

# TripleTOF System 5600/5600+

Systemhandbuch



---

Dieses Dokument wird Käufern eines SCIEX-Geräts für dessen Gebrauch zur Verfügung gestellt. Dieses Dokument ist urheberrechtlich geschützt und jegliche Vervielfältigung dieses Dokuments, im Ganzen oder in Teilen, ist strengstens untersagt, sofern keine schriftliche Genehmigung von SCIEX vorliegt.

Die in diesem Dokument beschriebene Software unterliegt einer Lizenzvereinbarung. Das Kopieren, Ändern oder Verbreiten der Software auf einem beliebigen Medium ist rechtswidrig, sofern dies nicht ausdrücklich durch die Lizenzvereinbarung genehmigt wird. Darüber hinaus kann es nach der Lizenzvereinbarung 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 als Marken eingetragen sind und/oder die Marken ihrer jeweiligen Inhaber darstellen. Jede Nennung solcher Marken dient ausschließlich der Bezeichnung von Produkten eines Herstellers, die von SCIEX für den Einbau in die eigenen Geräte bereitgestellt werden, und bedeutet nicht, dass eigene oder fremde Nutzungsrechte und/oder -lizenzen zur Verwendung derartiger Hersteller- und/oder Produktnamen als Marken vorliegen.

Die Garantien von SCIEX beschränken sich auf die zum Verkaufszeitpunkt oder bei Erteilung der Lizenz für die eigenen Produkte ausdrücklich zuerkannten Garantien und sind die von SCIEX alleinig und ausschließlich zuerkannten Zusicherungen, Garantien und Verpflichtungen. SCIEX gibt keinerlei andere ausdrückliche oder implizite Garantien wie beispielsweise Garantien zur Marktgängigkeit oder Eignung für einen bestimmten Zweck, unabhängig davon, ob diese auf gesetzlichen oder sonstigen Rechtsvorschriften beruhen oder aus Geschäftsbeziehungen oder Handelsbrauch entstehen, und lehnt alle derartigen Garantien ausdrücklich ab; zudem übernimmt SCIEX keine Verantwortung und Haftungsverhältnisse, einschließlich solche in Bezug auf indirekte oder nachfolgend entstehenden Schäden, die sich aus der Nutzung durch den Käufer oder daraus resultierende widrige Umstände ergeben.

Nur für Forschungszwecke. Nicht zur Verwendung bei Diagnoseverfahren.

Die hier erwähnten Marken und/oder eingetragenen Marken, einschließlich deren Logos, sind Eigentum der AB Sciex Pte. Ltd. oder ihrer jeweiligen Inhaber in den Vereinigten Staaten und/oder anderen Ländern (siehe [sciex.com/trademarks](http://sciex.com/trademarks)).

AB Sciex™ wird unter Lizenz verwendet.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.

B1k33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

# Inhalt

---

<b>Kapitel 1: Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb</b> .....	<b>7</b>
Allgemeine Informationen zur Sicherheit.....	7
Symbole und Konventionen der Dokumentation.....	7
Einhaltung gesetzlicher Vorschriften.....	8
Australien und Neuseeland.....	8
Kanada.....	8
Europa.....	8
Vereinigte Staaten.....	9
Internationale Normen.....	9
Elektrische Vorsichtsmaßnahmen.....	10
Stromversorgung.....	10
Schutzleiter.....	10
Chemische Vorsichtsmaßnahmen.....	11
Sichere Systemflüssigkeiten.....	12
Vorsichtsmaßnahmen für Be- und Entlüftung.....	13
Physische Vorsichtsmaßnahmen.....	14
Umweltschutzmaßnahmen.....	14
Elektromagnetische Umgebung.....	15
Außerbetriebnahme und Entsorgung.....	16
Qualifiziertes Personal.....	17
Laborbedingungen.....	17
Sichere Umgebungsbedingungen.....	17
Leistungsspezifikationen.....	17
Verwendung und Änderungen an den Geräten.....	18
<b>Kapitel 2: Grundlagen der Handhabung</b> .....	<b>19</b>
Systemüberblick.....	19
Hardware-Übersicht.....	19
Symbole der Gehäuseabdeckung.....	23
Theoretische Grundlagen der Handhabung.....	24
Umgang mit Daten.....	25
<b>Kapitel 3: Betriebsanleitung</b> .....	<b>26</b>
Inbetriebnahme des Systems.....	26
Herunterfahren des Systems.....	27
Justieren der Position der integrierten Spritzenpumpe.....	28
Zurücksetzen der Spritzenpumpe.....	31
<b>Kapitel 4: Betriebsanleitung — Proben-Workflows</b> .....	<b>33</b>

<b>Kapitel 5: Betriebsanleitung – Hardware-Profile und Projekte</b> .....	<b>37</b>
Hardwareprofile .....	37
Erstellen eines Hardwareprofils .....	37
Geräte einem Hardwareprofil hinzufügen .....	42
Fehlerbehebung bei der Hardwareprofil-Aktivierung .....	44
Projekte und Teilprojekte .....	45
Erstellen von Projekten und Teilprojekten .....	45
Teilprojekte erstellen .....	47
Kopieren von Teilprojekten .....	47
Wechsel zwischen Projekten und Teilprojekten .....	47
Installierte Projektordner .....	48
Sichern des Ordners „API Instrument“ .....	49
Wiederherstellen des Ordners „API Instrument“ .....	49
<b>Kapitel 6: Betriebsanleitung – Tunen und Kalibrieren</b> .....	<b>50</b>
Optimieren des Massenspektrometers .....	51
Das Dialogfeld „Verifying or Adjusting Performance“ .....	52
Results Summary .....	52
<b>Kapitel 7: Bedienungsanweisungen – Erfassungsmethoden</b> .....	<b>54</b>
Erstellen einer Erfassungsmethode mit dem „Acquisition Method Editor“ .....	54
Hinzufügen eines Experiments .....	55
Eine Periode hinzufügen .....	56
Ein Experiment in eine Periode kopieren .....	56
Kopieren eines Experiments innerhalb eines Zeitabschnitts .....	56
Erstellen Sie eine Erfassungsmethode mit dem „Method Wizard“ .....	56
Scan-Techniken .....	57
Einzel-Massenspektrometrie .....	57
Quadrupole-Based Single Mass Spectrometry .....	58
Einzel-Flugzeit-Massenspektrometrie .....	58
Tandem-Massenspektrometrie .....	58
Produkt-Ionen-Massenspektrometrie .....	58
Vorläufer-Ionen-Massenspektrometrie .....	58
Über die Spektraldatenerfassung .....	58
MS-Parameter .....	59
<b>Kapitel 8: Bedienungsanleitung – Batches</b> .....	<b>65</b>
Einstellen der Warteschlangenoptionen .....	65
Hinzufügen von Sätzen und Proben zu einem Batch .....	67
Übergeben einer Probe oder eines Probensatzes .....	70
Probenkalibrierung einrichten .....	70
Ändern der Probenreihenfolge .....	71
Erfassen von Daten .....	71
Bestimmen der Probenpositionen im Batch-Editor .....	72
Auswahl der Fläschchenpositionen mit der Registerkarte „Locations“ (optional) .....	72

---

Beenden der Probenerfassung .....	73
Status der Warteschlange und des Gerätes .....	74
Status der Warteschlange .....	74
Anzeige der Symbole für den Instrumenten- und Gerätestatus .....	75
<b>Kapitel 9: Bedienungsanleitung – Analyse und Exploration von Daten .....</b>	<b>77</b>
Dateien öffnen .....	77
Navigieren zwischen Proben in einer Datendatei .....	78
Versuchsbedingungen betrachten .....	78
Anzeige der Daten in Tabellenform .....	79
ADC-Daten anzeigen .....	80
Anzeige der grundlegenden quantitativen Daten .....	81
Chromatogramme .....	81
Anzeige von TICs aus einem Spektrum .....	83
Anzeige eines Spektrums aus einem TIC .....	83
XICs generieren .....	84
Generieren eines XICs mit einem ausgewählten Bereich .....	85
Generieren eines XICs mit dem maximalen Peak .....	86
Generieren eines XICs mit den Basispeakmassen .....	86
Extrahieren von Ionen durch Auswählen von Massen .....	86
Generieren von BPCs .....	87
Generieren von XWCs .....	89
DAD-Daten anzeigen .....	89
Generieren von TWCs .....	90
Anpassen des Schwellenwerts .....	90
Verarbeiten von Diagrammdaten .....	91
Diagramme .....	91
Verwalten von Daten .....	91
Vergrößern der Y-Achse .....	93
Vergrößern der X-Achse .....	93
<b>Kapitel 10: Service- und Wartungsinformationen .....</b>	<b>94</b>
Empfohlener Wartungsplan .....	94
Oberflächen reinigen .....	97
Reinigen der Vorderseite .....	97
Symptome einer Kontamination .....	98
Erforderliche Materialien .....	98
Bewährte Vorgehensweisen bei der Reinigung .....	99
Vorbereitung des Massenspektrometers .....	100
Reinigung der Curtain-Platte .....	101
Reinigung der Vorderseite der Orifice-Platte .....	103
Erneute Inbetriebnahme des Massenspektrometers .....	103
Entleeren des Quellenabluftauffangbehälters .....	103
Inspektion des Ölstands in der Vakuumpumpe .....	106
Ersetzen der Kühlerlüfterfilter des Massenspektrometers .....	107
Lagerung und Handhabung .....	109

## Inhalt

---

<b>Kapitel 11: Fehlerbehebung für das Massenspektrometer</b> .....	<b>110</b>
<b>Anhang A: Empfohlene Kalibrierungsionen</b> .....	<b>116</b>
<b>Anhang B: Exakte Massen und chemische Formeln</b> .....	<b>119</b>
<b>Anhang C: Symbole der Werkzeugleiste</b> .....	<b>122</b>
<b>Anhang D: Rechtsklick-Menüs</b> .....	<b>133</b>
Batch Editor.....	133
Queue.....	134
Rechtsklick-Menü „Show File Information Pane“.....	135
Chromatogrammfenster.....	135
Spektrfenster.....	136
Ergebnistabelle.....	138
Peak-Bewertung.....	138
Calibration Curve.....	139
<b>Anhang E: Glossar der Symbole</b> .....	<b>141</b>
<b>Anhang F: Verzeichnis der Warnhinweise</b> .....	<b>147</b>
<b>Kontaktangaben</b> .....	<b>149</b>
Kundenschulung.....	149
Online-Lernzentrum.....	149
SCIEX Support.....	149
Cybersicherheit.....	149
Dokumentation.....	149

# Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb 1

---

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

---

Dieser Abschnitt enthält allgemeine sicherheitsrelevante Informationen und stellt Informationen zur Einhaltung gesetzlicher Vorschriften bereit. Er enthält außerdem eine Beschreibung der möglichen Gefahren und der damit verbundenen Warnhinweise für das System sowie eine Beschreibung der Vorsichtsmaßnahmen, die getroffen werden sollten, um Gefahren zu minimieren.

Zusätzlich zu diesem Abschnitt finden Sie Informationen über die Symbole und Konventionen, die im Zusammenhang mit dem System in der Laborumgebung und in dieser Dokumentation verwendet werden, im Abschnitt: [Glossar der Symbole](#). Für Anforderungen an den Standort, einschließlich Netzstromversorgung, Quellenabluft, Lüftung, Druckluft, Stickstoff- und Vorvakuumpumpen-Anforderungen, siehe das Dokument: *Handbuch zur Standortplanung*.

## Allgemeine Informationen zur Sicherheit

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

Diese Sicherheitsinformationen sollen Vorschriften auf Bundes-, Landes- oder Bezirks- und regionaler 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.

## 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.

---

## Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb

---



**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.

---

## 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 Abschnitt: [Elektromagnetische Beeinflussung](#).
- **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 Abschnitt: [Elektromagnetische Beeinflussung](#).
- **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 Abschnitt: [Elektromagnetische Verträglichkeit](#).

- **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 Abschnitt: [Elektro- und Elektronik-Altgeräte](#).
- **Verpackungen und Verpackungsabfälle (PPW):** Richtlinie 94/62/EG über Verpackungen und Verpackungsabfälle
- **Beschränkung der Verwendung bestimmter gefährlicher Stoffe in Elektro- und Elektronikgeräten:** 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

## Internationale Normen

- **Elektromagnetische Verträglichkeit (EMV):**
  - IEC 61326-1
  - IEC CISPR 11 (Klasse A)
  - IEC 61000-3-2
  - IEC 61000-3-3

Siehe Abschnitt: [Elektromagnetische Verträglichkeit](#).

- **Sicherheit:**
  - IEC 61010-1
  - IEC 61010-2-061

## Elektrische Vorsichtsmaßnahmen



**WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Die Abdeckungen nicht entfernen.** 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.

---

- 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 Dokument: *Handbuch zur Standortplanung*.

## Stromversorgung

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 Netzsteckdose getrennt werden kann. Die Netzsteckdose muss zu jeder Zeit problemlos zugänglich sein.**

---



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

---

Für das Massenspektrometer oder die Vorvakuumpumpe wird kein externer Transformator benötigt.

## Schutzleiter

Das Netz muss mit einem korrekt installierten Schutzleiter ausgestattet sein. Der Erdungsschutzleiter muss installiert oder von einer Elektrofachkraft geprüft werden, bevor das System angeschlossen wird.



**WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Den Schutzleiter nicht absichtlich unterbrechen. Bei einer Unterbrechung des Schutzleiters besteht Stromschlaggefahr.**

---



**WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr.** Vergewissern Sie sich, dass ein Erdungsleiter (Erdungskabel) zwischen der Probenschleife und einem geeigneten Erdungspunkt an der Ionenquelle angeschlossen ist. Diese zusätzliche Erdung verstärkt die durch SCIEX spezifizierte Sicherheitskonfiguration.

---

## Chemische Vorsichtsmaßnahmen

---



**WARNHINWEIS! Gefährdung durch ionisierende Strahlung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren.** Klären Sie vor der Reinigung oder Wartung, ob eine Dekontaminierung erforderlich ist. Wenn im System radioaktives Material, biologische Wirkstoffe und giftige Chemikalien verwendet wurden, muss der Kunde das System vor der Reinigung oder Wartung dekontaminieren.

---



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

---



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

---

- Bestimmen Sie vor dem Kundendienst und der regelmäßigen Wartung, welche Chemikalien im System verwendet wurden. Für Arbeitsschutz- und Sicherheitshinweise, die im Zusammenhang mit einer Chemikalie zu beachten sind, siehe das Dokument: *Sicherheitsdatenblatt*. Informationen zur Lagerung finden Sie im Dokument: *Analysezertifikat*. SCIEX *Sicherheitsdatenblätter* oder *Analysezertifikate* finden Sie unter [sciex.com/tech-regulatory](http://sciex.com/tech-regulatory).
  - Tragen Sie immer die Ihnen zugewiesene persönliche Schutzausrüstung, einschließlich puderfreier Handschuhe, einer Schutzbrille und einem Laborkittel.
- 

**Hinweis:** Nitril- oder Neopren-Handschuhe werden empfohlen.

---

- Führen Sie alle Arbeiten nur in einem gut belüfteten Raum oder unter einer Abzugshaube durch.
  - Vermeiden Sie Zündquellen bei Arbeiten mit brennbaren Materialien wie z. B. Isopropanol, Methanol und anderen brennbaren Lösungsmitteln.
  - Lassen Sie in der Verwendung und Entsorgung von Chemikalien Vorsicht walten. Es besteht ein potenzielles Risiko für Personenschäden, wenn die ordnungsgemäßen Verfahren zur Handhabung und Entsorgung von Chemikalien nicht befolgt werden.
  - Vermeiden Sie bei der Reinigung Hautkontakt mit Chemikalien und waschen Sie die Hände nach dem Gebrauch.
-

## Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb

---

- 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 von, den Umgang mit und die Entsorgung von biogefährdenden, giftigen und radioaktiven Stoffen.
- (Empfohlen) Verwenden Sie unter der Vorvakuumpumpe, den Lösungsmittelflaschen und dem Reststoffbehälter eine zweite Auffangschale zur Aufnahme von potenziell verschütteten Chemikalien.

## Sichere Systemflüssigkeiten

Die folgenden Flüssigkeiten können mit dem System sicher verwendet werden. Informationen über sichere Reinigungslösungen finden Sie im Abschnitt: [Erforderliche Materialien](#).



---

**VORSICHT:** Mögliche Schäden am System. Verwenden Sie keine anderen Flüssigkeiten, bevor SCIEX nicht bestätigt hat, dass dadurch keine Gefahren entstehen. Dies ist keine vollständige Liste.

---

---

**Hinweis:** Verwenden Sie für die mobilen LC-Phasen nur neue, frisch zubereitete LC-MS-Lösungsmittel oder höherwertige Lösungsmittel.

---

- **Organische Lösungsmittel**
  - Acetonitril, LC-MS-Qualität, bis zu 100 %
  - Methanol, LC-MS-Qualität, bis zu 100 %
  - Isopropanol, LC-MS-Qualität, bis zu 100 %
  - Wasser, LC-MS-Qualität oder höher, bis zu 100 %
  - Acetonitril; bis zu 100 %
  - Methanol; bis zu 100 %
  - Isopropanol, bis zu 100 %
  - DDI-Wasser; bis zu 100 %
  - Tetrahydrofuran; bis zu 100 %
  - Toluol und andere aromatische Lösungsmittel; bis zu 100 %
  - Hexane; bis zu 100 %
- **Puffer**
  - Ammoniumacetat; weniger als 100 mmol
  - Ammoniumformiat; weniger als 100 mmol
  - Phosphat; weniger als 1 %

### • Säuren und Basen

- Ameisensäure; weniger als 1 %
- Essigsäure; weniger als 1 %
- Trifluoressigsäure (TFA), weniger als 1 %
- Heptafluorbuttersäure (HFBA), weniger als 1 %
- Ammoniak/Ammoniumhydroxid, weniger als 1 %
- Phosphorsäure, weniger als 1 %
- Trimethylamin; weniger als 1 %
- Triethylamin; weniger als 1 %

## Vorsichtsmaßnahmen für Be- und Entlüftung

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, dass die Luftqualität gemäß den Gesundheits- und Sicherheitsvorschriften vor Ort erhalten bleibt.

Die Quellenabluftanlage und die Vorvakuumpumpe müssen entweder mit einer speziellen Laborabzugshaube oder einer externen Abluftanlage entlüftet werden.



**WARNHINWEIS! Brandgefahr. Stellen Sie sicher, dass die Quellenabluftanlage angeschlossen ist und läuft, 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 abzuführen, und sorgen Sie dafür, dass die Abluftschläuche sicher 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 Quellenabluftleitungen und die Abluftleitungen der Vorvakuumpumpe nicht richtig an das Laborlüftungssystem angeschlossen sind. Überprüfen Sie die Abgasleitungen regelmäßig auf Leckagen. Die Verwendung des Massenspektrometers ohne ausreichende Systemlüftung kann gesundheitsschädlich sein und zu schweren Verletzungen führen.**

---

## Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb

---



**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-chemische 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. Aus dem Gerät stammende Abluft muss aus dem Raum abgeführt werden. Befolgen Sie bei der Entsorgung von scharfen und spitzen Gegenständen die Sicherheitsvorschriften Ihres Labors.

---

## Physische Vorsichtsmaßnahmen

---



**WARNHINWEIS!** Gefahr durch Heben. Verwenden Sie eine mechanische Hebevorrichtung, um das Massenspektrometer anzuheben und zu transportieren. Befolgen Sie die geltenden Verfahren zum sicheren Heben. Wir empfehlen den Einsatz eines professionellen Transportunternehmens. Die Gewichtsangaben für die verschiedenen Systemkomponenten finden Sie im Dokument: *Handbuch zur Standortplanung*.

---

## 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 siehe das Dokument: *Handbuch zur Standortplanung*.

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

---



**GEFAHR!** Explosionsgefahr. Das System darf nicht in einer Umgebung mit explosiven Gasen betrieben werden. Das System ist nicht für den Betrieb in explosionsgefährdeten Umgebungen konzipiert.

---



**WARNHINWEIS!** Biogefährdung. Halten Sie sich bei der Verwendung von biogefährlichem Material 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.

---



**WARNHINWEIS! Umweltgefährdung.** Befolgen Sie die festgelegten Verfahren zur Entsorgung von biologisch gefährlichem, giftigem, radioaktivem und elektronischem Abfall. Der Kunde ist für die Entsorgung gefährlicher Substanzen, darunter Chemikalien, Altöl und elektrische Komponenten, nach lokalen Bestimmungen und Vorschriften verantwortlich.

---

**VORSICHT: Mögliche Masseverschiebung.** Sorgen Sie für eine stabile Umgebungstemperatur. Wenn sich die Temperatur um mehr als 2 °C pro Stunde ändert, können die Auflösung und die Massenkalibrierung 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 mehrfache) 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 mehrfache) 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 Gesamtionenstroms (TIC).

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

### Elektromagnetische Beeinflussung

**Geräte der Gruppe 1:** Diese Geräte werden als industrielle, wissenschaftliche und medizinische (ISM) Geräte klassifiziert, bei denen möglicherweise HF-Energie für den internen Betrieb eingesetzt wird.

**Klasse-A-Geräte:** Geräte, die für den Einsatz in allen Einrichtungen außer Wohnbereichen und Bereichen, die an Niederspannungsnetze angeschlossen sind, mit denen Wohngebäude

## Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb

---

versorgt werden, geeignet sind. [Auszug aus CISPR 11:2009, 5.3] Klasse-A-Geräte müssen die Grenzwerte der Klasse A erfüllen.

---

**VORSICHT: Mögliche Funkstörung. Dieses Gerät ist nicht zur Verwendung in Wohngebieten bestimmt und bietet möglicherweise keinen angemessenen Schutz vor Funkempfang in solchen Umgebungen.**

---

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. Befolgen Sie die festgelegten Verfahren zur Entsorgung von biologisch gefährlichem, giftigem, radioaktivem und elektronischem Abfall. Der Kunde ist für die Entsorgung gefährlicher Substanzen, darunter Chemikalien, Altöl und elektrische Komponenten, nach lokalen Bestimmungen und Vorschriften verantwortlich.**

---

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

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

---

**Hinweis:** SCIEX nimmt ohne ausgefülltes Dekontaminierungsformular keine eingeschickten Systeme an. Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter, um eine Kopie des Formulars zu erhalten.

---

Bauteile oder Baugruppen der Anlage, einschließlich Systemkomponenten oder Unterbaugruppen, 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 das 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 *Checkliste zur Einführungsschulung für den Kunden*, um den Kunden in der Bedienung, Reinigung und grundlegenden Wartung der Anlage zu schulen. SCIEX übernimmt möglicherweise keine Gewährleistung für die Beschädigung eines Systems, wenn eine Wartung durch nicht von SCIEX autorisiertem Personal durchgeführt wurde.

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 Laborausüstung verbundenen Risiken von Chemikalien einschätzen kann.

### Laborbedingungen

#### Sichere Umgebungsbedingungen

Das System ist für den sicheren Betrieb unter diesen Bedingungen ausgelegt:

- Innenbereich
- Höhe: bis zu 2.000 m (6.560 Fuß) über dem Meeresspiegel
- Umgebungstemperatur: 5 °C (41 °F) bis 40 °C (104 °F)
- Relative Luftfeuchtigkeit: 20 % bis 80 %, nicht kondensierend
- Spannungsschwankungen der Netzversorgung:  $\pm 10$  % der Nennspannung
- Transiente Überspannungen: bis zu einem Niveau der Überspannungskategorie II
- Temporäre Überspannungen an der Netzversorgung
- Umweltverschmutzungsgrad 2

#### Leistungsspezifikationen

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

- Eine Umgebungstemperatur von 18 °C bis 26 °C (64 °F bis 79 °F)

Im Laufe der Zeit darf die Temperatur um nicht mehr als 2 °C (3.6 °F) schwanken, wobei die Temperaturänderungsrate nicht mehr als 2 °C (3.6 °F) pro Stunde betragen darf. Schwankungen der Umgebungstemperatur, die die Grenzwerte übersteigen, können zu Masseverschiebungen in den Spektren führen.

- Die relative Luftfeuchtigkeit beträgt 20 % bis 80 %, nicht kondensierend.

## Verwendung und Änderungen an den Geräten

---



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

---



**WARNHINWEIS!** Stromschlaggefahr. Die Abdeckungen nicht entfernen. 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.

---



**WARNHINWEIS!** Gefahr von 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 der bestimmungsgemäßen Verwendung entsprechen, kann den Benutzer gefährden oder die Systemleistung beeinträchtigen.

---



**WARNHINWEIS!** Gefahr durch Heben. Verwenden Sie eine mechanische Hebevorrichtung, um das Massenspektrometer anzuheben und zu transportieren. Befolgen Sie die geltenden Verfahren zum sicheren Heben. Wir empfehlen den Einsatz eines professionellen Transportunternehmens. Die Gewichtsangaben für die verschiedenen Systemkomponenten finden Sie im Dokument: *Handbuch zur Standortplanung*.

---



**WARNHINWEIS!** Quetschgefahr. Tragen Sie beim Transportieren schwerer Gegenstände schützendes Schuhwerk.

---

Verwenden Sie das Gerät nur im Innenbereich eines Labors, das den empfohlenen Umgebungsbedingungen im Dokument des Massenspektrometers *Handbuch zur Standortplanung* entspricht.

Wenn das System in einer Umgebung oder in einer Weise verwendet wird, die nicht den Vorschriften des Herstellers entspricht, dann können die Leistung und der im Gerät eingebaute Schutz beeinträchtigt werden.

Eine unbefugte Veränderung oder Bedienung des Systems kann zu Personenschäden und Schäden am Gerät und zum Erlöschen der Garantie führen. Wenn das System unter Umgebungsbedingungen, die außerhalb des empfohlenen Bereichs liegen, oder mit nicht genehmigten Änderungen betrieben wird, können fehlerhafte Daten erzeugt werden. Informationen zur Wartung des Systems erhalten Sie von einem Außendienstmitarbeiter.

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

Dieser Abschnitt enthält Informationen über das Massenspektrometer. Für eine Übersicht über die Ionenquelle, siehe das Dokument: *DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch*.

Nähere Informationen zum Computer und zur Software finden Sie im Dokument: *Software-Installationshandbuch* der --Software.

## Systemüberblick

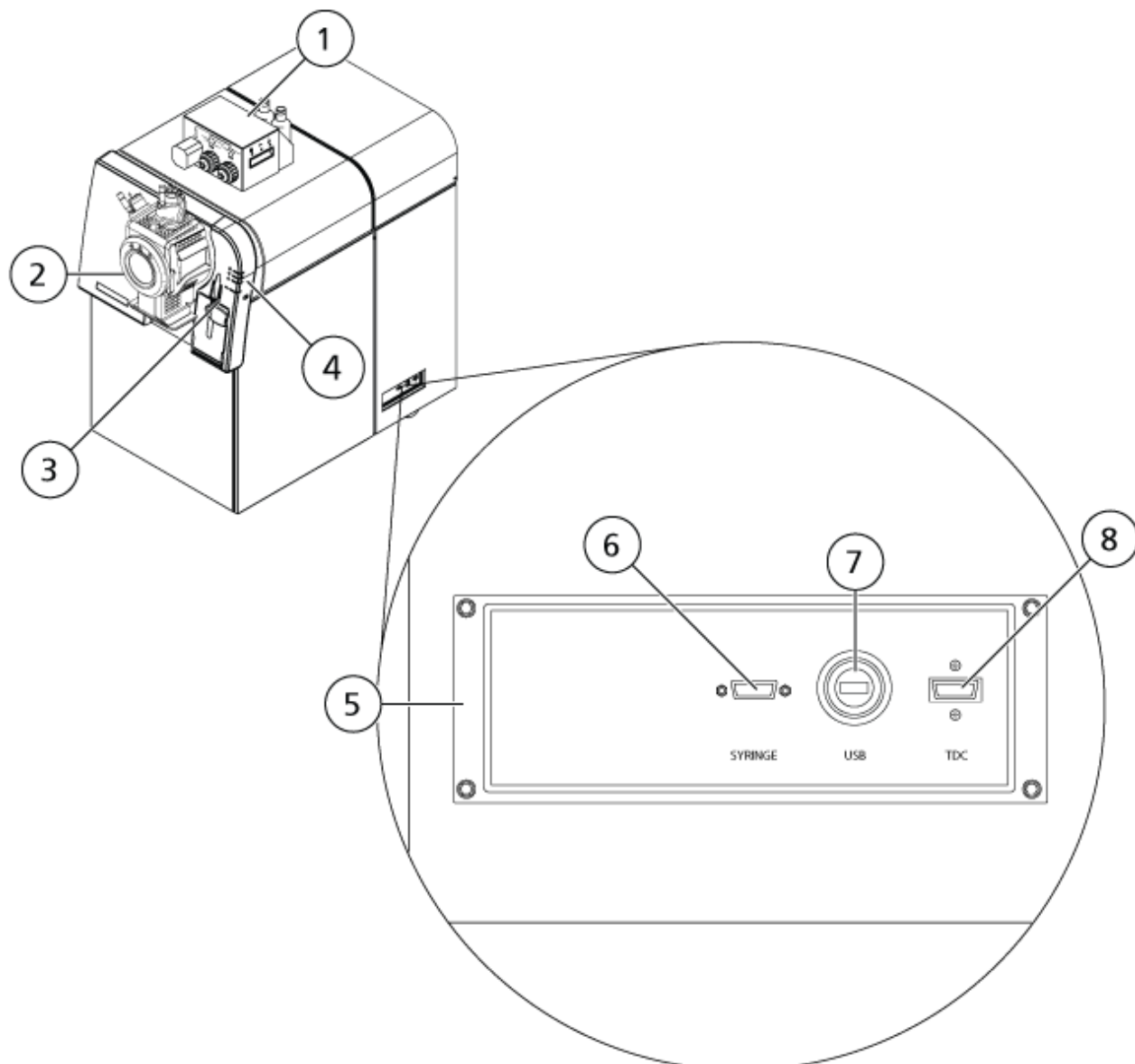
Das TripleTOF 5600/5600+-System umfasst die folgenden Komponenten:

- Ein TripleTOF 5600/5600+ Massenspektrometer mit einer Vorvakuumpumpe.
- Eine DuoSpray-Ionenquelle ersetzen. Siehe das Dokument: *DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch*.
- Ein von SCIEX bereitgestellter Computer und Monitor mit der Analyst TF-Software zur Instrumentenoptimierung, zur Entwicklung von Erfassungsmethoden und zur Datenerfassung. Nähere Informationen zu Spezifikationen und Anforderungen bezüglich des Computers finden Sie im Dokument: *Software-Installationshandbuch* der Analyst TF-Software.
- Das optionale Kalibrierungs-Abgabesystem (CDS)

## Hardware-Übersicht

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

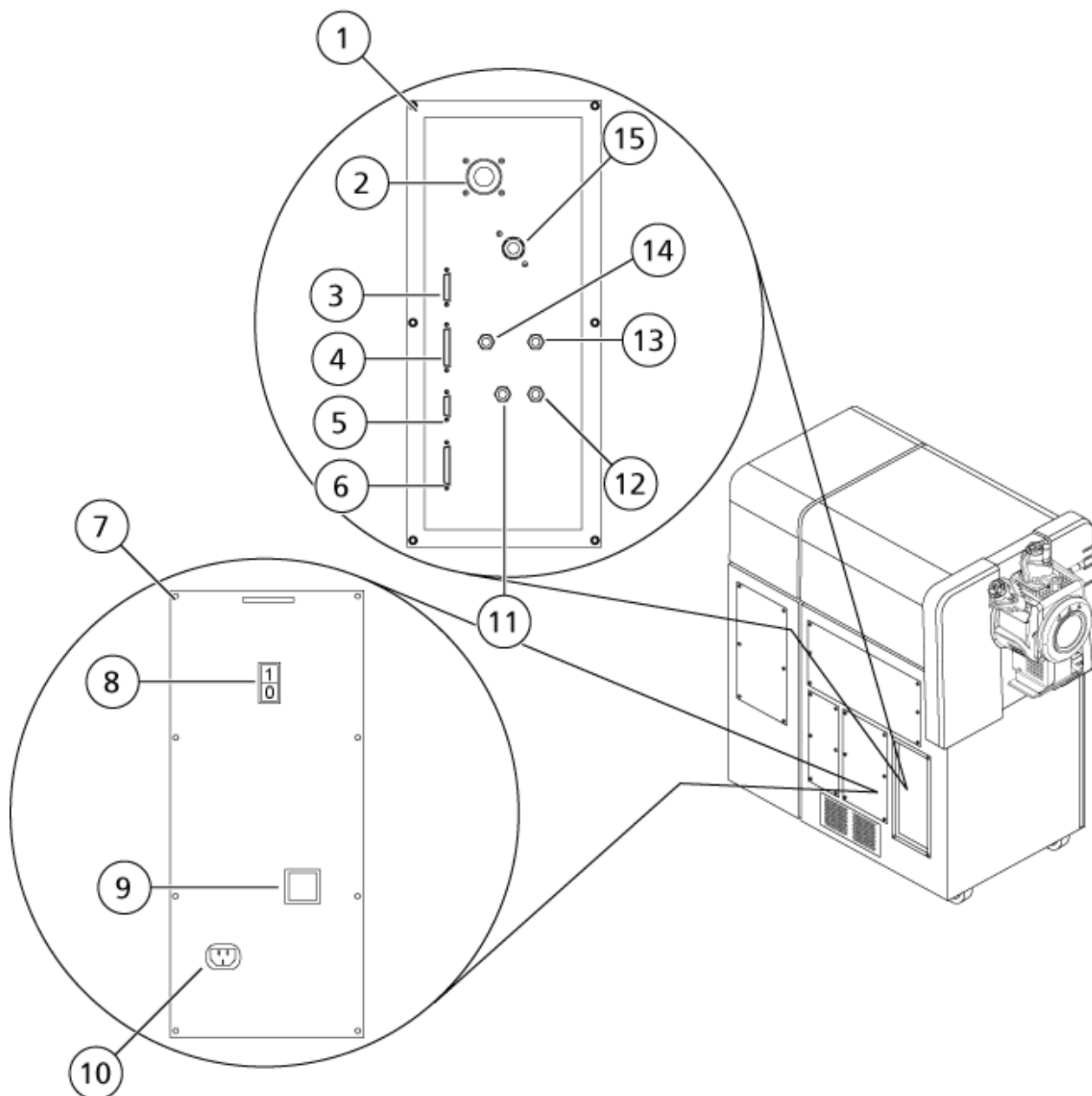
Abbildung 2-1: Vorderansicht und rechte Seitenansicht



Position	Beschreibung	Weitergehende Informationen
1	Optionales CDS	Siehe das <i>Kalibrierlösungszufuhrsystem Bedienerhandbuch</i> .
2	DuoSpray-Ionenquelle	Siehe das <i>DuoSpray-Ionenquelle für TripleTOF-Systeme Bedienerhandbuch</i> .
3	Spritzenpumpe	Siehe <a href="#">Justieren der Position der integrierten Spritzenpumpe</a> .

Position	Beschreibung	Weitergehende Informationen
4	Status-LEDs des Massenspektrometers	Siehe <a href="#">Symbole der Gehäuseabdeckung</a> .
5	Kommunikationsanschlüsse	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter von SCIEX.
6	Serieller (RS-232) Kabelanschluss für die Spritzenpumpe	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
7	USB-Kabelanschluss für die USB-GPIB-Karte	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
8	InfiniBand-Kabelanschluss für die TDC-Karte	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.

Abbildung 2-2: Linke Seitenansicht







Position	Beschreibung	Weitergehende Informationen
1	Gas- und Vakuuman­schlüsse	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
2	Anschluss der Vorvakuumpumpe	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
3	Steueranschluss des Kalibriermittels	Siehe das <i>Kalibrierlösungszufuhrsystem Bedienerhandbuch</i> .

Position	Beschreibung	Weitergehende Informationen
4	AUX E/A-Anschluss. An diesen Port wird das Startsignal des optionalen LC-Systems angeschlossen.	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
5	Externer Steueranschluss Dieser Port ist für zukünftige Verwendungszwecke bestimmt.	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
6	Quellenanschluss. An diesen Port werden einige Ionenquellen angeschlossen.	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
7	Wechselstrom-Verteilertafel	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
8	Ein-/Ausschalter des Geräts	Siehe <a href="#">Inbetriebnahme des Systems</a> .
9	Abdeckung des Schutzschalters	Siehe <a href="#">Inbetriebnahme des Systems</a> . Verwenden Sie den Netzschalter anstelle des Schutzschalters, um das System herunterzufahren.
10	Netzanschluss	Siehe <a href="#">Inbetriebnahme des Systems</a> .
11	Anschluss für die Versorgung mit Curtain Gas (Stickstoff)	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
12	Versorgungsanschluss für Gas 1 und Gas 2 (Nullluft)	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
13	Versorgungsanschluss für Quellenabluft (Nullluft oder Stickstoff)	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
14	Versorgungsanschluss für CAD-Gas (Stickstoff)	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
15	Quellenabluftanschluss	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.

## Symbole der Gehäuseabdeckung

In der folgenden Tabelle sind die Status-LEDs des Massenspektrometers aufgeführt.

**Tabelle 2-1: Symbole der Gehäuseabdeckung**

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

Nachdem das System eingeschaltet wurde, leuchten alle LEDs. Die Betriebs-LED bleibt eingeschaltet. Die anderen LEDs blinken zwei Sekunden lang und erlöschen danach. Die Vakuum-LED beginnt zu blinken. Nachdem das Betriebsvakuum erreicht wurde, 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 5600/5600+-System verfügt über eine Reihe von Quadrupol-Filtern, die Ionen nach ihrem Masse-zu-Ladung-Verhältnis ( $m/z$ ) auswählen oder übertragen. Der erste Quadrupol dieser Reihe ist die QJet-Ionenführung, die sich zwischen der Orifice-Platte und dem Q0-Bereich befindet. Die QJet-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-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 vom 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 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

Die Analyst TF-Software benötigt einen Computer mit dem Betriebssystem Windows 7 (64-Bit) oder Windows 10 (64-Bit). Der Computer mit der zugehörigen Systemsoftware arbeitet mit dem System-Controller und der zugehörigen Firmware zusammen, um das System und die Datenerfassung zu steuern. Beim Betrieb des Systems werden die erfassten Daten an die Analyst TF-Software gesendet, wo sie entweder als vollständige Massenspektren, als Ionenchromatogramm oder Ionenspektren oder als Gesamt-Ionenstrom als Funktion der Zeit angezeigt werden können.



**WARNHINWEIS!** Gefahr von 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 Netzsteckdose getrennt werden kann. Die Netzsteckdose muss zu jeder Zeit problemlos zugänglich sein.

---



**WARNHINWEIS!** Gefahr durch Heben. Setzen Sie das System nicht um, ohne einen Außendienstmitarbeiter (FSE) zu konsultieren. 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 im Abschnitt: [Vorsichtsmaßnahmen und Einschränkungen für den Betrieb](#).

---

### Voraussetzungen

- Die Anforderungen an den Standort, die im *Handbuch zur Standortplanung* angegeben sind, sind erfüllt. Das *Handbuch zur Standortplanung* enthält Informationen über Netzversorgung und Anschlüsse, Druckluft, Stickstoff, Vorvakuumpumpe, Lüftung, Abluft und Anforderungen in Bezug auf einzuhaltende Abstände. Bei Bedarf stellt Ihnen SCIEX auf Anfrage gerne eine Kopie des *Handbuchs zur Standortplanung* zur Verfügung. Kontaktinformationen finden Sie unter [sciex.com/contact-us](http://sciex.com/contact-us).
- Quellenabluftgas, Druckluft und Stickstoff sind an das Massenspektrometer angeschlossen.
- Der 4-Liter-Quellenabluftauffangbehälter ist auf der Rückseite des Massenspektrometers an den Abluftanschluss und das Laborlüftungssystem angeschlossen.
- Die Quellenabluftschläuche sind sicher an Massenspektrometer, Quellenabluftauffangbehälter und Belüftungsanschlüsse angeschlossen.
- Der Netzschalter des Geräts ist ausgeschaltet, und das Netzkabel am Massenspektrometer ist angeschlossen.
- Die Netzkabel für das Massenspektrometer und die Vorvakuumpumpe sind mit der Stromversorgung von 200 VAC bis 240 VAC verbunden.
- Das Ethernet-Kabel ist sowohl mit dem Massenspektrometer als auch mit dem Computer verbunden.

1. Schalten Sie die Vorvakuumpumpe 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 auf und ziehen Sie dann die Schraube, mit der die Abdeckung befestigt wird, handfest an.
4. Betätigen Sie den Netzschalter des Geräts. Siehe [Abbildung 2-2](#).
5. Schalten Sie den Computer ein.
6. Öffnen Sie die Steuerungssoftware.

## 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.

---

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 TF
4. Schließen Sie die Software.
5. Schalten Sie das Gerät am Netzschalter links am Gerät aus. Siehe [Hardware-Übersicht](#).
6. Befolgen Sie (bei Bedarf) die nachstehende Anleitung zum Belüften des Systems:

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

---

- a. Schalten Sie die Vorvakuumpumpe aus.
  - b. Warten Sie, bis die Belüftung des Systems abgeschlossen ist. Dieser Vorgang nimmt 15 Minuten bis 25 Minuten in Anspruch.
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. Bringen Sie die Abdeckung auf dem Schutzschalter an und ziehen Sie dann die Schraube, mit der die Abdeckung befestigt wird, handfest an.
  9. (Beim Belüften des Systems) Trennen Sie das Netzanschlusskabel der Vorvakuumpumpe von der Netzversorgung.

## Justieren der Position der integrierten Spritzenpumpe



**WARNHINWEIS!** Gefahr von Stichverletzungen. Gehen Sie beim Umgang mit der Spritze vorsichtig vor. Die Spritzenspitze ist extrem scharf.

---



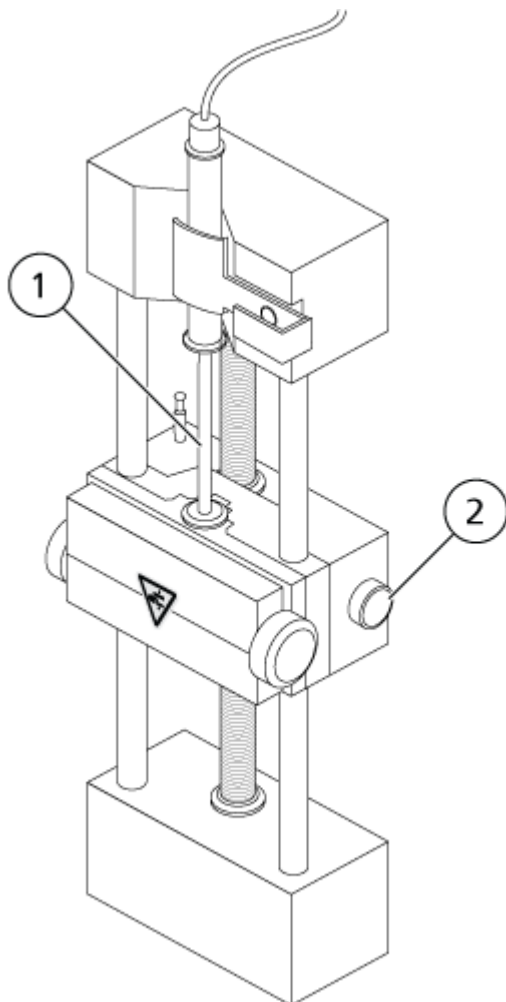
**WARNHINWEIS!** Gefahr von Stichverletzungen. Vergewissern Sie sich, dass die Spritze korrekt in der Spritzenpumpe sitzt und der automatische Spritzenpumpenanschlag ordnungsgemäß eingestellt ist, um eine Beschädigung oder ein Brechen der Glasspritze zu vermeiden. Wenn die Spritze bricht, befolgen Sie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

---

Für die Position der Spritzenpumpe am Massenspektrometer, siehe die Abbildung: [Abbildung 2-1](#).

1. Drücken Sie die Taste „Release“ auf der rechten Seite der Spritzenpumpe, um die Grundplatte abzusenken, und legen Sie dann die Spritze wie gezeigt ein.

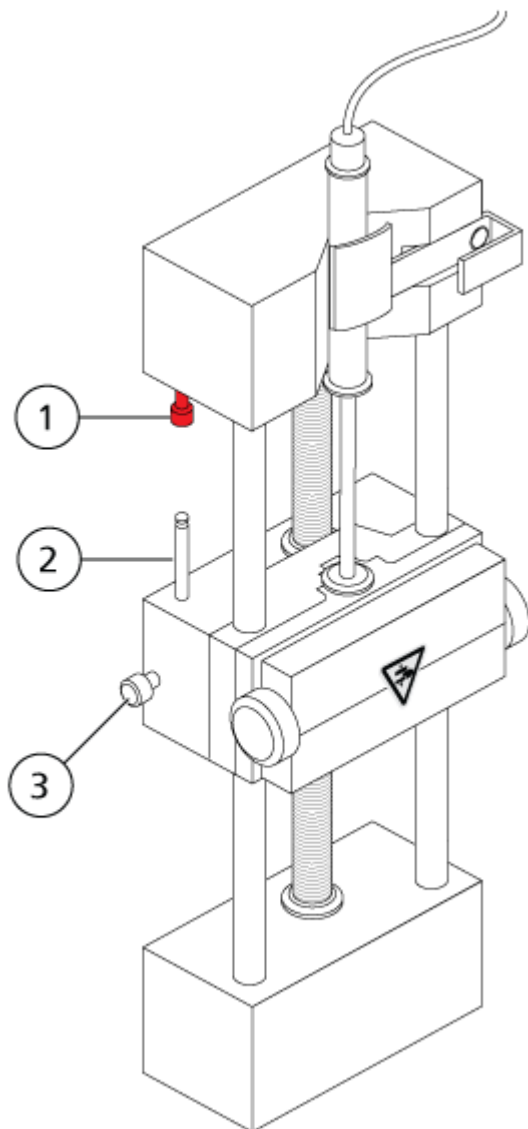
**Abbildung 3-1: Absenken der Spritze**



Element	Beschreibung
1	Spritzenkolben
2	Release-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.

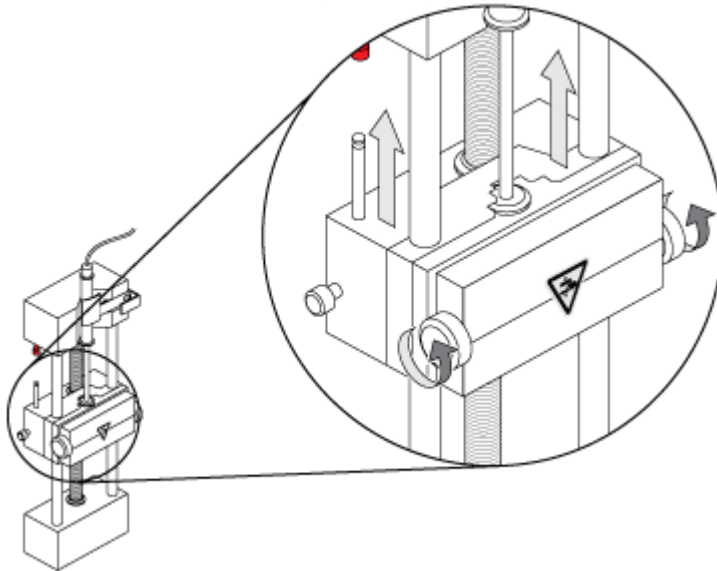
Abbildung 3-2: Automatischer Spritzenanschlag



Element	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 Schrauben der Spritzenpumpe, um die Spritze zu sichern.

Abbildung 3-3: Spritzenpumpenschrauben



5. Vergewissern Sie sich, dass das Massenspektrometer und die integrierte Spritzenpumpe in der Software aktiviert wurden.
6. Doppelklicken Sie in der Analyst TF-Software auf der Navigationsleiste auf **Manual Tuning**.
7. Klicken Sie auf **Start Syringe**.
8. Klicken Sie auf **Stop Syringe**, um die Spritzenpumpe zu stoppen.

## Zurücksetzen der Spritzenpumpe

Wenn die Analyst 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“ wie in [Abbildung 3-4](#) dargestellt einzudrücken.

Abbildung 3-4: Reset-Taste

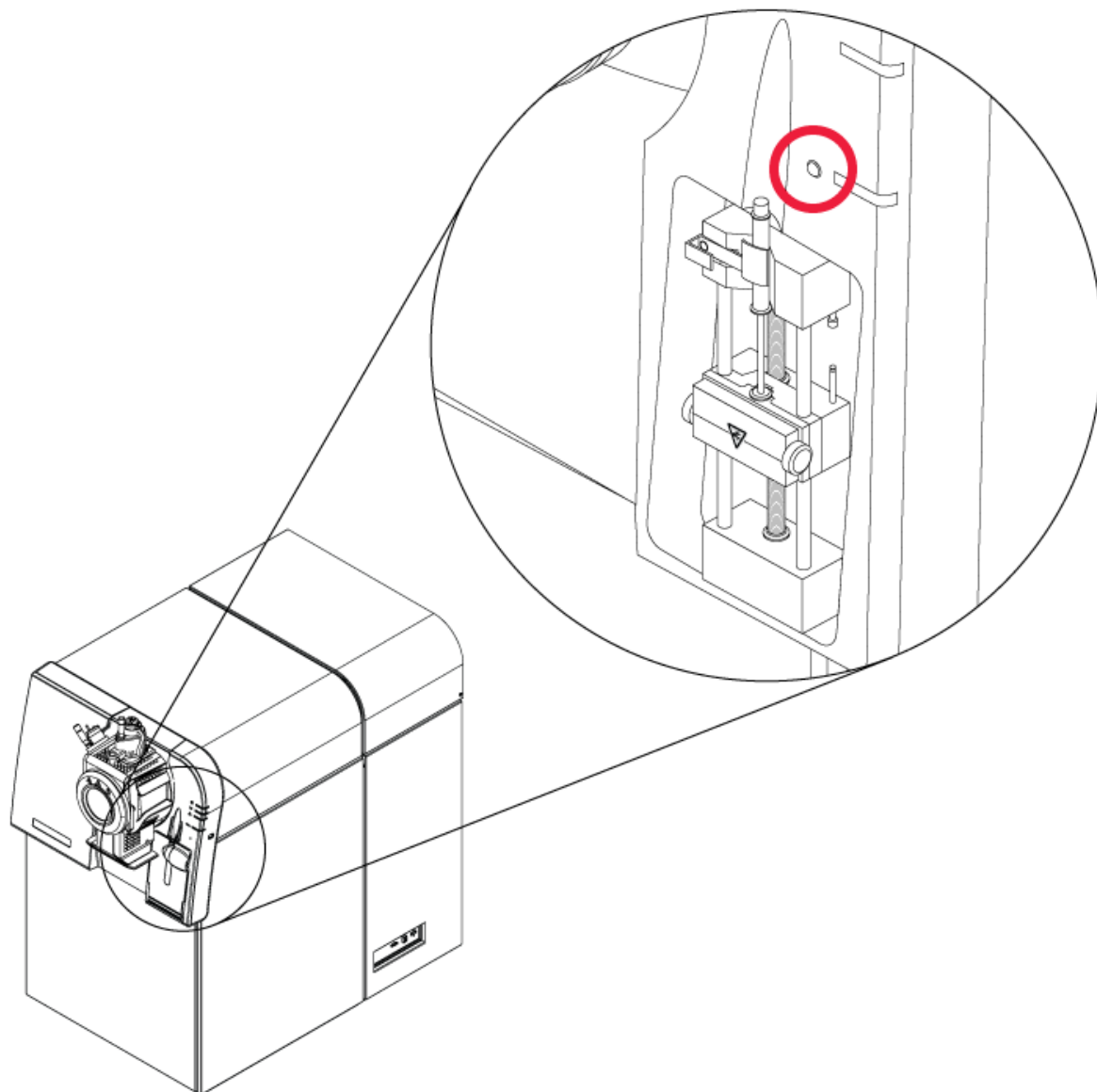




Tabelle 4-1: Instrumenteneinrichtung

Schritt	Aktion	Weitere Informationen	Funktion
1	Erstellen eines Hardware-Profiles	<a href="#">Erstellen eines Hardwareprofils</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</a>	Die Verwendung von Projekten und Teilprojekten verbessert das Datenmanagement und erleichtert den Vergleich von Ergebnissen.
3	Optimieren des Massenspektrometers	<a href="#">Optimieren des Massenspektrometers</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: Workflow für die Probenerfassung

Schritt	Aktion	Weitere Informationen	Funktion
1	Erstellen von Projekten zur Speicherung von Daten	<a href="#">Erstellen von Projekten und Teilprojekten</a>	Bevor Sie mit einem Experiment beginnen, legen Sie einen Speicherort für die Dateien des Experiments fest. Die Verwendung von Projekten und Teilprojekten verbessert das Datenmanagement und erleichtert den Vergleich von Ergebnissen.
2	Eine Erfassungsmethode erstellen	<a href="#">Bedienungsanweisungen – Erfassungsmethoden</a>	Erstellen Sie eine Erfassungsmethode 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	Erstellen und übergeben Sie eine Charge.	<a href="#">Hinzufügen von Sätzen und Proben zu einem Batch und Übergeben einer Probe oder eines Probensatzes</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: Workflow für die Probenerfassung (Fortsetzung)

Schritt	Aktion	Weitere Informationen	Funktion
4	Proben zur Datenerfassung verarbeiten	<a href="#">Erfassen von Daten</a>	Die Verarbeitung von Proben umfasst die Verwaltung der Erfassungs-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 Exploration von Daten</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.

Tabelle 4-2: Workflow für die Probenerfassung (Fortsetzung)

Schritt	Aktion	Weitere Informationen	Funktion
6	Analyse von Daten und Drucken von Berichten mithilfe der Zusatzsoftware.	MultiQuant-Software/ PeakView-Software	Verwenden Sie die MultiQuant-Software oder PeakView-Software für die Datenanalyse. Weitere Informationen finden Sie in der Dokumentation, die im Lieferumfang der jeweiligen Software enthalten ist.

Tabelle 4-3: Workflows für erfahrene Benutzer

Schritt	Aktion	Weitere Informationen
1	Massenkalibrierung des Geräts	Tutorial für die Massenkalibrierung unter <ul style="list-style-type: none"> <li>Betriebssystem Windows 7: Klicken Sie auf <b>Start &gt; All Program &gt; SCIEX &gt; Analyst TF &gt; Software Guides</b>.</li> <li>Betriebssystem Windows 10: Klicken Sie auf <b>Start &gt; SCIEX Analyst TF &gt; Analyst TF Documentation</b>, und doppelklicken Sie anschließend auf den Ordner <b>Software Guides</b>.</li> </ul>
2	Optimieren des Massenspektrometers	Tutorial für die manuelle Optimierung unter <ul style="list-style-type: none"> <li>Betriebssystem Windows 7: Klicken Sie auf <b>Start &gt; All Program &gt; SCIEX &gt; Analyst TF &gt; Software Guides</b>.</li> <li>Betriebssystem Windows 10: Klicken Sie auf <b>Start &gt; SCIEX Analyst TF &gt; Analyst TF Documentation</b>, und doppelklicken Sie anschließend auf den Ordner <b>Software Guides</b>.</li> </ul>

## Hardwareprofile

Ein Hardwareprofil teilt der Software mit, wie das Massenspektrometer und die Geräte konfiguriert und an den Computer angeschlossen sind. Es können mehrere Hardwareprofile konfiguriert werden, es kann jedoch nur ein Profil zurzeit 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. Die Konfiguration der Peripheriegeräte erfordert zwei Verfahren:

- Herstellen der physischen Verbindungen. Weitere Informationen über das Herstellen der physischen Verbindungen mit den Geräten finden Sie im Dokument: *Handbuch für die Einrichtung von Peripheriegeräten*.
- Konfigurieren der Software für die Kommunikation mit den Peripheriegeräten. Eine Liste der unterstützten Geräte finden Sie im Dokument: *Software Installation Guide* der Analyst TF-Software.

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 Konfigurationsinformationen konfiguriert.

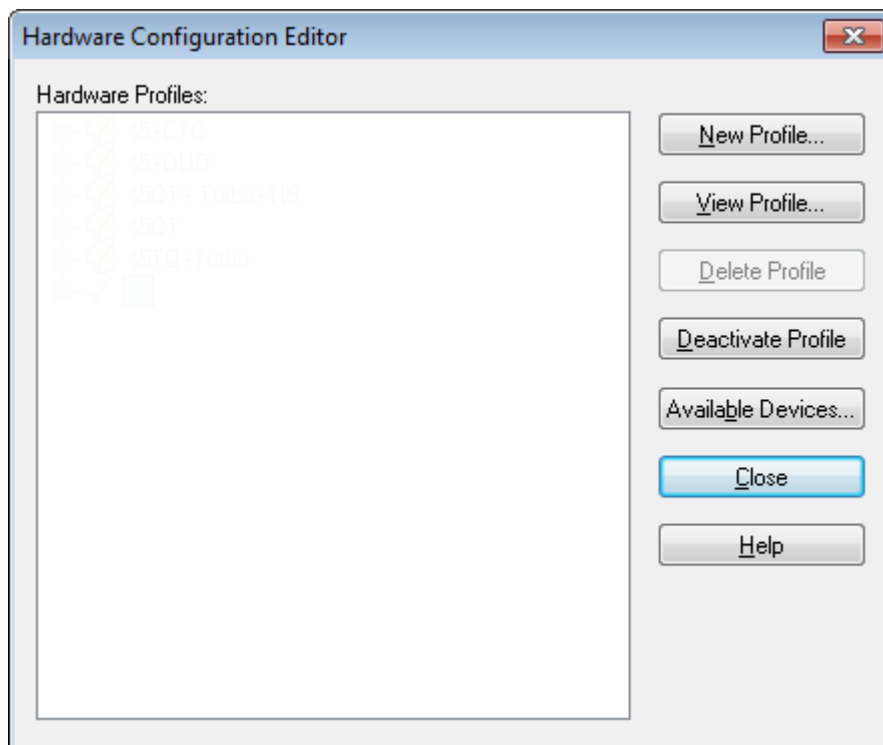
Jedes Hardwareprofil muss ein Massenspektrometer enthalten. Vor dem Erstellen einer Erfassungsmethode müssen Sie sicherstellen, dass alle in dem Verfahren zu verwendenden Geräte, einschließlich der Spritzenpumpe, im Hardware-Profil enthalten sind. Die im aktiven Hardwareprofil konfigurierten und im Dialogfeld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

## Erstellen eines Hardwareprofils

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

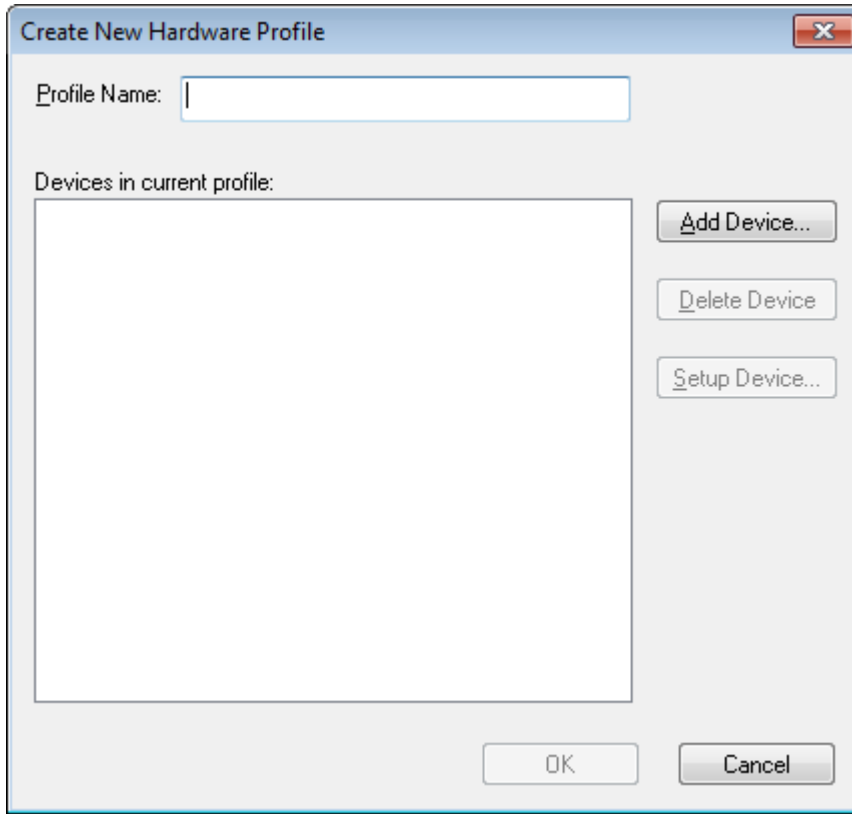
1. Doppelklicken Sie in der in der Navigationsleiste unter **Configure** auf **Hardware Configuration**.

Abbildung 5-1: Dialog „Hardware Configuration Editor“



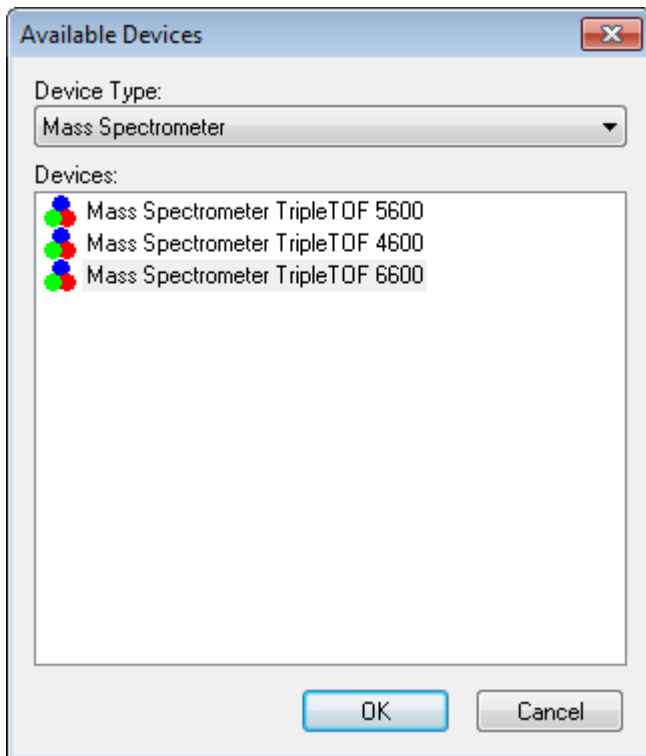
2. Klicken Sie auf **New Profile**.

Abbildung 5-2: Dialogfeld „Create New Hardware Profile“



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

Abbildung 5-3: Dialogfeld „Available Devices“

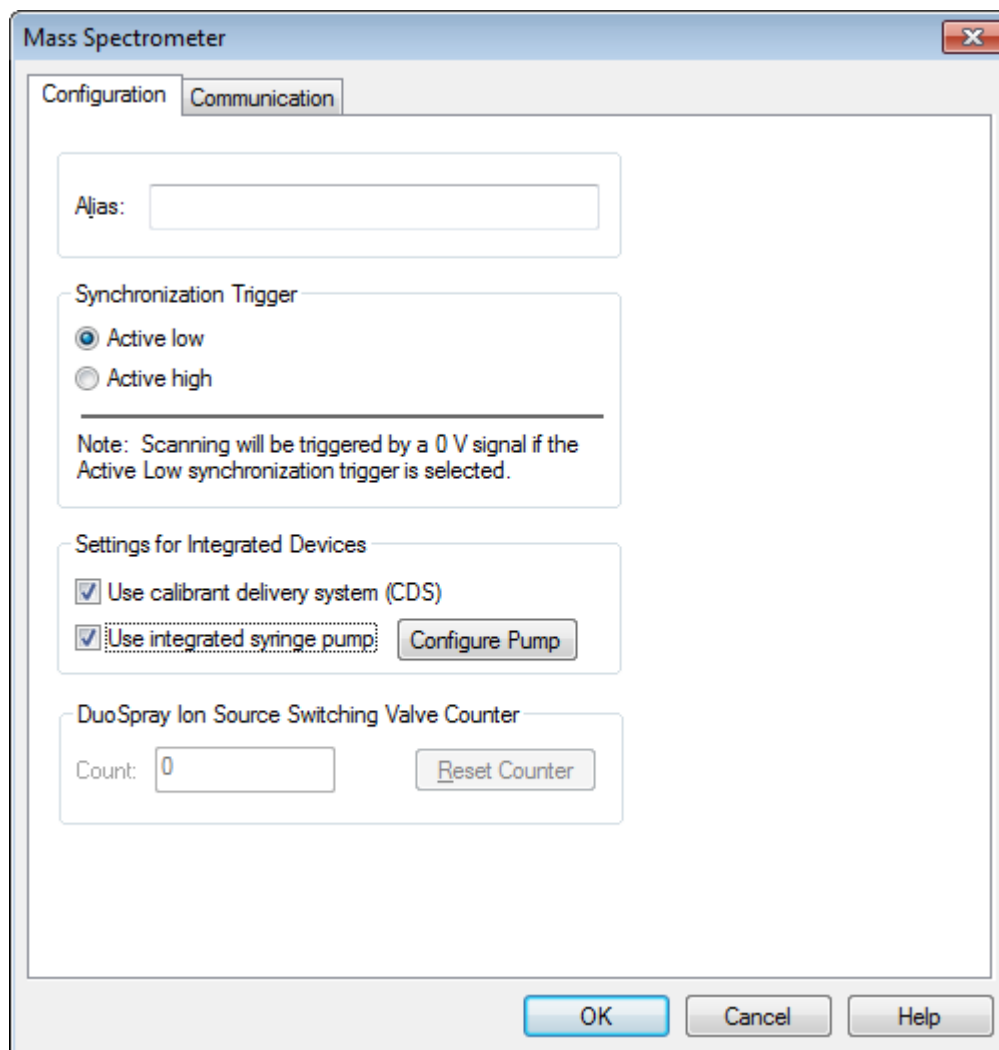


Im Dialogfeld Available Devices ist **Mass Spectrometer** der voreingestellte Wert für das Feld **Device Type**.

5. Wählen Sie aus der Liste **Devices** das entsprechende Massenspektrometer aus und klicken Sie dann auf **OK**.
6. Klicken Sie im Dialogfeld „Create New Hardware Profile“ 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 auf der Registerkarte Configuration die Option **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**.
11. Klicken Sie im Dialogfeld „Create New Hardware Profile“ auf **Add Device** und fügen Sie dann jedes Gerät, das mit dem Massenspektrometer verwendet wird, hinzu und konfigurieren Sie es. Siehe Abschnitt: [Geräte einem Hardwareprofil hinzufügen](#).
12. Klicken Sie im Dialogfeld „Create New Hardware Profile“ auf **OK**.
13. Klicken Sie auf das Hardwareprofil, das im Hardware Configuration Editor aktiviert werden soll.
14. Klicken Sie auf **Activate Profile**.

Das Häkchen wird grün. Wird ein rotes × angezeigt, dann besteht ein Problem mit der Hardwareprofil-Aktivierung.

---

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

---

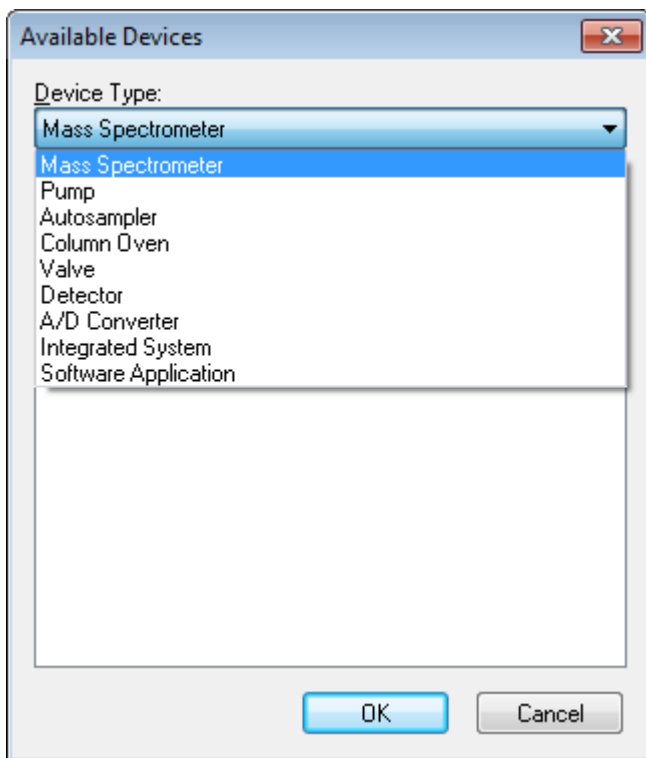
15. Klicken Sie auf **Close**.

## Geräte einem Hardwareprofil 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. Bevor Geräte konfiguriert werden können, müssen sie physisch mit dem Computer verbunden werden. Weitere Informationen finden Sie im Dokument: *Handbuch für die Einrichtung von Peripheriegeräten*.

1. Öffnen Sie den Hardware Configuration Editor.
2. In der Liste **Hardware Profiles** deaktivieren Sie das Hardware-Profil.
3. Klicken Sie auf **Edit Profile**.
4. Klicken Sie auf **Add Device**.  
Das Dialogfeld „Available Devices“ wird geöffnet.
5. Wählen Sie aus der Liste **Device Type** das Gerät aus und klicken Sie dann auf **OK**.

Abbildung 5-5: Dialogfeld „Available Devices“



6. Klicken Sie auf **OK**.
7. Wählen Sie das Gerät aus der Liste **Devices** und klicken Sie 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 **Serial Port** als Kommunikationsschnittstelle verwendet, wählen Sie den COM- 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 Communication auf **Set Defaults**.
11. Um die Konfiguration zu speichern, klicken Sie auf **OK**.
12. Wiederholen Sie Schritt 4 bis Schritt 11 für jedes Gerät.
13. Klicken Sie im Dialogfeld „Create New Hardware Profile“ auf **OK**.
14. Gehen Sie folgendermaßen vor, um das Hardwareprofil zu aktivieren:
  - a. Im Dialogfeld Hardware Configuration Editor klicken Sie auf das Hardwareprofil.
  - b. Klicken Sie auf **Activate Profile**.

Das Häkchen wird grün. Wird ein rotes × angezeigt, dann besteht ein Problem mit der Hardwareprofil-Aktivierung. Weitere Informationen finden Sie im Abschnitt: [Fehlerbehebung bei der Hardwareprofil-Aktivierung](#).

---

**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.

---

15. Klicken Sie auf **Close**.

## Fehlerbehebung bei der Hardwareprofil-Aktivierung

Wenn ein Hardware-Profil nicht aktiviert werden kann, öffnet sich ein Dialogfeld und zeigt an, welches Gerät im Profil sich nicht aktivieren ließ. 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 an der Netzstromversorgung angeschlossen und eingeschaltet ist.
3. Stellen Sie sicher, dass der dem Gerät zugeordnete COM-Port korrekt ist.
4. Stellen Sie sicher, dass die Kommunikationseinstellungen am Gerät, z. B. die DIP-Schalter-Einstellungen, korrekt vorgenommen sind und mit den Einstellungen auf 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 Geräts stattfindenden Prozesse abgeschlossen sind, bevor Sie versuchen, das Hardwareprofil wieder zu aktivieren. Manche Geräte benötigen 30 Sekunden oder mehr, um alle beim Einschalten des Gerätes ablaufenden Prozesse auszuführen.

8. Aktivieren Sie das Hardwareprofil.
9. Wenn das Problem weiterhin besteht, löschen Sie das fehlerhafte Profil und erstellen Sie danach ein neues.
10. Wenn das Problem weiterhin besteht, wechseln Sie zu [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support).

## Projekte und Teilprojekte

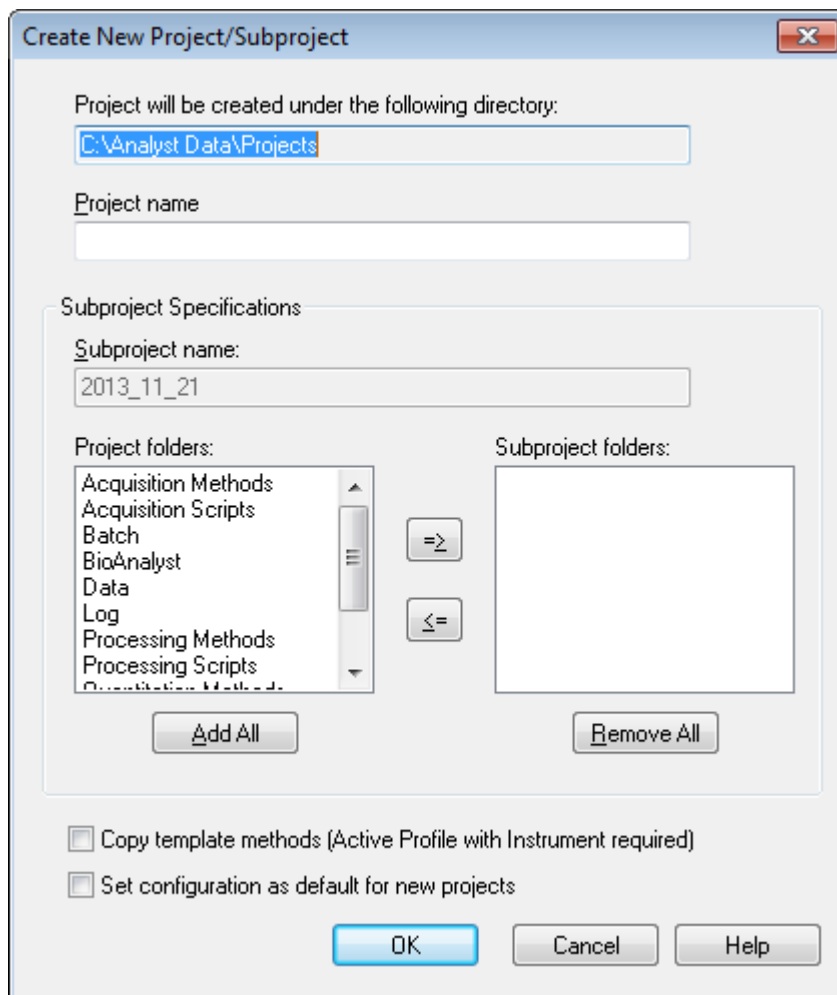
Bevor Sie ein Experiment beginnen, entscheiden Sie sich, wo die Dateien für den Versuch gespeichert werden sollen. Verwenden Sie Projekte und Teilprojekte für jedes Experiment, um die Daten besser zu verwalten und die Ergebnisse miteinander vergleichen zu können. Verwenden Sie zum Beispiel Teilprojekte, 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) Gehen Sie zur Nutzung von Teilprojekten folgendermaßen vor:
  - a. Wählen Sie den gewünschten Ordner und verschieben ihn mit den Pfeiltasten auf die Liste **Subproject folders**.
  - b. Geben Sie in das Feld **Subproject name** einen Namen für das erste Teilprojekt ein oder verwenden existierende Daten.
4. (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.
5. Klicken Sie auf **OK**.

## Teilprojekte 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**.

## Kopieren von Teilprojekten

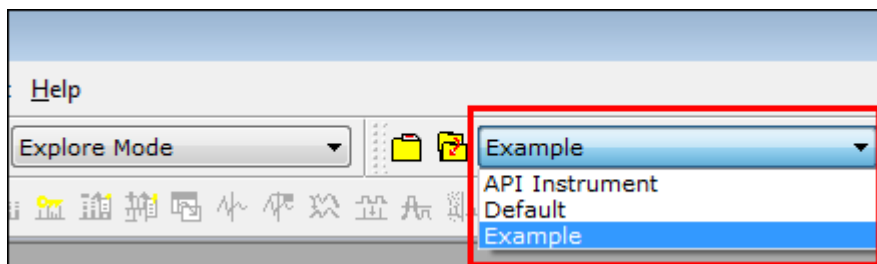
Ein Teilprojekt kann aus einem anderen Projekt kopiert werden, das bestehende Teilprojekte besitzt. Wenn die kopierten Teilprojekte Ordner besitzen, die ebenfalls im Zielprojekt-Ordner enthalten sind, verwendet die Software die Ordner auf Projektebene.

1. Klicken Sie auf **Tools > Project > Copy Subproject**.  
Das Dialogfeld Copy Subproject wird geöffnet
2. Klicken Sie auf **Browse**, um zur Teilprojektquelle 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 Teilprojektziel zu navigieren.
6. Geben Sie den Namen der in das 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** zum **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**.

## Wechsel 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 enthält die Ordner **API Instrument**, **Default** und **Example**.

### Installierte Projektordner

Drei Projektordner werden mit der Software installiert: **Default**, **API Instrument** und **Example**.

#### Ordner „API Instrument“

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. Diese Informationen umfassen:

- Parametereinstellungsdateien
- Referenzdateien
- Instrumentendatendateien, die Kalibrierungs- und Auflösungsinformationen enthalten
- Erfassungsmethoden, die während des automatischen Tunings verwendet werden

Der API Instrument-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 Instrument\Tuning Cache`-Ordner gespeichert und mit dem Erstellungsdatum und der Erstellungszeit benannt. Der Tuning Cache wird automatisch in regelmäßigen Abständen gelöscht.

#### Ordner „Default“

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

#### Ordner „Example“

Der Ordner „Example“ enthält beispielhafte Methoden und Dateien. Benutzer können mit den Beispieldatendateien die Arbeit mit den Modi Explore 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 Sie ihn an einer anderen Stelle, vorzugsweise auf einem anderen Computer, ein und benennen Sie den Ordner um. Verwenden Sie zur Benennung des Ordners das Datum und eine Massenspektrometerreferenz, wenn es mehr als ein Massenspektrometer gibt. Beispiel: `API Instrument_QT6500plus3_010121`

## Wiederherstellen des Ordners „API Instrument“

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`.

# Betriebsanleitung – Tunen und Kalibrieren

# 6

Die Option **Verify Performance Only** kann jederzeit ausgeführt werden. Das Instrument sollte jedoch nur abgestimmt werden, wenn ein Verlust der Empfindlichkeit oder 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.

---

**Tipp!** Führen Sie regelmäßig Wartungsarbeiten 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 Standardchemikalien-Kit mit dem System geliefert werden. Bei Bedarf kann ein neues Kit bei SCIEX bestellt werden.
- Gasdichte Spritze (1 ml empfohlen)
- Rote PEEK-Probenkapillare
- (Optionale) Spritzenpumpe, wenn ein System ohne integrierte Spritzenpumpe verwendet wird.

## Optimieren des Massenspektrometers

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 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. Doppelklicken Sie in der in der Navigationsleiste unter **Tune and Calibrate** auf **Instrument Optimization**.  
Der Dialog Instrument Optimization wird angezeigt.
4. Wählen Sie eine Tuning-Lösung. Vergewissern Sie sich, dass die Tuning-Lösung der Referenztabelle 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 Referenztabelle entspricht. Stellen Sie die geeignete Flussrate ein und klicken Sie dann auf CDS Inject.

---

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

---

7. Klicken Sie auf **GO**.  
Der Bildschirm „**Verifying or Adjusting Performance**“ wird geöffnet. Nachdem der Vorgang abgeschlossen ist, öffnet sich die **Results Summary**. Weitere Informationen erhalten Sie unter „Hilfe“.

## Das Dialogfeld „Verifying or Adjusting Performance“

Die obere linke Ecke zeigt den Teil des Gerätes, 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.

## Results Summary

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

Abbildung 6-1: Results Summary: TripleTOF 5600 System

Instrument Optimization

File Edit Help

## Results Summary

2014-02-25 at 13:22  
 Logged in as .

Instrument: TripleTOF 5600  
 Model #:  
 Serial #:

Instrument Optimization Ver: 2.9343.40

TOFMS High Resolution

Mass (Da)	Found At (Da)	Height (cps)	Area	Resolution	Error (ppm)
132.9049	132.9049	4.28E+02	1.54E+03	24 396	0.0
829.5393	829.5426	4.14E+02	2.79E+03	31 863	3.9

Product Ion High Resolution

Mass (Da)	Found At (Da)	Height (cps)	Area	Resolution	Error (ppm)
185.1285	185.1287	5.54E+02	2.14E+03	28 360	1.1
215.1390	215.1393	3.21E+02	1.32E+03	29 058	1.6
268.1656	268.1658	5.38E+02	2.26E+03	30 306	0.9
298.2125	298.2130	1.27E+03	5.31E+03	32 706	1.7
381.2496	381.2502	1.50E+03	6.98E+03	33 596	1.7
399.2602	399.2607	6.01E+02	2.96E+03	32 622	1.2
494.3337	494.3345	2.42E+03	1.21E+04	35 478	1.5

Help Next-> Finished

Instrument: TripleTOF 5600 Instrument Optimization Ver: 2.9343.40

Die Results Summary wird automatisch unter folgendem Pfad gespeichert:

<drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Data\Instrument Optimization\yyyy-mm-dd\results.pdf, where JJJJ-MM-TT ist das Datum, an dem der Bericht erstellt wurde. Benutzer können die „Results Summary“ ausdrucken oder eine zuvor gespeicherte „Results Summary“ öffnen.

Eine Erfassungsmethode besteht aus Experimenten und Zeiträumen. Verwenden Sie den Acquisition Method Editor, um eine Abfolge von Perioden und Experimenten für das Massenspektrometer und alle Geräte im aktiven Hardwareprofil zu erstellen.

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

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

Verwenden Sie die SWATH-Erfassungsfunktion, die sowohl im Method Wizard (Methoden-Assistent) als auch im Acquisition Method Editor verfügbar ist, um SWATH-Erfassungsmethoden zu erstellen. SWATH-Methoden mit variabler Fensterbreite können zudem mit dem Method Wizard oder dem Acquisition Method Editor erstellt werden. Weitere Informationen finden Sie im *Handbuch für Fortgeschrittene*, in der Analyst TF-Hilfe und in der Method Wizard-Hilfe.

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

## Erstellen einer Erfassungsmethode mit dem „Acquisition Method Editor“

**Tip!** Wenn Benutzer eine neue Erfassungsmethoden-Datei aus einer vorhandenen Rohdaten-Datei erstellen, können einige oder alle Peripheriegeräte-Methoden in der Erfassungsmethode verwendet werden, solange das Hardwareprofil übereinstimmt.

Im Fensterbereich Acquisition Method werden nur die Geräte angezeigt, die im aktiven Hardwareprofil konfiguriert wurden. Alle Geräte, die dem Hardwareprofil hinzugefügt wurden, müssen auch zu den bestehenden Erfassungsmethoden hinzugefügt werden. Weitere Informationen über Geräte finden Sie im Dokument: *Handbuch für die Einrichtung von Peripheriegeräten*.

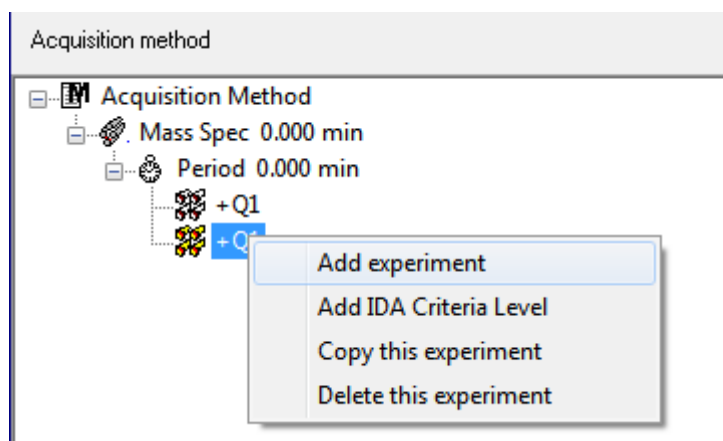
1. Stellen Sie sicher, dass ein Hardwareprofil mit dem Massenspektrometer und einem Peripheriegerät aktiv ist.
2. Doppelklicken Sie in der in der Navigationsleiste unter **Acquire** auf **Build Acquisition Method**.
3. Wählen Sie in der Registerkarte **Synchronization Mode** Acquisition Method Properties einen aus.

- (Optional) Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Auto-Equilibration** und geben Sie die erforderliche Äquilibrationszeit in Minuten ein.
- Klicken Sie im Fensterbereich Acquisition Method auf das **Mass Spec**-Symbol.
- Wählen Sie auf der Registerkarte MS einen **Scan type** aus.
- Geben Sie in die anderen Felder die erforderlichen Werte ein.
- Geben Sie in der Registerkarte Advanced MS gegebenenfalls Werte in die Felder ein.
- Klicken Sie auf der Registerkarte MS auf **Edit Parameters**.
- Geben Sie in der Registerkarte Source/Gas gegebenenfalls Werte in die Felder ein.
- Geben Sie auf der Registerkarte Compound nach Bedarf Werte in die Felder ein.
- Klicken Sie auf **OK**.
- Klicken Sie auf das Symbol für ein Gerät und legen Sie dann die Parameter für das Gerät fest.
- Fügen Sie weitere Zeiten und Experimente hinzu. Siehe die Abschnitte: [Hinzufügen eines Experiments](#) und [Eine Periode hinzufügen](#).
- Klicken Sie auf **File > Save**.

### Hinzufügen eines Experiments

- Klicken Sie im Fensterbereich „Acquisition Method“ mit der rechten Maustaste auf die 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. Wählen Sie auf der Registerkarte MS die korrekten Parameter aus.

### Eine Periode hinzufügen

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

### Kopieren eines Experiments innerhalb eines Zeitabschnitts

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 dann auf **Copy this experiment**.

Eine Kopie des Experiments wird unter dem letzten erstellten Experiment hinzugefügt.

## 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-Symboleiste 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.

## Scan-Techniken

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
  - Vorläuferionen-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-Ladung-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-Ladung-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 die Spektraldatenerfassung

Eine Beschreibung der Modi, in denen Spektraldaten erfasst werden können, finden Sie in der Tabelle: [Tabelle 7-1](#).

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

Tabelle 7-1: Spektraldaten

Modus	Beschreibung
Profile	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.

## MS-Parameter

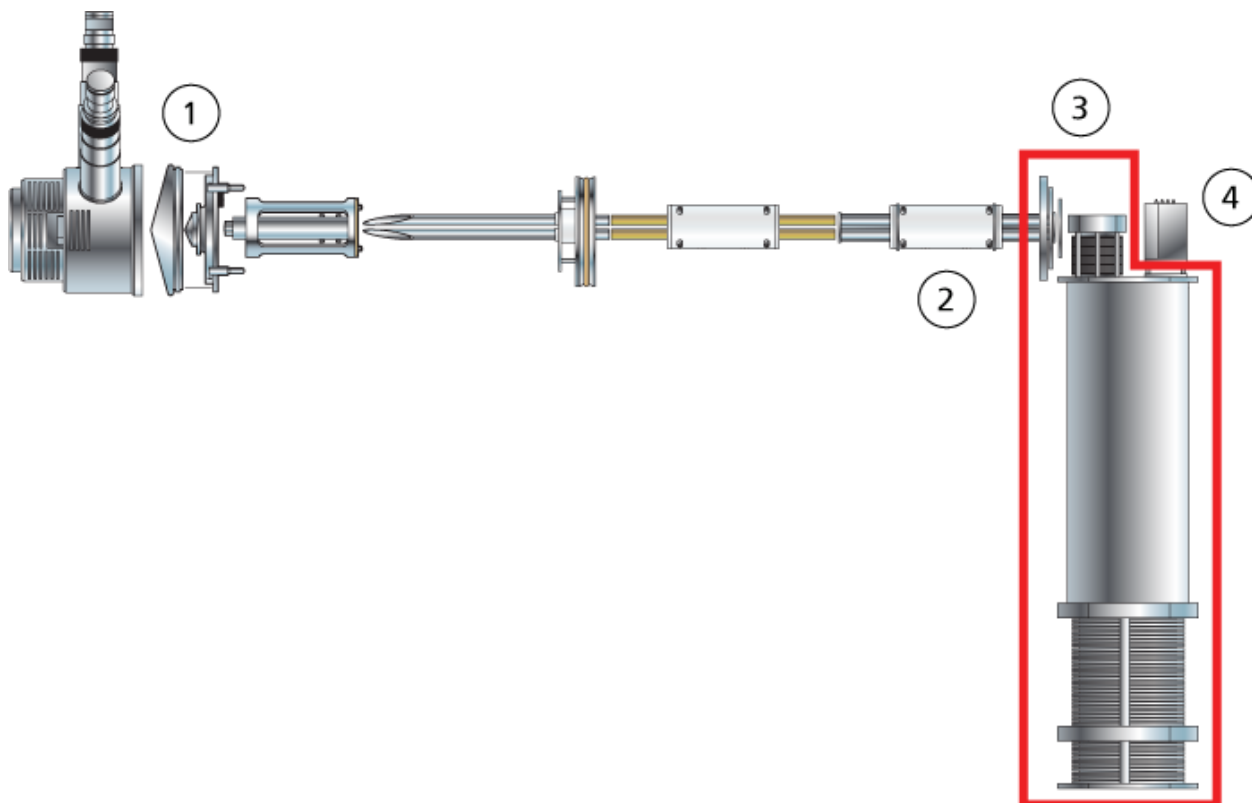
Arbeitsparameter sind die aktuell vom Massenspektrometer (MS) verwendeten Parameter.

Die Verbindungsparameter sowie die Quellen- und Gasparameter werden gemeinsam mit der Methode abgespeichert. Die Auflösung sowie die Detektorparameter hängen vom Massenspektrometer ab und werden als Gerätedaten gespeichert. Wenn der „Tune and Calibration“-Modus für die Erstellung einer Methode verwendet wird, können die Arbeitsparameter optimiert werden, um die bestmögliche Geräteleistung zu ermöglichen. Alternativ ist es möglich, die Parameter während des zyklischen Durchlaufs des Experiments einzeln zu erhöhen.

- Quellen- und Gasparameter: diese Parameter können sich in Abhängigkeit der verwendeten Ionenquelle ändern.
- Verbindungsparameter: Diese Parameter bestehen meist aus Spannungen innerhalb des Ionenpfades. Die optimalen Werte für verbindungsabhängige Parameter variieren je nach zu analysierender Verbindung.
- Auflösungsparameter: Diese Parameter beeinflussen die Auflösung und Kalibrierung.
- Detektorparameter: Diese Parameter beeinflussen den Detektor. Die Multi-Channel-Platte ist der Detektor in einem TOF-Instrument und umfasst vier Kanäle für den Ionennachweis. Die Summe der Kanäle entspricht der Ionenintensität. Dieser Parameter kann während der Instrumentenoptimierung optimiert werden.

Die Parameter in der Tabelle gelten für die Ionenquelle, die zusammen mit dem System ausgeliefert wurde. Für Informationen über andere Ionenquellen siehe das im Lieferumfang der Ionenquelle enthaltene *Bedienerhandbuch*. Die folgende Abbildung zeigt die Lage der Parameter auf dem optischen Ionenpfad.

Abbildung 7-2: Optische Ionenbahn und Parameter



Position	Parameter	Parameter art	Verwendung	Scan-Methode
1	IonSpray Voltage Floating (ISVF)	Quelle und Gas	Der ISVF-Parameter beeinflusst die Stabilität des Sprays und dadurch die Signalempfindlichkeit. Es handelt sich hierbei um die Spannung, die an die Nadel, welche die Probe versprüht, angelegt wird.	Alle
1	Ion Source Gas 1 (GS1)	Quelle und Gas	Der GS1-Parameter steuert das Zerstäubergas für die ESI-Sonde.	Alle
1	Ion Source Gas 2 (GS2)	Quelle und Gas	Der GS2-Parameter steuert das Heizergas für die ESI-Sonde und das Zerstäubergas für die APCI-Sonde.	Alle
1	Temperatur (TEM)	Quelle und Gas	Der TEM-Parameter steuert die Temperatur des Heizergases für die TurbolonSpray-Sonde oder die Temperatur der APCI-Sonde.	Alle

## Bedienungsanweisungen – Erfassungsmethoden

Position	Parameter	Parameter art	Verwendung	Scan-Methode
1	Curtain Gas (CUR)	Quelle und Gas	Der CUR-Parameter steuert den Gasfluss der Curtain Gas-Schnittstelle. Die Curtain Gas-Schnittstelle ist zwischen der Curtain-Platte und der Orifice angeordnet. Sie verhindert eine Kontamination der Ionenoptik.	Alle
1	Declustering Potential (DP)	Verbindung	<p>Der DP-Parameter steuert die Spannung an der Düse, die das Auflösungsvermögen der Ionen zwischen der Düse und der QJet-Ionenführung steuert. Mithilfe dieser Spannung können Lösungsmittelcluster minimiert werden, die auf den Probenionen verbleiben können, nachdem sie in die Vakuumkammer eingetreten sind. Gegebenenfalls können auch Ionen fragmentiert werden. 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.</p> <p>Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die jeweilige Verbindung.</p>	Alle

## Bedienungsanweisungen – Erfassungsmethoden

Position	Parameter	Parameter art	Verwendung	Scan-Methode
2	CAD-Gas	Quelle und Gas	<p>Der CAD-Parameter steuert den Druck des CAD-Gases in der Kollisionszelle. Das Stoßgas hilft, die Ionen während des Durchlaufs durch die Kollisionszelle zu fokussieren. Die Voreinstellung für den CAD-Parameter ist der Fixed-Modus. Bei MS/MS-Scantypen hilft das CAD-Gas, die Vorläuferionen zu fragmentieren. Wenn die Vorläuferionen mit dem Stoßgas kollidieren, dissoziieren sie und bilden Produkt-Ionen.</p> <p>Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die jeweilige Verbindung.</p>	Alle
2	Collision Energy (CE)	Verbindung	<p>Der CE-Parameter steuert die Potenzialdifferenz zwischen dem Q0-Bereich und der Q2-Kollisionszelle. Er wird nur bei MS/MS-Scantypen verwendet. Dieser Parameter ist die Energiemenge, die auf die Vorläuferionen einwirkt, wenn sie in die Q2-Kollisionszelle hinein beschleunigt werden, wo sie mit Gasmolekülen kollidieren und fragmentieren.</p> <p>Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die jeweilige Verbindung.</p>	TOF MS, TOF MS/MS

Position	Parameter	Parameter art	Verwendung	Scan-Methode
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 Stoßenergie wird schrittweise von niedrig bis hoch gesteigert. Im positiven Modus wird die Stoßenergie beispielsweise von CE - CES bis CE + CES erhöht. Durch die Eingabe eines CES-Wertes wird die Stoßenergieverteilung automatisch aktiviert.</p> <p>Verwenden Sie den voreingestellten Wert und optimieren Sie ihn für die jeweilige Verbindung.</p>	TOF MS/MS
3	Ion Release Delay (IRD)	Verbindung	<p>Die Zeit in Millisekunden vor dem Ionenimpuls. Der Standardwert (11 ms) wird basierend auf den TOF-Massen berechnet und kann vom Bediener angepasst werden. Der Wert liegt üblicherweise in einem Bereich von 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

## Bedienungsanweisungen – Erfassungsmethoden

---

Position	Parameter	Parameter art	Verwendung	Scan-Methode
3	Ion Release Width (IRW)	Verbindung	<p>Dies ist die Breite oder Dauer des Ionenimpulses in Millisekunden und wird basierend auf dem Parameter IRD berechnet. Der Wert liegt normalerweise in einem Bereich von 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)	Detector	Der CEM-Parameter steuert die Spannung, die an den Detektor angelegt wird. Die Spannung beeinflusst das Reaktionsverhalten des Detektors.	Alle



---

**VORSICHT: Mögliche Schäden am System. Wenn das an das Massenspektrometer angeschlossene LC-System nicht von der Software gesteuert wird, muss das Massenspektrometer während des Betriebs beaufsichtigt werden. Der Flüssigkeitsstrom des LC-Systems kann die Ionenquelle überfluten, wenn sich das Massenspektrometer im Standby-Modus befindet.**

---

Eine Charge ist eine Sammlung von Informationen über eine zu analysierende Probe. Proben werden für gewöhnlich in Sätzen zusammengefasst, um die Übermittlung zu vereinfachen. Durch die Gruppierung der Proben in Sätzen wird außerdem die Menge der manuell einzugebenden Daten reduziert. Ein Satz kann aus einer einzelnen Probe oder mehreren Proben bestehen. Alle Sätze in einer Charge verwenden das gleiche Hardware-Profil. Proben in einem Satz können jedoch unterschiedliche Erfassungsmethoden haben. Eine Charge kann nur von einem Erfassungscomputer übergeben werden.

Chargen beinhalten folgende Informationen:

- Probeninformationen wie Name, ID und Kommentar
- Informationen zum AutosamplerRack, Fläschchenposition und Injektionsvolumen
- Erfassungsmethoden
- Verarbeitungsmethode oder Skript (optional)
- Quantifizierungsinformation (optional)
- Benutzerdefinierte Probendaten (optional)
- Satzinformationen

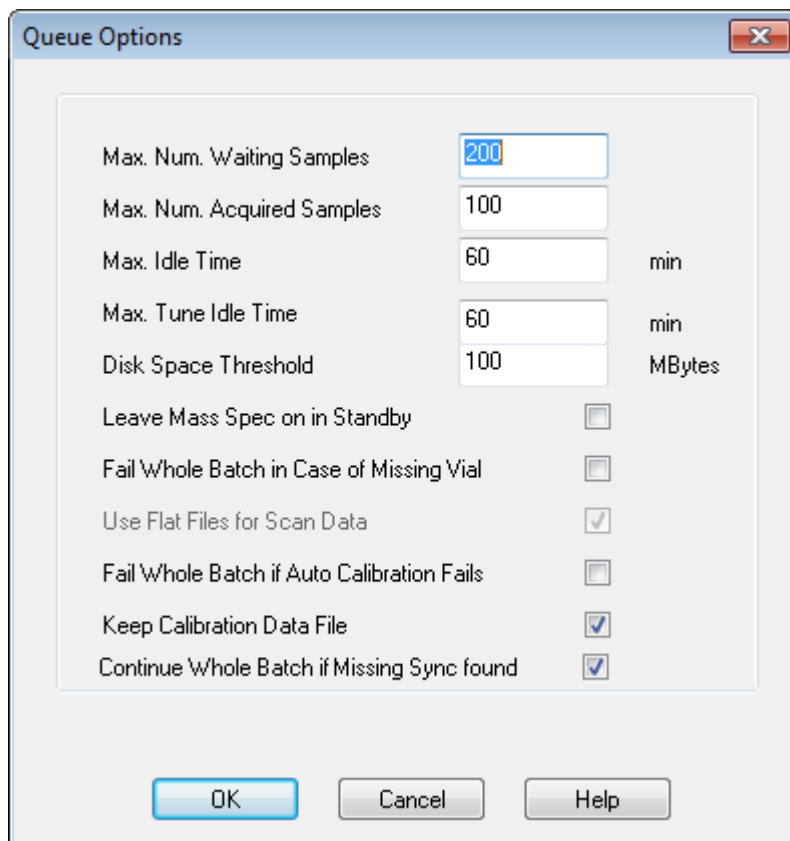
## Einstellen der Warteschlangenoptionen

Die Software geht nacheinander die Liste der Proben in der Warteschlange durch und erfasst jede Probe mit der ausgewählten Erfassungsmethode. Nachdem alle Proben erfasst wurden, stoppt die Erfassung und das Massenspektrometer wechselt in den Standby-Zustand, nachdem der Set **Max. Idle Time** in den „Queue Options“ abgelaufen ist. Im Standby-Zustand stoppen die LC-Pumpen und die elektrische Spannung wird an einigen Geräten ausgeschaltet.

Der Benutzer kann die Zeitspanne zwischen der Erfassung der letzten Probe und dem Wechsel in den Standby-Zustand ändern. Weitere Informationen zu den anderen Feldern im Dialogfeld Queue Options finden Sie im Dokument: *Hilfe*.

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

Abbildung 8-1: Dialog „Queue Options“



3. Legen Sie im Feld **Max. Num. Waiting Samples** die maximale Anzahl der Proben auf einen Wert fest, der höher als die Anzahl der Proben ist, die an die Warteschlange übergeben werden.
4. Geben Sie in das Feld **Max. Idle Time** die Dauer ein, die die Software nach einer Erfassung warten soll, bevor sie in den Standby-Zustand 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 fehlschlagen zu lassen, wenn ein fehlendes Fläschchen erfasst wird.

Wenn diese Option nicht ausgewählt ist, wird nur die aktuelle Probe abgebrochen und die Software 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.

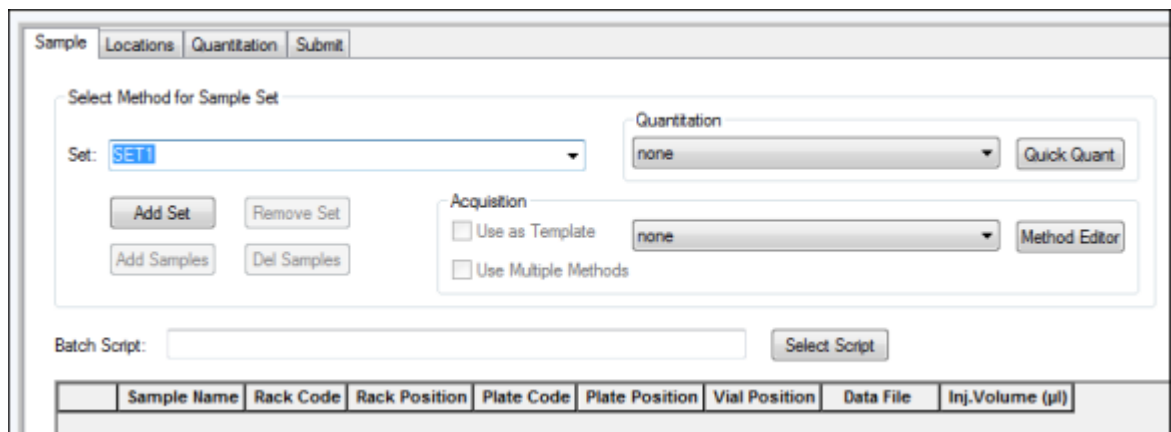
## Hinzufügen von Sätzen und Proben zu einem Batch

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

**Hinweis:** Für weitere Informationen darüber, wie man Quantifizierungsinformationen zu einem Batch hinzufügt, finden Sie im Dokument: *Handbuch für Fortgeschrittene*.

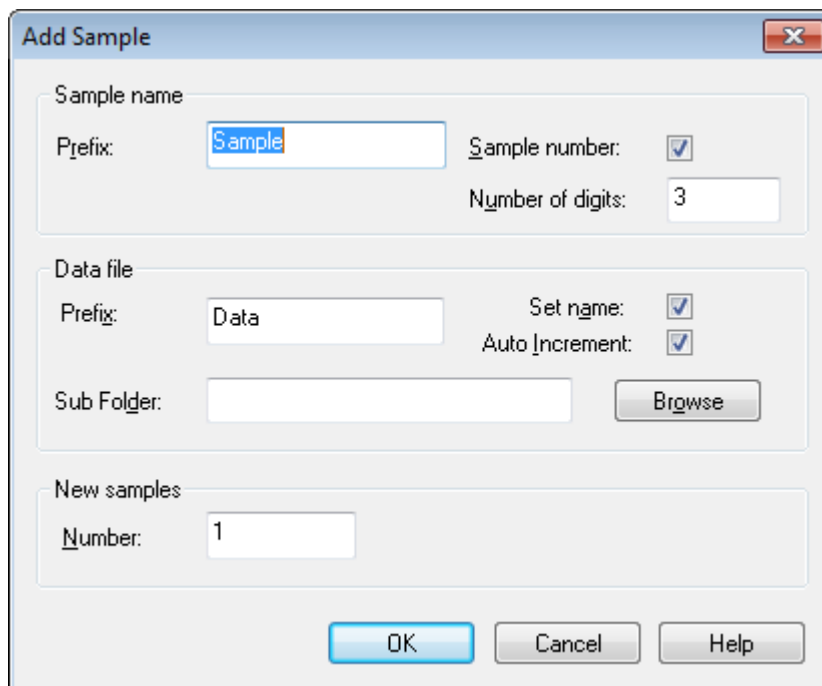
1. Doppelklicken Sie in der in der Navigationsleiste unter **Acquire** auf **Build Acquisition Batch**.

Abbildung 8-2: Dialog „Batch Editor“



2. Geben Sie auf der Registerkarte Sample der **Set**-Liste einen Namen 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 im Abschnitt **Prefix** Sample name ein.
6. Um eine automatisch steigende Nummerierung an das Ende eines Probennamens anzuhängen, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Sample number**.
7. Wenn das Kontrollkästchen **Sample number** aktiviert ist, geben Sie die Anzahl der im Probennamen gewünschten Stellen im Feld **Number of digits** ein. Wird zum Beispiel „3“ eingegeben, ergeben sich die Probennamen „samplename001“, „samplename002“ und „samplename003“.
8. Geben Sie einen Namen für die Datei, die die Probeninformationen speichern soll, im Feld im Abschnitt **Prefix** 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 im Feld **Sub Folder** einen Namen ein. Der Ordner wird im Ordner `Data` des aktuellen Projektes gespeichert. Bleibt das Feld **Sub Folder** leer, wird die Datendatei im Ordner `Data` gespeichert und kein Unterordner erstellt.

12. Geben Sie im Abschnitt New samples die Anzahl der hinzuzufügenden neuen Proben in das Feld **Number** ein.
13. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Probentabelle wird mit dem Probenamen 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 Injektionsvolumina von den in der Methode aufgeführten Volumina zu ändern, geben Sie in die 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 der Probenpositionen im Batch-Editor](#)
  - [Auswahl der Fläschchenpositionen mit der Registerkarte „Locations“ \(optional\)](#)
17. Öffnen Sie die Registerkarte Calibration.

---

**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 die neue Position.

---

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 [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.

# Übergeben einer Probe oder eines Probensatzes

---

**Hinweis:** Lassen Sie die Probe erneut durchlaufen, wenn die Probenerfassung nicht normal abgeschlossen wurde. Wenn ein Abbruch auf eine Unterbrechung der Stromzufuhr zurückzuführen ist, wird die Temperatur des Einsatzes des Autosamplers nicht aufrechterhalten und die Unversehrtheit der Probe ist unter Umständen nicht mehr gegeben.

---

1. Wählen Sie eine Probe oder einen Probensatz aus.
2. Öffnen Sie die Registerkarte **Submit** im **Batch Editor**.
3. Wenn die Gruppe **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-Referenztabelle aus, die für die aktuelle Polarität verfügbar sind. Stellen Sie sicher, dass die ausgewählte Referenztabelle 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.

## Ändern der Probenreihenfolge

Die Reihenfolge der Proben kann geändert werden, bevor die Proben an die **Queue** übergeben werden.

Doppelklicken Sie in der Registerkarte Submit 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.

## Erfassen von Daten

Die Software 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-Zustand versetzt worden ist.


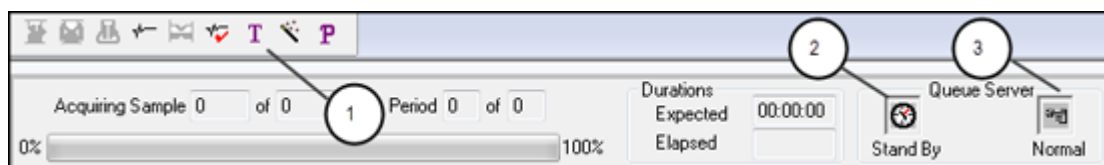
1. Stellen Sie sicher, dass die Temperatur des Säulenofens erreicht wurde.
2. Achten Sie darauf, dass das **Reserve Instrument for Tuning**-Symbol nicht gedrückt ist. 
3. Klicken Sie auf der Navigationsleiste auf **Acquire**.
4. Klicken Sie auf **View > Sample Queue**.  
Der Queue Manager wird geöffnet und zeigt alle eingereichten Proben an.

Abbildung 8-4: Queue Manager



Element	Beschreibung
1	Das Symbol <b>Reserve Instrument for Tuning</b> sollte nicht gedrückt sein.

Element	Beschreibung
2	Der Status der Warteschlange muss „Ready“ sein.
3	Der <b>Queue Server</b> -Status muss „Normal“ sein. Siehe Abschnitt: <a href="#">Status der Warteschlange</a> .

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

## Bestimmen der Probenpositionen im Batch-Editor

Wenn in der Erfassungsmethode ein Autosampler verwendet wird, müssen die Positionen der Proben im Aufnahmebatch definiert werden. Definieren Sie die Position auf der Registerkarte **Sample** oder auf der Registerkarte **Locations**. Weitere Informationen zum Erstellen von Batches finden Sie im Abschnitt: [Hinzufügen von Sätzen und Proben zu einem Batch](#).

1. Wählen Sie den Satz in der -Liste auf der Registerkarte **SampleSet** aus.
2. Für jede Probe im Satz gehen Sie ggf. folgendermaßen vor:
  - In der Spalte **Rack Code** wählen Sie den Racktyp aus.
  - Wählen Sie in der Spalte **Rack Position** die Position des Racks im Autosampler.
  - Wählen Sie in der Spalte **Plate Code** den Plattentyp aus.
  - Wählen Sie in der Spalte **Plate Position** die Position der Platte im Rack aus.
  - Bestimmen Sie in der Spalte **Vial Position** die Position des Fläschchens auf dem Träger oder im Fach.
3. Speichern Sie die Datei.

## Auswahl der Fläschchenpositionen mit der Registerkarte „Locations“ (optional)

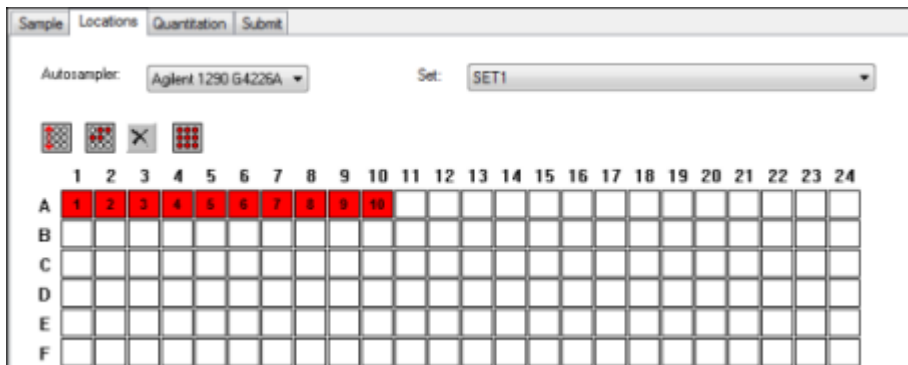
1. Klicken Sie im Batch Editor auf die Registerkarte **Locations**.
2. In der **Set**-Liste wählen Sie den Set (Satz) aus.
3. Wählen Sie einen Analyten aus der **Autosampler**-Liste aus.
4. Rechtsklicken Sie in den Rack-Bereich und wählen Sie den Rack-Typ aus. Die Platten oder Teller werden im Rack angezeigt.
5. Doppelklicken Sie in den Leerraum, der mit „Rack Type“ gekennzeichnet ist. Es wird ein visueller Probenbelegungsplan des Racks 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.



Es werden Kreise eingeblendet, die Vertiefungen oder Fläschchen für die Platte oder den Teller darstellen.

**Tipp!** Um die entsprechende Fläschchennummer in der grafischen Darstellung anzuzeigen, 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“**



**Hinweis:** Je nach verwendetem Autosampler ist es eventuell nicht erforderlich, Detailinformationen 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.

**Tipp!** Klicken Sie erneut auf eine Vertiefung oder ein Fläschchen, um es zu deaktivieren.

**Tipp!** 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**-Taste und klicken Sie gleichzeitig auf die Position des Fläschchens. Der rote Kreis wird zu einem grünen Kreis.

## Beenden der Probenerfassung

Wenn eine Probenerfassung gestoppt wird, schließt die Software den aktuellen Scan ab, bevor die Erfassung gestoppt wird.

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

3. Klicken Sie auf **Acquire > Stop Sample**.  
Die Erfassung wird beendet, nachdem der aktuelle Scan der ausgewählten Probe erfasst wurde. Der Probenstatus im Fenster **Queue Manager (Local)** wechselt zu **Terminated** und alle folgenden Proben in der Warteschlange werden in den Modus **Waiting** gestellt.
4. Um die Bearbeitung des Batches fortzuführen, klicken Sie auf **Acquire > Start Sample**.

## 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 ebenfalls eingesehen werden.

---

**Tip!** Klicken Sie auf **View Queue** () , um die Warteschlange anzuzeigen.

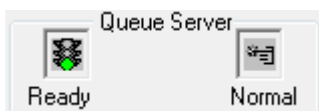
---

Informationen zur Verwendung des Rechtsklick-Menüs Queue finden Sie im Abschnitt: [Queue](#).

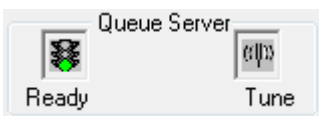
### Status der Warteschlange

Der aktuelle Status der Warteschlange wird in der Gruppe Queue Server angezeigt.

**Abbildung 8-6: Die Anzeige für den Queue Server zeigt den Modus „Normal“ an**



**Abbildung 8-7: 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 (zum Tuning) oder Normal-Modus (für die Bearbeitung von Proben) befindet. Beschreibungen der Symbole und Warteschlangenzustände finden Sie in der Tabelle: [Tabelle 8-1](#).

**Tabelle 8-1: Status der Warteschlange**

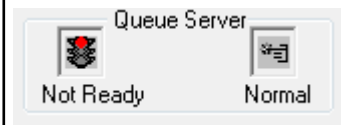
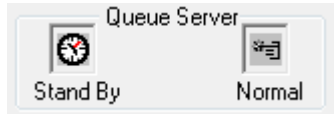

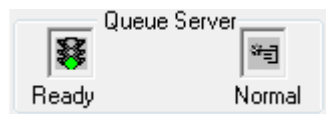




Symbole	Zustand	Definition
 <p>The image shows a window titled 'Queue Server' with two status indicators. The first indicator is a traffic light with the top red light lit, labeled 'Not Ready'. The second indicator is a queue icon with a document, labeled 'Normal'.</p>	<b>Not Ready</b>	Das Hardware-Profil ist deaktiviert und die Warteschlange akzeptiert keine Probenübergaben.

Tabelle 8-1: Status der Warteschlange (Fortsetzung)

Symbole	Zustand	Definition
	<b>Stand By</b>	Das Hardware-Profil wurde aktiviert aber alle Geräte befinden sich im Leerlauf. Pumpen laufen nicht und Gase sind abgeschaltet.
	<b>Warming Up</b>	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.
	<b>Ready</b>	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 arbeiten, sobald Proben übergeben wurden.
	<b>Waiting</b>	Das System beginnt automatisch mit der Aufnahme, sobald die nächste Probe übergeben wird.
	<b>PreRun</b>	Die Methode wird an jedes Gerät heruntergeladen und Geräte werden äquilibriert. Dieser Zustand tritt vor der Erfassung jeder Probe in einem Batch ein.
	<b>Acquiring</b>	Die Methode wird ausgeführt und die Datenaufnahme erfolgt.
	<b>Paused</b>	Das System wurde während der Erfassung angehalten.

## Anzeige der Symbole für den Instrumenten- und Gerätestatus

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 sicherzustellen, dass der LC-Pumpendruck angemessen ist, oder den genauen Status des Massenspektrometers anzeigen, um die Temperatur der Ionenquelle zu überwachen.

## Bedienungsanleitung – Batches

---

**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	Background Color (Hintergrundfarbe)	Beschreibung
Idle (Leerlauf)		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.
Äquilibrieren		Grün oder gelb	Das Gerät äquilibriert.
Im Wartezustand		Grün	Das Gerät wartet auf einen Befehl von der Software, von einem anderen Gerät oder auf bestimmte Maßnahmen durch den Bediener.
Läuft		Grün	Das Gerät verarbeitet einen Batch.
Abbruch		Grün	Das Gerät bricht den Vorgang ab.
Herunterladen		Grün	Eine Methode wird an das Gerät übertragen.
Bereit		Grün	Das Gerät arbeitet nicht, ist aber betriebsbereit.
Fehler		Rot	Das Gerät ist auf einen Fehler gestoßen, der untersucht werden sollte.

# Bedienungsanleitung – Analyse und Exploration von Daten

# 9

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

- Diagramme beschriften
- Überlagern und Summieren von Spektren oder Chromatogrammen
- Hintergrundsubtraktionen durchführen
- Algorithmen glätten
- Mit geglätteten Daten arbeiten
- Mit Strichspektrendaten arbeiten
- Mit Konturdiagrammen arbeiten
- Mit dem Fragment-Interpretationswerkzeug 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.

## Navigieren zwischen Proben in einer Datendatei

---

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

---

Beschreibungen der in diesem Verfahren verwendeten Navigationssymbole finden Sie in der Tabelle: [Tabelle C-4](#).

Öffnen Sie eine Datendatei, die mehrere Proben enthält, und führen Sie einen der folgenden Schritte aus:

- Um zur nächste Probe in der Datendatei zu wechseln, klicken Sie auf das Symbol **Show Next Sample** (→).
- Um zu einer nicht-sequenziellen Probe zu wechseln, klicken Sie auf das Symbol **Go to Sample** (↗).
- Wählen Sie die Probe, die angezeigt werden soll, aus der Liste **Sample** im Dialogfeld Probe auswählen aus.
- Um zur vorherigen Probe in der Datendatei zu wechseln, klicken Sie auf das Symbol **Show Previous Sample** (←).

## 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, d. h., die Anzahl der Perioden, Experimente und Zyklen, einschließlich Instrumentenparameter, sowie der LC-Geräte-Methode, einschließlich des LC-Pumpenvolumenstroms. Darüber hinaus enthalten sie auch MS-Auflösungs- und Massen-Kalibrierungstabellen für die angewendete Probenaufnahme. Informationen zu den Softwarefunktionen, die verfügbar sind, wenn der Benutzer die Dateiinformationen anzeigt, finden Sie im Abschnitt: [Rechtsklick-Menü „Show File Information Pane“](#).

**Hinweis:** Wenn Daten von mehr als einer Probe in dieselbe .wiff-Datei aufgenommen werden, wird der Dateiinformationen-Fensterbereich nicht automatisch aktualisiert, wenn der Benutzer durch die Proben scrollt. Schließen Sie den Dateiinformationen-Fensterbereich und öffnen Sie ihn wieder, um Details für die nächste Probe in der .wiff-Datei anzuzeigen.

---

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

Der Fensterbereich File information wird unter dem Diagramm geöffnet.

---

**Tip!** 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**.

---

## Anzeige der Daten in Tabellenform

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“ (TripleTOF-Systeme)

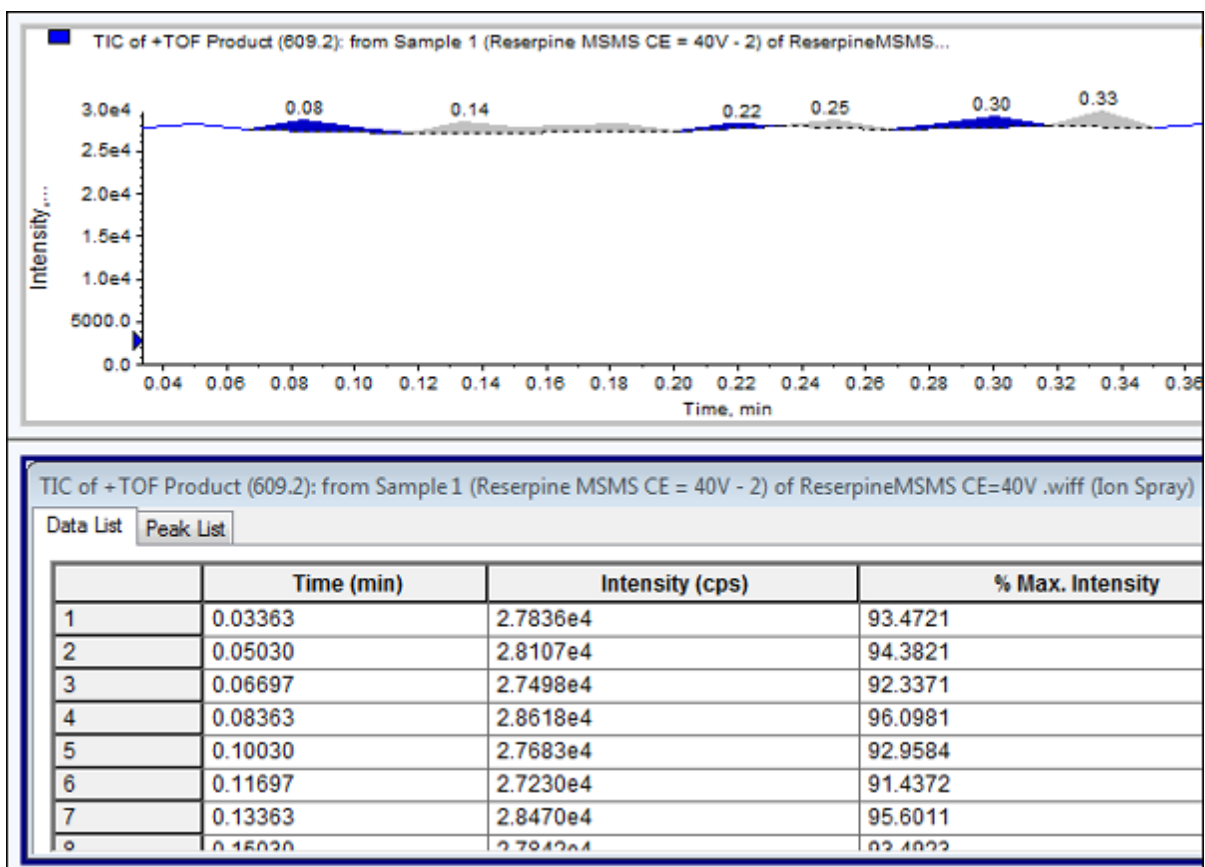


Tabelle 9-1: Rechtsklick-Menü für die Registerkarte „Spectral Peak List“

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

**Tabelle 9-2: Rechtsklick-Menü für die Registerkarte „Chromatographic Peak List“**

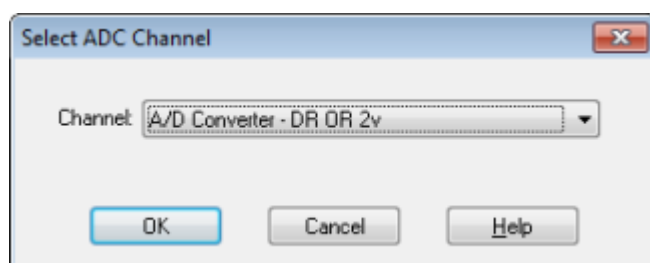
Menü	Funktion
<b>Show Peaks in Graph</b>	(Show Peaks in Graph) Zeigt die Peaks in der Grafik in zwei Farben an.
<b>IntelliQuan Parameters</b>	(IntelliQuan Parameters) Öffnet das Dialogfeld <b>IntelliQuan</b> .
<b>Save As Text</b>	(Save As Text) Speichert die Daten als .txt-Datei.
<b>Delete Pane</b>	(Teilfenster löschen) Löscht das ausgewählte Teilfenster.

## ADC-Daten anzeigen

Analog-Digital-Wandler (ADC)-Daten werden durch einen sekundären Sensor aufgenommen, wie beispielsweise von einem UV-Sensor durch eine ADC-Karte, und eignen sich für einen Vergleich mit Massenspektrometer-Daten. Um ADC-Daten bereitzustellen, erfassen Sie die ADC-Daten und die Massenspektrometerdaten gleichzeitig. Beide Datentypen werden dann in derselben Datei gespeichert.

1. Stellen Sie sicher, dass der Projektordner, in dem die ADC-Daten gespeichert sind, ausgewählt ist. Klicken Sie beispielsweise auf den Ordner *Example*.
2. Doppelklicken Sie in der in der Navigationsleiste unter **Explore** auf **Open Data File**. Das Dialogfeld „Select Sample“ wird geöffnet.
3. Doppelklicken Sie im Feld **Data Files** auf den Ordner „Sub-Data“ (sofern verfügbar), und klicken Sie dann auf die Datendatei, die geöffnet werden soll. Doppelklicken Sie beispielsweise im Ordner *Example* auf **Devices**, und klicken Sie dann auf **Adc16chan.wiff**.
4. Wählen Sie aus der **Samples**-Liste eine Probe aus und klicken Sie dann auf **OK**.
5. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show ADC Data**.

**Abbildung 9-2: Dialogfeld „Select ADC Channel“**



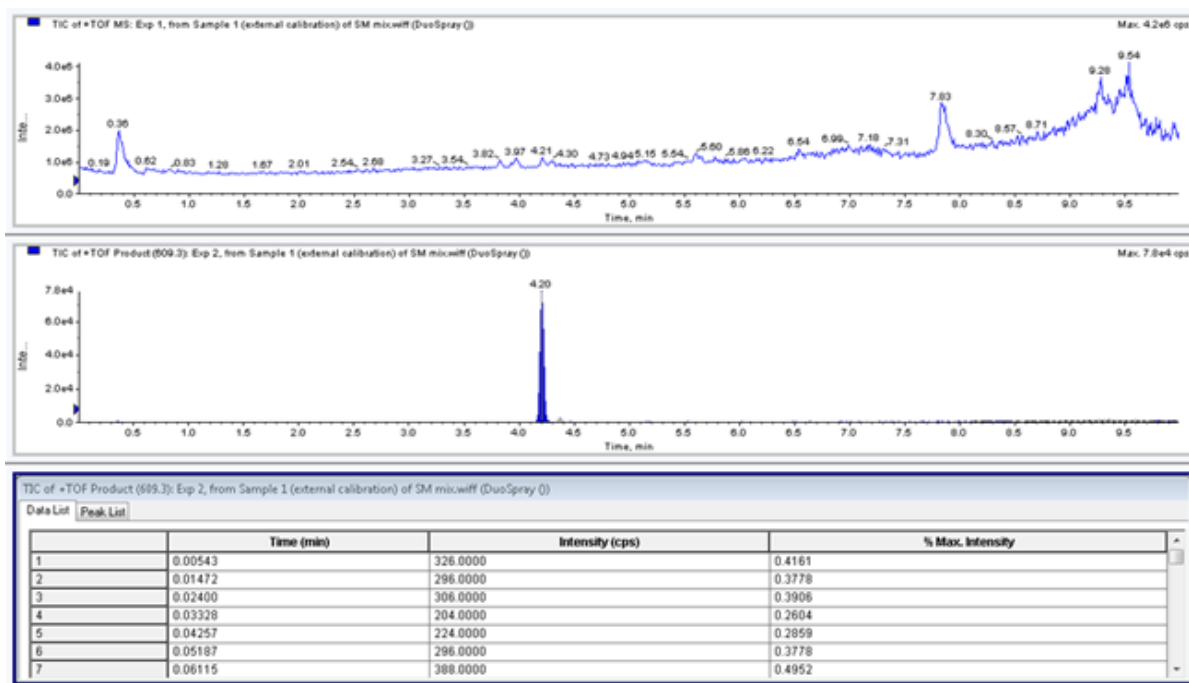
6. Wählen Sie aus der **Channel**-Liste einen Kanal aus und klicken Sie dann auf **OK**. Die ADC-Daten werden in einem neuen Fenster unter dem aktiven Fenster angezeigt.



## Anzeige der grundlegenden quantitativen Daten

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

Abbildung 9-3: List Data (Daten auflisten)



3. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Registerkarte Peak List 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 Sie dann **Analyst Classic Parameters** oder **IntelliQuan Parameters**, je nachdem, welche Option aktiv ist.
5. (Optional) Um die farbigen Peaks zu entfernen, klicken Sie mit der rechten Maustaste in der Registerkarte Peak List und löschen Sie 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. Weitere Informationen zu den für Chromatogramme verfügbaren Softwarefunktionen und zur Verwendung des „Chromatogram Panes“-Rechtsklick-Menüs finden Sie im folgenden Abschnitt: [Chromatogrammfenster](#)

## Bedienungsanleitung – Analyse und Exploration von Daten

---

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. Eine Beschreibung der Chromatogrammtypen finden Sie in der Tabelle: [Tabelle 9-3](#).

Für weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Ionen, siehe die Tabelle: [Tabelle 9-5](#).

**Tabelle 9-3: Chromatogramm-Arten**

<b>Chromatogramm-Arten</b>	<b>Ziel</b>
Total Ion Chromatogramm (TIC)	<p>Ein Chromatogramm, das 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 <b>MCA</b> während der Aufnahme der Datendatei aktiviert, dann wird die Datei für das Massenspektrum geöffnet. Wird das Kontrollkästchen <b>MCA</b> nicht aktiviert, dann wird die Datendatei als TIC geöffnet.</p>
Extrahiertes Ionenchromatogramm (XIC)	<p>Ein Chromatogramm 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>
Base Peak Chromatogramm (BPC)	<p>Ein Chromatogramm, das die Intensität des jeweils intensivsten Ions innerhalb eines Scans im Vergleich zur Zeit oder Anzahl der Analysen zeigt.</p>
Total Wavelength Chromatogramm (TWC)	<p>Ein Chromatogramm, das durch das Summieren aller Absorptionswerte im aufgenommenen Wellenlängenbereich und die Auftragung der Werte gegen die Zeit erstellt wird. Es besteht aus den summierten Absorptionen aller Ionen in einem Scan, die für einen chromatographischen Bereich als Funktion der Zeit dargestellt werden.</p>
Extracted Wavelength Chromatogramm (XWC)	<p>Eine Teilmenge von TWC. Ein XWC zeigt die Absorption für eine bestimmte Wellenlänge oder die Summe der Absorption für Wellenlängenbereiche.</p>
Diode Array Detector (DAD)	<p>Ein Chromatogramm, welches das Absorptionsspektrum der eluierenden Verbindungen bei einer oder mehreren Wellenlängen zeigt.</p>

## Anzeige von TICs aus einem Spektrum

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 klicken und dann auf **Show TIC**.

---

Informationen zur Verwendung des **Spectra Panes**-Rechtsklick-Menüs finden Sie im Abschnitt: [Spektralfenster](#).

## Anzeige eines Spektrums aus einem TIC

Ein TIC wird durch Summieren der Intensitätsbeiträge aller Ionen aus einer Reihe von Massen-Scans erzeugt. Verwenden Sie das TIC, um den gesamten Datensatz in einem einzigen Fenster anzuzeigen. Er besteht aus den summierten Intensitäten aller Ionen in einem Scan, die als Funktion der Zeit in einem chromatographischen Bereich abgebildet werden. Wenn die Daten Ergebnisse aus mehreren Experimenten enthalten, kann unterhalb des TIC ein TIC für jedes Experiment erstellt werden, das die Summe aller Experimente darstellt.

Wenn eine Datendatei geöffnet wird, wird sie standardmäßig als TIC angezeigt. Umfasst ein Experiment hingegen nur einen Scan, wird dieser als Spektrum angezeigt. Wenn der Benutzer vor der Erfassung der Datendatei das Kontrollkästchen **MCA** aktiviert, wird beim Öffnen der Datendatei das Massenspektrum angezeigt. Wird das Kontrollkästchen **MCA** nicht aktiviert, dann wird beim Öffnen der Datei der TIC angezeigt.

Informationen zur Verwendung des Spectra Panes-Rechtsklick-Menüs finden Sie im Abschnitt: [Spektralfenster](#).

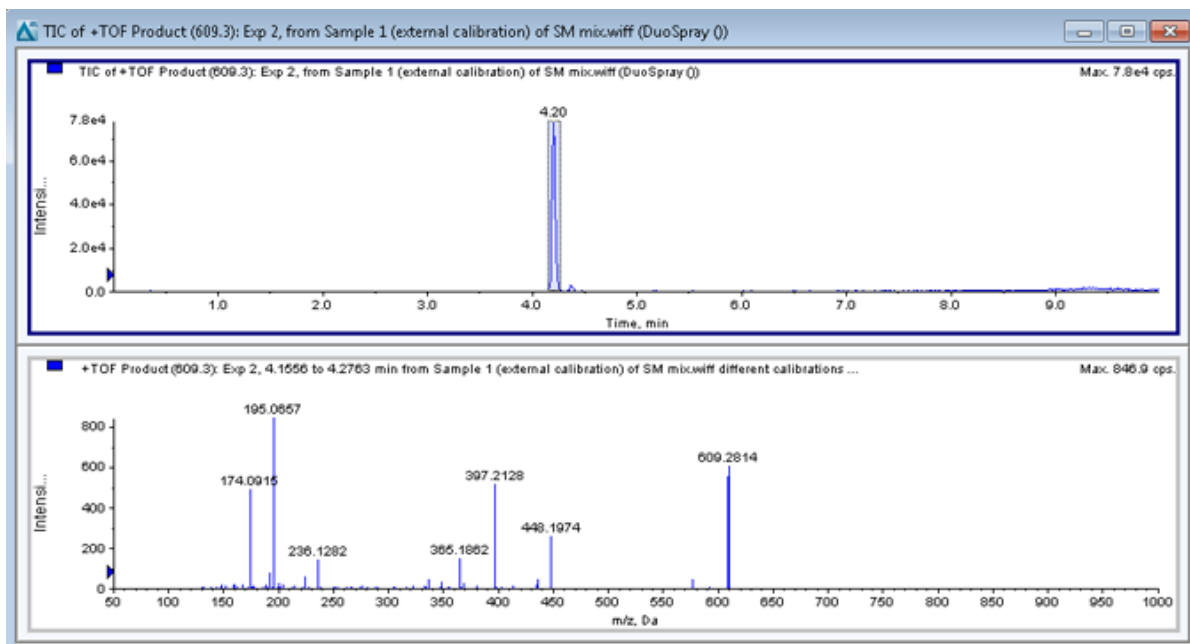
1. Wählen Sie in einem Bildschirmfenster, das einen TIC enthält, einen Bereich aus.
2. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show Spectrum**.  
Das Spektrum wird in einem neuen Fenster geöffnet.

---

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

---

Abbildung 9-4: Beispiel eines TIC



## XICs generieren

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. Für weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Ionen, siehe die Tabelle: [Tabelle 9-5](#).

Es gibt mehrere Verfahren zum Extrahieren von Ionen zur Erzeugung eines XIC, je nachdem, ob chromatographische oder spektrale Daten verwendet werden. Eine Zusammenfassung der Methoden, die mit Chromatogrammen und Spektren verwendet werden können, finden Sie in der folgenden Tabelle.

Tabelle 9-4: Zusammenfassung der Methoden zur XIC-Erzeugung

Method	Mit Chromatogramm verwenden	Mit Spektrum verwenden	Extraktion
Ausgewählter Bereich	Nein	Ja	Extrahiert Ionen aus einem ausgewählten Bereich in einem Spektrum.

Tabelle 9-4: Zusammenfassung der Methoden zur XIC-Erzeugung (Fortsetzung)

Methode	Mit Chromatogramm verwenden	Mit Spektrum verwenden	Extraktion
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.
Basispeakmassen	Ja	Ja	Kann nur bei Basispeak-Chromatogramm (BPCs) verwendet werden. Die Verwendung des Befehl <b>Use Base Peak Masses</b> 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.
Spezifizierte Massen	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.

## Generieren eines XICs mit einem ausgewählten Bereich

1. Öffnen Sie eine Datendatei, die Spektren enthält.
2. Wählen Sie einen Bereich aus, indem Sie mit der linken Maustaste an den Anfang des Bereichs klicken und mit gedrückter Maustaste den Mauszeiger an das Ende des Bereichs 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.

## Generieren eines XICs mit dem maximalen Peak

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 unter dem Spektrum-Fenster. Die Experiment-Informationen oben im Fenster zeigen den Massenbereich und die maximale Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde.

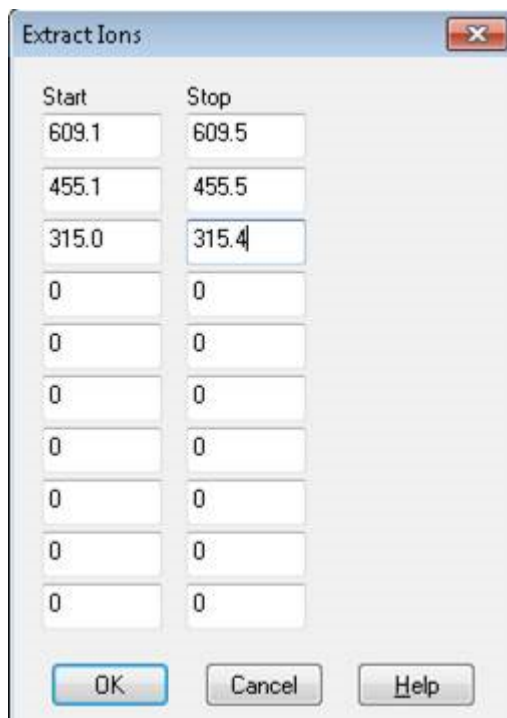
## Generieren eines XICs mit den Basispeakmassen

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 des Spektrum-Fensters. Die Experiment-Informationen auf der Fensteroberseite zeigen den Massenbereich und die maximale Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde.

## Extrahieren von Ionen durch Auswählen von Massen

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 jedes zu erstellende XIC ein.
  - 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.

---

**Hinweis:** Falls kein Endwert eingegeben wird, wird der Bereich durch den Anfangswert definiert.

---

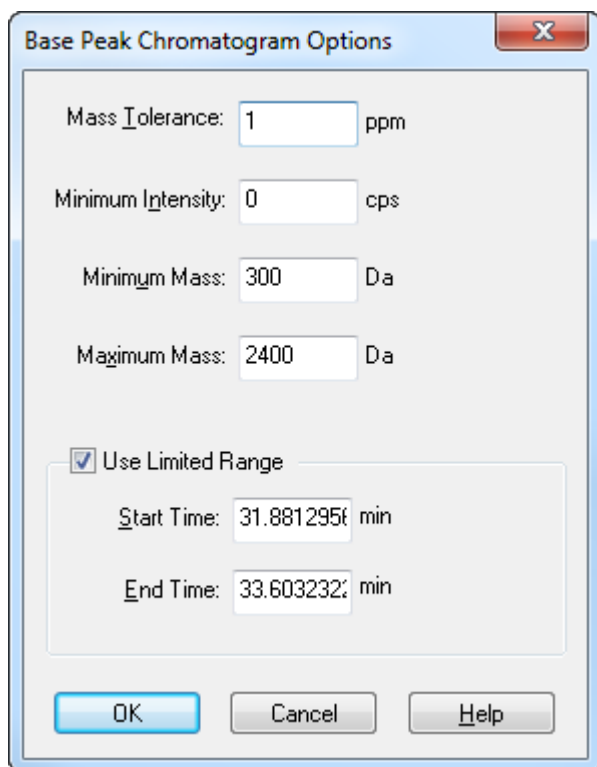
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Unterhalb des Chromatogramm-Fensters öffnet sich ein XIC (extrahiertes Ionenchromatogramm) für die getroffene Auswahl. Die Informationen zum Experiment oben im Fenster beinhalten Angaben zu den Massen und zur maximalen Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde.

## Generieren von BPCs

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 Auswahlen werden in den Feldern **Start Time** und **End Time** angezeigt.

**Abbildung 9-6: Base Peak Chromatogram Options**



4. Geben Sie in das Feld **Mass Tolerance** 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 in das Feld **Minimum Intensity** die Intensität ein, unter der Peaks vom Algorithmus ignoriert werden.
6. Geben Sie in das Feld **Minimum Mass** die Masse ein, die den Anfang des Scanbereiches bestimmt.
7. Geben Sie in das 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 gehen folgendermaßen vor:
  - Geben Sie in das Feld **Start Time** die Zeit ein, zu der der anvisierte Bereich des Experiments beginnt.
  - Geben Sie in das Feld **End Time** die Zeit ein, zu der der anvisierte Bereich des Experiments endet.
9. Klicken Sie auf **OK**.  
Der BPC wird in einem neuen Fenster erzeugt.

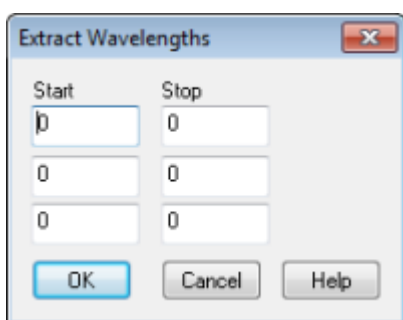


## Generieren von XWCs

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. Für weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Ionen, siehe die Tabelle: [Tabelle 9-5](#).

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

Abbildung 9-7: Dialog „Extract Wavelengths“



3. Geben Sie die Werte für **Start** und **Stop** ein.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Das XWC wird in einem Fenster unterhalb des DAD-Spektrums angezeigt.

## DAD-Daten anzeigen

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 aufgenommene 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 Sie einen Bereich des Spektrums, um einen Zeitbereich auszuwählen.
3. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show DAD Spectrum**.  
Das 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**.

---

## Generieren von TWCs

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 ein Chromatogramm als zeitabhängige Funktion dargestellt werden. Wenn die Daten Ergebnisse aus mehreren Experimenten enthalten, kann unterhalb des TWC ein TWC für jedes Experiment erstellt werden, 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. Für weitere Informationen über die Verwendung verfügbarer Ionen, siehe die Tabelle: [Tabelle 9-5](#).

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 dann auf **Show DAD TWC**.

---

## Anpassen des Schwellenwerts

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. Wenn Sie auf das blaue Dreieck klicken, sehen Sie 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 **Explore > Set Threshold**. im sich öffnenden Dialogfeld Threshold Options auf den Schwellenwert und klicken Sie dann auf **OK**.
  - Klicken Sie auf **Explore > Threshold**.

Das Diagramm wird aktualisiert und zeigt den neuen Schwellenwert. Die Kennzeichnung 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.

---

## 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

Grafische Daten können auf verschiedene Weise untersucht werden. Dieser Abschnitt enthält Informationen und Verfahren zur Verwendung einiger der am häufigsten verwendeten Funktionen.

Daten können zum Vergleich vor einer Verarbeitung wie Glättung oder Subtraktion gespeichert werden.

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

Teilfenster können eine variable oder feste Größe haben. Teilfenster werden innerhalb eines Fensters automatisch als Kacheln in Spalten und Zeilen angeordnet. Wenn die Größe eines Fensters geändert wird, passen sich die 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. Wird ein Fenster oder Teilfenster vergrößert, vergrößern sich die anderen Teilfenster gleichzeitig. Zum Beispiel kann ein Benutzer ein XIC mit einem BPC verknüpfen, aus dem das XIC extrahiert wurde. Vergrößert man ein BPC, so wird auch das XIC vergrößert, wodurch beide Chromatogramme die gleiche Vergrößerung haben.

### Verwalten von Daten

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

**Tabelle 9-5: 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> .	

Tabelle 9-5: Diagramm-Optionen (Fortsetzung)









Um dies zu tun ...	Verwenden Sie diese Menüoption	oder klicken Sie auf dieses Symbol
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 Sie 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	<ol style="list-style-type: none"> <li>Wenn zwei Grafiken geöffnet sind, klicken Sie auf eine und aktivieren damit dieses Teilfenster.</li> <li>Klicken Sie auf <b>Explore &gt; Link</b> und dann auf das andere Teilfenster.</li> </ol>	
Verknüpfungen entfernen	Schließen Sie eines der Fenster. Klicken Sie auf <b>Explore &gt; Remove Link</b> .	
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> .	

Tabelle 9-5: Diagramm-Optionen (Fortsetzung)

Um dies zu tun ...	Verwenden Sie diese Menüoption	oder klicken Sie auf dieses Symbol
Ein Fenster/ Teilfenster ausblenden	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf <b>Window</b> > <b>Hide Pane</b> .	
Ein Fenster maximieren	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf <b>Window</b> > <b>Maximize Pane</b> .	
Tile panes	Diagramm auswählen. Klicken Sie auf <b>Window</b> > <b>Tile all Panes</b> .	

## Vergrößern der Y-Achse

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 diese zu stark vergrößern, wird die Vergrößerungs-Box geschlossen.

---

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

---

**Tipp!** Um die Y-Achse der 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**..

---

## Vergrößern der X-Achse

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.

---

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

---

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



**WARNHINWEIS! Stromschlaggefahr. Die Abdeckungen nicht entfernen.** 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.



**WARNHINWEIS! Gefährdung durch ionisierende Strahlung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren.** Klären Sie vor der Reinigung oder Wartung, ob eine Dekontaminierung erforderlich ist. Wenn im System radioaktives Material, biologische Wirkstoffe und giftige Chemikalien verwendet wurden, muss der Kunde das System vor der Reinigung oder Wartung dekontaminieren.

## Empfohlener Wartungsplan

Die folgende Tabelle enthält einen empfohlenen Zeitplan für die Reinigung und Wartung des Systems.

**Tipp!** Führen Sie die Wartungsaufgaben regelmäßig durch, um die optimale Funktionsfähigkeit des Systems zu gewährleisten.

- Überprüfen Sie das System regelmäßig auf Gaslecks und führen Sie allgemeine Wartungsinspektionen durch, um den sicheren Betrieb des Systems zu gewährleisten.
- Reinigen Sie das System regelmäßig, um dessen Funktionstüchtigkeit zu erhalten.
- Überprüfen Sie im Zuge der Systemwartung sorgfältig die Teile des externen Gasversorgungssystems, einschließlich der an das Gerät angeschlossenen Schläuche, um sicherzustellen, dass sich diese in ordnungsgemäßem Zustand befinden. Ersetzen Sie alle gebrochenen, geknickten oder geplatzen Schläuche.

Informationen zur Wartung der Ionenquelle finden Sie im Dokument: *DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch*.

Um zu bestimmen, wie oft das Massenspektrometer und die Ionenquelle gereinigt oder gewartet werden müssen, berücksichtigen Sie bitte folgende Faktoren. Diese Faktoren können zu Veränderungen der Leistung des Massenspektrometers führen, die darauf hinweisen, dass eine Wartung erforderlich ist.

- Getestete Verbindungen
- Reinheit der Proben und Methoden zur Probenvorbereitung
- Die Dauer, während der die Sonde der Probe ausgesetzt ist
- Gesamtlaufzeit des Systems

Für die Bestellung von Verbrauchsmaterialien und die Durchführung grundlegender Service- oder Wartungsarbeiten, wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker (QMP) oder siehe das Dokument: *Handbuch für Teile und Ausrüstung*. Wenden Sie sich für alle weiteren Service- oder Wartungsanforderungen an einen Außendienstmitarbeiter von SCIEX.

**Tabelle 10-1: Wartungsarbeiten für das Massenspektrometer**

Komponente	Frequenz	Aufgabe	Weitere Informationen
System	Täglich	Überprüfen auf Undichtigkeiten	Siehe Abschnitt: <a href="#">Chemische Vorsichtsmaßnahmen</a> .
Curtain-Platte	Täglich	Reinigen	Siehe Abschnitt: <a href="#">Reinigung der Curtain-Platte</a> .
Vorvakuumumpumpenöl	Wöchentlich	Prüfen des Füllstands	Siehe Abschnitt: <a href="#">Inspektion des Ölstands in der Vakuumpumpe</a> . Wenden Sie sich für das Nachfüllen von Öl bei Bedarf an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder einen Außendienstmitarbeiter.
Vorvakuumumpumpenöl	Alle 3 Jahre oder nach Bedarf	Austauschen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.
Vorvakuumumpumpenöl	Nach Bedarf	Nachfüllen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.
Orifice-Platte (Vorderseite)	Nach Bedarf	Reinigen	Siehe Abschnitt: <a href="#">Reinigung der Vorderseite der Orifice-Platte</a> .
Orifice-Platte (Vorder- und Rückseite)	Nach Bedarf	Reinigen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.
QJet	Nach Bedarf	Reinigen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.

## Service- und Wartungsinformationen

---

**Tabelle 10-1: Wartungsarbeiten für das Massenspektrometer (Fortsetzung)**

Komponente	Frequenz	Aufgabe	Weitere Informationen
Q0-Stabsatz und IQ1-Linse	Nach Bedarf	Reinigen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.
Oberflächen des Geräts	Nach Bedarf	Reinigen	Siehe Abschnitt: <a href="#">Oberflächen reinigen</a> .
Quellenabluftauf-fangbehälter	Nach Bedarf	Leeren	Siehe Abschnitt: <a href="#">Entleeren des Quellenabluftauf-fangbehälters</a> .
Schnittstellenheizer	Nach Bedarf	Austauschen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.

**Tabelle 10-2: Ionenquellen-Wartungsarbeiten**

Komponente	Frequenz	Aufgabe	Weitere Informationen
TurbolonSpray- und APCI-Sonden	Nach Bedarf	Untersuchen und ersetzen	Siehe das Dokument: <i>DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch</i> .
Elektroden für die TurbolonSpray- und APCI-Sonden	Nach Bedarf	Untersuchen und ersetzen	Siehe das Dokument: <i>DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch</i> .
Koronaentladungsnadel	Nach Bedarf	Austauschen	Siehe das Dokument: <i>DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch</i> .
Turboheizer	Nach Bedarf	Austauschen	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.
Probenschlauch	Nach Bedarf	Austauschen	Siehe das Dokument: <i>DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch</i> .

Für Aufgaben, die mit „Nach Bedarf“ gekennzeichnet sind, beachten Sie bitte diese Empfehlungen:

- Reinigen Sie die Oberflächen des Massenspektrometers, wenn Substanzen ausgetreten sind oder wenn die Oberflächen verschmutzt wurden.
- Leeren Sie den Quellenabluftauffangbehälter, bevor er voll ist.



- Reinigen Sie die Orifice-Platte, die QJet-Ionenführung und den Q0-Bereich, wenn sich die Empfindlichkeit des Systems verschlechtert.

---

**Tip!** Reinigen Sie den Q0-Bereich regelmäßig, um die Auswirkungen von Aufladungen, einen erheblichen 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 auf, wenn der Ölstand unter den Mindestpegel fällt.
- Inspizieren Sie in regelmäßigen Abständen sämtliche Abluftanschlüsse und stellen Sie sicher, dass Abgase zuverlässig aus dem Labor des Kunden abgeführt werden.

## Oberflächen reinigen

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 eine Beschädigung des Geräts zu vermeiden.**

---

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 der Vorderseite

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



---

**WARNHINWEIS! Gefahr durch heiße Oberflächen. Lassen Sie die DuoSpray-Ionenquelle vor Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 30 Minuten 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.
- Umfangreichere Reinigungen vermieden werden, die einen Wartungstechniker erfordern.

Wenn eine 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.

## Service- und Wartungsinformationen

---

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 erhalten Sie im Abschnitt: [Chemische Vorsichtsmaßnahmen](#).

---

## Symptome einer Kontamination

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

- Deutlicher Empfindlichkeitsverlust
- Verstärktes Hintergrundrauschen
- Zusätzliche Peaks, die nicht Teil der Probe im vollständigen Scan oder in Vorläuferscan-Methoden sind

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 (es werden Neopren- bzw. Nitrilhandschuhe empfohlen)
  - Schutzbrillen
  - Laborkittel
  - Frisches Wasser in LC-MS-Qualität. Gebrauchtes Wasser kann Verunreinigungen enthalten, die das Massenspektrometer weiter verunreinigen können.
  - Methanol in LC-MS-Qualität, Isopropanol (2-Propanol) oder Acetonitril
  - Reinigungslösung. Verwenden Sie entweder:
    - 100 % Methanol
    - 100 % Isopropanol
    - Acetonitril/Wasser-Lösung im Verhältnis 1:1 (frisch angesetzt)
    - Acetonitril/Wasser-Gemisch im Verhältnis 1:1 mit 0,1 % Essigsäurelösung (frisch angesetzt)
  - Sauberes Becherglas mit einem Fassungsvermögen von 1 l oder 500 ml für die Herstellung der Reinigungslösungen
  - Becherglas mit einem Fassungsvermögen von 1 l zum Auffangen von benutzten Lösungsmitteln
  - Behälter für organischen Abfall
-

- Fusselfreie Wischtücher. Siehe Abschnitt: [Vom Hersteller erhältliche Werkzeuge und Hilfsmittel](#).
- (Optional) Polyestertupfer

## Vom Hersteller erhältliche Werkzeuge und Hilfsmittel

Tabelle 10-3:

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

## Bewährte Vorgehensweisen bei der Reinigung



**WARNHINWEIS!** Gefahr durch heiße Oberflächen. Lassen Sie die DuoSpray-Ionenquelle vor Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 30 Minuten abkühlen. Einige Oberflächen der Ionenquelle und der Vakuum-Schnittstelle werden beim Betrieb heiß.



**WARNHINWEIS!** Toxisch-chemische Gefahren. Beachten Sie die Sicherheitsdatenblätter der chemischen Produkte und befolgen Sie bei der Handhabung, Lagerung und Entsorgung von Chemikalien alle Sicherheitshinweise.



**WARNHINWEIS!** Gefährdung durch ionisierende Strahlung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Klären Sie vor der Reinigung oder Wartung, ob eine Dekontaminierung erforderlich ist. Wenn im System radioaktives Material, biologische Wirkstoffe und giftige Chemikalien verwendet wurden, muss der Kunde das System vor der Reinigung oder Wartung dekontaminieren.



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

- Lassen Sie die Ionenquelle abkühlen, bevor Sie sie ausbauen.
- Tragen Sie bei der Reinigung immer saubere, puderfreie Handschuhe (es werden Handschuhe aus Nitril oder Neopren empfohlen).
- Ziehen Sie nach der Reinigung der Komponenten des Massenspektrometers und vor dem Zusammenbau stets ein neues, sauberes Paar Handschuhe an.

## Service- und Wartungsinformationen

---

- Verwenden Sie keine Reinigungsmittel, die nicht in dieser Verfahrensbeschreibung angegeben sind.
- Wenn möglich, stellen Sie die Reinigungslösungen erst kurz vor Beginn der Reinigung her.
- Organische Lösungen und Lösungen mit organischen Komponenten dürfen nur in sehr sauberen Glasbehältern hergestellt und gelagert werden. Benutzen Sie niemals Flaschen aus Plastik. Aus diesen Flaschen können Verunreinigungen auslaugen und eine Verunreinigung des Massenspektrometers verursachen.
- Zur Vermeidung einer Kontamination der Reinigungslösung gießen Sie die Lösung auf das Tuch oder den Tupper.
- 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 Polyesterstopfen.

---

### Abbildung 10-1: Beispiel: Zusammenfalten des Wischtuches



- Um eine Kreuzkontamination zu vermeiden, berühren Sie die Oberfläche nur einmal mit dem Wischtuch oder dem Tupper 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 Tupper 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

---

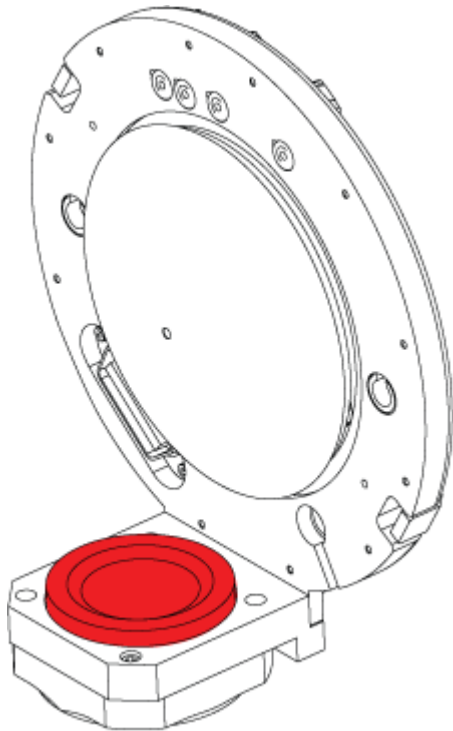


**WARNHINWEIS!** Gefahr durch heiße Oberflächen. Lassen Sie die DuoSpray-Ionenquelle vor Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 30 Minuten abkühlen. Einige Oberflächen der Ionenquelle und der Vakuum-Schnittstelle werden beim Betrieb heiß.

---

**VORSICHT: Mögliche Schäden am System. Lassen Sie nichts in den Ionenquellenablauf fallen, wenn die Ionenquelle entfernt wurde.**

**Abbildung 10-2: Ionenquellenablauf an der Vakuum-Schnittstelle**



---

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

---

1. Deaktivieren Sie das Hardwareprofil. Siehe das Dokument: *Softwarehandbuch*.
2. Entfernen Sie die Ionenquelle. Siehe das Ionenquellen-Dokument: *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 der Curtain-Platte, der Orifice-Platte oder des Schnittstellen-Heizers, um eine Beschädigung der Öffnung zu vermeiden.**

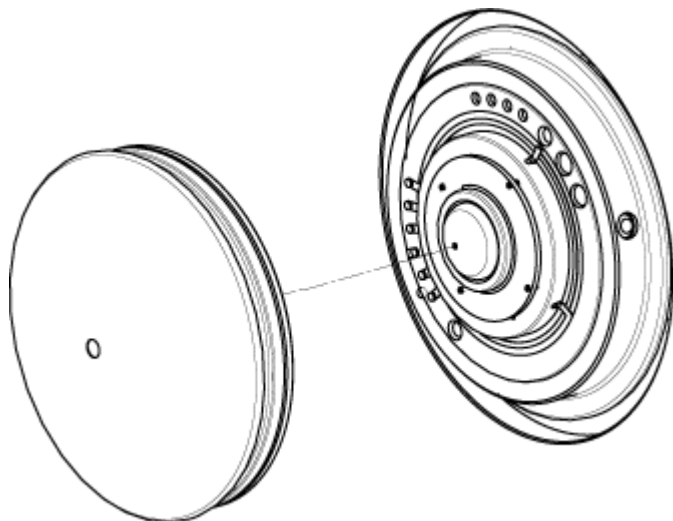
---

## Service- und Wartungsinformationen

---

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

**Abbildung 10-3: Entfernung der Curtain-Platte**



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

---

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

---

2. Befeuchten Sie ein fusselfreies Wischtuch mit Wasser in LC-MS-Qualität 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.** Der Schnittstellenheizer darf beim Reinigen der Orifice-Plattenoberfläche nicht entfernt werden. Häufiges Entfernen des Schnittstellenheizers kann Schäden am Schnittstellenheizer verursachen. Die Oberflächenreinigung des Schnittstellenheizers ist für die routinemäßige Reinigung ausreichend.

---

**VORSICHT: Mögliche Schäden am System.** Stecken Sie keinen Draht und keine Metallbürste in die Öffnung der Curtain-Platte, der Orifice-Platte oder des Schnittstellen-Heizers, um eine Beschädigung der Öffnung zu vermeiden.

---

1. Befeuchten Sie ein fusselfreies Tuch mit Wasser in LC-MS-Qualität 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.

---

## Erneute Inbetriebnahme des Massenspektrometers

1. Installieren Sie die Curtain-Platte.
2. Installieren Sie die Ionenquelle am Massenspektrometer. Siehe das Ionenquellen-Dokument: *Bedienerhandbuch*.  
Befestigen Sie die Ionenquelle durch Drehen der Verriegelungen nach unten in die verriegelte Position.
3. Aktivieren Sie das Hardwareprofil. Siehe das Dokument: *Softwarehandbuch*.

## Entleeren des Quellenabluftauffangbehälters

---



**WARNHINWEIS!** Gefahr durch heiße Oberflächen. Lassen Sie die DuoSpray-Ionenquelle vor Beginn von Wartungsarbeiten mindestens 30 Minuten abkühlen. Einige Oberflächen der Ionenquelle und der Vakuum-Schnittstelle werden beim Betrieb heiß.

---



**WARNHINWEIS!** Gefährdung durch ionisierende Strahlung, Biogefährdung oder toxisch-chemische Gefahren. Lagern Sie gefährliches Material in entsprechend gekennzeichneten Reststoffbehältern und entsorgen Sie es 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 abzuführen, und sorgen Sie dafür, dass die Abluftschläuche sicher mit Schellen befestigt sind. Stellen Sie sicher, dass der Luftaustausch im Labor für die ausgeführten Arbeiten angemessen ist.

---

**Hinweis:** Stellen Sie sicher, dass die Abfalleitung der Quelle weder Knicke aufweist noch durchhängt oder verdreht ist.

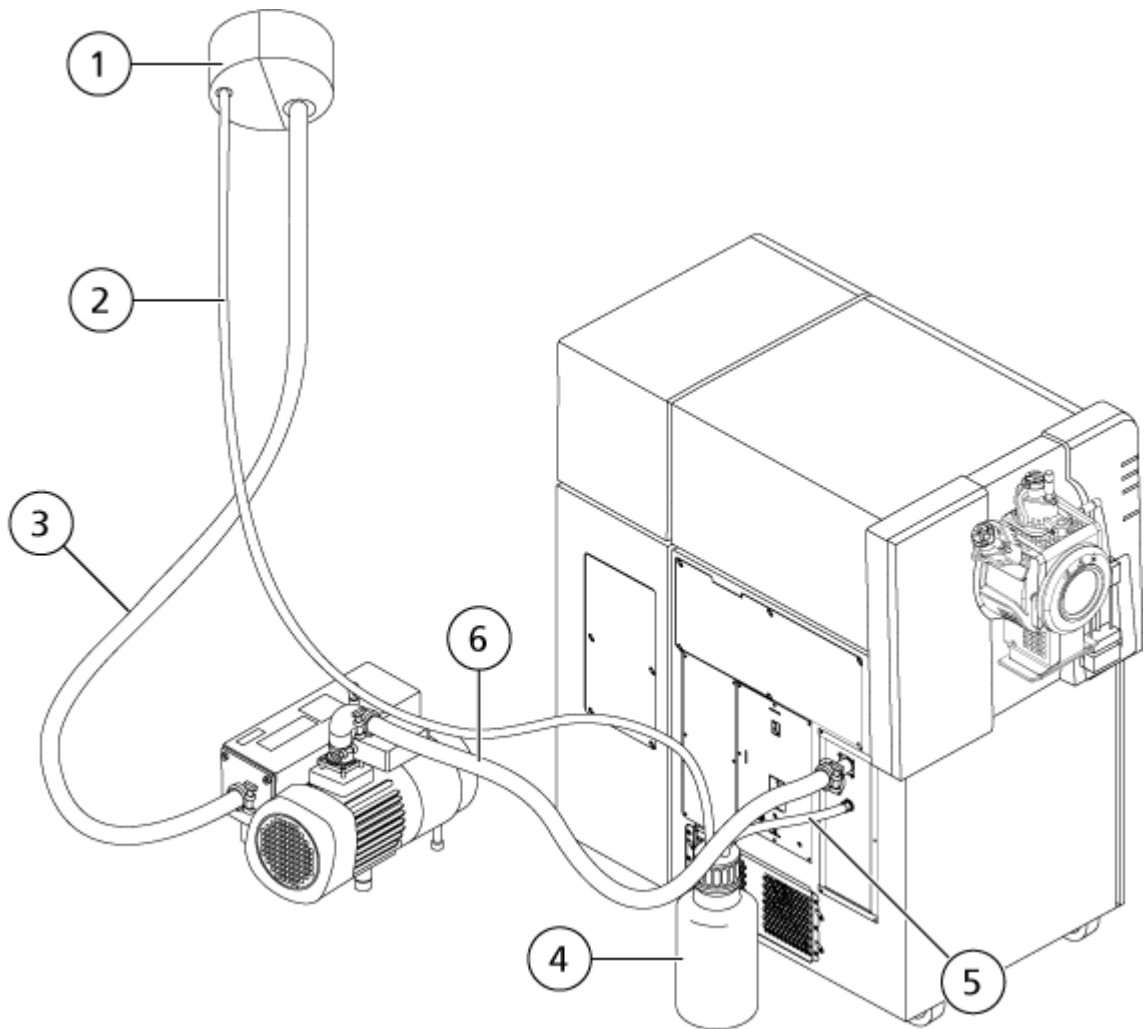
---

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 Dokument: *DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch*.
2. Lösen Sie die Klemmen, die die Schläuche mit dem Deckel des Quellenabluftauffangbehälters verbinden.



Abbildung 10-4: Quellenabluftauffangbehälter



Element	Beschreibung
1	Entlüftungsanschluss
2	Quellenabluftablaufschauch: 2,5 cm (1,0 Zoll) Innendurchmesser (ID)
3	Vorvakuumumpfen-Abluftschauch: 3,2 cm (1,25 Zoll) ID
4	Quellenabluftauffangbehälter In dieser Zeichnung ist der Auffangbehälter mit Kappe auf der Rückseite des Massenspektrometers zu sehen, um Anschlusspunkte sichtbar zu machen. Der Auffangbehälter kann sich an der Seite des Massenspektrometers im Auffangbehälter-Halter befinden. Vergewissern Sie sich, dass der Behälter gesichert ist, um Verschütten zu vermeiden.
5	Quellenabluftanschluss zum Massenspektrometer: 1,6 cm (0,625 Zoll) ID

## Service- und Wartungsinformationen

---

Element	Beschreibung
6	Vakuumeingangsschlauch der Vorvakuumpumpe.

---

**Hinweis:** Die Quellenabluftschlauchanschlüsse am Auffangbehälter, am Massenspektrometer und an der Laborentlüftung sind mit Schlauchklemmen gesichert.

---

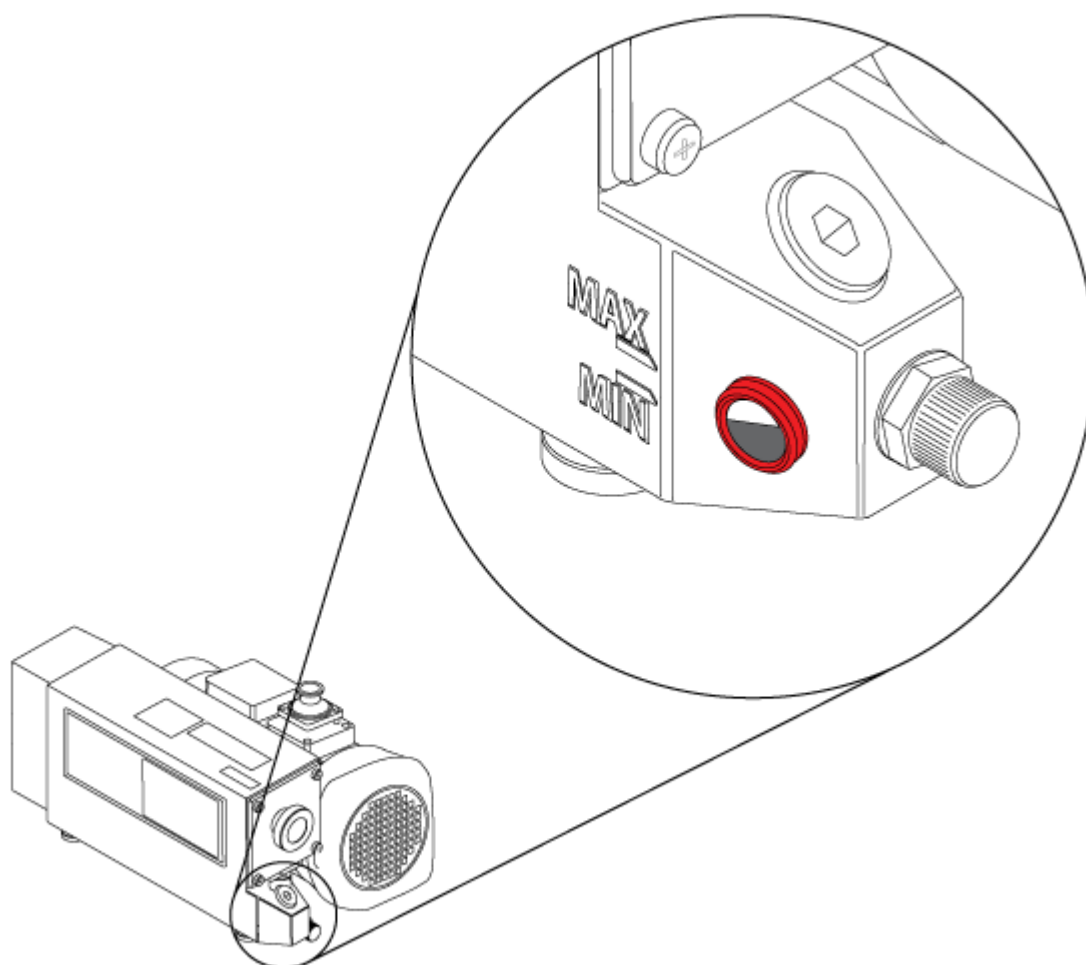
3. Heben Sie den Auffangbehälter aus dem Halter, falls erforderlich.
4. Trennen Sie die Kapillaren vom Deckel.
5. Entfernen Sie den Deckel vom Auffangbehälter.
6. Leeren Sie den Auffangbehälter und entsorgen Sie den Abfall gemäß den Laborverfahren und Vorschriften zur Abfallentsorgung.
7. Montieren Sie 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 10-5: Schauglas



## Ersetzen der Kühlerlüfterfilter des Massenspektrometers

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

### Voraussetzungen

- Schalten Sie das System wie im *Systemhandbuch* beschrieben ab.

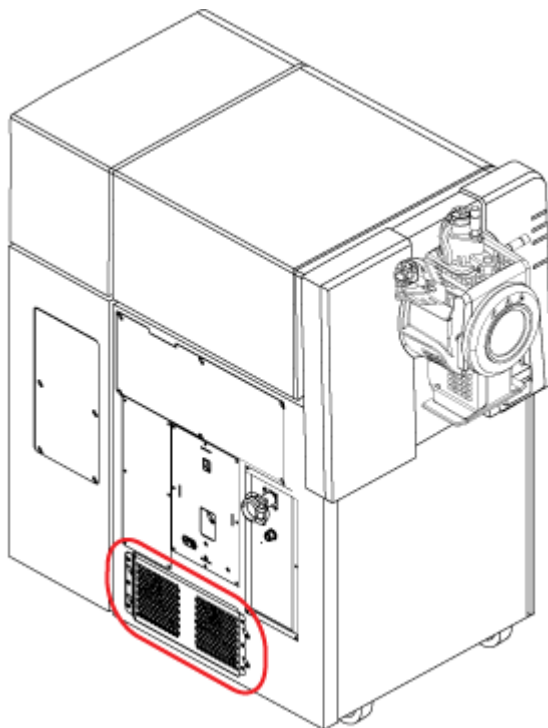


**WARNHINWEIS! Umweltgefährdung. Systemkomponenten nicht mit dem Hausmüll entsorgen. Befolgen Sie die lokalen Vorschriften für die Entsorgung von Komponenten.**

---

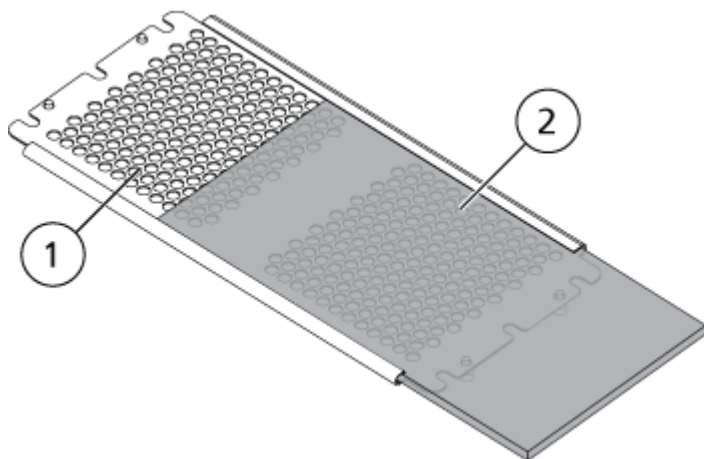
1. Entfernen Sie die vier Feststellschrauben an der Abdeckung des Kühlerlüfters.

**Abbildung 10-6: Filter des Kühlerlüfters**



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

**Abbildung 10-7: Filter der Kühlerlüfter**



Element	Beschreibung
1	Abdeckung der Kühlerlüfter
2	Filter

3. Bringen Sie die Filterabdeckung an.

## Lagerung und Handhabung



---

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

---

Wenn das Massenspektrometer für längere Zeit gelagert oder für den Transport vorbereitet werden soll, kontaktieren Sie einen Außendienstmitarbeiter von SCIEX, um Informationen zur Stilllegung zu erhalten. Um das Massenspektrometer von der Netzversorgung zu trennen, ziehen Sie den Netzstecker aus der Steckdose.

---

**Hinweis:** Die Ionenquelle und das Massenspektrometer müssen bei einer Temperatur zwischen  $-30\text{ °C}$  und  $+60\text{ °C}$  ( $-22\text{ °F}$  bis  $140\text{ °F}$ ) und einer relativen Luftfeuchtigkeit, die 99 % nicht überschreitet (nicht kondensierend), transportiert und gelagert werden. Lagern Sie das System nicht in einer Höhe von über 2.000 m (6.562 Fuß) über dem Meeresspiegel.

---

# Fehlerbehebung für das Massenspektrometer

# 11

Dieser Abschnitt enthält Informationen zur Behebung 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**

Symptom	Mögliche Ursache	Fehlerbehebung
Die QJet-Ionenführung ist äußerst schmutzig oder verschmutzt häufig.	Der Volumenstrom des Gases für die Curtain Gas-Schnittstelle ist zu niedrig.	Überprüfen Sie die Einstellung für das Gas für die Curtain Gas-Schnittstelle und erhöhen Sie diese, falls erforderlich.
Es ist ein Systemfehler aufgetreten, da der Vakuumdruck zu hoch ist.	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Der Ölstand der ist zu niedrig.</li><li>2. Es liegt eine Undichtigkeit vor.</li><li>3. Es wurde die falsche Orifice-Platte installiert.</li></ol>	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Überprüfen Sie den Ölstand in der Vorvakuumpumpe und wenden Sie sich dann zum Nachfüllen von Öl an den Wartungstechniker oder einen Außendienstmitarbeiter vor Ort. Siehe Abschnitt: <a href="#">Inspektion des Ölstands in der Vakuumpumpe</a>.</li><li>2. Prüfen Sie das Gerät auf Leckagen und beheben Sie diese.</li><li>3. Installieren Sie die richtige Orifice-Platte.</li></ol>

Tabelle 11-1: Systemfehler (Fortsetzung)

Symptom	Mögliche Ursache	Fehlerbehebung
Es ist ein Systemfehler aufgetreten, da die Temperatur im QPS-Erregermodul zu hoch ist.	1. Die Umgebungstemperatur ist zu hoch.	1. Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.  2. Die Spezifikationen für die Umgebungstemperatur finden Sie im Dokument: <i>Handbuch zur Standortplanung</i> für das System.
Die Steuerungssoftware meldet, dass sich das Massenspektrometer wegen der Ionenquelle im Fehlerstatus befindet.	1. Die Sonde ist nicht installiert. 2. Die Sonde ist nicht sicher angeschlossen.	Bestätigen Sie den Fehler im Statusfeld auf der Seite mit den Gerätedetails.  1. Installieren Sie die Sonde. Siehe das Dokument: <i>DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch</i> .  2. Entfernen und ersetzen Sie die Sonde anschließend. Ziehen Sie den Sicherungsring fest. Siehe das Dokument: <i>DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch</i> .
Die Steuerungssoftware zeigt an, dass die APCI-Sonde verwendet wird, obwohl die TurbolonSpray-Sonde installiert ist.	Die F3-Sicherung hat ausgelöst.	Wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter.
Der Sprühnebel wird nicht gleichmäßig verteilt.	Die Elektrode ist verstopft.	Reinigen oder ersetzen Sie die Elektrode. Siehe das Dokument: <i>DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch</i> .

## Fehlerbehebung für das Massenspektrometer

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

<b>Symptom</b>	<b>Mögliche Ursache</b>	<b>Fehlerbehebung</b>
Der Schnittstellenheizer ist nicht bereit.	Der Schnittstellenheizer ist fehlerhaft.	Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.
Die Auflösung des Massenspektrometers ist schlecht.	Das Massenspektrometer wurde nicht abgestimmt.	Optimieren Sie das Massenspektrometer mithilfe des Instrument Optimization-Assistenten. Weitere Informationen finden Sie im <i>Systemhandbuch</i> oder im Hilfesystem.
Die Leistung des Massenspektrometers hat nachgelassen.	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Die Ionenquellenbedingungen sind nicht optimiert.</li> <li>2. Die Probe wurde nicht richtig vorbereitet oder die Probe hat sich verschlechtert.</li> <li>3. Die Probeneinlassanschlüsse sind undicht.</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Optimieren Sie die Ionenquellenbedingungen. Siehe das Dokument: <i>DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch</i>.</li> <li>2. Bestätigen Sie, dass die Probe sachgemäß vorbereitet wurde.</li> <li>3. Vergewissern Sie sich, dass bei allen Anschlussstücken Typ und Größe stimmen, und achten Sie darauf, dass sie festen Sitz haben. 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>



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

Symptom	Mögliche Ursache	Fehlerbehebung
Es treten Lichtbögen oder Funken auf.	Die Koronaentladungsnadel befindet sich nicht an der richtigen Position.	Wenn die TurbolonSpray-Sonde verwendet wird, drehen Sie die Koronaentladungsnadel in Richtung der Curtain-Platte und weg vom Heizergasstrom. Siehe das Dokument: <i>DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch</i> .

**Tabelle 11-2: Probleme mit der Empfindlichkeit**

Mögliche Ursache	Fehlerbehebung
<b>Die Empfindlichkeit ist reduziert</b>	
Die Ionenquellenparameter sind nicht optimiert.	Optimieren Sie die Ionenquellenparameter.
Das Massenspektrometer ist nicht optimiert.	Optimieren Sie das Massenspektrometer mithilfe des Instrument Optimization-Assistenten.
Die Curtain-Platte ist verschmutzt.	Reinigen Sie die Curtain-Platte. Siehe Abschnitt: <a href="#">Reinigung der Curtain-Platte</a> .
Die Orifice-Platte ist verschmutzt.	Siehe Abschnitt: <a href="#">Reinigung der Vorderseite der Orifice-Platte</a> , oder wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.
Die QJet-Ionenführung oder die IQ0-Linse ist verschmutzt.	Reinigung der QJet-Ionenführung und IQ0-Linse. Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.
Der Q0-Bereich ist verschmutzt.	Prüfen Sie den Q0-Bereich auf Verunreinigung. Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.
Die Qualität der Probe hat sich verschlechtert oder die Probe hat eine niedrige Konzentration.	Überprüfen Sie die Konzentration der Probe. Verwenden Sie eine neue Probe.
Die Sonde ist nicht ordnungsgemäß installiert.	Entfernen und ersetzen Sie die Sonde.

## Fehlerbehebung für das Massenspektrometer

**Tabelle 11-2: Probleme mit der Empfindlichkeit (Fortsetzung)**

Mögliche Ursache	Fehlerbehebung
Die Ionenquelle ist nicht ordnungsgemäß installiert oder defekt.	Entfernen und installieren Sie die Ionenquelle. Achten Sie darauf, dass die Verriegelungen ordnungsgemäß gesichert sind. Wenn sich das Problem so nicht lösen lässt, installieren und optimieren Sie eine alternative Ionenquelle.
Einer oder mehrere O-Ringe der Vakuum-Schnittstelle fehlen.	Wenn die O-Ringe der Ionenquelle vorhanden sind, installieren Sie sie an der Vakuum-Schnittstelle. Wenn sie fehlen, ersetzen Sie sie.
Es liegt ein Problem des LC-Systems oder der Anschlüsse vor.	Führen Sie eine Fehlerbehebung des LC-Systems durch.
Das Auflösungspotenzial von Ionenclustern (DP) ist nicht optimiert.	Optimieren Sie das DP.
Die Elektrode ist verunreinigt oder verstopft.	Ersetzen Sie die Elektrode. Siehe das Dokument: <i>DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch</i> .
<b>Es gibt kein Signal, oder das Signal ist instabil</b>	
Die Schläuche sind verstopft.	Ersetzen Sie die Probenschläuche.

**Tabelle 11-3: Probleme mit Hintergrundrauschen**

Mögliche Ursache	Fehlerbehebung
Die <b>Temperature (TEM)</b> , IonSpray-Spannung (IS) oder der Volumenstrom des Heizergases (GS2) ist zu hoch.	Optimieren Sie die Ionenquellenparameter. Siehe das Dokument: <i>DuoSpray-Ionenquelle Bedienerhandbuch</i> .
Die Curtain-Platte ist verschmutzt.	Reinigen Sie die Curtain-Platte. Siehe Abschnitt: <a href="#">Reinigung der Curtain-Platte</a> .
Die Orifice-Platte ist verschmutzt.	Reinigen Sie die Vorderseite der Orifice-Platte. Siehe Abschnitt: <a href="#">Reinigung der Vorderseite der Orifice-Platte</a> .
Die QJet-Ionenführung oder die IQ0-Linse ist verschmutzt.	Nehmen Sie eine vollständige Reinigung der Komponenten an der Vorderseite des Massenspektrometers vor. Wenden Sie sich an einen qualifizierten Wartungstechniker vor Ort oder an einen Außendienstmitarbeiter.

**Tabelle 11-3: Probleme mit Hintergrundrauschen (Fortsetzung)**

Mögliche Ursache	Fehlerbehebung
Der Q0-Bereich ist verschmutzt.	Reinigen Sie den Q0-Bereich. Kontaktieren Sie den Wartungstechniker oder den Außendienstmitarbeiter.
Die mobile Phase ist kontaminiert.	Ersetzen Sie die mobile Phase.
Die Ionenquelle ist verunreinigt.	<p>Reinigen oder ersetzen Sie die Komponenten der Ionenquelle und stellen Sie dann die geeigneten Bedingungen für Ionenquelle und Front-End her:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Positionieren Sie die Sonde so weit wie möglich von der Öffnung entfernt (vertikal und horizontal).</li> <li>2. (Analyst TF Software) Stellen Sie sicher, dass die Schnittstellenheizung eingeschaltet ist.</li> <li>3. Infundieren oder injizieren Sie Methanol und Wasser im Verhältnis von 50:50 bei einer Pumpförderleistung von 1 ml/Min.</li> <li>4. Stellen Sie in der Steuerungssoftware die Temperatur auf 650, das Ionenquellengas 1 auf 60, und das Ionenquellengas 2 auf 60 ein.</li> <li>5. Stellen Sie den Volumenstrom des Gases für die Curtain Gas-Schnittstelle auf 45 oder 50 ein.</li> <li>6. Lassen Sie das System mindestens 2 Stunden, am besten jedoch über Nacht laufen.</li> </ol>

Wenn Sie Kontakt mit dem Vertrieb wünschen oder technische Unterstützung oder Service benötigen, wenden Sie sich bitte an einen Außendienstmitarbeiter oder besuchen Sie die SCIEX-Website unter [sciex.com](http://sciex.com). Dort finden Sie Kontaktinformationen.

# Empfohlene Kalibrierungen

# A

**VORSICHT: Potenziell falsches Ergebnis. Verwenden Sie keine Lösungen mit abgelaufenem Verwendungsdatum oder Lösungen, die nicht bei angegebener Lagertemperatur gelagert wurden.**

In der folgenden Tabelle sind die von SCIEX empfohlenen Standards für die Kalibrierung des TripleTOF 5600/5600+-Systems aufgeführt. Für Informationen zu Tuninglösungen siehe [Betriebsanleitung – Tunen und Kalibrieren](#).

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

Massen					
59,04914	233,17472	442,33740	674,50484	906,67228	1196,88158

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

Massen				
44,99819	411,25991	585,38549	933,63665	1165,80409

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

TOF MS	Massen
Aminoheptansäure	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
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**

TOF MS	Massen
7-Aminoheptansäure	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)**

MSMS (Sulfinpyrazon)	Massen
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

## Empfohlene Kalibrierungsionen

---

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

<b>MSMS (Sulfinpyrazonfragment)</b>	<b>Massen</b>
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	77,03967
C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N	116,0506
C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N	130,0662
C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> NO	158,0611
C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	200,0591
C <sub>15</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	217,0771
C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O	249,1033
C <sub>17</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	277,09825

# Exakte Massen und chemische Formeln

# B

## PPG

Table 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 MSMS-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.

Table B-1: Exakte PPG-Massen

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>
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
17	1004,72218	1022,75600	987,71890	520,39491	1049,72037

## Exakte Massen und chemische Formeln

**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>
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

## Reserpin

**Tabelle B-2: Exakte Massen von Reserpin (C<sub>33</sub>H<sub>40</sub>N<sub>2</sub>O<sub>9</sub>)**

Beschreibung	Masse
Molekulares Ion C <sub>33</sub> H <sub>41</sub> N <sub>2</sub> O <sub>9</sub>	609,28066
Fragment C <sub>23</sub> H <sub>30</sub> NO <sub>8</sub>	448,19659
Fragment C <sub>23</sub> H <sub>29</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	397,21218
Fragment C <sub>22</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	365,18597
Fragment C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>3</sub>	236,12812
Fragment C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> O <sub>4</sub>	195,06519
Fragment C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> NO	174,09134

## Taurocholsäure

**Tabelle B-3: Exakte Massen von Taurocholsäure (C<sub>26</sub>H<sub>45</sub>NO<sub>7</sub>S)**

Beschreibung	Masse
Molekulares Ion C <sub>26</sub> H <sub>44</sub> NO <sub>7</sub> S	514,28440
Fragment C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S	106,98084
Fragment C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>3</sub> S	124,00739
Fragment SO <sub>3</sub>	79,95736



TOF-Kalibrierlösung

Tabelle B-4: TOF-Kalibrierlösung, exakte Massen

Beschreibung	Masse
Molekulares Ion Cs <sup>+</sup>	132,90488
Molekulares Ion Peptid ALILTLVS	829,53933

Peptid ALILTLVS

Tabelle B-5: Exakte Masse des Peptids ALILTLVS



Name	Sequenz	Masse	Ladungszustand
Vorläufer-Ion	ALILTLVS	829,5393	1+
b8	ALILTLVS	811,5288	1+
b7	ALILTLV	724,4967	1+
b7-18	ALILTLV	706,4862	1+
b6-18	ALILTLV	607,4178	1+
y5	LTLVS	532,3341	1+
b5	ALILT	512,3443	1+
b5-18	ALILT	494,3337	1+
b4	ALIL	411,2966	1+
b3	ALI	298,2125	1+
Internes Fragment y b	IL oder LI	227,1754	1+
Internes Fragment y b	LT oder TL	215,139	1+
b2	AL	185,1285	1+
a2	AL	157,1335	1+
Immonium-Ionen	I oder L	86,09643	1+

# Symbole der Werkzeugleiste

# C

Weitere Informationen zu Symbolen der Werkzeugleiste finden Sie im Dokument: *Handbuch für Fortgeschrittene*.

















**Tabelle C-1: Symbole der Werkzeugleiste**

Symbol	Name	Beschreibung
	<b>New Subproject</b>	Erstellt ein Teilprojekt. Teilprojekte können später im Prozess nur dann erstellt werden, wenn das Projekt ursprünglich mit Teilprojekten erstellt wurde.
	<b>Copy Subproject</b>	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 auf Teilprojekt-Ebene vorhanden sind, verwendet die Software die Ordner der Projektebene.

**Tabelle C-2: Acquisition Method Editor-Symbole**




Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Mass Spec</b>	Zeigt die MS-Registerkarte im Acquisition Method Editor an.
	<b>Period</b>	Fügt ein Experiment, ein <b>IDA Criteria Level</b> hinzu, oder löscht den Zeitraum.
	<b>Autosampler</b>	Ruft die Registerkarte Autosampler Properties auf.
	<b>Syringe Pump</b>	Ruft die Registerkarte Syringe Pump Properties auf.
	<b>Column Oven</b>	Ruft die Registerkarte Column Oven Properties auf.
	<b>Valve</b>	Ruft die Registerkarte Valve Properties auf.
	<b>DAD</b>	Öffnet den DAD Method Editor. Siehe Abschnitt: <a href="#">DAD-Daten anzeigen</a> .
	<b>ADC</b>	Ruft die Registerkarte ACD Properties auf. Siehe Abschnitt: <a href="#">ADC-Daten anzeigen</a> .









Tabelle C-3: Symbole im Aufnahmemodus

Symbol	Name	Beschreibung
	<b>View Queue</b>	Zeigt die Proben-Warteschlange an.
	<b>Instrument Queue</b>	Zeigt eine entfernt liegende Instrumentenstation an.
	<b>Status for Remote Instrument</b>	Zeigt den Status eines entfernt liegenden Geräts an.
	<b>Start Sample</b>	Startet die Probe in der Warteschlange.
	<b>Stop Sample</b>	Stoppt die Probe in der Warteschlange.
	<b>Abort Sample</b>	Beendet die Probenaufnahme während der Verarbeitung dieser Probe.
	<b>Stop Queue</b>	Stoppt die Warteschlange, bevor die Verarbeitung aller Proben abgeschlossen ist.
	<b>Pause Sample Now</b>	Fügt eine Pause in die Warteschlange ein.
	<b>Insert Pause before Selected Sample(s)</b>	Fügt eine Pause vor einer bestimmten Probe ein.
	<b>Continue Sample</b>	Setzt die Aufnahme der Probe fort.
	<b>Next Period</b>	Startet eine neue Periode.
	<b>Extend Period</b>	Verlängert den aktuellen Zeitabschnitt.
	<b>Next Sample</b>	Stoppt die Aufnahme der aktuellen Probe und beginnt mit der Aufnahme der nächsten Probe.
	<b>Equilibrate</b>	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.
	<b>Standby</b>	Versetzt das Gerät in den <b>Standby</b> -Zustand.
	<b>Ready</b>	Versetzt das Gerät in den <b>Ready</b> -Zustand.

## Symbole der Werkzeugleiste

**Tabelle C-3: Symbole im Aufnahmemodus (Fortsetzung)**

Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Reserve Instrument for Tuning</b>	Stellt das Massenspektrometer für Tuning und Kalibrierung bereit.
	<b>Method Wizard</b>	Startet den <b>Method Wizard</b> .
	<b>Purge Modifier</b>	Startet die Spülung des Modifikators aus der Modifier-Pumpe.

Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Calibrate from spectrum</b>	Öffnet den Dialog Mass Calibration Option und verwendet das aktive Spektrum zum Kalibrieren des Massenspektrometers.
	<b>Manual Tune</b>	Öffnet den „Manual Tune Editor“.
	<b>Instrument Optimization</b>	Überprüft die Leistung des Geräts, passt die Massenkalisierung an oder passt die Massenspektrometer-Einstellungen an.
	<b>View Queue</b>	Zeigt die Proben-Warteschlange an.
	<b>Instrument Queue</b>	Zeigt ein dezentrales Gerät an.
	<b>Status for Remote Instrument</b>	Zeigt den Status eines entfernt liegenden Geräts an.
	<b>Reserve Instrument for Tuning</b>	Stellt das Instrument für Tuning und Kalibrierung bereit.
	<b>Purge Modifier</b>	Klicken Sie hier, um den Modifikator aus der Modifikator-Pumpe zu reinigen oder zu entleeren.

**Tabelle C-4: Explore – Schnellverweis: Chromatogramme und Spektrum**


















Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Open Data File</b>	Öffnet Dateien.
	<b>Show Next Sample</b>	Geht zur nächsten Probe.

Tabelle C-4: Explore – Schnellverweis: Chromatogramme und Spektrum (Fortsetzung)

Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Show Previous Sample</b>	Geht zur vorhergehenden Probe.
	<b>Go To Sample</b>	Öffnet das Dialogfeld „Select Sample“.
	<b>List Data</b>	Zeigt die Daten in Tabellenform an.
	<b>Show TIC</b>	Generiert ein TIC von einem Spektrum.
	<b>Extract Using Dialog</b>	Extrahiert Ionen durch Auswählen von Massen.
	<b>Show Base Peak Chromatogram</b>	Generiert ein BPC.
	<b>Show Spectrum</b>	Generiert ein Spektrum aus einem TIC.
	<b>Copy Graph to new Window</b>	Kopiert das aktive Diagramm in ein neues Fenster.
	<b>Baseline Subtract</b>	Öffnet das Dialogfeld „Baseline Subtract“.
	<b>Threshold</b>	Passt den Schwellenwert an.
	<b>Noise Filter</b>	Zeigt das Dialogfeld Noise Filter Options an, das verwendet werden kann, um die Mindestbreite eines Peaks zu definieren. Signale unterhalb dieser Mindestbreite werden als Rauschen betrachtet.
	<b>Show ADC</b>	Zeigt ADC-Daten an.
	<b>Show File Info</b>	Zeigt die experimentellen Bedingungen, die zur Sammlung der Daten verwendet wurden.
	<b>Add arrows</b>	Fügt Pfeile auf der X-Achse des aktuellen Diagramms ein.
	<b>Remove all arrows</b>	Entfernt Pfeile von der X-Achse des aktuellen Diagramms.

## Symbole der Werkzeugleiste

Tabelle C-4: Explore – Schnellverweis: Chromatogramme und Spektrum (Fortsetzung)














Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Offset Graph</b>	Kompensiert den kleinen Zeitunterschied zwischen der Aufzeichnung der ADC-Daten und der Erfassung der Massenspektrometer-Daten. Dies ist nützlich, wenn Sie Diagramme zum Vergleich überlagern.
	<b>Force Peak Labels</b>	Kennzeichnet alle Peaks.
	<b>Expand Selection By</b>	Bestimmt den Vergrößerungsfaktor für einen Teil des Diagramms, der genauer untersucht werden soll.
	<b>Clear ranges</b>	Bringt die vergrößerte Auswahl wieder auf die normale Ansicht.
	<b>Set Selection</b>	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.
	<b>Normalize To Max</b>	Skaliert ein Diagramm auf das Maximum, sodass der intensivste Peak auf die Originalgröße skaliert wird, egal, ob er sichtbar ist oder nicht.
	<b>Show History</b>	Zeigt eine Zusammenfassung der Datenverarbeitungsschritte an, die mit einer bestimmten Datei ausgeführt wurden, wie z. B. Glättung, Subtraktion, Kalibrierung und Rauschfilterung.
	<b>Open Compound Database</b>	Öffnet die Datenbank für chemische Verbindungen.
	<b>Set Threshold</b>	Passt den Schwellenwert an.
	<b>Show Contour Plot</b>	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.
	<b>Show DAD TWC</b>	Generiert ein TWC des DAD-Spektrums.
	<b>Show DAD Spectrum</b>	Generiert ein DAD-Spektrum.
	<b>Extract Wavelength</b>	Extrahiert bis zu drei Wellenlängenbereiche von einem DAD-Spektrum und zeigt ein XWC.

Tabelle C-5: Explore-Symbolleiste – Schnellverweis: Überlagern von Graphen





Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Home Graph</b>	Das Diagramm wieder auf den ursprünglichen Maßstab setzen.
	<b>Overlay</b>	Überlagert Diagramme.
	<b>Cycle Overlays</b>	Wechselt zwischen überlagerten Diagrammen.
	<b>Sum Overlays</b>	Fügt die Diagramme zusammen.

Tabelle C-6: Explore-Symbolleiste – Schnellverweis: Fragment Interpretation Tool










Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Show Fragment Interpretation Tool</b>	Öffnet das Fragment Interpretation Tool, das die einzelnen, nicht-zyklischen Bindungsspaltungsfragmente aus einer mol-Datei berechnet.

Tabelle C-7: Navigations-Symbole auf der Explore-Symbolleiste

Symbol	Name	Funktion
	<b>Open File</b>	Öffnet Dateien.
	<b>Show Next Sample</b>	Navigiert zur nächsten Probe.
	<b>Show Previous Sample</b>	Navigiert zur vorhergehenden Probe.
	<b>GoTo Sample</b>	Öffnet das Dialogfeld „Select Sample“.
	<b>List Data</b>	Zeigt die Daten in Tabellenform an.
	<b>Show TIC</b>	Generiert ein TIC von einem Spektrum.
	<b>Extract Using Dialog</b>	Anklicken extrahiert Ionen durch Auswählen von Massen.
	<b>Show Base Peak Chromatogram</b>	Generiert ein BPC.

## Symbole der Werkzeugleiste

**Tabelle C-7: Navigations-Symbole auf der Explore-Symboleiste (Fortsetzung)**
















Symbol	Name	Funktion
	<b>Show Spectrum</b>	Generiert ein Spektrum aus einem TIC.
	<b>Copy Graph to new Window</b>	Kopiert das aktive Diagramm in ein neues Fenster.
	<b>Baseline Subtract</b>	Öffnet das Dialogfeld „Baseline Subtract“.
	<b>Threshold</b>	Passt den Schwellenwert an.
	<b>Noise Filter</b>	Öffnet das Dialogfeld „Noise Filter Options“, das die Mindestbreite eines Peaks zu definiert. Signale unterhalb dieser Mindestbreite werden als Rauschen betrachtet.
	<b>Show ADC</b>	Zeigt ADC-Daten an.
	<b>Show File Info</b>	Zeigt die experimentellen Bedingungen, die zur Sammlung der Daten verwendet wurden.
	<b>Add arrows</b>	Fügt Pfeile auf der X-Achse des aktuellen Diagramms ein.
	<b>Remove all arrows</b>	Entfernt Pfeile von der X-Achse des aktuellen Diagramms.
	<b>Offset Graph</b>	Kompensiert den kleinen Zeitunterschied zwischen der Aufzeichnung der ADC-Daten und der Erfassung der Massenspektrometer-Daten. Dies ist nützlich, wenn Sie Diagramme zum Vergleich überlagern.
	<b>Force Peak Labels</b>	Kennzeichnet alle Peaks.
	<b>Expand Selection By</b>	Bestimmt den Vergrößerungsfaktor für einen Teil des Diagramms, der genauer untersucht werden soll.
	<b>Clear ranges</b>	Bringt die vergrößerte Auswahl wieder auf die normale Ansicht.
	<b>Set Selection</b>	Legt Anfangs- und Endpunkte für eine Auswahl fest. Dies ermöglicht eine genauere Auswahl als das Markieren des Bereiches mit dem Cursor.
	<b>Normalize to Max</b>	Vergrößert ein Diagramm auf das Maximum, so dass der intensivste Peak auf die Originalgröße skaliert wird, egal ob dieser sichtbar ist oder nicht.



Tabelle C-7: Navigations-Symbole auf der Explore-Symbolleiste (Fortsetzung)















Symbol	Name	Funktion
	<b>Show History</b>	Zeigt eine Zusammenfassung der Datenverarbeitungsschritte an, die mit einer bestimmten Datei ausgeführt wurden, wie z. B. Glättung, Subtraktion, Kalibrierung und Rauschfilterung.
	<b>Open Compound Database</b>	Öffnet die Datenbank für chemische Verbindungen.
	<b>Set Threshold</b>	Passt den Schwellenwert an.
	<b>Show Contour Plot</b>	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.
	<b>Show DAD TWC</b>	Generiert ein TWC vom DAD.
	<b>Show DAD Spectrum</b>	Generiert ein DAD-Spektrum.
	<b>Extract Wavelength</b>	Extrahiert bis zu drei Wellenlängenbereiche von einem DAD-Spektrum und zeigt ein XWC.

Tabelle C-8: Symbole auf der Registerkarte „Integration“ und im „Quantification Wizard“








Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Set parameters from Background Region</b>	Verwendet den ausgewählten Peak.
	<b>Select Peak</b>	Verwendet den ausgewählten Hintergrund.
	<b>Manual Integration Mode</b>	Integriert Peaks manuell.
	<b>Show or Hide Parameters</b>	Blendet die Peak-Finder-Parameter ein oder aus.
	<b>Show Active Graph</b>	Zeigt nur das Analyten-Chromatogramm.

## Symbole der Werkzeugleiste

**Tabelle C-8: Symbole auf der Registerkarte „Integration“ und im „Quantification Wizard“ (Fortsetzung)**

Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Show Both Analyte and IS</b>	Zeigt den Analyten und das damit verbundene Chromatogramm. Nur verfügbar, wenn ein zugehöriger interner Standard vorhanden ist.
	<b>Use Default View for Graph</b>	Keht zur voreingestellten Ansicht, alle Daten zeigen, zurück, wenn zum Beispiel der Benutzer ein Chromatogramm vergrößert hatte.

**Tabelle C-9: Symbole in der Ergebnistabelle**

Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Sort Ascending by Selection</b>	Sortiert die ausgewählte Spalte aufsteigend.
	<b>Sort Descending by Selection</b>	Sortiert die ausgewählte Spalte absteigend.
	<b>Lock Or Unlock Column</b>	Sperrt oder entsperrt die markierte Spalte. Eine gesperrte Spalte kann nicht verschoben werden.
	<b>Metric Plot By Selection</b>	Erstellt für die markierte Spalte eine metrische Kurve.
	<b>Show all Samples</b>	Zeigt alle Proben in der „Results Table“ an.
	<b>Delete Formula Column</b>	Löscht Formelspalten.
	<b>Report Generator</b>	Öffnet die Reporter-Software.

**Tabelle C-10: Kurzinformation zu Symbolen: Quantifizierungsmodus**



Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Add/Remove Samples</b>	Fügt Proben in der „Results Table“ hinzu oder entfernt sie.
	<b>Export as Text</b>	Speichert die „Results Table“ als Textdatei.

Tabelle C-10: Kurzinformation zu Symbolen: Quantifizierungsmodus (Fortsetzung)















Symbol	Name	Beschreibung
	<b>Modify Method</b>	Öffnet eine wiff-Datei.
	<b>Peak Review - Pane</b>	Öffnet Peaks in einem Teilfenster.
	<b>Peak Review - Window</b>	Öffnet Peaks in einem Fenster.
	<b>Calibration - Pane</b>	Öffnet die Kalibrierkurve in einem Teilfenster.
	<b>Calibration - Window</b>	Öffnet die Kalibrierkurve in einem Fenster.
	<b>Show First Peak</b>	Zeigt den ersten Peak in einem Teilfenster oder Fenster.
	<b>Show Last Peak</b>	Zeigt den letzten Peak in einem Teilfenster oder Fenster.
	<b>Show Audit Trail</b>	Zeigt den Prüfpfad für die „Results Table“ an.
	<b>Clear Audit Trail</b>	Löscht den Prüfpfad für die „Results Table“. Diese Funktion ist nicht verfügbar.
	<b>Statistics</b>	Öffnet das Fenster „Statistics“.
	<b>Report Generator</b>	Öffnet die Reporter-Software.

Tabelle C-11: Symbole im Aufnahmemodus

Symbol	Name	Funktion
	<b>Start Sample</b>	Durch Anklicken wird die Probe in der Warteschlange gestartet.
	<b>Stop Sample</b>	Durch Anklicken wird die Probe in der Warteschlange beendet.

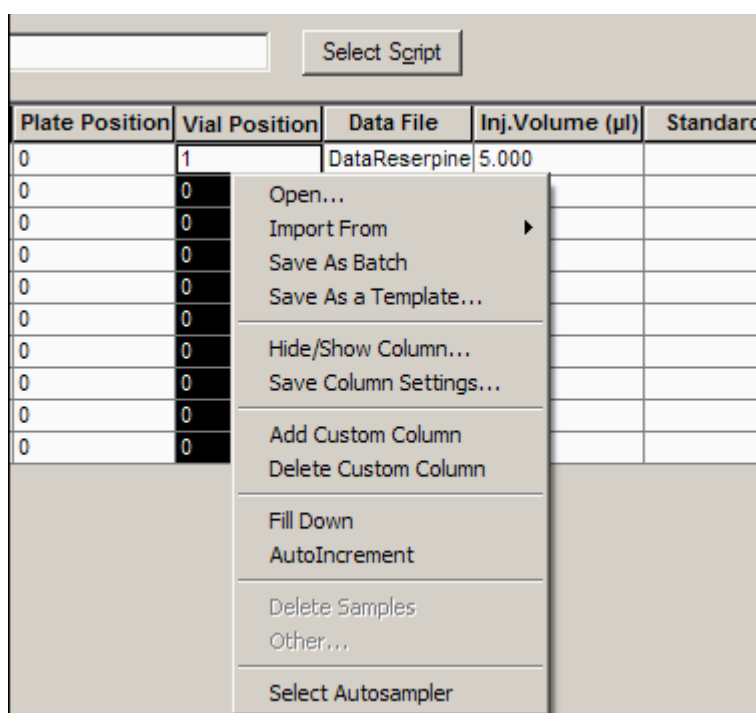
**Tabelle C-11: Symbole im Aufnahmemodus (Fortsetzung)**

<b>Symbol</b>	<b>Name</b>	<b>Funktion</b>
	<b>Equilibrate</b>	Klicken Sie auf eine Methode, die Sie für das Äquilibrieren des Massenspektrometers verwenden wollen und die Ionenquelle, die gegebenenfalls die LC-Säule und alle Peripheriegeräte beinhaltet. Es sollte die gleiche Methode sein, wie jene die bei der ersten Probe in der Warteschlange verwendet wird.

## Batch Editor

Klicken Sie mit der rechten Maustaste die Tabelle Batch Editor, um auf die Optionen zuzugreifen.

Abbildung D-1: Batch Rechtsklick-Menü



Menü	Funktion
<b>Open</b>	(Open)Öffnet eine Batch-Datei.
<b>Import From</b>	(Import From)Importiert einen Batch aus einer Datei.
<b>Save As Batch</b>	(Save As Batch)Speichert den Batch unter einem anderen Namen.
<b>Save As a Template</b>	(Save As a Template)Speichert den Batch als Vorlage.
<b>Hide/Show Column</b>	(Hide/Show Column)Blendet eine Spalte aus oder ein.
<b>Save Column Settings</b>	(Save Column Settings)Speichert die Spalteneinstellungen des Batches.

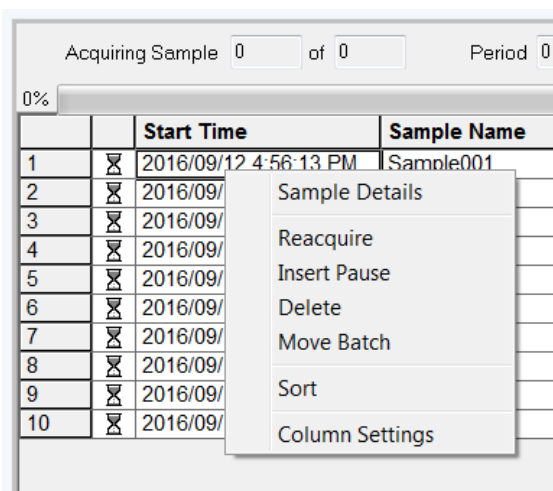
## Rechtsklick-Menüs

Menü	Funktion
<b>Add Custom Column</b>	(Add Custom Column)Fügt eine benutzerdefinierte Spalte hinzu.
<b>Delete Custom Column</b>	(Delete Custom Column)Löscht eine benutzerdefinierte Spalte.
<b>Fill Down</b>	(Fill Down)Kopiert dieselben Daten in die ausgewählten Zellen.
<b>AutoIncrement</b>	(AutoIncrement )Zählt die Daten in den ausgewählten Zellen automatisch hoch.
<b>Delete Samples</b>	(Delete Samples)Löscht die ausgewählte Zeile.
<b>Select Autosampler</b>	(Select Autosampler)Wählt einen Autosampler aus.

## Queue

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

**Abbildung D-2: Queue Manager Rechtsklick-Menü**



Menü	Funktion
<b>Sample Details</b>	(Sample Details)Öffnet das Dialogfeld „Sample Details“.
<b>Reacquire</b>	(Reacquire)Eine Probe wird erneut aufgenommen.
<b>Insert Pause</b>	(Insert Pause)Fügt eine Pause in Sekunden zwischen zwei Proben ein.
<b>Delete</b>	(Delete)Löscht entweder den Batch oder die ausgewählten Proben.

Menü	Funktion
Move Batch	(Move Batch)Verschiebt den Batch innerhalb der Warteschlange.
Sort	(Sort)Sortiert die vorher ausgewählte Spalte.
Column Settings	(Column Settings)Ändert die Spalteneinstellungen.

## Rechtsklick-Menü „Show File Information Pane“

Tabelle D-1: Rechtsklick-Menü „Show File Information Pane“

Menü	Funktion
Copy	(Copy)Kopiert die ausgewählten Daten.
Paste	(Paste)Fügt die Daten ein.
Select All	(Select All)Wählt alle Daten im Fensterbereich aus.
Save To File	(Save To File)Speichert die Daten als .rtf-Datei.
Font	(Font)Ändert die Schriftart.
Save Acquisition Method	(Save Acquisition Method)Speichert die Erfassungsmethode als .dam-Datei.
Save Acquisition Method to CompoundDB	(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	(Teilfenster löschen) Löscht das ausgewählte Teilfenster.

## Chromatogrammfenster

Tabelle D-2: 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.

Tabelle D-2: Rechtsklick-Menü für Chromatogramm-Teilfenster (Fortsetzung)

Menü	Funktion
<b>Extract Ions</b>	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.
<b>Show Base Peak Chromatogram</b>	Erzeugt ein neues Fenster mit einem Basispeak-Chromatogramm.
<b>Show ADC Data</b>	Erzeugt ggf. ein neues Fenster mit der ADC-Datenlinie.
<b>Show UV Detector Data</b>	Erzeugt ggf. ein neues Fenster mit der UV-Daten-Linie.
<b>Spectral Arithmetic Wizard</b>	Öffnet den Spectral Arithmetic Wizard (Assistent zur arithmetischen Spektrenbearbeitung)
<b>Save to Text File</b>	Erzeugt eine Textdatei, die die Daten in einem Fensterausschnitt enthält, und die in Microsoft Excel oder anderen Programmen geöffnet werden kann.
<b>Save Explore History</b>	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.
<b>Add Caption</b>	Fügt einen Text in der Cursorposition im Fensterbereich ein.
<b>Add User Text</b>	Fügt ein Textfeld in der Cursorposition im Fensterbereich ein.
<b>Set Subtract Range</b>	Legt den Subtraktionsbereich im Fenster fest.
<b>Clear Subtract Range</b>	Löscht den Subtraktionsbereich im Fenster.
<b>Subtract Range Locked</b>	Sperrt oder entsperrt den Subtraktionsbereich. Wenn die Subtraktionsbereiche nicht gesperrt sind, kann jeder Subtraktionsbereich unabhängig voneinander bewegt werden. Die Subtraktionsbereiche sind gesperrt voreingestellt.
<b>Delete Pane</b>	Löscht das ausgewählte Teilfenster.

## Spektralfenster

Tabelle D-3: Rechtsklick-Menü für Spektren-Teilfenster

Menü	Funktion
<b>List Data</b>	Listet Datenpunkte auf und integriert Chromatogramme.



Tabelle D-3: Rechtsklick-Menü für Spektren-Teilfenster (Fortsetzung)

Menü	Funktion
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 einen Text in der Cursorposition im Fensterbereich ein.
Add User Text	Fügt ein Textfeld in der Cursorposition im Fensterbereich ein.
Show Last Scan	Zeigt den Scan vor der Auswahl.
Select Peaks For Label	In diesem Dialog wählen Sie die Parameter zur Kennzeichnung 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.
Add a Record	Fügt Datensätze und verbindungsbezogene Daten einschließlich Spektren zur Bibliothek hinzu. Hierzu muss ein Spektrum aktiviert sein.
Search Library	Durchsucht die Bibliothek ohne Bedingungen oder mit zuvor gespeicherten Bedingungen.
Set Search Constraints	Durchsucht die Bibliothek mit den Kriterien, die im Dialogfeld Search Constraints eingegeben wurden.

## Ergebnistabelle

Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Results Table, um die in der folgenden Tabelle angezeigten Optionen aufzurufen.

**Tabelle D-4: Ergebnistabelle Rechtsklick-Menü**

Menü	Funktion
<b>Full</b>	(Full) Zeigt alle Spalten an.
<b>Summary</b>	(Summary) Zeigt bestimmte Spalten an.
<b>Analyte</b>	(Analyte) Zeigt einen bestimmten Analyten an.
<b>Analyte Group</b>	(Analyte Group) Erstellt eine Analytengruppe.
<b>Sample Type</b>	(Sample Type) Zeigt Proben eines bestimmten Typs oder alle Proben an.
<b>Add Formula Column</b>	(Add Formula Column) Fügt eine Formelspalte hinzu. Es wird empfohlen, dass der Benutzer Ergebnisse validiert, wenn eine Formel-Spalte verwendet wird.
<b>Table Settings</b>	(Table Settings) Bearbeitet oder wählt eine Tabelleneinstellung aus.
<b>Query</b>	(Query) Erstellt oder wählt eine Abfrage aus.
<b>Sort</b>	(Sort) Erstellt eine Sortierung oder sortiert nach dem Index.
<b>Metric Plot</b>	(Metric Plot) Erstellt eine metrische Kurve.
<b>Delete Pane</b>	(Delete Pane) Löscht den aktiven Fensterbereich.
<b>Fill Down</b>	(Fill Down) Kopiert dieselben Daten in die ausgewählten Zellen.
<b>Add Custom Column</b>	(Add Custom Column) Fügt eine benutzerdefinierte Spalte hinzu.
<b>Delete Custom Column</b>	(Delete Custom Column) Löscht die ausgewählte benutzerdefinierte Spalte.

## Peak-Bewertung

Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Fenster oder den Fensterbereich **Peak Review**, um auf die Optionen zuzugreifen, die in [dargestellt sind](#).

**Tabelle D-5: Rechtsklick-Menü „Peak Review“**

Menü	Funktion
<b>Options</b>	(Options) Öffnet das Dialogfeld Peak Review Options.

Tabelle D-5: Rechtsklick-Menü „Peak Review“ (Fortsetzung)

Menü	Funktion
<b>Sample Annotation</b>	(Sample Annotation) Öffnet das Dialogfeld Sample Annotation.
<b>Save Active to Text File</b>	(Save Active to Text File) Speichert den ausgewählten Peak als Textdatei.
<b>Show First Page</b>	(Show First Page) Wechselt zur ersten Probe.
<b>Show Last Page</b>	(Show Last Page) Wechselt zur letzten Probe.
<b>Slide Show Peak Review</b>	(Slide Show Peak Review) Öffnet die Diashow.
<b>Update Method</b>	(Update Method) Aktualisiert den Algorithmus für alle Peaks.
<b>Revert to Method</b>	(Revert to Method) Wählt einen neu definierten Peak auf der Basis der aktuellen Quantifizierungsmethode aus.
<b>Delete Pane</b>	(Delete Pane) Löscht den aktiven Fensterbereich.

## Calibration Curve

Durch Rechtsklick das Fenster Calibration oder eine Teilfenster-Tabelle können Sie auf die in der folgenden Tabelle beschriebenen Optionen zugreifen.

Tabelle D-6: Rechtsklick-Menü, Kalibrierkurve

Menü	Funktion
<b>Exclude (Include)</b>	(Ausschließen (Einschließen)) Um den Punkt aus der Kurve auszuschließen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Punkt und dann auf <b>Exclude</b> . Um Punkt wieder einzuschließen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Punkt und dann auf <b>Include</b> .
<b>Exclude All Analytes (Include All Analytes)</b>	(Alle Analyte ausschließen (Alle Analyte einschließen)) Um alle Analyte aus der Kurve auszuschließen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Punkt und dann auf <b>Exclude All Analytes</b> . Um die Punkte wieder einzuschließen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf einen Punkt und dann auf <b>Include All Analytes</b> .
<b>Show Peak</b>	(Show Peak) Prüft einen einzelnen Peak.
<b>Overlay</b>	(Overlay) Überlagert zwei Grafiken.
<b>Active Plot</b>	(Active Plot) Bestimmt, welche Kurve aktiv ist.
<b>Legend</b>	(Legend) Zeigt die Grafiklegende an.

## Rechtsklick-Menüs

---

**Tabelle D-6: Rechtsklick-Menü, Kalibrierkurve (Fortsetzung)**

<b>Menü</b>	<b>Funktion</b>
<b>Log Scale X Axis*</b>	(Log Scale X Axis) Nutzt einen logarithmischen Maßstab für die X-Achse.
<b>Log Scale Y Axis*</b>	(Log Scale Y Axis) Nutzt einen logarithmischen Maßstab für die Y-Achse.
<b>Delete Pane</b>	(Delete Pane) Löscht den aktiven Fensterbereich.
<b>Home Graph</b>	(Home Graph) Skaliert die Grafik auf ihre Originalgröße
* Ein logarithmischer Maßstab zeigt besser geordnete Datenpunkte an, so dass die Wirkung von allen Punkten gleichzeitig überwacht werden kann. Für diese Ansicht wählen Sie <b>Log Scale Y Axis</b> versus <b>Log Scale X</b> und nicht nur den Logarithmus für eine Achse.	










# Glossar der Symbole





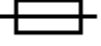





# E

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





Symbol	Beschreibung
	Regulatory Compliance Mark (Australien). Gibt an, dass das Produkt die EMV-Anforderungen der Australian Communications and Media Authority (ACMA) erfüllt.
	Wechselstrom
A	Ampere (Strom)
	Erstickungsgefahr
	Bevollmächtigter Vertreter in der Europäischen Gemeinschaft
	Biogefährdung
	CE-Zeichen
	cCSAus-Prüfzeichen. Nachweis für elektrische Sicherheit (Kanada und USA).
	Katalognummer
	Achtung. Informationen zu möglichen Gefahren finden Sie in der Bedienungsanleitung. <b>Hinweis:</b> In der SCIEX-Dokumentation bezeichnet dieses Symbol eine Verletzungsgefahr.

## Glossar der Symbole




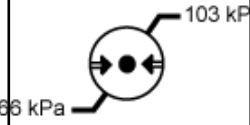
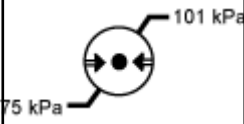
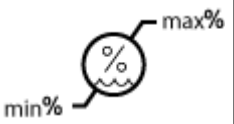
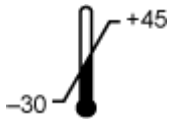
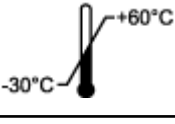

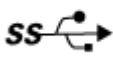


Symbol	Beschreibung
	<p>China RoHS-Label „Achtung“. Das elektronische Informationsprodukt enthält bestimmte toxische oder gefährliche Stoffe. Die Zahl in der Mitte steht für den Zeitraum, in dem eine umweltfreundliche Nutzung gegeben ist (Environmentally Friendly Use Period, EFUP) und gibt die Anzahl an Kalenderjahren an, über die das Produkt betrieben werden darf. Nach Ablauf des EFUP-Zeitraums muss das Produkt unverzüglich recycelt werden. Der kreisförmige Pfeil weist darauf hin, dass das Produkt recycelbar ist. Der Datumscode auf dem Etikett oder dem Produkt gibt das Herstellungsdatum an.</p>
	<p>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.</p>
	<p>Bedienungsanleitung beachten.</p>
	<p>Quetschgefahr</p>
	<p>cTUVus-Zeichen für TUV Rheinland of North America</p>
	<p>Datenmatrix-Symbol, das mit einem Strichcode-Lesegerät gescannt werden kann, um eine eindeutige Gerätekennung (UDI) zu erhalten</p>
	<p>Umweltgefährdung</p>
	<p>Ethernetanschluss</p>
	<p>Explosionsgefahr</p>

Symbol	Beschreibung
	Gefahr von Augenverletzungen
	Brandgefahr
	Gefahr durch entzündliche Chemikalien
	Zerbrechlich
	Sicherung
Hz	Hertz
	Internationales Sicherheitszeichen „Vorsicht, Stromschlaggefahr“ (ISO 3864), auch bekannt als Hochspannungssymbol Wenn die Hauptabdeckung entfernt werden muss, wenden Sie sich an einen SCIEX-Vertreter, um einen Stromschlag zu vermeiden.
	Gefahr durch heiße Oberflächen
	In-vitro-Diagnostikum
	Gefährdung durch ionisierende Strahlung
	Trocken aufbewahren. Vor Regen schützen. Relative Luftfeuchtigkeit darf 99 % nicht überschreiten.

## Glossar der Symbole



Symbol	Beschreibung
	Aufrecht halten
	Gefahr von Schnittwunden/Abtrennung von Körperteilen
	Gefahr durch Laserstrahlung
	Gefahr durch Heben
	Gefahr durch Magnete
	Hersteller
	Gefahr durch bewegliche Teile
	Gefahr für Personen mit Herzschrittmachern. Kein Zugang für Personen mit Herzschrittmachern.
	Quetschgefahr
	Gefahr durch Druckgas
	Schutzerdung (Erdung)
	Gefahr von Stichverletzungen



Symbol	Beschreibung
	Gefahren durch chemische Reaktionen
	Seriennummer
	Toxisch-chemische Gefahren
	Transportieren und lagern Sie das System zwischen 66 kPa und 103 kPa.
	Transportieren und lagern Sie das System zwischen 75 kPa und 101 kPa.
	Transportieren und lagern Sie das System bei einer relativen, nicht kondensierenden Luftfeuchtigkeit, die innerhalb der Mindest- ( <b>min</b> ) und Maximalwerte ( <b>max</b> ) liegt.
	Transportieren und lagern Sie das System bei einer Temperatur zwischen -30 °C und +45 °C.
	Transportieren und lagern Sie das System bei einer Temperatur zwischen -30 °C und +60 °C.
	USB 2.0-Anschluss
	USB 3.0-Anschluss
	Gefahr durch ultraviolette Strahlung
	United Kingdom Conformity Assessment Mark (UKCA-Kennzeichnung)
VA	Voltampere (Leistung)

## Glossar der Symbole

---

Symbol	Beschreibung
V	Volt (Spannung)
	WEEE. Das Gerät darf nicht im Hausmüll entsorgt werden. Umweltgefährdung
W	Watt
	<i>JJJJ-MM-TT</i> Herstellungsdatum

# Verzeichnis der Warnhinweise

# F

**Hinweis:** Wenn sich eine der Beschriftungen zur Kennzeichnung einer Komponente löst, wenden Sie sich an einen Außendienstmitarbeiter (FSE).

Bezeichnung	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.

## Verzeichnis der Warnhinweise

Bezeichnung	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>WARNUNG: 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 FÜR DIE WARTUNG AN FACHPERSONAL.</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Bedienungsanleitung beachten.</p>

# Kontaktangaben

---

## 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](http://sciex.com/education).

## Online-Lernzentrum

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

## SCIEX Support

SCIEX und seine Vertretungen beschäftigen weltweit einen Stab an ausgebildeten Servicekräften und technischen Spezialisten. Der Support kann Fragen zum System oder anderen auftretenden, technischen Problemen beantworten. Weitere Informationen finden Sie auf der SCIEX-Website unter [sciex.com](http://sciex.com), oder kontaktieren Sie uns unter:

- [sciex.com/contact-us](http://sciex.com/contact-us)
- [sciex.com/request-support](http://sciex.com/request-support)

## Cybersicherheit

Die aktuellsten Hinweise zur Cybersicherheit von SCIEX-Produkten finden Sie unter [sciex.com/productsecurity](http://sciex.com/productsecurity).

## Dokumentation

Diese Version des Dokuments ersetzt alle vorherigen Versionen.

Für die Anzeige des Dokuments wird der Adobe Acrobat Reader benötigt. Um sich die neueste Version herunterzuladen, besuchen Sie <https://get.adobe.com/reader>.

Softwareprodukt dokumentationen entnehmen Sie den Versionshinweisen oder dem mit der Software mitgelieferten Software-Installationshandbuch.

Informationen zur Hardware-Produkt dokumentation finden Sie auf der mit dem System oder der Komponente gelieferten *Customer Reference*-DVD.

Die neuesten Versionen der Dokumentationen sind auf der Website von SCIEX unter [sciex.com/customer-documents](http://sciex.com/customer-documents) verfügbar.

## Kontaktangaben

---

**Hinweis:** Wenn Sie eine kostenlose gedruckte Ausgabe dieses Dokuments wünschen, wenden Sie sich bitte an [sciex.com/contact-us](https://sciex.com/contact-us).

---