
Analyst MD Software

Avanceret brugervejledning



Dette dokument leveres til kunder, der har købt SCIEX-udstyr, til brug for driften af dette SCIEX-udstyr. Dette dokument er ophavsretligt beskyttet, og enhver reproduktion af dette dokument eller dele af dette dokument er strengt forbudt, medmindre SCIEX skriftligt har givet tilladelse hertil.

Software, som kan være beskrevet i dette dokument, leveres i henhold til en licensaftale. Det er ulovligt at kopiere, ændre eller distribuere softwaren på ethvert medium, medmindre det specifikt er tilladt i licensaftalen. Desuden kan licensaftalen forbyde, at softwaren demonteres, omvendt manipuleres eller dekompileres til ethvert formål. Garantier er som anført i aftalen.

I dele af dette dokument kan der være henvisninger til andre producenter og/eller deres produkter, som kan indeholde dele, hvis navne er registreret som varemærker og/eller fungerer som varemærker tilhørende deres respektive ejere. Enhver sådan brug har kun til formål at betegne disse producenters produkter som leveret af SCIEX til indbygning i dets udstyr og indebærer ikke nogen ret og/eller licens til at bruge eller tillade andre at bruge sådanne producenters og/eller deres produktnavne som varemærker.

SCIEX' garantier er begrænset til de udtrykkelige garantier, der gives på tidspunktet for salg eller licens af dets produkter, og er SCIEX' eneste og eksklusive erklæringer, garantier og forpligtelser. SCIEX giver ingen andre garantier af nogen art, hverken udtrykkelige eller stiltiende, herunder uden begrænsning garantier for salgbarhed eller egnethed til et bestemt formål, uanset om de følger af en lov eller på anden måde af loven eller af en handelspraksis eller handelsbrug, som alle udtrykkeligt fraskrives, og påtager sig intet ansvar eller eventualanvar, herunder indirekte eller følgeskader, for købers brug af produktet eller for eventuelle negative omstændigheder, der måtte opstå som følge heraf.

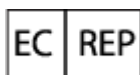
(GEN-IDV-09-10816-D)

Til *in vitro*-diagnostisk brug. Produkt(er) er ikke tilgængeligt/tilgængelige i alle lande. Kontakt din lokale salgsrepræsentant, eller se sciex.com/diagnostics for yderligere oplysninger.

Mærker og/eller registrerede varemærker, der er nævnt heri, herunder tilknyttede logoer, tilhører AB Sciex Pte. Ltd. eller deres respektive ejere i USA og/eller visse andre lande (se sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ anvendes under licens.

© 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

IVD

CE

UK
CA

Indholdsfortegnelse

Kapitel 1: Generelle oplysninger	7
Analyst MD Softwarebegivenheder	7
Filtrer systemloggen for oplysninger, der er relevante for Analyst MD-softwaren	7
Analyst MD-softwarevindue	8
Analyst MD Softwaretilstande	9
AnalystService	10
Start AnalystService	10
Stop AnalystService	10
API-instrumentprojektmapper	10
Programfiler	11
Projekter og delprojekter	12
Delprojekter	12
Projektorganisation	13
Adgang og sikkerhed	14
Arbejdsområder	15
 Kapitel 2: Tilstanden Tune and Calibrate	 17
Justering	18
Kalibrering	18
Automatisk indstilling og kalibrering	18
(Valgfrit) Sikkerhedskopier instrumentparametre manuelt	19
(Valgfrit) Gendan instrumentparametre	19
Optimering af forbindelser	19
Flowinjektionsanalyse	19
Infusion	20
T-infusion	20
 Kapitel 3: Dataopsamlingsmetoder	 21
Enheder i dataopsamlingsmetoder	21
Tilføjelse eller fjernelse af en perifer enhed	21
Indstil egenskaberne for LC-pumpe	22
Indstil egenskaberne for autosampler	22
Indstil egenskaberne for den integrerede sprøjtepumpe	23
Indstil egenskaberne for søjleovn	23
Angivelse af egenskaberne for skifteventilen	23
Indstil diodearray-detektorparametrene (Agilent)	24
Indstil egenskaberne for analog-til-digital-konverter	24
Dynamisk fyldningstid	25
Eksperimenter og perioder	25
Eksperimenter	25
Perioder	25

Indholdsfortegnelse

Metoder til informationsafhængig dataopsamling	26
Planlagt ionisering	27
Værdier for komprimerbarhed af opløsningsmiddel	28
Sprøjtestørrelse i forhold til flowhastighed	29
Kapitel 4: Batches	31
Batchredigeringsprogram	31
Importer batchfiler	32
Indstil kvantificering-detajler i batch editoren (valgfrit)	33
Kapitel 5: Kvalitativ dataanalyse	34
Kromatogrammer	34
Spektre	34
Baggrundssubtraktion	35
Udfør en baggrundssubtrahering for et kromatogram	35
Lås op for områderne	37
Subtraktion af baseline	37
Regnemaskiner	37
Regnemaskinen Elemental Composition	38
Regnemaskine til hypermasse	38
Regnemaskinen Elemental Targeting	38
Masseegenskabsberegner	38
Regnemaskine til isotopfordeling	38
Adgang til lommeregnerne	39
Toppe med beregnet massemidtpunkt	39
Beregning af en tops massemidtpunkt	40
Dataanalyse	40
Samlet ionkromatogram	40
Ekstraheret ionkromatogram	41
Basetopkromatogram	41
Ekstraheret bølgelængdekromatogram	41
Diodearray-detektor	41
Samlet bølgelængdekromatogram	41
Overlejring af grafer	41
Skift mellem overlejlrede grafer	42
Sum af overlejringer	42
Tilpasning af grafer	42
Tilføjelse af billedtekster i en graf	43
Tilføjelse af tekst i en graf	43
Database over forbindelser	43
Konturplot	44
Vis et konturplot	45
Vælg et område i et konturplot	45
Indstil intensitet og absorbans i et konturplot	46
Ændring af farver i et konturplot	46
Dynamic Background Subtraction-algoritme	46
Fragmentfortolkning	47
Forbindelse af værktøjet til fortolkning af fragmenter med et spektrum	47

Match fragmenter med toppe	48
Vælg en binding i en molekylær struktur	48
Vis isotoper	48
Vis en formelforskel i et spektrum	48
Vis en formelforskel på fragmentlisten	49
Vis en formelforskel i en molekylær struktur	49
IDA Explorer	49
Biblioteksdatabaser	50
Skift mellem eksisterende biblioteksdatabaser	51
Oprettelse af en lokal biblioteksdatabase	52
Oprettelse af forbindelse til en serverbiblioteksdatabase	53
Vis alle biblioteksposter	55
Tilføjelse af en post til biblioteket	55
Søg i biblioteksposter med begrænsninger	56
Tip til bibliotekssøgning	57
Søg efter et lignende spektrum	57
Vis en forbindelse fra søgeresultaterne	59
Behandlede datafiler	59
Gem en behandlet datafil	59
Åbn en behandlet datafil	59
Kvalitative data	59
Signal/støj-forhold	60
Udglatningsalgoritmer	60
Udglat data ved hjælp af udglatningsalgoritmen	61
Udglatning af data ved hjælp af gaussisk udjævning	61
Systemlogfiler	62
Gem systemloggen, og videresend til support	62
Filtrer systemloggen for oplysninger, der er relevante for Analyst MD-softwaren	63
Kapitel 6: Kvantitativ dataanalyse	64
Kalibreringsindstillinger	64
Om kalibreringskurver	64
Vælg den bedste regressionstype	64
Vælg den bedste vægtningsfaktor	65
Integrationsalgoritmer	66
Analyst Classic- og IntelliQuan-integrationsalgoritmer	66
Kvantificeringsmetode – Oprettelsesværktøjer	68
Guider	68
Editor til kvantificeringsmetode	69
Den semiautomatiske metode	70
Metriske plot	70
Generer et midlertidigt metrisk plot	71
Generer et metrisk plot, og gem plotkriterierne	72
Gem standardplotkriterier for fremtidige resultattabeller	73
Støj- og områdetærskelparametre	74
Genberegnet støj- og områdetærsklen	75
Topintegration	75
Topgennemgang	75
Tip til topgennemgang	76

Indholdsfortegnelse

Detekter toppe	76
Find den potentielle start på toppen	76
Bekræft starten for toppen	77
Find topspidsen	79
Find topenden	81
Separate toppe	83
Forespørgsler	83
Forespørgsler på prøvetype	84
Standardforespørgsler og tabelspecifikke forespørgsler	84
Sådan påvirker nøjagtighedsvariationer resultaterne	85
Regressionsligninger	85
Tilpasningsindstillinger	85
Vægtningsfaktorer	88
Rapportskabeloner	88
Tilpasning af rapporter	90
Forhåndsvisning, udskrivning og eksport af rapporter	91
Resultattabeller	92
Vis et specifikt layout for resultattabeller	92
Sorter data i resultattabeller	93
Sorter en resultattabel, og gem sorteringskriterierne	93
Gem standardsorteringskriterier for fremtidige resultattabeller	94
Sorter en resultattabel ved hjælp af forudindstillede sorteringskriterier	95
Om at bruge forespørgsler med resultattabeller	95
Sammenligning af resultater mellem batches	96
Sådan påvirker koncentrationsniveauer resultater	96
Layouts for resultattabel	96
Resultattabelfelter	99
Tip til resultattabellen	106
 Tillæg A: Ikoner på værktøjslinjer	107
 Tillæg B: PPG – Tabel over nøjagtig masse	108
 Kontakt os	114
Kundeuddannelse	114
Online-læringscenter	114
SCIEX	114
Cybersikkerhed	114
Dokumentation	114

Avanceret brugervejledning indeholder oplysninger om funktionerne i Analyst MD-softwaren.

Analyst MD Softwarebegivenheder

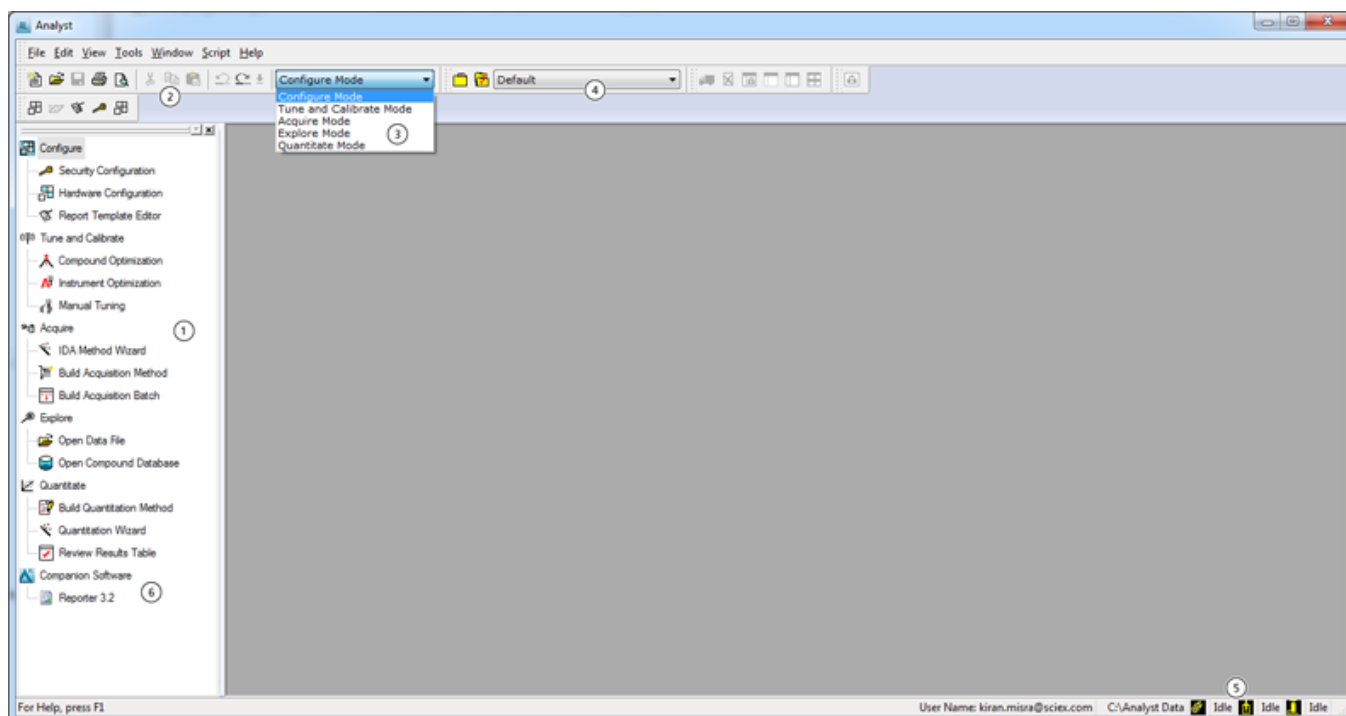
Systemloggen indeholder rapporter om systemhændelser, herunder fejl, advarsler og meddelelser. Brug Windows Event Viewer til at se oplysninger, der kan være nyttige til fejlfinding og udførelse af systemdiagnostik. Hvis du vil bruge oplysningerne i systemloggen effektivt, skal du filtrere oplysningerne, så der kun vises de elementer, der er relevante for softwaren.

Filtrer systemloggen for oplysninger, der er relevante for Analyst MD-softwaren.

1. Klik på **View > Event Log**.
Dialogboksen Event Viewer åbnes.
2. Dobbeltklik på mappen **Windows Logs**.
3. Klik på **Application**.
4. Klik på **Action > Filter Current Log**.
Dialogboksen Filter Current Log åbnes.
5. Vælg **Analyst** i feltet **Event Sources**.
6. Klik på **OK**.
Dialogboksen Event Viewer viser nu kun de filtrerede Analyst MD-softwarehændelser.

Analyst MD-softwarevindue

Figur 1-1: Analyst MD-softwarevindue



Element	Beskrivelse
1	<p>Navigationslinje: Navigationslinjen giver adgang til de forskellige softwaretilstande. Brugere kan tilpasse nogle elementer i navigationslinjen, så de passer til deres præferencer. Brugere kan f.eks. ændre størrelsen på den, flytte den eller rette den på plads. Navigationslinjen skjules ved at klikke på × i øverste højre hjørne. Klik på View > Navigation Bar for at se navigationslinjen.</p> <p>Det øverste niveau af navigationstræet har et ikon, der repræsenterer hver softwaretilstand. Dobbeltklik på ikonet for en bestemt tilstand for at udvide eller skjule træet. Dette viser eller skjuler ikonerne for den tilgængelige funktionalitet i den valgte tilstand.</p>
2	Menulinje: Ændres afhængigt af tilstanden. Nogle muligheder, såsom Klip, Kopier og Sæt ind, er de samme i alle tilstande. Andre muligheder er specifikke for visse tilstande og er ikke tilgængelige i andre tilstande.
3	Tilstandsliste: Klik for at ændre tilstande. Der er forskellige værktøjslinjeikoner i forskellige tilstande.
4	Projektliste: Klik for at ændre det projekt, hvori data gemmes.

Element	Beskrivelse
5	Status for instrument og perifer enhed: Statuslinjen indeholder oplysninger om aktuelle aktiviteter. Den afbilder instrumentets tilstand efter farve: grøn (klar), gul (ledig), rød (fejl) eller hvid (ingen lokal instrumentarbejdsstation). Et ikon angiver status for et fjerninstrument. Dobbeltklik på et ikon for at åbne enhedsstatusvinduet.
6	Ledsagende software: Indeholder enhver installeret ledsagende software, der åbnes fra softwaren.

Analyst MD Softwaretilstande

Softwaren er opdelt i tilstande, som er diskrete funktionsområder, hvor brugere kan udføre en række aktiviteter relateret til en hovedopgave. Brugere kan få adgang til tilstande via navigationslinjen eller tilstandslisten på værktøjslinjen og kan skifte fra en tilstand til en anden uden at miste noget arbejde.

Tabel 1-1: Tilstande i Analyst MD

Navn	Beskrivelse
Configure	(Konfigurer)Brug denne tilstand til at konfigurere enheder og systemindstillinger. Indstil forskellige muligheder og parametre for softwaren, herunder hardwarekonfiguration og rapportskabelonindstillinger.
Tune and Calibrate	(Tune og Kalibrer)Brug denne tilstand til at indstille muligheder for tuning af instrumenterne for at sikre optimale resultater. I denne tilstand kan brugere: <ul style="list-style-type: none"> • Udfør instrumentoptimering. • Udfør manuel tuning. • Skift udseendet af grafiske visninger, vælg de typer oplysninger, der vises, når filoplysningerne åbnes, og indstil sammenkædningsindstillinger og andre udseendeindstillinger. • Ændr procesmuligheder.
Acquire	(Erhverv)Brug denne tilstand til at indstille muligheder for at bestemme, hvordan prøver skal erhverves. I denne tilstand kan brugere: <ul style="list-style-type: none"> • Opret en IDA-dataopsamlingsmetode med IDA Method Wizard. • Opret en anskaffelsesmetode med redigeringsprogrammet til dataopsamlingsmetoden. • Opret en batch med redigeringsprogrammet til batch. • Vis køen med Køstyring. • Overvåg dataopsamlingsstatus.

Tabel 1-1: Tilstande i Analyst MD (fortsat)

Navn	Beskrivelse
Explore	(Udforsk)Brug denne tilstand til at udføre kvalitativ analyse på prøver. I denne tilstand kan brugere: <ul style="list-style-type: none">• Se en graf.• Se et kromatogram.• Se et spektrum.• Vis data i realtid under batchdataopsamling.
Quantitate	(Kvantificer)Brug denne tilstand til at analysere de indhentede data og opbygge en kvantitativ metode til at generere en resultattabel. Brug resultattabellen til manuelt at gennemgå alle toppene for hver analyt og intern standard i en batch og til at se kalibreringskurver, prøvestatistikker og metriske plot.

AnalystService

AnalystService er kommunikationsvejen mellem massespektrometeret og tilsluttede enheder. AnalystService startes hver gang Analyst MD-softwaren startes. AnalystService starter automatisk, når brugeren logger på Windows. Hvis tjenesten ikke kører, når Analyst MD-softwaren startes, starter AnalystService automatisk.

Start AnalystService

Hvis opstartstypen for AnalystService er angivet til **Manual**, skal du starte AnalystService manuelt, før du starter Analyst MD Analyst-softwaren. **Startup Type** må ikke ændres.

1. Åbn Administrative Tools.
2. Dobbeltklik på **Services**, og klik derefter på **AnalystService**.
3. Klik på **Start**.

Stop AnalystService

Stop AnalystService, hvis der er problemer med at kommunikere med instrumentet, eller hvis der er kommunikationsproblemer mellem instrumentet og de perifere enheder.

1. Åbn Administrative Tools.
2. Dobbeltklik på **Services**, og klik derefter på **AnalystService**.
3. Klik på **Stop**.

API-instrumentprojektmapper

Følgende er nogle af de mapper, der findes i API Instrument-projektet:

- **Bundler:** Indeholder et program, der tager alle aspekter af en datafil (wiff-fil) og automatisk kombinerer dem, når prøven er færdig.
- **Konfiguration:** Indeholder alle hardwareprofiler (hwpf-filer).
- **Instrumentdata:** Indeholder en fil med navnet `InstrumentData.ins`. Filen gemmer alle de kritiske kalibreringsoplysninger og meget mere.
- **Metodetabeller:** Indeholder alle instrumentparametre, der definerer de forbedrede scanningsfunktioner. Du må ikke ændre filerne i denne mappe. Ændring af indholdet i denne mappe vil påvirke udførelsen af de forbedrede scanningstilstande.
- **Parameterindstillinger:** Indeholder alle instrumentets parametre og links. Instrumentparametre gemmes som `ParamSettingsdef.psf` filer.
- **Indstillinger:** Indeholder `Tunedata.tun`-filen. Alle indstillingerne, herunder parameter, indstilling, instrument, behandling, udseende og kø, gemmes som `Tunedata.tun` i denne mappe.
- **Behandlingsscripts:** Indeholder scripts til databehandling i Explore-tilstand. Scripts findes i menuen **Script**.
- **Kødata:** Indeholder oplysninger fra køen.
- **Tuning Cache:** Indeholder alle de data, der er oprettet i Manuel Tuning ved at klikke på **Start** i stedet for **Acquire**. Filer gemmes med et tids- og datostempel for deres navne. Mappen Tuning Cache indeholder et begrænset antal filer og vil overskrive filer efter behov. Gem filerne med et nyt navn, og flyt filerne med det samme, hvis de skal gemmes.

Programfiler

Følgende mapper findes i mappen `Program Files\Analyst` på det 32-bit Windows 7-operativsystem eller i mappen `Program Files (x86)\Analyst` på det 64-bit, Windows 7- eller 64-bit Windows 10-operativsystemet.

- **bin:** Indeholder programfilerne til Analyst MD-softwaren. Indholdet af denne mappe bør ikke ændres, da dette vil påvirke softwarefunktionen.
- **binEx2:** Indeholder de komponenter, der er nødvendige for at styre ExionLC 2.0-enheder.
- **binEx:** Indeholder de komponenter, der er nødvendige for at styre ExionLC-, Jasper- og Shimadzu LC20/30-enheder, der styres ved hjælp af det integrerede system Shimadzu LC-20/30 Controller, og Shimadzu LC40-enheder.
- **Firmware:** Indeholder instrumentsystemets firmwarekonfigurationstabelfiler og instrumentets firmwarefiler. Der findes flere oplysninger i *softwareinstallationsvejledningen*, der følger med softwaren.
- **Hjælp:** Indeholder hjælpefilen, vejledninger, selvstudier, *udgivelsesbemærkninger* og *vejledning til installation af software*.
- **Scripts:** Indeholder de scripts, som brugeren kan installere, hvis det er nødvendigt. Disse scripts installeres ikke automatisk, når Analyst MD-softwaren er installeret. Der findes flere oplysninger i dokumentet: *Brugervejledning til scripts*.

- **Simulering:** Indeholder de instrumentdatafiler, der kræves for at køre softwaren i simuleringstilstand.

Projekter og delprojekter

Beslut, hvor de filer, der er relateret til et eksperiment, skal gemmes, før du starter eksperimentet. Brug projekter og delprojekter til hvert eksperiment til at styre dataene bedre og sammenligne resultaterne. For eksempel kan delprojekter bruges til at gemme resultaterne for specifikke datoer.

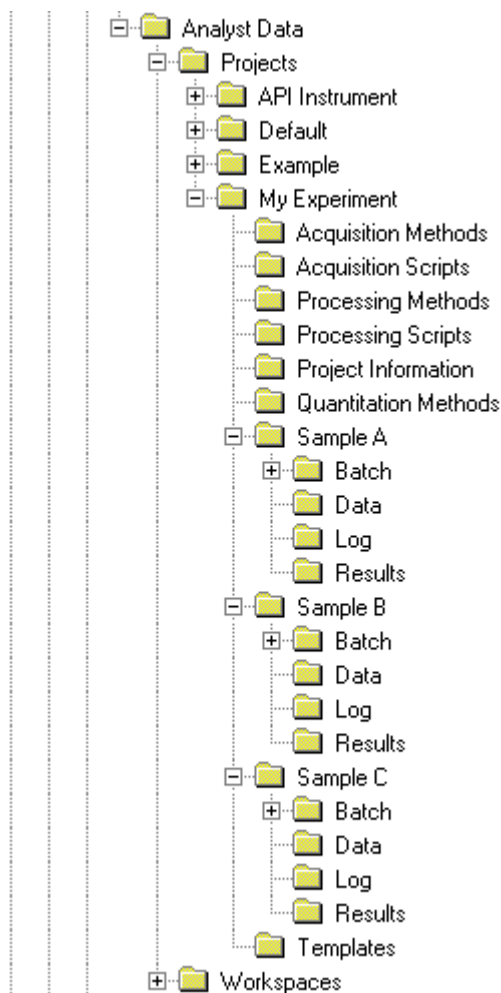
Bemærk: Hvis du vil bruge en delprojektstruktur i et projekt, skal du oprette mindst ét delprojekt, når du først opretter projektet. Brugere kan ikke oprette et delprojekt i et eksisterende projekt, der ikke allerede omfatter en delprojektstruktur.

Delprojekter

Et delprojekt indeholder en undergruppe af mapperne i projektet. Alle delprojekter skal indeholde de samme mapper. Delprojekter er nyttige til at organisere dataene.

Hvis prøver af forskellige forbindelser fra forskellige laboratorier for eksempel køres ved hjælp af den samme dataopsamlingsmetode, kan du oprette delprojekter for at gemme resultaterne for hvert laboratorium, men efterlade mappen med dataopsamlingsmetoden i projektet. Dataopsamlingsmetoden er derefter tilgængelig til brug i delprojektet eller laboratoriet. Som alternativ kan resultater fra hver dag lagres i et separat delprojekt, hvis der analyseres prøver over en periode på flere uger. Se følgende figur.

Figur 1-2: Eksempel på en mappestruktur for projekter og delprojekter



Projektorganisation

Et projekt er en mappestruktur til organisering og lagring af prøveoplysninger, data, kvantificeringsoplysninger osv. Inden for hvert projekt er der mapper, der kan indeholde forskellige typer af filer. Mappen Data indeholder f.eks. dataopsamlingsfiler. I følgende tabel findes en beskrivelse af indholdet af forskellige mapper.

Software kan kun få adgang til et projekt, hvis det er gemt i en rodmappe. Brugere kan ikke oprette projekter i en mappe, der ikke er defineret som en rodmappe.

Den forudindstillede rodmappe er Analyst Data på det drev, som softwaren er installeret på. Opret nye rodmapper for at gemme projekter andre steder. Der findes flere oplysninger om rodmapper i dokumentet: *Hjælp*.

Tabel 1-2: Projektmapper

Mappe	Indhold
\Acquisition Methods	Indeholder alle de tilgængelige dataopsamlingsmetoder. Dataopsamlingsmetodefiler har filtypenavnet dam.

Tabel 1-2: Projektmapper (fortsat)

Mappe	Indhold
\Acquisition Scripts	Dataopsamlingsscript er ikke tilgængelige med Analyst MD-softwaren. Denne mappe er tom. Brug af Analyst MD-softwarescripting, der gør det muligt at oprette brugerdefinerede scripts (brugerdefinerede analyst-funktionssekvenser), bør ikke anvendes som en del af <i>in vitro</i> -diagnostisk udstyr. Integrerede softwarekontroller, der udføres, når du bruger Analyst MD-softwaren, der ikke køres på brugerdefinerede scripts, kan føre til resultater, der er forkert knyttet til et prøve-id.
\Batch	Indeholder alle de dataopsamlingsbatchfiler, der er tilgængelige. Dataopsamlingsbatchfiler har filtypenavnet Dab. Denne mappe indeholder også undermappen Templates, der indeholder batchskabeloner til dataopsamling. Batchskabelonfiler har filtypenavnet DAT.
\Data	Indeholder dataopsamlingsfilerne, der har filtypenavnet WIFF.
\Log	Indeholder resultater af kvantificering og forbindelsesoptimering.
\Processing Methods	Indeholder alle de anvendte kvalitative databehandlingsmetoder.
\Processing Scripts	Indeholder databehandlingsscriptene. Bearbejdning af scripts, der er gemt i API-instrumentprojektet, vises i menuen Scripts .
\Project Information	Indeholder alle projektoplysninger og indstillinger. Denne mappe kan ikke gemmes i et underprojekt.
\Quantitation Methods	Indeholder alle anvendte kvantificeringsmetoder, der har filtypenavnet qmf.
\Results	Indeholder alle de filer med tabeller over kvantificeringsresultater, som har filtypenavnet rdb.
\Templates	Indeholder rapportskabelonfiler med filtypenavnet rpt.

Adgang og sikkerhed

Analyst MD-softwaren arbejder med sikkerheds-, applikations- og systemhændelsesrevisionskomponenterne i Windows Administrative Tools.

Derudover omfatter softwaren en række funktioner til konfiguration og styring af sikkerhed. Softwareadministratoren kan:

- Vælge en sikkerhedstilstand, der passer bedst til driftsmiljøets behov.
- Tilføje og slette brugere og roller.
- Angive adgangsrettigheder for brugere og roller efter behov.

- Kontrollere adgang til fjerntliggende massespektrometre.
- Kontrollere adgang til projektfiler.

Du kan finde flere oplysninger om softwaresikkerhed i dokumentet: *Laboratoriechefens vejledning*.

Bemærk: Eventuelle ændringer i softwaresikkerhedskonfigurationen træder i kraft efter genstart af softwaren.


Arbejdsområder

Et arbejdsområde er et bestemt arrangement af vinduer og ruder, herunder eventuelle tilknyttede filer. Når du arbejder på et bestemt datasæt, kan brugerne for eksempel åbne og ændre størrelsen på forskellige vinduer for at hjælpe med analysen. Dette arrangement, eller arbejdsområde, kan gemmes, så vinduesarrangementet det samme, næste gang brugerne ser på dataene.

Brugerne kan tilpasse et arbejdsområde ved at vælge, hvilke vinduer og ruder hvert arbejdsområde skal indeholde. Brugerne kan ændre størrelsen og positionen af vinduer og ruder, låse ruder sammen og skjule eller vise bestemte ruder og vinduer. På denne måde kan brugerne tilpasse et arbejdsområde, som passer til de aktuelle opgaver.

I tilstanden Quantitate og Explore kan brugerne have flere arbejdsområder pr. session. Brugeren kan gemme et arbejdsområde, som også omfatter de tilknyttede data. Når én af disse tilstande er valgt, kan et bestemt arbejdsområde åbnes uden at forlade den pågældende tilstand. For at genbruge et bestemt arrangement af vinduer og ruder til andre datasæt, kan brugeren gemme et arbejdsområde som en skabelon. I tilstanden Tune og Calibrate eller Acquire gemmer softwaren arbejdsområdet automatisk.

Generelle oplysninger

Hvis du vil gøre dette	Skal du gøre dette
Opret et arbejdsområde	<ol style="list-style-type: none">1. Klik på den tilstand, hvor arbejdsområdet skal oprettes, på navigationslinjen.2. Åbn de vinduer og ruder, der skal medtages i arbejdsområdet, og arranger dem derefter på skærmen, lås vinduer sammen, og tilpas størrelsen af vinduer og ruder efter behov.3. Klik på File > Save Workspace.4. Indtast et filnavn for arbejdsområdet i feltet File name. <hr/> <p>Bemærk: Navnet på arbejdsområdet og stien må samlet ikke overstige 255 tegn. Navnet på arbejdsområdet efterfølges af et punktum og filtypenavnet wws for at angive, at det er en arbejdsstationsfil.</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none">5. Klik på Save. <p>Oplysningerne om arbejdsområdet gemmes i en fil med filtypenavnet wws i den angivne mappe.</p>
Åbn et arbejdsområde	<p>I tilstanden Quantitate og Explore kan forskellige arbejdsområder åbnes uden at forlade den aktuelle tilstand.</p> <ol style="list-style-type: none">1. Klik på File > Open Workspace.2. Vælg den relevante arbejdsområdefil på listen, og klik derefter på OK.
Gem et arbejdsområde	<ol style="list-style-type: none">1. Sørg for, at arbejdsområdet er aktivt i tilstanden Quantitate eller Explore.2. Klik på File > Save Workspace As. <hr/> <p>Tip! Klik på Save Workspace for at gemme arbejdsområdeoplysningerne med det aktuelle filnavn og placeringen.</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none">3. Indtast et navn for arbejdsområdefilen, og klik derefter på Save. <p>Software gemmer automatisk vindues- og rudeoplysningerne som en del af det arbejdsområde, der er tilknyttet den aktuelle tilstand. I tilstanden Configure, Tune and Calibrate eller Acquire gemmer softwaren automatisk arbejdsområdet, når brugeren lukker den aktuelle tilstand.</p>
Lås softwaren	<ol style="list-style-type: none">1. Klik på værktøjslinjen Lock Application .

Afstemning og kalibrering af massespektrometeret maksimerer ydeevnen af opløsningen og intensiteten.

Følgende opgaver kan udføres under afstemning:

- Tilpas opløsningens forskydningsværdier for at justere intensiteten og opløsningen af kalibreringsmasserne (kun for quadrupol-tilstand).
- Vælg de masser, der skal kalibreres. Om nødvendigt kan masser tilføjes og fjernes fra kalibreringslisten.
- Opret ét eller flere unikke kalibreringsstandardsæt. Et kalibreringsstandardsæt skal have mindst to forbindelser for de lave og høje ender af det relevante masseområde.

Et afstemt og kalibreret instrument kan detektere den angivne topopløsning og massetildeling af prøven. Dette opnås ved at anvende en kendt kalibreringsstandard, såsom PPG (polypropylenglycol). Der anvendes en kalibreringsstandard til at kalibrere masseskalaen for at detektere målionerne så tæt som muligt på deres nøjagtige masse-/ladningsforhold inden for en acceptabel masseforskydning. Ud over at identificere den nøjagtige top, kan brugerne justere opløsningen for at opnå den optimale bredde og form af toppen.

Et korrekt indstillet og kalibreret massespektrometer giver det bedste resultat for enhver prøve eller forbindelse, der analyseres i massespektrometeret. Afstemning og kalibrering udføres sammen, uafhængigt af optimering. Afstemning og kalibrering fokuserer på opløsning og massekalibrering. Optimering fokuserer på følsomhed.

Ændringer i massespektrometerets konfiguration under afstemning og kalibrering gemmes i datafiler i API-instrumentmappen. De forudindstillede parametre i mappen API Instrument method bør anvendes, idet de er optimeret af SCIEX-feltservicemedarbejderen (FSE).

Efter afstemning og kalibrering maksimeres systemets ydeevne, og de angivne parametre bliver standardparametre for alle eksperimenter. Brugere kan køre eksperimenter med de optimerede kilde- og forbindelsesafhængige parametre for at maksimere responsen for alle analytter.

Tip! Rengør Q0-området regelmæssigt for at minimere effekten af opladning (et betydeligt tab af følsomhed af de relevante ioner over en kort periode) på quadrupoler. Se dokumentet: *Vejledning til kvalificeret vedligeholdelsespersone*.

Brugerne kan indstille og kalibrere instrumentet automatisk eller manuelt.

Automatisk indstilling: Softwaren udfører opløsningsoptimering og massekalibrering ved hjælp af instrumentoptimeringsguiden. For instrumenter med lineær ionfælde (LIT) udføres der også MS³-optimeringer.

Manuel indstilling: Brugere kan udføre mange af optimeringerne af instrumentopløsning og kalibreringer manuelt.

Justering

Justering af massespektrometeret er processen med at optimere opløsning og instrumentparametre for at opnå den bedste følsomhed og ydeevne af massespektrometeret. Indstil og kalibrer massespektrometret med jævne mellemrum, eller hvis systemets ydeevne er faldet. Optimer massespektrometret for at maksimere responsen fra en ny prøve eller forbindelse. Optimering af opløsningen omfatter justering af topbredden og topformen.

Kalibrering

Massekalibrering er processen med at tildele massetoppe de korrekte værdier for masse/ladning-forhold (m/z). Når en massekalibrering udføres ved hjælp af en kalibreringsstandard såsom polypropylenglycol (PPG), kan resultaterne sammenlignes med en tidligere kalibrering for at bestemme, hvor tæt m/z -værdierne for de observerede toppe er på de teoretiske værdier. Den tidligere kalibrering kan opdateres eller mere typisk erstattes med den nye kalibrering.

Vælg flere masser, når du kalibrerer Q1, Q3 og alle LIT-scanninger for hver polaritet. Resultaterne gemmes i en kalibreringstabel. Når der udføres en massekalibrering, opdateres kalibreringstabellen med nye DAC-værdier (digital-til-analog-konverter) fra den eller de nye kalibreringsmasser, der allerede er i kalibreringstabellen. Alle data for masser, der ikke er kalibreret i den aktuelle kalibrering, opbevares. Hvis massekalibreringen udskiftes, erstattes alle tidligere kalibreringsværdier for alle masser. Udfør en massekalibrering ved hjælp af et nyerehvert spektrum eller brug et spektrum fra en lagret datafil.

Automatisk indstilling og kalibrering

Instrumentoptimering er automatisk instrumenttuningssoftware, der tuner både firedobbelt- og LIT-tilstande og udfører massekalibrering. Til firedobbelt-tilstand justerer det opløsningsforskydningerne. Til LIT-tilstand optimerer den AF3 og EXB. For MS³ justeres excitations- og isolationskoefficienterne. Vælg en af følgende muligheder for instrumentydelse:

- **Verificer instrumentets ydeevne:** Tester instrumentets ydeevne, men lader instrumentindstillingerne være uændrede. Der oprettes en rapport i slutningen af testen. Brug denne indstilling ugentligt for at kontrollere, hvor godt instrumentet fungerer.
- **Kun justering af massekalibrering:** Kontrollerer og justerer automatisk massekalibreringen. Hvis massekalibreringen er ændret, retter softwaren det. Brug denne indstilling ugentligt for LIT-instrumenter eller månedligt for at kontrollere og justere massekalibreringen, hvis det er nødvendigt.
- **Juster instrumentindstillingerne:** Kontrollerer og justerer instrumentindstillingerne og massekalibreringen. Instrumentindstillingerne opdateres fra de aktuelle indstillinger til optimale indstillinger. Brug denne indstilling, hvis instrumentets ydeevne er dårlig, eller hvis tomformen er dårlig. Kun erfarne brugere bør justere instrumentindstillingerne.

Bemærk: Gamle LIT-metoder skal opdateres med de nye indstillinger. Slå LIT-hastigheden på den avancerede MS-fane, og gem derefter metoden.

- **Nulstil valgte scanningstilstande til standardværdier, og juster instrumentindstillingerne:** Nulstiller instrumentværdierne til fabriksindstillede værdier. Vælg denne mulighed, hvis en hovedkomponent af instrumentet udskiftes eller efter den første installation. *Kun FSE'er bør bruge denne funktion.*

(Valgfrit) Sikkerhedskopier instrumentparametre manuelt

Sikkerhedskopier de aktuelle instrumentparametre, hvis de skal gendannes senere. Den forudindstillede placering for de manuelt sikkerhedskopierede instrumentparametre er <drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Optimization\Instrument Settings Backups\User Created Backups.

1. Dobbeltklik på **Instrument Optimization** under **Tune and Calibrate** på navigationslinjen.
2. Klik på **File > Backup Instrument Settings**.
3. Indtast et filnavn.
4. Klik på **Save**.

(Valgfrit) Gendan instrumentparametre

1. Dobbeltklik på **Instrument Optimization** under **Tune and Calibrate** på navigationslinjen.
2. Klik på **File > Restore Instrument Settings File**.
3. Naviger til instrumentindstillingerne for at gendanne.
4. Klik på **Open**.

Optimering af forbindelser

Guiden Compound Optimization software optimerer automatisk en analyt. Prøver kan introduceres ved hjælp af infusion eller FIA (flowinjektionsanalyse). Softwaren kontrollerer først for tilstedeværelsen af forbindelser. Spændingerne i de forskellige ionbaneparametre øges eller mindskes gradvist for at bestemme den maksimale signalintensitet (Q1-scanning) for hvert ion. Der oprettes og vises derefter en tekstfil under optimeringsprocessen. Denne fil registrerer de forskellige eksperimenter, der udføres, og de optimale værdier for hver ionoptisk parameter. Der oprettes også en filmappe, der indeholder alle de udførte eksperimenter. Denne kan findes ved at åbne datafilmappen i udforskningstilstand. For hvert eksperiment, der udføres, oprettes og gemmes også en dataopsamlingsmetode i mappen til dataopsamlingsmetoder.

Flowinjektionsanalyse

Flowinjektionsanalyse (FIA) er injektion af en lille kvantitet af en prøve af en autosampler i LC-strømmen. Under FIA-optimeringsprocessen udføres flere prøveinjektioner for forskellige kilde- eller forbindelsesafhængige parametertyper, eller begge typer, der

ændres mellem injektioner. Med FIA optimeres klyngeopdelingspotentiale, kollisionsenergi og kollisionscelleudtrædelsespotentiale ved at udføre cirkulære eksperimenter i rækkefølge, dvs. en forbindelsesafhængig parameter efterfulgt af den næste forbindelsesafhængige parameter. Der optimeres for kildeafhængige parametre ved at foretage en injektion for hver parameter.

Brug FIA-optimering til at optimere både forbindelses- og kildeafhængige parametre ved hjælp af LC ved højere flowhastigheder.

Infusion

Infusion er den kontinuerlige strømning af prøven ved lave flowhastigheder ind i ionkilden ved hjælp af en sprøjtepumpe. Under infusionsoptimeringen kan der i softwaren vælges prækursor- og produkt-ioner og optimeres for klyngeopdelingspotentiale, kollisionsenergi og kollisionscelleudgangspotentiale for begge. Spændingerne i disse ionbaneparametre øges eller mindskes gradvist for at bestemme den maksimale signalintensitet for prækursoren og produkt-ionerne.

Brug infusionsoptimering til kun at optimere forbindelsesafhængige parametre ved lavere flowhastigheder end dem, der anvendes under LC/MS-analyse.

T-infusion

T-infusion (eller opdelt infusion) er det kontinuerlige prøveflow ved lav hastighed i ionkilden via en trevejsjordforbindelsessamler ved ionkilden. Trevejsjordforbindelsessamleren er forbundet til en sprøjtepumpe med en rød PEEK-slange og en LC-pumpe.

Når du opretter en dataopsamlingsmetodefil fra en eksisterende fil, kan brugeren bruge nogle eller alle enhedsmetoder i dataopsamlingsmetoden. Brug Acquisition Method Editor til at tilpasse dataopsamlingsmetoden ved at tilføje eller fjerne enhedsmetoder. Hvis det ønskede enhedsikon ikke er i ruden Acquisition Method Browser, kan brugerne kun tilføje enheden, hvis den er inkluderet i den aktive hardwareprofil.

Det anbefales, at kun brugere, der er dygtige til metodeudvikling, opretter eller ændrer dataopsamlings- og kvantificeringsmetoder. Du kan flere oplysninger om roller og sikkerhed i afsnittet Om personer og roller i dokumentet: *Laboratoriechefens vejledning*.

Enheder i dataopsamlingsmetoder

Opret en dataopsamlingsmetode for en perifer enhed ved at vælge driftsparametrene for den pågældende enhed. Der kan oprettes dataopsamlingsmetoder for en af følgende enheder, hvis de er konfigureret i den aktive hardwareprofil:

- Pumper
- Autosamlere
- Sprøjtepumper
- Søjleovne
- Omstillingsventiler
- Diodearray-detektor
- Analog-til-digital-omformere
- Integrerede systemer

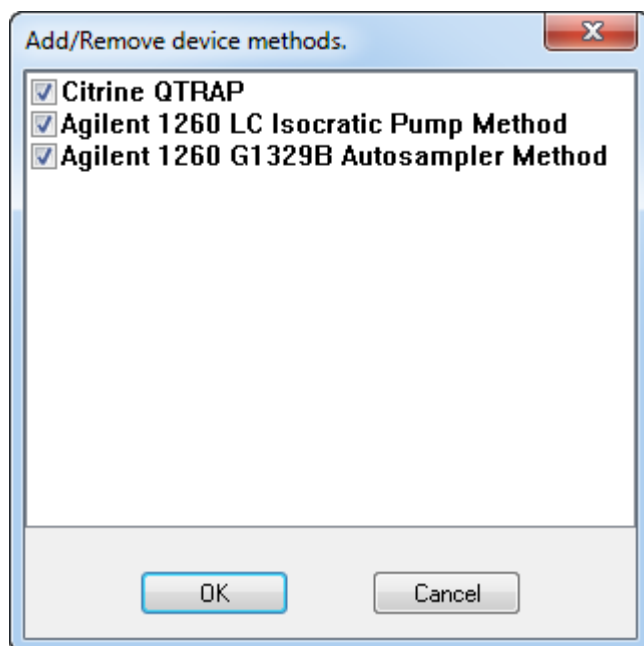
Der findes oplysninger om indstilling af egenskaber for enheder i dokumentet: *Vejledning til opsætning af perifere enheder*

Bemærk: De tilgængelige parametre for LC-enhederne varierer afhængigt af producenten.

Tilføjelse eller fjernelse af en perifer enhed

1. Mens en metodefil er åben i Acquisition Method Editor, skal du højreklikke på **Acquisition Method** i ruden Acquisition method og derefter klikke på **Add/Remove Device Method**. Dialogboksen Add/Remove Device Method åbnes, og viser de enheder, der er konfigureret i den aktive hardwareprofil.

Figur 3-1: Dialogboksen Tilføj/fjern enhedsmetode



2. Markér eller fjern markeringen i afkrydsningsfelterne ved siden af enhedsmetoden for at tilføje eller fjerne enhedsmetoden.
3. Klik på **OK**.

Indstil egenskaberne for LC-pumpe

1. Gør ét af følgende, mens en dataopsamlingsmetodefil er åben i ruden Acquisition method i Acquisition Method Editor:
 - Klik på ikonet **Pump** for Agilent-pumpen.
 - Ved Shimadzu LC 20/30-enheder, der er aktiveret ved hjælp af det integrerede system Shimadzu LC Controller, skal du klikke på **Shimadzu LC System**.
 - Ved Shimadzu LC 20/30-enheder, der er aktiveret ved hjælp af det integrerede system Shimadzu LC-20/30 Controller, Shimadzu LC 40-enheder, ExionLC-enheder, ExionLC 2.0-enheder eller Jasper LC-enheder skal du klikke på **LC System**.
2. Vælg fanen for LC-pumpen i højre rude, hvis den ikke allerede er valgt, og rediger derefter egenskaberne eller indstillingerne efter behov.
3. Gem filen.

Indstil egenskaberne for autosamplers

1. Sørg for, at feltet **Synchronization Mode** på fanen Acquisition Properties er indstillet til **LC Sync**. Enheden, prøveinjektionen og instrumentdataopsamlingen starter samtidigt.
2. Gør ét af følgende, mens en metodefil er åben i ruden Acquisition method i Acquisition Method Editor:

- Ved Agilent-autosampler skal du klikke på ikonet Agilent Autosampler.
 - Ved CTC PAL-autosampler skal du klikke på ikonet CTC PAL Autosampler.
 - Ved Shimadzu LC 20/30-enheder, der er aktiveret ved hjælp af det integrerede system Shimadzu LC Controller, skal du klikke på **Shimadzu LC System**.
 - Ved Shimadzu LC 20/30-enheder, der er aktiveret ved hjælp af det integrerede system Shimadzu LC-20/30 Controller, Shimadzu LC 40-enheder, ExionLC-enheder, ExionLC 2.0-enheder eller Jasper LC-enheder skal du klikke på **LC System**.
3. Åbn fanen Autosampler i højre rude, og rediger derefter egenskaberne eller indstillingerne efter behov.
 4. Gem filen.

Indstil egenskaberne for den integrerede sprøjtepumpe

Denne procedure gælder for systemer med indbyggede sprøjtepumper.

1. Mens en dataopsamlingsmetodefil er åben i Acquisition Method Editor, skal du klikke på ikonet Syringe Pump i ruden Acquisition Method Browser. Fanen Syringe Pump Method Properties vises i ruden Acquisition Method Editor.
2. Rediger felterne efter behov.
3. Gem filen.

Indstil egenskaberne for søjleovn

1. Gør ét af følgende, mens en dataopsamlingsmetodefil er åben i ruden Acquisition method i Acquisition Method Editor:
 - Ved Agilent-søjleovnen skal du klikke på ikonet for **Agilent Column Compartment**.
 - Ved Shimadzu LC 20/30-enheder, der er aktiveret ved hjælp af det integrerede system Shimadzu LC Controller, skal du klikke på **Shimadzu LC System**.
 - Ved Shimadzu LC 20/30-enheder, der er aktiveret ved hjælp af det integrerede system Shimadzu LC-20/30 Controller, Shimadzu LC 40-enheder, ExionLC-enheder, ExionLC 2.0-enheder eller Jasper LC-enheder skal du klikke på **LC System**.
2. Markér kolonnen Column Oven i højre rude, hvis den ikke allerede er markeret, og rediger derefter egenskaberne eller indstillingerne efter behov.
3. Gem filen.

Angivelse af egenskaberne for skifteventilen

Skifteventilen kan bruges som afleder eller injektionsventil. Vælg synkroniseringstilstanden **Manual Sync with Valve**, hvis ventilen bruges som en injektor. Vælg enhver anden tilstand, hvis ventilen bruges som en afleder.

1. Klik på ikonet **Valve**, mens en metodefil er åben i ruden Acquisition Method i Acquisition Method Editor. Fanen Valve Properties åbnes i ruden Acquisition Method Editor.

2. Omdøb de forudindstillede positioner, hvis det er nødvendigt.
Skifteventilen bruges nogle gange til at omstille strømmen af opløsningsmiddel til affald eller til en anden kolonne. De forudindstillede positionsnavne er A og B.
 - Vælg en position på listen **Change Position Names**.
 - På listen **Change Position Names** skal du omdøbe de forudindstillede positionsnavne i forhold til, hvordan ventilen er tilsluttet. Hvis ventilen bruges som en injektor, skal du omdøbe A og B til Injicer og afled eller Kolonne og affald. Hvis ventilen bruges som en afleder, skal du omdøbe A og B til Afled og injicer eller Affald og kolonne.
3. Klik på en celle i kolonnen **Total Time (min)**, og indtast derefter den samlede tid, hvor ventilen forbliver i denne position.
4. Klik på en celle i kolonnen **Position**, og vælg derefter ventilpositionen på listen **Position**.
5. Gentag trinene 3 og 4 for hver kontakt på ventilen, som kræves under dataopsamling.
6. Gem filen.

Indstil diodearray-detektorparametrene (Agilent)

1. Mens en dataopsamlingsmetodefil er åben i Acquisition Method Editor, skal du klikke på ikonet Agilent-diodearray-detektor i vinduet Acquisition method. Fanen Agilent DAD Method Editor åbnes i ruden Acquisition Method Editor.
2. Rediger egenskaberne efter behov.
3. Gem filen.

Indstil egenskaberne for analog-til-digital-konverter

1. Mens en metodefil er åben i Acquisition Method Editor, skal du klikke på ikonet Analog to Digital Converter (ADC) i ruden Acquisition method. Fanen Analog/Digital Converter Properties åbnes i vinduet Acquisition Method Editor.
2. Indtast hastigheden i feltet **Rate (pts/sec)** i afsnittet Sample.

Bemærk: Intervallet og hastigheden er proportionale med hinanden. Når hastigheden ændres, beregnes intervallet automatisk igen i softwaren.

3. Sådan indstilles kanaloplysningerne:
 - a. I feltet **Channels** skal du klikke på kanalnavnet og derefter markere afkrydsningsfeltet ved siden af navnet for at inkludere det i metoden.
 - b. Indtast den relevante værdi i feltet **Interpreted Value @ Full Scale**.
 - c. Indtast den relevante enhed i feltet **Interpreted Unit**.

Antallet af tilgængelige kanaler angives ved opsætning af ADC i hardwareprofilen.
4. Gem filen.

Dynamisk fyldningstid

Dynamisk fyldningstid (DFT) er en funktion, der er specielt designet til at optimere de data, der indhentes i hvert spektrum for de lineære ionfældescanningsfunktioner. DFT justerer automatisk den fyldningstid, der bruges til at fylde ionfælden, på grundlag af ionstrømmen fra kilden. Ved mere intense ioner vil fyldningstiden automatisk blive reduceret for at sikre, at fælden ikke er overfyldt med ioner.

Ved mindre intense ioner øges fyldningstiden automatisk, hvilket sikrer, at der opnås god ionstatistik i spektret. DFT kan anvendes til følgende scanningstyper:

- Forbedret MS (EMS)
- Forbedret opløsning (ER)
- Forbedret produkt-ion (EPI)
- MS/MS/MS (MS³)

Juster DFT-indstillingerne ved at vælge **Tools > Settings > Method Options** i softwaren.

Eksperimenter og perioder

Massespektrometrets dataopsamlingsmetode består af eksperimenter og perioder. I ruden Acquisition Method Browser skal du oprette en sekvens af dataopsamlingsperioder og eksperimenter for massespektrometeret. Alternativt kan du åbne en metode, der tidligere er oprettet i Tune Method Editor.

Eksperimenter

Et eksperiment omfatter massespektrometerindstillingerne og scanningstypen under en MS-scanning. Et sæt MS-scanninger udført i et bestemt tidsrum kaldes en periode. En dataopsamlingsmetode, hvor MS-parametre og -handlinger er de samme gennem hele varigheden kaldes en enkelt periode, enkelt eksperiment-metode.

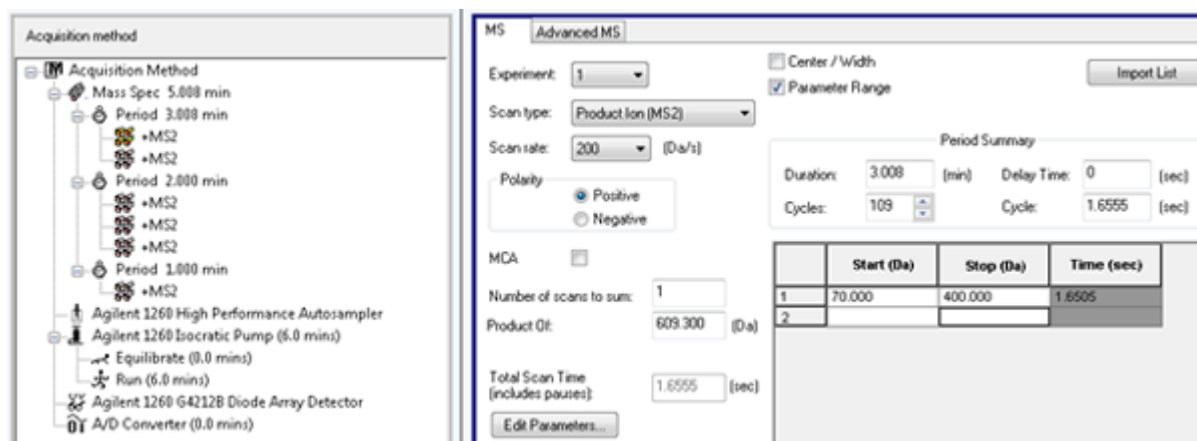
I looped-forsøg ændres MS-indstillingerne for hver enkelt scanning. Hvis prøven f.eks. indeholder to stoffer, A og B, kan brugerne f.eks. ønske at loope et MS/MS-eksperiment af stof A med et MS/MS-eksperiment af stof B for at få oplysninger om begge stoffer i den samme kørsel. Massespektrometermetoden vil veksle mellem de to scanningstyper. Andre eksempler på loopede eksperimenter omfatter veksling mellem positive og negative tilstande i en procedure og informationsafhængige dataopsamlingsmetoder (IDA).

Perioder

En periode kan indeholde et eller flere sløjfeeksperimenter. I en dataopsamlingsmetode med flere perioder udføres eksperimenter for en bestemt mængde tid, hvorefter softwaren skifter til et andet sæt af eksperimenter. Perioder er nyttige, når man kender elueringstiden for forbindelser i en LC-kørsel. Der kan udføres forskellige eksperimenter med massespektrometeret, alt efter hvornår forbindelserne eluerer, for at få så mange oplysninger som muligt i samme kørsel.

I følgende figur vises en metode med tre perioder.

Figur 3-2: Eksempel på et flerperiodeeksperiment



Metoder til informationsafhængig dataopsamling

En IDA-metode kører automatisk eksperimenter på grundlag af resultater fra tidligere cyklusser. Brug IDA-kriterier til at optimere dataopsamlingsindstillinger, mens du indsamler data, for at reducere prøveopsamlingstiden i en enkelt injektion. Med IDA kan brugerne spare både den påkrævede prøvemængde, der kræves, og den værdifulde arbejdstid.

Opret en IDA-metode med op til to undersøgelsesscanninger og afhængige scanninger for op til otte mest intense toppe i en enkelt periode. En undersøgelsesscanning bruges i IDA til at udløse yderligere eksperimenter. Følgende scanningstyper kan bruges som en undersøgelsesscanning:

- Forbedret produkt-ion (EPI) (scanningsundersøgelse på andet niveau)
- Forbedret MS (EMS)
- Multipel reaktionsovervågning (MRM) eller *Scheduled* MRM-algoritme
- Neutralt tab (NL)
- Prækursor-ion (Prec)
- Q3 MS

Følgende scanningstyper kan bruges som afhængige scanninger:

- EPI
- MS/MS

Under en IDA-metodeopsamling varieres massespektrometrets handlinger fra scanning til scanning på grundlag af de data, der er opsamlet i en tidligere cyklus. I softwaren analyseres data i takt med opsamlingen, hvorefter de masser, hvorpå der skal udføres afhængige scanninger, bestemmes. Brugere kan indstille de kriterier, der vil aktivere et IDA-eksperiment, og de metodeparametre, der skal anvendes.

Dataopsamling efter IDA-metoden forbedrer resultaterne ved at køre afhængige scanninger på grundlag af følgende brugerdefinerede kriterier:

- Ion-intensitet og ladetilstand
- Inkluderings- og udelukkelseslister
- Isotopmønster
- Dynamisk udelukkelse
- Ændring i ionintensitet (se afsnittet: [Dynamic Background Subtraction-algoritme](#)).

Planlagt ionisering

Funktionen Scheduled Ionization kan bruges til at reducere nedetiden for massespektrometeret ved at mindske risikoen for kontamination. Den er tilgængelig i Acquisition Method Editor og kan bruges til batchopsamling ved hjælp af en enkeltperiodisk dataopsamlingsmetode. Se følgende figur.

Figur 3-3: Skemalæg ioniseringsfunktionen i 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				

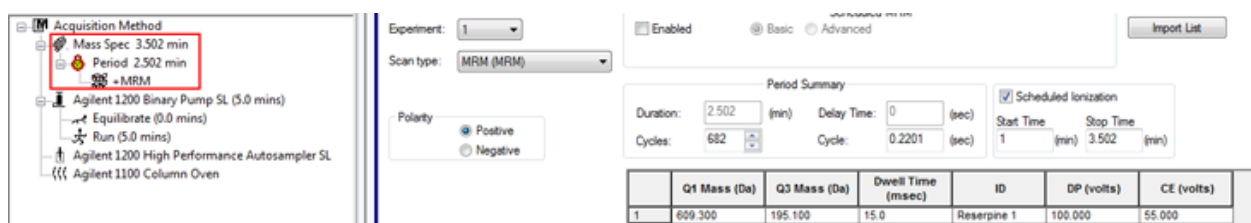
Når **Scheduled Ionization** er valgt, og **Start Time** og **Stop Time** for **Scheduled Ionization** er indstillet, indstilles **IonSpray Voltage (ISV)** kun til den **ISV**-værdi, der er angivet i dataopsamlingsmetoden, mellem **Start Time** og **Stop Time**, hvor toppene af interesse elueres. **ISV** er indstillet til 0 før **Start time** og efter **Stop time**. LC-metoden skal indstilles som sædvanlig. Hvis LC varigheden f.eks. er indstillet til 5 min., og **Scheduled Ionization** er indstillet til at starte ved 1,5 min. og stoppe ved 3,5 min., så starter LC ved 0 min. og stopper ved 5 min., og dataopsamlingen med massespektrometeret starter ved 1,5 min. og stopper derefter ved 3,5 min. **Scheduled Ionization** kan bruges til **Nebulizer Current (NC)** samt når en Turbo V- eller IonDrive Turbo V-ionkilde bruges i APCI-tilstand.

Start Time Og **Stop Time** for en dataopsamlingsmetode med den valgte **Scheduled Ionization**-funktion bør udvikles på grundlag af de data, der blev opsamlet ved hjælp af den samme dataopsamlingsmetode, men uden valgt **Scheduled Ionization**.

Bemærk: **Stop Time** skal være større end **Start Time**.

Bemærk: Hvis afkrydsningsfeltet **Scheduled Ionization** er markeret, er tiden **Mass Spec** den stoptid (**Stop Time**), hvor ioniseringen er planlagt at stoppe. Den tid, der vises ved siden af **Period** i Acquisition Method Editor, er den værdi, der vises i feltet **Duration**. Se følgende figur.

Figur 3-4: Massespektrometertid, når planlagt ionisering er valgt



Værdier for komprimerbarhed af opløsningsmiddel

Tabel 3-1: Værdier for komprimerbarhed af opløsningsmiddel

Opløsningsmiddel	Komprimerbarhed ($10^{-6}/\text{bar}$)
Acetone	126
Acetonitril	115
Benzen	95
Tetrachlormethan	110
Kloroform	100
Cyclohexan	118
Ethanol	114
Ethylacetat	104
Heptan	120
Hexan	150
Isobutanol	100
Isopropanol	100
Methanol	120

Tabel 3-1: Værdier for komprimerbarhed af opløsningsmiddel (fortsat)

Opløsningsmiddel	Komprimerbarhed ($10^{-6}/\text{bar}$)
1-Propanol	100
Toluen	87
Vand	46

Sprøjtestørrelse i forhold til flowhastighed

Flowhastigheden af en sprøjtepumpe afhænger af den sprøjte, der er installeret i pumpen. Følgende tabeller viser forholdet mellem flowhastighed og sprøjtestørrelse.

Tabel 3-2: Sprøjtestørrelse og flowhastighed ved l/time

Sprøjtestørrelse (μl)	L/time minimum	L/time maksimum
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

Tabel 3-3: Sprøjtestørrelse og flowhastighed ved $\mu\text{l}/\text{minut}$

Sprøjtestørrelse (μl)	$\mu\text{l}/\text{minut}$ minimum	$\mu\text{l}/\text{minut}$ maksimum
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

Tabel 3-4: Sprøjtestørrelse og flowhastighed ved ml/time

Sprøjtestørrelse (ml)	ml/time minimum	ml/time Maksimum
2,0	0,011	186,8

Tabel 3-4: Sprøjtestørrelse og flowhastighed ved ml/time (fortsat)

Sprøjtestørrelse (ml)	ml/time minimum	ml/time Maksimum
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

Tabel 3-5: Sprøjtestørrelse og flowhastighed ved ml/minut

Sprøjtestørrelse (ml)	ml/minut minimum	ml/minut maksimum
50,0	0,002	28,40
100,0	0,003	47,60
140,0	0,004	55,10

En batch er en samling af oplysninger om de prøver, der skal analyseres. Prøver grupperes normalt i sæt for at forenkle indsendelsen. Ved at gruppere prøverne i et sæt reduceres også mængden af data, der skal indtastes manuelt. Et sæt kan bestå af en enkelt prøve eller flere prøver. Alle sæt i en batch bruger den samme hardwareprofil. Prøver i et sæt kan dog have forskellige dataopsamlingsmetoder. En batch kan kun indsendes fra en dataopsamlingsstation.

Batches omfatter følgende oplysninger:

- Eksempeloplysninger, såsom navn, ID, datafilnavn og kommentar
- Autosamplerplacering (rack-oplysninger), hætteglasposition
- Dataopsamlingsmetoder og injektionsvolumen
- Kvantificeringsmetode (valgfrit)
- Kvantificeringsoplysninger (valgfrit)
- Brugerdefinerede prøvedata (valgfrit)
- Angiv oplysninger.

Batchredigeringsprogram

Brug batchredigeringsprogrammet til at oprette eller ændre batches og til at oprette batchskabeloner. Hvis du vil køre prøver, der alle bruger forskellige dataopsamlingsmetoder, skal du vælge flere dataopsamlingsmetoder i samme sæt.

En dataopsamlingsmetode kan også bruges som skabelon. Hvis det gøres, anvendes den samme metode til hver prøve, men brugeren kan vælge forskellige masser eller masseområder for hver prøve. Batchredigeringsprogrammet kan også bruges til at importere prøvelister, der er oprettet i eksterne programmer, f.eks. Microsoft Excel.

Brugeren kan ændre alle detaljer i batchen, før den indsendes til behandling. Når en batch indsendes til analyse, kan brugeren indsende hele batchen, specifikke sæt i batchen eller specifikke prøver i et sæt.

Hvis du f.eks. vil analysere 10 prøver (fem ved hjælp af én dataopsamlingsmetode og fem ved hjælp af en anden dataopsamlingsmetode), skal du oprette en batch à to sæt (ét for hver metode, der anvendes).

Bemærk: Vi anbefaler, at brugerne gennemgår alle batchparametrene, før de indsender batchen, for at sikre, at positionerne for rack, plade og hætteglas stemmer overens med hardwareindstillingerne på autosampleren, og at indstillingen for rackindstilling Specify rack er tilgængelig i dataopsamlingsmetoden og valgt til den autosampler, der er i brug.

Batches

Bemærk: Det anbefales, at brugerne sikrer sig, at det korrekte rack og den korrekte plade med de korrekte prøveplaceringer er indsat i autosampleren, før batchen indsendes.

Tabel 4-1: Faner i batchredigeringsprogrammet

Fane	Beskrivelse
Prøve	Bruges til at oprette prøvelisten og vælge prøveoplysninger såsom prøvenavnet og den dataopsamlingsmetode, der skal bruges til at opsamle prøven.
Placeringer	Bruges til at vælge placeringen af prøver i autosampleren. Prøveplaceringer kan angives numerisk på fanen Prøve. Fanen Placeringer giver dog en grafisk grænseflade til valg af prøveplaceringer.
Kvantificering	Anvendes til at vælge prøvetyper og koncentrationer til kvantificeringsbatcher. Da kvantificeringsoplysninger kan specificeres efter dataopsamling i kvantificeringsresultattabellen, behøver brugerne ikke at bruge fanen Quantification i batchredigeringsprogrammet. I stedet kan Kvantificeringsguiden bruges.
Indsend	Bruges til at verificere prøveoplysninger og til at indsende prøver til dataopsamlingskøen. Køadministratoren viser kø-, batch- og prøvestatus og giver brugerne mulighed for at administrere prøver i køen.

Importer batchfiler

Brugere kan importere en tekstfil, der indeholder batchoplysninger, i stedet for at oprette en batch i Batch Editor. Hvis alle prøveoplysningerne er i et regneark, er det hurtigere at omarrangere og importere dataene i regnearket end manuelt at indtaste dataene i Batch Editor.

Før du importerer batchoplysninger fra en tekstfil, skal du sørge for, at dataene i filen er organiseret og formateret korrekt. Navnlig skal kolonneoverskrifterne i regnearket stemme overens med kolonneoverskrifterne i Batch Editor. For at sikre, at tekstfilen indeholder de korrekte overskrifter, skal du oprette en batch ved hjælp af Batch Editor (batcheditor), eksportere den som en tekstfil, indtaste de relevante værdier i en regnearkseditor og derefter importere filen tilbage til Batch Editor (batcheditor).

For eksempler på korrekt formaterede filer henvises der til mappen Batch (batch) i eksempelprojektet.

Oplysningerne i en batchfil kan også eksporteres til brug med andre applikationer, såsom Microsoft Excel, Microsoft Access og visse software til Laboratory Information Management System (laboratorieinformationsstyringssystem) (LIMS).

Indstil kvantificering-detajler i batch editoren (valgfrit)

Hvis der anvendes en kvantificeringsmetode med en batch, og hvis brugeren ikke ønsker at vælge kvantificeringoplysninger efter dataopsamlingen, skal kvantificeringoplysningerne (prøvetype, prøvekoncentration) defineres, før batchen indsendes.

De relevante **Internal Standard**- og **Standard** -kolonner vises i fanen Quantitation i henhold til den kvantificeringsmetode, der er valgt i fanen Sample.

1. Åbn fanen Quantitation med en batchfil åben i vinduet Batch Editor.
2. Vælg det sæt, der indeholder prøverne.
3. Vælg **Quant Type**, **Dilution Factor** og **Weight/Volume** for alle prøverne fra listen i cellen.
4. (Hvis påkrævet) I kolonnen **Analyte** indtastes analytkoncentrationen.
5. (Hvis påkrævet) I kolonnen **Internal Standard** indtastes den interne standardkoncentration.
6. Gentag denne procedure for hvert sæt i batchen.

Brugere kan få vist oplysningerne i en datafil i tabel- eller grafform. Grafiske data præsenteres enten som et kromatogram eller som et spektrum. Data i en af disse formularer kan ses som en tabel over datapunkter, og der kan udføres forskellige sorteringsoperationer på dataene.

I softwaren gemmes TIC- og metodedata i wiff-filer og spektrale data i wiff.scan-filer. Softwaren kræver både wiff- og wiff.scan-filer til at åbne datafilen. Derudover kan softwaren åbne txt-filer, der indeholder data for kun én prøve. Når en datafil åbnes i softwaren, vises forskellige ruder, afhængigt af den type eksperiment, der blev udført.

Hvis MCA-afkrydsningsfeltet er markeret i Tune Method Editor, åbnes et massespektrum for datafilen. Hvis afkrydsningsfeltet MCA ikke er markeret, åbnes et total ion-kromatogram (TIC) for datafilen. Brugere kan vælge et område og derefter dobbeltklikke i TIC-ruden på et bestemt tidspunkt for at vise spektret for dette område.

Kromatogrammer

Et kromatogram viser variationen af en vis kvantitet med hensyn til tid i et gentaget eksperiment. Når massespektrometeret f.eks. er programmeret til at gentage et givet sæt spektrale scanninger flere gange. Kromatografiske data er sammenhængende, selv om dataenes intensitet er nul. Kromatogrammer genereres ikke direkte af massespektrometeret, men genereres fra spektre.

I kromatogramvisningen vises intensiteten, i tællinger pr. sekund (cps), på Y-aksen i forhold til tiden på X-aksen. Toppe mærkes automatisk.

I tilfælde af LC/MS vises kromatogrammet ofte som en funktion af tiden, det tidspunkt, hvor en bestemt scanning blev opnået, som kan udledes af scanningsnummeret.

Et kromatogram giver et generelt overblik over dataene, sædvanligvis tidsafhængigt, når en LC-kolonne anvendes, men det giver oplysninger om komponenterne i en top. Mens et kromatogram for eksempel kun viser én top, kan denne top repræsentere mere end én forbindelse, dvs. forskellige masser.

Kromatografiske data kan ændres i både tid og intensitet, hvis de kromatografiske forhold i en given prøve ændres.

Spektre

Et spektrum er de data, der indhentes direkte fra massespektrometeret og normalt repræsenterer det antal ioner, der detekteres med bestemte masse-/ladningsforhold (m/z)-værdier. Det vises som en graf med m/z på X-aksen og intensiteten (cps) repræsenteret på Y-aksen.

For MRM-spektre er intensiteten forbundet med to masser, prækursor-ionmassen (Q_1) og produkt-ionmassen eller -masserne (Q_3).

Når data vises som et spektrum, indhentes massespecifikke oplysninger om en forbindelse. Et spektrum indeholder m/z -værdierne m/z for de ioner, der svarer til en bestemt kromatografisk top. Disse ioner kan bruges til at finde mere specifikke oplysninger. Et spektrum viser f.eks. alle de masser, der udgør en top, herunder intensiteten af hver masse.

Spektrale intensiteter kan ændre sig, men m/z er fast, da massen af en forbindelse ikke ændrer sig.

Der kan genereres spektrale data på to måder:

- Hvis der kun indhentes én scanning, eller hvis MCA anvendes til dataopsamling, vises dataene som et spektrum.
- Fra et kromatogram.

Baggrundssubtraktion

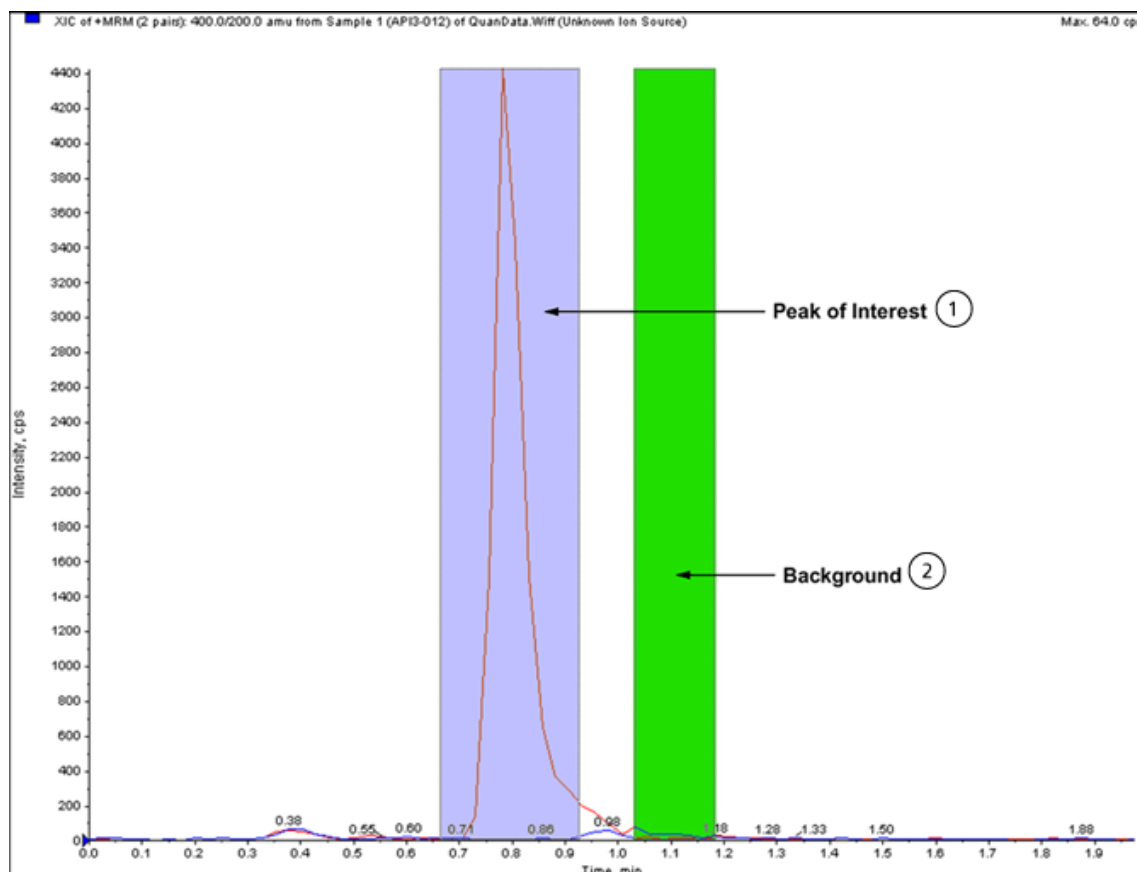
Baggrundssubtraktion reducerer mængden af støj i et spektrum ved at subtrahere enten et eller to områder, der indeholder støj, fra et område, der indeholder en top. Brugere kan flytte intervallerne uafhængigt eller låse dem og flytte dem som en enkelt enhed inden for grafen for at optimere topisolering eller for at isolere en anden top. Låst baggrundssubtraktion er den forudindstillede indstilling. Softwaren tilbyder forskellige metoder til baggrundssubtraktion.

Baggrundssubtraktion: Brugere kan bruge baggrundssubtraktion til at isolere en top af interesse. Brugere kan fremhæve og fratrække op til to valgte intervaller fra toppen. Brugere kan også låse områderne og flytte dem inden for grafen for at optimere topisolering eller for at isolere en anden top.

Udfør en baggrundssubtrahering for et kromatogram

1. Åbn en datafil.
2. Vælg et baggrundsinterval i kromatogrammet.
3. Tryk på **Shift**, og vælg derefter et andet baggrundsområde.

Figur 5-1: XIC



Element	Beskrivelse
1	Top af interesse
2	Baggrund

- Klik på **Explore > Background Subtract > Set Subtract range** for at indstille subtraktionsområdet.
- Vælg den relevante top.
- Klik på **Explore > Background Subtract > Perform Background Subtract**. Baggrunden trækkes fra toppen, og der oprettes et nyt spektrum.
- Du kan isolere en anden top ved at trække de låste områder i kromatogrammet og derefter gentage baggrundssubtraheringen.

Tip! Du rydder baggrundssubtraktionsområdet ved at klikke på **Explore > Background Subtract > Clear Subtract Range**.

- Klik på **File > Save Processed Data File** for at gemme det spektrum, der er subtraheret i baggrunden, som en behandlet datafil.

Lås op for områderne

Forudsætning
<ul style="list-style-type: none">• Det valgte subtraktionsområde er indstillet til låst.

Klik på **Explore > Background Subtract > Subtract Range Locked**.

Intervallerne er låst op, og hver enkelt kan flyttes uafhængigt.

Substraktion af baseline

Substraktion af baseline fjerner en konstant eller langsomt varierende forskydning fra et sæt af data. Denne funktion er nyttig til at lokalisere små toppe, der er skjult af støj. Softwaren bruger følgende algoritme, når du udfører en substraktion af baseline.

- Hvert datapunkt i datasættet betragtes som midten af et vindue (i masse eller tid) med en brugerdefinerbar bredde målt i amu eller minutter.
- Minimumsværdierne på hver side af det aktuelle datapunkt (minima) i vinduet lokaliseres.
- Der indsættes en lige linje mellem de to minima, og højden (intensiteten) af det aktuelle datapunkt over linjen beregnes. Dataenes slutpunkter betragtes som minima.
- Datapunktet erstattes af den nye beregnede værdi.

Regnemaskiner

Brug en regnemaskine til at udføre beregninger på grundlag af opsamlede data. Selv om regnemaskinen er et separat vindue, er den forbundet med den aktive graf i softwaren.

Følgende regnemaskiner er tilgængelige:

- [Regnemaskinen Elemental Composition](#)
- [Regnemaskine til hypermasse](#)
- [Regnemaskinen Elemental Targeting](#)
- [Masseegenskabsberegner](#)
- [Regnemaskine til isotopfordeling](#)

Brugere kan klippe og indsætte fra tekstboks til tekstboks mellem de forskellige vinduer i regnemaskiner. Data fra en af regnemaskinerne kan udskrives ved at klikke på ikonet **Print** i øverste venstre hjørne af vinduet. Du kan få flere oplysninger om brug af regnemaskiner i hjælpen.

Data fra regnemaskinerne Elemental Composition, Mass Property og Isotopic Distribution kan eksporteres til en separat fil. Brug regnemaskinen Elemental Targeting til at ændre dataene i den aktive graf. Data fra regnemaskinerne HyperMass og Isotopic Distribution kan overlejres på det aktive spektrum.

Tip! Indstil nøjagtigheden af regnemaskinedata på fanen Calculators i dialogboksen Appearance Options. Klik på **Tools > Settings > Appearance Options** for at åbne dialogboksen.

Regnemaskinen Elemental Composition

Regnemaskinen Elemental Composition bestemmer potentielle molekyle- eller aminosyresammensætninger på grundlag af et tilstræbt masse/opladning-forhold. Indtast dette forhold manuelt, eller vælg det fra et aktivt spektrum. Denne regnemaskine opretter en tabel med de mulige element- eller aminosyrekombinationer, der udgør massen af interesse og egenskaberne for hver.

Indtast eller vælg værdier for parametre såsom tolerance, elektrontilstand og antal ladninger. Brugere kan også indtaste en liste over mulige elementer og sætte en grænse for antallet af hver.

Regnemaskine til hypermasse

Hypermass-beregneren bestemmer fordelingen af en multipliceret konvolut på grundlag af en uladet masse. Brugere kan vælge den uladete masse, herunder adduktionen og dens polaritet.

I regnemaskinen vises en grafisk repræsentation af Hypermass-serien, som kan overlejres det aktive spektrum. En liste over Hypermass-data er også tilgængelig.

Regnemaskinen Elemental Targeting

Dataspektret reduceres automatisk på grundlag af et specifikt mønster, der primært er et, der svarer til isotopfordelinger, i regnemaskinen Elemental Targeting. I regnemaskinen søges også automatisk efter et MS-dataspektrum for et specifikt mønster af toppe, som kan indtastes enten som en formel eller som en isotopfordeling.

Hvis der findes et match i regnemaskinen, oprettes et reduceret diagram, der kun indeholder data vedrørende det angivne mønster. Alle umatched data for et spektrum fjernes i regnemaskinen. Ved et kromatogram beregnes det elementære mål for hvert af de underliggende spektre i regnemaskinen, og hvert punkt i kromatogrammet regenereres på grundlag af disse nye spektre.

Masseegenskabsberegner

Med masseegenskabsberegneren bestemmes forskellige egenskaber såsom nøjagtig masse, gennemsnitlig masse, massenøjagtighed og massefejl for en masse af interesse. Resultater af denne beregning afhænger af antallet af udfyldte indtastningsfelter.

Regnemaskine til isotopfordeling

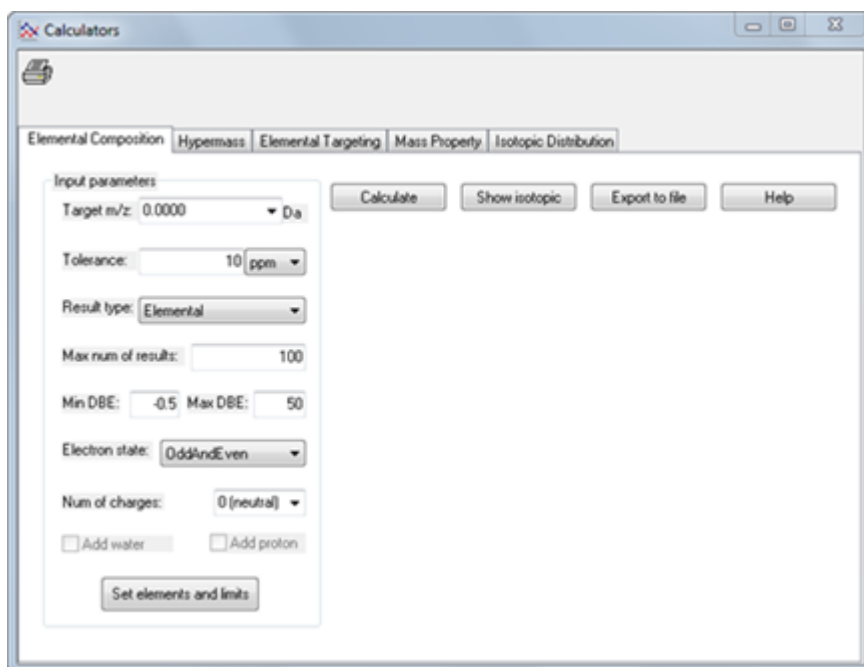
Beregningen af isotopisk fordeling bestemmer den isotopiske fordeling på grundlag af en indtastet formel. Dette giver brugerne mulighed for at skelne mellem forbindelser med samme masse på grund af isotopernes relative intensitet.

Den beregnede isotopfordeling kan vises i grafisk format eller tekstformat i ruden Isotopic Distribution, overlejres på det aktive spektrum eller eksporteres til en separat fil.

Adgang til lommeregnerne

Klik på **Tools > Calculators**.

Figur 5-2: Dialogboksen Calculators



Dialogboksen Calculators åbnes.

Toppe med beregnet massemidtpunkt

Ved at beregne massemidtpunktet af en top konverteres topfordelingsværdier til en enkelt værdi af m/z og intensitet, der repræsenterer toppen. Massemidtpunkt af data, der er opsamlet i profiltilstand, forenkler dataene og reducerer filstørrelsen. Massemidtpunkt af data giver mere nøjagtig toptildeling og reducerer mængden af data, men det fjerner også oplysningerne om topform.

Massemidpunktsalgoritmen konverterer toppe til enkeltværdier ved hjælp af et intensitetsvægtet gennemsnit til at beregne toppens tyngdepunkt. Algoritmens output er en liste over toppe med parametre, som vist i følgende tabel.

Tabel 5-1: Toppparametre

Parameter	Definition
Massemidtpunkt sværði	Værdien af de massemidpunktsdata i masseenheder eller tid.
Intensitet	Intensiteten af hver top i cps.

Tabel 5-1: Topparametre (fortsat)

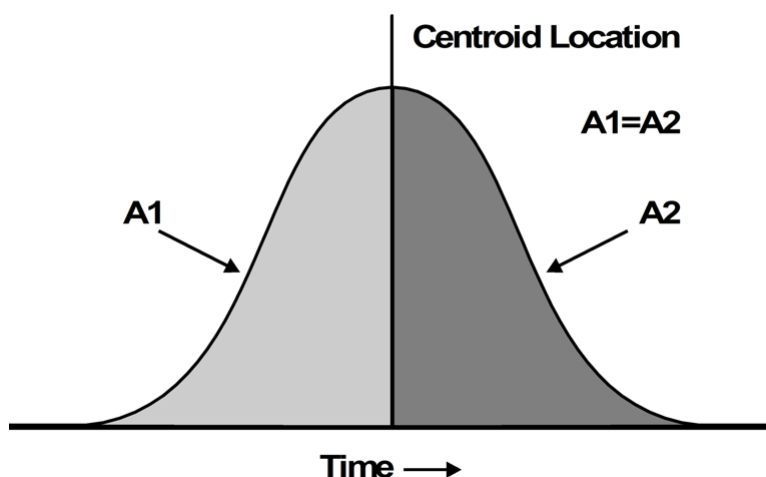
Parameter	Definition
Bredde	Bredden af massemidtpunktsstop i Da.

Data beregnes automatisk som et massemidtpunkt, når de føjes til et bibliotek, eller når der foretages en søgning.

Beregning af en tops massemidtpunkt

1. Vælg en rude, der indeholder et spektrum.
Beregning af toppens massemidtpunkt ændrer udseendet af den eksisterende graf. Sammenligning af resultatet med de oprindelige data kræver, at du laver en kopi af grafen, før du beregner massemidtpunktet.
2. Klik på **Explore > Centroid**.
Dataene er samlet i et massemidtpunkt.

Figur 5-3: Placering af massemidtpunkt for analyt



Dataanalyse

Brugere kan åbne filer, der indeholder eksisterende data eller data, der er ved at blive opsamlet. Alle eksperimentrelaterede data kan også vises i tabelform. Tabelruden består af to faner, fanen Data List og fanen Peak List. Fanen Dataliste indeholder eksperimentrelaterede oplysninger, såsom dataopsamlings- og scanningsintensitet. Fanen Peak List indeholder toprælaterede oplysninger såsom tophøjde, topområde og baselinetype.

Samlet ionkromatogram

Et total ion-kromatogram (TIC) oprettes ved at summere intensitetsbidragene fra alle ioner i en serie af massescanninger. Brugere kan bruge TICc til at se et helt datasæt i en enkelt

rude. Den består af de summerede intensiteter af alle ioner i en scanning afbildet i forhold til tiden i en kromatografisk rude. Hvis dataene indeholder resultater fra flere eksperimenter, kan brugeren oprette individuelle TIC'er for hvert eksperiment og en anden TIC, som repræsenterer summen af alle eksperimenter. Den forudindstillede TIC, der repræsenterer summen af alle eksperimenter, vises med et splitter-værktøj under midten af x-aksen.

Ekstraheret ionkromatogram

Et ekstraheret ionkromatogram (XIC) oprettes ved at tage intensitetsværdier ved en enkelt diskret masseværdi eller et masseområde fra en række af massespektralscanninger. Det viser funktionsmåden for en given masse, eller masseområde, som en funktion af tid. Ionens intensitet, eller de summerede intensiteter af alle ioner i et givet område, afbildes i en kromatografisk rude.

Basetopkromatogram

Et basetopkromatogram (BPC) viser intensiteten af det mest intense ion i hver scanning som en funktion af scanningsnummer eller retentionstid. Det er nyttigt i tilfælde, hvor TIC er så domineret af støj, at forskydningen er stor, og kromatografiske toppe er svære at skelne. Det hjælper også med at skelne mellem co-eluerende komponenter. BPC'er kan kun oprettes ud fra en enkelt periode, enkelt eksperimentdata.

Grafen bruger to farver, der skifter, hver gang massen af basetoppen ændres. Farveændringerne bevares, når dataene manipuleres ved at rulle eller zoome. Der findes flere oplysninger om valg af farver, der bruges i grafen, i hjælpen.

Ekstraheret bølgelængdekromatogram

Et ekstraheret bølgelængdekromatogram (XWC) er et bølgelængdekromatogram, der fremstilles ved at tage intensitetsværdier ved en enkelt bølgelængde eller ved at tage summen af absorbansen for et interval på flere bølgelængder.

Diodearray-detektor

Brugere kan få vist DAD-spektret (diode array detektor) for et enkelt tidspunkt, eller for et tidsinterval, som et kromatogram med samlet bølgelængde.

Samlet bølgelængdekromatogram

Et samlet bølgelængdekromatogram (TWC) er et mindre almindeligt anvendt kromatogram. Det viser den samlede absorbans (mAU) som en funktion af tid. TWC'et er en måde at vise et helt datasæt i en enkelt rude. Det består af summen af absorbansen for alle ioner i en scanning afbildet i forhold til tiden i en kromatografisk rude. Hvis dataene indeholder resultater fra flere eksperimenter, kan brugeren oprette individuelle TWC'er for hvert eksperiment og et andet TWC, som repræsenterer summen af alle eksperimenter.

Overlejring af grafer

To eller flere datasæt kan sammenlignes visuelt ved at overlejre grafer, som er oprettet ved hjælp af lignende metoder. Hvert individuelt spektrum er kendetegnet ved farven på sit spor.

Kvalitativ dataanalyse

For fuldstændige scanningsdata giver dette brugere mulighed for at visualisere forskellene mellem flere prøvespektre.

Hvis der vælges én eller flere ruder, åbnes hver XIC i en separat rude.

Tip! Hvis du vil overlejre mindre end fire grafer i samme rude, skal du trykke på **Ctrl**, højreklikke på en rude og derefter klikke på **Appearance Options**. I dialogboksen Appearance Options på fanen Multiple Graph Options skal du vælge **Yes** for felterne **Overlay Multiple Panes for Spectrum** og **Chromatogram**.

1. Vælg den første rude, der skal overlejres.
2. Klik på **Explore > Overlay**.
3. Klik i den anden rude.

Graferne overlejres og viser de to spor med forskellige farver.

Tip! Højreklik på rudens titellinje for at få vist en farvekodet liste over de overlejlrede grafer.

Skift mellem overlejlrede grafer

1. Vælg en rude, der indeholder overlejlrede grafer.
2. Klik på **Explore > Cycle Overlays**.
Visningen ændres, så den næste graf i rækkefølge vises i forgrunden.

Sum af overlejlringer

Hvis to eller flere grafer er overlejlret, kan brugerne summere graferne for at få et nyt spor. Hvert punkt på den nye kurve er summen af punkterne fra graferne. Summering af flere overlejlringer af lignende datatype kan gøre efterfølgende behandling lettere og hurtigere. Brugere kan for eksempel overlejlre flere XIC'er, summere dem og derefter udjævne den summerede overlejlring for at fjerne støj.

Summering af overlejlringer svarer til at generere et TIC med den fordel, at man kan vælge, hvilke grafer der skal overlejres. Hvis der for eksempel vises 10 eksperimenter, lægger TIC alle 10 eksperimenter sammen. Hvis overlejlringer summeres, har brugerne mulighed for kun at tilføje 9 af 10 overlejlrede grafer. Denne procedure kan anvendes, hvis de data, der indsamles i det ene eksperiment, kun er støj.

1. Foretag overlejlring af de grafer, der skal summeres.
2. Klik på **Explore > Sum Overlays**.
De overlejlrede grafer lægges sammen.

Tilpasning af grafer

Grafer kan tilpasses ved hjælp af den forudindstillede stil for etiketter, billedtekster eller tekster, på grafer og kromatogrammer. Brugere kan vælge de skrifttyper, der skal bruges til top- og akseetiketter, og de farver, der skal bruges til sporene. Brugere kan også tilføje akseetiketter og typen af etiket og præcision for toppe.

Tilføjelse af billedtekster i en graf

Brug billedtekster til at markere toppe af interesse eller væsentlige punkter på grafen. Når en billedtekst placeres ved siden af en top, bevares billedteksten sammen med toppen, når der zoomes ind på eller ud fra grafen. Billedtekster bevares også sammen med den oprindelige prøve, når brugere navigerer mellem prøver i en datafil. En billedtekst indeholder én tekstlinje med maksimalt 128 tegn.

1. Højreklik i spektret, og klik derefter på **Add Caption**. Dialogboksen Add Caption åbnes.
2. Indtast teksten i feltet **Caption**.
3. Klik på **Font** for at ændre billedtekstens størrelse og stil.
4. Klik på **OK** for at placere billedteksten.

Tip! Hvis billedtekstens position ikke er tilfredsstillende, skal du trække billedteksten til en anden position. Billedteksten forbliver på samme sted i forhold til X- og Y-akserne, når der er zoomet ind på eller ud fra grafen. Du kan redigere eller slette billedteksten ved at højreklikke på billedteksten og derefter klikke på den relevante kommando.

Tilføjelse af tekst i en graf

Brug tekst til at føje flere linjer med oplysninger til en graf. I modsætning til billedtekster, der er forbundet med en bestemt top og bevæger sig med den, mens der zoomes ind på grafen, forbliver tekstetiketter i deres oprindelige placering, mens der zoomes ind på grafen. De bliver ikke hos den oprindelige prøve, når brugerne navigerer mellem prøver i en datafil.

1. Højreklik på grafen, og klik derefter på **Add User Text**. Dialogboksen Add User Text åbnes.
2. Indtast teksten i feltet **User Text**.
3. Markér afkrydsningsfeltet **Center Text** for at centrere teksten.
4. Klik på **Font** for at ændre billedtekstens størrelse og stil.
5. Klik på **OK** for at indsætte teksten.

Tip! Hvis tekstens position ikke er tilfredsstillende, skal du trække teksten til en anden position. Du kan redigere eller slette teksten ved at højreklikke på teksten og derefter vælge den relevante kommando.

Database over forbindelser

I databasen over forbindelser findes oplysninger om forbindelser, herunder optimeringsspecifikationer. Brug databasen over forbindelser, når der er et stort antal prøver, og der hurtigt skal optimeres et stort antal forbindelser. I vinduet Compound Database findes optimerede betingelser for forbindelser, der kan hentes for at køre prøver. Der findes flere oplysninger i dokumentet: *Hjælp*.

Konturplot

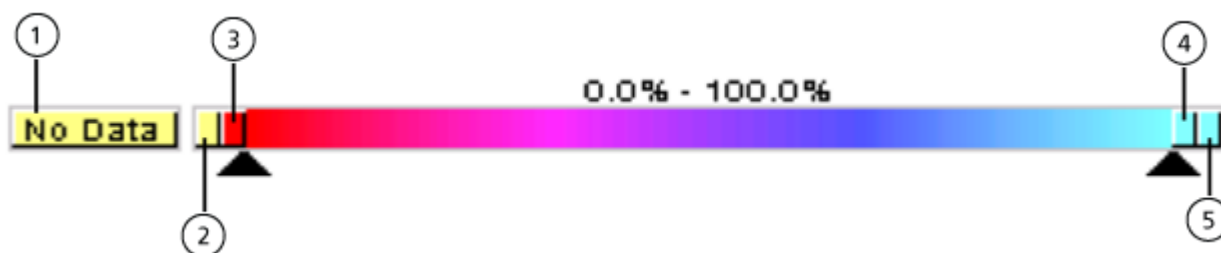
Et konturplot er et farvekodet plot af et komplet datasæt, hvori bruges farve til at repræsentere en tredje dimension i plottet. I et konturplot af en TIC repræsenterer X-aksen retentionstid eller scanningsnummer, Y-aksen repræsenterer masse, og farven repræsenterer intensiteten af dataene på det pågældende punkt. I et konturplot af TWC for DAD-data repræsenterer X-aksen retentionstid eller scanningsnummer, Y-aksen repræsenterer bølgelængde, og farven repræsenterer absorbans. Konturplottet er et postdataopsamlingsværktøj, der ikke fungerer ved en dataopsamling gennem scanning i realtid.

Bemærk: Konturplottet understøtter ikke MI- eller MRM-scanninger, men det understøtter DAD-scanninger.

Farve er den tredje akse i konturplottet, og den repræsenterer enten intensitet eller absorbans. Brugere kan ændre de høje og lave intensitets- eller absorbansværdier i Contour Plot ved hjælp af kontrollotrekanterne på farvebjælken over konturplottet. Procentparametrene øverst i ruden Contour Plot angiver de værdier, som skyderne for lav og høj står på. De faktiske værdier er baseret på en procentdel af den maksimale intensitet eller absorbans inden for det valgte område. Værdien vises i øverste højre hjørne af ruden Contour Plot.

De kontroller, der vises i følgende figur, ændrer farverne i et konturplot.

Figur 5-4: Knapper til styring af konturplotfarver



Element	Beskrivelse
1	Ingen data
2	Under lave data
3	Lave data
4	Høje data
5	Over høje data

Brugere kan definere farverne i en konturplotgraf for at opnå bedre kontrast og for at vise dataspecifikationer i forhold til deres behov. For eksempel kan indstilling af intensitet/ bølgelængde og ændring af farven på værdierne for **Below Low Data Above High Data** eliminere baggrundsstøj i et konturplot.

Størrelsen af knapperne **Below Low Data** og **Above High Data** formindskes og forstørres på farvebjælken, hvis skyderkontrollerne flyttes. Når konturplotfarverne ændres, bliver de nye farver de forudindstillede farver for alle efterfølgende grafer.

Tabel 5-2: Højrekliksmenu for konturplotruder

Kommando	Funktion
Show DAD Spectrum	(Vis DAD-spektrum)Åbner en ny rude med DAD-spektret.
Extract Wavelengths (Use Range)	(Udtræk bølgelængder (Brug rækkevidde))Udtrækker op til tre bølgelængdeområde fra et DAD-spektrum til visning af XWC.
Extract Wavelengths (Use Maximum)	(Udtræk bølgelængder (Brug maksimum))Udtrækker bølgelængdeområder ved hjælp af de maksimale bølgelængder.
Zoom to selection	(Zoom ind på markering)Zoomer ind på det markerede område.
Add User Text	(Tilføj brugertekst)Tilføjer en tekstboks på markørens placering.
Undo Zoom	(Fortryd zoom)Stiller grafen tilbage til den oprindelige skala.
Delete Pane	(Slet rude)Sletter den valgte rude.
Show Cross-Hair	(Vis trådkors)Viser trådkors (nm/min).

Vis et konturplot

Et konturplot kan kun vises efter dataopsamling. Brugere kan se et konturplot fra TIC-, XIC-, TWC- eller XWC-grafer. TIC'er og XIC'er er tilgængelige for alle wiff-datafiler. TWC'er og XWC'er er kun tilgængelige for data, som er opsamlet af en DAD eller PDA.

1. Åbn en datafil som en TIC-, XIC-, TWC- eller XWC-graf i tilstanden Explore.
2. Fremhæv det område, der skal vises i konturplottet. Hvis der ikke foretages et valg, vises hele området.
3. Klik på **Explore > Show > Show Contour Plot**.
Et konturplot af det valgte område åbnes i en separat rude.

Tip! For at lukke en rude med et konturplot skal du højreklikke i ruden Contour Plot og derefter klikke på **Delete Pane**.

Vælg et område i et konturplot

Hvis du vil zoome ind på et bestemt valg eller have vist det tilsvarende massespektrum for det pågældende valg, skal du gøre et af følgende:

- Hvis du vil vælge et standardområde i en boks, skal du trække cursoren for at oprette en boks omkring et område i konturplottet.

- Hvis du vil foretage et lodret valg, skal du trykke på **Ctrl** og derefter trække markøren lodret.
- Hvis du vil foretage et vandret valg, skal du trykke på mellemrumstasten og trække markøren vandret.

Indstil intensitet og absorptions i et konturplot

Gør ét af følgende:

- Den lave intensitets-/absorptionsværdi i et konturplot indstilles ved fra farvelinjen over konturplottet at trække den trekantede skyder til venstre til den ønskede position.

Farven af værdierne under indstillingen justeres automatisk i konturplottet for at angive, at de er uden for området.

- Den høje intensitets-/absorptionsværdi i et konturplot indstilles ved fra farvelinjen over konturplottet at trække den trekantede skyder til højre til den ønskede position.

Farven af værdier over indstillingen justeres automatisk i konturplottet for at angive, at de er uden for området.

Ændring af farver i et konturplot

Tip! Ved at bruge paletten Definer brugerdefinerede farver kan brugerne oprette brugerdefinerede farver til brug i et konturplot.

1. Klik på en af farveknapperne i ruden Contour Plot. Dialogboksen Color åbnes.

Bemærk: Der er fem knapper, der styrer farven i konturplottet. Hver viser sit navn, når markøren forbliver over knappen. Dette sikrer, at den korrekte funktion ændres. Derudover reduceres og øges størrelsen af knapperne Below Low Data og Above High Data på farvebjælken, hvis brugeren flytter skyderen. Når brugeren har ændret konturplotfarverne, bliver dette nu standardfarverne for alle efterfølgende grafer.

2. Klik på en farve.
3. Klik på **OK**. Grafen ændres for at afspejle farveændringen.

Dynamic Background Subtraction-algoritme

Algoritmen Dynamic Background Subtraction forbedrer detektering af prækursor-ioner i et IDA-eksperiment (informationsafhængig dataopsamling). Når algoritmen er aktiveret, bruger IDA et spektrum, der er subtraheret i baggrunden, til at vælge prækursor-ionet af interesse til MS/MS-analysen, i stedet for at vælge prækursor-ionet direkte fra undersøgelsesspektret. Fordi denne proces finder sted under LC-analyse, gør algoritmen det muligt at detektere arter i takt med, at deres signal øges i intensitet. Resultatet er, at denne algoritme fokuserer på detektion og analyse af prækursor-ioner på den stigende del af LC-toppen, op til eller lidt over toppen af LC-toppene.

Fragmentfortolkning

Værktøjet Fragmentfortolkning hjælper brugeren med at fortolke MS/MS-data.

Værktøjet Fragmentfortolkning genererer fragmentmasser fra enkeltstående, ikke-cyklisk bindingsspaltning af en molekylær struktur. Den molekylære struktur kan oprettes i et tredjeparts tegneprogram og derefter gemmes som en mol-fil. Værktøjet kan derefter matche den teoretiske liste med toppe i det aktuelle massespektrum. Fragmentfortolkningen viser de teoretiske fragmenter i fragmentlisten og sammenligner fragmentmasserne med toppe i massespektret. Toppe over tærskelintensiteten og inden for den brugerdefinerede massetolerance (højest 2 Da) for fragmentmasser betragtes som matchede og vises med fed skrift i fragmentlisten.

Bemærk: Værktøjet Fragmentfortolkning kan ikke bruges med følgende scanningstyper:

- Prækursor-ion
 - Neutralt tab
 - Q1 flere ioner
 - Q3 flere ioner
 - Multipel reaktionsovervågning (MRM)
-

Forbindelse af værktøjet til fortolkning af fragmenter med et spektrum

Når der vælges en enkelt, ikke-cyklisk binding i den molekylære struktur, fremhæver værktøjet til fortolkning af fragmenter de to fragmenter, der oprettes, når bindingen spaltes, og viser matchende toppe i det forbundne spektrum.

Hvis der vises flere spektrumruder, forbindes værktøjet til fortolkning af fragmenter med det aktive spektrum. Hvis datafilen indeholder mere end én prøve, forbindes værktøjet til fortolkning af fragmenter med det aktive spektrum.

Hvis et spektrum er åbent, når værktøjet til fortolkning af fragmenter åbnes, forbindes det aktive panel automatisk med det åbne spektrum.

1. Klik på **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Klik på forbindelsesknappen i nederste højre hjørne af ruden Fragment Interpretation. Markøren skifter til forbindelsesværktøjet.
3. Klik på den spektrumgraf, der skal forbindes med værktøjet til fortolkning af fragmenter. Den tilsluttede grafindikator i nederste venstre hjørne indeholder navnet på den graf, der er forbundet med ruden Fragment Interpretation. Forbindelsen afbrydes, når enten grafen eller fragmentfortolkningen lukkes. Hvis den tilsluttede WIFF-fil har mere end én prøve, opdateres ruden Fragment Interpretation automatisk, efterhånden som brugeren ruller gennem prøverne.

Match fragmenter med toppe

1. Klik på **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Med en mol-fil i ruden Fragment Interpretation skal du markere en celle i den fragmentliste, der vises med fed skrift.
I spektret fremhæver softwaren den matchende spektrale top i den farve, der er valgt under fanen Options. I den molekylære struktur er bindingen fremhævet.
3. Hvis der klikkes på en række, der har mere end ét matchende fragment, fremhæves den spektrale top, der er tættest på dens monoisotopiske masse, i massespektret med den farve, der er angivet på fanen Options.

Vælg en binding i en molekylær struktur

1. Klik på **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Med en mol-fil åbnet i ruden Fragment Interpretation skal du klikke på en enkelt, ikke-cyklisk binding i molekylestrukturen.

De to resulterende fragmenter er vist som højdepunkter på fragmentlisten. Massen af de to fragmenter er vist på hver side af båndet.

Hvis et spektrum er forbundet, viser eventuelt matchende toppe på grafen i værktøjet Fragment Interpretation. Hvis et fragment på listen er markeret, og fragmentet er matchet med en top, zoomer der ind på den pågældende top i vinduet Fragment Interpretation.

Vis isotoper

Værktøjet til fortolkning af fragmenter kan vise den teoretiske isotopfordeling for en top, der matcher et fragment på fragmentlisten.

1. Klik på **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**.
2. Klik på fanen **Options** i ruden Fragment Interpretation.
3. Klik på afkrydsningsfeltet **Show Isotopes**.
4. Klik på **Apply**.
5. Vælg et fragment, der matcher en top, på fragmentlisten.
Den isotopiske fordeling for matchede toppe er vist i spektret.

Vis en formelforskel i et spektrum

Formlen og forskellen i monoisotopisk masse mellem to relaterede hypotetiske fragmenter kan vises. Formelforskellen vises, når der vælges to toppe. Formlen og forskellen i monoisotopisk masse vises, når der vælges to fragmenter eller to enkeltstående ikke-cykliske bindinger.

1. Klik på en fragmenttop.
2. Tryk på **Shift**, og klik derefter på en anden fragmenttop.

Hvis formelforskellen er lig med et fragment på fragmentlisten, fremhæves fragmentet på listen. I modsat fald vises formelforskellen mellem de matchende brudstykker af toppene i en meddelelsesboks.

Vis en formelforskel på fragmentlisten

1. Klik på række nummeret for et fragment.
2. Tryk på **Ctrl**, og klik derefter på et andet fragment.
Formlen og forskellen i monoisotopisk masse vises i en meddelelsesboks, hvis fragmenterne er relaterede.

Vis en formelforskel i en molekylær struktur

1. Klik på en enkelt, ikke-cyklisk binding. Det forudindstillede fragment (af de to fremhævede fragmenter) er valgt. For at vælge det andet fragment af den spaltede binding skal du trykke på **Ctrl** og derefter klikke på bindingen.
2. Vælg en anden ikke-cyklisk binding. For at vælge det forudindstillede fragment skal du trykke på **Shift** og derefter klikke på bindingen. For at vælge det andet fragment af den spaltede binding, skal du trykke på **Ctrl + Shift** og derefter klikke på bindingen.
Fortolkning af fragmenter beregner formelen og forskellen i monoisotopisk masse mellem det fragment, der er valgt i trin 1, og det fragment, der er valgt i trin 2, hvis fragmenterne er relaterede. Formlen og forskellen i monoisotopisk masse vises i en meddelelsesboks.

IDA Explorer

IDA Explorer (Information Dependent Acquisition) bruges til at vise data, der er opsamlet via en IDA-metode.

IDA Explorer kan slås fra og til på fanen IDA Explorer i dialogboksen Appearance Options. Kolonner, der findes i listevisningen, kan også defineres på denne fane.

Den venstre side af fremviseren, der vises i følgende figur, viser de masser, hvorpå der blev udført en produkt-ion-scanning. I dette område kan brugerne i enten en listevisning eller en trævisning undersøge massen, intensiteten, tiden og kollisionsenergien af de ioner, der blev foretaget produkt-ion-skanninger på. På listevisningen kan listen sorteres ved at dobbeltklikke på en hvilken som helst kolonneoverskrift. Brug dialogboksen Appearance Options til at tilpasse kolonnerne på listevisningen.

I højre side er fremviseren opdelt i fire ruder. Den øverste venstre rude viser undersøgelsens TIC-data. Den nederste venstre rude viser massens XIC. I øverste højre rude vises undersøgelsen eller undersøgelsen skiftevis med ER-scanninger (Enhanced Resolution), og i nederste højre rude vises produktscanningen.

I IDA-fremviseren vises alle de masser, som EPI-scanninger (Enhanced Product Ion) eller ER-scanningstyper blev udført på. I IDA-fremviseren kan brugerne gøre følgende:

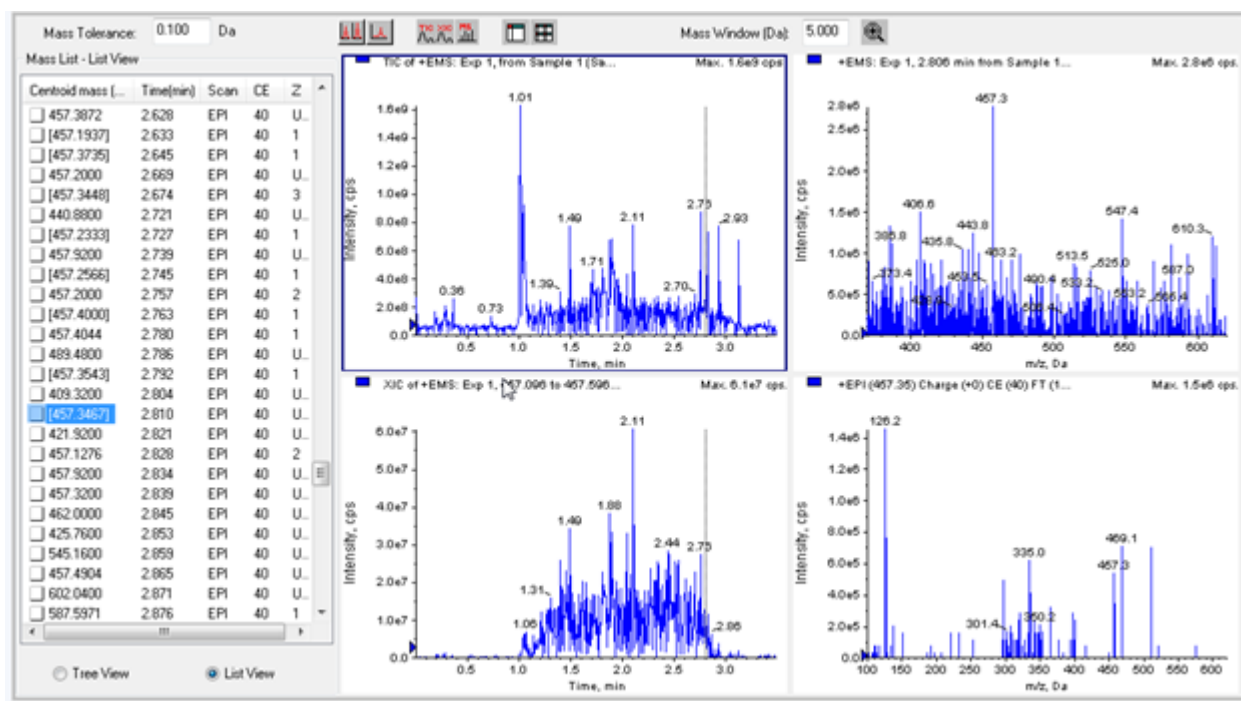
- Klik på en masse på listen eller trævisningen for at få vist observationsområder, der er relevante for den pågældende masse.
- Vis det undersøgelsesspektrum, hvorfra massen blev identificeret, og produktspektret for den pågældende masse.

Kvalitativ dataanalyse

- Vis TIC for undersøgelsesscanningen og XIC for hver masse.

Bemærk: Beslag omkring en masse angiver, at massen er flettet. En flettet masse er sammenhængende på tværs af en række cyklusser. Når der vises en flettet masse, angiver det et gennemsnitligt spektrum, der indeholder gennemsnittet af alle tilstødende spektre.

Figur 5-5: IDA-fremviser



Biblioteksdatabaser

Biblioteksøgningsfunktionen sammenligner ukendte spektre med kendte MS-spektre i en biblioteksdatabase og opretter en liste over mulige matches. Brug biblioteksøgningen til at oprette og administrere en massespektradbaser, der kan bruges til at søge efter og matche ukendte spektre mod de massespektre, der er gemt i databasen.

Med biblioteksøgning kan brugere:

- Sammenlign bibliotekets indhold med et ukendt spektrum.
- Tilføj poster til biblioteket.
- Rediger eksisterende poster.

Biblioteksdata kan gemmes på følgende steder:

- MS Access på en lokal database.
- MS SQL Server.

Før du bruger funktionen Library Search, skal du bestemme, hvor biblioteksdatabaseen er gemt, og forbinde computeren med den pågældende placering. Biblioteksdatabaser kan gemmes lokalt på en computer eller på en server over et netværk.

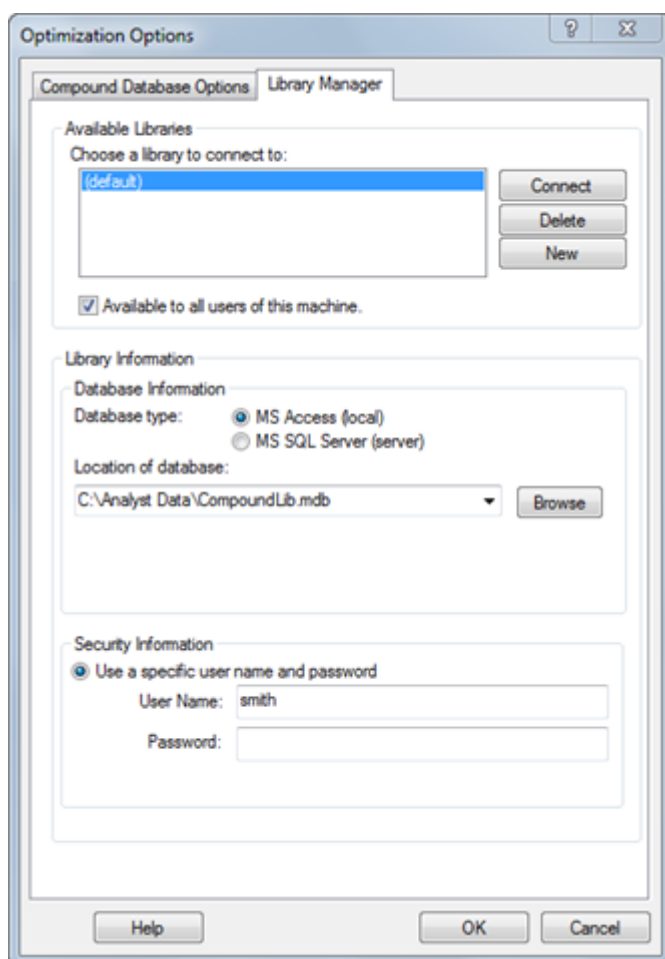
Brug et alias til at oprette forbindelse til en database. I så fald angiver aliaset en forbindelse til en specifik database og kan indeholde det brugernavn og den adgangskode, som kræves for at få adgang til databasen. For eksempel kan en bruger have en lille biblioteksdatabase med identificerede forbindelser på en computer, og organisationen kan have en central database, der bruges lejlighedsvis af brugerne. Oprettelse af et alias for hver database giver brugeren mulighed for at skifte mellem databaser hurtigt. Der findes oplysninger om oprettelse af aliaser og forbindelse med databaser i hjælpen.

Skift mellem eksisterende biblioteksdatabaser

Brugere kan oprette forbindelse til alle databaser med aliaser, som allerede er oprettet.

1. Klik på **Tools > Settings > Optimization Options**. Dialogboksen Optimization Options åbnes.
2. Klik på fanen **Library Manager**.

Figur 5-6: Dialogboksen Optimization Options – Fanen Library Manager



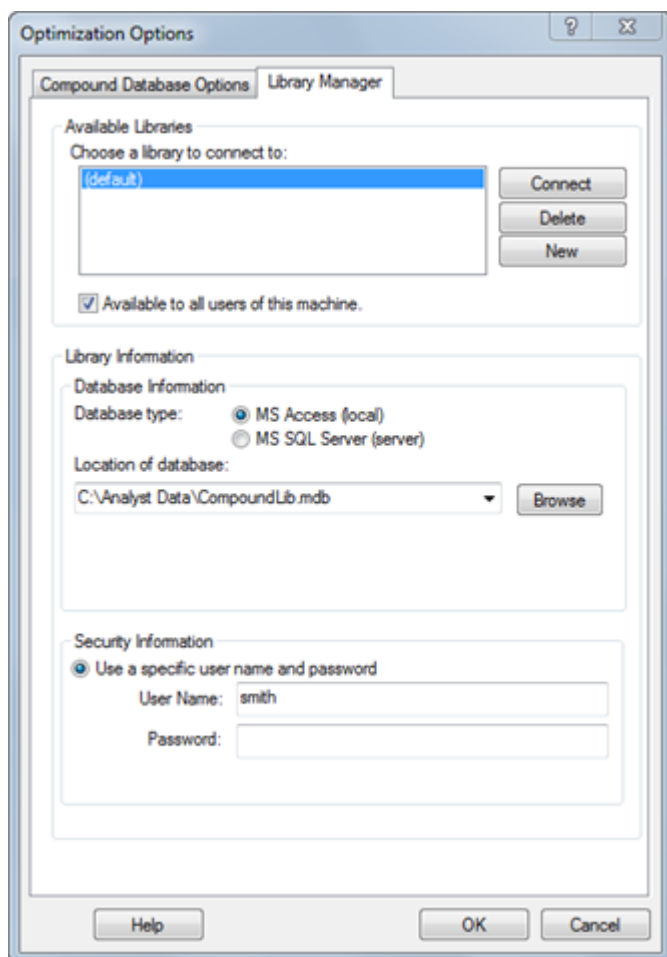
3. Klik på aliaset for den database, der skal oprettes forbindelse til, i afsnittet **Available Libraries**, og klik derefter på **Connect**.

4. (Valgfrit) Hvis du vil give andre brugere adgang til databasen, skal afkrydsningsfeltet **Available to all users of this machine** markeres.
5. Klik på **OK**.

Oprettelse af en lokal biblioteksdatabase

1. Klik på **Tools > Settings > Optimization Options**.
Dialogboksen Optimization Options åbnes.
2. Klik på fanen **Library Manager**.

Figur 5-7: Dialogboksen Optimization Options – Fanen Library Manager



3. Klik på **New** i afsnittet **Available Libraries**.
Dialogboksen Add Library åbnes.

Figur 5-8: Dialogboksen 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:

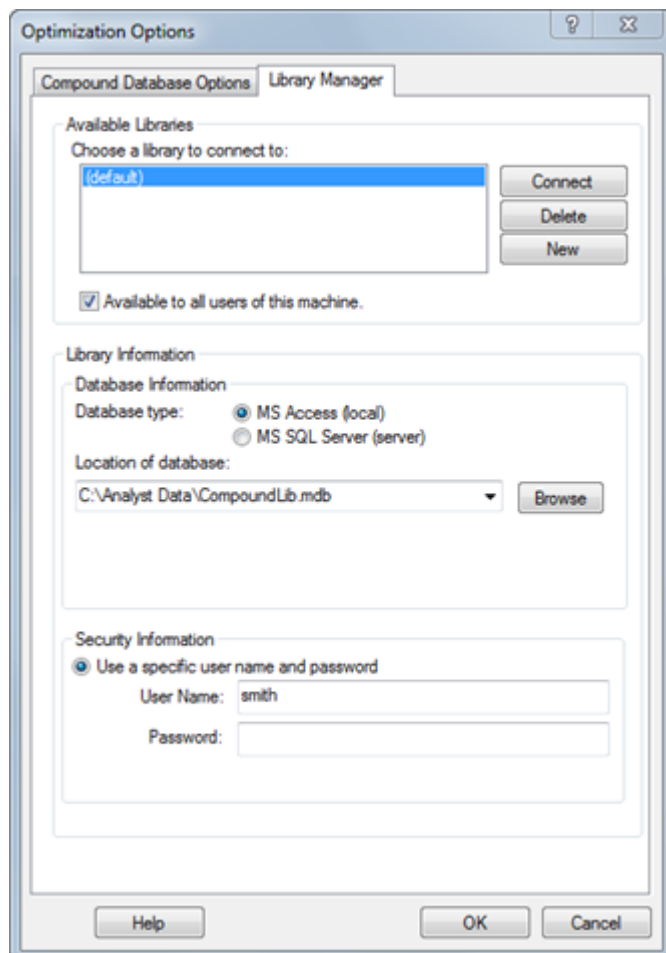
Save Cancel

4. Indtast et navn til biblioteket i feltet **Enter a Name for the Library**.
5. Vælg **MS Access (local)** i sektionen **Database Information**.
6. Indtast databasens placering.
7. I afsnittet **Security Information** skal du indtaste et brugernavn og en adgangskode for at få adgang til databasen, hvis det er nødvendigt.
8. Klik på **Save**.

Oprettelse af forbindelse til en serverbiblioteksdatabase

1. Klik på **Tools > Settings > Optimization Options**.
Dialogboksen Optimization Options åbnes.
2. Klik på fanen **Library Manager**.

Figur 5-9: Dialogboksen Optimization Options – Fanen Library Manager



3. Klik på **New** i afsnittet **Available Libraries**.

Dialogboksen Add Library åbnes.

4. Indtast et navn til biblioteket i feltet **Enter a Name for the Library**.
5. Vælg **MS SQL Server (server)** i sektionen **Database Information**.

Figur 5-10: Dialogboksen 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 name of the database server:

Refresh

Enter the name of the database on the server:

Security Information

☐ Use Windows integrated security ☒ Use a specific user name and password

User Name:

Password:

Save Cancel

6. Indtast navnet på databaseserveren.
7. Indtast navnet på databasen.
8. Gør ét af følgende:
 - Hvis der kræves et specifikt brugernavn og en adgangskode for at få adgang til denne database, skal du indtaste brugernavnet og adgangskoden.
 - Hvis Windows-sikkerhed bruges, skal du vælge indstillingen **Use Windows integrated security** i afsnittet Security Information.
9. Klik på **Save**.

Vis alle biblioteksposter

Klik på **Explore > Library Search > List**.

Dialogboksen Librarian åbnes med alle poster i databasen.

Tilføjelse af en post til biblioteket

1. Højreklik på et aktivt spektrum, og klik derefter på **Add a Record**.
Spektret beregnes automatisk som et massemidtpunkt. Dialogboksen Add a Record åbnes med data fra spektret.
2. Indtast et navn i feltet **Compound Name** på fanen Mass Spectral Information.

Navnet på forbindelsen er obligatorisk og skal entydigt identificere forbindelsen i biblioteket.

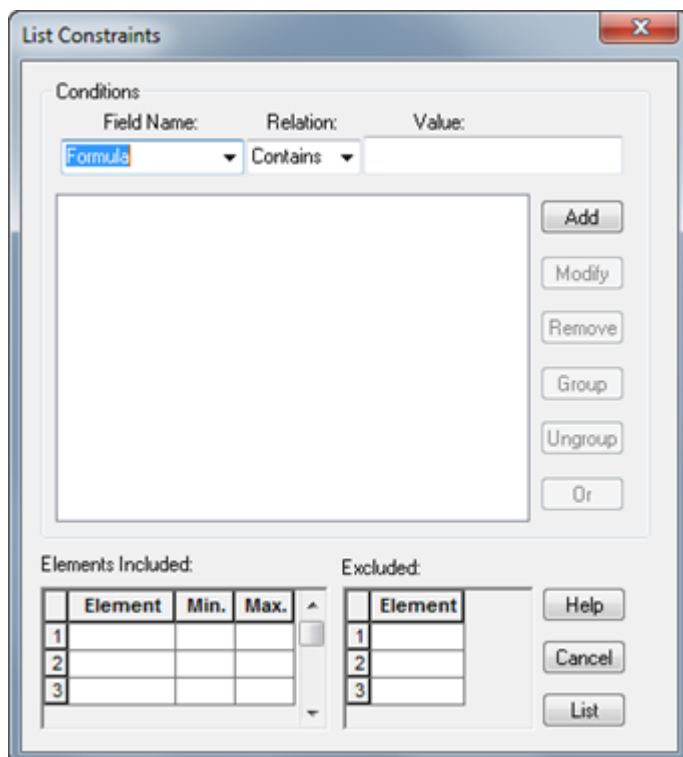
3. Rediger et af de andre felter. Mange af felterne udfyldes automatisk ud fra de data, der er knyttet til spektret.
4. Klik på fanen **General Information**.
5. Rediger felterne efter behov.
6. Klik på **OK**.

Søg i biblioteksposter med begrænsninger

Brug liste over begrænsninger til at indsnævre resultaterne. Når det er defineret, anvendes begrænsninger for alle søgninger.

1. Klik på **Explore > Library Search > List With Constraints**.

Figur 5-11: Dialogboksen List Constraints



Dialogboksen List Constraints åbnes.

2. Markér et felt, som en begrænsning skal baseres på, på listen **Field Name**.
3. Vælg den relation (operator), der gælder for feltnavnet, på listen **Relation**.
4. Indtast værdien af feltnavnet på grundlag af relationen i feltet **Value**.
5. Klik på **Add** for at føje den valgte begrænsning til listen **Conditions**.
6. Fortsæt med at føje begrænsninger til betingelseslisten efter behov.

7. Kobling af forskellige begrænsninger på listen **Conditions** skaber mere specifikke betingelser, der forbedrer søgningen. Begrænsninger kan grupperes ved at markere begrænsningerne og derefter klikke på **Group**. Hvis du vil adskille grupperede begrænsninger, skal du klikke på gruppen og derefter klikke på **Ungroup**.
8. Hvis du vil ændre forholdet mellem begrænsningerne, skal du klikke på forholdet og derefter klikke på **And** eller **Or**.
9. Hvis du vil inkludere forbindelser, der indeholder et bestemt antal atomer af specifikke elementer, skal du vælge eller indtaste elementerne i tabellen **Elements Included** og derefter indtaste et minimum og maksimum antal atomer af elementet.

Bemærk: I elementsymboler gøres forskel på store og små bogstaver. For eksempel er brint H, ikke h, og natrium er Na, ikke NA eller na.

10. Hvis du vil udelukke stoffer, der indeholder visse grundstoffer, skal du vælge eller indtaste grundstofferne i tabellen **Excluded**.
11. Klik på **List** for at søge efter forbindelser, der passer til kriterierne.
Poster, der matcher alle begrænsningerne, vises i tabellen **Records**.
Opslagsbegrænsninger gemmes.

Tip til bibliotekssøgning

Hvis du vil gøre dette	Skal du gøre dette
Gruppebetingelser	Vælg de forhold, der skal grupperes, og klik derefter på Group . Denne funktion fungerer som parenteser i formularer.
Søgningen uden brug af begrænsninger	Højreklik på et aktivt spektrum, og klik derefter på Search Library . Dialogboksen Search Results åbnes.

Søg efter et lignende spektrum

Brugeren kan søge i biblioteket efter et spektrum og dets relaterede forbindelsesoplysninger, der matcher eller ligner et aktivt spektrum. Søgninger kan udføres med eller uden begrænsninger. Når brugeren søger med begrænsninger, vises kun de poster, der matcher alle kriterierne. Resultaterne vises på en rangeret liste. Det første punkt på listen er det bedst egnede til det aktive spektrum. Angivelser længere nede på listen stemmer ikke så godt overens.

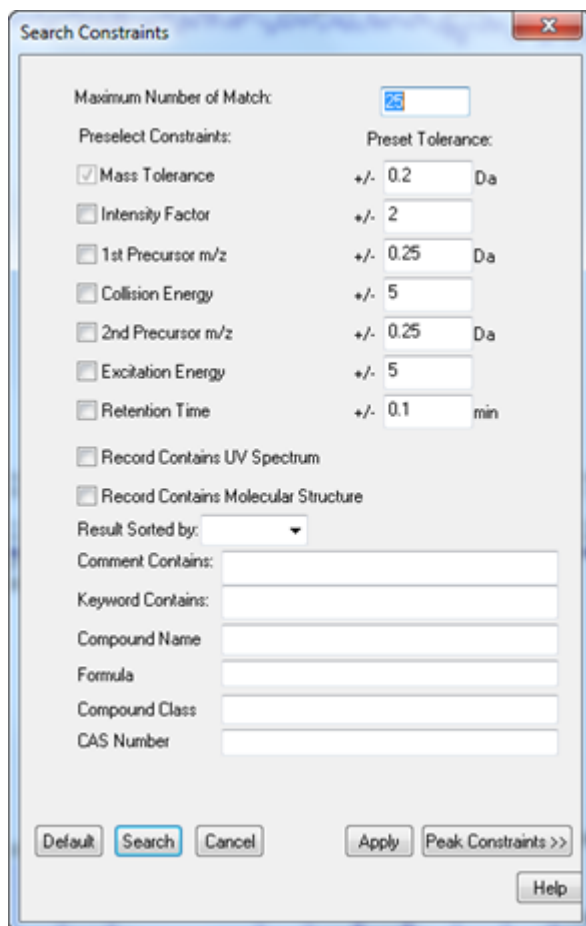
Jo flere begrænsninger, der vælges, jo mere præcis bliver listen, og jo færre, desto mere relevante er de matches, der er anført. Når et sæt begrænsninger er defineret, vil de gælde for alle efterfølgende søgninger, medmindre de redigeres. Når en bruger søger uden begrænsninger, er der en meget større liste over foreslåede spektre, fordi biblioteket laver færre specifikke matches med de spektrale data.

Kun toppe over tærsklen bruges i søgningen. Når du vælger søgebegrænsninger, kan brugeren også tilføje eller trække toppe fra det aktive spektrum.

Hvis brugeren for eksempel mener, at en top faktisk er en baggrunds- eller støjtop, bør toppen ikke bruges til søgningen, fordi den kan give unøjagtige resultater.

1. Højreklik på et aktivt spektrum, og klik derefter på **Search With Constraints**.
Softwaren beregner automatisk spektrumets massemidtpunkt.
2. I feltet **Maximum Number of Match** skal du indtaste det maksimale antal forbindelser, der skal returneres af søgningen.

Figur 5-12: Dialogboksen Search Constraints



3. I afsnittet **Preselect Constraints** skal du markere afkrydsningsfelterne for de begrænsninger, der skal gælde.
4. Indtast tolerancen for hver af de valgte begrænsninger i afsnittet **Preset Tolerance**.
5. Vælg om nødvendigt en metode til sortering af poster på listen **Result Sorted by**.
6. Hvis det er nødvendigt, skal du indtaste tekst i feltet **Comment Contains**.
7. Hvis det er nødvendigt, skal du indtaste tekst i feltet **Keyword Contains**.
8. Hvis du vil anvende begrænsning af toppe ved at tilføje og fjerne toppe, skal du klikke på **Peak Constraints**.
Tabellen Peaks Included åbnes.

9. Hvis du vil tilføje toppe til listen, der skal søges efter, skal du klikke på **Add** og derefter indtaste m/z -værdierne og den tilsvarende intensitet i den tomme celle.
10. Hvis du vil fjerne toppe, så de ikke vil blive inkluderet i søgningen, skal du markere toppe og derefter klikke på **Remove**.
11. Klik på **Search** for at gemme begrænsningerne og begynde søgningen.

Vis en forbindelse fra søgeresultaterne

Hvis flere spektre matcher det ukendte spektrum, kan brugeren få vist de kendte spektre og sammenligne dem med det ukendte.

1. Vælg række nummeret på den forbindelse, der skal vises, på listen over forbindelser i dialogboksen Search Results.
2. Klik på spektrumruden for én af de kendte forbindelser.
Spektret for den valgte forbindelse vises.

Behandlede datafiler

Brugeren kan gemme behandlede data, f.eks. specifikke layout og billedtekster, som kun kan åbnes i udforskningstilstand. Disse filer indeholder også historikoplysninger og ligner datafiler bortset fra, at de kun indeholder data fra den aktive rude i Explore. Disse filer har filtypenavnet pdt og gemmes i mappen Data i det aktuelle projekt.

Gem en behandlet datafil

1. Vælg den rude med data, der skal gemmes.
2. Klik på **File > Save Processed Data File**.
3. Indtast et navn i feltet **File name**.
4. Klik på **Save**.

Åbn en behandlet datafil

1. Klik på **File > Open Processed Data File** i Explore-tilstand.
Dialogboksen Load Processed Data File åbnes.
2. Vælg en fil, og klik derefter på **Open**.

Kvalitative data

Brugeren kan se oplysningerne i en datafil i tabel- eller grafform. Grafiske data vises som et kromatogram eller som et spektrum. Data i en tabel vises som datapunkter. Brugeren kan udføre forskellige sorteringsoperationer på dataene.

Når brugeren åbner en datafil, åbnes forskellige ruder afhængigt af den type eksperiment, der udføres.

Hvis afkrydsningsfeltet **MCA** er markeret i Tune Method Editor, åbnes datafilen med massespektret (MS). Hvis afkrydsningsfeltet **MCA** ikke markeres, åbnes datafilen med TIC.

Vælg et område, og dobbeltklik derefter i ruden TIC på et bestemt tidspunkt for at vise MS for dette område.

Softwaren gemmer data i filer med filtypenavnene wiff og wiff.scan. En datafil kan indeholde data for mere end én prøve. Softwaren har brug for både wiff- og wiff.scan-filer til at åbne datafilen. Ud over datafiler kan softwaren åbne txt-filer. En txt-fil indeholder data for kun én prøve.

Signal/støj-forhold

Signal/støj-forholdet er tophøjden divideret med støjen.

For at beregne støjen bruger softwaren standardafvigelsen ved hjælp af en middelværdi på nul for alle datapunkterne i kromatogrammet fra tidspunktet for **Background Start** til **Background End** (begge vist i de avancerede parametre for kvantificeringsmetodeeditoren og vinduet Peak Review). Disse tidspunkter angives, når et nyt baggrundsinterval defineres.

Hvis brugeren opbygger en metode uden at definere et nyt baggrundsinterval, hvilket er muligt, hvis den forudindstillede integration accepteres uden ændringer, vises værdien for både **Background Start** og **Background End** som **N/A**. Som følge heraf beregnes signal/støj-forholdet ikke, og det tilsvarende felt i resultattabellen vises som **N/A**.

Udglatningsalgoritmer

Brugeren kan vælge udglatningsalgoritmen eller den gaussiske udjævningsalgoritme som udglatningsmetode. Udglatningshandlingen omfatter udskiftning af hvert datapunkt med gennemsnittet af datapunktet før og efter det. Det udglattede datasæt erstatter det gamle sæt.

Data kan udglattes mere end én gang, men softwaren kan kun fortryde den sidste udglatning.

Udglatning er ikke tilgængelig for multiple ioner (MI) eller MRM-spektre.

Udglatningsalgoritme

Ved udglatning af data angiver brugeren punktvægtningensværdierne for tre datapunkter: Det aktuelle punkt, det foregående punkt og det efterfølgende datapunkt. Udglatningsalgoritmen ganger datapunkterne med de tildelte vægtningensværdier, summerer disse værdier og dividerer derefter totalt med summen af punktvægtningensværdierne. Dette er en blidere udglatning end den gaussiske algoritme, og det tager lang tid at udglatte data med meget støj.

Gaussisk udjævningsalgoritme

Gaussisk udjævning indebærer at erstatte hvert datapunkt med det vægtede gennemsnit af et antal datapunkter på hver side af det. Vægtningen for hvert nyt datapunkt beregnes på grundlag af en gaussisk kurve. Dette er en grovere udglatning end udjævningsalgoritmen, men er velegnet til udglatning af meget støjende data.

Angiv to værdier, når du anvender den gaussiske udjævningsmetode:

Gaussisk filterbredde (% af minimal afstand mellem punkter): Den bredde, der anvendes til at beregne vægtningen af tilstødende punkter. Bredden beskrives i procent af afstanden mellem to punkter i scanningen, hvor den forudindstillede bredde på 100 % giver en fordeling, der er lige så bred som afstanden mellem datapunkterne.

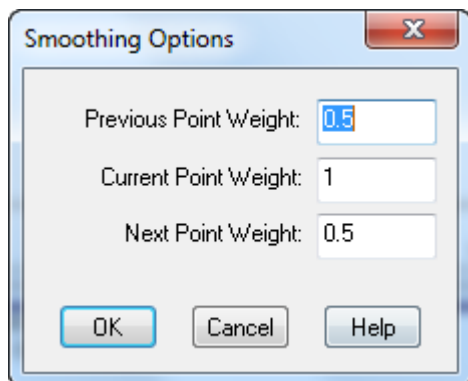
Grænse for gaussisk filter (værdi for minimal afstand mellem punkter): Grænserne for den gaussiske kurve, vist i multipla af afstanden mellem punkter. For eksempel skaber den forudindstillede værdi på 10 en gaussisk kurve, der afkortes efter ti datapunktsbredder på hver side af midten.

Udglat data ved hjælp af udglatningsalgoritmen

Tip! Klik på **Edit > Undo** for at fortryde udglatning. Softwaren understøtter ét niveau af fortrydelse.

1. Vælg en rude, der indeholder et kromatogram eller spektrum.
2. Klik på **Explore > Smooth**.
Dialogboksen Smoothing Options åbnes.

Figur 5-13: Dialogboksen Udglatningsindstillinger



3. I feltet **Previous Point Weight** indtastes den vægtningsfaktor, der skal anvendes på det foregående datapunkt.
4. I feltet **Current Point Weight** indtastes den vægtningsfaktor, der skal anvendes på centerdatapunktet.
5. I feltet **Next Point Weight** indtastes den vægtningsfaktor, der skal anvendes på det følgende datapunkt.
6. Klik på **OK**.
Datasættet udglattes og erstatter det aktuelle datasæt i ruden.

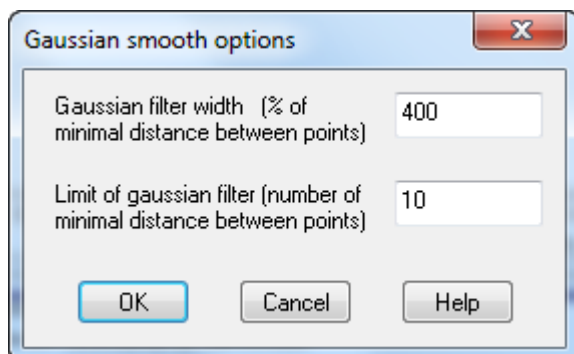
Udglatning af data ved hjælp af gaussisk udjævning

Tip! Udglatning kan fortrydes ved at klikke på **Edit > Undo**. Softwaren understøtter ét niveau af fortrydelse.

1. Vælg en rude, der indeholder et kromatogram eller spektrum.
-

2. Klik på **Explore > Gaussian Smooth**.
Dialogboksen Gaussian smooth options åbnes.

Figur 5-14: Dialogboksen Gaussian smooth options



3. I feltet **Gaussian filter width** indtastes den bredde, som bruges til at finde vægtningen af nabopunkter som en procentdel af afstanden mellem de to punkter.
4. I feltet **Limit of gaussian filter** skal du indtaste grænsen for den gaussiske kurve, angivet i multipla af afstanden mellem punkterne.
5. Klik på **OK**.
Datasættet udglattes og erstatter det aktuelle datasæt i ruden.

Systemlogfiler

Systemloggen indeholder rapporter om systemhændelser, herunder fejl, advarsler og meddelelser. Brug Windows Event Viewer til at se oplysninger, der kan være nyttige til fejlfinding og udførelse af systemdiagnostik. Hvis du vil bruge oplysningerne i systemloggen effektivt, skal du filtrere oplysningerne, så der kun vises de elementer, der er relevante for softwaren.

Se Windows Application Event Log for at forstå oplysningerne i systemlogfilerne og fejlfinding af fejl. Den indeholder relevante fejlfindingsoplysninger.

Gem systemloggen, og videresend til support

1. Klik på **View > Event Log**.
2. Klik på plustegnet til højre for mappen **Windows Logs**.
3. Højreklik på **Application**.
4. Klik på **Save All Events As**.
Dialogboksen Gem som åbnes.
5. Indtast et filnavn, og klik derefter på **Save**.
Dialogboksen Display Information åbnes.
6. Klik på **Display information for these languages**.
7. Sørg for, at **English (United States)** er markeret.

8. Klik på **OK**.
9. Vedhæft filen en e-mail, og send den derefter til SCIEX.

Bemærk: Kontakt sciex.com/request-support for at få yderligere loginfunktioner til fejlfinding ved problemer.

Filtrer systemloggen for oplysninger, der er relevante for Analyst MD-softwaren.

1. Klik på **View > Event Log**.
Dialogboksen Event Viewer åbnes.
2. Dobbeltklik på mappen **Windows Logs**.
3. Klik på **Application**.
4. Klik på **Action > Filter Current Log**.
Dialogboksen Filter Current Log åbnes.
5. Vælg **Analyst** i feltet **Event Sources**.
6. Klik på **OK**.
Dialogboksen Event Viewer viser nu kun de filtrerede Analyst MD-softwarehændelser.

Kalibreringsindstillinger

Kalibreringsindstillingerne definerer parametrene for en kalibreringskurve, som anvendes til at bestemme den beregnede koncentration af prøverne. Kurven er et diagram over standardens koncentration i forhold til standardens område eller højde, hvis der ikke anvendes en intern standard. Hvis der anvendes en intern standard, er kurven et diagram over koncentrationsforholdet i forhold til område- eller højdeforholdet. Denne kurve anvendes sammen med området (eller højden) for ukendte til at interpolere den beregnede koncentration.

Vælg den bedste regressionstype eller pasform for at tilpasse kurven til punkterne og den bedste vægtningsfaktor for projektet.

Om kalibreringskurver

Kalibreringskurven anvendes til at bestemme den beregnede koncentration af prøver, herunder QC-prøver. Det er en kurve, der fremkommer ved at afbilde standardens koncentration i forhold til dens areal eller højde eller forhold, hvis der anvendes en intern standard. Arealet eller højden af en prøve anvendes derefter på denne kurve for at bestemme prøvekoncentrationen, som vist i resultattabellen. Regressionsligningen fra denne kalibreringskurve anvendes til at beregne koncentrationen af de ukendte prøver.

Softwaren placerer de kendte koncentrationer (eller forhold) på x-aksen og det beregnede areal eller højde (eller forhold) på y-aksen. Derefter plotter den punkterne for alle standarderne i batchen. Systemet producerer en bedst egnet kurve til disse punkter gennem regression og vægningstype, der er valgt. Denne kurve anvendes sammen med arealet (eller højden) for de ubekendte til at interpolere koncentrationen.

Vælg den bedste regressionstype

Efter valg af regressionstype (tilpasning) kan brugeren ikke se kalibreringskurven i guiden. Brug i stedet de forudindstillede værdier, erfaring eller virksomhedspolitik til at vælge en regressionstype.

Når tilpasningen er ændret, gennemgås kolonnen **Accuracy** i resultattabellen for ændringer. Jo bedre tilpasningen er, jo mere nøjagtig vil den kvantitative analyse være.

Kalibreringskurven viser standardkoncentrationen i forhold til dens topområde eller tophøjde (eller topforhold, hvis der anvendes en intern standard). Når punkterne for standarderne er plottet, skal du bestemme den bedste tilpasning til kurven til disse punkter og angive valget i dialogboksen Specify Calibration i guiden. Den forudindstillede pasform er lineær, hvilket forudsætter, at alle standarder vil falde på en lige linje. Vælg fra typerne at tilpasning i følgende tabel.

Tabel 6-1: Typer af tilpasning

Tilpas	Beskrivelse
Lineær	Lineær regression forudsætter, at standardpunkterne falder på en lige linje.
Lineær gennem nul	I "lineær gennem nul"-regression antages, at standardpunkterne falder på en lige linje, og at punkterne er på linje med nulpunktet på X- og Y-akserne. Brug denne indstilling til at tvinge linjen til at gå gennem nulpunktet.
Kvadratisk	Hvis standardpunkterne ikke falder på en lige linje, så brug kvadratisk regression til at producere en kvadratisk tilpasning til datapunkterne.
Middelresponsfaktor	Hvis standardpunkterne falder på en lige linje, anvendes middelresponsfaktoren regression til at producere et gennemsnit af hældningen for hvert punkt på kurven.
Effekt	Hvis der ses nogle lineære og nogle krumninger i linjen af punkter, skal du bruge potensregression i stedet for lineær eller kvadratisk regression til at producere en linje et sted mellem disse tilpasninger.

Vælg den bedste vægtningsfaktor

Kalibreringskurven viser standardkoncentrationen i forhold til dens topområde eller -højde. Når punkterne for standarderne er plottet, skal du bestemme den bedste vægtningsfaktor for disse punkter og angive den i dialogboksen Specify Calibration. Den forudindstillede tilpasning er **None**, hvilket forudsætter, at alle punkter langs kurven har samme betydning. Vælg blandt typerne af vægtning i følgende tabel. Der findes flere oplysninger i afsnittet: [Vægningsfaktorer](#).

Tabel 6-2: Typer af vægtning

Vægtning	Beskrivelse
1/x	Brug en vægtningsfaktor på 1/x til at lægge yderligere vægt på punkter af lavere værdi.
1/ x ²	Brug en vægtning på 1/x ² for at lægge meget større vægt på punkter af lavere værdi.
1/y	Der anvendes en vægtningsfaktor på 1/år ved kalibrering af arealet (y-aksen) i stedet for koncentrationen (x-aksen), og der skal lægges en vis vægt på punkter med lavere værdi. En vægtning på 1/y er en variant af 1/x, hvor y og x skal være proportionale med hinanden.
1/år ²	Anvend en vægtningsfaktor på 1/y ² ved kalibrering af området (y-aksen) i stedet for koncentrationen (x-aksen), og der skal lægges langt større vægt på punkter med lavere værdi. En vægtning af 1/y i anden er en variant af 1/x i anden, hvor y og x skal være proportionale med hinanden.

Tabel 6-2: Typer af vægtning (fortsat)

Vægtning	Beskrivelse
I x	Brug logaritmen af x til at lægge mere vægt på punkter med højere værdi.
I y	Brug logaritmen for y til at lægge mere vægt på punkter med højere værdi. Anvendes ved kalibrering af området (y-aksen) i stedet for koncentrationen (x-aksen).

Integrationsalgoritmer

Analyst MD-softwaren har to integrationsalgoritmer: den oprindelige Analyst Classic-integrationsalgoritme og IntelliQuan-integrationsalgoritmen. IntelliQuan-algoritmen giver mere konsekvent toplokalisering og integrerede funktioner med færre parametre, der kræver justering.

Analyst Classic- og IntelliQuan-integrationsalgoritmer

IntelliQuan-algoritmen bruger én af to toplokaliseringsparametre: Automatisk IQA II, der er en parameterløs indstilling, eller Angiv parametre MQ III. Når du har integreret toppe ved hjælp af IntelliQuan-algoritmen, skal du vælge, hvilken toplokaliseringsparameter der passer bedst til datasættet. Dette gøres i de topintegrationsparametre, der vises i ruden Peak Review eller vinduet.

Følgende tabel viser de parametre, der er tilgængelige med Analyst Classic-algoritmen.

Tabel 6-3: Analyst Classic-algoritme

Parameter	Definition
Default Bunching Factor	Antallet af point, der skal gennemsnitsberegnes samlet og betragtes som et enkelt punkt med henblik på toplokalisering.
Default Number of Smooths	Antallet af gange, som kromatogrammet udglattes.
Default Void Volume Retention Time	Alle toppe, der opstår før dette tidspunkt, ignoreres.
Default Concentration Units	De koncentrationsenheder, der anvendes til at beskrive prøvekoncentrationen, f.eks. pg/μL.
Default Calculated Concentration Units	De koncentrationsenheder, der anvendes til at beskrive den beregnede prøvekoncentration, f.eks. pg/μL.

Tabel 6-3: Analyst Classic-algoritme (fortsat)

Parameter	Definition
Default RT Window	Tidsvinduet, der er centreret på den forventede retentionstid for toplokalisering. En 30-sekunders retentionstid giver f.eks. ekstra 15 sekunder før og efter den forventede retentionstid.

Følgende tabel viser de parametre, der er tilgængelige med MQ III-algoritmen, men ikke IQA II-algoritmen.

Tabel 6-4: MQ III-algoritme

Parameter	Definition
Default Noise Percentage	Den tærskel, der anvendes ved toplokalisering. Kun toppe højere end denne angivne procentdel vil blive detekteret.
Default Baseline Subtraction Window	Et tidsvindue omkring hvert datapunkt, der anvendes til at bestemme højden af den korrektion af baseline, der skal anvendes på det pågældende punkt. Dette tidsvindue hjælper med at fjerne overdreven støj fra kromatogrammet. Baseline defineres som den linje, der forbinder punktet med minimal intensitet på venstre side af et givet datapunkt med punktet med minimal intensitet på højre side inden for det angivne vindue.
Default Peak-Splitting Factor	Bestemmer, om en given topklynge består af flere tilstødende toppe eller en (muligvis støjende) top. Hvis intensitetsfaldet er mindre end den angivne værdi, indberettes en enkelt top. Ellers opdeler punktet med minimal intensitet i faldet klyngen i to separate toppe. Indstilling af en stor faktor vil forhindre klynger i at blive opdelt i mere end én top.
Default Void Volume Retention Time	Alle toppe, der opstår før dette tidspunkt, ignoreres.
Report Largest Peak	Valg af denne parameter giver den største top i retentionstidsvinduet. Hvis denne parameter ikke er valgt, findes den nærmeste top til den forventede retentionstid. Den forventede retentionstid beregnes automatisk i kvantificeringsguiden.

Følgende tabel viser de parametre, der er tilgængelige til brug med begge IntelliQuan-algoritmer.

Tabel 6-5: IntelliQuan-algoritme for både IQA II og MQ III

Parameter	Definition
Standard minimumstophøjde	Minimumshøjden for en top, der kræves til topintegration.

Tabel 6-5: IntelliQuan-algoritme for både IQA II og MQ III (fortsat)

Parameter	Definition
Standard minimumstopbreddede	Den mindste bredde af en top, der kræves til topintegration.
Standard RT-vindue	Angiver tidsvinduet centreret på den forventede retentionstid for toplokalisering. En 30-sekunders retentionstid giver f.eks. ekstra 15 sekunder før og efter den forventede retentionstid.
Standard udglatningsbreddede	Antallet af punkter, der anvendes til dataudglatning.
Standardkoncentrationsenheder	De koncentrationsenheder, der anvendes til at beskrive prøvekoncentrationen, f.eks. pg/ μ L.
Standardberegneede koncentrationenheder	De koncentrationsenheder, der anvendes til at beskrive den beregnede prøvekoncentration, f.eks. pg/ μ L.

Kvantificeringsmetode – Oprettelsesværktøjer

Softwaren tilbyder fire værktøjer til oprettelse af kvantificeringsmetoder, der hver skaber en fuldt fungerende metode. Det bedste valg af værktøj afhænger af de opgaver, der skal udføres.

Vi anbefaler, at kun brugere, der er dygtige i metodeudvikling, opretter eller ændrer dataopsamlings- og kvantificeringsmetoder.

Der findes flere oplysninger om roller og sikkerhed i afsnittet: *Om personer og roller*, i dokumentet: *Laboratoriechefens vejledning*.

Guider

De tilgængelige guider til metodeoprettelse er guiden Standard Quantitation og guiden Automatic Quantitation. Begge giver brugeren mulighed for at vælge den eller de batches, der skal kvantificeres, oprette eller vælge en kvantificeringsmetode og derefter integrere prøvedataene.

Forskellen mellem de to er den type metode, der oprettes. Guiden Standard Quantitation opretter en standardmetode, mens guiden Automatic Quantitation opretter en metode og automatisk genererer en resultattabel. Med guiden Automatic Quantitation verificeres toppene ikke som en del af metodeoprettelsen. Toppene kan dog stadig gennemgås, når integrationen har fundet sted.

Der er kun ét fælles tilfælde, hvor toppene ikke behøver at blive verificeret: Når kvantificeringen kun foretages for at integrere og ikke med henblik på at finde koncentrationer. Dette kan f.eks. være nødvendigt for en batch, som indeholder forskellige forbindelser i hver prøve, eller når massen ikke er den samme fra prøve til prøve. Hvis dette

er tilfældet, skal den automatiske guide anvendes. Ellers skal du bruge guiden Standard Quantitation til at udføre kvantificering.

Brug guiden Standard Quantitation, når du har opsamlet prøven, for at gøre følgende:

- Vælg en repræsentativ prøve.
- Vælg analyt og toppe for intern standard.
- Juster parametre for toplokalisering og integration.
- Gennemgå toppe under metodeoprettelse.
- Vælg kalibrering.

Brug guiden Automatic Quantitation til at vælge en batch, oprette en metode (uden bekræftelse af top) og derefter integrere prøvedataene. Denne guide er hurtigere end guiden Standard Quantitation og kræver ikke, at de scannede masser er de samme for alle prøver. Den giver imidlertid ikke mulighed for at vælge en intern standard – alle ioner behandles som analytter.

Brug guiden Automatic Quantitation, efter at prøven er indsamlet, i følgende scenarier:

- Der ønskes at vælge kalibrering.
- Der ønskes ikke at tilpasse toplokalisering og integrationsparametre.
- Der ønskes ikke at vælge Ønsker ikke at vælge navne på analyttoppe.
- Der ønskes ingen interne standarder.
- Der ønskes ikke at gennemgå toppe under metodeoprettelse eller at have forskellige forbindelser i hver prøve.

Når der kun integreres toppe, er det ikke nødvendigt at verificere dem, idet der ikke kræves beregning af koncentrationen. I dette tilfælde skal du bruge guiden Automatic Quantitation, som gør det muligt at gennemgå toppe, når integrationen har fundet sted.

Lokalisering af toppe ved hjælp af en automatisk metode

I softwaren bruges standardmetoden til detektion af topværdi med følgende undtagelser:

- Bundtningsfaktoren og antallet af udglatninger (fra guiden) anvendes, som de er.
- Den forventede retentionstid og støj- og arealtærskler beregnes separat for hver top.

Editor til kvantificeringsmetode

Efter opsamling af prøven kan du bruge denne indstilling til at gøre følgende:

- Juster parametre for toplokalisering og integration.
- Vælg analyt og toppe for intern standard.
- Vælg kalibrering.

Brug redigeringsprogrammet til kvantificeringsmetoder til at udføre tre ekstra opgaver:

- Summerer ioner til integration.

- Brug en intern standard fra en anden periode eller eksperiment (hvis den interne standard blev opsamlet i en anden periode eller et andet eksperiment end analytten).
- Rediger en eksisterende metode.

Den semiautomatiske metode

Den semiautomatiske kvantificeringsmetodeeditor er en del af batcheditoren. Brug den semiautomatiske kvantificeringsmetodeeditor til at vælge kvantificeringsoplysninger, såsom prøvetype og prøvekoncentration, inden dataopsamling. Denne klargøring gør det lettere at udføre efterfølgende kvantitative analyser. Alternativt kan der vælges en fuld metode i batcheditoren, som derefter automatisk anvendes ved slutningen af batchkørslen for at generere tabellen med kvantificeringsresultater.

Brug ikke den automatisk genererede Quick Quant-metode til at udføre kvantificering, hvis Quick Quant-funktionen bruges til at gemme prøvetyper og -koncentrationer i datafilen. Denne kvantificeringsmetode bruger ikke forbindelser og prøvespecifikke integrationsparametre, der er blevet optimeret til top-udvælgelse.

Brug denne indstilling i følgende scenarier:

- Der er endnu ikke indsamlet prøver ved hjælp af samme dataopsamlingsmetode.
- Der ønskes at vælge navne og masser for analyt og toppe for intern standard.
- Der ønskes at vælge koncentrationer og prøvetyper på fanen Quantitation i batcheditoren, men der er ikke andre kvantificeringsmetoder.
- Der ønskes at redigere kvantificeringsmetoden, hvis det er nødvendigt, på et senere tidspunkt.

Lokalisering af toppe ved hjælp af en semiautomatisk metode

I softwaren bruges standardmetoden til detektion af topværdi med følgende undtagelser:

- Den bruger bundtningsfaktoren (i dialogboksen Quantitation Method Options) og antallet af glatte (i dialogboksen Create Semi-Automatic Quantitation Method) som de er.
- Den anvender den mest koncentrerede standard som repræsentativ prøve. Den største top i kromatogrammet bruges til at bestemme retentionstid.
- Den resulterende baselinestøj bruges til at indstille støj- og områdetærskler. (Denne proces er identisk med, hvordan de forudindstillede værdier er indstillet for toppe i normale metoder). Disse integrationsparametre anvendes på alle andre prøver.
- Hvis den undersøgte batch ikke indeholder kvantificeringsoplysninger (prøvetype og koncentrationer), beregnes retentionstiden og tærsklerne særskilt for hver top (som for fuldautomatiske metoder).

Metriske plot

Et metrisk plot viser grafisk dataene i en resultattabelkolonne, der er plottet mod X-aksen eller Y-aksen, eller dataene i to kolonner, der er plottet mod hinanden. Dette afsnit beskriver, hvordan du opretter og arbejder med metriske plot.

Et par foruddefinerede metriske plot er også inkluderet:

- Int_Std_Response (for at finde eksempel på prøve)
- Analyt_Areal versus højde (for at verificere kromatografiens opførsel)
- PK-profil (koncentration i forhold til tidspunkt, der skal køres efter prøveforespørgsel)

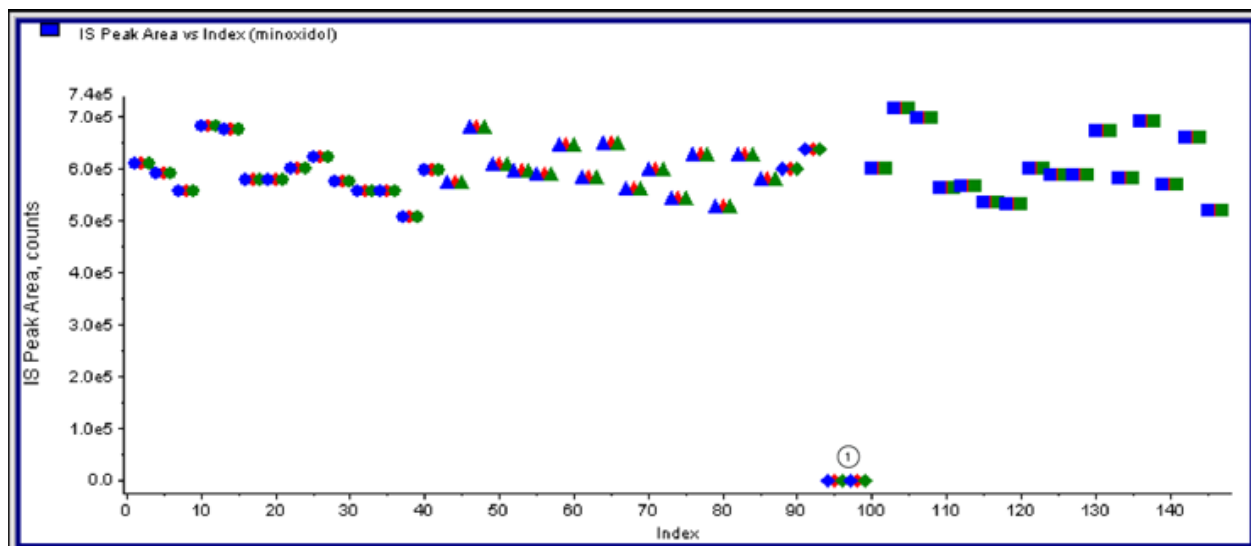
Brug metriske diagrammer til at plote en given kolonne, f.eks. **Analyte Peak Area Accuracy** eller **Calculated Concentration** fra resultattabellen. Tabelfelter med to resultater kan også plottes mod hinanden. Derefter kan punkter, der vises uden for normalområdet, undersøges. Metriske plot bruges ofte med forespørgsler. Der findes flere oplysninger om forespørgsler i dokumentet: *Hjælp*.

Generér metriske plot på følgende måder:

- Brug knappen **Plot** til at plote en kolonne eller kolonner i den aktuelle resultattabel, men ikke til at gemme plottekriterierne.
- Opret et tabelspecifikt plot for at gemme plotkriterierne med den aktuelle tabel.
- Opret et globalt plot for at gemme plotkriterierne til brug med fremtidige resultattabeller.

Kvalitetskontrol, ukendt, blanke, dobbeltblanke og opløsningsmidler kan ikke ses på kalibreringskurven, men der kan genereres metriske diagrammer af dem.

Figur 6-1: Eksempel på et metrisk plot for topområde for intern standard, der er plottet mod prøveindeks



Element	Beskrivelse
1	Dobbelte blanke

Generer et midlertidigt metrisk plot

1. Gør en af følgende, mens en resultattabel er åben:

- Hvis du vil plotte data på y-aksen med x-aksen som indeks, skal du klikke på overskriften i kolonnen for de data, der skal plottes.
 - Hvis du vil plotte data fra den første valgte kolonne på x-aksen og den anden valgte kolonne på y-aksen, skal du vælge to kolonner ved at trykke på Ctrl-tasten og klikke på kolonneoverskrifterne.
2. Klik på ikonet **Metric Plot by Selection** over resultattabellen.
Det metriske plot åbnes.
 3. Højreklik i plotruden, og klik derefter på Data Legend for at få vist en forklaring af de farver, der bruges i plottet.
 4. Højreklik i plotruden, og klik derefter på Point Legend for at få vist en forklaring af de symboler, der bruges af plottet.

Generer et metrisk plot, og gem plotkriterierne

1. Åbn en passende resultattabel.
2. Højreklik i Results Table, og klik derefter på **Metric Plot > New**.

Figur 6-2: Dialogboksen Metrisk plot

The dialog box is titled "Metric Plot". It contains the following elements:

- Name:** A text input field.
- X Axis:**
 - Group:** A dropdown menu with "Index" selected.
 - Column:** An empty dropdown menu.
- Y Axis:**
 - Group:** A dropdown menu with "Index" selected.
 - Column:** An empty dropdown menu.
- Show:**
 - Regression:** A dropdown menu with "None" selected.
 - Weighting:** A dropdown menu with "None" selected.
 - ☒ None
 - ☐ Percent Deviation
 - ☐ Standard Deviation
 - Percent:** A text input field with "50".
 - Multiplier:** A text input field with "2".
- Buttons:** "Save/Execute", "Cancel", "Execute", and "Help" are located on the right side.

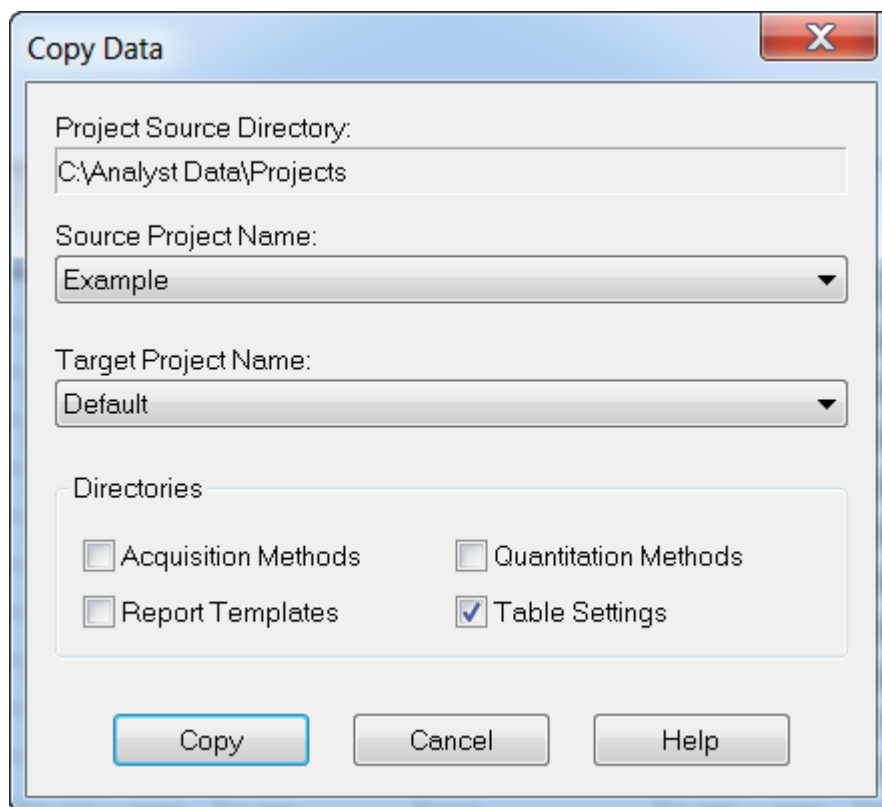
3. Indtast navnet på de nye plotkriterier i feltet **Name**.
4. I gruppen X-Axis på listen **Group** skal du vælge **Index** og derefter lade listen **Column** være tom for at plotte et felt i Y-aksen ved hjælp af X-aksen som indeks.

5. Hvis det er nødvendigt, skal du i gruppen Y-axis på listen **Group** vælge **Internal Standard** og derefter på listen **Column** vælge **IS Peak Area** for at plotte to kolonner mod hinanden.
6. Hvis det er nødvendigt, skal du på listen **Regression** vælge den regressionstype, der skal bruges, og derefter vælge de relevante regressionsindstillinger.
7. Hvis du vil generere plottet og gemme plotkriterierne, skal du klikke på **Save/Execute**. Det metriske plot åbnes. Der findes flere oplysninger i figuren: [Figur 6-1](#).
8. Højreklik i plotruden, og klik derefter på **Data Legend** for at få vist en forklaring af de farver, der bruges i plottet.
9. Højreklik i plotruden, og klik derefter på **Point Legend** for at få vist en forklaring af de symboler, der bruges af plottet.
Dette sæt kriterier er nu tilgængelige til fremtidige plot af denne resultattabel. Højreklik i resultattabellen for at få adgang til kriterierne. Plottekriterierne kan også redigeres.
10. Hvis du vil have vist problemprøven, kan du prøve at plotte koncentrationen af det ukendte i forhold til tid eller plotte området af den interne standard i forhold til indekset.

Gem standardplotkriterier for fremtidige resultattabeller

1. Højreklik i resultattabellen, og klik derefter på **Table Settings > Export To New Table Settings**.
Dette vil eksportere tabelindstillingerne fra rdb, så det kan genbruges i andre kvantificeringkørsler inden for projektet.
2. Hvis du vil eksportere tabelindstillinger til et andet projekt, skal du klikke på **Tools > Project > Copy Data**.

Figur 6-3: Dialogboksen Kopiér data



Støj- og områdetærskelparametre

Identifikation af toppe kræver et sæt støj- og områdetærskelparametre i softwaren. Disse parametre angives indledningsvist i softwaren, men brugerne kan ændre dem senere. Parametrene angives på følgende måde i softwaren:

1. I softwaren beregnes den største intensitetsforskel mellem alle to sekventielle datapunkter. Dette tal repræsenterer forskellen mellem to intensiteter, ikke den faktiske intensitet.
2. Standardafvigelsen for hvert sekventielt par med en intensitetsforskel på mindre end 5 % af den værdi, der er beregnet i trin 1, beregnes (ved hjælp af et gennemsnit på nul) for intensitetsforskellene. Softwaren bruger ikke disse par af punkter med en intensitetsforskel, der er større end 5 % af det maksimale.
 - Støjgrænsen er lig med den standardafvigelse, der blev beregnet i trin 2.
 - Områdetærsklen er lig med fem gange støjtærsklen.

Bemærk: Minimumsværdien for både støj- og områdetærsklerne er 0,000001. Hvis de foregående beregninger frembringer en værdi, der er lavere end dette minimum, nulstiller softwaren værdien af denne tærskel til 0,000001.

Genberegning af støj- og områdetærsklen

Hvis der er identificeret et nyt baggrundsområde, genberegnes støj- og områdetærsklerne på følgende måde i softwaren.

I softwaren beregnes standardafvigelsen af intensitetsforskellen for hvert sekventielt par af datapunkter ved hjælp af et gennemsnit på nul. Analyst MD-softwaren bruger alle punkterne inden for det valgte område, fordi det udtrykkeligt oplyses, at det valgte område er baggrundsstøj.

- Støjtærsklen er lig med den standardafvigelse, der blev beregnet ud fra det valgte område.
- Områdetærsklen er lig med fem gange støjtærsklen.

Bemærk: Minimumsværdien for både støj- og områdetærsklerne er 0,000001. Hvis de foregående beregninger frembringer en værdi, der er lavere end dette minimum, nulstiller softwaren værdien af denne tærskel til 0,000001.

Topintegration

Følgende er integrationstyper, hvormed baseline blev fundet og integreret, da toppen blev fundet.

- **Manuel:** Toppen blev manuelt integreret af brugeren.
- **Automatisk:** Toppen blev automatisk integreret som følger:
 - **Baseline-til-baseline:** Topområdet defineres af lodrette faldlinjer i begyndelsen og slutningen af toppen, som strækker sig til baseline. Denne integrationstype er kun mulig for toppe, der ikke har en anden top umiddelbart før eller efter.
 - **Bund:** Samme som baseline-til-baseline bortset fra, at det kun gælder for toppe, der har en anden top umiddelbart før eller efter.
 - **Eksponentiel skimning:** Topområdet er den primære eller overordnede top i en eksponentiel skimning.
 - **Eksponentiel underordnet:** Topområdet er den underordnede top, hvilket resulterer i en eksponentiel skimning.

Topgennemgang

Under topgennemgang kan brugere undersøge de toppe, der blev valgt i softwaren, og derefter omdefinere toppen eller start- og endepunkterne, hvor det er nødvendigt.

Generelt udføres præcis identifikation af analyttoppe og interne standardtoppe i softwaren. Af forskellige årsager, herunder definition af prøvedataopsamling og kvantificeringsmetode, bliver den korrekte top ikke altid fundet i softwaren, og den forkerte vælges, eller der kan slet ikke findes en top. På andre tidspunkter, selvom toppen eventuelt identificeres korrekt i softwaren, er brugerne måske ikke enige i de valgte start- eller slutpunkter.

Tip til topgennemgang

Hvis du vil gøre dette	Skal du gøre dette
Topintegration: Sådan gennemgås toppe	Hvis du vil gennemgå alle toppe, skal du sørge for, at alle prøver er opført i resultattabellen. Vinduet Peak Review indeholder de toppe, der er angivet i resultattabellen. Hvis nogen af prøverne er skjult i tabellen (f.eks. hvis der er anvendt en forespørgsel), er de også skjult i topgennemgangen.
Topintegration: Sådan navigerer du til den første top i batchen	Højreklik et vilkårligt sted i ruden Peak Review, og klik derefter på Show First Page . Hvis du vil gå til den sidste top i batchen, skal du højreklikke et vilkårligt sted i ruden Peak Review og derefter klikke på Show Last Page .

Detekter toppe

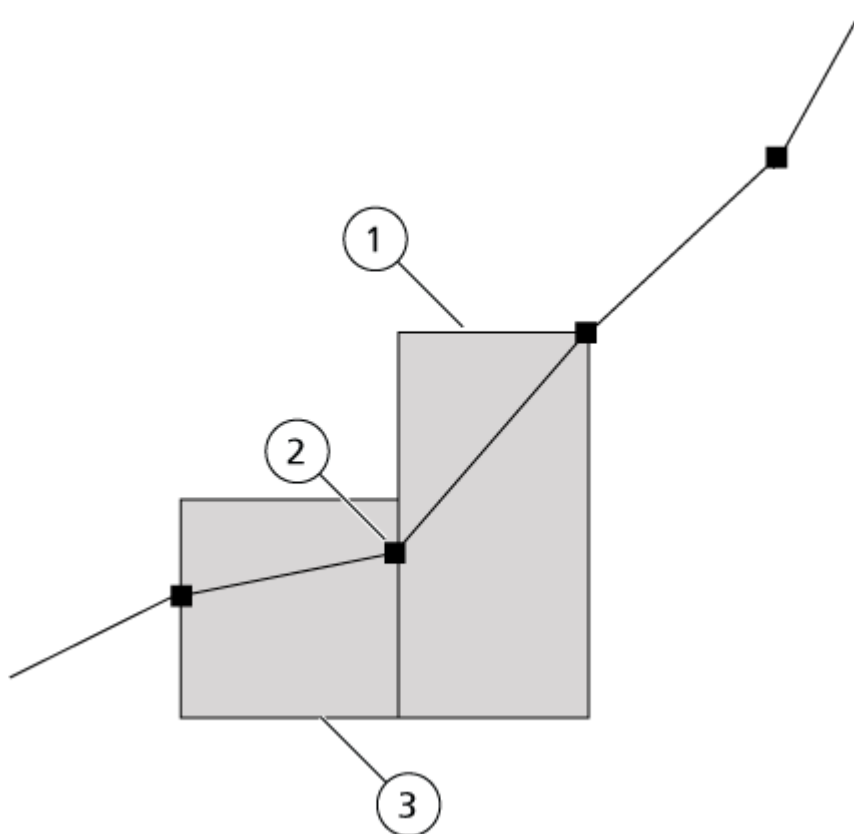
I softwaren detekteres toppe i fire faser.

1. Den potentielle start på toppen findes ved at undersøge afstanden mellem hvert batchpunkt og det foregående. Når afstanden overstiger den aktuelle støjgrænse, er der fundet en potentiel start på toppen.
2. Den maksimale start på toppen bekræftes ved at sikre, at der er nok punkter i en række til at overskride områdetærsklen.
3. Toppens højeste punkt findes ved at søge efter et punkt, der er lavere end det foregående punkt.
4. Slutningen af toppen findes ved at identificere det sted, hvor afstanden mellem ét batchpunkt og det næste falder til under støjgrænsen. Om nødvendigt adskilles toppe derefter.

Find den potentielle start på toppen

For at finde den potentielle start på en top måler softwaren intensitetsforskellen mellem sekventielle par af kombinerede punkter med start fra det første punkt. Når der findes en forskel, der overstiger den aktuelle støjærskel, erklæres det første punkt for en potentiel start på en top i softwaren.

Figur 6-4: Find den potentielle start på toppen



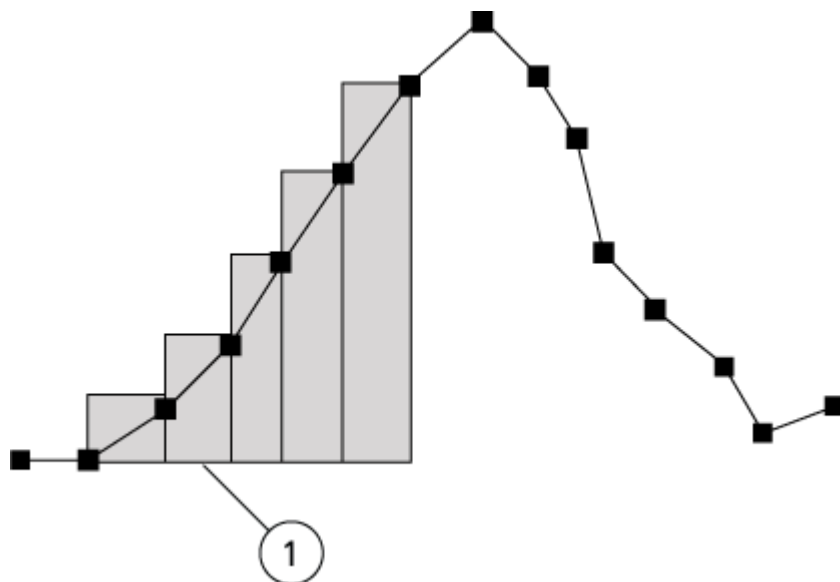
Element	Beskrivelse
1	Overstiger støjtærsklen
2	Potentiel start af toppen
3	Overstiger ikke støjtærsklen

Bekræft starten for toppen

For at være sikker på, at der er fundet en reel top, følges kurven i softwaren, så forskellen mellem intensiteten af hvert kombineret datapunkt og intensiteten ved den potentielle start af toppen adderes til beregningen af en samlet sum. Denne proces stopper, når intensitetsforskellen mellem efterfølgende punkter er mindre end støjgrænsen. Denne sum er en tilnærmelse af området af den forreste kant af toppen. Hvis denne sum overstiger områdetærsklen, bekræfter softwaren starten på toppen.

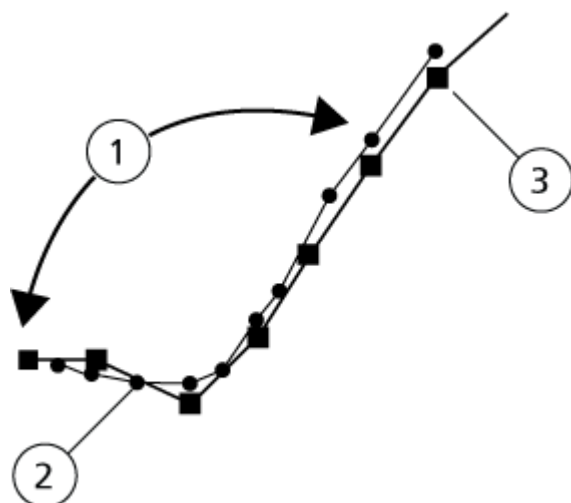
Derefter bestemmes den faktiske start af toppen i softwaren gennem bevægelse tilbage fra den potentielle start af toppen, indtil det laveste punkt i toppen findes. Der navigeres tilbage gennem fem batches af rådata. Dette punkt er den faktiske start på toppen.

Figur 6-5: Bekræft starten for toppen



Element	Beskrivelse
1	Summen af områdeudsnit, der er større end områdetærsklen

Figur 6-6: Bekræft den faktiske start på toppen



Element	Beskrivelse
1	Gennemse datapunkterne i dette område
2	Mindste datapunkt
3	Potentiel start af toppen

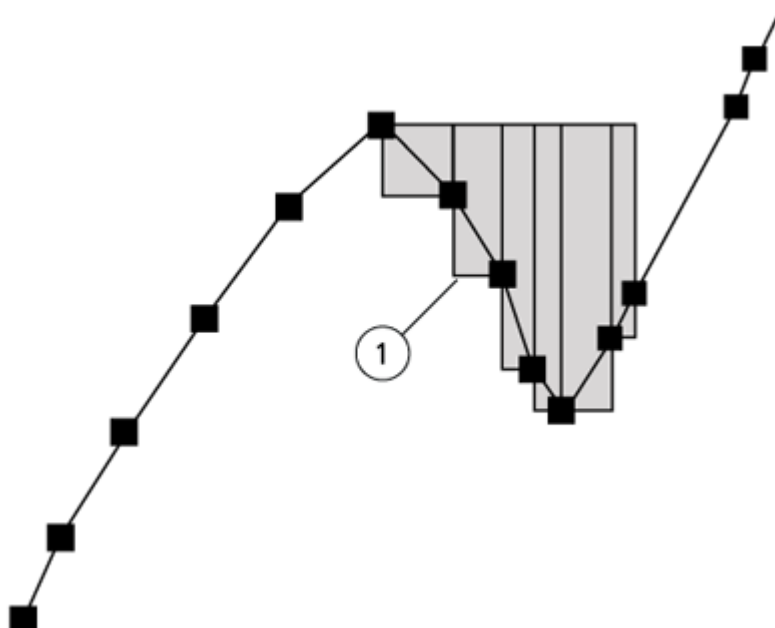
Find topspidsen

Topspidsen findes ved, at der i softwaren første søges efter et punkt, der er lavere end det foregående punkt. Når toppen derefter er fundet korrekt, opsummeres intensitetsforskellene mellem den potentielle top og efterfølgende batchpunkter i softwaren, indtil enden af toppen er nået. Hvis den samlede afstand mellem punkterne overstiger to tredjedele af områdetærsklen, bekræftes topspidsen. Det vil sige, at der i softwaren først findes en top, hvorefter der arbejdes baglæns for at finde spidsen af den.

Hvis der imidlertid findes et højere batchpunkt i softwaren, før områdetesten er bestået, identificeres en ny spids, og områdetesten genstartes.

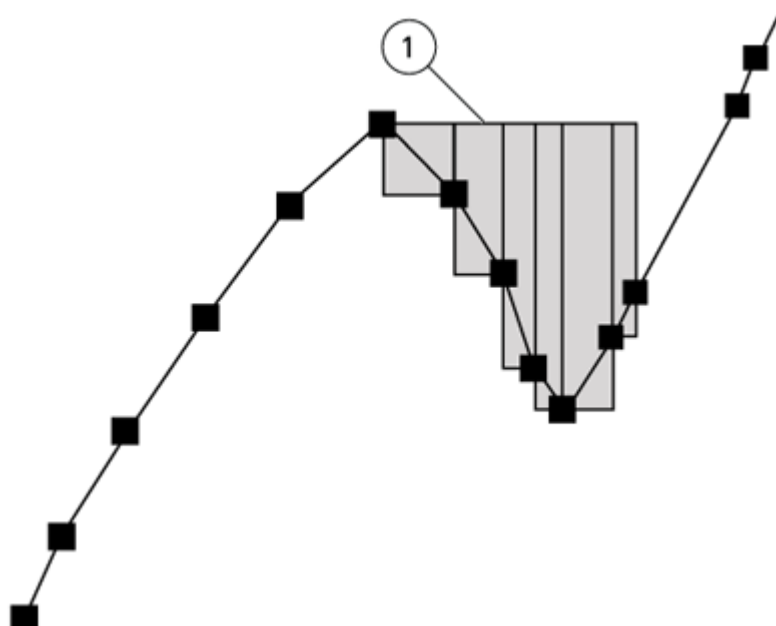
Bemærk: Den faktiske retentionstid for en top er ikke blot det punkt, der blev identificeret, som beskrevet tidligere. I stedet bestemmes den ud fra en kvadratisk pasform, der er baseret på de tre højeste datapunkter.

Figur 6-7: Find topspidsen



Element	Beskrivelse
1	Summen af områdeudsnit er større end to tredjedele af områdetærsklen

Figur 6-8: Identificer en ny topspids



Element	Beskrivelse
1	Der er et maksimum for det øvre område, men det kumulative højdepunktsområde er ikke større end to tredjedele af områdetærsklen.

Find topenden

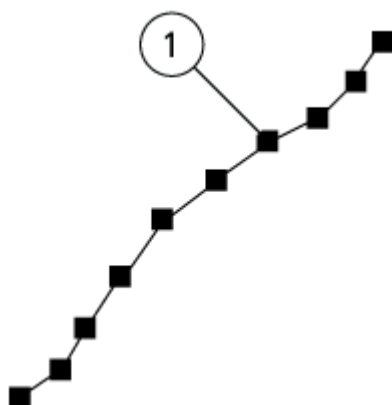
I softwaren angives et topendepunkt, når ét af følgende forekommer:

- Forskellen mellem to efterfølgende punkter består ikke støjgrænseprøven.
- I softwaren registreres starten på en ny top.

I begge tilfælde anses det laveste batchpunkt fra de sidste fem batches for at være det faktiske endepunkt for toppen.

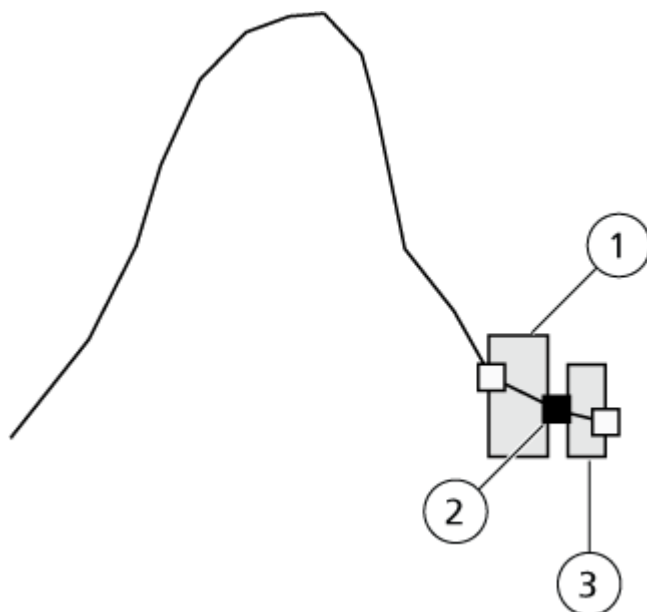
I softwaren findes normalt flere toppe for hvert kromatogram. Den top, der vælges, er den, hvis retentionstid er tættest på den forventede retentionstid, der er angivet i metoden. Hvis ingen top har en retentionstid inden for specifikationerne, markeres toppen som ikke fundet i softwaren.

Figur 6-9: Find toppe



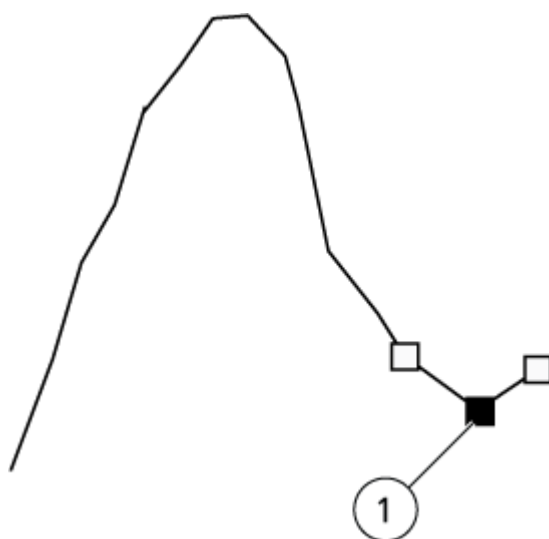
Element	Beskrivelse
1	Der er ikke noget separat maksimumspunkt for skulderen.

Figur 6-10: Find topenden: Tilfælde 1



Element	Beskrivelse
1	Overstiger støjtærsklen
2	Topende
3	Overstiger ikke støjtærsklen

Figur 6-11: Find topenden: Tilfælde 2



Element	Beskrivelse
1	Topende

Separate toppe

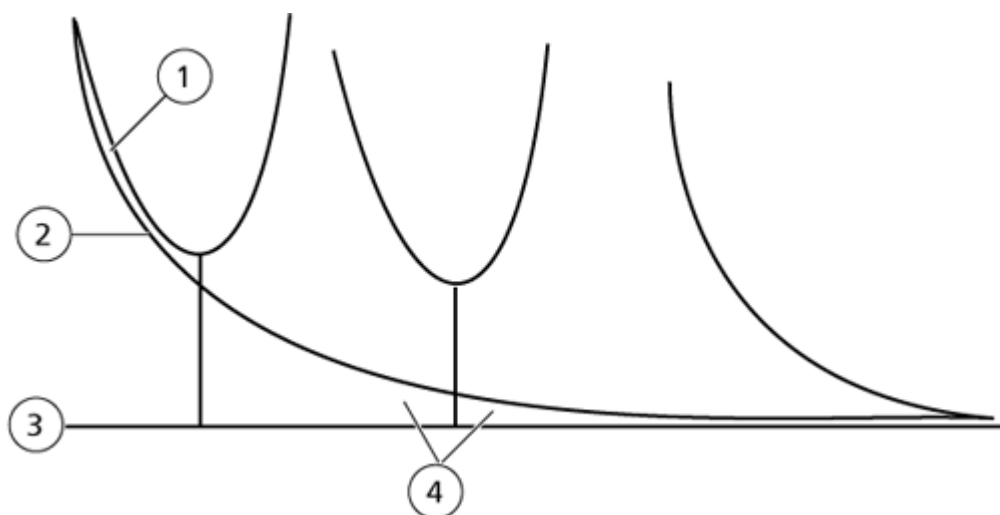
Hvis en ny top begynder, før den aktuelle top når baselinen, afgøres ud fra følgende kriterier, om baselinen skal løses ved hjælp af eksponentielle skimninger, i softwaren. Skimningen passerer under én eller flere toppe, der følger prækursoren. Disse toppe kaldes produkttoppe.

Når der udføres en eksponentiel skimming i softwaren, fratrækkes arealet under skumningen fra produktets toppe og gives det til prækursortoppen. Derefter trækkes det lille område over skimningen fra prækursortoppen, og det lægges til den første produkttop.

I softwaren bruges følgende kriterier til at afgøre, om der skal bruges eksponentiel skimming:

- Eksponentielt topforhold
- Eksponentielt justeret forhold
- Eksponentielt bundforhold

Figur 6-12: Separate toppe: En eksponentiel skimming



Element	Beskrivelse
1	Dette område fratrækkes prækursortoppen og lægges til den første produkttop
2	Eksponentiel skimming
3	Klyngebaseret baseline
4	Disse områder trækkes fra produktets toppe og lægges til prækursortoppene

Forespørgsler

En forespørgsel er en metode til kun at vælge de poster, der opfylder visse kriterier. Brugere kan bruge forespørgsler til at se bestemte dele af dataene i resultattabellen, som interesserer

dem, på grundlag af tekstmæssige eller matematiske valg. En forespørgsel, der er gemt i et projekt, er tilgængelig for alle resultattabellerne i det pågældende projekt.

Når der anvendes en forespørgsel, viser tabellen kun de datarækker, der opfylder de valgte kriterier. Alle kolonner vises. Valg kan yderligere forbedres ved at køre en anden forespørgsel på de rækker, der vises af den første forespørgsel.

Brug foruddefinerede valg og indtastede indgange til at oprette en forespørgsel, der kan udføres, gemmes eller ændres. Hver linje i forespørgslen fungerer som en boolsk søgning, der kører mod resultattabellens kolonner for at afgøre, hvilke poster der skal vises. Hver linje i forespørgslen vælger kun de poster til visning, der opfylder dens kriterier. En forudindstillet eller tabelspecifik forespørgsel kan defineres.

Vi anbefaler, at brugeren validerer alle forespørgsler, der bruges til at analysere data i en resultattabel.

Forespørgsler på prøvetype

Ved en forespørgsel, der kun er beregnet til at vælge standardprøvetyper, vises kun de datarækker, der indeholder Standard i kolonnen Sample Type, i resultattabellen.

Standardforespørgsler og tabelspecifikke forespørgsler

En standardforespørgsel bruges generelt til at identificere prøver, der ikke opfylder visse kriterier. En tabel-specifik forespørgsel bruges generelt til at identificere poster, der opfylder visse kriterier.

Standardforespørgslen bruges generelt til at finde problemer med kvalitetskontrol eller standarder. Hvis koncentrationen og den maksimale variation af kvalitetskontrollerne og standarderne vælges i vejledningen til kvantificeringsmetode, vises kun de prøver, der ligger uden for dette område, i resultattabellen. Hvis resultattabellen ikke viser noget, er prøverne i orden. Hvis afkrydsningsfeltet Execute Query as Standard Query (Udfør forespørgsel som standardforespørgsel) er markeret, vises alle prøverne i resultattabellen, men en Fail- eller Pass-status vises i kolonnen Standard Query Status (Status for standardforespørgsel) afhængigt af, om prøverne mislykkedes eller bestod forespørgslen.

Tabelspecifikke forespørgsler køres op imod en vist resultattabel for at vælge poster, der opfylder visse kriterier. Design disse forespørgsler gennem menuen, der er tilgængelig ved at højreklikke i tabellen. Gem og eksporter en forespørgsel for at gøre den tilgængelig for fremtidige resultattabeller.

Tabelspecifikke eller globale indstillinger

Når du arbejder med indstillinger for bordindstilling, kan procedurerne være bordspecifikke eller globale.

- **Bordspecifikke indstillinger:** Når bordindstillingerne ændres på selve tabellen, er ændringerne i indstillingerne kun tilgængelige for den pågældende tabel. De kan dog eksporteres som globale indstillinger.
- **Globale indstillinger:** Ændring af globale indstillinger indebærer ændringer af en gruppe indstillinger, der kan anvendes på fremtidige resultattabeller. Hvis du vil tilpasse en resultattabel, der oprettes, skal du vælge en gruppe indstillinger på siden Opret

kvantificeringssæt: Vælg indstillinger og forespørgsel. Hvis en gruppe indstillinger ikke er valgt, bruger softwaren automatisk de forudangivne indstillinger.

Sådan påvirker nøjagtighedsvariationer resultaterne

Nøjagtigheden for forudindstillede forespørgsler udtrykkes i procent og implementeres som plus eller minus dette tal. Hvis der f.eks. indtastes 10 for **Maximum Variation for standards** i dialogboksen Create Default Query, vises alle poster, der indeholder standarder, hvis nøjagtighed ligger uden for 90 % og 110 %, i resultattabellen. Hvis der indtastes 5, vil kun standarder, hvis nøjagtighed er mindre end 95 % og større end 105 %, blive vist i resultattabellen. Se afsnittet: [Resultattabeller](#).

Regressionsligninger

Dette afsnit beskriver de ligninger, der anvendes til at beregne regressionskurverne. I de følgende ligninger repræsenterer x analytkoncentrationen for standardprøver, og y repræsenterer det tilsvarende topområde eller den tilsvarende tophøjde. De nøjagtige variable, der anvendes til regressionen, afhænger af, om der anvendes en intern standard, og om topområdet eller tophøjden anvendes, som vist i nedenstående tabel.

Tabel 6-6: Regressionsvariable

Intern standard brugt?	Brugt areal?	x	y
Ja	Ja	$C_a / C_{er} / DF$	A_a / A_{er}
Ja	No	$C_a / C_{er} / DF$	H_a / H_{er}
No	Ja	C_a / DF	A_a
No	No	C_a / DF	H_a

hvor:

- C_a = faktisk analytkoncentration
- C_{er} = intern standardkoncentration
- DF = fortyndingsfaktor
- A_a = analyttopområde
- A_{er} = topområde for intern standard
- H_a = analyttophøjde
- H_{er} = intern standard tophøjde

Tilpasningsindstillinger

Tilpasning angiver den type regressionsanalyse, der skal anvendes på dataene. De forskellige tilpasningsmuligheder er lineær, lineær gennem nul, middelresponsfaktor, effekt og kvadratisk.

Lineær regression

Lineær regression forudsætter, at standardens punkter falder på en lige linje.

Den lineære kalibreringsligning er:

$$y = mx + b$$

Hældningen og skæringspunktet beregnes som:

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

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

hvor:

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

Lineær gennem nul

I "lineær gennem nul"-regression antages, at punkterne i standarden falder på en lige linje, og at punkterne står på linje op med nulpunktet på x og y-akserne. Brug denne indstilling til at tvinge linjen til at gå gennem nulpunktet.

Ligningen for kalibreringen lineær gennem nul er:

$$y = mx$$

Hældningen beregnes som:

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

Middelresponsfaktor

Middelresponsfaktoren for kalibrering er:

$$y = mx$$

Det er den samme ligning som for kalibreringen lineær gennem nul. Hældningen beregnes dog forskelligt som:

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

og responsfaktorens standardafvigelse som:

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

hvor:

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

Bemærk: Point, hvis x-værdi er nul, er udelukket fra summerne.

Hvis der er nogle linearitet og nogle krumning i linjen af punkter, så bruges potensregression i stedet for lineær eller kvadratisk regression til at producere en linje et sted mellem disse matches.

Effekt

Effektfunktionens kalibreringsligning er:

$$y = aks^p$$

Ligningerne for den lineære kalibrering anvendes, som beskrevet ovenfor, til beregning af hældningen (m) og skæringspunktet (b), bortset fra at x i disse ligninger erstattes af ln x, og y erstattes af ln y. Når dette er gjort, beregnes a og p som:

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Hvis nogen af x- eller y-værdierne er negative eller nul, indberettes en fejl.

Kvadratisk

Den kvadratiske kalibreringsligning er:

$$y = a_2 x^2 + a_1 x + a_0$$

De polynomiale koefficienter beregnes som:

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

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2 b_4/b_3$$

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

hvor:

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

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

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

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

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

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

Vægtningstyper

Følgende tabel viser, hvordan vægtningstypen (w) beregnes for hver af de syv vægtningstyper.

Tabel 6-7: Vægtningstyper

Vægtningstype	Vægt (w)
Ingen	Altid 1,0.
$1/x$	Hvis $ x < 10^{-5}$, er $w = 10^5$. I modsat fald er $w = 1/ x $.
$1/x^2$	Hvis $ x < 10^{-5}$, er $w = 10^{10}$. I modsat fald er $w = 1/x^2$.
$1/y$	Hvis $ y < 10^{-8}$, er $w = 10^8$. I modsat fald er $w = 1/ y $.
$1/y^2$	Hvis $ y < 10^{-8}$, er $w = 10^{16}$. I modsat fald er $w = 1/y^2$.
$\ln(x)$	Hvis $x < 0$, genereres en fejl. Hvis $x < 10^{-5}$, så er $w = \ln 10^5$. I modsat fald er $w = \ln(x) $.
$\ln(y)$	Hvis $y < 0$, genereres en fejl. Hvis $y < 10^{-8}$, så er $w = \ln 10^8$. I modsat fald er $w = \ln(y) $.

Rapportskabeloner

Dette afsnit beskriver de forskellige elementer, der anvendes i de rapportskabeloner, der oprettes ved hjælp af **Report Template Editor** i afsnittet **Configure** på navigationsbjælken Analyst MD i Analyst-softwaren.

Følgende oplysninger kan føjes til rapportoverskrifter og sidefodder.

Bemærk: Lav en sikkerhedskopi af de eksisterende rapportskabeloner, før du redigerer dem.

Tabel 6-8: Grundlæggende designelementer

Element	Definition
Printing Date	(Udskriftsdato) Dato, hvor dokumentet blev udskrevet.
Printing Time	(Udskriftstid) Tidspunkt for udskrivning af dokumentet.
Operator	(Operatør) Den operatør, der udskrev dokumentet.
Workstation	(Arbejdsstation) Den arbejdsstation, som dokumentet blev udskrevet fra.
Page n of N	(Side n af N) Sidetal af det samlede antal sider.
Custom Field	(Brugerdefineret felt) Opret brugerdefineret tekst her.
Analyst Version	(Analytikerversion) Version af Analyst MD-softwaren.
User Type	(Brugertype) Brugertype (sikkerhed).

Tabel 6-8: Grundlæggende designelementer (fortsat)

Element	Definition
Electronic Signature	(Elektronisk signatur) Angiver, om den elektroniske signaturfunktion (sikkerhed) er aktiveret eller deaktiveret.

Tabel 6-9: Dataopsamlingselementer

Element	Definition
Acquisition File	Navnet på datafilen med prøveopsamlingsoplysningerne.
Acquisition Date	Dato for prøveopsamlingen.
Acquisition Time	Tidspunkt for prøveopsamlingen.
Operator	Navn på den operatør, der kørte prøvebatchen.
Batch Name	Batchens navn.
Sample Number	Nummer relateret til prøven.
Sample Name	Navn på prøven.
Sample Comment	Kommentar om prøve indtastet via Acquisition Method Editor.
Sample ID	Prøvens identifikationsnummer.
Scan Mode	Den metode, hvor systemet beregner massepunkterne for en scanning for en komplet masseområdescanning.
Scan Type and Polarity	Dataopsamlingsscanningstype (Q1, Q3, MRM, produkt-ion, prækursor-ion, neutralt tab/gevinst) og dataopsamlingsmetodepolaritet (positiv eller negativ).
Scan Mass(es)	Ioner eller ionfragmenter, som skal scannes.
Dwell Time	Den tid, det tager systemet at scanne en bestemt masse.
Pause Time	En pause mellem scanning af masseområder eller mellem eksperimenter.
Ion Energy	Ionenergi kommer fra dataopsamlingsmetoden og er relateret til IonSpray-ionkildespænding eller kollisionsenergien.
Collision Energy	Kollisionsenergi kommer fra dataopsamlingsmetoden og er relateret IonSpray-ionkildespændingen.

Tabel 6-9: Dataopsamlingselementer (fortsat)

Element	Definition
Period and Experiment	En periode indeholder en samling af eksperimenter. Et eksperiment indeholder en række egenskaber såsom Scan Type , Scan Mode , Resolution , Ion Source Parameters , og en samling af masseområder eller masser.
State Table Parameters	De massespektrometerparametre, der anvendes i forsøget.
Pumpe	Navn på den pumpe, der blev brugt til eksperimentet.
Autosampler	Navn på den autosampler, der blev brugt til eksperimentet.
Brugerdefineret annotering	Brugerdefineret tekst tilføjet i Batch Editor.
Indsamlet af	Navn på den person, der indsamlede dataene.

Tabel 6-10: Kvantificeringselementer

Element	Definition
Results Table Name	Navn på resultattabellen.
Results Table Path	Placering af resultattabellen.
Method Name	Kvantificeringsmetodens navn.
Method Path	Placering af metodefilen.
Project Name	Projektets navn.

Tilpasning af rapporter

Rapportskabeloneditoren giver en måde at tilpasse rapporter på ved at konfigurere sidehoveder, sidefodder og sidelayout. Brug rapportskabeloner med både udskrevet output og data, der er eksporteret til et andet program.

Trykt output omfatter flere typer elementer:

- **Vindue:** Vinduer åbnes i arbejdsområdet i softwarevinduet, under værktøjslinjen og til højre for navigationslinjen. Udskrivning af et vindue udskriver alt, hvad der vises.
- **Rude:** Ruder er dele af et vindue, der er arrangeret på en sådan måde, at de ikke overlapper og altid er fuldt synlige. For eksempel indeholder vinduet Method Editor to ruder: ruden Browser og ruden Method Editor. Brugere kan udskrive oplysninger fra hver rude i vinduet.
- **Rapport:** Rapporter er strukturerede sæt af oplysninger, der er oprettet i softwaren. Nogle rapporter kan udskrives direkte, f.eks. kalibreringsrapporter. Andre oplysninger skal eksporteres, f.eks. batcher og kvantificeringsresultater.

Forhåndsvisning, udskrivning og eksport af rapporter

Dataopsamlingsmetoder, batches, tabeller med kvantificeringsresultater og tabeller med grafresultater kan eksporteres som rapporter. Andre former for information, f.eks. regnemaskinedata, kan eksporteres, men kan ikke tilpasses med en rapportskabelon.

De fleste områder, der ses på skærmen, kan udskrives. Ved hjælp af funktionen Print Preview kan brugerne forhåndsvise, skalere eller kopiere grafer.

En eksporteret rapport gemmes i et filformat, der er egnet til programmer såsom Notesblok, Microsoft Word, Excel eller LIMS-software (Laboratory Information Management System).

Eksporter rapporter i følgende formater:

- csv
- dok
- pdf
- txt

De tilgængelige formater afhænger af de oplysninger, der eksporteres. En graf kan f.eks. eksporteres som en pdf. En datatabel kan eksporteres som en txt-fil.

Hvis du vil inkludere yderligere oplysninger i rapportens sidehoved og sidefod, skal du udskrive rapporten ved hjælp af en passende rapportskabelon.

Tabel 6-11: Forhåndsvisning, udskrivning og eksport af rapporter

Hvis du vil gøre dette	Skal du gøre dette
Sådan får du vist en graf	Klik på File > Print Preview > Pane .
Sådan udskriver du en rapport uden en skabelon	Klik på File > Print , og klik derefter på den rapport, der skal udskrives.
Sådan udskriver du en rapport med en skabelon	<ol style="list-style-type: none"> 1. Klik på File > Print & Report Setup. 2. Vælg den skabelon, der skal bruges, i afsnittet Report Template, og klik derefter på OK.
Sådan eksporteres en rapport	<ol style="list-style-type: none"> 1. Klik på File > Export. 2. Indtast filens navn i feltet File. 3. Vælg filtype på listen Save as type. 4. Hvis du eksporterer en rapport i kvantificeringstilstanden Quantitate, skal du vælge enten All Columns eller Visible Columns i afsnittet Export og derefter klikke på Save.

Resultattabeller

Resultattabeller opsummerer den beregnede koncentration af analytten i hver ukendt prøve på grundlag af kalibreringskurven. De omfatter også kalibreringskurver og statistikker for resultaterne.

Eksportér dataene fra en resultattabel til en txt-fil til brug i andre programmer, f.eks. Microsoft Excel. Alle mulige data i tabellen eller kun dataene i de synlige kolonner kan eksporteres.

Bemærk: Vi anbefaler, at brugerne kun bruger de kontrollerede metoder såsom eksport af resultattabeller og rapportering til uddata Analyst MD fra Analyst-softwaren. Andre kilder til uddata såsom kopiering fra resultattabeller og indsætning er ikke kontrolleret og bør ikke anvendes.

Dataene i en resultattabel kan sorteres på tre forskellige måder:

- Sortér hurtigt tabellen over én til tre kolonner ved hjælp af en af **Sort**-knapperne. Dette sorteringskriterium kan ikke gemmes.
- Opret en tabelspecifik sortering for at gemme sorteringskriterierne med den aktuelle tabel. Tabelspecifikke sorteringer gør det muligt at sortere den aktuelle tabel over én til tre kolonner og gemme kriteriet til brug med den pågældende tabel.
- Brug en tidligere oprettet forudindstillet sortering. Opret og gem en sortering, og anvend den senere på en resultattabel.

Tip! Hvis du vil gemme en sortering eller en anden bordindstilling, skal du højreklikke i tabellen og derefter klikke på **Table Settings > Export To New Table Settings..** Sorteringen og andre parametre kan bruges i det aktuelle projekt. Hvis du vil bruge tabelindstillingerne i et andet projekt, skal du kopiere det til et andet projekt ved at klikke på **Tools > Project > Copy Data..** Vælg **Source Project Name** og **Target Project Name**, markér afkrydsningsfeltet **Table Settings** under Directories, og klik derefter på **Copy**. Hvis **Table Settings** skal bruges i et nyt projekt, skal det nye projekt oprettes først, før du kopierer **Table Settings**.

Vis et specifikt layout for resultattabeller

Standardvisningen for resultattabeller er Full Layout eller Summary Layout. Hvis der er flere analytter pr. prøve, kan hver analyt ses i Analyte Layout.

Med en åben og aktiv Results Table skal du højreklikke og derefter klikke på ét af følgende felter:

Tabel 6-12: Layouts for resultattabel

Felt	Beskrivelse
Full	Klik for at få vist hele layoutet.
Summary	Klik på et feltnavn.
Analyte	Klik på en enkelt analyt for at få vist analytlayoutet. Ved visning af MRM eller <i>Scheduled</i> MRM-algoritmeresultater kan brugere klikke på Analyte for at få vist en liste med forbindelses-id'er.

Tabel 6-12: Layouts for resultattabel (fortsat)

Felt	Beskrivelse
Analyte Group	Klik på en analytgruppe for at få vist layoutet af analytgruppen.
	Tip! Der skal først oprettes en ny analytgruppe. For at gøre dette skal du højreklikke i resultattabellen og derefter klikke på Analyte Group > New .
Sample Type	Klik for at få vist en bestemt prøvetype.

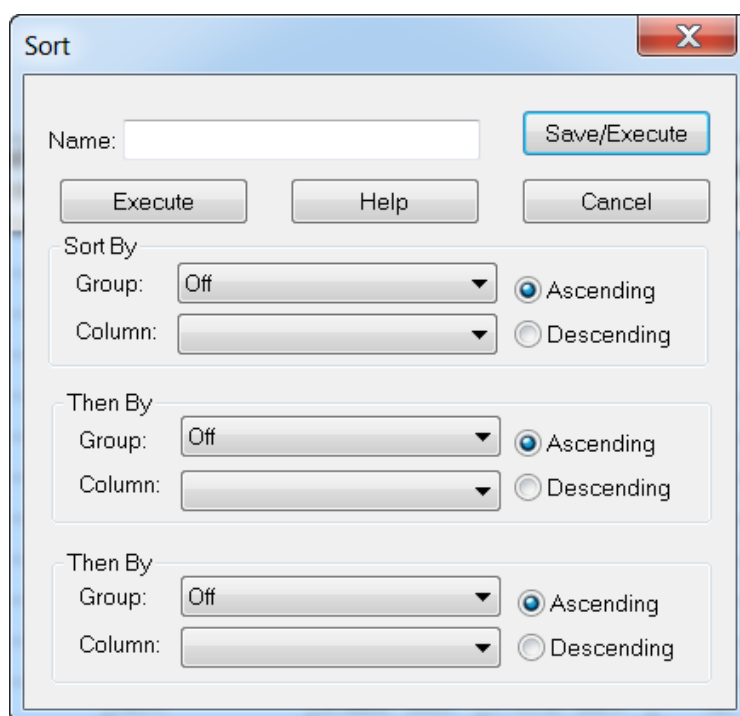
Sorter data i resultattabeller

1. Vælg op til tre kolonner i resultattabellen i den rækkefølge, de skal sorteres.
2. Gør ét af følgende:
 - Klik på **A-Z** for at sortere i stigende rækkefølge.
 - Klik på **Z-A** for at sortere i faldende rækkefølge.

Sorter en resultattabel, og gem sorteringskriterierne

1. Højreklik i resultattabellen, og klik derefter på **Sort > New**.

Figur 6-13: Sorteringsdialog



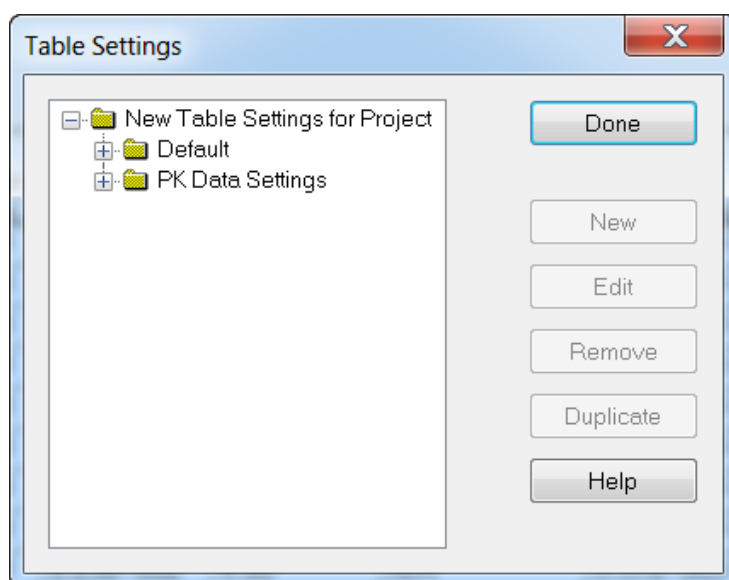
2. Indtast navnet på den nye sortering i feltet **Name**.

3. Gør følgende for hver sorteringsregel i afsnittene **Sort By** og **Then By** for hver sorteringsregel:
 - Vælg den kolonnetype, der skal sorteres efter, på listen **Group**.
 - Vælg den kolonne, der skal sorteres efter, på listen **Column**.
 - Vælg retningen for sorteringen: **Ascending** eller **Descending**.
4. Gør et af følgende:
 - Klik på **Save/Execute** for at udføre sorteringen, gemme sorteringskriterierne og lukke dialogboksen **Sort**.
 - Klik på **Execute** for at udføre sorteringen og lukke dialogboksen **Sort** uden at gemme sorteringskriterierne.

Gem standardsorteringskriterier for fremtidige resultattabeller

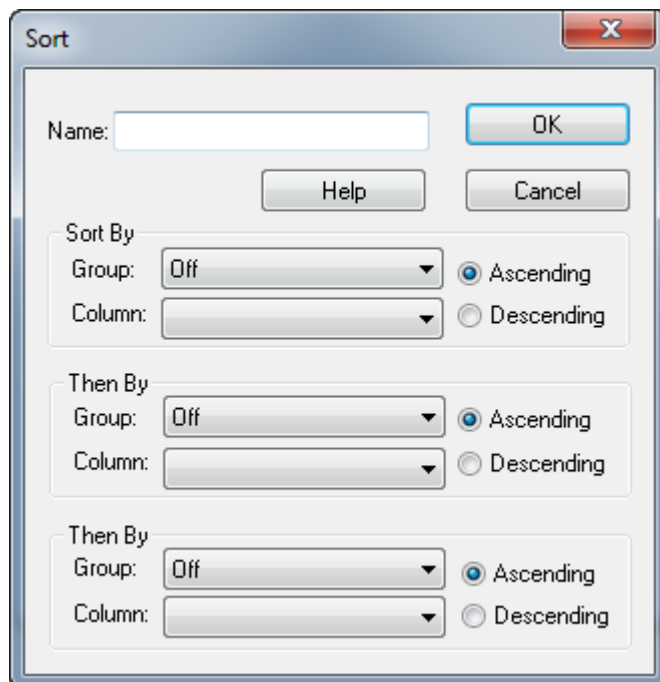
1. Klik på **Tools > Settings > New Quantitation Results Table Settings**.

Figur 6-14: Dialogboksen Tabelindstillinger



2. Udvid mappen **Table Settings**, og dobbeltklik derefter på mappen **Default**.
3. Vælg mappen **Default** fra den udvidede **Sorts**-mappe.
4. Klik på **New**.

Figur 6-15: Dialogboksen Sort



5. Indtast et navn i feltet **Name**.
6. Ved hver sorteringsregel, der skal indstilles, skal du gøre følgende i afsnittet Sort By:
 - a. Vælg kolonnetype på listen **Group**.
 - b. Vælg kolonnen på listen **Column**.
 - c. Vælg retningen for sorteringen: **Ascending** eller **Descending**.
7. Klik på **OK**, hvis du vil gemme kriterierne og lukke dialogboksen Sort.
8. Klik på **Done**.

Sorter en resultattabel ved hjælp af forudindstillede sorteringskriterier

Højreklik i resultattabellen, klik på **Sort**, og vælg navnet på sorteringen.

Om at bruge forespørgsler med resultattabeller

En forespørgsel er en anmodning om poster i en resultattabel, der opfylder visse betingelser, der er fastsat ved hjælp af tekstmæssige eller matematiske udvælgelseskriterier. Anvend en forespørgsel enten under processen med at generere en resultattabel eller efter generering af én. Disse to typer forespørgsler kaldes standardforespørgsler og tabelspecifikke forespørgsler. Se afsnittet: [Standardforespørgsler og tabelspecifikke forespørgsler](#).

Vi anbefaler, at brugeren validerer alle forespørgsler, der bruges til at analysere data i en resultattabel.

Sammenligning af resultater mellem batches

Antallet af analytter og deres navne skal være det samme for de data, der skal kombineres i vinduet Statistics.

1. Åbn en Results Table.
2. Klik på **Tools > Statistics**.
3. Gør ét af følgende:
 - Hvis du vil arrangere resultaterne efter **Results Table**, skal du vælge **Group By Batch** på listen **Conc. as Rows**.
 - Vælg **Group By Concentration** på listen **Conc. as Rows** for at arrangere resultaterne efter koncentration.
 - Hvis du vil arrangere resultaterne efter koncentration uden en række, der viser statistikkerne for hver gruppe eller batch, skal du vælge **Group By Concentration (no All)** på listen **Conc. as Rows**.

Resultaterne sorteres i softwaren. Efter hver batch eller gruppe vises en eller to ekstra rækker: **All** (statistik for alle resultattabeller i den pågældende gruppe) og **Average** (statistik for statistikken for den pågældende batch eller gruppe).

Sådan påvirker koncentrationsniveauer resultater

Koncentrationen er defineret for alle kvalitetskontroller og standarder. Hvis koncentrationsniveauets nøjagtighed ændres med mere end den mængde, der er defineret i feltet Max. Variation i dialogboksen Create Default Query, så vises disse oplysninger i resultattabellen.

Layouts for resultattabel

Softwaren har følgende foruddefinerede visninger af resultattabellen.

- [Fuld layoutvisning](#)
- [Oversigtslayoutvisning](#)
- [Visning af analytlayout](#)
- [Visning af analytgruppelayout](#)
- [Visning af eksempel på typelayout](#)

Hver analyt fra en prøve af flere analytter kan ses i visningen Analyte Layout. Den forudindstillede visning er Full layout.

Fuld layoutvisning

Den forudindstillede fulde layoutvisning viser data for alle analytter i kvantificeringsbatchen. De kolonner, der vises, afhænger af de kolonner, der er valgt i dialogboksen Results Table Columns, og de indstillinger, der er valgt på den anden side i guiden Quantitation Method.

Figur 6-16: Eksempel på fuld layoutvisning

	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	4.53e+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	4.83e+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

Oversigtslayoutvisning

Oversigtslayoutvisningen indeholder de låste kolonner og det valgte felt for hver analyt i de resterende kolonner. Hvis Analyte Peak Area f.eks. i menuen for to analytter, vises kolonnerne Sample Name og Analyte Peak Area for disse analytnavne. Oversigtslayoutvisningen indeholder også kolonnerne Formula og Custom, hvis disse findes.

Figur 6-17: Eksempel på oversigtslayoutvisning

	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

Visning af analytlayout

Visningen Analyte Layout indeholder data for en bestemt analyt. Alle andre analytter er skjulte. Hvis f.eks. analyt A er valgt, ses alle data for analyt A. De kolonner, der vises, afhænger af de kolonner, der er valgt i dialogboksen Results Table Columns, og de indstillinger, der er valgt på den anden side i guiden Quantitation Method.

En Analyte Layout-visning, med top 1 valgt, kunne ligne følgende grafik. I denne visning er alle andre rækker, der vises i den fulde layoutvisning, udelukket.

Figur 6-18: Visning af prøveanalytlayout

	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"/>

Visning af analytgruppelayout

Visningen analytgruppelayoutet indeholder data for de analytter, der tilhører en bestemt gruppe. Kolonner, der er valgt, som det er vist i dialogboksen Results Table Columns, vises i resultattabellen. Se følgende grafik. Vis **Analyte Peak Name**-kolonnen i resultattabellen for at vise navnene på de analytter, der tilhører gruppen.


Figur 6-19: Eksempel på visningen af analytgruppelayout

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

Visning af eksempel på typelayout

Med layoutet Sample Type (Prøvetype) kan brugeren filtrere resultattabellen efter prøvetype.

Figur 6-20: Visning af eksempel på typelayout

<div>  <div> Sample Type: Standard Query: None Idle Sort : Unsorted </div> </div>				
	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

Resultattabelfelter

Føj kolonner til standardresultattavlen for at vise DAD-data (diodearraydetektor) for felterne Analyte, Internal Standard og Record.

Formelfelter

Formelfelterne viser resultatet af en formel i regnearkstil, der er defineret af brugerne. Formelfeltet øverst i resultattabellen vises kun, hvis mindst én formelkolonne er i resultattabellen. Feltet Formula bliver aktivt, når der er markeret formelkolonneceller. Knappen Delete Formula Column under feltet Formula bliver også tilgængelig, når kolonnen Formula er valgt.

Vi anbefaler, at brugeren validerer resultaterne, hvis der anvendes en formelkolonne.

Brugerdefinerede felter

Brugerdefinerede felter indeholder oplysninger, der er defineret under dataopsamlingen. Når der opsamles prøver, kan brugerne oprette brugerdefinerede kolonner og definere den type data, der skal indsættes i dem. Når den brugerdefinerede kolonne er del af resultattabellen, kan den behandles som enhver anden kolonne (f.eks. flytte den, skjule den, basere en formel på den).

Felter i intern standard-kolonner

I intern standard-kolonnerne i resultattabellen vises oplysninger om den interne standard efter analyse. Følgende tabel viser de tilgængelige felter.

Tabel 6-13: Intern standard-kolonner

Kolonner	Beskrivelse
IS Peak Name	Navnet på toppen for den interne standard.
IS Units	De enheder, som den interne standard er angivet i.
IS Peak Area	Arealet af toppen for den interne standard.
IS Peak Height	Højden af toppen for den interne standard.
IS Concentration	Den kendte koncentration af den interne standard. Dette gælder for standard- og kvalitetskontrolprøvetype. Der vises nuller for opløsningsmiddel, blinde og dobbeltblinde prøvetyper. Der vises N/A for ubekendte.
IS Retention Time	Den kromatografiske retentionstid som bestemt af softwaren.
IS Expected Retention Time	Retentionstiden for den repræsentative prøve. Taget fra kvantificeringsmetoden.
IS Retention Time Window	Retentionstidsvinduet, som specificeret i kvantificeringsmetoden.
IS Centroid Location	Den intensitetsvægtede gennemsnitlige retentionstid for analytten. Topområderne indtil og efter dette tidspunkt er identificeret.
IS Start Scan	Det cyklusnummer, der er knyttet til den periode eller eksperimentkombination, hvor toppen begynder.
IS Start Time	Den tid, der er forbundet med den periode eller eksperimentkombination, hvor toppen begynder.
IS Stop Scan	Det cyklusnummer, der er knyttet til den periode eller eksperimentkombination, hvor toppen slutter.
IS Stop Time	Den tid, der er forbundet med den periode eller eksperimentkombination, hvor toppen slutter.
IS Integration Type	Den metode, hvorved baseline blev fundet og integreret, da toppen blev fundet. Typerne er manuelle og automatiske (Baseline-to-Baseline , Valley , Exponential Skim og Exponential Child).
IS Signal to Noise	Signal/støj-forholdet for toppen.
IS Peak Width	Forholdet mellem tophøjden og dens bredde.
IS UV Range	UV-området for den interne standard.
IS UV Channel	UV-kanalen for den interne standard.
IS Peak Width at 50 Percent (min.)	(Skrivebeskyttet) Topbredden ved 50 % af tophøjden.

Tabel 6-13: Intern standard-kolonner (fortsat)

Kolonner	Beskrivelse
IS Baseline Slope (%/min.)	(Skrivebeskyttet) Den kolonne, der viser hældningen af baseline.
IS Peak Asymmetry	(Skrivebeskyttet) Den kolonne, der viser topasymmetrien, og som beregnes ved hjælp af følgende formel: $[(\text{Topendetid}) - (\text{retentionstid})] / [(\text{Retentionstid}) - (\text{Topstarttid})]$ Værdier nær 1,0 angiver symmetriske toppe, værdier større end 1,0 angiver følgetoppe, og værdier mindre end 1,0 angiver fronttoppe.
IS Processing Alg	(Skrivebeskyttet) Den kolonne, hvori den anvendte behandlingsalgoritme vises.
IS Integration Quality	Integrationskvalitetsindekset angiver, hvor godt toppen er integreret. Værdier tættere på 1 angiver velintegrerede toppe, og værdier tættere på 0 angiver dårligt integrerede toppe.

Optagelsesfelter

Record Kolonnerne i resultattabellen indeholder yderligere oplysninger om hver prøveoptegnelse (oplysninger, der kun gælder for analytten, ikke den interne standard). Følgende tabel viser de tilgængelige felter.

Tabel 6-14: Optag kolonner

Kolonner	Beskrivelse
Use Record	Angiver, om denne optagelse skal medtages til kalibrering. Gælder for standarder og kvalitetskontroller. Hvis afkrydsningsfeltet afkrydses, overstreges de ubrugte standarder og kvalitetskontroller i statistiktabelen.
Record Modified	Angiver, om den kvantificeringsmetode, der blev anvendt til optagelsen, på nogen måde blev ændret i forhold til originalen.
Calculated Concentration	Den beregnede koncentration af analytten, som beregnet ved hjælp af kalibreringskurven.
Relative Retention Time	Forholdet mellem retentionstiderne for den interne standard og analytten.
Accuracy	Den beregnede koncentration divideret med den kendte koncentration (i procent).
Response Factor	Topområdet eller -højden (afhængigt af regressionsindstillingen) divideret med analytkoncentrationen.

Analytkolonner

Analyttens kolonner i resultattabellen indeholder oplysninger om hver analyt og intern standard (hvis en blev anvendt) efter analyse. Følgende tabel viser de tilgængelige felter.

Tabel 6-15: Resultattabeller: Analytkolonner

Kolonne	Beskrivelse
Analyte Peak Name	Navnet på analytten.
Analyte Units	De enheder, hvori analytkoncentrationerne er angivet.
Analyte Peak Area	Arealet af analytten.
Analyte Peak Height	Analyttoppens højde.
Analyte Concentration	Den faktiske, kendte koncentration af analytten. Dette gælder for standard- og kvalitetskontrolprøvetype. Der vises nuller for typer af opløsningsmidler, blindprøver og dobbeltblindprøver. N/A vises for ubekendte.
Analyte Retention Time	Den kromatografiske retentionstid som bestemt af softwaren.
Analyte Expected Retention Time	Retentionstiden for den repræsentative prøve, som udtaget efter kvantificeringsmetoden.
Analyte Retention Time Window	Retentionstidsvinduet, som specificeret i kvantificeringsmetoden.
Analyte Centroid Location	Den intensitetsvægtede gennemsnitlige retentionstid for analytten. Topområderne indtil og efter dette tidspunkt er identificeret.
Analyte Start Scan	Det cyklusnummer, der er knyttet til den periode eller eksperimentkombination, hvor toppen begynder.
Analyte Start Time	Den tid, der er forbundet med den periode eller eksperimentkombination, hvor toppen begynder.
Analyte Stop Scan	Det cyklusnummer, der er knyttet til den periode eller eksperimentkombination, hvor toppen slutter.
Analyte Stop Time	Den tid, der er forbundet med den periode eller eksperimentkombination, hvor toppen slutter.
Analyte Integration Type	Den metode, hvorved baseline blev fundet og integreret, da toppen blev fundet. Typerne er manuelle og automatiske (Baseline-to-Baseline, Valley, Exponential Skim og Exponential Child).

Tabel 6-15: Resultattabeller: Analytkolonner (fortsat)

Kolonne	Beskrivelse
Analyte Signal to Noise	Signal/støj-forholdet for toppen i forhold til baseline.
Analyte Peak Width	Forholdet mellem tophøjden og dens bredde.
Analyte UV Range	Analyttens UV-område.
Analyte UV Channel	Analyttens UV-kanal.
Analyte Peak Width at 50 Percent (min.)	(Skrivebeskyttet) Den kolonne, der viser topbredden ved 50 % af tophøjden.
Analyte Baseline Slope (%/min.)	(Skrivebeskyttet) Den kolonne, der viser hældningen af baseline.
Analyte Peak Asymmetry	(Skrivebeskyttet) Den kolonne, der viser topasymmetrien, og som beregnes ved hjælp af følgende formel: $[(\text{Topendetid}) - (\text{retentionstid})] / [(\text{Retentionstid}) - (\text{Topstarttid})]$ Værdier nær 1,0 angiver symmetriske toppe, værdier større end 1,0 angiver følgetoppe, og værdier mindre end 1,0 angiver fronttoppe.
Analyte Processing Alg	En skrivebeskyttet kolonne, der viser den anvendte behandlingsalgoritme
Analyte Integration Quality	Integrationskvalitetsindeks angiver, hvor godt toppen er integreret. Værdier tættere på 1 angiver velintegrerede toppe, og værdier tættere på 0 angiver dårligt integrerede toppe. Dette forenkler topgennemgang, da brugerne kan se toppe med lave analytintegrationskvalitetsværdier for manuel gennemgang. Derudover kan brugerne forespørge om data for værdierne for analyttens integrationskvalitet, der er mindre end en værdi, de anser for acceptabel til at vise og manuelt gennemgå en delmængde af dataene.

Prøvekolonner

Prøvekolonnerne i resultattabellen viser oplysninger om den prøve, der er fælles for alle analytter. Blank og dobbeltblank kan defineres forskelligt fra laboratorium til laboratorium. De tilgængelige felter vises i følgende tabel.

Tabel 6-16: Prøvekolonner

Kolonne	Beskrivelse
Sample Name	Navnet, som brugeren tildelte prøven, da den blev anskaffet.

Tabel 6-16: Prøvekolonner (fortsat)

Kolonne	Beskrivelse
Sample ID	En brugerdefineret identifikator, der er knyttet til prøven.
Sample Type	<p>Alle analytter i en prøve skal være af samme type. Én af følgende prøvetyper er vist:</p> <p>Unknown: Indeholder analytter, hvis koncentrationer skal bestemmes.</p> <p>Standard: En prøve med kendt analytkoncentration. Den anvendes til kalibreringsformål.</p> <p>Quality Control: En prøve med kendt analytkoncentration. Den bruges til at kontrollere nøjagtigheden af standardkurven.</p> <p>Solvent: Bekræfter, at massespektrometeret er rent. Opløsningsmidlerne køres ikke gennem prøveforberedelsesprocessen.</p> <p>Blank: En nulkoncentrationsprøve, der ikke anvendes ved regression.</p> <p>Double Blank: En prøve, der er fremstillet uden intern standard eller prøveanalyt. Bekræfter, at udvindingsprocessen ikke tilføjede noget.</p>
Sample Comment	En kommentar, der beskriver prøven.
Set Number	Et tal, der identificerer en delmængde af en helt batch.
Acquisition Method	Navnet på den metode, der er anvendt til at opsamle prøverne.
Acquisition Date	Den dato og det tidspunkt, hvor dataopsamlingen blev gennemført.
Rack Type	En identifikator, der er knyttet til den type autosamplerrack, der anvendes (hvis nogen).
Rack Number	Den rackposition, som prøven blev placeret i, da den blev opsamlet. (I autosamlere med et enkelt rack er dette altid 1).
Vial Position	Den placering på autosamplerpladen, hvor hætteglasset var placeret.
Plate Type	En identifikator for den type plade, der anvendes (kun racks med flere plader).
Plate Number	Pladepositionen på racket (kun racks med flere plader).
File Name	Navnet på rådatafilen. Dette navn er ikke unikt, fordi en enkelt datafil kan indeholde data fra mange prøver.
Dilution Factor	Den mængde, som prøven er fortyndet med. Det anvendes til at bestemme den beregnede koncentration.
Sample Annotation	Supplerende bemærkninger til beskrivelsen af prøven.

Tabel 6-16: Prøvekolonner (fortsat)

Kolonne	Beskrivelse
Weight-to-Volume Ratio	Forholdet mellem vægt og volumen for prøven.

Tabel 6-17: DAD-kolonner

Kolonne	Beskrivelse
Analyte Peak Area for DAD	Arealet af analyttoppen (mAU/min).
Analyte Peak Height for DAD	Højden af analyttoppen (mAu).
Analyte Wavelength Ranges	Bølgelængdeområdet (nm).
IS Peak Area for DAD	Arealet af toppen for den interne standard (mAU/min).
IS Wavelength Ranges	Bølgelængdeområdet (nm).
IS Peak Height for DAD	Højden af toppen for den interne standard (mAU) Beregnet koncentration for DAD.

I følgende tabel vises de felter, der kan føjes til resultattabellen for data, der er opsamlet med en ADC (analog til digital konverter).

Tabel 6-18: ADC-kolonner











Kolonne	Beskrivelse
Analyte Channel	Den ADC-kanal, hvorfra analytten blev opnået.
Analyte Wavelength Ranges	Bølgelængdeområdet (nm).
IS Channel	Den ADC-kanal, hvorfra den interne standard blev opnået.
IS Wavelength Ranges	Bølgelængdeområdet (nm).

Tip til resultattabellen

Hvis du vil gøre dette...	... skal du gøre følgende
Tabelspecifikke forespørgsler: For at se hele tabellen igen	Højreklik hvor som helst i resultattabellen, og klik derefter på Query > Show All . Forespørgslen kan anvendes igen eller redigeres.
Undersøgelse af kalibreringskurver	Højreklik hvor som helst på kurven, klik på Active Plot , og vælg den kurve, der skal markeres øverst.
Eksempel på statistisk gennemgang: Sådan gennemgår du en individuel top	Markér afkrydsningsfeltet Display the Data Set(s) , og dobbeltklik derefter på det datapunkt, der repræsenterer toppen, i kolonnen Data Point. I softwaren vises vinduet Peak Review med den brugervalgte top.
Resultattabeller: Sådan returneres resultattabellen til sin oprindelige rækkefølge	Højreklik på resultattabellen, og klik på Sort > Sort By Index .

Ikoner på værktøjslinjer

A

Ikon	Navn	Funktion
	Baggrundssubtraktion	Udfører en baggrundssubtraktion, når baggrundsintervallerne er valgt.
	Subtraktionsområdet er låst	Låser de valgte baggrundsområder. Hvis baggrundsområderne er ulåste, kan brugerne flytte de enkelte områder uafhængigt.
	Massemidtpunkt	Beregner massemidtpunktet for dataene.
	Startgraf	Returnerer grafen til den oprindelige skala.
	Overlejring	Overlejrer grafer.
	Cyklusoverlejring	Skifter mellem overlejrede grafer.
	Sum af overlejring	Summerer graferne.
	Vis værktøj til fortolkning af fragmenter	Åbner værktøjet til fortolkning af fragmenter, som beregner de enkelte, ikke-cykliske bindingsspaltningfragmenter fra en .mol-fil.
	Glat	Udglatter data ved hjælp af udjævningsalgoritmen.
	Gaussisk udjævning	Udglatter data ved hjælp af gaussisk udjævning.

PPG – Tabel over nøjagtig masse

B

I følgende tabel vises de nøjagtige monoisotopiske masser og ladede arter (positive og negative), der observeres med PPG-kalibreringsopløsninger (polypropylenglykol). Masser og ioner blev beregnet ved hjælp af formelen $M = H[OC_3H_6]_nOH$, mens de positive MS/MS-ion-fragmenter brugte formelen $[OC_3H_6]_n(H^+)$. I alle beregninger er $H = 1,007825$, $O = 15,99491$, $C = 12,00000$ og $N = 14,00307$.

Bemærk: Når der udføres kalibrering med PPG-opløsningerne, skal sikres, at den korrekte isotoptop anvendes.

Tabel B-1: PPG – Nøjagtige masser

n	Nøjagtig masse (M)	(M+NH ₄) ⁺	MS/MS-fragmenter	(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
11	656,471	674,506	639,4	346,270	701,469

Tabel B-1: PPG – Nøjagtige masser (fortsat)

n	Nøjagtig masse (M)	(M+NH ₄) ⁺	MS/MS-fragmenter	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
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
28	1643,184	1661,218	1626,2	839,626	1688,180

PPG – Tabel over nøjagtig masse

Tabel B-1: PPG – Nøjagtige masser (fortsat)

n	Nøjagtig masse (M)	(M+NH ₄) ⁺	MS/MS-fragmenter	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
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
45	2629,896	2647,930	2612,9	1332,982	2674,892

Tabel B-1: PPG – Nøjagtige masser (fortsat)

n	Nøjagtig masse (M)	(M+NH ₄) ⁺	MS/MS-fragmenter	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
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
62	3616,608	3634,643	3599,6	1826,339	3661,604

PPG – Tabel over nøjagtig masse

Tabel B-1: PPG – Nøjagtige masser (fortsat)

n	Nøjagtig masse (M)	(M+NH ₄) ⁺	MS/MS-fragmenter	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
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
79	4603,321	4621,355	4586,3	2319,695	4648,315

Tabel B-1: PPG – Nøjagtige masser (fortsat)

n	Nøjagtig masse (M)	(M+NH ₄) ⁺	MS/MS-fragmenter	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
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

Kontakt os

Kundeuddannelse

- I Nordamerika: NA.CustomerTraining@sciex.com
- I Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Uden for EU og Nordamerika kan du besøge sciex.com/education for at få kontaktoplysninger.

Online-læringscenter

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

SCIEX

SCIEX og dets repræsentanter har et personale af fuldt uddannede service- og tekniske specialister, der er placeret over hele verden. De kan besvare spørgsmål om systemet eller eventuelle tekniske problemer, der måtte opstå. Besøg SCIEX hjemmeside på sciex.com eller kontakt os på en af følgende måder for at få yderligere oplysninger:

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

Cybersikkerhed

Besøg [SCIEXsciex.com/productsecurity](http://sciex.com/productsecurity)-produkter.

Dokumentation

Denne version af dokumentet overgår alle tidligere versioner af dette dokument.

Hvis du vil se dette dokument elektronisk, er Adobe Acrobat Reader påkrævet. Gå til <https://get.adobe.com/reader> for at downloade den seneste version.

Se udgivelsesbemærkninger eller software installationsvejledning, der følger med softwaren, for at finde software produktdokumentation.

For at finde hardwareproduktdokumentation henvises der til *kundereference*-DVD'en, der følger med systemet eller komponenten.

Bemærk: Kontakt sciex.com/contact-us for at anmode om en gratis, trykt version af dette dokument.
