



Geräte der Serie 6500/6500+

Systemhandbuch



Dieses Dokument wird Käufern eines SCIEX-Geräts für dessen Gebrauch zur Verfügung gestellt. Dieses Dokument ist urheberrechtlich geschützt und jegliche Vervielfältigung dieses Dokuments oder eines Teils dieses Dokuments ist strengstens untersagt, sofern dies nicht schriftlich von SCIEX genehmigt wurde.

Die in diesem Dokument beschriebene Software unterliegt einer Lizenzvereinbarung. Es ist gesetzlich untersagt, die Software auf andere Medien zu kopieren, zu ändern oder zu verbreiten, sofern dies nicht ausdrücklich durch die Lizenzvereinbarung genehmigt wird. Darüber hinaus kann es nach dem Lizenzvertrag untersagt sein, die Software zu disassemblieren, zurückzuentwickeln oder zurückzuübersetzen. Es gelten die aufgeführten Garantien.

Teile dieses Dokuments können sich auf andere Hersteller und/oder deren Produkte beziehen, die wiederum Teile enthalten können, deren Namen und/oder Funktion als Marken ihrer jeweiligen Eigentümer eingetragen sind. Jede derartige Verwendung dient ausschließlich der Bezeichnung von Produkten eines Herstellers, die von SCIEX für den Einbau in seine Geräte bereitgestellt werden. Damit sind keinerlei eigene noch fremde Nutzungsrechte und/oder -lizenzen zur Verwendung derartiger Hersteller- und/oder Produktnamen als Marken verbunden.

Die Garantien von SCIEX beschränken sich auf die zum Verkaufszeitpunkt oder bei Erteilung der Lizenz für seine Produkte ausdrücklich zuerkannten Garantien und sind die von SCIEX alleinig und ausschließlich zuerkannten Zusicherungen, Garantien und Verpflichtungen. SCIEX gibt keinerlei andere ausdrücklichen noch impliziten Garantien, einschließlich und ohne Einschränkung, Garantien zur Marktgängigkeit oder Eignung für einen bestimmten Zweck, gleichgültig ob diese auf gesetzlichen oder sonstigen Rechtsvorschriften beruhen oder sich aus dem Verlauf des Handels oder der Nutzung des Handels ergeben, und lehnt alle derartigen Garantien ausdrücklich ab und übernimmt für durch die Nutzung durch den Käufer oder für sich daraus ergebende widrige Umstände, einschließlich indirekter Schäden oder Folgeschäden, keinerlei Verantwortung oder Eventualverbindlichkeiten.

Nur für Forschungszwecke. Nicht zur Verwendung bei Diagnoseverfahren.

AB Sciex tätigt Geschäfte als SCIEX.

Die in diesem Dokument angegebenen Marken sind Eigentum von AB Sciex Pte. Ltd. oder ihrer jeweiligen Eigentümer.

AB SCIEX™ wird unter Lizenz verwendet.

© 2017 AB Sciex



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk 33, #04-06
Marsiling Ind Estate Road 3
Woodlands Central Indus. Estate.
SINGAPUR 739256

Inhalt

Kapitel 1 Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb.....	7
Allgemeine Informationen zur Sicherheit.....	7
Einhaltung gesetzlicher Vorschriften.....	7
Australien und Neuseeland.....	8
Kanada.....	8
Europa.....	8
Vereinigte Staaten.....	8
International.....	9
Elektrische Vorsichtsmaßnahmen.....	9
Netzversorgung.....	9
Schutzleiter.....	10
Chemische Vorsichtsmaßnahmen.....	10
Sichere Systemflüssigkeiten.....	11
Ventilation Vorsichtsmaßnahmen.....	12
Umweltschutzmaßnahmen.....	13
Elektromagnetische Umgebung.....	14
Außerbetriebnahme und Entsorgung.....	15
Qualifiziertes Personal.....	15
Laborbedingungen.....	15
Betriebsbedingungen.....	15
Leistungsspezifikationen.....	16
Verwendung und Änderungen der Ausrüstung.....	16
Kontakt.....	17
Technischer Support.....	17
Symbole und Konventionen der Dokumentation.....	17
Weiterführende Dokumentation.....	18
Kapitel 2 Grundlagen der Handhabung.....	19
Systemüberblick.....	19
Hardware-Übersicht.....	20
Theoretische Grundlagen der Handhabung – Hardware	23
Analyst [®] Software-Übersicht	25
Theoretische Grundlagen der Handhabung – Analyst [®] -Software.....	32
Kapitel 3 Betriebsanleitung – Proben-Workflows.....	35
Kapitel 4 Betriebsanleitung – Hardware.....	48
Inbetriebnahme des Systems.....	48
Rücksetzen des Massenspektrometers.....	49
Abschalten und Belüften des Systems.....	49
Justieren Sie die Position der integrierten Spritzenpumpe.....	50
Umleitventil anschließen.....	54
Schaltventil im Injektormodus einrichten.....	54
Umleitventil im Umleitmodus ausrichten.....	55

Kapitel 5 Bedienungsanleitung – Hardware-Profile und Projekte.....	57
Hardware-Profile.....	57
Erstellen eines Hardware-Profiles.....	57
Geräte einem Hardware-Profil hinzufügen.....	62
Fehlerbehebung bei der Hardware-Profil-Aktivierung.....	64
Projekte und Teilprojekte.....	64
Erstellen von Projekten und Teilprojekten.....	64
Teilprojekt erstellen.....	65
Teilprojekte kopieren.....	66
Wechseln zwischen Projekten und Teilprojekten.....	66
Installierte Projekt-Ordner.....	66
Sichern des Ordners „API Instrument“.....	67
Den Ordner „API Instrument“ wiederherstellen.....	67
Kapitel 6 Abstimmen und Kalibrieren.....	68
Instrumentenleistung überprüfen.....	68
Über den Dialog „Verifying or Adjusting Performance“.....	69
Zusammenfassung der Ergebnisse.....	69
Kapitel 7 Automatische Optimierung.....	71
Über die automatische Optimierung.....	72
Arten von Probeninjektionen.....	73
Automatisch für einen Analyten mit Infusion optimieren.....	74
Bestätigen Sie, dass eine Verbindung vorhanden ist.....	74
Führen Sie eine automatische MS- und MS/MS-Optimierung mit Infusion mit einem bekannten Vorläufer-Ion und einem unbekanntem Produkt-Ion durch.....	76
Überprüfen der Optimierungsergebnisse.....	79
Automatisch für einen Analyten mit Fließinjektionsanalyse (FIA) optimieren.....	80
Kapitel 8 Bedienungsanleitung – Akquisitionsmethoden.....	87
Eine Erfassungsmethode mit dem „Acquisition Method Editor“ erstellen.....	87
Konfigurieren der integrierten Spritzenpumpe.....	88
Experiment hinzufügen.....	88
Eine Periode hinzufügen.....	89
Ein Experiment in eine Periode kopieren.....	89
Ein Experiment innerhalb einer Periode kopieren.....	89
Scan-Techniken.....	89
Quadrupol-Modus Scan-Methoden.....	90
LIT-Modus Scan-Methoden.....	91
Über Spektraldatenaufnahme.....	91
Kapitel 9 Bedienungsanleitung – Analyse und Verarbeitung von quantitativen Daten.....	93
Quantitative Analysen.....	93
Quantifizierungsmethoden.....	93
Über Ergebnistabellen.....	94
Quantifizierungsmethoden und Ergebnistabellen.....	94
Eine Methode mit dem „Quantitation Method Editor“ erstellen.....	94
Eine Ergebnistabelle mit dem Quantitation Wizard erstellen.....	96
Eine Standardabfrage erstellen (Optional).....	97
Ergebnistabelle Rechtsklick-Menü.....	99
Peak-Überprüfung und manuelle Integration von Peaks.....	100
Peaks untersuchen.....	101

Peaks manuell integrieren.....	105
Peak Review Rechtsklick-Menü.....	106
Kalibrierkurven.....	107
Kalibrierkurven anzeigen.....	107
Kalibrierkurven überlagern.....	109
Rechtsklick-Menü „Calibration Curve“.....	109
Probenstatistiken.....	110
Statistiken für Standards und QCs anzeigen.....	110
Vergleichen von Ergebnissen zwischen Batches.....	111
Kapitel 10 Bedienungsanleitung – Analyse und Untersuchung von Daten.....	112
Dateien öffnen.....	112
In einer Datei zwischen Proben navigieren.....	112
Versuchsbedingungen betrachten.....	113
Daten in Tabellenform anzeigen.....	114
ADC-Daten anzeigen.....	116
Grundlegende quantitative Daten anzeigen.....	116
Chromatogramme.....	117
TICs aus einem Spektrum anzeigen.....	118
Ein Spektrum aus einem TIC anzeigen.....	119
Über das Generieren von XICs.....	120
Ein XIC mit einem ausgewählten Bereich generieren.....	121
Ein XIC mit dem maximalen Peak generieren.....	121
Ein XIC mit den Basispeakmassen generieren.....	122
Ionen durch Auswählen von Massen extrahieren.....	122
BPCs generieren.....	123
XWCs generieren.....	124
Generieren von DAD-Daten.....	125
TWCs generieren.....	126
Schwellenwert anpassen.....	126
Chromatogramm-Teilfenster.....	127
Spektren-Teilfenster.....	128
Verarbeiten von Diagrammdaten.....	129
Diagramme.....	129
Daten verwalten.....	129
Die Y-Achse vergrößern.....	131
Die X-Achse vergrößern.....	131
Kapitel 11 Reporter Software.....	132
Analyst Reporter-Benutzeroberfläche.....	133
Berichte generieren.....	135
Kapitel 12 Bedienungsanleitung – Batches.....	137
Optionen für Warteschlangen einstellen.....	137
Einen Batch erstellen und übergeben.....	138
Sets und Proben zu einem Batch hinzufügen.....	138
System äquilibrieren.....	141
Eine Probe oder einen Probensatz übergeben.....	141
Reihenfolge der Proben ändern.....	142
Daten aufnehmen.....	142
Bestimmen Sie die Sample Locations (Probenpositionen) im Batch Editor.....	143
Mit der Registerkarte „Locations“ die Fläschchenpositionen bestimmen (optional).....	143

Inhalt

Quantifizierungsdetails im Batch Editor bestimmen (optional).....	144
Probenakquisition beenden.....	145
Importieren von Batch-Dateien.....	145
Erstellen eines Batches als Textdatei.....	145
Importieren eines Batches aus einer Textdatei.....	146
Batch Editor Rechtsklick-Menü.....	146
Status der Warteschlange und des Gerätes.....	147
Status der Warteschlange.....	148
Symbole für den Instrument- und Peripheriegerätestatus.....	149
Rechtsklick-Menü „Queue“.....	150
Kapitel 13 Service- und Wartungsinformationen.....	152
Empfohlener Wartungsplan.....	152
Reinigen der Oberflächen.....	155
Reinigen des Eingangsbereiches.....	155
Merkmale einer Kontamination.....	156
Erforderliche Materialien.....	156
Bewährte Vorgehensweisen bei der Reinigung.....	157
Vorbereitung des Massenspektrometers.....	159
Reinigung der Curtain-Platte.....	160
Reinigung der Vorderseite der Orifice-Platte.....	161
Das Massenspektrometer wieder in Betrieb nehmen.....	161
Inspektion des Ölstands in der Vakuumpumpe.....	161
Entleeren des Quellenabluftauffangbehälters.....	162
Lagerung und Handhabung.....	164
Kapitel 14 Fehlersuche für das Massenspektrometer.....	165
Anhang A Betriebsanleitung – Manuelle Verbindungsoptimierung.....	169
Über manuelle Optimierung von Verbindungen.....	170
Über Scan-Typen.....	170
Optimieren Sie einen Analyten manuell.....	170
Bestätigen des Vorhandenseins von Verbindungen.....	171
Optimieren Sie die MS-spezifischen Parameter.....	172
Bestimmen Sie die Produkt-Ionen für die Optimierung.....	174
Optimieren Sie das Kollisionszellen-Austrittspotenzial für jedes Produkt-Ion.....	175
Manuelles Optimieren der Ionenquellen- und Gas-Parameter.....	176
Vorbereiten der Ionenquelle.....	177
Optimieren der Ionenquellen-Parameter.....	177
Erweiterte Parameter.....	178
Optimieren von AF2.....	178
Über Kollisionsenergieverschmierung (CES).....	178
Anhang B Systemparameter der Serien 6500 und 6500⁺.....	180
Anhang C Ionen und Lösungen kalibrieren.....	184
Anhang D Symbole der Werkzeugleiste.....	186
Anhang E Glossar der Symbole.....	195
Anhang F Glossar der Warnhinweise.....	199

Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb

1

Hinweis: Lesen Sie vor der Bedienung des Systems alle Abschnitte dieses Handbuchs sorgfältig.

Dieser Abschnitt enthält allgemeine sicherheitsrelevante Informationen und stellt Informationen zur Einhaltung gesetzlicher Vorschriften bereit. Er beschreibt ebenfalls mögliche Gefahren und die damit verbundenen Warnhinweise für das System und die Vorsichtsmaßnahmen, die getroffen werden sollten, um Gefahren zu minimieren.

Bitte beachten Sie zusätzlich zu diesem Abschnitt auch [Glossar der Symbole auf Seite 195](#). Dort finden Sie Informationen über die Symbole und Konventionen, die im Zusammenhang mit dem System in der Laborumgebung und in dieser Dokumentation verwendet werden. Im *Handbuch zur Standortplanung* finden Sie Anforderungen an den Standort, einschließlich Netzstromversorgung, Quellenabluft, Lüftung, Druckluft, Stickstoff und Vakuumpumpen-Anforderungen.

Allgemeine Informationen zur Sicherheit

Lesen und beachten Sie alle in diesem Dokument aufgeführten Vorsichts- und Warnhinweise, die Sicherheitsdatenblätter (SDS) der Hersteller und die Angaben auf den Produktetiketten, um Verletzungen und Beschädigungen am System zu vermeiden. Diese Etiketten zeigen international anerkannte Symbole. Die Nichtbeachtung dieser Warnhinweise kann zu schweren Verletzungen führen.

Diese Sicherheitsinformationen sollen Vorschriften auf Bundes-, Landes- oder Bezirks- und lokaler Ebene zu Sicherheit, Gesundheit und Umweltschutz (SGU) ergänzen. Diese angesprochenen Informationen betreffen systemrelevante Sicherheitsinformationen, die sich auf den Betrieb des Systems anwenden lassen. Es werden nicht alle Sicherheitsmaßnahmen behandelt, die beachtet werden sollten. Letztendlich sind der Benutzer und die Organisation für die Einhaltung der Bundes-, Landes-, Bezirks- und lokalen SGU-Vorschriften und für die Aufrechterhaltung einer sicheren Laborumgebung verantwortlich.

Weitere Informationen finden Sie im entsprechenden Laborreferenzmaterial und in den Standardarbeitsanweisungen.

Einhaltung gesetzlicher Vorschriften

Dieses System entspricht den in diesem Abschnitt aufgeführten Vorschriften und Normen. Mit Datum versehene Referenzen finden Sie in der dem System und einzelnen Systemkomponenten beigefügten Konformitätserklärung. Entsprechende Aufkleber wurden am System angebracht.

Australien und Neuseeland

- **Elektromagnetische Verträglichkeit (EMV):** Radio Communications Act 1992, wie umgesetzt in den Normen:
 - Elektromagnetische Interferenz – AS/NZ CISPR 11/ EN 55011/ CISPR 11 (Klasse A). Siehe [Elektromagnetische Interferenz auf Seite 14](#).
- **Sicherheit:** AS/NZ 61010-1 und IEC 61010-2-061

Kanada

- **Elektromagnetische Beeinflussung (EMB):** CAN/CSA CISPR11. Dieses ISM-Gerät entspricht der kanadischen Norm ICES-001: Siehe [Elektromagnetische Interferenz auf Seite 14](#).
- **Sicherheit:**
 - CAN/CSA C22.2 Nr. 61010-1
 - CAN/CSA C22.2 Nr. 61010-2-061

Europa

- **Elektromagnetische Verträglichkeit (EMV):** Richtlinie 2014/30/EU über die elektromagnetische Verträglichkeit (EMV), wie in diesen Normen umgesetzt:
 - EN 61326-1
 - EN 55011 (Klasse A)
Siehe [Elektromagnetische Verträglichkeit auf Seite 14](#).
- **Sicherheit:** Niederspannungsrichtlinie 2014/35/EU, wie in diesen Normen umgesetzt:
 - EN 61010-1
 - EN 61010-2-061
- **Elektro- und Elektronik-Altgeräte (WEEE):** Richtlinie 2012/96/EG über Elektro- und Elektronik-Altgeräte, wie in EN 40519 umgesetzt. Siehe [Elektro- und Elektronik-Altgeräte auf Seite 15](#).
- **Verpackungen und Verpackungsabfälle (PPW):** Richtlinie 94/62/EG über Verpackungen und Verpackungsabfälle
- **RoHS Restriction of Hazardous Substances:** RoHS-Richtlinie 2011/65/EU

Vereinigte Staaten

- **Vorschriften zu Störfrequenzen:** 47 CFR 15 wie umgesetzt in: FCC Teil 15 (Klasse A)
- **Sicherheit:** Bestimmungen zu Sicherheit und Gesundheit am Arbeitsplatz – 29 CFR 1910 wie umgesetzt in diesen Normen:
 - UL 61010-1
 - IEC 61010-2-061

International

- **Elektromagnetische Verträglichkeit (EMV):**
 - IEC 61326-1
 - IEC CISPR 11 (Klasse A)
 - IEC 61000-3-2
 - IEC 61000-3-3Siehe [Elektromagnetische Verträglichkeit auf Seite 14](#).
- **Sicherheit:**
 - IEC 61010-1
 - IEC 61010-2-061

Elektrische Vorsichtsmaßnahmen



WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Entfernen Sie nicht die Abdeckungen. Durch das Entfernen der Abdeckungen kann es zu Verletzungen oder Fehlfunktionen des Systems kommen. Die Abdeckungen müssen für routinemäßige Wartungsarbeiten, Inspektionen oder Einstellungen nicht entfernt werden. Bei Reparaturen, die eine Entfernung der Hauptabdeckung erfordern, wenden Sie sich bitte an einen SCIEX-Außendienstmitarbeiter (FSE).

- Folgen Sie den vorgeschriebenen Sicherheitsverfahren für elektrische Arbeiten.
- Verwenden Sie Kabelmanagementpraktiken, um elektrische Kabel kontrolliert zu verlegen. Dies verringert die Stolpergefahr.

Informationen zu den Elektrospezifikationen finden Sie im *Handbuch zur Standortplanung*.

Netzversorgung

Schließen Sie das System an eine kompatible Netzversorgung an, wie in diesem Handbuch angegeben.



WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Setzen Sie ausschließlich qualifiziertes Personal für die Installation aller elektrischen Ausrüstungen und Einrichtungen ein und stellen Sie sicher, dass alle Anlagen den lokalen Vorschriften und Sicherheitsstandards entsprechen.



WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Stellen Sie sicher, dass das System in einem Notfall von der Steckdose der Netzversorgung getrennt werden kann. Die Steckdose der Netzversorgung muss zu jeder Zeit problemlos zugänglich sein.

Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb



WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Verwenden Sie nur die im Lieferumfang des Systems enthaltenen Stromkabel. Verwenden Sie nur Stromkabel, die für den Betrieb des Systems ausgelegt sind.

Für das Massenspektrometer, den optionalen Labortisch oder die Vakuumpumpe wird kein externer Transformator benötigt.

Schutzleiter

Die Netzversorgung muss mit einem korrekt installierten Schutzleiter ausgestattet sein. Der Erdungsschutzleiter muss installiert oder von einer Elektrofachkraft überprüft werden, bevor das System angeschlossen wird.



WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Unterbrechen Sie den Schutzleiter nicht absichtlich. Durch eine Unterbrechung des Schutzleiters kommt es zur Stromschlaggefahr.



WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Vergewissern Sie sich, dass ein Anschluss zwischen dem Erdungsleiter (dem Schutzleiter) an der Probenschleife und einem geeigneten Erdungspunkt an der Ionenquelle des Massenspektrometers vorhanden ist. Diese zusätzliche Erdung verstärkt die durch SCIEX angegebene Sicherheitskonfiguration.

Chemische Vorsichtsmaßnahmen



WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Klären Sie vor der Reinigung oder Wartung, ob eine Dekontamination erforderlich ist. Der Kunde muss das System vor der Reinigung oder vor Wartungsarbeiten dekontaminieren, wenn radioaktive Stoffe, biologische Wirkstoffe oder giftige Chemikalien in dem System eingesetzt wurden.



WARNHINWEIS! Umweltgefährdung. Entsorgen Sie die Systemkomponenten nicht mit dem Hausmüll. Befolgen Sie die lokalen Vorschriften für die Entsorgung von Komponenten.



WARNHINWEIS! Biogefährdung, toxisch-chemische Gefahren. Befestigen Sie den Ablaufschlauch ordnungsgemäß am Massenspektrometer und am Quellenabluftauffangbehälter, um ein Auslaufen zu verhindern.

- Bestimmen Sie, welche Chemikalien im System vor dem Einsatz und der regelmäßigen Wartung verwendet wurden. Informationen zu Gesundheits- und Sicherheitsvorkehrungen, die im Zusammenhang mit Chemikalien zu beachten sind, finden Sie in den *Sicherheitsdatenblättern*. SCIEX-Sicherheitsdatenblätter finden Sie unter sciex.com/tech-regulatory.
- Führen Sie alle Arbeiten nur in einem gut belüfteten Raum oder unter einer Abzugshaube durch.
- Tragen Sie immer die Ihnen zugewiesene persönliche Schutzausrüstung, einschließlich puderfreier Neopren- oder Nitril-Handschuhe, einer Schutzbrille und einem Laborkittel.
- Vermeiden Sie Zündquellen bei Arbeiten mit brennbaren Materialien, wie z. B. Isopropanol, Methanol und andere brennbare Lösungsmittel.
- Lassen Sie in der Verwendung und Entsorgung von Chemikalien Vorsicht walten. Potenzielles Risiko für Personenschäden, wenn die ordnungsgemäßen Verfahren zur Handhabung und Entsorgung von Chemikalien nicht befolgt werden.
- Bei der Reinigung Hautkontakt mit Chemikalien vermeiden und Hände nach Gebrauch waschen.
- Vergewissern Sie sich, dass alle Abluftschläuche ordnungsgemäß angeschlossen sind und alle Anschlüsse wie gewünscht funktionieren.
- Sammeln Sie alle gebrauchten Flüssigkeiten und entsorgen Sie diese als gefährlichen Abfall.
- Befolgen Sie alle lokalen Vorschriften für die Lagerung, den Umgang und die Entsorgung mit biogefährdenden, giftigen oder radioaktiven Stoffen.
- (Empfohlen) Verwenden Sie unter der Vakuumpumpe, den Lösungsmittelflaschen und dem Abfallaufnahmebehälter eine zweite Auffangschale zur Aufnahme von potenziell verschütteten Chemikalien.

Sichere Systemflüssigkeiten

Die folgenden Flüssigkeiten können mit dem System sicher verwendet werden. Informationen zu sicheren Reinigungslösungen finden Sie unter [Erforderliche Materialien auf Seite 156](#).

VORSICHT! Mögliche Schäden am System. Verwenden Sie keine anderen Flüssigkeiten, bevor SCIEX nicht bestätigt, dass dadurch keine Gefahren entstehen. Diese Liste ist nicht vollständig.

- **Organische Lösungsmittel**
 - Acetonitril, MS-Qualität, bis zu 100 %
 - Methanol, MS-Qualität, bis zu 100 %
 - Isopropanol, bis zu 100 %
 - Wasser, HPLC-Qualität oder höher, bis zu 100 %
 - Tetrahydrofuran, bis zu 100 %
 - Toluol und andere aromatische Lösungsmittel, bis zu 100 %
 - Hexane, bis zu 100 %

Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb

- **Puffer**
 - Ammoniumacetat, weniger als 1 %
 - Ammoniumformiat, weniger als 1 %
 - Phosphat, weniger als 1 %
- **Säuren und Basen**
 - Ameisensäure, weniger als 1 %
 - Essigsäure, weniger als 1 %
 - Trifluoressigsäure (TFA), weniger als 1 %
 - Heptafluorbuttersäure (HFBA), weniger als 1 %
 - Ammoniak/Ammoniumhydroxid, weniger als 1 %
 - Phosphorsäure, weniger als 1 %
 - Trimethylamin, weniger als 1 %
 - Triethylamin, weniger als 1 %

Ventilation Vorsichtsmaßnahmen

Bei der Entlüftung der Abluft und der Entsorgung von Abfällen müssen alle Bundes-, Landes-, Bezirks- und lokalen Gesundheits- und Sicherheitsvorschriften eingehalten werden. Der Kunde ist dafür verantwortlich sicherzustellen, dass die Luftqualität gemäß den Gesundheits- und Sicherheitsvorschriften vor Ort erhalten bleibt.

Die Quellenabluftanlage und die Vakuumpumpe müssen entweder mit einer speziellen Laborabzugshaube oder einer externen Entlüftung entlüftet werden.



WARNHINWEIS! Brandgefahr. Stellen Sie sicher, dass die Quellenabluftanlage angeschlossen ist und funktioniert, um zu verhindern, dass sich entzündliche Dämpfe in der Ionenquelle ansammeln.



WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Achten Sie darauf, die Abluft über eine dafür vorgesehene Laborabzugshaube oder eine Abluftanlage abzulassen, und sorgen Sie dafür, dass die Abluftschläuche gut mit Schellen befestigt sind. Stellen Sie sicher, dass der Luftaustausch im Labor für die ausgeführten Arbeiten angemessen ist.



WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Betreiben Sie das Massenspektrometer nicht, wenn die Quellenabluftrohre und Vakuumabluftrohre nicht richtig an das Laborbelüftungssystem angeschlossen sind. Kontrollieren Sie regelmäßig das Abluftrohr, um sicherzustellen, dass keine Undichtigkeiten vorhanden sind. Die Verwendung des Massenspektrometers ohne ausreichende Systembelüftung kann gesundheitsschädlich sein und zu schweren Verletzungen führen.



WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Verwenden Sie die Ionenquelle nur, wenn Sie Kenntnisse über die ordnungsgemäße Verwendung, Eingrenzung und Entsorgung von mit der Ionenquelle verwendeten giftigen oder schädlichen Materialien haben und darin geschult wurden.



WARNHINWEIS! Gefahr von Stichverletzungen, Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemischen Gefahren. Verwenden Sie die Ionenquelle nicht weiter, wenn das Fenster gesprungen oder zerbrochen ist, und wenden Sie sich an einen SCIEX-Außendienstmitarbeiter (FSE). Alle giftigen oder schädlichen Stoffe, die dem Gerät zugeführt werden, sind in der Abluft der Ionenquelle vorhanden. Befolgen Sie bei der Entsorgung von scharfen und spitzen Gegenständen die vorhandenen Sicherheitsvorschriften Ihres Labors.

Umweltschutzmaßnahmen

Verwenden Sie qualifiziertes Personal für die Installation von Strom-, Heizungs-, Lüftungs- und Sanitäranschlüssen und -zubehör. Stellen Sie sicher, dass alle Installationen die lokalen Bestimmungen und Vorschriften zur Biogefährdung befolgen. Für Informationen über erforderliche Umgebungsbedingungen für das System beziehen Sie sich bitte auf das *Handbuch zur Standortplanung*.

Lassen Sie bei der Aufstellung des Systems um das Gerät herum Platz, um den Zugang zu ermöglichen.



GEFAHR! Explosionsgefahr. Betreiben Sie das System nicht in einer Umgebung mit explosiven Gasen. Das System ist nicht für den Betrieb in explosionsgefährdeten Umgebungen konzipiert.



WARNHINWEIS! Biogefährdung. Bei der Verwendung von biogefährlichem Material halten Sie sich bei der Beurteilung, Kontrolle und Beseitigung von Gefahren immer an die lokalen Vorschriften. Das System bzw. seine Teile sind nicht dafür bestimmt, als biologisches Sicherheitssystem genutzt zu werden.

VORSICHT! Mögliche Masseverschiebung. Sorgen Sie für eine stabile Umgebungstemperatur. Wenn sich die Temperatur um mehr als 2 °C pro Stunde ändert, können Auflösung und Massenkalisierung beeinträchtigt werden.

Elektromagnetische Umgebung

Elektromagnetische Verträglichkeit

Einfache elektromagnetische Umgebung: Umgebung in Bereichen, die dadurch charakterisiert werden, dass sie direkt mit Niederspannung aus dem öffentlichen Stromnetz versorgt werden.

Leistungskriterium A (Kriterium A): Das Gerät funktioniert wie vorgesehen ohne Beeinträchtigung der Leistung und ohne Funktionsverlust vor oder nach dem Test.

Leistungskriterium B (Kriterium B): Das Gerät kann während des Tests (einen oder mehrere) Funktionsverluste aufweisen, funktioniert jedoch wie vorgesehen mit leichter Leistungsbeeinträchtigung und funktioniert nach dem Test mit Selbstwiederherstellung.

Leistungskriterium C (Kriterium C): Das Gerät kann während des Tests (einen oder mehrere) Funktionsverluste aufweisen, funktioniert jedoch wie vorgesehen mit leichter Leistungsbeeinträchtigung und funktioniert nach dem Test nach Wiederherstellung durch den Bediener.

Dieses Gerät ist für die Verwendung in einer einfachen elektromagnetischen Umgebung bestimmt.

Der erwartete Leistungsverlust unter Bedingungen der elektromagnetischen Störfestigkeit beträgt weniger als 60 % (bei Systemen der 6500-Serie) oder weniger als 20 % (bei Systemen der 6500⁺ Serie) der Änderung der Gesamtanzahl (Total Ion Count, TIC).

Stellen Sie sicher, dass eine angemessene elektromagnetische Umgebung für das Gerät aufrechterhalten wird, damit das Gerät in gewünschter Weise funktionieren kann. Wenn die Stromzufuhr einem hohen elektrischen Rauschen ausgesetzt wird, installieren Sie bitte einen Überspannungsschutz.

Elektromagnetische Interferenz

Klasse-A-Gerät: Geräte, die für den Einsatz in allen Einrichtungen außer Wohnbereichen und Bereichen, die an Niederspannungsnetze angeschlossen sind, mit denen Wohngebäude versorgt werden. [Auszug aus CISPR 11:2009, 5.3] Klasse-A-Geräte müssen die Grenzwerte der Klasse A erfüllen.

Dieses Gerät wurde getestet und entspricht den Grenzwerten für Digitalgeräte der Klasse A gemäß Teil 15 der FCC (Federal Communications Commission) – Einhaltungsvorschriften.

Diese Grenzwerte sollen einen angemessenen Schutz vor schädlichen Interferenzen bieten, wenn das Gerät kommerziell eingesetzt wird. Dieses Gerät erzeugt, verwendet und kann Hochfrequenzenergie abstrahlen und kann, bei unsachgemäßer Installation und Verwendung entgegen der Betriebsanleitung, Störungen im Funkverkehr verursachen.

Der Betrieb dieses Gerätes führt in einem Wohngebiet wahrscheinlich zu Störungen und diese Störungen müssen auf Ihre Kosten beseitigt werden. Nicht ausdrücklich vom Hersteller genehmigte Änderungen oder Modifikationen können zum Entzug der Betriebserlaubnis führen.

Außerbetriebnahme und Entsorgung



WARNHINWEIS! Umweltgefährdung. Entsorgen Sie die Systemkomponenten nicht mit dem Hausmüll. Befolgen Sie die lokalen Vorschriften für die Entsorgung von Komponenten.

Dekontaminieren Sie das gesamte System vor der Außerbetriebnahme entsprechend den lokalen Vorschriften.

Trennen und recyceln Sie bei Stilllegung des Systems die verschiedenen Materialien gemäß nationalen und lokalen Umweltvorschriften. Siehe [Lagerung und Handhabung auf Seite 164](#).

Hinweis: SCIEX nimmt keine Systemrückgaben ohne ausgefülltes Dekontaminationsformular an. Eine Kopie des Formulars können Sie bei einem Außendienstmitarbeiter (FSE) anfordern.

Bauteile oder Baugruppen der Anlage, einschließlich Computerteile, dürfen nicht als unsortierter Hausmüll entsorgt werden.

Elektro- und Elektronik-Altgeräte

Befolgen Sie die lokalen kommunalen Abfallverordnungen für ordnungsgemäße Entsorgungseinrichtungen, damit Umweltbelastungen durch Elektro- und Elektronikgeräte-Abfall (WEEE) reduziert werden. Zur sicheren Entsorgung des Gerätes kontaktieren Sie ein lokales Kundenservicebüro für eine kostenlose Abholung und Recycling von Geräten.

Qualifiziertes Personal

Nur qualifizierte SCIEX-Mitarbeiter sollten das Gerät installieren, prüfen und warten. Nach der Installation des Systems verwendet der Außendienstmitarbeiter (FSE) die *Customer Familiarization Checklist*, um den Kunden in der Bedienung, Reinigung und grundlegenden Wartung der Anlage zu schulen.

Die Anlage darf nur von Personal gewartet werden, das vom Hersteller dazu qualifiziert wurde. Eine verantwortliche Person des Labors kann während der Installation mit den Verfahren vertraut gemacht werden, die der qualifizierte Wartungstechniker durchführt. Der Wartungstechniker ist eine Person, die die Gefahren im Zusammenhang mit Elektrizität kennt und die mit Wartungsarbeiten an Laborausstattung verbundenen Risiken von Chemikalien einschätzen kann.

Laborbedingungen

Betriebsbedingungen

Das System für den sicheren Betrieb unter diesen Bedingungen ausgelegt:

- Innenbereich
- Höhe: bis zu 2.000 m (6.400 Fuß) über dem Meeresspiegel
- Umgebungstemperatur: 5 °C (41 °F) bis 40 °C (104 °F)

Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb

- Relative Luftfeuchtigkeit: 80 % für Temperaturen bis zu 31 °C (88 °F), linear abnehmend bis 50 % bei 40 °C (104 °F)
- Spannungsschwankungen der Netzversorgung: ± 10 % der Nennspannung
- Transiente Überspannungen: bis zu einem Niveau der Überspannungskategorie II
- Temporäre Überspannungen an der Netzversorgung
- Grad der Umweltverschmutzung: Grad der Umweltverschmutzung 2

Leistungsspezifikationen

Das System für die Einhaltung der Spezifikationen unter diesen Bedingungen ausgelegt:

- Umgebungstemperatur: 15 °C (59 °F) bis 30 °C (86 °F)
Im Laufe der Zeit darf die Temperatur um nicht mehr als 4 °C (7,2 °F) schwanken, wobei die Temperaturänderungsrate nicht mehr als 2 °C (3,6 °F) pro Stunde betragen darf. Schwankungen der Umgebungstemperatur, die die Grenzwerte übersteigen, können zu Masseverschiebungen in den Spektren führen.
- Relative Luftfeuchtigkeit: 20 % bis 80 %, nicht kondensierend

Verwendung und Änderungen der Ausrüstung



WARNHINWEIS! Gefahr für Personenschäden. Wenden Sie sich an einen Vertreter von SCIEX, wenn eine Installation, Anpassung oder Ortsveränderung des Produkts notwendig ist.



WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Entfernen Sie nicht die Abdeckungen. Durch das Entfernen der Abdeckungen kann es zu Verletzungen oder Fehlfunktionen des Systems kommen. Die Abdeckungen müssen für routinemäßige Wartungsarbeiten, Inspektionen oder Einstellungen nicht entfernt werden. Bei Reparaturen, die eine Entfernung der Hauptabdeckung erfordern, wenden Sie sich bitte an einen SCIEX-Außendienstmitarbeiter (FSE).



WARNHINWEIS! Gefahr für Personenschäden. Verwenden Sie ausschließlich von SCIEX empfohlene Teile. Die Verwendung von Teilen, die nicht von SCIEX empfohlen werden oder die Verwendung von Teilen für Zwecke, die nicht dem empfohlenen Verwendungszweck entsprechen, kann den Benutzer gefährden oder die Systemleistung beeinträchtigen.

Verwenden Sie das Massenspektrometer und die Ionenquelle im Innenbereich in einem Labor, das den empfohlenen Umgebungsbedingungen im *Handbuch zur Standortplanung* entspricht.

Wenn das Massenspektrometer und die Ionenquelle in einer Umgebung oder in einer Weise verwendet werden, die nicht den Vorschriften des Herstellers entspricht, kann der im Gerät eingebaute Schutz beeinträchtigt werden.

Unautorisierte Veränderungen oder Bedienungen des Massenspektrometers und der Ionenquelle können zu Personenschäden und Schäden am Gerät und zum Erlöschen der Garantie führen. Wenn das Massenspektrometer und die Ionenquelle unter Umgebungsbedingungen, die über oder unter dem empfohlenen Bereich liegen, oder mit nicht genehmigten Änderungen betrieben wird, können fehlerhafte Daten erzeugt werden. Informationen zur Wartung des Systems erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter.

Kontakt

SCIEX Support

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

Kundenschulung

- In Nordamerika: NA.CustomerTraining@sciex.com
- In Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Die Kontaktinformationen für Länder außerhalb der EU und Nordamerikas finden Sie unter sciex.com/education.

Online-Lernzentrum

- [SCIEXUniversity](https://sciex.com/education)

Cybersicherheit

Die aktuellsten Hinweise zur Cybersicherheit von SCIEX-Produkten finden Sie unter sciex.com/Documents/brochures/win7-SecurityGuidance.pdf.

Technischer Support

SCIEX und seine Vertretungen haben auf der ganzen Welt einen Stab an voll ausgebildeten Servicekräften und technischen Spezialisten. Der Support kann Fragen zum System oder anderen auftretenden, technischen Problemen beantworten. Für weitere Informationen besuchen Sie die SCIEX-Website unter sciex.com.

Symbole und Konventionen der Dokumentation

Die folgenden Symbole und Konventionen werden im gesamten Handbuch verwendet.



GEFAHR! Gefahr bedeutet eine Handlung, die zu schweren Verletzungen oder zum Tod führt.



WARNHINWEIS! Eine Warnung weist auf Handlungen hin, die zu Verletzungen führen könnten, wenn Vorsichtsmaßnahmen nicht befolgt werden.

VORSICHT! Ein Vorsichtshinweis weist auf Handlungen hin, die zu Schäden oder Beschädigungen am System oder Datenverlust führen können, wenn Vorsichtsmaßnahmen nicht befolgt werden.

Hinweis: Ein Hinweis betont wichtige Informationen in einem Verfahren oder in einer Beschreibung.

Tipp! Ein Tipp gibt nützliche Informationen, die dabei helfen, im Text beschriebene Techniken und Verfahren für bestimmte Bedürfnisse anzuwenden, und zeigt Tastenkombinationen, ist aber für die Durchführung eines Verfahrens nicht wesentlich.

Weiterführende Dokumentation

Softwareprodukt dokumentationen entnehmen Sie den Versionshinweisen oder dem mit der Software mitgelieferten Software-Installationshandbuch. Dokumentationen für die Hardwareprodukte können auf der mit dem System oder der Komponente mitgelieferten *Kundendokumente*-DVD gefunden werden.

Die neuesten Versionen der Dokumentation finden Sie auf der SCIEX Website unter sciex.com.

Das System 6500 oder 6500⁺ ist für die qualitative und quantitative Analyse chemischer Spezies ausgelegt.

Dieser Abschnitt enthält Informationen über das Massenspektrometer und die Analyst[®]-Software. Eine Übersicht über die Ionenquelle finden Sie im *Bedienerhandbuch* der Ionenquelle.

Nähere Informationen zum Computer und zur Software finden Sie im *Software-Installationshandbuch* der Analyst[®] Software.



WARNHINWEIS! Gefahr durch Heben. Das System nicht bewegen. Gefahr von Personenschäden oder Schäden am System. Wenn das System umgesetzt werden muss, wenden Sie sich bitte an einen Außendienstmitarbeiter (FSE).

Systemüberblick



WARNHINWEIS! Gefahr durch Heben. Sorgen Sie dafür, dass mindestens sechs Personen zum Anheben des Massenspektrometers zur Verfügung stehen. Befolgen Sie die geltenden Verfahren zum sicheren Heben. Informationen zum Gewicht der einzelnen Systemkomponenten finden Sie im *Site Planning Guide*.

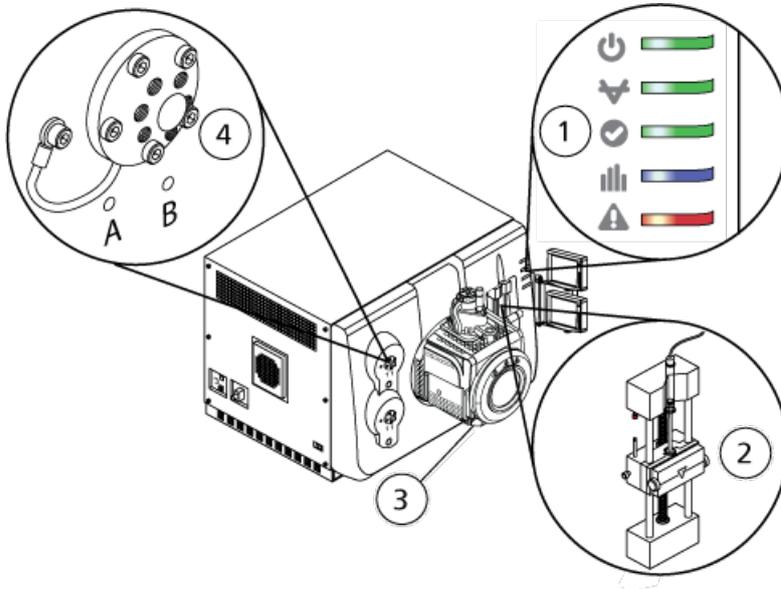
Dieses System ist für die qualitative und quantitative Analyse einer chemischen Spezies bestimmt.

Die Geräte der Serie 6500 oder 6500⁺ bestehen aus folgenden Komponenten:

- Ein Massenspektrometer SCIEX Triple Quad[™] 6500 oder 6500⁺ oder QTRAP[®] 6500 oder 6500⁺ mit zwei Vakuumpumpen und einer Quelle für Druckluft und Stickstoff.
- IonDrive[™] Turbo V-Ionenquelle, die entweder die TurbolonSpray[®]-Probe oder die Probe für chemische Ionisation bei Atmosphärendruck (APCI) verwendet. Siehe *IonDrive[™] Turbo V Ionenquellen-Bedienerhandbuch*.
- Von SCIEX bereitgestellter Computer und Bildschirm mit Analyst[®]-Software zur Geräteoptimierung, Entwicklung von Erfassungsmethoden, Datenerfassung und -verarbeitung. Nähere Informationen zu Computerspezifikationen und -anforderungen finden Sie im *Analyst[®]-Software-Installationshandbuch*.

Hardware-Übersicht

Abbildung 2-1 Vorderansicht



Position	Beschreibung	Siehe...
1	Symbole der Gehäuseabdeckung	Symbole der Gehäuseabdeckung auf Seite 20.
2	Spritzenpumpe	Justieren Sie die Position der integrierten Spritzenpumpe auf Seite 50
3	Ionenquelle	<i>IonDrive™ Turbo V-Ionenquellen-Bedienerhandbuch</i> , verfügbar auf der Dokumentations-DVD der Ionenquelle oder auf der SCIEX-Website unter sciex.com
4	Schaltventil	Umleitventil anschließen auf Seite 54.

Symbole der Gehäuseabdeckung

[Tabelle 2-1](#) beschreibt die Status-LEDs des Massenspektrometers.

Tabelle 2-1 Symbole der Gehäuseabdeckung

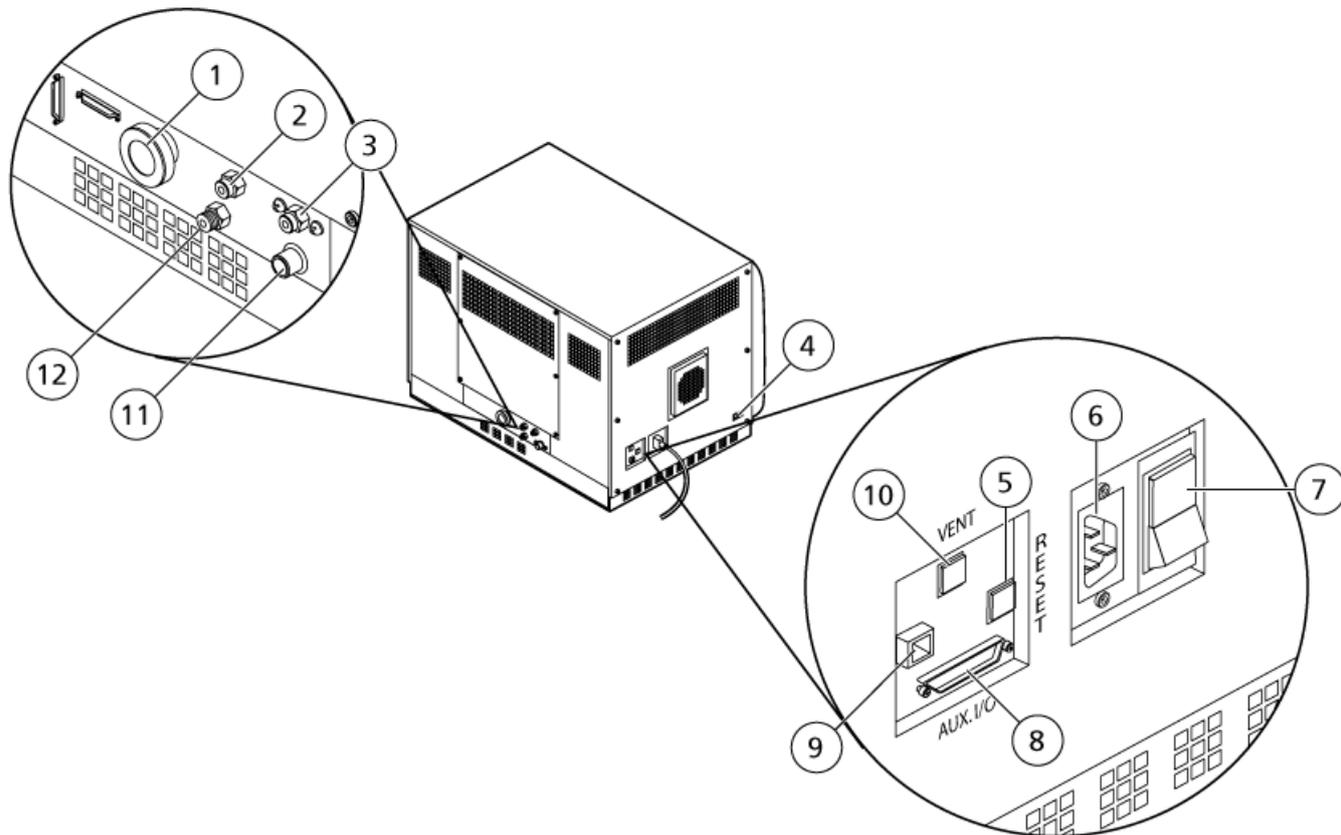
LED	Farbe	Name	Beschreibung
	Grün	Power	Leuchtet, wenn das System eingeschaltet ist.
	Grün	Vakuum	Leuchtet, wenn die richtige Vakuumstufe erreicht wurde. Blinkt, wenn sich das Vakuum nicht in der ordnungsgemäßen Stufe befindet (während des Herunterpumpens und Belüftens).
	Grün	Bereit	Leuchtet, wenn das System betriebsbereit ist. Das System muss sich für den Betrieb im Ready-Status befinden.
	Blau	Scannen	Blinkt, während das System Daten aufnimmt.
	Rot	Fehler	Leuchtet, wenn das System einen Systemfehler feststellt.

Nachdem das System eingeschaltet wurde, leuchten alle fünf LEDs. Die Power-LED bleibt eingeschaltet. Die anderen LEDs blinken zwei Sekunden lang und erlöschen danach. Die Vakuum-LED beginnt zu blinken. Nachdem das richtige Vakuum erreicht wird, leuchtet diese LED weiter.

Anschlüsse

Abbildung 2-2 zeigt die Anordnung der Massenspektrometer-Anschlüsse und wo sich die Tasten **RESET** und **VENT** und der Netzschalter des Massenspektrometers befinden.

Abbildung 2-2 Rück- und Seitenansichten



Position	Beschreibung	Grundmaterialien	Weitere Informationen erhalten Sie unter ...
1	Anschluss der Vakuumpumpe	Aluminium (Schlauchanschlussstück), verzinkter Stahl (Schlauchschelle)	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter (FSE).
2	Luftzufuhr (Gas 1/Gas 2)	Kunststoff	Siehe das <i>Site Planning Guide</i> . Der Gasschlauch von der Zufuhr Gas 1/Gas 2 wird an diesen Anschluss angeschlossen.
3	Quellenabluft-Zufuhr	Edelstahl	Siehe das <i>Site Planning Guide</i> . Der Gasschlauch von der Quellenabluft-Zufuhr wird an diesen Anschluss angeschlossen.
4	Quellenkommunikationsverbindung	Aluminium	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter (FSE).
5	Schaltfläche RESET	Kunststoff	Siehe Rücksetzen des Massenspektrometers auf Seite 49 .

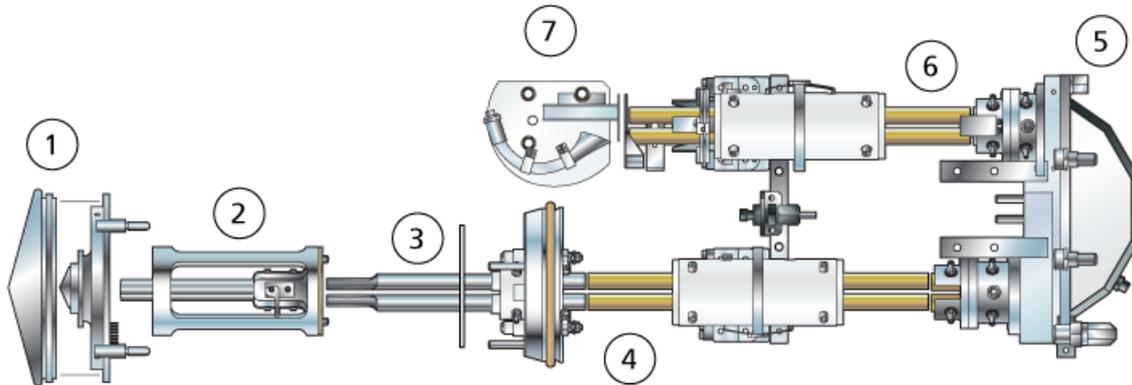
Position	Beschreibung	Grundmaterialien	Weitere Informationen erhalten Sie unter ...
6	Netzanschluss- verbindung	Aluminium/Kunststoff	Siehe Inbetriebnahme des Systems auf Seite 48 oder Abschalten und Belüften des Systems auf Seite 49 .
7	Netzschalter des Massenspektrometers (Oben = An, Unten = Aus)	Kunststoff	Siehe Inbetriebnahme des Systems auf Seite 48 oder Abschalten und Belüften des Systems auf Seite 49 .
8	AUX E/A-Verbindung	Blech (verzinkt)	Siehe <i>Peripheral Devices Setup Guide</i> .
9	Ethernet-Anschluss (verbindet das Massenspektrometer mit dem Computer)	Blech (verzinkt)	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter (FSE).
10	Schaltfläche VENT	Kunststoff	Siehe Inbetriebnahme des Systems auf Seite 48 oder Abschalten und Belüften des Systems auf Seite 49 .
11	Quellenabluft-Ablauf (zum Auffangbehälter)	Edelstahl	Siehe das <i>Site Planning Guide (Handbuch zur Standortplanung)</i> .
12	Stickstoff-Gaszufuhr (Curtain Gas™-Versorgung, CAD-Gas)	Edelstahl	Siehe das <i>Site Planning Guide</i> . Der Gasschlauch von der Stickstoff-Gaszufuhr wird an diesen Anschluss angeschlossen.

Theoretische Grundlagen der Handhabung – Hardware

Die Massenspektrometrie misst das Masse-zu-Ladung-Verhältnis von Ionen, um unbekannte Verbindungen zu identifizieren, bekannte Verbindungen zu quantifizieren und Informationen über die strukturellen und chemischen Eigenschaften von Molekülen zu erhalten.

Das Massenspektrometer hat eine Reihe von Quadrupol-Filtern, die Ionen nach ihrem Masse-zu-Ladungsverhältnis (m/z -Verhältnis) übertragen. Der erste Quadrupol dieser Reihe ist die IonDrive™ QJet-Ionenführung zwischen der Orifice-Platte und dem Q0-Bereich. Die IonDrive™ QJet-Ionenführung filtert keine Ionen, sondern fokussiert diese, bevor sie in den Q0-Bereich gelangen. Durch Vorfokussierung des höheren Ionenflusses durch die größere Orifice erhöht die IonDrive™ QJet-Ionenführung die Systemempfindlichkeit und verbessert das Signal-zu-Rausch-Verhältnis. Im Q0-Bereich werden die Ionen weiter fokussiert, bevor sie in den Q1-Quadrupol gelangen.

Abbildung 2-3 Ionenpfad



Position	Beschreibung
1	Orifice-Platte
2	QJet-Ionenführung
3	Q0-Region
4	Q1-Quadrupol
5	Q2-Kollisionszelle
6	Q3-Quadrupol
7	Sensor

Das Q1-Quadrupol ist ein Quadrupol-Filter, der Ionen sortiert, bevor sie in die Q2-Kollisionszelle gelangen. In der Q2-Kollisionszelle wird die innere Energie der Ionen durch Kollisionen mit Gasmolekülen bis zu dem Punkt erhöht, an dem die molekularen Bindungen auseinander brechen und Produkt-Ionen erzeugen. Diese Technik ermöglicht es Benutzern, Experimente zu entwerfen, mit denen der m/z von Produkt-Ionen gemessen wird, um die Zusammensetzung der Mutter-Ionen zu bestimmen.

Nach dem Durchlaufen der Q2-Kollisionszelle gelangen die Ionen zur weiteren Filterung in den Q3-Quadrupol und gelangen dann in den Detektor. Im Detektor erzeugen die Ionen einen Strom, der in einen Spannungsimpuls umgewandelt wird. Die Spannungsimpulse, die den Detektor verlassen, sind direkt proportional zu der Menge der Ionen, die den Detektor gelangen. Das System überwacht diese Spannungsimpulse und wandelt die Informationen anschließend in ein Signal um. Das Signal steht für die Ionen-Intensität bei einem bestimmten m/z -Wert und das System zeigt diese Formation als Massenspektrum.

Die LIT-Funktionalität (lineare Ionenfalle) bietet eine Reihe von erweiterten Betriebsmodi. Eine Gemeinsamkeit der erweiterten Modi ist, dass Ionen in der Q3 Quadrupol-Region eingefangen und dann zum Erstellen des vollen Spektrums abgetastet werden. Viele Spektren werden schnell abgetastet und sind wesentlich intensiver als Spektren, die mit einem vergleichbaren Standard Quadrupol-Betriebsmodus abgetastet werden.

In der Akquisitionphase bewegen sich die Ionen durch die Q2 Kollisionszelle, wo das CAD-Gas die Ionen in der Q3-Region konzentriert. Der Quadrupol Q3 wird nur mit der Haupt-HF-Spannung betrieben. Ionen werden

daran gehindert, dass sie sich durch den Quadrupolstabsatz Q3 bewegen, und werden durch eine Austrittslinse, an der eine Gleichstrom-Spannung angelegt wird, reflektiert. Nachdem die Füllzeit verstrichen ist (eine Zeit, die vom Benutzer definiert oder durch die Dynamic-Fill-Time-Funktion bestimmt wird), wird eine Gleichstrom-Spannungsbarriere an der Q3 Eintrittslinse (IQ3) aufgebracht. Dadurch werden die in Q3 gesammelten Ionen festgehalten und es wird verhindert, dass weitere Ionen eindringen. Die an der Eintritts- und Austrittslinse aufgebrachte Gleichspannungsbarriere und die an den Quadrupolstäben aufgebrachte HF-Spannung halten die Ionen in Q3.

Während der Abtastphase wird die Spannung an der Austrittslinse und die zusätzliche HF-Spannung gleichzeitig mit der Haupt-HF-Spannung erhöht, damit eine bessere Auflösung und Empfindlichkeit im Vergleich zu Quadrupol-Scanmodi erzielt wird. Eine zusätzliche Wechselstrom-Frequenz wird auf dem Q3 Quadrupol aufgebracht. Die Haupt-HF-Spannungsamplitude wird von niedrigen auf hohe Werte hochgefahren und bringt die Massen nacheinander mit der zusätzlichen Wechselstrom-Frequenz zum Mitschwingen. Wenn Ionen mit der Wechselstrom-Frequenz zum Mitschwingen gebracht wurden, gewinnen sie genug Axialgeschwindigkeit um die Austrittslinsen-Barriere zu überwinden und werden axial in Richtung auf den Massenspektrometer-Ionendetektor ausgestoßen. Vollständige Spektrendaten können aus den in Q3 gesammelten Ionen durch schnelles Abtasten der Haupt-RF-Spannung erfasst werden.

Umgang mit Daten

Für die Software Analyst[®] ist ein Computer mit dem Betriebssystem Windows 7 (32- oder 64-Bit) oder Windows 10, 64-Bit, erforderlich. Der Computer mit der zugehörigen Systemsoftware arbeitet mit dem Systemcontroller und der zugehörigen Firmware, um das System und die Datenerfassung zu steuern. Beim Betrieb des Systems werden die aufgenommenen Daten an die Analyst[®]-Software gesendet, wo sie als vollständige Massenspektren, als Intensität einzelner oder mehrerer Ionen als Funktion der Zeit oder als Gesamtionenstrom als Funktion der Zeit dargestellt werden können.

Analyst[®] Software-Übersicht

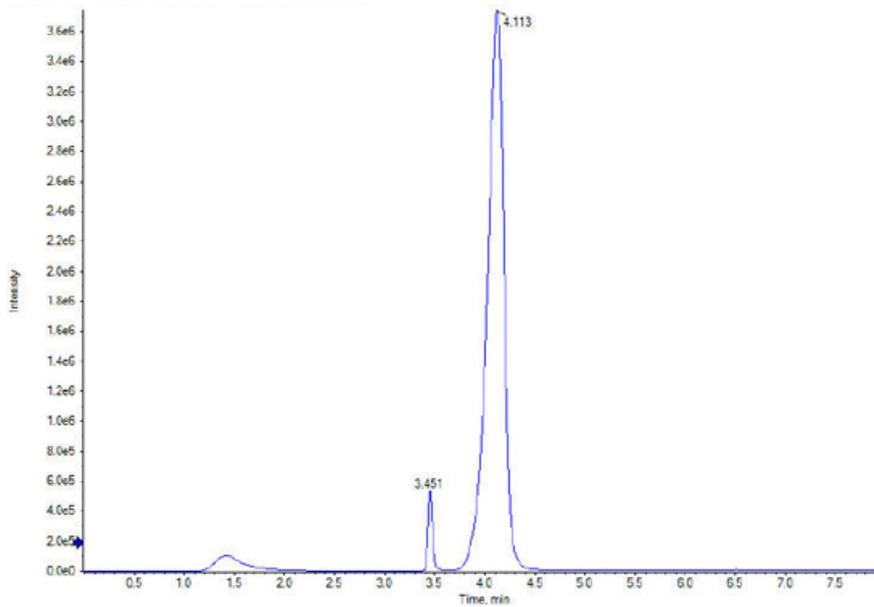
Die Analyst[®] Software arbeitet mit dem Massenspektrometer, dem Flüssigkeitschromatografie (LC)-System und der entsprechenden Firmware, um das System und die Datenerfassung zu steuern. Bei Systembetrieb werden die aufgenommenen Daten an die Analyst[®] Software gesendet, wo sie als vollständige Massenspektren, als Intensität einzelner oder mehrerer Ionen als Funktion der Zeit, oder als Totalionenstrom als Funktion der Zeit dargestellt werden können.

Verschiedene Datenansichten

Die folgenden Abbildungen zeigen Beispiele für zwei Datenansichtstypen: Gesamtionenchromatogramm (Total Ion Chromatogram; TIC) und extrahiertes Ionenchromatogramm (Extracted Ion Chromatogram; XIC).

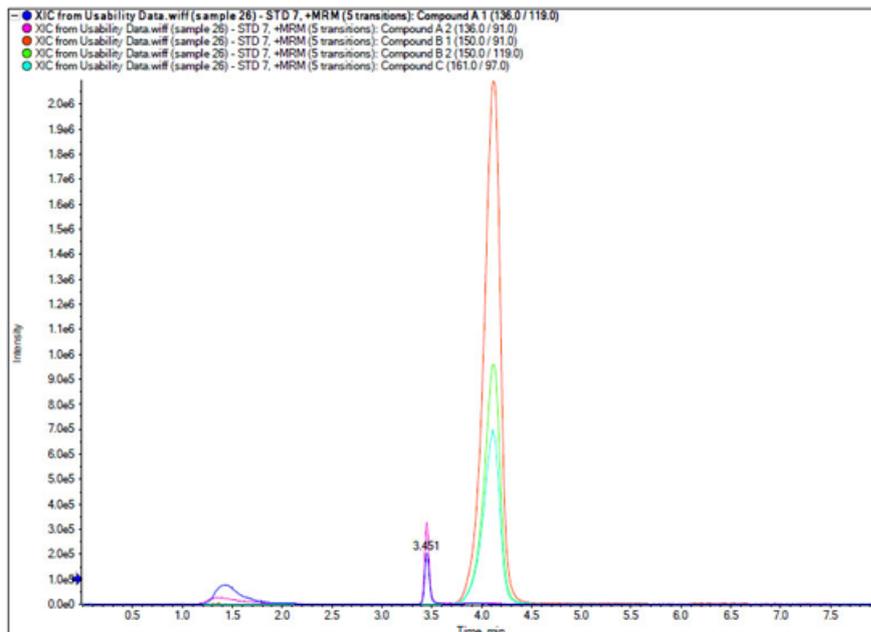
TIC: Die Darstellung des Gesamtionenstroms als Funktion der Zeit.

Abbildung 2-4 Beispiel-TIC



XIC: Ein Ionenchromatogramm wird erstellt, indem Intensitätswerte bei einem diskreten Massenwert oder Massenbereich aus einer Reihe von massenspektrometrischen Scans verwendet werden. Es zeigt das Verhalten einer bestimmten Masse oder Massenbereiches als Funktion der Zeit.

Abbildung 2-5 Beispiel-XIC



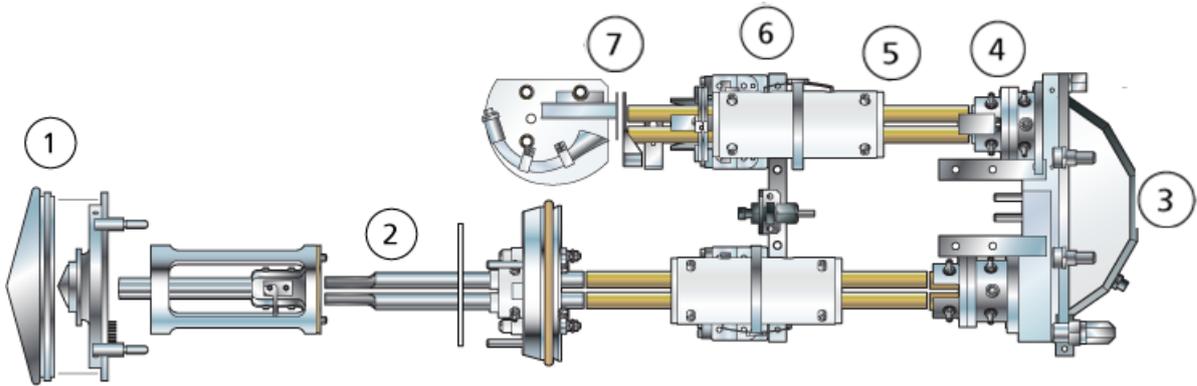
Parameter

Arbeitsparameter bezeichnen den Satz der gerade verwendeten Instrumenten-Parameter.

- Quell- und Gasparameter: diese Parameter können sich in Abhängigkeit der verwendeten Ionenquelle ändern.
- Substanzspezifische Parameter: Diese Parameter bestehen meist aus Spannungen auf dem Ionenpfad. Die optimalen Werte für substanzspezifische Parameter variieren je nach analysierter Verbindung.
- Auflösungsparameter: Die folgenden Parameter beeinflussen die Auflösung und Kalibrierung.
- Detektorparameter: Die folgenden Parameter beeinflussen den Detektor.

Die folgende Abbildung zeigt die Lage der Parameter auf dem optischen Ionenpfad.

Abbildung 2-6 Optischer Ionenpfad und Parameter



Grundlagen der Handhabung

Position	Parameter	Parameterart	Verwendung	Scan-Methode
1	IonSpray Voltage (IS)	Quelle und Gas	Der IS-Parameter steuert die Spannung, die an der Elektrode in der TurbolonSpray [®] -Probe anliegt und die Probe in der Ionenquelle ionisiert. Der Parameter hängt von der Polarität ab und beeinflusst Spray-Stabilität und Empfindlichkeit. Dieser Parameter wird ebenfalls mit der NanoSpray [®] -Ionenquelle verwendet. Siehe entsprechendes <i>Ionenquellen-Bedienerhandbuch</i> . Der Parameter kann verbindungsabhängig sein und sollte für jede Verbindung optimiert werden.	Alle
1	Nebulizer Current (NC)	Quelle und Gas	Der NC-Parameter regelt den Strom, der an der Koronaentladungsnadel in der APCI-Probe angelegt ist, zur Verwendung in der Turbo V TM oder DuoSpray TM -Ionenquelle Protonentransferreaktionen vor. Die Entladung ionisiert die Lösungsmittelmoleküle, was wiederum die Probenmoleküle ionisiert.	Alle
1	Interface Heater Temperature (IHT)	Quelle und Gas	Der IHT-Parameter steuert die Temperatur der NanoSpray [®] -Schnittstellenheizung und ist nur verfügbar, wenn die NanoSpray [®] -Ionenquelle und -Schnittstelle installiert sind. Die optimale Heizungstemperatur hängt von der analysierten Probe und dem verwendeten Lösungsmittel ab. Ist die Heizungstemperatur zu hoch, verschlechtert sich das Signal. Normalerweise liegt die Heizungstemperatur im Bereich von 130 °C bis 180 °C. Die maximal einstellbare Heizungstemperatur beträgt 250 °C, allerdings ist diese für die meisten Anwendungen zu hoch.	Alle
1	Ion Source Gas 1 (GS1)	Quelle und Gas	Der GS1-Parameter steuert das Zerstäubergas sowohl für die TurbolonSpray [®] als auch für die APCI-Probe. Der GS1-Parameter steuert das Zerstäubergas für die TurbolonSpray [®] -Probe.	Alle

Position	Parameter	Parameterart	Verwendung	Scan-Methode
1	Ion Source Gas 2 (GS2)	Quelle und Gas	Der GS2-Parameter steuert das Heizergas für die TurbolonSpray®-Probe sichtbar. Der GS2-Parameter steuert das Heizergas für die TurbolonSpray®-Probe und das Zerstäubergas für die APCI-Probe.	Alle
1	Temperature (TEM)	Quelle und Gas	Der TEM-Parameter steuert die Temperatur des Heizergases für die TurbolonSpray®-Probe oder die Temperatur der APCI-Probe.	Alle
1	Curtain Gas (CUR)	Quelle und Gas	Der CUR-Parameter steuert den Gasfluss der Curtain Gas™-Schnittstelle. Die Curtain Gas™-Schnittstelle ist zwischen der Curtain-Platte und der Orifice angeordnet. Sie verhindert eine Kontamination der Ionenoptik.	Alle
1	sdp	Quelle und Gas	Der sdp-Parameter steuert die Auswahl der DuoSpray™-Ionenquellenprobes: TurbolonSpray® oder APCI-Probe.	Nicht zutreffend
1	Declustering Potential (DP)	Verbindung	Der DP-Parameter steuert die Spannung an der Orifice, welche das Auflösungsvermögen der Ionen zwischen der Orifice und der IonDrive™ QJet-Ionenführung steuert. Damit werden Lösungsmittel-Cluster minimiert, die auf Probenionen verbleiben können, nachdem sie in die Vakuumkammer eingetreten sind, und ggf. Ionen fragmentiert. Je höher die Spannung, desto höher ist die Energie, die auf die Ionen übertragen wird. Wenn der DP-Parameter zu hoch ist, kann eine unerwünschte Fragmentierung auftreten. Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die Verbindung.	Alle
2	Entrance Potential (EP)	Verbindung	Der EP-Parameter bestimmt die Potentialdifferenz zwischen der Spannung an Q0 und dem Erdungsschalter. Das Eingangspotenzial führt und fokussiert die Ionen durch den Hochdruck im Q0-Bereich. Verwenden Sie den voreingestellten Wert.	Alle

Grundlagen der Handhabung

Position	Parameter	Parameterart	Verwendung	Scan-Methode
2	Q0 Trapping	Verbindung	<p>Der Q0-Trapping-Parameter steuert die Speicherung von Ionen im Q0-Bereich. Er wird verwendet, um die Empfindlichkeit und den Arbeitszyklus zu erhöhen, indem Ionen im Q0-Bereich aufgefangen werden, während Ionen massenabhängig von der linearen Ionenfalle ausgestoßen werden. Verwenden Sie mit diesem Parameter eine feste Füllzeit.</p> <p>Aktivieren oder deaktivieren Sie diese Funktion je nach Experiment.</p> <p>Wir empfehlen die Verwendung einer festen Füllzeit von 20 ms oder mehr.</p>	EMS, EMC, EPI, ER und MS/MS/MS
3	CAD Gas	Quelle und Gas	<p>Der CAD-Parameter steuert den Druck des CAD-Gases in der Kollisionszelle während Q3-, MS/MS- und LIT-Scans. Bei Q3-Scans hilft das Kollisionsgas, die Ionen während des Durchlaufes durch die Q2-Kollisionszelle zu fokussieren. Die Voreinstellung für den CAD-Parameter ist der stationäre Modus. Für MS/MS-Scan-Typen hilft das CAD-Gas, die Vorläufer-Ionen zu fragmentieren. Wenn die Vorläufer-Ionen mit dem Kollisionsgas kollidieren, dissoziieren sie und bilden Produkt-Ionen. Bei LIT-Scans unterstützt das Kollisionsgas dabei, Ionen im LIT zu fokussieren und zu fangen.</p> <p>Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die Verbindung.</p>	Q3 MI, Q3 MS, MRM, Prec, NL, EMS, ER, EPI, MS/MS/MS, EMC und TDF
3	Collision Energy (CE)	Verbindung	<p>Der CE-Parameter bestimmt die Potenzialdifferenz zwischen dem Q0-Bereich und der Q2-Kollisionszelle. Er wird nur bei MS/MS-Scan-Typen verwendet. Dieser Parameter ist die Energiemenge, die auf die Vorläufer-Ionen einwirkt, wenn sie in die Q2-Kollisionszelle hinein beschleunigt werden und mit Gasmolekülen kollidieren und fragmentieren.</p> <p>Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die Verbindung.</p>	EPI, MS/MS/MS, MRM, MS2, Prec, NL und LIT

Position	Parameter	Parameterart	Verwendung	Scan-Methode
3	Collision Energy Spread (CES)	Verbindung	In Verbindung mit dem CE-Parameter bestimmt der CES-Parameter, welche drei diskreten Kollisionsenergien auf die Vorläufer-Masse in einem Enhanced Product Ion (EPI) oder MS/MS/MS (MS3) -Scan einwirken, wenn CES verwendet wird. Bei Eingabe eines Wertes für die Kollisionsenergie-Spreizung wird CES automatisch aktiviert. Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die Verbindung.	EPI und MS/MS/MS
3	Collision Cell Exit Potential (CXP)	Verbindung	Der CXP-Parameter wird nur bei Q3- und MS/MS-Scan-Typen verwendet. Dieser Parameter überträgt die Ionen zum Q3-Quadrupol. Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die Verbindung.	Q3, MRM, MS2, Prec, NL
4	Q3 Entry Barrier	Verbindung	Der Parameter „Q3 Zugangsschranke“ wird zur Übertragung der Ionen von der Q2-Kollisionszelle in die lineare Ionenfalle verwendet. Verwenden Sie den voreingestellten Wert.	EMS, EMC, EPI, ER und MS/MS/MS
4	Q3 Empty Time	Verbindung	Der Parameter „Q3 Empty Time“ bestimmt die Zeit, in der einfach geladene Ionen aus der linearen Ionenfalle entfernt werden. Verwenden Sie den voreingestellten Wert.	EMC
5	Multi-Charge Separation Barrier (MCS)	Verbindung	Der Parameter „MCS Barrier“ kontrolliert die Spannung zur Beseitigung der einfach geladenen Ionen aus der linearen Ionenfalle. Verwenden Sie den voreingestellten Wert.	EMC
6	MS/MS/MS Fragmentation Excitation Time	Verbindung	Der MS/MS/MS Fragmentation Time-Parameter bestimmt die Zeitdauer, in der die Anregungsenergie aufgebracht wird. Er wird in Kombination mit der Anregungsenergie zur Fragmentierung der isolierten zweiten Vorläufer-Ionen verwendet. Verwenden Sie den voreingestellten Wert.	MS/MS/MS

Position	Parameter	Parameterart	Verwendung	Scan-Methode
6	Fixed LIT Fill Time	Verbindung	Der Fixed LIT Fill Time-Parameter bestimmt die Zeitdauer, in der der LIT mit Ionen beschickt wird. Verwenden Sie den voreingestellten Wert und passen Sie ihn an, um die gewünschte Signalreaktion basierend auf der Probenkonzentration zu erreichen.	EMS, EPI, ER und MS/MS/MS
6	Dynamic Fill Time (DFT)	Verbindung	Der DFT-Parameter berechnet die Dauer dynamisch, in der Ionen aufgrund des eingehenden Ionensignals in der linearen Ionenfalle gesammelt werden. Wird DFT aktiviert, wird das Signal so optimiert, dass entweder die Empfindlichkeit erhöht oder die Raumladung minimiert wird. Aktivieren oder deaktivieren Sie diese Funktion je nach Experiment. Im Dialogfeld Tools > Settings > Method Options werden die DFT-Einstellungen für die Standard-Abtastrate optimiert. Diese Einstellungen sind auch für andere LIT Scan-Geschwindigkeiten geeignet.	EMS, EPI, ER und MS/MS/MS
7	CEM	Detektor	Der CEM-Parameter steuert die Spannung, die auf den Sensor aufgebracht wird. Die Spannung steuert das Detektorverhalten.	Alle

Theoretische Grundlagen der Handhabung – Analyst[®]-Software

Quantifizierung

Ziel der Quantifizierung in der LC-MS/MS ist die genaue Bestimmung der Konzentration einer Verbindung in einer unbekannt Probe. Der MRM-Scan-Typ wird hauptsächlich für die quantitative Analyse in einem Triple-Quadrupol- oder QTRAP[®]-Massenspektrometer verwendet. In einem MRM-Scan bietet die Fähigkeit der Definition des Vorläufer-Ions und des charakteristischen Produkts die Möglichkeit zur Erstellung eines Paares, das äußerst analytenspezifisch ist. Der MRM-Übergang (Paar) liefert zusammen mit der Retentionszeit, die mit dem Analyten während der Flüssigkeitschromatografie assoziiert ist, die für die Quantifizierung erforderliche Spezifität.

Die Quantifizierung wird erreicht durch die Verwendung von validierten MRM-LC-MS/MS-Akquisitionsmethoden, die Akquisition von Kalibrierstandardkurven und die nachfolgende Integration der mit den betrachteten Verbindungen assoziierten Peaks. Das Kalibrierkurven-Verhältnis zwischen Signalantwort und -konzentration wird verwendet, um die Menge eines bestimmten Analyten in einer unbekannt Probe zu bestimmen.

Integration

Bei LC-MS/MS-Daten bezieht sich die Integration auf den Erhalt des Bereichs unter einer Kurve für den Peak, der mit einer bestimmten Verbindung assoziiert ist. Durch die Entwicklung einer Methode, die die Übergänge, erwarteten Retentionszeiten, internen Standards, Integrations- und Regressionsparameter festlegt, ist die Software in der Lage, Peaks für ein gegebenes Probenset automatisch zu integrieren.

Über Ergebnistabellen

Ergebnistabellen fassen berechnete Konzentration eines Analyten in jeder unbekannt Probe auf Basis der Kalibrierkurve zusammen. Ergebnistabellen enthalten auch Kalibrierkurven und Statistiken zu den Ergebnissen. Der Benutzer kann die Ergebnistabelle anpassen und die Ergebnistabellen in Layouts anzeigen.

Daten aus einer Ergebnistabelle können als .txt-Datei zur Verwendung in anderen Anwendungen, wie Microsoft Excel, exportiert werden. Der Benutzer kann entweder Daten in einer Tabelle oder nur die Daten in den sichtbaren Spalten exportieren.

Kalibrierkurven

Eine Kalibrierkurve (auch bekannt als Standardkonzentrationskurve) ist eine Methode zur Bestimmung der Konzentration einer Substanz in einer unbekannt Probe durch Vergleich der unbekannt Probe mit einer Reihe von Standardproben mit bekannter Konzentration. Die Kalibrierkurve stellt die Reaktion (das Analysesignal) des Instruments auf Änderungen der Konzentration des Analyten (die zu messende Substanz) dar. Der Bediener erstellt eine Standardserie mit verschiedenen Konzentrationen, die nahe der erwarteten Konzentration des Analyten in der unbekannt Probe liegen.

Kalibrierstandards werden zur Erstellung von Kalibrierkurven verwendet. Falsche oder ausgelassene Messwerte bei einigen der Kalibrierproben können auf Probleme beim analytischen Durchlauf hinweisen. Befolgen Sie akzeptable Methoden, die Sie in der Literatur und in Leitfäden von Aufsichtsbehörden zur Erstellung einer Kalibrierkurve finden. Beispiele für gute Vorgehensweisen bei der Erstellung von Kalibrierkurven sind unter anderem:

- Erstellung von Kalibrierstandards in einer leeren Matrix, in der der Analyt zu messen ist.
- Erstellung einer Kalibrierkurve für jeden zu messenden Analyten.
- Sicherstellen der Deckung des erwarteten Konzentrationsbereichs des Analyten, einschließlich typischer und atypischer Proben.
- Verwendung von sechs bis acht Standards zur Erstellung der Kurve.

Diese Liste ist nicht vollständig und weitere Leitfäden sollten zur Bestimmung der besten Vorgehensweise bei der Entwicklung einer Kalibrierkurve für das Labor verwendet werden.

Hinweis: In manchen analytischen Durchläufen werden Einpunktkalibrierstandards verwendet. Einpunktkalibrierungen werden mit einer Leermatrixprobe und einer Einzelstandardkonzentration durchgeführt. Die Beziehung zwischen Instrumentenreaktion und Analytenkonzentration wird durch die Gerade bestimmt, die durch diese zwei Punkte entsteht. Sowohl Akquisitions- als auch Quantifizierungsmethoden sollten vor Genehmigung für ihren Verwendungszweck überprüft werden.

Regressions

Die Flächen der Analyt-Peaks in den Kalibrierkurvenstandards wird den bekannten Konzentrationen gegenübergestellt. Danach wird eine Gerade zu diesen zwei Punkten gezeichnet. Mit dieser Regressionsgeraden berechnet man die Konzentration der unbekanntenen Proben.

- Linear ($y = mx + b$)
- Linear durch Null ($y = mx$)
- Quadratisch ($y = a_2 + bx + c$)

Auch ist es möglich, verschiedene Gewichtungstypen für die Regression hinzuzufügen, einschließlich:

- $1/x$
- $1/x^2$
- $1/y$
- $1/y^2$

Tabelle 3-1 Instrumenteneinrichtung Arbeitsablauf

Schritt	Um dies zu tun ...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
1	Erstellen eines Hardware-Profiles.	Erstellen eines Hardware-Profiles auf Seite 57	Jedes Hardware-Profil muss ein Massenspektrometer und andere Geräte, wie beispielsweise ein LC-System, enthalten. Nur Geräte, die im aktiven Hardware-Profil enthalten sind, können zur Erstellung von Erfassungsmethoden verwendet werden.
2	Erstellen von Projekten zur Speicherung von Daten.	Erstellen von Projekten und Teilprojekten auf Seite 64	Die Verwendung von Projekten und Teilprojekten verbessert das Datenmanagement und erleichtert den Vergleich von Ergebnissen.
3	Optimieren des Massenspektrometers.	Instrumentenleistung überprüfen auf Seite 68	Mit diesem Verfahren werden die Parameter der Auflösung und des Massenspektrometers optimiert und das Massenspektrometer kalibriert, um die beste Empfindlichkeit und Leistung des Systems zu erhalten.

Tabelle 3-2 Probenaufnahme-Workflow

Schritt	Um dies zu tun ...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
1	Erstellen von Projekten zur Speicherung von Daten.	Erstellen von Projekten und Teilprojekten auf Seite 64	Die Verwendung von Projekten und Teilprojekten verbessert das Datenmanagement und erleichtert den Vergleich von Ergebnissen.
2	Eine Akquisitionsmethode erstellen.	Bedienungsanleitung – Akquisitionsmethoden auf Seite 87	Erstellen Sie eine Akquisitionsmethode für das Massenspektrometer und jegliche LC-Geräte, um Proben zu analysieren. Eine Erfassungsmethode zeigt an, welche Peripheriegeräte zur Datenerfassung zu verwenden sind, sowie die damit verbundenen Parameter.
3	Einen Batch erstellen und übergeben.	Sets und Proben zu einem Batch hinzufügen auf Seite 138 und Eine Probe oder einen Probensatz übergeben auf Seite 141	Nach dem Erstellen einer Erfassungsmethode verarbeiten Sie Proben durch Erstellen eines Erfassungs-Batch und Übergabe des Batch an die Erfassungs-Warteschleife.

Tabelle 3-2 Probenaufnahme-Workflow (Fortsetzung)

Schritt	Um dies zu tun ...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
4	Proben zur Datenakquisition verarbeiten.	Daten aufnehmen auf Seite 142	Die Verarbeitung von Proben umfasst die Verwaltung der Akquisitions-Warteschleife und Überwachung des Instrumenten- und Gerätestatus. Verwenden Sie den Warteschleifen-Manager, um Proben zu übergeben und Daten zu erfassen. Der Warteschleifen-Manager zeigt den Status von Warteschleife, Batch und Probe an und ermöglicht die Verwaltung von Proben und Batches in der Warteschleife.

Tabelle 3-2 Probenaufnahme-Workflow (Fortsetzung)

Schritt	Um dies zu tun ...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
5	Analyse von Daten im Explore-Modus. – ODER – Schritt 6 – Quantitative Daten analysieren	Bedienungsanleitung – Analyse und Untersuchung von Daten auf Seite 112	Im Explore-Modus sind viele Tools zum Ansehen und Verarbeiten der erfassten Daten verfügbar. Diagramme können mit Kennzeichnungen und Beschriftungen von Peaks angepasst werden, Konturdiagramme können angezeigt und Spektren können in der Bibliothek gespeichert werden.
6	Quantitative Daten analysieren.	Bedienungsanleitung – Analyse und Verarbeitung von quantitativen Daten auf Seite 93	Verwenden Sie die verschiedenen Tools zur Erstellung der quantitativen Methode im Quantifizierungs-Modus, um die erfassten Daten zu analysieren, und erstellen Sie eine quantitative Methode zur Erzeugung einer Ergebnistabelle. Verwenden Sie die Ergebnistabelle, um alle Peaks für jeden Analyten und internen Standard innerhalb eines Batch zu überprüfen und um sich Kalibrierungskurven, Probenstatistiken und metrische Kurven anzusehen.

Tabelle 3-3 Beispiel für einen Routine-Analyse-Arbeitsablauf

Schritt	Um dies zu tun...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
1	Aktivieren Sie ein für die Methode zutreffendes Hardware-Profil.	Erstellen eines Hardware-Profiles auf Seite 57	Jedes Hardware-Profil muss ein Massenspektrometer und andere Geräte, wie beispielsweise ein LC-System, enthalten. Nur Geräte, die im aktiven Hardware-Profil enthalten sind, können zur Erstellung von Erfassungsmethoden verwendet werden.
2	Erstellen von Projekten zur Speicherung von Daten.	Erstellen von Projekten und Teilprojekten auf Seite 64	Die Verwendung von Projekten und Teilprojekten verbessert das Datenmanagement und erleichtert den Vergleich von Ergebnissen.
3	Einen Batch erstellen und übergeben.	Sets und Proben zu einem Batch hinzufügen auf Seite 138 und Eine Probe oder einen Probensatz übergeben auf Seite 141	Nach dem Erstellen einer Erfassungsmethode verarbeiten Sie Proben durch Erstellen eines Erfassungs-Batch und Übergabe des Batch an die Erfassungs-Warteschleife.
4	Äquilibrieren des Systems	System äquilibrieren auf Seite 141	Äquilibrieren Sie das System, bevor Sie mit der Datenerfassung beginnen. Ein nicht äquilibriertes System kann zu schlechten Ergebnissen führen.

Tabelle 3-3 Beispiel für einen Routine-Analyse-Arbeitsablauf (Fortsetzung)

Schritt	Um dies zu tun...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
5	Proben zur Datenakquisition verarbeiten.	Daten aufnehmen auf Seite 142	Die Verarbeitung von Proben umfasst die Verwaltung der Akquisitions-Warteschleife und Überwachung des Instrumenten- und Gerätestatus. Verwenden Sie den Warteschleifen-Manager, um Proben zu übergeben und Daten zu erfassen. Der Warteschleifen-Manager zeigt den Status von Warteschleife, Batch und Probe an und ermöglicht die Verwaltung von Proben und Batches in der Warteschleife.
6	Analyse von Daten im Explore-Modus (optional).	Bedienungsanleitung – Analyse und Untersuchung von Daten auf Seite 112	Im Explore-Modus sind viele Tools zum Ansehen und Verarbeiten der erfassten Daten verfügbar. Diagramme können mit Kennzeichnungen und Beschriftungen von Peaks angepasst werden, Konturdiagramme können angezeigt und Spektren können in der Bibliothek gespeichert werden.
<ul style="list-style-type: none"> • Um eine quantitative Analyse unter Anwendung der MultiQuant™-Software durchzuführen, führen Sie die Schritte 7 bis 8 durch. Die MultiQuant™-Software wird für größere Datensätze empfohlen. • Um eine quantitative Analyse unter Anwendung der Analyst®-Software durchzuführen, führen Sie die Schritte 9 bis 10a durch. • Um eine qualitative Analyse unter Anwendung der Analyst®-Software durchzuführen, führen Sie die Schritte 9 bis 10b durch. 			

Tabelle 3-3 Beispiel für einen Routine-Analyse-Arbeitsablauf (Fortsetzung)

Schritt	Um dies zu tun...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
7	Analyse von quantitativen Daten in der MultiQuant™-Software.	<i>MultiQuant™-Software-Handbuch:</i> Kapitel 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14	Erstellen und verwenden Sie die Ergebnistabelle, um alle Peaks für jeden Analyten und internen Standard innerhalb eines Batches zu überprüfen und um sich Kalibrierungskurven, Probenstatistiken und metrische Kurven anzusehen.
8	Erstellen eines Berichts in der MultiQuant™-Software.	<i>MultiQuant™-Software-Handbuch:</i> Anhang C	Erstellen Sie einen Bericht für die generierten und geprüften Ergebnisse unter Anwendung der bereitgestellten Berichtsvorlage.
9	Analyse qualitativer (oder quantitativer) Daten in der Analyst®-Software.	Bedienungsanleitung – Analyse und Verarbeitung von quantitativen Daten auf Seite 93	Erstellen Sie manuell eine Ergebnistabelle, um alle Peaks für jeden Analyten und internen Standard innerhalb eines Batches zu überprüfen. Überprüfen Sie bei quantitativen Analysen auch die Kalibrierungskurven, Probenstatistiken und metrischen Kurven.

Tabelle 3-3 Beispiel für einen Routine-Analyse-Arbeitsablauf (Fortsetzung)

Schritt	Um dies zu tun...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
10a	Erstellen eines Berichts im Analyst Reporter.	Berichte generieren	Erstellen Sie einen Bericht für die generierten und geprüften Ergebnisse unter Anwendung der bereitgestellten Berichtsvorlage. Für Berichte, die speziell auf die qualitative Analyse abzielen, verwenden Sie den Berichtsdatensatz, der mit Bibliothek durchsuchen gekennzeichnet ist.
10b	Wählen Sie eine Bibliothek und erstellen Sie dann einen Bericht unter Anwendung des Analyst Reporter.	Berichte generieren	Wählen Sie die geeignete MS/MS-Spektrenbibliothek für die Ergebnisse und erstellen Sie den Bericht für die generierten und geprüften Ergebnisse unter Anwendung der mit „als Bibliothek durchsuchen“ gekennzeichneten Berichtsvorlagen. Für Berichte, die speziell auf die qualitative Analyse abzielen, verwenden Sie den Berichtsdatensatz, der „mit Bibliothek durchsuchen“ gekennzeichnet ist.

Tabelle 3-4 Beispiel für einen Methodenentwickler-Arbeitsablauf

Schritt	Um dies zu tun...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
1	Erstellen eines Hardware-Profiles.	Erstellen eines Hardware-Profiles auf Seite 57	Jedes Hardware-Profil muss ein Massenspektrometer und andere Geräte, wie beispielsweise ein LC-System, enthalten. Nur Geräte, die im aktiven Hardware-Profil enthalten sind, können zur Erstellung von Erfassungsmethoden verwendet werden.
2	Erstellen von Projekten zur Speicherung von Daten.	Erstellen von Projekten und Teilprojekten auf Seite 64	Die Verwendung von Projekten und Teilprojekten verbessert das Datenmanagement und erleichtert den Vergleich von Ergebnissen.
3	Automatische Optimierung der Verbindung - oder - Schritt 4 Manuelle Optimierung der Verbindung.	Automatische Optimierung auf Seite 71	Für die relevanten Verbindungen optimiert die Software die Parameter für die Verbindung und das Massenspektrometer automatisch.
4	Manuelle Optimierung der Verbindung	Betriebsanleitung – Manuelle Verbindungsoptimierung auf Seite 169	Für die relevanten Verbindungen optimiert der Benutzer die Parameter für die Verbindung und das Massenspektrometer manuell. Bei der manuellen Optimierung haben erfahrenere Benutzer größere Kontrolle während des Optimierungsprozesses.

Tabelle 3-4 Beispiel für einen Methodenentwickler-Arbeitsablauf (Fortsetzung)

Schritt	Um dies zu tun...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
5	Eine Akquisitionsmethode erstellen.	Bedienungsanleitung – Akquisitionsmethoden auf Seite 87	Erstellen Sie eine Akquisitionsmethode für das Massenspektrometer und jegliche LC-Geräte, um Proben zu analysieren. Eine Akquisitionsmethode zeigt an, welche Peripheriegeräte zur Datenerfassung zu verwenden sind, sowie die damit verbundenen Parameter.
6	Einen Batch erstellen und übergeben.	Sets und Proben zu einem Batch hinzufügen auf Seite 138 und Eine Probe oder einen Probensatz übergeben auf Seite 141	Nach dem Erstellen einer Erfassungsmethode verarbeiten Sie Proben durch Erstellen eines Erfassungs-Batch und Übergabe des Batch an die Erfassungs-Warteschleife.
7	Äquilibrieren des Systems	System äquilibrieren auf Seite 141	Äquilibrieren Sie das System, bevor Sie mit der Datenerfassung beginnen. Ein nicht äquilibriertes System kann zu schlechten Ergebnissen führen.

Tabelle 3-4 Beispiel für einen Methodenentwickler-Arbeitsablauf (Fortsetzung)

Schritt	Um dies zu tun...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
8	Proben zur Datenakquisition verarbeiten.	Daten aufnehmen auf Seite 142	Die Verarbeitung von Proben umfasst die Verwaltung der Akquisitions-Warteschleife und Überwachung des Instrumenten- und Gerätestatus. Verwenden Sie den Warteschleifen-Manager, um Proben zu übergeben und Daten zu erfassen. Der Warteschleifen-Manager zeigt den Status von Warteschleife, Batch und Probe an und ermöglicht die Verwaltung von Proben und Batches in der Warteschleife.
9	Analyse von Daten im Explore-Modus (optional).	Bedienungsanleitung – Analyse und Untersuchung von Daten auf Seite 112	Im Explore-Modus sind viele Tools zum Ansehen und Verarbeiten der erfassten Daten verfügbar. Diagramme können mit Kennzeichnungen und Beschriftungen von Peaks angepasst werden, Konturdiagramme können angezeigt und Spektren können in der Bibliothek gespeichert werden.
<ul style="list-style-type: none"> • Um eine quantitative Analyse unter Anwendung der MultiQuant™-Software durchzuführen, führen Sie die Schritte 10 bis 12 durch. Die MultiQuant™-Software wird für größere Datensätze empfohlen. • Um eine quantitative Analyse unter Anwendung der Analyst®-Software durchzuführen, führen Sie die Schritte 13 bis 15 durch. • Um eine qualitative Analyse durchzuführen, nehmen Sie Kontakt mit dem Support auf. 			

Tabelle 3-4 Beispiel für einen Methodenentwickler-Arbeitsablauf (Fortsetzung)

Schritt	Um dies zu tun...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
10	Erstellen einer quantitativen Methode in der MultiQuant™-Software.	<i>MultiQuant™-Software-Handbuch:</i> Quantitation Method Editor	Verwenden Sie die verschiedenen Tools zur Erstellung der quantitativen Methode in der Software, um die erfassten Daten zu analysieren, und erstellen Sie eine quantitative Methode zur Erzeugung einer Ergebnistabelle.
11	Analyse von quantitativen Daten in der MultiQuant™-Software.	<i>MultiQuant™-Software-Handbuch:</i> Kapitel 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14	Erstellen und verwenden Sie die Ergebnistabelle, um alle Peaks für jeden Analyten und internen Standard innerhalb eines Batches zu überprüfen und um sich Kalibrierungskurven, Probenstatistiken und metrische Kurven anzusehen.
12	Erstellen eines Berichts in der MultiQuant™-Software.	<i>MultiQuant™-Software-Handbuch:</i> Anhang C	Erstellen Sie einen Bericht für die generierten und geprüften Ergebnisse unter Anwendung der bereitgestellten Berichtsvorlage.
13	Erstellen und Speichern einer Quantifizierungsmethode in der Analyst®-Software.	<i>MultiQuant™-Software-Handbuch:</i> Quantitation Method Editor	Verwenden Sie die verschiedenen Tools zur Erstellung der quantitativen Methode in der Software, um die erfassten Daten zu analysieren, und erstellen Sie eine quantitative Methode zur Erzeugung einer Ergebnistabelle.

Tabelle 3-4 Beispiel für einen Methodenentwickler-Arbeitsablauf (Fortsetzung)

Schritt	Um dies zu tun...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
14	Analyse qualitativer (oder quantitativer) Daten in der Analyst [®] -Software.	Bedienungsanleitung – Analyse und Verarbeitung von quantitativen Daten auf Seite 93	Erstellen Sie manuell eine Ergebnistabelle, um alle Peaks für jeden Analyten und internen Standard innerhalb eines Batches zu überprüfen. Überprüfen Sie bei quantitativen Analysen auch die Kalibrierungskurven, Probenstatistiken und metrischen Kurven.
14	Erstellen eines Berichts im Analyst Reporter.	Berichte generieren	Erstellen Sie einen Bericht für die generierten und geprüften Ergebnisse unter Anwendung der bereitgestellten Berichtsvorlage. Für Berichte, die speziell auf die qualitative Analyse abzielen, verwenden Sie den Berichtsdatensatz, der mit Bibliothek durchsuchbar gekennzeichnet ist.



WARNHINWEIS! Gefahr für Personenschäden. Befolgen Sie bei Verwendung des Systems die Anweisungen in der Dokumentation. Wenn das Gerät in einer Umgebung oder in einer Weise verwendet wird, die nicht der Beschreibung von SCIEX entspricht, kann der im Gerät eingebaute Schutz beeinträchtigt werden.

Inbetriebnahme des Systems



WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Stellen Sie sicher, dass das System in einem Notfall von der Steckdose der Netzversorgung getrennt werden kann. Die Steckdose der Netzversorgung muss zu jeder Zeit problemlos zugänglich sein.



WARNHINWEIS! Gefahr durch Heben. Das System nicht bewegen. Gefahr von Personenschäden oder Schäden am System. Wenn das System umgesetzt werden muss, wenden Sie sich bitte an einen Außendienstmitarbeiter (FSE).

Hinweis: Vor der Inbetriebnahme des Systems, lesen Sie bitte die Sicherheitshinweise in [Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb auf Seite 7](#).

Voraussetzungen

- Die Anforderungen an den Standort, die im *Handbuch zur Standortplanung* angegeben sind, werden erfüllt. Das *Handbuch zur Standortplanung* enthält Informationen über Netzversorgung und Anschlüsse, Druckluft, Stickstoff, Vakuumpumpe, Lüftung, Abluft und Zwischenraum-Anforderungen. Bei Bedarf stellen wir Ihnen auf Anfrage gerne eine Kopie des *Handbuchs zur Standortplanung* bereit. Kontaktinformationen finden Sie unter sciex.com/contact-us.
- Quellenabluftgas, Druckluft und Stickstoffgase sind an das Massenspektrometer angeschlossen.
- Der 4-Liter-Quellenabluftauffangbehälter ist auf der Rückseite des Massenspektrometers an den Abluftanschluss und das Laborbelüftungssystem angeschlossen.
- Die Quellenabluftschläuche sind sicher an Massenspektrometer, Auffangbehälter und Belüftungsanschlüsse angeschlossen.
- Der Netzschalter des Massenspektrometers ist ausgeschaltet und das Netzversorgungskabel am Massenspektrometer angeschlossen.
- Die Netzversorgungskabel für das Massenspektrometer und die Vakuumpumpe sind mit der Stromversorgung von 200 V bis 240 V Wechselspannung verbunden.
- Das Ethernet-Kabel ist sowohl mit dem Massenspektrometer als auch mit dem Computer verbunden.

1. Schalten Sie den Komfortschalter des Massenspektrometers ein. Siehe [Abbildung 2-2 auf Seite 22](#).
2. Schalten Sie den Computer ein.
3. Starten Sie die Analyst[®]-Software.

Rücksetzen des Massenspektrometers

1. Beenden Sie alle laufenden Scans und schalten Sie den Probenfluss zum Massenspektrometer aus.
2. Deaktivieren Sie in der Analyst[®]-Software das Hardware-Profil, wenn es aktiv ist.
3. Drücken und halten Sie die **Reset**-Taste fünf Sekunden lang gedrückt.

Ein Klicken ist zu hören, wenn das Relais anspringt. Nach etwa drei Minuten erreicht das Massenspektrometer den Betriebsdruck.

Abschalten und Belüften des Systems

Bei einigen Verfahren muss das System abgeschaltet werden. Bei manchen muss es außerdem belüftet werden. Befolgen Sie diese Schritte, um das System abzuschalten und bei Bedarf zu belüften.

Hinweis: Sollte die Gaszufuhr getrennt werden müssen, lassen Sie zuvor den Druck aus den Gasleitungen ab.

Tipp! Wenn das Massenspektrometer längere Zeit nicht benutzt wird, belassen Sie es im Standby-Modus mit angebrachter Ionenquelle. Wenn das Massenspektrometer heruntergefahren werden muss, befolgen Sie diese Anweisungen. Schalten Sie die Vakuumpumpe erst aus, nachdem die Turbo-Pumpen ausgelaufen sind.

1. Beenden oder unterbrechen Sie alle laufenden Scans.

VORSICHT! Mögliche Schäden am System. Schalten Sie den Probendurchsatz aus, bevor Sie das System ausschalten.

2. Stellen Sie den Probendurchsatz zum System ab.
3. Deaktivieren Sie in der Analyst[®] Software das Hardware-Profil, wenn es aktiv ist.
4. Schließen Sie die Software.
5. Befolgen Sie (bei Bedarf) die nachstehende Anleitung zum Belüften des Systems:

Hinweis: Belüften Sie das System vor dem Durchführen einer vollständigen Reinigung der Vakuum-Schnittstelle, vor dem Reinigen des Q0-Bereichs und vor dem Austauschen des Vorvakuumumpenöls. Für weitere Informationen kontaktieren Sie einen qualifizierten Wartungstechniker oder Außendienstmitarbeiter.

- a. Drücken Sie die **Vent**-Taste und halten Sie sie drei Sekunden lang gedrückt.

Die Vakuum-LED beginnt schnell zu blinken (schneller als beim Herunterpumpen). Die Turbopumpe kommt allmählich zum Stehen.
 - b. Belüften Sie das System 15 Minuten lang.
6. Schalten Sie den Netzschalter des Massenspektrometers aus.
 7. Trennen Sie das Stromanschlusskabel des Massenspektrometers von der Netzversorgung.
 8. (Beim Belüften des Systems) Trennen Sie das Netzanschlusskabel der Vakuumpumpe von der Netzversorgung.

Justieren Sie die Position der integrierten Spritzenpumpe



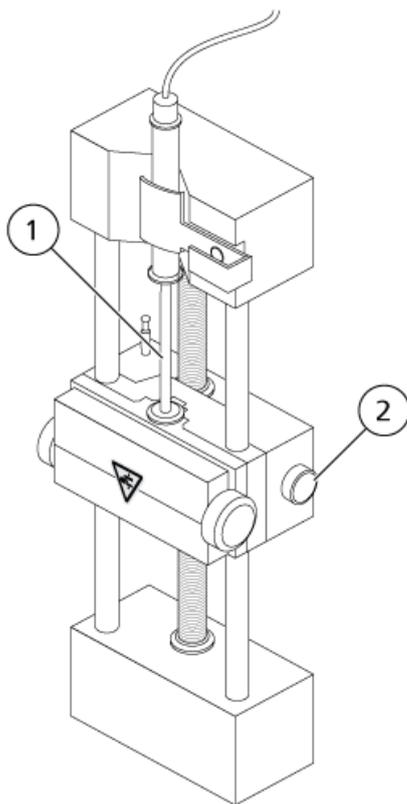
WARNHINWEIS! Gefahr von Stichverletzungen. Gehen Sie beim Umgang mit der Spritze vorsichtig vor. Die Spritzen spitze ist sehr scharf.



WARNHINWEIS! Gefahr von Stichverletzungen. Vergewissern Sie sich, dass die Spritze korrekt in der Spritzenpumpe sitzt und der automatische Spritzenpumpenanschlag ordnungsgemäß eingestellt ist, um eine Beschädigung oder ein Brechen der Glasspritze zu vermeiden. Wenn die Spritze bricht, befolgen Sie die vorgeschriebenen Sicherheitsmaßnahmen für die Entsorgung scharfer und spitzer Gegenstände.

1. Drücken Sie die Taste **Release** auf der rechten Seite der Spritzenpumpe, um die Grundplatte abzusenken, und legen dann die Spritze wie gezeigt ein. Siehe [Abbildung 4-1](#).

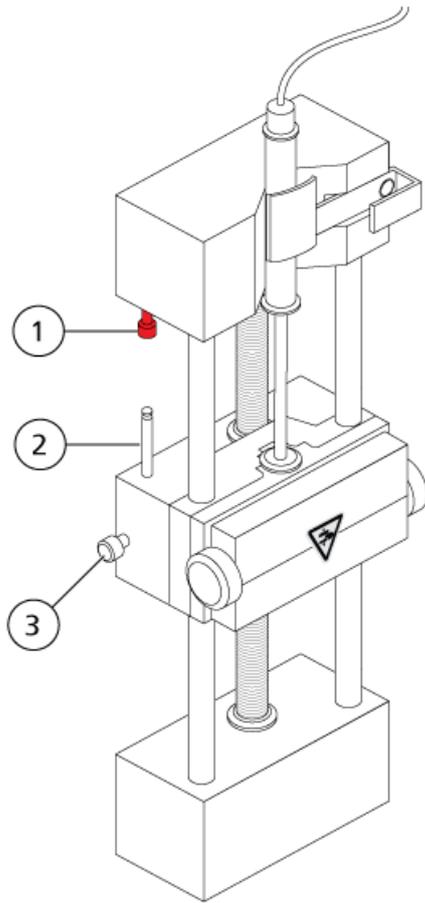
Abbildung 4-1 Absenken der Spritze



Position	Beschreibung
1	Spritzenkolben
2	Freigabe-Taste. Zum Anheben oder Absenken der Grundplatte drücken.

2. Stellen Sie sicher, dass das Ende der Spritze mit der Grundplatte bündig ist und der Schaft der Spritze in der Aussparung aufsitzt.
3. Stellen Sie den Stift so ein, dass der automatische Spritzenanschlag ausgelöst wird, bevor der Spritzenkolben das untere Ende der Glasspritze berührt. Siehe [Abbildung 4-2](#).

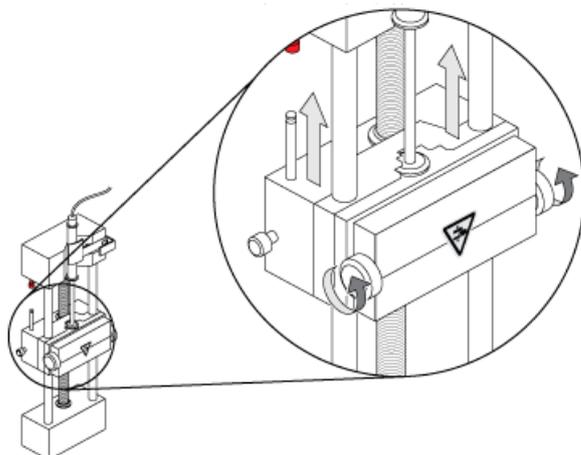
Abbildung 4-2 Automatischer Spritzenstopp



Position	Beschreibung
1	Automatischer Spritzenanschlag. Nachdem der Stift auf den automatischen Spritzenanschlag trifft, stoppt die Spritzenpumpe.
2	Stift. Stellen Sie die Höhe ein, damit der Spritzenkolben die Spritze während der Probeninfusion nicht berührt.
3	Stift-Feststellschraube. Ziehen Sie die Schraube fest, nachdem die Höhe des Stiftes eingestellt wurde.

4. Drehen Sie die seitlichen Schrauben wie in [Abbildung 4-3](#) gezeigt an, um die Spritze zu sichern.

Abbildung 4-3 Spritzenpumpen-Schrauben



5. Vergewissern Sie sich, dass das Massenspektrometer und die integrierte Spritzenpumpe in der Software aktiviert wurden.

Hinweis: Drücken Sie beim nachfolgenden manuellen Gebrauch am Massenspektrometer die Taste auf der rechten Seite der Spritzenpumpe, um den Durchfluss zu starten. Siehe [Abbildung 4-4](#). Die LED neben der Taste blinkt, sobald die Spritzenpumpe arbeitet. Der Spritzenpumpendurchfluss kann auch automatisch über die Software Analyst[®] kontrolliert werden.

Abbildung 4-4 Spritzenpumpen-LED

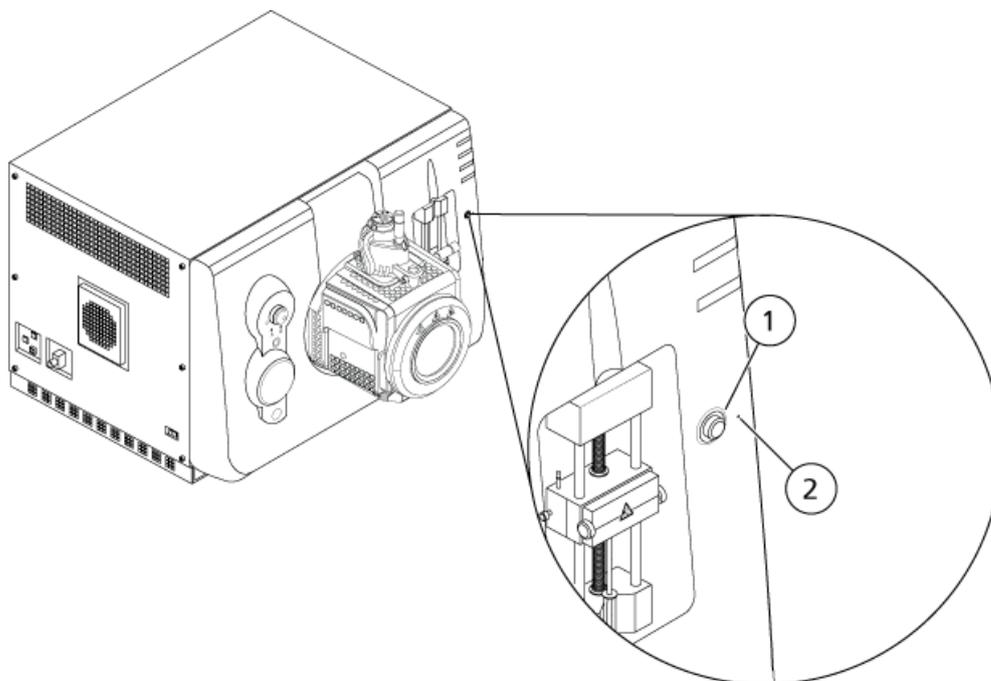
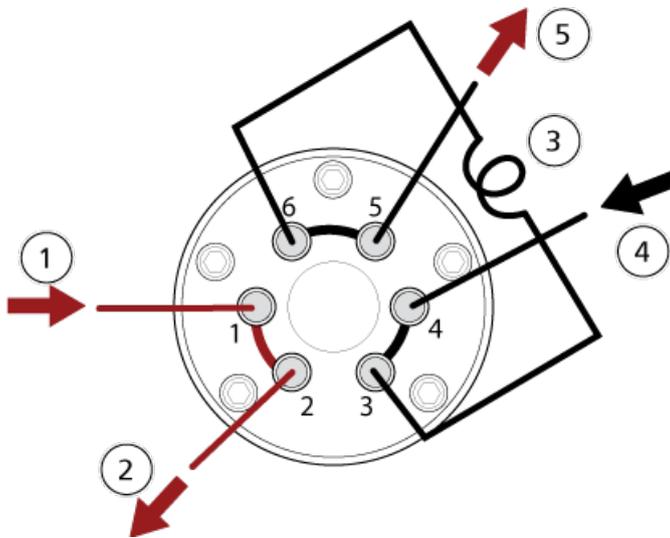


Abbildung 4-6 Umleitventil – Injektormodus Position B



Position	Beschreibung
1	Probeneinlass
2	Abfallauslass
3	Probenschleife (Anschlüsse 3 und 6)
4	Einlass Mobile Phase
5	Zur Säule (oder zum Massenspektrometer, wenn keine Säule installiert ist)

Umleitventil im Umleitmodus ausrichten

Wenn sich das Ventil in Position A befindet, wird der Durchfluss zum Abfallauslass geleitet. Wird das Ventil auf Position B umgeschaltet, wird der Durchfluss zum Massenspektrometer geleitet.

- Ventil für den Umleitmodus anschließen.

Abbildung 4-7 Umleitventil – Umleitmodus Position A

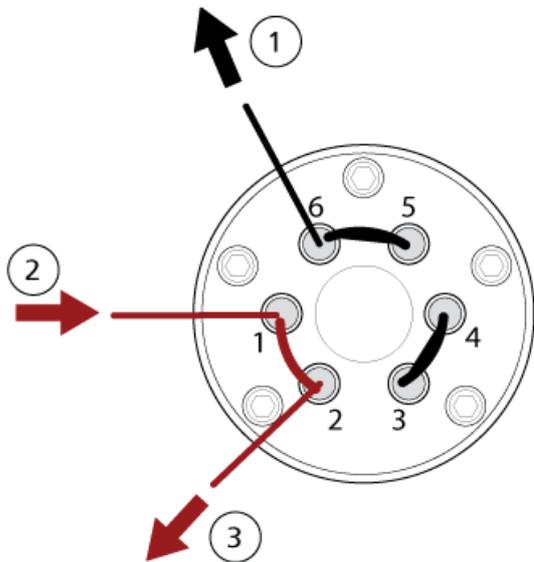
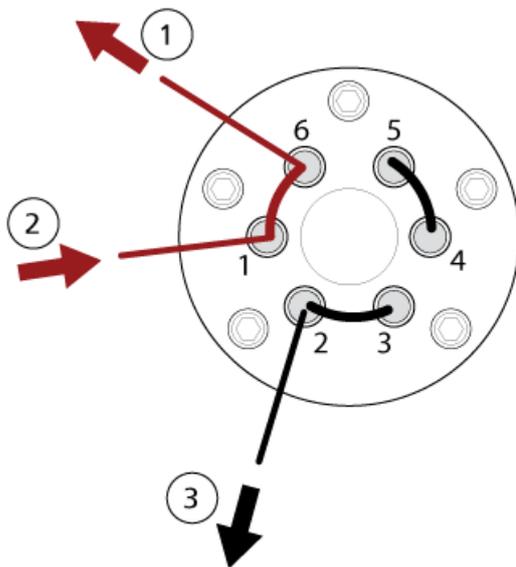


Abbildung 4-8 Umleitventil – Umleitmodus Position B



Position	Beschreibung
1	Zum Massenspektrometer
2	Von Säule
3	Abfallauslass

Hardware-Profile

Ein Hardware-Profil teilt der Software mit, wie das Massenspektrometer und die Geräte konfiguriert und an den Computer angeschlossen sind. Es können mehrere Hardware-Profile eingerichtet werden, doch nur ein Profil kann zu gegebener Zeit aktiv sein.

Wenn ein Hardware-Profil im Hardware Configuration Editor erstellt wird, müssen die Peripheriegeräte so konfiguriert werden, dass die Software mit ihnen kommunizieren kann. Das Konfigurieren der Peripheriegeräte verlangt zwei Verfahren: die Einrichtung der technischen Verbindungen und die Konfiguration der Software, damit sie mit den Peripheriegeräten kommunizieren kann. Wenn die Software installiert ist, wird auch der erforderliche Treiber für jedes Peripheriegerät installiert. Nachdem die Peripheriegeräte technisch mit dem Computer verbunden sind, werden die entsprechenden Konfigurations-Informationen eingerichtet.

Jedes Hardware-Profil muss ein Massenspektrometer enthalten. Vor dem Erstellen einer Akquisitionsmethode müssen Sie sicherstellen, dass alle in dem Verfahren zu verwendenden Geräte, einschließlich der Spritzenpumpe, im Hardware-Profil enthalten sind. Die im aktiven Hardwareprofil konfigurierten und im Dialogfeld „Add/Remove Device Method“ ausgewählten Geräte erscheinen im Teilfenster „Acquisition Method“ als Symbole. Nur Peripheriegeräte, die im aktiven Hardware-Profil enthalten sind, können zur Erstellung von Akquisitionsmethoden verwendet werden.

Jedes Hardware-Profil muss ein Massenspektrometer enthalten. Vor dem Erstellen einer Akquisitionsmethode müssen Sie sicherstellen, dass alle in dem Verfahren verwendenden Geräte im Hardware-Profil enthalten sind. Die im aktiven Hardwareprofil konfigurierten und im Dialogfeld „Add/Remove Device Method“ ausgewählten Geräte erscheinen im Teilfenster „Acquisition Method“ als Symbole. Nur Peripheriegeräte, die im aktiven Hardware-Profil enthalten sind, können zur Erstellung von Akquisitionsmethoden verwendet werden.

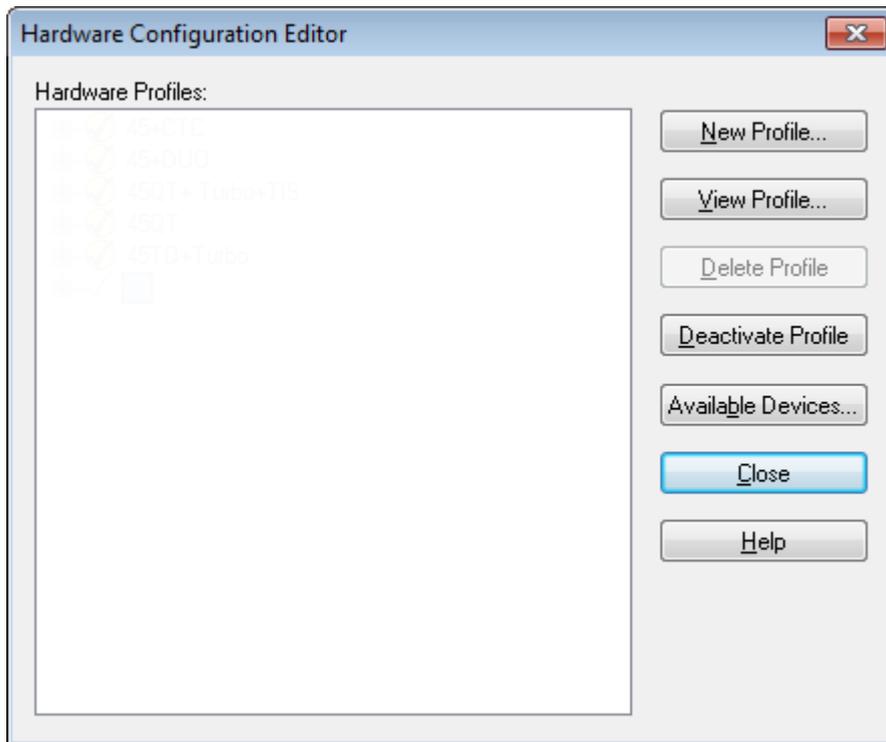
Weitere Informationen über das Einrichten der physischen Verbindungen mit den Geräten finden Sie im *Handbuch für die Einrichtung von Peripheriegeräten*. Eine Liste der unterstützten Geräte finden Sie im *Software-Installationshandbuch* der Analyst[®]-Software.

Erstellen eines Hardware-Profiles

Der Benutzer kann mehrere Hardware-Profile erstellen, aber nur ein Profil kann zu einer gegebenen Zeit aktiv sein.

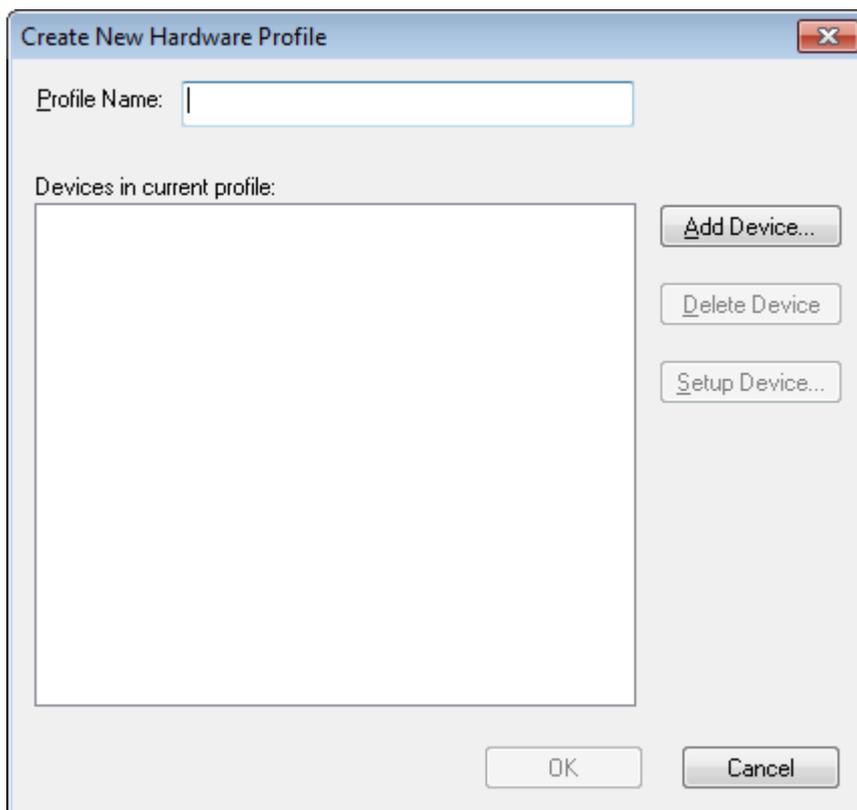
1. Doppelklicken Sie auf der Navigationsleiste unter **Configure** auf **Hardware Configuration**.

Abbildung 5-1 Dialog „Hardware Configuration Editor“



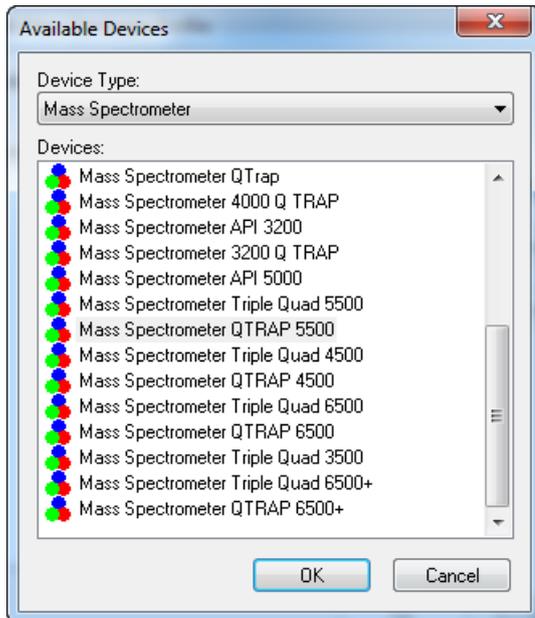
2. Im Dialogfeld „Hardware Configuration Editor“ klicken Sie auf **New Profile**.

Abbildung 5-2 Dialog „Create New Hardware Profile“



3. Geben Sie einen Namen in das Feld **Profile Name** ein.
4. Klicken Sie auf **Add Device**.

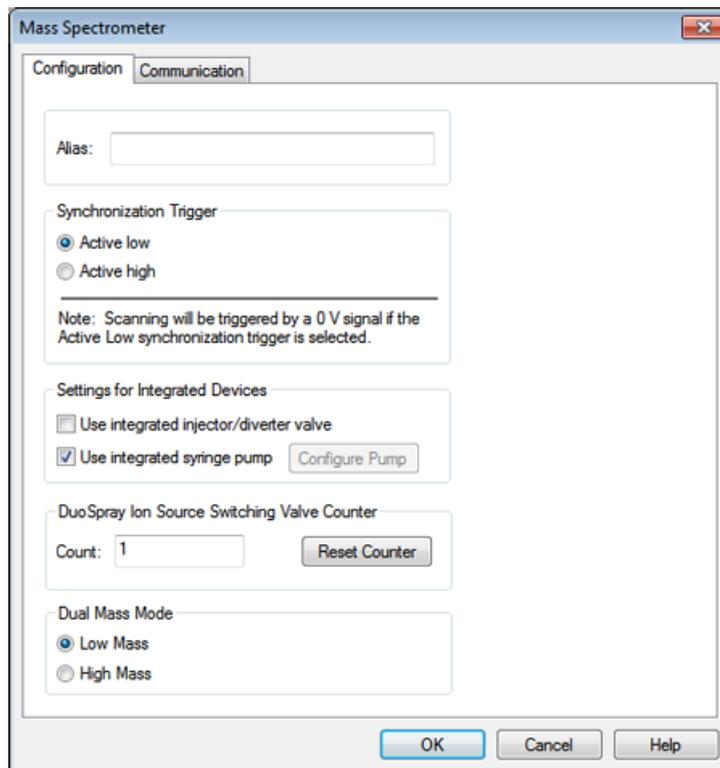
Abbildung 5-3 Dialog „Available Devices“



Im Dialogfeld Available Devices ist der voreingestellte Wert im Feld **Device Type Mass Spectrometer**.

5. In der **Devices**-Liste wählen Sie das Massenspektrometer und klicken dann auf **OK**, um zum Dialog Create New Hardware Profile zurückzukehren.
6. Klicken Sie auf **Setup Device**.
7. Auf der Registerkarte **Configuration** im Abschnitt **Dual Mass Mode** wählen Sie eine der folgenden zwei Optionen:
 - **Low Mass:** Wählen Sie diese Option, wenn Sie in einen Betriebsmodus mit begrenztem Massenbereich und hoher Empfindlichkeit wünschen. Der maximale Massenbereich beträgt 50 bis 1250 Da für LIT-Scans (lineare Ionenfalle) und 5 bis 1000 Da für Quadrupol-Scans.
 - **High Mass:** Wählen Sie diese Option, wenn Sie einen Betriebsmodus mit erweitertem Massenbereich wünschen. Der maximale Massenbereich beträgt 50 bis 2000 Da für LIT-Scans und 5 bis 2000 Da für Quadrupol-Scans.
8. (Optional) Um Massenspektrometer zu konfigurieren, die die integrierte Spritzenpumpe verwenden, wählen Sie in der Registerkarte **Configuration** das Kontrollkästchen **Use integrated syringe pump**.

Abbildung 5-4 Registerkarte „Configuration“ mit konfigurierter Spritzenpumpe



9. (Optional) Um das Massenspektrometer für das Umleitventil zu konfigurieren, wählen Sie in der Registerkarte **Configuration** **Use integrated injector/diverter valve**.
10. (Optional) Wählen Sie zusätzliche Funktionen auf der Registerkarte **Configuration** und **Communication** je nach Bedarf aus.
11. Klicken Sie auf **OK** um zum Dialogfeld Create New Hardware Profile zurückzukehren.
12. Klicken Sie auf **Add Device** und fügen Sie dann die jeweiligen Geräte hin zu, die mit dem Massenspektrometer verwendet werden, und nehmen Sie die entsprechenden Einstellungen vor. Siehe [Geräte einem Hardware-Profil hinzufügen auf Seite 62](#).
13. Klicken Sie im Dialogfeld **Create New Hardware Profile** auf **OK**.
14. Klicken Sie auf das Hardware-Profil, das im **Hardware Configuration Editor**, aktiviert werden soll.
15. Klicken Sie auf **Activate Profile**.

Das Häkchen wird grün. Wird ein rotes X angezeigt, dann besteht ein Problem mit der Hardware-Profil-Aktivierung.

Tipp! Ein Hardwareprofil muss vor der Aktivierung eines anderen Profils nicht deaktiviert werden. Klicken Sie auf ein Hardware-Profil und klicken Sie dann auf **Activate Profile**. Das andere Profil wird automatisch deaktiviert.

16. Klicken Sie auf **Close**.

Geräte einem Hardware-Profil hinzufügen

Geräte müssen so konfiguriert werden, dass die Software mit ihnen kommunizieren kann. Wenn die Software installiert ist, wird auch der erforderliche Treiber für jedes Gerät installiert. Konfigurieren Sie die Geräte nachdem sie physisch mit dem Computer verbunden wurden.

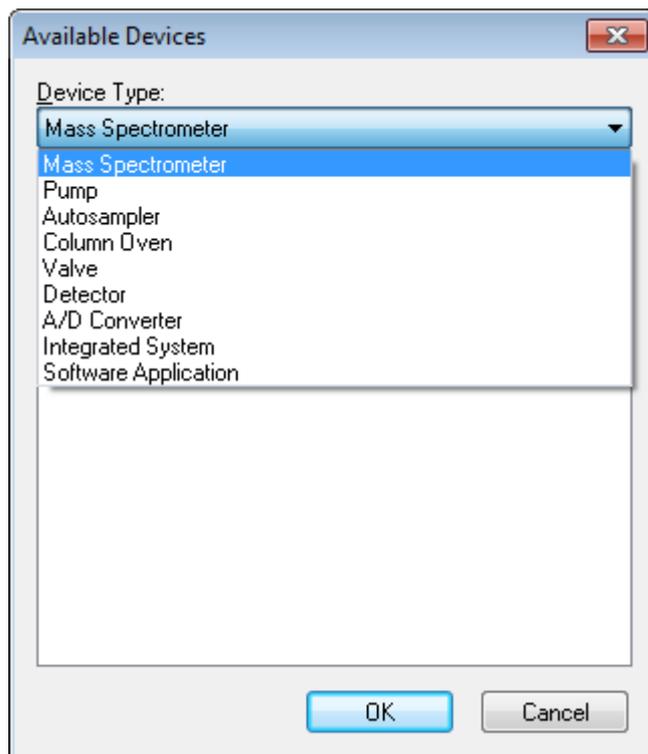
Nur die im aktiven Hardware-Profil konfigurierten und im Dialogfeld Add/Remove Device Method ausgewählten Geräte erscheinen im Fenster Acquisition Method Browser als Symbole.

1. Öffnen Sie den Hardware Configuration Editor.
2. In der Liste **Hardware Profile** deaktivieren Sie das Hardware-Profil. Bitte beachten Sie, dass Hardware-Profile nur in deaktivierter Form bearbeitet werden können.
3. Klicken Sie auf **Edit Profile**.
4. Klicken Sie auf **Add Device**.

Hinweis: Denken Sie daran, ein Massenspektrometer hinzuzufügen. Weitere Informationen erhalten Sie unter [Erstellen eines Hardware-Profiles auf Seite 57](#).

5. Im Dialogfeld Available Devices wählen Sie das Gerät aus der Liste **Device Type** und klicken dann auf **OK**.

Abbildung 5-5 Dialog „Available Devices“



6. Klicken Sie auf **OK**.

- Wählen Sie das Gerät aus der Liste **Devices** und klicken dann auf **OK**.
- Klicken Sie auf **Setup Device**.

Ein Dialogfeld mit Konfigurationswerten für das Gerät wird geöffnet.

- (Optional) Geben Sie für das Gerät einen Namen oder Kennung in der Registerkarte Communication im Feld **Alias** ein.

Hinweis: Stellen Sie für Geräte mit serieller Kommunikation sicher, dass die ausgewählte serielle Schnittstelle mit dem seriellen Port übereinstimmt, an dem das Gerät physisch angeschlossen ist. Wenn das serielle Verlängerungskabel verwendet wird, dann ist die im Profil ausgewählte Zahl die Nummer auf dem Kabel plus zwei.

Hinweis: Das Feld **Alias** kann auch als Feld **Name** bezeichnet werden und kann auf einer anderen Registerkarte unter **Alias** zu finden sein.

- Wenn das Gerät einen **seriellen Anschluss** als Kommunikationsschnittstelle verwendet, wählen Sie den COM-Port, an den das Gerät angeschlossen ist, in der Liste **COM Port Number** aus.
- Verwendet das Gerät **Ethernet** als Kommunikationsschnittstelle, geben Sie die durch den Administrator zugewiesene **IP Address** des Gerätes ein oder verwenden den entsprechenden **Host Name** als Adresse.
- Verwendet das Gerät eine **GPIB Board** als Kommunikationsschnittstelle, dann ändern Sie die Einstellungen für die GPIB-Karte nicht.

Die übrigen für das Gerät voreingestellten Werte sind wahrscheinlich passend. Ändern Sie sie nicht. Für Informationen über die Registerkarten Configuration und Communication siehe Help.

- Um die voreingestellten Werte für das Gerät wiederherzustellen, klicken Sie in der Registerkarte Kommunikation auf **Set Defaults**.
- Um die Konfiguration zu speichern, klicken Sie auf **OK**.
- Wiederholen Sie die Schritte 4 bis 11 für jedes Gerät.
- Klicken Sie im Dialogfeld Create New Hardware Profile auf **OK**.
- Zum aktivieren des Hardware-Profiles klicken Sie im Dialogfeld Hardware Configuration Editor auf das Hardware-Profil.
- Klicken Sie auf **Activate Profile**.

Das Häkchen wird grün. Wird ein rotes X angezeigt, dann gibt es ein Problem mit der Hardware-Profil-Aktivierung. Weitere Informationen erhalten Sie unter [Fehlerbehebung bei der Hardware-Profil-Aktivierung auf Seite 64](#).

Tipp! Ein aktives Hardware-Profil muss vor der Aktivierung eines anderen Profils nicht deaktiviert werden. Klicken Sie auf ein inaktives Hardware-Profil und klicken Sie dann auf **Activate Profile**. Das andere Profil wird automatisch deaktiviert.

- Klicken Sie auf **Close**.

Fehlerbehebung bei der Hardware-Profil-Aktivierung

Wenn ein Hardware-Profil nicht aktiviert werden kann, öffnet sich ein Dialogfeld und zeigt an, bei welchem Geräte im Profil ein Fehler aufgetreten ist. Ein Gerät kann möglicherweise aufgrund von Kommunikationsfehlern nicht aktiviert werden.

1. Lesen Sie die generierte Fehlermeldung. Abhängig von der Nachricht liegt möglicherweise ein Problem mit einem Gerät vor oder damit, wie die Kommunikation eingestellt ist.
2. Stellen Sie sicher, dass das Gerät mit Strom versorgt wird und eingeschaltet ist.
3. Überprüfen Sie, ob der dem Gerät zugeordnete COM-Port oder die IP-Adresse korrekt ist.

Tipp! Auf Computern mit zwei integrierten serielle Ports ist der erste Port der seriellen Schnittstellen-Steckkarte normalerweise COM3, obwohl das Kabel P1 anzeigt.

4. Stellen Sie sicher, dass die Kommunikations-Einstellungen am Gerät (z. B. DIP-Schalter-Einstellungen) korrekt eingestellt sind und mit den Einstellungen in der Registerkarte Communication übereinstimmen.
5. Schalten Sie das Gerät aus.
6. Warten Sie 10 Sekunden.
7. Schalten Sie das Gerät ein.

Warten Sie, bis alle beim Einschalten des Gerätes stattfindenden Prozesse abgeschlossen sind, bevor Sie versuchen, das Hardware-Profil wieder zu aktivieren. Manche Geräte benötigen 30 Sekunden oder mehr, um alle beim Einschalten des Gerätes ablaufenden Prozesse auszuführen.

8. Hardwareprofil aktivieren.
9. Wenn das Problem weiterhin besteht, löschen Sie das fehlerhafte Profil und erstellen Sie danach ein neues.
10. Wenn das Problem weiterhin besteht, wenden Sie sich an den technischen Support.

Projekte und Teilprojekte

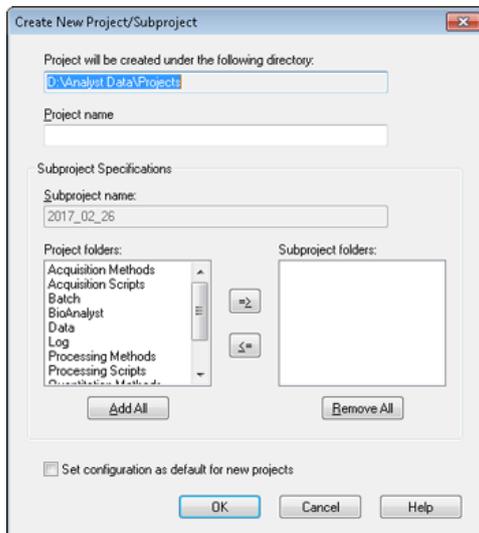
Bevor Sie ein Experiment beginnen, entscheiden Sie sich, wo die Dateien für den Versuch gespeichert werden sollen. Verwenden Sie Projekte und Teilprojekte für jedes Experiment, um die Daten besser zu verwalten und die Ergebnisse miteinander vergleichen zu können. Verwenden Sie zum Beispiel Teilprojekte, um die Ergebnisse für bestimmte Daten zu speichern.

Erstellen von Projekten und Teilprojekten

Um eine Teilprojekt-Struktur in einem Projekt zu verwenden, erstellen Sie die Teilprojekt-Struktur, wenn das Projekt erstellt wird.

1. Klicken Sie auf **Tools > Project > Create Project**.

Abbildung 5-6 Dialogfeld „Create new Project/Subproject“



Hinweis: Es kann kein neues Teilprojekt für ein Projekt angelegt werden, das nicht bereits am Anfang mit einem Teilprojekt erstellt wurde.

2. Geben Sie im Feld **Project name** einen Projektnamen ein.
3. (Optional) Um Teilprojekte zu verwenden, wählen Sie den gewünschten Ordner und verschieben ihn mit den Pfeiltasten zur Liste **Subproject folders**.
4. (Falls Teilprojekte verwendet werden) Geben Sie im Feld **Subproject name** einen Namen für das erste Teilprojekt ein oder verwenden Sie vorhandene Daten.
5. (Optional) Um diese Projekt- und Teilprojekt-Ordner-Organisation für alle neuen Projekte zu verwenden, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Set configuration as default for new projects**.

Alle neuen Projekte werden mit dieser Ordner-Konfiguration erstellt.

6. Klicken Sie auf **OK**.

Teilprojekt erstellen

Teilprojekte können nur in einem Projekt erstellt werden, das eine bestehende Teilprojekt-Struktur besitzt.

1. Wählen Sie das Projekt aus der Symbolleiste **Project** in der Liste **Project** aus.
2. Klicken Sie auf **Tools > Project > Create Subproject**.
3. Geben Sie im Feld **Subproject name** einen Namen für das Teilprojekt ein oder verwenden Sie die existierenden Daten.
4. Klicken Sie auf **OK**.

Teilprojekte kopieren

Ein Teilprojekt kann aus einem anderen Projekt kopiert werden, das bestehende Teilprojekte besitzt. Wenn die kopierten Teilprojekte Ordner besitzen, die ebenfalls im Projekt-Ordner enthalten sind, verwendet die Software die Ordner auf Projektebene.

1. Klicken Sie auf **Tools > Project > Copy Subproject**.

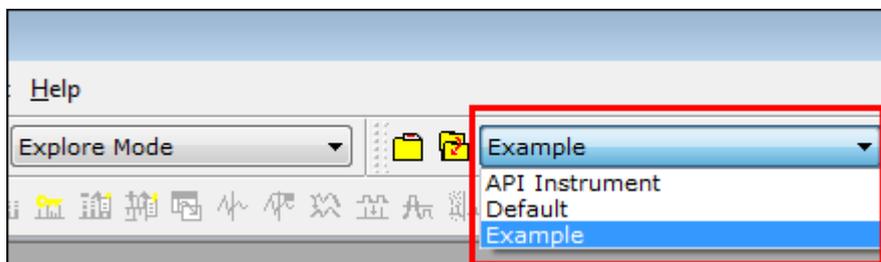
Der Dialog Copy Subproject wird angezeigt.

2. Klicken Sie auf **Browse**, um zur gewünschten Teilprojekt-Quelle zu navigieren.
3. Klicken Sie auf **OK**.
4. Wählen Sie das Teilprojekt in der Liste **Source Subproject** aus.
5. Klicken Sie auf **Browse**, um zum gewünschten Ziel zu navigieren.
6. Geben Sie den Namen im Feld **Target Subproject** ein.
7. Klicken Sie auf **OK**.
8. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
 - Um alle Ordner und Dateien aus der **Subproject Source** in die **Subproject Destination** zu kopieren, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Copy Contents**.
 - Um nur die Ordner in der gleichen Struktur in die **Subproject Destination** zu kopieren, stellen Sie sicher, dass das Kontrollkästchen **Copy Contents** vor dem Kopieren deaktiviert ist.
9. Klicken Sie auf **Copy**.

Wechseln zwischen Projekten und Teilprojekten

- Klicken Sie in der Software-Funktionsleiste in der Projekt-Liste auf das gewünschte Projekt oder Teilprojekt.

Abbildung 5-7 Projektliste



Die Projektliste in dieser Abbildung zeigt die Ordner **API Instrument**, **Default** und **Example** an.

Installierte Projekt-Ordner

Drei Projekt-Ordner werden mit der Software installiert: **API Instrument**, **Default** und **Example**.

API Instrument Ordner

Der Ordner „API Instrument“ ist eindeutig und für die korrekte Funktion des Massenspektrometers sehr wichtig. Der Ordner „API Instrument“ enthält Informationen, die für das Tuning und die Kalibrierung des Massenspektrometers erforderlich sind. Zu diesen Informationen gehören Parametereinstellungsdateien, Referenzdateien, Instrumentendateien mit Informationen über Kalibrierung und Auflösung und die beim automatischem Tuning verwendeten Aufnahmefethoden. Der API-Instrumenten-Ordner enthält auch Dateien über manuelle Tuningläufe, die über den Button Start anstatt dem Button Acquire durchgeführt wurden. Diese Dateien werden automatisch in den API-Instrumenten-Ordner im Tuning-Cache-Ordner gespeichert und mit dem Erstellungsdatum und der Erstellungszeit benannt. Der Tuning Cache wird automatisch in regelmäßigen Abständen gelöscht.

Default Ordner

Der Ordner „Default“ enthält Ordner, die in neuen Projekten enthalten sind, und dient als Vorlage für neue Projekte.

Example Ordner

Der Beispielordner enthält beispielhafte Methoden und Dateien. Benutzer können mit den Beispieldatendateien die Arbeit mit Explore Mode oder dem Quantitate üben. Die Beispiel-Dateien sind in Unterordnern nach Massenspektrometer-Typ und Einsatzbereich sortiert.

Sichern des Ordners „API Instrument“

Sichern Sie den Ordner API Instrument regelmäßig und nachdem die routinemäßigen Wartungsarbeiten durchgeführt worden sind.

- Kopieren Sie den API Instrument-Ordner, fügen ihn an einer anderen Stelle, vorzugsweise in einem anderen Computer ein und benennen den Ordner um. Verwenden Sie, wenn Sie den Ordner umbenennen, das Datum und eine Massenspektrometer-Referenz, wenn Sie mehr als ein Massenspektrometer haben. Beispiel: API Instrument_ *instrument mode*/3_010107

Den Ordner „API Instrument“ wiederherstellen

Sichern Sie den Ordner **API Instrument** regelmäßig und nachdem die routinemäßigen Wartungsarbeiten durchgeführt worden sind. Um den Ordner API Instrument wiederherzustellen, gehen Sie wie folgt vor:

1. Benennen Sie den aktuellen Ordner **API Instrument** um.
2. Kopieren Sie den Sicherungsordner in den Ordner **Projects**.
3. Ändern Sie den Namen des Sicherungsordners in **API Instrument**.

Führen Sie die Option **Verify instrument performance** wöchentlich oder nach der Reinigung des Massenspektrometers durch, um sicherzustellen, dass das System ordnungsgemäß funktioniert. Im Allgemeinen hält die Kalibrierung und Auflösung für Quadrupol-Systeme für drei bis sechs Monate, es sei denn, das System verliert Vakuum. Bei QTRAP[®]-Systemen sollte die Auflösung ebenfalls für drei bis sechs Monate Bestand haben, aber die Kalibrierung sollte in etwa monatlich durchgeführt werden. Wenn das System Vakuum verliert, dann überprüfen Sie die Kalibrierung und Auflösung, bevor Sie das System verwenden. Weitere Informationen über Tuning und Kalibrierung finden Sie im *Handbuch für fortgeschrittene Benutzer* und im *Anleitung zum manuellen Abstimmen*.

Tipp! Führen Sie die Wartungsaufgaben regelmäßig durch, um sicherzustellen, dass das Massenspektrometer optimal funktioniert.

Voraussetzungen

- Das Spray ist stabil und die richtige Tuning-Lösung wird verwendet.
- Es ist ein Drucker konfiguriert.

Erforderliche Materialien

- Tuning-Lösungen, die im Standard-Chemie-Testset mit dem System geliefert werden. Bei Bedarf kann ein neues Kit bei SCIEX bestellt werden.
- 5 mL, 1 mL und 250 µL serielle gasdichte Injektionspritzen.
- Rote PEEK-Probenkapillare.

Instrumentenleistung überprüfen

Im Folgenden wird beschrieben, wie die Leistung des Massenspektrometers überprüft oder angepasst wird. Weitere Informationen über die Verwendung der Instrument-Performance-Optionen finden Sie unter Hilfe. Siehe [Ionen und Lösungen kalibrieren](#).

1. In der Navigationsleiste unter **Tune and Calibrate**, doppelklicken Sie auf **Manual Tuning**.
2. Starten Sie die Spritzenpumpe und führen Sie dann eine Kalibrierungsmethode durch. Bestätigen Sie, dass das Total Ion Chromatogram (TIC) stabil ist und dass die relevanten Peaks im Spektrum vorhanden sind.
3. Doppelklicken Sie in der Navigationsleiste unter **Tune and Calibrate**, auf **Instrument Optimization**.

Das Dialogfeld **Instrument Optimization** wird angezeigt.

4. Klicken Sie auf **Verify instrument performance**.

5. Klicken Sie auf **Next**.
6. Klicken Sie auf **Approved Tuning**.
7. Klicken Sie auf **Next**.
8. Wählen Sie aus der Liste eine **Tuning Solution**.

Abhängig von der gewählten Lösung sind verschiedene Modi zur Verfügung:

- a. Klicken Sie auf eine Polarität.
 - b. Falls vorhanden, klicken Sie auf **Q1** und **Q3** im **Quad**-Abschnitt.
 - c. Falls vorhanden, klicken Sie auf die gewünschten Scan-Geschwindigkeiten.
 - d. Falls vorhanden, klicken Sie auf die gewünschten Scan-Geschwindigkeiten im **LIT**-Abschnitt.
 - e. Falls vorhanden, klicken Sie auf **Excitation** im Abschnitt **MS/MS/MS**.
9. Klicken Sie auf **Next**.
 10. Wenn die Seite **Select a mode** geöffnet wird, wählen Sie **Automatic**.
 11. Klicken Sie auf **Next**.
 12. Klicken Sie auf **GO**.

Das Fenster Verifying or Adjusting Performance wird geöffnet. Nachdem der Vorgang abgeschlossen ist, öffnet sich die Results Summary. Weitere Informationen erhalten Sie unter Hilfe.

13. Falls vorhanden; dies ist abhängig von den gewählten Optionen. Ändern Sie auf Anforderung die Lösungen für verschiedene Scantypen und Polaritäten.

Über den Dialog „Verifying or Adjusting Performance“

Die obere linke Ecke zeigt den Teil des Instruments, der optimiert wird.

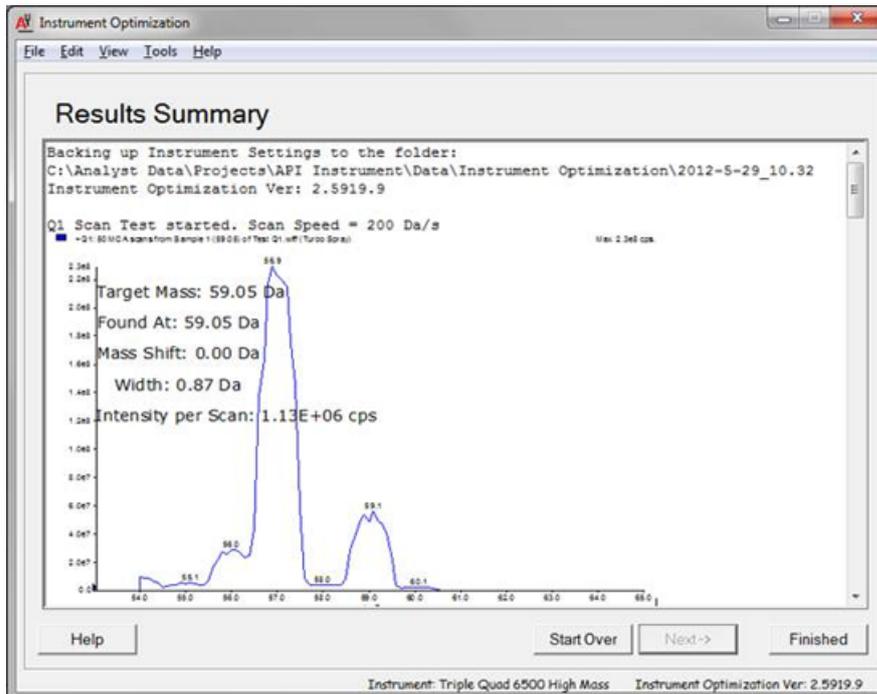
Das Diagramm „Current Spectrum“ zeigt das Spektrum des aktuellen Scans, den optimalen von der Software ausgewählten Scan oder den Scan mit dem aktuellen Parameterwert, wenn die Softwareergebnisse im interaktiven Modus betrachtet werden.

Die Instrument Optimization Decision Plots im rechten oberen Diagramm zeigen die Intensitätskurven im Vergleich zu den Spannungskurven der Parameter dynamisch an, die derzeit optimiert werden.

Zusammenfassung der Ergebnisse

Die Zusammenfassung der Ergebnisse ist eine Aufzeichnung aller Änderungen der Geräteeinstellungen, die vom Instrument Optimization-Assistenten vorgenommen wurden.

Abbildung 6-1 Zusammenfassung der Ergebnisse



Die Results Summary enthält ebenfalls die Position der Datendateien und Sicherungskopien der Geräteeinstellungen sowie Schritt-für-Schritt-Änderungen und Ergebnisse während der Optimierung.

Darüber hinaus zeigt die „Results Summary“ einen Prüfbericht an. Dieser Bericht enthält eine Momentaufnahme des Massenspektrums für jede relevante Masse für die geprüften Scan-Modi. Das Spektrum wird mit der Ziel-Masse, wo die Masse gefunden wurde, Massenverschiebung, Peakbreite und Peak-Intensität gekennzeichnet. Das Spektrum kann als visuelle Aufzeichnung der Peakform oder Leistung eines Scan-Modus verwendet werden. Eine zusammenfassende Tabelle der Ergebnisse folgt der Spektren.

Die Zusammenfassung der Ergebnisse wird automatisch im folgenden Pfad gespeichert: <Laufwerk>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Data\Instrument Optimization\jjjj-mm-tt\results.doc, wobei *jjjj-mm-tt* das Datum ist, an dem der Bericht erstellt wurde. Benutzer können die „Results Summary“ ausdrucken oder eine zuvor gespeicherte „Results Summary“ öffnen.

Die Benutzer lernen Folgendes:

- Automatisch für den Analyten unter Verwendung des Assistenten Compound Optimization optimieren.
- Wählen Sie zwischen Infusion und Fließinjektionsanalyse (FIA).
- Optimieren von Parametern:
 - Wenn die Infusionsanalyse gewählt wurde, verwenden Sie eine Infusionsmethode, um substanzspezifische Parameter zu optimieren.
 - Wenn die FIA-Analyse gewählt wurde, verwenden Sie FIA, um substanz- und ionenquellspezifische Parameter zu optimieren.

In diesem Abschnitt werden Minoxidil, Tolbutamid, Reserpin und Rescinnamin als Beispiel-Verbindungen verwendet. Es können andere verfügbare Verbindungen verwendet werden; in diesem Fall müssen die Methoden jedoch entsprechend angepasst werden.

Der Benutzer kann die Methoden auch manuell optimieren.

Voraussetzungen

- Das Massenspektrometer ist getuned (angepasst) und optimiert.
- (Für FIA-Analyse) Eine Akquisitionsmethodenvorlage ist verfügbar.
- (Für FIA-Analyse) Eine LC-Pumpe und ein Autosampler sind verbunden und im Hardware-Profil konfiguriert.
- Wenn das System über eine integrierte Spritzenpumpe verfügt, wird eine Spritzenpumpe im Hardware-Profil konfiguriert.
- Alle erforderlichen Peripheriegeräte, einschließlich der LC-Komponenten, falls benötigt, werden im Hardware-Profil konfiguriert.

Automatische Optimierung

Erforderliche Materialien

- Mischung von vier Komponenten (50 ng/ml), bestehend aus Reserpin, Minoxidil, Tolbutamid und Rescinnamin. Die Lösung kann für Infusionen und FIA eingesetzt werden. Die Konzentration ist systemabhängig. Verwenden Sie einer Lösung aus 49,9% Acetonitril, mit 50% VE-Wasser und 0,1% Ameisensäure als Verdünnungsmittel.
- Eine Spritze, vorzugsweise eine 1,0-ml-Spritze.
- (Für FIA-Analyse) Mobile Phase: 1:1 Acetonitril : Wasser + 2 ml Ammoniumacetat + 0,1 % Ameisensäure.

Hinweis: Benutzer können basierend auf den experimentellen Eigenschaften der Verbindung eine andere mobile Phase auswählen.

- LC-Pumpe und Autosampler
- (Für FIA-Analyse) Autosampler-Fläschchen.

Tabelle 7-1 Verbindungen und Molekulargewichte

Verbindung	<i>m/z</i>
Minoxidil	210,2
Tolbutamid	271,3
Reserpin	609,4
Rescinnamin	635,4

Tabelle 7-2 Anhaltswerte für Startkonzentrationen

System	Konzentration
QTRAP® 6500-System	10 ng/ml
SCIEX Triple Quad™ 6500-System	10 ng/ml
QTRAP® 6500 ⁺ -System	10 ng/ml
SCIEX Triple Quad™ 6500 ⁺ -System	10 ng/ml

Über die automatische Optimierung

Die automatische Optimierung prüft zunächst auf das Vorliegen der Verbindungen. Die Spannungen der verschiedenen Ionenpfad-Parameter werden allmählich erhöht oder verringert, um die maximale Signalstärke (Q1 Scan) für jedes Ion zu bestimmen. Eine Textdatei wird erzeugt und während dem Optimierungsprozess angezeigt. Diese Datei speichert die verschiedenen Experimente und die optimalen Werte für die einzelnen Parameter. Ein Ordner mit allen durchgeführten Experimenten wird ebenfalls erzeugt und kann im Explore-Modus

angezeigt werden. Für jedes durchgeführte Experiment wird eine Erfassungsmethode erzeugt und im Ordner „Acquisition Method“ gespeichert.

Während des Optimierungsprozesses wählen Sie, wie das Vorläufer-Ion und die entsprechenden Produkt-Ionen ausgewählt werden.

Arten von Probeninjektionen

Infusion

Infusion ist das kontinuierliche Fließen einer Probe in die Ionenquelle bei niedrigen Flussgeschwindigkeit mittels einer Spritzenpumpe. Während dem Infusions-Optimierungsprozess können Vorläufer- und Produkt-Ionen von der Software ausgewählt und entsprechend dem Declustering Potential, der Kollisionsenergie und dem Kollisionszellen-Austrittspotenzial optimiert werden. Die Spannungen der verschiedenen Ionenpfad-Parameter werden allmählich erhöht oder verringert, um die maximale Signalstärke für Vorläufer- und Produkt-Ionen zu bestimmen.

Verwenden Sie die Infusionsoptimierung zur Optimierung von substanzspezifischen Parametern nur bei Flussgeschwindigkeiten, die viel geringer sind als bei LC-MS/MS-Analysen.

FIA

FIA ist die Injektion einer Probe über den Autosampler in das Massenspektrometer bei der Flüssigkeitschromatographie. Während dem FIA-Optimierungsprozess werden mehrere Probeninjektionen für verschiedene ionenquellenspezifische oder substanzspezifische Parameter-Typen durchgeführt und zwischen den Injektionen verändert. FIA-Verbindungsoptimierung optimiert Parameter durch aufeinanderfolgende, schleifenförmige Experimente. Zuerst wird ein substanzspezifischer Parameter optimiert und dann der nächste substanzspezifische Parameter. FIA optimiert ionenquellenspezifische Parameter, indem eine Injektion für jeden Wert vorgenommen wird.

Verbindungsparameter müssen unter Verwendung von mindestens zwei weiteren FIA-Zyklen eingegrenzt werden. Mit FIA-Optimierung optimieren Sie sowohl substanzspezifische wie auch ionenquellenspezifische Parameter über LC bei höheren Flussgeschwindigkeiten.

Tabelle 7-3 Unterschiede zwischen Probeninjektionsmethoden

Methode	Erforderliche Geräte	Parameters	Typischer Durchflussmengenbereich
Infusion	Spritzenpumpe	Verbindungsabhängig	5 bis 25 µl/min
FIA	LC-Pumpe und Autosampler	Ionenquellen- und verbindungsabhängig	25 µl/min bis 1000 µl/min

Während der Optimierung wird eine Textdatei erzeugt und dann angezeigt. Diese Datei speichert die verschiedenen Experimente und die optimalen Werte für die einzelnen Parameter. Ein Ordner mit allen Dateien wird ebenfalls erzeugt. Für jedes durchgeführte Experiment wird ebenfalls eine Erfassungsmethode erzeugt und im Ordner „Acquisition Method“ gespeichert.

Automatisch für einen Analyten mit Infusion optimieren

In diesem Abschnitt lernen Benutzer, wie sie eine automatische MS/MS-Optimierung mit Infusion mit einem bekannten Vorläufer-Ion und einem unbekanntem Produkt-Ion durchführen.

Bestätigen Sie, dass eine Verbindung vorhanden ist

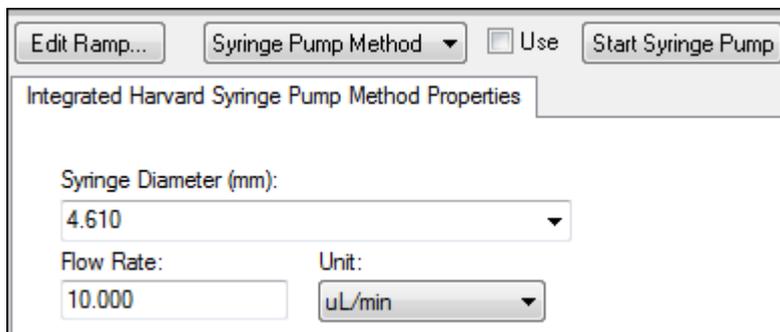
Bestätigen Sie, dass relevante Verbindungen vorhanden sind, bevor Sie mit der automatischen Optimierung fortfahren.

1. Erstellen Sie In der Analyst[®]-Software ein Projekt.
2. Hardwareprofil aktivieren.
3. Infundieren Sie die Verbindung in Lösung mit einer Geschwindigkeit von 5 µl/min bis 10 µl/min.
4. Doppelklicken Sie in der Navigationsleiste unter **Tune and Calibrate**, auf **Manual Tuning**.
5. Im Methoden-Listenfeld klicken Sie auf **Syringe Pump Method**.
6. Geben Sie auf der Registerkarte Syringe Pump Method Properties die entsprechenden Parameterwerte ein. Siehe [Tabelle 7-4](#).

Tabelle 7-4 Registerkarte „Syringe Pump Method Properties“

Parameter	Typische Werte
Spritzendurchmesser	Spritzenabhängig; 1,0 ml Spritze ist gleich 4,610 mm
Volumenstrom	10
Einheit	µl/min

Abbildung 7-1 Registerkarte „Syringe Pump Method Properties“



7. Klicken Sie auf **Start Syringe Pump**.
8. Aus der Methodenliste wählen Sie **MS Method**.
9. Geben Sie auf der Registerkarte MS die entsprechenden Parameterwerte ein. Siehe [Tabelle 7-5](#).

Tabelle 7-5 MS Registerkarte

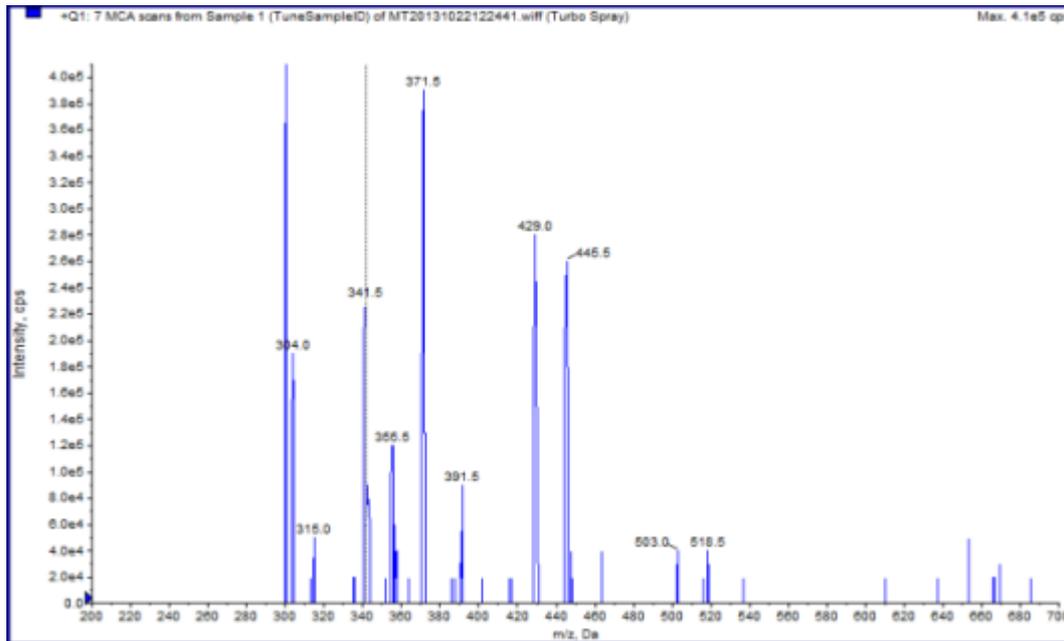
Parameter	Wert
Scan-Typ	Q1 MS (Q1)
Start (Da)	200
Stop (Da)	700
*Zeit (s) (falls vorhanden)	2,5
*Scan-Rate (Da/s) (falls vorhanden)	200
Dauer (Min.)	3
* Diese Felder sind instrumentabhängig.	

10. Klicken Sie auf **Start**.
11. Warten Sie, bis ein gleichmäßiger TIC auf der linken Seite und Peaks auf der rechten Seite angezeigt werden, und klicken Sie dann auf **Stop**.
12. Aktivieren Sie das **MCA** Kontrollkästchen.
13. Geben Sie **10** im Feld **Cycles** ein.
14. Klicken Sie auf **Start**.

Nach Abschluss der zehn Scans sollte das Diagramm die Massen der vier Verbindungen als Ionen darstellen.

Hinweis: Die Intensitäten der Verbindungen sollten viel höher sein als die kleinsten Peaks des Rauschens, aber nicht so hoch, dass man keine Rauschpeaks sehen kann. Im ersten Fall kann es sein, dass der Peak keine echte Verbindung ist. Im zweiten Fall kann die Konzentration so hoch sein, dass die Software nicht richtig optimieren kann.

Abbildung 7-2 Verbindungs-Ionen



Führen Sie eine automatische MS- und MS/MS-Optimierung mit Infusion mit einem bekannten Vorläufer-Ion und einem unbekanntem Produkt-Ion durch

Die automatische Optimierung für MS/MS-Analysen optimiert bestimmte verbindungsabhängige Parameter für einen oder mehrere MRM-Übergänge. Die Software findet das relevante Ion und optimiert die substanzspezifischen Parameter, um die maximale Empfindlichkeit für die Verbindung zu erhalten. Die Software fährt die Kollisionsenergie (CE) hoch und nimmt die intensivsten Fragmente auf, die die Auswahlkriterien aller Produkt-Ionen erfüllen.

Falls das anfängliche Q1-Scansignal zu hoch ist, versucht die Software die CEM zu reduzieren, um die Ionen im Detektorbereich zu halten. Wenn das Signal nach dem Reduzieren der CEM noch immer zu hoch ist, stoppt der Prozess und eine Fehlermeldung wird angezeigt. Verdünnen Sie die Lösung und starten Sie dann die Optimierung erneut. Achten Sie darauf, die Infusionsleitung zu säubern. Die Parameter der letzten quantitativen Optimierung wurden gespeichert.

1. Achten Sie darauf, dass die korrekte Konzentration der Lösung in die Spritzenpumpe gegeben wurde und dass die Spritzenpumpe gestartet wurde. Wenn eine integrierte Spritzenpumpe verfügbar ist und gestartet wurde, blinkt die Status-LED der Spritzenpumpe.

Die Spritzenpumpe muss im Fenster Manual Tune gestartet werden, bevor die Verbindungsoptimierung beginnt.

2. In der Navigationsleiste unter **Tune und Calibrate** doppelklicken Sie auf **Compound Optimization**.
3. Auf der Seite Instrument Settings im Abschnitt **Inlet** klicken Sie auf **Infusion**.

4. Klicken Sie auf **MS/MS Analysis** im Abschnitt **Mass Spectrometer**.
5. Klicken Sie auf **Next**.
6. Wählen Sie auf der Seite Ions to use in MS/MS Analysis die entsprechenden Parameterwerte aus. Siehe [Tabelle 7-6](#).

Tabelle 7-6 Auf der Seite „MS/MS Analysis“ zu verwendende Beispielparameter.

Parameter	Wert
MW Ion: Suchfenster	2,500
Auflösung	Einheit
Polarität	Positiv
Produktion	Automatische Auswahl
Auflösung	Einheit

Hinweis: Der Optimierungsalgorithmus sucht im angegebenen Suchfenster nach dem intensivsten Peak. Ist der intensivste Peak in diesem Fenster nicht die relevante Masse, optimiert die Software mit dem falschen Ion.

7. Klicken Sie auf **Criteria** neben der Option **Auto Select**.
8. Geben Sie im Dialogfeld Product Ion Auto Selection Criteria die entsprechenden Parameter ein. Siehe [Tabelle 7-7](#).

Tabelle 7-7 „Product Ion Auto Selection Criteria Dialog“ – Beispiel

Parameter	Parameter	Wert
Nach den intensivsten (Peaks)	3	Die Anzahl der zu optimierenden Peak-Fragmente. Der Algorithmus erzeugt ein Produkt-Ionen-Scan-Spektrum, während die Stoßenergie im MCA-Modus hochgefahren wird. In diesem Beispiel nimmt der Algorithmus die drei intensivsten Fragment-Ionen aus dem Spektrum und setzt die MS/MS-Optimierung dann nur noch mit diesen Fragmenten fort. Wählen Sie bei unbekanntem Verbindungen mehr Peaks aus.
Endgültige Methode erstellen mit (den intensivsten Peaks)	2	Die Zahl der Fragment-Ionen pro Vorläufer-Ion (Zielverbindung), die automatisch in die Erfassungsmethode einbezogen wird. Die angegebene Anzahl definiert die Anzahl der MRM-Übergänge, die in der Methode für jede Zielverbindung einbezogen werden. Die Reihenfolge der Präferenz beruht auf der Intensität des Fragment-Ions. Zwei ist ein besserer Ausgangswert als eins, weil in der Regel zwei Produkt-Ionen für die Quantifizierung erforderlich sind. Beginnen Sie mit drei, falls es mit einem der beiden besten ein Problem gibt. Gehen Sie zurück, und das dritte ist bereits bestimmt. Wählen Sie bei unbekanntem Verbindungen mehr Peaks zur Verwendung im Fall einer Störung aus.
Produkt-Ionen ausschliessen mit \pm (Da des Vorläufer-Ions m/z)	20,000	Der Da-Wert, der das Ausschluss-Fenster um das Vorläufer-Ion definiert, damit in dieses Fenster fallende Fragment-Ionen nicht für die MRM-Optimierung ausgewählt werden. Wenn der Benutzer beispielsweise ± 5 Da für ein Vorläufer-Ion eingibt, das ein m/z von 500 hat, werden sämtliche Fragment-Ionen innerhalb eines m/z von 495 bis 505 ausgeschlossen. Dies verhindert, dass das Vorläufer-Ion als Produkt-Ion optimiert wird.
Min. Masse für das Produkt-Ion (Da)	60,000	Die für die Optimierung zu berücksichtigende niedrigste Fragment-Masse. Mit dieser Option verengen oder erweitern Sie das Fenster der Fragment-Ionen, die aus der Vorläufer-Masse berücksichtigt werden sollen.
Schwellenwert für Produkt-Ionen (cps)	100,000	Mindestzahl der Zählungen, damit ein Produkt-Ion berücksichtigt wird.

9. Klicken Sie auf **OK**, um die Änderungen in den Auswahlkriterien zu speichern.

10. Klicken Sie auf **Next**.

11. Geben Sie im Dialogfeld Target Components die entsprechenden Parameterwerte ein. Siehe [Tabelle 7-8](#).

Hinweis: Der Name einer Verbindung muss für jede Verbindung oder jeden Übergang eindeutig sein.

Tabelle 7-8 Beispiel-Dialog-Parameter für Zielverbindungen

Zielverbindung	Feld	Wert
Reserpin	Verbindungsname	Reserpin
	MW (Da)*	609,3
	Anzahl Ladungen	1
Minoxidil	Verbindungsname	Minoxidil
	MW (Da)*	210,2
	Anzahl Ladungen	1
Tolbutamid	Verbindungsname	Tolbutamid
	MW (Da)*	271,3
	Anzahl Ladungen	1
Rescinnamin (IS)	Verbindungsname	Rescinnamin
	MW (Da)*	635,4
	Anzahl Ladungen	1
*Geben Sie die genaue Ionen-Masse ein.		

12. Klicken Sie auf **Finish**, um die Optimierung zu beginnen.

Der Bildschirm zeigt zwei Fenster, ein Textdatei-Fenster und ein Erfassungsfenster. Möglicherweise muss der Benutzer eines minimieren, um das andere zu sehen. Das ausgeführte Experiment wird auf der Oberseite des Erfassungsfensters angezeigt. Die x-Achse zeigt die Parameter, die für jedes Experiment optimiert werden. Das Textdatei-Fenster wird aktualisiert, sobald Ergebnisse generiert werden.

Nach Abschluss der Optimierung wird eine MRM-Erfassungsdatei erstellt und folgendermaßen benannt: [Verbindung]_QOpt_FinalMRM_Pos.dam, wobei [Verbindung] die erste Verbindung auf der Seite „Target Components“ ist.

Überprüfen der Optimierungsergebnisse

Am Ende der Optimierung werden die optimierten Parameter in einer Erfassungsmethode gespeichert. Alle beim Optimierungsprozess erzeugten .dam- und .wiff-Dateien werden im Ordner Acquisition Methods und in einem Unterordner des Data-Ordners des entsprechenden Projekts gespeichert. Der Name des erzeugten Unterordners verwendet den Namen der Verbindung und das Datum.

1. Nach Abschluss der Optimierung drucken Sie die Textdatei mit den optimierten Parametern jeder Verbindung.
2. Klicken Sie auf **File > Open** und wählen dann die Datei Reserpine_QOpt_FinalMRM.POS.dam.
3. Vergleichen Sie die Werte in der Textdatei mit den Werten in der .dam-Datei.

4. Überprüfen Sie den Inhalt der folgenden Ordner:

- **Data:** Prüfen Sie alle während der Optimierung ausgeführten Läufe. Vergleichen Sie eine .wiff-Datei mit dem optimierten Wert in der Methode oder den gedruckten Parametern.
- **Acquisition Method:** Die Datei Reserpine_QOpt_FinalMRM.POS.dam und andere während der Optimierung erstellte .dam-Dateien.
- **Log:** Während des Optimierungsprozesses angezeigte Report-Datei (.rtf).

Automatisch für einen Analyten mit Fließinjektionsanalyse (FIA) optimieren

Voraussetzungen

- Identifizieren Sie die Ionen für die Verbindungen und speichern die grundlegende Erfassungsmethode.
- Fügen Sie der grundlegenden Erfassungsmethode einen Autosampler und eine LC-Methode hinzu. Die Verwendung von FIA zur Optimierung setzt voraus, dass diese Geräte im Hardware-Profil aktiv sind.
- Erstellen Sie eine LC-MS/MS-Erfassungsmethode auf Basis der Datei Reserpine_QOpt_FinalMRM.POS.dam und nennen dann die neue Methode FIA_AutoOpt_Tutorial.dam.
- Vergewissern Sie sich, dass das ausgewählte Projekt die angewandte Erfassungsmethode enthält.

Hinweis: Obwohl FIA verwendet werden kann, um substanzspezifische Parameter zu optimieren, wird dies in der Regel wegen der Anzahl der erforderlich Zyklen zur Bestimmung der optimalen Parameterwerte nicht gemacht.

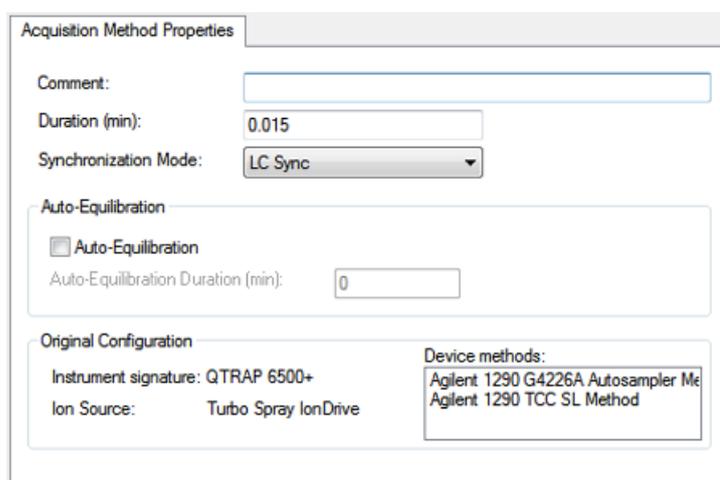
1. Geben Sie eine 4-Komponenten-Mix-Verdünnung in einen Autosampler.

Sie benötigen genügend Probenvolumen, um jede Variable jedes einzelnen Parameters prüfen zu können und danach noch einen Rest der Probe übrig zu haben. Wenn Sie z. B. mit Temperaturen von 300 °C, 400 °C und 500 °C arbeiten möchten und das Injektionsvolumen 10 µl beträgt, benötigen Sie mehr als 30 µl (3 × 10 µl Injektion).

2. Bestätigen Sie, dass **LC Sync** in der Methode ausgewählt wurde.

Hinweis: Im LC-Sync-Modus verhält sich das Massenspektrometer entsprechend der Betrieb des LC-Systems, um eine ordnungsgemäße Datenerfassung zu gewährleisten.

Abbildung 7-3 Erfassungsmethode mit „LC Sync“ ausgewählt



3. Stellen Sie sicher, dass die Ionenquellen- und Gasparameter auf angemessene Werte eingestellt sind, damit das Massenspektrometer während der Optimierung nicht kontaminiert wird. Weitere Informationen finden Sie im *Bedienerhandbuch* der Ionenquelle.
4. Stellen Sie das horizontale Mikrometer auf 5.
5. Stellen Sie das vertikale Mikrometer an der Ionenquelle auf die Durchflussgeschwindigkeit ein. Verwenden Sie als Ausgangspunkt die Parameter in der folgenden Tabelle: Weitere Informationen finden Sie im *Bedienerhandbuch* der Ionenquelle.

Tabelle 7-9 Vertikale Parameter für Ionenquelle

Flussrate	Vertikale Anfangsparameter
1 µl/min bis 20 µl/min	10 mm
20 µl/min bis 250 µl/min	5 mm
250 µl/min bis 500 µl/min	2 mm
>500 µl/min	0 mm

6. Stellen Sie die Werte für das HPLC-System ein und verwenden Sie ein Autosampler-Injektionsvolumen von 10 µl. Verwenden Sie dieselbe oder eine niedrigere Konzentration wie für das Infusionsexperiment.

Die LC-Pumpen müssen für einen isokratischen Lauf ohne Säulen konfiguriert werden. Die MS- und LC-Dauer müssen gleich sein, damit die richtigen Daten erfasst werden.

Die Strömungsgeschwindigkeit und der Prozentwert der verwendeten mobilen Phasen sollten auf der verwendeten LC-Säule, der allgemeinen Chromatographie und der ungefähren mobilen Phasen-Konzentration basieren, bei der die relevanten Verbindungen eluieren.

7. Doppelklicken Sie in der Navigationsleiste unter **Tune und Calibrate** auf **Compound Optimization**.

Automatische Optimierung

8. Geben Sie auf der Seite Instrument Settings abhängig vom verwendeten LC-System die entsprechenden Parameterwerte ein. Siehe [Tabelle 7-10](#).

Tabelle 7-10 Beispiel für Geräteparameter-Einstellungen

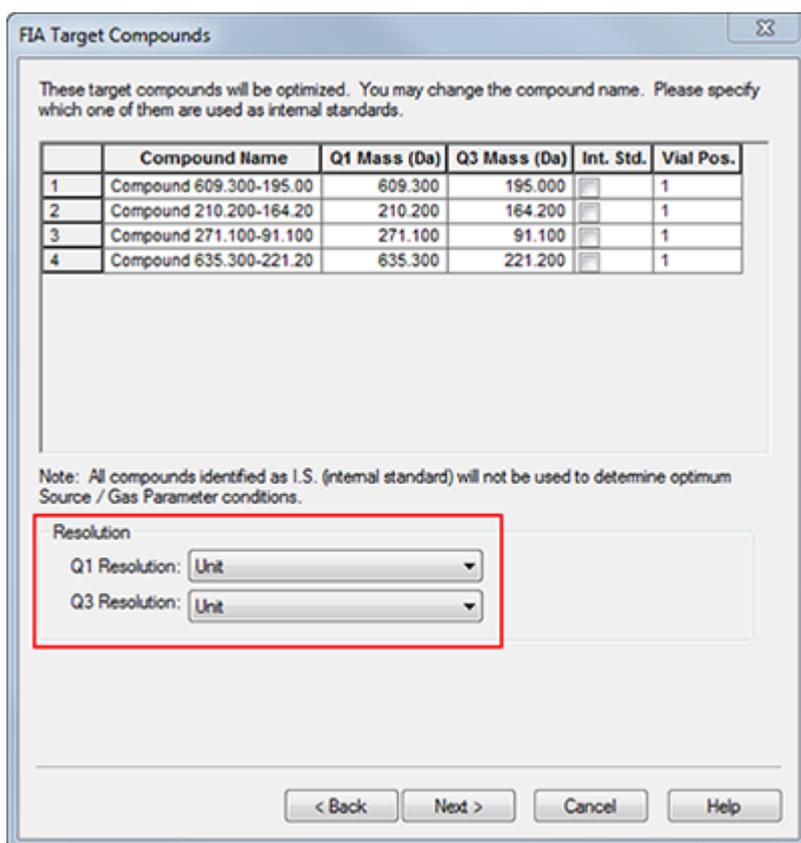
Parameter	Wert
Einlass	FIA
Standard Erfassung- Methode	FIA_AutoOpt_Tutorial.dam
Rack-Code	Autosampler spezifisch
Rack-Position	Autosampler spezifisch
Injektionsvolumen	10 µl
Massenspektrometer	MS/MS-Analyse

9. Klicken Sie auf **Next**.
10. Stellen Sie sicher, dass das **Int. Std.** Kontroll- kästchen nicht aktiviert wurde.

Die Aktivierung dieses Kontrollkästchens zeigt an, welche MRM den internen Standards entspricht. Interne Standards werden während des Optimierungsprozesses nicht optimiert.

11. Im Abschnitt **Resolution** wählen Sie **Unit** in den Feldern **Q1 Resolution** und **Q3 Resolution**.

Abbildung 7-4 Q1 und Q3 Auflösungsfelder



12. Klicken Sie auf **Next**.
13. Auf der Seite FIA Source Parameters geben Sie niedrigere oder höhere Werte als den ursprünglichen Wert ein, solange sie sich noch innerhalb der Spezifikationen befinden.

Achten Sie darauf, dass keine Einstellung zu niedrig wird, damit das System sauber bleibt. In [Tabelle 7-11](#) finden Sie Parameter, die Sie als Ausgangspunkt verwenden können.

Tip! Geben Sie die Werte ein, bevor Sie das Kontrollkästchen aktivieren.

Tabelle 7-11 Beispiel-Parameter für die Seite „FIA Source Parameters“

Parameter	Aktivieren des Kontrollkästchens „Optimize“?	Werte für die Optimierung
Curtain Gas	Ja	20;40;55
Collision Gas	Nein	–

Tabelle 7-11 Beispiel-Parameter für die Seite „FIA Source Parameters“ (Fortsetzung)

Parameter	Aktivieren des Kontrollkästchens „Optimize“?	Werte für die Optimierung
IonSpray Voltage	Ja	1500;2000;3000;4000;5000
Temperature	Ja	300;400;500;600;700
Ion Source Gas 1	Ja	40;50;60;70;80;90
Ion Source Gas 2	Ja	40;50;60;70;80;90
Interface Heater	Nein	–

14. Wählen Sie **1** oder **2** neben **Replicate Injection for each Parameter**.

Die Gesamtzahl der Injektionen und das gesamte Probenvolumen werden anhand dieser Spezifikationen berechnet. Beachten Sie das insgesamt benötigte Probenvolumen. Das Probenvolumen könnte je nach Anzahl der Variablen, die für jeden Parameter optimiert werden, zu hoch sein, da jede Variable eine separate Methode ist.

Abbildung 7-5 Injektion für jedes Parameterfeld wiederholen – Beispiel

Please select the Source Parameters to optimize in FIA:

	Parameter Name	Optimize	Current Val.	Values for Optimization
1	Curtain Gas	<input checked="" type="checkbox"/>	10.0	20.0;40.0;55.0;
2	Collision Gas	<input type="checkbox"/>	9.00	
3	IonSpray Voltage	<input checked="" type="checkbox"/>	5500.0	1500.0;2000.0;3000.0;4000
4	Temperature	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0	300.0;400.0;500.0;600.0;700
5	Ion Source Gas 1	<input checked="" type="checkbox"/>	15.0	40.0;50.0;60.0;70.0;80.0;90
6	Ion Source Gas 2	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0	40.0;50.0;60.0;70.0;80.0;90

Replicate Injection for each Parameter: 1 2 3 4

Total # of injections: 50
Total Sample Volume: 50 (µl)

< Back Next > Cancel Help

15. Klicken Sie auf **Next**.
16. Verwenden Sie auf der Seite FIA Compound Parameters für jeden Analyten die angegebenen Beispiel-Parameterwerte als Ausgangspunkt. Siehe [Tabelle 7-12](#).

Hinweis: Die Werte in [Tabelle 7-12](#) sind empfohlene Werte. Weitere Informationen erhalten Sie unter Hilfe.

Tabelle 7-12 Seite „FIA Compound Parameters“ – Beispiel

Parameter	Aktivieren des Kontrollkästchens „Optimize“?	Werte für die Optimierung
Decustering Potential	Ja	60;80;100;120;200
Entrance Potential	Nein	–
Collision Energy	Ja	20;30;40;50;70;80;100
Collision Cell Exit Potential	Ja	2;4;6;8;10;12

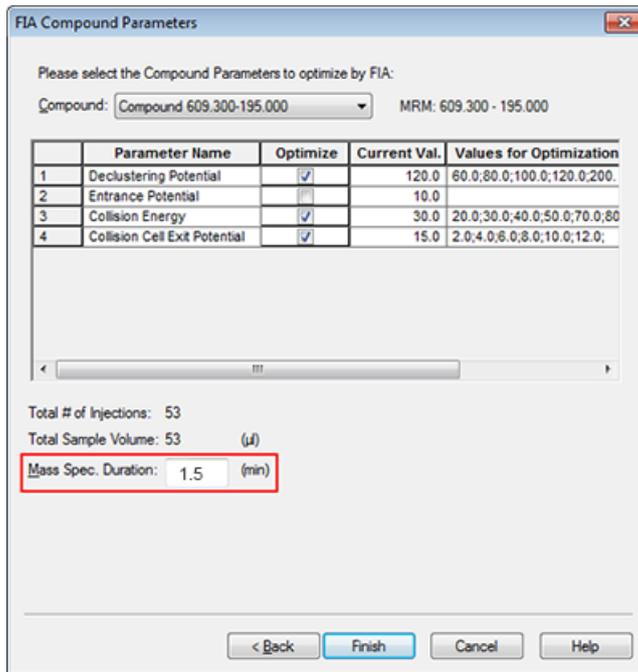
Die Gesamtzahl der Injektionen und das davon abhängige Probenvolumen werden automatisch aktualisiert. Im Gegensatz zu Ionenquellen-Parametern, die eine Injektion pro Wert und Wiederholung benötigen, verlangen verbindungsabhängige Parameter nur eine Injektion pro Parameter. Ein schleifenförmiges Experiment wird für jeden Parameter durchgeführt. Die Werte alternieren bei einer Injektion bei jedem Scan.

Hinweis: Geben Sie nicht zu viele Werte ein. Ansonsten wird die korrekte Bewertung der Parameter verhindert.

17. Navigieren Sie mithilfe der Liste der Verbindungen zu einer anderen Verbindung und geben Sie die zu optimierenden Parameter ein.
18. Wiederholen Sie Schritt 19, bis alle Parameter für alle Verbindungen angegeben sind.
19. Geben Sie **1,5** im Feld **Mass Spec. Duration** ein.

Hinweis: Dieser Wert sollte mindestens so hoch sein wie die erforderliche Zeitdauer einer Injektion.

Abbildung 7-6 Das Feld „Mass Spec. Duration“ – Beispiel



20. Klicken Sie auf **Finish**, um die Optimierung zu beginnen.

Die Software optimiert die von Ionenquelle und Verbindung abhängigen angegebenen Parameter, um die maximale Sensitivität für die MRM-Übergänge der Verbindung zu bestimmen. Während die Software die Optimierung durchführt, wird ein Bericht **Compound Optimization** erstellt.

21. Um optimierte Parameter zu erhalten, muss diese Routine wiederholt werden.

Hinweis: Typischerweise müssen die Ionenquellen- und Gasparameter durch einen weiteren FIA-Zyklus verengt werden.

22. Öffnen Sie die endgültig optimierte FIA-Methode namens *_FIA_sample_1.

Hinweis: Die Software generiert mehrere Erfassungsmethoden.

23. Speichern Sie diese Methode unter einem einfacheren Namen.

Eine Aufnahmemethode besteht aus Experimenten und Zeiträumen. Mit dem Acquisition Method Editor erstellen Sie eine Abfolge von Zeiträumen und Experimenten für Instrumente und Geräte.

Es wird empfohlen, dass nur diejenigen Benutzer Akquisitions- und Quantifizierungsmethoden erstellen oder ändern, die mit der Methodenentwicklung vertraut sind. Weitere Informationen über Rollen und Sicherheit finden Sie im *Handbuch für Laborleiter*.

Eine Erfassungsmethode mit dem „Acquisition Method Editor“ erstellen

Tipp! Wenn Benutzer eine neue Erfassungsmethoden-Datei aus einer vorhandenen Datei erstellen, können einige oder alle Peripheriegeräte-Methoden in der Erfassungsmethode verwendet werden.

Im Fensterbereich Acquisition Method erscheinen nur die Geräte, die im aktiven Hardware-Profil konfiguriert wurden. Alle Geräte, die dem Hardware-Profil hinzugefügt wurden, müssen auch zu den bestehenden Aufnahmemethoden hinzugefügt werden. Weitere Informationen über Geräte finden Sie im *Peripheral Devices Setup Guide*.

1. Stellen Sie sicher, dass ein Hardware-Profil mit dem Massenspektrometer und einem Peripheriegerät aktiv ist.
2. In der Navigationsleiste doppelklicken Sie unter **Acquire** auf **Build Acquisition Method**.
3. Wählen Sie in der Registerkarte Acquisition Method Properties einen **Synchronization Mode** aus.
4. (Optional) Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Auto-Equilibration** und geben Sie die erforderliche Äquilibrationszeit in Minuten ein.
5. Klicken Sie im Fensterbereich Acquisition Method auf das Symbol **Mass Spec**.
6. Wählen Sie einen **Scan**-Typ auf der Registerkarte MS.
7. Geben Sie in die Felder die gewünschten Werte ein. Siehe [Parameter auf Seite 27](#).
8. Geben Sie in der Registerkarte Advanced MS gegebenenfalls Werte in die Felder ein.
9. Auf der Registerkarte MS klicken Sie auf **Edit Parameters**.
10. Geben Sie in der Registerkarte Source/Gas gegebenenfalls Werte in die Felder ein.
11. Geben Sie in der Registerkarte Compound gegebenenfalls Werte in die Felder ein und klicken Sie dann auf **OK**.
12. Klicken Sie auf das Symbol für ein Gerät und geben Sie dann die Parameter für das Gerät ein.
13. Fügen Sie weitere Zeiten und Experimente hinzu. Siehe [Experiment hinzufügen auf Seite 88](#) und [Eine Periode hinzufügen auf Seite 89](#).

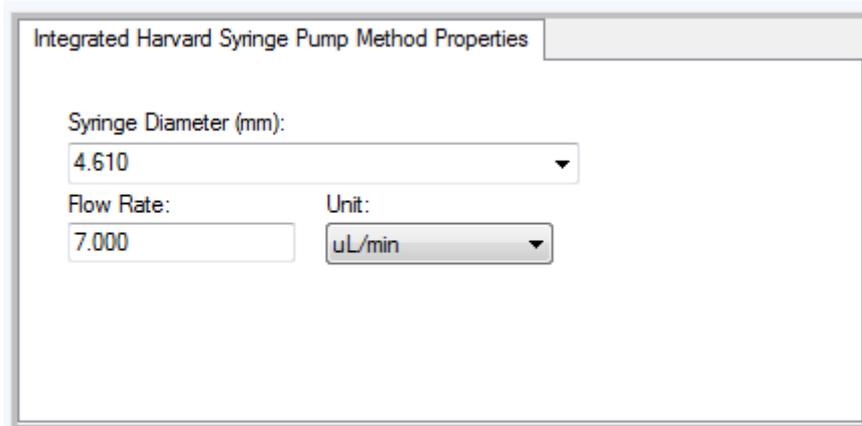
14. Klicken Sie auf **File > Save**.

Konfigurieren der integrierten Spritzenpumpe

1. Bestätigen Sie, dass die integrierte Spritzenpumpe im Hardware-Profil des Geräts ausgewählt wurde.
2. Klicken Sie im Teilfenster Acquisition Method auf das Symbol **Syringe Pump**.

Die Registerkarte Syringe Pump Method Properties öffnet sich im Acquisition Method Editor.

Abbildung 8-1 Registerkarte Syringe Pump Properties

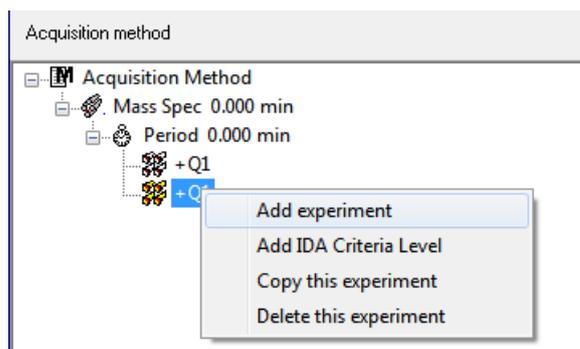


3. Geben Sie den Spritzendurchmesser im Feld **Syringe Diameter (mm)** ein.
4. Geben Sie die Durchflussmenge im Feld **Flow Rate** ein.
5. Wählen Sie die Durchfluss-Einheiten in der Liste **Unit** aus.

Experiment hinzufügen

1. Machen Sie einen Rechtsklick im Acquisition method-Fenster der Periode, der das Experiment hinzugefügt werden soll, und klicken Sie dann auf **Add experiment**.

Abbildung 8-2 Add Experiment



Ein Experiment wird für diese Periode unter dem letzten Experiment hinzugefügt.

Hinweis: Ein Experiment kann nicht zwischen bestehenden Experimenten, IDA-Kriterien oder Perioden eingefügt werden. Benutzer können ein Experiment nur am Ende der Periode hinzufügen.

2. In der Registerkarte MS wählen Sie die korrekten Parameter.

Eine Periode hinzufügen

- Im Fenster Acquisition Method klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das **Mass Spec** Symbol und klicken dann auf **Add Period**.

Eine Periode wird unter der zuletzt erzeugten Periode hinzugefügt.

Hinweis: Benutzer können in einem IDA Experiment nicht mehrere Zeitabschnitte verwenden.

Ein Experiment in eine Periode kopieren

1. Öffnen Sie eine mehrphasige Methode.
2. Im Fenster Acquisition Method drücken Sie die **STRG**-Taste und ziehen dann das Experiment auf die Periode.

Das Experiment wird für diese Periode unter das letzte Experiment kopiert.

Ein Experiment innerhalb einer Periode kopieren

Mit diesem Verfahren können Sie einer Periode gleiche oder ähnliche Experimente hinzufügen, wenn die meisten oder alle Parameter gleich sind.

- Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Experiment und klicken dann auf **Copy this experiment**.

Eine Kopie des Experiments wird unter dem letzten erstellten Experiment hinzugefügt. Dies ist hilfreich, wenn dasselbe oder ähnliche Experiment(e) in einer Erfassungsmethode hinzugefügt werden.

Scan-Techniken

MS: Bei MS-Scans, die auch als MS-Einzelscans bezeichnet werden, werden Ionen entsprechend ihrem Masse-zu-Ladung-Verhältnis (m/z) getrennt. Ein MS-Einzelscan kann dazu benutzt werden, das Molekulargewicht einer Verbindung zu bestimmen. MS-Einzelscans werden auch als Survey-Scans (Vorläuferscans) bezeichnet. MS-Scans geben über die Masse hinaus keine weitere Auskunft über die chemische Zusammensetzung von Ionen. Führen Sie MS/MS- oder MS/MS/MS-Scans durch, um weitere Informationen über die Ionen zu erhalten.

MS/MS: Mit MS/MS-Scans werden molekulare Gattungen festgestellt.

- Bei MS/MS-Scans in Triple-Quadrupol-Systemen findet die Fragmentierung in der Stoßzelle statt.
- Bei MS/MS-Scans in QTRAP[®]-Systemen findet die Fragmentierung des Vorläufer-Ions in der Stoßzelle oder in der linearen Ionenfalle statt.

Wenn genügend Energie verwendet wird, fragmentieren Vorläufer-Ionen so, dass sie charakteristische Produkt-Ionen erzeugen.

MS/MS/MS: MS/MS/MS-Scans mit LIT-Systemen (lineare Ionenfalle) gehen noch einen Schritt weiter als MS/MS-Scans. Ein in der Stoßzelle erzeugtes Fragment wird dann in der linearen Ionenfalle weiter fragmentiert, um weitere Informationen über die Struktur des Molekularions zu erhalten.

Quadrupol-Modus Scan-Methoden

Triple-Quadrupol-Instrumente verfügen über hochempfindliche MRM-Funktionen (Multiple Reaction Monitoring), die für Quantifizierungsexperimente erforderlich sind. Darüber hinaus verfügen sie über sehr spezifische Scan-Methoden, wie z. B. Vorläufer-Ionen- und Neutralverlust-Scan, die eine erweiterte Suche nach den Komponenten der Proben ermöglichen.

Q1 MS (Q1): Ein vollständiger Scan-Typ unter Verwendung des ersten Quadrupols (Q1). Im Scanbereich wird die Ionen-Intensität für jede Masse ausgegeben.

Q1 Multiple Ions (Q1 MI): Ein Nullbreiten-Scan-Typ, der den ersten Quadrupol (Q1) verwendet. Die Ionen-Intensität wird nur für die angegebene Masse ausgegeben.

Q3 MS (Q3): Ein vollständiger Scan-Typ mit dem dritten Quadrupol (Q3). Im Scanbereich wird die Ionen-Intensität für jede Masse ausgegeben.

Q3 Multiple Ions (Q3 MI): Ein Nullbreiten-Scan-Typ, der das dritte Quadrupol (Q3) verwendet. Die Ionen-Intensität wird nur für die angegebene Masse ausgegeben.

MRM (MRM): Ein MS/MS-Scan, in dem ein vom Benutzer ausgewähltes Ion durch den ersten Quadrupol (Q1) geleitet und dann in der Stoßzelle des zweiten Quadrupols (Q2) fragmentiert wird. Der Q3-Quadrupol wählt dann das Fragment-Ion aus, das in den Detektor gelangt. Dieser Scan-Modus wird hauptsächlich zur Quantifizierung eingesetzt.

Product Ion (MS2): Ein vollständiger MS/MS-Scan, bei dem der erste Quadrupol (Q1) fixiert wird, um ein bestimmtes Vorläufer-Ion zu übertragen und der dritte Quadrupol (Q3) einen definierten Massenbereich analysiert. Wird zur Bestimmung aller Produkte eines bestimmten Vorläufer-Ions eingesetzt.

Precursor Ion (Prec): Ein MS/MS-Scan, bei dem der dritte Quadrupol (Q3) an einem bestimmten Masse-zu-Ladung-Verhältnis fixiert wird, um ein bestimmtes Produkt-Ion zu übertragen und der erste Quadrupol (Q1) einen Massenbereich scannt. Wird dazu verwendet, die Existenz eines Vorläufer-Ions zu belegen, oder noch häufiger zur Bestimmung von Verbindungen mit gemeinsamen Produkt-Ionen.

Neutral Loss (NL): Ein MS/MS-Scan, bei dem sowohl der erste Quadrupol (Q1) als auch der dritte Quadrupol (Q3) einen Massenbereich mit einem bestimmten Massenabstand scannt. Eine Reaktion wird beobachtet, wenn die durch den ersten Quadrupol (Q1) ausgewählten Ionen durch den festgelegten Neutralverlust (der festen Masse) fragmentieren. Wird dazu verwendet, die Existenz eines Vorläufer-Ions zu belegen, oder noch häufiger zur Bestimmung von Verbindungen mit einem gemeinsamen Neutralverlust.

LIT-Modus Scan-Methoden

Die LIT-Modus-Scans verwenden den Quadrupol Q3 als lineare Ionenfalle. Die Ionen werden gefangen und im Quadrupol Q3 gespeichert, bevor sie ausgescannt werden, was zu einer erhöhten Empfindlichkeit führt. Darüber hinaus kann die MS/MS/MS-Analyse in der linearen Ionenfalle durchgeführt werden und so mehr Informationen über die Probe liefern. LIT-Modus Scan-Typen werden in der Regel für qualitative Messungen eingesetzt.

Enhanced MS (EMS): Ionen werden im Quadrupol Q1 analysiert und in der linearen Ionenfalle gesammelt. Diese Ionen werden aus dem Quadrupol Q3 heraus analysiert, um MS-Einzelscanspektren zu erzeugen.

Enhanced Multi-Charge (EMC): Dieser Scan-Typ ähnelt dem EMS-Scan mit dem Unterschied, dass es, bevor die Ionen aus der linearen Ionenfalle ausgescannt werden, eine Verzögerung gibt, in der die nicht ausreichend geladenen Ionen (hauptsächlich einfach geladenen Ionen) vorzugsweise aus der linearen Ionenfalle entkommen können. Wenn die zurückgehaltenen Ionen analysiert wurden, wird die Population mehrfach geladener Ionen das resultierende Spektrum dominieren.

Enhanced Product Ion (EPI): Mit dieser Scan-Methode erzielt man für ein bestimmtes Ion ein MS/MS-Spektrum hoher Qualität. Die Fragmentierung findet in der Stoßzelle Q2 statt und stellt somit MS/MS-Spektren mit hohem Informationsgehalt zur Verfügung, die für stoßinduzierte Dissoziationsfragmentierungen (CAD) typisch sind. In diesem Scan-Modus wird das zu fragmentierende Vorläufer-Ion zuerst im Quadrupol Q1 durch ein Masse-Fenster mit einer Weite zwischen 1 und 4 Da ausgewählt, wodurch alle anderen Ionen herausgefiltert werden. Das Vorläufer-Ion wird durch CAD-Gas in der Stoßzelle Q2 fragmentiert. Die erzeugten Fragment-Ionen werden in der linearen Ionenfalle eingefangen und dann, je nach erforderlicher Fragment-Ion-Auflösung, bei einer von drei Scan-Geschwindigkeiten heraus analysiert.

Bei IDA-Experimenten ist das Feld **Product Of** standardmäßig auf 30 Da eingestellt und dieser Wert sollte nicht geändert werden.

Enhanced Resolution (ER): Dieser Scan-Typ ähnelt einem EMS-Scan, mit dem Unterschied, dass eine kleine 30 Da Masse um die Vorläufer-Masse aus der linearen Ionenfalle bei der niedrigsten Abtastrate ausgescannt wird, um ein schmales Fenster der am besten aufgelösten Spektren zu erzeugen.

MS/MS/MS (MS3): Ein Vorläufer-Ion wird im Quadrupol Q1 ausgewählt und mit stoßinduzierter Dissoziation in der Stoßzelle Q2 fragmentiert. Alle resultierenden Produkt-Ionen werden in die lineare Ionenfalle transferiert, wo dann ein einzelnes Produkt-Ion isoliert wird. Das isolierte wird in der linearen Ionenfalle weiter fragmentiert und die resultierenden Produkt-Ionen werden dann aus der Ionenfalle bei einer von drei Scan-Geschwindigkeiten heraus analysiert. Wie bei jeder innerhalb der Falle wirkenden stoßinduzierten Dissoziationstechnik (CID-Technik) gibt es für den zweiten MS/MS-Schritt eine Sperre für zu geringe Masse, weil sich das kleinste Massenfragment mit dem Vorläufer in der Falle gleichzeitig in einem stabilen Zustand befinden müssen. Bei QTRAP[®] Systemen führt dies bei MS3-Experimenten zum Verlust von Ionen mit weniger als 28 Prozent der Masse der Vorläufer-Ionen. Dieses Phänomen wird häufig als die Ein-Drittel-Absperr-Regel bezeichnet.

Über Spektraldatenaufnahme

Spektraldaten können in einem der in [Tabelle 8-1](#) beschriebenen Modi erfasst werden.

Tabelle 8-1 Spektraldaten

Modus	Beschreibung
Profil	Der voreingestellte Wert ist 0,1 Da. Profildaten sind die vom Massenspektrometer erzeugten Daten und entsprechen der Intensität, die bei einer Reihe von diskreten Massewerten mit gleichmäßigem Abstand aufgezeichnet wird. Zum Beispiel wird das Massenspektrometer bei einem Massenbereich von 100 Da bis 200 Da und einer Schrittweite von 0,1 Da Werte von 99,95 bis 100,05 messen (aufgezeichnet als Wert 100), 100,05 bis 101,15 (aufgezeichnet als Wert 101) ... 199,95 bis 200,05 (aufgezeichnet als Wert 200).
Peak-Hopping	Der voreingestellte Wert ist 1,0 Da. Beim Peak-Hopping werden am Massenspektrometer große Schritte (etwa 1 Da) unternommen. Es hat den Vorteil, schneller zu sein (weniger Datenschnitte werden benötigt), jedoch gehen Informationen über die Form von Peaks verloren.
Strichspektrum	Das Massenspektrometer scannt wie im Profil-Modus, erzeugt aber aus den Daten ein Strichspektrum und ersetzt bei jedem Peak den gefundenen Peak durch einen intensitätsgewichteten Schwerpunkt. Strichspektraldaten haben den Vorteil von deutlich reduzierten Dateigrößen. Der Nachteil ist, dass Informationen über die Form von Peaks verloren gehen und als Strichspektrum gesammelte Daten nicht verändert werden können. Wir empfehlen die Verwendung des Profil-Modus und die Erstellung eines Strichspektrums der Daten nach der Erfassung.

Bedienungsanleitung – Analyse und Verarbeitung von quantitativen Daten

9

In diesem Abschnitt wird beschrieben, wie Sie die Analyst[®]-Software verwenden, um quantitative Daten zu analysieren und zu verarbeiten. Die Datenverarbeitung kann auch unter Verwendung der MultiQuant[™]-Software erfolgen. Wir schlagen vor, zur Quantifizierung von Daten die MultiQuant[™]-Software zu verwenden. Bitte lesen Sie die Dokumentation, die mit der MultiQuant[™]-Software geliefert wurde.

Verwenden Sie die Beispieldateien im Ordner Example und lernen Sie, wie man Proben zur Quantifizierung auswählt, wie man voreingestellte Abfragen auswählt, tabellenspezifische Abfragen erstellt und wie man die gewonnenen Daten analysiert. Weitere Informationen zu den folgenden Themen finden Sie im *Advanced User Guide (Handbuch für Fortgeschrittene)*.

- Metrische Kurven
- Layout einer Ergebnistabelle

Quantitative Analysen

Quantitative Analysen verwendet man, um die Konzentration einer bestimmten Substanz in einer Probe zu finden. Analysiert und vergleicht man eine unbekannte Probe mit anderen Proben, die die gleiche Substanz mit einer bekannten Konzentration (Standards) enthalten, kann die Software die Konzentration der unbekannt Probe berechnen. Der Prozess umfasst das Erstellen einer Kalibrierkurve unter Verwendung der Standards und der darauf folgenden Berechnung der Konzentration der unbekannt Probe. Die berechneten Konzentrationen für jede Probe werden dann in einer Ergebnistabelle angezeigt.

Quantifizierungsmethoden

Quantifizierungsmethoden bestehen aus Parametersätzen, mit denen man Peaks in einer Probe erzeugen kann. Quantifizierungsmethoden können Parameter enthalten, mit denen man Peaks lokalisieren und integrieren, Standard-Kurven generieren und unbekannt Konzentrationen berechnen kann. Eine zuvor gespeicherte Quantifizierungsmethode kann im Batch aus dem Menü Quantitation ausgewählt werden. Der Benutzer kann eine Quantifizierungsmethode vor der Datenaufnahme erstellen und die Methode nach Ablauf des Batches automatisch auf die quantitativen Daten anwenden. Alternativ kann man eine Quantifizierungsmethode zuerst erstellen und nach der Aufnahme anwenden.

Quantifizierungsmethoden kann man mit drei Werkzeugen erstellen: dem Quantitation Wizard, der Build Quantitation Method und Quick Quant.

Quantitation Wizard

Mit dem Quantitation Wizard wird eine Ergebnistabelle gleichzeitig mit der Quantifizierungsmethode erzeugt. Mit der Build Quantitation Method kann man auch bestehende Quantifizierungsmethoden ändern.

Build Quantitation Method

Die Option „Build Quantitation Method“ generiert keine Quantifizierungsergebnistabelle, obwohl man die Methode anschließend im „Quantitation Wizard“ verwenden kann, um eine Ergebnistabelle zu erstellen. Mit „Build Quantitation Method“ kann man auch bestehende Quantifizierungsmethoden ändern. Dies ist die flexibelste Art, um Quantifizierungsmethoden zu erstellen. Siehe [Eine Methode mit dem „Quantitation Method Editor“ erstellen auf Seite 94](#).

Quick Quant

Quick Quant wird nicht zur Quantifizierung von Ergebnissen empfohlen.

Quick Quant ist Teil des Batch-Editors. Verwenden Sie Quick Quant, um Verbindungskonzentrationen vor der Datenerfassung hinzuzufügen. Da eine Probe noch nicht erfasst wurde, sind die Auswahl einer repräsentativen Stichprobe und das Betrachten von Peaks nicht möglich. Bei diesem Verfahren werden nur die Komponenten der Methode definiert.

Zur Anwendung einer zuvor gespeicherten Quantifizierungsmethode diese aus dem Quantitation-Menü im Batch auswählen. Für Anleitungen zum Erstellen von einem Batch siehe [Einen Batch erstellen und übergeben auf Seite 138](#).

Über Ergebnistabellen

Ergebnistabellen fassen berechnete Konzentration eines Analyten in jeder unbekannt Probe auf Basis der Kalibrierkurve zusammen. Ergebnistabellen enthalten auch Kalibrierkurven und Statistiken zu den Ergebnissen. Der Benutzer kann die Ergebnistabelle anpassen und die Ergebnistabellen in Layouts anzeigen.

Daten aus einer Ergebnistabelle können als .txt-Datei zur Verwendung in anderen Anwendungen, wie Microsoft Excel, exportiert werden. Der Benutzer kann entweder Daten in einer Tabelle oder nur die Daten in den sichtbaren Spalten exportieren.

Quantifizierungsmethoden und Ergebnistabellen

Für die folgenden Verfahren verwenden Sie die Beispieldaten, die im Example-Ordner installiert sind. Der Ordner **Triple Quad** enthält die Datendateien, Mix_Batch_1 und Mix_Batch_2. Diese Beispieldateien sollen die Nützlichkeit metrischer Kurven zur Eingrenzung problematischer Proben demonstrieren. Bei den analysierten Ionen handelt es sich um Reserpin (609.3/195.0), Minoxidil (210.2/164.2), Tolbutamid (271.1/91.1) und Rescinnamin (635.3/221.2), wobei es sich um die internen Standardwerte handelt. Mix_Batch_1 enthält keine Fehler im Hinblick auf die Probenvorbereitung, während Mix_Batch_2 eine QC-Probe enthält, für die der interne Standard zweimal aufgenommen (Probe QC2) wurde.

Eine Methode mit dem „Quantitation Method Editor“ erstellen

Voraussetzungen
<ul style="list-style-type: none">• Wählen Sie das Projekt aus, das die zu quantifizierenden Daten enthält.• Wechseln zwischen Projekten und Teilprojekten auf Seite 66

1. Stellen Sie sicher, dass der Example-Ordner ausgewählt wird.

2. Doppelklicken Sie in der Navigationsleiste unter **Quantitate** auf **Build Quantitation Method**.

Das Dialogfeld Select Sample wird geöffnet.

3. In der Liste **Data Files** doppelklicken Sie auf den Ordner **Triple Quad**.
4. Wählen Sie **Mix_Batch_2. wiff**.

Die Proben in der ausgewählten Datendatei erscheinen in der Liste **Samples**.

Hinweis: Wenn das Feld **Compound ID** für die Proben und internen Standards in der Erfassungsmethode befüllt wurde und in der Tabelle **Internal Standards** ein Wert im **Q1/Q3**-Feld ausgewählt wurde, wird das Feld **Name** automatisch befüllt.

5. Wählen Sie eine Probe, die ein messbares Signal abgibt, um die Integrationsparameter auszuwählen, die für die gesamte Charge gelten, und klicken dann auf **OK**.
6. In der Tabelle **Internal Standards** wählen Sie in der Spalte **Name Rescinnamin**. In der Spalte **Q1/Q3** wählen Sie **635.3/221.2**.
7. In der Tabelle **Analytes** machen Sie Folgendes:
 - a. Wählen Sie in der Spalte **Name Minoxidol** für die **Q1/Q3**-Spaltenmassen von **210.2/164.188**, **Tolbutamid** für **271.3/91.146** und **Reserpin** für **609.4/195.039** aus.
 - b. In der Spalte **Internal Standard** wählen Sie aus der Liste **Rescinnamin** als den internen Standard aus, der jedem Analyten zugeordnet werden soll.
 - c. Löschen Sie **635.4/221.185** aus der **Q1/Q3**-Spalte in der Tabelle **Analytes**.

Hinweis: Wenn das Feld Verbindungs-ID für die Proben und internen Standards in der Erfassungsmethode befüllt wurde, werden in der Tabelle Analyten die Felder Name und Q1/Q3 befüllt.

8. Klicken Sie auf die Registerkarte **Integration**.

Die voreingestellten Integrationsparameter eignen sich für die meisten Peaks.

9. Wenn sich die Integration nicht eignet, ändern Sie den Algorithmus. Siehe [Peaks manuell integrieren auf Seite 105](#).
10. Klicken Sie auf das Symbol **Show or Hide Parameters**, um weitere Integrations-Algorithmen anzuzeigen.
11. Klicken Sie auf die Registerkarte **Calibration**.

Die voreingestellten Parameter eignen sich für diese Proben. Je nach speziellen Anwendungen kann der Benutzer die Ausgleichs-, Gewichtung- und Regressionsparameter ändern.

12. Speichern Sie die Quantifizierungsmethode.

Die neue Methode kann man verwenden, wenn ein Batch im Batch Editor erstellt wird oder wenn man mit dem Quantitation Wizard eine Ergebnistabelle erstellt.

Tipp! Die Quantifizierungsmethode kann man nur im aktuellen Projekt verwenden, es sei denn, es wurde in ein anderes Projekt kopiert. Klicken Sie dazu auf **Tools > Project > Copy Data**. Ein neues Projekt muss erstellt und ausgewählt werden, damit man es benutzen kann.

Eine Ergebnistabelle mit dem Quantitation Wizard erstellen

Voraussetzungen

- Wählen Sie das Projekt aus, das die zu quantifizierenden Daten enthält.
- [Wechseln zwischen Projekten und Teilprojekten auf Seite 66](#)

1. Doppelklicken Sie in der Navigationsleiste unter **Quantitate** auf den **Quantitation Wizard**.

Die Seite Create Quantitation Set - Select Samples wird geöffnet.

2. In der Liste **Available Data Files** doppelklicken Sie auf den Ordner **Triple Quad**.
3. Wählen Sie **Mix_batch_2.wiff**.
4. Klicken Sie auf **Add All**.

Hinweis: Wir empfehlen, dass die Benutzer Ergebnisse von einer Probe nicht verarbeiten oder berichten, bei der die Erfassung anormal oder unerwartet abgebrochen wurde.

5. Klicken Sie auf **Next**.

Die Seite Create Quantitation Set - Select Settings & Query wird geöffnet.

6. Klicken Sie im Abschnitt **Default Query** auf **Select Existing: Query**.
7. Klicken Sie in der Liste **Query** auf **Accuracy 15%**.

Hinweis: Um gleichzeitig eine Abfrage zu erstellen, siehe [Eine Standardabfrage erstellen \(Optional\) auf Seite 97](#).

Hinweis: Es liegt in der Verantwortung des Benutzers, die für spezielle Anwendungen zu verwendende Abfrage zu evaluieren und zu validieren.

8. Klicken Sie auf **Next**.

Die Seite Create Quantitation Set - Select Method wird geöffnet.

9. Klicken Sie auf **Choose Existing Method**.
10. Wählen Sie in der Liste **Method PK Data_Mix.qmf**.
11. Klicken Sie auf **Finish**.

Die Ergebnistabelle wird geöffnet.

Tipp! Zum Hinzufügen oder Entfernen von Proben aus der Ergebnistabelle klicken Sie auf **Tools > Results Table > Add/Remove Samples**.

12. Prüfen Sie den Probentyp, die tatsächliche Konzentration, die Peak-Integration, die Kalibrierungskurven, das Statistikfenster, die metrische Kurve für den internen Standard sowie andere Informationen im Zusammenhang mit der Datenquantifizierung.
13. Speichern Sie die Ergebnistabelle.

Hinweis: Wir empfehlen, dass die Benutzer Namen von Datendateien (.wiff) nicht ändern, wenn eine Ergebnistabelle Proben aus dieser Datei enthält.

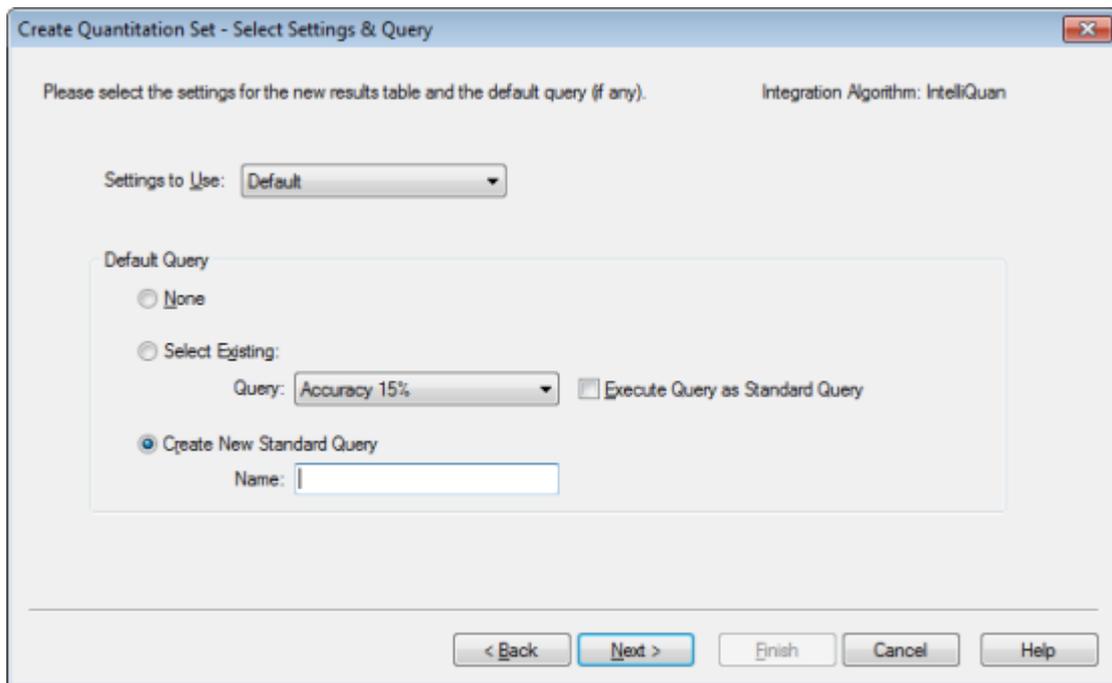
Tipp! Mit der Reporter Software können auf der Grundlage von Ergebnistabellen gut formatierte Berichte erstellt werden. Wir empfehlen, dass die Ergebnisse validiert werden, wenn eine Reporter-Vorlage mit Abfrage verwendet wird. Siehe [Reporter Software auf Seite 132](#).

Eine Standardabfrage erstellen (Optional)

Fortgeschrittene Benutzer können eine Abfrage und eine Standardabfrage auf viele Arten erstellen. Das Folgende ist ein Beispiel. Klicken Sie auf Hilfe, um weitere Informationen zum Erstellen von Abfragen zu erhalten.

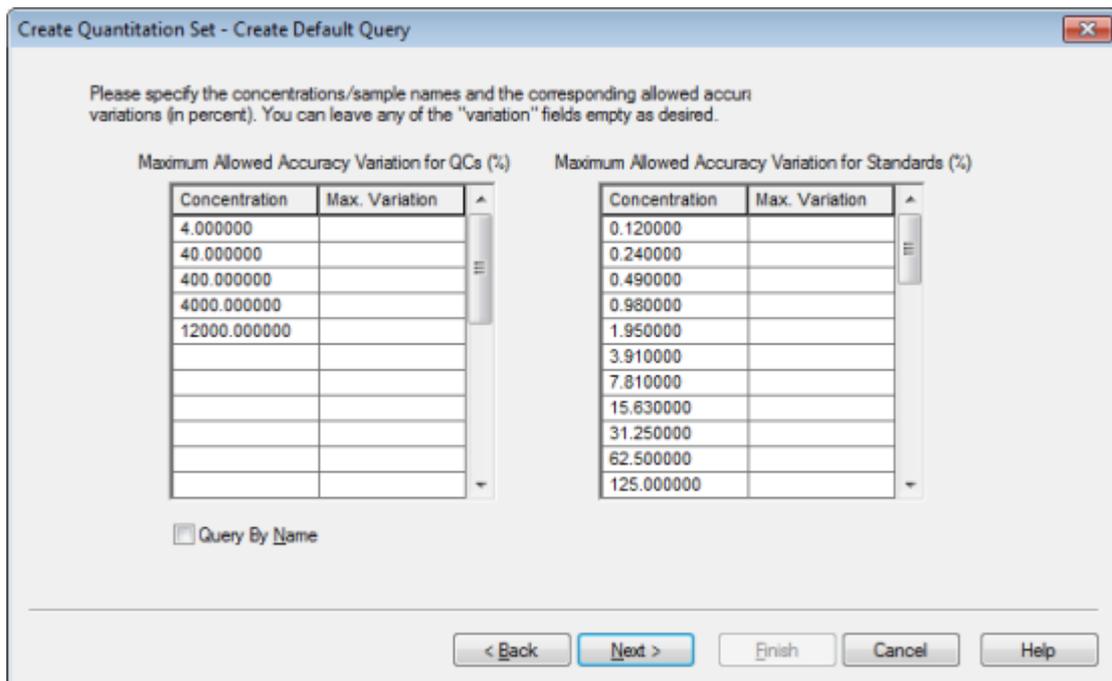
1. Doppelklicken Sie in der Navigationsleiste unter **Quantitate** auf den **Quantitation Wizard**.
2. Wählen Sie Proben auf der Seite Create Quantitation Set - Select Samples aus.
3. Klicken Sie auf **Next**.
4. Wählen Sie auf der Seite Select Settings & Query im Abschnitt **Default Query Create New Standard Query** aus.
5. Geben Sie einen Namen für die Abfrage ein.

Abbildung 9-1 Seite „Create Quantitation Set - Select Settings & Query“



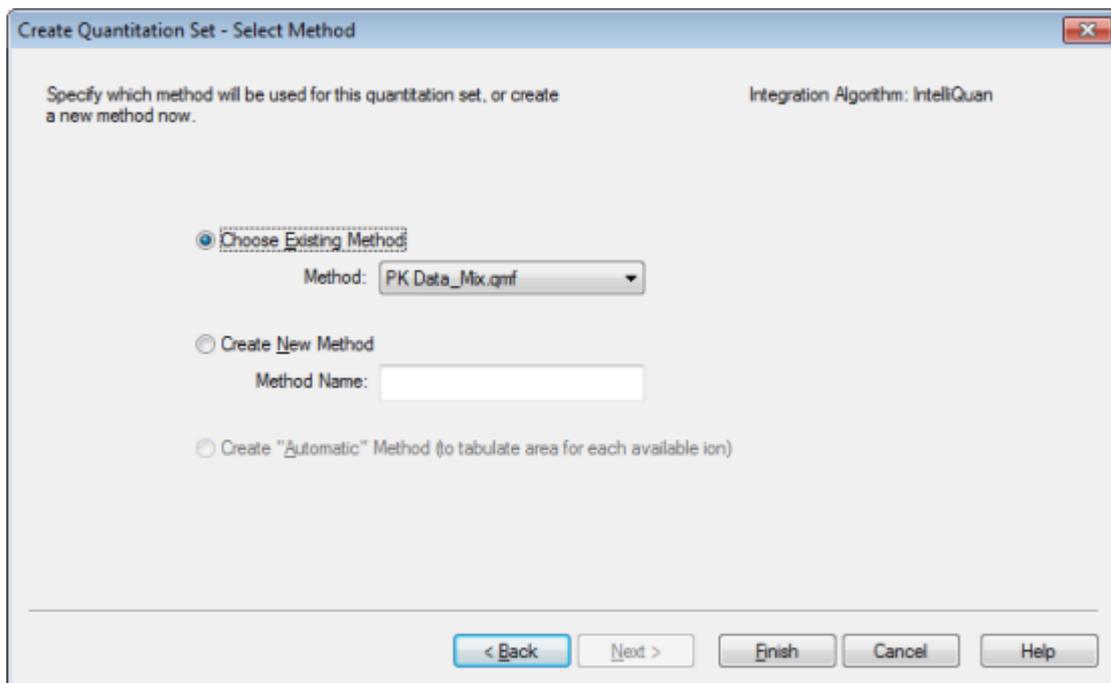
6. Klicken Sie auf **Next**.

Abbildung 9-2 Seite „Create Quantitation Set — Create Default Query“



7. In der Tabelle **Maximum Allowed Accuracy Variation for QCs (%)** in der Spalte **Max. Variation** geben Sie in der gleichen Zeile wie die entsprechende Konzentration die maximal zulässige prozentuale Abweichung für jede QC ein (zum Beispiel bedeutet $5 \pm 5\%$). Wenn die Konzentrationen während der Erfassung nicht angegeben wurden, werden sie hier nicht angezeigt. In diesem Fall geben Sie sie in der Spalte **Concentration** ein.
8. In der Tabelle **Maximum Allowed Accuracy Variation for Standards (%)** in der Spalte **Max. Variation** geben Sie in der gleichen Zeile wie die entsprechende Konzentration die maximal zulässige prozentuale Abweichung für jeden Standard ein (zum Beispiel bedeutet $10 \pm 10\%$). Wenn die Konzentrationen während der Erfassung nicht angegeben wurden, werden sie hier nicht angezeigt. Geben Sie die Konzentrationen in der Spalte **Concentration** ein.
9. Klicken Sie auf **Next**.

Abbildung 9-3 Seite „Create Quantitation Set - Select Method“



10. Wählen oder erstellen Sie eine Methode.
11. Klicken Sie auf **Finish**.

Die Abfrage wird als Standard-Abfrage angewendet. Die „Query“-Ergebnisse erscheinen als „Pass“- oder „Fail“-Eintrag in der Spalte **„Standard Query Status“** der Ergebnistabelle.

Tipp! Um zur Vollbildansicht zurückzukehren klicken Sie mit der rechten Maustaste auf **Full**.

Ergebnistabelle Rechtsklick-Menü

Durch Rechtsklick in der Ergebnistabelle können Sie auf die in [Tabelle 9-1](#) dargestellten Optionen zugreifen.

Tabelle 9-1 Ergebnistabelle Rechtsklick-Menü

Menü	Funktion
Full	Zeigt alle Spalten an.
Summary	Zeigt bestimmte Spalten an.
Analyte	Zeigt einen bestimmten Analyten.
Analyte Group	Erstellt eine Analytengruppe.
Sample Type	Zeigt ein Beispiel eines bestimmten Typs oder alle Proben.
Add Formula Column	Fügt eine Formelspalte hinzu. Wir empfehlen, dass der Benutzer die Ergebnisse validiert, wenn eine Formelspalte verwendet wird.
Table Settings	Bearbeitet oder wählt Tabelleneinstellungen aus.
Query	Erstellt oder wählt eine Abfrage aus.
Sort	Erstellt eine Sortierung oder sortiert nach dem Index.
Metric Plot	Erstellt eine metrische Kurve
Delete Pane	Löscht das aktive Fenster.
Fill Down	Kopiert die gleichen Daten in die ausgewählten Zellen.
Add Custom Column	Fügt eine benutzerdefinierte Spalte hinzu.
Delete Custom Column	Löscht die ausgewählte benutzerdefinierte Spalte.

Peak-Überprüfung und manuelle Integration von Peaks

Mit „Peak Review“ untersuchen Sie die Peaks, die die Software identifiziert hat, und definieren dann die Peaks oder die Start- und Endpunkte neu, falls erforderlich.

Nachdem die Analyten und internen Standards identifiziert wurden, welche die Software finden muss, sucht die Software nach den Peaks in den Proben. Wenn die Software einen Peak identifiziert hat, zeigt sie die Chromatogramme für jeden Analyten und internen Standard auf der Seite Create Quantitation Method: Define Integration des Standard Wizard oder auf der Registerkarte des Full Method Editor. Der Benutzer kann gefundene Peaks bestätigen oder die Quantifizierungsmethode ändern, um Peaks besser zu definieren. Wir empfehlen Benutzern, alle Integrationsergebnisse manuell zu überprüfen.

Peaks untersuchen

Wenn Peaks untersucht werden, kann der Benutzer einen Peak in seiner Gesamtheit betrachten oder die Grundlinie untersuchen, um herauszufinden, wie gut die Software die Start- und Endpunkte des Peaks gefunden hat. Mit der automatischen Zoom-Funktion ist beides möglich.

Definieren Sie die genauen Start- und Endpunkte eines Peaks und den Hintergrund manuell, damit die Software einen Peak leichter finden kann. Diese Änderungen wird nur auf diesen Peak angewendet, es sei denn, die globale Methode wird aktualisiert.

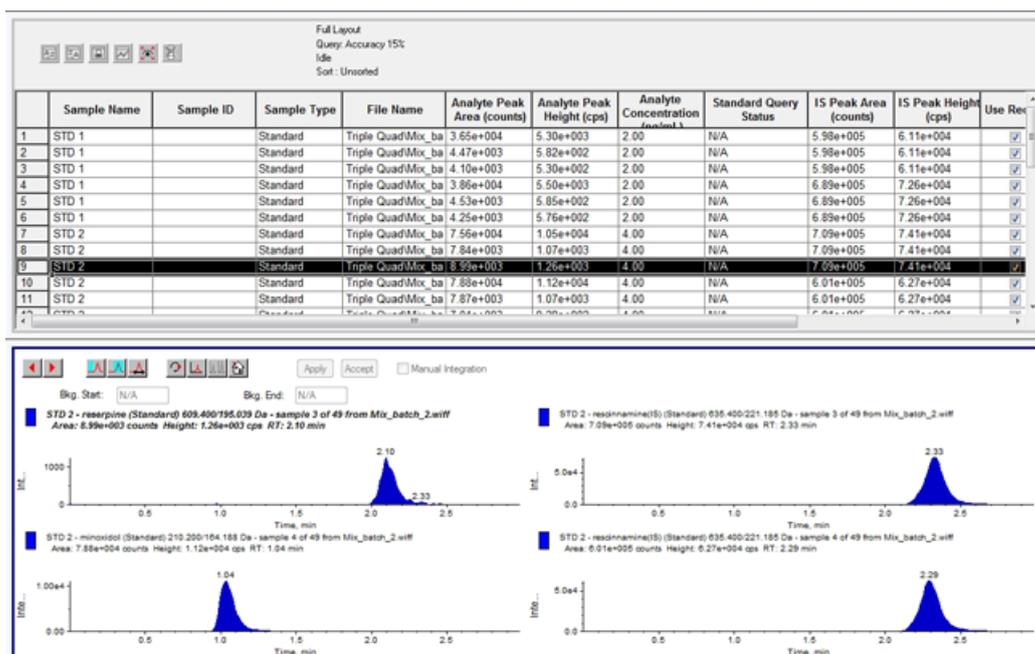
Hinweis: Wir empfehlen, manuelle Ergebnisse zu validieren.

Tipp! Um einen einzelnen Peak zu überprüfen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf einen Punkt der Kurve und dann auf **Show Peak**. Die Software öffnet das Fenster Peak Review mit dem ausgewählten Peak.

1. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die **Ergebnistabelle** und danach auf **Analyte**.
2. Wählen Sie einen Analyten aus.
3. Klicken Sie auf **Tools > Peak Review > Pane**.

Die Peaks erscheinen unterhalb der **Ergebnistabelle** nur für die Peaks, die in der Ergebnistabelle aufgeführt sind.

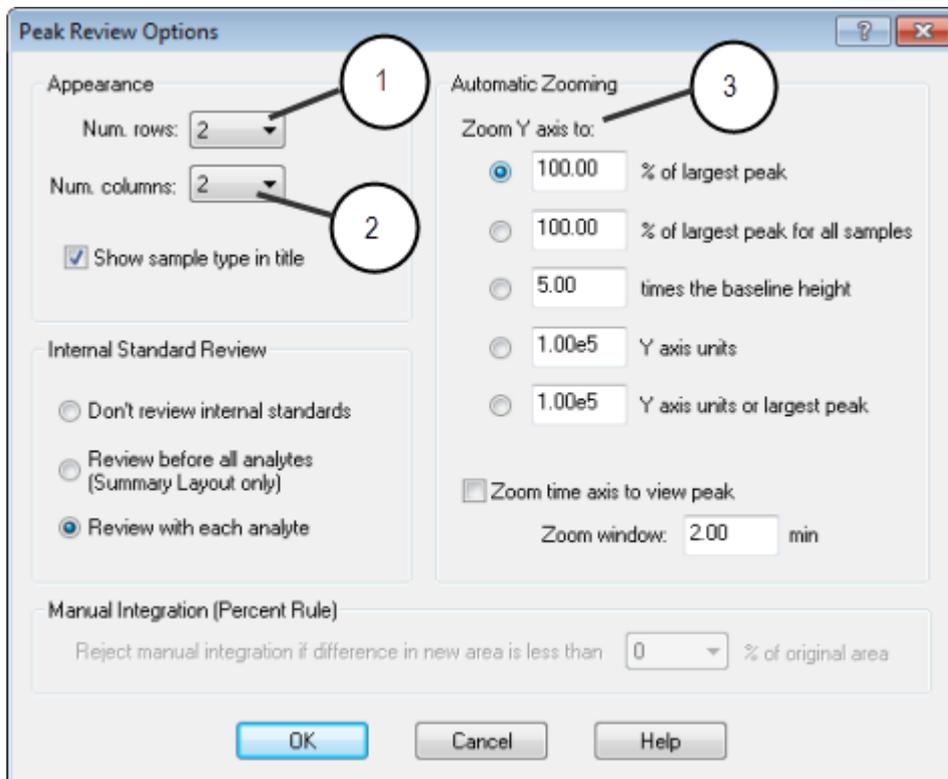
Abbildung 9-4 Peak-Bewertung



4. Im Fensterbereich mit der rechten Maustaste klicken und dann auf **Options** klicken.

5. Im Dialogfeld **Peak Review Options** im Abschnitt **Appearance** ändern Sie **Num. rows** auf **1** und **Num. columns** auf **2**.
6. Damit der ganze Peak angezeigt wird, klicken Sie im Abschnitt **Automatic Zooming** auf **Zoom Y axis to: 100% of largest peak**.

Abbildung 9-5 Dialog „Peak Review Options“



Position	Definition
1	Number of rows
2	Number of columns
3	Zoom Y-axis to 100 % of largest peak wählen, um den gesamten Peak anzuzeigen

7. Klicken Sie auf **OK**.
8. Durch Klicken auf den nach rechts weisenden Pfeil bewegen Sie sich von einem Peak zum nächsten. Siehe [Abbildung 9-6](#) und [Abbildung 9-7 auf Seite 104](#).
9. Gehen Sie zur zweiten Einspritzung von Standard 3.

In diesem Beispiel kann der Peak durch Auswahl der Option **Specify Parameter** näher an der Grundlinie integriert werden.

Tipp! Um zu einem bestimmten Peak im Fenster Peak Review zu kommen, wählen Sie die entsprechende Zeile in der Ergebnistabelle aus.

Abbildung 9-6 Peak-Review-Fenster

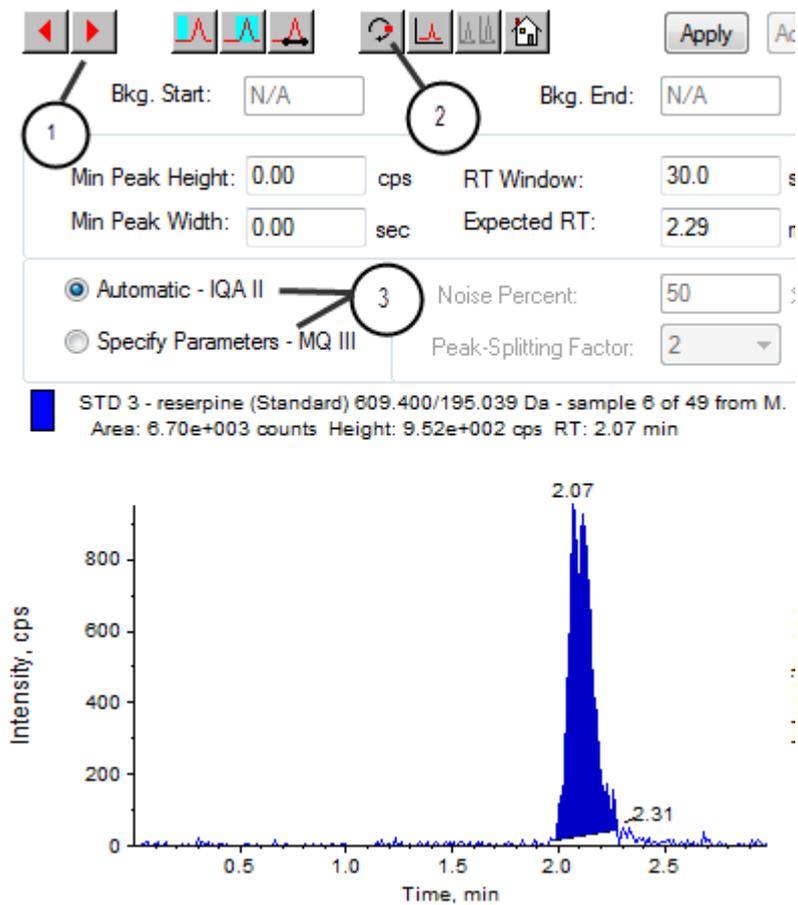
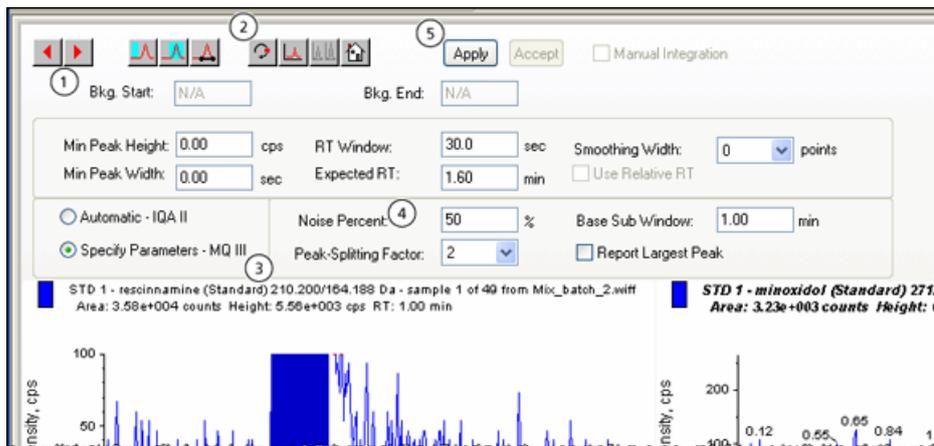


Abbildung 9-7 Teilfenster „Peak Review“



Position	Definition
1	Pfeile: Durch Klicken bewegen Sie sich von einem Peak zum nächsten.
2	Show or Hide Parameters: Durch Klicken werden Parameter ein- oder ausgeblendet.
3	Integration parameters: Klicken Sie, um die Parameter zu ändern.
4	Rauschanteil: Geben Sie einen Prozentsatz für das Rauschen ein.
5	Übernehmen: Klicken Sie, um die Parameter zu integrieren.

10. Klicken Sie zweimal auf **Show or Hide Parameters**.

11. Klicken Sie auf **Specify Parameters -MQ III**.

12. Ändern Sie den Wert für **Noise Percent**.

13. Klicken Sie auf **Apply**.

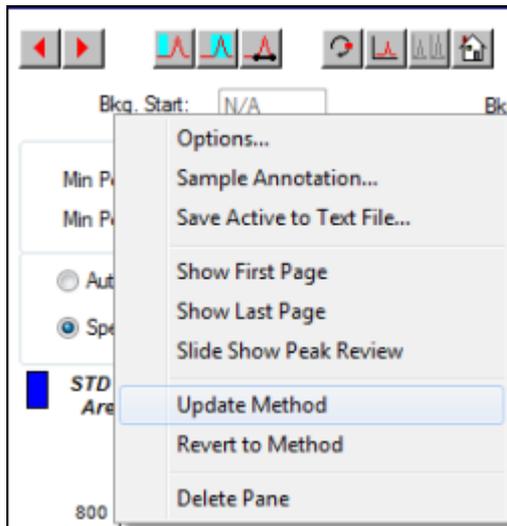
Der Peak ist jetzt näher an der Basislinie integriert.

14. Wenn die Änderung die Peak-Integration nicht verbessert passen Sie den **Noise Percent**-Parameter so lange an, bis der optimale Wert gefunden wird.

Hinweis: Die Funktion **Update Method** aktualisiert nur die Algorithmuswerte für diesen spezifischen Analyten (oder internen Standard) und nicht für alle Analyten.

15. Um den Algorithmus für alle Peaks zu aktualisieren, klicken Sie im Fenster mit der rechten Maustaste auf **Update Method**.

Abbildung 9-8 Update Method



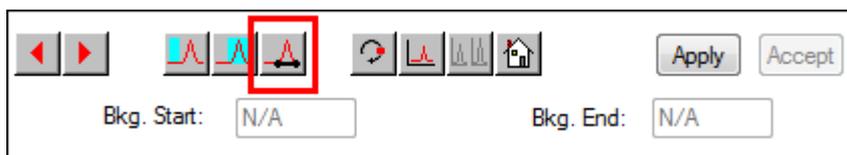
Peaks manuell integrieren

Das manuelle Integrieren von Peaks sollte zuletzt verwendet werden, um die personenabhängige Variabilität zu beschränken. Peaks sollten nur manuell integriert werden, wenn auch nach Anpassung und Aktualisierung der Algorithmus-Parameter nicht alle Peaks gefunden wurden. Wir empfehlen, dass die Benutzer die Ergebnisse validieren, um festzustellen, ob die manuelle Integration für bestimmte Applikationen akzeptabel ist.

Hinweis: Manuell integrierte Peaks oder ein Algorithmus, der nur für diesen Peak geändert wurde, werden in der Spalte „Record Modified“ der Ergebnistabelle gekennzeichnet. Das gleiche gilt für Peaks, bei denen Algorithmus-Parameter für eine Probe geändert wurden, die jedoch nicht auf die gesamte Analytengruppe angewendet wurden.

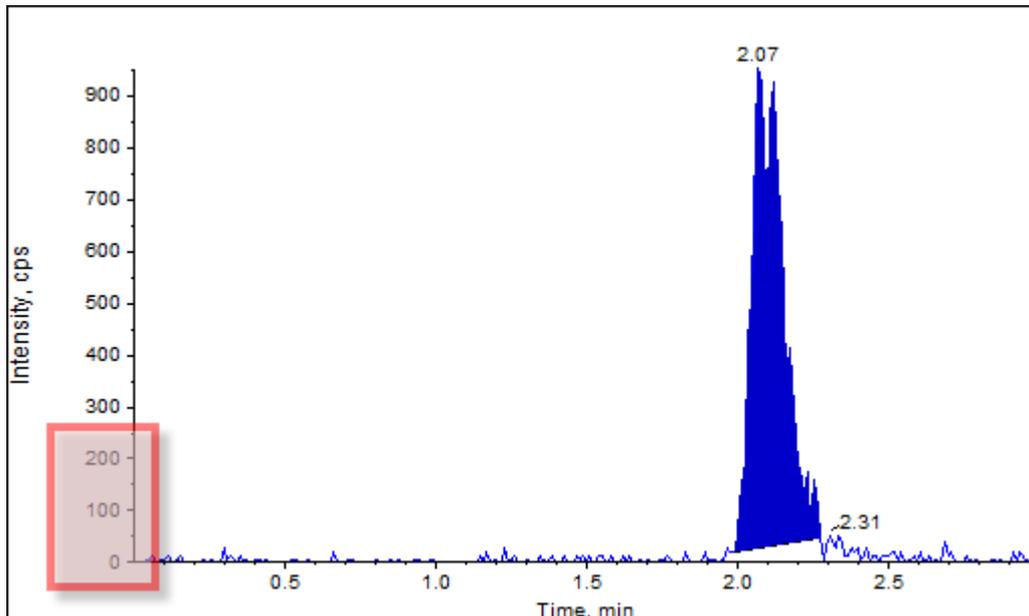
1. Im Fenster **Peak Review** klicken Sie auf **Manual Integration Mode**.

Abbildung 9-9 Teilfenster „Peak Review“: Manual Integration



2. Zoomen Sie auf die unteren 10 % des Peaks

Abbildung 9-10 Teilfenster „Peak Review“: Hineinzoomen auf einen Peak



3. Bewegen Sie das Fadenkreuz auf den gewünschten Start des zu definierenden Peaks und ziehen Sie dann das Fadenkreuz auf dessen Ende.

Die Software schattiert den Bereich, der von der Basis und den Seiten des Peaks begrenzt wird. Peak-Parameter sind grau, da sie nicht mehr anwendbar sind, weil der Peak von Hand gezeichnet wurde.

4. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
 - Um diese Änderung dauerhaft zu machen, klicken Sie auf **Accept**.
 - Um die Änderungen zu verwerfen, deaktivieren Sie das Kontrollkästchen **Manual Integration**.

Tip! Wenn ein ursprünglich ausgewählter Peak richtig war, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Peak und klicken Sie dann auf **Revert to Method**.

Peak Review Rechtsklick-Menü

Durch Rechtsklick in das Fenster oder Teilfenster **Peak Review** können Sie auf die Optionen zugreifen, die in [Tabelle 9-2](#) dargestellt sind.

Tabelle 9-2 Peak Review Rechtsklick-Menü

Menü	Funktion
Optionen	Öffnet das Dialogfeld Peak Review Options.
Sample Annotation	Öffnet das Dialogfeld Sample Annotation.

Tabelle 9-2 Peak Review Rechtsklick-Menü (Fortsetzung)

Menü	Funktion
Save Active to Text File	Speichert den ausgewählten Peak als Textdatei.
Show First Page	Geht zur ersten Probe.
Show Last Page	Geht zur letzten Probe.
Slide Show Peak Review	Startet die Bildschirmpräsentation.
Update Method	Aktualisiert den Algorithmus für alle Peaks.
Revert to Method	Wählt einen neu definierten Peak auf Basis der aktuellen Quantifizierungsmethode aus.
Delete Pane	Löscht das aktive Fenster.

Kalibrierkurven

Verwenden Sie Kalibrierkurven, um die berechnete Konzentration von Proben, einschließlich Qualitätskontroll-Proben (QC-Proben), zu ermitteln. QCs werden einem Batch hinzugefügt, um die Qualität und Genauigkeit der Standards im Batch zu schätzen. QCs haben bekannte Analytkonzentrationen, werden jedoch als Unbekannte behandelt, damit die gemessenen Konzentrationen mit dem tatsächlichen Wert verglichen werden können.

Die Kalibrierkurve wird durch Darstellung der Konzentration eines Standards im Verhältnis zur Fläche oder Höhe erzeugt. Bei Verwendung eines internen Standards wird das Verhältnis der Standardkonzentration oder des internen Standards gegenüber dem Verhältnis von Standard-Peak-Höhe oder Standard-Peak-Fläche zur internen Standard-Peak-Höhe oder zur internen Standard-Peak-Fläche dargestellt. Um die Konzentration einer Probe zu finden wird das Flächen- oder Höhenverhältnis einer Probe auf diese Kurve angewendet und in der Ergebnistabelle dargestellt. Eine Regressionsgleichung wird durch diese Kalibrierkurve entsprechend der vorgegebenen Regression erzeugt. Mit der Regressionsgleichung berechnet man die Konzentration der unbekanntenen Proben.

Kalibrierkurven anzeigen

Der Benutzer kann die Kalibrierkurve betrachten und die Regressionsoptionen in einer geöffneten Ergebnistabelle ändern. Sind zwei oder mehrere Ergebnistabellen geöffnet, können die Kalibrierkurven überlagert werden. Um Kurven zu überlagern, stellen Sie sicher, dass die gleichen Methoden zur Erstellung der Tabellen verwendet werden.

Durch Zeichnen einer Kalibrierkurve sieht man die Kurve, die für diese Regression verwendet wurde. Das Feld „Calculated Concentration“ in der Ergebnistabelle zeigt alle Änderungen an, die sich aus der Anpassung der Kurve an die Punkte der Norm ergeben.

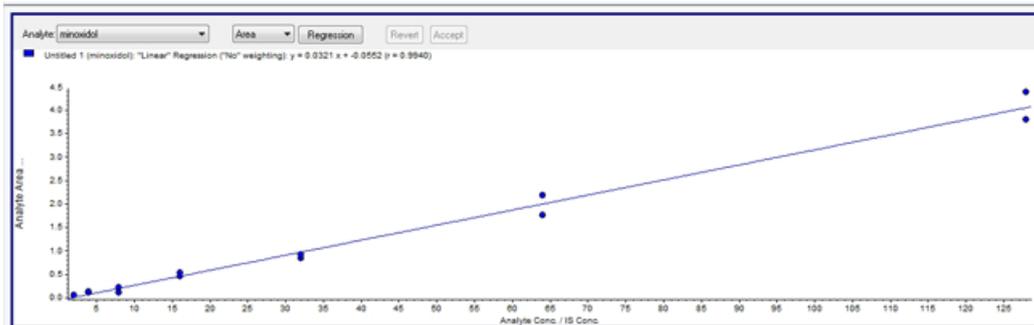
Hinweis: Diese Option ist nur verfügbar, wenn eine Ergebnistabelle im Arbeitsbereich geöffnet ist.

1. Öffnen Sie eine Ergebnistabelle.

2. Klicken Sie auf **Tools > Calibration > Pane**.

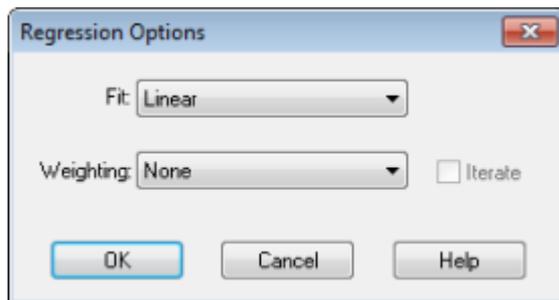
Das Fenster „Calibration Curve“ mit der Kalibrierkurve wird geöffnet.

Abbildung 9-11 Kalibrierkurve



3. Gibt es mehrere Analyten, kann man die Kalibrierkurve für einen weiteren Analyten durch folgende Schritte anzeigen:
 - a. Wählen Sie einen Analyten in der **Analyte**-Liste aus.
 - b. Wählen Sie gegebenenfalls aus der nächsten Liste **Area** oder **Height** aus.
4. Gehen Sie folgendermaßen vor, um die Regressionsoptionen einer Kalibrierkurve zu ändern:
 - a. Klicken Sie auf **Regression**.

Abbildung 9-12 Dialog „Regression Options“



- b. Wählen Sie in der Liste **Fit Linear**.
- c. Wählen Sie in der Liste **Weighting 1 / x**.
- d. Klicken Sie auf **OK**.

Die Kalibrierkurve wird geöffnet. Um eine bessere Kurve zu erzeugen, kann der Benutzer individuelle Peaks auf der Kurve betrachten oder Punkte aus der Kurve ausschließen.

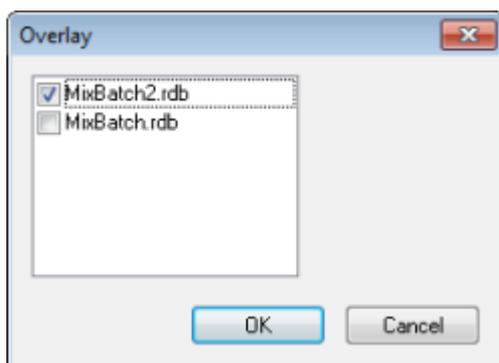
5. Falls erforderlich, wiederholen Sie diese Schritte, um eine bessere Kurve zu erzeugen.
6. Um Änderungen zu speichern, klicken Sie auf **Accept**.

Kalibrierkurven überlagern

Tipp! Um die Kurve einer Tabelle genauer zu untersuchen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Kurve und klicken Sie dann auf **Active Plot**. Wählen Sie die Kurve aus, die oben gezeichnet werden soll.

1. Mit zwei oder mehr offenen Ergebnistabellen können Sie die Kalibrierkurve einer Tabelle anzeigen.
2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Kalibrierkurve und dann auf **Overlay**.

Abbildung 9-13 Dialog „Overlay“



3. Wählen Sie die Tabellen aus, um sie mit der aktuellen Kurve zu überlagern.
4. Klicken Sie auf **OK**.

Die Software zeichnet die Kurven für alle ausgewählten Tabellen auf der gleichen Kurve.

Rechtsklick-Menü „Calibration Curve“

Durch Rechtsklick in das Fenster Calibration oder eine Teilfenster-Tabelle können Sie auf die in [Tabelle 9-3](#) beschriebenen Optionen zugreifen.

Tabelle 9-3 Rechtsklick-Menü „Calibration Curve“

Menü	Funktion
Exclude (Include)	Um den Punkt aus der Kurve auszuschließen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Punkt und klicken dann auf Exclude . Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Punkt und klicken dann auf Include , um den Punkt einzuschließen.
Exclude All Analytes (Include All Analytes)	Um alle Analyten aus der Kurve auszuschließen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Punkt und klicken dann auf Exclude All Analytes . Um Punkt wieder einzuschließen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Punkt und klicken dann auf Include All Analytes .
Show Peak	Bewertet einen einzelnen Peak.

Tabelle 9-3 Rechtsklick-Menü „Calibration Curve“ (Fortsetzung)

Menü	Funktion
Overlay	Überlagert zwei Diagramme
Active Plot	Legt fest, welche Zeichnung aktiv ist.
Legend	Zeigt die Diagramm-Legende.
Log Scale X Axis*	Verwendet einen logarithmischen Maßstab für die X-Achse.
Log Scale Y Axis*	Verwendet einen logarithmischen Maßstab für die Y-Achse.
Delete Pane	Löscht das aktive Fenster.
Home Graph	Zeigt die Grafik in Originalgröße an

* Ein logarithmischer Maßstab zeigt besser geordnete Datenpunkte an, so dass die Wirkung von allen Punkten gleichzeitig überwacht werden kann. Für diese Ansicht wählen Sie **Log Scale Y Axis** versus **Log Scale X** und nicht nur den Logarithmus für eine Achse.

Probenstatistiken

Mit dem Fenster Statistics zeigen Sie die Statistik für Proben an, typischerweise für Standards und QCs (Qualitätskontrollen). Die Daten von jedem verfügbaren Batch in der Ergebnistabelle werden in tabellarischer Form im Gitter angezeigt und eine Datenreihe wird für jeden Standard oder QC-Konzentration angezeigt.

Statistiken für Standards und QCs anzeigen

Wenn mehr als eine **Ergebnistabelle** geöffnet ist, können statistische Informationen über die Standards und QCs weiterer Batches im Fenster **Statistics** erhalten werden. Dies erleichtert den Vergleich von Ergebnissen zwischen den Batches und die Identifikation von Trends in den Standards oder QCs.

1. Öffnen Sie eine Ergebnistabelle.
2. Klicken Sie auf **Tools > Statistics**.
3. Wählen Sie **Concentration** in der Liste **Statistics Metric**.
4. Wählen Sie im Feld **Analyte Name** einen Analyten.
5. Wählen Sie im Feld **Sample Type Standard**.

Die Ergebnisse werden angezeigt.

6. Schauen Sie auf die Spalten **%CV** und **Accuracy**.

%CV zeigt den Variationskoeffizienten zwischen den Messungen eines Parameters, zum Beispiel der Fläche. **Accuracy** zeigt, wie nah der gezeichnete Punkt am interpolierten Wert liegt.

7. Aktivieren Sie bei Bedarf das Kontrollkästchen **Display Low/High values** und betrachten Sie dann die Werte **Low**, **High** und **Mean** für jede Tabellenzeile. Jede Zeile steht für Standards, die die gleiche Konzentrationen haben.

8. Wählen Sie einen anderen Analyten aus.

Die Ergebnisse werden pro Analyt angezeigt.

9. Um zu überprüfen, ob in der **Qualitätskontrolle** bei gleichen Konzentrationen Abweichungen vorliegen, wählen Sie **QC** im Feld **Sample Type**.

Vergleichen von Ergebnissen zwischen Batches

Wenn mehr als eine Ergebnistabelle angezeigt wird, können statistische Informationen über die Standards und QCs weiterer Batches im Fenster „Statistics“ abgerufen werden. Normalerweise werden Ergebnisse zwischen Batches verglichen, um nach Trends in den Standards oder QCs zu suchen oder um zu überprüfen, ob die Methode gültig ist.

Wenn zwei oder mehr Ergebnistabellen geöffnet sind, können Ergebnisse im Fenster „Statistics“ verglichen werden. Beide Statistiksätze werden im Fenster „Statistics“ angezeigt.

Damit Daten im Fensterbereich Statistics zusammengefasst werden können, müssen die Anzahl der Analyten und die Analyten-Namen übereinstimmen.

1. Öffnen Sie eine Ergebnistabelle.
2. Klicken Sie auf **Tools > Statistics**.
3. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
 - Um die Ergebnisse nach **Ergebnistabelle** zu ordnen, wählen Sie **Group By Batch** unter **Conc. as Rows**.
 - Um die Ergebnisse nach der Konzentration zu ordnen, wählen Sie **Group By Concentration** in der Liste **Conc. as Rows** zu ordnen.
 - Um die Ergebnisse nach Konzentration zu ordnen, aber ohne die Zeile, in der die Statistik für jede Gruppe oder jeden Batch angezeigt wird, wählen Sie **Group By Concentration (no All)** in der Liste **Conc. as Rows (Konzentrationen als Zeilen)** angezeigt wird.

Die Software sortiert die Ergebnisse. Am Ende jedes Batches oder jeder Gruppe erscheinen ein oder zwei zusätzliche Zeilen: **All** (Statistik für alle Ergebnistabellen in dieser Gruppe) und **Average** (Statistik über die Statistiken dieses Batches oder dieser Gruppe).

Verwenden Sie die Beispieldateien, die im Ordner „Example“ installiert wurden, um zu lernen, wie man Daten mit den gängigsten Analyse- und Bearbeitungswerkzeuge betrachten und analysieren kann. Weitere Informationen zu den folgenden Themen finden Sie im *Handbuch für fortgeschrittene Benutzer*:

- Diagramme beschriften
- Überlagerung und Summierung von Spektren oder Chromatogrammen
- Hintergrundsubtraktionen durchführen
- Glätten der Daten
- Mit geglätteten Daten arbeiten
- Mit Strichspektrendaten arbeiten
- Mit Konturdiagrammen arbeiten
- Mit dem Fragment-Interpretations-Tool arbeiten
- Mit Bibliothek-Datenbanken und Bibliothek-Datensätzen arbeiten

Dateien öffnen

Tipp! Um das automatische Aktualisieren des Massenspektrums auszuschalten, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Massenspektrum und klicken Sie dann auf **Show Last Scan**. Wenn ein Häkchen neben **Show Last Scan** angezeigt wird, dann wird das Spektrum in Echtzeit aktualisiert.

1. In der Navigationsleiste unter **Explore** doppelklicken Sie auf **Open Data File**.

Der Dialog „Select Sample“ wird angezeigt.

2. In der Liste **Data Files** navigieren Sie zu der zu öffnenden Datendatei, wählen eine Probe aus und klicken auf **OK**.

Die aus der Probe aufgenommenen Daten werden angezeigt. Werden Daten noch immer aufgenommen, werden das Massenspektrum, die DAD/UV-Spur und TIC automatisch aktualisiert.

In einer Datei zwischen Proben navigieren

Hinweis: Wurden Proben in separaten Dateien gespeichert, dann öffnen Sie jede Datei einzeln.

Tabelle D-5 auf Seite 188 zeigt die in diesem Verfahren verwendeten Navigationssymbole.

- Öffnen Sie eine Datendatei, die mehrere Proben enthält, und führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
 - Klicken Sie auf das Symbol mit dem nach rechts zeigenden Pfeil, um zur nächsten Probe in der Datendatei zu springen.
 - Klicken Sie auf das Symbol mit dem nach rechts geschwungenen Pfeil, um zu einer nicht darauf folgenden Probe zu springen.
 - Wählen Sie die Probe aus der Liste Sample im Dialogfeld **Select Sample** zur Anzeige aus.
 - Klicken Sie auf das Symbol mit dem nach links zeigenden Pfeil, um zur vorherigen Probe in der Datendatei zu springen.

Versuchsbedingungen betrachten

Die experimentellen Bedingungen, die zur Sammlung von Daten verwendet werden, sind in der Datei mit den Ergebnissen gespeichert. Die Informationen enthalten Details zur angewandten Erfassungsmethode: die MS-Erfassungsmethode (das heißt, die Anzahl der Perioden, Experimente und Zyklen) einschließlich Geräteparameter und HPLC-Geräte-Methoden (LC-Pumpendurchfluss). Darüber hinaus enthalten sie auch MS-Auflösungs- und Massen-Kalibrierungstabellen für die angewendete Probenaufnahme. Tabelle 10-1 zeigt die zur Verfügung stehende Software-Funktionalität, wenn der Benutzer Datei-Informationen betrachtet.

Hinweis: Wenn Daten von mehr als einer Probe in der gleichen wiff-Datei aufgenommen werden, wird das Dateiinformatoren-Fenster beim Scrollen durch die Proben nicht automatisch aktualisiert. Schließen Sie das Dateiinformatoren-Fenster und öffnen es dann wieder, um Details für die nächste Probe in der wiff-Datei anzuzeigen.

- Klicken Sie auf **Explore > Show > Show File Information**.

Das Dateiinformatoren-Fenster wird unter dem Diagramm geöffnet.

Tipp! Um eine Erfassungsmethode im Teilfenster **File Information** zu erstellen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Teilfenster **File Information** und klicken Sie dann auf **Save Acquisition Method**.

Tabelle 10-1 Rechtsklick-Menü für das Teilfenster Show File Information

Menü	Funktion
Copy	Kopiert die ausgewählten Daten
Paste	Fügt Daten ein.
Select All	Wählt alle Daten im Fensterbereich aus.
Save To File	Speichert Daten als RTF-Datei.
Font	Ändert die Schriftart.

Tabelle 10-1 Rechtsklick-Menü für das Teilfenster Show File Information (Fortsetzung)

Menü	Funktion
Save Acquisition Method	Speichert die Erfassungsmethode als dam-Datei.
Save Acquisition Method to CompoundDB	Öffnet das Dialogfeld Specify Compound Information. Wählen Sie die IDs und Molekulargewichte, die in der Datenbank für chemische Verbindungen gespeichert werden sollen.
Delete Pane	Löscht das ausgewählte Teilfenster.

Daten in Tabellenform anzeigen

1. Öffnen Sie eine Datei.
2. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show List Data**.

Die Daten werden in einem Fenster unter der Grafik angezeigt.

Abbildung 10-1 Registerkarte „Peak List“

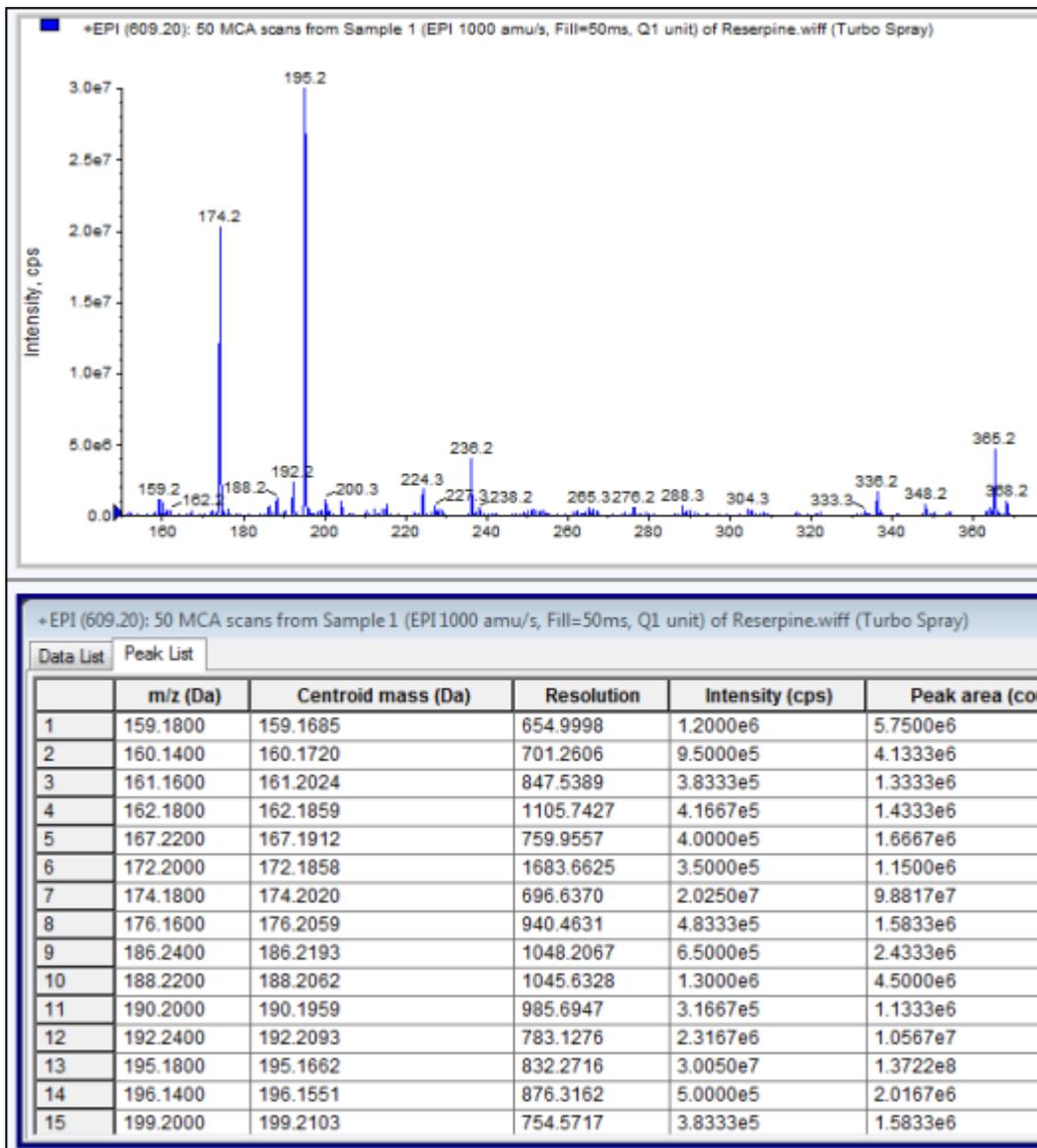


Tabelle 10-2 Rechtsklick-Menü für die Registerkarte „Spectral Peak List“

Menü	Funktion
Spaltenoptionen	Öffnet das Dialogfeld Select Columns for Peak List .
Save As Text	Speichert die Daten als .txt-Datei.
Delete Pane	Löscht das ausgewählte Teilfenster.

Tabelle 10-3 Rechtsklick-Menü für die Registerkarte „Chromatographic Peak List“

Menü	Funktion
Show Peaks in Graph	Zeigt die Peaks in zwei Farben im Diagramm an.
IntelliQuan Parameters	Öffnet das Dialogfeld IntelliQuan .
Save As Text	Speichert die Daten als txt-Datei.
Delete Pane	Löscht das ausgewählte Teilfenster.

ADC-Daten anzeigen

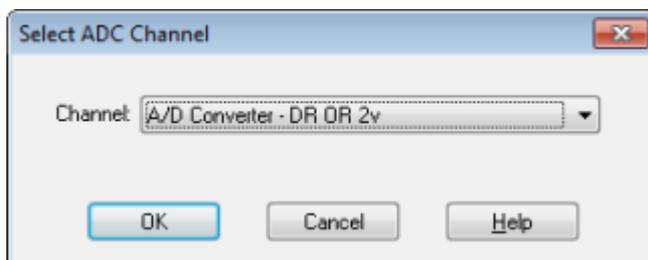
ADC- (Analog-Digital-Wandler)-Daten werden durch einen sekundären Detektor aufgenommen (beispielsweise durch einen UV-Detektor über eine ADC-Karte) und eignen sich für einen Vergleich mit Massenspektrometer-Daten. Um ADC-Daten zur Verfügung zu haben, nehmen Sie Daten und Massenspektrometer-Daten gleichzeitig auf und speichern diese dann in der gleichen Datei ab.

1. Stellen Sie sicher, dass der **Example**-Ordner ausgewählt wird.
2. In der Navigationsleiste unter **Explore** doppelklicken Sie auf **Open Data File**.

Das Dialogfeld Select Sample wird geöffnet.

3. Im Feld **Data Files** doppelklicken Sie auf **Devices** und dann auf **Adc16chan.wiff**.
4. In der **Samples**-Liste wählen Sie eine Probe und klicken Sie dann auf **OK**.
5. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show ADC Data**.

Abbildung 10-2 Dialogfeld „Select ADC Channel“



6. Wählen Sie einen Kanal in der **Channel**-Liste aus und klicken Sie dann auf **OK**.

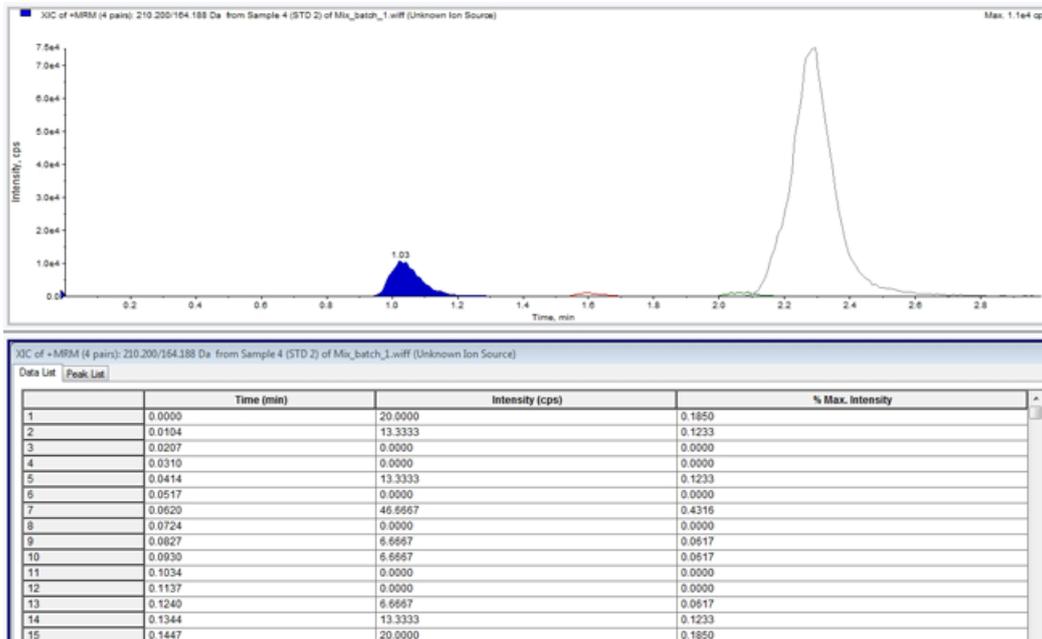
Die ADC-Daten werden in einem neuen Fenster unter dem aktiven Fenster angezeigt.

Grundlegende quantitative Daten anzeigen

1. Öffnen Sie eine Datei.

2. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show List Data**.

Abbildung 10-3 Daten auflisten



3. Klicken Sie in der Registerkarte Peak List mit der rechten Maustaste und wählen Sie dann **Show Peaks in Graph**.

Peaks werden in zwei Farben angezeigt.

4. Um die Einstellungen für den Algorithmus zum Finden von Peaks zu ändern, klicken Sie mit der rechten Maustaste und wählen dann **Analyst Classic Parameters** oder **IntelliQuan Parameters**, je nachdem, welcher aktiv ist.
5. (Optional) Um die farbigen Peaks zu entfernen, klicken Sie mit der rechten Maustaste in der Registerkarte Peak List und löschen dann **Show Peaks in Graph**.

Chromatogramme

Ein Chromatogramm ist eine graphische Darstellung der Daten, die bei der Analyse einer Probe gewonnen wurden. Die Signalstärke wird dabei auf einer Achse dargestellt, die entweder die Zeit oder die Anzahl der Scans zeigt. Für weitere Informationen über die für Chromatogramme verfügbaren Softwarefunktionen siehe [Tabelle 10-6 auf Seite 127](#).

Die Software zeigt die Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde (Counts per Second - cps) auf der Y-Achse gegen die Zeit auf der X-Achse. Peaks oberhalb eines festgelegten Schwellenwerts werden automatisch beschriftet. Im Falle von LC-MS wird ein Chromatogramm oft als Funktion der Zeit dargestellt. [Tabelle 10-4](#) enthält eine Beschreibung der Arten von Chromatogrammen.

Weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Symbole siehe [Tabelle 10-8 auf Seite 130](#).

Tabelle 10-4 Chromatogramm-Arten

Chromatogramm-Arten	Ziel
TIC (Total Ion Chromatogram - Gesamtionenchromatogramm)	<p>Eine chromatographische Anzeige, die durch Auftragen der Summe der Intensitäten aller Ionen in einem Scan als Funktion von Zeit oder Anzahl der Scans generiert wird.</p> <p>Wenn eine Datendatei geöffnet wird, wird sie standardmäßig als TIC geöffnet. Enthält ein Experiment nur einen Scan, wird es als Spektrum angezeigt.</p> <p>Wird das Kontrollkästchen MCA während der Erfassung der Datei ausgewählt, dann wird die Datei für das Massenspektrum geöffnet. Wird das Kontrollkästchen MCA nicht aktiviert, dann wird die Datendatei als TIC geöffnet.</p>
XIC (Extracted Ion Chromatogram – Auszug aus dem Ionenchromatogramm)	<p>Ein Ionenchromatogramm wird erstellt, indem Intensitätswerte bei einem diskreten Massenwert oder Massenbereich aus einer Reihe von massenspektrometrischen Scans verwendet werden. Es zeigt das Verhalten einer bestimmten Masse oder Massenbereiches als Funktion der Zeit.</p>
BPC (Basepeakchromatogramm)	<p>Eine chromatographische Kurve, die die Intensität des jeweils intensivsten Ions innerhalb eines Scans im Vergleich zur Zeit oder Anzahl der Analysen zeigt.</p>
TWC (Total Wavelength Chromatogram - Gesamtwellenlängen-Chromatogramm)	<p>Bei einer chromatographischen Anzeige werden alle Absorptionswerte im aufgenommenen Wellenlängenbereich summiert und die Werte als Funktion der Zeit aufgetragen. Es besteht aus den summierten Absorptionen aller Ionen in einem Scan, die für einen chromatographischen Bereich als Funktion der Zeit aufgetragen werden.</p>
XWC (Extracted Wavelength Chromatogram – Extrahiertes Wellenlängen-Chromatogramm)	<p>Eine Teilmenge von TWC. Ein XWC zeigt die Absorption für einer bestimmten Wellenlänge oder die Summe der Absorption für Wellenlängenbereiche.</p>
DAD (Diode Array Detector - Diodenarray-Detektor)	<p>Ein UV-Detektor überwacht das Absorptionsspektrum der eluierenden Verbindungen bei einer oder mehreren Wellenlängen.</p>

TICs aus einem Spektrum anzeigen

Um eine Beispiel-Datendatei anzuzeigen, stellen Sie sicher, dass das Projekt Example ausgewählt ist. Öffnen Sie den Ordner LIT und öffnen Sie dann die Datei Reserpine.wiff.

- Klicken Sie auf **Explore > Show > Show TIC**.

Das TIC wird in einem neuen Fenster geöffnet.

Tipp! Klicken Sie mit der rechten Maustaste in ein Fenster mit einem Spektrum und dann auf **Show TIC**.

Ein Spektrum aus einem TIC anzeigen

Ein TIC wird durch Summieren der Intensitätsbeiträge aller Ionen aus einer Reihe von Massen-Scans erzeugt. Verwenden Sie das TIC, um den gesamten Datensatz in einem einzigen Fenster zu sehen. Es besteht aus den summierten Intensitäten aller Ionen in einem Scan, die für einen chromatographischen Bereich als zeitabhängige Funktion abgebildet werden. Wenn die Dateien Ergebnisse aus mehreren Experimenten enthalten, kann der Benutzer ein individuelles TIC für jedes Experiment erstellen und ein anderes TIC, das die Summe aller Experimente darstellt.

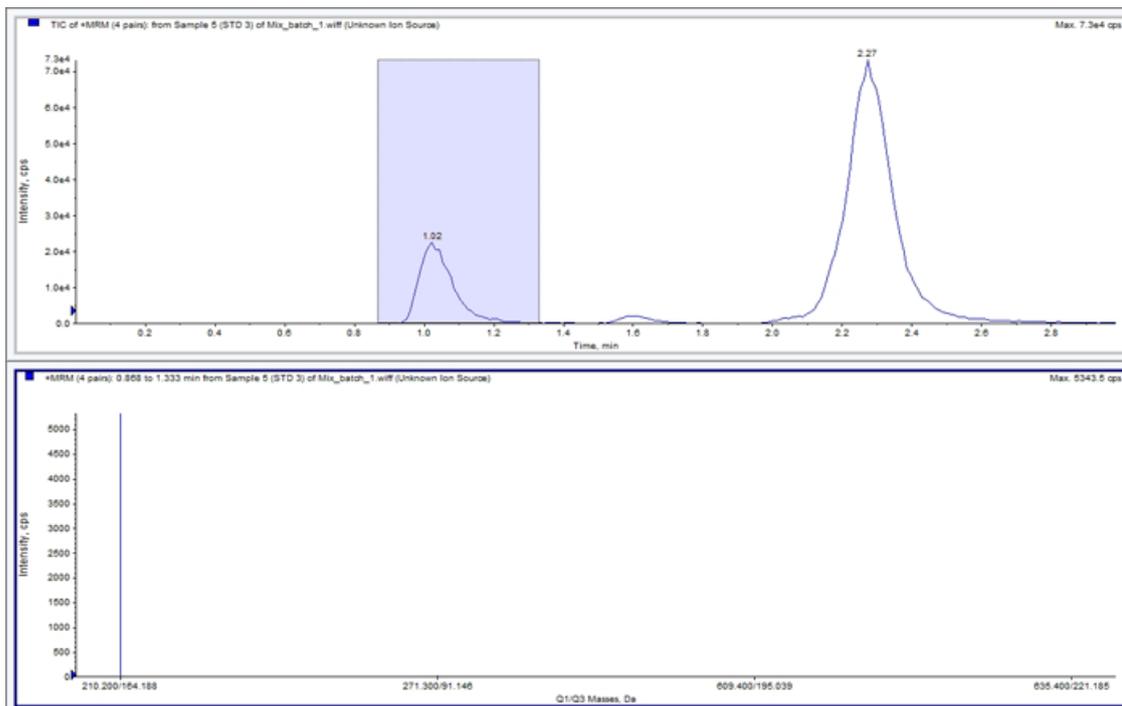
Wenn eine Datei geöffnet wird, wird sie standardmäßig als TIC angezeigt. Enthält ein Experiment dagegen nur einen Zyklus, wird es als Spektrum angezeigt. Wenn der Benutzer das Kontrollkästchen MCA vor der Erfassung der Datendatei auswählt, dann wird die Datei für das Massenspektrum geöffnet. Wird das Kontrollkästchen MCA nicht ausgewählt, dann wird die Datei für den TIC geöffnet.

1. Wählen Sie einen Bereich aus einem Teilfenster mit einem TIC.
2. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show Spectrum**.

Das Spektrum wird in einem neuen Fenster geöffnet.

Tipp! Doppelklicken Sie im Fensterbereich TIC auf eine bestimmte Zeit, um das Spektrum anzuzeigen.

Abbildung 10-4 Beispiel eines TIC



Über das Generieren von XICs

XICs können nur mit den Chromatogrammen oder Spektren für eine einzige Periode und ein einziges Experiment generiert werden. Um ein XIC aus Daten für mehrere Perioden oder mehrere Experimente zu erhalten, müssen Sie die Daten durch Klicken auf das Dreieck unter der x-Achse in einzelne Teilfenster aufteilen. Weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Symbole siehe [Tabelle 10-8 auf Seite 130](#).

Es gibt mehrere Verfahren zum Extrahieren von Ionen zur Erzeugung eines XIC, je nachdem, ob chromatographische oder spektrale Daten verwendet werden. [Tabelle 10-5](#) enthält eine Zusammenfassung der Verfahren, die mit Chromatogrammen und Spektren angewendet werden können.

Tabelle 10-5 Zusammenfassung der Methoden, wie man XICs generiert

Methoden	Mit Chromatogramm verwenden	Mit Spektrum verwenden	Extraktion
Selected range	Nein	Ja	Extrahiert Ionen aus einem ausgewählten Bereich in einem Spektrum.
Maximum	Nein	Ja	Extrahiert Ionen aus einem ausgewählten Bereich in einem Spektrum und verwendet dazu den intensivsten Peak im ausgewählten Bereich. Diese Option erzeugt ein XIC unter Verwendung der maximalen Masse aus dem ausgewählten Spektralbereich.
Base peak masses	Ja	Ja	Kann nur bei Basepeakchromatogrammen (BPCs) verwendet werden. Die Verwendung des Befehl Use Base Peak Masses zur Extraktion von Ionen ergibt ein XIC mit einer andersfarbigen Linie für jede Masse. Wenn die Auswahl mehrere Peaks umfasst, wird die resultierende XIC die gleiche Anzahl von Linien mit einer anderen Farbe für jede Masse haben.
Specified masses	Ja	Ja	Extrahiert Ionen aus jeder Art von Spektrum oder Chromatogramm. Wählen Sie bis zu zehn Anfangs- und Endmassen, für die XICs generiert werden sollen.

Ein XIC mit einem ausgewählten Bereich generieren

1. Öffnen Sie eine Datendatei, die Spektren enthält.
2. Wählen Sie einen Bereich aus, indem Sie die linke Maustaste am den Anfang des Bereichs klicken und mit gedrückter Maustaste den Mauszeiger an den Endpunkt ziehen und die linke Maustaste dort loslassen.

Die Auswahl wird Blau angezeigt.

3. Klicken Sie auf **Explore > Extract Ions > Use Range**.

Ein XIC für die Auswahl wird in einem Teilfenster unterhalb des Spektrum-Teilfensters geöffnet. Die Experiment-Informationen oben im Fenster zeigen den Massenbereich und die maximale Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde.

Ein XIC mit dem maximalen Peak generieren

1. Öffnen Sie eine Datendatei, die Spektren enthält.

2. Wählen Sie einen Bereich in einem Spektrum.

Die Auswahl wird Blau angezeigt.

3. Klicken Sie auf **Explore > Extract Ions > Use Maximum**.

Ein XIC für den ausgewählten maximalen Peak öffnet sich in einem Fenster unterhalb des Spektrum-Fensters. Die Experiment-Informationen oben im Fenster zeigen den Massenbereich und die maximale Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde.

Ein XIC mit den Basispeakmassen generieren

1. Öffnen Sie eine Datendatei, die Spektren enthält.
2. In einem BPC wählen Sie den Peak, aus dem Ionen extrahiert werden sollen.

Die Auswahl wird Blau angezeigt.

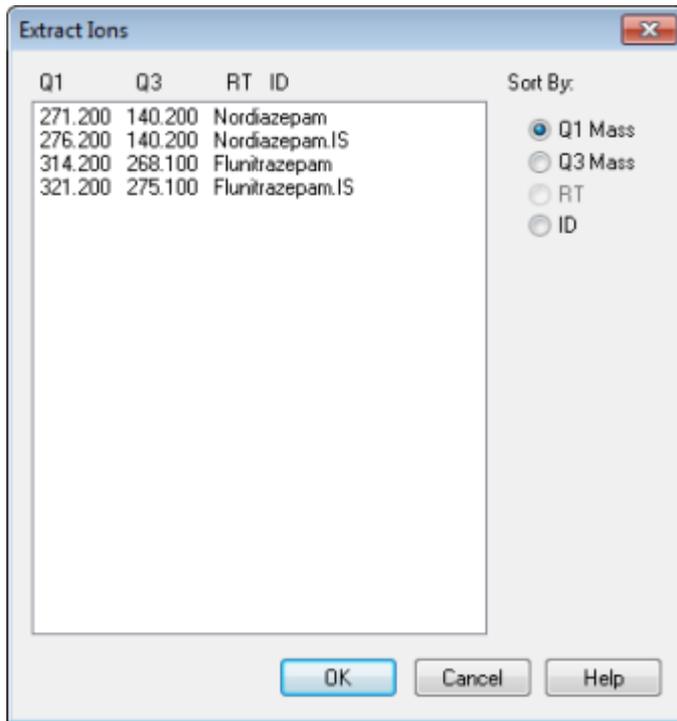
3. Klicken Sie auf **Explore > Extract Ions > Use Base Peak Masses**.

Ein XIC für die getroffene Auswahl öffnet sich unterhalb dem Spektrum-Fenster. Die Experiment-Informationen auf der Fensteroberseite zeigen den Massenbereich und die maximale Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde.

Ionen durch Auswählen von Massen extrahieren

1. Öffnen Sie ein Spektrum oder Chromatogramm.
2. Klicken Sie auf **Explore > Extract Ions > Use Dialog**.

Abbildung 10-5 Dialog Extract Ions



3. Geben Sie die Werte für jede zu erstellende XIC ein. Falls kein Endwert eingegeben wird, wird der Bereich durch den Anfangswert definiert.

- Im Feld **Start** geben Sie den Anfangswert (kleinerer Wert) für den Massenbereich ein.
- Im Feld **Stop** geben Sie den Endwert (größerer Wert) für den Massenbereich ein.

4. Klicken Sie auf **OK**.

Ein XIC für die getroffene Auswahl öffnet sich unterhalb dem Chromatogramm-Fenster. Die Experiment-Informationen oben im Fenster enthält die Massen und die maximale Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde.

BPCs generieren

BPCs können nur mit den Daten für eine einzige Periode und ein einziges Experiment generiert werden.

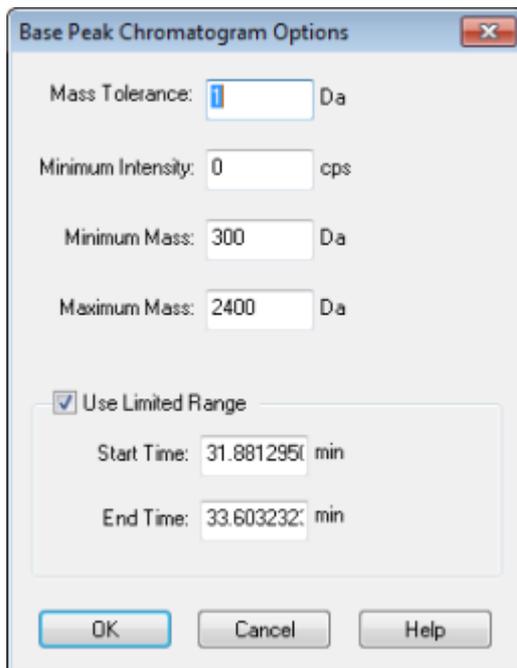
1. Öffnen Sie eine Datei.
2. Wählen Sie einen Bereich innerhalb eines TIC.

Die Auswahl wird Blau angezeigt.

3. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show Base Peak Chromatogram**.

Die Auswahl wird in den Feldern **Start Time** und **End Time** angezeigt.

Abbildung 10-6 Base Peak Chromatogram Options



4. Im Feld **Mass Tolerance** geben Sie den Wert ein, der den zu verwendenden Massenbereich zum Finden eines Peaks anzeigt. Die Software findet den Peak über den zweifachen Wert, der für den Bereich eingegeben wurde (\pm Massenwert).
5. Geben Sie im Feld **Minimum Intensity** die Intensität ein, unter der Peaks vom Algorithmus ignoriert werden.
6. Geben Sie im Feld **Minimum Mass** die Masse ein, die den Anfang des Scanbereiches bestimmt.
7. Geben Sie im Feld **Maximum Mass** die Masse ein, die das Ende des Scanbereiches bestimmt.
8. Um die Start- und Endzeit festzulegen, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Use Limited Range** und machen Folgendes:
 - Im Feld **Start Time** geben Sie die Zeit ein, die den Beginn des Experiments bestimmt.
 - Im Feld **End Time** geben Sie die Zeit ein, die das Ende des Experiments bestimmt.
9. Klicken Sie auf **OK**.

Der BPC wird in einem neuen Fenster erzeugt.

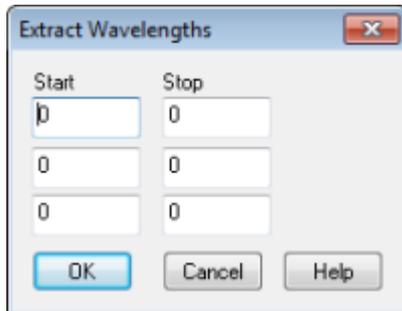
XWCs generieren

Ein XWC ist ein Wellenlängen-Chromatogramm und wird erzeugt, indem die Intensität einer bestimmten Wellenlänge oder die Summe der Absorption für mehrere Wellenlängenbereiche verwendet wird. Sie können

bis zu drei Bereiche aus einem DAD-Spektrum extrahieren, um den XWC zu generieren. Weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Ionen siehe [Tabelle 10-8 auf Seite 130](#).

1. Öffnen Sie eine Datei, die ein DAD-Spektrum enthält.
2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste an einer beliebigen Stelle im Fensterbereich und dann auf **Extract Wavelengths**.

Abbildung 10-7 Dialog „Extract Wavelengths“



3. Geben Sie **Start-** und **Stop** ein.
4. Klicken Sie auf **OK**.

Das XWC wird in einem Fenster unterhalb des DAD-Spektrums angezeigt.

Generieren von DAD-Daten

Wie bei Massenspektrometer-Daten können Sie DAD-Daten als Chromatogramm oder Spektrum anzeigen. Benutzer können das DAD-Spektrum für einen bestimmten Zeitpunkt oder einen Zeitbereich als Gesamtwellenlängen-Chromatogramm (TWC) anzeigen.

1. Öffnen Sie eine Datei, die mit einem DAD aufgenommenen Daten enthält.

Ein TWC, das analog zu einem TIC ist, öffnet sich in einem Fenster unterhalb des TIC.

2. Klicken Sie im Teilfenster TWC auf einen Punkt, um einen bestimmten Zeitpunkt auszuwählen oder markieren einen Bereich des Spektrums, um einen Zeitbereich auszuwählen.
3. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show DAD Spectrum**.

Die DAD-Spektrum öffnet sich in einem Fenster unterhalb des TWC. Die y-Achse zeigt die Absorption und die x-Achse zeigt die Wellenlänge.

Tipp! Wenn das Teilfenster mit dem TWC geschlossen ist, klicken Sie auf einen beliebigen Punkt im TWC, um es erneut zu öffnen. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show DAD TWC**.

TWCs generieren

Ein TWC ist ein weniger gebräuchliches Chromatogramm. Es zeigt die gesamte Absorption (mAU) als eine Funktion der Zeit. Ein TWC zeigt einen ganzen Datensatz in einem einzigen Fenster an. Es besteht aus den summierten Absorptionen aller Ionen in einem Scan, die für einen chromatographischen Bereich als zeitabhängige Funktion dargestellt werden. Wenn die Dateien Ergebnisse aus mehreren Experimenten enthalten, erstellen Sie ein individuelles TWC für jedes Experiment und ein anderes TWC, das die Summe aller Experimente darstellt.

Ein TWC zeigt die gesamte Absorption (mAU) auf der y-Achse als Funktion der Zeit auf der x-Achse an. Weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Optionen siehe [Tabelle 10-8 auf Seite 130](#).

1. Öffnen Sie eine Datei, die ein DAD-Spektrum enthält.
2. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show DAD TWC**.

Das TWC wird in einem Fenster unterhalb des DAD-Spektrums angezeigt.

Tipp! Klicken Sie mit der rechten Maustaste in das Fenster mit dem DAD-Spektrum und klicken dann auf **Show DAD TWC**.

Schwellenwert anpassen

Der Schwellenwert ist eine unsichtbare Linie parallel zur x-Achse eines Diagramms und stellt eine Grenze dar, unterhalb der die Software die Peaks in einem Spektrum nicht mehr berücksichtigt. Die Linie hat einen Griff, der als blaues Dreieck auf der linken Seite der y-Achse dargestellt wird. Klicken Sie auf das blaue Dreieck und Sie sehen eine gestrichelte Linie, die den Schwellenwert repräsentiert. Der Schwellenwert kann angehoben oder abgesenkt werden, aber eine Änderung des Schwellenwertes verändert keine Daten. Die Software markiert keine Peaks für den Bereich, die unter dem Schwellenwert liegen.

1. Öffnen Sie eine Datei.
2. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
 - Um den Schwellenwert zu erhöhen, ziehen Sie das blaue Dreieck auf der y-Achse nach oben. Um den Schwellenwert zu senken, ziehen Sie das blaue Dreieck nach unten.
 - Klicken Sie auf **Explore > Set Threshold**. Geben Sie dann im sich öffnenden Dialogfeld Threshold Options den Schwellenwert ein und klicken Sie dann auf **OK**.
 - Klicken Sie auf **Explore > Threshold**.

Das Diagramm wird aktualisiert und zeigt den neuen Schwellenwert. Die Beschriftung von Peaks und die Liste der Peaks werden ebenfalls aktualisiert.

Tipp! Um den aktuellen Schwellenwert anzuzeigen, bewegen Sie den Mauszeiger über den Griff des Schwellenwertes.

Chromatogramm-Teilfenster

Tabelle 10-6 Rechtsklick-Menü für Chromatogramm-Teilfenster

Menü	Funktion
List Data	Listet die Datenpunkte auf und integriert die in Chromatogrammen ermittelten Peaks.
Show Spectrum	Erzeugt ein neues Teilfenster mit dem Spektrum.
Show Contour Plot	Zeigt eine farbkodierte Linie für einen Datensatz, wobei die Farbe für die Intensität der Daten an diesem Punkt steht. Nur bestimmte MS-Modi werden unterstützt.
Extract Ions	Extrahiert ein bestimmtes Ion oder einen bestimmten Satz von Ionen aus einem ausgewählten Teilfenster und erzeugt dann ein neues Teilfenster mit einem Chromatogramm für die jeweiligen Ionen.
Show Base Peak Chromatogram	Erzeugt ein neues Fenster mit einem Basispeakchromatogramm.
Show ADC Data	Erzeugt ggf. ein neues Fenster mit der ADC-Datenlinie.
Show UV Detector Data	Erzeugt ggf. ein neues Fenster mit der UV-Daten-Linie.
Spectral Arithmetic Wizard	Öffnet den Spectral Arithmetic Wizard (Assistent zur arithmetischen Spektrenbearbeitung)
Save to Text File	Erzeugt eine Textdatei, die die Daten in einem Fensterausschnitt enthält, und die in Microsoft Excel oder anderen Programmen geöffnet werden kann.
Save Explore History	Speichert Informationen zu Änderungen an Verarbeitungsparametern, die auch „Processing Options“ genannt werden und die vorgenommen wurden, während eine .wiff-Datei im Modus „Explore“ verarbeitet wurde. Das Verarbeitungsprotokoll wird in einer Datei mit der Erweiterung .EPH (Explore Processing History - Verarbeitungsprotokoll der Untersuchung) gespeichert.
Add Caption	Fügt einen Text an der Cursor-Stelle im Fensterbereich ein.
Add User Text	Fügt ein Textfeld an der Mauszeiger-Position im Teilfenster ein.
Set Subtract Range	Legt den Subtraktionsbereich im Fenster fest.
Clear Subtract Range	Löscht den Subtraktionsbereich im Fenster.
Subtract Range Locked	Sperrt oder entsperrt den Subtraktionsbereich. Wenn die Subtraktionsbereiche nicht gesperrt sind, kann jeder Subtraktionsbereich unabhängig voneinander bewegt werden. Die Subtraktionsbereiche sind gesperrt voreingestellt.
Delete Pane	Löscht das ausgewählte Teilfenster.

Spektren-Teilfenster

Tabelle 10-7 Rechtsklick-Menü für Spektren-Teilfenster

Menü	Funktion
List Data	Listet Datenpunkte auf und integriert Chromatogramme.
Show TIC	Erzeugt ein neues Fenster mit TIC.
Extract Ions (Use Range)	Extrahiert ein bestimmtes Ion oder einen bestimmten Satz von Ionen aus einem ausgewählten Teilfenster und erzeugt dann ein neues Teilfenster mit einem Chromatogramm für die jeweiligen Ionen.
Extract Ions (Use Maximum)	Extrahiert Ionen und verwendet dazu den intensivsten Peak in einem ausgewählten Bereich.
Save to Text File	Erzeugt eine Textdatei des Fensterausschnittes, die in Microsoft Excel oder anderen Programmen geöffnet werden kann.
Save Explore History	Speichert Informationen zu Änderungen an Verarbeitungsparametern, die auch „Processing Options“ genannt werden und die vorgenommen wurden, während eine wiff-Datei im Modus „Explore“ verarbeitet wurde. Das Verarbeitungsprotokoll wird in einer Datei mit der Erweiterung .EPH (Explore Processing History - Verarbeitungsprotokoll der Untersuchung) gespeichert.
Add Caption	Fügt eine Beschriftung an der Cursor-Stelle im Fensterbereich ein.
Add User Text	Fügt ein Textfeld an der Mauszeiger-Position im Fensterbereich ein.
Show Last Scan	Zeigt den Scan vor der Auswahl.
Select Peaks For Label	In diesem Dialog wählen Sie die Parameter zur Kennzeichnungen von Peaks.
Delete Pane	Löscht das ausgewählte Teilfenster.
Add a Record	Fügt Datensätze und verbindungsbezogene Daten einschließlich Spektren zur Bibliothek hinzu. Hierzu muss ein Spektrum aktiviert sein.
Search Library	Durchsucht die Bibliothek ohne Bedingungen oder mit zuvor gespeicherten Bedingungen.
Set Search Constraints	Durchsucht die Bibliothek mit den Kriterien, die im Dialogfeld Search Constraints eingegeben wurden.

Verarbeiten von Diagrammdateien

Graphische Daten können auf viele Arten verarbeitet werden. Dieser Abschnitt enthält Informationen und Verfahren zur Verwendung einiger der am häufigsten verwendeten Werkzeuge.

Der User kann sowohl in Spektren wie auch Chromatogrammen einen Teil einer Grafik vergrößern (zoomen) um einen bestimmten Peak oder eine bestimmte Fläche genauer zu sehen. Der Benutzer kann immer wieder vergrößern, um noch kleinere Peaks zu sehen.

Diagramme

Die gleichen Daten können auf verschiedene Weise untersucht werden. Daten können zum Vergleich vor einer Verarbeitung wie Glättung oder Subtraktion gespeichert werden.

Ein Fenster enthält eines oder mehrere Teilfenster, die so angeordnet sind, dass alle Teilfenster vollständig sichtbar sind und sich nicht überlappen.

Teilfenster können eine variable oder feste Größe haben. Teilfenster werden innerhalb eines Fensters automatisch als Kacheln in Spalten und Zeilen angeordnet. Wenn die Größe eines Fensters geändert wird, passen sich die Teilfenster innerhalb des Fensters automatisch an die neue Größe an. Die Größe eines Fensters kann nicht so verändert werden, dass Teilfenster kleiner als ihre minimale Größe werden.

Zwei oder mehrere Fenster oder Teilfenster mit ähnlichen Daten können verknüpft werden, zum Beispiel Spektren mit ähnlichem Massenbereich. Wird ein Fenster oder Teilfenster vergrößert, vergrößern sich die anderen Teilfenster gleichzeitig. Zum Beispiel kann ein User eine XIC mit einem BPC verknüpfen, aus dem die XIC extrahiert wurde. Vergrößert man ein BPC, so wird auch das XIC vergrößert, wodurch beide Chromatogramme die gleiche Vergrößerung haben.

Daten verwalten

Die Prüfung bzw. der Vergleich der Daten kann auf verschiedene Weisen erfolgen. Die Benutzer möchten die Daten vielleicht zum Vergleich vor einer Verarbeitung wie Glättung oder Subtraktion aufbewahren.

Ein Fenster enthält eines oder mehrere Teilfenster, die so angeordnet sind, dass alle Teilfenster vollständig sichtbar sind und sich nicht überlappen.

Fenster können eine variable oder feste Größe haben. Teilfenster werden innerhalb eines Fensters automatisch als Kacheln in Spalten und Zeilen angeordnet. Wenn die Größe eines Fensters geändert wird, passen sich die übrigen Teilfenster innerhalb des Fensters automatisch an die neue Größe an. Die Größe eines Fensters kann nicht so verändert werden, dass Teilfenster kleiner als ihre minimale Größe werden.

Zwei oder mehrere Fenster oder Teilfenster mit ähnlichen Daten können verknüpft werden, zum Beispiel Spektren mit ähnlichem Massenbereich. Wenn der Benutzer ein Fenster oder Teilfenster vergrößert, vergrößern sich die anderen Teilfenster gleichzeitig. Zum Beispiel kann ein User ein XIC mit dem BPC verknüpfen, aus dem es extrahiert wurde. Vergrößert man das BPC, so wird auch das XIC vergrößert, wodurch beide Chromatogramme mit der gleichen Vergrößerung angezeigt werden.

- Verwenden Sie die folgenden Menüoptionen oder Symbole, um Daten in Diagrammen zu verwalten.

Tabelle 10-8 Diagramm-Optionen

Um dies zu tun ...	verwenden Sie diese Menüoption oder klicken Sie auf dieses Symbol
Eine Grafik in ein neues Fenster kopieren	Das zu kopierende Diagramm auswählen. Klicken Sie auf Explore > Duplicate Data > In New Window.	
Grafik wieder auf die ursprüngliche Größe skalieren	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf Explore > Home Graph.	
Verschieben eines Fensters	<ul style="list-style-type: none"> • Diagramm auswählen. Klicken Sie auf Window > Move Pane. • Wählen Sie das Teilfenster oder Fenster aus und ziehen es dann an die neue Position. Diese Position kann im gleichen Fenster oder in einem anderen Fenster sein. <p>Ein Pfeil mit vier Spitzen wird angezeigt, wenn der Cursor auf den Rand des aktiven Fensters oder Teilfensters trifft.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Wenn das Teilfenster am oberen oder unteren Rand des Ziel-Teilfensters ist, verschiebt sich das Teilfenster entsprechend darüber oder darunter. • Wenn das Teilfenster am rechten oder linken Rand des Ziel-Teilfensters ist, verschiebt sich das Teilfenster entsprechend nach links oder rechts. • Befindet sich das Teilfenster an einer anderen Position, bewegt sich das Teilfenster in die Zielzeile. Der Schlagschatten beim Verschieben des Teilfensters zeigt seine neue Position an. 	
Teilfenster verknüpfen	<p>a. Wenn zwei Grafiken geöffnet sind, klicken Sie auf eine und aktivieren damit dieses Teilfenster.</p> <p>b. Klicken Sie auf Explore > Link und dann auf das andere Teilfenster.</p>	
Verknüpfungen entfernen	Schließen Sie eines der Fenster. Klicken Sie auf Explore > Remove Link.	
Ein Fenster/Teilfenster löschen	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf Window > Delete Pane.	
Ein Fenster/Teilfenster sperren	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf Window > Lock Panes.	
Ein Fenster/Teilfenster ausblenden	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf Window > Hide Pane.	

Tabelle 10-8 Diagramm-Optionen (Fortsetzung)

Um dies zu tun ...	verwenden Sie diese Menüoption oder klicken Sie auf dieses Symbol
Ein Fenster maximieren	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf Window > Maximize Pane.	
Fenster/Teilfenster in Kacheln anordnen	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf Window > Tile all Panes.	

Die Y-Achse vergrößern

1. Setzen Sie den Mauszeiger links von der Y-Achse auf eine der Seiten der zu vergrößernden Fläche und ziehen Sie dann mit gedrückt gehaltener Maustaste vom Ausgangspunkt in vertikaler Richtung.

Eine Box wird entlang der y-Achse gezeichnet und repräsentiert die neue Anzeige.

Hinweis: Vorsicht, wenn Sie die Grundlinie vergrößern. Wenn Sie zu stark vergrößern, wird die Vergrößerungs-Box geschlossen.

2. Lassen Sie die Maustaste los, um das Diagramm in der neuen Größe zu zeichnen.

Die X-Achse vergrößern

Tipp! Um die Grafik wieder auf den ursprünglichen Maßstab zu bringen, doppelklicken Sie auf eine der Achsen. Um das gesamte Diagramm wieder auf den ursprünglichen Maßstab zu bringen, klicken Sie auf **Explore > Home Graph.**

1. Setzen Sie den Mauszeiger unter der X-Achse auf eine der Seiten der zu vergrößernden Fläche und ziehen Sie dann mit gedrückt gehaltener Maustaste vom Ausgangspunkt in horizontaler Richtung.
2. Lassen Sie die Maustaste los, um das Diagramm in der neuen Größe zu zeichnen.

Die Reporter Software erweitert die verfügbare Berichterstellungs-Funktionalität in der Analyst[®]-Software.

Wir empfehlen, dass die Benutzer die Ergebnisse validieren, wenn eine modifizierte Reporter-Vorlage oder eine, die eine Abfrage enthält, verwendet wird.

Mit der Reporter Software können benutzerdefinierte Berichte mit Microsoft Word und Excel (2010, 2013 oder 2016) erstellt werden. Die Reporter Software verfügt über die folgenden Funktionen:

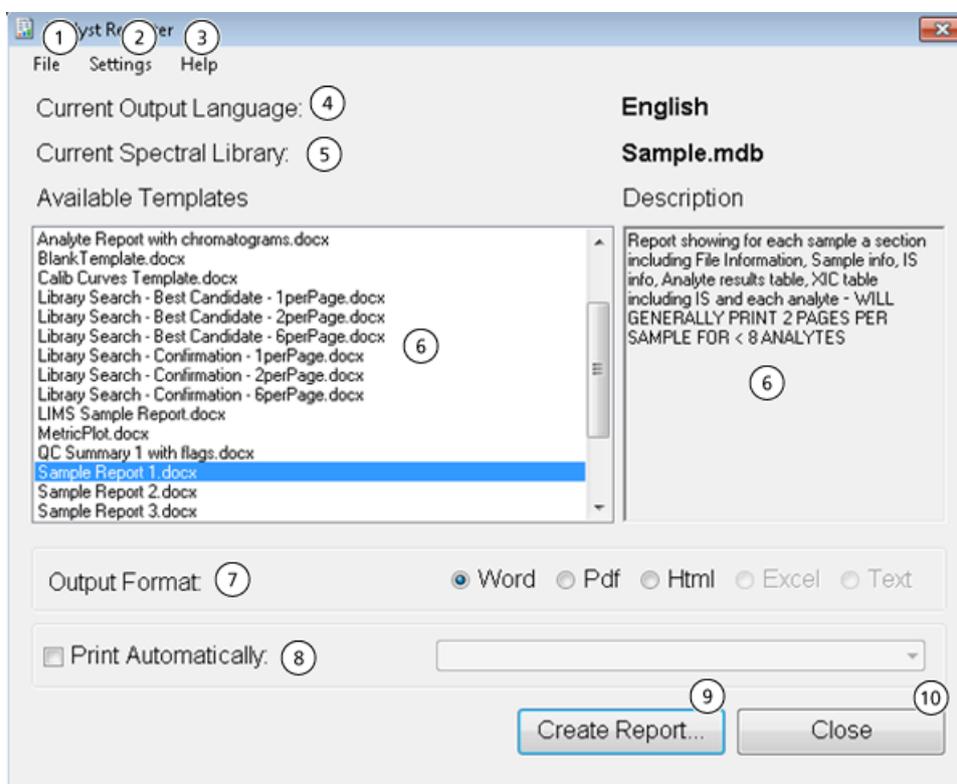
- Bietet eine Vielzahl von Berichten, die die Daten in Ergebnistabellen, in Datei-Informationen und quantitativen Peak-Review-Fenstern verwenden.
- Bietet eine Vielzahl von Berichten, die Ergebnisse von MS/MS-Bibliothekssuchen präsentieren. Der Benutzer kann die Reporter-Software so konfigurieren, dass in jeder MS/MS-Spektrenbibliothek eine Suche erfolgt, die das Analyst[®]-Format (mdb) verwendet.
- Verwendet Microsoft Word-Vorlagen, um benötigte Format-Informationen beim Generieren von Berichten zu liefern. Diese Vorlagen können erstellt oder geändert werden, um benutzerdefinierte Report-Formate zu bieten. Klicken Sie auf Hilfe, um weitere Informationen zum Erstellen und Bearbeiten des Report Template Editor.
- Enthält eine leere Vorlage, die in der Reporter Editing-Umgebung der Analyst[®] Software verwendet werden kann, um Berichtsvorlagen zu entwerfen, die den meisten Berichtsanforderungen gerecht werden.
- Automatisiert die Berichterstellung über das Autoquan Reporter Batch-Skript.
- Druckt automatisch, exportiert in das Adobe Portable Document Format (pdf) und liefert Ergebnisse per E-Mail.
- Ordnet den Berichtsvorlagen Verarbeitungsskripts zu, um sowohl den Inhalt als auch den Automatisierungsgrad für verschiedene Workflow-Anforderungen zu erweitern.
- Erzeugt Berichte aus kundenspezifischen Softwareanwendungen, die die verfügbaren Analyst[®] Software Programmierungsbibliotheken verwenden.

Die Reporter Software kann wie folgt verwendet werden:

- Innerhalb der Analyst[®] Software, um manuell einen Bericht oder eine Reihe von Berichten zu generieren.
- Durch ein Batch-Skript, um die Berichterstellung für einen Batch zu automatisieren. Benutzer können für jede Probe entweder während oder nach einer Batchfassung Berichte erstellen.
- Durch Anwendungen ohne Verwendung der Analyst[®]-Software.

Analyst Reporter-Benutzeroberfläche

Abbildung 11-1 Analyst Reporter



Position	Option	Beschreibung
1	File > Exit	Beendet das Programm und gibt alle Ressourcen frei.
2	Settings > Select Output Language	Legt die verwendete Wörterbuch-Sprache fest, wenn Sprach-Tags in einer Berichtsvorlage ersetzt werden. Vorlagen, die Sprach-Tags enthalten, können zur Erstellung von Berichten in jeder beliebigen Sprache verwendet werden. Die Sprach-Tags werden mit dem Text aus einem passenden Tag in der Wörterbuch-Datei für die ausgewählte Sprache ersetzt. Diese Wörterbuch-Dateien befinden sich im Ordner: C:\Program Files\AB SCIEX\AnalystReporter\Resources\Languages auf Windows 7 32-Bit-Betriebssystemen, oder C:\Program Files (x86)\AB SCIEX\AnalystReporter\Resources\Languages auf Windows 7 64-Bit-Betriebssystemen, oder Windows 10 64-Bit-Betriebssystemen.

Position	Option	Beschreibung
2	Settings > Select Library	Navigieren Sie zu einer Spektrenbibliothek. Diese Bibliothek wird für das Abgleichen und die Bewertung von MS/MS-Daten aus Ergebnistabellen verwendet, die durch informationsabhängige Erfassung (Information Dependent Acquisition, IDA) ausgelöste MS/MS-Daten enthält.
2	Settings > Select Template Folder	Legt den Ordner fest, aus dem die verfügbaren Vorlagen gelesen werden. Um zum Standard-Vorlagen-Ordner zurückzukehren, wählen Sie die Option Default .
3	Help > About	Zeigt Informationen über die derzeit installierte Version von Reporter an.
4	Current Output Language	Zeigt das aktuell ausgewählte Sprach-Wörterbuch an, das beim Ersetzen von Sprach-Tags in einer Berichtsvorlage verwendet wird. Das Sprach-Wörterbuch wird über Settings > Select Output Language gewählt.
5	Current Spectral Library	Zeigt die aktuell ausgewählte Spektrenbibliothek an. Die Spektrenbibliothek wird über Settings > Select ausgewählt.
6	Available Templates and Description	Zeigt eine Liste der verfügbaren Berichtsvorlagen. Die Auswahl einer Vorlage zeigt eine Beschreibung der ausgewählten Vorlage. Um den Ordner zu ändern, aus dem die verfügbaren Vorlagen gelesen werden, wählen Sie Settings > Select Template Folder > Browse .

Position	Option	Beschreibung
7	Output Format	<p>Zeigt die Ausgabeformate an, die von der Reporter Software unterstützt werden. Nur die Formate, die mit der ausgewählten Berichtsvorlage kompatibel sind, stehen zur Auswahl zur Verfügung.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Word: ein Microsoft Word-Dokument (.docx) wird erstellt. Dieses Dokument kann von Microsoft Word 2010 und höher angezeigt werden. • PDF: Erstellt einen Bericht direkt im PDF-Format. • HTML: Microsoft Word wird verwendet, um eine HTML-Datei zu erzeugen. Die zugehörigen Bilddateien werden in einem Ordner mit dem gleichen Namen wie die HTML-Datei gespeichert. • Excel: Eine einfache Textdatei (.csv) wird erstellt. Berichtsvorlagen mit durch Komma getrennten Werten können mit Microsoft Excel geöffnet werden, wobei jeder Wert in einer separaten Zelle angezeigt wird. Nur Vorlagen, die speziell als textkompatibel markiert werden, können für dieses Ausgabe-Format verwendet werden. • Text: Ein einfaches Textdokument (.txt) wird erstellt. Nur Vorlagen, die speziell als textkompatibel markiert werden, können für dieses Ausgabe-Format verwendet werden.
8	Print Automatically	Nachdem der Bericht erstellt wurde, wird er auf dem ausgewählten Drucker gedruckt. Wählen Sie einen beliebigen verfügbaren Drucker.
9	Create Report	Erstellt einen Bericht im gewählten Ausgabeformat mit der ausgewählten Berichtsvorlage.
10	Close	Beendet das Programm und gibt alle Ressourcen frei.

Berichte generieren

Die Reporter Software extrahiert numerische Daten aus der Ergebnistabelle und Informationen über Proben und Grafiken aus der .wiff-Datei.

Wählen Sie eine Vorlage in dem Feld „Available Template“.

Tipp! Für Berichte, die für Einzelproben generiert werden, ist eine automatische Berichtserstellung mithilfe eines Batch-Skripts während der Erfassung möglicherweise effizienter. Auf diese Weise können lange Verarbeitungszeiten nach Ende der Erfassung vermieden werden. Weitere Informationen zur Batch-Skripts finden Sie im *Skripthandbuch*.

1. Öffnen Sie eine **Ergebnistabelle**.
2. In der **Companion Software** doppelklicken Sie auf **Reporter**.
3. Wählen Sie im Dialogfeld **Analyst Reporter** im Feld **Available Templates** die entsprechende Berichtsvorlage aus.
4. Klicken Sie auf das **PDF**-Ausgabeformat.

Die „Word“-Option ist vorgewählt und der Bericht wird automatisch im Ordner „Results“ im aktuellen Projekt gespeichert. Wenn diese Option nicht ausgewählt ist, dann wird der Bericht erstellt und in Word geöffnet oder entsprechend der Auswahl ausgedruckt, aber der Bericht wird nicht gespeichert. Dies ermöglicht dem Benutzer die Bearbeitung des Berichts in Word vor dem Speichern des ursprünglichen Berichts.

5. Wählen Sie entweder ein Dokument mit allen Proben oder mehrere Dokumente mit je einer Probe.
6. (Optional) Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Print Automatically**, wenn die Berichte automatisch auf einem vorher ausgewählten Drucker gedruckt werden sollen.

Der in Windows festgelegte „Default Printer“ wird verwendet, wenn kein anderer Drucker ausgewählt wurde. Die Reporter Software merkt sich den ausgewählten Drucker zwischen den Vorgängen. Wenn als Drucker ein .pdf-Druckertreiber eingestellt ist, generiert der Reporter automatisch PDF-Dateien der erstellten Berichte.

7. Klicken Sie auf **Create Report**.

Der Bildschirm zeigt verschiedene Statusanzeigen, während die Software die ausgewählte Vorlage öffnet und mit Daten aus der Ergebnistabelle befüllt. Das Erstellen einiger Berichte dauert Sekunden, andere können länger dauern. Ein großer Datensatz mit vielen MRM-Übergängen oder einer großen Anzahl von Grafiken könnte einen Bericht von mehreren hundert Seiten ergeben, dessen Generierung mehrere Stunden dauern kann.

VORSICHT! Mögliche Schäden am System. Wenn die an das Massenspektrometer angeschlossenen des HPCL-Systems nicht von der Software gesteuert werden, muss das Massenspektrometer während des Betriebs beaufsichtigt werden. Der flüssige Strom der HPLC-System kann die Ionenquelle überfluten, wenn sich das Massenspektrometer im Standby-Modus befindet.

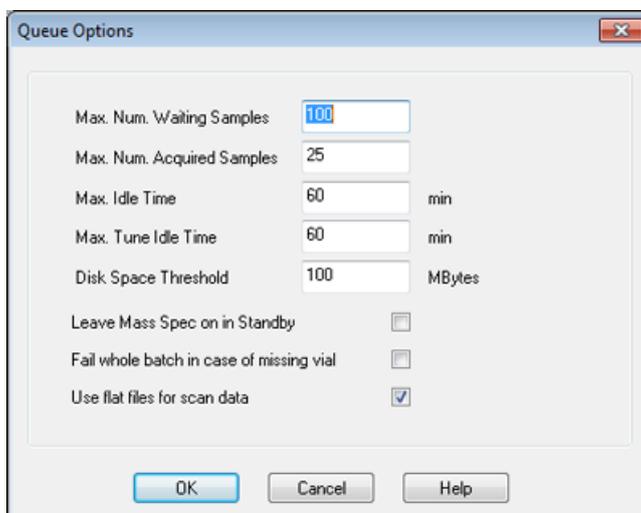
Optionen für Warteschlangen einstellen

Die Warteschlange arbeitet einen Schritt der Liste nach dem anderen ab und unterzieht jede Probe der ausgewählten Erfassungsmethode. Nachdem alle Proben erfasst wurden, stoppt die Warteschlange und das Massenspektrometer wechselt in den Standby-Modus. Im Standby-Modus werden die LC-Pumpen und die elektrische Spannung an einigen Instrument ausgeschaltet.

Der Benutzer kann die Länge der Wartezeit nach Abarbeitung der letzten Probe aus der Warteschlange ändern, bevor die Analyst[®]-Software das Massenspektrometer in den Standby-Modus versetzt. Weitere Informationen über die anderen Felder im Dialogfeld Queue Optionen siehe „Help“.

1. Klicken Sie auf der Navigationsleiste auf **Configure**.
2. Klicken Sie auf **Tools > Settings > Queue Options**.

Abbildung 12-1 Dialog „Queue Options“



3. Geben Sie in das Feld **Max. Num. Waiting Samples** die maximale Anzahl der Proben als einen Wert ein, der höher als die Anzahl der Proben ist, die an die Warteschlange übergeben werden.

4. Geben Sie in das Feld **Max. Idle Time** die Länge der Zeit ein, die eine Warteschlange nach einer Aufnahme warten soll, bevor sie in den Standby-Modus wechselt. Der voreingestellte Wert ist 60 Minuten.

Wenn Sie für den Betrieb des Massenspektrometers Gasflaschen verwenden, stellen Sie diese Zeit so ein, dass das Gas in den Flaschen nicht aufgebraucht wird.

Stellen Sie bei einem LC-Verfahren vor einem Lauf sicher, dass die Behälter genügend Lösungsmittel für alle Proben-Läufe und die maximale Stillstandszeit enthalten.

5. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Leave Mass Spec on in Standby**, um das Massenspektrometer nach dem Ende der Analyse weiter laufen zu lassen. Dank dieser Funktion können die Heizgeräte und Gase weiter laufen, auch nachdem die Geräte in den Status Idle versetzt wurden, sodass die Ionenquelle und der Eingang des Massenspektrometers frei von Kontamination gehalten werden.
6. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Fail Whole Batch in Case of Missing Vial**, um den gesamten Batch abzubrechen, wenn ein fehlendes Fläschchen erkannt wird. Wenn diese Option nicht ausgewählt ist, wird nur die aktuelle Probe abgebrochen und die Warteschlange fährt mit der nächsten Probe fort.

Einen Batch erstellen und übergeben

Mit diesem Workflow erstellen Sie einen Batch. In diesem Beispiel verwenden Sie den MRM-Scan, der zuvor erstellt wurde. Arbeiten Sie diesen Workflow noch zweimal für Übungszwecke durch, einmal mit der Q1MS-Methode und das zweite Mal mit der Q1MI-Methode.

Sets und Proben zu einem Batch hinzufügen

Ein Satz kann aus einer einzelnen Probe oder mehreren Proben bestehen.

Hinweis: Für weitere Informationen darüber, wie man Quantifizierungsinformationen zu einem Batch hinzufügt, sehen Sie bitte das *Handbuch für fortgeschrittene Benutzer*.

1. In der Navigationsleiste doppelklicken Sie unter **Acquire** auf **Build Acquisition Method**.

Abbildung 12-2 Dialog „Batch Editor“

Sample Name	Rack Code	Rack Position	Plate Code	Plate Position	Vial Position	Data File	Inj. Volume (µl)
-------------	-----------	---------------	------------	----------------	---------------	-----------	------------------

2. Geben Sie einen Namen in der Registerkarte Sample in der **Set**-Liste ein.
3. Klicken Sie auf **Add Set**.
4. Klicken Sie auf **Add Samples**, um Proben zum neuen Set hinzuzufügen.

Abbildung 12-3 Dialog „Add Samples“

The screenshot shows the 'Add Sample' dialog box with the following fields and options:

- Sample name:**
 - Prefix: Sample
 - Sample number:
 - Number of digits: 3
- Data file:**
 - Prefix: Data
 - Set name:
 - Auto Increment:
 - Sub Folder: Browse
- New samples:**
 - Number: 1

Buttons: OK, Cancel, Help

5. Geben Sie einen Namen für die Proben in diesem Set im Feld **Prefix** im Abschnitt **Sample name** ein.
6. Um eine automatisch steigende Nummerierung an das Ende eines Probennamens anzuhängen, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Sample number**.
7. Wenn das Kontrollkästchen **Sample number** aktiviert ist, geben Sie die Anzahl der im Probennamen gewünschten Stellen im Feld **Number of digits** ein.

Wird zum Beispiel „3“ eingegeben, ergeben sich die Probennamen „samplename001“, „samplename002“ und „samplename003“.

8. Geben Sie einen Namen für die Datei, die die Probeninformationen speichern soll, im Feld **Prefix** im Abschnitt **Data file** ein.
9. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Set name**, wenn der Set-Name als Teil des Dateinamen verwendet werden soll.
10. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Auto Increment**, damit Dateinamen automatisch aufsteigend nummeriert werden.

Hinweis: Die Daten für die einzelnen Proben können in der gleichen oder in einer separaten Datendatei gespeichert werden. Die Dateinamen bekommen numerische Zusätze und beginnen mit 1.

Bedienungsanleitung – Batches

11. Geben Sie einen Namen im Feld **Sub Folder** ein.

Der Ordner wird im Ordner Data des aktuellen Projektes gespeichert. Bleibt das **Sub Folder** leer, wird die Datendatei im Ordner **Data** gespeichert und kein Unterordner erstellt.

12. Im Abschnitt **New samples** geben Sie im Feld **Number** die Anzahl der hinzuzufügenden neuen Proben ein.
13. Klicken Sie auf **OK**.

Die Probentabelle wird mit dem Probennamen und Dateinamen ausgefüllt.

Tipp! Die Optionen **Fill Down** und **Auto Increment** im Rechtsklick-Menü stehen zur Verfügung, nachdem eine Spaltenüberschrift oder mehrere Zeilen in einer Spalte ausgewählt wurden.

14. In der Registerkarte Sample im Abschnitt **Acquisition** wählen Sie eine Methode aus der Liste aus.

Je nachdem, wie das System eingerichtet ist, müssen bestimmte Informationen für den Autosampler eingegeben werden. Selbst wenn das Injektionsvolumen in der Methode eingestellt wurde, kann der Benutzer das Injektionsvolumen für eine oder mehrere Proben ändern, indem der Wert in der Spalte „Injection volume“ verändert wird.

Hinweis: Um verschiedene Methoden für einige der Proben in diesem Satz zu verwenden, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Use Multiple Methods**. Die Spalte **Acquisition Method** wird in der Tabelle **Sample** angezeigt. Wählen Sie für jede Probe die Erfassungsmethode in dieser Spalte.

15. Um die in der Methode aufgeführten Injektionsvolumina zu ändern, geben Sie das Injektionsvolumen in der Spalte **Inj. Volume (µl) das Injektionsvolumen für jede Probe ein**.
16. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus, wenn Sie die Probenpositionen festlegen wollen:
- [Bestimmen Sie die Sample Locations \(Probenpositionen\) im Batch Editor auf Seite 143](#)
 - [Mit der Registerkarte „Locations“ die Fläschchenpositionen bestimmen \(optional\) auf Seite 143](#)
17. (Optional) Informationen über die Definition von Quantifizierungs-Details vor der Übergabe des Batches siehe [Quantifizierungsdetails im Batch Editor bestimmen \(optional\) auf Seite 144](#).
18. Klicken Sie auf die Registerkarte **Submit**.

Hinweis: Die Reihenfolge der Proben kann bearbeitet werden, bevor die Proben an die Warteschlange übergeben werden. Zum Ändern der Reihenfolge der Proben doppelklicken Sie in der Registerkarte **Submit** auf eine der weit links von der Tabelle angezeigten Nummern (ein sehr schwaches quadratisches Feld wird angezeigt) und ziehen Sie diese an den neuen Standort.

19. Wenn der Abschnitt **Submit Status** eine Meldung über den Status des Batches enthält, führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
- Wenn die Meldung darauf hinweist, dass der Batch für die Übergabe bereit ist, fahren Sie mit Schritt [20](#) fort.

- Wenn die Meldung darauf hinweist, dass der Batch nicht für die Übergabe bereit ist, nehmen Sie die Änderungen entsprechend der Meldung vor.

20. Nachdem Sie bestätigt haben, dass alle Batchinformationen korrekt sind, klicken Sie auf **Submit**.

Der Batch wurde an die Warteschlange übergeben und kann im Warteschleifen-Manager angezeigt werden.

21. Speichern Sie die Datei.

System äquilibrieren

Äquilibrieren Sie das System, bevor Sie eine Charge übergeben. Durch die Äquilibrierung wird das Massenspektrometer für die nächste Probe oder die nächste Batch aufgewärmt und vorbereitet.

1. Klicken Sie auf .

Der Dialog Equilibrate öffnet sich.

2. Wählen Sie die für die übergebene Charge verwendete Erfassungsmethode aus.
3. Geben Sie die Äquilibrierungszeit im Feld **Time (min)** in Minuten ein.
4. Wählen Sie **OK**. Das System startet die Äquilibrierung.

Nach Abschluss der Äquilibrierung geht das System in den Status Ready über.

Tipp! Wenn die Äquilibrierung nicht wie erwartet endet oder wenn sich der Systemstatus nach Ende der Äquilibrierung auf Ready ändert, stellen Sie Folgendes sicher:

- Das aktivierte Hardware-Profil ist für die Erfassungsmethode geeignet.
 - Das HPLC-System ist eingeschaltet.
 - Die Kommunikation zwischen dem HPLC-System und der Software ist korrekt eingerichtet.
-

Eine Probe oder einen Probensatz übergeben

Hinweis: Verarbeiten Sie die Probe erneut, falls die Probenerfassung abgebrochen wurde. Wenn ein Abbruch auf eine Unterbrechung der Stromzufuhr zurückzuführen ist, wird die Temperatur des Einsatzes des Autosamplers nicht aufrechterhalten und die Intaktheit der Probe kann beeinträchtigt werden.

1. Wählen Sie eine Probe oder einen Probensatz aus.
2. Klicken Sie auf die Registerkarte **Submit** im **Batch Editor**.
3. Wenn der Abschnitt **Submit Status** eine Meldung über den Status des Batches enthält, führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
 - Wenn die Meldung darauf hinweist, dass der Batch für die Übergabe bereit ist, fahren Sie mit dem nächsten Schritt fort.

- Wenn die Meldung darauf hinweist, dass der Batch nicht für die Übergabe bereit ist, nehmen Sie die Änderungen entsprechend der Meldung vor.

4. Klicken Sie auf **Submit**.

Reihenfolge der Proben ändern

Die Reihenfolge der Proben kann bearbeitet werden, bevor die Proben an die **Warteschlange** übergeben werden.

- In der Registerkarte **Submit**, doppelklicken Sie auf eine der weit links von der Tabelle angezeigten Nummern (ein sehr schwaches quadratisches Feld ist sichtbar) und ziehen Sie diese an die neue Position.

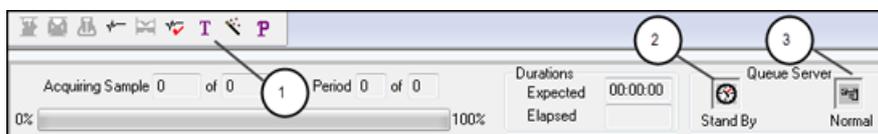
Daten aufnehmen

Das System sollte nicht im Modus „Tune and Calibrate“ sein, wenn die Probenerfassung gestartet wird. Außerdem wird die Probenaufnahme automatisch gestartet, wenn das System an diesem Tag schon einmal gelaufen ist und noch nicht in den Standby-Modus versetzt worden ist.

1. Stellen Sie sicher, dass die Temperatur des Säulenofens erreicht wurde.
2. Achten Sie darauf, dass das -Symbol nicht eingedrückt ist.
3. Klicken Sie auf der Navigationsleiste auf **Acquire**.
4. Klicken Sie auf **View > Sample Queue**.

Der Queue Manager wird geöffnet und zeigt alle übergebenen Proben an.

Abbildung 12-4 Queue Manager



Position	Beschreibung
1	Das Symbol „Reserve Instrument for Tuning“ sollte nicht gedrückt sein.
2	Der Warteschlangen-Status sollte sich im Modus Ready befinden.
3	Der Warteschlangen-Server sollte sich im Modus „Normal“ befinden. Siehe Status der Warteschlange auf Seite 148 .

5. Klicken Sie auf **Acquire > Start Sample**.

Bestimmen Sie die Sample Locations (Probenpositionen) im Batch Editor

Wenn in der Aufnahmemethode ein Autosampler verwendet wird, müssen die Positionen der Proben im Aufnahmebatch definiert werden. Definieren Sie die Position in der Registerkarte **Sample** oder in der Registerkarte **Locations**. Für weitere Informationen zum Erstellen von Batches siehe [Sets und Proben zu einem Batch hinzufügen auf Seite 138](#).

1. In der **Set**-Liste in der Registerkarte **Sample** wählen Sie den Probensatz aus.
2. Für jede Probe im Satz gehen Sie ggf. folgendermaßen vor:
 - In der Spalte **Rack Code** wählen Sie den Rack-Typ.
 - In der Spalte **Rack Position** wählen Sie die Position des Racks im Autosampler.
 - In der Spalte **Plate Code** wählen Sie den Platten-Typ.
 - In der Spalte **Plate Position** wählen Sie die Position der Platte im Rack.
 - In der Spalte **Vial Position** bestimmen Sie die Position des Vials auf dem Träger oder im Fach.
3. Speichern Sie die Datei.

Mit der Registerkarte „Locations“ die Fläschchenpositionen bestimmen (optional)

1. Klicken Sie auf die Registerkarte **Locations** im **Batch Editor**.
2. Wählen Sie den Probensatz in der Liste **Set** aus.
3. Wählen Sie den Autosampler in der **Autosampler**-Liste.
4. Wählen Sie mit der rechten Maustaste den Rack-Typ, der mit einem freien Rack verknüpft ist.

Die Platten oder Wannen werden im Rack angezeigt.

5. Machen Sie einen Doppelklick in den Leerraum, der als „rack type“ gekennzeichnet ist. Ein optischer Probenbelegungsplan des Racks wird angezeigt.

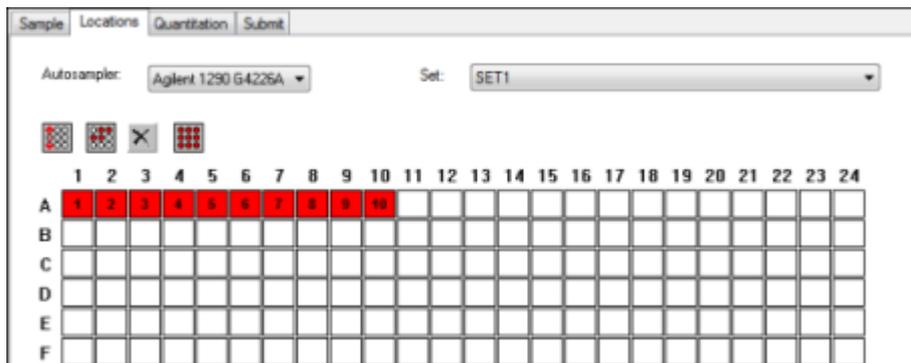
Die entsprechende Anzahl der freien Racks für den Autosampler wird in der grafischen Darstellung der Racks angezeigt.

6. Doppelklicken Sie auf eines der Rechtecke.

Kreise erscheinen, welche die Wells oder Vials für die Träger darstellen.

Tipp! Um die entsprechende Fläschchennummer in der grafischen Darstellung zu sehen, bewegen Sie die Maus über die Probenposition. Verwenden Sie diese Informationen, um zu bestätigen, dass die Fläschchenpositionen in der Software den Fläschchenpositionen im Autosampler entsprechen.

Abbildung 12-5 Registerkarte „Locations“ (Positionen)



Hinweis: Je nach verwendetem Autosampler ist es eventuell nicht erforderlich, Details in weitere Spalten einzugeben.

7. Um festzulegen, ob Proben nach Zeilen oder Spalten gekennzeichnet werden, klicken Sie auf die Auswahl-Schaltfläche **Row/Column Selection**.

Wenn die Schaltfläche eine rote horizontale Linie zeigt, markiert der **Batch Editor** die Proben nach Zeilen. Wenn die Schaltfläche eine rote vertikale Linie zeigt, markiert der **Batch Editor** die Proben nach Spalten.

8. Klicken Sie auf die Wells oder Fläschchen in der Reihenfolge, in der sie analysiert werden sollen.

Tip! Klicken Sie erneut auf ein Well oder ein Fläschchen, um sie zu deaktivieren.

Tip! Um Proben automatisch einzutragen, halten Sie die **Shift**-Taste gedrückt, während Sie auf das erste und letzte Fläschchen in einem Satz klicken. Um mehrere Injektionen aus demselben Fläschchen durchzuführen, drücken Sie die **Ctrl** (Strg)-Taste und klicken Sie dann auf die Position des Fläschchens. Der rote Kreis wird zu einem grünen Kreis.

Quantifizierungsdetails im Batch Editor bestimmen (optional)

Wenn eine Quantifizierungsmethode bei einem Batch verwendet wird und der Benutzer Quantifizierungsdetails nicht nach der Erfassung auswählen will, definieren Sie die Quantifizierungsdetails (Probentyp, Probenkonzentration) vor der Übergabe des Batches.

Die entsprechenden internen Standards und Standard-Spalten werden in der Registerkarte Quantitation entsprechend der auf der Registerkarte Sample ausgewählten Quantifizierungsmethode angezeigt.

1. Mit einer im **Batch Editor**-Fenster geöffneten Batch-Datei klicken Sie auf die Registerkarte **Quantitation**.
2. Wählen Sie das Set mit den Proben.
3. Wählen Sie einen **Quant Typ** für alle Proben aus der Liste in der Zelle aus.

4. Falls zutreffend, geben Sie die Analyt-Konzentration in der **Analyte**-Spalte ein.
5. Falls zutreffend, geben Sie die interne Standardkonzentration in der **Internal Standard**-Spalte ein.
6. Wiederholen Sie diesen Vorgang für jedes Set im Batch.

Probenakquisition beenden

Wenn eine Probenakquisition gestoppt wird, wird der aktuelle Scan beendet, bevor die Akquisition angehalten wird.

1. Im **Queue Manager** klicken Sie auf die Probe in der Warteschlange nach dem Punkt, an dem die Akquisition beendet werden soll.
2. Klicken Sie auf der Navigationsleiste auf **Acquire**.
3. Klicken Sie auf **Acquire > Stop Sample**.

Die Warteschlange wird beendet, nachdem der aktuelle Scan der ausgewählten Probe abgeschlossen ist. Der Probenstatus im Fenster **Queue Manager (Local)** wird auf **Terminated** geändert und allen folgenden Proben in der Warteschlange werden auf **Waiting** gestellt.

4. Um die Bearbeitung des Batches fortzuführen, klicken Sie auf **Acquire > Start Sample**.

Importieren von Batch-Dateien

Sie können eine Textdatei mit Batch-Informationen importieren, anstatt einen Batch im **Batch Editor** zu erstellen. Wenn Sie alle Probendetails in einer Tabellenkalkulation haben, ist es schneller, diese in der Tabellenkalkulation neu zu ordnen und zu importieren, als die Daten im **Batch Editor** manuell einzugeben.

Bevor Sie Batch-Informationen aus einer Textdatei importieren, stellen Sie sicher, dass die Daten in der Datei korrekt organisiert und formatiert sind. Insbesondere müssen die Spaltenüberschriften in der Tabelle den Spaltenüberschriften im **Batch Editor** entsprechen.

Erstellen eines Batches als Textdatei

Voraussetzungen

Stellen Sie sicher, dass das aktive Hardware-Profil alle Geräte enthält, die zur Erfassung der Proben verwendet werden sollen.
--

Um sicherzustellen, dass die Textdatei die richtigen Überschriften enthält, erstellen Sie einen Batch mit dem Batch Editor, exportieren Sie diesen als Textdatei, geben Sie die entsprechenden Werte in einem Tabellenkalkulationsprogramm ein und importieren Sie die Datei dann wieder in den Batch Editor. Benutzer können einen Batch nur dann exportieren, wenn er mindestens einen Satz mit mindestens einer Probe enthält. Die gespeicherte Textdatei kann später erneut als Vorlage verwendet werden.

1. Erstellen Sie im **Batch Editor** einen Batch mit einem Satz und einer Probe.
2. Klicken Sie auf **File > Export**.

Das Dialogfeld **Save as** wird geöffnet.

3. Geben Sie im Feld **File name** einen Namen für die Textdatei ein und klicken auf **Save**.
4. Öffnen Sie die Textdatei in einem Tabellenkalkulationsprogramm wie Microsoft Excel.
5. Schreiben oder kopieren sie die Details für die Proben: eine Probe pro Zeile mit den Details unter den entsprechenden Spaltenüberschriften.

Hinweis: Löschen Sie keine der Spalten. Die Spalten in der Tabelle müssen mit den Spalten im Batch-Editor übereinstimmen.

6. Speichern Sie die geänderte Textdatei als .txt oder .csv-Datei und schließen dann das Tabellenkalkulationsprogramm.

Die Textdatei kann jetzt in den Batch-Editor importiert werden.

Importieren eines Batches aus einer Textdatei

1. Klicken Sie auf der Registerkarte **Sample** im **Batch Editor** mit der rechten Maustaste und klicken Sie dann auf **Import From > File**.

Das **Open**-Dialogfeld wird geöffnet.

2. Wählen Sie die gewünschte Textdatei aus und klicken Sie dann auf **Open**.

Wenn ein Autosampler verwendet wird, wird das Dialogfeld **Select Autosampler** geöffnet.

Hinweis: Wenn Sie die gespeicherte Textdatei nicht in der Liste **Files of type** sehen, wählen Sie **Microsoft Text Driver (*.txt; *.csv)** aus. Dateien mit der Erweiterung .txt werden im Feld angezeigt.

3. Wählen Sie in der Autosampler-Liste den Autosampler und klicken Sie dann auf **OK**.

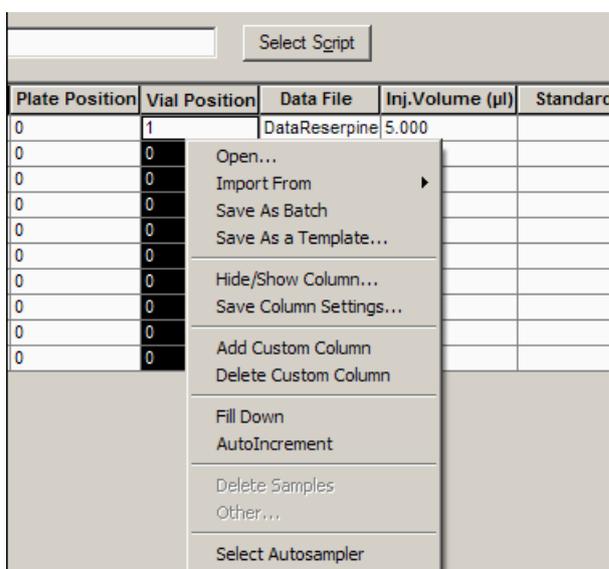
Die Probentabelle wird mit den Details aus der Textdatei ausgefüllt.

4. Übergeben des Batches

Batch Editor Rechtsklick-Menü

Klicken Sie in der Tabelle **Batch Editor**, um auf die Optionen zuzugreifen.

Abbildung 12-6 Batch Rechtsklick-Menü



Menü	Funktion
Open	Öffnet eine Batch-Datei.
Import From	Importiert eine Datei.
Save As Batch	Speichert den Batch mit einem anderen Namen.
Save As a Template	Speichert den Batch als Vorlage ab
Hide/Show Column	Blendet eine Spalte ein oder aus.
Save Column Settings	Speichert die Spalteneinstellungen für den Batch.
Add Custom Column	Fügt eine benutzerdefinierte Spalte hinzu.
Delete Custom Column	Löscht eine benutzerdefinierte Spalte.
Fill Down	Kopiert die gleichen Daten in die ausgewählten Zellen.
AutoIncrement	Nummeriert die ausgewählten Zellen automatisch aufsteigend.
Delete Samples	Löscht die ausgewählte Zeile.
Select Autosampler	Wählt einen Autosampler aus.

Status der Warteschlange und des Gerätes

Der **Queue Manager** zeigt den Status von Warteschlange, Batch und Probe. Detaillierte Informationen zu einer bestimmten Probe in der Warteschlange können auch eingesehen werden.

Tipp! Zeigt die  Warteschlange an.

Status der Warteschlange

Der aktuelle Zustand der Warteschlange wird im **Queue Server** angezeigt.

Abbildung 12-7 Die Anzeige für den Queue Server zeigt den Modus „Normal“ an

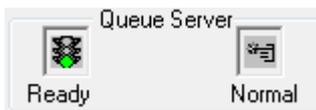
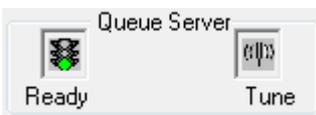


Abbildung 12-8 Die Anzeige für den Queue Server zeigt den Modus „Tune“ an



Das erste Symbol zeigt den Status der Warteschlange. Das zweite Symbol zeigt an, ob sich die Warteschlange im **Tune**-Modus oder **Normal**-Modus (für die Bearbeitung von Proben) befindet. [Tabelle 12-1](#) beschreibt die Symbole und den Warteschlangenzustand.

Tabelle 12-1 Status der Warteschlange

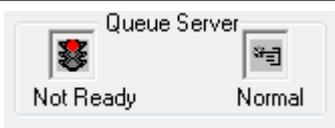
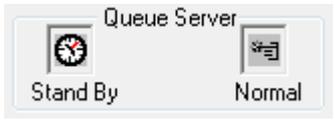
Symbole	Zustand	Definition
	Not Ready	Das Hardware-Profil ist deaktiviert und die Warteschlange akzeptiert keine Probenübergaben.
	Stand By	Das Hardware-Profil wurde aktiviert, aber alle Geräte befinden sich im Leerlauf. Pumpen laufen nicht und Gase sind abgeschaltet.
	Warming Up	Das Massenspektrometer und die Geräte werden äquilibriert, Säulen werden aufbereitet, die Autosampler-Nadel wird gereinigt und die Säulenöfen werden auf Temperatur gebracht. Die Dauer der Äquilibrierung wird vom Bediener ausgewählt. Aus diesem Zustand kann das System in den Zustand Ready gehen.
	Ready	Das System ist bereit, Proben zu analysieren, und die Geräte wurden äquilibriert und sind einsatzbereit. In diesem Zustand kann die Warteschlange Proben aufnehmen und wird ausgeführt, sobald Proben übergeben wurden.

Tabelle 12-1 Status der Warteschlange (Fortsetzung)

Symbole	Zustand	Definition
 	Waiting	Das System beginnt automatisch mit der Aufnahme, sobald die nächste Probe übergeben wird.
 	PreRun	Die Methode wird an jedes Gerät übergeben und Geräte werden äquilibriert. Dieser Zustand tritt vor der Aufnahme jeder Probe in einem Batch ein.
 	Acquiring	Die Methode wird ausgeführt und die Datenaufnahme erfolgt.
 	Paused	Das System wurde während der Akquisition angehalten.

Symbole für den Instrument- und Peripheriegerätstatus

Symbole für das Massenspektrometer und jedes Gerät der aktiven Hardware-Konfiguration erscheinen in der Statuszeile in der unteren rechten Ecke des Fensters. Der Benutzer kann den genauen Status einer LC-Pumpe anzeigen, um zu ermitteln, ob der LC-Pumpendruck angemessen ist, oder den genauen Status des Massenspektrometers anzeigen, um die Temperatur der Ionenquelle zu bestätigen.

Hinweis: Für jeden Status kann die Hintergrundfarbe Rot sein. Ein roter Hintergrund bedeutet, dass das Gerät, während es sich in diesem Zustand befindet, einen Fehler erkannt hat.

- Doppelklicken Sie in der Statusleiste auf das Symbol für das Gerät oder Massenspektrometer.
Das Dialogfeld Instrument Status öffnet sich.

Tabelle 12-2 Symbole für Instrument- und Gerätestatus

Status	Symbol	Hintergrundfarbe	Beschreibung
Idle		Grün oder gelb	Das Gerät läuft nicht. Wenn die Hintergrundfarbe Gelb ist, sollte das Gerät äquilibriert werden, damit es wieder betriebsbereit ist. Wenn die Hintergrundfarbe grün ist, ist das Gerät betriebsbereit.
Equilibrating		Grün oder gelb	Das Gerät äquilibriert.

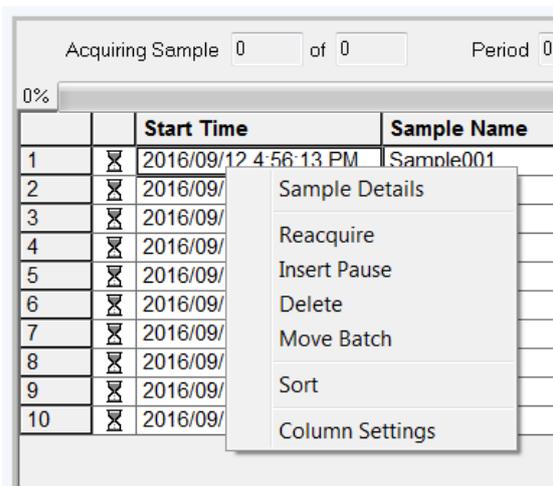
Tabelle 12-2 Symbole für Instrument- und Gerätestatus (Fortsetzung)

Status	Symbol	Hintergrundfarbe	Beschreibung
Waiting		Grün	Das Gerät wartet auf einen Befehl von der Software, von einem anderen Gerät oder auf bestimmte Maßnahmen durch den Bediener.
Running		Grün	Das Gerät verarbeitet einen Batch.
Aborting		Grün	Das Gerät bricht den Vorgang ab.
Herunterladen		Grün	Eine Methode wird an das Gerät übertragen.
Ready		Grün	Das Gerät arbeitet nicht, ist aber betriebsbereit.
Fehler		Rot	Das Gerät ist auf einen Fehler gestoßen, der untersucht werden sollte.

Rechtsklick-Menü „Queue“

Durch Rechtsklick in der Tabelle „Queue“ können Sie auf folgende Optionen zugreifen.

Abbildung 12-9 Queue Manager Rechtsklick-Menü



Menü	Funktion
Sample Details	Öffnet das Dialogfeld Sample Details auf.
Reacquire	Die Probe wird nochmals aufgenommen.

Menü	Funktion
Insert Pause	Fügt eine Pause, in Sekunden, zwischen zwei Proben ein.
Delete	Löscht entweder den Batch oder die ausgewählten Proben.
Move Batch	Verschiebt den Batch innerhalb der Warteschlange.
Sort	Sortiert die vorher ausgewählte Spalte.
Column Settings	Ändert die Spalteneinstellungen.

Reinigen und warten Sie das System regelmäßig, um optimale Leistungen zu erzielen.



WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Entfernen Sie nicht die Abdeckungen. Durch das Entfernen der Abdeckungen kann es zu Verletzungen oder Fehlfunktionen des Systems kommen. Die Abdeckungen müssen für routinemäßige Wartungsarbeiten, Inspektionen oder Einstellungen nicht entfernt werden. Bei Reparaturen, die eine Entfernung der Hauptabdeckung erfordern, wenden Sie sich bitte an einen SCIEX-Außendienstmitarbeiter (FSE).



WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Klären Sie vor der Reinigung oder Wartung, ob eine Dekontamination erforderlich ist. Der Kunde muss das System vor der Reinigung oder vor Wartungsarbeiten dekontaminieren, wenn radioaktive Stoffe, biologische Wirkstoffe oder giftige Chemikalien in dem System eingesetzt wurden.

Empfohlener Wartungsplan

[Tabelle 13-1](#) gibt einen empfohlenen Zeitplan für die Reinigung und Wartung des Systems.

Tipp! Führen Sie die Wartungsaufgaben regelmäßig durch, um sicherzustellen, dass das Massenspektrometer optimal funktioniert.

Informationen zur Wartung der Ionenquelle entnehmen Sie bitte dem Ionenquellen-*Bedienerhandbuch*.

Für die Bestellung von Verschleißteilen wenden Sie sich bitte an einen qualifizierten Wartungstechniker. Für technische Wartungsarbeiten und Support wenden Sie sich bitte an einen SCIEX-Außendienstmitarbeiter.

Tabelle 13-1 Wartungsaufgaben

Komponenten	Häufigkeit	Aufgabe	Weitere Informationen erhalten Sie unter...
System			
Schläuche	Täglich	Prüfen Sie die Schläuche und die Anschlüsse, um sicherzustellen, dass sie ordnungsgemäß verbunden sind und es keine Undichtigkeiten gibt.	Siehe Chemische Vorsichtsmaßnahmen auf Seite 10 .
Massenspektrometer			
Curtain-Platte	Täglich	Reinigen	Siehe Reinigung der Curtain-Platte auf Seite 160 .
Orifice-Platte (Vorderseite)	Täglich	Reinigen	Siehe Reinigung der Vorderseite der Orifice-Platte auf Seite 161 .
Vorvakuum-pumpenöl	Wöchentlich	Füllstand prüfen	Siehe Inspektion des Ölstands in der Vakuumpumpe auf Seite 161 .
Massenspek-trometer-Luftfilter	Alle 6 Monate	Ersetzen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
Vorvakuum-pumpenöl	Jährlich	Ersetzen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
Instrumenten-oberflächen	Nach Bedarf	Reinigen	Siehe Reinigen der Oberflächen auf Seite 155 .
Quellenabluft-Auffangbehälter	Nach Bedarf	Leeren	Siehe Entleeren des Quellenabluftauffangbehälters auf Seite 162 .
Orifice-Platte (Vorder- und Rückseite)	Nach Bedarf	Reinigen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.

Tabelle 13-1 Wartungsaufgaben (Fortsetzung)

Komponenten	Häufigkeit	Aufgabe	Weitere Informationen erhalten Sie unter...
IonDrive™ QJet -Ionenführung und IQ0-Linse	Nach Bedarf	Reinigen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
Q0-Stabsatz und IQ1-Linse	Nach Bedarf	Reinigen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
Vorvakuum- pumpenöl	Nach Bedarf	Nachfüllen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
Schnittstellen- heizung	Nach Bedarf	Ersetzen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
Ionenquelle			
TurbolonSpray® und APCI-Elektroden	Nach Bedarf	Überprüfen und ersetzen	Siehe <i>Bedienerhandbuch</i> der Ionenquelle.
Koronaentla- dungsnadel	Nach Bedarf	Ersetzen	Siehe <i>Bedienerhandbuch</i> der Ionenquelle.
Turboheizer	Nach Bedarf	Ersetzen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
Probenschlauch	Nach Bedarf	Ersetzen	Siehe <i>Bedienerhandbuch</i> der Ionenquelle.

Für „Je nach Bedarf“-Aufgaben beachten Sie bitte diese Empfehlungen:

- Reinigen Sie die Oberflächen des Massenspektrometers nach einem Verschütten oder wenn sie schmutzig werden.
- Leeren Sie den Auffangbehälter, bevor er voll wird.

- Reinigen Sie die Orifice-Platte, IonDrive™ QJet-Ionenführung und Q0-Region, wenn die Empfindlichkeit des Systems abnimmt.

Tip! Reinigen Sie den Q0-Bereich regelmäßig, um die Auswirkungen von Aufladung (ein erheblicher Verlust der Empfindlichkeit der betreffenden Ionen über einen kurzen Zeitraum) an den Quadrupolen und Linsen zu minimieren. Kontaktieren Sie einen Wartungstechniker oder einen Außendienstmitarbeiter.

- Reinigen Sie die IonDrive™ QJet-Ionenführung und Q0-Region, wenn die Empfindlichkeit des Systems abnimmt.

Tip! Reinigen Sie den Q0-Bereich regelmäßig, um die Auswirkungen von Aufladung (ein erheblicher Verlust der Empfindlichkeit der betreffenden Ionen über einen kurzen Zeitraum) an den Quadrupolen und Linsen zu minimieren. Kontaktieren Sie einen Wartungstechniker oder einen Außendienstmitarbeiter.

- Füllen Sie die Vakuumpumpe nach, wenn der Ölstand unter den Minimalwert fällt.

Reinigen der Oberflächen

Reinigen Sie die äußeren Oberflächen des Massenspektrometers nach einem Verschütten oder wenn sie verschmutzt sind.

VORSICHT! Mögliche Schäden am System. Verwenden Sie nur die empfohlenen Reinigungsmethoden und -materialien, um das Gerät nicht zu beschädigen.

1. Wischen Sie die Außenflächen mit einem weichen und feuchten Tuch mit warmem Seifenwasser ab.
2. Wischen Sie die Außenflächen mit einem weichen und feuchten Tuch ab, um alle Seifenreste zu entfernen.

Reinigen des Eingangsbereiches

Die folgenden Warnhinweise beziehen sich auf alle Verfahren in diesem Abschnitt:



WARNHINWEIS! Gefahr durch heiße Oberfläche. Bei Verwendung der IonDrive™ Turbo V-Ionenquelle lassen Sie die Ionenquelle und die Schnittstelle vor dem Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 90 Minuten lang abkühlen. Bei Verwendung der Ionenquelle Turbo V™ oder DuoSpray™ lassen Sie die Ionenquelle und die Schnittstelle vor dem Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 30 Minuten lang abkühlen. Bei Verwendung der Ionenquelle NanoSpray® lassen Sie die Ionenquelle und die Schnittstelle vor dem Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 60 Minuten lang abkühlen. Einige Oberflächen der Ionenquelle und der Vakuum-Schnittstelle werden beim Betrieb heiß.

Reinigen Sie den Eingangsbereich des Massenspektrometers nach dem üblichen Reinigungsverfahren, damit:

- Ungeplante Ausfallzeiten minimiert werden.

Service- und Wartungsinformationen

- Eine optimale Empfindlichkeit erhalten bleibt.
- Umfangreiche Reinigungen vermieden werden, die einen Wartungstechniker erfordern.

Wenn Kontamination auftritt, führen Sie zuerst eine routinemäßige Reinigung durch. Reinigen Sie bis zur und einschließlich der Vorderseite der Orifice-Platte. Wenn eine routinemäßige Reinigung die Probleme mit der Empfindlichkeit nicht beheben kann, kann eine vollständige Reinigung notwendig sein. Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.

Dieser Abschnitt enthält Anweisungen zur Durchführung einer routinemäßigen Reinigung ohne Unterbrechung des Vakuums.

Hinweis: Beachten Sie alle geltenden lokalen Vorschriften. Weitere Informationen über Gesundheits- und Sicherheitsvorschriften finden Sie in [Chemische Vorsichtsmaßnahmen auf Seite 10](#).

Merkmale einer Kontamination

Wenn eines der folgenden Merkmale auftritt, ist das System eventuell kontaminiert:

- Deutlicher Empfindlichkeitsverlust
- Verstärktes Hintergrundrauschen
- Zusätzliche Peaks, die nicht Teil der Probe sind, erscheinen im vollständigen Scan oder in Survey Scanmethoden.

Wenn Sie eines dieser Probleme bemerken, reinigen Sie den Eingangsbereich des Massenspektrometers.

Erforderliche Materialien

Hinweis: US-Kunden können unter der Telefonnummer 877-740-2129 Informationen zu Bestellungen erhalten und Fragen stellen. Internationale Kunden gehen bitte zu sciex.com/contact-us.

- Puderfreie Handschuhe (Neopren- bzw. Nitrilhandschuhe werden empfohlen)
- Schutzbrillen
- Laborkittel
- Frisches, hochwertiges (reines) Wasser (mindestens 18 M Ω entionisiertes Wasser (DI Wasser) oder ultra-reines Wasser in HPLC-Qualität). Gebrauchtes Wasser kann Verunreinigungen enthalten, die das Massenspektrometer weiter verunreinigen können.
- MS-reines Methanol, Isopropanol (2-Propanol) oder Acetonitril
- Reinigungslösung. Verwenden Sie entweder:
 - 100% Methanol
 - 100% Isopropanol
 - 1:1 Acetonitril:Wasser-Lösung (frisch zubereitet)
 - 1:1 Acetonitril:Wasser mit 0,1% Essigsäurelösung (frisch zubereitet)
- Sauberes 1-l- oder 500-ml-Becherglas für die Vorbereitung der Reinigungslösungen

- 1-l-Becherglas zum Auffangen von verwendetem Lösungsmittel
- Behälter für organischen Abfall
- Fusselfreie Wischtücher. Siehe [Vom Hersteller erhältliche Werkzeuge und Hilfsmittel auf Seite 157](#).
- (Optional) Polyestertupfer

Vom Hersteller erhältliche Werkzeuge und Hilfsmittel

Beschreibung	Artikelnummer
Kleiner Polyestertupfer (thermisch gebunden). Auch im Reinigungskit erhältlich.	1017396
Fusselfreies Tuch (11 cm x 21 cm, 4,3 Zoll x 8,3 Zoll). Auch im Reinigungskit erhältlich.	018027
Reinigungskit. Enthält kleinen Polyestertupfer, fusselfreie Tücher, Q0-Reinigungswerkzeug, konische Reinigungsbürste für die IonDrive™ QJet-Ionenführung, Q0-Reinigungsbürste und Alconoxpackungen.	5021294

Bewährte Vorgehensweisen bei der Reinigung



WARNHINWEIS! Gefahr durch heiße Oberfläche. Bei Verwendung der IonDrive™ Turbo V-Ionenquelle lassen Sie die Ionenquelle und die Schnittstelle vor dem Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 90 Minuten lang abkühlen. Bei Verwendung der Ionenquelle Turbo V™ oder DuoSpray™ lassen Sie die Ionenquelle und die Schnittstelle vor dem Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 30 Minuten lang abkühlen. Bei Verwendung der Ionenquelle NanoSpray® lassen Sie die Ionenquelle und die Schnittstelle vor dem Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 60 Minuten lang abkühlen. Einige Oberflächen der Ionenquelle und der Vakuum-Schnittstelle werden beim Betrieb heiß.



WARNHINWEIS! Toxisch-chemische Gefahren. Siehe *Sicherheitsdatenblätter* der chemischen Produkte und befolgen Sie alle empfohlenen Sicherheitshinweise bei der Handhabung, Lagerung und Entsorgung von Chemikalien. Gesundheitsbezogene Hinweise und Sicherheitshinweise, siehe *Systemhandbuch*.



WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Klären Sie vor der Reinigung oder Wartung, ob eine Dekontamination erforderlich ist. Der Kunde muss das System vor der Reinigung oder vor Wartungsarbeiten dekontaminieren, wenn radioaktive Stoffe, biologische Wirkstoffe oder giftige Chemikalien in dem System eingesetzt wurden.



WARNHINWEIS! Umweltgefährdung. Entsorgen Sie die Systemkomponenten nicht mit dem Hausmüll. Befolgen Sie die lokalen Vorschriften für die Entsorgung von Komponenten.

- Lassen Sie die Ionenquelle vor dem Entfernen abkühlen.
 - Tragen Sie bei der Reinigung immer saubere, puderfreie Handschuhe (es werden Handschuhe aus Nitril oder Neopren empfohlen).
 - Ziehen Sie ein neues, sauberes Paar Handschuhe nach der Reinigung der Massenspektrometerkomponenten und vor dem Zusammenbau an.
 - Verwenden Sie keine Reinigungsmittel, die nicht in diesem Verfahren angegeben sind.
 - Wenn möglich, bereiten Sie die Reinigungslösungen kurz vor Beginn der Reinigung zu.
 - Zubereitung und Verwahrung aller organischen Lösungen und Lösungen mit organischen Komponenten nur in sehr sauberen Gläsern. Benutzen Sie niemals Flaschen aus Plastik. Verunreinigungen können aus diesen Flaschen auslaugen und weitere Verunreinigung des Massenspektrometers verursachen.
 - Zur Vermeidung einer Kontamination der Reinigungslösung, gießen Sie die Lösung auf das Tuch oder den Tupfer.
 - Achten Sie darauf, dass nur der mittlere Bereich des Wischtuchs mit der Oberfläche des Massenspektrometers in Berührung kommt. Schnittkanten können Fasern hinterlassen.
-

Tipp! Wickeln Sie das Wischtuch um einen thermisch gebundenen Polyestertupfer.

Abbildung 13-1 Beispiel: Zusammenfalten des Wischtuches



- Um eine Kreuzkontamination zu vermeiden, berühren Sie die Oberfläche nur einmal mit dem Wischtuch oder dem Tupfer und werfen Sie diese dann weg.
- Bei größeren Teilen der Vakuum-Schnittstelle, wie der Curtain-Platte, können mehrere Reinigungen mit mehreren Wischtüchern erforderlich sein.
- Befeuchten Sie das Tuch oder den Tupfer nur leicht, wenn Sie Wasser oder Reinigungsmittel auftragen. Wasser kann leichter als organische Lösungsmittel dazu führen, dass Wischtücher verschleifen und Rückstände auf dem Massenspektrometer hinterlassen.
- Gehen Sie mit dem Tuch nicht über die Öffnung. Reiben Sie um die Öffnung herum, damit keine Fasern des Wischtuches in das Massenspektrometer gelangen.
- Stecken Sie die Bürste nicht in die Öffnung der Curtain-Platte oder Orifice-Platte.

Vorbereitung des Massenspektrometers

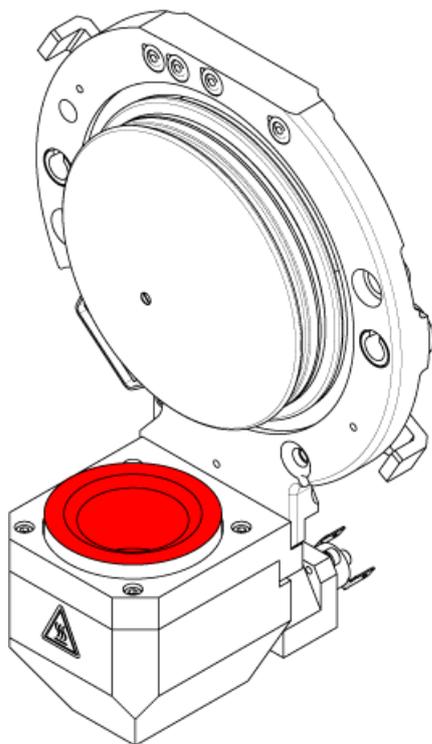
Hinweis: Massenspektrometer mit einer NanoSpray[®]-Ionenquelle erfordern eventuell eine vollständige Reinigung, damit sie beste Ergebnisse liefern. Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort (QMP) oder an einen Außendienstmitarbeiter (FSE).



WARNHINWEIS! Gefahr durch heiße Oberfläche. Bei Verwendung der IonDrive[™] Turbo V-Ionenquelle lassen Sie die Ionenquelle und die Schnittstelle vor dem Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 90 Minuten lang abkühlen. Bei Verwendung der Ionenquelle Turbo V[™] oder DuoSpray[™] lassen Sie die Ionenquelle und die Schnittstelle vor dem Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 30 Minuten lang abkühlen. Bei Verwendung der Ionenquelle NanoSpray[®] lassen Sie die Ionenquelle und die Schnittstelle vor dem Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 60 Minuten lang abkühlen. Einige Oberflächen der Ionenquelle und der Vakuum-Schnittstelle werden beim Betrieb heiß.

VORSICHT! Mögliche Schäden am System. Lassen Sie nichts in den Ionenquellenexhaust fallen, wenn die Ionenquelle entfernt wurde.

Abbildung 13-2 Ionenquellenablauf auf der Vakuum-Schnittstelle



-
1. Deaktivieren Sie das Hardware-Profil.

Service- und Wartungsinformationen

2. Entfernen Sie die Ionenquelle. Siehe das Ionenquellen-*Bedienerhandbuch*.

Lagern Sie die Ionenquelle bei Nichtgebrauch zum Schutz vor Beschädigung und zum Erhalt der Betriebsbereitschaft an einem sicheren Ort.

Reinigung der Curtain-Platte

VORSICHT! Mögliche Schäden am System. Legen Sie die Curtain-Platte oder die Orifice-Platte nicht auf der Öffnungsspitze ab. Achten Sie darauf, dass die konische Seite der Curtain-Platte nach oben zeigt.

VORSICHT! Mögliche Schäden am System. Stecken Sie keinen Draht und keine Metallbürste in die Öffnung von Curtain-Platte, Orifice-Platte oder Schnittstellenheizung, um eine Beschädigung der Öffnung zu vermeiden.

1. Entfernen Sie die Curtain-Platte von der Vakuum-Schnittstelle und legen Sie sie mit der konischen Seite nach oben auf eine saubere und stabile Oberfläche.

Die Curtain-Platte wird von drei Kugellagern gehalten, die auf der Orifice-Platte angebracht sind.

Tipp! Wenn sich die Curtain-Platte nicht sofort von der Orifice-Platte löst, drehen Sie die Curtain-Platte ein Stück weit (um weniger als 90 Grad), um die Schnäpper zu lösen.

2. Befeuchten Sie ein fusselfreies Wischtuch mit reinem Wasser und reinigen Sie dann beide Seiten der Curtain-Platte.

Hinweis: Verwenden Sie bei Bedarf mehrere Wischtücher.

3. Wiederholen Sie Schritt 2 mit der Reinigungslösung.
4. Reinigen Sie die Öffnung mit einem feuchten Tuch oder einem kleinem Polyestertupfer.
5. Warten Sie, bis die Curtain-Platte trocken ist.
6. Untersuchen Sie die Curtain-Platte auf Lösungsmittelflecken oder Flusen und entfernen Sie mit einem sauberen, leicht feuchten und fusselfreien Tuch sämtliche Rückstände.

Hinweis: Ständige Flecken- oder Filmbildung sind ein Anzeichen für verunreinigte Lösungsmittel.

Reinigung der Vorderseite der Orifice-Platte

VORSICHT! Mögliche Schäden am System. Entfernen Sie beim Reinigen der Oberfläche der Orifice-Platte die Schnittstellenheizung nicht. Häufiges Entfernen der Schnittstellenheizung kann Schäden an der Schnittstellenheizung verursachen. Die Oberflächenreinigung der Schnittstellenheizung ist für die routinemäßige Reinigung ausreichend.

VORSICHT! Mögliche Schäden am System. Stecken Sie keinen Draht und keine Metallbürste in die Öffnung von Curtain-Platte, Orifice-Platte oder Schnittstellenheizung, um eine Beschädigung der Öffnung zu vermeiden.

1. Befeuchten Sie das fusselfreie Tuch mit Wasser und wischen Sie die Vorderseite der Orifice-Platte ab, einschließlich der Schnittstellenheizung.
2. Wiederholen Sie Schritt 1 mit der Reinigungslösung.
3. Warten Sie, bis die Orifice-Platte trocken ist.
4. Untersuchen Sie die Orifice-Platte auf Lösungsmittelflecken oder Flusen und entfernen Sie mit einem sauberen, leicht feuchten und fusselfreien Tuch sämtliche Rückstände.

Hinweis: Ständige Flecken- oder Filmbildung sind ein Anzeichen für verunreinigte Lösungsmittel.

Das Massenspektrometer wieder in Betrieb nehmen

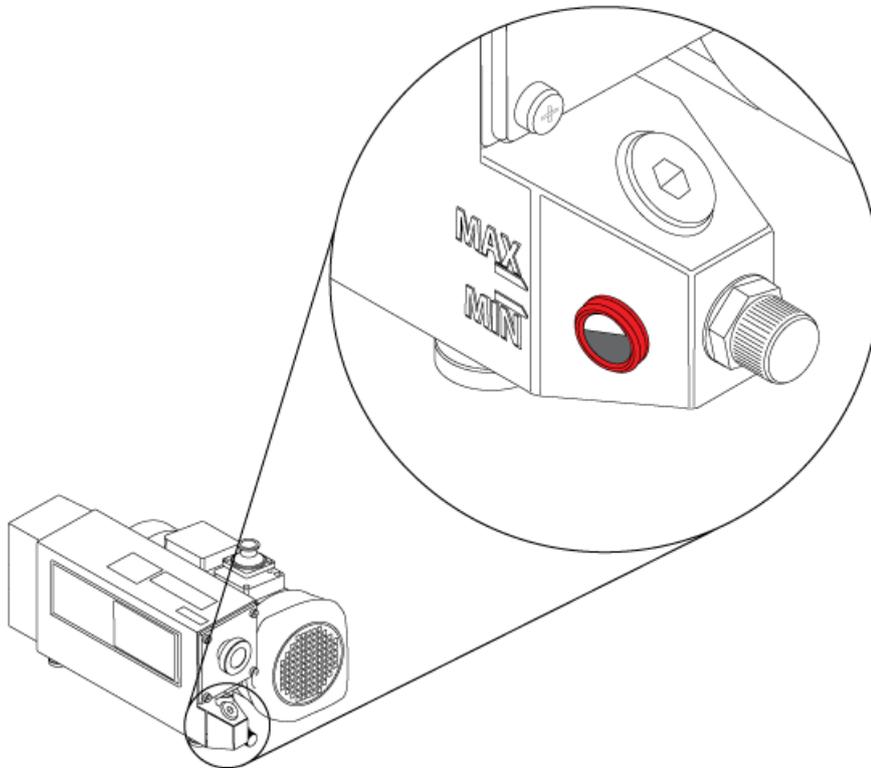
1. Installieren Sie die Curtain-Platte an dem Massenspektrometer.
2. Installieren Sie die Ionenquelle am Massenspektrometer. Siehe Ionenquellen-*Bedienerhandbuch*.
3. Aktivieren Sie das Hardware-Profil. Siehe *Systemhandbuch*.

Inspektion des Ölstands in der Vakuumpumpe

- Überprüfen Sie das Schauglas an der Vakuumpumpe, um zu bestätigen, dass der Ölstand oberhalb des Mindestfüllstands liegt.

Wenn der Ölstand unterhalb des Mindestfüllstands liegt, wenden Sie sich an den Wartungstechniker oder den SCIEX-Außendienstmitarbeiter.

Abbildung 13-3 Schauglas



Entleeren des Quellenabluftauffangbehälters



WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Lagern Sie gefährliches Material in entsprechend gekennzeichneten Reststoffbehältern und entsorgen Sie sie gemäß den lokalen Vorschriften.

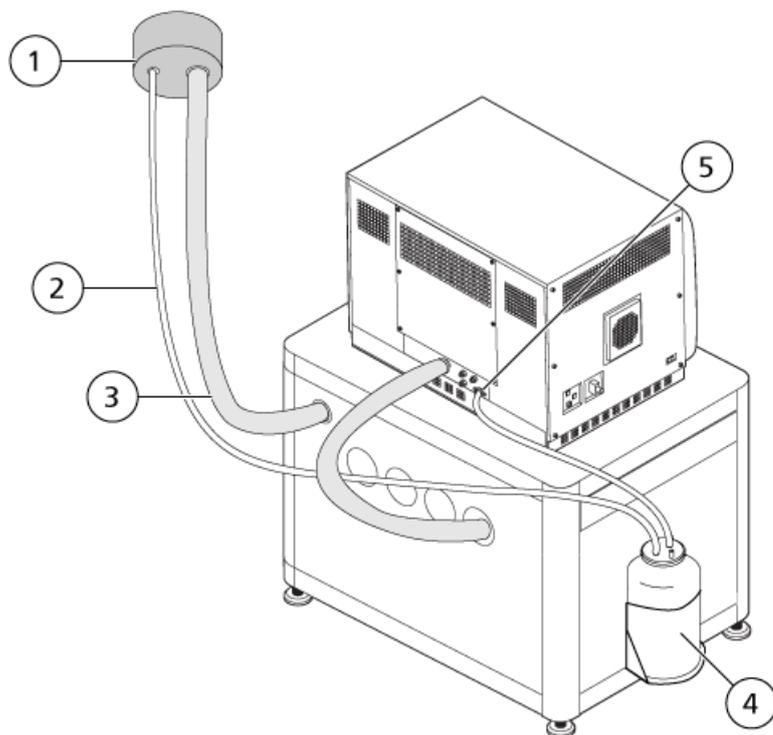


WARNHINWEIS! Strahlengefährdung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Achten Sie darauf, die Abluft über eine dafür vorgesehene Laborabzugshaube oder eine Abluftanlage abzulassen, und sorgen Sie dafür, dass die Abluftschläuche gut mit Schellen befestigt sind. Stellen Sie sicher, dass der Luftaustausch im Labor für die ausgeführten Arbeiten angemessen ist.

Untersuchen Sie den Quellenabluftauffangbehälter regelmäßig und leeren Sie ihn, bevor er voll ist. Untersuchen Sie den Behälter und seine Anschlussstücke außerdem regelmäßig auf Undichtigkeiten und ziehen Sie bei Bedarf Anschlüsse fest bzw. ersetzen Sie Komponenten. Zum Leeren des Behälters befolgen Sie die folgenden Verfahrensschritte.

1. Entfernen Sie die Ionenquelle. Siehe das Ionenquellen-*Bedienerhandbuch*.
2. Lösen Sie die Klammern, die die Schläuche mit dem Deckel des Quellenabluftauffangbehälters verbinden.
3. Trennen Sie die Kapillaren vom Deckel.
4. Heben Sie den Auffangbehälter aus dem Halter, falls erforderlich.
5. Entfernen Sie den Deckel vom Auffangbehälter.
6. Leeren Sie den Auffangbehälter und entsorgen Sie den Abfall gemäß den Laborverfahren und Vorschriften zur Abfallentsorgung.
7. Montieren Sie den Deckel auf dem Behälter und setzen Sie den Behälter dann in den Halter ein.
8. Verbinden Sie die Schläuche mit dem Deckel und sichern Sie sie dann mit Klemmen, sodass sie fest sitzen.

Abbildung 13-4 Quellenabluft-Auffangbehälter



Position	Beschreibung
1	Entlüftungsanschluss
2	Quellenabluftabluftschlauch: 2,5 cm (1,0 Zoll) Innendurchmesser (ID)
3	Vakuumpumpenabluftschlauch: 3,2 cm (1,25 Zoll) Innendurchmesser.

Service- und Wartungsinformationen

Position	Beschreibung
4	Quellenabluft-Auffangbehälter. Vergewissern Sie sich, dass der Behälter gesichert ist, um Verschütten zu vermeiden.
5	Anschluss zum Massenspektrometer: 1,6 cm (0,625 Zoll) ID

Hinweis: Die Quellenabluftschlauchanschlüsse am Auffangbehälter, am Massenspektrometer und die Laborentlüftung sind mit Rohrschellen gesichert.

Lagerung und Handhabung



WARNHINWEIS! Umweltgefährdung. Entsorgen Sie die Systemkomponenten nicht mit dem Hausmüll. Befolgen Sie die lokalen Vorschriften für die Entsorgung von Komponenten.

Wenn das Massenspektrometer für längere Zeit gelagert oder für den Transport vorbereitet werden soll, kontaktieren Sie einen Außendienstmitarbeiter von SCIEX, um Informationen zur Stilllegung zu erhalten. Um das Massenspektrometer von der Netzversorgung zu trennen, ziehen Sie den Netzstecker aus der Steckdose.

Hinweis: Die Ionenquelle und das Massenspektrometer müssen zwischen -30 °C und +60 °C (-22 °F und 140 °F) transportiert und gelagert werden. Lagern Sie das System nicht in einer Höhe von über 2.000 m (6.562 Fuß) über dem Meeresspiegel.

Fehlersuche für das Massenspektrometer

14

Dieser Abschnitt enthält Informationen zur Beseitigung einfacher Systemfehler. Bestimmte Tätigkeiten dürfen nur von einem durch SCIEX geschulten qualifizierten Wartungstechniker im Labor durchgeführt werden. Für komplizierte Störungsbehebungen wenden Sie sich an einen SCIEX-Außendienstmitarbeiter.

Tabelle 14-1 Systemfehler

Fehler	Mögliche Ursache	Abhilfemaßnahme
Die IonDrive™ QJet-Ionenführung ist sehr stark verschmutzt oder verschmutzt sehr häufig.	Der Curtain Gas™-Volumenstrom ist zu niedrig.	Überprüfen Sie die Einstellung des Parameters CUR und erhöhen Sie ihn, falls erforderlich.
Es ist ein Systemfehler aufgetreten, da der Vakuumdruck zu hoch ist.	<ol style="list-style-type: none">1. Der Ölstand in der Vakuumpumpe ist zu niedrig.2. Es liegt eine Undichtigkeit vor.3. Die falsche Orifice-Platte ist installiert.	<ol style="list-style-type: none">1. Überprüfen Sie den Ölstand in der Vakuumpumpe und wenden Sie sich dann an den lokalen Wartungstechniker oder Außendienstmitarbeiter, um Öl nachzufüllen.2. Inspizieren und reparieren Sie Lecks.3. Installieren Sie die richtige Orifice-Platte.
Es ist ein Systemfehler aufgetreten, da die Temperatur im QPS-Steuermodul zu hoch ist.	<ol style="list-style-type: none">1. Der Luftfilter des Massenspektrometers ist verstopft.2. Die Umgebungstemperatur ist zu hoch.	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
Die Analyst®-Software meldet, dass sich das Massenspektrometer wegen der Ionenquelle im Fehlerstatus befindet.	<ol style="list-style-type: none">1. Die Probe ist nicht installiert.2. Die Probe ist nicht sachgemäß angeschlossen.	<ol style="list-style-type: none">1. Bestätigen Sie den Fehler im Statusfeld auf der Seite Gerätedetails.2. Installieren Sie die Probe. Siehe <i>Bedienerhandbuch</i> der Ionenquelle.3. Entfernen und ersetzen Sie die Probe. Ziehen Sie den Sicherungsring fest. Siehe <i>Bedienerhandbuch</i> der Ionenquelle.

Fehlersuche für das Massenspektrometer

Tabelle 14-1 Systemfehler (Fortsetzung)

Fehler	Mögliche Ursache	Abhilfemaßnahme
Die Analyst [®] -Software zeigt an, dass die APCI-Probe verwendet wird, es ist jedoch die TurbolonSpray [®] -Probe installiert.	Die F3-Sicherung ist durchgebrannt.	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
Das Spray wird nicht gleichmäßig verteilt.	Die Elektrode ist verstopft.	Reinigen oder ersetzen Sie die Elektrode. Siehe <i>Bedienerhandbuch</i> der Ionenquelle.

Tabelle 14-1 Systemfehler (Fortsetzung)

Fehler	Mögliche Ursache	Abhilfemaßnahme
Die Empfindlichkeit ist reduziert.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Die Ionenquellenparameter sind nicht optimiert. 2. Das Massenspektrometer ist nicht optimiert. 3. Die Curtain-Platte ist verschmutzt. 4. Die Orifice-Platte ist verschmutzt. 5. Die IonDrive™ QJet-Ionenführung oder die IQ0-Linse ist verschmutzt. 6. Der Q0-Bereich ist verschmutzt. 7. Die Spritze oder die Probenleitung ist undicht. 8. Die Qualität der Probe hat sich vermindert, oder die Konzentration der Probe ist gering. 9. Die Probe ist nicht ordnungsgemäß installiert. 10. Die Ionenquelle ist nicht ordnungsgemäß installiert oder defekt. 11. Einer oder mehrere der O-Ringe an der Vakuum-Schnittstelle fehlen. 12. Es besteht ein Problem mit dem LC-System oder den Anschlüssen. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Optimieren Sie die Ionenquellen-Parameter. Siehe Hilfesystem der Analyst® Software. 2. Siehe Reinigung der Curtain-Platte auf Seite 160. 3. Siehe Reinigung der Vorderseite der Orifice-Platte auf Seite 161 oder wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter. 4. Reinigen Sie den Q0-Bereich. Kontaktieren Sie den Wartungstechniker oder den Außendienstmitarbeiter. 5. Prüfen Sie die Spritze oder den Probenschlauch auf Undichtigkeiten und beseitigen Sie eventuelle Leckagen. Vergewissern Sie sich, dass bei allen Anschlussstücken Typ und Größe stimmen. 6. Überprüfen Sie die Konzentration der Probe. Verwenden Sie eine neue Probe. 7. Entfernen und ersetzen Sie die Probe. 8. Entfernen und installieren Sie die Ionenquelle. Achten Sie darauf, dass die Verriegelungen ordnungsgemäß gesichert sind. Wenn dies das Problem nicht löst, installieren und optimieren Sie eine alternative Ionenquelle. 9. Wenn die O-Ringe auf der Ionenquelle vorhanden sind, installieren Sie sie auf der Vakuum-Schnittstelle. Wenn sie fehlen, wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter. 10. Beheben Sie Fehler des LC Systems.

Tabelle 14-1 Systemfehler (Fortsetzung)

Fehler	Mögliche Ursache	Abhilfemaßnahme
Die Leistung des Massenspektrometers hat nachgelassen.	<ol style="list-style-type: none">1. Die Probe ist nicht richtig optimiert.2. Die Proben wurden nicht richtig vorbereitet oder die Proben haben sich verschlechtert.3. Es besteht ein Leck an den Probeneinlassanschlüssen.	<ol style="list-style-type: none">1. Optimieren Sie die Sonde. Siehe <i>Bedienerhandbuch</i> der Ionenquelle.2. Bestätigen Sie, dass die Proben sachgemäß vorbereitet wurden.3. Vergewissern Sie sich, dass bei allen Anschlussstücken Typ und Größe stimmen, und achten Sie darauf, dass sie fest sitzen. Ziehen Sie die Anschlussstücke nicht zu fest an. Ersetzen Sie die Anschlussstücke, wenn weiterhin Leckagen auftreten.4. Installieren und optimieren Sie eine alternative Ionenquelle.5. Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter, wenn das Problem weiterhin besteht.
Lichtbögen oder Funken treten auf.	Die Koronaentladungsnadel befindet sich nicht an der richtigen Position.	Drehen Sie die Koronaentladungsnadel in Richtung der Curtain-Platte und weg vom Heizergasstrom. Siehe das Ionenquellen- <i>Bedienerhandbuch</i> .

Wenn Sie Informationen zu Verkauf, technischer Unterstützung oder Service benötigen, wenden Sie sich bitte an einen Außendienstmitarbeiter (FSE), oder besuchen Sie die SCIEX-Website unter sciex.com. Auf dieser Site finden Sie Kontaktinformationen.

Betriebsanleitung – Manuelle Verbindungsoptimierung

A

Der Benutzer muss den Autosampler und das Einspritzventil manuell steuern, da diese Geräte im Modus „Tune and Calibrate“ nicht durch das System gesteuert werden können.

Voraussetzungen

- Das Massenspektrometer ist abgestimmt und optimiert.
- Die Bedingungen für eine LC-Trennung sind bekannt.
- Alle erforderlichen Peripheriegeräte, einschließlich ggf. der Spritzenpumpe und LC-Komponenten, sind im Hardware-Profil enthalten.

Erforderliche Materialien

Um die Instrumentenparameter für bestimmte Verbindungen zu tunen, werden die folgenden Lösungen empfohlen. Die Mischung von vier Verbindungen wird verwendet, um die Schritte des Verfahrens zu illustrieren.

- Mobile Phase: 1:1 Acetonitril : Wasser + 2 ml Ammoniumacetat + 0,1% Ameisensäure.
- LC-Pumpe und Autosampler
- Autosampler-Fläschchen
- Mischung von vier Komponenten (50 ng/ml), bestehend aus Reserpin, Minoxidil, Tolbutamid und Rescinnamin. Die Lösung kann für Infusion und FIA (Flussinjektionsanalyse) eingesetzt werden. Die Konzentration ist systemabhängig. Verwenden Sie eine Lösung aus 49,9% Acetonitril, mit 50% VE-Wasser und 0,1% Ameisensäure als Verdünnungsmittel.
Andere Verbindungen können ersetzt werden, soweit ihr Molekulargewicht bekannt ist und die Verbindung angemessenerweise ionisiert werden kann mit der IonDrive™ Turbo V Ionenquelle.

Tabelle A-1 Verbindungen und Molekulargewichte

Verbindung	m/z
Minoxidil	210,2
Tolbutamid	271,1
Reserpin	609,3
Rescinnamin	635,3

Über manuelle Optimierung von Verbindungen

Manuelle Verbindungsoptimierung wird verwendet, um verbindungs- und ionenquellenspezifische Parameter für einen Analyten zu optimieren. Wenn der Benutzer für einen Analyten manuell optimiert, wird eine MS-Erfassungsmethode im Modus „Tune and Calibrate“ erstellt. Abhängig von der gewählten Methode der Probeninjizierung fügen Sie eine LC-Methode zur Erfassungsmethode hinzu, damit entweder Infusion oder LC verwendet werden kann.

Die Optimierung zur Ausgabe des höchsten Signals ergibt nicht immer das beste Signal-zu-Rausch-Verhältnis. Das Rauschen kann für einige Parameter mit dem Signal skalieren und sollte bei der Optimierung überprüft werden, wenn das Ziel ist, das maximale Signal-zu-Rausch-Verhältnis zu erhalten.

Bei der Optimierung ionenquellenspezifischer Parameter führen Sie die Probe bei der Flussrate ein, die während der Probenanalyse verwendet wird, und verwenden Sie entweder Fließinjektionsanalyse (FIA) oder T-Infusion als Methode der Probeninjektion. Das CAD-Gas ist der einzige verbindungsabhängige Parameter, der in der Registerkarte Source/Gas angezeigt wird und kann einfach optimiert werden, während der Analyt infundiert wird.

Optimieren Sie die Position der Ionenquelle, bevor Sie ionenquellenspezifischen Parameter optimieren. Siehe das Ionenquellen-*Bedienerhandbuch*.

Über Scan-Typen

Für dieses Beispiel verwenden Sie die Scan-Typen Q1 MS, Q1 MI, Produkt-Ion und MRM. Der Q1 MS-Scan-Typ wird verwendet, um die Anwesenheit von relevanten Verbindungen zu bestätigen. Der Q1-MI-Scan wird verwendet, um MS oder Vor-Stoßzellen-Spannungen zu optimieren. Der Scan-Typ Product Ion wird verwendet, um die Produkt-Ionen für jede Verbindung zu bestimmen. Mit dem Scan-Typ MRM werden Kollisionsenergie (CE) und Stoßzellen-Austrittspotenzial (CXP) für jedes Produkt-Ion oder -Fragment optimiert. Verwenden Sie die in diesem Abschnitt erstellten Methoden zur quantitativen und qualitativen Analyse.

Optimieren Sie einen Analyten manuell

Nachdem die Erfassungsmethode erstellt wurde, optimieren Sie substanzspezifische Parameter mit Hilfe der Funktion **Edit Ramp** oder durch manuelles Bearbeiten der Parameter im Tune Method Editor. Ionenquellenspezifische Parameter können nur durch manuelles Anpassen der Parameter im Tune Method Editor optimiert werden. Abhängig vom verwendeten Scan-Typ stehen verschiedene Parameter zur Optimierung zur Verfügung.

Befolgen Sie die Verfahrensweisen in der angegebenen Reihenfolge:

1. [Bestätigen des Vorhandenseins von Verbindungen auf Seite 171](#)
2. [Optimieren Sie die MS-spezifischen Parameter auf Seite 172](#)
3. [Bestimmen Sie die Produkt-Ionen für die Optimierung auf Seite 174](#)
4. [Bestimmen Sie die Produkt-Ionen für die Optimierung auf Seite 174](#)
5. [Optimieren Sie das Kollisionszellen-Austrittspotenzial für jedes Produkt-Ion auf Seite 175](#)

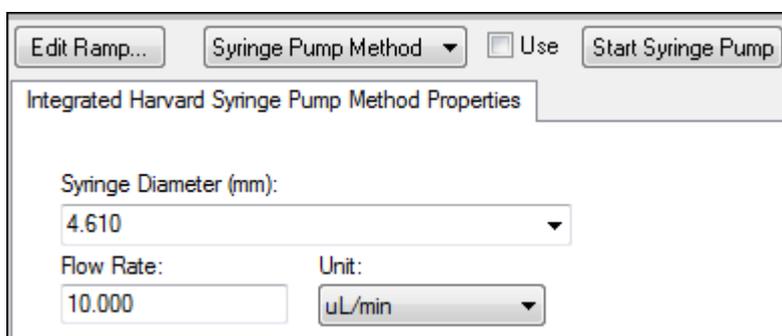
Bestätigen des Vorhandenseins von Verbindungen

1. Erstellen Sie ein Projekt.
2. Hardwareprofil aktivieren.
3. Vorbereiten der Probe:
 - a. Ziehen Sie die Verbindungslösung in eine Spritze auf und entfernen die Luft aus der Spritze.
 - b. Verwenden Sie einen Schlauch mit einem korrekten Anschluss, um die Spritze an das Massenspektrometer anzuschließen.
 - c. Installieren Sie die Spritze in die integrierte Spritzenpumpe.
4. Infundieren Sie die Verbindung in die Lösung mit einer Geschwindigkeit von 5 µl/min bis 10 µl/min.
5. Doppelklicken Sie in der Navigationsleiste unter **Tune and Calibrate** auf **Manual Tuning**.
6. Im Methoden-Listenfeld klicken Sie auf **Syringe Pump Method**.
7. In der Registerkarte Syringe Pump Method, Properties geben Sie die in [Tabelle A-2](#) angezeigten Parameter ein.

Tabelle A-2 Registerkarte „Syringe Pump Method Properties“

Parameter	Wert
Spritzendurchmesser	Spritzenabhängig 4,610 mm, wenn eine 1,0-ml-Injektionsspritze verwendet wird
Volumenstrom	10
Einheit	µl/min

Abbildung A-1 Registerkarte „Syringe Pump Method Properties“



8. Klicken Sie auf **Start Syringe Pump**.
9. Aus der Methodenliste wählen Sie **MS Method**.
10. In der Registerkarte MS geben Sie die in [Tabelle A-3](#) angezeigten Parameter ein.

Tabelle A-3 MS Registerkarte

Parameter	Wert
Scan-Typ	Q1 MS (Q1)
Start (Da)	200
Stop (Da)	700
Scan-Rate (Da/s) (falls vorhanden)	200
Dauer (Min.)	3

11. Klicken Sie auf **Start**.
12. Warten Sie, bis ein gleichmäßiger TIC auf der linken Seite und Peaks auf der rechten Seite angezeigt werden, und klicken Sie dann auf **Stop**.
13. Aktivieren Sie das **MCA** Kontrollkästchen.
14. Geben Sie **10** im Feld **Cycles** ein.
15. Klicken Sie auf **Start**.
16. Nach Abschluss von zehn Scans werden die Massen der vier Verbindungen als Ionen angezeigt.

Tipp! Wenn das letzte oder das erwartete ionenchromatographische Fenster ausgeblendet ist, wählen Sie das anzuzeigende Fenster aus dem **Window**-Menü aus.

Hinweis: Ionen-Intensitäten der Verbindungen können starke Schwankungen zeigen. Um das Wechseln zu einer Lösung mit einer höheren oder niedrigeren Konzentration nach Bedarf zu ermöglichen, bereiten Sie mehrere Konzentrationsstufen zu, bevor Sie mit der Optimierung beginnen.

17. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Spektral-Fenster rechts unten und klicken dann auf **Open File**.
18. Finden Sie die relevanten Verbindungen und notieren Sie dann die *m/z*-Werte für die höchsten Peaks. Diese Werte sollten innerhalb von 0,1 Da bis 0,2 Da des erwarteten *m/z* liegen. Verwenden Sie im nächsten Vorgang die *m/z*-Werte.

Optimieren Sie die MS-spezifischen Parameter

Declustering Potential (DP) und Eingangspotenzial (EP) sind Vor-Stoßkammer-Spannungen. Zum Optimieren dieser Werte gehört das allmähliche Ändern des Spannungsbereichs bei gleichzeitiger Überwachung der Signalstärke der Verbindung.

DP ist der Unterschied zwischen Orifice und Erdung. Je höher die Potentialdifferenz, um so größer die Menge an Ent-Clustern.

Der DP-Parameter hat eine signifikante Wirkung auf das Analyt-Signal. Typische DP-Werte reichen von 20 V bis 150 V. Wenn der DP-Wert zu niedrig ist, führt dies zu einer niedrigeren Ionenintensität und potenziellen

Störungen von Clustern. Wenn der DP-Wert zu hoch ist, kann er eine Fragmentierung des Analyten in der Quelle verursachen. Allgemein sollte der DP auf den Wert eingestellt werden, der die höchste Intensität bietet.

Der EP-Parameter steuert das Eingangspotenzial, das die Ionen durch die Hochdruck-Q0-Region führt und fokussiert. Es wird in der Regel auf 10 V für positive Ionen oder –10 V für negative Ionen eingestellt. Der EP-Parameter hat einen geringen Einfluss auf die Optimierung von Verbindungen und kann im Allgemeinen bei Standardwerten belassen werden, ohne dass sich dies auf die Analyt-Nachweisgrenzen auswirkt.

1. Kehren Sie zum Tune Method Editor zurück und ändern die Methode zum Scan-Typ **Q1 Multiple Ions (Q1 MI)**.
2. Geben Sie in der Massentabelle die entsprechenden Parameterwerte ein. Siehe [Tabelle A-4](#).

Tabelle A-4 Massentabellen-Parameter - Q1 Multiple Ionen (Q1 MI)

Verbindung	Q1 Masse	Zeit
Reserpin	609,4	1
Minoxidil	210,2	1
Tolbutamid	271,3	1
Rescinnamin	635,4	1

Beginnen Sie bei einem einfachen Fall mit Reserpin. Wiederholen Sie das manuelle Optimierungsverfahren für die anderen Verbindungen.

3. Klicken Sie auf **Edit Ramp**.
4. Wählen Sie **Declustering Potential (DP)** im Dialogfeld Ramp Parameter Settings.

Hinweis: Starten Sie mit dem DP-Parameter und optimieren Sie dann die anderen Parameter in der Reihenfolge, in der sie im Dialogfeld angezeigt werden. Wenn sie nicht in der richtigen Reihenfolge optimiert werden, ist es möglich, dass die Parameter nicht korrekt optimiert werden.

5. Geben Sie die Werte für **Start**, **Stop** und **Step** ein.

Tipp! Die vorhandenen Werte sind gute Ausgangspunkte. Verwenden Sie die Funktion **Edit Ramp**, um Werte für eine höhere Effizienz zu ändern.

6. Klicken Sie auf **OK**.
7. Klicken Sie auf **Start**.
8. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das XIC-Fenster rechts unten und klicken dann auf **Open File**, um die XIC-Ansicht zu maximieren.
9. Überwachen Sie die XICs.

Hinweis: Der Wert, der das beste Signal pro Sekunde für das relevante Ion ergibt, ist der optimale Wert.

10. Beachten Sie den optimalen Wert für die relevanten Ionen.
11. Bewegen Sie den Cursor zur Massentabelle, klicken Sie mit der rechten Maustaste und fügen Sie dann den gerade optimierten Parameter hinzu.

Der Tabelle wird eine neue Spalte hinzugefügt.

12. Fügen Sie den optimierten Wert in der entsprechenden Zeile hinzu.
13. Wiederholen Sie diese Schritte für jede Masse in der Erfassungsmethode, bis Sie eine Liste mit den optimalen Werten für alle Massen haben.
14. Wiederholen Sie diese Schritte, um die anderen MS-spezifischen Parameter zu optimieren.

Tabelle A-5 MS-spezifische Parameter

Parameter	Kommentar
DP	Stellen Sie den DP auf den Wert ein, der die höchste Intensität bietet.
EP	Sie werden diesen Parameter selten optimieren, weil er nur eine geringere Wirkung hat.

Bestimmen Sie die Produkt-Ionen für die Optimierung

Die Stoßenergie (CE) steuert die Energiemenge, die auf die Vorläufer-Ionen einwirkt, wenn sie in die Stoßzelle hinein beschleunigt werden.

Führen Sie dieses Verfahren für eine Verbindung nach der anderen durch und verwenden dabei die vorher erhaltenen, MS-spezifischen optimierten Werte. Die Produkt-Ionen geben die Q3-Masse von MRM-Übergängen an.

In diesem Beispiel wird die Verbindung Reserpin verwendet.

1. Im Tune Method Editor schließen Sie die XIC-Fenster.
2. Klicken Sie im Feld **Scan Type** auf **Product Ion (MS2)**.
3. Klicken Sie auf die Registerkarte **Compound** und geben den zuvor notierten optimalen Wert ein.
4. In der Registerkarte MS im Feld **Product Of** geben Sie **609,4** ein. Dieser Wert ist die Masse-Zuordnung für Reserpin, die in [Bestätigen des Vorhandenseins von Verbindungen auf Seite 171](#) notiert wurde.
5. Stellen Sie sicher, dass das Kontrollkästchen **Center / Width** nicht aktiviert ist.
6. Geben Sie in der Massentabelle die geeigneten Werte für Start, Stop und Time ein. Siehe [Tabelle A-6](#).

Tabelle A-6 Massentabellen-Parameter (Produkt-Ionen-Scan)

Feld	Wert
Start (Da)	100
Stop (Da)	650
Time (sec)	2

7. Klicken Sie auf **Edit Ramp**.
8. Im Dialogfeld Ramp Parameter Settings wählen Sie **Collision Energy** und geben dann die Werte für **Start**, **Stop** und **Step** ein.

Hinweis: Die vorhandenen Werte sind gute Ausgangspunkte. Verwenden Sie die Funktion **Edit Ramp**, um Werte für eine höhere Effizienz zu ändern.

9. Klicken Sie auf **OK**.
10. Aktivieren Sie das **MCA** Kontrollkästchen.
11. Klicken Sie auf **Start**.
12. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das XIC-Fenster rechts unten und klicken dann auf **Open File**.
13. Wählen Sie die Produkt-Ionen mit der größten Intensität aus und notieren Sie den *m/z*-Wert der Produkt-Ionen bis zur ersten Dezimalstelle (wie z. B. 195,1).

Wir empfehlen, für jede Verbindung zwei oder drei Produkt-Ionen zu optimieren. Die zusätzlichen Übergänge können zur Bestätigung verwendet werden, oder um zu vermeiden, dass eine erneute Optimierung einer Verbindung erforderlich ist, wenn eine Störung festgestellt wird.

Hinweis: Stellen Sie sicher, dass die für die Optimierung gewählten höchsten Peaks keinen üblichen Verlust aus dem Vorläufer-Ion darstellen, wie z. B. Wasser oder Kohlendioxid. Stellen Sie außerdem sicher, dass das Produkt-Ion keine zu geringe Masse besitzt oder dass bei der Analyse auf der Säule keine Störungen für diesen Übergang in echten Proben oder Clustern in der mobilen Phase vorkommen können.

14. Wiederholen Sie dieses Verfahren für die anderen Verbindungen.

Optimieren Sie das Kollisionszellen-Austrittspotenzial für jedes Produkt-Ion

1. Im Tune Method Editor schließen Sie die XIC-Fenster.
2. Öffnen Sie die zuvor gespeicherte Methode.
3. Prüfen Sie in der Massentabelle die *m/z*-Werte für Q1 und Q3 für die Verbindung.
4. Klicken Sie auf die Registerkarte **Compound** und geben Sie die zuvor notierten DP- und Stoßenergie-Werte ein.
5. Klicken Sie auf **Edit Ramp**.

6. Wählen Sie **Collision Cell Exit Potential (CXP)** im Dialogfeld Ramp Parameter Settings.
7. Geben Sie die Werte für **Start**, **Stop** und **Step** ein.

Tipp! Die vorhandenen Werte sind gute Ausgangspunkte. Verwenden Sie die Funktion **Edit Ramp**, um Werte für eine höhere Effizienz zu ändern.

8. Klicken Sie auf **OK**.
9. Klicken Sie auf **Start**.
10. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das XIC-Fenster rechts unten und klicken dann auf **Open File**.
11. Beachten Sie den optimalen Wert für die relevanten Ionen.

Der Wert, der das beste Signal ergibt, ist der optimale Wert.

12. Klicken Sie in der Massentabelle mit der rechten Maustaste und wählen Sie dann den gerade optimierten Parameter aus.

Dies fügt eine Spalte in der Tabelle hinzu.

13. Wiederholen Sie dieses Verfahren, wenn weitere Produkt-Ionen überwacht wurden.
14. Fügen Sie die optimierten Werte in der entsprechenden Zeile hinzu.
15. Speichern Sie die Methode.
16. Wiederholen Sie dieses Verfahren für alle anderen Verbindungen, die zuvor optimiert wurden.

Manuelles Optimieren der Ionenquellen- und Gas-Parameter

Die Ionenquellen- und Gas-Einstellungen müssen korrekt eingestellt werden, um sicherzustellen, dass das Massenspektrometer sauber bleibt und dass die relevanten Verbindungen optimal als Ionen in die Gasphase überführt wurden.

Hinweis: Die optimalen Ionenquellen- und Gas-Einstellungen sind von der Lösungsmittelzusammensetzung und der Durchflussrate abhängig.

Die Ionenquellen- und Gas-Einstellungen müssen angepasst werden, wenn sich die LC-Bedingungen wesentlich verändern.

Um die Ionenquellen- und Gas-Parameter zu optimieren, richten Sie eine Spritzenpumpe mit den relevanten Verbindungen ein und schließen Sie die Leitung mit einem T-Stück an das LC-Gerät an. Sie können die LC-Pumpe manuell oder über die Software steuern.

Eine weitere Möglichkeit, die Ionenquellen- und Gas-Einstellungen manuell zu optimieren, ist, den Autosampler die Verbindung manuell injizieren zu lassen, während Sie die Parameter im Modus „Manual Tuning“ manuell verändern, um die optimalen Einstellungen zu ermitteln.

Vorbereiten der Ionenquelle

1. Stellen Sie das horizontale Mikrometer auf 5.
2. Stellen Sie das vertikale Mikrometer an der Ionenquelle auf die Durchflussgeschwindigkeit ein.

Verwenden Sie die Parameter in [Tabelle A-7](#).

Tabelle A-7 Turbo V™ und IonDrive™ Turbo V Vertikale Parameter für

Volumenstrom	Vertikale Anfangsparameter
1 bis 20 µl/min	10
20 bis 250 µl/min	5
250 bis 500 µl/min	2
500 + µl/min	0

Abhängig davon, wie die Optimierung ausgeführt wird, muss möglicherweise ein Hardware-Profil mit LC-Pumpen konfiguriert werden.

Siehe *Bedienerhandbuch* der Ionenquelle.

Optimieren der Ionenquellen-Parameter

Ionenquellen-Parameter werden für das beste Signal-zu-Rauschen-Verhältnis für die relevante Verbindung optimiert. Der Volumenstrom der Curtain Gas™-Versorgung wird bei der höchsten Einstellung ohne Verlust der Empfindlichkeit optimiert. Siehe das Ionenquellen-*Bedienerhandbuch*.

Verwenden Sie das folgende Verfahren zur Optimierung des Curtain Gas™-Durchflussparameters. Die Hauptfunktion des Curtain Gas™-Durchflussparameter ist die Verhinderung einer Kontamination der Ionenoptik. Der Volumenstrom des Curtain Gas™-Durchflussparameters sollte immer so hoch wie ohne Verlust an Empfindlichkeit möglich aufrecht erhalten werden. Der Wert ist abhängig von der Art des Massenspektrometers und der Ionenquelle.

Setzen Sie den Parameter nicht unter den Startwert.

Der Mindestvolumenstrom für den Einsatz der APCI-Probe beträgt 200 µl/min.

Hinweis: Je nach Massenspektrometer sind möglicherweise nicht alle Parameter verfügbar.

1. Doppelklicken Sie in der Navigationsleiste unter **Tune and Calibrate**, auf **Manual Tuning**.
2. Klicken Sie auf **File > Open**.
3. In der Liste **Files** klicken Sie auf die verwendete Erfassungsmethode, um die Verbindungsparameter zu optimieren und klicken dann auf **OK**.

Die Methode wird im Tune Method Editor geöffnet.

4. Klicken Sie auf die Registerkarte **Source/Gas**.

- Über die Ionenquellen- und Gas-Strömungsgleichrichter stellen Sie alle Ionenquellen- und Gas-Parameter so ein, dass sie für die Durchflussgeschwindigkeit angemessen sind.
- Stellen Sie die Laufzeit lang genug ein, damit viele Parameter eingestellt werden können. Ein empfohlener Ausgangswert ist 15 Minuten.
- Klicken Sie auf **Start**.

Daten erscheinen in Teilfenstern unter dem Tune Method Editor.

- Beachten Sie das Signal der relevanten Peaks.
- In Feld **Curtain Gas (CUR)** erhöhen Sie den Wert um fünf.
- Erhöhen Sie den **Curtain Gas (CUR)**-Wert, bis Sie den höchsten Wert ohne Empfindlichkeitsverlust gefunden haben.

Wie bei den meisten Parametern Source/Gas verwenden Sie den höheren Wert, wenn zwei Werte das gleiche Ergebnis liefern.

- Wiederholen Sie dieses Verfahren für die anderen Source/Gas Parameter.

Beim Optimieren dieser Parameter suchen Sie den Wert, der den höchsten Rauschabstandswert liefert.

Erweiterte Parameter

Die folgenden Parameter sollten nur von einem erfahrenen Betreiber optimiert werden.

Optimieren von AF2

Der AF2-Parameter steuert die Fragmentierung des zweiten Vorläufer-Ions in einem MS3 Scan. Die Menge der Anregungsenergie hängt von der Verbindung und dem gewünschten Umfang der Fragmentierung ab.

- Bei positiven und negativen Ionen-Modi fahren Sie AF2 von 0,07 V bis 0,3 V mit einer Schrittweite von 0,01 V hoch.

Der zulässige Bereich beträgt 0 V bis 1 V.

- Bei positiven und negativen Ionen-Modi fahren Sie AF2 von 0 mV bis 200 mV mit einer Schrittweite von 5 mV hoch.
- Wählen Sie den AF2-Wert, der die größte Fragmentierung erzeugt.

Falls beim Einsatz der Geräte der Serien 6500 und 6500⁺ der MS3-Scan ausgewählt wird, ist die Option **No Fragmentation** nicht verfügbar. Benutzer können die Wirkung der Option **No Fragmentation** jedoch erzielen, indem sie im Tune Method Editor auf der Registerkarte **Compound** den Parameter **AF2** auf **0** einstellen.

Über Kollisionsenergieverschmierung (CES)

Unter den substanzspezifischen Parametern in „Enhanced Product Ion“ (EPI)- und MS3-Experimenten haben Benutzer durch Aktivieren des Kontrollkästchens „Collision energy spread (CES)“ die Möglichkeit, die Differenz

der Kollisionsenergie, die im Experiment angewandt wird, anzugeben. Wenn z. B. ein CE-Wert von 30 und ein CES-Wert von 15 verwendet werden, dann werden Kollisionsenergien von 15, 30 und 45 verwendet.

Systemparameter der Serien 6500 und 6500⁺

B

Die erste Zahl unter jeder Scan-Methode steht für den voreingestellten Wert; der Zahlenbereich ist für jeden Parameter erreichbar.

Tabelle B-1 Systemparameter der Serien 6500 und 6500⁺

Parameter ID	Zugangs-ID	Positiver Ionenmodus			Negativer Ionenmodus		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20 20 bis 55	20 20 bis 55	20 20 bis 55	20 20 bis 55	20 20 bis 55	20 20 bis 55
CAD ^{(a)(b)}	CAD ^{(c)(d)}	0 Nicht zutreffend	6 Nicht zutreffend	Med Niedrig, Mittel, Hoch	0 Nicht zutreffend	6 Nicht zutreffend	Med Niedrig, Mittel, Hoch
CAD ^{(c)(d)}	CAD ^{(a)(b)}	0 Nicht zutreffend	6 Nicht zutreffend	9 0 bis 12	0 Nicht zutreffend	6 Nicht zutreffend	9 0 bis 12
IS ⁽¹⁾⁽²⁾⁽⁷⁾	IS ⁽¹⁾⁽²⁾⁽⁷⁾	5500 0 bis 5500	5500 0 bis 5500	5500 0 bis 5500	-4500 -4500 bis 0	-4500 -4500 bis 0	-4500 -4500 bis 0
IS ⁽⁵⁾	IS ⁽⁵⁾	1500 0 bis 2500	1500 0 bis 2500	1500 0 bis 2500	-1500 -2500 bis 0	-1500 -2500 bis 0	-1500 -2500 bis 0
IS ⁽⁶⁾	IS ⁽⁶⁾	1000 0 bis 4000	1000 0 bis 4000	1000 0 bis 4000	-1000 -4000 bis 0	-1000 -4000 bis 0	-1000 -4000 bis 0
NC ⁽³⁾⁽⁴⁾⁽⁸⁾	NC ⁽³⁾⁽⁴⁾⁽⁸⁾	3 0 bis 5	3 0 bis 5	3 0 bis 5	-3 -5 bis 0	-3 -5 bis 0	-3 -5 bis 0
TEM ⁽²⁾⁽³⁾⁽⁴⁾⁽⁵⁾⁽⁷⁾⁽⁸⁾	TEM ⁽²⁾⁽³⁾⁽⁴⁾⁽⁵⁾⁽⁷⁾⁽⁸⁾	0 0 bis 750	0 0 bis 750	0 0 bis 750	0 0 bis 750	0 0 bis 750	0 0 bis 750
OR (DP = OR)	DP	100 0 bis 300	100 0 bis 300	100 0 bis 300	-100 -300 bis 0	-100 -300 bis 0	-100 -300 bis 0

Tabelle B-1 Systemparameter der Serien 6500 und 6500⁺ (Fortsetzung)

Parameter ID	Zugangs-ID	Positiver Ionenmodus			Negativer Ionenmodus		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
Q0 (EP = -Q0)	EP	10 2 bis 15	10 2 bis 15	10 2 bis 15	-10 -15 bis -2	-10 -15 bis -2	-10 -15 bis -2
IQ1 (IQ1 = Q0 + Offset)	IQ1	Q0 + (-0,5) -0,1 bis -2	Q0 + (-0,5) -0,1 bis -2	Q0 + (-0,5) -0,1 bis -2	Q0 + 0,5 0,1 bis 2	Q0 + 0,5 0,1 bis 2	Q0 + 0,5 0,1 bis 2
ST (ST = Q0 + Offset)	ST	Q0 + (-8) -12 bis -5	Q0 + (-8) -12 bis -5	Q0 + (-8) -12 bis -5	Q0 + 8 5 bis 12	Q0 + 8 5 bis 12	Q0 + 8 5 bis 12
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0 bis 3	Nicht zutreffend	1 0 bis 3	-1 -3 bis -0	Nicht zutreffend	-1 -3 bis -0
IQ2 (IQ2 = Q0 + Offset)	IQ2	Q0 + (-10) -30 bis -8	Q0 + (-10) -30 bis -8	Q0 + (-10) -30 bis -8	Q0 + 10 8 bis 30	Q0 + 10 8 bis 30	Q0 + 10 8 bis 30
RO2	RO2	-20 Nicht zutreffend	-20 Nicht zutreffend	Nicht zutreffend	20 Nicht zutreffend	20 Nicht zutreffend	Nicht zutreffend
RO2 (CE = Q0 - RO2)	CE	Nicht zutreffend	Nicht zutreffend	30 5 bis 180	Nicht zutreffend	Nicht zutreffend	-30 -180 bis -5
ST3 (ST3 = RO2 + Offset)	ST3	RO2 - 10 -30 bis -5	Nicht zutreffend	Nicht zutreffend	RO2 + 10 5 bis 30	Nicht zutreffend	Nicht zutreffend
ST3 (CXP = RO2 - ST3)	CXP	Nicht zutreffend	15 0 bis 55	15 0 bis 55	Nicht zutreffend	-15 -55 bis 0	-15 -55 bis 0
RO3	RO3	-50 Nicht zutreffend	Nicht zutreffend	Nicht zutreffend	50 Nicht zutreffend	Nicht zutreffend	Nicht zutreffend
RO3 (IE3 = RO2 - RO3)	IE3	Nicht zutreffend	1 0 bis 5	1 0 bis 5	Nicht zutreffend	-1 -5 bis 0	-1 -5 bis 0

Systemparameter der Serien 6500 und 6500⁺

Tabelle B-1 Systemparameter der Serien 6500 und 6500⁺ (Fortsetzung)

Parameter ID	Zugangs-ID	Positiver Ionenmodus			Negativer Ionenmodus		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CEM	CEM	1700 0 bis 3300	1700 0 bis 3300	1700 0 bis 3300	1700 0 bis 3300	1700 0 bis 3300	1700 0 bis 3300
GS1	GS1	20 0 bis 90	20 0 bis 90	20 0 bis 90	20 0 bis 90	20 0 bis 90	20 0 bis 90
GS2	GS2	0 0 bis 90	0 0 bis 90	0 0 bis 90	0 0 bis 90	0 0 bis 90	0 0 bis 90
IHT ⁶	IHT ⁶	150	150	150	150	150	150
sdp ⁴	sdp ⁴	1 1 oder 2	1 1 oder 2	1 1 oder 2	1 1 oder 2	1 1 oder 2	1 1 oder 2

(1) Turbo VTM-Ionenquelle (2) TurbolonSpray[®] (TIS) Probe (3) APCI-Probe (4) DuoSprayTM-Ionenquelle, 1=TIS und 2=HN (5) PhotoSpray[®]-Ionenquelle (6) NanoSpray[®]-Ionenquelle (7) IonDriveTM Turbo V-Ionenquelle (8) IonDriveTM Turbo V-Ionenquelle mit APCI-Probe (a) QTRAP[®] 6500 oder 6500⁺-System, massearm (LM) (b) QTRAP[®] 6500 oder 6500⁺-System, massereich (HM) (c) SCIEX Triple QuadTM 6500 oder 6500⁺-System, LM (d) SCIEX Triple QuadTM 6500 oder 6500⁺-System, HM

Tabelle B-2 Systemparameter der Serien 6500 und 6500⁺, nur für LIT-Scan-Typen

Parameter ID	Zugangs-ID	Positiver Ionenmodus	Negativer Ionenmodus
CAD	CAD	Hoch Niedrig, Mittel, Hoch	Hoch Niedrig, Mittel, Hoch
AF2**	AF2	0,1 0 bis 1	0,1 0 bis 1
AF3	AF3	masse-/geschwindigkeitsabhängig 0 bis 10	masse-/geschwindigkeitsabhängig 0 bis 10
EXB	EXB	masse-/geschwindigkeitsabhängig -165 bis 0	masse-/geschwindigkeitsabhängig 0 bis 165
CES	CES	0 0 bis 87,5	0 0 bis 87,5

Tabelle B-2 Systemparameter der Serien 6500 und 6500⁺, nur für LIT-Scan-Typen (Fortsetzung)

Parameter ID	Zugangs-ID	Positiver Ionenmodus	Negativer Ionenmodus
ROS	CE	10	-10
(Q0 - ROS)		5 bis 180	-5 bis -180
<p>** nur bei MS/MS/MS (1) Turbo VTM-Ionenquelle (2) TurbolonSpray[®] (TIS) Probe (3) APCI-Probe (4) DuoSprayTM-Ionenquelle, 1=TIS und 2=HN (5) PhotoSpray[®]-Ionenquelle (6) NanoSpray[®]-Ionenquelle (7) IonDriveTM Turbo V-Ionenquelle (8) IonDriveTM Turbo V-Ionenquelle mit APCI-Probe</p>			

Ionen und Lösungen kalibrieren



Tabelle C-1 Tuningfrequenz

Kalibrierung			Optimierung der Auflösung	
Scan-Methode	Frequenz	Manuelle/ Automatisch	Frequenz	Manuelle/ Automatisch
Q1 und Q3	3 Monate bis 6 Monate	Beide	3 Monate bis 6 Monate	Beide
LIT	Alle 2 Wochen; nach Bedarf	Beide	3 Monate bis 6 Monate	Nur automatisch

Tabelle C-2 Empfohlene Tuning-Lösungen für die Geräte der Serie 6500 oder 6500⁺

System	Q1 und Q3		LIT
	Positiv	Negativ	Positiv und Negativ
SCIEX Triple Quad™ 6500 oder 6500 ⁺ LC-MS/MS-System	POS PPG, 2e-7 M	NEG PPG, 3e-5 M	n. z.
QTRAP® 6500 oder 6500 ⁺ LC-MS/MS-System	POS PPG, 2e-7 M	NEG PPG, 3e-5 M	Agilent ESI Tuning Mix

Tabelle C-3 Q1- und Q3-Scans für Systeme der Serie 6500 oder 6500⁺

Polarität	Massen							
Massearm								
Positiv	59,05	175,13	500,38	616,46	906,67	1080,80	1196,88	n. z.
Negativ	45,00	585,39	933,64	1223,85	n. z.	n. z.	n. z.	n. z.
Massereich								
Positiv	59,05	175,13	500,38	616,46	906,67	1254,93	1545,13	1952,43
Negativ	45,00	411,26	585,39	933,64	1223,85	1572,10	1863,31	1979,39

Tabelle C-4 LIT-Scans für das LC-MS/MS System QTRAP® 6500 oder 6500⁺

Polarität	Massen				
Massearm					
Positiv	118,09	322,05	622,03	922,01	n. z.
Negativ	112,99	431,98	601,98	n. z.	n. z.
Massereich					
Positiv	118,09	322,05	622,03	922,01	1521,97
Negativ	112,99	431,98	601,98	1033,99	1633,95

Symbole der Werkzeugleiste

D

Weitere Informationen zu Symbolen der Werkzeugleiste finden Sie im *Handbuch für fortgeschrittene Benutzer*.

Tabelle D-1 Symbole der Werkzeugleiste

Symbol	Name	Beschreibung
	New Subproject	Erstellt ein Teilprojekt. Teilprojekte können später im Prozess nur dann erstellt werden, wenn das Projekt ursprünglich mit Teilprojekten erstellt wurde.
	Copy Subproject	Kopiert einen Teilprojekt-Ordner. Teilprojekte können nur aus einem anderen Projekt kopiert werden, das bestehende Teilprojekte besitzt. Wenn die gleichen Ordner sowohl auf Projekt- als auch Teilprojekt-Ebene vorhanden sind, verwendet die Software die Ordner der Projektebene.

Tabelle D-2 Acquisition Method Editor-Symbole

Symbol	Name	Beschreibung
	Mass Spec	Klicken Sie hier, um die Registerkarte MS im Acquisition Method Editor anzuzeigen.
	Period	Klicken Sie hier mit der rechten Maustaste, um ein Experiment hinzuzufügen, ein IDA Criteria Level hinzuzufügen oder den Zeitraum zu löschen.
	Autosampler	Klicken Sie hier, um die Registerkarte Autosampler Properties zu öffnen.
	Syringe Pump	Klicken Sie hier, um die Registerkarte Syringe Pump Properties zu öffnen.
	Column Oven	Klicken Sie hier, um die Registerkarte Column Oven Properties zu öffnen.
	Valve	Klicken Sie hier, um die Registerkarte Valve Properties zu öffnen.
	DAD	Klicken Sie hier, um den DAD Method Editor zu öffnen. Siehe Generieren von DAD-Daten auf Seite 125 .
	ADC	Klicken Sie hier, um die Registerkarte ADC Properties zu öffnen. Siehe ADC-Daten anzeigen auf Seite 116 .

Tabelle D-3 Symbole im Aufnahmemodus

Symbol	Name	Beschreibung
	View Queue	Zeigt die Proben-Warteschlange an.
	Instrument Queue	Zeigt eine entfernt liegende Instrumentenstation an.
	Status for Remote Instrument	Zeigt den Status eines entfernt liegenden Geräts an.
	Start Sample	Startet die Probe in der Warteschlange.
	Stop Sample	Stoppt die Probe in der Warteschlange.
	Abort Sample	Beendet die Probenaufnahme während der Verarbeitung dieser Probe.
	Stop Queue	Stoppt die Warteschlange, bevor es die Verarbeitung aller Proben abgeschlossen hat.
	Pause Sample Now	Fügt eine Pause in die Warteschlange ein.
	Insert Pause before Selected Sample(s)	Fügt eine Pause vor einer bestimmten Probe ein.
	Continue Sample	Setzt die Aufnahme der Probe fort.
	Next Period	Startet eine neue Periode.
	Extend Period	Verlängert den aktuellen Zeitabschnitt.
	Next Sample	Stoppt die Aufnahme der aktuellen Probe und beginnt mit der Aufnahme der nächsten Probe.
	Equilibrate	Wählt die zum Äquilibrieren der Geräte verwendete Methode aus. Es sollte die gleiche Methode sein, wie jene die bei der ersten Probe in der Warteschlange verwendet wird.
	Standby	Schaltet das Gerät in den Standby-Modus.
	Ready	Schaltet das Gerät in den Ready-Modus.
	Reserve Instrument for Tuning	Stellt das Massenspektrometer für Tuning und Kalibrierung bereit.

Symbole der Werkzeugleiste

Tabelle D-3 Symbole im Aufnahmemodus (Fortsetzung)

Symbol	Name	Beschreibung
	IDA Method Wizard	Startet den IDA Method Wizard.
	Purge Modifier	Startet die Spülung des Modifikators aus der Modifier-Pumpe.

Tabelle D-4 Modus-Symbole „Tunen und Kalibrieren“

Symbol	Name	Beschreibung
	Calibrate from spectrum	Öffnet den Dialog Mass Calibration Option und verwendet das aktive Spektrum zum Kalibrieren des Massenspektrometers.
	Manual Tune	Klicken Sie hier, um den Manual Tune Editor zu öffnen.
	Compound Optimization	Optimiert eine Verbindung mit Infusion durch FIA.
	Instrument Optimization	Überprüft die Leistung des Instruments, passt die Massenkalisierung an oder passt die Massenspektrometer-Einstellungen an.
	View Queue	Zeigt die Proben-Warteschlange an.
	Instrument Queue	Zeigt die Instrumentenüberwachung an.
	Status for Remote Instrument	Zeigt den Status der Instrumentenüberwachung an.
	Reserve Instrument for Tuning	Stellt das Instrument für Tuning und Kalibrierung bereit.
	IDA Method Wizard	Startet den IDA Method Wizard.

Tabelle D-5 Explore Quick Reference: Chromatogramme und Spectrum

Symbol	Name	Beschreibung
	Open Data File	Öffnet Dateien.
	Show Next Sample	Geht zur nächsten Probe.
	Show Previous Sample	Geht zur vorhergehenden Probe.

Tabelle D-5 Explore Quick Reference: Chromatogramme und Spectrum (Fortsetzung)

Symbol	Name	Beschreibung
	Zur Probe springen	Öffnet das Dialogfeld Select Sample.
	List Data	Zeigt die Daten in Tabellenform an.
	TIC anzeigen	Generiert ein TIC von einem Spektrum
	Dialogfeld Extract Using	Extrahiert Ionen durch Auswählen von Massen.
	Show Base Peak Chromatogram	Generiert ein BPC.
	Show Spectrum	Generiert ein Spektrum aus einem TIC.
	Copy Graph to new Window	Kopiert das aktive Diagramm in ein neues Fenster.
	Baseline Subtract	Öffnet das Dialogfeld Baseline Subtract.
	Threshold	Passt den Schwellenwert an.
	Noise Filter	Zeigt das Dialogfeld Noise Filter Options an, der verwendet werden kann, um die Mindestbreite eines Peaks zu definieren. Signale unterhalb dieser Mindestbreite werden als Rauschen betrachtet.
	Show ADC	Zeigt ADC-Daten an.
	Show File Info	Zeigt die experimentellen Bedingungen, die zur Sammlung der Daten verwendet wurden.
	Add arrows	Fügt Pfeile auf der X-Achse des aktuellen Diagramms ein.
	Remove all arrows	Entfernt Pfeile von der X-Achse des aktuellen Diagramms.
	Offset Graph	Kompensiert den kleinen Zeitunterschied zwischen der Aufzeichnung der ADC-Daten und der Akquisition der Massenspektrometer-Daten. Dies ist nützlich, wenn Sie Diagrammen zum Vergleich überlagern
	Force Peak Labels	Kennzeichnet alle Peaks.
	Expand Selection By	Bestimmt den Vergrößerungsfaktor für einen Teil des Diagramms, der genauer untersucht werden soll.
	Clear ranges	Bringt die vergrößerte Auswahl wieder auf die normale Ansicht.

Symbole der Werkzeugleiste

Tabelle D-5 Explore Quick Reference: Chromatogramme und Spectrum (Fortsetzung)

Symbol	Name	Beschreibung
	Set Selection	Definiert Anfangs- und Endwerte für eine Auswahl. Diese Funktion ermöglicht eine genauere Auswahl als dies durch das Markieren des Bereiches mit dem Cursor möglich ist.
	Normalize to Max	Skaliert ein Diagramm auf das Maximum, sodass der intensivste Peak auf die Originalgröße skaliert wird, egal, ob er sichtbar ist oder nicht.
	Show History	Zeigt eine Zusammenfassung der Datenverarbeitungsschritte an, die mit einer bestimmten Datei ausgeführt wurden, wie z. B. Glättung, Subtraktion, Kalibrierung und Rauschfilterung.
	Open Compound Database	Öffnet die Datenbank für chemische Verbindungen.
	Set Threshold	Passt den Schwellenwert an.
	Show Contour Plot	Zeigt ausgewählte Daten entweder als Spektrumdiagramm oder als XIC. Zusätzlich gilt für Daten, die durch DAD aufgenommen wurden, dass ein Konturdiagramm ausgewählte Daten entweder als DAD-Spektrum oder XWC zeigen kann.
	Show DAD TWC	Generiert ein TWC des DAD-Spektrums.
	Show DAD Spectrum	Generiert ein DAD-Spektrum.
	Extract Wavelength	Extrahiert bis zu drei Wellenlängenbereiche von einem DAD-Spektrum und zeigt ein XWC.

Tabelle D-6 Explore-Symboleiste – Schnellverweis: Überlagern von Graphen

Symbol	Name	Beschreibung
	Home Graph	Um die Grafik wieder auf den ursprünglichen Maßstab zu bringen, klicken Sie auf die Grafik.
	Overlay	Durch Anklicken werden Grafiken überlagert.
	Cycle Overlays	Durch Anklicken wechseln Sie zwischen überlagerten Grafiken.
	Sum Overlay	Durch Anklicken werden Grafiken summiert.

Tabelle D-7 Explore-Symboleiste Schnellverweis: Fragment Interpretation Tool

Symbol	Name	Beschreibung
	Show Fragment Interpretation Tool	Klicken Sie auf das „Fragment Interpretation Tool“, das die einzelnen, nicht-zyklischen Bindungsspaltungsfragmente aus der .mol-Datei berechnet.

Tabelle D-8 Navigations-Symbole auf der Explore-Symboleiste

Symbol	Name	Funktion
	Open File	Zum Öffnen von Dateien anklicken.
	Show Next Sample	Anklicken, um zur nächsten Probe zu navigieren.
	Show Previous Sample	Anklicken, um zur vorherigen Probe zu navigieren.
	GoTo Sample	Durch Anklicken öffnet sich das Dialogfeld Select Sample.
	List Data	Durch Anklicken Daten in Tabellenform anzeigen.
	Show TIC	Anklicken generiert ein TIC von einem Spektrum
	Extract Using Dialog	Anklicken extrahiert Ionen durch Auswählen von Massen.
	Show Base Peak Chromatogram	Anklicken generiert ein BPC.
	Show Spectrum	Anklicken generiert ein Spektrum aus einem TIC.
	Copy Graph to new Window	Anklicken kopiert das aktive Diagramm in ein neues Fenster.
	Baseline Subtract	Anklicken öffnet das Dialogfeld Baseline Subtract.
	Threshold	Anklicken, um Schwellenwert anzupassen.
	Noise Filter	Durch Klicken können Sie mit dem Dialogfeld Noise Filter Optionen die Mindestbreite eines Peaks definieren. Signale unterhalb dieser Mindestbreite werden als Rauschen betrachtet.
	Show ADC	Durch Anklicken werden ADC-Daten angezeigt.
	Show File Info	Anklicken zeigt die experimentellen Bedingungen an, die zur Sammlung der Daten verwendet wurden.
	Add arrows	Anklicken fügt Pfeile auf der x-Achse des aktuellen Diagramms hinzu.

Symbole der Werkzeugleiste

Tabelle D-8 Navigations-Symbole auf der Explore-Symbolleiste (Fortsetzung)

Symbol	Name	Funktion
	Remove all arrows	Anklicken löscht Pfeile von der x-Achse des aktuellen Diagramms.
	Offset Graph	Durch Klicken kompensieren Sie den kleinen Zeitunterschied zwischen der Aufzeichnung der ADC-Daten und der Massenspektrometer-Daten. Dies ist nützlich, wenn Sie Diagramme zum Vergleich überlagern
	Force Peak Labels	Anklicken kennzeichnet alle Peaks.
	Expand Selection By	Anklicken bestimmt den Vergrößerungsfaktor für einen Teil des Diagramms, den Sie genauer untersuchen wollen.
	Clear ranges	Anklicken bringt die vergrößerte Auswahl wieder auf die normale Ansicht.
	Set Selection	Durch Klicken können Sie Anfangs- und Endwerte für eine Auswahl eingeben. Dies ermöglicht eine genauere Auswahl als das Markieren des Bereiches mit dem Cursor.
	Normalize to Max	Durch Klicken vergrößern Sie ein Diagramm auf das Maximum, so dass die intensivsten Peaks auf die Originalgröße skaliert werden, egal ob sie sichtbar sind oder nicht.
	Show History	Anklicken zeigt eine Zusammenfassung der Datenverarbeitungsschritte, die mit einer bestimmten Datei ausgeführt wurden, wie z. B. Glättung, Subtraktion, Kalibrierung und Rauschfilterung.
	Open Compound Database	Anklicken öffnet die Datenbank für chemische Verbindungen.
	Set Threshold	Anklicken, um Schwellenwert anzupassen.
	Show Contour Plot	Durch Anklicken werden ausgewählte Daten entweder als Spektrumdiagramm oder als XIC angezeigt. Zusätzlich gilt für Daten, die durch DAD aufgenommen wurden, dass ein Konturdiagramm ausgewählte Daten entweder als DAD-Spektrum oder XWC zeigen kann.
	Show DAD TWC	Anklicken generiert ein TWC vom DAD.
	DAD-Spektrum anzeigen	Anklicken generiert ein DAD-Spektrum.
	Extract Wavelength	Anklicken extrahiert bis zu drei Wellenlängenbereiche von einem DAD-Spektrum und zeigt ein XWC.

Tabelle D-9 Symbole auf der Registerkarte „Integration“ und im „Quantification Wizard“

Symbol	Name	Beschreibung
	Set parameters from Background Region	Verwendet den ausgewählten Peak.
	Select Peak	Verwendet den ausgewählten Hintergrund.
	Manual Integration Mode	Integriert Peaks manuell.
	Show or Hide Parameters	Schaltet die Parameter zum Auffinden von Peaks zwischen ein- und ausgeblendet um.
	Show Active Graph	Zeigt nur das Analyten-Chromatogramm.
	Show Both Analyte and IS	Zeigt den Analyten und das damit verbundene Chromatogramm (nur verfügbar, wenn ein zugehöriger interner Standard vorhanden ist).
	Use Default View for Graph	Keht zur voreingestellten Ansicht zurück (alle Daten zeigen, wenn zum Beispiel der Benutzer ein Chromatogramm vergrößert hatte).

Tabelle D-10 Symbole in der Ergebnistabelle

Symbol	Name	Beschreibung
	Sort Ascending by Selection	Sortiert die ausgewählte Spalte nach aufsteigenden Werten.
	Sort Descending by Selection	Sortiert die markierte Spalte nach absteigenden Werten.
	Lock Or Unlock Column	Sperrt oder entsperrt die markierte Spalte. Eine gesperrte Spalte kann nicht verschoben werden.
	Metric Plot by Selection	Erstellt für die markierte Spalte eine metrische Kurve.
	Show all Samples	Zeigt alle Proben in der Ergebnistabelle an.
	Delete Formula Column	Löscht Formelspalten.
	Report Generator	Öffnet die Reporter-Software.

Tabelle D-11 Kurzinformation zu Symbolen: Quantifizierungsmodus

Symbol	Name	Beschreibung
	Add/Remove Samples	Addiert oder entfernt Proben aus der Ergebnistabelle.
	Export as Text	Speichert die Ergebnistabelle als Textdatei.
	Modify Method	Öffnet eine wiff-Datei.
	Peak Review – Pane	Öffnet Peaks in einem Teilfenster.
	Peak Review – Window	Öffnet Peaks in einem Fenster.
	Calibration – Pane	Öffnet die Kalibrierkurve in einem Teilfenster.
	Calibration – Window	Öffnet die Kalibrierkurve in einem Fenster.
	Show First Peak	Zeigt den ersten Peak in einem Teilfenster oder Fenster.
	Show Last Peak	Zeigt den letzten Peak in einem Teilfenster oder Fenster.
	Show Audit Trail	Zeigt den Prüfpfad für die Ergebnistabelle an.
	Clear Audit Trail	Löscht den Prüfpfad für die Ergebnistabelle. Diese Funktion ist nicht verfügbar.
	Statistics	Öffnet das Fenster „Statistics“.
	Report Generator	Öffnet die Reporter -Software.

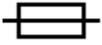
Glossar der Symbole

E

Hinweis: Nicht alle Symbole der folgenden Tabelle gelten für jedes Gerät.

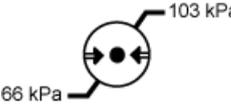
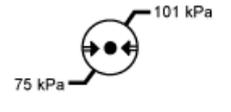
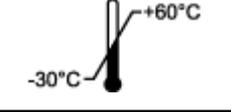
Symbol	Beschreibung
	Übereinstimmungszeichen der australischen Regulierungsbehörde. Bescheinigt, dass die Produkte die EMV-Anforderungen der Australian Communications and Media Authority (ACMA) erfüllen.
	Wechselstrom
A	Ampere (Strom)
	Autorisierter Vertreter in der Europäischen Gemeinschaft
	Biogefährdung
	CE-Konformitätskennzeichnung
	cCSAus-Prüfzeichen. Zeigt den elektrischen Sicherheitsnachweis für Kanada und die USA.
	Katalognummer
	Achtung Hinweis: In Dokumentationen von SCIEX bezeichnet dieses Symbol eine Verletzungsgefahr.

Glossar der Symbole

Symbol	Beschreibung
	China RoHS-Label „Achtung“. Das elektronische Informationsprodukt enthält bestimmte toxische oder gefährliche Stoffe. Die Zahl in der Mitte steht für den Zeitraum, in dem eine umweltfreundliche Nutzung gegeben ist (Environmentally Friendly Use Period, EFUP) und gibt die Anzahl an Kalenderjahren an, über die das Produkt betrieben werden darf. Nach Ablauf des EFUP muss das Produkt unverzüglich recycelt werden. Der kreisförmige Pfeil weist darauf hin, dass das Produkt wiederverwertbar ist. Der Datumscode auf dem Etikett oder dem Produkt gibt das Herstellungsdatum an.
	China RoHS-Logo. Das Gerät enthält keine toxischen und gefährlichen Stoffe oder Elemente über den Konzentrationshöchstwerten und es ist ein umweltfreundliches Produkt, das recycelt und wiederverwendet werden kann.
	Bedienungsanleitung beachten.
	cTUVus-Zeichen für TUV Rheinland of North America.
	Datenmatrix-Symbol, das mit einem Strichcode-Lesegerät gescannt werden kann, um eine eindeutige Gerätekennung (UDI) zu erhalten.
	Ethernetanschluss
	Explosionsgefahr
	Brandgefahr
	Zerbrechlich
	Sicherung
Hz	Hertz
	Hochspannung Stromschlaggefahr Wenn die Hauptabdeckung entfernt werden muss, wenden Sie sich an einen SCIEEX-Vertreter, um einen Stromschlag zu vermeiden.

Symbol	Beschreibung
	Gefahr durch heiße Oberfläche
	In-vitro-Diagnostikum
	Gefährdung durch ionisierende Strahlung
	Trocken aufbewahren. Vor Regen schützen. Relative Luftfeuchtigkeit darf 99 % nicht überschreiten.
	Aufrecht halten.
	Gefährliche Laserstrahlung
	Gefahr durch Heben
	Hersteller
	Gefahr durch bewegliche Teile
	Quetschgefahr
	Gefahr durch Druckgasflaschen
	Schutzerdung (Erdung)
	Gefahr von Stichverletzungen

Glossar der Symbole

Symbol	Beschreibung
	Seriennummer
	Toxisch-chemische Gefahren
	Das System bei einen Druck zwischen 66 kPa und 103 kPa transportieren und lagern.
	Das System bei einem Druck zwischen 75 kPa und 101 kPa transportieren und lagern.
	Transportieren und lagern Sie das System zwischen 10 % und 90 % relativer Luftfeuchtigkeit.
	Transportieren und lagern Sie das System zwischen -30 °C und +45 °C.
	Das System zwischen -30 °C und +60 °C transportieren und lagern.
	USB 2.0-Anschluss
	USB 3.0-Anschluss
	Gefahr durch ultraviolette Strahlung
VA	Voltampere (Leistung)
V	Volt (Spannung)
	Richtlinie über Elektro- und Elektronik-Altgeräte (WEEE). Das Gerät darf nicht im Hausmüll entsorgt werden.
W	Watt
	<i>JJJJ-MM-TT</i> Herstellungsdatum

Glossar der Warnhinweise

F

Hinweis: Wenn sich eine der Beschriftungen zur Kennzeichnung einer Komponente löst, wenden Sie sich an einen FSE.

Label	Übersetzung (sofern zutreffend)
FOR RESEARCH USE ONLY. NOT FOR USE IN DIAGNOSTIC PROCEDURES.	NUR FÜR FORSCHUNGSZWECKE. NICHT ZUR VERWENDUNG IN DIAGNOSTISCHEN VERFAHREN.
IMPACT INDICATOR SENSITIVE PRODUCT WARNING	STOSSANZEIGE WARNUNG BEI EMPFINDLICHER WARE Hinweis: Wenn die Anzeige ausgelöst wurde, wurde dieser Behälter fallen gelassen oder auf andere Weise falsch behandelt. Notieren Sie dies auf dem Lieferschein und untersuchen Sie dann die Lieferung auf Beschädigungen. Etwaige Ansprüche aufgrund von Stoßschäden erfordern eine Aufzeichnung.
IMPORTANT! RECORD ANY VISIBLE CRATE DAMAGE INCLUDING TRIPPED "IMPACT INDICATOR" OR "TILT INDICATOR" ON THE WAYBILL BEFORE ACCEPTING SHIPMENT AND NOTIFY YOUR LOCAL AB SCIEX CUSTOMER SUPPORT ENGINEER IMMEDIATELY. DO NOT UNCRATE. CONTACT YOUR LOCAL CUSTOMER SUPPORT ENGINEER FOR UNCRATING AND INSTALLATION.	WICHTIG! DOKUMENTIEREN SIE VOR ANNAHME DER SENDUNG ALLE SICHTBAREN SCHÄDEN AN DER KISTE, DARUNTER AUCH ANZEICHEN FÜR MÖGLICHE STOSS- UND NEIGUNGSSCHÄDEN, AUF DEM FRACHTBRIEF UND BENACHRICHTIGEN SIE UMGEHEND DEN ZUSTÄNDIGEN KUNDENDIENSTTECHNIKER VON AB SCIEX. DIE KISTE NICHT AUSPACKEN. WENDEN SIE SICH ZWECKS AUSPACKEN UND INSTALLATION AN IHREN ZUSTÄNDIGEN KUNDENDIENSTTECHNIKER.
MINIMUM OF SIX PERSONS REQUIRED TO SAFELY LIFT THIS EQUIPMENT	ES WERDEN MINDESTENS SECHS PERSONEN BENÖTIGT, UM DIESES GERÄT SICHER ZU HEBEN

Glossar der Warnhinweise

Label	Übersetzung (sofern zutreffend)
TIP & TELL	<p>Kippanzeiger</p> <hr/> <p>Hinweis: Zeigt an, ob der Behälter gekippt oder falsch behandelt wurde. Notieren Sie gegebenenfalls auf dem Lieferschein wenn die Anzeiger ein übermäßiges Kippen der Transportkiste anzeigen und untersuchen Sie den Transportbehälter auf Beschädigungen. Etwaige Ansprüche aufgrund von Kippen erfordern eine Aufzeichnung.</p>
TiltWatch PLUS ShockWatch	<p>Kippanzeiger</p> <hr/> <p>Hinweis: Zeigt an, ob der Behälter gekippt oder falsch behandelt wurde. Notieren Sie gegebenenfalls auf dem Lieferschein wenn die Anzeiger ein übermäßiges Kippen der Transportkiste anzeigen und untersuchen Sie den Transportbehälter auf Beschädigungen. Etwaige Ansprüche aufgrund von Kippen erfordern eine Aufzeichnung.</p>
WARNING: DO NOT OPERATE WITHOUT FIRST ENSURING BOTTLE CAP IS SECURED.	<p>WARNUNG: NICHT VERWENDEN, OHNE ZUNÄCHST SICHERZUSTELLEN, DASS DER BEHÄLTERDECKEL GESICHERT IST.</p> <hr/> <p>Hinweis: Dieser Warnhinweis ist auf dem Quellenabluftauffangbehälter angebracht.</p>
WARNING: NO USER SERVICEABLE PARTS INSIDE. REFER SERVICING TO QUALIFIED PERSONNEL.	<p>ACHTUNG: ENTHÄLT KEINE VOM BENUTZER ZU REPARIERENDEN TEILE. WENDEN SIE SICH ZUR WARTUNG AN FACHPERSONAL.</p> <hr/> <p>Hinweis: Bedienungsanleitung beachten.</p>