

---

# Molecule Profiler Software

Softwarehandbuch



---

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

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

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

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

Nur für Forschungszwecke. Nicht zur Verwendung bei Diagnoseverfahren.

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

AB Sciex™ wird unter Lizenz verwendet.

© 2021 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.

B1k33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

# Inhalt

---

<b>Kapitel 1: Erste Schritte</b> .....	<b>7</b>
Potenzielle Moleküle und deren Derivate ermitteln .....	8
Öffnen des Arbeitsbereichs „Molecule Profiler“ .....	8
Molecule Profiler-Fenster .....	10
Ordner erstellen .....	12
<b>Kapitel 2: Custom Elements</b> .....	<b>14</b>
Benutzerdefinierte Aminosäuren .....	14
Erstellen einer benutzerdefinierten Aminosäure .....	14
Bearbeiten einer benutzerdefinierten Aminosäure .....	15
Löschen einer benutzerdefinierten Aminosäure .....	16
Benutzerdefinierte Aminosäuremodifizierungen .....	16
Erstellen einer benutzerdefinierten Aminosäuremodifizierung .....	16
Bearbeiten einer benutzerdefinierten Aminosäuremodifizierung .....	17
Löschen einer benutzerdefinierten Aminosäuremodifizierung .....	18
Benutzerdefinierte Oligonukleotid-Rückstände oder Terminal-Gruppen .....	19
Erstellen eines benutzerdefinierten Oligonukleotid-Rückstands oder einer benutzerdefinierten Terminal-Gruppe .....	21
Bearbeiten eines benutzerdefinierten Oligonukleotid-Rückstands oder einer benutzerdefinierten Terminal-Gruppe .....	21
Einen benutzerdefinierten Oligonukleotid-Rückstand oder eine benutzerdefinierte Terminal-Gruppe löschen .....	22
Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen importieren .....	22
Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen exportieren .....	22
<b>Kapitel 3: Verbindungsbibliothek</b> .....	<b>24</b>
Verwendung von Strukturen und Sequenzen .....	24
Hinzufügen einer Struktur .....	24
Hinzufügen einer Peptidsequenz .....	26
Namenskonventionen für Peptidsequenzen .....	27
Hinzufügen einer Oligonukleotid-Sequenz .....	28
Namenskonventionen für Oligonukleotid-Sequenzen .....	28
Ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer wiff-Datei hinzufügen .....	30
Ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer txt-Datei hinzufügen .....	33
Informationen aus einer „Results Table“ zur Verbindungsbibliothek hinzufügen .....	33
<b>Kapitel 4: Biotransformationssets</b> .....	<b>35</b>
Informationen über Biotransformationen .....	35
Erstellen eines Biotransformationssets .....	35
Ein Biotransformationsset bearbeiten .....	36
Löschen eines Biotransformationssets .....	37

<b>Kapitel 5: Verarbeitungsmethoden erstellen</b> .....	<b>39</b>
Verarbeitungsparameter.....	39
Auswählen des Methodentyps.....	39
Parameterwerte auswählen.....	40
Eine Verbindung aus einer Bibliothek auswählen.....	41
Informationen über Strategien für die Peak-Ermittlung.....	41
Allgemeine Verarbeitungsparameter.....	45
Verbindungsspezifische Verarbeitungsparameter.....	57
Bearbeiten der isotopischen Anreicherung für Peptid- und Oligonukleotid-Formeln.....	62
<b>Kapitel 6: Nach potenziellen Molekülen suchen</b> .....	<b>64</b>
Informationen über den Arbeitsbereich „Batch“.....	64
Chargenoptionen festlegen.....	66
Optionen für die Verarbeitung von Chargen.....	67
Eine Charge erstellen.....	68
Kopieren und Einfügen einer Chargen-Zeile.....	69
Eine Chargenzeile löschen.....	70
Öffnen einer Charge.....	70
Eine Charge importieren.....	70
Eine Charge speichern.....	72
Übergeben einer Charge.....	73
<b>Kapitel 7: Ergebnisse anzeigen</b> .....	<b>74</b>
Informationen über den Arbeitsbereich „Results“.....	74
Nur gefiltertes Spektrum anzeigen.....	80
Informationen über Ergebnisfilter.....	81
Ergebnisse bearbeiten.....	83
Zeilen löschen.....	83
Den Namen und die Formel eines potenziellen Metaboliten bearbeiten.....	84
Gruppieren nach Peaks.....	85
Peak-IDs zuweisen.....	85
MS/MS-Spektren.....	85
<b>Kapitel 8: MS/MS-Daten charakterisieren</b> .....	<b>89</b>
Informationen über die Interpretationsansicht.....	89
Kleinmolekül-Interpretationsansicht.....	89
Peptid-Interpretationsansicht.....	93
Oligonukleotid-Interpretationsansicht.....	95
ADC-Interpretationsansicht.....	97
Manuelle Interpretation.....	100
Kleinmolekül-Arbeitsablauf.....	100
Peptid-Arbeitsabläufe.....	113
Oligonukleotid-Arbeitsabläufe.....	119
ADC-Arbeitsablauf.....	124
Automatische Interpretation.....	134
Kleinmolekül-Arbeitsablauf.....	134

---

Peptid-Arbeitsabläufe .....	135
<b>Kapitel 9: Ergebnisse korrelieren .....</b>	<b>137</b>
Vorbereitung einer Korrelation .....	137
Anpassen der Korrelation .....	138
Verbessern der Peak-Ausrichtung .....	138
Die Zusammenführung von Peaks definieren .....	138
Informationen über den Arbeitsbereich „Correlation“ .....	139
Den Namen eines korrelierten Metaboliten bearbeiten .....	141
Korrelierte Metaboliten vergleichen .....	142
Informationen über Korrelationsfilter .....	143
<b>Kapitel 10: Berichte .....</b>	<b>144</b>
Erstellen eines Berichts im Arbeitsbereich „Results“ .....	145
Erstellen eines Berichts im Arbeitsbereich „Correlation“ .....	146
Kopieren und Einfügen eines Diagramms .....	147
Kopieren und Einfügen der Tabelle „Potential Metabolites“ .....	147
<b>Kapitel 11: Analoge Integration .....</b>	<b>148</b>
Analogdaten manuell integrieren .....	148
Kontrollen anzeigen .....	150
Durchführen einer Basisliniensubtraktion .....	150
R. T.-Versatz ändern .....	150
Optionen für die analoge Integration festlegen .....	151
Tabelle aktualisieren .....	151
Ergebnisse aktualisieren und schließen .....	152
<b>Kapitel 12: Fehlersuche .....</b>	<b>153</b>
Eine Strukturdatei kann nicht geöffnet werden .....	153
Ändern von Nutzerberechtigungen .....	153
Es werden keine potenziellen Metaboliten gefunden .....	153
Es werden zu viele potenzielle Metaboliten gefunden .....	154
Lange Verarbeitungszeiten .....	154
Den Ordner „ProgramData“ anzeigen .....	155
Bekannte Probleme und Einschränkungen .....	155
<b>Anhang A: Beispiel für einen benutzerdefinierten Oligonukleotiden .....</b>	<b>156</b>
Erstellen des anderen Terminus .....	156
Die internen Rückstände als andere Rückstände erstellen .....	158
Schreiben einer benutzerdefinierten Sequenz .....	159
<b>Anhang B: Glossar .....</b>	<b>160</b>
Benennung von Metaboliten durch die Software .....	160
IDA .....	160
Peak-IDs .....	160
Relativer Ansprechfaktor .....	160

---

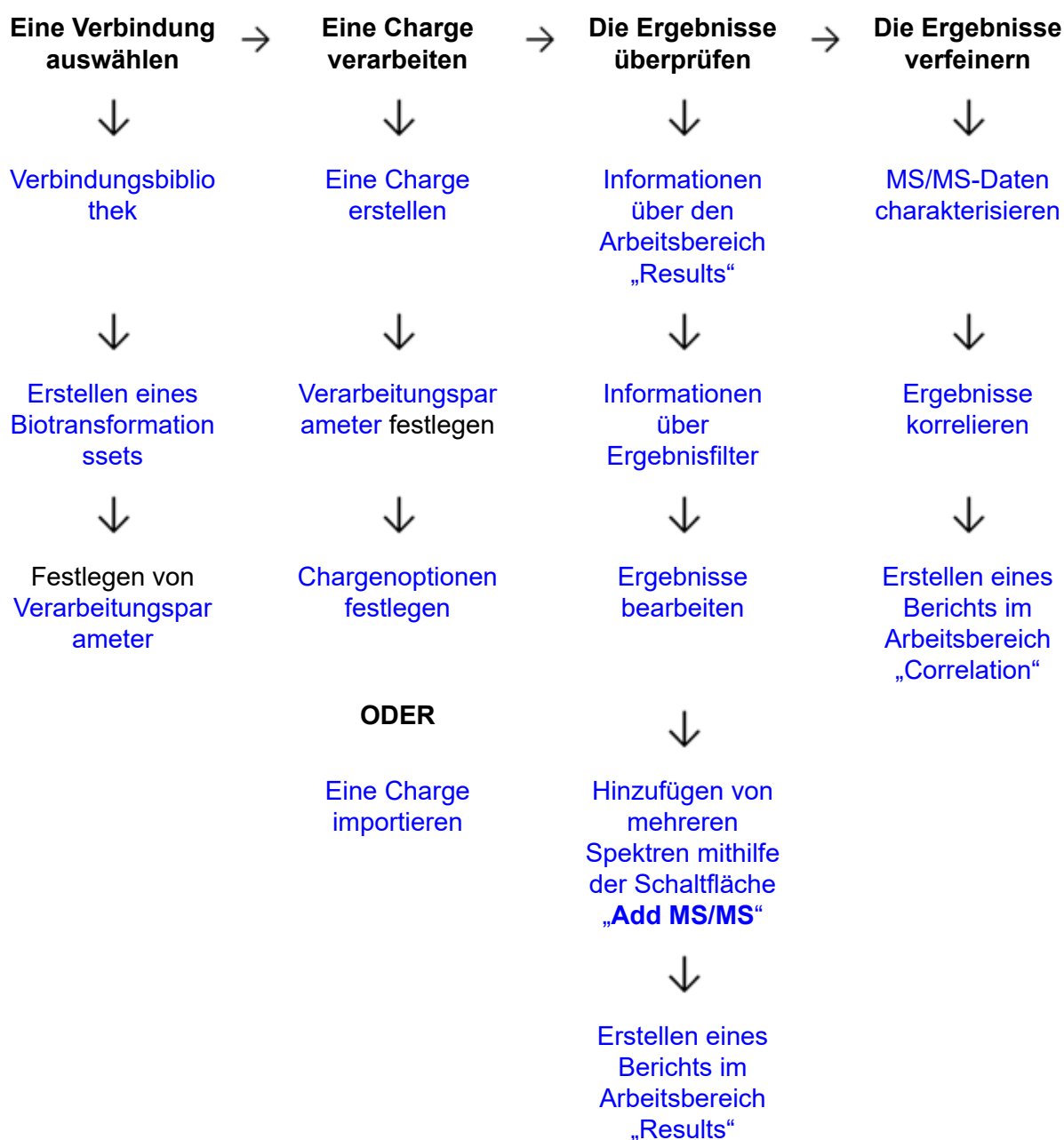
## Inhalt

---

Referenzspektrum.....	160
<b>Kontaktangaben.....</b>	<b>161</b>
Kundenschulung.....	161
Online-Lernzentrum.....	161
SCIEX Support.....	161
Cybersicherheit.....	161
Dokumentation.....	161

Verwenden Sie die Molecule Profiler Software, um nach Molekülen und deren Derivaten (einschließlich potenzieller Verunreinigungen und Metaboliten) in mit der Analyst TF Software und SCIEX OS erfassten Daten zu suchen und diese in den Bericht aufzunehmen.

Die Molecule Profiler Software unterstützt die Identifizierung von kleinen Molekülen, Peptiden, Antikörper-Wirkstoff-Konjugaten und Oligonukleotiden unter 10 kDa.



## Potenzielle Moleküle und deren Derivate ermitteln

Die Software enthält einige Strategien für die Peak-Ermittlung oder Algorithmen für die Suche nach potenziellen Molekülen in einer relevanten Probe. Siehe Abschnitt: [Informationen über Strategien für die Peak-Ermittlung](#).

Wenn es sich bei dem gefundenen Peak um ein vorhergesagtes Molekül handelt, dann weist die Software einen bestimmten Namen zu, der sich vom Vorläufer oder einer Kombination aus einer oder mehreren Transformationen ableitet. Basierend auf dem Arbeitsablauf können die Transformationen ein ausgewähltes Biotransformationsset, potenzielle Spaltungs-Metaboliten oder potenzielle hydrolytische Spaltungen oder potenzielle Sequenz-Fragmente eines Antikörpers enthalten.

Bei der Kleinmolekül-Datenanalyse umfassen die Transformationen ein ausgewähltes Biotransformationsset und potenzielle Spaltungs-Metaboliten.

Bei der Peptid-Datenanalyse umfassen die Transformationen ein ausgewähltes Biotransformationsset und potenzielle hydrolytische Spaltungen.

Bei der ADC-Datenanalyse (ADC - Antibody Drug Conjugate - Antikörper-Wirkstoff-Konjugat) umfassen die Transformationen ein ausgewähltes Biotransformationsset, potenzielle Spaltungs-Metaboliten und potenzielle Sequenz-Fragmente eines aufgeschlossenen Antikörper-Proteins.

Bei der Oligonukleotid-Analyse umfassen die Transformationen eine Auswahl von Biotransformationssets für Metaboliten und Verunreinigungen, sowie potenzielle Spaltungs-Metaboliten und interne n-1 und Terminus n+1 Sequenzen.

Wird die allgemeine Strategien für die Peak-Ermittlung verwendet und handelt es sich um ein unerwartetes Molekül, dann wird ein allgemeiner Name „Verlust von“ oder „Gewinn von“ und das protonierte Addukt bei der Ladung des molekularen Ions zugewiesen.

Wenn Kontrolldateien mit der Probe ausgewählt werden, dann führt die Software einen Vergleich zwischen der Probe und den Kontrolldaten durch. Wenn zudem Analogdateien mit der Probe ausgewählt werden, dann führt die Software einen Vergleich zwischen den MS-Daten und den Analogdaten durch.

Benutzer können die Parameter ändern, die den jeweiligen Algorithmus steuern. Siehe Abschnitt: [Parameterwerte auswählen](#).

## Öffnen des Arbeitsbereichs „Molecule Profiler“

Es muss die SCIEX OS Software Version 2.1.5 oder später installiert und eine gültige Molecule Profiler Software-Lizenz aktiviert sein.

1. Auswählen der Software im Startmenü: **Start > SCIEX OS > SCIEX OS**.

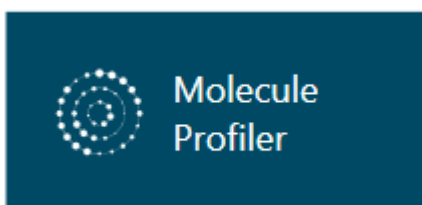
Wenn die Software für den „Integrated Mode“ konfiguriert ist, dann wird die Startseite geöffnet.



Wenn die Software für den „Mixed Mode“ konfiguriert ist, dann wird das Dialogfeld „Logon“ geöffnet. Fahren Sie mit folgendem Schritt fort.

2. Wenn sich das Dialogfeld „Logon“ öffnet, geben Sie den Benutzernamen und das Kennwort eines Benutzers ein, der zur Verwendung der Software autorisiert ist und klicken Sie dann auf **OK**.  
Die Startseite wird geöffnet.
3. Klicken Sie auf die Kachel „Molecule Profiler“.

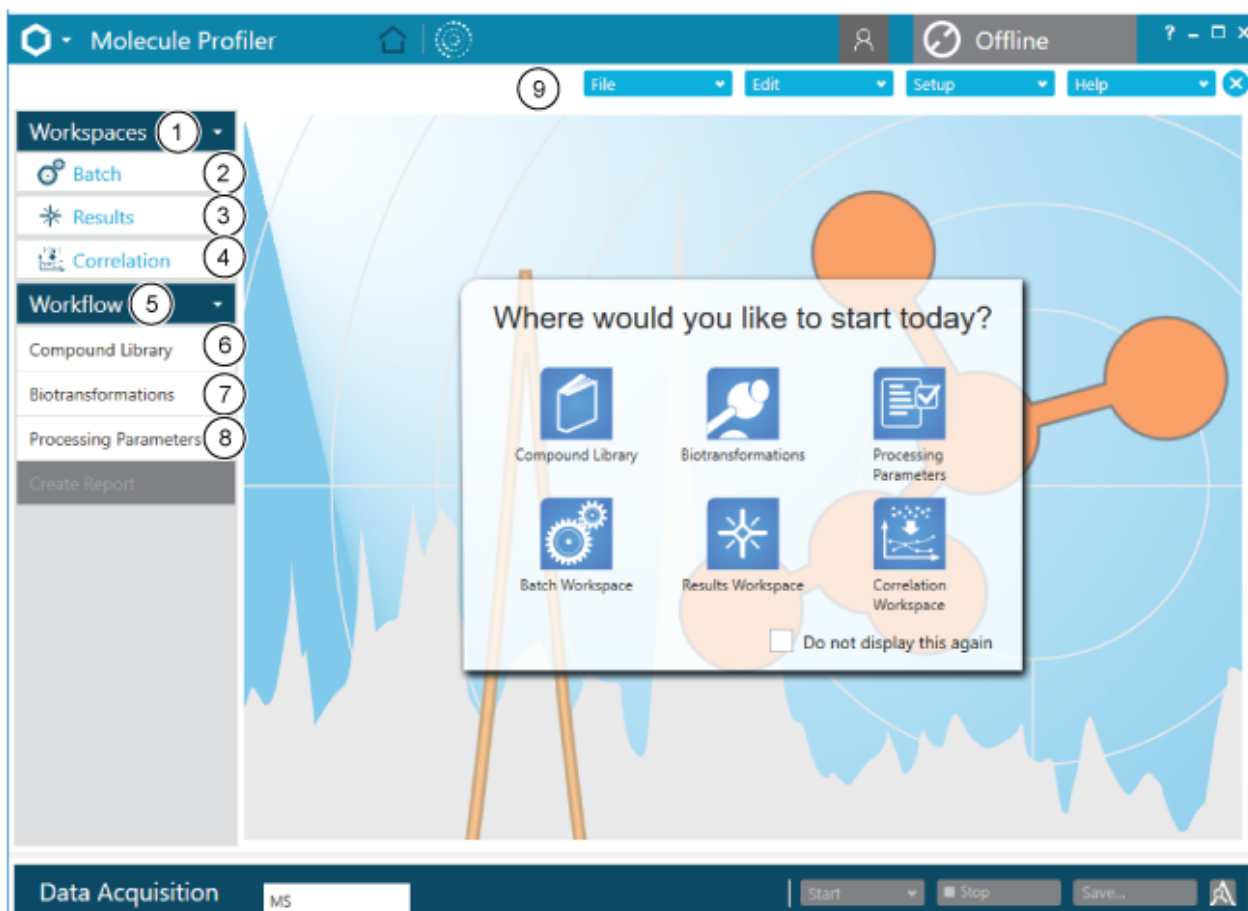
**Abbildung 1-1: Kachel „Molecule Profiler“**



Der Arbeitsbereich „Molecular Profiler“ wird geöffnet.

# Molecule Profiler-Fenster

Abbildung 1-2: Molecule Profiler-Fenster



Element	Beschreibung
1	Liste der Arbeitsbereiche
2	Arbeitsbereich „Batch“. Verwenden Sie diesen Arbeitsbereich für die Suche nach potenziellen Metaboliten. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über den Arbeitsbereich „Batch“</a> .
3	Arbeitsbereich „Results“. Verwenden Sie diesen Arbeitsbereich, um potenzielle Metaboliten nach der Verarbeitung anzuzeigen. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über den Arbeitsbereich „Results“</a> .
4	Arbeitsbereich „Correlation“. Verwenden Sie diesen Arbeitsbereich, um die in verschiedenen Ergebnisdateien gefundenen Metaboliten zu vergleichen. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über den Arbeitsbereich „Correlation“</a> .
5	Liste der Arbeitsabläufe

Element	Beschreibung
6	Verbindungsbibliothek. Erstellen und verwalten Sie eine Bibliothek mit Verbindungen. Siehe Abschnitt: <a href="#">Verbindungsbibliothek</a> .
7	Biotransformationen. Erstellen und verwalten Sie Listen mit allgemeinen Transformationen. Siehe Abschnitt: <a href="#">Biotransformationssets</a> .
8	Verarbeitungsparameter. Erstellen und verwalten Sie Verarbeitungsmethoden, die im Arbeitsbereich „Batch“ verwendet werden können. Siehe Abschnitt: <a href="#">Verarbeitungsmethoden erstellen</a> .
9	Menüleiste. Siehe die Tabelle: <a href="#">Tabelle 1-1</a> .

Tabelle 1-1: Menübefehle

Element	Beschreibung
Menü <b>File</b>	
<b>New</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Batch</b>: Erstellt eine neue Charge. Siehe Abschnitt: <a href="#">Eine Charge erstellen</a>.</li> <li>• <b>Correlation</b>: Erstellt eine neue Korrelation. Siehe Abschnitt: <a href="#">Vorbereitung einer Korrelation</a>.</li> </ul>
<b>Open</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Batch</b>: Öffnet eine Charge.</li> <li>• <b>Correlation</b>: Öffnet eine Korrelationsdatei.</li> <li>• <b>Results</b>: Öffnet eine Ergebnisdatei.</li> </ul>
<b>Save Batch</b>	Speichert die Charge im Arbeitsbereich „Batch“.
<b>Save Batch As</b>	Speichert die Charge im Arbeitsbereich „Batch“ unter einem anderen Namen.
<b>Create Report</b>	Erstellt einen Bericht. Siehe Abschnitt: <a href="#">Berichte</a> .
<b>Recent reports</b>	Öffnet einen aktuellen Bericht.
Menü <b>Edit</b>	
<b>Edit Name</b>	Bearbeitet den Namen und die Formel einer Verbindung.
<b>Copy Selected Table</b>	Kopiert die ausgewählte Tabelle.
<b>Copy Selected Graph</b>	Kopiert das ausgewählte Diagramm.
<b>Copy Batch Row</b>	Kopiert die ausgewählte Chargen-Zeile.
<b>Paste Batch Row</b>	Fügt die kopierte Chargen-Zeile an der ausgewählten Position ein.

Tabelle 1-1: Menübefehle (Fortsetzung)

Element	Beschreibung
<b>Clear Batch Row</b>	Löscht den Inhalt der ausgewählten Chargen-Zeile.
<b>Delete Selected Row</b>	Löscht die ausgewählte Zeile aus der „Results Table“. Die Software berechnet die Ergebnisse neu.
<b>Undo Delete</b>	Stellt die zuletzt gelöschte Zeile wieder her. Die Software berechnet die Ergebnisse neu.
<b>Hide Unchecked Rows</b>	Blendet nicht ausgewählte Zeilen aus.
<b>Show Hidden Rows</b>	Zeigt nicht ausgewählte Zeilen an.
<b>Custom Elements</b>	Öffnet das Dialogfeld „Custom Elements“. Verwenden Sie dieses Dialogfeld, um Aminosäuren und Oligonukleotid-Rückstände zu definieren. Siehe Abschnitt: <a href="#">Custom Elements</a> .
<b>Menü Setup</b>	
<b>Compound Library</b>	Öffnet die Verbindungsbibliothek. Siehe Abschnitt: <a href="#">Verbindungsbibliothek</a> .
<b>Biotransformationen</b>	Öffnet die Liste mit den Biotransformationssets. Siehe Abschnitt: <a href="#">Biotransformationssets</a> .
<b>Processing Parameters</b>	Öffnet das Fenster mit den Verarbeitungsmethoden. Siehe Abschnitt: <a href="#">Verarbeitungsmethoden erstellen</a> .
<b>Filters</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Results:</b> Legen Sie Filter für den Arbeitsbereich „Results“ fest. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über Ergebnisfilter</a>.</li> <li>• <b>Correlation:</b> Legen Sie Filter für den Arbeitsbereich „Correlation“ fest. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über Korrelationsfilter</a>.</li> <li>• <b>Interpretation:</b> Legen Sie Filter für den Arbeitsbereich „Interpretation“ fest.</li> </ul>
<b>Create New Folder</b>	Erstellt einen Ordner. Siehe Abschnitt: <a href="#">Ordner erstellen</a> .

## Ordner erstellen

In Ordnern werden die Dateien gespeichert, die von der Software benötigt werden, um potenzielle Moleküle in einer relevanten Probe zu ermitteln, sowie die Ergebnisdateien.

Benutzerdefinierte Ordner können zudem erstellt werden, um Ergebnisse zu organisieren.

1. Klicken Sie auf **Setup > Create New Folder**.

Das Dialogfeld „Create New Folder“ wird geöffnet.

2. Geben Sie einen **Name** für den Ordner ein.

Das Feld **Location** zeigt den Installationsort des Datenverzeichnisses (C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler\Data). Alle erstellten Ordner werden in diesem Verzeichnis gespeichert.

3. Klicken Sie auf **OK**.

Wenn ein Ordner erstellt wird, werden automatisch zwei Unterordner erstellt, der Ordner `Processing Parameters` und der Ordner `Results`.

Das Dialogfeld „Custom Elements“ enthält die folgenden Registerkarten:

- Die Registerkarte „AA List“ enthält Informationen für eine Liste mit Standard-Aminosäuren. Diese Informationen können weder bearbeitet noch gelöscht werden. Benutzer können benutzerdefinierte Aminosäuren zu dieser Liste hinzufügen und die hinzugefügten Elemente dann nach Bedarf ändern oder löschen. Die hinzugefügten Aminosäuren werden automatisch am Ende der Liste hinzugefügt. Die Liste kann jedoch sortiert werden, indem Sie auf eine der Spaltenüberschriften klicken.
- Die Registerkarte „AA Modifications“ enthält die Masseverschiebungsinformationen für die verschiedenen Modifizierungen, die auf Peptid-Terminal-Gruppen und Seitengruppen von Aminosäurerückständen angewendet werden können. Diese Informationen können weder bearbeitet noch gelöscht werden. Benutzer können benutzerdefinierte Aminosäuremodifizierungen zur Liste hinzufügen und die hinzugefügten Elemente dann nach Bedarf ändern oder löschen. Die hinzugefügten Aminosäuremodifizierungen werden automatisch am Ende der Liste hinzugefügt. Die Liste kann jedoch sortiert werden, indem Sie auf eine der Spaltenüberschriften klicken.
- Die Registerkarte „Oligo List“ enthält die vordefinierten Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen. Diese Informationen können weder bearbeitet noch gelöscht werden. Benutzer können neue Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen zu dieser Liste hinzufügen und die hinzugefügten Elemente dann nach Bedarf ändern oder löschen. Die hinzugefügten Rückstände werden automatisch am Ende der Liste hinzugefügt. Die Liste kann jedoch sortiert werden, indem Sie auf eine der Spaltenüberschriften klicken.

## Benutzerdefinierte Aminosäuren

### Erstellen einer benutzerdefinierten Aminosäure

1. Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.  
Das Dialogfeld „Custom Elements“ wird geöffnet.
2. Stellen Sie sicher, dass die Registerkarte „AA List“ ausgewählt ist.
3. Klicken Sie auf **New**.  
Das Dialogfeld „New Custom Amino Acid Residue“ wird geöffnet.
4. Füllen Sie die in der folgenden Tabelle beschriebenen Felder aus und klicken Sie dann auf **OK**.

**Tabelle 2-1: Felder des Dialogfeldes „New Custom Amino Acid Residue“**

Feld	Beschreibung	Zulässiger Wert
Name	Name der Aminosäure	Alphanumerisch

**Tabelle 2-1: Felder des Dialogfeldes „New Custom Amino Acid Residue“ (Fortsetzung)**

Feld	Beschreibung	Zulässiger Wert
<b>Symbol</b>	Symbol für die Aminosäure	<ul style="list-style-type: none"> <li>Alphanumerisch</li> <li>Der erste Buchstabe sollte ein Großbuchstabe sein</li> </ul>
<b>Residue Formula</b>	Formel für die Aminosäure	Empirische Formel, unter Verwendung periodischer Elemente. Ein angereichertes Isotop kann auch als Teil der Formel verwendet werden. Beispiel: $^{13}\text{C}$ , wobei $^{13}\text{C}$ Kohlenstoff-13-Isotop angibt.

Die benutzerdefinierte Aminosäure wird am Ende der Tabelle mit den Aminosäuren hinzugefügt und zeigt den Namen, das Symbol und die Masse an.

## Bearbeiten einer benutzerdefinierten Aminosäure

- Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.  
Das Dialogfeld „Custom Elements“ wird geöffnet.
- Stellen Sie sicher, dass die Registerkarte „AA List“ ausgewählt ist.
- Wählen Sie die zu bearbeitende Aminosäure aus.

**Hinweis:** Es können nur die vom Benutzer hinzugefügten benutzerdefinierten Aminosäuren bearbeitet werden. Die mit der Software ausgelieferten Aminosäuren können nicht bearbeitet werden.

- Klicken Sie auf **Edit**.  
Das Dialogfeld „Edit Custom Amino Acid Residue“ wird geöffnet.
- Bearbeiten Sie die in der folgenden Tabelle beschriebenen Felder.

**Tabelle 2-2: Felder des Dialogfeldes „Edit Custom Amino Acid Residue“**

Feld	Beschreibung	Zulässiger Wert
<b>Name</b>	Name der Aminosäure	Alphanumerisch
<b>Symbol</b>	Symbol für die Aminosäure	<ul style="list-style-type: none"> <li>Alphanumerisch</li> <li>Der erste Buchstabe sollte ein Großbuchstabe sein</li> </ul>
<b>Residue Formula</b>	Formel für die Aminosäure	Empirische Formel, unter Verwendung periodischer Elemente

## Custom Elements

---

6. Klicken Sie auf **OK**.  
Name, Symbol und Masse der ausgewählten benutzerdefinierten Aminosäure werden ggf. in der Tabelle mit den Aminosäuren aktualisiert.

## Löschen einer benutzerdefinierten Aminosäure

---

**Hinweis:** Das Löschen einer benutzerdefinierten Aminosäure, die in einer Verarbeitungsmethode oder einem Ergebnis verwendet wird, kann ein unerwartetes Verhalten zur Folge haben.

---

1. Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.  
Das Dialogfeld „Custom Elements“ wird geöffnet.
2. Stellen Sie sicher, dass die Registerkarte „AA List“ ausgewählt ist.
3. Wählen Sie die zu löschende Aminosäure aus.

**Hinweis:** Es können nur die vom Benutzer hinzugefügten benutzerdefinierten Aminosäuren gelöscht werden. Die mit der Software ausgelieferten Aminosäuren können nicht gelöscht werden.

---

4. Klicken Sie auf **Delete**.  
Die benutzerdefinierte Aminosäure wird aus der Tabelle mit den Aminosäuren entfernt.

## Benutzerdefinierte Aminosäuremodifizierungen

### Erstellen einer benutzerdefinierten Aminosäuremodifizierung

---

**Hinweis:** Benutzerdefinierte Aminosäuremodifizierungen können nur auf Standard-Aminosäuren angewendet werden.

---

1. Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.  
Das Dialogfeld „Custom Elements“ wird geöffnet.
2. Stellen Sie sicher, dass die Registerkarte „AA Modifications“ ausgewählt ist.
3. Klicken Sie auf **New**.  
Das Dialogfeld „New Custom Modification“ wird geöffnet.
4. Füllen Sie die in der folgenden Tabelle beschriebenen Felder aus und klicken Sie dann auf **OK**.

**Tabelle 2-3: Felder des Dialogfeldes „New Custom Modification“**

Feld	Beschreibung	Zulässiger Wert
Name	Name für den Rückstand	Alphanumerisch



Tabelle 2-3: Felder des Dialogfeldes „New Custom Modification“ (Fortsetzung)

Feld	Beschreibung	Zulässiger Wert
<b>Symbol</b>	Symbol für den Rückstand	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Muss beginnen mit _</li> <li>• Alphanumerisch</li> <li>• Der erste Buchstabe sollte ein Großbuchstabe sein</li> </ul>
<b>Formula Gain</b>	Durch den Rückstand gewonnene Formel	Empirische Formel, unter Verwendung periodischer Elemente
<b>Formula Lost</b>	Durch den Rückstand verlorene Formel	Empirische Formel, unter Verwendung periodischer Elemente
<b>Mod Type</b>	Position der Modifizierung	Aminosäure, N-Terminus, C-Terminus, Protein N-Terminus und Protein C-Terminus
<b>Applies to AA</b>	Name der zugehörigen Aminosäure	Die einbuchstabile Darstellung der Standard-Aminosäure, auf die die benutzerdefinierte Modifizierung angewendet wird, z. B. P für Prolin. Lassen Sie dieses Feld leer, um die benutzerdefinierte Modifizierung auf alle Standard-Aminosäuren anzuwenden.

Die benutzerdefinierte Aminosäuremodifizierung wird am Ende der Tabelle mit den Aminosäuremodifizierungen hinzugefügt und zeigt das Symbol, die Masseverschiebung und den Namen an.

## Bearbeiten einer benutzerdefinierten Aminosäuremodifizierung

1. Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.  
Das Dialogfeld „Custom Elements“ wird geöffnet.
2. Stellen Sie sicher, dass die Registerkarte „AA Modifications“ ausgewählt ist.
3. Wählen Sie die Modifizierung aus, die bearbeitet werden soll.

---

**Hinweis:** Es können nur die vom Benutzer hinzugefügten Modifizierungen bearbeitet werden. Die mit der Software ausgelieferten Modifizierungen können nicht bearbeitet werden.

---

4. Klicken Sie auf **Edit**.  
Das Dialogfeld „Edit Custom Modification“ wird geöffnet.
5. Bearbeiten Sie die entsprechenden in der folgenden Tabelle beschriebenen Felder.

Tabelle 2-4: Felder des Dialogfeldes „Edit Custom Modification“

Feld	Beschreibung	Zulässiger Wert
<b>Name</b>	Name für den Rückstand	Alphanumerisch
<b>Symbol</b>	Symbol für den Rückstand	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Muss beginnen mit _</li> <li>• Alphanumerisch</li> <li>• Der erste Buchstabe sollte ein Großbuchstabe sein</li> </ul>
<b>Formula Gain</b>	Durch den Rückstand gewonnene Formel	Empirische Formel, unter Verwendung periodischer Elemente
<b>Formula Lost</b>	Durch den Rückstand verlorene Formel	Empirische Formel, unter Verwendung periodischer Elemente
<b>Mod Type</b>	Position der Modifizierung	Aminosäure, N-Terminus, C-Terminus, Protein N-Terminus und Protein C-Terminus
<b>Applies to AA</b>	Name der zugehörigen Aminosäure	Die einbuchstabige Darstellung der Standard-Aminosäure, auf die die benutzerdefinierte Modifizierung angewendet wird, z. B. P für Prolin. Lassen Sie dieses Feld leer, um die benutzerdefinierte Modifizierung auf alle Standard-Aminosäuren anzuwenden.

6. Klicken Sie auf **OK**.  
Name, Symbol und Masseverschiebung der ausgewählten benutzerdefinierten Modifizierung werden ggf. in der Tabelle mit den Modifizierungen aktualisiert.

## Löschen einer benutzerdefinierten Aminosäuremodifizierung

**Hinweis:** Das Löschen einer benutzerdefinierten Aminosäuremodifizierung, die in einer Verarbeitungsmethode oder einem Ergebnis verwendet wird, kann ein unerwartetes Verhalten zur Folge haben.

1. Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.  
Das Dialogfeld „Custom Elements“ wird geöffnet.
2. Stellen Sie sicher, dass die Registerkarte „AA Modifications“ ausgewählt ist.
3. Wählen Sie die zu löschende Modifizierung aus.

**Hinweis:** Es können nur die vom Benutzer hinzugefügten benutzerdefinierten Modifizierungen gelöscht werden. Die mit der Software ausgelieferten Modifizierungen können nicht gelöscht werden.

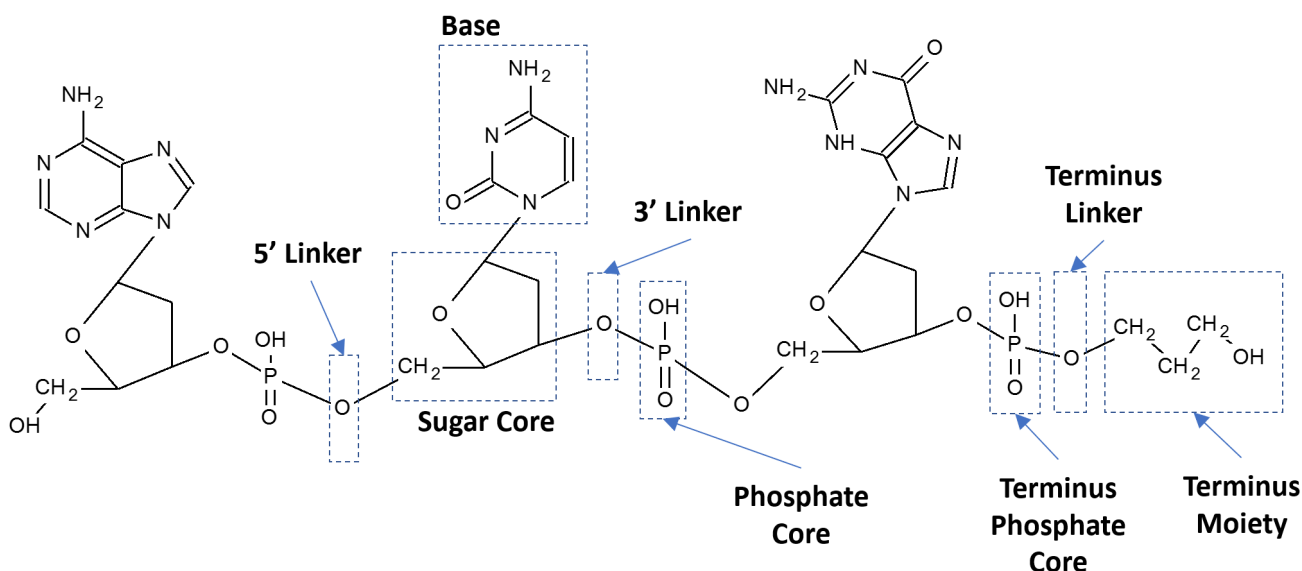
- Klicken Sie auf **Delete**.  
Die benutzerdefinierte Modifizierung wird aus der Tabelle mit den Modifizierungen entfernt.

## Benutzerdefinierte Oligonukleotid-Rückstände oder Terminal-Gruppen

Verwenden Sie benutzerdefinierte Elemente zum Erstellen von Sequenzen, die benutzerdefinierte Funktionsgruppen enthalten, die zur Kernstruktur eines Oligonukleotids hinzugefügt werden können. Diese Modifizierungen können in eine Sequenz eingegeben werden und dann von der Molecule Profiler Software ermittelt und identifiziert werden.

Ein Oligonukleotid kann in mehrere Substrukturen aufgespalten werden.

**Abbildung 2-1: Oligonukleotid-Substrukturen**



Benutzer können die Kern-Substrukturen eines Oligonukleotids ändern oder einen neuen Kern, Terminus und eine neues Phosphat-Backbone definieren. Verwenden Sie beim Erstellen einer benutzerdefinierten modifizierten Sequenz diese generalisierte Struktur:

5'-(Terminus Moiety)-(Terminus Linker)-(Terminus Phosphate Core)-(Residue Type)<sub>1</sub>-...-(Residue Type)<sub>n</sub>-(Terminus Phosphate Core)-(Terminus Linker)-(Terminus Moiety)-3'

Im Dialogfeld „New Oligo Residue or Terminus“ enthält das Feld **Type** mehrere vordefinierte Typen von Rückständen oder Termini. Diese vordefinierten Typen beschränken die Bearbeitung auf bestimmte Substrukturen des Oligonukleotids, um die Erstellung von Modifizierungen zu vereinfachen, die für den Typ selbst spezifisch sind. Informationen

## Custom Elements

---

dazu, wie jeder Typ in die oben beschriebene allgemeine Struktur passt, finden Sie in der folgenden Tabelle.

**Tabelle 2-5: Typen**

Typ	Kategorie	Bearbeitbare Substruktur
DNA	Rückstandstyp	Base
DNA*	Rückstandstyp	Base
RNA	Rückstandstyp	Base
RNA*	Rückstandstyp	Base
2'-O-Methyl RNA	Rückstandstyp	Base
2'-O-Methyl RNA*	Rückstandstyp	Base
Gesperrt (LNA)	Rückstandstyp	Base
Gesperrt (LNA)*	Rückstandstyp	Base
Anderer Rückstand	Rückstandstyp	Base 5'-Linker Zuckerker 3'-Linker Phosphatker
Phospho-Terminus*	Terminus-Teil	Terminus-Teil
Phospho-Terminus	Terminus-Teil	Terminus-Teil
Anderer Terminus	Terminus-Teil Terminus-Linker Terminus-Phosphatker	Terminus-Teil Terminus-Linker Phosphatker

\* Phosphorothioat-Backbone

Die flexibelste Art zum Hinzufügen und Bearbeiten von chemischen Formeln ist „Anderer Rückstand“. Dies kann geändert werden, um mehrere verschiedene benutzerdefinierte Substrukturen aufzunehmen, sodass der Benutzer in hohem Maße angepasste Oligonukleotide definieren kann. „Anderer Terminus“ erlaubt dem Benutzer das Definieren eines benutzerdefinierten 5'- oder 3'-Terminus, Linkers und Kerns.

Ein Beispiel finden Sie im Abschnitt: [Beispiel für einen benutzerdefinierten Oligonukleotiden](#).

## Erstellen eines benutzerdefinierten Oligonukleotid-Rückstands oder einer benutzerdefinierten Terminal-Gruppe

---

**Tipp!** Um einen Oligonukleotid-Rückstand oder eine Terminal-Gruppe durch Kopieren eines/ einer vorhandenen zu erstellen, wählen Sie das vorhandene Element auf der Registerkarte „Oligo List“ aus und klicken Sie dann auf **New From**.

---

1. Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.  
Das Dialogfeld „Custom Elements“ wird geöffnet.
2. Stellen Sie sicher, dass die Registerkarte „Oligo List“ ausgewählt ist.  
Die Liste enthält alle vordefinierten Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen.
3. Klicken Sie auf **New**.  
Das Dialogfeld „New Oligo Residue or Terminus“ wird geöffnet.
4. Füllen Sie die Felder im Dialogfeld aus. Beispiele finden Sie im Abschnitt: [Beispiel für einen benutzerdefinierten Oligonukleotiden](#).
5. Klicken Sie auf **OK**.  
Der benutzerdefinierte Rückstand oder die Terminal-Gruppe werden am Ende der Tabelle hinzugefügt.

## Bearbeiten eines benutzerdefinierten Oligonukleotid-Rückstands oder einer benutzerdefinierten Terminal-Gruppe

1. Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.  
Das Dialogfeld „Custom Elements“ wird geöffnet.
2. Stellen Sie sicher, dass die Registerkarte „Oligo List“ ausgewählt ist.
3. Wählen Sie den zu bearbeitenden Rückstand oder die zu bearbeitende Terminal-Gruppe aus.

---

**Hinweis:** Es können nur die vom Benutzer hinzugefügten Rückstände oder Terminal-Gruppen bearbeitet werden. Die mit der Software ausgelieferten Rückstände und Terminal-Gruppen können nicht bearbeitet werden.

---

4. Klicken Sie auf **Edit**.  
Das Dialogfeld „Edit Custom Amino Acid Residue“ wird geöffnet.
5. Bearbeiten Sie die Eigenschaften des Rückstands oder der Terminal-Gruppe.
6. Klicken Sie auf **OK**.

### Einen benutzerdefinierten Oligonukleotid-Rückstand oder eine benutzerdefinierte Terminal-Gruppe löschen

---

**Hinweis:** Das Löschen eines benutzerdefinierten Oligonukleotid-Rückstands bzw. einer Terminal-Gruppe, der/die in einer Verarbeitungsmethode oder einem Ergebnis verwendet wird, kann ein unerwartetes Verhalten zur Folge haben.

---

1. Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.  
Das Dialogfeld „Custom Elements“ wird geöffnet.
2. Stellen Sie sicher, dass die Registerkarte „Oligo List“ ausgewählt ist.
3. Wählen Sie den zu löschenden Rückstand oder die zu löschende Terminal-Gruppe aus.

**Hinweis:** Es können nur die vom Benutzer hinzugefügten Rückstände oder Terminal-Gruppen gelöscht werden. Die mit der Software ausgelieferten Rückstände und Terminal-Gruppen können nicht gelöscht werden.

---

4. Klicken Sie auf **Delete**.  
Der benutzerdefinierte Rückstand bzw. die Terminal-Gruppe werden aus der Tabelle entfernt.

### Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen importieren

Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen können aus einer Textdatei importiert werden.

1. Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.  
Das Dialogfeld „Custom Elements“ wird geöffnet.
2. Stellen Sie sicher, dass die Registerkarte „Oligo List“ ausgewählt ist.  
Die Liste enthält alle vordefinierten Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen.
3. Klicken Sie auf **Import**.  
Das Dialogfeld „Import Text File“ wird geöffnet.
4. Navigieren Sie zur Textdatei, wählen Sie sie aus und klicken Sie dann auf **Open**.

### Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen exportieren

Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen können in eine Textdatei exportiert werden.

1. Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.  
Das Dialogfeld „Custom Elements“ wird geöffnet.
2. Stellen Sie sicher, dass die Registerkarte „Oligo List“ ausgewählt ist.  
Die Liste enthält alle vordefinierten Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen.

3. Wählen Sie die zu exportierenden Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen aus.

---

**Tipp!** Drücken Sie **Ctrl+A**, um alle Rückstände und Terminal-Gruppen in der Liste auszuwählen.

---

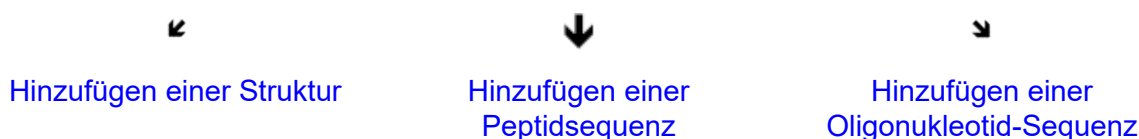
4. Klicken Sie auf **Export**.  
Das Dialogfeld „Save As“ wird geöffnet.
5. Geben Sie den Namen der Textdatei ein, in der die exportierten Oligonukleotid-Rückstände und Terminal-Gruppen gespeichert werden sollen.

Die Verbindungsbibliothek speichert Informationen, einschließlich chemische Formel, Struktur oder Sequenz, Isotopenmuster und MS/MS-Spektren für Verbindungen. Benutzer können zudem das Referenzspektrum für jede Verbindung festlegen. Jeder Eintrag in der Bibliothek kann verwendet werden, um Verarbeitungsparameter zu erstellen.

Die Software wird mit einer Basisbibliothek mit Verbindungen installiert, Benutzer können die Bibliothek jedoch anpassen, indem sie Einträge hinzufügen, bearbeiten und löschen.

**Hinweis:** Jeder Eintrag muss eine chemische Formel und mindestens ein MS/MS-Spektrum enthalten.

## Optionen der Verbindungsbibliothek



## Verwendung von Strukturen und Sequenzen

Chemische Strukturen und Peptid- und Oligonukleotid-Sequenzen werden von der Software verwendet, um verbindungsspezifische Parameterwerte wie z. B. potenzielle Spaltungs-Metaboliten zu generieren.

**Hinweis:** Die Software generiert automatisch eine chemische Formel aus der Struktur oder Sequenz.

Die Software unterstützt sowohl v2000- als auch v3000 mol-Dateien, einschließlich Dateien mit Markush- oder mehreren Strukturen.

## Hinzufügen einer Struktur

Verwenden Sie wiff-Dateien und txt-Dateien, um ein Referenzspektrum zu einzelnen Einträgen in der Verbindungsbibliothek hinzuzufügen.

1. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Compound Library**. Das Dialogfeld „Compound Library“ wird geöffnet.
2. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
  - Erstellen Sie eine neue Verbindung.
    - a. Klicken Sie auf **New** und wählen Sie dann **Structure** aus der Optionsliste aus. Das Dialogfeld „New Entry“ wird geöffnet.
    - b. Geben Sie einen **Name** für die Verbindung ein und klicken Sie dann auf **OK**.



Die Software füllt das Feld **Compound name** im Dialogfeld „Compound Library“ automatisch mit dem angegebenen Namen aus.

- Wählen Sie eine Verbindung aus der im Feld **Compound name** angegebenen Liste aus.

Das Dialogfeld „Compound Library“ wird mit den Informationen entsprechend der ausgewählten Verbindung aktualisiert.

3. Klicken Sie auf **Open Structure**.  
Das Dialogfeld „Open Structure File“ wird geöffnet.
4. Navigieren Sie dann zu einer gültigen mol-Datei und wählen Sie sie aus.
5. Klicken Sie auf **Open**.

Die Software füllt die folgenden Felder im Dialogfeld „Compound Library“ aus:

- Structure
- Chemical formula
- Polarity
- Isotope Pattern

Das Feld **Adduct** wird standardmäßig mit einem einfach geladenen protonierten Addukt [M+H]<sup>+</sup> oder [M-H]<sup>-</sup> ausgefüllt. Die Software aktualisiert zudem das Feld **m/z** mit den entsprechenden Informationen.

6. Wählen Sie die **Polarity** der Erfassung aus.  
Das **Isotope Pattern** und die **m/z**- und **Adduct**-Werte auf der Registerkarte „Compound Details“ werden basierend auf der ausgewählten Polarität aktualisiert.
7. Füllen Sie die folgenden Felder mit den entsprechenden Informationen aus:
  - Compound class
  - CAS number
  - Comments (z. B. können Informationen über Metabolitklassen zu diesem Feld hinzugefügt werden.)
8. Öffnen Sie die Registerkarte „Experimental Data“.
9. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
  - Um ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer wiff-Datei hinzuzufügen, fahren Sie mit dem folgenden Abschnitt fort: [Ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer wiff-Datei hinzufügen](#).
  - Um ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer txt-Datei hinzuzufügen, fahren Sie mit dem folgenden Abschnitt fort: [Ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer txt-Datei hinzufügen](#).

## Hinzufügen einer Peptidsequenz

Verwenden Sie wiff-Dateien und txt-Dateien, um ein Referenzspektrum zu einzelnen Einträgen in der Verbindungsbibliothek hinzuzufügen.

1. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Compound Library**.  
Das Dialogfeld „Compound Library“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **New** und wählen Sie dann **Sequence** aus der Optionsliste aus.  
Das Dialogfeld „New Entry“ wird geöffnet.
3. Geben Sie einen **Name** für die Verbindung ein und klicken Sie dann auf **OK**.  
Die Software füllt das Feld **Compound name** im Dialogfeld „Compound Library“ automatisch mit dem angegebenen Namen aus.
4. Geben Sie die entsprechende Peptidsequenz im Feld **Sequence** ein.

---

**Hinweis:** Die Sequenz kann benutzerdefinierte Elemente enthalten. Siehe Abschnitt: [Custom Elements](#).

---

5. Klicken Sie in das Feld **Chemical formula**.

Die Software füllt die folgenden Felder im Dialogfeld „Compound Library“ aus:

- Chemical formula
- Polarity
- Isotope Pattern

Das Feld **Adduct** wird standardmäßig mit einem doppelt geladenen protonierten Addukt  $[M+2H]^{2+}$  oder  $[M-2H]^{2-}$  ausgefüllt. Die Software aktualisiert zudem das Feld **m/z** mit den entsprechenden Informationen.

6. Wählen Sie die **Polarity** der Erfassung aus.  
Das **Isotope Pattern** und die **m/z**- und **Adduct**-Werte auf der Registerkarte „Compound Details“ werden basierend auf der ausgewählten Polarität aktualisiert.
7. Klicken Sie auf die Registerkarte „Experimental Data“.
8. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
  - Um ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer wiff-Datei hinzuzufügen, fahren Sie mit dem folgenden Abschnitt fort: [Ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer wiff-Datei hinzufügen](#).
  - Um ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer txt-Datei hinzuzufügen, fahren Sie mit dem folgenden Abschnitt fort: [Ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer txt-Datei hinzufügen](#).

## Namenskonventionen für Peptidsequenzen

Tabelle 3-1: Peptidsequenzen

Eigenschaft	Eingabe-Konvention	Beispiel
Mehrere Ketten	/	LIGHTCHAIN / HEAVYCHAIN
Modifizierung an Aminosäure: Seitengruppe	[Symbol]	M[Oxi]
Modifizierung an Aminosäure: C-Terminal	-[Symbol]	Y-[Ami]
Modifizierung an Aminosäure: N-Terminal	[Symbol]-	[1Me]-Y
Verbindungen	<ul style="list-style-type: none"> <li>[*#] an jedem gebundenen Rückstand</li> <li>Die Anzahl an jedem verbundenen Rückstand</li> </ul>	S-S-Brücke: MYC[*1]PEPC[*1]TIDE

Tabelle 3-2: Verbindungen

Art der Verbindung	Konvention	Beispiel
S-S-Brücke	[*#] zu beiden Rückständen in der Brücke hinzufügen	Einfachkette: MYC[*1]PEPC[*1]TIDE  Mehrfachkette: LIGHTC[*1]HAIN / MC[*2]HEAVYC[*1]HAINC[*2] ]AD
Ester-/Amidbrücke	'[O-1]' zu einem der Bindungsrückstände hinzufügen	MYR[*1]PEPD[*1][O-1]TIDE
Zyklisch	'[H]' zum C-Term hinzufügen	M[*1]YCPEPCTIDE[*1]-[H]
Schleifen: Verbundener Rückstand bei erstem oder letztem Index und die Terminal-Gruppen sind nicht Teil der Brückenbindung	Die Terminal-Gruppen explizit hinzufügen	[H]-C[*1]YCPEPCTIDC[*1]- [OH]

## Hinzufügen einer Oligonukleotid-Sequenz

Optional können Oligonukleotid-Verbindungsinformationen zur Verbindungsbibliothek hinzugefügt werden. Verbindungen in der Bibliothek umfassen MS/MS-Spektren, die während der Verarbeitung verwendet werden.

---

**Hinweis:** Befindet sich eine Verbindung nicht in der Bibliothek, dann kann der Benutzer diese manuell zu einer Verarbeitungsmethode hinzufügen.

---

Sequenzen werden im Textformat hinzugefügt. Um die verschiedenen therapeutischen Oligonukleotid-Modifizierungen und benutzerdefinierten Elementen zu erfassen, müssen die Regeln in Bezug auf die Eingabe von Sequenzen beachtet werden. Siehe Abschnitt: [Namenskonventionen für Oligonukleotid-Sequenzen](#). Eine detailliertere Liste der Modifizierungen und benutzerdefinierten Elemente finden Sie im Abschnitt: [Custom Elements](#).

1. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Compound Library**.
2. Klicken Sie auf **New > Oligonucleotide Sequence**. Das Dialogfeld „New Entry“ wird geöffnet.
3. Geben Sie den **Name** der Oligonukleotid-Sequenz ein und klicken Sie dann auf **OK**.
4. Geben Sie die Sequenz in der Tabelle **Sequence** ein.

---

**Hinweis:** Die Sequenz kann benutzerdefinierte Elemente enthalten. Siehe Abschnitt: [Custom Elements](#).

---

5. Klicken Sie auf das Feld **Chemical formula**, um die chemische Formel automatisch zu aktualisieren.
6. (Optional) Geben Sie Informationen in die Felder auf der Registerkarte „Compound Details“ ein.
7. Klicken Sie auf die Registerkarte „Experimental Data“.
8. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
  - Um ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer wiff-Datei hinzuzufügen, fahren Sie mit dem folgenden Abschnitt fort: [Ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer wiff-Datei hinzufügen](#).
  - Um ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer txt-Datei hinzuzufügen, fahren Sie mit dem folgenden Abschnitt fort: [Ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer txt-Datei hinzufügen](#).

## Namenskonventionen für Oligonukleotid-Sequenzen

Oligonukleotid-Sequenzen können mithilfe von charakteristischen einbuchstabigen Kennungen für die Basen festgelegt werden:

- Adenin (A)
- Cytosin (C)

- Thymin (T)
- Guanin (G)
- Uracil (U)

Oligonukleotid-Typen wie z. B. Desoxyribonukleinsäure (DNA, d), Ribonukleinsäure (RNA, r) können mit dem einbuchstabigen Kennungen identifiziert werden, der am Anfang der Sequenz, oder, bei gemischten Oligonukleotid-Typen, zwischen den Basen eingefügt wird.

Verwenden Sie bei Oligonukleotiden mit synthetischen Nukleotiden wie z. B. der verbrückten Nukleinsäure (LNA) das vollständige Symbol für jeden Rückstand, wenn Sie die Sequenz definieren. Beispiel: IA für LNA-A oder moA für 2'-Methoxymethyl-A.

Backbone-Modifizierungen wie z. B. Phosphorothioat (HPSO, \*) werden am Ende der jeweiligen Base hinzugefügt.

Schwere Atome wie z. B. Kohlenstoff-13(/13Cn/) werden nach dem spezifischen Oligonukleotid-Rückstand hinzugefügt, wobei *n* die Anzahl der schweren Atome angibt.

**Hinweis:** Im vorherigen Beispiel werden durch die Bezeichnung „/13Cn/“ schwere Atome zur vorhandenen Formel hinzugefügt. Atome in der Nucleobase werden nicht durch die Bezeichnung „schwer“ ersetzt. Um eine isotoopenmarkierte Nucleobase zu definieren, ist eine benutzerdefinierte Modifizierung erforderlich.

Verwenden Sie einen Schrägstrich (/) als das erste und letzte Zeichen zum Identifizieren einer benutzerdefinierten Modifizierung. Informationen über das Hinzufügen von benutzerdefinierten Modifizierungen und Beispiele für zusätzliche Anwendungsfälle für Modifizierungen und zugehörige Namenskonventionen finden Sie im Abschnitt: [Custom Elements](#).

**Tabelle 3-3: Oligonukleotid-Konventionen**

Eigenschaft	Eingabe-Konvention	Beispiel
DNA	d	dACG T
RNA	r	rACG U
DNA und LNA gemischt	d, l	dACG lT
Phosphorothioat-Backbone	*	dA*C*G* T*
2'Methoxymethyl (2'MOE) Zuckermodifizierung	mo	moAmoCmoG moT
Kohlenstoff-13	/13Cn/	dACG T/13C2/
Benutzerdefinierter Rückstand	//	dACG /Anderer Rückstand/

## Ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer wiff-Datei hinzufügen

1. Klicken Sie auf **Open wiff File**.  
Das Dialogfeld „Select Data“ wird geöffnet.
2. Navigieren Sie zum entsprechenden Speicherort, wählen Sie eine wiff-Datei aus, die ein Spektrum für die Verbindung enthält, die hinzugefügt wird, und klicken Sie dann auf **OK**.

**Hinweis:** Die wiff-Datei muss die Verbindung als ein Vorläufer-Ion enthalten.

**Tabelle 3-4: Ein Referenzspektrum hinzufügen**

Die Datei enthält mehrere Vorläufer	Die Datei enthält einen Vorläufer
<p>Wenn sich mehrere Vorläufer in der ausgewählten wiff-Datei befinden, dann wird das Dialogfeld „Select a Spectrum“ geöffnet und die folgenden Informationen in der Tabelle „Precursors“ für jeden verfügbaren Vorläufer angezeigt:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• m/z</li> <li>• Zeit (Min.)</li> <li>• Qualität</li> <li>• Ladung</li> </ul>	<p>Wenn die wiff-Datei nur einen Vorläufer enthält, dann wird das Fenster „MS/MS Spectrum“ mit dem Spektrum aktualisiert.</p>
<p>Aktivieren Sie das Kontrollkästchen für die anzuwendenden Filter.</p> <p>Wählen Sie eine oder beide Filteroptionen nach Bedarf. Die Tabelle <b>Precursors</b> wird aktualisiert, sodass nur die Zeilen angezeigt werden, die die angegebenen Kriterien erfüllen.</p>	<p>Die Software verwendet <b>m/z</b> und <b>Charge</b> des ausgewählten Vorläufers und die Stoßenergie des Experiments, um eine eindeutige Informationszeile im Feld <b>Spectra</b> im Dialogfeld „Compound Library“ zu erstellen. Beispielsweise werden Prec (m/z), CE (Stoßenergie aus dem Experiment), Charge (Ladung) in dem Feld angezeigt.</p> <p>Der Titel des Spektrums enthält die <b>Polarity</b> und den <b>Compound name</b> aus der Gruppe „Compound Information“, gefolgt von den Informationen aus dem Feld <b>Spectra</b>.</p> <p>Die <b>Spectrum Details</b> enthalten den Gerätetyp, die Retentionszeit, die Ladung und die Stoßenergie, die dem ausgewählten MS/MS-Spektrum entsprechen. Diese Informationen sind schreibgeschützt.</p>

Tabelle 3-4: Ein Referenzspektrum hinzufügen (Fortsetzung)

Die Datei enthält mehrere Vorläufer	Die Datei enthält einen Vorläufer
<p>Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle „Precursors“ aus.</p> <p>Das Fenster „MS/MS Spectrum“ wird mit dem Spektrum für den ausgewählten Vorläufer aktualisiert.</p> <hr/> <p><b>Tipp!</b> Verwenden Sie <b>Ctrl</b>+Klicken, um mehrere Zeilen auszuwählen. Wenn mehrere Zeilen ausgewählt werden, dann wird das <b>MS/MS Spectrum</b> für den ersten ausgewählten Vorläufer angezeigt.</p>	—
<p>Wenn das Kontrollkästchen <b>Charge state from</b> aktiviert ist, dann wählen Sie die <b>from-</b> und <b>to-</b>Werte aus den angegebenen Optionen aus. Der <b>from-</b>Wert entspricht dem minimalen verfügbaren Ladungszustand in der Tabelle „Precursors“. Der <b>to-</b>Wert entspricht dem maximalen verfügbaren Ladungszustand in der Tabelle „Precursors“.</p>	—
<p>Wenn das Kontrollkästchen <b>Quality above</b> aktiviert ist, dann geben Sie den entsprechenden Wert im angegebenen Feld ein.</p>	—
<p>Klicken Sie auf <b>OK</b>.</p>	—

Tabelle 3-4: Ein Referenzspektrum hinzufügen (Fortsetzung)

Die Datei enthält mehrere Vorläufer	Die Datei enthält einen Vorläufer
<p>Für jede in der Tabelle „Precursors“ ausgewählte Zeile verwendet die Software <b>m/z</b> und <b>Charge</b> des ausgewählten Vorläufers und die Stoßenergie des Experiments, um eine eindeutige Informationszeile im Feld <b>Spectra</b> im Dialogfeld „Compound Library“ zu erstellen. Beispielsweise werden Prec (m/z), CE (Stoßenergie aus dem Experiment), Charge (Ladung) in dem Feld angezeigt.</p> <p>Die im Feld <b>Spectra</b> angezeigten Informationen und das im Feld <b>MS/MS Spectrum</b> angezeigte Spektrum entsprechen der ersten in der Tabelle „Precursors“ ausgewählten Zeile.</p> <p>Der Titel des Spektrums enthält die <b>Polarity</b> und den <b>Compound name</b> aus der Gruppe „Compound Information“, gefolgt von den Informationen aus dem Feld <b>Spectra</b>.</p> <p>Die <b>Spectrum Details</b> enthalten den Gerätetyp, die Retentionszeit, die Ladung und die Stoßenergie, die dem ausgewählten MS/MS-Spektrum entsprechen. Diese Informationen sind schreibgeschützt.</p>	—

3. (Optional) Wählen Sie ein anderes **Spectra** aus der angegebenen Liste aus. Das **MS/MS Spectrum** und die **Spectrum Details** werden aktualisiert, um die mit der Auswahl verbundenen Informationen anzuzeigen.
4. Um ein Spektrum als vordefiniertes Spektrum für die Verbindung zu speichern, wählen Sie das passende **Spectra** aus der angegebenen Liste aus und klicken Sie dann auf **Set as Reference**.  
- **Reference** wird zu den Informationen im Feld **Spectra** hinzugefügt. Beispielsweise wird „Prec (xx.xx), CE(xx), Charge(xx) - Reference“ im Feld angezeigt.
5. Klicken Sie auf **Save**.
6. Klicken Sie auf **OK**.  
Die neue Verbindung wird in der Bibliothek gespeichert und das Dialogfeld „Compound Library“ wird geschlossen.



## Ein MS/MS-Referenzspektrum aus einer txt-Datei hinzufügen

1. Klicken Sie auf **Open txt File**.  
Das Dialogfeld „Open txt File“ wird geöffnet.
2. Navigieren Sie zum entsprechenden Speicherort, wählen Sie eine MS/MS txt-Datei aus und klicken Sie dann auf **OK**.  
Das Dialogfeld „Spectrum Details“ wird geöffnet.
3. Geben Sie die entsprechenden Informationen für das ausgewählte Spektrum ein und klicken Sie dann auf **OK**.

Die Software verwendet die Informationen in den Feldern **Precursor mass (m/z)**, **Collision energy** und **Charge**, um die Informationen im Feld **Spectra** im Dialogfeld „Compound Library“ zu generieren. Beispielsweise werden Prec (Vorläufermasse (m/z)), CE (Stoßenergie), Charge (Ladung) in dem Feld angezeigt.

Die im Feld **Spectra** angezeigten Informationen und das im Feld **MS/MS Spectrum** angezeigte Spektrum entsprechen der ausgewählten txt-Datei.

Der Titel des Spektrums enthält die **Polarity** und den **Compound name** aus der Gruppe „Compound Information“, gefolgt von den Informationen aus dem Feld **Spectra**.

Die **Spectrum Details** enthalten den Gerätetyp, die Retentionszeit, die Ladung und die Stoßenergie, die dem ausgewählten MS/MS-Spektrum entsprechen. Diese Informationen sind schreibgeschützt.

4. (Optional) Wählen Sie ein anderes **Spectra** aus der angegebenen Liste aus.  
Das **MS/MS Spectrum** und die **Spectrum Details** werden aktualisiert, um die mit der Auswahl verbundenen Informationen anzuzeigen.
5. Um ein Spektrum als vordefiniertes Spektrum für die Verbindung zu speichern, wählen Sie das passende **Spectra** aus der angegebenen Liste aus und klicken Sie dann auf **Set as Reference**.  
- **Reference** wird zu den Informationen im Feld **Spectra** hinzugefügt. Beispielsweise wird „Prec (xx.xx), CE(xx), Charge(xx) - Reference“ im Feld angezeigt.
6. Klicken Sie auf **Save**.
7. Klicken Sie auf **OK**.  
Die neue Verbindung wird in der Bibliothek gespeichert und das Dialogfeld „Compound Library“ wird geschlossen.

## Informationen aus einer „Results Table“ zur Verbindungsbibliothek hinzufügen

---

**Hinweis:** Diese Funktion ist nur verfügbar für Kleinmolekül- und Peptid-Ergebnisdateien. Diese Funktion ist nicht verfügbar für ADC- und Oligonukleotid-Ergebnisdateien.

---

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.
-

Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.

2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
5. Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ aus, klicken Sie mit der rechten Maustaste und wählen Sie dann **Add to Compound Library** aus.

---

**Hinweis:** Wenn die ausgewählte Zeile kein MS/MS-Spektrum enthält, dann ist die Option **Add to Compound Library** nicht verfügbar.

---

6. Klicken Sie in der angezeigten Bestätigungsmeldung auf **OK**.
7. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Compound Library**.  
Das Dialogfeld „Compound Library“ wird geöffnet. Der hinzugefügte Metabolit wird zur Liste **Compound name** hinzugefügt.

Biotransformationssets sind Listen mit allgemeinen Transformationen.

## Informationen über Biotransformationen

Benutzer können mithilfe von vordefinierten, mit der Software installierten Biotransformationssets nach vorhergesagten Metaboliten suchen oder sie können neue Biotransformationssets erstellen. Beispielsweise können Benutzer ein unterschiedliches Set für jede zu analysierende Verbindung erstellen. Die installierten Biotransformationen enthalten eingebettete Informationen, die während dem automatischen Sequenz- oder Strukturvorschlag verwendet werden.

Methodenspezifische Biotransformationssets werden als Standard für jeden Methodentyp verwendet. Beispielsweise verwendet die Peptid-Methode das Biologika-Biotransformationsset als Standard. Dieses Biotransformationsset enthält die relevantesten Biotransformationen für In-vivo-metabolische Reaktionen für Peptide.

Wählen Sie für Oligonukleotide eines von drei vordefinierten Transformationssets:

- **Oligonucleotide Basic:** Bietet eine präzise Liste der Modifizierungen und beschränkt sich auf jene, die ausschließlich Auswirkungen auf Base oder Backbone haben.
- **Oligonucleotide Comprehensive:** Bietet eine umfangreiche Abdeckung aller Transformationen, die während Synthese, Metabolismus und Speicherung auftreten können.
- **Oligonucleotide Metabolites:** Enthält eine Teilmenge des umfassenden Sets, das sich ausschließlich auf Transformationen konzentriert.

Prüfen Sie den Ursprung der Probe sorgfältig und wählen Sie dann das repräsentativste Set aus. Benutzer können ein eigenes benutzerdefiniertes Biotransformationsset aus Standardeinträgen oder durch Hinzufügen neuer Einträge erstellen. Siehe die Abschnitte: [Erstellen eines Biotransformationssets](#) und [Ein Biotransformationsset bearbeiten](#).

Erstellen Sie benutzerdefinierte Biotransformationen, indem Sie eine Änderung der chemischen Formel identifizieren oder zwei vorhandene Biotransformationen kombinieren.

Benutzerdefinierte Biotransformationen oder Biotransformationen aus vorhandenen Sets können zu jedem neuen Biotransformationsset hinzugefügt werden, das erstellt wird.

---

**Tipp!** Wählen Sie bei der Bewertung von Biologika-Daten sehr wahrscheinliche Biotransformationen, um ein kleines Set für eine schnellere Analyse der Daten zu erstellen.

---

## Erstellen eines Biotransformationssets

1. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Biotransformations**. Das Dialogfeld „Biotransformations“ wird geöffnet.

## Biotransformationssets

---

2. Klicken Sie auf **New**.  
Das Dialogfeld „New Biotransformation Set“ wird geöffnet.
3. Geben Sie im Feld **Working biotransformation set** einen Namen für das Set ein.
4. Klicken Sie auf **New Biotransformation**.  
Das Dialogfeld „New Biotransformation“ wird geöffnet.
5. Geben Sie im Feld **Name** einen Namen für die Biotransformation ein.
6. (Optional) Geben Sie die entsprechenden Details in Bezug auf die Biotransformation in den Feldern **Description** und **Comments** ein.
7. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:

**Tabelle 4-1: Erstellen von Biotransformationssets**

<b>Eine einfache Biotransformation erstellen</b>	<b>Eine kombinierte Biotransformation erstellen</b>
Klicken Sie auf <b>Single biotransformation</b> .	Klicken Sie auf <b>Combined biotransformation</b> .
Identifizieren Sie den verlorenen Teil der Struktur im Feld <b>Formula from</b> .	Wählen Sie eine Biotransformation aus den jeweiligen Feldern <b>Biotransformation 1</b> und <b>Biotransformation 2</b> .
Geben Sie die Formel der Biotransformation im Feld <b>Formula to</b> ein.	—

---

**Hinweis:** Die verfügbaren Biotransformationen sind jene, die im Arbeitsset vorhanden sind.

---

**Hinweis:** Die Software berechnet automatisch die Änderung aufgrund der Biotransformation und füllt das Feld **Mass shift** mit diesem Wert aus.

---

8. Klicken Sie auf **OK**.  
Die neue Biotransformation wird in den Tabellen des Biotransformations-Arbeitssets und des Biotransformations-Quellensets angezeigt.
9. Klicken Sie auf **OK**, um das neue Biotransformationsset zu speichern.  
Das Dialogfeld „New Biotransformation Set“ wird geschlossen.
10. Klicken Sie auf **OK**.  
Das Dialogfeld „Biotransformations“ wird geschlossen.

## Ein Biotransformationsset bearbeiten

1. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Biotransformations**.  
Das Dialogfeld „Biotransformations“ wird geöffnet.
2. Wählen Sie das entsprechende **Set** aus der angegebenen Liste aus.
3. Klicken Sie auf **Edit**.

Das Dialogfeld „Edit Biotransformation Set“ wird geöffnet und zeigt den Namen des ausgewählten Sets im Feld **Working biotransformation set** an.

4. Geben Sie im Feld **Working biotransformation set** einen Namen für das entsprechende Set ein.
5. Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle des Biotransformations-Arbeitssets aus.
6. Klicken Sie auf **Edit Biotransformation**.  
Das Dialogfeld „Edit Biotransformation“ wird geöffnet.
7. (Optional) Nehmen Sie erforderliche Änderungen in den Feldern **Name**, **Description** und **Comments** vor.
8. (Optional) Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:

**Tabelle 4-2: Biotransformationssets bearbeiten**

<b>Eine einfache Biotransformation erstellen</b>	<b>Eine kombinierte Biotransformation erstellen</b>
Klicken Sie auf <b>Single biotransformation</b> .	Klicken Sie auf <b>Combined biotransformation</b> .
Identifizieren Sie den verlorenen Teil der Struktur im Feld <b>Formula from</b> .	Wählen Sie eine Biotransformation aus den jeweiligen Feldern <b>Biotransformation 1</b> und <b>Biotransformation 2</b> .
Geben Sie die Formel der Biotransformation im Feld <b>Formula to</b> ein.	—

**Hinweis:** Die verfügbaren Biotransformationen sind jene, die im Arbeitsset vorhanden sind.

9. Klicken Sie auf **OK**.  
Die aktualisierte Biotransformation wird im Biotransformations-Arbeitsset und im Biotransformations-Quellenset angezeigt.
10. Klicken Sie auf **OK**, um den Benutzer zu speichern.  
Das Dialogfeld „Edit Biotransformation Set“ wird geschlossen.
11. Klicken Sie auf **OK**.  
Das Dialogfeld „Biotransformations“ wird geschlossen.

## Löschen eines Biotransformationssets

1. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Biotransformations**.  
Das Dialogfeld „Biotransformations“ wird geöffnet.
2. Wählen Sie das entsprechende **Set** aus der angegebenen Liste aus.
3. Klicken Sie auf **Delete**.  
Eine Bestätigungsmeldung wird geöffnet.
4. Klicken Sie auf **Yes**.

## Biotransformationssets

---

5. Klicken Sie auf **OK**.  
Das Dialogfeld „Biotransformations“ wird geschlossen.

# Verarbeitungsmethoden erstellen 5

---

Die Software unterstützt vier Arbeitsabläufe: Kleinmolekül, Peptid, Oligonukleotid und ADC.

Es muss eine Methode erstellt werden, die Verarbeitungsparameter enthält, die spezifisch für die untersuchte Probe sind, um potenzielle Metaboliten in einer relevanten Probe zu ermitteln.

[Auswählen des Methodentyps](#)



[Parameterwerte auswählen](#)



[Allgemeine Verarbeitungsparameter](#) festlegen



[Verbindungsspezifische Verarbeitungsparameter](#) festlegen

## Verarbeitungsparameter

Die Verarbeitungsparameter in der Molecule Profiler Software enthalten alle Attribute und Werte für die Verarbeitung von wiff-Dateien. Die Verarbeitungsfunktion wird verwendet, um Metaboliten zu ermitteln und zu charakterisieren. Zudem weist die Verarbeitungsfunktion den Metaboliten Konfidenzwerte zu.

Diese Verarbeitungsparameter-Vorlagen werden verwendet:

- Small molecule
- Peptide
- Oligonucleotides
- ADC

Die Vorlagen stellen die Arten von Verbindungen und Arbeitsabläufen dar, die für die verschiedenen Analysearten berücksichtigt werden.

---

**Hinweis:** Stellen Sie beim Hinzufügen von Verbindungs-Sequenzen sicher, dass die Sequenz-Namen korrekt formatiert sind. Siehe die Abschnitte: [Namenskonventionen für Peptidsequenzen](#) oder [Namenskonventionen für Oligonukleotid-Sequenzen](#).

---

## Auswählen des Methodentyps

1. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Processing Parameters**.

## Verarbeitungsmethoden erstellen

---

Der Arbeitsbereich „Processing Parameters“ wird geöffnet.

2. Klicken Sie auf **New** und wählen Sie dann den Methodentyp aus der angegebenen Liste aus.
3. Fahren Sie fort mit Schritt 2 von [Parameterwerte auswählen](#).

## Parameterwerte auswählen

1. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Processing Parameters**.  
Der Arbeitsbereich „Processing Parameters“ wird geöffnet.
2. Geben Sie die Verbindungsinformationen im Arbeitsbereich „Processing Parameters“ ein.
  - Klicken Sie bei Kleinmolekül- und ADC-Arbeitsabläufen auf **Open Structure** in der Gruppe „Structure“, wählen Sie die Ziel-mol-Datei aus und importieren Sie dann die Struktur.
  - Geben Sie bei Peptid- und Oligonukleotid-Arbeitsabläufen die entsprechende Sequenz in der Gruppe „Sequence“ ein.

---

**Tipp!** Klicken Sie alternativ auf **Select From Library**, um einen Eintrag aus der Verbindungsbibliothek auszuwählen, um die Struktur oder Sequenz auszufüllen. Es sind nur die Einträge, die dem Arbeitsablauf entsprechen, in der Liste verfügbar. Siehe Abschnitt: [Eine Verbindung aus einer Bibliothek auswählen](#).

---

3. Stellen Sie sicher, dass **Polarity**, **Charge state**, und **Adduct** oder **Ion type** für den Datensatz geeignet sind.  
Oligonukleotide werden typischerweise in negativer Polarität oder im negativen Ionen-Modus erfasst. Der empfohlene Ladungsbereich für Oligonukleotide mit Massen von 10.000 Da oder weniger liegt bei -2 bis -20. Eine Verarbeitung von Oligonukleotiden mit Massen größer als 10.000 Da wird nicht empfohlen.
4. Wählen Sie die bei der Suche nach potenziellen Metaboliten zu verwendenden Strategien für die Peak-Ermittlung aus. Siehe Abschnitt: [Informationen über Strategien für die Peak-Ermittlung](#).
5. Konfigurieren Sie die Parameter, die unabhängig von der Verbindung sind, die verarbeitet wird. Siehe Abschnitt: [Allgemeine Verarbeitungsparameter](#).
6. Konfigurieren Sie die Parameter, die abhängig von der Verbindung sind. Siehe Abschnitt: [Verbindungsspezifische Verarbeitungsparameter](#).
7. Klicken Sie auf **Save and Close**.
8. Wählen Sie den Methoden-Speicherort im Feld **Folder** des Dialogfeldes „Save Processing Parameters As“ aus.
9. Geben Sie im Feld **Name** einen Namen für die Methode ein und klicken Sie auf **OK**. Die Methode wird gespeichert und der Arbeitsbereich „Processing Parameters“ wird geschlossen.



## Eine Verbindung aus einer Bibliothek auswählen

1. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Processing Parameters**.  
Der Arbeitsbereich „Processing Parameters“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Select From Library**.  
Das Dialogfeld „Select From Library“ wird geöffnet.
3. Wählen Sie eine Verbindung aus der Liste im Feld **Compound name** aus.

---

**Hinweis:** Bei Kleinmolekül- und ADC-Verarbeitungsparametern werden nur die Einträge in der Liste angezeigt, die als Strukturen in der Verbindungsbibliothek identifiziert wurden. Bei Peptid- und Oligonukleotid-Verarbeitungsparametern werden nur die Einträge in der Liste angezeigt, die als Sequenzen in der Verbindungsbibliothek identifiziert wurden.

---

4. Klicken Sie auf **OK**.  
Der Arbeitsbereich mit den Verarbeitungsparametern wird mit den Informationen der ausgewählten Verbindung aktualisiert.
5. Um das MS/MS-Referenzspektrum zu überprüfen oder zu bearbeiten, klicken Sie auf **Compound-Specific Parameters > Product Ions and Neutral Losses**.

---

**Hinweis:** Das Teilfenster „Reference MS/MS Spectrum“ wird mit dem MS/MS-Spektrum der ausgewählten Verbindung aufgefüllt.

---

6. (Optional) Wenn mehrere Referenzspektren verfügbar sind, dann navigieren Sie durch die Liste und wählen Sie ggf. ein anderes Spektrum aus.

---

**Hinweis:** Wenn ein anderes Referenzspektrum ausgewählt wird, dann wird das Teilfenster „Reference MS/MS Spectrum“ aktualisiert und die Informationen werden aus der Produkt-Ionen- und Neutralverlust-Tabelle gelöscht.

---

7. Um die Fragment-Tabelle zu konfigurieren, klicken Sie auf **Assign Fragments**.
8. Fahren Sie fort mit Schritt 5 im Abschnitt: [Parameterwerte auswählen](#).

## Informationen über Strategien für die Peak-Ermittlung

Strategien für die Peak-Ermittlung beziehen sich auf die Algorithmen, die die Software verwendet, um potenzielle Metaboliten in der relevanten Probe zu finden. Benutzer können spezifische Algorithmen in der Gruppe „Peak Finding Strategy“ zum Verarbeiten der Daten auswählen.

Algorithmus	Beschreibung
TOF MS	

## Verarbeitungsmethoden erstellen

Algorithmus	Beschreibung
<b>Predicted metabolites</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Small molecule:</b> Mit diesem Algorithmus sucht die Software nach Metaboliten, basierend auf dem ausgewählten Biotransformationsset, den vorhergesagten Spaltungs-Metaboliten und einer Kombination aus beidem.</li> <li>• <b>Peptides:</b> Mit diesem Algorithmus sucht die Software nach Metaboliten, basierend auf dem Biotransformationsset, den vorhergesagten Kataboliten und einer Kombination aus beidem.</li> <li>• <b>Oligonucleotides:</b> Mit diesem Algorithmus sucht die Software nach Metaboliten, basierend auf dem Biotransformationsset, den vorhergesagten Kataboliten (einschließlich hydrolytische Spaltung, Terminus n+1 und interne n-1 Produkte) und einer Kombination aus beidem.</li> <li>• <b>ADC:</b> Mit diesem Algorithmus sucht die Software nach Metaboliten, basierend auf Biotransformationen, Spaltungen, Antikörperfragmenten und einer Kombination der drei.</li> </ul> <p>Siehe Abschnitt: <a href="#">Allgemeine Verarbeitungsparameter</a>. Bei jeder Methode werden die auf der Registerkarte „MS Parameters“ ausgewählten <b>Available Adducts</b> bei Verwendung der Kombinationen ebenfalls einbezogen.</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Die Option <b>Predicted metabolites</b> wird für die Verarbeitung von Oligonukleotid-Daten empfohlen.</p>
<b>Generic peak finding</b>	<p>Mit diesem Algorithmus sucht die Software nach unerwarteten Metaboliten. Die Suche kann weiter verfeinert werden, indem <b>Apply mass defect filter</b> oder <b>Apply charge state filter</b> ausgewählt wird.</p> <p>Die Parameter, die diesen Algorithmus steuern, finden sich auf den Registerkarten <b>Chromatographic Data</b> und <b>MS Parameters</b>. Siehe Abschnitt: <a href="#">Allgemeine Verarbeitungsparameter</a>.</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Diese Option wird zusammen mit der Option <b>Predicted metabolites</b> für die Verarbeitung von Oligonukleotid-Daten empfohlen.</p>
<b>Apply mass defect filter</b>	<p>Dieser Filter begrenzt die Suche auf Peaks, die die im Bereich <b>Mass Defect</b> ausgewählten und in den „Compound-Specific Parameters“ festgelegten Filter aufweisen. Wenn dieser Filter ausgewählt wird, dann werden ausschließlich die mithilfe der allgemeinen Peak-Ermittlung gefundenen Metaboliten, die die festgelegten Kriterien erfüllen, in die Ergebnisse einbezogen.</p>

Algorithmus	Beschreibung
<b>Apply charge state filter</b>	<p>Dieser Filter beschränkt die Suche auf Peaks mit einer Ladung, die sich innerhalb der Registerkarte „Charge state“ in der Gruppe „Compound Information“ befindet. Wenn dieser Filter ausgewählt wird, dann werden ausschließlich die mithilfe der allgemeinen Peak-Ermittlung gefundenen Metaboliten, die die festgelegten Kriterien erfüllen, in die Ergebnisse einbezogen.</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Diese Option wird für die Verarbeitung von Oligonukleotid-Daten nicht empfohlen.</p>
<b>Mass defect</b>	<p>Dieser Algorithmus ist nur anwendbar auf Kleinmolekül-Methoden.</p> <p>Dieser Algorithmus verwendet Massenanteile zum Filtern der Daten. Die Verbindung, ausgewählte Biotransformationen und potenzielle Spaltungs-Metaboliten tragen zu den verfügbaren Filtern bei, mit denen Benutzer nach spezifischen Metaboliten innerhalb eines Massenbereichs suchen können.</p> <p>Die Parameter, die diesen Algorithmus steuern, finden sich auf der Registerkarte „Mass Defect“. Siehe Abschnitt: <a href="#">Verbindungsspezifische Verarbeitungsparameter</a>.</p>
<b>Isotope pattern</b>	<p>Dieser Algorithmus sucht nach Metaboliten, die ein ähnliches Isotopenmuster wie die Ausgangsverbindung aufweisen.</p> <hr/> <p><b>Tipp!</b> Ist die Verbindung radioaktiv markiert, dann können Benutzer die isotopische Anreicherung im Dialogfeld „Processing Parameters“ durch Auswahl von <b>Compound-Specific Parameters &gt; Isotope Pattern</b> definieren.</p> <hr/> <p>Die Parameter, die diesen Algorithmus steuern, finden sich auf der Registerkarte „Isotope Pattern“. Siehe Abschnitt: <a href="#">Verbindungsspezifische Verarbeitungsparameter</a>.</p>
<p><b>TOF MSMS</b></p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Dieser Algorithmus funktioniert nur, wenn die Verarbeitungsparameter-Methode ein MS/MS-Referenzspektrum enthält. Das MS/MS-Referenzspektrum kann aus dem Eintrag in der Verbindungsbibliothek stammen oder auf der Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“ manuell hinzugefügt werden. Siehe Abschnitt: <a href="#">Verbindungsspezifische Verarbeitungsparameter</a>.</p>	

## Verarbeitungsmethoden erstellen

---

Algorithmus	Beschreibung
<b>Find characteristic product ions</b>	<p>Die Software verwendet diesen Algorithmus zum Durchsuchen der IDA-Daten und der SWATH-Erfassungsdaten nach Metaboliten, die die für die Ausgangsverbindung charakteristischen Produkt-Ionen aufweisen.</p> <p>Mit diesem Algorithmus können Benutzer nach allen oder nach einer begrenzten Anzahl von identifizierten Ionen suchen.</p> <p>Die Parameter, die diesen Algorithmus steuern, finden sich auf der Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“. Siehe Abschnitt: <a href="#">Verbindungsspezifische Verarbeitungsparameter</a>.</p>
<b>All specified ions</b>	<p>Ist diese Option ausgewählt, wird nach allen identifizierten Ionen gesucht. Werden beispielsweise vier Produkt-Ionen identifiziert und dann eine Suche durchgeführt nach Peaks, die alle diese Ionen aufweisen, dann werden ausschließlich exakte Übereinstimmungen als potenzielle Metaboliten identifiziert.</p>
<b>At least __ ions</b>	<p>Wenn diese Option ausgewählt ist, dann wird nur nach den auf der Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“ ausgewählten Ionen gesucht. Wird beispielsweise nach Peaks mit mindestens zwei Ionen gesucht, dann müssen mindestens zwei der ausgewählten Ionen im MS/MS-Spektrum des Metaboliten vorhanden sein, bevor ein Peak als Metabolit betrachtet werden kann.</p>
<b>Find characteristic neutral losses</b>	<p>Die Software verwendet diesen Algorithmus zum Durchsuchen der IDA-Daten und der SWATH-Erfassungsdaten nach Metaboliten, die die für die Ausgangsverbindung charakteristischen Neutralverluste aufweist. Der Algorithmus ist nicht anwendbar auf Peptid- und Oligonukleotid-Arbeitsabläufe.</p> <p>Mit diesem Algorithmus können Benutzer nach allen oder nach einer begrenzten Anzahl von Verlusten suchen. Werden beispielsweise vier Neutralverluste identifiziert und dann eine Suche durchgeführt nach Peaks, die alle diese Verluste aufweisen, dann werden ausschließlich exakte Übereinstimmungen als potenzielle Metaboliten identifiziert. Wird nach Peaks mit mindestens zwei Verlusten gesucht, dann müssen mindestens zwei der ausgewählten Verluste im MS/MS-Spektrum des Metaboliten vorhanden sein, bevor ein Peak als Metabolit betrachtet werden kann.</p> <p>Die Parameter, die diesen Algorithmus steuern, finden sich auf der Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“. Siehe Abschnitt: <a href="#">Verbindungsspezifische Verarbeitungsparameter</a>.</p>

Algorithmus	Beschreibung
<b>All specified losses</b>	Wenn diese Option ausgewählt ist, dann wird nach allen Metaboliten gesucht und alle Neutralverluste werden im Bericht aufgenommen.
<b>At least __ losses</b>	Wenn diese Option ausgewählt ist, dann wird nur nach den auf der Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“ ausgewählten Verlusten gesucht. Werden beispielsweise vier Neutralverluste identifiziert und eine Suche durchgeführt nach Peaks, die alle diese Verluste aufweisen, dann werden ausschließlich exakte Übereinstimmungen als potenzielle Metaboliten identifiziert. Wird nach Peaks mit mindestens zwei Verlusten gesucht, dann müssen mindestens zwei der ausgewählten Verluste im MS/MS-Spektrum des Metaboliten vorhanden sein, bevor ein Peak als Metabolit betrachtet werden kann.
<b>Consider internal neutral losses</b>	Dieser Algorithmus ist spezifisch für SWATH-Erfassungsdaten.  Diese Strategie funktioniert nur, wenn mindestens zwei Neutralverluste ausgewählt werden. Der interne Neutralverlust ist das Delta zwischen den beiden Neutralverlust-Formeln. Beachten Sie, dass eine Neutralverlust-Formel eine Teilmenge der anderen Neutralverlust-Formel sein muss, damit „Find by Internal Neutral Loss“ wirksam werden kann.
<b>Isotope pattern (SWATH Only)</b>	Dieser Algorithmus ist spezifisch für SWATH-Erfassungsdaten.  Vorläufer mit einem Fragment-Isotopenmuster, das mit dem in der Tabelle auf der Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“ unter „Compound-Specific Parameters“ ausgewählten Fragment-Isotopenmuster übereinstimmt, werden als Metaboliten gekennzeichnet. Der Benutzer muss eines oder mehrere der Kontrollkästchen für Fragment-Isotopenformel in der Spalte <b>Isotope Pattern</b> aktivieren. Das experimentelle Fragment-Isotopenmuster muss mit dem theoretischen Fragment-Isotopenmuster innerhalb der MS/MS <i>m/z</i> -Toleranz und Intensitätstoleranz auf der Registerkarte „MS/MS Parameters“ übereinstimmen, damit der Peak als Metabolit betrachtet werden kann.

## Allgemeine Verarbeitungsparameter

Allgemeine Parameter sind Einstellungen, die unabhängig sind von der Verbindung, die verarbeitet wird. Jede der folgenden Registerkarten verwaltet allgemeine Parameter:

### Generic Parameters



## Verarbeitungsmethoden erstellen

---

<b>Small Molecules</b>	<b>Peptides</b>	<b>Oligonucleotides</b>	<b>ADC</b>
Registerkarte „Biotransformations“	Registerkarte „Biotransformations“	Registerkarte „Biotransformations“	Registerkarte „Biotransformations“
Registerkarte „Chromatographic Data“	Registerkarte „Chromatographic Data“	Registerkarte „Chromatographic Data“	Registerkarte „Chromatographic Data“
Registerkarte „MS Parameters“	Registerkarte „MS Parameters“	Registerkarte „MS Parameters“	Registerkarte „MS Parameters“
Registerkarte „MS/MS Parameters“	Registerkarte „MS/MS Parameters“	Registerkarte „MS/MS Parameters“	Registerkarte „MS/MS Parameters“
Registerkarte „Formula Prediction“ (Kleinmolekül- und ADC-Methoden)	Registerkarte „Confirmation Scoring“	Registerkarte „Confirmation Scoring“	Registerkarte „Formula Prediction“ (Kleinmolekül- und ADC-Methoden)
Registerkarte „Confirmation Scoring“			Registerkarte „Confirmation Scoring“

### Registerkarte „Biotransformations“

Identifiziert das Biotransformationsset, das die erwarteten Biotransformationen enthält. Die Software enthält vordefinierte Biotransformationssets. Zum Erstellen eines benutzerdefinierten Biotransformationssets, siehe Abschnitt: [Erstellen eines Biotransformationssets](#).

Parameter	Beschreibung
<b>Select Set</b>	<p>Wählt ein anderes Biotransformationsset aus der Datenbank aus, das für die Verarbeitung verwendet werden soll.</p> <p>Wenn diese Option ausgewählt ist, dann zeigt die Software möglicherweise die folgende Warnung an: <code>The selected biotransformation set might no longer exist in the biostransformations database.</code> Dies geschieht, weil das ausgewählte Biotransformationsset in der Verarbeitungsparameter-Datei gespeichert wurde. Nachfolgende Änderungen am Biotransformationsset im Arbeitsbereich „Biotransformations“ werden nicht in der Verarbeitungsparameter-Datei gespeichert.</p> <p>Klicken Sie für die erneute Bearbeitung unter Verwendung des gespeicherten Biotransformationssets auf <b>OK</b> und klicken Sie dann auf <b>Cancel</b> im Dialogfeld „Biotransformations“. Um die Verarbeitungsparameter-Datei mit einem neuen Biotransformationsset zu aktualisieren, gehen Sie wie folgt vor:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Klicken Sie auf <b>OK</b>.</li> <li>2. Wählen Sie ein Biotransformationsset aus.  Eine Meldung wird angezeigt: <code>If you select this new biotransformation set, you might not be able to re-select the existing set. Do you want to continue?</code></li> <li>3. Klicken Sie auf <b>OK</b>.</li> </ol>

### Registerkarte „Chromatographic Data“

Parameter	Beschreibung
<b>Chromatographic Peak</b>	

## Verarbeitungsmethoden erstellen

Parameter	Beschreibung
<b>Retention time window</b>	<p>Legt den Bereich der Retentionszeiten fest, innerhalb dessen nach potentiellen Metaboliten gesucht werden soll. Die Größe des RT-Fensters (Retentionszeitfenster) ist direkt proportional zur Verarbeitungszeit.</p> <p>Geben Sie einen Wert größer als 0,00 Min. an, um das Leervolumen aus der Spalte auszuschließen.</p> <p>Der <b>to</b>-Wert muss größer sein als der <b>from</b>-Wert.</p> <p>Es wird empfohlen, ein RT-Fenster für alle Arbeitsabläufe festzulegen, da ein weiterer RT-Bereich die Verarbeitungszeiten stark erhöhen kann. Bereiche sind stark abhängig vom analysierten Experiment. Überprüfen Sie das RT-Fenster für jedes Experiment. Es wird empfohlen, eine Startzeit etwas größer als 0,00 Min. und eine Endzeit kurz nach dem relevanten Peak festzulegen, oder, wenn die Methode in die Phase der hohen Elution oder in die Waschphase des Gradienten übergeht.</p>
<b>MS data</b>	<p>Gibt die Methode zum Festlegen der XIC-Breite an.</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>XIC width</b>: Gibt die Breite des extrahierten Ionenchromatogramms zur Berücksichtigung bei der Verarbeitung an.</li><li>• <b>Automatic</b>: Die Software berechnet die optimale Breite basierend auf den ausgewählten Daten.</li></ul> <p>Die Einstellung <b>Automatic</b> wird für Oligonukleotid-Arbeitsabläufe empfohlen.</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Wird diese Option ausgewählt, wenn SWATH-Erfassungsdaten verarbeitet werden, dann wird die Option <b>XIC width</b> angewendet.</p> <hr/>
<b>LC peak separation</b>	<p>Bestimmt, wie eng eluierende Peaks integriert werden. Dieser Parameter behandelt auch chromatographische Peaks mit signifikantem Tailing.</p> <p>Legen Sie diesen Parameter niedriger fest, wenn eng eluierende Peaks vorhanden sind. Durch die niedrigere Einstellung können Peaks separat betrachtet werden und nicht als ein Peak.</p>
<b>TOF MS</b>	
<b>Minimum peak width</b>	<p>Schließt chromatographische Peaks mit einer Breite unterhalb dieses Wertes aus.</p> <p>Stellen Sie den Wert niedriger ein, um schmale Peaks einzuschließen.</p>



Parameter	Beschreibung
<b>Minimum peak intensity</b>	<p>Chromatographische Peaks unterhalb einer bestimmten TOF MS-Intensitätsebene werden nicht berücksichtigt.</p> <p>Verwenden Sie diesen Parameter bei verrauschten chromatographischen Daten. Indem ein Schwellenwert direkt oberhalb des Rauschpegels festgelegt wird, können Peaks, die wahrscheinlich das Ergebnis des Rauschens sind, verworfen werden.</p> <p>Überprüfen Sie Peak-Breiten vor der Verarbeitung von Daten in der Molecule Profiler Software oder in einer Viewer-Software wie z. B. im Arbeitsbereich „Explorer“ in SCIEX OS. Verwenden Sie einen allgemeinen Durchschnitt aller überprüfter Peaks, um die minimale Peak-Breite zu berechnen.</p> <p>Bei Oligonukleotid-Methoden mit TOF MS- oder IDA-Experimenten wird eine Einstellung von 50 cps empfohlen.</p>
<b>Use smoothing</b>	<p>Unterscheidet Peaks hinsichtlich des Rauschens, indem die Variation bei der Intensität des Rauschens beseitigt wird.</p> <p>Wählen Sie diesen Parameter bei verrauschten chromatographischen Daten.</p> <p>Diese Option wird für Oligonukleotid-Arbeitsabläufe empfohlen.</p>
<b>Sample-control offset</b>	<p>Stimmt die MS-Probe und das Kontroll-Chromatogramm ab. Während der Verarbeitung verschiebt die Software alle Kontrollen, bevor diese mit der Probe verglichen werden.</p>
<b>Sample/control ratio</b>	<p>Gibt an, um wie viel größer ein Proben-Peak im Vergleich zur Kontrolle sein muss, um dann als Metabolit berücksichtigt zu werden.</p>
<b>TOF MS/MS</b>	
<b>Minimum peak intensity</b>	<p>Dieser Parameter wird nur verwendet, wenn SWATH-Erfassungsdaten mit den Algorithmen für die MS/MS-Peak-Ermittlung verarbeitet werden. Dieser Parameter wird bei der Verarbeitung von IDA-Daten nicht verwendet.</p> <p>Chromatographische Peaks unterhalb einer bestimmten TOF MS/MS-Intensitätsebene werden nicht berücksichtigt.</p> <p>Verwenden Sie diesen Parameter bei verrauschten chromatographischen Daten. Indem ein Schwellenwert direkt oberhalb des Rauschpegels festgelegt wird, können Peaks, die wahrscheinlich das Ergebnis des Rauschens sind, verworfen werden.</p>
<b>Analog data</b>	
<b>Wavelength (UV only)</b>	<p>Wählt die Wellenlänge aus, die bei der Bestätigung potenzieller Metaboliten verwendet wird.</p>

## Verarbeitungsmethoden erstellen

---

Parameter	Beschreibung
<b>Time offset from MS</b>	<p>Stimmt die MS- und analogen chromatographischen Daten ab. Während der Verarbeitung verschiebt die Software die Analogdaten, bevor diese mit den MS-Daten verglichen werden.</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Die MS- und analogen chromatographischen Daten können im Arbeitsbereich „Analog Interpretation“ abgeglichen und nachbearbeitet werden. Siehe Abschnitt: <a href="#">R.T.-Versatz ändern</a>.</p> <hr/>
<b>LC peak separation</b>	<p>Bestimmt, wie eng eluierende Peaks integriert werden. Dieser Parameter behandelt auch chromatographische Peaks mit signifikantem Tailing.</p> <p>Legen Sie diesen Parameter niedriger fest, wenn eng eluierende Peaks vorhanden sind. Durch die niedrigere Einstellung können Peaks separat betrachtet werden und nicht als ein Peak.</p>
<b>Minimum peak width</b>	<p>Schließt chromatographische Peaks mit einer Breite unterhalb dieses Wertes aus.</p> <p>Stellen Sie den Wert niedriger ein, um schmale Peaks einzuschließen.</p>
<b>Minimum peak intensity</b>	<p>Chromatographische Peaks unterhalb einer bestimmten Intensitätsebene werden nicht berücksichtigt.</p> <p>Verwenden Sie diesen Parameter bei verrauschten chromatographischen Daten. Indem ein Schwellenwert direkt oberhalb des Rauschpegels festgelegt wird, können Peaks, die wahrscheinlich das Ergebnis des Rauschens sind, verworfen werden.</p>
<b>Use smoothing</b>	<p>Unterscheidet Peaks hinsichtlich des Rauschens, indem die Variation bei der Intensität des Rauschens beseitigt wird.</p> <p>Wählen Sie diesen Parameter bei verrauschten chromatographischen Daten.</p>
<b>Sample-control offset</b>	<p>Stimmt die MS-Probe und das Kontroll-Chromatogramm ab. Während der Verarbeitung verschiebt die Software alle Kontrollen, bevor diese mit der Probe verglichen werden.</p>

## Registerkarte „MS Parameters“

Parameter	Beschreibung
m/z Tolerance	

Parameter	Beschreibung
<b>MS m/z tolerance</b>	<p>Legt einen Bereich für die Bestimmung von Peaks im MS-Spektrum fest. Alle Massen innerhalb dieses Bereichs werden als ein eindeutiger Peak betrachtet. Damit ein Peak mit einer zugewiesenen experimentellen Formel als potenzieller Metabolit betrachtet wird, muss die Massengenauigkeit des Peaks innerhalb der angegebenen Toleranz liegen.</p> <p>Dieser Parameter hängt stark vom Kalibrierzustand des Geräts ab. Bei Geräten, die innerhalb <math>\pm 3</math> ppm kalibriert wurden, wird ein Wert von 10 ppm für Oligonukleotid-Methoden empfohlen, die TOF MS- oder IDA-Experimente enthalten.</p>
<b>Minimum MS peak intensity</b>	<p>Gibt den minimalen spektralen Schwellenwert für die MS Peak-Intensität an. Schließt MS Peaks mit einer Intensität unter dem angegebenen spektralen Schwellenwert aus.</p> <p>Legen Sie den Wert basierend auf dem Rauschpegel in den Spektren fest.</p>
<b>Isotope Pattern Tolerances</b>	
<b>MS m/z tolerance</b>	<p>Gibt die Toleranz an, die auf das Isotopenmuster der Metaboliten angewendet wird. Nur Peaks mit <math>m/z</math>-Versatzwerten des Isotops innerhalb dieser Toleranz werden als Übereinstimmung betrachtet.</p> <p>Bei Oligonukleotid-Methoden mit TOF MS- oder IDA-Experimenten wird ein Wert von 10 mDa empfohlen.</p>
<b>Intensity tolerance</b>	<p>Gibt die relative Toleranz für die isotopischen Intensitäten wie auf der Registerkarte „Isotope Pattern“ in den „Compound-Specific Parameters“ angegeben an. Um als Übereinstimmung betrachtet zu werden, muss das Intensitätsverhältnis von zwei Peaks gleich dem erwarteten Verhältnis innerhalb dieser Toleranz sein.</p> <p>Bei Oligonukleotid-Methoden mit TOF MS-Experimenten wird ein Wert von 20 % empfohlen.</p>
<b>Minimum Score</b>	<p>(Oligonukleotid-Methoden) Gibt die minimale Übereinstimmungstoleranz (in Prozent) für die beobachteten Isotopenmuster für einen Metaboliten im Vergleich zum erwarteten Isotopenmuster an. Es wird empfohlen, mit einem Wert von 0 % zu starten und den Wert dann entsprechend zu erhöhen, um bestätigte falsch positive Identifizierungen zu entfernen.</p>
<b>Limits</b>	

## Verarbeitungsmethoden erstellen

Parameter	Beschreibung
<b>Maximum number of unexpected metabolites</b>	<p>Wählen Sie eine maximale Anzahl von unerwarteten Peaks aus, die als potenzielle Metaboliten identifiziert werden können.</p> <p>Diese Einstellung beeinflusst die maximale Anzahl von Peaks, die durch die allgemeine Peak-Ermittlung identifiziert werden können. Die allgemeine Peak-Ermittlung interagiert mit der Peak-Ermittlung für vorhergesagte Metaboliten. Wenn beispielsweise ein kleineres Biotransformationsset für eine komplexe Probe ausgewählt wird, dann wird die maximale Anzahl von unerwarteten Metaboliten hoch sein und somit muss diese Einstellung erhöht werden. Für die Verarbeitung von Oligonukleotid-Proben mit Verunreinigungen wird für gewöhnlich eine Einstellung von 100 empfohlen. Bei komplexeren Proben sollte diese Zahl erhöht werden.</p>
<b>Mass range window (m/z)</b>	Schränkt den Massenbereich ein, innerhalb dessen nach potenziellen Metaboliten gesucht werden soll.
<b>Generic LC/MS Peak Finding</b>	
<b>Perform background subtraction</b>	<p>Gibt an, ob die Hintergrundsubtraktion ausgeführt werden soll. Wählen Sie diese Option, um die Hintergrund-Ionen zu entfernen, wenn der Hintergrundpegel im LC/MS-Chromatogramm hoch ist.</p> <p>Bei Oligonukleotid-Methoden mit TOF MS- und TOF MS/MS-Experimenten wird diese Option nicht empfohlen.</p>
<b>Available Adducts (Kleinmolekül-Methoden)</b>	
Eine Liste aller unterstützten Addukte, basierend auf dem in der Gruppe „Compound Information“ definierten Ladungsbereich.	
<b>Use</b>	Gibt an, ob die Addukte in die Suche einbezogen werden sollen.
<b>__ adduct(s) selected</b>	(Schreibgeschützt) Gibt die Anzahl der Addukte an, die in der Spalte <b>Use</b> der Tabelle „Available Adducts“ ausgewählt wurden.
<b>Advanced Ion Types (ADC-, Peptid- und Oligonukleotid-Methoden)</b>	
<b>Use</b>	Gibt an, ob die Ionen in die Suche einbezogen werden sollen.
<b>__ adduct(s) selected</b>	(Schreibgeschützt) Gibt die Anzahl der Ionen an, die in der Spalte <b>Use</b> der Tabelle „Advanced Ion Types“ ausgewählt wurden.

## Registerkarte „MS/MS Parameters“

Parameter	Beschreibung
<b>MS/MS Finding</b>	

Parameter	Beschreibung
<b>MS/MS m/z tolerance</b>	<p>Legt einen Bereich für die Bestimmung von Peaks im MS/MS-Spektrum fest. Die MS/MS <i>m/z</i>-Toleranz ist die Toleranz, innerhalb derer gefundene Fragment-Peaks im MS/MS-Spektrum mit den auf der Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“ in den „Compound-Specific Parameters“ ausgewählten Fragment- oder Neutralverlust-Werten übereinstimmen müssen, sodass das entsprechende Vorläufer-Peak als potenzieller Metabolit betrachtet werden kann.</p> <p>Bei Oligonukleotid-Methoden mit TOF MS/MS- oder IDA-Experimenten wird ein Wert von 10 mDa empfohlen.</p>
<b>Minimum MS/MS peak intensity</b>	<p>Schließt MS/MS-Peaks mit einer Intensität unter dem angegebenen spektralen Schwellenwert aus.</p> <p>Legen Sie den Wert basierend auf dem Rauschpegel in den Spektren fest.</p>
<b>MS/MS Isotope Finding</b>	
<b>MS/MS m/z tolerance</b>	<p>Legt einen Bereich für die Bestimmung von Peaks im MS/MS-Spektrum fest. Damit Peaks im MS/MS-Spektrum als Übereinstimmung betrachtet werden, muss der Massenunterschied zwischen zwei isotopischen Peaks dem erwarteten Unterschied innerhalb dieser Toleranz entsprechen.</p> <p>Die MS/MS <i>m/z</i>-Toleranz wird bei der Verarbeitung von SWATH-Erfassungsdaten mit der ausgewählten Strategie für die Peak-Ermittlung für das Isotopenmuster (nur SWATH) verwendet.</p> <p>Bei Oligonukleotid-Methoden mit TOF MS/MS- oder IDA-Experimenten wird ein Wert von 10 mDa empfohlen.</p>
<b>Intensity tolerance</b>	<p>Gibt die relative Toleranz um diese isotopischen Intensitäten der ausgewählten Fragment-Formeln entsprechend der ausgewählten Zelle <b>IP</b> auf der Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“ in den Compound-Specific Parameters an. Um als Übereinstimmung betrachtet zu werden, muss das Intensitätsverhältnis von zwei Peaks gleich dem erwarteten Verhältnis innerhalb dieser Toleranz sein. Dieser Parameter definiert zudem das kleinste Isotop, das als Teil des Musters betrachtet wird. Liegt die Intensitätstoleranz beispielsweise bei 10 %, dann muss das kleinste Isotop, das zum Massenmuster beitragen kann, bei mindestens 10 % des als 100 % definierten Peaks liegen.</p> <p>Die <b>Intensity tolerance</b> wird bei der Verarbeitung von SWATH-Erfassungsdaten mit der ausgewählten Strategie für die Peak-Ermittlung für das Isotopenmuster (nur SWATH) verwendet.</p> <p>Bei Oligonukleotid-Methoden mit TOF MS/MS- oder IDA-Experimenten wird ein Wert von 20 % empfohlen.</p>

## Verarbeitungsmethoden erstellen

Parameter	Beschreibung
<b>Source of Reference MS/MS Spectrum</b>	
<b>Control</b>	Wählen Sie ein Referenzspektrum für die relevante Verbindung aus. Das Spektrum kann aus verschiedenen Speicherorten ausgewählt werden.  Das ausgewählte Referenzspektrum wird standardmäßig ausgewählt.  Wir empfehlen die Auswahl der Option <b>Selected reference spectrum</b> , wenn die Funktion für die automatische Struktur- oder Sequenz-Generierung verwendet wird.
<b>Sample</b>	
<b>Selected reference spectrum</b>	
<b>MS/MS Spectrum</b>	
<b>Use advanced MS/MS filter</b>	Dieser Filter wird ausschließlich für SWATH-Erfassungsdaten verwendet. Die von diesem Filter verwendeten Algorithmen umfassen PCVG, der für die Zuweisung von Fragmenten aus einem MS/MS-Spektrum zu einem bestimmten Vorläufer für SWATH-Erfassungsdaten verwendet wird. Nur die Fragmente, die ohne Weiteres dem Vorläufer zugewiesen werden können, werden im MS/MS-Spektrum angezeigt, abhängig von der Position des Schiebereglers ( <b>Comprehensive</b> oder <b>Confident</b> ).
<b>Similarity and Fragment Interpretation</b>	
<b>MS/MS m/z tolerance</b>	Wählen Sie eine Massengenauigkeitstoleranz, um das MS/MS-Referenzspektrum mit dem MS/MS-Spektrum des Metaboliten zu vergleichen. Dieser Parameter wird ebenfalls verwendet, wenn Fragmente in der Tabelle „Interpretation“ zugewiesen werden. Die Massengenauigkeit des zugewiesenen Fragments muss innerhalb der angegebenen <i>m/z</i> -Toleranz liegen.  Bei Oligonukleotid-Methoden mit TOF MS/MS- oder IDA-Experimenten wird ein Wert von 10 ppm empfohlen.
<b>Minimum signal-to-noise ratio</b>	Wählen Sie ein minimales Signal-zu-Rausch-Verhältnis, um das MS/MS-Referenzspektrum mit dem MS/MS-Spektrum des Metaboliten zu vergleichen. Dieser Parameter wird ebenfalls verwendet, wenn Fragmente in der Tabelle „Interpretation“ zugewiesen werden. Das Signal-zu-Rausch-Verhältnis des zugewiesenen Fragments muss über dem angegebenen minimalen Signal-zu-Rausch-Verhältnis liegen.
<b>Fragment Interpretation Options (Kleinmolekül- und Peptid-Methoden)</b>	
<b>Number of fragment peaks selected for assignment</b>	(Kleinmolekül-Methoden) Legt die Anzahl von MS/MS-Fragmenten fest, die für die Zuweisung ausgewählt werden. Die Peaks werden basierend auf ihren Intensitäten ausgewählt (die intensiveren Peaks werden zuerst ausgewählt).
<b>Break aromatic rings</b>	(Kleinmolekül-Methoden) Bricht Bindungen, die Teil eines aromatischen Rings sind.

Parameter	Beschreibung
<b>Maximum number of bonds to break</b>	(Kleinmolekül-Methoden) Legt die maximale Anzahl der zu brechenden Bindungen fest, wenn MS/MS-Fragmente zur Interpretation zugewiesen werden.
<b>Maximum number of C-C bonds to break</b>	(Kleinmolekül-Methoden) Legt die maximale Anzahl der zu brechenden C-C-Bindungen fest, wenn MS/MS-Fragmente zur Interpretation zugewiesen werden.
<b>Fragment Types</b>	(Peptid-Methoden) Identifiziert den Fragmenttyp. Es können mehrere Typen ausgewählt werden.
<b>Maximum bonds to break</b>	(Peptid-Methoden) Legt die maximale Anzahl der zu brechenden Bindungen fest.
<b>Break linkages</b>	(Peptid-Methoden) Bricht Verbindungen in der Peptid- oder Oligonukleotid-Sequenz.

### Registerkarte „Formula Prediction“ (Kleinmolekül- und ADC-Methoden)

Parameter	Beschreibung
<b>Search Constraints</b>	
<b>Elements from</b> <b>Elements to</b>	Legt das Startelement fest, das die Software verwendet, um Formeln für potenzielle Metaboliten vorzuschlagen.
<b>Isotope Pattern Tolerances</b>	
<b>MS m/z tolerance</b>	Nachdem die Software ein theoretisches vorhergesagtes Isotopenmuster für eine vorgeschlagene Formel identifiziert hat, beschränkt dieser Parameter den zulässigen Massenunterschied zwischen Isotopen im Vergleich zum Isotopenmuster des Metaboliten.
<b>Intensity tolerance</b>	Nachdem die Software ein theoretisches vorhergesagtes Isotopenmuster für eine vorgeschlagene Formel identifiziert hat, beschränkt dieser Wert den zulässigen Unterschied bei der isotopischen Peak-Intensität im Vergleich zum Isotopenmuster des Metaboliten.
<b>Ranking</b>	
<b>Contribution</b>	Legt fest, ob Formeln basierend auf dem MS-Spektrum oder dem MS/MS-Spektrum in den Ergebnissen angegeben werden sollen.
<b>Automatically weight MS/MS</b>	Wählen Sie diese Option, um eine logarithmische Skala auf die MS/MS-Gewichtung anzuwenden.
<b>Rings and Double Bonds</b>	

## Verarbeitungsmethoden erstellen

---

Parameter	Beschreibung
<b>RDB from</b> <b>RDB to</b>	Identifiziert einen Bereich von Ringen und Doppelbindungen in den vorgeschlagenen Formeln der potenziellen Metaboliten.  Wenn die Anzahl der Ringe und Doppelbindungen einer vorgeschlagenen Formel nicht innerhalb des angegebenen Bereichs liegt, dann wird diese Formel für den Metaboliten nicht berücksichtigt.  Der minimale Wert muss kleiner sein als der maximale Wert.
<b>Element Ratios</b>	
<b>Oxygen/ phosphorus count</b>	Gibt den Bereich von Sauerstoff-Phosphor-Molekülen an, die in den vorgeschlagenen Formeln vorhanden sein müssen.  Dieser Parameter gilt sowohl für MS- als auch für MS/MS-Formeln.
<b>Oxygen/sulphur count</b>	Gibt den Bereich von Sauerstoff-Schwefel-Molekülen an, die in den vorgeschlagenen Formeln vorhanden sein müssen.  Dieser Parameter gilt sowohl für MS- als auch für MS/MS-Formeln.

## Registerkarte „Confirmation Scoring“

Wenn ein potenzieller Metabolit in der relevanten Probe gefunden wird, dann weist die Software einen Bestätigungswert zu, der die Wahrscheinlichkeit angibt, dass es sich bei dem gefundenen Peak um einen Metaboliten handelt. Die Bewertung ist unabhängig von den für die Suche nach Metaboliten verwendeten Algorithmen und basiert auf verschiedenen Eigenschaften.

---

**Hinweis:** Bei Oligonukleotid-Methoden wird ein Wert von 100 für **Isotope pattern** und 0 für alle anderen Parameter empfohlen.

---

Parameter	Beschreibung
<b>Mass defect</b>	(Kleinmolekül-Methoden) Gibt an, inwiefern der Massendefekt des Metaboliten mit dem Massendefekt der Ausgangsverbindung, potenziellen Spaltungs-Metaboliten oder Phase II-Metaboliten übereinstimmt.  <b>Hinweis:</b> Dieses Attribut wird nicht für die Berechnung des Gesamtbestätigungswerts für ADC-, Peptid- und Oligonukleotid-Daten verwendet.



Parameter	Beschreibung
<b>Isotope pattern</b>	<p>(Kleinmolekül- und ADC-Methoden) Gibt an, ob der Metabolit ein Isotopenmuster ähnlich der Ausgangsverbindung aufweist. Diese Eigenschaft hat eine Bewertung von 0 bis 100.</p> <p>(Oligonukleotid-Methoden) Gibt an, ob der Metabolit ein Isotopenmuster ähnlich dem erwarteten Isotopenmuster aufweist. Dieser Parameter ist sehr nützlich für das Filtern von falsch positiven Ergebnissen. Es wird ein Wert von 100 empfohlen.</p>
<b>MS/MS</b>	<p>Gibt an, wie nah das MS/MS-Spektrum beim Referenzspektrum liegt. Diese Eigenschaft findet nur Anwendung, wenn ein Referenzspektrum verfügbar ist.</p> <p>Die MS/MS-Bewertung umfasst zwei Komponenten:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Qualität: Ein Maß für die Fähigkeit, spektrale Peaks von Hintergrundrauschen zu unterscheiden.</li> <li>• Ähnlichkeit: Die Software berechnet, wie nah das MS/MS-Spektrum beim Referenzspektrum liegt, einschließlich der Produkt-Ionen, die basierend auf bekannten Biotransformationen verschoben wurden.</li> </ul> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Werden nur TOF MS-Daten verarbeitet, dann setzen Sie diesen Parameter auf 0.</p>
<b>Mass accuracy</b>	Gibt an, wie nah der gefundene <i>m/z</i> -Wert bei dem erwarteten <i>m/z</i> -Wert liegt. Diese Eigenschaft findet nur Anwendung bei vorhergesagten Metaboliten.
<b>Total confirmation score</b>	(Schreibgeschützt) Summe der vier Eigenschaftswerte.

**Tipp!** Geben Sie 0 in der Tabelle „Scoring“ ein, um eine bestimmte Eigenschaft bei der Bewertung zu ignorieren.

## Verbindungsspezifische Verarbeitungparameter

Verbindungsspezifische Verarbeitungparameter sind Einstellungen, die abhängig sind von der Verbindung, die verarbeitet wird. Jede der folgenden Registerkarten verwaltet verbindungsspezifische Parameter.

### Compound-Specific Parameters



## Verarbeitungsmethoden erstellen

Registerkarte „Cleavage Metabolites“ (Kleinmolekül- und ADC-Methoden)	Registerkarte „Catabolites“ (Peptid- Methoden)	Registerkarte „Catabolites“ (Oligonukleotid- Methoden)	Registerkarte „Cleavage Metabolites“ (Kleinmolekül- und ADC-Methoden)
Registerkarte „Mass Defect“ (Kleinmolekül- Methoden)	Registerkarte „Isotope Pattern“	Registerkarte „Isotope Pattern“	Registerkarte „Isotope Pattern“
Registerkarte „Isotope Pattern“	Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“	Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“	Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“
Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“			Antikörperdetails

### Registerkarte „Cleavage Metabolites“ (Kleinmolekül- und ADC-Methoden)

Identifiziert die potenziellen Spaltungs-Metaboliten der Ausgangsverbindung. Die Methode muss eine Struktur enthalten, bevor die Software eine Liste mit potenziellen Spaltungs-Metaboliten generieren kann.

Parameter	Beschreibung
<b>Potential Compound Cleavages</b>	
<b>Maximum bonds to break</b>	Legt die maximale Anzahl der zu brechenden Bindungen fest.
<b>Break ring bonds</b>	Bricht Bindungen, die Teil eines Rings sind.
<b>Only break C-N bonds</b>	Bricht nur C-N-Bindungen.
<b>Cleavages selected</b>	Gibt die Anzahl der Spaltungen an, die in der Tabelle der potenziellen Verbindungsspaltungen ausgewählt wurden. Automatisch von der Software generiert.

### Registerkarte „Catabolites“ (Peptid-Methoden)

Identifiziert die potenziellen hydrolytischen Spaltungen der Ausgangsverbindung. Die Methode muss eine Peptidsequenz enthalten, bevor die Software eine Liste mit potenziellen hydrolytischen Kataboliten generieren kann.

Parameter	Beschreibung
<b>Potential Hydrolytic Cleavages</b>	

Parameter	Beschreibung
<b>Max. peptide bonds to break</b>	Legt die maximale Anzahl der zu brechenden Peptidbindungen fest.
<b>Max. cross-links to break</b>	Legt die maximale Anzahl der zu brechenden Querverbindungen fest.
<b>Min. AA count</b>	Legt die maximale Anzahl der Aminosäuren im Kataboliten fest.
<b>Catabolites selected</b>	(Schreibgeschützt) Gibt die Anzahl der Kataboliten an, die in der Tabelle der potenziellen hydrolytischen Spaltungen ausgewählt wurden.

### Registerkarte „Catabolites“ (Oligonukleotid-Methoden)

Identifiziert die potenziellen hydrolytischen Spaltungen der Ausgangsverbindung. Die Methode muss eine Peptidsequenz enthalten, bevor die Software eine Liste mit potenziellen hydrolytischen Kataboliten generieren kann.

Parameter	Beschreibung
<b>Potential Hydrolytic Cleavages</b>	
<b>Max. bonds to break</b>	Gibt die maximale Anzahl von Bindungen an, die nur entlang des Oligonukleotid-Backbone brechen können, einschließlich des Verlustes von H <sub>2</sub> PO <sub>3</sub> . Informationen über Nukleobasen- und Zuckerverluste finden Sie im Abschnitt: <a href="#">Registerkarte „Biotransformations“</a> .
<b>Min. Nucleotides</b>	Gibt die minimale Anzahl von Nukleotiden an, die für die Generierung von potenziellen Kataboliten und hydrolytischen Spaltungen verwendet werden.
<b>Include terminus n+1 sequences</b>	Legt fest, ob nach Terminus n+1 Verunreinigungen gesucht werden soll.
<b>Include internal n-1 sequences</b>	Legt fest, ob nach internen n-1 Verunreinigungen gesucht werden soll.
<b>Catabolites selected</b>	(Schreibgeschützt) Gibt die Anzahl der Kataboliten an, die in der Tabelle der potenziellen hydrolytischen Spaltungen ausgewählt wurden.

### Registerkarte „Mass Defect“ (Kleinmolekül-Methoden)

Wenn komplexe biologische Proben analysiert werden, dann können diese Filter dabei helfen, Hintergrund-Interferenzen zu beseitigen.

Parameter	Beschreibung
<b>Mass Defect Filters</b>	
<b>Filters selected</b>	Gibt die Anzahl der Massendefektfilter an, die in der Tabelle der Massendefektfilter ausgewählt wurden. Automatisch von der Software generiert.

## Verarbeitungsmethoden erstellen

---

Parameter	Beschreibung
<b>Filters</b>	
Parent	Standardmäßig ausgewählt.
Glucuronidation	Standardmäßig ausgewählt.
Bis-Glucuronidation	Standardmäßig ausgewählt.
Glutathione	Standardmäßig ausgewählt.
Sulphate	Standardmäßig ausgewählt.

## Registerkarte „Isotope Pattern“

Parameter	Beschreibung
<b>Isotope Pattern</b>	<p>Zeigt eine grafische Darstellung der in der Tabelle „Isotopes“ aufgelisteten Informationen.</p> <p>(Oligonukleotid-Methoden) Zeigt eine grafische Darstellung der Isotopenverteilung für das Oligonukleotid bei einem bestimmten Ladungszustand. Um den Ladungszustand zu ändern, wählen Sie einen anderen <b>Ion type</b> in den „Compound Information“ aus.</p>
<b>Isotopic Enrichment</b>	<p>Gibt die isotopische Anreicherung eines Atoms an, das in der Formel der Ausgangsverbindung verwendet wird.</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Um ein Isotop-Element für ADC- oder Kleinmolekül-Methoden hinzuzufügen, importieren Sie die mol-Datei, die das Isotop enthält.</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Um die isotopische Anreicherung für Peptid- und Oligonukleotid-Formeln mit angereicherten Atomen zu ändern, siehe Abschnitt: <a href="#">Bearbeiten der isotopischen Anreicherung für Peptid- und Oligonukleotid-Formeln</a>.</p> <hr/>
<b>Isotopes</b>	Zeigt die intensivsten Isotope, basierend auf der Formel und isotopischen Anreicherung (falls zutreffend) der Ausgangsverbindung.
<b>Isotope Pattern Intensity Cutoff for Metabolite XICs (%)</b>	(Oligonukleotid-Methoden) Gibt den Cutoff-Wert (als prozentuale Intensität) an, der während der Berechnung der Peak-Fläche auf einzelne Isotope angewendet wird, die für die XIC-Extraktion berücksichtigt werden. Isotope, die Intensitäten unterhalb des Cutoffs aufweisen, werden in der Tabelle rot dargestellt.

## Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“

Parameter	Beschreibung
<b>Reference MS/MS Spectrum</b>	<p>Identifiziert ein zu verwendendes Spektrum bei der Auswahl von Produkt-Ionen und Neutralverlusten zum Abgleich mit dem MS/MS potenzieller Metaboliten. Die beste Quelle ist eine Datendatei für eine Probe, die unter ähnlichen Bedingungen wie die relevante Probe erfasst wurde.</p> <p>Das Spektrum kann an einem von zwei Speicherorten ausgewählt werden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• wiff-Datei</li> <li>• Verbindungsbibliothek</li> </ul>
<b>Filters</b>	
<b>m/z From __ to __</b>	Definiert den Massenbereich, der beim Auffüllen der Produkt-Ionen- und Neutralverlust-Tabelle berücksichtigt wird. Es werden nur die Fragmente innerhalb des ausgewählten Bereichs in der Produkt-Ionen- und Neutralverlust-Tabelle angezeigt.
<b>Charge state From __ to __</b>	Definiert den Ladungszustandsbereich, der beim Auffüllen der Produkt-Ionen- und Neutralverlust-Tabelle berücksichtigt wird. Es werden nur Fragmente mit Ladungen innerhalb des ausgewählten Bereichs in der Produkt-Ionen- und Neutralverlust-Tabelle angezeigt.
<b>Only show product ions above (%)</b>	Definiert den minimalen Schwellenwert für Produkt-Ionen, die in der Produkt-Ionen- und Neutralverlust-Tabelle aufgenommen werden sollen. Produkt-Ionen unterhalb der angegebenen Intensität werden nicht berücksichtigt.
<b>Mass accuracy within (mDa)</b>	Es werden nur Fragmente mit einer Massengenauigkeit im Bereich des angegebenen Wertes in der Produkt-Ionen- und Neutralverlust-Tabelle angezeigt.
<b>Add product ions, neutral losses from Phase II metabolites</b>	(Kleinmolekül- und ADC-Methoden) Beinhaltet Produkt-Ionen und Neutralverluste der Phase II-Metaboliten in der Produkt-Ionen- und Neutralverlust-Tabelle.

**Hinweis:** Nachdem alle erforderlichen Änderungen an den Filtern vorgenommen wurden, klicken Sie auf **Assign Fragments**, um die Produkt-Ionen- und Neutralverlust-Tabelle zu aktualisieren.

## Antikörperdetails

**Hinweis:** Diese verbindungs-spezifischen Parameter gelten nur für ADC-Methoden.

## Verarbeitungsmethoden erstellen

---

Parameter	Beschreibung
<b>Protein Sequence</b>	Die Proteinsequenz des Antikörpers.
<b>Enzyme</b>	Enzym, das für den Aufschluss des Proteins verwendet wird.
<b>Break disulfide bonds</b>	Disulfidbindungen werden gebrochen, wenn dieses Kontrollkästchen aktiviert ist.
<b>Site of conjugation</b>	Aminosäure in dem Antikörper, mit dem das Wirkstoffmolekül konjugiert werden kann.
<b>Type of conjugation</b>	Die chemischen Prozesse, die an der Konjugation des Wirkstoffmoleküls mit dem Antikörper beteiligt sind.
<b>Max. AA count</b>	Die maximale Anzahl von Aminosäuren, die nach dem Aufschluss als potenzielle Fragmente betrachtet werden.
<b>Selected fragments</b>	Automatisch von der Software generiert. Gibt die Anzahl der Fragmente an, die in der Tabelle ausgewählt wurden.

## Bearbeiten der isotopischen Anreicherung für Peptid- und Oligonukleotid-Formeln

### Voraussetzung

Es muss eine benutzerdefinierte Aminosäure mit oder ohne einer benutzerdefinierten Aminosäuremodifizierung erstellt werden. Siehe die Abschnitte: [Erstellen einer benutzerdefinierten Aminosäure](#) und [Erstellen einer benutzerdefinierten Aminosäuremodifizierung](#). Die benutzerdefinierte Aminosäure oder die benutzerdefinierte Aminosäuremodifizierung muss mindestens ein angereichertes Isotop enthalten.

1. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Processing Parameters**. Der Arbeitsbereich „Processing Parameters“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **New > Peptides** oder **New > Oligonucleotide**


---

**Hinweis:** Wählen Sie alternativ einen Eintrag aus der Verbindungsbibliothek, um die Sequenz auszufüllen.

---

3. Geben Sie den **Compound name** für die benutzerdefinierte Aminosäure oder das Oligonukleotid im angegebenen Feld ein.
4. Geben Sie die **Sequence**-Informationen für die benutzerdefinierte Aminosäure oder das Oligonukleotid ein. Die Sequenz muss mindestens ein angereichertes Isotop enthalten.
5. Klicken Sie in das Feld **Chemical formula**.

Das Feld **Chemical formula** und der **m/z**-Wert werden mit den Informationen in Bezug auf die benutzerdefinierte Aminosäure ausgefüllt.

**Tipp!** Das Symbol  wird über der Sequenz angezeigt. Bewegen Sie den Cursor über das Symbol, um das **Symbol** und die **Residue Formula** der verwendeten benutzerdefinierten Aminosäure anzuzeigen.

---

6. Klicken Sie auf die **Compound-Specific Parameters > Isotope Pattern**.  
In der Tabelle „Isotopic Enrichment“ wird die Rückstandsformel der benutzerdefinierten Aminosäure in der Spalte **Element** angezeigt, und **100** wird in der Spalte **Enrichment %** angezeigt.
7. Ändern Sie den **Enrichment %**-Wert nach Bedarf.
8. Klicken Sie auf **Save and Close**.

# Nach potenziellen Molekülen suchen

# 6

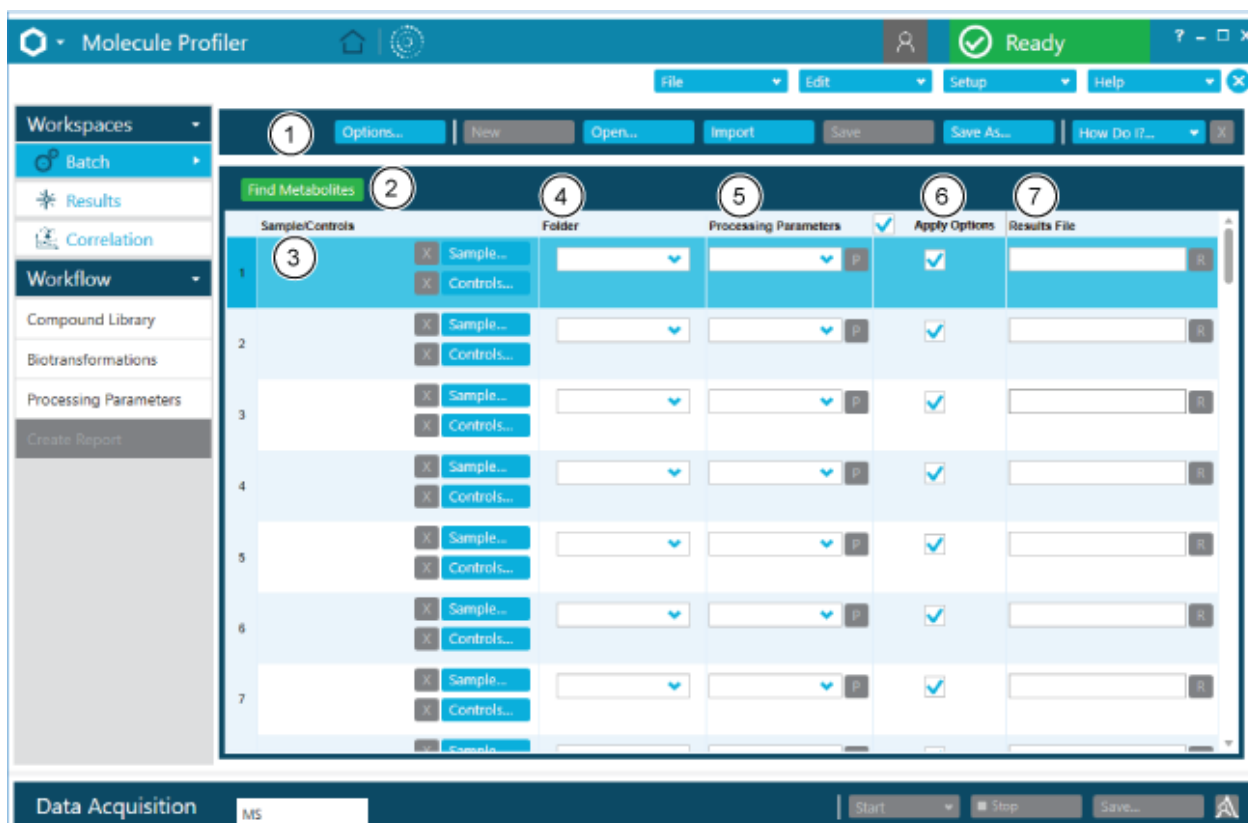
Der Arbeitsbereich „Batch“ wird verwendet, um mehrere Probendateien gleichzeitig zu verarbeiten. Die Chargentabelle kann manuell ausgefüllt werden oder es kann eine vorhandene Charge importiert werden, um die Tabelle aufzufüllen.

1. Um eine Charge manuelle vorzubereiten, fahren Sie fort mit dem Abschnitt: [Eine Charge erstellen](#).
2. Um eine vorhandene Charge zu öffnen, fahren Sie fort mit dem Abschnitt: [Öffnen einer Charge](#).
3. Um eine vorhandene Charge zu importieren, fahren Sie fort mit dem Abschnitt: [Eine Charge importieren](#).

## Informationen über den Arbeitsbereich „Batch“

Verwenden Sie den Arbeitsbereich „Batch“ zum Erstellen von Proben-Chargen zur Verarbeitung.

Abbildung 6-1: Arbeitsbereich „Batch“





Element	Beschreibung
1	<p>Menüleiste. Enthält folgende Schaltflächen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Options:</b> Öffnet das Dialogfeld „Batch Processing Options“, in dem der Benutzer die für die Charge relevanten Optionen festlegen kann. Siehe Abschnitt: <a href="#">Optionen für die Verarbeitung von Chargen</a>.</li> <li>• <b>New:</b> Klicken Sie auf diese Option, um die Charge zu speichern. Nur verfügbar, nachdem eine Probe zum Feld <b>Sample/Controls</b> hinzugefügt wurde.</li> <li>• <b>Open:</b> Öffnet das Dialogfeld „Open Processing Batch“, in dem der Benutzer eine vorhandene Charge auswählen kann, die geöffnet wird. Siehe Abschnitt: <a href="#">Öffnen einer Charge</a>.</li> <li>• <b>Import:</b> Öffnet das Dialogfeld „Batch Importer“, in dem der Benutzer eine Excel-Datei für den Import auswählen kann. Siehe Abschnitt: <a href="#">Eine Charge importieren</a>.</li> <li>• <b>Save:</b> Speichert die aktuell geöffnete Chargendatei. Die vorhandene Version wird automatisch ersetzt. Nur verfügbar, nachdem die Chargeninformationen geändert wurden.</li> <li>• <b>Save As:</b> Speichert die aktuell geöffnete Chargendatei. Benutzer können der Chargendatei einen neuen Namen zuweisen.</li> </ul>
2	Schaltfläche <b>Find Metabolites</b> . Startet die Verarbeitung der Charge.
3	Spalte <b>Sample/Controls</b> . Mithilfe der Schaltfläche <b>Sample</b> wird das Dialogfeld „Select Data“ geöffnet, in dem der Benutzer die relevante Probe auswählen kann. Mithilfe der Schaltfläche <b>Controls</b> wird das Dialogfeld „Select Data“ geöffnet, in dem der Benutzer die entsprechende Kontrollprobe auswählen kann. Es können maximal fünf Kontrollen pro Probe ausgewählt werden.
4	Spalte <b>Folder</b> . Enthält eine Liste mit Ordnerspeicherorten, an denen die Verarbeitungsparameter und Ergebnisse gespeichert sind.
5	Spalte <b>Processing Parameters</b> . Enthält eine Liste der Verarbeitungsparameter, die für die Verarbeitung der relevanten Probe verwendet werden können. Es stehen nur Verarbeitungsparameter zur Auswahl, die im ausgewählten <b>Folder</b> gespeichert sind.

## Nach potenziellen Molekülen suchen

---

Element	Beschreibung
6	<p>Spalte <b>Apply Options</b>. Standardmäßig ausgewählt. Wenn diese ausgewählt ist, werden alle im Dialogfeld „Batch Processing Options“ ausgewählten „Auto Assign“- und „Report“-Optionen auf die Proben und Kontrollproben in der Charge angewendet. Folgende Optionen sind vorhanden:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Deaktivieren des Kontrollkästchens <b>Apply Options</b>, um alle aktivierten Kontrollkästchen zu deaktivieren.</li><li>• Deaktivieren des Kontrollkästchens für spezifische Proben.</li><li>• Aktivieren des Kontrollkästchens für spezifische Proben.</li></ul> <p>Siehe Abschnitt: <a href="#">Optionen für die Verarbeitung von Chargen</a>.</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> „Auto Assign“-Optionen gelten nicht für den Oligonukleotid-Arbeitsablauf.</p> <hr/>
7	Spalte <b>Results File</b> . Benutzerspezifischer Name für die Ergebnisdatei.

## Chargenoptionen festlegen

Siehe Abschnitt: [Optionen für die Verarbeitung von Chargen](#).

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Batch**.  
Der Arbeitsbereich „Batch“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Options**.  
Das Dialogfeld „Batch Processing Options“ wird geöffnet.
3. (Kleinmolekül-, Peptid- und ADC-Arbeitsabläufe) Auf der Registerkarte „Auto Assign“:
  - Aktivieren Sie das Kontrollkästchen für jede anwendbare Option.
  - Geben Sie den entsprechenden Wert für jede ausgewählte Option ein.
4. Auf der Registerkarte „Report“:
  - Aktivieren Sie das Kontrollkästchen für jede anwendbare Option.
  - Geben Sie den entsprechenden Wert für jede ausgewählte Option ein.
5. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Chargenoptionen werden mit der Charge gespeichert.

## Optionen für die Verarbeitung von Chargen

Option	Beschreibung
<b>Auto Assign</b>	
<p><b>Hinweis:</b> Die Optionen für die automatische Zuweisung sind nicht voneinander abhängig. Diese werden als „oder“-Bedingungen betrachtet. Eine oder mehrere der ausgewählten Optionen müssen den angegebenen Kriterien entsprechen.</p>	
<p><b>Hinweis:</b> Die Optionen für die automatische Zuweisung werden nicht auf Oligonukleotid-Proben angewendet.</p>	
<b>Assign Structures or Sequences</b>	<p>Schlägt potenzielle Strukturen oder Sequenzen für Metaboliten vor, die den Kriterien der ausgewählten Option entsprechen. Abhängig vom Datentyp und den verwendeten Verarbeitungsparametern (d. h., ob es sich um ein kleines Molekül oder ein Peptid handelt).</p> <p><b>Hinweis:</b> Es können mehrere Optionen ausgewählt werden.</p>
<b>Metabolites with peak areas above (%)</b>	Schlägt potenzielle Strukturen oder Sequenzen für Metaboliten mit einer XIC-Peak-Fläche über dem angegebenen Wert vor.
<b>Metabolites with analog peak areas above (%)</b>	Schlägt potenzielle Strukturen oder Sequenzen für Metaboliten mit einer analogen Peak-Fläche über dem angegebenen Wert vor.
<b>Metabolites with MS/MS quality above</b>	<p>Schlägt potenzielle Strukturen oder Sequenzen für Metaboliten mit einer MS/MS-Qualität über dem angegebenen Wert vor.</p> <p>Diese Option gilt nicht für Oligonukleotid-Arbeitsabläufe.</p>
<b>Report</b>	
<p><b>Hinweis:</b> Die Bericht-Optionen sind voneinander abhängig. Diese werden als „und“-Bedingungen betrachtet. Alle ausgewählten Optionen müssen den angegebenen Kriterien entsprechen.</p>	
<b>Report metabolites with assigned structures or sequences</b>	Zeigt in der Spalte <b>Report</b> der Tabelle „Potential Metabolites“ ein Häkchen für jeden Metaboliten mit einer zugewiesenen Struktur oder Sequenz.
<b>Report metabolites with peak areas above (%)</b>	Zeigt in der Spalte <b>Report</b> der Tabelle „Potential Metabolites“ ein Häkchen für jeden Metaboliten mit einer Peak-Fläche über dem angegebenen Wert.
<b>Report metabolites with analog peak areas above (%)</b>	Zeigt in der Spalte <b>Report</b> der Tabelle „Potential Metabolites“ ein Häkchen für jeden Metaboliten mit einer Analog-Peak-Fläche über dem angegebenen Wert.

## Nach potenziellen Molekülen suchen

---

Option	Beschreibung
<b>Report metabolites with scores above (%)</b>	Zeigt in der Spalte <b>Report</b> der Tabelle „Potential Metabolites“ ein Häkchen für jeden Metaboliten mit einer Bewertung über dem angegebenen Wert.

## Eine Charge erstellen

---

**Hinweis:** Es kann jeweils nur eine Probe in jeder Zeile verarbeitet werden. Es können maximal fünf Kontrollen für jede Probe ausgewählt werden. Kontrollen sind für die Verarbeitung jedoch nicht erforderlich.

---

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Batch**.  
Der Arbeitsbereich „Batch“ wird geöffnet.

---

**Tipp!** Wählen Sie die Option **Open**, um eine zuvor gespeicherte Chargendatei abzurufen. Siehe Abschnitt: [Öffnen einer Charge](#).

---

2. Fügen Sie eine MS-Probe hinzu, indem Sie wie folgt vorgehen:
  - a. Klicken Sie in der ersten verfügbaren Zeile der Chargentabelle auf **Sample**.  
Das Dialogfeld „Select Data“ wird geöffnet.
  - b. Klicken Sie auf **Browse** und navigieren Sie dann zum entsprechenden Quellenordner.
  - c. Wählen Sie die wiff-Datei und Injektion mit der relevanten Probe im Feld **Available** aus und klicken Sie dann auf **>>**.  
Die Probeninformationen werden im Feld **Selected** angezeigt.
3. (Optional) Fügen Sie eine analoge Probe hinzu, indem Sie wie folgt vorgehen:

---

**Tipp!** Wenn Analogdaten erfasst wurden, dann aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Use analog data**, um Analogdaten automatisch hinzuzufügen, wenn die MS-Probe hinzugefügt wird.

---

- a. Klicken Sie in der ersten verfügbaren Zeile der Chargentabelle auf **Use analog data**.
  - b. Öffnen Sie die Registerkarte „Analog Sample“.
  - c. Klicken Sie auf **Browse** und navigieren Sie dann zum entsprechenden Quellenordner.
  - d. Wählen Sie die analoge Probe im Feld **Available** aus und klicken Sie dann auf **>>**.  
Die Probeninformationen werden im Feld **Selected** angezeigt.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Das Feld **Sample/Controls** der ausgewählten Zeile in der Chargentabelle wird mit den Probeninformationen aufgefüllt.
  5. (Optional) Fügen Sie eine MS-Kontrolle hinzu, indem Sie wie folgt vorgehen:

- a. Klicken Sie in der ersten verfügbaren Zeile der Chargentabelle auf **Control**. Das Dialogfeld „Select Data“ wird geöffnet.
  - b. Klicken Sie auf **Browse** und navigieren Sie dann zum entsprechenden Quellenordner.
  - c. Wählen Sie die wiff-Datei und Injektion mit der Kontrolle im Feld **Available** aus und klicken Sie dann auf **>>**. Die Probeninformationen werden im Feld **Selected** angezeigt.
  - d. Fahren Sie mit folgendem Schritt fort, um eine analoge Kontrolle hinzuzufügen oder klicken Sie auf **OK**, um dieses Dialogfeld zu schließen.
6. (Optional) Fügen Sie eine analoge Kontrolle hinzu, indem Sie wie folgt vorgehen:
- a. Klicken Sie in der ersten verfügbaren Zeile der Chargentabelle auf **Use analog data**.
  - b. Öffnen Sie die Registerkarte „Analog Sample“.
  - c. Klicken Sie auf **Browse** und navigieren Sie dann zum entsprechenden Quellenordner.
  - d. Wählen Sie die analoge Probe im Feld **Available** aus und klicken Sie dann auf **>>**. Die Probeninformationen werden im Feld **Selected** angezeigt.
  - e. Klicken Sie auf **OK**. Das Feld **Sample/Controls** der ausgewählten Zeile in der Chargentabelle wird mit den Probeninformationen aufgefüllt.
7. Wählen Sie in der Spalte **Folder** den Ordner aus, in dem die Verarbeitungsparameter und Ergebnisdateien gespeichert werden sollen.
8. Wählen Sie in der Spalte **Processing Parameters** eine Verarbeitungsparameterdatei aus.

---

**Tipp!** Klicken Sie zum Anzeigen der Verarbeitungsparameterdatei auf **P**. Ändern Sie die Parameter entsprechend und klicken Sie dann auf **Save and Close**, um diese zu speichern.

---

9. Geben Sie in der Spalte **Results File** den Namen der Datei ein, in der die Ergebnisse gespeichert werden sollen.
10. Wiederholen Sie Schritt 2 bis Schritt 9 für jede Zeile in der Charge.

---

**Hinweis:** Die maximale Anzahl von Zeilen, die in einer Charge verarbeitet werden können, beträgt 200.

---

**Tipp!** Um die Erstellung der Charge zu erleichtern, können Zeilen kopiert und eingefügt oder gelöscht werden. Siehe die Abschnitte: [Kopieren und Einfügen einer Chargen-Zeile](#) oder [Eine Chargenzeile löschen](#).

---

## Kopieren und Einfügen einer Chargen-Zeile

Verwenden Sie die Optionen zum Kopieren und Einfügen, um eine Charge zu bearbeiten.

## Nach potenziellen Molekülen suchen

---

1. Wählen Sie in der Chargen-Tabelle die zu kopierende Zeile aus.
2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste und wählen Sie dann **Copy Batch Row** aus.
3. Wählen Sie die Zielzeile für die einzufügenden Informationen.
4. Klicken Sie mit der rechten Maustaste und wählen Sie dann **Paste Batch Row** aus.

---

**Hinweis:** Vorhandene Informationen in der Zielzeile werden überschrieben.

---

## Eine Chargenzeile löschen

Zeilen mit Probeninformationen können beim Erstellen einer Charge gelöscht werden.

1. Wählen Sie in der Chargen-Tabelle die zu löschende Zeile aus.
2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste und wählen Sie dann **Clear Batch Row** aus.  
Alle Daten werden aus der ausgewählten Zeile entfernt.

## Öffnen einer Charge

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Batch**.  
Der Arbeitsbereich „Batch“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Processing Batch“ wird geöffnet.
3. Wählen Sie die Chargendatei aus und klicken Sie dann auf **OK**.
4. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
  - Ist die Charge abgeschlossen, dann fahren Sie fort mit dem Abschnitt: [Übergeben einer Charge](#).
  - Ist die Charge nicht abgeschlossen, dann fahren Sie fort mit dem Abschnitt: [Eine Charge erstellen](#).

## Eine Charge importieren

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Batch**.
2. Klicken Sie auf **Import**.  
Das Dialogfeld „Batch Importer“ wird geöffnet.
3. Klicken Sie auf **Browse**.  
Das Dialogfeld „Open excel file“ wird geöffnet.
4. Navigieren Sie zu der entsprechenden Excel-Datei und wählen Sie sie aus.

---

**Hinweis:** Die Excel-Datei sollte unter Verwendung der Beispieldatei (BatchImportTemplate.xlsx) erstellt werden, die in der Software enthalten ist. Während der Installation wird die Vorlage an folgendem Speicherort installiert: Ordner  
C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler\Batch Import Templates.

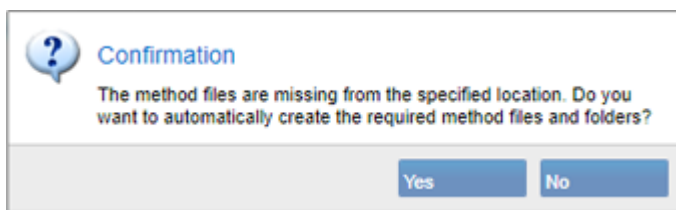
---

5. Klicken Sie auf **Open**.

Das Feld **Target batch file** wird mit dem Namen der importierten Excel-Datei ausgefüllt. Diese Informationen können nach Bedarf geändert werden.

6. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
  - Um die ausgewählte Excel-Datei in eine Molecule Profiler Software-Charge zu konvertieren und die Charge im Arbeitsbereich „Batch“ zu öffnen, klicken Sie auf **Convert and Open** und fahren Sie fort mit dem Schritt [7](#).
  - Um die ausgewählte Excel-Datei in eine Molecule Profiler Software-Charge zu konvertieren, die zu einem späteren Zeitpunkt im Arbeitsbereich „Batch“ geöffnet werden kann, klicken Sie auf **Convert** und fahren Sie fort mit dem Schritt [7](#).
  - Um den Import abzubrechen, klicken Sie auf **Close**.
7. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
  - Wenn die Option **Convert and Open** ausgewählt wurde und alle in der Excel-Datei referenzierten Verarbeitungsparameter (Methodendateien) und Ordner an den korrekten Speicherorten gespeichert wurden, dann fahren Sie fort mit dem Abschnitt: [Übergeben einer Charge](#).
  - Wenn die Option **Convert** ausgewählt wurde und alle in der Excel-Datei referenzierten Verarbeitungsparameter (Methodendateien) und Ordner an den korrekten Speicherorten gespeichert wurden, dann fahren Sie fort mit dem Abschnitt: [Eine Charge speichern](#).
  - Wenn die Option **Convert and Open** oder die Option **Convert** ausgewählt wurde und ein Bestätigungsdialogfeld angezeigt wird, dann fahren Sie fort mit dem Schritt [8](#).

### Abbildung 6-2: Bestätigungsdialogfeld



8. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
  - (Kleinmolekül-Arbeitsablauf) Um die erforderlichen Methodendateien automatisch zu erstellen, fahren Sie fort mit dem Schritt [9](#).

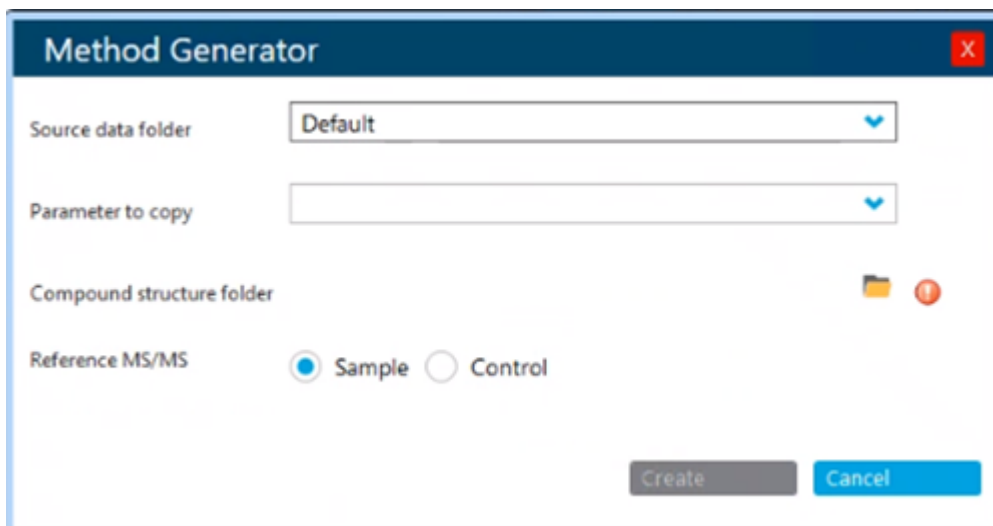
---

**Hinweis:** Der „Method Generator“ kann nicht bei Peptid-, Oligonukleotid- oder ADC-Arbeitsabläufen verwendet werden.

---

  - Um die erforderlichen Methodendateien manuell zu erstellen, klicken Sie auf **No** und brechen Sie dann den Import ab. Fahren Sie mit folgendem Schritt fort: [Verarbeitungsmethoden erstellen](#).
9. Klicken Sie auf **Yes**.

Abbildung 6-3: Dialogfeld „Method Generator“



10. Wählen Sie den entsprechenden Ordner aus der Liste **Source data folder** aus.
11. Wählen Sie die entsprechende Methodendatei aus der Liste **Parameters to copy** aus.
12. Klicken Sie auf das Ordnersymbol rechts vom Feld **Compound structure folder**, und navigieren Sie dann zu dem Ordner, der die Vorläuferstrukturen der Verarbeitungsparameter enthält und wählen Sie diesen aus.
13. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
  - Klicken Sie auf **Sample**, wenn die Proben-wiff-Datei das Referenz-MS/MS enthält.
  - Klicken Sie auf **Control**, wenn die Kontroll-wiff-Datei das Referenz-MS/MS enthält.
14. Klicken Sie auf **Create**.  
Die Verarbeitungsparameter und alle fehlenden Ordner werden erstellt und an dem im Excel-Arbeitsblatt angegebenen Speicherort gespeichert.
15. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
  - Wenn die Option **Convert and Open** ausgewählt wurde, dann fahren Sie fort mit dem Abschnitt: [Übergeben einer Charge](#).
  - Wenn die Option **Convert** ausgewählt wurde, dann fahren Sie fort mit dem Abschnitt: [Eine Charge speichern](#).

## Eine Charge speichern

Informationen, die im Arbeitsbereich „Batch“ zur Tabelle hinzugefügt wurden, können für eine spätere Verwendung gespeichert werden.

1. Um eine Charge mit demselben Dateinamen zu speichern, klicken Sie auf **Save**.
2. Um eine Charge mit einem anderen Namen zu erstellen, klicken Sie auf **Save As**.  
Das Dialogfeld „Save Processing Batch As“ wird geöffnet.
3. Geben Sie einen eindeutigen **Name** ein und klicken Sie dann auf **OK**.



## Übergeben einer Charge

Nachdem die Charge vorbereitet und die Chargenoptionen festgelegt wurden, wird die Charge zur Datenverarbeitung übergeben.

---

**Hinweis:** Die Verarbeitungsparameter können für eine relevante Probe ggf. geändert werden, bevor die Charge übergeben wird.

---

1. (Optional) Um die Verarbeitungsparameter für eine Probe anzuzeigen, gehen Sie wie folgt vor:
  - a. Wählen Sie die Zeile mit der relevanten Probe aus und klicken Sie dann auf das **P** rechts neben dem Feld **Processing Parameters**.  
Die der ausgewählten Probe zugeordneten Verarbeitungsparameter werden angezeigt.
  - b. Nehmen Sie alle erforderlichen Änderungen vor und klicken Sie dann auf **Save and Close**.  
Der Arbeitsbereich „Batch“ wird angezeigt.
2. Klicken Sie auf **Save As**.  
Das Dialogfeld „Save Processing Batch As“ wird geöffnet.
3. Geben Sie einen eindeutigen **Name** ein und klicken Sie dann auf **OK**.
4. Klicken Sie auf **Find Metabolites**.  
Die Verarbeitung der Charge startet. Ein Fortschrittsbalken zeigt den Status der Verarbeitung an. Während der Verarbeitung wird **P** deaktiviert, um eine Modifizierung der Parameter zu vermeiden. Wenn die Verarbeitung für die Zeile abgeschlossen ist, dann sind **P** rechts neben dem Feld **Processing Parameters** und **R** rechts neben dem Feld **Results File** verfügbar.
5. Klicken Sie auf **R**, um die Ergebnisdatei im Arbeitsbereich „Results“ zu öffnen.

---

**Hinweis:** Alle „Auto Assign“- und „Report“-Optionen, die im Dialogfeld „Batch Processing Options“ ausgewählt wurden, werden von der Software abgeschlossen.

---

6. (Optional) Schließen Sie den Schritt 1 ab, um die aktualisierten Verarbeitungsparameter zu speichern.
7. Klicken Sie auf **Save**.

---

**Tipp!** Klicken Sie auf **Save As**, um die Charge unter einem anderen Namen zu speichern.

---

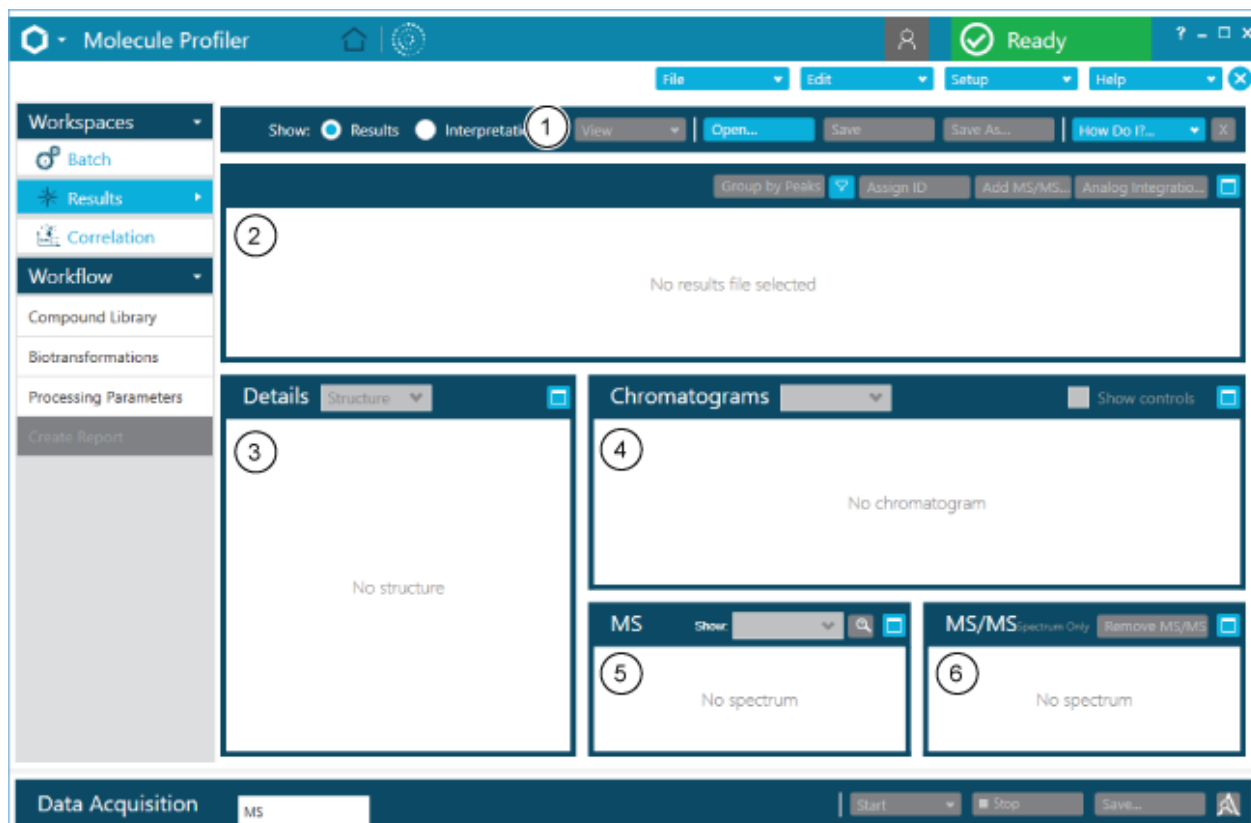
Verwenden Sie den Arbeitsbereich „Results“, um die Ergebnisse der Suche nach potenziellen Metaboliten in einer relevanten Probe anzuzeigen.

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.

## Informationen über den Arbeitsbereich „Results“

Nachdem die Software die Daten verarbeitet hat, verwenden Sie den Arbeitsbereich „Results“, um die Liste der potenziellen Metaboliten anzuzeigen.

Abbildung 7-1: Arbeitsbereich „Results“



Element	Beschreibung
1	<p>Menüleiste. Enthält folgende Schaltflächen:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>View</b><ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Processing Parameters:</b> Zeigt die Verarbeitungsparameter für die Ergebnisse.</li><li>• <b>Batch Options:</b> Zeigt die Optionen für die Verarbeitung von Chargen für die Ergebnisse.</li><li>• <b>Sample Details:</b> Zeigt detaillierte Informationen über die Probe.</li></ul></li><li>• <b>Open:</b> Öffnet das Dialogfeld „Open Results“, in dem Benutzer zur entsprechenden Ergebnisdatei navigieren können.</li><li>• <b>Save:</b> Speichert die aktuell geöffnete Ergebnisdatei. Die vorhandene Version wird automatisch ersetzt.</li><li>• <b>Save As:</b> Speichert die aktuell geöffnete Ergebnisdatei. Benutzer können den Zielordner auswählen und der Ergebnisdatei einen neuen Namen zuweisen.</li></ul>
2	<p>Teilfenster „Potential Metabolites“. Listet alle Peaks auf, die von den ausgewählten Algorithmen in der relevanten Probe gefunden wurden. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über Strategien für die Peak-Ermittlung</a>.</p> <p>Bearbeiten Sie die Ergebnisse, indem Sie die Zeilen löschen, die keine potenziellen Metaboliten enthalten, Namen und Formel ändern, MS/MS-Spektren hinzufügen und Peak-IDs zuweisen. Siehe Abschnitt: <a href="#">Ergebnisse bearbeiten</a>.</p> <p>Eine Beschreibung der Spalten in der Tabelle „Potential Metabolites“ finden Sie im Abschnitt: <a href="#">Tabelle 7-1</a>.</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Vordefinierte Filter können Auswirkungen auf die in der Liste angezeigten potenziellen Metaboliten haben. Siehe die Tabelle: <a href="#">Informationen über Ergebnisfilter</a>.</p> <hr/>

## Ergebnisse anzeigen

---

Element	Beschreibung
3	<p>Teilfenster „Details“. Enthält Informationen über die Bewertung des potenziellen Metaboliten. Für jede Eigenschaft in der Verarbeitungsmethode zeigt die Liste <b>Scoring</b> die Bewertung für den jeweiligen Metaboliten sowie die Gesamtbewertung für alle Metaboliten. Siehe Abschnitt: <a href="#">Registerkarte „Confirmation Scoring“</a>. Bewertungen werden angezeigt für <b>Mass Defect</b> (deaktiviert für Oligonukleotide), <b>Isotope Pattern</b>, <b>MS/MS</b>, <b>Mass Accuracy</b> und <b>Total confirmation score</b>.</p> <p>Bei Kleinmolekül-Ergebnissen zeigt die Liste <b>Structure</b> die verfügbaren Strukturen an.</p> <p>Bei ADC-Ergebnissen zeigt die Liste <b>Structure</b> die verfügbare Struktur und die verfügbare Sequenz an.</p> <p>Bei Peptid-Ergebnissen zeigt die Liste <b>Sequence</b> die verfügbare Sequenz an.</p> <p>Bei Oligonukleotid-Ergebnissen zeigt die Liste <b>Sequence</b> die Oligonukleotid-Sequenz für den ausgewählten Metaboliten entsprechend der Bestimmung durch die MS/MS-Zuweisung in der Ansicht „Interpretation“ an. Ist keine Zuweisung erfolgt, dann ist dieses Feld leer.</p>

Element	Beschreibung
4	<p data-bbox="478 349 1394 450">Teilfenster „Chromatograms“. Ermöglicht dem Benutzer, verschiedene Chromatogramme für den gefundenen potenziellen Metaboliten anzuzeigen:</p> <ul data-bbox="478 479 1406 1509" style="list-style-type: none"> <li data-bbox="478 479 1406 651">• <b>Metabolites:</b> Zeigt die Summe aller aktuell gefundenen Metabolit-Peaks. Alle bedeutenden chromatographischen Peaks werden zusammen mit ihren RTs und Peak-IDs angezeigt. Der ausgewählte Metabolit-Peak und alle Peaks die bei derselben Retentionszeit eluieren, werden gelb dargestellt.</li> <li data-bbox="478 674 1382 775">• <b>XIC:</b> Zeigt ein extrahiertes Ionenchromatogramm (XIC) für den ausgewählten Metaboliten an. Für die XIC-Extraktion ausgewählte Isotope werden oben im Diagramm gekennzeichnet.</li> <li data-bbox="478 797 1406 898">• <b>Mass Defect:</b> Zeigt die für die Identifizierung des ausgewählten Metaboliten verwendeten Massendefekt-Chromatogramme an. Dies ist nur spezifisch für Kleinmolekül-Daten.</li> <li data-bbox="478 920 1402 987">• <b>Isotope Pattern:</b> Zeigt ein Chromatogramm aller Peaks mit Isotopenmustern, die mit der Ausgangsverbindung übereinstimmen.</li> <li data-bbox="478 1010 1402 1111">• <b>Product Ions:</b> Zeigt ein Chromatogramm aller Peaks mit Fragment-Ionen, die mit den ausgewählten Fragmenten auf der Registerkarte „Product Ion and Neutral Losses“ übereinstimmen.</li> <li data-bbox="478 1133 1406 1234">• <b>Neutral Losses:</b> Zeigt ein Chromatogramm aller Peaks mit Neutralverlusten, die mit den ausgewählten Neutralverlusten auf der Registerkarte „Product Ion and Neutral Losses“ übereinstimmen.</li> <li data-bbox="478 1256 1406 1391">• <b>Isotope Pattern (SWATH-Erfassungsdaten):</b> Zeigt ein Chromatogramm aller Peaks mit Fragment-Isotopenmustern, die mit den ausgewählten Fragment-Isotopenmustern auf der Registerkarte „Product Ion and Neutral Losses“ übereinstimmen.</li> <li data-bbox="478 1413 1406 1509">• <b>Analog Data:</b> Zeigt ein Analog-Chromatogramm aller Peaks. Eine Peak-Beschriftung gibt übereinstimmende Peak-IDs für das analoge Peak und das entsprechende MS-Peak an.</li> </ul> <hr data-bbox="478 1536 1431 1541"/> <p data-bbox="478 1547 1406 1760"><b>Hinweis:</b> Die Chromatogramme <b>Mass Defect</b>, <b>Isotope Pattern</b>, <b>Product Ions</b>, <b>Neutral Losses</b> und <b>Isotope Pattern (SWATH-Erfassungsdaten)</b> sind nur verfügbar, wenn diese Algorithmen für die Verarbeitung ausgewählt wurden. Wenn zudem Analogdaten wie in der Verarbeitungsmethode festgelegt verarbeitet wurden, dann ist das Chromatogramm <b>Analog Data</b> in der Liste <b>Chromatograms</b> verfügbar.</p> <hr data-bbox="478 1771 1431 1776"/> <hr data-bbox="478 1787 1431 1792"/> <p data-bbox="478 1805 1342 1872"><b>Hinweis:</b> In Oligonukleotid-Arbeitsabläufen sind nur die Ansichten <b>Metabolites</b>, <b>XIC</b> und <b>Analog Data</b> verfügbar.</p> <hr data-bbox="478 1883 1431 1888"/>

## Ergebnisse anzeigen

Element	Beschreibung
	<p><b>Hinweis:</b> Wenn das Kontrollkästchen <b>Show Controls</b> aktiviert ist, dann zeigen die Chromatogramme <b>XIC</b> und <b>Analog Data</b> (sofern zutreffend) die Kontrollkurven an.</p>
5	<p>Teilfenster „MS“. Zeigt das MS-Spektrum an. Über die Optionen in der Liste <b>Show</b> werden die hervorzuhebenden Peaks ausgewählt:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Default:</b> Zeigt einen Teil der Proben-MS, zentriert um den <math>m/z</math>-Wert des ausgewählten Metaboliten.</li><li>• <b>Mass Defect:</b> Hebt alle <math>m/z</math>-Werte hervor, die mit den in der Verarbeitungsmethode ausgewählten Massendefektfiltren übereinstimmen. Dies ist nur spezifisch für Kleinmolekül-Daten.</li><li>• <b>Isotope Pattern:</b> Hebt alle <math>m/z</math>-Werte hervor, die dasselbe Isotopenmuster wie die Ausgangsverbindung aufweisen.</li></ul> <p>Bei Oligonukleotid-Arbeitsabläufen werden die Kurven <b>Predicted Isotope Pattern</b> und <b>Charge Series</b> standardmäßig überlagert. Die Standardansicht zeigt das zentrierte TOF MS-Spektrum für die ausgewählten Metaboliten. Das monoisotopische Peak ist mit der vorhergesagten Ladung gekennzeichnet und ein blauer Pfeil gibt dessen Position an. Rote Pfeile auf der <math>m/z</math>-Achse geben einzelne Isotope an, die für die XIC-Extraktion und Bereichsermittlung ausgewählt wurden. Eine theoretische Isotopenhülle überlagert Strichspektrum-Peaks, um eine Anpassungsgüte-Bewertung für beobachtete Daten bereitzustellen. Um den gesamten Bereich für das Spektrum festzulegen, doppelklicken Sie unterhalb der <math>m/z</math>-Achse. Um die vorhergesagte Position zusätzlicher Ladungszustände für den ausgewählten Metaboliten anzuzeigen, verschieben und zoomen Sie, indem Sie mit der linken Maustaste klicken und über die <math>m/z</math>-Achse ziehen.</p>
6	<p>Teilfenster „MS/MS“. Zeigt ein MS/MS-Spektrum für den ausgewählten Metaboliten an. Die Quelle dieser Daten ist eine der folgenden:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Die wiff-Datei. der Proben-IDA.</li><li>• Die wiff-Datei der Proben-SWATH-Erfassung.</li><li>• Die zugehörige MS/MS wiff-Datei, die zur Ergebnisdatei hinzugefügt wurde. Siehe Abschnitt: <a href="#">Hinzufügen von mehreren Spektren mithilfe der Schaltfläche „Add MS/MS“</a>.</li></ul> <p>Bei Oligonukleotiden werden gemeinsame Produkt-Ionen-Peaks, die auf das in den Verarbeitungsparametern ausgewählte MS/MS-Referenzspektrum abgestimmt wurden, gelb dargestellt. Nicht abgestimmte Produkt-Ionen-Peaks werden blau dargestellt.</p>

Tabelle 7-1: Spalten der Tabelle „Potential Metabolites“

Spalte	Beschreibung
<b>Report</b>	Falls ausgewählt, wird der Metabolit in den Abschlussbericht einbezogen.
<b>Peak ID</b>	Zeigt die Peak-ID des Metaboliten. Die ID basiert auf der Retentionszeit und der Masse des Metaboliten. Bei allen Vorläufer-Metaboliten ist die <b>Peak ID</b> leer.  – # wird Peaks mit derselben Masse und Retentionszeit aber unterschiedlicher Ladung zugewiesen. Beispiel: M1-1, M1-2, M1-3 usw.
<b>Name</b>	Zeigt den Namen des Metaboliten.  Bei ADC-Ergebnissen ist den Namen das Wort „Parent“ vorangestellt. „Parent“ gibt an, dass der Wirkstoff mit kleinen Molekülen (Payload) und Linker-Komponenten kombiniert werden.  Bei Oligonukleotid-Ergebnissen werden die Hauptkomponentennamen durch die Wörter „Parent“ und „Ion charge“ angegeben. Biotransformations- oder Spaltungsprodukte, die durch die vorhergesagte Peak-Ermittlung identifiziert wurden, weisen die charakteristische Schreibweise 5' oder 3' (n-#) auf. Die Ergebnisse der allgemeinen Peak-Ermittlung werden durch das Präfix „Gain“ oder „Loss“ angegeben.
<b>Formula</b>	Zeigt die neutrale Formel des Metaboliten.
<b>Assigned</b>	Falls ausgewählt, wird angegeben, dass Informationen im Arbeitsbereich „Interpretation“ vorhanden sind. Beispielsweise kann eine Struktur oder Sequenz vorhanden sein oder die Tabelle „Fragments“ kann ausgefüllt sein.
<b>Neutral Mass</b>	Zeigt die neutrale Masse des Metaboliten.
<b>m/z</b>	Zeigt das monoisotopische Masse-zu-Ladungs-Verhältnis für den Metaboliten.  Bei Oligonukleotid-Ergebnissen (wenn das Monoisotop nicht beobachtet wird) berechnet die Software die Position und markiert den <i>m/z</i> -Wert mit einem ( <i>n</i> ), wobei <i>n</i> die Anzahl der Peaks angibt, die das Monoisotop vom ersten beobachteten Peak entfernt ist.
<b>Charge</b>	Zeigt die Ladung des Metaboliten.

## Ergebnisse anzeigen

Tabelle 7-1: Spalten der Tabelle „Potential Metabolites“ (Fortsetzung)

Spalte	Beschreibung
<b>Peak Index</b>	<p>Spiegelt das Isotop der für den Metaboliten angezeigten XIC-Peak-Fläche.</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Blank cell:</b> Monoisotop</li><li>• <b>1:</b> Das erste Isotop nach dem monoisotopischen Peak</li><li>• <b>2:</b> Das zweite Isotop nach dem monoisotopischen Peak usw.</li></ul> <p>Wenn die Spalte nicht in der Tabelle enthalten ist, dann wird die XIC-Peak-Fläche mit dem Monoisotop der Metaboliten verbunden. Bei Metaboliten, die durch die Strategie für die vorhergesagte Metabolit-Suche identifiziert werden, wird ein geschätzter hypothetischer Basispeak-Index für einen Metaboliten angezeigt. Bei Metaboliten, die durch andere Strategien für die Peak-Ermittlung identifiziert werden, wird das experimentelle isotopische Peak angezeigt. Für gewöhnlich ist das experimentelle isotopische Peak das Basispeak. Bei IDA-Daten könnte das experimentelle isotopische Peak jedoch der Index des Vorläufer-Ions sein.</p>
<b>ppm</b>	Zeigt die Massengenauigkeit (in ppm) des Metaboliten.
<b>R.T. (min)</b>	Zeigt die Retentionszeit des Metaboliten.
<b>Peak Area</b>	Zeigt die XIC-Peak-Fläche des Isotops, dessen Peak-Index in der Spalte <b>Peak Index</b> angezeigt wird.
<b>% Area</b>	Zeigt die % Fläche des XIC, basierend auf der Gesamtzahl der Metaboliten in der Tabelle.
<b>% Score</b>	Zeigt die % Bewertung des Metaboliten.
<b>Analog - Peak Area</b>	Zeigt die Peak-Fläche des analogen Peaks. Nur verfügbar, wenn Analogdaten verarbeitet wurden.
<b>Analog - % Area</b>	Zeigt die % Fläche des analogen Peaks. Nur verfügbar, wenn Analogdaten verarbeitet wurden.
<b>Analog - R.T. (min)</b>	Zeigt die Retentionszeit des analogen Peaks. Nur verfügbar, wenn Analogdaten verarbeitet wurden.

## Nur gefiltertes Spektrum anzeigen

**Hinweis:** Diese Funktion gilt nicht für Oligonukleotid-Arbeitsabläufe.

Wenn der Parameter **Use advanced MS/MS filter** für die Verarbeitung einer SWATH-Erfassungs-Datendatei auf der Registerkarte „MS/MS Parameters“ in der Gruppe „Generic Parameters“ im Arbeitsbereich „Processing Parameters“ ausgewählt wurde, dann aktivieren Sie dieses Kontrollkästchen, um nur ein mit dem erweiterten Filter gefiltertes




MS/MS-Spektrum anzuzeigen. Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen, um das hintergrund-subtrahierte Spektrum anzuzeigen.

**Hinweis:** Wenn der Parameter **Use advanced MS/MS filter** ausgewählt wurde, aber nur das hintergrund-subtrahierte Spektrum im MS/MS-Spektrum angezeigt wird, dann kann das an Folgendem liegen:

- Leeres gefiltertes Spektrum.
- Ineffektiver erweiterter Filter aufgrund einer Interferenz durch einen gleichzeitig eluierenden Peak mit einer ca. 10-fachen oder höheren Intensität.
- Ineffektiver erweiterter Filter, verursacht durch weniger als fünf Datenpunkte über dem Vorläufer-Peak.

## Informationen über Ergebnisfilter

Filter können angewendet werden, um die in der Tabelle „Potential Metabolites“ angezeigten Ergebnisse einzugrenzen.

**Tip!** Klicken Sie auf das Filtersymbol , um das Dialogfeld „Results Filters“ zu öffnen.

**Tabelle 7-2: Filter**

Diesen Filter auswählen	Um Folgendes anzuzeigen
<b>Metabolites</b>	
<b>Top __ metabolites by peak area</b>	Nur die festgelegte Anzahl von Peaks, bei denen es sich basierend auf der % Peak-Fläche um die am häufigsten vorkommenden handelt.
<b>Reported metabolites</b>	Nur die Metaboliten, die in der Spalte <b>Report</b> ausgewählt wurden.
<b>Metabolites by adduct</b>	Nur die Metaboliten, die durch ein primäres Addukt gefunden wurden. Ein primäres Addukt wird definiert als das Addukt, das die erste angezeigte Auswahl in der Tabelle <b>Advanced Ion Types</b> der Registerkarte <b>Generic Parameters &gt; MS Parameters</b> darstellt. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Primäre</li> <li>• Intensivste</li> </ul>
<b>Assigned Metabolites</b>	
<b>Metabolites with structures or sequences assigned</b>	Nur die Metaboliten mit zugewiesenen Strukturen (kleine Moleküle) oder zugewiesenen Sequenzen (Peptide und Oligonukleotide), angegeben durch ein Häkchen in der Spalte <b>Assigned</b> in der Tabelle „Potential Metabolites“.

## Ergebnisse anzeigen

Tabelle 7-2: Filter (Fortsetzung)

Diesen Filter auswählen	Um Folgendes anzuzeigen
<b>Retention Time Window</b>	
Retention time from ___ to ___	Nur Peaks innerhalb des angegebenen Bereichs.
<b>Peak Area</b>	
Peak area from ___ % to ___ %	Nur Peaks mit einer % Fläche, die innerhalb des angegebenen prozentualen Bereichs liegt.
Analog peak area from ___ % to ___ %	Nur Peaks mit einer % Analog-Fläche, die innerhalb des angegebenen prozentualen Bereichs liegt. Wenn keine analogen Dateien zur Verarbeitung bereitgestellt wurden, dann hat dieser Filter keine Auswirkungen.
<b>Charge</b>	
Charge from ___ to ___	Nur die Metaboliten mit einem Ladungswert innerhalb des angegebenen Bereichs.
<b>Score</b>	
Overall score above ___ %	<p>Nur Peaks mit einer Gesamtbewertung über dem angegebenen Wert. Siehe Abschnitt: <a href="#">Registerkarte „Confirmation Scoring“</a>.</p> <p>Bei Oligonukleotid-Arbeitsabläufen wird empfohlen, die Isotopenhülle als einzigen Parameter für den Bestätigungswert zu verwenden. Zudem wird empfohlen, den <b>Overall Score</b> über 20 % festzulegen, damit Metaboliten mit niedrigen theoretischen Isotopen-Überlappungswerten entfernt werden.</p>
<b>Mass Accuracy</b>	
Accuracy within ___ ppm	Nur Peaks mit einer Massengenauigkeit, die innerhalb des angegebenen Bereichs liegt.
<b>Mass Range</b>	
m/z from ___ to ___	Nur m/z-Werte, die innerhalb des angegebenen Bereichs liegen.
<b>Product Ions and Neutral Losses</b>	
MS/MS similarity above ___	Nur Peaks mit einer Bewertung der MS/MS-Ähnlichkeit über dem angegebenen Wert. Wenn kein Referenzspektrum bereitgestellt wurde, dann hat dieser Filter keine Auswirkungen.
Minimum number of common product ions ___	Nur Peaks, die zumindest hinsichtlich der festgelegten Anzahl von Produkt-Ionen mit der Ausgangsverbindung übereinstimmen. Wenn kein Referenzspektrum bereitgestellt wurde, dann hat dieser Filter keine Auswirkungen.

Tabelle 7-2: Filter (Fortsetzung)

Diesen Filter auswählen	Um Folgendes anzuzeigen
<b>Minimum number of common neutral losses</b> —	Nur Peaks, die zumindest hinsichtlich der festgelegten Anzahl von Neutralverlusten mit der Ausgangsverbindung übereinstimmen. Wenn kein Referenzspektrum bereitgestellt wurde, dann hat dieser Filter keine Auswirkungen.

**Hinweis:** Durch das Löschen und Hinzufügen von Zeilen aus/zur Tabelle werden die **% Area** und **% Analog Area** der jeweiligen Metaboliten automatisch aktualisiert. Dies hat Einfluss darauf, wie die Filter für die Peak-Fläche, analoge Peak-Fläche und oberen Metaboliten nach Peak-Fläche auf die verbleibenden Zeilen angewendet werden.

## Ergebnisse bearbeiten

Einträge in der Tabelle „Potential Metabolites“ können bearbeitet oder gelöscht werden, um die Ergebnisse weiter zu verfeinern.

Benutzer können:

- [Zeilen löschen](#)
- [Den Namen und die Formel eines potenziellen Metaboliten bearbeiten](#)
- [Peak-IDs zuweisen](#)

### Zeilen löschen

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
5. Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ aus.

**Tipp!** Klicken Sie und drücken Sie **Strg** oder **Umschalt**, um mehrere Zeilen auszuwählen.

6. Klicken Sie auf **Edit > Delete Selected Rows**.

**Tipp!** Um den letzten Löschvorgang rückgängig zu machen, klicken Sie auf **Edit > Undo Delete**.

7. Klicken Sie auf **Save**.

# Den Namen und die Formel eines potenziellen Metaboliten bearbeiten

Siehe Abschnitt: [Benennung von Metaboliten durch die Software](#).

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
5. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ und wählen Sie **Edit Name and Formula** aus.  
Das Dialogfeld „Edit Name and Formula“ wird geöffnet.
6. Gehen Sie wie folgt vor, um den **Name** zu ändern:
  - Wählen Sie ggf. einen Namen aus der angegebenen Liste mit Optionen aus.
  - Geben Sie einen neuen Namen ein.
7. Wählen Sie ggf. ein Addukt aus der angegebenen Liste mit Optionen aus.

---

**Hinweis:** Wird das Addukt geändert, wird die **Mass accuracy** des Metaboliten automatisch aktualisiert.

---

8. Gehen Sie wie folgt vor, um die **Formula** zu ändern:
  - Falls keine ausreichenden Informationen zum Bestimmen einer Formel verfügbar sind, wählen Sie **Unknown** aus.
  - Um dem potenziellen Metaboliten eine Formel manuell hinzuzufügen, wählen Sie **Use** und geben Sie dann eine Formel im angegebenen Feld ein.
  - Wenn potenzielle Formeln von der Software vorhergesagt wurden, dann wählen Sie **Automatic** und wählen Sie einen Eintrag aus der Liste aus.

---

**Hinweis:** Wenn keine potenziellen Formeln von der Software vorhergesagt wurden, dann kann **Automatic** nicht ausgewählt werden.

---

**Hinweis:** Die Werte in den Feldern **Mass accuracy** und **RDB** werden von der Software automatisch aktualisiert, wenn die neue Formel hinzugefügt wird.

---

9. Um den Metaboliten aus der ausgewählten Zeile als Ausgangsverbindung zu identifizieren, klicken Sie auf **Assign as Parent**.
10. Klicken Sie auf **OK**.
11. Klicken Sie auf **Save**.

---

**Hinweis:** Bei Peptiden basiert die Reihenfolge der Namen auf der Massengenauigkeit des vorgeschlagenen Namens und der Anzahl der erforderlichen Manipulationen, z. B. der Anzahl der gebrochenen Bindungen. Das bedeutet, der vorgeschlagene Name für das Peptid mit einer höheren Massengenauigkeit und weniger Manipulationen wird ganz oben in der Liste angezeigt.

---

## Gruppieren nach Peaks

Verwenden Sie die Schaltfläche **Group by Peaks**, um Peaks zu gruppieren, die dieselbe neutrale Masse aufweisen, z. B. die vielfachen Ladungszustände eines Moleküls, um eine Zusammenfassungstabelle der identifizierten Moleküle anzuzeigen, wobei **Peak Area**, **%Area** usw. für alle identifizierten Ladungszustände zusammengerechnet sind. Die Peaks werden basierend auf der neutralen Masse und Retentionszeittoleranz gruppiert.

---

**Hinweis:** Die Funktion zum Gruppieren gilt nur für den Oligonukleotid-Arbeitsablauf.

---

## Peak-IDs zuweisen

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
5. Überprüfen Sie die aktuellen **Peak-IDs** in der Tabelle „Potential Metabolites“.
6. Nehmen Sie Änderungen an der Tabelle vor, einschließlich dem Löschen von Zeilen und Umbenennen von Metaboliten.
7. Klicken Sie auf **Assign ID**.

Zeilen, die mit derselben neutralen Formel und Retentionszeit verknüpft sind, werden gruppiert. Eine Zeile wird der primären Peak-ID zugewiesen und die verbleibenden Zeilen in der Gruppe werden einer sequenziellen ID zugewiesen, eine Ebene unterhalb der primären Peak-ID. Beispiel: Wenn die zugewiesene primäre Peak-ID M2 entspricht, dann wird jede verbleibende Zeile einer sequenziellen ID zugewiesen, beginnend mit M2. Beispiel: M2-1, M2-2 usw.

Nicht primäre Peak-IDs werden Peaks mit nicht primären Addukten zugewiesen. Nicht primäre Addukte sind jene, die in der Tabelle „Advanced Ion Types“ ausgewählt wurden, in der Liste der Ionentypen jedoch nicht angezeigt werden. In der Liste der Ionentypen werden nur die primären Peak-IDs angezeigt.

## MS/MS-Spektren

MS/MS-Spektren können für jeden Metaboliten hinzugefügt, entfernt oder ausgetauscht werden. Ein MS/MS-Spektrum kann manuell hinzugefügt werden, indem ein einzelnes zentriertes MS/MS-Spektrum im Arbeitsbereich „Explorer“ kopiert und anschließend im

## Ergebnisse anzeigen

---

Arbeitsbereich „Results“ eingefügt wird, oder automatisch über die Schaltfläche **Add MS/MS** im Arbeitsbereich „Results“.

## Spektren durch Einfügen hinzufügen

---

**Hinweis:** Dies ist eine Betafunktion.

---

**Hinweis:** Diese Funktion ist ausschließlich im Oligonukleotid-Arbeitsablauf für TOF-MS/MS- und IDA-Daten verfügbar. Das Einfügen von MS/MS-Spektren aus dem IDA-Explorer wird derzeit nicht unterstützt. Datendateien müssen als Standard-TIC geöffnet und im Arbeitsbereich „Explorer“ zentriert werden, bevor sie in Molecule Profiler eingefügt werden.

---

**Hinweis:** Das vorhandene MS/MS-Spektrum in der Ergebnisdatei wird erst überschrieben, wenn die Ergebnisdatei gespeichert wurde. Um zum ursprünglichen Spektrum für den ausgewählten Metaboliten (wie in der Ergebnisdatei gespeichert) zurückzukehren, klicken Sie auf **Remove MS/MS**, bevor Sie die Ergebnisdatei speichern.

---

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei, wählen Sie diese aus, und klicken Sie dann auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
4. Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ aus.
5. Öffnen Sie auf der SCIEX OS Startseite den Arbeitsbereich „Explorer“.
6. Wählen Sie **File > Open Sample** aus.  
Das Dialogfeld „Select Sample“ wird geöffnet.
7. Navigieren Sie zur Datendatei mit der Probe, klicken Sie auf **+**, um diese zu erweitern, wählen Sie die zu öffnende Probe aus und klicken Sie dann auf **OK**.  
Bei der Datendatei muss es sich um eine wiff- oder wiff2-Datendatei mit TOF-MS/MS- oder IDA-Daten handeln.
8. Wenn die Datendatei IDA-Daten enthält, dann wählen Sie **As a standard TIC** im Dialogfeld „Open IDA Sample“ aus und klicken Sie dann auf **OK**.
9. Öffnen Sie ein MS- und MS/MS-Spektrum.

---

**Tipp!** Legen Sie zum Öffnen der Spektren ein Auswahlfenster fest, oder doppelklicken Sie auf eine Retentionszeit im Teilfenster „TIC“.

---

10. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Kopfzeile des MS/MS-Spektrums und wählen Sie dann **Remove All Traces Except Active** aus.
11. Wählen Sie **Process > Centroid Spectrum** aus.  
Das Dialogfeld „Centroid“ wird geöffnet.

12. Wählen Sie aus, ob der Schwerpunkt auf **Intensity**, **Height**, **Area** oder **Intensity sum above 50%** gelegt werden soll.
13. Wählen Sie **Edit > Copy** aus.
14. Wechseln Sie zum Arbeitsbereich „Molecule Profiler“.
15. Klicken Sie auf **Paste MS/MS**.  
Das MS/MS-Spektrum wird hinzugefügt.
16. Klicken Sie auf **Save**.


---

## Hinzufügen von mehreren Spektren mithilfe der Schaltfläche „Add MS/MS“

---

**Hinweis:** Das vorhandene MS/MS-Spektrum in der Ergebnisdatei wird erst überschrieben, wenn die Ergebnisdatei gespeichert wurde. Um zum ursprünglichen Spektrum für den ausgewählten Metaboliten (wie in der Ergebnisdatei gespeichert) zurückzukehren, klicken Sie auf **Remove MS/MS**, bevor Sie die Ergebnisdatei speichern.

---

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei, wählen Sie diese aus, und klicken Sie dann auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
4. Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ aus.
5. Klicken Sie auf **Add MS/MS**.  
Das Dialogfeld „Add MS/MS“ wird geöffnet.
6. Klicken Sie auf **Select MS/MS**.  
Das Dialogfeld „Select Data“ wird geöffnet.
7. Navigieren Sie zum entsprechenden Ordner **Source** und wählen Sie diesen aus.
8. Klicken Sie auf **OK**.
9. Wählen Sie im Teilfenster „Available“ des Dialogfeldes „Select Data“ die wiff-Datei und Injektion mit einem MS/MS-Spektrum aus und klicken Sie dann auf das Symbol () um die Datei in das Teilfenster „Selected“ zu verschieben.

---

**Tipp!** Es können bis zu 10 Injektionen ausgewählt werden.

---

10. Wenn alle erforderlichen Dateien im Dialogfeld „Add MS/MS“ angezeigt werden, dann klicken Sie auf **OK**.  
Die Software versucht, ein übereinstimmendes Spektrum für jeden Metaboliten zu finden.
11. Überprüfen Sie die Bewertung der jeweiligen Metaboliten.

## Ergebnisse anzeigen

---

Wenn das MS/MS-Spektrum geändert wurde, dann kann es sein, dass die Software die % **Score** neu berechnet.

12. Klicken Sie auf **Save**.

Informationen zum Bearbeiten spezifischer Fragmenttypen innerhalb eines einzelnen MS/MS-Spektrums finden Sie im Abschnitt: [Oligonukleotid-Arbeitsabläufe](#).

## Spektren entfernen

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
5. Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ aus.
6. Klicken Sie auf **Remove MS/MS** im Teilfenster „MS/MS“.

---

**Hinweis:** Falls ein IDA-Spektrum für den potenziellen Metaboliten vorhanden ist, wird dieses im Teilfenster „MS/MS“ angezeigt.

---

7. Klicken Sie auf **Save**.

## MS/MS-Spektrumsdateien entfernen

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
5. Klicken Sie auf **Add MS/MS**.
6. Wählen Sie die entsprechende wiff-Datei im Feld **MS/MS Samples** aus.
7. Klicken Sie auf **Remove** und dann auf **OK**.  
Alle zugehörigen MS/MS-Spektren in der wiff-Datei werden aus den Ergebnissen entfernt.
8. Klicken Sie auf **Save**.



Nachdem die Peaks in einer relevanten Probe identifiziert wurden, verwenden Sie die Fragment-Interpretation, um die Struktur der jeweiligen potenziellen Metaboliten zu identifizieren.

## Informationen über die Interpretationsansicht

Die Interpretationsansicht im Arbeitsbereich „Results“ zeigt die Daten und Tools, die erforderlich sind, um eine potenzielle Struktur für jeden Metaboliten in einer Ergebnisdatei zu ermitteln.

### Interpretationsansichten



## Kleinmolekül-Interpretationsansicht

Abbildung 8-1: Kleinmolekül-Interpretationsansicht

Interpretation Desotope Prepare... Options... Generate Apply Remove Selected neutral formula: C<sub>32</sub>H<sub>40</sub>BrN<sub>5</sub>O<sub>5</sub>

TOF MS/MS of 654.2

Assigned: 29 of 30 peaks, score for 29 proposed assignments: 654.5

Fragments: 29 of 127 Proposed Formulae

Use	Mass (m/z)	Ion Formula	Error (mDa)	Intensity (cps)	RDB	Proposed Structures	Sc
<input checked="" type="checkbox"/>	176.0652	C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> N	0.1	207.3	11.6	0	
<input checked="" type="checkbox"/>	181.1342	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O	0.7	804.1	4.0	1	
<input checked="" type="checkbox"/>	191.0730	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> N	0.0	338.0	11.5	0	
<input checked="" type="checkbox"/>	206.0690	C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	0.0	1141.1	12.0	0	
<input checked="" type="checkbox"/>	207.0690	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	2.5	2740.1	12.0	0	

Structure Details for C<sub>1</sub>...

2a Use Broken & Del

2b Use Mass Fi

Composition: C<sub>32</sub>H<sub>40</sub>BrN<sub>5</sub>O<sub>5</sub>, Mass: 653.2213

Parent Structure Structure Candidates

3 No additional proposed structures

## MS/MS-Daten charakterisieren

Element	Schnittstellenkomponente	Beschreibung
1	Teilfenster „MS/MS“	Zeigt das MS/MS-Spektrum des ausgewählten Metaboliten an. Das Spiegelbild des MS/MS-Referenzspektrums wird (falls verfügbar) ebenfalls angezeigt. Sternchen identifizieren Peaks, die für die Zuweisung ausgewählt wurden. Die Quelle dieses Spektrums ist die wiff-Datei der Proben-IDA, die wiff-Datei der Proben-SWATH-Erfassung oder eine zugehörige MS/MS wiff-Datei, die zur Ergebnisdatei hinzugefügt wurde. Eine Beschreibung der Funktionen der Schaltflächen finden Sie in der Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-1</a> .
2	Tabelle „Fragments“	<p>Listet alle zugewiesenen Fragmente für den ausgewählten Metaboliten auf, einschließlich deren <i>m/z</i>-Wert, die Anzahl der vorgeschlagenen Strukturen und die Bewertung. Wenn einem bestimmten <i>m/z</i>-Wert verschiedene Formeln zugewiesen werden konnten, dann enthält die Tabelle eine Zeile für jede Formel. Standardmäßig ist bei der Zeile mit der höchsten Bewertung für die jeweilige Kombination aus Formel und <i>m/z</i>-Wert das Kontrollkästchen <b>Use</b> aktiviert.</p> <hr/> <p><b>Tipp!</b> Zeilen, bei denen das Kontrollkästchen <b>Use</b> nicht aktiviert ist, können ausgeblendet werden. Um alle Zeilen anzuzeigen, klicken Sie mit der rechten Maustaste und klicken Sie dann auf <b>Show Hidden Rows</b>.</p> <hr/> <p>Eine Beschreibung der Funktionen der Symbole finden Sie in der Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-3</a>.</p>
2a	Tabelle „Structure Details“	<p>Listet die Teile der Struktur auf, die das ausgewählte Fragment ergeben könnten, einschließlich der Anzahl der gebrochenen Bindungen, des Delta H-Wertes und der Bewertung. Durch die Auswahl einer Zeile in dieser Tabelle wird der zugehörige Teil der Struktur hervorgehoben.</p> <p>Standardmäßig ist bei der Fragment-Struktur mit der höchsten Bewertung das Kontrollkästchen <b>Use</b> aktiviert.</p>
2b	Tabelle „Contained Neutral Losses“	Enthält die Neutralverluste der beiden Fragmentmassen.

Element	Schnittstellenkomponente	Beschreibung
3	Teilfenster „Structure charts“	<p>Enthält die folgenden zwei Registerkarten:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Die Registerkarte „Parent Structure“ mit der Ausgangsstruktur des ausgewählten Metaboliten.</li> <li>Die Registerkarte „Structure Candidates“, bei der es sich um ein interaktives Histogramm handelt, das eine Tabelle mit der vollständigen Liste der vorgeschlagenen Strukturen enthält, die absteigend nach der Bewertung sortiert ist. Durch die Auswahl einer Zeile in dieser Tabelle wird die im Teilfenster „Structure“ (Element 2) angezeigte Struktur geändert. Um eine bestimmte Struktur in die Ergebnisse einzubeziehen, aktivieren Sie das Kontrollkästchen <b>Apply to Results</b> für diese Struktur. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über die Registerkarte „Structure Candidates“</a>.</li> </ul>
4	Teilfenster „Structure“	Ermöglicht dem Benutzer, eine Kandidatenstruktur für potenzielle Metaboliten zu laden und enthält grundlegende Zeichenwerkzeuge zum Bearbeiten der Struktur. Eine Beschreibung der Funktionen der Schaltflächen finden Sie in der Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-2</a> .

Tabelle 8-1: Schaltflächen des Teilfensters „MS/MS“

Schaltfläche	Beschreibung
<b>Deisotope</b>	Blendet alle Isotope im Teilfenster „MS/MS“ aus. Klicken Sie erneut, um die Isotope anzuzeigen.
<b>Prepare</b>	Öffnet das Dialogfeld „Interpret Data“, in dem Benutzer die für die Interpretation der ausgewählten Metaboliten erforderlichen Details bearbeiten können (Formel, aktive Peaks, Neukalibrierung des MS/MS-Spektrums).
<b>Options</b>	Öffnet das Dialogfeld „Options“, in dem Benutzer MS/MS-Fragmente zuweisen können. Siehe die Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-15</a> im Abschnitt: <a href="#">Festlegen von Optionen</a> .
<b>Generate</b>	Füllt die Registerkarte „Structure Candidate“ mit automatisch generierten potenziellen Kandidaten für den ausgewählten Metaboliten auf. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über die Registerkarte „Structure Candidates“</a> .
<b>Apply</b>	Wendet die Interpretationsänderungen auf den ausgewählten Peak an.




**Tabelle 8-1: Schaltflächen des Teilfensters „MS/MS“ (Fortsetzung)**

Schaltfläche	Beschreibung
Remove	Entfernt die zugewiesenen Fragmente und die Metabolitstruktur vom ausgewählten Peak.

**Tabelle 8-2: Schaltflächen des Teilfensters „Structure“**

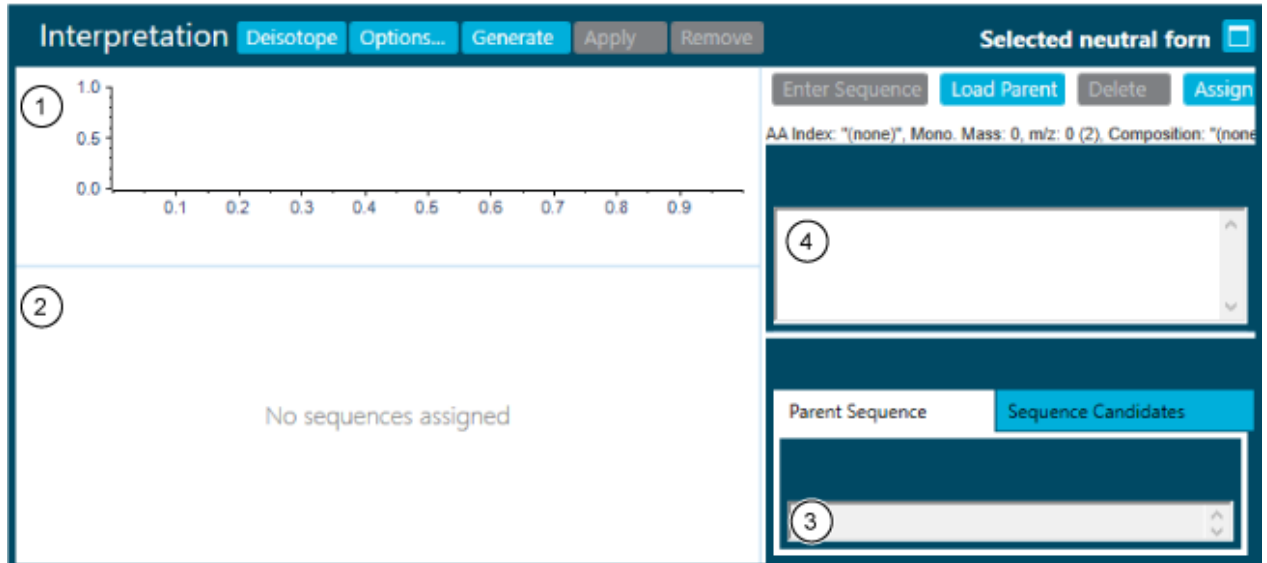
Schaltfläche	Beschreibung
Load	<ul style="list-style-type: none"><li>• Vorläufer laden: Öffnet die Ausgangsstruktur des ausgewählten Metaboliten.</li><li>• Struktur laden: Öffnet eine Strukturdatei für den ausgewählten Peak.</li></ul>
Delete	Entfernt die angezeigte Struktur aus dem Teilfenster „Structure“.
Save As	Ermöglicht dem Benutzer, die angezeigte Struktur unter einem anderen Dateinamen zu speichern.
Assign	Berechnet die Fragmente und Neutralverluste für die potenzielle Struktur und weist dann die Ionen dem MS/MS-Spektrum zu.

**Tabelle 8-3: Symbole der Tabelle „Fragments“**

Symbol	Beschreibung
	Fügt eine Beschriftung für das ausgewählte Fragment hinzu.
	Löscht alle Beschriftungen aus dem MS/MS-Spektrum.
	Öffnet das Dialogfeld „Interpretation Filters“. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über Interpretationsfilter für kleine Moleküle</a> .

## Peptid-Interpretationsansicht

Abbildung 8-2: Peptid-Interpretationsansicht



Element	Schnittstellenkomponente	Beschreibung
1	Teilfenster „MS/MS“	Zeigt das MS/MS-Spektrum des ausgewählten Metaboliten an. Das Spiegelbild des MS/MS-Referenzspektrums wird (falls verfügbar) ebenfalls angezeigt. Die Quelle dieses Spektrums ist die wiff-Datei der Proben-IDA, die wiff-Datei der Proben-SWATH-Erfassung oder eine zugehörige MS/MS wiff-Datei, die zur Ergebnisdatei hinzugefügt wurde. Eine Beschreibung der Funktionen der Schaltflächen finden Sie in der Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-4</a> .
2	Teilfenster „Sequence“	Ermöglicht dem Benutzer die Eingabe einer Sequenz. Eine Beschreibung der Funktionen der Schaltflächen finden Sie in der Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-5</a> .
3	Tabelle „Fragments“	Enthält eine Liste der vorgeschlagenen Formeln für die ausgewählten potenziellen Metaboliten. Die Liste beinhaltet die <i>m/z</i> -Werte, Sequenzen, Fragmentionentypen (z. B. y oder b), Ladung, Fehler und Intensitäten. Eine Beschreibung der Funktionen der Symbole finden Sie in der Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-6</a> .

Element	Schnittstellenkomponente	Beschreibung
4	Teilfenster „Sequence charts“	<p>Enthält die folgenden zwei Registerkarten:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Die Registerkarte „Parent Sequence“, die die Sequenz des Ausgangswirkstoffs enthält.</li> <li>Die Registerkarte „Sequence Candidates“, die ein interaktives Histogramm ist und eine Tabelle enthält, die eine Liste mit Sequenzen enthält, die von der Software vorgeschlagen werden. Jeder vorgeschlagenen Sequenz wird eine auf der zugewiesenen prozentualen Peak-Fläche basierende Bewertung zugewiesen. Um eine bestimmte Sequenz auf die Ergebnisse anzuwenden, aktivieren Sie das Kontrollkästchen <b>Apply to Results</b> für diese Sequenz. Die angewendete Sequenz wird als die Standard-Sequenz angezeigt, nachdem die Ergebnisdatei geschlossen und erneut geöffnet wurde. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über die Registerkarte „Sequence Candidates“</a>.</li> </ul>

Tabelle 8-4: Schaltflächen des Teilfensters „MS/MS“

Schaltfläche	Beschreibung
<b>Deisotope</b>	Entfernt alle Isotope aus dem MS/MS-Spektrum.
<b>Options</b>	Öffnet das Dialogfeld „Options“. Siehe die Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-16</a> im Abschnitt: <a href="#">Festlegen von Optionen</a> .
<b>Generate</b>	Füllt die Registerkarte „Structure Candidate“ mit automatisch generierten potenziellen Kandidaten für den ausgewählten Metaboliten auf. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über die Registerkarte „Structure Candidates“</a> .
<b>Apply</b>	Wendet die Interpretationsänderungen auf den ausgewählten Peak an.
<b>Remove</b>	Entfernt die zugewiesenen Fragmente und die Metabolitstruktur aus dem ausgewählten Peak.





Tabelle 8-5: Schaltflächen des Teilfensters „Sequence“

Schaltfläche	Beschreibung
<b>Enter Sequence</b>	Ermöglicht dem Benutzer die Eingabe einer neuen Sequenz im Teilfenster „Sequence“. Siehe Abschnitt: <a href="#">Namenskonventionen für Peptidsequenzen</a> .

Tabelle 8-5: Schaltflächen des Teilfensters „Sequence“ (Fortsetzung)

Schaltfläche	Beschreibung
Load Parent	Öffnet die Ausgangssequenz des ausgewählten Metaboliten.
Delete	Entfernt die angezeigte Sequenz aus dem Teilfenster „Sequence“.
Assign	Berechnet die Fragmente und Neutralverluste für die potenzielle Struktur und weist dann die Ionen dem MS/MS-Spektrum zu.

Tabelle 8-6: Symbole der Tabelle „Fragments“

Symbol	Beschreibung
	Fügt Beschriftungen für alle Peaks hinzu.
	Fügt eine Beschriftung für das ausgewählte Fragment hinzu.
	Löscht alle Beschriftungen aus dem MS/MS-Spektrum.
	Öffnet das Dialogfeld „Interpretation Filters“. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über Interpretationsfilter für Peptide</a> .

## Oligonukleotid-Interpretationsansicht

Abbildung 8-3: Oligonukleotid-Interpretationsansicht

The screenshot displays the 'Interpretation' window for a selected neutral formula: C194H247N70O120P19. The main panel shows a mass spectrum plot with peaks at m/z 110.0353 and 110.0446. Below the plot, a table lists 24 proposed formulae for fragments. The table columns are Use, Mass (m/z), Sequence, Ion, Charge, Error (ppm), and Intensity (cps). The first six rows are shown, with the first row selected.

Use	Mass (m/z)	Sequence	Ion	Charge	Error (ppm)	Intensity (cps)
<input checked="" type="checkbox"/>	110.0353	// aC /C-SH...	B1	1	-0.5	194.0
<input checked="" type="checkbox"/>	125.0353	// aT /C-SH...	B5	1	-2.6	341.0
<input checked="" type="checkbox"/>	134.0474	// aA /C-SH...	B8	1	1.1	868.0
<input checked="" type="checkbox"/>	176.9959	// /C5H7O5P/	PO5C5H7	1	0.3	629.0
<input checked="" type="checkbox"/>	195.0046	dC /C-4H-3...	d1 - B	1	-9.1	225.0
<input checked="" type="checkbox"/>	288.0381	// aC /HPO2/	(wb)4 - H2O	1	-0.1	471.0

On the right side, there are buttons for 'Load Parent', 'Delete', and 'Assign'. Below these, the 'Mono. Mass' and 'Composition' are displayed. A text area shows the sequence 'dCdGdG dCdTdA dCdCdT dTdGdT dTdAdG dCdAdC dAdT'. Below this, a 'Parent Sequence' section shows the sequence 'dCdGdG dCdTdA dCdCdT dTdGdT dTdAdG dCdAdC dAdT'.

## MS/MS-Daten charakterisieren

Element	Schnittstellenkomponente	Beschreibung
1	Teilfenster „MS/MS“	Zeigt das MS/MS-Spektrum des ausgewählten Metaboliten an. Das Spiegelbild des MS/MS-Referenzspektrums wird (falls verfügbar) ebenfalls angezeigt. Die Quelle dieses Spektrums ist die wiff-Datei der Proben-IDA, die wiff-Datei der Proben-SWATH-Erfassung oder eine zugehörige MS/MS wiff-Datei, die zur Ergebnisdatei hinzugefügt wurde. Eine Beschreibung der Funktionen der Schaltflächen finden Sie in der Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-7</a> .
2	Tabelle „Fragments“	Enthält eine Liste der vorgeschlagenen Formeln für die ausgewählten potenziellen Metaboliten. Die Liste beinhaltet die <i>m/z</i> -Werte, Sequenzen, Fragmentionentypen (z. B. y oder b), Ladung, Fehler und Intensitäten. Eine Beschreibung der Funktionen der Symbole finden Sie in der Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-6</a> .
3	Teilfenster „Sequence charts“	Enthält die Sequenz des Ausgangswirkstoffs.
4	Teilfenster „Sequence“	Ermöglicht dem Benutzer die Eingabe einer Sequenz. Eine Beschreibung der Funktionen der Schaltflächen finden Sie in der Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-5</a> .

**Tabelle 8-7: Schaltflächen des Teilfensters „MS/MS“**

Schaltfläche	Beschreibung
Deisotope	Entfernt alle Isotope aus dem MS/MS-Spektrum.
Options	Öffnet das Dialogfeld „Options“. Siehe die Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-18</a> im Abschnitt: <a href="#">Festlegen von Optionen</a> .
Apply	Wendet die Interpretationsänderungen auf den ausgewählten Peak an.
Remove	Entfernt die zugewiesenen Fragmente und die Metabolitstruktur aus dem ausgewählten Peak.

**Tabelle 8-8: Schaltflächen des Teilfensters „Sequence“**





Schaltfläche	Beschreibung
Load Parent	Öffnet die Ausgangssequenz des ausgewählten Metaboliten.
Delete	Entfernt die angezeigte Sequenz aus dem Teilfenster „Sequence“.



Tabelle 8-8: Schaltflächen des Teilfensters „Sequence“ (Fortsetzung)

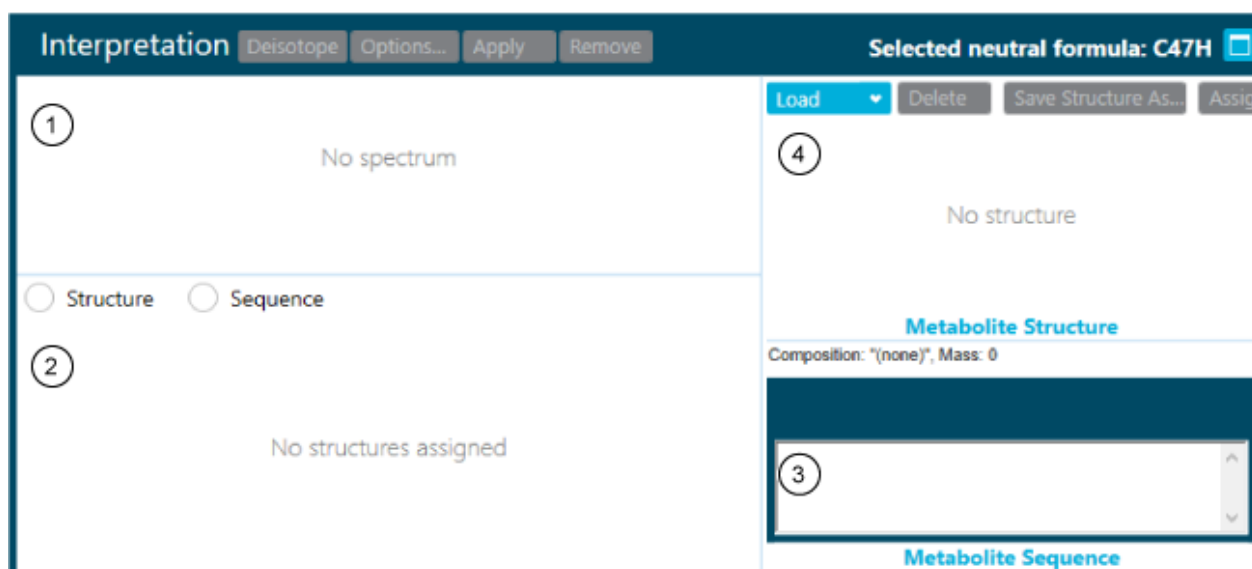
Schaltfläche	Beschreibung
Assign	Berechnet die Fragmente und Neutralverluste für die potenzielle Struktur und weist dann die Ionen dem MS/MS-Spektrum zu.

Tabelle 8-9: Symbole der Tabelle „Fragments“

Symbol	Beschreibung
	Fügt Beschriftungen für alle Peaks hinzu.
	Fügt eine Beschriftung für das ausgewählte Fragment hinzu.
	Löscht alle Beschriftungen aus dem MS/MS-Spektrum.
	Öffnet das Dialogfeld „Interpretation Filters“. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über Interpretationsfilter für Oligonukleotide</a> .

## ADC-Interpretationsansicht

Abbildung 8-4: ADC-Interpretationsansicht



## MS/MS-Daten charakterisieren

Element	Schnittstellenkomponente	Beschreibung
1	Teilfenster „MS/MS“	Zeigt das MS/MS-Spektrum des ausgewählten Metaboliten an. Das Spiegelbild des MS/MS-Referenzspektrums wird (falls verfügbar) ebenfalls angezeigt. Die Quelle dieses Spektrums ist die wiff-Datei der Proben-IDA, die wiff-Datei der Proben-SWATH-Erfassung oder eine zugehörige MS/MS wiff-Datei, die zur Ergebnisdatei hinzugefügt wurde. Eine Beschreibung der Funktionen der Schaltflächen finden Sie in der Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-10</a> .
2	Tabelle „Fragments“	Enthält die folgenden Registerkarten: <ul style="list-style-type: none"><li>• Die Registerkarte „Structure“, auf der alle zugewiesenen Fragmente für den ausgewählten Metaboliten aufgelistet werden, einschließlich deren <i>m/z</i>-Wert, die Anzahl der vorgeschlagenen Strukturen und die Bewertung. Wenn einem bestimmten <i>m/z</i>-Wert verschiedene Formeln zugewiesen werden konnten, dann enthält die Tabelle eine Zeile für jede Formel. Standardmäßig ist bei der Zeile mit der höchsten Bewertung für die jeweilige Kombination aus Formeln und <i>m/z</i>-Wert das Kontrollkästchen <b>Use</b> aktiviert.</li><li>• Die Registerkarte „Sequence“, auf der alle vorgeschlagenen Formeln für die ausgewählten potenziellen Metaboliten aufgelistet sind. Die Liste beinhaltet die <i>m/z</i>-Werte, Sequenzen, Fragmentionentypen (z. B. y oder b), Ladung, Fehler und Intensitäten.</li></ul> Eine Beschreibung der Funktionen der Symbole finden Sie in der Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-13</a> .
3	Teilfenster „Sequence“	Zeigt den Teil der Sequenz, der mit dem Payload- oder Linker-Teil konjugiert ist. Um den mit dem Payload- oder dem Linker-Teil konjugierten Rückstand anzugeben, wählen Sie den Rückstand aus, klicken Sie mit der rechten Maustaste und wählen Sie dann <b>Mark Residue to Conjugate</b> aus.
4	Teilfenster „Structure“	Ermöglicht dem Benutzer, eine Kandidatenstruktur für potenzielle Metaboliten zu laden und enthält einfache Zeichenwerkzeuge zum Bearbeiten der Struktur. Eine Beschreibung der Funktionen der Schaltflächen finden Sie in der Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-11</a> .

Tabelle 8-10: Schaltflächen des Teilfensters „MS/MS“

Schaltfläche	Beschreibung
Deisotope	Entfernt alle Isotope aus dem MS/MS-Spektrum.
Options	Öffnet das Dialogfeld „Options“. Siehe die Tabelle: <a href="#">Tabelle 8-21</a> im Abschnitt: <a href="#">Festlegen von Optionen</a> .
Apply	Wendet die Interpretationsänderungen auf den ausgewählten Peak an.
Remove	Entfernt die zugewiesenen Fragmente und die Metabolitstruktur aus dem ausgewählten Peak.

Tabelle 8-11: Schaltflächen des Teilfensters „Structure“

Schaltfläche	Beschreibung
Load	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Load Parent Structure:</b> Zum Öffnen der Ausgangsstruktur des ausgewählten Metaboliten.</li> <li>• <b>Load Sequence:</b> Zum Öffnen der Sequenz des ausgewählten Metaboliten.</li> </ul>
Delete	Entfernt die geladene Struktur aus dem Teilfenster „Structure“, die geladenen Sequenzinformationen aus dem Teilfenster „Sequence“ und die zugewiesene Struktur und Sequenzinformationen aus der Tabelle „Fragments“.
Save Structure As	Ermöglicht dem Benutzer, die Struktur unter einem anderen Dateinamen zu speichern.
Assign	Berechnet die Fragmente und Neutralverluste für die potenzielle Struktur und weist dann die Ionen dem MS/MS-Spektrum zu.





Tabelle 8-12: Schaltflächen der Tabelle „Fragments“

Schaltfläche	Beschreibung
Structure	Listet alle zugewiesenen Fragmente für den ausgewählten Metaboliten auf, einschließlich deren $m/z$ -Wert, die Anzahl der vorgeschlagenen Strukturen und die Bewertung. Wenn einem bestimmten $m/z$ -Wert verschiedene Formeln zugewiesen werden konnten, dann enthält die Tabelle eine Zeile für jede Formel. Standardmäßig ist bei der Zeile mit der höchsten Bewertung für die jeweilige Kombination aus Formeln und $m/z$ -Wert das Kontrollkästchen <b>Use</b> aktiviert.

Tabelle 8-12: Schaltflächen der Tabelle „Fragments“ (Fortsetzung)

Schaltfläche	Beschreibung
Sequence	Listet alle vorgeschlagenen Formeln für die ausgewählten potenziellen Metaboliten auf. Die Liste beinhaltet die <i>m/z</i> -Werte, Sequenzen, Fragment-Ionentypen (z. B. y oder b), Ladung, Fehler und Intensitäten.

Tabelle 8-13: Symbole der Tabelle „Fragments“

Symbol	Beschreibung
	Fügt Beschriftungen für alle Peaks hinzu.
	Fügt eine Beschriftung für das ausgewählte Fragment hinzu.
	Löscht alle Beschriftungen aus dem MS/MS-Spektrum.
	Öffnet das Dialogfeld „Interpretation Filters“. Siehe Abschnitt: <a href="#">Informationen über Interpretationsfilter für das ADC</a> .

## Manuelle Interpretation

### Manuelle Interpretation



### Kleinmolekül-Arbeitsablauf

Laden einer Struktur

Bearbeiten einer Struktur

Vorbereitung einer strukturellen Zuweisung



Den Namen und die Formel eines potenziellen Metaboliten bearbeiten

Erneutes Kalibrieren des MS/MS-Spektrums

Deisotopieren des MS/MS-Spektrums

Aktive Peaks auswählen

Auswahl von Fragment-Peaks für die Zuweisung

Festlegen von Optionen

Fragmentstrukturen zuweisen



Vorgeschlagene Formeln und Strukturen zuweisen

Eine Formelstruktur für jedes Fragment auswählen

Markush-Strukturen anbringen

Informationen über Peak-Beschriftungen →

Hinzufügen einer Peak-Beschriftung zum MS/MS-Spektrum

Informationen über Interpretationsfilter für kleine Moleküle

### Laden einer Struktur

Laden Sie vor Beginn der strukturellen Ermittlung eines Metaboliten die Strukturdateien, mithilfe derer die Software potenzielle Fragment-Strukturen bestimmen kann.

---

**Hinweis:** Ist eine Struktur nicht geladen, können potenzielle Formeln dennoch Fragmenten zugewiesen werden.

---

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu einer Ergebnisdatei und wählen Sie diese aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.
5. Wählen Sie im Feld **Show** die Option **Interpretation** aus.
6. Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ aus.
7. Klicken Sie im Teilfenster „Structure“ auf **Load** und wählen Sie dann die Option **Load Structure** aus.  
Das Dialogfeld „Open Structure File“ wird geöffnet.
8. Navigieren Sie zu einer Strukturdatei und wählen Sie diese aus.

---

**Hinweis:** Die Software akzeptiert Strukturdateien im sdf- oder mol-Format.

---

9. Falls kleinere Änderungen erforderlich sind, bearbeiten Sie die Struktur. Siehe Abschnitt: [Bearbeiten einer Struktur](#).

### Bearbeiten einer Struktur

Verwenden Sie nach dem Laden einer Struktur für einen bestimmten Metaboliten die Bearbeitungstools, um kleinere Änderungen vorzunehmen.

---

**Tipp!** Verwenden Sie die Bearbeitungstools, um kleinere Änderungen an einer Struktur vorzunehmen, z. B. unterschiedliche Bindungspositionen für eine metabolische Transformation. Die Bearbeitungstools sollten nicht verwendet werden, um neue Strukturen zu erstellen oder um größere Änderungen an vorhandenen Strukturen vorzunehmen.

---

Tabelle 8-14: Bearbeiten einer Struktur

Ziel	Aufgabe
Ein Atom zu einer Struktur hinzufügen	Ziehen Sie ein bestimmtes Symbol auf der Palette zur neuen Position. Das hinzugefügte Atom bildet eine Einfachbindung mit dem nächstgelegenen vorhandenen Atom.
Neue Atome auf der Palette erstellen	Klicken Sie auf ein leeres Quadrat, geben Sie das Symbol im Dialogfeld „Specify Symbol“ ein und klicken Sie dann auf <b>OK</b> .  <b>Tip!</b> Klicken Sie auf das hinzugefügte Quadrat und geben Sie ein neues Symbol ein, um verschiedene Atome zu erstellen.
Einen Teil der Struktur hervorheben	Ziehen Sie einen Kreis um die erforderlichen Atome und Bindungen.
Ein oder mehrere Atome verschieben	Ziehen Sie einen hervorgehobenen Teil der Struktur zur neuen Position. Wenn der Teil an ein anderes Atom gebunden ist, dann wird die Bindung an die neue Position verschoben. Wenn der Teil an zwei oder mehrere Atome gebunden ist, dann wird der Teil verschoben, die vorhandenen Bindungen bleiben jedoch unverändert.
Eine Struktur in eine vorhandene Struktur einfügen	Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Struktur und klicken Sie auf eine der folgenden Optionen: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Insert .mol File</b>, um eine weitere Struktur hinzuzufügen.</li> <li>• <b>Insert Conjugate</b>, um eine bestimmte Konjugatstruktur hinzuzufügen.</li> </ul>
Ein oder mehrere Atome löschen	Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf einen hervorgehobenen Teil der Struktur und klicken Sie dann auf <b>Remove Selected Atoms</b> .
Eine Bindung erstellen	Wählen Sie zwei nicht gebundene Atome aus, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Auswahl, klicken Sie auf <b>New Bond</b> , und wählen Sie dann die Art der Bindung aus.
Eine Bindung bearbeiten	Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf eine Bindung, klicken Sie auf <b>Set Bond Type</b> , und wählen Sie dann die Art der Bindung aus.
Eine Bindung löschen	Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf eine Bindung und anschließend auf <b>Remove Bond</b> .

Tabelle 8-14: Bearbeiten einer Struktur (Fortsetzung)

Ziel	Aufgabe
Den Ladungszustand eines vorhandenen Atoms ändern	Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Atom, klicken Sie auf <b>Atom Charge State</b> , und wählen Sie dann den Zustand aus.

**Tipp!** Um die bearbeitete Struktur als separate Datei zu speichern, klicken Sie auf **Save As**.

**Tipp!** Strukturen können als mol- oder sdf-Dateien gespeichert werden. Geben Sie die entsprechende Erweiterung im Dialogfeld „Save As“ ein.

## Vorbereitung einer strukturellen Zuweisung

Bei der Vorbereitung einer strukturellen Zuweisung können vier Aufgaben durchgeführt werden:

- Bearbeiten des Namens oder der Formel des potenziellen Metaboliten.
- Erneutes Kalibrieren des MS/MS-Spektrums.
- Auswahl bestimmter Peaks im MS/MS-Spektrum.
- Auswahl von Fragment-Peaks für die Interpretation.

**Hinweis:** Wenn keine dieser Aufgaben erforderlich ist, dann können Benutzer diese Vorgänge ignorieren und umgehend Fragmentstrukturen zuweisen.

### Den Namen und die Formel eines potenziellen Metaboliten bearbeiten

Siehe Abschnitt: [Benennung von Metaboliten durch die Software](#).

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
5. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ und wählen Sie **Edit Name and Formula** aus.  
Das Dialogfeld „Edit Name and Formula“ wird geöffnet.
6. Gehen Sie wie folgt vor, um den **Name** zu ändern:
  - Wählen Sie ggf. einen Namen aus der angegebenen Liste mit Optionen aus.
  - Geben Sie einen neuen Namen ein.
7. Wählen Sie ggf. ein Addukt aus der angegebenen Liste mit Optionen aus.

## MS/MS-Daten charakterisieren

---

**Hinweis:** Wird das Addukt geändert, wird die **Mass accuracy** des Metaboliten automatisch aktualisiert.

---

8. Gehen Sie wie folgt vor, um die **Formula** zu ändern:
    - Falls keine ausreichenden Informationen zum Bestimmen einer Formel verfügbar sind, wählen Sie **Unknown** aus.
    - Um dem potenziellen Metaboliten eine Formel manuell hinzuzufügen, wählen Sie **Use** und geben Sie dann eine Formel im angegebenen Feld ein.
    - Wenn potenzielle Formeln von der Software vorhergesagt wurden, dann wählen Sie **Automatic** und wählen Sie einen Eintrag aus der Liste aus.
- 

**Hinweis:** Wenn keine potenziellen Formeln von der Software vorhergesagt wurden, dann kann **Automatic** nicht ausgewählt werden.

---

**Hinweis:** Die Werte in den Feldern **Mass accuracy** und **RDB** werden von der Software automatisch aktualisiert, wenn die neue Formel hinzugefügt wird.

---

9. Um den Metaboliten aus der ausgewählten Zeile als Ausgangsverbindung zu identifizieren, klicken Sie auf **Assign as Parent**.
  10. Klicken Sie auf **OK**.
  11. Klicken Sie auf **Save**.
- 

**Hinweis:** Bei Peptiden basiert die Reihenfolge der Namen auf der Massengenauigkeit des vorgeschlagenen Namens und der Anzahl der erforderlichen Manipulationen, z. B. der Anzahl der gebrochenen Bindungen. Das bedeutet, der vorgeschlagene Name für das Peptid mit einer höheren Massengenauigkeit und weniger Manipulationen wird ganz oben in der Liste angezeigt.

---

### Erneutes Kalibrieren des MS/MS-Spektrums

1. Klicken Sie in der Interpretationsansicht auf **Prepare**. Das Dialogfeld „Interpret Data“ wird geöffnet.
  2. Klicken Sie auf die Registerkarte „MS/MS Details“.
  3. Wählen Sie ein Fragment zur Verwendung als Kalibrierungspunkt aus.
  4. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das ausgewählte Fragment und klicken Sie dann auf **Set calibration points**. Die Farbe des Fragment-Kreises ändert sich zu blau.
  5. Wiederholen Sie die Schritte **3** und **4**, um zusätzliche Kalibrierungspunkte auszuwählen.
  6. Um festgelegte Kalibrierungspunkte zu entfernen, wählen Sie die entsprechenden Kalibrierungspunkte aus, klicken Sie mit der rechten Maustaste und wählen Sie dann **Clear calibration points** aus. Die Farbe des Fragment-Kreises wechselt wieder zu grün.
  7. Um die Details eines Fragments anzuzeigen, wählen Sie einen Kalibrierungspunkt aus, klicken Sie mit der rechten Maustaste und wählen Sie dann **Composition details** aus.
-



Das Dialogfeld „Fragment“ öffnet sich, das den  $m/z$ -Wert, den Massenfehler in ppm und mDa, eine Angabe dazu, ob die vorgeschlagene Formel auf eine gerade Elektronenzahl hindeutet und den RDB-Wert (Ringe und Doppelbindungen) der vorgeschlagenen Formel enthält.

- Um einen Kalibrierungspunkt als Zusammensetzung des Fragments oder als potenziellen Kalibrierungspunkt auszuwählen, wählen Sie einen Kalibrierungspunkt aus, klicken Sie mit der rechten Maustaste und wählen Sie dann **Select composition** aus.
- Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das MS/MS-Spektrum und anschließend auf **Recalibrate**.

---

**Hinweis:** Um das neu kalibrierte Spektrum zu verwerfen, klicken Sie mit der rechten Maustaste und klicken Sie dann auf **Revert Calibration**.

---

### Deisotopieren des MS/MS-Spektrums

Wenn in der Ansicht „Interpretation“ die Option „Deisotope“ angeklickt wird, dann werden alle Isotope aus dem MS/MS-Spektrum entfernt. Dies bietet eine Schnellansicht der monoisotopischen Peaks. Dies ist hilfreich bei der Anzeige von SWATH-Erfassungsdaten.

---

**Hinweis:** Es werden nur die Monoisotope in der „Results Table“ angezeigt, unabhängig davon, ob diese Option ausgewählt ist oder nicht.

---

### Aktive Peaks auswählen

Aktive Peaks sind die einzigen Peaks im MS/MS-Spektrum, die für die Fragmentinterpretation zur Verfügung stehen.

- Klicken Sie in der Interpretationsansicht auf **Prepare**. Das Dialogfeld „Interpret Data“ wird geöffnet.
- Überprüfen Sie das MS/MS-Spektrum. Blaue Pfeile kennzeichnen die aktuell aktiven Peaks.
- Um einen Peak auszuwählen, ziehen Sie ein Quadrat über den Peak.
- Doppelklicken Sie auf den ausgewählten Peak. Ein blauer Pfeil wird unterhalb des ausgewählten Peaks angezeigt.
- Um einzelne Peaks zu entfernen, ziehen Sie den blauen Pfeil unter den Rand des Dialogfeldes „Interpret Data“. Der blaue Pfeil unterhalb des ausgewählten Peaks wird entfernt.

---

**Tipp!** Um alle aktiven Peaks zu löschen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Spektrum und klicken Sie dann auf **Clear All Markers**.

---

- Klicken Sie nach der Auswahl aller aktiven Peaks auf **Find**.
- Wählen Sie die Zeile mit der Formel, die den MS- und MS/MS-Spektren am ehesten entspricht.
- Klicken Sie auf **Select**.

### Auswahl von Fragment-Peaks für die Zuweisung

Obwohl möglicherweise mehrere Peaks als aktiv identifiziert werden, können Benutzer auswählen, nur mit den Peaks mit den höchsten Intensitäten zu arbeiten.

1. Klicken Sie in der Interpretationsansicht auf **Options**.  
Das Dialogfeld „Options“ wird geöffnet.
2. Geben Sie im Feld **Number of fragment peaks selected for assignment** die entsprechende Zahl ein.
3. Klicken Sie auf **OK**.  
Sternchen im MS/MS-Spektrum identifizieren die für die Zuweisung ausgewählten Peaks.

### Festlegen von Optionen

1. Klicken Sie in der Interpretationsansicht auf **Options**.  
Das Dialogfeld „Options“ wird geöffnet.
2. Modifizieren Sie die Fragmentierungs- und Bezeichnungs-Parameter wie in der folgenden Tabelle beschrieben: [Tabelle 8-15](#).

**Tabelle 8-15: Dialogfeld „Options“**

Option	Beschreibung
<b>Number of fragment peaks selected for assignment</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die Anzahl der Fragment-Peaks festzulegen, die zugewiesen werden. Diese Zahl kann eine Teilmenge der Gesamtanzahl der Peaks sein, die im Dialogfeld „Prepare“ ausgewählt wurden. Wenn es sich um eine Teilmenge der Gesamtanzahl der Peaks handelt, dann werden Peaks in der Reihenfolge der Intensität gewählt.
<b>Minimum signal-to-noise ratio</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um den für die Zuweisung von Fragment-Peaks verwendeten Schwellenwert anzugeben. Peaks unterhalb dieses Schwellenwertes werden nicht zugewiesen. Rauschen wird als der Peak mit der geringsten Intensität im MS/MS-Spektrum definiert.
<b>MS/MS m/z tolerance (ppm or mDa)</b>	Damit einem Fragment-Peak eine Formel und möglicherweise eine Struktur zugewiesen wird, muss dessen Massengenauigkeit innerhalb der angegebenen MS/MS <i>m/z</i> -Toleranz liegen.
<b>Fragmentation Settings</b>	
<b>Break aromatic rings</b>	Aktivieren Sie dieses Kontrollkästchen, um den aromatischen Ring zu brechen.

Tabelle 8-15: Dialogfeld „Options“ (Fortsetzung)

Option	Beschreibung
<b>Maximum number of bonds to break</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die maximale Anzahl der zu brechenden Bindungen festzulegen. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none"> <li>• 1</li> <li>• 2</li> <li>• 3</li> <li>• 4</li> </ul>
<b>Maximum number of C-C bonds to break</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die maximale Anzahl der zu brechenden C-C-Bindungen festzulegen. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none"> <li>• 0</li> <li>• 1</li> <li>• 2</li> <li>• 3</li> <li>• 4</li> </ul>
<b>Label Settings</b>	
<b>Label peaks with</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die Informationen anzugeben, die in den Peak-Bezeichnungen angezeigt werden sollen. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ion</li> <li>• Ion with ppm Error</li> <li>• Ion with mDa Error</li> </ul>
<b>Apply options to all potential metabolites</b>	Aktivieren Sie dieses Kontrollkästchen, um die aktuellen Optionen auf alle nicht zugewiesenen Metaboliten anzuwenden.

## Fragmentstrukturen zuweisen

Um Strukturen zuzuweisen, verknüpft die Software die Fragment-Peaks im MS/MS-Spektrum mit potenziellen Teilen der Kandidaten-Struktur. Benutzer können dann eine Formel und Struktur auswählen, die dem  $m/z$ -Wert am besten entsprechen. Nach der Zuweisung werden die Sternchen, die die für die Zuweisung ausgewählten Peaks identifiziert haben, entweder durch ein Häkchen ersetzt, um anzuzeigen, dass die Zuweisung stattgefunden hat, oder durch ein x, um anzuzeigen, dass eine Zuweisung nicht möglich war.

## MS/MS-Daten charakterisieren

---

**Hinweis:** Die Fragmentierungsregeln sind in die Software integriert und können nicht bearbeitet werden.

---

### Vorgeschlagene Formeln und Strukturen zuweisen

Jeder Metabolit muss ein MS/MS-Spektrum aufweisen, bevor Fragmentstrukturen zugewiesen werden können. Zum Hinzufügen eines Spektrums, siehe Abschnitt: [Hinzufügen von mehreren Spektren mithilfe der Schaltfläche „Add MS/MS“](#).

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
5. Wählen Sie im Feld **Show** die Option **Interpretation** aus.
6. Laden und bearbeiten Sie eine Kandidatenstruktur. Siehe die Abschnitte: [Laden einer Struktur](#) und [Bearbeiten einer Struktur](#).
7. Bereiten Sie ggf. eine strukturelle Zuweisung vor. Siehe Abschnitt: [Vorbereitung einer strukturellen Zuweisung](#).
8. Klicken Sie im Teilfenster „Structure“ der Ansicht „Interpretation“ auf **Assign**.  
Drei Tabellen werden unterhalb des Teilfensters „MS/MS“ angezeigt: Die Tabelle „Fragments“ mit den identifizierten Fragmenten, die Tabelle „Structure Details“ mit den potenziellen Strukturen und die Tabelle „Contained Neutral Losses“ mit den enthaltenen Neutralverlusten.

---

**Hinweis:** Ist eine Struktur nicht geladen, weist die Software nur potenzielle Formeln den Fragmenten zu.

---

### Eine Formelstruktur für jedes Fragment auswählen

1. Klicken Sie ggf. mit der rechten Maustaste in der Ansicht „Interpretation“ jeweils auf die Tabellen „Fragments“, „Structure Details“ und „Contained Neutral Losses“ und klicken Sie anschließend auf **Show Hidden Rows**.

---

**Hinweis:** In der Tabelle „Fragments“ ist bei der Zeile mit der höchsten Bewertung für den  $m/z$ -Wert das Kontrollkästchen **Use** aktiviert. In der Tabelle „Structure Details“ ist bei der Zeile mit der höchsten Bewertung das Kontrollkästchen **Use** aktiviert. In der Tabelle „Contained Neutral Losses“ ist bei allen Zeilen das Kontrollkästchen **Use** aktiviert.

---

2. Aktivieren Sie in der Tabelle „Fragments“ das Kontrollkästchen **Use**, um die Zeile zu identifizieren, die die genaueste Formel für jeden  $m/z$ -Wert enthält.

---

**Tipp!** Aktivieren Sie in der Tabelle „Fragments“ das Kontrollkästchen **Use** in mehr als einer Zeile, um mehrere potenzielle Formeln für jedes Fragment auszuwählen.

---

3. Aktivieren Sie in der Tabelle „Structure Details“ das Kontrollkästchen **Use**, um die Teile der Struktur zu identifizieren, die möglichst genau mit der ausgewählten Formel übereinstimmen.
4. Aktivieren Sie in der Tabelle „Contained Neutral Losses“ das Kontrollkästchen **Use**, um die Zeile zu identifizieren, die die enthaltenen Neutralverluste möglichst genau widerspiegelt.

---

**Tipp!** Aktivieren Sie in den Tabellen „Structure Details“ und „Contained Neutral Losses“ das Kontrollkästchen **Use** in mehr als einer Zeile für ein bestimmtes Fragment.

---

5. Klicken Sie auf **Apply**.  
Die Interpretationsdaten werden für den ausgewählten Metaboliten gespeichert.
6. Wenn alle Änderungen vorgenommen wurden, klicken Sie auf **Save**.

---

**Tipp!** Um alle Interpretationsdaten für einen bestimmten Metaboliten zu löschen, klicken Sie auf **Remove**.

---

### Informationen über die Registerkarte „Structure Candidates“

Wenn die automatische Strukturgenerierung verwendet wird, dann wird die Registerkarte „Structure Candidates“ im Teilfenster „Structure charts“ mit einer Liste mit Strukturen für den ausgewählten Metaboliten ausgefüllt, die die im Dialogfeld „Options“ festgelegten Bedingungen erfüllen. Siehe Abschnitt: [Optionen für die Verarbeitung von Chargen](#). Die Software generiert Strukturen für die folgenden Arten von Metaboliten:

- Metaboliten mit einer oder zwei Spaltungen
- Einfache Biotransformations-Metaboliten
- Metaboliten mit einer Spaltung und einfacher Biotransformation

Bei einem komplexeren Metabolismus kann der Benutzer eine benutzerdefinierte Metabolitstruktur angeben oder bearbeiten und solche Strukturvorschläge bewerten.

Die Liste der Strukturen (als Histogramm bezeichnet) enthält die folgenden Informationsspalten:

Spalte	Beschreibung
Rank	Gibt die Position oder Rangfolge der Strukturen an.

## MS/MS-Daten charakterisieren

---

Spalte	Beschreibung
<b>Relative Evidence</b>	<p>Die Rangfolge oder Bewertung basiert auf einem Vergleich zwischen dem MS/MS-Spektrum der Ausgangsstruktur und dem MS/MS-Spektrum der Metaboliten. Metabolit-Fragmente werden dann mit denen des Vorläufers verglichen, um verschobene und nicht verschobene Fragmente zu identifizieren. Andere Attribute wie z. B. die Fragmentintensität und die Eindeutigkeit eines Vorschlags werden bei der Strategie für die Gesamtwertung ebenfalls berücksichtigt. Die finale Rangfolge gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass eine Biotransformation oder Spaltung bei einem bestimmten Atomindex stattfindet.</p> <p>Diese Spalte ermöglicht dem Benutzer zudem das Umschalten zwischen Strukturen. Siehe Abschnitt: <a href="#">Zwischen Strukturen wechseln</a>.</p>
<b>Apply to Results</b>	Ein aktiviertes Kontrollkästchen zeigt an, dass die entsprechende Struktur für die Ergebnisdatei gespeichert wird.

Die Gesamtzahl der Kandidaten wird über der Histogramm-Tabelle angezeigt, direkt über der Spalte **Apply to Results**.

Automatisch generierte Strukturen können nicht bearbeitet werden. Benutzer können eine Struktur laden, die erforderlichen Modifizierungen vornehmen und dann das Kontrollkästchen **Apply to Results** aktivieren, um die Strukturen in die Ergebnisdatei einzubeziehen. Siehe die Schritte 7 und 8 in den Abschnitten: [Laden einer Struktur](#) und [Bearbeiten einer Struktur](#).

### Zwischen Strukturen wechseln

Klicken Sie auf einen blauen Balken im Histogramm.  
Die entsprechende Struktur wird im Teilfenster „Structure“ angezeigt.

### Auswählen eines leeren Teilfensters

Klicken Sie auf die erste Zeile im Histogramm.  
Die erste Zeile im Histogramm enthält die Wörter `No structure`. Das Teilfenster „Structure“ wird aktualisiert und `No structure` wird angezeigt.

### Hinzufügen einer Struktur

---

**Hinweis:** Es kann nur eine Struktur zur Liste der automatisch generierten Strukturen hinzugefügt werden. Wird eine zusätzliche Struktur hinzugefügt, dann wird die zuvor vom Benutzer hinzugefügte Struktur überschrieben.

---

1. Klicken Sie im Teilfenster „Structure“ auf **Load** und wählen Sie dann die Option **Load Structure** aus.  
Das Dialogfeld „Open Structure File“ wird geöffnet.
2. Navigieren Sie dann zu einer mol- oder sdf-Datei und wählen Sie sie aus.
3. Klicken Sie auf **Open**.

Die ausgewählte Struktur wird im Teilfenster „Structure“ angezeigt und der Histogramm-Tabelle wird eine Zeile direkt über der ersten automatisch generierten Struktur hinzugefügt. Der Blauton für die geladene Strukturzeile unterscheidet sich leicht von dem Blauton für die Zeilen, die die automatisch generierten Strukturen enthalten. Die Rangfolge wird auf 0 festgelegt.

Die vom Benutzer hinzugefügte Struktur kann bearbeitet werden. An der Struktur vorgenommene Änderungen werden zwischengespeichert, wenn der Benutzer das Teilfenster „Structure“ ausblendet.

### Eine Struktur zur Ansicht auswählen

1. Klicken Sie auf einen blauen Balken im Histogramm.  
Die entsprechende Struktur wird im Teilfenster „Structure“ angezeigt. Standardmäßig ist nur der ersten Struktur im Histogramm die Tabelle „Fragments“ zugewiesen.
2. Um die Tabelle „Fragments“ für eine andere Struktur zuzuweisen, klicken Sie auf den blauen Balken im Histogramm und klicken Sie dann auf **Assign**.

### Eine Struktur löschen

1. Klicken Sie auf einen blauen Balken im Histogramm.  
Die entsprechende Struktur wird im Teilfenster „Structure“ angezeigt.
2. Klicken Sie im Teilfenster „Structure“ auf **Delete**.  
Die Struktur wird aus dem Teilfenster „Structure“ entfernt, die ausgewählte blaue Linie wird aus dem Histogramm entfernt und die Tabelle „Fragments“ wird entfernt. Die Struktur der nächsten Zeile im Histogramm wird im Teilfenster „Structure“ angezeigt.

## Markush-Strukturen anbringen

Nachdem Fragmentstrukturen zugewiesen wurde, verwenden Sie Markush-Strukturen, um ungefähre Positionen für chemische Modifizierungen anzuzeigen.

---

**Hinweis:** Fragmentstrukturen können einem Metaboliten, der eine Markush-Struktur enthält, nicht zugewiesen werden.

---

1. Heben Sie einen Teil der Struktur hervor.
2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste oberhalb oder unterhalb der Struktur und klicken Sie dann auf **Attach Markush**.
3. Wählen Sie **Single Bond** oder **Double Bond** aus.
4. Geben Sie im Dialogfeld „Select Symbol“ das erforderliche Symbol bzw. die erforderliche Formel ein.
5. Klicken Sie auf **OK**.

Die Markush-Struktur wird mit einer gestrichelten Linie angezeigt und somit mit dem ausgewählten Teil der Struktur verbunden.

## MS/MS-Daten charakterisieren

---

**Hinweis:** Änderungen an der Struktur können nach der Zuweisung von Interpretationsdaten vorgenommen werden, wenn eine Markush-Struktur angebracht ist. Wird die Markush-Struktur entfernt, dann werden durch Änderungen alle Interpretationsdaten für den Metaboliten gelöscht.


---

### Informationen über Peak-Beschriftungen

Peaks können gekennzeichnet werden mit:

- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Peptid)
- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Peptid) und einem ppm-Fehler
- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Peptid) und einem mDa-Fehler

### Hinzufügen einer Peak-Beschriftung zum MS/MS-Spektrum

1. Klicken Sie in der Interpretationsansicht auf **Options**. Das Dialogfeld „Options“ wird geöffnet.
2. Wählen Sie im Feld **Label peaks with** die Beschriftungsart aus.
3. Klicken Sie auf **OK**.
4. Wählen Sie in der Tabelle „Fragments“ die Zeile mit dem zu beschriftenden Peak aus.
5. Klicken Sie auf .


---

**Tipp!** Um alle Beschriftungen aus dem MS/MS-Spektrum zu löschen, klicken Sie auf .

---

### Informationen über Interpretationsfilter für kleine Moleküle

Wenden Sie Filter an, um die in der Tabelle „Fragments“ angezeigten Daten einzugrenzen.

Um auf das Dialogfeld „Interpretation Filters“ zuzugreifen, klicken Sie auf das Symbol  in der Tabelle „Fragments“.

Filter	Beschreibung
<b>Rings and Double Bonds</b>	
<b>RDB</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Integer value (even-electron):</b> Zeigt nur Fragmente, die einen ganzzahligen Wert für Ringe und Doppelbindungen aufweisen.</li><li>• <b>Non-integer value (odd-electron):</b> Zeigt nur Fragmente, die einen nicht ganzzahligen Wert für Ringe und Doppelbindungen aufweisen.</li></ul>
<b>Mass Range</b>	
<b>m/z from __ to __</b>	Zeigt nur Fragmente mit einem <i>m/z</i> -Wert, der innerhalb des angegebenen Bereichs liegt.
<b>Mass Accuracy</b>	



Filter	Beschreibung
<b>Accuracy within</b>	Zeigt nur Fragmente mit einer Massengenauigkeit, die innerhalb des angegebenen Bereichs liegt. <b>Hinweis:</b> Ob die Massengenauigkeit in mDa oder ppm gemessen wird, ist abhängig von der Auswahl im Dialogfeld „Options“.
<b>Intensity</b>	
<b>Intensity above __ cps</b>	Zeigt nur Fragmente mit einem Intensitätswert, der über dem angegebenen Wert liegt.
<b>Score</b>	
<b>Score above</b>	Zeigt nur Fragmente mit einer Bewertung, die über dem angegebenen Wert liegt.
<b>Strukturen</b>	
<b>Fragments with assigned structures</b>	Zeigt nur Fragmente, die Strukturen zugeordnet sind.

## Peptid-Arbeitsabläufe

[Laden einer Sequenz](#)

[Bearbeiten einer Sequenz](#)

[Festlegen von Optionen](#)

[Fragmentsequenzen zuweisen](#)

[Informationen über Peak-Beschriftungen](#) → [Hinzufügen einer Peak-Beschriftung zum MS/MS-Spektrum](#)

[Informationen über Interpretationsfilter für Peptide](#)

## Laden einer Sequenz

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu einer Ergebnisdatei und wählen Sie diese aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.
5. Wählen Sie im Feld **Show** die Option **Interpretation** aus.
6. Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ aus.
7. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:

## MS/MS-Daten charakterisieren

---

- Wenn das Teilfenster „Sequence“ leer ist, dann klicken Sie auf **Load Parent**.
- Wenn bereits eine Sequenz im Teilfenster „Sequence“ vorhanden ist und eine neue Sequenz hinzugefügt werden muss, dann klicken Sie auf **Enter Sequence**, um den Inhalt des Teilfensters zu löschen und klicken Sie dann auf **Load Parent**.

Die Ausgangssequenz wird im Teilfenster „Sequence“ angezeigt. Die folgende Bezeichnung wird über dem Teilfenster hinzugefügt: **AA Index: [ ], Mono. Mass: [ ], m/z: [ ], Composition: [ ]**, wobei Folgendes gilt:

- **AA Index:** (Aminosäure-Index) Die Aminosäure-Indizes geben die Position des ersten und letzten Rückstands der Sequenz in der Ausgangssequenz an. Wenn die Katabolit-Sequenz keine Teilmenge der Ausgangssequenz ist, dann wird der AA-Index nicht angezeigt.
  - **Mono. Mass:** Die monoisotopische Masse der neutralen Komponente.
  - **m/z:** Der Masse-zu-Ladungs-Wert. Die Ladung wird in Klammern angezeigt.
  - **Composition:** Die ungeladene Element-Zusammensetzung der Sequenz.
8. Falls Änderungen erforderlich sind, bearbeiten Sie die Sequenz. Siehe Abschnitt: [Bearbeiten einer Sequenz](#).

## Bearbeiten einer Sequenz

Nachdem eine Sequenz für einen spezifischen Metaboliten erstellt oder geladen wurde, kann diese bearbeitet werden.

1. Klicken Sie in der Sequenz auf die Stelle, an der die Änderungen erforderlich sind.
2. Nehmen Sie die gewünschten Änderungen vor. Siehe Abschnitt: [Namenskonventionen für Peptidsequenzen](#).

## Festlegen von Optionen

1. Klicken Sie in der Interpretationsansicht auf **Options**. Das Dialogfeld „Options“ wird geöffnet.
2. Modifizieren Sie die Fragmentierungs- und Bezeichnungs-Parameter. Siehe die Tabelle: [Tabelle 8-16](#).

**Tabelle 8-16: Dialogfeld „Options“**

Option	Beschreibung
<b>Minimum signal-to-noise ratio</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um den für die Zuweisung von Fragment-Peaks verwendeten Schwellenwert anzugeben. Peaks unterhalb dieses Schwellenwertes werden nicht zugewiesen. Rauschen wird als der Peak mit der geringsten Intensität im MS/MS-Spektrum definiert.
<b>MS/MS m/z tolerance (ppm or mDa)</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die MS/MS <i>m/z</i> -Toleranz festzulegen. Damit einem Fragment-Peak ein Ionentyp und eine Sequenz zugewiesen wird, muss die Massengenauigkeit innerhalb der angegebenen MS/MS <i>m/z</i> -Toleranz liegen.

Tabelle 8-16: Dialogfeld „Options“ (Fortsetzung)

Option	Beschreibung
<b>Fragmentation Settings</b>	
<b>Fragment Types</b>	<p>Wählen Sie den entsprechenden Fragmenttyp aus. Es können mehrere Typen ausgewählt werden. Folgende Optionen sind vorhanden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>a</b></li> <li>• <b>b</b></li> <li>• <b>y</b></li> </ul>
<b>Maximum number of bonds to break</b>	<p>Verwenden Sie dieses Feld, um die maximale Anzahl der zu brechenden Bindungen festzulegen. Folgende Optionen sind vorhanden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>1</b></li> <li>• <b>2</b></li> <li>• <b>3</b></li> </ul> <hr/> <p><b>Tipp!</b> Wenn bei komplexeren Peptiden 3 als maximale Anzahl der zu brechenden Bindungen ausgewählt wird, dann führt dies dazu, dass sich die erforderliche Verarbeitungszeit verlängert.</p> <hr/>
<b>Break linkages</b>	Sind Verbindungen in der Peptidsequenz vorhanden, dann aktivieren Sie dieses Kontrollkästchen, damit die Verbindungen zwischen individuellen Aminosäuren gebrochen werden können.
<b>Label Settings</b>	
<b>Label peaks with</b>	<p>Verwenden Sie dieses Feld, um die Informationen anzugeben, die in den Peak-Bezeichnungen angezeigt werden sollen. Folgende Optionen sind vorhanden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Ion</b></li> <li>• <b>Ion with ppm Error</b></li> <li>• <b>Ion with mDa Error</b></li> <li>• <b>Ion with Charge</b></li> </ul>
<b>Apply options to all potential metabolites</b>	Aktivieren Sie dieses Kontrollkästchen, um die aktuellen Optionen auf alle nicht zugewiesenen Metaboliten anzuwenden.

### Fragmentsequenzen zuweisen

---

**Hinweis:** Die Fragmentierungsregeln sind in die Software integriert und können nicht bearbeitet werden.

---

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
5. Wählen Sie im Feld **Show** die Option **Interpretation** aus.
6. Laden Sie eine Sequenz. Siehe Abschnitt: [Laden einer Sequenz](#).
7. Klicken Sie im Teilfenster „Sequence“ auf **Assign**.  
Die Tabelle „Fragments“ wird mit den Interpretationsergebnissen für die geladene Sequenz unter Verwendung der ausgewählten Optionen aufgefüllt. Siehe Abschnitt: [Festlegen von Optionen](#). Grüne vertikale Linien, die die in der Tabelle „Fragments“ abgestimmten Ionen identifizieren, werden zum Teilfenster „MS/MS“ hinzugefügt. Die Bezeichnung über der Tabelle wird aktualisiert und gibt Folgendes an:
  - **Assigned: x of y peaks**. Gibt die Anzahl der zugewiesenen Peaks an.
  - **MSMS Peak Area Assigned: x%**. Gibt den Prozentwert der MS/MS-Peak-Fläche an, die zugewiesen wurde.
  - **Sequence Coverage: x of y consecutive amino acids**. Gibt die Anzahl der aufeinanderfolgenden Aminosäuren an, die von der Sequenz abgedeckt werden.

### Informationen über die Registerkarte „Sequence Candidates“

Wenn die automatische Sequenzgenerierung verwendet wird, dann wird die Registerkarte „Sequence Candidates“ im Teilfenster „Sequence charts“ mit einer Liste mit Sequenzen für den ausgewählten Kataboliten oder Metaboliten ausgefüllt, die die im Dialogfeld „Options“ festgelegten Bedingungen erfüllen. Siehe Abschnitt: [Optionen für die Verarbeitung von Chargen](#). Die Software generiert Sequenzen für die folgenden Arten von Metaboliten oder Kataboliten:

- *n*-Spaltungen: bis zu vier Modifizierungen an den Spaltungen
- Vorläufer: wobei *n* sich auf eine beliebige Anzahl von Spaltungen bezieht

Die Liste der Sequenzen (als Histogramm bezeichnet) enthält die folgenden Informationsspalten:

Spalte	Beschreibung
<b>Rank</b>	Gibt die relative Rangfolge aller Isomer-Sequenzen an, die für den angegebenen Metaboliten gefunden wurden. Der Rang basiert auf der zugewiesenen MS/MS-Peak-Fläche.
<b>View sequence fragments</b>	Die Prozentwerte geben die Bewertung der vorgeschlagenen Sequenz an.  Diese Spalte ermöglicht dem Benutzer zudem das Umschalten zwischen Sequenzen. Siehe Abschnitt: <a href="#">Zwischen Sequenzen wechseln</a> .
<b>AA Index</b>	Gibt den Beginn und das Ende der Aminosäure der Sequenz an.
<b>Apply to Results</b>	Ein aktiviertes Kontrollkästchen zeigt an, dass die entsprechende Sequenz für die Ergebnisdatei gespeichert wird.

Die Gesamtzahl der Kandidaten wird über der Histogramm-Tabelle angezeigt, direkt über der Spalte **Apply to Results**.

Automatisch generierte Sequenzen können nicht bearbeitet werden. Benutzer können eine Sequenz laden, die erforderlichen Modifizierungen vornehmen und dann das Kontrollkästchen **Apply to Results** aktivieren, um die Sequenzen in die Ergebnisdatei einzubeziehen. Siehe Schritt 7 in den Abschnitten: [Laden einer Sequenz](#) und [Bearbeiten einer Sequenz](#).

## Informationen über Peak-Beschriftungen



Peaks können gekennzeichnet werden mit:

- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Peptid)
- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Peptid) und einem ppm-Fehler
- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Peptid) und einem mDa-Fehler
- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Peptid) mit Ladung

### Hinzufügen einer Peak-Beschriftung zum MS/MS-Spektrum

1. Klicken Sie in der Interpretationsansicht auf **Options**.  
Das Dialogfeld „Options“ wird geöffnet.
2. Wählen Sie im Feld **Label peaks with** die Beschriftungsart aus.
3. Klicken Sie auf **OK**.
4. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:


Tabelle 8-17: Peak-Beschriftungen hinzufügen

Um einen Peak zu beschriften	Um alle Peaks zu beschriften
Wählen Sie in der Tabelle „Fragments“ die Zeile mit dem zu beschriftenden Peak aus.	Klicken Sie auf 
Klicken Sie auf  .	—

**Tip!** Um alle Beschriftungen aus dem MS/MS-Spektrum zu löschen, klicken Sie auf .

## Informationen über Interpretationsfilter für Peptide

Wenden Sie Filter an, um die in der Tabelle „Fragments“ angezeigten Daten einzugrenzen.

Um auf das Dialogfeld „Interpretation Filters“ zuzugreifen, klicken Sie auf das Symbol  in der Tabelle „Fragments“.

Filter	Beschreibung
<b>Mass Range</b>	
m/z from __ to __	Zeigt nur Fragmente mit einem <i>m/z</i> -Wert, der innerhalb des angegebenen Bereichs liegt.
<b>Charge Range</b>	
Charge from __ to __	<p>Zeigt nur Fragmente mit einer Ladung, die innerhalb des ausgewählten Bereichs liegt. Folgende Optionen sind vorhanden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>From range:</b> 1 bis einschließlich 10</li> <li>• <b>To range:</b> 1 bis einschließlich 10</li> </ul> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Der Wert für den Bis-Bereich muss größer oder gleich dem Wert für den Ab-Bereich sein.</p>
<b>Ion Type</b>	
Fragment type	<p>Wählen Sie den entsprechenden Fragmenttyp aus. Es können mehrere Typen ausgewählt werden. Diese Optionen stehen zur Verfügung:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>a</b></li> <li>• <b>b</b></li> <li>• <b>y</b></li> </ul>
<b>Mass Accuracy</b>	

Filter	Beschreibung
<b>Accuracy within</b>	Zeigt nur Fragmente mit einer Massengenauigkeit, die innerhalb des angegebenen Bereichs liegt. <b>Hinweis:</b> Ob die Massengenauigkeit in mDa oder ppm gemessen wird, ist abhängig von der Auswahl im Dialogfeld „Options“.
<b>Intensity</b>	
<b>Intensity above __ cps</b>	Zeigt nur Fragmente mit einem Intensitätswert, der über dem angegebenen Wert liegt.

## Oligonukleotid-Arbeitsabläufe

[Laden einer Sequenz](#)

[Bearbeiten einer Sequenz](#)

[Festlegen von Optionen](#)

[Fragmentsequenzen zuweisen](#)

[Informationen über Peak-Beschriftungen](#) → [Hinzufügen einer Peak-Beschriftung zum MS/MS-Spektrum](#)

[Informationen über Interpretationsfilter für Oligonukleotide](#)

### Laden einer Sequenz

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu einer Ergebnisdatei und wählen Sie diese aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.
5. Wählen Sie im Feld **Show** die Option **Interpretation** aus.
6. Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ aus.
7. Wenn das Teilfenster „Sequence“ leer ist, dann gehen Sie wie folgt vor:
  - Klicken Sie auf **Load Parent**.
  - Geben Sie eine Sequenz im Teilfenster ein oder fügen Sie eine Sequenz ein.

Die folgende Bezeichnung wird über dem Teilfenster hinzugefügt: **Mono. Mass: [ ], m/z: [ ], Composition: [ ]**, wobei Folgendes gilt:

- **Mono. Mass:** Die monoisotopische Masse der neutralen Komponente.
- **m/z:** Der Masse-zu-Ladungs-Wert. Die Ladung wird in Klammern angezeigt.

- **Composition:** Die ungeladene Element-Zusammensetzung der Sequenz.
8. Falls Änderungen erforderlich sind, bearbeiten Sie die Sequenz. Siehe Abschnitt: [Bearbeiten einer Sequenz](#).

### Bearbeiten einer Sequenz

Nachdem eine Sequenz für einen spezifischen Metaboliten erstellt oder geladen wurde, kann diese bearbeitet werden.

1. Klicken Sie in der Sequenz auf die Stelle, an der die Änderungen erforderlich sind.
2. Nehmen Sie die gewünschten Änderungen vor. Siehe Abschnitt: [Namenskonventionen für Oligonukleotid-Sequenzen](#).

### Festlegen von Optionen

1. Klicken Sie in der Interpretationsansicht auf **Options**. Das Dialogfeld „Options“ wird geöffnet.
2. Modifizieren Sie die Fragmentierungs- und Bezeichnungs-Parameter. Siehe die Tabelle: [Tabelle 8-18](#).

**Tabelle 8-18: Dialogfeld „Options“**

Option	Beschreibung
<b>Minimum signal-to-noise ratio</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um den für die Zuweisung von Fragment-Peaks verwendeten Schwellenwert anzugeben. Peaks unterhalb dieses Schwellenwertes werden nicht zugewiesen. Rauschen wird als der Peak mit der geringsten Intensität im MS/MS-Spektrum definiert.
<b>MS/MS m/z tolerance (ppm or mDa)</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die MS/MS <i>m/z</i> -Toleranz festzulegen. Damit einem Fragment-Peak ein Ionentyp und eine Sequenz zugewiesen wird, muss die Massengenauigkeit innerhalb der angegebenen MS/MS <i>m/z</i> -Toleranz liegen.
<b>Fragmentation Settings</b>	



Tabelle 8-18: Dialogfeld „Options“ (Fortsetzung)

Option	Beschreibung
<b>Fragment Types</b>	<p>Wählen Sie den entsprechenden Fragmenttyp aus. Es können mehrere Typen ausgewählt werden. Folgende Optionen sind vorhanden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>a</b></li> <li>• <b>b</b></li> <li>• <b>c</b></li> <li>• <b>d</b></li> <li>• <b>y</b></li> <li>• <b>Other</b></li> <li>• <b>wb-H20</b></li> <li>• <b>x</b></li> <li>• <b>y</b></li> </ul> <p>Siehe Abschnitt: <a href="#">Beispiel für einen benutzerdefinierten Oligonukleotiden</a>.</p>
<b>Maximum number of bonds to break</b>	<p>Verwenden Sie dieses Feld, um die maximale Anzahl der zu brechenden Bindungen festzulegen. Folgende Optionen sind vorhanden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>1</b></li> <li>• <b>2</b></li> </ul> <p>Es wird ein Wert von 2 empfohlen.</p> <hr/> <p><b>Tipp!</b> Wenn bei komplexeren Oligonukleotiden 3 als maximale Anzahl der zu brechenden Bindungen ausgewählt wird, dann führt dies dazu, dass sich die erforderliche Verarbeitungszeit verlängert.</p>
<b>Maximum water and Base losses</b>	<p>Legt die maximalen Wasserverluste fest, die während der Fragmentierung auftreten können. Es wird ein Wert von 1 empfohlen.</p>
<b>Label Settings</b>	

Tabelle 8-18: Dialogfeld „Options“ (Fortsetzung)

Option	Beschreibung
<b>Label peaks with</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die Informationen anzugeben, die in den Peak-Bezeichnungen angezeigt werden sollen. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Ion</b></li><li>• <b>Ion with ppm Error</b></li><li>• <b>Ion with mDa Error</b></li><li>• <b>Ion with Charge</b></li></ul>
<b>Apply options to all potential metabolites</b>	Aktivieren Sie dieses Kontrollkästchen, um die aktuellen Optionen auf alle nicht zugewiesenen Metaboliten anzuwenden.

## Fragmentsequenzen zuweisen

---

**Hinweis:** Die Fragmentierungsregeln sind in die Software integriert und können nicht bearbeitet werden.

---

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
5. Wählen Sie im Feld **Show** die Option **Interpretation** aus.
6. Laden Sie eine Sequenz. Siehe Abschnitt: [Laden einer Sequenz](#).
7. Klicken Sie im Teilfenster „Sequence“ auf **Assign**.  
Die Tabelle „Fragments“ wird mit den Interpretationsergebnissen für die geladene Sequenz unter Verwendung der ausgewählten Optionen aufgefüllt. Siehe Abschnitt: [Festlegen von Optionen](#). Zyanfarbene vertikale Linien, die die in der Tabelle „Fragments“ abgestimmten Ionen identifizieren, werden zum Teilfenster „MS/MS“ hinzugefügt. Die Bezeichnung über der Tabelle wird aktualisiert und gibt Folgendes an:
  - **Assigned: x of y peaks**. Gibt die Anzahl der zugewiesenen Peaks an.
  - **MSMS Peak Area Assigned: x%**. Gibt den Prozentwert der MS/MS-Peak-Fläche an, die zugewiesen wurde.
  - **Sequence Coverage: x of y consecutive nucleotides**. Gibt die Anzahl der aufeinanderfolgenden Nukleotide an, die von der Sequenz abgedeckt werden.

## Informationen über Peak-Beschriftungen



Peaks können gekennzeichnet werden mit:

- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Oligonukleotid)
- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Oligonukleotid) und einem ppm-Fehler
- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Oligonukleotid) und einem mDa-Fehler
- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Oligonukleotid) mit Ladung

### Hinzufügen einer Peak-Beschriftung zum MS/MS-Spektrum

1. Klicken Sie in der Interpretationsansicht auf **Options**.  
Das Dialogfeld „Options“ wird geöffnet.
2. Wählen Sie im Feld **Label peaks with** die Beschriftungsart aus.
3. Klicken Sie auf **OK**.
4. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:


**Tabelle 8-19: Peak-Beschriftungen hinzufügen**

Um einen Peak zu beschriften	Um alle Peaks zu beschriften
Wählen Sie in der Tabelle „Fragments“ die Zeile mit dem zu beschriftenden Peak aus.	Klicken Sie auf  .
Klicken Sie auf  .	—

**Tipp!** Um alle Beschriftungen aus dem MS/MS-Spektrum zu löschen, klicken Sie auf .

## Informationen über Interpretationsfilter für Oligonukleotide

Wenden Sie Filter an, um die in der Tabelle „Fragments“ angezeigten Daten einzuzugrenzen.

Um auf das Dialogfeld „Interpretation Filters“ zuzugreifen, klicken Sie auf das Symbol  in der Tabelle „Fragments“.

Filter	Beschreibung
<b>Mass Range</b>	
m/z from ___ to ___	Zeigt nur Fragmente mit einem <i>m/z</i> -Wert, der innerhalb des angegebenen Bereichs liegt.
<b>Charge Range</b>	
Charge from ___ to ___	Zeigt nur Fragmente mit einer Ladung, die über dem ausgewählten Wert liegt. Gültig sind Werte von 1 bis 10.
<b>Ion Type</b>	

Filter	Beschreibung
<b>Fragment type</b>	<p>Wählen Sie den entsprechenden Fragmenttyp aus. Es können mehrere Typen ausgewählt werden. Diese Optionen stehen zur Verfügung:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>a</b></li> <li>• <b>b</b></li> <li>• <b>c</b></li> <li>• <b>d</b></li> <li>• <b>w</b></li> <li>• <b>wb-H2O</b></li> <li>• <b>x</b></li> <li>• <b>y</b></li> <li>• <b>Other</b></li> <li>• <b>Base loss</b></li> <li>• <b>Water loss</b></li> <li>• <b>Internals</b></li> </ul>
<b>Mass Accuracy</b>	
<b>Accuracy within</b>	<p>Zeigt nur Fragmente mit einer Massengenauigkeit, die innerhalb des angegebenen Bereichs liegt.</p> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Ob die Massengenauigkeit in mDa oder ppm gemessen wird, ist abhängig von der Auswahl im Dialogfeld „Options“.</p> <hr/>
<b>Intensity</b>	
<b>Intensity above __ cps</b>	Zeigt nur Fragmente mit einem Intensitätswert, der über dem angegebenen Wert liegt.

## ADC-Arbeitsablauf

[Laden einer Struktur](#)

[Bearbeiten einer Struktur](#)

[Laden einer Sequenz](#)

[Bearbeiten einer Sequenz](#)

[Festlegen von Optionen](#)

[Zuweisen von Fragment-Ionen für eine Struktur und Sequenz](#)

Informationen über Peak-Beschriftungen → Hinzufügen einer Peak-Beschriftung zum MS/MS-Spektrum

Informationen über Interpretationsfilter für das ADC

## Laden einer Struktur

Vor Beginn der strukturellen Ermittlung eines Metaboliten kann die Software durch das Laden einer Struktur potenzielle Fragment-Strukturen bestimmen.

**Hinweis:** Ist eine Struktur nicht geladen, können potenzielle Formeln dennoch Fragmenten zugewiesen werden.

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu einer Ergebnisdatei und wählen Sie diese aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.
5. Wählen Sie im Feld **Show** die Option **Interpretation** aus.
6. Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ aus.
7. Klicken Sie im Teilfenster „Structure“ auf **Load** und wählen Sie dann die Option **Load Parent Structure** aus.  
Das Teilfenster wird mit der Ausgangsstruktur des ausgewählten Metaboliten aufgefüllt. Die markierte Bindungsstelle (wie in der Datei mit eingebetteten Verarbeitungsparametern angezeigt) oder die Atome werden lilafarben dargestellt.
8. Falls kleinere Änderungen erforderlich sind, bearbeiten Sie die Struktur. Siehe Abschnitt: [Bearbeiten einer Struktur](#).

## Bearbeiten einer Struktur

Verwenden Sie nach dem Laden einer Struktur für einen bestimmten Metaboliten die Bearbeitungstools, um kleinere Änderungen vorzunehmen.

**Tipp!** Verwenden Sie die Bearbeitungstools, um kleinere Änderungen an einer Struktur vorzunehmen, z. B. unterschiedliche Bindungspositionen für eine metabolische Transformation. Die Bearbeitungstools sollten nicht verwendet werden, um neue Strukturen zu erstellen oder um größere Änderungen an vorhandenen Strukturen vorzunehmen.

**Tabelle 8-20: Bearbeiten einer Struktur**

Ziel	Aufgabe
Ein Atom zu einer Struktur hinzufügen	Ziehen Sie ein bestimmtes Symbol auf der Palette zur neuen Position. Das hinzugefügte Atom bildet eine Einfachbindung mit dem nächstgelegenen vorhandenen Atom.

Tabelle 8-20: Bearbeiten einer Struktur (Fortsetzung)

Ziel	Aufgabe
Neue Atome auf der Palette erstellen	Klicken Sie auf ein leeres Quadrat, geben Sie das Symbol im Dialogfeld „Specify Symbol“ ein und klicken Sie dann auf <b>OK</b> .  <b>Tip!</b> Klicken Sie auf das hinzugefügte Quadrat und geben Sie ein neues Symbol ein, um verschiedene Atome zu erstellen.
Einen Teil der Struktur hervorheben	Ziehen Sie einen Kreis um die erforderlichen Atome und Bindungen.
Ein oder mehrere Atome verschieben	Ziehen Sie einen hervorgehobenen Teil der Struktur zur neuen Position. Wenn der Teil an ein anderes Atom gebunden ist, dann wird die Bindung an die neue Position verschoben. Wenn der Teil an zwei oder mehrere Atome gebunden ist, dann wird der Teil verschoben, die vorhandenen Bindungen bleiben jedoch unverändert.
Eine Struktur in eine vorhandene Struktur einfügen	Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Struktur und klicken Sie auf eine der folgenden Optionen: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Insert .mol File</b>, um eine weitere Struktur hinzuzufügen.</li> <li>• <b>Insert Conjugate</b>, um eine bestimmte Konjugatstruktur hinzuzufügen.</li> </ul>
Ein oder mehrere Atome löschen	Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf einen hervorgehobenen Teil der Struktur und klicken Sie dann auf <b>Remove Selected Atoms</b> .
Eine Bindung erstellen	Wählen Sie zwei nicht gebundene Atome aus, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Auswahl, klicken Sie auf <b>New Bond</b> , und wählen Sie dann die Art der Bindung aus.
Eine Bindung bearbeiten	Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf eine Bindung, klicken Sie auf <b>Set Bond Type</b> , und wählen Sie dann die Art der Bindung aus.
Eine Bindung löschen	Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf eine Bindung und anschließend auf <b>Remove Bond</b> .
Den Ladungszustand eines vorhandenen Atoms ändern	Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Atom, klicken Sie auf <b>Atom Charge State</b> , und wählen Sie dann den Zustand aus.

---

**Tipp!** Um die bearbeitete Struktur als separate Datei zu speichern, klicken Sie auf **Save As**.

---

**Tipp!** Strukturen können als mol- oder sdf-Dateien gespeichert werden. Geben Sie die entsprechende Erweiterung im Dialogfeld „Save As“ ein.

---

## Laden einer Sequenz

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu einer Peptid-Ergebnisdatei und wählen Sie diese aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.
5. Wählen Sie im Feld **Show** die Option **Interpretation** aus.
6. Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ aus.
7. Klicken Sie im Teilfenster „Structure“ auf **Load** und wählen Sie dann die Option **Load Sequence** aus.  
Das Teilfenster „Sequence“ wird mit der Ausgangssequenz des ausgewählten Metaboliten aufgefüllt.
8. Wählen Sie den Rückstand für die Konjugation aus, klicken Sie mit der rechten Maustaste und wählen Sie dann **Mark Residue to Conjugate** aus.  
Der ausgewählte Rückstand wird lilafarben dargestellt.
9. Falls Änderungen erforderlich sind, bearbeiten Sie die Sequenz. Siehe Abschnitt: [Bearbeiten einer Sequenz](#).

## Bearbeiten einer Sequenz

Nachdem eine Sequenz für einen spezifischen Metaboliten erstellt oder geladen wurde, kann diese bearbeitet werden.

1. Klicken Sie in der Sequenz auf die Stelle, an der die Änderungen erforderlich sind.
2. Nehmen Sie die gewünschten Änderungen vor. Siehe Abschnitt: [Namenskonventionen für Peptidsequenzen](#).

## Festlegen von Optionen

1. Klicken Sie in der Interpretationsansicht auf **Options**.  
Das Dialogfeld „Options“ wird geöffnet.
2. Modifizieren Sie die Fragmentierungs- und Bezeichnungs-Parameter wie in der folgenden Tabelle beschrieben: [Tabelle 8-21](#).

Tabelle 8-21: Dialogfeld „Options“

Option	Beschreibung
<b>Number of fragment peaks selected for structure assignment</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die Anzahl der Fragment-Peaks festzulegen, die für den Strukturteil des ADC zugewiesen werden. Wenn es sich um eine Teilmenge der Gesamtanzahl von Peaks handelt, dann werden Peaks in der Reihenfolge ihrer Intensitäten gewählt.
<b>Minimum signal-to-noise ratio</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um den für die Zuweisung von Fragment-Peaks verwendeten Schwellenwert anzugeben. Peaks unterhalb dieses Schwellenwertes werden nicht zugewiesen.
<b>MS/MS <math>m/z</math> tolerance (ppm or mDa)</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die MS/MS $m/z$ -Toleranz in ppm oder mDa festzulegen. Damit einem Fragment-Peak eine Formel und möglicherweise eine Struktur zugewiesen wird, muss dessen Massengenauigkeit innerhalb der angegebenen MS/MS $m/z$ -Toleranz liegen.
<b>Structure Fragmentation Settings</b>	
<b>Break aromatic rings</b>	Aktivieren Sie dieses Kontrollkästchen, um den aromatischen Ring zu brechen.
<b>Maximum number of bonds to break</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die maximale Anzahl der zu brechenden Bindungen festzulegen. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none"> <li>• 1</li> <li>• 2</li> <li>• 3</li> <li>• 4</li> </ul>
<b>Maximum number of C-C bonds to break</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die maximale Anzahl der zu brechenden C-C-Bindungen festzulegen. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none"> <li>• 0</li> <li>• 1</li> <li>• 2</li> <li>• 3</li> <li>• 4</li> </ul>
<b>Sequence Fragmentation Settings</b>	



Tabelle 8-21: Dialogfeld „Options“ (Fortsetzung)

Option	Beschreibung
<b>Fragment Types</b>	Wählen Sie den entsprechenden Fragmenttyp aus. Es können mehrere Typen ausgewählt werden. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>a</b></li> <li>• <b>b</b></li> <li>• <b>y</b></li> </ul>
<b>Maximum number of bonds to break</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die maximale Anzahl der zu brechenden Bindungen festzulegen. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>1</b></li> <li>• <b>2</b></li> <li>• <b>3</b></li> </ul> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Wenn bei komplexeren Peptiden 3 als maximale Anzahl der zu brechenden Bindungen ausgewählt wird, dann führt dies dazu, dass sich die erforderliche Verarbeitungszeit verlängert.</p>
<b>Break linkages</b>	Sind Verbindungen in der Peptidsequenz vorhanden, dann aktivieren Sie dieses Kontrollkästchen, damit die Verbindungen zwischen individuellen Aminosäuren gebrochen werden können.
<b>Label Settings</b>	
<b>Label peaks with</b>	Verwenden Sie dieses Feld, um die Informationen anzugeben, die in den Peak-Bezeichnungen angezeigt werden sollen. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Ion</b></li> <li>• <b>Ion with ppm Error</b></li> <li>• <b>Ion with mDa Error</b></li> <li>• <b>Ion with Charge</b></li> </ul>
<b>Apply options to all potential metabolites</b>	Aktivieren Sie dieses Kontrollkästchen, um die aktuellen Optionen auf alle nicht zugewiesenen Metaboliten anzuwenden.

## Zuweisen von Fragment-Ionen für eine Struktur und Sequenz

**Hinweis:** Die Fragmentierungsregeln sind in die Software integriert und können nicht bearbeitet werden.

## MS/MS-Daten charakterisieren

---

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
5. Wählen Sie im Feld **Show** die Option **Interpretation** aus.
6. Laden Sie eine Struktur und eine Sequenz. Siehe Abschnitt: [Laden einer Struktur](#) und [Laden einer Sequenz](#).

---

**Hinweis:** Es muss jeweils nur eine Struktur oder eine Sequenz geladen werden. Dieser Vorgang wird basierend auf der Annahme geschrieben, dass beide geladen wurden.

---

7. Klicken Sie im Teilfenster „Structure“ auf **Assign**.

Sowohl die Ansicht „Structure“ als auch die Ansicht „Sequence“ unter den TOF MS/MS-Spektren werden aufgefüllt, wobei standardmäßig die Ansicht „Structure“ angezeigt wird.

---

**Hinweis:** Falls nur die Ausgangsstruktur geladen wurde, wird die Ansicht „Structures“ der Tabelle „Fragments“ angezeigt. Falls nur die Ausgangssequenz geladen wurde, wird die Ansicht „Sequences“ der Tabelle „Fragments“ angezeigt.

---

In der Ansicht „Structure“ wird die Tabelle „Fragments“ mit den identifizierten Fragmenten aufgefüllt, die Tabelle „Structure Details“ wird mit den potenziellen Strukturen aufgefüllt und die Tabelle „Contained Neutral Losses“ wird mit den enthaltenen Neutralverlusten aufgefüllt. Die Ergebnisse basieren auf den ausgewählten Optionen. Siehe Abschnitt: [Festlegen von Optionen](#). Hellblaue vertikale Linien, die die in der Tabelle „Fragments“ abgestimmten Ionen identifizieren, werden zum Teilfenster „MS/MS“ hinzugefügt.

---

**Hinweis:** Wenn die Struktur keine Interpretationsergebnisse aufweist, dann wird `No structures assigned` in der Tabelle „Fragments“ angezeigt.

---

Die Bezeichnung über der Tabelle „Fragments“ gibt Folgendes an:

- **Assigned:**  $a$  von  $b$  Peaks (Struktur:  $x$ , Sequenz:  $y$ ), wobei  $a$  die Summe aus  $x$  und  $y$  ist und die Anzahl der zugewiesenen Peaks angibt,  $b$  gibt die Gesamtanzahl der Peaks an,  $x$  gibt die Anzahl der Zeilen in der Ansicht „Structures“ an und  $y$  gibt die Anzahl der Zeilen in der Ansicht „Sequences“ an.
- **MSMS Peak Area Assigned:**  $w\%$ , wobei  $w$  die prozentuale Fläche der zugewiesenen Peaks aus den Spektraldaten angibt.

Die Tabelle „Fragments“ enthält eine Spalte **Use as Conjugate**. Diese Spalte enthält ein Häkchen für jede Zeile in der Tabelle. Wenn das Kontrollkästchen aktiviert werden kann, dann ist eine Bindungsstelle auf der vorgeschlagenen Struktur für das Fragment vorhanden. Wenn das Kontrollkästchen nicht aktiviert werden kann, dann ist keine Bindungsstelle vorhanden. Wird das Kontrollkästchen aktiviert, dann wird das Fragment

für die Konjugation mit der Sequenz verwendet. Wird das Kontrollkästchen nicht aktiviert, dann wird das Fragment nicht verwendet. Standardmäßig sind maximal drei Fragmente mit vorhandener Bindungsstelle ausgewählt, basierend auf Genauigkeit und Abundanz. Die erste Zeile in der Tabelle ist standardmäßig ausgewählt.

8. Stellen Sie sicher, dass die Ansicht „Structures“ ausgewählt ist.
9. Klicken Sie ggf. mit der rechten Maustaste jeweils auf die Tabellen „Fragments“, „Structure Details“ und „Contained Neutral Losses“ und klicken Sie anschließend auf **Show Hidden Rows**.

---

**Hinweis:** In der Tabelle „Fragments“ ist bei der Zeile mit der höchsten Bewertung für den  $m/z$ -Wert das Kontrollkästchen **Use** aktiviert. In der Tabelle „Structure Details“ ist bei der Zeile mit der höchsten Bewertung das Kontrollkästchen **Use** aktiviert. In der Tabelle „Contained Neutral Losses“ ist bei allen Zeilen das Kontrollkästchen **Use** aktiviert.

---

10. Aktivieren Sie in der Tabelle „Fragments“ das Kontrollkästchen **Use**, um die Zeile zu identifizieren, die die genaueste Formel für jeden  $m/z$ -Wert enthält.

---

**Tipp!** Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Use** in mehr als einer Zeile, um mehrere potenzielle Formeln für jedes Fragment auszuwählen.

---

Der zugewiesene  $m/z$ -Wert wird fett und kursiv dargestellt.

11. Aktivieren Sie in der Tabelle „Structure Details“ das Kontrollkästchen **Use**, um die Teile der Struktur zu identifizieren, die möglichst genau mit der ausgewählten Formel übereinstimmen.
12. Aktivieren Sie in der Tabelle „Contained Neutral Losses“ das Kontrollkästchen **Use**, um die Zeile zu identifizieren, die die enthaltenen Neutralverluste möglichst genau widerspiegelt.

---

**Tipp!** Aktivieren Sie in den Tabellen „Structure Details“ und „Contained Neutral Losses“ das Kontrollkästchen **Use** in mehr als einer Zeile für ein bestimmtes Fragment.

---

13. Wählen Sie die Ansicht „Sequences“.

In der Ansicht „Sequence“ wird die Tabelle „Fragments“ mit den Ergebnissen der Interpretation aufgefüllt, basierend auf den ausgewählten Optionen (siehe Abschnitt: [Festlegen von Optionen](#)), den in der Ansicht „Structures“ ausgewählten Konjugaten, der auf der Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“ der verbindungs-spezifischen Parameter getroffenen Auswahl (siehe Abschnitt: [Registerkarte „Product Ions and Neutral Losses“](#)) und der Sequenz. Grüne vertikale Linien, die die in der Tabelle „Fragments“ abgestimmten Ionen identifizieren, werden zum Teilfenster „MS/MS“ hinzugefügt.

---

**Hinweis:** Wenn die Sequenz keine Interpretationsergebnisse aufweist, dann wird `No sequences assigned` in der Tabelle „Fragments“ angezeigt.

---

Die Bezeichnung über der Tabelle gibt Folgendes an:

## MS/MS-Daten charakterisieren

---

- Zugewiesen: a von b Peaks (Struktur: x, Sequenz: y), wobei a die Summe aus x und y ist und die Anzahl der zugewiesenen Peaks angibt, b gibt die Gesamtanzahl der Peaks an, x gibt die Anzahl der Zeilen auf der Registerkarte **Structures** an und y gibt die Anzahl der Zeilen auf der Registerkarte **Sequences** an.
- **MSMS Peak Area Assigned: w%**, wobei w die prozentuale Fläche der zugewiesenen Peaks aus den Spektraldaten angibt.

14. Klicken Sie ggf. mit der rechten Maustaste in die Tabelle „Fragments“ und klicken Sie dann auf **Show Hidden Rows**.

---

**Hinweis:** In der Tabelle „Fragments“ ist bei der Zeile mit der höchsten Bewertung für den *m/z*-Wert das Kontrollkästchen **Use** aktiviert.

---

15. Aktivieren Sie in der Tabelle „Fragments“ das Kontrollkästchen **Use**, um die Zeile zu identifizieren, die die genaueste Formel für jeden *m/z*-Wert enthält.

---

**Tipp!** Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Use** in mehr als einer Zeile, um mehrere potenzielle Formeln für jedes Fragment auszuwählen.

---

Der zugewiesene *m/z*-Wert wird fett und kursiv dargestellt.

16. Nachdem alle Änderungen vorgenommen wurden, klicken Sie auf **Apply**. Die Interpretationsdaten werden für den ausgewählten Metaboliten gespeichert.
17. Klicken Sie auf **Save**.

---

**Tipp!** Um alle Interpretationsdaten für einen bestimmten Metaboliten zu löschen, klicken Sie auf **Remove**.

---

## Informationen über Peak-Beschriftungen



Peaks können gekennzeichnet werden mit:

- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Peptid)
- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Peptid) und einem ppm-Fehler
- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Peptid) und einem mDa-Fehler
- einer Ionenformel oder einem Ionentyp (für ein Peptid) mit Ladung

### Hinzufügen einer Peak-Beschriftung zum MS/MS-Spektrum

1. Klicken Sie in der Interpretationsansicht auf **Options**. Das Dialogfeld „Options“ wird geöffnet.
2. Wählen Sie im Feld **Label peaks with** die Beschriftungsart aus.
3. Klicken Sie auf **OK**.
4. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:


Tabelle 8-22: Peak-Beschriftungen hinzufügen

Um einen Peak zu beschriften	Um alle Peaks zu beschriften
Wählen Sie in der Tabelle „Fragments“ die Zeile mit dem zu beschriftenden Peak aus.	Klicken Sie auf  .
Klicken Sie auf  .	—

**Tipp!** Um alle Beschriftungen aus dem MS/MS-Spektrum zu löschen, klicken Sie auf .

## Informationen über Interpretationsfilter für das ADC

Wenden Sie Filter an, um die in der Tabelle „Fragments“ angezeigten Daten einzugrenzen.

Um auf das Dialogfeld „Interpretation Filters“ zuzugreifen, klicken Sie auf das Symbol  in der Tabelle „Fragments“.

Filter	Beschreibung
<b>Rings and Double Bonds</b>	
<b>RDB</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Integer value (even-electron):</b> Zeigt nur Fragmente, die einen ganzzahligen Wert für Ringe und Doppelbindungen aufweisen.</li> <li>• <b>Non-integer value (odd-electron):</b> Zeigt nur Fragmente, die einen nicht ganzzahligen Wert für Ringe und Doppelbindungen aufweisen.</li> </ul>
<b>Mass Range</b>	
<b>m/z from ___ to ___</b>	Zeigt nur Fragmente mit einem <i>m/z</i> -Wert, der innerhalb des angegebenen Bereichs liegt.
<b>Charge Range</b>	
<b>Charge from ___ to ___</b>	<p>Zeigt nur Fragmente mit einer Ladung, die innerhalb des ausgewählten Bereichs liegt. Folgende Optionen sind vorhanden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>From range:</b> 1 bis einschließlich 10</li> <li>• <b>To range:</b> 1 bis einschließlich 10</li> </ul> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Der Wert für den Bis-Bereich muss größer oder gleich dem Wert für den Ab-Bereich sein.</p> <hr/>
<b>Ion Type</b>	

Filter	Beschreibung
<b>Fragment type</b>	Wählen Sie den entsprechenden Fragmenttyp aus. Es können mehrere Typen ausgewählt werden. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none"><li>• a</li><li>• b</li><li>• y</li></ul>
<b>Mass Accuracy</b>	
<b>Accuracy within</b>	Zeigt nur Fragmente mit einer Massengenauigkeit, die innerhalb des angegebenen Bereichs liegt. <b>Hinweis:</b> Ob die Massengenauigkeit in mDa oder ppm gemessen wird, ist abhängig von der Auswahl im Dialogfeld „Options“.
<b>Intensity</b>	
<b>Intensity above __ cps</b>	Zeigt nur Fragmente mit einem Intensitätswert, der über dem angegebenen Wert liegt.
<b>Score</b>	
<b>Score above</b>	Zeigt nur Fragmente mit einer Bewertung, die über dem angegebenen Wert liegt.
<b>Strukturen</b>	
<b>Fragments with assigned structures</b>	Zeigt nur Fragmente, die Strukturen zugeordnet sind.

## Automatische Interpretation

### Automatische Interpretation



[Kleinmolekül-Arbeitsablauf](#)



[Peptid-Arbeitsabläufe](#)

### Kleinmolekül-Arbeitsablauf

Die automatische Generierung von Strukturen kann auf folgende Arten erfolgen:

- Aktivieren Sie im Arbeitsbereich „Batch“ das Kontrollkästchen **Apply Options**, um alle im Dialogfeld „Batch Processing Options“ ausgewählten „Auto Assign“-Optionen auf die Proben und Kontrollproben in der Charge anzuwenden. Es muss zumindest die Option „Assign Structures or Sequences“ ausgewählt werden. Siehe Abschnitt: [Optionen für die Verarbeitung von Chargen](#).

- Klicken Sie in der Ansicht „Interpretation“ des Arbeitsbereichs „Results“ auf **Generate** im Teilfenster „MS/MS“.

## Peptid-Arbeitsabläufe

Die automatische Generierung von Sequenzen kann auf folgende Arten erfolgen:

- Aktivieren Sie im Arbeitsbereich „Batch“ das Kontrollkästchen **Options**, um alle im Dialogfeld „Batch Processing Options“ ausgewählten **Auto Assign**-Optionen auf die Proben und Kontrollproben in der Charge anzuwenden. Es muss zumindest die Option **Assign Structures or Sequences** ausgewählt werden. Siehe Abschnitt: [Optionen für die Verarbeitung von Chargen](#).
- Klicken Sie in der Ansicht „Interpretation“ des Arbeitsbereichs „Results“ auf **Generate** im Teilfenster „MS/MS“.

## Zwischen Sequenzen wechseln

Klicken Sie auf einen blauen Balken im Histogramm.

Die entsprechende Sequenz wird im Teilfenster „Sequence“ angezeigt und die Tabelle „Fragments“ wird mit den Informationen in Bezug auf die ausgewählte Sequenz aktualisiert. Die Bezeichnung über dem Teilfenster „Sequence“ wird aktualisiert, um die Sequenznummer und den zugewiesenen Rang anzugeben. Beispiel: Sequenz x von y, Rang = z.

## Auswählen eines leeren Teilfensters

Klicken Sie auf die erste Zeile im Histogramm.

Die erste Zeile im Histogramm enthält die Wörter `No sequence`. Die Inhalte des Teilfensters „Sequence“ werden gelöscht, die Tabelle „Fragments“ wird aktualisiert und es wird `No sequences assigned` angezeigt.

## Hinzufügen einer Sequenz

---

**Hinweis:** Es kann nur eine Sequenz zur Liste der automatisch generierten Sequenzen hinzugefügt werden. Wird eine zusätzliche Sequenz hinzugefügt, dann wird die zuvor vom Benutzer hinzugefügte Sequenz überschrieben.

---

1. Klicken Sie im Teilfenster „Sequence“ auf **Enter Sequence**. Die Inhalte des Teilfensters „Sequence“ werden gelöscht, die Tabelle „Fragments“ wird aktualisiert und es wird `No sequence assigned` angezeigt.
2. Klicken Sie auf **Load Parent**. Die Ausgangssequenz wird in Teilfenster „Sequence“ und auf der Registerkarte **Parent Sequence** des Teilfensters „Sequence charts“ angezeigt.
3. Drücken Sie **Tab**, um die Ausgangssequenz zu validieren.

Es wird eine Unterstreichung zur Sequenz hinzugefügt, um deren Gültigkeit anzugeben. Auf der Registerkarte „Sequence Candidates“ wird ein neues Histogramm erstellt, das die vom Benutzer hinzugefügte Sequenz in der Zeile direkt über der ersten automatisch generierten Sequenz anzeigt. Die Rangfolge für die vom Benutzer hinzugefügte Sequenz lautet 0. Der blaue Balken erstreckt sich über die gesamte Breite der Tabelle.

Der Prozentwert wird in dem Balken jedoch nicht angezeigt. Der Balken für die geladene Sequenzzeile unterscheidet sich leicht von dem Balken für die Zeilen, die die automatisch generierten Sequenzen enthalten. Die Anzahl der vorgeschlagenen Sequenzen wird um eins erhöht.

Die vom Benutzer hinzugefügte Sequenz kann bearbeitet werden. An der Sequenz vorgenommene Änderungen werden zwischengespeichert, wenn der Benutzer das Teilfenster „Sequence“ ausblendet.

### Eine Sequenz zur Ansicht auswählen

Klicken Sie auf einen blauen Balken im Histogramm.

Die entsprechende Sequenz wird im Teilfenster „Sequence“ angezeigt. Die Tabelle „Fragments“ wird mit den Informationen in Bezug auf die ausgewählte Sequenz aktualisiert. Die Bezeichnung über dem Teilfenster „Sequence“ wird aktualisiert, um die Sequenznummer und den zugewiesenen Rang anzugeben. Beispiel: Sequenz x von y, Rang = z.

### Eine Sequenz löschen

1. Klicken Sie auf einen blauen Balken im Histogramm.  
Die entsprechende Sequenz wird im Teilfenster „Sequence“ angezeigt.
2. Klicken Sie im Teilfenster „Sequence“ auf **Delete**.  
Die Sequenz wird aus dem Teilfenster „Sequence“ entfernt und die Zeile wird aus dem Histogramm entfernt. Die Sequenz der nächsten Zeile im Histogramm wird im Teilfenster „Sequence“ angezeigt und die Tabelle „Fragments“ wird mit den Informationen zur ausgewählten Sequenz aktualisiert.



Wenn potenzielle Metaboliten in mehreren relevanten Proben gefunden werden, dann können die Ergebnisse der jeweiligen Probe verglichen werden. Dadurch kann der Benutzer die Unterschiede und Ähnlichkeiten zwischen den durch mehrere Ergebnisdateien generierten potenziellen Metaboliten erkennen. Metaboliten aus den verschiedenen Ergebnisdateien werden als identisch betrachtet, wenn sie dem/den im Dialogfeld „Correlate Results“ festgelegten Masse-zu-Ladungs-Verhältnis und Retentionszeittoleranzen entsprechen.

Bei Oligonukleotid-Arbeitsabläufen kann die Software mehrfach geladene Metaboliten mit derselben neutralen Masse und innerhalb der Retentionszeittoleranz in einem einzelnen Eintrag im Arbeitsbereich „Correlation“ gruppieren. Diese Funktion wird als „Gruppierung“ bezeichnet. Um die Funktion zu aktivieren, wählen Sie beim Korrelieren der Ergebnisse **Group results by analyte** aus. Wenn die Funktion aktiviert ist, werden mehrfach geladene Spezies zusammengeführt und der Vergleich zwischen Ergebnisdateien wird vereinfacht.

---

**Hinweis:** Aktivieren Sie die Funktion zum Gruppieren, bevor Sie die Ergebnisdateien korrelieren.

---

## Vorbereitung einer Korrelation

1. Klicken Sie auf **File > New > Correlation**.  
Das Dialogfeld „Correlate Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Add Results**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu den entsprechenden Dateien und wählen Sie sie aus.

---

**Hinweis:** Die ausgewählten Dateien können verschiedene Verbindungen enthalten. Für die Korrelation sind keine Analogdaten erforderlich.

---

4. Füllen Sie die Felder **X-axis title** und **X-axis units** aus.  
Dadurch wird eine Bezeichnung für die X-Achse der Diagramme im Arbeitsbereich „Correlation“ zugewiesen.
5. Geben Sie einen eindeutigen Wert neben jeder Ergebnisdatei in dem der X-Achsen-Bezeichnung entsprechenden Feld ein. Wenn beispielsweise die in Schritt 4 zugewiesene Bezeichnung **Time** ist, dann geben Sie die Zeit für jede Ergebnisdatei im Feld **Time** ein.
6. Wählen Sie ggf. **Include RRF in % area determination** aus.

---

**Hinweis:** Wählen Sie nicht **Include RRF in % area determination** und **Group results by analyte** gleichzeitig aus.

---

## Ergebnisse korrelieren

---

Wird diese Option ausgewählt, dann wird der MS-Bereich mit dem [Relativer Ansprechfaktor](#) multipliziert. Die Änderung im Bereich wird in den Ansichten Liniendiagramm, Balkendiagramm und Tabelle des Teilfensters „Correlation Details“ angezeigt. In der Tabelle „Potential Metabolites“ wird die Änderung nicht angezeigt.

7. (Oligonukleotid-Arbeitsablauf) Wählen Sie ggf. die Option **Group results by analyte** aus, um Peaks basierend auf der neutralen Masse zu gruppieren.
8. Passen Sie die Korrelation an. Siehe Abschnitt: [Anpassen der Korrelation](#).
9. Geben Sie im Feld **Correlation file name** einen Namen für die Datei ein.

---

**Hinweis:** Der Dateiname darf keine Leerzeichen enthalten.

---

10. Um einen bestimmten Speicherort zum Speichern der Korrelationsdatei auszuwählen, klicken Sie auf **Browse** und wählen Sie dann den entsprechenden Ordner aus.
11. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Software vergleicht die in den ausgewählten Dateien gefundenen Metaboliten und zeigt die Ergebnisse im Arbeitsbereich „Correlation“ an.

---

**Tipp!** Dieselbe Korrelation kann unter Verwendung anderer Einstellungen verarbeitet werden. Klicken Sie im Arbeitsbereich „Correlation“ auf **Correlate Results**.

---

## Anpassen der Korrelation

Nachdem die Dateien für die Korrelation ausgewählt wurden, bearbeiten Sie die Parameterwerte im Dialogfeld „Correlation Results“, um die Ergebnisse zu verbessern.

### Verbessern der Peak-Ausrichtung

Die Retentionszeiten der einzelnen Ergebnisdateien können verschoben werden, um die ausgewählten Dateien besser korrelieren zu können.

1. Gehen Sie vor der Korrelation der Ergebnisse wie folgt vor:
  - a. Öffnen Sie alle entsprechenden Ergebnisdateien im Arbeitsbereich „Results“.
  - b. Überprüfen Sie die Retentionszeit eines bestimmten Metaboliten, der in allen Dateien angezeigt wird.
2. Geben Sie basierend auf der in der Ergebnisdatei im Dialogfeld „Correlate Results“ angezeigten Verschiebung einen Wert im Feld **R.T. Shift (min)** neben der spezifischen Datei ein.

---

**Hinweis:** Im Feld **R.T. Shift (min)** sind Werte von -2,00 Minuten bis 2,00 Minuten zulässig.

---

## Die Zusammenführung von Peaks definieren

Spezifische Toleranzen erlauben es, dass Peaks mit ähnlichen Werten als identische Peaks betrachtet werden.

1. Öffnen Sie die jeweilige Ergebnisdatei im Arbeitsbereich „Results“.
2. Identifizieren Sie die Retentionszeit und Massentoleranz eines bestimmten Metaboliten, der in allen Dateien angezeigt wird.
3. Geben Sie im Dialogfeld „Correlate Results“ in der Gruppe „Tolerances“ einen Wert im Feld **Retention time** ein.

**Hinweis:** Im Feld **Retention time** sind Werte zwischen 0,01 Minute und 0,25 Minuten zulässig.

4. Geben Sie einen Wert im Feld **MS m/z** ein und wählen Sie dann entweder **ppm** oder **mDa** als Maßeinheit aus.

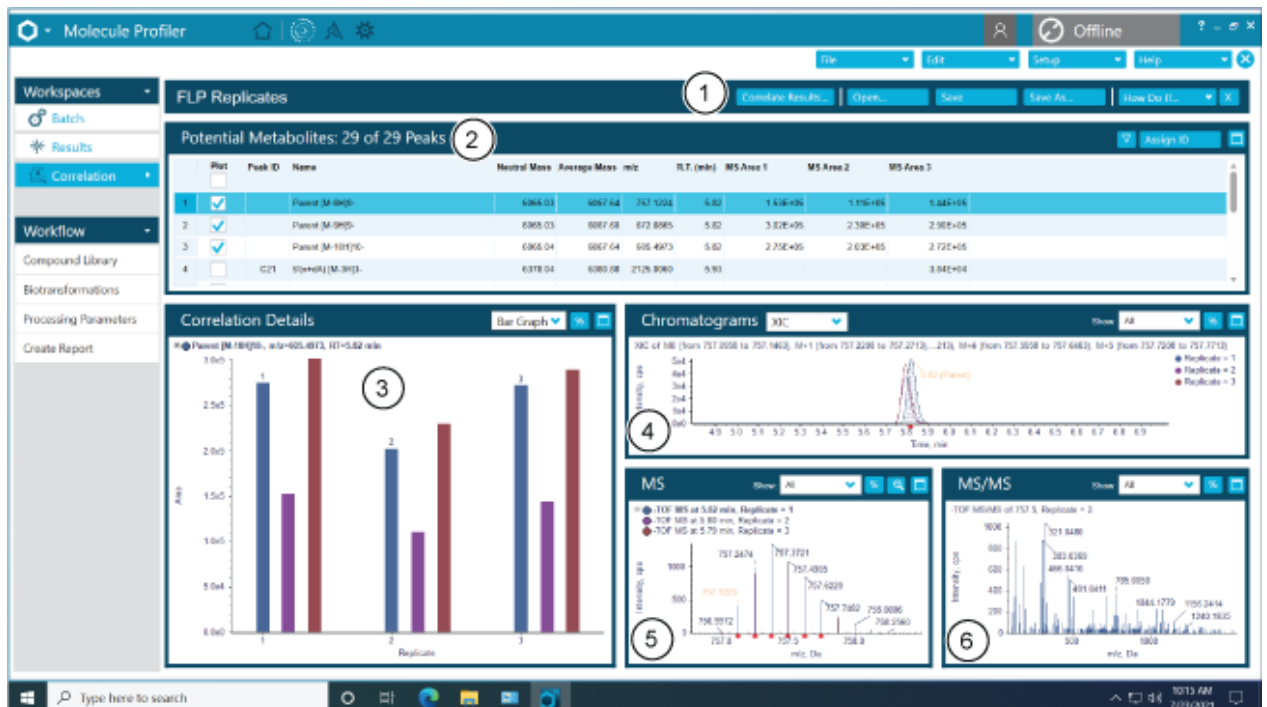
**Hinweis:** Wenn in Oligonukleotid-Arbeitsabläufen die Option **Group results by analyte** ausgewählt ist, dann ist nur **ppm** verfügbar.

**Hinweis:** Im Feld **MS m/z** sind Werte zwischen 0,1 und 250,0 zulässig.

## Informationen über den Arbeitsbereich „Correlation“


Der Arbeitsbereich „Correlation“ zeigt den Vergleich potenzieller Metaboliten, die in den ausgewählten Ergebnisdateien gefunden wurden.

Abbildung 9-1: Arbeitsbereich „Correlation“



## Ergebnisse korrelieren

---

Element	Beschreibung
1	<p>Menüleiste. Die Menüleiste enthält folgende Schaltflächen:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Correlate Results</b>: Öffnet das Dialogfeld „Correlate Results“. Siehe Abschnitt: <a href="#">Vorbereitung einer Korrelation</a>.</li><li>• <b>Open</b>: Öffnet das Dialogfeld „Open Correlation“, in dem der Benutzer zu den entsprechenden Korrelationsdateien navigieren kann.</li><li>• <b>Save</b>: Speichert die aktuell geöffnete Korrelationsdatei. Die vorhandene Version wird automatisch ersetzt.</li><li>• <b>Save As</b> : Speichert die aktuell geöffnete Korrelationsdatei. Wählen Sie optional den Zielordner und weisen Sie der Korrelationsdatei einen neuen Namen zu.</li></ul>
2	<p>Teilfenster „Potential Metabolites“. Listet alle korrelierten Peaks basierend auf den festgelegten Toleranzen auf. Jede Zeile listet einen korrelierten potenziellen Metaboliten, die <b>MS Area</b> und die <b>Analog Area</b> (sofern zutreffend) der Ergebnisdateien auf. Eine leere Zelle <b>MS Area</b> gibt an, dass der Metabolit in der spezifischen Ergebnisdatei nicht gefunden wurde. Eine leere Zelle <b>Analog Area</b> gibt an, dass entweder der Metabolit in der Ergebnisdatei nicht gefunden wurde oder die analoge Antwort null war.</p> <p>Dieses Teilfenster enthält folgende Schaltflächen:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Select values to filter peaks from the results.</b> (Informationen über Korrelationsfilter.</li><li>• <b>Assign ID</b>: Weist jedem Peak in der Tabelle „Potential Metabolites“ eine eindeutige Kennung zu, basierend auf der Retentionszeit und dem <i>m/z</i>-Wert.</li></ul>

Element	Beschreibung
3	<p>Teilfenster „Correlation Details“. Erlaubt es Benutzern, korrelierte Metaboliten zu vergleichen. Siehe Abschnitt: <a href="#">Korrelierte Metaboliten vergleichen</a>. Es können verschiedene Metaboliten und Ergebnisdateien ausgewählt werden. MS- und Analogdaten können in folgenden Formaten dargestellt werden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Linear Graph</b> oder <b>Bar Graph</b>: Vergleicht die Intensität des jeweiligen Metaboliten in jeder Ergebnisdatei, in der dieser gefunden wurde.</li> <li>• <b>Table</b>: Identifiziert die Ergebnisdateien, in denen jeder Metabolit gefunden wurde. Benutzer können zudem auswählen, dass die Vorkommnis, Peak-ID oder Peak-Fläche in der Tabelle angezeigt wird.</li> </ul> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Wenn ein relativer Ansprechfaktor bei der Vorbereitung einer Korrelation angewendet wurde, dann werden quantitative MS-Daten in den Liniendiagrammen und den Balkendiagrammen angezeigt.</p>
4	Teilfenster „Chromatograms“: Zeigt entweder ein extrahiertes Ionenchromatogramm (XIC) oder eine analoges Chromatogramm für den ausgewählten Metaboliten. Die Chromatogramme können Daten aus einer oder aus allen Ergebnisdateien enthalten, die den Metaboliten enthalten.
5	Teilfenster „MS“: Zeigt das MS-Spektrum der relevanten Probe aus einer oder aus allen Ergebnisdateien, die den ausgewählten Metaboliten enthalten.
6	Teilfenster „MS/MS“: Zeigt das MS/MS-Spektrum des ausgewählten Metaboliten aus einer oder aus allen Ergebnisdateien, die den Metaboliten enthalten.

**Hinweis:** Wenn Korrelationsergebnisse gruppiert werden, dann werden chromatographische, MS- und MS/MS-Spektren nicht angezeigt.

## Den Namen eines korrelierten Metaboliten bearbeiten

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Correlation**.  
Der Arbeitsbereich „Correlation“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Correlation“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Korrelations-Datei und wählen Sie sie aus.
4. Wählen Sie eine Zeile in der Tabelle „Potential Metabolites“ aus.

## Ergebnisse korrelieren

---

5. Klicken Sie auf **Edit > Edit Name**.  
Das Dialogfeld „Edit Name“ wird geöffnet.
6. Geben Sie einen neuen Metabolit-Namen ein.
7. Klicken Sie auf **OK**.  
Der Metabolit-Name wird in den neuen Wert geändert.

## Korrelierte Metaboliten vergleichen

Nachdem die in mehreren Ergebnisdateien enthaltenen Metaboliten korreliert wurden, können Benutzer ausgewählte spezifische Metaboliten genauer vergleichen.


1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Correlation**.  
Der Arbeitsbereich „Correlation“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Correlation“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Aktivieren Sie in der Tabelle „Potential Metabolites“ das Kontrollkästchen **Plot** neben den potenziellen Metaboliten, die verglichen werden sollen.  
Die Metaboliten werden im Teilfenster „Correlation Details“ angezeigt.
5. Um den relativen Ansprechfaktor eines spezifischen Metaboliten zu ändern, geben Sie einen Wert im Feld **RRF** ein.

Im Liniendiagramm und Balkendiagramm werden der MS-Bereich und der Analogbereich (falls zutreffend) mit dem RRF-Wert multipliziert.

---

**Hinweis:** Dieses Feld wird nur angezeigt, wenn ein relativer Ansprechfaktor bei der Vorbereitung einer Korrelation verwendet wurde.

---

6. Um Analogdaten im Teilfenster „Correlation Details“ anzuzeigen, klicken Sie auf **Analog data**.
7. Um die Dateien zu identifizieren, die die ausgewählten Metaboliten enthalten, wählen Sie **Table** im Teilfenster „Correlation Details“ aus.
8. Um normalisierte Daten anzuzeigen, klicken Sie auf .

---

**Tipp!** Normalisierte Daten können im Liniendiagramm, im Balkendiagramm, im XIC, im analogen Chromatogramm, im MS-Spektrum und im MS/MS-Spektrum angezeigt werden.

---

9. Um die Peak-IDs der potenziellen Metaboliten in den korrelierten Dateien basierend auf der Retentionszeit und dem *m/z*-Wert erneut zuzuweisen, klicken Sie auf **Assign ID**.

## Informationen über Korrelationsfilter

Wenden Sie Filter an, um die in der Tabelle „Correlation“ angezeigten Daten weiter einzugrenzen. Klicken Sie auf das Symbol , um auf das Dialogfeld „Correlation Filters“ zuzugreifen, oder klicken Sie auf **Setup > Filters > Correlation**.

Filter	Beschreibung
<b>Mass Range</b>	
m/z from __ to __	Zeigt nur Peaks mit einem <i>m/z</i> -Wert, der innerhalb des angegebenen Bereichs liegt.
<b>Retention Time</b>	
R.T. from __ to __	Zeigt nur Peaks mit einer Retentionszeit, die innerhalb des angegebenen Bereichs liegt.
<b>Occurrence</b>	
Peaks in __ or more results files	Zeigt nur Peaks, die in der angegebenen Anzahl von Ergebnisdateien angezeigt werden. <b>Hinweis:</b> Der maximale Wert ist abhängig von der für die Korrelation ausgewählten Anzahl von Dateien. Beispiel: Wenn fünf Ergebnisdateien für die Korrelation ausgewählt sind, dann können maximal fünf Vorkommnisse eines Peaks ausgewählt werden.

Um Berichte mit der Software zu generieren, muss Microsoft Word 2010 oder höher auf dem Computer installiert sein.

Benutzer können Berichte in Adobe PDF, Microsoft Word und HTML erstellen. Ein Bericht kann auch direkt an den Drucker gesendet werden.

Die folgenden Berichtsvorlagen werden mit der Software im Ordner C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler\Report Templates installiert:

- Ordner „Correlation“
  - Correlation Detailed Report
  - Correlation Summary Report
  - Correlation Group Report
- Ordner „ResultsAndInterpret“
  - Interpretation Detailed Report
  - Interpretation Summary Report
  - Results Detailed Report
  - Results Summary Report
- Ordner „ResultsAndInterpret\_ADC“
  - Interpretation Detailed Report
  - Interpretation Summary Report
  - Results Detailed Report
  - Results Summary Report
- Ordner „ResultsAndInterpret\_Peptides“
  - Interpretation Detailed Report
  - Interpretation Summary Report
  - Results Detailed Report
  - Results Summary Report
- Ordner „ResultsAndInterpret\_Oligo“
  - Interpretation Detailed Report
  - Interpretation Summary Report
  - Results Detailed Report
  - Results Summary Report



---

Obwohl jeder Bericht mehrere Informationselemente enthalten kann, zeigt der Bericht nur die Inhalte der Ergebnisdatei, die bei der Generierung des Berichts aufgenommen werden. Wenn die Ergebnisdatei ein bestimmtes Informationselement nicht enthält, z. B. die isotopische Anreicherung, dann enthält der generierte Bericht diese Inhalte nicht und enthält in den meisten Fällen keine Feldbezeichnung oder Überschrift für diese Inhalte. Filter, die auf die Tabelle „Potential Metabolites“ oder die Tabelle „Fragments“ angewendet wurden, werden im Bericht wiedergegeben. Wenn z. B. die Tabelle „Potential Metabolites“ gefiltert wird, sodass nur die höchsten 5 von 23 Peaks angezeigt werden, dann werden nur diese 5 Peaks in den Bericht aufgenommen.

Alle im Bericht enthaltenen Diagramme oder Spektren werden mit dem standardmäßigen Zoomfaktor angezeigt, unabhängig davon, welcher Zoomfaktor in der Benutzeroberfläche ausgewählt wurde. Alle Korrelationsdiagramme werden mit nicht normalisierten Daten in den Bericht aufgenommen.

---

**Hinweis:** Stellen Sie beim Erstellen von benutzerdefinierten Korrelations-Berichtsvorlagen zur Verwendung mit gruppierten Daten sicher, dass „grouped“ im Dateinamen enthalten ist.

---

## Erstellen eines Berichts im Arbeitsbereich „Results“

Ein Bericht kann für jedes der Kleinmolekül-, Peptid- und ADC-Ergebnisse erstellt werden.

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt.
5. Aktivieren Sie in der Spalte **Report** das entsprechende Kontrollkästchen für jeden Metaboliten, der im Bericht enthalten sein soll.  
Nicht ausgewählte Metaboliten werden in den generierten Bericht nicht aufgenommen.
6. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Create Report**.  
Das Dialogfeld „Create Report“ wird geöffnet.
7. Wählen Sie aus dem Feld **Available templates** eine Vorlage für den Bericht aus.  
Eine Liste mit Vorlagen finden Sie im Abschnitt: [Berichte](#).
8. Aktivieren Sie die entsprechenden **Formats**-Kontrollkästchen, um die erforderlichen Versionen der Berichtsdateien zu erstellen oder um den Bericht zu drucken.

---

**Hinweis:** Es können mehrere Formate ausgewählt werden.

---

9. Klicken Sie für jede ausgewählte Formatversion auf **Browse** und navigieren Sie dann im Dialogfeld „Browse For Folder“ zu dem spezifischen Speicherort und wählen Sie diesen für die Berichtsdatei aus.

10. Klicken Sie auf **OK**.  
Das Dialogfeld „Browse For Folder“ wird geschlossen.
11. Geben Sie für jede ausgewählte Formatversion einen Namen für den Bericht im angegebenen Feld ein.
12. (Oligonukleotid-Arbeitsablauf) Aktivieren oder deaktivieren Sie nach Bedarf das Kontrollkästchen **Report grouping table for Results**.
13. Klicken Sie auf **Generate Report**.
14. Wenn die Option **Print report** ausgewählt wurde, dann wählen Sie die erforderlichen Druckoptionen im Dialogfeld „Print“ aus und klicken Sie auf **OK**.  
Die Software generiert den Bericht.

## Erstellen eines Berichts im Arbeitsbereich „Correlation“

Ein Korrelationsbericht kann für jedes der Kleinmolekül-, Peptid- und ADC-Ergebnisse erstellt werden.

1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Correlation**.  
Der Arbeitsbereich „Correlation“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Correlation“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.
4. Klicken Sie auf **Open**.  
Die Ansicht „Correlation Results“ wird angezeigt.
5. Um die Korrelationsdetails für den relevanten Metaboliten in den Bericht aufzunehmen, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Plot**.
6. Klicken Sie im Bereich „Workflow“ auf **Create Report**.  
Das Dialogfeld „Create Report“ wird geöffnet.
7. Wählen Sie aus dem Feld **Available templates** eine Vorlage für den Bericht aus.

Eine Liste mit Vorlagen finden Sie im Abschnitt: [Berichte](#).

---

**Hinweis:** Wenn die Korrelationsdatei keine gruppierten Daten enthält, dann sind nur nicht gruppierte Berichtsvorlagen verfügbar. Wenn die Korrelationsdatei gruppierte Daten enthält, dann werden nur Berichtsvorlagen mit „gruppiert“ im Dateinamen angezeigt.

---

8. Aktivieren Sie die entsprechenden **Formats**-Kontrollkästchen, um die erforderlichen Versionen der Berichtsdateien zu erstellen oder um den Bericht zu drucken.

---

**Hinweis:** Es können mehrere Formate ausgewählt werden.

---

9. Klicken Sie für jede ausgewählte Formatversion auf **Browse** und navigieren Sie dann im Dialogfeld „Browse For Folder“ zu dem spezifischen Speicherort und wählen Sie diesen für die Berichtsdatei aus.
10. Klicken Sie auf **OK**.  
Das Dialogfeld „Browse For Folder“ wird geschlossen.
11. Geben Sie für jede ausgewählte Formatversion einen Namen für den Bericht im angegebenen Feld ein.
12. Klicken Sie auf **Generate Report**.
13. Wenn die Option **Print report** ausgewählt ist, dann wählen Sie die erforderlichen Druckoptionen im Dialogfeld „Print“ aus und klicken Sie auf **OK**.  
Die Software generiert den Bericht.

## Kopieren und Einfügen eines Diagramms

Diagramme können aus dem Arbeitsbereich „Results“ sowie aus den Dialogfeldern „Compound Library“ und „Processing Parameters“ kopiert werden.

1. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das zu kopierende Diagramm und klicken Sie dann auf **Copy Selected Graph**.  
Das Diagramm wird in die Zwischenablage kopiert.
2. Fügen Sie das Diagramm in eine andere Anwendung ein, z. B. Microsoft Word.

## Kopieren und Einfügen der Tabelle „Potential Metabolites“

1. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Tabelle und anschließend auf **Copy Table** im Arbeitsbereich „Results“.  
Die Tabelle wird in die Zwischenablage kopiert.
2. Fügen Sie die Tabelle in Excel ein.

Es werden Analogdaten verwendet, um zu bestätigen, dass es sich bei den mithilfe des Massenspektrometers gefundenen Metaboliten um tatsächliche Metaboliten und nicht um falsch positive Ergebnisse handelt. Benutzer, die Analogdaten in Übereinstimmung mit dem Massenspektrometer verwenden, können diese Funktion verwenden, um die Integration des Analogbereichs zu optimieren und die Zuordnung von MS-Peaks zu analogen Peaks besser darzustellen.

Wenn eine Ergebnisdatei geöffnet wird, die Analogdaten enthält, dann ist die Schaltfläche **Analog Integration** in der Tabelle „Potential Metabolites“ aktiviert.

Wenn Sie auf **Analog Integration** klicken, wird das Dialogfeld „Analog Integration“ geöffnet.

Die ursprüngliche Tabelle „Potential Metabolites“ aus dem Arbeitsbereich „Results“ wird angezeigt, mit den folgenden Ausnahmen:

- Analoge Peaks ohne zugeordnete Massenpeaks werden angezeigt, die MS-bezogenen Spalten sind jedoch leer.
- Eine zusätzliche Spalte, **Analog Signal in Control**, wird direkt nach der Spalte **Analog - R.T. (min)** angezeigt, wenn analoge Kontrolldaten vorhanden sind. Sind keine analogen Kontrolldaten vorhanden, dann wird diese Spalte nicht angezeigt.

Die Spalte **Analog Signal in Control** bietet die folgenden Informationen:

- Wenn das Proben-/Kontrollverhältnis des analogen Peaks höher als der in den Verarbeitungsparametern angegebene Wert ist, dann wird ein x in der Spalte angezeigt.
- Wenn das Proben-/Kontrollverhältnis des analogen Peaks niedriger als der in den Verarbeitungsparametern angegebene Wert ist, dann wird ein Häkchen in der Spalte angezeigt.

## Analogdaten manuell integrieren

<b>Voraussetzungen:</b>
<ul style="list-style-type: none"><li>• Ergebnisse wurden mit Analogdaten verarbeitet.</li></ul>



1. Klicken Sie im Bereich „Workspace“ auf **Results**.  
Der Arbeitsbereich „Results“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Open**.  
Das Dialogfeld „Open Results“ wird geöffnet.
3. Navigieren Sie zu der entsprechenden Datei und wählen Sie sie aus.

---



**Hinweis:** Die Ergebnisdatei muss ein analoges Chromatogramm enthalten.

---

4. Klicken Sie auf **OK**.  
Die Ansicht „Results“ wird angezeigt. Wenn die Ergebnisdatei Analogdaten enthält, dann ist die Schaltfläche **Analog Integration** in der Tabelle „Potential Metabolites“ aktiviert. Wenn die Ergebnisdatei keine Analogdaten enthält, dann ist diese Schaltfläche nicht verfügbar.
5. Klicken Sie auf **Analog Integration**.  
Das Dialogfeld „Analog Integration“ wird geöffnet.  
  
Zusätzlich zur Tabelle „Potential Metabolites“ werden zwei Chromatogramme angezeigt. Das erste Chromatogramm, das Chromatogramm „Analog Sample“, zeigt alle analogen Peaks innerhalb des auf der Registerkarte „Chromatographic Data“ der allgemeinen Verarbeitungsparameter festgelegten Retentionszeitbereichs. Siehe Abschnitt: [Registerkarte „Chromatographic Data“](#). Das zweite Chromatogramm, das extrahierte Ionenchromatogramm (XIC) der „MS Sample“, zeigt alle Peaks für die ausgewählte Zeile. Das XIC wird immer dann aktualisiert, wenn in der Tabelle „Potential Metabolites“ eine andere Zeile ausgewählt wird.
6. Wählen Sie das Chromatogramm „Analog Sample“ aus und führen Sie dann ggf. die folgenden Aufgaben aus, um die Daten zu integrieren:
  - Peaks manuell integrieren
  - Die vorhandene Integration der Peaks modifizieren
  - Peaks entfernenWenn die Änderungen vorgenommen werden, aktualisiert die Software das Chromatogramm „Analog Sample“ automatisch.
7. (Optional) Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Show Controls**.  
Es werden maximal fünf Kontrollproben unter dem Titel des Chromatogramms „Analog Sample“ angezeigt. Siehe Abschnitt: [Kontrollen anzeigen](#).
8. (Optional) Klicken Sie auf **Baseline Subtract**.  
Die Basisliniensubtraktion wird auf die analoge Probe und auf alle Kontrollen angewendet. Der Ausdruck `baseline subtracted` wird zum Titel des Chromatogramms „Analog Sample“ und zu allen Kontrollen hinzugefügt. Siehe Abschnitt: [Durchführen einer Basisliniensubtraktion](#).
9. (Optional) Ändern Sie den **R.T. Offset**. Siehe Abschnitt: [R.T.-Versatz ändern](#).  
Der R.T.-Versatz gilt sowohl für die analoge Probe als auch für die Kontrollkurven.
10. (Optional) Wenden Sie die **Options** für die analoge Integration an. Siehe Abschnitt: [Optionen für die analoge Integration festlegen](#).
11. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
  - Klicken Sie auf **Update Table**. Siehe Abschnitt: [Tabelle aktualisieren](#).
  - Klicken Sie auf **Update Results and Close**. Siehe Abschnitt: [Ergebnisse aktualisieren und schließen](#).
12. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:

- Klicken Sie auf **Save**, um die aktuell geöffnete Ergebnisdatei zu speichern und die vorhandene Version zu überschreiben.
- Klicken Sie auf **Save As**, um die aktuell geöffnete Ergebnisdatei unter einem neuen Namen zu speichern. Die vorhandene Ergebnisdatei wird nicht aktualisiert.

## Kontrollen anzeigen

1. Aktivieren Sie im Teilfenster „Chromatograms“ des Dialogfeldes „Analog Integration“ das Kontrollkästchen **Show controls**.  
Es werden ggf. maximal fünf Kontrollen unterhalb des Titels „Analog Sample“ im Teilfenster „Chromatograms“ angezeigt. Es werden ggf. maximal fünf Kontrollen unterhalb des Titels „MS Sample“ im Teilfenster „XIC“ angezeigt.
2. Klicken Sie auf das Symbol , um die Liste zu erweitern und sowohl die analoge Probe als auch die analoge Kontrolle oder die MS-Probe und die MS-Kontrolle anzuzeigen.
3. Klicken Sie auf das Symbol , um die Liste zu reduzieren und nur die analoge Probe oder die MS-Probe anzuzeigen.
4. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Show controls** erneut, um die Kontrollen aus der Ansicht zu entfernen.

## Durchführen einer Basisliniensubtraktion

1. Klicken Sie im Teilfenster „Chromatograms“ des Dialogfeldes „Analog Integration“ auf **Baseline Subtract**.  
Das Chromatogramm „Analog Sample“ wird von der Basislinie subtrahiert. Die Basisliniensubtraktion wird sowohl auf die analoge Probe als auch auf alle Kontrollkurven angewendet. Der Ausdruck `baseline subtracted` wird zum Namen des Chromatogramms „Analog Sample“ hinzugefügt.
2. Klicken Sie erneut auf **Baseline Subtract**, um die Basisliniensubtraktion zu entfernen. Der Ausdruck `baseline subtracted` wird vom Namen des Chromatogramms „Analog Sample“ entfernt.

## R.T.-Versatz ändern

Verwenden Sie im Teilfenster „Chromatograms“ des Dialogfeldes „Analog Integration“ die Nach-oben- und Nach-unten-Tasten im Feld **R.T. Offset**, um den Retentionszeit-Versatz zu ändern.

Die Peaks im Chromatogramm „Analog Sample“ werden durch den angegebenen Retentionszeit-Versatz verschoben. Wenn die Tabelle „Potential Metabolites“ aktualisiert wird oder die Ergebnisse aktualisiert werden, dann werden die Werte in der Spalte **Analog R.T. (min)** aktualisiert, um die Verschiebung im angegebenen Retentionszeit-Versatz widerzuspiegeln. Der Versatz gilt sowohl für die analoge Probe als auch für die Kontrollproben.

## Optionen für die analoge Integration festlegen

1. Klicken Sie im Teilfenster „Chromatograms“ des Dialogfeldes „Analog Integration“ auf **Options**.  
Das Dialogfeld „Analog Integration Options“ wird geöffnet.
2. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen für jede anzuwendende Option.

Option	Beschreibung
<b>Overlay XIC for peaks at the same analog retention time</b>	Überlagert MS-Proben-XICs für diese Kurven mit identischen analogen Retentionszeiten.
<b>Link x-axis</b>	Verbindet die X-Achse des Chromatogramms „Analog Sample“ und das XIC-Chromatogramm.

3. Klicken Sie auf **OK**.

## Tabelle aktualisieren

Wenn Änderungen im Dialogfeld „Analog Integration“ vorgenommen werden, dann ist die Option **Update Table** aktiviert.

Klicken Sie auf **Update Table**.

Die Informationen in den folgenden Spalten der Tabelle „Potential Metabolites“ werden aktualisiert, um alle vorgenommenen Änderungen an der analogen Peak-Integration, der analogen Retentionszeit und der Basislinien-Subtraktion wiederzugeben:

- Die zugewiesene **Peak ID** für das Chromatogramm „Analog Sample“ wird möglicherweise aktualisiert, um eine manuelle Integration wiederzugeben. Der analoge Peak wird als Übereinstimmung mit einem MS Peak betrachtet, wenn die Retentionszeit des analogen Peaks mit der Retentionszeit des MS Peaks innerhalb einer festgelegten Toleranz übereinstimmt.
- Die **Analog - Peak Area** wird aktualisiert, um neue integrierte Bereiche wiederzugeben.
- Die **Analog - % Area** wird aktualisiert, um Änderungen am Algorithmus wiederzugeben. Die **Analog - % Area** wird basierend auf allen analogen Peaks (den Peaks, die mit MS Peaks verknüpft sind und den Peaks, die nicht mit MS Peaks verknüpft sind) innerhalb des in den Verarbeitungsparametern angegebenen Zeitbereichs berechnet. Wenn ein analoger Peak mit mehr als einem MS Peak verknüpft ist, dann wird die für eine bestimmte M# gelistete analoge Peak-Fläche proportional basierend auf der XIC MS-Fläche dieser M# berechnet, wobei die Peak-Flächen aller zugeordneten MS Peaks als die Gesamtmenge verwendet werden.
- Die **Analog - R.T. (min)** wird aktualisiert, um Änderungen am Retentionszeit-Versatz wiederzugeben.

**Hinweis:** Diese Änderungen werden nicht in der Ergebnisdatei gespeichert und können zurückgesetzt werden, indem Sie auf **Cancel** klicken.

---

## Ergebnisse aktualisieren und schließen

Wenn Änderungen im Dialogfeld „Analog Integration“ vorgenommen werden, dann ist die Option **Update Results and Close** aktiviert.

1. Klicken Sie auf **Update Results and Close**.  
Es öffnet sich eine Meldung, in der der Benutzer zur Bestätigung aufgerufen wird, dass die analogen Informationen basierend auf den vorgenommenen Änderungen aktualisiert werden sollen.
2. Klicken Sie auf **Yes**.  
Das Dialogfeld „Analog Integration“ wird geschlossen. Die Informationen in den folgenden Spalten der Tabelle „Potential Metabolites“ werden aktualisiert, um alle vorgenommenen Änderungen an der analogen Peak-Integration, der analogen Retentionszeit und der Basislinien-Subtraktion wiederzugeben:
  - Die zugewiesene **Peak ID** für das Chromatogramm „Analog Sample“ wird möglicherweise aktualisiert, um eine manuelle Integration wiederzugeben. Der analoge Peak wird als Übereinstimmung mit einem MS Peak betrachtet, wenn die Retentionszeit des analogen Peaks mit der Retentionszeit des MS Peaks innerhalb einer festgelegten Toleranz übereinstimmt.
  - Die **Analog - Peak Area** wird aktualisiert, um neue integrierte Bereiche wiederzugeben.
  - Die **Analog - % Area** wird aktualisiert, um Änderungen am Algorithmus wiederzugeben. Die **Analog - % Area** wird basierend auf allen analogen Peaks (den Peaks, die mit MS Peaks verknüpft sind und den Peaks, die nicht mit MS Peaks verknüpft sind) innerhalb des in den Verarbeitungsparametern angegebenen Zeitbereichs berechnet. Wenn ein analoger Peak mit mehr als einem MS Peak verknüpft ist, dann wird die für eine bestimmte M# gelistete analoge Peak-Fläche proportional basierend auf der XIC MS-Fläche dieser M# berechnet (wobei die Peak-Flächen aller zugeordneten MS Peaks als die Gesamtmenge verwendet werden).
  - Die **Analog - R.T. (min)** wird aktualisiert, um Änderungen am Retentionszeit-Versatz wiederzugeben.



Wenn Sie Hilfe bei einem bestimmten Problem benötigen, wählen Sie den entsprechenden Link aus:

- [Eine Strukturdatei kann nicht geöffnet werden](#)
- [Ändern von Nutzerberechtigungen](#)
- [Es werden keine potenziellen Metaboliten gefunden](#)
- [Es werden zu viele potenzielle Metaboliten gefunden](#)
- [Lange Verarbeitungszeiten](#)
- [Den Ordner „ProgramData“ anzeigen](#)
- [Bekannte Probleme und Einschränkungen](#)

## Eine Strukturdatei kann nicht geöffnet werden

Stellen Sie sicher, dass die Strukturdatei diesen Konventionen folgt:

- Format: mol
- Version: v2000 oder v3000
- Inhalt: Enthält keinen Text

## Ändern von Nutzerberechtigungen

Wenn die Molecule Profiler Software installiert wird, erhalten alle Benutzer die Berechtigung zum Lesen, Schreiben und Löschen von Dateien im installierten Ordner mit Benutzerdaten. Werden die Berechtigungen geändert, funktioniert die Software möglicherweise nicht mehr ordnungsgemäß.

---

**Hinweis:** Der Standardspeicherort des installierten Benutzerordners ist  
C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler Data.

---

## Es werden keine potenziellen Metaboliten gefunden

Gehen Sie wie folgt vor, um mehr Metaboliten in der relevanten Probe zu finden:

- Wählen Sie eine andere Strategie für die Peak-Ermittlung aus. Siehe Abschnitt: [Informationen über Strategien für die Peak-Ermittlung](#).
- Verringern Sie die minimale chromatographische Intensität auf der Registerkarte „Chromatographic Data“. Siehe Abschnitt: [Registerkarte „Chromatographic Data“](#).

- Erhöhen Sie die **MS m/z tolerance** in der Gruppe „m/z Tolerance“ auf der Registerkarte „MS Parameters“. Siehe Abschnitt: [Registerkarte „MS Parameters“](#).
- Verringern Sie die **Minimum MS peak intensity** in der Gruppe „m/z Tolerance“ auf der Registerkarte „MS Parameters“. Siehe Abschnitt: [Registerkarte „MS Parameters“](#).
- (Oligonukleotid-Arbeitsablauf) Erhöhen Sie die **Intensity tolerance** in der Gruppe „Isotope Pattern Tolerances“ auf der Registerkarte „MS Parameters“.

## Es werden zu viele potenzielle Metaboliten gefunden

Gehen Sie wie folgt vor, um die Anzahl der gefundenen potenziellen Metaboliten zu verringern:

- Wählen Sie eine andere Strategie für die Peak-Ermittlung aus. Siehe Abschnitt: [Informationen über Strategien für die Peak-Ermittlung](#).
- Erhöhen Sie die minimale chromatographische Intensität auf der Registerkarte „Chromatographic Data“. Siehe Abschnitt: [Registerkarte „Chromatographic Data“](#).
- Verkleinern Sie das Retentionszeitfenster auf der Registerkarte „Chromatographic Data“. Siehe Abschnitt: [Registerkarte „Chromatographic Data“](#).
- Verkleinern Sie das Massenbereichfenster auf der Registerkarte „MS Parameters“. Siehe Abschnitt: [Registerkarte „MS Parameters“](#).
- Erhöhen Sie die **Minimum MS peak intensity** in der Gruppe „Isotope Pattern Tolerances“ auf der Registerkarte „MS Parameters“. Siehe Abschnitt: [Registerkarte „MS Parameters“](#).

## Lange Verarbeitungszeiten

Die Verarbeitungszeit wird durch viele Faktoren beeinflusst, einschließlich Komplexität der Daten, Verarbeitungsparameter, Workstation und Betriebssystem.

Um die für die Verarbeitung benötigte Zeit zu verringern:

1. Schließen Sie andere auf der Workstation ausgeführte Anwendungen.
2. Ändern Sie die Verarbeitungsparameter-Werte. Beispiel:
  - Reduzieren Sie die Anzahl der ausgewählten Algorithmen.
  - Erhöhen Sie die minimale chromatographische Intensität auf der Registerkarte „Chromatographic Data“.
  - Verkleinern Sie das Retentionszeitfenster auf der Registerkarte „Chromatographic Data“.
  - Erhöhen Sie die minimale MS-Peak-Intensität auf der Registerkarte „MS Parameters“.
  - Verkleinern Sie das Massenbereichfenster auf der Registerkarte „MS Parameters“.
  - Reduzieren Sie die Anzahl der ausgewählten Massendefektfilter (nur bei kleinen Molekülen).

- Reduzieren Sie die Anzahl der Biotransformationen.
- (Peptid- Oligonukleotid- und ADC-Arbeitsabläufe) Reduzieren Sie die Anzahl der generierten Kataboliten durch Anpassung der verbindungs-spezifischen Parameter.

## Den Ordner „ProgramData“ anzeigen

Im Microsoft Windows Betriebssystem kann der Ordner `C:\ProgramData` möglicherweise ausgeblendet sein. Stellen Sie nach der Installation der Molecule Profiler Software sicher, dass alle Benutzer den Ordner `C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler Data` anzeigen können. Falls der Ordner nicht angezeigt wird, dann gehen Sie wie folgt vor:

1. Klicken Sie im File Explorer auf **View > Options**.  
Das Dialogfeld „Folder Options“ wird geöffnet.
2. Wählen Sie die Registerkarte „View“ aus.
3. Klicken Sie auf **Hidden files and folder > Show hidden files, folders, or drives**.
4. Klicken Sie auf **Apply**.
5. Klicken Sie auf **OK**.

## Bekannte Probleme und Einschränkungen

### Ergebnisdaten

- Bei der Bestimmung der MS-Peak-Fläche wird jetzt ein Zeitumrechnungsfaktor von 60 für die Berechnungen angewendet.

### Interpretation

- Klicken Sie bei der Vorbereitung der strukturellen Zuweisung immer auf **Find**, nachdem Änderungen im Dialogfeld „Interpret Data“ vorgenommen wurden. Die Software berechnet die Liste der verfügbaren Formeln basierend auf den ausgewählten Einstellungen neu.

### Korrelation

- Wenn der relative Ansprechfaktor (RRF) eines spezifischen Metaboliten geändert wird, dann wird der MS-Bereich mit dem RRF-Wert multipliziert. Der aktualisierte MS-Bereich des ausgewählten Metaboliten wird im Teilfenster „Correlation details“ in den jeweiligen Liniendiagrammen, Balkendiagrammen und Tabellen angezeigt.

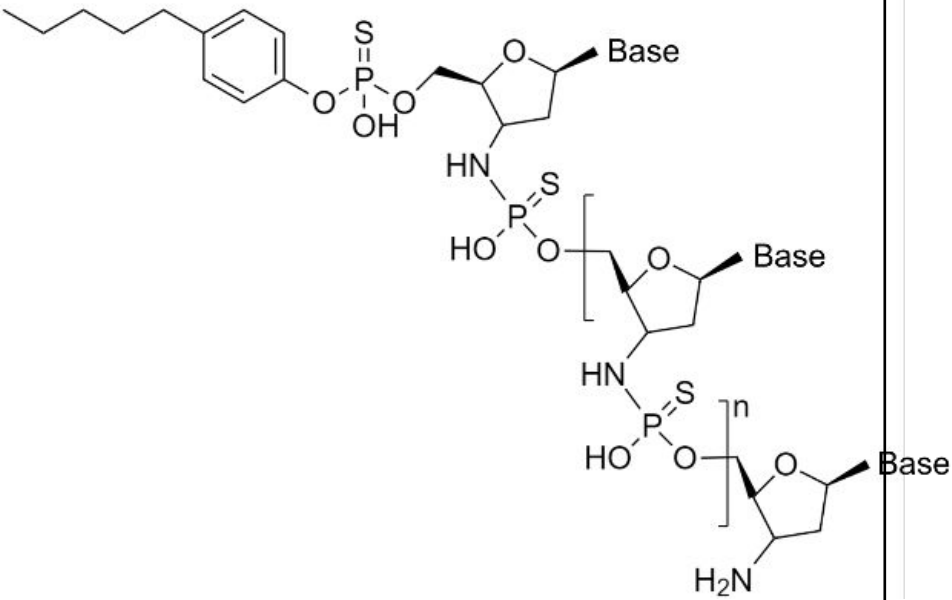
### Berichterstellung

- Wenn bei der Erstellung von Berichten Konflikte mit den Microsoft Word Berichtsvorlagen auftreten, dann stellen Sie sicher, dass alle Microsoft Office Anwendungen geschlossen sind und versuchen Sie es erneut.

# Beispiel für einen benutzerdefinierten Oligonukleotiden

# A

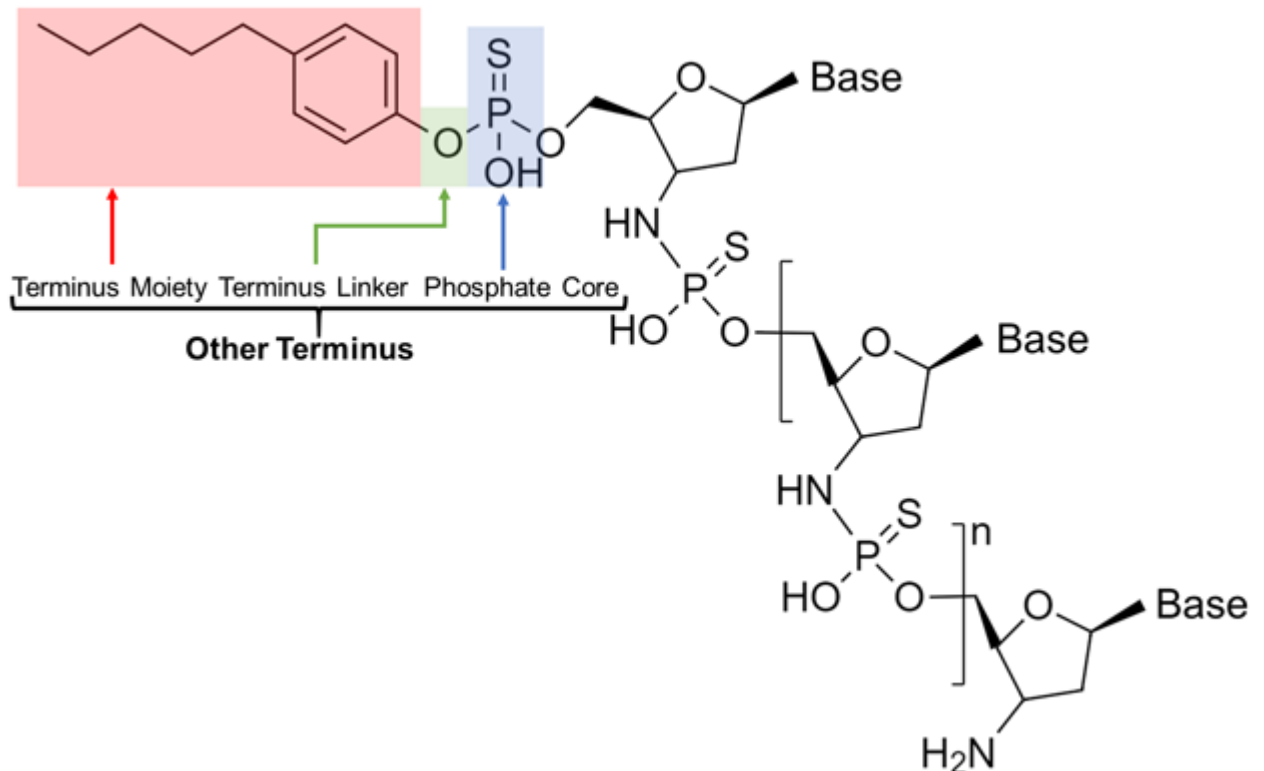
Ein Thiophosphoramidat-Oligonukleotid, der mit einem Benzylpentan-Linker konjugiert ist, der an das 5'-Thiophosphat-Ende gebunden ist.

Sequenz	Chemische Struktur, Formel und monoisotopische Masse
5'- ATCGATCGTTTAAA- 3'	<p><b>Abbildung A-1: <math>C_{149}H_{203}N_{65}O_{57}P_{14}S_{14}</math> ( 4695.7400)</b></p> 

## Erstellen des anderen Terminus

Folgen Sie dem allgemeinen Schema zum Identifizieren der Substrukturen, die den 5'-Linker-Teil bilden.

Abbildung A-2: Anderer Terminus



1. Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.
2. Klicken Sie auf der Registerkarte „Oligo List“ auf **New**.  
Das Dialogfeld „New Oligo Residue or Terminus“ wird geöffnet.
3. In das Feld **Name** geben Sie einen Namen ein, z. B. 5' benzyl-pentane terminus.
4. In das Feld **Symbol** geben Sie ein Symbol ein, z. B. /CustomBP/.
5. Wählen Sie im Feld **Composition Type** die Option **Other Terminus** aus.
6. Füllen Sie die Felder für den anderen Terminus aus.

Tabelle A-1: Felder des anderen Terminus

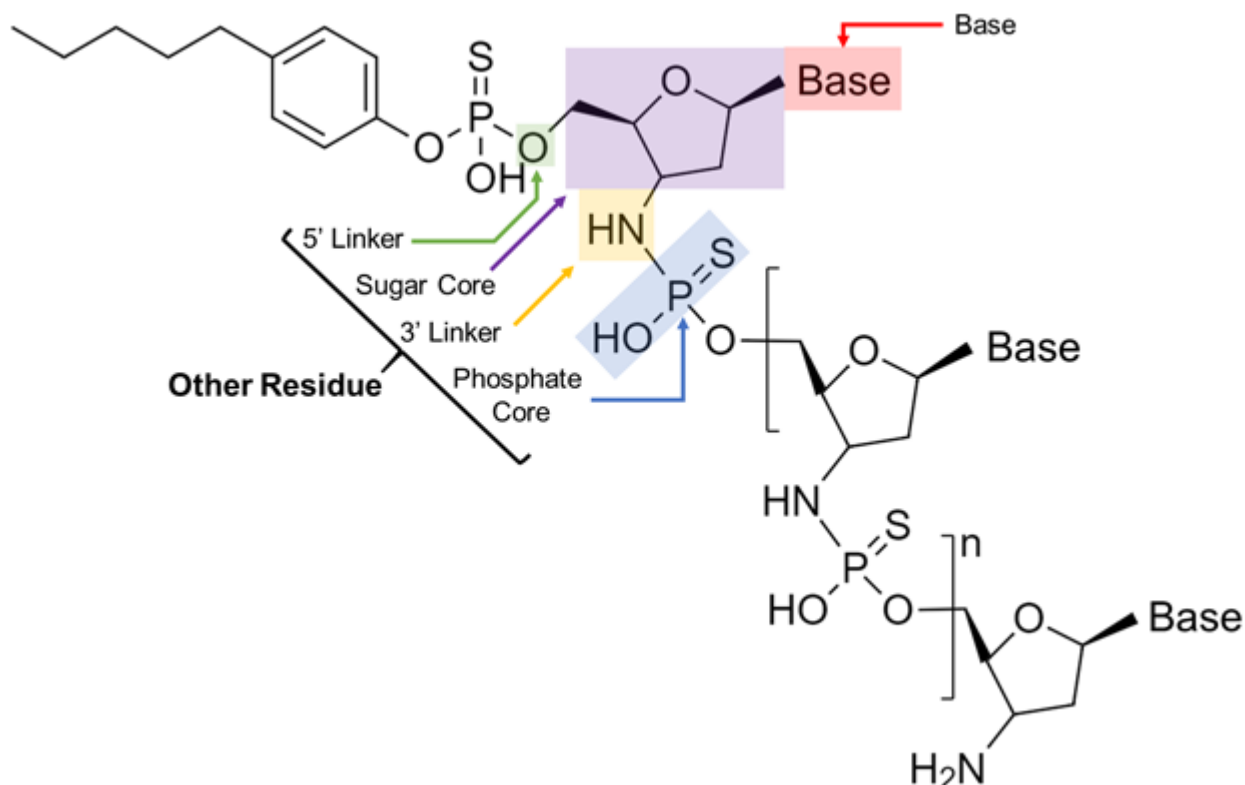
Feld	Wert
Terminus Moiety	C11H15
Terminus Linker	O
Phosphate Core	HOPS

7. Klicken Sie auf **OK**.  
Ein Dialogfeld „Warning“ wird angezeigt, mit der Meldung The "Terminus Moiety" field is usually odd electron. Do you want to continue?"
8. Klicken Sie auf **OK**.

## Die internen Rückstände als andere Rückstände erstellen

Folgen Sie dem allgemeinen Schema zum Identifizieren der Substrukturen, die die benutzerdefinierten Basen bilden.

Abbildung A-3: Anderer Rückstand



1. Klicken Sie auf **Edit > Custom Elements**.
2. Klicken Sie auf der Registerkarte „Oligo List“ auf **New**.

---

**Tipp!** Definieren Sie beim Erstellen der benutzerdefinierten Rückstände alle vier Nucleotide. Es wird empfohlen, einen einzelnen Nucleotiden zu erstellen und anschließend auf **New From** zu klicken, um die drei übrigen Nucleotide zu erstellen.

---

Das Dialogfeld „New Oligo Residue or Terminus“ wird geöffnet.

3. Führen Sie für den Adeninnucleotid die folgenden Schritte durch:
  - a. Geben Sie in das Feld **Name** `Custom dA` ein.
  - b. Geben Sie in das Feld **Symbol** `/CustomdA/` ein.
  - c. Wählen Sie im Feld **Composition Type** die Option **Other Residue** aus.
  - d. Füllen Sie die Felder für den anderen Rückstand aus.

Tabelle A-2: Felder des anderen Rückstands

Feld	Wert
Base	C5H4N5
5' Linker	O
Sugar Core	C5H7O
3' Linker	NH
Phosphate Core	HPOS

- e. Klicken Sie auf **OK**.  
Ein Dialogfeld „Warning“ wird angezeigt, mit der Meldung `The "Sugar Core" field is usually odd electron. Do you want to continue?`
  - f. Klicken Sie auf **OK**.
4. Gehen Sie für die übrigen drei Nukleotide wie folgt vor:
- a. Wählen Sie **/CustomdA/** aus und klicken Sie dann auf **New From**.  
Das Dialogfeld „New Oligo Residue or Terminus“ wird geöffnet.
  - b. Geben Sie Folgendes ein: **Name**, **Symbol** und **Base**. Für Basenformeln siehe die folgende Tabelle.

Tabelle A-3: Basenformeln

Nukleotid	Name	Symbol	Base
Thymin	Custom dT	/CustomdT/	C5H5N2O2
Guanin	Custom dG	/CustomdG/	C5H4N5O
Cytosin	Custom dC	/CustomdC/	C4H4N3O

- c. Klicken Sie auf **OK**.

## Schreiben einer benutzerdefinierten Sequenz

1. Klicken Sie auf **New > Oligonucleotide**.
2. Geben Sie im Teilfenster „Sequence“ Folgendes ein:  
/CustomBP/ /CustomdA//CustomdT//CustomdC/ /CustomdG//CustomdA//CustomdT/ /  
CustomdC//CustomdG//CustomdT/ /CustomdT//CustomdT//CustomdA/ /CustomdA//  
CustomdA/
3. Klicken Sie in das Feld **Chemical formula**.  
C149H203N65O57P14S14 wird im Feld angezeigt.

## Benennung von Metaboliten durch die Software

Namen werden potenziellen Metaboliten auf zwei Arten zugewiesen. Wenn es sich bei dem Peak um einen vorhergesagten Metaboliten handelt, dann basiert der Name auf der übereinstimmenden Biotransformation, dem Spaltungs-Metaboliten oder einer Kombination aus beiden. Wenn es sich bei dem Peak um einen unerwarteten Metaboliten handelt, dann erhält dieser die Bezeichnung „Verlust von“ oder „Gewinn von“.

Die Software weist zudem jedem Metaboliten eine potenzielle Formel zu. Benutzer können die Formel ändern, indem sie eine andere Formel aus einer von der Software vorgeschlagenen Liste mit Formeln auswählen oder indem sie eine Formel manuell eingeben.

## IDA

Eine IDA-Methode erkennt Ionen in Voll-Scan-Spektren während der Erfassung und entscheidet dann in Echtzeit, welche Ionen per MS/MS analysiert werden sollen.

## Peak-IDs

Die Software kennzeichnet potenzielle Metaboliten in Form von M1, M2, M3 usw., basierend auf der Retentionszeit und dem  $m/z$ -Wert.

## Relativer Ansprechfaktor

Der relative Ansprechfaktor (RRF) ist ein Wert, mit dem die Peak-Fläche multipliziert wird, um die Peak-Fläche künstlich zu vergrößern oder zu verkleinern. Dadurch kann die Darstellung dieser Peak-Fläche im Diagramm mit den Korrelationsdetails geändert werden.

## Referenzspektrum

Das MS/MS-Spektrum einer bestimmten Verbindung, das zur Identifizierung potenzieller Metaboliten verwendet wird.



# Kontaktangaben

---

## Kundenschulung

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

## Online-Lernzentrum

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

## SCIEX Support

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

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

## Cybersicherheit

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

## Dokumentation

Diese Version des Dokuments ersetzt alle vorherigen Versionen.

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

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

---

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

---