
Analyst MD Software

Handbuch für fortgeschrittene Benutzer



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.

IVD

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.

CE

Die Garantien von SCIEX beschränken sich auf die zum Verkaufszeitpunkt oder bei Erteilung der Lizenz für die eigenen Produkte ausdrücklich anerkannten Garantien und sind die von SCIEX alleinig und ausschließlich anerkannten 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.

UK
CA

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.

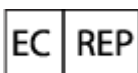
Rx only.

Ein oder mehrere Produkte sind möglicherweise nicht in allen Ländern erhältlich. Weitere Informationen erhalten Sie von Ihrem Vertriebspartner vor Ort oder unter sciex.com.

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).

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

Kapitel 1: Allgemeine Informationen	8
Analyst MD Software-Ereignisse	8
Filtern des Systemprotokolls nach Informationen, die für die Analyst MD Software relevant sind	8
Analyst MD Software-Fenster	9
Analyst MD Software-Modi	10
AnalystService	11
Starten des AnalystService	11
Beenden des AnalystService	12
API-Instrument-Projektordner	12
Programmdateien	12
Projekte und Teilprojekte	13
Teilprojekte	13
Projektorganisation	14
Zugriff und Sicherheit	16
Arbeitsbereiche	16
 Kapitel 2: Modus „Tune and Calibrate“	 19
Tuning	20
Kalibrierung	20
Automatische Abstimmung und Kalibrierung	20
Manuelles Sichern der Geräteparameter (optional)	21
Wiederherstellen der Geräteparameter (optional)	21
Verbindungsoptimierung	22
Flussinjektionsanalyse	22
Infusion	22
T-Infusion	22
 Kapitel 3: Acquisition Methods	 24
Erfassungsmethoden für Geräte	24
Hinzufügen oder Entfernen eines Peripheriegeräts	24
Festlegen der LC-Pumpeneigenschaften	25
Festlegen der Autosampler-Eigenschaften	25
Festlegen der Eigenschaften der integrierten Spritzenpumpe	26
Festlegen der Säulenofen-Eigenschaften	26
Festlegen der Eigenschaften des Umschaltventils	26
Festlegen der Diodenanordnungsdetektor-Parameter (Agilent)	27
Festlegen der Analog/Digital-Wandler-Eigenschaften	27
Dynamic Fill Time (Dynamische Füllzeit)	28
Experimente und Zeiträume	28
Experimente	28

Zeiträume	29
Informationsabhängige Erfassungsmethoden	29
Geplante Ionisation	30
Lösungsmittel-Kompressibilitätswerte	32
Vergleich von Spritzengröße und Flussrate	33
Kapitel 4: Chargen	35
Batch Editor	35
Importieren von Chargen-Dateien	36
Festlegen von Quantifizierungsdetails im Batch Editor (optional)	37
Kapitel 5: Qualitative Datenanalyse	38
Chromatogramme	38
Spektren	39
Hintergrundsubtraktion	39
Durchführen einer Hintergrundsubtraktion für ein Chromatogramm	39
Entsperren der Bereiche	41
Basisliniensubtraktion	41
Rechner	41
Rechner „Elemental Composition“	42
Rechner „Hypermass“	42
Rechner „Elemental Targeting“	42
Rechner „Mass Property“	42
Rechner „Isotopic Distribution“	43
Zugriff auf die Rechner	43
Zentrierte Peaks	43
Berechnen des Strichspektrums eines Peaks	44
Datenanalyse	44
Gesamtionenchromatogramm	45
Extrahiertes Ionenchromatogramm	45
Basispeak-Chromatogramm	45
Extrahiertes Wellenlängen-Chromatogramm	45
Diodenanordnungsdetektor	45
Gesamtwellenlängen-Chromatogramm	46
Überlagern von Diagrammen	46
Wechseln des Zyklus zwischen überlagerten Diagrammen	46
Überlagerungen addieren	46
Anpassen von Diagrammen	47
Hinzufügen von Bildunterschriften zu einem Graph	47
Hinzufügen von Text zu einem Diagramm	47
Compound Database (Datenbank für chemische Verbindungen)	48
Konturdiagramm	48
Anzeigen eines Konturdiagramms	50
Auswählen eines Bereichs in einem Konturdiagramm	50
Festlegen der Intensität und des Absorptionsgrads in einem Konturdiagramm	51
Ändern der Farben in einem Konturdiagramm	51
Dynamic Background Subtraction-Algorithmus	51
Fragment Interpretation	52

Verbinden des Fragment Interpretation Tools mit einem Spektrum	52
Zuordnen von Fragmenten zu Peaks	53
Auswählen einer Bindung in einer molekularen Struktur	53
Anzeigen von Isotopen	53
Anzeigen einer Formeldifferenz in einem Spektrum	54
Anzeigen einer Formeldifferenz in der Fragmentliste	54
Anzeigen einer Formeldifferenz in einer molekularen Struktur	54
IDA-Explorer	54
Bibliotheksdatenbanken	56
Wechseln zwischen vorhandenen Bibliotheksdaten	56
Erstellen einer lokalen Bibliotheksdatenbank	57
Herstellen einer Verbindung mit einer Server-Bibliotheksdatenbank	59
Anzeigen aller Bibliotheksdatensätze	61
Hinzufügen eines Datensatzes zur Bibliothek	61
Suchen nach Bibliotheksdatensätzen mit Einschränkungen	62
Tipps zur Bibliothek-Suchfunktion	63
Suchen nach einem ähnlichen Spektrum	63
Anzeigen einer Verbindung aus den Suchergebnissen	66
Verarbeitete Datendateien	66
Speichern verarbeiteter Dateien	66
Öffnen einer verarbeiteten Datei	66
Qualitative Daten	66
Signal-Rausch-Verhältnis	67
Glättungsalgorithmen	67
Glätten von Daten mit dem Glättungsalgorithmus	68
Glätten von Daten mit der Gauß'schen Glättung	69
Systemprotokolle	69
Speichern des Systemprotokolls und Weiterleiten an den Support	69
Filtern des Systemprotokolls nach Informationen, die für die Analyst MD Software relevant sind	70
Kapitel 6: Quantitative Datenanalyse	71
Kalibrierungsoptionen	71
Über Kalibrierkurven	71
Auswählen der besten Regressionsart	71
Auswählen des besten Gewichtungsfaktors	72
Integrationsalgorithmen	73
Analyst Classic- und IntelliQuan-Integrationsalgorithmen	73
Werkzeuge zum Erstellen von Quantifizierungsmethoden	75
Assistenten	76
Quantitation Method Editor	77
Der halbautomatische Method Editor	77
Metrische Kurven	78
Generieren einer temporären metrischen Kurve	79
Generieren einer metrischen Kurve und Speichern der Darstellungskriterien	80
Speichern von Standard-Darstellungskriterien für zukünftige Ergebnistabellen	81
Rausch- und Bereichsschwellenwert-Parameter	82
Erneute Berechnung von Rausch- und Bereichsschwellenwert	83
Peak-Integration	83

Peak-Bewertung.....	83
Tipps zur Peak-Bewertung.....	84
Feststellen von Peaks.....	84
Suchen des potenziellen Peak-Starts.....	84
Bestätigen des Peak-Starts.....	85
Suchen der Peak-Spitze.....	87
Finden des Peak-Endes.....	89
Separate Peaks.....	91
Abfragen.....	92
Abfragen nach Probentyp.....	92
Standardabfragen und tabellenspezifische Abfragen.....	92
Wie Genauigkeitsvariationen die Ergebnisse beeinflussen.....	93
Regressionsgleichungen.....	93
Anpassen der Optionen.....	94
Gewichtungsfaktoren.....	96
Berichtsvorlagen.....	96
Anpassen von Berichten.....	99
Vorschau, Drucken und Exportieren von Berichten.....	99
„Results Tables“.....	100
Anzeigen eines spezifischen Layouts für „Results Tables“.....	101
Sortieren von Daten in einer Ergebnistabelle.....	101
Sortieren einer Ergebnistabelle und Speichern der Sortierkriterien.....	102
Speichern von Standard-Sortierkriterien für zukünftige Ergebnistabellen.....	103
Sortieren einer Ergebnistabelle mit voreingestellten Sortierkriterien.....	104
Informationen über die Verwendung von Abfragen bei Ergebnistabellen.....	104
Vergleichen von Ergebnissen zwischen Chargen.....	105
Wie Konzentrationen die Ergebnisse beeinflussen.....	105
„Results Table“-Layouts.....	105
Felder der Ergebnistabelle.....	109
Tipps zu Ergebnistabellen.....	116
Anhang A: Symbole der Werkzeugleisten.....	117
Anhang B: Tabelle der exakten PPG-Massen.....	118
Kontaktangaben.....	124
Kundenschulung.....	124
Online-Lernzentrum.....	124
SCIEX Support.....	124
Cybersicherheit.....	124
Dokumentation.....	124

Das *Benutzerhandbuch für Fortgeschrittene* stellt Informationen über die Funktionen der Analyst MD Software zur Verfügung.

Analyst MD Software-Ereignisse

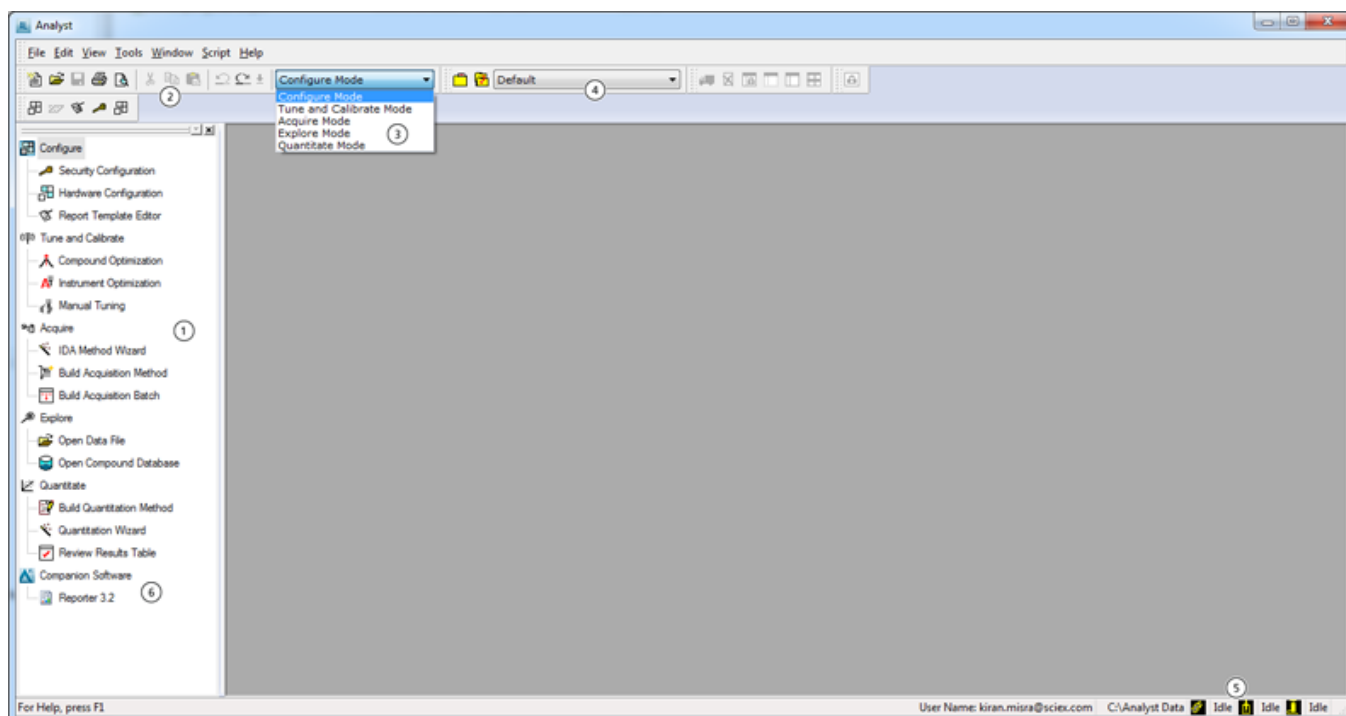
Das Systemprotokoll enthält Berichte über Systemereignisse wie Fehlermeldungen, Warnhinweise und Benachrichtigungen. Verwenden Sie den „Windows Event Viewer“, um Informationen anzuzeigen, die bei der Fehlersuche und bei der Durchführung einer Systemdiagnose hilfreich sein könnten. Um die Informationen aus dem Systemprotokoll wirksam einzusetzen, filtern Sie diese Informationen so, dass nur die softwarerelevanten Elemente angezeigt werden.

Filtern des Systemprotokolls nach Informationen, die für die Analyst MD Software relevant sind

1. Klicken Sie auf **View > Event Log**.
Das Dialogfeld „Event Viewer“ wird geöffnet.
2. Doppelklicken Sie auf den Ordner **Windows Logs**.
3. Klicken Sie auf **Application**.
4. Klicken Sie auf **Action > Filter Current Log**.
Das Dialogfeld „Filter Current Log“ wird geöffnet.
5. Wählen Sie **Analyst** im Feld **Event Sources** aus.
6. Klicken Sie auf **OK**.
Das Dialogfeld „Event Viewer“ zeigt jetzt nur die gefilterten Analyst MD Software-Ereignisse an.

Analyst MD Software-Fenster

Abbildung 1-1: Analyst MD Software-Fenster



Element	Beschreibung
1	<p>Navigationsleiste: Die Navigationsleiste ermöglicht den Zugriff auf die verschiedenen Software-Modi. Benutzer können einige Elemente der Navigationsleiste entsprechend ihren Vorlieben anpassen. Benutzer können zum Beispiel die Größe und Position verändern. Um die Navigationsleiste auszublenden, klicken Sie auf das X rechts oben. Um die Navigationsleiste anzuzeigen, klicken Sie auf View > Navigation Bar.</p> <p>Auf oberster Ebene des Navigationsbaums befindet sich ein Symbol, das für die Software-Modi steht. Doppelklicken Sie auf das Symbol eines bestimmten Modus, um die Baumansicht ein- oder auszublenden. Dadurch werden die Symbole der verfügbaren Funktion im ausgewählten Modus ein- oder ausgeblendet.</p>
2	<p>Menüleiste: Ändert sich abhängig vom Modus. Einige Optionen wie Ausschneiden Kopieren und Einfügen, sind in jedem Modus identisch. Andere Optionen sind dagegen nur in bestimmten Modi verfügbar.</p>
3	<p>Modusliste: Anklicken, um zwischen Modi umzuschalten. Die verschiedenen Modi verfügen über unterschiedliche Symbole in der Werkzeugleiste.</p>

Element	Beschreibung
4	Projektliste: Anklicken, um das Projekt zu ändern, in dem die Daten gespeichert sind.
5	Status von Instrumenten und Peripheriegeräten: Die Statusleiste enthält Informationen über die aktuellen Aktivitäten. Sie gibt den Instrumentenzustand mit Farbkennung an: grün (bereit), gelb (Leerlauf), rot (Fehler) oder weiß (keine lokale Instrumenten-Workstation). Das Symbol zeigt den Status eines Remote-Instruments an. Doppelklicken Sie auf ein Symbol, um das Gerätestatus-Fenster zu öffnen.
6	Companion-Software: Umfasst jede installierte Companion-Software, die mit der Software geöffnet wird.

Analyst MD Software-Modi

Die Software ist in Modi unterteilt. Dies sind eigenständige Funktionsbereiche, die Benutzer zur Durchführung einer Vielzahl an Aktivitäten, die Teil einer Hauptaufgabe sind, nutzen können. Benutzer können über die Navigationsleiste oder über die Modusliste in der Werkzeugleiste auf die Modi zugreifen sowie von einem Modus zum anderen wechseln, ohne Arbeitsergebnisse zu verlieren.

Tabelle 1-1: Modi in der Analyst MD-Software

Name	Beschreibung
Configure	(Konfigurieren) Verwenden Sie diesen Modus zum Konfigurieren von Geräten und Systemeinstellungen. Legen Sie verschiedene Softwareoptionen und -parameter fest, einschließlich der Hardwarekonfiguration und Berichtsvorlageneinstellungen.
Tune and Calibrate	(Abstimmen und Kalibrieren) Verwenden Sie diesen Modus zum Festlegen von Abstimmungsoptionen für die Instrumente, um optimale Ergebnisse sicherzustellen. In diesem Modus können Benutzer Folgendes tun: <ul style="list-style-type: none">• Instrumentenoptimierung durchführen• manuelle Abstimmung durchführen• das Erscheinungsbild der graphischen Ansichten ändern, die Informationsarten auswählen, die angezeigt werden, wenn Dateiinformationen geöffnet werden und Verbindungs- und andere Ansichtsoptionen festlegen.• Verarbeitungsoptionen ändern

Tabelle 1-1: Modi in der Analyst MD-Software (Fortsetzung)

Name	Beschreibung
Acquire	(Erfassen) Verwenden Sie diesen Modus, um zu entscheiden, wie Proben erfasst werden sollen. In diesem Modus können Benutzer Folgendes tun: <ul style="list-style-type: none"> • eine IDA-Erfassungsmethode mit dem „IDA Method Wizard“ erstellen. • eine Erfassungsmethode mit dem „Acquisition Method Editor“ erstellen • eine Charge mit dem Batch Editor erstellen • die Warteschlange mit dem „Queue Manager“ anzeigen • den Erfassungsstatus überwachen
Explore	(Durchsuchen) Verwenden Sie diesen Modus zum Durchführen qualitativer Analysen an Proben. In diesem Modus können Benutzer Folgendes tun: <ul style="list-style-type: none"> • ein Diagramm anzeigen lassen • eine Chromatogramm anzeigen lassen • ein Spektrum anzeigen lassen • Daten in Echtzeit während der Chargen-Erfassung anzeigen lassen
Quantitate	(Quantifizieren) Verwenden Sie diesen Modus, um die erfassten Daten zu analysieren, und erstellen Sie eine quantitative Methode zur Erzeugung einer „Results Table“. Verwenden Sie die „Results Table“, um alle Peaks für jeden Analyten und internen Standard innerhalb einer Charge zu überprüfen und um sich Kalibrierungskurven, Probenstatistiken und metrische Kurven anzusehen.

AnalystService

Der AnalystService ist der Kommunikationspfad zwischen dem Massenspektrometer und den angeschlossenen Geräten. AnalystService wird jedes Mal gestartet, wenn die Analyst MD Software gestartet wird. Der AnalystService startet automatisch, wenn sich der Benutzer bei Windows anmeldet. Wenn der Dienst bei Start der Analyst MD Software nicht ausgeführt wird, dann startet AnalystService automatisch.

Starten des AnalystService

Wenn „Startup Type“ für den AnalystService auf **Manual** eingestellt ist, muss AnalystService manuell gestartet werden, bevor die Analyst MD Software gestartet wird. Ändern Sie nicht den **Startup Type**.

1. Öffnen Sie die Administrative Tools.
2. Doppelklicken Sie auf **Services** und dann auf **AnalystService**.
3. Klicken Sie auf **Start**.

Beenden des AnalystService

Beenden Sie den AnalystService, wenn Kommunikationsstörungen im Gerät oder zwischen Gerät und Peripheriegeräten auftreten.

1. Öffnen Sie die Administrative Tools.
2. Doppelklicken Sie auf **Services** und dann auf **AnalystService**.
3. Klicken Sie auf **Stop**.

API-Instrument-Projektordner

Nachstehend sind einige Ordner des API-Instrument-Projekts aufgeführt:

- **Bundler:** Enthält ein Programm, das alle Aspekte einer Datendatei (wiff-Datei) aufnimmt und diese automatisch verbindet, wenn die Probe abgeschlossen ist.
- **Configuration:** Enthält alle Hardware-Profile (hwpf-Dateien).
- **Instrument Data:** Enthält eine Datei mit dem Namen `InstrumentData.ins`. In der Datei werden alle kritischen Kalibrierungsinformationen und Weiteres gespeichert.
- **Method Tables:** Enthält alle Instrumentenparameter, die die erweiterten Scan-Funktionen definieren. Nehmen Sie keine Änderungen an den Dateien in diesem Ordner vor. Eine Änderung des Inhalts dieses Ordners hat eine Auswirkung auf die Leistung der erweiterten Scan-Modi.
- **Parameter Settings:** Enthält alle Instrumentenparameter und -verbindungen. Die Instrumentenparameter werden in `ParamSettingsdef.psf`-Dateien gespeichert.
- **Preferences:** Enthält die `Tunedata.tun`-Datei. Alle Einstellungen (einschließlich Parameter, Abstimmung, Instrument, Verarbeitung, Anzeige und Warteschlange) werden als `Tunedata.tun` in diesem Ordner gespeichert.
- **Processing Scripts:** Enthält die Skripte für die Datenverarbeitung im Modus „Explore“. Skripte sind im **Script**-Menü zu finden.
- **Queue Data:** Enthält Informationen aus der Warteschlange.
- **Tuning Cache:** Enthält alle Daten, die in „Manual Tuning“ durch Klicken auf **Start** anstatt auf **Acquire** erstellt wurden. Die Dateien werden mit einem Zeit- und Datumsstempel für ihre Namen gespeichert. Der Ordner „Tuning Cache“ enthält eine begrenzte Anzahl an Dateien und wird Dateien bei Bedarf überschreiben. Speichern Sie die Dateien unter einem neuen Namen und verschieben Sie die Dateien, sobald diese gespeichert werden müssen.

Programmdateien

Die folgenden Ordner befinden sich im Ordner `Program Files\Analyst` beim Betriebssystem Windows 7, 32-Bit-Version, oder im Ordner `Program Files (x86)\Analyst` beim Betriebssystem Windows 7, 64-Bit-Version, bzw. Windows 10, 64-Bit-Version.

- **bin:** Enthält die Analyst MD Software-Programm-Dateien. Der Inhalt dieses Ordners sollte nicht geändert werden, da sonst die Funktionalität der Software beeinträchtigt wird.
- **binEx2:** Enthält die Komponenten, die zur Steuerung von ExionLC 2.0-Geräten erforderlich sind.
- **binEx:** Enthält die Komponenten, die erforderlich sind zur Steuerung von ExionLC, Jasper und Shimadzu LC20/30-Geräten, die mit dem Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller gesteuert werden und Shimadzu LC40-Geräten. beeinträchtigt wird.
- **Firmware:** Enthält die Firmware- und Konfigurationstabellen-Dateien des Geräte-Systems und die Firmware-Dateien des Geräts. Weitere Informationen finden Sie im *Software-Installationshandbuch*, das der Software beiliegt.
- **Hilfe:** Enthält die Hilfedatei, Handbücher, Tutorials, *Versionshinweise* und das *Software-Installationshandbuch*.
- **Scripts:** Enthält die Skripte, die der Benutzer gegebenenfalls installieren kann. Diese Skripte sind nicht automatisch installiert, wenn die Analyst MD-Software installiert ist. Weitere Informationen finden Sie im Dokument: *Skripthandbuch*.
- **Simulation:** Enthält die Geräte-Datendateien, die erforderlich sind, um die Software im Simulationsmodus auszuführen.

Projekte und Teilprojekte

Entscheiden Sie, bevor Sie ein Experiment beginnen, wo die Dateien für das Experiment gespeichert werden sollen. Verwenden Sie Projekte und Teilprojekte für jedes Experiment, um die Daten besser zu verwalten und Ergebnisse miteinander zu vergleichen. Zum Beispiel können Ergebnisse für bestimmte Daten in Teilprojekten gespeichert werden.

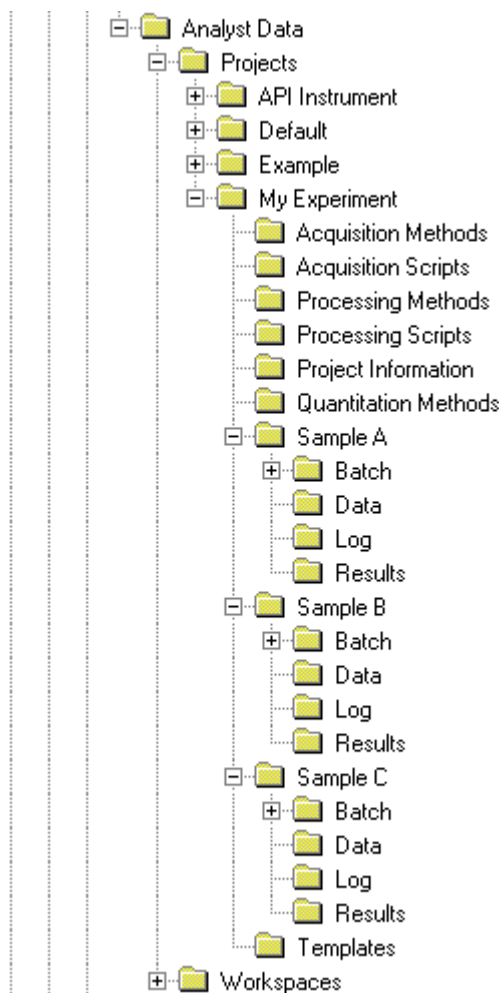
Hinweis: Um eine Teilprojekt-Struktur in einem Projekt zu verwenden, muss bei der Erstellung des Projekts mindestens ein Teilprojekt angelegt werden. Benutzer können ein Teilprojekt nur in einem bestehenden Projekt anlegen, wenn dieses bereits eine Teilprojekt-Struktur hat.

Teilprojekte

Ein Teilprojekt enthält eine Teilmenge der Ordner in einem Projekt. Alle Teilprojekte müssen die gleichen Ordner enthalten. Teilprojekte dienen der Organisation von Daten.

Wenn Sie z. B. Proben verschiedener Verbindungen aus verschiedenen Laboratorien mit der gleichen Erfassungsmethode verarbeiten, dann legen Sie Teilprojekte zum Speichern der Ergebnisse für jedes Labor an, ohne den Erfassungsmethoden-Ordner aus dem Projekt zu entfernen. Die Erfassungsmethode ist dann zur Verwendung für das Teilprojekt oder im Labor verfügbar. Oder es können die Ergebnisse für jeden Tag in einem separaten Teilprojekt gespeichert werden, wenn die Proben über einen Zeitraum von mehreren Wochen analysiert werden. Siehe die folgende Abbildung.

Abbildung 1-2: Beispiel für eine Projekt- und Teilprojekt-Ordner-Struktur



Projektorganisation

Ein Projekt ist eine Ordnerstruktur zur Organisation und Speicherung von Probeninformationen, Daten, Quantifizierungsinformationen usw. Innerhalb jedes Projektes gibt es Ordner, die verschiedene Arten von Dateien enthalten können. Zum Beispiel enthält der Ordner Dateien mit Erfassungsdaten. In der folgenden Tabelle finden Sie eine Beschreibung der Inhalte der verschiedenen Ordner.

Die Software kann auf ein Projekt nur dann zugreifen, wenn es in einem Stammordner gespeichert ist. Benutzer können Projekte nur in Ordnern erstellen, die als Stammordner definiert wurden.

Der voreingestellte Stammordner heißt „Analyst Data“ auf dem Laufwerk, auf dem die Software installiert wurde. Wenn Sie Projekte an anderen Speicherplätzen speichern möchten, müssen Sie neue Stammordner erstellen. Weitere Informationen über Stammordner finden Sie im Dokument: *Hilfe*.

Tabelle 1-2: Projektordner

Ordner	Inhalt
\Acquisition Methods	Enthält alle verfügbaren Erfassungsmethoden. Die Erfassungsmethoden-Dateien haben die .dam-Erweiterung.
\Acquisition Scripts	<p>Erfassungsskripte sind in der Analyst MD Software nicht verfügbar. Dieser Ordner ist leer.</p> <p>Das Analyst MD „Software Scripting“, mit dem benutzerdefinierte Skripte (benutzerdefinierte Sequenzen für den Analyst-Betrieb) erstellt werden können, sollte nicht als Teil eines <i>In-Vitro</i>-Diagnostik-Systems verwendet werden. Inhärente Software-Prüfungen, die bei der Arbeit mit der Analyst MD Software durchgeführt werden, werden bei benutzerdefinierten Skripten nicht ausgeführt und können dazu führen, dass Ergebnisse mit Proben-IDs fehlerhaft verknüpft werden.</p>
\Batch	Enthält alle verfügbaren Erfassungschargendateien. Erfassungschargendateien haben die .dab-Erweiterung. Dieser Ordner enthält außerdem einen Unterordner namens „Templates“ mit Erfassungschargen-Vorlagen. Chargenvorlagendateien haben die .dat-Erweiterung.
\Data	Enthält die Dateien der Erfassungsdaten mit der .wiff-Erweiterung.
\Log	Enthält die Ergebnisse von Quantifizierungen und Verbindungsoptimierungen.
\Processing Methods	Enthält alle verwendeten qualitativen Datenverarbeitungsmethoden.
\Processing Scripts	Enthält die Datenverarbeitungsskripte. Die Verarbeitung von im „API Instrument“-Projekt gespeicherten werden im Menü Scripts Scripts angezeigt.
\Project Information	Enthält alle Projektinformationen und -einstellungen. Dieser Ordner kann nicht in einem Teilprojekt gespeichert werden.
\Quantitation Methods	Enthält alle verwendeten Quantifizierungsmethoden mit der .qmf-Erweiterung.
\Results	Enthält alle Dateien mit Quantifizierungs-„Results Tables“ mit der .rdb-Erweiterung.
\Templates	Enthält Berichtsvorlagendateien mit der .rpt-Erweiterung.

Zugriff und Sicherheit

Die Analyst MD-Software arbeitet mit den Sicherheits-, Anwendungs- und System-Ereignisüberüberprüfungskomponenten der Administrative Tools von Windows zusammen.

Zusätzlich verfügt die Software über eine Vielzahl an Funktionen zum Konfigurieren und Verwalten der Sicherheit. Der Softwareadministrator kann:

- den Sicherheitsmodus wählen, der am besten für die Arbeitsumgebung geeignet ist
- Benutzer und Funktionen hinzufügen und löschen
- bei Bedarf Zugriffsrechte für Benutzer und Funktionen einstellen
- den Zugriff auf Remote-Massenspektrometer kontrollieren
- den Zugriff auf Projektdateien kontrollieren.

Weitere Informationen über die Sicherheit der Software finden Sie im Dokument: *Handbuch für Laborleiter*.

Hinweis: Änderungen der Software-Sicherheitskonfiguration werden nach dem Neustart der Software wirksam.

Arbeitsbereiche


Ein Arbeitsbereich ist eine bestimmte Anordnung von Fenstern und Feldern, die alle zugehörigen Dateien umfasst. Beispiel: Bei der Arbeit an einem bestimmten Datensatz können Benutzer verschiedene Fenster öffnen und deren Größe ändern, um die Analyse zu erleichtern. Diese Anordnung bzw. dieser Arbeitsbereich kann gespeichert werden, damit die Fensteranordnung das nächste Mal, wenn der Benutzer die Daten betrachtet, identisch ist.

Benutzer können einen Arbeitsbereich individuell anpassen, indem sie die gewünschten Fenster und Teilfenster für einen Arbeitsbereich auswählen. Benutzer können die Größe und Position der Fenster und Teilfenster ändern, Teilfenster zusammenfügen und bestimmte Teilfenster und Fenster ausblenden oder einblenden. Auf diese Weise können Benutzer einen Arbeitsbereich so anpassen, dass dieser sich für die gestellten Aufgaben eignet.

In Quantitate and Explore modes stehen den Benutzern mehrere Arbeitsbereiche pro Sitzung zur Verfügung. Der Benutzer kann einen Arbeitsbereich speichern, der auch die zugehörigen Daten enthält. In einem dieser beiden Modi kann ein bestimmter Arbeitsbereich geöffnet werden, ohne den jeweiligen Modus zu verlassen. Um eine bestimmte Anordnung von Fenstern und Teilfenstern für andere Datensätze wiederzuverwenden, können Benutzer einen Arbeitsbereich als Vorlage speichern. In den Modi „Tune and Calibrate“ oder „Acquire“ speichert die Software den Arbeitsbereich automatisch.

Ziel	Aufgabe
Einen Arbeitsbereich erstellen	<ol style="list-style-type: none"> 1. Klicken Sie auf der Navigationsleiste auf den Modus, in dem der Arbeitsbereich erstellt werden soll. 2. Öffnen Sie die Fenster und Teilfenster, die in den Arbeitsbereich einbezogen werden sollen, und ordnen Sie sie dann auf dem Bildschirm an, indem Sie Fenster verbinden und die Größe der Fenster und Teilfenster entsprechend anpassen. 3. Klicken Sie auf File > Save Workspace. 4. Geben Sie in das Feld File name einen Dateinamen für den Arbeitsbereich ein. <hr/> <p>Hinweis: Arbeitsbereichname und -pfad dürfen zusammen 255 Zeichen nicht überschreiten. Dem Arbeitsbereichnamen folgt ein Punkt und die Erweiterung .wws, um anzugeben, dass es sich um eine Workstation-Datei handelt.</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none"> 5. Klicken Sie auf Save. <p>Die Arbeitsbereich-Informationen werden in einer Datei mit der Erweiterung .wws im angegebenen Verzeichnis gespeichert.</p>
Öffnen eines Arbeitsbereichs	<p>In den Modi „Quantitate“ und „Explore“ können verschiedene Arbeitsbereiche geöffnet werden, ohne den aktuellen Modus zu verlassen.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Klicken Sie auf File > Open Workspace. 2. Wählen Sie die entsprechende Arbeitsbereich-Datei aus der Liste aus und klicken Sie dann auf OK.
Speichern eines Arbeitsbereichs	<ol style="list-style-type: none"> 1. Stellen Sie im Modus „Quantitate“ oder „Explore“ sicher, dass der Arbeitsbereich aktiv ist. 2. Klicken Sie auf File > Save Workspace As. <hr/> <p>Tipp! Klicken Sie auf Save Workspace, um die Arbeitsbereich-Informationen mit dem aktuellen Dateinamen und Speicherort zu speichern.</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none"> 3. Geben Sie einen Namen für die Arbeitsbereich-Datei ein und klicken Sie auf Save. <p>Die Software speichert die Fenster- und Teilfenster-Informationen automatisch als Teil des mit dem aktuellen Modus verbundenen Arbeitsbereichs. In Modi „Configure“, „Tune and Calibrate“ oder „Acquire“ speichert die Software den Arbeitsbereich automatisch, wenn der Benutzer den aktuellen Modus schließt.</p>

Allgemeine Informationen

Ziel	Aufgabe
Sperren der Software	1. Klicken Sie auf der Werkzeugleiste auf Lock Application  .

Durch die Abstimmung und Kalibrierung des Massenspektrometers wird die Auflösung und Intensitätsleistung maximiert.

Die folgenden Aufgaben können während der Abstimmung ausgeführt werden:

- Passen Sie die Offset-Werte der Auflösung an, um die Intensität und Auflösung der Kalibriermassen (nur für den Quadrupol-Modus) einzustellen.
- Wählen Sie die zu kalibrierenden Massen. Bei Bedarf können Massen zu und aus der Kalibrierliste hinzugefügt bzw. entfernt werden.
- Erstellen Sie einen oder mehrere eindeutige Kalibrierstandard-Sets. Ein Kalibrierstandard-Set sollte mindestens zwei Verbindungen für die niedrigen und hohen Werte des relevanten Massenbereichs haben.

Ein abgestimmtes und kalibriertes Instrument kann die angegebene Peak-Auflösung und Masse-Zuordnung der Probe feststellen. Zu diesem Zweck wird ein bekannter Kalibrierungsstandard verwendet, z. B. PPG (Polypropylenglykol). Ein Kalibrierungsstandard wird verwendet, um die Massenskala zu kalibrieren, um die Ziel-Ionen so nah wie möglich an ihrem exakten Masse-zu-Ladungs-Verhältnis innerhalb einer akzeptablen Masseverschiebung zu ermitteln. Benutzer können nicht nur den exakten Peak identifizieren, sondern auch die Auflösung anpassen, um die optimale Peak-Breite und -Form zu erhalten.

Ein ordnungsgemäß abgestimmtes und kalibriertes Massenspektrometer liefert das beste Ergebnis für alle im Massenspektrometer analysierten Proben oder Verbindungen. Abstimmung und Kalibrierung werden zusammen durchgeführt, unabhängig von der Optimierung. Bei der Abstimmung und Kalibrierung liegt der Fokus auf der Auflösung und Massenkalkulation. Bei der Optimierung liegt der Fokus auf der Empfindlichkeit.

Änderungen an der Konfiguration des Massenspektrometers während der Abstimmung und Kalibrierung werden in Datendateien im Ordner „API Instrument“ gespeichert. Die voreingestellten Parameter im Ordner „API Instrument Method“ sollten verwendet werden, da sie vom SCIEX Außendienstmitarbeiter (FSE) während der Installation optimiert wurden.

Nach der Abstimmung und Kalibrierung wird die Systemleistung maximiert und die angegebenen Parameter werden die Standardparameter für alle Experimente. Benutzer können Experimente mit den optimierten Quellen- und Verbindungs-abhängigen Parametern durchführen, um die Reaktion aller Analyten maximieren.

Tipp! Reinigen Sie den Q0-Bereich regelmäßig, um die Auswirkungen von Aufladungen (erheblicher Verlust der Empfindlichkeit der betreffenden Ionen über einen kurzen Zeitraum) an den Quadrupolen zu minimieren. Siehe das Dokument: *Handbuch für qualifizierte Wartungstechniker*.

Benutzer können das Instrument entweder automatisch oder manuell abstimmen und kalibrieren.

Automatische Abstimmung: Die Software führt mit dem Instrument Optimization-Assistenten eine Auflösungsoptimierung und Massenkalisierung durch. Für Instrumente mit linearer Ionenfalle (LIT-Instrumente) werden auch MS³-Optimierungen durchgeführt.

Manuelle Abstimmung: Benutzer können viele der Optimierungen und Kalibrierungen der Instrumentenauflösung manuell durchführen.

Tuning

Durch die Abstimmung des Massenspektrometers werden die Auflösung und Geräteparameter optimiert, um die beste Sensitivität und Leistung des Massenspektrometers zu erzielen. Das Massenspektrometer sollte in regelmäßigen Abständen abgestimmt und kalibriert werden, oder, wenn die Systemleistung nachlässt. Optimieren Sie das Massenspektrometer, um die Reaktion einer neuen Probe oder Verbindung zu maximieren. Durch die Optimierung der Auflösung werden Peak-Breite und Peak-Form angepasst.

Kalibrierung

Massenkalibrierung ist das Verfahren, bei dem Massenpeaks die richtigen Masse-zu-Ladung-Werte (m/z) zugeordnet werden. Wenn eine Massenkalibrierung mithilfe eines Kalibrierungsstandards, z. B. Polypropylenglykol (PPG), durchgeführt wird, dann können die Ergebnisse mit einer vorhergehenden Kalibrierung verglichen werden, um zu bestimmen, wie nahe die m/z -Werte der beobachteten Peaks an den theoretischen Werten liegen. Die vorhergehende Kalibrierung kann aktualisiert, oder, noch typischer, durch die neue Kalibrierung ersetzt werden.

Wählen Sie mehrere Massen beim Kalibrieren von Q1, Q3 und bei allen LIT-Scans für jede Polarität. Die Ergebnisse werden in einer Kalibriertabelle gespeichert. Wenn eine Massenkalibrierung durchgeführt wird, dann wird die Kalibriertabelle mit neuen DAC (Digital-Analog-Wandler)-Werten aus der neuen Kalibrierung oder Massen aktualisiert, die bereits in der Kalibrierungstabelle vorhanden sind. Alle Daten für diejenigen Massen, die in der aktuellen Kalibrierung nicht kalibriert werden, werden beibehalten. Wenn die Massenkalibrierung ersetzt wird, werden alle vorherigen Kalibrierwerte für alle Massen ersetzt. Führen Sie eine Massenkalibrierung mit einem neu erfassten Spektrum durch oder verwenden Sie ein Spektrum aus einer gespeicherten Datei.

Automatische Abstimmung und Kalibrierung

„Instrument Optimization“ ist eine automatische Instrument Tuning-Software, die sowohl Quadrupol- als auch LIT-Modi abstimmt und Massenkalisierung durchführt. Für den Quadrupol-Modus passt sie die Auflösungs-Offsets an. Für den LIT-Modus optimiert sie AF3 und EXB. Für MS³ passt sie die Anregungs- und Isolations-Koeffizienten an. Wählen Sie eine der folgenden Instrument-Performance-Optionen:

- **Verify instrument performance:** Testet die Leistung des Geräts, lässt aber die Geräteeinstellungen unverändert. Ein Bericht wird am Ende des Tests erzeugt. Verwenden Sie diese Option wöchentlich, um zu überprüfen, wie gut das Gerät funktioniert.

- **Adjust mass calibration only:** Überprüft und passt die Massenkalisierung automatisch an. Wurde die Massenkalisierung geändert, dann wird durch die Software eine Korrektur vorgenommen.. Verwenden Sie diese Option für LIT-Instrumente wöchentlich oder monatlich, um die Massenkalisierung zu überprüfen und gegebenenfalls anzupassen.
- **Adjust instrument settings:** Prüft die Geräteeinstellungen und Massenkalisierung und passt diese an. Die Geräteeinstellungen werden aus den aktuellen Einstellungen auf die optimalen Einstellungen aktualisiert. Verwenden Sie diese Option, wenn die Geräteleistung oder die Peakform schlecht ist. Nur erfahrene Benutzer sollten Geräteeinstellungen anpassen.

Hinweis: Alte LIT-Methoden müssen mit den neuen Einstellungen aktualisiert werden. Schalten Sie die LIT-Geschwindigkeit in der „Advanced MS“-Registerkarte um und speichern dann diese Methode.

- **Reset selected scan modes to default values and adjust instrument settings:** Setzt die Instrumenten-Werte auf die Werkseinstellungen zurück. Wählen Sie diese Option, wenn ein wichtiger Bestandteil des Gerätes ausgewechselt wurde, oder nach der ersten Installation. *Nur Außendienstmitarbeiter sollten diese Funktion verwenden.*

Manuelles Sichern der Geräteparameter (optional)

Sichern Sie die aktuellen Geräteparameter, um diese gegebenenfalls wiederherzustellen. Der voreingestellte Speicherort für die manuell gesicherten Geräteparameter ist `<drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Optimization\Instrument Settings Backups\User Created Backups`.

1. Doppelklicken Sie in der Navigationsleiste unter **Tune and Calibrate** auf **Instrument Optimization**.
2. Klicken Sie auf **File > Backup Instrument Settings**.
3. Geben Sie einen Dateinamen ein.
4. Klicken Sie auf **Save**.

Wiederherstellen der Geräteparameter (optional)

1. Doppelklicken Sie in der Navigationsleiste unter **Tune and Calibrate** auf **Instrument Optimization**.
2. Klicken Sie auf **File > Restore Instrument Settings File**.
3. Navigieren Sie zu den Geräteeinstellungen, um diese wiederherzustellen.
4. Klicken Sie auf **Open**.

Verbindungsoptimierung

Der Software-Assistent für die Verbindungsoptimierung führt eine automatische Optimierung der Analyten durch. Proben können mittels Infusion oder FIA (Flussinjektionsanalyse) eingefügt werden. Die Software prüft zunächst das Vorhandensein der Verbindungen. Die Spannungen der verschiedenen Ionenbahn-Parameter werden allmählich erhöht oder verringert, um die maximale Signalstärke (Q1 Scan) für jedes Ion zu bestimmen. Eine Textdatei wird erzeugt und anschließend während des Optimierungsprozesses angezeigt. Diese Datei speichert die verschiedenen Experimente und die optimalen Werte für die einzelnen Ionenoptik-Parameter. Ein Ordner mit allen durchgeführten Experimenten wird ebenfalls erzeugt und kann im „Explore“-Modus angezeigt werden. Für jedes durchgeführte Experiment wird ebenfalls eine Erfassungsmethode erzeugt und im Ordner „Acquisition Method“ gespeichert.

Flussinjektionsanalyse

Die Flussinjektionsanalyse (Flow Injection Analysis, FIA) ist die Injektion einer geringen Probenmenge durch einen Probengeber in den LC-Strom. Während des FIA-Optimierungsprozesses werden mehrere Probeninjektionen für verschiedene quellenabhängige und/oder substanzspezifische Parametertypen durchgeführt, die zwischen den Injektionen verändert werden. FIA optimiert Parameter für das Auflösungspotenzial von Ionenclustern, die Stoßenergie und das Stoßkammeraustrittspotenzial durch aufeinanderfolgende, schleifenförmige Experimente, d. h. zunächst mit einem substanzspezifischen Parameter und dann mit dem nächsten substanzspezifischen Parameter. Der Prozess optimiert die quellenabhängigen Parameter, indem eine Injektion für jeden Parameter vorgenommen wird.

Mit der FIA-Optimierung können sowohl die verbindungsspezifischen als auch die quellenspezifischen Parameter unter Verwendung der LC bei höherem Volumenstrom optimiert werden.

Infusion

Infusion ist das kontinuierliche Fließen einer Probe in die Ionenquelle bei niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten mittels einer Spritzenpumpe. Während des Infusionsoptimierungsprozesses können Vorläufer- und Produkt-Ionen von der Software ausgewählt und entsprechend dem Auflösungspotenzial von Ionenclustern, der Kollisionsenergie und dem Stoßzellen-Austrittspotenzial für beide optimiert werden. Die Spannungen dieser verschiedenen Ionenpfad-Parameter werden allmählich erhöht oder verringert, um die maximale Signalstärke für Vorläufer- und Produkt-Ionen zu bestimmen.

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

T-Infusion

T-Infusion (oder Split-Infusion) ist das kontinuierliche Fließen einer Probe in die Ionenquelle bei niedriger Flussgeschwindigkeit durch einen Drei-Wege-Erdungsanschluss an der

Ionenquelle. Der Drei-Wege-Erdungsanschluss ist mit einer Spritzenpumpe mit einer PEEK-Kapillare und einer LC-Pumpe verbunden.

Bei der Erstellung einer Erfassungsmethoden-Datei aus einer vorhandenen Datei kann der Benutzer einige oder alle Geräte-Methoden in der Erfassungsmethode verwenden. Verwenden Sie den Acquisition Method Editor, um die Erfassungsmethode durch Hinzufügen oder Entfernen von Geräte-Methoden anzupassen. Wenn das gewünschte Geräte-Symbol im Teilfenster „Acquisition Method Browser“ nicht angezeigt wird, können Benutzer das Gerät nur dann hinzufügen, wenn es im aktiven Hardware-Profil enthalten ist.

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

Erfassungsmethoden für Geräte

Erstellen Sie eine Erfassungsmethode für ein Peripheriegerät, indem Sie die Betriebsparameter für dieses Gerät auswählen. Erfassungsmethoden können für jedes der folgenden Geräte erstellt werden, wenn sie im aktiven Hardware-Profil konfiguriert sind:

- Pumpen
- Autosampler
- Spritzenpumpen
- Säulenöfen
- Umschaltventile
- Diodenanordnungsdetektor
- Analog-Digital-Umwandler
- Integrierte Systeme

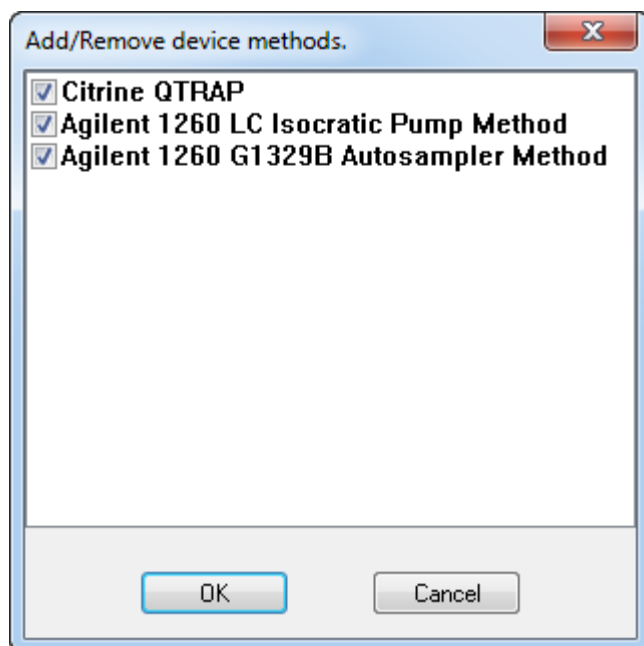
Weitere Informationen über die Einstellung von Geräteeigenschaften finden Sie im Dokument: *Handbuch für das Einrichten von Peripheriegeräten*.

Hinweis: Die für die LC-Geräte verfügbaren Parameter variieren je nach Hersteller.

Hinzufügen oder Entfernen eines Peripheriegeräts

1. Mit einer im Acquisition Method Editor geöffneten Methodendatei klicken Sie mit der rechten Maustaste im Teilfenster „Acquisition Method“ auf **Acquisition Method** und dann auf **Add/Remove Device Method**.
Der Dialog „Add/Remove Device Method“ öffnet sich und zeigt die im aktiven Hardware-Profil konfigurierten Geräte.

Abbildung 3-1: Dialog „Add/Remove Device Method“



2. Aktivieren oder deaktivieren Sie die Kontrollkästchen neben einer Geräte-Methode, um eine Geräte-Methode hinzuzufügen oder zu entfernen.
3. Klicken Sie auf **OK**.

Festlegen der LC-Pumpeneigenschaften

1. Führen Sie mit einer im „Acquisition Method Editor“ geöffneten Erfassungsmethoden-Datei im Teilfenster „Acquisition Method“ eine der folgenden Aktionen aus:
 - Um die Agilent-Pumpe zu aktivieren, klicken Sie auf das Symbol **Pump**.
 - Klicken Sie bei Shimadzu LC 20/30-Geräten, die mithilfe des Integrated System Shimadzu LC Controller aktiviert wurden, auf **Shimadzu LC System**.
 - Klicken Sie bei Shimadzu LC 20/30-Geräten, die mithilfe des Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller, Shimadzu LC 40-Geräten, ExionLC-Geräten, ExionLC 2.0-Geräten oder Jasper LC-Geräten aktiviert wurden, auf **LC System**.
2. Wählen Sie im rechten Teilfenster die Registerkarte „LC pump“, wenn diese nicht bereits ausgewählt ist. Bearbeiten Sie dann nach Bedarf die Eigenschaften oder Einstellungen.
3. Speichern Sie die Datei.

Festlegen der Autosampler-Eigenschaften

1. Stellen Sie sicher, dass auf der Registerkarte „Acquisition Properties“ das Feld **Synchronization Mode** auf **LC Sync** eingestellt ist. Das Gerät, die Probeninjektion und die Instrumentenerfassung starten gleichzeitig.
2. Führen Sie mit einer im „Acquisition Method Editor“ geöffneten Methoden-Datei im Teilfenster „Acquisition Method“ eine der folgenden Aktionen aus:

- Klicken Sie auf das Symbol Agilent Autosampler, um den Agilent-Probengeber auszuführen.
 - Klicken Sie auf das Symbol CTC PAL Autosampler, um den CTC PAL-Probengeber auszuführen.
 - Klicken Sie bei Shimadzu LC 20/30-Geräten, die mithilfe des Integrated System Shimadzu LC Controller aktiviert wurden, auf **Shimadzu LC System**.
 - Klicken Sie bei Shimadzu LC 20/30-Geräten, die mithilfe des Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller, Shimadzu LC 40-Geräten, ExionLC-Geräten, ExionLC 2.0-Geräten oder Jasper LC-Geräten aktiviert wurden, auf **LC System**.
3. Öffnen Sie die Registerkarte „Autosampler“ im rechten Teilfenster und bearbeiten Sie dann die Eigenschaften oder Einstellungen nach Bedarf.
 4. Speichern Sie die Datei.

Festlegen der Eigenschaften der integrierten Spritzenpumpe

Dieses Verfahren gilt für Systeme mit eingebauten Spritzenpumpen.

1. Mit einer im „Acquisition Method Editor“ geöffneten Erfassungsmethoden-Datei klicken Sie im Teilfenster „Acquisition Method Browser“ auf das Symbol „Syringe Pump“. Die Registerkarte „Syringe Pump Method Properties“ wird im Teilfenster „Acquisition Method Editor“ angezeigt.
2. Bearbeiten Sie die Felder nach Bedarf.
3. Speichern Sie die Datei.

Festlegen der Säulenofen-Eigenschaften

1. Führen Sie mit einer im „Acquisition Method Editor“ geöffneten Erfassungsmethoden-Datei im Teilfenster „Acquisition Method“ eine der folgenden Aktionen aus:
 - Klicken Sie bei Agilent-Säulenofen auf das Symbol **Agilent Column Compartment**.
 - Klicken Sie bei Shimadzu LC 20/30-Geräten, die mithilfe des Integrated System Shimadzu LC Controller aktiviert wurden, auf **Shimadzu LC System**.
 - Klicken Sie bei Shimadzu LC 20/30-Geräten, die mithilfe des Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller, Shimadzu LC 40-Geräten, ExionLC-Geräten, ExionLC 2.0-Geräten oder Jasper LC-Geräten aktiviert wurden, auf **LC System**.
2. Wählen Sie im rechten Teilfenster die Registerkarte „Column Oven“, wenn diese nicht bereits ausgewählt ist. Bearbeiten Sie dann nach Bedarf die Eigenschaften oder Einstellungen.
3. Speichern Sie die Datei.

Festlegen der Eigenschaften des Umschaltventils

Das Umschaltventil kann als Umleit- oder Einspritzventil verwendet werden. Wählen Sie den Synchronisationsmodus **Manual Sync with Valve**, wenn das Ventil als Injektor verwendet

wird. Wählen Sie einen beliebigen anderen Modus, wenn das Ventil als Umleitventil verwendet wird.

1. Mit einer im „Acquisition Method Editor“ geöffneten Methoden-Datei klicken Sie im Teilfenster „Acquisition Method“ auf das Symbol **Valve**.
Die Registerkarte „Valve Properties“ öffnet sich im Fensterausschnitt „Acquisition Method Editor“.
2. Ändern Sie gegebenenfalls die voreingestellten Positionsnamen.
Das Umschaltventil wird manchmal dazu verwendet, Lösungsmittel zu den Abfallstoffen oder zu einer anderen Säule zu leiten. Die voreingestellten Positionsnamen sind A und B.
 - Wählen Sie in der Liste **Change Position Names** eine Position aus.
 - Ändern Sie in der Liste **Change Position Names** die voreingestellten Positionsnamen entsprechend den Ventilanschlüssen. Wenn das Ventil als Injektor verwendet wird, dann ändern Sie A und B zu „Inject and Divert“ oder „Column and Waste“. Wenn das Ventil als Umleitventil verwendet wird, dann ändern Sie A und B zu „Divert“ and „Inject“ oder „Waste and Column“.
3. Klicken Sie in der Spalte **Total Time (min)** auf eine Zelle und geben Sie dann die Gesamtzeit ein, für die das Ventil in dieser Position bleiben wird.
4. In der Spalte **Position** klicken Sie auf eine Zelle und wählen dann in der Liste **Position** die Ventilstellung.
5. Wiederholen Sie die Schritte [3](#) und [4](#) für jeden Schalter des Ventils, den Sie während der Erfassung benötigen.
6. Speichern Sie die Datei.

Festlegen der Diodenanordnungsdetektor-Parameter (Agilent)

1. Mit einer im „Acquisition Method Editor“ geöffneten Erfassungsmethoden-Datei klicken Sie im Teilfenster „Acquisition Method“ auf das Symbol Agilent Diode Array Detector. Die Registerkarte „Agilent DAD Method Editor“ öffnet sich im Fensterausschnitt „Acquisition Method Editor“.
2. Bearbeiten Sie die Eigenschaften, falls erforderlich.
3. Speichern Sie die Datei.

Festlegen der Analog/Digital-Wandler-Eigenschaften

1. Mit einer im „Acquisition Method Editor“ geöffneten Methoden-Datei klicken Sie im Teilfenster „Acquisition Method“ auf das Symbol Analog to Digital Converter (ADC). Die Registerkarte „Analog/Digital Converter Properties“ wird im Teilfenster „Acquisition Method Editor“ geöffnet.
2. Geben Sie im Abschnitt „Sample“ im Feld **Rate (pts/sec)** die Geschwindigkeit ein.

Hinweis: Intervall und Geschwindigkeit sind zueinander proportional. Wenn die Geschwindigkeit geändert wird, berechnet die Software automatisch das Intervall neu.

3. Gehen Sie folgendermaßen vor, um die Kanal-Details festzulegen:
 - a. Im Feld **Channels** klicken Sie auf den Namen des Kanals und aktivieren dann das Kontrollkästchen neben dem Namen, um den Kanal in die Methode aufzunehmen.
 - b. Im Feld **Interpreted Value @ Full Scale** geben Sie den entsprechenden Wert ein.
 - c. Im Feld **Interpreted Unit** geben Sie den entsprechenden Wert ein.

Die Anzahl der verfügbaren Kanäle wird festgelegt, wenn der ADC im Hardware-Profil eingerichtet wird.

4. Speichern Sie die Datei.

Dynamic Fill Time (Dynamische Füllzeit)

„Dynamic Fill Time“ (DFT) ist eine Funktion, die speziell dafür entwickelt wurde, um in einem Spektrum erfasste Daten für die Scan-Funktionen der linearen Ionenfalle zu optimieren. DFT passt die zum Füllen der Ionenfalle verwendete Füllzeit automatisch entsprechend dem Ionenfluss aus der Ionenquelle an. Für intensivere Ionen wird die Füllzeit automatisch verringert, um sicherzustellen, dass die Falle nicht mit Ionen überfüllt wird.

Für weniger intensive Ionen wird die Füllzeit automatisch erhöht, um sicherzustellen, dass man im Spektrum eine gute Ionen-Statistik erhält. DFT ist für die folgenden Scan-Typen möglich:

- Erweiterte MS (EMS)
- Enhanced Resolution (ER)
- Enhanced Product Ion (EPI)
- MS/MS/MS (MS³)

Passen Sie die DFT-Einstellungen an, indem Sie **Tools > Settings > Method Options** in der Software auswählen.

Experimente und Zeiträume

Die Erfassungsmethode des Massenspektrometers besteht aus Experimenten und Zeiträumen. Erstellen Sie im Fensterbereich „Acquisition Method Browser“ eine Abfolge von Erfassungszeiträumen und Experimenten für das Massenspektrometer. Öffnen Sie alternativ eine zuvor im Tune Method Editor erstellte Methode.

Experimente

Ein Experiment umfasst die Einstellungen des Massenspektrometers und die Scan-Methode während eines MS-Scans. Ein Satz durchgeführter MS-Scans für eine bestimmte zeitliche Dauer wird als Zeitraum bezeichnet. Eine Erfassungsmethode, in der die MS-Parameter und Aktionen über die gesamte Dauer gleich bleiben, wird als Methode mit einem einzigen Zeitraum und einem einzigen Experiment bezeichnet.

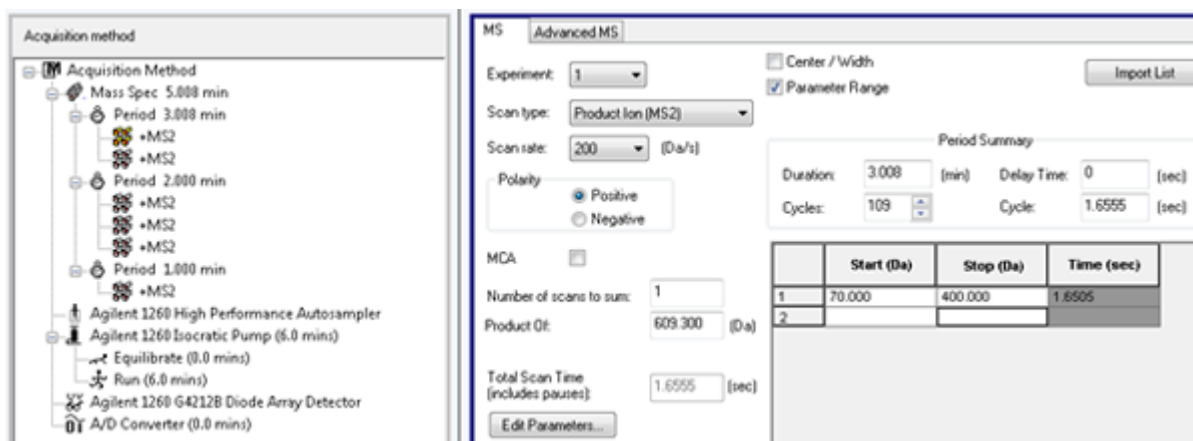
Bei schleifenförmigen Experimenten werden die MS-Einstellungen für jeden Scan geändert. Beispiel: Wenn die Probe zwei Verbindungen, A und B, enthält, können Benutzer ein MS/MS-Experiment mit Verbindung A mit einem MS/MS-Experiment mit Verbindung B in eine Schleife legen, um im gleichen Durchlauf Informationen über beide Verbindungen zu erhalten. Die Massenspektrometer-Methode wechselt zwischen den beiden Scan-Typen. Weitere Beispiele für schleifenförmige Experimente sind die abwechselnde Verwendung von positiven und negativen Modi in einem Durchlauf und „Information Dependent Acquisition“- (IDA-)Methoden.

Zeiträume

Ein Zeitraum kann ein oder mehrere schleifenförmige Experimente enthalten. In einer Erfassungsmethode mit mehreren Zeiträumen werden Experimente für eine bestimmte Dauer durchgeführt und dann wechselt die Software auf einen anderen Satz von Experimenten. Zeiträume sind dann hilfreich, wenn die Elutionszeit der Verbindungen in einem LC-Durchlauf bekannt ist. Das Massenspektrometer ist so einstellbar, dass es je nach Elutionszeitpunkt der Verbindungen verschiedene Experimente durchführt, um in einem Durchlauf so viele Informationen wie möglich zu erhalten.

Die folgende Abbildung zeigt eine Methode mit drei Zeiträumen.

Abbildung 3-2: Beispiel für ein Experiment mit mehreren Zeiträumen



Informationsabhängige Erfassungsmethoden

Eine IDA-Methode verarbeitet Experimente automatisch basierend auf den Ergebnissen aus vorhergehenden Zyklen. Verwenden Sie die IDA-Kriterien zur Optimierung der Datenerfassungseinstellungen während der Datenerfassung und zur Verkürzung der Probenerfassungsdauer bei einer einzigen Injektion. Durch IDA können Benutzer sowohl die Anzahl der benötigten Proben als auch wertvolle Arbeitszeit sparen.

Sie können eine IDA-Methode mit bis zu zwei Vorläuferscans und abhängigen Scans für bis zu acht der intensivsten Peaks in einem einzigen Zeitabschnitt erstellen. Ein Vorläuferscan löst bei IDA weitere Experimente aus. Die folgenden Scan-Methoden können als Vorläuferscans verwendet werden:

- Enhanced Product Ion (EPI) (zweiter Vorläuferscan)

- Erweiterte MS (EMS)
- Multiple Reaction Monitoring (MRM) oder *Scheduled* MRM Algorithmus
- Neutralverlust (NL)
- Vorläufer-Ion (Prec)
- Q3 MS

Die folgenden Scan-Methoden können als abhängige Scans verwendet werden:

- EPI
- MS/MS

Während der Erfassung einer IDA-Methode variieren die Aktionen im Massenspektrometer von Scan zu Scan aufgrund der in einem vorhergehenden Zyklus erfassten Daten. Die Software analysiert die Daten bei der Erfassung und bestimmt dann die Massen, mit denen abhängige Scans durchzuführen sind. Benutzer können die Kriterien für die Auslösung eines IDA-Experiments und die zu verwendenden Methoden-Parameter festlegen.

Die Erfassung mittels IDA-Methode verbessert die Ergebnisse, indem die abhängigen Scans mit den folgenden benutzerdefinierten Kriterien ausgeführt werden:

- Ionen-Intensität und Ladungszustand
- Liste mit Einschluss- und Ausschlusskriterien
- Isotopenmuster
- Dynamischer Ausschluss
- Änderungsrate der Ionenintensität (siehe Abschnitt: [Dynamic Background Subtraction-Algorithmus](#).)

Geplante Ionisation

Mithilfe der Funktion „Scheduled Ionization“ kann die Ausfallzeit des Massenspektrometers reduziert werden, indem das Risiko einer Kontamination verringert wird. Sie ist verfügbar im „Acquisition Method Editor“ und kann für die Chargenerfassung mithilfe einer Erfassungsmethode für einen Zeitraum verwendet werden. Siehe die folgende Abbildung.

Abbildung 3-3: Funktion „Geplante Ionisation“ im Acquisition Method Editor

MS Advanced MS

Experiment: 1

Scan type: MRM (MRM)

Polarity: ☒ Positive ☐ Negative

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

Edit Parameters...

☒ DMS Off

☒ Ramp COV

Start: -30.000 Stop: 30.000 Step: 0.100

Scheduled MRM

☐ Enabled ☒ Basic ☐ Advanced

Import List

Period Summary

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

Cycles: 600 Cycle: 0.0000 (sec)

☒ Scheduled Ionization

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

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Dwell Time (msec)	ID
1				

Wenn **Scheduled Ionization** ausgewählt ist, und die **Start Time** und **Stop Time** für **Scheduled Ionization** festgelegt sind, dann wird die **IonSpray Voltage (ISV)** auf den **ISV-Wert** eingestellt, der in der Erfassungsmethode nur zwischen der **Start Time** und der **Stop Time** angegeben ist, bei der die relevanten Peaks eluieren. Die **ISV** wird vor der **Start time** und nach der **Stop time** auf 0 gesetzt. Die LC-Methode sollte wie gewöhnlich eingestellt werden. Wenn die LC-Dauer beispielsweise auf 5 Min. eingestellt ist, und die **Scheduled Ionization** bei 1,5 Min. startet und bei 3,5 Min. stoppt, dann startet die LC bei 0 Min. und stoppt bei 5 Min. Die Massenspektrometer-Datensammlung startet bei 1,5 Min. und stoppt bei 3,5 Min. Die **Scheduled Ionization** kann auch für den **Nebulizer Current (NC)** verwendet werden, wenn eine Turbo V- oder IonDrive Turbo V-Ionenquelle im APCI-Modus verwendet wird.

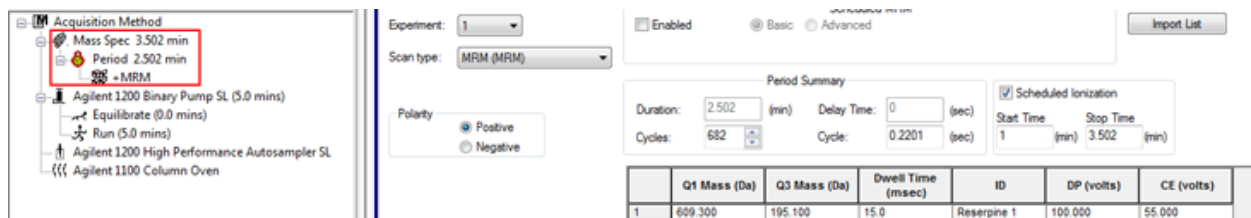
Die **Start Time** und **Stop Time** für eine Erfassungsmethode mit ausgewählter Funktion **Scheduled Ionization** sollte basierend auf den mithilfe derselben Erfassungsmethode erfassten Daten entwickelt werden, jedoch ohne ausgewählter **Scheduled Ionization**.

Hinweis: Die **Stop Time** muss größer als die **Start Time** sein.

Acquisition Methods

Hinweis: Wenn das Kontrollkästchen **Scheduled Ionization** aktiviert ist, ist die **Mass Spec**-Zeit die **Stop Time** (die geplante Zeit für das Ende der Ionisation). Die im „Acquisition Method Editor“ neben der **Period** angezeigte Zeit ist der Wert, der im Feld **Duration** angezeigt wird. siehe die folgende Abbildung.

Abbildung 3-4: Massenspektrometerzeit wenn Scheduled Ionization ausgewählt ist



Lösungsmittel-Kompressibilitätswerte

Tabelle 3-1: Lösungsmittel-Kompressibilitätswerte

Lösungsmittel	Kompressibilität 10 ⁻⁶ /bar)
Aceton	126
Acetonitril	115
Benzol	95
Kohlenstofftetrachlorid	110
Chloroform	100
Cyclohexan	118
Ethanol	114
Ethylacetat	104
Heptan	120
Hexan	150
Isobutanol	100
Isopropanol	100
Methanol	120
1-Propanol	100
Toluol	87
Wasser	46

Vergleich von Spritzengröße und Flussrate

Die Flussrate einer Spritzenpumpe hängt von der in der Pumpe installierten Spritze ab. Die folgenden Tabellen zeigen das Verhältnis von Flussrate und Spritzengröße.

Tabelle 3-2: Spritzengröße und Flussrate bei l/Std.

Spritzengröße (µl)	Minimum (l/Std.)	Maximum (l/Std.)
0,5	0,002	23,8
1,0	0,003	47,8
2,0	0,006	95,2
5,0	0,015	238,0
10,0	0,029	474,0
25,0	0,073	1193,0

Tabelle 3-3: Spritzengröße und Flussrate bei µl/Min.

Spritzengröße (µl)	Minimum (µl/Min.)	Maximum (µl/Min.)
50	0,002	39,7
100	0,005	79,7
250	0,012	197,8
500	0,024	397,0
1000	0,048	795,0
1,0	0,049	805,0

Tabelle 3-4: Spritzengröße und Flussrate bei ml/Std.

Spritzengröße (ml)	Minimum (ml/Std.)	Maximum (ml/Std.)
2,0	0,011	186,8
2,5	0,010	168,2
3,0	0,011	181,4
5,0	0,019	317,0
10,0	0,028	461,0
20,0	0,050	821,0
30,0	0,074	1208,0

Tabelle 3-5: Spritzengröße und Flussrate bei ml/Min.

Spritzengröße (ml)	Minimum (ml/Min.)	Maximum (ml/Min.)
50,0	0,002	28,40
100,0	0,003	47,60
140,0	0,004	55,10

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

Chargen beinhalten folgende Informationen:

- Probeninformationen wie z. B. Name, ID, Datendatei-Name und Kommentar
- Autosampler-Position (Rack-Informationen), Fläschchenposition
- Erfassungsmethoden und Injektionsvolumen
- Quantifizierungsmethode (optional)
- Quantifizierungsinformation (optional)
- Benutzerdefinierte Probendaten (optional)
- Satzinformationen.

Batch Editor

Verwenden Sie den Batch Editor zum Erstellen und Bearbeiten von Chargen und zum Erstellen von Chargen-Vorlagen. Bei der Bearbeitung von Proben, die jeweils eine unterschiedliche Erfassungsmethode verwenden, wählen Sie mehrere Erfassungsmethoden im gleichen Satz aus.

Eine Erfassungsmethode kann auch als Vorlage verwendet werden. In diesem Fall wird für jede Probe die gleiche Methode verwendet, der Benutzer kann jedoch für jede Probe unterschiedliche Massen oder Massenbereiche wählen. Mithilfe des Batch Editors können außerdem Probenlisten importiert werden, die mit externen Programmen, wie z. B. Microsoft Excel, erstellt wurden.

Der Benutzer kann jedes Detail der Charge verändern, bevor er sie zur Verarbeitung übermittelt. Wenn eine Charge zur Analyse übermittelt wird, kann der Benutzer entweder die gesamte Charge, bestimmte Sätze innerhalb der Charge oder bestimmte Proben innerhalb eines Satzes übermitteln.

Beispiel: Um zehn Proben zu analysieren, fünf mit einer Erfassungsmethode und fünf mit einer anderen Erfassungsmethode, erstellen Sie eine Charge mit zwei Sätzen, einen für jede verwendete Methode.

Chargen

Hinweis: Wir empfehlen, dass Benutzer alle Chargen-Parameter vor der Chargen-Übermittlung überprüfen, um sicherzustellen, dass die Rack-, Platten- und Fläschchenpositionen mit den Hardwareeinstellungen des Probengebers übereinstimmen. Außerdem kann geprüft werden, ob die Rackeinstelloption „Specify rack“ für die Erfassungsmethode verfügbar und für den verwendeten Probengeber ausgewählt ist.

Hinweis: Wir empfehlen Benutzern zu prüfen, ob Rack und Platte mit den richtigen Probenpositionen in den Probengeber geladen wurden, bevor die Charge übermittelt wird.

Tabelle 4-1: Registerkarten des Batch Editors

Registerkarte	Beschreibung
Probe	Wird verwendet, um die Probenliste zu erstellen und Probendetails auszuwählen, wie Probenname und Erfassungsmethode, die für die Erfassung der Probe verwendet werden sollen.
Locations	Wird verwendet, um die Positionen der Proben im Autosampler auszuwählen. Proben-Speicherplätze können numerisch auf der Registerkarte „Sample“ angegeben werden. Die Registerkarte „Locations“ bietet jedoch eine graphische Oberfläche für die Auswahl der Proben-Speicherplätze.
Quantifizierung	Wird verwendet, um die Probentypen und Konzentrationen für Quantifizierungs-Chargen auszuwählen. Da Quantifizierungsinformationen nach der Erfassung in der Ergebnistabelle der Quantifizierung angegeben werden können, müssen Benutzer die Registerkarte „Quantitation“ im Batch Editor nicht verwenden. Stattdessen kann der „Quantitation Wizard“ verwendet werden.
Submit	Wird verwendet, um die Probeninformation zu überprüfen und Proben an die Erfassungswarteschlange zu übermitteln. Der „Queue Manager“ zeigt den Status von Warteschlange, Charge und Probe und ermöglicht den Benutzern, Proben in der Warteschlange zu verwalten.

Importieren von Chargen-Dateien

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

Bevor Sie Chargen-Informationen aus einer Textdatei importieren, stellen Sie sicher, dass die Daten in der Datei korrekt organisiert und formatiert sind. Insbesondere müssen die Spaltenüberschriften in der Tabelle den Spaltenüberschriften im „Batch Editor“ entsprechen. Um sicherzustellen, dass die Textdatei die richtigen Überschriften enthält, erstellen Sie eine Charge mit dem Batch Editor, exportieren Sie diesen als Textdatei, geben Sie die entsprechenden Werte in einem Tabellenkalkulationsprogramm ein und importieren Sie die Datei dann wieder in den Batch Editor.

Beispiele für korrekt formatierte Dateien entnehmen Sie bitte dem Batch-Ordner im Beispielprojekt.

Die Informationen in einer Chargen-Datei können auch zur Verwendung mit anderen Anwendungen exportiert werden, z. B. mit Microsoft Excel, Microsoft Access und bestimmten LIMS-Softwareanwendungen (Labor-Informations- und Management-System).

Festlegen von Quantifizierungsdetails im Batch Editor (optional)

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

Die entsprechenden Spalten **Internal Standard** und **Standard** werden in der Registerkarte „Quantitation“ entsprechend der auf der Registerkarte „Sample“ ausgewählten Quantifizierungsmethode angezeigt.

1. Öffnen Sie mit einer im Batch Editor-Fenster geöffneten Chargendatei die Registerkarte „Quantitation“.
2. Wählen Sie das Set mit den Proben.
3. Wählen Sie einen **Quant Type**, **Dilution Factor** und **Weight/Volume** für alle Proben aus der Liste in der Zelle aus.
4. Geben Sie (falls erforderlich) in die Spalte **Analyte** die Analyt-Konzentration ein.
5. Geben Sie (falls erforderlich) in die Spalte **Internal Standard** die Konzentration des internen Standards ein.
6. Wiederholen Sie diesen Vorgang für jedes Set in der Charge.

Benutzer können die in einer Datei enthaltenen Informationen als Tabelle oder Diagramm anzeigen. Grafische Daten werden entweder als Chromatogramm oder als Spektrum dargestellt. Die Daten in jedem dieser Formulare können als Tabelle aus Datenpunkten angezeigt und es können verschiedene Sortiervorgänge mit den Daten durchgeführt werden.

Die Software speichert das TIC und die Methodendaten in wiff-Dateien und die Spektraldaten in wiff.scan-Dateien. Zum Öffnen der Datendatei erfordert die Software sowohl .wiff- als auch .wiff.scan-Dateien. Zudem kann die Software .txt-Dateien öffnen, die Daten einer einzigen Probe enthalten. Wenn eine Datendatei in der Software geöffnet wird, werden in Abhängigkeit von der Art des durchgeführten Experiments verschiedene Teilfenster angezeigt.

Wird das Kontrollkästchen „MCA“ im Tune Method Editor aktiviert, dann öffnet die Datendatei ein Massenspektrum. Wird das Kontrollkästchen „MCA“ nicht aktiviert, dann wird ein „Total Ion Chromatogramm“ (TIC) durch die Datendatei geöffnet. Benutzer können zunächst einen Bereich auswählen und dann im TIC-Fenster auf eine bestimmte Zeit doppelklicken, um das Spektrum für diesen Bereich zu zeigen.

Chromatogramme

Ein Chromatogramm zeigt die Mengenvariation im Verhältnis zur Zeit in einem wiederholten Experiment. Beispielsweise, wenn die Programmierung des Massenspektrometers vorgibt, dass ein bestimmter Satz von spektrometrischen Scans mehrmals zu wiederholen ist. Die Chromatographiedaten sind fortlaufend, selbst wenn die Intensität der Daten Null beträgt. Chromatogramme werden nicht direkt vom Massenspektrometer, sondern aus Spektren generiert.

Im Chromatogramm wird die Intensität in Zählimpulsen pro Sekunde (Counts per Second – cps) auf der Y-Achse gegenüber der Zeit auf der X-Achse angezeigt. Peaks werden automatisch gekennzeichnet.

Im Falle von LC/MS wird ein Chromatogramm oft als zeitabhängige Funktion dargestellt. Der Zeitpunkt, zu der ein bestimmter Scan erstellt wurde, lässt sich von der Scan-Nummer ableiten.

Ein Chromatogramm liefert bei Verwendung einer LC-Säule in der Regel einen zeitabhängigen allgemeinen Überblick über die Daten. Es liefert jedoch keine Informationen über die Komponenten eines Peaks. Während zum Beispiel ein Chromatogramm nur einen Peak anzeigen könnte, kann dieser Peak mehr als nur eine Verbindung, d. h. unterschiedliche Massen, repräsentieren.

Die chromatographischen Daten können sich sowohl hinsichtlich der Zeit als auch der Intensität ändern, wenn sich die chromatographischen Bedingungen in einer bestimmten Probe ändern.

Spektren

Ein Spektrum besteht aus den Daten, die direkt vom Massenspektrometer erfasst werden, und repräsentiert normalerweise die Zahl der mit einem bestimmten Masse-zu-Ladungs-Verhältnis (m/z) erkannten Ionen. Es wird als Diagramm mit den m/z -Werten auf der X-Achse und der Intensität (cps) auf der Y-Achse dargestellt.

Bei MRM-Spektren wird die Intensität mit zwei Massen in Beziehung gesetzt, der Vorläuferionen-Masse (Q1) und der Produktionen-Masse oder -Massen (Q3).

Wenn die Daten als Spektrum dargestellt werden, erhält man massenspezifische Informationen zu einer Verbindung. Ein Spektrum liefert die m/z -Werte für die Ionen, die einem bestimmten chromatographischen Peak entsprechen. Diese Ionen können verwendet werden, um weitere spezifische Informationen zu gewinnen. Beispiel: Ein Spektrum zeigt alle Massen, aus denen ein Peak zusammengesetzt ist, einschließlich der Intensität der einzelnen Massen.

Die spektralen Intensitäten könnten sich ändern, aber der m/z -Wert bleibt gleich, weil sich die Masse einer Verbindung nicht ändert.

Mann kann Spektraldaten auf zwei Arten erzeugen:

- Wenn nur ein Scan erfasst oder MCA zur Erfassung verwendet wird, werden die Daten als Spektrum dargestellt.
- Aus einem Chromatogramm.

Hintergrundsubtraktion

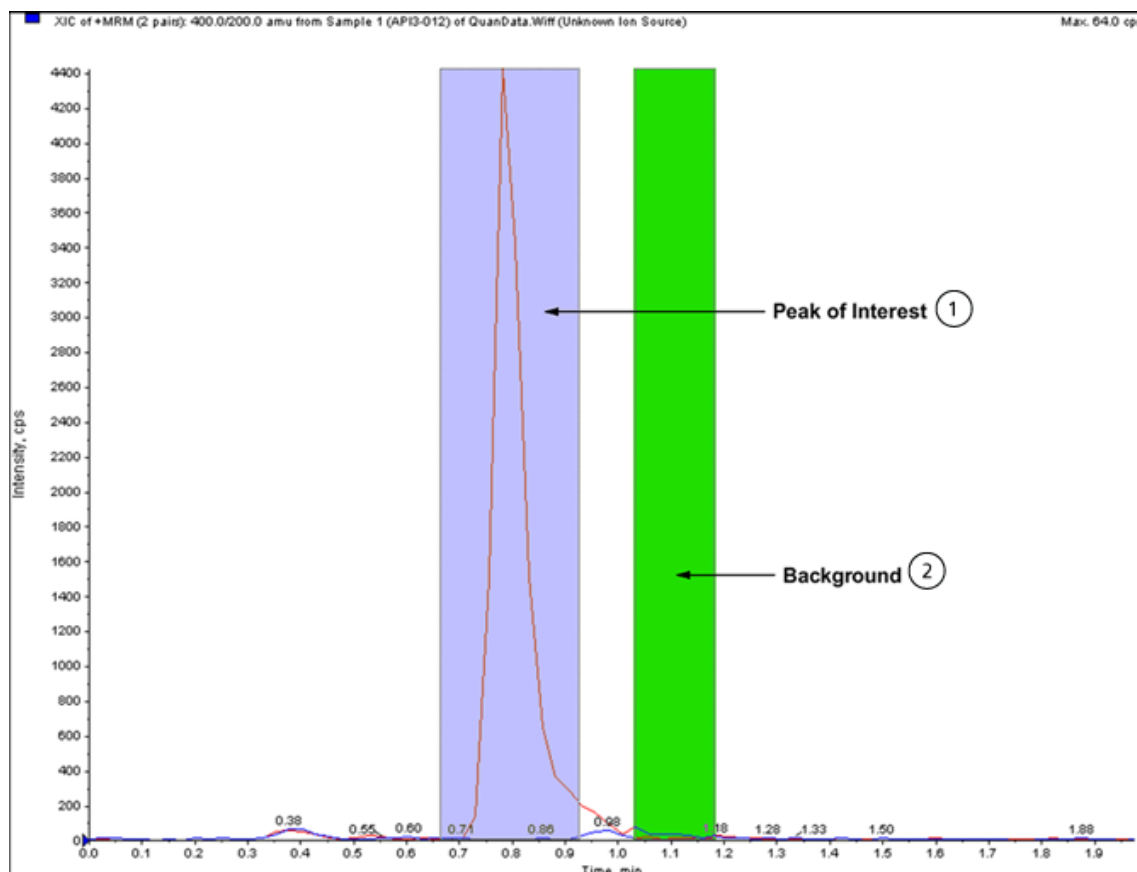
Hintergrundsubtraktionen reduzieren die Menge an Rauschen in einem Spektrum, indem entweder ein oder zwei Bereiche mit Rauschen von dem Bereich, der einen Peak enthält, subtrahiert werden. Benutzer können die Bereiche unabhängig voneinander verschieben oder miteinander verkoppeln und als eine Einheit innerhalb des Diagramms verschieben, um die Peak-Isolierung zu optimieren oder einen anderen Peak zu isolieren. „Locked Background Subtract“ ist die Voreinstellung. Die Software bietet verschiedene Methoden der Hintergrundsubtraktion.

Background Subtract: Mithilfe der Hintergrundsubtraktion können Benutzer relevante Peaks isolieren. Benutzer können bis zu zwei ausgewählte Bereiche des Peaks markieren und subtrahieren. Benutzer können ihre Bereiche auch sperren und im Diagramm verschieben, um die Peak-Isolierung zu optimieren oder einen weiteren Peak zu isolieren.

Durchführen einer Hintergrundsubtraktion für ein Chromatogramm

1. Öffnen Sie eine Datei.
2. Wählen Sie einen Hintergrundbereich im Chromatogramm.
3. Drücken Sie **Shift** und wählen Sie dann einen anderen Hintergrundbereich.

Abbildung 5-1: Extrahierter Ionenstrom



Element	Beschreibung
1	Interessierender Peak
2	Hintergrund

- Klicken Sie zum Festlegen des Subtraktionsbereichs auf **Explore > Background Subtract > Set Subtract range**.
- Wählen Sie den relevanten Peak.
- Klicken Sie auf **Explore > Background Subtract > Perform Background Subtract**. Der Hintergrund wird vom Peak subtrahiert und ein neues Spektrum wird erzeugt.
- Um einen weiteren Peak zu isolieren, ziehen Sie die gesperrten Bereiche im Chromatogramm und wiederholen Sie dann die Hintergrundsubtraktion.

Tipp! Um den Hintergrundsubtraktionsbereich zu löschen, klicken Sie auf **Explore > Background Subtract > Clear Subtract Range**.

- Zum Speichern des Spektrums nach Hintergrundsubtraktion als verarbeitete Datei klicken Sie auf **File > Save Processed Data File**.

Entsperren der Bereiche

Voraussetzung
<ul style="list-style-type: none">Der ausgewählte Subtraktionsbereich ist gesperrt.

Klicken Sie auf **Explore > Background Subtract > Subtract Range Locked**.

Die Bereiche werden entsperrt und können unabhängig voneinander verschoben werden.

Basisliniensubtraktion

Bei der Basisliniensubtraktion wird eine Konstante oder ein langsam variierender Versatz aus einem Datensatz entfernt. Diese Funktion ist hilfreich zum Auffinden kleiner Peaks, die durch Rauschen verdeckt werden. Die Software nutzt den folgenden Algorithmus bei der Durchführung einer Basisliniensubtraktion.

- Jeder Datenpunkt in dem Datensatz wird als Mittelpunkt eines Fensters (in Masse oder Zeit) mit benutzerdefinierbarer Breite betrachtet, gemessen in AME oder Minuten.
- Die Mindestwerte auf beiden Seiten des aktuellen Datenpunktes (Minimum) innerhalb des Fensters werden ermittelt.
- Eine gerade Linie wird zwischen die zwei Minima eingefügt und die Höhe (Intensität) des aktuellen Datenpunktes oberhalb der Linie wird berechnet. Die Endpunkte der Daten werden als Minima betrachtet.
- Der Datenpunkt wird durch den neuen berechneten Wert ersetzt.

Rechner

Verwenden Sie einen Rechner, um Berechnungen anhand erfasster Daten durchzuführen. Obwohl es sich bei dem Rechner um ein separates Fenster handelt, wird er mit der aktiven Grafik der Software verbunden.

Die folgenden Rechner sind verfügbar:

- [Rechner „Elemental Composition“](#)
- [Rechner „Hypermass“](#)
- [Rechner „Elemental Targeting“](#)
- [Rechner „Mass Property“](#)
- [Rechner „Isotopic Distribution“](#)

Zwischen den verschiedenen Fenstern der Rechner besteht die Möglichkeit, etwas aus einem Textfeld auszuschneiden und in ein anderes Textfeld einzufügen. Daten können ebenfalls von jedem Rechner ausdruckt werden, indem man auf das **Print**-Symbol in der linken oberen Ecke des Fensters klickt. Klicken Sie auf Hilfe, um weitere Informationen über die Verwendung von Rechnern zu erhalten.

Die Daten der Rechner „Elemental Composition“, „Mass Property“ und „Isotopic Distribution“ können in eine separate Datei exportiert werden. Verwenden Sie den Rechner „Elemental Targeting“, um die Daten im aktiven Diagramm zu verändern. Die Daten der Rechner „Hypermass“ und „Isotopic Distribution“ können ein aktives Spektrum überlagern.

Tipp! Stellen Sie die Präzision der Rechnerdaten auf der Registerkarte „Calculators“ des Dialogfeldes „Appearance Options“ ein. Klicken Sie auf **Tools > Settings > Appearance Options**, um das Dialogfeld zu öffnen.

Rechner „Elemental Composition“

Basierend auf einem gewünschten Masse-zu-Ladung-Verhältnis bestimmt der Rechner „Elemental Composition“ potenzielle Molekül- oder Aminosäurezusammensetzungen. Geben Sie dieses Verhältnis manuell ein oder wählen Sie es aus einem aktiven Spektrum aus. Dieser Rechner erstellt eine Tabelle mit den möglichen Element- oder Aminosäurezusammensetzungen, die die relevante Masse und die entsprechenden Eigenschaften ergeben.

Geben Sie Parameter wie Toleranz, Elektronenzustand und Anzahl der Ladungen ein bzw. wählen Sie diese aus. Benutzer können ebenfalls eine Liste der möglichen Elemente eingeben und die Anzahl für jedes einzelne Element begrenzen.

Rechner „Hypermass“

Der Rechner „Hypermass“ bestimmt die Verteilung einer mehrfach geladenen Hülle basierend auf einer ungeladenen Masse. Benutzer können die ungeladene Masse auswählen, einschließlich des Addukts und dessen Polarität.

Der Rechner zeigt eine grafische Darstellung der „Hypermass“-Serie, die das aktive Spektrum überlagern kann. Eine Liste der „Hypermass“-Daten ist ebenfalls verfügbar.

Rechner „Elemental Targeting“

Der Rechner „Elemental Targeting“ reduziert das Datenspektrum basierend auf einer bestimmten Vorlage, insbesondere basierend auf einer der Isotopenverteilungen entsprechenden Vorlage. Er kann ebenfalls ein MS-Datenspektrum nach einem bestimmten Peak-Muster durchsuchen, das entweder als Formel oder als Isotopenverteilung eingegeben werden kann.

Wenn der Rechner eine Entsprechung findet, erstellt er eine reduzierte Abbildung, die ausschließlich Daten des vorgegebenen Musters enthält. Für ein Spektrum entfernt der Rechner alle Daten, die nicht dem Muster entsprechen. Für ein Chromatogramm berechnet der Rechner das Elementenziel für jedes der zugrunde liegenden Spektren und erstellt jeden Punkt im Chromatogramm auf Grundlage dieser neuen Spektren neu.

Rechner „Mass Property“

Der Rechner „Mass Property“ bestimmt verschiedene Eigenschaften, z. B. genaue Masse, durchschnittliche Masse, Massengenauigkeit und Massendefekt der relevanten Masse. Die von diesem Rechner generierten Ergebnisse sind abhängig von der Anzahl der ausgefüllten Eingabefelder.

Rechner „Isotopic Distribution“

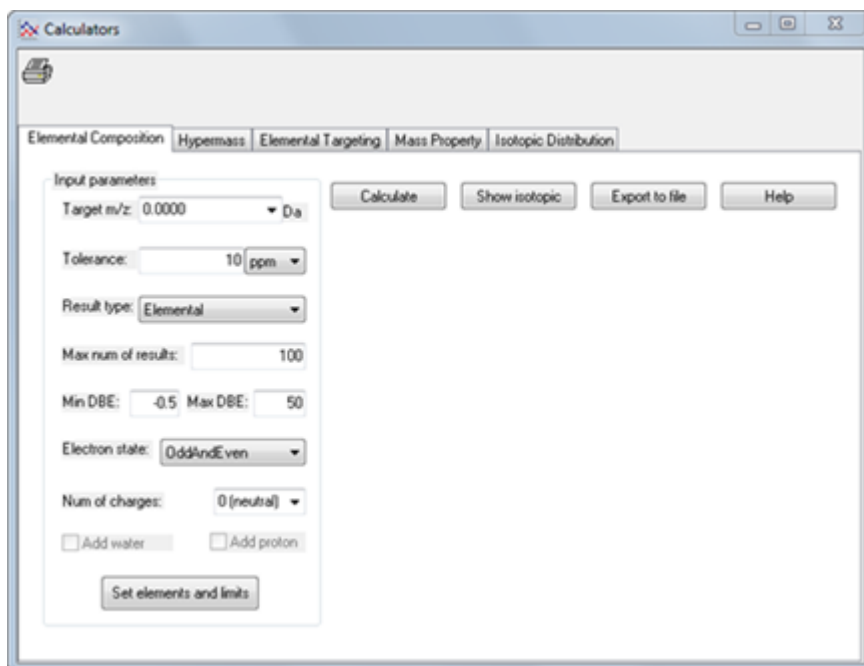
Der Rechner „Isotopic Distribution“ bestimmt die Isotopenverteilung basierend auf der eingegebenen Formel. Dies gibt Benutzern die Möglichkeit, zwischen Verbindungen mit den gleichen Massen zu unterscheiden, basierend auf relativen Isotopenintensitäten.

Die berechnete Isotopenverteilung kann als Grafik oder in Textform im Fensterbereich „Isotopic Distribution“ angezeigt werden, das aktive Spektrum überlagern oder in eine separate Datei exportiert werden.

Zugriff auf die Rechner

Klicken Sie auf **Tools > Calculators**.

Abbildung 5-2: Dialogfeld „Calculators“



Das Dialogfeld „Calculators“ öffnet sich.

Zentrierte Peaks

Die Berechnung des Strichspektrums eines Peaks wandelt Peak-Verteilungswerte in einen einzigen Wert von m/z und Intensität um und repräsentiert den Peak. Die Zentrierung von im Profil-Modus gesammelten Daten vereinfacht die Daten und verringert die Dateigröße. Die Zentrierung von Daten liefert genauere Peak-Zuordnungen und reduziert die Menge von Daten, entfernt aber auch Informationen über die Peak-Form.

Der Strichspektrum-Algorithmus wandelt Peaks in Einzelwerte unter Verwendung eines intensitätsgewichteten Durchschnittswertes um, um so den Schwerpunkt eines Peaks zu berechnen. Der Algorithmus erzeugt eine Liste von Peaks mit Parametern, wie in der folgenden Tabelle dargestellt.

Tabelle 5-1: Peak-Parameter

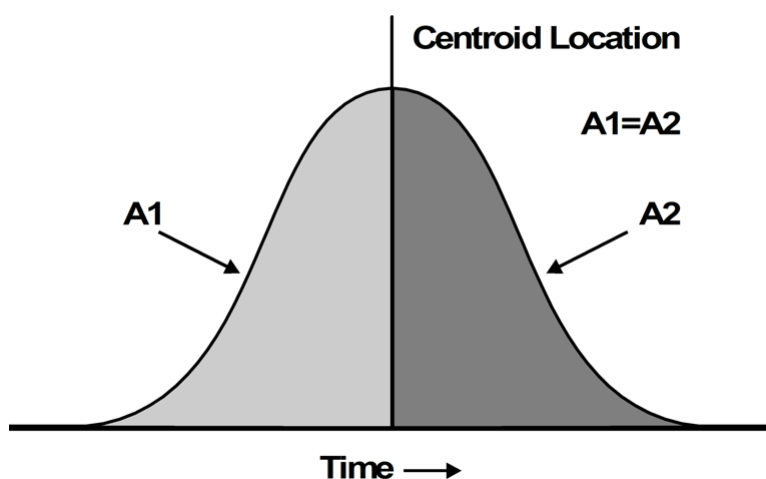
Parameter	Definition
Strichspektrumwert	Der Wert zentrierter Daten als Masse- oder Zeiteinheiten.
Intensität	Die Intensität eines jeden Peaks in cps (Zählimpulsen pro Sekunde).
Breite	Die Breite eines zentrierten Peaks in Da.

Die Daten werden automatisch als Strichspektrum berechnet, wenn diese zu einer Bibliothek hinzugefügt werden oder eine Suche durchgeführt wird.

Berechnen des Strichspektrums eines Peaks

1. Wählen Sie einen Bereich mit einem Spektrum.
Durch die Berechnung des Strichspektrums des Peaks wird die Darstellung des vorhandenen Diagramms geändert. Um das Ergebnis mit den ursprünglichen Daten vergleichen zu können, erstellen Sie vor der Berechnung des Strichspektrums eine Kopie des Diagramms.
2. Klicken Sie auf **Explore > Centroid**.
Die Daten werden zentriert.

Abbildung 5-3: Zentroidierte Lage des Analyten



Datenanalyse

Benutzer können Dateien öffnen, die vorhandene Daten enthalten oder Daten, die derzeit erfasst werden. Alle experimentbezogenen Daten können außerdem in tabellarischer Form angezeigt werden. Das Tabellen-Teilfenster besteht aus zwei Registerkarten, der Registerkarte „Data List“ und der Registerkarte „Peak List“. Die Registerkarte „Data List“ enthält experimentbezogene Informationen, z. B. Erfassungsdauer und Scan-Intensität. Die

Registerkarte „Peak List“ enthält Peak-bezogene Informationen z. B. Peakhöhe, Peakfläche und Basislinientyp.

Gesamtionenchromatogramm

Ein Gesamtionenchromatogramm (TIC) wird erstellt, indem der Intensitätsbeitrag aller Ionen einer Serie von Massen-Scans summiert wird. Benutzer können das TIC verwenden, um den gesamten Datensatz in einem einzigen Fenster zu sehen. Er besteht aus den summierten Intensitäten aller Ionen in einem Scan, die als Funktion der Zeit in einem chromatographischen Bereich abgebildet werden. Wenn die Daten Ergebnisse aus mehreren Experimenten enthalten, kann der Benutzer für jedes Experiment einen separaten TIC und einen weiteren TIC erstellen, der die Summe aller Experimente darstellt. Das voreingestellte TIC, das die Summe aller Versuche darstellt, wird mit einem Splitter-Tool unterhalb der Mitte der x-Achse angezeigt.

Extrahiertes Ionenchromatogramm

Ein extrahiertes Ionenchromatogramm (XIC) wird erstellt, indem Intensitätswerte bei einem diskreten Massenwert oder Massenbereich aus einer Reihe von massenspektrometrischen Scans verwendet werden. Es zeigt das Verhalten einer bestimmten Masse oder eines bestimmten Massenbereiches als Funktion der Zeit. Die Intensität der Ionen oder die summierten Intensitäten aller Ionen in einem bestimmten Bereich werden in einem chromatographischen Teilfenster angezeigt.

Basispeak-Chromatogramm

Ein Basispeak-Chromatogramm (BPC) zeigt die Intensität des intensivsten Ions in jedem Zyklus als eine Funktion der Scan-Anzahl oder Retentionszeit. Es ist in den Fällen nützlich, in denen ein TIC von Rauschen so stark überlagert wird, dass es zu einem großen Versatz kommt und chromatographische Peaks nur schwer zu unterscheiden sind. Es ist auch hilfreich, zwischen gleichzeitig eluierenden Komponenten zu unterscheiden. BPCs kann man nur mit den Daten für eine bestimmte Periode und ein bestimmtes Experiment generieren.

Das Diagramm verwendet jedes Mal, wenn sich der Basispeak ändert, abwechselnd zwei Farben. Der Farbenwechsel bleibt erhalten, wenn die Daten durch Scrollen oder Zoomen bearbeitet werden. Informationen über die Auswahl der Farben in der Grafik finden Sie unter Hilfe.

Extrahiertes Wellenlängen-Chromatogramm

Ein extrahiertes Wellenlängen-Chromatogramm (XWC) ist ein Wellenlängen-Chromatogramm, das erzeugt wird, indem die Intensität einer bestimmten Wellenlänge oder die Summe der Absorption für mehrere Wellenlängenbereiche verwendet wird.

Diodenanordnungsdetektor

Benutzer können das Spektrum des Diodenanordnungsdetektors (Diode Array Detektor, DAD) für einen bestimmten Zeitpunkt oder eine Zeitspanne als Gesamtwellenlängen-Chromatogramm (Total Wavelength Chromatogram, TWC) anzeigen.

Gesamtwellenlängen-Chromatogramm

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

Überlagern von Diagrammen

Es können zwei oder mehrere Datensätze visuell verglichen werden, indem durch ähnliche Verfahren erstellte Diagramme überlagert werden. Jedes Spektrum unterscheidet sich durch die Farbe seiner Linien. Bei vollständigen Scan-Daten können Benutzer damit die Unterschiede zwischen mehreren Probenspektren visualisieren.

Wenn ein oder mehrere Teilfenster ausgewählt werden, wird jeder XIC in einem eigenen Teilfenster geöffnet.

Tipp! Um weniger als vier Diagramme im gleichen Teilfenster zu überlagern, drücken Sie auf **Ctrl**, klicken Sie mit der rechten Maustaste in ein Teilfenster und dann auf **Appearance Options**. Im Dialogfeld „Appearance Options“ auf der Registerkarte „Multiple Graph Options“ wählen Sie **Yes** bei den **Overlay Multiple Panes**-Feldern für **Spectrum** und **Chromatogram**.

1. Wählen Sie das erste Teilfenster, das überlagert werden soll.
2. Klicken Sie auf **Explore > Overlay**.
3. Klicken Sie in das zweite Teilfenster.

Die Diagramme werden überlagert und zeigen die beiden Linien in unterschiedlichen Farben.

Tipp! Zur Anzeige der Farbcodierung der überlagerten Diagramme klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Titelleiste des Fensters.

Wechseln des Zyklus zwischen überlagerten Diagrammen

1. Wählen Sie ein Teilfenster mit überlagerten Kurven.
2. Klicken Sie auf **Explore > Cycle Overlays**.
Die Ansicht ändert sich, so dass die nächste Kurve in der Reihe im Vordergrund angezeigt wird.

Überlagerungen addieren

Wenn sich mindestens zwei Kurven überlagern, können Benutzer diese zusammenfassen und eine neue Kurve erzeugen. Jeder Punkt auf der neuen Kurve ist die Summe der Punkte aus den Diagrammen. Die Zusammenfassung mehrerer Überlagerungen eines ähnlichen Datentyps kann die nachfolgende Verarbeitung einfacher und schneller machen.

Zum Beispiel können Benutzer mehrere XICs überlagern, zusammenfassen und dann die zusammengefasste Überlagerung glätten, um Rauschen zu entfernen.

Die Zusammenfassung von Überlagerungen ist dem Erstellen eines TICs ähnlich, bietet aber den Vorteil, dass man bestimmen kann, welche Diagramme überlagert werden. Wenn z. B. 10 Versuche angezeigt werden, dann wird das TIC alle 10 Experimente aufaddieren. Nach dem Summieren der Überlagerungen haben Benutzer die Möglichkeit, nur neun der zehn überlagerten Diagramme hinzuzufügen. Dieses Verfahren kann verwendet werden, wenn die Daten in einem Experiment nur aus Rauschen bestehen.

1. Überlagern Sie die zusammenzufassenden Diagramme.
2. Klicken Sie auf **Explore > Sum Overlays**.
Die überlagerten Graphen werden addiert.

Anpassen von Diagrammen

Diagramme können anhand eines voreingestellten Stils für Beschriftungen, Bildunterschriften oder Texten auf Diagrammen und Chromatogrammen angepasst werden. Benutzer können die Schriftarten für die Beschriftung von Peaks und Achsen und die Farben für die Linien wählen. Benutzer können außerdem Achsenbeschriftungen, Beschriftungsarten und die Präzision für Peaks hinzufügen.

Hinzufügen von Bildunterschriften zu einem Graph

Verwenden Sie Bildunterschriften zum Kennzeichnen von relevanten Peaks oder wichtigen Punkten auf dem Diagramm. Wenn eine Beschriftung neben einen Peak platziert wird, dann bleibt die Beschriftung bei diesem Peak, wenn das Diagramm vergrößert oder verkleinert wird. Bildunterschriften bleiben bei der ursprünglichen Probe, wenn Benutzer zwischen den Proben in einer Datei navigieren. Eine Beschriftung enthält eine Zeile mit Text mit maximal 128 Zeichen.

1. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf ein Spektrum und klicken dann auf **Add Caption**.
Das Dialogfeld „Add Caption“ wird geöffnet.
2. Geben Sie im Feld **Caption** den Text ein.
3. Um die Größe und den Stil der Beschriftung zu ändern, klicken Sie auf **Font**.
4. Um die Beschriftung zu platzieren, klicken Sie auf **OK**.

Tipp! Wenn die Position der Beschriftung nicht zufriedenstellend ist, ziehen Sie diese zu einer anderen Position. Die Beschriftung bleibt beim Vergrößern oder Verkleinern des Diagramms an der gleichen Stelle in Bezug auf die X- und Y-Achse. Wenn Sie eine Bildunterschrift bearbeiten oder löschen wollen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Bildunterschrift und dann auf den entsprechenden Befehl.

Hinzufügen von Text zu einem Diagramm

Verwenden Sie die Textfunktion, um mehrere Zeilen mit Informationen zu einem Diagramm hinzuzufügen. Anders als bei Beschriftungen, die einem bestimmten Peak zugeordnet sind

und sich beim Vergrößern oder Verkleinern mit bewegen, bleiben Textbeschriftungen beim Ändern der Ansicht auf den Diagrammen an ihrer ursprünglichen Position. Sie bleiben nicht bei der ursprünglichen Probe, wenn Benutzer zwischen den Proben in einer Datei navigieren.

1. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Diagramm und klicken dann auf **Add User Text**.
Der Dialog „Add User Text“ wird geöffnet.
2. Im Feld **User Text** geben Sie den Text ein.
3. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Center Text**, um den Text zu zentrieren.
4. Um die Größe und den Stil der Beschriftung zu ändern, klicken Sie auf **Font**.
5. Um den Text einzufügen, klicken Sie auf **OK**.

Tipp! Wenn die Position des Textes nicht zufriedenstellend ist, ziehen Sie diesen zu einer anderen Position. Wenn Sie einen Text bearbeiten oder löschen wollen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Text und wählen Sie dann den entsprechenden Befehl.

Compound Database (Datenbank für chemische Verbindungen)

Die Datenbank für chemische Verbindungen speichert Informationen über Verbindungen, einschließlich der Optimierungsspezifikationen. Verwenden Sie die Datenbank für chemische Verbindungen, wenn viele Proben vorhanden sind und eine große Anzahl an Verbindungen schnell optimiert werden muss. Das Fenster der Datenbank für chemische Verbindungen speichert optimierte Bedingungen für Verbindungen, die für die Verarbeitung von Proben abgerufen werden können. Weitere Informationen finden Sie im Dokument: *Hilfe*.

Konturdiagramm

Ein Konturdiagramm ist eine farbkodierte Darstellung eines kompletten Datensatzes, das mit Hilfe von Farben eine dritte Dimension im Diagramm darstellt. In einem Konturdiagramm eines TICs stellt die X-Achse die Retentionszeit oder Scannummer dar, die Y-Achse repräsentiert die Masse und die Farbe die Intensität der Daten an diesem Punkt. In einem Konturdiagramm eines TWCs für DAD-Daten repräsentiert die X-Achse die Retentionszeit oder Scannummer, die Y-Achse repräsentiert die Wellenlänge und die Farbe repräsentiert den Absorptionsgrad. „Contour Plot“ ist ein Tool, das nach der Erfassung eingesetzt wird und funktioniert bei der Echtzeit-Scan-Erfassung nicht.

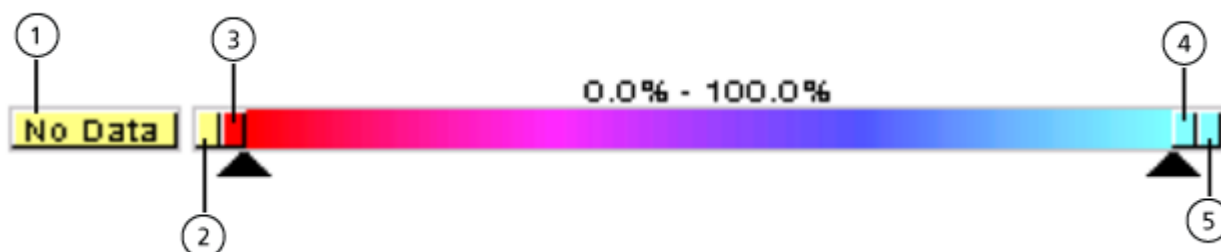
Hinweis: „Contour Plot“ unterstützt MI- oder MRM-Scans nicht, DAD-Scans werden jedoch unterstützt.

Farbe ist die dritte Achse in einem Konturdiagramm und repräsentiert die Intensität oder den Absorptionsgrad. Benutzer können die hohen und niedrigen Intensitäts- oder Absorptionswerte in einem Konturdiagramm über Reglerdreiecke auf dem Farbbalken über dem Konturdiagramm ändern. Die Prozent-Parameter über dem Konturdiagramm-Fenster zeigen die Werte an, die in den niedrigen und hohen Schiebereglern eingestellt sind.

Die tatsächlichen Werte basieren auf einem Prozentsatz der maximalen Intensität oder Absorption im ausgewählten Bereich. Der Wert wird in der oberen rechten Ecke des Fensters „Contour Plot“ angezeigt.

Die Steuerelemente, die in der folgenden Abbildung gezeigt werden, ändern die Farben in einem Konturdiagramm.

Abbildung 5-4: Schaltflächen, die die Farben in einem Konturdiagramm regeln



Element	Beschreibung
1	Keine Daten
2	Unter niedrigen Daten
3	Niedrige Daten
4	Hohe Daten
5	Über hohen Daten

Benutzer können die Farben in einer „Contour Plot“-Darstellung definieren, um einen besseren Kontrast zu erzielen und Datenspezifikationen entsprechend ihren Bedürfnissen anzuzeigen. Zum Beispiel kann die Einstellung der Intensität/Wellenlänge und das Ändern der Farbe für die Werte **Below Low Data** und **Above High Data** Hintergrundrauschen in einem Konturdiagramm eliminieren.

Die **Below Low Data**- und **Above High Data**-Schaltflächen verkleinern und erweitern sich auf dem Farbbalken, wenn die Schieberegler bewegt werden. Wenn die Farben in einem Konturdiagramm geändert werden, dienen die neuen Farben als voreingestellte Farben für alle nachfolgenden Diagramme.

Tabelle 5-2: Rechtsklick-Menü für „Contour Plot Panes“

Befehl	Funktion
Show DAD Spectrum	(DAD-Spektrum anzeigen) Öffnet ein neues Teilfenster mit dem DAD-Spektrum.
Extract Wavelengths (Use Range)	(Wellenlängen extrahieren (Bereich verwenden)) Extrahiert bis zu drei Wellenlängenbereiche von einem DAD-Spektrum und zeigt ein XWC.

Tabelle 5-2: Rechtsklick-Menü für „Contour Plot Panes“ (Fortsetzung)

Befehl	Funktion
Extract Wavelengths (Use Maximum)	(Wellenlängen extrahieren (Maximum verwenden)) Extrahiert Wellenlängenbereiche mit maximalen Wellenlängen.
Zoom to selection	(Zoom auf Auswahl) Vergrößert den ausgewählten Bereich.
Add User Text	(Benutzertext hinzufügen) Fügt ein Textfeld an der Position des Mauszeigers ein.
Undo Zoom	(Vergrößern oder verkleinern rückgängig machen) Setzt das Diagramm wieder auf den ursprünglichen Maßstab.
Delete Pane	(Teilfenster löschen) Löscht das ausgewählte Teilfenster.
Show Cross-Hair	(Fadenkreuz anzeigen) Zeigt das Fadenkreuz (nm/min).

Anzeigen eines Konturdiagramms

Das Konturdiagramm kann erst nach der Erfassung angezeigt werden. Benutzer können ein Konturdiagramm aus TIC-, XIC-, TWC- oder XWC-Diagrammen anzeigen. TICs und XICs sind für alle wiff-Datendateien verfügbar. TWCs und XWCs sind nur für Daten verfügbar, die durch DAD oder PDA erfasst wurden.

1. Im „Explore“-Modus öffnen Sie eine Datei als TIC-, XIC-, TWC- oder XWC-Grafik.
2. Markieren Sie den Bereich, der im Konturdiagramm angezeigt werden soll. Wenn keine Auswahl getroffen wird, wird der gesamte Bereich angezeigt.
3. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show Contour Plot**.
Ein Konturdiagramm des ausgewählten Bereichs wird in einem separaten Fenster geöffnet.

Tipp! Um ein Teilfenster „Contour Plot“ zu schließen, klicken Sie mit der rechten Maustaste in das Teilfenster „Contour Plot“ und anschließend auf **Delete Pane**.

Auswählen eines Bereichs in einem Konturdiagramm

Zum Vergrößern der Ansicht einer bestimmten Auswahl oder zum Anzeigen des entsprechenden Massenspektrums für diese Auswahl wählen Sie eine der folgenden Vorgehensweisen:

- Um einen Standardbereich in einer Box auszuwählen, ziehen Sie den Mauszeiger und erzeugen Sie ein Rechteck um einen Bereich im Konturdiagramm.
- Um eine vertikale Auswahl zu treffen, drücken Sie **Ctrl** und ziehen Sie dann den Mauszeiger vertikal.

- Um eine horizontale Auswahl zu treffen, drücken Sie die Leertaste und ziehen Sie den Mauszeiger horizontal.

Festlegen der Intensität und des Absorptionsgrads in einem Konturdiagramm

Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:

- Um die Werte für eine niedrige Intensität/Absorptionsgrad in einem Konturdiagramm einzustellen, ziehen Sie den linken dreieckigen Regler aus der Farbleiste über dem Konturdiagramm in die gewünschte Position.

Das Konturdiagramm passt die Farbe der Werte unterhalb der Einstellung automatisch an und zeigt an, dass sie sich außerhalb des Bereichs befinden.

- Um die Werte für eine hohe Intensität/Absorptionsgrad in einem Konturdiagramm einzustellen, ziehen Sie den rechten dreieckigen Regler aus der Farbleiste über dem Konturdiagramm in die gewünschte Position.

Das Konturdiagramm passt die Farbe der Werte oberhalb der Einstellung automatisch an und zeigt an, dass sie sich außerhalb des Bereichs befinden.

Ändern der Farben in einem Konturdiagramm

Tip! Mit der Palette „Define Custom Colors“ können Benutzer benutzerdefinierte Farben erstellen, um diese in einem Konturdiagramm zu verwenden.

1. Klicken Sie im Teilfenster „Contour Plot“ auf eine der Farbschaltflächen. Das Dialogfeld „Color“ wird geöffnet.

Hinweis: Es gibt fünf Schaltflächen, die die Farbe im Konturdiagramm steuern. Bei jeder dieser Schaltflächen wird der Name angezeigt, wenn der Cursor auf der Schaltfläche verbleibt. Dadurch wird sichergestellt, dass die korrekte Funktion geändert wird. Zusätzlich verkleinern und erweitern sich die „Below Low Data“- und „Above High Data“-Tasten auf dem Farbbalken, wenn der Benutzer die Schieberegler bewegt. Nachdem der Benutzer die Konturdiagrammfarben geändert hat, werden diese die Standardfarben für alle nachfolgenden Diagramme.

2. Klicken Sie auf eine Farbe.
3. Klicken Sie auf **OK**.
Die Grafik ändert sich, um die Farbänderung widerzuspiegeln.

Dynamic Background Subtraction-Algorithmus

Der Dynamic Background Subtraction-Algorithmus verbessert die Detektion von Vorläufer-Ionen in einem IDA-Experiment (Information Dependent Acquisition). Wenn der Algorithmus aktiviert wird, verwendet IDA zur Auswahl des relevanten Vorläufer-Ions für eine MS/MS-Analyse ein Spektrum, dessen Hintergrund subtrahiert wurde, anstatt den Vorläufer direkt aus dem Übersichtsspektrum zu wählen. Da dieser Prozess während einer LC-Analyse stattfindet, ermöglicht der Algorithmus den Nachweis von Spezies, wenn deren Signal an

Intensität zunimmt. Daher konzentriert sich dieser Algorithmus auf die Detektion und Analyse von Vorläufer-Ionen im ansteigenden Abschnitt bis hin zur Spitze eines LC-Peaks oder leicht darüber hinaus.

Fragment Interpretation

Mit dem Fragment Interpretation Tool können Benutzer MS/MS-Daten interpretieren. Das „Fragment Interpretation Tool“ generiert eine Liste der theoretischen Fragmentmassen aus einzelnen, nicht-zyklischen Bindungsspaltungen einer molekularen Struktur. Die molekulare Struktur kann im Zeichenprogramm eines Drittanbieters erstellt und anschließend als .mol-Datei gespeichert werden. Das Tool kann dann theoretische Listen mit Peaks im aktuellen Massenspektrum abgleichen. „Fragment Interpretation“ zeigt die theoretischen Fragmente in der Fragmentliste und vergleicht die Fragmentmassen mit den Peaks im Massenspektrum. Peaks oberhalb der Intensitätsschwelle und innerhalb der vom Benutzer definierten Massentoleranz (maximal 2 Da) der Fragmentmassen gelten als passend und werden in der Fragmentliste in Fettdruck angezeigt.

Hinweis: Das Fragment Interpretation Tool kann mit den folgenden Scantypen nicht verwendet werden:

- Vorläufer-Ion
- Neutralverlust
- Q1 Multi-Ionen-Scan
- Q3 Multi-Ionen-Scan
- Multiple Reaction Monitoring (MRM)

Verbinden des Fragment Interpretation Tools mit einem Spektrum

Wenn eine einzelne, nicht-zyklische Bindung in der molekularen Struktur ausgewählt ist, markiert das Fragment Interpretation Tool die zwei Fragmente, die bei der Spaltung der Bindung erzeugt werden und zeigt dann die passenden Peaks im damit verknüpften Spektrum an.

Bei der Anzeige von Multi-Spektrum-Fenstern stellt das Fragment Interpretation Tool eine Verbindung mit dem aktiven Spektrum her. Enthält die Datei mehr als eine Probe, dann stellt das Fragment Interpretation Tool eine Verbindung mit dem aktiven Spektrum her.

Wenn ein Spektrum bei geöffnetem Fragment Interpretation Tool geöffnet wird, stellt das aktive Teilfenster automatisch eine Verbindung mit dem offenen Spektrum her.

1. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. In der unteren rechten Ecke des Fragment Interpretation Teilfensters klicken Sie auf die Schaltfläche „Connect“.
Der Zeiger ändert sich zum Verbindungs-Tool.

3. Klicken Sie auf das Spektrumdiagramm, das mit dem Fragment Interpretation Tool verbunden werden soll.

Die Anzeige für verknüpfte Diagramme in der unteren linken Ecke enthält den Namen des Diagramms, mit dem das Teilfenster „Fragment Interpretation“ verknüpft ist. Die Verbindung wird unterbrochen, wenn entweder die Grafik oder die Fragment Interpretation geschlossen wird. Wenn die verknüpfte .wiff-Datei mehr als eine Probe enthält, wird das Teilfenster „Fragment Interpretation“ automatisch aktualisiert, wenn Benutzer durch die Proben blättern.

Zuordnen von Fragmenten zu Peaks

1. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Wählen Sie mit einer im Teilfenster „Fragment Interpretation“ geöffneten .mol-Datei eine Zelle in der Fragmentliste aus, die in Fettschrift dargestellt wird.
Im Spektrum markiert die Software den passenden spektralen Peak in der Farbe, die in der Registerkarte „Options“ ausgewählt wurde. In der molekularen Struktur wird die Bindung markiert.
3. Wenn eine Zeile angeklickt wird, die mehr als ein passendes Fragment enthält, wird der Spektral-Peak, der seiner monoisotopischen Masse am nächsten ist, im Massenspektrum in der Farbe markiert, die in der Registerkarte „Options“ festgelegt wurde.

Auswählen einer Bindung in einer molekularen Struktur

1. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Mit einer im Teilfenster „Fragment Interpretation“ geöffneten mol-Datei klicken Sie auf eine einzelne nicht-zyklische Bindung in der molekularen Struktur.

Die beiden resultierenden Fragmente werden in der Fragmentliste markiert angezeigt. Die Massen der beiden Fragmente werden auf beiden Seiten der Bindung angezeigt.

Wenn ein Spektrum angeschlossen ist, zeigt das Fragment Interpretation Tool alle übereinstimmenden Peaks auf der Kurve. Wenn ein Fragment in der Liste ausgewählt und das Fragment einem Peak zugeordnet wurde, vergrößert das Fenster „Fragment Interpretation“ diesen Peak.

Anzeigen von Isotopen

Das Fragment Interpretation Tool kann die theoretische Isotopenverteilung für einen Peak anzeigen, der einem Fragment in der Fragmentliste entspricht.

1. Klicken Sie auf **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Im Teilfenster „Fragment Interpretation“ klicken Sie auf die Registerkarte **Options**.
3. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Show Isotopes**.
4. Klicken Sie auf **Apply**.
5. Wählen Sie aus der Fragmentliste ein Fragment aus, das einem Peak entspricht. Die Isotopenverteilung für passende Peaks wird im Spektrum angezeigt.

Anzeigen einer Formeldifferenz in einem Spektrum

Zwischen zwei hypothetischen Fragmenten kann die Formel- und monoisotopische Massendifferenz angezeigt werden. Die Formeldifferenz wird bei Auswahl von zwei Peaks angezeigt. Die Formel- und monoisotopische Massendifferenz wird angezeigt, wenn zwei Fragmente oder zwei einzelne nicht-zyklische Bindungen ausgewählt werden.

1. Klicken Sie auf einen Fragment-Peak.
2. Drücken Sie **Shift** und klicken Sie dann auf einen anderen Fragment-Peak.
Wenn die Formeldifferenz einem Fragment aus der Fragmentliste entspricht, wird das Fragment in der Liste markiert. Andernfalls wird die Formeldifferenz zwischen den passenden Fragmenten der Peaks in einem Meldungsfeld angezeigt.

Anzeigen einer Formeldifferenz in der Fragmentliste

1. Klicken Sie auf die Zeilennummer für ein Fragment.
2. Drücken Sie **Ctrl** und klicken Sie dann auf ein weiteres Fragment.
Die Formel und monoisotopische Massendifferenz wird in einem Meldungsfeld angezeigt, wenn die Fragmente verwandt sind.

Anzeigen einer Formeldifferenz in einer molekularen Struktur

1. Klicken Sie auf eine einzelne nicht-zyklische Bindung. Das voreingestellte Fragment (der beiden markierten Fragmente) wird ausgewählt. Um das andere Fragment der gespaltenen Bindung auszuwählen, drücken Sie **Ctrl** und klicken dann auf die Bindung.
2. Wählen Sie eine zweite nicht-zyklische Bindung. Um das voreingestellte Fragment auszuwählen, drücken Sie **Shift** und klicken dann auf die Bindung. Um das andere Fragment der gespaltenen Bindung auszuwählen, drücken Sie **Ctrl + Shift** und klicken Sie dann auf die Bindung.
„Fragment Interpretation“ berechnet die Formel und monoisotopische Massendifferenz zwischen dem Fragment, das in Schritt 1 ausgewählt wurde, und dem Fragment, das in Schritt 2 ausgewählt wurde, wenn die Fragmente verwandt sind. Die Formel- und monoisotopische Massendifferenz wird in einem Meldungsfeld angezeigt.

IDA-Explorer

Der Information Dependent Acquisition (IDA)-Explorer wird verwendet, um Daten anzuzeigen, die mit einer IDA-Methode erfasst wurden.

Auf der Registerkarte „IDA Explorer“ im Dialogfeld „Appearance Options“ können Sie den IDA-Explorer aus- und einschalten. Außerdem können in dieser Registerkarte die Spalten definiert werden.

Die linke Seite der Anzeige in der folgenden Abbildung zeigt die Massen, mit denen ein Produkt-Ionen-Scan durchgeführt wurde. In diesem Bereich können Benutzer die Masse, Intensität, Zeit und Stoßenergie von Ionen, mit denen Produkt-Ionen-Scans durchgeführt wurden, in einer Listen- oder Strukturansicht untersuchen. In der Listenansicht haben Sie die

Möglichkeit, die Liste durch Doppelklicken auf jede Spaltenüberschrift zu sortieren. Über das Dialogfeld „Appearance Options“ können Sie die Spalten der Listenansicht anpassen.

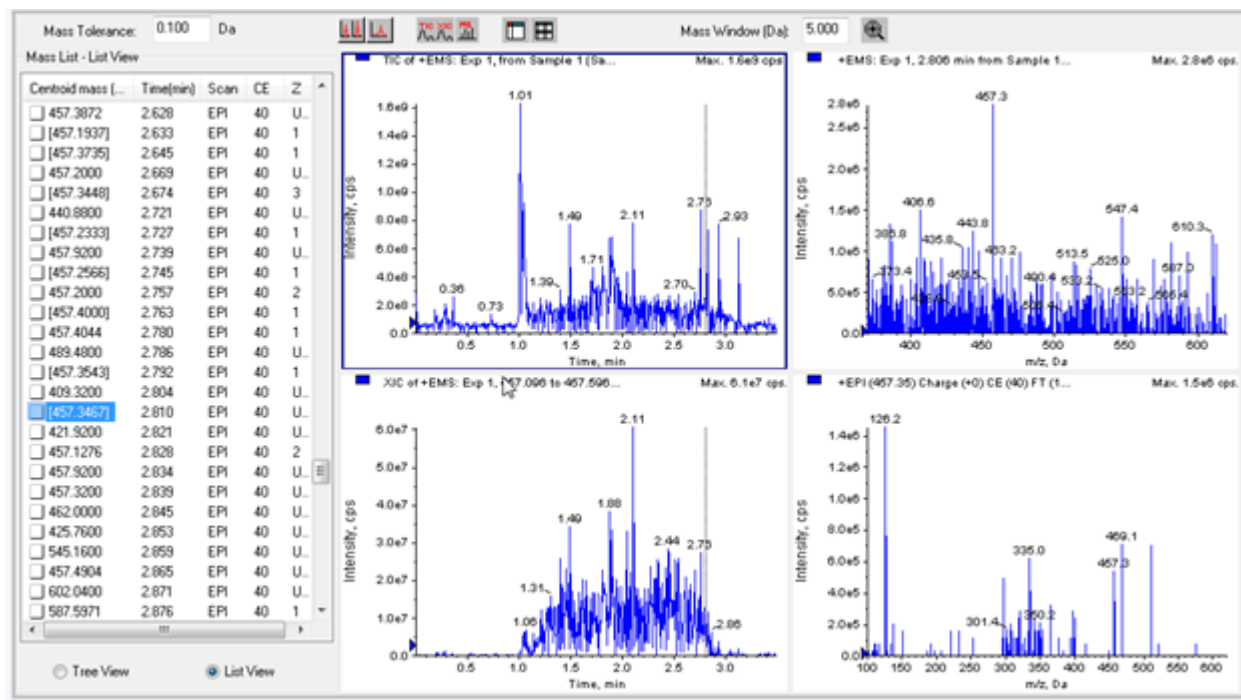
Auf der rechten Seite ist die Anzeige in vier Fensterbereiche unterteilt. Im linken oberen Teilfenster werden die Probe-TIC-Daten angezeigt. Im linken unteren Teilfenster wird der XIC der Masse angezeigt. Das obere rechte Teilfenster zeigt das Experiment oder das Experiment im Wechsel mit ER-Scans (Enhanced Resolution, erweiterte Auflösung) an. Im unteren rechten Teilfenster wird der Produkt-Scan angezeigt.

Die IDA-Anzeige führt alle Massen auf, mit denen Scans des Typs EPI (Enhanced Product Ion, Erweitertes Produkt-Ion) oder ER durchgeführt wurden. In der IDA-Anzeige können Benutzer folgende Aktionen ausführen:

- Eine Masse in der Listen- oder Strukturansicht anzeigen, um für diese Masse relevante Darstellungen anzuzeigen.
- Das Übersichtsspektrum, aus dem die Masse ermittelt wurde, und das Produktspektrum dieser Masse anzeigen.
- Das TIC des Vorläuferscans und das XIC für jede Masse anzeigen.

Hinweis: Klammern um eine Masse zeigen an, dass die Masse zusammengefasst wurde. Eine zusammengefasste Masse ist über eine Reihe von Zyklen fortlaufend. Wenn eine zusammengefasste Masse angezeigt wird, wird ein durchschnittliches Spektrum angegeben, das den Durchschnitt aller fortlaufender Spektren enthält.

Abbildung 5-5: IDA-Anzeige



Bibliotheksdatenbanken

Die Funktion „Library Search“ vergleicht unbekannte Spektren mit bekannten MS-Spektren in einer Bibliotheksdatenbank und erstellt eine Liste der möglichen Übereinstimmungen. Verwenden Sie „Library Search“, um eine Massenspektren-Datenbank zu erstellen und zu verwalten, die zum Suchen unbekannter Spektren und deren Abgleich mit in der Datenbank gespeicherten Massenspektren dient.

Mit „Library Search“ können Benutzer Folgendes tun:

- Den Inhalt der Bibliothek mit unbekannten Spektren vergleichen.
- Datensätze zur Bibliothek hinzufügen.
- Vorhandene Datensätze bearbeiten.

Bibliothekdaten können an folgenden Orten gespeichert werden:

- MS Access auf einer lokalen Datenbank.
- MS SQL Server.

Bevor Sie die Funktion „Library Search“ verwenden, ermitteln Sie, wo die Bibliotheksdatenbank gespeichert ist, und stellen Sie zwischen Ihrem Computer und diesem Speicherort eine Verbindung her. Bibliotheksdatenbanken können lokal auf einem Computer oder Server über ein Netzwerk abgerufen werden.

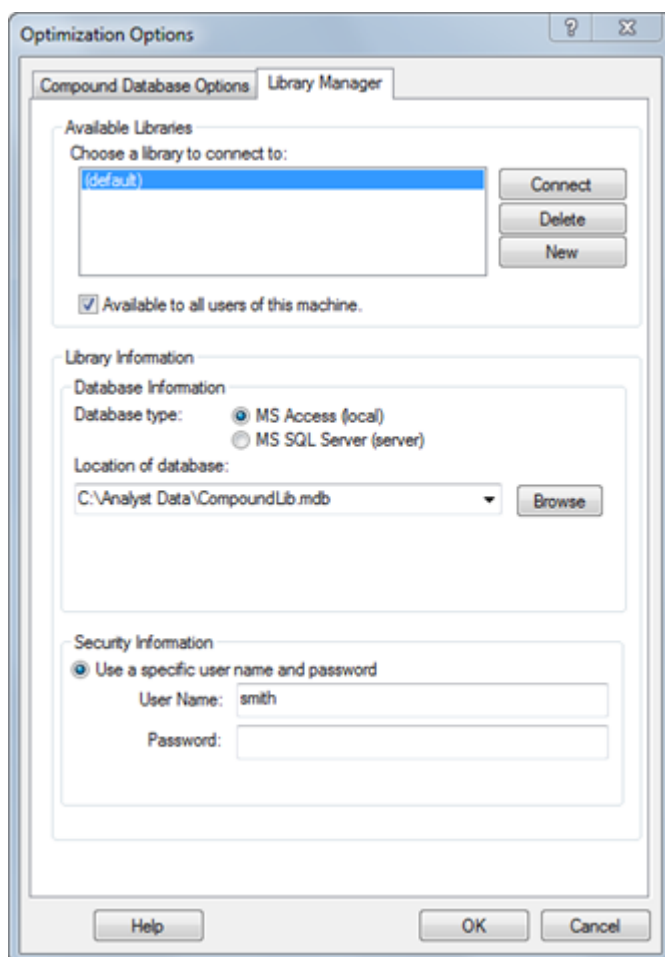
Verwenden Sie einen Aliasnamen, um die Verbindung zur Datenbank herzustellen. In diesem Fall bezieht sich der Aliasname auf eine Verbindung zu einer bestimmten Datenbank und kann den Benutzernamen und das Passwort, die für den Zugriff auf die Datenbank erforderlich sind, beinhalten. So kann ein Benutzer beispielsweise auf seinem Computer über eine kleine Bibliotheksdatenbank mit identifizierten Verbindungen verfügen, während die Organisation über eine zentrale Datenbank verfügt, die gelegentlich von Benutzern verwendet wird. Durch die Erstellung eines Aliasnamens für jede Datenbank kann der Benutzer schnell zwischen den einzelnen Datenbanken umschalten. Klicken Sie auf Hilfe, um weitere Informationen zum Erstellen von Aliasnamen und die Verbindung mit Datenbanken zu erhalten.

Wechseln zwischen vorhandenen Bibliotheksdaten

Benutzer können sich mit jeder Datenbank verbinden, die über bereits eingerichtete Aliasnamen verfügt.

1. Klicken Sie auf **Tools > Settings > Optimization Options**.
Das Dialogfeld „Optimization Options“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf die Registerkarte **Library Manager**.

Abbildung 5-6: Dialogfeld „Optimization Options“ – Registerkarte „Library Manager“

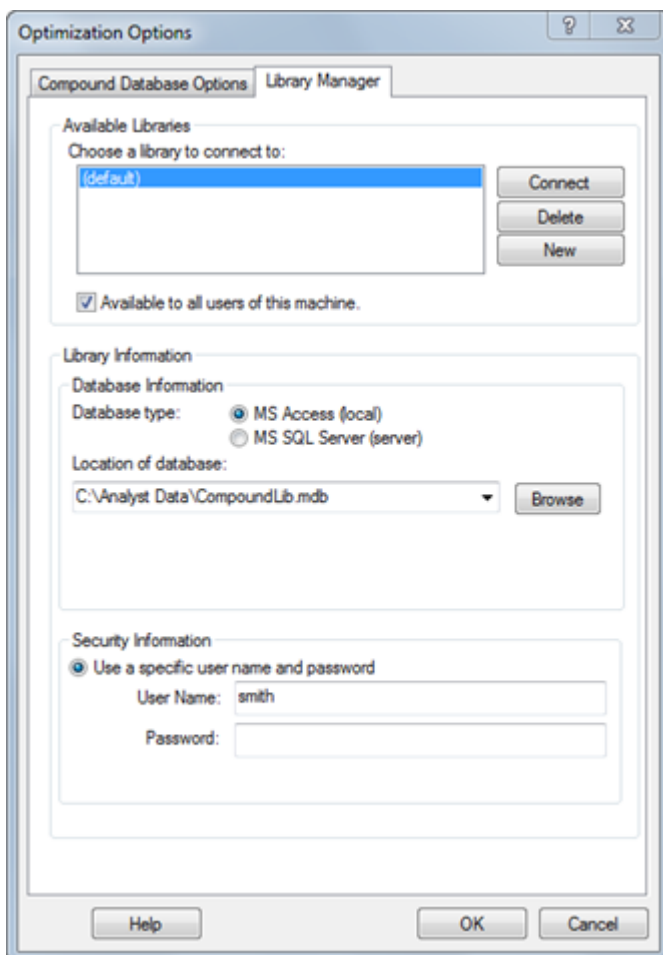


3. Klicken Sie im Abschnitt **Available Libraries** auf das Alias der Datenbank, mit der Sie eine Verbindung herstellen wollen und klicken dann auf **Connect**.
4. (Optional) Um anderen Benutzern Zugriff auf die Datenbank zu geben, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Available to all users of this machine**.
5. Klicken Sie auf **OK**.

Erstellen einer lokalen Bibliotheksdatenbank

1. Klicken Sie auf **Tools > Settings > Optimization Options**.
Der Dialog „Optimization Options“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf die Registerkarte **Library Manager**.

Abbildung 5-7: Dialogfeld „Optimization Options“ – Registerkarte „Library Manager“



3. Klicken Sie im Abschnitt **Available Libraries** auf **New**.
Das Dialogfeld „Add Library“ wird geöffnet.

Abbildung 5-8: Dialogfeld „Add Library“

Add Library

Library Information

Enter a Name for the Library

Database Information

Database type: ☒ MS Access (local) ☐ MS SQL Server (server)

Enter the location of the database:

Browse

Security Information

☒ Use a specific user name and password

User Name:

Password:

Save Cancel

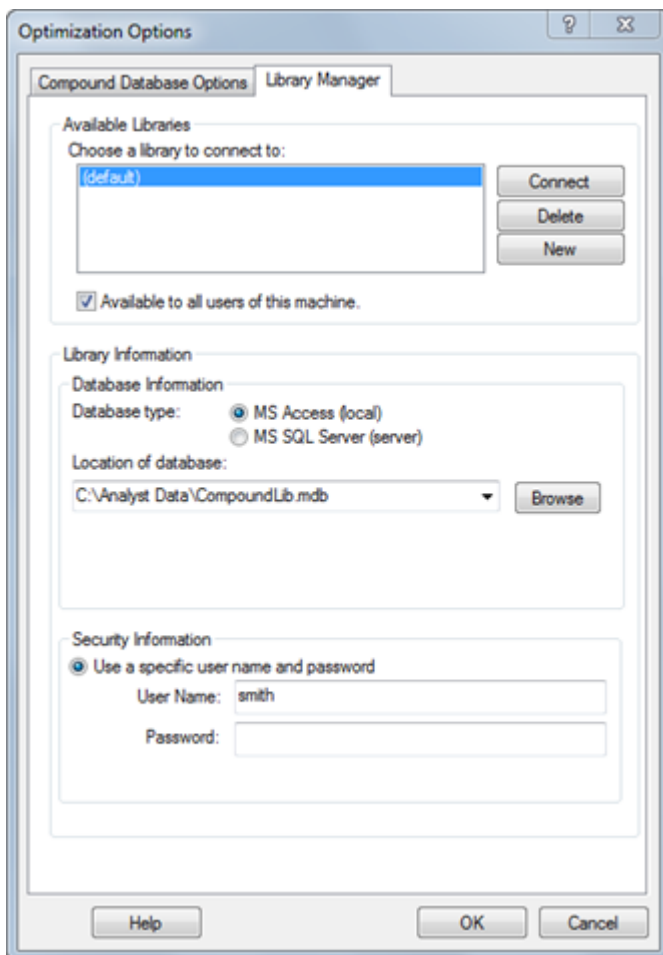
4. Geben Sie im Feld **Enter a Name for the Library** einen Namen für die Bibliothek ein.
5. Wählen Sie im Abschnitt **Database Information** die Option **MS Access (local)** aus.
6. Geben Sie den Speicherort der Datenbank ein.
7. Geben Sie im Abschnitt **Security Information** den Benutzernamen und das Passwort ein, um bei Bedarf auf die Datenbank zuzugreifen.
8. Klicken Sie auf **Save**.

Herstellen einer Verbindung mit einer Server-Bibliotheksdatenbank

1. Klicken Sie auf **Tools > Settings > Optimization Options**.
Der Dialog „Optimization Options“ wird geöffnet.

2. Klicken Sie auf die Registerkarte **Library Manager**.

Abbildung 5-9: Dialog „Optimization Options“ – Registerkarte „Library Manager“



3. Im Abschnitt **Available Libraries** klicken Sie auf **New**.
Der Dialog „Add Library“ wird geöffnet.
4. Geben Sie im Feld **Enter a Name for the Library** einen Namen für die Bibliothek ein.
5. In Abschnitt **Database Information** wählen Sie **MS SQL Server**.

Abbildung 5-10: Dialog „Add Library“

6. Geben Sie den Namen des Datenbank-Servers ein.
7. Geben Sie den Namen der Datenbank ein.
8. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
 - Geben Sie gegebenenfalls einen für den Zugriff auf die Datenbank notwendigen Benutzernamen und das Kennwort ein.
 - Zur Verwendung von Windows-Security klicken Sie in den Abschnitt „Security Information“ und wählen Sie die Option **Use Windows integrated security**.
9. Klicken Sie auf **Save**.

Anzeigen aller Bibliotheksdatensätze

Klicken Sie auf **Explore > Library Search > List**.

Das Dialogfeld „Librarian“ wird mit allen Datensätzen in der Datenbank geöffnet.

Hinzufügen eines Datensatzes zur Bibliothek

1. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf ein aktives Spektrum und dann auf **Add a Record**.
Das Spektrum wird automatisch als Strichspektrum berechnet. Das Dialogfeld „Add a Record“ wird mit den Daten aus dem Spektrum geöffnet.

2. Geben Sie auf der Registerkarte „Mass Spectral Information“ einen Namen im Feld **Compound Name** ein.

Der Verbindungsname ist obligatorisch und muss die Verbindung in der Bibliothek eindeutig identifizieren.

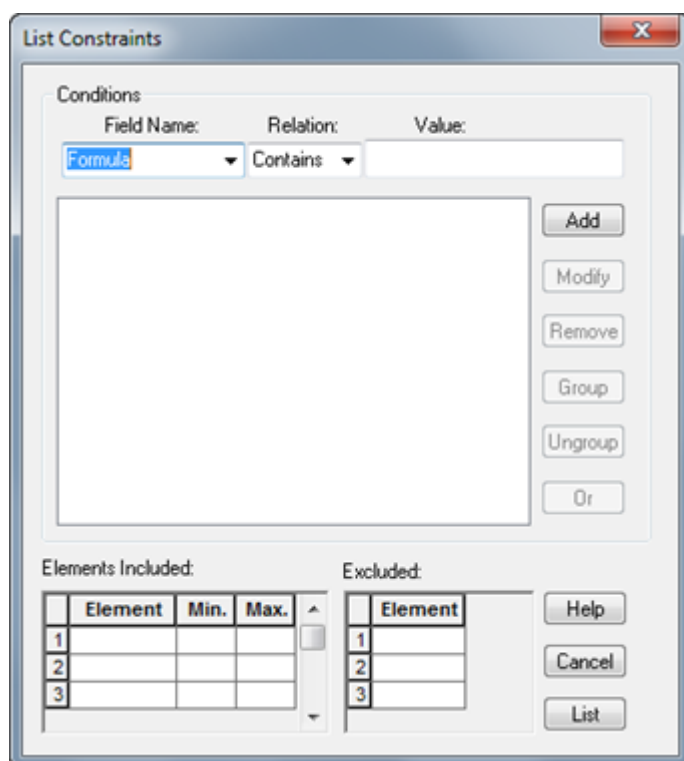
3. Bearbeiten Sie eines der anderen Felder. Viele der Felder werden automatisch mit den Daten gefüllt, die dem Spektrum zugeordnet sind.
4. Klicken Sie auf die Registerkarte **General Information**.
5. Bearbeiten Sie die Felder nach Bedarf.
6. Klicken Sie auf **OK**.

Suchen nach Bibliotheksdatensätzen mit Einschränkungen

Verwenden Sie die „List with Constraints“, um die Ergebnisse einzuschränken. Nach einmaliger Festlegung werden die Einschränkungen auf alle Suchen angewandt.

1. Klicken Sie auf **Explore > Library Search > List With Constraints**.

Abbildung 5-11: Dialogfeld „List Constraints“



Das Dialogfeld „List Constraints“ wird geöffnet.

2. In der Liste **Field Name** wählen Sie ein Feld, auf dem die Einschränkung basieren soll.
3. In der Liste **Relation** wählen Sie die Beziehung (den Operator), der für diesen Feldnamen Anwendung findet.

4. Im Feld **Value** geben Sie auf der Grundlage der Beziehung den Wert des Feldnamens ein.
5. Um die ausgewählte Einschränkung zur Liste **Conditions** hinzuzufügen, klicken Sie auf **Add**.
6. Fügen Sie gegebenenfalls weitere Einschränkungen zur Bedingungsliste hinzu.
7. Wenn man Einschränkungen mit der Liste **Conditions** kombiniert, entstehen spezifischere Bedingungen, die die Suche verbessern. Zum Gruppieren der Einschränkungen wählen Sie die Einschränkungen und klicken Sie dann auf **Group**. Um gruppierte Einschränkungen wieder zu trennen, klicken Sie auf die Gruppe und klicken Sie dann auf **Ungroup**.
8. Um Beziehung zwischen Einschränkungen zu ändern, klicken Sie auf die Beziehung und klicken Sie dann auf **And** oder **Or**.
9. Um Verbindungen mit einer bestimmten Anzahl von Atomen bestimmter Elemente einzuschließen, wählen Sie diese Elemente aus der Tabelle **Elements Included** oder geben Sie diese darin ein und geben Sie dann eine minimale und maximale Atom-Anzahl des Elements ein.

Hinweis: Bei Element-Symbolen muss die Groß- und Kleinschreibung beachtet werden. Beispielsweise ist Wasserstoff „H“ und nicht „h“ und Natrium ist „Na“ und nicht „NA“ oder „na“.

10. Um Verbindungen mit bestimmten Elemente auszuschließen, wählen Sie diese Elemente aus der Tabelle **Excluded**.
11. Um nach den Verbindungen entsprechend den Kriterien zu suchen, klicken Sie auf **List**. Datensätze, die allen Einschränkungen entsprechen, werden in der Tabelle **Records** aufgeführt. Einschränkungen für Listen werden gespeichert.

Tipps zur Bibliothek-Suchfunktion

Ziel	Aufgabe
Gruppieren von Bedingungen	Wählen Sie die zu gruppierenden Bedingungen aus und klicken Sie dann auf Group . Diese Funktion hat die gleiche Funktionsweise wie Klammern in Formeln.
Suchen ohne Einschränkungen	Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf ein aktives Spektrum und dann auf Search Library . Das Dialogfeld „Search Results“ wird geöffnet.

Suchen nach einem ähnlichen Spektrum

Der Benutzer kann die Bibliothek nach einem Spektrum (und seinen zugehörigen Verbindungsinformationen) durchsuchen, das dem aktiven Spektrum entspricht (oder ähnlich

ist). Es kann mit oder ohne Einschränkungen gesucht werden. Wenn der Benutzer mit Einschränkungen sucht, werden nur diejenigen Datensätze aufgelistet, die alle Einschränkungen erfüllen. Die Ergebnisse werden in einer Rangliste angezeigt. Der erste Punkt auf der Liste passt am besten zum aktiven Spektrum. Einträge weiter unten in der Liste passen nicht so gut.

Je mehr Einschränkungen gewählt werden, desto genauer wird die Liste und desto weniger, relevantere Treffer werden aufgelistet. Nachdem eine Reihe von Einschränkungen definiert wurde, gelten diese für alle nachfolgenden Suchvorgänge, es sei denn, sie werden bearbeitet. Wenn ein Benutzer ohne Einschränkungen sucht, ist die Liste an möglichen Spektren viel größer, weil die Bibliothek viel weniger spezifische Übereinstimmungen mit den Spektraldaten findet.

Nur Peaks über dem Schwellwert werden in der Suche verwendet. Bei der Auswahl der Sucheinschränkungen kann der Benutzer auch Peaks aus dem aktiven Spektrum addieren oder subtrahieren.

Wenn ein Benutzer vermutet, dass ein Peak eigentlich eine Hintergrund- oder Rausch-Spitze ist, dann sollte der Peak von der Suche ausgeschlossen werden, da dieser ungenaue Ergebnisse produzieren könnte.

1. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf ein aktives Spektrum und dann auf **Search With Constraints**.
Die Software berechnet automatisch das Strichspektrum.
2. Im Feld **Maximum Number of Match** geben Sie die maximale Anzahl von Verbindungen ein, die eine Suche anzeigen soll.

Abbildung 5-12: Dialogfeld „Search Constraints“

3. Im Abschnitt **Preselect Constraints** aktivieren Sie die Kontrollkästchen, die für die Einschränkungen gelten sollen.
4. Für jede gewählte Einschränkung geben Sie im Abschnitt **Preset Tolerance** die Toleranz ein.
5. Wählen Sie gegebenenfalls ein Verfahren zum Sortieren von Datensätzen aus der Liste **Result Sorted by**.
6. Geben Sie gegebenenfalls einen Text in das Feld **Comment Contains** ein.
7. Geben Sie gegebenenfalls einen Text in das Feld **Keyword Contains** ein.
8. Um Peak-Einschränkungen durch das Hinzufügen und Entfernen von Peaks zu übernehmen, klicken Sie auf **Peak Constraints**.
Die Tabelle „Peaks Included“ wird geöffnet.
9. Um Peaks zur Liste hinzuzufügen, die bei der Suche verwendet werden soll, klicken Sie auf **Add** und geben dann die *m/z*-Werte und die entsprechende Intensität in der leeren Zelle ein.
10. Um Peaks zu entfernen, damit sie nicht in die Suche einbezogen werden, wählen Sie die entsprechenden Peaks aus und klicken Sie dann auf **Remove**.

11. Klicken Sie auf **Search**, um die Einschränkungen zu speichern und die Suche zu starten.

Anzeigen einer Verbindung aus den Suchergebnissen

Wenn mehrere Spektren mit dem unbekannten Spektrum übereinstimmen, können Benutzer bedarfsweise die bekannten Spektren anzeigen und mit dem unbekannten vergleichen.

1. Wählen Sie im Dialog „Search Results“ in der Liste der Verbindungen die anzuzeigende Zeilennummer der Verbindung aus.
2. Klicken Sie auf das Spektrum-Teilfenster einer der bekannten Verbindungen. Das Spektrum der ausgewählten Verbindung wird angezeigt.

Verarbeitete Datendateien

Der Benutzer kann verarbeitete Daten, z. B. bestimmte Layouts und Beschriftungen, speichern, die nur im „Explore“-Modus geöffnet werden können. Diese Dateien enthalten auch Verlaufsinformationen und sind Datendateien ähnlich, enthalten aber nur Daten aus dem aktiven „Explore“-Teilfenster. Diese Dateien haben die pdt-Erweiterung und werden im Datenordner des aktuellen Projekts gespeichert.

Speichern verarbeiteter Dateien

1. Wählen Sie das zu speichernde Datenfenster aus.
2. Klicken Sie auf **File > Save Processed Data File**.
3. Geben Sie im Feld **File name** den Namen ein.
4. Klicken Sie auf **Save**.

Öffnen einer verarbeiteten Datei

1. Klicken Sie im Modus Explore auf **File > Open Processed Data File**. Der Dialog „Load Processed Data File“ wird geöffnet.
2. Wählen Sie eine Datei und klicken Sie auf **Open**.

Qualitative Daten

Der Benutzer kann die in einer Datei enthaltenen Informationen als Tabelle oder Diagramm anzeigen. Grafische Daten werden entweder als Chromatogramm oder als Spektrum angezeigt. Die Daten in der Tabelle werden als Datenpunkte angezeigt. Der Benutzer kann verschiedene Sortiervorgänge mit den Daten durchführen.

Wenn der Benutzer eine Datendatei öffnet, werden in Abhängigkeit von der Art des durchgeführten Experiments verschiedene Teilfenster angezeigt.

Wird das Kontrollkästchen **MCA** im Tune Method Editor aktiviert, dann wird die Datendatei für das MS (Massenspektrum) geöffnet. Wird das Kontrollkästchen **MCA** nicht aktiviert, dann wird beim Öffnen der Datei der TIC angezeigt. Wählen Sie zunächst einen Bereich aus

und doppelklicken Sie dann im TIC-Fenster auf eine bestimmte Zeit, um das MS für diesen Bereich anzuzeigen.

Die Software speichert Daten in Dateien mit einer .wiff- oder wiff.scan-Erweiterung. Datendateien können Daten für mehr als eine Probe enthalten. Zum Öffnen der Datendatei benötigt die Software sowohl wiff- als auch wiff.scan-Dateien. Zusätzlich zu Datendateien kann die Software txt-Dateien öffnen. .txt-Dateien enthalten nur Daten für eine Probe.

Signal-Rausch-Verhältnis

Das Signal-Rausch-Verhältnis ist die Peak-Höhe geteilt durch das Rauschen.

Für die Berechnung des Rauschens verwendet die Software die Standardabweichung (mit einem Mittelwert von null) aller Datenpunkte im Chromatogramm vom Zeitpunkt **Background Start** bis zum Zeitpunkt **Background End** (beide werden in den erweiterten Parametern für den Quantitation Method Editor und das Fenster „Peak Review“ angezeigt). Diese Zeitpunkte werden beim Definieren eines neuen Hintergrundbereichs eingestellt.

Wenn der Benutzer eine Methode erstellt, ohne einen neuen Hintergrundbereich festzulegen (was möglich ist, wenn die voreingestellte Integration ohne Änderungen angenommen wird), werden die Werte für **Background Start** und **Background End** als **N/A** angezeigt. Aus diesem Grund wird das Signal-Rausch-Verhältnis nicht berechnet und das entsprechende Feld in der „Results Table“ zeigt **N/A** an.

Glättungsalgorithmen

Der Benutzer kann den Glättungsalgorithmus oder den Gauß'schen Glättungsalgorithmus als gewünschte Glättungsmethode einstellen. Bei der Glättung wird jeder Datenpunkt durch den Mittelwert aus dem vorherigen und dem folgenden Datenpunkt ersetzt. Der geglättete Datensatz ersetzt den alten Satz.

Daten können mehrmals geglättet werden, wobei die Software jeweils nur die letzte Glättung rückgängig machen kann.

Glättung steht für Multiple Ion (MI)- oder MRM-Spektren nicht zur Verfügung.

Glättungsalgorithmus

Beim Glätten von Daten legt der Benutzer die Punkt-Gewichtungswerte für drei Datenpunkte fest: den aktuellen Punkt, den vorhergehenden Punkt und den folgenden Datenpunkt. Der Glättungsalgorithmus multipliziert die Datenpunkte mit den zugewiesenen Gewichtungswerten, addiert diese Werte und teilt die Summe durch die Summe der Punkt-Gewichtungswerte. Dies ist eine sanftere Glättung als der Gauß'sche Algorithmus und es dauert lange, bis sehr verrauschte Daten geglättet sind.

Gauß'scher Glättungsalgorithmus

Bei der Gauß'schen Glättung wird jeder Datenpunkt durch den gewichteten Durchschnitt einer Anzahl von Datenpunkten ersetzt, die sich auf beiden Seiten des Datenpunktes befinden. Die Gewichtung für jeden neuen Datenpunkt wird auf der Grundlage einer Gauß'schen Kurve berechnet. Dies ist eine gröbere Glättung als beim Glättungsalgorithmus, eignet sich aber gut für die Glättung stark verrauschter Daten.

Verwenden Sie zwei Werte bei der Gauß'schen Glättungsmethode:

Gaussian filter width (% of minimal distance between points): Die Breite, die bei der Berechnung der Gewichtung benachbarter Punkte verwendet wird. Die Breite wird als Prozentsatz des Abstandes zwischen zwei Punkten im Scan angegeben, wobei die vorgegebene Breite von 100 % eine Verteilung erreicht, die so breit wie der Abstand zwischen den Datenpunkten ist.

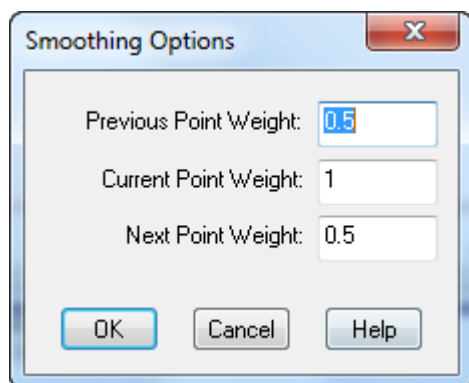
Limit of Gaussian filter (number of minimal distance between points): Die Grenzen der Gauß-Kurve, angezeigt als Vielfaches des Abstandes zwischen Punkten. Zum Beispiel erzeugt der voreingestellte Wert von 10 eine Gauß-Kurve, welche die Breite auf 10 Datenpunkte beiderseits des Mittelpunkts beschränkt.

Glätten von Daten mit dem Glättungsalgorithmus

Tipp! Um eine Glättung rückgängig zu machen, klicken Sie auf **Edit > Undo**. Die Software unterstützt einmaliges Rückgängigmachen.

1. Wählen Sie einen Bereich mit einem Chromatogramm oder Spektrum.
2. Klicken Sie auf **Explore > Smooth**.
Der Dialog „Smoothing Options“ wird geöffnet.

Abbildung 5-13: Dialog „Smoothing Options“



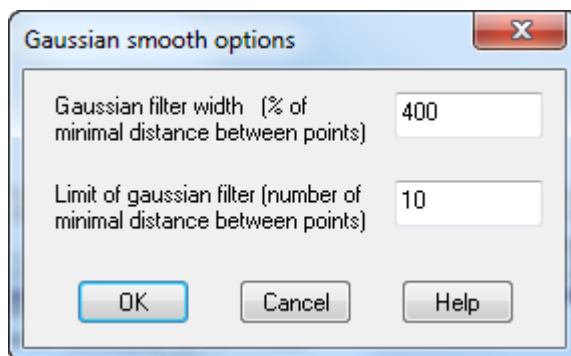
3. Im Feld **Previous Point Weight** geben Sie den Gewichtungsfaktor ein, der auf den vorherigen Datenpunkt angewendet werden soll.
4. Im Feld **Current Point Weight** geben Sie den Gewichtungsfaktor ein, der auf den mittleren Datenpunkt angewendet werden soll.
5. Im Feld **Next Point Weight** geben Sie den Gewichtungsfaktor ein, der auf den nächsten Datenpunkt angewendet werden soll.
6. Klicken Sie auf **OK**.
Der Datensatz wird geglättet und ersetzt den aktuellen Datensatz im Teilfenster.

Glätten von Daten mit der Gauß'schen Glättung

Tipp! Um die Glättung rückgängig zu machen, klicken Sie auf **Edit > Undo**. Die Software ermöglicht es, einen Schritt rückgängig zu machen.

1. Wählen Sie einen Bereich mit einem Chromatogramm oder Spektrum.
2. Klicken Sie auf **Explore > Gaussian Smooth**.
Das Dialogfeld „Gaussian Smooth“ wird geöffnet.

Abbildung 5-14: Dialogfeld „Gaussian Smooth Options“



3. Im Feld **Gaussian filter width** (Gaußfilterbreite) geben Sie die Breite ein, die bei der Gewichtung benachbarter Punkten als Prozentsatz des Abstandes zwischen zwei Punkten verwendet werden soll.
4. Geben Sie im Feld **Limit of gaussian filter** die Grenze der Gaußkurve ein, die als Vielfaches des Abstandes zwischen Punkten angegeben wird.
5. Klicken Sie auf **OK**.
Der Datensatz wird geglättet und ersetzt den aktuellen Datensatz im Teilfenster.

Systemprotokolle

Das Systemprotokoll enthält Berichte über Systemereignisse wie Fehlermeldungen, Warnhinweise und Benachrichtigungen. Verwenden Sie den „Windows Event Viewer“, um Informationen anzuzeigen, die bei der Fehlersuche und bei der Durchführung einer Systemdiagnose hilfreich sein könnten. Um die Informationen aus dem Systemprotokoll wirksam einzusetzen, filtern Sie diese Informationen so, dass nur die softwarerelevanten Elemente angezeigt werden.

Um die Informationen in den Systemprotokollen zu verstehen und Fehler zu behandeln, siehe das Windows-Anwendungsereignisprotokoll. Dieses enthält relevante Informationen zur Problembehandlung.

Speichern des Systemprotokolls und Weiterleiten an den Support

1. Klicken Sie auf **View > Event Log**.

2. Klicken Sie auf das Pluszeichen rechts vom Ordner **Windows Logs**.
3. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf **Application**.
4. Klicken Sie auf **Save All Events As**.
Das Dialogfeld „Save As“ wird geöffnet.
5. Geben Sie einen Dateinamen ein und klicken dann auf **Save**.
Das Dialogfeld „Display Information“ wird geöffnet.
6. Klicken Sie auf **Display information for these languages**.
7. Stellen Sie sicher, dass **English (United States)** ausgewählt ist.
8. Klicken Sie auf **OK**.
9. Senden Sie die Datei als Anhang einer E-Mail an SCIEX.

Hinweis: Für zusätzliche Anmeldefunktionen zur Problembehandlung wenden Sie sich an sciex.com/request-support.

Filtern des Systemprotokolls nach Informationen, die für die Analyst MD Software relevant sind

1. Klicken Sie auf **View > Event Log**.
Das Dialogfeld „Event Viewer“ wird geöffnet.
2. Doppelklicken Sie auf den Ordner **Windows Logs**.
3. Klicken Sie auf **Application**.
4. Klicken Sie auf **Action > Filter Current Log**.
Das Dialogfeld „Filter Current Log“ wird geöffnet.
5. Wählen Sie **Analyst** im Feld **Event Sources** aus.
6. Klicken Sie auf **OK**.
Das Dialogfeld „Event Viewer“ zeigt jetzt nur die gefilterten Analyst MD Software-Ereignisse an.

Kalibrierungsoptionen

Die Kalibrierungsoptionen definieren die Parameter für eine Kalibrierkurve, die zur Bestimmung der berechneten Konzentration der Proben verwendet werden. Die Kurve ist eine Abbildung der Konzentration des Standards in Abhängigkeit vom Bereich oder von der Höhe des Standards, wenn kein interner Standard verwendet wird. Wenn ein interner Standard verwendet wird, ist die Kurve eine Abbildung des Konzentrationsverhältnisses in Abhängigkeit vom Bereichs- oder Höhenverhältnis. Die Kurve wird verwendet, um gemeinsam mit dem Bereich (oder der Höhe) für die Unbekannten die berechnete Konzentration zu interpolieren.

Ermitteln Sie die beste Regressionsart oder die beste Passung, die die Kurve an die Punkte anpasst, und den besten Gewichtungsfaktor für das Projekt.

Über Kalibrierkurven

Eine Kalibrierkurve wird zur Bestimmung der berechneten Konzentration von Proben verwendet, einschließlich QC (Qualitätskontroll)-Proben. Es handelt sich hierbei um eine Kurve, die durch Darstellung der Konzentration eines Standards im Verhältnis zur Fläche oder Höhe erzeugt wird, oder zu Verhältnissen, wenn ein interner Standard verwendet wird. Um die Konzentration einer Probe zu finden, wird die Flächen- oder Höhe einer Probe auf diese Kurve angewendet und in der Ergebnistabelle dargestellt. Mit der von dieser Kalibrierkurve generierten Regressionsgleichung wird die Konzentration der unbekannten Proben berechnet.

Die Software platziert die bekannten Konzentrationen (oder Verhältnisse) auf der x-Achse und den berechneten Bereich oder die berechnete Höhe (oder Verhältnisse) auf der y-Achse. Dann bildet sie die Punkte für alle Standards im Batch ab. Das System erstellt eine Kurve mit der besten Passung für diese Punkte anhand der gewählten Regressions- und Gewichtungsart. Die Kurve wird verwendet, um gemeinsam mit dem Bereich (oder der Höhe) für die Unbekannten die Konzentration zu interpolieren.

Auswählen der besten Regressionsart

Nach Auswahl einer Regressionsart (Passung) können die Benutzer die Kalibrierkurve vom Assistenten aus nicht sehen. Verwenden Sie stattdessen die voreingestellten Werte oder nutzen Sie Ihre Erfahrung bzw. die Richtlinien Ihres Unternehmens zur Auswahl einer Regressionsart.

Nachdem Sie die Passung geändert haben, müssen Sie die Spalte **Accuracy** in der „Results Table“ auf Änderungen überprüfen. Je besser die Passung ist, umso besser fällt die Genauigkeit der quantitativen Analyse aus.

Die Kalibrierkurve bildet die Konzentration des Standards im Verhältnis zu dessen Peak-Fläche oder Höhe (oder Verhältnissen, wenn ein interner Standard verwendet wird) ab. Wenn die Punkte für die Standards abgebildet sind, müssen Sie die beste Passung für

die Kurve zu diesen Punkten festlegen und die Auswahl im Dialogfeld „Specify Calibration“ im Assistenten angeben. Die voreingestellte Passung ist linear, wobei davon ausgegangen wird, dass alle Standards auf eine Gerade fallen. Treffen Sie eine Auswahl aus den Passungstypen in der folgenden Tabelle.

Tabelle 6-1: Passungstypen

Passung	Beschreibung
Linear	Lineare Regression geht davon aus, dass die Standardpunkte eine Gerade bilden.
Linear durch Null	Die lineare Regression durch den Ursprung geht davon aus, dass die Standardpunkte eine Gerade bilden und dass die Gerade der Punkte durch den Nullpunkt auf der X- und Y-Achse verläuft. Verwenden Sie diese Einstellung, um die Gerade dazu zu zwingen, durch den Nullpunkt zu verlaufen.
Quadratisch	Wenn die Standardpunkte keine Gerade bilden, dann verwenden Sie die quadratische Regression, um eine quadratische Passung für die Datenpunkte zu produzieren.
Mittlerer Reaktionsfaktor	Wenn die Standardpunkte eine Gerade ergeben und Sie den Durchschnitt der Punkte bilden möchten, verwenden Sie die Regressionsart des durchschnittlichen Ansprechfaktors, um einen Durchschnitt der Steigung für jeden Punkt auf der Kurve zu produzieren.
Betrieb	Wenn die Linie der Punkte teils linear und teils gekrümmt ist, verwenden Sie anstatt der linearen oder quadratischen Regression die Potenzregression, um eine Linie zu produzieren, die sich irgendwo zwischen diesen Passungen befindet.

Auswählen des besten Gewichtungsfaktors

Die Kalibrierkurve bildet die Konzentration des Standards im Verhältnis zu dessen Peak-Fläche oder -Höhe ab. Wenn die Punkte für die Standards abgebildet sind, legen Sie den besten Gewichtungsfaktor für diese Punkte fest und geben Sie Ihre Wahl im Dialogfeld „Specify Calibration“ an. Die voreingestellte Passung ist **None**, damit wird angenommen, dass alle Punkte auf der Kurve von gleicher Bedeutung sind. Treffen Sie eine Auswahl aus den Gewichtungsarten in der folgenden Tabelle. Weitere Informationen finden Sie im Abschnitt: [Gewichtungsfaktoren](#).

Tabelle 6-2: Gewichtungsarten

Weighting	Beschreibung
1/x	Verwenden Sie einen Gewichtungsfaktor von 1/x, um Punkten mit niedrigeren Werten eine zusätzliche Gewichtung zu verleihen.
1/x ²	Verwenden Sie eine Gewichtung von 1/x ² , um Punkten mit niedrigeren Werten eine bedeutend höhere Gewichtung zu verleihen.

Tabelle 6-2: Gewichtungsarten (Fortsetzung)

Weighting	Beschreibung
1/y	Verwenden Sie einen Gewichtungsfaktor von 1/y , wenn Sie eher nach Bereich (y-Achse) als nach Konzentration (x-Achse) kalibrieren und wenn Punkten mit niedrigeren Werten eine gewisse Gewichtung zukommen muss. Eine Gewichtung von 1/y ist eine Variante von 1/x, wobei y und x proportional zueinander sein sollten.
1/y ²	Verwenden Sie einen Gewichtungsfaktor von 1/y ² , wenn Sie eher nach Bereich (y-Achse) als nach Konzentration (x-Achse) kalibrieren und wenn Punkten mit niedrigeren Werten eine viel höhere Gewichtung zukommen muss. Eine Gewichtung von 1/y im Quadrat ist eine Variante von 1/x im Quadrat, wobei y und x proportional zueinander sein sollten.
ln x	Verwenden Sie den Logarithmus von x, um Punkten mit höheren Werten eine stärkere Gewichtung zu verleihen.
ln y	Verwenden Sie den Logarithmus von y, um Punkten mit höheren Werten eine stärkere Gewichtung zu verleihen. Zu verwenden, wenn Sie nach Bereich (y-Achse) statt nach Konzentration (x-Achse) kalibrieren.

Integrationsalgorithmen

Die Analyst MD Software verfügt über zwei Integrationsalgorithmen: den ursprünglichen Analyst Classic- und den IntelliQuan-Integrationsalgorithmus. Der IntelliQuan-Algorithmus bietet eine konsistentere Peak-Suche und integrierte Funktionen, bei denen weniger Parameter angepasst werden müssen.

Analyst Classic- und IntelliQuan-Integrationsalgorithmen

Der IntelliQuan-Algorithmus verwendet einen von zwei Peak-Suchparametern: Automatic IQA II (Einstellung ohne Parameter) oder Specify Parameters MQ III. Nachdem Sie die Peaks mithilfe des IntelliQuan-Algorithmus integriert haben, können Sie den Peak-Suchparameter wählen, der für den Datensatz am besten geeignet ist. Hierfür nutzen Sie die Peak-Integrationsparameter, die im Fensterbereich oder Fenster „Peak Review“ angezeigt werden.

Die folgende Tabelle zeigt die Parameter, die mit dem Analyst Classic-Algorithmus verfügbar sind.

Tabelle 6-3: Analyst Classic-Algorithmus

Parameter	Definition
Default Bunching Factor	Die Anzahl der Punkte, deren Mittelwert gebildet wird und die zum Zweck der Peak-Suche als ein Punkt betrachtet werden.

Tabelle 6-3: Analyst Classic-Algorithmus (Fortsetzung)

Parameter	Definition
Default Number of Smooths	Die Anzahl der Glättungen des Chromatogramms.
Default Void Volume Retention Time	Alle Peaks, die vor diesem Zeitpunkt auftreten, werden ignoriert.
Default Concentration Units	Die Konzentrationseinheiten, die zur Beschreibung der Probenkonzentration verwendet werden, z. B. pg/μl.
Default Calculated Concentration Units	Die Konzentrationseinheiten, die zur Beschreibung der berechneten Probenkonzentration verwendet werden, z. B. pg/μl.
Default RT Window	Das Zeitfenster in der Mitte der erwarteten Retentionszeit für die Peak-Suche. Beispiel: Ein 30-sekündiges Retentionszeitfenster enthält zusätzliche 15 Sekunden vor und nach der erwarteten Retentionszeit.

Die folgende Tabelle zeigt die beim MQ III-Algorithmus, jedoch nicht beim IQA II-Algorithmus verfügbaren Parameter.

Tabelle 6-4: MQ III-Algorithmus

Parameter	Definition
Default Noise Percentage	Der bei der Peak-Suche verwendete Schwellenwert. Es werden nur Peaks festgestellt, die über diesem festgelegten Prozentsatz liegen.
Default Baseline Subtraction Window	Ein Zeitfenster um jeden Datenpunkt, das verwendet wird, um die Höhe der Basislinienkorrektur zu bestimmen, die für diesen Punkt angewendet werden soll. Dieses Zeitfenster hilft dabei, starkes Rauschen aus dem Chromatogramm zu entfernen. Die Basislinie wird definiert als Linie, die den Punkt der geringsten Intensität auf der linken Seite eines vorgegebenen Datenpunkts mit dem Punkt der geringsten Intensität auf der rechten Seite innerhalb des jeweiligen Fensters verbindet.
Default Peak-Splitting Factor	Kontrolliert, ob ein bestimmtes Peak-Cluster aus mehreren zusammenhängenden Peaks oder aus einem (möglicherweise verrauschten) Peak besteht. Wenn die Senke der Intensitätswerte geringer als der angegebene Wert ist, wird ein einzelner Peak gemeldet. Andernfalls teilt der Punkt mit der geringsten Intensität in der Senke das Cluster in zwei separate Peaks. Durch das Einstellen eines hohen Faktors wird vermieden, dass Cluster in mehr als einen Peak geteilt werden.

Tabelle 6-4: MQ III-Algorithmus (Fortsetzung)

Parameter	Definition
Default Void Volume Retention Time	Alle Peaks, die vor diesem Zeitpunkt auftreten, werden ignoriert.
Report Largest Peak	Durch die Auswahl dieses Parameters wird der höchste Peak im Retentionszeitfenster ausgegeben. Wenn dieser Parameter nicht ausgewählt wird, dann wird der Peak gefunden, der der erwarteten Retentionszeit am nächsten ist. Die erwartete Retentionszeit wird im Quantitation Wizard automatisch berechnet.

Die folgende Tabelle zeigt die Parameter, die für die Verwendung mit beiden IntelliQuan-Algorithmen verfügbar sind.

Tabelle 6-5: IntelliQuan-Algorithmus sowohl für IQA II als auch für MQ III

Parameter	Definition
Default Minimum Peak Height	Die für die Peak-Integration erforderliche Mindesthöhe eines Peaks.
Default Minimum Peak Width	Die für die Peak-Integration erforderliche Mindestbreite eines Peaks.
Default RT Window (Standard-RT-Fenster)	Legt das Zeitfenster in der Mitte der erwarteten Retentionszeit für die Peak-Suche fest. Beispiel: Ein 30-sekündiges Retentionszeitfenster enthält zusätzliche 15 Sekunden vor und nach der erwarteten Retentionszeit.
Default Smoothing Width	Die Anzahl der in der Datenglättung verwendeten Punkte.
Default Concentration Units	Die Konzentrationseinheiten, die zur Beschreibung der Probenkonzentration verwendet werden, z. B. pg/μl.
Default Calculated Concentration Units	Die Konzentrationseinheiten, die zur Beschreibung der berechneten Probenkonzentration verwendet werden, z. B. pg/μl.

Werkzeuge zum Erstellen von Quantifizierungsmethoden

Die Software stellt vier Werkzeuge zum Erstellen von Quantifizierungsmethoden zur Verfügung, von denen jedes eine vollständig funktionale Methode erstellt. Die Auswahl des am besten geeigneten Werkzeugs hängt davon ab, welche Aufgabe ausgeführt werden muss.

Es wird empfohlen, dass nur diejenigen Benutzer Erfassungs- und Quantifizierungsmethoden erstellen oder ändern, die mit der Methodenentwicklung vertraut sind.

Weitere Informationen über Rollen und Sicherheit finden Sie im Abschnitt: *Über Benutzer und Rollen* im Dokument: *Handbuch für Laborleiter*.

Assistenten

Die verfügbaren Assistenten zur Erstellung von Methoden sind der Standard Quantitation-Assistent und der Automatic Quantitation-Assistent. Mit beiden Assistenten hat der Benutzer die Möglichkeit, die Charge bzw. die Chargen zu wählen, die quantifiziert werden sollen, eine Quantifizierungsmethode zu erstellen oder auszuwählen und dann die Probandaten zu integrieren.

Der Unterschied zwischen den Assistenten besteht in der Art der erstellten Methode. Der Standard Quantitation-Assistent erstellt eine Standardmethode, während der Automatic Quantitation-Assistent eine Methode erstellt und automatisch eine „Results Table“ generiert. Bei dem Automatic Quantitation-Assistenten ist die Verifizierung der Peaks nicht Bestandteil der Methodenerstellung. Die Peaks können jedoch nach durchgeführter Integration überprüft werden.

Eine Überprüfung der Peaks ist nur in einer Situation nicht erforderlich: Wenn die Quantifizierung ausschließlich zum Zwecke der Integration durchgeführt wird und nicht, um Konzentrationen zu finden. Dies kann beispielsweise nötig sein, wenn eine Charge vorhanden ist, die unterschiedliche Verbindungen in jeder Probe enthält, oder wenn die Masse jeder Probe unterschiedlich ist. In diesem Fall sollten Sie den automatischen Assistenten verwenden. Andernfalls verwenden Sie den Standard Quantitation-Assistenten zur Durchführung der Quantifizierung.

Verwenden Sie den Standard Quantitation Wizard, nachdem Sie die Probe erfasst haben, um Folgendes zu tun:

- eine repräsentative Probe auswählen
- die Peaks von Analyten und internem Standard auswählen
- die Parameter für Peak-Suche und Integration anpassen
- Peaks während der Methodenerstellung überprüfen
- die Kalibrierung auswählen.

Verwenden Sie den automatischen Quantifizierungsassistenten, um eine Charge auszuwählen, eine Methode zu erstellen (ohne Peak-Bestätigung) und dann die Probandaten zu integrieren. Dieser Assistent ist schneller als der Standard Quantitation-Assistent und erfordert nicht, dass die gescannten Massen für alle Proben gleich sind. Er bietet jedoch nicht die Möglichkeit, einen internen Standard auszuwählen – alle Ionen werden als Analyten behandelt.

Verwenden Sie den Automatic Quantitation Wizard, nachdem Sie die Probe erfasst haben, wenn Sie:

- die Kalibrierung auswählen möchten
- keine Parameter für die Peak-Suche und Integration anpassen möchten

- keine Analyten-Peak-Namen auswählen möchten
- keine internen Standards verwenden möchten
- die Peaks während der Methodenerstellung nicht überprüfen möchten oder wenn Sie verschiedene Verbindungen in jeder Probe haben

Wenn die Peaks nur integriert werden, müssen sie nicht überprüft werden, da keine Konzentrationsberechnung erforderlich ist. Verwenden Sie in diesem Fall den Automatic Quantitation-Assistenten, der es ermöglicht, die Peaks nach durchgeführter Integration zu überprüfen.

Peak-Suche mit einer automatischen Methode

Die Software verwendet den Standardprozess zur Peak-Erkennung, mit den folgenden Ausnahmen:

- Sie verwendet den Bündelungsfaktor und die Anzahl der Glättungen (aus dem Assistenten) unverändert.
- Sie berechnet die erwartete Retentionszeit und die Schwellenwerte für Rauschen und Bereich für jeden Peak einzeln.

Quantitation Method Editor

Verwenden Sie diese Option, nachdem Sie die Probe erfasst haben, um Folgendes zu tun:

- die Parameter für Peak-Suche und Integration anpassen
- die Peaks von Analyten und internem Standard auswählen
- die Kalibrierung auswählen.

Verwenden Sie den Quantitation Method Editor für die folgenden drei Aufgaben:

- Summieren von Ionen für die Integration
- Verwenden eines internen Standards aus einem anderen Zeitraum oder Experiment (falls der interne Standard in einem anderen Zeitraum oder Experiment als der Analyt erfasst wurde)
- Bearbeiten einer vorliegenden Methode.

Der halbautomatische Method Editor

Der Semi-Automatic Quantitation Method Editor ist Bestandteil des Batch Editors. Verwenden Sie den Semi-Automatic Quantitation Method Editor vor der Datenerfassung zur Auswahl von Quantifizierungsinformationen wie Probenotyp und Probenkonzentration. Durch diese Vorbereitung werden nachfolgende quantitative Analysen einfacher. Alternativ kann eine vollständige Methode im Batch Editor ausgewählt werden, die dann automatisch am Ende der Batch-Ausführung angewandt wird, um die Ergebnistabelle der Quantifizierung zu generieren.

Verwenden Sie nicht die automatisch generierte Quick Quant-Methode zur Quantifizierung, wenn die Quick Quant-Funktion dazu verwendet wird, Probenotypen und Konzentrationen in

der Datei zu speichern. Diese Quantifizierungsmethode verwendet keine verbindungs- und probenspezifischen Integrationsparameter, die für die Peak-Auswahl optimiert wurden.

Verwenden Sie diese Option in den folgenden Szenarien, wenn Sie:

- noch keine Proben mit derselben Erfassungsmethode erfasst haben
- Namen und Massen für die Peaks von Analyten und internem Standard auswählen möchten
- Konzentrationen und Probentypen auf der Registerkarte „Quantitation“ im Batch Editor auswählen möchten, jedoch keine andere Quantifizierungsmethode haben
- die Quantifizierungsmethode gegebenenfalls zu einem späteren Zeitpunkt bearbeiten möchten.

Peak-Suche mit einer halbautomatischen Methode

Die Software verwendet den Standardprozess zur Peak-Erkennung, mit den folgenden Ausnahmen:

- Sie verwendet den Bündelungsfaktor (aus dem Dialog „Quantitation Method Options“) und die Anzahl der Glättungen (aus dem Dialog „Create Semi-Automatic Quantitation Method“) unverändert.
- Sie verwendet den Standard mit der höchsten Konzentration als repräsentative Probe. Für die Festlegung der Retentionszeit verwendet sie den höchsten Peak des jeweiligen Chromatogramms.
- Für die Einstellung von Rausch- und Bereichsschwellenwerten verwendet sie das resultierende Grundrauschen. (Dieser Prozess ist identisch mit der Vorgehensweise, mit der die voreingestellten Werte für Peaks in normalen Methoden festgelegt werden.) Diese Integrationsparameter werden auf alle anderen Proben angewandt.
- Wenn der untersuchte Batch nicht die Quantifizierungsinformationen (Probentyp und Konzentrationen) enthält, werden die Retentionszeit und Schwellenwerte für jeden Peak einzeln berechnet (wie bei vollautomatischen Methoden).

Metrische Kurven

Eine metrische Kurve bildet graphisch die Daten der Spalte einer „Results Table“ gegenüber der X- oder Y-Achse ab, oder sie bildet gegenüberstellend die Daten zweier Spalten ab. Dieser Abschnitt beschreibt, wie man metrische Kurven generiert und mit ihnen arbeitet.

Einige vordefinierte metrische Kurven sind ebenfalls enthalten:

- Int_Std_Response (zum Finden von problematischen Proben)
- Analyte_Area gegenüber Höhe (zum Überprüfen des chromatographischen Verhaltens)
- PK-Profil (Konz. gegenüber Zeitpunkt, wird nach Beispielabfragen durchgeführt)

Mit metrischen Kurven kann man aus einer „Results Table“ eine bestimmte Spalte abbilden, z. B. **Analyte Peak Area**, **Accuracy** oder **Calculated Concentration**. Es können auch zwei Ergebnistabellen-Felder gegeneinander abgebildet werden. Es können dann Punkte untersucht werden, die außerhalb des normalen Bereichs angezeigt werden. Metrische

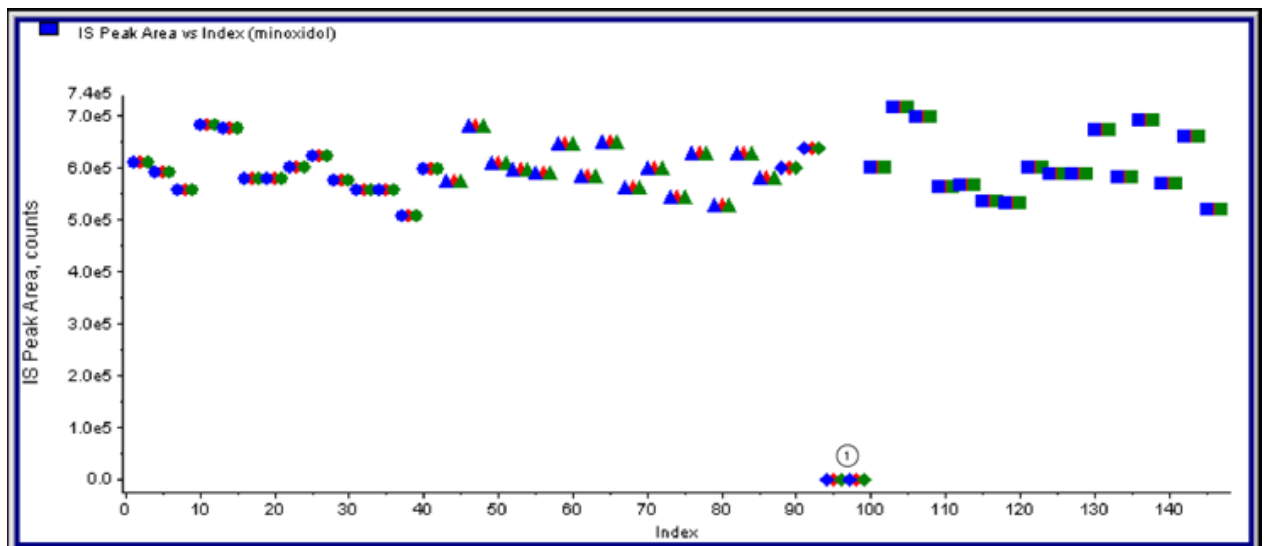
Kurven werden oft mit Abfragen verwendet. Weitere Informationen über Abfragen finden Sie im Dokument: *Hilfe*.

So können metrische Kurven erzeugt werden:

- Mit der Schaltfläche **Plot** stellen Sie eine oder mehrere Spalten der aktuellen „Results Table“ dar, speichern aber die Darstellungskriterien nicht.
- Erstellen Sie eine tabellenspezifische Darstellung, damit Sie die Darstellungskriterien mit der aktuellen Tabelle speichern können.
- Erstellen Sie globale Darstellungskriterien und speichern Sie diese für die Verwendung mit zukünftigen Ergebnistabellen.

Proben des Typs QC, Unbekannt, Leerproben, Doppelleerproben und Lösungsmittelproben können nicht auf der Kalibrierkurve angezeigt werden. Es können jedoch metrische Kurven aus ihnen erzeugt werden.

Abbildung 6-1: Beispiel einer metrischen Kurve für die Peak-Fläche des internen Standards in Abhängigkeit des Probenindex



Element	Beschreibung
1	Doppelte Blindproben

Generieren einer temporären metrischen Kurve

- Bei geöffneter Ergebnistabelle führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
 - Um die Daten der y-Achse mit der x-Achse als Index zu zeichnen, klicken Sie auf die Spaltenüberschrift der zu zeichnenden Daten.
 - Um die Daten der ersten ausgewählten Spalte auf der x-Achse und die Daten der zweiten ausgewählten Spalte auf der y-Achse zu zeichnen, wählen Sie zwei Spalten, indem Sie die Strg-Taste gedrückt halten und gleichzeitig auf die Spaltenüberschriften klicken.

2. Oberhalb der Ergebnistabelle klicken Sie auf das Symbol **Metric Plot by Selection**. Die metrische Kurve wird geöffnet.
3. Klicken Sie mit der rechten Maustaste in das Kurven-Teilfenster und klicken Sie dann auf „Data Legend“, um eine Erklärung der in der Kurve verwendeten Farben zu erhalten.
4. Klicken Sie mit der rechten Maustaste in das Kurven-Teilfenster und klicken Sie dann auf „Point Legend“, um eine Erklärung der in der Kurve verwendeten Symbole zu erhalten.

Generieren einer metrischen Kurve und Speichern der Darstellungskriterien

1. Öffnen Sie eine entsprechende Ergebnistabelle.
2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste in die „Results Table“ und dann auf **Metric Plot > New**.

Abbildung 6-2: Dialogfeld „Metric Plot“

Metric Plot

Name:

Save/Execute

Cancel

Execute

Help

X Axis

Group:

Column:

Y Axis

Group:

Column:

Show

Regression: Weighting:

☒ None

☐ Percent Deviation Percent:

☐ Standard Deviation Multiplier:

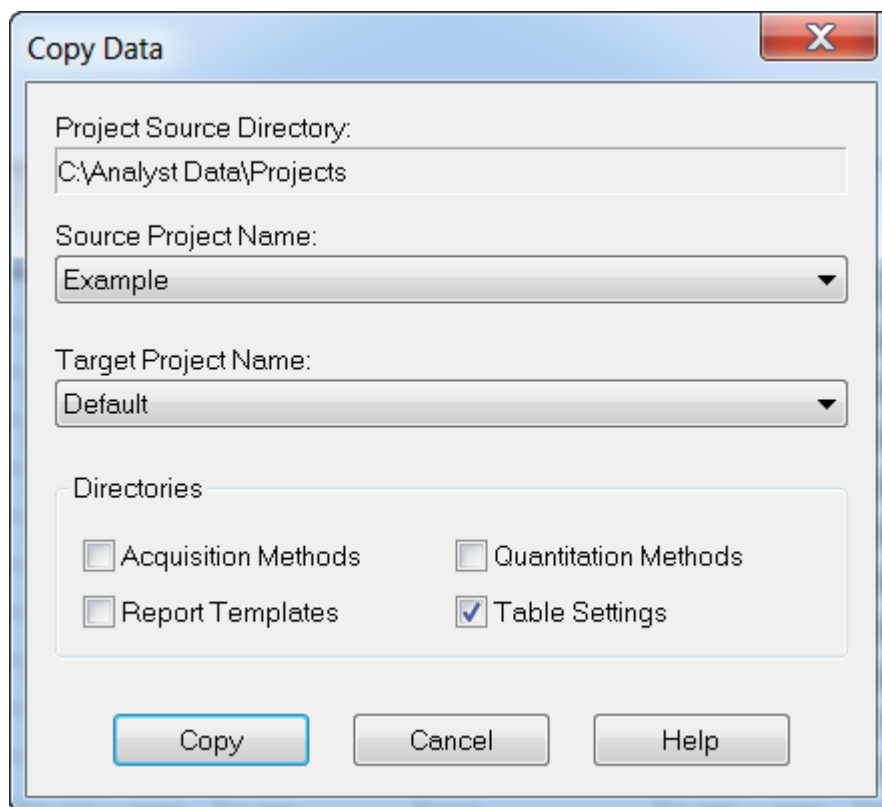
3. Geben Sie in das Feld **Name** den Namen für das neue Darstellungskriterium ein.
4. Wählen Sie in der „X-Axis“-Gruppe in der Liste **Group** die Option **Index** aus und lassen Sie dann die Liste **Column** leer, um ein Feld in der Y-Achse mithilfe der X-Achse als Index abzubilden.

5. Wählen Sie bei Bedarf in der „Y-axis“-Gruppe in der Liste **Group** die Option **Internal Standard** aus und wählen Sie dann in der Liste **Column** die Option **IS Peak Area** aus, um zwei Spalten in Abhängigkeit voneinander aufzuzeichnen.
6. Wählen Sie falls erforderlich in der Liste **Regression** den zu verwendenden Regressionstyp und wählen Sie dann die entsprechenden Regressionseinstellungen.
7. Um die Kurve zu generieren und die Darstellungskriterien zu speichern, klicken Sie auf **Save/Execute**.
Die metrische Kurve wird geöffnet. Für weitere Informationen siehe die Abbildung: [Abbildung 6-1](#).
8. Klicken Sie mit der rechten Maustaste in das Kurven-Teilfenster und klicken Sie dann auf **Data Legend** und Sie erhalten eine Erklärung der in der Kurve verwendeten Farben.
9. Klicken Sie mit der rechten Maustaste in das Kurven-Teilfenster und klicken Sie dann auf **Point Legend** und Sie erhalten eine Erklärung der in der Kurve verwendeten Symbole. Dieser Kriteriensatz ist ab sofort für zukünftige Darstellungen dieser Ergebnistabelle verfügbar. Klicken Sie mit der rechten Maustaste in die Ergebnistabelle, um auf die Kriterien zuzugreifen. Die Darstellungskriterien können ebenfalls bearbeitet werden.
10. Zur Anzeige der problematischen Probe versuchen Sie die Konzentration der Unbekannten gegen die Zeit oder die Fläche des internen Standards gegen den Index zu zeichnen.

Speichern von Standard-Darstellungskriterien für zukünftige Ergebnistabellen

1. Klicken Sie mit der rechten Maustaste in die Ergebnistabelle und klicken Sie dann auf **Table Settings > Export To New Table Settings**.
Dadurch werden die Tabelleneinstellungen aus der rdb-Datei exportiert, damit sie in anderen Quantifizierungsläufen innerhalb des Projekts erneut verwendet werden können.
2. Um die Tabelleneinstellungen in ein anderes Projekt zu exportieren, klicken Sie auf **Tools > Project > Copy Data**.

Abbildung 6-3: Dialog „Copy Data“



Rausch- und Bereichsschwellenwert-Parameter

Zum Erkennen von Peaks benötigt die Software eine Reihe von Rausch- und Bereichsschwellenwert-Parametern. Die Software stellt diese Parameter zu Beginn ein, Benutzer können sie jedoch zu einem späteren Zeitpunkt verändern. Die Software legt die Parameter wie folgt fest:

1. Die Software berechnet die höchste Intensitätsdifferenz zwischen zwei aufeinanderfolgenden Datenpunkten. Diese Zahl stellt die Differenz zwischen zwei Intensitäten dar, nicht die Intensität an sich.
2. Für jedes aufeinanderfolgende Paar, dessen Intensitätsdifferenz niedriger ist als 5 % des in Schritt 1 berechneten Wertes, berechnet die Software die Standardabweichung (mit einem Mittelwert von null) der Intensitätsdifferenzen. Die Software verwendet nicht diejenigen Punktpaare, bei denen die Intensitätsdifferenz größer ist als 5 % des Höchstwertes.
 - Der Rausch-Schwellenwert entspricht der in Schritt 2 berechneten Standardabweichung.
 - Der Bereichsschwellenwert entspricht dem Fünffachen des Rausch-Schwellenwertes.

Hinweis: Der Mindestwert für Rausch- und Bereichsschwellenwert liegt bei 0,000001. Wenn die vorherigen Berechnungen einen Wert ergeben, der unter diesem Mindestwert liegt, setzt die Software diesen Schwellenwert auf 0,000001 zurück.

Erneute Berechnung von Rausch- und Bereichsschwellenwert

Wenn ein neuer Hintergrundbereich definiert wird, berechnet die Software die Rausch- und Bereichsschwellenwerte neu und wie nachfolgend beschrieben.

Für jedes aufeinanderfolgende Datenpunkt-Paar berechnet die Software die Standardabweichung (mit einem Mittelwert von null) der Intensitätsdifferenz. Die Analyst MD Software verwendet alle Punkte im ausgewählten Bereich, da die Software ausdrücklich darüber informiert ist, dass der ausgewählte Bereich Hintergrundrauschen ist.

- Der Rausch-Schwellenwert entspricht der aus dem ausgewählten Bereich berechneten Standardabweichung.
- Der Bereichsschwellenwert entspricht dem Fünffachen des Rausch-Schwellenwertes.

Hinweis: Der Mindestwert für Rausch- und Bereichsschwellenwert liegt bei 0,000001. Wenn die vorherigen Berechnungen einen Wert ergeben, der unter diesem Mindestwert liegt, setzt die Software diesen Schwellenwert auf 0,000001 zurück.

Peak-Integration

Die Folgenden sind Integrationsarten, anhand derer die Basislinie nach der Peak-Suche gefunden und integriert wurde.

- **Manual:** Der Peak wurde manuell vom Benutzer integriert.
- **Automatic:** Der Peak wurde automatisch folgendermaßen integriert:
 - **Baseline-to-baseline:** Die Peak-Fläche wird durch Lotfällung am Anfang und am Ende des Peaks definiert, wobei die senkrechte Linie bis zur Basislinie reicht. Dieser Integrationstyp ist ausschließlich für Peaks geeignet, in deren unmittelbarer Umgebung sich kein anderer Peak befindet.
 - **Valley:** Ebenso wie Baseline-to-Baseline, abgesehen von der Tatsache, dass diese Integrationsart ausschließlich für Peaks geeignet ist, in deren unmittelbarer Umgebung sich ein anderer Peak befindet.
 - **Exponential Skim:** Die Peak-Fläche ist der Haupt- oder übergeordnete Peak in einer exponentiellen Abtrennung.
 - **Exponential Child:** Die Peak-Fläche ist der untergeordnete Peak in einer exponentiellen Abtrennung.

Peak-Bewertung

Während der Peak-Bewertung können Benutzer die Peaks, die die Software ausgewählt hat, untersuchen und dann den Peak oder die Start- und Endpunkte ggf. neu definieren.

Im Allgemeinen ist die Software sehr gut dazu in der Lage, die Peaks von Analyten und internen Standards genau zu identifizieren. Aus einer Vielzahl an Gründen, zu denen die Probenerfassung und die Definition der Quantifizierungsmethode zählen, verfehlt die Software jedoch manchmal den korrekten Peak, wählt den falschen oder ist gar nicht in der Lage, einen Peak zu finden. In anderen Fällen kann es vorkommen, dass die Software den Peak zwar richtig identifiziert, Benutzer jedoch mit den ausgewählten Start- und Endpunkten nicht einverstanden sind.

Tipps zur Peak-Bewertung

Ziel	Aufgabe
Peak Integration: um Peaks zu überprüfen	Um alle Peaks zu überprüfen, stellen Sie sicher, dass alle Proben in der Ergebnistabelle aufgelistet sind. Das Fenster „Peak Review“ enthält die in der „Results Table“ aufgeführten Peaks. Wenn einige Proben in der Tabelle ausgeblendet sind (z. B. bei einer Abfrage), dann werden sie auch im „Peak Review“ ausgeblendet.
Peak Integration: um den ersten Peak in einer Charge zu finden	Klicken Sie mit der rechten Maustaste irgendwo in das Teilfenster „Peak Review“ und klicken Sie dann auf Show First Page . Um den letzten Peak in einer Charge zu finden, klicken Sie mit der rechten Maustaste irgendwo in das Teilfenster „Peak Review“ und klicken Sie dann auf Show Last Page .

Feststellen von Peaks

Die Software stellt Peaks in vier Stufen fest.

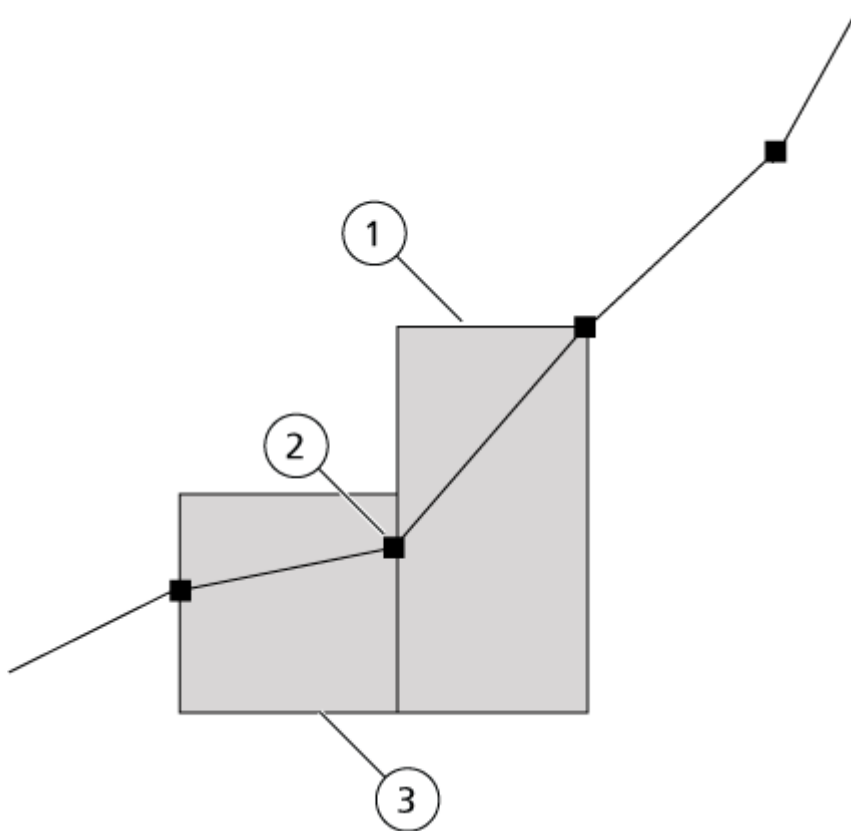
1. Sie findet den potenziellen Peak-Start, indem sie den Abstand zwischen jedem gebündelten Punkt und dem vorherigen untersucht. Wenn der Abstand größer ist als der aktuelle Rausch-Schwellenwert, ist ein potenzieller Peak-Start gefunden.
2. Sie bestätigt den Peak-Start, indem sie überprüft, dass genügend Punkte in einer Reihe vorhanden sind, damit der Bereichsschwellenwert überstiegen wird.
3. Sie findet die Peak-Spitze, indem sie einen Punkt sucht, der niedriger ist als der vorherige Punkt.
4. Sie findet das Ende des Peaks, indem sie den Ort sucht, an dem der Abstand zwischen einem gebündelten Punkt und dem nächsten unter dem Rausch-Schwellenwert liegt. Gegebenenfalls separiert sie dann Peaks.

Suchen des potenziellen Peak-Starts

Um den potenziellen Start eines Peaks zu finden, misst die Software die Intensitätsdifferenz zwischen aufeinander folgenden Paaren gebündelter Punkte, beginnend mit dem ersten

Punkt. Wenn sie eine Differenz findet, die den aktuellen Rausch-Schwellenwert übersteigt, erklärt die Software diesen ersten Punkt zum potenziellen Peak-Start.

Abbildung 6-4: Suchen des potenziellen Peak-Starts



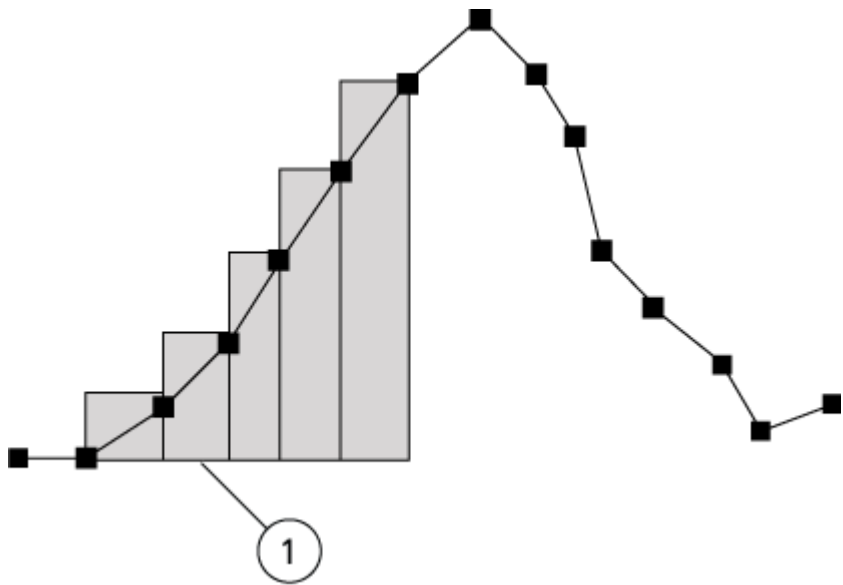
Element	Beschreibung
1	Übersteigt Rausch-Schwellenwert
2	Potenzieller Peak-Start
3	Übersteigt Rausch-Schwellenwert nicht

Bestätigen des Peak-Starts

Um sicherzustellen, dass sie einen echten Peak gefunden hat, bewegt sich die Software an der Kurve entlang, wobei sie die Intensitätsdifferenz zwischen jedem gebündelten Datenpunkt und der Intensität am potenziellen Peak-Start zum Berechnen einer Gesamtsumme hinzufügt. Dieser Prozess wird angehalten, wenn die Intensitätsdifferenz zwischen den nachfolgenden Punkten geringer ist als der Rausch-Schwellenwert. Diese Summe ist der geschätzte Bereich des vorderen Peak-Rands. Wenn diese Summe den Bereichsschwellenwert übersteigt, bestätigt die Software den Peak-Start.

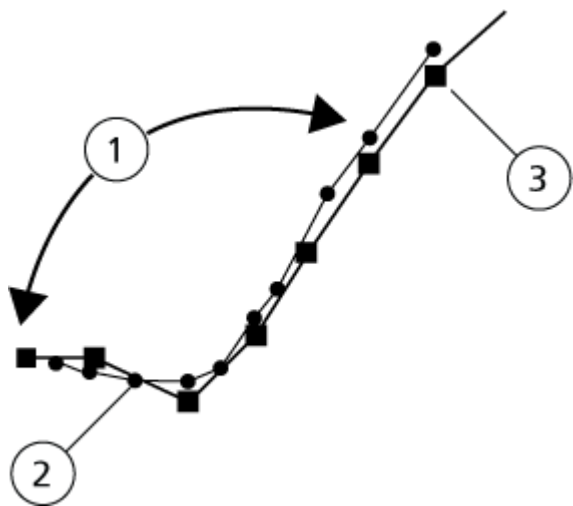
Dann bestimmt die Software den tatsächlichen Start des Peaks, indem sie vom potenziellen Peak-Start rückwärts geht, bis sie den niedrigsten Punkt des Peaks findet. Sie geht durch fünf Rohdaten-Bündel zurück. Dieser Punkt ist der tatsächliche Peak-Start.

Abbildung 6-5: Bestätigen des Peak-Starts



Element	Beschreibung
1	Summe der Bereichsanteile, die den Bereichsschwellenwert übersteigen

Abbildung 6-6: Bestätigen des tatsächlichen Peak-Starts



Element	Beschreibung
1	Durchsicht der Datenpunkte in dieser Region
2	Minimaler Datenpunkt
3	Potenzieller Peak-Start

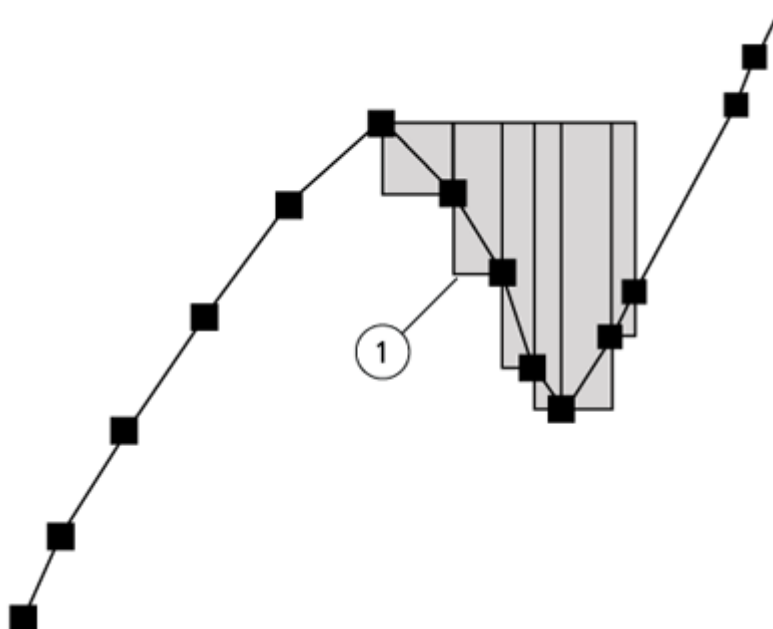
Suchen der Peak-Spitze

Um die Peak-Spitze zu finden, sucht die Software zunächst einen Punkt, der niedriger ist als der vorherige Punkt. Um zu bestätigen, dass sie die Spitze tatsächlich gefunden hat, bildet sie danach die Summe der Intensitätsdifferenzen zwischen der potenziellen Spitze und den folgenden gebündelten Punkten, bis sie das Ende des Peaks erreicht hat. Wenn der Gesamtabstand zwischen den Punkten zwei Drittel des Bereichsschwellenwerts übersteigt, ist die Peak-Spitze bestätigt. Das heißt, die Software vergewissert sich zunächst, dass sie den Peak gefunden hat, und geht dann zurück, um dessen Spitze zu finden.

Wenn die Software jedoch einen höheren gebündelten Punkt findet, bevor der Bereichstest bestanden ist, identifiziert sie eine neue Spitze und startet den Bereichstest erneut.

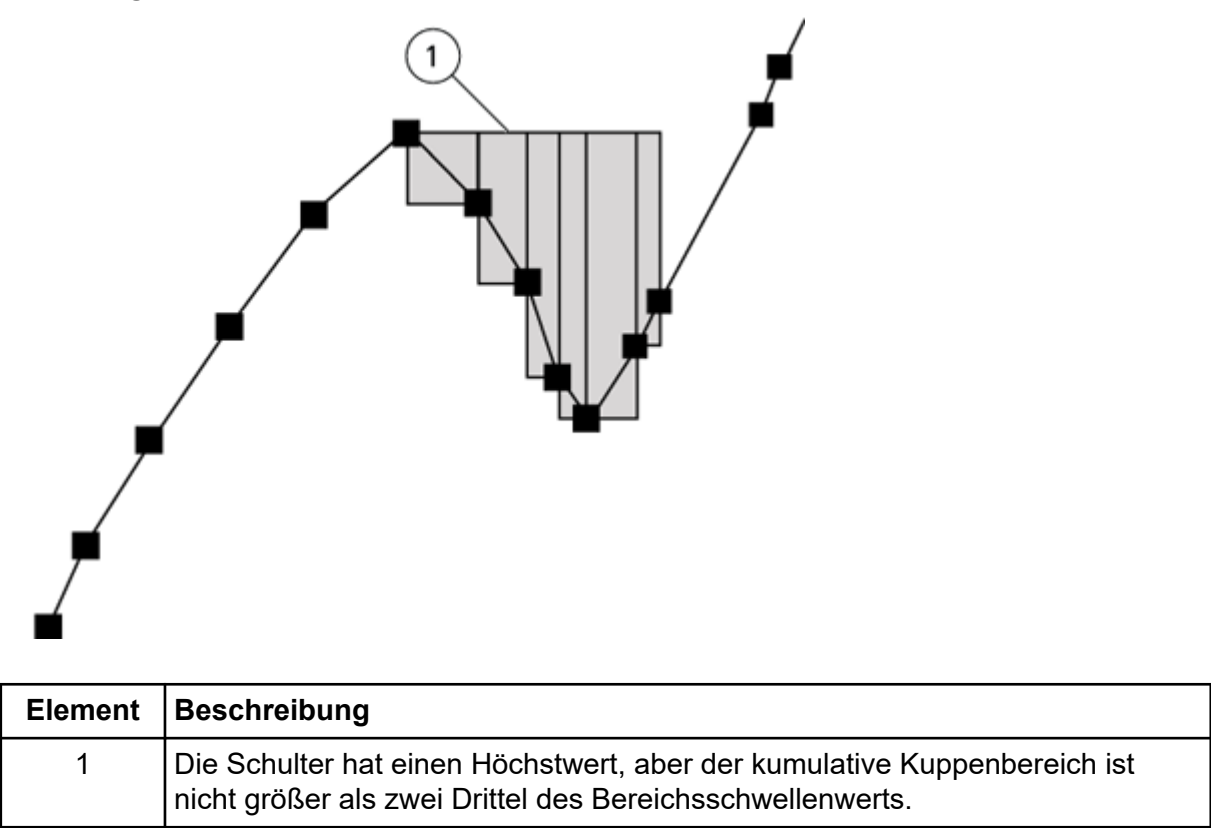
Hinweis: Die tatsächliche Retentionszeit für einen Peak ist nicht einfach der Punkt, der anhand der zuvor beschriebenen Vorgehensweise identifiziert wird. Stattdessen wird sie durch eine quadratische Passung anhand der drei höchsten Datenpunkte bestimmt.

Abbildung 6-7: Suchen der Peak-Spitze



Element	Beschreibung
1	Die Summe der Bereichsanteile ist größer als zwei Drittel des Bereichsschwellenwerts.

Abbildung 6-8: Identifizieren einer neuen Peak-Spitze



Finden des Peak-Endes

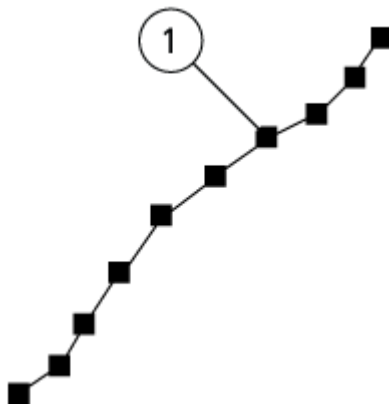
Die Software sieht einen Punkt als Peak-Endpunkt an, wenn eine der folgenden Aussagen zutrifft:

- Die Differenz zwischen zwei aufeinander folgenden Punkten besteht den Rausch-Schwellenwerttest nicht.
- Die Software erkennt den Start eines neuen Peaks.

In beiden Fällen wird der niedrigste gebündelte Punkt der letzten fünf Bündel als tatsächlicher Endpunkt des Peaks betrachtet.

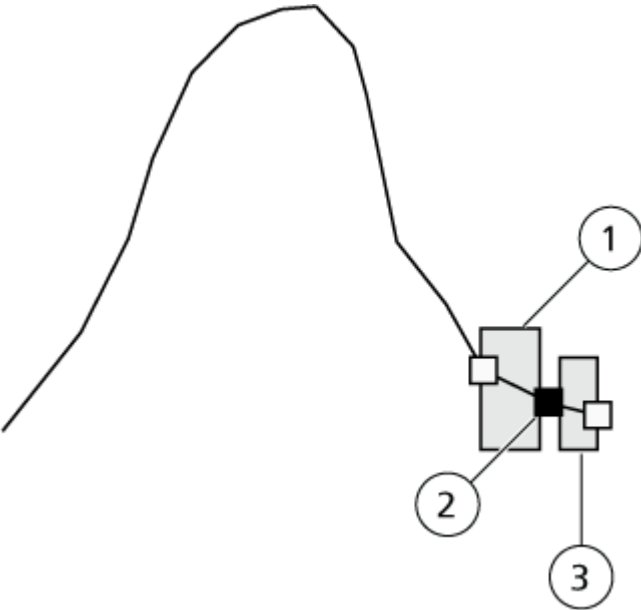
Für gewöhnlich findet die Software mehrere Peaks für jedes Chromatogramm. Sie wählt den Peak aus, dessen Retentionszeit der erwarteten, in der Methode festgelegten Retentionszeit am nächsten ist. Wenn kein Peak eine Retentionszeit aufweist, die innerhalb der Spezifikationen liegt, dann markiert die Software den Peak als nicht gefunden.

Abbildung 6-9: Suchen von Peaks



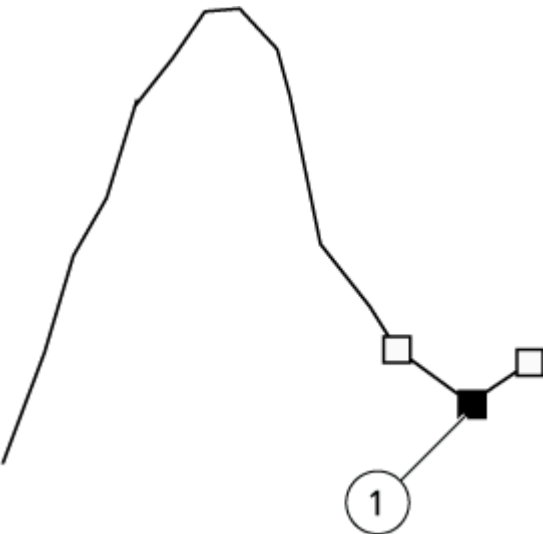
Element	Beschreibung
1	Die Schulter hat keinen separaten Höchstpunkt

Abbildung 6-10: Suchen des Peak-Endes: Fall 1



Element	Beschreibung
1	Übersteigt Rausch-Schwellenwert
2	Peak-Ende
3	Übersteigt Rausch-Schwellenwert nicht

Abbildung 6-11: Suchen des Peak-Endes: Fall 2



Element	Beschreibung
1	Peak-Ende

Separate Peaks

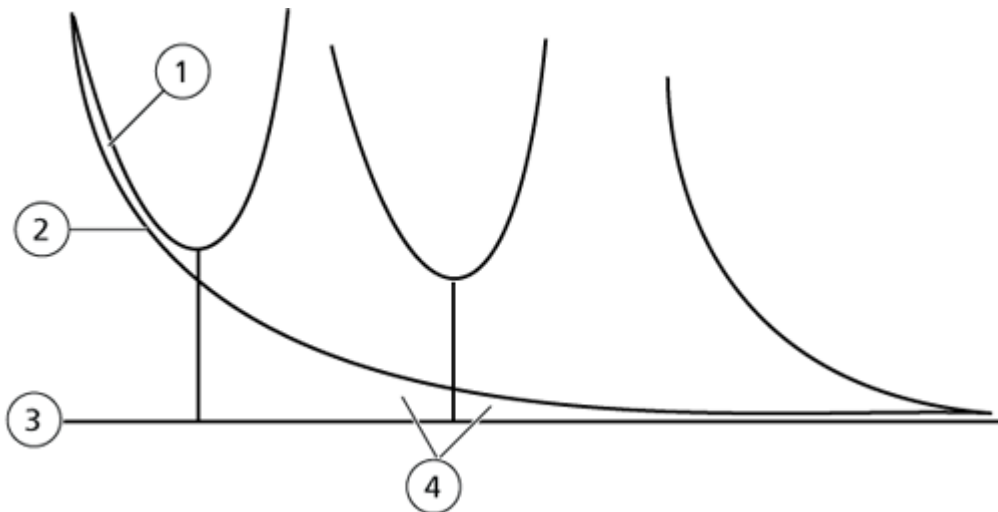
Wenn ein neuer Peak beginnt, bevor der aktuelle Peak die Basislinie erreicht, entscheidet die Software nach den folgenden Kriterien, ob die Basislinie mithilfe von exponentiellen Abtrennungen aufzulösen ist. Die Abtrennung passiert den Bereich unterhalb eines oder mehrerer Peaks, die hinter dem Vorläufer liegen. Diese Peaks werden als Produkt-Peaks bezeichnet.

Wenn die Software eine exponentielle Abtrennung durchführt, subtrahiert sie den Bereich unterhalb der Abtrennung eines Produkt-Peaks und fügt diesen dem Vorläufer-Peak hinzu. Sie subtrahiert dann den kleinen Bereich über der Abtrennung vom Vorläufer-Peak und fügt ihn dem ersten Produkt-Peak hinzu.

Die Software entscheidet anhand der folgenden Kriterien, ob sie die exponentielle Abtrennung verwendet:

- Exponentielles Peak-Verhältnis
- Exponentiell angepasstes Verhältnis
- Exponentielles Valley-Verhältnis

Abbildung 6-12: Separate Peaks: exponentielle Abtrennung



Element	Beschreibung
1	Dieser Bereich wird vom Vorläufer-Peak subtrahiert und dem ersten Produkt-Peak hinzugefügt.
2	Exponentielle Abtrennung
3	Cluster-Basislinie
4	Diese Bereiche werden von den Produkt-Peaks subtrahiert und den Vorläufer-Peaks hinzugefügt.

Abfragen

Eine Abfrage ist ein Verfahren, um nur diejenigen Datensätze auszuwählen, die bestimmte Kriterien erfüllen. Benutzer können Abfragen verwenden, um bestimmte Teile der Daten in der Ergebnistabelle, die für sie von Interesse sind, anzusehen. Hierfür wird eine textbasierte oder mathematische Auswahl getroffen. Eine in einem Projekt abgespeicherte Abfrage ist in allen Ergebnistabellen dieses Projekts verfügbar.

Wenn eine Abfrage durchgeführt wird, zeigt die Tabelle nur die Datenreihen an, die die ausgewählten Kriterien erfüllen. Alle Spalten werden angezeigt. Die Auswahl kann weiter verfeinert werden, indem eine zweite Abfrage für die Reihen durchgeführt wird, die nach der ersten Abfrage angezeigt werden.

Sie können vordefinierte Auswahlen und manuelle Eingaben verwenden, um eine Abfrage zu erstellen, die ausgeführt, gespeichert oder verändert werden kann. Jede Zeile der Abfrage funktioniert wie eine Boole'sche Suche, die für die Spalten der Ergebnistabelle durchgeführt wird, um festzulegen, welche Datensätze angezeigt werden sollen. Jede Zeile der Abfrage wählt nur diejenigen Datensätze zum Anzeigen aus, die ihre Kriterien erfüllen. Es kann eine voreingestellte oder tabellenspezifische Abfrage definiert werden.

Wir empfehlen, dass der Benutzer alle Abfragen validiert, mit denen Daten in einer Ergebnistabelle analysiert werden.

Abfragen nach Probentyp

Bei einer Abfrage, die ausschließlich zur Auswahl des Standardprobentyps entworfen wurde, zeigt die Ergebnistabelle nur die Datenreihen an, die „Standard“ in der Spalte „Sample Type“ enthalten.

Standardabfragen und tabellenspezifische Abfragen

Eine Standardabfrage wird im Allgemeinen zur Identifizierung von Proben verwendet, die gewisse Kriterien nicht erfüllen. Eine tabellenspezifische Abfrage wird im Allgemeinen zur Identifizierung von Datensätzen verwendet, die gewisse Kriterien erfüllen.

Die Standardabfrage wird im Allgemeinen verwendet, um Probleme bei der Qualitätskontrolle oder bei Standards zu finden. Wenn eine Konzentration und eine maximale Variation der Qualitätskontrollen und Standards im Quantitation Method Wizard ausgewählt werden, dann zeigt die Ergebnistabelle nur die Proben an, die außerhalb dieses Bereichs liegen. Wenn die Ergebnistabelle nichts anzeigt, sind alle Proben in Ordnung. Wenn das Kontrollkästchen „Execute Query as Standard Query“ aktiviert wurde, werden alle Proben in der Ergebnistabelle angezeigt, jedoch zudem mit den Status „Fail“ oder „Pass“ in der Spalte „Standard Query Status“, je nachdem, ob die Proben die Abfrage bestanden haben oder nicht.

Tabellenspezifische Abfragen werden an einer geöffneten Ergebnistabelle durchgeführt, wobei die Datensätze ausgewählt werden, die bestimmte Kriterien erfüllen. Zum Entwerfen dieser Abfragen verwenden Sie das Menü, das verfügbar wird, wenn Sie mit der rechten Maustaste auf die Tabelle klicken. Speichern und exportieren Sie die Abfrage, um sie für zukünftige Ergebnistabellen verfügbar zu machen.

Tabellenspezifische oder globale Einstellungen

Bei der Arbeit mit Tabelleneinstellungsoptionen können die Verfahren tabellenspezifisch oder global sein.

- **Table-specific settings:** Beim Bearbeiten von Tabelleneinstellungen an der Tabelle selbst sind die vorgenommenen Einstellungsänderungen ausschließlich für diese Tabelle verfügbar. Diese können jedoch als globale Einstellungen exportiert werden.
- **Global settings:** Beim Bearbeiten globaler Einstellungen werden Änderungen an einer Gruppe von Einstellungen vorgenommen, die auf zukünftige Ergebnistabellen angewandt werden können. Um eine gerade erstellte Ergebnistabelle individuell anzupassen, wählen Sie eine Gruppe von Einstellungen auf der Seite „Create Quantitation Set: Select Settings & Query“. Wenn keine Gruppe von Einstellungen ausgewählt ist, verwendet die Software automatisch die Voreinstellungen.

Wie Genauigkeitsvariationen die Ergebnisse beeinflussen

Bei voreingestellten Abfragen wird die Genauigkeit als Prozentzahl angegeben und als +/- diese Zahl implementiert. Beispiel: Wenn die **Maximum Variation for standards** im Dialogfeld „Create Default Query“ mit 10 eingegeben wird, dann werden alle Datensätze mit Standards, deren Variation außerhalb von 90 % und 110 % liegen, in der „Results Table“ angezeigt. Wenn 5 eingegeben wird, werden nur die Standards in der „Results Table“ angezeigt, deren Genauigkeit unter 95 % und über 105 % liegt. Siehe Abschnitt: „[Results Tables](#)“.

Regressionsgleichungen

Dieser Abschnitt beschreibt die Gleichungen, die zur Berechnung der Regressionskurven verwendet werden. In den folgenden Gleichungen stellt x die Analytenkonzentration für Standardproben und y die entsprechende Peak-Fläche oder -Höhe dar. Die genauen Variablen für die Regression hängen davon ab, ob der interne Standard verwendet wird oder ob die Peak-Fläche oder -Höhe wie in der folgenden Tabelle gezeigt verwendet wird.

Tabelle 6-6: Regressionsvariablen

Interner Standard verwendet?	Fläche verwendet?	x	y
Ja	Ja	$C_a / C_{ist} / DF$	A_a / A_{ist}
Ja	No	$C_a / C_{ist} / DF$	H_a / H_{ist}
No	Ja	C_a / DF	A_a
No	No	C_a / DF	H_a

wobei Folgendes gilt:

- C_a = Ist-Konzentration des Analyten
- C_{ist} = Konzentration des internen Standards

- DF = Verdünnungsfaktor
- A_a = Peak-Fläche des Analyten
- A_{ist} = Peak-Fläche des internen Standards
- H_a = Peak-Höhe des Analyten
- H_{ist} = Peak-Höhe des internen Standards

Anpassen der Optionen

Die Passung gibt die Art der Regressionsanalyse an, die auf die Daten angewendet werden soll. Die verschiedenen Passungsoptionen sind „Linear“, „Linear durch Ursprung“, „Durchschnittlicher Ansprechfaktor“, „Potenz“ und „Quadratisch“.

Linear Regression

Die lineare Regression geht davon aus, dass die Punkte des Standards eine Gerade bilden.

Die lineare Kalibrierungsgleichung lautet:

$$y = mx + b$$

Steigung und Achsenabschnitt werden wie folgt berechnet:

$$m = (\sum w \sum wxy - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

wobei Folgendes gilt:

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

Linear durch den Ursprung

Die lineare Regression durch den Ursprung geht davon aus, dass die Punkte des Standards eine Gerade bilden und dass die Punkte durch den Nullpunkt auf der x- und y-Achse verlaufen. Verwenden Sie diese Einstellung, um die Gerade dazu zu zwingen, durch den Nullpunkt zu verlaufen.

Die Kalibrierungsgleichung für lineare Regression durch den Ursprung lautet:

$$y = mx$$

Die Steigung wird wie folgt berechnet:

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

Mittlerer Reaktionsfaktor

Der mittlere Reaktionsfaktor beträgt:

$$y = mx$$

Dies ist die gleiche Gleichung wie bei der linearen Nullpunktkalibrierung. Die Steigung wird jedoch anders berechnet:

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

und die Standardabweichung des Reaktionsfaktors:

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1)) / \sum w}$$

wobei Folgendes gilt:

$$D = \sum w \sum wy^2 / x^2 - (\sum wy / x)^2$$

Hinweis: Punkte, deren x-Wert gleich null ist, werden nicht summiert.

Wenn die Linie der Punkte teils linear und teils gekrümmt ist, verwenden Sie anstatt der linearen oder quadratischen Regression die Potenzregression, um eine Linie irgendwo zwischen diesen Passungen zu erzeugen.

Potenz

Die Potenzfunktionskalibrierungsgleichung lautet:

$$y = ax^p$$

Die Gleichungen für die lineare Kalibrierung werden wie oben beschrieben für die Berechnung von Steigung (m) und Achsenabschnitt (b) verwendet. Der Unterschied besteht jedoch darin, dass x in diesen Gleichungen ersetzt wird durch ln x und y durch ln y. In diesem Fall werden a und p wie folgt berechnet:

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Wenn einer der x- oder y-Werte negativ oder null ist, wird ein Fehler gemeldet.

Quadratisch

Die quadratische Kalibrierungsgleichung lautet:

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

Die Polynomkoeffizienten werden wie folgt berechnet:

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum wy - a_1\sum wx - a_2\sum wx^2) / \sum w$$

wobei Folgendes gilt:

$$b_0 = \sum wx / \sum w - \sum wx^2 / \sum wx$$

$$b_1 = \sum wx^2 / \sum w - \sum wx^3 / \sum wx$$

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$

$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2 y / \sum wx^2$$

Gewichtungsfaktoren

Die folgende Tabelle zeigt, wie der Gewichtungsfaktor (w) für jede der sieben Gewichtungsarten berechnet wird.

Tabelle 6-7: Gewichtungsfaktoren

Weighting Type	Gewicht (w)
Keine	immer 1,0
1/x	Wenn $ x < 10^{-5}$, dann $w = 10^5$, andernfalls $w = 1/ x $.
1/x ²	Wenn $ x < 10^{-5}$, dann $w = 10^{10}$, andernfalls $w = 1/x^2$.
1/y	Wenn $ y < 10^{-8}$, dann $w = 10^8$, andernfalls $w = 1/ y $.
1/y ²	Wenn $ y < 10^{-8}$, dann $w = 10^{16}$, andernfalls $w = 1/y^2$.
ln (x)	Wenn $x < 0$, dann wird ein Fehler generiert. Wenn $x < 10^{-5}$, dann $w = \ln 10^5$. Andernfalls $w = \ln x $.
ln (y)	Wenn $y < 0$, dann wird ein Fehler generiert. Wenn $y < 10^{-8}$, dann $w = \ln 10^8$. Andernfalls $w = \ln y $.

Berichtsvorlagen

In diesem Abschnitt werden die verschiedenen Elemente der Berichtsvorlagen beschrieben, die mit dem **Report Template Editor** im Abschnitt **Configure** auf der Navigationsleiste in der Analyst MD Software erstellt werden.

Die folgenden Informationen können zu den Kopf- und Fußzeilen der Dokumente hinzugefügt werden.

Hinweis: Erstellen Sie eine Sicherungskopie der vorliegenden Berichtsvorlagen, bevor Sie diese bearbeiten.

Tabelle 6-8: Grundlegende Entwurfselemente

Element	Definition
Printing Date	(Druckdatum) Das Datum, an dem das Dokument gedruckt wurde.
Printing Time	(Druckzeit) Die Uhrzeit, zu der das Dokument gedruckt wurde.
Operator	(Bediener) Der Bediener, der das Dokument gedruckt hat.
Workstation	(Workstation) Die Workstation, an der das Dokument gedruckt wurde.
Page n of N	(Seite n von N) Seitennummer der Gesamtseitenzahl.
Custom Field	(Benutzerdefiniertes Feld) Erstellen Sie hier einen benutzerdefinierten Text.
Analyst Version	(Analyst-Version) Version der Analyst MD Software.
User Type	(Benutzertyp) Benutzertyp (Sicherheit).
Electronic Signature	(Elektronische Signatur) Gibt an, ob die Funktion der elektronischen Signatur (Sicherheit) aktiviert oder deaktiviert ist.

Tabelle 6-9: Erfassungselemente

Element	Definition
Acquisition File	Der Name der Datendatei mit den Probenerfassungs-Informationen.
Acquisition Date	Datum der Probenerfassung.
Acquisition Time	Uhrzeit der Probenerfassung.
Operator	Name des Bedieners, der die Proben-Charge durchgeführt hat.
Batch Name	Name der Charge.
Sample Number	Nummer der Probe.
Sample Name	Bezeichnung der Probe.
Sample Comment	Kommentar zur Probe, die mit dem Acquisition Method Editor eingegeben wurde.
Sample ID	Identifikationsnummer der Probe.
Scan Mode	Die Methode, mit der das System die Massenpunkte für einen Scan für einen vollständigen Massenbereichs-Scan berechnet.

Tabelle 6-9: Erfassungselemente (Fortsetzung)

Element	Definition
Scan Type and Polarity	Scan-Methode der Erfassung (Q1, Q3, MRM, Produkt-Ion, Vorläufer-Ion, Neutralverlust/Gewinn) und Polarität der Erfassungsmethode (positiv oder negativ).
Scan Mass(es)	Die zu scannenden Ionen oder Ionenfragmente.
Dwell Time	Die Zeit, die das System für den Scan einer bestimmten Masse benötigt.
Pause Time	Pause zwischen dem Scannen von Massenbereichen oder zwischen Experimenten.
Ion Energy	Die Ionenenergie kommt von der Erfassungsmethode und steht im Zusammenhang mit der Spannung der IonSpray-Ionenquelle oder der Stoßenergie.
Collision Energy	Die Stoßenergie kommt von der Erfassungsmethode und steht im Zusammenhang mit der Spannung der IonSpray-Ionenquelle.
Period and Experiment	Ein Zeitraum umfasst eine Reihe von Experimenten. Ein Experiment umfasst eine Vielzahl von Eigenschaften wie Scan Type , Scan Mode , Resolution , Ion Source Parameters und eine Reihe von Massenbereichen oder Massen.
State Table Parameters	Die im Experiment verwendeten Massenspektrometer-Parameter.
Pumpe	Name der für das Experiment verwendeten Pumpe.
Autosampler	Name des für das Experiment verwendeten Probengebers.
Custom Annotation	Im „Batch Editor“ eingegebener benutzerdefinierter Text.
Collected By	Name der Person, die die Daten erfasst hat.

Tabelle 6-10: Quantifizierungselemente

Element	Definition
Results Table Name	Name der „Results Table“
Results Table Path	Speicherort der „Results Table“
Method Name	Name der Quantifizierungsmethode.
Method Path	Speicherort der Methoden-Datei.

Tabelle 6-10: Quantifizierungselemente (Fortsetzung)

Element	Definition
Project Name	Name des Projekts.

Anpassen von Berichten

Der Report Template Editor bietet die Möglichkeit, Berichte nach Wunsch des Benutzers mit angepassten Kopfzeilen, Fußzeilen und Seitenlayouts zu erstellen. Verwenden Sie Berichtsvorlagen sowohl bei Druckausgabe als auch bei Datenexport nach einer anderen Anwendung.

Die Druckausgabe umfasst verschiedene Elementarten.

- **Fenster:** Fenster werden im Arbeitsbereich des Softwarefensters, unterhalb der Werkzeugleiste und rechts von der Navigationsleiste, geöffnet. Beim Drucken eines Fensters wird der gesamte in diesem Bereich angezeigte Inhalt gedruckt.
- **Teilfenster:** Teilfenster sind Teile von Fenstern, die so angeordnet sind, dass sie sich nicht überlappen und jederzeit vollständig sichtbar sind. Das Fenster „Method Editor“ beispielsweise enthält zwei Teilfenster: Das Teilfenster „Browser“ und das Teilfenster „Method Editor“. Benutzer können Informationen aus jedem im Fenster angezeigten Teilfenster drucken.
- **Bericht:** Berichte sind ein strukturierter Satz an Informationen, die in der Software erstellt werden. Einige Berichte können direkt gedruckt werden, z. B. Kalibrierungsberichte. Andere Informationen müssen exportiert werden, z. B. Batches und Quantifizierungs-Ergebnistabellen.

Vorschau, Drucken und Exportieren von Berichten

Erfassungsmethoden, Chargen, Quantifizierungs-„Results Tables“ und Diagramm-„Results Tables“ können als Berichte exportiert werden. Andere Informationsformen wie Rechnerdaten können exportiert werden, es besteht jedoch nicht die Möglichkeit, diese mit einer Berichtsvorlage anzupassen.

Die meisten auf dem Bildschirm angezeigten Bereiche können gedruckt werden. Anhand der Funktion „Print Preview“ haben Benutzer die Möglichkeit, eine Druckvorschau von Diagrammen anzuzeigen und Diagramme zu skalieren oder zu kopieren.

Ein exportierter Bericht wird in einem Dateiformat gespeichert, das für Programme wie Notepad, Microsoft Word, Excel oder für LIMS (Laboratory Information Management System)-Softwareanwendungen geeignet ist.

Berichte in folgenden Formaten exportieren:

- csv
- doc
- pdf
- txt

Die verfügbaren Formate hängen von den zu exportierenden Informationen ab. Ein Diagramm kann zum Beispiel als pdf exportiert werden. Und eine Datentabelle als txt-Datei.

Um zusätzliche Informationen in die Kopf- und Fußzeile des Berichts einzufügen, drucken Sie den Bericht unter Verwendung einer entsprechenden Berichtsvorlage aus.

Tabelle 6-11: Vorschau, Drucken und Exportieren von Berichten

Ziel	Aufgabe
Anzeigen einer Diagramm-Vorschau	Klicken Sie auf File > Print Preview > Pane .
Drucken eines Berichts ohne Vorlage	Klicken Sie auf File > Print und dann auf den zu druckenden Bericht.
Drucken eines Berichts mit Vorlage	<ol style="list-style-type: none">1. Klicken Sie auf File > Print & Report Setup.2. Im Abschnitt Report Template wählen Sie die zu verwendende Vorlage und klicken Sie dann auf OK.
Exportieren eines Berichts	<ol style="list-style-type: none">1. Klicken Sie auf File > Export.2. Geben Sie im Feld File den Namen der Datei ein.3. Wählen Sie in der Liste Save as type den Dateityp aus.4. Wenn Sie einen Bericht im „Quantitate“-Modus exportieren, wählen Sie entweder All Columns oder Visible Columns im Abschnitt Export und klicken Sie dann auf Save.

„Results Tables“

Ergebnistabellen fassen die berechnete Konzentration eines Analyten in jeder unbekannten Probe basierend auf der Kalibrierkurve zusammen. Sie enthalten auch die Kalibrierkurven und Statistiken zu den Ergebnissen.

Exportieren Sie Daten aus Ergebnistabellen als txt-Datei zur Verwendung in anderen Anwendungen, z. B. Microsoft Excel. Es können entweder alle möglichen Daten in einer Tabelle oder nur die Daten in den sichtbaren Spalten exportiert werden.

Hinweis: Wir empfehlen, dass Benutzer nur kontrollierte Methoden, z. B. das Exportieren von „Results Tables“ und die Berichterstellung, verwenden, um Daten aus der Analyst MD Software auszugeben. Andere Methoden zur Datenausgabe wie Kopieren aus „Results Tables“ und Einfügen sind unkontrolliert und dürfen nicht verwendet werden.

Es gibt drei verschiedene Sortierungsmöglichkeiten für Daten in einer Ergebnistabelle:

- Mit einer der **Sort**-Schaltflächen können Sie eine Tabelle schnell sortieren. Diese Sortierkriterien können nicht gespeichert werden.
- Erstellen Sie eine tabellenspezifische Sortierung, damit Sie die Sortierkriterien mit der aktuellen Tabelle speichern können. Mit tabellenspezifischen Sortierungen können 1 bis

3 Spalten der aktuellen Tabelle sortiert und das Sortierkriterium für die Verwendung mit dieser Tabelle gespeichert werden.

- Verwenden Sie ein zuvor erstelltes Sortierkriterium. Erstellen und speichern Sie ein Sortierkriterium, um es später auf eine Ergebnistabelle anzuwenden.

Tipp! Zum Speichern neuer Sortierkriterien oder Tabelleneinstellungen klicken Sie mit der rechten Maustaste in die Tabelle und klicken Sie dann auf **Table Settings > Export To New Table Settings**. Das Sortierkriterium und andere Parameter können im aktuellen Projekt verwendet werden. Um Tabelleneinstellungen in einem anderen Projekt zu verwenden, kopieren Sie diese in ein anderes Projekt durch Klicken auf **Tools > Project > Copy Data**. Wählen Sie den **Source Project Name** und den **Target Project Name**, aktivieren Sie das Kontrollkästchen für **Table Settings** unter „Directories“ und klicken Sie dann auf **Copy**. Wenn die **Table Settings** in einem neuen Projekt verwendet werden sollen, dann muss vor dem Kopieren der **Table Settings** zunächst das neue Projekt erstellt werden.

Anzeigen eines spezifischen Layouts für „Results Tables“

Die Standardansicht für „Results Tables“ ist das „Full Layout“ oder das „Summary Layout“. Falls mehrere Analyten pro Probe vorhanden sind, kann jeder Analyt im „Analyte Layout“ angezeigt werden.

Klicken Sie bei geöffneter und aktiver „Results Table“ mit der rechten Maustaste und klicken Sie dann auf eines der folgenden Felder:

Tabelle 6-12: „Results Table“-Layouts

Feld	Beschreibung
Full	Klicken Sie darauf, um das „Full Layout“ anzuzeigen.
Summary	Klicken Sie auf einen Feldnamen.
Analyte	Klicken Sie auf einen einzelnen Analyten, um das „Analyte Layout“ anzuzeigen. Bei der Anzeige der MRM- oder <i>Scheduled</i> MRM-Algorithmus-Ergebnisse können Benutzer auf Analyte klicken, um eine Liste der Verbindungs-IDs anzuzeigen.
Analyte Group	<p>Klicken Sie auf eine Analyt-Gruppe, um das „Analyte Group Layout“ anzuzeigen.</p> <hr/> <p>Tipp! Eine neue Analyten-Gruppe muss zuerst angelegt werden. In einer „Results Table“ klicken Sie dazu mit der rechten Maustaste und klicken dann auf Analyte Group > New..</p> <hr/>
Sample Type	Klicken Sie darauf, um einen bestimmten Probenotyp anzuzeigen.

Sortieren von Daten in einer Ergebnistabelle

1. Wählen Sie bis zu drei Spalten in der Ergebnistabelle in der Reihenfolge, in der diese sortiert werden sollen.

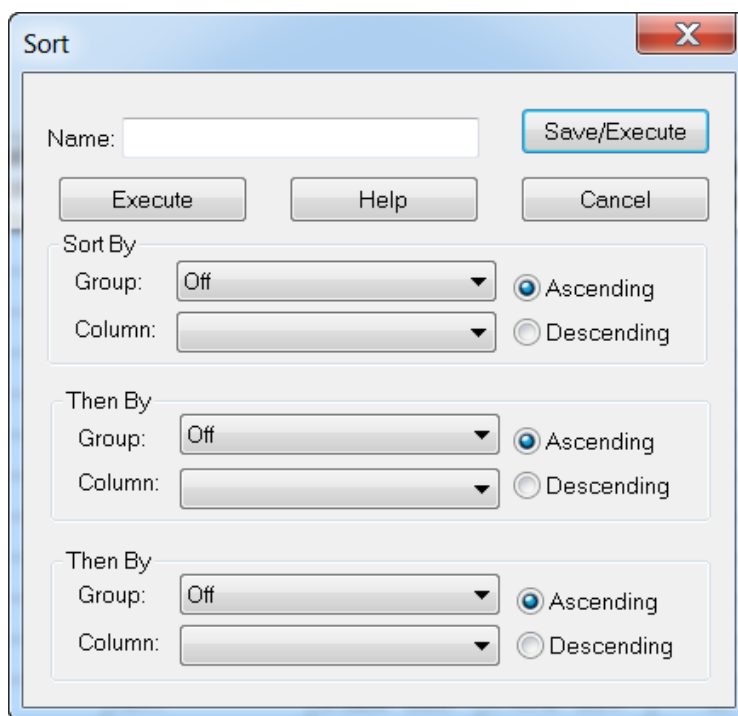
2. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:

- Um in aufsteigender Reihenfolge zu sortieren, klicken Sie auf **A-Z**.
- Um in absteigender Reihenfolge zu sortieren, klicken Sie auf **Z-A**.

Sortieren einer Ergebnistabelle und Speichern der Sortierkriterien

1. Klicken Sie dazu mit der rechten Maustaste in eine Ergebnistabelle und klicken Sie dann auf **Sort > New**.

Abbildung 6-13: Dialog „Sort“

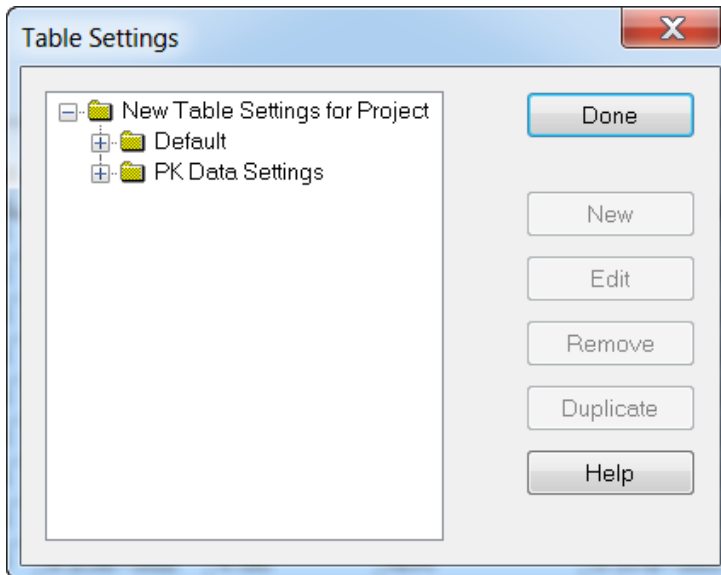


2. Geben Sie in das Feld **Name** den Namen für das neue Sortierkriterium ein.
3. Für jedes Sortierkriterium gehen Sie in den Abschnitten **Sort By** und **Then By** wie folgt vor:
- Wählen Sie in der Liste **Group** die Spaltenart aus, nach der sortiert werden soll.
 - In der Liste **Column** wählen Sie die Spalte aus, nach der sortiert werden soll.
 - Wählen Sie die Sortierrichtung: **Ascending** oder **Descending**.
4. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
- Um die Sortierung durchzuführen, speichern Sie die Sortierkriterien, schließen das Dialogfeld **Sort** und klicken auf **Save/Execute**.
 - Um die Sortierung durchzuführen und das Dialogfeld **Sort** ohne Speichern der Sortierkriterien zu schließen, klicken Sie auf **Execute**.

Speichern von Standard-Sortierkriterien für zukünftige Ergebnistabellen

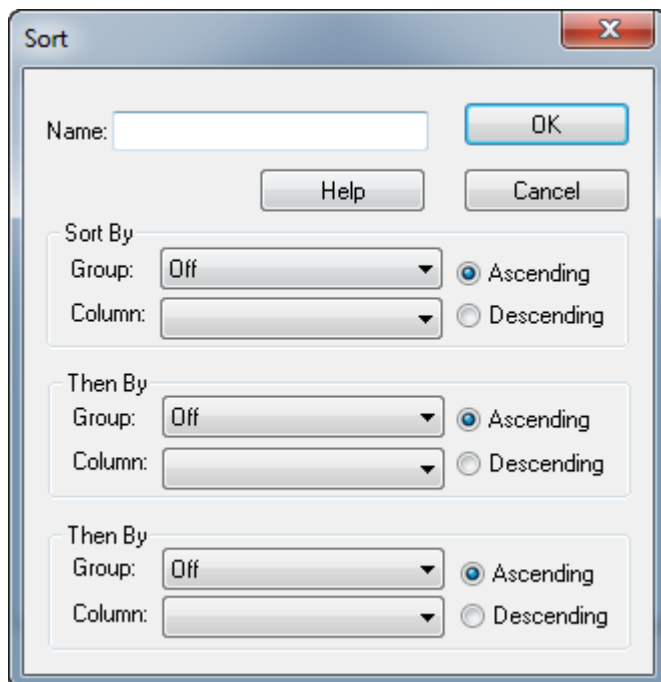
1. Klicken Sie auf **Tools > Settings > New Quantitation Results Table Settings**.

Abbildung 6-14: Dialog „Table Settings“



2. Erweitern Sie den Ordner **Table Settings** und doppelklicken Sie dann auf den Ordner **Default**.
3. Im erweiterten Ordner **Default** wählen Sie den Ordner **Sorts** aus.
4. Klicken Sie auf **New**.

Abbildung 6-15: Dialog „Sort“



5. Geben Sie einen Namen im Feld **Name** ein.
6. Führen Sie im Abschnitt „Sort By“ für jedes gewünschte Sortierkriterium Folgendes durch:
 - a. In der Liste **Group** wählen Sie die Spaltenart aus.
 - b. In der Liste **Column** wählen Sie die Spalte aus.
 - c. Wählen Sie die Sortierrichtung: **Ascending** oder **Descending**.
7. Um die Sortierung zu speichern, schließen Sie das Dialogfeld „Sort“ und klicken Sie auf **OK**.
8. Klicken Sie auf **Done**.

Sortieren einer Ergebnistabelle mit voreingestellten Sortierkriterien

Klicken Sie mit der rechten Maustaste in die Ergebnistabelle, klicken Sie auf **Sort** und wählen Sie dann den Namen des Sortierkriteriums.

Informationen über die Verwendung von Abfragen bei Ergebnistabellen

Eine Abfrage ist eine Suche nach Datensätzen in einer Ergebnistabelle, die bestimmte Bedingungen erfüllen, die mithilfe von textbasierten oder mathematischen Auswahlkriterien festgelegt werden. Nehmen Sie eine Abfrage entweder während der Erstellung einer Ergebnistabelle oder nach deren Erstellung vor. Diese beiden Arten von Abfragen

werden bezeichnet als Standard- und tabellenspezifische Abfragen. Siehe Abschnitt: [Standardabfragen und tabellenspezifische Abfragen](#).

Wir empfehlen, dass der Benutzer alle Abfragen validiert, mit denen Daten in einer „Results Table“ analysiert werden.

Vergleichen von Ergebnissen zwischen Chargen

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

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

Die Software sortiert die Ergebnisse. Am Ende jeder Charge oder Gruppe erscheinen ein oder zwei zusätzliche Zeilen: **All** (Statistik für alle „Results Tables“ in dieser Gruppe) und **Average** (Statistik über die Statistiken dieser Charge oder Gruppe).

Wie Konzentrationen die Ergebnisse beeinflussen

Die Konzentration wird für alle QCs und Standards definiert. Wenn die Schwankung der Konzentrationsgenauigkeit den im Feld „Max. Variation“ im Dialog „Create Default Query“ angegebenen Wert übersteigt, dann wird diese Information in der Ergebnistabelle angezeigt.

„Results Table“-Layouts

Die Software verfügt über die folgenden vordefinierte Ansichten für die „Results Table“.

- [Ansicht „Full Layout“](#)
- [Ansicht „Summary Layout“](#)
- [Ansicht „Analyte Layout“](#)
- [Ansicht „Analyte Group Layout“](#)
- [Probentyp-Layout-Ansicht](#)

Jeder Analyt aus einer Probe mit mehreren Analyten wird in der Ansicht „Analyt Layout“ angezeigt. Die voreingestellte Ansicht ist „Full Layout“.

Ansicht „Full Layout“

Die voreingestellte Ansicht „Full Layout“ zeigt die Daten für alle Analyten im Quantifizierungs-Batch. Welche Spalten angezeigt werden, hängt davon ab, welche Spalten im Dialog „Results Table Columns“ ausgewählt wurden, sowie von den gewählten Einstellungen auf der zweiten Seite des Quantitation Method Wizard.

Abbildung 6-16: Probenansicht „Full Layout“

	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name	Analyte Peak Area	Analyte Peak Height	Analyte Concentration
1	B series 0 blank	Blank	QuanData.Wiff	Peak 1	2.45e+002	6.02e+001	0.00
2	B series 0 blank	Blank	QuanData.Wiff	Peak 2	1.25e+004	4.63e+003	0.00
3	B series 0.1 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.80e+002	2.53e+002	0.00
4	B series 0.1 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.39e+004	4.93e+003	0.00
5	B series 0.2 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	1.55e+003	5.08e+002	0.00
6	B series 0.2 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.28e+004	4.27e+003	0.00
7	B series 0.5 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	3.32e+003	1.04e+003	0.00
8	B series 0.5 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.14e+004	4.20e+003	0.00
9	B series 1.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.12e+003	2.33e+003	0.00
10	B series 1.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.23e+004	4.35e+003	0.00
11	B series 2.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	1.50e+004	4.77e+003	0.00
12	B series 2.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.34e+004	4.63e+003	0.00
13	B series 5.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	3.70e+004	1.20e+004	0.00
14	B series 5.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.51e+004	5.29e+003	0.00
15	B series 10.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.73e+004	2.49e+004	0.00
16	B series 10.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.50e+004	5.41e+003	0.00
17	B series 20.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.61e+004	2.44e+004	0.00
18	B series 20.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	8.04e+003	3.13e+003	0.00

Ansicht „Summary Layout“

Die Ansicht „Summary Layout“ enthält die gesperrten Spalten und das für jeden Analyten gewählte Feld in den verbleibenden Spalten. Beispiel: Wenn „Analyte Peak Area“ für zwei Analyten im Menü ausgewählt wird, sieht man die Spalten „Sample Name“ und „Analyte Peak Area“ für diese Analytenamen. Die Ansicht „Summary Layout“ enthält auch die Spalten „Formula“ und „Custom“, falls diese vorhanden sind.

Abbildung 6-17: Probenansicht „Summary Layout“

	Sample Name	Peak 1	Peak 2
1	B series 0 blank	2.45e+002	1.25e+004
3	B series 0.1 ng/mL	7.80e+002	1.39e+004
5	B series 0.2 ng/mL	1.55e+003	1.28e+004
7	B series 0.5 ng/mL	3.32e+003	1.14e+004
9	B series 1.0 ng/mL	7.12e+003	1.23e+004
11	B series 2.0 ng/mL	1.50e+004	1.34e+004
13	B series 5.0 ng/mL	3.70e+004	1.51e+004
15	B series 10.0 ng/mL	7.73e+004	1.50e+004
17	B series 20.0 ng/mL	7.61e+004	8.04e+003
19	Unknown concentra	1.23e+004	8.39e+003
21	Unknown concentra	8.71e+003	5.71e+003
23	Unknown concentra	1.12e+004	7.18e+003
25	Unknown concentra	1.32e+004	7.36e+003
27	Unknown concentra	1.25e+004	7.14e+003
29	Unknown concentra	1.10e+004	6.50e+003
31	Unknown concentra	1.36e+004	7.94e+003

Ansicht „Analyte Layout“

Die Ansicht „Analyte Layout“ enthält die Daten eines bestimmten Analyten. Alle anderen Analyten sind ausgeblendet. Wenn zum Beispiel Analyt A ausgewählt wurde, werden alle Daten für Analyt A angezeigt. Welche Spalten angezeigt werden, hängt davon ab, welche Spalten im Dialogfeld „Results Table Columns“ ausgewählt wurden, sowie von den gewählten Einstellungen auf der zweiten Seite des Quantitation Method Wizard.

Eine Ansicht „Analyte Layout“, bei der Peak 1 ausgewählt wurde, könnte aussehen wie die folgende Abbildung. In dieser Ansicht wird jede andere in der Ansicht „Full Layout“ angezeigte Zeile ausgeschlossen.

Abbildung 6-18: Probenansicht „Analyte Layout“

	Sample Name	File Name	Analyte Peak Area	Analyte Peak Height	Analyte Concentration	Use Record	Record Modified
1	B series 0 blank	QuanData.Wiff	2.45e+002	6.02e+001	0.00		<input type="checkbox"/>
3	B series 0.1 ng/mL	QuanData.Wiff	7.80e+002	2.53e+002	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
5	B series 0.2 ng/mL	QuanData.Wiff	1.55e+003	5.08e+002	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
7	B series 0.5 ng/mL	QuanData.Wiff	3.32e+003	1.04e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
9	B series 1.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.12e+003	2.33e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
11	B series 2.0 ng/mL	QuanData.Wiff	1.50e+004	4.77e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
13	B series 5.0 ng/mL	QuanData.Wiff	3.70e+004	1.20e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
15	B series 10.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.73e+004	2.49e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
17	B series 20.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.61e+004	2.44e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
19	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.23e+004	4.30e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
21	Unknown concentra	QuanData.Wiff	8.71e+003	2.53e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
23	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.12e+004	3.40e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
25	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.32e+004	4.24e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
27	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.25e+004	4.04e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
29	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.10e+004	3.96e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
31	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.36e+004	5.16e+003	N/A		<input type="checkbox"/>

Ansicht „Analyte Group Layout“

Die Ansicht „Analyte Group Layout“ enthält die Daten der Analyten, die zu einer bestimmten Gruppe gehören. Die Spalten, die im Dialogfeld „Results Table Columns“ zur Ansicht ausgewählt werden, werden in der „Results Table“ angezeigt. Siehe die folgende Abbildung. Zeigen Sie die Spalte **Analyte Peak Name** in der Results Table an, um die Namen der Analyten anzuzeigen, die zur Gruppe gehören.


Abbildung 6-19: Probenansicht „Analyte Group Layout“

Formula:		Analyte Group: Minoxidols Only			
		Query: None			
		Idle			
		Sort : Unsorted			
	Sample Name	Sample ID	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name
1	STD 1		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
2	STD 1		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
3	STD 2		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
4	STD 2		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
5	STD 3		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol

Probentyp-Layout-Ansicht

Das Probentyp-Layout ermöglicht es dem Benutzer, die „Results Table“ nach Probentyp zu filtern.

Abbildung 6-20: Probentyp-Layout-Ansicht



Sample Type: Standard
Query: None
Idle
Sort : Unsorted

	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Area (counts)
1	STD 1	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.63e+005
2	STD 1	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.68e+005
3	STD 2	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.31e+005
4	STD 2	Standard	Triple Quad\Mix_ba	6.11e+005
5	STD 3	Standard	Triple Quad\Mix_ba	6.58e+005
6	STD 3	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.76e+005
7	STD 4	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.72e+005
8	STD 4	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.94e+005
9	STD 5	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.61e+005

Felder der Ergebnistabelle

Fügen Sie der Standard-Ergebnistabelle Spalten hinzu, um DAD (Diode Array Detector)-Daten für die Felder „Analyt“, „Internal Standard“ und „Record“ anzuzeigen.

Formelfelder

In den Feldern „Formula“ wird das Ergebnis einer durch den Benutzer per Tabellenkalkulation definierten Formel angezeigt. Das im oberen Bereich der Ergebnistabelle befindliche Feld „Formula“ wird nur dann angezeigt, wenn die Ergebnistabelle mindestens eine Spalte „Formula“ enthält. Das Feld „Formula“ wird aktiviert, wenn die Zellen in der Spalte „Formula“ ausgewählt werden. Auch die Schaltfläche „Delete Formula Column“ unterhalb des Feldes „Formula“ wird verfügbar, wenn die Spalte „Formula“ ausgewählt wird.

Wir empfehlen, dass der Benutzer die Ergebnisse validiert, wenn eine Formelspalte verwendet wird.

Benutzerdefinierte Felder

Benutzerdefinierte Felder enthalten Informationen, die während der Erfassung definiert werden. Bei der Erfassung von Proben können Benutzer benutzerdefinierte Spalten erstellen und den dazugehörigen Datentyp definieren. Sobald eine benutzerdefinierte Spalte in die Ergebnistabelle aufgenommen wurde, kann sie wie jede andere Spalte verwendet werden (Sie können sie beispielsweise verschieben, ausblenden oder eine auf der Spalte basierende Formel erstellen).

Felder der Spalte „Internal Standards“

Die Spalten des internen Standards in der „Results Table“ zeigen Informationen über den internen Standard nach der Analyse an. Die folgende Tabelle zeigt die verfügbaren Felder.

Tabelle 6-13: Spalten „Internal Standards“

Spalten	Beschreibung
IS Peak Name	Der Name des Peaks des internen Standards.
IS Units	Die Einheiten, in denen der interne Standard angegeben wird.
IS Peak Area	Die Fläche des Peaks des internen Standards.
IS Peak Height	Die Höhe des Peaks des internen Standards.
IS Concentration	Die bekannte Konzentration des internen Standards. Dies gilt für Standard- und Qualitätskontrollproben. Für die Proben Typen Lösungsmittel, Leer- und Doppelleerprobe werden Nullen angezeigt. N/A Für Unbekannte wird angezeigt.
IS Retention Time	Die von der Software festgelegte chromatographische Retentionszeit.
IS Expected Retention Time	Die Retentionszeit der repräsentativen Probe. Stammt aus der Quantifizierungsmethode.

Tabelle 6-13: Spalten „Internal Standards“ (Fortsetzung)

Spalten	Beschreibung
IS Retention Time Window	Das in der Quantifizierungsmethode angegebene Retentionszeitfenster.
IS Centroid Location	Die intensitätsgewichtete durchschnittliche Retentionszeit des Analyten. Die Peakflächen bis zu und nach diesem Zeitpunkt werden identifiziert.
IS Start Scan	Die Zyklusnummer der Zeitraum- oder Experimentenkombination, an der der Peak beginnt.
IS Start Time	Der Zeitpunkt der Zeitraum- oder Experimentenkombination, an der der Peak beginnt.
IS Stop Scan	Die Zyklusnummer der Zeitraum- oder Experimentenkombination, an der der Peak endet.
IS Stop Time	Der Zeitpunkt der Zeitraum- oder Experimentenkombination, an der der Peak endet.
IS Integration Type	Die Methode, anhand der die Basislinie gefunden und nach der Peak-Suche integriert wurde. Die Typen sind manuell und automatisch (Baseline-to-Baseline , Valley , Exponential Skim und Exponential Child).
IS Signal to Noise	Das Signal-Rausch-Verhältnis des Peaks.
IS Peak Width	Das Verhältnis der Peak-Höhe zu dessen Breite.
IS UV Range	Der UV-Bereich des internen Standards.
IS UV Channel	Der UV-Kanal des internen Standards.
IS Peak Width at 50 Percent (min.)	(Schreibgeschützt) Die Peakbreite bei 50 % der Peakhöhe.
IS Baseline Slope (%/min.)	(Schreibgeschützt) Die Spalte, in der die Steigung der Basislinie angezeigt wird.
IS Peak Asymmetry	<p>(Schreibgeschützt) Die Spalte, in der die mit der folgenden Formel berechnete Peak-Asymmetrie angezeigt wird:</p> $[(\text{Zeitpunkt Peak-Ende}) - (\text{Retentionszeit})] / [(\text{Retentionszeit}) - (\text{Zeitpunkt Peak-Start})]$ <p>Werte um 1,0 geben symmetrische Peaks an, Werte über 1,0 geben „Tailing“-Peaks an und Werte unter 1,0 geben „Fronting“-Peaks an.</p>
IS Processing Alg	(Schreibgeschützt) Eine Spalte, in der der verwendete Verarbeitungsalgorithmus angezeigt wird.

Tabelle 6-13: Spalten „Internal Standards“ (Fortsetzung)

Spalten	Beschreibung
IS Integration Quality	Der Integration Quality Index zeigt an, wie gut der Peak integriert wurde. Werte näher an 1 weisen auf gut integrierte Peaks hin und Werte näher an 0 weisen auf schlecht integrierte Peaks hin.

Datensatzfelder

Die **Record**-Spalten in der „Results Table“ enthalten zusätzliche Informationen über jeden Probandensatz (Informationen, die ausschließlich für den Analyten gelten, nicht für den internen Standard). Die folgende Tabelle zeigt die verfügbaren Felder.

Tabelle 6-14: Record-Spalten

Spalten	Beschreibung
Use Record	Gibt an, ob dieser Datensatz für die Kalibrierung verwendet werden sollte. Gilt für Standards und QCs. Wenn das Kontrollkästchen deaktiviert wurde, werden die nicht verwendeten Standards und QCs in der Statistiktabelle gestrichen.
Record Modified	Gibt an, ob die für den Datensatz verwendete Quantifizierungsmethode verändert wurde und in irgendeiner Weise von der ursprünglichen Form abweicht.
Calculated Concentration	Die berechnete Konzentration des Analyten, gemäß Berechnung mit der Kalibrierkurve.
Relative Retention Time	Das Verhältnis der Retentionszeiten von internem Standard und Analyten.
Accuracy	Die berechnete Konzentration geteilt durch die bekannte Konzentration (in Prozent).
Response Factor	Peak-Fläche oder -Höhe (in Abhängigkeit von der Regressionsoption) geteilt durch die Analyt-Konzentration.

Analyt-Spalten

Die Analyt-Spalten in der Results Table enthalten Informationen über jeden Analyten und internen Standard (falls einer verwendet wurde) nach der Analyse. Die folgende Tabelle zeigt die verfügbaren Felder.

Tabelle 6-15: Results Tables: Analyt-Spalten

Spalte	Beschreibung
Analyte Peak Name	Der Name des Analyten.
Analyte Units	Die Einheiten, in denen die Analyt-Konzentrationen angegeben werden.

Tabelle 6-15: Results Tables: Analyt-Spalten (Fortsetzung)

Spalte	Beschreibung
Analyte Peak Area	Die Fläche des Analyten.
Analyte Peak Height	Die Höhe des Analyt-Peaks.
Analyte Concentration	Die tatsächliche, bekannte Konzentration des Analyten. Dies gilt für Standard- und Qualitätskontrollprobenotypen. Für die Probenotypen Lösungsmittel, Leer- und Doppelleerprobe werden Nullen angezeigt. Für Unbekannte wird N/A angezeigt.
Analyte Retention Time	Die von der Software festgelegte chromatographische Retentionszeit.
Analyte Expected Retention Time	Die Retentionszeit der repräsentativen Probe gemäß Quantifizierungsmethode.
Analyte Retention Time Window	Das in der Quantifizierungsmethode angegebene Retentionszeitfenster.
Analyte Centroid Location	Die intensitätsgewichtete durchschnittliche Retentionszeit des Analyten. Die Peakflächen bis zu und nach diesem Zeitpunkt werden identifiziert.
Analyte Start Scan	Die Zyklusnummer der Zeitraum- oder Experimentenkombination, an der der Peak beginnt.
Analyte Start Time	Der Zeitpunkt der Zeitraum- oder Experimentenkombination, an der der Peak beginnt.
Analyte Stop Scan	Die Zyklusnummer der Zeitraum- oder Experimentenkombination, an der der Peak endet.
Analyte Stop Time	Der Zeitpunkt der Zeitraum- oder Experimentenkombination, an der der Peak endet.
Analyte Integration Type	Die Methode, anhand der die Basislinie gefunden und nach der Peak-Suche integriert wurde. Die Typen sind manuell und automatisch („Baseline-to-Baseline“, „Valley“, „Exponential Skim“ und „Exponential Child“).
Analyte Signal to Noise	Das Signal-Rausch-Verhältnis des Peaks im Vergleich zur Basislinie.
Analyte Peak Width	Das Verhältnis der Peak-Höhe zu dessen Breite.
Analyte UV Range	Der UV-Bereich des Analyten.

Tabelle 6-15: Results Tables: Analyt-Spalten (Fortsetzung)

Spalte	Beschreibung
Analyte UV Channel	Der UV-Kanal des Analyten.
Analyte Peak Width at 50 Percent (min.)	(Schreibgeschützt) Die Spalte, in der die Peakbreite bei 50 % der Peakhöhe angezeigt wird.
Analyte Baseline Slope (%/min.)	(Schreibgeschützt) Die Spalte, in der die Steigung der Basislinie angezeigt wird.
Analyte Peak Asymmetry	<p>(Schreibgeschützt) Die Spalte, in der die mit der folgenden Formel berechnete Peak-Asymmetrie angezeigt wird:</p> $[(\text{Zeitpunkt Peak-Ende}) - (\text{Retentionszeit})] / [(\text{Retentionszeit}) - (\text{Zeitpunkt Peak-Start})]$ <p>Werte um 1,0 geben symmetrische Peaks an, Werte über 1,0 geben „Tailing“-Peaks an und Werte unter 1,0 geben „Fronting“-Peaks an.</p>
Analyte Processing Alg	Eine schreibgeschützte Spalte, in der der Verarbeitungs-Algorithmus angezeigt wird.
Analyte Integration Quality	Der Integration Quality Index zeigt an, wie gut der Peak integriert wurde. Werte näher an 1 weisen auf gut integrierte Peaks hin und Werte näher an 0 weisen auf schlecht integrierte Peaks hin. Dies erleichtert die Peak-Bewertung, weil Benutzer die Peaks mit niedrigen Analyt-Integrationsqualitätswerten anzeigen können, um sie manuell zu überprüfen. Darüber hinaus können Benutzer diese Daten nach Analyt-Integrationsqualitätswerten durchsuchen, die unter den als akzeptabel geltenden Werten liegen, um diese anzuzeigen und dann manuell eine Teilmenge der Daten zu überprüfen.

Proben-Spalten

Die Proben-Spalten in der „Results Table“ zeigen Informationen über die Probe, die für alle Analyten gelten. Leerprobe und doppelte Leerprobe können in den einzelnen Laboratorien unterschiedlich definiert werden. Die folgenden Tabellen zeigen die verfügbaren Felder.

Tabelle 6-16: Proben-Spalten

Spalte	Beschreibung
Sample Name	Der Name, den der Benutzer der Probe zum Zeitpunkt der Erfassung zugewiesen hat.
Sample ID	Eine benutzerdefinierte Kennung der Probe.

Tabelle 6-16: Proben-Spalten (Fortsetzung)

Spalte	Beschreibung
Sample Type	<p>Der Probenotyp aller Analyten innerhalb einer Probe muss gleich sein. Einer der folgenden Probenotypen wird angezeigt:</p> <p>Unknown: Enthält Analyten, deren Konzentrationen noch bestimmt werden müssen.</p> <p>Standard: Eine Probe, deren Analyt-Konzentration bekannt ist. Wird zu Kalibrierungszwecken verwendet.</p> <p>Quality Control: Eine Probe, deren Analyt-Konzentration bekannt ist. Wird verwendet, um die Genauigkeit der Standardkurve zu überprüfen.</p> <p>Solvent: Bestätigt, dass das Massenspektrometer sauber ist. Lösungsmittel laufen während der Probenvorbereitung nicht durch.</p> <p>Blank: Eine Probe, deren Konzentration null beträgt und die nicht in der Regression verwendet wird.</p> <p>Double Blank: Eine Probe, die ohne internen Standard oder Probenanalyten vorbereitet wird. Bestätigt, dass bei der Extraktion nichts hinzugefügt wurde.</p>
Sample Comment	Ein Kommentar, der die Probe beschreibt.
Set Number	Eine Nummer, die eine Teilmenge einer gesamten Charge identifiziert.
Acquisition Method	Die Bezeichnung der für die Probenerfassung verwendeten Methode.
Acquisition Date	Datum und Uhrzeit, zu der die Erfassung durchgeführt wurde.
Rack Type	Eine Kennung, mit der die Art des verwendeten Autosampler-Racks (falls verwendet) angegeben wird.
Rack Number	Die Rack-Position, in der die Probe bei der Erfassung platziert wurde. (Für Probengeber mit einem Rack beträgt diese Zahl immer 1.)
Vial Position	Die Position in der Autosampler-Platte, in die das Fläschchen platziert wurde.
Plate Type	Eine Kennung, mit der die Art der verwendeten Platte (gilt nur für Racks mit mehreren Platten) angegeben wird.
Plate Number	Die Position der Platte im Rack (gilt nur für Racks mit mehreren Platten).
File Name	Der Name der Rohdatendatei. Der Name ist nicht eindeutig, da in einer Datendatei die Daten von vielen Proben enthalten sein können.
Dilution Factor	Die Menge, mit der die Probe verdünnt wurde. Wird zur Ermittlung der berechneten Konzentration verwendet.

Tabelle 6-16: Proben-Spalten (Fortsetzung)

Spalte	Beschreibung
Sample Annotation	Zusätzliche Kommentare, mit denen die Probe beschrieben wird.
Weight-to-Volume Ratio	Das Verhältnis von Gewicht zu Volumen für die Probe.

Tabelle 6-17: DAD-Spalten

Spalte	Beschreibung
Analyte Peak Area for DAD	Die Fläche des Analyt-Peaks (mAU/min).
Analyte Peak Height for DAD	Die Höhe des Analyt-Peaks (mAu).
Analyte Wavelength Ranges	Der Bereich der Wellenlängen (nm).
IS Peak Area for DAD	Die Fläche des Peaks des internen Standards (mAu/min).
IS Wavelength Ranges	Der Bereich der Wellenlängen (nm).
IS Peak Height for DAD	Die Höhe des Peaks des internen Standards (mAu). Berechnete Konzentration für DAD.

Die folgende Tabelle zeigt die Felder, die der „Results Table“ für Daten hinzugefügt werden können, die mit einem ADC (Analog-Digital-Umwandler) erfasst wurden.

Tabelle 6-18: ADC-Spalten

Spalte	Beschreibung
Analyte Channel	Der ADC-Kanal, von dem der Analyt erfasst wurde.
Analyte Wavelength Ranges	Der Bereich der Wellenlängen (nm).
IS Channel	Der ADC-Kanal, von dem der interne Standard erfasst wurde.
IS Wavelength Ranges	Der Bereich der Wellenlängen (nm).

Tipps zu Ergebnistabellen

Aufgabe	... gehen Sie wie folgt vor
Tabellenspezifische Abfragen: um die gesamte Tabelle erneut anzuzeigen	Klicken Sie mit der rechten Maustaste irgendwo in die „Results Table“ und klicken Sie dann auf Query > Show All . Die Abfrage kann entweder erneut gestellt oder bearbeitet werden.
Um Kalibrierkurven zu untersuchen	Klicken Sie mit der rechten Maustaste irgendwo in die Kurve, klicken Sie auf Active Plot und wählen Sie die Kurve aus, die im Vordergrund gezeichnet werden soll.
Bewertung von Probenstatistiken: um einen einzelnen Peak zu prüfen	Aktivieren Sie das Kontrollkästchen Display the Data Set(s) und doppelklicken dann in der Spalte Data Point auf den Datenpunkt, der dem Peak entspricht. Die Software zeigt das Fenster „Peak Review“ mit dem vom Benutzer ausgewählten Peak an.
„Results Tables“: um die „Results Table“ wieder in ihre ursprüngliche Reihenfolge zurückzuführen	Klicken Sie mit der rechten Maustaste in eine „Results Table“ und klicken Sie dann auf Sort > Sort By Index .

Symbole der Werkzeugleisten

A











Symbol	Name	Funktion
	Hintergrundsubtraktion	Führt eine Hintergrundsubtraktion aus, nachdem die Hintergrundbereiche ausgewählt wurden.
	Hintergrundbereich gesperrt	Sperret die ausgewählten Hintergrundbereiche. Wenn die Hintergrundbereiche nicht gesperrt sind, können Benutzer jeden Bereich einzeln verschieben.
	Strichspektrum	Berechnet das Strichspektrum der Daten.
	Ursprüngliches Diagramm	Setzt das Diagramm wieder auf den ursprünglichen Maßstab.
	Überlagerung	Überlagert Diagramme.
	Zwischen Überlagerungen wechseln	Wechselt zwischen überlagerten Diagrammen.
	Überlagerungen addieren	Fügt die Diagramme zusammen.
	Fragment Interpretation Tool anzeigen	Öffnet das Fragment Interpretation Tool, das die einzelnen, nicht-zyklischen Bindungsspaltungsfragmente aus einer .mol-Datei berechnet.
	Glättung	Glättet Daten mit dem Glättungsalgorithmus.
	Gauß'sche Glättung	Glättet Daten mit der Gauß'schen Glättung.

Tabelle der exakten PPG-Massen

B

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

Hinweis: Achten Sie darauf, dass bei der Kalibrierung mit den PPG-Lösungen der richtige Isotopen-Peak verwendet wird.

Tabelle B-1: Exakte PPG-Massen

n	Exakte Masse (M)	$(M + NH_4)^+$	MS/MS-Fragmente	$(M + 2NH_4)^{2+}$	$(M + COOH)^-$
1	76,052	94,087	59,0	56,061	121,050
2	134,094	152,129	117,1	85,082	179,092
3	192,136	210,171	175,1	114,102	237,134
4	250,178	268,212	233,2	143,123	295,176
5	308,220	326,254	291,2	172,144	353,218
6	366,262	384,296	349,2	201,165	411,259
7	424,304	442,338	407,3	230,186	469,301
8	482,346	500,380	465,3	259,207	527,343
9	540,388	558,422	523,4	288,228	585,385
10	598,430	616,464	581,4	317,249	643,427

Tabelle B-1: Exakte PPG-Massen (Fortsetzung)

n	Exakte Masse (M)	(M + NH ₄) ⁺	MS/MS-Fragmente	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
11	656,471	674,506	639,4	346,270	701,469
12	714,513	732,548	697,5	375,291	759,511
13	772,555	790,590	755,5	404,312	817,552
14	830,597	848,631	813,6	433,333	875,594
15	888,639	906,673	871,6	462,354	933,636
16	946,681	964,715	929,7	491,373	991,678
17	1004,723	1022,757	987,7	520,396	1049,720
18	1062,765	1080,799	1045,7	549,417	1107,762
19	1120,807	1138,841	1103,8	578,438	1165,804
20	1178,849	1196,883	1161,8	607,459	1223,845
21	1236,890	1254,925	1219,9	636,480	1281,887
22	1294,932	1312,967	1277,9	665,501	1339,929
23	1352,974	1371,009	1335,9	694,521	1397,971
24	1411,016	1429,050	1394,0	723,542	1456,013
25	1469,058	1487,092	1452,0	752,563	1514,055
26	1527,100	1545,134	1510,1	781,584	1572,097
27	1585,142	1603,176	1568,1	810,605	1630,138

Tabelle der exakten PPG-Massen

Tabelle B-1: Exakte PPG-Massen (Fortsetzung)

n	Exakte Masse (M)	(M + NH ₄) ⁺	MS/MS-Fragmente	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
28	1643,184	1661,218	1626,2	839,626	1688,180
29	1701,226	1719,260	1684,2	868,647	1746,222
30	1759,268	1777,302	1742,2	897,668	1804,264
31	1817,309	1835,344	1800,3	926,689	1862,306
32	1875,351	1893,386	1858,3	955,710	1920,348
33	1933,393	1951,428	1916,4	984,731	1978,390
34	1991,435	2009,469	1974,4	1013,752	2036,431
35	2049,477	2067,511	2032,5	1042,773	2094,473
36	2107,519	2125,553	2090,5	1071,794	2152,515
37	2165,561	2183,595	2148,5	1100,815	2210,557
38	2223,603	2241,637	2206,6	1129,836	2268,599
39	2281,645	2299,679	2264,6	1158,857	2326,641
40	2339,687	2357,721	2322,7	1187,878	2384,683
41	2397,728	2415,783	2380,7	1216,899	2442,724
42	2455,770	2473,805	2438,7	1245,920	2500,766
43	2513,812	2531,847	2496,8	1274,940	2558,808
44	2571,854	2589,888	2554,8	1303,961	2616,850

Tabelle B-1: Exakte PPG-Massen (Fortsetzung)

n	Exakte Masse (M)	(M + NH ₄) ⁺	MS/MS-Fragmente	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
45	2629,896	2647,930	2612,9	1332,982	2674,892
46	2687,938	2705,972	2670,9	1362,003	2732,934
47	2745,980	2764,014	2729,0	1391,024	2790,976
48	2804,022	2822,056	2787,0	1420,045	2849,017
49	2862,064	2880,098	2845,0	1449,066	2907,059
50	2920,106	2938,140	2903,1	1478,087	2965,101
51	2978,147	2996,182	2961,1	1507,108	3023,143
52	3036,189	3054,224	3019,2	1536,129	3081,185
53	3094,231	3112,266	3077,2	1565,150	3139,227
54	3152,273	3170,307	3135,2	1594,171	3197,269
55	3210,315	3228,349	3193,3	1623,192	3255,311
56	3268,357	3286,391	3251,3	1652,213	3313,352
57	3326,399	3344,433	3309,4	1681,234	3371,394
58	3384,441	3402,475	3367,4	1710,255	3429,436
59	3442,483	3460,517	3425,5	1739,276	3487,478
60	3500,525	3518,559	3483,5	1768,297	3545,5202
61	3558,566	3576,601	3541,5	1797,318	3603,562

Tabelle der exakten PPG-Massen

Tabelle B-1: Exakte PPG-Massen (Fortsetzung)

n	Exakte Masse (M)	(M + NH ₄) ⁺	MS/MS-Fragmente	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
62	3616,608	3634,643	3599,6	1826,339	3661,604
63	3674,650	3692,685	3657,6	1855,359	3719,645
64	3732,692	3750,726	3715,7	1884,380	3777,687
65	3790,734	3808,768	3773,7	1913,401	3835,729
66	3848,776	3866,810	3831,7	1942,422	3893,771
67	3906,818	3924,852	3889,8	1971,443	3951,813
68	3964,860	3982,894	3947,8	2000,464	4009,855
69	4022,902	4040,936	4005,9	2029,485	4067,897
70	4080,944	4098,978	4063,9	2058,506	4125,938
71	4138,985	4157,020	4122,0	2087,527	4183,980
72	4197,027	4215,062	4180,0	2116,548	4242,022
73	4255,069	4273,104	4238,0	2145,569	4300,064
74	4313,111	4331,145	4296,1	2174,590	4358,106
75	4371,153	4389,187	4354,1	2203,611	4416,148
76	4429,195	4447,229	4412,2	2232,632	4474,190
77	4487,237	4505,271	4470,2	2261,653	4532,231
78	4545,279	4563,313	4528,3	2290,674	4590,273

Tabelle B-1: Exakte PPG-Massen (Fortsetzung)

n	Exakte Masse (M)	(M + NH ₄) ⁺	MS/MS-Fragmente	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
79	4603,321	4621,355	4586,3	2319,695	4648,315
80	4661,363	4679,397	4644,3	2348,716	4706,357
81	4719,404	4737,439	4702,4	2377,737	4764,399
82	4777,446	4795,481	4760,4	2406,758	4822,441

Kontaktangaben

Kundenschulung

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

Online-Lernzentrum

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

SCIEX Support

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

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

Cybersicherheit

Die aktuellsten Hinweise zur Cybersicherheit von SCIEX-Produkten finden Sie unter sciex.com/productsecurity.

Dokumentation

Diese Version des Dokuments ersetzt alle vorherigen Versionen.

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

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

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

Hinweis: Wenn Sie eine kostenlose gedruckte Ausgabe dieses Dokuments wünschen, wenden Sie sich bitte an sciex.com/contact-us.
