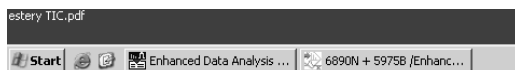


Software pro GC/MS

budova A
přízemí SV
místnost 107

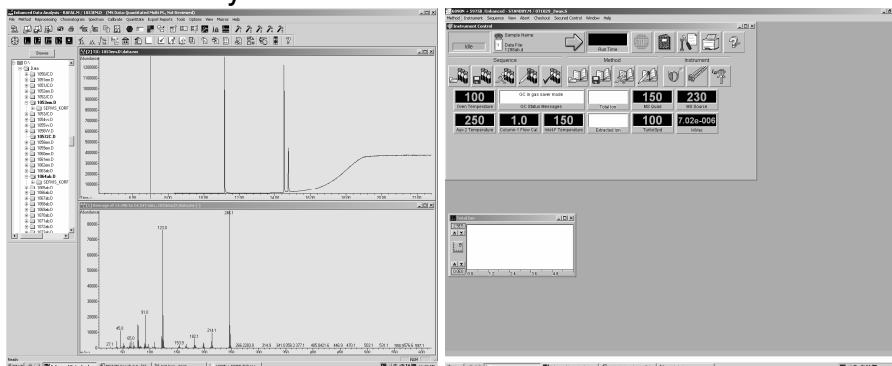


ChemStation



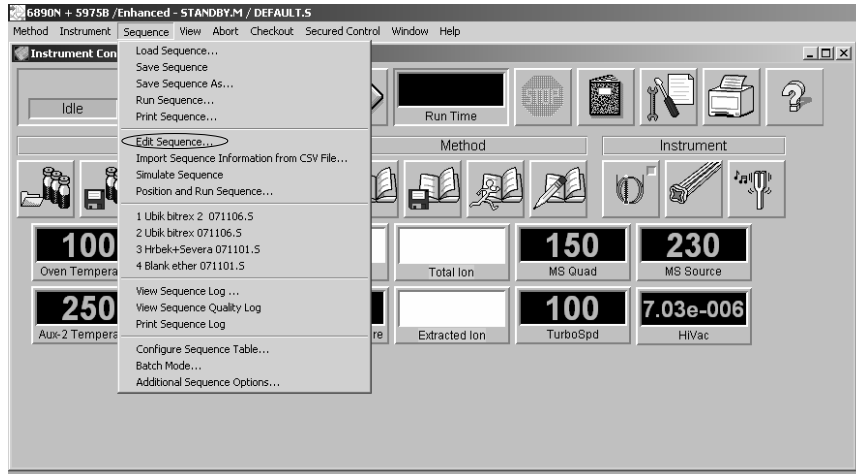
Vyhodnocování

Měření



Spuštění analýzy

6890N + 5975B → „Sequence“ → „Edit Sequence“



Sample Log Table

Sample Log Table

Data Path: D:\DATA Browse... Method Path: C:\MSDCHEM\METHODS Browse...

Type	Vial	Sample	Method / Keyword	Data File	Comment / Keyword/Setting	Multiplic	Level	Update RS	Update RT	Update QT	Up...
1	Blank	1 Hexan	WAX_EST2	NC1275			1.00000	No Update	No Update	No Update	No Up
2	Sample	2 14.0,18.1	WAX_EST2	NC1276	WAX 1		1.00000	No Update	No Update	No Update	No Up
3	Sample	3 16.1,16.1	WAX_EST2	NC1277	WAX 2		1.00000	No Update	No Update	No Update	No Up
4	Sample	4 18.1,14.1	WAX_EST2	NC1278	WAX 3		1.00000	No Update	No Update	No Update	No Up
5											
6											
7											
8											
9											
10											
11											
12											
13											
14											
15											
16											
17											
18											
19											
20											
21											
22											
23											
24											
25											
26											
27											
28											
29											
30											
31											
32											
33											
34											
35											

Read Barcode OK Cancel Help

Taskbar: 6890N + 5975B Enhanced... Sample Log Table Enhanced Data Analysis... NIST MS Search 2.0 - Da... unlabel - Print 10:35 AM

Smažte předchozí sekvenci

Sample Log Table

Data Path: D:\DATA

	Type	Vial	Sample	Met Key
1	Blank	1	Hexan	WAX_EST
2	Sample	2	14.0,18.1	WAX_EST
3		3	16.1,16.1	WAX_EST
4		4	18.1,14.1	WAX_EST
5				
6				
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15				
16				

Context menu for row 2:

- Copy
- Cut
- Paste
- Insert Row
- Delete Rows
- Fill Column & increment
- Fill Column, NO increment
- Repeat Row & increment
- Repeat Row, NO increment

označit myší řádky
→ klik pravým tlačítkem
→ „Delete Rows“

Vyplňte tabulku

Sample Log Table

Data Path: D:\DATA

Method Path: C:\MSDCHEM\METHODS

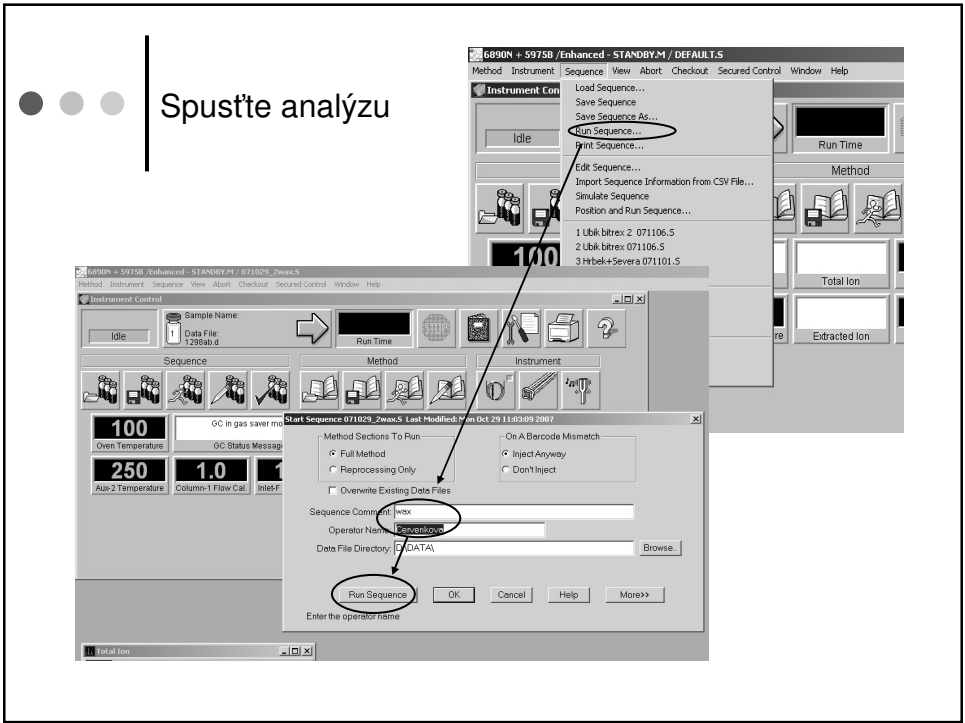
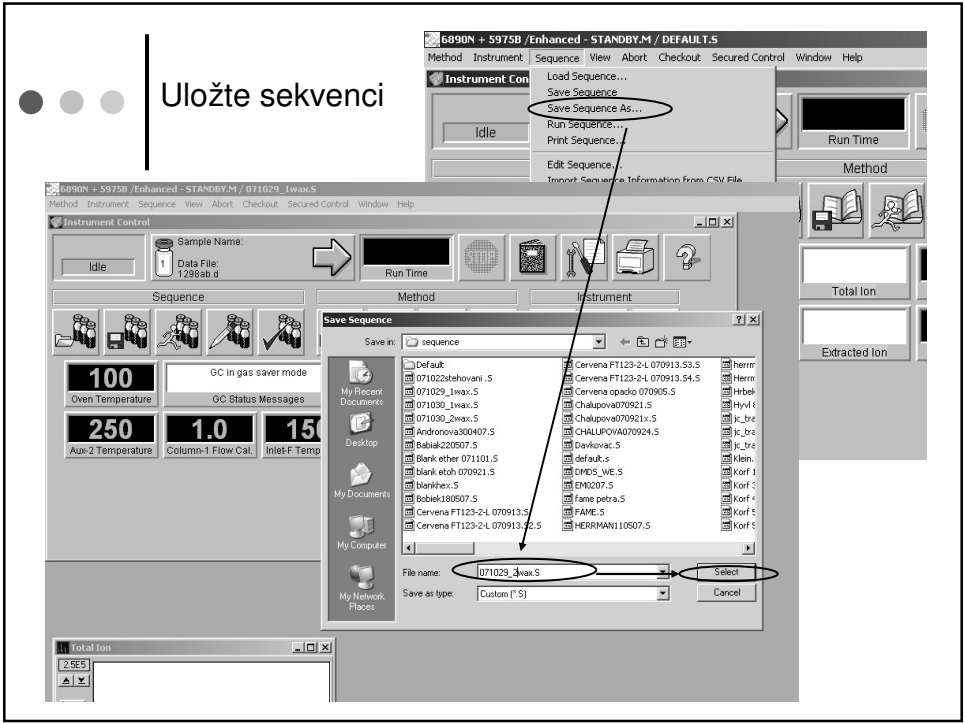
Type	Vial	Sample	Metod / Experiment	Data File	Comment / Experiment	Multiplier	Level	Update M	Update RT	Update QF	Ug 2
1	Blank	1 Hexan	WAX_EST2	WAX_1275		1.00000		No Update	No Update	No Update	No Up
2	Sample	2 14.0,18.1	WAX_EST2	WAX_1275	WAX_1	1.00000		No Update	No Update	No Update	No Up
3	Sample	3 16.1,16.1	WAX_EST2	WAX_1275	WAX_2	1.00000		No Update	No Update	No Update	No Up
4	Sample	4 18.1,14.1	WAX_EST2	WAX_1275	WAX_3	1.00000		No Update	No Update	No Update	No Up
5											
6											
7											
8											
9											
10											
11											
12											
13											
14											
15											
16											
17											
18											
19											
20											
21											
22											
23											
24											
25											
26											
27											
28											
29											
30											
31											
32											
33											
34											
35											

Annotations:

- blank nebo vzorek ?
- poloha vzorku v autosampleru
- popis vzorku
- metoda
- popis vzorku
- datový soubor
- popis vzorku

Po vyplnění a kontrole → OK

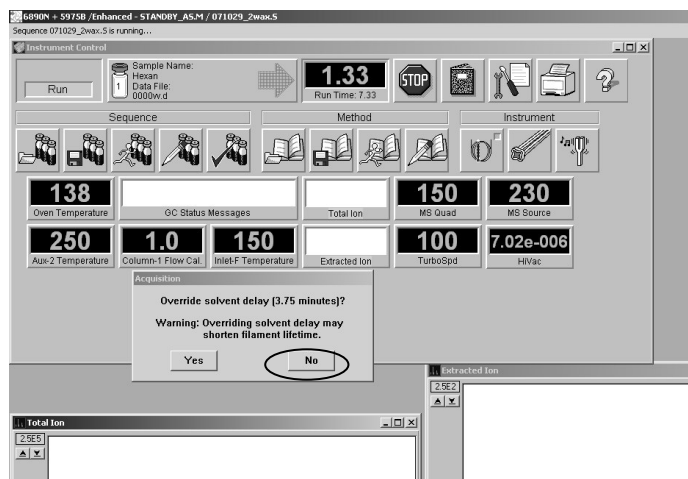
název metody	teplota nástřiku	split*	hmotnostní rozsah	teplotní program
AS_M-nizke_C-nizke	200°C	10:1	do 600 m/z	40°C(2min) →8°C/min do 200→15°C/min do 320°C(3 min)
AS_M-nizke_C-vysoke	200°C	50:1	do 600 m/z	40°C(2min) →8°C/min do 200→15°C/min do 320°C(3 min)
AS_M- vysoke_C-nizke	230°C	10:1	do 800 m/z	60°C(2min) →10°C/min do 320°C(10 min)
AS_M- vysoke_C-vysoke	230°C	50:1	do 800 m/z	60°C(2min) →10°C/min do 320°C(10 min)





„Solvent delay“

Vždy NO !!!!!!!!!!!!!!!

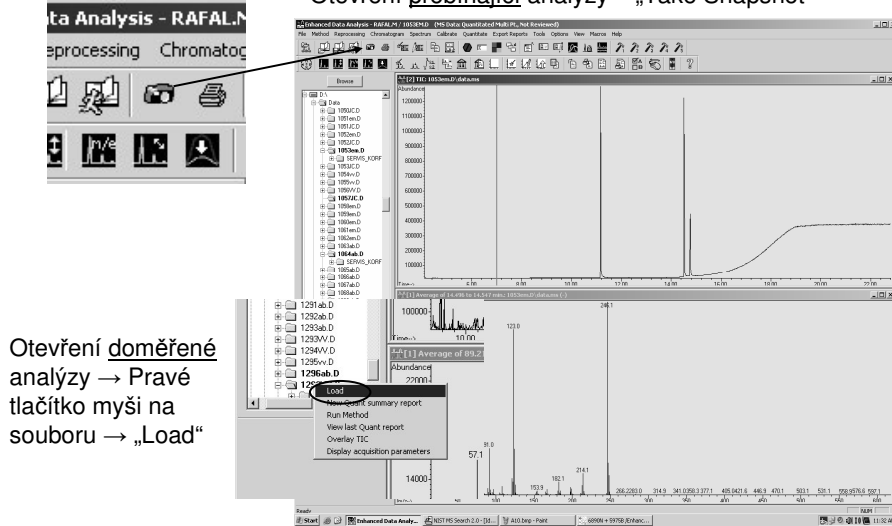


Vyhodnocení

- Pokud máte k dispozici *ChemStation* :
stáhnout data z D/DATA/....přes *ftp*: klienta v
Total Commander nebo flash disk
 - Licence na *ChemStation* – J. Cvačka
- Pokud nemáte k dispozici *ChemStation*
můžete si vyhodnotit svá data na PC v
místnosti 107
- Naměřená data si zálohujte na svých
počítačích, budou se průběžně mazat

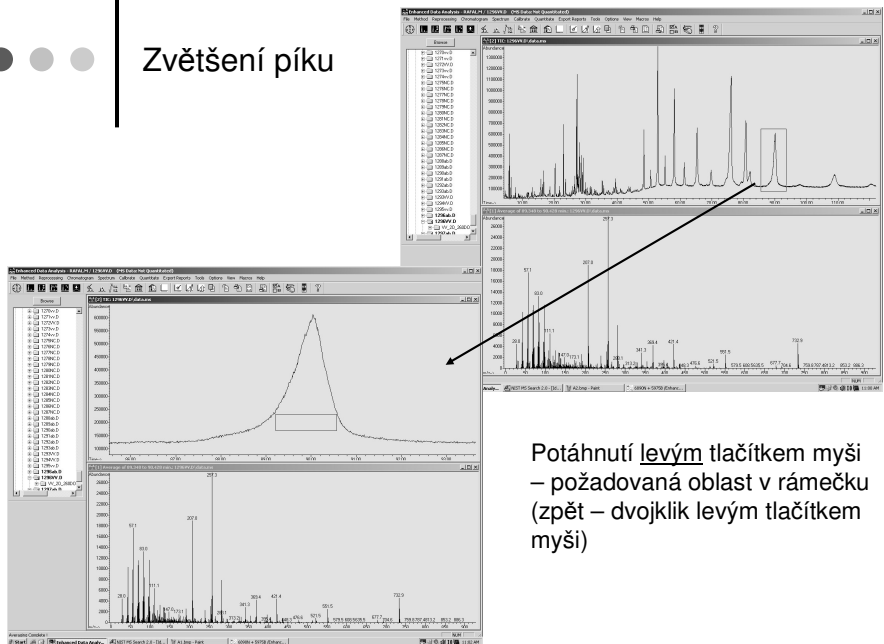
Otevření naměřených dat

Otevření probíhající analýzy – „Take Snapshot“



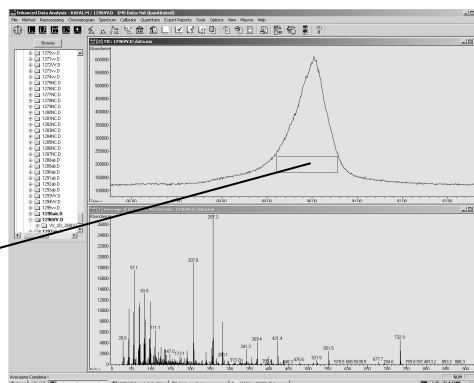
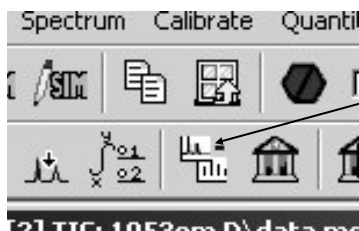
Otevření doměřené analýzy → Právé tlačítko myši na souboru → „Load“

Zvětšení píku



Potáhnutí levým tlačítkem myši – požadovaná oblast v rámečku (zpět – dvojklik levým tlačítkem myši)

Sejmutí spektra a odečtení pozadí



Odečtení pozadí

1. Sejmout spektrum píku
2. Sejmout spektrum pozadí
3. Kliknout na ikonu „Subtract“

Sejmutí spektra – potáhnutí **pravým** tlačítkem myši – požadovaná oblast v rámečku
(zpět – dvojklik levým tlačítkem myši)

Prohledávání knihovny - NIST

#	Lib.	Match%	Priority	Rank	Name
1	AA	631	741	42.5	Heuridecronic acid, octadecyl ester
2	R	610	724	18.1	Heuridecronic acid, heuridecyl ester
3	AA	593	747	9.66	Heuridecronic acid, heuridecyl ester
4	AA	591	692	8.71	Heuridecronic acid, eicosyl ester
5	AA	551	748	2.47	Heuridecronic acid, heuridecyl ester
6	AA	530	724	1.89	Heuridecronic acid, 1,3-cyclohexyl ester
7	R	548	628	1.54	Heuridecronic acid, 20-tetradecyl ester
8	AA	542	584	1.22	Heuridecronic acid, 20-tetradecyl ester
9	AA	528	594	0.74	Dodecyl acid, 20-tetradecyl ester
10	AA	525	754	0.17	1,3-Diphenylpropane
11	R	522	593	0.10	1,3-Diphenylpropane
12	AA	522	512	0.10	Dodecyl acid, 1,2,3-tripropenyl ester
13	MS	521	603	0.37	Average of 68.74 to 69.22 min.: 20001
14	AA	515	570	0.45	Heuridecronic acid, 20-tetradecyl ester
15	R	514	577	0.43	Heuridecronic acid, octadecyl ester
16	AA	512	672	0.40	Heuridecronic acid, octadecyl ester
17	AA	511	673	0.36	Heuridecronic acid, octadecyl ester
18	AA	505	512	0.30	Heuridecronic acid, 20-tetradecyl ester
19	AA	503	718	0.28	1,3-Diphenylpropane
20	AA	503	553	0.28	Heuridecronic acid, octadecyl ester
21	R	500	581	0.24	Heuridecronic acid, octadecyl ester
22	AA	500	540	0.24	Heuridecronic acid, eicosyl ester
23	AA	499	547	0.23	Heuridecronic acid, octadecyl ester
24	AA	498	559	0.22	Heuridecronic acid, octadecyl ester
25	AA	494	834	0.21	Dodecyl acid, dodecyl ester
26	AA	493	537	0.21	Heuridecronic acid, octadecyl ester
27	R	494	429	0.19	Heuridecronic acid, octadecyl ester
28	AA	493	463	0.18	Heuridecronic acid, octadecyl ester
29	AA	493	548	0.18	Heuridecronic acid, octadecyl ester
30	AA	492	632	0.17	Heuridecronic acid, octadecyl ester
31	AA	492	664	0.17	Heuridecronic acid, octadecyl ester
32	AA	492	553	0.17	Heuridecronic acid, octadecyl ester
33	AA	491	547	0.17	Heuridecronic acid, octadecyl ester
34	AA	490	570	0.16	Heuridecronic acid, octadecyl ester
35	AA	489	555	0.15	Heuridecronic acid, octadecyl ester
36	AA	488	589	0.15	Heuridecronic acid, octadecyl ester
37	AA	487	537	0.14	Heuridecronic acid, octadecyl ester

Dvojklik pravým tlačítkem myši na spektrum

Tisk na papír nebo do PDF

Pozn: Požadovanou tiskárnu nastavit „defaultně“ v nastavení počítače

Zobrazení extrahovaného chromatogramu

Návrat k „TICu“

Integrace

Automatická integrace

Manuální integrace

Integrace – potáhnutí pravým tlačítkem myši při základně píku

Překrývání chromatogramů



Informační zdroje

- o K dispozici jsou
 - Zjednodušený návod k obsluze + informace o metodách
 - Tato přednáška vytištěná a na ploše počítače
 - Manuál k ChemStation na ploše počítače
 - HELP v programu
- o **V případě problémů s měřením kontaktujte pracovníky oddělení MS**
– tel. 302, 492