

---

# Analyst MD Software

Handbuch für die Benutzeroberfläche



---

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



Die in diesem Dokument beschriebene Software unterliegt einer Lizenzvereinbarung. Das Kopieren, Ändern oder Verbreiten der Software auf einem beliebigen Medium ist rechtswidrig, sofern dies nicht ausdrücklich durch die Lizenzvereinbarung genehmigt wird. Darüber hinaus kann es nach der Lizenzvereinbarung untersagt sein, die Software zu disassemblieren, zurückzuentwickeln oder zurückzuübersetzen. Es gelten die aufgeführten Garantien.

Teile dieses Dokuments können sich auf andere Hersteller und/oder deren Produkte beziehen, die wiederum Teile enthalten können, deren Namen als Marken eingetragen sind und/oder die Marken ihrer jeweiligen Inhaber darstellen. Jede Nennung solcher Marken dient ausschließlich der Bezeichnung von Produkten eines Herstellers, die von SCIEX für den Einbau in die eigenen Geräte bereitgestellt werden, und bedeutet nicht, dass eigene oder fremde Nutzungsrechte und/oder -lizenzen zur Verwendung derartiger Hersteller- und/oder Produktnamen als Marken vorliegen.



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



**Zur Verwendung in der *In-vitro*-Diagnostik.** Das Produkt/die Produkte ist/sind nicht in allen Ländern verfügbar. Weitere Informationen erhalten Sie von Ihrem lokalen Vertriebspartner oder unter [sciex.com/diagnostics](https://sciex.com/diagnostics).

**Rx only.**

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

AB Sciex™ wird unter Lizenz verwendet.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



Leica Microsystems CMS GmbH  
Ernst-Leitz-Strasse 17-37  
35578 Wetzlar  
Germany



AB Sciex Pte. Ltd.  
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3  
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

# Inhalt

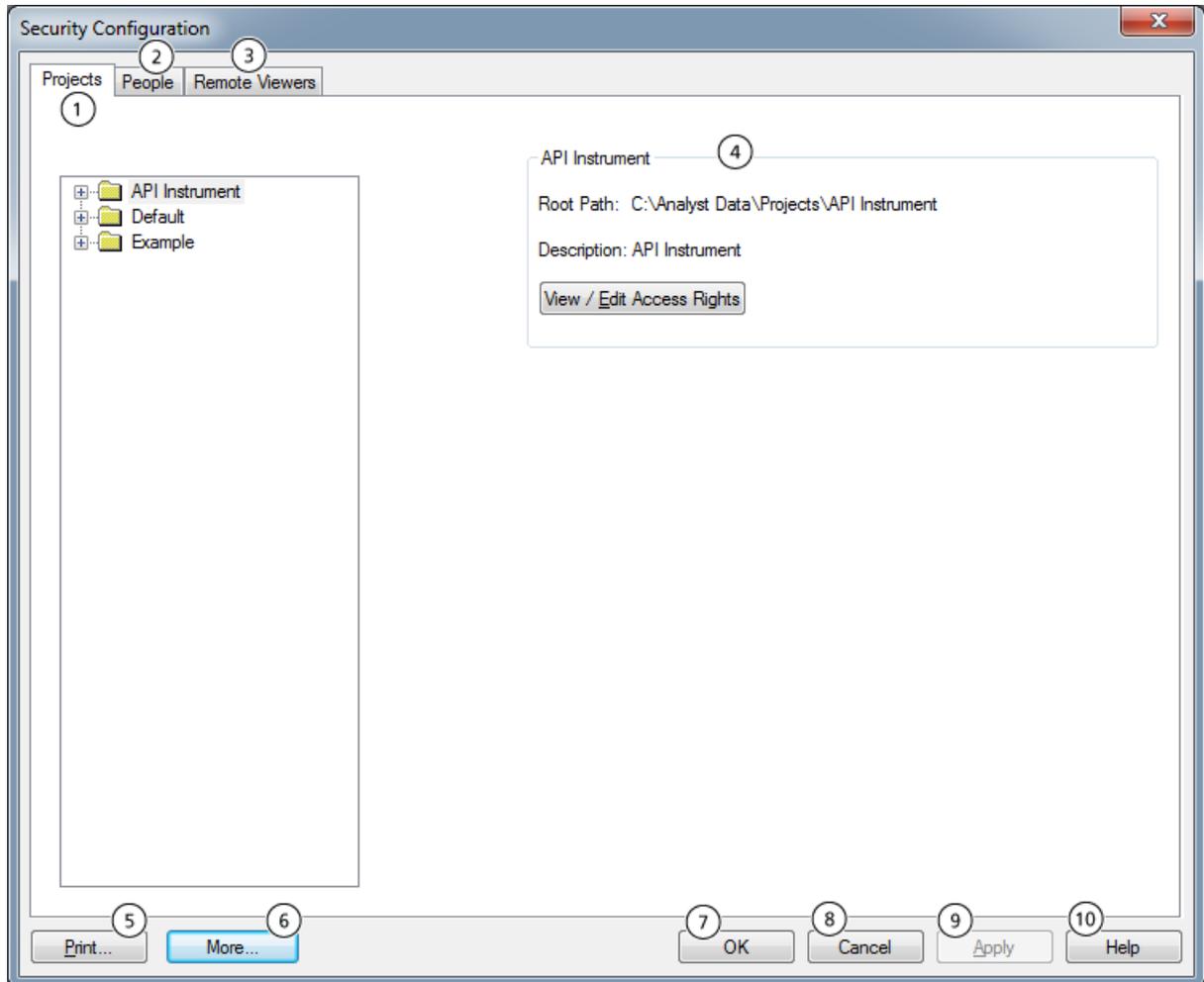
---

<b>Kapitel 1: Sicherheitskonfiguration .....</b>	<b>5</b>
<b>Kapitel 2: Hardwarekonfiguration .....</b>	<b>25</b>
<b>Kapitel 3: Report Template Editor .....</b>	<b>55</b>
<b>Kapitel 4: Verbindungsoptimierung .....</b>	<b>58</b>
<b>Kapitel 5: Geräteoptimierung .....</b>	<b>71</b>
<b>Kapitel 6: „IDA Method Wizard“ .....</b>	<b>79</b>
<b>Kapitel 7: Erfassungsmethode erstellen .....</b>	<b>90</b>
<b>Kapitel 8: Quantifizierungsmethode erstellen .....</b>	<b>125</b>
<b>Kapitel 9: Quantitation Wizard .....</b>	<b>130</b>
<b>Kapitel 10: Erfassungscharge erstellen .....</b>	<b>141</b>
<b>Kapitel 11: Durchsuchen .....</b>	<b>147</b>
<b>Kapitel 12: Peak-Bewertung .....</b>	<b>153</b>
<b>Kapitel 13: Reporter Software .....</b>	<b>173</b>

# Sicherheitskonfiguration

# 1

Abbildung 1-1: Editor „Security Configuration“ – Registerkarte „Projects“



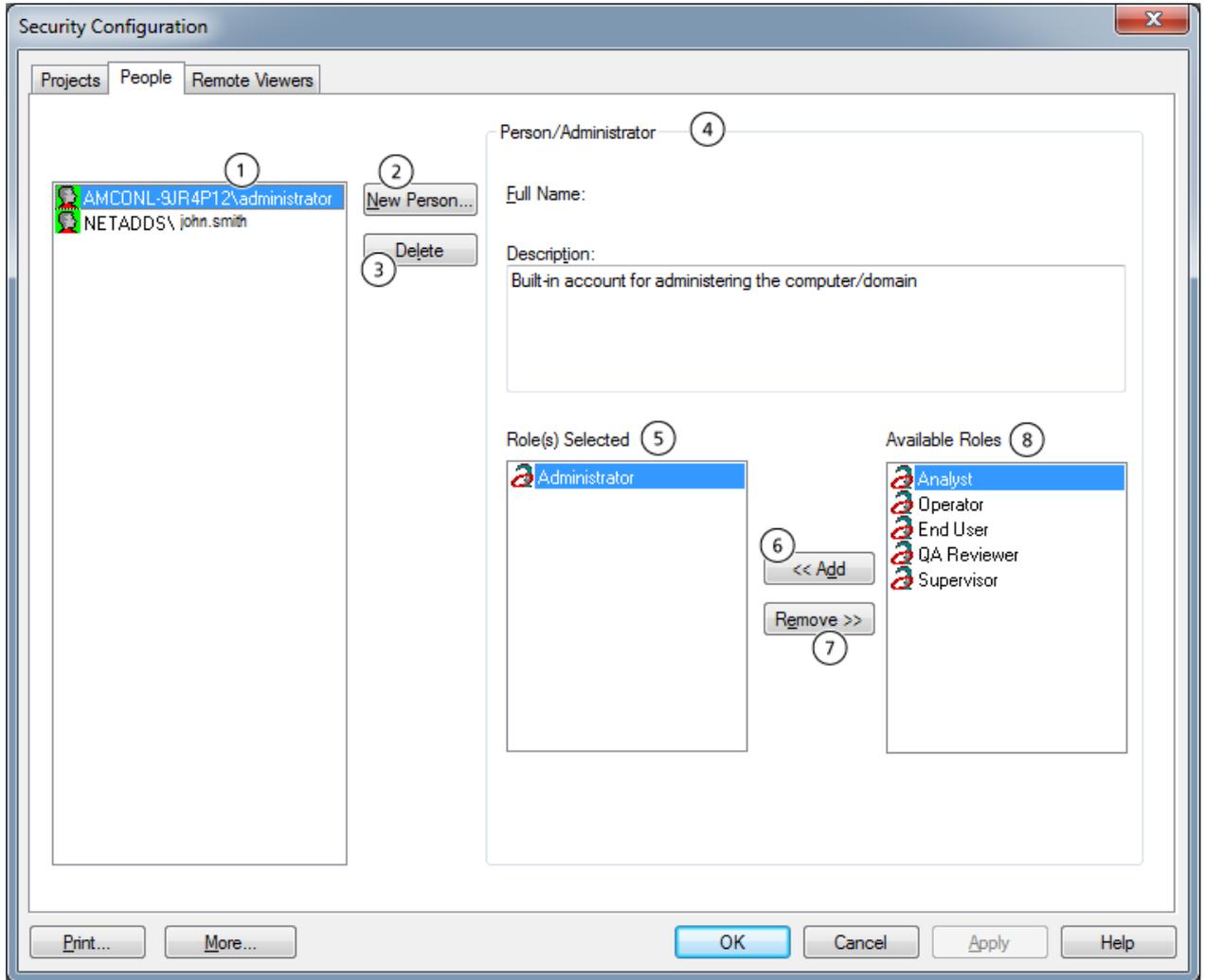
Element	Bezeichnung
1	Projects <ul style="list-style-type: none"><li>• API-Instrument</li><li>• Standard</li><li>• Beispiel</li></ul>
2	Personen
3	Remote-Anzeige

## Sicherheitskonfiguration

---

Element	Bezeichnung
4	<p>API-Instrument</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Quellpfad: &lt;drive&gt;:\Analyst Data\Projects\API Instrument</li><li>• Beschreibung: API-Instrument</li><li>• Zugriffsrechte anzeigen/bearbeiten</li></ul> <p>Standard (wenn „Default“ ausgewählt ist)</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Quellpfad: &lt;drive&gt;:\Analyst Data\Projects\Defaults</li><li>• Beschreibung: Standard</li><li>• Zugriffsrechte anzeigen/bearbeiten</li></ul> <p>Beispiel (wenn „Example“ ausgewählt ist)</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Quellpfad: &lt;drive&gt;:\Analyst Data\Projects\Example</li><li>• Beschreibung: Beispiel</li><li>• Zugriffsrechte anzeigen/bearbeiten</li></ul>
5	Drucken
6	Mehr
7	OK
8	Abbrechen
9	Übernehmen
10	Hilfe

Abbildung 1-2: Editor „Security Configuration“ – Registerkarte „People“



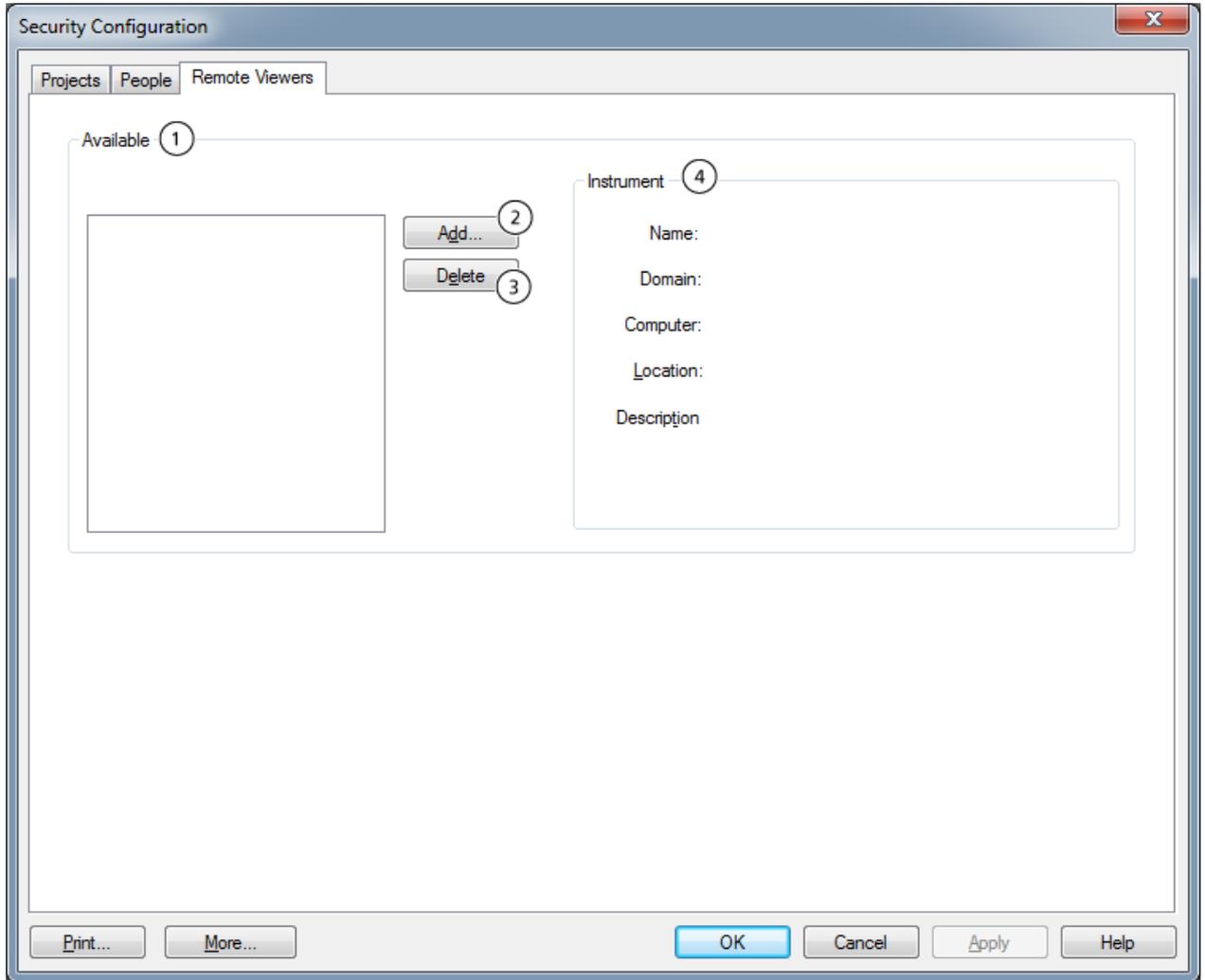
Element	Bezeichnung
1	network-name\administrator network-name\user.name
2	Neue Person
3	Löschen
4	Person/Administrator <ul style="list-style-type: none"> <li>• Vollständiger Name:</li> <li>• Beschreibung: Integriertes Konto zur Verwaltung des Computers/der Domäne</li> </ul>

## Sicherheitskonfiguration

---

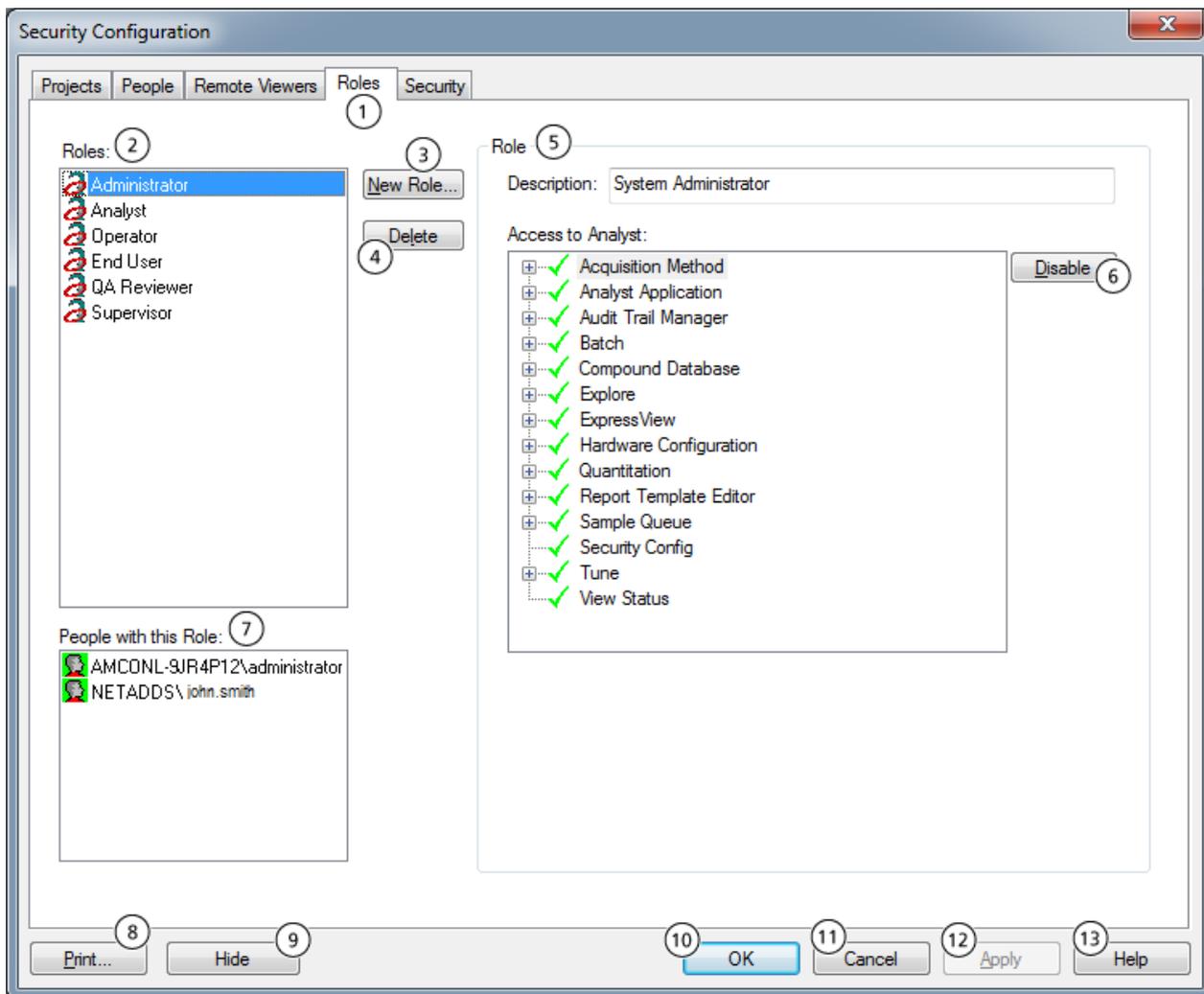
<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
5	Ausgewählte Rolle(n) <ul style="list-style-type: none"><li>• Administrator</li></ul>
6	„Add“
7	Entfernen
8	Verfügbare Rollen <ul style="list-style-type: none"><li>• Analyst</li><li>• Operator</li><li>• Endbenutzer</li><li>• QA Reviewer</li><li>• Supervisor</li></ul>

Abbildung 1-3: Editor „Security Configuration“ – Registerkarte „Remote Viewers“



Element	Bezeichnung
1	Verfügbar
2	„Add“
3	Löschen
4	Instrument <ul style="list-style-type: none"> <li>• Name:</li> <li>• Domäne:</li> <li>• Computer:</li> <li>• Position:</li> <li>• Beschreibung:</li> </ul>

Abbildung 1-4: Editor „Security Configuration“ – Registerkarte „Remote Viewers“

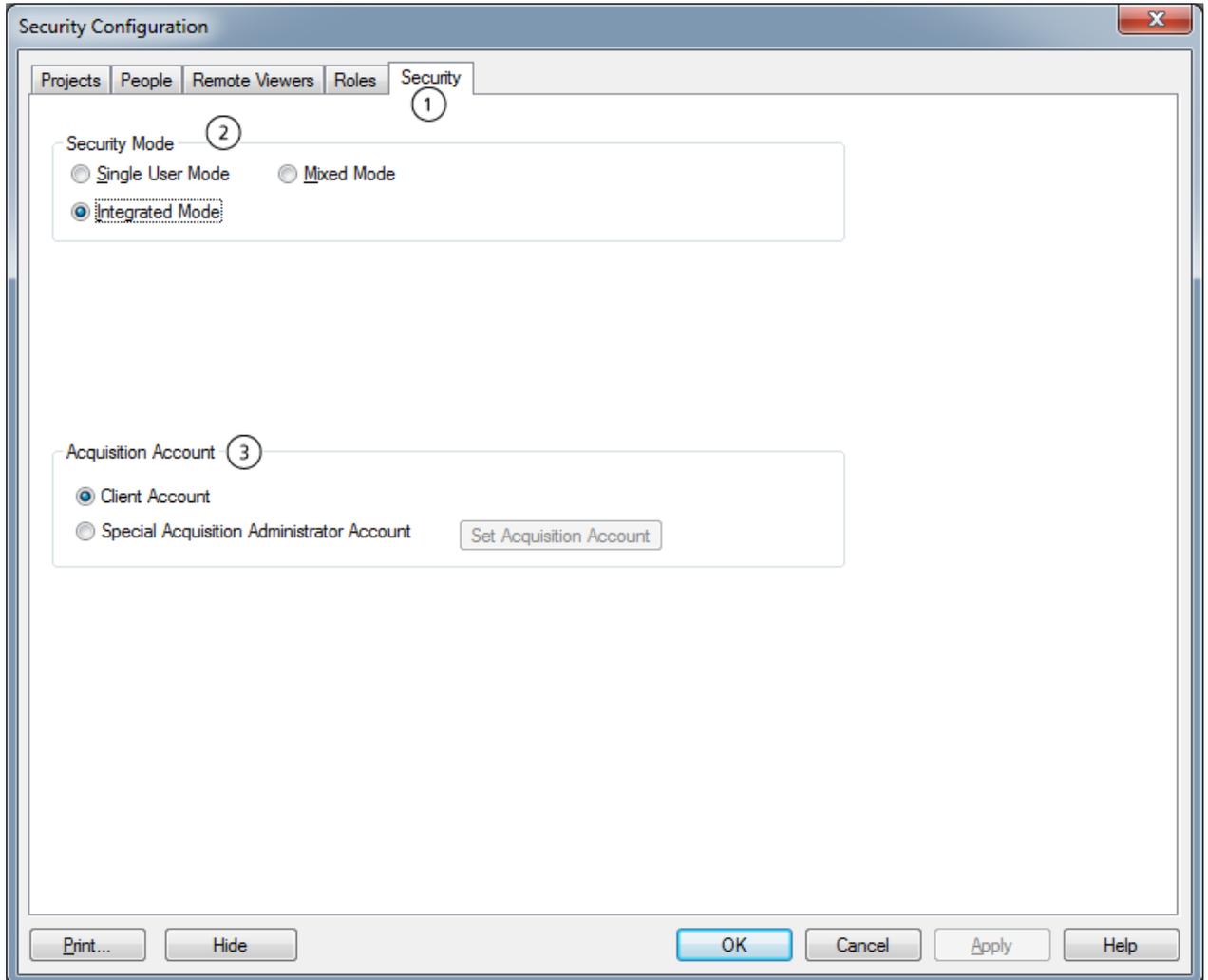


Element	Bezeichnung
1	Rollen
2	Rollen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Administrator</li> <li>• Analyst</li> <li>• Operator</li> <li>• Endbenutzer</li> <li>• QA Reviewer</li> <li>• Supervisor</li> </ul>
3	Neue Rolle
4	Löschen

Element	Bezeichnung
5	Rolle <ul style="list-style-type: none"> <li>• Beschreibung: Systemadministrator</li> <li>• Zugriff auf Analyst                             <ul style="list-style-type: none"> <li>• Erfassungsmethode</li> <li>• Analyst-Anwendung</li> <li>• Audit Trail Manager</li> <li>• Charge</li> <li>• Compound Database (Datenbank für chemische Verbindungen)</li> <li>• Durchsuchen</li> <li>• ExpressView</li> <li>• Hardwarekonfiguration</li> <li>• Quantifizierung</li> <li>• Report Template Editor</li> <li>• Probenwarteschlange</li> <li>• Sicherheitskonfiguration</li> <li>• Abstimmen</li> <li>• Status anzeigen</li> </ul> </li> </ul>
6	Deaktivieren
7	Personen mit dieser Rolle: <ul style="list-style-type: none"> <li>• network-name\administrator</li> <li>• network-name\user.name</li> </ul>
8	Drucken
9	Ausblenden
10	OK
11	Abbrechen
12	Übernehmen
13	Hilfe

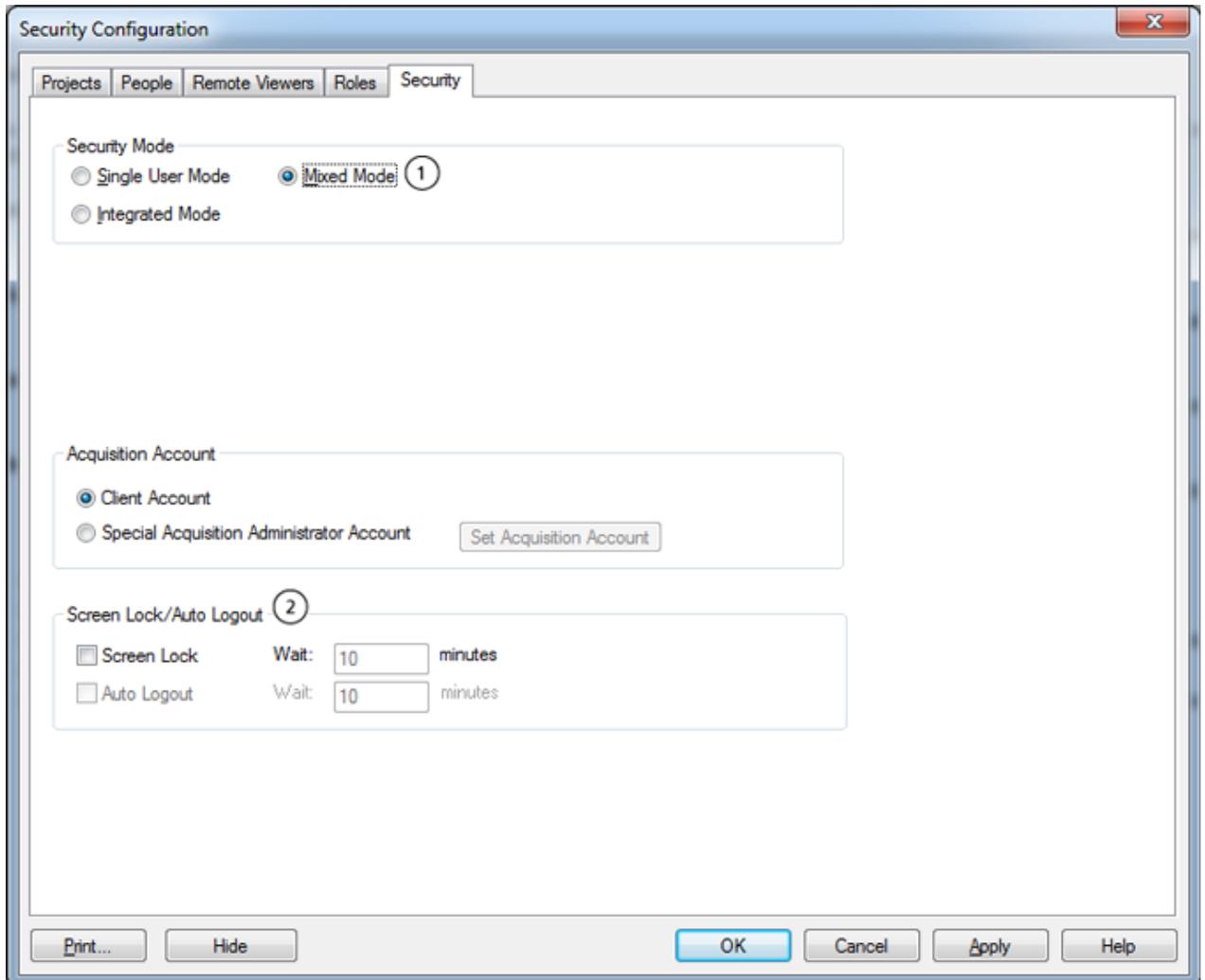
## Sicherheitskonfiguration

Abbildung 1-5: Editor „Security Configuration“ – Registerkarte „Security“



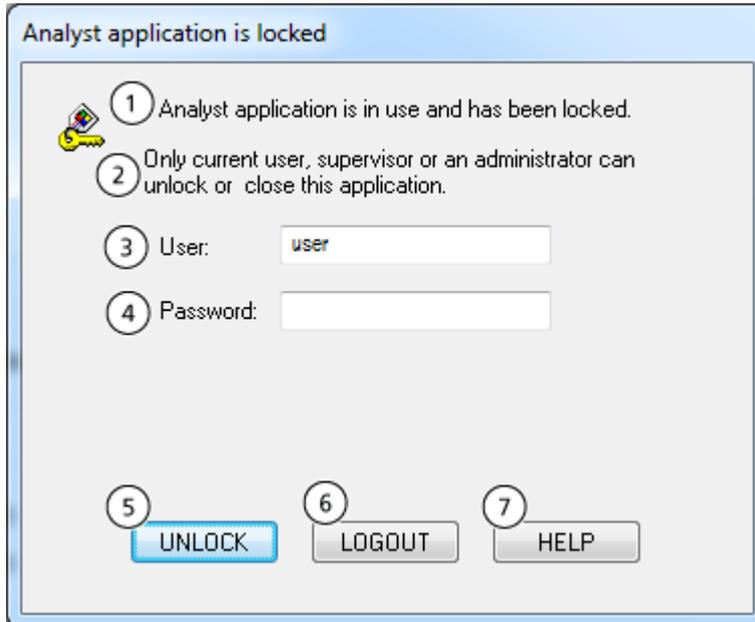
Element	Bezeichnung
1	Sicherheit
2	Sicherheitsmodus <ul style="list-style-type: none"> <li>• Einzelplatzsystem-Modus</li> <li>• Gemischter Modus</li> <li>• Integrierter Modus</li> </ul>
3	Erfassungskonto <ul style="list-style-type: none"> <li>• Kundenkonto</li> <li>• Besonderes Administrator-Erfassungskonto</li> </ul> Erfassungskonto einstellen

Abbildung 1-6: Editor „Security Configuration“ – Registerkarte „Security“ (bei ausgewähltem Modus „Mixed“)



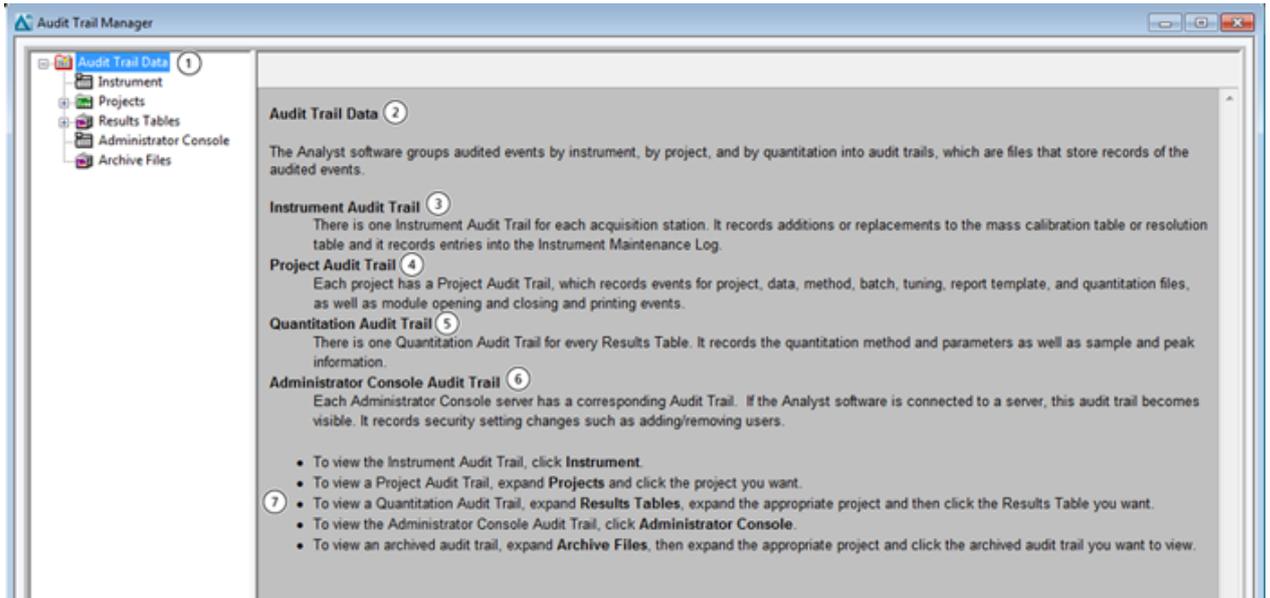
Element	Bezeichnung
1	Gemischter Modus
2	Bildschirmsperre/automatisches Abmelden <ul style="list-style-type: none"> <li>• Bildschirmsperre</li> <li>• Automatisches Abmelden</li> <li>• Warten: _ Minuten</li> <li>• Warten: _ Minuten</li> </ul>

**Abbildung 1-7: Dialogfeld „Analyst application is locked“**



Element	Bezeichnung
1	Die Analyst-Anwendung wird verwendet und wurde gesperrt.
2	Die Anwendung kann nur von einem aktuellen Benutzer, einem Supervisor oder einem Administrator entsperrt oder geschlossen werden
3	Benutzer
4	Passwort
5	ENTSPERREN
6	ABMELDEN
7	HILFE

Abbildung 1-8: Audit Trail Manager



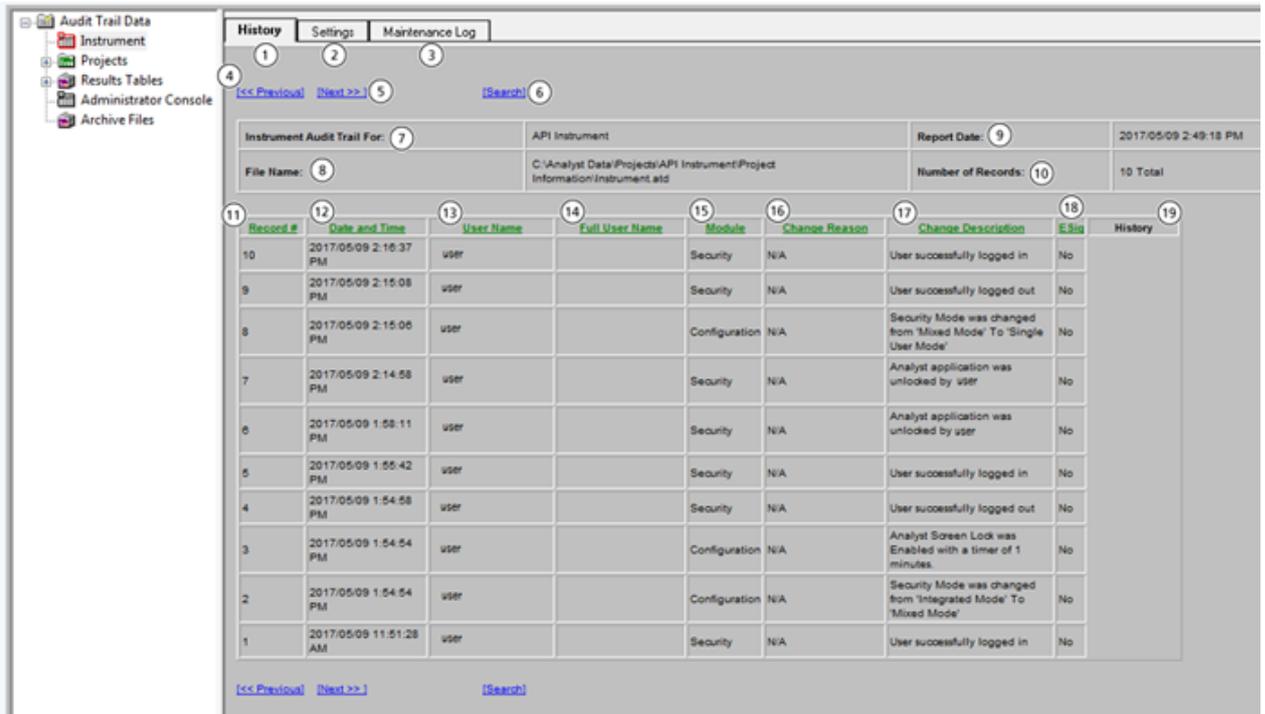
Element	Bezeichnung
1	<p>Prüfpfad-Daten</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Instrument</li> <li>• Projects</li> <li>• „Results Tables“</li> <li>• Administrator Console</li> <li>• Archive Files</li> </ul>
2	<p>Prüfpfad-Daten</p> <p>Die Analyst-Software fasst geprüfte Ereignisse nach Instrument, Projekt und Quantifizierung in Audit Trails (Prüfprotokollen) in Gruppen zusammen. Hierbei handelt es sich um Dateien, die Aufzeichnungen von geprüften Ereignissen speichern.</p>
3	<p>Instrument-Audit-Trail</p> <p>Jede Erfassungsstation verfügt über einen Instrument-Prüfpfad. In ihm werden Ergänzungen oder Austausche in der Massenkabrierungstabelle oder Auflösungstabelle sowie die Einträge im Instrumenten-Wartungsprotokoll aufgezeichnet.</p>

## Sicherheitskonfiguration

---

Element	Bezeichnung
4	<p>Projekt-Audit-Trail</p> <p>Jedes Projekt hat einen Projekt-Prüfpfad, in dem Ereignisse für Projekt, Daten, Methode, Charge, Abstimmung, Berichtsvorlage und Quantifizierungsdateien sowie Öffnen und Schließen des Moduls und Druckereignisse aufgezeichnet werden.</p>
5	<p>Quantifizierungs-Prüfpfad</p> <p>Jede Ergebnistabelle verfügt über einen Quantifizierungs-Prüfpfad. In ihm werden die Quantifizierungsmethode und die Parameter sowie Proben- und Peak-Informationen aufgezeichnet.</p>
6	<p>Administrator Console Audit-Trail</p> <p>Jeder Administrator Console Server verfügt über einen entsprechenden Prüfpfad. Wenn die Analyst-Software mit einem Server verbunden ist, wird dieser Prüfpfad angezeigt. Dieser zeichnet Änderungen an Sicherheitseinstellungen auf, wie z.B. das Hinzufügen oder Entfernen von Benutzern.</p>
7	<ul style="list-style-type: none"><li>• Zum Anzeigen des Prüfpfads klicken Sie auf „Instrument“.</li><li>• Um einen Projekt-Prüfpfad anzuzeigen, erweitern Sie „Projects“ und klicken Sie auf das entsprechende Projekt.</li><li>• Um einen Quantifizierungs-Prüfpfad anzuzeigen, erweitern Sie „Results Tables“, dann das entsprechende Projekt und klicken dann auf die entsprechende „Results Table“.</li><li>• Zum Anzeigen des Administrator Console Audit-Trail klicken Sie auf „Administrator Console“.</li><li>• Zum Anzeigen eines archivierten Prüfpfads vergrößern Sie „Archive Files“, dann das entsprechende Projekt und klicken dann auf die archivierte Prüfung, die angezeigt werden soll.</li></ul>

Abbildung 1-9: „Audit Trail Manager“, „Instrument“, Registerkarte „History“

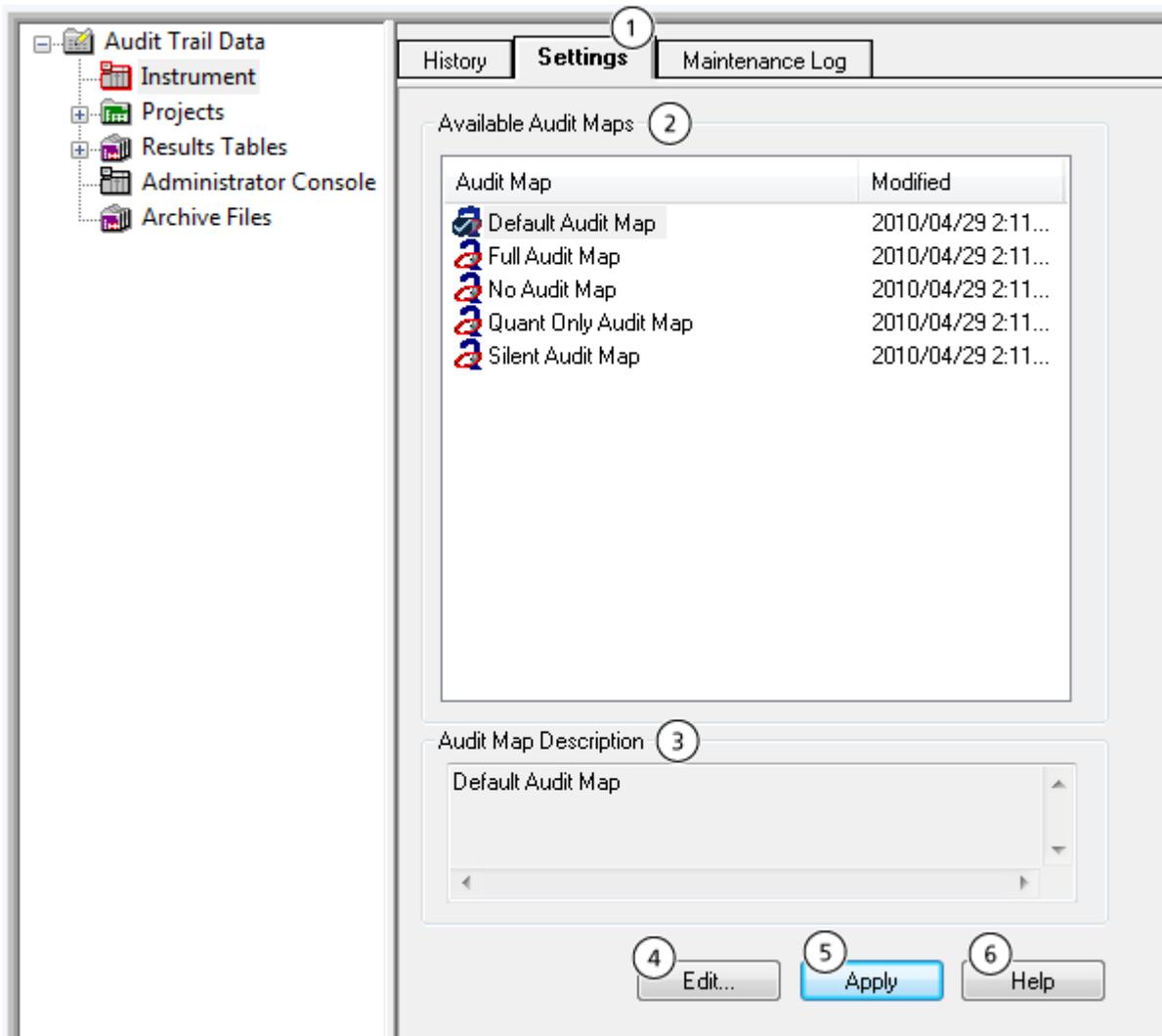


Element	Bezeichnung
1	Historie
2	Einstellungen
3	Wartungsprotokoll
4	Vorheriger
5	Weiter
6	Suchen
7	Instrument-Prüfpfad für: API-Instrument
8	Dateiname: <drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Project Information\Instrument.atd
9	Berichtsdatum
10	Anzahl der Datensätze: _ gesamt
11	Datensatz
12	Datum und Uhrzeit
13	Benutzername
14	Full User Name
15	Modul

## Sicherheitskonfiguration

Element	Bezeichnung
16	Änderungsgrund
17	Änderungsbeschreibung
18	ESig
19	Historie

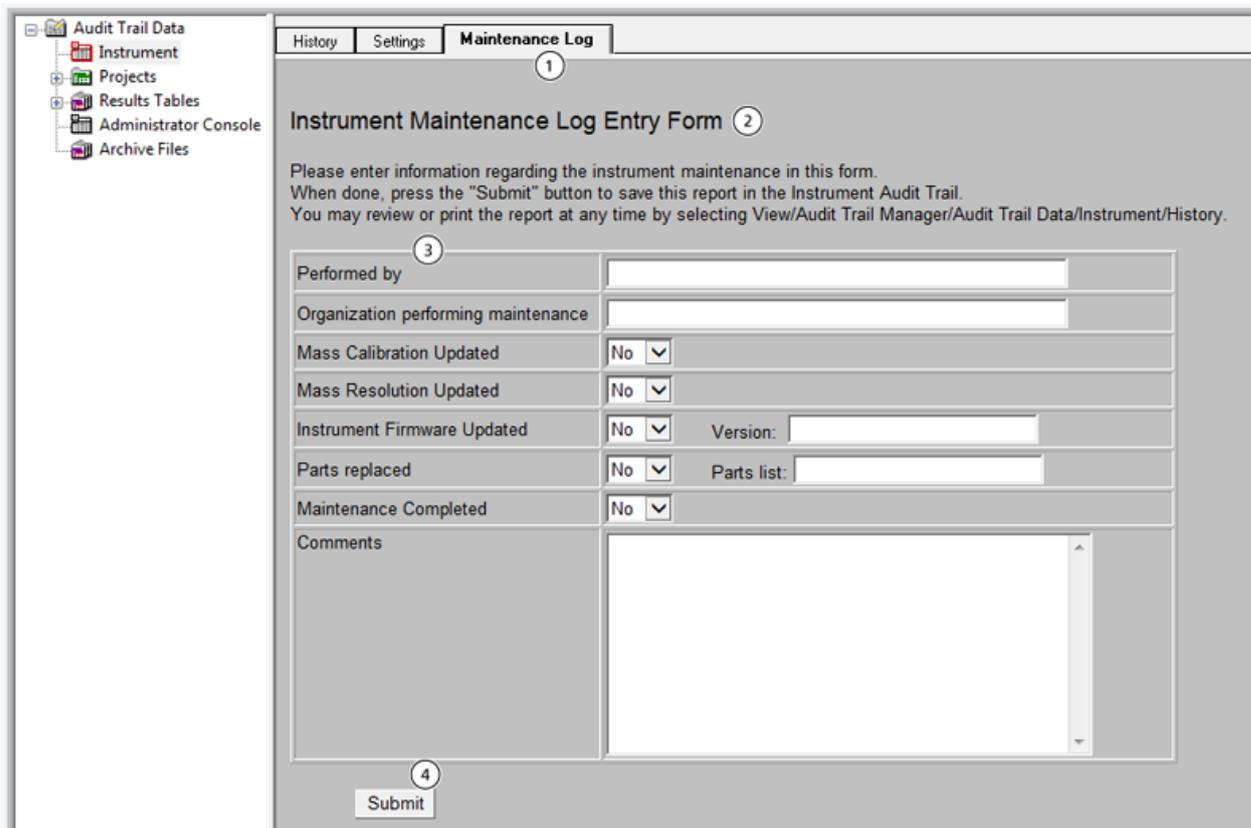
Abbildung 1-10: „Audit Trail Manager“, „Instrument“, Registerkarte „Settings“



Element	Bezeichnung
1	Dialogfelds „Settings“

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
2	Verfügbare Audit Maps <ul style="list-style-type: none"><li>• Audit-Map<ul style="list-style-type: none"><li>• Default Audit Map</li><li>• Full Audit Map</li><li>• No Audit Map</li><li>• Quant Only Audit Map</li><li>• Silent Audit Map</li></ul></li><li>• Geändert</li></ul>
3	Audit Map-Beschreibung <ul style="list-style-type: none"><li>• Default Audit Map</li></ul>
4	Edit
5	Übernehmen
6	Hilfe

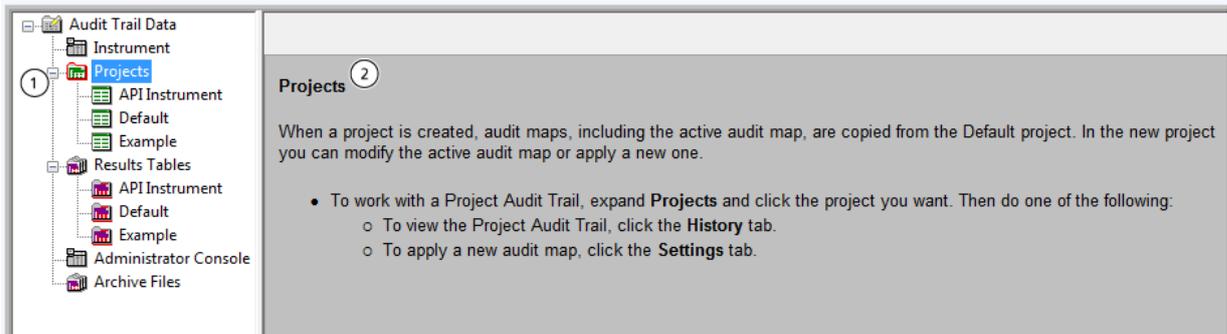
Abbildung 1-11: „Audit Trail Manager“, „Instrument“, Registerkarte „Maintenance Log“



Element	Bezeichnung
1	Wartungsprotokoll
2	<p>Eingabeformular für Wartungsprotokoll</p> <p>Geben Sie die Informationen zur Instrumentenwartung in dieses Formular ein. Wenn Sie fertig sind, klicken Sie auf „Submit“, um den Bericht im Instrument-Prüfpfad zu speichern. Sie können den Bericht jederzeit überprüfen oder ausdrucken, indem Sie „View/Audit Trail Manager/Audit Trail Data/Instrument History“ auswählen.</p>

Element	Bezeichnung
3	<p>Verfügbare Audit Maps</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Durchgeführt von</li> <li>• Organisation, die Wartung durchführt</li> <li>• Massenkalisierung aktualisiert: Ja, Nein</li> <li>• Massenauflösung aktualisiert: Ja, Nein</li> <li>• Instrumentenfirmware aktualisiert: Ja, Nein                             <ul style="list-style-type: none"> <li>• Version</li> </ul> </li> <li>• Teile ersetzt: Ja, Nein                             <ul style="list-style-type: none"> <li>• Stückliste</li> </ul> </li> <li>• Wartung abgeschlossen: Ja, Nein</li> <li>• Kommentar</li> </ul>
4	Submit

Abbildung 1-12: Projects

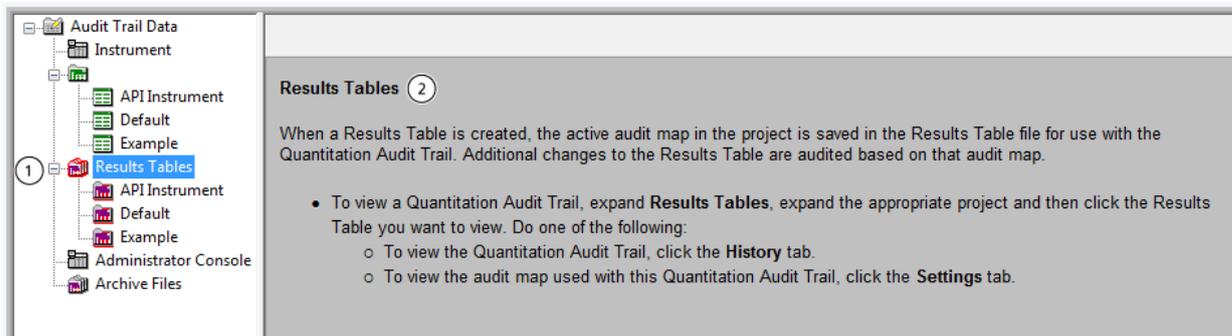


Element	Bezeichnung
1	<p>Projects</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• API-Instrument</li> <li>• Standard</li> <li>• Beispiel</li> </ul>

## Sicherheitskonfiguration

Element	Bezeichnung
2	<p>Projects</p> <p>Wenn ein Projekt erstellt wird, werden Audit Maps, einschließlich der aktiven Audit Map, aus dem Standard-Projekt kopiert. In dem neuen Projekt können Sie die aktive Audit Map ändern oder eine neue anwenden.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Um mit einem Projekt-Prüfpfad zu arbeiten, erweitern Sie „Projects“ und klicken Sie auf das gewünschte Projekt. Dann führen Sie einen der folgenden Schritte aus: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Zum Anzeigen des Projekt-Prüfpfads klicken Sie auf die Registerkarte „History“.</li> <li>• Zum Anwenden einer neuen Audit Map klicken Sie auf die Registerkarte „Settings“.</li> </ul> </li> </ul>

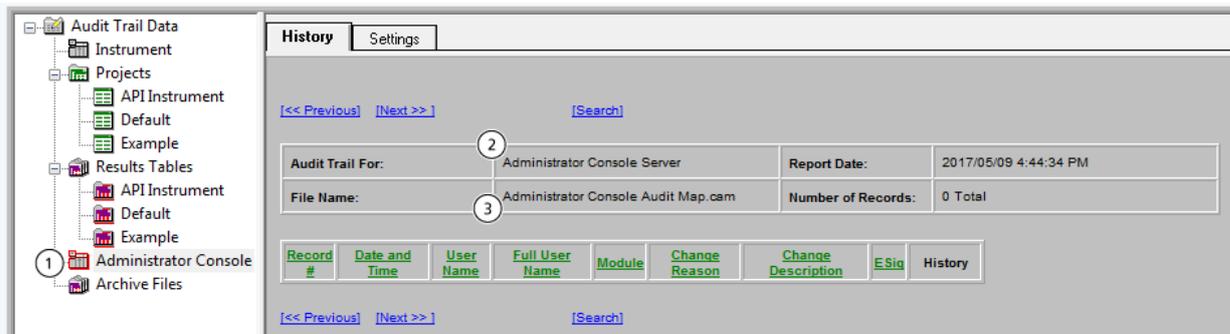
Abbildung 1-13: „Results Tables“



Element	Bezeichnung
1	<p>„Results Tables“</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• API-Instrument</li> <li>• Standard</li> <li>• Beispiel</li> </ul>

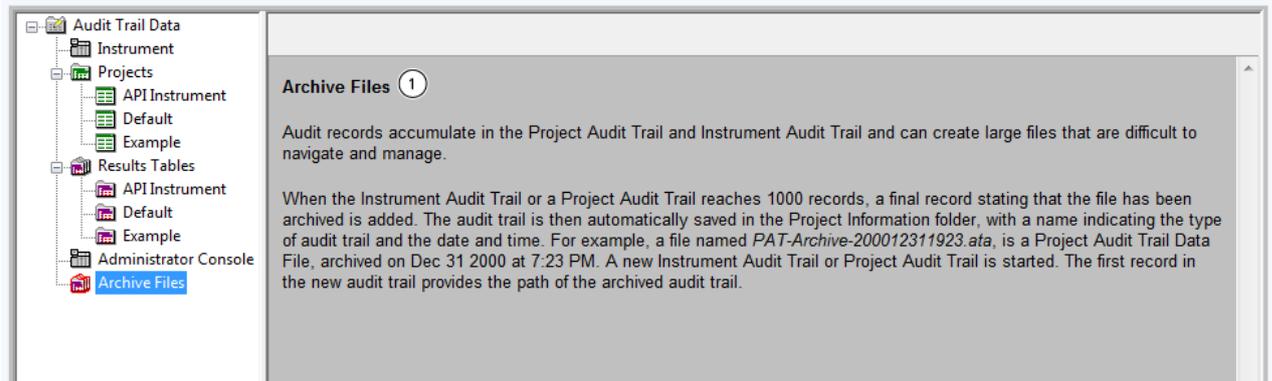
Element	Bezeichnung
2	<p>„Results Tables“</p> <p>Wenn eine Ergebnistabelle erstellt wird, wird die im Projekt aktive Audit Map in der Ergebnistabellendatei zur Verwendung mit dem Quantifizierungs-Prüfpfad gespeichert. Zusätzliche Änderungen an der Ergebnistabelle werden anhand dieser Audit Map geprüft.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Um einen Quantifizierungs-Prüfpfad anzuzeigen, erweitern Sie „Results Tables“, dann das entsprechende Projekt und klicken dann auf die gewünschte „Results Table“. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus: <ul style="list-style-type: none"> <li>Zum Anzeigen des Quantifizierungs-Prüfpfads klicken Sie auf die Registerkarte „History“.</li> <li>Zum Anzeigen der Audit Map, die zusammen mit diesem Quantifizierungs-Prüfpfad verwendet wird, klicken Sie auf die Registerkarte „Settings“.</li> </ul> </li> </ul>

Abbildung 1-14: Administrator Console



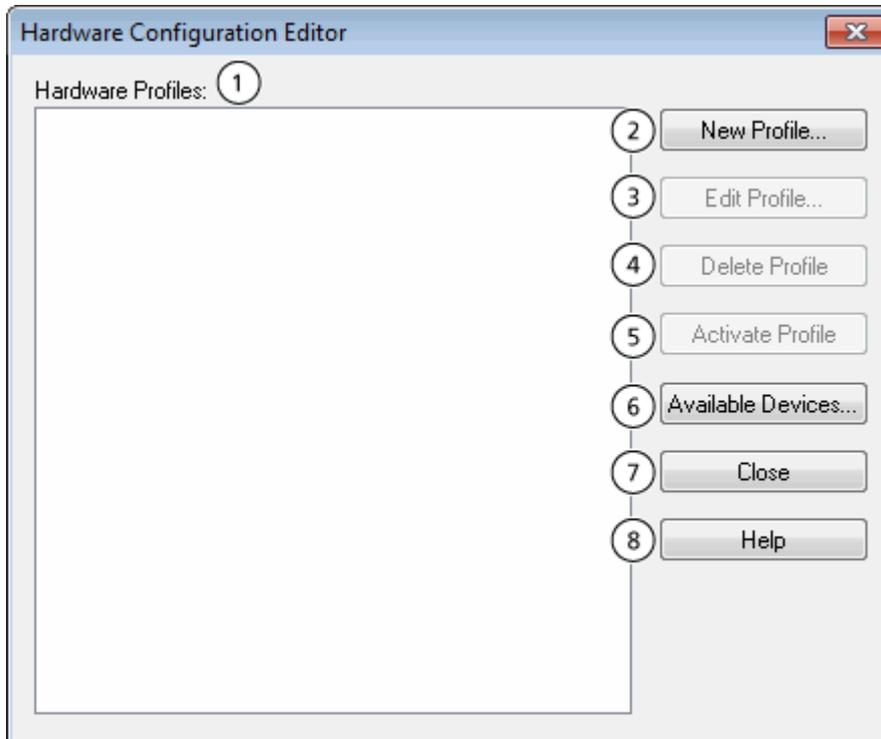
Element	Bezeichnung
1	Administrator Console
2	Prüfpfad für: Administrator Console Server
3	Dateiname: Administrator Console Audit Map.cam

Abbildung 1-15: Archiv-Dateien



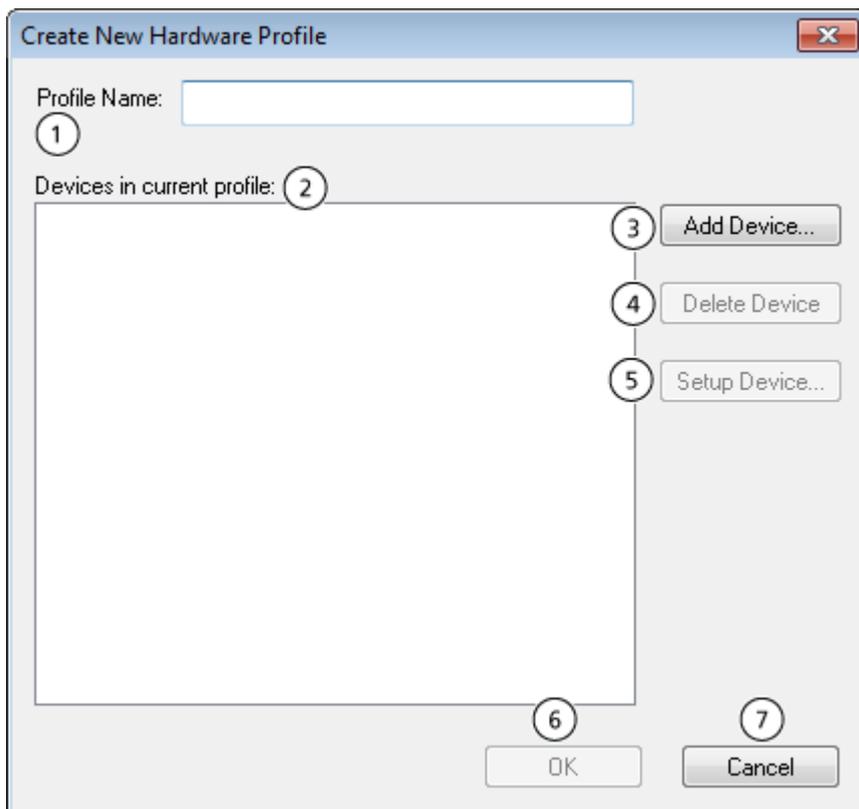
Element	Bezeichnung
1	<p>Archiv-Dateien</p> <p>Audit-Aufzeichnungen sammeln sich im Projekt-Audit-Trail und im Geräte-Audit-Trail an. Die resultierenden Dateien können sehr groß werden und daher schwierig zu navigieren und zu verwalten sein.</p> <p>Wenn ein Geräte-Audit-Trail oder ein Projekt-Audit-Trail 1000 Aufzeichnungen erreicht hat, wird eine letzte Aufzeichnung hinzugefügt, die besagt, dass die Datei archiviert wurde. Der Prüfpfad wird dann automatisch im Ordner „Project Information“ mit einem Namen gespeichert, der den Typ des Prüfpfads und das Datum und die Uhrzeit angibt. Zum Beispiel handelt es sich bei einer Datei mit dem Namen <i>PAT-Archive-200012311923.ata</i> um eine Projekt-Prüfpfad-Datendatei, archiviert am 31. Dezember 2000 um 19:23 Uhr. Ein neuer Instrument-Prüfpfad oder Projekt-Prüfpfad wird gestartet. Der erste Datensatz im neuen Prüfpfad gibt den Pfad des archivierten Prüfpfads an.</p>

Abbildung 2-1: Hardware Configuration Editor (Hardwarekonfigurationseditor)



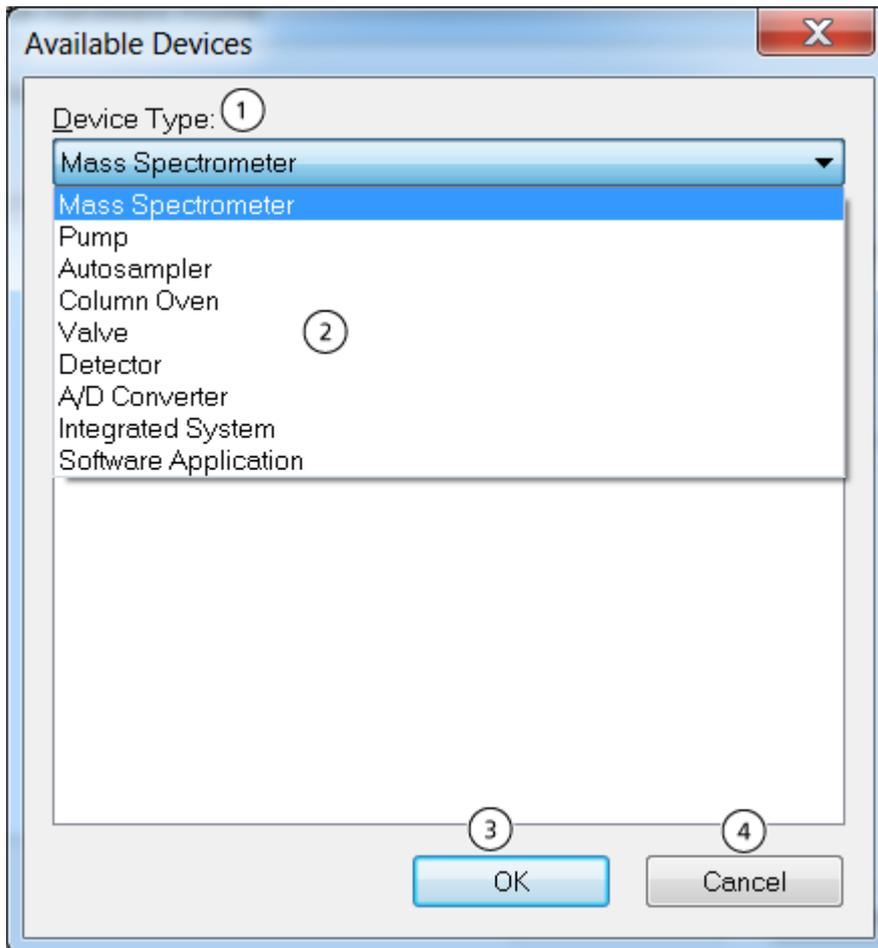
Element	Bezeichnung
1	Hardwareprofile
2	Neues Profil
3	Parameter bearbeiten
4	Profil löschen
5	Profil aktivieren (Profil deaktivieren)
6	Verfügbare Geräte
7	Schließen
8	Hilfe

Abbildung 2-2: Create New Hardware Profile



Element	Bezeichnung
1	Profilname
2	Geräte im aktuellen Profil
3	Gerät hinzufügen
4	Löschen Gerät
5	Gerät einrichten
6	OK
7	Abbrechen

Abbildung 2-3: Verfügbare Geräte

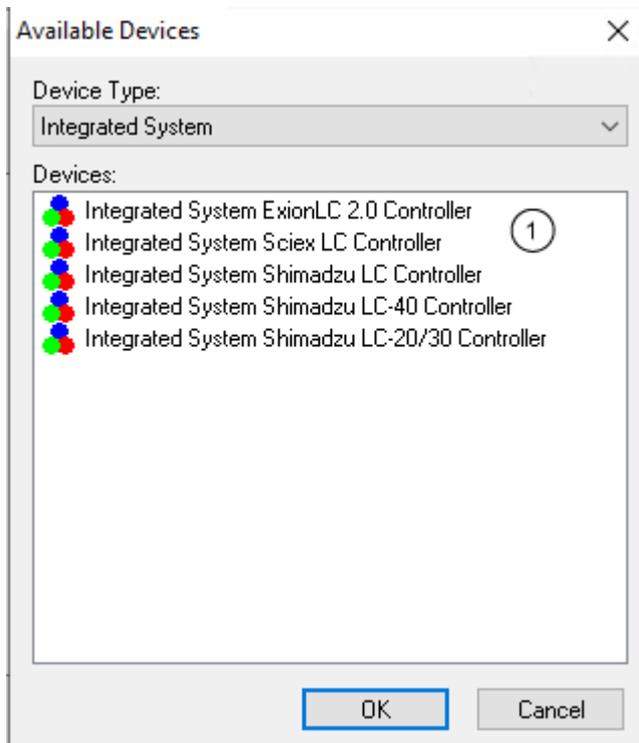


Element	Bezeichnung
1	Geräteart
2	Massenspektrometer Pumpe Autosampler Säulenofen Ventil Detektor A/D-Umwandler Integriertes System Software-Anwendung
3	OK

## Hardwarekonfiguration

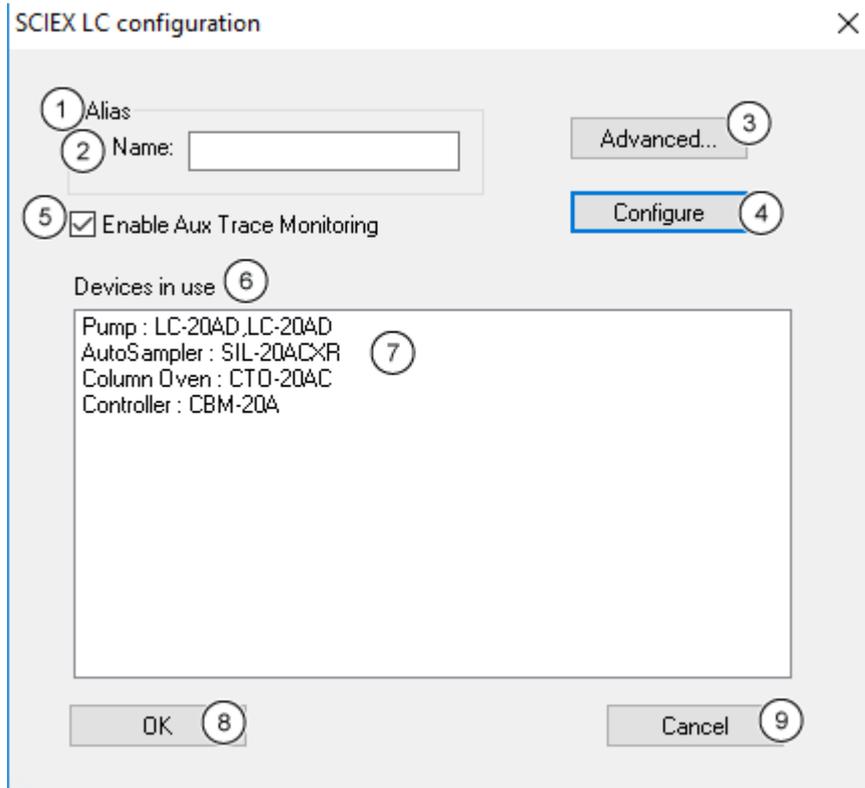
Element	Bezeichnung
4	Abbrechen

Abbildung 2-4: „Available Devices“, „Integrated System“ ausgewählt



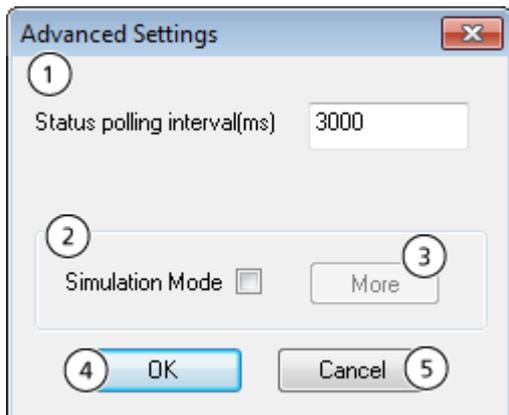
Element	Bezeichnung
1	Geräte <ul style="list-style-type: none"> <li>• Integriertes System ExionLC 2.0 Controller</li> <li>• Integriertes System Sciex LC-Controller</li> <li>• Integriertes System Shimadzu LC-Controller</li> <li>• Integriertes System Shimadzu LC-40 Controller</li> <li>• Integriertes System Shimadzu LC-20/30 Controller</li> </ul>

Abbildung 2-5: SCIEX LC Configuration



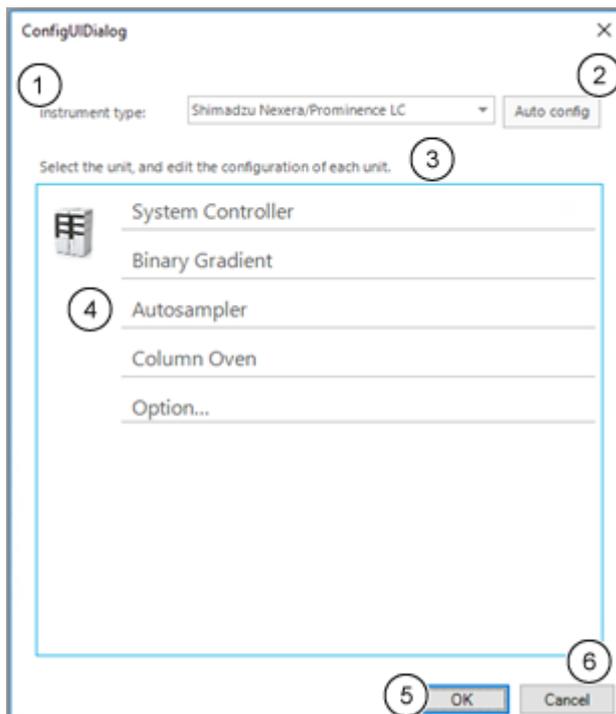
Element	Bezeichnung
1	Alias
2	Name
3	Erweitert
4	Konfigurieren
5	Überwachung zus. Kurven aktivieren
6	Genutzte Geräte
7	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Pumpe</li> <li>• AutoSampler</li> <li>• Säulenofen</li> <li>• Controller</li> </ul>
8	OK
9	Abbrechen

Abbildung 2-6: Erweiterte Einstellungen



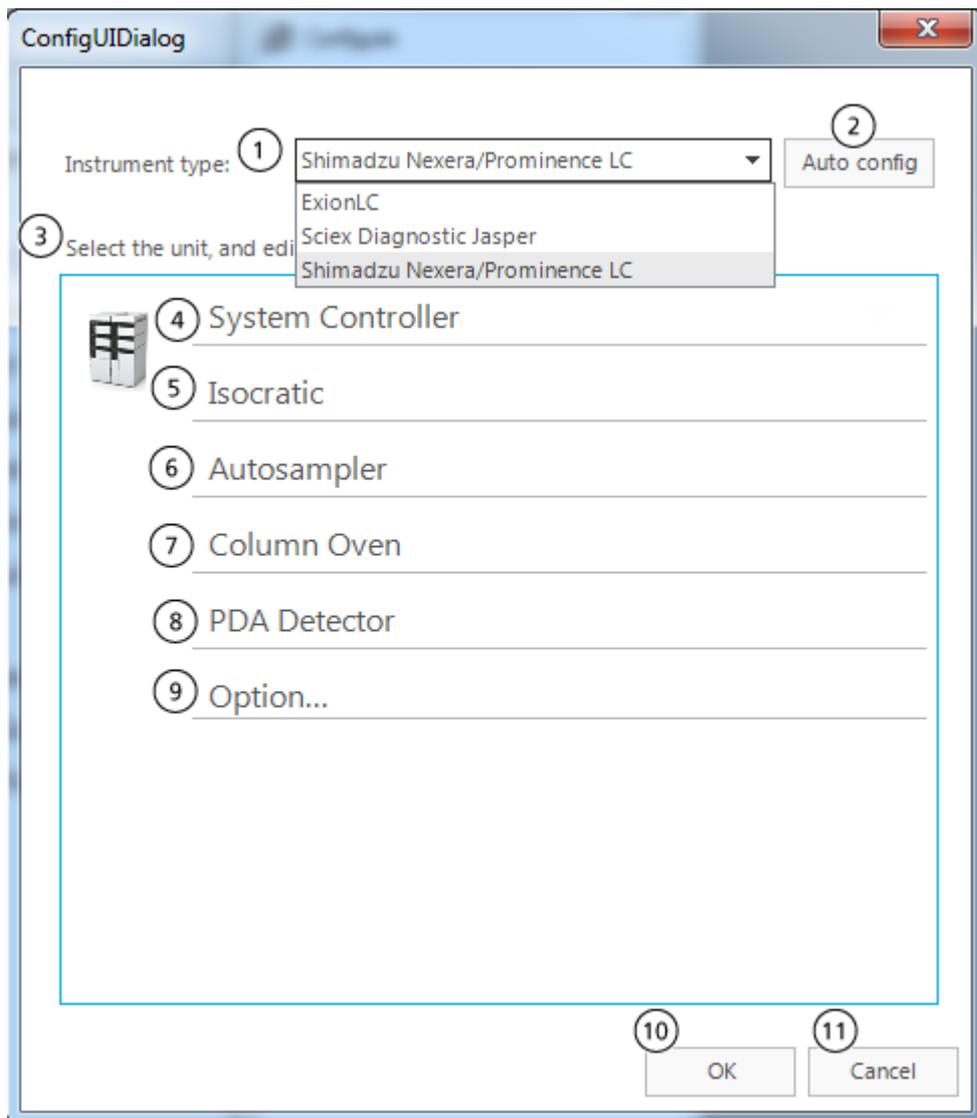
Element	Bezeichnung
1	Statusabfrageintervall (ms)
2	Simulationsmodus
3	Mehr
4	OK
5	Abbrechen

Abbildung 2-7: ConfigUIDialog



<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
1	Instrumententyp
2	Autom. Konfiguration
3	Einheit auswählen und die Konfiguration jeder Einheit bearbeiten
4	<ul style="list-style-type: none"><li>• System-Controller</li><li>• Binärer Gradient</li><li>• Autosampler</li><li>• Säulenofen</li><li>• Option</li></ul>
5	OK
6	Abbrechen

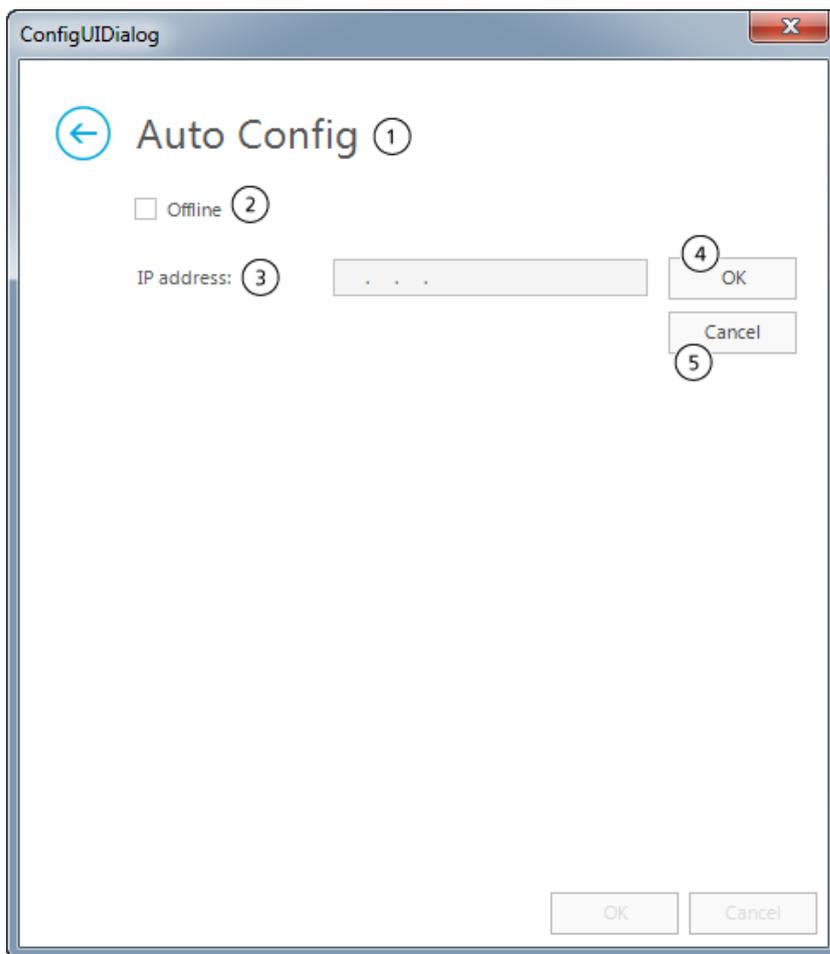
Abbildung 2-8: ConfigUIDialog



Element	Bezeichnung
1	Instrumententyp <ul style="list-style-type: none"> <li>• ExionLC</li> <li>• Sciex Diagnostic Jasper</li> <li>• Shimadzu Nexera/Prominence LC</li> </ul>
2	Autom. Konfiguration
3	Einheit auswählen und die Konfiguration jeder Einheit bearbeiten.
4	System-Controller
5	Isokratisch (oder binärer Gradient)

Element	Bezeichnung
6	Autosampler
7	Column Oven
8	PDA-Detektor
9	Option
10	OK
11	Abbrechen

Abbildung 2-9: Dialogfeld „Auto Configuration“

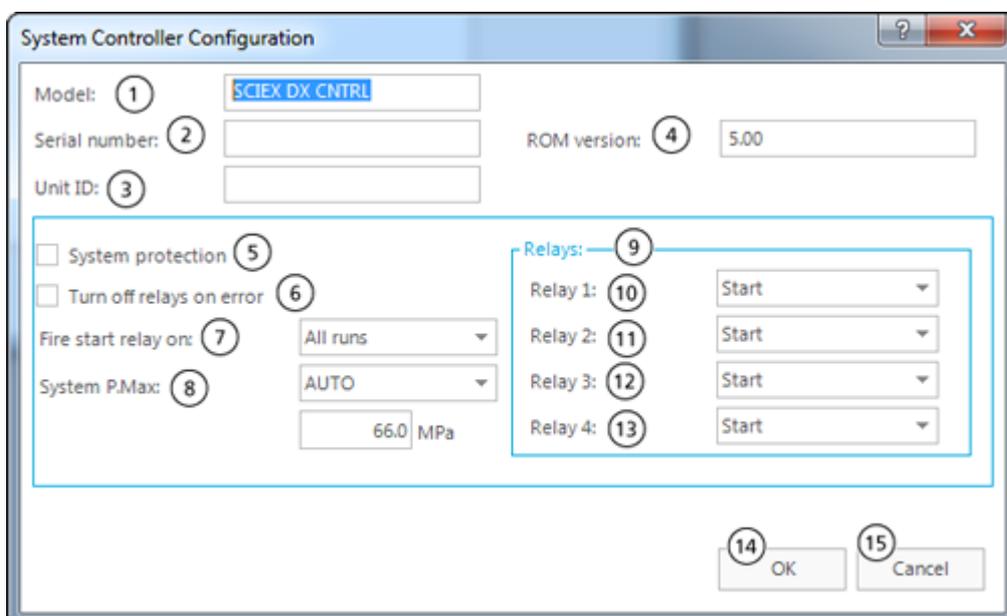


Element	Bezeichnung
1	Autom. Konfiguration
2	Offline
3	IP-Adresse

## Hardwarekonfiguration

Element	Bezeichnung
4	OK
5	Abbrechen

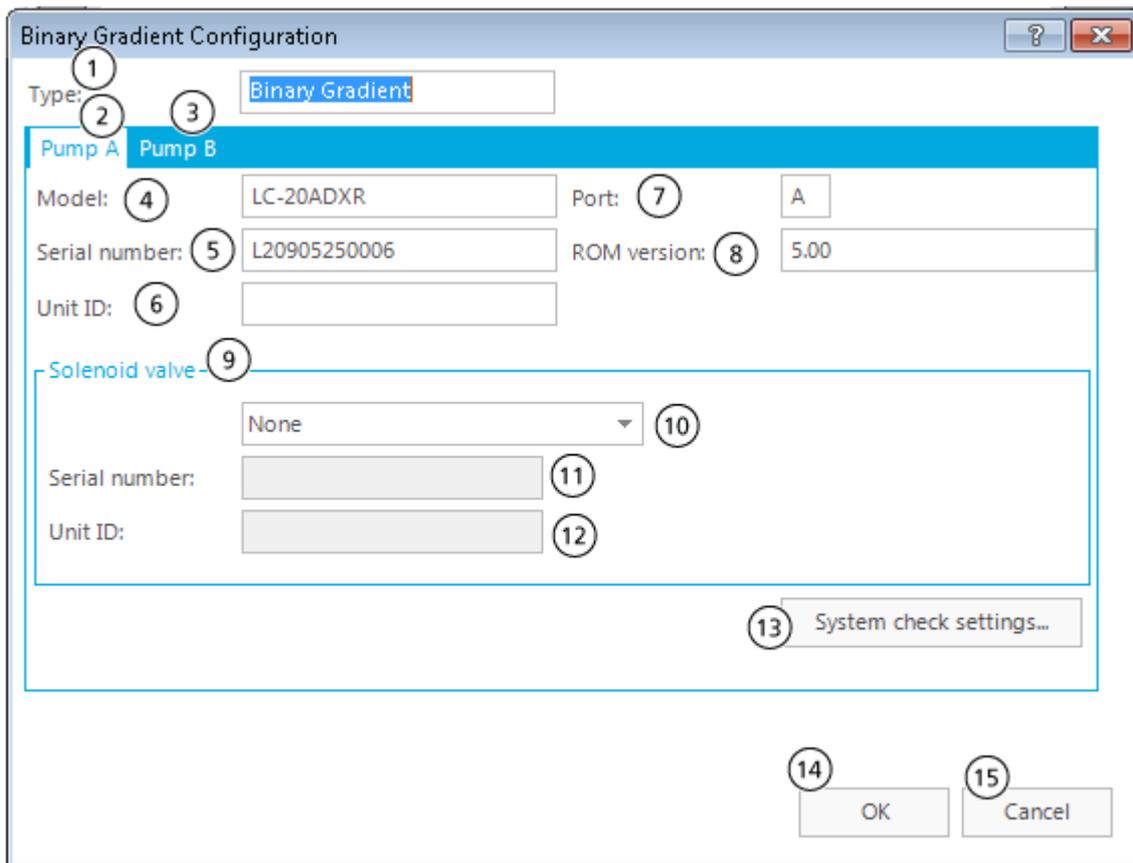
Abbildung 2-10: System Controller Configuration



Element	Bezeichnung
1	Modell <ul style="list-style-type: none"> <li>• SCIEX DX CNTRL (wenn das Jasper System verwendet wird)</li> <li>• CBM-20A (bei Shimadzu LC-Serien)</li> <li>• Controller (bei den Systemen ExionLC AC oder ExionLC AD)</li> </ul>
2	Seriennummer
3	Einheits-ID
4	ROM-Version
5	Systemschutz
6	Relais bei Fehler ausschalten
7	Startrelais auslösen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Deaktivieren</li> <li>• Alle Durchläufe</li> <li>• Injektionsvolumen (ausschließlich)</li> </ul>

Element	Bezeichnung
8	System P.Max <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aus</li> <li>• AUTO</li> <li>• MANUAL</li> </ul> _ mPa (Nur verfügbar, wenn entweder AUTO oder MANUAL unter „System P.Max“ ausgewählt ist)
9	Relais
10	Relais 1 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Start</li> <li>• Stopp</li> <li>• Fehler</li> <li>• Ereignisliste</li> </ul>
11	Relais 2 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Start</li> <li>• Stopp</li> <li>• Fehler</li> <li>• Ereignisliste</li> </ul>
12	Relais 3 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Start</li> <li>• Stopp</li> <li>• Fehler</li> <li>• Ereignisliste</li> </ul>
13	Relais 4 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Start</li> <li>• Stopp</li> <li>• Fehler</li> <li>• Ereignisliste</li> </ul>
14	OK
15	Abbrechen

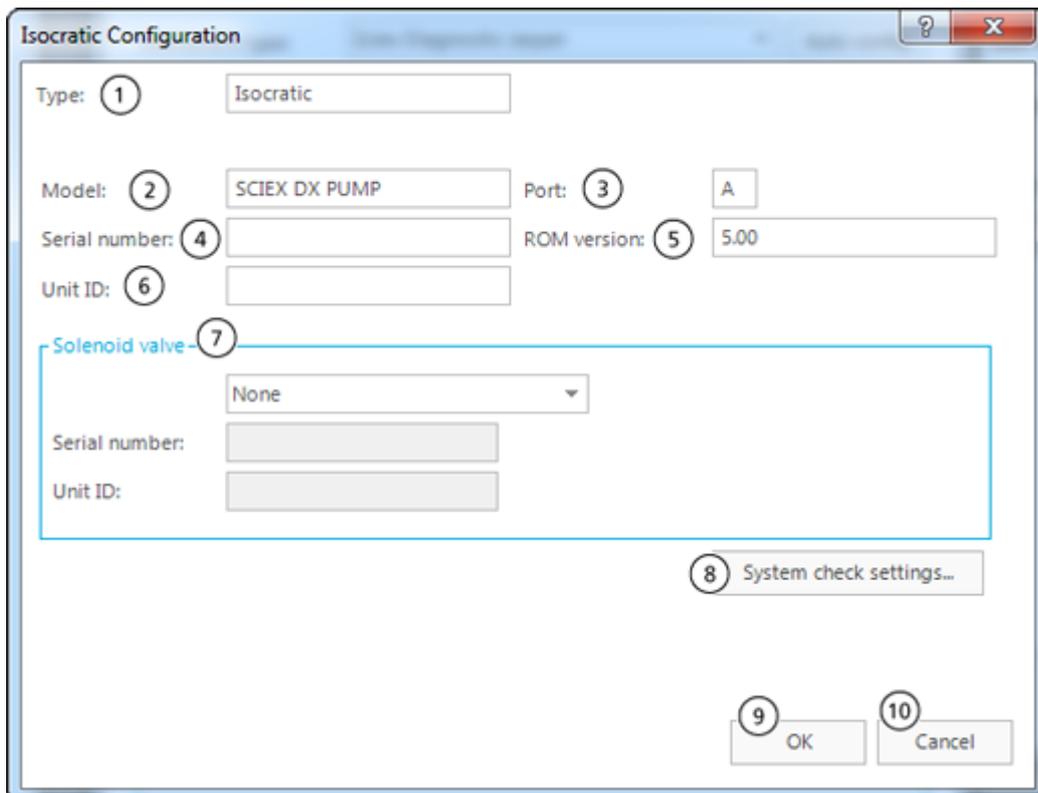
Abbildung 2-11: „Binary Gradient Configuration“



Element	Bezeichnung
1	Typ <ul style="list-style-type: none"> <li>Binärer Gradient</li> </ul>
2	Pumpe A
3	Pumpe B
4	Modell <ul style="list-style-type: none"> <li>SCIEX DX-PUMPE (wenn Jasper System verwendet wird)</li> <li>LC-20ADXR (bei Shimadzu LC-Serien)</li> <li>AC Pumpe oder AD Pumpe (bei den Systemen ExionLC AC oder ExionLC AD)</li> </ul>
5	Seriennummer
6	Einheits-ID

Element	Bezeichnung
7	Anschluss- <ul style="list-style-type: none"> <li>• A (wenn die Registerkarte „Pump A“ ausgewählt wird)</li> <li>• B (wenn die Registerkarte „Pump B“ ausgewählt wird)</li> </ul>
8	ROM-Version
9	Wegeventil
10	Keine
11	Seriennummer
12	Einheits-ID
13	Einstellungen zur Systemprüfung
14	OK
15	Abbrechen

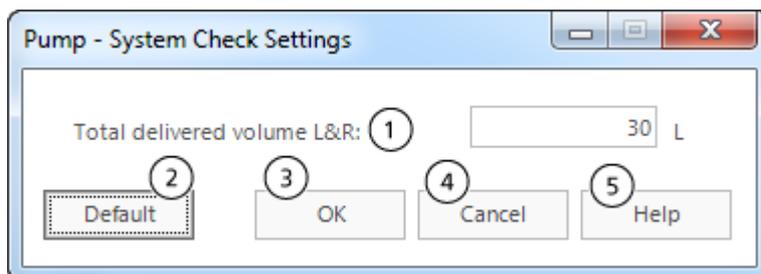
Abbildung 2-12: Isocratic Configuration



## Hardwarekonfiguration

Element	Bezeichnung
1	Typ <ul style="list-style-type: none"> <li>• Isokratisch</li> </ul>
2	Modell <ul style="list-style-type: none"> <li>• SCIEX DX-PUMPE (wenn Jasper System verwendet wird)</li> <li>• LC-20ADXR (bei Shimadzu LC-Serien)</li> <li>• AC Pumpe oder AD Pumpe (bei den Systemen ExionLC AC oder ExionLC AD)</li> </ul>
3	Anschluss <ul style="list-style-type: none"> <li>• A</li> </ul>
4	Seriennummer
5	ROM-Version
6	Einheits-ID
7	Wegeventil <ul style="list-style-type: none"> <li>• Keine</li> <li>• Seriennummer</li> <li>• Einheits-ID</li> </ul>
8	Einstellungen zur Systemprüfung
9	OK
10	Abbrechen

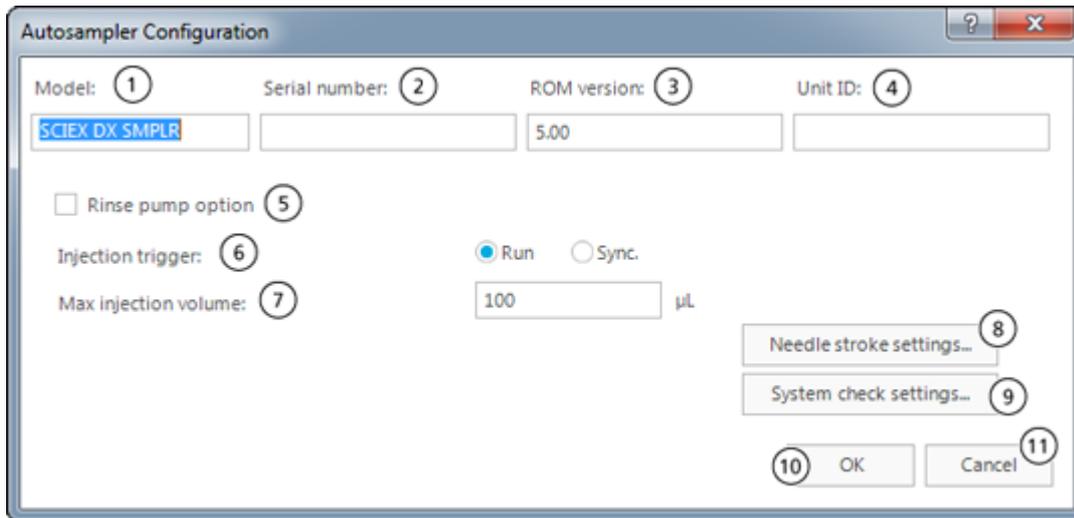
Abbildung 2-13: Pump - System Check Settings



Element	Bezeichnung
1	Gesamtes abgegebenes Volumen links und rechts: _L
2	Standard

Element	Bezeichnung
3	OK
4	Abbrechen
5	Hilfe

Abbildung 2-14: Autosampller-Konfiguration

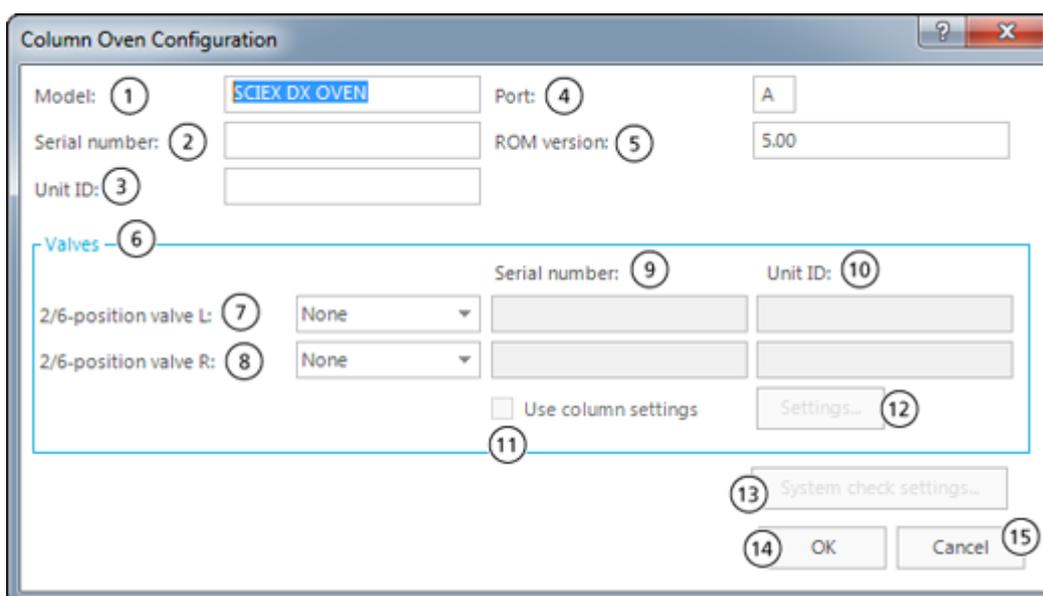


Element	Bezeichnung
1	Modell <ul style="list-style-type: none"> <li>• SCIEX DX SMPLR (wenn Jasper System verwendet wird)</li> <li>• SIL-20ACXR (bei Shimadzu LC-Serien)</li> <li>• AC Autosampler oder AD Autosampler (bei den Systemen ExionLC AC oder ExionLC AD)</li> </ul>
2	Seriennummer
3	ROM-Version
4	Einheits-ID
5	Option zum Spülen der Pumpe (nicht verfügbar bei ExionLC AD System)
6	Injektionsauslöser <ul style="list-style-type: none"> <li>• Durchführen</li> <li>• Sync</li> </ul> Injektionstyp: Direkte Injektion (nur verfügbar, wenn der AD-Autosampler im ExionLC AD System verwendet wird)

## Hardwarekonfiguration

Element	Bezeichnung
7	Max. Injektionsvolumen: _ µl
8	Einstellungen für den Nadelhub
9	Einstellungen zur Systemprüfung
10	OK
11	Abbrechen

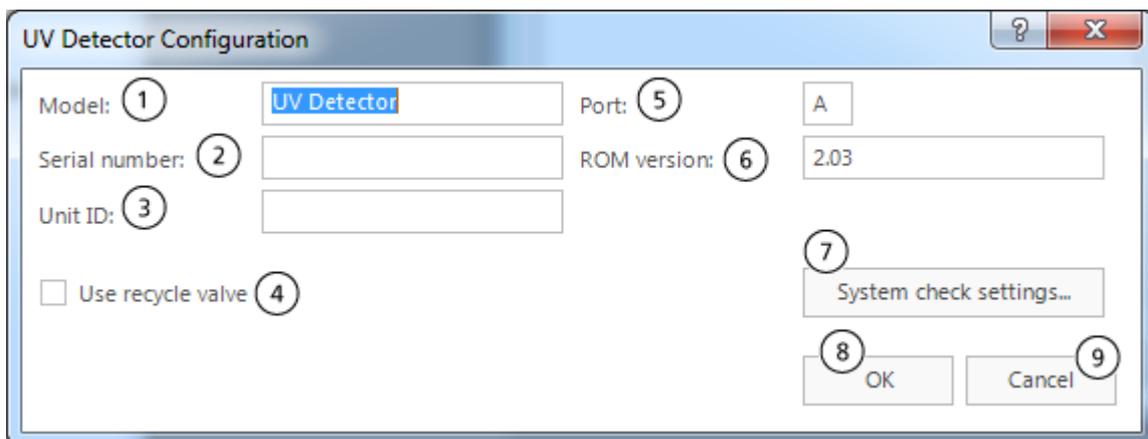
Abbildung 2-15: Column Oven Configuration



Element	Bezeichnung
1	Modell <ul style="list-style-type: none"> <li>• SCIEX DX-Ofen (wenn Jasper System verwendet wird)</li> <li>• CTO-30A (bei Shimadzu LC-Serien)</li> <li>• AC Column Oven oder AD Column Oven (bei den Systemen ExionLC AC oder ExionLC AD)</li> </ul>
2	Seriennummer
3	Einheits-ID
4	Anschluss-
5	ROM-Version
6	Ventile

Element	Bezeichnung
7	2/6-Positionsventil links • Keine
8	2/6-Positionsventil rechts • Keine
9	Seriennummer
10	Einheits-ID
11	Säuleneinstellungen verwenden
12	Dialogfelds „Settings“
13	Einstellungen zur Systemprüfung
14	OK
15	Abbrechen

Abbildung 2-16: Dialogfeld „UV Detector Configuration“

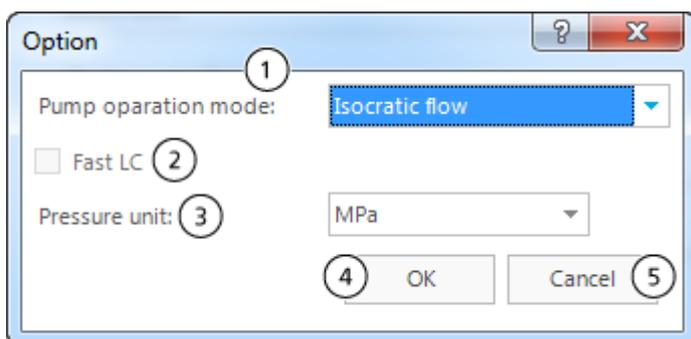


Element	Bezeichnung
1	Modell • PDA-Detektor (für das ExionLC AC System) • UV-Detektor (für das ExionLC AD System)
2	Seriennummer
3	Einheits-ID
4	Rückführventil verwenden (bei ExionLC AD-System)
5	Anschluss (bei ExionLC AD-System)

## Hardwarekonfiguration

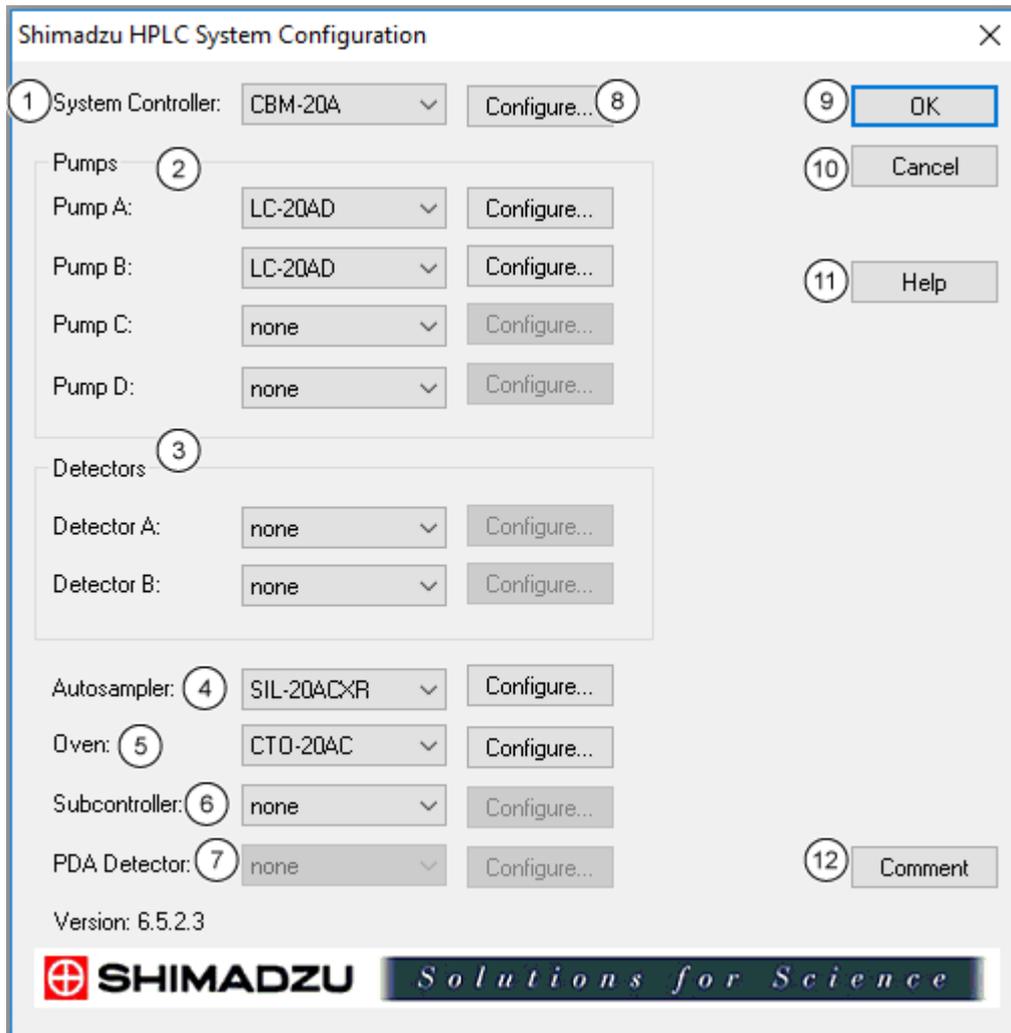
Element	Bezeichnung
6	ROM-Version
7	Einstellungen zur Systemprüfung
8	OK
9	Abbrechen

Abbildung 2-17: Option



Element	Bezeichnung
1	Pumpenbetriebsmodus <ul style="list-style-type: none"> <li>• Isokratischer Fluss</li> <li>• Binärer Gradient</li> </ul>
2	Schnell LC
3	Druckeinheit <ul style="list-style-type: none"> <li>• kgf/cm<sup>2</sup></li> <li>• psi</li> <li>• MPa</li> <li>• bar</li> </ul>
4	OK
5	Abbrechen

**Abbildung 2-18: Shimadzu LC System-Konfiguration mit dem Integrated System Shimadzu LC Controller**

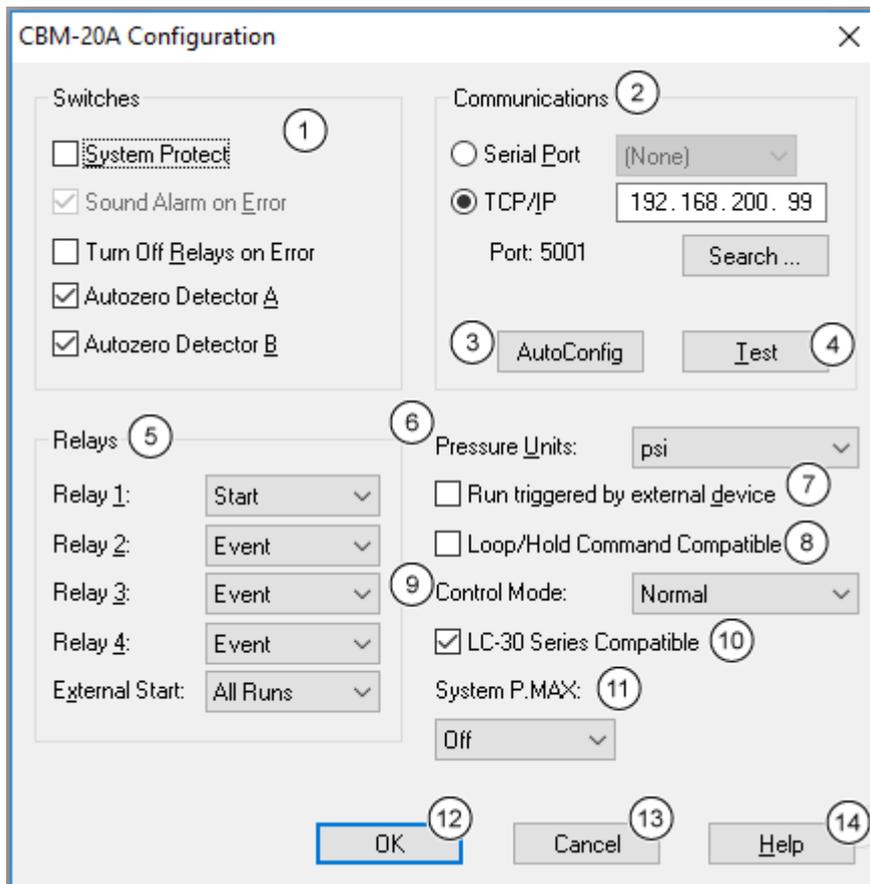


Element	Bezeichnung
1	System-Controller
2	Pumpen • Konfigurieren
3	Detektoren • Konfigurieren
4	Autosampler • Konfigurieren

## Hardwarekonfiguration

Element	Bezeichnung
5	Ofen • Konfigurieren
6	Subcontroller • Konfigurieren
7	PDA-Detektor • Konfigurieren
8	Konfigurieren
9	OK
10	Abbrechen
11	Hilfe
12	Kommentar

Abbildung 2-19: (Shimadzu) CBM-20A Configuration

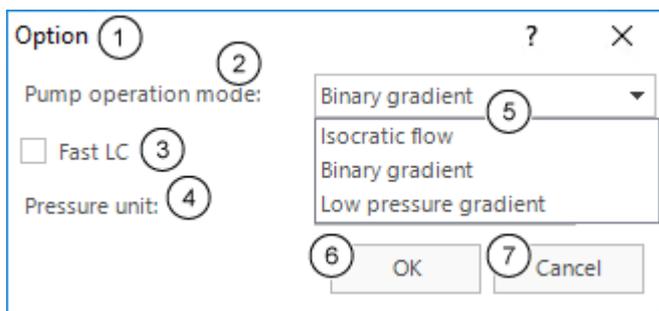


Element	Bezeichnung
1	<p>Schalter</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Systemschutz</li> <li>• Akustischer Alarm bei Fehler</li> <li>• Relais bei Fehler ausschalten</li> <li>• Autozero Detektor A</li> <li>• Autozero Detektor B</li> </ul>
2	<p>Kommunikationen</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Serielle Schnittstelle</li> <li>• TCP/IP</li> <li>• Anschluss</li> <li>• Suchen</li> </ul>
3	AutoConfig
4	Test
5	<p>Relais</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Relais 1 – Relais 4 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Start</li> <li>• Stopp</li> <li>• Fehler</li> <li>• Ereignisliste</li> </ul> </li> <li>• Externer Start <ul style="list-style-type: none"> <li>• Deaktivieren</li> <li>• Alle Durchläufe</li> <li>• Nur Injizieren</li> </ul> </li> </ul>
6	Druckeinheiten (psi, kgf/cm <sup>2</sup> , mPa, Bar)
7	Durchlauf von externem Gerät ausgelöst
8	Loop/Hold-Befehl kompatibel
9	Steuerungsmodus (Normal, Schnell-LC)
10	Kompatibel mit LC-30 Series
11	System P.MAX

## Hardwarekonfiguration

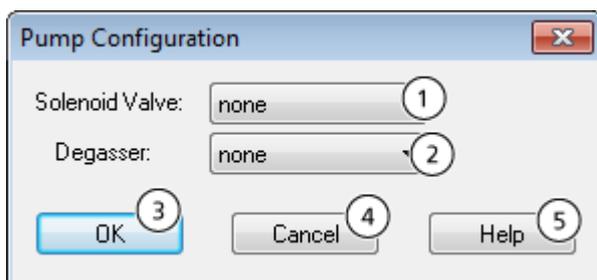
Element	Bezeichnung
12	OK
13	Abbrechen
14	Hilfe

**Abbildung 2-20: Dialogfeld „Option“**



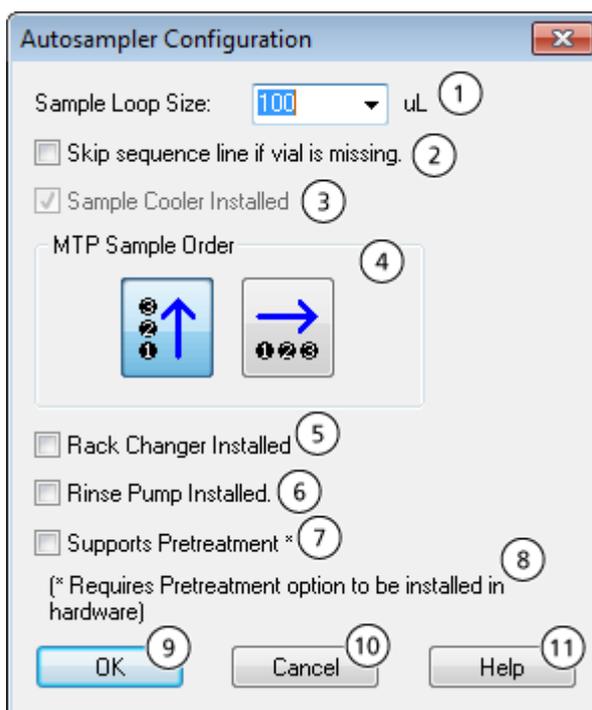
Element	Bezeichnung
1	Option
2	Pumpenbetriebsmodus
3	Schnell LC
4	Druckeinheit
5	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Binärer Gradient</li> <li>• Isokratischer Fluss</li> <li>• Binärer Gradient</li> <li>• Niederdruck-Gradient</li> </ul>
6	OK
7	Abbrechen

**Abbildung 2-21: (Shimadzu) Pump Configuration**



Element	Bezeichnung
1	Solenoidventil (keine)
2	Entgaser (Keine)
3	OK
4	Abbrechen
5	Hilfe

Abbildung 2-22: (Shimadzu) Autosampler Configuration



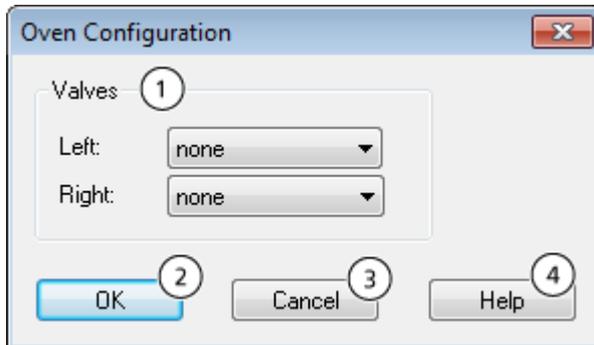
Element	Bezeichnung
1	Probenschleifen-Größe: _ ul
2	Sequenz überspringen, wenn ein Fläschchen fehlt.
3	Probenkühler installiert
4	Reihenfolge der MTP-Probe
5	Rack-Wechsler installiert
6	Spülungspumpe installiert
7	Unterstützt Vorbehandlung *
8	(* Option „Pretreatment“ muss in der Hardware installiert sein)
9	OK

## Hardwarekonfiguration

---

Element	Bezeichnung
10	Abbrechen
11	Hilfe

Abbildung 2-23: (Shimadzu) Oven Configuration



Element	Bezeichnung
1	Ventile • Links • Rechts
2	OK
3	Abbrechen
4	Hilfe

Abbildung 2-24: (Shimadzu) Registerkarte „Pumps“

Element	Bezeichnung
1	Pumpmodus <ul style="list-style-type: none"> <li>• Isokratischer Fluss</li> <li>• Binärer Fluss</li> </ul>
2	Konstant <ul style="list-style-type: none"> <li>• Druck</li> <li>• Durchfluss</li> <li>• Pumpe A Durchfluss: _ ml/min</li> <li>• Pumpe B Durchfluss: _ ml/min</li> </ul>
3	Konfigurierte Pumpen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Pumpe A</li> <li>• Pumpe B</li> <li>• Pumpe C</li> <li>• Pumpe D</li> </ul>

## Hardwarekonfiguration

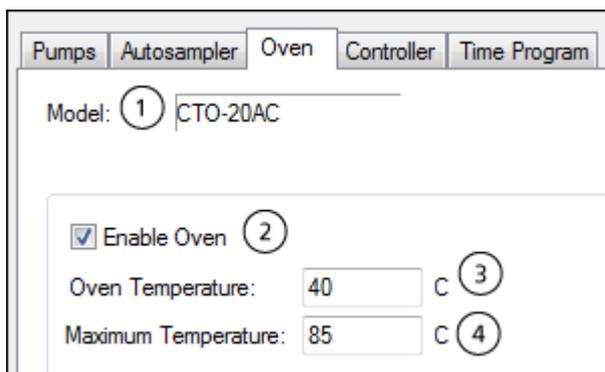
Element	Bezeichnung
4	Druckgrenzwerte (Pumpe A) <ul style="list-style-type: none"> <li>• Minimum: _ psi</li> <li>• Maximum: _ psi</li> </ul>
5	Druckgrenzwerte (Pumpe B) <ul style="list-style-type: none"> <li>• Minimum: _ psi</li> <li>• Maximum: _ psi</li> </ul>

Abbildung 2-25: (Shimadzu) Registerkarte „Autosampler“

Element	Bezeichnung
1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modell</li> <li>• Rack-Typ</li> <li>• Rack löschen</li> </ul>

Element	Bezeichnung
2	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Autosampler verwenden</li> <li>• Spülvolumen: _ (ul)</li> <li>• Nadelhub: _ (mm)</li> <li>• Spülgeschwindigkeit: _ (ul/s)</li> <li>• Probenahme-Geschwindigkeit: _ (ul)</li> <li>• Reinigungsdauer: _ (min)</li> <li>• Spülungssenkdauer: _ (s)</li> <li>• Spülmodus (Keine Spülung/Vor der Ansaugung/Nach der Ansaugung/Vor und nach der Ansaugung)</li> <li>• Kühlereinheit aktivieren</li> <li>• Kühler Temperatur: _ (°C)</li> <li>• Fläschchen-Nadelhub steuern: _ (mm)</li> </ul>

Abbildung 2-26: (Shimadzu) Registerkarte „Oven“



Element	Bezeichnung
1	Modell
2	Ofen aktivieren
3	Ofentemperatur: _ C
4	Maximale Temperatur: _ C

## Hardwarekonfiguration

Abbildung 2-27: (Shimadzu) Registerkarte „Controller“

The screenshot shows the 'Controller' tab in the software interface. At the top, there are tabs for 'Pumps', 'Autosampler', 'Oven', 'Controller', and 'Time Program'. The 'Controller' tab is active. Below the tabs, there is a 'Model:' label followed by a text input field containing 'CBM-20A' and a circled '1' next to it. Below this, there is a list of checkboxes: 'Power On' (2) is checked, 'Event 1' is unchecked, 'Event 2' (3) is unchecked, 'Event 3' is unchecked, and 'Event 4' is unchecked.

Element	Bezeichnung
1	Modell
2	Strom Ein
3	Ereignis 1, 2, 3, 4

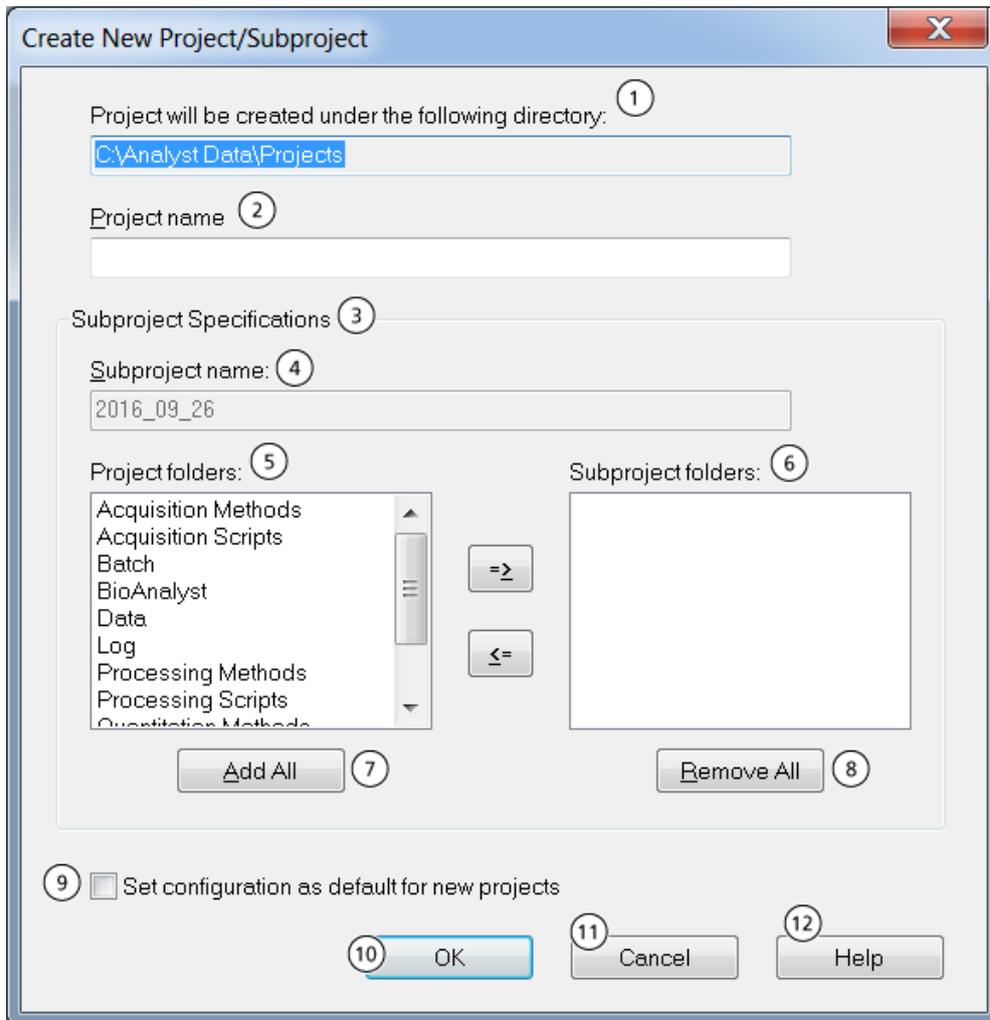
Abbildung 2-28: (Shimadzu) Registerkarte „Time Program“

The screenshot shows the 'Time Program' tab in the software interface. At the top, there are tabs for 'Pumps', 'Autosampler', 'Oven', 'Controller', and 'Time Program'. The 'Time Program' tab is active. Below the tabs, there is a table with the following structure:

	Time (1)	Module (2)	Event (3)	Parameter (4)
1	90.00	Controller	Stop	
2				

Element	Bezeichnung
1	Zeit
2	Modul
3	Ereignisliste
4	Parameter

Abbildung 2-29: Create New Project/Subproject



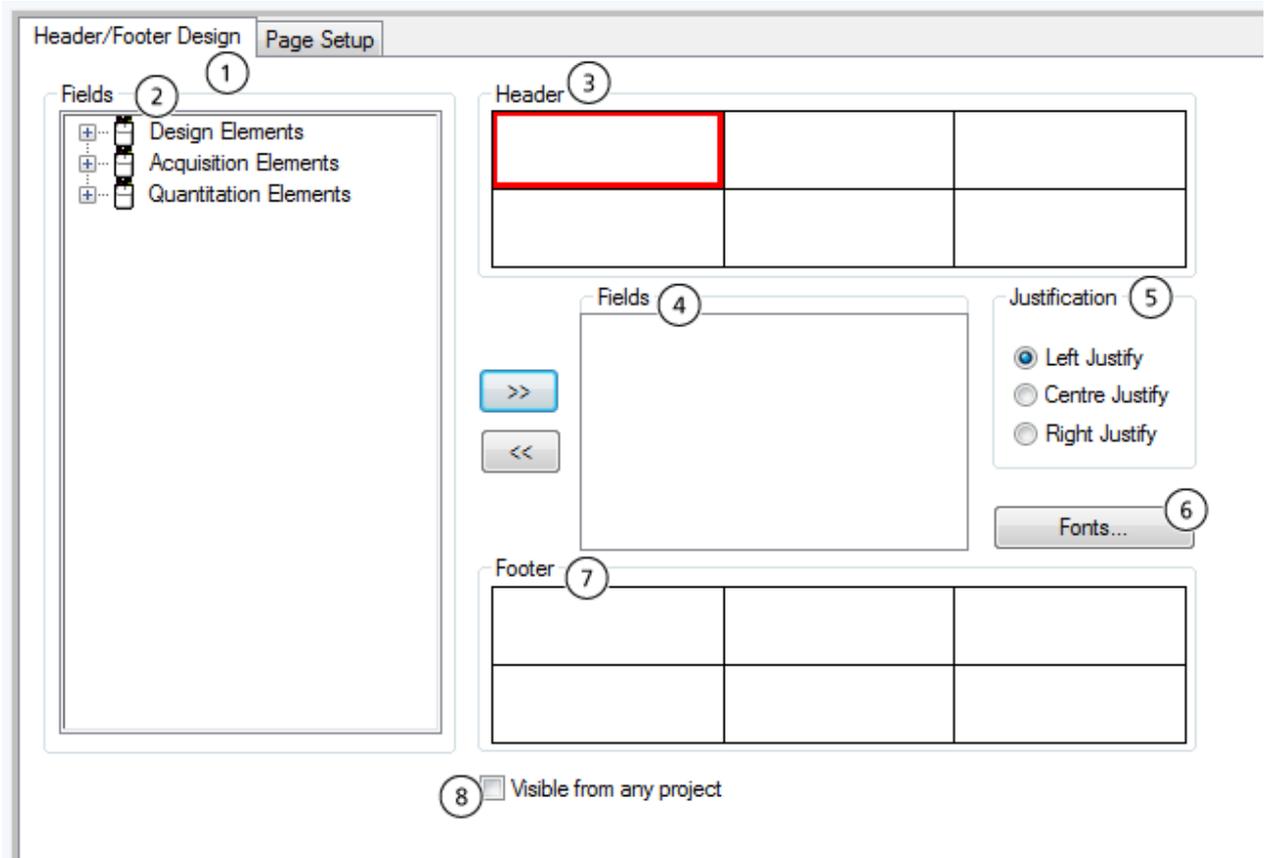
Element	Bezeichnung
1	Das Projekt wird im folgenden Verzeichnis erstellt
2	Projektname
3	Teilprojekt-Spezifikationen
4	Teilprojektname
5	Projektordner
6	Teilprojektordner
7	Alle hinzufügen
8	Alle entfernen
9	Konfiguration als Standard für neue Projekte festlegen
10	OK

## Hardwarekonfiguration

---

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
11	Abbrechen
12	Hilfe

Abbildung 3-1: „Report Template Editor“ – Registerkarte „Header/Footer Design“

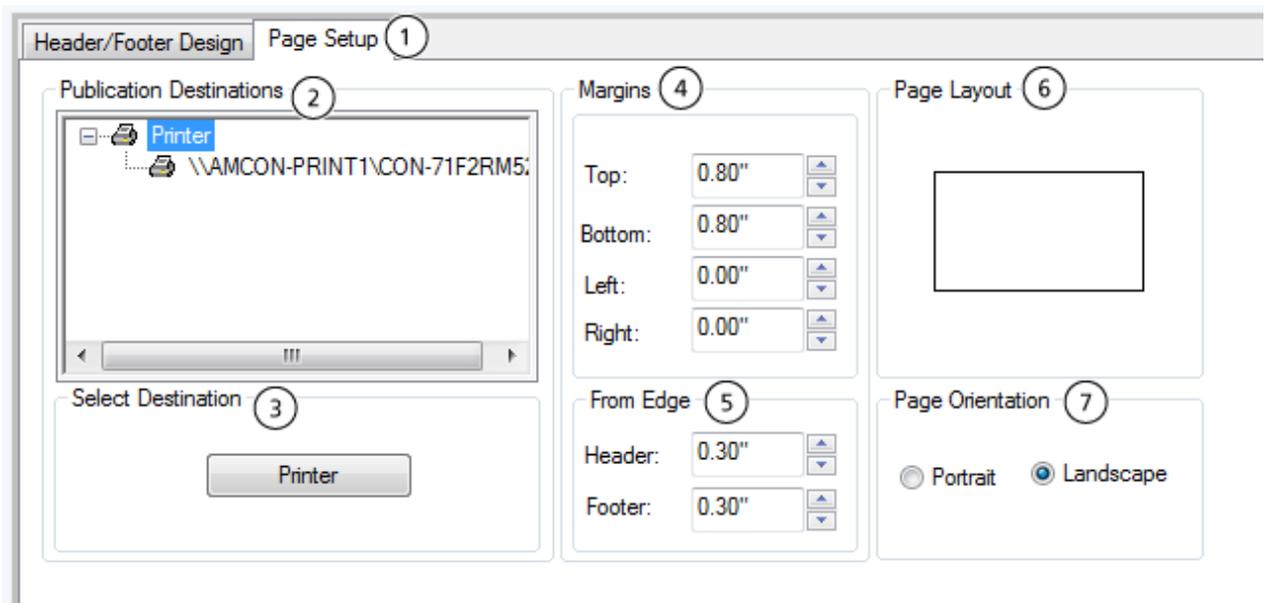


Element	Bezeichnung
1	Design von Kopf-/Fußzeile
2	Felder <ul style="list-style-type: none"> <li>• Designelemente</li> <li>• Erfassungselemente</li> <li>• Quantifizierungselemente</li> </ul>
3	Kopfzeile
4	Felder

## Report Template Editor

Element	Bezeichnung
5	Ausrichtung <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ausrichtung nach links</li> <li>• Ausrichtung mittig</li> <li>• Ausrichtung nach rechts</li> </ul>
6	Schriftarten
7	Fußzeile
8	Sichtbar aus jedem Projekt

Abbildung 3-2: „Report Template Editor“ – Registerkarte „Page Setup“



Element	Bezeichnung
1	Seiteneinrichtung
2	Veröffentlichungsziele <ul style="list-style-type: none"> <li>• Drucker</li> </ul>
3	Ziel auswählen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Drucker</li> </ul>

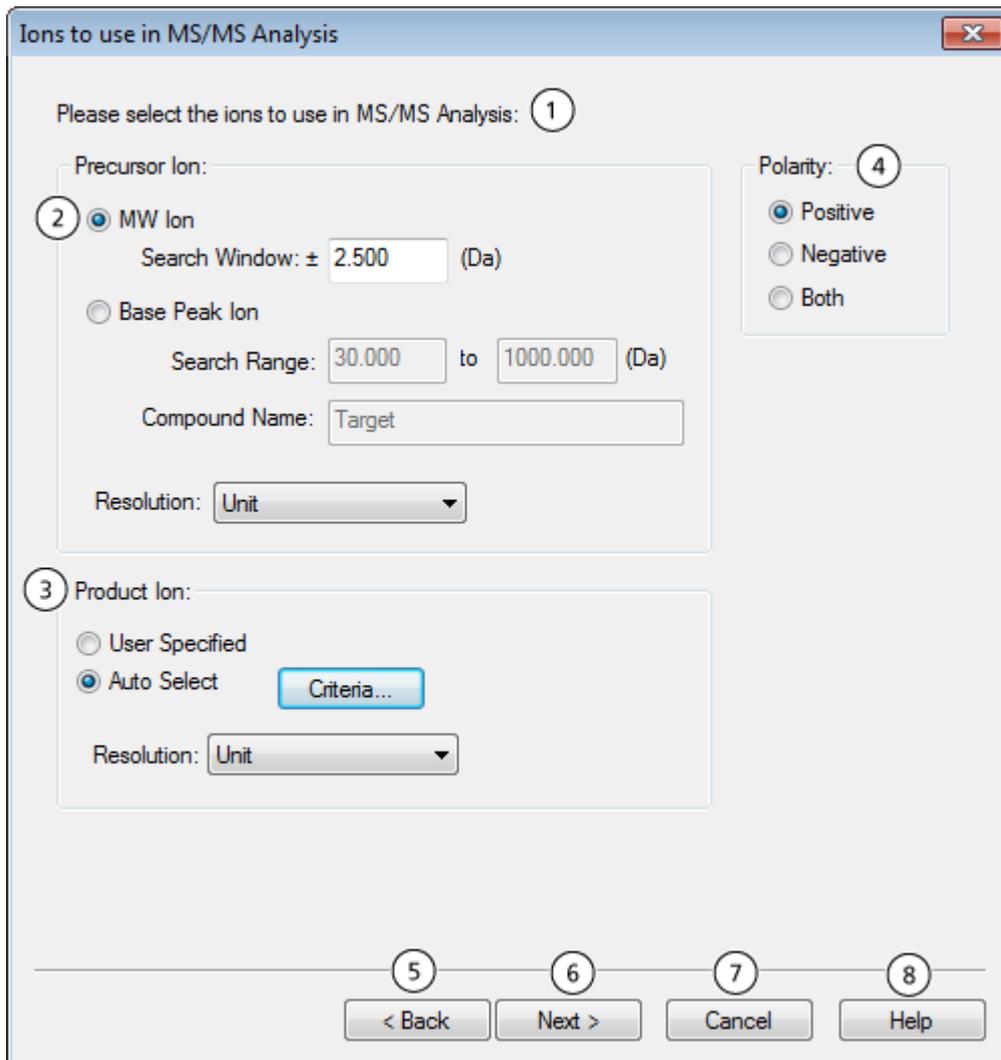
<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
4	Rahmen <ul style="list-style-type: none"><li>• Oben</li><li>• Unten</li><li>• Links</li><li>• Rechts</li></ul>
5	Von Kante <ul style="list-style-type: none"><li>• Kopfzeile</li><li>• Fußzeile</li></ul>
6	Seitenlayout
7	Seitenausrichtung <ul style="list-style-type: none"><li>• Hochformat</li><li>• Querformat</li></ul>

Abbildung 4-1: Instrument Settings

Element	Bezeichnung
1	Bitte stellen Sie den Gerätezustand ein
2	Einlass <ul style="list-style-type: none"> <li>• Infusion</li> <li>• FIA</li> </ul>

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
3	Massenspektrometer <ul style="list-style-type: none"><li>• MS-Analyse</li><li>• MS/MS-Analyse</li></ul>
4	Standard-Erfassungsmethode
5	Rack Code
6	Rack Position
7	Plate Code
8	Plate Position
9	Injektionsvolumen ( $\mu$ l)
10	Rückseite
11	Weiter
12	Abbrechen
13	Hilfe

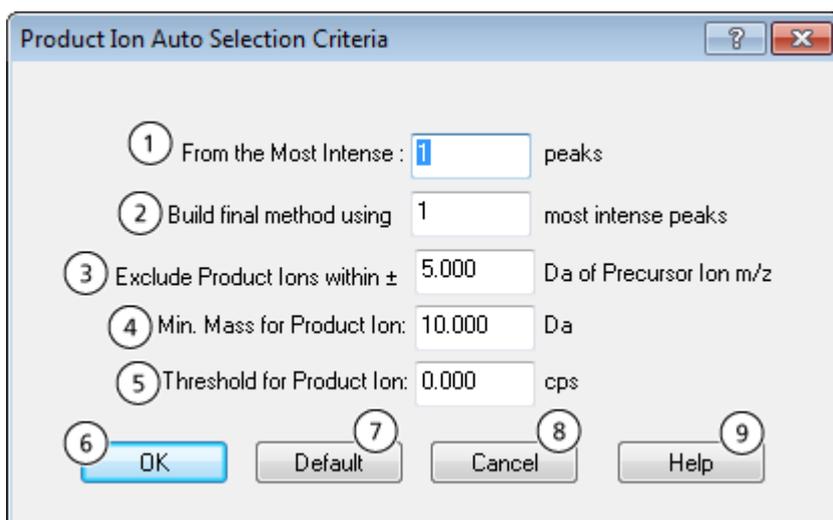
Abbildung 4-2: Ions to use in MS/MS Analysis



Element	Bezeichnung
1	Bitte wählen Sie die in MS/MS-Analyse zu verwendenden Ionen
2	<p>Vorläufer-Ion</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• MW-Ion                             <ul style="list-style-type: none"> <li>• Suchfenster (± Da)</li> </ul> </li> <li>• Basis-Peak-Ion                             <ul style="list-style-type: none"> <li>• Suchbereich: _ bis _ (Da)</li> <li>• Verbindungsname</li> </ul> </li> <li>• Auflösung (niedrig, Einheit, hoch)</li> </ul>

Element	Bezeichnung
3	Produkt-Ion <ul style="list-style-type: none"> <li>• Benutzerspezifisch</li> <li>• Automatische Auswahl</li> <li>• Kriterien</li> <li>• Auflösung (niedrig, Einheit, hoch)</li> </ul>
4	Polarität <ul style="list-style-type: none"> <li>• Positiv</li> <li>• Negativ</li> <li>• Beide</li> </ul>
5	Rückseite
6	Weiter
7	Abbrechen
8	Hilfe

Abbildung 4-3: Product Ion Auto Selection Criteria



Element	Bezeichnung
1	Aus den intensivsten_ Peaks
2	Endgültige Methode erstellen mit den_ intensivsten Peaks
3	Produkt-Ionen ausschließen mit ± _ Da des Vorläufer-Ions m/z

## Verbindungsoptimierung

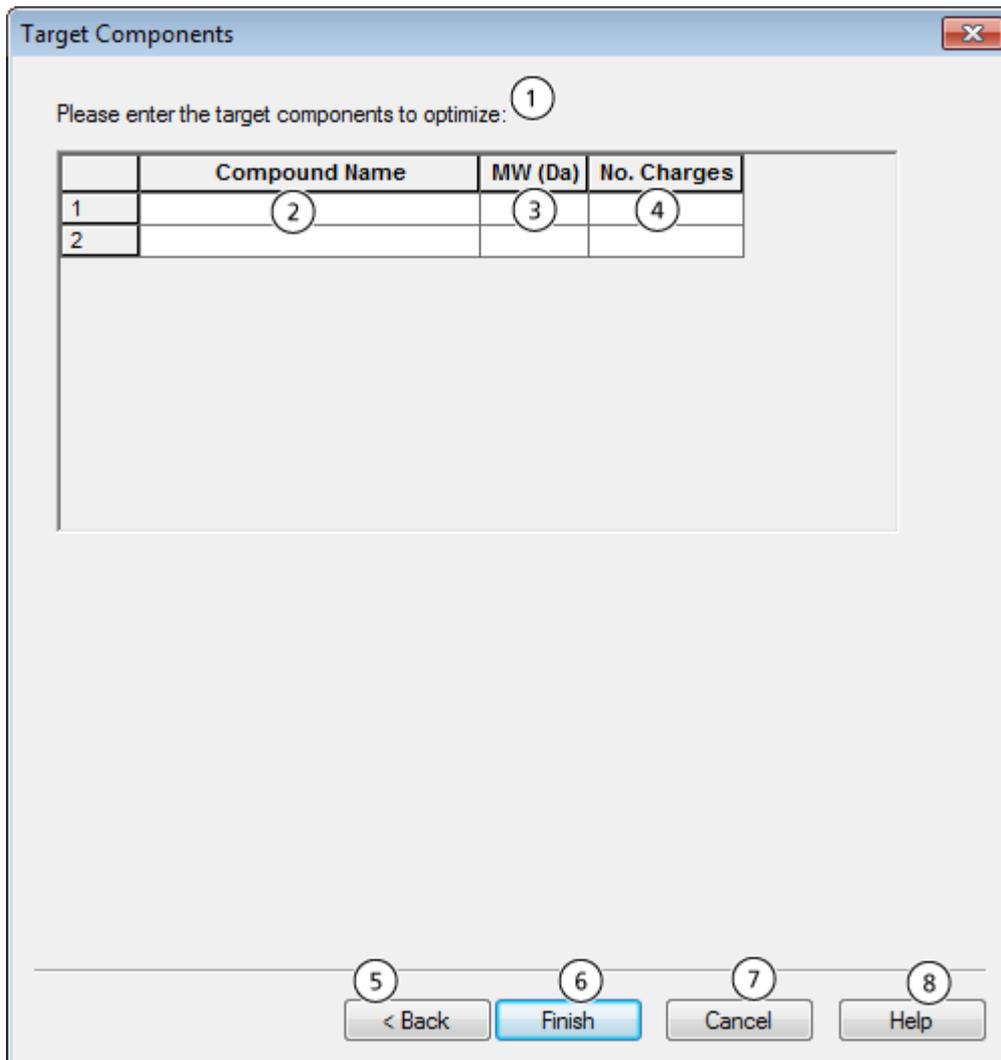
Element	Bezeichnung
4	Min. Masse für das Produkt-Ion: Da
5	Schwellenwert für Produkt-Ionen: cps
6	OK
7	Standard
8	Abbrechen
9	Hilfe

Abbildung 4-4: Ions to use in MS Analysis

Element	Bezeichnung
1	Bitte wählen Sie die in MS-Analyse zu verwendenden Ionen

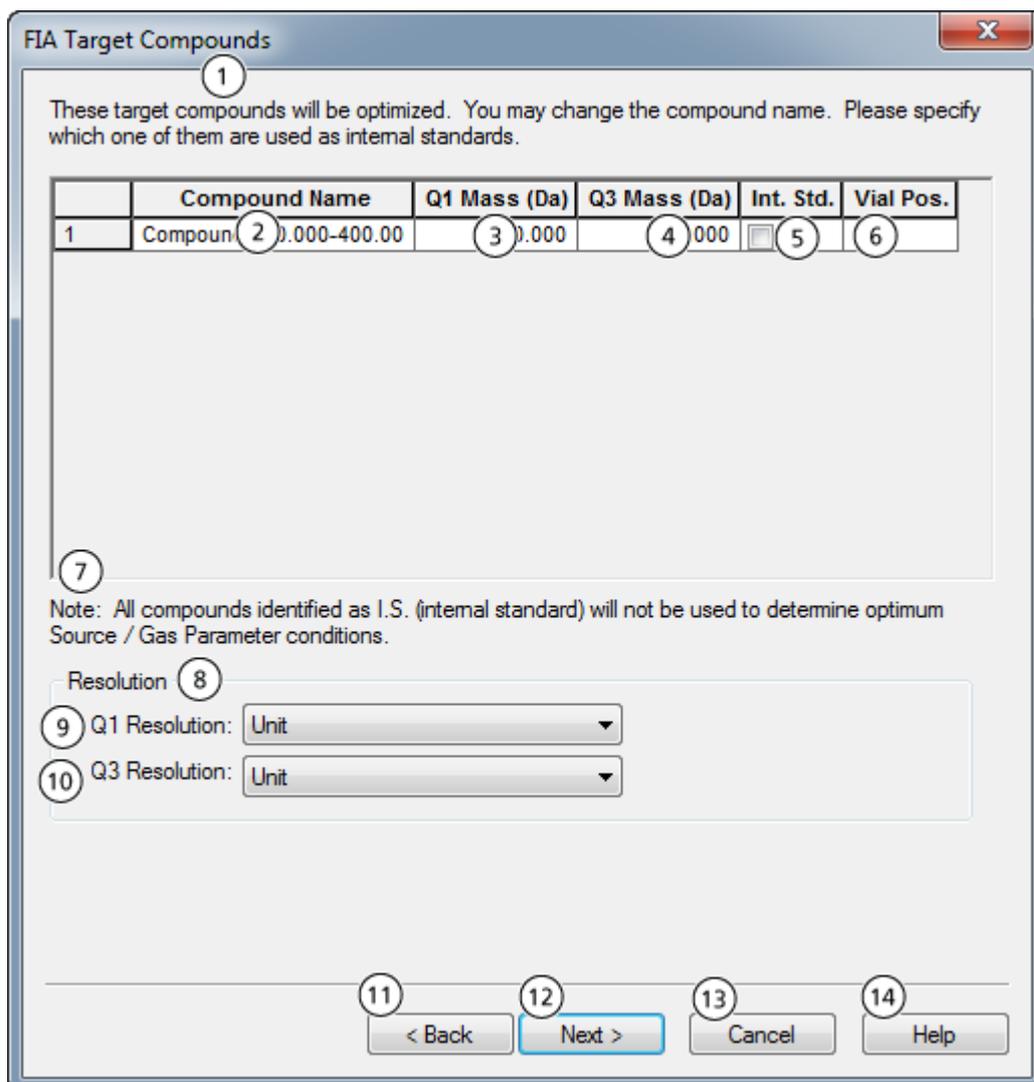
<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
2	Ziel-Ion <ul style="list-style-type: none"><li>• MW-Ion<ul style="list-style-type: none"><li>• Suchfenster (<math>\pm</math> Da)</li></ul></li><li>• Basis-Peak-Ion<ul style="list-style-type: none"><li>• Suchbereich: _ bis _ (Da)</li><li>• Verbindungsname</li></ul></li><li>• Auflösung (niedrig, Einheit, hoch)</li></ul>
3	Polarität <ul style="list-style-type: none"><li>• Positiv</li><li>• Negativ</li><li>• Beide</li></ul>
4	Rückseite
5	Weiter
6	Abbrechen
7	Hilfe

Abbildung 4-5: Target Components



Element	Bezeichnung
1	Bitte geben Sie die zu optimierenden Zielkomponenten ein:
2	Verbindungsname
3	MW (Da)
4	Nein. Ladungen
5	Rückseite
6	Fertigstellen
7	Abbrechen
8	Hilfe

Abbildung 4-6: Dialogfeld „FIA Target Compounds“



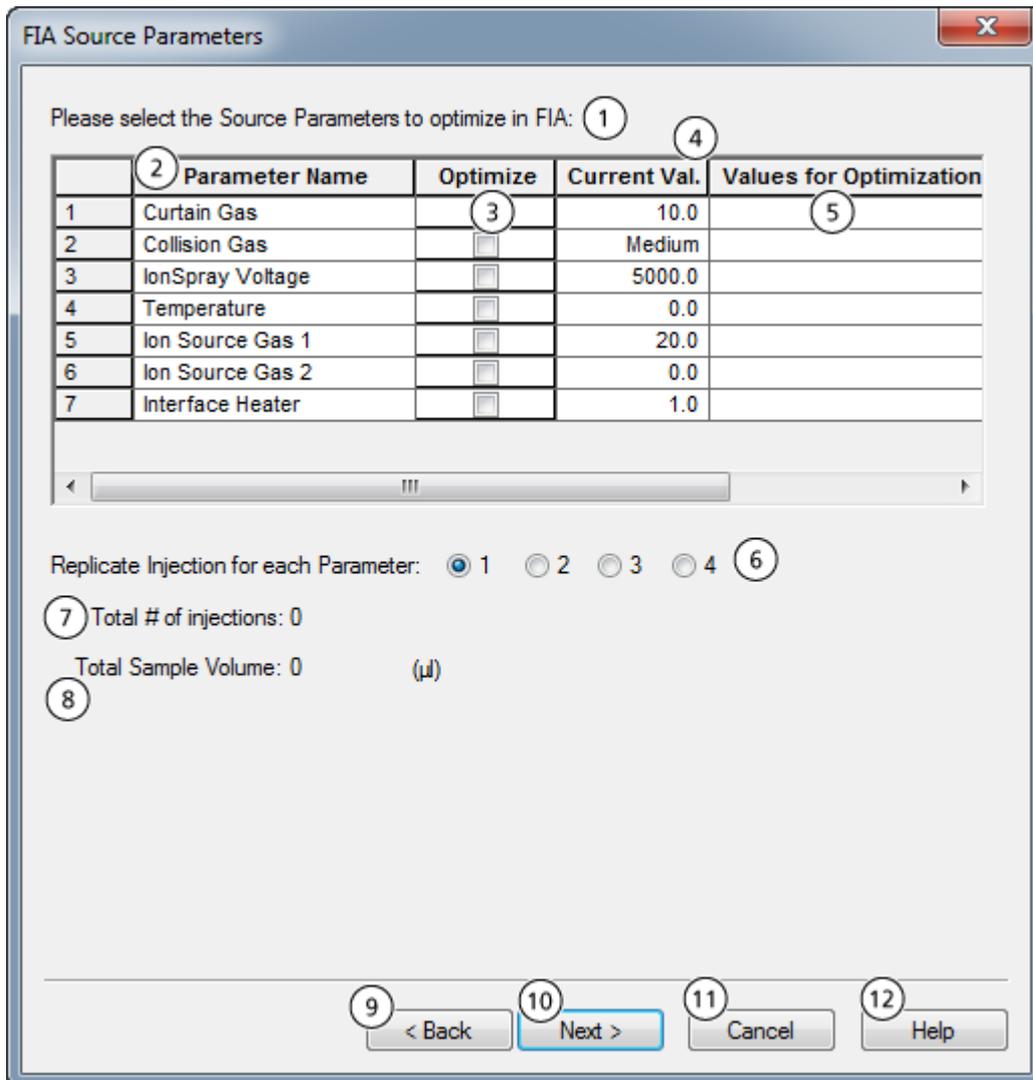
Element	Bezeichnung
1	Diese Zielverbindungen werden optimiert. Sie können den Verbindungsnamen ändern. Geben Sie an, welche als interner Standard verwendet werden soll.
2	Verbindungsname
3	Q1-Masse (Da)
4	Q3-Masse (Da)
5	Interner Standard Std.
6	Fläschchenposition
7	Hinweis: Alle als I.S. (interner Standard) definierten Verbindungen werden nicht verwendet, um optimale Quelle/Gas-Parameterbedingungen zu bestimmen.

## Verbindungsoptimierung

---

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
8	Resolution
9	Q1-Auflösung <ul style="list-style-type: none"><li>• Niedrig</li><li>• Einheit</li><li>• Hoch</li></ul>
10	Q3-Auflösung <ul style="list-style-type: none"><li>• Niedrig</li><li>• Einheit</li><li>• Hoch</li></ul>
11	Rückseite
12	Weiter
13	Abbrechen
14	Hilfe

Abbildung 4-7: Dialogfeld „FIA Source Parameters“



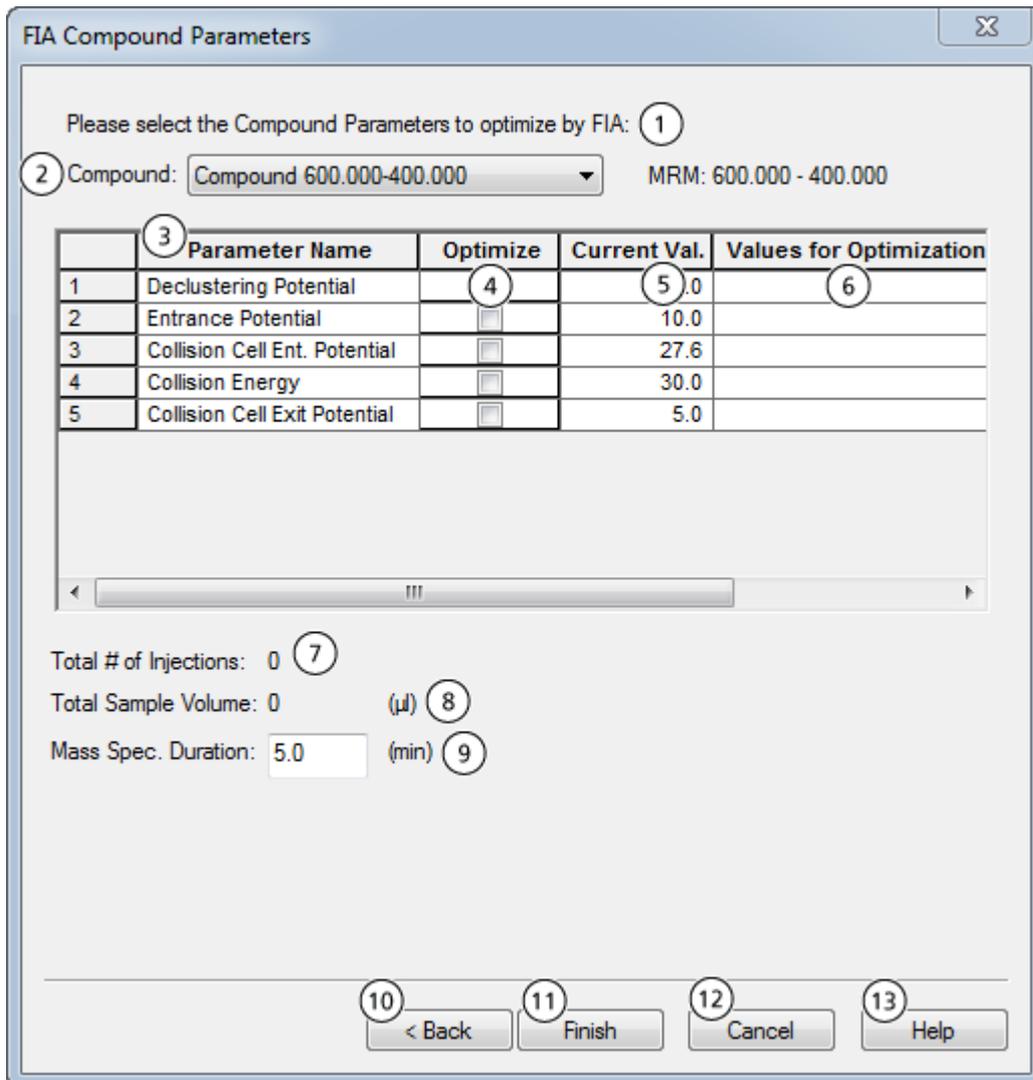
Element	Bezeichnung
1	Wählen Sie die Quellenparameter zur Optimierung in FIA aus
2	Parameternamen • Curtain Gas • Stoßgas • IonSpray-Spannung • Temperatur • Gas 1 der Ionenquelle • Gas 2 der Ionenquelle • Interfaceheizung

## Verbindungsoptimierung

---

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
3	Optimieren
4	Aktueller Wert
5	Wert zur Optimierung
6	Injektion für jeden Parameter wiederholen
7	Gesamtzahl der Injektionen
8	Gesamtes Probenvolumen: _ (µl)
9	Rückseite
10	Weiter
11	Abbrechen
12	Hilfe

Abbildung 4-8: Dialogfeld „FIA Compound Parameters“



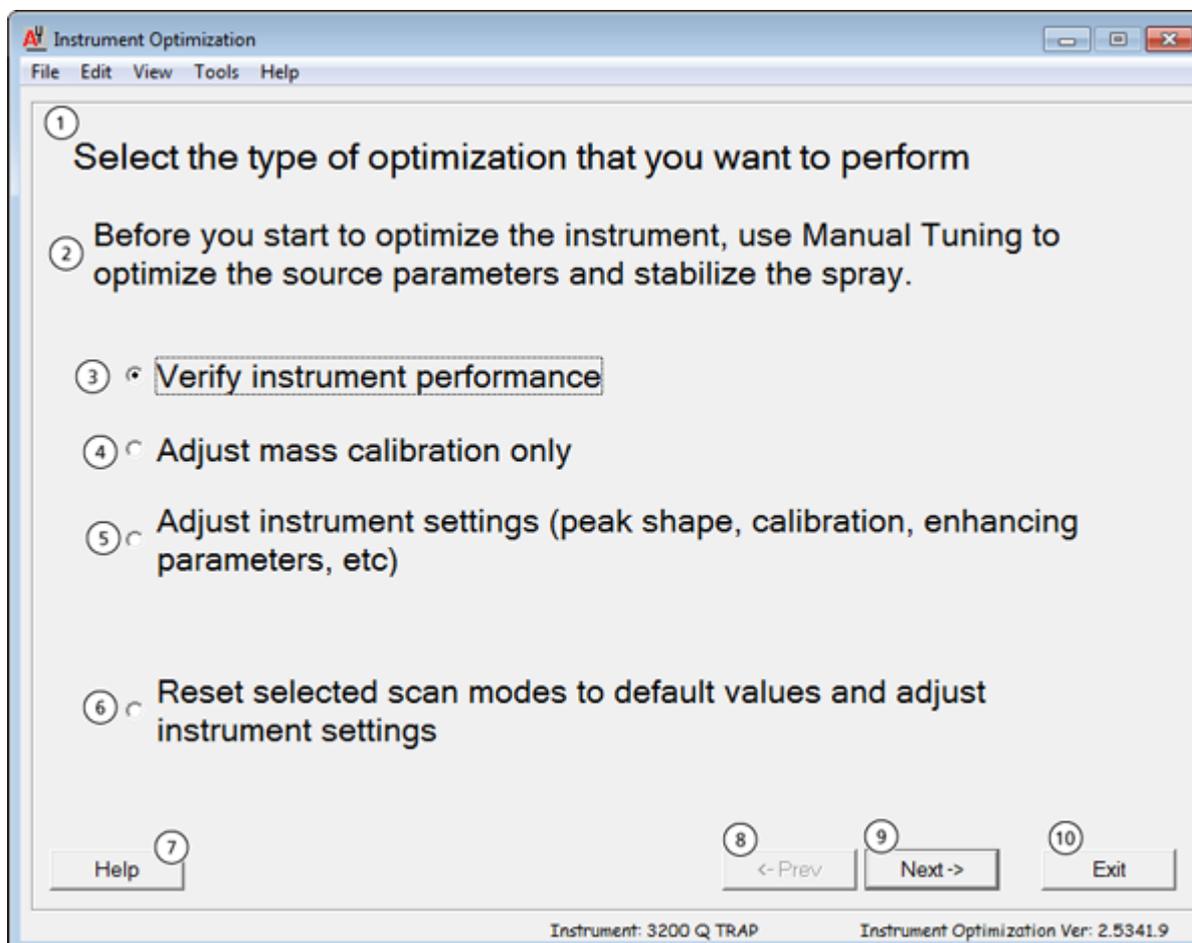
Element	Bezeichnung
1	Wählen Sie die Verbindungsparameter zur Optimierung durch FIA aus
2	Verbindung MRM

## Verbindungsoptimierung

---

Element	Bezeichnung
3	Parametername <ul style="list-style-type: none"><li>• Auflösungspotenzial von Ionenclustern</li><li>• Eingangspotenzial</li><li>• Stoßzellen- Eingangspotenzial</li><li>• Stoßenergie</li><li>• Stoßzellen-Austrittspotenzial</li></ul>
4	Optimieren
5	Aktueller Wert
6	Wert zur Optimierung
7	Gesamtzahl der Injektionen
8	Gesamtes Probenvolumen: _ (µl)
9	Massenspektrometer Dauer: _ (min)
10	Rückseite
11	Fertigstellen
12	Abbrechen
13	Hilfe

Abbildung 5-1: Geräteoptimierung

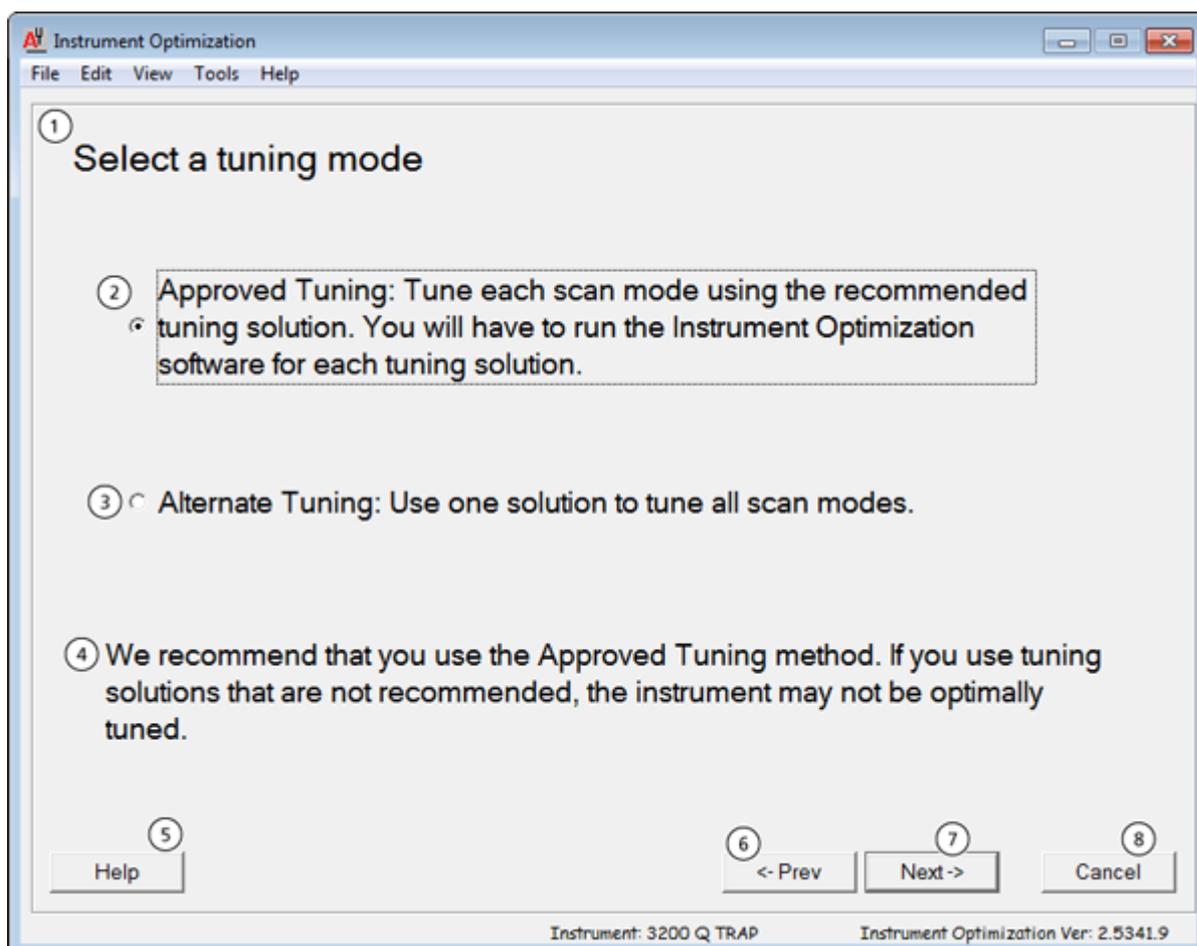


Element	Bezeichnung
1	Wählen Sie die Optimierungsart, die Sie ausführen möchten.
2	Bevor Sie mit der Optimierung des Geräts beginnen, nutzen Sie den Modus „Manual Tuning“, um die Quellparameter zu optimieren und das Spray zu stabilisieren.
3	Instrumentenleistung überprüfen
4	Nur Massenkalkulierungen anpassen
5	Geräteeinstellungen anpassen (Form der Peaks, Kalibrierung, erweiterte Parameter usw.)
6	Zurücksetzen der gewählten Scan-Modi auf Standardwerte und Anpassung der Geräteeinstellungen

## Geräteoptimierung

Element	Bezeichnung
7	Hilfe
8	Vorheriges
9	Weiter
10	Beenden

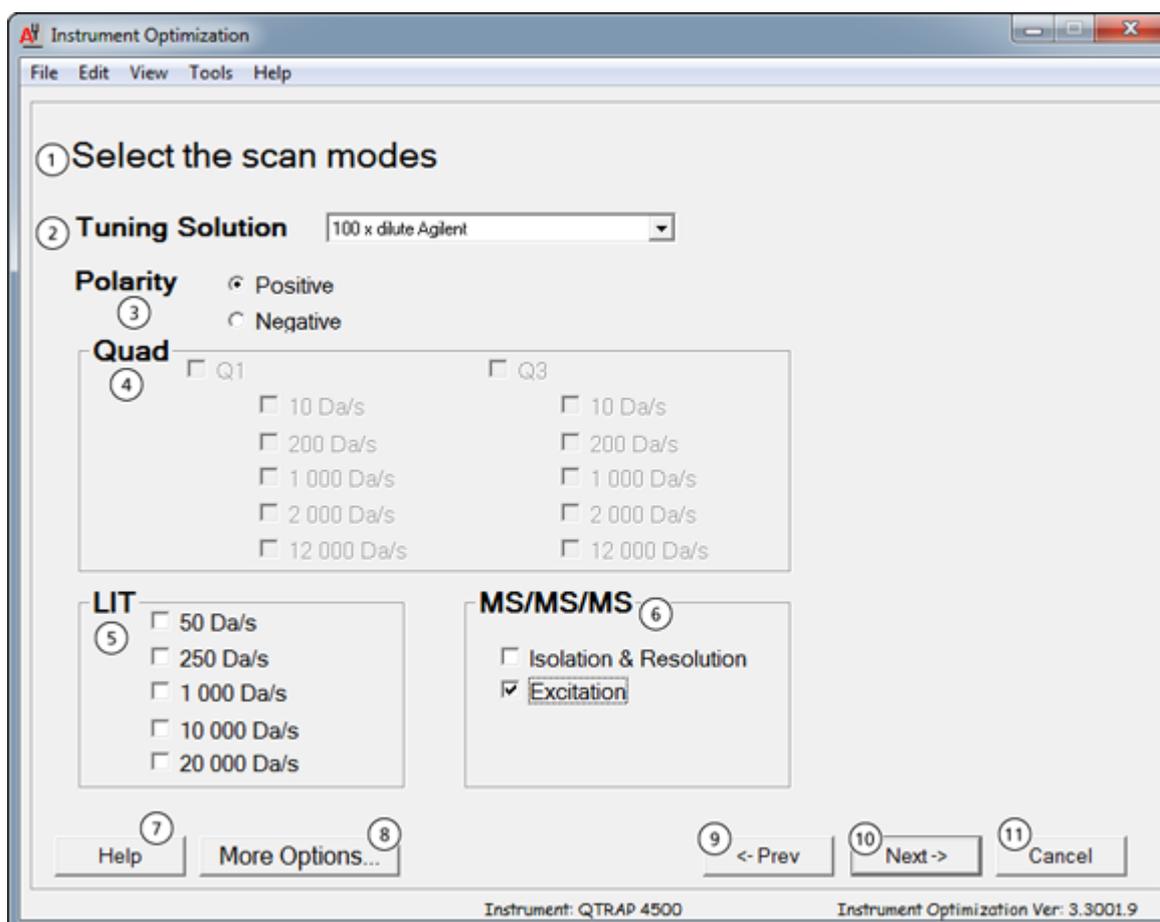
Abbildung 5-2: Geräteoptimierung



Element	Bezeichnung
1	Wählen Sie einen Abstimmmodus
2	Zugelassenes Abstimmen: Stimmen Sie jeden Scan-Modus mit der empfohlenen Abstimmungslösung ab. Sie müssen die Software zur Instrumentenoptimierung für jede Abstimmungslösung ausführen.
3	Alternatives Abstimmen: Eine Lösung zur Abstimmung aller Scan-Modi verwenden.

Element	Bezeichnung
4	Es wird empfohlen, die zugelassene Abstimmethode zu verwenden. Wenn Sie nicht empfohlene Abstimm Lösungen verwenden, wird das Instrument möglicherweise nicht optimal abgestimmt.
5	Hilfe
6	Vorheriges
7	Weiter
8	Abbrechen

Abbildung 5-3: Geräteoptimierung



Element	Bezeichnung
1	Scan-Modi auswählen
2	Tuning-Lösung

## Geräteoptimierung

---

Element	Bezeichnung
3	Polarität <ul style="list-style-type: none"><li>• Positiv</li><li>• Negativ</li></ul>
4	Quad
5	LIT (Da/s)
6	MS/MS/MS Isolierung und Auflösung Anregung
7	Hilfe
8	Weitere Optionen
9	Vorheriges
10	Weiter
11	Abbrechen

Abbildung 5-4: Instrument Optimization: Options

Instrument Optimization: Options

**LIT Preferences** ①

**POS +** ②

③

Fixed Fill Time

Dynamic Fill Time

Q0 Trap

**NEG -** ④

**Scan Duration for LIT Testing and Calibration** ⑤

seconds

⑥ low m/z region

higher sensitivity  better peak shape

⑦ high m/z region

higher sensitivity  better peak shape

**Quad Preferences**

Peak Width Target  ⑧

**Options** ⑨

Optimize C2B

Maximum EXB

⑩ Help

⑪ OK

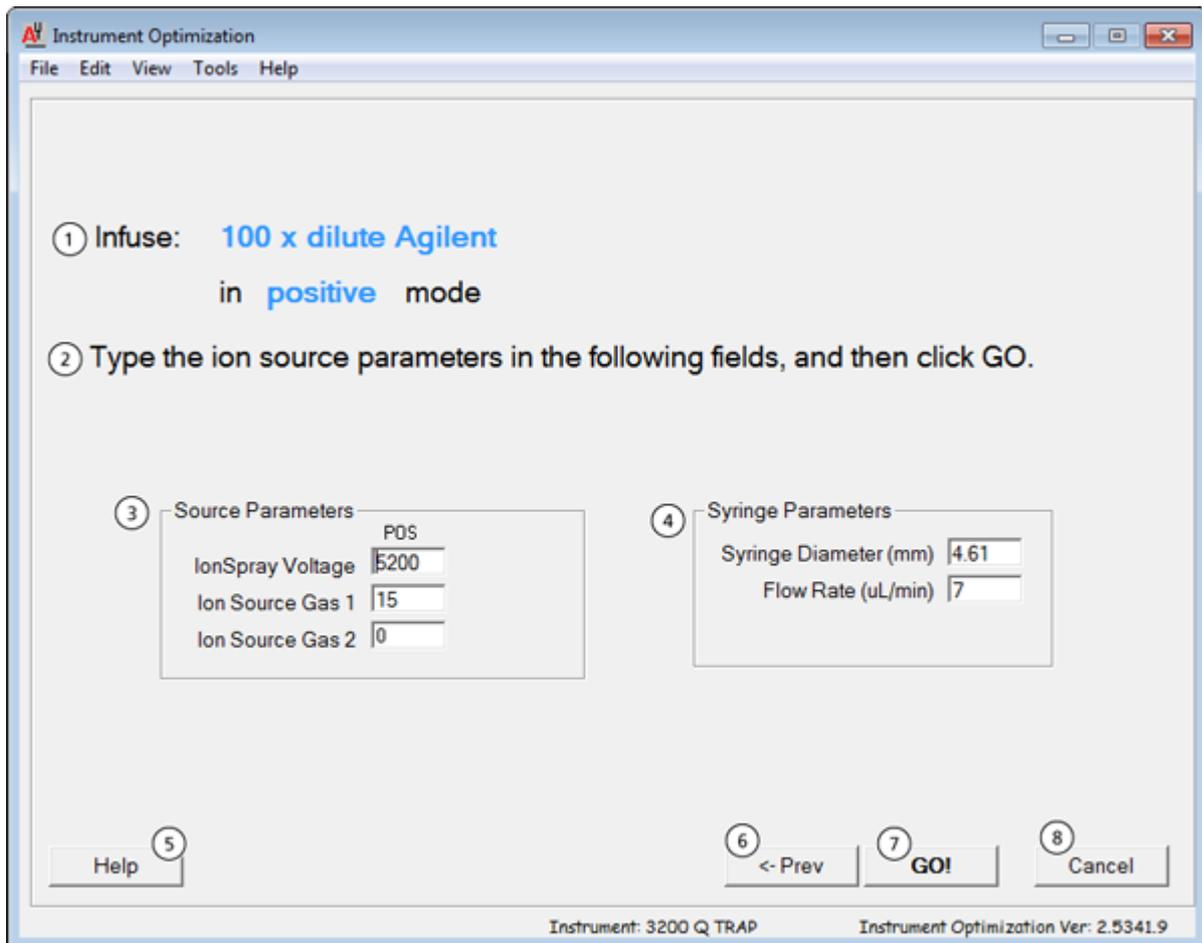
Element	Bezeichnung
1	LIT-Präferenzen
2	POS +
3	<ul style="list-style-type: none"> <li>Feste Füllzeit</li> <li>Dynamische Füllzeit</li> <li>Q0-Trap</li> </ul>
4	NEG -
5	Scan-Dauer für LIT Tests und Kalibrierung _ Sekunden

## Geräteoptimierung

---

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
6	Niedriger m/z-Bereich <ul style="list-style-type: none"><li>• höhere Empfindlichkeit</li><li>• bessere Form der Peaks</li></ul>
7	Hoher m/z-Bereich <ul style="list-style-type: none"><li>• höhere Empfindlichkeit</li><li>• bessere Form der Peaks</li></ul>
8	Quad-Präferenzen <ul style="list-style-type: none"><li>• Peak-Breiten-Ziel</li></ul>
9	Optionen <ul style="list-style-type: none"><li>• Optimieren von C2B</li><li>• Maximum EXB</li></ul>
10	Hilfe
11	OK

Abbildung 5-5: Geräteoptimierung



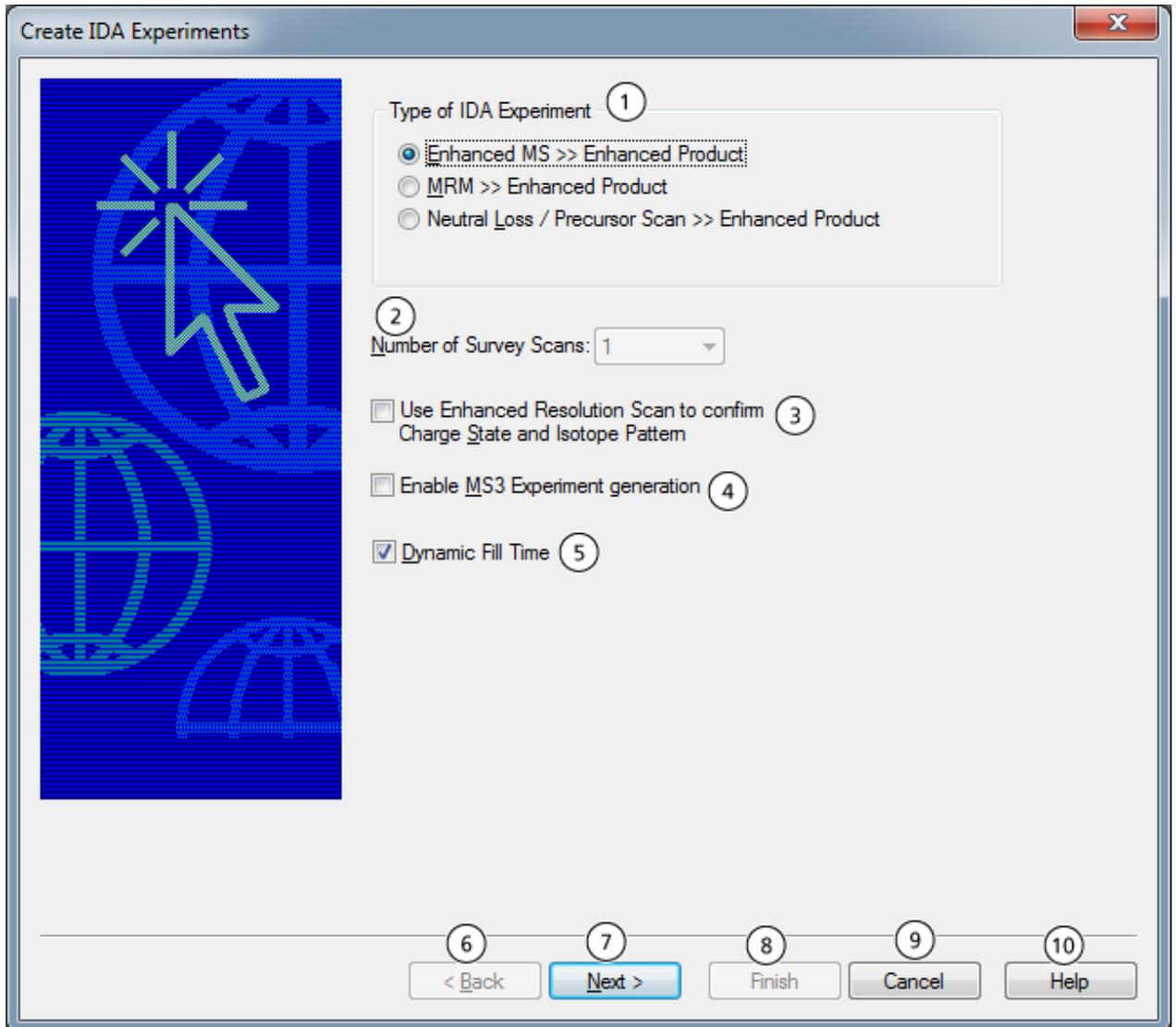
Element	Bezeichnung
1	Infundieren: im _ Modus
2	Geben Sie die Quellparameter der Ionenquelle in die folgenden Felder ein und klicken Sie dann auf „GO!“.
3	Quellenparameter <ul style="list-style-type: none"> <li>• IonSpray-Spannung</li> <li>• Gas 1 der Ionenquelle</li> <li>• Gas 2 der Ionenquelle</li> </ul>
4	Spritzenparameter <ul style="list-style-type: none"> <li>• Spritzendurchmesser (mm)</li> <li>• Volumenstrom (uL/min)</li> </ul>
5	Hilfe

## Geräteoptimierung

---

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
6	Vorheriges
7	GO
8	Abbrechen

Abbildung 6-1: Dialogfeld „Create IDA Experiments“



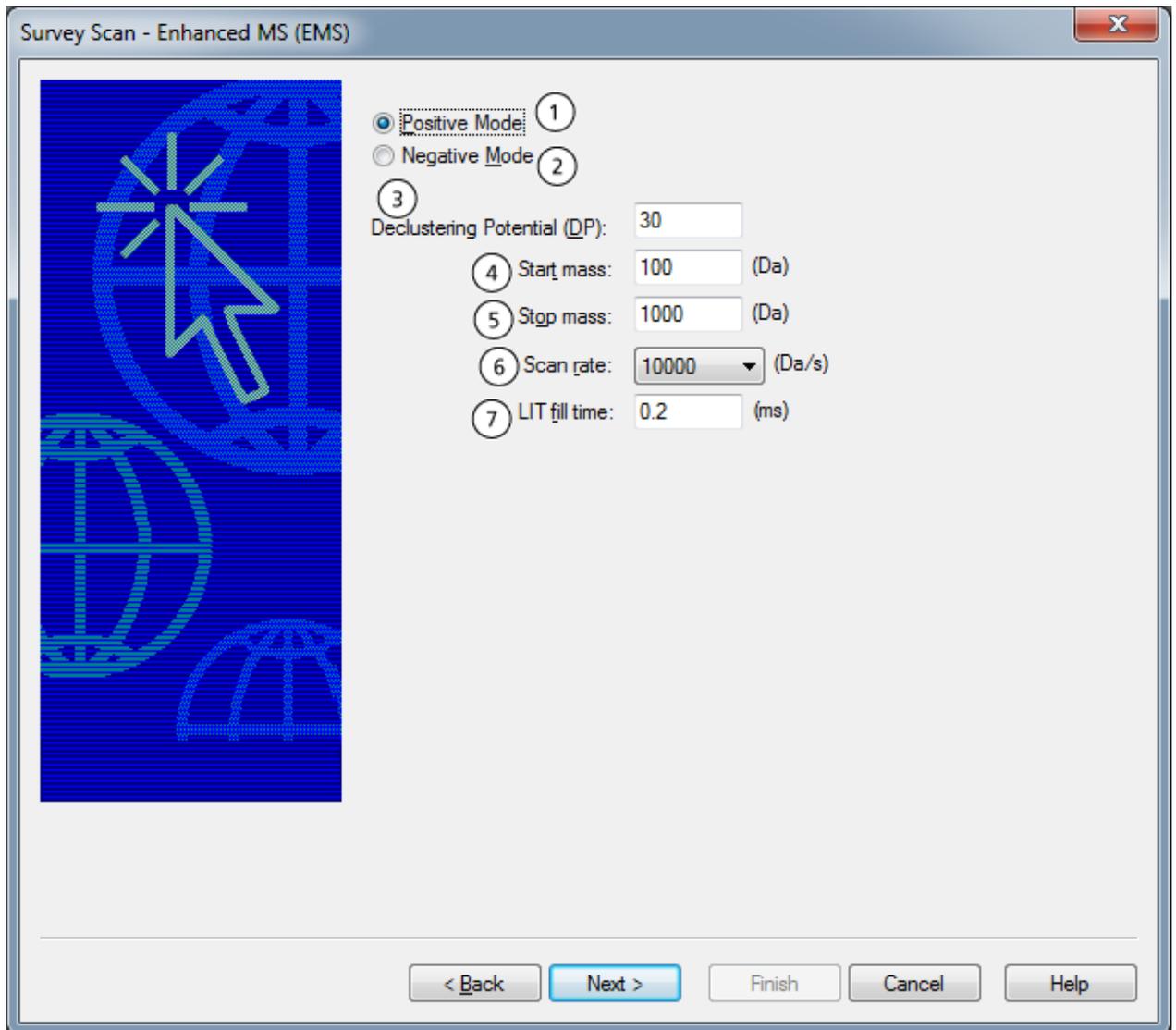
Element	Bezeichnung
1	Art des IDA-Experiments <ul style="list-style-type: none"> <li>• Erweitertes MS &gt;&gt; Erweitertes Produkt</li> <li>• MRM &gt;&gt; Erweitertes Produkt</li> <li>• Neutralverlust/Voläufer-Scan &gt;&gt; Erweitertes Produkt</li> </ul>
2	Anzahl der Übersichtscans

## „IDA Method Wizard“

---

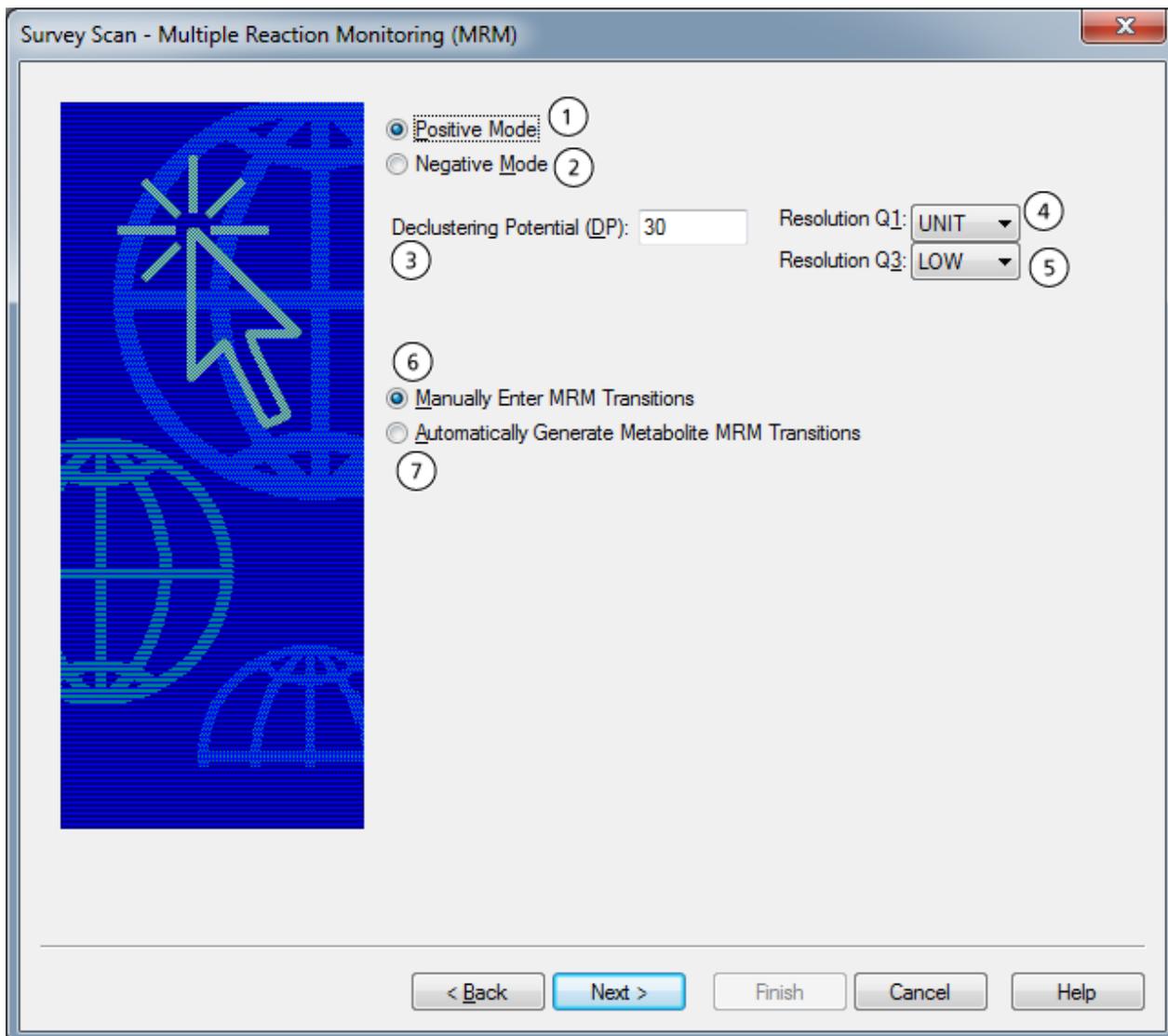
<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
3	„Enhanced Resolution Scan“ verwenden, um Ladezustand und Isotopenmuster zu bestätigen
4	Erzeugung MS3-Experiment aktivieren
5	Dynamische Füllzeit
6	Zurück
7	Weiter
8	Fertigstellen
9	Abbrechen
10	Hilfe

Abbildung 6-2: Dialogfeld „Survey Scan – Enhanced MS (EMS)“



Element	Bezeichnung
1	Positiver Modus
2	Negativer Modus
3	Auflösungspotenzial (DP): _
4	Startmasse: _ (Da)
5	Stoppmasse: _ (Da)
6	Abtastrate: _ (Da/s)
7	LIT-Füllzeit: _ (ms)

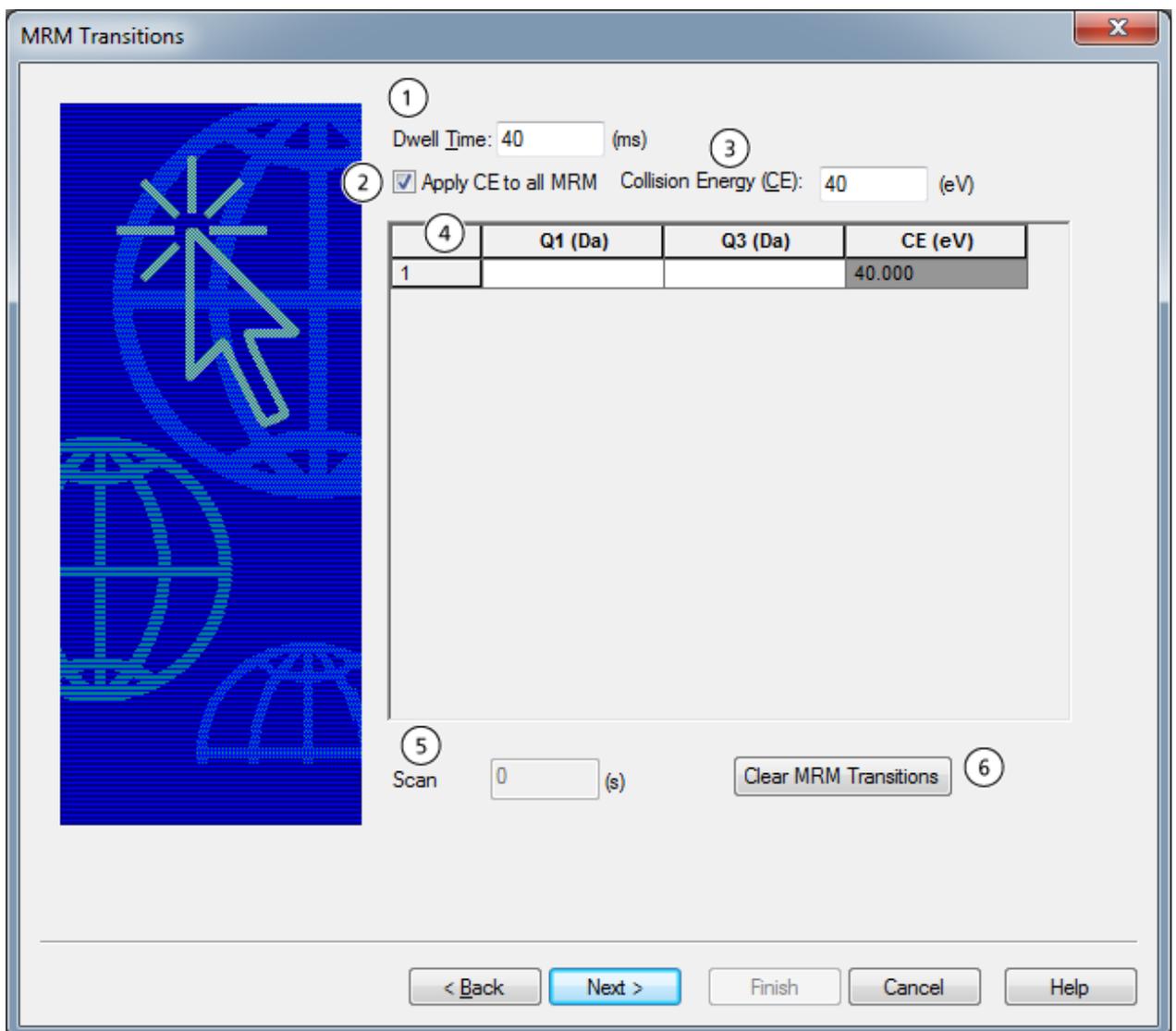
Abbildung 6-3: „Survey Scan – Multiple Reaction Monitoring (MRM)“



Element	Bezeichnung
1	Positiver Modus
2	Negativer Modus
3	Auflösungspotenzial (DP): _
4	Auflösung Q1 <ul style="list-style-type: none"> <li>• HOCH</li> <li>• EINHEIT</li> <li>• NIEDRIG</li> <li>• OFFEN</li> </ul>

Element	Bezeichnung
5	Auflösung Q3 <ul style="list-style-type: none"> <li>• HOCH</li> <li>• EINHEIT</li> <li>• NIEDRIG</li> <li>• OFFEN</li> </ul>
6	MRM-Übergänge manuell eingeben
7	Metabolit-MRM-Übergänge automatisch erzeugen

Abbildung 6-4: MRM Transitions

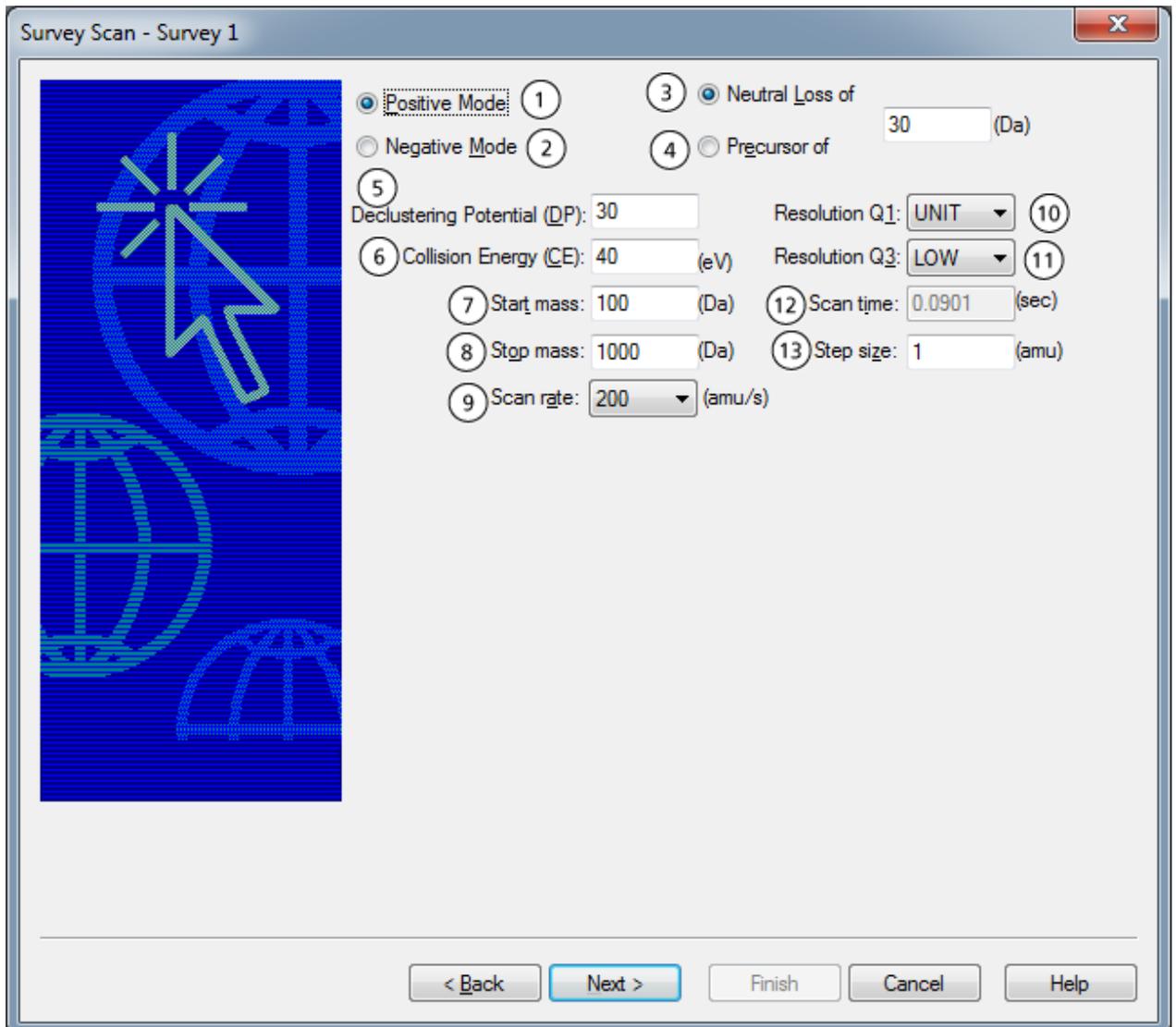


## „IDA Method Wizard“

---

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
1	Stehzeit: _ (ms)
2	CE auf alle MRM anwenden
3	Stoßenergie (CE): _ (eV)
4	<ul style="list-style-type: none"><li>• Q1 (Da)</li><li>• Q3 (Da)</li><li>• CE (eV)</li></ul>
5	Scan _ (s)
6	MRM-Übergänge löschen

Abbildung 6-5: „Survey Scan“ – „Survey 1“



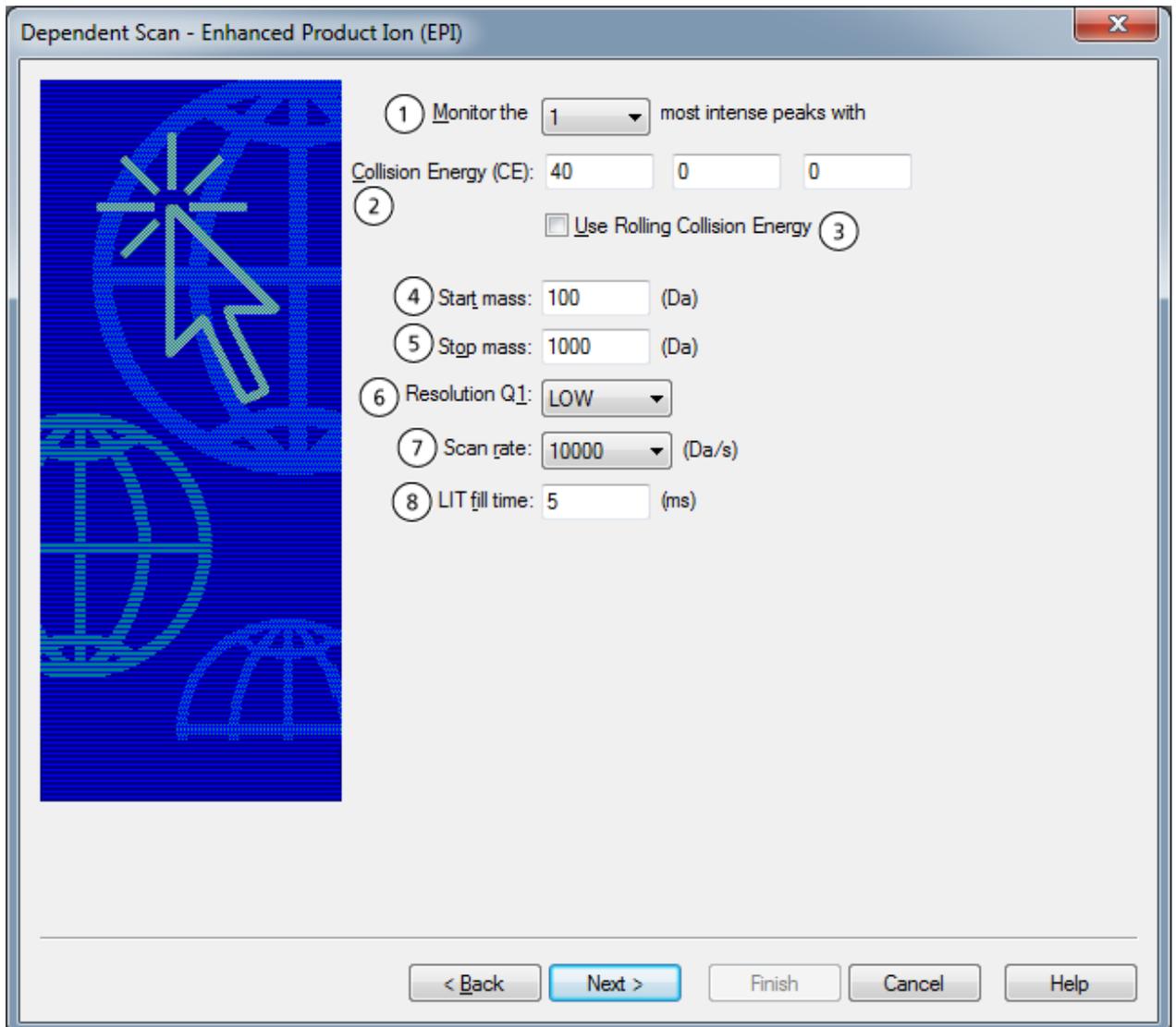
Element	Bezeichnung
1	Positiver Modus
2	Negativer Modus
3	Neutralverlust von _ (Da)
4	Vorläufer von _ (Da)
5	Auflösungspotenzial (DP): _
6	Stoßenergie (CE): _ (eV)
7	Startmasse: _ (Da)
8	Stoppmasse: _ (Da)
9	Abtastrate: _ (amu/s)

## „IDA Method Wizard“

---

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
10	Auflösung Q1 <ul style="list-style-type: none"><li>• HOCH</li><li>• EINHEIT</li><li>• NIEDRIG</li><li>• OFFEN</li></ul>
11	Auflösung Q3 <ul style="list-style-type: none"><li>• HOCH</li><li>• EINHEIT</li><li>• NIEDRIG</li><li>• OFFEN</li></ul>
12	Abtastdauer: _ (s)
13	Schrittweite: _ (amu)

Abbildung 6-6: „Dependent Scan“ – „Enhanced Product Ion (EPI)“

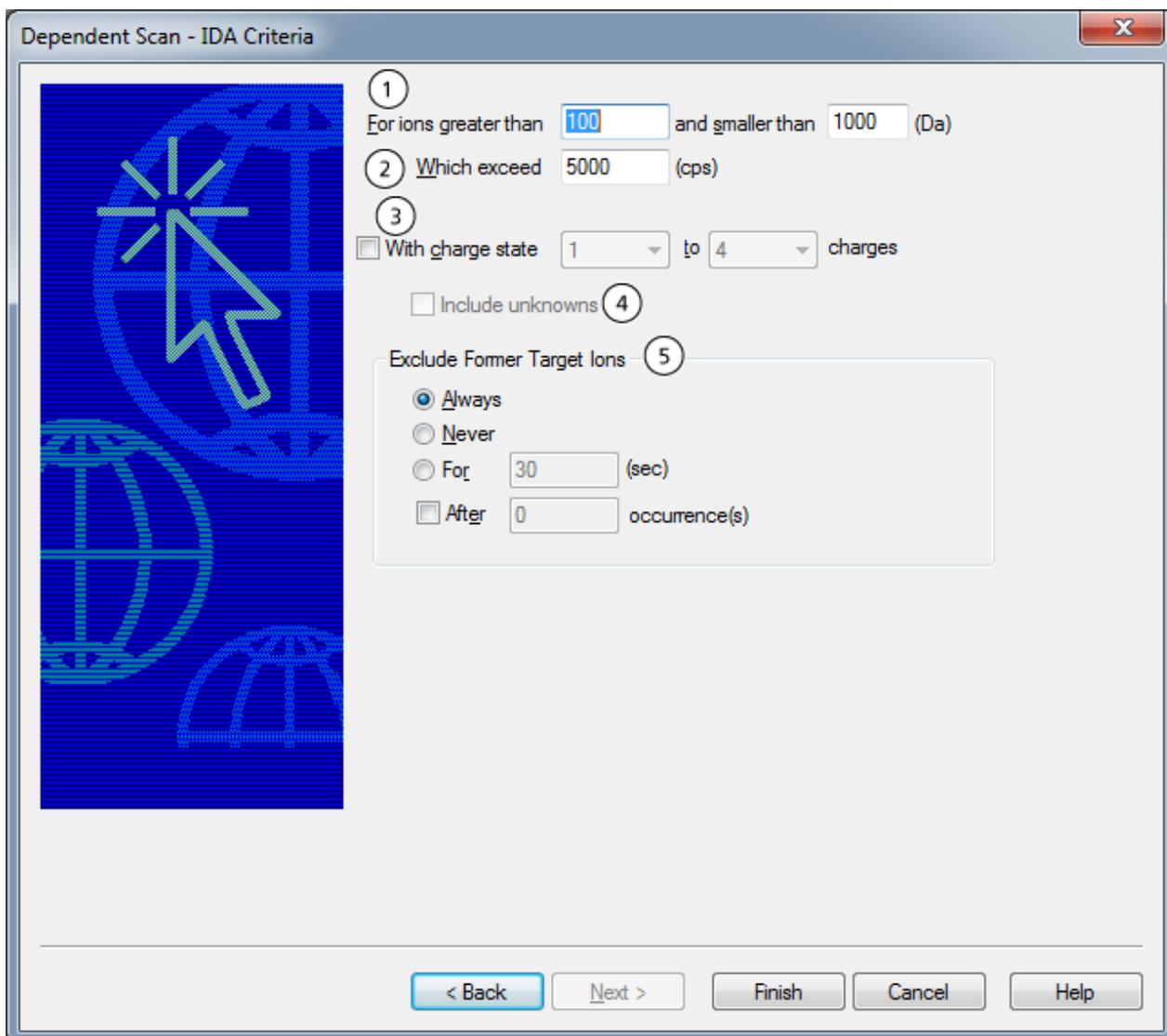


Element	Bezeichnung
1	Die _ intensivsten Peaks überwachen mit
2	Collision Energy (CE)
3	Rollende Stoßenergie verwenden
4	Startmasse: _ (Da)
5	Stoppmasse: _ (Da)

„IDA Method Wizard“

Element	Bezeichnung
6	Auflösung Q1 <ul style="list-style-type: none"> <li>• HOCH</li> <li>• EINHEIT</li> <li>• NIEDRIG</li> <li>• OFFEN</li> </ul>
7	Abtastrate: _ (Da/s)
8	LIT-Füllzeit: _ (ms)

Abbildung 6-7: „Dependent Scan“ – „IDA Criteria“



<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
1	Für Ionen, die größer als _ sind und kleiner als _ (Da)
2	Welche übersteigen _ (cps)
3	Mit Ladezustand von _ bis _ Ladungen
4	Unbekannte einschließen
5	Frühere Ziel-Ionen ausschließen <ul style="list-style-type: none"><li>• Immer</li><li>• Niemals</li><li>• Für _ (s)</li><li>• Nach _ Vorkommnis(sen)</li></ul>

Abbildung 7-1: Liste der Scan-Typen

The screenshot shows a software interface for configuring mass spectrometry scans. At the top, there are two tabs: 'MS' and 'Advanced MS'. Below the tabs, there is a dropdown menu for 'Experiment' set to '1'. The 'Scan type:' dropdown is open, showing a list of options: 'MRM (MRM)', 'Enhanced MS (EMS)', 'Enhanced Product Ion (EPI)', 'Enhanced Resolution (ER)', 'MRM (MRM)', 'MS/MS/MS (MS3)', 'Neutral Loss (NL)', 'Precursor Ion (Prec)', 'Product Ion (MS2)', 'Q1 MS (Q1)', 'Q1 Multiple Ions (Q1 MI)', 'Q3 MS (Q3)', and 'Q3 Multiple Ions (Q3 MI)'. A blue highlight is on the second 'MRM (MRM)' option. A circled '1' is next to 'Precursor Ion (Prec)'. To the left of the dropdown, there is a 'Polarity' label with a line pointing to the dropdown area. Below the dropdown, there is a 'Total Scan Time (includes pauses):' label, a text input field containing '0.0000', and '(sec)' to its right. At the bottom left, there is a button labeled 'Edit Parameters...'.

Element	Bezeichnung
1	Erweiterte MS (EMS) Erweitertes Produkt-Ion (EPI) Erweiterte Auflösung (ER) MRM (MRM) MS/MS/MS (MS3) Neutralverlust (NL) Vorläufer-Ion (Prec) Produkt-Ion (MS2) Q1 MS (Q1) Q1 Multiple Ionen (Q1 MI) Q3 MS (Q3) Q3 Multiple Ionen (Q3 MI)

Abbildung 7-2: Registerkarte „Q1 MS (Q1) MS“

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window. It includes fields for 'Experiment' (1), 'Scan type' (2), 'Scan rate' (3), 'Polarity' (4), 'MCA' (5), 'Number of scans to sum' (6), 'Total Scan Time' (7), and an 'Edit Parameters' button (8). A 'Period Summary' section (12) contains 'Duration' (9), 'Cycles' (10), 'Delay Time', and 'Cycle' fields. A 'Scheduled Ionization' section (16) has 'Start Time' and 'Stop Time' fields. A table at the bottom right shows a single row with columns 'Start (Da)', 'Stop (Da)', and 'Time (sec)', with callouts 13, 14, and 15 respectively.

Element	Bezeichnung
1	Versuch
2	Scantyp
3	Abtastrate

## Erfassungsmethode erstellen

---

Element	Bezeichnung
4	Polarität <ul style="list-style-type: none"><li>• Positiv</li><li>• Negativ</li></ul>
5	MCA
6	Anzahl der aufzusummierenden Scans
7	Scanzeit gesamt (einschließlich Pausen): _ (s)
8	Parameter bearbeiten
9	Zentrum/Breite
10	Parameterbereich
11	Importliste
12	Zusammenfassung der Periode <ul style="list-style-type: none"><li>• Dauer: _ (min)</li><li>• Zyklen: _</li><li>• Verzögerungszeit: _ (s)</li><li>• Zyklus: _ (s)</li></ul>
13	Start (Da)
14	Stopp (Da)
15	Zeit (s)
16	Geplante Ionisation <ul style="list-style-type: none"><li>• Startzeit (Min.)</li><li>• Stoppzeit (Min.)</li></ul>

Abbildung 7-3: Registerkarte „Q1 MS (Q1) Advanced MS“

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window with the following settings:

- Scan mode: 1 (Profile) 2
- Step size: 3 (0.1) (Da)
- Resolution Q1: 4 (Unit)
- Intensity threshold (total count): 5 (0)
- Settling time: 6 (0) (ms)
- Pause between mass ranges: 7 (5.007) (ms)

Element	Bezeichnung
1	Scan-Modus Scan-Modus: Strichspektrum <ul style="list-style-type: none"> <li>• Min. Peak-Trennung (Da)</li> <li>• Min. Peak-Breite (Da)</li> <li>• Scan-Modus: Springen von Peak zu Peak                             <ul style="list-style-type: none"> <li>• Massendefekt mDa/(100*Da)</li> </ul> </li> </ul>
2	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Profil</li> <li>• Schnellprofil</li> <li>• Strichspektrum</li> <li>• Springen von Peak zu Peak</li> </ul>
3	Schrittweite: _ (Da)

## Erfassungsmethode erstellen

Element	Bezeichnung
4	Auflösung Q1 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Niedrig</li> <li>• Einheit</li> <li>• Hoch</li> <li>• Öffnen</li> </ul>
5	Intensitäts-Schwellenwert (Gesamtanzahl)
6	Setzzeit: _ (ms)
7	Pause zwischen Massenbereichen: _ (ms)

Abbildung 7-4: Registerkarte „MRM MS“ für SCIEX 4500MD- und Citrine-Systeme

Element	Bezeichnung
1	Versuch
2	Scantyp
3	Polarität <ul style="list-style-type: none"> <li>• Positiv</li> <li>• Negativ</li> </ul>
4	Scanzzeit gesamt (einschließlich Pausen): _ (s)
5	Parameter bearbeiten

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
6	Scheduled MRM <ul style="list-style-type: none"><li>• Aktiviert</li><li>• Grundeinstellung</li><li>• Erweitert</li></ul>
7	Importliste
8	Zusammenfassung der Periode <ul style="list-style-type: none"><li>• Dauer: _ (min)</li><li>• Zyklen: _</li><li>• Verzögerungszeit: _ (s)</li><li>• Zyklus: _ (s)</li></ul>
9	Q1-Masse (Da)
10	Q3-Masse (Da)
11	Stehzeit (Millisek.)
12	ID
13	Geplante Ionisation <ul style="list-style-type: none"><li>• Startzeit (Min.)</li><li>• Stoppzeit (Min.)</li></ul>

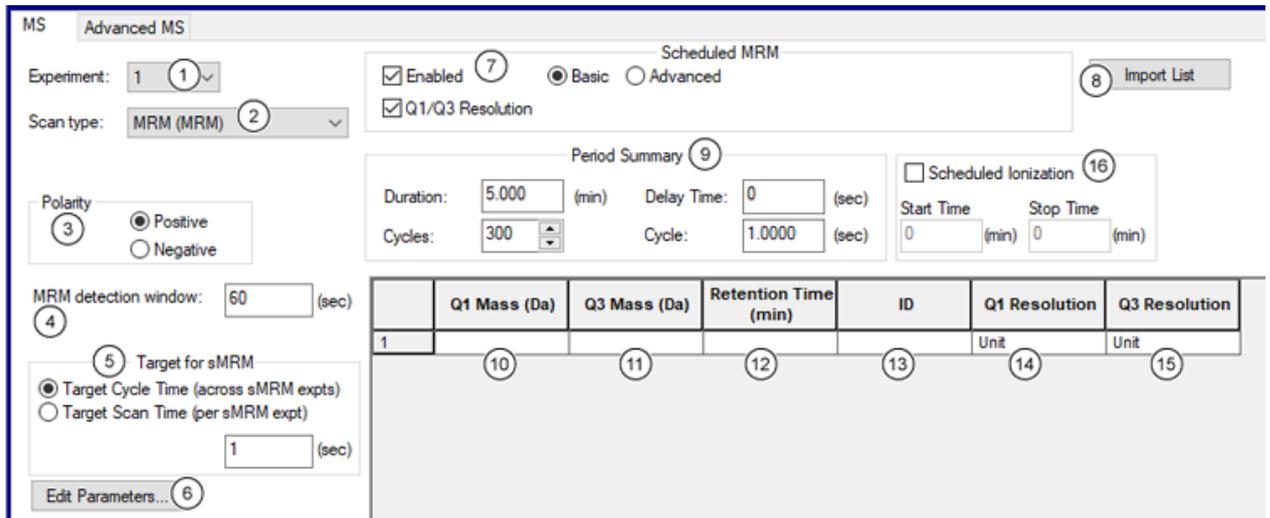
## Erfassungsmethode erstellen

Abbildung 7-5: Registerkarte „MRM Advanced MS“ für SCIEX 4500MD- und Citrine-Systeme

MS	Advanced MS
Resolution Q1: ①	<input type="text" value="Unit"/>
Resolution Q3: ②	<input type="text" value="Unit"/>
Intensity threshold (total count): ③	<input type="text" value="0"/>
Settling time: ④	<input type="text" value="0"/> (ms)
Pause between mass ranges: ⑤	<input type="text" value="5.007"/> (ms)

Element	Bezeichnung
1	Auflösung Q1 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Niedrig</li> <li>• Einheit</li> <li>• Hoch</li> <li>• Öffnen</li> </ul>
2	Auflösung Q3 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Niedrig</li> <li>• Einheit</li> <li>• Hoch</li> <li>• Öffnen</li> </ul>
3	Intensitäts-Schwellenwert (Gesamtanzahl)
4	Setzzeit: _ (ms)
5	Pause zwischen Massenbereichen: _ (ms)

Abbildung 7-6: Registerkarte „Scheduled MRM MS“ für SCIEX 4500MD- und Citrine-Systeme



Element	Bezeichnung
1	Versuch
2	Scantyp
3	Polarität <ul style="list-style-type: none"> <li>• Positiv</li> <li>• Negativ</li> </ul>
4	MRM-Messfenster: _ (s)
5	Ziel für sMRM <ul style="list-style-type: none"> <li>• Zielzyklusdauer (bei sMRM-Experimenten)</li> <li>• Ziel-Scan-Dauer (nach sMRM-Experimenten)</li> </ul>
6	Parameter bearbeiten
7	Scheduled MRM <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aktiviert</li> <li>• Grundeinstellung</li> <li>• Erweitert</li> <li>• Q1/Q3-Auflösung</li> </ul>
8	Importliste

## Erfassungsmethode erstellen

---

Element	Bezeichnung
9	Zusammenfassung der Periode <ul style="list-style-type: none"><li>• Dauer: _ (min)</li><li>• Zyklen: _</li><li>• Verzögerungszeit: _ (s)</li><li>• Zyklus: _ (s)</li></ul>
10	Q1-Masse (Da)
11	Q3-Masse (Da)
12	Retentionszeit (min)
13	ID
14	Q1-Auflösung <ul style="list-style-type: none"><li>• Niedrig</li><li>• Einheit</li><li>• Hoch</li><li>• Öffnen</li></ul>
15	Q3-Auflösung <ul style="list-style-type: none"><li>• Niedrig</li><li>• Einheit</li><li>• Hoch</li><li>• Öffnen</li></ul>
16	Geplante Ionisation <ul style="list-style-type: none"><li>• Startzeit (Min.)</li><li>• Stoppzeit (Min.)</li></ul>

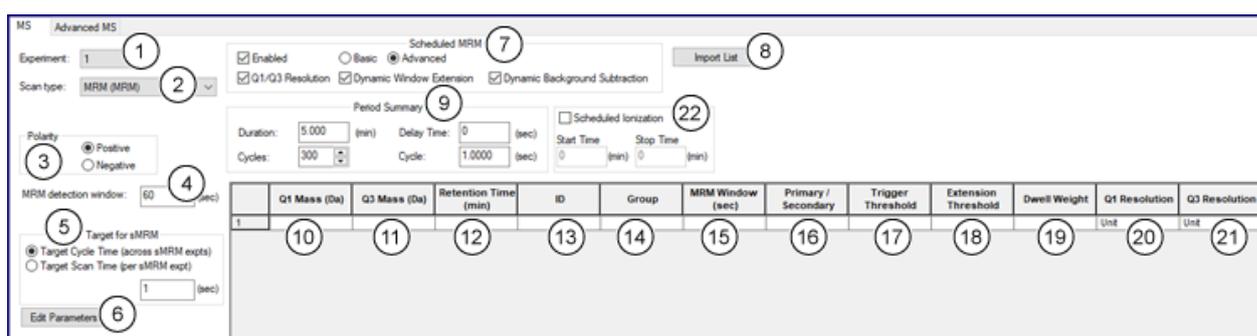
Abbildung 7-7: Registerkarte „Scheduled MRM Advanced MS“ für SCIEX 4500MD- und Citrine-Systeme

Element	Bezeichnung
1	Auflösung Q1 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Niedrig</li> <li>• Einheit</li> <li>• Hoch</li> <li>• Öffnen</li> </ul>
2	Auflösung Q3 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Niedrig</li> <li>• Einheit</li> <li>• Hoch</li> <li>• Öffnen</li> </ul>
3	Intensitäts-Schwellenwert (Gesamtanzahl)
4	Setzzeit: _ (ms)

## Erfassungsmethode erstellen

Element	Bezeichnung
5	Pause zwischen Massenbereichen: _ (ms)
6	Scheduled MRM <ul style="list-style-type: none"> <li>• Min. Stehzeit: _ (ms)</li> <li>• Max. Stehzeit: _ (ms)</li> </ul>

Abbildung 7-8: Registerkarte „Scheduled MRM Pro MS“ für SCIEX 4500MD- und Citrine-Systeme



Element	Bezeichnung
1	Versuch
2	Scantyp
3	Polarität <ul style="list-style-type: none"> <li>• Positiv</li> <li>• Negativ</li> </ul>
4	MRM-Messfenster: _ (s)
5	Ziel für sMRM <ul style="list-style-type: none"> <li>• Zielzyklusdauer (bei sMRM-Experimenten)</li> <li>• Ziel-Scan-Dauer (nach sMRM-Experimenten)</li> </ul>
6	Parameter bearbeiten

Element	Bezeichnung
7	Scheduled MRM <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aktiviert</li> <li>• Grundeinstellung</li> <li>• Erweitert</li> <li>• Q1/Q3-Auflösung</li> <li>• Dynamische Fenstererweiterung</li> <li>• Dynamische Hintergrundsubtraktion</li> </ul>
8	Importliste
9	Zusammenfassung der Periode <ul style="list-style-type: none"> <li>• Dauer: _ (min)</li> <li>• Zyklen: _</li> <li>• Verzögerungszeit: _ (s)</li> <li>• Zyklus: _ (s)</li> </ul>
10	Q1-Masse (Da)
11	Q3-Masse (Da)
12	Retentionszeit (min)
13	ID
14	Gruppe
15	MRM-Fenster (s)
16	Primär/Sekundär
17	Auslösungsschwellenwert
18	Erweiterungsschwellenwert
19	Verweilgewicht
20	Q1-Auflösung <ul style="list-style-type: none"> <li>• Niedrig</li> <li>• Einheit</li> <li>• Hoch</li> <li>• Öffnen</li> </ul>

## Erfassungsmethode erstellen

Element	Bezeichnung
21	Q3-Auflösung <ul style="list-style-type: none"> <li>• Niedrig</li> <li>• Einheit</li> <li>• Hoch</li> <li>• Öffnen</li> </ul>
22	Geplante Ionisation <ul style="list-style-type: none"> <li>• Startzeit (Min.)</li> <li>• Stoppzeit (Min.)</li> </ul>

Abbildung 7-9: Registerkarte „Enhanced Product Ion (EPI) MS“

Element	Bezeichnung
1	Versuch
2	Scantyp
3	Abtastrate: _ (Da/s)
4	Polarität <ul style="list-style-type: none"> <li>• Positiv</li> <li>• Negativ</li> </ul>
5	MCA

Element	Bezeichnung
6	Anzahl der aufzusummierenden Scans
7	Produkt von: _ (Da)
8	Scanzzeit gesamt (einschließlich Pausen): _ (s)
9	Parameter bearbeiten
10	Zentrum/Breite
11	Parameterbereich
12	Importliste
13	Massen optimieren
14	Start (Da)
15	Stopp (Da)
16	Time (sec)
17	Zusammenfassung der Periode <ul style="list-style-type: none"> <li>• Dauer: _ (min)</li> <li>• Zyklen: _</li> <li>• Verzögerungszeit: _ (s)</li> <li>• Zyklus: _ (s)</li> </ul>
18	Geplante Ionisation <ul style="list-style-type: none"> <li>• Startzeit (Min.)</li> <li>• Stoppzeit (Min.)</li> </ul>

## Erfassungsmethode erstellen

Abbildung 7-10: Registerkarte „Enhanced Product Ion (EPI) Advanced MS“

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window. It includes the following settings:

- Scan mode: 1 (Profile) 2
- Step size: 3 (0.06 Da)
- Resolution Q1: 4 (Unit)
- Intensity threshold (total count): 5 (0)
- Settling time: 6 (0 ms)
- Pause between mass ranges: 7 (5.007 ms)
- Q0 Trapping: 8 (checkbox)
- Fixed LIT fill time: 9 (20 ms)
- Dynamic fill time: 10 (checkbox)
- Q3 Entry Barrier: 11 (8 V)

Element	Bezeichnung
1	Scan-Modus
2	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Profil-</li> <li>• Strichspektrum</li> </ul>
3	Schrittweite: _ (Da)
4	Auflösung Q1 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Niedrig</li> <li>• Einheit</li> <li>• Hoch</li> <li>• Öffnen</li> </ul>
5	Intensitäts-Schwellenwert (Gesamtanzahl)
6	Setzzeit: _ (ms)
7	Pause zwischen Massenbereichen: _ (ms)
8	Q0 Trapping
9	Feste LIT-Füllzeit: _ (ms)
10	Dynamische Füllzeit
11	Q3 Zugangsschranke: _ (V)

Abbildung 7-11: Registerkarte „MS/MS/MS (MS3) MS“

Element	Bezeichnung
1	Versuch
2	Scantyp
3	Abtastrate: _ (Da/s)
4	Polarität <ul style="list-style-type: none"> <li>• Positiv</li> <li>• Negativ</li> </ul>
5	MCA
6	Anzahl der aufzusummierenden Scans
7	1. Vorläufer: _ (Da)
8	2. Vorläufer: _ (Da)
9	Scanzzeit gesamt (einschließlich Pausen): _ (s)
10	Parameter bearbeiten
11	Zentrum/Breite
12	Parameterbereich
13	Keine Fragmentierung
14	Importliste
15	Massen optimieren

## Erfassungsmethode erstellen

Element	Bezeichnung
16	Zusammenfassung der Periode <ul style="list-style-type: none"> <li>• Dauer: _ (min)</li> <li>• Zyklen: _</li> <li>• Verzögerungszeit: _ (s)</li> <li>• Zyklus: _ (s)</li> </ul>
17	Start (Da)
18	Stopp (Da)
19	Time (sec)
20	Geplante Ionisation <ul style="list-style-type: none"> <li>• Startzeit (Min.)</li> <li>• Stoppzeit (Min.)</li> </ul>

Abbildung 7-12: Q1 Multiple Ionen (Q1 MI)

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window. At the top, 'Experiment' is set to 1 and 'Scan type' is 'Q1 Multiple Ions (Q1 MI)'. The 'Polarity' is set to 'Positive'. The 'Period Summary' section shows 'Duration: 0.000 (min)', 'Delay Time: 0 (sec)', 'Cycles: 1', and 'Cycle: 0.0000 (sec)'. There is a 'Scheduled Ionization' checkbox and 'Start Time' and 'Stop Time' fields, both set to 0. The 'Total Scan Time (includes pauses)' is 0.0000 (sec). A table below shows the scan parameters:

	Q1 Mass (Da)	Dwell Time (msec)
1	8	9

Element	Bezeichnung
1	Versuch
2	Scantyp

Element	Bezeichnung
3	Polarität <ul style="list-style-type: none"> <li>• Positiv</li> <li>• Negativ</li> </ul>
4	Scanzeit gesamt (einschließlich Pausen): _ (s)
5	Parameter bearbeiten
6	Importliste
7	Zusammenfassung der Periode <ul style="list-style-type: none"> <li>• Dauer: _ (min)</li> <li>• Zyklen: _</li> <li>• Verzögerungszeit: _ (s)</li> <li>• Zyklus: _ (s)</li> </ul>
8	Q1-Masse (Da)
9	Stehzeit (Millisek.)
10	Geplante Ionisation <ul style="list-style-type: none"> <li>• Startzeit (Min.)</li> <li>• Stoppzeit (Min.)</li> </ul>

Abbildung 7-13: Registerkarte „Precursor Ion (Prec) MS“

MS **Advanced MS**

Experiment: 1  Center / Width  Parameter Range

Scan type: Precursor Ion (Prec)  Scheduled Ionization

Scan rate: 200 (Da/s)

Period Summary

Duration: 0.000 (min) Delay Time: 0 (sec)

Cycles: 1 Cycle: 0.0000 (sec)

Start Time: 0 (min) Stop Time: 0 (min)

Polarity:  Positive  Negative

MCA

Number of scans to sum: 1

Precursor Of: 1 30.000 (Da)

Total Scan Time (includes pauses): 0.0000 (sec)

	Start (Da)	Stop (Da)	Time (sec)
1			

## Erfassungsmethode erstellen

Element	Bezeichnung
1	Vorläufer von: _ (Da)

Abbildung 7-14: Registerkarte: „Neutral Loss MS“

MS **Advanced MS**

Experiment: 1  Center / Width   
 Parameter Range

Scan type: Neutral Loss (NL)  Scheduled Ionization

Scan rate: 200 (Da/s)  (min) Delay Time: 0 (sec)  
 (sec)

Period Summary

Duration: Cycles: 1 Cycle: 0.0000

Start Time: 0 (min) Stop Time: 0 (min)

Polarity  
 Positive  
 Negative

MCA

Number of scans to sum: 1  
 Loss Of: 1 30.000 (Da)

Total Scan Time (includes pauses): 0.0000 (sec)

	Start (Da)	Stop (Da)	Time (sec)
1			

Element	Bezeichnung
1	Verlust von: _ (Da)

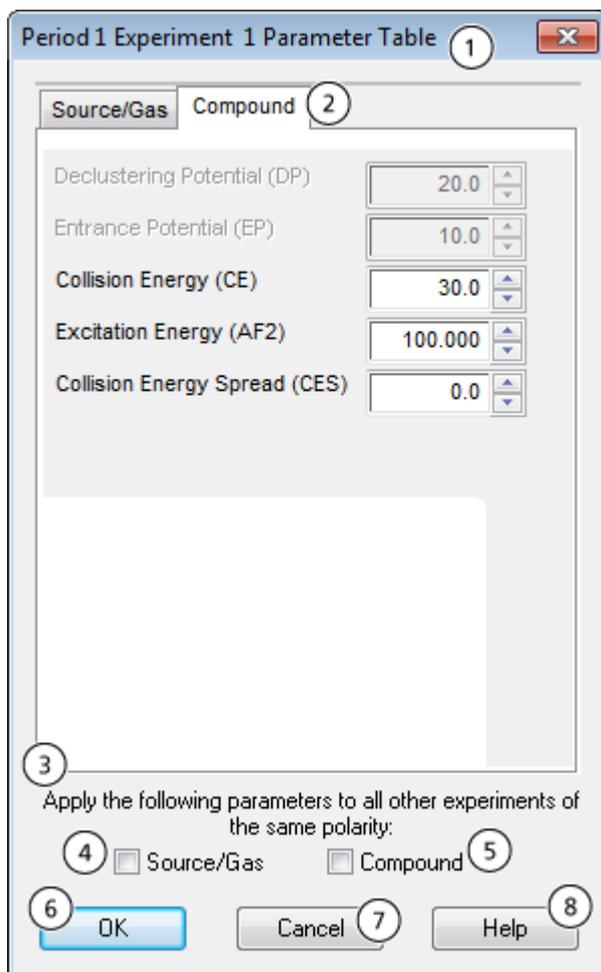
Abbildung 7-15: Registerkarte: „Neutral Loss Advanced MS“

Element	Bezeichnung
1	Scan-Modus <ul style="list-style-type: none"> <li>• Profil</li> <li>• Schnellprofil</li> <li>• Strichspektrum</li> <li>• Springen von Peak zu Peak</li> </ul>
2	Schrittweite: _ (Da)
3	Auflösung Q1 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Niedrig</li> <li>• Einheit</li> <li>• Hoch</li> <li>• Öffnen</li> </ul>
4	Auflösung Q1 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Niedrig</li> <li>• Einheit</li> <li>• Hoch</li> <li>• Öffnen</li> </ul>

## Erfassungsmethode erstellen

Element	Bezeichnung
5	Intensitäts-Schwellenwert (Gesamtanzahl)
6	Setzzeit: _ (ms)
7	Pause zwischen Massenbereichen: _ (ms)

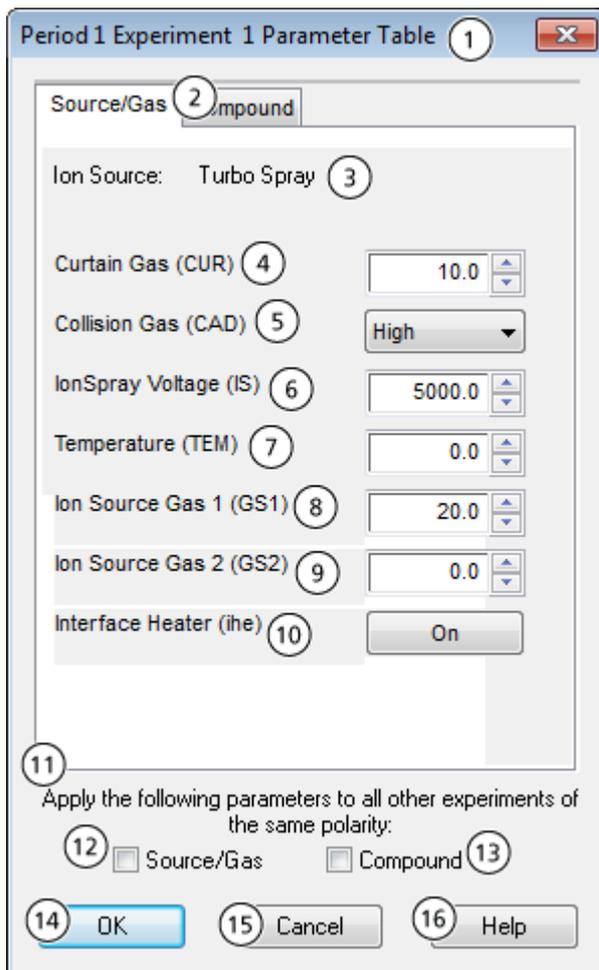
Abbildung 7-16: Registerkarte „Compound“



Element	Bezeichnung
1	Parametertabelle Zeitabschnitt 1 Experiment 1
2	Verbindung
3	Die folgenden Parameter auf alle anderen Experimente der gleichen Polarität anwenden:
4	„Source/Gas“
5	Verbindung

Element	Bezeichnung
6	OK
7	Abbrechen
8	Hilfe

Abbildung 7-17: Registerkarte „Source/Gas“



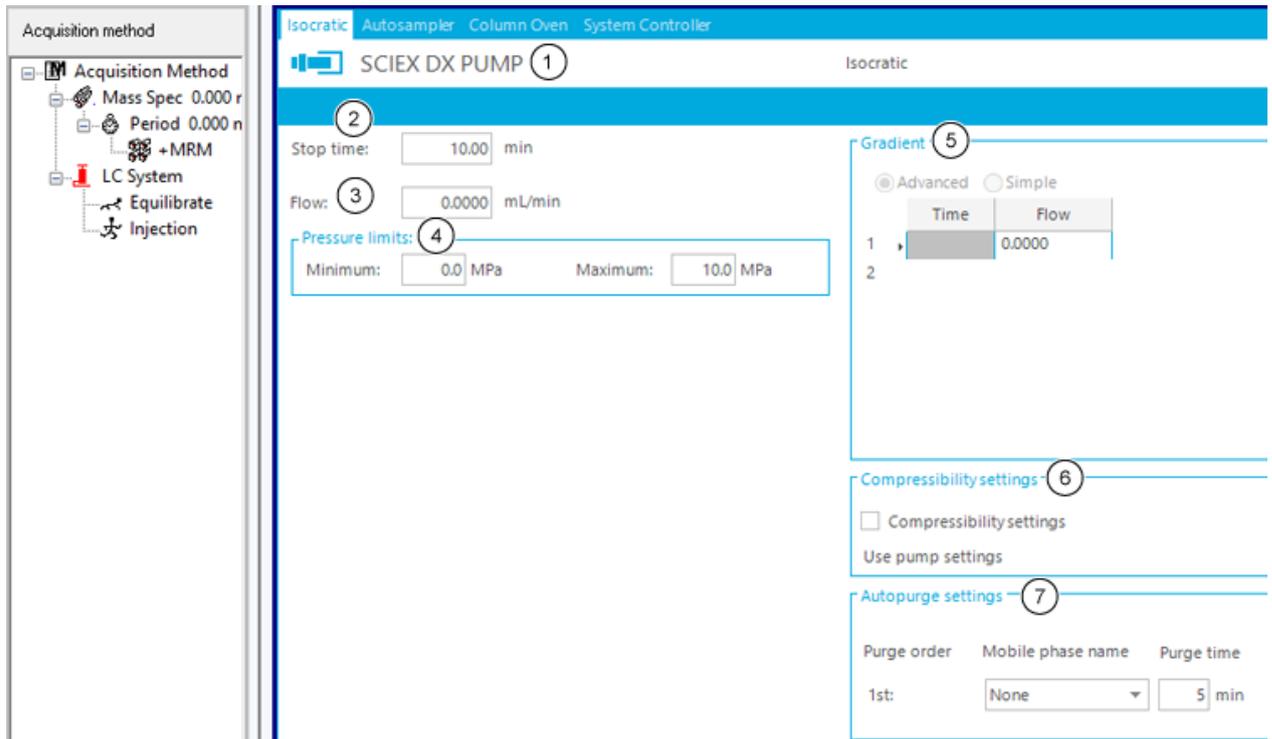
Element	Bezeichnung
1	Parametertabelle Zeitabschnitt 1 Experiment 1
2	„Source/Gas“
3	Ionenquelle: Turbospray
4	Curtain Gas (CUR)

## Erfassungsmethode erstellen

---

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
5	Collision Gas (CAD) <ul style="list-style-type: none"><li>• Niedrig</li><li>• Mittel</li><li>• Hoch</li></ul>
6	IonSpray-Spannung (IS)
7	Temperatur (TEM)
8	Ionenquellengas 1 (GS1)
9	Ionenquellengas 2 (GS2)
10	Schnittstellenheizer (IHE) (Ein, Aus)
11	Die folgenden Parameter auf alle anderen Experimente der gleichen Polarität anwenden:
12	„Source/Gas“
13	Verbindung
14	OK
15	Abbrechen
16	Hilfe

Abbildung 7-18: „Acquisition Method Editor“ – Registerkarte „Isocratic“ (Jasper LC-System oder Shimadzu CL LC-Serien)

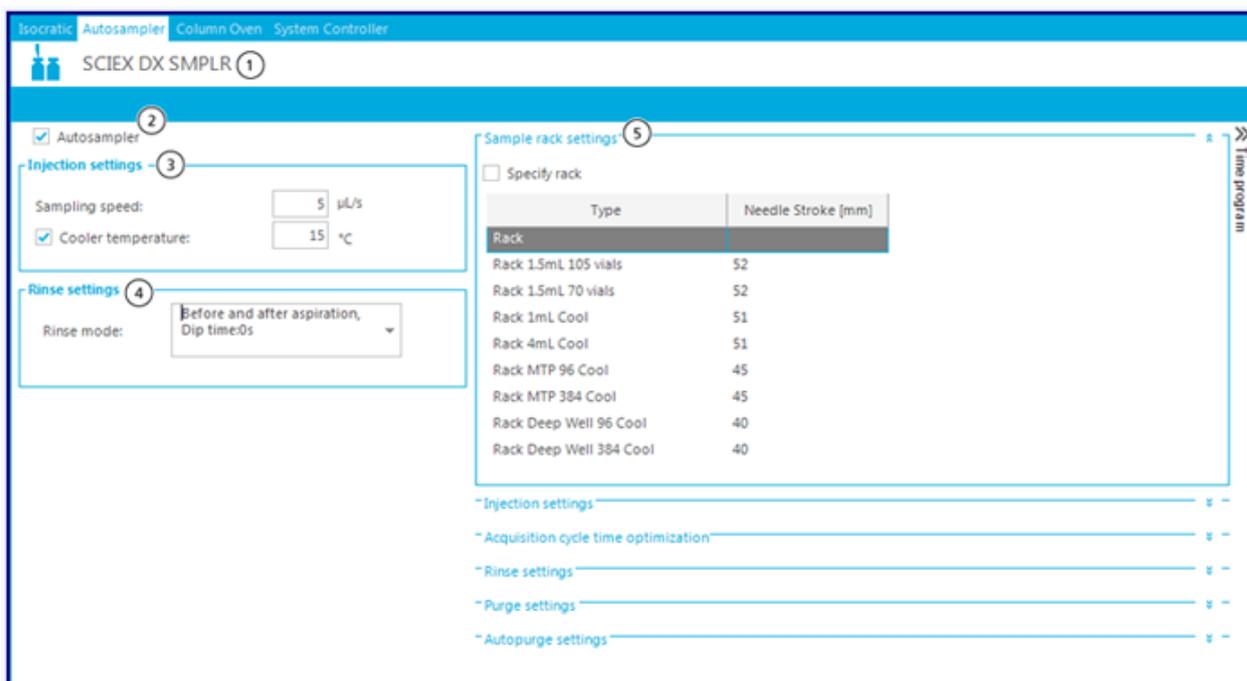


Element	Bezeichnung
1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• SCIEX DX-PUMPE (Jasper LC-System)</li> <li>• LC-20ADXR (Shimadzu CL LC-Serien)</li> </ul>
2	Stopzeit: _ (min)
3	Durchfluss: _ (ml/min)
4	Druckgrenzen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Minimum: _ (mPa)</li> <li>• Maximum: _ (mPa)</li> </ul>
5	Gradient <ul style="list-style-type: none"> <li>• Erweitert                             <ul style="list-style-type: none"> <li>• Zeit</li> <li>• Durchfluss</li> </ul> </li> <li>• Einfach</li> </ul>

## Erfassungsmethode erstellen

Element	Bezeichnung
6	<p>Kompressibilitätseinstellungen</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Kompressibilitätseinstellungen</li> <li>• Pumpeneinstellungen verwenden</li> </ul>
7	<p>Einstellungen für automatische Reinigung</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Reinigungsreihenfolge: 1.</li> <li>• Name der mobilen Phase: Keiner</li> <li>• Reinigungsdauer: _ (min)</li> </ul>

**Abbildung 7-19: „Acquisition Method Editor“ – Registerkarte „Autosampler“ (Jasper LC-System oder Shimadzu CL LC-Serien)**



Element	Bezeichnung
1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• SCIEX DX SMPLR (Jasper LC-System)</li> <li>• SIL-20ACXR (Shimadzu CL LC-Serien)</li> </ul>
2	Autosampler

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
3	Injektionseinstellungen <ul style="list-style-type: none"><li>• Probenahme-Geschwindigkeit: _ (µl/s)</li><li>• Kühlertemperatur: _ (°C)</li></ul>
4	Spüleinstellungen <ul style="list-style-type: none"><li>• Spülmodus<ul style="list-style-type: none"><li>• Vor und nach der Ansaugung, Senkdauer: 0 s<ul style="list-style-type: none"><li>• Spülmodus: Keine Spülung, Vor der Ansaugung, Nach der Ansaugung, Vor und nach der Ansaugung</li></ul></li></ul></li><li>• Spülungssenkdauer: _ (s)</li></ul>
6	Probenrackeinstellungen <ul style="list-style-type: none"><li>• Rack angeben</li><li>• Typ</li><li>• Nadelhub (mm)</li></ul>

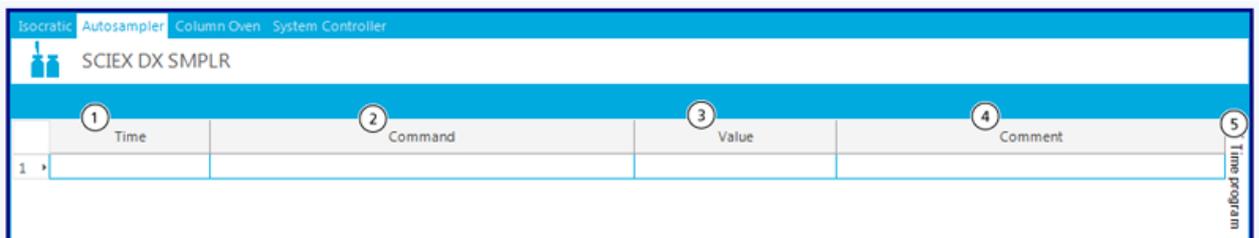
## Erfassungsmethode erstellen

Abbildung 7-20: „Acquisition Method Editor“ – Registerkarte „Autosampller“ (Jasper LC-System oder Shimadzu CL LC-Serien)

Element	Bezeichnung
1	<p>Probenrackeinstellungen</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Rack angeben</li> <li>• Probenrack: _</li> <li>• Nadelhub: _ mm</li> </ul>
2	<p>Injektionseinstellungen</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Fläschchen-Nadelhub steuern: _ mm</li> </ul>
3	<p>Erfassungszykluszeit-Optimierung</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Startzeit für Vorbehandlung: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aus</li> <li>• Automatisch</li> <li>• Manuell</li> </ul> </li> <li>• Überlappungszeit für Vorbehandlung: _ min</li> </ul>

Element	Bezeichnung
4	Spüleinstellungen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Spülgeschwindigkeit: _ µl/s</li> <li>• Spülvolumen: _ µl</li> </ul>
5	Reinigungseinstellungen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Reinigungsdauer: _ min</li> </ul>
6	Einstellungen für automatische Reinigung <ul style="list-style-type: none"> <li>• Reinigung des Probengebers durchführen</li> </ul>

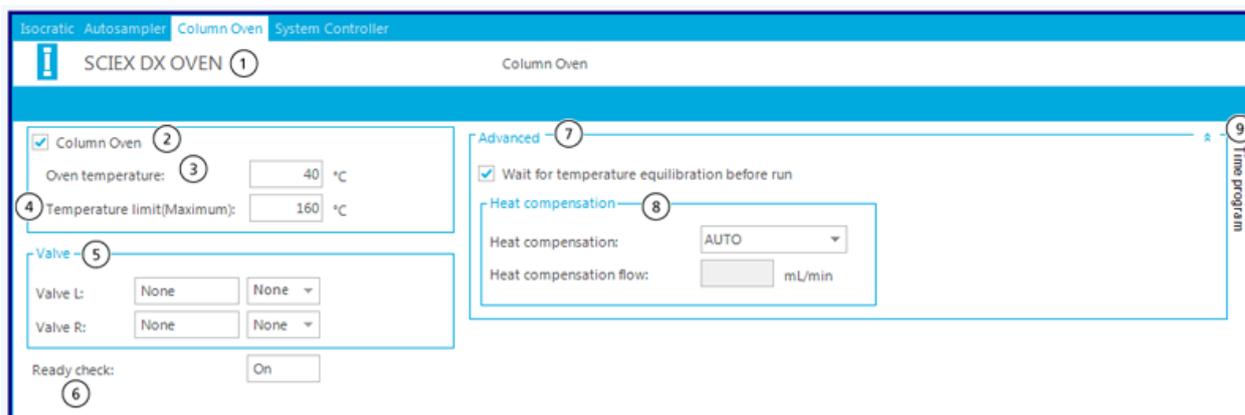
Abbildung 7-21: „Acquisition Method Editor“ – Registerkarte „Autosampler“ (Jasper LC-System oder Shimadzu CL LC-Serien)



Element	Bezeichnung
1	Zeit
2	Befehl
3	Wert
4	Kommentar
5	Zeitprogramm

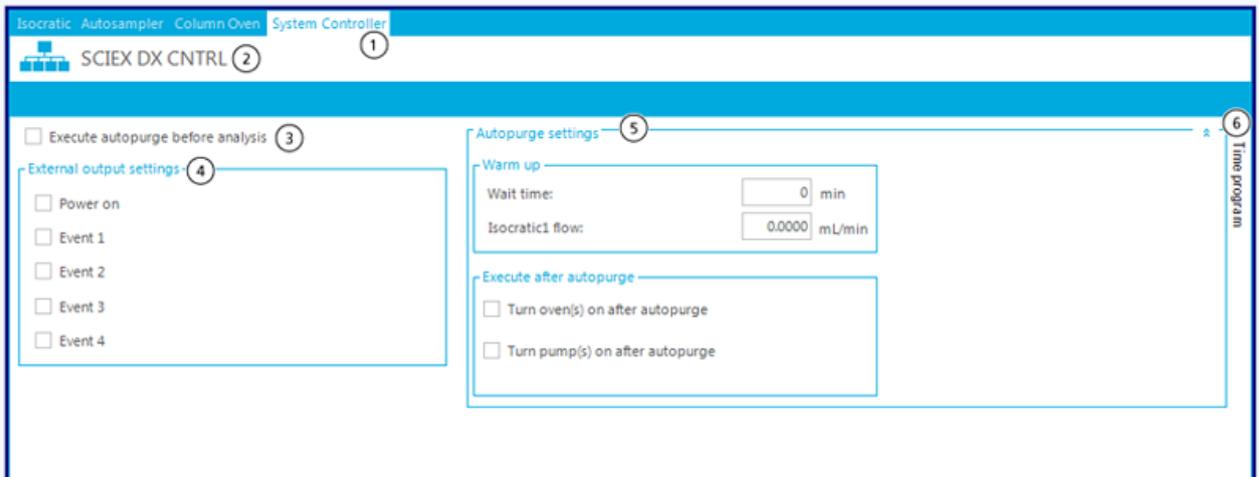
## Erfassungsmethode erstellen

Abbildung 7-22: „Acquisition Method Editor“ – Registerkarte „Column Oven“ (Jasper LC-System oder Shimadzu CL LC-Serien)



Element	Bezeichnung
1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• SCIEX DX-OFEN (Jasper LC-System)</li> <li>• CTO-20AC (Shimadzu CL LC-Serien)</li> </ul>
2	Column Oven
3	Ofentemperatur: _ °C
4	Temperaturgrenze (Maximum): _ °C
5	Ventil <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ventil links: Keins; keins</li> <li>• Ventil rechts: Keins; keins</li> </ul>
6	Bereitschaftsprüfung: Ein
7	Erweitert <ul style="list-style-type: none"> <li>• Vor der Durchführung auf den Temperaturabgleich warten</li> </ul>
8	Hitzekompensation (gilt nur für Jasper LC-System) <ul style="list-style-type: none"> <li>• Hitzekompensation:               <ul style="list-style-type: none"> <li>• Automatisch</li> <li>• Manuell</li> </ul> </li> <li>• Hitzekompensation: _ ml/min</li> </ul>
9	Zeitprogramm

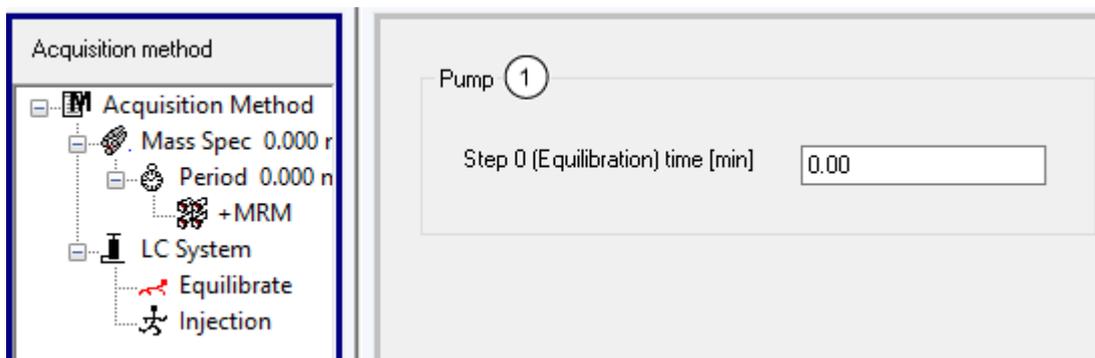
Abbildung 7-23: „Acquisition Method Editor“ – Registerkarte „System Controller“ (Jasper LC-System oder Shimadzu CL LC-Serien)



Element	Bezeichnung
1	System-Controller
2	<ul style="list-style-type: none"> <li>• SCIEX DX CNTRL (Jasper LC-System)</li> <li>• CBM-20A (Shimadzu CL LC-Serien)</li> </ul>
3	Automatische Reinigung vor Analyse durchführen
4	Externe Ausgabeeinstellungen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Strom Ein</li> <li>• Ereignis 1</li> <li>• Ereignis 2</li> <li>• Ereignis 3</li> <li>• Ereignis 4</li> </ul>
5	Einstellungen für automatische Reinigung <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aufwärmen                             <ul style="list-style-type: none"> <li>• Wartezeit: _ min</li> <li>• Isokratischer1 Durchfluss: _ ml/min</li> </ul> </li> <li>• Nach automatischer Reinigung durchführen                             <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ofen nach automatischer Reinigung einschalten</li> <li>• Pumpe(n) nach automatischer Reinigung einschalten</li> </ul> </li> </ul>
6	Zeitprogramm

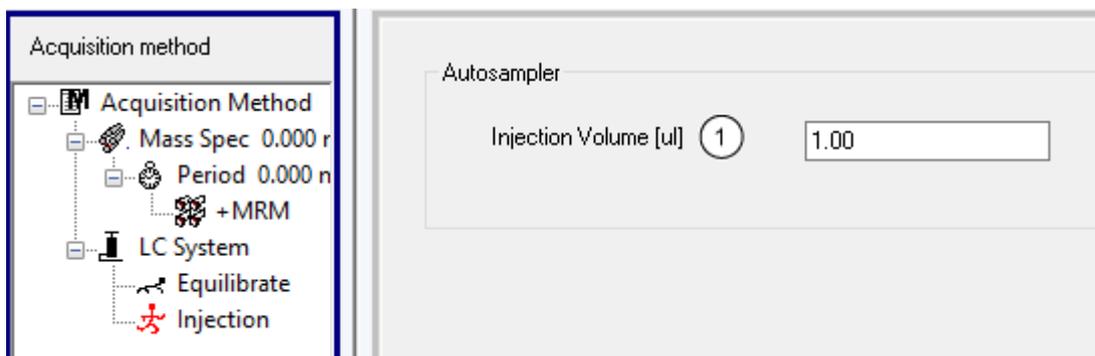
## Erfassungsmethode erstellen

Abbildung 7-24: „Acquisition Method Editor“ – „Equilibrate“ ausgewählt (Jasper LC-System)



Element	Bezeichnung
1	Pumpe <ul style="list-style-type: none"> <li>Schritt 0 (Äquilibrer)zeit (min)</li> </ul>

Abbildung 7-25: „Acquisition Method Editor“ – „Injection“ ausgewählt (Jasper LC-System)



Element	Bezeichnung
1	Autosampler <ul style="list-style-type: none"> <li>Injektionsvolumen (µl)</li> </ul>

Abbildung 7-26: Registerkarte „Agilent Autosampler Properties“

Element	Bezeichnung
1	Injektionsdetails
2	Spritzengröße (µl)
3	Injektionsvolumen (µl)
4	Aufzugsgeschwindigkeit (µl/min)
5	Ausstoßgeschwindigkeit (µl/min)
6	Nadelpiegel (mm)
7	Temperaturregelung <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aktiviert</li> <li>• Sollwert (4–40 C)</li> </ul>
8	Waschdetails <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aktiviert</li> <li>• Waschposition (Waschtiegel, Spülport)</li> <li>• Waschzeit (1–999 s)</li> <li>• Waschzyklen (1–5)</li> <li>• Waschfläschchennummer</li> <li>• Wasch-Rack-Nummer</li> </ul>

## Erfassungsmethode erstellen

Abbildung 7-27: Registerkarte „LC Pump Gradient“ (LC-Pumpen-Steigung)

Element	Bezeichnung
1	Gesamtzeit (min)
2	Volumenstrom (µl/min)
3	Schritt hinzufügen
4	Schritt entfernen
5	Diagramm anzeigen

Abbildung 7-28: Registerkarte „Limits“

Element	Bezeichnung
1	Parameter
2	Mindestdruck (psi)
3	Höchstdruck (psi)
4	Kompressibilität

Element	Bezeichnung
5	Totvolumen (µl)
6	Stoßvolumen (µl)
7	Maximale Druckrampe (psi/s)
8	Maximale Flussrampe (ml/min <sup>2</sup> )

Abbildung 7-29: Registerkarte „Limits (Advanced)“

Element	Bezeichnung
1	Parameter
2	Kompressibilität links
3	Kompressibilität rechts
4	Totvolumen links (µl)
5	Totvolumen rechts (µl)
6	Stoßvolumen links (µl)
7	Stoßvolumen rechts (µl)
8	Lösungsmittel links
9	Lösungsmittel rechts

Abbildung 7-30: Micro Mode

LC Pump Gradient Limits Limits (Advanced) Micro Mode

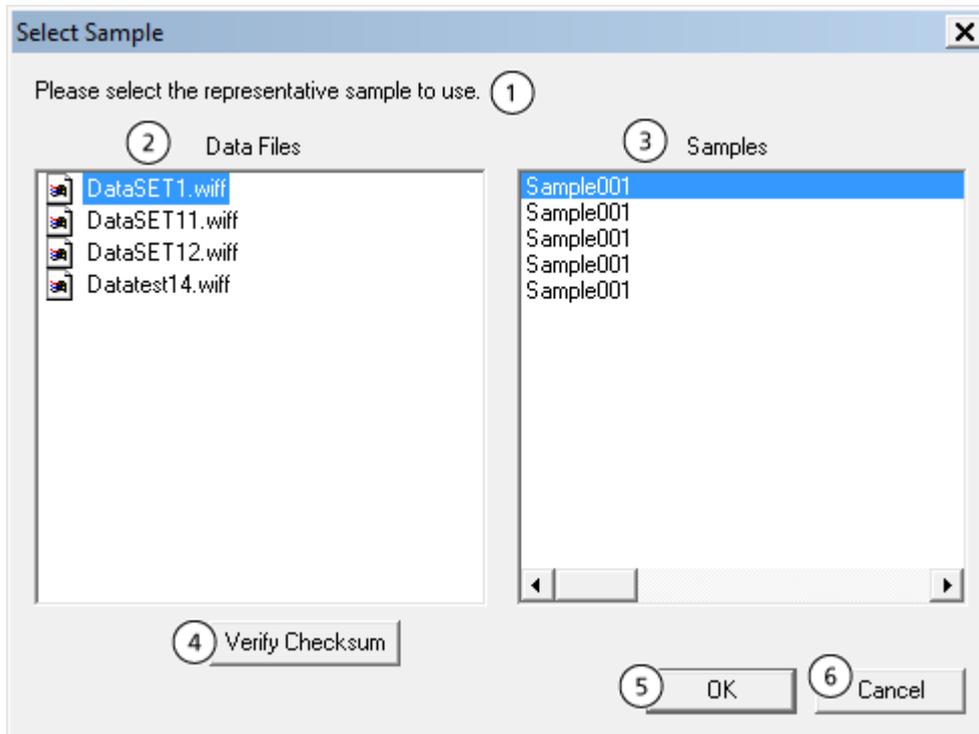
1  
Capillary Pump Mode: Micro

Parameters 2  
Primary Flow Rate (ul/min): 500.0  
Flow Sensor Calibration Table Index: 0

Element	Bezeichnung
1	Kapillarpumpenmodus (Mikro, Normal)
2	Parameter <ul style="list-style-type: none"><li>• Primärer Volumenstrom (ul/min)</li><li>• Flusssensor-Kalibrierungstabellenindex</li></ul>

# Quantifizierungsmethode erstellen 8

Abbildung 8-1: Select Sample



Element	Bezeichnung
1	Wählen Sie die zu verwendende repräsentative Probe aus.
2	Datendateien
3	Proben
4	Prüfsumme überprüfen
5	OK
6	Abbrechen

## Quantifizierungsmethode erstellen

Abbildung 8-2: Die Registerkarte Components

Components | Integration | Calibration

① Data Source:  ②  Sum Multiple Ions

Internal Standards

③

	Name	Q1 / Q3
1		
2		
3		
4		

Analytes

④

	Name	Internal Standard	Q1 / Q3
1			210.200 / 164.188
2			271.300 / 91.146
3			609.400 / 195.039
4			635.400 / 221.185
5			
6			
7			
8			

Element	Bezeichnung
1	Datenquelle <ul style="list-style-type: none"> <li>• Zeitraum Nr./Expt.Nr.</li> </ul>
2	Summe mehrerer Ionen
3	Interne Standards <ul style="list-style-type: none"> <li>• Name</li> <li>• Q1/Q3</li> </ul>
4	Analyten <ul style="list-style-type: none"> <li>• Name</li> <li>• Interner Standard</li> <li>• Q1/Q3</li> </ul>

Abbildung 8-3: Registerkarte „Integration“

Element	Bezeichnung
1	Analyt
2	Übernehmen
3	Concentration Units
4	Berechn. Konz. Einheiten
5	Bkg. Start
6	Bkg. Ende
7	<ul style="list-style-type: none"> <li>Min. Peak-Höhe _ cps</li> <li>Min. Peak-Breite _ s</li> </ul>
8	<ul style="list-style-type: none"> <li>RT-Fenster _ s</li> <li>Erwartete RT _ min</li> </ul>
9	Glättungsbreite: _ Punkte
10	Relative RT verwenden
11	<ul style="list-style-type: none"> <li>Automatisch - IQA II</li> <li>Parameter angeben - MQ III</li> </ul>
12	Rauschen Prozent
13	Peak-Splitting-Faktor
14	Basis Sub-Fenster: _ min
15	Höchsten Peak berichten

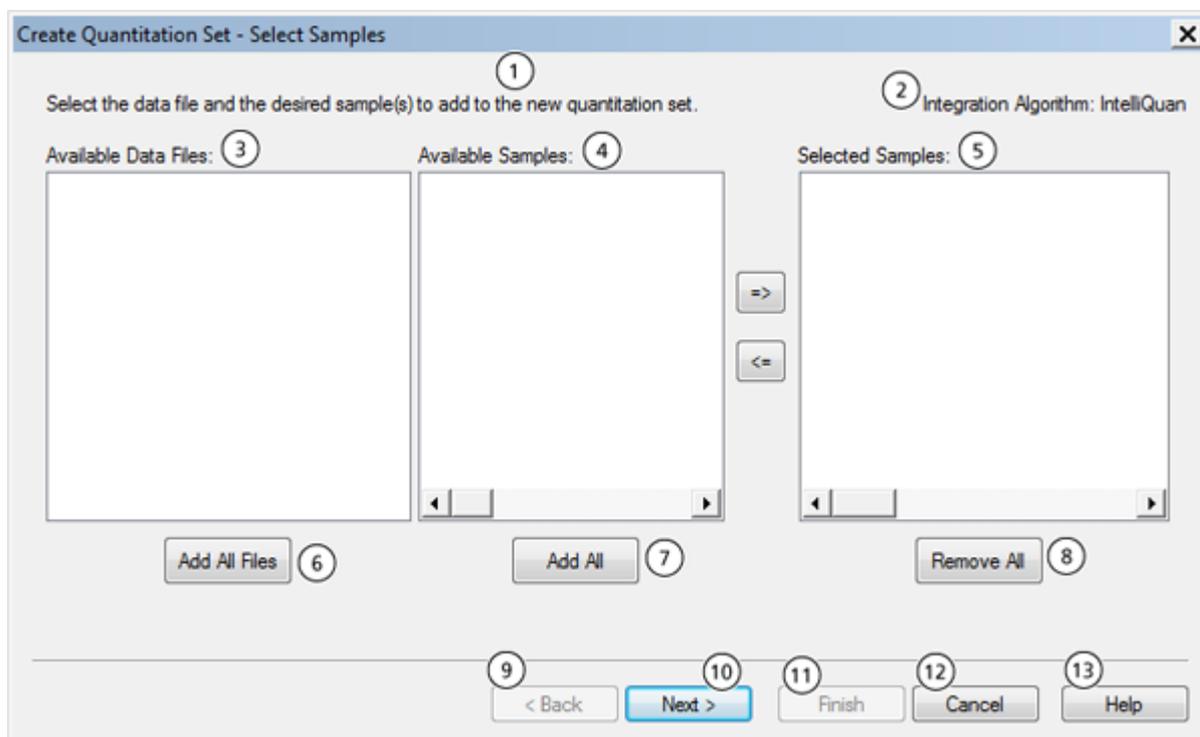
## Quantifizierungsmethode erstellen

Abbildung 8-4: Registerkarte „Calibration“

Element	Bezeichnung
1	Auf alle Analyten anwenden
2	Analyt
3	Passung <ul style="list-style-type: none"> <li>• Linear</li> <li>• Linear durch Null</li> <li>• Quadratisch</li> <li>• Mittlerer Reaktionsfaktor</li> <li>• Betrieb</li> <li>• Keine</li> </ul>
4	Weighting <ul style="list-style-type: none"> <li>• Keine</li> <li>• 1/x</li> <li>• 1/(x * x)</li> <li>• 1/y</li> <li>• 1/(y * y)</li> <li>• ln x</li> <li>• ln y</li> </ul>
5	Iterieren

Element	Bezeichnung
6	Regressionsparameter <ul style="list-style-type: none"><li data-bbox="480 409 580 439">• Area</li><li data-bbox="480 461 587 490">• Höhe</li></ul>

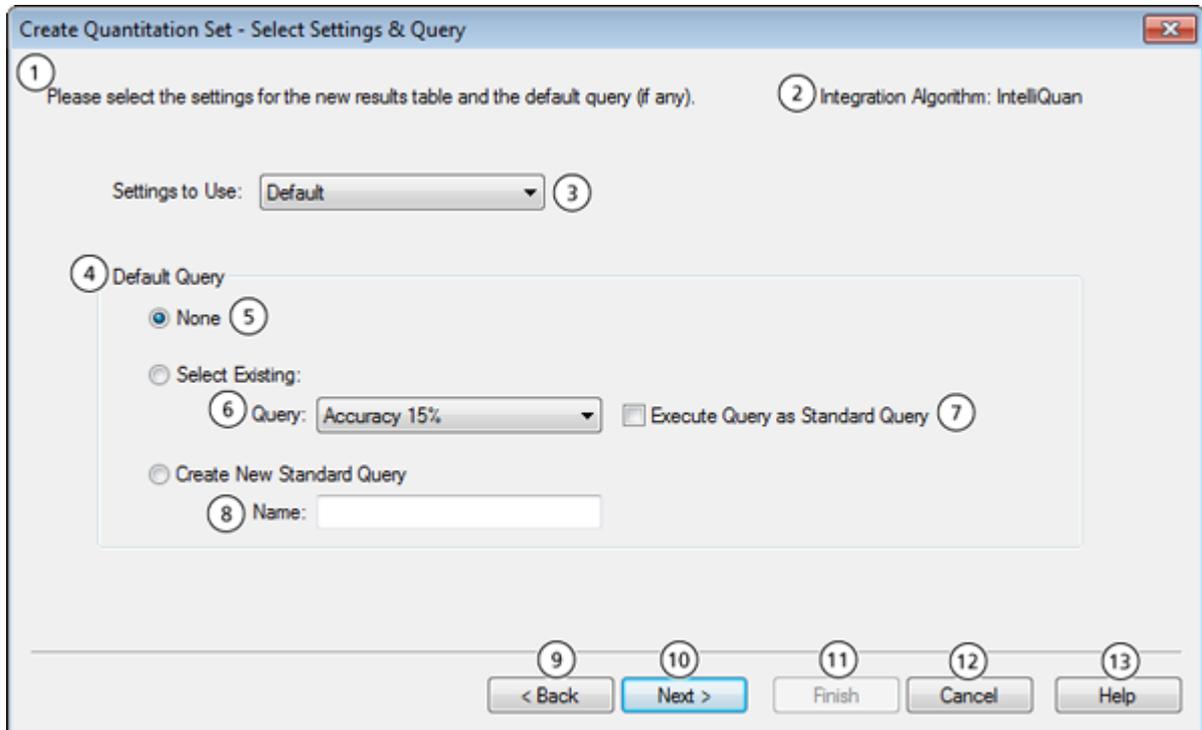
Abbildung 9-1: Create Quantitation Set - Select Samples



Element	Bezeichnung
1	Wählen Sie die Datendatei und die gewünschte Probe(n) aus, um sie dem neuen Quantifizierungssatz hinzuzufügen.
2	Integrationsalgorithmus
3	Verfügbare Datendateien
4	Verfügbare Proben
5	Ausgewählte Proben
6	Alle Dateien hinzufügen
7	Alle hinzufügen
8	Alle entfernen
9	Rückseite
10	Weiter
11	Fertigstellen
12	Abbrechen

Element	Bezeichnung
13	Hilfe

Abbildung 9-2: Create Quantitation Set - Select Settings & Query



Element	Bezeichnung
1	Bitte wählen Sie die Einstellungen für die neue Ergebnistabelle und (ggf.) die Standardabfrage aus.
2	Integrationsalgorithmus
3	Zu verwendende Einstellungen
4	Standardabfrage
5	Keine
6	Vorhandene auswählen <ul style="list-style-type: none"> <li>Abfrage</li> </ul>
7	Abfrage als Standardabfrage ausführen
8	Neue Standardabfrage erstellen <ul style="list-style-type: none"> <li>Name</li> </ul>
9	Rückseite

## Quantitation Wizard

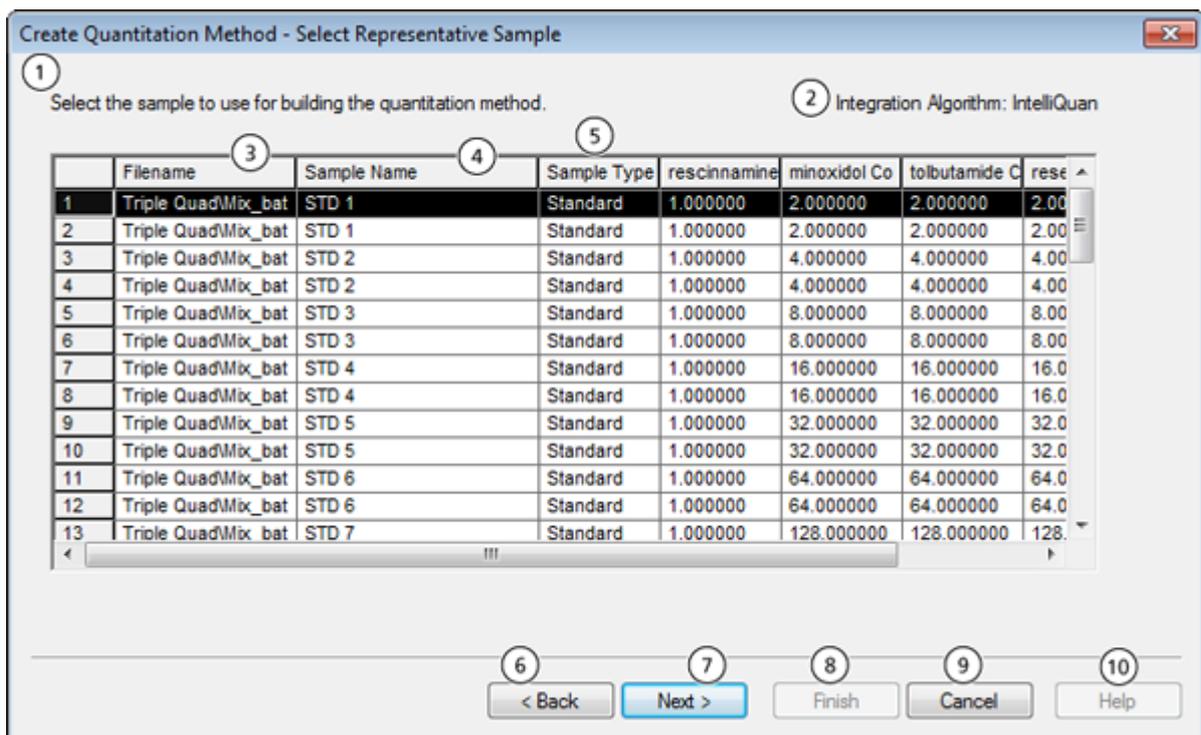
Element	Bezeichnung
10	Weiter
11	Fertigstellen
12	Abbrechen
13	Hilfe

Abbildung 9-3: Create Quantitation Set - Select Method

Element	Bezeichnung
1	Geben Sie an, welche Methode für diesen Quantifizierungssatz verwendet werden soll oder erstellen Sie jetzt eine neue Methode.
2	Integrationsalgorithmus
3	Choose Existing Method <ul style="list-style-type: none"> <li>• Methode</li> </ul>
4	Create New Method <ul style="list-style-type: none"> <li>• Methodename</li> </ul>
5	„Automatische“ Methode erstellen (um Bereich für jedes verfügbare Ion zu tabulieren)

Element	Bezeichnung
6	Zurück
7	Weiter
8	Fertigstellen
9	Abbrechen
10	Hilfe

Abbildung 9-4: Create Quantitation Method - Select Representative Sample



Element	Bezeichnung
1	Wählen Sie die zur Erstellung der Quantifizierungsmethode zu verwendende Probe.
2	Integrationsalgorithmus
3	Dateiname
4	Probenname
5	Probenart
6	Zurück
7	Weiter
8	Fertigstellen

## Quantitation Wizard

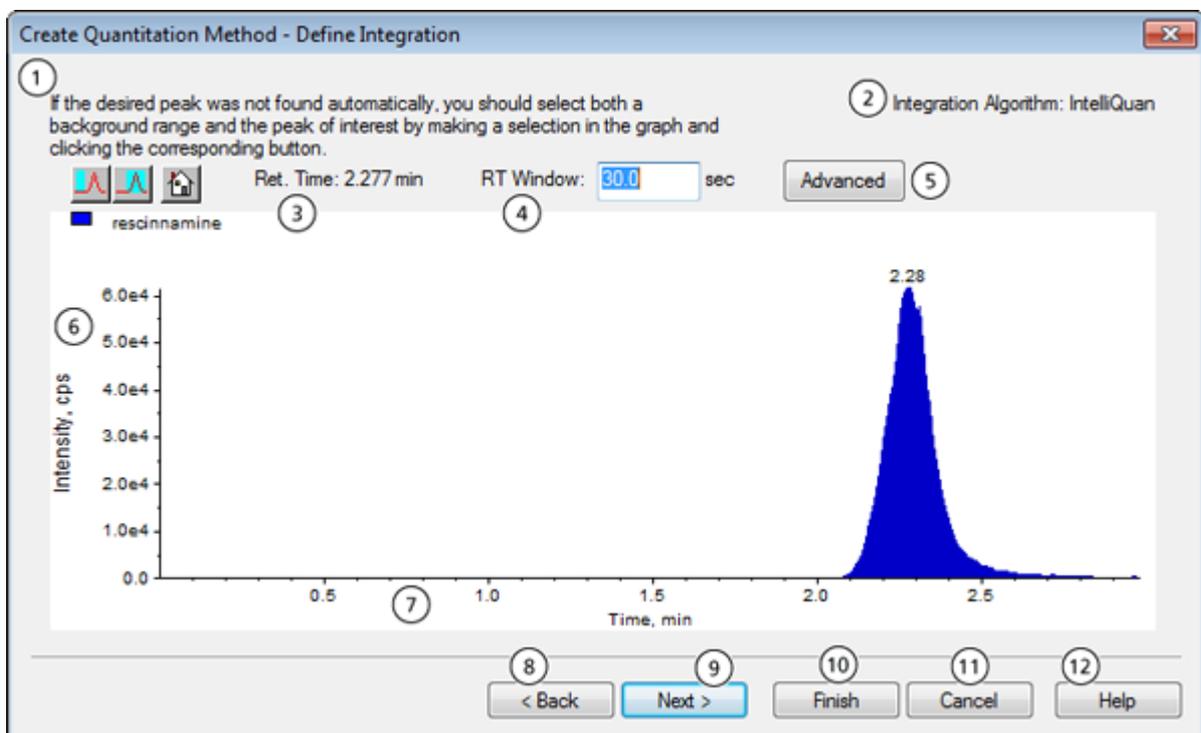
Element	Bezeichnung
9	Abbrechen
10	Hilfe

Abbildung 9-5: Create Quantitation Method - Define Peaks For MassSpec

Element	Bezeichnung
1	Bitte passen Sie die Namen der Peaks und Massen wie erforderlich für Zeitabschnitt 1, Experiment 1 an.
2	Integrationsalgorithmus
3	Summe mehrerer Ionen
4	Standard-Glättungsbreite: _ Punkte
5	Interne Standards <ul style="list-style-type: none"> <li>• Name</li> <li>• Q1/Q3</li> </ul>

Element	Bezeichnung
6	Analyten <ul style="list-style-type: none"> <li>Name</li> <li>Interner Standard</li> <li>Q1/Q3</li> </ul>
7	Rückseite
8	Weiter
9	Fertigstellen
10	Abbrechen
11	Hilfe

Abbildung 9-6: Create Quantitation Method - Define Integration

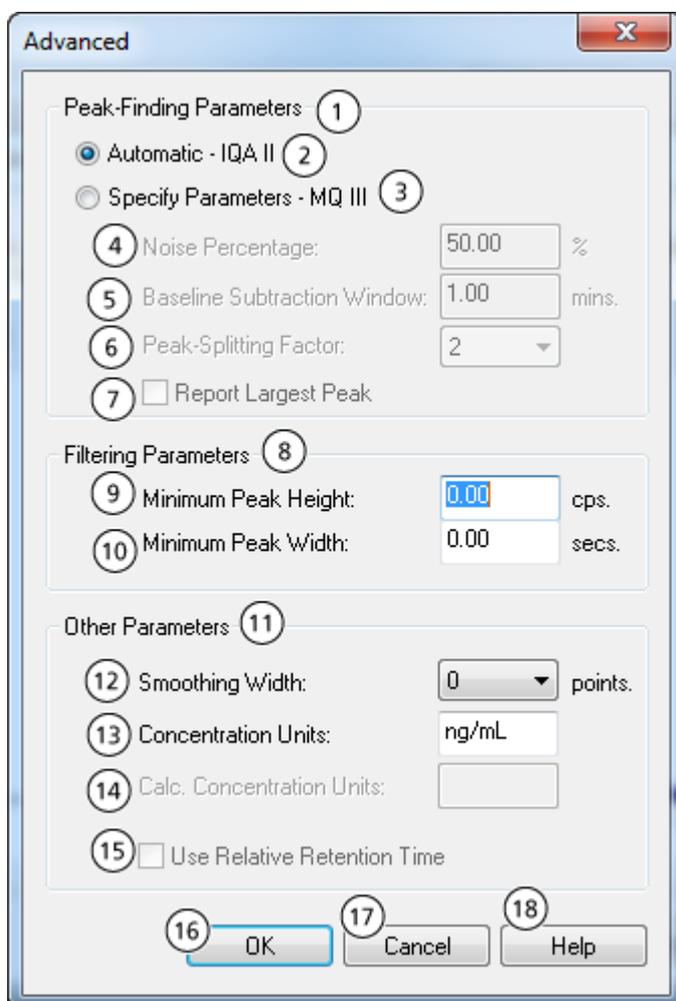


Element	Bezeichnung
1	Wurde der gewünschte Peak nicht automatisch gefunden, sollten Sie einen Hintergrundbereich und den relevanten Peak auswählen, indem Sie eine Auswahl im Diagramm treffen und dann auf die entsprechende Schaltfläche klicken.
2	Integrationsalgorithmus

## Quantitation Wizard

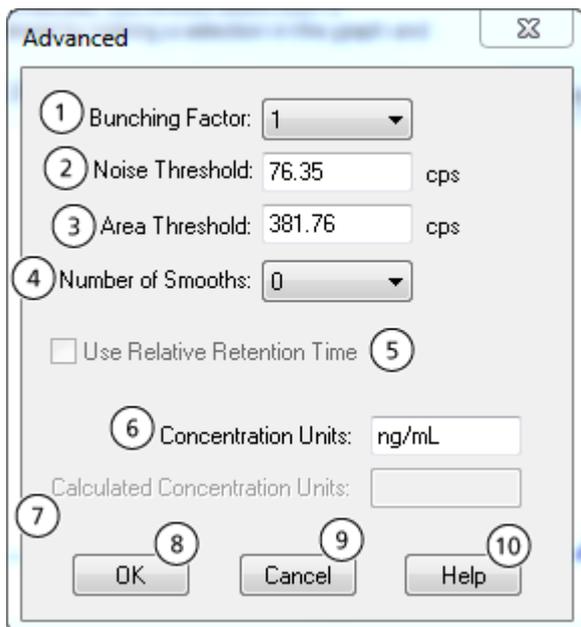
Element	Bezeichnung
3	Ret. Dauer: _ min
4	RT-Fenster: _ s
5	Erweitert
6	Intensität, cps
7	Zeit, min
8	Rückseite
9	Weiter
10	Fertigstellen
11	Abbrechen
12	Hilfe

Abbildung 9-7: Dialogfeld „Advanced“ (IntelliQuan-Algorithmus ausgewählt)



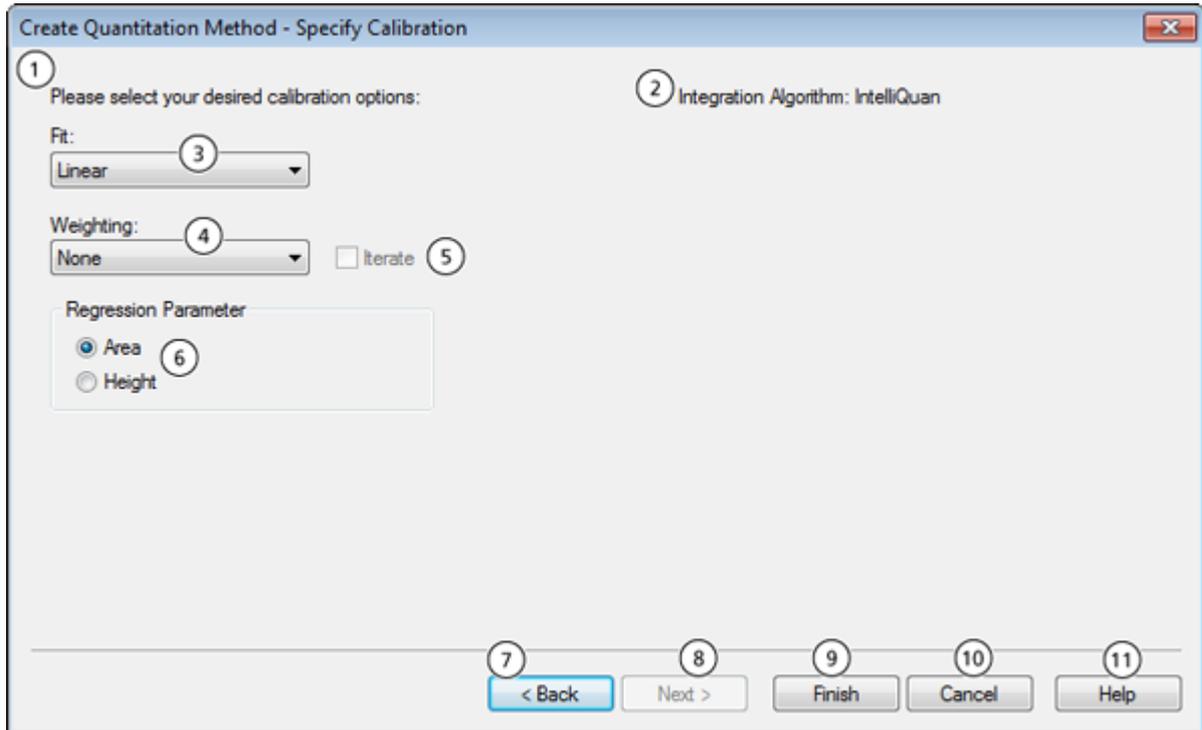
Element	Bezeichnung
1	Peak-Finder-Parameter
2	Automatisch - IQA II
3	Parameter angeben - MQ III
4	Prozentsatz des Rauschens
5	Basisliniensubtraktionsfenster: _ min
6	Peak-Splitting-Faktor
7	Höchsten Peak berichten
8	Filterparameter
9	Min. Peak-Höhe: _ cps
10	Min. Peak-Breite: _ s
11	Andere Parameter
12	Glättungsbreite: _ Punkte
13	Konzentrationseinheiten: ng/ml
14	Berechn. Concentration Units
15	Relative Retentionszeit verwenden
16	OK
17	Abbrechen
18	Hilfe

Abbildung 9-8: Dialogfeld „Advanced“ (Klassischer Algorithmus ausgewählt)



Element	Bezeichnung
1	Bunching Factor
2	Rauschgrenze: _ cps
3	Flächengrenze: _ cps
4	Anzahl der Glättungen
5	Relative Retentionszeit verwenden
6	Konzentrationseinheiten: ng/ml
7	Berechnete Standard-Konzentrationseinheiten
8	OK
9	Abbrechen
10	Hilfe

Abbildung 9-9: Create Quantitation Method - Specify Calibration



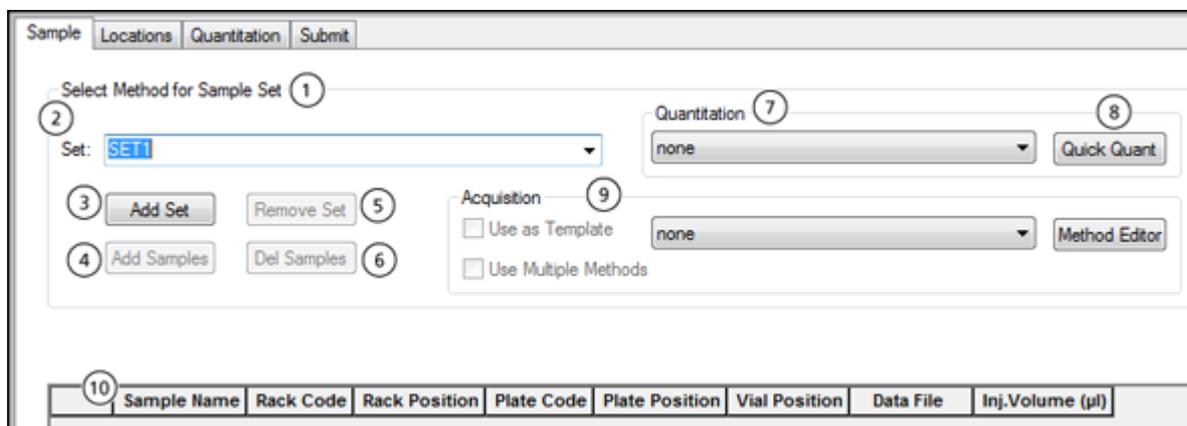
Element	Bezeichnung
1	Bitte wählen Sie die gewünschten Kalibrierungsoptionen aus.
2	Integrationsalgorithmus
3	Passung <ul style="list-style-type: none"> <li>• Linear</li> <li>• Linear durch Null</li> <li>• Quadratisch</li> <li>• Mittlerer Reaktionsfaktor</li> <li>• Betrieb</li> <li>• Keine</li> </ul>

## Quantitation Wizard

---

Element	Bezeichnung
4	Weighting <ul style="list-style-type: none"><li>• Keine</li><li>• 1/x</li><li>• 1/(x * x)</li><li>• 1/y</li><li>• 1/(y * y)</li><li>• ln x</li><li>• ln y</li></ul>
5	Iterieren
6	Regressionsparameter <ul style="list-style-type: none"><li>• Area</li><li>• Höhe</li></ul>
7	Rückseite
8	Weiter
9	Fertigstellen
10	Abbrechen
11	Hilfe

Abbildung 10-1: Registerkarte „Sample“

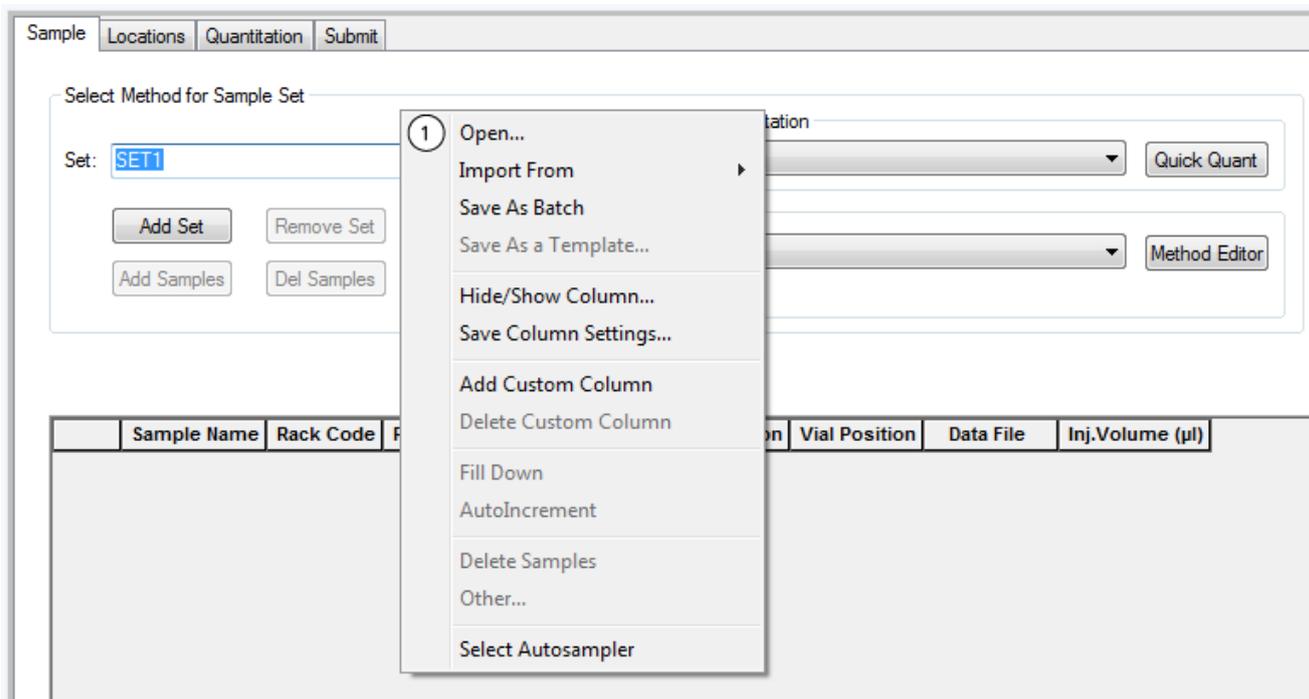


Element	Bezeichnung
1	Methode für Probensatz auswählen
2	Set
3	Satz hinzufügen
4	Hinzufügen von Proben
5	Satz entfernen
6	Proben löschen
7	Quantifizierung
8	Schnelle Quant.
9	Erfassung <ul style="list-style-type: none"> <li>• Als Vorlage verwenden</li> <li>• Mehrere Methoden verwenden</li> <li>• Methoden-Editor</li> </ul>

## Erfassungscharge erstellen

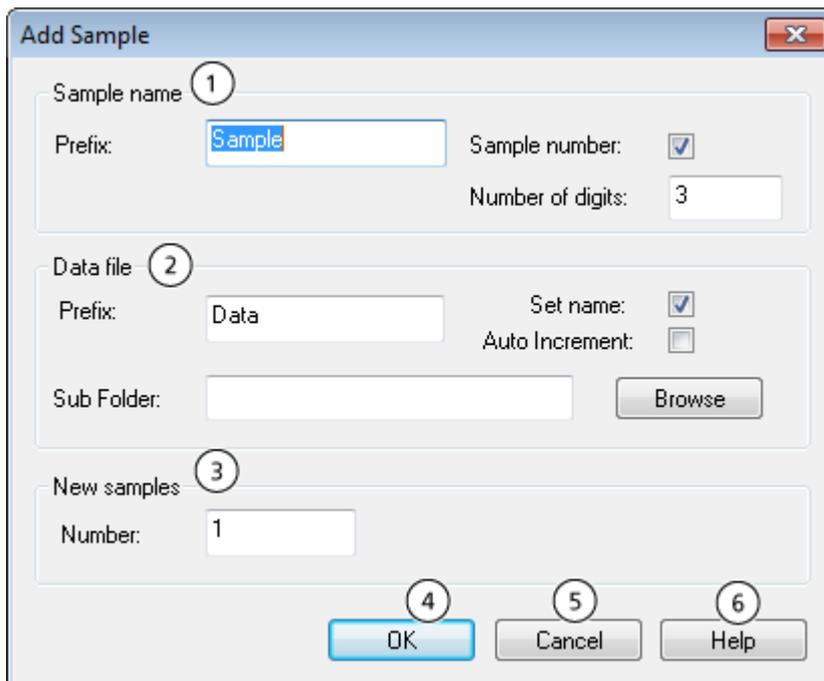
Element	Bezeichnung
10	<ul style="list-style-type: none"><li>• Probenname</li><li>• Rackcode</li><li>• Rackposition</li><li>• Plattencode</li><li>• Plattenposition</li><li>• Fläschchenposition</li><li>• Datendatei</li><li>• Injektionsvolumen Volumen (µl)</li></ul>

Abbildung 10-2: Rechtsklick-Menü der Registerkarte „Sample“



Element	Bezeichnung
1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Öffnen</li> <li>• Importieren von</li> <li>• Als Charge speichern</li> <li>• Als Vorlage speichern</li> <li>• Spalte ein-/ausblenden</li> <li>• Spalteneinstellungen speichern</li> <li>• Benutzerdefinierte Spalte hinzufügen</li> <li>• Benutzerdefinierte Spalte löschen</li> <li>• Zellen nach unten kopieren</li> <li>• AutoIncrement</li> <li>• Proben löschen</li> <li>• Andere</li> <li>• Autosampler auswählen</li> </ul>

Abbildung 10-3: Dialogfeld „Add Sample“



## Erfassungscharge erstellen

Element	Bezeichnung
1	Proben- name <ul style="list-style-type: none"> <li>• Präfix</li> <li>• Probennummer</li> <li>• Anzahl der Ziffern</li> </ul>
2	Datendatei <ul style="list-style-type: none"> <li>• Präfix</li> <li>• Setname</li> <li>• Automatisch aufsteigend nummerieren</li> <li>• Teilordner</li> <li>• Durchsuchen</li> </ul>
3	Neue Proben <ul style="list-style-type: none"> <li>• Nummer</li> </ul>
4	OK
5	Abbrechen
6	Hilfe

Abbildung 10-4: Registerkarte „Locations“

Element	Bezeichnung
1	Autosampler
2	Set
3	Kein Rack

Abbildung 10-5: Registerkarte „Quantitation“

Sample Name	Quant Type	Dilution Factor	Weight/Volume	Set Name
Sample001	Unknown	1.000000	0.00000000	SET1

Element	Bezeichnung
1	Set
2	Quant.-Methode
3	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Probenname</li> <li>• Quantifizierungstyp</li> <li>• Dilution Factor</li> <li>• Gewicht/Volumen</li> <li>• Setname</li> </ul>

Abbildung 10-6: Registerkarte „Submit“

Sample Name	Rack Position	Plate Position	Vial Position	Acquisition Method	Quantitation	Data File	Set Name	Submit Status
Sample001	1	1	0	none	none	DataSET1	SET1	Not

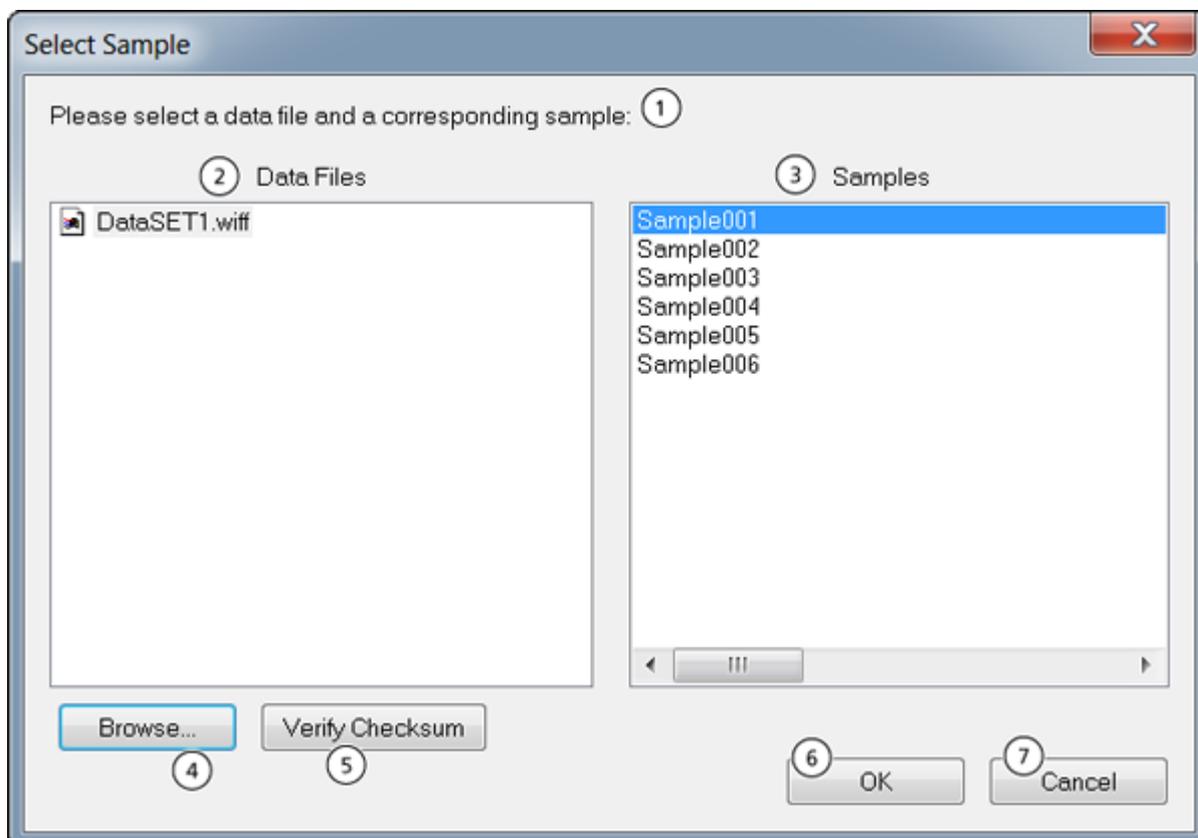
Element	Bezeichnung
1	Name des Batch-Verantwortlichen
2	Submit
3	Status übergeben

## Erfassungscharge erstellen

---

Element	Bezeichnung
4	<ul style="list-style-type: none"><li>• Probenname</li><li>• Rack Position</li><li>• Plate Position</li><li>• Fläschchenposition</li><li>• Erfassungsmethode</li><li>• Quantifizierung</li><li>• Datendatei</li><li>• Setname</li><li>• Status übergeben</li></ul>

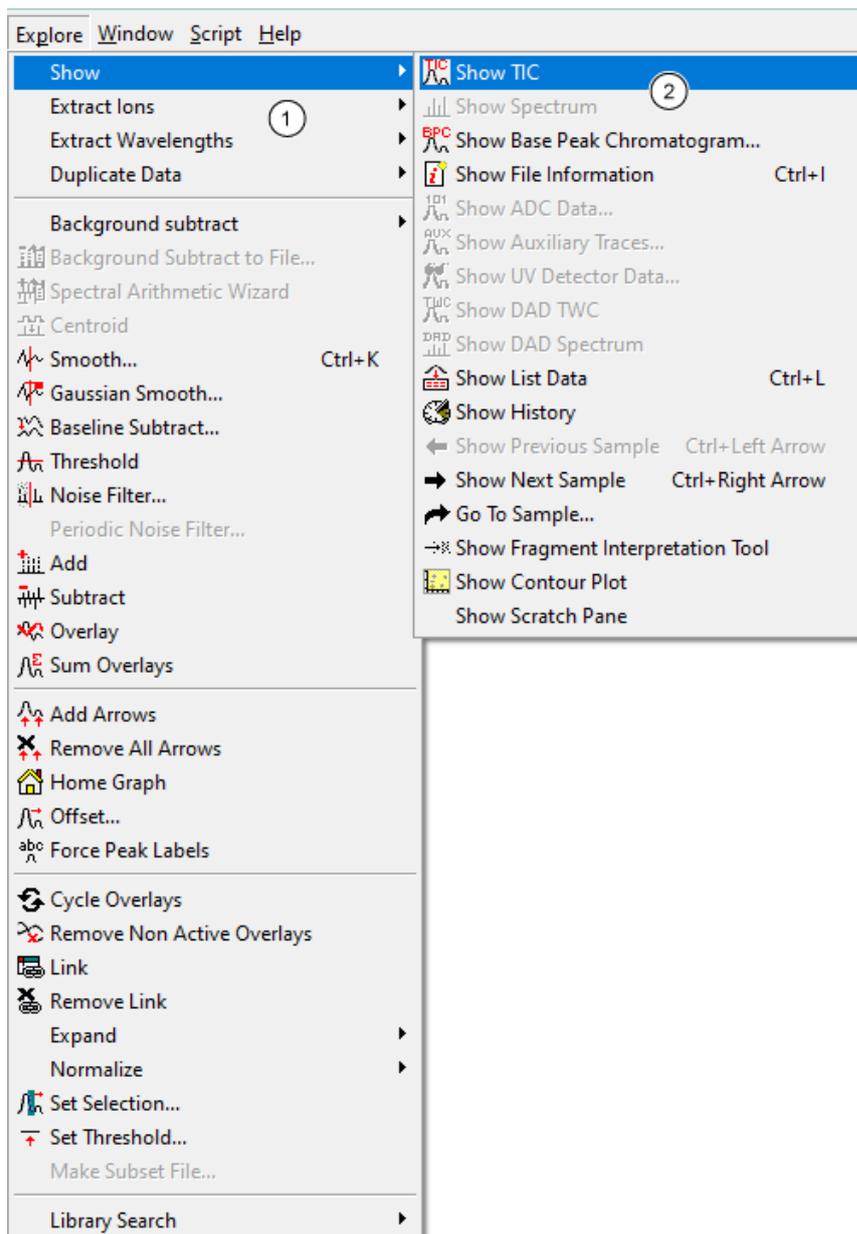
Abbildung 11-1: Select Sample



Element	Bezeichnung
1	Bitte wählen Sie eine Datendatei und eine entsprechende Probe:
2	Datendateien
3	Proben
4	Durchsuchen
5	Prüfsumme überprüfen
6	OK
7	Abbrechen

## Durchsuchen

Abbildung 11-2: Das Menü „Explore“



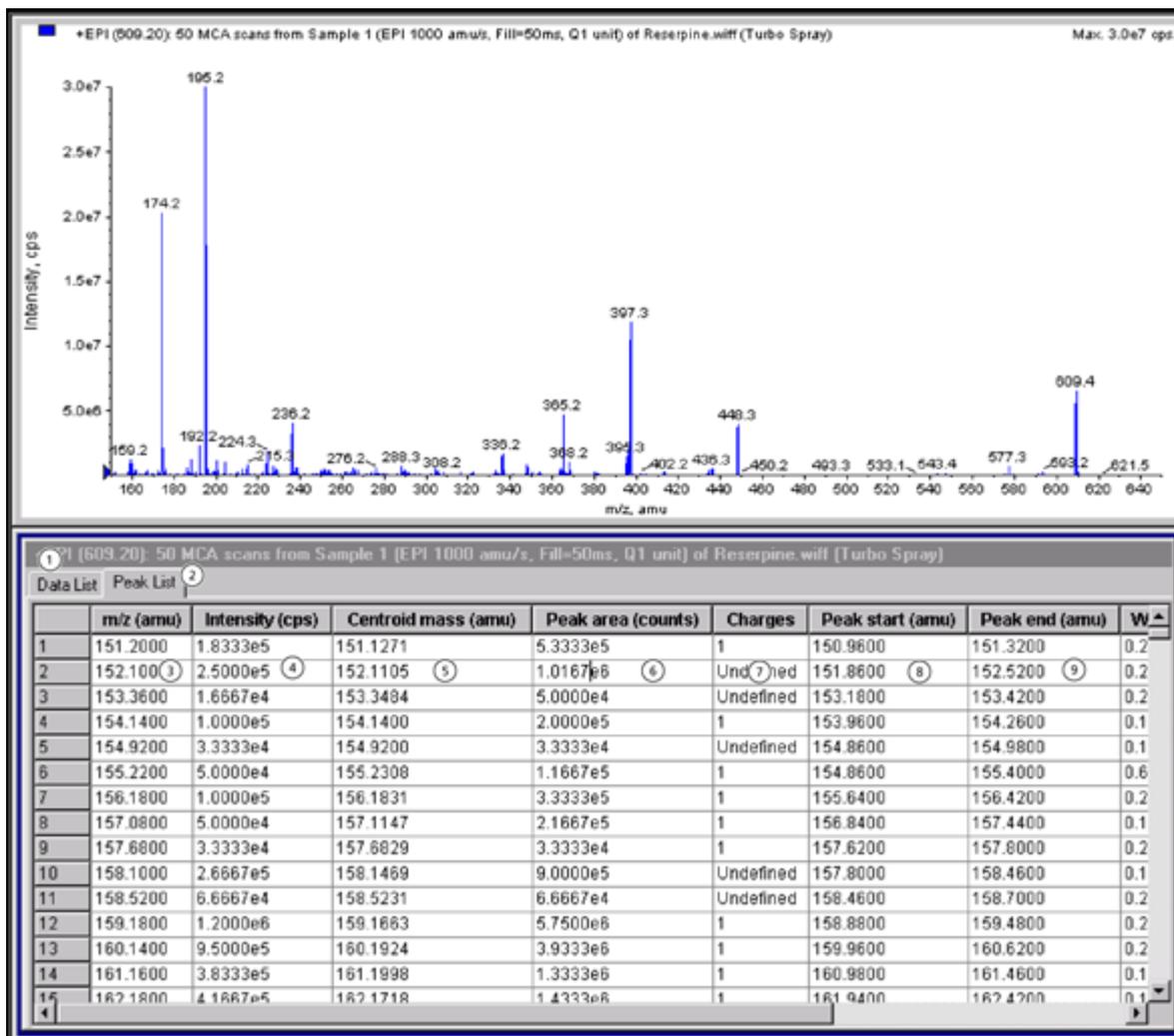
Element	Bezeichnung
1	Anzeigen Extrahieren von Ionen Wellenlängen extrahieren Daten duplizieren Hintergrundsubtraktion Strichspektrum Glättung Gaußsche Glättung Basislinie subtrahieren Schwellenwert Rauschfilter „Add“ „Subtract“ Überlagerung Überlagerungen addieren Pfeile hinzufügen Alle Pfeile entfernen Home Graph (Diagramm-Ausgangsposition) Versatz Kennzeichnungen von Peaks anzeigen Zwischen Überlagerungen wechseln Nicht aktive Überlagerungen entfernen Link Link entfernen Vergrößern Normalisieren Auswahl bestimmen Schwellenwert bestimmen

## Durchsuchen

---

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
	Bibliothekssuche
2	TIC anzeigen Spektrum anzeigen Basis-Peak-Chromatogramm anzeigen Dateiinformationen anzeigen ADC-Daten anzeigen Zusätzliche Kurven anzeigen UV-Detektordaten anzeigen DAD-TWC anzeigen Zeige DAD-Spektrum Listendaten anzeigen Verlauf anzeigen Vorherige Probe anzeigen Nächste Probe anzeigen Zur Probe springen Fragment Interpretation Tool anzeigen Konturdiagramm anzeigen Konzeptfenster anzeigen

Abbildung 11-3: Tabelle „Data List“ und „Peak List“



Element	Beschriftung (übersetzt)
1	Datenliste
2	Peak-Liste
3	m/z (amu)
4	Intensität (cps)
5	Linienpektrum-Masse (amu)
6	Peak-Fläche (Anzahl)
7	Ladungen (Undefiniert)
8	Peak-Start (amu)

## Durchsuchen

---

Element	Beschriftung (übersetzt)
9	Peak-Ende (amu)

Abbildung 12-1: Spalten der „Results Table“

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Sample Name	Sample ID	Sample Type	File Name	Analyte Peak Area (counts)	Analyte Peak Height (cps)	Analyte Concentration (ng/ml)	Standard Query Status	IS Peak Area (counts)	IS Peak Height (cps)	Use Record	Record Modified	Calculated Concentration (ng/ml)	Accuracy (%)	Time
1	STD 1	Standard	Triple Quad.M	4.25e+004	5.83e+003	2.00	N/A	6.09e+005	6.73e+004	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	3.22	161	0.000000
2	STD 1	Standard	Triple Quad.M	4.18e+003	5.00e+002	2.00	N/A	6.09e+005	6.73e+004	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	3.29	165	0.000000
3	STD 1	Standard	Triple Quad.M	4.50e+003	6.20e+002	2.00	N/A	6.09e+005	6.73e+004	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	2.74	137	0.000000

Element	Bezeichnung
1	Probenname
2	Proben-ID
3	Probenart
4	Dateiname
5	Analyt-Peak-Fläche (Anzahl)
6	Analyt-Peak-Höhe (cps - Zählimpulse pro Sekunde)
7	Analyt-Konzentration (ng/ml)
8	Standard-Abfrage-Status
9	IS-Peak-Fläche (Anzahl)
10	IS-Peak-Höhe (cps)
11	Datensatz verwenden
12	Record Modified
13	Berechnete Konzentration (ng/ml)
14	Genauigkeit (%)
15	Zeit
16	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Voll-Layout</li> <li>• Abfrage: Keine</li> <li>• Leerlauf</li> <li>• Sortieren: Unsortiert</li> </ul>

## Peak-Bewertung

Abbildung 12-2: Results Table Columns: Sample

Title (5)	Shown	Significant Figures (7)	Scientific Notation (8)	Precision (9)
Sample Name	<input checked="" type="checkbox"/>			
Sample ID	<input checked="" type="checkbox"/>			
Sample Type	<input checked="" type="checkbox"/>			
Sample Comment	<input type="checkbox"/>			
Set Number	<input type="checkbox"/>			
Acquisition Method (10)	<input type="checkbox"/>			
Acquisition Date	<input type="checkbox"/>			
Rack Type	<input type="checkbox"/>			
Rack Position	<input type="checkbox"/>			
Vial Position	<input type="checkbox"/>			
Plate Type	<input type="checkbox"/>			
Plate Position	<input type="checkbox"/>			
File Name	<input checked="" type="checkbox"/>			
Dilution Factor	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	3
Weight To Volume Ratio	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	3
Sample Annotation	<input type="checkbox"/>			
Disposition	<input type="checkbox"/>			

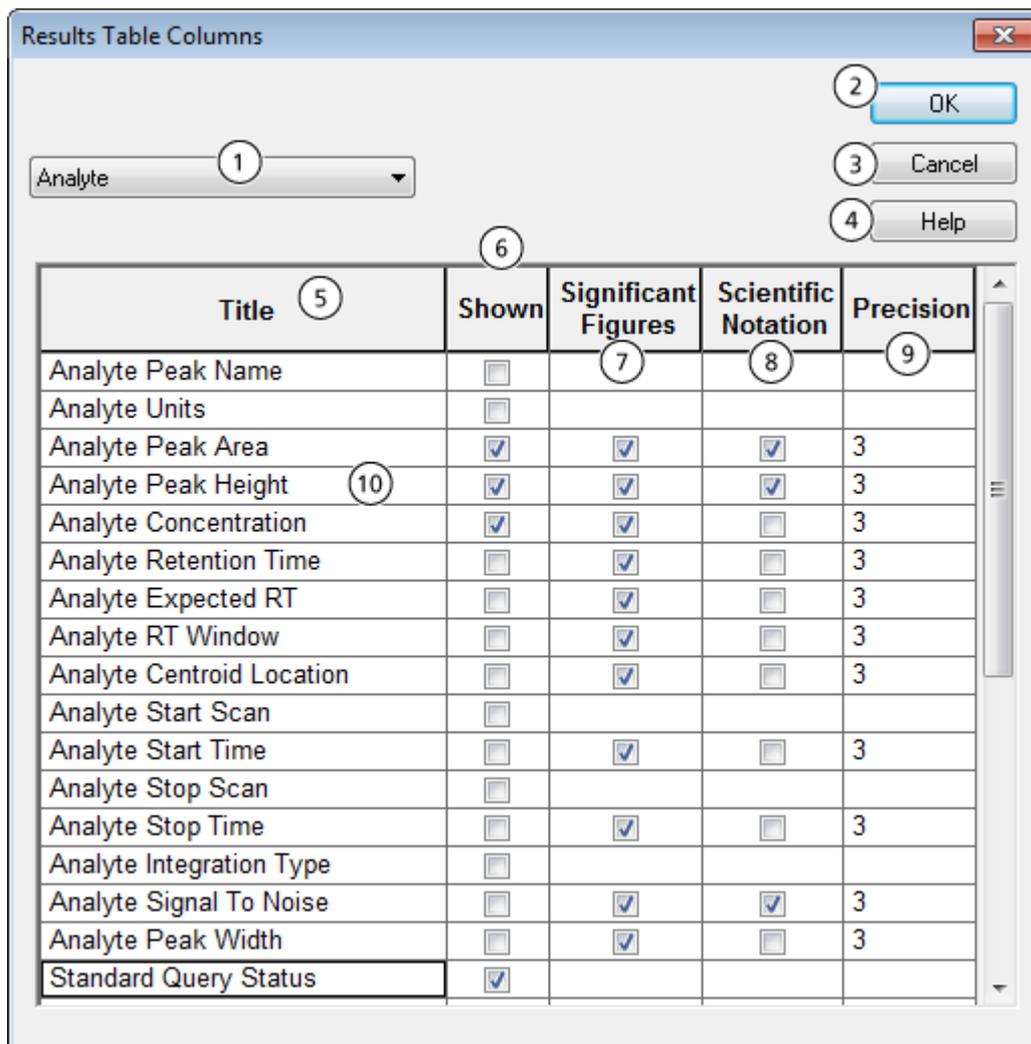
Element	Bezeichnung
1	Probeneinlass
2	OK
3	Abbrechen
4	Hilfe
5	Titel
6	Angezeigt
7	Signifikante Stellen
8	Wissenschaftliche Darstellung
9	Präzision
10	Probenname

---

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
	Proben-ID
	Probenart
	Sample Comment
	Satznummer
	Erfassungsmethode
	Erfassungsdatum
	Rack-Typ
	Rack Position
	Fläschchenposition
	Plattentyp
	Plate Position
	Dateiname
	Dilution Factor
	Verhältnis Gewicht zu Volumen
	Anmerkungen zur Probe
	Anordnung

## Peak-Bewertung

Abbildung 12-3: Results Table Columns: Analyte

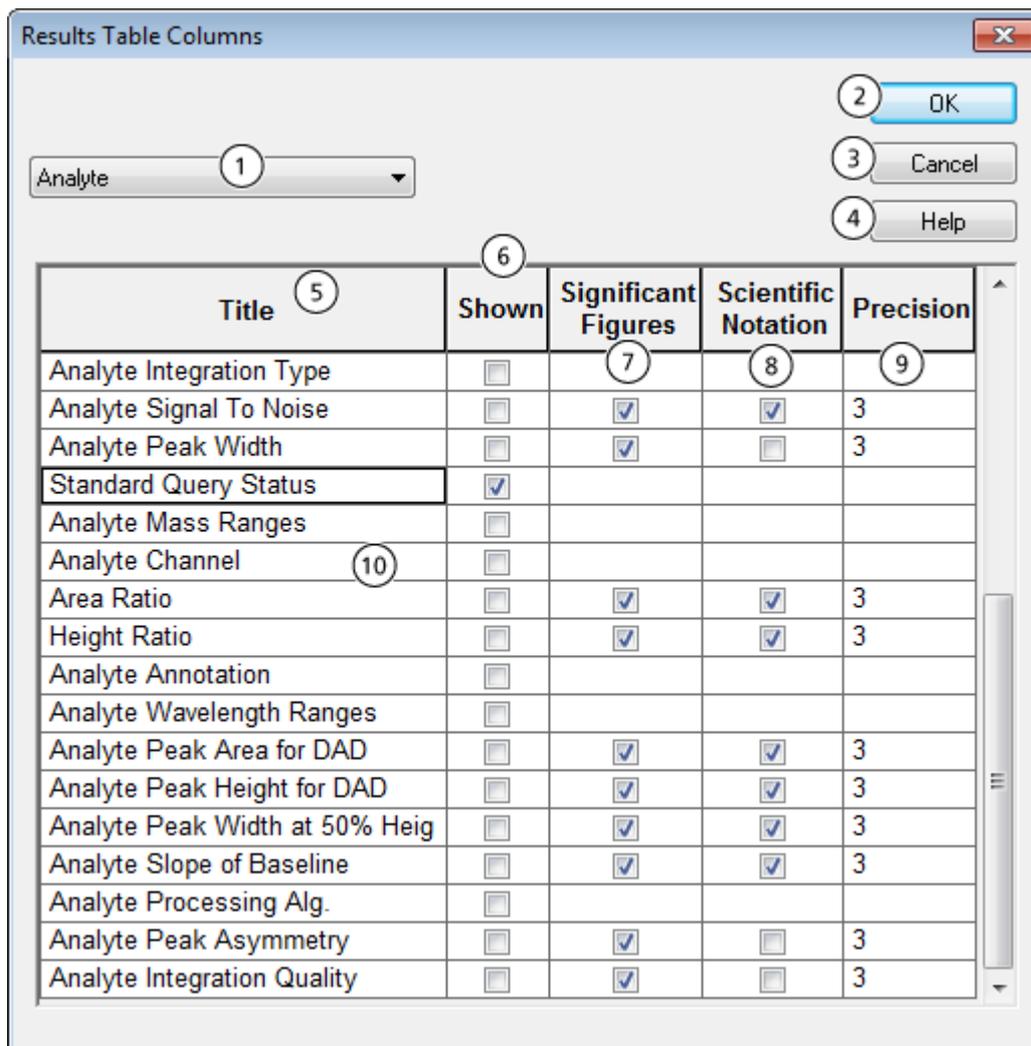


Element	Bezeichnung
1	Analyt
2	OK
3	Abbrechen
4	Hilfe
5	Titel
6	Angezeigt
7	Signifikante Stellen
8	Wissenschaftliche Darstellung
9	Präzision
10	Analyt-Peak-Name

Element	Bezeichnung
	Analyt-Einheiten
	Analyt-Peak-Fläche
	Analyt-Peak-Höhe
	Analyt-Konzentration
	Analyt-Retentionszeit
	Erwartete Analyt-RT
	Analyt-RT-Fenster
	Zentroidierte Lage des Analyten
	Analyt-Scan-Start
	Analyt-Startzeit
	Analyt-Scan-Stopp
	Analyt-Stoppzeit
	Analyt-Integrationstyp
	Analyt-Signal zu Rauschen
	Analyt-Peak-Breite
	Standard-Abfrage-Status

## Peak-Bewertung

Abbildung 12-4: Results Table Columns: Analyte

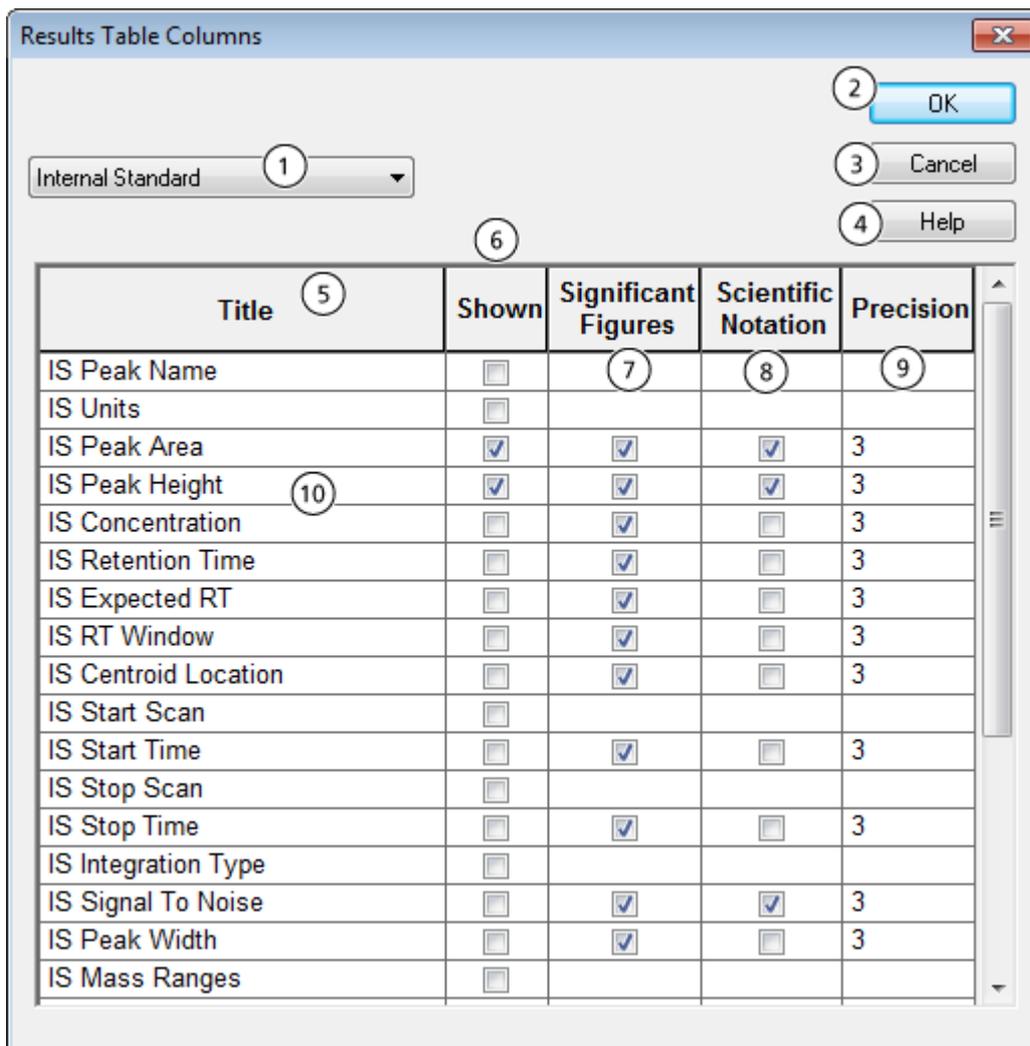


Element	Bezeichnung
1	Analyt
2	OK
3	Abbrechen
4	Hilfe
5	Titel
6	Angezeigt
7	Signifikante Stellen
8	Wissenschaftliche Darstellung
9	Präzision
10	Analyt-Integrationstyp

Element	Bezeichnung
	Analyt-Signal zu Rauschen
	Analyt-Peak-Breite
	Standard-Abfrage-Status
	Analyt-Massenbereiche
	Analyt-Kanal
	Flächenverhältnis
	Höhenverhältnis
	Analyt-Anmerkung
	Analyt-Wellenlängenbereiche
	Analyt-Peak-Fläche für DAD
	Analyt-Peak-Höhe für DAD
	Analyt-Peak-Breite bei 50 % Höhe
	Analyt-Steigung der Basislinie
	Analyt-Verarbeitungs-Alg.
	Analyt-Peak-Asymmetrie
	Analyt-Integrationsqualität

## Peak-Bewertung

Abbildung 12-5: Results Table Columns: Internal Standard

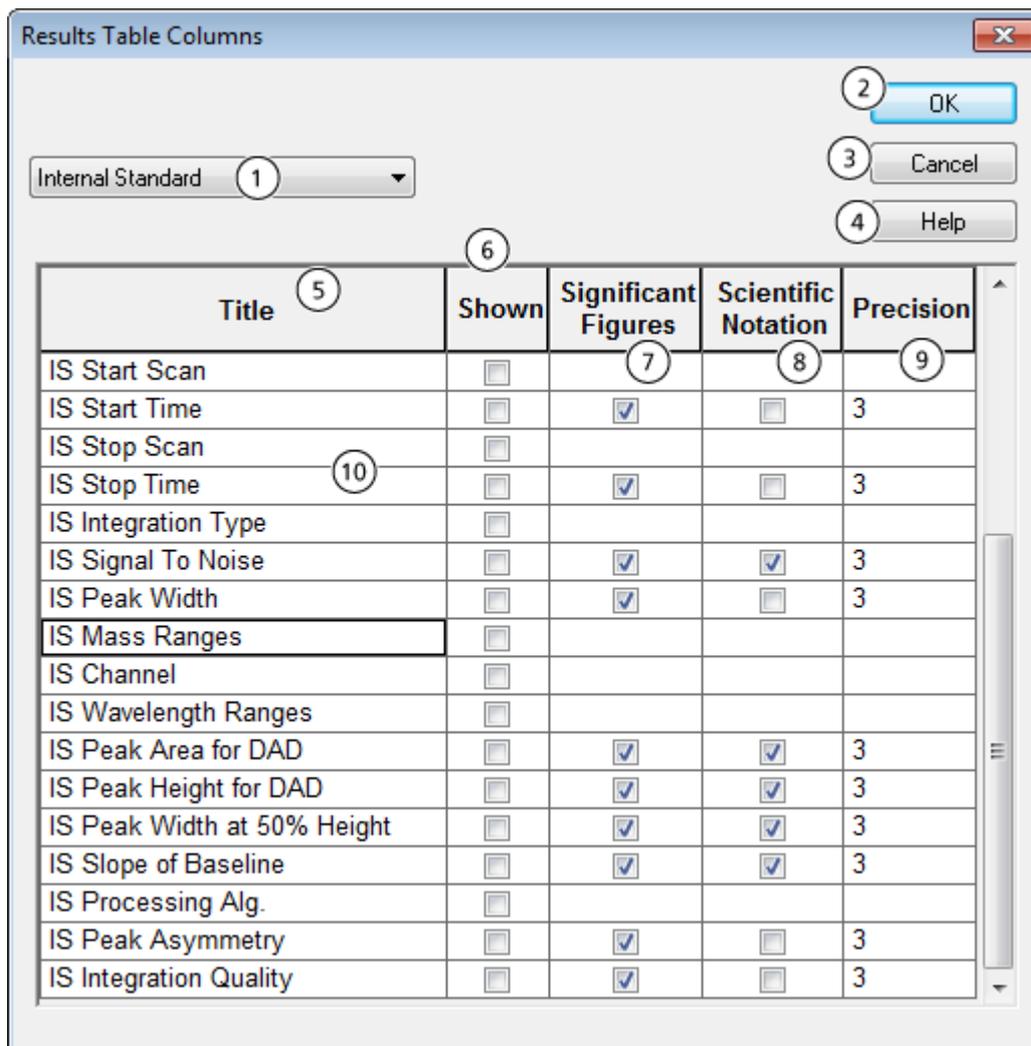


Element	Bezeichnung
1	Interner Standard
2	OK
3	Abbrechen
4	Hilfe
5	Titel
6	Angezeigt
7	Signifikante Stellen
8	Wissenschaftliche Darstellung
9	Präzision
10	IS-Peak-Name

Element	Bezeichnung
	IS-Einheiten
	IS-Peak-Fläche
	IS-Peak-Höhe
	IS-Konzentration
	IS-Retentionszeit
	Erwartete RT für IS
	IS-RT-Fenster
	Zentroidierte Lage des IS
	IS-Scan-Start
	IS-Startzeit
	IS-Scan-Stopp
	IS-Stoppzeit
	IS-Integrationstyp
	IS-Signal zu Rauschen
	IS-Peak-Breite
	IS-Massenbereiche

## Peak-Bewertung

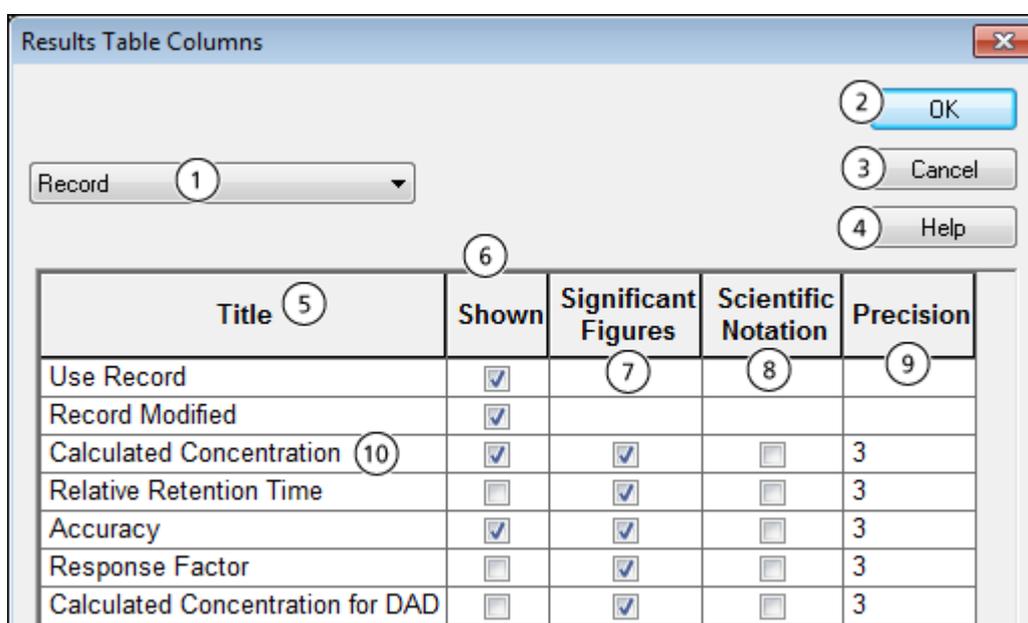
Abbildung 12-6: Results Table Columns: Internal Standard



Element	Bezeichnung
1	Interner Standard
2	OK
3	Abbrechen
4	Hilfe
5	Titel
6	Angezeigt
7	Signifikante Stellen
8	Wissenschaftliche Darstellung
9	Präzision
10	IS-Scan-Start

Element	Bezeichnung
	IS-Startzeit
	IS-Scan-Stopp
	IS-Stoppzeit
	IS-Integrationstyp
	IS-Signal zu Rauschen
	IS-Peak-Breite
	IS-Massenbereiche
	IS-Kanal
	IS-Wellenlängenbereiche
	IS-Peak-Fläche für DAD
	IS-Peak-Höhe für DAD
	IS-Peak-Breite bei 50 % Höhe
	IS-Steigung der Basislinie
	IS-Verarbeitungs-Alg.
	IS-Peak-Asymmetrie
	IS-Integrationsqualität

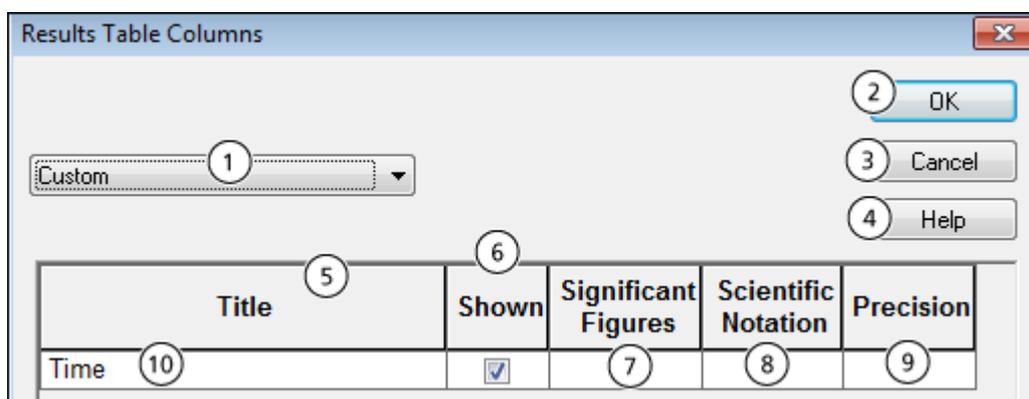
Abbildung 12-7: Results Table Columns: Record



## Peak-Bewertung

Element	Bezeichnung
1	Datensatz
2	OK
3	Abbrechen
4	Hilfe
5	Titel
6	Angezeigt
7	Signifikante Stellen
8	Wissenschaftliche Darstellung
9	Präzision
10	Datensatz verwenden
	Record Modified
	Calculated Concentration
	Relative Retentionszeit
	Genauigkeit
	Ansprechfaktor
	Berechnete Konzentration für DAD

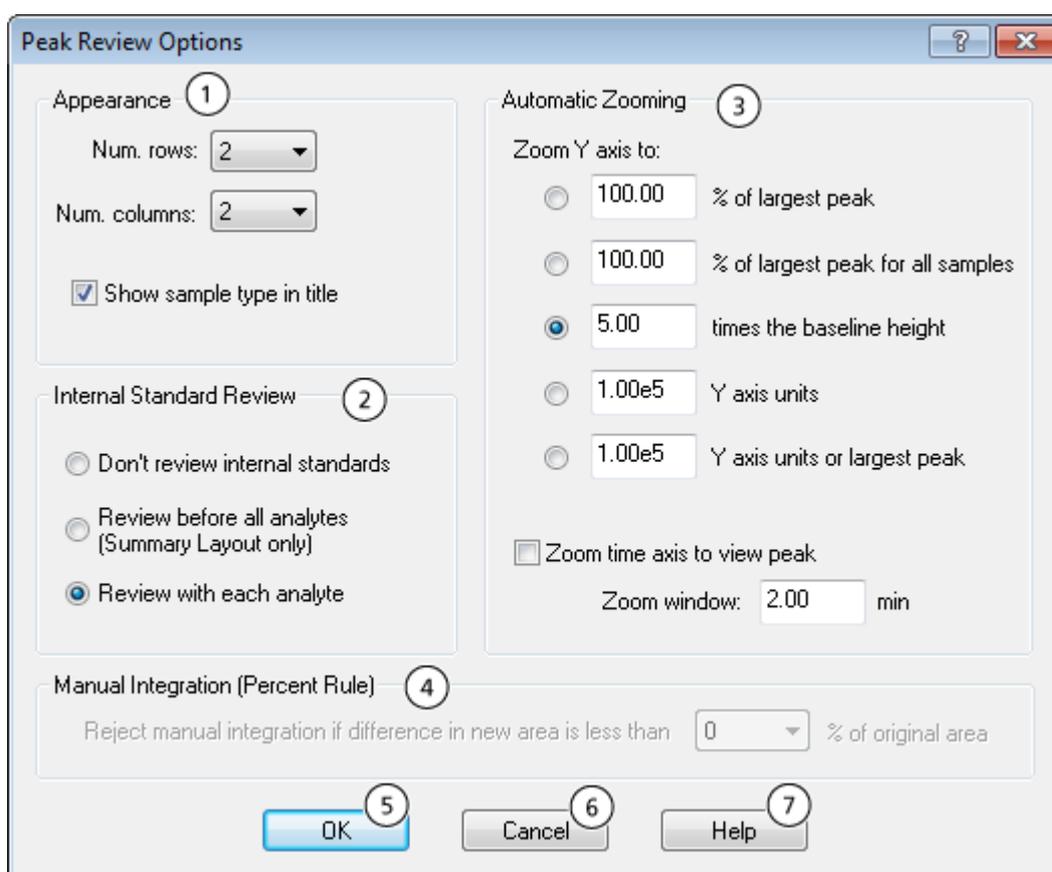
Abbildung 12-8: Results Table Columns: Custom



Element	Bezeichnung
1	Benutzerdefiniert
2	OK
3	Abbrechen

Element	Bezeichnung
4	Hilfe
5	Titel
6	Angezeigt
7	Signifikante Stellen
8	Wissenschaftliche Darstellung
9	Präzision
10	Dauer

Abbildung 12-9: Peak-Bewertungsoptionen

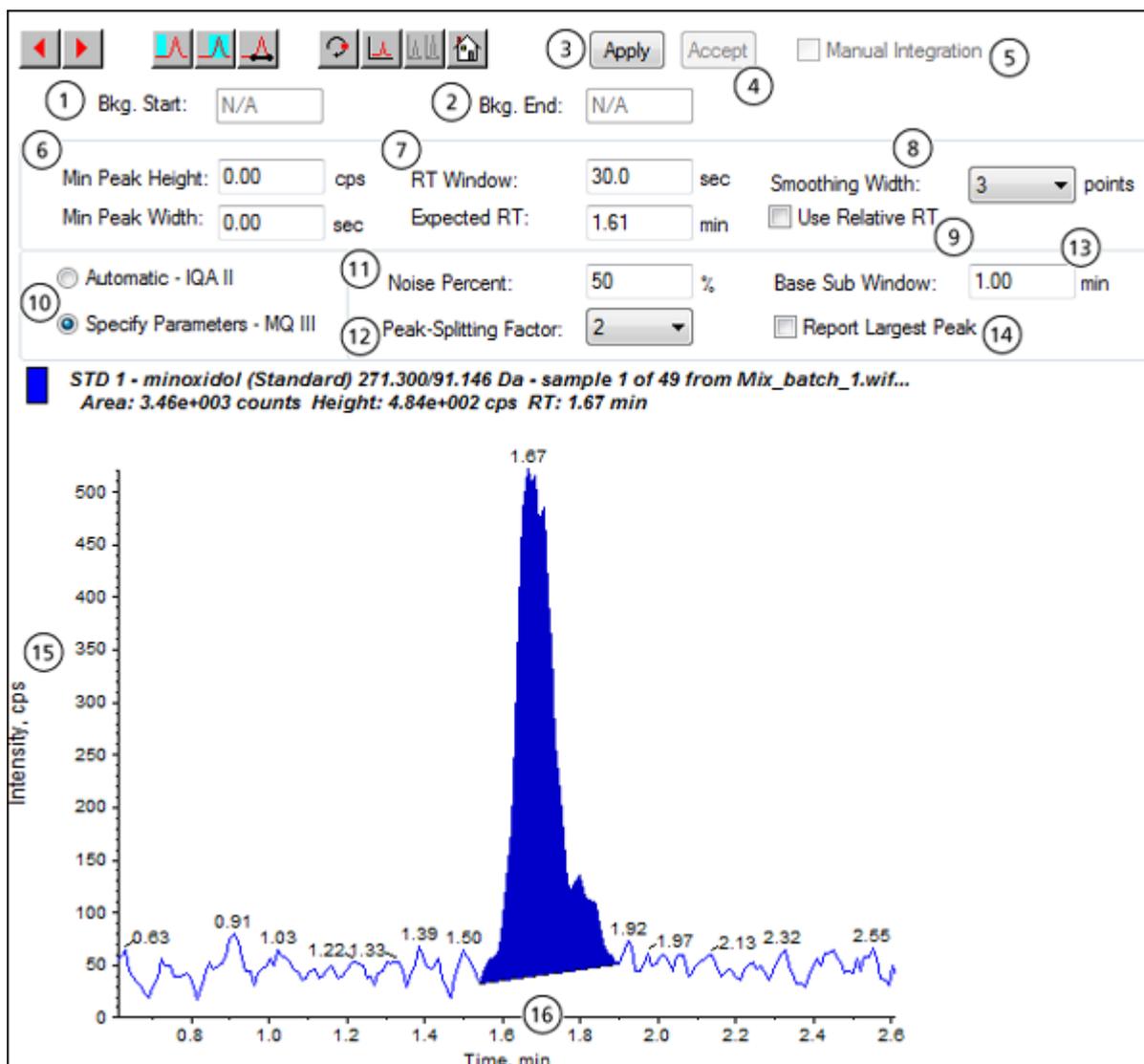


## Peak-Bewertung

---

Element	Bezeichnung
1	Darstellung <ul style="list-style-type: none"><li>• Num. Zeilen</li><li>• Num. Spalten</li><li>• Probenart in Titel anzeigen</li></ul>
2	Interne Standardbewertung <ul style="list-style-type: none"><li>• Interne Standards nicht überprüfen</li><li>• Vor allen Analyten überprüfen (nur Zusammenfassungs-Layout)</li><li>• Mit jedem Analyten überprüfen</li></ul>
3	Automatische Zoom-Funktion <ul style="list-style-type: none"><li>• Y-Achse auf<ul style="list-style-type: none"><li>• _ % des größten Peaks zoomen</li><li>• _ % des größten Peaks für alle Proben zoomen</li><li>• das _-fache der Basislinienhöhe zoomen</li><li>• _ Y-Achsen-Einheiten</li><li>• _ Y-Achsen-Einheiten oder höchster Peak</li></ul></li><li>• Zeitachse vergrößern, um Peak anzuzeigen<ul style="list-style-type: none"><li>• Fenster zoomen: _ min</li></ul></li></ul>
4	Manuelle Integration (Prozent-Regel)  Manuelle Integration ablehnen, wenn die Differenz weniger als _ % des ursprünglichen Bereichs beträgt
5	OK
6	Abbrechen
7	Hilfe

Abbildung 12-10: Teilfenster „Peak Review“



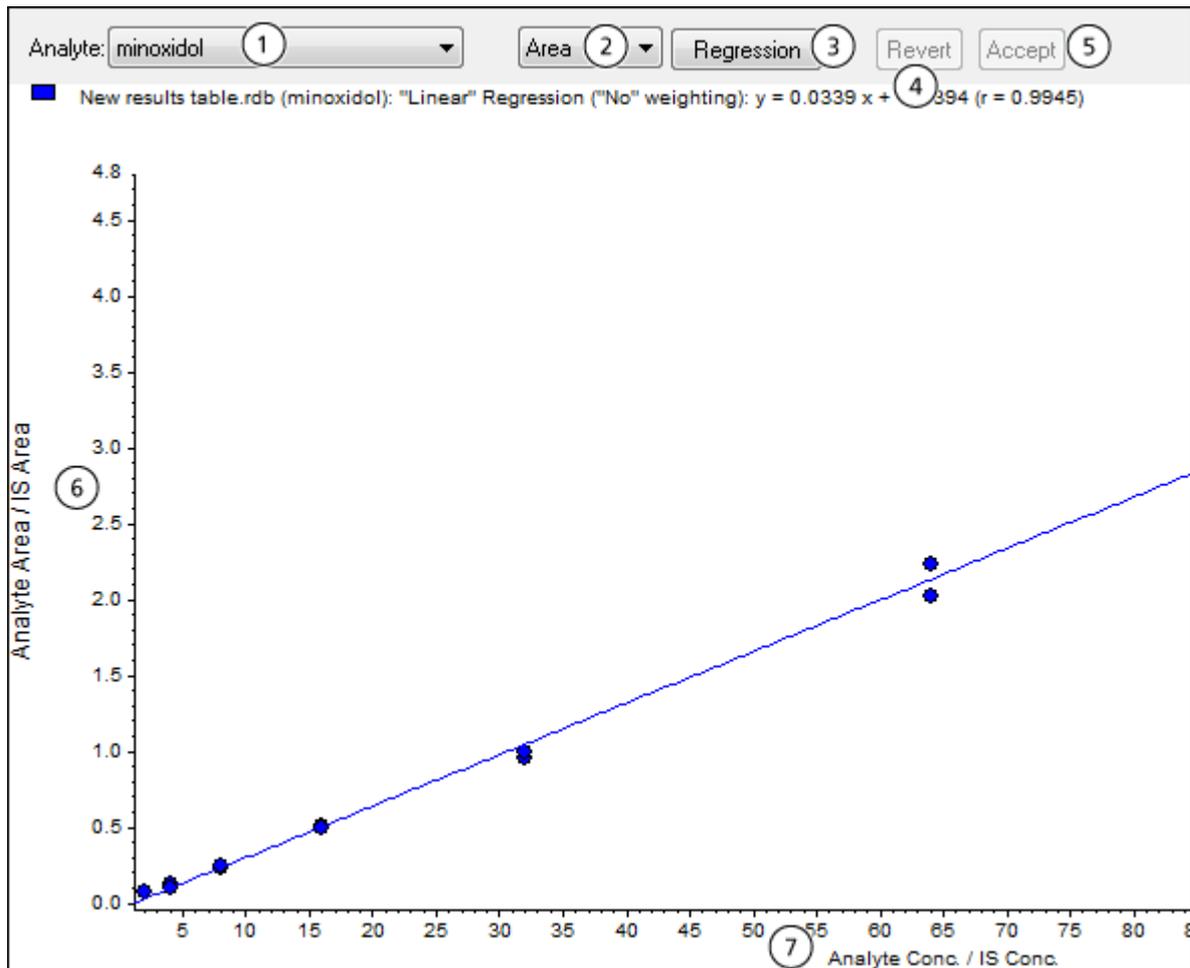
Element	Bezeichnung
1	Bkg. Start
2	Bkg. Ende
3	Übernehmen
4	Akzeptieren
5	Manuelle Integration
6	<ul style="list-style-type: none"> <li>Min. Peak-Höhe: _ cps</li> <li>Min. Peak-Breite: _ cps</li> </ul>

## Peak-Bewertung

---

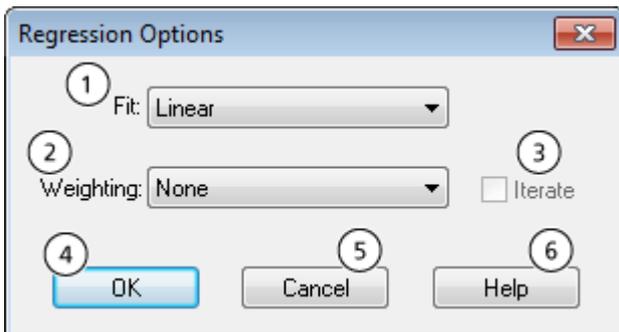
Element	Bezeichnung
7	<ul style="list-style-type: none"><li>• RT-Fenster: _ s</li><li>• Erwartete RT: _ min</li></ul>
8	Glättungsbreite: _ Punkte
9	Relative RT verwenden
10	<ul style="list-style-type: none"><li>• Automatisch - IQA II</li><li>• Parameter angeben - MQ III</li></ul>
11	Rauschen Prozent
12	Peak-Splitting-Faktor
13	Basis Sub-Fenster: _ min
14	Höchsten Peak berichten
15	Intensität, cps
16	Zeit, min

Abbildung 12-11: Calibration Curve



Element	Bezeichnung
1	Analyt
2	Bereich/Höhe
3	Regression
4	Zurücksetzen
5	Akzeptieren
6	Analytfläche/IS-Fläche
7	Analyt-Konz. /IS-Konz.

Abbildung 12-12: Regressionsoptionen



Element	Bezeichnung
1	Passung <ul style="list-style-type: none"> <li>• Linear</li> <li>• Linear durch Null</li> <li>• Quadratisch</li> <li>• Mittlerer Reaktionsfaktor</li> <li>• Betrieb</li> </ul>
2	Weighting <ul style="list-style-type: none"> <li>• Keine</li> <li>• 1/x</li> <li>• 1/(x*x)</li> <li>• 1/y</li> <li>• 1/(y*y)</li> <li>• ln x</li> <li>• ln y</li> </ul>
3	Iterieren
4	OK
5	Abbrechen
6	Hilfe

Abbildung 12-13: Statistiktabelle

10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	19
Expected Concentration	Sample Name	Number Of Values Used	Low	High	Mean	Standard Deviation	%CV	Accuracy	Data Point #1	Data Point #2
2.000000	STD 1	2 of 2	3.199389	3.243137	3.221263	0.030935	0.960337	161.063156	3.243137	3.199389
4.000000	STD 2	2 of 2	4.292737	4.977682	4.635209	0.484329	10.448920	115.880228	4.977682	4.292737
8.000000	STD 3	2 of 2	7.894063	8.302010	8.098036	0.288462	3.562120	101.225455	7.894063	8.302010
16.000000	STD 4	2 of 2	15.581237	15.937081	15.759159	0.251620	1.596659	98.494743	15.937081	15.581237
32.000000	STD 5	2 of 2	29.175366	30.534652	29.855009	0.961160	3.219427	93.296903	29.175366	30.534652
64.000000	STD 6	2 of 2	60.364863	67.275259	63.820061	4.886388	7.656508	99.718845	67.275259	60.364863
128.000000	STD 7	2 of 2	117.741863	139.480662	128.611263	15.371652	11.952026	100.477549	139.480662	117.741863

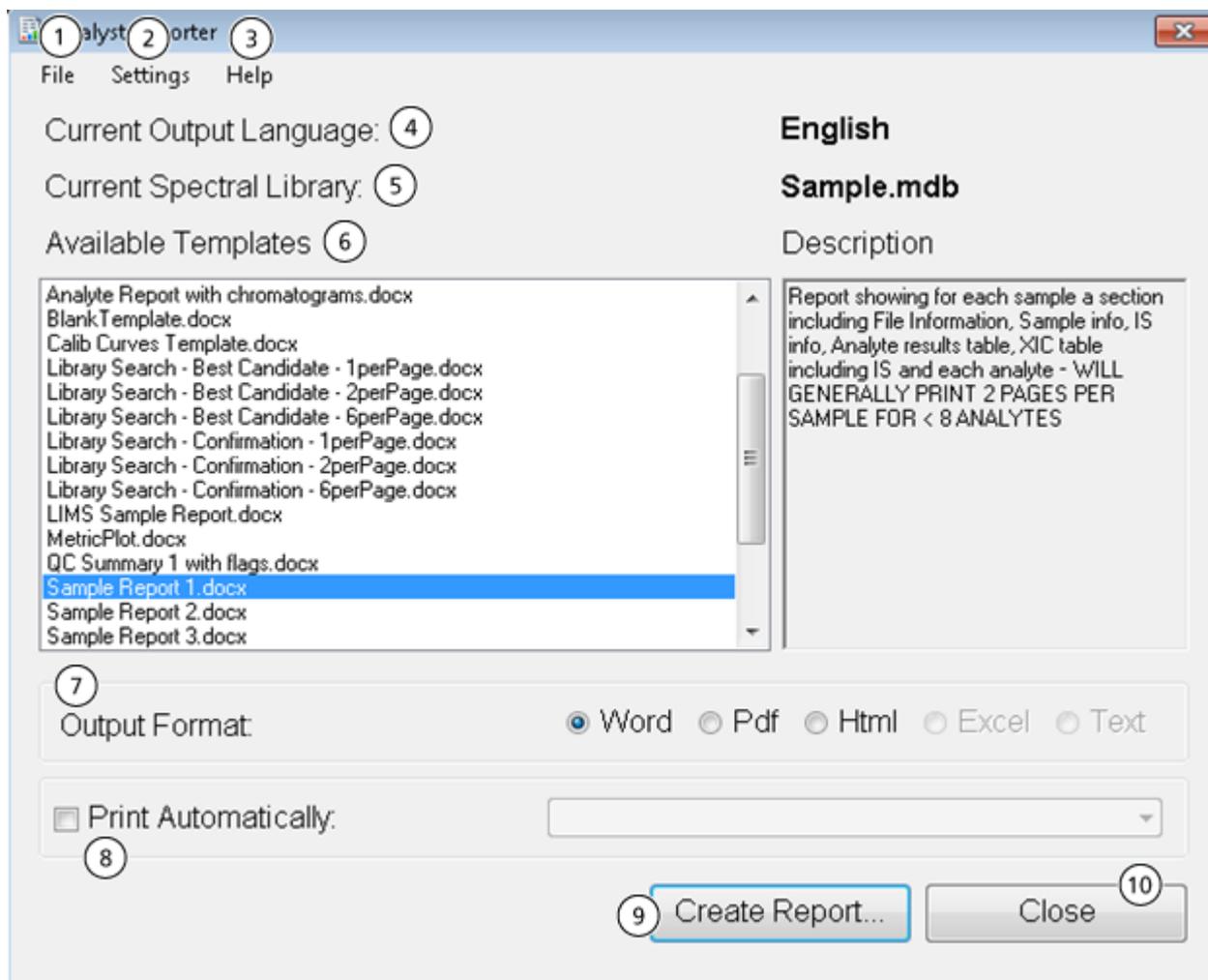
Element	Bezeichnung
1	Parameter
2	Statistik-Metrik <ul style="list-style-type: none"> <li>• Konzentration</li> <li>• Area</li> <li>• Höhe</li> <li>• Analyt-Bereich/IS-Bereich</li> <li>• Analyt-Höhe/IS-Höhe</li> </ul>
3	Analyt-Name
4	Probenart <ul style="list-style-type: none"> <li>• Standard</li> <li>• QC</li> </ul>
5	Layout
6	Konz. als Zeilen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Gruppieren nach Charge</li> </ul>
7	Konz. als Spalten <ul style="list-style-type: none"> <li>• Anzeigen nach Charge</li> </ul>
8	Datensatz/Datensätze anzeigen
9	Niedrige/hohe Werte anzeigen
10	Erwartete Konzentration
11	Probenname
12	Anzahl der verwendeten Werte

## Peak-Bewertung

---

<b>Element</b>	<b>Bezeichnung</b>
13	Niedrig
14	Hoch
15	Mittelwert
16	Standardabweichung
17	%CV
18	Genauigkeit
19	Datenpunkt

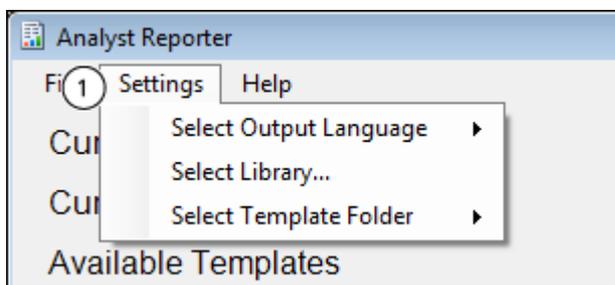
Abbildung 13-1: Analyst Reporter



Element	Bezeichnung
1	Datei
2	Einstellungen
3	Hilfe
4	Aktuelle Ausgabesprache
5	Aktuelle Spektralbibliothek
6	Verfügbare Vorlagen

Element	Bezeichnung
7	Ausgabeformat <ul style="list-style-type: none"> <li>• Word</li> <li>• PDF</li> <li>• Html</li> <li>• Excel</li> <li>• Text</li> </ul>
8	Automatisch drucken
9	Bericht erstellen
10	Schließen

Abbildung 13-2: Menü „Settings“



Element	Bezeichnung
1	Dialogfelds „Settings“ <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ausgabesprache wählen</li> <li>• Bibliothek wählen</li> <li>• Vorlagenordner wählen</li> </ul>