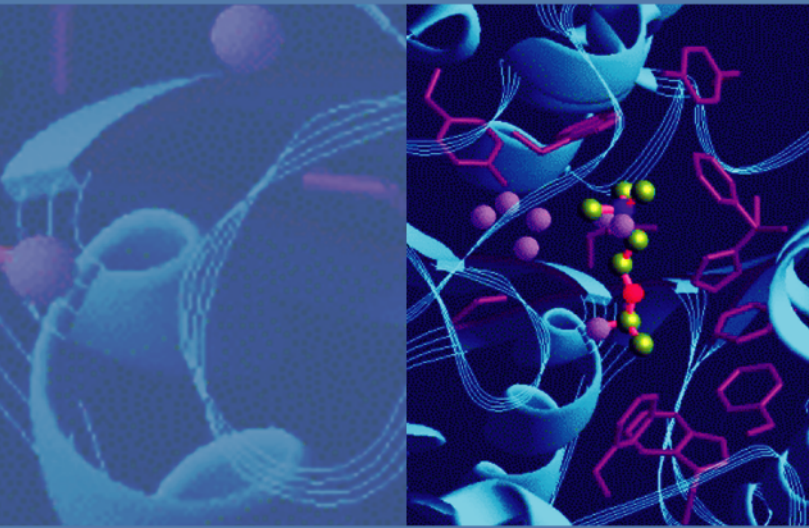




TSQ 系列

TSQ Quantum XLS 系列

用户手册

70111-97235 修订版 A

2011 年 12 月

© 2011 Thermo Fisher Scientific Inc. 保留所有权利。

TriPlus 是商标， TSQ Quantum 和 TRACE GC Ultra 是 Thermo Fisher Scientific Inc. 在美国的注册商标。

下列是在美国和其它国家（地区）的注册商标：Teflon 和 Vespel 是 E. I. du Pont de Nemours & Co. 的注册商标。Convectron 是 Helix Technology Corporation 的注册商标。Granville-Phillips 是 Brooks Automation, Inc 的注册商标。Intel、Pentium、Xeon 和 Core 是 Intel Corporation 的注册商标。Restek 是 Restek Corp 的注册商标。Dust-Off 和 Falcon 是 Falcon Safety Products, Inc 的注册商标。Microsoft 和 Windows 是 Microsoft Corporation 的注册商标。

Micro-Blast 和 Microcare 是 MicroCare Corporation 在美国的注册商标。Edwards 是 Edwards Limited 在英国的商标。

所有其他商标都是 Thermo Fisher Scientific Inc. 及其子公司的财产。

Thermo Fisher Scientific Inc. 为购买产品的客户提供本文档，供其在操作产品时参考。本文档受版权保护，未经 Thermo Fisher Scientific Inc. 书面许可，严禁复制本文档或本文档的任何部分。

本文档的内容可能随时更改，恕不另行通知。本文档中的所有技术信息仅供参考。本文档中的系统配置和规格将取代购买者先前获得的所有信息。

Thermo Fisher Scientific Inc. 不保证本文档的完整性和准确性，而且对于可能因使用本文档（即使是在正确遵循本文档中的说明信息的情况下）而导致的任何错误、疏忽、损害或损失，Thermo Fisher Scientific Inc. 概不负责。

本文档不是 Thermo Fisher Scientific Inc. 和购买者之间的销售合同的一部分。任何情形下，都不得使用本文档来取代或修改任何“销售条款与条件”，若两份文档信息发生冲突，则以“销售条款与条件”中的信息为准。

发行历史：修订版 A，2011 年 12 月。

软件版本：Thermo Xcalibur 2.2，Thermo Foundation 2.0，TSQ 2.4

仅供研究使用。不可用于诊断。

合规性

Thermo Fisher Scientific 对其产品进行了全面测试和评估，确保完全符合相应的国内和国际法规。在系统交付时，系统符合所有下一部分或产品名称部分说明的下列电磁兼容性（EMC）和安全标准。

用户对系统所做的改动可能违反一项或多项电磁兼容性及安全标准。对系统的改动包括更换零件或增加未经 Thermo Fisher Scientific 专门授权和认定的部件、选项，或外围设备。为保证继续符合电磁兼容性和安全标准，更换的零件和增加的部件、选项和外围设备必须从 Thermo Fisher Scientific 或其授权代理处订购。

TSQ Quantum XLS 和 TSQ Quantum XLS Ultra

EMC 指令 2004/108/EC

EMC 合规性已通过 TUV Rheinland of North America Inc 评估。

EN 55011	2007 ; A2: 2007	EN 61000-4-5	2005
EN 61000-3-2	2006	EN 61000-4-6	2007
EN 61000-3-3	1995 ; A1: 2001 ; A2: 2005	EN 61000-4-11	2004
EN 61000-4-2	1995 ; A1: 1999 ; A2: 2001	EN 61326-1	2006
EN 61000-4-3	2006	FCC A 类	2008, CFR 47, 第 15 部分
EN 61000-4-4	2004		

低电压指令 2006/95/EC

本设备符合低电压指令 2006/95/EEC 和协调标准 E: EN 61010-1:2001 ; IEC 61010-1: 2002 ; UL 61010A-1:2004 ; CAN/CSA 22.2 61010-1:2004。

用户对系统所做的改动可能违反一项或多项电磁兼容性及安全标准。对系统的改动包括更换零件或增加未经 Thermo Fisher Scientific 专门授权和认定的部件、选项，或外围设备。为保证继续符合电磁兼容性和安全标准，更换的零件和增加的部件、选项和外围设备必须从 Thermo Fisher Scientific 或其授权代理处订购。

符合 FCC 声明

本设备符合 FCC 法规第 15 章。操作必须符合以下两个条件：（1）设备不会造成有害干扰，和（2）设备必接受收到的任何干扰，包括可能引起误操作的干扰。



警告 使用本设备之前，仔细阅读并了解本手册内有关本产品的安全使用和操作的各种防范措施注释、标记和符号。

抬举和搬运 Thermo Fisher Scientific 仪器注意事项

为了安全，同时为了符合相关国际标准，搬运和 / 或移动 Thermo Fisher Scientific 仪器时，要求多人合作。本仪器很重、很庞大，一个人无法独自安全搬运。

正确使用 Thermo Fisher Scientific 仪器注意事项

符合国际法规：本仪器的使用条件与赛默飞世尔科技指定的方式不同时，可能消弱仪器提供的任何保护。

电磁传输磁化率注意事项

仪器设计用于在受控电磁环境中工作。勿在仪器附近使用无线电射频发送器，例如手机。

WEEE 合规性

本产品需要符合欧盟的“废弃电气与电子设备”（Waste Electrical & Electronic Equipment, WEEE）指令 2002/96/EC。它以下列符号标示：



Thermo Fisher Scientific 与每个欧盟 (EU) 成员国的一家或更多家循环利用或处理公司签订合同，这些公司应该处理或循环利用此产品。查看 www.thermo.com/WEEERoHS 以获取有关 Thermo Fisher Scientific 符合这些指令以及用户国家中的循环利用规定的更多信息。

WEEE Konformität

Dieses Produkt muss die EU Waste Electrical & Electronic Equipment (WEEE) Richtlinie 2002/96/EC erfüllen. Das Produkt ist durch folgendes Symbol gekennzeichnet:



Thermo Fisher Scientific hat Vereinbarungen mit Verwertungs-/Entsorgungsfirmen in allen EU-Mitgliedsstaaten getroffen, damit dieses Produkt durch diese Firmen wiederverwertet oder entsorgt werden kann. Mehr Information über die Einhaltung dieser Anweisungen durch Thermo Fisher Scientific, über die Verwerter, und weitere Hinweise, die nützlich sind, um die Produkte zu identifizieren, die unter diese RoHS Anweisung fallen, finden sie unter www.thermo.com/WEEERoHS.

Conformité DEEE

Ce produit doit être conforme à la directive européenne (2002/96/EC) des Déchets d'Equipements Electriques et Electroniques (DEEE). Il est marqué par le symbole suivant:



Thermo Fisher Scientific s'est associé avec une ou plusieurs compagnies de recyclage dans chaque état membre de l'union européenne et ce produit devrait être collecté ou recyclé par celles-ci. Davantage d'informations sur la conformité de Thermo Fisher Scientific à ces directives, les recycleurs dans votre pays et les informations sur les produits Thermo Fisher Scientific qui peuvent aider la détection des substances sujettes à la directive RoHS sont disponibles sur www.thermo.com/WEEERoHS.

目录

	前言	.xi
	相关文档	.xi
	安全和特殊注意事项	xii
	联系我们	xiii
第 1 章	概述	1
	电离模式	3
	电子电离模式	4
	化学电离模式	4
	离子极性模式	5
	扫描模式	5
	Q1MS 和 Q3MS 扫描模式	7
	子离子扫描模式	7
	母离子扫描 模式	8
	中性丢失扫描模式	9
	数据依赖扫描模式	11
	扫描类型	12
	全扫描	12
	选择离子监测 (SIM)	12
	选择反应监测 (SRM)	13
	高选择性反应监测 (HSRM)	13
	智能选择反应监测 (iSRM)	13
	定量增强, 数据依赖质谱 (QED MS)	14
	自动 SIM	14
	数据类型	14
	轮廓图数据类型	14
	棒状图数据类型	15
	质荷比范围	15
第 2 章	功能描述	17
	自动进样器	18
	气相色谱仪	19
	直接进样杆	19
	传输线	20

	质谱仪	21
	控件和指示灯	22
	EI/CI 离子源	26
	入口阀	28
	离子 光学系统.....	29
	质量 分析器.....	31
	离子检测系统	38
	真空系统和进气口硬件	40
	电子组件	45
	数据系统	47
	计算机硬件	47
	数据系统 / 质谱仪 /GC 接口	47
	数据系统 / 局域网接口.....	47
第 3 章	系统关机、开机和重启	49
	在紧急情况下关闭系统	49
	将系统置于待机模式	51
	完全关闭系统	51
	在完全关机后启动系统	53
	恢复 TSQ Quantum XLS 系列系统的电源	54
	启动 GC.....	54
	启动数据系统	54
	启动质谱仪	54
	启动自动进样器	56
	设置操作条件	56
	重启质谱仪	57
	重启数据系统	57
	关闭所选质谱仪组件	58
第 4 章	调谐和校正	61
	显示 FC-43 质谱	62
	运行自动调谐和校正	64
	保存调谐校正报告	67
	运行维护调谐	70
	创建质量控制 (QC) 调谐报告.....	71
第 5 章	改变电离模式.....	73
	移除离子盒	73
	安装离子盒	80
第 6 章	维护.....	83
	清洁离子源组件	85
	清洁离子盒	87
	清洁离子源透镜	87
	更换离子源灯丝	93

	彻底分解和组装离子源	95
	彻底分解和组装离子源	96
	清洁不锈钢部件	98
	清洁非不锈钢或组合部件	100
	维护前级泵	101
	添加校正化合物	102
	更换 球阀 密封	105
	移除和安装 GC 毛细管色谱柱	107
	移除 GC 毛细管色谱柱	107
	安装 GC 毛细管色谱柱	109
第 7 章	诊断和故障排除.....	113
	诊断	113
	故障排除	114
	通信问题	114
	污染问题	117
	灯丝和透镜控制问题	119
	加热区问题	120
	高真空问题	121
	线性问题	123
	电源问题	124
	灵敏度问题	124
	稳定性问题	127
	调谐问题	128
	更换保险丝	130
	更换 PCB 和电源供应器	130
附录 A	使用直接进样杆.....	131
	创建仪器方法	131
	创建序列	134
	准备进样杆和入口阀	135
	准备质谱仪	135
	运行序列	137
	在 Qual Browser 中检查原始数据	141
	移除进样杆	142
附录 B	可更换配件和消耗品	145
	EI/CI 离子源可更换配件	145
	各种可更换配件和消耗品	147
	附件套件	148
	化学品套件	149
	术语表	150
	索引	155

前言

Thermo Scientific TSQ Quantum XLS 和 TSQ Quantum XLS Ultra 系统完善了 TSQ Quantum XLS 系列仪器，是 TSQ Quantum™ 质谱仪家族中的一员。

本 *TSQ Quantum XLS 系列用户手册* 包含关于 TSQ Quantum XLS 系列系统的操作模式和硬件组件原则的说明。此外，本手册提供清洁和维护质谱仪的逐步说明。

目录

- [相关文档](#)
- [安全和特殊注意事项](#)
- [联系我们](#)

❖ 若要对文档或 Help 提出更改建议

- 点击以下链接完成有关本文档的简短调查。
在此先对您的帮助表示感谢。



相关文档

除了本手册，Thermo Fisher Scientific 为 TSQ Quantum XLS 系列系统提供下列 PDF 文档和帮助：

- *TSQ Quantum XLS Series Preinstallation Requirements Guide* (*TSQ Quantum XLS 系列预安装要求手册*)
- 其他的系统型号所随附的手册
- Help（帮助）包括在软件中

安全和特殊注意事项

确保遵循本手册中发布的事先声明。安全和其他特别注意事项显示在方框内。

安全和其他特别注意事项包括下列内容：



警告 强调对人体的危险。每个“警告”事项都会标有适当的符号。



警告 烫伤危险。离子源、GC 柱温箱、进样口和传输线都很烫。在接触之前使它们冷却到室温。



警告 触电危险。在继续之前拔下产品名称质谱仪插头。



警告 材料和眼睛危险。当进行清洁程序时佩戴不渗透的实验室手套和保护眼镜。



注意事项 强调对财产或环境的危害。

重要信息 强调防止软件损害、数据丢失或无效测试结果必需的信息；或可能包含获得系统最佳性能的重要信息。

注释 强调普遍关注的信息。

提示 强调能够帮助简化工作的信息。

联系我们

可以通过多种方式联系 Thermo Fisher Scientific，获取所需信息。

❖ 若要联系技术支持中心

电话	800-532-4752
传真	561-688-8736
电子邮件	us.techsupport.analyze@thermofisher.com
知识库	www.thermokb.com

若要下载更新和配套软件，访问：mssupport.thermo.com。

❖ 若要联系客户服务中心，获取订购信息

电话	800-532-4752
传真	561-688-8731
电子邮件	us.customer-support.analyze@thermofisher.com
网站	www.thermo.com/ms

❖ 若要获得本地销售或服务联系信息

转至 www.thermoscientific.com/wps/portal/ts/contactus。

❖ 若要从互联网复制手册

转至 mssupport.thermo.com，同意相关条款和条件，然后单击窗口左侧空白处的 **Customer Manuals**（用户手册）。

❖ 对文档或 **Help** 提出更改建议

- 在 www.surveymonkey.com/s/PQM6P62 中在线填写问卷调查。
- 向技术出版编辑发送电子邮件，邮箱地址为 techpubs-lcms@thermofisher.com。

概述

TSQ Quantum XLS 系列系统是高级分析仪器，包括质谱仪、气相色谱仪和 Xcalibur™ 数据系统。参阅图 1 和图 2。

目录

- 电离模式
- 离子极性模式
- 扫描模式
- 扫描类型
- 数据类型
- 质荷比范围

在典型分析中，自动进样器（AS）将样品注入气相色谱仪（GC）。GC 可将样品分离为不同组分。组分从 GC 洗脱并传入质谱仪进行分析。

TSQ Quantum XLS 系列质谱仪包括电子电离 / 化学电离（EI/CI）离子源、离子光学、三级质量分析器和离子检测系统 — 所有这些都包含在真空腔体内。样品的电离在离子源内发生。用来电离样品的特定方式称为电离模式。离子光学组件可将离子源中产生的离子传输到质量分析器，质量分析器根据其质荷比过滤离子。应用到离子源和离子光学组件中透镜的电压极性，决定被传输到质量分析器的是正电荷离子还是负电荷离子。可以将质谱仪配置为分析正电荷或负电荷离子（称为正或负离子极性模式）。

图 1. TSQ Quantum XLS Ultra 质谱仪， TriPlus 自动进样器和 TRACE GC Ultra 气相色谱仪



图 2. TSQ Quantum XLS 质谱仪， TriPlus 自动进样器和 TRACE GC Ultra 气相色谱仪



质谱仪的三级质量分析器执行一级或二级质量分析：

- 质谱仪作为具有一级质量分析的传统质谱仪操作。离子源将样品电离，产生的离子将由第一个杆组件进行质量分析。第二个和第三个杆组件将所选质量的结果离子传输到离子检测系统。¹
- 质谱仪作为二级质量分析的串联质谱仪操作。离子源将样品电离，产生的离子将由第一个杆组件进行质量分析。但是，在此情形下，存在于第一个杆组件中的所选质量离子，将会和第二个杆组件中的惰性气体碰撞产生碎片，从而产生一组子离子。（在第二个杆组件周围有一个碰撞室。碰撞室可使用惰性气体增压。）子离子将在第三个杆组件中进行进一步的质量分析以检测所选的离子。二级质量分析比一级获得更好的化学特性，因为系统可以选择和确定两组离散但直接关联的质量数。

在一级质量分析中，质谱仪可用来阐明纯有机化合物的结构，以及混合物的组分结构。此外，在二级质量分析中，质谱仪可打碎和分离离子源中形成的母离子的每个碎片离子，以逐渐拼凑建立分子的完整结构。因此，TSQ Quantum XLS 系列系统会调查质谱仪中可能出现的每个离子形成和分裂的所有途径。

二级质量分析，可减少最后质谱图中的化学噪声，允许进行高选择性和高灵敏度的分析。

一级和二级质量分析的每个序列称为一次扫描。质谱仪使用多种不同的扫描模式和不同的扫描类型，过滤、裂解或传输质量分析器中的离子。连同电离和离子极性模式，改变扫描模式和扫描类型可以为用户提供很大的灵活性，能够充分使用仪器来解决复杂的分析问题。

电离模式

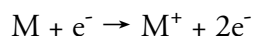
用来电离样品的特定方式称为电离模式。可以在两种电离模式下操作 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪：

- 电子电离模式
- 化学电离模式

¹ 该仪器也可作为一级质谱仪使用，通过第一个和第二个杆组件传输离子，然后在第三个杆组件中进行质量分析。

电子电离模式

在电子电离（EI）模式下，热灯丝上有电流通过，利用热电子发射产生电子。灯丝及其偏转器一般维持在相对离子源模块的 -70 V 的电势。该电势加速电子通过电离区域，称作离子盒。这些带有能量的电子与中性的气相分析物分子相互作用，并导致分析物失去电子形成阳离子：



通常，各种分裂反应产生裂解离子，提供与分析物有关的结构信息。

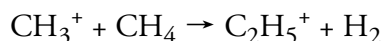
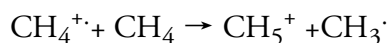
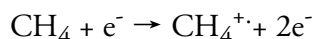
EI 正离子模式是唯一常见的 EI 模式。

化学电离模式

在化学电离（CI）模式下，样品分子电离是一个多步骤过程：

1. 反应气以大约 2 mL/min （对于甲烷）流速被引入 CI 离子盒，样品蒸汽一般在分压小于反应气千分之一的时候出现。
2. 加热灯丝发射带有能量的（一般 100 eV ）电子，使反应气电离并形成等离子体。该反应也生成热电子。
3. 反应气离子与反应气分子相互作用，形成各种稳定的次级离子。

例如，对于甲烷：



4. 正样品离子形成如下：

- 从次级反应气离子传递一个质子到样品分子
- 由反应气离子提取一个电子
- 在离子相关反应中，一个反应气离子和样品分子之间形成了加合离子

在甲烷正离子 CI 模式下，观察到的相关峰是 MH^+ 、 $[\text{M}+\text{CH}_5]^+$ 和 $[\text{M}+\text{C}_2\text{H}_5]^+$ ；但主要是 MH^+ 。

在异丁烷正离子 CI 模式下，观察到的主峰是 MH^+ 。

在氨水正离子 CI 模式下，观察到的主峰是 MH^+ 和 $[\text{M}+\text{NH}_4]^+$ 。

负样品离子形成的常见途径如下：

- 样品分子捕获离子源内的次级热电子
- 电子转移形成电离的反应气（例如 NH_2^- ）
- 质子提取

在负离子化学电离质谱中观察到的分子离子通常是 M^- 或 $[\text{M-H}]^-$ 。

离子极性模式

可以在两种电离模式下操作 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪：正或者负。正电荷及负电荷离子都在质谱仪离子源中形成。通过改变应用到离子源和离子光学组件的电压极性，质谱仪可控制将正离子或负离子传输到质量分析器进行质量分析。离子光学组件将离子源中产生的离子聚焦成离子束，传输到质量分析器。质谱仪可以在 95 ms 内在正极性和负极性模式之间切换。

由于正离子质谱的信息与负离子质谱不同，而是互为补充，获得这两种质谱有助于样品的定性分析。可以选择离子极性模式和电离模式，以获取最大的灵敏度进行特定的目标物分析。

扫描模式

可以在多种扫描模式下操作 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪。最常见扫描模式可以分为两类：单质谱（MS）扫描模式以及串联质谱（MS/MS）扫描模式。每个类别的扫描模式如下所述：

- MS 扫描模式：Q1MS 和 Q3MS 扫描模式
- MS/MS 扫描模式：Product（子离子）扫描模式、Parent（母离子）扫描模式、Neutral Loss（中性丢失）扫描模式
- 数据依赖扫描模式

可根据杆组件数量和类型以及应用到杆组件的电压来选择扫描模式。

质量分析器或质谱仪具有三个杆组件。² 第一个和第三个杆组件，Q1 和 Q3 是四极杆，而第二个杆组件 Q2 是方形四极杆。

杆组件可按以下两个功能之一操作：

- 作为离子传输设备

² 杆组件是规律排列的金属杆。有关 TSQ Quantum XLS 系列仪器上的杆组件讨论信息，参阅第 31 页的“质量分析器”。

- 作为质量分析器

如果仅应用 RF 电压，杆组件可作为离子传输设备使用，传输大范围质荷比（即实际存在所有离子）内的所有离子。

如果同时将 RF 和 DC 电压应用到杆组件，将会使不同质荷比的离子分离。此分离允许杆组件作为质量分析器。

在 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪上，四极杆组件可以使用 rf 和 dc 电压操作，或仅使用 rf 电压操作。也就是说，Q1 和 Q3 可作为质量分析器或离子传输设备。Q2 杆组件仅可使用 rf 电压操作。因此，Q2 永远是一个离子传输设备。Q2 的周围是一个碰撞室，如果该单元中存在氩碰撞气体，则会发生裂解。有关杆组件如何在几个主要扫描模式中操作的总结，参阅表 1。

表 1. 扫描模式总结

扫描模式	Q1 四极杆	Q2 碰撞池	Q3 四极杆
Q1MS	扫描 ^a	传送所有离子 ^b	传送所有离子
Q3MS	传送所有离子	传送所有离子	扫描
子离子	设置 ^c	碎片离子 ^d ，然后传送所有碎片	扫描
母离子	扫描	碎片离子，然后传送所有碎片	设置
中性丢失	扫描	碎片离子，然后传送所有碎片	扫描

a 扫描 = 全扫描或传输所选的离子

b 传送所有离子或碎片 = 传送大范围质荷比内的离子或碎片

c 设置 = 设置传送单一质荷比或一组质荷比的离子

d 碎片离子 = 和氩气碰撞导致离子裂解

Q1MS 和 Q3MS 扫描模式

Q1MS 和 Q3MS 扫描模式仅执行一级质量分析。所获得的质谱和使用单四极杆仪器所获取的质谱等同。一级分析中，离子源中形成的离子会进入分析器组件。扫描其中一个质量分析器（Q1 或 Q3）以获取完整的质谱。其他杆组件（分别为 Q2 和 Q3，或 Q1 和 Q2）将作为离子传输设备。在 Q1MS 扫描模式中，Q1 用作质量分析器；在 Q3MS 扫描模式中，Q3 用作质量分析器。

子离子扫描模式

子离子扫描模式执行两级质量分析。在第一个阶段中，在离子源中形成的离子将进入 Q1，Q1 设置为传输一个质荷比的离子。在质量分析的第一个阶段选择的离子称为母离子。（因此，Q1 将作为母离子质量分析器，而由母离子质量分析器传输的质荷比离子将作为母离子质量组。）Q1 选择的母离子便会进入 Q2，Q2 的周围是碰撞单元。

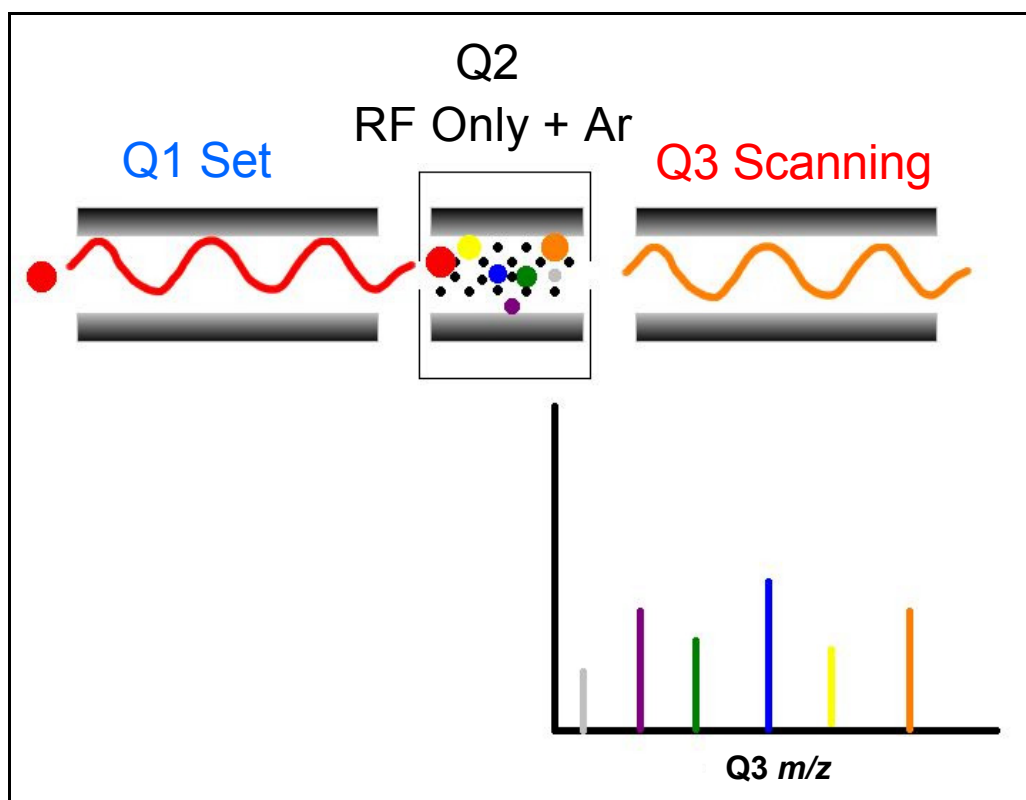
注释 为了方便起见，当提及第一个、第二个和第三个杆组件作为硬件时，可以分别称它们称为 Q1、Q2 和 Q3。但是，为了清楚讨论它们在 MS/MS 扫描模式中的功能，可分别称它们为母离子质量分析器、碰撞室（被碰撞单元包围的离子传输设备）和子离子质量分析器。

在二级分析阶段，碰撞单元中的离子可进一步裂解产生子离子。两个过程产生子离子：通过亚稳离子的单分子分解，或通过与碰撞单元中的氦气发生碰撞解离。随后的步骤称为碰撞诱导分解（CID）。在碰撞单元中形成的离子将进入 Q3（子质量分析器），以进行二级质量分析。扫描 Q3 以获取所选母离子分裂产生的子离子的质谱。

子离子扫描模式中获得的质谱（子离子质谱），是所选母离子的质谱。

图 3 说明子离子扫描模式。

图 3. 子离子扫描模式图解



母离子扫描模式

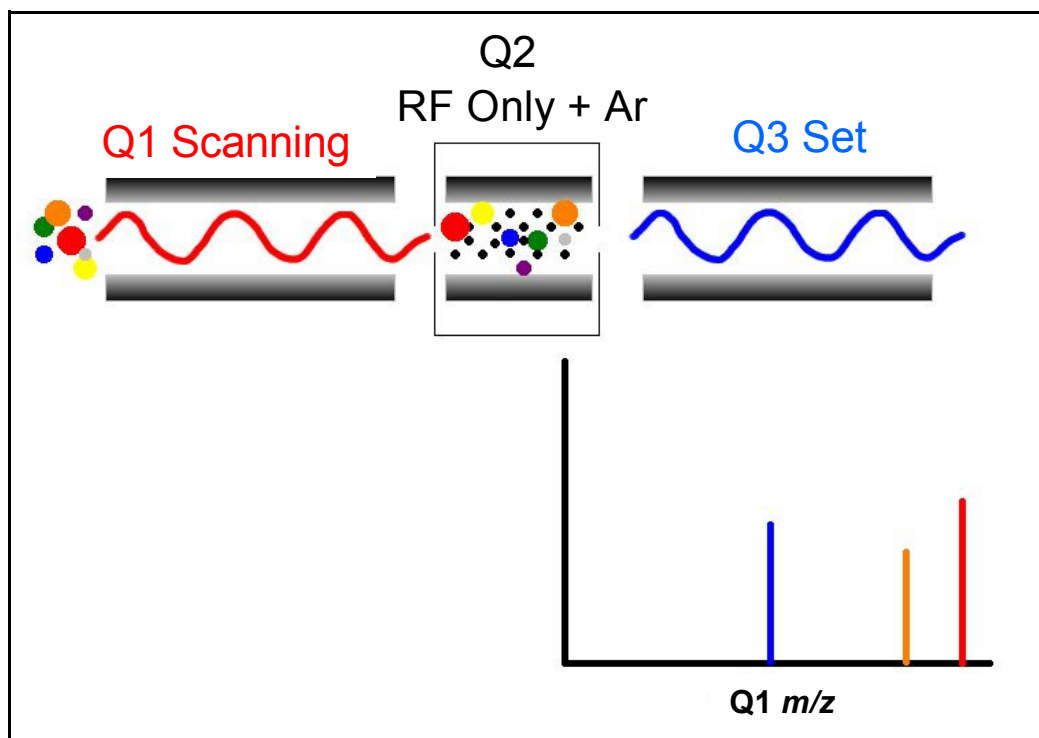
母离子扫描模式也是二级分析。在第一阶段，离子源中形成的离子将引入母离子质量分析器，该分析器依次将母离子扫描至碰撞单元中。

在分析的第二阶段，在碰撞单元中，母离子可通过亚稳离子的单分子分解或通过碰撞诱导解离产生子离子。在碰撞单元中形成的碎片离子将进入子离子质量分析器，它将传输所选的子离子。（子离子质量组是由子离子质量分析器传输的某个质荷比的离子。）

得到的质谱图显示裂解产生所选子离子的所有母离子。请注意，对于在母离子扫描模式中获取的质谱（母离子质谱图），质荷比轴的数据从 Q1（母离子）获得，而离子强度轴的数据则从 Q3（监测子离子）获得。

图 4 说明母离子扫描模式。

图 4. 母离子扫描模式的图解



采用母离子扫描模式的实验（母离子实验）可用于结构和碎片研究以及混合物的调查分析。一般，母离子扫描模式实验可检测产生相同碎片的所有化合物。该实验对于快速检测具有共同碎片离子（例如，邻苯二甲酸盐的 m/z 149）的结构同系物非常有用。

中性丢失扫描模式

在中性丢失扫描模式中，两个质量分析器（Q1 和 Q3）将链接在一起，在相同宽度的质量范围内以相同速度扫描。但是，相应的质量范围相对所选的质量有偏移，使子离子质量分析器扫描的质量单元数值比母离子质量分析器扫描的低。

因此，在中性丢失扫描模式中，是二级质量分析。在第一个阶段中，母离子质量分析器会按照质荷比分离离子源中形成的离子。这些离子随后将引入碰撞单元中。

在分析的第二个阶段中，进入碰撞单元的离子可通过亚稳离子的分解或通过 CID 进一步裂解以产生子离子。然后，子离子质量分析器会根据质荷比分离这些子离子。图 5 说明中性丢失扫描模式。第 11 页的图 6 显示具有共同中性丢失片段的化合物例子。

在离子离开 Q1 和进入 Q3 的时间内要探测某个离子，它必须丢失一个中性基团，其质量（中性丢失质量）等于两个质量分析器所扫描的质量范围差。因此，中性丢失质谱是显示丢失所选质量中性基团的所有母离子。

请注意，中性获得（或联合）实验也可使 Q3 扫描的质量范围高于 Q1 扫描的质量范围。

请注意，对于中性丢失（或中性获得）质谱，正如母离子质谱一样，质荷比轴的数据从 Q1（母离子）获得，而离子强度轴的数据则从 Q3（监测离子）获得。

使用中性丢失扫描模式（中性丢失实验）对于寻找大量含有相同官能团的化合物很有用。中性部分通常从取代官能团上丢失（例如，从羧基丢失的 CO_2 ，从乙醛丢失的 CO ，从卤化物丢失的 HX 以及从乙醇丢失的 H_2O ）。

图 5. 中性丢失扫描模式的图解

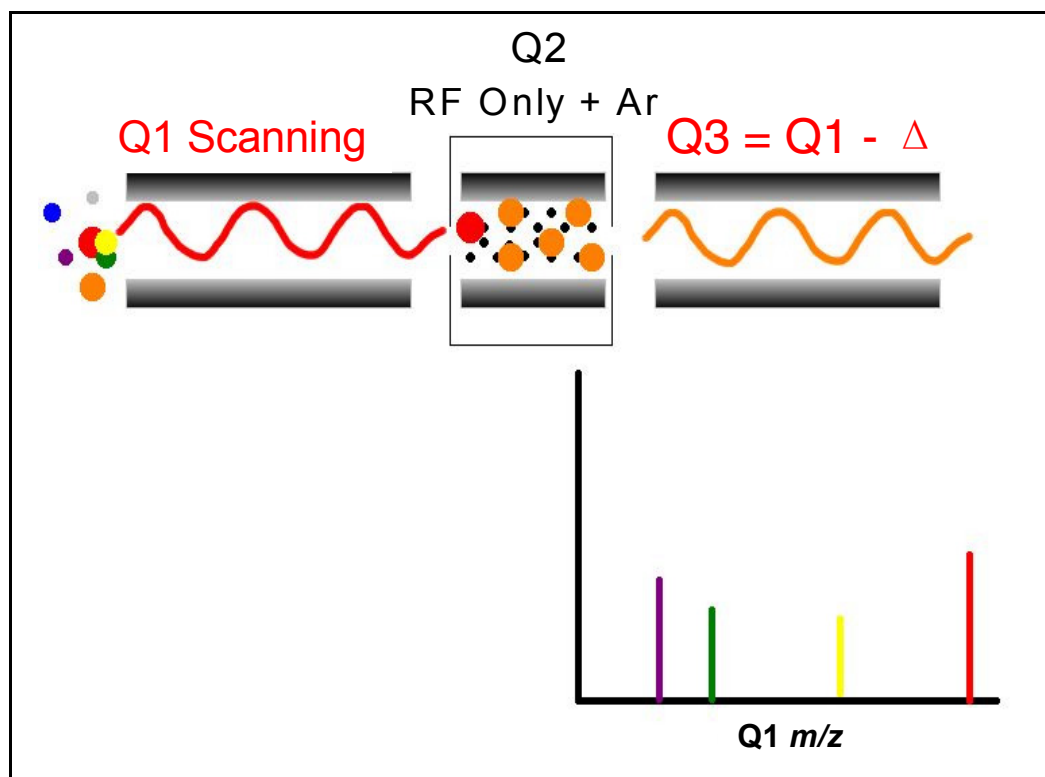
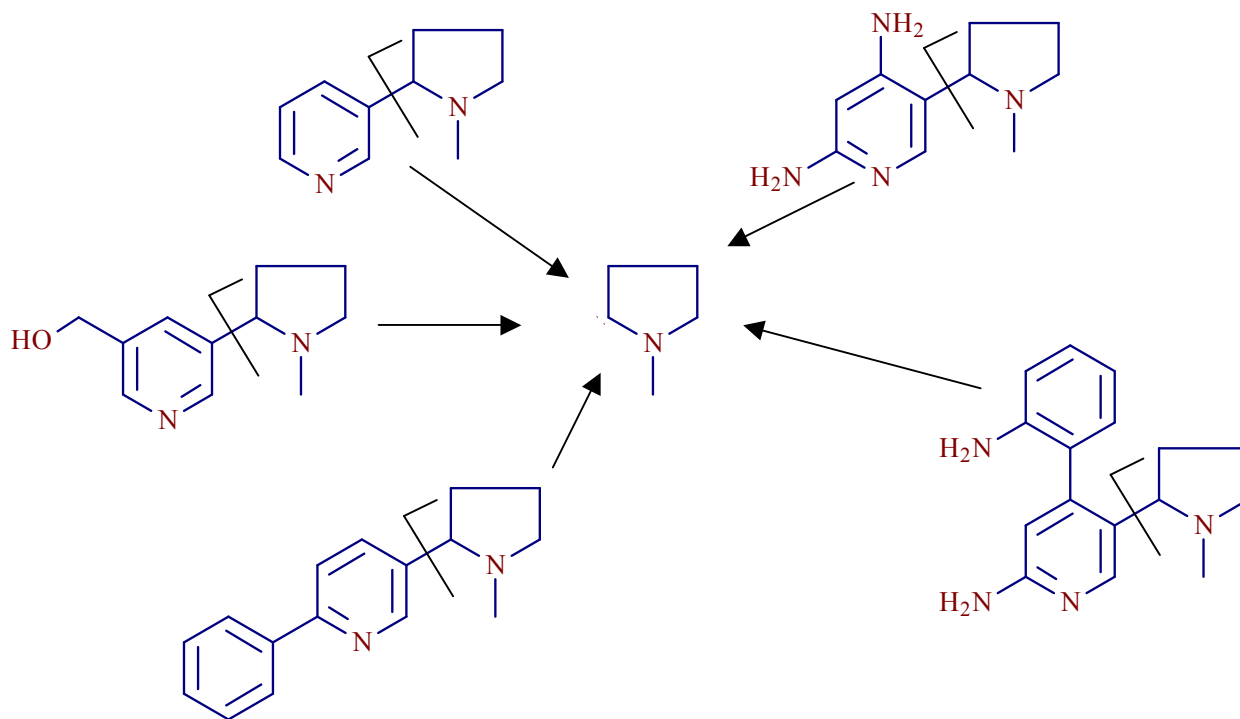


图 6. 具有共同中性丢失碎片的化合物例子



数据依赖扫描模式

TSQ Quantum XLS 系列质谱仪根据数据依赖扫描模式实验中的信息自动决定，不需要用户输入下一个实验步骤。在数据依赖扫描模式中，可以指定标准选择一个或多个感兴趣离子，以执行后续扫描，例如 MS/MS。可以使用下列两个方法之一进入数据依赖实验的设置：

- 如果对母离子有些概念，或者如果期望获得某种母离子，可以设置可能的母离子列表。然后，在检测到所指定的其中一个母离子时，就可以采集子离子图谱，然后分析该信息。相反地，也可以设置不关心的离子列表。
- 如果化合物信息少，可以设置数据依赖实验的参数，这样如果离子信号强度高于指定阈值，则质谱仪生成子离子质谱。稍后，可以确定该信息是否有用。

由于数据依赖扫描需要使用上一个扫描的目标离子，因此，第一个扫描事件不可以是数据依赖扫描。

扫描类型

可以在多种扫描模式下操作 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪。最常用的扫描类型如下所述：

- 全扫描
- 选择离子监测 (SIM)
- 选择反应监测 (SRM)
- 智能选择反应监测 (iSRM)
- 定量增强，数据依赖质谱 (QED MS)
- 自动选择离子监测 (AutoSIM)

全扫描

全扫描类型提供每个分析物的完整质谱。全扫描将在指定的扫描时间内，质量分析器不间断地从第一个质量数扫到最后一个质量数。

全扫描实验用于确定或确认未知化合物或含有未知化合物的混合物中每个成份。（一般，需要全扫描图谱来确定未知化合物。）

全扫描类型会比 SIM 提供更多关于分析物的信息，但全扫描的灵敏度不如 SIM 或 SRM 扫描类型。在全扫描模式下用于监测每个离子信号的时间，比 SIM 或 SRM 中的少。全扫描比 SIM 或 SRM 扫描类型提供更多信息，但灵敏度较低。

使用 SIM 或 SRM，需要明确要寻找的离子或反应，才可使用这些扫描类型。因此，在 SIM 之前可以利用全扫描来确定分析物并获取其质谱，在 SRM 之前可以利用全扫描来确定感兴趣母离子的质谱和子离子图谱。然后，可以使用 SIM 或 SRM 来执行化合物的常规定量分析。

选择离子监测 (SIM)

选择离子监测 (SIM) 可监控某个离子或一组离子。当已知目标化合物质谱时，SIM 实验适用于检测复杂混合物中的微量目标化合物。SIM 在痕量分析和大量样品快速筛选目标化合物时很有用。

由于 SIM 仅监测几个离子，因此它比全扫描模式提供更低的检测限和更快的速度。SIM 可实现较低检测限，因为可以花更多时间来监测目标分析物图谱中肯定存在的重要离子。SIM 可实现更快的速度，因为它仅监控几个感兴趣的离子；SIM 不会监控质谱图中空的区域或不含感兴趣离子的区域。

SIM 可以提高检测限并减少分析时间，但它也会降低特异性。由于 SIM 只监测特定离子，任何生成这个离子的化合物都会被认作目标化合物，这样可能导致假阳性结果。

选择反应监测 (SRM)

选择反应监测 (SRM) 可监控某个反应或几组反应，例如，某个离子的裂解或中性基团丢失。

SRM 监测有限数量的母离子 / 子离子对。在子离子类型实验中，通常选择一个母离子，但一般仅监测一个子离子。SRM 实验通常使用子离子扫描模式执行。

和 SIM 一样，SRM 可快速分析复杂混合物中的痕量组分。但是，由于 SRM 选择两组离子，因此所获得的特异性会比 SIM 强很多。一个干扰化合物不仅需要形成和目标化合物的选定母离子具有相同质荷比的母离子，而且该母离子也必须裂解形成和目标化合物的选定子离子具有相同质荷比的子离子。

高选择性反应监测 (HSRM)

高选择性反应监测 (HSRM) 是在更高的 Q1 分辨率下执行的 SRM (0.4 u fwhm [低于 TSQ Quantum XLS Ultra 质谱仪] vs. 0.7 u fwhm SRM)。

智能选择反应监测 (iSRM)

在智能选择反应监测 (iSRM) 实验中，质谱仪为每个目标化合物 (母离子) 执行多次“一级”选择反应监测 (SRM)。质谱仪利用某个目标物的一级 SRM 扫描强度的总和进行定量。

为每个一级 SRM 扫描指定一个触发阈值。如果某个目标物的所有列出的二级 SRM 反应强度都超过触发阈值，而且如果所有扫描都在指定保留时间窗口内，则质谱仪执行“二级”扫描确认目标物的存在。二级 SRM 反应的最大数量是 12 400。

质谱仪利用参比 SRM 扫描调整接下来 SRM 扫描的采集时间窗口。它使用参比 SRM 反应的预期和观察保留时间之间的差异，校正用于步骤决策的保留时间。质谱仪记录真实的保留时间。应该指定 LC 运行过程中间隔的 2-4 个

参比反应。质谱仪使用上述的两个保留时间校正，以计算之后的一级 SRM 扫描的分段线性保留时间校正。正如一级 SRM 扫描，参比 SRM 扫描可能触发二级 SRM 扫描。

一级加上参比 SRM 离子对的最大数量是 3600。

定量增强，数据依赖质谱 (QED MS)

定量增强，数据依赖质谱 (QED MS) 扫描类型提供同时的定量 (SRM) 和结构确认 (全扫描 MS/MS 子离子质谱)。如果某个指定母离子的 SRM 反应强度超过触发阈值，质谱仪执行全扫描 MS/MS 子离子扫描以确认分析物的存在。可以利用 QED MS 执行保留时间校正。

自动选择离子监测 (AutoSIM)

在“自动选择离子监测 (AutoSIM)”扫描类型中，质谱仪会在预扫描中自动选择强度最大的质量 (m/z 值)，为它们建立一个 SIM 扫描列表，然后采集和记录这些选定质量的离子电流。可在任何扫描模式的任何全扫描上执行自动 SIM，但不可在数据依赖扫描中执行。

数据类型

可以使用 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪的两种数据类型之一，采集和显示质谱数据 (强度 vs. 质荷比)：

- [轮廓图数据类型](#)
- [棒状图数据类型](#)

轮廓图数据类型

在轮廓图数据类型中，可以看到质谱峰的形状。每个原子质量单位划分为很多取样间隔。在每个取样间隔处确定离子电流强度。轮廓图数据类型显示每个取样间隔处的强度，并采用连续线条将这些强度连接起来。一般，调谐和校正质谱仪时使用轮廓图数据类型，这样可以轻松观察和测量质量分辨率。

棒状图数据类型

棒状图数据类型将质谱显示为条形图，并将每组取样间隔处的强度相加。显示图是使用这个总和 vs. 取样间隔质量数的整数中心。一般，采用棒状图扫描数据类型进行数据采集，会加快扫描速度。棒状图的数据处理也快很多。

质荷比范围

TSQ Quantum XLS 和 TSQ Quantum XLS Ultra 质谱仪可以分别在 10 到 3000 Da，以及 10 到 1500 Da 的质荷比范围内操作。

功能描述

本章描述 TSQ Quantum XLS 系列系统的主要组件及其各自功能。

目录

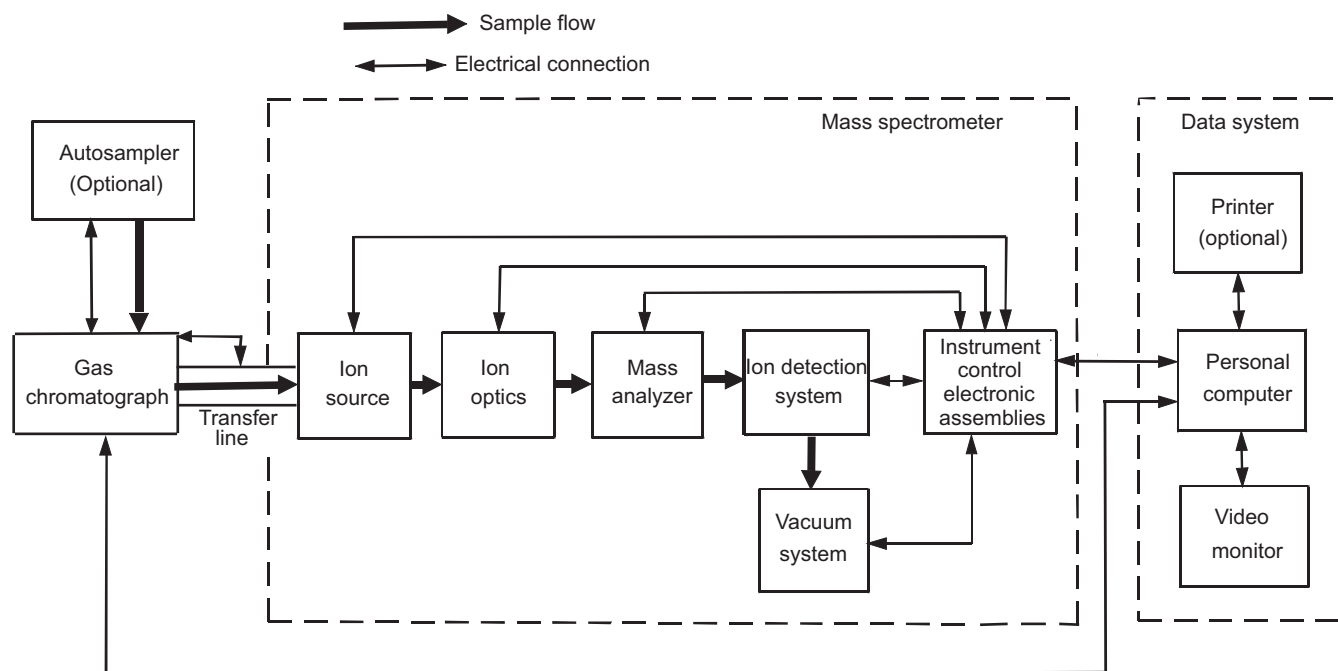
- 自动进样器（可选）
- 气相色谱仪
- 直接进样杆（可选）
- 传输线
- 质谱仪
- 数据系统

TSQ Quantum XLS 质谱仪的功能模块图示显示在图 7 中。样品传输线可将气相色谱仪 (GC) 连接到质谱仪。自动进样器和 GC 通常安装在质谱仪的左侧。

在 GC/MS 分析中，将样品注入 GC 色谱柱。接着，样品会分离成不同成份。这些成份从 GC 色谱柱上洗脱并通过传输管线传入质谱仪中进行分析。可使用直接进样杆将样品引入质谱仪中。

电子电离 (EI) 或化学电离 (CI) 在样品分子进入质谱仪时将其电离。离子光学组件可集中和加速样品离子传输到质量分析器，并在质量分析器中根据其质荷比分析这些离子。然后，离子检测系统将检测到的离子数量成比例放大信号。系统电子设备可接收和简化来自离子检测系统的离子电流信号。接着，该信号将被传送到数据系统进行进一步处理、存储和显示。数据系统可提供主要质谱仪用户接口。

图 7. TSQ Quantum XLS 系列系统的功能模块图示



自动进样器

可以使用选配的 Thermo Scientific TriPlus™ 自动进样器将样品自动注入 GC 入口。可以利用自动进样器来自动化 GC/MSMS 分析。TriPlus 自动进样器显示在图 1 和图 2 中。

自动进样器 Start/Stop（启动 / 停止）的信号通过触点闭合提供给质谱仪。

可以从数据系统计算机配置 TriPlus 自动进样器。在 Instrument Configuration（仪器配置）窗口中选择 TriPlus 自动进样器按钮，可从 Microsoft™ Windows™ 任务栏中选择 **Start（开始） > All Programs（所有程序） > Thermo Foundation 2.0 > Instrument Configuration（仪器配置）**。有关 TriPlus 配置选项的描述，参阅 Xcalibur Help（Xcalibur 帮助）。

也可以使用数据系统来设置 TriPlus 自动进样器进样。选择 **Start > All Programs > Thermo Xcalibur > Xcalibur** 并单击 **Instrument Setup（仪器设置）** 打开 Instrument Setup 窗口。然后单击 **TriPlus** 图标打开 TriPlus Autosampler（TriPlus 自动进样器）页面。参阅 Help 了解运行 TriPlus 自动进样器的说明。

有关维护步骤，参阅自动进样器随附的文档。

气相色谱仪

Thermo Scientific TRACE GC Ultra™ 气相色谱仪（GC）可使用气相色谱分析技术将样品混合物分离成各化学成份。在气相色谱分析中，样品混合物在固体相和流动气体之间进行分配。固定相吸附在小直径玻璃管内部：毛细管色谱柱。混合物每个成份的分子结构决定其从 LC 洗脱和进入质谱仪的顺序。TRACE GC Ultra 气相色谱仪显示在图 1 和图 2 中。

气相色谱技术广泛应用于分析化学，但是 GC 中用到高温使其不适用于高分子量的生物聚合物，而这类化合物在生物化学中十分常见。它最适合于石化、环境监测和工业化学领域。它还广泛应用于化学研究。

从数据系统计算机配置 TRACE GC Ultra 气相色谱仪。在 Instrument Configuration 窗口中单击 **TRACE GC Ultra** 按钮，可从 Microsoft Windows 任务栏中选择 **Start > All Programs > Thermo Foundation 2.0 > Instrument Configuration**。有关 TRACE GC Ultra 配置选项的描述，参阅 Xcalibur Help。

TSQ Quantum XLS 系列数据系统计算机可以直接控制 TRACE GC Ultra。选择 **Start > All Programs > Thermo Xcalibur > Xcalibur** 并单击 **Instrument Setup** 打开 Instrument Setup 窗口。单击 **TRACE GC Ultra** 图标打开 TRACE GC Ultra 页面。有关操作 TRACE GC Ultra 的说明，参阅 Help。

有关 GC 前面板（键盘）操作以及 GC 的维护程序，参阅 GC 随附的文档。若要替换 GC 毛细管色谱柱，参阅第 107 页的“移除和安装 GC 毛细管色谱柱”。

直接进样杆

利用可选的直接进样杆可以在没有 GC 色谱柱分离的情况下将化合物进样到离子源内。参阅图 8。直接进样杆特别适合于定性或半定量分析，尤其那些不需要 GC 色谱柱分离或很难用色谱方法洗脱的材料。直接进样杆将样品通过真空互锁直接进样到离子源内。一个带可更换探针工具的单控制器盒（图 8）使得选择最佳进样方法十分简便。

直接进样杆系统包括两个探针工具：

- 直接暴露杆
- 直接插入杆

直接暴露杆（DEP）具有一个快速蒸发液体或溶液的加热灯丝。DEP 适用于在合适溶剂中溶解的液体或固体的快速分子量确认。DEP 可以蒸发具有高沸点的化合物。

直接插入杆（DIP）具有一个可缓慢蒸发固体样品的控温加热毛细管。可以使用 DIP 快速分析固体基质中的固体或痕量组分，例如法医样品或组织。

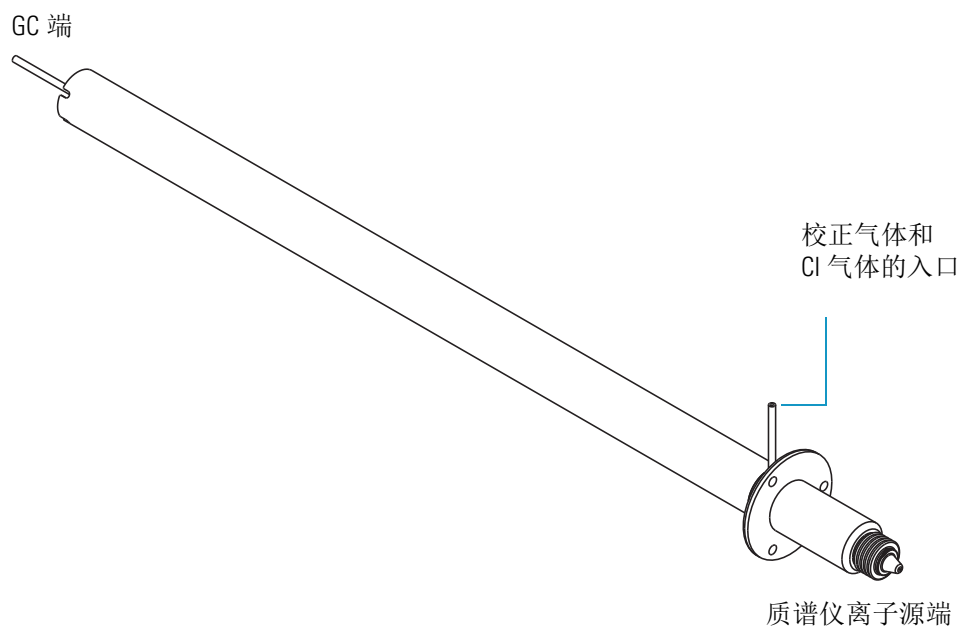
图 8. 直接进样杆和控制器



传输线

传输线是 GC 和质谱仪之间的接口。当色谱柱将离子传递到质谱仪的离子源内时，传输线加热毛细管色谱柱。这可以防止样品凝聚。传输线包括校正气体和化学电离气体的入口。参阅图 9。

图 9. 传输线



质谱仪

TSQ Quantum XLS 系列质谱仪为从气相色谱仪或直接插入杆进样的样品提供样品电离或质量分析。质谱仪使用三重四极杆质量分析器和质量分析器外部的离子源。TSQ Quantum XLS 系列质谱仪的许多重要特性如下所述：

- 高灵敏度和分辨率
- 对于 TSQ Quantum XLS，其质量数范围为 m/z 10 到 3000，对于 TSQ Quantum XLS Ultra，其质量数范围为 m/z 10 到 1500
- EI 和 CI 电离模式
- 正和负离子极性模式
- MS 和 MS/MS 扫描模式
- 全扫描、SIM、SRM、iSRM、QED MS、AutoSIM 和数据依赖扫描类型

质谱仪包括下列组件：

- 控件和指示灯
- EI/CI 离子源
- 离子 光学系统
- 质量 分析器
- 离子检测系统
- 真空系统和进气口硬件
- 电子组件
- 数据系统

控件和指示灯

五个光发射二极管（LED）位于质谱仪前面板的右上角。参阅图 10 和图 11。

Power（电源）LED 将会在质谱仪的真空系统和电子组件每次有供电时呈绿色亮起。

Vacuum（真空）LED 将会在涡轮分子泵接近所需速度（其 750 MHz 操作速度的 80 %）以及可安全打开离子规时呈黄色亮起。Vacuum LED 会在涡轮分子泵未抵达所需速度时熄灭。通过离子计测量的分析器室压力，处于或低于安全启用质谱仪上高电压的压力值时，Vacuum LED 将会呈绿色亮起。参阅表 2。

图 10.TSQ Quantum XLS Ultra 质谱仪的前面板 LED



图 11.TSQ Quantum XLS 质谱仪的前面板 LED

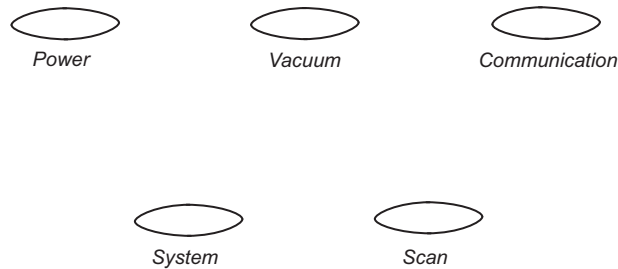


表 2. 打开高电压的最大允许压力

载气	Ar 碰撞气体	最大压力 (Torr)
He	Off (关)	8×10^{-6}
He	On (开)	5×10^{-5}

Communication (通信) LED 将会在质谱仪和数据系统尝试建立通信连接时呈黄色亮起。Communication LED 将会在质谱仪和数据系统之间的以太网通信链接已经建立时呈绿色亮起。

System (系统) LED 将会在每次质谱仪处于待机状态时呈黄色亮起 – 即高电压未应用到离子源、质量分析器或离子探测系统, 但质谱仪的电源打开时。System LED 将会在每次启用高电压和系统处于 On 状态时呈绿色亮起。如果分析器室的电压低于表 2 列出值, 则启用高电压。

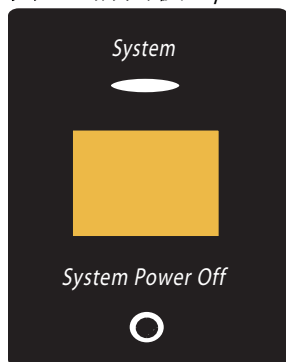
Scan (扫描) LED 会在每次质谱仪处于打开状态和正在扫描离子时呈蓝色闪烁。

位于电子模块前部的 System Power Off (系统电源关闭) 按钮关闭质谱仪、气相色谱仪和自动进样器的电源。参阅图 12。若要恢复质谱仪、气相色谱仪和自动进样器的电源, 必须使用位于电子模块背面的主电源断路器。



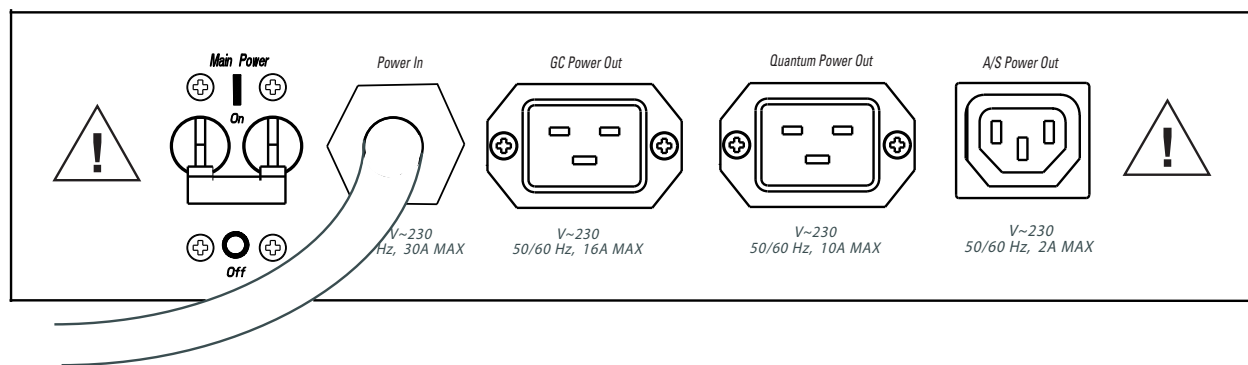
注意事项 在紧急情况下, 若要关闭质谱仪、气相色谱仪和自动进样器的电源, 按下仪器前方的 System Power Off 按钮。

图 12. 前面板 System Power Off 按钮



主电源断路器开关（标记为 Main Power）位于质谱仪背面电源面板上。参阅图 13。在 Off (O)（关，O）位置，断路器可取消质谱仪、气相色谱仪和自动进样器的所有电源。在 On (I)（开，I）位置，电源将供应到质谱仪、气相色谱仪和自动进样器。在标准操作模式中，断路器将保持在 On (I) 位置。

图 13. 电子模块的背面电源面板



质谱仪主电源断路器开关（标记为 Main Power）位于质谱仪右面板右下角的仪器电源面板上。参阅图 14。在 Off (O) 位置，断路器可取消质谱仪的所有电源，包括真空泵。在 On (I) 位置，电源将供应到质谱仪。在标准操作模式中，断路器将保持在 On (I) 位置。

电子维修开关（标记为 Electronics），位于质谱仪电源面板的主电源断路器旁边（图 14）。在 Service Mode（维修模式）位置，开关可取消质谱仪所有组件的电源，除了真空系统。在 Operating Mode（操作模式）位置，电源将供应到质谱仪的所有非真空系统组件。

真空维修开关（标记为 Vacuum），位于质谱仪电源面板的电子维修开关旁边（图 14）。在 Service Mode 位置，开关可消除真空系统所有组件的电源，包括前级泵、涡轮分子泵，和涡轮分子泵控制器。处于 Operating Mode 位置的开关可为质谱仪的所有真空系统组件供应电源。

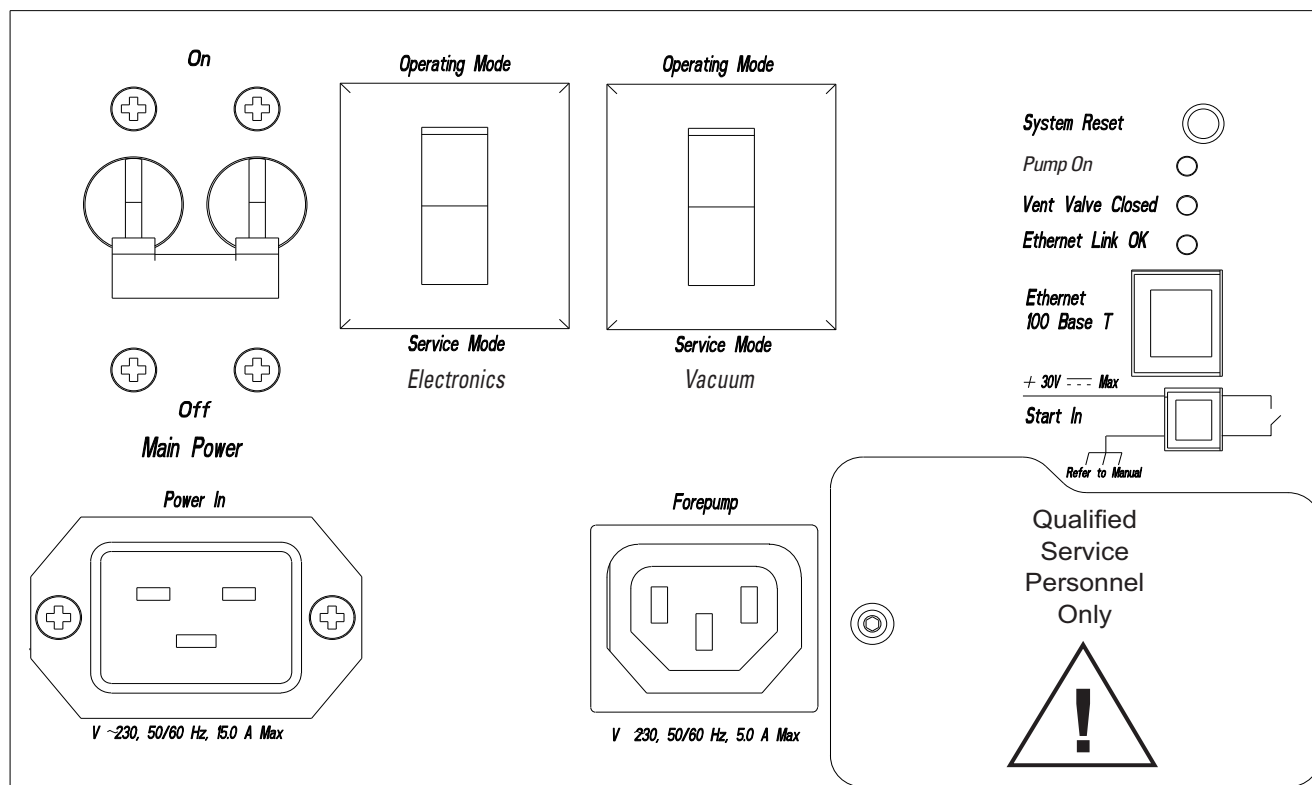
System Reset（系统重启）按钮也位于质谱仪电源面板上。按下 System Reset 按钮实现 5 V 逻辑接地，并使 System Control PCB（系统控制印刷电路板）上的嵌入式计算机重启。有关如何重启质谱仪软件的信息从数据系统重新载入，参阅第 57 页的“重启数据系统”。有关如何重启质谱仪的信息，参阅第 57 页的“重启质谱仪”。

电源面板上有三个 LED：Pump On（泵打开）LED 将会在前级泵电流传感器探测到有电流传送到前级泵时呈绿色亮起。如果前级泵电流传感器没有探测到电流传送到前级泵，该 LED 将会熄灭。如果电流传感器在质谱仪打开时探测到电流丢失，真空系统放空。

Vent Valve Closed（放空阀关闭）LED 将会在放空阀电流传感器探测到有电流通过放空阀而放空阀关闭时呈绿色亮起。该 LED 将会在放空阀打开时熄灭。

Ethernet Link OK（以太网链接良好）LED 将会在系统控制 PCB 和数据系统计算机通信时呈绿色亮起。该 LED 将会在系统控制 PCB 和数据系统计算机之间没有通信时熄灭。

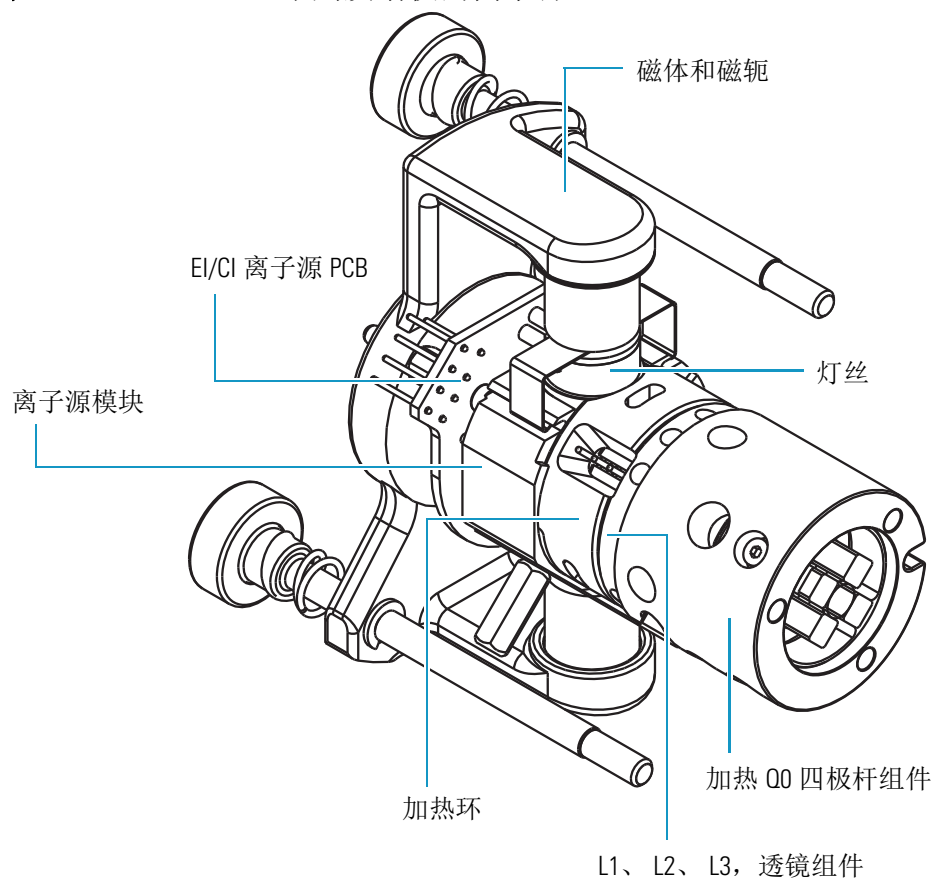
图 14. 质谱仪的右侧电源面板



EI/CI 离子源

EI/CI 离子源可以将从 GC 洗脱或由直接进样杆引入的样品分子电离形成气相样品离子。参阅图 15。可以在电子电离 (EI) 或化学电离 (CI) 模式下操作离子源。参阅第 3 页的“电离模式”。

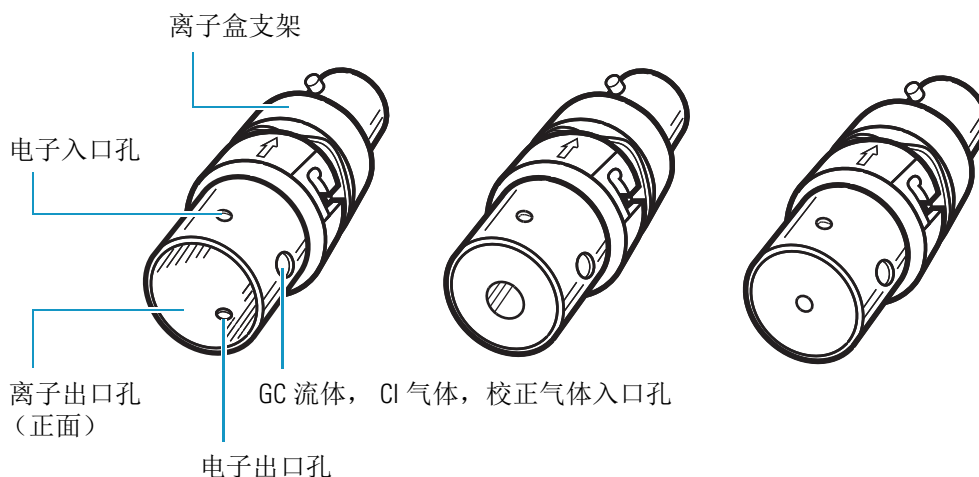
图 15. TSQ Quantum XLS 系列质谱仪的离子源



离子盒位于离子源中心，即电子与反应气分子相互作用形成离子的场所。三个可更换的离子盒和离子盒支架可用于离子源。参阅图16。离子盒的选择取决于离子化模式。开放的 EI 离子盒在分析器端开放，具有一个相对大的电子入口孔。封闭的 EI 离子盒具有一个小于 EI 离子盒的离子出口孔。这导致被分析物的压力更高，灵敏度更好，但是动态范围减小。CI 离子盒在分析器端封闭，除了一个离子出口小孔和一个相对小的电子入口孔。在 CI 模式下，必须维持相对高的反应气压力。

离子源模块将离子盒保持在中心。从 GC 毛细管色谱柱引入的样品，通过离子源模块的狭缝进入离子盒。校正气体或化学电离气体通过传输线进入离子盒。

图 16.EI（左侧）、封闭 EI（中心）和 CI（右侧）离子盒和支架



匣加热器加热离子源模块和透镜组件，最大程度减少沉积物形成在离子源模块、离子盒和透镜组件的速率。在灯丝打开后，离子源模块也被加热以帮助离子源模块和离子盒之间的快速温度平衡。在 EI 模式下，离子源一般维持在 150 °C 到 220 °C。但是，可以偶尔使用更低或者更高的温度进行某些应用。在 CI 模式下，离子源一般维持在 180 °C 到 200 °C。离子源加热器是通过反馈控制。

灯丝组件位于离子源模块顶部的凹处，它包括灯丝、偏转器和电子透镜。灯丝是一根铯线，电加热灯丝通过热电子发射产生电子。偏转器将灯丝发射的电子排斥远离灯丝，向离子盒前进。灯丝及其偏转器维持在一个相对离子盒的负电势。电子透镜防止正离子偏离电子束。反之，这样可以防止正离子通过电子入口孔离开离子盒。灯丝与离子盒之间的电势差决定了电子能量。

两个永久磁体固定在磁轭中，磁轭位于离子源模块上方和下方合适的位置上。永久磁体校准电子束，并使电子束螺旋通过离子盒。这确保样品的最佳电离。

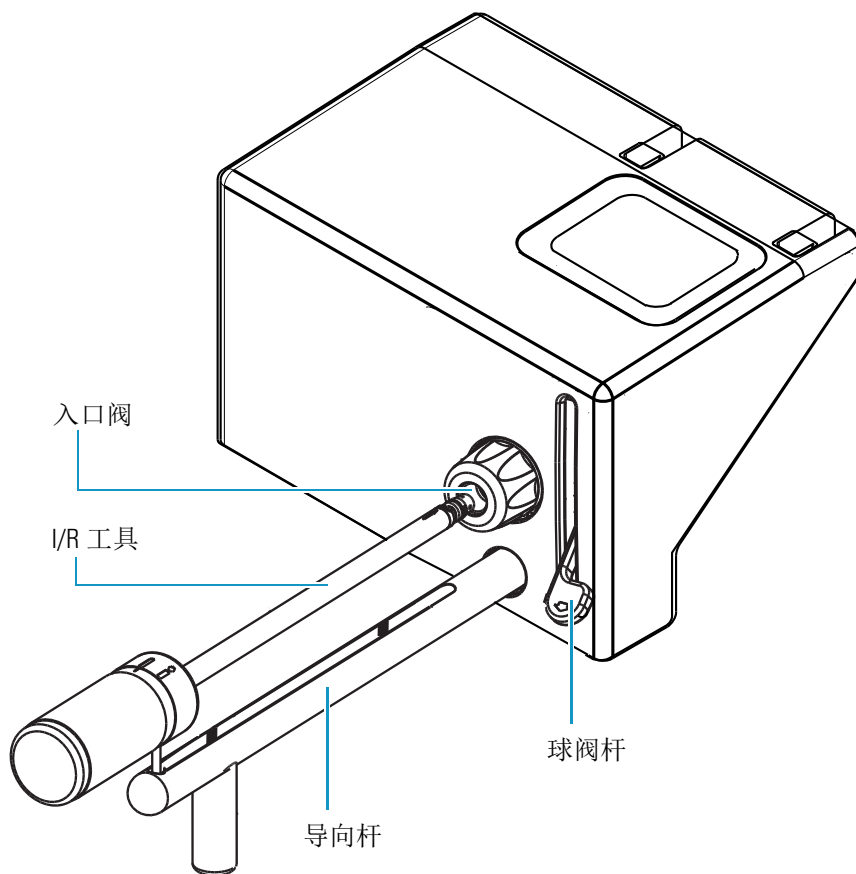
TSQ Quantum XLS 系列质谱仪的离子源具有两个离子源透镜组件，叫做 L1、L2 和 L3 透镜组件和加热 Q0 四极杆组件。这些透镜提取离子源中形成的离子，将其传输到离子光学系统。透镜 L1 电压与质量数有关。加热 Q0 四极杆的杆接触 Q0 四极杆的杆并共享它们的 rf 和 dc 电压。

入口阀

入口阀位于真空腔体的前部，它是一个真空密封阀，允许用户更换离子盒或插入直接暴露杆，而无需质谱仪泄真空。使用插入 / 移除 (I/R) 工具插入或移除离子盒。参阅图 17。前级泵抽空入口阀。

球阀是一个内部有孔的球形阀门，它位于真空腔体和入口阀模块之间。当球孔与真空腔体和入口阀之间的开口对齐时，球阀打开。球阀杆打开并关闭球阀。当球阀关闭时，它防止真空腔体泄真空。

图 17. 入口阀， I/R 工具， 导向杆和球阀杆



离子光学系统

离子光学系统会聚齐离子源中产生的离子，然后将它们传输到质量分析器。离子光学包括 Q0 四极杆和透镜 L11 及 L12。

Q0 四极杆是一个四根方形杆的矩形阵列，可作为离子传输设备。参阅图 18。应用到杆的 rf 电压产生沿着四极杆轴引导离子的电场。Q0 补偿电压可增加从离子源处产生离子的平移动能。

Q0 四极杆分为两个部分。参阅图 18。更小的加热 Q0 四极杆组件连接着离子源，而离子源利用匝加热器加热该组件。加热 Q0 四极杆的杆与更大的 Q0 四极杆的杆具有电接触。

图 18. 加热 Q0 四极杆（左侧）和 Q0 四极杆（右侧）

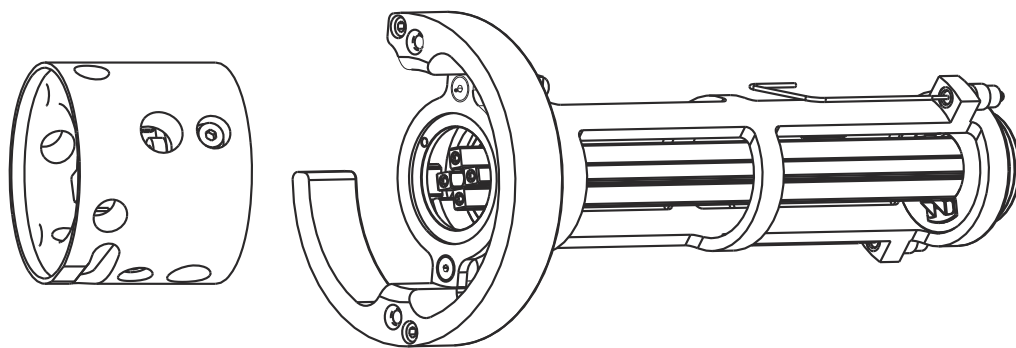
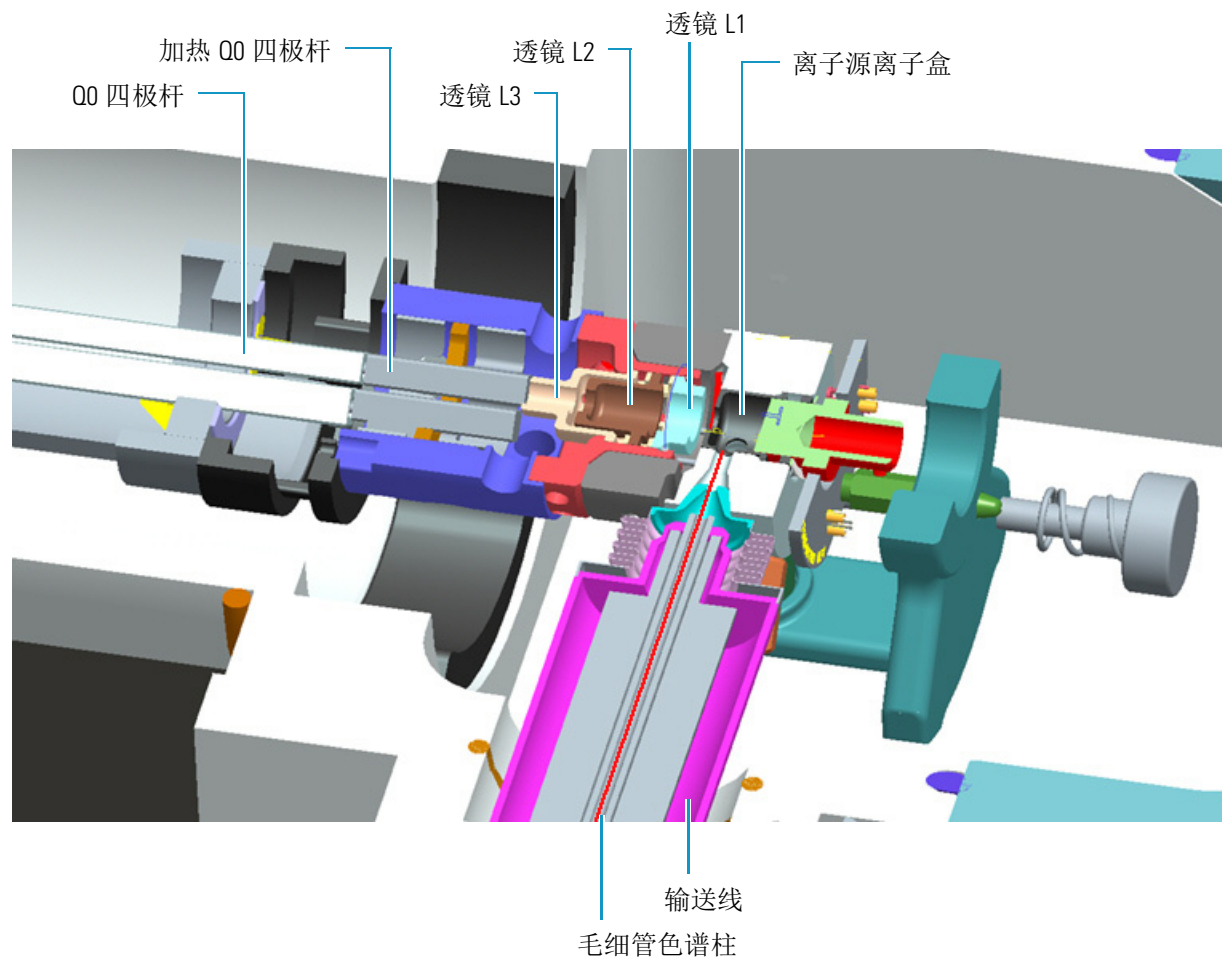


图 19 给出传输线、离子源、加热 Q0 四极杆和 Q0 四极杆的横截面视图。

图 19. TSQ Quantum XLS 系列质谱仪的传输线、离子源、加热 Q0 四极杆和 Q0 四极杆的横截面视图



L11 和 L12 透镜是金属盘，中间贯穿一个圆孔可让离子束通过。它们可以联合作为一个双元件锥透镜。应用到透镜的电压在离子接近透镜时加速（或减速）离子，并可在离子经过透镜时聚焦离子束。电压范围在 0 和 ± 300 V 之间。透镜 L11 和 L12 也可作为 Q0 四极杆室和质量分析器室之间的真空缓冲区。

质量分析器

质量分析器可根据离子的质荷比分离离子，然后将它们传送到离子检测系统。TSQ Quantum XLS 系列质谱仪上的质量分析器包含三个四极杆组件（Q1、Q2 和 Q3）以及三个透镜组。

下面详细讨论质量分析器：

- 四极杆组件
- 应用到四极杆的 rf 和 dc 场
- 质量分析
- 碰撞室和 CID 效率
- 四极杆补偿电压
- 质量分析器透镜

四极杆组件

在质谱仪中使用的三个杆组件从腔体的离子源端进行编号并指定为 Q1、Q2 和 Q3。Q1 和 Q3 是可启用高分辨率扫描而不会丢失信号的四极杆。

Q1 和 Q3 是经过精细机器加工和精确排列的方形阵列，是真正的双曲面四极杆，称为 hyperquads (TSQ Quantum XLS Ultra 质谱仪) 或双曲面型圆杆 (TSQ Quantum XLS 质谱仪)。参阅图 20 和图 21。石英间隔器可作为邻近杆之间的电绝缘物。

图 20. TSQ Quantum XLS Ultra 质谱仪的 Q1 或 Q3 hyperquad

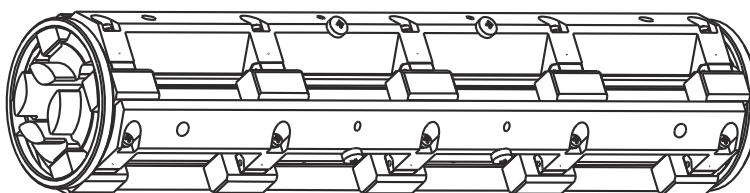
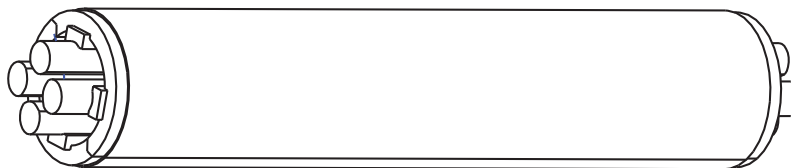
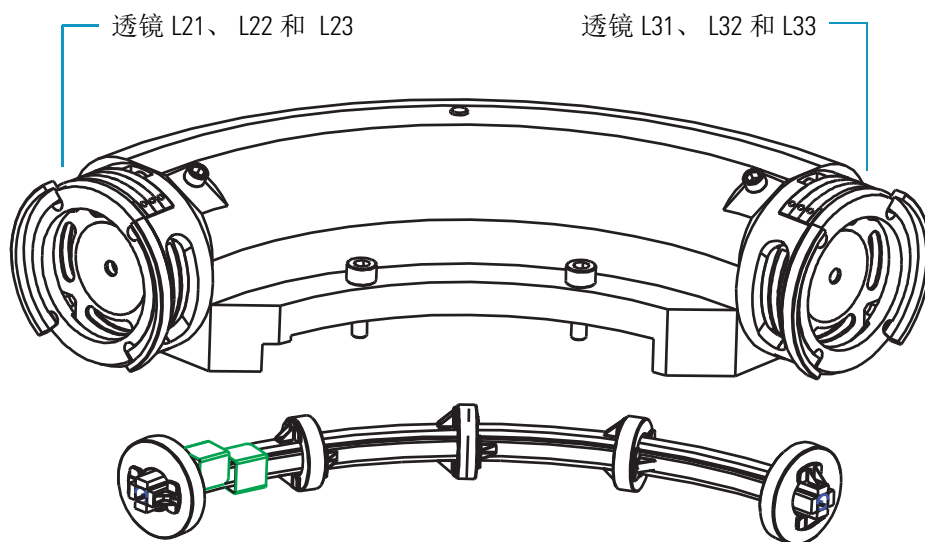


图 21. TSQ Quantum XLS 质谱仪的 Q1 或 Q3 四极杆



Q2 是一个方形的四极杆组件。Q2 总是作为离子传输设备。Q2 四极杆呈 90 度弯曲。除了减少仪器的占地面积外，此弯杆还可防止不需要的中性物质被传输至检测器，大大降低数据中的噪声水平。Q2 已成为碰撞室这个术语的同义词。在技术上，碰撞室即包含 Q2 的腔体，如果存在氦气，可能会发生碰撞诱导解离。参阅图 22。

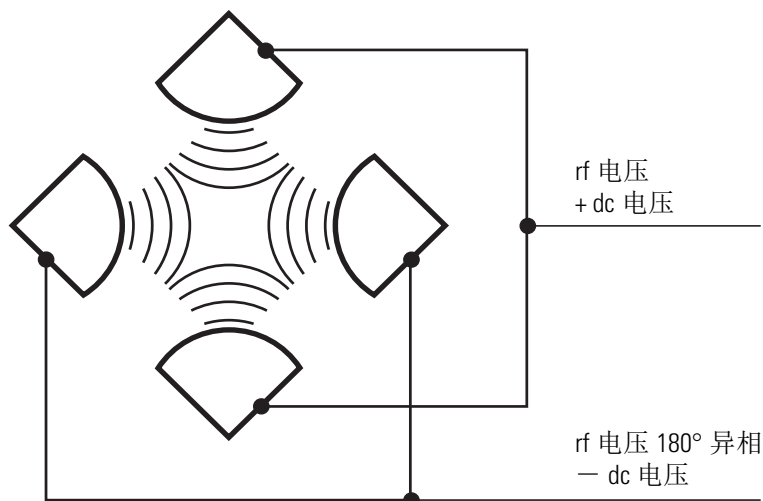
图 22. 碰撞室、Q2 四极杆和透镜



应用到四极杆的 rf 和 dc 场

在四极杆组件中，由于阵列中每个相对的杆都以电场相连，因此可将四个杆考虑为两对杆，每对具有两个杆。Ac 和 dc 电压会应用到四极杆，而这些电压将会在扫描时递变。相同振幅和符号的电压将应用到每一对杆。但是，应用到不同对杆的电压具有相同振幅但符号相反。参阅图 23。

图 23. 应用到 Q1 和 Q3 质量分析器的 rf 和 dc 电压的极性



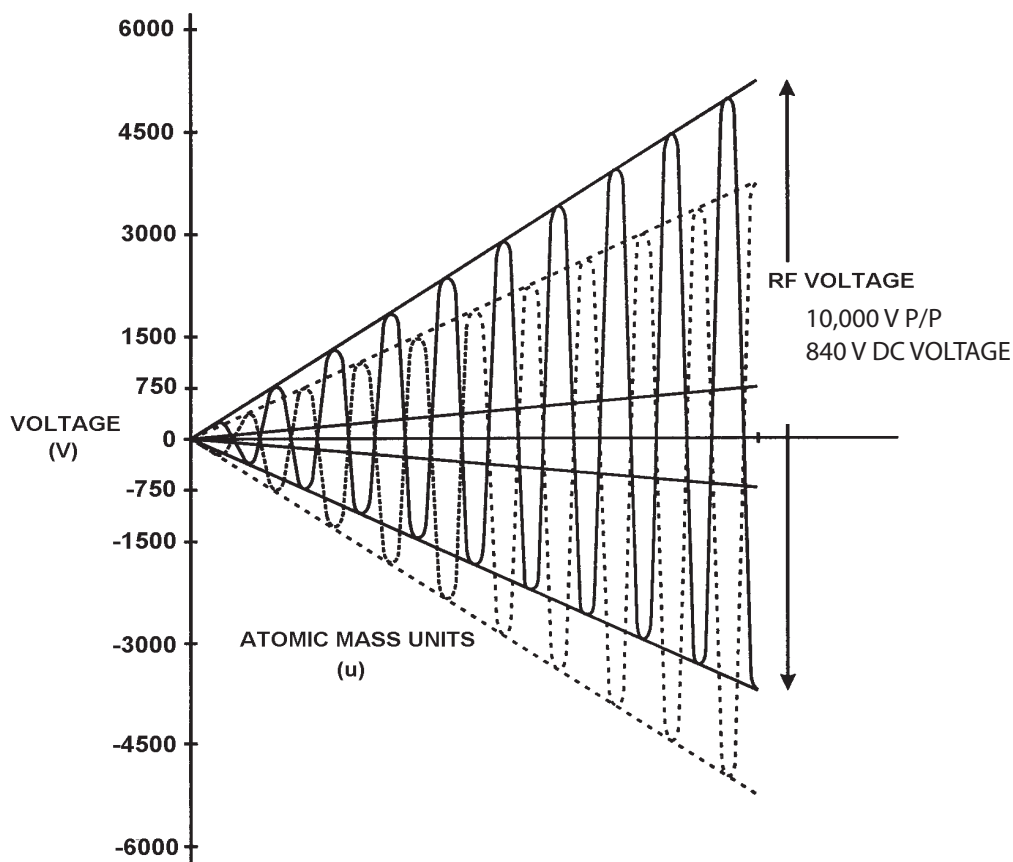
应用到四极杆的 ac 电压频率不变 (1.123 MHz)。应用到杆的 ac 电压变化范围 0 到 10 000 V 峰到峰，而 dc 电压则从 0 到 ± 840 V 之间变化。相同振幅和符号的电压应用到每一对杆。但是，应用到另一对四极杆的电压具有相同振幅但符号是相反的。

由于此 ac 电压的频率处于射频范围，因此称为 rf 电压。在图 24 中，实线代表应用到一对杆的 rf 和 dc 电压组合，虚线代表应用到另一对杆的 rf 和 dc 电压组合。rf 电压对 dc 电压的比率将决定质谱仪分离不同质荷比离子的能力。

第一个和第三个四极杆组件 (Q1 和 Q3 四极杆) 可作为质量分析器或离子传输设备。同时应用 rf 和 dc 电压时，Q1 和 Q3 可作为质量分析器。若仅应用 rf 电压，它们则作为离子传输设备。在离子传输模式中，四极杆组件将允许很宽范围的质荷比离子通过。

方形四极杆组件 (Q2) 仅可在离子传输模式中操作。Q2 的周围是一个碰撞室，如果该单元中存在氩碰撞气体，则会发生碰撞诱导分解 (CID)。

图 24. 应用到 Q1 和 Q3 质量分析器的 rf 和 dc 电压的振幅



质量分析

Q1 和 Q3 杆上负荷 rf 电压和 dc 电压的可变比率（图 24）。这些电压产生静电场，具有特定质荷比的离子能够稳定振荡通过，其他离子不能稳定振荡通过。

在任何给定时刻都会有一组特定的 rf 和 dc 电压值应用到质量分析器四极杆上。在这种情况下，只有特定质荷比（例如， m/z 180）的离子能保持有界振荡通过质量分析器。与此同时，所有其他离子将经历无界振荡。这些离子可能会冲击其中一个杆表面，变成中性，然后被泵抽出去，或从杆组件中间弹出。

然后，rf 和 dc 电压将改变，允许下一个质荷比（例如， m/z 181）离子可以通过，而所有其它离子（包括 m/z 180）则会变得不稳定并开始无界振荡。此过程周而复始，某个质荷比的离子传输结束后，开始传输另一个质荷比的离子，同时对应 rf 和 dc 电压的值改变。四极杆上的电压可以快速而精确的变化。在扫描结束时，质谱仪使 rf 和 dc 电压释放为零，并重复这个过程。

质谱仪的精密四极杆可提供卓越的灵敏度、峰形、分辨率和高质量数传输。

碰撞室和 CID 效率

在 MS/MS 扫描模式中，质谱仪会在扫描之间应用与 Q2 四极杆对相反极性的高电压，以清空碰撞室。此过程可确保扫描之间不会有离子遗留在碰撞室中。

永远作为离子传输设备的碰撞室四极杆组件（Q2），是一个方形杆的方形阵列。该杆负荷可变的 rf 电压，可创建静电场，并能够为大范围质荷比离子提供稳定振荡。

碰撞室环绕着 Q2，通常以氩气加压到 1×10^{-3} 到 4×10^{-3} Torr。在碰撞室发生碰撞诱导解离（CID）。

CID 是离子和中性原子或分子碰撞，然后由于碰撞而分解成更小碎片的过程。分解机理包括将某些离子的部分平移动能（TKE）转换成内能。该碰撞会将离子置于激发状态。如果内能足够，离子就会裂解。

有三个表达式可传达 CID 过程的效率：

- 采集效率
- 裂解效率
- 总体 CID 效率

碰撞效率：在碰撞室出口和入口测量的离子流速。不存在碰撞气体时，质谱仪可获得几乎 100% 的采集效率。采集效率是一个质量相关参数。例如，存在中等范围碰撞气体压力时，对于较小的离子（更倾向于散开），采集效率大约为 50%，对于较大的离子（比较不倾向于散开）采集效率则会增加至 75%。

裂解效率：来自碎片离子的，在碰撞室出口的离子流的一部分。裂解效率直接取决于离子的稳定性，和离子的质量关系不大。离子越稳定，碰撞分裂离子的可能性越低。一般，相比高质量数离子，低质量数离子需要更高碰撞能量进行裂解。若要补偿这种情况，可以使用数据系统指定一个与质量有关的碰撞能量梯度。

在中等范围碰撞气压时，不同化合物的裂解效率可能会从 15 到 65 % 不等。当碰撞气压提高时，所有化合物的裂解效率会因为多次碰撞而接近 100%。但是，采集效率会因为离子分散而降低。

总体 CID 效率：采集效率和裂解效率的产物。总体 CID 效率展现中间压力的最大值。当压力增加到超出最佳值时，就会发生越来越多的碰撞，分散的可能性会提高，而且通过碰撞室的离子更少。这样会导致采集效率降低。裂解效率也会随着压力从其最佳值降低，因为发生的碰撞会越来越少。

四极杆补偿电压

四极杆补偿电压是除了递增 dc 电压外，应用到四极杆的另一个直流电压。应用到两个成对杆组件的补偿电压具有相等的振幅和符号。四极杆补偿电压可使离子加速或减速，因此，在离子进入四极杆组件时设置离子的 TKE。

一般，在指定实验中，质谱仪的 Q1 和 Q2 具有固定的补偿电压。但是，在 MS/MS 实验中，应用到 Q3 的四极杆补偿电压通常会在扫描进行时改变。质谱仪会自动计算需要的 Q3 四极杆补偿电压，然后在进行每次扫描时适当改变此值。

应用到 Q2（它包含碰撞室）的补偿电压会影响碰撞能量。碰撞能量是离子源（形成母离子的地方）和 Q2（母离子和碰撞气体碰撞的地方）之间的电压差。当 Q2 的补偿电压增加时，母离子的 TKE 也会增加。因此，增加 Q2 的补偿电压，可增加离子 / 氦气碰撞的能量。碰撞能量通常随着 m/z 的减小而增加，以促进低质量数离子的裂解。

在获取任何质谱前，质谱仪会在 Q1MS 扫描模式（Q2 和 Q3 仅加 rf 电压）中调谐 Q1，并在 Q3MS 扫描模式（Q1 和 Q2 仅加 rf 电压）中调谐 Q3。在调谐过程中，质谱仪会决定 Q1 和 Q3 的最佳四极杆补偿电压。

质量分析器透镜

TSQ Quantum XLS 系列质量分析器具有三个透镜组。参阅第 32 页的图 22。那些在 Q1 和 Q2 之间的指定为 L21、L22、L23；那些在 Q2 和 Q3 之间的指定为 L31、L32、L33；在 Q3 和离子检测系统之间的透镜指定为出口透镜。所有透镜的中心都贯穿圆孔，可让离子束通过。

透镜组件也可保持三个四极杆组件，确保这些杆组件精确和自动的轴向准直。

L2x 透镜组（在 Q1 和 Q2 之间），其中 x=1、2、3 和 L3x 透镜组（在 Q2 和 Q3 之间）提供这些功能：

- 减少从碰撞单元（Q2）进入质量分析器（Q1 和 Q3）的碰撞气体量。Q2 一侧的透镜 L22 和 L21 以及 Q2 另一侧的 L32 和 L33 用作挡板。（若要传输高质量数离子，必须保持质量分析器中的低压。）
- 保留碰撞气体。透镜 L23 和 L3 构成碰撞室的两个壁，使它们倾向于保持碰撞室中的碰撞气体。但是，碰撞气体会从离子束通过的相同透镜孔流出。
- 遮蔽 Q1，防止应用到 Q2 的 rf 电压影响 Q1，反之亦然（L2x 透镜组），以及遮蔽 Q3，防止应用到 Q2 的 rf 电压影响 Q3，反之亦然（L3x 透镜组）。
- 聚集离子束。Q1 和 Q2 之间的三个透镜（以及那些在 Q2 和 Q3 之间的透镜）会一起形成一个三元素的孔径透镜。第一个和第三个透镜通常设为类似或相同的值，而中间透镜则设为和其它两个不同的值（高于或低于）。

应用到每个透镜的电压从大约 -300 到 +300 V 不等。但是，一般而言，应用到 L2x 透镜组的第一个和第三个元素的电压会稍微大于应用到 Q1 的四极杆补偿电压。由于 Q1 四极杆补偿电压通常设为大约 ± 5 V（取决于目标离子的电荷），应用到透镜 L21 和 L23 的电压对于正离子和负离子通常分别设为 -10 V 和 +10 V。L2x 透镜组中间透镜的电压通常设为大约 ± 225 V。

在 Q3MS 扫描模式中，应用到 L3x 透镜组透镜的电压设为大约和应用到 L2x 透镜组相应透镜的电压相同。但是，请注意，在 MS/MS 扫描模式中，应用到 L3x 透镜组的电压，会自动随着应用到 Q3 的四极杆补偿电压而改变。当 Q3 四极杆补偿电压递增时，应用到透镜的电压也会相应递增。

出口透镜位于 Q3 和离子检测系统之间。出口透镜保持地电势。它的作用是遮蔽 Q3，防止应用到离子检测系统的高压影响 Q3，以及遮蔽离子检测系统，防止应用到 Q3 的高 rf 电压影响离子检测系统。

离子检测系统

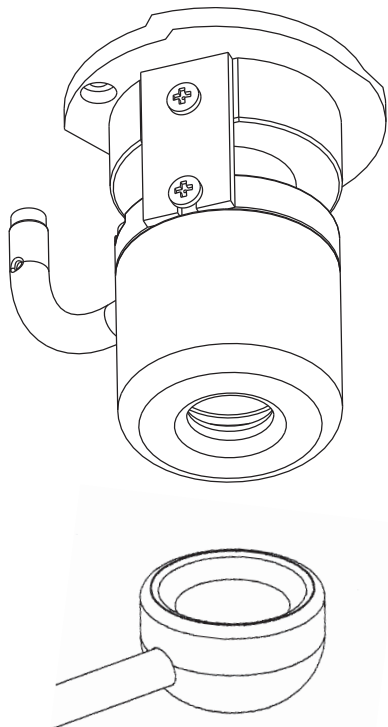
TSQ Quantum XLS 系列质谱仪配备一个高灵敏度的离轴离子检测系统。参阅图 25。此系统可产生高信噪比，并允许在正离子和负离子操作模式之间切换电压极性。离子检测系统包括一个 10 kV 转换打拿极和电子倍增器。离子检测系统位于质量分析器后面真空腔体的背部。

转换打拿极为凹金属表面，与离子束形成直角。质谱仪对转换打拿极应用 +10 kV 电压（用于负离子检测）或 -10 kV 电压（用于正离子检测）。当离子冲击转换打拿极表面时，会产生一个或多个次级粒子。这些次级粒子可包括正离子、负离子、电子和中性子。当正离子冲击负电荷转换打拿极时，目标次级粒子为负离子和电子。当负离子冲击正电荷转换打拿极时，目标次级粒子为正离子。转换打拿极的弧形表面会聚集这些次级粒子，同时加载的电压梯度加速这些粒子进入电子倍增器。

电子倍增器包括阴极和阳极。电子倍增器的阴极为铅氧化漏斗型电阻。高电压圈对阴极应用高达 -2.5 kV 的电势。阴极出口端（位于阳极）接近接地电势。

电子倍增器的阳极是一个位于阴极出口端的小杯。阳极收集由阴极产生的电子。阳极以螺钉旋入座板的阳极馈入装置中。

图 25. 离子检测系统，显示电子倍增器（上）和转换打拿极（下）



转换打拿极的次级粒子使用足够的能量冲击电子倍增器阴极内壁，以抛射电子。抛射的电子被进一步加速进入阴极中，通过增加的正电位梯度驱使电子。漏斗形阴极使放出电子在再次冲击阴极内壁之前不能射放太远，因为那会导致发射更多电子。然后会产生电子流，最后会在阴极的末端产生可测的电流，在那儿阳极接收电子。通过阳极收集的电流与冲击阴极的次级粒子数量成正比。

一般，电子倍增器设置增益在扫描模式下约 3×10^5 （即对于每个进入的离子或电子， 3×10^5 个电子出去），在 MS/MS 模式下 2×10^6 。静电计电路把离开电子倍增器的电流从阳极转换为电压，数据系统会记录该电压。

质谱仪的离子检测系统提高信号并降低噪声。施加到转换打拿极的高电压导致高转换效率并增加信号 — 即每个冲击转换打拿极的离子生成许多次级粒子。对于较大质量数离子，转换效率的增长比较小质量数离子明显。

因为离子检测系统的离轴方位与质量分析器有关，来自质量分析器的中性分子不趋向于冲击转换打拿极或电子倍增器。因此，中性分子的噪声将会减少。

真空系统和进气口硬件

真空系统会抽空离子源、离子光学组件、质量分析器和离子检测系统周围的区域。真空系统的主要组件如下：

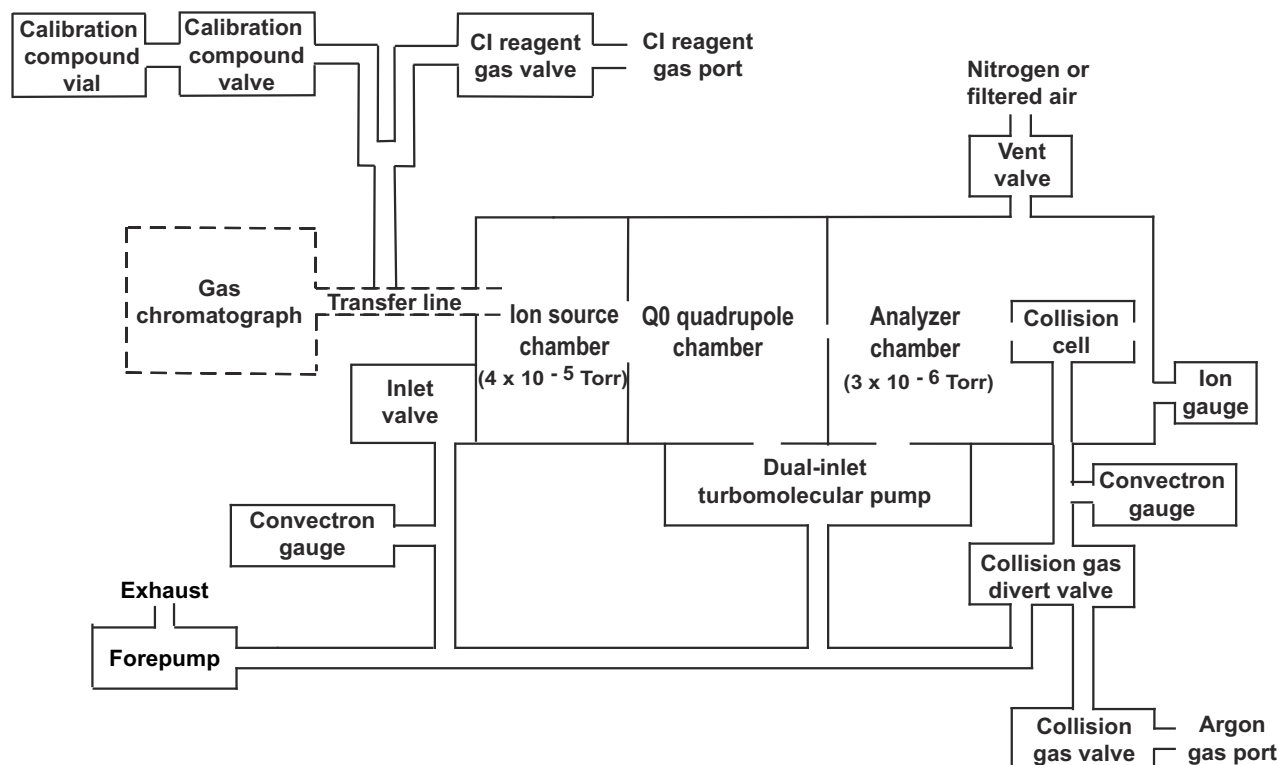
- 真空腔体
- 涡轮分子泵
- 前级泵
- Convectron 测压计
- 离子规

进气口硬件控制进入质谱仪的碰撞气体、CI 反应气、校正化合物和空气（在排气时）的流速。进气口硬件包括下列部分：

- 放空阀
- 碰撞气体流量控制阀
- 校正化合物和 CI 反应气流量控制

图 26 显示真空系统和进气口硬件的功能模块图

图 26. 真空系统和进气口硬件的功能模块图



真空腔体

真空腔体会覆盖离子源、离子光学系统、质量分析器和离子检测系统组件。真空腔体为厚壁的铝质管腔，带有两个可拆卸的侧盖板、在顶端、背部和侧面具有开口、具有各种电气馈入装置和进气口。

真空腔体由一个挡板分隔成两个室。参阅图 27。涡轮分子泵的高真空口会抽空第一个真空室区域，称为分析器区域，直到压力小于 10^{-5} Torr。涡轮分子泵连续通过前级管路将气体排放进入前级泵中。

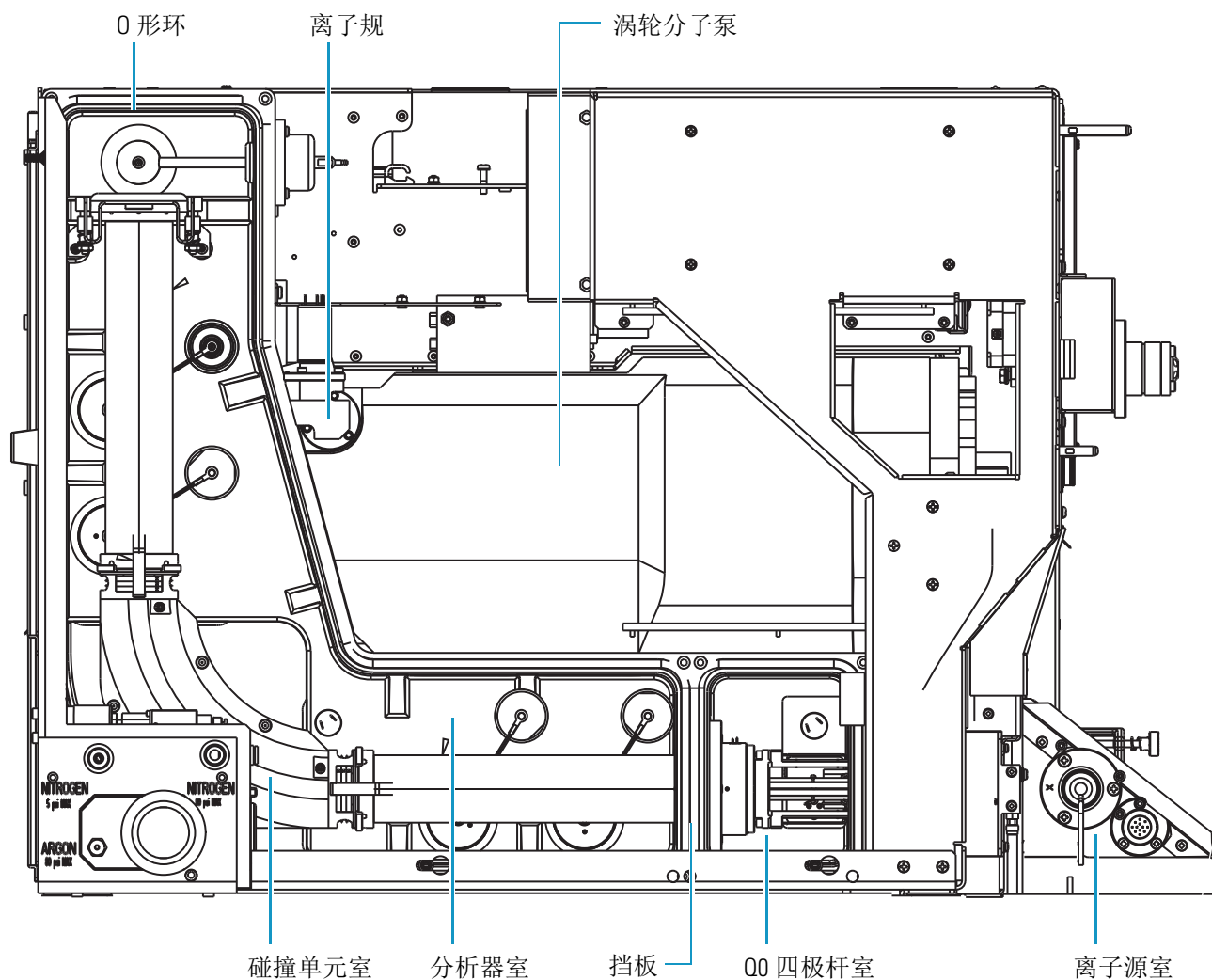
第二个室内的区域，称作 Q0 四极杆区域，通过涡轮分子泵的级间口抽空到 1 mTorr。

第二个真空腔体覆盖了离子源，而离子源对 Q0 四极杆室开放。涡轮分子泵的级间口也抽空离子源区域。

当打开 CID 时，分析器室内的碰撞单元室，具有用户可控制的氩气压力，介于 1 到 4 mTorr。当关闭 CID 时，前级泵抽空碰撞室内的氩气。

位于真空腔体左侧的两个可拆卸的侧盖板，可以让用户打开侧板进入 Q0 离子光学组件、质量分析器和离子检测系统。两个电导 O 形环，在侧盖板和真空腔体之间提供真空密封。

图 27. 真空腔体（内部）



涡轮分子泵

Leybold TW220/150/15S 双进口涡轮分子泵为真空腔体的离子源、Q0 四极杆区域和分析器区域提供真空。涡轮分子泵安装于真空腔体顶部（图 27）。

涡轮分子泵具有两个泵口：

- 位于转子栈顶部的高真空口，用于抽空分析器室。
- 大约位于转子栈中部的级间进口，用于抽空离子源和Q0四极杆室。

涡轮分子泵由 Leybold TDS 控制器控制，使用 +24 V dc (250 W) 交流电源。涡轮分子泵的电源由质谱仪断路器开关和真空维修开关来关闭和打开，而非电子维修开关控制。一个风扇从仪器前部抽空气冷却泵。

如果 Convectron™ 测压计测量到的前级压力过高，或如果涡轮分子的温度过高，则涡轮分子泵的电源关闭。

前级泵

Edwards™ E2M30 前级泵（或低真空泵）为涡轮分子泵的正确操作建立了必要的真空。前级泵也会抽空入口阀和碰撞室。泵的最大抽速为 650 L/min 并保持约为 0.01 Torr (1 Pa) 的最小压力。

前级泵通过加固的 PVC 管与涡轮分子泵连接。前级泵电源线插入位于电源面板上标记为 *Forepump*（前级泵）的输出口（参阅第图 14）。此输出口为泵提供电源，由主电源断路器开关和真空维修开关控制，而非电子维修开关。



注意事项 始终将前级泵电源线插入位于质谱仪右侧电源面板上标记为 *Forepump* 的输出口。切勿将它直接插在墙壁插座上。

Convectron 测压计

Convectron 测压计测量连接涡轮分子泵和前级泵的入口阀和前级管线的压力。第二个 Convectron 测压计测量碰撞室内氩碰撞气体的压力。

Convectron 测压计使用带温度敏感电阻器的 Wheatstone 电桥测量低至不到一个 mTorr 的压力。电桥顶部的电压取决于电阻器辐射热量的速度，这与压力有关。Convectron 测压计测量的压力由 Source PCB（离子源印刷电路板）监测，而 System Control PCB 上的嵌入式计算机负责监测 Source PCB。真空保护电路检测对于涡轮分子泵的正确操作而言，前级压力是否过高。

离子规

一个 Granville-Phillips™ 342 小型离子规测量真空腔体的分析器区域内的压力。离子规会产生使离子规中的分子电离化的具有一定能量的电子。离子规中形成的正离子会被采集器吸附。采集器电流与真空腔体中的压力相关。离子规也受真空保护。

放空阀

如果用户连接了氮气容器，或通过烧结尼龙过滤器过滤的空气容器，位于 Q2 区域的放空阀，允许真空腔体排出氮气。放空阀是螺线管操作阀，由 Vent Delay PCB（放空延迟印刷电路板）控制。当螺线管被激活时，放空阀将关闭。如果出现电源故障或将主电源断路器置于 Off (O) 位置，位于 Power Entry Module（电源输入模块）的 4 法拉电容器将使螺线管保持在关闭位置数分钟。如果电源未及时恢复，螺线管便会打开，而系统将会排出氮气或过滤空气。放空阀将会在质谱仪的电源恢复后关闭。

碰撞气体流量控制阀

碰撞气体流量控制阀可控制进出 Q2 碰撞室的氦碰撞气体流速。螺线管阀可关闭流入该单元的氦气。碰撞气体压力将由数据系统控制的比例阀控制。可以在 EZ Tune（EZ 调谐）窗口的 Define Scan（定义扫描）对话框中设置碰撞气体压力（0 至 5 mTorr）。

进入 Q2 碰撞室的离子，与氦碰撞气体碰撞，然后，因为碰撞而分解成更小的碎片。参阅第 35 页的“碰撞室和 CID 效率”。

氦气会通过质谱仪左边的一个 1/8 in. 进气口进入质谱仪。

当 CID 关闭时，第二个比例阀允许前级泵排空 Q2 碰撞室的氦气和废气。质谱仪会根据 Q2 是作为离子传输设备或碰撞室，自动打开和关闭碰撞气体抽空阀。

校正化合物和 CI 反应气流量控制

校正化合物气体流量控制阀，控制校正化合物气体通过传输线进入离子源的流量。校正气体流量可以高或者低。通常使用低流量，但是对于负离子 CI 校正需要使用高流量。

CI 气体流量控制阀，控制化学电离反应气通过传输线进入离子源的流量。最大 CI 气体流速约为 4 mL/min，这与气体有关。

电子组件

控制质谱仪操作的电子组件分布在塔内、嵌入式计算机内的各种 PCB 和其它模块，以及质谱仪真空腔体上或周围。

Power Entry Module 提供：

- 质谱仪电源控制
- 触点闭合接口
- 放空阀控制
- 从 System Control PCB 到数据系统计算机的一个以太网 100 base-T 连接。
- 机械泵故障保护电路（连接到放空阀控制）
- 系统重启按钮
- Status（状态）LED 指示灯
- 维修端口

在第 25 页的图 14 中显示电源面板的右边，是 Power Entry Module 的一部分。

Power Entry Module 接受线路电源，过滤它，然后将其提供给质谱仪的各种组件。Power Entry Module 包括下列部分：

- 主电源断路器开关
- 电涌抑制器
- 线路过滤器
- 电子维修开关
- 真空维修开关

质谱仪的“大脑”位于 System Control PCB 内。System Control PCB 和嵌入式计算机包括以下组件：

- PowerPC 处理机
- 串行外围设备互连（Serial Peripheral Interconnect，SPI）总线
- I/O 协处理器
- 超级哈佛结构计算机（Super Harvard Architecture Computer，Sharc）总线
- 扫描发生器 DSP
- 采集处理器 DSP
- Interbus 桥
- 100 base-T 以太网端口

rf 电压生成电子组件可产生 Q0、Q1、Q2 和 Q3 rf 电压，这些电压能够启用离子传输和质量分析。由 Analyzer Control PCB（分析器控制印刷电路板）和 System Control PCB 控制所有 rf 电压

Q1 和 Q3 rf 电压放大器电路相同，而 Q0 和 Q2 的电路类似。

rf 电压生成电子组件包括下列组件：

- rf 振荡器
- rf Voltage Amplifier PCB（电压放大器印刷电路板）
- Low Pass Filter PCB（低通滤波器印刷电路板）
- rf 电压线圈
- rf 电压检测器
- 质量 DAC
- 集成放大器

离子检测系统电子组件为离子检测系统的电子倍增器和转换打拿极提供高电压。它们也接受电子倍增器输出电流信号，将它转换为电压（通过静电计电路），然后将其传送到嵌入式计算机。

离子检测系统电子组件包括下列组件：

- 电子倍增器电源供应器
- 转换打拿级电源供应器
- 静电计 PCB
- 采集 DSP

Analyzer Control PCB 包含用于控制和监测离子源、离子光学系统、质量分析器和离子检测系统操作的电路。这些电路由 System Control PCB 的 PowerPC 处理器，通过 SPI 总线轮流监视。

Analyzer Control PCB 控制和监测 Q0、Q1、Q2 和 Q3 四极杆的 rf 电压。它也具备透镜电压驱动器，可将 DC Rod Driver PCB（DC 杆驱动器印刷电路板）的 ± 330 V dc 电源转换为应用到透镜的 dc 电压。

数据系统

数据系统可控制和监测质谱仪。数据系统也处理质谱仪采集的数据。数据系统由下列组件组成：

- 计算机硬件
- 数据系统 / 质谱仪 / GC 接口
- 数据系统 / 局域网接口

计算机硬件

这些是数据系统计算机的主要特点：

- Intel™ Pentium™、Core™ 2 Duo 或 Xeon™ 处理器
- 大容量硬盘驱动
- 主用以太网端口（数据系统到质谱仪）
- 备用以太网端口（数据系统到局域网）
- 高性能视频图形卡
- CDRW 驱动
- DVD 驱动器
- 1280 × 1024 分辨率彩色显示器
- 键盘和鼠标

有关计算机的详细信息，参阅适当的手册。

数据系统 / 质谱仪 / GC 接口

数据系统计算机包含一个 100 base-T 以太网适配器（称为主以太网适配器），专门用于数据系统 / 质谱仪 / GC 通信。此主以太网适配器通过 10/100 base-T 以太网交换机，与质谱仪和 GC 模块通信。质谱仪上的以太网适配器在 System Control PCB 内。双绞线以太网电缆，将数据系统的主以太网适配器与以太网交换机连接起来，而交换机连接着质谱仪电源面板上的以太网接口以及 GC。

数据系统 / 局域网接口

数据系统计算机包含一个次要以太网适配器。备用以太网适配器不参与数据系统 / 质谱仪 / 或 GC 通信。可以使用此备用以太网适配器访问用户局域网。

系统关机、开机和重启

TSQ Quantum XLS 系列系统的大多数维护程序要求质谱仪完全关机。此外，如果质谱仪不会在 12 个小时或更长时间内使用，可将质谱仪置于 Standby（待机）模式。

目录

- 在紧急情况下关闭系统
- 将系统置于待机模式
- 完全关闭系统
- 在完全关机后启动系统
- 重启质谱仪
- 重启数据系统
- 关闭所选质谱仪组件

在紧急情况下关闭系统

可以按下 System Power Off（系统电源关闭）按钮关闭质谱仪电源、气相色谱仪和自动进样器的所有电源，该按钮位于电子模块前面（参阅图 28），或者按下电子模块背面的主电源断路器关闭所有电源（参阅图 29）。可以只用电子模块背面的主电源断路器打开系统电源，而不使用 System Power Off 开关。

❖ 若要紧急关闭质谱仪



注意事项 按下电子模块前面的 System Power Off 按钮。参阅图 28。System Power Off 按钮关闭质谱仪（包括真空泵）、气相色谱仪和自动进样器的所有电源。尽管突然断开电源不会损害系统内的任何组件，但在正常状态下勿使用 System Power Off 按钮关闭系统。有关建议的步骤，参阅第 51 页的“完全关闭系统”。

3 系统关机、开机和重启

在紧急情况下关闭系统

图 28. 电子模块前面的 System Power Off 按钮

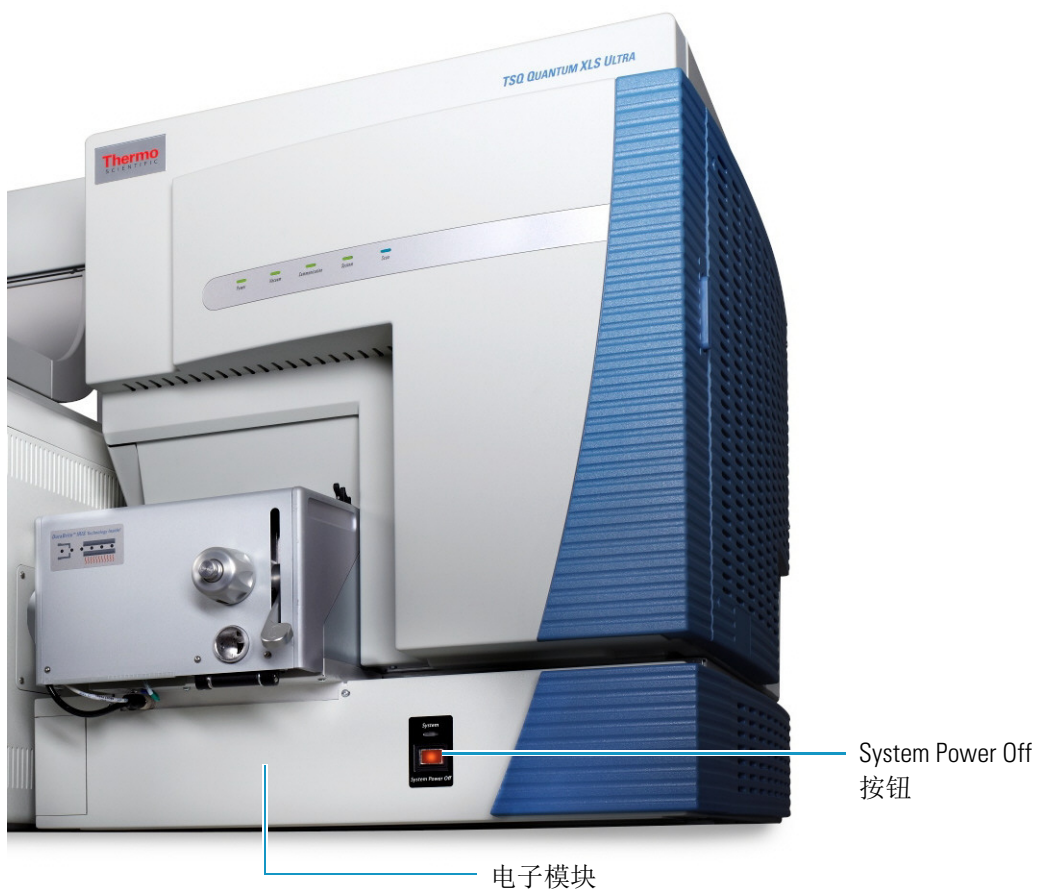
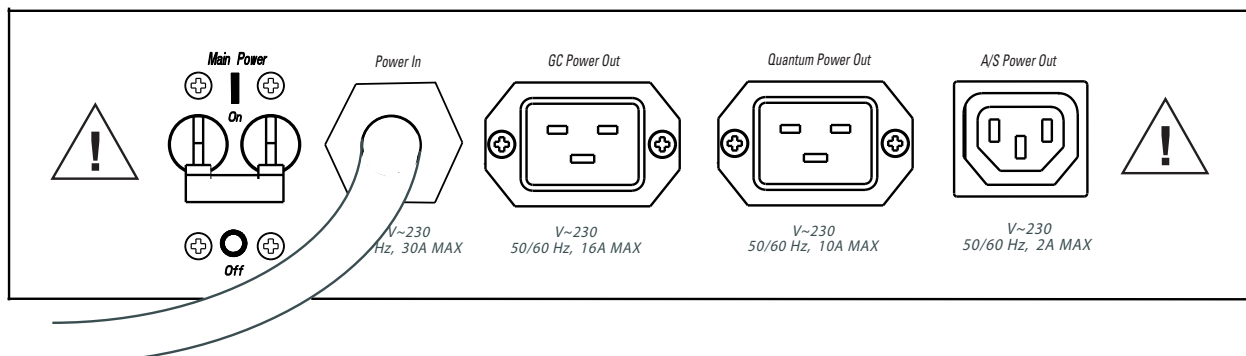


图 29. 电子模块背面的电源面板



将系统置于待机模式

如果短时间内不打算使用 TSQ Quantum XLS 系列系统，例如隔夜或一个周末，则不需要完全关闭系统。如果在 12 个小时或更长时间内不打算使用系统，可将系统置于 Standby 模式。

❖ 若要将系统置于 Standby 模式

1. 等待直到数据采集（若有）完成为止。
2. 从 TSQ EZ Tune（EZ 调谐）窗口，选择 **Control（控制） > Standby（待机）**（或单击 **On/Standby（开 / 待机）** 按钮）将质谱仪置于待机模式。



当选择 Control > Standby 时，TSQ Quantum XLS 系列系统会关闭电子倍增器、转换打拿极、离子源灯丝和透镜（但不是加热器），以及质量分析器和离子光学 rf 电压。当质谱仪处于 Standby 模式时，质谱仪组件的 On / Off（开 / 关）状态，参阅第 59 页的上表 4。质谱仪前面板上的 System（系统）LED 会在系统处于待机模式时呈黄色亮起。

3. 保持质谱仪电源打开。
4. 保持 GC 电源以及色谱柱流路打开。
5. 保持自动进样器电源打开。
6. 保持数据系统电源打开。

完全关闭系统

只在当长时间不使用系统，或在必须关闭以进行维护或维修步骤的情况下，完全关闭 TSQ Quantum XLS 系列系统。如果短时间不使用，例如隔夜或一个周末，可将系统置于 Standby 模式。参阅“[将系统置于待机模式。](#)”

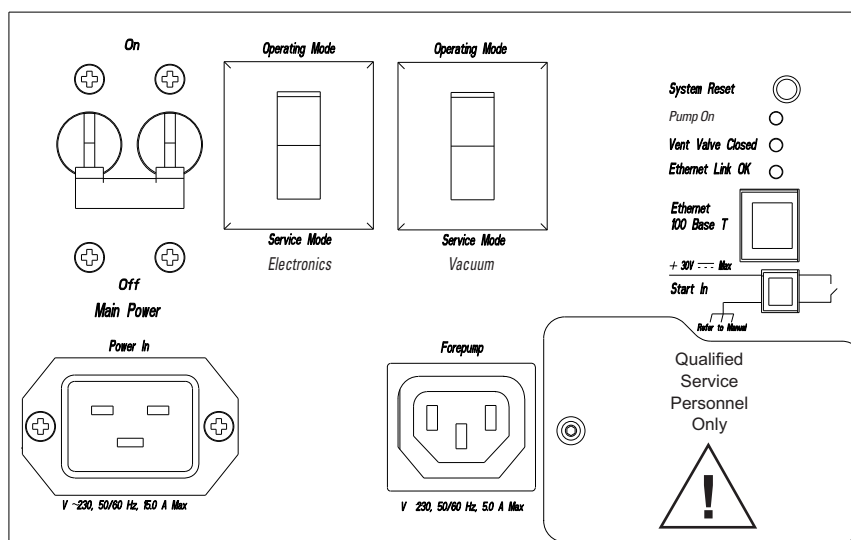
❖ 若要完全关闭系统

1. 冷却 GC 柱温箱、进样口、传输线和离子源：
 - GC 柱温箱：30 °C（从 TRACE GC Ultra Setup（TRACE GC Ultra 设置）视图的 Oven（柱温箱）页面）
 - 进样口：off（从 TRACE GC Ultra Setup 视图的 SSL 页面）
 - 传输线：off（从 TRACE GC Ultra Setup 视图的 Aux Zones（附件区）页面）
 - 离子源：30 °C（从 TSQ EZ Tune 窗口）

注释 如果不准备更换色谱柱或执行气相色谱仪维护，无需降低进样口温度。

2. 从 TSQ EZ Tune 窗口，选择 **Control > Standby**（或单击 **On/Standby** 按钮）将质谱仪置于待机模式。
3. 将电源面板右侧的电子维修开关拨至 Service Mode（维修模式）位置。参阅图 30。

图 30. 质谱仪的右侧电源面板



4. 将电源面板右侧的真空维修开关拨至 Service Mode 位置。
5. 将电源面板右侧的质谱仪主电源断路器，置于 Off 位置。当将主电源断路器开关拨至 Off 位置时，会发生下列情况：
 - 质谱仪的所有电源将关闭。（质谱仪前面板上的所有 LED 将熄灭。）
 - Vent Delay PCB（放空延迟印刷电路板）上的电容器为放空阀提供两至四分钟的电源（以允许涡轮分子泵停止旋转）。电容器放电后，放空阀螺线管的电源关闭。当放空阀螺线管的电源关闭，放空阀打开，如果连接氮气容器或者过滤空气，则真空腔体放空氮气或其他气体。
 - 大约两分钟后，真空腔体的压力会达到大气压。
6. 拔下质谱仪的电源线。



警告 烫伤危险。 对变热的组件进行维修前，使其先冷却。

注释 如果计划仅对质谱仪执行日常或预防性系统维护，可以保持氦气、数据系统、GC 和自动进样器打开。在该情况下，已完成关闭步骤。但是，如果计划长时间不操作系统，Thermo Fisher Scientific 建议按照以下步骤 7 至步骤 12 关闭 GC、数据系统和自动进样器。

7. 关闭 GC。按照 GC 随附手册中描述的步骤执行。
8. 通过使用主电源 on/off 开关关闭自动进样器。
9. 按下 System Power Off 按钮（第 50 页的图 28）移除 TSQ Quantum XLS 系列系统的所有电源。
10. 如果不准备长期使用系统，关闭氦气碰撞气体供应的气瓶。
11. 关闭数据系统：
 - a. 从 Windows 任务栏选择 **Start（开始） > Shut Down（关机）**。Shut Down Windows（关闭 Windows）对话框显示。
 - b. 若要开始 Windows 关机程序，选择 **Shut Down** 然后单击 **OK（确定）**。
12. 通过使用 on/off 开关关闭（可选）打印机。



警告 烫伤危险。离子源、GC 柱温箱、进样口和传输线都很烫。在接触之前使它们冷却到室温。

在完全关机后启动系统

在彻底关闭 TSQ Quantum XLS 系列系统之后，重启系统需要完成下列任务：

- 恢复 TSQ Quantum XLS 系列系统的电源
- 启动 GC
- 启动数据系统
- 启动质谱仪
- 启动自动进样器（自动进样器是可选的）
- 设置操作条件

恢复 TSQ Quantum XLS 系列系统的电源

若要恢复 TSQ Quantum XLS 系列系统的电源，将位于电子模块（第 50 页的图 29）背面的主电源断路器置于 On 位置。

启动 GC

若要启动气相色谱仪（GC），按照 GC 随附手册中描述的启动程序执行。确认气相色谱仪打开，载气通过色谱柱流入质谱仪。

启动数据系统

❖ 若要启动数据系统

1. 打开显示器、计算机和打印机。
2. 遵循显示器上的 Windows 开机程序。根据提示按下 CTRL+ALT+DELETE。
3. 在 Logon Information（登录信息）对话框中，点击 OK 或输入密码（如果有的话）。

启动质谱仪

❖ 若要启动质谱仪



注意事项 不要在打开 GC 毛细管柱流路之前打开质谱仪。空气会损坏 GC 色谱柱并污染离子源。

1. 如果氦气关闭，则打开气瓶的氦气流路。

重要信息 确认在启动质谱仪之前，数据系统正在运行。在质谱仪接收到来自数据系统信息之前，质谱仪将无法操作。

2. 确认右侧电源面板（第 52 页的图 30）的质谱仪主电源断路器开关，位于 Off (O) 的位置，以及电子维修开关和真空维修开关均位于 Service Mode 位置。
3. 插入质谱仪的电源线。

4. 将质谱仪主电源断路器开关拨至 **On** (I) 的位置。当将主电源断路器开关拨至开 (I) 的位置时，电源会供应给那些不受真空维修开关和电子维修开关影响的质谱仪组件。
5. 将真空维修开关拨至 **Operational** (操作) 位置。
6. 将电子维修开关拨至 **Operational** 位置。下列情况发生：
 - 质谱仪前面板上的 **Power** (电源) LED 呈绿色亮起，表示电源供应至质谱仪电子组件。(电子倍增器、转换打拿级、离子源、质量分析器和离子光学 rf 电压保持关闭。) 参阅图 31 和图 32。
 - 嵌入式计算机重新启动。几秒之后，前面板上的 **Communication** (通信) LED 呈黄色亮起，表示数据系统和质谱仪已开始建立通信链接。
 - 再过几秒之后，**Communication** LED 呈绿色亮起，表示数据系统和质谱仪已建立了通信链接。用于质谱仪操作的软件这时会从数据系统传输到质谱仪。
 - 三分钟后，**System** LED 呈黄色亮起，表示已完成将软件从数据系统传输到质谱仪的操作，并且仪器在待机中。
 - 质谱仪前面板上的 **Vacuum** (真空) LED 保持在熄灭状态，直到涡轮分子泵达到其 750 Hz 的操作速率的 80% 为止。此时，离子规打开且 **Vacuum** LED 呈黄色亮起。**Vacuum** LED 呈绿色亮起，仅当真空腔体内的质量分析器区域的电压低于表 3 列出值时，高电压被打开。

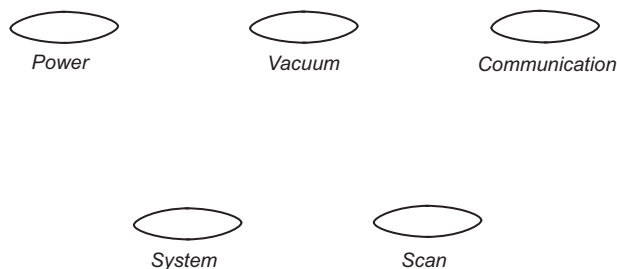
表 3. 打开高电压的最大允许压力

载气	Ar 碰撞气体	最大压力 (Torr)
He	Off	8×10^{-6}
He	On	5×10^{-5}

图 31. TSQ Quantum XLS Ultra 质谱仪的前面板 LED



图 32. TSQ Quantum XLS 质谱仪的前面板 LED



如果具有自动进样器，转至[启动自动进样器](#)。如果没有自动进样器，转至[设置操作条件](#)。

启动自动进样器

将自动进样器上的主电源开关拨至 On 的位置，以启动自动进样器。如有必要，配置自动进样器。

有关放置样品瓶、准备溶剂和废液瓶、安装注射器及其他步骤，参阅自动进样器随附的手册。

设置操作条件

❖ 若要设置 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪以进行操作

1. 在使用 TSQ Quantum XLS 系列系统开始采集数据之前，系统必须抽真空至少一个小时。在真空腔体中具有过多空气和水的条件下操作系统，会导致灵敏度降低、调谐问题，以及缩短电子倍增器的使用寿命。
2. 确定氦压力处于操作限制之内（氦：135 ±70 kPa [20 ±10 psig]）。

注释 必须净化氦管线中的空气或给予足够时间净化以提供标准的 TSQ 性能。

3. 在 TSQ EZ Tune 窗口中，选择 **View（查看） > Instrument Status（仪器状态）**。查看 Status 视图。检查当碰撞气体关闭时，离子规测量的压力小于 3×10^{-6} Torr。

注释 无需在每次重新启动 TSQ Quantum XLS 系列系统时校正和调谐 TSQ 质谱仪。若要调谐和校正质谱仪，参阅第 4 章，“调谐和校正”。

重启质谱仪

如果质谱仪和数据系统计算机之间的通信丢失，则可能需要使用右侧电源面板上的 System Reset（系统重启）按钮重启质谱仪。按下 System Reset 按钮会使嵌入式计算机中断。这导致嵌入式计算机以已知（默认）状态重新启动。有关 System Reset 按钮的位置，参阅第 52 页的图 30。

此处提供的步骤假设为质谱仪和数据系统计算机均已开机且处于运行中。如果质谱仪、数据系统计算机或两者均关机，转到第 53 页的“在完全关机后启动系统”。

❖ 若要重启质谱仪

按下位于右侧电源面板上的 System Reset 按钮。在放开 System Reset 按钮之前，确定 Communication LED 熄灭。当按下 System Reset 按钮时，会发生下列情况：

- 嵌入式计算机上的中断导致 CPU 重新启动。质谱仪前面板上的所有 LED 将熄灭，除了 Power LED 之外。
- 几秒之后，前面板上的 Communication LED 呈黄色亮起，表示数据系统和质谱仪正开始建立通信链接。
- 再过几秒之后，Communication LED 呈绿色亮起，表示数据系统和质谱仪已建立了通信链接。用于质谱仪操作的软件这时会从数据系统传输到质谱仪。
- 三分钟后，已完成软件传输。System LED 呈绿色亮起表示仪器准备就绪并且已打开高电压，或呈黄色亮起表示仪器准备就绪并且处于待机状态。

重启数据系统

如有可能，使用 Windows 关机和重启程序来关闭和重启数据系统，这样 Windows 可以正确地关闭程序并保存更改的文件。

❖ 若要使用 Windows 关机和开机程序重启数据系统

1. 从 Windows 任务栏选择 **Start > Shut Down**。Shut Down Windows 对话框显示。
2. 选择 **Restart（重启）** 并单击 **OK** 启动 Windows 关机和重启程序。
3. 遵循监视器上的 Windows 关机和重启程序。根据提示按下 **CTRL+ALT+DELETE**。
4. 在 Logon Information 对话框中，单击 **OK** 或输入密码（如有）。

注释 数据系统和质谱仪之间的通信链接应会在重启数据系统后自动重新建立。发生此情况时，质谱仪前面板上的 Communication LED 会呈黄色，然后呈绿色亮起。如果系统无法建立通信链接，按下质谱仪电源面板上的 System Reset 按钮。

关闭所选质谱仪组件

可以采用多种不同的方式关闭部分或所有质谱仪组件：

- 从 TSQ EZ Tune 窗口关闭个别的质谱仪组件。当进行故障排除或运行某些诊断程序时，可能有必要关闭个别的质谱仪组件。
- 让质谱仪处于 Standby 模式。Standby 是质谱仪不在使用中的正常状态。若要将质谱仪置于待机，从 TSQ EZ Tune 窗口选择 **Control > Standby**（或切换 On/Standby 按钮）。
- 让质谱仪处于 Off 状态。Off 状态与 Standby 相似，除了质谱仪所有高电压组件均关闭之外。若要将质谱仪置于 Off 状态，从 TSQ EZ Tune 窗口选择 **Control > Off**。
- 将电子维修开关拨至 Service Mode 位置。电子维修开关关闭质谱仪中所有的组件，除了 +24 V 电源、前级泵、涡轮分子泵、Vent Delay PCB 和风扇之外。
- 将真空维修开关拨至 Service Mode 位置。真空维修开关会关闭所有的真空系统组件，包括 +24 V 电源、前级泵、涡轮分子泵、Vent Delay PCB 和风扇。
- 将右侧电源面板的主电源断路器开关拨至 Off 的位置。将右侧电源面板的主电源断路器开关拨至 Off 的位置，这样会切断所有连至质谱仪的电源，包括真空系统。
- 按下 System Power Off 按钮。按下 System Power Off 按钮可切断质谱仪、气相色谱仪和自动进样器的所有电源。

表 4 总结了质谱仪组件、电压和气流的 on/off 状态。

表 4. 质谱仪组件和电压的 On/Off 状态

质谱仪 组分	Standby 	Off 	电子维修 开关 位于 Service Mode 位置	真空维修 开关 位于 Service Mode 位置	MS 主电源断路器开关位于 Off 位置
电子倍增器	Off	Off	Off	Off	Off
转换打拿极	Off	Off	Off	Off	Off
质量分析器 rf 电压	Off	Off	Off	Off	Off
质量分析器 dc 补偿电压	Off	Off	Off	Off	Off
Q0 离子光学 rf 电压	Off	Off	Off	Off	Off
Q0 离子光学 dc 补偿电压	Off	Off	Off	Off	Off
离子源灯丝	Off	Off	Off	Off	Off
离子源加热器	On	Off	Off	Off	Off
离子源透镜	Off	Off	Off	Off	Off
氩碰撞气体	Off	Off	Off	Off	Off
放空阀	关闭	关闭	关闭	打开 (在 2 至 4 min 后)	打开 (在 2 至 4 min 后)
涡轮分子泵	On	On	On	Off	Off
前级泵	On	On	On	Off	Off
Vent Delay PCB	On	On	On	On	Off
嵌入式计算机	On	On	Off	On	Off
涡轮分子泵控制器	On	On	On	Off	Off
电源、电子倍增器和转换打拿极	Off	Off	Off	On	Off
电源, 8 kV	Off	Off	Off	On	Off
PS1 电源, +24 V	On	On	On	Off	Off
PS2 电源、+5、±15、±24 V dc	On	On	Off	Off	Off
PS3 电源、+36、- 28V dc	On	On	Off	Off	Off
风扇, 涡轮分子泵	On	On	On	Off	Off
风扇, 在腔体之上	On	On	On	Off	Off
风扇, 中间壁	On	On	On	Off	Off
Convectron 测压计, 前级管线	On	On	On	On	Off
Convectron 测压计, 碰撞单元	On	On	Off	On	Off
离子规	On	On	Off	Off	Off

调谐和校正

调谐参数是影响离子信号强度的仪器参数。校正参数是影响质量精确度和质谱分辨率的仪器参数。利用 TSQ EZ Tune (TSQ EZ 调谐) 用全氟三丁胺 (FC-43) 作为调谐和校正化合物，调谐和校正 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪。FC-43 在质谱仪样品瓶内。

目录

- 显示 FC-43 质谱
- 运行自动调谐和校正
- 保存调谐校正报告
- 运行维护调谐
- 创建质量控制 (QC) 调谐报告

在调谐和校正质谱仪之后，记录 FC-43 的离子信号强度（参阅图 34）。周期性检查 FC-43 离子信号。如果 FC-43 离子信号低于调谐值的 50%，则重新调谐和校正质谱仪。还必须在 EI 和 CI 模式之间切换后，或在正负极性离子模式之间切换后，重新调谐和校正。

注释 如果在 H-SRM 模式（与 SRM 模式相对）下操作，可能需要更频繁地校正。

表 5 列出在 EI 正离子极性模式下，在 FC-43 质谱图上观察到的典型峰。

表 5. 在 EI 和正离子极性模式下观察到的典型 FC-43 峰

m/z 69	m/z 314
m/z 100	m/z 352
m/z 114	m/z 402
m/z 119	m/z 414
m/z 131	m/z 464
m/z 169	m/z 502
m/z 219	m/z 614
m/z 264	

显示 FC-43 质谱

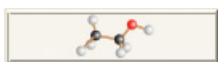
调谐和校正质谱仪的第一步就是显示 FC-43 质谱。

❖ 若要显示 **FC-43** 质谱

1. 选择 **Start**（开始）> **Programs**（程序）> **Thermo Instruments**（Thermo 仪器）> **TSQ** > **TSQ Tune**（TSQ 调谐）打开 EZ Tune 窗口。

正 

负 

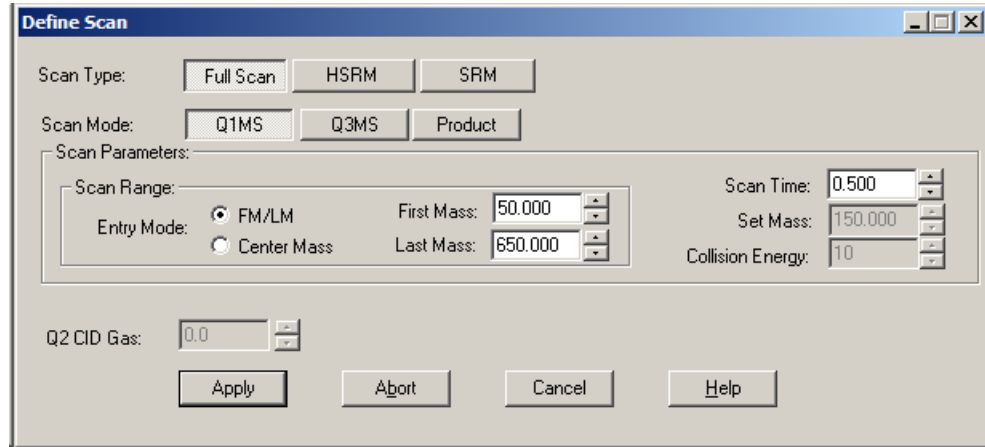


2. 选择一个极性模式。在这个例子中，质谱仪处于正极性模式。如有需要，单击极性按钮。

注释 对于 EI 负极性模式，可以将校正气流设置为一个较高的值。

3. 单击 **Define Scan**（定义扫描）按钮显示 Define Scan 对话框。参阅图 33。
4. 在 Define Scan 对话框中选择或输入下列设置：
 - Scan Type（扫描类型）：**Full Scan**（全扫描）
 - Scan Mode（扫描模式）：**QIMS**
 - Scan Range Entry Mode（扫描范围输入模式）：**FM/LM**
 - First Mass（起始质量数）：**50**
 - Last Mass（结束质量数）：**650**
 - Scan Time（扫描时间）：**0.500**

图 33. Define Scan 对话框



5. 点击 **Apply**（应用）以应用这些设置。
6. 若要打开校正气体进入离子源的流量，单击 EZ Tune（EZ 调谐）工具栏上的 **Calibration Gas**（校正气体）按钮。
7. 若要打开灯丝，单击 EZ Tune 工具栏上的 **Filament**（灯丝）按钮以打开灯丝。
8. 选择 **Control**（控制）> **On**（开）启动质谱扫描。
9. 观察质谱图。如果质谱图与图 34 中的质谱图明显不同，参阅第 113 页的“**诊断和故障排除**”。

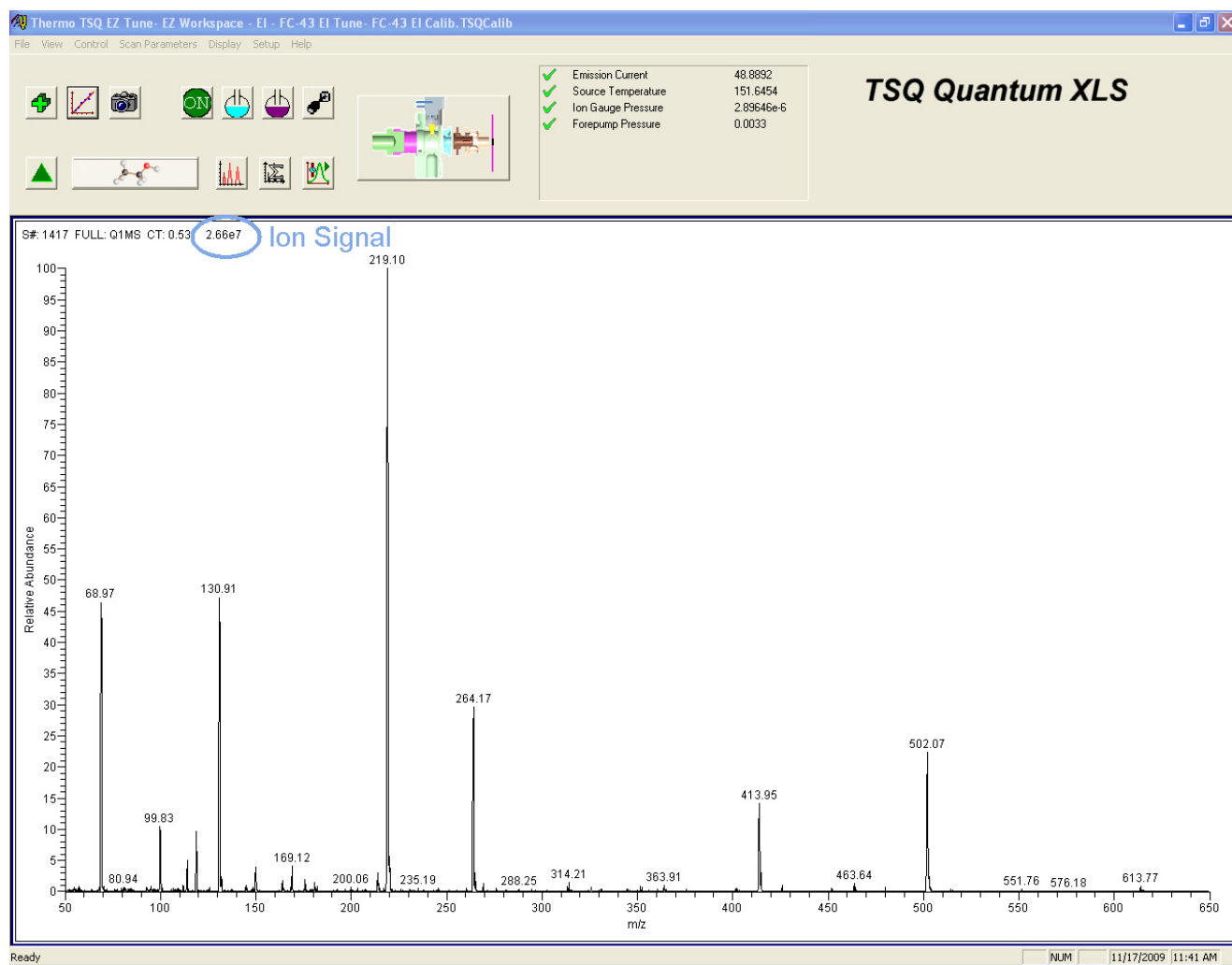
Cal Gas Off

Cal Gas On

Filament Off

Filament On

图 34. EZ Tune EZ Workspace (EZ 调谐 EZ 工作区)，显示在调谐和校正之前，EI 和正极性模式下的 FC-43 质谱图



运行自动调谐和校正

在获得良好的 FC-43 离子信号之后运行调协校正程序。

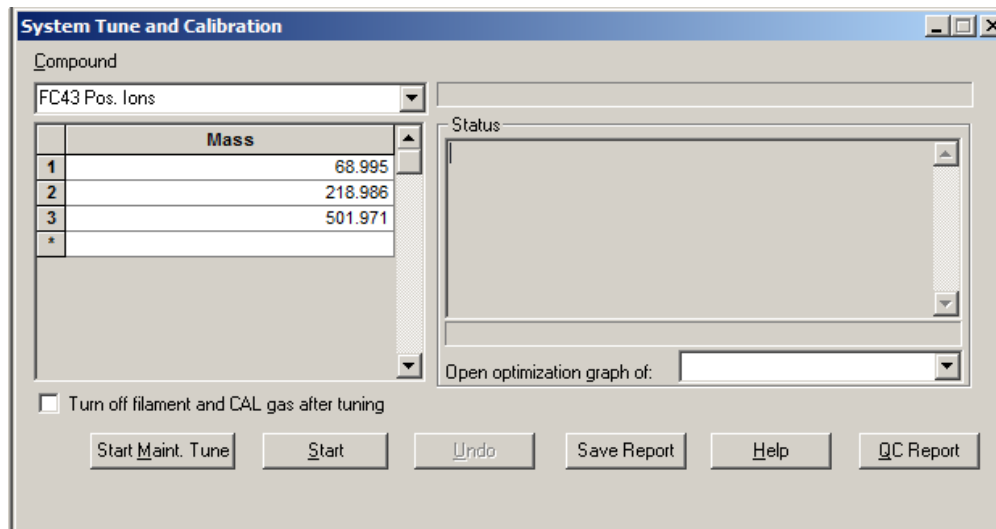
❖ 若要在 EI 正极性模式下自动调谐校正质谱仪离子模式

1. 根据前一部分的说明显示 FC-43 正离子质谱图。



2. 单击 **System Tune and Calibration** (系统调谐和校正) 按钮 (或选择 **Setup** (设置) > **System Tune and Calibration** (系统调谐和校正)) 以显示 **System Tune and Calibration** 对话框 (参阅图 35)。

图 35. System Tune and Calibration 对话框



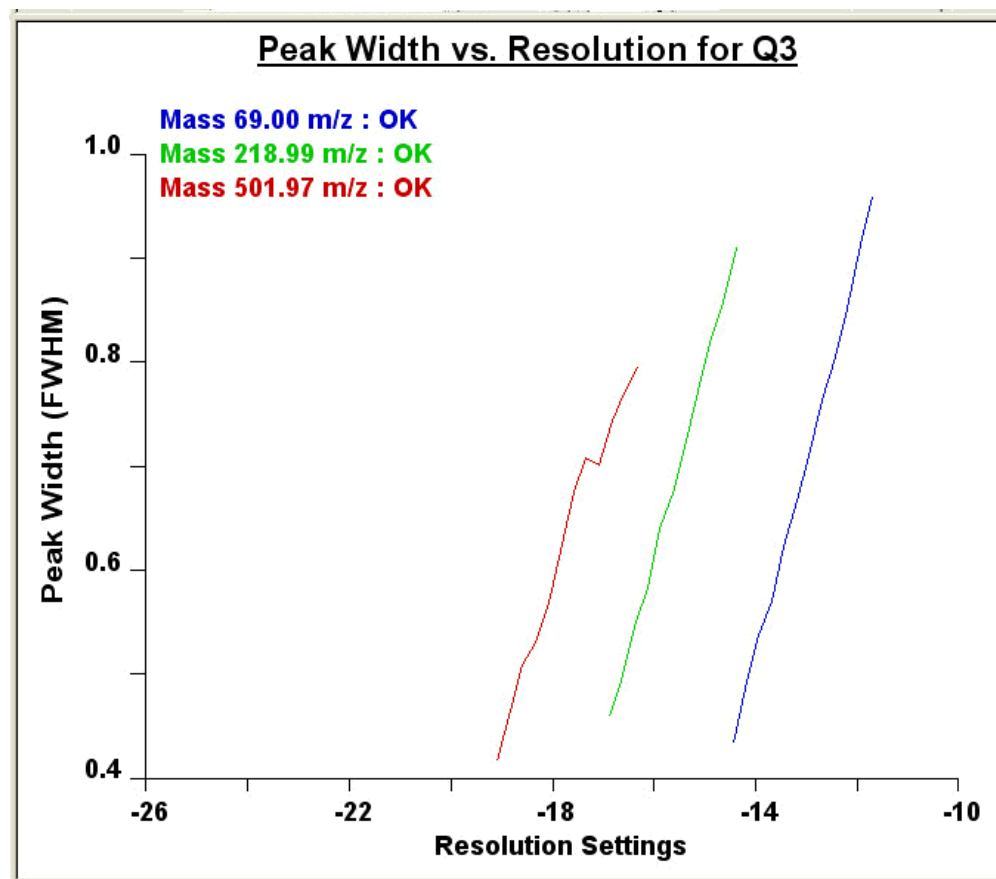
3. 在 Compound（化合物）列表中选择 **FC43 Pos. Ions**（FC43 正离子）。该操作将自动选择使用带正电荷的 FC-43 离子进行自动调谐校正。
4. 若要开始执行自动调谐校正步骤，点击 **Start**。

系统调谐校正的实时信息会显示在 Status（状态）框内，因此，可以监测每个子程序的进程。当一个子步骤完成后，系统报告结果（例如，是否通过）。当所有步骤结束时，Status 框会显示运行摘要。

- 如果自动调谐校正过程中出现错误，转向[步骤 5](#)。
 - 如果自动调谐校正过程完成，并没有出现错误，转至[步骤 6](#)。
5. 如果在自动调谐校正过程中出现错误，则恢复以前质谱仪的设置，然后完成以下步骤再次执行调谐校正程序：
 - a. 点击 **Undo**（**撤消**）恢复以前的调谐校正设置。
 - b. 点击 **Accept**（**接受**）将之前的调谐校正设置重新载入到质谱仪。
 - c. 故障排除及纠正导致调谐校正程序失败的问题。参阅[第 127 页](#)的“[调谐问题](#)”。
 - d. 转到[步骤 4](#)重新开始调谐校正程序。

图 36 显示一个典型的参数优化图。

图 36. 典型参数优化图



6. 点击 **Accept**（接受）接受调谐校正程序的结果。

在接受调谐校正程序的结果之后，会出现一个信息框，询问是否要将正离子调谐校正的设置拷贝至负离子模式。

- 如果已经在负离子模式下成功进行了仪器的调谐校正，单击 **No**（否）。（不要将正离子模式参数拷贝到负离子模式。）
- 如果尚未在负离子模式下成功地调谐校正仪器，则单击 **Yes**（是）。

注释 如果要执行高灵敏度的负离子谱图分析，Thermo Fisher Scientific 建议在负离子模式下对仪器进行一次全面的调谐校正。

7. 通过如下操作保存校正文件：
 - a. 单击 **Save Calib.As**（将校正文件另存为）打开 Save Calibration File（保存校正文件）对话框。
 - b. 在 File Name（文件名）框中输入要保存的校正文件名称。
 - c. 单击 **Save**（保存）保存校正文件。Save As（另存为）对话框打开。
8. 通过如下操作保存调谐方法文件：
 - a. 在 File Name 框中输入要保存的调谐方法文件名称。
 - b. 单击 **Save** 保存调谐方法文件。

质谱仪现在已经在 EI 正离子模式下调谐校正完毕。

保存调谐校正报告

可以将 Status 框内和参数优化图内出现的信息保存为一个 PDF 文件。来自调谐校正报告的状态信息和参数优化图示例显示在图 37 和图 38。

图 37. 调协校正报告，状态页面

```
Results from System Tune and Calibration using FC43 Pos. Ions:

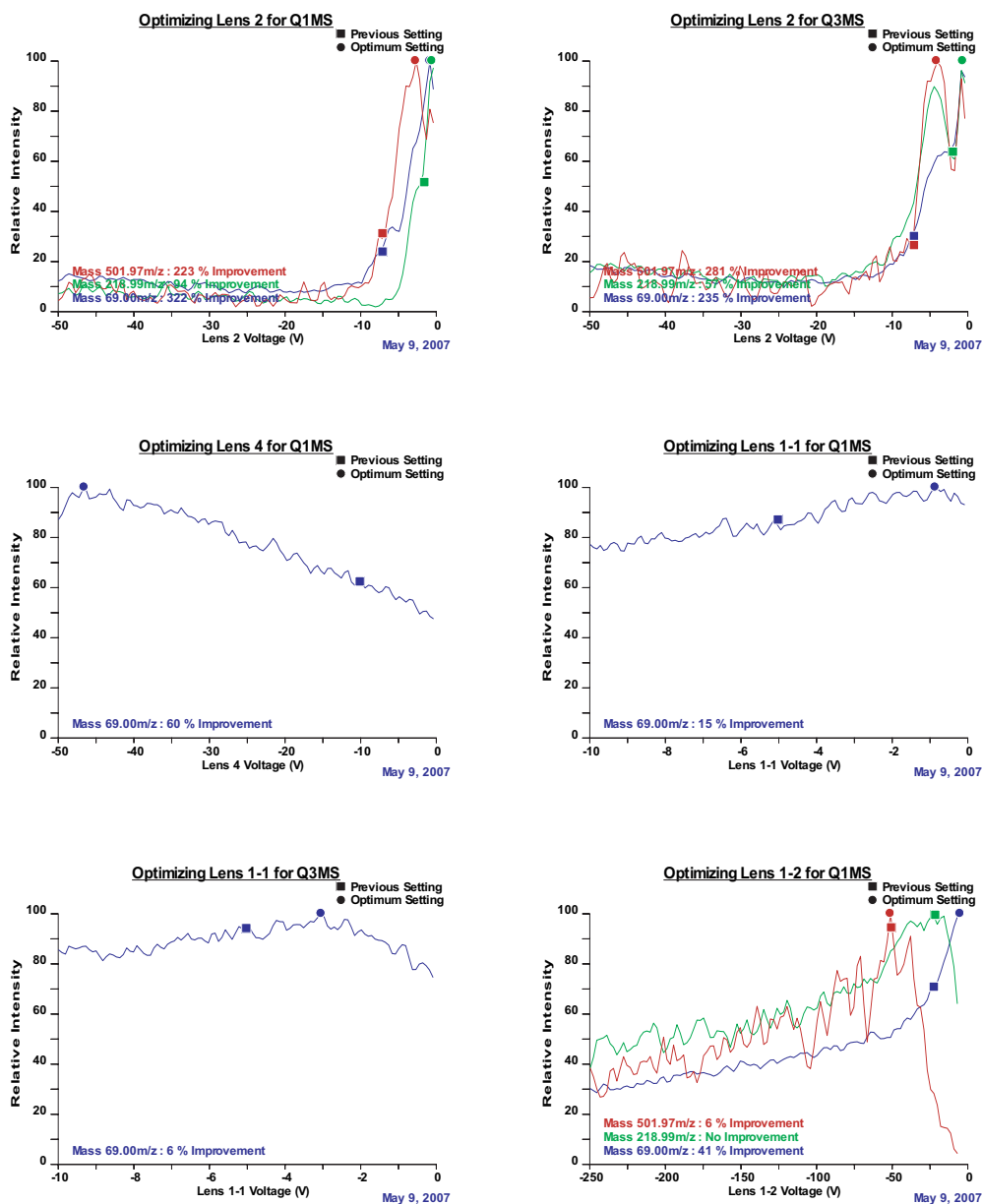
Q1 and Q3 Tuning & Calibrating

10:55:29: Tuning and Calibrating Q1
10:55:39: Tuning Q1MS at mass 69.00 m/z
10:55:41: Opening resolution
10:55:42: Adjusting resolution
10:56:02: The adjusted resolution is -13.33 at the width 0.78
10:56:02: Coarse resolution done - Quick calibration
10:56:07: The adjusted calibration of mass 69.0 is -0.88
10:56:08: Averaging Stopping Curve...
10:56:12: Q1 Quadrupole Offset set to -0.85 for all reswidths
10:56:14: Optimizing Lens 2 for ion 69.00 m/z
10:56:20: Previous Setting = -7.00, New Setting = -0.80
10:56:20: Maximum Intensity = 1.04e+06
10:56:20: 322 % Improvement
10:56:20: Optimizing Lens 4 for ion 69.00 m/z
10:56:26: Previous Setting = -10.00, New Setting = -46.55
10:56:26: Maximum Intensity = 1.61e+06
10:56:26: 60 % Improvement
10:56:26: Optimizing Lens 1-1 for ion 69.00 m/z
10:56:32: Previous Setting = -5.00, New Setting = -0.86
10:56:32: Maximum Intensity = 1.93e+06
10:56:32: 15 % Improvement
10:56:32: Optimizing Lens 1-2 for ion 69.00 m/z
10:56:38: Previous Setting = -21.90, New Setting = -5.00
10:56:38: Maximum Intensity = 2.43e+06
10:56:38: 41 % Improvement
10:56:38: Optimizing Lens 2-1 for ion 69.00 m/z
10:56:45: Previous Setting = -8.45, New Setting = 3.92
10:56:45: Maximum Intensity = 2.56e+06
10:56:45: 17 % Improvement
10:56:45: Tuning Q1MS at mass 501.97 m/s
10:56:47: Opening resolution
10:56:48: Adjusting resolution
10:57:04: The adjusted resolution is -14.38 at the width 0.78
10:57:04: Coarse resolution done - Quick calibration
10:57:10: The adjusted calibration of mass 502.0 is -0.16
10:57:11: Averaging Stopping Curve...
10:57:16: Q1 Quadrupole Offset set to -2.00 for all reswidths
10:57:18: Optimizing Lens 2 for ion 501.97 m/z
10:57:24: Previous Setting = -7.00, New Setting = -2.70
10:57:24: Maximum Intensity = 2.97e+05
10:57:24: 223 % Improvement
10:57:24: Optimizing Lens 1-2 for ion 501.97 m/z
10:57:30: Previous Setting = -50.14, New Setting = -51.11
10:57:30: Maximum Intensity = 4.35e+05
10:57:30: 6 % Improvement
10:57:30: Optimizing Lens 2-1 for ion 501.97 m/z

Signature: _____
```

图 38. 调谐和校正报告，参数优化图

Quantum Tune Master - Tune and Calibration



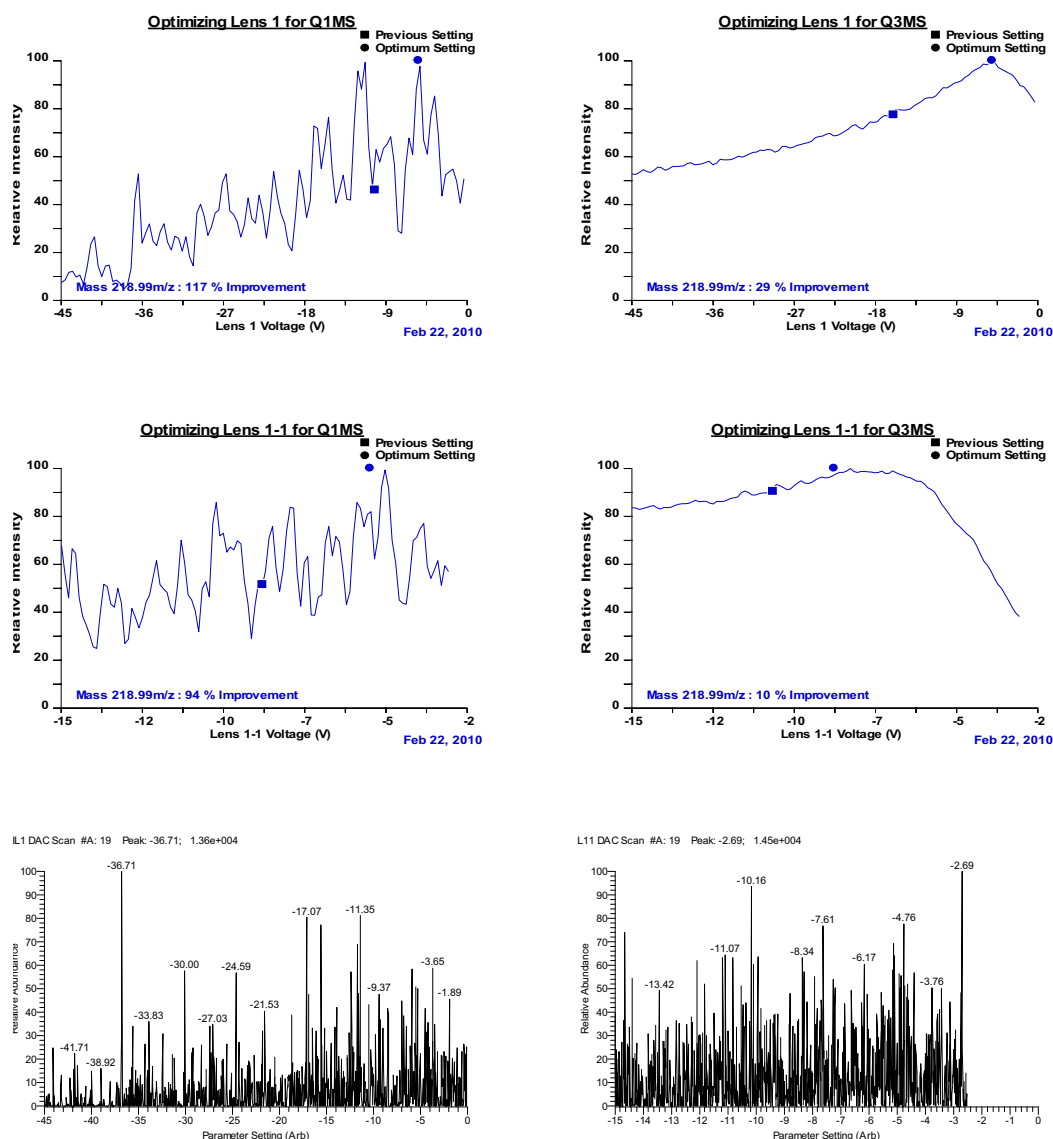
❖ 若保存调谐和校正文件

1. 在 System Tune and Calibration 对话框中单击 **Save Report**（保存报告）。Save As 对话框打开。
2. 输入报告的名称和路径，然后单击 **Save**。

运行维护调谐

利用 EZ Tune 中的维护调谐程序快速增加质谱仪的离子信号。维护调谐调整透镜 L1 电压和透镜 L11 补偿电压，最大化离子信号，例如，FC-43 正极性模式下的 m/z 219。在程序结束时，可以将优化的透镜 L1 电压保存为调谐文件，将优化的透镜 L11 补偿电压保存为校正文件。图 39 显示一个维护调谐报告。

图 39. 维护调谐报告，第 2 页



❖ 若要运行维护调谐

1. 根据第 62 页的“显示 FC-43 质谱”的说明显示正或负极性模式下的 FC-43 质谱图。



2. 单击 **System Tune and Calibration** 按钮（或选择 **Setup > System Tune and Calibration**）以显示 System Tune and Calibration 对话框。参阅图 35。
3. 选择校正化合物。
4. 单击 **Start Main Tune**（启动维护调谐）启动维护调谐程序。
5. 在这个程序结束后，可以接受维护调谐并保存校正，或撤销调谐。

创建质量控制 (QC) 调谐报告

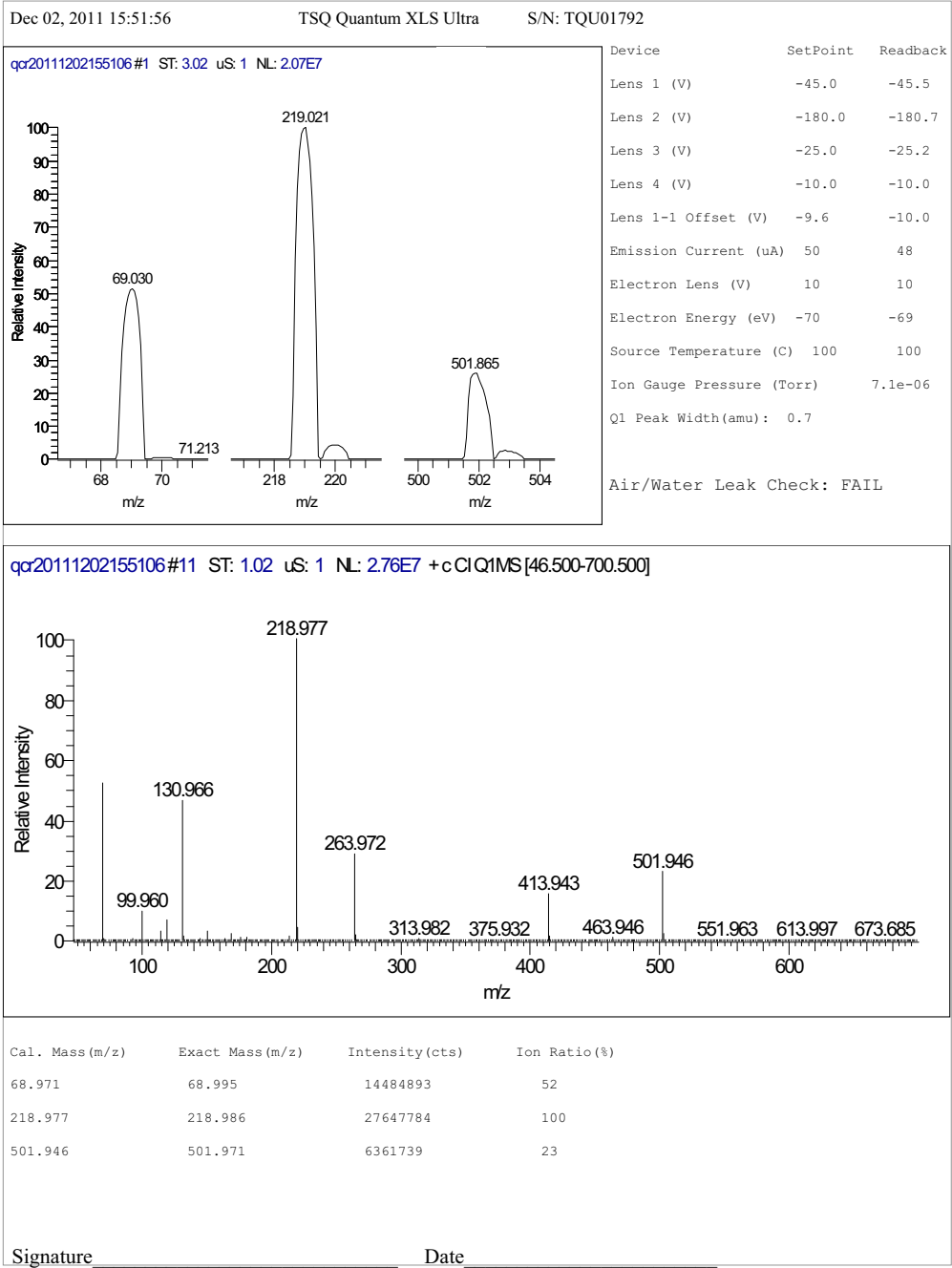
使用 EZ 调谐中的 TSQ QC Report (TSQ 质量控制报告) 对话框生成一个报告，显示与质谱仪性能有关的调谐参数和质谱图。可以将报告另存为一个 PDF 文件。

TSQ QC 调谐报告包括下列部分：

- 三个 FC-43 峰的轮廓图
- 离子源透镜和 L11 电压的选点和读回值
- m/z 50 到 650 的 Q1/MS 全扫描棒状图
- FC-43 峰位置和强度比
- 检漏的结果（通过与否）

图 40 显示一个 QC 调协报告。

图 40.QC 调谐报告



- ❖ 若要创建和保存 QC 调谐报告
1. 选择 **View** (查看) > **QC Report** (质量控制报告) 打开 TSQ QC Report 对话框。
 2. 点击 **Start** 开始 QC 报告程序。
 3. 当该步骤结束后, 单击 **View Report** (查看报告) 查看作为 PDF 文件的 QC 报告。
 4. 保存 PDF 文件。

改变电离模式

可以在 EI 或 CI 电离模式下操作 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪。改变电离模式需要更换离子盒。无需关闭质谱仪以更换离子盒。

下面部分说明如何改变电离模式。

目录

- 移除离子盒
- 安装离子盒

移除离子盒



需要的工具

- 手套，干净不掉毛且无粉
- 插入 / 移除 (I/R) 工具和导向杆



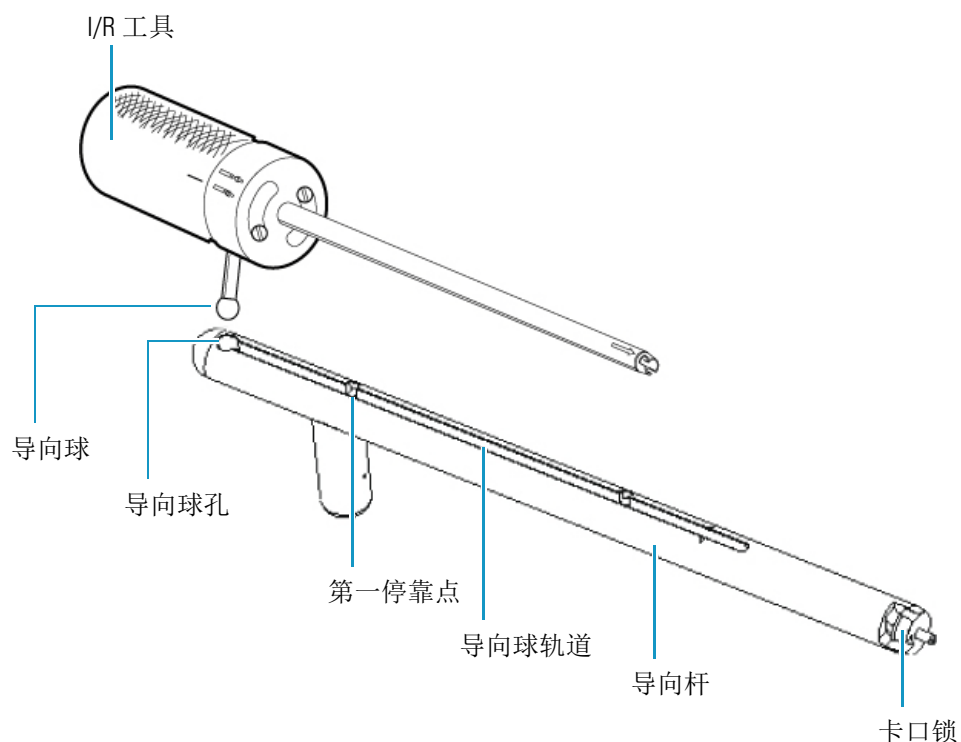
频率

当改变电离模式或根据需要清洁离子盒时

❖ 若要移除离子盒

1. 安装导向杆：
 - a. 当导向球轨道面向左侧时，将导向杆插入进口处。参阅图 41。
 - b. 尽可能最大程度地推导向杆；然后将其顺时针旋转 90° 锁定进口处的导向杆。

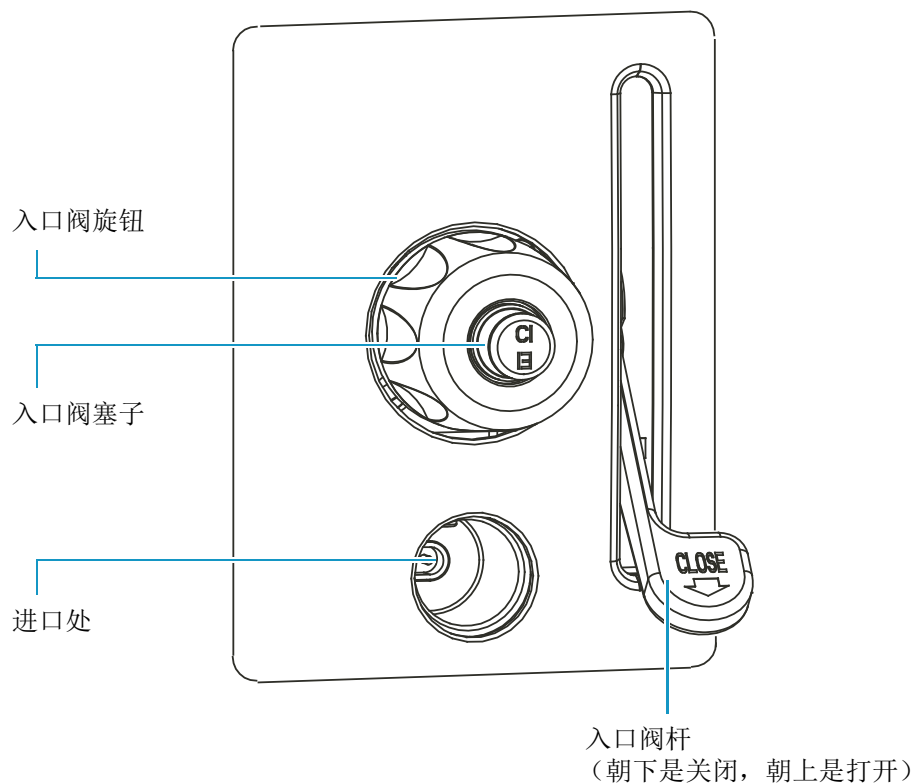
图 41. 插入 / 移除 (I/R) 工具和导向杆



2. 准备好入口阀和 I/R 工具准备插入:

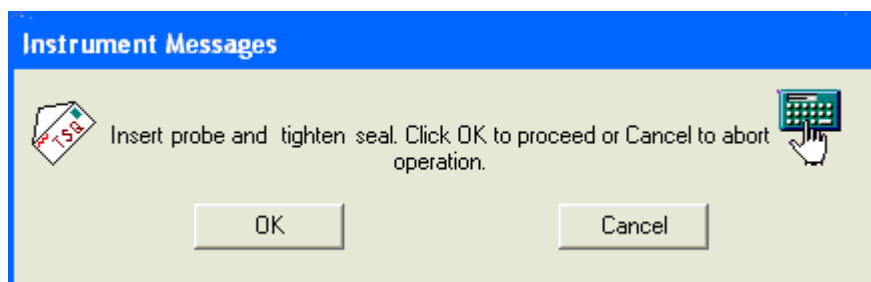
- 确保入口阀关闭。图 42 显示入口阀杆朝下，阀门已关闭。
- 逆时针拧松入口阀旋钮，移除入口阀塞子。万一入口阀被误操作打开时，入口阀塞子防止空气进入真空腔体。
- 将 I/R 工具旋转到解锁位置 ，这表示 I/R 工具已经就位接受离子盒。

图 42. 入口阀部件



3. 选择 **Start (开始) > All Programs (所有程序) > Thermo Instruments (Thermo 仪器) > TSQ > TSQ Tune (TSQ 调谐)** 打开 EZ Tune (EZ 调谐) 窗口。
4. 单击 EZ Tune 工具栏上的 **Probe (工具)** 按钮 。Insert Probe (插入工具) 信息出现 (图 43)。

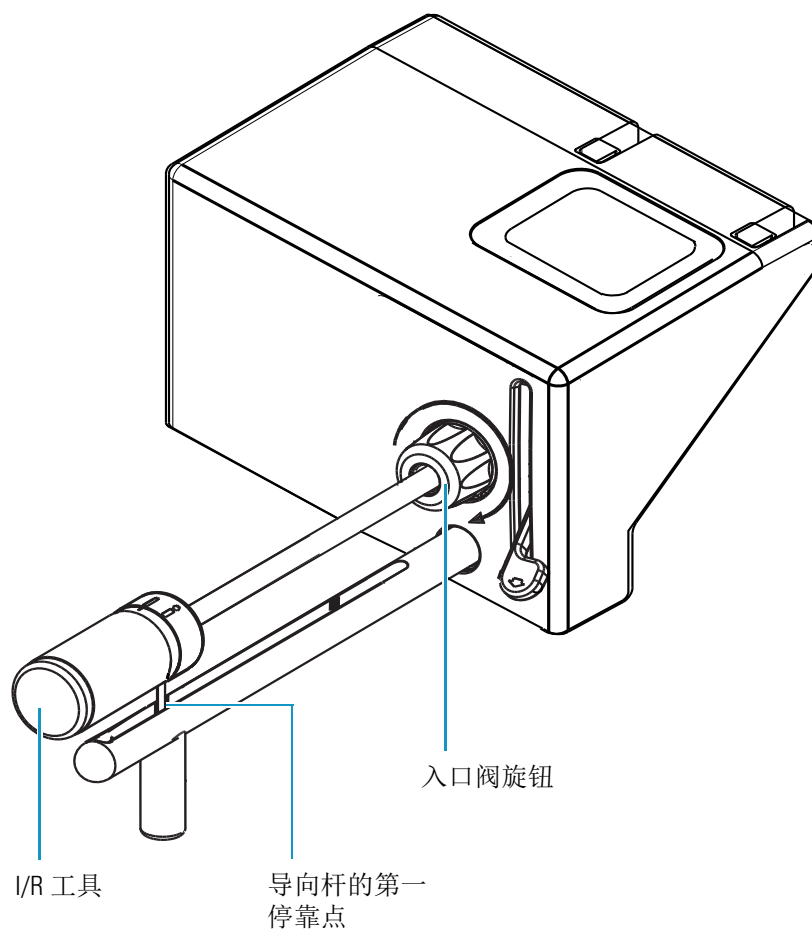
图 43. Insert Probe 信息



5. 将 I/R 工具插入入口阀:
 - a. 将导向球插入导向球孔。
 - b. 使 I/R 工具向前滑入口阀, 直到导向球处于导向杆的第一停靠点 (参阅图 44)。

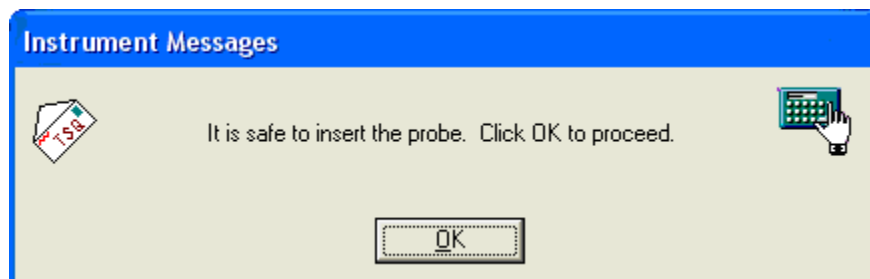
c. 顺时针拧紧入口阀旋钮，确保良好的密封。

图 44. 位于导向杆第一停靠点的 I/R 工具以及入口阀旋钮已经拧紧



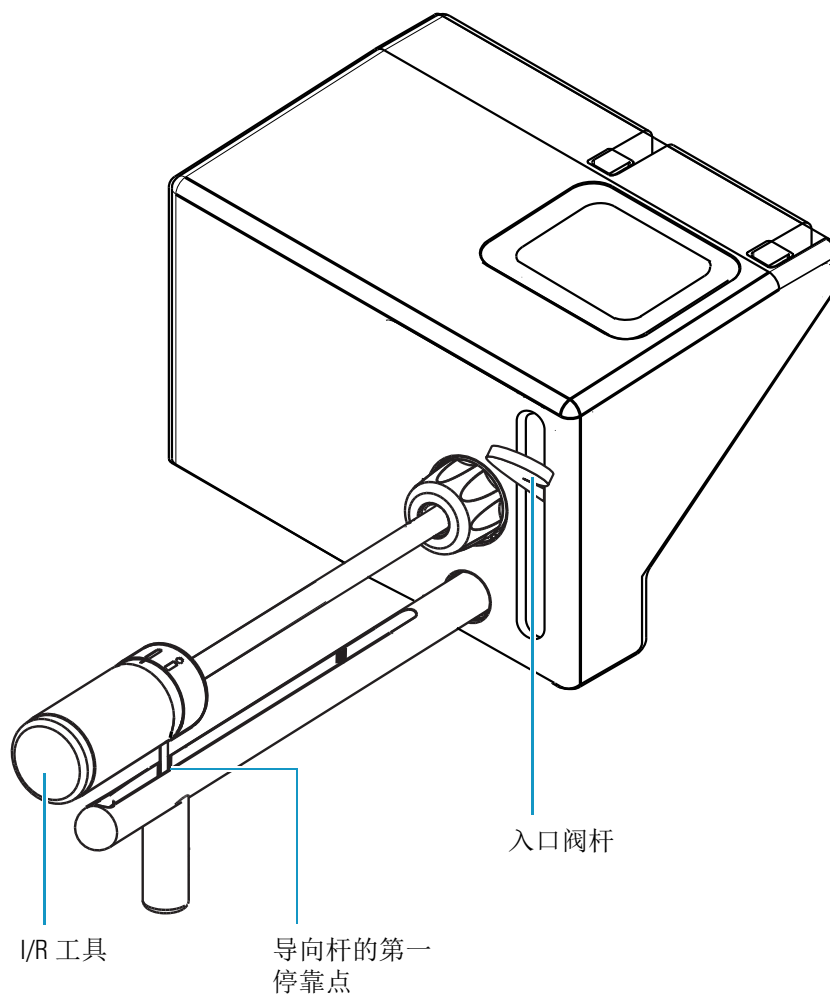
6. 单击 **OK (确定)**。前级泵抽空入口阀。等待直到可以安全插入工具 (图 45)，然后单击 **OK**。

图 45. 提示可以安全插入工具的信息



7. 一旦抽空完成，将入口阀杆向上拉 (图 46)。

图 46. 第一停靠点的 I/R 工具以及入口阀杆朝上

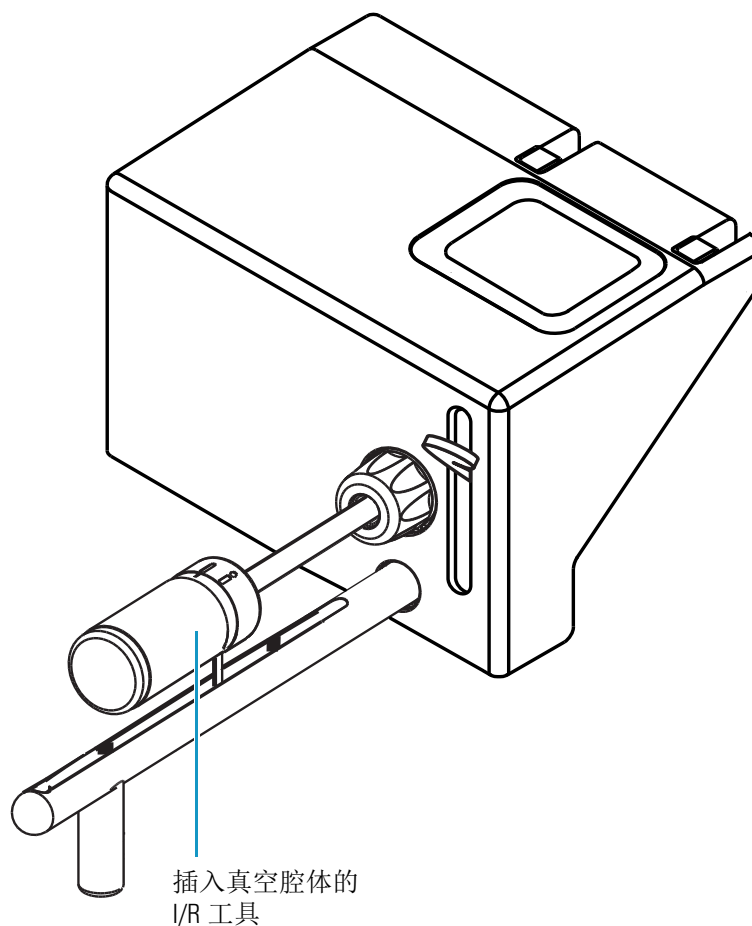


入口阀打开。

8. 移除离子盒：

- a. 将 I/R 工具滑入真空腔体，直到工具的前端完全插入离子盒支架。参阅图 47。通过离子源腔体的窗口能够看到的 I/R 工具上的箭头，这时应该无法看到。

图 47. 插入入口阀的 I/R 工具



- b. 逆时针旋转 I/R 工具手柄使 I/R 工具处于锁定位置，。听到一声喀哒声，这表示手柄已经完全处于锁定位置，并固定住离子盒。



注意事项 不要将 I/R 工具往回拉超过那个导向球到达导向杆第一停靠点的位置点。首先关闭入口阀。否则，系统放空到大气中。

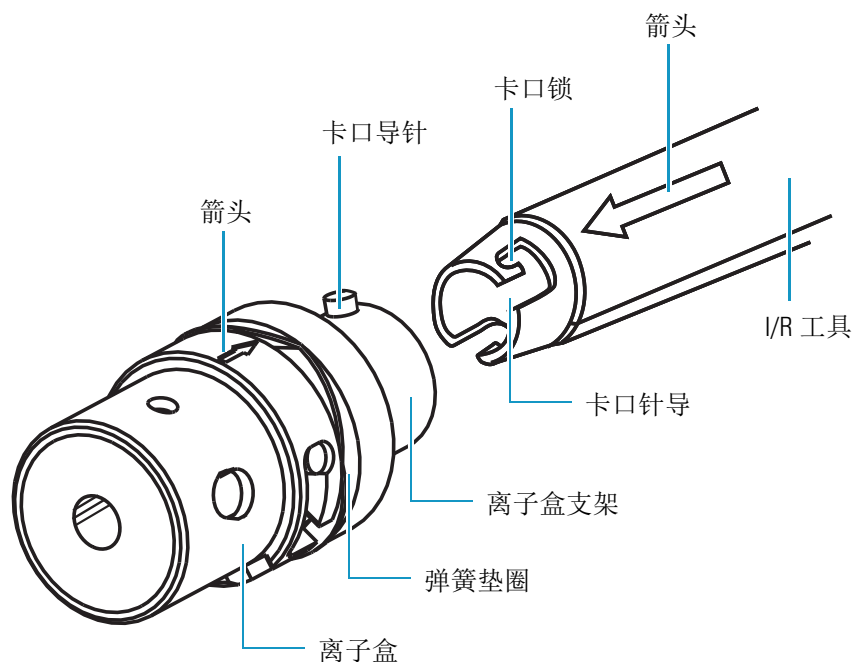
- c. 撤回 I/R 工具（连接着离子盒）直到导向球到达第一停靠点（参阅第 77 页的图 46）。
- d. 将杆下拉关闭入口阀。
- e. 逆时针拧松入口阀旋钮，释放密封。
- f. 通过使 I/R 工具沿着导向球轨道滑动，继续彻底回撤 I/R 工具。



警告 烫伤危险。由于离子盒可能太烫无法解除，在处理之前使其冷却。

9. 从 I/R 工具上取下离子盒（参阅图 48）：
 - a. 戴上清洁手套，将离子盒向前按入 I/R 工具的前端，然后使其旋转断开卡口导针与针导的连接。
 - b. 将离子盒拉出 I/R 工具。

图 48. 离子盒，离子盒支架和 I/R 工具



10. 若要清洁离子盒，使用第 98 页的“**清洁不锈钢部件**”中的说明。如果正在清洁 CI 离子盒，确保清洁电子入口小孔。氧化铝可能堵住小孔，导致灵敏度下降。利用锐口牙刮匙或注射器针清洁小孔。

安装离子盒

在清洁或改变电离模式之后安装离子盒。

❖ 若要安装离子盒

注释 当处理清洁离子盒时，戴上清洁不掉毛和无粉的手套。

1. 利用箭头准直将清洁的离子盒放到 I/R 工具上。参阅图 48。



注意事项 若要避免离子源损坏，确保 I/R 工具和离子盒的箭头准直。

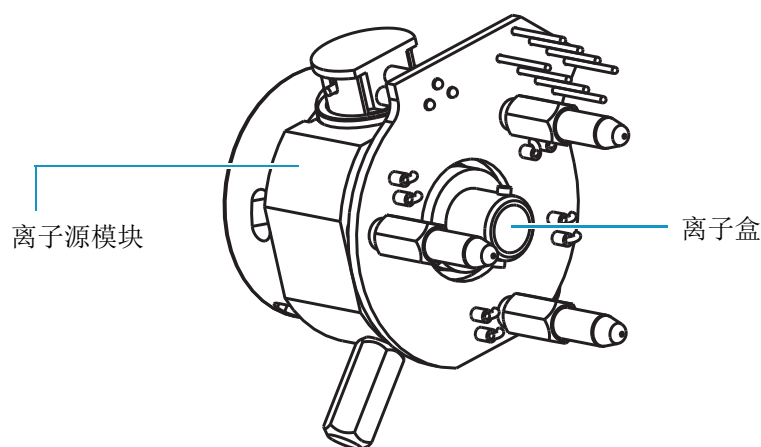
2. 旋转 I/R 工具手柄到达锁定位置，.
3. 安装导向杆：
 - a. 当导向球轨道面向左侧时，将导向杆插入进口处（参阅第74页的图41）。
 - b. 尽可能最大程度地推导向杆，然后将其顺时针旋转 90° 锁定进口处的导向杆。
4. 准备好入口阀开始插入：
 - a. 确保入口阀关闭。图 42 显示入口阀杆，朝下处于关闭位置。
 - b. 逆时针拧松入口阀旋钮，移除入口阀塞子。万一入口阀被误操作打开时，入口阀塞子防止空气进入真空腔体。
5. 选择 **Start > Programs > Thermo Instruments > TSQ > TSQ Tune** 打开 EZ Tune 窗口。
6. 单击 EZ Tune 工具栏上的 **Probe** 按钮 。Insert Probe 信息出现。参阅图 43。
7. 将 I/R 工具插入入口阀：
 - a. 将导向球插入导向球孔。
 - b. 使 I/R 工具向前滑进入口阀，直到导向球处于导向杆的第一停靠点。参阅第 76 页的图 44。
 - c. 顺时针拧紧入口阀旋钮，确保良好的密封。
8. 单击 **OK**。前级泵抽空入口阀。等待直到可以安全插入工具（第 76 页的图 45）；然后单击 **OK**。

9. 一旦抽空完成，将入口阀杆向上拉打开入口阀。

10. 安装离子盒：

- a. 将 I/R 工具和离子盒组件滑入真空腔体，直到离子盒组件完全插入并位于离子源模块内。听到一声喀哒声，这表示离子盒已经与离子源模块连接。
- b. 旋转 I/R 工具手柄回到解锁位置，，从 I/R 工具释放离子盒。

图 49. 位于离子源模块内的离子盒



11. 确保离子盒完全位于离子源模块内：

- 从离子盒回撤 I/R 工具大约 2.5 cm (1 in.)，并旋转 I/R 工具手柄到达锁定位置。
- 将 I/R 工具在真空腔体内来回滑动，直到工具的末端刚好接触离子盒。
- 测试 I/R 工具不会完全进入入口阀，这表示离子盒已经正确就位。

12. 移除 I/R 工具：



注意事项 不要将 I/R 工具往回拉超过那个导向球到达导向杆第一停靠点的位置点。首先关闭入口阀。否则，系统放空到大气中。

- a. 撤回 I/R 工具直到导向球到达第一停靠点（参阅第 77 页的图 46）。
- b. 向下拉入口阀杆关闭入口阀（参阅第 76 页的图 44）。
- c. 逆时针拧松入口阀旋钮。
- d. 通过使 I/R 工具沿着导向球轨道滑动，继续彻底回撤 I/R 工具。

13. 逆时针旋转导向杆 90° 然后滑出入口处取下导向杆。
14. 装好入口阀塞子。定位塞子以表明是否安装了 EI 或 CI 离子盒。
15. 顺时针拧紧入口阀旋钮，确保良好的密封。
16. （可选）若要防止入口阀被意外打开，随意拉并取下入口阀杆。

表 6. 维护

本章说明确保TSQ Quantum XLS系列质谱仪处于最佳性能必须执行的日常维护步骤。质谱仪的最佳性能取决于对仪器所有部件维护。**用户负责通过定期执行这些维护步骤，正确维护仪器。**

表 6 列出常规和非经常性的质谱仪维护步骤。有关维护 GC 或自动进样器的说明，参阅 GC 或自动进样器附带的手册。

目录

- 清洁离子源组件
- 更换离子源灯丝
- 彻底分解和组装离子源
- 维护前级泵
- 添加校正化合物
- 更换 球阀 密封
- 移除和安装 GC 毛细管色谱柱

提示 当执行维护步骤时，按部就班；处理离子源组件时，戴上清洁、无绒手套；将组件放置在清洁、无绒的表面上，切勿过分旋紧螺钉或用力过度。

表 7. 维护步骤 （第 1 页，共 2 页）

质谱仪组件	步骤	频率	参考文献
离子源	清洁离子盒	在需要时 ^a	第 87 页
离子源	清洁透镜	在需要时 ^a	第 87 页
离子源	清洁整个离子源	在需要时 ^a	第 96 页
离子源	更换灯丝	如果灯丝故障	第 93 页
入口阀	更换球阀密封	如果入口阀有漏气	第 105 页

表 7. 维护步骤 (第 2 页, 共 2 页)

质谱仪组件	步骤	频率	参考文献
校正化合物	添加校正化合物	如果 EZ Tune (EZ 调谐) 错误信息表示校正气体离子强度低	第 102 页
气相色谱仪	更换毛细管柱	如果色谱分离不佳或此应用需要另一个静止相	第 107 页
Q0 离子光学组件	清洁 Q0 四极杆, L11 和 L12 透镜 ^b	在需要时 ^a	
质量分析器	清洁 Q1、Q2 和 Q3 四极杆和透镜 ^b	在需要时 ^a	
前级泵	排掉前级泵油	如果泵油浑浊	制造商的文件
前级泵	添加泵油	如果油位低	制造商的文件
前级泵	更换泵油	每四个月或者泵油浑浊或变色	制造商的文件
离子检测系统	更换电子倍增器组件 ^b	如果质谱中的噪声过多或无法达到正确的电子倍增器增益	
电子模块	更换电子模块 ^b	如果电子模块出现故障	
PCBs	更换 PCB ^b	如果 PCB 出现故障	

^a清洁质谱仪组件的频率取决于引入到仪器中样品及溶剂的类型和数量。Q0、Q1、Q2 和 Q3 四极杆一般不需要经常清洁。

^b应由 Thermo Fisher Scientific 现场服务工程师执行本维护步骤。

清洁离子源组件

维护 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪的一个重要部分就是确保离子源组件清洁。根据这一部分的清洁步骤清洁不锈钢和非不锈钢部件。

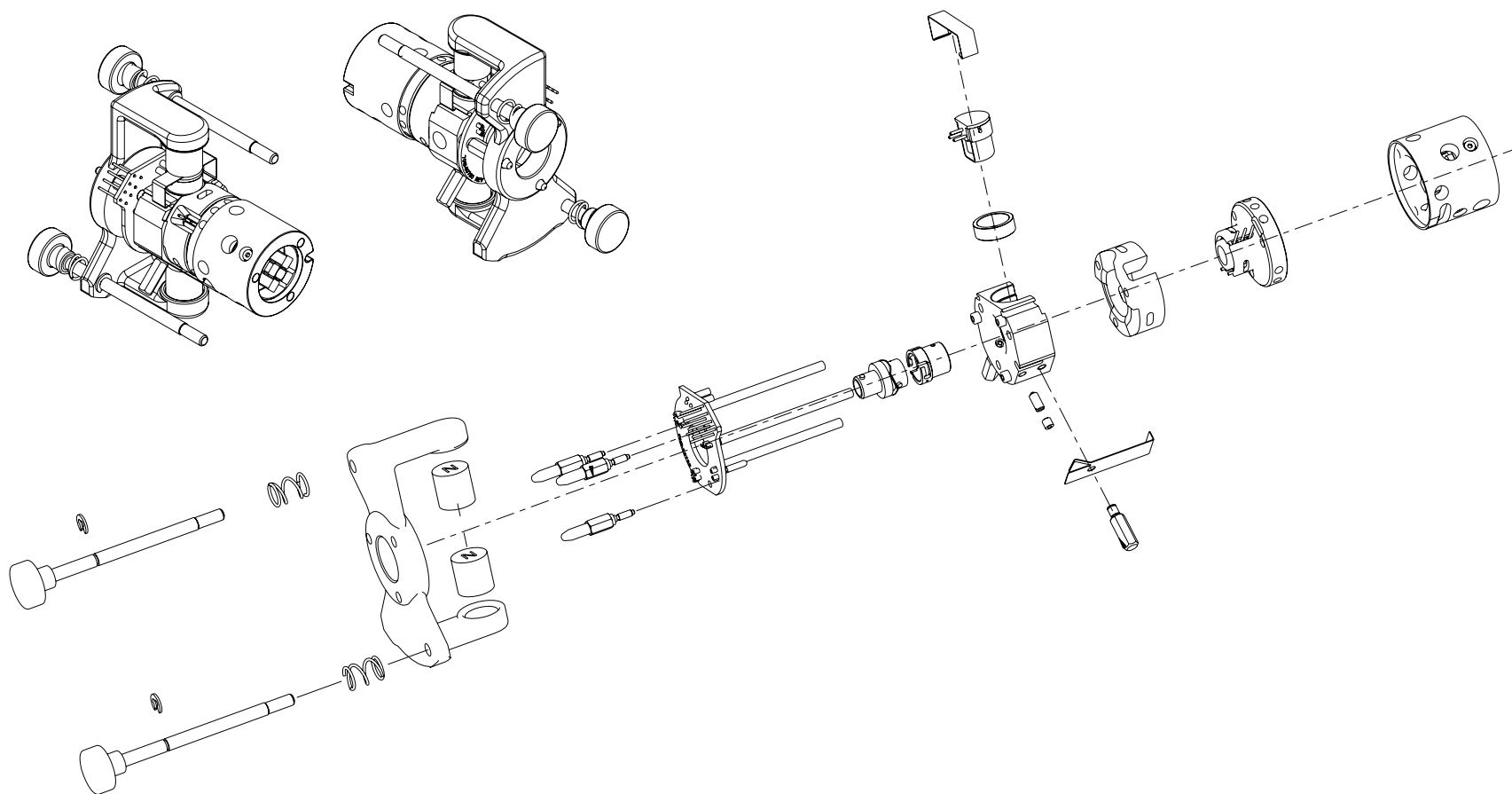
当质谱仪清洁并处于良好工作状态时，执行标准测试并记录结果。当系统测试性能从标准测试结果显著下降时，清洁离子盒。如果这无法恢复系统性能，则清洁透镜。

清洁离子源的频率取决于进样的样品和溶剂类型以及量。一般，离进样点越近，该部件越容易变脏。离子盒比其他部件更容易变脏。如果只想更换或清洁离子盒，无需关闭系统。

可以手动移除和拆卸大部分部件。在开始每个步骤之前，确保已经准备好所需工具。

图 50 显示离子源组件的分解图和装配图。

图 50. 离子源组件，装配和分解图



清洁离子盒

清洁离子盒时，无需放空质谱仪。

❖ 若要清洁离子盒

1. 移除离子盒。参阅第 73 页的“移除离子盒”。



警告 烫伤危险。离子盒可能很烫。在接触之前使离子盒冷却到室温。

2. 清洁离子盒。参阅第 98 页的“清洁不锈钢部件”。如果正在清洁 CI 离子盒，确保清洁电子入口小孔。氧化铝可能堵住小孔，导致灵敏度下降。利用锐口牙刮匙或注射器针清洁小孔。
3. 重新安装离子盒。参阅第 80 页的“安装离子盒”。

清洁离子源透镜

如果清洁离子盒无法恢复系统性能，则清洁离子源透镜。

❖ 若要清洁离子源透镜

1. 关机并进行系统泄真空。参阅第 51 页的“完全关闭系统”。



警告 触电危险。在继续之前拔下 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪插头。



警告 烫伤危险。离子源可能很烫。在接触之前使离子源冷却到室温。

2. 移除离子源。参阅第 88 页的“移除离子源”。
3. 从离子源上移除离子源透镜组件，并分解它。参阅第 90 页的“移除 L1、L2、L3 透镜组件和加热 Q0 四极杆组件”。
4. 清洁透镜和垫圈。分别参阅第 98 页的“清洁不锈钢部件”和第 100 页的“清洁非不锈钢或组合部件”。
5. 重新组装 L1、L2、L3 透镜组件，将它和加热 Q0 四极杆安装到离子源上。参阅第 92 页的“组装 L1、L2、L3 透镜组件”。

6. 重新将离子源安装到质谱仪上，在离子源内重新插入毛细管柱。参阅第 92 页的“重新安装离子源”。
7. 重启系统。参阅第 53 页的“在完全关机后启动系统”。

移除离子源

移除离子源清洁透镜或更换灯丝。



需要的工具

- 清洁室级手套（P/N 23827-0008 和 23827-0009）
- 无绒布



频率

根据需要进行离子源维护

❖ 若要移除离子源

1. 关机并进行质谱仪泄真空。参阅第 51 页的“完全关闭系统”。



警告 触电危险。在继续之前拔下质谱仪插头。



注意事项 不要在取出 GC 毛细管柱之前移除离子源，否则毛细管柱可能断裂。

2. 取出毛细管柱：
 - a. 在继续之前使柱温箱、进样口和传输线温度降至 30 °C 进行冷却。



警告 烫伤危险。GC 柱温箱、进样口和传输线都很烫。在接触之前使它们冷却到室温。

- b. 一旦 GC 柱温箱、进样口和传输线都冷却完毕，关闭气相色谱仪。
 - c. 松开传输线螺母。参阅第 108 页的图 61。
 - d. 取出毛细管柱。（可以首先以白色校正液或某些类似工具标记柱的位置。）
3. 铺上一块无绒布准备一块清洁的工作区域。
 4. 松开固定离子源真空腔体盖的两个插销，打开 盖。

5. 断开EI/CI离子源PCB上导针以及L1、L2、L3透镜组件的接头。参阅图51。

图 51. TSQ Quantum XLS 系列离子源，已安装



警告 烫伤危险。离子源可能很烫。在接触之前使离子源冷却到室温。

注释 当处理离子源时，戴上清洁不掉毛和无粉的手套。

6. 当固定离子源组件时，松开两个将离子源固定在 Q0 四极杆底座上的指旋螺钉。
7. 将离子源组件从 Q0 四极杆底座上拉出，稍微向右以清洁下方的传输线。
8. 使离子源滑出磁轭。
9. 将离子源和磁轭放置在清洁不掉毛的布上。
10. 关闭离子源真空腔体的盖。

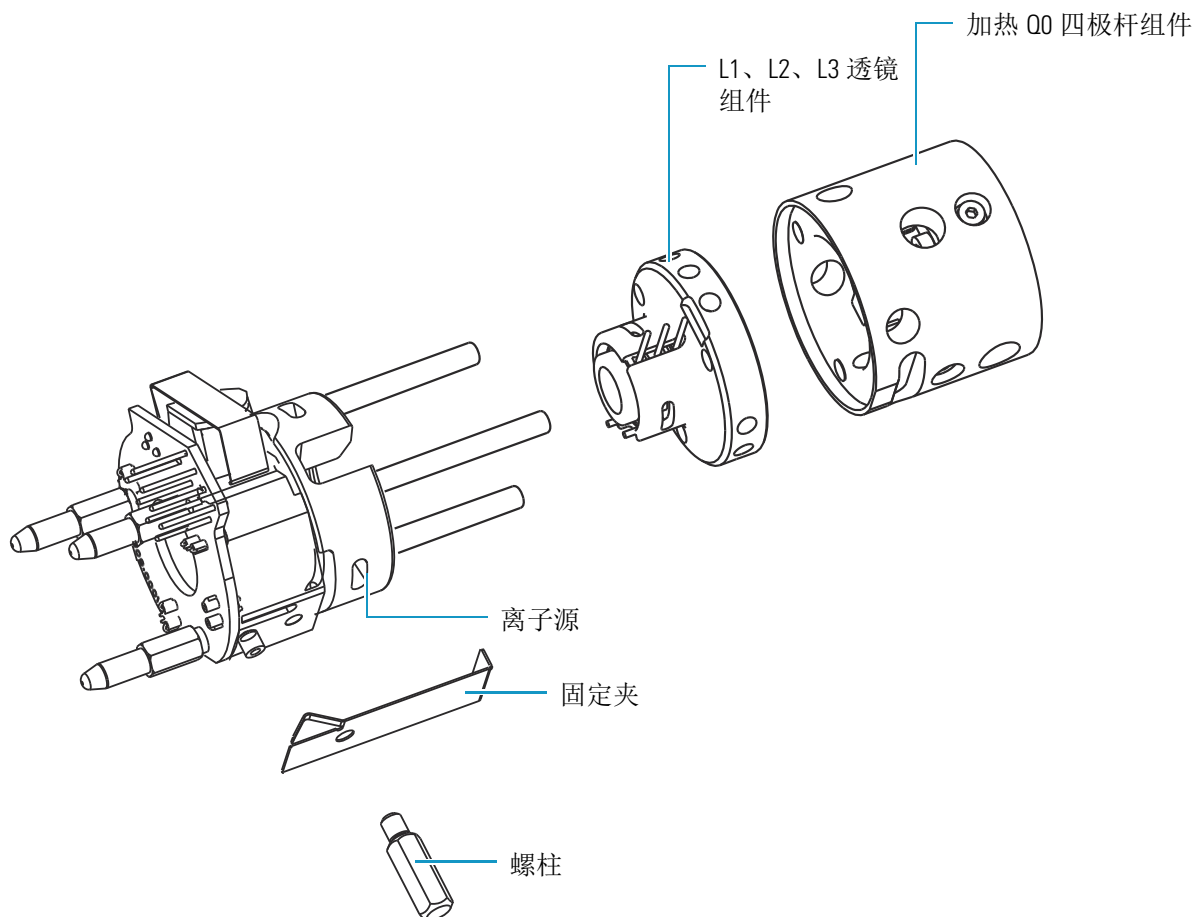
移除 L1、L2、L3 透镜组件和加热 Q0 四极杆组件

离子源包括 L1、L2、L3 透镜组件和加热 Q0 四极杆组件。必须移除和分解 L1、L2、L3 透镜组件以清洁透镜。一个固定夹将 L1、L2、L3 透镜组件和加热 Q0 四极杆组件固定到离子源模块上。

若要拆卸离子源透镜组件

1. 戴上清洁、不掉毛和无粉手套，拧下六角螺柱，移除将透镜组件固定到离子源模块上的固定夹。参阅图 52。
2. 从离子源的加热器筒上移除加热 Q0 四极杆组件和 L1、L2、L3 透镜组件。将它放置在清洁的表面上。

图 52. 从离子源移除 L1、L2、L3 透镜组件和加热 Q0 四极杆组件

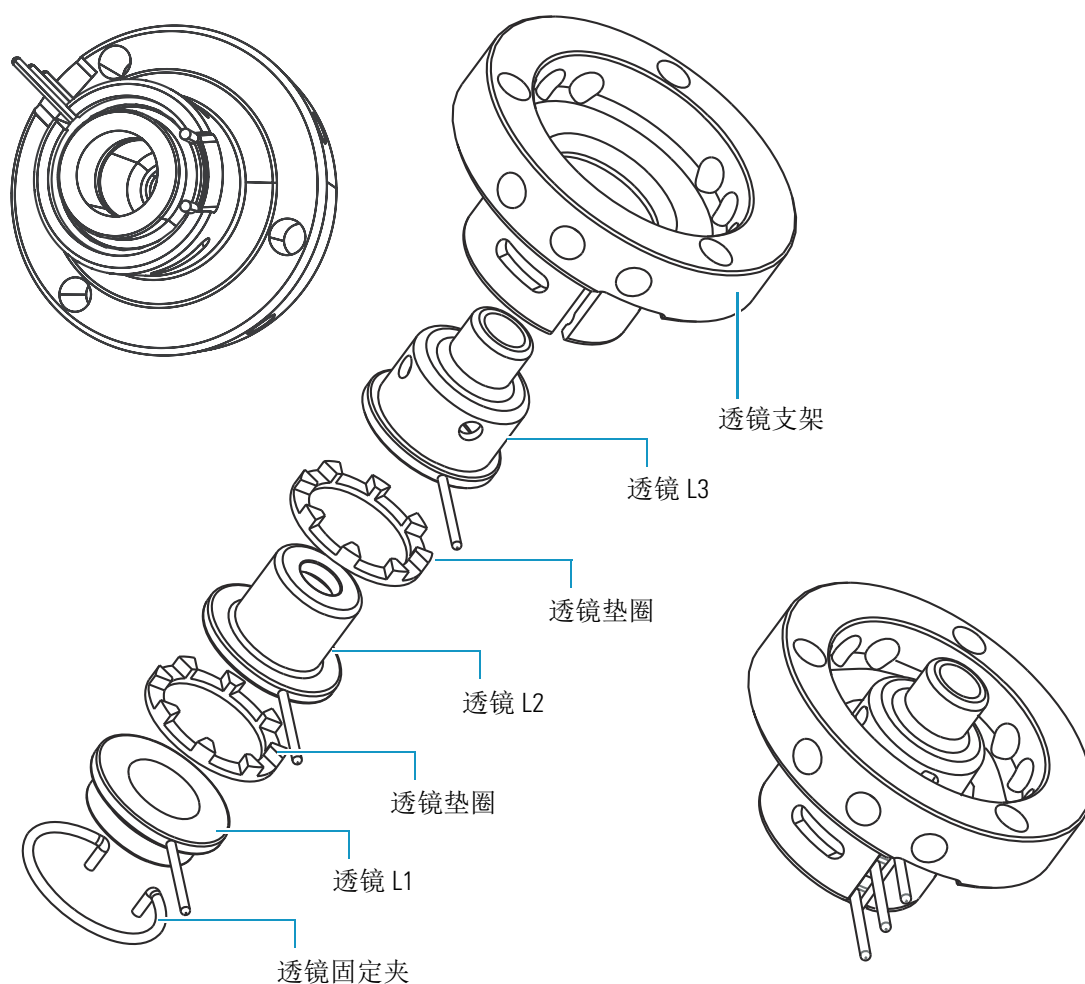


分解 L1、L2、L3 透镜组件

❖ 若要分解 L1、L2、L3 透镜组件

1. 用手指或镊子捏住末端取下透镜固定夹。参阅图 53。
2. 从透镜支架上取下透镜和垫圈。
3. 将部件放在清洁表面上。

图 53. L1、L2、L3 透镜组件，装配图和分解图



注释 若要清洁离子源透镜，使用第 98 页的“清洁不锈钢部件”中的步骤。若要清洁其他部件，使用第 100 页的“清洁非不锈钢或组合部件”中的步骤。

组装 L1、L2、L3 透镜组件

在组装透镜组件之前，确保透镜清洁干燥。

❖ 若要组装 L1、L2、L3 透镜组件

1. 戴上清洁、不掉毛和无粉手套，按照第 91 页的图 53 中的次序和方位重新安装透镜支架中的透镜和垫圈，从透镜 L3 开始。
2. 用手指或镊子捏住末端重新安装透镜夹，并使其在透镜支架中就位。
3. 将透镜准直工具（在 TSQ Quantum XLS 附件套件中）插入透镜组件，并使透镜准直。

重新安装离子源透镜组件

❖ 若要将离子源透镜组件重新安装到离子源

1. 戴上清洁、不掉毛和无粉手套，通过 L1、L2、L3 透镜组件上相应的孔插入离子源的三个加热器筒。参阅第 90 页的图 52。
2. 通过加热 Q0 四极杆组件上相应的孔插入离子源的三个加热器筒。确认加热 Q0 四极杆组件上导针孔和固定夹槽准确定位。
3. 使用固定夹和螺柱将透镜组件固定在离子源上。

重要信息 对于加热器模块的准确温度读数，将螺柱完全旋进离子源，确保温度传感器和加热器模块之间的良好接触。

重新安装离子源

对于离子源组件的位置，参阅第 86 页的图 50。

❖ 若要在真空腔体内重新安装离子源

1. 戴上清洁、无绒和无粉的手套，将离子源放在磁轭上。
2. 在真空腔体内定位离子源，确保：
 - 传输线位于离子源内的样品入口狭缝。
 - Q0 四极杆底座上的导针插入加热 Q0 透镜组件上的导针槽。
 - 两个指旋螺钉与 Q0 四极杆底座中的螺钉孔对齐。
3. 交替拧紧每个指旋螺钉半圈，使离子源固定到 Q0 四极杆底座上。确保离子源已经固定就位。
4. 将 8-pin 接头对齐并重新连接到 EI/CI 离子源 PCB 上的导针。
5. 对齐 3-pin 接头，这样斜边与 L3 导针最近，圆角边与 L1 导针最近。

6. 将 3-pin 接头重新连接到 L1、L2 和 L3 透镜的导针。
7. 将毛细管柱重新插入离子源：
 - a. 使用 I/R 工具移除离子盒。参阅第 73 页的“移除离子盒”。
 - b. 推入毛细管柱，直到可以在离子源中看到它。
 - c. 往回拉色谱柱，直到看不到它。
 - d. 拧紧传输线螺母和传输线两通。
 - e. 使用 I/R 工具安装离子盒。参阅第 80 页的“安装离子盒”。
8. 关闭并固定离子源真空腔体的盖。

更换离子源灯丝

离子源中产生的离子数量大约与灯丝发射电流成正比。如果离子产率不足，可能必须更换灯丝。如果测量的发射电流显著小于其设置值，或者测量发射电流随着时间逐渐下降，然后灯丝故障或正在出现问题并要求更换。



需要的工具

- 灯丝 (P/N 120320-0030)
- 清洁室级手套 (P/N 23827-0008 和 23827-0009)
- 无绒布



频率

如果灯丝故障

对于离子源组件的位置，参阅第 86 页的图 50 和第 94 页的图 54。

❖ 若要更换离子源灯丝

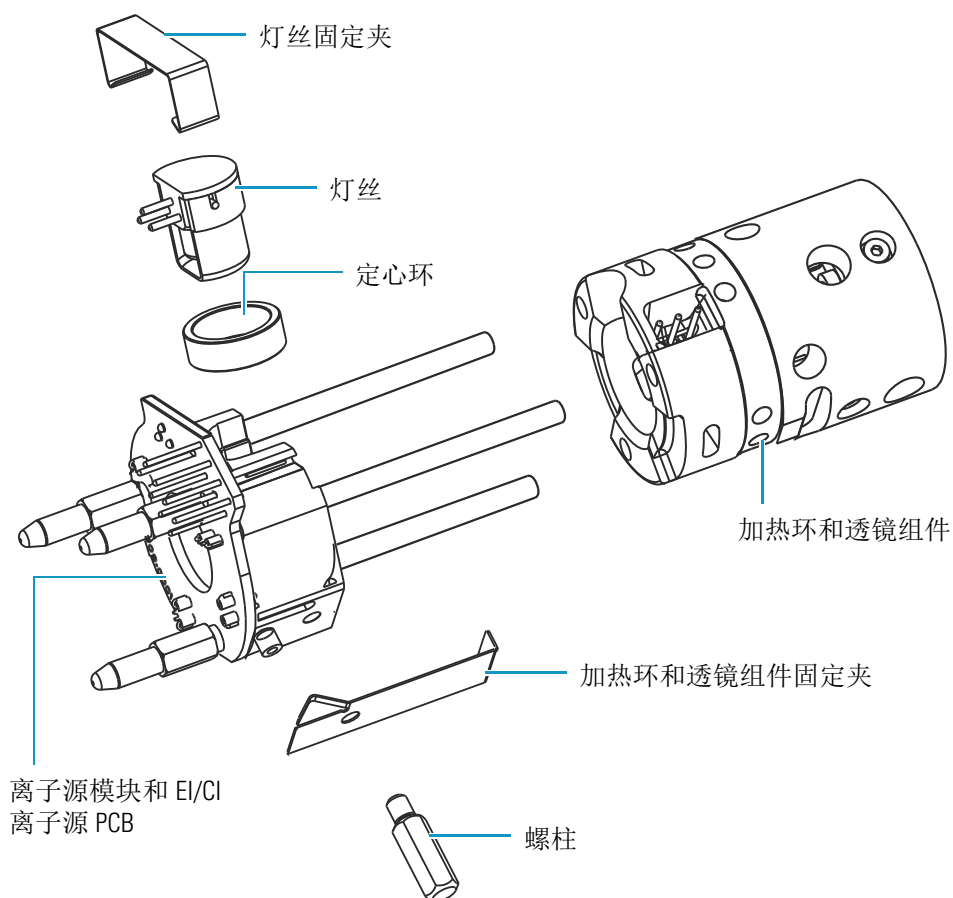
1. 铺上一块无绒布准备一块清洁的工作区域。
2. 关机并进行质谱仪泄真空。参阅第 51 页的“完全关闭系统”。



警告 触电危险。在继续之前拔下质谱仪插头。

3. 移除离子源。参阅第 88 页的“移除离子源”。
4. 戴上清洁、无绒和无粉的手套，从磁轭上取下离子源。

图 54. 分解离子源更换灯丝



5. 拧下螺柱，移除将加热器环和透镜组件固定到离子源模块上的固定夹。参阅图 54。
6. 将加热器环和透镜组件从离子源模块的筒形加热器上拉出。将它们放置在清洁的表面上。
7. 移除将灯丝和定心环固定到离子源模块上的固定夹。
8. 从离子源模块上取下灯丝和定心环。

提示 现在可以清洁离子源模块和透镜。如需要，使用第 98 页的“清洁不锈钢部件”中说明的步骤。

检查和安装新灯丝（P/N 120320-0030，在 TSQ Quantum XLS 附件套件中）：

- a. 确认灯丝线处于电子透镜孔的中心。
 - b. 将灯丝插入定心环。
 - c. 使灯丝与 EI/CI 离子源 PCB 接头对齐，并轻轻将其按入接头中。通常，在灯丝和接头之间有大约 0.4 mm（0.016 in.）的间隙。这个间隙使陶瓷定心环正确定位，并使电子透镜孔和离子盒对齐。
 - d. 利用固定夹固定灯丝和定心环。
9. 将加热器环和透镜组件按入离子源模块的筒形加热器。
 10. 使用固定夹和螺柱将透镜组件固定在离子源上。参阅第 94 页的图 54。

重要信息 对于加热器模块的准确温度读数，将螺柱完全旋进离子源，确保温度传感器和加热器模块之间的良好接触。

11. 使离子源重新安装到磁轭上。
12. 重新将离子源安装到真空腔体内，在离子源内重新插入毛细管柱。参阅第 92 页的“重新安装离子源”。

重启系统。参阅第 53 页的“在完全关机后启动系统”。

彻底分解和组装离子源

彻底分解离子源以清洁离子源或更换 EI/CI 离子源 PCB。



需要的工具

- 清洁间级别手套（P/N 23827-0008 和 23827-0009）
- 无绒布



频率

在需要时

彻底分解和组装离子源

对于离子源组件的位置，参阅图 55。

❖ 若要彻底分解离子源

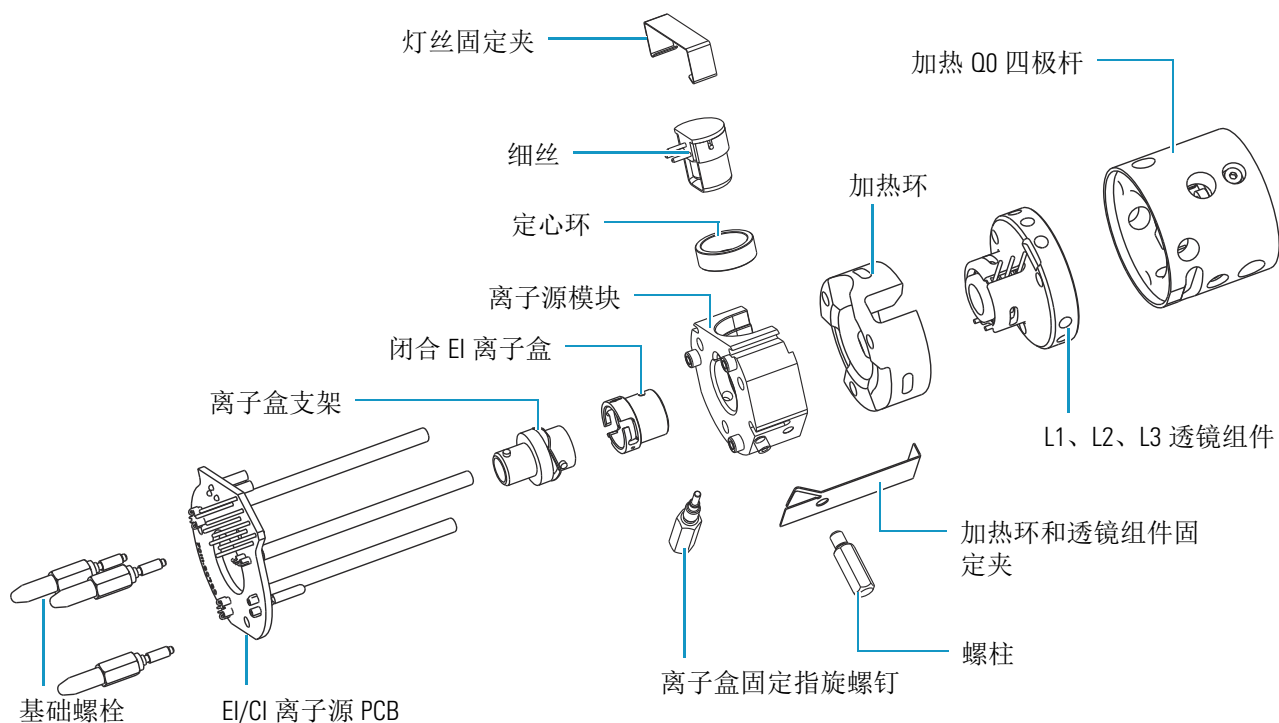
1. 铺上一块无绒布准备一块清洁的工作区域。
2. 关闭并放空 TSQ Quantum XLS 系列系统。参阅第 53 页的“在完全关机后启动系统”。



警告 触电危险。在继续之前拔下质谱仪插头。

3. 戴上清洁、无绒和无粉的手套，移除离子源。参阅第 88 页的“移除离子源”。
4. 从磁轭上取下离子源。

图 55. TSQ Quantum XLS 系列离子源，已分解



5. 拧下六角螺柱，移除将加热器环和透镜组件固定到离子源模块上的固定夹。
6. 从离子源上移除加热 Q0 四极杆组件和 L1、L2、L3 透镜组件。

7. 将加热环拉出离子源。
8. 拧松并取下三个基础螺栓。



注意事项 为了防止损害，不要将 EI/CI 离子源 PCB 拉出离子源模块。

9. 移除 EI/CI 离子源 PCB:
 - a. 使筒形加热器朝下，EI/CI 离子源 PCB 朝上，将离子源放到清洁表面上。
 - b. 在离子源模块上往下按，使其与 EI/CI 离子源 PCB 分离。
10. 移除将灯丝和定心环固定到离子源模块上的固定夹。
11. 从离子源模块上取下灯丝和定心环。
12. 清洁离子源模块和透镜。参阅第 98 页的“[清洁不锈钢部件](#)”。根据第 100 页的“[清洁非不锈钢或组合部件](#)”的说明清洁不锈钢部件。

❖ **若要分解离子源**

1. 重新安装 EI/CI 离子源 PCB:
 - a. 将 EI/CI 离子源 PCB 上的筒形加热器和温度传感器对齐并插入离子源模块上对应的小孔。

重要信息 确保温度传感器正确就位。

- b. 重新安装三个基础螺栓。
2. 重新安装灯丝和定心环:
 - a. 将灯丝插入定心环。
 - b. 使灯丝与 EI/CI 离子源 PCB 接头对齐，并轻轻将其按入接头中。通常，在灯丝和接头之间有大约 0.4 mm (0.016 in.) 的间隙。这个间隙使陶瓷定心环正确定位，并使电子透镜孔和离子盒对齐。
 - c. 利用固定夹固定灯丝和定心环。
3. 将加热器环和透镜组件按入离子源模块。
4. 使用固定夹和螺柱将加热器透镜组件固定在离子源上。参阅第 96 页的图 55。

重要信息 对于加热器模块的准确温度读数，将螺柱完全旋进离子源，确保温度传感器和加热器模块之间的良好接触。

5. 重新将离子源安装到真空腔体内，在离子源内重新插入毛细管柱。参阅第 92 页的“重新安装离子源”。
6. 重启系统。参阅第 53 页的“在完全关机后启动系统”。

清洁不锈钢部件



需要的工具

- 丙酮，试剂级（或其他稳定的极性溶剂）
- 氧化铝磨料，600 目（P/N 32000-60340）
- 敷抹器，棉边（P/N 00301-01-00015）
- 烧杯，450 mL
- 洁净的干燥气体
- 去离子水
- 洗涤剂（Alconox™，Micro 或其他）
- Dremel™ 旋转工具或等效工具（推荐）
- 铝箔
- 镊子（P/N 76360-0400）
- 清洁室级手套（P/N 23827-0008 和 23827-0009）
- 丙三醇，试剂级
- 无绒布
- 防护眼镜
- 自来水
- 软毛牙刷
- 超声清洁器



频率

根据需要清洁这些不锈钢部件：

- 离子盒
- 离子源模块
- 离子源透镜



警告 材料和眼睛危险。当进行清洁步骤时佩戴不渗透的实验室手套和保护眼镜。

❖ 若要清洁不锈钢部件

1. 清洁所有表面的污染：

- a. 使用在丙三醇中 600 目氧化铝的浆液和清洁刷或棉边敷抹器。污染表现为深色或变色区域，但是也经常不可见。最严重的污染通常在孔径附近，例如离子盒上的电子入口小孔。
- b. 即使看不到污染也要彻底清洁每个部件。
- c. 使用以某个角度切割木头端的敷抹器清洁内部角落。
- d. 使用具有最低速抛光棒的 Dremel 工具。这样会提高清洁效率，同时减少清洁时间。



警告 为了防止人员伤害，确保 Dremel 工具远离可能的危险，例如静水或可燃溶剂。

2. 使用干净水润洗部件。使用干净的敷抹器或牙刷去除氧化铝浆液。不要让浆液在金属上干燥；干燥的氧化铝很难除掉。
3. 在热洗涤剂溶液中超声部件：
 - a. 使用镊子将部件放入含热洗涤剂溶液的烧杯中。
 - b. 将烧杯放在超声浴中五分钟。
 - c. 使用自来水润洗部件去除洗涤剂。
4. 在去离子水中超声部件：
 - a. 使用镊子将部件放入含去离子水的烧杯中。
 - b. 将烧杯放在超声浴中五分钟。
 - c. 如果超声后水浑浊，倒水，添加新鲜水后将烧杯再次放入超声浴中五分钟。重复这个步骤直到水变清澈。
5. 在丙酮中超声部件：
 - a. 使用镊子将部件放入含丙酮的烧杯中。
 - b. 使用镊子将部件放入含新鲜丙酮的烧杯中。
 - c. 将烧杯放在超声浴中五分钟。
6. 立刻吹干部件。使用洁净干燥的气体吹干部件上的丙酮。
7. 使用镊子将部件放入烧杯，盖上铝箔，然后把烧杯放入烤箱。
8. 在 100 °C 的烤箱中使部件干燥 30 分钟。
9. 在组装之前使其冷却。

清洁非不锈钢或组合部件



需要的工具

- 丙酮，试剂级（或其他稳定的极性溶剂）
- 氧化铝磨料，600 目（P/N 32000-60340）
- 敷抹器，棉边（P/N 00301-01-00015）
- 烧杯，450 mL
- 洁净的干燥气体
- 去离子水
- 洗涤剂（Alconox™，Micro 或其他）
- Dremel™ 旋转工具或等效工具（推荐）
- 镊子（P/N 76360-0400）
- 清洁室级手套（P/N 23827-0008 和 23827-0009）
- 丙三醇，试剂级
- 无绒布
- 防护眼镜
- 自来水
- 软毛牙刷



频率

根据需要清洁非不锈钢部件（例如铝、陶瓷或镀金），或清洁部分由不锈钢制成的组合部件。

- 透镜支架和垫圈
- 灯丝垫圈
- 加热环



警告 材料和眼睛危险 当进行清洁步骤时佩戴不渗透的实验室手套和保护眼镜。

❖ 若要清洁非不锈钢或组合部件

1. 除去不锈钢表面的污染。只需清洁与离子束接触的表面。
 - a. 使用在丙三醇中 600 目氧化铝的浆液和清洁刷或棉边敷抹器。

注释 污染表现为深色或变色区域，但是也经常不可见。

- b. 即使看不到污染也要彻底清洁每个部件。
- c. 使用以某个角度切割木头端的敷抹器清洁内部角落。
- d. 使用具有最低速抛光棒的 Dremel 工具。这样会提高清洁效率，同时减少清洁时间。



警告 为了防止人员伤害，确保工具远离可能的危险，例如静水或可燃溶剂。

- e. 使用干净水润洗部件。使用干净的敷抹器或牙刷去除氧化铝浆液。不要让浆液在金属上干燥；干燥的氧化铝很难除掉。
2. 使用热洗涤剂溶液擦洗所有部件：
 - a. 使用牙刷或干净的敷抹器擦洗部件。不要将部件浸透在洗涤剂中或者在其中超声。
 - b. 使用镊子以及自来水彻底润洗部件去除洗涤剂。



注意事项 不要将铝部件留在洗涤剂中，例如加热器环。碱性溶液，比如洗涤剂，会使铝变色。

3. 在去离子水中润洗部件。

使用镊子将部件放入含去离子水的烧杯中。如果水变浑浊则换水。不要将部件浸透或者超声。
4. 使用丙酮润洗部件。使用镊子将部件放入含丙酮的烧杯中。如果变浑浊则换丙酮。不要将部件浸透或者超声。
5. 立刻吹干部件。使用洁净干燥的气体吹干部件上的丙酮。

维护前级泵

检查、添加、净化和更换前级泵油是维护前级泵所必需的所有步骤。

必须经常检查的泵油，呈半透明的浅琥珀色。在正常操作中，油位必须始终介于 MIN（最小）和 MAX（最大）的油位指示标记之间。如果油位低于 MIN 标记，添加油。如果油出现浑浊或变色，净化油以排除污染的溶解溶剂。如果油仍然出现变色，给予更换。计划在每操作 3000 个小时（大约四个月）后更换泵油。有关净化、添加和更换前级泵油的步骤，参阅制造商的文件。



注意事项 如果使用氨水作为化学电离试剂气体，则需每月更换油。氨水为高碱性，可迅速破坏前级泵的密封性。使用镇气控件来净化油可帮助去除油中的溶解氨。

添加校正化合物



需要的工具

- 校正化合物（P/N 50010-02500）
- 注射器（P/N 36502019）



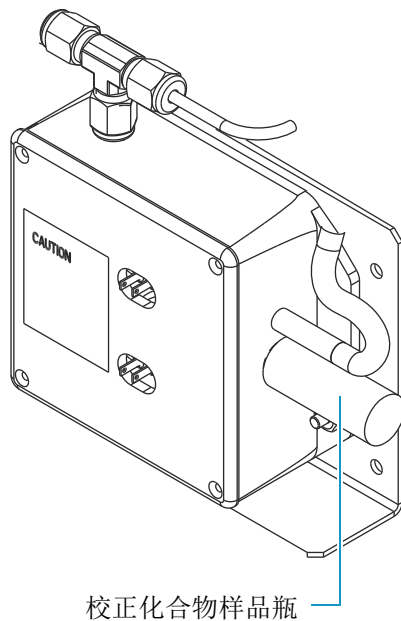
频率

每年或者根据需要

校正化合物是一种液体，其质谱离子用于调谐和校正 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪。质谱仪使用 FC-43 作为校正化合物。当添加校正化合物时，尽管无法视觉上确认，Xcalibur Automatic Tune（自动调谐）生成错误信息：“the intensity of calibration gas ions is too low（校正气体离子的强度过低）。”必须添加校正化合物；但是，除此之外，许多其他因素也会导致校正气体离子强度低。因此每年添加一次校正化合物。

校正化合物在圆柱形小瓶中（参阅图 56）。

图 56. 校正气体流速模块，显示校正化合物样品瓶



❖ 若要添加校正化合物

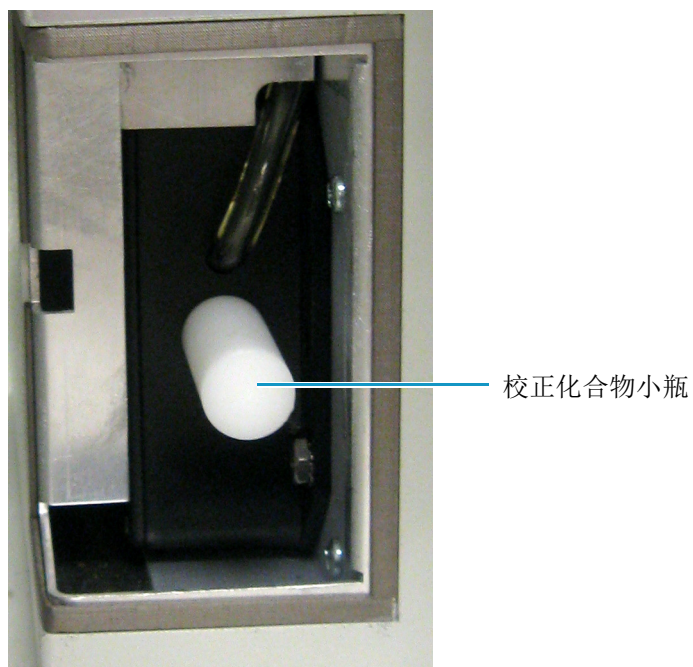
1. 在 EZ Tune 中使仪器待机。
2. 取下校正化合物小瓶室的盖子。参阅图 57。

图 57. 校正化合物小瓶室的位置



3. 逆时针转动校正化合物小瓶，从校正气体流速模块上取下它。参阅图 58。
将小瓶放在工作台上。

图 58. 校正化合物小瓶





注意事项 超过 0.1 mL 的校正化合物会污染校正气体流速模块。确保小瓶中的校正化合物少于 0.1 mL。当装回小瓶时，确保液体不会进入流速模块。

4. 添加校正化合物。
 - a. 使用干净的注射器抽取少于 0.1 mL 校正化合物。
 - b. 将注射器插入校正化合物小瓶。
 - c. 将少于 0.1 mL 校正化合物注入白色小瓶。小瓶吸收校正化合物，所以如果校正化合物累积（校正液盖住了小瓶顶部），则校正化合物太多了。根据本地环境法规立刻倒出多余的校正液。
5. 将注射器拔出校正化合物小瓶。
6. 重新将校正化合物小瓶安装到校正气体流速模块。顺时针旋转小瓶使其拧紧。
7. 重新安装校正化合物小瓶室的盖子。

更换 球阀 密封



需要的工具

- 球阀密封套件 (P/N 119265-0003)



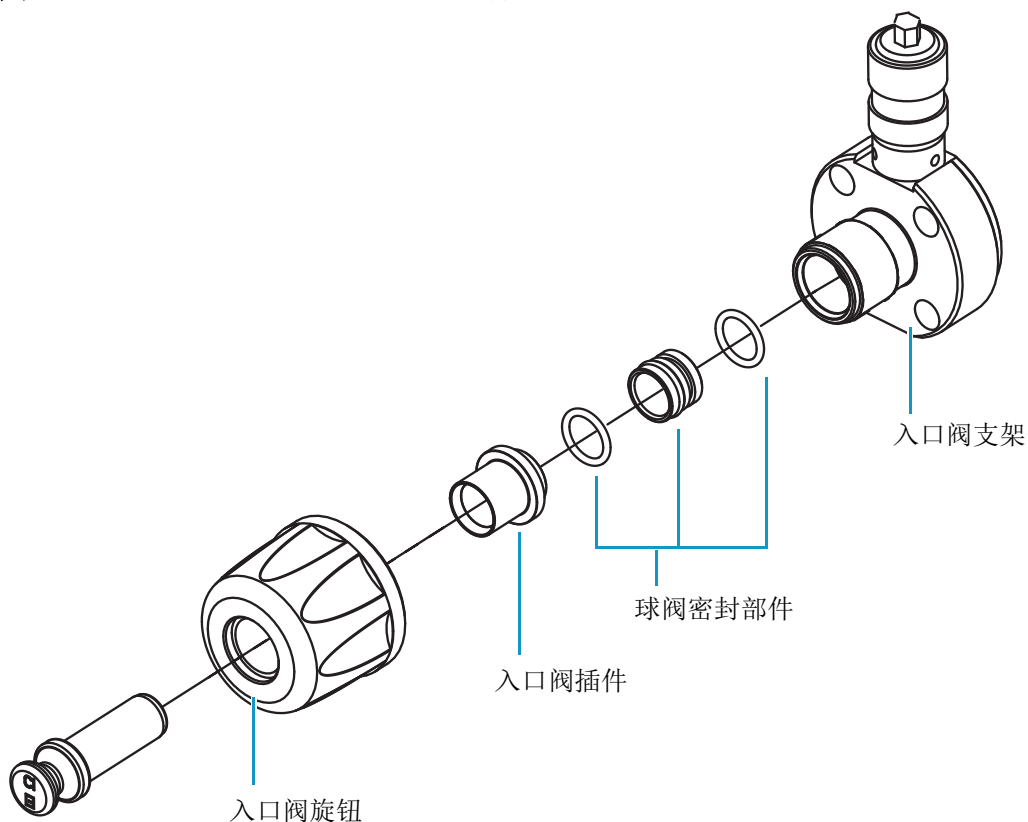
频率

在将直接插入杆或 I/R 工具插入入口阀，并拧紧入口阀旋钮后，如果球阀密封漏气

入口阀中的球阀密封随着时间损耗。在插入直接插入杆或 I/R 工具，并拧紧入口阀旋钮后，球阀密封漏气，则更换它。球阀密封套件 (P/N 119265-0003) 包括在附件套件中。

球阀密封包括 Teflon™ 线圈和两个 O 形环。参阅图 59。

图 59. 球阀密封和入口阀的组件

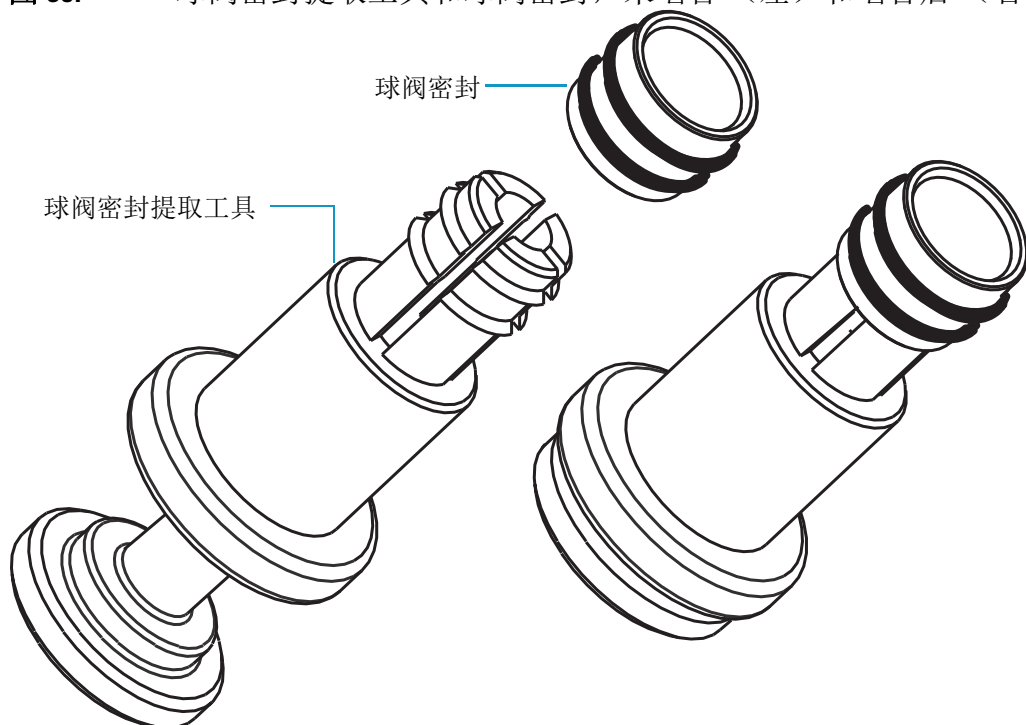


利用球阀密封提取工具（球阀密封套件的零件，P/N 119265-0003）移除球阀密封。参阅图 60。

❖ 若要移除球阀密封

1. 逆时针拧松入口阀旋钮，直到可以取下它。
2. 移除入口阀旋钮、塞子和插件。
3. 将未啮合的球阀密封提取工具插入入口阀支架。
4. 向前推球阀密封提取工具的活塞，啮合球阀密封。
5. 移除密封和工具。
6. 往后拉活塞释放密封。

图 60. 球阀密封提取工具和球阀密封，未啮合（左）和啮合后（右）



❖ 若要安装球阀密封

1. 球阀密封套件（P/N 119265-0003）包括在附件套件中。
2. 通过将两个 O 形环安装到 Teflon 线圈上，组装球阀密封。
3. 用手指将球阀密封插入球阀腔体。
4. 安装入口阀旋钮和插件。
5. 装好入口阀塞子，顺时针拧紧入口阀旋钮。

移除和安装 GC 毛细管色谱柱

如果色谱分离不佳或柱内没有适用于应用的静止相，更换 GC 毛细管柱。



需要的工具

- 清洁间级别手套（P/N 23827-0008 和 23827-0009）
- 开口扳手，5/16 in.
- 开口扳手，7/16 in.
- 开口扳手，6 mm



频率

需要维护或更换色谱柱时

移除 GC 毛细管色谱柱

❖ 若要移除 GC 毛细管色谱柱

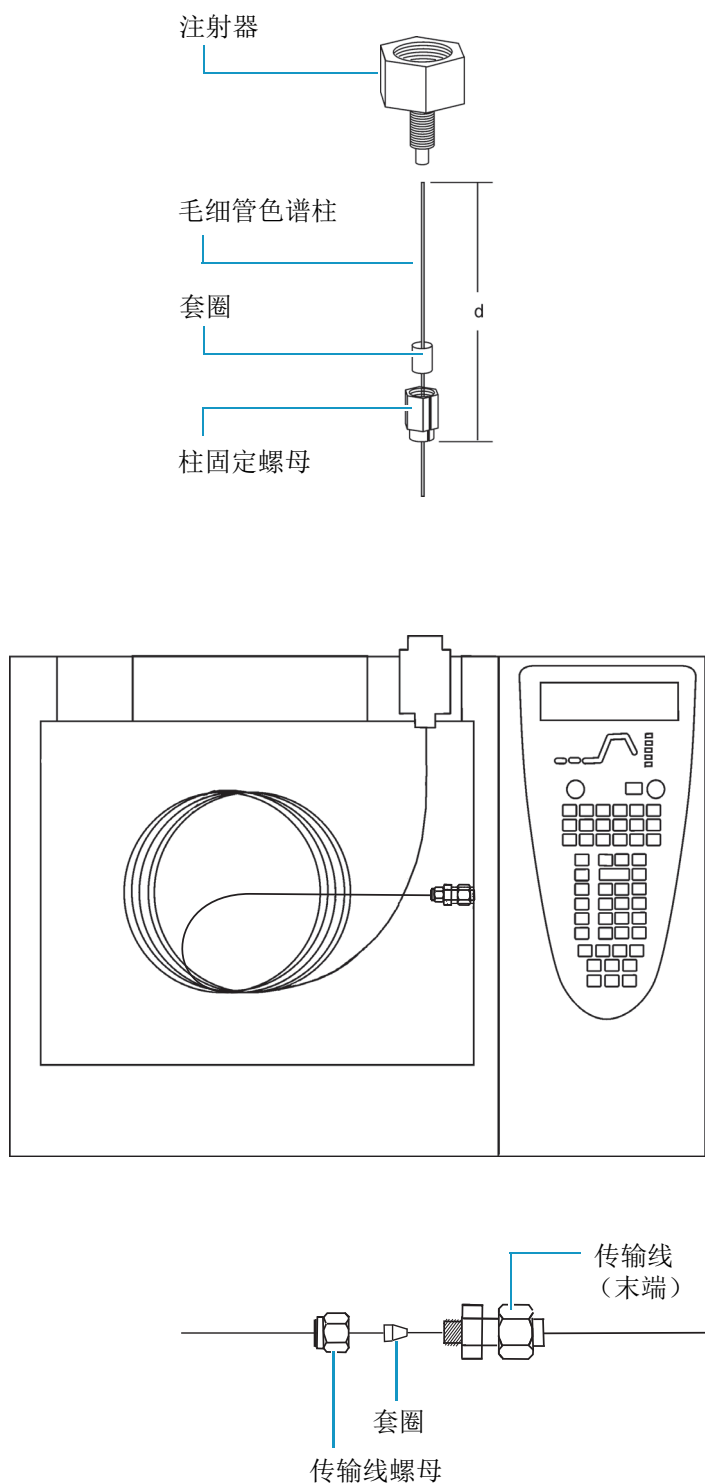
1. 关闭质谱仪和气相色谱仪：
 - a. 关机并进行质谱仪泄真空。参阅第 51 页的“完全关闭系统”。
 - b. 在继续之前使柱温箱、进样口和传输线温度降至 30 °C 进行冷却。



警告 烫伤危险 柱温箱、进样口和传输线都很烫。在接触之前使它们冷却到室温。

- c. 一旦 GC 柱温箱、进样口和传输线都冷却完毕，关闭气相色谱仪。
2. 从传输线取下色谱柱。参阅图 61。
 - a. 松开传输线螺母。
 - b. 从传输线取下色谱柱。

图 61. GC 进样口和传输线两通接头



3. 从进样口取下色谱柱。有关说明参阅 *TRACE GC Ultra Operating Manual* (*TRACE GC Ultra 操作手册*) 的 Columns (色谱柱) 章节。

安装 GC 毛细管色谱柱



需要的工具

- 毛细管色谱柱
- 清洁室级手套 (P/N 23827-0008 和 23827-0009)
- 进样口套圈, 用于 0.25 mm 色谱柱 (P/N 290 134 88)
- 泄漏检测器, 手持电子设备 (GL Sciences, Inc., model LD-228 或等效工具)
- 不掉毛纸巾
- 放大镜
- 甲醇或其他合适溶剂
- 毛细管柱切管器, 切割毛细管柱
- 传输线套圈, 0.4 mm 内径 (P/N A0101-18100)
- 开口扳手, 5/16 in.
- 两端开口扳手, 7/16 in.
- 开口扳手, 6 mm



频率

在需要时

有关其他 GC 色谱柱安装信息, 参阅 *TRACE GC Ultra Operating Manual* 和 *TRACE GC Ultra Maintenance and Troubleshooting Manual* (*TRACE GC Ultra 维护和故障排除手册*)。

❖ 若要安装 GC 毛细管色谱柱



警告 烫伤危险。进样口、柱温箱和传输线可能很烫。在接触之前使它们冷却到室温。

注释 当处理色谱柱和进样口套圈时, 戴上清洁不掉毛和无粉的手套。

1. 将色谱柱连接到进样口。有关说明参阅 *TRACE GC Ultra Operating Manual* 的 Columns 章节。有关进样口色谱柱深入长度, 参阅 *TRACE GC Ultra Quick Reference* (*TRACE GC Ultra 快速参考指南*) 卡。
2. 设置气相色谱仪:
 - a. 打开气相色谱仪。
 - b. 设置柱温箱和进样口温度为 30 °C。
 - c. 设置进样口流速为 1.0 mL/min。

- d. 关闭真空补偿（在 Right or Left Carrier（左或右载气）菜单下）。
 - e. 将色谱柱出口浸入装有甲醇的小瓶。气泡表示有流动气体通过色谱柱。
 - f. 允许色谱柱清洗至少 10 分钟。
3. 执行手动色谱柱检漏。有关说明参阅 *TRACE GC Ultra Maintenance and Troubleshooting Manual* 的 Ensuring Tightness（确保密封）章节。
 4. 执行色谱柱评估。有关说明参阅 *TRACE GC Ultra Operating Manual* 的 Columns 章节。有关各种柱直径、柱长度和载气的预计 K 因子，参阅 *K-Factor Quick Reference*（K 因子快速参考指南）卡。

注释 K 因子是柱阻抗的衡量。K 因子过低可能表示系统漏气，而 K 因子过高表示系统阻塞。

5. 执行自动色谱柱检漏：
 - a. 运行自动色谱柱检漏。有关说明参阅 *TRACE GC Ultra Operating Manual* 的 Columns 章节。
 - b. 如果报告指出泄漏，寻找泄漏点并使用泄漏检测器修复 GC 所有接头的漏点。
 - c. 重复柱评估和检漏步骤，直到没有泄漏为止。



注意事项 不要升高柱温箱温度，直到确认系统无泄漏。在超过 100 °C 时，氧气暴露会损坏色谱柱。

6. 根据制造商说明老化毛细管柱。必须在将新柱插入质谱仪之前进行柱老化。



注意事项 在老化时不要将柱插入传输线。在老化时从柱释放的材料（柱流失）会污染离子源，因此必须清洁离子源。



注意事项 不要超过色谱柱制造商规定的最高操作温度。

7. 将色谱柱连接到传输线：
 - a. 关机并进行质谱仪泄真空。参阅第 51 页的“完全关闭系统”。
 - b. 在继续之前使 GC 柱温箱温度降至 30 °C 进行冷却。



警告 烫伤危险。 GC 柱温箱和传输线可能很烫。在接触之前使它们冷却到室温。冷却之前不要接触进样口。

- c. 戴上清洁的不掉毛的无粉手套，从色谱柱出口端释放毛细管色谱柱约一圈（如第 108 页的图 61 所示）。
- d. 利用在甲醇中浸泡的无尘纸擦拭约 450 mm（18 in.）的色谱柱。

注释 在传输线螺母帮助测量螺母和色谱柱末端之间的正确距离之前，将隔垫滑动安装到色谱柱上。确保色谱柱超过传输线末端大约 1 到 2 mm。

- e. 穿过传输线螺母和套圈插入色谱柱。使用浸泡了甲醇的无尘纸再次清洁色谱柱。
- f. 利用色谱柱切管器切割色谱柱末端。利用放大镜检查确保平整的切割面。如有必要则重复操作。
- g. 将色谱柱插入传输线：
 - i. 打开离子源室盖，这样可以更好的观察色谱柱。
 - ii. 使用 I/R 工具移除离子盒。参阅第 73 页的“移除离子盒”。
 - iii. 将色谱柱插入传输线，用手拧紧传输线。
 - iv. 推入毛细管柱，直到看到它穿过入口阀。
 - v. 往回拉色谱柱，直到看不到它。
 - vi. 拧紧传输线螺母和传输线两通接头。
 - vii. 使用 I/R 工具更换离子盒。参阅第 80 页的“安装离子盒”。
- 8. 修整传输线套圈。Graphite/Vespel™ 套圈，类似传输线套圈，需要修整以确保密封。
 - a. 升高柱温箱温度到最高温度以操作色谱柱（通常 300 °C）。
 - b. 等待 10 分钟。
 - c. 在继续之前使柱温箱温度降至 30 °C 进行冷却。



警告 烫伤危险。 柱温箱可能很烫。在接触之前使它冷却到室温。冷却之前不要接触进样口。

- d. 重新拧紧传输线螺母和传输线两通接头。

9. 设置气相色谱仪：
 - a. 确保色谱柱没有尖锐的弯头，并且它没有接触柱温箱内的任何金属物体或壁。
 - b. 升高柱温箱温度到初始温度（通常 40 °C）。
 - c. 打开真空补偿（在 Right or Left Carrier 菜单下）。

诊断和故障排除

TSQ Quantum XLS 系列系统诊断可以测试 TSQ Quantum XLS 质谱仪的众多组件。如果仪器电子系统出现问题，通常可通过诊断找出问题所在。更换有故障的 PCB 或组件通常可以纠正问题。在更换 PCB 或组件后，Thermo Fisher Scientific 现场维修工程师将再次运行诊断测试，确认仪器的正常运行。

目录

- 诊断
- 故障排除
- 更换保险丝
- 更换 PCB 和电源供应器

诊断

TSQ Quantum XLS 系列系统诊断测试仪器内的主要电路，并指出电路是否通过测试。如果仪器电子系统确实存在问题，则系统诊断通常能指出位置。

由于系统诊断只能诊断出电子系统本身存在的问题（例如，无法诊断出由于错误校准或脏的部件或不正确的调谐，导致的灵敏度下降），运行诊断的人必须熟悉系统操作和基本硬件理论，以及诊断详细信息。

重要信息 一般上，只有 Thermo Fisher Scientific 现场服务工程师可运行诊断测试，因为某些测试会覆盖系统参数。

致电 Thermo Fisher Scientific 现场服务工程师要求运行诊断之前，考虑下列事项：

- 系统是否在运行样品时出现故障？
- 问题是否在对仪器、数据系统或外围设备执行维护后发生？
- 在问题发生前不久，是否更改了系统、电缆或外围设备的配置？

如果以上第一个项目的答案是“是”，则可能是硬件故障，运行诊断是适当的。

如果以上最后两个项目的答案是“是”，则可能是机械上的问题，而不是电子系统问题。致电 Thermo Fisher Scientific 现场服务工程师之前，再次检查准直、配置和电缆连接是否正确。仔细记录问题的性质和所采取的纠正步骤。如果无法成功纠正问题，可以通过电邮将这些信息发送给现场服务工程师。现场服务部门即可针对用户问题进行初步评估，然后再指派工程师前往现场。

故障排除

下列主题讨论可能的 TSQ Quantum XLS 系列系统问题和解决方案。

通信问题

通信问题可能是数据系统和质谱仪、气相色谱仪或自动进样器之间的连接问题。这个部分不会涉及与其他设备的通信问题。

可能产生通信问题的情况如下：

- 质谱仪和数据系统之间的数据传输
- 质谱仪、气相色谱仪和自动进样器电流状态读回
- 仪器控制，方法下载和上载
- 启动、停止、暂停和初始化功能
- 错误信息

质谱仪通信如何工作？

TSQ Quantum XLS 系列系统中的数字信息流是双向的；数据系统将分析方法下载到仪器，激活启动、停止、关闭、开始和初始化的功能。TSQ Quantum XLS 系列系统报告它们的准备就绪状态，当前任务、各种电压、加热区以及压力读数。它们还在采集时传输稳定的质谱数据流。

为什么质谱仪会有通信问题？

某些通信问题是来自机械故障 — 例如，电缆可能没插好，或者某个设备被关闭。在其他情况下，仪器方法可能不适用于 TSQ Quantum XLS 系列系统操作。其他不太常见的通信问题来自有缺陷的电子硬件部件。

如何检测通信问题？

用户可以从数据系统发布的错误信息检测通信问题，或者注意数据系统执行某些预期任务的故障。

问题： 数据系统无法初始化与质谱仪的通信。

可能的原因 / 解决方案

- 该软件没有进行正确的配置。从 Instrument Configuration（仪器配置）窗口选择和配置质谱仪。
- 以太网电缆没插好。确认以太网电缆连接了质谱仪的以太网端口。参阅第 25 页的图 14。
- 计算机的以太网卡没有配置或者故障。检查配置或更换以太网卡。
- 质谱仪上的电子维修开关处于 Service Mode（维修模式）位置。将电子维修开关拨至 Operating Mode（操作模式）位置。
- 所用以太网电缆不适用于质谱仪。适用提供的 10 Base-T 类型 5 交叉电缆（P/N 76396-0052，在 TSQ Quantum XLS 附件套件内）。

注释 通过插入连接交叉电缆的标准类型 5 电缆，可延长以太网电缆的长度。

问题： 计算机偶尔丢失与质谱仪的通信。

可能的原因 / 解决方案

- 以太网电缆松动或损坏。检查电缆，如有必要则更换它。

问题： 无法将方法下载到质谱仪。

可能的原因 / 解决方案

- 该软件没有进行正确的配置。在 Instrument Configuration 中确认正确的设置。

问题： 采集没有按照预期开始。

可能的原因 / 解决方案

- 启动模式没有进行正确的配置。确认仪器得到了正确的配置。参阅 Xcalibur 帮助获得更多信息。
- 质谱仪 Instrument Setup（仪器设置）文件的设置不正确。在 Instrument Setup 文件中检查开始时间。
- 由于溶剂峰导致前级压力过高。减少进样体积或延长灯丝 / 倍增器延迟时间，直到溶剂峰之后。
- GC 的远程启动电缆没有连接。连接远程启动电缆。
- GC 没有启动。确认 GC 仪器方法和配置。确认自动进样器和 GC 之间的连接。
- 自动进样器没有启动。确认自动进样器的仪器方法和配置。确认样品的存在。
- 加热区有问题。参阅第 120 页的“加热区问题”。

问题： 采集意外中止。

可能的原因 / 解决方案

- TSQ Quantum XLS 系列仪器方法中的结束运行时间不正确。检查 GC 和 MS 的仪器方法。
- 数据系统没有硬盘空间。检查硬盘空间；备份和转移文件。

问题： 无法初始化气相色谱仪。

可能的原因 / 解决方案

- GC 未打开。打开 GC。
- 在 Xcalibur 数据系统内没有正确配置 GC。检查 Instrument Configuration。
- COM1 和 GC 之间的电缆未连接。确认连接。
- COM1 没有得到正确配置。确认 COM 端口配置。

问题： 无法将方法下载到气相色谱仪。

可能的原因 / 解决方案

- 仪器方法和配置之间有矛盾。确认方法和仪器配置之间的一致性。
- COM1 没有得到正确配置。确认 COM 端口配置。

问题： 无法初始化自动进样器。

可能的原因 / 解决方案

- 自动进样器未打开。打开自动进样器。
- 在 Xcalibur 数据系统内没有正确配置自动进样器。检查 Instrument Configuration。
- 自动进样器和 GC 之间的电缆未连接。确认连接。
- 自动进样器仪器配置没有设置到正确的端口。确认连接和配置。

问题： 无法将方法下载到自动进样器。

可能的原因 / 解决方案

- 仪器方法和配置之间有矛盾。确认仪器方法和仪器配置之间的一致性。

污染问题

化学噪声总是出现在任何质谱仪中。结果，质谱仪的高灵敏度可以导致新用户将背景与污染问题混淆。另外，Xcalibur Tune（Xcalibur 调谐）和 Real-Time Display（实时显示）中显示的质谱是自动归一化，使得背景水平比较高。

某些化学噪声的确有，例如一系列进样之后的隔垫流失、样品瓶样品流失（当从一个样品瓶多次进样时会发生），以及在柱头或者进样口内聚集，规律间隔处色谱图中出现的硅氧烷峰。

其他可能的污染源包括载气、泵油或仪器清洁溶剂的碳氢化合物污染。

总是戴上清洁、不掉毛且无粉的手套处理离子源和质量分析器组件，确保载气过滤器、载气线路以及气体调节器免除污染和泄漏。

问题： 由于柱流失引起的过量化学背景（ m/z 429, 355, 281）。

可能的原因 / 解决方案

- 毛细管柱没有经过正确老化。老化毛细管柱。
- 由于暴露在氧气下导致毛细管柱损坏。找到载气或泄漏空气中的氧气源。重新老化或更换毛细管柱。

问题： 过量的进样口隔垫流失（一般 m/z 207, 429, 355, 281）。

可能的原因 / 解决方案

- 隔垫损耗或者损坏。更换隔垫。
- 隔垫的小部分在进样口衬管内。更换进样口衬管；老化毛细管柱。

问题： 邻苯二甲酸盐背景（ m/z 149, 167, 279）。

可能的原因 / 解决方案

- 由于样品处理或者溶剂污染导致邻苯二甲酸盐污染。
- 包装材料可能是邻苯二甲酸盐源头。
- 隔离邻苯二甲酸盐源，例如样品瓶盖或者塑料溶剂容器，并进行补救。

问题： 过量的碳氢化合物污染（典型离子是 m/z 43, 57, 71, 85, 99）。

可能的原因 / 解决方案

- 载气管路被污染。
- 隔离碳氢化合物污染源并进行补救。
- 更换载气管路。
- 改变载气过滤器。

问题： 氧化铯导致的化学背景（ m/z 185/187, 201/203, 217/219, 233/235, 250/252）。

可能的原因 / 解决方案

- 这些铯的氧化钨来自铯灯丝的氧化，因为灯丝打开时空气要被引入离子源。
- 检查漏气并进行补救。有关详细信息，参阅第 121 页的“高真空问题”。

问题： 由于下列溶剂观察到的质谱：

溶剂质谱

丙酮（ m/z 43, 58, 59）

己烷（ m/z 41, 43, 56, 57, 58, 85, 86）

甲醇（ m/z 31）

二氯甲烷（ m/z 84, 83）

甲苯（ m/z 91, 92）

三氯乙烷（ m/z 151, 153）

二甲苯（ m/z 105, 106）

可能的原因 / 解决方案

- 来自清洁步骤或实验室背景污染的残留溶剂。当完成清洁步骤时，让清洁部件彻底干燥。在 GC 柱温箱内使部件保温去除残留溶剂。
- 观察到的化合物已经通过进样引入。最终源头是样品溶剂或自动进样器润洗溶剂。优化 GC 方法将色谱图中的溶剂峰与目标峰分离。

灯丝和透镜控制问题

灯丝寿命取决于在氧气和溶剂蒸汽下的暴露时间。灯丝组件保护灯丝，增加数月的寿命。

Xcalibur 诊断测试灯丝的连续性和电流规则。在每次采集之前测试灯丝连续性，确保一个开口的灯丝情况会停止自动进样器序列，生成错误信息。

诊断测试 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪的透镜。一根平线代表电压读回 VS 预期电压梯度，这表示透镜或其他控制故障。污染导致透镜性能随着时间恶化；时间量取决于样品类型和电离模式。



注意事项 小心处理透镜，不要使用粗糙的清洁技术。损坏的透镜导致短路，反过来导致透镜驱动器的损坏。

问题： 诊断表明灯丝开口。

可能的原因 / 解决方案

- 灯丝开口。放空系统并取下灯丝。通常阻值是 1.0 欧。如果开口则更换它。

问题： 不稳定的发射电流。

可能的原因 / 解决方案

- 灯丝接近其使用寿命。更换灯丝。

问题： 灯丝寿命短。

可能的原因 / 解决方案

- 漏气导致灯丝寿命短。检查漏气；找到并修复问题。有关详细信息，参阅第 121 页的“高真空问题”。
- 溶剂峰时灯丝打开。提高采集延迟时间，直到溶剂峰通过。
- 使用高发射电流。使用更低的发射电流，延长灯丝寿命。

问题： 诊断表明平坦的透镜响应。

可能的原因 / 解决方案

- 透镜的电源有问题。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。
- 透镜驱动器有故障。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。

加热区问题

离子源和传输线都是加热区。质谱仪控制离子源加热器，TRACE GC Ultra 的 Aux1 加热区控制传输线加热器。

加热区问题通常都是下载仪器方法到仪器的结果，而仪器的设置点与电流设置不同，这导致加热区加热或冷却时有延迟。

部件故障相对较少，但是也有。这通常与加热器机架的开路或故障问题传感器有关。

手册不讨论气相色谱仪中的加热区。

问题： 过量的色谱峰拖尾。

可能的原因 / 解决方案

- 离子源，传输线，或者两者温度不够高。提高传输线温度，这样它至少和最高 GC 柱温箱温度一样。然后提高离子源温度。
- 待测样品在 GC 进样口吸收。清洁并使进样衬管去活。也可以尝试其他材料的衬管。
- GC 柱温箱不需要经过梯度到达足够高温。提高柱温箱温度。
- 必须更换 GC 色谱柱，或者柱内没有适合应用的静止相。更换 GC 色谱柱。参阅第 107 页的“[移除和安装 GC 毛细管色谱柱](#)”。
- GC 色谱柱在传输线尖端末尾的延伸长度不够。如果色谱柱末端位于尖端内，GC 的过量的流体接触尖端内壁。遵循第 109 页的“[安装 GC 毛细管色谱柱](#)”中的步骤。

问题： 离子源加热器不会很热。

可能的原因 / 解决方案

- 离子源温度传感器和加热器模块之间没有接触。对于加热器模块的准确温度读数，将由螺纹的支架完全旋进离子源，确保温度传感器和加热器模块之间的良好接触。参阅第 92 页的“[组装 L1、L2、L3 透镜组件](#)”。
- EI/CI 离子源 PCB 上的一个或多个加热器机架发生故障。更换 EI/CI 离子源 PCB。参阅第 95 页的“[彻底分解和组装离子源](#)”。
- 离子源温度传感器（RTD）发生故障。更换 EI/CI 离子源 PCB。参阅第 95 页的“[彻底分解和组装离子源](#)”。

问题： 离子源加热器过热。

可能的原因 / 解决方案

- 离子源温度传感器（RTD）发生故障。如有必要更换 EI/CI 离子源 PCB。参阅第 95 页的“[彻底分解和组装离子源](#)”。

问题： 传输线不会很热。

可能的原因 / 解决方案

- GC 的 Aux1 区域没有为质谱传输线进行配置。配置 GC 的 Aux1 区域，并在 GC Method Editor（方法编辑器）内设置传输线温度。
- 传输线加热器元件发生故障。更换传输线。
- 传输线温度传感器（RTD）发生故障。更换传输线。

问题： 传输线过热。

可能的原因 / 解决方案

- 传输线温度传感器发生故障。更换传输线。

高真空问题

高真空问题在下面两种情况下变得显著：

- 间歇的真空情况（真空腔体内的真空压力间歇性波动）引起色谱信号下降；或者如果压力超过 Xcalibur 数据系统内设置的最大允许压力（参阅第 55 页的表 3），然后 TSQ Quantum XLS 系列系统关闭。
- 如果真空足够稳定，而且没有超过最大允许压力，避免 Xcalibur 系统的自动关闭，色谱图中可以生成不重复的错误色谱峰。

典型的前级压力读回值是 30 到 40 mTorr（在 EI 模式下），以及典型的腔体压力（离子规读回）是 2×10^{-5} Torr，氩碰撞气体打开，以及 2×10^{-6} Torr，氩碰撞气体关闭。

注释 在自动调谐校正步骤和维护调谐步骤中，质谱仪执行检漏。质谱仪返回通过或未通过的报告。

最可靠的找到真空泄漏处的方法是在真空腔体周围喷气体，在全扫描 EI 模式下寻找特征离子。氩气产生 m/z 40。或者，使用包含 HFC 的压缩电子粉尘喷雾。例如，Falcon™ Dust-Off™ 和 MicroCare™ Micro-Blast™ 包括四氟化碳，在 m/z 69 和 83 时生成离子。

问题： 前级泵没有打开。

可能的原因 / 解决方案

- 前级泵关闭。检查前级泵开关。
- 真空维修开关处于 Off（关）位置。将真空维修开关拨至操作位置。
- 质谱仪的前级泵电源缆线没有连接。连接电源缆线。
- 前级泵故障。更换前级泵。

问题： 前级泵电源打开，但是不抽气。

可能的原因 / 解决方案

- 前级泵的油位不够。检查油位；如有必要添加油。
- 前级线路泄漏。检查夹子和接头。如果找到漏洞，更换前级管。
- 真空腔体泄漏。
- 前级泵故障。更换前级泵。

问题： 涡轮分子泵在操作时关闭。

可能的原因 / 解决方案

- 前级压力过高。检查前级线路中的泄漏。

问题： 意外的通风发生。

可能的原因 / 解决方案

- 出现重大的泄漏。检查有无泄漏。
- 通过入口阀放空系统。关闭并塞好入口阀。
- GC 色谱柱在传输线处断开。更换 GC 色谱柱。参阅第 107 页的“[移除和安装 GC 毛细管色谱柱](#)”。
- 前级线路被切断。更换前级线的软管。

问题： 真空故障。 **可能的解决方案**

- 出现重大的泄漏。检查有无泄漏。
- 真空腔体的分析器区域内的压力，如离子规所测，必须低于第 55 页的表 3 列出的压力。

线性问题

当强度相对于已知化合物浓度的图不是线性，则线性问题出现。糟糕的仪器操作情况导致线性问题。另外，由于色谱活性，某些化合物不会给出预期的线性响应。

一个维护良好的仪器对很宽浓度范围的大多数化合物提供良好的线性响应。正如大多数仪器，TSQ Quantum XLS 系列质谱仪具有一个饱和点。

执行日常进样和色谱柱维护，可最大程度减少线性问题。通常，影响线性的硬件故障，与促进线性的硬件相比，显示不同的问题。

问题： 校正图线性不好。

可能的原因 / 解决方案

- 高端标样对于质谱浓度太高。使用分流进样技术降低样品量，或者减小发射电流降低质谱灵敏度。
- 离子盒和透镜变脏。根据第 85 页的“[清洁离子源组件](#)”说明清洁离子盒和透镜。
- 电子倍增器设置不正确。根据第 64 页的“[运行自动调谐和校正](#)”的说明运行调谐和校正步骤。
- 进样口衬管或者毛细管柱变脏。更换进样口衬管；裁剪毛细管柱。
- 毛细管柱的静止相太薄，无法使用高浓度样品。采用具有更厚的静止相的更高容量毛细管柱，或者使用分流进样技术。
- 毛细管柱失效。更换毛细管柱。参阅第 107 页的“[移除和安装 GC 毛细管色谱柱](#)”。

电源问题

Xcalibur 诊断检测大多数电源问题。电源问题多数涉及断开的保险丝、出故障的电子部件，或者电缆断开的小问题。联系 Thermo Fisher Scientific 现场服务工程师更换保险丝。

问题： 质谱仪电源没开。

可能的原因 / 解决方案

- 电源线没有连接。确认电源线插入。
- 电源插座中没有电压。确认电源插座可以用。
- Power Module（电源模块）故障。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。

问题： 质谱仪电源打开，但是导致断路器跳闸。

可能的原因 / 解决方案

- Power Module 故障。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。
- 前级泵导致断路器跳闸。检查前级泵；如有需要更换它。

灵敏度问题

如果观察到仪器灵敏度的下降，确定灵敏度下降是否突然，或者是逐渐下降。灵敏度的突然下降可能是组件故障的突发，或者分析方法的某个不起眼的修改。简单的错误例如塞住的自动进样器注射器，或者样品瓶中过低的样品水平，都会表现出仪器故障。

灵敏度的逐渐下降通常是离子盒或透镜污染，通过清洁离子盒或透镜可以纠正这个问题。

电子倍增器影响灵敏度，而且寿命有限。最终必须更换电子倍增器。

不合适的 GC 维护是另一个灵敏度逐渐下降的原因。建立 GC 的日常维护项目非常重要。更多建立维护步骤的信息，参阅 *TRACE GC Maintenance Manual* (*Trace GC 维护手册*)。

问题： 色谱图具有
低的总离子电流信号。

可能的原因 / 解决方案

- GC 温度梯度不会继续升到足够高的问题，以洗脱高沸点化合物。多次进样导致这些化合物在色谱柱内累积，使灵敏度下降。提高 GC 柱温箱梯度内的高温或者延长高温时间。
- 仪器调谐失效，或者调谐文件不正确。根据第64页的“运行自动调谐和校正”的说明选择正确的方法调谐文件，或者运行自动调谐。
- 离子盒被污染。清洁离子盒。
- 离子盒位置不正确。使离子盒正确就位。
- 离子源上方和下方的磁体安装不正确。正确安装磁体，这样南极在顶部。如果某个磁体方向颠倒，电子不会聚焦到离子盒内。
- 灰尘聚集到电子倍增器中或者转换打拿极上。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。
- 发射电流设置过低。检查发射电流的设置。
- 电表PCB和阳极馈穿之间的接地连接故障。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。
- 灯丝或者透镜控制有问题。有关详细信息，参阅第119页的“灯丝和透镜控制问题”。
- EI/CI离子源PCB故障，使发射电流漏地。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。
- 反应气漏到分析器并抑制EI信号。检查质谱图中CI反应离子的出现。如有必要更换 CI Gas Flow Module（化学电离气流模块）。

问题： 糟糕的化合物灵敏度。

可能的原因 / 解决方案

- 注射器、进样口衬管，以及进样口中的柱深度都不匹配。对于正确的组合，参阅 *TRACE GC Ultra Operators Manual*（TRACE GC Ultra 操作人员手册）。
- 由于堵塞的注射器针，样品传递不充分。清洁或更换注射器。
- 进样口衬管被污染。清洁或更换进样口衬管。
- 石墨或隔垫颗粒污染进样口。清洁进样口。
- 进样口或隔垫泄漏。更换隔垫并执行 GC 检漏。
- 毛细管柱接近其使用寿命。更换毛细管柱。
- 方法开发有问题。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。

问题： 灵敏度不稳定或随着重复进样下降。

可能的原因 / 解决方案

- GC 温度梯度不会继续升到足够高的问题，以洗脱高沸点化合物。多次进样导致这些化合物在色谱柱内累积，使灵敏度下降。提高 GC 柱温箱梯度内的高温或者延长高温时间。
- 离子盒或透镜被污染。根据第 85 页的“[清洁离子源组件](#)”的说明清洁离子盒和透镜。
- 离子源温度过低并导致离子源快速被污染。根据第 85 页的“[清洁离子源组件](#)”的说明清洁离子盒和透镜，并提高离子源温度。
- 灯丝发射电流控制有问题。有关详细信息，参阅第 119 页的“[灯丝和透镜控制问题](#)”。
- 电子倍增器有故障。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。
- 进样口衬管或者毛细管柱被污染。更换进样口衬管并裁剪毛细管柱。

问题： CI 模式下不佳的灵敏度。

可能的原因 / 解决方案

- 安装了 EI 离子盒。根据第 73 页的“[改变电离模式](#)”的说明安装 CI 离子盒。
- CI 离子盒上的小孔被堵塞。利用锐口牙刮匙或旧注射器针清洁小孔。
- 灯丝没有对齐。取下离子盒并检查离子束是否在电子入口小孔的中心。确保灯丝正确插入接头。小心弯曲灯丝线，以便更好地使其与离子盒对齐。
- 离子盒的插入不正确。当运行仪器时，可以使用 I/R 工具推动离子盒。监测压力确保 I/R 工具周围良好的密封。否则可能损坏灯丝。当推动离子盒时，校正气体信号的增加通常表明灯丝没有正确对齐。

稳定性问题

稳定性可以提供稳定的仪器精度以及准确的结果重复性。质谱仪、气相色谱仪和自动进样器良好的操作条件，有助于仪器稳定性的提高。

样品制备，加标错误，进样错误，以及日常维护的缺乏，可以导致稳定性问题。

当硬件故障影响仪器稳定性时，首先调查简单解决方案，例如清洁离子盒和透镜，或检查漏气。通常，影响稳定性的硬件故障，与提高稳定性的硬件相比，显示不同的问题。

问题： 信号响应不稳定或突然下降。

可能的原因 / 解决方案

- 灯丝或者透镜控制有问题。有关详细信息，参阅第119页的“灯丝和透镜控制问题”。
- 有漏气。运行维护调谐或 Xcalibur 自动调谐和校正步骤，后者执行检漏并返回通过或未通过信息。如有必要，检查漏气。有关详细信息，参阅第121页的“高真空问题”。
- 有高真空问题。有关详细信息，参阅第121页的“高真空问题”。
- 有污染问题。有关详细信息，参阅第117页的“污染问题”。
- 灰尘聚集到电子倍增器中或者转换打拿极上。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。

调谐问题

当 Xcalibur 自动调谐和校正失效时，可以猜测是调谐问题。自动调谐和校正步骤执行多个功能，问题或错误信息表示不同缘由。诊断通常不涵盖调谐问题。

问题： 收到 “Cannot find Calibration Gas (无法找到校正气体)” 错误信息。

可能的原因 / 解决方案

- 离子源或透镜存在机械问题。确认安装了EI离子盒。确认离子盒的正确定位和清洁。确认透镜的清洁和正确操作。
- 调谐文件设置超出可用范围。恢复默认调谐设置和校正设置。运行 Auto Tune and Calibration (自动调谐和校正)。参阅第61页的“调谐和校正”。
- 校正气体瓶是空的。添加 100 μ L (最多) 校正化合物到校正气体瓶中。参阅第102页的“添加校正化合物”。

问题： 电子倍增器
增益校正失败。

可能的原因 / 解决方案

- 自放空后，电子倍增器没有为抽气提供足够的时间。要用更多时间抽气。
- GC 色谱柱流速过高。降低流速到 1 mL/min。
- 倍增器接近其使用寿命。在倍增器噪声过高，以至于无法准确设置增益之前，一般可以使用 2-3 年。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。
- 倍增器电源故障。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。
- 灯丝是过高背景噪声的源头。有关详细信息，参阅第119页的“灯丝和透镜控制问题”。
- 腔体内的化学背景升高。纠正泄漏或载气中的水污染源。有关详细信息，参阅第 121 页的“高真空问题”。
- 电子能量和设定点之间的差异超过 5 V。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持寻求帮助。

问题： 不佳的高质量数响应。

可能的原因 / 解决方案

- 不佳的高 m/z 离子强度，可能是由于离子源的温度太高。降低离子源温度，减少热分解和裂解的分析物。
- 不佳的高 m/z 离子强度，可能是由于不适当的离子源透镜设置。运行调谐校正步骤。参阅第 61 页的“调谐和校正”。
- 离子源内的氦气压力太高或者太低。对于大部分应用可设置流速 1.0 mL/min。
- 有真空泄漏问题。找到并修复任何泄漏。确保检查 GC 柱温箱内的传输线接头。有关详细信息，参阅第 121 页的“高真空问题”。
- 过量的低 m/z 离子，例如碳氢化合物或柱流失。修复这些低 m/z 离子的来源。
- 离子盒或透镜被污染。清洁离子盒或透镜。参阅第 85 页的“清洁离子源组件”。
- m/z 131 不是基峰，因为倍增器增益太低。倍增器增益校正可能将一个噪声大的倍增器电压设置过低。使用超过 2-3 年的电子倍增器通常噪声很大。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。
- 不佳的高 m/z 强度和低 m/z 离子的分辨率，因为转换打拿极故障。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。
- 进样 rf 没有校正。根据第 61 页的“调谐和校正”的说明运行调谐和校正步骤。
- 灯丝或者透镜控制有问题。有关详细信息，参阅第 119 页的“灯丝和透镜控制问题”。
- 反应气漏到分析器并抑制 EI 信号。检查质谱图中 CI 反应离子的压力。如有必要更换 CI Reagent Gas Flow Module（化学电离反应气流速模块）。

问题： 微弱的信号。

可能的原因 / 解决方案

- 离子盒或离子源透镜变脏。根据第 85 页的“[清洁离子源组件](#)”的说明污染部件。
- 倍增器设置过低。根据第 61 页的“[调谐和校正](#)”的说明运行调谐和校正步骤中的倍增器增益校正。运行超过 2-3 年的电子倍增器，通常噪声过大而使倍增器增益校正无法准确设置电压。可能需要更换电子倍增器。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。
- 安装了型号错误的离子盒。EI 和 CI 需要不同的离子盒。它们可能不能交换使用。根据第 73 页的“[改变电离模式](#)”的说明更换离子盒。
- 离子盒缺失或位置不正确。确认离子盒正确就位。
- 灯丝或者透镜控制有问题。有关详细信息，参阅第 119 页的“[灯丝和透镜控制问题](#)”。
- 电子倍增器有故障。联系 Thermo Fisher Scientific 技术支持。

更换保险丝



注意事项 当电流过载时，保险丝熔断变成开路以保护各种不同的电路。在 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪上，失效的保险丝表示失效的电路板或电子模块，而且必须由 Thermo Fisher Scientific 现场服务工程师更换这些部件。

更换 PCB 和电源供应器



注意事项 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪电子组件采用紧密包装以最小化系统的大小。由于卸下和重新安装质谱仪电子组件的复杂性，因此只有 Thermo Fisher Scientific 现场服务工程师可更换电子组件。

使用直接进样杆

利用直接进样杆（直接插入杆和直接暴露杆）可以在没有 GC 色谱柱分离的情况下将化合物直接进样到离子源内。本章包括利用 perfluorotetracosane ($\text{CF}_3(\text{CF}_2)_{22}\text{CF}_3$ ，分子量 1238.18，熔点 190°C) 完成逐步地直接插入杆 (DIP) 实验。可以利用自己的化合物完成类似的实验。

目录

- [创建仪器方法](#)
- [创建序列](#)
- [准备进样杆和入口阀](#)
- [准备质谱仪](#)
- [运行序列](#)
- [在 Qual Browser 中检查原始数据](#)
- [移除进样杆](#)

创建仪器方法

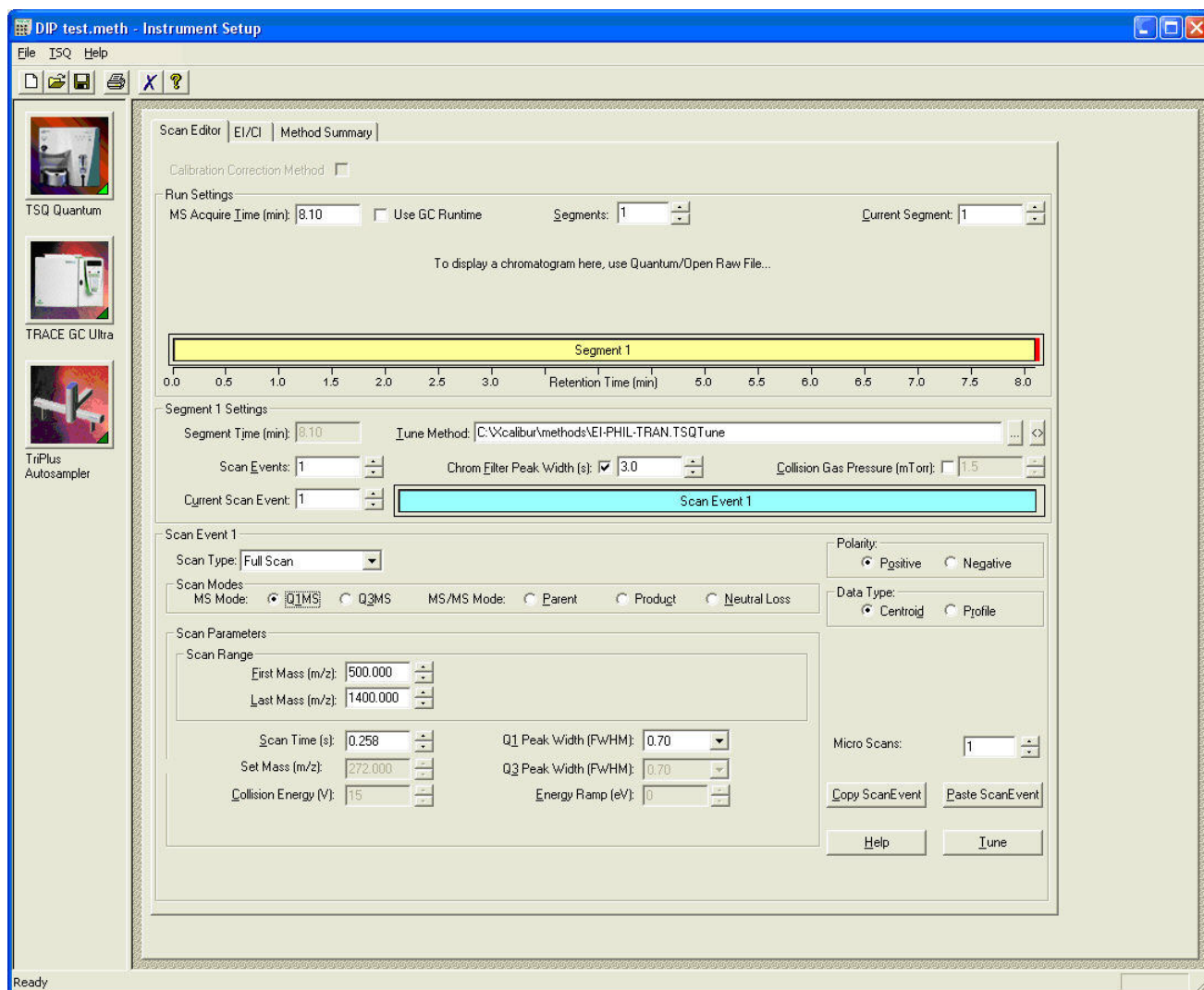
一个仪器方法包括在实验时 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪使用的设置。利用 Instrument Setup（仪器设置）视图创建仪器方法。

❖ 若要创建仪器方法

1. 在 Thermo Xcalibur 导航图上单击 **Instrument Setup** 图标打开 Instrument Setup 视图。
2. 单击工具栏上的 TSQ 图标。
3. 选择 **TSQ > Regular Method**（常规方法）以打开常规方法 Scan Editor（扫描编辑器）页面。
4. 在 Scan Editor 页面上创建一个片段，一个扫描事件仪器方法。在本例中，片段为 8 分钟长（参阅图 62）。

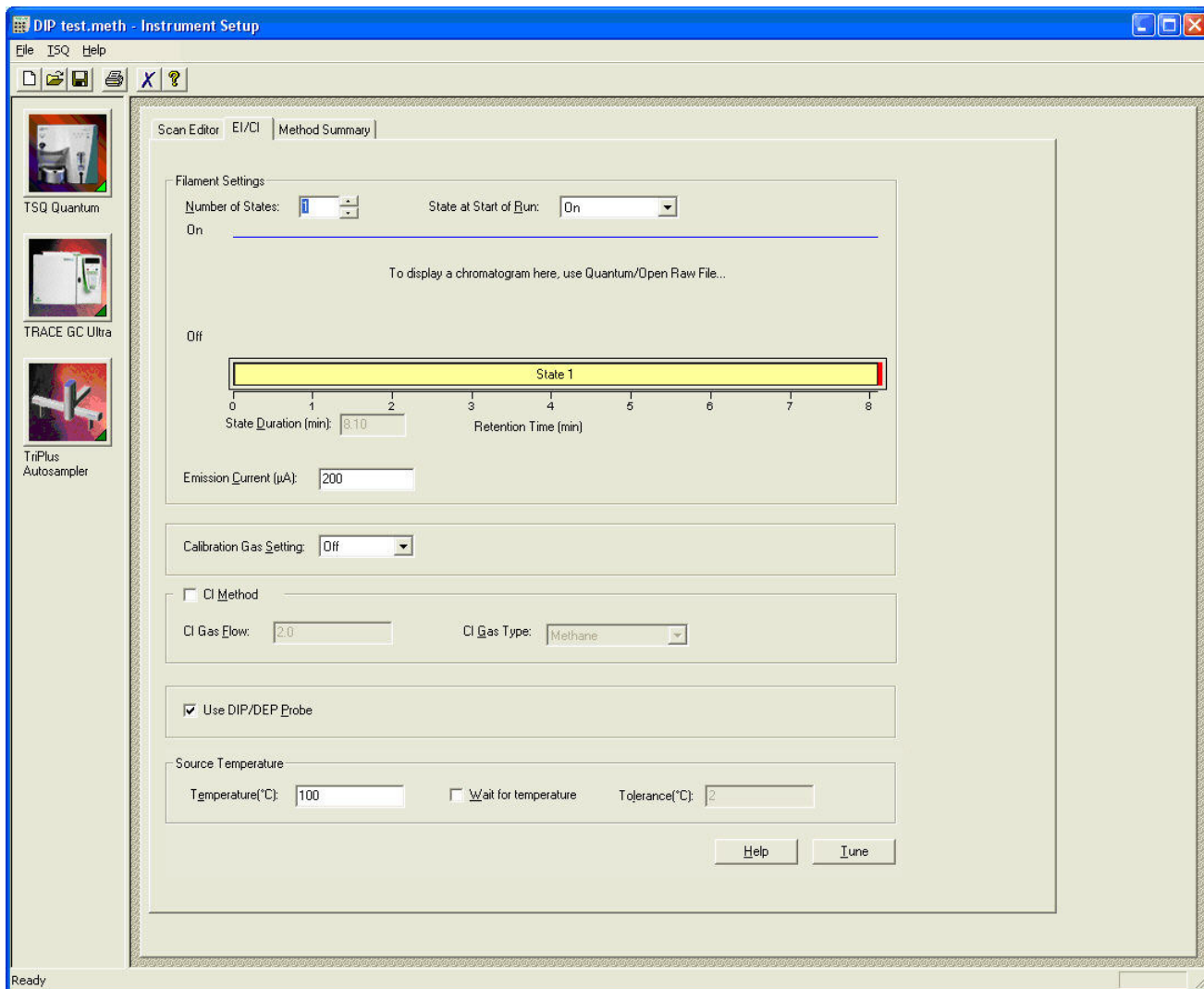
5. 指定质谱仪设置: 对于本例, **Full-Scan** (全扫描) (Scan Type (扫描类型) 列表), **Q1MS** (Scan Modes (扫描模式) | MS Mode (质谱模式) 选项), 和 **Positive** (正) (Polarity (极性) 区域)。

图 62. Instrument Setup 的 Scan Editor 页面



6. 单击 EI/CI (电子电离 / 化学电离) 选项卡显示 EI/CI 页面 (参阅图 63)。

图 63. Instrument Setup 的 EI/CI 页面



7. 输入或选择下列设置：

- Number of States （状态数）： 1
- State at Start of Run （运行开始状态）： On （开）
- Calibration Gas Setting （校正气体设置）： Off （关）
- Use DIP/DEP Probe （使用直接插入杆 / 直接暴露杆）： ☒

本例是一个 EI 实验，具有 200 μ A 发射电流。

8. 保存仪器方法。

- a. 选择 **File**（文件）> **Save As**（另存为）打开 Save As 对话框。
- b. 将仪器方法另存为 **.meth** 文件。在本例中我们命名仪器方法为 **Dip test.meth**。

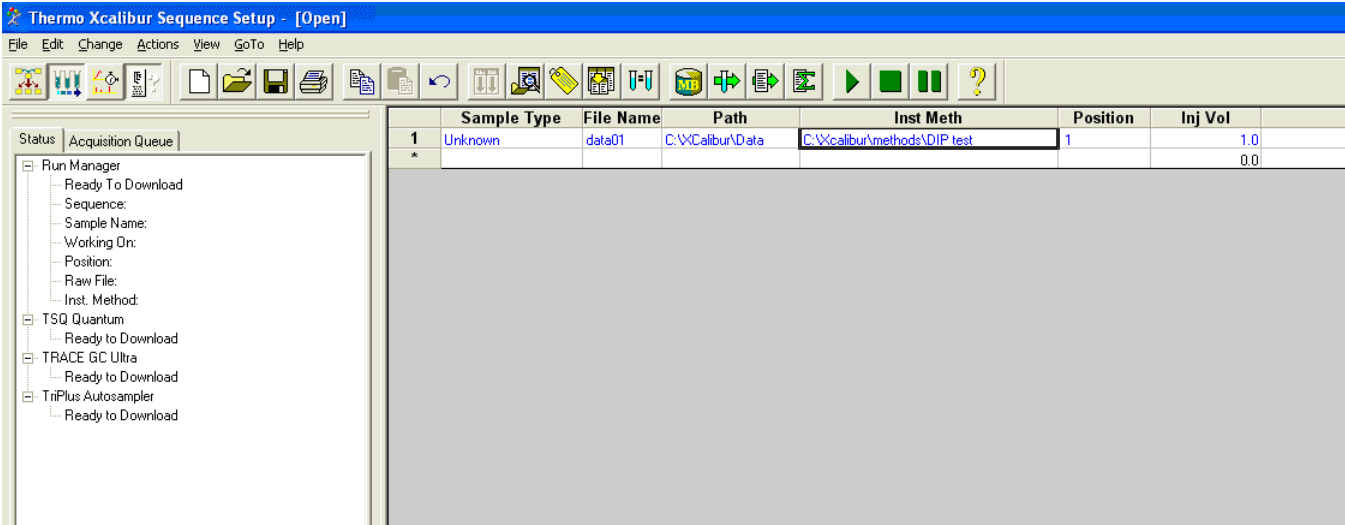
创建序列

一个序列包括样品信息 — 每行一个样品。在本例中序列有一个样品。

注释 如果序列中有多个样品，Xcalibur 数据系统提示用户在每个样品后重新载入进样杆。

- ❖ 若要创建序列
 1. 单击 **Start（开始） > Programs（程序） > Thermo Xcalibur > Xcalibur** 打开 Thermo Xcalibur 导航图。
 2. 在 Thermo Xcalibur 导航图上单击 **Sequence Setup（序列设置）** 图标打开 Sequence Setup 视图（参阅图 64）。
 3. 为仪器方法输入名称和路径。在这个例子中为 **C:\Xcalibur\methods\DIP test**。
 4. 为包含采集数据的原始文件输入一个名称和路径。在本例中为 **C:\Xcalibur\Data\data01**。

图 64. Sequence Setup 视图，显示系列中的一个样品



准备进样杆和入口阀

❖ 若要准备进样杆和入口阀

1. 利用带杆启动电缆（P/N 70111-63627，附件套件中）的触点闭合将直接进样杆控制器连接到质谱仪。
2. 在控制器上创建一个进样杆方法。参阅进样杆手册。本例使用 DIP 设置：
 - 初始温度：50 °C
 - 初始时间：5 s
 - 升温速率：100 °C/min
 - 最终温度：200 °C
 - 梯度时间：200 s
3. 将样品载入进样杆。
4. 安装导向杆：
 - a. 当导向球轨道面向左侧时，将导向杆插入进口处。参阅第 28 页的图 17。
 - b. 尽可能远地推出导向杆。将其顺时针旋转 90° 以把导向杆锁定在入口处。
5. 准备入口阀：
 - a. 确保入口阀杆朝下关闭了入口阀，如第 28 页的图 17 所示。
 - b. 逆时针拧松入口阀旋钮，移除入口阀塞子。

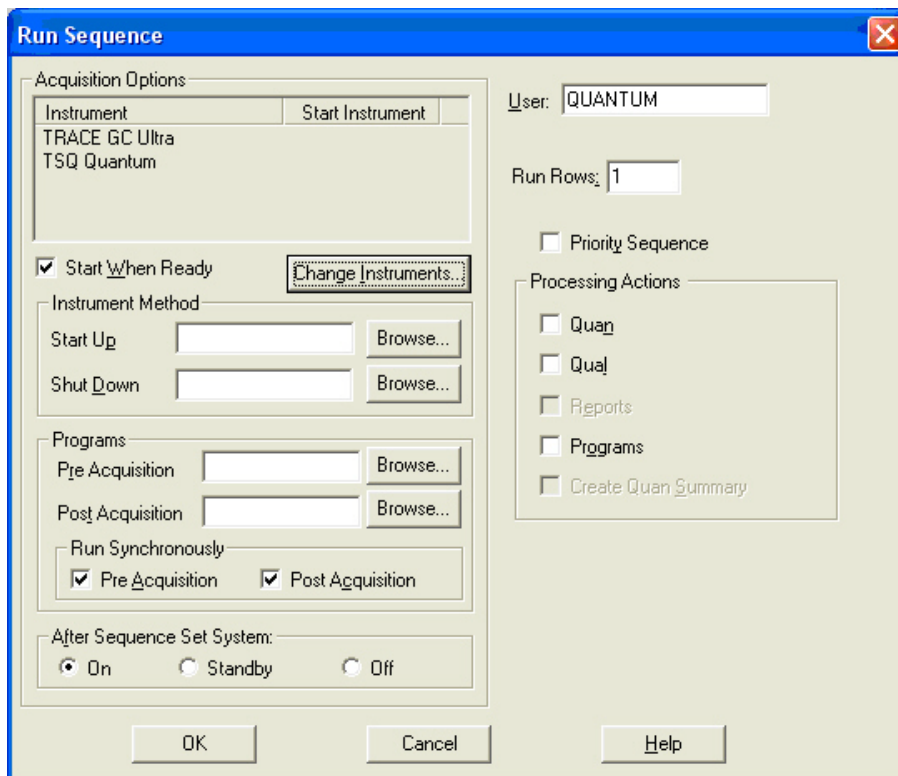
准备质谱仪

❖ 若要准备质谱仪进行实验

1. 如果 EZ Tune（EZ 调谐）窗口没有打开，选择 **Start（开始） > All Programs（所有程序） > Thermo Instruments（Thermo 仪器） > TSQ > TSQ Tune（TSQ 调谐）**。
- 重要信息** 必须打开 TSQ EZ Tune（TSQ EZ 调谐）窗口使质谱仪启动杆插入序列。
2. 确保 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪是唯一使用中的仪器，且没有启动仪器。
 - a. 在 Thermo Xcalibur 导航图上单击 **Sequence Setup** 图标打开 Sequence Setup。

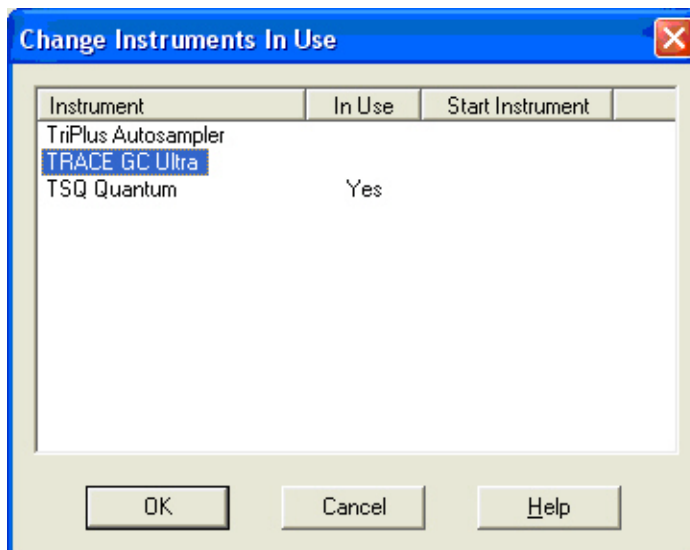
- b. 从 Sequence Setup 窗口中选择 **Actions (操作) > Run Sequence (运行序列)**。Run Sequence 对话框打开 (参阅图 65)。

图 65. Run Sequence 对话框, 显示使用中的仪器



- c. 单击 **Change Instruments (更改仪器)** 打开 Change Instruments In Use (更改使用仪器) 对话框 (参阅图 66)。

图 66. Change Instruments In Use 对话框, 显示 TSQ Quantum 质谱仪正在使用, 且没有启动仪器



- d. 单击 In Use（使用中）列的任何 Yes（是）清除 TSQ Quantum 以外的所有仪器。
- e. 确保 TSQ Quantum 的 In Use 列具有 Yes。如有必要单击这个区域。
- f. 在 Start Instrument（启动仪器）列单击任何 Yes 清除所有启动仪器。
- g. 单击 OK（确定）以保存设置和关闭 Change Instruments In Use 对话框。

运行序列

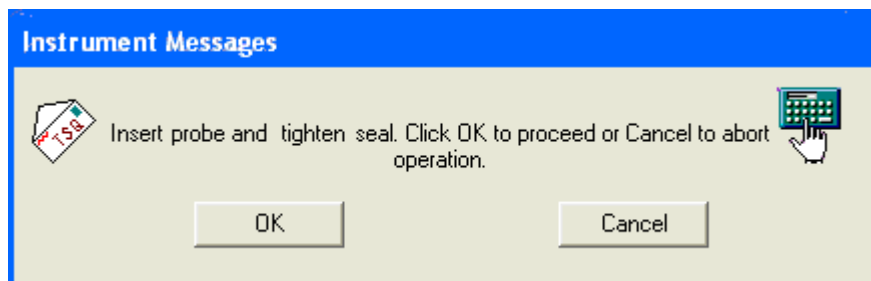
通过运行序列采集数据。Xcalibur 数据系统在原始文件中保存数据。

注释 必须运行 TSQ EZ Tune 或 QuickQuan 应用程序，这样 Xcalibur 程序才能显示仪器方法。

❖ 若要运行序列

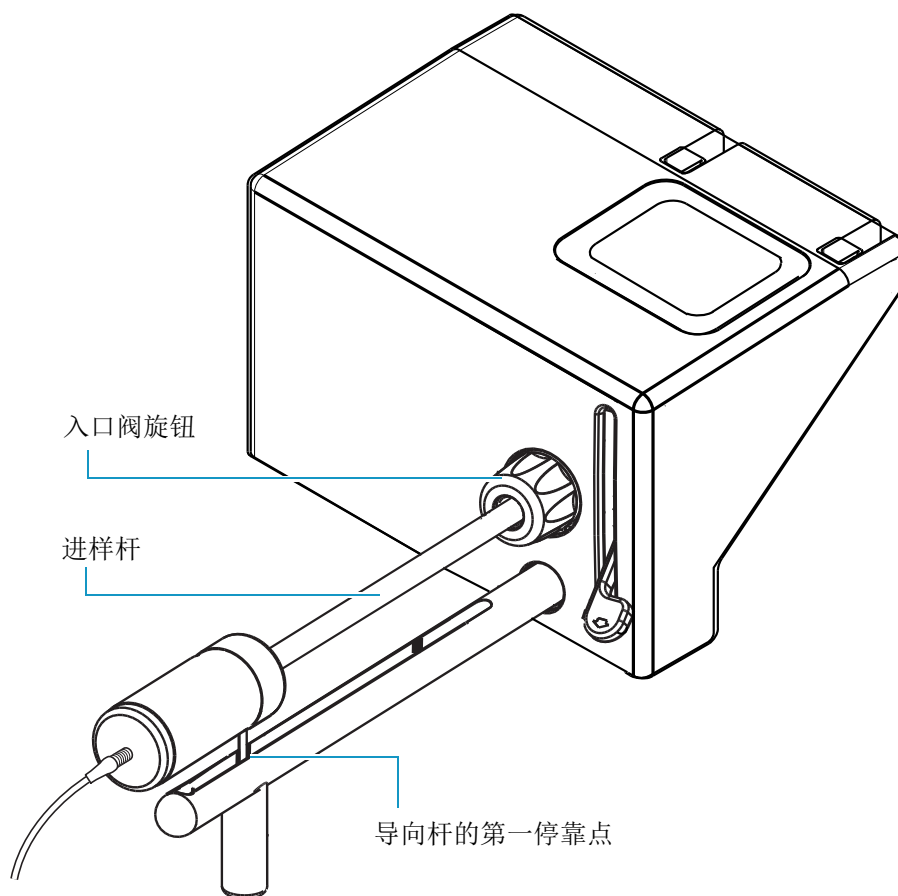
1. 在 Run Sequence 对话框中（参阅第 136 页的图 65），单击 OK 开始采集。Xcalibur 系统显示插入进样杆的信息（图 67）。

图 67. Insert Probe（插入进样杆）信息



2. 将进样杆插入入口阀：
 - a. 将 DIP 杆上的导向球插入导向杆上的导向球孔。
 - b. 使进样杆向前滑入口阀，直到导向球处于导向杆的第一停靠点。参阅图 68。
 - c. 顺时针拧紧入口阀旋钮，确保良好的密封。

图 68. 位于导向杆第一停靠点的进样杆



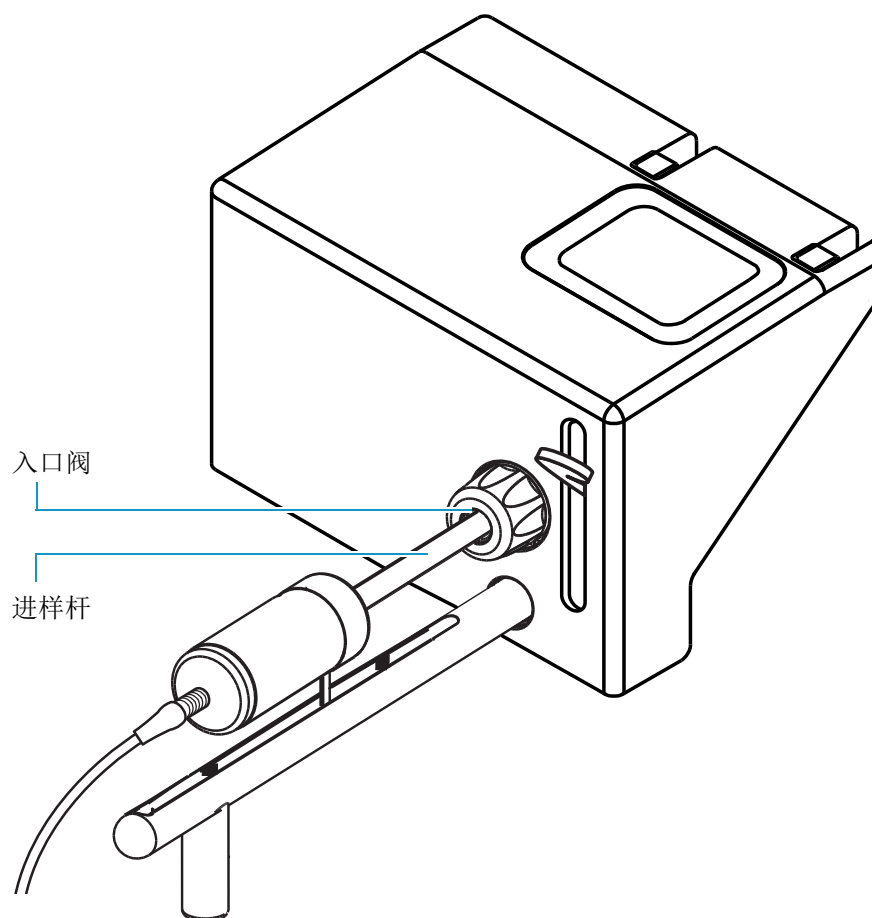
3. 单击 **OK**。前级泵抽空入口阀。
4. 当 Safe to Open the Valve （可以安全打开阀）信息出现时（图 69），单击 **OK**。

图 69. Safe to open the valve 信息



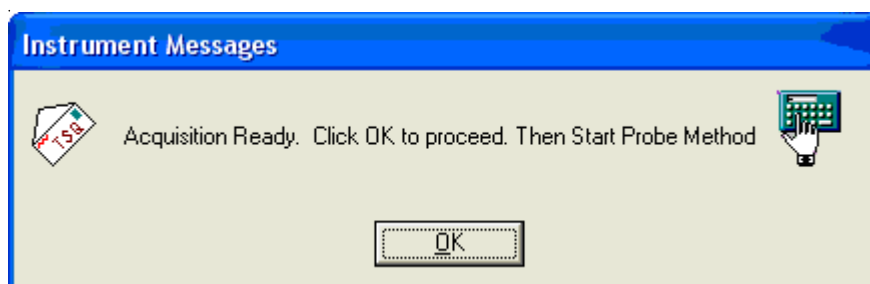
5. 将入口阀杆向上拉打开入口阀。
6. 将进样杆滑入真空腔体，直到工具的前端完全插入离子盒支架。参阅图 70。

图 70. 插入入口阀的进样杆



- 当收到 Acquisition Ready（采集准备就绪）信息时（图 71），单击 OK。质谱仪现在等待触点闭合。

图 71. Acquisition Ready 信息



- 在 Sequence Setup 中选择 View（查看）> Real Time Plot View（实时谱图）显示质谱图和色谱图。
- 从杆控制器启动杆方法，以启动数据采集。参阅第 140 页的图 72 和图 73。

图 72. 0.56 分钟保留时间的 Perfluorotetracosane 质谱图

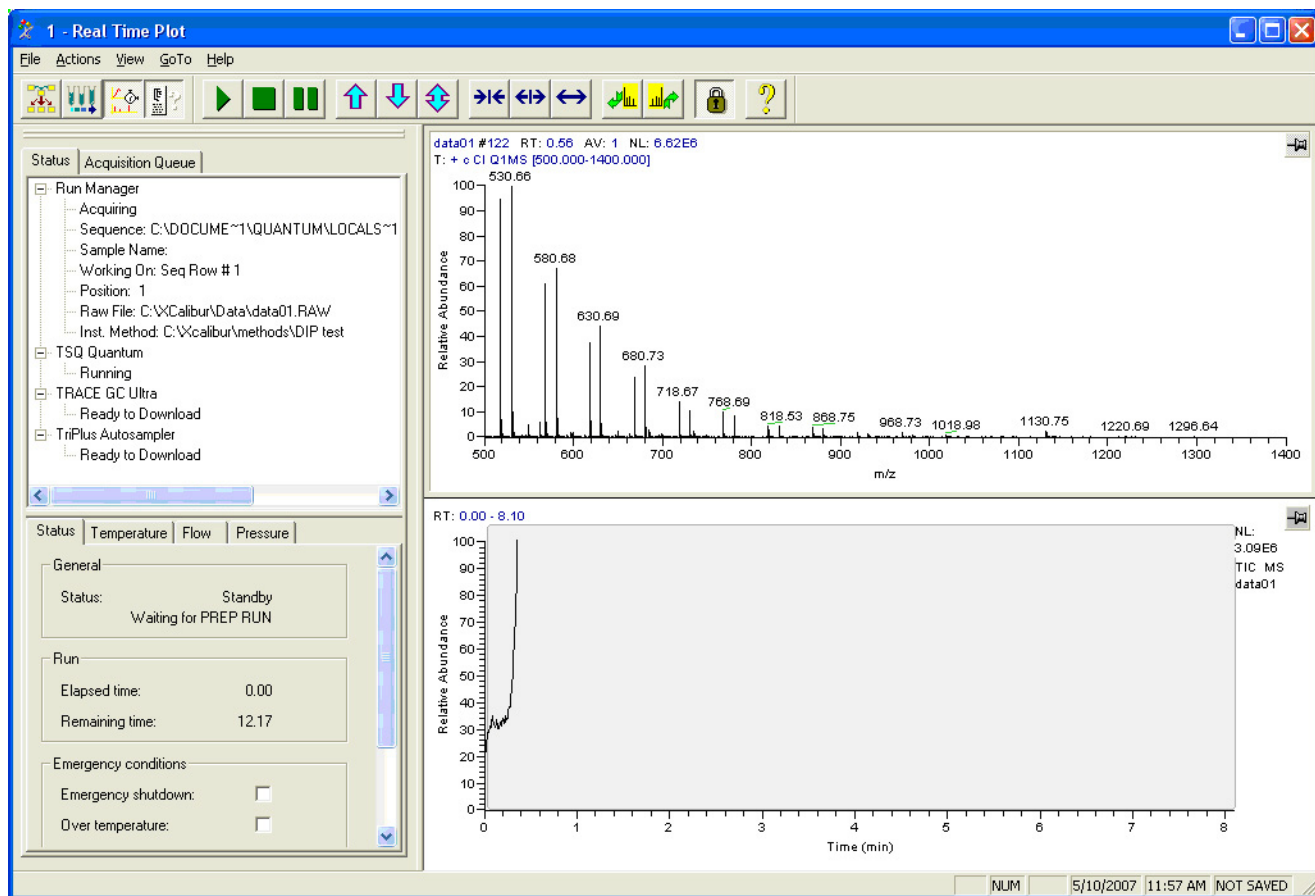
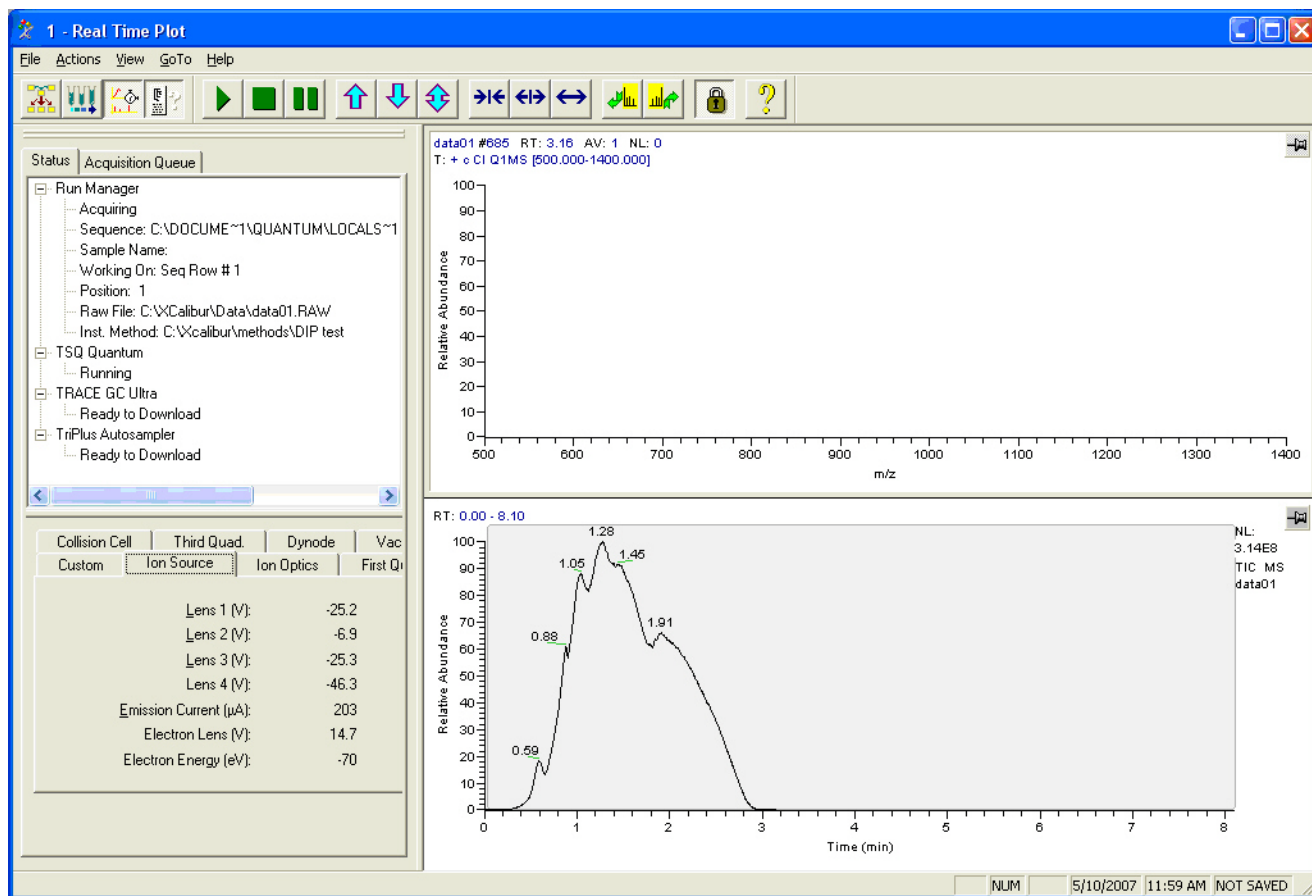


图 73. Perfluorotetracosane 色谱图



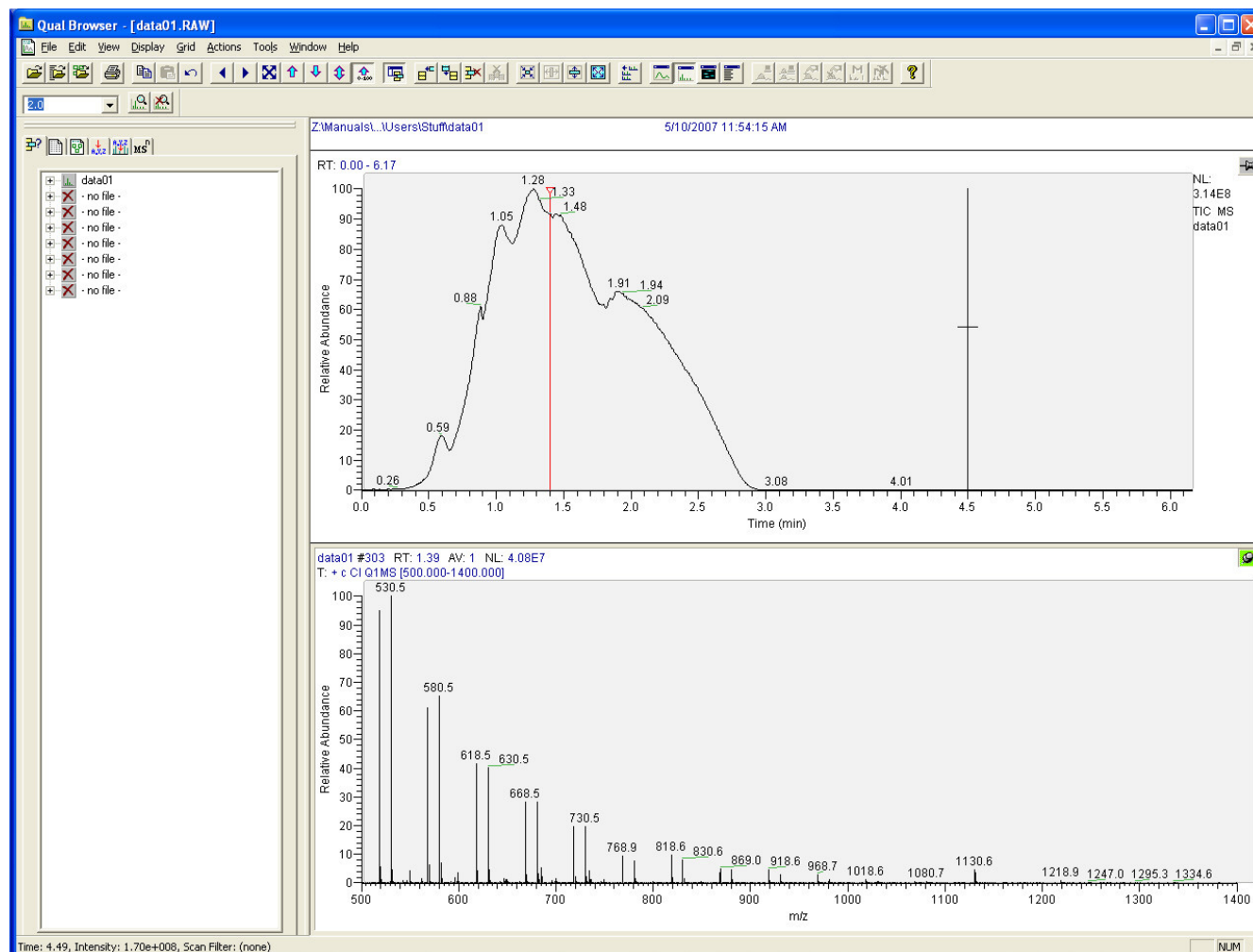
在 Qual Browser 中检查原始数据

可以使用 Qual Browser（定性浏览器）显示色谱图不同时间点的质谱图。

❖ 若要分析原始数据

1. 在 Thermo Xcalibur 导航图上单击 **Qual Browser** 图标打开 Qual Browser 窗口。
2. 在色谱图上单击以显示某个保留时间的质谱图。
参阅图 74。

图 74. 显示在 Qual Browser 中的原始文件



移除进样杆

❖ 若要移除进样杆



注意事项 不要将杆往回拉超过那个导向球到达导向杆第一停靠点的位置点。首先关闭入口阀。否则，系统放空到大气中。

1. 往回拉进样杆直到杆上的导向球到达导向杆的第一停靠点（参阅第 138 页的图 68）。
2. 向下拉入口阀杆关闭入口阀。
3. 逆时针拧松入口阀旋钮。

4. 通过使进样杆沿着导向球轨道滑动，继续彻底回撤杆。
5. 将进样杆保存在盒中。
6. 逆时针旋转导向杆 90° 然后滑出入口处取下导向杆。
7. 装好入口阀塞子，顺时针拧紧入口阀旋钮形成密封。万一入口阀被误操作打开时，入口阀塞子防止空气进入真空腔体。也可以随意拉取下入口阀杆。

可更换配件和消耗品

本附录包括 TSQ Quantum XLS 系列的可更换配件和消耗品的部件号。为了确保对 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪进行维修服务时获得正确效果，仅订购下面列出的部件或其同等产品。联系 Thermo Fisher Scientific Austin 并准备好 TSQ Quantum XLS 序列号。

这些可更换配件和消耗品的套件适用于 TSQ Quantum XLS 系列系统：

目录

- EI/CI 离子源可更换配件
- 各种可更换配件和消耗品
- 各种可更换配件和消耗品
- 化学品套件

EI/CI 离子源可更换配件

图75和图76显示TSQ Quantum XLS系列质谱仪的EI/CI离子源的可更换配件。

图 75. 离子源 (70111-60840)

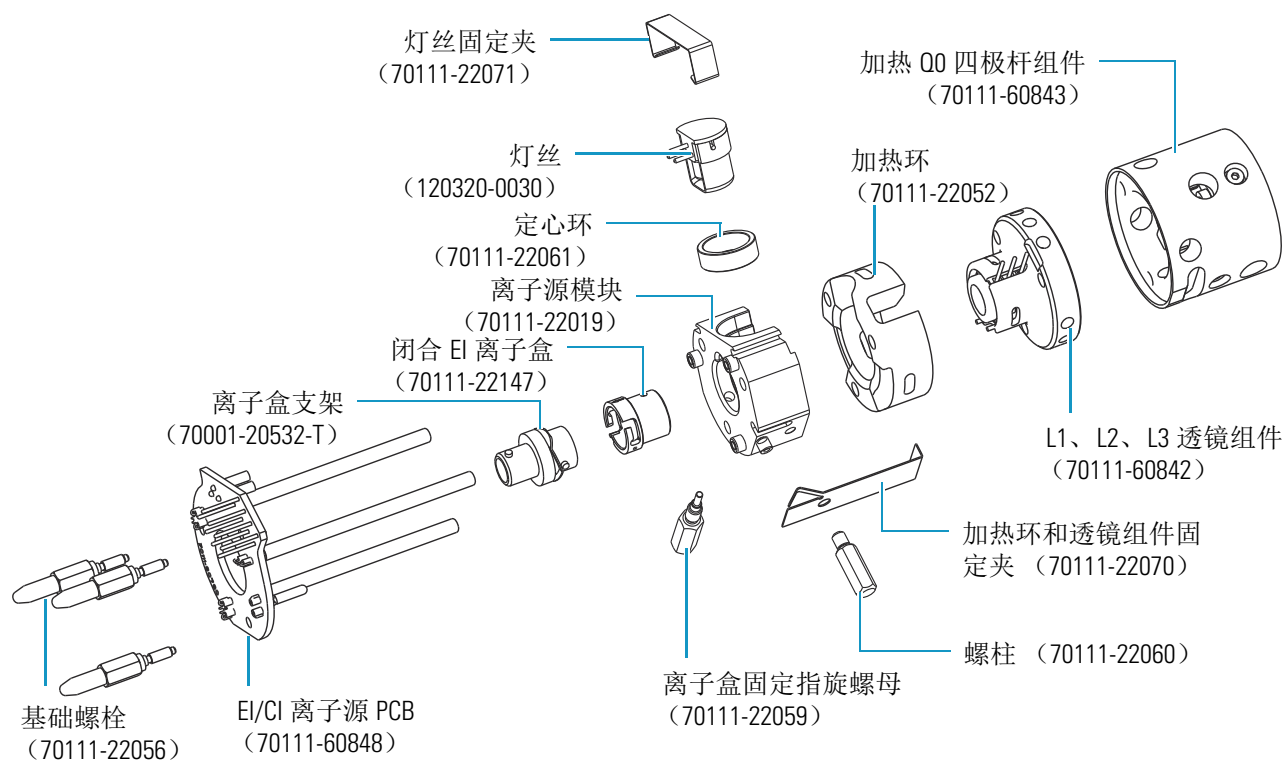
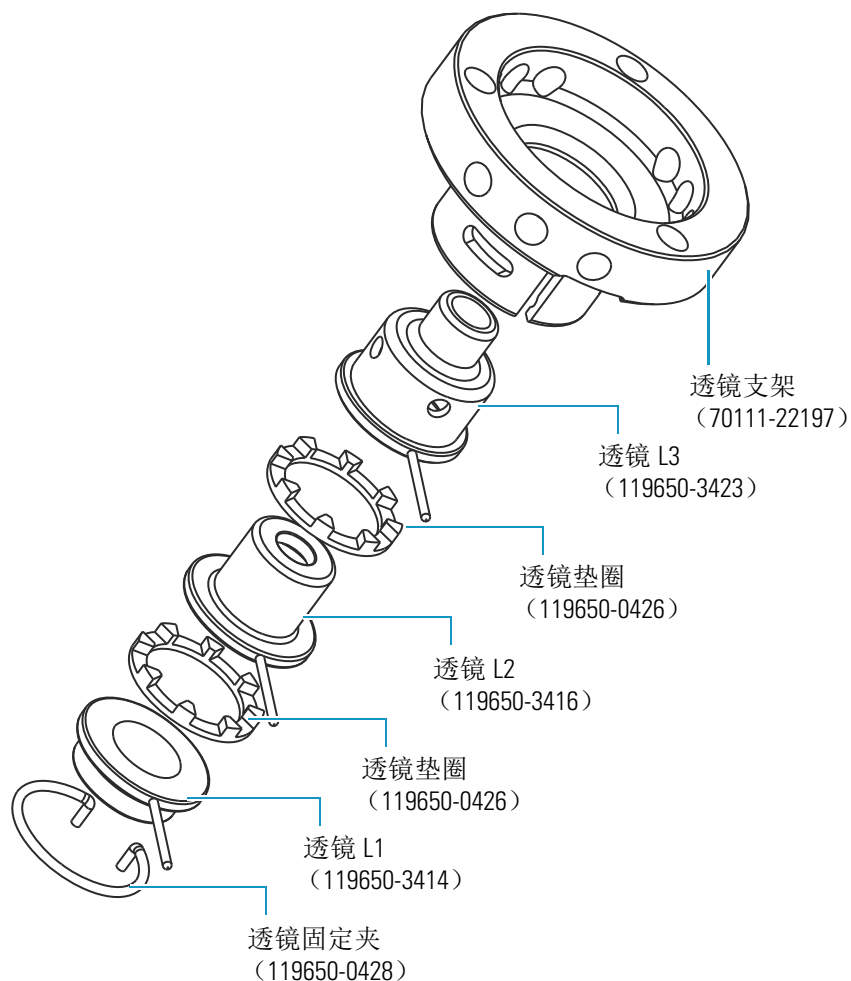


图 76. L1、L2、L3 透镜组件 (70111-60842)



各种可更换配件和消耗品

表 7. 各种可更换配件 (第 1 页, 共 2 页)

描述	功能	部件号
校正化合物样品瓶	盛放熔块和 FC-43 调谐和校正化合物。	120428-0002
校正化合物熔块	盛放 FC-43 调谐和校正化合物。	120432-0001
离子盒, 闭合 EI, P 型	Ni-Cr, 用于农药化合物	70001-22202

表 7. 各种可更换配件 （第 2 页，共 2 页）

描述	功能	部件号
离子盒支架， T 型	特殊合金	70001-20532-T
GC 毛细管色谱柱， 15 m × 0.25 mm ID × 0.25 µm 膜厚 SQC 安装柱	更换毛细管色谱柱	76317-3015

附件套件

表 8. 附件套件 （P/N 70111-62077） （第 1 页，共 2 页）

描述	功能	部件号
接头，套圈， SWG， 1/8 in.， 黄铜， 成套		00101-08-00009
接头，连接， 1/4 to 1/8 in.		00101-01709
接头，连接， 1/4 to 1/8 in.		00101-01712
接头，套圈， SWG， 前部， 3/8 in.， 黄铜		00101-11500
套圈， 0.4mm ID × 1/16 in.		00101-18100
Restek™ 毛细管级碳氢化合物阱	为了从 GC 载气中除去碳氢化合物	00106-99-00001
Restek 大容量氧气阱	为了从 GC 载气中除去氧气	00106-99-00002
棉签	用于在不锈钢配件上涂抹清洁剂	00301-01-00015
管路， 1/8 in.， 铜， 预清洁的	气体管路	00301-22701
球阀密封套件 （更换）	用于更换入口阀内的球阀密封	119265-0003
透镜准直工具	用于准直离子源透镜 1、2 和 3	120271-0001
灯丝组件	用于更换离子源内的坏掉的灯丝	120320-0030
丁腈手套， 中号	用于在真空下处理清洁的配件	23827-0008
丁腈手套， 大号	用于在真空下处理清洁的配件	23827-0009

表 8. 附件套件 (P/N 70111-62077) (第 2 页, 共 2 页)

描述	功能	部件号
注射器, 10 µL, 80 mm	用于添加校正化合物	36502019
T 型三通, 1/8 in.		00101-01-00012
电缆, 启动, 探针	直接进样杆和质谱仪之间的触点闭合电缆	70111-63627
电缆, 启动, GC	GC 和质谱仪之间的触点闭合电缆	70111-63626
镊子, 10 in., 不锈钢	用于处理离子盒和清洁组件	76360-0400
电缆, 10 base-T, 交叉, 15 ft, 屏蔽	通信	76396-0052
真空泵油, 1 L	前级泵润滑油	00301-15101
电缆, RJ45, 7 ft.		00302-01838
以太网开关, 5 端口	通信	00825-01-00024
软件, QuanLab Forms 2.5.1 SP1	色谱分析软件	120395-0001
软件, GC Devices 2.1.0, 适用于 Xcalibur 2.1	GC 设备控制软件	120399-0001

化学品套件

表 9. 化学品套件 (P/N 70111-62078)

描述	功能	部件号
全氟三丁胺 (FC-43)	调谐校正化合物	50010-02500
氧化铝	清洁不锈钢配件	32000-60340
苯并己烷	性能测试	120150-TEST
八氟萘	性能测试	120150-TEST

术语表

A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z

A

Accept 接受

Acquisition Ready 采集准备就绪

Actions 操作

All Programs 所有程序

Analyzer Control PCB 分析器控制印刷电路板

Apply 应用

Auto Tune and Calibration 自动调谐和校正

Automatic Tune 自动调谐

Aux Zones 附件区

C

Cal Gas Off 校正气体关闭

Cal Gas On 校正气体打开

Calibration Gas 校正气体

Calibration Gas Setting 校正气体设置

Cannot find Calibration Gas 无法找到校正气体

Change Instruments 更改仪器

Change Instruments In Use 更改使用仪器

CI Reagent Gas Flow Module 化学电离反应气体
流速模块

Columns 色谱柱

Communication 通信

Compound 化合物

Control 控制

Customer Manuals 用户手册

D

DC Rod Driver PCB DC 杆驱动器印刷电路板

Define Scan 定义扫描

E

EI/CI 电子电离 / 化学电离

Ensuring Tightness 确保密封

Ethernet Link OK 以太网链接良好

EZ Tune EZ 调谐

EZ Tune EZ Workspace EZ 调谐 EZ 工作区

F

FC43 Pos. Ions FC43 正离子

Filament 灯丝

Filament Off 灯丝关闭

Filament On 灯丝打开

File 文件

File Name 文件名

First Mass 起始质量数

Forepump 前级泵

Full Scan 全扫描

H

Help 帮助

I

In Use 使用中

Insert Probe 插入工具 / 插入进样杆

Instrument Configuration 仪器配置

Instrument Setup 仪器设置

Instrument Status 仪器状态

K

K-Factor Quick Reference K 因子快速参考指南

L

Last Mass 结束质量数

Logon Information 登录信息

Low Pass Filter PCB 低通滤波器印刷电路板

M

MAX 最大

Method Editor 方法编辑器

MIN 最小

MS Mode 质谱模式

N

Neutral Loss 中性丢失

No 否

Number of States 状态数

O

Off 关

OK 确定

On 开

Operating Mode 操作模式

Operational 操作

Oven 柱温箱

P

Parent 母离子

Polarity 极性

Positive 正

Power 电源

Power Entry Module 电源输入模块

Power Module 电源故障

Probe 工具

Product 子离子

Programs 程序

Pump On 泵打开

Q

QC Report 质量控制报告

Qual Browser 定性浏览器

R

Real-Time Display 实时显示

Real Time Plot View 实时谱图

Regular Method 常规方法

Restart 重启

Right or Left Carrier 左或右载气

Run Sequence 运行序列

S

Safe to Open the Valve 可以安全打开阀

Save 保存

Save As 另存为

Save Calib. As 将校正文件另存为

Save Calibration File 保存校正文件

Save Report 保存报告

Scan 扫描

Scan Editor 扫描编辑器

Scan Mode(s) 扫描模式

Scan Range Entry Mode 扫描范围输入模式

Scan Time 扫描时间

Scan Type 扫描类型

Sequence Setup 序列设置

Serial Peripheral Interconnect/SPI 串行外围设备互连

Service Mode 维修模式

Setup 设置

Shut Down 关机

Shut Down Windows 关闭 Windows

Source PCB 离子源印刷电路板

Standby 待机

Start 开始

Start Instrument 启动仪器

Start Main. Tune 启动维护调谐

Start/Stop 启动 / 停止

State at Start of Run 运行开始状态

Status 状态

Super Harvard Architecture Computer 超级哈佛结构计算机

System 系统

System Control PCB 系统控制印刷电路板

System Power Off 系统电源关闭

System Reset 系统重启

System Tune and Calibration 系统调谐和校正

T

Thermo Instruments Thermo 仪器

TRACE GC Maintenance Manual TRACE GC 维护手册

TRACE GC Ultra Maintenance and Troubleshooting Manual TRACE GC Ultra 维护和故障排除手册

TRACE GC Ultra Operating Manual TRACE GC Ultra 操作手册

TRACE GC Ultra Operators Manual TRACE GC Ultra 操作人员手册

TRACE GC Ultra Quick Reference TRACE GC Ultra 快速参考指南

TRACE GC Ultra Setup TRACE GC Ultra 设置

TriPlus Autosampler TriPlus 自动进样器

TSQ EZ Tune TSQ EZ 调谐

TSQ QC Report TSQ 质量控制报告

TSQ Quantum XLS Series User Guide
TSQ Quantum XLS 系列用户手册

TSQ Tune TSQ 调谐

术语表 : Undo

U

Undo 撤销

Use DIP/DEP Probe 使用直接插入杆 / 直接暴露杆

V

Vacuum 真空

Vent Delay PCB 放空延迟印刷电路板

Vent Valve Closed 放空阀关闭

View 查看

View Report 查看报告

Voltage Amplifier PCB 电压放大器印刷电路板

W

Waste Electrical & Electronic Equipment/WEEE 废弃电气与电子设备

X

Xcalibur Help Xcalibur 帮助

Xcalibur Tune Xcalibur 调谐

Y

Yes 是

索引

A

Analyzer Control PCB, 讨论 46

B

八氟萘 149

棒状图数据类型 15

保留时间校正 (iSRM) 13

保险丝, 质谱仪, 更换 130

苯并己烷 149

泵

前级泵 43

涡轮分子泵 42

油, 部件号 149

表

附件套件 148

化学品套件 147, 149

扫描模式总结 6

质谱仪维护步骤 83

质谱仪组件 On/Off 状态 59

最大允许压力 55

丙酮溶剂峰溶剂峰 118

补偿电压, 四极杆 36

部件号

附件套件 148

各种配件 147

化学品套件 149

不锈钢部件, 清洁 98

步骤

安装毛细管色谱柱 109

彻底分解离子源 96

分解离子源透镜组件 91

GC 检漏 110

老化毛细管色谱柱 110

毛细管色谱柱

安装 109

移除 107

清洁不锈钢部件 98

清洁离子盒 87

清洁离子源组件 85

维护前级泵 101

移除离子源 88

移除离子源透镜组件 90

移除毛细管色谱柱 107

重新安装离子源 92

重新安装离子源 PCB 97

组装离子源透镜 92

C

Communication LED

描述 23

图 22, 55-56

质谱仪启动 55

质谱仪重启 57

compliance

regulatory iv

Convectron 测压计, 描述 43

参比 SRM 反应 13

参比扫描 (iSRM) 13

侧盖板 (真空腔体), 描述 41

插入 / 移除 (I/R) 工具

插入 75

回撤 (注意事项) 78, 81

解锁位置 74

离子盒, 移除和安装 79

锁定位置 78

图 28, 74

程序

安装离子盒 80

保存调谐校正报告 69

操作入口阀 73

创建 QC 调谐报告 71

调谐和校正 64

- 改变电离模式 73
- 将系统置于待机状态 51
- 紧急关机 49
- 启动质谱仪 54
- 系统启动 53
- 系统完全关机 51
- 显示 FC-43 质谱 62
- 移除离子盒 73
- 重启质谱仪 57

D

DIP（直接插入杆），示例步骤

- 1 创建仪器方法 131
 - 2 创建序列 134
 - 3 准备进样杆和入口阀 135
 - 4 准备质谱仪 135
 - 5 运行序列 137
 - 6 分析数据 141
 - 7 移除进样杆 142
- perfluorotetracosane 131

打拿极 38

待机状态

- 将系统置于 51

导向杆

- 安装 73
- 图 28, 74

灯丝

- 部件号 93
- 打开和关闭 62
- 更换 93
- 可更换配件 148
- 描述 27
- 位置 94
- 位置（图）26
- 问题，故障排除 119

低真空泵 43

电缆 149

电离模式

- 电子电离（EI）3
- 更改 73
- 化学电离（CI）3
- 描述 3

电压

- Q0 补偿电压 29
- 四极杆 rf 和 dc 32
- 转换打拿极 38

电源断路器

- 描述 24

电源问题，故障排除 124

电源线，前级泵（注意事项）43

电子倍增器

- 描述 38
- 图 39
- 阳极，描述 38

电子电离（EI）

- 描述 4
- 移除离子盒 73

电子维修开关

- 描述 24
- 位置（图）25
- 质谱仪组件 On/Off 状态 59

电子组件

- 离子检测系统 46
- 描述 45
- Power Entry Module，描述 45
- RF 电压生成，描述 46

调谐

- 调谐校正报告 67
- 频率（注释）61
- 讨论 61
- 运行程序 64

调谐和校正（注释）56

调谐问题，故障排除 128

调谐校正报告

- 保存 67
- 图 68

定量增强数据依赖质谱（QED MS）扫描类型 14

断路器 24

对文档或 xiii

E

EI/CI 离子源 PCB

- 更换 96
- 位置 26

Ethernet Link OK LED 25

二甲苯溶剂峰 118

二氯甲烷溶剂峰 118

F

FC-43

- 部件号 149
- 打开和关闭流量 62
- 观察的峰 62
- 质谱，显示 62
- 质谱，正极性 EI 模式 64

放空阀

- LED 24
- 描述 44

分析器区域，真空腔体

- 描述 41
- 位置 41
- 分析器室, 位置 (图) 42
- 分析器组件, 透镜, 电压应用到 37
- 符合性
 - WEEE vi
- 附件套件 148

G

GC Devices 2.1.0 149

杆组件

- 离子传输 6
- 描述 32
- Q1、Q2 和 Q3 (注释) 7
- 质量分析 6
- 质量分析器, 四极杆 31
- 高选择性反应监测 (H-SRM) 13
- 隔垫流失污染 118
- 个人计算机, 特性 47

功能描述

- 离子光学系统 29
- Q0 四极杆 29
- 气相色谱仪 (GC) 19
- 入口阀 28
- 数据系统 47
- 直接进样杆 20
- 质量分析器 31
- 质谱仪 21
- 传输线 20
- 自动进样器 18

故障排除

- 灯丝和透镜控制 119
- 电源 124
- 调谐 128
- 高真空 121
- 加热区 120
- 检漏 122
- 灵敏度 124
- 气相色谱仪通信 116
- 通信问题 114
- 稳定性 127
- 污染问题 117
- 线性 123
- 自动进样器通信 117

关机

- 非紧急 51
- 紧急, 前面板 system power off 按钮 23
- 紧急程序 49
- 数据系统 53
- 完全关机 51
- 质谱仪 51

过滤它 45

H

后部电源面板, 位置 (图) 50

化学电离 (CI)

- 甲烷 4
- 描述 4
- 气体阀, 描述 44
- 移除离子盒 73
- 化学品套件 149

J

Insert Probe 信息 (图) 75

Instrument Configuration 窗口, 打开 18–19

Instrument Setup 窗口, 打开 18

ISRM 扫描类型 13

计算机, 特性 47

机械泵 43

甲苯溶剂峰 118

加热 Q0 四极杆

- 图 29
- 位置 (图) 26
- 移除 90
- 重新安装 92

检测器系统 38

检漏

- GC 110
- QC 调谐报告 71
- 在自动调谐时 122

接头 148

紧急关机

- 程序 49
- system power off 按钮 23, 49
- 注意事项 23

进气口硬件

- CI 气体阀 44
- 功能模块图 40
- 描述 40
- 碰撞气体阀 44
- 校正化合物 44

警告

- 触电危险, 移除离子源 88
- 烫伤危险
 - 移除离子源 89
- 烫伤危险。
 - GC 柱温箱、进样口和传输线 88

K

可更换配件

- 附件套件 148
- 化学品套件 149
- 毛细管色谱柱 147
- 校正化合物样品瓶 147

L

LEDs

Communication LED

- 模式 23
- 质谱仪启动 55
- 质谱仪重启 57

Ethernet Link OK (以太网链接良好) 24–25

Forepump On (前级泵打开) 24

Power LED 22

- 质谱仪启动 55
- 质谱仪重启 57

Pump On LED, 位置 (图) 25

Scan LED 23

System LED

- 模式 23
- 质谱仪启动 55
- 质谱仪重启 57

Vacuum LED 22

Vacuum LED, 质谱仪启动 55

Vent Valve Closed LED

- 模式 24
- 图 25

离子光学系统, 描述 29

离子规

- 描述 43
- 位置 (图) 42

离子盒

- 安装 80
- 从 I/R 工具连接和取下 79
- 可更换配件 147
- 清洁 87
- 图 27
- 位置 (图) 81
- 移除 73

离子极性模式, 已讨论 5

离子检测系统

- 电子倍增器 38
- 电子倍增器增益 39
- 电子组件 46
- 描述 38
- 转换打拿极 38

离子源

- 彻底分解 96
- 灯丝, 更换 93
- 电气连接 53

分解图 86

横截面视图 (图) 30

离子源 PCB, 位置 (图) 96

描述 26

清洁组件 85

透镜组件

- 分解 91
- 分解图 91
- 移除 90
- 重新安装 92

图 26

位置 (图) 53

移除 88

重新安装 92

离子源模块, 位置 (图) 26

离子源 PCB

位置 (图) 53

重新安装 97

离子源室, 位置 (图) 42

离子传输设备

- 杆组件 6
- 已定义 6

联系 xiii

邻苯二甲酸盐污染 118

灵敏度问题, 故障排除 124

轮廓图数据类型 14

M

MS/MS 扫描模式

- 母离子 8
- 中性丢失 9
- 子离子 7

毛细管色谱柱

- 安装 109
- 老化 110
- 移除 107
- 移除离子源 (注意事项) 88

母离子扫描模式

- 说明 (图) 8
- 讨论 8

O

Off 状态, 质谱仪组件 On/Off 状态 59

P

Power Entry Module, 描述 45

Power LED

- 模式 22

图 22, 55–56
 质谱仪启动 55
 质谱仪重启 57
 probe 按钮 75
 碰撞能量 (Q2 补偿电压) 36
 碰撞气体, 描述 35
 碰撞气体阀, 描述 44
 碰撞室
 图 32
 位置 (图) 42
 碰撞诱导解离 (CID), 讨论 35

Q

Q0 四极杆
 横截面视图 (图) 30
 描述 29
 位置 (图) 42
 Q1MS 和 Q3MS 扫描模式 7
 Q1 四极杆
 扫描模式 5
 图 31
 Q2 杆组件
 扫描模式 5
 图 32
 Q3 四极杆
 扫描模式 5
 图 31
 QC 调谐报告
 创建 72
 检漏 71
 例子 (图) 72
 启动
 操作条件, 设置 56
 气相色谱仪 (GC) 54
 自动进样器 56
 QED MS 扫描类型 14
 Qual Browser (定性浏览器)
 查看数据 141
 打开 141
 直接进样杆, 运行 141
 QuanLab Forms 149
 气相色谱分析 (GC)
 毛细管色谱柱
 安装 109
 气相色谱仪 (GC)
 保留时间校正 (iSRM) 13
 电源插座 24
 功能描述 19
 故障排除通信问题 116
 检漏 110
 毛细管色谱柱
 移除 107
 配置 19
 启动 53–54
 色谱柱安装 109
 与数据系统通信 47
 照片 2
 前级泵
 电源插座 (图) 25
 电源线 (注意事项) 43
 描述 43
 Pump On LED 25
 维护 101
 前面板 LED
 Communication 23
 描述 22
 Power 23
 Scan 23
 System 23
 图 22, 55–56
 Vacuum 23
 前面板 system power off 按钮
 图 23
 嵌入式计算机
 描述 45
 重启 57
 清洁
 不锈钢部件 98
 步骤列表 (表) 83
 离子盒 87
 离子源透镜 87
 铝部件 100
 频率 83
 陶瓷部件 100
 球阀
 密封, 更换 106
 密封, 组件 105
 密封套件 148
 提取工具
 使用 106
 图 106
 全扫描类型 12

R

regulatory compliance iv
 rf 电压生成, 讨论 46
 溶剂峰 118
 丙酮 118
 二甲苯 118
 二氯甲烷 118
 己烷 118
 甲苯 118

甲醇 118
 三氯乙烷 118
 入口阀
 部件 (图) 75
 插入 / 移除 (I/R) 工具, 插入 75
 导向杆 28
 杆, 移除 82
 和直接进样杆 135
 Insert Probe 信息 75
 离子盒, 安装 80
 描述 28
 Safe to Insert Probe 信息 76
 塞子定位 82
 使用, 程序 74
 图 28
 注意事项 78, 81
 软件
 GC Devices 2.1.0 149
 QuanLab Forms 149

S

Safe to Open Valve 信息, 直接进样杆 138
 safety standards iv
 Scan LED
 描述 23
 图 22, 56
 Sequence Setup, 打开 135
 Standby 状态
 质谱仪组件 On/Off 状态 59
 System Control PCB, 描述 45
 System LED
 模式 23
 图 22, 55–56
 质谱仪启动 55
 质谱仪重启 57
 system power off 按钮
 紧急关机 23, 49
 位置 (图) 50
 System Reset 按钮
 描述 24
 位置 (图) 24
 三氯乙烷溶剂峰 118
 扫描 LED
 图 55
 扫描类型
 定量增强数据依赖质谱 (QED MS) 14
 高选择性反应监测 (H-SRM) 13
 描述 12
 全扫描 12
 选择反应监测 (SRM) 13
 选择离子监测 (SIM) 12

智能选择反应监测 (iSRM) 13
 自动 SIM 14
 扫描模式
 母离子
 说明 (图) 9
 讨论 8
 Neutral Loss (中性丢失)
 说明 (图) 10
 Q1MS 和 Q3MS 7
 数据依赖 11
 讨论 5
 质谱仪 5
 中性丢失
 例子 (图) 11
 讨论 9
 子离子
 说明 (图) 8
 讨论 7
 总结 (表) 6
 数据类型
 棒状图 15
 轮廓图 14
 讨论 14
 数据系统
 GC 接口 47
 个人计算机 47
 关机 53
 LAN 接口 47
 描述 47
 仪器接口 47
 主用以太网适配器 47
 数据相关扫描模式, 已讨论 11
 四极杆
 Q0, 描述 29
 Q1 和 Q3 31
 RF 和 DC 场 32
 RF 和 DC 场 (图) 33–34
 质量分析 31
 四极杆质量分析器
 功能描述 31
 四极杆补偿电压 36

T

Thermo Xcalibur 导航图, 打开 134
 TRACE GC Ultra 气相色谱仪
 系统配置 19
 照片 2
 TriPlus 自动进样器
 配置 18
 照片 2
 TSQ Quantum XLS 系列系统
 功能模块图示 (图) 18

气相色谱仪 19
 数据系统 47
 TSQ Quantum XLS Ultra 系统 (照片) 2
 TSQ Quantum XLS 系统 (照片) 2
 自动进样器 18
 TSQ Quantum XLS 系列质谱仪
 质谱仪 21
 TSQ Quantum 系列质谱仪
 前面板 LED 22
 TSQ Quantum 质谱仪
 操作条件, 设置 56
 待机状态 51
 调谐 61
 调谐和校正 (注释) 56
 关闭组件 58
 LED 和系统启动 57
 离子极性模式 5
 启动 53
 扫描类型 12
 扫描模式 5
 数据类型 14
 校正 61
 校正化合物, 添加 102
 质量范围 15
 质量数分析, 概述 3
 综述 1
 碳氢化合物阱 148
 套件
 附件套件 148
 化学品套件 149
 套圈 148
 特殊注意事项 xii
 透镜
 分析器组件, 电压应用到 37
 L1、L2、L3
 分解图 91
 图 26
 L21、L22、L23 (图) 32
 L31、L32、L33 (图) 32
 离子源透镜
 分解图 91
 重新安装 92
 透镜 L1、L2、L3, 位置 (图) 26
 透镜准直工具 148
 透镜组件, 移除 90

W

Vacuum LED
 和分析器区域压力 22
 描述 22
 模式 22

图 22, 55–56
 质谱仪启动 55
 WEEE 合规性 vi
 Vent Valve Closed LED 24
 维护
 步骤 (表) 83
 频率 83
 气相色谱柱
 安装 109
 移除 107
 前级泵 101
 球阀密封, 更换 105
 维护调谐
 报告 70
 运行 70
 文档 xi
 稳定性问题, 故障排除 127
 涡轮分子泵, 描述 42
 污染
 隔垫流失 118
 故障排除 117
 邻苯二甲酸盐 118
 柱流失 117

X

系统调谐和校正工作区 (图) 64
 系统关机
 紧急程序 49
 完全关机 51
 系统重启按钮
 质谱仪重启 57
 线性问题, 故障排除 123
 消耗品, 可更换配件 148
 校正
 调谐校正报告 67
 和 H-SRM (注释) 61
 频率 (注释) 61
 讨论 61
 运行程序 64
 校正化合物
 观察的峰 62
 开, 关 62
 流量控制, 描述 44
 质谱, 显示 62
 质谱, 正极性 EI 模式 64
 校正化合物小瓶
 位置 103
 校正化合物样品瓶
 可更换配件 147
 位置 102
 校正气体阀, 描述 44

序列

- 创建 134
- Sequence Setup 视图 134
- 直接进样杆, 运行 137
- 选择反应监测 (SRM) 扫描类型 13
- 选择离子监测 (SIM) 扫描类型 12

Y

- 压力, 最大允许 (表) 55
- 氧化铝 149
- 阳极, 电子倍增器, 描述 38
- 氧气阱 148
- 仪器方法, 创建 131
- 以太网 47
- 阴极, 电子倍增器, 描述 38
- 应用到质量分析器的 rf/dc 电压, 讨论 31
- 油, 前级泵, 部件号 149
- 右侧电源面板
 - 描述 24
 - 图 52

Z

- 诊断 113
- 真空泵
 - Pump On LED 25
 - 前级泵 43
 - 涡轮分子泵 42
- 真空服务开关
 - 位置 (图) 25
- 真空腔体
 - 侧盖板, 描述 41
 - 描述 41
 - 位置 (图) 42
- 真空维修开关
 - 描述 24
 - 质谱仪组件的 On/Off 状态 59
- 真空系统
 - Convectron 测压计 43
 - 放空阀 44
 - 功能模块图 (图) 40
 - 关机 24
 - 检漏 122
 - 离子规 43
 - 描述 40
 - 碰撞气体阀 44
 - 前级泵 43
 - Vacuum LED 22
 - 问题, 故障排除 121
 - 涡轮分子泵 42

- 真空腔体 41
- 真空维修开关 24
- 最大允许压力 55
- 直接暴露杆 (DEP) 19
- 直接插入杆 (DIP) 19
- 直接插入杆 (DIP), perfluorotetracosane 示例步骤 131
- 直接进样杆
 - 插入入口阀 (图) 138
 - 和入口阀 135
 - 使用 131
 - 照片 20
 - 直接暴露杆 (DEP) 19
 - 直接插入杆 (DIP) 19
 - 质谱仪, 准备 135
- 质量范围 15
- 质量分析
 - 描述 32
 - 碰撞诱导分解 35
 - RF 和 DC 场 (图) 33
- 质量分析器
 - 描述 31
 - 四极杆组件, 功能描述 31
 - 已定义 6
- 质量控制 (QC) 调谐报告
 - 创建 71
 - 检漏 71
 - 例子 (图) 72
- 智能选择反应监测 (iSRM) 13
- 质谱仪
 - CI 气体阀 44
 - 待机状态 51
 - 电源插座 24
 - 电子维修开关, 位置 (图) 25
 - 电子组件 45
 - 调谐和校正 (注释) 56
 - 断路器, 位置 (图) 25
 - 放空阀 44
 - 功能描述 21
 - 关闭组件 58
 - 关机 51
 - 紧急关机 49
 - 进气口硬件 40
 - LED 和系统启动 57
 - 离子光学系统 29
 - 离子规 43
 - 离子检测系统 38
 - 离子检测系统电子组件 46
 - 离子源 26
 - Off 状态 59
 - Power Entry Module, 描述 45
 - 碰撞气体阀 44
 - Q0 四极杆 29

- 启动 53
- 前面板 LED 22
- RF 电压生成电子组件 46
- 入口阀 (图) 28
- Standby 状态 59
- 维护步骤 (表) 83
- 涡轮分子泵 42
- 校正化合物, 添加 102
- 右侧电源面板 52
- 真空腔体 41
- 真空维修开关, 位置 (图) 25
- 真空系统 40
- 质量分析器 31
- 重启 57
- 组件的 On/Off 状态 59
- 质谱仪, 和直接进样杆 135
- 质谱仪断路器, 位置 (图) 25
- 质谱仪主电源断路器, 质谱仪组件 On/Off 状态 59
- 中性丢失扫描模式
 - 例子 (图) 11
 - 说明 (图) 10
 - 讨论 9
- 主电源断路器
 - 描述 24
 - 位置 (图) 24
- 柱流失污染 117
- 柱温箱 xii
- 注意事项
 - 更换保险丝 130
 - 更换 PCB 和电源供应器 130
 - I/R 工具移除, 回撤 78, 81
 - 紧急关机 23, 49
 - 前级泵和电源线 43
 - 移除离子源和毛细管柱 88
- 转换打拿极
 - 描述 38
 - 图 39
- 传输线
 - 功能描述 20
 - 横截面视图 (图) 30
 - 两通接头 (图) 108
 - 毛细管色谱柱
 - 安装 109
 - 移除 108
 - 图 21
 - 位置 (图) 53
- 自动调谐校正 64
- 自动进样器
 - 电源插座 24
 - 故障排除通信问题 117
 - 配置 18
 - 启动 53, 56
 - TriPlus 18
- 照片 2
- 自动 SIM 扫描类型 14
- 子离子扫描模式
 - 描述 7
 - 图 8

