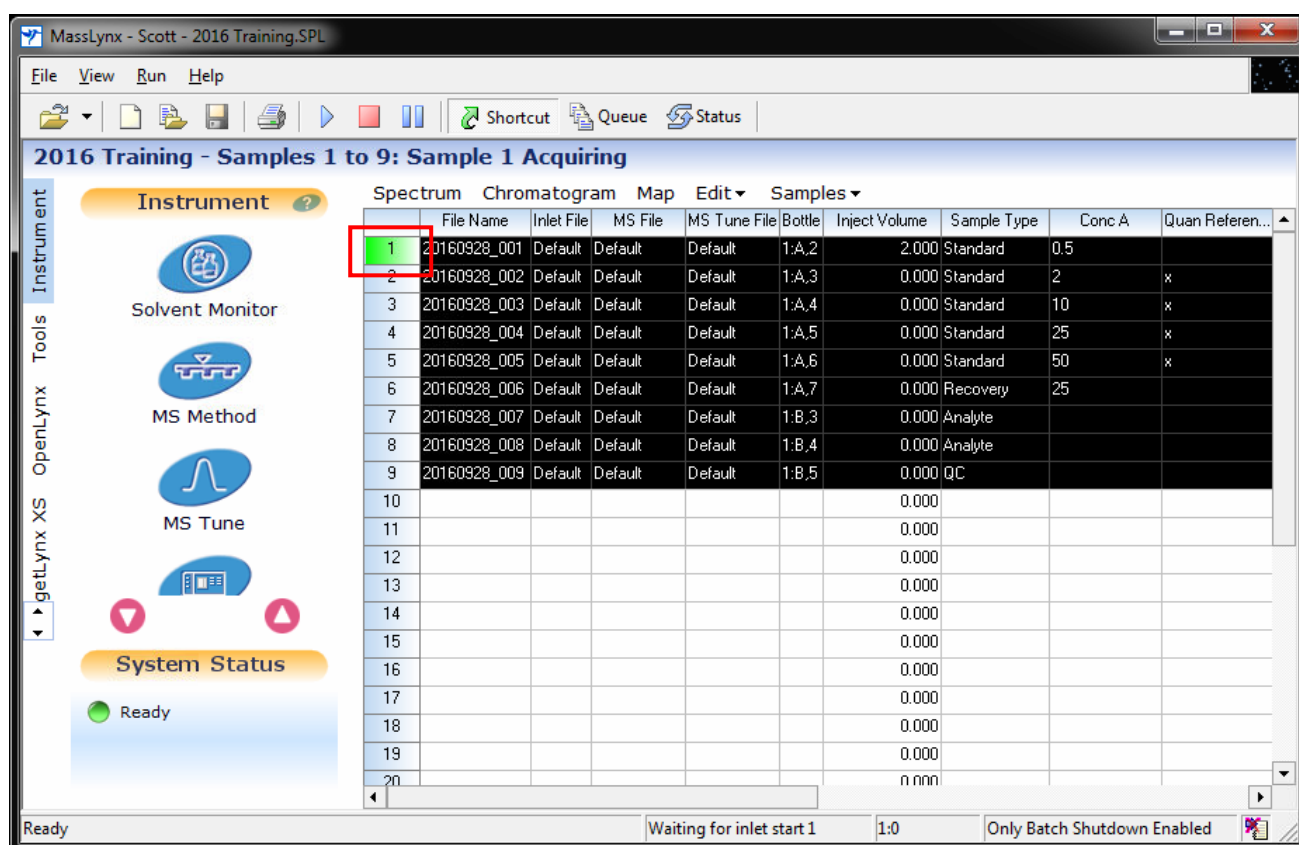
按住滑鼠左鍵選擇樣品

Ready Not Scanning 0:0 Only Batch Shutdown Enabled

B. 勾選 Acquire Sample Data，點選 OK



C. 綠色方塊圖示表示目前正在分析的樣品。



IV. 數據處理

1. 建立定量數據處理方法-TargetLynx

A. 在樣品清單選擇一筆數據，點選表格上方的 Chromatogram，開啟層析圖。

MassLynx - Quantify - Quantify.spl

File View Run Help

Queue Is Empty

Spectrum **Chromatogram** Map Edit Samples

	File Name	Sample ID	File Text	MS File	Inlet File	Bottle	Inject Volume	Sample
1	ASSAY01	ID	plasma blank	DEFAULT	DEFAULT	1	10.000	Blank
2	ASSAY02	ID2	0.2pg/ml std	DEFAULT	DEFAULT	2	10.000	Standard
3	ASSAY03	ID3	0.5pg/ml std	DEFAULT	DEFAULT	3	10.000	Standard
4	ASSAY04	ID4	0.75pg/ml std	DEFAULT	DEFAULT	4	10.000	Standard
5	ASSAY05	ID5	1pg/ml std	DEFAULT	DEFAULT	5	10.000	Standard
6	ASSAY06	ID6	2pg/ml std	DEFAULT	DEFAULT	6	10.000	Standard
7	ASSAY07	ID7	5pg/ml std	DEFAULT	DEFAULT	7	10.000	Standard
8	ASSAY08	ID8	10pg/ml std	DEFAULT	DEFAULT	8	10.000	Standard
9	ASSAY09	ID9	15pg/ml std	DEFAULT	DEFAULT	9	10.000	Standard
10	ASSAY10	ID10	0.3pg/ml QC	DEFAULT	DEFAULT	10	10.000	QC
11	ASSAY11	ID11	2pg/ml QC	DEFAULT	DEFAULT	11	10.000	QC
12	ASSAY12	ID12	12pg/ml QC	DEFAULT	DEFAULT	12	10.000	QC
13	ASSAY13	ID13	Rat sample 01	DEFAULT	DEFAULT	13	10.000	Blank
14	ASSAY14	ID14	Rat sample 02	DEFAULT	DEFAULT	14	10.000	Analyte
15	ASSAY15	ID15	Rat sample 03	DEFAULT	DEFAULT	15	10.000	Analyte
16	ASSAY16	ID16	Rat sample 04	DEFAULT	DEFAULT	16	10.000	Analyte
17	ASSAY17	ID17	Rat sample 05	DEFAULT	DEFAULT	17	10.000	Analyte
18	ASSAY18	ID18	Rat sample 06	DEFAULT	DEFAULT	18	10.000	Analyte
19	ASSAY19	ID19	Rat sample 07	DEFAULT	DEFAULT	19	10.000	Analyte
20	ASSAY20	ID20	Rat sample 08	DEFAULT	DEFAULT	20	10.000	Analyte
21	ASSAY21	ID21	Rat sample 09	DEFAULT	DEFAULT	21	10.000	Analyte
22	ASSAY22	ID22	Rat sample 10	DEFAULT	DEFAULT	22	10.000	Analyte

TargetLynx XS

Edit Method

Process Samples

View Results

TrendPlot

System Status

Not Ready

Instrument in standby

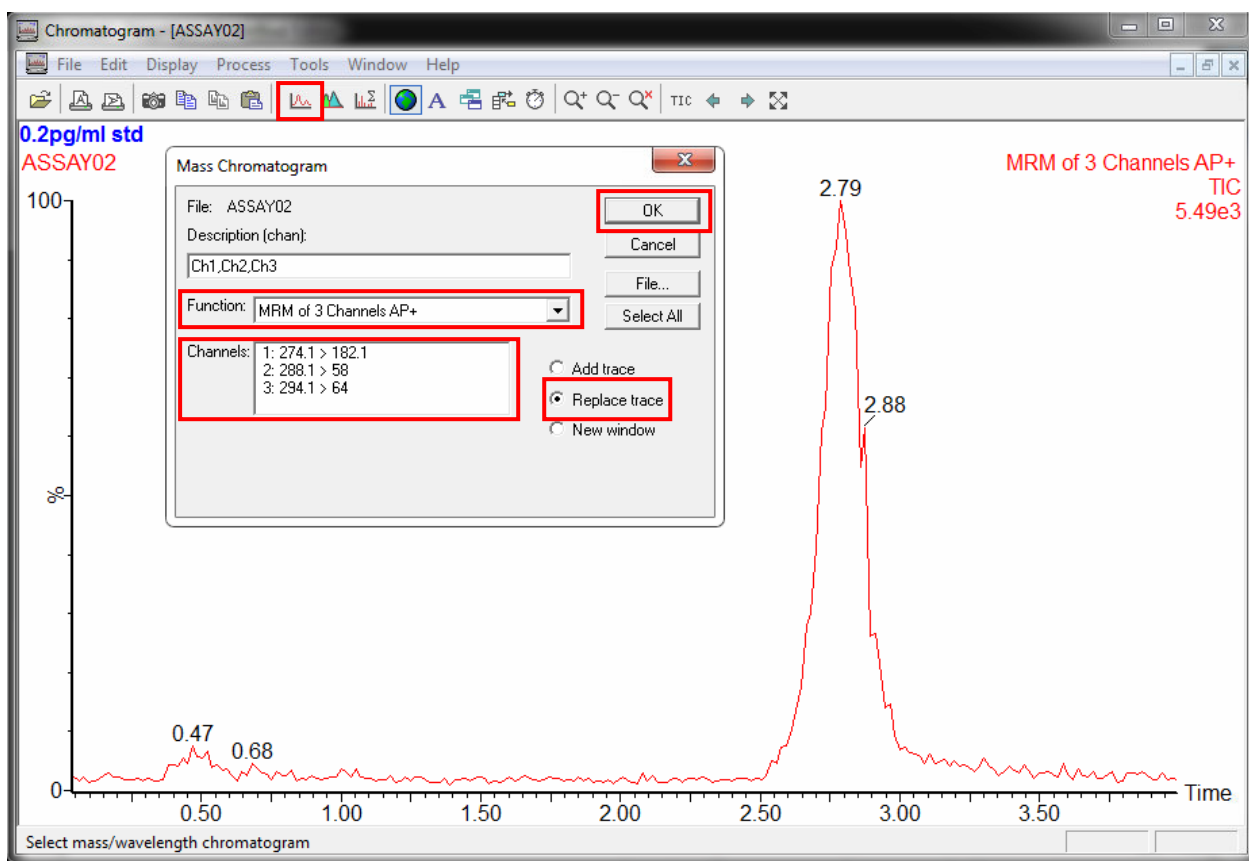
Ready

Not Scanning

0:0

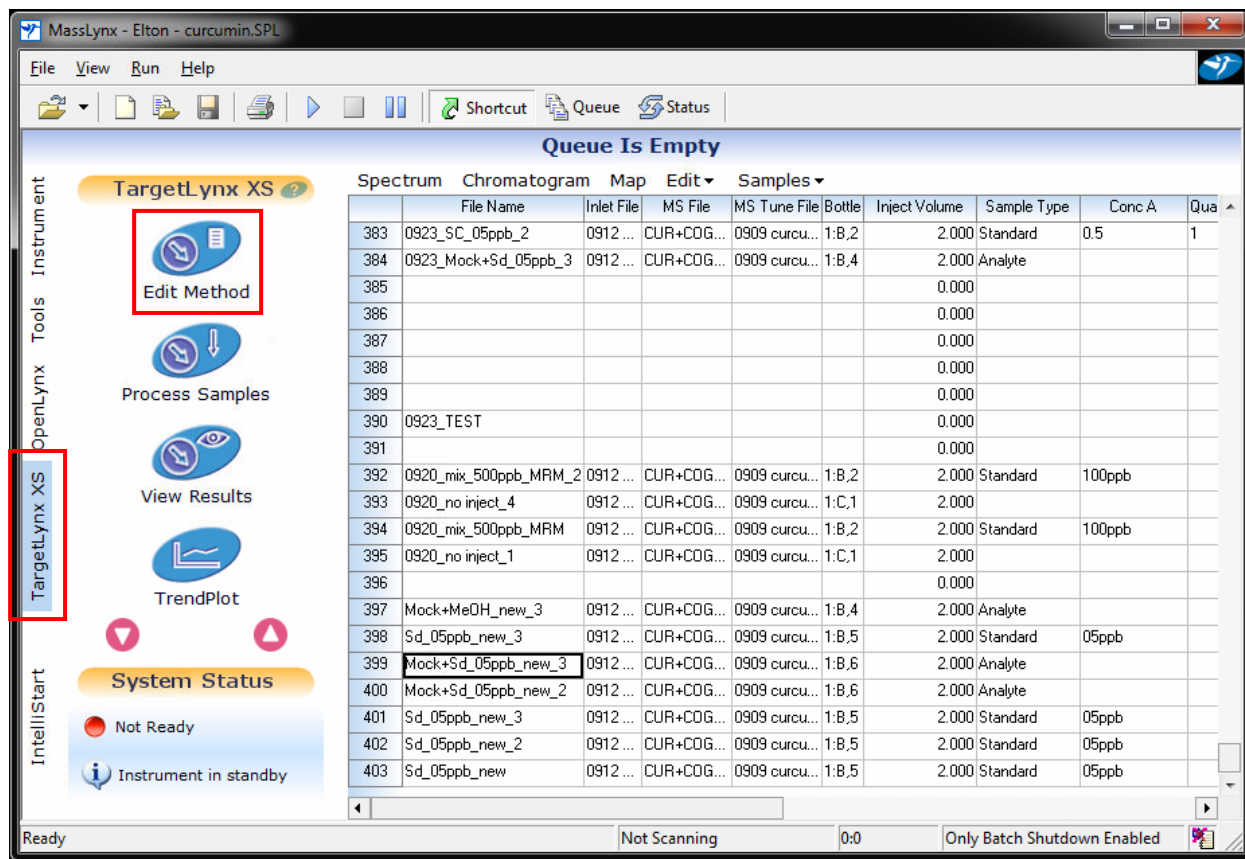
Only Batch Shutdown Enabled

- B. 在層析圖視窗，點選  按鈕，在 Function 選單選擇成分，在 Channels 滑鼠左鍵點選兩下要開啟的圖檔，點選 Replace trace，按下 OK。

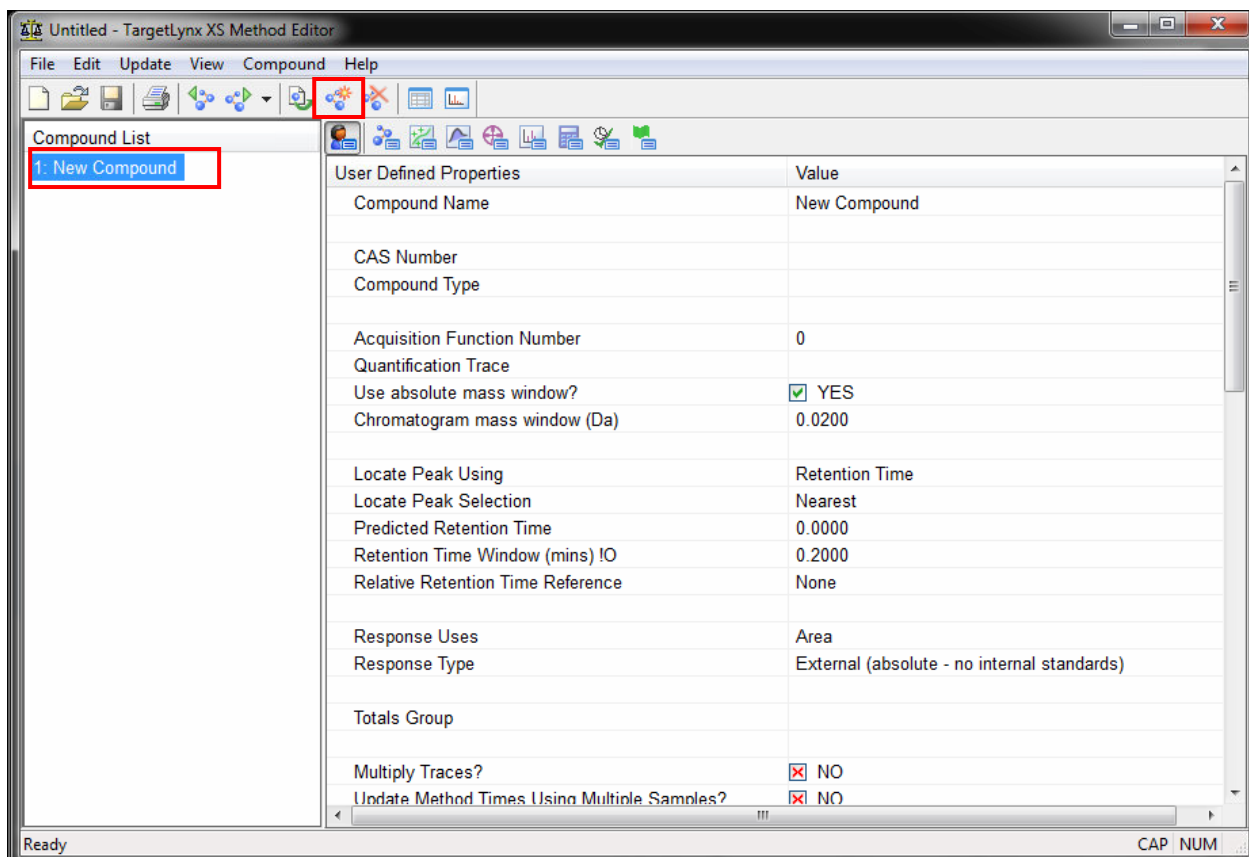


C. MassLynx 主畫面左側點選 TargetLynx 分頁，再點選 Edit Method，出現

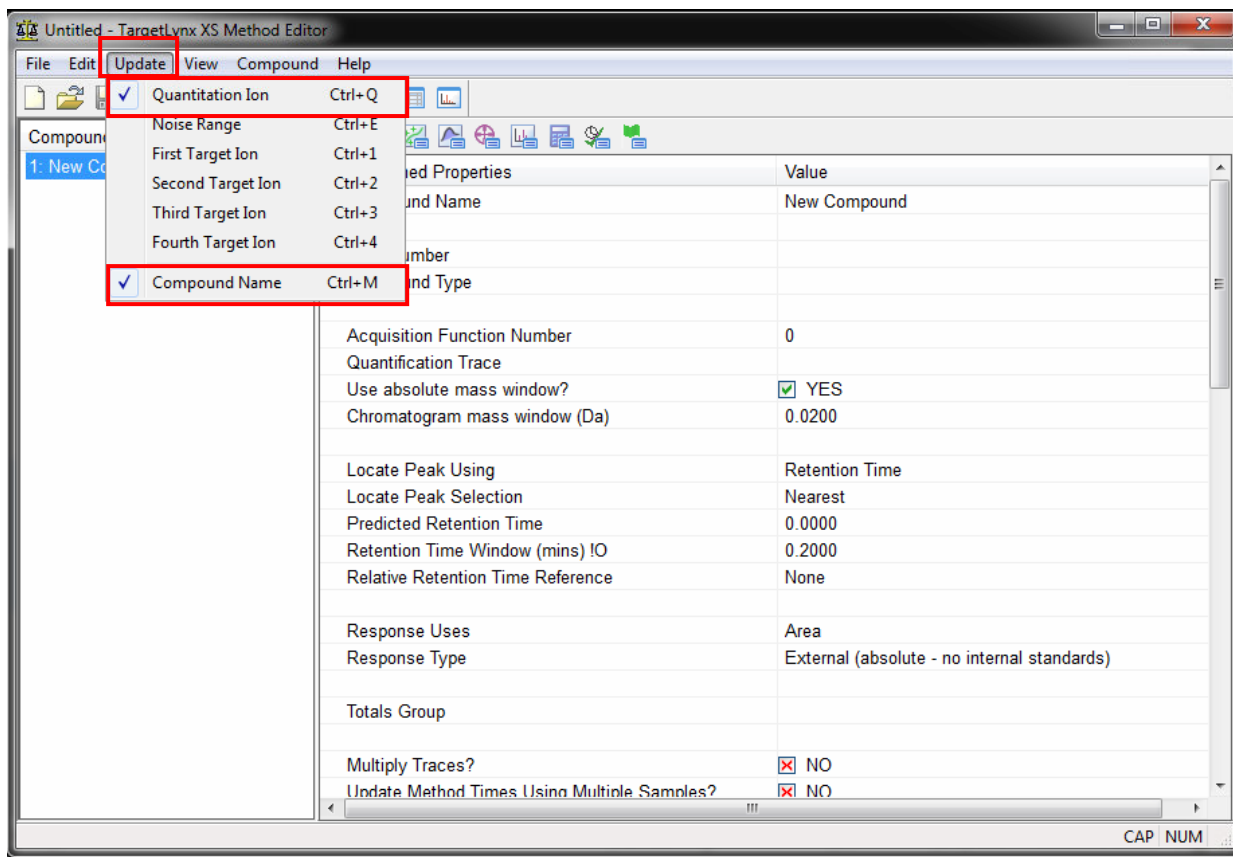
TargetLynx 設定視窗 。



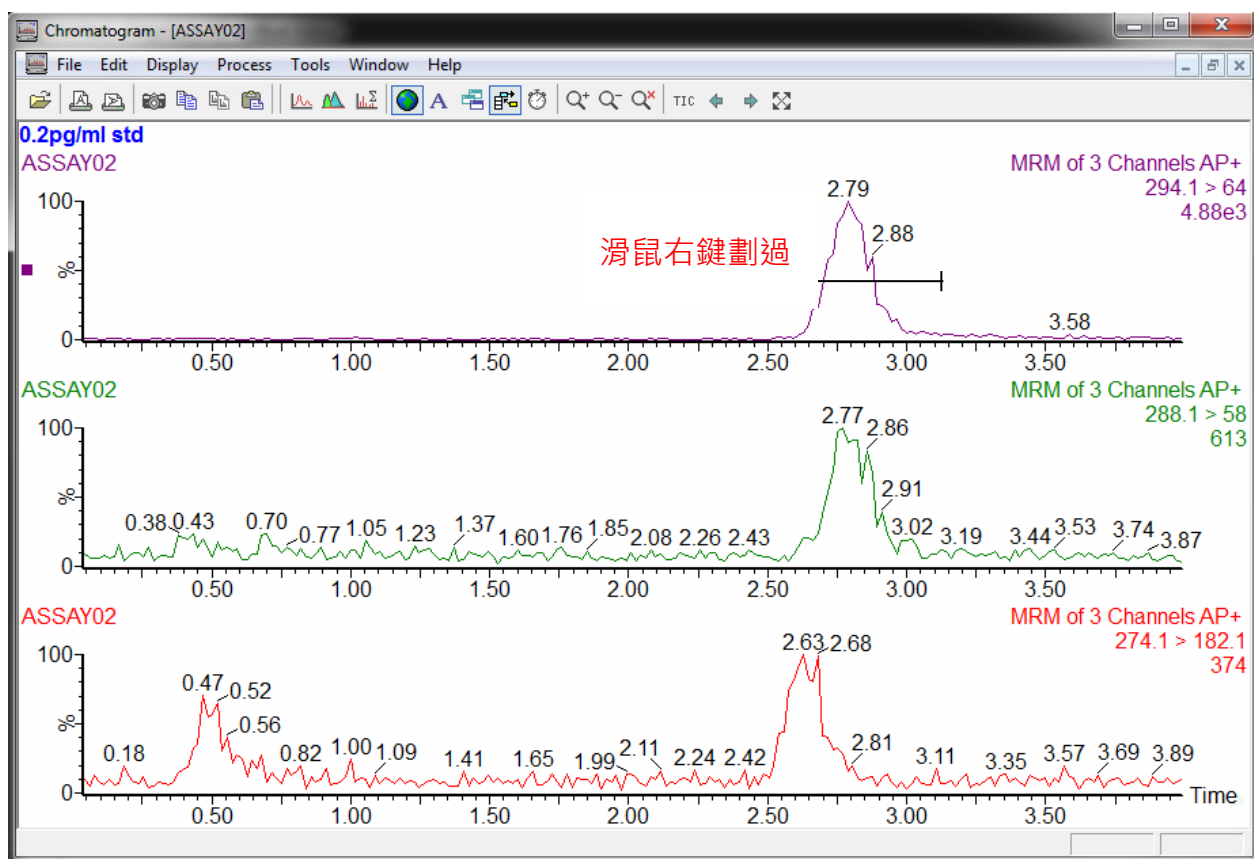
D. 點選  按鈕，新增一項成分數據處理指令。



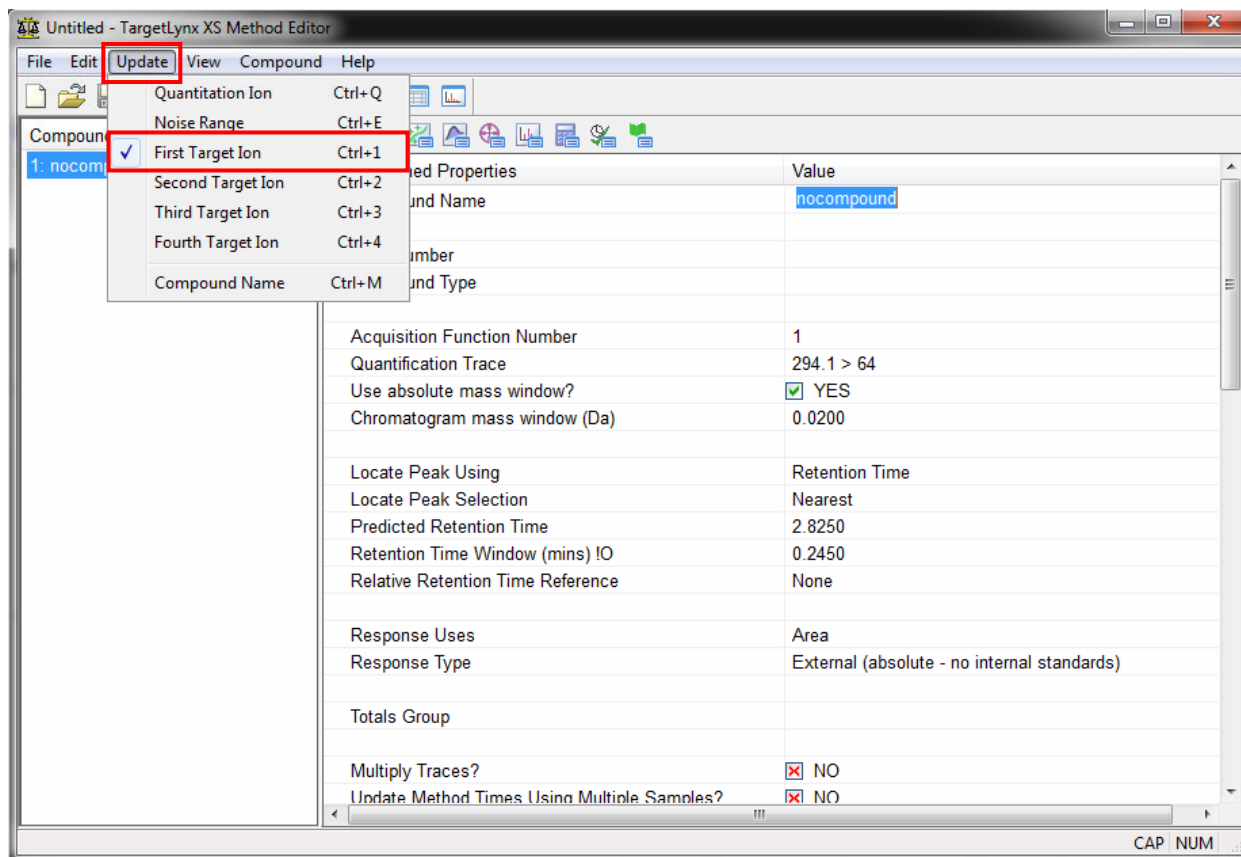
- E. 點選 Update，勾選定量離子對 Quantitation Ion 以及成分名稱 Compound Name。



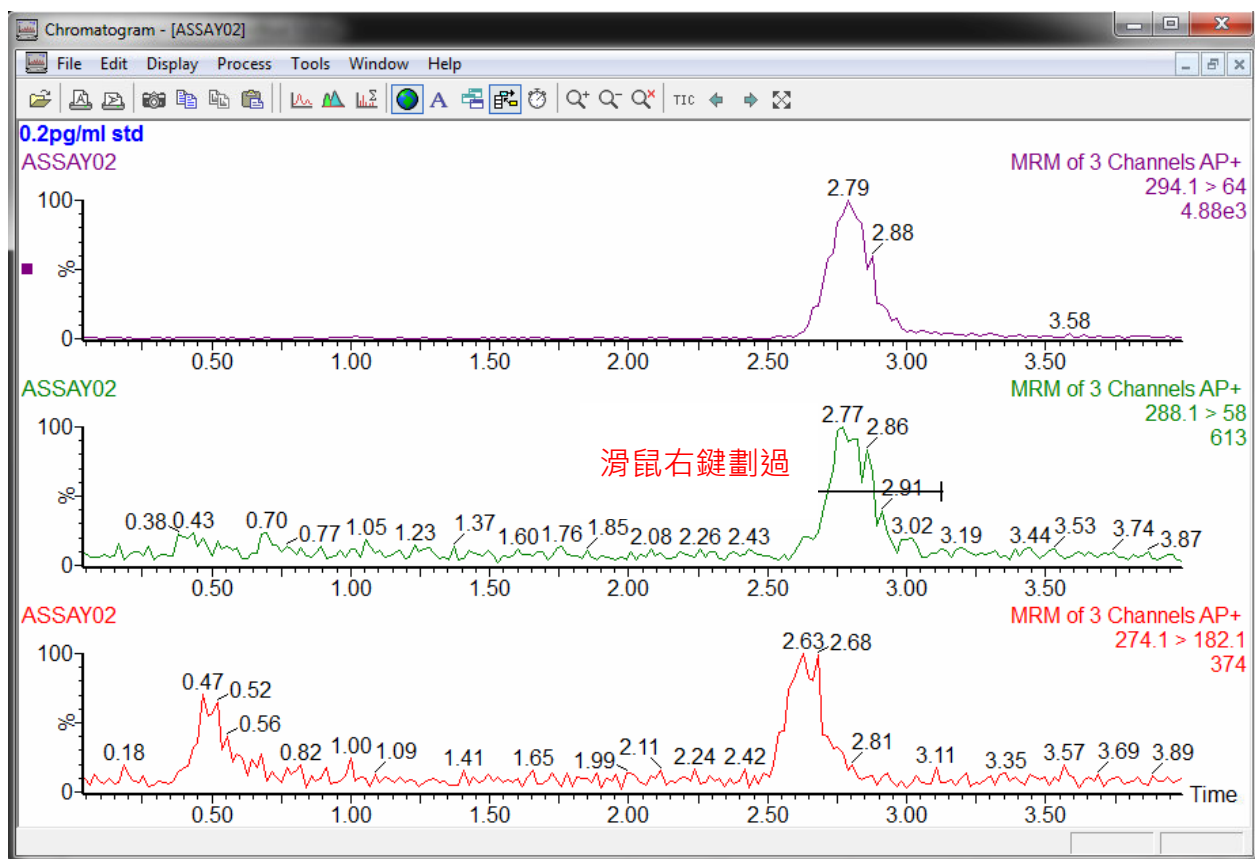
F. 在定量離子對的層析圖上，按住滑鼠右鍵，劃過待測物訊號峰。



G. 回到 TargetLynx 設定視窗，勾選 Update 選項中的 First Target Ion，設定第一定性離子對。



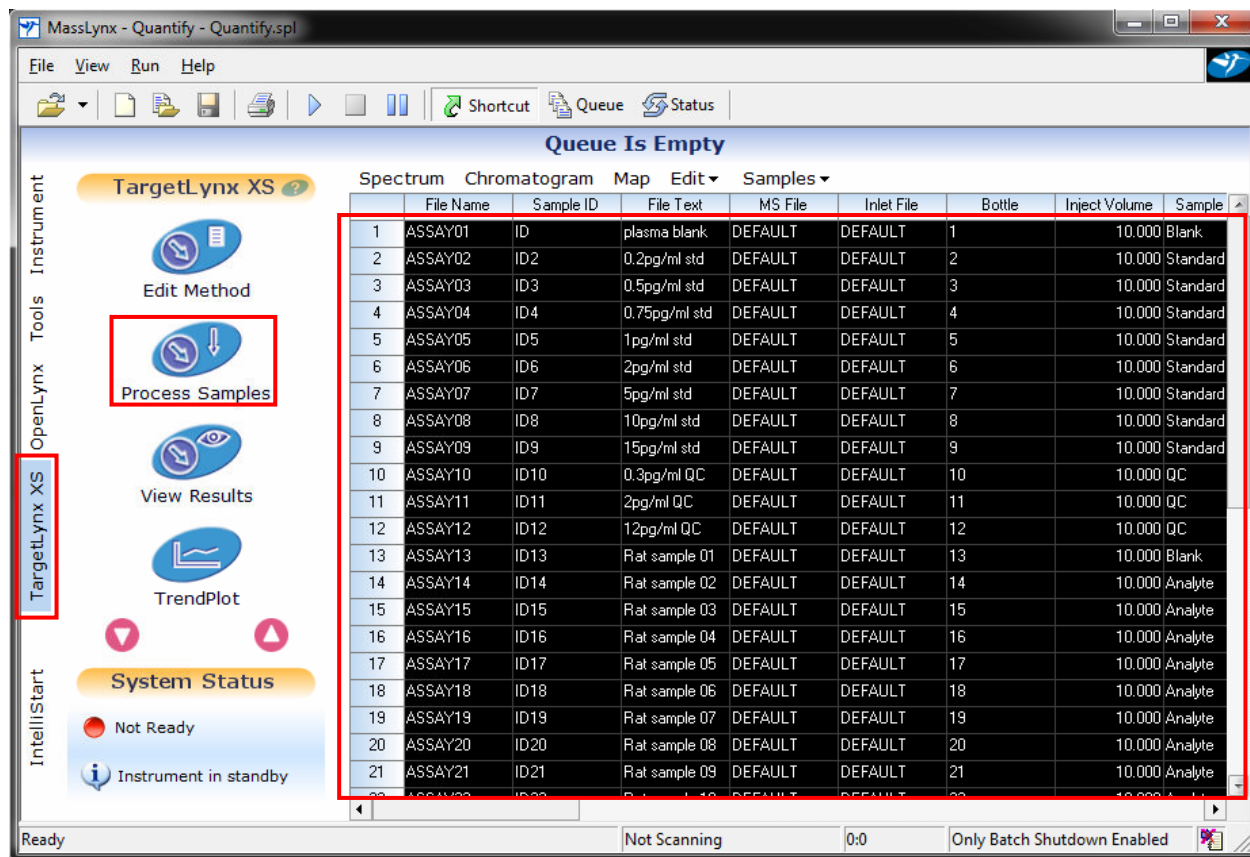
- H. 在第一定性離子對的層析圖上，按住滑鼠右鍵，劃過待測物訊號峰。重複步驟 C~H，將每個待測物成分都建立定量分析指令。



- I. 重複步驟 C~H，將每個待測物成分都建立定量分析指令。
- J. 詳細 TargetLynx 設定說明，請參考[附錄二、TargetLynx 設定說明](#)。

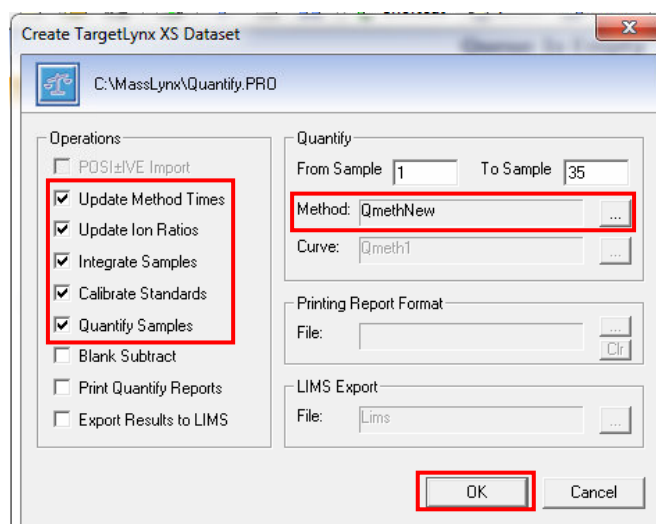
2. 數據處理

A. 樣品清單選擇數據，點選 TargetLynx 分頁，再點選 Process Samples。



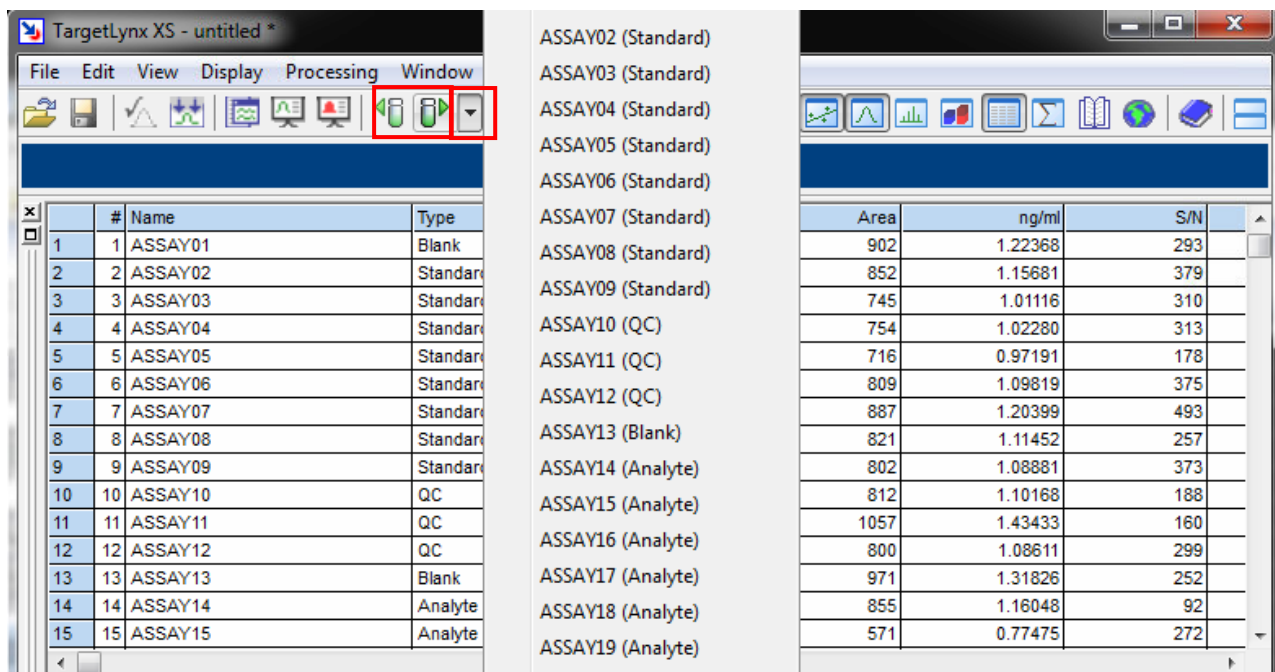
B. 勾選 Update Method Times、Update Ion Ratios、Integrate Samples、Calibrate Standards、Quantify Samples。Method 選擇要套用的

TargetLynx 方法。按下 OK。出現數據處理結果視窗



3. 閱覽數據

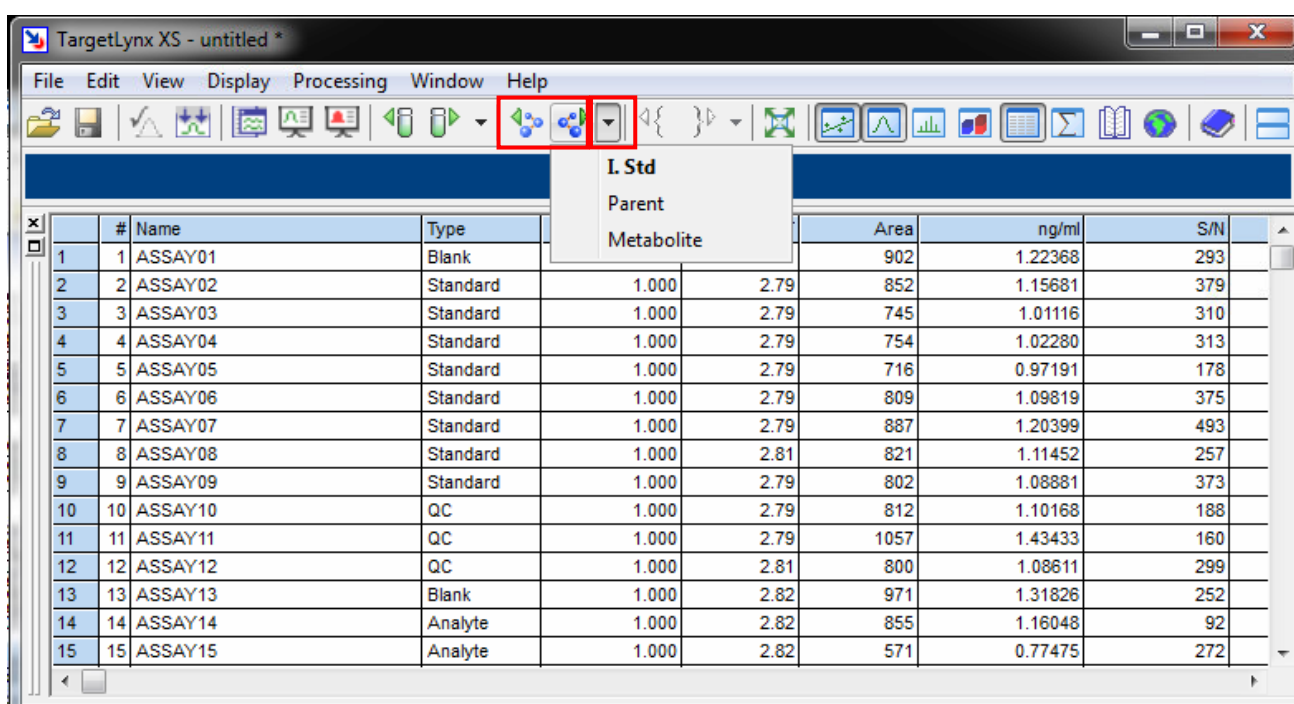
- A. 點選   按鈕，可以切換樣品檔案。或是以下拉選單直接選擇樣品檔案。



The screenshot shows the TargetLynx XS software interface. The menu bar includes File, Edit, View, Display, Processing, and Window. The toolbar contains various icons, with the sample selection icon (two green cylinders) highlighted by a red box. Below the toolbar, a list of assay samples is displayed, including ASSAY01 through ASSAY15, with their respective types (Blank, Standard, QC, Analyte). To the right, a data table shows the results for these assays, including Area, ng/ml, and S/N values.

Area	ng/ml	S/N
902	1.22368	293
852	1.15681	379
745	1.01116	310
754	1.02280	313
716	0.97191	178
809	1.09819	375
887	1.20399	493
821	1.11452	257
802	1.08881	373
812	1.10168	188
1057	1.43433	160
800	1.08611	299
971	1.31826	252
855	1.16048	92
571	0.77475	272

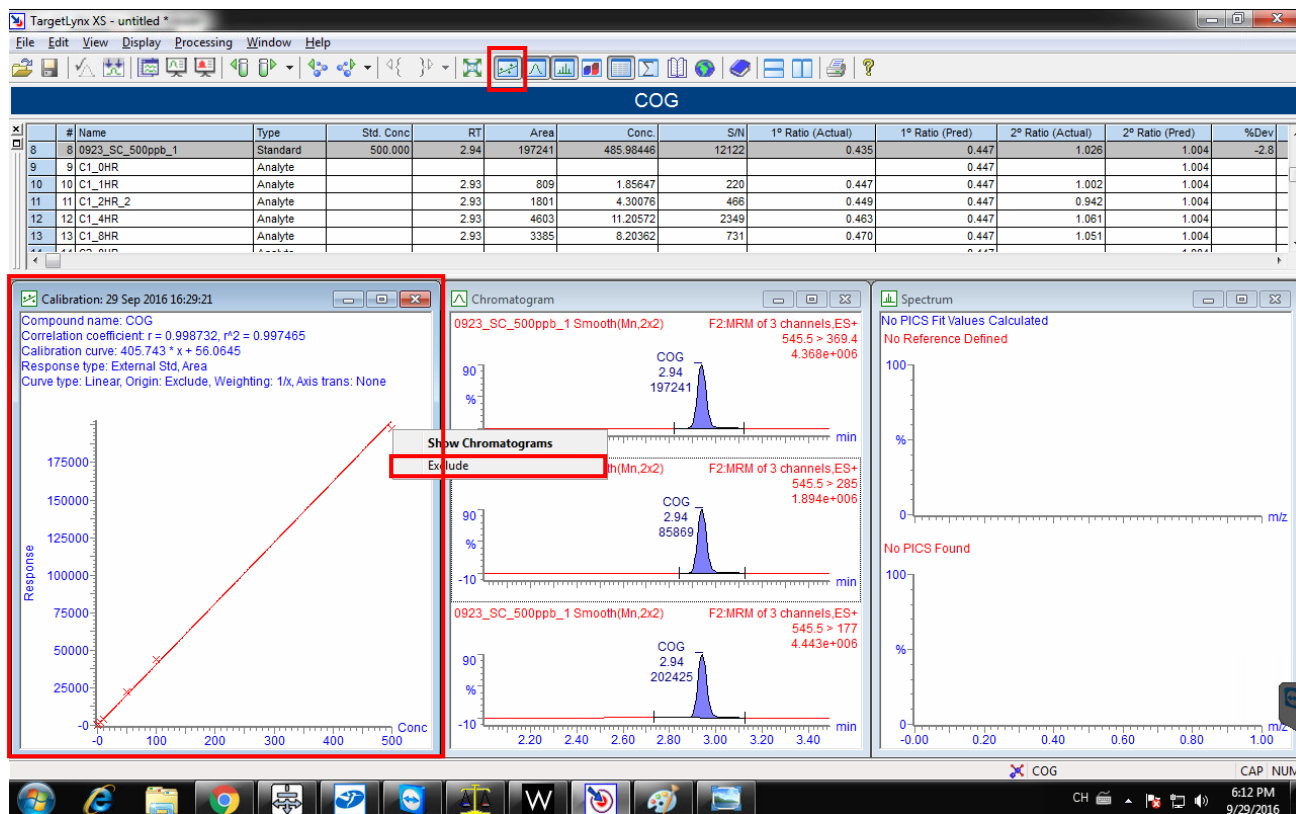
- B. 點選   按鈕，可以切換成分。或是可以以下拉選單直接選擇成分。



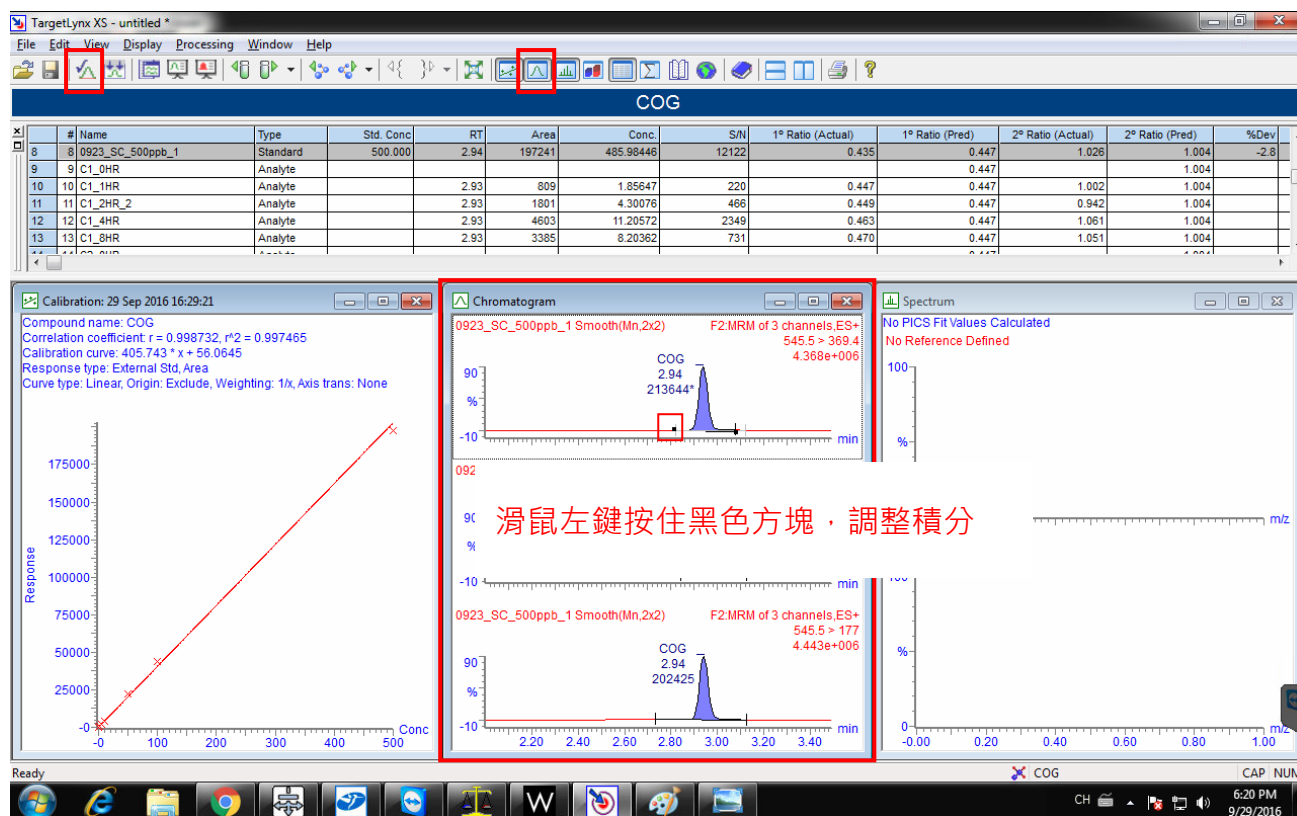
The screenshot shows the TargetLynx XS software interface. The menu bar includes File, Edit, View, Display, Processing, Window, and Help. The toolbar contains various icons, with the component selection icon (two blue cylinders) highlighted by a red box. Below the toolbar, a list of assay samples is displayed, including ASSAY01 through ASSAY15, with their respective types (Blank, Standard, QC, Analyte). To the right, a data table shows the results for these assays, including Area, ng/ml, and S/N values. A dropdown menu is open, showing the selection of 'I. Std' as the parent metabolite.

Area	ng/ml	S/N
902	1.22368	293
852	1.15681	379
745	1.01116	310
754	1.02280	313
716	0.97191	178
809	1.09819	375
887	1.20399	493
821	1.11452	257
802	1.08881	373
812	1.10168	188
1057	1.43433	160
800	1.08611	299
971	1.31826	252
855	1.16048	92
571	0.77475	272

- C. 點選  按鈕，開啟檢量線視窗，檢示檢量線品質。在檢量線上的標準品點，按下滑鼠右鍵，選擇 Exclude，可排除標準品點。



- A. 點選  按鈕，開啟層析圖視窗，檢示層析峰積分品質。滑鼠左鍵點選層析峰，再以滑鼠左鍵按住黑色方塊，調整層析峰積分範圍。按下  按鈕，寫下更改理由，儲存調整積分的結果。



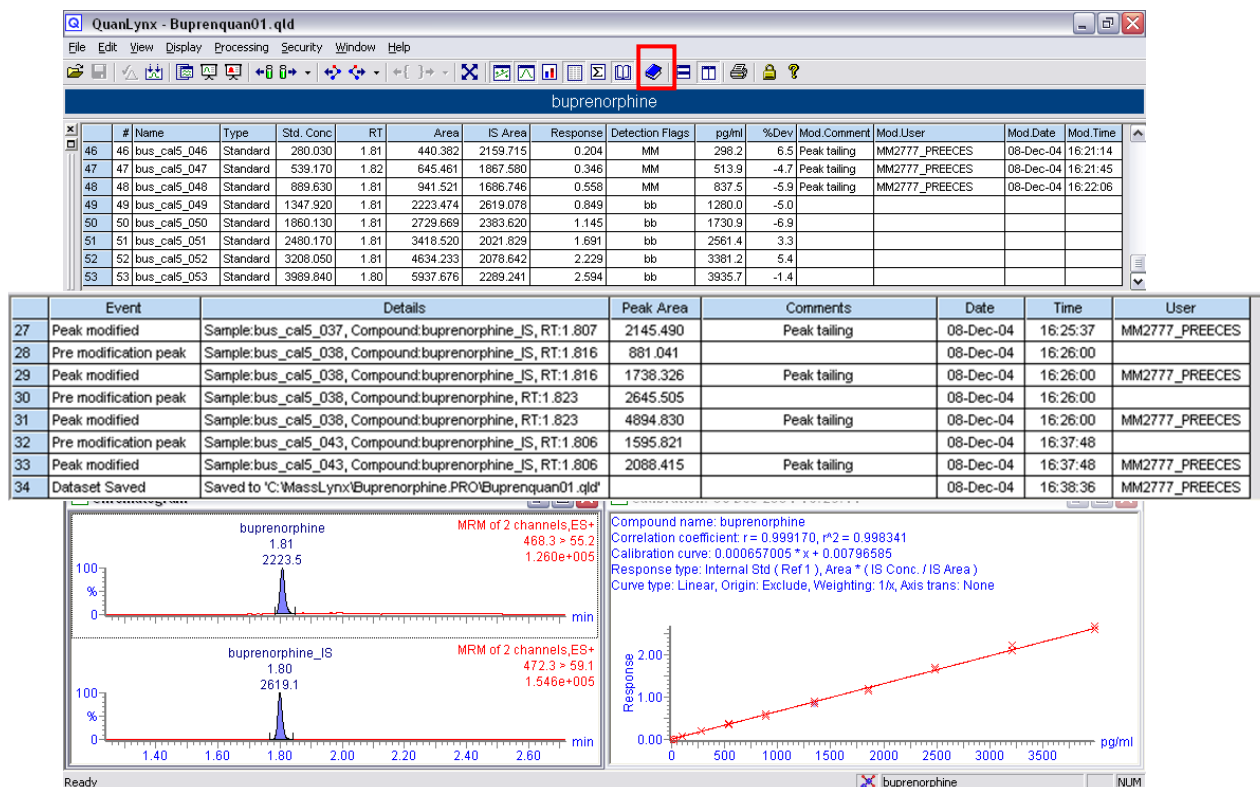
Sign Modification

This operation may be signed and/or have a reason for change.

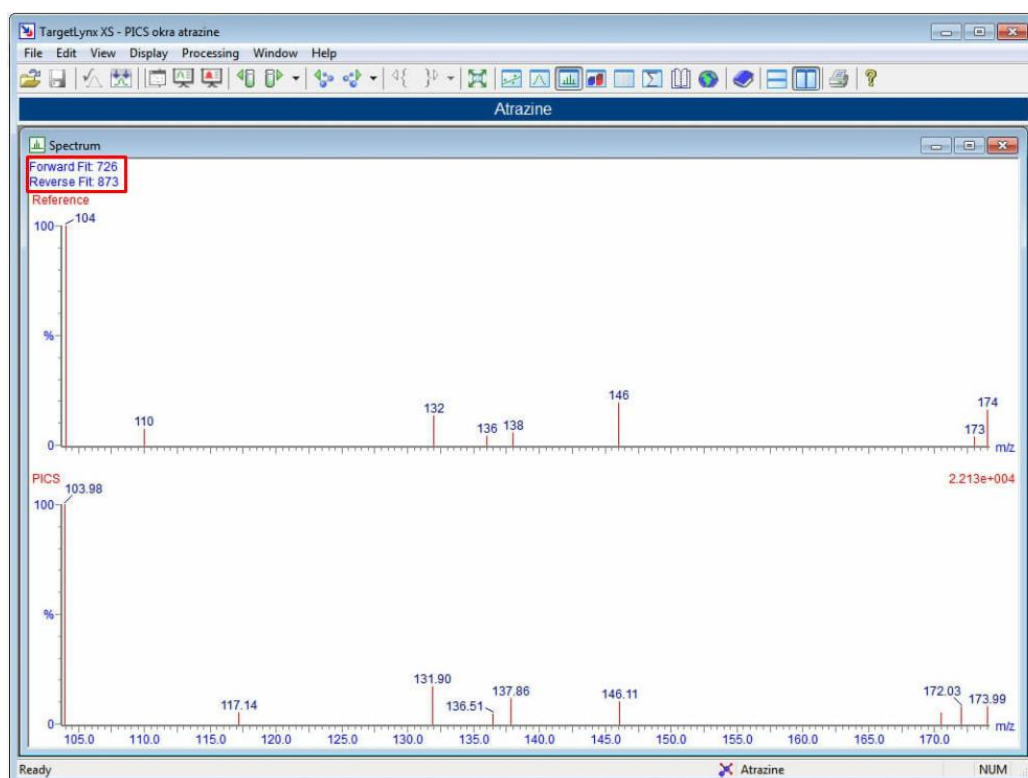
User: analysts1
Password: ●●●●●●●●
Domain: MM2737

Reason for change:
- Select Reason -
- Select Reason -
peak modification
Changes made in accordance with SOP 2345

B. 點選  按鈕，可觀看積分過程及紀錄。



C. 點選  按鈕，開啟 PIC Scan 視窗，檢視樣品的子離子掃描質譜圖(下圖)與標準品碎片質譜圖(Reference Defined)是否相似。



D. 點選  按鈕，開啟總表視窗，檢視所有樣品的每一個成分的定量濃度結果。

若有超過品管法規限制的成分，儲存格會標示為紅色。滑鼠指向紅色格子，

可查看超過品質規範的項目。

若檢出濃度低於 Reporting concentration，則會顯示為 Below RL。

若紅色格子中顯示為粗體字，代表檢出濃度超過 maximum concentration。

TargetLynx XS - Overview Flagging

File Edit View Display Processing Help

Methamidophos

	Methamidop...	Methomyl	Acephate	Atrazine-de...	Simazine	Chlorotoluron	Monolinuron	Atrazine	Metoxuron	Terbutylaz...	Sebutylazi...
050617_egg_002	Below RL	Below RL		Below RL	Below RL	Below RL	Below RL		Below RL	Below RL	Below RL
050617_egg_003	4.7	4.6	4.2	4.4	4.4	4.6	4.3	4.4	4.5	4.4	4.4
050617_egg_004	10.5	10.3	10.9	10.3	10.4	10.2	10.4	10.3	10.3	10.1	10.1
050617_egg_005	25.2	24.9	27.2	25.6	25.5	24.7	25.7	25.2	25.0	24.9	25.1
050617_egg_006	49.1	50.8	53.5	49.3	49.2	48.9	49.7	50.4	50.4	49.2	49.4
050617_egg_007	75.0	75.2	79.5	74.3	75.8	74.1	75.4	76.5	74.2	74.4	74.2
050617_egg_009	Below RL	Below RL		Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL
050617_egg_011	10.5	10.5		10.5	10.5	10.7	10.6	10.5	10.5	10.8	10.6
050617_egg_012	25.6	25.6		25.6	25.6	25.7	25.4	25.6	25.5	26.0	26.4
050617_egg_013	51.1	51.1		51.1	51.1	50.2	49.9	49.6	50.4	50.6	50.2
050617_egg_014	74.3	74.3		74.3	74.3	75.8	75.6	75.5	75.1	76.0	74.9
050617_egg_015	99.6	99.6		99.6	99.6	100.0	99.3	98.9	100.6	99.7	99.7
050617_egg_016	Below RL	Below RL		Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL
050617_egg_017	98.8	98.8		98.8	98.8	100.2	99.1	100.5	99.0	99.9	99.0
050617_egg_018	99.9	99.9		99.9	99.9	100.1	99.7	97.5	99.5	99.0	100.8
050617_egg_019	Below RL	Below RL		Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL
050617_egg_020	Below RL	Below RL		Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL
050617_egg_021	Below RL	Below RL		Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL	Below RL
050617_egg_022	48.9	48.1		48.9	48.1	49.8	49.8	49.4	49.6	43.3	48.8

050617_egg_007
Methamidophos
1° Target Ion Ratio Flagged
Actual Ratio = 3.55
Ratio Limits = 3.47 ± 0.03
Maximum concentration exceeded
Maximum Concentration: 50.000 ng/ml
Concentration: 74.978 ng/ml
Reporting concentration exceeded
Reporting Concentration: 3.000 ng/ml
Concentration: 74.978 ng/ml

Custom Reporting: Select reports to generate

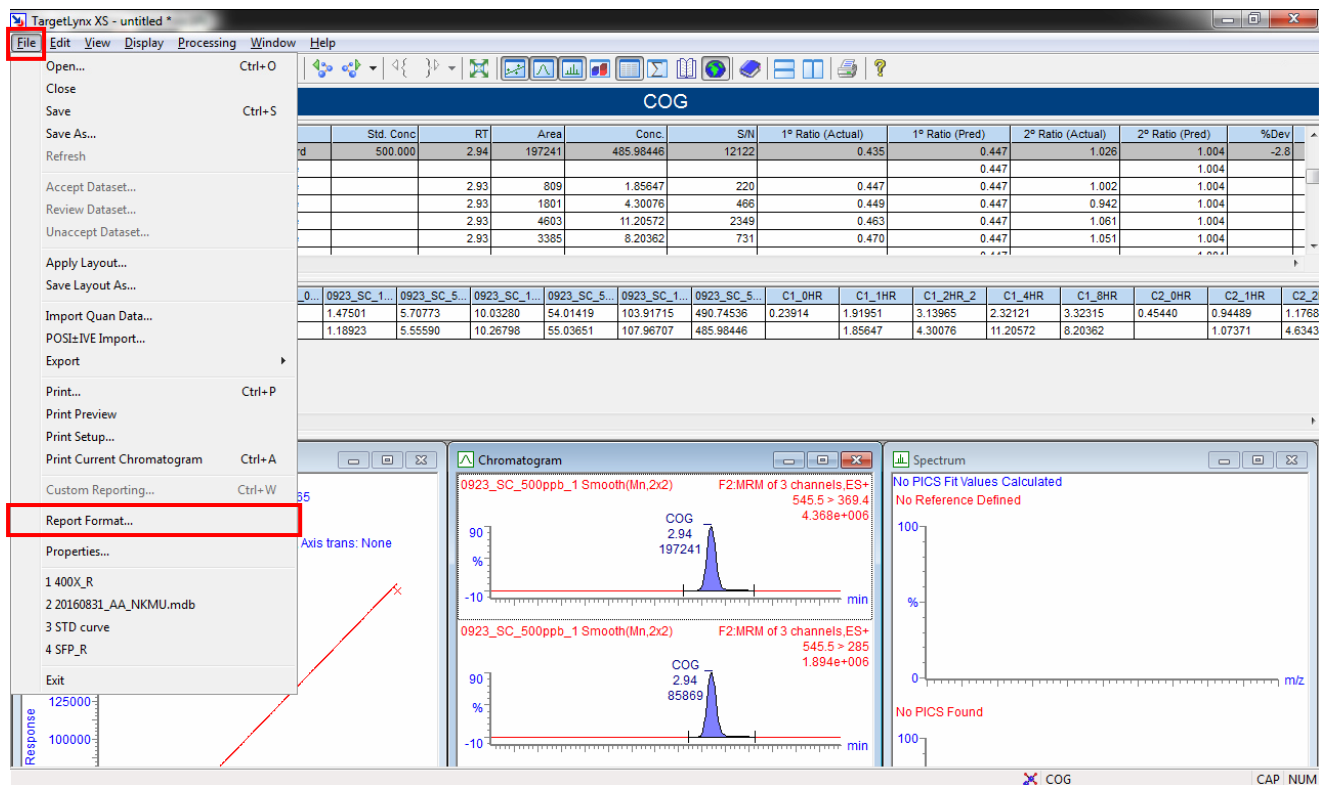
Methamidophos

NUM

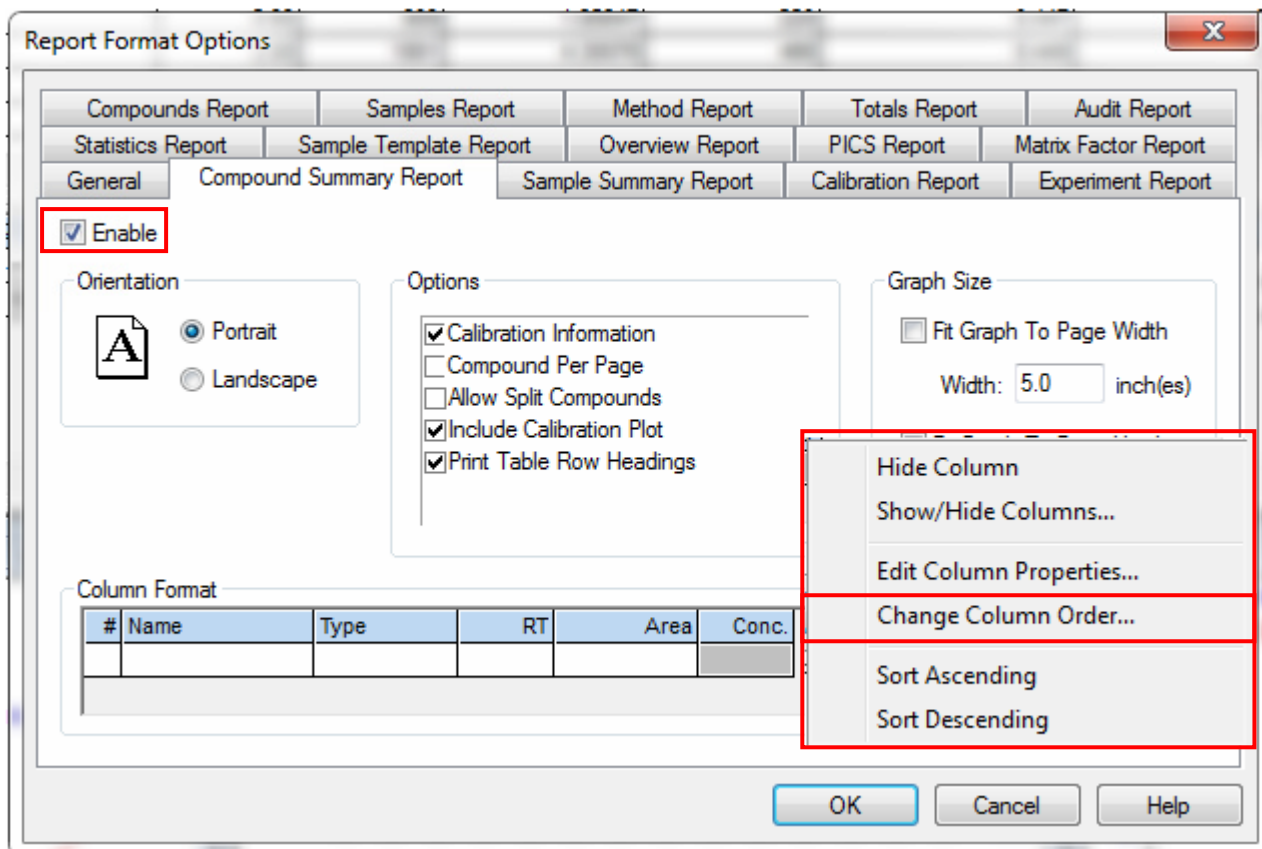
V. 列印報告

1. 編輯報告格式

A. 在 TargetLynx 視窗，點選 File>Report Format



- B. 選擇想要的範本，勾選 enable。在表格上按下滑鼠右鍵，點選 Change Column Order，可增加表格其他欄位。



2. 輸出報告

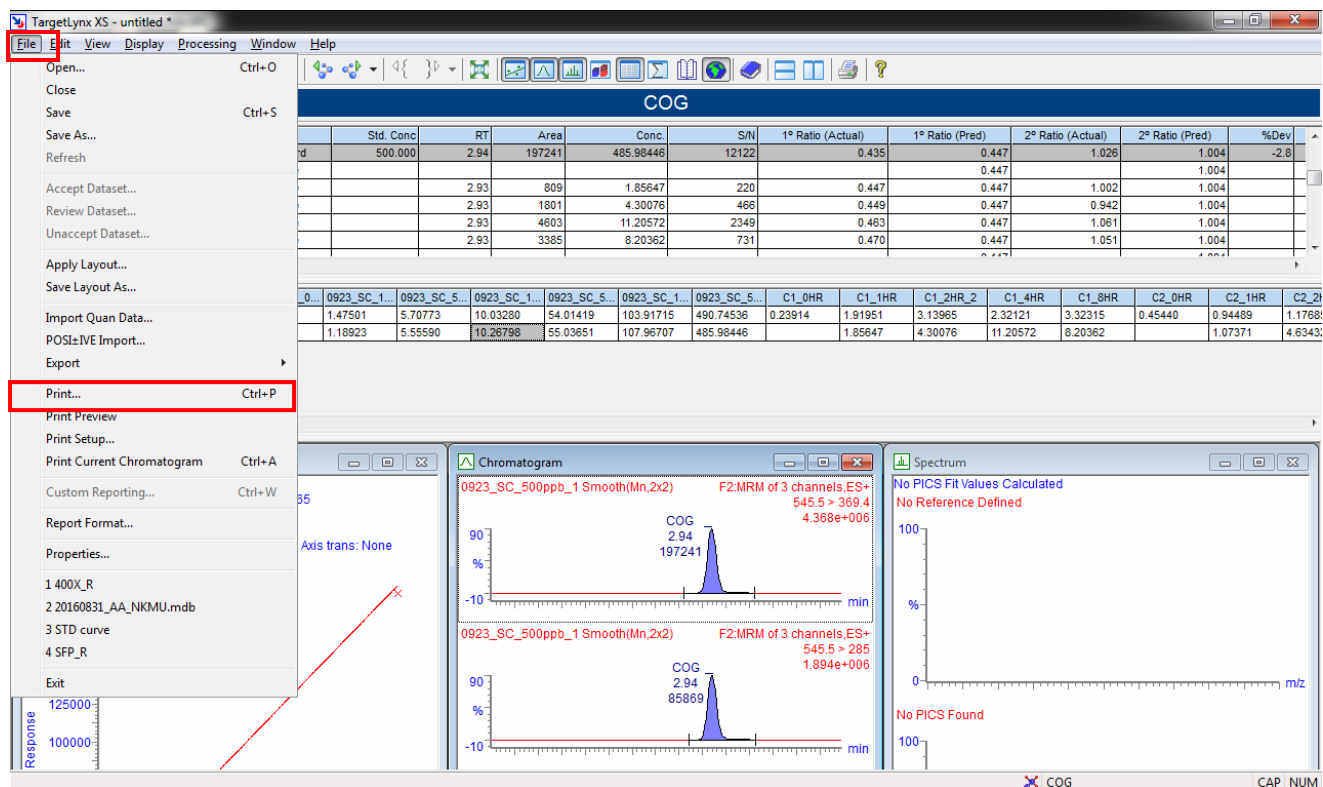
- A. 在 TargetLynx 視窗，點選 File>Export，選擇 Current Summary 可匯出當下瀏覽的樣品與成分的定量結果。選擇 Complete Summary 可匯出所有樣品與成分的定量結果。匯出的表格格式與瀏覽畫面中的表格相同。

The screenshot shows the TargetLynx XS software interface. The 'File' menu is open, and the 'Export' option is selected, which has opened a sub-menu. In this sub-menu, 'Current Summary...' is highlighted with a red box. A red arrow points from this option to the 'COG' table at the top of the window. The 'COG' table contains the following data:

	Std. Conc	RT	Area	Conc.	S/N	1° Ratio (Actual)	1° Ratio (Pred)	2° Ratio (Actual)	2° Ratio (Pred)	%Dev
500.000	2.94	197241	485.98446	12122	0.435	0.447	0.447	1.026	1.004	-2.8
	2.93	809	1.85647	220	0.447	0.447	1.002	1.004		
	2.93	1801	4.30076	466	0.449	0.447	0.942	1.004		
	2.93	4603	11.20572	2349	0.463	0.447	1.061	1.004		
	2.93	3385	8.20362	731	0.470	0.447	1.051	1.004		

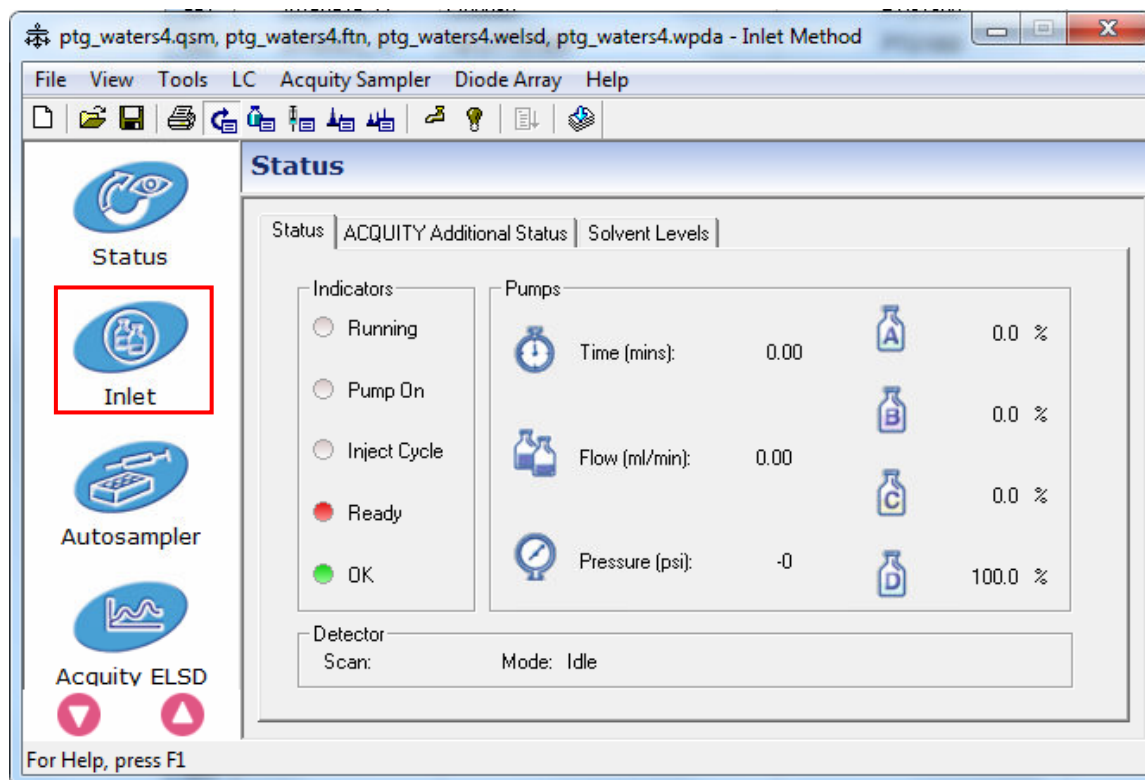
Below the table, there are two chromatograms. The top one is labeled 'COG 2.94 197241' and the bottom one is labeled 'COG 2.94 85869'. Both show a single peak at 2.94 minutes. The right side of the interface shows a 'Spectrum' window with the text 'No PICS Fit Values Calculated' and 'No Reference Defined'.

B. 點選 File>Print，可列印紙本報告。



VI. 附錄一、儀器方法設定

1. Inlet File – 泵浦設定



A. ACQUITY UPLC H-Class · 設定四溶媒系統 Quaternary Solvent Manager

Modify ACQUITY Quaternary Solvent Manager Instrument Method

Acquity Quaternary Solvent Manager

Auto • Blend Plus™ Run Time: 25 min

General Misc Data

Solvents

A 0.1% FA water

B 0.1% FA ACN

C 0.1% FA in Methanol

D No Change

Pressure Limits

Low: 0 psi

High: 15000 psi

Seal Wash Period: 5.00 min

Gradient:

	Time	Flow (mL/min)	%A	%B	%C	%D	Curve
1	Initial	0.500	100.0	0.0	0.0	0.0	Initial
2	10.00	0.500	0.0	100.0	0.0	0.0	6
3	15.00	0.500	0.0	100.0	0.0	0.0	6
4	20.00	0.500	100.0	0.0	0.0	0.0	6

Comment:

OK Cancel

- ✓ **Solvent** : 可選擇移動相溶劑種類。
- ✓ **Flow (mL/min)** : 輸入移動相流速。
- ✓ **Pressure Limits** : 最高 15000psi。
- ✓ **Gradient**
 - **Time(min)** : 輸入梯度變化的時間點。
 - **Flow (mL/min)** : 輸入移動相流速。
 - **%A/%B** : 移動相比例。
- ✓ **Run Time** : 須大於或等於梯度表最後時間

B. ACQUITY UPLC I-Class，設定二溶媒系統 Binary Solvent Manager

Binary Solvent Manager Run Time: 60.00 min

General | Data | Analog Out | Events

Solvents

A1 Water

B1 Acetonitrile

Pressure Limits

Low: 0 psi

High: 15000 psi

Seal Wash: 5.0 min

Gradient ☐ 2D Repeat

	Time (min)	Flow (mL/min)	%A	%B	Curve
1	Initial	0.400	99.0	1.0	Initial
2	5.00	0.400	99.0	1.0	6
3	40.00	0.400	50.0	50.0	6
4	40.10	0.400	10.0	90.0	6
5	55.00	0.400	10.0	90.0	6
6	55.10	0.400	99.0	1.0	6

Gradient Start:

☒ At injection

☐ Before injection

☐ After injection

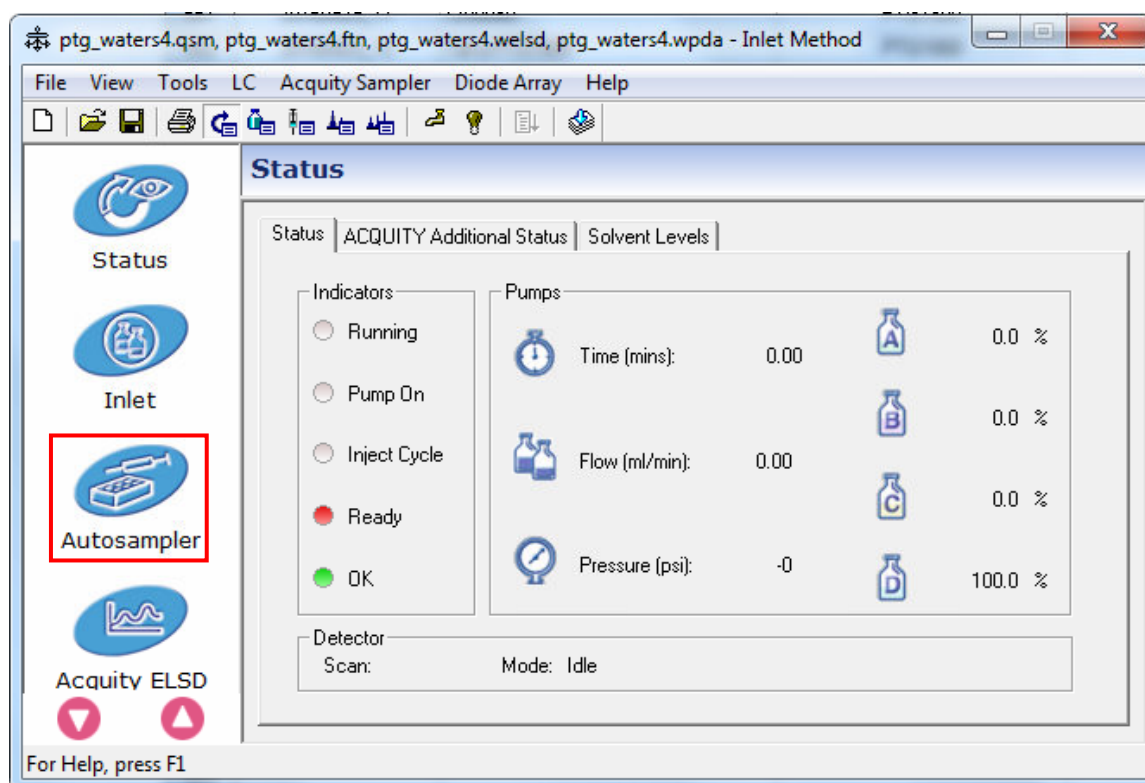
0 uL

Comment:

OK Cancel

- ✓ **Solvent :**
 - A1/A2 移動相管路擇一，B1/B2 移動相管路擇一。
 - 可分別註明溶劑種類。
- ✓ **Pressure Limits :** 最高 18000psi。
- ✓ **Gradient**
 - **Time(min) :** 輸入梯度變化的時間點。
 - **Flow (mL/min) :** 輸入移動相流速。
 - **%A/%B :** 移動相比例。
- ✓ **Run Time :** 須大於或等於梯度表最後時間

2. Inlet File – 自動注射器設定



A. Sample Manager FTN

Modify Sample Manager Instrument Method

Sample Manager FTN Run Time: 1.00 min

General | Data | Dilution | Events

Solvents

Wash Solvent Name: 0.1%FA in MeOH

Purge Solvent Name: Water

Pre-Inject Wash: 60 sec

Post-Inject Wash: 60 sec

Temperature Control

Column: 40.0 °C Alarm Band: ± 5.0 °C

Sample: Off °C ± 5.0 °C

☐ Loop Offline: Automatic min

☐ Load Ahead

Active Preheater: Use Console Configuration

Comment:

OK Cancel Advanced...

- ✓ **Wash Solvent Name** : 選擇 Wash Solvent 溶劑種類。
- ✓ **Purge Solvent Name** : 選擇 Purge Solvent 溶劑種類。
- ✓ **Pre-Inject Wash** : 抽樣前洗針時間。
- ✓ **Post-Inject Wash** : 注射後洗針時間。
- ✓ **Temperature Control**
 - **Column** : 外掛 30cm 管柱烘箱時的管柱控制溫度。
 - **Sample** : 輸入樣品控溫。

B. Sample Manager FL

Modify Sample Manager Instrument Method

Run Time: 1.00 min

Sample Manager

General | Data | Events

Wash Solvents

Weak Wash Name: [Dropdown]

Strong Wash Name: [Dropdown]

Weak Wash Volume: 600 µL

Strong Wash Volume: 200 µL

Max Sample Volume: 0.00 µL

Comment: [Text Box]

Temperature Control

Column: [Dropdown] °C

Alarm Band: ☐ ±5.0 °C

Sample: [Dropdown] °C

☐ ±5 °C

Loop Offline: [Dropdown] min

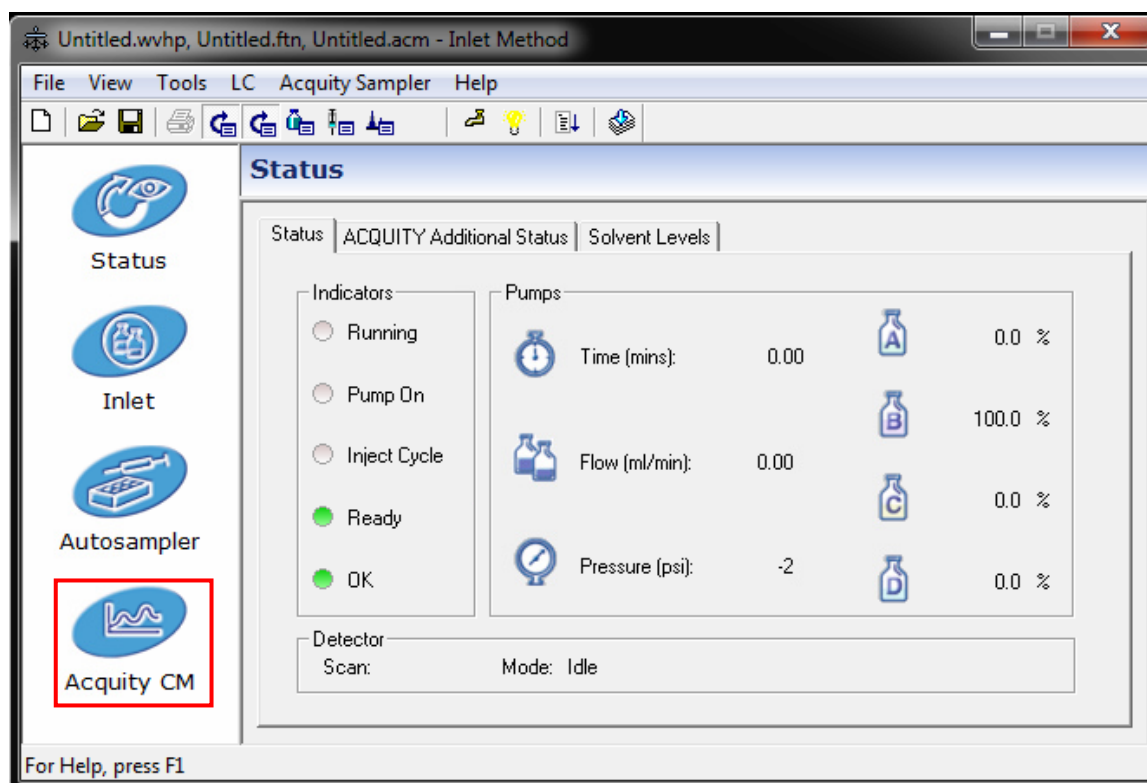
☐ Load Ahead

Advanced...

OK Cancel

- ✓ **Wash Solvent**
 - **Weak Wash Name** : 選擇弱洗液溶劑種類。
 - **Strong Wash Name** : 選擇強洗液溶劑種類。
 - **Weak Wash Volume** : 輸入弱洗液清洗體積。
 - **Strong Wash Volume** : 選擇強洗液清洗體積。
- ✓ **Temperature Control**
 - **Column** : 外掛 30cm 管柱烘箱時的管柱控制溫度。
 - **Sample** : 輸入樣品控溫。
- ✓ **Advanced**
 - **Injection Mode** : 可選擇注射模式，Full Loop、PLNO、Partial Loop。

3. Inlet File – 管柱設定



A. Column Manager

Modify ColumnManager Instrument Method

Column Manager

General | Data

☒ Column Selection Run Time: 1.00 min
☐ Advanced

Temperature

Column: Off °C ☒ Alarm Band: ± 5.0 °C ☐ Shutdown all columns

Column Selection

Valve Position: Column 1 Equilibration Time: 0.1 min

External Valve 1: No Change External Valve 2: No Change External Valve 3: No Change

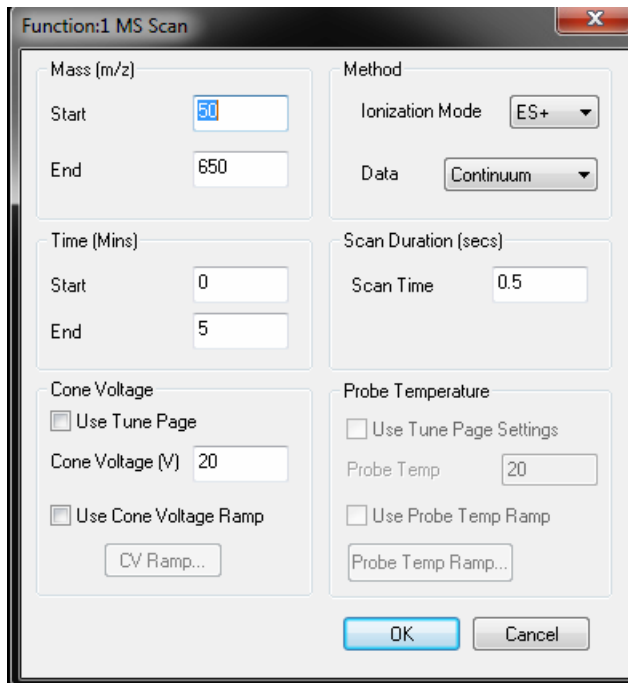
Comment:

OK Cancel

- ✓ **Temperature**
 - **Column** : 輸入管柱控溫。
- ✓ **Column Selection** :
 - **Valve Position** : 選擇 Column 位置。

4. MS File –質譜儀紀錄模式設定

A. MS Scan MS Scan



- ✓ **Mass (m/z) Start/End**：指定掃描的 m/z 範圍。
- ✓ **Time (Mins) Start/Stop**：層析圖紀錄的時間範圍。
- ✓ **Ionization Mode**：選擇游離法。(ES，電噴灑游離法；API，大氣壓化學游離法；APPI，大氣壓光化學游離法；ASAP，固態氣化化學游離法。)
- ✓ **Data**：質譜圖中質量訊號峰的紀錄方式。Centroid，直條圖；Continuum，連續波峰圖。
- ✓ **Scan Duration(secs)**：質譜圖指定之 m/z 範圍的掃描速率。設定值越大，質譜圖感度越弱，層析圖點數越多。採用預設值即可。
- ✓ **Cone Voltage**：指定進樣錐電壓。或是 Use Tune Page 依照 Tune Page 的進樣錐電壓。設定值越大，離子在進樣錐碎裂的機會越大，越不容易發現指定的離子訊號。

B. SIR SIR

Function:1 SIR

Method
Ionization Mode: ES+
Span: 0

Use Tune Cone Voltage: ☐

Retention Window (Mins)
Start: 0
End: 16

Probe Temperature
Use Tune Page Settings: ☒
Probe Temp: 20
Use Probe Temp Ramp: ☐
Probe Temp Ramp...

Channels

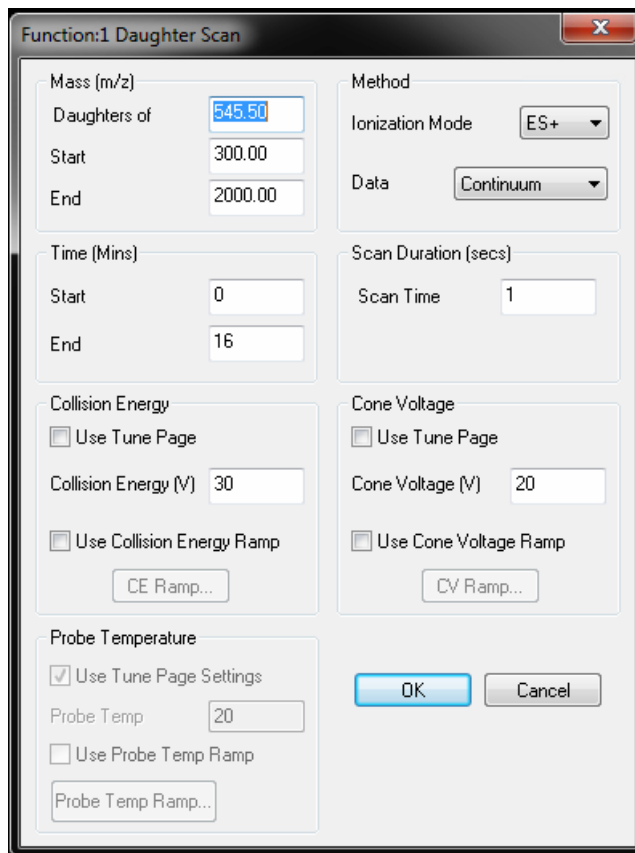
	Compound Name	Mass (m/z)	Auto Dwell	Dwell (s)	Cone (V)	Com
1			☐	0.025		

Add Delete Clear All Undo Redo Fill Down

OK Cancel

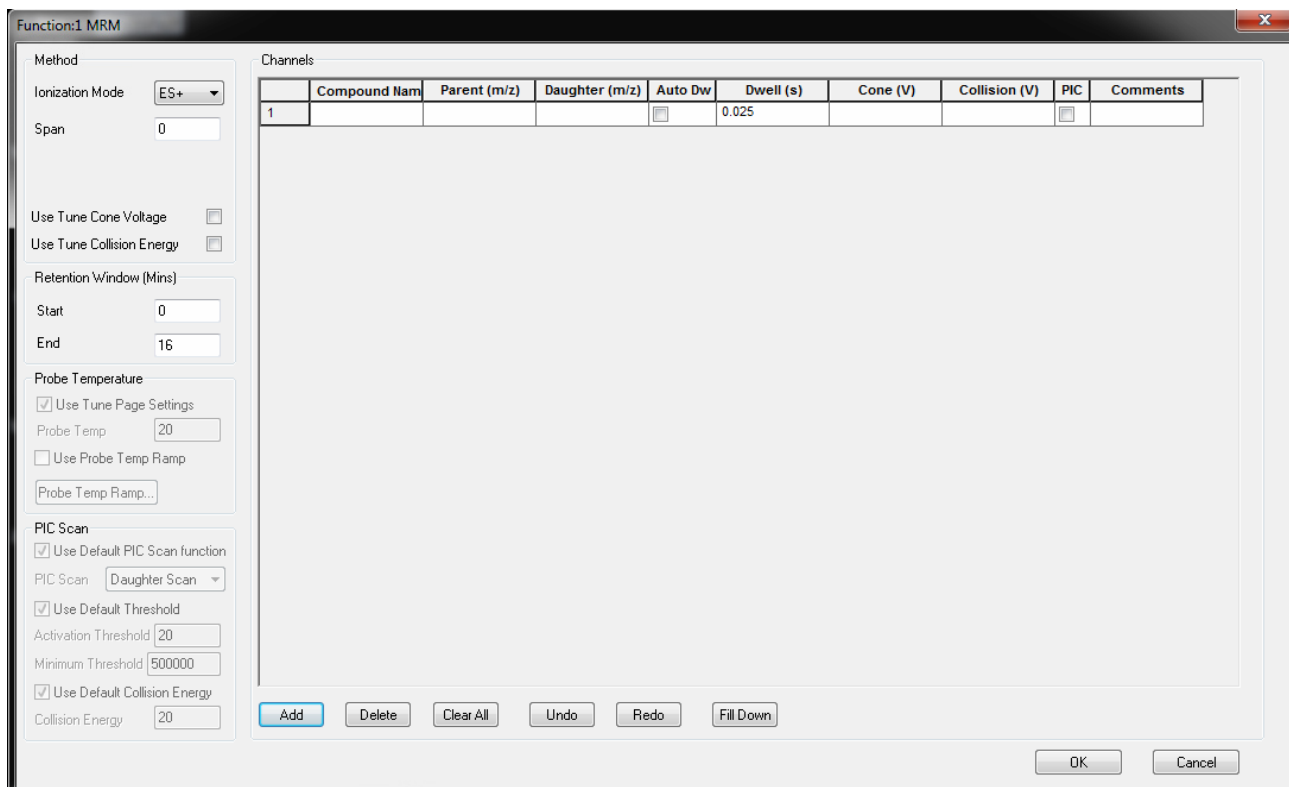
- ✓ **Ionization Mode**：選擇游離法。(ES，電噴灑游離法；API，大氣壓化學游離法；APPI，大氣壓光化學游離法；ASAP，固態氣化化學游離法。)
- ✓ **Span**：允許 m/z 的質量誤差。
- ✓ **Retention Window (Mins) Start/Stop**：層析圖紀錄的時間範圍。
- ✓ **Compound Name**：成分名稱。
- ✓ **Mass (m/z)**：指定 m/z。
- ✓ **Dwell (s)**：四極桿分析 m/z 的維持時間。設定值越大，質譜圖感度越強，層析圖點數越少。採用預設值即可。
- ✓ **Cone Voltage**：指定進樣錐電壓。或是 Use Tune 依照 Tune Page 的進樣錐電壓。設定值越大，離子在進樣錐碎裂的機會越大，越不容易發現指定的離子訊號。

C. Daughter Scan Daughters



- ✓ **Daughters of**：指定前驅離子進行碎裂
- ✓ **Start/End**：指定掃描的 m/z 範圍。
- ✓ **Time Start/Stop (min)**：層析圖紀錄的時間範圍。
- ✓ **Ionization Mode**：選擇游離法。(ES，電噴灑游離法；API，大氣壓化學游離法；APPI，大氣壓光化學游離法；ASAP，固態氣化化學游離法。)
- ✓ **Data**：質譜圖中質量訊號峰的紀錄方式。Centroid，直條圖；Continuum，連續波峰圖。
- ✓ **Scan Duration(secs)**：質譜圖指定之 m/z 範圍的掃描速率。設定值越大，質譜圖感度越弱，層析圖點數越多。採用預設值即可。
- ✓ **Collision Energy**：指定碰撞能量。或是 Use Tune 依照 Tune Page 的碰撞能量。碰撞能量越大碎片越多越小。
- ✓ **Cone Voltage**：指定進樣錐電壓。或是 Use Tune Page 依照 Tune Page 的進樣錐電壓。設定值越大，離子在進樣錐碎裂的機會越大，越不容易發現指定的離子訊號。

D. MRM MRM



Function:1 MRM

Method

Ionization Mode: ES+

Span: 0

Use Tune Cone Voltage: ☐

Use Tune Collision Energy: ☐

Retention Window (Mins)

Start: 0

End: 16

Probe Temperature

☒ Use Tune Page Settings

Probe Temp: 20

☐ Use Probe Temp Ramp

Probe Temp Ramp...

PIC Scan

☒ Use Default PIC Scan function

PIC Scan: Daughter Scan

☒ Use Default Threshold

Activation Threshold: 20

Minimum Threshold: 500000

☒ Use Default Collision Energy

Collision Energy: 20

Channels

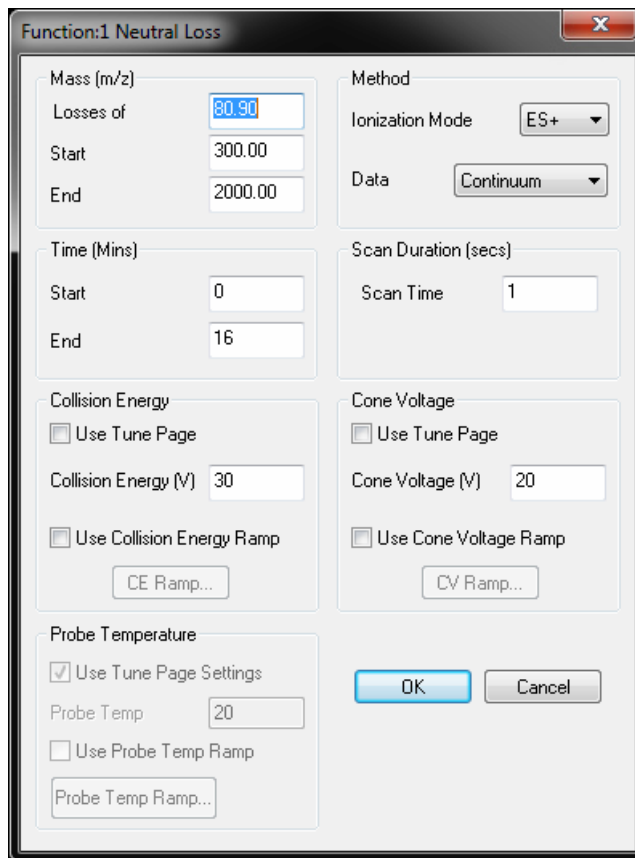
	Compound Name	Parent (m/z)	Daughter (m/z)	Auto Dw	Dwell (s)	Cone (V)	Collision (V)	PIC	Comments
1				☐	0.025			☐	

Add Delete Clear All Undo Redo Fill Down

OK Cancel

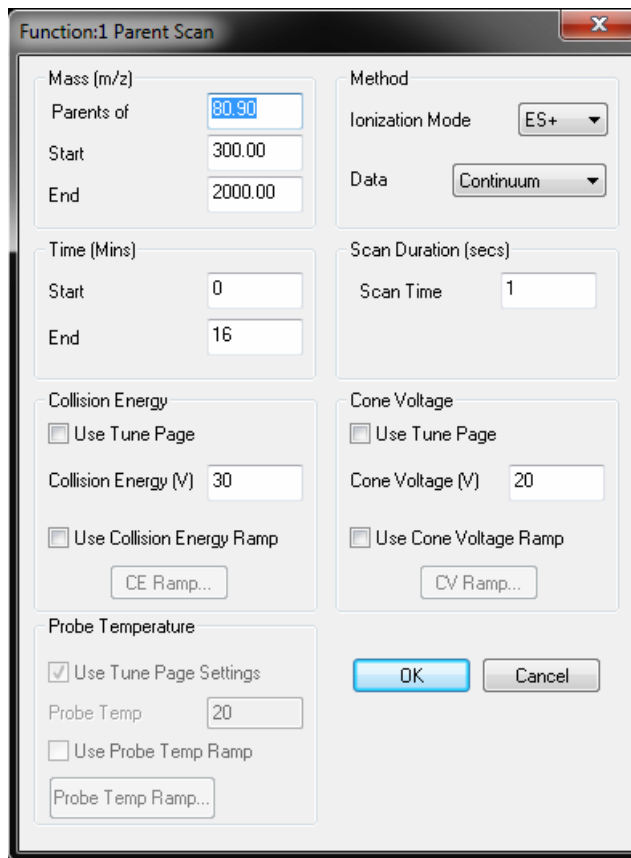
- ✓ **Ionization Mode**：選擇游離法。(ES，電噴灑游離法；API，大氣壓化學游離法；APPI，大氣壓光化學游離法；ASAP，固態氣化化學游離法。)
- ✓ **Span**：允許 m/z 的質量誤差。
- ✓ **Retention Window (Mins) Start/Stop**：層析圖紀錄的時間範圍。
- ✓ **Compound Name**：成分名稱。
- ✓ **Parent (m/z)**：指定前趨離子 m/z，進行碎裂。
- ✓ **Daughter (m/z)**：指定碎片離子 m/z。
- ✓ **Dwell (s)**：四極桿分析 m/z 的維持時間。設定值越大，質譜圖感度越強，層析圖點數越少。採用預設值即可。
- ✓ **Collision Energy**：指定碰撞能量。或是 Use Tune 依照 Tune Page 的碰撞能量。碰撞能量越大碎片越多越小。
- ✓ **Cone Voltage**：指定進樣錐電壓。或是 Use Tune 依照 Tune Page 的進樣錐電壓。設定值越大，離子在進樣錐碎裂的機會越大，越不容易發現指定的離子訊號。
- ✓ **PIC**：勾選可執行“碎片離子掃描確認”之功能。

E. Neutral Loss Neutral Loss



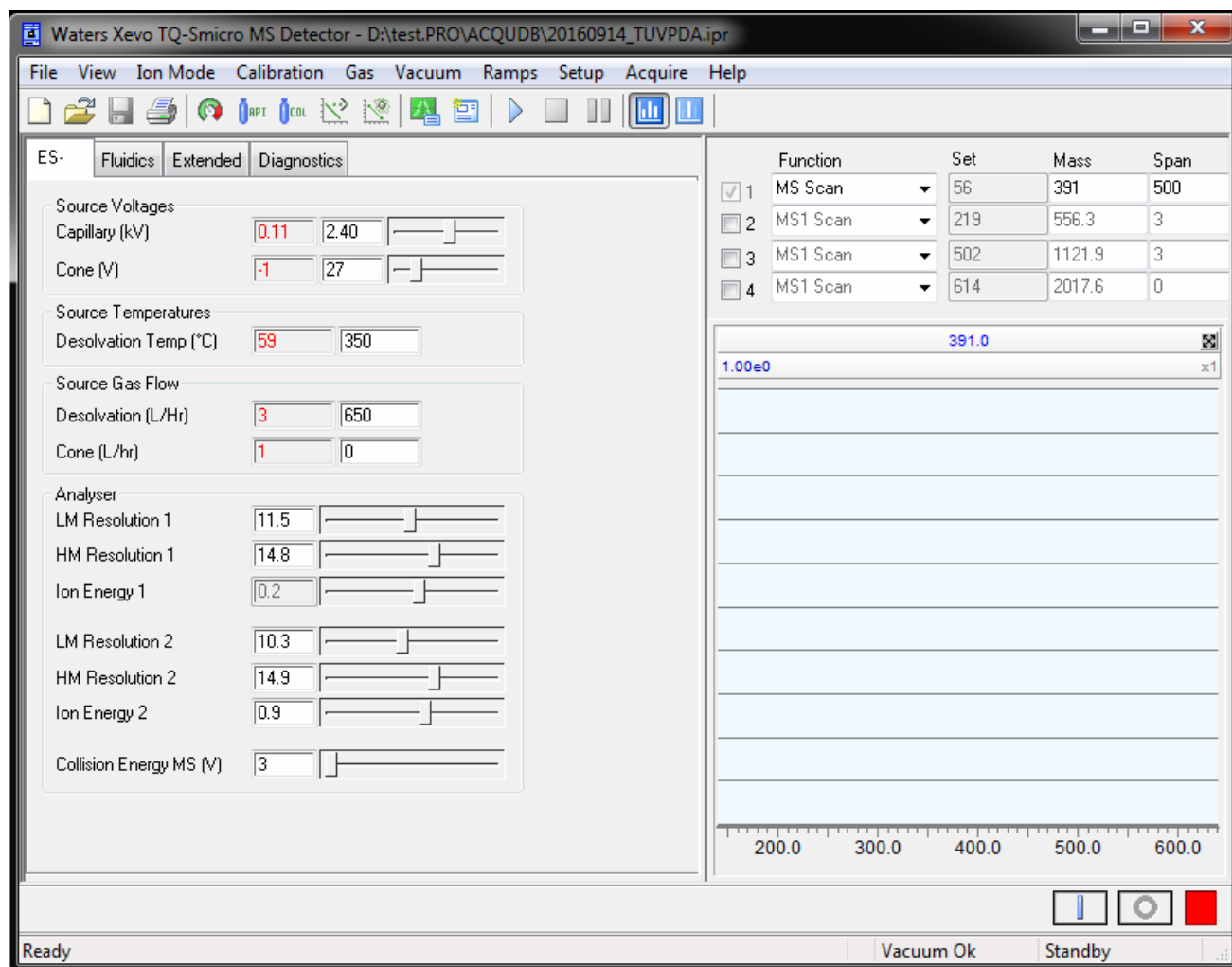
- ✓ **Loss of** : 指定中性碎片分子量。
- ✓ **Start/End** : 指定掃描的 m/z 範圍。
- ✓ **Time Start/Stop (min)** : 層析圖紀錄的時間範圍。
- ✓ **Ionization Mode** : 選擇游離法。(ES, 電噴灑游離法; API, 大氣壓化學游離法; APPI, 大氣壓光化學游離法; ASAP, 固態氣化化學游離法。)
- ✓ **Data** : 質譜圖中質量訊號峰的紀錄方式。Centroid, 直條圖; Continuum, 連續波峰圖。
- ✓ **Scan Duration(secs)** : 質譜圖指定之 m/z 範圍的掃描速率。設定值越大, 質譜圖感度越弱, 層析圖點數越多。採用預設值即可。
- ✓ **Collision Energy** : 指定碰撞能量。或是 Use Tune 依照 Tune Page 的碰撞能量。碰撞能量越大碎片越多越小。
- ✓ **Cone Voltage** : 指定進樣錐電壓。或是 Use Tune Page 依照 Tune Page 的進樣錐電壓。設定值越大, 離子在進樣錐碎裂的機會越大, 越不容易發現指定的離子訊號。

F. Parent Scan Parents



- ✓ **Parents of**：指定碎片離子 m/z 。
- ✓ **Start/End**：指定掃描的 m/z 範圍。
- ✓ **Time Start/Stop (min)**：層析圖紀錄的時間範圍。
- ✓ **Ionization Mode**：選擇游離法。(ES，電噴灑游離法；API，大氣壓化學游離法；APPI，大氣壓光化學游離法；ASAP，固態氣化化學游離法。)
- ✓ **Data**：質譜圖中質量訊號峰的紀錄方式。Centroid，直條圖；Continuum，連續波峰圖。
- ✓ **Scan Duration(secs)**：質譜圖指定之 m/z 範圍的掃描速率。設定值越大，質譜圖感度越弱，層析圖點數越多。採用預設值即可。
- ✓ **Collision Energy**：指定碰撞能量。或是 Use Tune 依照 Tune Page 的碰撞能量。碰撞能量越大碎片越多越小。
- ✓ **Cone Voltage**：指定進樣錐電壓。或是 Use Tune Page 依照 Tune Page 的進樣錐電壓。設定值越大，離子在進樣錐碎裂的機會越大，越不容易發現指定的離子訊號。

5. MS Tune File –離子化介面設定

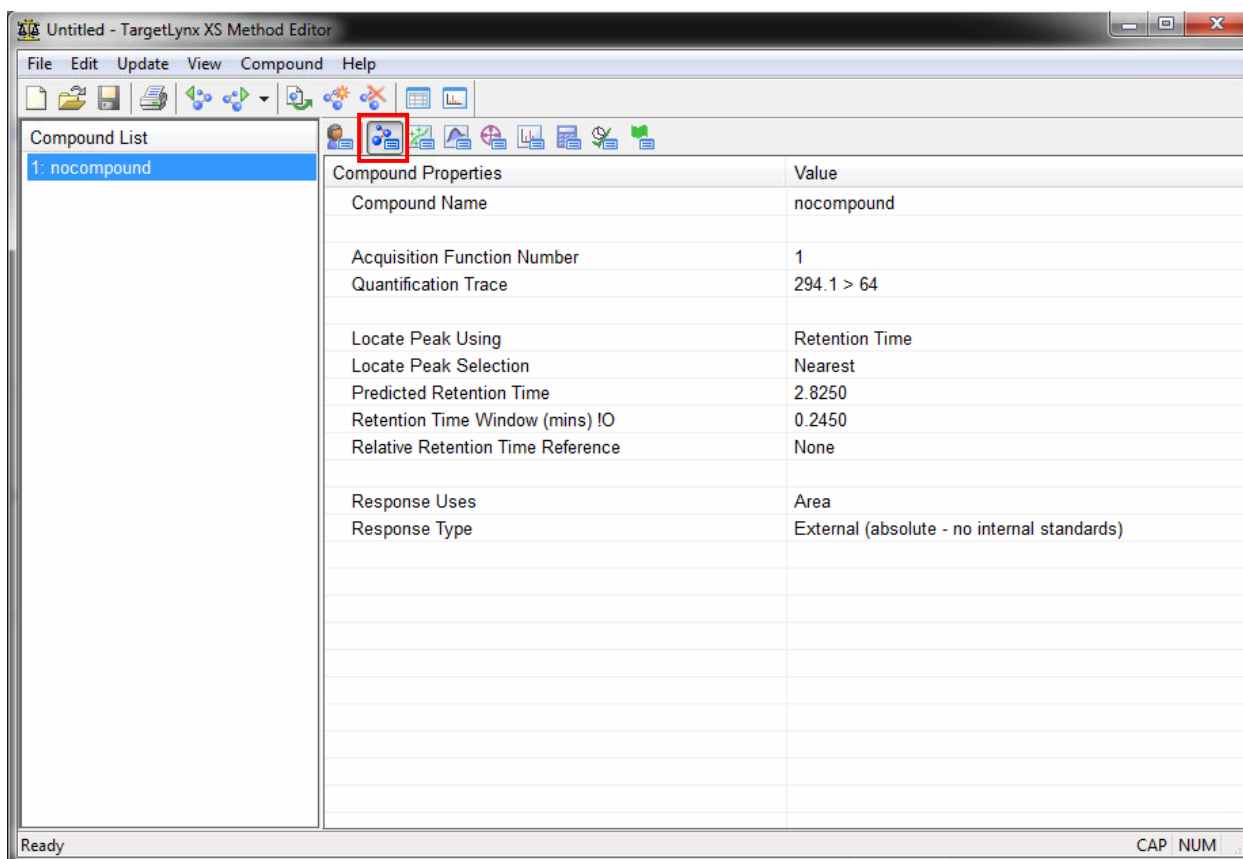


- ✓ **Capillary (kV)**：毛細管電壓。
- ✓ **Cone (V)**：進樣錐電壓。
- ✓ **Desolvation Temp(°C)**：溶媒氣化溫度。
- ✓ **Desolvation (L/Hr)**：毛細管氮氣氣簾流速。
- ✓ **Cone (L/Hr)**：進樣錐氮氣氣簾流速。

VII. 附錄二、數據處理方法設定

1. 層析峰命名設定

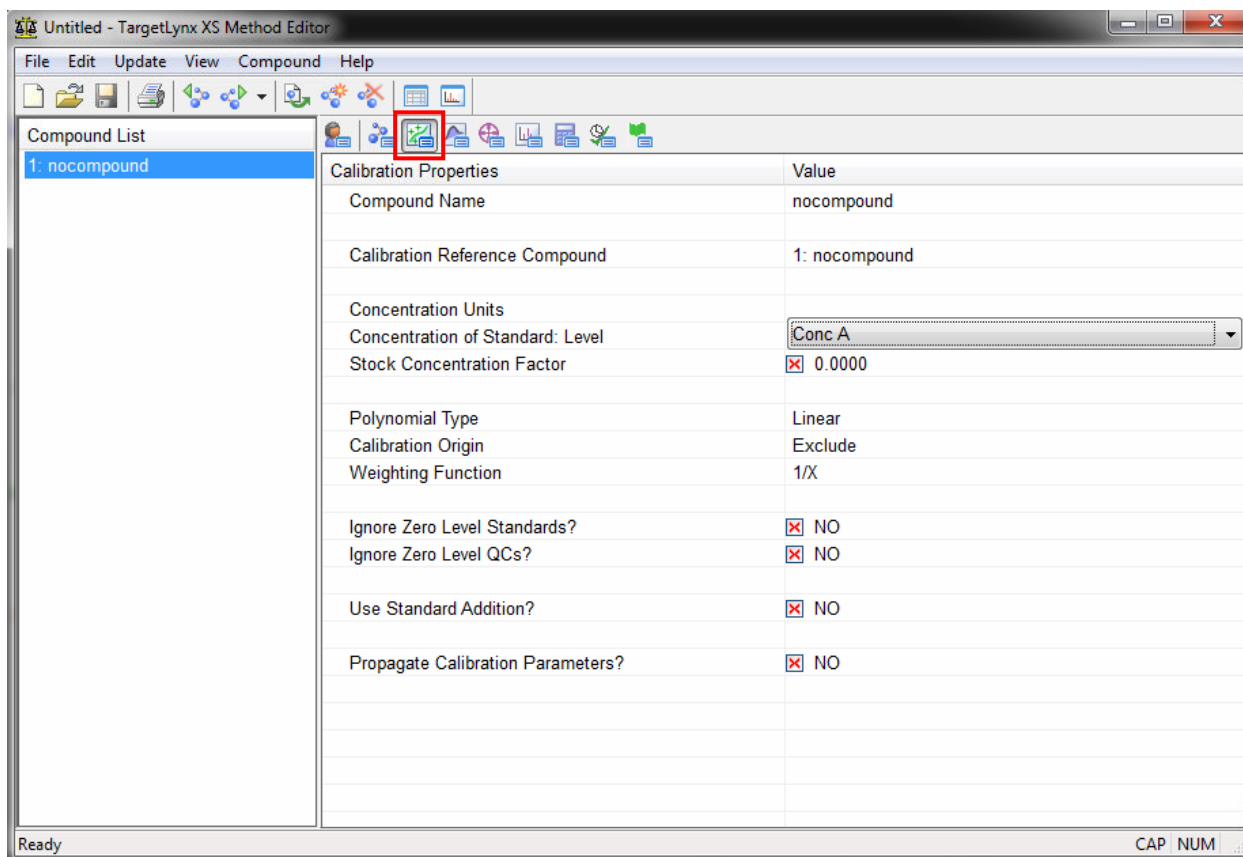
A. 在 TargetLynx 設定視窗，點選  按鈕



- ✓ **Compound Name:** 輸入成分名稱
- ✓ **Acquisition Function Number:** 對應於 MS File 中的紀錄指令編號
- ✓ **Quantification Trace:** 定量離子對
- ✓ **Locate Peak Using:** Retention Time，以層析峰滯留時間辨識成分
- ✓ **Locate Peak Selection:** Nearest，最靠近滯留時間的層析峰才命名
- ✓ **Predicted Retention Time:** 層析峰預計滯留時間
- ✓ **Retention Time Window (mins):** 允許的層析峰滯留時間偏移範圍
- ✓ **Response Uses:** Area，以面積做為檢量線的 y 軸。
- ✓ **Response Type:** External，不含內標準品的檢量線；Internal，含內標準品的檢量線。當選擇內標法時，內標準品成分須選擇 External。

2. 檢量線設定

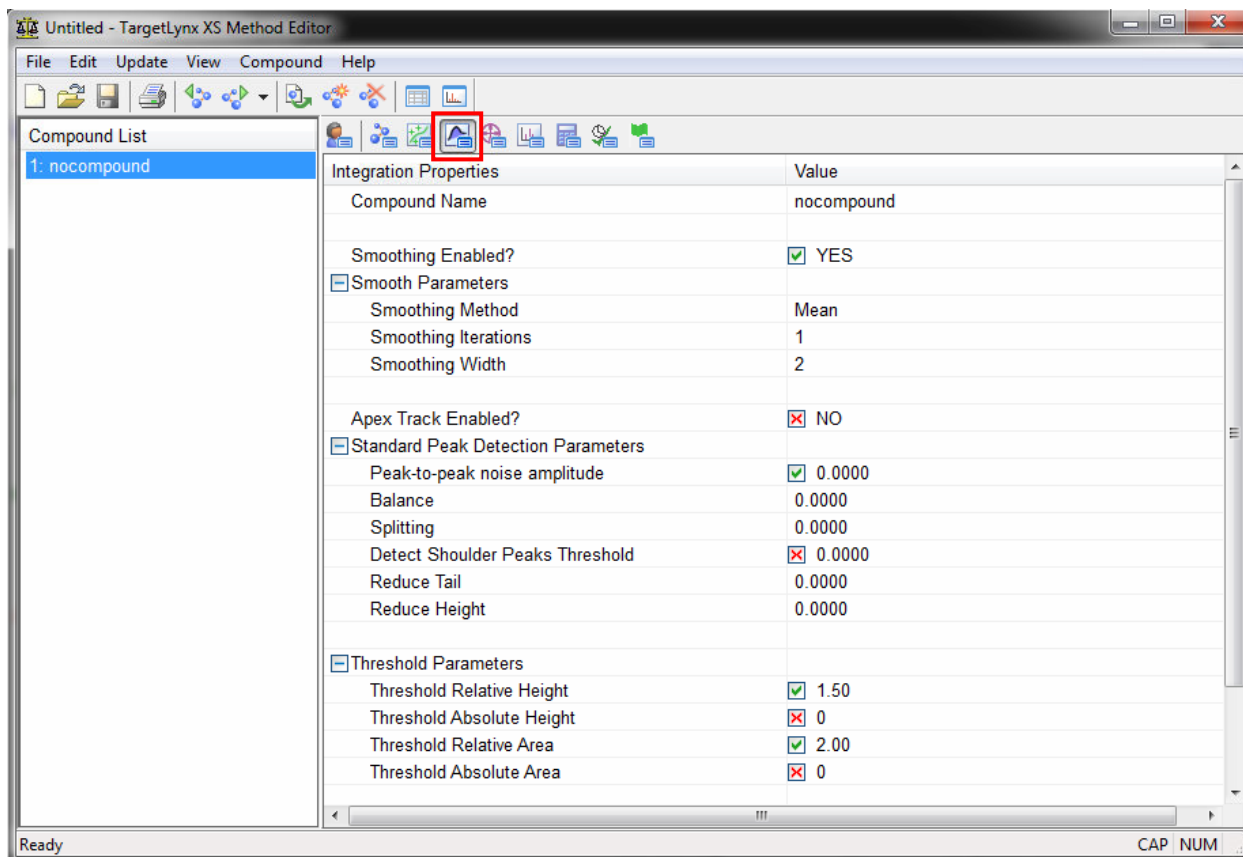
A. 在 TargetLynx 設定視窗，點選  按鈕



- ✓ **Concentration Units:** 濃度單位，例如 ppb。
- ✓ **Concentration of Standard Level:** 標準品或品管標準品的濃度，對應於樣品清單的濃度欄位。
- ✓ **Polynomial Type:** Linear，檢量線為線性模式。
- ✓ **Calibration Origin:** Exclude，檢量線不通過原點。
- ✓ **Weighting Function:** 檢量線加權計算方式， $1/x$ 或 $1/x^2$ 。

3. 層析峰積分設定

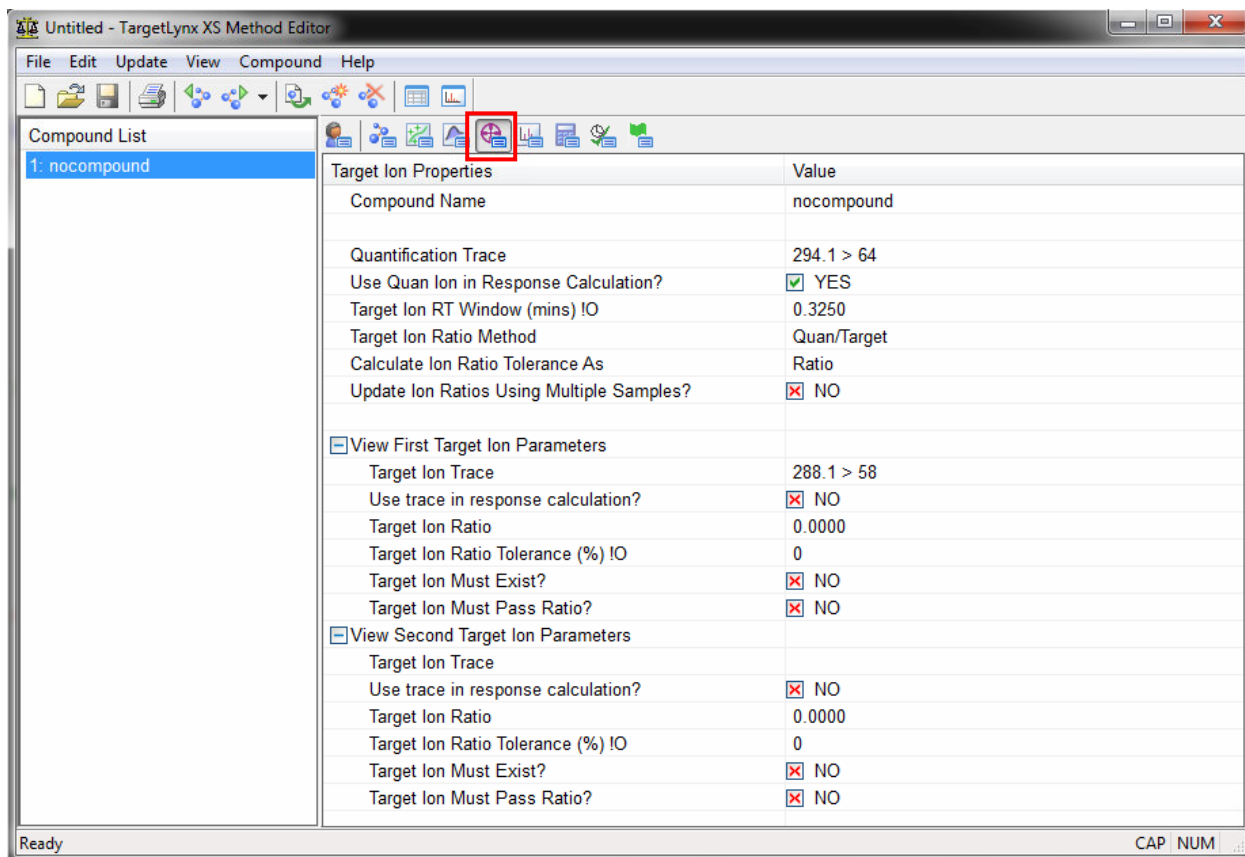
A. 在 TargetLynx 設定視窗，點選  按鈕



✓ 可在 Chromatogram 測試積分後，複製積分方式，在此頁貼上

4. 定量與定性離子對設定

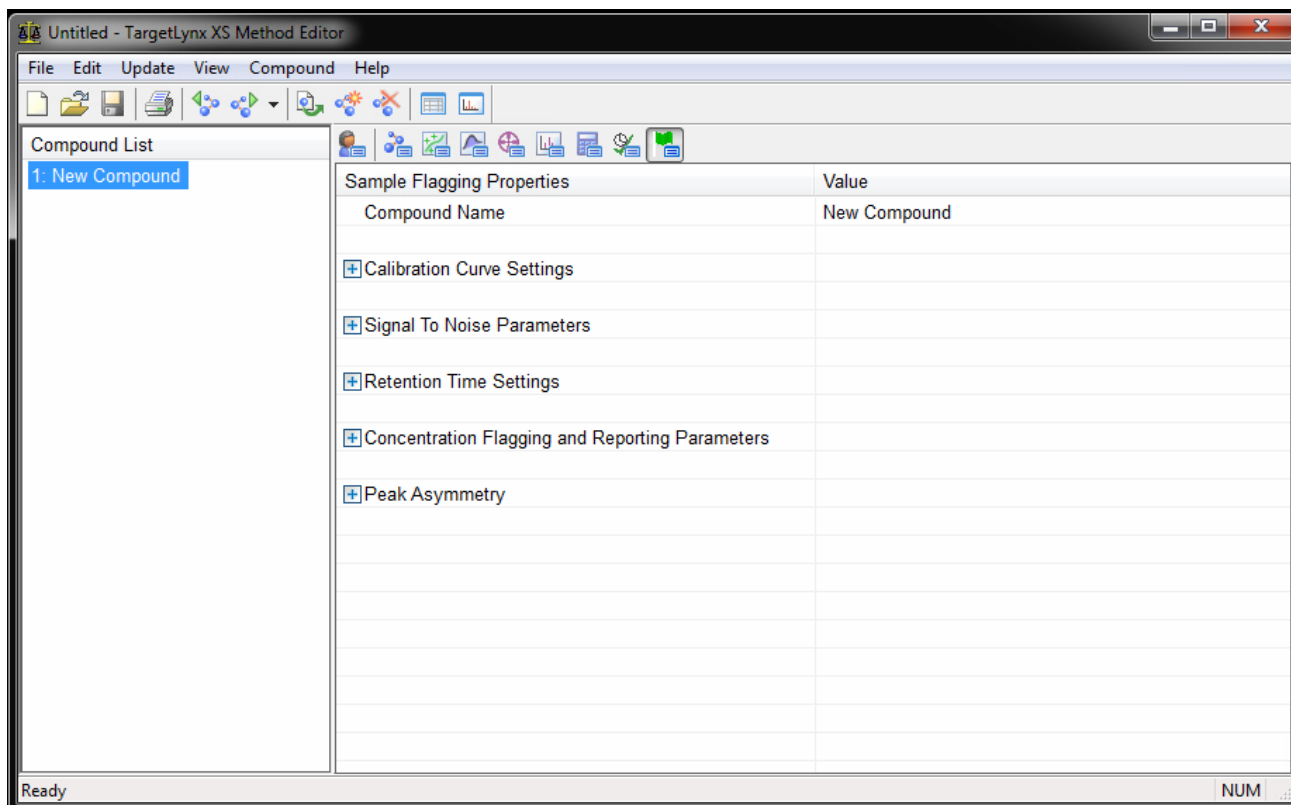
A. 在 TargetLynx 設定視窗，點選  按鈕



- ✓ **Quantification Trace:** 定量離子對。
- ✓ **Target Ion RT Window (min):** 定性離子對層析峰的滯留時間的允許誤差範圍。
- ✓ **Target Ion Ratio Method:** 離子對比值的計算方式。Quan/Target，定量/定性。
Target/Quan，定性/定量。
- ✓ **Update Ion Ratios Using Multiple Samples:** 勾選的話，Ion Ratio 期望值來自於，
樣品清單的 Quan Reference 欄位有
註記的標準品之 Ion Ratio 的平均
值。
- ✓ **Target Ion Ratio:** Ion Ratio 期望值。
- ✓ **Target Ion Ratio Tolerance (%):** 允許樣品中監控成分的 Ion Ratio 的誤差範圍。
- ✓ **Target Ion Must Exist:** 勾選，才能自動判斷 Ion Ratio 是否超過規格。
- ✓ **Target Ion Must Pass Ratio:** 勾選，才能自動判斷 Ion Ratio 是否超過規格。

5. 法規閾值設定

A. 在 TargetLynx 設定視窗，點選  按鈕



- ✓ **Calibration Curve Settings:** 檢量線迴歸係數閾值。
- ✓ **Signal To Noise Parameters:** 訊噪比計算方式，噪音時間範圍設為 0，可自動計算。
- ✓ **Retention Times Settings:** 層析峰滯留時間誤差閾值。
- ✓ **Concentration Flagging and Reporting Parameters:** 上限濃度(Maximum concentration)與報告濃度(Reporting concentration)閾值。
- ✓ **Peak Asymmetry:** 層析峰對稱性閾值。