ChroZen GC/MSD

Clarity MANUAL

Clarity 소프트웨어

Windows 7(64bit and 32bit) / Clarity 버전 8.1 / YCMChroZen Ver. 1.8.0 (F3)이상

Ⅰ. 초기설정

1. TCP/IP 입력

윈도우 –> 제어판 –> 네트워크 및 인터넷 –> 네트워크 및 공유센터 –> 어댑터 설정변경 –>이더넷-속성 –> 인터넷프로토콜 버전 4 (TCP/IPv4) –> 속성에서 설정

다음 IP주소 사용에 체크

IP 주소 : 10.10.10.1

서브넷마스크 : 255.255.255.0

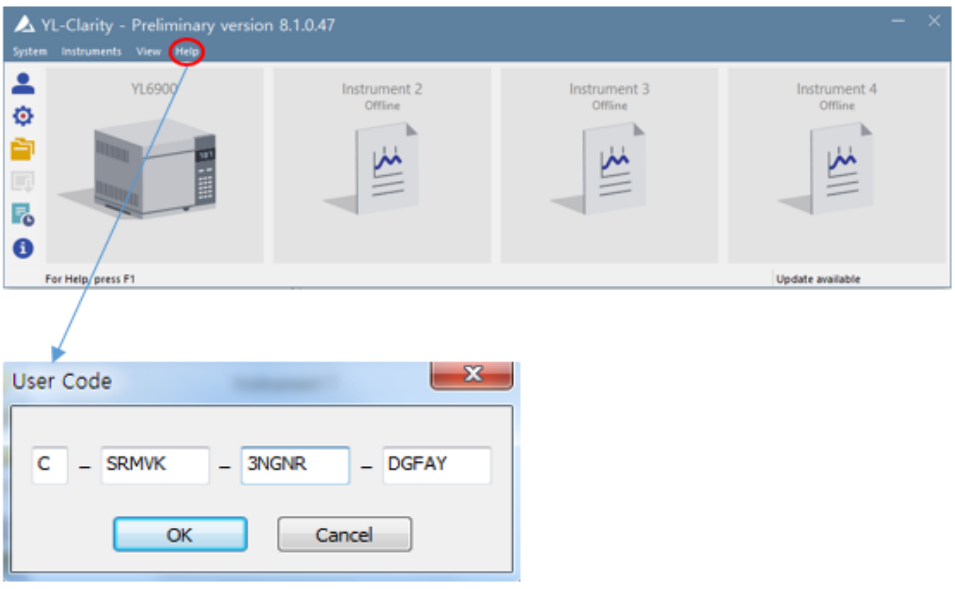
Start & Shutdown 매뉴얼 참조

2. User Code 입력

① YL Clarity Serial 동글키를 PC의 USB slot에 장착한 후, YL-Clarity 아이콘을 클릭

② Help항목 => User Code를 입력

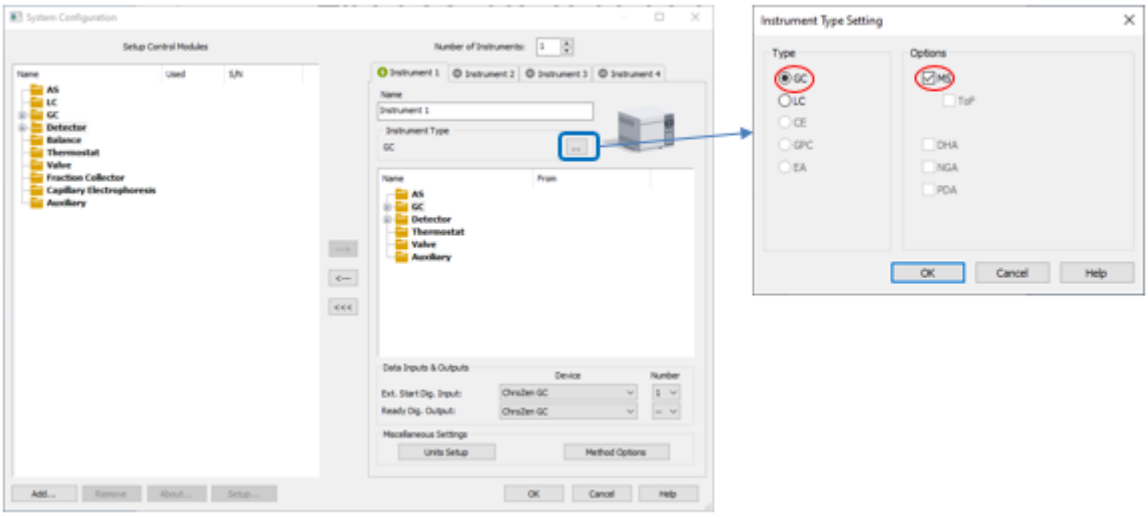
** 동글 키가 없거나 User Code 미 입력 / 잘못 입력 시 기기를 사용 할 수 없음



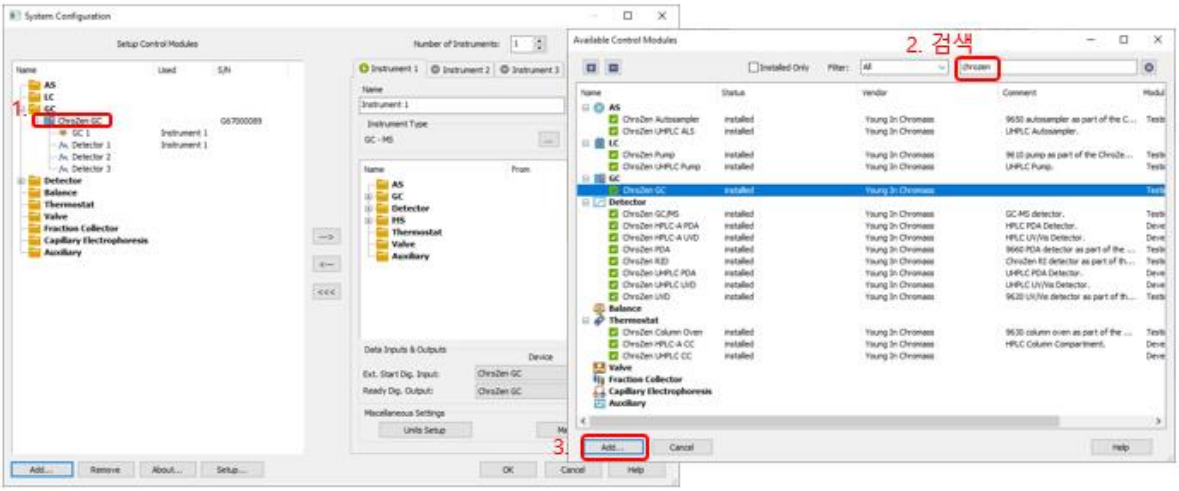
3. 기기 구성

① 초기 화면 왼쪽의 Configuration을 클릭하면 아래와 같은 화면이 나타남

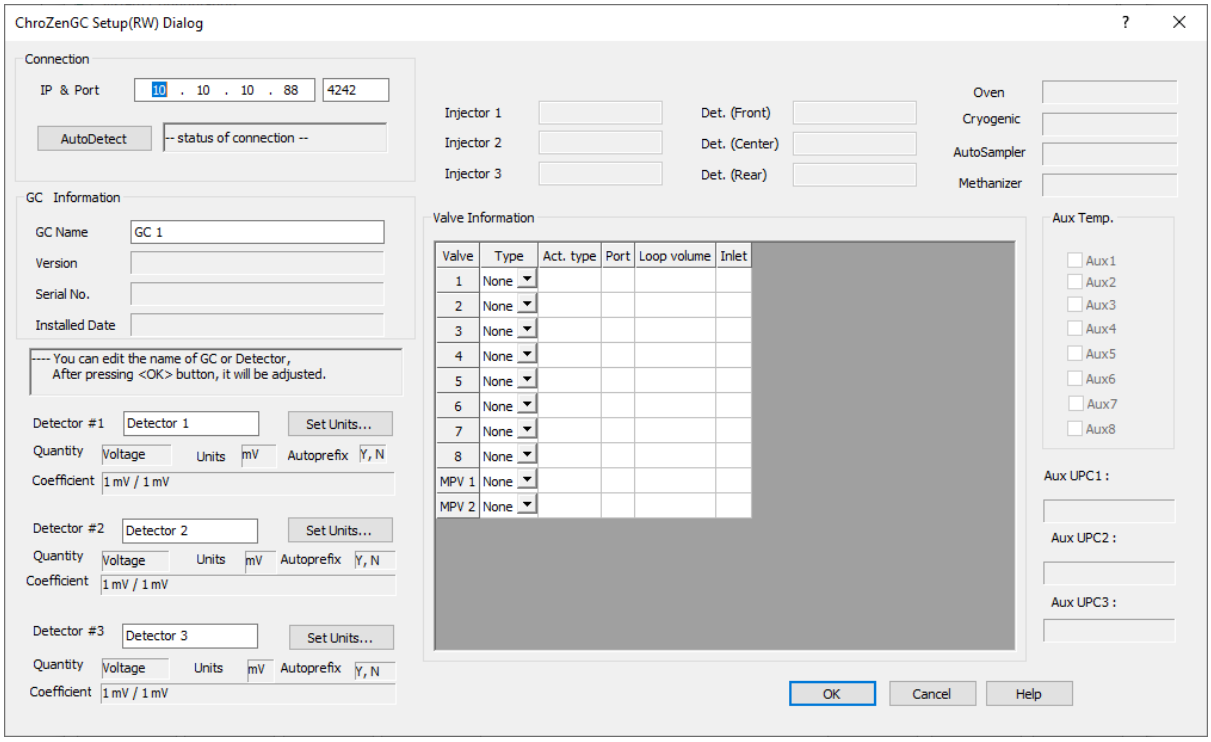
- Instrument Type 에서 "GC-MS"로 선택



② Add를 눌러 나타나는 팝업 창에서 "ChroZen"검색 -> ChroZen을 더블 클릭하여 불러옴



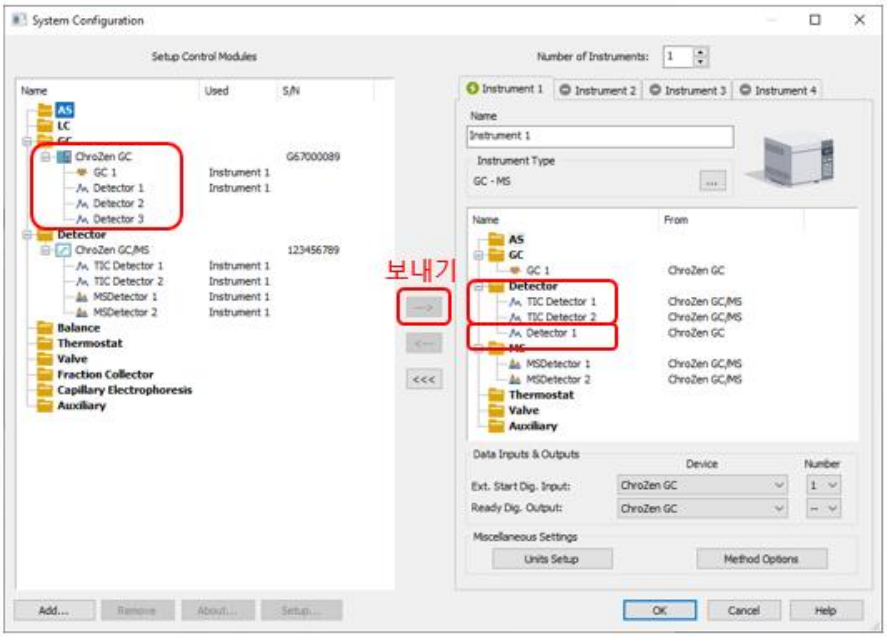
③ 기기의 IP : Port 확인 후 (GC장비>Main-Config, 10.10.10.99 또는 10.10.10.98)
"AutoDetect"를 클릭하여 연결, 현재 GC의 주입구/검출기 Type이 나타남



④ 아래의 순서대로 시행하여 기기구성 설정 완료

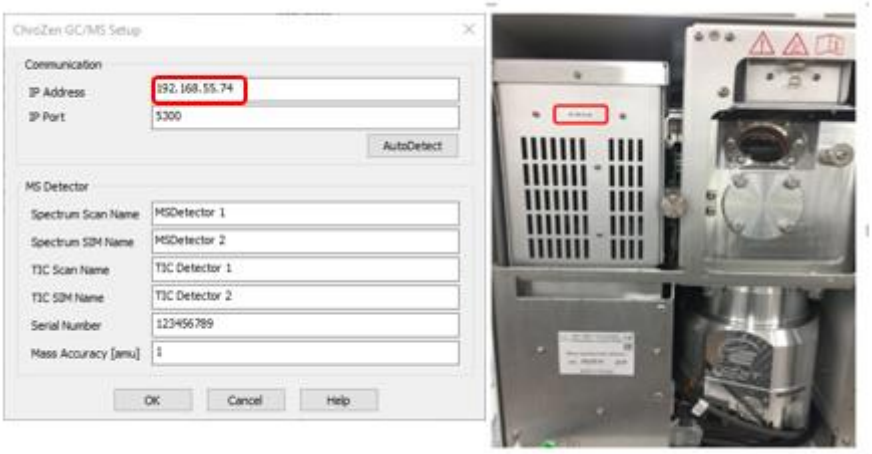
** 주의 **

- 장착되지 않은 Detector는 반드시 다시 왼쪽의 Setup화면으로 보냄
- 반드시 Detector 1은 남겨둔다.
- 아래의 구성과 동일하게 함.



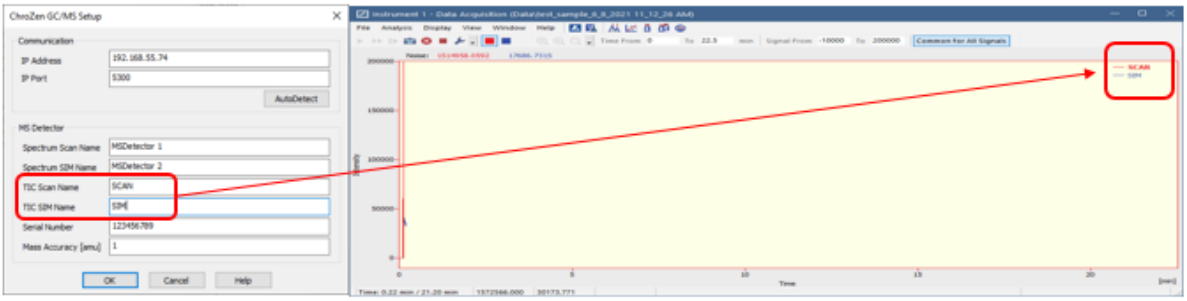
⑤ CHROZEN GC의 IP Address를 입력, 그 다음 MS Detector의 이름 등을 아래와 같이 설정

- IP는 장비마다 다른 값이 설정되어 있음. (IP Address는 장비 전면부 안쪽에서 확인할 수 있음)



⑥ ChroZen GC와 마찬가지로 GC MSD를 오른쪽에 있는 기기 구성 창으로 이동 ④의 과정 반복

⑦ Spectrum Name과 TIC Name을 수정.
수정한 이름으로 Chromatogram에 표기가 됨.

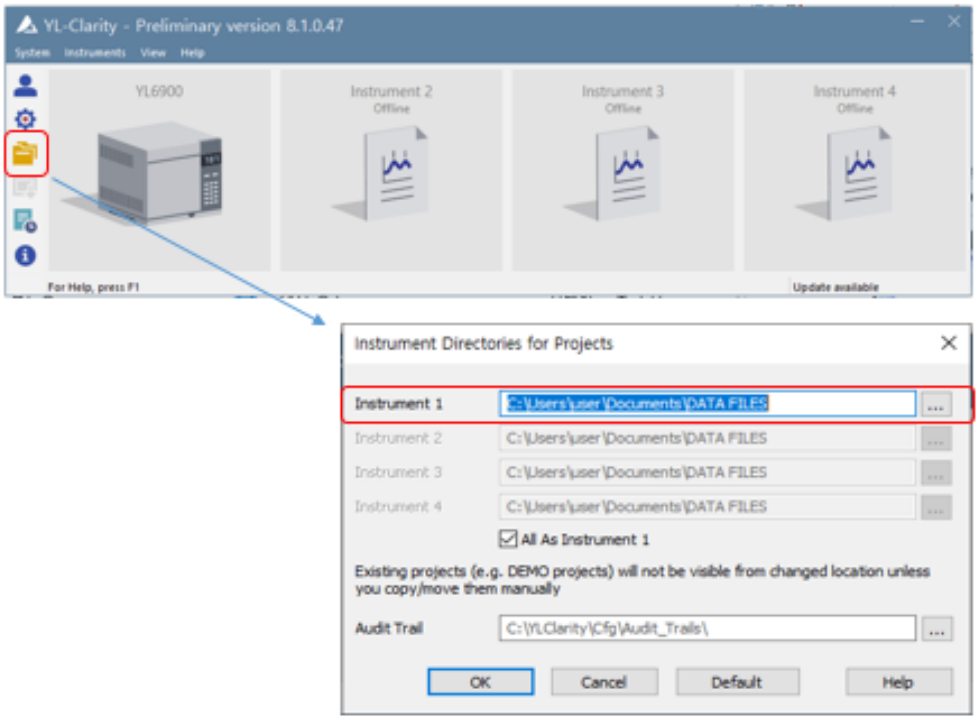


4. 디렉터리 설정

- 기기와 연결 전, 실험의 데이터가 저장될 Directory를 설정

초기화면에서 Directory 클릭 => 프로젝트 상위 폴더 지정

(관리자 또는 분류기준에 따라 해당 하드 드라이브 내 폴더 별로 분류하여 지정 가능함)

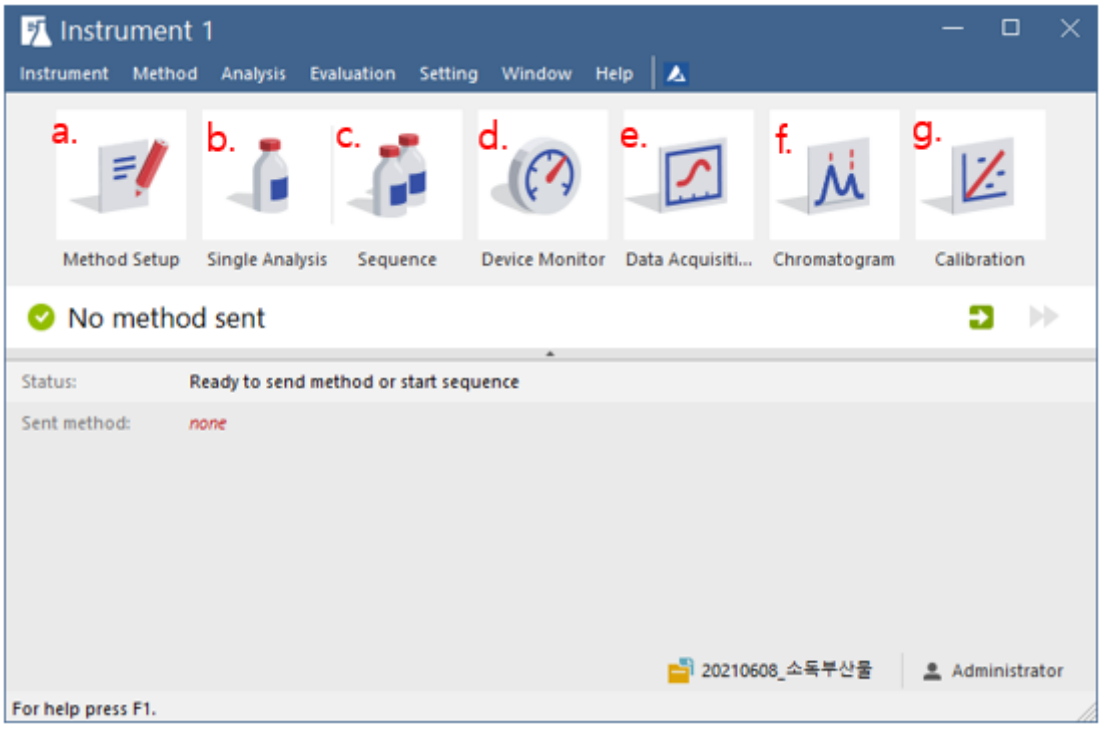


Ⅱ. 제어방법 설정

1. 기기 제어 방법(Method) 설정

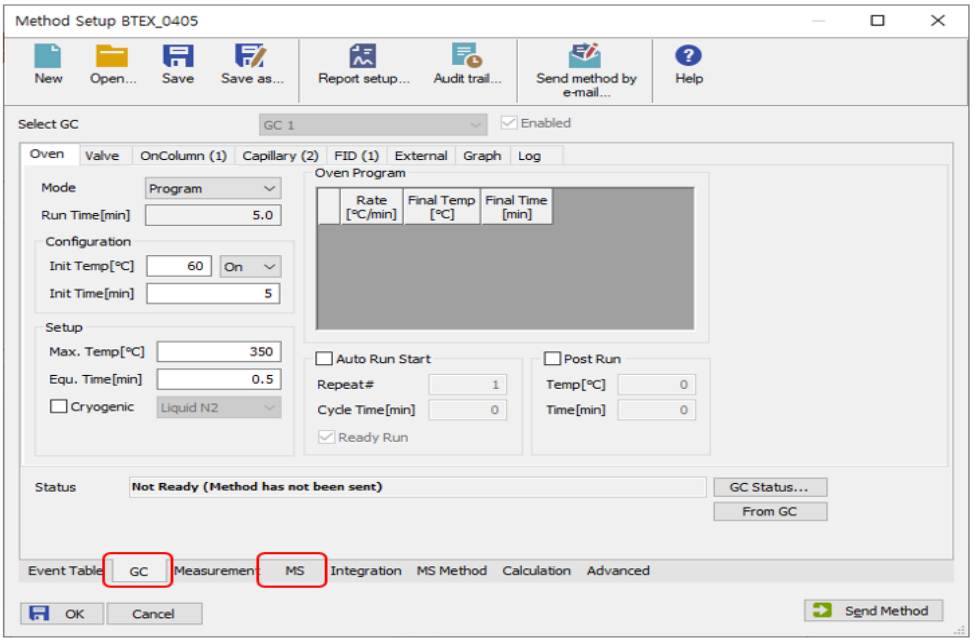
- 디렉터리 및 기기구성이 완료 후에 로그인

- 로그인 후 아래와 같이 기본설정화면이 나타남



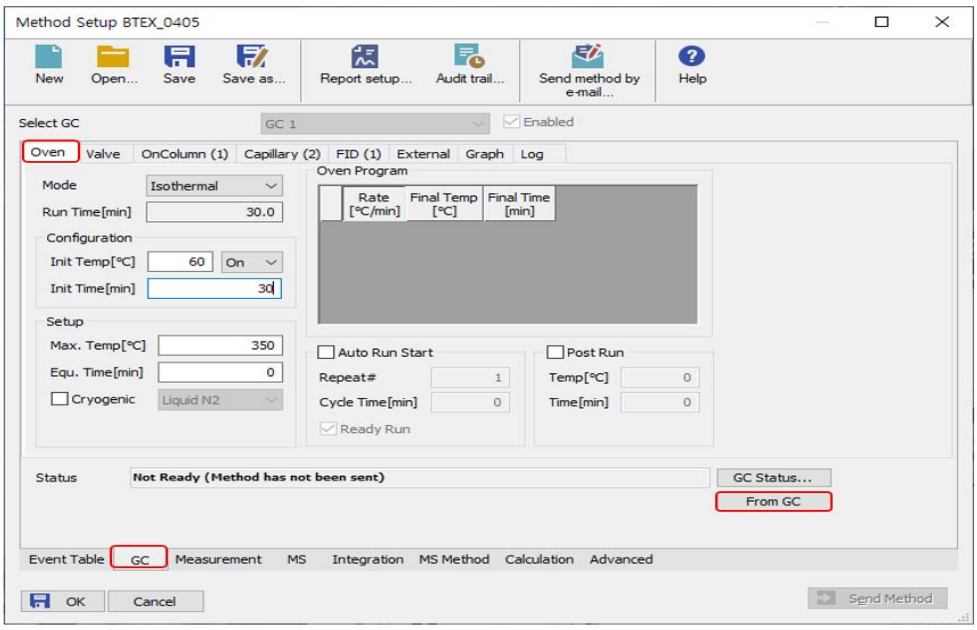
a : Method Setup
b : manual injection
c : sequence (auto sampler)
d : Device Monitor
e : 실시간 수집 창
f : Chromatogram Window
g : Calibration Window

1) Method Setup: **a**를 클릭하여 분석하고자 하는 물질 분석을 위한 모든 조건(GC, MS)을 아래 탭을 사용하여 작성할 수 있음.

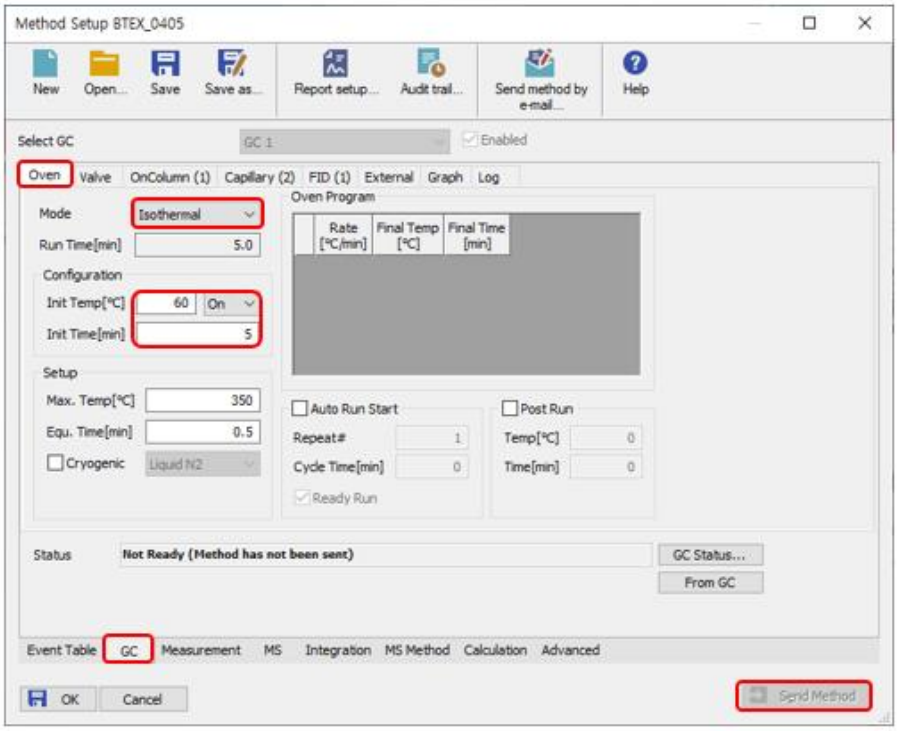


1-1) GC의 오븐 조건 세팅

Oven 탭으로 이동, From GC 버튼을 눌러 YCMChroZen GC에 설정되어 있는 값을 불러온 후 등온/승온 모드를 선택



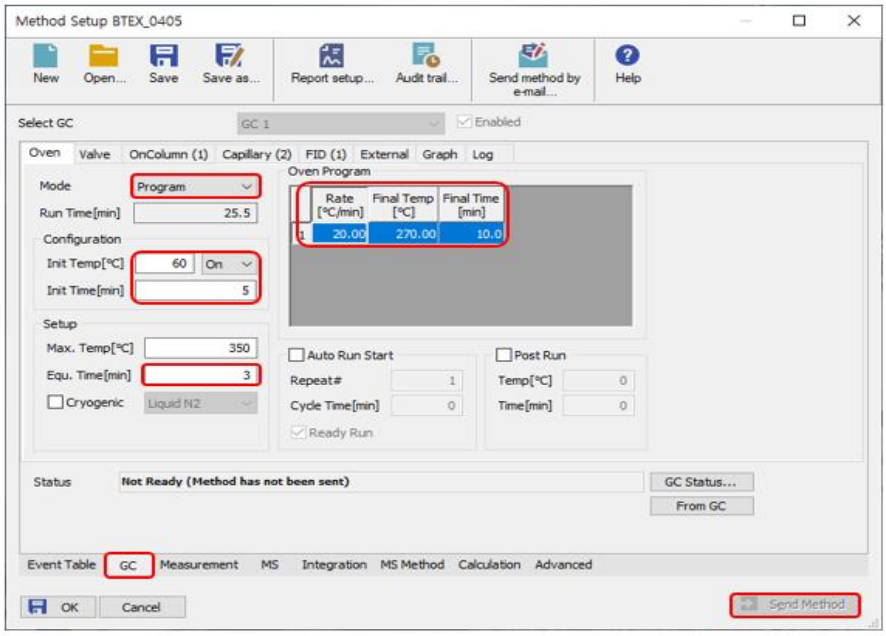
[등온모드(Isothermal)]



① Isothermal Mode를 선택.

② Init Temp, Init Time 입력

[승온모드(Program)]



① Mode를 Program으로 선택

② 초기 유지온도와 초기온도 유지시간 입력

③ 오른쪽 Program창에서 우 클릭 -> "Add Row" -> 승온속도와 최종온도 및 온도유지 시간 입력

예) 위의 경우, 초기온도 60 ℃에서 5분 머무른 후 분당 20 ℃의 속도로 최종온도 270 ℃에 도달 후 10분 머무르는 조건임.

분석시간은 프로그램 한 시간대로 Run Time에 자동 계산되어 나타남.

④ Equ. Time: 등온모드= 0 min, 승온모드 = 1 ~ 3 min 입력

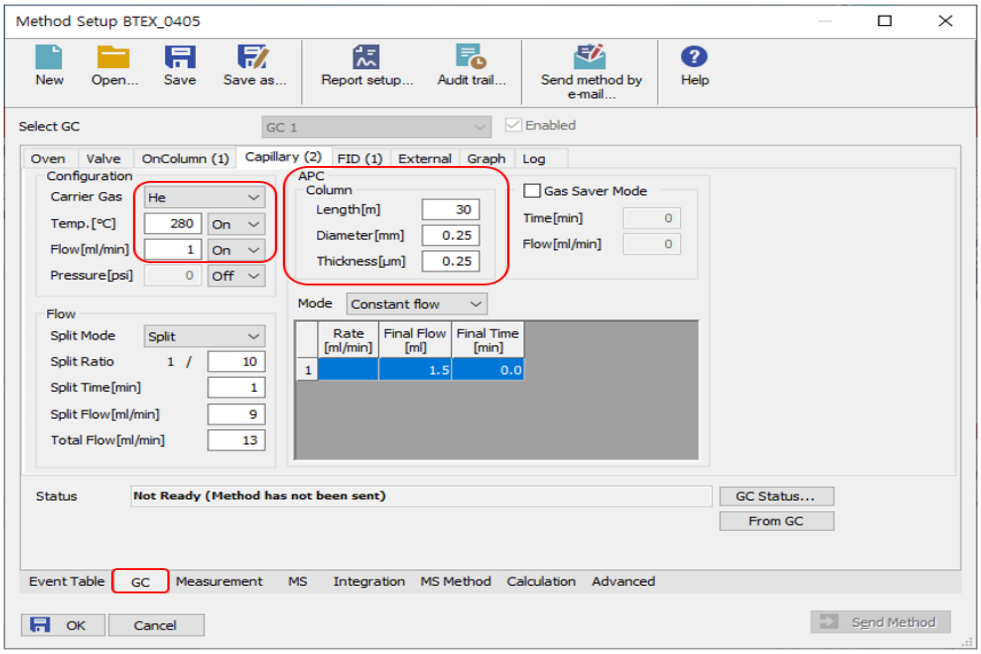
** 주의**

- Run Time은 온도프로그램만을 계산한 값이므로 다시 초기온도로 돌아와 안정화 된 후 기기상태가 Ready가 될 때까지의 시간이 아님

∴ 분석시간 후 설정 된 초기 온도로 떨어진 다음 기기가 Ready 상태가 되므로, 확인 후 다음실험 진행

1-2) 주입구(Injector): 주입구의 온도, 유속, 분할 비 등을 입력

[Capillary]



① 컬럼규격 입력 (예: 30m * 0.25mm * 0.25㎛)

② 이동상 He선택 / 온도 / 유량(0.7 ~ 1.5 mL/min) / 분할 비 등 입력

TIP. Splitless 사용하는 방법

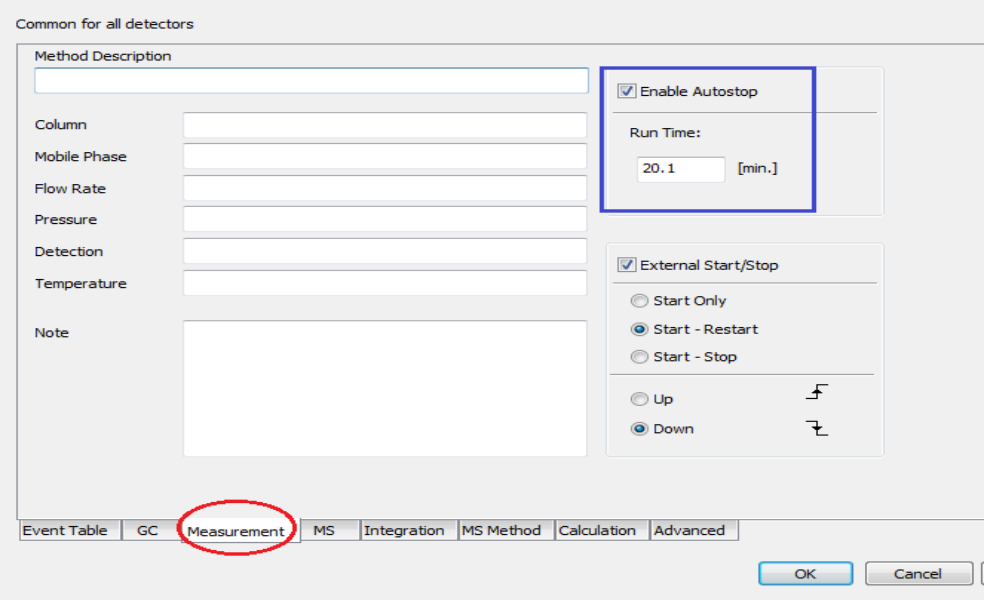
a. Auto Sampler를 이용한 시료주입 시

b. 직접시료주입

Splitless로 설정한 후에 YCMChroZen에서 Ready Run버튼을 한번 누름

1 ~ 2분후에 Ready버튼이 연속적으로 깜박이면 시료주입

1-3) Measurement: 총 분석 시간(Run Time)을 입력 (오븐 Run Time +0.1min 설정)

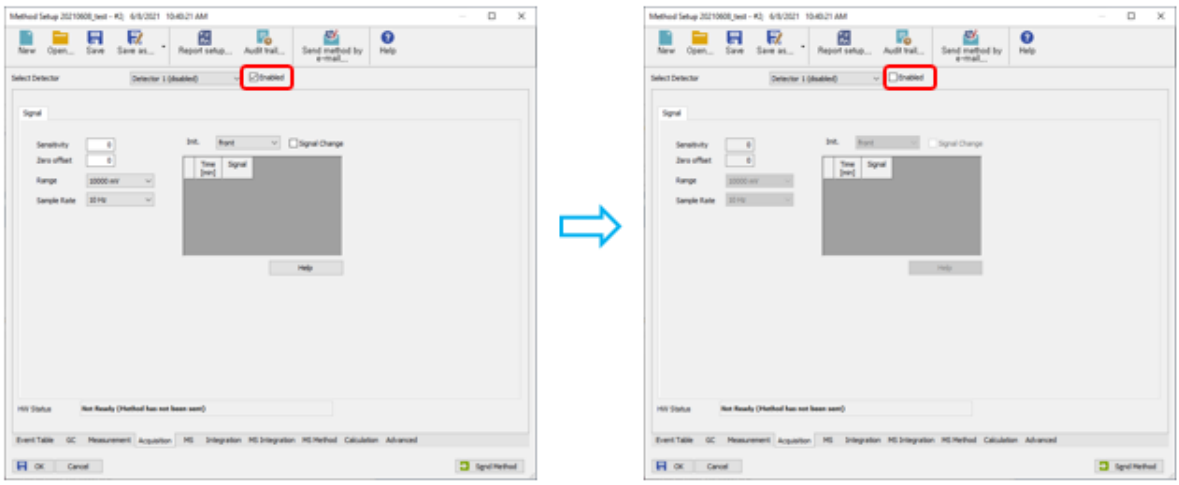


① Enable Autostop 체크

② GC 내 Oven에서 설정한 분석시간 + 0.1 min 입력

- > 등온모드 = Init. Time / 승온모드 = Run Time + 0.1

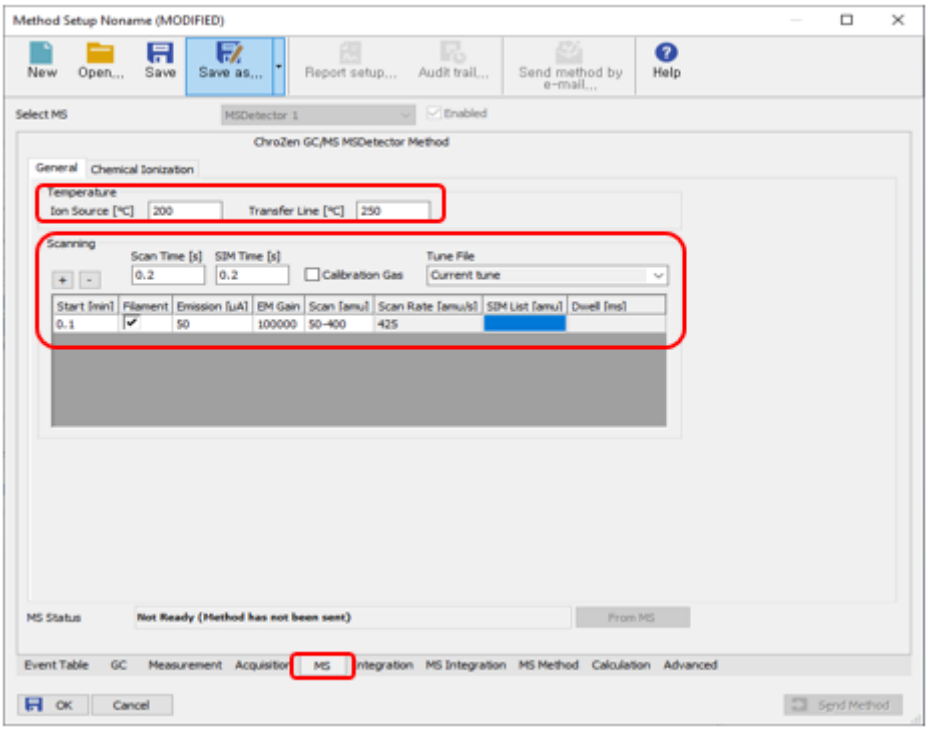
1-4) Acquisition 설정



① Enable 체크 된 것을 해지

②

1-5) MS Method Setup



a. Ion Source (200 ~ 350 ℃) 온도설정, Transfer Line (200 ~ 350 ℃) 온도설정

주의사항

- Transfer Line의 온도는 Oven 최종온도와 동일 하거나 조금 낮은 온도로 설정
- Ion Source온도는 Transfer Line 보다 20 ~ 50 ℃ 낮게 설정
- 일반적으로 Ion Source 230 ℃ Transfer Line 280 ℃를 설정 (컬럼의 종류에 따라 변함)

b. Tune File은 Clarity 사용 전 작성한 tune파일을 찾아 넣음. 보통 최근 파일을 사용.

c. Start Time: Solvent가 빠져나간 후에 필라멘트 ON

** Solvent가 빠져나가는 것을 확인 하는 방법**

ⓐ 최초 분석 시 **Filament를 Off**해 놓은 상태에서 **Solvent만 주입하여** Blank분석을 실시

ⓑ Fore Pressure값이 급격하게 증가한 후, 감소하는 시간을 체크

Device Monitor창에서 확인한다.

ⓒ Pressure값이 초기에 유지했던 값으로 돌아간 시간을 Start Time으로 입력

d. Emission Current(50 ~ 300 μA), EM Gain(100,000 ~ 300,000)

기본 설정값: Emission Current: 50 μA, EM Gain: 100,0000

e. Scan 분석 시 Start Mass와 End Mass값 설정(1 ~ 1,200 amu)

➔ 넓은 Scan Range는 노이즈의 양을 증가시키는 원인,

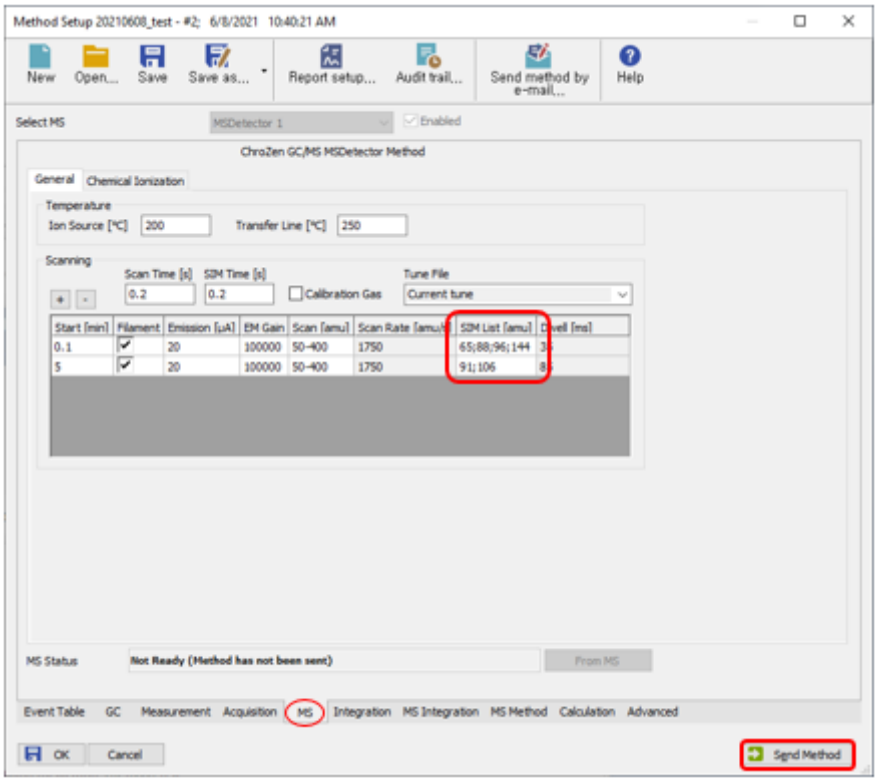
기본 설정값 : 30~350 amu

f. SIM 분석 시 원하는 Ion의 amu(m/z)값을 SIM List에 입력, 이때 많은 SIM Ion을 입력하면 SIM Time에러가 발생한다.

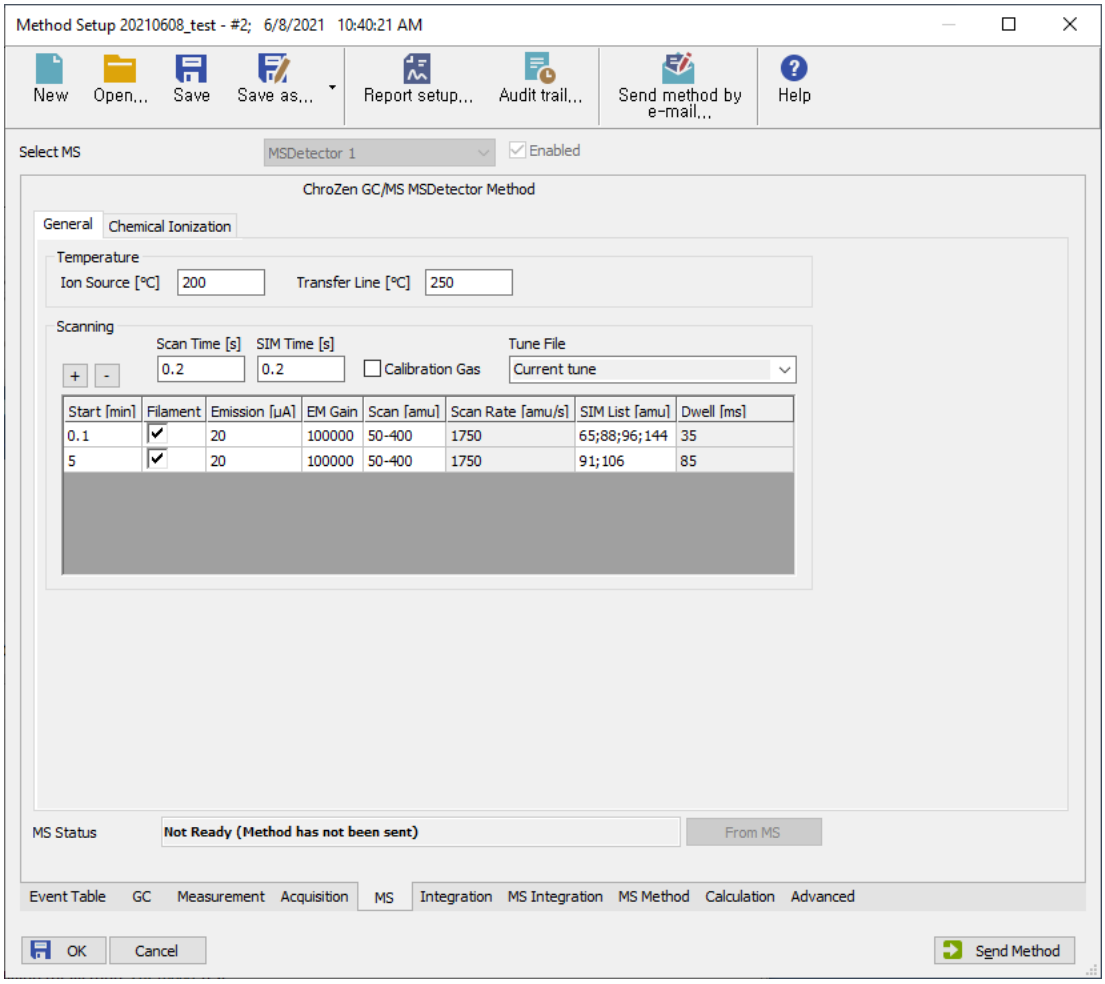
조치방법 : 에러에서 나오는 최저값보다 높은 SIM TIME값을 입력해준다.

예 1) SIM TIME 0.2일 때 에러 (SIM ion의 숫자가 많을 때 아래와 같은 에러 가 뜸)

-> **SIM TIME을 0.301 또는 0.31로 입력**



예 2) 피크가 검출되는 시간대 별로 이온 값을 나누어 입력 할수 있음.



g. 작성한 분석법을 save as 아이콘을 클릭하여 이름을 지정하고 저장.

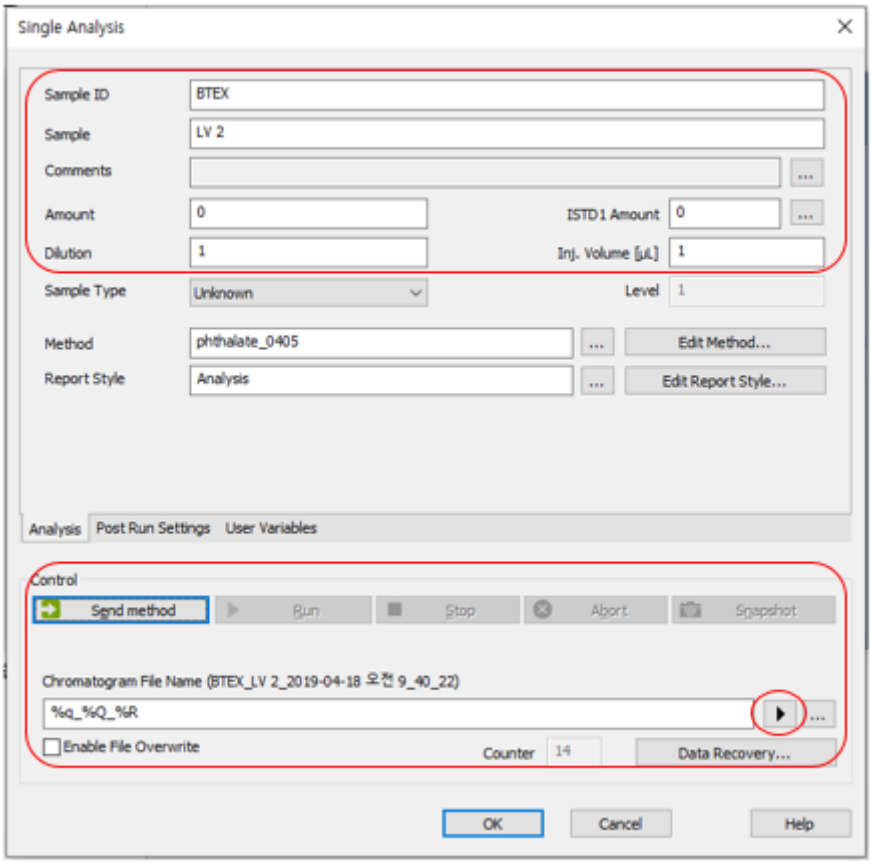
h. Send Method 버튼을 눌러 장비로 전송함 (분석법 저장되지 않으면 Send Method 창이 활성화 되지 않음)

*주의 : 분석법을 수정 또는 변경한 후에는 반드시 저장 후 Send Method 실시.

Ⅲ. 시료주입

1. 1회주입(Single Analysis)

기기제어 화면의 아이콘 클릭하여 시료이름, 파일이름을 입력. "Send Method"후, 장비의 Start Key를 눌러 데이터 수집을 시작



① 시료의 정보를 입력 (ID, Sample Name, 농도, 희석배수, 내부표준물질의 양, 시료주입양과 같은 시료정보)

② 생성될 파일의 이름을 설정

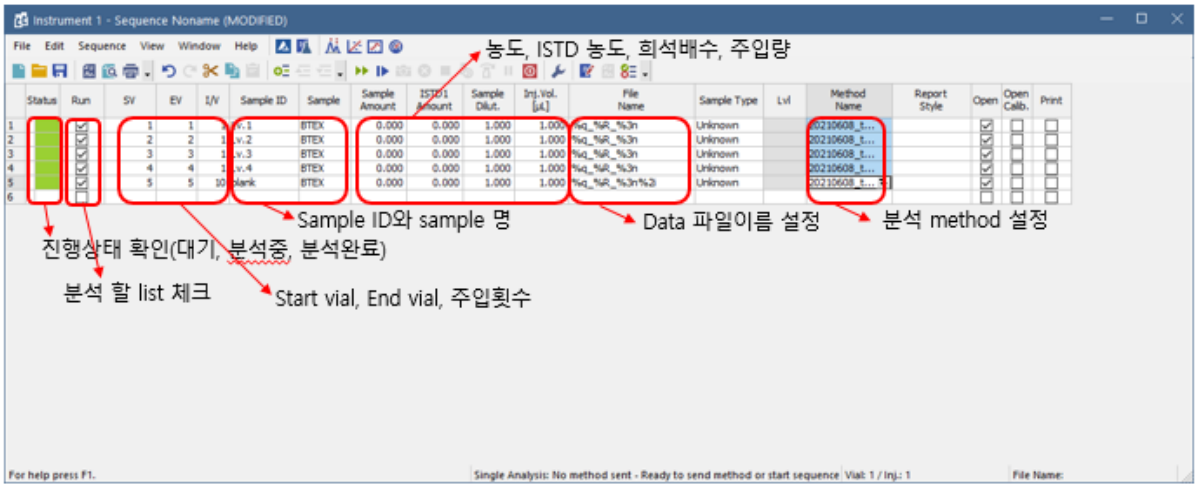
버튼을 누른 후에 원하는 옵션을 선택하여 원하는 파일명을 입력 가능

③ Run : 분석시작, Stop : 분석정지(분석 중인 파일은 그대로 저장), Abort : 분석취소(분서 중인 파일이 지워짐)

2. Sequence

기기제어 화면의 아이콘 클릭하여 Sequence창을 열고, Sample ID, Sample명, 농도, Method 등을 선택한 후 Check Sequence를 눌러 오류가 있는지 확인하고, Run Sequence 버튼을

눌러 데이터 수집을 시작


농도, ISTD 농도, 희석배수, 주입량
Sample ID와 sample 명
Data 파일이름 설정
분석 method 설정
진행상태 확인(대기, 분석중, 분석완료)
분석 할 list 체크
Start vial, End vial, 주입횟수

Ⅳ. 기기 상태

1. 현재 GC/MSD의 기기상태 표시창(Device Monitor)

① Not Ready 상태에서 초기 온도 상태로 되면 Ready 상태로 바뀌면 기기 분석 가능.
② GC/MSD 현재 온도와 상태를 확인 할 수 있음.

Ⅳ. 데이터 수집 및 적분

1. 데이터 수집(Data Acquisition)

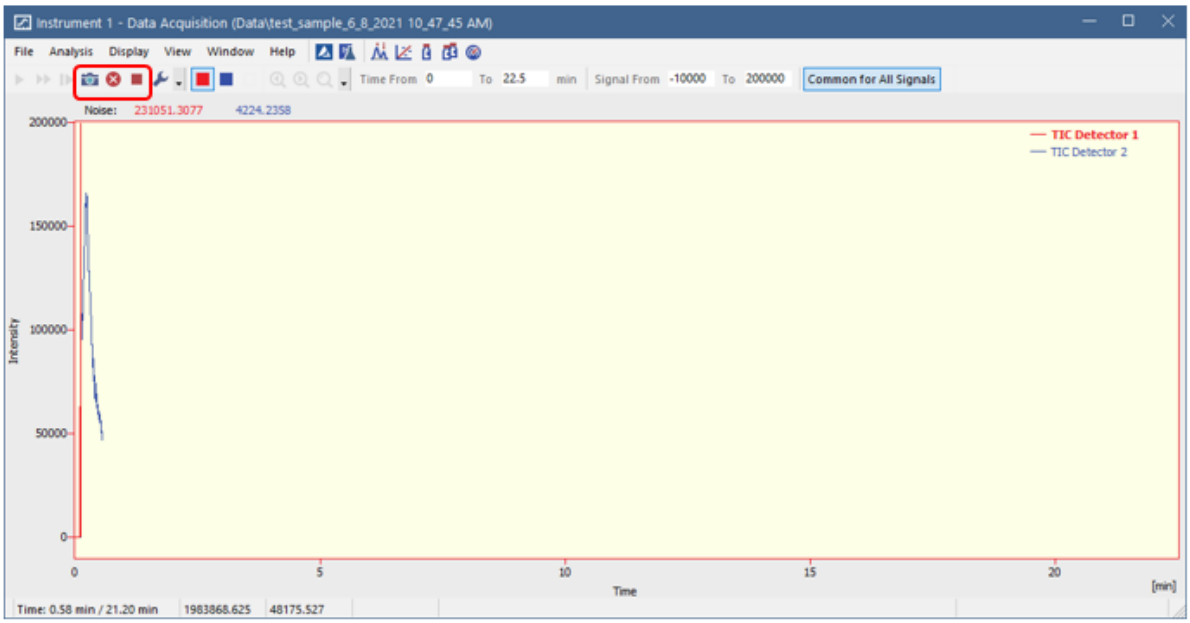
시료 주입 후 기기제어 화면의 아이콘 클릭하면, 현재 수집중인 데이터가 나타남

① Snapshot: 수집중인 데이터의 결과 값을 확인할 때 사용

② Abort: 데이터 수집 취소 시 사용, 데이터 저장되지 않음

③ Stop: 데이터 수집 중단 시 사용, 데이터 저장

바탕 크로마토그램: 상위메뉴 File => Set Background Chromatogram
=> 데이터 파일 선택하면 바탕 크로마토그램 나타남

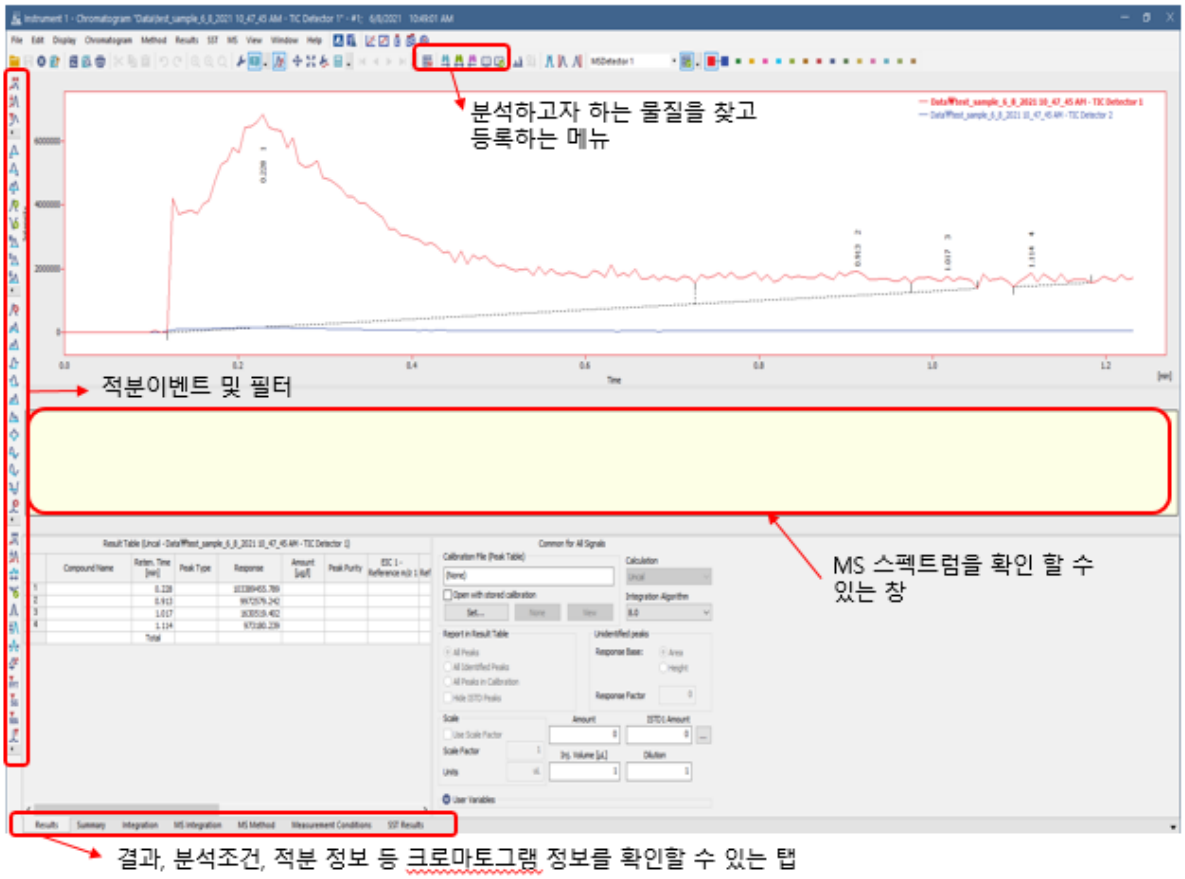


수집이 완료된 크로마토그램은 Data 폴더에 저장되며, 크로마토그램 윈도우 에서 확인할 수 있음

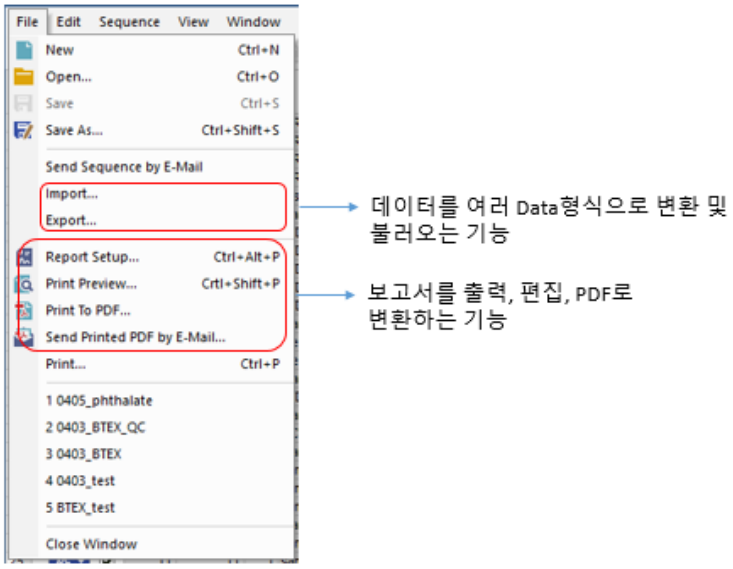
2. Chromatogram window

① Chromatogram window 화면 구성

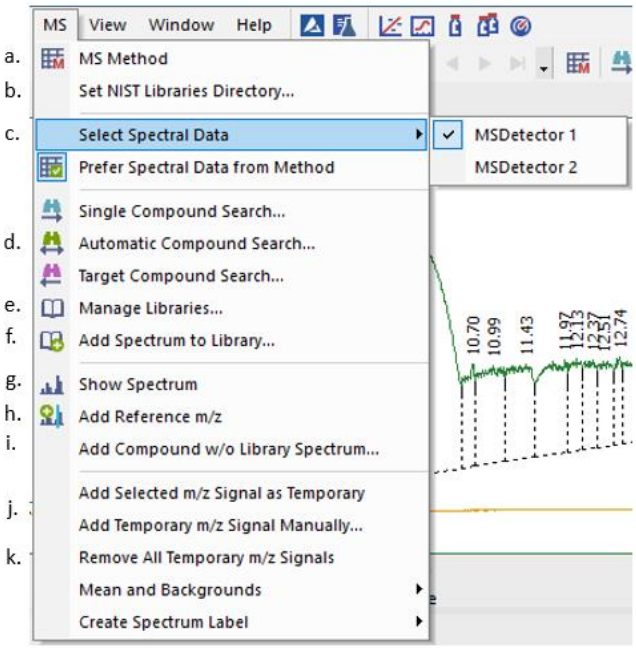
버튼을 누르면 아래와 같은 크로마토그램 윈도우 창이 나타남



② File



③ MS Menu



a. MS Method 탭을 여는 버튼
b. NIST라이브러리의 위치를 지정 할 때 사용(NIST설치후 최초 1회)
c. Scan Spectrum과 SIM Spectrum을 선택 할 때 사용
d. Single Compound Search : 선택한 Peak의 Spectrum을 NIST와 비교하여 정성할 때 사용
Automatic Compound Search : 적분한 Peak들을 NIST와 비교하여 정성할 때 사용
Target Compound Search : 크로마토그램에서 분석하고자 하는 compound가 있는지 검색할 때 사용
e. NIST라이브러리를 열 때 사용

f. NIST에 현재 활성화 되어 있는 Spectrum을 등록하는 기능(User 라이브러리)
사용자가 필요로 할 때, 합성한 물질등을 분석할 때 사용

g. 크로마토그램에서 원하는 R.T.의 Spectrum을 볼 때 사용

h. MS Method 탭에서 Reference ion을 추가 할 때 사용
각 Compound를 선택하고 버튼을 눌러 Reference Ion 입력

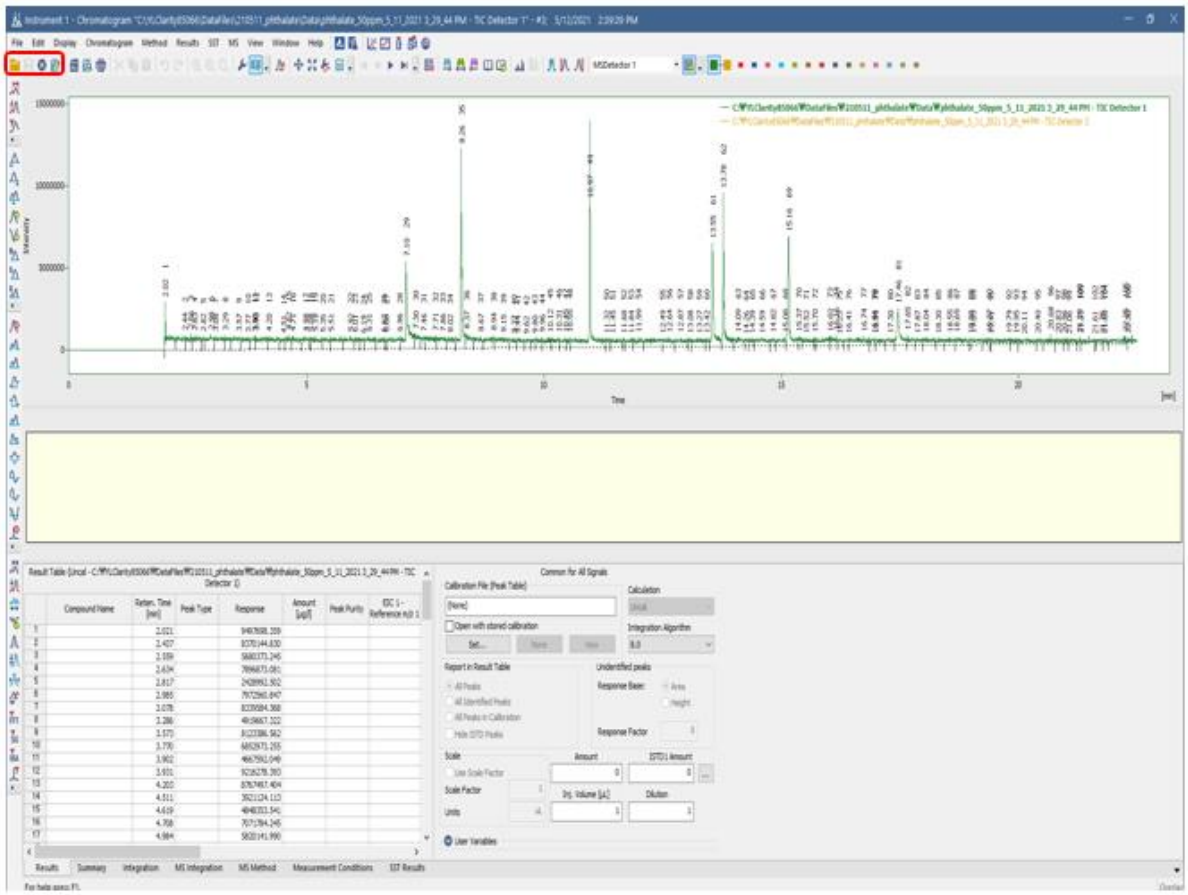
i. SIM Data와 Scan Data에서 원하는 Peak의 이름을 설정하고 MS Method탭에 등록

j. 크로마토그램에서 원하는 m/z값을 볼 때 사용

k. 선택되어 표시된 m/z그래프를 삭제 할 때 사용

3. 적분(Integration)

크로마토그램 윈도우(Chromatogram Window) 아이콘 클릭하면, 다음과 같은 화면이 나타남



① 적분 할 Data 불러오기

상위 메뉴 중 "열기" 아이콘 클릭 => Data 클릭 후 OK

=> 크로마토그램 윈도우(Chromatogram Window) 에 선택한 데이터가 나타남

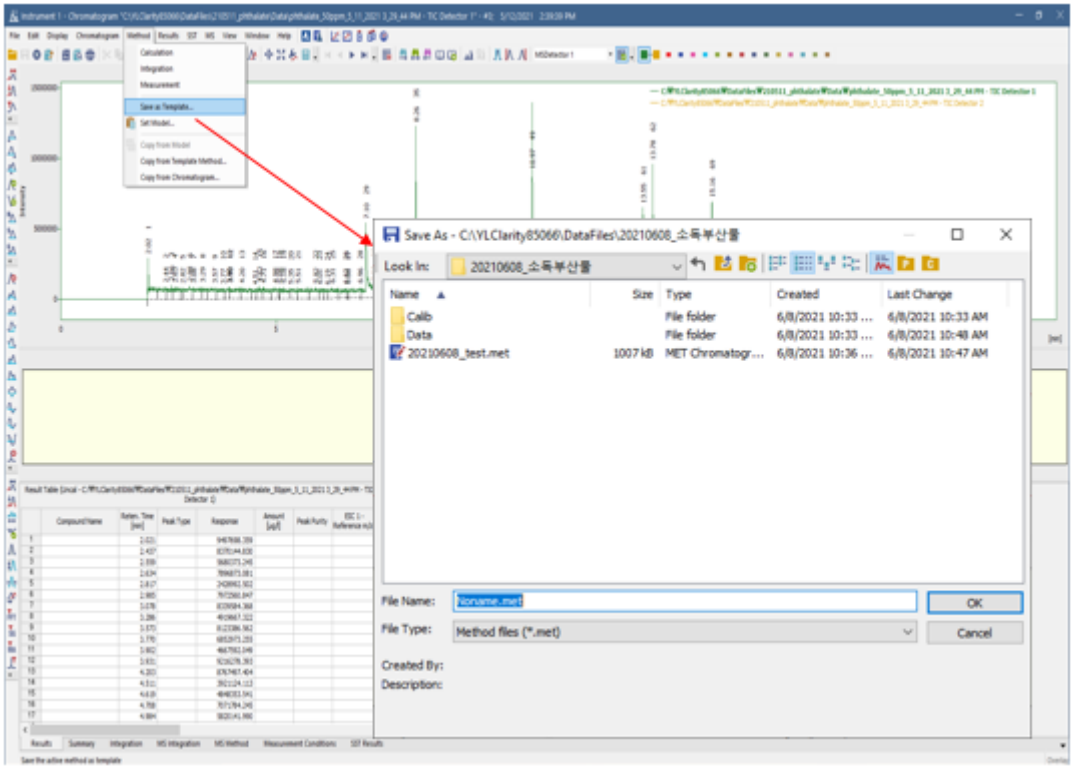
② Integration Factor 입력

Integration 화면 클릭 한 후

- 기본 적분 Factor (Peak Width, Threshold): Value 입력 후 Enter
- 추가 적분 Factor: 적분 이벤트 표 클릭 => 원하는 항목 선택 후 Value 입력 후 Enter
  또는 좌측 적분이벤트 아이콘 클릭 후 적분 Factor 적용 할 크로마토그램의 Start/Stop 범위를 마우스 사용하여 클릭

③ 적분 Factor Method로 저장하기

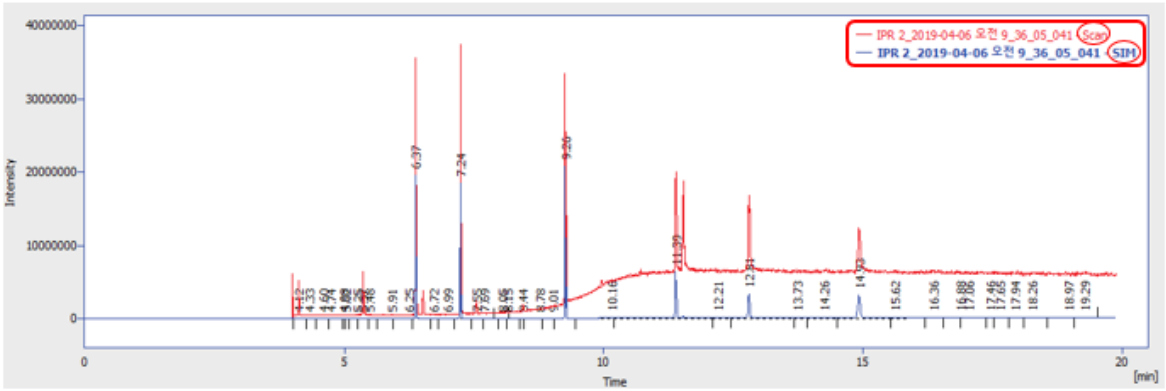
상위메뉴 Method => Save as Template => Method File이름 입력 한 후 OK를 클릭



**** 주의사항**

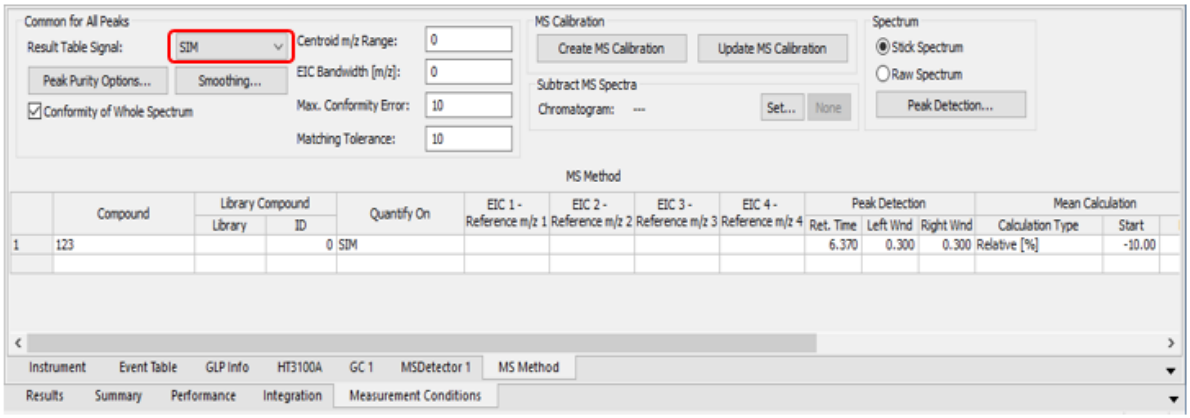
① SIM Data와 Scan Data를 각각 적분할 때 적분하고자 하는 크로마토그램을 선택

예) 아래의 그림은 SIM Data이다. 파란색 글씨가 두껍게 나타난 것을 볼 수 있다. 이는 SIM Data가 활성화 된 것을 나타낸다.



② SIM Data와 Scan Data를 각각 적분할 때 MSD Method에서 Result Table Signal을 수집한 신호로 바꿈

예) 아래그림과 같이 SIM Data 분석 시, Result Table Signal을 SIM으로 설정

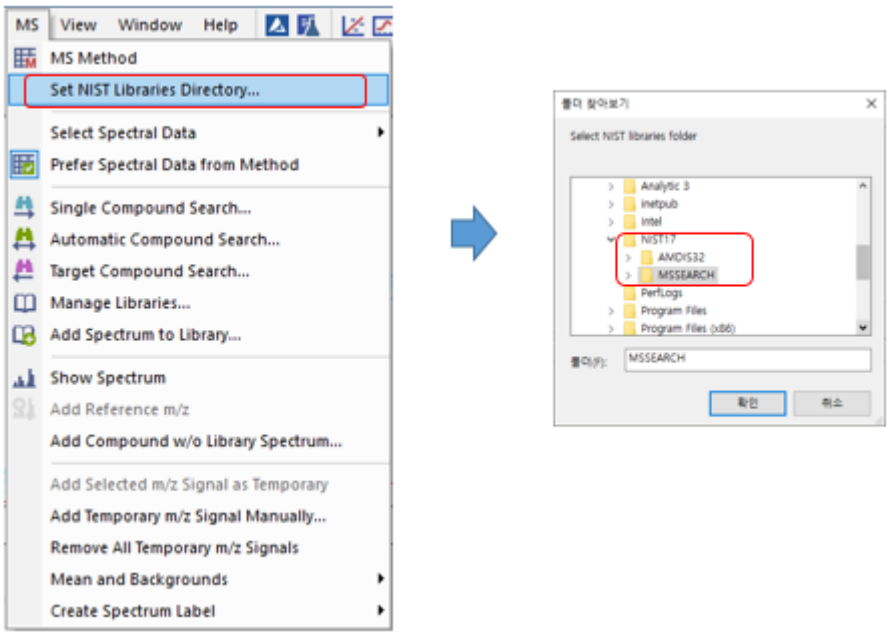

Common for All Peaks
Result Table Signal:
SIM
Peak Purity Options...
Smoothing...
Conformity of Whole Spectrum
Centroid m/z Range:
EIC Bandwidth [m/z]:
Max. Conformity Error:
Matching Tolerance:
MS Calibration
Create MS Calibration
Update MS Calibration
Subtract MS Spectra
Chromatogram:
Set...
None
Spectrum
Stick Spectrum
Raw Spectrum
Peak Detection...
MS Method
Compound
Library Compound
Library
ID
Quantify On
EIC 1 - Reference m/z 1
EIC 2 - Reference m/z 2
EIC 3 - Reference m/z 3
EIC 4 - Reference m/z 4
Peak Detection
Ret. Time
Left Wnd
Right Wnd
Mean Calculation
Calculation Type
Start
1
123
0
SIM
6.370
0.300
0.300
Relative [%]
-10.00
Instrument
Event Table
GLP Info
HT3100A
GC 1
MSDetector 1
MS Method
Results
Summary
Performance
Integration
Measurement Conditions

V. 정성

1. NIST등록 방법(프로그램 설치 시 최초 1회만 시행)

Scan Mode에서 데이터 수집 후에 결과를 이용하여 Library Search를 하고 정성을 하는 것이 CHROZEN GC GC/MSD의 가장 큰 장점이다. Library Search를 하기 위해서는 YCMClarity에 NIST Library 경로를 지정해 주어야 한다.

크로마토그램 윈도우(Chromatogram Window) 아이콘 클릭한 후 아래그림과 같이 Set NIST Libraries Directory를 클릭한다. NIST 14가 설치된 폴더를 클릭하면 MS SEARCH라는 폴더가 나오는데, 이 폴더를 클릭한 후 확인을 누르면 된다.



2. 화학물질 정성

Scan Mode로 분석을 한 다음 NIST를 이용한 정성하는 방법은 크게 3가지로 Single Compound Search, Automatic Compound Search, Target Compound Search가 있다.

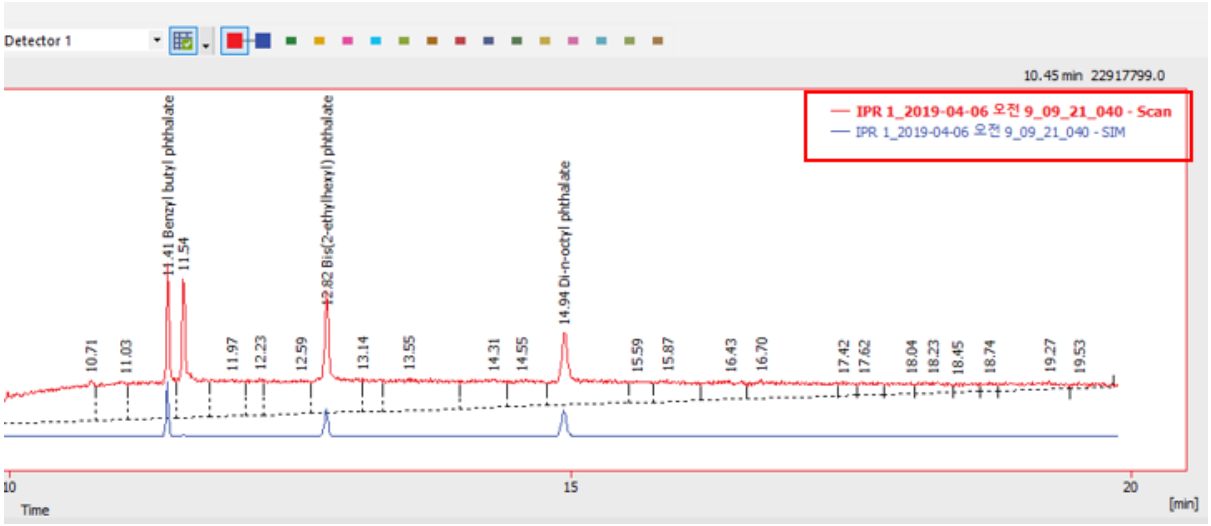
주의

- SIM 분석 시 NIST를 이용한 Search를 할 수 없음

크로마토그램 윈도우(Chromatogram Window) 화면 상단에서 다음과 같은 아이콘을 볼 수 있다. 각각 Single Compound Search, Automatic Compound Search, Target Compound Search아이콘이다.

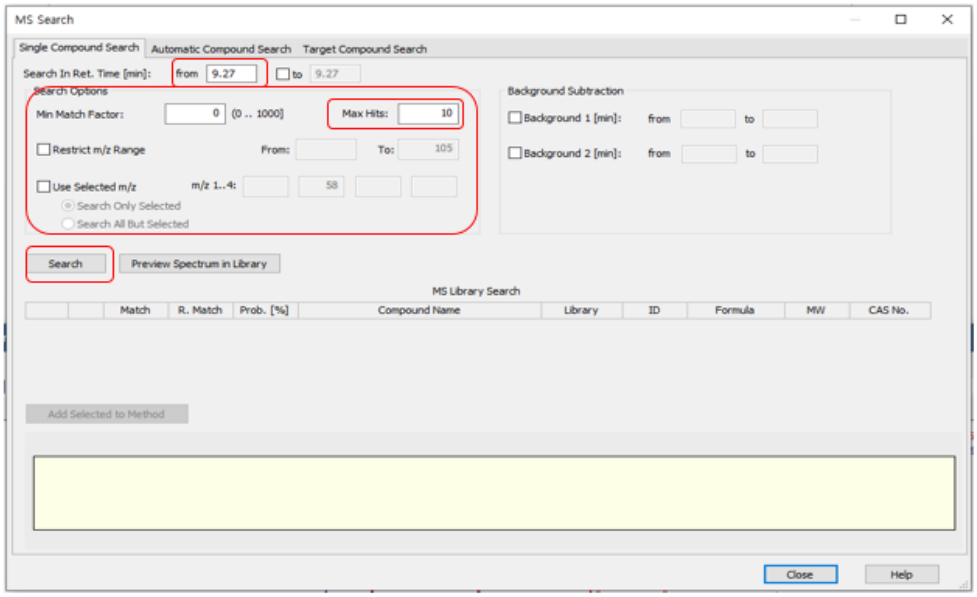
Search를 하기 전에 크로마토그램에서 Scan Data를 선택하여 활성화 시키고 MS Method에서 Result Table Signal을 Scan으로 바꾸어준다. 마지막으로 아래의 그림과 같이 Spectrum을 Scan Spectrum으로 바꾸어준다.

- 아래그림은 Scan Data가 활성화(활성화 되면 두꺼운 글씨체로 바뀜)되어 있는 상태

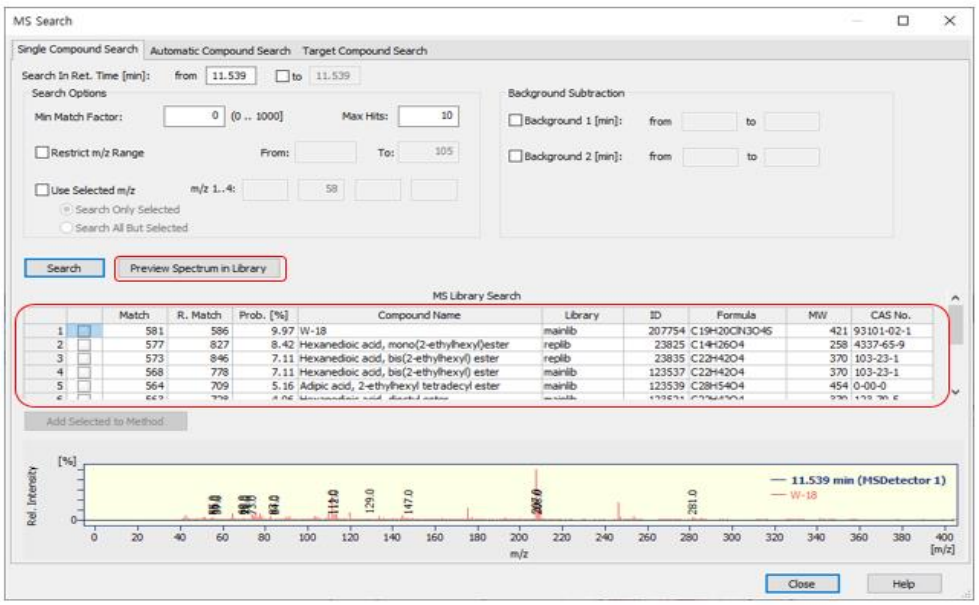


1) Single Compound Search

버튼을 누르고 정성하고자 하는 Peak를 클릭하면 아래의 그림과 같은 화면이 나타남



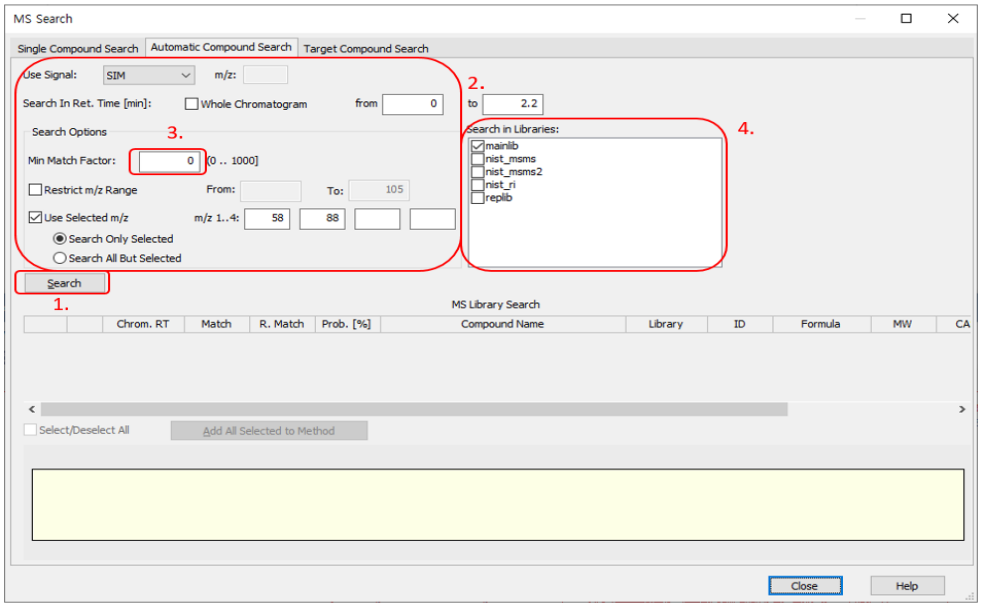
① 선택한 R.T.가 나타남(Search하고자 하는 R.T를 임의로 입력할 수 있음)
② 물질을 검색할 때 필요한 검색 조건 등을 입력
③ 최소 Match Factor 값을 기준으로 유사한 물질을 표시할 때 나타나는 개수를 지정할 수 있음
④ Search버튼을 누르면 NIST로 화면 창이 바뀌며 검색된 결과를 볼 수 있음
⑤ 검색완료 후, NIST화면을 종료하면 아래와 같은 화면이 나타나면서, spectrum 일치도가 높은 순서대로 물질 검색 결과가 나타남.



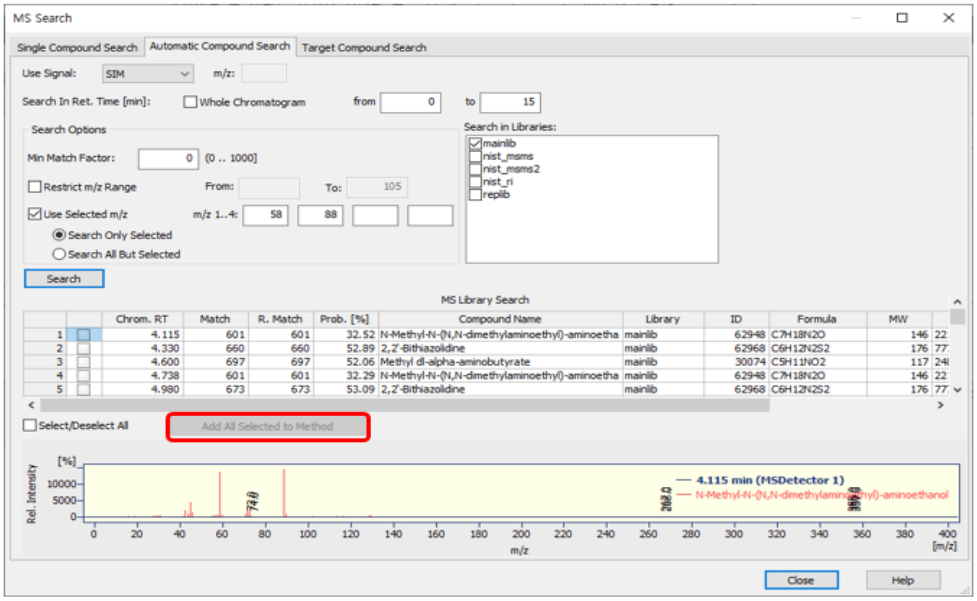
⑥ 위의 그림을 보면 Max Hits이 10개가 나타난 것을 볼 수 있다. 원하는 물질을 선택한 후 Add all Selected to Method버튼을 누르면 MS Method탭에 화학물질이 등록이 되는 것을 볼 수 있다. 이는 추후에 검량선 작성 및 정량 할 때 필요하다.

2) Automatic Compound Search

버튼을 누르면 다음과 같은 화면이 나타남

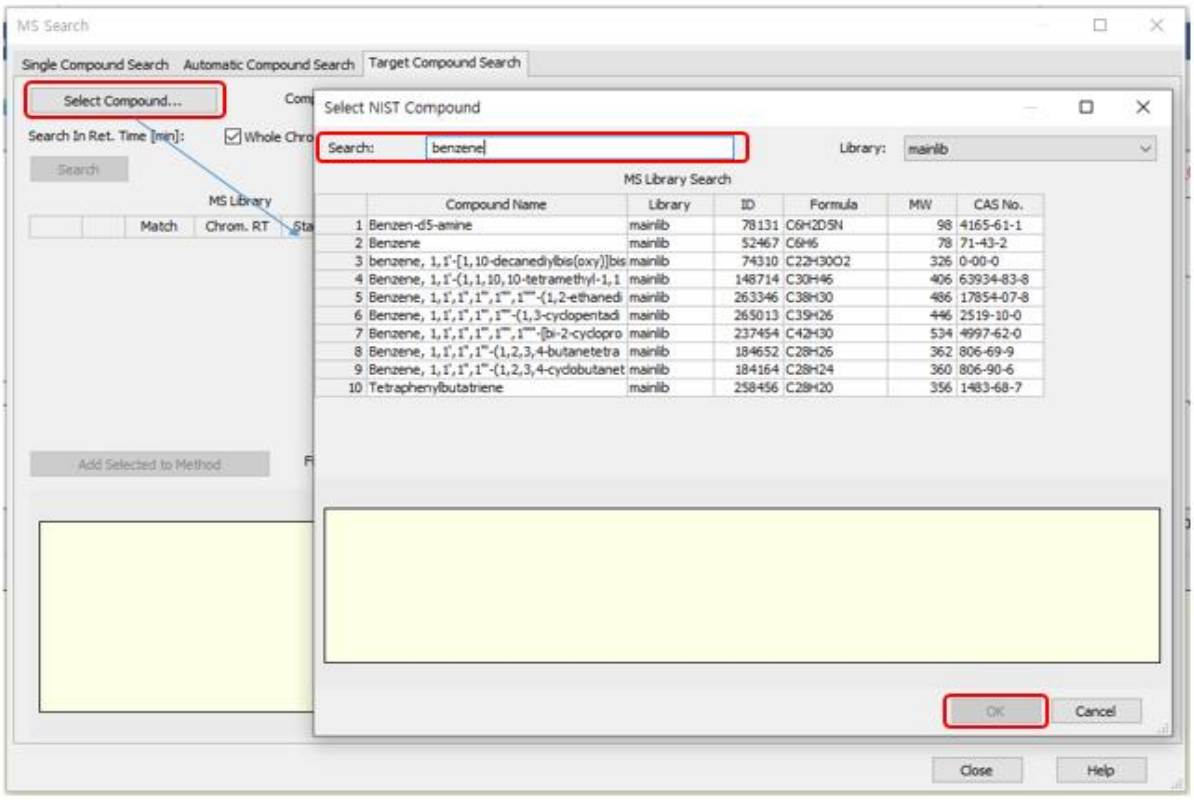


① Search 버튼을 누르면 조건에 맞는 물질들을 검색
② 물질을 검색할 때 필요한 검색 조건 등을 입력
③ Minimum Match Factor를 지정하면, 기준 값 이상의 결과만 검색됨.
④ 검색 시 사용할 Libraries중 mainlib 만 체크하고 사용
⑤ 검색완료 후 원하는 물질을 선택한 후 Add all Selected to Method버튼을 누르면 MS Method탭에 화학물질이 등록이 되는 것을 볼 수 있다. 이는 추후에 검량선 작성 및 정량 할 때 필요하다.


MS Search
Single Compound Search
Automatic Compound Search
Target Compound Search
Use Signal:
SIM
m/z:
Search In Ret. Time [min]:
Whole Chromatogram
from
0
to
15
Search Options
Min Match Factor:
0
(0 .. 1000)
Restrict m/z Range
From:
To:
105
Use Selected m/z
m/z 1..4:
58
88
Search Only Selected
Search All But Selected
Search in Libraries:
mainlib
nist_msms
nist_msms2
nist_ri
replib
Search
MS Library Search
Chrom. RT
Match
R. Match
Prob. [%]
Compound Name
Library
ID
Formula
MW
1 4.115 601 601 32.52 N-Methyl-N-(N,N-dimethylaminoethyl)-aminoetha mainlib 62948 C7H18N2O 146
2 4.330 660 660 52.89 2,2'-Bithiazolidine mainlib 62968 C6H12N2S2 176
3 4.600 697 697 52.06 Methyl dl-alpha-aminobutyrate mainlib 30074 C5H11NO2 117
4 4.738 601 601 32.29 N-Methyl-N-(N,N-dimethylaminoethyl)-aminoetha mainlib 62948 C7H18N2O 146
5 4.980 673 673 53.09 2,2'-Bithiazolidine mainlib 62968 C6H12N2S2 176
Select/Deselect All
Add All Selected to Method
[%]
10000
5000
0
Rel. Intensity
74.0
4.115 min (MSDetector 1)
N-Methyl-N-(N,N-dimethylamin
hyl)-aminoethanol
0 20 40 60 80 100 120 140 160 180 200 220 240 260 280 300 320 340 360 380 400
m/z
[m/z]
Close
Help

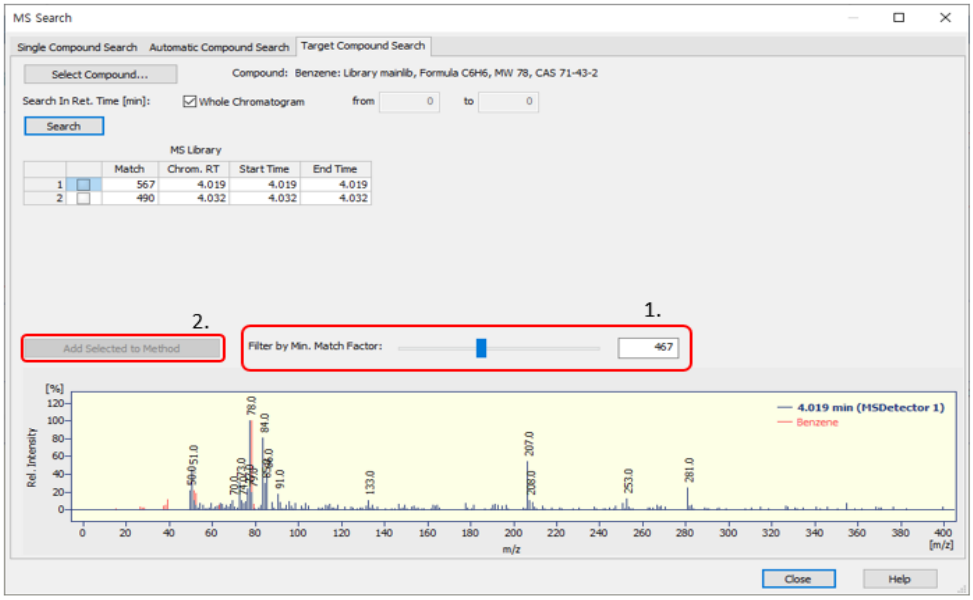
3) Target Compound Search

버튼을 누르면 다음과 같은 화면이 나타남



① Select Compound를 클릭

② Select NIST Compound창의 Search탭에서 찾고자 하는 물질 명을 입력 (예. Benzene)

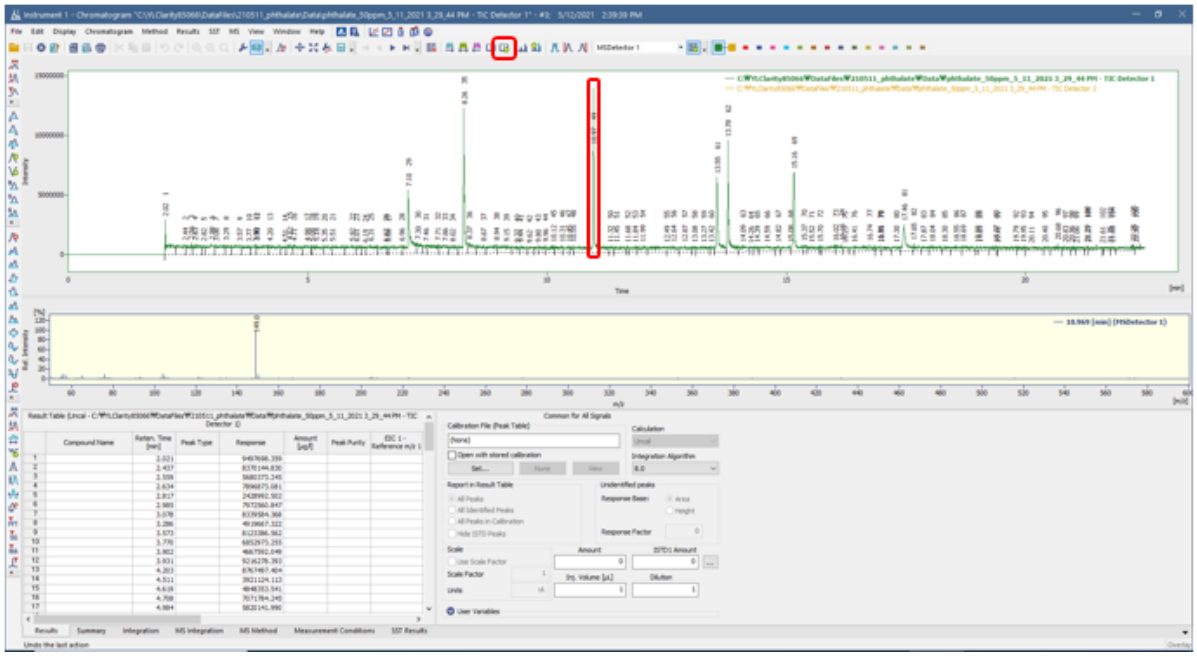


③ 최소 Match Factor값을 조절하며 Search를 해주는 기능.

④ Auto Compound Search와 동일하게 Add Selected to Method를 클릭하여 원하는 retention time과 Match값을 갖는 물질을 등록

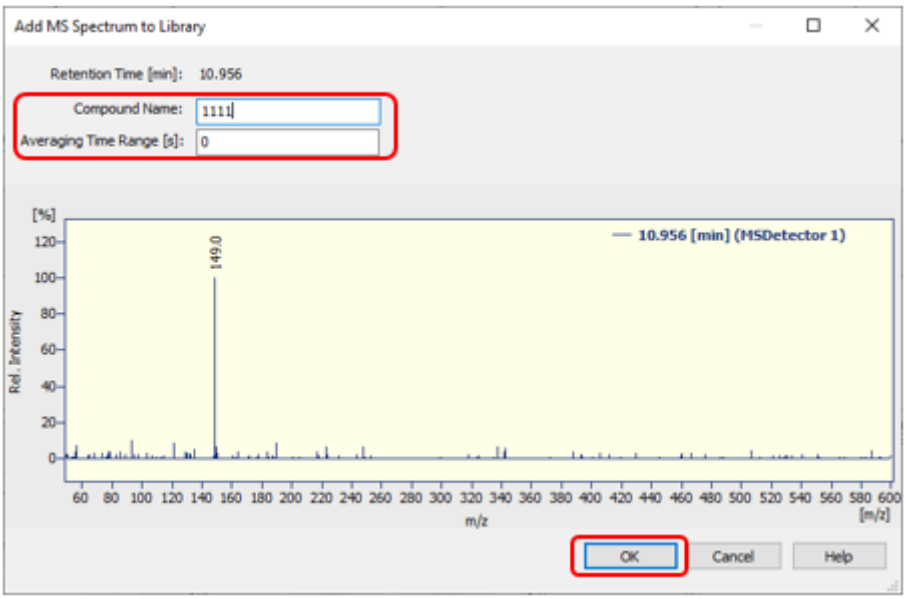
4) Add Spectrum to Library

선택한 화합물(또는 스펙트럼)을 자신의 Library에 추가할 수 있는 기능. Librarian 탭에서 해당 화합물을 선택해서 작성한다.



① (Add Spectrum to Library) 아이콘을 클릭.

② Chromatogram에 원하는 Retention time을 선택하여 클릭



③ Compound Name을 입력 (예. 1111)

④ Averaging Time Range[s] 에 Retention Time을 입력하면 그대로 적용, Time을 입력하지 않으면 기존에 선택된 Retention Time이 적용된다.

⑤ 기존 Library에 직접 작성한 Library 적용되어 새로운 창이 나타난다.

VI. 검량선 작성

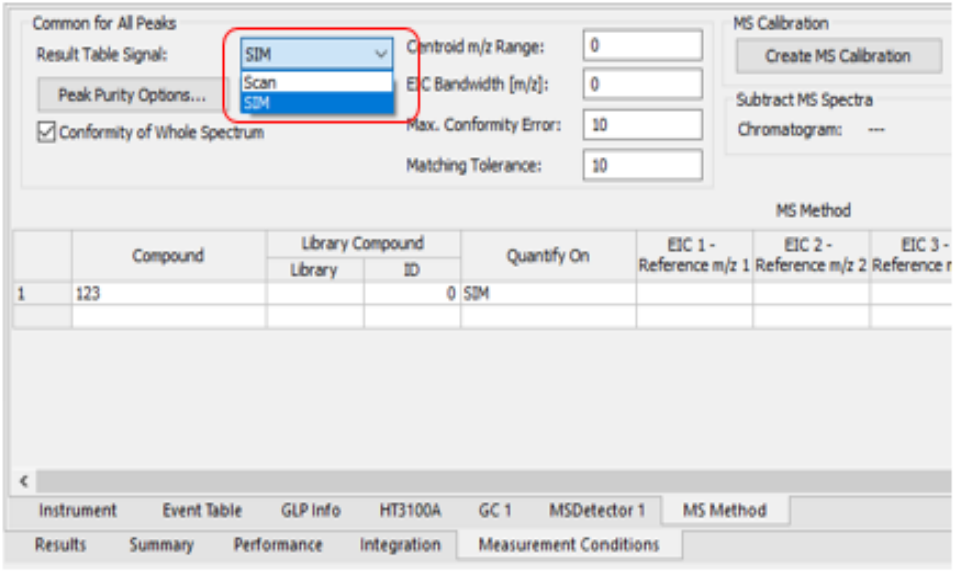
SIM 모드에서 분석한 결과와 Scan 모드에서 분석한 결과를 이용한 검량선 작성시 차이점은 다음과 같다. SIM 데이터는 NIST를 이용한 Compound Search가 안됨, 분석자가 직접 물질 명을 입력해주어야 한다. 하지만 Scan데이터의 경우 NIST를 통한 Compound Search를 통해서 등록이 가능하다.

1. SIM 데이터 Calibration

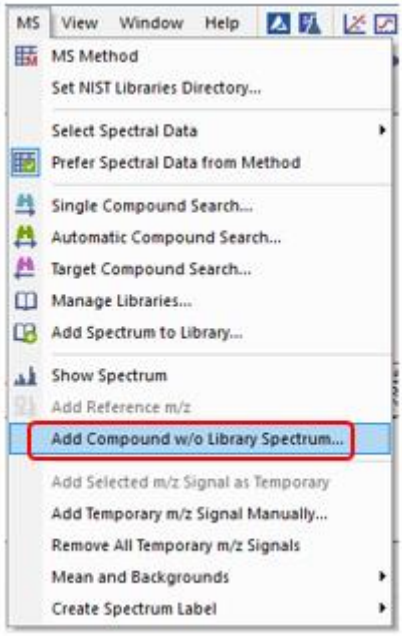
① 크로마토그램 윈도우(Chromatogram Window) 아이콘 클릭한 후 SIM Data를 적분

② 각 Peak의 Compound Name 입력방법

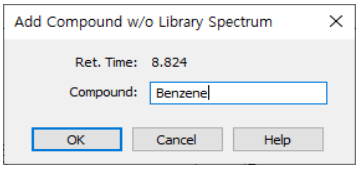
a. Scan Spectrum을 SIM으로 변경



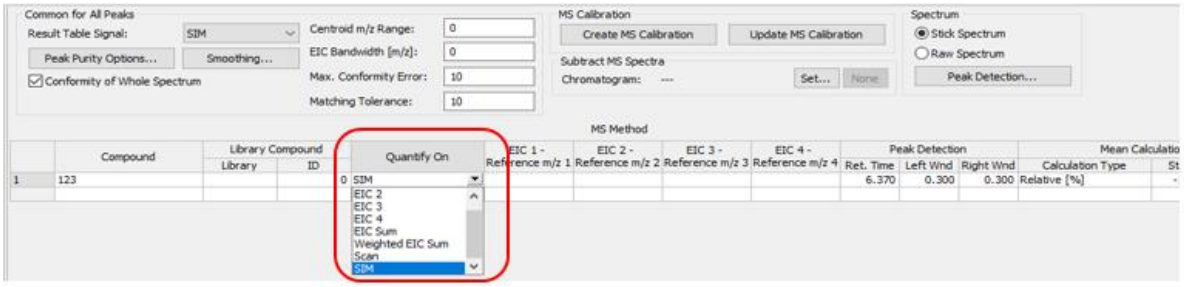
b. MS메뉴의 Add Compound w/o Library Spectrum을 클릭하여 Peak를 선택



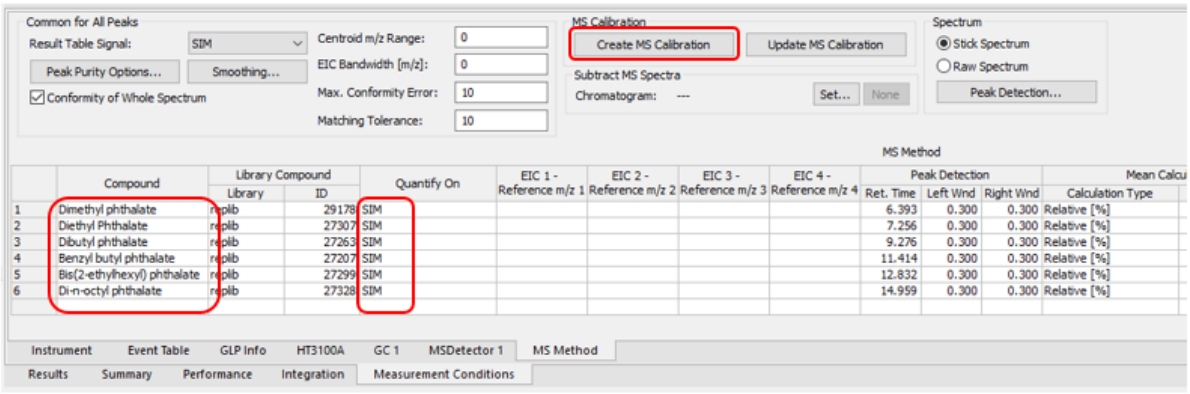
c. Peak선택후 Peak의 물질 명을 아래와 같이 입력



d. 물질 명을 입력하면 MS Method탭에 물질이 추가 된 것을 확인, 아래의 그림과 같이 Quantify On을 SIM으로 바꾸어주고 Spectrum이 SIM Spectrum인지 확인

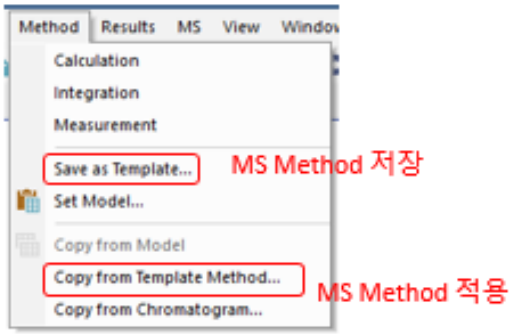


e. 동일하게 검량선을 작성하고자 하는 Peak들을 MS Method에 등록 한 다음 Create MS Calibration버튼을 클릭
(Create MS Calibration 버튼을 누르기 전에 Result창에 물질명이 들어갔는지 확인, 물질명이 입력이 되지 않았다면 A과정을 재확인)

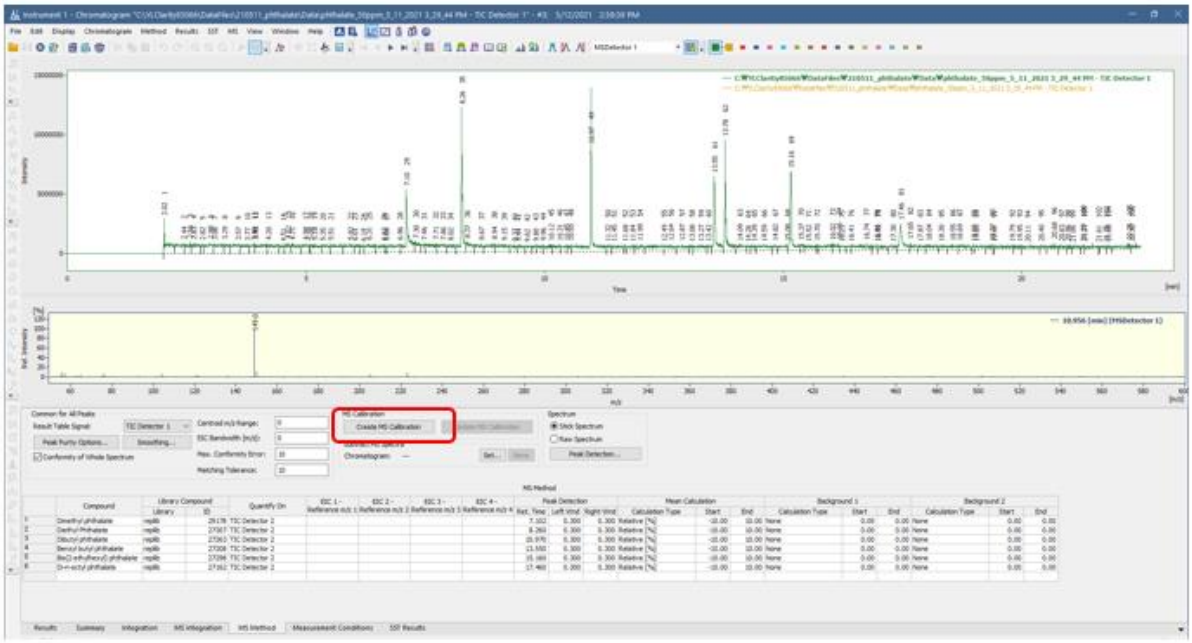


f. 적분과 MS Method 작성을 완료하면,
화면 상단의 Method -> Save as Template을 통해 분석 Method에 Integration event와 MS Method를 저장할 수 있다.

g. 동일한 물질을 분석한 데이터의 경우
Method -> Copy from Template Method를 통해, 기존에 저장한 Integration과 MS Method를 적용할 수 있다.

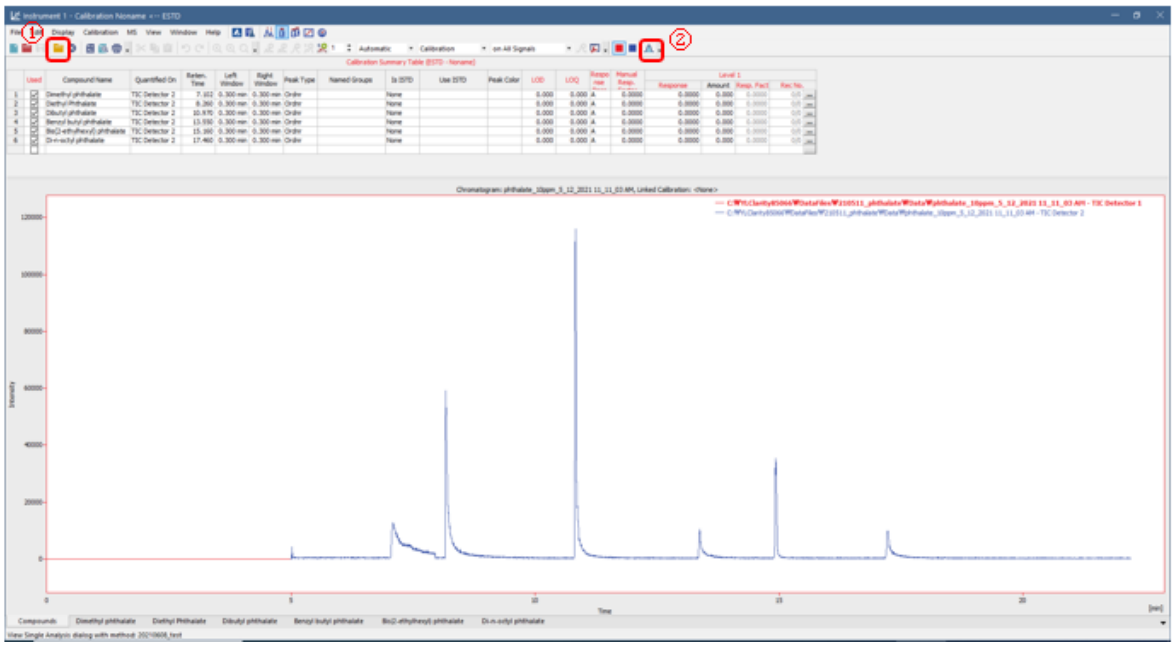


③ MS Method에서 Create MS Calibration을 선택하면 다음과 같은 화면이 나타난다. 여기서 새로 작성할 검량선의 이름을 입력하고 OK 버튼을 클릭

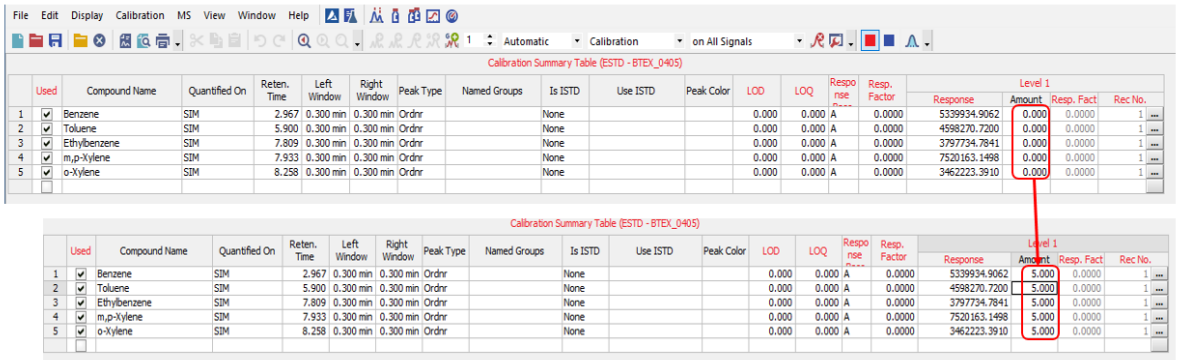


④ 검량 할 Data 불러오기

a. 상위 메뉴 중 "열기" 아이콘 (Open chromatogram) 클릭 => Data 클릭 후 OK!
-검량 윈도우(Calibration Window) 에 선택한 데이터가 나타남, 이때 적분한 Spectrum의 종류를 선택(예: SIM 분석 시 SIM Spectrum으로 선택)



b. 툴 바에 Fill All Responses from Quant. Signals버튼을 누르면 Response값이 자동으로 입력된 것을 볼 수 있음, Response값 입력 후에 각각의 농도를 입력



Calibration Summary Table (ESTD - BTEX_0405)

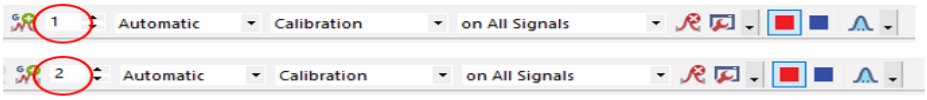
	Used	Compound Name	Quantified On	Reten. Time	Left Window	Right Window	Peak Type	Named Groups	Is ISTD	Use ISTD	Peak Color	LOD	LOQ	Response	Resp. Factor	Level 1 Response	Level 1 Amount	Level 1 Resp. Fact	Level 1 Rec No.
1	☑	Benzene	SIM	2.967	0.300 min	0.300 min	Ordnr		None			0.000	0.000	A	0.0000	5339934.9062	0.000	0.0000	1
2	☑	Toluene	SIM	5.900	0.300 min	0.300 min	Ordnr		None			0.000	0.000	A	0.0000	4598270.7200	0.000	0.0000	1
3	☑	Ethylbenzene	SIM	7.809	0.300 min	0.300 min	Ordnr		None			0.000	0.000	A	0.0000	3797734.7841	0.000	0.0000	1
4	☑	m,p-Xylene	SIM	7.933	0.300 min	0.300 min	Ordnr		None			0.000	0.000	A	0.0000	7520163.1498	0.000	0.0000	1
5	☑	o-Xylene	SIM	8.258	0.300 min	0.300 min	Ordnr		None			0.000	0.000	A	0.0000	3462223.3910	0.000	0.0000	1

Calibration Summary Table (ESTD - BTEX_0405)

	Used	Compound Name	Quantified On	Reten. Time	Left Window	Right Window	Peak Type	Named Groups	Is ISTD	Use ISTD	Peak Color	LOD	LOQ	Response	Resp. Factor	Level 1 Response	Level 1 Amount	Level 1 Resp. Fact	Level 1 Rec No.
1	☑	Benzene	SIM	2.967	0.300 min	0.300 min	Ordnr		None			0.000	0.000	A	0.0000	5339934.9062	5.000	0.0000	1
2	☑	Toluene	SIM	5.900	0.300 min	0.300 min	Ordnr		None			0.000	0.000	A	0.0000	4598270.7200	5.000	0.0000	1
3	☑	Ethylbenzene	SIM	7.809	0.300 min	0.300 min	Ordnr		None			0.000	0.000	A	0.0000	3797734.7841	5.000	0.0000	1
4	☑	m,p-Xylene	SIM	7.933	0.300 min	0.300 min	Ordnr		None			0.000	0.000	A	0.0000	7520163.1498	5.000	0.0000	1
5	☑	o-Xylene	SIM	8.258	0.300 min	0.300 min	Ordnr		None			0.000	0.000	A	0.0000	3462223.3910	5.000	0.0000	1

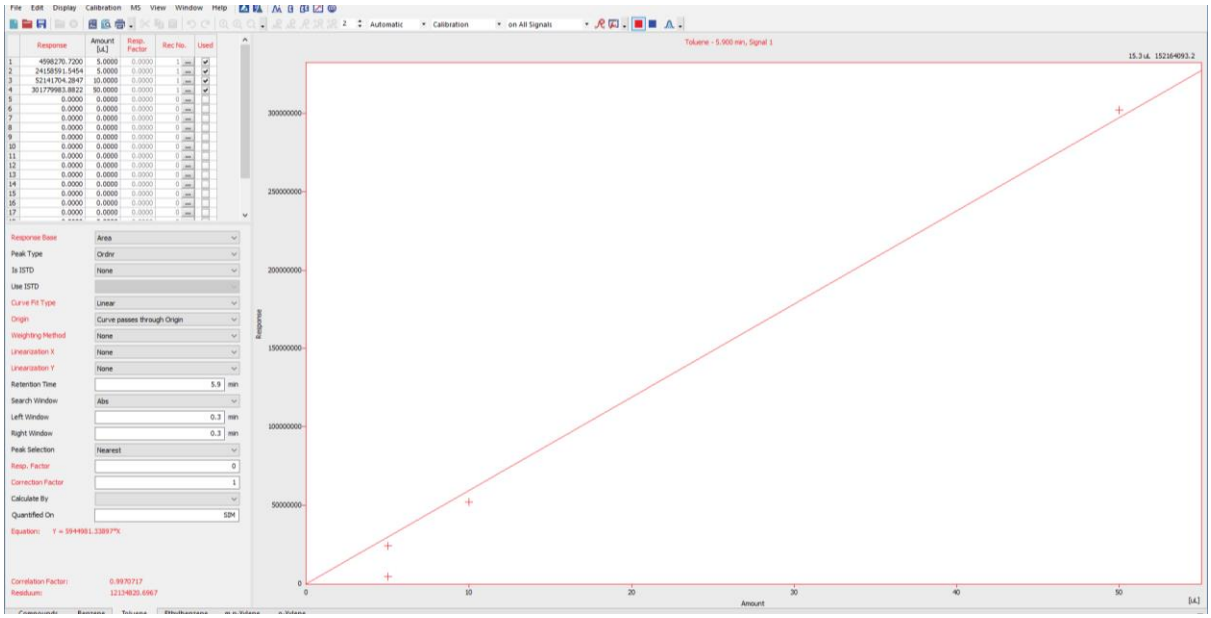
c. 검량 Level (표준시료 농도단계)를 추가 시켜 줍니다.

d. Level 2, Level 3 등 추가 STD 작성 시 검량의 1), 2)번 과정 동일하게 반복하여 Level 및 농도를 계속 추가



e. 검량선 작성

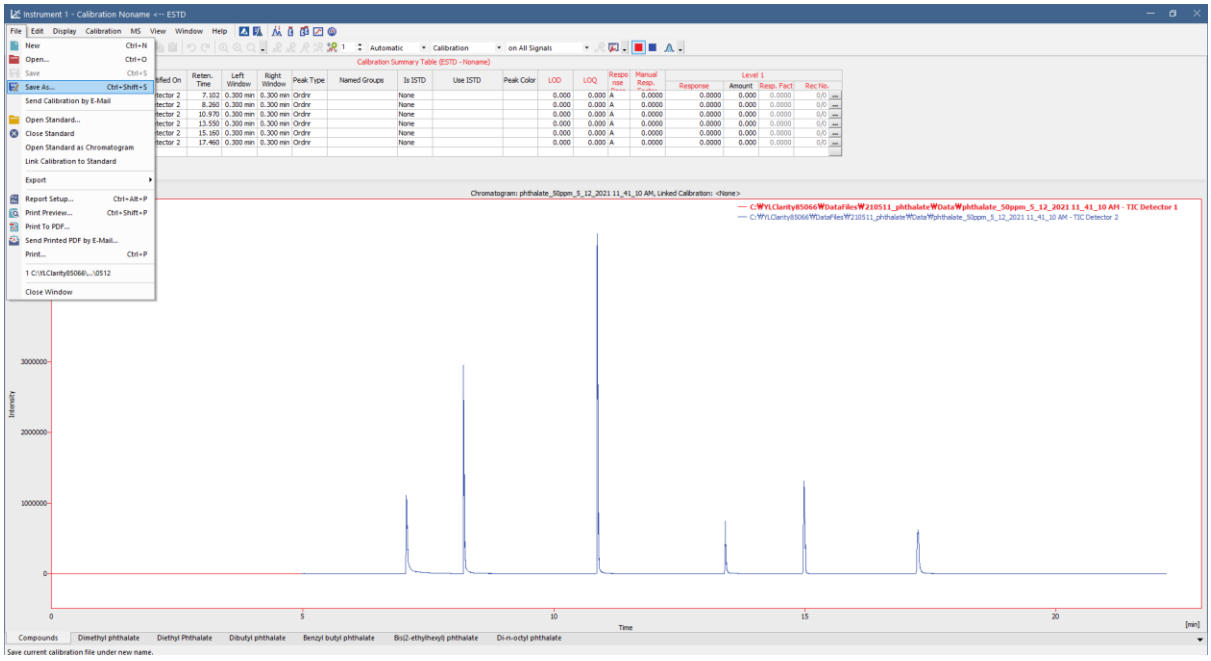
성분명에 해당하는 시트(아래)를 클릭하면 검량선 및 검량 정보 나타냄



- Response Base: Area, Height 중 선택
- Origin: 원점 포함, 통과, 무시 중 선택
- Correlation Factor: R^2

f. 검량 방법 저장

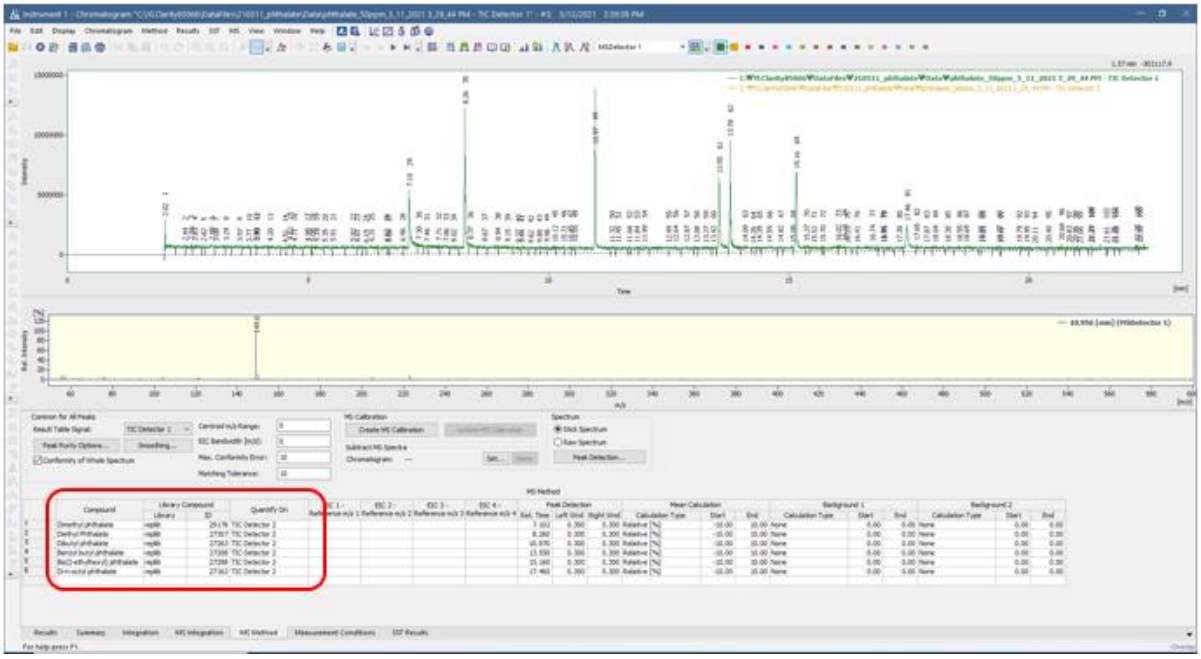
상위메뉴 File => Save As => Calibration 파일 폴더 및 이름지정 => OK 클릭



2. Scan 데이터 Calibration

(Chromatogram Window) 아이콘을 클릭한 후 Scan Data를 적분한다.

Scan 분석결과를 이용해 검량선을 작성하는 방법은 크게 2가지가 있다. 첫 번째는 SIM에서 한 방법처럼 Add Compound w/o Library Spectrum메뉴를 이용 하여 검량선을 작성하는 방법과 NIST를 통한 정성을 할 때 Add Selected to Method버튼을 눌러 MS Method텝에 물질을 등록한 다음 SIM과 동일한 방법으로 검량선을 작성하면 된다.



차이점은 위에 보는 것처럼 Library Compound에서 ID가 등록이 되는 여부로 나타난다.
(DimethYCM phthalate는 NIST를 통한 등록, DiethYCM phthalate은 Add Compound w/o Library spectrum으로 등록)

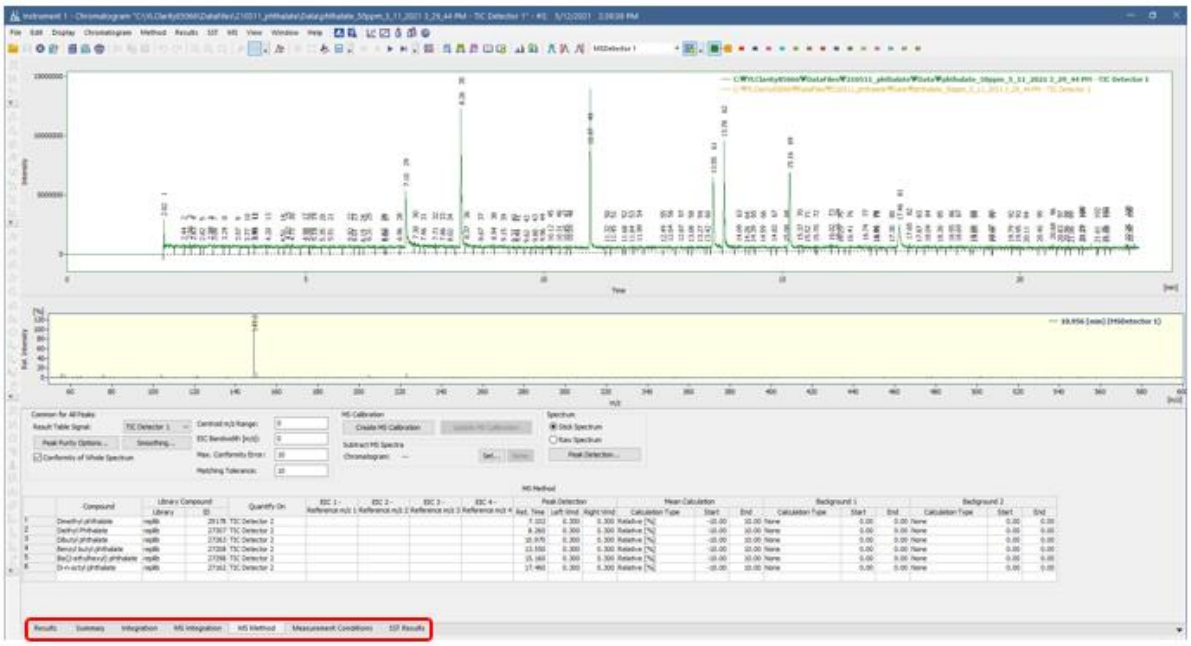
Ⅶ. 정량

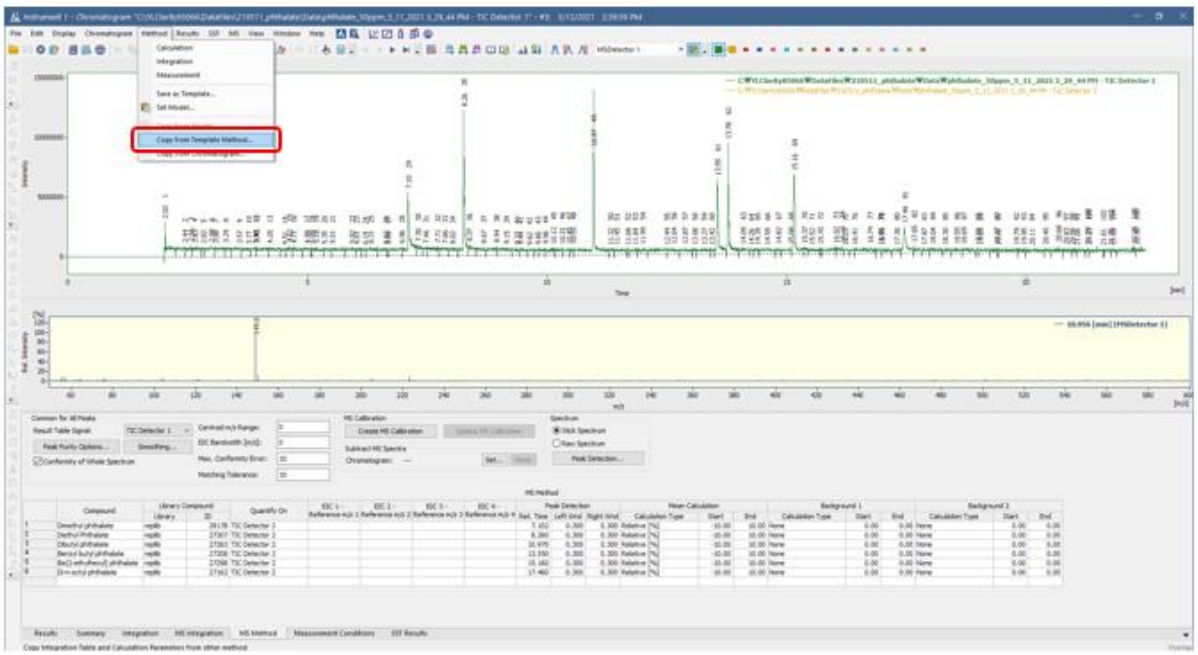
1. 정량 할 Data 불러오기

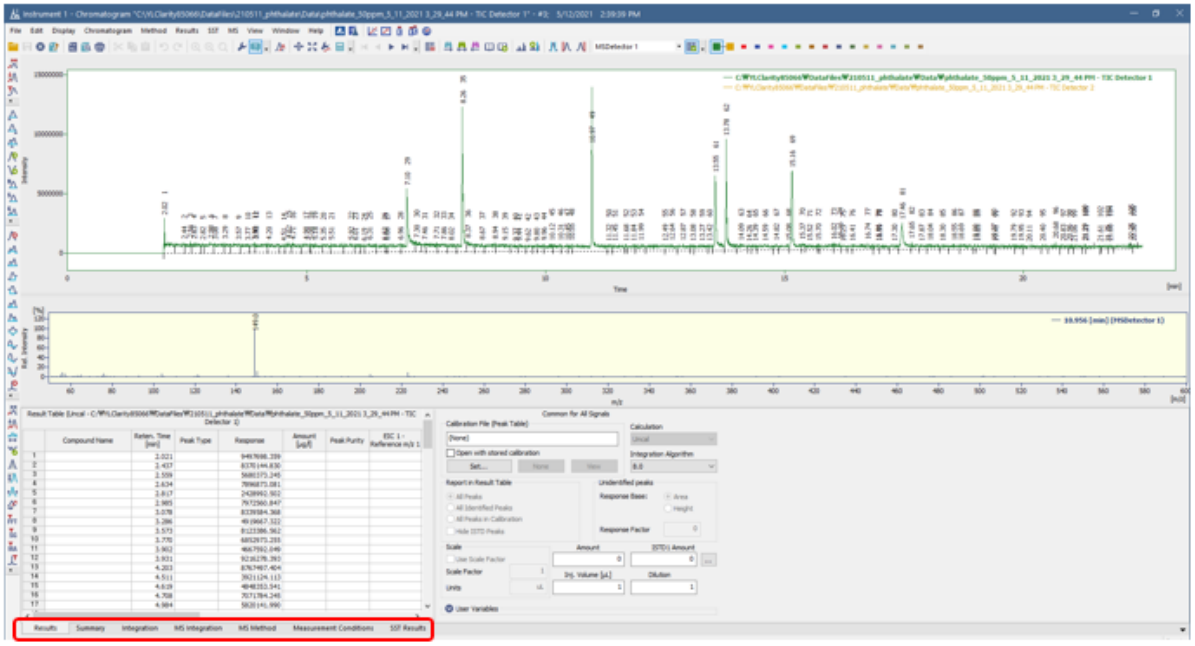
① 크로마토그램 윈도우(Chromatogram Window) 상위 메뉴 중 "열기" 아이콘 클릭

② Data 클릭 후 OK! => 선택한 데이터의 크로마토그램 및 결과표가 나타남

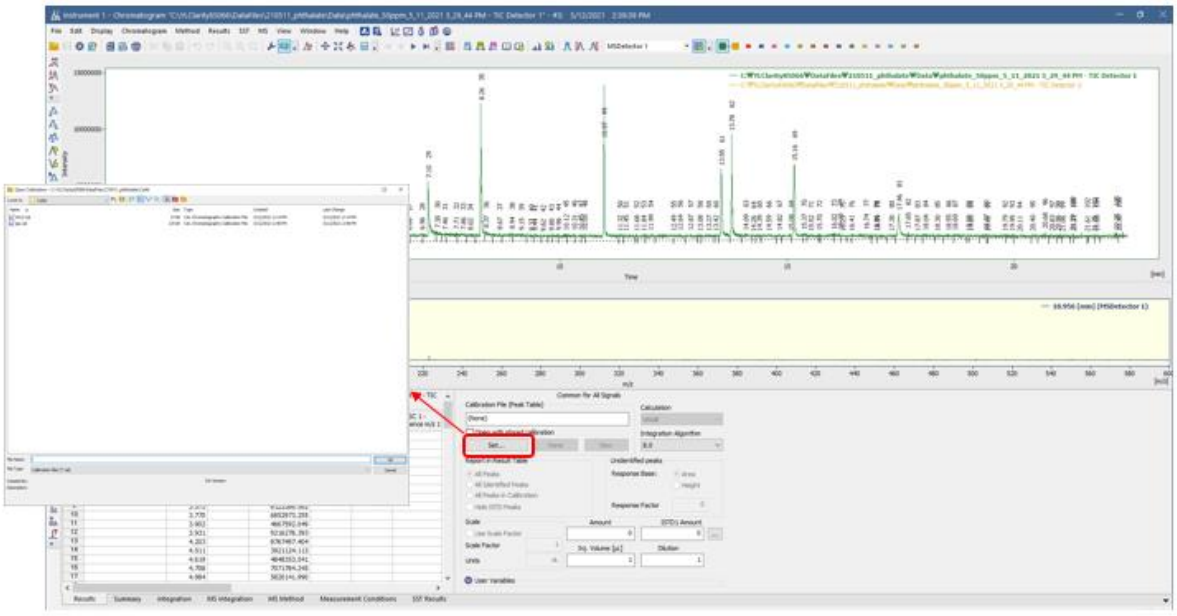
③ 앞서 검량선 작성에서처럼 MS Method탭에 분석한 각각의 Compound를 아래와 같이 추가



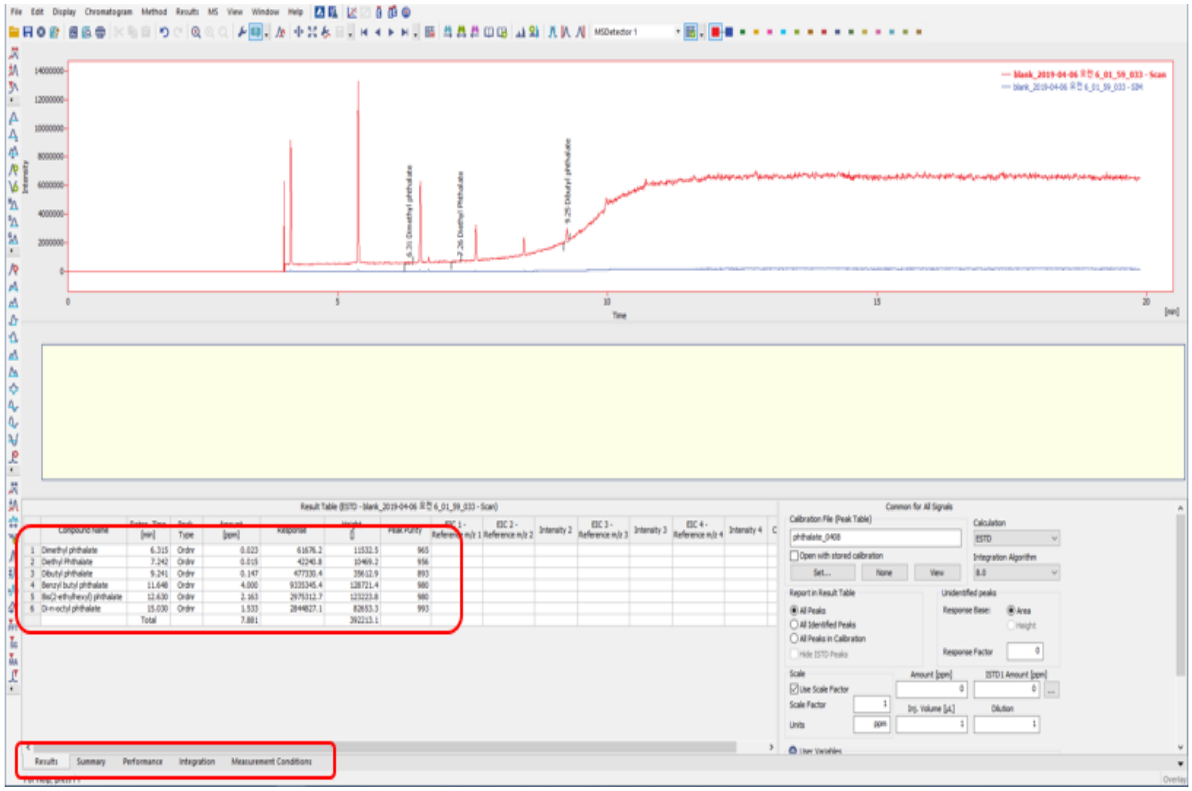




④ MS Method 에 Compound 정보를 추가시킨 다음 Result 탭으로 이동한 후 아래의 그림과 같이 "Set" 선택 => 적용 할 "Calibration file" 선택 => OK 클릭



⑤ 다음과 같은 정량결과(농도)가 나타남



** 주의사항

MS Method에 미지물질의 정보(물질 명, Retention Time 등)가 등록되어 있어야 함