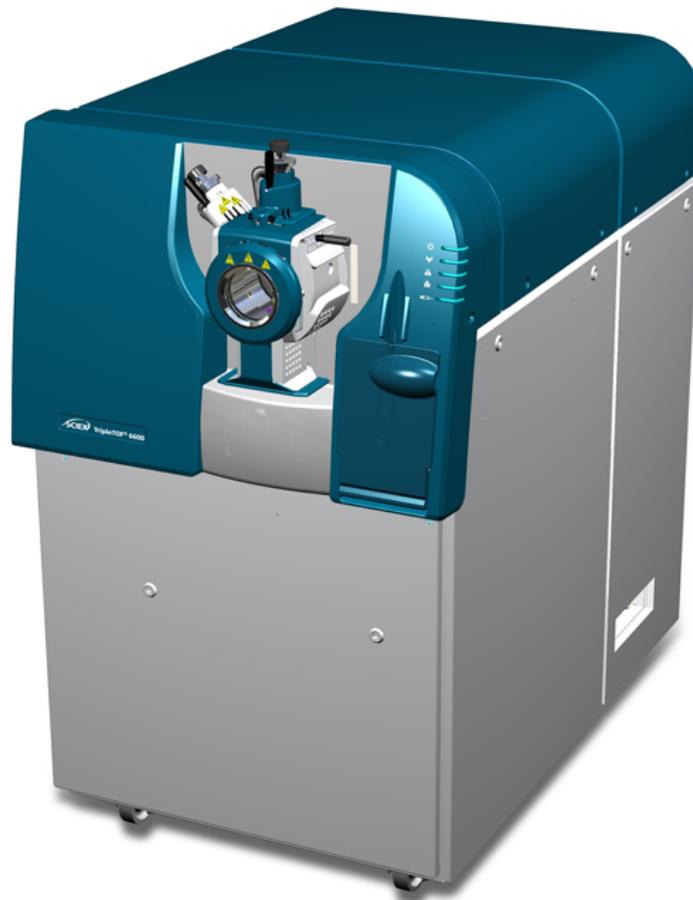




---

# TripleTOF<sup>®</sup> 6600-System

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.

© 2018 AB Sciex



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

# Inhalt

---

<b>1</b>	<b>Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb.....</b>	<b>6</b>
	Allgemeine Informationen zur Sicherheit.....	6
	Einhaltung gesetzlicher Vorschriften.....	6
	Australien und Neuseeland.....	7
	Kanada.....	7
	Europa.....	7
	Vereinigte Staaten.....	7
	International.....	8
	Elektrische Vorsichtsmaßnahmen.....	8
	Netzversorgung.....	8
	Schutzleiter.....	9
	Chemische Vorsichtsmaßnahmen.....	9
	Ventilation Vorsichtsmaßnahmen.....	10
	Umweltschutzmaßnahmen.....	11
	Elektromagnetische Umgebung.....	12
	Außerbetriebnahme und Entsorgung.....	13
	Qualifiziertes Personal.....	13
	Laborbedingungen.....	13
	Betriebsbedingungen.....	13
	Leistungsspezifikationen.....	14
	Verwendung und Änderungen der Ausrüstung.....	14
	Kontakt.....	15
	Technischer Support.....	15
	Symbole und Konventionen der Dokumentation.....	15
	Weiterführende Dokumentation.....	16
<b>2</b>	<b>Grundlagen der Handhabung.....</b>	<b>17</b>
	Systemüberblick.....	17
	Hardware-Übersicht.....	17
	Symbole der Gehäuseabdeckung.....	20
	Theoretische Grundlagen der Handhabung.....	21
	Umgang mit Daten.....	22
<b>3</b>	<b>Betriebsanleitung – Hardware.....</b>	<b>23</b>
	Inbetriebnahme des Systems.....	23
	Herunterfahren des Systems.....	24
	Justieren Sie die Position der integrierten Spritzenpumpe.....	25
	Zurücksetzen der Spritzenpumpe.....	28
<b>4</b>	<b>Betriebsanleitung – Proben-Workflows.....</b>	<b>30</b>
<b>5</b>	<b>Bedienungsanleitung – Hardware-Profile und Projekte.....</b>	<b>34</b>
	Hardware-Profile.....	34
	Erstellen eines Hardware-Profiles.....	34
	Geräte einem Hardware-Profil hinzufügen.....	39

## Inhalt

---

Fehlerbehebung bei der Hardware-Profil-Aktivierung.....	41
Projekte und Teilprojekte.....	42
Erstellen von Projekten und Teilprojekten.....	42
Teilprojekt erstellen.....	44
Teilprojekte kopieren.....	44
Wechseln zwischen Projekten und Teilprojekten.....	44
Installierte Projekt-Ordner.....	45
Sichern des Ordners „API Instrument“.....	45
Den Ordner „API Instrument“ wiederherstellen.....	46
<b>6 Abstimmen und Kalibrieren.....</b>	<b>47</b>
Optimieren Sie das Massenspektrometer.....	47
Über den Dialog „Verifying or Adjusting Performance“.....	48
Zusammenfassung der Ergebnisse.....	48
<b>7 Bedienungsanleitung – Akquisitionsmethoden.....</b>	<b>50</b>
Eine Erfassungsmethode mit dem „Acquisition Method Editor“ erstellen.....	50
Experiment hinzufügen.....	51
Eine Periode hinzufügen.....	51
Ein Experiment in eine Periode kopieren.....	52
Ein Experiment innerhalb einer Periode kopieren.....	52
Erstellen Sie eine Erfassungsmethode mit dem „Method Wizard“.....	52
Scantechniken.....	53
Einzel-Massenspektrometrie.....	53
Quadrupole-Based Single Mass Spectrometry.....	53
Einzel-Flugzeit-Massenspektrometrie.....	54
Tandem-Massenspektrometrie.....	54
Produkt-Ionen-Massenspektrometrie.....	54
Vorläufer-Ionen-Massenspektrometrie.....	54
Über Spektraldatenaufnahme.....	54
Parameter.....	55
<b>8 Bedienungsanleitung – Batches.....</b>	<b>60</b>
Optionen für Warteschlangen einstellen.....	60
Sets und Proben zu einem Batch hinzufügen.....	62
Eine Probe oder einen Probensatz übergeben.....	65
Probenkalibrierung einrichten.....	65
Reihenfolge der Proben ändern.....	66
Daten aufnehmen.....	66
Bestimmen Sie die Sample Locations (Probenpositionen) im Batch Editor.....	67
Mit der Registerkarte „Locations“ die Fläschchenpositionen bestimmen (optional).....	67
Probenakquisition beenden.....	68
Batch Editor Rechtsklick-Menü.....	69
Status der Warteschlange und des Gerätes.....	70
Status der Warteschlange.....	70
Symbole für den Instrument- und Peripheriegerätstatus.....	71
Rechtsklick-Menü „Queue“.....	72
<b>9 Bedienungsanleitung – Analyse und Untersuchung von Daten.....</b>	<b>74</b>
Dateien öffnen.....	74
In einer Datei zwischen Proben navigieren.....	75
Versuchsbedingungen betrachten.....	75
Daten in Tabellenform anzeigen.....	76

---

ADC-Daten anzeigen.....	78
Grundlegende quantitative Daten anzeigen.....	78
Chromatogramme.....	79
TICs aus einem Spektrum anzeigen.....	80
Ein Spektrum aus einem TIC anzeigen.....	81
Über das Generieren von XICs.....	81
Ein XIC mit einem ausgewählten Bereich generieren.....	82
Ein XIC mit dem maximalen Peak generieren.....	83
Ein XIC mit den Basispeakmassen generieren.....	83
Ionen durch Auswählen von Massen extrahieren.....	83
BPCs generieren.....	84
XWCs generieren.....	86
DAD-Daten.....	86
TWCs generieren.....	87
Schwellenwert anpassen.....	87
Chromatogramm-Teilfenster.....	88
Spektrum-Teilfenster.....	89
Verarbeiten von Diagrammdateien.....	90
Diagramme.....	90
Daten verwalten.....	90
Die Y-Achse vergrößern.....	92
Die X-Achse vergrößern.....	92
<b>10 Service- und Wartungsinformationen.....</b>	<b>93</b>
Empfohlener Wartungsplan.....	93
Reinigen der Oberflächen.....	96
Reinigen des Eingangsbereiches.....	96
Merkmale einer Kontamination.....	97
Erforderliche Materialien .....	97
Bewährte Vorgehensweisen bei der Reinigung.....	98
Vorbereitung des Massenspektrometers.....	100
Reinigung der Curtain-Platte.....	101
Reinigung der Vorderseite der Orifice-Platte.....	101
Das Massenspektrometer wieder in Betrieb nehmen.....	102
Entleeren des Quellenabluftauffangbehälters.....	102
Inspektion des Ölstands in der Vakuumpumpe.....	104
Ersetzen der Kühlerlüfterfilter des Massenspektrometers.....	105
Lagerung und Handhabung.....	107
<b>11 Fehlersuche für das Massenspektrometer.....</b>	<b>109</b>
<b>A Empfohlene Kalibrierungsionen.....</b>	<b>113</b>
<b>B Exakte Massen und chemische Formeln.....</b>	<b>116</b>
<b>C Symbole der Werkzeuggestreife.....</b>	<b>119</b>
<b>D Glossar der Symbole.....</b>	<b>128</b>
<b>E Glossar der Warnhinweise.....</b>	<b>133</b>

# 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 128](#). 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 12](#).
- **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 12](#).
- **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 12](#).
- **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 13](#).
- **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 61000-3-3

Siehe [Elektromagnetische Verträglichkeit auf Seite 12](#).

- **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.

---



**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 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! Gefährdung durch ionisierende Strahlung, 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](https://sciex.com/tech-regulatory).

## Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb

---

- 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.

## 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! Gefährdung durch ionisierende Strahlung, 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!** Gefährdung durch ionisierende Strahlung, 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!** Gefährdung durch ionisierende Strahlung, 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 toxischen oder schädlichen Materialien haben und darin geschult wurden.

---



**WARNHINWEIS!** Gefahr von Stichverletzungen, Gefährdung durch ionisierende Strahlung, 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 den elektromagnetischen Immunitätsbedingungen ist eine Änderung von weniger als 20 % des Gesamtionsstroms (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 107](#).

---

**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:  $\pm 10$  % 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:

- Eine Umgebungstemperatur von 18 °C bis 25 °C (64 °F bis 77 °F)  
Im Laufe der Zeit darf die Temperatur um nicht mehr als 2 °C (3,6 °F) von der Temperatur zum Zeitpunkt der letzten Kalibrierung 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.
- Die relative Luftfeuchtigkeit beträgt 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](https://sciex.com/contact-us)
- [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support)

### Kundenschulung

- In Nordamerika: [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- In Europa: [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- Die Kontaktinformationen für Länder außerhalb der EU und Nordamerikas finden Sie unter [sciex.com/education](https://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](https://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](https://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](http://sciex.com).

Das System TripleTOF<sup>®</sup> 6600 ist für die qualitative und quantitative Analyse chemischer Spezies ausgelegt.

Dieser Abschnitt enthält Informationen über das Massenspektrometer und die Analyst<sup>®</sup> TF-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<sup>®</sup> TF 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. Befolgen Sie die geltenden Verfahren zum sicheren Heben. Informationen zum Gewicht der einzelnen Systemkomponenten finden Sie im *Site Planning Guide*.**

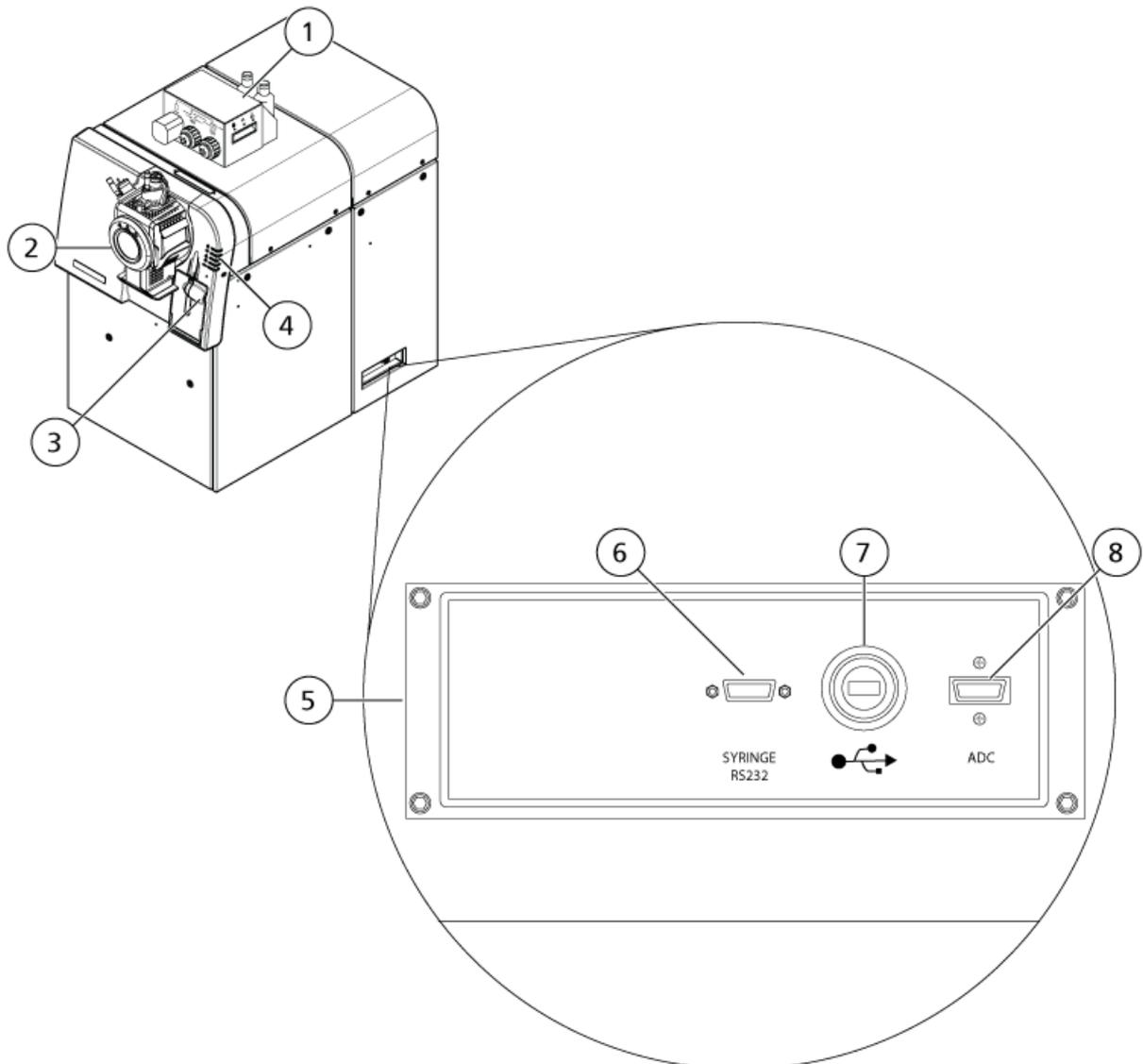
Das System TripleTOF<sup>®</sup> 6600 besteht aus folgenden Komponenten:

- Ein Massenspektrometer TripleTOF<sup>®</sup> 6600 mit einer Vakuumpumpe.
- Eine DuoSpray<sup>™</sup>-Ionenquelle Protonentransferreaktionen vor. Siehe *DuoSpray<sup>™</sup>-Ionenquellen-Bedienerhandbuch*.
- Von SCIEX bereitgestellter Computer und Bildschirm mit Analyst<sup>®</sup> TF-Software zur Geräteoptimierung, Entwicklung von Erfassungsmethoden und Datenerfassung. Nähere Informationen zu Computerspezifikationen und -anforderungen finden Sie im *Software-Installationshandbuch* der Analyst<sup>®</sup> TF Software unterstützt.
- Das optionale Kalibrierungs-Abgabesystem (CDS)

## Hardware-Übersicht

[Abbildung 2-1](#) und [Abbildung 2-2](#) zeigen die Komponenten und Verbindungen des Massenspektrometers.

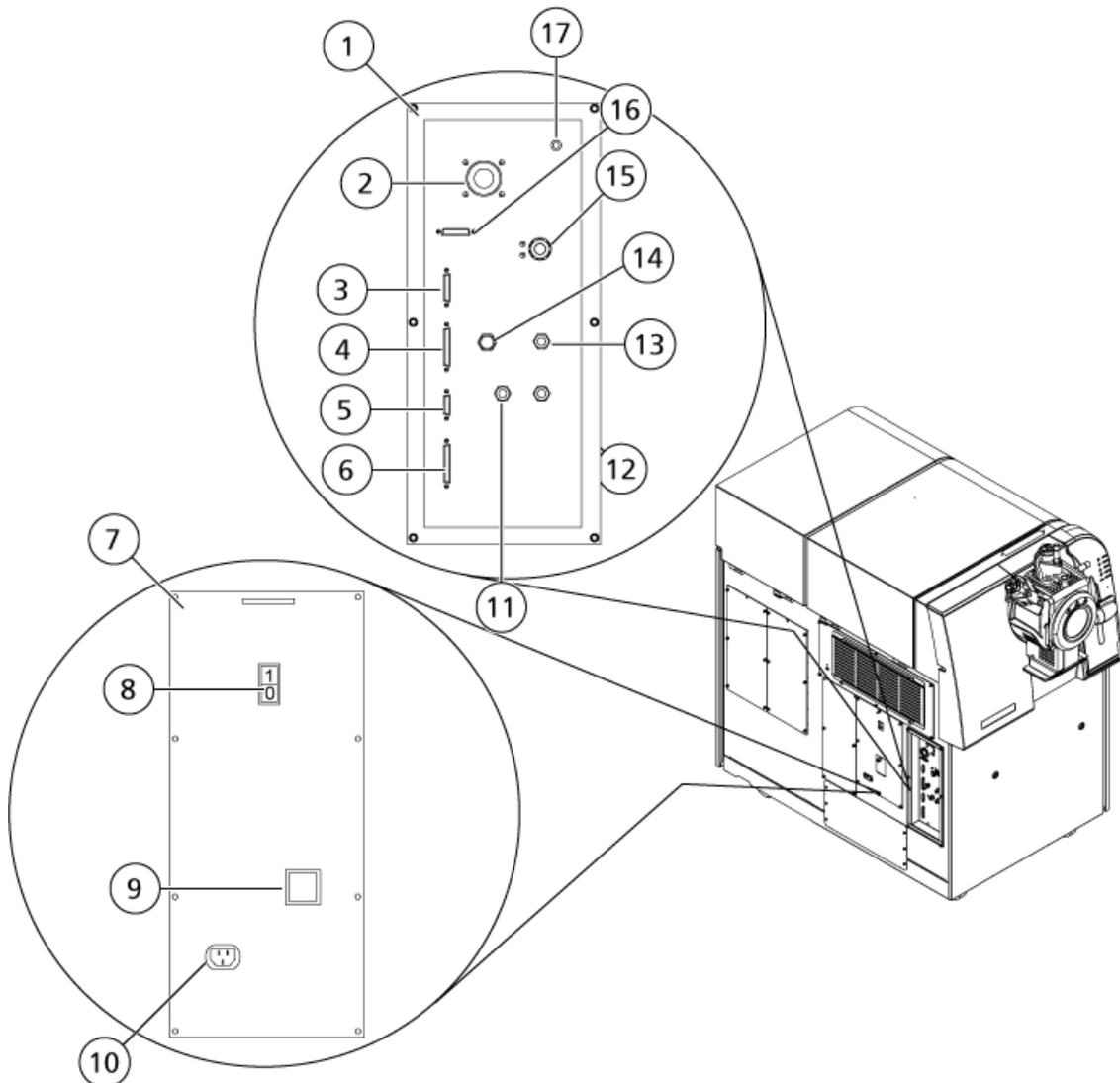
Abbildung 2-1 Vorderansicht und rechte Seitenansicht



Position	Beschreibung	Weitere Informationen...
1	Optionales CDS	Siehe <i>CDS Operator Guide (CDS-Bedienerhandbuch)</i> .
2	DuoSpray™ Ionenquelle	Siehe <i>DuoSpray™-Ionenquelle für TripleTOF®-Systeme-Bedienerhandbuch</i>
3	Spritzenpumpe	Siehe <a href="#">Justieren Sie die Position der integrierten Spritzenpumpe auf Seite 25.</a>
4	Status-LEDs des Massenspektrometers	Siehe <a href="#">Symbole der Gehäuseabdeckung.</a>

Position	Beschreibung	Weitere Informationen...
5	Kommunikations-Anschlüsse	Kontaktieren Sie einen Außendienstmitarbeiter (FSE) von SCIEX.
6	Serieller (RS-232) Kabelanschluss für die Spritzenpumpe	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
7	USB-Kabelanschluss für die USB-GPIB-Karte	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
8	InfiniBand-Kabelanschluss für die ADC-Karte	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).

Abbildung 2-2 Linke Seitenansicht



## Grundlagen der Handhabung

Position	Beschreibung	Weitere Informationen...
1	Gas- und Vakuum-Anschlüsse	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
2	Vakuum-Anschluss der Vorvakuumpumpe	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
3	Anschluss der Kalibrierungssteuerung	Siehe <i>CDS-Bedienerhandbuch</i> .
4	AUX E/A-Verbindung Das optionale Startsignal des LC-Systems wird an diesen Port angeschlossen.	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
5	Externer Steuerungsanschluss Dieser Port ist für zukünftige Verwendungszwecke bestimmt.	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
6	Quellen-Anschluss. Einige Ionenquellen werden an diesen Port angeschlossen.	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
7	Wechselstrom-Verteilertafel	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
8	Ein-/Ausschalter des Geräts	Siehe <a href="#">Inbetriebnahme des Systems auf Seite 23</a> .
9	Abdeckung des Schutzschalters	Siehe <a href="#">Inbetriebnahme des Systems auf Seite 23</a> . Verwenden Sie den Netzschalter anstelle des Schutzschalters, um das System herunterzufahren.
10	Netzanschluss	Siehe <a href="#">Inbetriebnahme des Systems auf Seite 23</a> .
11	Curtain Gas™ (Stickstoff-) Versorgungsanschluss	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
12	Gas 1 und Gas 2 (Nullluft- oder Stickstoff-) Versorgungsanschluss	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
13	Quellenabluft- (Nullluft- oder Stickstoff-) Versorgungsanschluss	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
14	CAD-Gas- (Stickstoff-) Versorgungsanschluss	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
15	Quellenabluftanschluss	erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter (FSE).
16	Nicht verwendet	Nicht zutreffend.
17	Nicht verwendet	Nicht zutreffend.

## 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.
	Grün	Syringe Pump Status	Leuchtet, wenn die Spritzenpumpe arbeitet.

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.

## Theoretische Grundlagen der Handhabung

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 aufzunehmen.

Das TripleTOF<sup>®</sup> 6600-System verfügt über eine Reihe von Quadrupolfiltern, die Ionen nach ihrem Masse-zu-Ladung-Verhältnis ( $m/z$ ) übertragen. Der erste Quadrupol dieser Reihe ist die QJet<sup>®</sup>-Ionenführung, die sich zwischen der Orifice-Platte und dem Q0-Bereich befindet. Die QJet<sup>®</sup>-Ionenführung filtert keine Ionen, sondern fokussiert diese, bevor sie in den Q0-Bereich gelangen. Durch Vorfokussierung des höheren Ionenflusses durch das größere Orifice erhöht die QJet<sup>®</sup>-Ionenführung die Geräteempfindlichkeit und verbessert das Signal-zu-Rausch-Verhältnis. Im Q0-Bereich werden die Ionen weiter fokussiert, bevor sie in den Q1-Quadrupol gelangen.

Der Q1-Quadrupol selektiert Ionen, bevor sie in die Q2-Stoßzelle gelangen. Der Q1-Quadrupol arbeitet in zwei Betriebsarten:

- Durchlassen aller Ionen innerhalb eines bestimmten  $m/z$ -Bereichs zur Q2-Stoßzelle. Dies wird als TOF MS-Scan bezeichnet. Alle Ionen werden von dem TOF-System analysiert.

- Durchlassen eines Ions mit einem bestimmten  $m/z$ -Verhältnis zur Q2-Stoßzelle. Dies wird als TOF MS/MS-Scan bezeichnet. Nur das ausgewählte Ion wird analysiert.

In der Q2-Stoßzelle wird die innere Energie der Ionen durch Kollision mit Gasmolekülen bis zu dem Punkt erhöht, an dem die molekularen Bindungen auseinanderbrechen und Produkt-Ionen erzeugt werden. Dieses Verfahren ermöglicht es, Versuche zur Messung des  $m/z$ -Verhältnisses von Produkt-Ionen zu entwerfen, um die Zusammensetzung der Vorläufer-Ionen zu bestimmen und Informationen über die strukturellen und chemischen Eigenschaften der Moleküle zu erhalten.

Nach Durchlaufen der Q2-Stoßzelle gelangen die Ionen in die TOF-Region für die weitere Massenanalyse. Sie erreichen den Detektor zu unterschiedlichen Zeitpunkten, abhängig von ihrem  $m/z$ -Verhältnis. Im Detektor erzeugen die Ionen einen Strom, der in einen Spannungsimpuls umgewandelt wird. Diese Spannungsimpulse werden gezählt, und die Anzahl der Impulse ist direkt proportional zu der Menge der Ionen, die in den Detektor gelangen. Das Massenspektrometer wandelt die Spannungsimpulse in ein Signal um und setzt das Signal in Beziehung zu der Zeit, die jedes Ion benötigt, um den Detektor zu erreichen. Das Signal repräsentiert die Ionenintensität und die Zeit bis zum Erreichen des Detektors repräsentiert einen spezifischen  $m/z$ -Wert. Das Massenspektrometer zeigt diese Daten als Massenspektrum an.

## Umgang mit Daten

Für die Software Analyst<sup>®</sup> TF 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<sup>®</sup> TF-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.



**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 6](#).

---

### 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](http://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 Geräts 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.

1. Schalten Sie die Vakuumpumpe ein.
2. Entfernen Sie die Abdeckung auf dem Schutzschalter an der – von vorne gesehen – linken Seite des Massenspektrometers und schalten Sie den Schutzschalter dann ein. Siehe [Abbildung 2-2](#).
3. Setzen Sie die Abdeckung wieder auf den Schutzschalter und ziehen Sie dann die Schraube, mit der die Abdeckung befestigt wird, handfest an.
4. Schalten Sie das System mit dem Netzschalter des Geräts ein. Siehe [Abbildung 2-2](#).
5. Schalten Sie den Computer ein.
6. Starten Sie die Analyst<sup>®</sup> TF-Software.

## Herunterfahren 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 der Gasschlauch abgetrennt 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<sup>®</sup> TF Software das Hardware-Profil, wenn es aktiv ist.
4. Schließen Sie die Software.
5. Schalten Sie das Gerät am Netzschalter an der linken Geräteseite aus. Siehe [Hardware-Übersicht](#).
6. 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.

---

**Hinweis:** Lassen Sie die Ionenquelle installiert, um eine einwandfreie Belüftung zu gewährleisten.

---

- a. Schalten Sie die Vorvakuumpumpe aus. Belüften Sie das System 20 Minuten lang.
7. Entfernen Sie die Abdeckung auf dem Schutzschalter an der linken Seite des Massenspektrometers und schalten Sie den Schutzschalter dann aus. Siehe [Abbildung 2-2](#).
8. Setzen Sie die Abdeckung wieder auf den Schutzschalter und ziehen Sie dann die Schraube, mit der die Abdeckung befestigt wird, handfest an.
9. (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 Spritzenspitze ist sehr scharf.

---



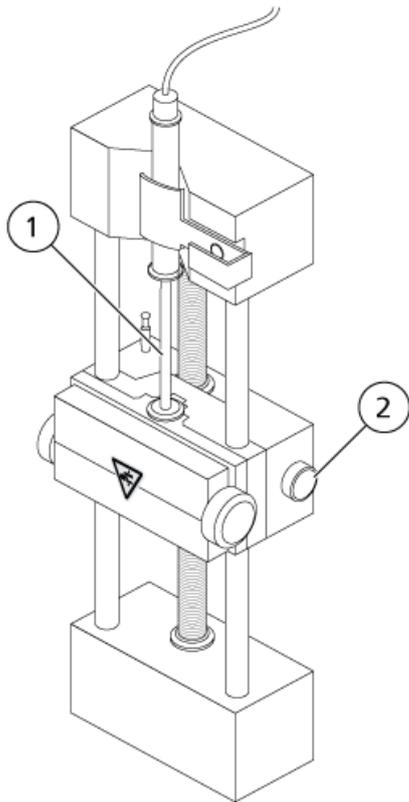
---

**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 3-1](#).

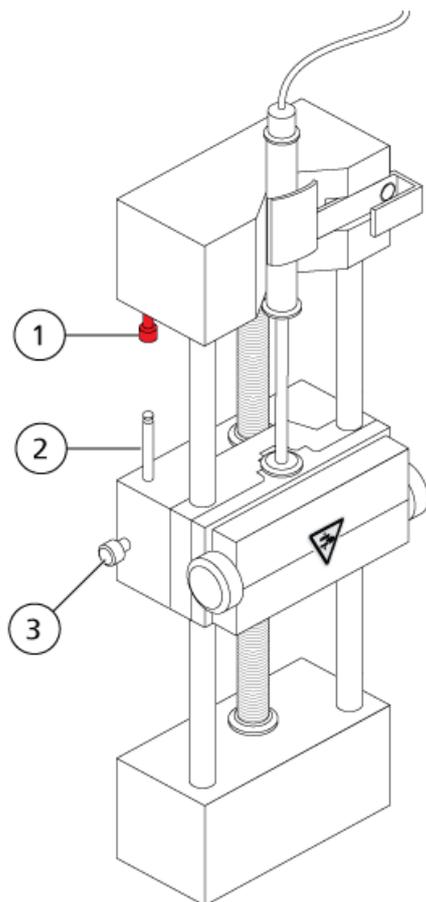
Abbildung 3-1 Absenken der Spritze



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 3-2](#).

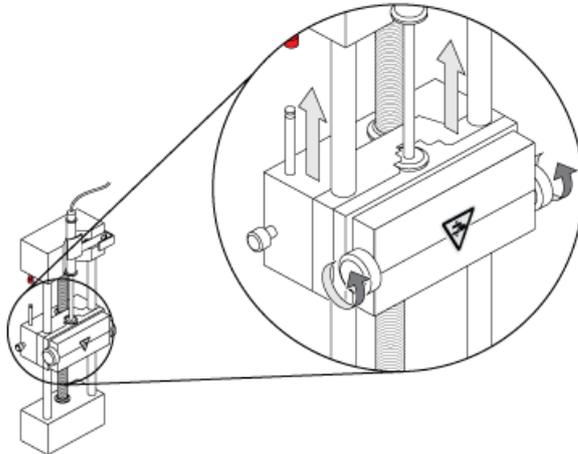
Abbildung 3-2 Automatischer Spritzenstopp



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 3-3](#) gezeigt an, um die Spritze zu sichern.

Abbildung 3-3 Spritzenpumpen-Schrauben



5. Doppelklicken Sie in der Navigationsleiste der Analyst<sup>®</sup>-Software auf **Manual Tuning**.
6. Klicken Sie auf **Start Syringe**.
7. Klicken Sie auf **Stop Syringe**, um die Spritzenpumpe zu stoppen.

## Zurücksetzen der Spritzenpumpe

Wenn Analyst<sup>®</sup> TF Software nicht mehr mit der Spritzenpumpe kommuniziert, setzen Sie die Spritzenpumpe zurück.

- Verwenden Sie eine Büroklammer oder ein ähnliches Werkzeug, um die Taste „Reset“ einzudrücken, wie in [Abbildung 3-4 auf Seite 29](#) dargestellt.

Abbildung 3-4 Reset-Taste

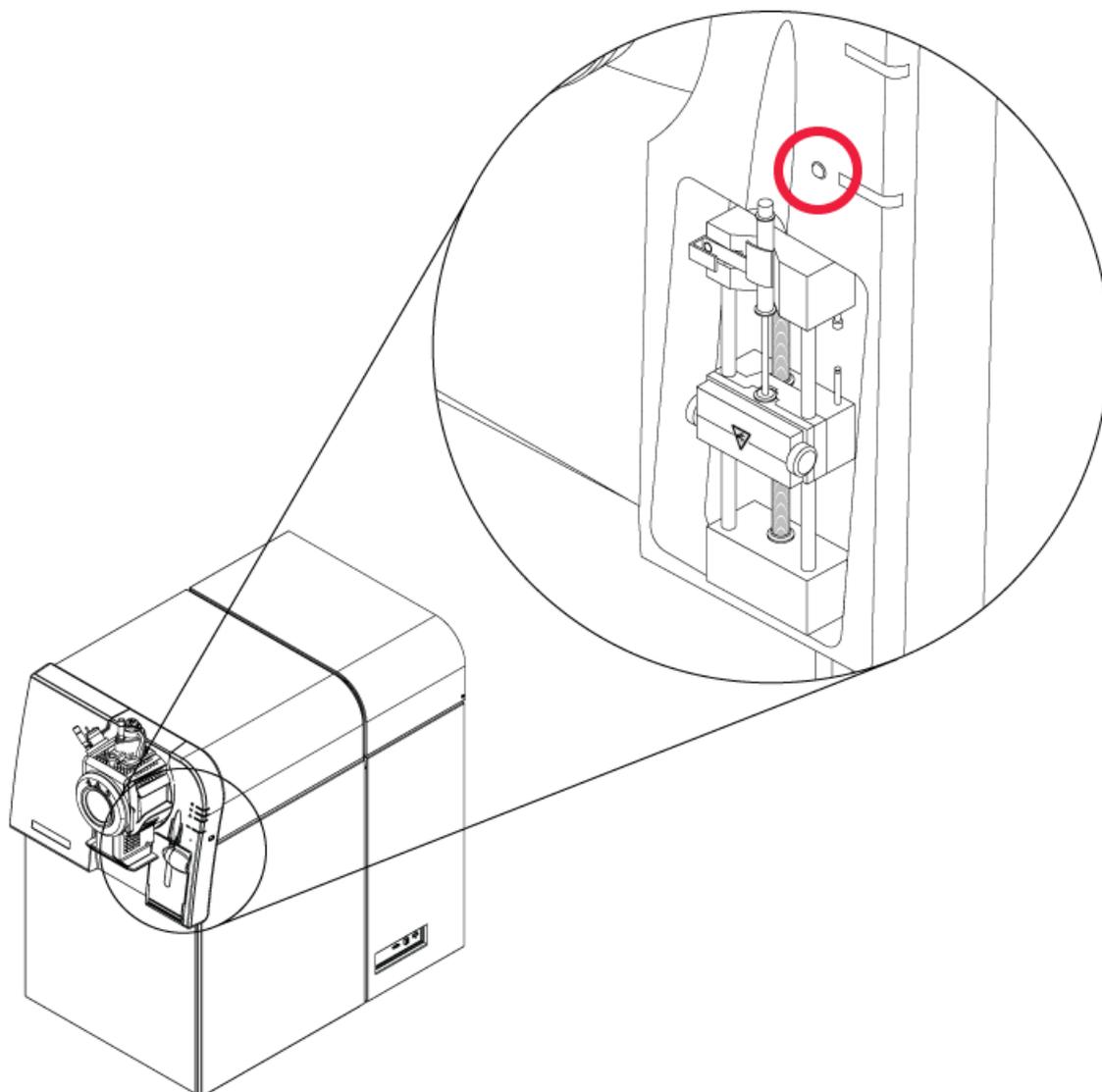


Tabelle 4-1 Instrumenteneinrichtung

Schritt	Um dies zu tun ...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
1	Erstellen eines Hardware-Profiles.	<a href="#">Erstellen eines Hardware-Profiles auf Seite 34</a>	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.	<a href="#">Erstellen von Projekten und Teilprojekten auf Seite 42</a>	Die Verwendung von Projekten und Teilprojekten verbessert das Datenmanagement und erleichtert den Vergleich von Ergebnissen.
3	Optimieren des Massenspektrometers.	<a href="#">Optimieren Sie das Massenspektrometer auf Seite 47</a>	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 4-2 Probenaufnahme-Workflow

Schritt	Um dies zu tun ...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
1	Erstellen von Projekten zur Speicherung von Daten.	<a href="#">Erstellen von Projekten und Teilprojekten auf Seite 42</a>	Bevor Sie ein Experiment beginnen, entscheiden Sie sich, wo die Dateien für den Versuch gespeichert werden sollen. Die Verwendung von Projekten und Teilprojekten verbessert das Datenmanagement und erleichtert den Vergleich von Ergebnissen.
2	Eine Akquisitionsmethode erstellen.	<a href="#">Bedienungsanleitung – Akquisitionsmethoden auf Seite 50</a>	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.	<a href="#">Sets und Proben zu einem Batch hinzufügen auf Seite 62</a> und <a href="#">Eine Probe oder einen Probensatz übergeben auf Seite 65</a>	Nach dem Erstellen einer Erfassungsmethode verarbeiten Sie Proben durch Erstellen eines Erfassungs-Batch und Übergabe des Batch an die Erfassungs-Warteschleife.

Tabelle 4-2 Probenaufnahme-Workflow (Fortsetzung)

Schritt	Um dies zu tun ...	Suchen Sie die Informationen in ...	Was tut es?
4	Proben zur Datenakquisition verarbeiten.	<a href="#">Daten aufnehmen auf Seite 66</a>	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.
5	Analyse von Daten im Explore-Modus. – ODER –	<a href="#">Bedienungsanleitung – Analyse und Untersuchung von Daten auf Seite 74</a>	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	Analysieren von Daten und Drucken von Berichten mit weitergehender Software.	MultiQuant™ Software/PeakView® Software	Verwenden Sie die MultiQuant™ Software oder PeakView® Software, um Daten zu analysieren. Weitere Informationen finden Sie in der Dokumentation, die der jeweiligen Software beiliegt.

**Tabelle 4-3 Workflows für erfahrene Benutzer**

<b>Schritt</b>	<b>Um dies zu tun ...</b>	<b>Suchen Sie die Informationen in ...</b>
1	Massenkalibrierung des Geräts	Das Tutorial zur Massenkalibrierung finden Sie unter <b>Start &gt; Programs &gt; SCIEX &gt; Analyst® TF &gt; Software Guides.</b>
2	Optimieren des Massenspektrometers	Das Tutorial zur manuellen Optimierung finden Sie unter <b>Start &gt; Programs &gt; SCIEX &gt; Analyst® TF &gt; Software Guides.</b>

## 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.

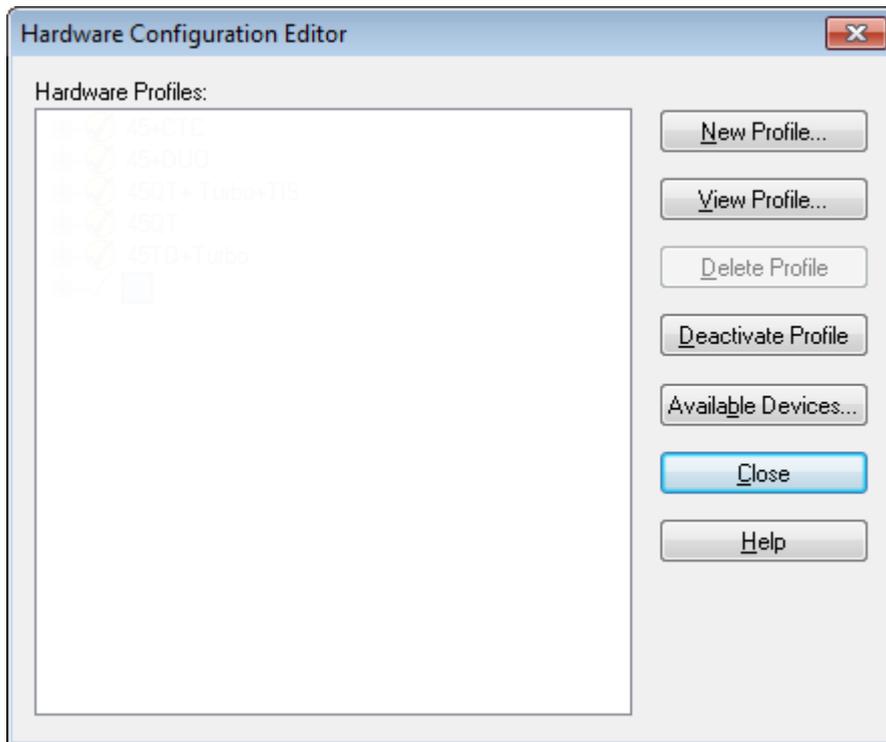
Weitere Informationen über das Einrichten der physischen Verbindungen mit den Geräten finden Sie im *Handbuch für die Einrichtung von Peripheriegeräten*. Eine Liste der unterstützten Geräte finden Sie im *Software-Installationshandbuch* der Analyst<sup>®</sup> TF-Software.

## Erstellen eines Hardware-Profiles

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

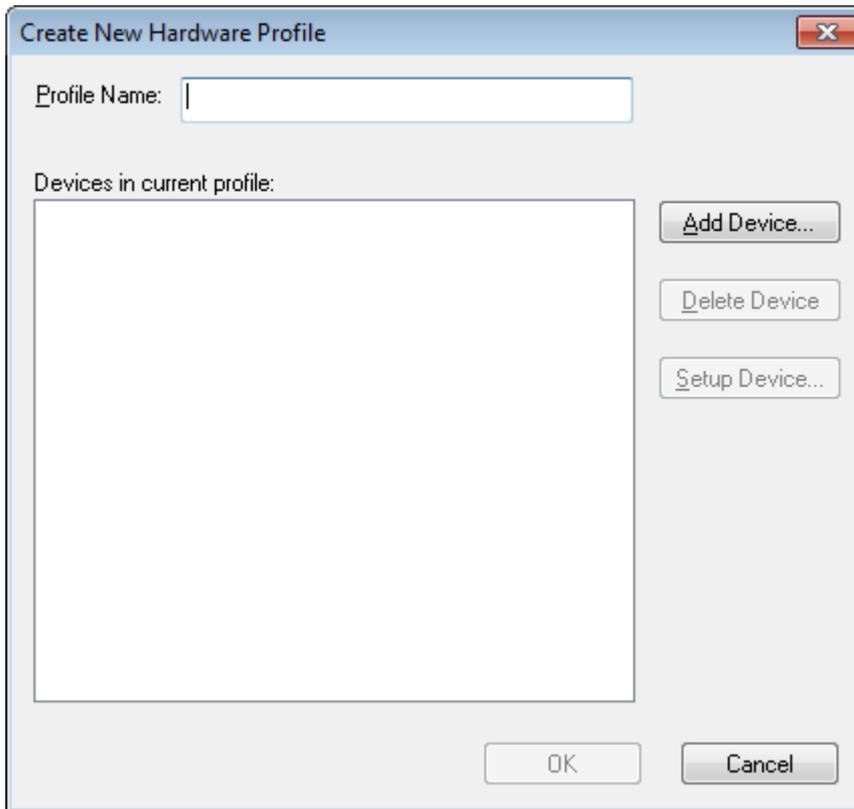
1. Doppelklicken Sie auf der Navigationsleiste unter **Configure** auf **Hardware Configuration**.

Abbildung 5-1 Dialog „Hardware Configuration Editor“



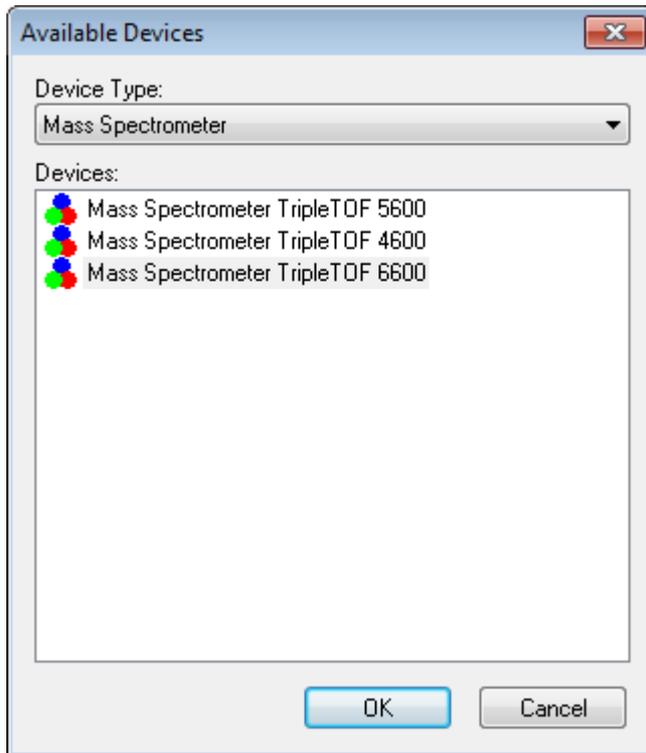
2. Im Dialogfeld „Hardware Configuration Editor“ klicken Sie auf **New Profile**.

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**.

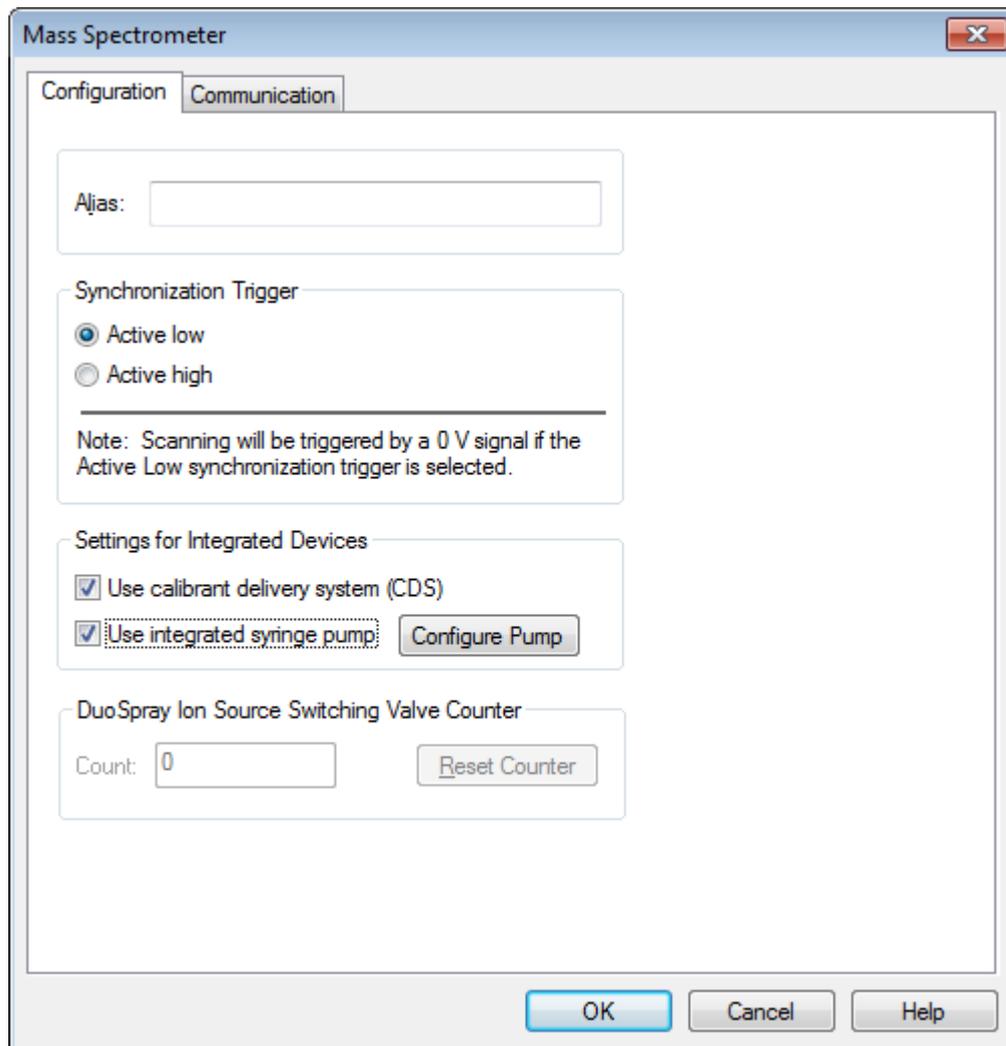
Abbildung 5-3 Dialog „Available Devices“



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. (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 CDS und Spritzenpumpe



8. (Optional) Um das Massenspektrometer für das CDS zu konfigurieren, wählen Sie in der Registerkarte **Configuration Use calibrant delivery system (CDS)**.
9. (Optional) Wählen Sie zusätzliche Funktionen auf der Registerkarte **Configuration** und **Communication** je nach Bedarf aus.
10. Klicken Sie auf **OK** um zum Dialogfeld Create New Hardware Profile zurückzukehren.
11. 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 39](#).
12. Klicken Sie im Dialogfeld **Create New Hardware Profile** auf **OK**.
13. Klicken Sie auf das Hardware-Profil, das im **Hardware Configuration Editor**, aktiviert werden soll.
14. 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.

---

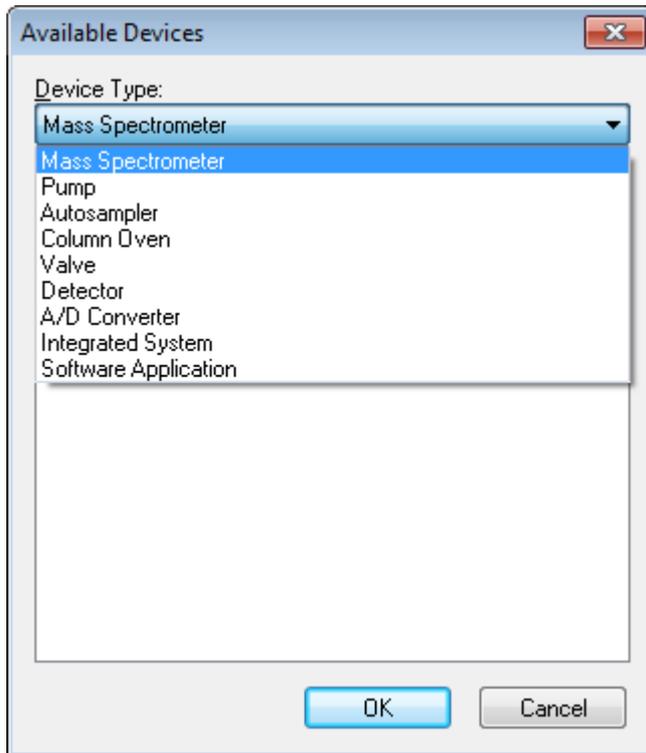
15. Klicken Sie auf **Close**.

## 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.

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

Ein Dialogfeld mit Konfigurationswerten für das Gerät wird geöffnet.

9. (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.

---

**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.

10. Um die voreingestellten Werte für das Gerät wiederherzustellen, klicken Sie in der Registerkarte Kommunikation auf **Set Defaults**.
11. Um die Konfiguration zu speichern, klicken Sie auf **OK**.
12. Wiederholen Sie die Schritte 4 bis 11 für jedes Gerät.
13. Klicken Sie im Dialogfeld Create New Hardware Profile auf **OK**.
14. Zum aktivieren des Hardware-Profiles klicken Sie im Dialogfeld Hardware Configuration Editor auf das Hardware-Profil.
15. 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 41](#).

---

**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.

---

16. 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 korrekt ist.
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

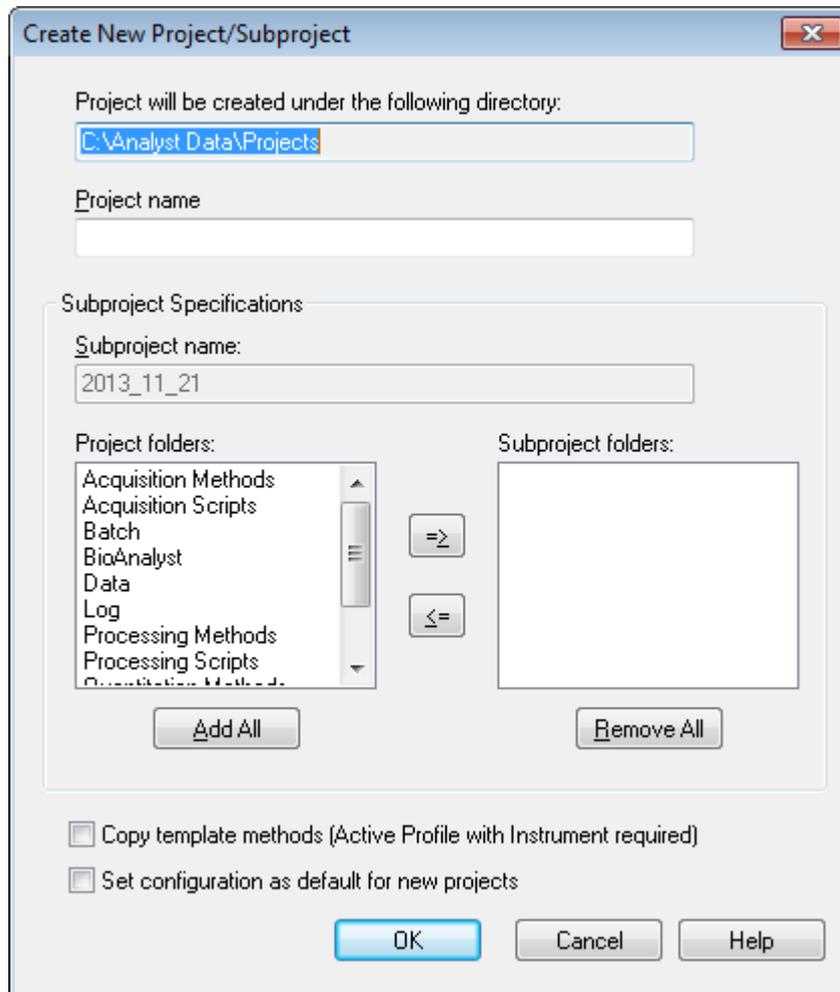
Bevor Sie ein Experiment beginnen, entscheiden Sie sich, wo die Dateien für den Versuch gespeichert werden sollen. Verwenden Sie Projekte und Teilprojekte für jedes Experiment, um die Daten besser zu verwalten und die Ergebnisse miteinander vergleichen zu können. Verwenden Sie zum Beispiel Teilprojekte,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

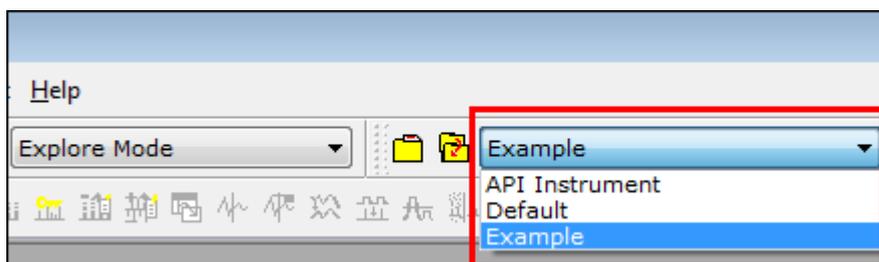
Der Dialog Copy Subproject wird angezeigt.

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 üben

## 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 model3\_010107*

### Den Ordner „API Instrument“ wiederherstellen

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

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 Performance Only** zu einem beliebigen Zeitpunkt aus. Führen Sie das Tuning des Geräts jedoch nur dann durch, wenn ein Rückgang der Empfindlichkeit oder der Auflösung festgestellt wird. Weitere Informationen über Tuning und Kalibrierung finden Sie im *Advanced User Guide*.

Verwenden Sie zum Tuning des Systems die folgenden Lösungen, die im Installationskit enthalten sind.

Für den positiven Modus:

- Verwenden Sie zur Optimierung von TOF MS - Product Ion High Resolution oder Product Ion High Sensitivity die Tuning-Lösung.
- Verwenden Sie zur Q1-Kalibrierung die PPG POS-Lösung.

Im negativen Modus:

- Verwenden Sie zur Optimierung von TOF MS - Product Ion High Resolution oder Product Ion High Sensitivity Taurocholsäure.

---

**Hinweis:** Wir empfehlen, nach der Verwendung der Taurocholsäure die Kanalausrichtung mit der PPG POS Lösung zu wiederholen.

---

- Verwenden Sie zur Q1-Kalibrierung die PPG POS-Lösung.

---

**Tip!** 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-Testsatz mit dem System geliefert werden. Bei Bedarf kann ein neues Kit bei SCIEX bestellt werden. Siehe [Empfohlene Kalibrierungsionen](#).
- Gasdichte Spritze (1,0 ml empfohlen)
- Rote PEEK-Probenkapillare.

## Optimieren Sie das Massenspektrometer

Im Folgenden wird beschrieben, wie die Leistung des Massenspektrometers überprüft wird. Weitere Informationen über die Verwendung der Instrument-Performance-Optionen finden Sie unter Hilfe.

1. Doppelklicken Sie in der Navigationsleiste unter **Tune and Calibrate**, auf **Manual Tuning**.
2. Führen Sie einen TOF MS- oder Produkt-Ionen-Scan-Typ durch und bestätigen Sie, dass es ein stabiles TIC gibt und dass die Peaks von Interesse im Spektrum vorhanden sind.
3. In der Navigationsleiste unter **Tune and Calibrate** doppelklicken Sie auf **Instrument Optimization**.

Das Dialogfeld Instrument Optimization wird angezeigt.

4. Wählen Sie eine Tuning-Lösung. Vergewissern Sie sich, dass die Tuning-Lösung der Referenztablette entspricht.
5. Das Kontrollkästchen **Verify Performance Only** ist vorausgewählt. Klicken Sie auf **Next**.

Lassen Sie für dieses Beispiel diese Option ausgewählt. Wenn der Bericht anzeigt, dass ein Tuning für das Instrument erforderlich ist, führen Sie die Geräteoptimierung erneut aus und wählen Sie einen Scan-Modus oder mehrere Scan-Modi zur Optimierung.

6. Vergewissern Sie sich, dass die Ionenquelle und Spritzenparameter geeignet sind.

---

**Hinweis:** Benutzer können auch das CDS zum Injizieren der Lösung verwenden. Vergewissern Sie sich, dass die Tuning-Lösung der Konfiguration in der Referenztablette entspricht. Stellen Sie die geeignete Flussrate ein und klicken Sie dann auf CDS Inject.

---

---

**Hinweis:** Vergewissern Sie sich, dass die korrekte Kalibrieremittelventilposition im Referenztabelleneditor für die gewählte Referenztablette ausgewählt ist. CDS kann aus bis zu vier Positionen, A bis D, auswählen.

---

7. 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.

## 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

Instrument Optimization

File Edit Help

### Results Summary

2014-02-24 at 17:00  
 Logged in as \

Instrument: TripleTOF 6600  
 Model #:  
 Serial #:

Instrument Optimization Ver: 2.9359.40

Instrument performance...

TOFMS High Resolution

Mass (Da)	Found At (Da)	Height (cps)	Area	Resolution	Error (ppm)
132.9049	132.9044	1.34E+04	5.38E+04	24 823	3.6
829.5393	829.5406	3.58E+03	2.41E+04	35 559	1.5

Product Ion High Resolution

Mass (Da)	Found At (Da)	Height (cps)	Area	Resolution	Error (ppm)
185.1285	185.1289	1.61E+03	7.38E+03	26 619	2.3
215.1390	215.1397	8.86E+02	4.09E+03	27 790	3.3
298.2125	298.2137	3.45E+03	1.66E+04	32 315	4.1
381.2496	381.2511	2.66E+03	1.42E+04	32 176	3.9
494.3337	494.3350	4.63E+03	2.79E+04	32 355	2.7
607.4178	607.4189	3.20E+03	2.06E+04	32 694	1.8

Help Next-> Finished

Instrument: TripleTOF 6600 Instrument Optimization Ver: 2.9359.40

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.

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

Eine Akquisitionsmethode besteht aus der Methode für das Massenspektrometer und für Flüssigkeitschromatographie (LC-)-Geräte. Erstellen Sie eine Akquisitionsmethode mit dem Method Wizard.

Mit dem Acquisition Method Editor können Sie ebenfalls Akquisitionsmethoden erstellen und eine Abfolge von Zeiträumen und Experimenten für Instrumente und Geräte hinzufügen.

Verwenden Sie die SWATH<sup>®</sup> Akquisitionsfunktion, die sowohl im Method Wizard als auch im Acquisition Method Editor verfügbar ist, um SWATH<sup>®</sup>-Akquisitionsmethoden zu erstellen. Methoden SWATH<sup>®</sup> mit variabler Fensterbreite können ebenfalls mit dem Method Wizard oder dem Acquisition Method Editor erstellt werden. Weitere Informationen finden Sie im *Advanced User Guide*, in der Analyst<sup>®</sup> Help und Method Wizard Help.

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*.

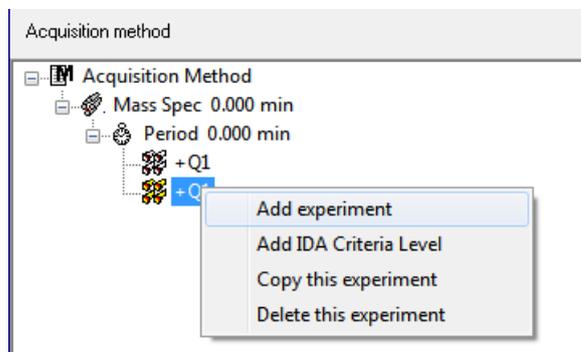
1. Stellen Sie sicher, dass ein Hardware-Profil mit dem Massenspektrometer und einem Peripheriegerät aktiv ist.
2. In der Navigationsleiste doppelklicken Sie unter **Acquire** auf **Build Acquisition Method**.
3. Wählen Sie in der Registerkarte Acquisition Method Properties einen **Synchronization Mode** aus.
4. (Optional) Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Auto-Equilibration** und geben Sie die erforderliche Äquilibrierungszeit 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 55](#).
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 51](#) und [Eine Periode hinzufügen auf Seite 51](#).
14. Klicken Sie auf **File > Save**.

## 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 7-1 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.

## Erstellen Sie eine Erfassungsmethode mit dem „Method Wizard“

Die Erfassungsmethode kann in einem vorhandenen Projekt gespeichert werden.

---

**Tipp!** Zum Kopieren der Vorlagenmodelle des **Method Wizard** in den Ordner **Acquisition Methods** im Projektordner aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Copy method templates** im Dialogfeld **Create New Project or Subproject**. Um diesen Dialogfeld zu öffnen, klicken Sie auf **Tools > Project > Create Project or Create Subproject**.

---

1. Stellen Sie sicher, dass ein Hardware-Profil mit dem Massenspektrometer und einem Peripheriegerät aktiv ist.
2. Auf der Software-Symbolleiste stellen Sie sicher, dass das entsprechende Projekt ausgewählt ist.
3. In der Navigationsleiste unter dem Modus **Acquire** doppelklicken Sie auf den **Method Wizard**.

Daraufhin öffnet sich der **Method Wizard**.

---

**Tipp!** Bewegen Sie den Cursor über dem Fenster, um Werkzeugtipps und Verfahren anzuzeigen.

---

4. Wählen Sie **TOF MS (+)** in der Liste **Choose MS Method**.
5. Wählen Sie die LC-Methode, die für das Hardware-Profil erstellt wurde, aus der Liste **Choose LC Method**.

6. Geben Sie einen Namen für die Methode ein und drücken Sie auf **Enter**.
7. Klicken Sie auf **Next**.
8. Überprüfen Sie die Werte in der Registerkarte **Ion Source Parameters**, bearbeiten Sie diese, falls erforderlich, und klicken Sie dann auf **Next**.
9. Überprüfen Sie die Werte in der Registerkarte **TOF MS**, bearbeiten Sie diese, falls erforderlich, und klicken Sie dann auf **Finish**.

---

**Tipp!** Falls erforderlich, können die Benutzer die Erfassungsmethode mit dem **Acquisition Method Editor** weiter bearbeiten. Klicken Sie im Modus **Acquire** auf **File > Open** und öffnen Sie dann die Methode, die mit dem **Method Wizard** erstellt wurde.

---

Nächste Schritte: Die neu erstellte Erfassungsmethode kann jetzt verwendet werden, um Daten zur vorläufigen Analyse zu erfassen.

## Scantechniken

Das System ist vielfältig einsetzbar und zuverlässig. Es dient zur LC/MS-Analyse (Flüssigkeitschromatographiemassenspektrometrie-Analyse) von flüssigen Probenströmen für die Identifizierung, Quantifizierung und Untersuchung von Verbindungen.

Das System verwendet zur Analyse von Proben die folgenden Massenspektrometrie-Techniken:

- Zwei Modi für Einzelmassenspektrometrie (MS):
  - Quadrupol-basierte Einzelmassenspektrometrie (dieser Modus wird ausschließlich für die Q1-Kalibrierung verwendet)
  - Flugzeit-basierte Einzelmassenspektrometrie
- Zwei Modi der Tandemmassenspektrometrie (MS/MS):
  - Massenspektrometrie von Produkt-Ionen
  - Vorläufer-Ionen-Massenspektrometrie

## Einzel-Massenspektrometrie

Einzel-Massenspektrometrie (MS) wird zur Analyse geladener Moleküle verwendet, um das Molekulargewicht und die Menge der ermittelten Ionen zu ermitteln. Einzelne, durch MS ermittelte Ionen können auf das Vorhandensein eines Ziel-Analyten hinweisen.

## Quadrupole-Based Single Mass Spectrometry

In einem Quadrupol-basierten Einzel-Massenspektrometrie-Scan (Q1 MS) funktioniert das System als traditionelles Quadrupol-Massenspektrometer. In diesem Modus generiert das System Einzel-Massenspektrometrie-Informationen unter Verwendung des ersten Quadrupol-Abschnitts (Q1) des Geräts.

### Einzel-Flugzeit-Massenspektrometrie

Bei einem TOF MS-Scan (Time-of-Flight Single Mass Spectrometry - Flugzeit-Einzel-Massenspektrometrie) erzeugt das System massenspektrometrische Informationen durch die Messung der Flugzeit gepulster Ionen von der orthogonalen Ablenkung bis zum Detektor. Ionen mit einem höheren Masse-zu-Ladungs-Verhältnis benötigen mehr Zeit, um die Flugstrecke zurück zu legen.

### Tandem-Massenspektrometrie

Diese MS/MS-Technik ist geeignet für die Analyse von Mischungen, da, unter der Annahme, dass Produkt-Ionen ein eindeutiges m/z-Verhältnis haben, die charakteristischen Produkt-Ionen-Spektren für jede Komponente in einer Mischung erhalten werden können, ohne die anderen Komponenten zu stören.

Verwenden Sie die Tandemmassenspektrometrie zur gezielten Analyse spezifischer Vorläufer-/Produkt-Ionen, während die Probe eluiert. Dieser Analysetyp ist spezifischer als die Einzel-Massenspektrometrie, die nur basierend auf dem Masse-zu-Ladungs-Verhältnis unterscheidet.

### Produkt-Ionen-Massenspektrometrie

Bei einem Produkt-Ionen-Scan (**Product Ion**) erzeugt das System massenspektrometrische Informationen durch Auswahl eines bestimmten Vorläufer-Ionen-Fensters in Q1, Fragmentieren in Q2 (eine Stoßzelle) und Analysieren der Ionen (Fragment-Ionen) in einer Flugrohr und Aufzeichnen ihrer genauen Ankunftszeit am Detektor. Produkt-Ionen können Informationen zur Molekularstruktur des ursprünglichen (Vorläufer-) Ions geben.

### Vorläufer-Ionen-Massenspektrometrie

Bei einem Vorläufer-Ionen-Scan erkennt das System Vorläufer-Ionen, die ein spezifisches Produkt-Ion erzeugen. Das Instrument verwendet Q1 im Modus „Mass Resolving“ (Massen-Auflösend), um über den relevanten Massenbereich zu scannen, während der Abschnitt „TOF“ Produkt-Ionen-Spektren für jedes Vorläufer-Ion erfasst. Das Q1-Massenspektrum zeigt alle Vorläufer-Ionen an, die das relevante Ion erzeugen.

### Über Spektraldatenaufnahme

Spektraldaten können in einem der in [Tabelle 7-1](#) beschriebenen Modi erfasst werden.

Spektraldaten können nur von Q1- und Vorläufer-Ionen-Scan-Typen erfasst werden.

Tabelle 7-1 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 Gerät bei dem Massenbereich von 100 Da bis 200 Da und einer Schrittweite von 0,1 Werte von 100 Da bis 200 Da in Schrittweiten von 0,1 Da messen (zum Beispiel 100,0, 100,1, 100,2, 100,3... bis zu 200,0).
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.

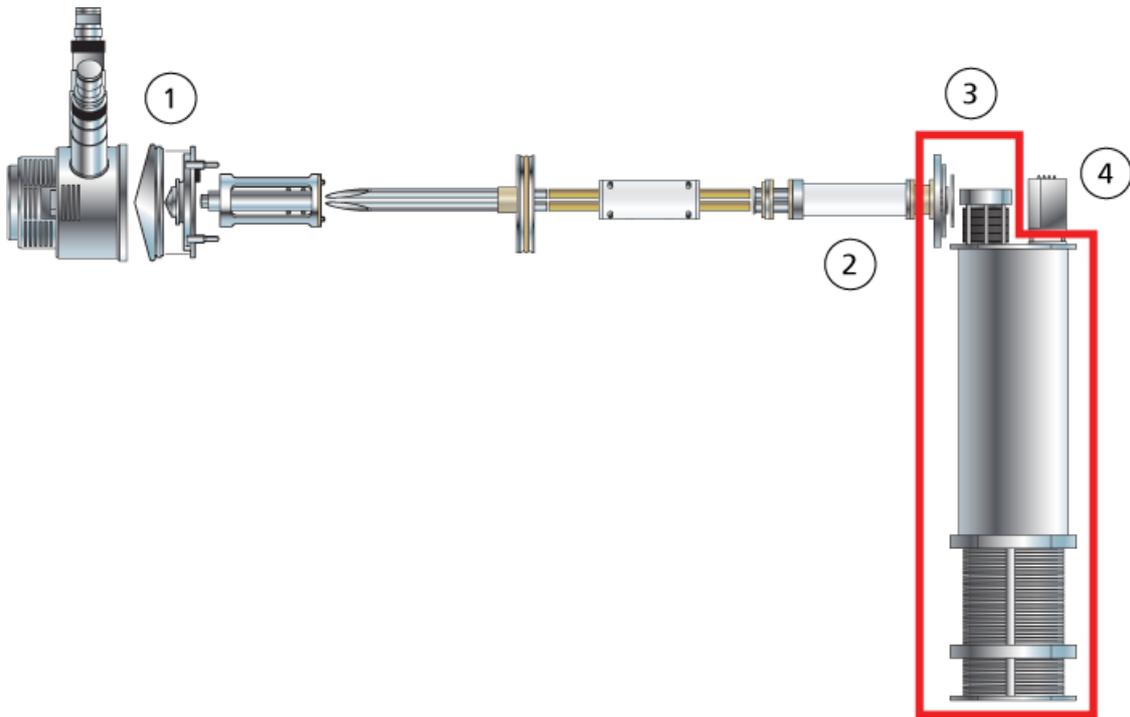
## Parameter

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 Mehrkanal-Kapillare ist der Sensor in einem TOF-Instrument und bestehen aus vier Kanälen für den Ionennachweis. Die Summe der Kanäle entspricht der Ionenintensität. Dieser Parameter kann während der Instrumentenoptimierung optimiert werden.

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

Abbildung 7-2 Optischer Ionenpfad und Parameter



Position	Parameter	Parameterart	Verwendung	Scan-Methode
1	IonSpray Voltage Floating (ISVF)	Quelle und Gas	Der ISVF-Parameter beeinflusst die Spray-Stabilität und dadurch die Empfindlichkeit. Hierbei handelt es sich um die auf die Nadel, die die Probe aussprüht, angewendete Spannung.	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

<b>Position</b>	<b>Parameter</b>	<b>Parameterart</b>	<b>Verwendung</b>	<b>Scan-Methode</b>
1	Ion Source Gas 1 (GS1)	Quelle und Gas	Der GS1-Parameter steuert das Zerstäubergas sowohl für die TurbolonSpray <sup>®</sup> als auch für die APCI-Probe. Der GS1-Parameter steuert das Zerstäubergas für die TurbolonSpray <sup>®</sup> -Probe.	Alle
1	Ion Source Gas 2 (GS2)	Quelle und Gas	Der GS2-Parameter steuert das Heizergas für die TurbolonSpray <sup>®</sup> -Probe sichtbar. Der GS2-Parameter steuert das Heizergas für die TurbolonSpray <sup>®</sup> -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 <sup>®</sup> -Probe oder die Temperatur der APCI-Probe.	Alle
1	Curtain Gas (CUR)	Quelle und Gas	Der CUR-Parameter steuert den Gasfluss der Curtain Gas <sup>™</sup> -Schnittstelle. Die Curtain Gas <sup>™</sup> -Schnittstelle ist zwischen der Curtain-Platte und der Orifice angeordnet. Sie verhindert eine Kontamination der Ionenoptik.	Alle
1	Declustering Potential (DP)	Verbindung	Der DP-Parameter steuert die Spannung an der Orifice, welche das Auflösungsvermögen der Ionen zwischen der Orifice und der QJet <sup>®</sup> -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

## Bedienungsanleitung – Akquisitionsmethoden

Position	Parameter	Parameterart	Verwendung	Scan-Methode
2	CAD Gas	Quelle und Gas	<p>Der CAD-Parameter steuert den Druck des CAD-Gases in der Kollisionszelle. Das Kollisionsgas hilft, die Ionen während des Durchlaufes durch die 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.</p> <p>Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die Verbindung.</p>	Alle
2	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>	TOF MS, TOF MS/MS
2	Collision Energy Spread (CES)	Verbindung	<p>In Verbindung mit dem CE-Parameter bestimmt der CES-Parameter, welche drei diskreten Kollisionsenergien auf die Vorläufer-Masse in einem Produkt-Ionen-Scan einwirken, wenn CES verwendet wird. Die Kollisionsenergie wird schrittweise von niedrig bis hoch gesteigert. Im positiven Modus wird die Kollisionsenergie von <math>CE - CES</math> bis <math>CE + CES</math> erhöht. Durch die Eingabe eines CES-Wertes wird die Kollisionsenergie-Spreizung automatisch aktiviert. Dieser Parameter ist hilfreich, wenn Sie Verbindungen mit unterschiedlichen Stabilitäten analysieren möchten.</p> <p>Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die Verbindung.</p>	TOF MS/MS

Position	Parameter	Parameterart	Verwendung	Scan-Methode
3	Ion Release Delay (IRD)	Verbindung	<p>Die Zeitmenge in Millisekunden vor dem Ionenimpuls. Der Standard (11 ms) wird basierend auf den TOF-Massen berechnet und kann vom Bediener angepasst werden. Der Bereich ist normalerweise 6 ms bis 333 ms.</p> <p>Dieser Parameter wird mit dem Assistenten <b>Instrument Optimization</b> optimiert, wenn die Option <b>Enhanced Ion</b> in den Optionen <b>Advanced</b> ausgewählt ist. Im Allgemeinen muss die Standardeinstellung nicht geändert werden.</p>	Nur MS/MS, Erweitert
3	Ion Release Width (IRW)	Verbindung	<p>Dies ist die Breite oder Dauer des Ionenimpulses in Millisekunden und wird basierend auf dem IRD berechnet. Der Bereich ist normalerweise 5 ms bis 328 ms mit einem Standardwert von 10 ms.</p> <p>Dieser Parameter wird mit dem Assistenten <b>Instrument Optimization</b> optimiert, wenn die Option <b>Enhanced Ion</b> in den Optionen <b>Advanced</b> ausgewählt ist. Im Allgemeinen muss die Standardeinstellung nicht geändert werden.</p>	Nur MS/MS, Erweitert
4	MCP (CEM)	Detektor	Der CEM-Parameter steuert die Spannung, die auf den Sensor aufgebracht wird. Die Spannung beeinflusst das Sensorverhalten.	Alle

---

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

---

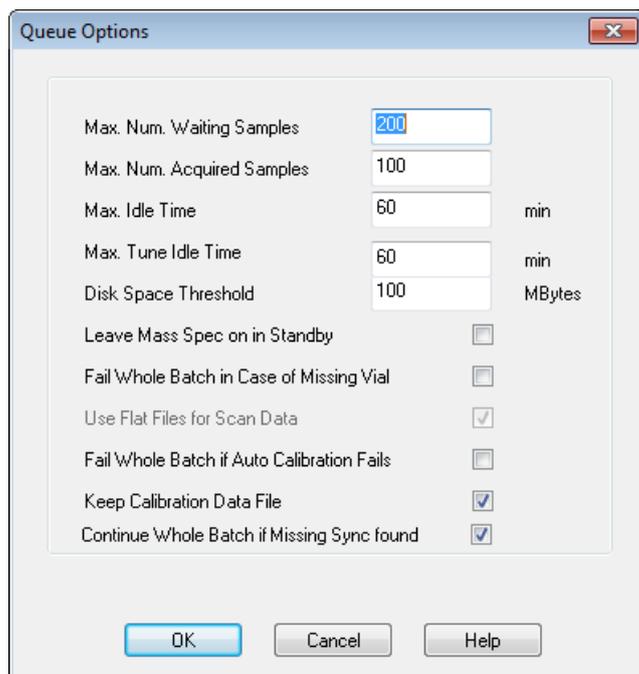
## Optionen für Warteschlangen einstellen

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<sup>®</sup> TF-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 8-1 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.
7. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Fail Whole Batch if Auto Calibration Fails**, um den Batch zu stoppen, wenn die automatische Kalibrierung fehlschlägt.
8. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Keep Calibration Data File**, um die Kalibrierungs-Datendatei in einem Teilordner des Ordners „Data“ des Projekts aufzubewahren, aus dem Proben übergeben werden.
9. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Continue Whole Batch if Missing Sync found**, um den gesamten Batch weiter zu erfassen, wenn ein fehlendes Synchronisierungssignal festgestellt wird. Wenn

dieses Kontrollkästchen nicht aktiviert ist, schlägt die aktuelle Probe fehl und die Warteschlange fährt nicht mit der nächsten Probe fort, wenn ein fehlendes Synchronisierungs-Signal festgestellt wird.

# Sets und Proben zu einem Batch hinzufügen

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

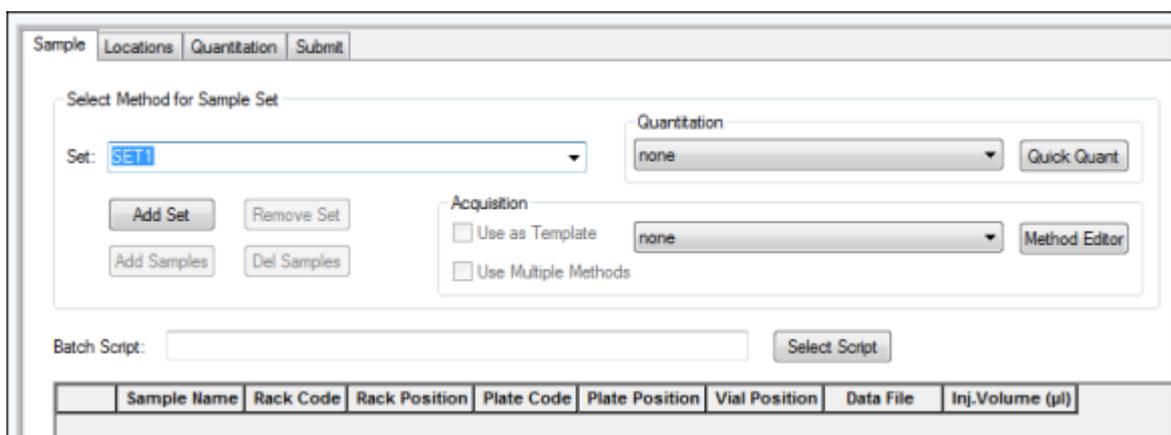
---

**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 8-2 Dialog „Batch Editor“



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 8-3 Dialog „Add Samples“

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 Probenamen „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.

---

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 67](#)
  - [Mit der Registerkarte „Locations“ die Fläschchenpositionen bestimmen \(optional\) auf Seite 67](#)
17. 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.

---

18. 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 [19](#) fort.
  - Wenn die Meldung darauf hinweist, dass der Batch nicht für die Übergabe bereit ist, nehmen Sie die Änderungen entsprechend der Meldung vor.
19. 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.
20. Speichern Sie die Datei.

---

## 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**.

## Probenkalibrierung einrichten

Die Software kann automatisch die externe Kalibrierung planen und ausführen, während Proben im Batch-Modus erfasst werden. Dies stellt sicher, dass eine gute Massengenauigkeit während der Datenerfassung erhalten wird.

Wenn das CDS nicht konfiguriert ist, erfolgt die Kalibrierung mit einem Autosampler und die Benutzer müssen die Kalibrierungsmethode (\*.dam) und die Fläschchen-Position der Kalibrierungsprobe angeben.

1. Klicken Sie im **Batch Editor** auf die Registerkarte **Calibrate**.
2. Geben Sie im Feld **Calibrate Every \_ Samples** die Anzahl der Proben ein, die zwischen zwei Kalibrierungen erfasst werden sollen.
3. Wählen Sie in der **Calibrant Reference Table** eine Tabelle aus der Liste aller Kalibriermittel-Referenztabellen aus, die für die aktuelle Polarität verfügbar sind. Stellen Sie sicher, dass die ausgewählte Referenztable die korrekte **Calibrant Valve Position** hat.
4. Legen Sie die **CDS Inject Flow Rate** fest.

Wenn der Batch übergeben wird, werden die Kalibrierungsproben in die Warteschlange eingefügt. Jeder Satz beginnt mit einer Kalibrierungsprobe. Die Kalibrierungsmethode wird mit AnalystCal\_ und dem Namen der Erfassungsmethode benannt (zum Beispiel AnalystCal\_TOF.dam). Wenn das CDS konfiguriert ist, erstellt die Software automatisch eine Kalibrierungsmethode, die der Erfassungsmethode entspricht, die für die nächste Probe in der Warteschlange verwendet wird. Kalibrierungsdaten werden in einer getrennten Datendatei für jede Kalibrierungsprobe gespeichert. Die Kalibrierungs-Datendatei wird mit dem Kalibrierungsbericht im Teilordner „Cal Data“ gespeichert und mit Cal und dem Zeitstempel und dem Kalibrierungsproben-Index (z. B. Cal200906261038341.wiff) benannt, wenn die Option „Keep Calibration Data File“ im Dialogfeld „Queue Options“ ausgewählt ist. Der Kalibrierungsbericht wird mit Cal und dem Zeitstempel, dem Kalibrierungsproben-Index und dem Word-Bericht benannt (z. B.

Cal20130822154447030\_report.txt). Der Bericht zeigt die Kriterien zur Peak-Ermittlung, die Parameter und die Massen an, die für die Kalibrierung verwendet wurden. Er informiert die Benutzer, ob die Kalibrierung erfolgreich war. Der Bericht fasst ebenfalls die für die Kalibrierung verwendeten Parameter zusammen.

## 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.

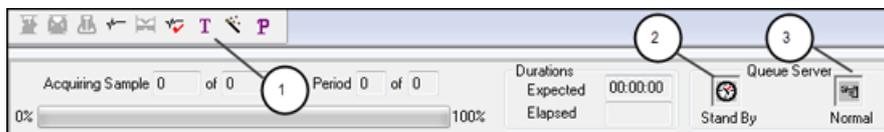
## Daten aufnehmen

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 8-4 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 <a href="#">Status der Warteschlange auf Seite 70</a> .

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 62](#).

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.

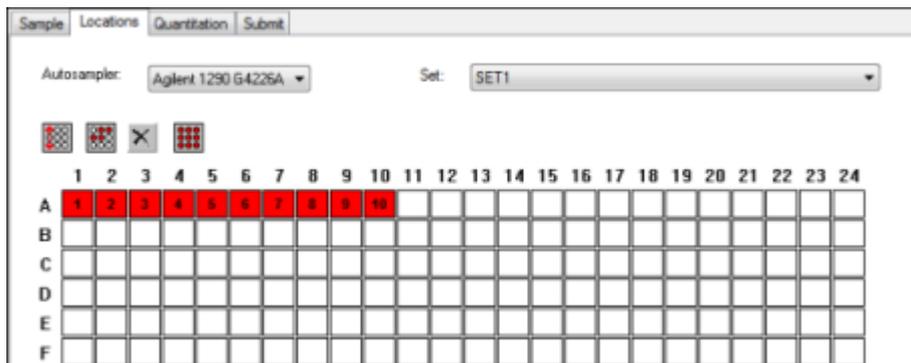
Kreise erscheinen, welche die Wells oder Vials für die Träger darstellen.

---

**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 8-5** 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.

---

## 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**.

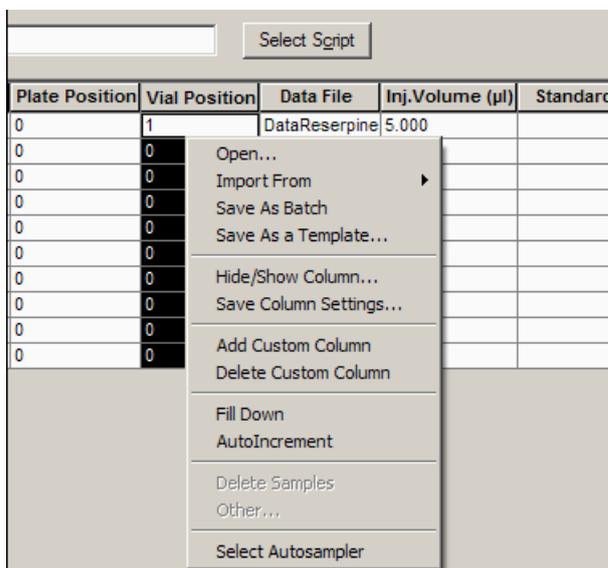
Die Warteschlange wird beendet, nachdem der aktuelle Scan der ausgewählten Probe abgeschlossen ist. Der Probenstatus im Fenster **Queue Manager (Local)** wird auf **Terminated** geändert und allen folgenden Proben in der Warteschlange werden auf **Waiting** gestellt.

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

## Batch Editor Rechtsklick-Menü

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

Abbildung 8-6 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

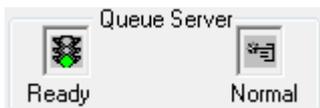
Der **Queue Manager** zeigt den Status von Warteschlange, Batch und Probe. Detaillierte Informationen zu einer bestimmten Probe in der Warteschlange können auch eingesehen werden.

**Tipp!** Zeigt die  Warteschlange an.

### Status der Warteschlange

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

**Abbildung 8-7** Die Anzeige für den Queue Server zeigt den Modus „Normal“ an



**Abbildung 8-8** 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 8-1](#) beschreibt die Symbole und den Warteschlangenzustand.

**Tabelle 8-1** Status der Warteschlange

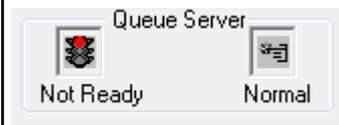
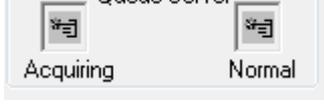
Symbole	Zustand	Definition
	Not Ready	Das Hardware-Profil ist deaktiviert und die Warteschlange akzeptiert keine Probenübergaben.
	Stand By	Das Hardware-Profil wurde aktiviert, aber alle Geräte befinden sich im Leerlauf. Pumpen laufen nicht und Gase sind abgeschaltet.
	Warming Up	Das Massenspektrometer 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 <b>Ready</b> gehen.

Tabelle 8-1 Status der Warteschlange (Fortsetzung)

Symbole	Zustand	Definition
	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.
	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.

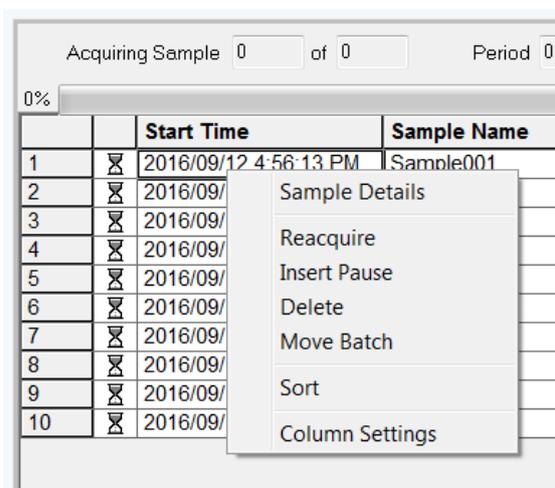
**Tabelle 8-2 Symbole für Instrument- und Gerätestatus**

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.
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 8-9 Queue Manager Rechtsklick-Menü



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

# Bedienungsanleitung – Analyse und Untersuchung von Daten

# 9

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.

**Tipp!** Um eine Beispiel-Datendatei anzuzeigen, stellen Sie sicher, dass das Projekt **Example** ausgewählt ist. Öffnen Sie den Ordner TOF und öffnen Sie dann die Datei **TOFMS PPGs3000.wiff**. Wählen Sie in der Probenliste **TOFMS** aus.

## In einer Datei zwischen Proben navigieren

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

Tabelle C-5 auf Seite 121 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 9-1 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 9-1 Rechtsklick-Menü für das Teilfenster Show File Information

Menü	Funktion
Copy	Kopiert die ausgewählten Daten
Paste	Fügt Daten ein.

**Tabelle 9-1 Rechtsklick-Menü für das Teilfenster Show File Information (Fortsetzung)**

Menü	Funktion
Select All	Wählt alle Daten im Fensterbereich aus.
Save To File	Speichert Daten als RTF-Datei.
Font	Ändert die Schriftart.
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 9-1 Registerkarte „Peak List“

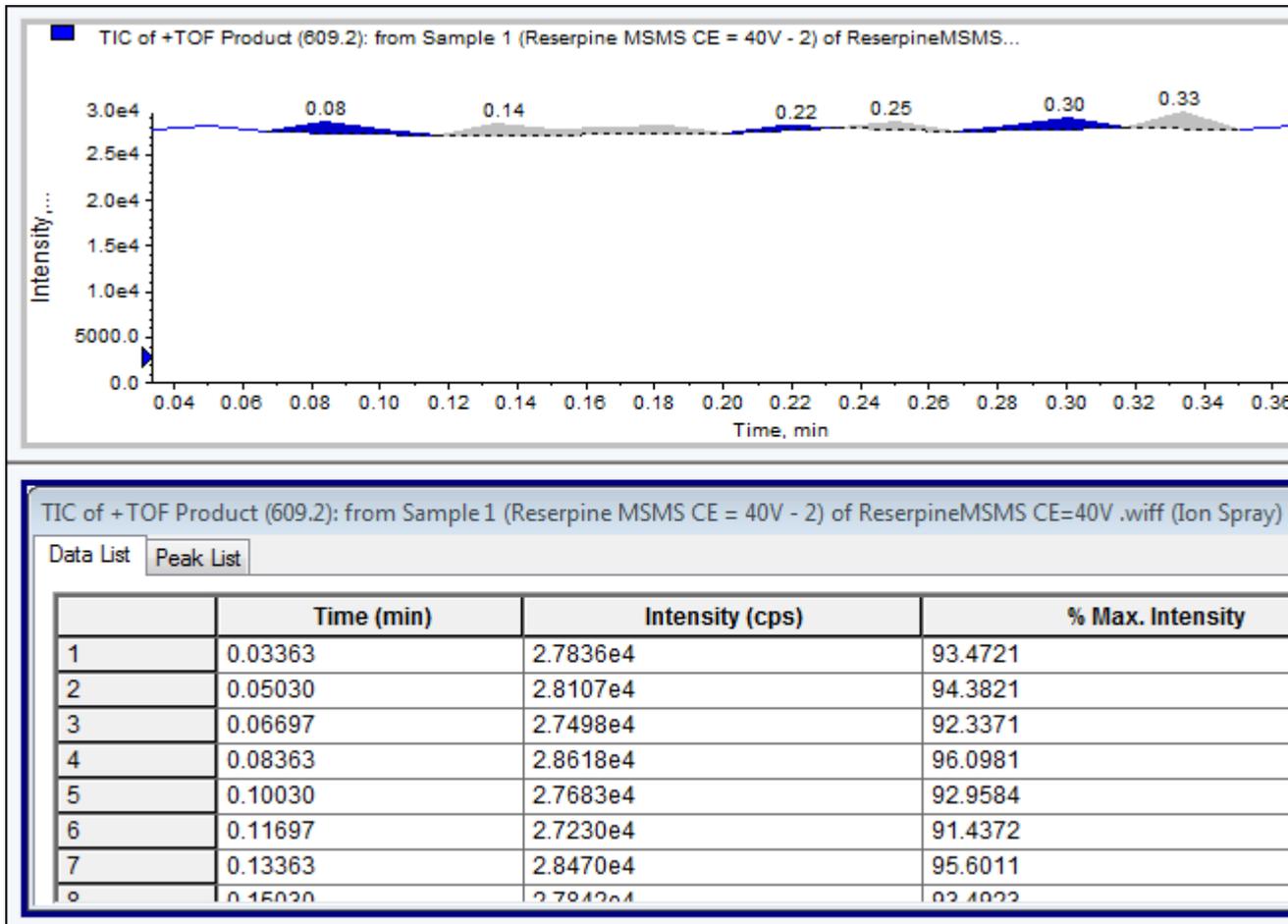


Tabelle 9-2 Rechtsklick-Menü für die Registerkarte „Spectral Peak List“

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

Tabelle 9-3 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 <b>IntelliQuan</b> .

**Tabelle 9-3 Rechtsklick-Menü für die Registerkarte „Chromatographic Peak List“ (Fortsetzung)**

Menü	Funktion
Save As Text	Speichert die Daten als txt-Datei.
Delete Pane	Löscht das ausgewählte Teilfenster.

## ADC-Daten anzeigen

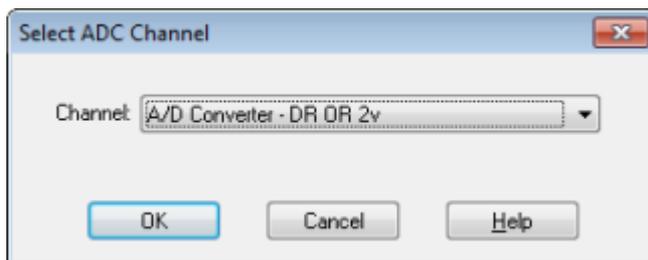
ADC- (Analog-Digital-Wandler)-Daten werden durch einen sekundären Detektor aufgenommen (beispielsweise durch einen UV-Detektor über eine ADC-Karte) und eignen sich für einen Vergleich mit Massenspektrometer-Daten. Um ADC-Daten zur Verfügung zu haben, nehmen Sie Daten und Massenspektrometer-Daten gleichzeitig 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 9-2 Dialogfeld „Select ADC Channel“**



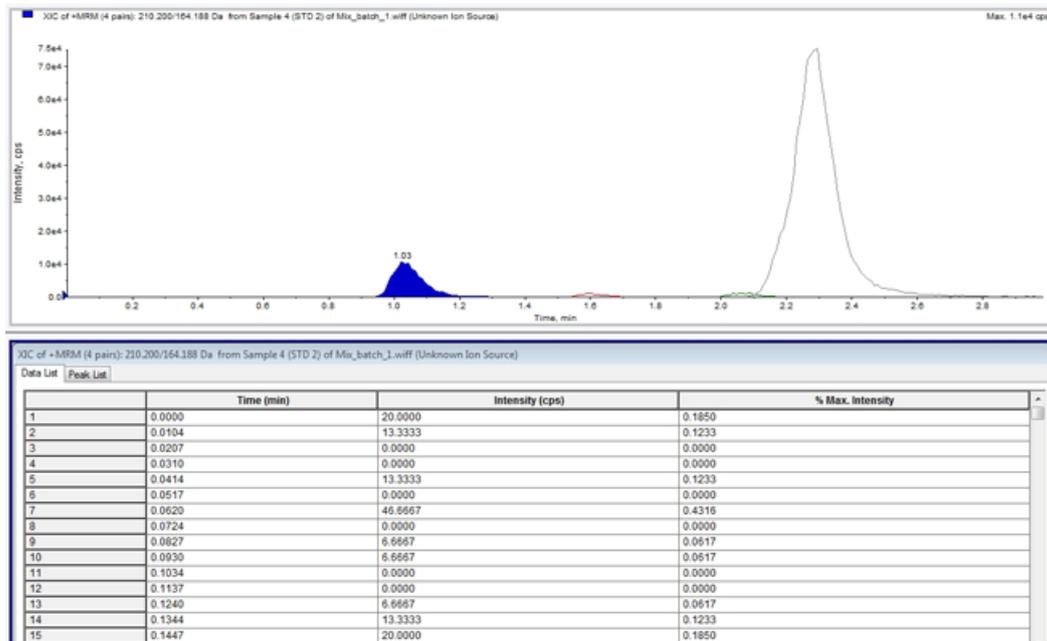
6. Wählen Sie einen Kanal in der **Channel**-Liste aus und klicken Sie dann auf **OK**.

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 9-3 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 9-6 auf Seite 88](#).

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 9-4](#) enthält eine Beschreibung der Arten von Chromatogrammen.

Weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Symbole siehe [Tabelle 9-8 auf Seite 91](#).

Tabelle 9-4 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

- 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**.

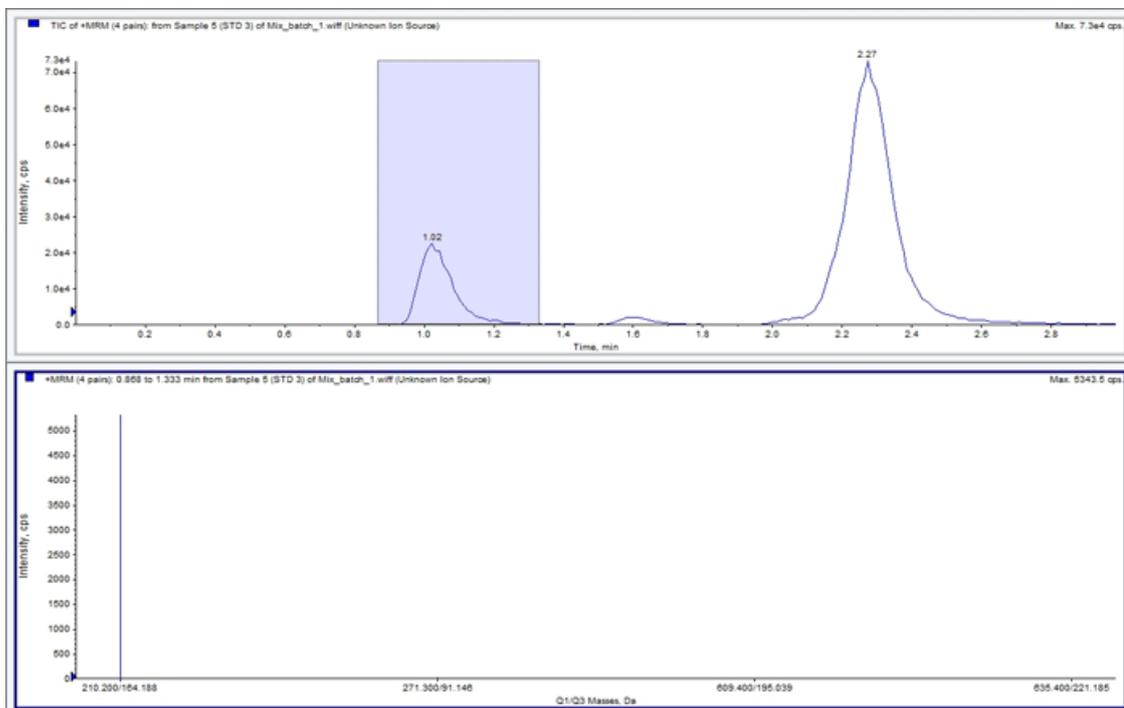
## Ein Spektrum aus einem TIC anzeigen

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 9-4 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 9-8 auf Seite 91](#).

Es gibt mehrere Verfahren zum Extrahieren von Ionen zur Erzeugung eines XIC, je nachdem, ob chromatographische oder spektrale Daten verwendet werden. [Tabelle 9-5](#) enthält eine Zusammenfassung der Verfahren, die mit Chromatogrammen und Spektren angewendet werden können.

**Tabelle 9-5 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 Befehls 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.

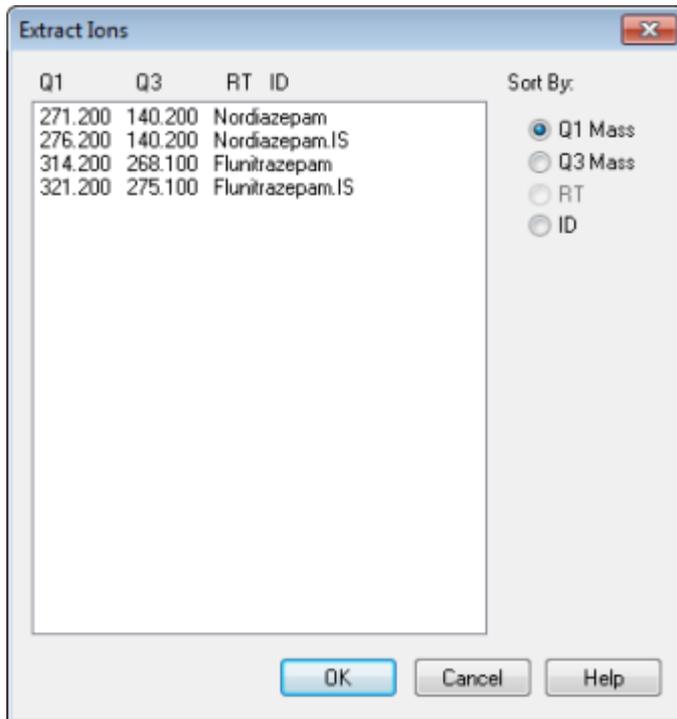
3. Klicken Sie auf **Explore > Extract Ions > Use Base Peak Masses**.

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 9-5 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.

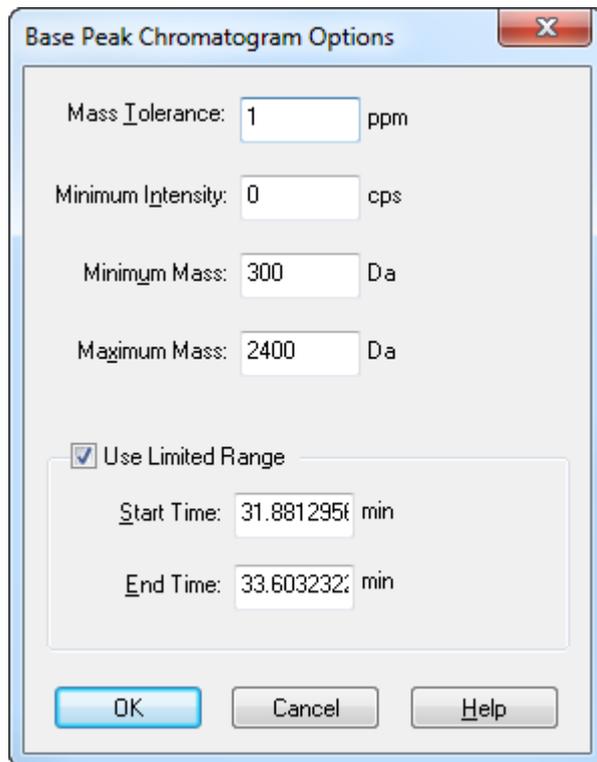
1. Öffnen Sie eine Datei.
2. Wählen Sie einen Bereich innerhalb eines TIC.

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 9-6 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**.

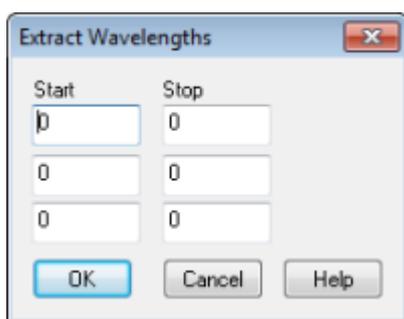
Der BPC wird in einem neuen Fenster erzeugt.

## 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 9-8 auf Seite 91](#).

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 9-7 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.

## 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 9-8 auf Seite 91](#).

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 9-6 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.

Tabelle 9-6 Rechtsklick-Menü für Chromatogramm-Teilfenster (Fortsetzung)

Menü	Funktion
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 9-7 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.
Re-Calibrate TOF	Öffnet das Dialogfeld TOF Calibration.
Abscissa (Time)	Wechselt die Anzeige, um TOF-Werte auf der X-Achse anzuzeigen.
Delete Pane	Löscht das ausgewählte Teilfenster.

**Tabelle 9-7 Rechtsklick-Menü für Spektren-Teilfenster (Fortsetzung)**

Menü	Funktion
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 <b>Search Constraints</b> eingegeben wurden.

## Verarbeiten von Diagrammdaten

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

## Diagramme

Die gleichen Daten können auf verschiedene Weise untersucht werden. Daten können zum Vergleich vor einer Verarbeitungen 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 9-8 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 <b>Explore &gt; Duplicate Data &gt; In New Window.</b>	
Grafik wieder auf die ursprüngliche Größe skalieren	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf <b>Explore &gt; Home Graph.</b>	
Verschieben eines Fensters	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Diagramm auswählen. Klicken Sie auf <b>Window &gt; Move Pane.</b></li> <li>• 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.</li> </ul> <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"> <li>• Wenn das Teilfenster am oberen oder unteren Rand des Ziel-Teilfensters ist, verschiebt sich das Teilfenster entsprechend darüber oder darunter.</li> <li>• Wenn das Teilfenster am rechten oder linken Rand des Ziel-Teilfensters ist, verschiebt sich das Teilfenster entsprechend nach links oder rechts.</li> <li>• 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.</li> </ul>	
Teilfenster verknüpfen	<p>a. Wenn zwei Grafiken geöffnet sind, klicken Sie auf eine und aktivieren damit dieses Teilfenster.</p> <p>b. Klicken Sie auf <b>Explore &gt; Link</b> und dann auf das andere Teilfenster.</p>	
Verknüpfungen entfernen	Schließen Sie eines der Fenster. Klicken Sie auf <b>Explore &gt; Remove Link.</b>	

Tabelle 9-8 Diagramm-Optionen (Fortsetzung)

Um dies zu tun ...	verwenden Sie diese Menüoption ...	... oder klicken Sie auf dieses Symbol
Ein Fenster/Teilfenster löschen	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf <b>Window &gt; Delete Pane.</b>	
Ein Fenster/Teilfenster sperren	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf <b>Window &gt; Lock Panes.</b>	
Ein Fenster/Teilfenster ausblenden	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf <b>Window &gt; Hide Pane.</b>	
Ein Fenster maximieren	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf <b>Window &gt; Maximize Pane.</b>	
Fenster/Teilfenster in Kacheln anordnen	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf <b>Window &gt; Tile all Panes.</b>	

## 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.

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! Gefährdung durch ionisierende Strahlung, 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 10-1](#) gibt einen empfohlenen Zeitplan für 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 10-1 Wartungsaufgaben

Komponenten	Häufigkeit	Aufgabe	Weitere Informationen erhalten Sie unter...
<b>System</b>			
Schläuche	Täglich	Prüfen Sie die Schläuche und die Anschlüsse, um sicherzustellen, dass sie ordnungsgemäß verbunden sind und es keine Undichtigkeiten gibt.	Siehe <a href="#">Chemische Vorsichtsmaßnahmen auf Seite 9</a> .
<b>Massenspektrometer</b>			
Curtain-Platte	Täglich	Reinigen	Siehe <a href="#">Reinigung der Curtain-Platte auf Seite 101</a> .
Orifice-Platte (Vorderseite)	Täglich	Reinigen	Siehe <a href="#">Reinigung der Vorderseite der Orifice-Platte auf Seite 101</a> .
Vorvakuum-pumpenöl	Wöchentlich	Füllstand prüfen	Siehe <a href="#">Inspektion des Ölstands in der Vakuumpumpe auf Seite 104</a> .
Vorvakuum-pumpenöl	Alle sechs bis zwölf Monate	Ersetzen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
Instrumenten-oberflächen	Nach Bedarf	Reinigen	Siehe <a href="#">Reinigen der Oberflächen auf Seite 96</a> .
Quellenabluft-Auffangbehälter	Nach Bedarf	Leeren	Siehe <a href="#">Entleeren des Quellenabluftauffangbehälters auf Seite 102</a> .
Orifice-Platte (Vorder- und Rückseite)	Nach Bedarf	Reinigen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
QJet <sup>®</sup> - Ionenführung und IQO-Linse	Nach Bedarf	Reinigen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.

Tabelle 10-1 Wartungsaufgaben (Fortsetzung)

Komponenten	Häufigkeit	Aufgabe	Weitere Informationen erhalten Sie unter...
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.
Kühlerlüfterfilter des Massenspektrometers	Nach Bedarf	Ersetzen	<a href="#">Ersetzen der Kühlerlüfterfilter des Massenspektrometers auf Seite 105.</a>
Schnittstellenheizung	Nach Bedarf	Ersetzen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
<b>Ionenquelle</b>			
TurbolonSpray <sup>®</sup> und APCI-Elektroden	Nach Bedarf	Überprüfen und ersetzen	Siehe <i>Bedienerhandbuch</i> der Ionenquelle.
Koronaentladungsnadel	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, QJet<sup>®</sup>-Ionenführung und Q0-Region, wenn die Empfindlichkeit des Systems abnimmt.

---

**Tipp!** 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 QJet<sup>®</sup>-Ionenführung und Q0-Region, wenn die Empfindlichkeit des Systems abnimmt.

---

**Tipp!** 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<sup>™</sup> 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<sup>™</sup> oder DuoSpray<sup>™</sup> lassen Sie die Ionenquelle und die Schnittstelle vor dem Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 30 Minuten lang abkühlen. Bei Verwendung der Ionenquelle NanoSpray<sup>®</sup> 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.

- 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 9](#).

---

## 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](http://sciex.com/contact-us).

---

- Puderfreie Handschuhe (Neopren- bzw. Nitrilhandschuhe werden empfohlen)
- Schutzbrillen
- Laborkittel
- Frisches, hochwertiges (reines) Wasser (mindestens 18 M $\Omega$  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

## Service- und Wartungsinformationen

---

- 1-l-Becherglas zum Auffangen von verwendetem Lösungsmittel
- Behälter für organischen Abfall
- Fusselfreie Wischtücher. Siehe [Vom Hersteller erhältliche Werkzeuge und Hilfsmittel auf Seite 98](#).
- (Optional) Polyestertupfer

### Vom Hersteller erhältliche Werkzeuge und Hilfsmittel

Beschreibung	Artikelnummer
Kleiner Polyestertupfer (thermisch gebunden). Auch im Reinigungsset erhältlich.	1017396
Fusselfreies Tuch (11 cm x 21 cm, 4,3 Zoll x 8,3 Zoll). Auch im Reinigungsset erhältlich.	018027
Reinigungsset. Enthält kleinen Polyestertupfer, fusselfreie Tücher, Q0-Reinigungswerkzeug, konische Reinigungsbürste für die QJet®-Ionenführung und Alconoxpackungen.	5020763

## 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!** Gefährdung durch ionisierende Strahlung, 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 10-1 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<sup>®</sup>-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).

---

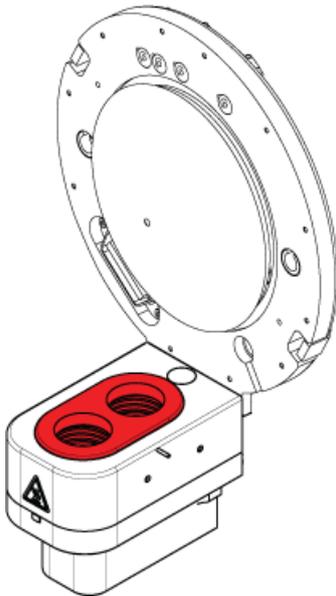


**WARNHINWEIS!** Gefahr durch heiße Oberfläche. Bei Verwendung der IonDrive<sup>™</sup> Turbo V-Ionenquelle lassen Sie die Ionenquelle und die Schnittstelle vor dem Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 90 Minuten lang abkühlen. Bei Verwendung der Ionenquelle Turbo V<sup>™</sup> oder DuoSpray<sup>™</sup> lassen Sie die Ionenquelle und die Schnittstelle vor dem Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 30 Minuten lang abkühlen. Bei Verwendung der Ionenquelle NanoSpray<sup>®</sup> 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 10-2 Ionenquellenablauf auf der Vakuum-Schnittstelle



1. Deaktivieren Sie das Hardware-Profil.
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.

---

**Hinweis:** Falls das Nanozellen-Heizerbauteil installiert ist, befolgen Sie die Anweisungen im *Bedienerhandbuch* der Ionenquelle, um es zu entfernen und zu reinigen.

---

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 das Ionenquellen-*Bedienerhandbuch*.  
Befestigen Sie die Ionenquelle durch Drehen der Riegel nach unten in die verriegelte Position.
3. Aktivieren Sie das Hardware-Profil.

## Entleeren des Quellenabluftauffangbehälters



---

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

---



---

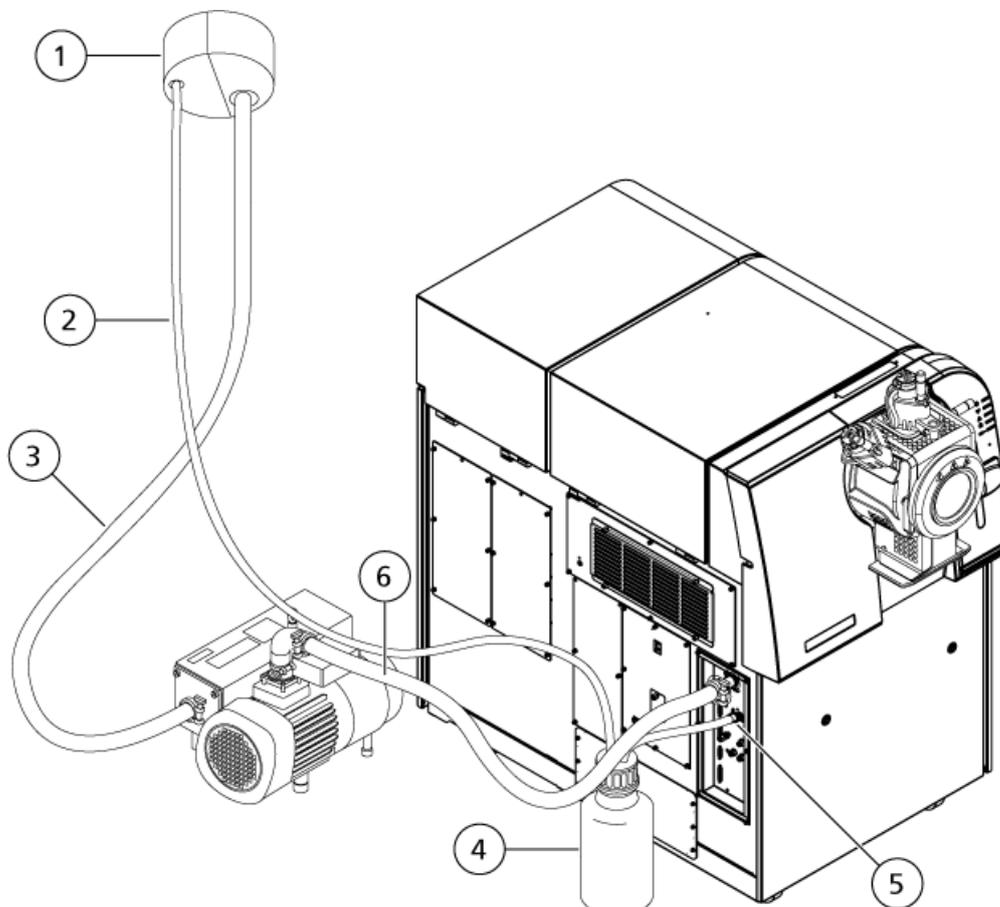
**WARNHINWEIS!** Gefährdung durch ionisierende Strahlung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Achten Sie darauf, die Abluft über eine dafür vorgesehene Laborabzugshaube oder eine Abluftanlage abzulassen, und sorgen Sie dafür, dass die Abluftschläuche gut mit Schellen befestigt sind. Stellen 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.

**Abbildung 10-3 Quellenabluftauffangbehälter**



Position	Beschreibung
1	Entlüftungsanschluss
2	Quellenabluftabluftschlauch: 2,5 cm (1,0 Zoll) Innendurchmesser (ID)
3	Vakuumpumpenabluftschlauch: 3,2 cm (1,25 Zoll) Innendurchmesser.
4	Quellenabluftauffangbehälter. In dieser Zeichnung ist der Auffangbehälter mit Kappe auf der Rückseite des Massenspektrometers zu sehen, um Anschlusspunkte sichtbar zu machen. Der Auffangbehälter befindet sich an der Seite des Massenspektrometers im Auffangbehälter-Halter. Vergewissern Sie sich, dass der Behälter gesichert ist, um Verschütten zu vermeiden.
5	Anschluss zum Massenspektrometer: 1,6 cm (0,625 Zoll) ID
6	Vakuumeingangsschlauch der Vakuumpumpe

---

**Hinweis:** Die Quellenabluftschlauchanschlüsse am Auffangbehälter, am Massenspektrometer und die Laborentlüftung sind mit Rohrschellen gesichert.

---

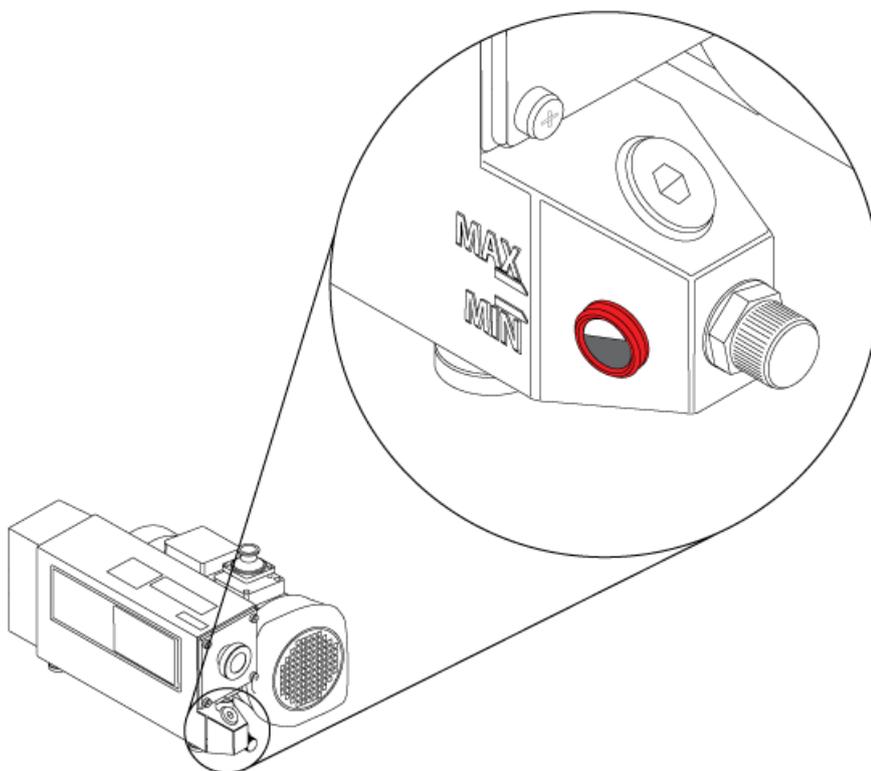
3. Trennen Sie die Kapillaren vom Deckel.
4. Heben Sie den Auffangbehälter aus dem Halter, falls erforderlich.
5. Entfernen Sie den Deckel vom Auffangbehälter.
6. Leeren Sie den Auffangbehälter und entsorgen Sie den Abfall gemäß den Laborverfahren und Vorschriften zur Abfallentsorgung.
7. Montieren Sie 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.

## 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 10-4 Schauglas



## Ersetzen der Kühlerlüfterfilter des Massenspektrometers

Die Kühlerlüfterfilter des Massenspektrometers befinden sich an der linken Seite des Massenspektrometers.

### Voraussetzungen

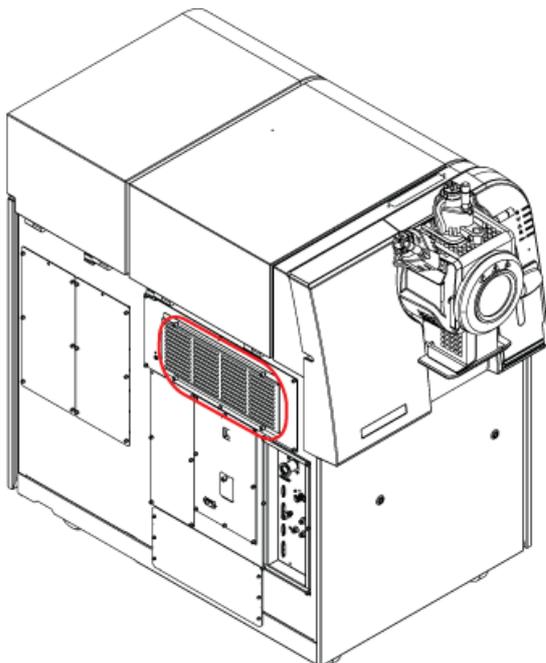
- Schalten Sie das System gemäß dem im *Systemhandbuch* beschriebenen Verfahren ab.



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

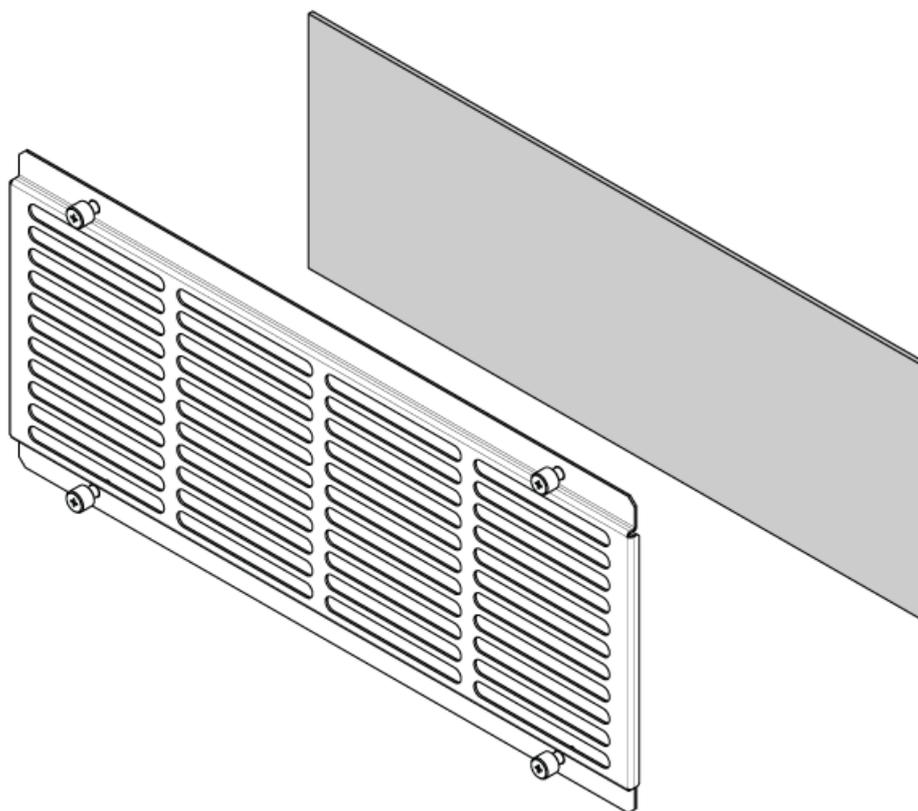
1. Entfernen Sie die vier Feststellschrauben an der Abdeckung des Kühlerlüfters.

Abbildung 10-5 Filter des Kühlerlüfters



2. Entfernen Sie den Filter und ersetzen Sie ihn durch einen neuen.

Abbildung 10-6 Filter der Kühlerlüfter



Position	Beschreibung
1	Abdeckung der Kühlerlüfter
2	Filter

3. Bringen Sie die Filterabdeckung an.

## 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.

## Service- und Wartungsinformationen

---

**Hinweis:** Die Ionenquelle und das Massenspektrometer müssen zwischen  $-30\text{ °C}$  bis  $+60\text{ °C}$  ( $-22\text{ °F}$  bis  $140\text{ °F}$ ) 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

# 11

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 11-1 Systemfehler**

Fehler	Mögliche Ursache	Abhilfemaßnahme
Die QJet <sup>®</sup> -Ionenführung ist sehr stark verschmutzt oder verschmutzt sehr häufig.	Der Curtain Gas <sup>™</sup> -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"> <li>1. Der Ölstand in der Vakuumpumpe ist zu niedrig.</li> <li>2. Es liegt eine Undichtigkeit vor.</li> <li>3. Die falsche Orifice-Platte ist installiert.</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Überprüfen Sie den Ölstand in der Vakuumpumpe und wenden Sie sich dann an den lokalen Wartungstechniker oder Außendienstmitarbeiter, um Öl nachzufüllen.</li> <li>2. Inspizieren und reparieren Sie Lecks.</li> <li>3. Installieren Sie die richtige Orifice-Platte.</li> </ol>
Es ist ein Systemfehler aufgetreten, da die Temperatur im QPS-Steuermodul zu hoch ist.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Die Umgebungstemperatur ist zu hoch.</li> </ol>	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
Die Analyst <sup>®</sup> TF-Software meldet, dass sich das Massenspektrometer wegen der Ionenquelle im Fehlerstatus befindet.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Die Probe ist nicht installiert.</li> <li>2. Die Probe ist nicht sachgemäß angeschlossen.</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Bestätigen Sie den Fehler im Statusfeld auf der Seite Gerätedetails.</li> <li>2. Installieren Sie die Probe. Siehe <i>Bedienerhandbuch</i> der Ionenquelle.</li> <li>3. Entfernen und ersetzen Sie die Probe. Ziehen Sie den Sicherungsring fest. Siehe <i>Bedienerhandbuch</i> der Ionenquelle.</li> </ol>

**Tabelle 11-1 Systemfehler (Fortsetzung)**

Fehler	Mögliche Ursache	Abhilfemaßnahme
Die Analyst <sup>®</sup> TF-Software zeigt an, dass die APCI-Probe verwendet wird, es ist jedoch die TurbolonSpray <sup>®</sup> -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.
Die Empfindlichkeit ist reduziert.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Die Ionenquellenparameter sind nicht optimiert.</li> <li>2. Das Massenspektrometer ist nicht optimiert.</li> <li>3. Die Curtain-Platte ist verschmutzt.</li> <li>4. Die Orifice-Platte ist verschmutzt.</li> <li>5. Die QJet<sup>®</sup>-Ionenführung oder die IQ0-Linse ist verschmutzt.</li> <li>6. Der Q0-Bereich ist verschmutzt.</li> <li>7. Die Spritze oder die Probenleitung ist undicht.</li> <li>8. Die Qualität der Probe hat sich vermindert, oder die Konzentration der Probe ist gering.</li> <li>9. Die Probe ist nicht ordnungsgemäß installiert.</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Optimieren Sie die Ionenquellen-Parameter. Siehe Hilfesystem der Analyst<sup>®</sup> TF Software.</li> <li>2. Siehe <a href="#">Reinigung der Curtain-Platte auf Seite 101</a>.</li> <li>3. Siehe <a href="#">Reinigung der Vorderseite der Orifice-Platte auf Seite 101</a> oder wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.</li> <li>4. Reinigen Sie den Q0-Bereich. Kontaktieren Sie den Wartungstechniker oder den Außendienstmitarbeiter.</li> <li>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.</li> <li>6. Überprüfen Sie die Konzentration der Probe. Verwenden Sie eine neue Probe.</li> <li>7. Entfernen und ersetzen Sie die Probe.</li> </ol>

Tabelle 11-1 Systemfehler (Fortsetzung)

Fehler	Mögliche Ursache	Abhilfemaßnahme
Die Empfindlichkeit ist reduziert. (Fortsetzung)	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Die Ionenquelle ist nicht ordnungsgemäß installiert oder defekt.</li> <li>2. Einer oder mehrere der O-Ringe an der Vakuum-Schnittstelle fehlen.</li> <li>3. Es besteht ein Problem mit dem LC-System oder den Anschlüssen.</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 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.</li> <li>2. 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.</li> <li>3. Beheben Sie Fehler des LC Systems.</li> </ol>
Die Leistung des Massenspektrometers hat nachgelassen.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Die Probe ist nicht richtig optimiert.</li> <li>2. Die Proben wurden nicht richtig vorbereitet oder die Proben haben sich verschlechtert.</li> <li>3. Es besteht ein Leck an den Probeneinlassanschlüssen.</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Optimieren Sie die Sonde. Siehe <i>Bedienerhandbuch</i> der Ionenquelle.</li> <li>2. Bestätigen Sie, dass die Proben sachgemäß vorbereitet wurden.</li> <li>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.</li> <li>4. Installieren und optimieren Sie eine alternative Ionenquelle.</li> <li>5. Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter, wenn das Problem weiterhin besteht.</li> </ol>
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> .

## Fehlersuche für das Massenspektrometer

---

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](https://www.sciex.com). Auf dieser Site finden Sie Kontaktinformationen.

# Empfohlene Kalibrierungen

# A

In den folgenden Tabellen sind die von SCIEX empfohlenen Normen für die Kalibrierung des TripleTOF® 6600-Systems. Informationen zu Tuninglösungen siehe [Abstimmen und Kalibrieren auf Seite 47](#)

**Tabelle A-1 Q1 PPG positive Kalibrierungen**

Massen								
59,04914	233,17472	442,33740	674,50484	906,67228	1196,88158	1545,13274	1952,42576	2242,63506

**Tabelle A-2 Q1 PPG negative Kalibrierungen**

Massen								
44,99819	411,25991	585,38549	933,63665	1165,80409	1572,09711	1863,30641	1979,39013	2211,55757

**Tabelle A-3 APCI positive Kalibrierlösung und ESI positive Kalibrierlösung: TOF MS**

TOF MS	Massen
Amino-Heptansäure	146,11756
Amino-dPEG 4-Säure	266,15981
Clomipramin	315,16225
Amino-dPEG 6-Säure	354,21224
Amino-dPEG 8-Säure	442,26467
Reserpin	609,28066
Amino-dPEG 12-Säure	618,36953
Hexakis(2,2,3,3-tetrafluoropropoxy) Phosphazen	922,0098
Hexakis(1H,1H,5H-octafluoropentoxy) Phosphazen	1521,97148

**Tabelle A-4 APCI positive Kalibrierlösung und ESI positive Kalibrierlösung: MSMS (Clomipramin)**

MSMS (Clomipramin)	Massen
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> N	58,0651
C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N	86,0964

## Empfohlene Kalibrierungsionen

---

**Tabelle A-4 APCI positive Kalibrierlösung und ESI positive Kalibrierlösung: MSMS (Clomipramin) (Fortsetzung)**

<b>MSMS (Clomipramin)</b>	<b>Massen</b>
C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> N	220,1121
C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> NCl	227,0496
C <sub>17</sub> H <sub>17</sub> N	235,1356
C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> NCl	242,0731
C <sub>17</sub> H <sub>17</sub> ClN	270,1044
C <sub>19</sub> H <sub>23</sub> ClN <sub>2</sub>	315,16225

**Tabelle A-5 APCI negative Kalibrierlösung und ESI negative Kalibrierlösung: TOF MS**

<b>TOF MS</b>	<b>Massen</b>
7-Amino-Heptansäure	144,103
Amino-dPEG 4-Säure	264,14526
Sulfinpyrazonfragment	277,09825
Amino-dPEG 6-Säure	352,19769
Sulfinpyrazon	403,11219
Amino-dPEG 8-Säure	440,25012
Amino-dPEG 12-Säure	616,35498
Amino-dPEG 16-Säure	792,45984

**Tabelle A-6 APCI negative Kalibrierlösung und ESI negative Kalibrierlösung: MSMS (Sulfinpyrazon)**

<b>MSMS (Sulfinpyrazon)</b>	<b>Massen</b>
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O	93,0344
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OS	125,0067
C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> NO	158,06114
C <sub>17</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	277,0983
C <sub>23</sub> H <sub>2</sub> ON <sub>2</sub> OS <sub>3</sub>	403,11219

Tabelle A-7 APCI negative Kalibrierlösung und ESI negative Kalibrierlösung: MSMS (Sulfinpyrazonfragment)

MSMS (Sulfinpyrazonfragment)	Massen
$C_6H_5$	77,03967
$C_8H_6N$	116,0506
$C_9H_8N$	130,0662
$C_{10}H_8NO$	158,0611
$C_{11}H_8N_2O_2$	200,0591
$C_{15}H_9N_2$	217,0771
$C_{16}H_{13}N_2O$	249,1033
$C_{17}H_{13}N_2O_2$	277,09825

# Exakte Massen und chemische Formeln

# B

## PPG

Tabelle B-1 enthält die exakten monoisotopischen Massen und geladenen Spezies (positive und negative), die bei den PPG- (Propylenglykol-) Kalibrierlösungen beobachtet werden. Die Massen und Ionen wurden mit der Formel  $M = H[OC_3H_6]_nOH$  berechnet, während für die MS/MS-Fragmente der positiven Ionen die Formel  $[OC_3H_6]_n(H^+)$  verwendet wurde. In allen Berechnungen war  $H = 1,007825$ ,  $O = 15,99491$ ,  $C = 12,00000$  und  $N = 14,00307$ .

**Hinweis:** Verwenden Sie bei der Durchführung von Kalibrierungen mit PPG-Lösungen den korrekten Isotopen-Peak.

Tabelle B-1 Exakte PPG-Massen

n	Exakte Masse (M)	$(M + NH_4)^+$	MS/ MS-Fragmente	$(M + NH_4)^{2+}$	$(M + COOH)^-$
1	76,05242	94,08624	59,04914	56,06003	121,05061
2	134,09428	152,12810	117,09100	85,08096	179,09247
3	192,13614	210,16996	175,13286	114,10189	237,13433
4	250,17800	268,21182	233,17472	143,12282	295,17619
5	308,21986	326,25368	291,21658	172,14375	353,21805
6	366,26172	384,29554	349,25844	201,16468	411,25991
7	424,30358	442,33740	407,30030	230,18561	469,30177
8	482,34544	500,37926	465,34216	259,20654	527,34363
9	540,38730	558,42112	523,38402	288,22747	585,38549
10	598,42916	616,46298	581,42588	317,24840	643,42735
11	656,47102	674,50484	639,46774	346,26933	701,46921
12	714,51288	732,54670	697,50960	375,29026	759,51107
13	772,55474	790,58856	755,55146	404,31119	817,55293
14	830,59660	848,63042	813,59332	433,33212	875,59479
15	888,63846	906,67228	871,63518	462,35305	933,63665
16	946,68032	964,71414	929,67704	491,37398	991,67851

Tabelle B-1 Exakte PPG-Massen (Fortsetzung)

n	Exakte Masse (M)	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	MS/ MS-Fragmente	(M + NH <sub>4</sub> ) <sup>2+</sup>	(M + COOH) <sup>-</sup>
17	1004,72218	1022,75600	987,71890	520,39491	1049,72037
18	1062,76404	1080,79786	1045,76076	549,41584	1107,76223
19	1120,80590	1138,83972	1103,80262	578,43677	1165,80409
20	1178,84776	1196,88158	1161,84448	607,45770	1223,84595
21	1236,88962	1254,92344	1219,88634	636,47863	1281,88781
22	1294,93148	1312,96530	1277,92820	665,49956	1339,92967
23	1352,9733	1371,0072	1335,9701	694,5205	1397,9715
24	1411,0152	1429,0490	1394,0119	723,5414	1456,0134
25	1469,0571	1487,0909	1452,0538	752,5624	1514,0553
26	1527,0989	1545,1327	1510,0956	781,5833	1572,0971
27	1585,1408	1603,1746	1568,1375	810,6042	1630,1390
28	1643,1826	1661,2165	1626,1794	839,6251	1688,1808
29	1701,2245	1719,2583	1684,2212	868,6461	1746,2227
30	1759,2664	1777,3002	1742,2631	897,6670	1804,2646
31	1817,3082	1835,3420	1800,3049	926,6879	1862,3064
32	1875,3501	1893,3839	1858,3468	955,7089	1920,3483
33	1933,3919	1951,4258	1916,3887	984,7298	1978,3901
34	1991,4338	2009,4676	1974,4305	1013,7507	2036,4320
35	2049,4757	2067,5095	2032,4724	1042,7717	2094,4739
36	2107,5175	2125,5513	2090,5142	1071,7926	2152,5157
37	2165,5594	2183,5932	2148,5561	1100,8135	2210,5576
38	2223,6012	2241,6351	2206,5980	1129,8344	2268,5994

## Reserpin

Tabelle B-2 Exakte Massen von Reserpin

Reserpin (C<sub>33</sub>H<sub>40</sub>N<sub>2</sub>O<sub>9</sub>)

## Exakte Massen und chemische Formeln

Beschreibung	Masse
Molekulares Ion $C_{33}H_{41}N_2O_9$	609,28066
Fragment $C_{23}H_{30}NO_8$	448,19659
Fragment $C_{23}H_{29}N_2O_4$	397,21218
Fragment $C_{22}H_{25}N_2O_3$	365,18597
Fragment $C_{13}H_{18}NO_3$	236,12812
Fragment $C_{10}H_{11}O_4$	195,06519
Fragment $C_{11}H_{12}NO$	174,09134

## Taurocholsäure

Tabelle B-3 Exakte Massen von Taurocholsäure

Taurocholsäure ( $C_{26}H_{45}NO_7S$ )

Beschreibung	Masse
Molekulares Ion $C_{26}H_{44}NO_7S$	514,28440
Fragment $C_2H_3O_3S$	106,98084
Fragment $C_2H_6NO_3S$	124,00739
Fragment $SO_3$	79,95736

## TOF-Kalibrierlösung

Tabelle B-4 TOF-Kalibrierlösung, exakte Massen

Beschreibung	Masse
Molekulares Ion $Cs^+$	132,90488
Molekulares Ion Peptid ALILTLVS	829,53933

# Symbole der Werkzeugleiste

# C

Weitere Informationen zu Symbolen der Werkzeugleiste finden Sie im *Handbuch für fortgeschrittene Benutzer*.

**Tabelle C-1 Symbole der Werkzeugleiste**

Symbol	Name	Beschreibung
	New Subproject	Erstellt ein Teilprojekt. <b>Teilprojekte</b> 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 C-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 <b>IDA Criteria Level</b> 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 <a href="#">DAD-Daten auf Seite 86</a> .
	ADC	Klicken Sie hier, um die Registerkarte ADC Properties zu öffnen. Siehe <a href="#">ADC-Daten anzeigen auf Seite 78</a> .

## Symbole der Werkzeugleiste

Tabelle C-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.

Tabelle C-3 Symbole im Aufnahmemodus (Fortsetzung)

Symbol	Name	Beschreibung
	Method Wizard	Startet den Method Wizard.
	Purge Modifier	Startet die Spülung des Modifikators aus der Modifier-Pumpe.

Tabelle C-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	Öffnet den Manual Tune Editor.
	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.
	Purge Modifier	Klicken Sie hier, um den Modifikator aus der Modifikator-Pumpe zu reinigen oder zu entleeren.

Tabelle C-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.
	Zur Probe springen	Öffnet das Dialogfeld Select Sample.

## Symbole der Werkzeugleiste

Tabelle C-5 Explore Quick Reference: Chromatogramme und Spectrum (Fortsetzung)

Symbol	Name	Beschreibung
	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.
	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.

Tabelle C-5 Explore Quick Reference: Chromatogramme und Spectrum (Fortsetzung)

Symbol	Name	Beschreibung
	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 C-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 C-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.

## Symbole der Werkzeugleiste

**Tabelle C-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.
	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.

Tabelle C-8 Navigations-Symbole auf der Explore-Symbolleiste (Fortsetzung)

Symbol	Name	Funktion
	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 C-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.

## Symbole der Werkzeuggestreife

**Tabelle C-9 Symbole auf der Registerkarte „Integration“ und im „Quantification Wizard“ (Fortsetzung)**

Symbol	Name	Beschreibung
	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 C-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 C-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.

Tabelle C-11 Kurzinformation zu Symbolen: Quantifizierungsmodus (Fortsetzung)

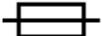
Symbol	Name	Beschreibung
	Peak Review – Pane	Öffnet Peaks in einem Teilfenster.
	Peak Review – Window	Öffnet Peaks in einem Fenster.
	Calibration – Pane	Öffnet die Kalibrierkurve in einem Teilfenster.
	Calibration – Window	Öffnet die Kalibrierkurve in einem Fenster.
	Show First Peak	Zeigt den ersten 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 <b>Reporter</b> -Software.

# Glossar der Symbole

# D

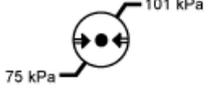
**Hinweis:** Nicht alle Symbole der folgenden Tabelle gelten für jedes Gerät.

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 <b>Hinweis:</b> In der SCIEX-Dokumentation bezeichnet dieses Symbol eine Verletzungsgefahr.

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 Geräteerkennung (UDI) zu erhalten.
	Ethernetanschluss
	Explosionsgefahr
	Brandgefahr
	Gefahr durch entzündliche Chemikalien
	Zerbrechlich
	Sicherung
Hz	Hertz

## Glossar der Symbole

Symbol	Beschreibung
	Hochspannung Stromschlaggefahr Wenn die Hauptabdeckung entfernt werden muss, wenden Sie sich an einen SCIEX-Vertreter, um einen Stromschlag zu vermeiden.
	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)

Symbol	Beschreibung
	Gefahr von Stichverletzungen
	Gefahr von Stichverletzungen
	Gefahren durch chemische Reaktionen
	Seriennummer
	Toxisch-chemische Gefahren
	Das System bei einem 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)

## Glossar der Symbole

---

Symbol	Beschreibung
V	Volt (Spannung)
	Richtlinie über Elektro- und Elektronik-Altgeräte (WEEE). Das Gerät darf nicht im Hausmüll entsorgt werden. Umweltgefährdung
W	Watt
	<i>JJJ-MM-TT</i> Herstellungsdatum

# Glossar der Warnhinweise

# E

**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  <b>Hinweis:</b> 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.

## Glossar der Warnhinweise

Label	Übersetzung (sofern zutreffend)
TIP & TELL	<p>Kippanzeiger</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> 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><b>Hinweis:</b> 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>WARNING: NICHT VERWENDEN, OHNE ZUNÄCHST SICHERZUSTELLEN, DASS DER BEHÄLTERDECKEL GESICHERT IST.</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> 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><b>Hinweis:</b> Bedienungsanleitung beachten.</p>