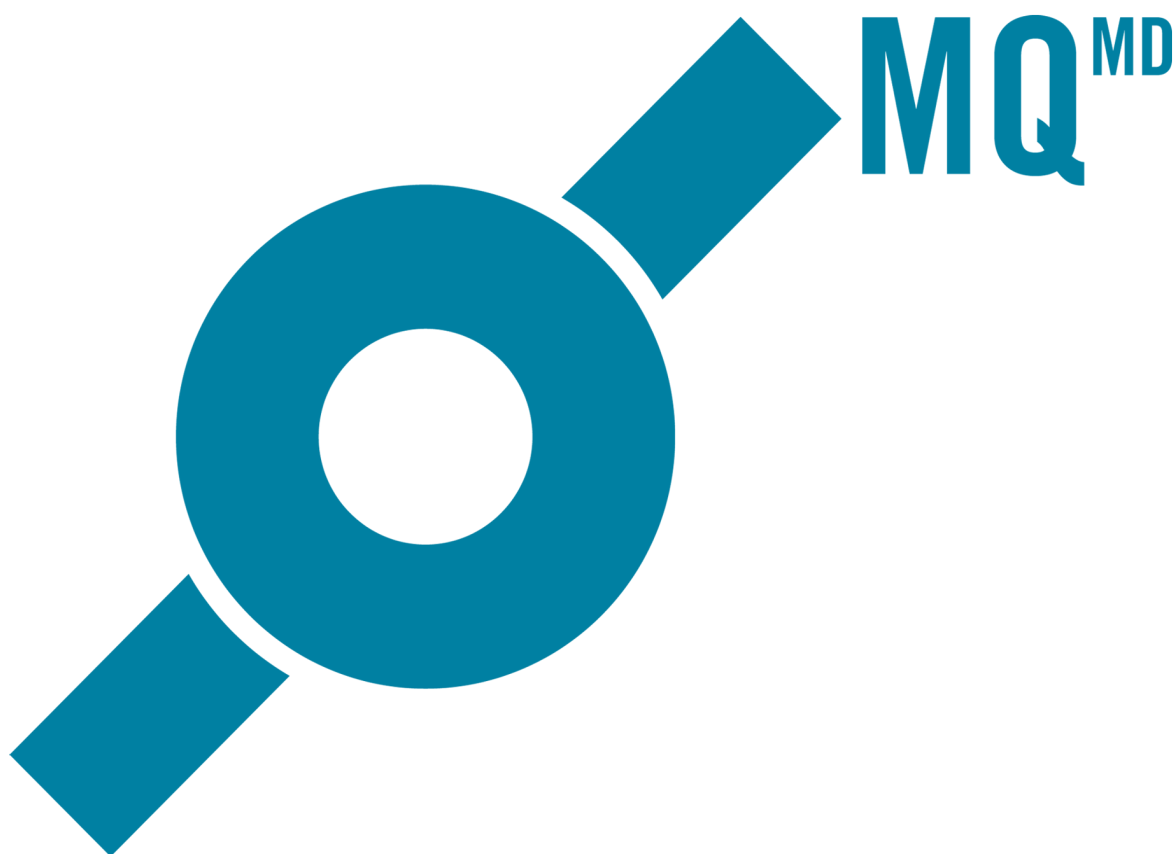


---

# MultiQuant™ MD 3.0.3 Software

Referenzhandbuch



Dieses Dokument wird Käufern eines SCIEX-Geräts für dessen Gebrauch zur Verfügung gestellt. Dieses Dokument ist urheberrechtlich geschützt und jegliche Vervielfältigung dieses Dokuments oder eines Teils dieses Dokuments ist strengstens untersagt, sofern dies nicht schriftlich von SCIEX genehmigt wurde.

IVD

Die in diesem Dokument beschriebene Software unterliegt einer Lizenzvereinbarung. Es ist gesetzlich untersagt, die Software auf andere Medien zu kopieren, zu ändern oder zu verbreiten, sofern dies nicht ausdrücklich durch die Lizenzvereinbarung genehmigt wird. Darüber hinaus kann es nach dem Lizenzvertrag 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 und/oder Funktion als Marken ihrer jeweiligen Eigentümer eingetragen sind. Jede derartige Verwendung dient ausschließlich der Bezeichnung von Produkten eines Herstellers, die von SCIEX für den Einbau in seine Geräte bereitgestellt werden. Damit sind keinerlei eigene noch fremde Nutzungsrechte und/oder -lizenzen zur Verwendung derartiger Hersteller- und/oder Produktnamen als Marken verbunden.

CE

Die Garantien von SCIEX beschränken sich auf die zum Verkaufszeitpunkt oder bei Erteilung der Lizenz für seine Produkte ausdrücklich anerkannten Garantien und sind die von SCIEX alleinig und ausschließlich anerkannten Zusicherungen, Garantien und Verpflichtungen. SCIEX gibt keinerlei andere ausdrücklichen noch impliziten Garantien, einschließlich und ohne Einschränkung, Garantien zur Marktgängigkeit oder Eignung für einen bestimmten Zweck, gleichgültig ob diese auf gesetzlichen oder sonstigen Rechtsvorschriften beruhen oder sich aus dem Verlauf des Handels oder der Nutzung des Handels ergeben, und lehnt alle derartigen Garantien ausdrücklich ab und übernimmt für durch die Nutzung durch den Käufer oder für sich daraus ergebende widrige Umstände, einschließlich indirekter Schäden oder Folgeschäden, keinerlei Verantwortung oder Eventualverbindlichkeiten.

#### **Zur Verwendung in der In-vitro-Diagnostik.**

##### **Rx only.**

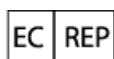
Nicht in allen Ländern erhältlich. Weitere Einzelheiten erfragen Sie bitte beim zuständigen SCIEX-Mitarbeiter.

AB Sciex tätigt Geschäfte als SCIEX.

Die in diesem Dokument angegebenen Marken sind Eigentum von AB Sciex Pte. Ltd. oder ihrer jeweiligen Eigentümer.

AB SCIEX™ wird unter Lizenz verwendet.

© 2017 AB Sciex



AB Sciex Netherlands B.V.  
1e Tochtweg 11,  
2913LN Nieuwerkerk aan den IJssel  
Niederlande



AB Sciex Pte. Ltd.  
Blk 33, #04-06  
Marsiling Ind Estate Road 3  
Woodlands Central Indus. Estate.  
SINGAPUR 739256

# Inhalt

---

<b>1 Einführung in die Software.....</b>	<b>7</b>
Software-Hilfe.....	7
File Types (Dateiarten).....	8
Kontakt.....	8
Technischer Support.....	8
<b>2 Dateimenü.....</b>	<b>9</b>
Eine Quantifizierungsmethode importieren.....	10
Untermenü „Export“ (Exportieren).....	11
Results Tables exportieren.....	11
Ergebnistabelle exportieren – Metrik.....	13
Transfer to LIMS (An LIMS übertragen).....	14
<b>3 Menü „Edit“ (Bearbeiten).....</b>	<b>15</b>
Modify Results Table Method (Methode für Ergebnistabelle ändern).....	17
Project Units & Calibration Defaults.....	18
Project Secure Export Settings.....	18
<b>4 Das Menü „Process“.....</b>	<b>20</b>
Export Calibration (Kalibrierung exportieren).....	21
Import External Calibration (Externe Kalibrierung importieren).....	21
<b>5 Menü „Audit Trail“ (Prüfprotokoll).....</b>	<b>23</b>
Audit Trail Viewer.....	23
Prüfprotokoll-Ergebnisse im Audit Trail Viewer anzeigen.....	23
Stichwortsuche durchführen.....	25
Geprüfte Ereignisse filtern.....	25
Audit Trail Viewer exportieren.....	27
Die Prüfprotokollansicht drucken.....	27
Audit Trail Manager.....	27
Über Audit Maps.....	28
Erstellen einer Audit Map.....	28
Audit Map ändern.....	31
Audit Map bearbeiten.....	32
Eingebettete Audit-Konfiguration anzeigen.....	35
<b>6 Menü „Help“.....</b>	<b>37</b>
<b>7 Ergebnistabellen.....</b>	<b>38</b>
Liste Components & Groups.....	39
Rechtsklickmenü Results Table.....	40
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All.....	41
Column Settings.....	42
Probentypfilter.....	43
View Hidden Rows (Ausgeblendete Zeilen anzeigen).....	44
Dialog „Results Table“ (Ergebnistabelle).....	44

## Inhalt

---

Select Samples (Proben auswählen).....	44
Select Method (Methode wählen).....	45
Repräsentative Probe auswählen.....	46
Define Components (Komponenten definieren).....	47
Integration definieren.....	50
Outlier Settings (Ausreißereinstellungen).....	53
Spalten der Ergebnistabelle.....	55
<b>8 Peak Review.....</b>	<b>64</b>
Manuelle Integration.....	64
Apply.....	65
Tipps für das Untersuchen von Peaks.....	65
Rechtsklickmenü Peak Review .....	66
Dialogfeld Peak-Bewertungsoptionen: Registerkarte Erscheinungsbild.....	67
Dialogfeld Peak Review Options: Registerkarte Zooming.....	69
Set Peak Review Title Format.....	71
Parameter kopieren.....	71
Parameter einfügen.....	72
Peak auf „Nicht gefunden“ einstellen.....	72
Peak verwenden.....	72
Quantifizierungsmethode für Komponente aktualisieren.....	72
Quantifizierungsmethode für Gruppe aktualisieren.....	72
Integrationsparameter auf Probe innerhalb der Gruppe übertragen.....	73
Revert Peak to Original Method.....	73
Revert All Peaks for Component (Alle Peaks für Komponente zurücksetzen).....	73
<b>9 Nebeneinander liegende Probenprüfung.....</b>	<b>74</b>
Bewertung nebeneinander liegender Proben.....	74
<b>10 Calibration - Teilfenster.....</b>	<b>76</b>
Dialog „Regression Options“ .....	76
Tipps für die Kalibrierung.....	77
Rechtsklick-Menü „Calibration“ (Kalibrierung).....	77
<b>11 Statistiktabelle.....</b>	<b>80</b>
Tipps zur Statistiktabelle.....	81
Rechtsklick-Menü „Statistics Table“ .....	82
<b>12 Metrische Kurven.....</b>	<b>83</b>
Eine metrische Kurve erzeugen.....	83
Metrik-Einstellungen für grafische Darstellung speichern.....	83
Tipps zu metrischen Kurven.....	83
Rechtsklick-Menü „Metric Plot“ (Metrische Kurve).....	84
Dialog „Regression“ .....	85
<b>13 Quantitation Method Editor.....</b>	<b>87</b>
Registerkarte „Components“ .....	87
Untermenü „Groups“ (Gruppen).....	88
Untermenü „Internal Standards“ (Interne Standards).....	90
Registerkarte „Integration“ .....	91
Dialog „Highlight Components“ .....	92
Dialog „Update Retention Time“ (Aktualisierung der Retentionszeit).....	93
Registerkarte Outlier Settings .....	93
<b>14 Quantitative Analysen - Workflow-Tutorial.....</b>	<b>95</b>

Über Kalibrierkurven.....	95
Voraussetzungen.....	95
Ändern der in der Ergebnistabelle angezeigten Spalten.....	95
Verarbeiten von Daten mit dem SignalFinder™ Integrationsalgorithmus.....	97
Peak-Integrationsparameter festlegen.....	97
Erstellen einer Ergebnistabelle.....	98
Peaks bewerten.....	102
Ändern der Kalibrierkurve.....	103
Überprüfen von Probenstatistiken.....	104
Verarbeiten von Daten mit dem MQ4-Integrationsalgorithmus.....	105
Peak-Integrationsparameter festlegen.....	105
Erstellen einer Ergebnistabelle.....	106
Peaks bewerten.....	110
Ändern der Kalibrierkurve.....	112
Überprüfen von Probenstatistiken.....	113
Integrationsalgorithmen.....	114
Über den SignalFinder Integrationsalgorithmus.....	114
SignalFinder™ Integrationsalgorithmus-Parameter.....	117
Parameter bei MQ4-Integrationsalgorithmus.....	121
Optionale Aufgaben.....	124
Metrische Kurven erstellen.....	124
Benutzerdefinierte Spalten erstellen.....	125
Über Quantitation Methods (Quantifizierungsmethoden) und Embedded Methods (Eingebettete Methoden).....	125
<b>A Integrationsalgorithmusparameter.....</b>	<b>126</b>
SignalFinder Integrationsalgorithmus-Parameter.....	126
Parameter bei MQ4-Integrationsalgorithmus.....	129
<b>B Regressionsgleichungen.....</b>	<b>132</b>
Gewichtungsfaktoren.....	133
Regressionen.....	133
Linear.....	134
Linear durch Null.....	134
Mittlerer Reaktionsfaktor.....	134
Quadratisch.....	135
Potenz.....	135
Wagner.....	135
Hill.....	136
Endgültige Konzentrationen berechnen.....	136
Linear.....	136
Linear Through Zero (Linear durch Null) und Mean Response Factor (Durchschnittlicher Ansprechfaktor).....	136
Quadratisch.....	136
Potenz.....	136
Wagner.....	136
Hill.....	137
<b>C Berichte.....</b>	<b>138</b>
Create Reports (Berichte erstellen).....	138
Benutzerdefinierte Berichtsvorlagen erstellen.....	139
Berichtsvorlagen.....	140
Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags).....	142

**Inhalt**

---

**D Relatives Rauschen und Signal-zu-Rauschen-Berechnungen.....156**  
Hinweis zu Signal-zu-Rauschen bei Verwendung des SignalFinder™  
Integrationsalgorithmus.....160

**E Software-Symbole.....161**

**F MultiQuant™ MD Software-Zugriff.....168**  
Sicherheitseinstellungen.....171

**Revisionen.....174**

# Einführung in die Software

---

1

In diesem Dokument werden die in MultiQuant™ MD Software unterstützt.

Der Zugriff auf die Software erfolgt auf Grundlage der dem Benutzer in Analyst® MD Software. Stellen Sie sicher, dass jedem Benutzer der richtige Zugriff auf die Software zugeordnet wurde.

Es werden nur englischer Versionen der folgenden Microsoft-Betriebssysteme unterstützt:

- Windows 7 (32-Bit und 64-Bit) mit SP1
- Windows 10

---

**VORSICHT! Das Format für Zahlen, Währungen, Datumsangaben und Uhrzeit muss auf Englisch (USA) eingestellt werden. Wird das Format auf einen anderen Wert gesetzt, kann dies zu fehlerhaften Daten führen.**

---

MultiQuant™ MD-Software mit Prüfprotokoll und Sicherheitsfunktionen sind eine Volllizenz und eine Installation der Analyst® MD-Software erforderlich.

Exportieren einer Ergebnistabelle, Übertragung an LIS und Berichterstellung sind die kontrollierten Methoden, um Daten aus der Software auszugeben. Andere Methoden zur Datenausgabe wie das Kopieren und Einfügen von der Ergebnistabelle aus werden nicht kontrolliert. Die Benutzer sollten davon absehen, für reguläre Arbeitsabläufe unkontrollierte Ausgabemethoden zu verwenden.

---

**Hinweis:** MultiQuant™ MD-Software verwendet den Analyst® MD Software. Keine weitere Einrichtung ist erforderlich für die MultiQuant™ MD Software unterstützt.

---

---

**Hinweis:** Die Datei- und Ordnerstruktur muss beibehalten werden, damit Chromatogramme angezeigt werden können. Wenn Daten verschoben werden müssen, verschieben Sie das gesamte Projekt und behalten Sie die Dateistruktur bei.

---

## Software-Hilfe

Die Software bietet Tooltips und Fehlermeldungen mit zusätzlichen Informationen zu den Software-Funktionen.

- Wenn ein Feld nicht verfügbar ist, bewegen Sie den Mauszeiger über dem Feld, um Tooltips anzuzeigen, die erklären, warum die Funktion nicht verfügbar ist. Zusätzliche Informationen umfassen, wie das Feld aktiviert werden kann oder welche Sicherheitseinstellung erforderlich ist, um das Feld zu aktivieren.
- Fehlermeldungen enthalten Informationen zu den für die Verwendung der Funktion erforderlichen Sicherheitseinstellungen.

## File Types (Dateiarten)

Tabelle 1-1 Software-Dateitypen

File Type (Dateiart)	Beschreibung
*.qsession	Ergebnistabelle der MultiQuant Software. Enthält Daten zum Quantifizierungs-Prüfprotokoll.
*.qmethod	Quantifizierungsmethode der MultiQuant Software.
*.qmap	Audit-Vorgaben der MultiQuant Software.
*.mqcal	Externe Kalibrierungsdatei.
*.cset	Datei „Column Settings“ (Spalteneinstellungen)

## Kontakt

### SCIEX Support

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

### 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](https://sciex.com/education).

### Online-Lernzentrum

- [SCIEXUniversity](https://sciex.com/education)

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

## Technischer Support

SCIEX und seine Vertretungen haben auf der ganzen Welt einen Stab an voll ausgebildeten Servicekräften und technischen Spezialisten. Der Support kann Fragen zum System oder anderen auftretenden, technischen Problemen beantworten. Für weitere Informationen besuchen Sie die SCIEX-Website unter [sciex.com](https://sciex.com).



**Tabelle 2-1 Optionen „File Menu“ (Dateimenü)**

Menüoption	Beschreibung
New Results Table	Quantifiziert einen Datensatz und erstellt dann eine Ergebnistabelle. Wählen Sie die zu verarbeitenden Datendateien sowie die anzuwendende Quantifizierungsmethode aus. Siehe <a href="#">Dialog „Results Table“ (Ergebnistabelle) auf Seite 44.</a>
New Quantitation Method	Ein leerer Quantifizierungsmethoden-Editor wird nach dem Auswählen der Probe erstellt. Normalerweise erstellt der Benutzer eine Methode mithilfe des Assistenten New Results Table Wizard (Neue Ergebnistabelle erstellen). Dieser Befehl ist jedoch hilfreich, wenn der Benutzer eine Methode erstellen möchte, diese jedoch nicht sofort auf eine Sammlung von Proben anwenden und eine Ergebnistabelle erstellen möchte. <ul style="list-style-type: none"> <li>• Das Fenster „Navigation“ zeigt die Unterordner, .wiff-Dateien und Proben an, die im Ordner <b>Data (Daten)</b> für das ausgewählte Projekt verfügbar sind.</li> <li>• Erweitern Sie einzelne Ordner, um alle Unterordner oder .wiff-Dateien anzuzeigen. Erweitern Sie die .wiff-Datei, um die verfügbaren Proben anzuzeigen.</li> </ul>
Open Results Table	Öffnet eine zuvor gespeicherte Ergebnistabelle. Nach dem Auswählen des Befehls wird ein Standarddialog <b>Open (Öffnen)</b> geöffnet. Siehe <a href="#">Ergebnistabellen auf Seite 38.</a>
Open Quantitation Method	Öffnet eine zuvor gespeicherte Quantifizierungsmethode. Nach dem Auswählen des Befehls wird ein Standarddialog <b>Open (Öffnen)</b> geöffnet. Siehe <a href="#">Quantitation Method Editor auf Seite 87.</a>
Save	Wird verwendet, um die aktive Ergebnistabelle oder den aktiven Quantifizierungsmethoden-Editor in eine Datei zu speichern. Wenn die Ergebnistabelle oder der Quantifizierungsmethoden-Editor noch nie gespeichert wurde, wird der Benutzer aufgefordert, den Dateinamen einzugeben. Andernfalls wird die vorherige Version überschrieben.
Save As	Wird verwendet, um die aktive Ergebnistabelle oder den aktiven Quantifizierungsmethoden-Editor in einer neuen Datei zu speichern.
Recent Results Table	Enthält Untermenüelemente für jede kürzlich verwendete Ergebnistabelle. Wählen Sie eines der folgenden Elemente, um die entsprechende Datei zu öffnen.
Recent Quantitation Methods	Enthält Untermenüelemente für jede kürzlich verwendete Quantifizierungsmethode. Wählen Sie eines der folgenden Elemente, um die entsprechende Datei zu öffnen.

Tabelle 2-1 Optionen „File Menu“ (Dateimenü) (Fortsetzung)

Menüoption	Beschreibung
Import	Erstellt eine neue Quantifizierungsmethode aus einer Textdatei. Normalerweise erstellt der Benutzer eine Methode manuell mit dem Befehl „New Quantitation Method“ (Neue Quantifizierungsmethode) (siehe <a href="#">Quantitation Method Editor auf Seite 87</a> ) oder im Rahmen des Prozesses zur Erstellung einer neuen Ergebnistabelle (siehe <a href="#">Ergebnistabellen auf Seite 38</a> ). Dieser Befehl ist hilfreich, wenn der Benutzer eine Quantifizierungsmethode hinzufügen oder ändern möchte. Erstellen Sie in diesem Fall eine Methode manuell und verwenden Sie dann den Befehl <b>Quantitation Method as Text (Quantifizierungsmethode als Text)</b> .
Export	Enthält Befehle zum Exportieren von Quantifizierungsmethoden in Text- oder .qmethod-Dateien. Siehe <a href="#">Untermenü „Export“ (Exportieren) auf Seite 11</a> . Exportieren einer Ergebnistabelle, Übertragung an LIMS und Berichterstellung sind die kontrollierten Methoden, um Daten aus der Software auszugeben. Andere Methoden zur Datenausgabe wie das Kopieren und Einfügen von Ergebnistabellen aus werden nicht kontrolliert. Die Benutzer sollten davon absehen, für reguläre Arbeitsabläufe unkontrollierte Ausgabemethoden zu verwenden.
Transfer to LIMS	Eine LIMS-Lizenzdatei ist erforderlich, um diese Funktion zu aktivieren. Siehe <a href="#">Transfer to LIMS (An LIMS übertragen) auf Seite 14</a> .
Export and Save Results Table	Das Exportieren der Ergebnistabelle ist eine der kontrollierten Methoden zur Datenausgabe.
Create Report and Save Results Table	Erstellt einen Bericht im Format Microsoft Word mithilfe der Reporter Software. Siehe <a href="#">Berichte auf Seite 138</a> . Im Fall der Erstellung einer benutzerdefinierten Berichtsvorlage ist der Benutzer für die Validierung der Vorlage verantwortlich. Das Zahlenformat kann im Vorlagen-Editor geändert werden. Falls in der Vorlage kein Zahlenformat spezifiziert wird, wird das Format der <b>Results Table Column Setting (Spalteneinstellungen der Ergebnistabelle)</b> für den Bericht verwendet.
Exit	Beendet das Programm. Der Benutzer wird aufgefordert, alle nicht gespeicherten Daten zu speichern.

## Eine Quantifizierungsmethode importieren

1. Klicken Sie auf **File (Datei) > Import > Quantitation Method from Text (Quantifizierungsmethode aus Textdatei)**.

2. Wählen Sie die Textdatei aus.

3. Wählen Sie eine repräsentative Probe aus.

Der Quantifizierungsmethoden-Editor wird geöffnet.

4. Speichern Sie die Methode im \*.qmethod-Format, sodass sie anschließend dazu verwendet werden kann, einen neuen Datensatz zu quantifizieren.

## Untermenü „Export“ (Exportieren)

Exportieren einer Ergebnistabelle, Übertragung an LIMS und Berichterstellung sind die kontrollierten Methoden, um Daten aus der Software auszugeben. Andere Methoden zur Datenausgabe wie das Kopieren und Einfügen von der Ergebnistabelle aus werden nicht kontrolliert. Die Benutzer sollten davon absehen, für reguläre Arbeitsabläufe unkontrollierte Ausgabemethoden zu verwenden.

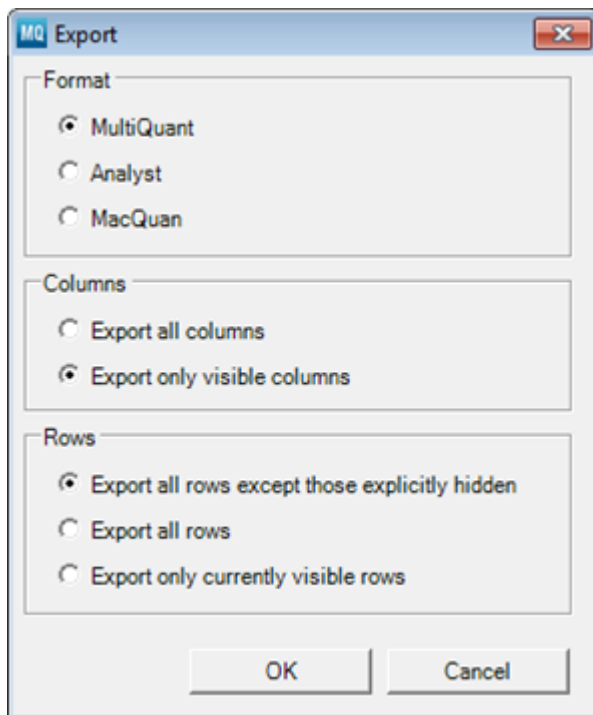
**Tabelle 2-2 Optionen Menü „Export“ (Exportieren)**

Menüoption	Beschreibung
Results Table-Metric	Erstellt eine tabulatorgetrennte Textdatei mit der Information aus der aktiven Ergebnistabelle. Siehe <a href="#">Ergebnistabelle exportieren – Metrik auf Seite 13</a> .
Results Table's Quantitation Method as *.qmethod	Exportiert die Quantifizierungsmethode in eine neue Datei. Wenn eine Ergebnistabelle erstellt wird, wird eine Kopie der zur Erstellung der Tabelle verwendeten Quantifizierungsmethode intern mit der Tabelle gespeichert. Dies ist hilfreich, wenn die ursprüngliche Quantifizierungsmethode gelöscht (oder verändert) wurde und der Benutzer diese ursprüngliche Methode für einen neuen Batch von Proben bei der Erstellung einer Ergebnistabelle übernehmen möchte.
Results Table's Quantitation Method as Text	Exportiert eine Kopie dieser Methode in Textformat. Wenn eine Ergebnistabelle erstellt wird, wird eine Kopie der zur Erstellung der Tabelle verwendeten Quantifizierungsmethode intern mit der Tabelle gespeichert.
Quantitation Method as Text	Diese Dateien enthalten eine Titelzeile und eine Zeile für jede Komponente (Analyt oder internen Standard). Es gibt eine Spalte für den Namen der Komponente, den Massenbereich, jeden Integrationsparameter usw. Kopfzeilen dürfen weder geändert noch sollten Spalten hinzugefügt oder gelöscht werden, wenn die Quantifizierungsmethode in MultiQuant™ MD Software verwenden zu müssen. Wenn die Kopfzeile einer Spalte, welche ein Integrationsparameter angibt, geändert oder die Spalte selbst gelöscht wird, wird der Standardwert wie für diesen Integrationsparameter in den Benutzerintegrationsstandards festgelegt auf alle Komponenten angewendet. Wenn die Kopfzeile für eine andere Spalte geändert oder gelöscht wird, wird die Methode nicht importiert. Der Benutzer sollte die Methode öffnen und bestätigen, dass die erforderlichen Änderungen in der importierten Quantifizierungsmethode enthalten sind. Siehe <a href="#">Tabelle 2-1</a> .

## Results Tables exportieren

**Hinweis:** Der Hersteller übernimmt keine Verantwortung oder Eventualverbindlichkeit, einschließlich indirekter oder Folgeschäden nach dem Export der Daten aus der Software. Die Results Table wird unabhängig vom Zahlenformat in den Spalteneinstellungen mit voller Genauigkeit exportiert.

Abbildung 2-1 Dialogfeld Export



Label	Beschreibung
<b>Format</b>	
MultiQuant	Zum Exportieren in voller Präzision auswählen. In diesem Format enthält die Textdatei eine Kopfzeile mit denselben Spaltenbezeichnungen wie die <b>Results Table</b> . Dies ist das empfohlene Format zum Exportieren von <b>Results Tables</b> .
Analyst	Wählen Sie diese Option, um mit der in der Spalteneinstellung definierten Präzision zu exportieren. Dieses Format entspricht dem aus Analyst <sup>®</sup> MD-Software-Quantifizierungs- <b>Results Tables</b> . Der Unterschied zwischen diesem Format und dem vorherigen Format besteht darin, dass die Spaltenüberschriften in einigen Fällen leicht abweichen (damit Sie mit dem Analyst <sup>®</sup> MD-Softwareformat übereinstimmen) und weitere Kopfzeilen für die einzelnen Analyten vorhanden sind, in denen die Kalibrierung erläutert wird.
MacQuan	Dieses Format ähnelt dem der Analyst <sup>®</sup> MD-Software, abgesehen davon, dass die Spaltenüberschriftsnamen mit denen übereinstimmen, die vom MacQuan-Quantifizierungspaket verwendet werden.
<b>Spalten</b>	
Export all columns	Wählen Sie diese Option, um alle verfügbaren Felder, einschließlich der aktuell in der <b>Ergebnistabelle</b> ausgeblendeten Spalten, zu exportieren.

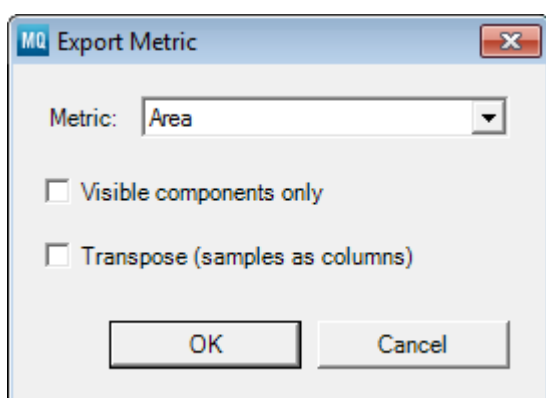
Label	Beschreibung
Export only visible columns	Wählen Sie diese Option, um ausschließlich die aktuell in der <b>Ergebnistabelle</b> angezeigten Spalten zu exportieren. Der Benutzer kann mit dem Befehl <b>Results Table Column Settings</b> ebenfalls auswählen, welche Spalten in der Ergebnistabelle dargestellt werden. Siehe <a href="#">Rechtsklickmenü Results Table auf Seite 40</a> .
<b>Zeilen</b>	
Export all rows except those explicitly hidden	Wählen Sie diese Option, um alle Zeilen zu exportieren, außer jenen, die aufgrund einer spezifischen Filterung ausgeblendet sind. Siehe <a href="#">Software-Symbole auf Seite 161</a> . Zeilen, die aufgrund einer Filterung nach <b>Sample Type</b> oder <b>Component</b> ausgeblendet sind, werden exportiert.
Export all rows	Auswählen, um alle Zeilen zu exportieren (d. h. alle Komponenten für alle Proben).
Export only currently visible rows	Wählen Sie diese Option, um ausschließlich die aktuell in der <b>Ergebnistabelle</b> angezeigten Zeilen zu exportieren. Zeilen, die aufgrund einer Filterung nach <b>Sample Type</b> oder <b>Component</b> ausgeblendet sind, werden nicht eingeschlossen.

## Ergebnistabelle exportieren – Metrik

**Hinweis:** Der Hersteller übernimmt keine Verantwortung oder Eventualverbindlichkeit, einschließlich indirekter oder Folgeschäden nach dem Export der Daten aus der Software. Die **Ergebnistabelle** wird unabhängig vom Zahlenformat in den Spalteneinstellungen mit voller Genauigkeit exportiert.

Dies wird genutzt, um eine tabulatorgetrennte Textdatei mit der Information aus der aktiven Ergebnistabelle zu generieren.

**Abbildung 2-2 Dialogfeld Export Metric**



Label	Beschreibung
Metric	Wählen Sie das Feld, das exportiert werden soll. Siehe <a href="#">Spalten der Ergebnistabelle auf Seite 55</a> .
Visible components only	Wenn diese Option ausgewählt wird, werden nur diejenigen Komponenten exportiert, von denen mindestens eine zugehörige Zeile aktuell in der Ergebnistabelle sichtbar ist. Wenn diese Option nicht ausgewählt wird, werden die Informationen aller Komponenten exportiert.
Transpose (samples as columns)	Wenn diese Option ausgewählt wird, hat die generierte Datei eine Spalte für jede Probe und eine Zeile für jede Komponente (Analyt oder interner Standard). Wenn diese Option nicht ausgewählt wird, wird eine Spalte für jede Komponente und eine Zeile für jede Probe vorgesehen.

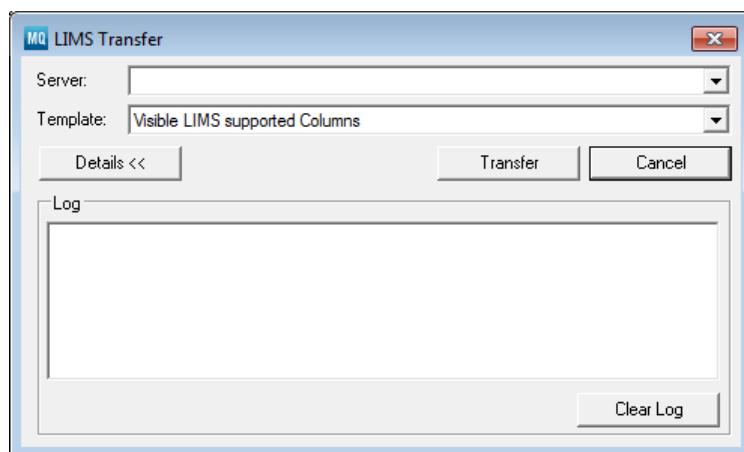
## Transfer to LIMS (An LIMS übertragen)

Dieser Befehl ist nur verfügbar, wenn eine Ergebnistabelle geöffnet ist. Eine LIMS-Lizenzdatei ist erforderlich, um diese Funktion zu aktivieren.

Exportieren einer Ergebnistabelle, Übertragung an LIMS und Berichterstellung sind die kontrollierten Methoden, um Daten aus der Software auszugeben. Andere Methoden zur Datenausgabe wie das Kopieren und Einfügen von der Ergebnistabelle aus werden nicht kontrolliert. Die Benutzer sollten davon absehen, für reguläre Arbeitsabläufe unkontrollierte Ausgabemethoden zu verwenden.

1. Klicken Sie auf **Help (Hilfe) > Install License (Lizenz installieren)**, um eine Lizenz zu aktivieren.

**Abbildung 2-3 Dialog „LIMS Transfer“ (LIMS-Übertragung)**



2. Geben Sie den Namen des Servers im Feld **Server** im folgenden Format ein:  
**http:\\Server-IP-Adresse;Portnummer**
3. Wählen Sie eine Vorlage aus der Liste **Template (Vorlage)** aus.
4. Klicken Sie auf **Transfer**.

# Menü „Edit“ (Bearbeiten)

# 3

Tabelle 3-1 Menü „Edit“ (Bearbeiten) Optionen

Menüoption	Beschreibung
Clear	Löscht die aktuelle Auswahl. Dies gilt, wenn in der Registerkarte <b>Components (Komponenten)</b> des <b>Quantitation Method Editor (Quantifizierungsmethoden-Editor)</b> eine oder mehrere Zeilen ausgewählt sind.
Copy	Wenn die <b>Ergebnistabelle</b> aktiv ist, kopiert dieser Befehl den ausgewählten Abschnitt der Ergebnistabelle in die Zwischenablage. Falls <b>Peak Review (Peak-Bewertung)</b> oder <b>Calibration plot (Kalibrierkurve)</b> aktiviert ist, wird ein Bild der Kurve kopiert.
Paste	Wenn die <b>Ergebnistabelle</b> aktiv und ein bearbeitbarer Bereich ausgewählt ist, fügt dieser Befehl Zellen oder Spalten aus der Zwischenablage ein.
Copy Entire Table	Wenn eine <b>Ergebnistabelle</b> oder <b>Statistiktable</b> aktiv ist, kopiert dieser Befehl alle Daten in die Zwischenablage. Im Fall einer <b>Ergebnistabelle</b> werden ausschließlich die aktuell sichtbaren Zeilen und Spalten kopiert.
Fill Down	Wenn die <b>Ergebnistabelle</b> aktiv und ein bearbeitbarer Bereich ausgewählt ist, kopiert dieser Befehl die Information der ersten ausgewählten Zeile in alle nachfolgenden Zeilen.
Select all Rows	Wählt alle Zeilen in der derzeit aktiven <b>Ergebnistabelle</b> oder <b>Statistiktable</b> aus. Diese Funktion ist hilfreich, wenn der Benutzer nachfolgend einen Befehl wie z B. <b>Kopieren</b> für alle ausgewählten Zeilen anwenden möchte.

Tabelle 3-1 Menü „Edit“ (Bearbeiten) Optionen (Fortsetzung)

Menüoption	Beschreibung
Modify Results Table Method	<p>Nimmt Änderungen an der Quantifizierungsmethode vor, die mit der derzeit aktiven <b>Ergebnistabelle</b> verbunden ist. Diese Funktion ist hilfreich, wenn der Benutzer Komponenten hinzufügen oder entfernen möchte. Um nur die Integrationsparameter zu ändern, verwenden Sie den Befehl <b>Update Quantitation Method for Group (Quantifizierungsmethode für Gruppe aktualisieren)</b>. Siehe <a href="#">Peak Review auf Seite 64</a>.</p> <p>Wenn der Befehl ausgewählt wird, öffnet sich der Dialog <b>Quantitation Method Editor (Quantifizierungsmethoden-Editor)</b>. Die Daten werden erneut verarbeitet und die <b>Ergebnistabelle</b> wird aktualisiert, um die Daten anzuzeigen. Siehe <a href="#">Quantitation Method Editor auf Seite 87</a> und <a href="#">Dialog „Results Table“ (Ergebnistabelle) auf Seite 44</a>.</p> <p>Wenn die <b>Quantifizierungsmethode</b> erneut angewendet wird, werden alle manuell geänderten Peaks für die jeweilige Komponente überschrieben und die Kontrollkästchen in der Spalte <b>Modified (Geändert)</b> der Ergebnistabelle geleert.</p>
Project Integration Defaults	<p>Legt die Standardparameter zur Peak-Ermittlung fest, die verwendet werden, wenn eine Quantifizierungsmethode erstellt wird. Wenn mehr als nur einige wenige Komponenten vorliegen, legen Sie die Standardwerte basierend auf der Chromatographie fest, damit Sie nicht für jede Komponente einzeln angepasst werden müssen. Allerdings ist wahrscheinlich kein Parametersatz für alle Komponenten ideal, darum kann es erforderlich sein, einige der Parameter für einige der Komponenten einzeln anzupassen. Siehe <a href="#">Integrationsalgorithmusparameter auf Seite 126</a>.</p>
Project Units & Calibration Defaults	<p>Legt die Standardkonzentrationsseinheiten und Regressionsparameter fest, die verwendet werden, wenn eine neue Quantifizierungsmethode erstellt wird. Der Benutzer kann diese Parameter also festlegen, wenn er die Methode selbst erstellt. Wenn jedoch dieselben Einstellungen verwendet werden, ist es einfacher, die Standardwerte nach der Verwendung dieses Befehls festzulegen. Siehe <a href="#">Project Units &amp; Calibration Defaults auf Seite 18</a>.</p>
Project Secure Export Settings	<p>Falls diese Option gewählt wird, werden die Daten in der Textdatei beim Exportieren verschlüsselt. Legen Sie ein Passwort fest, um die Verschlüsselung zu aktivieren. Siehe <a href="#">Project Secure Export Settings auf Seite 18</a>.</p>
Enable Project Modified Peak Warning	<p>Standardmäßig nicht ausgewählt. Wenn diese Option ausgewählt ist, erscheint ein Warnhinweis mit der Angabe, dass eine Änderung vorgenommen wurde, sobald ein Benutzer in einer <b>Ergebnistabelle</b> eine Änderung an einem Chromatogramm vornimmt und die Änderungen speichert. Der Benutzer hat die Möglichkeit, mit dem Speichern fortzufahren oder zur <b>Ergebnistabelle</b> zurückzukehren. Siehe <a href="#">Modify Results Table Method (Methode für Ergebnistabelle ändern) auf Seite 17</a>.</p>



Tabelle 3-1 Menü „Edit“ (Bearbeiten) Optionen (Fortsetzung)

Menüoption	Beschreibung
Cache Chromatograms for Faster Peak Review	<p>Wenn diese Funktion aktiviert ist, wird jedes Mal, wenn ein extrahiertes Ionenchromatogramm (XIC) einer bestimmten Probe berechnet wird, dieses zur schnelleren Verarbeitung gespeichert, solange die zugehörige Ergebnistabelle geöffnet bleibt.</p> <p>Wenn der Benutzer zum Beispiel eine <b>Ergebnistabelle</b> erstellt, wenn diese Funktion aktiviert ist, werden die Chromatogramme im Fenster <b>Peak Review (Peak-Bewertung)</b> schnell angezeigt, da sie zuvor während des ersten Integrationsprozesses zur Erstellung der <b>Ergebnistabelle</b> zwischengespeichert wurden und nicht aus den Informationen in der .wiff-Datei neu berechnet werden müssen. Wenn der Benutzer eine zuvor gespeicherte <b>Ergebnistabelle</b> öffnet, müssen die einzelnen Chromatogramme berechnet werden, wenn sie zum ersten Mal im Fenster <b>Peak Review (Peak-Bewertung)</b> angezeigt werden. Die Rückkehr zu einem früher berechneten Chromatogramm wird jedoch schneller sein.</p> <p>Der Computer sollte über ausreichend Arbeitsspeicher verfügen, um alle Chromatogramme zwischenzuspeichern. Für sehr große Probensätze mit einer großen Anzahl von Analyten sollte diese Option jedoch deaktiviert werden, um Meldungen über unzureichenden Arbeitsspeicher zu vermeiden.</p>
Cache all Chromatograms Now	<p>Wenn der Befehl <b>Cache Chromatograms for Faster Peak Review (Chromatogramme für schnellere Peak-Bewertung zwischenspeichern)</b> aktiviert ist, wird dieser Befehl verwendet, um alle Chromatogramme für die aktive <b>Ergebnistabelle</b> zu berechnen und dann zwischenzuspeichern. Für einen großen Datensatz kann die Ausführung dieses Befehls einige Zeit in Anspruch nehmen. Aber nachdem die Ausführung abgeschlossen ist, sind alle Chromatogramme zwischengespeichert und die Peak-Bewertung ist schneller. Die Ausführung des Befehls kann gestoppt werden, falls erforderlich.</p> <p>Führen Sie diesen Vorgang aus, wenn viele Chromatogramme bewertet werden müssen. Wenn die Option <b>Cache Chromatograms for Faster Peak Review (Chromatogramme für schnellere Peak-Bewertung zwischenspeichern)</b> ursprünglich aktiviert war, muss dieser Vorgang nicht erneut ausgeführt werden, nachdem eine <b>Ergebnistabelle</b> erstellt wurde, da die Chromatogramme bereits zwischengespeichert sind. Dieser Befehl ist nach dem Öffnen einer zuvor gespeicherten <b>Ergebnistabelle</b> hilfreich.</p>

## Modify Results Table Method (Methode für Ergebnistabelle ändern)

Nimmt Änderungen an der Quantifizierungsmethode vor, die mit der derzeit aktiven Ergebnistabelle verbunden ist. Diese Funktion ist hilfreich, wenn der Benutzer Komponenten hinzufügen oder entfernen möchte. Um nur

## Menü „Edit“ (Bearbeiten)

---

die Integrationsparameter zu ändern, verwenden Sie den Befehl **Update Quantitation Method for Group (Quantifizierungsmethode für Gruppe aktualisieren)**. Siehe [Quantifizierungsmethode für Gruppe aktualisieren auf Seite 72](#).

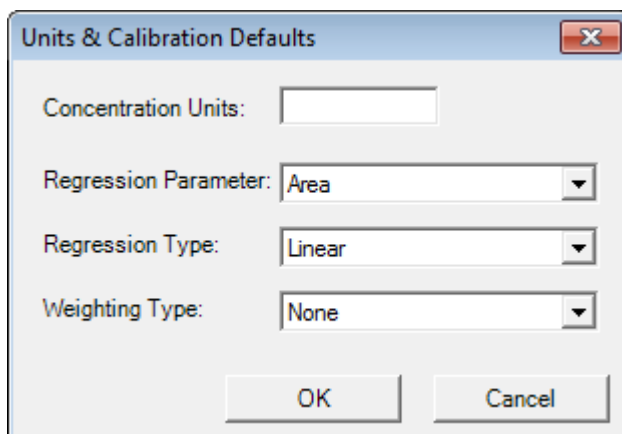
Wenn der Befehl ausgewählt wird, öffnet sich der Dialog „Quantitation Method Editor“ (Quantifizierungsmethoden-Editor). Die Daten werden erneut verarbeitet und die Ergebnistabelle wird aktualisiert, um die neuen Daten anzuzeigen. Siehe [Quantitation Method Editor auf Seite 87](#).

Wenn die Quantifizierungsmethode erneut angewendet wird, werden alle manuell geänderten Peaks für die jeweilige Komponente überschrieben und die Kontrollkästchen in der Spalte **Modified (Geändert)** der **Ergebnistabelle** geleert.

## Project Units & Calibration Defaults

Stellen Sie die Werte für **Concentration Units**, **Regression Parameter** (Area or Height), **Regression Type**, and **Weighting Type** ein. Die verschiedenen Regressions- und Gewichtungsarten sind in [Regressionsgleichungen auf Seite 132](#) beschrieben.

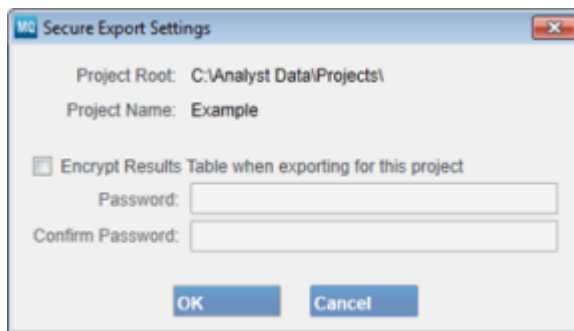
Abbildung 3-1 Standardwerte für Einheiten und Kalibrierung



## Project Secure Export Settings

Daten in der Textdatei werden beim Exportieren verschlüsselt. Legen Sie ein Passwort fest, um die Verschlüsselung zu aktivieren. Siehe [Abbildung 3-2](#).

**Abbildung 3-2 Dialogfeld Secure Export Settings**



# Das Menü „Process“

# 4

Tabelle 4-1 Optionen des Menüs „Process“

Menüoption	Beschreibung
Add Samples	<p>Fügt der derzeit aktiven <b>Results Table</b> zusätzliche Proben hinzu. Siehe <a href="#">Select Samples (Proben auswählen) auf Seite 44</a>.</p> <p>Während die neuen Proben integriert und zur vorhandenen Probe hinzugefügt werden, erscheint ein Fortschrittsbalken. Für den Benutzer muss die Berechtigung <b>Add samples to Results Table</b> aktiviert sein, damit er diese Aufgabe ausführen kann.</p>
Remove Selected Samples	<p>Entfernt ausgewählte Proben aus der derzeit aktiven <b>Results Table</b>. Für den Benutzer muss die Berechtigung <b>Remove samples from Results Table</b> aktiviert sein, damit er diese Aufgabe ausführen kann.</p>
Show Only Outliers	<p>Zeigt die Zeilen an, die Ausreißer enthalten. Klicken Sie auf <b>Process &gt; Show Only Outliers</b>.</p> <p>Klicken Sie erneut auf <b>Process &gt; Show Only Outliers</b>, um alle Zeilen anzuzeigen.</p>
Go to Next Outlier	<p>Geht zum nächsten Ausreißer in der <b>Results Table</b>. Klicken Sie auf <b>Process &gt; Go to Next Outlier</b>.</p>
Export Calibration and Save Results Table	<p>Speichert eine Kopie der Kalibrierungsgleichung für alle Analyten, die mit der aktiven <b>Results Table</b> verbunden sind, in einer externen Datei (*.mqcal). Dies ermöglicht, die Kalibrierung eines Satzes von Standardproben auf andere Proben anzuwenden, die nicht Teil derselben <b>Results Table</b> sind. Siehe <a href="#">Export Calibration (Kalibrierung exportieren) auf Seite 21</a>.</p>
Import External Calibration	<p>Wendet eine zuvor exportierte Kalibrierung auf die aktive <b>Results Table</b> an. Eine Alternative zur Verwendung dieses Befehls ist, die externe Kalibrierungsdatei aus dem <b>New Results Table wizard</b> anzugeben, wie unter <a href="#">Integration definieren auf Seite 50</a> beschrieben. Siehe <a href="#">Import External Calibration (Externe Kalibrierung importieren) auf Seite 21</a>.</p>
Remove External Calibration	<p>Entfernt eine zuvor angewendete externe Kalibrierung aus einer aktiven <b>Results Table</b>.</p>

## Export Calibration (Kalibrierung exportieren)

Speichert eine Kopie der Kalibrierungsgleichung für alle Analyten, die mit der aktiven **Ergebnistabelle** verbunden sind, in einer externen Datei (\*.mqcal). Dies ermöglicht, die Kalibrierung eines Satzes von Standardproben auf andere Proben anzuwenden, die nicht Teil derselben **Ergebnistabelle** sind.

Der typische Workflow ist:

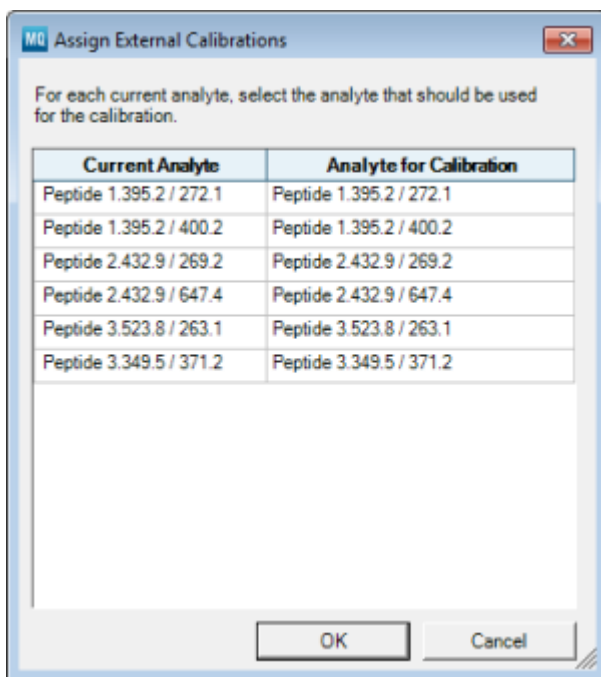
1. Erstellen Sie eine neue **Ergebnistabelle**, die nur den **Standard** enthält.
2. Verwenden Sie das Fenster **Peak Review (Peak-Bewertung)**, um sicherzustellen, dass die Integration erfolgreich war.
3. Verwenden Sie den Befehl **Export Calibration**, um eine Kopie der Kalibrierung zu speichern.
4. Erstellen Sie eine neue **Ergebnistabelle**, die Proben mit unbekannten Konzentrationen enthält.
5. Wenden Sie die zuvor exportierte Kalibrierung auf die neue Tabelle an, indem Sie den Befehl **Import External Calibration (Externe Kalibrierung importieren)** verwenden oder die Kalibrierungsdatei angeben.
6. Wiederholen Sie die Schritte 4 und 5 nach Bedarf.

Wenn die ursprüngliche **Ergebnistabelle** (mit den **Standard**proben) geändert wird, werden zuvor exportierte Kalibrierungen nicht automatisch aktualisiert. Die **Ergebnistabelle** muss erneut exportiert werden.

## Import External Calibration (Externe Kalibrierung importieren)

Wenn dieselben Analytenamen in der aktuellen **Ergebnistabelle** verwendet werden, wie in der exportierten Kalibrierung, wird der Dialog automatisch ausgefüllt und der Benutzer kann auf **OK** klicken. Wenn die Analyten in der aktuellen **Ergebnistabelle** bestimmten Gruppen zugeordnet werden und Analyten in der exportierten Kalibrierung Gruppen mit denselben Namen zugeordnet werden, wird der Dialog automatisch ausgefüllt. Wenn mehr als nur einige wenige Analyten vorliegen, verwenden Sie dieselben Analytenamen oder verwenden Sie konsistente Namen für die **Gruppe**.

**Abbildung 4-1 Dialog „Assign External Calibrations“ (Externe Kalibrierungen zuordnen)**



Label	Beschreibung
Current Analyte	Enthält einen Eintrag für jeden Analyten aus der Quantifizierungsmethode für die aktuelle <b>Ergebnistabelle</b> .
Analyte for Calibration	Enthält eine Liste der Namen aller Analyten, die in der externen Kalibrierungsdatei verfügbar sind. Wählen Sie für jeden der aktuellen Analyten den entsprechenden externen Analyten aus, von dem die Kalibrierung übernommen wird.

# Menü „Audit Trail“ (Prüfprotokoll)

5

---

**Hinweis:** Die Audit-Vorgaben werden der Sitzung hinzugefügt, wenn die **Ergebnistabelle** neu erstellt wird. Sie können nach dem Hinzufügen nicht geändert werden.

---

**Tabelle 5-1 Menü „Audit Trail“ (Prüfprotokoll)**

Menüpunkt	Beschreibung
Audit Trail Viewer	Öffnet den <b>Audit Trail Viewer (Prüfprotokoll-Ansicht)</b> .
Audit Map Manager	Wählt <b>Audit Maps (Audit-Vorgaben)</b> aus, ändert und aktiviert sie.
View Session Audit Map	Öffnet die aktuellen Vorgaben der aktiven <b>Ergebnistabelle</b> .

## Audit Trail Viewer

Die Prüfprotokoll-Ansicht zeigt den vollständigen Verlauf einer bestimmten Probe in der Ergebnistabelle an. Ergebnistabellen werden im Ordner <drive>:\Analyst Data\Projects\<project name>\Results gespeichert.

---

**Hinweis:**

Die Ergebnistabelle sollte bei der Durchführung von anderen Aktionen nicht ausgeblendet werden. Zum Beispiel nach dem Speichern eines Prüfprotokolls.

Um ein weiteres Teilfenster zu maximieren, beispielsweise das Teilfenster Peak Review (Peak-Bewertung), verwenden Sie die Schaltfläche **Toggles tab mode (Schaltet Registerkarten-Modus ein und aus)** in der Werkzeugleiste.

---

Mit dem **Audit Trail Viewer (Prüfprotokoll-Ansicht)** können Benutzer:

- Die Prüfprotokoll-Aufzeichnungen für jede **Ergebnistabelle** anzeigen.
- Eine Stichwortsuche durchführen, die jede Stelle, an der der Text vorkommt, hervorhebt.
- Die geprüften Ereignisse im Prüfprotokoll der Software anhand einer Reihe von bestimmten Kriterien filtern.
- Die Prüfprotokoll-Datensätze in eine .txt-Datei exportieren Exportierte Dateien können bearbeitet werden.
- In eine gesicherte PDF-Datei drucken.

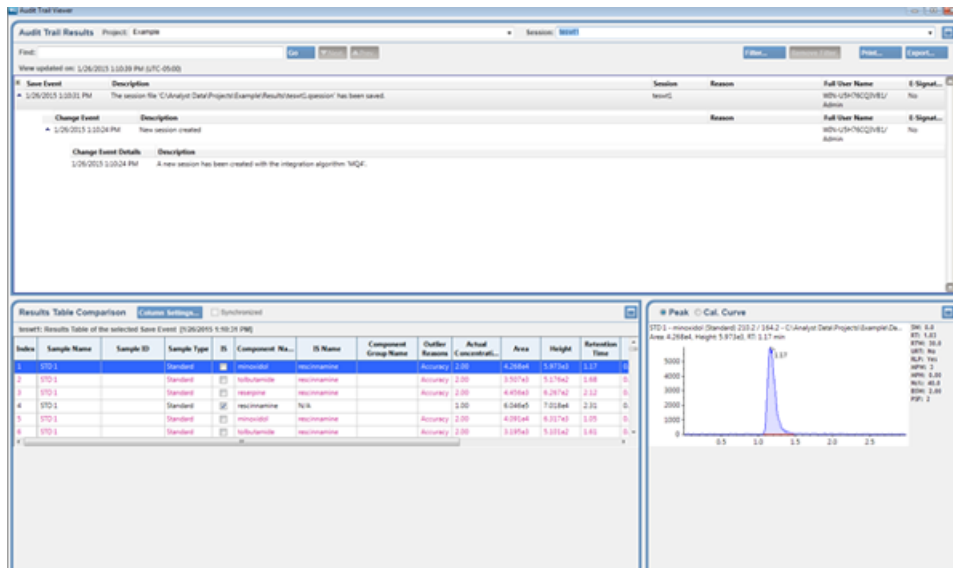
## Prüfprotokoll-Ergebnisse im Audit Trail Viewer anzeigen

1. Öffnen Sie eine Ergebnistabelle.
2. Klicken Sie auf **Audit Trail > Audit Trail Viewer (Prüfprotokoll > Prüfprotokoll-Ansicht)**.

## Menü „Audit Trail“ (Prüfprotokoll)

- Um zwischen Projekten zu wechseln, klicken Sie auf die Liste **Projects** und wählen Sie dann ein anderes Projekt.
- Um andere Sitzungen anzuzeigen, klicken Sie auf die Liste **Sessions (Sitzungen)** und wählen Sie dann eine andere Sitzung. Die Benutzer können ebenfalls wählen, alle Sitzungen im Projekt gleichzeitig anzuzeigen.

**Abbildung 5-1 Audit Trail Viewer**



Label	Beschreibung
Project	Wählen Sie ein Projekt aus der Liste aus.
Session	Wählen Sie eine Sitzungsdatei aus
Find	Eine Stichwortsuche ohne Filterung. Hebt jede Stelle, an der der Text vorkommt, hervor.
Go	Anklicken, um mit der Suche zu beginnen.
Next	Anklicken, um zu dem nächsten Wort zu gehen.
Prev	Anklicken, um zu dem vorherigen Wort zu gehen.
Filter	Klicken Sie, um nur die Ereignisse anzuzeigen, die den ausgewählten Kriterien entsprechen.
Remove Filter	Klicken Sie, um den Filter zu entfernen.
Print	Zum Ausdrucken des Audit Trail Viewer anklicken
Export	Klicken Sie, um das Prüfprotokoll zu exportieren.
Save Event	Wenn eine Sitzungsdatei gespeichert wird, wird ein Sicherungsereignis erstellt. Das Sicherungsereignis speichert sämtliche Änderungen seit dem vorherigen Sicherungsereignis sowie jeden Wert in der <b>Ergebnistabelle</b> .



Label	Beschreibung
Description	Einzelheiten des Änderungsereignisses.
Session	Zeigt die Bezeichnung der Sitzungsdatei an.
Reason	Zeigt den Grund für die in der <b>Ergebnistabelle</b> durchgeführte Änderung an.
Full User Name	Zeigt den Namen des Benutzers an, der die Änderung der <b>Ergebnistabelle</b> vorgenommen hat.
E-Signature	Gibt an, ob Änderungen der <b>Ergebnistabelle</b> akzeptiert wurden.
Column Settings	Klicken Sie hier, um Spalten in der <b>Ergebnistabelle</b> anzuzeigen oder auszublenden.
Synchronized	Wählen Sie diese Option aus, um gleichzeitig durch beide <b>Ergebnistabellen</b> horizontal zu blättern.
Previous version	Zeigt die vorherige Version der ausgewählten Sitzungsdatei an.
Peak	Klicken Sie diese Option an, um den Peak der ausgewählten Probe anzuzeigen.
Cal Curve	Klicken Sie diese Option an, um die Kalibrierkurve der ausgewählten Probe anzuzeigen.

## Stichwortsuche durchführen

Benutzer können eine Stichwortsuche durchführen, die jede Stelle, an der der Text vorkommt, hervorhebt.

1. Öffnen Sie eine Ergebnistabelle.
2. Klicken Sie auf **Audit Trail > Audit Trail Viewer (Prüfprotokoll > Prüfprotokoll-Ansicht)**.
3. Geben Sie den Suchbegriff im Feld **Find (Suchen)** ein und klicken Sie dann auf **Go (Los)**.

Falls passende Einträge gefunden werden, färbt sich das Feld **Find (Suchen)** grün, die Anzahl der Treffer wird angezeigt und die entsprechenden Wörter werden gelb markiert. Falls keine passenden Einträge gefunden werden, färbt sich das Feld **Find (Suchen)** rosa.

4. Mithilfe der Schaltflächen **Next (Weiter)** und **Prev (Voransicht)** können Sie sich zwischen den Treffern bewegen.

## Geprüfte Ereignisse filtern

Die Benutzer können die geprüften Ereignisse im Prüfprotokoll anhand einer Reihe von bestimmten Kriterien filtern.

1. Öffnen Sie eine Ergebnistabelle.
2. Klicken Sie auf **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. Klicken Sie auf **Filter**.

Abbildung 5-2 Dialogfeld Filter Audit Trail Events

Position	Beschreibung
1	Name der Datei <b>Results Table</b> . Eine Datei <b>Results Table</b> oder alle Dateien <b>Results table</b> des aktiven Projekts können gefiltert werden.
2	<b>Description:</b> Geben Sie die Bezeichnung der Ereignisart teilweise oder vollständig ein. <b>Sample Name:</b> Geben Sie den Probennamen teilweise oder vollständig ein. <b>Full User Name:</b> Geben Sie den Namen des Benutzers teilweise oder vollständig ein. <b>E-Signature:</b> Wählen Sie „Yes“ oder „No“. <b>Reason:</b> Geben Sie die Grund teilweise oder vollständig ein.
3	<b>is:</b> Verwenden, um ein bestimmtes Wort oder eine Wortgruppe zu filtern.
4	<b>contains:</b> Verwenden, um Teile eines Worts oder einer Wortgruppe zu filtern.
5	<b>Date:</b> Filtern Sie Ereignisse eines bestimmten Datums und einer bestimmten Uhrzeit heraus.

4. Verwenden Sie die Listen im Dialog **Filter Audit Trail Events**, um Filterkriterien auszuwählen.

**Hinweis:** Das Feld „Results Table“ kann nicht bearbeitet werden.

5. Klicken Sie auf **Clear**, um die Filterkriterien auf **No filter** zurückzusetzen.
6. Klicken Sie auf **OK**, um die Ereignisse zu filtern.

---

**Tipp!** Klicken Sie im **Audit Trail Viewer** auf **Remove Filter**, um den Filter zu entfernen.

---

## Audit Trail Viewer exportieren

1. Öffnen Sie eine Ergebnistabelle.
2. Klicken Sie auf **Export** und geben Sie einen Dateinamen ein.

Die Datei wird als tabulatorgetrennte Textdatei exportiert.

---

**Hinweis:** Nur der gespeicherte Teil der Ereignisse des „Audit Trail Viewer“ wird exportiert.

---

## Die Prüfprotokollansicht drucken

1. Öffnen Sie eine Ergebnistabelle.
2. Klicken Sie auf **Print (Drucken)** und wählen Sie einen Drucker aus.

Benutzer können mit pdfFactory eine sichere PDF ausdrucken.

---

**Hinweis:** Nur der gespeicherte Teil der Ereignisse des „Audit Trail Viewer“ wird gedruckt.

---

## Audit Trail Manager

Die Software gruppiert geprüfte Quantifizierungsergebnisse in Prüfprotokollen. Prüfprotokolle sind Dateien, die Aufzeichnungen von geprüften Ereignissen speichern. Prüfprotokolle bilden in Verbindung mit Dateien wie z. B. .wiff-Dateien und **Ergebnistabellen** gültige elektronische Datensätze, die für Compliance-Zwecke verwendet werden können.

Die Software **Audit Trail Manager (Prüfprotokoll-Manager)** pflegt alle Ereignisse, wie in den Audit-Vorgaben definiert. Die Software erfasst die elektronischen Signaturen und Gründe, einschließlich Benutzer, Datum und Details der Änderungen. Sie erfasst gemäß den Audit-Vorgaben ebenfalls zusätzliche Informationen, wie Kommentare.

---

**Tipp!** Eine Sitzungsdatei enthält die **Ergebnistabelle**, eine Kopie der Quantifizierungsmethode, eine Kopie der Audit-Vorgaben zum Zeitpunkt der Erstellung sowie das gesamte Prüfprotokoll für die gesamte Sitzung.

---

Wenn die Software eine .qsession- oder .qmethod-Datei erstellt oder ändert, wird das Ereignis im **Project Audit Trail (Projekt-Prüfprotokoll)** in der Registerkarte **History (Historie)** der Analyst<sup>®</sup> MD Software verwendet zu müssen. Die folgenden Ereignisse werden erfasst:

## Menü „Audit Trail“ (Prüfprotokoll)

---

- Quantifizierungsmethoden-Datei wurde erstellt.
- Quantifizierungsmethoden-Datei wurde geändert.
- Die Quantifizierungs-**Ergebnistabelle** wurde erstellt.
- Die Quantifizierungs-**Ergebnistabelle** wurde geändert.

Wenn die **E-signature (Elektronische Signatur)** oder die **Reason Prompt (Eingabeaufforderung Grund)** ausgewählt wird, um die Quantifizierungsmethoden-Datei zu ändern, wird das von der Software erzeugte **Prüfprotokoll** in Analyst<sup>®</sup> MD-Software wird in MultiQuant<sup>™</sup> MD Software konfigurieren.

**Tabelle 5-2 Prüfprotokolle**

Prüfprotokoll	Beispiele für aufgezeichnete Ereignisse
Quantifizierungs-Prüfprotokoll (eines pro Ergebnistabelle)	Änderungen an: <ul style="list-style-type: none"><li>• Erstellung und Änderung von Sitzungsdateien</li><li>• Probeninformation.</li><li>• Peak-Integrations-Parameter.</li></ul>

## Über Audit Maps

Die MultiQuant<sup>™</sup> MD Software pflegt einen Revisionsverlauf der Informationen zu Verarbeitungseinstellungen in Verbindung mit den Quantifizierungsergebnissen. Die Software prüft alle Ereignisse gemäß der aktiven „Audit Map“ des Projekts und erfasst alle elektronischen Signaturen und Links zu den entsprechenden Datensätzen.

## Erstellen einer Audit Map

Die Software installiert mehrere Audit-Vorgaben. Lassen Sie die Audit-Vorgaben anzeigen und entscheiden Sie, ob ein Ändern einer oder mehreren Audit-Vorgaben einfacher wäre, als eine neue zu erstellen. Das Erstellen und das Ändern von Audit-Vorgaben sind Ereignisse, die im Prüfprotokoll der Analyst<sup>®</sup> MD-Software erscheinen.

---

**VORSICHT! Wenn zwei Benutzer die gleiche Audit-Vorgabe zur gleichen Zeit ändern, werden nur die Änderungen des Benutzers verwendet, der die Datei zuletzt gespeichert hat.**

---

Die aktive Audit-Zuordnung für ein Projekt bestimmt, welche Ereignisse im Prüfprotokoll für jede erstellte **Results Tables** aufgezeichnet werden.

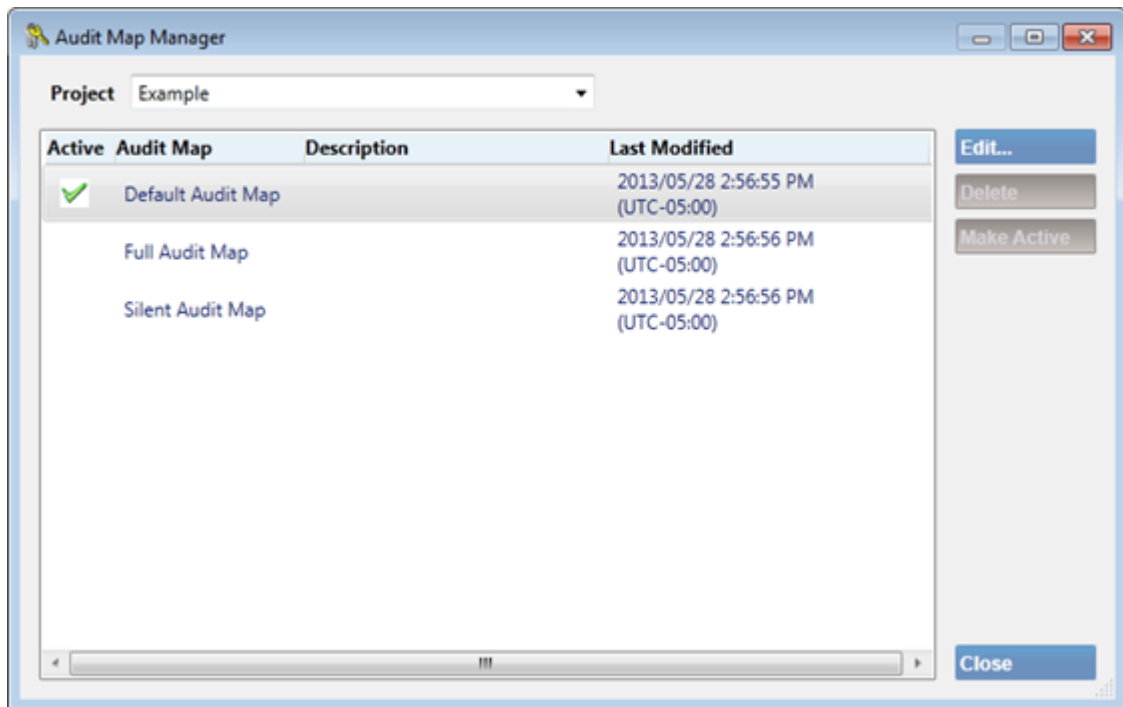
---

**Hinweis:** Nach dem Speichern einer **Results Table** werden die aktiven Audit-Vorgaben mit der **Results Table** gespeichert und die Audit-Vorgaben können nicht mehr geändert werden.

---

1. Klicken Sie auf **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Abbildung 5-3 Audit Map Manager



Label	Beschreibung
Project	Wählen Sie ein Projekt aus der Liste aus.
Edit	Klicken Sie, um die aktive Audit-Vorgabe zu bearbeiten.
Delete	Klicken Sie, um die ausgewählte Audit-Vorgabe zu löschen.

2. Klicken Sie in der Liste **Project** auf das Projekt, für das Sie Audit-Vorgaben erstellen wollen.
3. Wählen Sie eine Audit-Vorgabe und klicken dann auf **Edit**.

Abbildung 5-4 Audit Map Editor

Event	Audit ...	Reason Pro...	Predefined Reasons Only	E-Sig	Predefined Reason 1	Predefined Reason 2
New session created	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Session file saved	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Integration parameters changed for sample	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Modify and apply quantitation method	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Actual concentration changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample name changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample type changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample ID changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Dilution factor changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Used column changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Custom columns modified	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Manually integrated	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Clear integration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Samples added or removed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
External Calibration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		

Label	Beschreibung
Description	Geben Sie eine Beschreibung für die Audit-Vorgabe ein.
Check	Klicken Sie, um ein Kontrollkästchen auszuwählen.
Uncheck	Klicken Sie, um das Kontrollkästchen zu leeren.
Add Predefined Reasons	Klicken Sie, um der Liste einen vordefinierten Grund hinzuzufügen.

4. Geben Sie eine Beschreibung für die Audit-Vorgabe im Feld **Description** ein, falls erforderlich.
5. Konfigurieren Sie jedes Ereignis in der Tabelle **Audit Map** wie folgt:
  - Um das Ereignis zu prüfen, aktivieren Sie das Kontrollkästchen in der Spalte **Audited**.

**Tipp!** Um aufeinander folgende Kontrollkästchen in einer Spalte zu aktivieren, drücken Sie **Ctrl** oder die **Shift**, klicken Sie auf die Zellen und klicken Sie dann auf **Check**.

- Damit die Benutzer einen benutzerdefinierten Grund eingeben oder einen vordefinierten Grund auswählen können, aktivieren Sie das Kontrollkästchen in der Spalte **Reason Prompt**.
- Damit die Benutzer nur einen vordefinierten Grund für die Änderung angeben können, wenn das Ereignis eintritt, aktivieren Sie die Kontrollkästchen in den Spalten **Reason Prompt** und **Predefined Reason Only**. Wählen Sie in den Spalten **Predefined Reason** \_ bis zu zehn Gründe aus.

---

**Tipp!** Um einen vordefinierten Grund hinzuzufügen, klicken Sie auf **Add Predefined Reasons**.

---

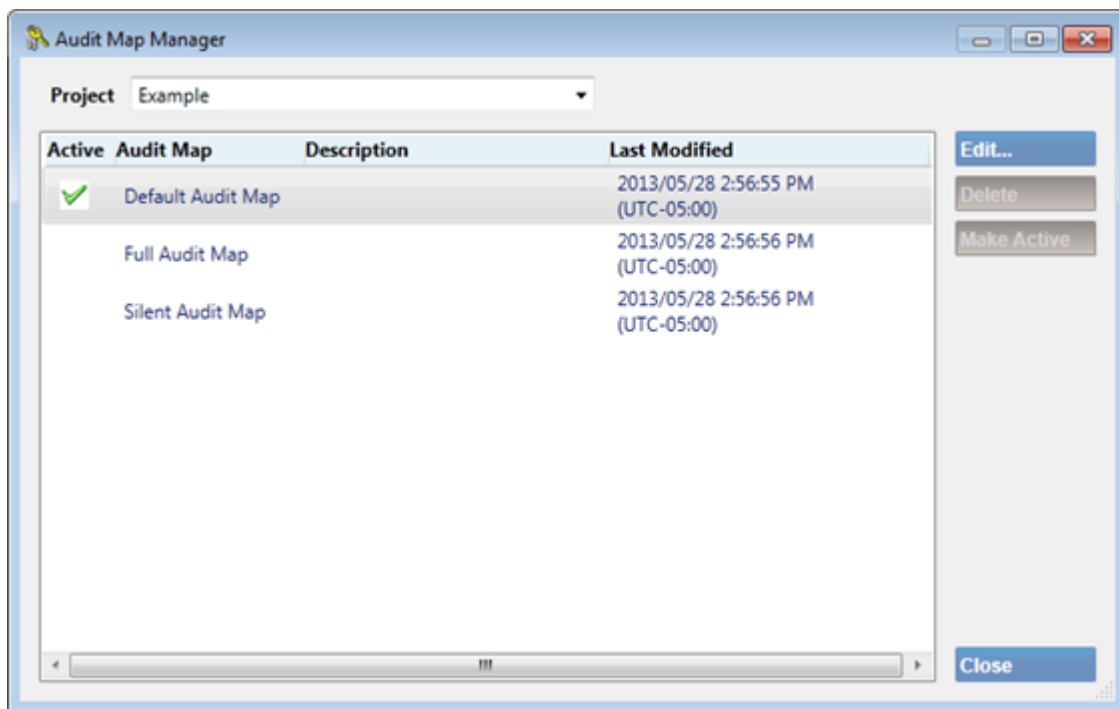
- Um elektronische Signaturen für das Ereignis zu fordern, aktivieren Sie das Kontrollkästchen in der Spalte **E-Signature**.
6. Klicken Sie auf **Save As** und geben Sie dann einen Namen im Dialog **Save Quantitation Method As** ein.
  7. Klicken Sie auf **Save**.
  8. Klicken Sie im Dialog **Audit Map Editor** auf **Close**.
  9. Klicken Sie auf **Make Active**.

Wenn eine Audit-Vorgabe angewendet wird, wird diese zur aktiven Audit-Vorgabe. Die Audit-Konfiguration in der aktiven Audit-Vorgabe bestimmt, welche Ereignisse von diesem Zeitpunkt an in den Prüfprotokollen aufgezeichnet werden.

## Audit Map ändern

1. Klicken Sie auf **Audit Trail > Audit Map Manager** .

Abbildung 5-5 Audit Map Manager



Label	Beschreibung
Project	Wählen Sie ein Projekt aus der Liste aus.
Edit	Klicken Sie, um die aktive Audit-Vorgabe zu bearbeiten.
Delete	Klicken Sie, um die ausgewählte Audit-Vorgabe zu löschen.

2. Klicken Sie in der Liste **Project** auf das Projekt, für das Sie Audit-Vorgaben ändern möchten.
3. Wählen Sie andere Vorgaben und klicken Sie dann auf **Make Active**.
4. Klicken Sie auf **Close**.

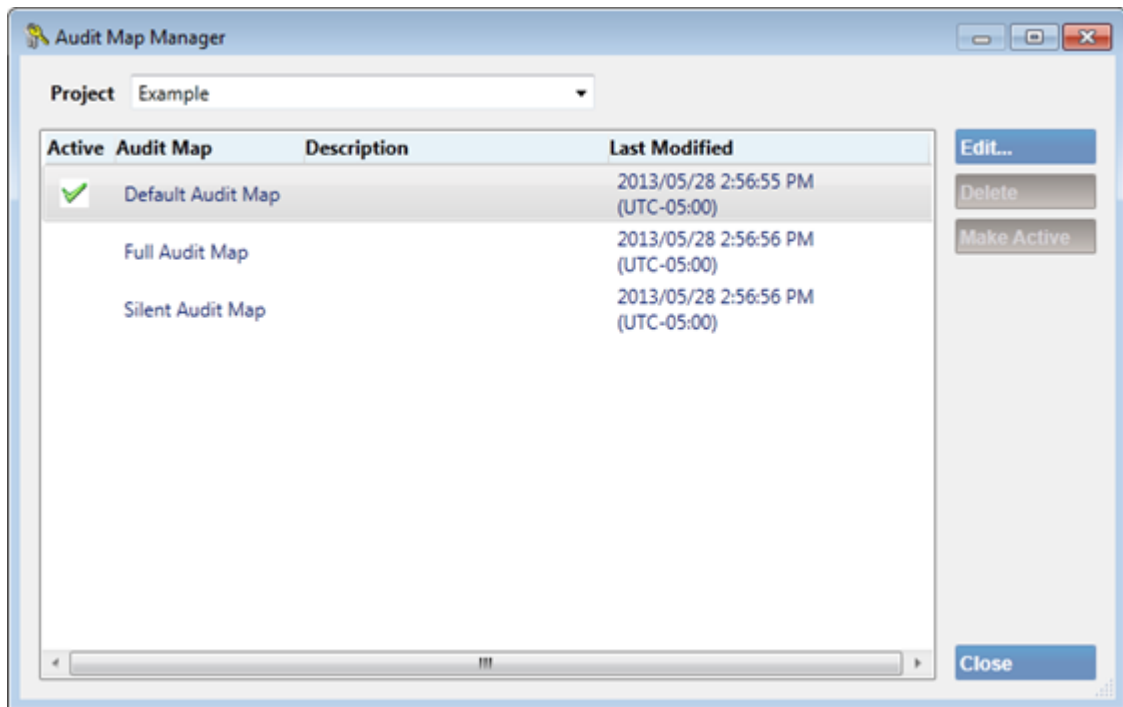
## Audit Map bearbeiten

Die folgenden Audit-Ereignisse werden immer erfasst und darum nicht im **Audit Map Editor** angezeigt: Print Report, Export Results Table und Transfer to LIMS.

1. Klicken Sie auf **Audit Trail > Audit Map Manager**.



Abbildung 5-6 Audit Map Manager



Label	Beschreibung
Project	Wählen Sie ein Projekt aus der Liste aus.
Edit	Klicken Sie, um die aktive Audit-Vorgabe zu bearbeiten.
Delete	Klicken Sie, um die ausgewählte Audit-Vorgabe zu löschen.

2. Wählen Sie eine Audit-Vorgabe und klicken dann auf **Edit**.

Abbildung 5-7 Audit Map Editor

Event	Audit ...	Reason Pro...	Predefined Reasons Only	E-Sig	Predefined Reason 1	Predefined Reason 2
New session created	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Session file saved	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Integration parameters changed for sample	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Modify and apply quantitation method	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Actual concentration changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample name changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample type changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample ID changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Dilution factor changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Used column changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Custom columns modified	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Manually integrated	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Clear integration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Samples added or removed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
External Calibration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		

Label	Beschreibung
Description	Geben Sie eine Beschreibung für die Audit-Vorgabe ein.
Check	Klicken Sie, um ein Kontrollkästchen auszuwählen.
Uncheck	Klicken Sie, um das Kontrollkästchen zu leeren.
Add Predefined Reasons	Klicken Sie, um der Liste einen vordefinierten Grund hinzuzufügen.

- Geben Sie eine Beschreibung für die Audit-Vorgabe im Feld **Description** ein, falls erforderlich.
- Konfigurieren Sie jedes Ereignis in der Tabelle **Audit Map** wie folgt:

- Um das Ereignis zu prüfen, aktivieren Sie das Kontrollkästchen in der Spalte **Audited**.

**Tipp!** Um aufeinander folgende Kontrollkästchen in einer Spalte zu aktivieren, drücken Sie **Ctrl** oder die **Shift**, klicken Sie auf die Zellen und klicken Sie dann auf **Check**.

- Damit die Benutzer einen benutzerdefinierten Grund eingeben oder einen vordefinierten Grund auswählen können, aktivieren Sie das Kontrollkästchen in der Spalte **Reason Prompt**.
- Damit die Benutzer nur einen vordefinierten Grund für die Änderung angeben können, wenn das Ereignis eintritt, aktivieren Sie die Kontrollkästchen in den Spalten **Reason Prompt** und **Predefined Reason Only**. Wählen Sie in den Spalten **Predefined Reason** \_ bis zu zehn Gründe aus.

---

**Tipp!** Um einen vordefinierten Grund hinzuzufügen, klicken Sie auf **Add Predefined Reasons**.

---

- Um elektronische Signaturen für das Ereignis zu fordern, aktivieren Sie das Kontrollkästchen in der Spalte **E-Signature**.

5. Klicken Sie auf **Save**.

6. Klicken Sie auf **Make Active**.

Wenn eine Audit-Vorgabe angewendet wird, wird diese zur aktiven Audit-Vorgabe. Die Audit-Konfiguration in der aktiven Audit-Vorgabe bestimmt, welche Ereignisse von diesem Zeitpunkt an in den Prüfprotokollen aufgezeichnet werden.

## Eingebettete Audit-Konfiguration anzeigen

Die Audit-Konfiguration, die für eine Ergebnistabelle verwendet wird, wird in die Ergebnistabellen-Datei eingebettet, wenn die Ergebnistabelle erstellt wird. Diese Konfiguration kann nicht geändert werden. Der neben dem Namen der Audit-Vorgaben angezeigte Zeitstempel gibt an, wann die Audit-Vorgaben, die zur Einbindung der Konfiguration verwendet wurden, zuletzt gespeichert wurden.

1. Öffnen Sie eine Ergebnistabelle.
2. Klicken Sie auf **Audit Trail > View Session Audit Map**.

Abbildung 5-8 Audit Map der Sitzung

Session Audit Map (ResultsTable1.qsession)

Audit Map: Default Audit Map Last Modified: 2013/05/28 2:56:55 PM (UTC-05:00)

Description:

Event	Audited	Reason Prom ...	Predefined Reasons Only	E-Sig	Predefined Reason 1
New session created	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Session file saved	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Integration parameters changed for sample	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Modify and apply quantitation method	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Actual concentration changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample name changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample type changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample ID changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Dilution factor changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Used column changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Custom columns modified	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Manually integrated	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Clear integration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Samples added or removed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
External Calibration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	

Close

Mit Ausnahme des Elements **About** enthält dieses Menü die in [Tabelle 6-1](#) aufgeführten Elemente. Diese Dateien werden automatisch installiert und befinden sich ebenfalls im Ordner <drive>:\Program Files\AB SCIEX\MultiQuant 3\Help.

Dokumente oder Ordner (oder Verknüpfungen damit) können in diesen Ordner Help kopiert werden, damit sie automatisch im Menü erscheinen.

**Tabelle 6-1 Menü „Help“**

Menüpunkt	Beschreibung
Install License	Klicken Sie, um den Dialog zur MultiQuant™ MD-Aktivierung zu öffnen.
Verify Installation	Klicken Sie auf diese Option, um die Dateien und Installation zu überprüfen.
Software Reference Guide	Dieser Abschnitt beschreibt die Funktionen und Anwendungen der Software.
Software Release Notes	Zeigt Informationen zur Software sowie Verfahren zur Installation der Software an.
About	Zeigt die Version des Programms, Urheberrechtshinweise und andere Programminformationen sowie Informationen dazu, welche Lizenzfunktionen installiert sind, an.

# Ergebnistabellen

# 7

Eine **Ergebnistabelle** ist der Ausgangspunkt für Datenprüfung und -export. Verwenden Sie den **New Results Table wizard (Assistent für neue Ergebnistabelle)** oder klicken Sie auf **File (Datei) > New Results Table (Neue Ergebnistabelle)**, um eine Ergebnistabelle zu erstellen. Siehe [Dialog „Results Table“ \(Ergebnistabelle\) auf Seite 44](#).

**Hinweis:** Die Spalten **Sample Name (Probenname)** und **Sample ID (Proben-ID)** dürfen die folgenden Zeichen nicht enthalten: \ / : \* ? " < > | =.

Die Audit-Konfiguration, die für eine **Ergebnistabelle** verwendet wird, wird in die **Ergebnistabellen**-Datei eingebettet, wenn die **Ergebnistabelle** erstellt wird. Diese Konfiguration kann nicht geändert werden. Der neben dem Namen der Audit-Vorgabe angezeigte Zeitstempel gibt an, wann die Audit-Vorgabe zuletzt gespeichert wurde, die zur Einbindung der Konfiguration verwendet wurde.

**Hinweis:** Wenn Daten verschoben werden, verschieben Sie das gesamte Projekt, um die Dateistruktur beizubehalten. Wenn die Datei- und Ordnerstruktur nicht beibehalten wird, kann eine **Ergebnistabelle** oder ein Chromatogramm nicht angezeigt werden.

Es wird eine separate Zeile für jede Komponente jeder ursprünglich ausgewählten Probe ausgegeben.

Abbildung 7-1 Beispiel-Ergebnistabelle

Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Outer Response	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.26e4	5.37e3	1.17	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	3.32e4	101.76
2	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.95e3	5.17e2	1.48	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.10e4	154.39
3	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	1.49e3	6.25e2	2.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.89e4	140.27
4	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.36e4	7.01e4	2.31	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
5	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.01e4	6.37e3	1.26	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.16e4	198.39
6	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.19e3	5.10e2	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.90e4	148.38
7	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.98e3	6.07e2	2.07	0.07	<input checked="" type="checkbox"/>	2.93e4	126.68
8	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	3.89e4	4.89e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
9	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	7.17e4	1.08e4	1.54	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.94e4	123.64
10	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.26e3	1.06e3	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.71e4	179.47
11	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		4.00	6.67e3	9.86e2	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.23e4	128.91
12	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.90e3	6.37e4	2.29	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
13	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	1.18e4	1.30e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.23e4	108.80
14	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		4.00	6.90e3	1.03e3	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.40e4	111.37
15	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.69e3	1.31e3	2.07	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.40e4	111.68
16	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	4.81e3	7.03e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
17	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.62e4	2.25e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.62e4	97.82
18	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.26e4	2.54e3	1.60	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	7.49e4	93.70
19	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.41e4	1.87e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.01e4	87.67
20	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.74e3	7.32e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
21	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.40e3	2.05e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.32e4	104.34
22	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	2.08e4	1.05e3	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.14e4	107.78
23	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.39e4	1.80e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.97e4	89.62
24	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.70e3	6.02e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
25	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.89e3	4.08e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.59e4	89.96
26	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.88e4	4.17e3	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.83e4	97.07
27	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.78e4	3.94e3	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	1.52e4	90.28
28	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.76e3	6.26e4	2.26	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
29	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.92e3	4.18e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.93e4	97.11
30	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.84e4	4.29e3	1.63	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.93e4	99.13
31	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.89e4	4.12e3	2.08	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.94e4	96.79
32	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.89e3	6.47e4	2.30	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A

- Die Spalten **IS**, **Component Name (Komponentenname)** und **IS Name (IS-Name)** enthalten Informationen über die Analyten.
- Das ausgewählte Kontrollkästchen gibt den internen Standard für die Probe an.
- Wählen Sie im Dialog **Column Settings (Spalteneinstellungen)** aus, welche Spalten in der **Ergebnistabelle** angezeigt werden sollen. Siehe [Column Settings auf Seite 42](#).

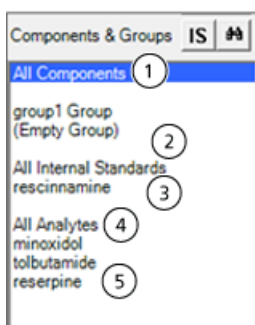
- Ändern Sie die Breite der Spalten durch Ziehen der Linie, die die beiden Spaltenüberschriften trennt. Diese Informationen werden automatisch gespeichert und übernommen, wenn der Benutzer zuvor gespeicherte **Ergebnistabellen** öffnet.
- Ändern Sie die Reihenfolge der Spalten, indem Sie auf eine Spaltenüberschrift klicken und diese dann zu einer neuen Position ziehen. Diese Informationen werden automatisch gespeichert und übernommen, wenn der Benutzer zuvor gespeicherte **Ergebnistabellen** öffnet.
- Benutzer können die Ergebnistabelle einschränken, sodass diese nur die Zeilen anzeigt, die bestimmten Analyten oder internen Standards entsprechen. Verwenden Sie die Werkzeugleiste, um die Probenarten einzuschränken, die dargestellt werden. Siehe [Liste Components & Groups auf Seite 39](#) und [Probentypfilter auf Seite 43](#).
- Bestimmte Operationen, wie z. B. Synchronisation mit dem Fenster **Peak Review (Peak-Bewertung)**, werden in die aktuell ausgewählte(n) Zeile(n) übernommen. Wählen Sie Zeilen durch Klicken auf den Bereich links von der ersten Spalte aus.

## Liste Components & Groups

Wenn eine **Results Table** geöffnet ist, wird eine Liste der aktuellen Komponenten und Gruppen auf der linken Seite des Hauptfensters angezeigt. Verwenden Sie diese Liste, um zu ändern, welche Komponenten in der **Results Table** sowie in einer verbundenen **Peak Review** oder **Calibration** sichtbar sind.

Komponenten sind als einfacher Übergangs- oder Massenbereich definiert. Eine Gruppe ist definiert als der Name der Gruppe, zu der die Komponente gehört.

Abbildung 7-2 Liste Components & Groups



Position	Label	Beschreibung
1	Alle Komponenten	Klicken Sie hierauf, um alle verfügbaren Analyten und internen Standards in der <b>Results Table</b> sowie, sofern angezeigt, in der zugehörigen <b>Peak Review</b> und <b>Calibration</b> anzusehen.
2	Alle internen Standards	Klicken Sie hierauf, um alle internen Standards anzusehen und alle Analyten auszublenden. Dieses Element ist nicht vorhanden, wenn keine internen Standards definiert worden sind.

## Ergebnistabellen

Position	Label	Beschreibung
3	Spezifische interne Standards	Die Namen aller einzelnen internen Standards erscheinen in der Liste. Klicken Sie auf eines dieser Elemente, um den entsprechenden internen Standard anzusehen und alle anderen Komponenten auszublenden.
4	Alle Analyten	Klicken Sie hierauf, um alle Analyten anzusehen und alle internen Standards auszublenden. Dieses Element ist nicht eingeschlossen, wenn keine internen Standards definiert wurden.
5	Spezifische Analyten	Die Namen aller einzelnen Analyten erscheinen in der Liste. Klicken Sie auf eines dieser Elemente, um den entsprechenden Analyten anzusehen und alle anderen Komponenten auszublenden.

Klicken Sie auf ein einzelnes Element in der Liste, um nur die Komponenten für dieses Element anzuzeigen. Drücken Sie die **Shift** oder **Ctrl**, um mehrere Elemente auszuwählen. Dies ist zum Beispiel sinnvoll, wenn nur zwei bestimmte Analyten angezeigt werden sollen. Wenn die Liste aktiviert ist, können Sie die Pfeile nach oben und unten verwenden, um sich durch die Elemente zu bewegen.

**Tipp!** Machen Sie die Liste breiter oder schmaler, indem Sie den rechten Rand nach links bzw. rechts ziehen.

Die tatsächliche Reihenfolge der Zeilen in der Ergebnistabelle wird nicht durch Filtern beeinflusst. Die Tabelle ist so voreingestellt, dass sie zuerst nach Probe und dann nach Komponente geordnet wird, gemäß der Reihenfolge, die in der Quantifizierungsmethode angegeben wurde. Die Tabelle kann jedoch auch in einer spezifischen Reihenfolge sortiert werden, wie in [Software-Symbole auf Seite 161](#) beschrieben.

## Rechtsklickmenü Results Table

Durch Rechtsklick in der Results Table können Sie auf ein Kontextmenü zugreifen. Die folgenden Befehle sind verfügbar:

**Tabelle 7-1 Optionen des Rechtsklick-Menüs „Results Table“**

Menüoption	Beschreibung
Column Settings	Verwenden Sie diesen Befehl, um die Spalten der <b>Results Table</b> zu bearbeiten. Die Änderungen werden nur auf die aktuelle <b>Results Table</b> angewendet, sofern sie nicht als Projektstandard gespeichert werden.
Add Custom Column	Dies fügt eine neue, bearbeitbare Spalte in der Tabelle hinzu. Füllen Sie die Spalte, indem Sie entweder direkt in die Zellen schreiben oder Inhalt einfügen. Jede Art von Text kann eingegeben werden, wie Kommentare oder die Ergebnisse von benutzerdefinierten Berechnungen.
Rename Custom Column	Benennt eine vorhandene benutzerdefinierte Spalte um. Bevor Sie diesen Befehl verwenden, klicken Sie auf den benutzerdefinierten Titel, um die benutzerdefinierte Spalte auszuwählen.



Tabelle 7-1 Optionen des Rechtsklick-Menüs „Results Table“ (Fortsetzung)

Menüoption	Beschreibung
Remove Custom Column	Wird verwendet, um eine bestehende benutzerdefinierte Spalte zu löschen. Bevor Sie diesen Befehl verwenden, klicken Sie auf den Spaltentitel, um die benutzerdefinierte Spalte auszuwählen.
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All	Bietet eine Tastenkombination zur Einstellung des Felds <b>Actual Concentration</b> für alle Analyten für Proben vom Typ <b>Standard</b> , wenn es mehr als einen Analyten gibt und alle Analyten in diesen Proben in derselben Konzentration vorliegen. Siehe <a href="#">Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All</a> auf Seite 41.
Apply Current IS's Actual Concentrations to All	Diese Funktion ist ähnlich der Funktion <b>Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All</b> , nur dass sie für interne Standards und nicht für Analyten angewendet wird.
Set ,Used'	Verwenden Sie diesen Befehl, um eine absolute Quantifizierung durchzuführen, um zu bestimmen, ob eine bestimmte <b>Standard</b> probe in der Berechnung der Kalibrierkurve für einen bestimmten Analyten verwendet werden soll.  Die ersten beiden Elemente werden verwendet, um das Feld <b>Used</b> für die aktuell ausgewählten Zeilen in der <b>Results Table</b> auszuwählen oder zu löschen. Das dritte und das vierte Element sind ähnlich, nur dass die Operation für alle Analyten für jegliche Proben, die einer ausgewählten Zeile entsprechen, gilt.
Set Peaks to ,Not Found' for Selected Rows	Verwenden Sie diesen Befehl, um die Peak-Integration für die aktuell ausgewählten Zeilen zu löschen.

## Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All

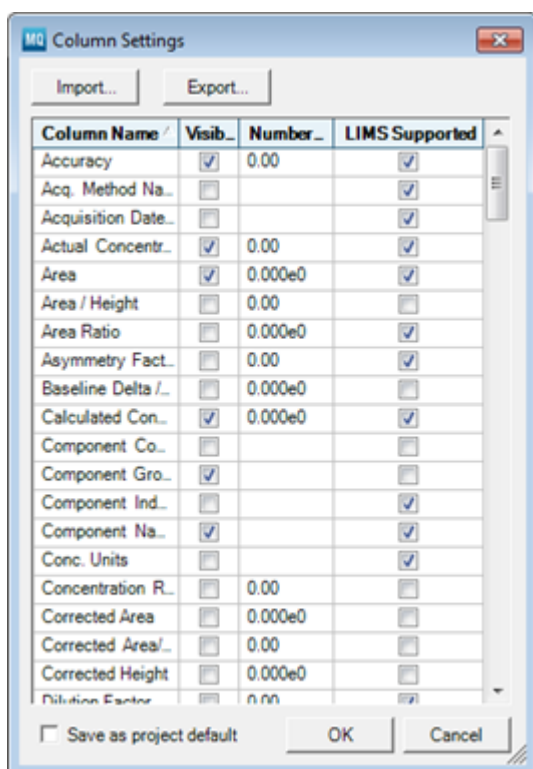
1. Verwenden Sie die [Liste Components & Groups](#) auf Seite 39, um die Tabelle so einzuschränken, dass diese nur einen bestimmten Analyten anzeigt.
2. Es ist auch möglich, den **Sample Type Filter (Filter nach Probenart)** zu verwenden, um nur **Standardproben** anzuzeigen. Siehe [Probentypfilter](#) auf Seite 43.
3. Legen Sie die Ist-Konzentrationen für den Analyten fest, indem Sie entweder direkt in die Zellen schreiben oder die Spalte auswählen und **Paste (Einfügen)** wählen, wenn die Konzentrationen an einer anderen Stelle im Textformat vorliegen.
4. Klicken Sie auf **Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All (Ist-Konzentrationen des aktuellen Analyten auf alle übertragen)**.
5. Kehren Sie bei Bedarf zur Ansicht aller Komponenten und aller Probenarten zurück.

## Column Settings

Wenn Spaltennamen abgekürzt sind, bewegen Sie den Mauszeiger über dem Feld, um den Spaltennamen in einem Tooltip anzuzeigen.

Verwenden Sie für numerische Felder das Format 0.00 für nicht-wissenschaftliche Notizen und verwenden Sie das Format 0.00e0 für wissenschaftliche Notizen. Ändern Sie die Dezimalpunkte, um die Präzision der angezeigten Zahlen anzugeben. Nur ein Punkt (.) kann als Dezimaltrennzeichen verwendet werden. Zifferngruppierung wird nicht unterstützt.

Abbildung 7-3 Dialogfeld Column Settings



Feld	Beschreibung
Import	Klicken Sie, um eine zuvor mithilfe von <b>Export</b> gespeicherte Spalteneinstellungsdatei auszuwählen. Die Dialogfelder werden mit den Informationen der ausgewählten Datei aktualisiert.
Export	Anklicken, um die Einstellungen des aktuellen Dialogfelds in einer Datei zu speichern. So kann der Benutzer zwischen verschiedenen Spalteneinstellungen wechseln.
Column Name	Zeigt die Bezeichnung der Spalten in alphabetischer Reihenfolge an. Siehe <a href="#">Spalten der Ergebnistabelle auf Seite 55</a> .
Visible	Wählen Sie diese Option, um die Spalte sichtbar zu machen. Ansonsten ist die Spalte ausgeblendet.

Feld	Beschreibung
Number Format	Verwenden Sie für numerische Felder das Format 0.00 für nicht-wissenschaftliche Notizen und verwenden Sie das Format 0.00e0 für wissenschaftliche Notizen. Um die angezeigte Präzision festzulegen, ändern Sie die Dezimalpunkte.
LIMS Supported	Die Spalten, bei denen LIMS Supported angezeigt wird, werden vom LIMS vordefiniert und die Spaltenauswahl kann nicht geändert werden.
Save as project default	Wählen Sie diese Option aus, um die Spalteneinstellungen in künftigen Ergebnistabellen zu verwenden.

## Probentypfilter

Tabelle 7-2 Beschreibungen der Probentypfilter

Filterart	Beschreibung
All Sample Types	Zeigt alle Probenarten.
Unknowns	Zeigt nur unbekannte Proben an, die normale Proben mit unbekannter Konzentration sind. Beim Verwenden von Standardproben wird deren Konzentration aus der Kalibrierkurve rückberechnet und in der Ergebnistabelle als „Calculated Concentration“ berichtet. Siehe <a href="#">Regressionsgleichungen auf Seite 132</a> .
Standards	Zeigt nur Proben mit bekannter Konzentration an. Diese Proben werden für die Erzeugung der Kalibrierkurve verwendet.
Quality Controls	Zeigt nur Qualitätskontrollproben an. Diese Proben mit bekannter Konzentration werden verwendet, um die Genauigkeit der Kalibrierkurve zu überprüfen, sie beeinflussen allerdings nicht ihren eigentlichen Aufbau.
Standards & QCs	Zeigt sowohl Standard- als auch Qualitätskontrollproben an.
Unknowns, Standards & QCs	Zeigt Unbekannte, Standard- sowie Qualitätskontrollproben an.
Blanks	Zeigt nur Leerproben an. Hierbei handelt es sich im Allgemeinen um Proben, die die internen Standardverbindungen beinhalten (sofern verwendet), jedoch keine Analyten und die das normale Probenvorbereitungsverfahren durchlaufen haben. Diese Proben werden nicht zum Aufbau der Kalibrierkurve verwendet. Um diese einzuschließen, wählen Sie die Probenart Standard und stellen Sie die Ist-Konzentration anschließend auf 0 ein.
Double Blanks	Zeigt nur Doppelleerproben an. Dies sind Proben ohne interne Standards oder Analyten.

**Tabelle 7-2 Beschreibungen der Probenfilter (Fortsetzung)**

Filterart	Beschreibung
Lösungsmittel	Zeigt nur Lösungsmittelproben an. Hierbei handelt es sich um Doppelleerproben, die nicht das normale Probenaufbereitungsverfahren durchlaufen haben.
Blanks, Double Blanks & Solvents	Zeigte alle Leerprobenarten an: Blind-, Doppelblind- und Lösungsmittelproben.

## View Hidden Rows (Ausgeblendete Zeilen anzeigen)

In der **Ergebnistabelle** werden Zeilen für jede Komponente nur für jene Proben angezeigt, für die der entsprechende MRM-Übergang verfügbar ist. Die nicht verwendeten Zeilen, Komponenten mit Übergängen, die für eine bestimmte Probe nicht verfügbar sind, sind in der Tabelle vorhanden, aber standardmäßig ausgeblendet.

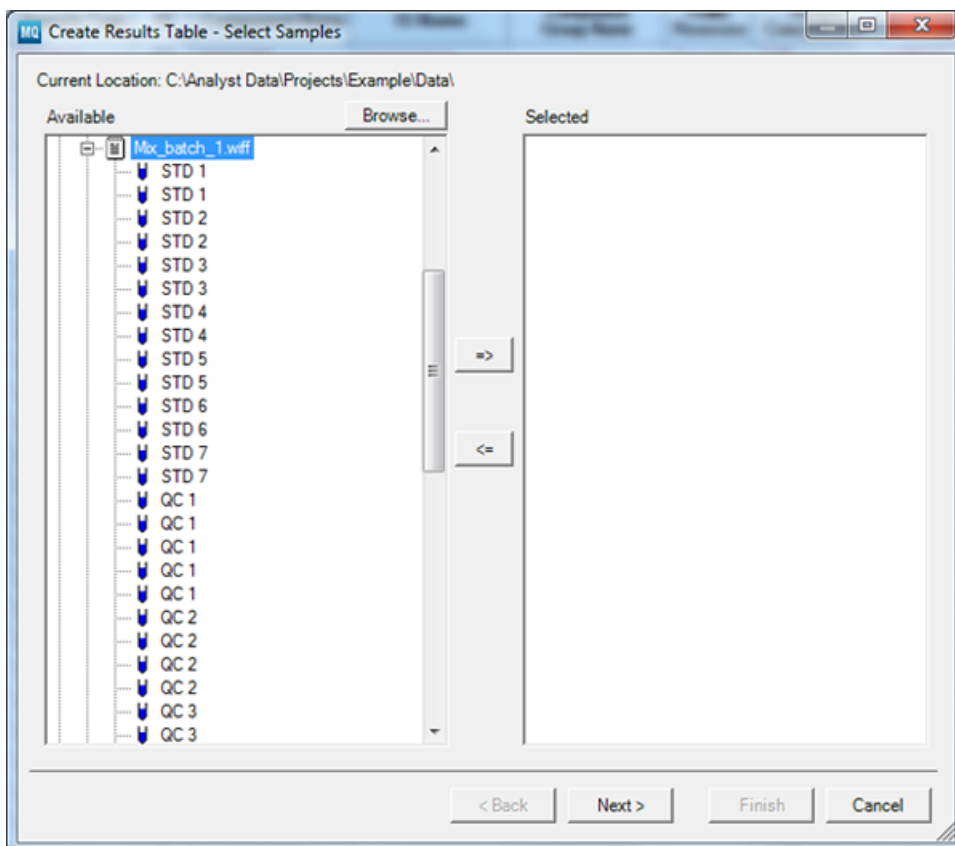
1. Anzeigen der Spalte **Peak Comment (Peak-Kommentar)** in der **Ergebnistabelle**, falls sie noch nicht sichtbar ist.
2. Sortieren Sie die Tabelle mit dieser Spalte.
3. Wählen Sie die (jetzt nebeneinander liegenden) Zeilen mit dem Kommentar **Not Present (Nicht vorhanden)**.
4. Klicken Sie auf das Symbol **Hide selected rows(s) (Ausgewählte Zeile(n) ausblenden)**. Siehe [Software-Symbole auf Seite 161](#).

## Dialog „Results Table“ (Ergebnistabelle)

### Select Samples (Proben auswählen)

Wählen Sie die Proben aus den zu verarbeitenden .wiff-Dateien aus.

**Abbildung 7-4 Seite Create Results Table - Select Samples Page (Ergebnistabelle erstellen - Proben auswählen)**

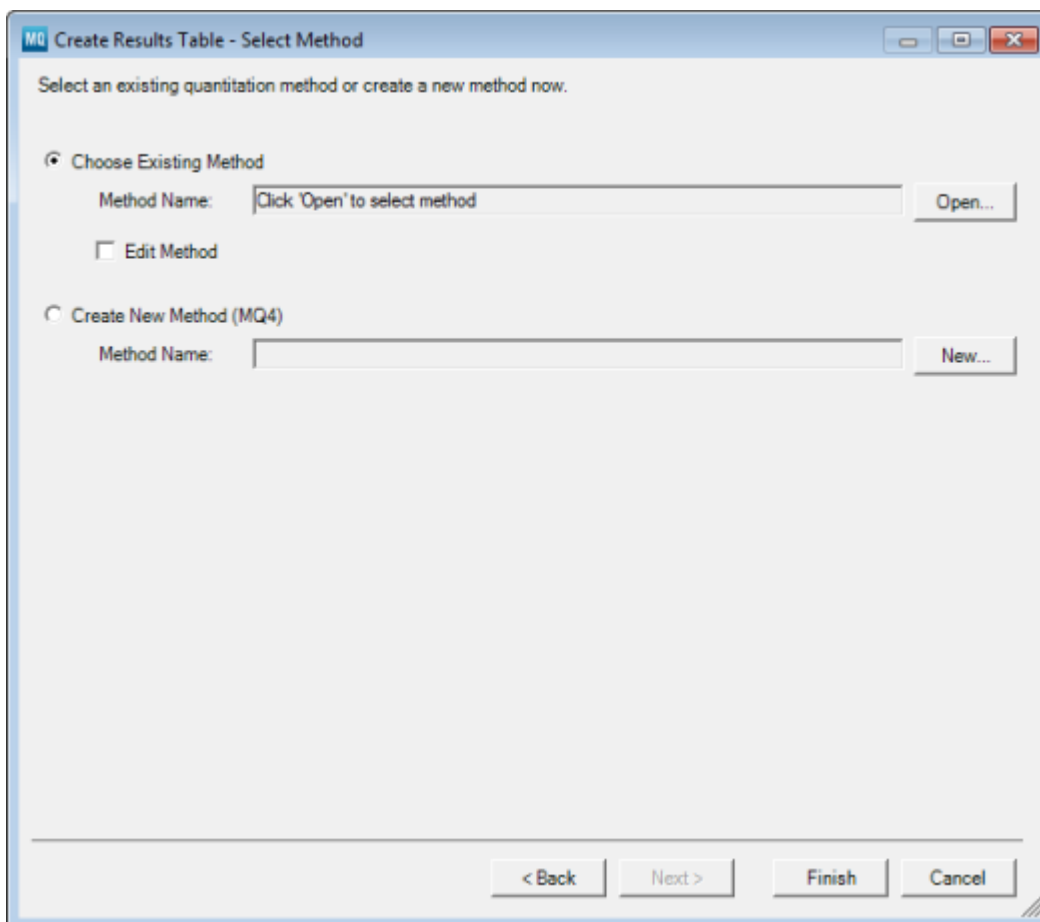


- Das Fenster **Available (Verfügbar)** zeigt die Unterordner, .wiff-Dateien und Proben an, die im Ordner **Data (Daten)** für den ausgewählten Ordner verfügbar sind.
- Erweitern Sie einzelne Ordner, um alle Unterordner oder .wiff-Dateien anzuzeigen. Wenn die .wiff-Datei erweitert wird, öffnet sie sich, um die verfügbaren Proben anzuzeigen.
- Verwenden Sie die Pfeile zum Hinzufügen oder Entfernen von Proben.
- Wählen Sie Proben aus, indem Sie auf eine einzelne Probe doppelklicken, eine Proben- oder Datendatei auswählen und dann auf die Schaltfläche => klicken, oder indem Sie eine Proben- oder Datendatei aus dem linken Fenster in das rechte Fenster ziehen. Drücken Sie die **Umschalttaste** oder **Strg**, um mehrere Elemente oder Proben auszuwählen, bevor Sie sie verschieben.

## Select Method (Methode wählen)

Wählen Sie die Quantifizierungsmethode aus. Wenn eine vorhandene Methode ausgewählt, aber nicht bearbeitet wird, erscheint ein Fortschrittsbalken, während die ausgewählten Proben verarbeitet werden. Am Ende dieses Prozesses wird eine **Ergebnistabelle** erstellt.

**Abbildung 7-5** Seite „Create Results Table - Select Method Page“ (Ergebnistabelle erstellen - Methode auswählen)



Label	Beschreibung
Choose Existing Method	Wählen Sie <b>Open (Öffnen)</b> , um eine bestehende Quantifizierungsmethode auszuwählen.
Edit Method	Wählen Sie diesen Befehl zum Bearbeiten einer vorliegenden Methode. Die folgenden Seiten des Assistenten werden mit Informationen aus der vorliegenden Methode ausgefüllt, die nach Bedarf geändert werden können.
Create New Method	Klicken Sie auf <b>New (Neu)</b> , um eine Quantifizierungsmethode zu erstellen. Der Algorithmus in Klammern ist der im Dialog <b>Integration Default (Integrationsstandards)</b> ausgewählte Algorithmus.

## Repräsentative Probe auswählen

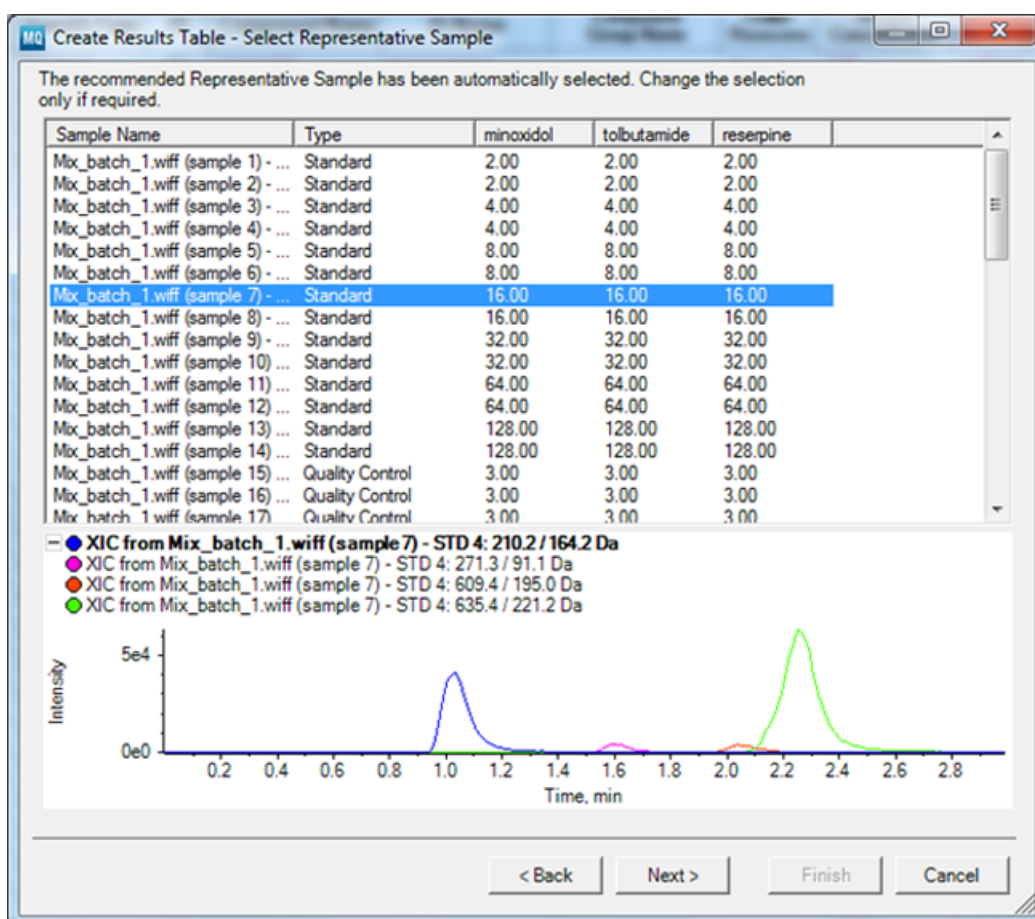
Die Seite **Select Representative Sample** zeigt die ausgewählte repräsentative Probe, für die Chromatogramme dargestellt werden, wenn die Parameter für Peak-Ermittlung und -integration visuell

festgelegt werden. Diese Probe muss alle Verbindungen enthalten, die in die Quantifizierungsmethode aufgenommen werden.

Wenn die Probenotypen und Analytkonzentrationen mit dem Analyst<sup>®</sup> MD-Software Batch Editors ausgewählt wurden, bevor die Proben abgerufen wurden, werden diese Informationen als zusätzliche Spalten angezeigt.

Die Software wählt standardmäßig eine Probe aus. Falls die ausgewählte Probe nicht geeignet ist, wählen Sie eine andere repräsentative Probe aus. Wenn der SignalFinder<sup>™</sup>-Algorithmus ausgewählt wird, wird von der Software keine repräsentative Probe empfohlen, wenn die TIC-Ebene in allen Proben über 1,0e6 liegt, um die Erstellung eines inkorrekten Integrationsmodells zu vermeiden. Benutzer können in diesem Szenario eine repräsentative Probe manuell auswählen.

Abbildung 7-6 Seite „Create Results Table - Select Representative Sample“



## Define Components (Komponenten definieren)

Die Seite **Define Components (Komponenten definieren)** enthält eine Zeile für jeden Analyten oder internen Standard. Wählen Sie die Namen der Analyten und internen Standards, falls diese verwendet werden. Siehe [Rechtsklick-Menü „Define Components“ \(Komponenten definieren\) auf Seite 49](#).

**Abbildung 7-7 Seite „Create Results Table - Define Components“ (Ergebnistabelle erstellen - Komponenten definieren)**

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: MRM (4 transitions)

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinnamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinnamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinnamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinnamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

< Back   Next >   Finish   Cancel

Label	Beschreibung
Experiment	Wählen Sie ein zu verarbeitendes Experiment aus der Liste. Wählen Sie für Daten aus mehreren Zeiträumen oder mehreren Experimenten jedes der Experimente aus, das verarbeitet werden muss, und füllen Sie dann die Tabelle mit den Komponenten für das entsprechende Experiment aus.
Row	Gibt die aktuelle Zeilennummer an.
IS	Zeigt an, ob die für die Zeile definierte Komponente ein Analyt (nicht ausgewählt) oder ein interner Standard (ausgewählt) ist.
Name	Enthält den Namen der Komponente. Bei MRM-Experimenten wird der Name automatisch mit den Übergangsmassen <b>Q1/Q3</b> vervollständigt. Wenn Sie einen spezifischen Namen wünschen, geben Sie die Bezeichnung im Feld ein.



Label	Beschreibung
Group	<p>Enthält den Namen der Gruppe, zu der die Komponente für die Zeile gehört. Wenn Analyten oder interne Standards, die miteinander in Verbindung stehen, in der gleichen Gruppe platziert werden, können sie besser gemeinsam bewertet und manipuliert werden. Dies gilt ebenfalls für Komponenten mit derselben Retentionszeit, z. B. verschiedene MRM-Übergänge für dieselbe Verbindung.</p> <p>Geben Sie die Gruppenamen ein oder füllen Sie sie automatisch aus. Siehe <a href="#">Rechtsklick-Menü „Define Components“ (Komponenten definieren)</a> auf Seite 49.</p>
IS Name	Enthält den Namen des optionalen internen Standards, der für den Analyten verwendet werden sollte, der in der Zeile definiert ist. Dieses Feld gilt nicht für interne Standards selbst.
Mass Info	<p>Bei MRM-Experimenten erhält diese Spalte den Titel <b>Q1/Q3</b> und enthält das Massenpaar für die in der Zeile definierte Komponente. Wählen Sie den erforderlichen Übergang aus der Liste, die alle verfügbaren Übergänge für das Experiment enthält. Normalerweise wird die Spalte automatisch mit den verfügbaren Übergängen initialisiert.</p> <p>Bei Profil- (Scan-) Experimenten erhält diese Spalte den Titel <b>Start - Stop (Start - Stopp)</b> und enthält den Massenbereich, der verwendet wird, um ein XIC (Extracted Ion Chromatogram - Auszug aus dem Ionenchromatogramm) für die in der Zeile definierte Komponente zu berechnen. Geben Sie den Massenbereich mit einem Bindestrich ein, um die beiden Massen zu trennen. Zum Beispiel 200-201 oder 200-1. Für die letztere Option ist der Massenbereich 199,5-200,5.</p>

### Rechtsklick-Menü „Define Components“ (Komponenten definieren)

Klicken Sie auf der Seite **Define Components (Komponenten definieren)** mit der rechten Maustaste, um auf ein Kontextmenü zuzugreifen. Die folgenden Befehle sind verfügbar:

**Tabelle 7-3 Rechtsklick-Menüoptionen für „Define Components“**

Menüoption	Beschreibung
Clear	Löscht den Inhalt der ausgewählten Zeilen oder Spalten. Zeilen werden durch Klicken oder Ziehen in dem Bereich vor der Zeilennummer ausgewählt.
Copy	Kopiert die ausgewählten Zeilen oder Spalten in die Zwischenablage.
Paste	Fügt den Inhalt der Zwischenablage ein.

**Tabelle 7-3 Rechtsklick-Menüoptionen für „Define Components“ (Fortsetzung)**

Menüoption	Beschreibung
Find Component by Name	Wählt diejenigen Komponenten aus, deren <b>Name</b> mit dem Text übereinstimmt. Um einen passenden Eintrag zu finden, ist nicht der exakte Text erforderlich. Das ist hilfreich, um eine bestimmte Komponente auszuwählen, wenn es viele Komponenten gibt.  Wenn anfangs keine Zeile in der Tabelle ausgewählt wird, beginnt die Suche in der ersten Zeile. Andernfalls beginnt die Suche in der Zeile unter der markierten Zeile und springt am Ende der Tabelle nach oben zur ersten Zeile. Das ist hilfreich, wenn es mehr als eine Komponente gibt, deren <b>Name</b> den Text enthält. Wenn die Komponente beim ersten Durchsuchen nicht gefunden wird, starten Sie eine erneute Suche, bei der die erste Komponente markiert bleibt, um einen anderen Treffer in der Tabelle zu finden.
Insert Row Above	Fügt eine einzelne leere Zeile unmittelbar über der derzeit markierten Zeile ein.
Delete Selected Rows	Entfernt die markierten Zeilen aus der Tabelle.
Sum Multiple Ions	Addiert Chromatogramme für mehrfache MRM-Übergänge oder Voll-Scan-Massenbereiche. Nach Auswahl des Befehls werden zusätzliche Massen-Spalten zur Tabelle <b>Components</b> hinzugefügt. Alle für eine bestimmte Zeile ausgewählten Massen werden zur Konstruktion des summierten XIC für den entsprechenden Analyten oder internen Standard verwendet. Es wird empfohlen, diese Funktion immer auszuwählen.
Groups	Siehe <a href="#">Untermenü „Groups“ (Gruppen) auf Seite 88</a> .
Internal Standards	Siehe <a href="#">Untermenü „Internal Standards“ (Interne Standards) auf Seite 90</a> .

## Integration definieren

Wählen Sie die erwartete Retentionszeit und andere Parameter zur Peak-Ermittlung für jede der Komponenten.

Die Liste links zeigt einen Eintrag für jede Komponente, die auf der nächsten Seite des Assistenten definiert ist. Klicken Sie auf eine bestimmte Zeile, um das entsprechende Chromatogramm und die aktuelle Integration für die repräsentative Probe anzuzeigen. Blättern Sie durch die Liste, indem Sie die Pfeiltasten nach oben oder unten oder das Bildlaufrad verwenden. Im Allgemeinen wird empfohlen, dass alle Komponenten auf Korrektheit der Integration geprüft werden. Wenn jedoch viele Komponenten vorliegen, verwenden Sie den Befehl **Highlight Components with Uncertain RT**, um die Anzahl der zu prüfenden Komponenten einzuschränken.

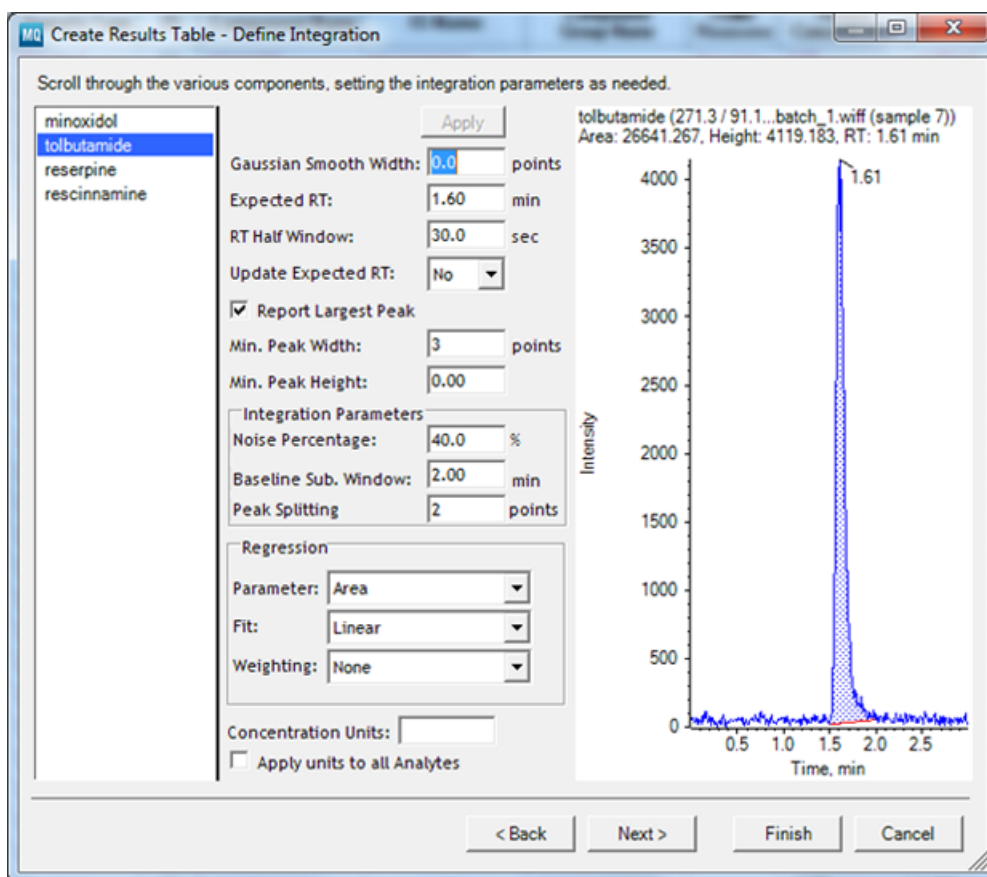
**Hinweis:** Wenn mehr als nur einige wenige Komponenten vorliegen, stellen Sie sicher, dass die Parameter zur Peak-Ermittlung auf angemessene Standardwerte eingestellt sind, um eine Anpassung der Parameter für jede Komponente zu vermeiden.

Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf der Seite, um die verfügbaren Befehle anzuzeigen. Siehe [Rechtsklick-Menü „Define Integration“ \(Integration definieren\) auf Seite 52](#).

Ändern Sie in der Gruppe **Regression** die Kalibrierungsoptionen für alle oder die ausgewählten Komponenten, nachdem die Ergebnistabelle erstellt wurde. Legen Sie die Standard-Konzentrationsseinheiten und Regressionsparameter fest, damit Sie nicht jedes Mal angepasst werden müssen.

**Tipp!** Zoomen Sie das Diagramm heran, indem Sie die Bereiche der X- oder Y-Achse ziehen. Kehren Sie zur voreingestellten Ansicht zurück, indem Sie das Kontextmenü (**Home Graph Axes**) verwenden oder im Achsenbereich doppelklicken.

Abbildung 7-8 Seite „Create Results Table - Define Integration“



## Ergebnistabellen

Label	Beschreibung
Apply	Passen Sie die Parameter zur Peak-Ermittlung ggf. für eine bestimmte Komponente an. Bei der Erstellung der neuen Ergebnistabelle werden die angegebenen Parameter für eine bestimmte Komponente für alle Proben auf diese Komponente angewendet, wenn die Daten integriert sind. Siehe <a href="#">Integrationsalgorithmusparameter auf Seite 126</a> .
Expected RT	Stellen Sie die Retentionszeit zunächst auf den Punkt mit der höchsten Intensität für das Chromatogramm ein. Normalerweise handelt es sich hierbei um den erforderlichen Peak. Wenn jedoch Isomere vorliegen, muss dieser Wert möglicherweise angepasst werden. Um den Wert anzupassen, geben Sie einen neuen Wert im Feld <b>Expected RT</b> ein und klicken Sie dann auf <b>Apply</b> . Alternativ können Sie im Diagramm klicken und dann über den Peak von Interesse ziehen. Achten Sie darauf, nicht versehentlich den Cursor innerhalb des Diagramms zu ziehen und die erwartete Retentionszeit zu ändern.
Parameter	Wählen Sie <b>Area</b> oder <b>Height</b> .
Fit	Die verschiedenen Fitarten sind unter <a href="#">Regressionsgleichungen auf Seite 132</a> beschrieben.
Weighting	Die verschiedenen Gewichtungsarten sind in <a href="#">Gewichtungsfaktoren auf Seite 133</a> beschrieben.
Concentration Units	Geben Sie die für die Analyten und internen Standards verwendeten Konzentrationseinheiten ein. Wenn eine relative Quantifizierung erfolgt, lassen Sie dieses Feld leer. Der Assistent geht davon aus, dass für alle Komponenten die gleichen Einheiten verwendet werden. Falls dies nicht der Fall ist, verwenden Sie den <b>Quantitation Method Editor</b> .
Apply units to all Analytes	Benutzer können eine Konzentrationseinheit für einzelne Komponenten eingeben. Um die gleiche Einheit auf alle Komponenten anzuwenden, aktivieren Sie dieses Kontrollkästchen. Die Information muss mit den <b>Concentration Units</b> konsistent sein.

### Rechtsklick-Menü „Define Integration“ (Integration definieren)

Klicken Sie auf der Seite **Define Integration (Integration definieren)** mit der rechten Maustaste, um auf ein Kontextmenü zuzugreifen. Die folgenden Befehle sind verfügbar:

Tabelle 7-4 Rechtsklick-Menüoptionen für „Define Integration“

Menüoption	Beschreibung
Find Component by Name	Ähnlich wie der auf der Seite <b>Define Components</b> verfügbare Befehl. Der Unterschied besteht darin, dass nicht ganze Zeilen wie in der Tabelle <b>Components</b> , sondern einzelne Elemente der Komponentenliste ausgewählt werden.
Highlight Components with Uncertain RT	Wird verwendet, um Komponenten hervorzuheben, bei denen die standardmäßige erwartete Retentionszeit (basierend auf der Retentionszeit des Peaks mit der größten Intensität für jedes Chromatogramm) inkorrekt ist. Wenn die Anzahl der Komponenten klein ist, überprüfen Sie jede einzeln und verwenden Sie diesen Befehl nicht. Wenn es viele Komponenten gibt, verwenden Sie diesen Befehl, um optisch nur diejenigen zu überprüfen, für die im Chromatogramm mehrere signifikante Peaks vorliegen. Siehe <a href="#">Dialog „Highlight Components“ auf Seite 92</a> .
Home Graph Axes	Setzt das vergrößerte Diagramm auf seine Startansicht zurück, in der alle Daten sichtbar sind.
Overlay Other Components for Group	Verwenden Sie diesen Befehl, um Chromatogramme zu überlagern, wenn verschiedene Komponenten Gruppen zugeordnet wurden und wenn für die einer Gruppe zugeordneten Komponenten dieselbe Retentionszeit erwartet wird, beispielsweise wenn sie verschiedene MRM-Übergänge derselben eigentlichen Verbindung darstellen.  Wenn das Chromatogramm für die aktuelle Komponente, deren Integrationsparameter definiert werden, ausgewählt wird, wird dieses mit einer durchgehenden blauen Linie eingezeichnet und die integrierte Peak-Fläche wird angezeigt. Die Chromatogramme (und nicht die integrierte Peak-Fläche) für die anderen Komponenten derselben Gruppe werden mithilfe einer gestrichelten Linie überlagert.
Update Retention Times	Wird verwendet, um die erwarteten Rückhaltezeiten für eine zuvor erstellte Quantifizierungsmethode zurückzusetzen. Wenn eine vorhandene Quantifizierungsmethode geöffnet und danach die Option <b>Set New Typical Sample</b> ausgewählt wird, wird das Chromatogramm der neuen Probe angezeigt, die erwarteten Retentionszeiten bleiben jedoch unverändert.  Für jede Komponente wird die erwartete Retentionszeit derart aktualisiert, dass sie der Retentionszeit des Peaks mit der stärksten Intensität innerhalb eines Fensters der spezifizierten Breite entspricht, welches in der ursprünglich erwarteten Retentionszeit zentriert wurde.  Siehe <a href="#">Dialog „Update Retention Time“ (Aktualisierung der Retentionszeit) auf Seite 93</a> .

## Outlier Settings (Ausreißereinstellungen)

Benutzer können die Ausreißer der Genauigkeit von **Standards**, **QCs**, **Ionenverhältnis** und **Berechnete Konzentration** markieren. Die folgenden Befehle sind verfügbar:

Abbildung 7-9 Dialog „Outlier Settings“ ()

Label	Beschreibung
Accuracy for Standards	Verändert die Genauigkeitstoleranz der <b>Standard</b> proben.
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Verändert die Genauigkeitstoleranz für <b>Standard</b> proben durch einen Wert entsprechend den Standardarbeitsanweisungen des Labors.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Verändert die Genauigkeitstoleranz für den <b>Standard</b> mit der niedrigsten Konzentration, falls die Standardarbeitsanweisungen des Labors für diesen <b>Standard</b> eine andere Toleranz vorsehen.
Accuracy for QCs	Verändert die Genauigkeitstoleranz der <b>Qualitätskontroll</b> -Proben.
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Verändert die Genauigkeitstoleranz für Proben zur <b>Qualitätskontrolle</b> durch einen Wert entsprechend den Standardarbeitsanweisungen des Labors.
Ion Ratio	Nur dann verfügbar, wenn die Komponenten Gruppen zugeordnet sind. Wählen Sie diese Option, um das Ionenverhältnis der Peak-Fläche oder der Peak-Höhe zu verwenden. Fläche oder Höhe der Peaks wird beim Auswählen der Regressionsparameter während der Entwicklung der Quantifizierungsmethode eingestellt.

Label	Beschreibung
Calculated Concentration	Bei der Verwendung von <b>Standard</b> proben bekannter Konzentration ist dies die aus der Kalibrierkurve rückberechnete Konzentration. Die Regressionsgleichungen beschreiben, wie die Regression für die verschiedenen Regressionsarten und Gewichtungen durchgeführt wird.
Component	Die Analyten oder internen Standards für alle Proben.
IS	Der ausgewählte interne Standard. Nur verfügbar, wenn das Kontrollkästchen <b>Ion Ratio</b> aktiviert ist.
Group	Komponenten mit derselben Rückhaltezeit (d. h. verschiedene Übertragungen für dieselbe Verbindung) können gruppiert werden. Nur verfügbar, wenn das Kontrollkästchen <b>Ion Ratio</b> aktiviert ist.
Ion Ratio Tolerance (%)	Verwenden Sie die Standardeinstellung oder ändern Sie diese Einstellung entsprechend den Standardarbeitsanweisungen des Labors. Nur verfügbar, wenn das Kontrollkästchen <b>Ion Ratio</b> aktiviert ist.
Lower Limit of Calculated Concentration	Geben Sie den unteren Grenzwert des akzeptablen Konzentrationsbereich ein. Alle Proben, deren <b>berechnete Konzentration</b> geringer ist als dieser Wert, werden als Konzentrationsausreißer gekennzeichnet.
Upper Limit of Calculated Concentration	Geben Sie den oberen Grenzwert des akzeptablen Konzentrationsbereichs ein. Alle Proben, deren <b>berechnete Konzentration</b> höher ist als dieser Wert, werden als Konzentrationsausreißer gekennzeichnet.

Klicken Sie auf der Seite **Outlier Settings (Ausreißer-Einstellungen)** mit der rechten Maustaste, um auf ein Kontextmenü zuzugreifen.

**Tabelle 7-5 Rechtsklick-Menüoptionen für „Outlier Settings“**

Label	Beschreibung
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Übernimmt den unteren Grenzwert der berechneten Konzentration für alle Analyten, falls alle Analyten dieselben Kriterien haben.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Übernimmt den oberen Grenzwert der berechneten Konzentration für alle Analyten, falls alle Analyten dieselben Kriterien haben.

## Spalten der Ergebnistabelle

**Hinweis:** Bestimmte für die Probeninformationen kritische Spalten wie **Sample Name (Probenname)**, **Sample ID (Proben-ID)** etc. sollten beim Anpassen der Spalteneinstellungen der **Ergebnistabelle** nicht ausgeblendet werden.

## Ergebnistabellen

Verwenden Sie für numerische Felder das Format 0.00 für nicht-wissenschaftliche Notizen und verwenden Sie das Format 0.00e0 für wissenschaftliche Notizen. Ändern Sie die Dezimalpunkte, um die Präzision der angezeigten Zahlen anzugeben. Nur ein Punkt (.) kann als Dezimaltrennzeichen verwendet werden. Zifferngruppierung wird nicht unterstützt.

**Tabelle 7-6 Ergebnistabellenspalten**

Label	Beschreibung
Accuracy	Wenn Sie <b>Standard</b> proben bekannter Konzentration für <b>Standard</b> proben und Proben zur <b>Qualitätskontrolle</b> verwenden, ist dies definiert als: $100 \% * (\text{berechnete Konzentration}) / (\text{Ist-Konzentration})$ Für andere Probenarten beträgt der Wert N/A.
Acq. Method Name	Der Name der zur Erfassung der Probe verwendeten Erfassungsmethode.
Acquisition Date & Time	Das Datum und die Zeit, wann die .wiff-Probe aufgenommen wurde.
Actual Concentration	Für <b>Standard</b> proben und <b>Qualitätskontrollen</b> ist dies die erwartete bekannte Konzentration.
Area	Die festgestellte Peak-Fläche. Falls kein Peak erkannt wurde, ist der Wert N/A.
Area / Height	Die festgestellte Peak-Fläche geteilt durch die Höhe. Falls kein Peak erkannt wurde, ist der Wert N/A.
Area Ratio	Für Analyten, die einen internen Standard verwenden, ist dies das Verhältnis von <b>Fläche</b> zu <b>IS-Fläche</b> . Für interne Standards oder Analyten ohne internen Standard ist der Wert N/A.
Asymmetry Factor	Der Abstand zwischen der Mittellinie des Peaks und der hinteren Neigung geteilt durch den Abstand zwischen der Mittellinie des Peaks und der vorderen Neigung, wobei alle Messungen bei 10 % der maximalen Peak-Höhe durchgeführt werden.
Baseline Delta / Height	Der absolute Wert der Höhendifferenz von der Basislinie (zu Beginn und am Ende des Peaks) zur tatsächlichen Peak-Höhe. Werte, die höher als etwa 0,1 sind, weisen darauf hin, dass die Basislinie möglicherweise nicht korrekt integriert wurde und der Peak überprüft werden sollte.
Calculated Concentration	Bei der Verwendung von <b>Standard</b> proben bekannter Konzentration ist dies die aus der Kalibrierkurve rückberechnete Konzentration. Siehe <a href="#">Regressionsgleichungen auf Seite 132</a> für Informationen dazu, wie die Regression für die verschiedenen Regressionsarten und Gewichtungen durchgeführt wird.
Component Comment	Ein beliebiger Kommentar, der auf den Analyten oder den internen Standard aller Proben zutrifft.
Component Group Name	Der mit dem Analyten oder dem internen Standard assoziierte Gruppenname (falls vorhanden).



Tabelle 7-6 Ergebnistabellenspalten (Fortsetzung)

Label	Beschreibung
Component Index	Der Index des Analyten oder internen Standards in der ursprünglichen Quantifizierungsmethode. Es kann hilfreich sein, die Tabelle basierend auf diesem Feld zu sortieren.
Component Name	Die Bezeichnung des Analyten oder internen Standards.
Conc. Units	Die Konzentrationseinheiten
Concentration Ratio	Für Analyten, die einen internen Standard verwenden, ist dies das Verhältnis der <b>Ist-Konzentration</b> zur <b>IS Ist-Konzentration</b> . Für interne Standards oder Analyten ohne internen Standard ist der Wert N/A.
Corrected Area	Die festgestellte Peak-Fläche. Falls kein Peak erkannt wurde, ist der Wert N/A.
Corrected Area / Height	Die festgestellte Peak-Fläche geteilt durch die Höhe. Falls kein Peak erkannt wurde, ist der Wert N/A.
Corrected Height	Die festgestellte Peak-Höhe. Falls kein Peak erkannt wurde, ist der Wert N/A.
Dilution Factor	Der Faktor, mit dem die Probe verdünnt worden ist. Dieser Faktor wird bei der Berechnung der Kalibrierkurve verwendet. Siehe <a href="#">Regressionsgleichungen auf Seite 132</a> .
End Time	Die End-Retentionszeit des festgestellten Peaks in Minuten.
End Time at 10%	Die Zeit in Minuten entlang der Rückseite des Peaks, wo die Intensität 10 % der Peak-Höhe entspricht.
End Time at 5%	Die Zeit in Minuten entlang der Rückseite des Peaks, wo die Intensität 5 % der Peak-Höhe entspricht.
Expected Ion Ratio	Das erwartete Ionenverhältnis für alle Probenarten.
Expected RT	Die ursprünglich von der Quantifizierungsmethode erwartete Retentionszeit in Minuten.
Height	Die festgestellte Peak-Höhe. Falls kein Peak erkannt wurde, ist der Wert N/A.
Height Ratio	Für Analyten, die einen internen Standard verwenden, ist dies das Verhältnis von <b>Höhe</b> zu <b>IS-Höhe</b> . Für interne Standards oder Analyten ohne internen Standard ist der Wert N/A.
Index	Dies ist der Index der Zeile in der ursprünglichen, ungeordneten Reihenfolge. Falls die Tabelle nach einer anderen Spalte sortiert wurde, kann die ursprüngliche Reihenfolge durch Sortierung dieser Spalte wieder hergestellt werden.
Injection Volume	Das Volumen der durch den Autosampler injizierten Probe in ml.

Tabelle 7-6 Ergebnistabellenspalten (Fortsetzung)

Label	Beschreibung
Integration Type	<ul style="list-style-type: none"> <li>Der Wert <b>Baseline (Basislinie)</b> gibt an, dass ein eigenständiger Peak auf übliche Weise integriert wurde.</li> <li>Der Wert <b>Valley (Tal)</b> gibt an, dass das Signal zwischen zwei benachbarten Peaks nicht zum Basislinien-Wert zurückgekehrt ist.</li> <li>Der Wert <b>Manual (Manuell)</b> gibt an, dass das Peak manuell integriert wurde.</li> <li>Der Wert <b>N/A</b> gibt an, dass kein Peak erkannt wurde.</li> </ul>
Ion Ratio	<ul style="list-style-type: none"> <li><b>Ionenverhältnisse</b> werden bestimmt, wenn mindestens zwei MRM-Übergänge eines einzelnen Analyten in einer Gruppe zusammengefasst wurden.</li> <li>Die erste Komponente einer Untergruppe wird als <b>Quantifier</b>-Ionen verwendet. Die restlichen Komponenten in der Untergruppe werden als <b>Qualifier</b>-Ionen verwendet.</li> <li>Ionenverhältnis = (Fläche des Peaks oder Höhe des Qualifiers) / (Fläche des Peaks oder Höhe des Quantifiers)</li> <li>Subgroups <ul style="list-style-type: none"> <li>Alle Analyten einer Gruppe bilden eine <b>Analyten</b>-Untergruppe</li> <li>Alle internen Standards einer Gruppe bilden eine <b>IS</b>-Untergruppe</li> </ul> </li> <li>Falls eine Komponente nicht zu einer Gruppe gehört, ist das <b>Ionenverhältnis</b> „N/A“</li> <li>Falls der Peak nicht gefunden wird, ist das <b>Ionenverhältnis</b> „N/A“</li> <li>Wird für alle Komponenten sowohl in den Untergruppen <b>Analyt</b> als auch <b>IS</b> für den <b>Quantifier</b> und den <b>Qualifier</b> selbst übernommen.</li> <li>Falls sich die Integration entweder für die Peaks des <b>Quantifiers</b> oder des <b>Qualifiers</b> ändert, wird das <b>Ionenverhältnis</b> erneut berechnet.</li> <li>Kann sowohl für die Fläche als auch die Höhe des Peaks berechnet werden. Wenn die <b>Fläche</b> im Regressionsteil einer .qmethod für die erste Komponente (Komponentenindex 1) in der <b>Ergebnistabelle</b> verwendet wird, dann wird die Peak-Fläche zur Berechnung des <b>Ionenverhältnisses</b> der gesamten <b>Ergebnistabelle</b> verwendet. Wenn die <b>Höhe</b> in der Regression der ersten Komponente verwendet wird, dann wird die Peak-Höhe für die Berechnung verwendet.</li> </ul>
IS	Ein aktiviertes Kontrollkästchen zeigt an, dass die Komponente der Zeile ein interner Standard und kein Analyt ist.

Tabelle 7-6 Ergebnistabellenspalten (Fortsetzung)

Label	Beschreibung
IS Actual Concentration	Die mit dem aktuellen Analyten assoziierte Ist-Konzentration des internen Standards oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Area	Fläche für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Area / Height	Das Verhältnis zwischen <b>Fläche</b> und <b>Höhe</b> des mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standards oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Baseline Delta / Height	<b>Baseline Delta / Height (Basislinien-Delta / Höhe)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Comment	Ein beliebiger Kommentar zu einem mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Corrected Area	Der korrigierte Fläche für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Corrected Area / Height	<b>Corrected Area (Korrigierte Fläche) / Corrected Height (Korrigierte Höhe)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Corrected Height	<b>Corrected Height (Korrigierte Höhe)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS End Time	<b>End Time (Endzeit)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Expected RT	<b>Expected RT (Erwartete RT)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Height	<b>Height (Höhe)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Integration Type	<b>Integration Type (Integrationstyp)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Mass Info	<b>Mass Info (Masseinformation)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.

**Tabelle 7-6 Ergebnistabellenspalten (Fortsetzung)**

Label	Beschreibung
IS Name	<b>Component Name (Komponentenname)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Peak Comment	<b>Peak Comment (Peak-Kommentar)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Quality	Qualität für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Region Height	Qualitätsmetrik für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Retention Time	<b>Retention Time (Retentionszeit)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Signal / Noise	<b>Signal / Noise (Signal / Rauschen)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Start Time	<b>Start Time (Startzeit)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Total Width	<b>Total Width (Gesamtbreite)</b> für den mit dem aktuellen Analyten assoziierten internen Standard oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
IS Width at 50%	Die mit dem aktuellen Analyten assoziierte Breite bei 50 % des internen Standards oder N/A für interne Standards oder Analyten ohne einen internen Standard.
Mass Info	Die mit der Komponente assoziierte Information bzgl. der Masse. Für MRM-Experimente ist dies <b>Q1/Q3</b> und für Profilexperimente (vollständiger Scan) ist dies <b>Start - Stop (Start - Stopp)</b> .
Modified	Eine Markierung zeigt an, dass die Peak-Finder-Parameter im Fenster <b>Peak Review (Peak-Bewertung)</b> von ihren ursprünglichen, in der Quantifizierungsmethode angegebenen Werten modifiziert worden sind.
Operator Name	Der Name des Instrumentenbedieners, der die Probe aufgenommen hat.
Original Filename	Der Name der .wiff-Datei.

Tabelle 7-6 Ergebnistabellenspalten (Fortsetzung)

Label	Beschreibung
Outlier Reasons	<p>Wenn in der Quantifizierungsmethode Kriterien für Ausreißer-Werte festgelegt wurden, zeigt diese Spalte an, welches Kriterium sich außerhalb der vorab für die Komponente festgelegten Grenzwerte befand.</p> <p>Die Spalte <b>Outlier Reasons (Ausreißer-Gründe)</b> ist nur mit den <b>Outlier Settings (Ausreißer-Einstellungen)</b> in der Quantifizierungsmethode verbunden und ist eine voreingestellte Spalte der <b>Ergebnistabelle</b>.</p> <p>Der Grund für die Kennzeichnung des Ausreißerwerts:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Genauigkeit</b></li> <li>• <b>Konzentration</b></li> <li>• <b>Ionenverhältnis</b> Wenn für den Quantifier ein Peak vorliegt, für den Qualifier jedoch nicht, wird das Ionenverhältnis für beide Komponenten markiert. Wenn für den Qualifier ein Peak vorliegt, für den Quantifier jedoch nicht, wird das Ionenverhältnis für beide Komponenten markiert. Wenn für keinen der beiden ein Peak vorliegt, wird keine Komponenten markiert.</li> <li>• <b>Das erwartete Ionenverhältnis kann nicht berechnet werden.</b></li> </ul>
Peak Comment	Ein beliebiger Kommentar für die Zeile.
Plate Number	Die Plattennummer des Autosamplers wie ursprünglich im zur Datenerfassung genutzten <b>Batch-Editor</b> angegeben.
Points Across Baseline	Die Anzahl der Scans vom Anfang bis zum Ende des Peaks.
Points Across Half Height	Die Anzahl von Scans über dem Peak bei etwa 50 % der Höhe.
Quality	<p>Mit dieser Metrik soll die Qualität des integrierten Peaks angegeben werden.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Werte nahe Null weisen darauf hin, dass der Peak schlecht integriert wurde (oder dass kein Peak vorliegt).</li> <li>• Werte nahe 1,0 weisen darauf hin, dass der Peak gut integriert wurde und nicht überprüft werden muss.</li> </ul>
Rack Number	Die Racknummer des Autosamplers, wie ursprünglich im zur Datenerfassung genutzten <b>Batch-Editor</b> spezifiziert.
Region Height	Die Peak-Höhe des größten Peaks in der Nähe des ermittelten Peaks. Dies ist hilfreich in Verbindung mit dem Feld <b>Quality (Qualität)</b> . Peaks mit niedriger Qualität, die außerdem eine angemessene <b>Regionenhöhe</b> haben, müssen überprüft werden. Wenn die <b>Regionenhöhe</b> gering ist, liegt kein signifikanter Peak vor.
Relative RT	Für Analyten, die einen internen Standard verwenden, ist dies das Verhältnis von <b>Retentionszeit</b> zu <b>IS-Retentionszeit</b> . Für interne Standards oder Analyten ohne internen Standard ist der Wert N/A.

**Tabelle 7-6 Ergebnistabellenspalten (Fortsetzung)**

Label	Beschreibung
Retention Time	Die tatsächliche Retentionszeit des festgestellten Peaks in Minuten.
Sample Comment	Ein beliebiger Kommentar für die Probe.
Sample ID	Ein beliebiger Identifikator für die Probe. Sie wird durch den Wert initialisiert, der ursprünglich im zur Datenerfassung verwendeten <b>Batch Editor</b> spezifiziert wurde.
Sample Index	Der Index der derzeitigen Probe.
Sample Name	Ein beliebiger Name für die Probe. Sie wird durch den Wert initialisiert, der ursprünglich im zur Datenerfassung verwendeten <b>Batch Editor</b> spezifiziert wurde.
Sample Type	Die Art der Probe. Siehe <a href="#">Probentypfilter auf Seite 43</a> .
Signal / Noise	<p>Eine Schätzung des Verhältnisses zwischen der Peak-Höhe des erkannten Peaks und dem im Chromatogramm vorhandenen Rauschen.</p> <p>Wenn der SignalFinder-Integrationsalgorithmus verwendet wird, wird das Rauschen mithilfe des berechneten relativen Rauschens und der Basislinie an der Spitze des Peaks geschätzt. Bei dem MQ4-Integrationsalgorithmus wird ähnlich verfahren, die Basislinie wird jedoch anhand des gesamten Chromatogramms geschätzt.</p> <p>Siehe <a href="#">Relatives Rauschen und Signal-zu-Rauschen-Berechnungen auf Seite 156</a>.</p>
Slope of Baseline	Gibt die Veränderung von der Basislinie an.
Start Time	Die Start-Retentionszeit des festgestellten Peaks in Minuten.
Start Time at 10%	Die Zeit in Minuten entlang der Vorderseite des Peaks, wo die Intensität 10 % der Peak-Höhe entspricht.
Start Time at 5%	Die Zeit in Minuten entlang der Vorderseite des Peaks, wo die Intensität 5 % der Peak-Höhe entspricht.
Tailing Factor	Der Abstand zwischen der vorderen Neigung des Peaks und der hinteren Neigung geteilt durch den doppelten Abstand zwischen der Mittellinie des Peaks und der vorderen Neigung, wobei alle Messungen bei 5 % der maximalen Peak-Höhe durchgeführt werden.
Total Width	Die chromatografische Peak-Breite an der Basislinie in Minuten.
Used	Für <b>Standard</b> proben zeigt eine Markierung an, dass der entsprechende Analyt derzeit zur Konstruktion der Kalibrierkurve genutzt wird. Für Proben zur <b>Qualitätskontrolle</b> zeigt eine Markierung an, dass der Analyt zur Berechnung der QC-Statistik genutzt wird. Für andere Probenarten hat dieses Feld lediglich informativen Charakter.
Vial Number	Die Fläschchennummer des Autosamplers, wie ursprünglich im zur Datenerfassung genutzten <b>Batch-Editor</b> spezifiziert.
Width at 10%	Die bei 10 % der Peak-Höhe gemessene Breite des Peaks.

Tabelle 7-6 Ergebnistabellenspalten (Fortsetzung)

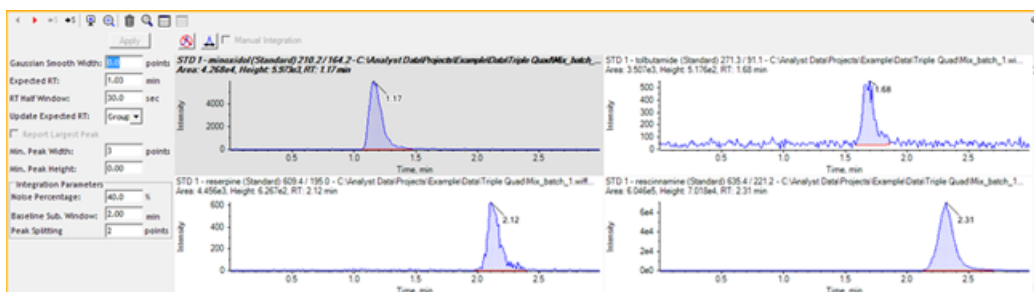
Label	Beschreibung
Width at 5%	Die bei 5 % der Peak-Höhe gemessene Breite des Peaks.
Width at 50%	Die chromatografische Peak-Breite (in Minuten) des erkannten Peaks, gemessen bei der Hälfte der höchsten Intensität.

Verwenden Sie das Fenster **Peak Review (Peak-Bewertung)** dazu, die Rohchromatogramme zu überprüfen, sodass die Qualität des Peak-Findungsprozesses bestimmt werden kann. Wenn eine **Ergebnistabelle** aktiv ist, klicken Sie auf das Symbol **Show Peak Review (Peak-Bewertung anzeigen)** in der Werkzeugleiste der Ergebnistabelle, um das Fenster Peak Review (Peak-Bewertung) zu öffnen. Prüfer sollten die quantitativen Daten gemäß den Kriterien der Peak-Integration und Datenübernahme ihrer eigenen Standardarbeitsanweisung (SOP) prüfen.

Das Gruppieren von Zahlen wird nicht unterstützt. Die Benutzer sollten Zahlen nicht in einem Textfeld (z. B. Integrationsparameter) oder dem Raster (z. B. **Ergebnistabellen**) gruppieren.

Die erweiterte **Peak Review (Peak-Bewertung)** zeigt die Annahme des **Ion Ratio (Ionenverhältnisses)** auf einem überlagerten Chromatogramm an. Der Benutzer kann ebenfalls ein einzelnes Chromatogramm vergrößern.

**Abbildung 8-1** Teilfenster „Peak Review“



Verwenden Sie das Fenster **Peak Review (Peak-Bewertung)** um Chromatogramme, die nicht korrekt integriert wurden, zu korrigieren, entweder durch Einstellen der Peak-Ermittlungsparameter oder durch manuelles Auswählen der Start- und Endpunkte für die Integration. Nach der Integration eines Chromatogramms wird die **Ergebnistabelle** automatisch mit dem neuen Peak-Bereich und anderen Parametern aktualisiert.

Die Quantifizierungsmethoden umfassen die Kriterien, die zur Quantifizierung der zur Integration ausgewählten Peaks verwendet werden. Prüfer sollten die quantitativen Daten gemäß den Kriterien der Peak-Integration und Datenübernahme ihrer eigenen Standardarbeitsanweisung prüfen.

## Manuelle Integration

Nachdem ein Peak in einem bestimmten Chromatogramm manuell integriert wurde, aktivieren Sie dieses Kontrollkästchen, um anzugeben, dass das Chromatogramm manuell integriert ist. Wenn der Benutzer in diesem Status das Kontrollkästchen leert, wird die manuelle Integration des Peaks abgebrochen und der Peak automatisch entsprechend den Parametern der Methode reintegriert.



Der Unterschied zwischen diesem Kontrollkästchen und der Schaltfläche **Enable Manual Integration Mode** besteht darin, dass dieses Kontrollkästchen den Status des aktuellen Peaks widerspiegelt, während die Schaltfläche die Verhaltensweise beim Ziehen eines Chromatogramms angibt.

---

**Hinweis:** Nachdem der manuelle Integrationsmodus aktiviert wurde, bleibt er für alle Fenster aktiv, bis er abgewählt wird.

---

## Apply

Wenn der Benutzer Parameter zur Peak-Ermittlung angepasst hat, ist die Schaltfläche **Apply** aktiviert. Klicken Sie auf die Schaltfläche, um die geänderten Parameter zur Peak-Ermittlung auf das aktive Chromatogramm anzuwenden.

Außer im manuellen Integrationsmodus entspricht das Ziehen über einen bestimmten Peak in einem Chromatogramm der Anpassung des Parameters **Expected RT** und dem darauf folgenden Klicken auf **Apply**.

---

**Hinweis:** Wenn der Benutzer die Parameter zur Peak-Ermittlung ändert und dann ein anderes Chromatogramm aktiviert, ohne auf **Apply** zu klicken, werden die Parameter nicht angewendet und die Änderungen gehen verloren.

---

## Tipps für das Untersuchen von Peaks

- Sortieren Sie die **Results Table** nach einer bestimmten Spalte und untersuchen Sie ausschließlich diejenigen Chromatogramme, die oben oder unten in der Tabelle stehen.
- Das Fenster **Peak Review** ist stets mit der entsprechenden **Results Table** synchronisiert und zeigt die Chromatogramme für dieselben Peaks und in derselben Reihenfolge wie in der **Results Table** an. Alle Änderungen (wie Sortieren der Zeilen, Filtern von Probenarten oder Auswahl bestimmter Komponenten) in der **Results Table** werden automatisch in das Fenster **Peak Review** übertragen.
- Wählen Sie die Chromatogramme, die gleichzeitig angezeigt werden sollen.
- Nutzen Sie den Balken zum Scrollen an der rechten Seite des Fensters, um durch die verfügbaren Chromatogramme zu scrollen. Wenn das Fenster **Peak Review** aktiv ist, können Sie die Pfeile nach oben und unten auf der Tastatur oder das Bildlaufrad verwenden, um sich durch die Chromatogramme zu bewegen.
- Es wird jeweils nur ein bestimmtes Chromatogramm als aktiv betrachtet, was durch den fett gedruckten Titel zu erkennen ist. Sobald Sie ein bestimmtes Chromatogramm an irgendeiner Stelle anklicken, wird es aktiviert.
- Sobald ein Chromatogramm aktiviert wird, werden die Integrationsparameter auf der linken Seite des Fensters mit den Daten des nun aktiven Chromatogramms aktualisiert. Wenn ein Benutzer die Peak-Integrationsparameter verändert und **Apply** anklickt, wirkt sich dies auf das derzeit aktive Chromatogramm aus.

## Peak Review

---

- Wählen Sie in der **Results Table** durch Anklicken des grauen Bereichs auf der linken Seite der ersten Spalte eine Zeile aus, um das entsprechende Fenster **Peak Review** anzuzeigen. Wenn der Benutzer zu einem bestimmten Chromatogramm im Fenster **Peak Review** scrollt, wird die entsprechende Zeile in der **Results Table** hervorgehoben und angezeigt.
- Wenn der Benutzer in einem Chromatogramm über einen bestimmten Peak zieht, wird der Integrationsparameter **Expected RT** mit der Retentionszeit des Peaks aktualisiert. Die neue Retentionszeit wird daraufhin automatisch übernommen, der Peak wird erneut integriert und die **Results Table** wird aktualisiert.
- Wenn der Benutzer Peaks im manuellen Integrationsmodus untersucht, führt ein Ziehen über den Peak zur automatischen Integration des ausgewählten Peaks.
- Der Prozess zur Peak-Bewertung kann beschleunigt werden, indem zuvor berechnete Chromatogramme zwischengespeichert werden. Siehe [Menü „Edit“ \(Bearbeiten\) auf Seite 15](#).

## Rechtsklickmenü Peak Review

Diese Funktionen steuern die Darstellung der Integrationsparameter auf der linken Seite des Chromatogramms. Klicken Sie im Fenster **Peak Review** mit der rechten Maustaste, um auf die folgenden Funktionen zuzugreifen. Die folgenden Befehle sind verfügbar:

**Tabelle 8-1 Peak-Review-Parameter**

Aufgabe	Befehle
Darstellung des Fensters <b>Peak Review</b> ändern.	<a href="#">Dialogfeld Peak-Bewertungsoptionen: Registerkarte Erscheinungsbild auf Seite 67</a> oder <a href="#">Dialogfeld Peak Review Options: Registerkarte Zooming auf Seite 69</a> .
Titelformat für Peak Review einstellen.	<a href="#">Set Peak Review Title Format auf Seite 71</a> .
Die Parameter mit beschreibenden Bezeichnungen für die Einzelparameter anzeigen.	Die Voreinstellung <b>Show Parameters-Normal Width</b> ist standardmäßig immer eingestellt.
Parameter kopieren.	<a href="#">Parameter kopieren auf Seite 71</a> .
Parameter einfügen.	<a href="#">Parameter einfügen auf Seite 72</a> .
Den Peak auf „Not Found“ einstellen.	<a href="#">Peak auf „Nicht gefunden“ einstellen auf Seite 72</a> .
Den Peak verwenden.	<a href="#">Peak verwenden auf Seite 72</a> .
Die Quantifizierungsmethode für die Komponente aktualisieren.	<a href="#">Quantifizierungsmethode für Komponente aktualisieren auf Seite 72</a> .
Die Quantifizierungsmethode für die Gruppe aktualisieren.	<a href="#">Quantifizierungsmethode für Gruppe aktualisieren auf Seite 72</a> .
Die Integrationsparameter für eine Probe innerhalb einer Gruppe übernehmen.	<a href="#">Integrationsparameter auf Probe innerhalb der Gruppe übertragen auf Seite 73</a> .

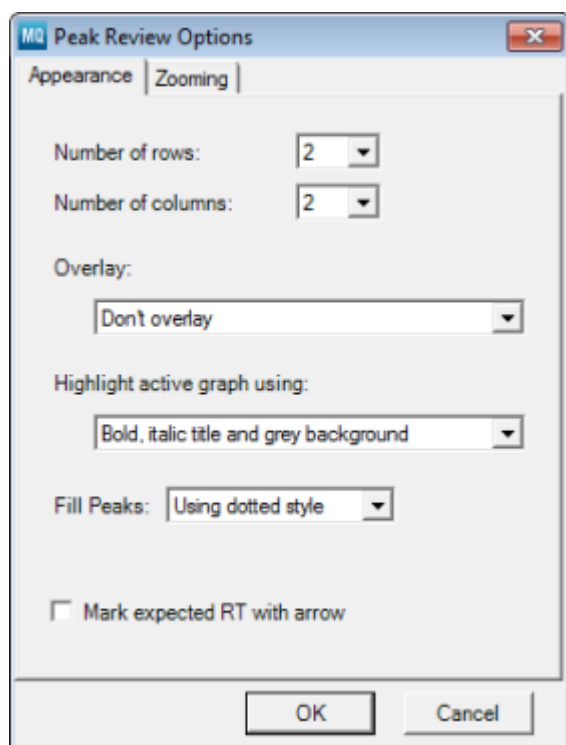
Tabelle 8-1 Peak-Review-Parameter (Fortsetzung)

Aufgabe	Befehle
Den Peak zur ursprünglichen Methode zurücksetzen.	<a href="#">Revert Peak to Original Method auf Seite 73.</a>
Alle Peaks einer Komponente zurücksetzen.	<a href="#">Revert All Peaks for Component (Alle Peaks für Komponente zurücksetzen) auf Seite 73.</a>

## Dialogfeld Peak-Bewertungsoptionen: Registerkarte Erscheinungsbild

Klicken Sie mit der rechten Maustaste im Fenster **Peak Review** um Optionen, die das Erscheinungsbild des Fensters **Peak Review** beeinflussen, einzustellen. Es wird empfohlen, nicht mehr als vier Zeilen und vier Spalten einzustellen.

Abbildung 8-2 Dialogfeld Peak-Bewertungsoptionen: Registerkarte Erscheinungsbild



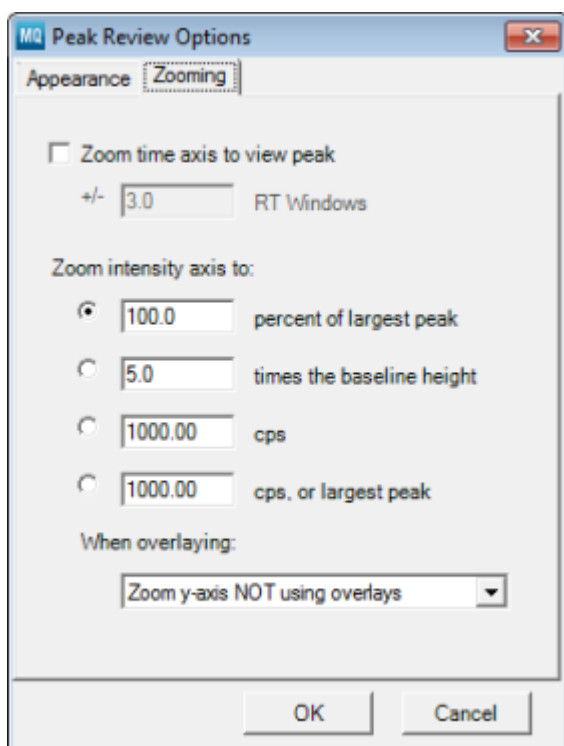
Label	Beschreibung
Number of rows und Number of columns	Kontrolliert die Anzahl von Chromatogrammen, die gleichzeitig sichtbar sind. Sofern Chromatogramme nicht bereits zwischengespeichert wurden, dauert es länger, um zwischen verschiedenen Seiten zu blättern, wenn viele Chromatogramme angezeigt werden. Siehe <a href="#">Menü „Edit“ (Bearbeiten) auf Seite 15</a> .
Overlay	<p>Bestimmt, ob andere Chromatogramme in jedem der Unter-Teilfenster das Hauptchromatogramm überlagern sollen.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Don't Overlay (Nicht überlagern):</b> Verhindert das Überlagern von anderen Chromatogrammen.</li> <li>• <b>All components for group (Alle Komponenten der Gruppe):</b> Überlagert alle Chromatogramme für Komponenten von derselben Gruppe als Hauptkomponente (für die aktuelle Probe).</li> <li>• <b>Analytes and IS's separately for group (Analyten und IS getrennt für Gruppe):</b> Ähnlich wie die vorherige Option, außer dass, statt alle Komponenten für dieselbe Gruppe zu überlagern, Analyten und interne Standards getrennt gehalten werden.</li> <li>• <b>Internal Standard with Analyte (Interner Standard mit Analyt):</b> Überlagert bei Analyten den internen Standard, der von dem Analyt verwendet wird (Chromatogramme des internen Standards haben keine anderen Überlagerungen).</li> <li>• <b>Qualifier and Quantifier with Ion Ratio Lines (Qualifikator und Quantifikator mit Ionenverhältnis-Linien):</b> Zeigt die Ionenverhältnis-Linien an. Wählen Sie diese Option, um die Ionenverhältnis-Annahme in der <b>Ergebnistabelle</b> anzuzeigen. Benutzer können die Ionenverhältnis-Annahme anzeigen, wenn Gruppen in der Quantifizierungsmethode definiert sind. Die <b>Ion Ratio Lines (Ionenverhältnis-Linien)</b> sind jedoch nur ein Zeichen für die Annahme und nicht das Endergebnis. Die Linien werden im Chromatogramm als Peak-Höhe dargestellt, aber die Linien werden basierend auf dem Peak-Bereich oder der Peak-Höhe berechnet, abhängig von den in der Quantifizierungsmethode definierten Einstellungen. Wenn eine Diskrepanz zwischen Höhe und Bereich vorliegt, muss der Benutzer den <b>Ionenverhältnis-Ausreißer</b> in der <b>Ergebnistabelle</b> bestätigen.</li> </ul>
Highlight active graph using:	Gibt an, wie das derzeit aktive Chromatogramm angezeigt werden soll. Stellen Sie dies ein, um sowohl den Fettdruck-Kursivtitel als auch den grauen Hintergrund zu verwenden.

Label	Beschreibung
Fill peaks	<p>Gibt an, wie der integrierte Bereich für die Peaks angezeigt werden soll. Zur Auswahl stehen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Verwenden von gestrichelten Linien, wie in den Screen-Aufnahmen in diesem Dokument verwendet.</li> <li>• Verwenden von durchgehenden Linien.</li> <li>• Verwenden von nicht gefüllt. In allen Fällen wird die Basislinie für den Peak ebenfalls gezeichnet (in rot).</li> </ul> <p>Bei Verwendung der dritten Option wird nur die Basislinie gezeichnet und der Peak ist nicht gefüllt.</p>
Mark expected RT with arrow	<p>Gibt die <b>Expected Retention Time (erwartete Retentionszeit)</b> mit einem blauen, unter der Zeitachse eingezeichneten Pfeil an. Dies kann hilfreich sein, um zu bestimmen, ob der integrierte Peak sich in der Nähe der erwarteten Retentionszeit befindet.</p>

## Dialogfeld Peak Review Options: Registerkarte Zooming

Klicken Sie mit der rechten Maustaste im Fenster **Peak Review** um Optionen, die das Erscheinungsbild des Fensters **Peak Review** beeinflussen, einzustellen. Die Funktionen **Zoom intensity axis to** werden verwendet, um die Y-Achse der Chromatogramme automatisch einzustellen.

Abbildung 8-3 Dialogfeld Peak Review Options: Registerkarte Zooming



## Peak Review

Label	Beschreibung
Zoom time axis to view peak	Bei Auswahl wird die x-Achse der Chromatogramme automatisch eingestellt, sodass nur ein Teil des gesamten Durchlaufs sichtbar ist. Dies ist bei langen LC-Durchläufen hilfreich, sodass der Bereich von Interesse deutlicher zu sehen ist. Die Fensterbreite wird als Vielfaches des RT-Fenster-Integrationsparameters ausgedrückt. Die Gesamtbreite des gezoomten Bereichs entspricht dem Doppelten des Vielfachen des <b>RT-Fensters</b> .
Zoom intensity axis to percent of largest peak	Wird verwendet, um die Y-Achse der Chromatogramme automatisch einzustellen. Skaliert die Y-Achse auf den angegebenen Prozentwert des größten Peaks innerhalb des sichtbaren X-Bereichs des Chromatogramms. Dieser wird kleiner als die gesamte LC-Durchlauflänge sein, wenn die Funktion Zoom time axis to view peak (Zeitachse vergrößern, um Peak anzuzeigen) verwendet wird.
Zoom intensity axis to times the baseline height	Wird verwendet, um die Y-Achse der Chromatogramme automatisch einzustellen. Wird verwendet, um auf den Basislinien-Bereich selbst zu fokussieren.
Zoom intensity axis to cps	Skaliert die Y-Achse direkt auf den festgelegten Wert..
Zoom intensity axis to cps, or largest peak	Skaliert die Y-Achse direkt auf den kleineren festgelegten Wert oder den größten Peak.
When overlaying Zoom y-axis NOT using overlays	Bewahrt die Einstellungen von Zoom intensity axis to the section nur unter Verwendung des Hauptdatensatzes. Diese Einstellung kann dazu führen, dass die Überlagerungen nur teilweise sichtbar sind, wenn sie intensiver als der Hauptdatensatz sind.
When overlaying Zoom y-axis using overlays	Verwendet den Hauptdatensatz und alle Überlagerungen und verwendet den größten Gesamt-Y-Wert. Bei dieser Funktion sind die Überlagerungen immer sichtbar.
When overlaying Use a percentage y-axis	Skaliert den Hauptdatensatz und die Überlagerungen getrennt unter Verwendung einer Prozentskala. Dies führt dazu, dass jede Linie die gesamte verfügbare Höhe verwendet. Allerdings können die relativen Peak-Höhen nicht direkt visuell miteinander verglichen werden.

**Tipp!** Durch einen Doppelklick innerhalb der Y-Achse wird die Achse auf den intensivsten Peak innerhalb des gesamten Datensatzes skaliert.

Bei Auswahl wird das Chromatogramm für den Peak, der aktuell überprüft wird, mit einer durchgehenden blauen Linie gezeichnet und sein integrierter Peak-Bereich wird angezeigt. Die Chromatogramme (nicht der integrierte Peak-Bereich) für die anderen Komponenten (für dieselbe Probe) werden mit einer gestrichelten Linie überlagert.

Wenn das Diagramm Überlagerungen in dieser Weise anzeigt, doppelklicken Sie irgendwo im Titelbereich, um zwischen der Anzeige der Titel für alle Chromatogramme oder nur für das aktive Chromatogramm hin- und herzuschalten.

---

**Tipp!** Durch einen Doppelklick innerhalb der X-Achse wird das Diagramm auf seine Startansicht zurückgesetzt, in der alle Daten sichtbar sind. Vergrößerung ist durch Ziehen innerhalb der Achse, um einen Zeitbereich auszuwählen, möglich.

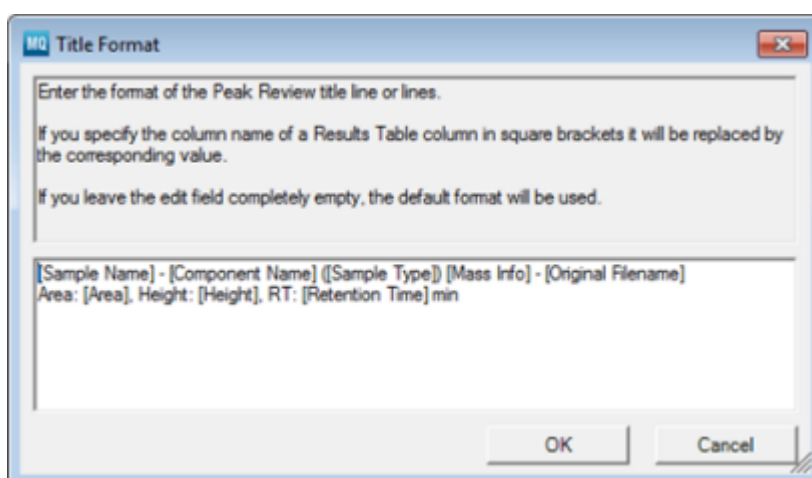
---

## Set Peak Review Title Format

Verwenden Sie diesen Dialog, um die im Titel des Diagramms jedes Chromatogramms angezeigten Informationen individuell anzupassen. Wenn der Benutzer in der **Results Table** einen Spaltennamen in eckigen Klammern eingibt, wird dieser durch den Feldwert der derzeitigen Probe und Komponente ersetzt. Es kann auch weiterer Text eingegeben werden, welcher unverändert bleibt. Es wird empfohlen, dass der Probenname [Sample Name] in den Titel der Peak-Bewertung aufgenommen wird.

- Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Fenster **Peak Review** und danach auf **Set Peak Review Title Format**.

Abbildung 8-4 Dialogfeld Title Format



## Parameter kopieren

Klicken Sie im Fenster **Peak Review (Peak-Bewertung)**, um auf diesen Befehl zuzugreifen. Verwenden Sie diesen Befehl in Verbindung mit der Funktion **Paste Parameters (Parameter einfügen)**, um die Peak-Finder-Parameter von einem Chromatogramm in ein anderes zu kopieren. Dieser Befehl kann verwendet werden, wenn für verschiedene Chromatogramme dieselben Parametereinstellungen vorgenommen werden müssen.

1. Klicken Sie mit der rechten Maustaste in einer Grafik mit einem geöffneten und aktiven Chromatogramm und klicken Sie danach auf **Copy Parameters**.
2. Verwenden Sie den Befehl **Update Quantitation Method for Component (Quantifizierungsmethode für Komponente aktualisieren)**, um die Änderungen auf alle Chromatogramme der Komponente anzuwenden.

## Parameter einfügen

1. Klicken Sie mit der rechten Maustaste in einer Grafik mit einem geöffneten und aktiven Chromatogramm und klicken Sie danach auf **Copy Parameters**.
2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste in ein anderes Chromatogramm und dann auf **Paste Parameters (Parameter einfügen)**.

Die zuvor kopierten Parameter werden in das neue Chromatogramm übernommen.

## Peak auf „Nicht gefunden“ einstellen

- Klicken Sie in einem Diagramm mit einem aktivem Chromatogramm mit der rechten Maustaste und klicken Sie danach auf **Set Peak to „Not Found“ (Peak auf „Nicht gefunden“ einstellen)**, um die Integration aus dem ausgewählten Chromatogramm zu entfernen.

## Peak verwenden

- Klicken Sie mit der rechten Maustaste in einer Grafik mit einem geöffneten und aktiven Chromatogramm und klicken Sie dann auf **Use Peak (Peak verwenden)**, um den aktiven Peak in die Kalibrierkurve ein- oder auszuschließen.

## Quantifizierungsmethode für Komponente aktualisieren

Wählen Sie diese Funktion nach der Anpassung der Peak-Finder-Parameter für ein bestimmtes Chromatogramm, um die Kopie der Quantifizierungsmethode, die mit der Ergebnistabelle gespeichert wurde, für die Verwendung dieser Parameter für die Komponente anzupassen.

- Klicken Sie nach der Anpassung der Peak-Finder-Parameter mit der rechten Maustaste und klicken Sie danach auf **Update Quantitation Method for Component (Quantifizierungsmethode für Komponente aktualisieren)**.

Für die entsprechende Komponente werden alle Proben automatisch integriert, um die neuen Parameter zu verwenden, und die **Peak Review (Peak-Bewertung)** und die **Ergebnistabelle** werden aktualisiert. Falls Peaks manuell integriert worden sind, wird der Benutzer gefragt, ob die Reintegration für alle oder nur für die nicht manuell integrierten Peaks übernommen werden soll.

## Quantifizierungsmethode für Gruppe aktualisieren

Dieser Befehl ähnelt dem Befehl **Update Quantitation Method for Component (Quantifizierungsmethode für Komponente aktualisieren)**, die Integration wird jedoch von allen Komponenten übernommen, die zur selben Gruppe wie die Komponente des derzeit aktiven Chromatogramms gehören. Wenn der Benutzer die verschiedenen Komponenten Gruppen zugeordnet hat und für die einer Gruppe zugeordneten Komponenten dieselbe Retentionszeit angenommen werden kann, ist diese Funktion hilfreich, da der Benutzer hiermit die Parameter einschließlich der Retentionszeit für alle Komponenten der



Gruppe gleichzeitig zurücksetzen kann. Diese Funktion ist nicht hilfreich, wenn die Komponenten der Gruppen nicht dieselbe Retentionszeit haben.

- Passen Sie die Parameter für Peak Finding (Peak-Ermittlung) an, klicken Sie auf die rechte Maustaste und klicken Sie dann auf **Update Quantitation Method for Component** (Quantifizierungsmethode für Gruppe aktualisieren).

## Integrationsparameter auf Probe innerhalb der Gruppe übertragen

Verwenden Sie diese Funktion nach der Anpassung der Peak-Finder-Parameter für ein bestimmtes Chromatogramm, um die ursprünglichen Parameter aus der Kopie der Quantifizierungsmethode, die mit der Ergebnistabelle im Chromatogramm gespeichert wurde, zu übernehmen.

- Klicken Sie nach der Anpassung der Peak-Finder-Parameter für ein bestimmtes Chromatogramm mit der rechten Maustaste und klicken Sie danach auf **Apply Integration Parameters to Sample Within Group**.

## Revert Peak to Original Method

Verwenden Sie diese Funktion nach der Anpassung der Peak-Finder-Parameter für ein bestimmtes Chromatogramm, um die ursprünglichen Parameter aus der Kopie der Quantifizierungsmethode, die mit der **Results Table** im Chromatogramm gespeichert wurde, zu übernehmen.

- Klicken Sie mit der rechten Maustaste und klicken Sie dann auf **Revert Peak to Original Method**.

## Revert All Peaks for Component (Alle Peaks für Komponente zurücksetzen)

Verwenden Sie diese Funktion nach der Anpassung der Peak-Finder-Parameter einiger Chromatogramme, um die ursprünglichen Parameter aus der Kopie der Quantifizierungsmethode, die mit der **Ergebnistabelle** gespeichert wurde, in alle Chromatogramme für dieselbe Komponente wie das aktive Chromatogramm zu übernehmen. Falls Peaks manuell integriert worden sind, wird der Benutzer gefragt, ob die Reintegration für alle oder nur für die nicht manuell integrierten Peaks übernommen werden soll.

- Klicken Sie mit der rechten Maustaste und klicken Sie dann auf **Revert All Peaks for Component** (Alle Peaks für Komponente zurücksetzen).

# Nebeneinander liegende Probenprüfung

9

Verwenden Sie die Funktion **Side-by-side Sample Review**, um nach bestimmten Zielkomponenten zu suchen. Benutzer können bis zu sechs Proben auswählen, um die Peak-Ergebnisse Proben-übergreifend zu vergleichen. Prüfer sollten die quantitativen Daten gemäß den Kriterien der Peak-Integration und Datenübernahme ihrer eigenen Standardarbeitsanweisung (SOP) prüfen.

Wenn eine **Results Table** aktiv ist, klicken Sie auf das Symbol **Side by Side Sample Review** in der Werkzeugleiste der **Results Table**, um das Fenster **Side by Side Sample Review** zu öffnen.

Abbildung 9-1 Fenster „Side by Side Sample Review“



Die Quantifizierungsmethoden umfassen die Kriterien, die zur Quantifizierung der zur Integration ausgewählten Peaks verwendet werden. Prüfer sollten die quantitativen Daten gemäß den Kriterien der Peak-Integration und Datenübernahme ihrer eigenen Standardarbeitsanweisung prüfen.

## Bewertung nebeneinander liegender Proben

1. Öffnen Sie eine Ergebnistabelle.
2. Klicken Sie auf das Symbol **Side by Side Sample Review (Bewertung nebeneinander liegender Proben)**.
3. Wählen Sie eine Probe aus der Liste im Fenster **Side by Side Sample Review (Bewertung nebeneinander liegender Proben)**.

Die Integrationsparameter werden angezeigt.

---

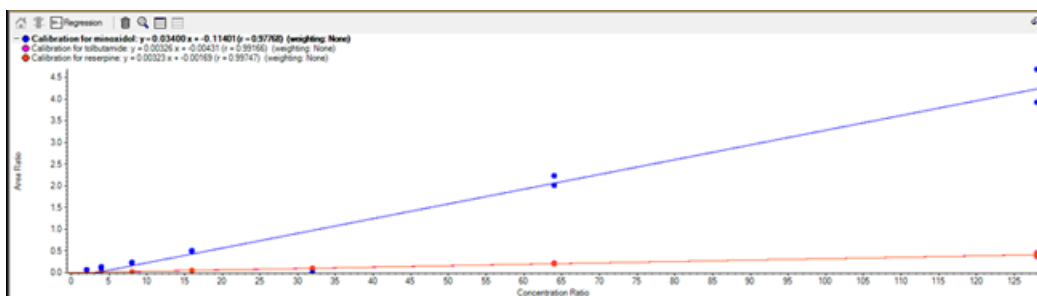
**Tipp!** Klicken Sie mit der rechten Maustaste im Fenster **Side by Side Sample Review (Bewertung nebeneinander liegender Proben)** und klicken Sie dann auf **Options (Optionen)**, um die Anzahl der Spalten in der nebeneinander liegenden Bewertung zu ändern.

---

4. Wählen Sie eine andere Probe aus der Liste aus.

Verwenden Sie das Teilfenster **Calibration**, um eine Sichtprüfung der Regression für jeden Analyten durchzuführen, wenn **Standard**proben einer bekannten Konzentration verwendet werden. Dieser Bereich ist nicht anwendbar, wenn der Benutzer eine relative Quantifizierung durchführt und keine **Standard**proben hat. Wenn eine **Results Table** aktiv ist, klicken Sie auf **Show Calibration** in der Funktionsleiste.

Abbildung 10-1 Calibration - Teilfenster

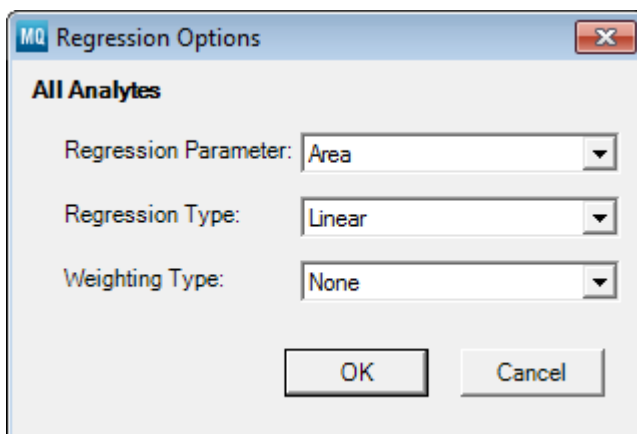


Der Benutzer kann nicht nur die Regression prüfen, sondern auch **Standard**proben ausschließen, sodass diese nicht für die Regression verwendet werden. Nachdem die Anpassungen erfolgt sind, wird automatisch eine neue Regression berechnet und Parameter wie die **Calculated Concentration** und **Accuracy** werden für alle Proben des Analyten neu berechnet. Siehe [Regressionsgleichungen auf Seite 132](#).

## Dialog „Regression Options“

Wenn viele Analyten vorliegen, ist es einfacher, Änderungen mit dem Dialog **Regression Options** (**Regressionsoptionen**) anzuwenden, statt die Regressionsparameter einzeln zu ändern.

Abbildung 10-2 Dialog „Regression Options“



## Tipps für die Kalibrierung

- Bei Analyten ohne einen verbundenen internen Standard ist die Y-Achse ein(e) **Peak-Area** oder **-Height**, wie in der Quantifizierungsmethode ausgewählt. Bei Analyten mit einem internen Standard ist die Y-Achse das **Peak-Area-** oder **-Heightverhältnis** (des Analyten zum internen Standard).
- Bei Analyten ohne einen verbundenen internen Standard ist die X-Achse die **Actual Concentration**. Ansonsten ist sie das Verhältnis der **Actual Concentration** (des Analyten zum internen Standard).
- Wenn mehr als ein Analyt aus der Liste **Components & Groups** ausgewählt wurde, werden die Kalibrierungen aller Komponenten überlagert. Ansonsten wird die Kalibrierung für den ausgewählten Analyt angezeigt.
- Der Titelbereich zeigt stets die Bezeichnung des aktiven Analyten und die damit verbundene Regressionsgleichung mit dem Korrelationskoeffizienten an. Wenn die Regression nicht berechnet werden konnte, wenn zum Beispiel keine **Standard**proben vorliegen, weist der Titel darauf hin. Wenn Kalibrierungen für mehrere Analyten überlagert werden, können Sie durch Doppelklicken innerhalb des Titelbereichs zwischen der Anzeige der Informationen für alle Analyten und der Anzeige ausschließlich der aktiven Linie umschalten. Wenn viele Analyten überlagert werden, ist es eventuell unmöglich, alle Informationen anzuzeigen. Führen Sie in diesem Fall einen Bildlauf im Titel durch, indem Sie innerhalb des Titels ziehen.
- Die Datenpunkte für die verwendeten **Standard**proben werden immer so grafisch dargestellt, wie in der Kalibrierungsgleichung, die diese Punkte verwendet. Der Benutzer kann optional Datenpunkte für ausgeschlossene **Standard**proben und für **Quality Control**-Proben anzeigen.
- Wenn der Benutzer auf einen Datenpunkt klickt, wird die entsprechende Zeile der **Results Table** automatisch ausgewählt und in den Sichtbereich verschoben, vorausgesetzt, dass die Zeile irgendwo in der Tabelle sichtbar ist und nicht ausgeblendet wurde.

## Rechtsklick-Menü „Calibration“ (Kalibrierung)

Klicken Sie im Teilfenster **Calibration (Kalibrierung)** mit der rechten Maustaste, um auf ein Kontextmenü zuzugreifen. Die folgenden Befehle sind verfügbar:

Tabelle 10-1 Optionen des Rechtsklick-Menüs des Teilfensters „Calibration“ (Kalibrierung)

Menüoption	Beschreibung
Exclude (oder Include)	Wenn der Benutzer mit der rechten Maustaste auf einen Datenpunkt für den Standard klickt, der nicht ausgeschlossen wurde, wird diese Option verwendet, um die Probe aus der Regressionsberechnung auszuschließen (für die Probe und den Analyten des angeklickten Datenpunkts). Wenn die Probe bereits ausgeschlossen wurde, lautet der Text des Menüelements <b>Include (Einschließen)</b> und wenn es ausgewählt wird, wird dieser Punkt eingeschlossen. Nach der Auswahl wird die Regression berechnet und die <b>Ergebnistabelle</b> aktualisiert. Diese Funktion entspricht dem Auswählen oder Abwählen des Kontrollkästchens <b>Used (Verwendet)</b> in der Ergebnistabelle für die entsprechende Zeile.
Exclude – All Analytes (or Include – All Analytes)	Schließt alle Analyten ein oder aus, nicht nur den Analyten, der einem ausgewählten Datenpunkt entspricht.
Show Excluded Standards	Wenn diese Option ausgewählt ist, werden Datenpunkte für ausgeschlossene Standards (ggf.) mit offenen Kreisen dargestellt. Wenn diese Option nicht ausgewählt ist, werden ausgeschlossene Standards nicht dargestellt.
Show QCs	Wenn diese Option ausgewählt ist, werden Datenpunkte für <b>Quality Control (Qualitätskontrolle)</b> (QC) mit einem offenen Diamanten dargestellt. Wenn diese Option nicht ausgewählt ist, werden die <b>QC</b> -Proben nicht dargestellt.
Show Legend	<p>Wenn diese Option ausgewählt ist, wird eine Legende rechts vom Diagramm gezeichnet, die die Punktsymbole für die verschiedenen Probenarten darstellt (geschlossene Kreise für <b>Standard</b>proben, offene Kreise für ausgeschlossene Standards und offene Diamanten für <b>Qualitätskontroll</b>-Proben).</p> <p><b>Hinweis:</b> Wenn der Benutzer bestimmte Probenarten nicht anzeigt, wenn zum Beispiel die Option <b>Show QCs (QCs anzeigen)</b> nicht ausgewählt ist, liegt der Eintrag für diese Probenart nicht vor. Wenn weder <b>QC</b>-Proben noch ausgeschlossene Standards angezeigt werden, ist diese Option nicht verfügbar und es wird keine Legende gezeichnet.</p>

**Tabelle 10-1 Optionen des Rechtsklick-Menüs des Teilfensters „Calibration“ (Kalibrierung)  
(Fortsetzung)**

Menüoption	Beschreibung
Use Percent Y-Axis	<p>Wenn diese Option nicht ausgewählt ist, erscheint die Y-Achse der Darstellung in Einheiten des absoluten Peak-<b>Bereichs</b> oder der absoluten Peak-<b>Höhe</b> (oder des Peak-Verhältnisses für <b>Bereich</b> oder <b>Höhe</b>, wenn ein interner Standard verwendet wird). Wenn diese Option ausgewählt ist, wird die Y-Achse als Prozentwert des Datenpunkts mit dem höchsten Y-Wert für jeden Analyten unabhängig ausgedrückt.</p> <p>Die Verwendung einer Achse in Prozent ist hilfreich, wenn mehr als ein Analyt überlagert wird und ihre absoluten Reaktionen deutlich unterschiedlich sind, da dadurch jede Kurve so skaliert werden kann, dass der gesamte, vertikal verfügbare Bereich ausgenutzt wird. Andernfalls liegen Analyten mit geringer Reaktion nahe der X-Achse und die Darstellung muss gezoomt werden, um sie detailliert anzuzeigen.</p>
Log-Log Plot	<p>Wird verwendet, um zwischen der Darstellung von <b>Area (Bereich)</b> und <b>Concentration (Konzentration)</b> bzw. <b>Log(Area) (Protokoll (Bereich))</b> und <b>Log(Concentration) (Protokoll (Konzentration))</b> zu wechseln.</p>

Verwenden Sie die **Statistics Table**, um Informationen zur Reproduzierbarkeit einer Analyse anzuzeigen. Jede Zeile enthält eine Zusammenfassung von Informationen, wie z. B. den Mittelwert und die Standardabweichung für eine Gruppe zugehöriger Peaks desselben Analyts, für die im Idealfall dieselbe Reaktion erwartet wird.

Abbildung 11-1 Teilfenster „Statistics“

Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	miconidol	2.00	2 of 2	5.402e0	3.884e-2	0.72	270.09	5.429e0	5.374e0
2	miconidol	4.00	2 of 2	6.791e0	4.993e-1	7.35	169.76	7.144e0	6.437e0
3	miconidol	8.00	2 of 2	1.026e1	3.500e-1	3.41	128.21	1.001e1	1.050e1
4	miconidol	16.00	2 of 2	1.791e1	3.199e-1	1.79	111.94	1.814e1	1.760e1
5	miconidol	32.00	1 of 2	3.996e0	N/A	N/A	10.49	N/A	3.996e0
6	miconidol	64.00	2 of 2	6.980e1	4.679e0	7.11	102.82	6.911e1	6.290e1
7	miconidol	128.00	2 of 2	1.302e2	1.583e1	12.16	101.69	1.414e2	1.190e2
8	tolbutamide	2.00	2 of 2	3.034e0	9.353e-2	3.08	151.69	3.100e0	2.960e0
9	tolbutamide	4.00	2 of 2	4.616e0	2.274e-1	4.93	115.39	4.776e0	4.405e0
10	tolbutamide	8.00	2 of 2	7.819e0	4.579e-1	5.86	97.74	7.496e0	8.143e0
11	tolbutamide	16.00	2 of 2	1.570e1	2.324e-1	1.48	98.10	1.553e1	1.586e1
12	tolbutamide	32.00	2 of 2	2.986e1	1.189e0	3.98	93.32	2.902e1	3.070e1
13	tolbutamide	64.00	2 of 2	6.485e1	3.313e0	5.11	101.33	6.281e1	6.719e1
14	tolbutamide	128.00	2 of 2	1.281e2	2.000e1	15.61	100.10	1.432e2	1.140e2
15	nesequine	2.00	2 of 2	2.663e0	1.912e-1	7.16	133.44	2.804e0	2.534e0
16	nesequine	4.00	2 of 2	4.382e0	1.633e-1	3.75	108.80	4.237e0	4.467e0
17	nesequine	8.00	2 of 2	7.491e0	6.761e-1	9.03	93.64	7.013e0	7.970e0
18	nesequine	16.00	2 of 2	1.535e1	1.693e-1	1.10	96.03	1.525e1	1.540e1

Label	Beschreibung
Row	Die Zeilennummer. Klicken Sie auf einen der anderen Spaltentitel, um die Tabelle zu sortieren. Versetzen Sie die Tabelle wieder in die ursprüngliche Ansicht, indem Sie auf diesen Titel klicken.
Component Name	Der Name des Analyten.
Actual Concentration (or Sample Name)	Wenn nach Ist-Konzentration gruppiert wird, zeigt diese Spalte die Konzentration an. Wenn nach Probenamen gruppiert wird, ändert sich der Titel der Spalte und der Probenname wird angezeigt.
Num. Values	Zeigt m von n an, wobei n die Gesamtanzahl von Proben in der Ist-Konzentration (oder mit demselben Probenamen) und m die Anzahl dieser Proben, die für die Berechnungen verwendet wurden, ist. Proben werden nicht verwendet, wenn der entsprechende Peak nicht integriert werden konnte oder wenn das Feld <b>Used</b> manuell gelöscht wurde.
Mean	Der Mittelwert der verwendeten Proben.
Standard Deviation	Die Standardabweichung der verwendeten Proben.
Percent CV	Der Variationskoeffizient, ausgedrückt als Prozent: $100 \cdot (\text{Standardabweichung}) / \text{Mittelwert}$ .



Label	Beschreibung
Accuracy	Der Mittelwert geteilt durch die Ist-Konzentration, ausgedrückt als Prozentsatz: $100 * \text{Mittelwert} / (\text{Ist-Konzentration})$ . Dieses Feld wird nur bei Gruppierung nach Ist-Konzentration, nicht bei Gruppierung nach Probenname angezeigt.
Values	Die einzelnen Werte für die Proben erscheinen in zusätzlichen Spalten. Falls die entsprechende Probe nicht integriert werden konnte, ist der Wert N/A. Falls das Feld <b>Used</b> manuell gelöscht worden ist, wird der Wert als durchgestrichen angezeigt.

## Tipps zur Statistiktable

- Die **Statistics Table (Statistiktable)** ist mit der Liste **Components & Groups (Komponenten und Gruppen)** verknüpft, um die Zeilen entsprechend den ausgewählten Analyten anzuzeigen. Wenn die Elemente **All Components (Alle Komponenten)** oder **All Analytes (Alle Analyten)** ausgewählt werden, liegen Einträge für alle Analyten vor. Wenn Sie einen einzelnen Analyten auswählen, liegen ausschließlich Einträge für diesen Analyten vor. Wenn ein einzelner interner Standard aus der Liste ausgewählt wird, ist die **Statistics Table (Statistiktable)** leer. Siehe [Liste Components & Groups auf Seite 39](#).
- Wenn eine **Value (Wert)**-Zelle angeklickt wird, wird die entsprechende Zeile der **Ergebnistabelle** für den Analyten und die Probe ausgewählt, falls die Zeile aktuell in der **Statistics Table (Statistiktable)** sichtbar ist. Es werden ausschließlich Proben **unbekannter** Art in der **Ergebnistabelle** angezeigt. Falls in der **Statistics Table (Statistiktable)** Informationen für **Standard**proben angezeigt werden, sind die entsprechenden Zeilen in der **Ergebnistabelle** nicht sichtbar. Wenn das Fenster **Peak Review (Peak-Bewertung)** sichtbar ist, ist es mit der **Ergebnistabelle** verknüpft und wird beim Anklicken der Zelle aktualisiert.
- Klicken Sie auf die Kopfzeile einer Spalte, um die **Statistics Table (Statistiktable)** zu sortieren.
- Der Benutzer kann die gesamte **Statistics Table (Statistiktable)** oder nur bestimmte Zeilen kopieren.
  - Um die gesamte Tabelle zu kopieren, klicken Sie auf **Edit > Copy (Bearbeiten > Kopieren)**.
  - Um nur bestimmte Zeilen zu kopieren, wählen Sie die gewünschten Zeilen manuell aus und klicken Sie danach auf **Edit > Copy (Bearbeiten > Kopieren)**.
- Wenn die Breite der Spalten angepasst wird, werden diese Breiten wiederhergestellt, sobald die **Statistiktable** erneut angezeigt wird.
- Das Format und die Genauigkeit entsprechen denen der **Ergebnistabelle**.
- Die Option **Group by Concentration for Standards and QCs (Gruppe nach Konzentration für Standards und QCs)** basiert auf der **angezeigten Ist-Konzentration** und nicht auf der in der **Ergebnistabelle** gespeicherten **Ist-Konzentration**. Falls die Std 1 Konzentration 0,001, die Std 2 Konzentration 0,005 beträgt und für das Anzeigeformat 0 eingestellt ist, werden Std 1 und Std 2 zusammen gruppiert, da sie beide als 0 behandelt werden. Um sie getrennt zu gruppieren, stellen Sie die Genauigkeit der Option **Analyte Concentration (Analyt-Konzentration)** im Dialog **Column Settings (Spalteneinstellungen)** auf 0,000 ein. Falls Std 1 den Wert 0,500 und Std 2 den Wert 0,499 hat, stellen Sie die Genauigkeit auf 0,00 ein, um sie zusammen zu gruppieren.

### Rechtsklick-Menü „Statistics Table“

Durch Rechtsklick in der **Statistics Table** können Sie auf den Befehl **Use Peak** zugreifen. Verwenden Sie diesen Befehl, um das Feld **Used** für die Probe und den Analyten entsprechend der ausgewählten Zelle in einer der Spalten **Value** einzustellen. Bevor Sie mit der rechten Maustaste klicken, um das Menü zu erhalten, klicken Sie auf die entsprechende Zelle in einer der Spalten **Value**, um diese auszuwählen.

Verwenden Sie Metric Plots, um die Werte in einer Spalte der Ergebnistabelle in Abhängigkeit von der Zeilennummer oder einer anderen Spalte abzubilden. Diese Kurven sind bei der Sichtprüfung der Daten sehr hilfreich, insbesondere wenn die Benutzer nicht jedes Chromatogramm manuell im Fenster Peak Review prüfen möchten.

## Eine metrische Kurve erzeugen

1. Wählen Sie eine oder zwei Spalten in der **Ergebnistabelle** aus.
2. Klicken Sie auf **Show Metric Plot (Metrische Kurve anzeigen)**.

Wenn eine Spalte ausgewählt wird, zeigt die Kurve die Werte der Spalte in Abhängigkeit von der Zeilennummer in der Tabelle an. Wenn zwei Spalten ausgewählt werden, dann werden die Werte beider Spalten vergleichend abgebildet. Die zuerst ausgewählte Spalte enthält die X-Werte und die zweite Spalte die Y-Werte.

## Metrik-Einstellungen für grafische Darstellung speichern

1. Öffnen Sie eine metrische grafische Darstellung durch Auswahl einer Spalte, und klicken Sie dann auf **Show Metric Plot (Metrische Kurve anzeigen)**.
2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Darstellung und danach auf **Save Setting (Einstellung speichern)**.

Hierdurch ist es möglich, häufig verwendete **metrische Kurven** schnell zu erzeugen, ohne jedes Mal die entsprechende Spalte auswählen zu müssen.

## Tipps zu metrischen Kurven

- Wenn der Benutzer mit der linken Maustaste auf einen Datenpunkt klickt, wird die entsprechende Zeile der Ergebnistabelle automatisch ausgewählt und angezeigt. Falls das Fenster Peak Review geöffnet ist, wird dieses ebenfalls mit dem entsprechenden Chromatogramm aktualisiert. Dadurch wird die Durchführung eines Peak Reviews für Ausreißer erleichtert.
- Wenn mehr als eine Komponente aus der Liste Components & Groups ausgewählt wird, werden die Spuren aller Komponenten überlagert. Andernfalls wird die Spur der einen ausgewählten Komponente angezeigt.

- Der Titelbereich zeigt stets die Bezeichnung der aktiven Spur an. Wenn Kurven für mehrere Komponenten überlagert werden, können Sie durch Doppelklicken innerhalb des Titelbereichs zwischen der Anzeige der Informationen für alle Kurven oder der Anzeige ausschließlich der aktiven Kurve umschalten. Aktivieren Sie eine bestimmte Kurve, indem Sie auf den Farbpunkt links neben dem entsprechenden Titel klicken.
- Speichern Sie die Einstellungen für die metrische Kurve zur späteren Verwendung. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die metrische Kurve und danach auf **Save Settings As**.

## Rechtsklick-Menü „Metric Plot“ (Metrische Kurve)

Klicken Sie mit der rechten Maustaste in der metrischen Kurve, um auf ein Kontextmenü zuzugreifen. Die folgenden Befehle sind verfügbar:

**Tabelle 12-1 Rechtsklickmenüoptionen für metrische Kurven**

Menüoption	Beschreibung
Regression	Zeigt eine Regressionsgerade auf der metrischen Kurve an. <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Regression Type (Regressionsart)</b></li><li>• <b>Weighting Type (Gewichtungsart)</b></li><li>• <b>Include standard deviation lines and Multiplier (Linien für Standardabweichungen und Multipliktor aufnehmen)</b></li></ul> Siehe <a href="#">Dialog „Regression“</a> auf Seite 85.
Display "N/A" as 0.0	Wenn diese Option ausgewählt ist, werden nicht numerische Werte mittels eines Y-Werts von Null dargestellt. Andernfalls sind derartige Punkte nicht in der Grafik enthalten. Zum Beispiel wird die <b>Retention Time</b> für Peaks, die nicht integriert werden konnten, als N/A angegeben. Bei dieser Funktion ist ein Punkt für solche Peaks sichtbar, damit der Benutzer sich diese potenziell problematischen Proben ansehen und diese dann durch Klicken auf den Punkt mit dem Fenster <b>Peak Review</b> verbinden kann.
Show Legend	Ändert die Legende mit den Erklärungen der Punktsymbole, die für die verschiedenen Probenarten verwendet werden.
Label Active Series (using sample names)	Bestimmt, ob die Datenpunkte mit dem Text aus dem Feld <b>Sample Name</b> der <b>Ergebnistabelle</b> beschriftet werden. Wenn es mehr als eine überlagerte Kurve gibt, wird nur die aktuell aktive Kurve beschriftet.
Use Percent Y-Axis	Bestimmt, ob die Y-Achse absolute Einheiten oder einen Prozentsatz des Maximum-Y-Werts verwendet. Bei Verwendung der Prozentsatzfunktion wird der Prozentsatz unabhängig für jede überlagerte Spur berechnet. Diese Funktion kann verwendet werden, um die überlagerten Spuren für mehrere Komponenten darzustellen, und die Reaktion bei der Metrik für die Komponenten ist deutlich unterschiedlich.
Start Y-Axis at Zero	Bestimmt, ob die Y-Achse bei $y = 0$ oder bei dem kleinsten X-Wert, der dargestellt werden muss, beginnt.

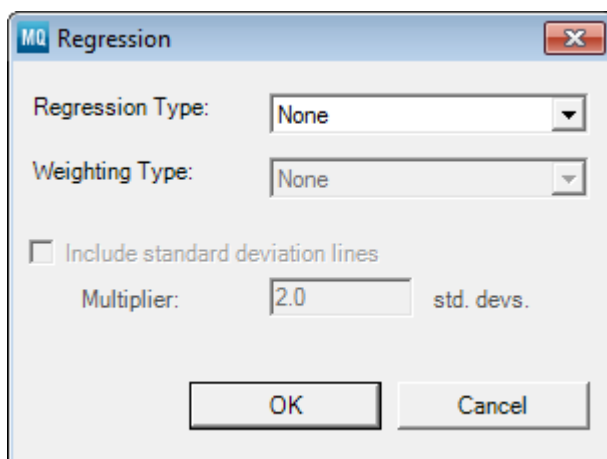
Tabelle 12-1 Rechtsklickmenüoptionen für metrische Kurven (Fortsetzung)

Menüoption	Beschreibung
Connect Points With Lines	Bestimmt, ob die Datenpunkte mit Linien verbunden werden.
Save Setting	Wenn die Grafik aktuell mit einer Einstellung verbunden ist, speichert diese Funktion die aktuellen Funktionen. Ansonsten verhält sich diese Funktion genauso wie die Funktion <b>Save Setting As</b> .
Save Setting As	Werden dieselben Spalten häufig grafisch dargestellt, kann der Benutzer die Darstellungsoptionen als Einstellung speichern. Hierdurch ist es dem Benutzer möglich, schnell eine Grafik zu erzeugen, selbst wenn die erforderlichen Spalten aktuell nicht in der <b>Ergebnistabelle</b> sichtbar sind. Neben den Spalten werden auch die verschiedenen Darstellungsoptionen gespeichert. Nachdem eine Einstellung gespeichert wurde, wird der Name im Menü <b>Metric Plot</b> angezeigt.
Delete Setting	Wenn die aktuelle Kurve mit einer Einstellung verbunden ist, verwenden Sie diese Funktion, um die Einstellung zu löschen.

## Dialog „Regression“

Klicken Sie hier, um eine Regressionsgerade auf der metrischen Kurve anzuzeigen.

Abbildung 12-1 Dialog „Regression“



## Metrische Kurven

---

Label	Beschreibung
Regression Type	Enthält die verschiedenen Regressionsarten (linear, quadratisch und so weiter). Die <b>Mean</b> Regressionsart resultiert in einer horizontalen Linie an der Stelle des durchschnittlichen Y-Werts für alle der Datenpunkte und die <b>Median</b> Regressionsart resultiert in einer horizontalen Linie an der Stelle des medianen Y-Werts für die Punkte. Des Weiteren gibt es eine Funktion <b>None</b> , bei der alle früheren Regressionen entfernt werden.
Weighting Type	Die verschiedenen Gewichtungsarten sind in <a href="#">Gewichtungsfaktoren auf Seite 133</a> beschrieben.
Include standard deviation lines and Multiplier	Diese Optionen sind verfügbar, wenn die Regressionsart <b>Mean</b> oder <b>Median</b> ausgewählt ist. Bei Auswahl werden zusätzliche gestrichelte horizontale Linien in dem Diagramm der bestimmten Anzahl von Standardabweichungen über und unter der Hauptlinie hinzugefügt. Verwenden Sie diese Option, um Punkte anzuzeigen, die zum Beispiel mehr als zwei oder drei Standardabweichungen vom Durchschnitt sind.

Verwenden Sie den **Quantitation Method Editor (Quantifizierungsmethoden-Editor)**, um eine Quantifizierungsmethode zu erstellen oder eine vorhandene Quantifizierungsmethode zu bearbeiten.

Der typische Workflow ist, Quantifizierungsmethoden mithilfe des **New Results Table wizard (Assistent für neue Ergebnistabellen)** zu erstellen. Der Benutzer kann jedoch den **Quantitation Method Editor (Quantifizierungsmethoden-Editor)** verwenden, um eine Quantifizierungsmethode zu erstellen, die nach Bedarf eingesetzt werden kann.

## Registerkarte „Components“

Klicken Sie in der Registerkarte **Components** mit der rechten Maustaste, um auf ein Kontextmenü zuzugreifen. Die folgenden Befehle sind verfügbar:

**Tabelle 13-1 Rechtsklick-Menüoptionen für „Components“**

Menüoption	Beschreibung
Find Component by Name	Wird verwendet, um diejenige Komponenten auszuwählen, deren <b>Name</b> dem Text entspricht. Um einen passenden Eintrag zu finden, ist nicht der exakte Text erforderlich. Das ist hilfreich, um eine bestimmte Komponente auszuwählen, wenn es viele Komponenten gibt.  Wenn anfangs keine Zeile in der Tabelle ausgewählt wird, beginnt die Suche in der ersten Zeile. Andernfalls beginnt die Suche in der Zeile unter der markierten Zeile und springt am Ende der Tabelle nach oben zur ersten Zeile. Das ist hilfreich, wenn es mehr als eine Komponente gibt, deren <b>Name</b> den Text enthält. Wenn die Komponente beim ersten Durchsuchen nicht gefunden wird, starten Sie eine erneute Suche, bei der die erste Komponente markiert bleibt, um einen anderen Treffer in der Tabelle zu finden.
Insert Row Above	Fügt eine leere Zeile unmittelbar über der markierten Zeile ein.
Delete Selected Rows	Entfernt die markierten Zeilen aus der Tabelle.
Sum Multiple Ions	Addiert Chromatogramme für mehrfache MRM-Übergänge oder Voll-Scan-Massenbereiche. Nach Auswahl des Befehls werden zusätzliche Massen-Spalten zur Tabelle <b>Components</b> hinzugefügt. Alle für eine bestimmte Zeile ausgewählten Massen werden zur Konstruktion des summierten XIC für den entsprechenden Analyten oder internen Standard verwendet. Es wird empfohlen, diese Funktion immer auszuwählen.
Groups	Siehe <a href="#">Untermenü „Groups“ (Gruppen)</a> auf Seite 88.
Internal Standards	Siehe <a href="#">Untermenü „Internal Standards“ (Interne Standards)</a> auf Seite 90.

## Untermenü „Groups“ (Gruppen)

Tabelle 13-2 Optionen des Menüs „Groups“ (Gruppen)

Menüoption	Beschreibung
Using Constant Group Size	Öffnet den Dialog „Set Automatic Groups“ (Automatische Gruppen festlegen), mit dem die Spalte „Group“ (Gruppe) automatisch ausgefüllt werden kann. Dazu wird der Name der ersten Komponente für jede Gruppe verwendet und davon ausgegangen, dass die Anzahl an Komponenten jeder Gruppe gleich ist. Siehe <a href="#">Dialog „Set Automatic Groups“ auf Seite 89</a> .
By Filling Down Existing Groups	Gibt aufeinander folgenden Komponenten automatisch denselben Gruppennamen. Um den Befehl zu verwenden, geben Sie manuell den Gruppennamen der ersten Komponente für jede einzelne Gruppe ein und wählen Sie dann den Befehl. Die angegebenen Gruppennamen werden von allen nachfolgenden Komponenten derselben Spalte mit leerem Gruppennamen übernommen. Es werden ausschließlich Zeilen berücksichtigt, deren Name ausgefüllt wurde.
Using Q1 Masses	Nur für MRM-Versuche verfügbar. Wird verwendet, um die Spalte „Group“ (Gruppe) mithilfe der Q1-Masse auszufüllen. Das ist hilfreich, wenn dieselbe Q1-Masse für verschiedene Übertragungen derselben Verbindung spezifiziert wurde und unterschiedliche Fragmente beobachtet wurden. Wenn bei vielen Komponenten einige zufälligerweise dieselbe Q1-Masse haben, werden diese derselben Gruppe zugeordnet.
Using Q3 Masses	Nur für MRM-Versuche verfügbar. Wird verwendet, um die Spalte „Group“ (Gruppe) mithilfe der Q3-Masse auszufüllen. Das ist hilfreich, wenn verschiedene isotopische Formen einer Verbindung (mit unterschiedlichen Q1-Massen) überwacht worden sind, jedoch eine konstante Q3-Masse überwacht wurde. Wenn bei vielen Komponenten einige zufälligerweise dieselbe Q3-Masse haben, werden diese derselben Gruppe zugeordnet.
Using (Q1 – Q3) Mass Differences	Wird verwendet, um die Spalte „Group“ (Gruppe) mithilfe der Differenz zwischen der Q1- und Q3-Masse auszufüllen (ausschließlich für MRM-Versuche verfügbar). Das kann bisweilen hilfreich sein, wenn verschiedene isotopische Formen einer Verbindung (mit unterschiedlichen Q1-Massen) beobachtet worden sind, jedoch eine konstante Q3-Masse beobachtet wurde. Wenn bei vielen Komponenten einige zufälligerweise dieselbe Massendifferenz haben, werden diese derselben Gruppe zugeordnet.
Add Group to Start of Component Name	Setzt den Gruppennamen vor den Analyten- oder internen Standardnamen. Das kann hilfreich sein, wenn die ursprünglichen Namen nicht eindeutig sind.



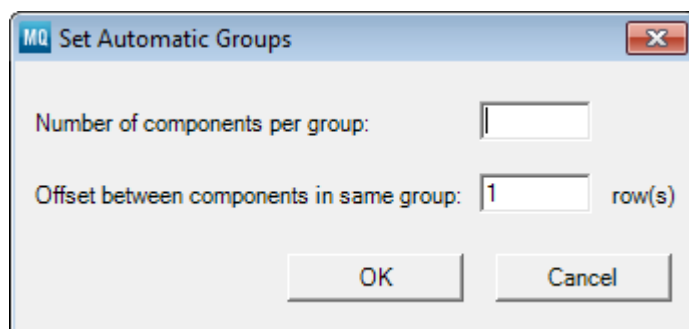
Tabelle 13-2 Optionen des Menüs „Groups“ (Gruppen) (Fortsetzung)

Menüoption	Beschreibung
Remove Group from Start of Component Name	Entfernt gegebenenfalls den Gruppennamen vor dem Analyten- oder internen Standardnamen.
Append Summed Ions for Groups	Wenn die Option „Sum Multiple Ions“ (Summe mehrerer Ionen) aktiviert ist, hängt dieser Befehl eine neue Komponente für jede Gruppe an, die das summierte Chromatogramm für die Gruppe verwendet. Für Analyten und interne Standards für die Gruppen werden getrennte Komponenten hinzugefügt, wenn beide definiert sind. Der Name für die neuen Analyten ist standardmäßig der Gruppenname und der Name für die internen Standards der Gruppenname mit dem Suffix .IS. Wenn die summierten Komponenten erforderlich sind, und nicht die ursprünglichen Einzelmassen-Komponenten, können letztere gelöscht werden.

### Dialog „Set Automatic Groups“

Füllt die Spalte Group automatisch mit dem Namen der ersten Komponente für jede Gruppe aus, unter der Annahme, dass die Anzahl an Komponenten jeder Gruppe gleich ist.

Abbildung 13-1 Dialog „Set Automatic Groups“



Label	Beschreibung
Number of components per group	Die gesamte Anzahl der Komponenten in jeder Gruppe.
Offset between components in same group	Der Zeilenversatz zwischen aufeinander folgenden Komponenten derselben Gruppe. Dieser Wert beträgt gewöhnlich 1, kann jedoch größer sein, falls sich die Komponenten der Gruppe nicht in benachbarten Zeilen befinden.

## Untermenü „Internal Standards“ (Interne Standards)

Tabelle 13-3 Menüoptionen „Internal Standards“ (Interne Standards)

Menüoption	Beschreibung
Set IS for All Analytes	Stellt das Feld IS Name für alle Analyten-Zeilen ein. Wenn nur ein interner Standard definiert wurde, wird dessen Name verwendet. Wählen Sie andernfalls den gewünschten internen Standard in dem Dialogfeld aus, das angezeigt wird.
Set IS for Selected Analytes	Wenn derselbe interne Standard für mehr als einen Analyten verwendet wird, sollten Sie eine Tastenkombination zum Festlegen des internen Standards für jeden einzelnen Analyten einrichten. Siehe <a href="#">Set IS for Selected Analytes auf Seite 90</a> .
Set Last Component of Group as IS	Verwenden Sie diesen Befehl, wenn mehrere Komponenten Groups zugeordnet wurden, entweder manuell oder mit Elementen des Untermenüs „Set Groups“. Das Kontrollkästchen IS wird für die letzte Komponente jeder Gruppe ausgewählt und alle anderen Komponenten der Gruppe, von denen angenommen wird, dass es sich um Analyten handelt, werden so festgelegt, dass sie diese letzte Komponente als internen Standard verwenden.
Set for All Groups as for Selected Group	Wird verwendet, um die Anordnung der internen Standards für die Gruppe, die zur aktuell markierten Zeile gehört, auf alle anderen Gruppen in symmetrischer Weise zu kopieren. Das ist hilfreich, wenn es mehr als einen internen Standard für jede Gruppe gibt. Siehe <a href="#">Set for All Groups as for Selected Group auf Seite 90</a> .

### Set IS for Selected Analytes

1. Stellen Sie sicher, dass der gewünschte interne Standard definiert wurde (sowohl der **Name** als auch das Kontrollkästchen **IS** sind ausgewählt).
2. Markieren Sie die Zeilen der Analyten, für die der interne Standard verwendet werden soll.
3. Wählen Sie den Menüpunkt.

Wenn mehr als ein interner Standard definiert wurde, öffnet sich ein Dialog mit der Aufforderung, den gewünschten internen Standard auszuwählen.

### Set for All Groups as for Selected Group

1. Gruppen zuordnen
2. Geben Sie manuell durch Auswahl des Kästchens in der ersten Spalte der ersten Gruppe an, welche Komponenten interne Standards sind.
3. Geben Sie durch Auswahl aus dem Kombinationsfeld der Liste in der Spalte **IS Name** manuell den internen Standard für jeden Analyten der ersten Gruppe an.
4. Markieren Sie alle einzelnen Zeilen, die zur ersten Gruppe gehören.

5. Klicken Sie auf **Set for All Groups as for Selected Group**.

## Registerkarte „Integration“

Klicken Sie in die Registerkarte **Integration (Integration)** mit der rechten Maustaste, um auf ein Kontextmenü zuzugreifen. Die folgenden Befehle sind verfügbar:

**Tabelle 13-4 Rechtsklick-Menüoptionen der Registerkarte „Integration & Regression“**

Menüoption	Beschreibung
Find Component by Name	Ähnlich wie der in der Registerkarte <b>Components</b> verfügbare Befehl. Der Unterschied besteht darin, dass nicht ganze Zeilen wie in der Tabelle <b>Components</b> , sondern einzelne Elemente der Komponentenliste ausgewählt werden.
Highlight Components with Uncertain RT	Wird verwendet, um Komponenten hervorzuheben, bei denen die standardmäßige erwartete Retentionszeit (basierend auf der Retentionszeit des Peaks mit der größten Intensität für jedes Chromatogramm) inkorrekt ist. Wenn die Anzahl der Komponenten klein ist, überprüfen Sie jede einzeln und verwenden Sie diesen Befehl nicht. Wenn es viele Komponenten gibt, verwenden Sie diesen Befehl, um optisch nur diejenigen zu überprüfen, für die im Chromatogramm mehrere signifikante Peaks vorliegen. Siehe <a href="#">Dialog „Highlight Components“ auf Seite 92</a> .
Home Graph Axes	Setzt das vergrößerte Diagramm auf seine Startansicht zurück, in der alle Daten sichtbar sind.
Overlay Other Components for Group	Verwenden Sie diesen Befehl, um Chromatogramme zu überlagern, wenn verschiedene Komponenten Gruppen zugeordnet wurden und wenn für die einer Gruppe zugeordneten Komponenten dieselbe Retentionszeit erwartet wird, beispielsweise wenn sie verschiedene MRM-Übergänge derselben eigentlichen Verbindung darstellen.  Wenn das Chromatogramm für die aktuelle Komponente, deren Integrationsparameter definiert werden, ausgewählt wird, wird dieses mit einer durchgehenden blauen Linie eingezeichnet und die integrierte Peak-Fläche wird angezeigt. Die Chromatogramme (und nicht die integrierte Peak-Fläche) für die anderen Komponenten derselben Gruppe werden mithilfe einer gestrichelten Linie überlagert.

**Tabelle 13-4 Rechtsklick-Menüoptionen der Registerkarte „Integration & Regression“ (Fortsetzung)**

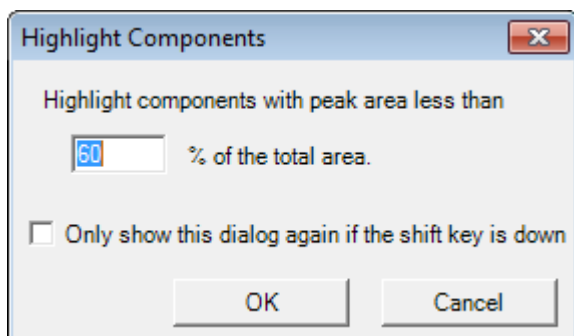
Menüoption	Beschreibung
Update Retention Times	<p>Wird verwendet, um die erwarteten Rückhaltezeiten für eine zuvor erstellte Quantifizierungsmethode zurückzusetzen. Wenn eine vorhandene Quantifizierungsmethode geöffnet und danach die Option <b>Set New Typical Sample</b> ausgewählt wird, wird das Chromatogramm der neuen Probe angezeigt, die erwarteten Retentionszeiten bleiben jedoch unverändert.</p> <p>Für jede Komponente wird die erwartete Retentionszeit derart aktualisiert, dass sie der Retentionszeit des Peaks mit der stärksten Intensität innerhalb eines Fensters der spezifizierten Breite entspricht, welches in der ursprünglich erwarteten Retentionszeit zentriert wurde. Siehe <a href="#">Dialog „Update Retention Time“ (Aktualisierung der Retentionszeit)</a> auf Seite 93.</p>
Set New Typical Sample	<p>Wird verwendet, um eine repräsentative Probe mit der Methode zu verknüpfen. Dies kann möglicherweise Auswirkungen auf die verfügbaren Auswahlmöglichkeiten der Spalte <b>Q1/Q3</b> (für MRM-Experimente) oder der Spalte <b>Start - Stop</b> (für Profilexperimente) haben. Es wirkt sich außerdem auf die in der Registerkarte <b>Integration</b> angezeigten Chromatogramme aus.</p>

## Dialog „Highlight Components“

Die Namen der Komponenten, deren automatisch ausgewählter Peak nicht mindestens den festgelegten Prozentsatz der gesamten Peak-Fläche im Chromatogramm erreicht, werden fett gedruckt angezeigt. Wenn zum Beispiel in [Abbildung 13-2](#) der standardmäßig ausgewählte Peak 70 % bis 100 % des Gesamtbereichs ausmacht, wird er nicht markiert. Bewerten Sie nur diese Peaks, indem Sie sie aus der Komponentenliste auswählen.

Wenn das Kontrollkästchen **Only show this dialog again if the Shift key is down** ausgewählt ist, wird der Dialog nicht angezeigt, wenn der Befehl das nächste Mal ausgewählt wird, es sei denn, der Benutzer drückt die **Umschalttaste**. Der zuvor angegebene Parameter für den gesamten Bereich wird automatisch verwendet.

**Abbildung 13-2 Dialog „Highlight Components“**



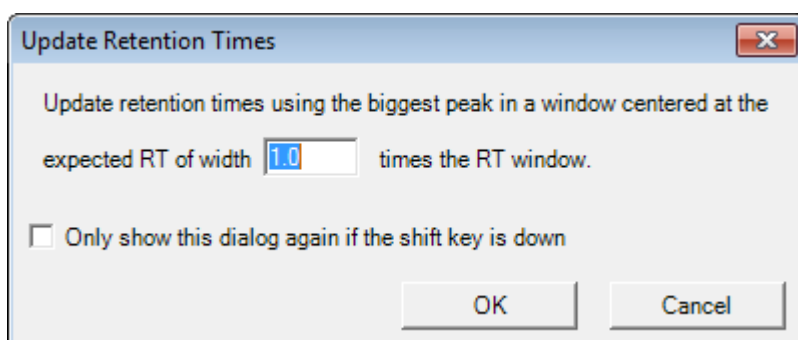
## Dialog „Update Retention Time“ (Aktualisierung der Retentionszeit)

Wird verwendet, um die erwarteten Retentionszeiten für eine zuvor erstellte Quantifizierungsmethode zurückzusetzen. Wenn eine vorhandene Quantifizierungsmethode geöffnet wird und danach die Option „Set New Typical Sample“ (Neue typische Probe festlegen) ausgewählt wird, entspricht das angezeigte Chromatogramm der neuen Probe, die erwarteten Retentionszeiten bleiben jedoch unverändert.

Für jede Komponente wird die erwartete Retentionszeit derart aktualisiert, dass sie der Retentionszeit des Peaks mit der stärksten Intensität innerhalb eines Fensters der spezifizierten Breite entspricht, welches in der ursprünglich erwarteten Retentionszeit zentriert wurde.

Wenn das Kontrollkästchen **Only show this dialog again if the Shift key is down (Den Dialog nur erneut anzeigen, wenn die Umschalttaste gedrückt wird)** ausgewählt ist, wird der Dialog nicht angezeigt, wenn der Befehl das nächste Mal ausgewählt wird, es sei denn, der Benutzer drückt die **Umschalttaste**. Die zuvor angegebene Retentionszeit wird automatisch verwendet.

Abbildung 13-3 Dialogfeld Highlight Components



## Registerkarte Outlier Settings

Klicken Sie in die Registerkarte **Outlier Settings (Ausreißer-Einstellungen)** mit der rechten Maustaste, um auf ein Kontextmenü zuzugreifen. Die folgenden Befehle sind verfügbar:

Label	Beschreibung
Accuracy for Standards	Verändert die Genauigkeitstoleranz der <b>Standard</b> proben.
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Verändert die Genauigkeitstoleranz für <b>Standard</b> proben durch einen Wert entsprechend den Standardarbeitsanweisungen des Labors.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Verändert die Genauigkeitstoleranz für den <b>Standard</b> mit der niedrigsten Konzentration, falls die Standardarbeitsanweisungen des Labors für diesen <b>Standard</b> eine andere Toleranz vorsehen.
Accuracy for QCs	Verändert die Genauigkeitstoleranz der <b>Qualitätskontroll</b> -Proben.
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Verändert die Genauigkeitstoleranz für Proben zur <b>Qualitätskontrolle</b> durch einen Wert entsprechend den Standardarbeitsanweisungen des Labors.

Label	Beschreibung
Ion Ratio	Nur dann verfügbar, wenn die Komponenten Gruppen zugeordnet sind. Wählen Sie diese Option, um das Ionenverhältnis der Peak-Fläche oder der Peak-Höhe zu verwenden. Fläche oder Höhe der Peaks wird beim Auswählen der Regressionsparameter während der Entwicklung der Quantifizierungsmethode eingestellt.
Calculated Concentration	Bei der Verwendung von <b>Standard</b> proben bekannter Konzentration ist dies die aus der Kalibrierkurve rückberechnete Konzentration. Die Regressionsgleichungen beschreiben, wie die Regression für die verschiedenen Regressionsarten und Gewichtungen durchgeführt wird.
Component	Die Analyten oder internen Standards für alle Proben.
IS	Der ausgewählte interne Standard. Nur verfügbar, wenn das Kontrollkästchen <b>Ion Ratio</b> aktiviert ist.
Group	Komponenten mit derselben Rückhaltezeit (d. h. verschiedene Übertragungen für dieselbe Verbindung) können gruppiert werden. Nur verfügbar, wenn das Kontrollkästchen <b>Ion Ratio</b> aktiviert ist.
Ion Ratio Tolerance (%)	Verwenden Sie die Standardeinstellung oder ändern Sie diese Einstellung entsprechend den Standardarbeitsanweisungen des Labors. Nur verfügbar, wenn das Kontrollkästchen <b>Ion Ratio</b> aktiviert ist.
Lower Limit of Calculated Concentration	Geben Sie den unteren Grenzwert des akzeptablen Konzentrationsbereich ein. Alle Proben, deren <b>berechnete Konzentration</b> geringer ist als dieser Wert, werden als Konzentrationsausreißer gekennzeichnet.
Upper Limit of Calculated Concentration	Geben Sie den oberen Grenzwert des akzeptablen Konzentrationsbereichs ein. Alle Proben, deren <b>berechnete Konzentration</b> höher ist als dieser Wert, werden als Konzentrationsausreißer gekennzeichnet.

Tabelle 13-5 Rechtsklick-Menüoptionen für „Outlier Settings“

Label	Beschreibung
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Übernimmt den unteren Grenzwert der berechneten Konzentration für alle Analyten, falls alle Analyten dieselben Kriterien haben.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Übernimmt den oberen Grenzwert der berechneten Konzentration für alle Analyten, falls alle Analyten dieselben Kriterien haben.

Ziele:

- Erfahren Sie, wie Sie Daten mit dem SignalFinder™-Algorithmus.
- Erfahren Sie, wie Sie Daten mit dem MQ4-Integrationsalgorithmus verarbeiten.
- Erfahren Sie, wie Sie MQ4 und SignalFinder™-Integrationsalgorithmusparameter.

Quantifizierungsmethoden umfassen eine Reihe von Anweisungen, wie man die für die Integration ausgewählten Peaks quantifiziert. In diesem Tutorial werden gleichzeitig eine Quantifizierungsmethode und die Ergebnistabelle erstellt.

Zusätzliche Aufgaben zur Manipulation der Daten in der **Ergebnistabelle** sowie Informationen zu den verfügbaren Symbolen in der Software werden ebenfalls behandelt.

---

**Hinweis:** Benutzer der Version mit Prüfprotokoll- und Sicherheitsfunktionen unterliegen Einschränkungen bei der Verwendung der Datenordnerstruktur in Analyst. Die Benutzer können nur Datendateien verarbeiten, die sich in der Dateistruktur des Analyst® MD-Software-Dateistruktur. Wenn die Datei- und Ordnerstruktur nicht beibehalten wird, kann der Benutzer Chromatogramme möglicherweise nicht anzeigen.

---

## Über Kalibrierkurven

Eine Kalibrierkurve (auch bekannt als Standardkonzentrationskurve) ist eine Methode zur Bestimmung der Konzentration einer Substanz in einer **unbekannten** Probe durch Vergleich der **unbekannten** Probe mit einer Reihe von **Standard**proben mit bekannter Konzentration. Die Kalibrierkurve stellt die Reaktion (das Analysesignal) des Instruments auf Änderungen der Konzentration des Analyten (die zu messende Substanz) dar. Der Benutzer erstellt eine Reihe von **Standard**proben mit verschiedenen Konzentrationen, die nahe der erwarteten Konzentration des Analyten in der **unbekannten** Probe liegen.

## Voraussetzungen

In der Analyst® MD-Software das Projekt **Example (Beispiel)**.

Mix\_batch\_1. Die Wiff-Datei finden Sie im Ordner Analyst Data\Projects\Example\Data\Triple Quad.

## Ändern der in der Ergebnistabelle angezeigten Spalten

Verwenden Sie dieses Verfahren, wenn Sie Spalten in der **Results Table** anzeigen oder ausblenden oder die Präzision des Zahlenformats ändern möchten. Verwenden Sie für numerische Felder das Format 0.00 für

nicht-wissenschaftliche Notizen und verwenden Sie das Format 0.00e0 für wissenschaftliche Notizen. Ändern Sie die Dezimalpunkte, um die Präzision der angezeigten Zahlen anzugeben. Nur ein Punkt (.) kann als Dezimaltrennzeichen verwendet werden. Zifferngruppierung wird nicht unterstützt.

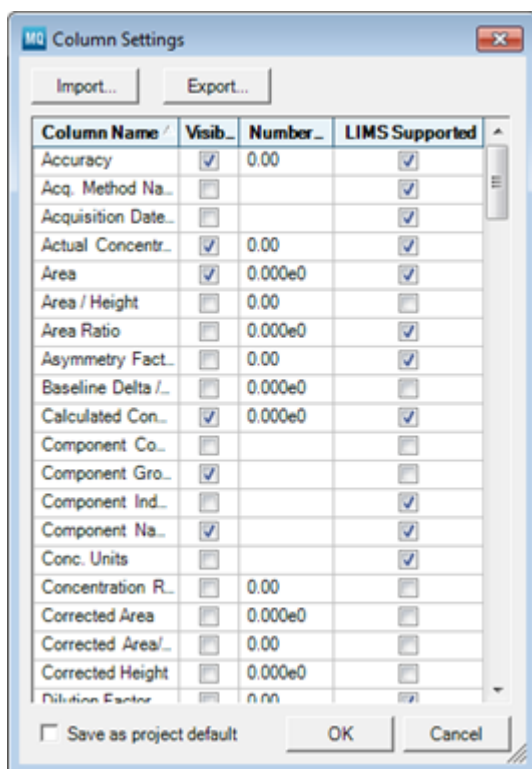
---

**Hinweis:** Bestimmte für die Probeninformationen kritische Spalten wie **Sample Name**, **Sample ID** etc. sollten beim Anpassen der Spalteneinstellungen der **Results Table** nicht ausgeblendet werden.

---

1. Klicken Sie mit der rechten Maustaste in der **Results Table** und danach auf **Column Settings (Spalteneinstellungen)**.

**Abbildung 14-1** Dialogfeld Column Settings



2. Markieren oder löschen Sie das Kontrollkästchen in der Spalte **Visible** nach Bedarf.
3. Ändern Sie das Format in der Spalte **Number Format** auf ganze Zahlen oder wissenschaftliche Schreibweise. Die Anzahl der angezeigten Dezimalstellen kann ebenfalls geändert werden.

---

**Tipp!** Um die Spalteneinstellungen für alle **Results Tables** des Projekts zu übernehmen, markieren Sie das Kontrollkästchen **Save as project default**.

---

4. Klicken Sie auf **OK**.



# Verarbeiten von Daten mit dem SignalFinder™ Integrationsalgorithmus

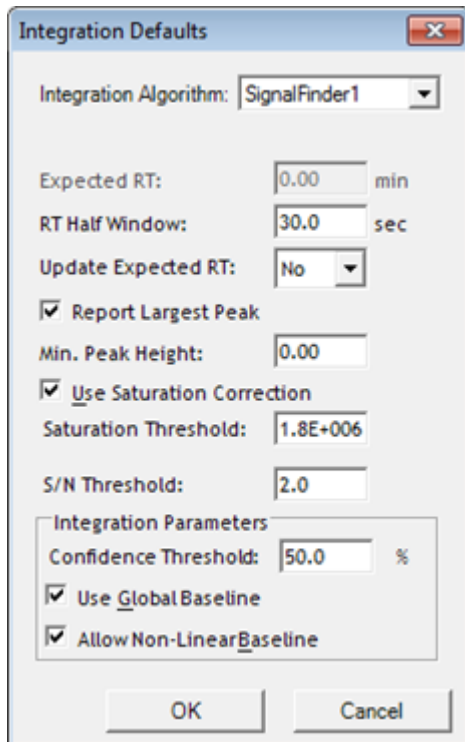
Im Gegensatz zum MQ4-Integrationsalgorithmus oder dem in der Analyst® MD-Software verfügbaren Algorithmus erstellt SignalFinder™ bei der Erstellung einer neuen Quantifizierungsmethode ein Peak-Modell unter Verwendung der ausgewählten Probe. Dieses Modell beschreibt die Form des ausgewählten Peaks, den der Algorithmus verwendet. Zum Zeitpunkt der Integration wendet der Integrationsalgorithmus SignalFinder dieses Modell auf die anderen Proben an und dehnt oder staucht dabei die Probe. Dadurch ist es möglich, dass die Peak-Form für einen bestimmten Analyten oder internen Standard für mehrere Proben ähnlich, aber nicht identisch ist.

## Peak-Integrationsparameter festlegen

Verwenden Sie das folgende Verfahren, um den Integrationsalgorithmus zu überprüfen oder festzulegen, der die Daten verarbeitet. Siehe [Über den SignalFinder Integrationsalgorithmus auf Seite 114](#).

1. In der Analyst® MD-Software, in der **Navigationsleiste** unter **Companion Software** auf **MultiQuant 3.0.3**.
2. Klicken Sie auf **Edit > Project Integration Defaults**.
3. Wählen Sie im Dialog **Integration Defaults** **SignalFinder1** aus der Liste **Integration Algorithm**.
4. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Use Saturation Correction** und legen Sie dann den **Saturation Threshold** auf **1.8E+006** fest.

Abbildung 14-2 Dialog „Integration Defaults“



---

**Hinweis:** Peaks oberhalb des **Saturation Threshold** werden als gesättigt betrachtet. Dieser Wert ist sensorabhängig.

---

5. Klicken Sie auf **OK**.

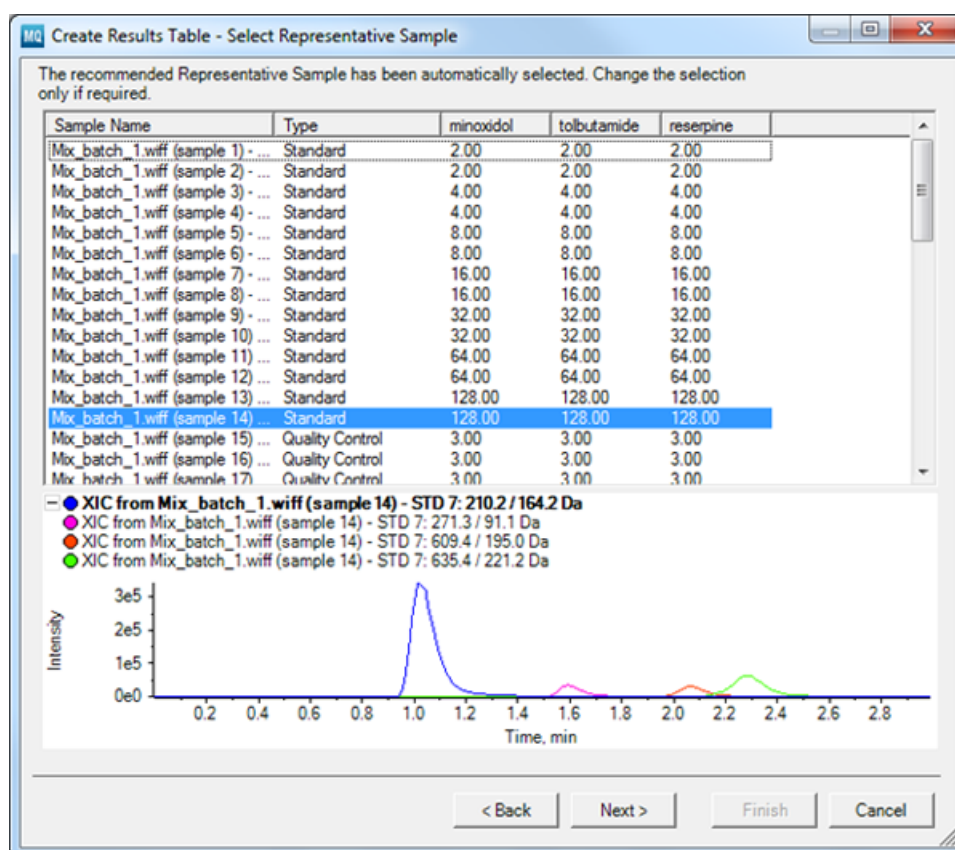
## Erstellen einer Ergebnistabelle

1. Klicken Sie auf **File > New Results Table (Datei > Neue Ergebnistabelle)**.
2. Erweitern Sie auf der Seite **Create Results Table - Select Samples (Ergebnistabelle erstellen - Proben auswählen)** den Ordner **Example Data (Beispieldaten)** und ziehen Sie dann die Datei **Mix\_batch\_1.wiff** in das Fenster **Selected (Ausgewählt)**.
3. Klicken Sie auf **Next (Weiter)**.
4. Klicken Sie auf die Option **Create New Method (SignalFinder1) (Neue Methode erstellen (SignalFinder1))**.
5. Klicken Sie auf **New (Neu)**.
6. Geben Sie einen Namen für die Methode im Dialog **Save Quantitation Method As (Quantifizierungsmethode speichern unter)** ein und klicken Sie auf **Save (Speichern)**.
7. Klicken Sie auf **Next**.

Auf der Seite **Create Results Table - Select Representative Sample (Ergebnistabelle erstellen - Repräsentative Probe auswählen)** wurde eine repräsentative Probe ausgewählt. Die Software empfiehlt eine repräsentative Probe basierend auf der Auswahl eines Chromatogramms, das die beste Möglichkeit bietet, Integrationsparameter auszuwählen, die für den gesamten Batch passend sind. Es wird empfohlen, einen nicht gesättigten Standard mit hoher Konzentration oder eine **QC**-Probe (TIC unter 1E+006 cps) zu verwenden.

**Tipp!** Während der Peak-Bewertung kann eine andere Probe, aus der während der Peak-Bewertung ein Peak-Modell erstellt werden soll, ausgewählt werden.

**Abbildung 14-3 Seite „Create Results Table - Select Representative Sample“ (Ergebnistabelle erstellen - Repräsentative Probe auswählen)**



8. Bestätigen Sie auf der Seite **Create Results Table - Define Components (Ergebnistabelle erstellen - Komponenten definieren)** die internen Standards und die Analyten.
9. Klicken Sie auf **Next**.

**Abbildung 14-4 Seite „Create Results Table - Define Components“ (Ergebnistabelle erstellen - Komponenten definieren)**

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: MRM (4 transitions)

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinnamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinnamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinnamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinnamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

< Back   Next >   Finish   Cancel

---

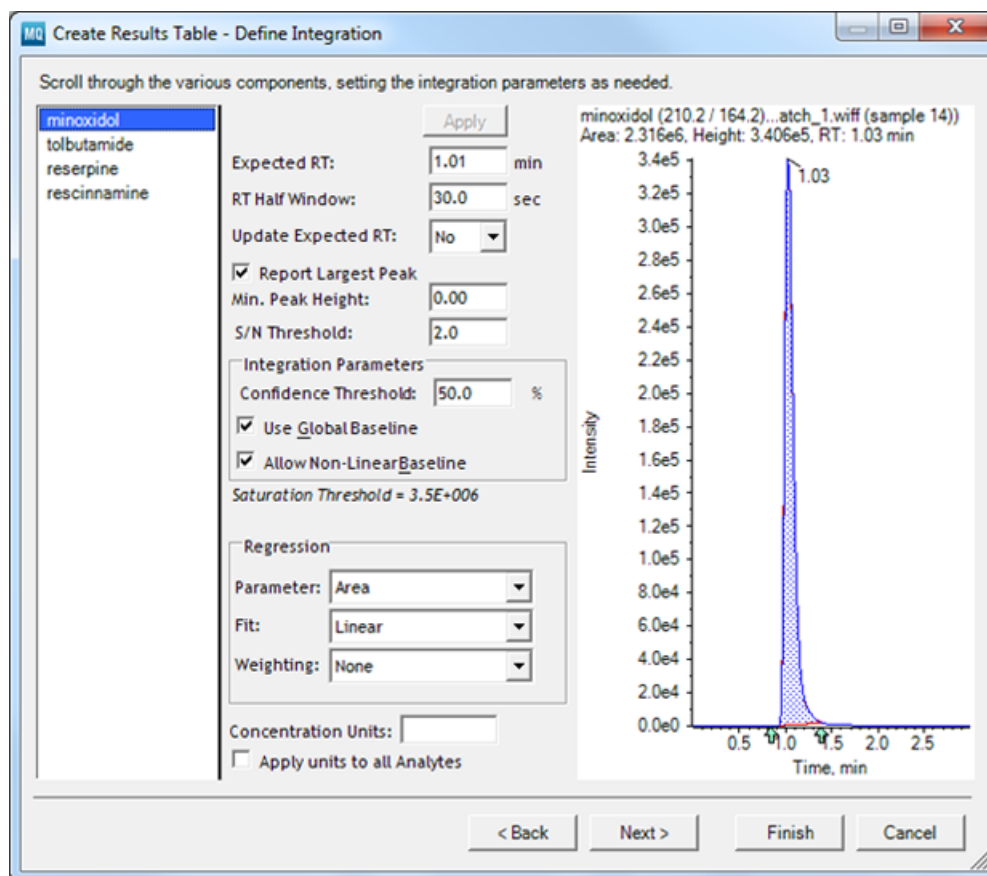
**Hinweis:** Wenn eine Erfassungsmethode erstellt wird und der Komponentennamen in der Spalte **ID** der Tabelle „Massenbereiche“ aufgenommen ist, wird dieser Name automatisch auf der Seite **Define Components (Komponenten definieren)** ausgefüllt. Wenn der Komponentennamen nicht aufgenommen wurde, aktualisieren Sie die Tabelle manuell mit dem Komponentennamen.

---

Auf der Seite **Create Results Table - Define Integration (Ergebnistabelle erstellen - Integration definieren)** werden die Analyten und internen Standards auf der linken Seite dargestellt. Die aktuellen Integrationsparameter wurden für die repräsentative Probe übernommen und das Chromatogramm wird angezeigt.

Die Komponenten der zuvor ausgewählten repräsentativen Probe erscheinen im Fenster **Integration**. Die Peaks in dieser repräsentativen Probe werden anhand der im Dialog **Integration Defaults (Integrationsstandards)** eingestellten Parameter ermittelt und integriert.

Abbildung 14-5 Seite „Create Results Table - Define Integration“ (Ergebnistabelle erstellen - Integration definieren)



Passen Sie, falls erforderlich, die Parameter zur Peak-Ermittlung und die Positionen der grünen Pfeile in der X-Achse der Chromatogramme an. Dies ermöglicht es dem Benutzer, die erforderlichen Start- und Endpositionen der Peak-Integration genauer festzulegen. Hierbei handelt es sich um ein visuelles Verfahren zur Anpassung von zwei Parametern zur Peak-Ermittlung, die mit der Quantifizierungsmethode gespeichert und auf alle zu integrierenden Peaks angewendet werden. Die Software beschränkt die Grenzwerte dieser Parameter auf den Bereich, den sie als angemessene Grenzwerte für den Umfang des Peaks betrachtet.

Wenn in dem Chromatogramm mehr als ein Peak vorliegt und der richtige Peak nicht automatisch ausgewählt wurde, ziehen Sie über einen Peak, um die erwartete Retentionszeit festzulegen. Ziehen Sie vom tatsächlichen Start bis zum tatsächlichen Ende des Peaks und wählen Sie keinen sehr breiten oder sehr engen Bereich aus. Der Grund dafür ist, dass der Algorithmus davon ausgeht, dass sich in der Auswahl nur ein Peak befindet. Wenn der Datensatz zum Beispiel viel Rauschen enthält und der Algorithmus zwei vereinte Peaks ermittelt, wenn nur ein Peak vorliegt, wählen Sie einen Bereich aus, der beide Peaks enthält, damit der Algorithmus seine internen Parameter so anpasst, dass nur ein Peak ermittelt wird. Alternativ können Sie, wenn der Algorithmus einen Peak ermittelt hat und Sie denken, dass zwei oder mehr nebeneinander liegende Peaks vorliegen, einen Bereich auswählen, der nur den interessierenden Peak umfasst.

10. Aktivieren Sie in der Gruppe **Integration Parameters (Integrationsparameter)** das Kontrollkästchen **Global Baseline (Globale Basislinie)**, um das gesamte Chromatogramm als Basislinie zu nutzen.

Wenn diese Option nicht ausgewählt ist, berücksichtigt die Software nur einen engen Bereich um den interessierenden Peak.

11. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Allow Non-Linear Baseline (Nicht lineare Basislinie zulassen)**, um zwischen einer linearen oder nicht linearen Basislinie auszuwählen. Eine nicht lineare Basislinie schätzt die Basislinie unter jedem Peak. Eine lineare Basislinie platziert eine Linie zwischen den Punkten am Anfang und am Ende dieser spezifischen Gruppe von Peaks.
12. Prüfen Sie durch Anklicken der Komponentennamen im linken Bereich die Peak-Integration jeder Komponente. Passen Sie die Integrationsparameter an, damit der repräsentative Peak richtig integriert wird.
13. Verwenden Sie für die Komponenten **Minoxidol Tolbutamid** und **Reserpin** die Parameter der Gruppe **Regression**, um Folgendes festzulegen, und klicken Sie dann auf **Apply (Anwenden)**:
  - **Parameter:** Area (Fläche)
  - **Fit:** Linear
  - **Weighting (Gewichtung):** Keine
14. Legen Sie die **Concentration Units (Konzentrationseinheiten)** auf **ng/ml** fest und wählen Sie dann das Kontrollkästchen **Apply units to all Analytes (Einheiten auf alle Analyten anwenden)**.
15. Klicken Sie auf **Apply (Anwenden)**.
16. Klicken Sie auf **Finish (Beenden)**.

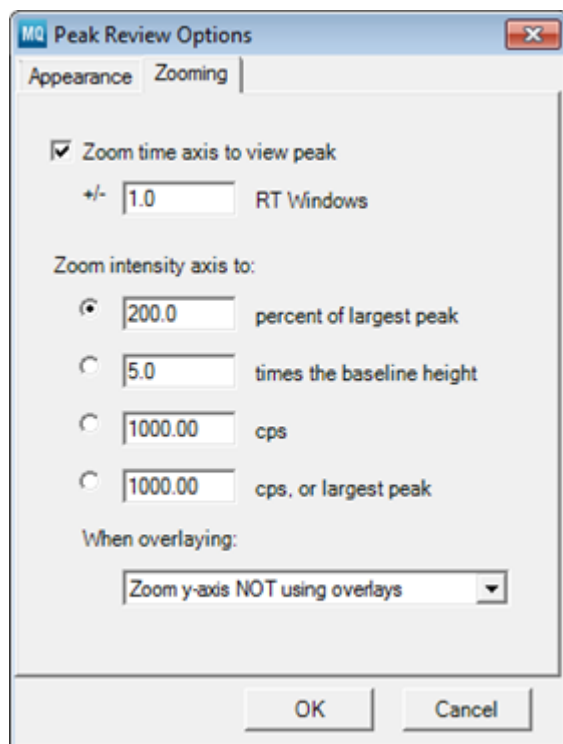
Die Beispieldateien werden automatisch eingebunden und eine **Ergebnistabelle** erzeugt.

Siehe [Peaks bewerten auf Seite 102](#) zum Verwalten von Daten in der **Ergebnistabelle**. Für weitere Informationen zum Erstellen von Projekten siehe [Berichte auf Seite 138](#).

## Peaks bewerten

1. Klicken Sie auf das Symbol **Peak Review (Peak-Bewertung)**.
2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Tabelle und danach auf **Column Settings (Spalteneinstellungen)**.
3. Blenden Sie die Spalte **SF Saturated (SF-Gesättigt)** ein.
4. Klicken Sie im Fenster **Peak Review (Peak-Bewertung)** mit der rechten Maustaste und klicken Sie danach auf **Options (Optionen)**.
5. Ändern Sie in der Registerkarte **Zooming** die Option **Zoom time axis to view peak (Zeitachse vergrößern, um Peak anzuzeigen)** auf 1.
6. Legen Sie die **Zoom intensity axis (Zoom-Intensitätsachse)** auf **200 Prozent des größten Peaks** fest.

Abbildung 14-6 Peak Review Options



7. Verwenden Sie die roten Pfeile, um durch die Peaks zu blättern..

Wenn der Sensor gesättigt ist, erscheint der Peak flacher als üblich. Dieses Peak hat zum Beispiel ein rotes Profil um den Peak und **Yes (Ja)** erscheint in der Spalte **SF Saturated (SF-Gesättigt)**, da die Peak-Intensität oberhalb des Sättigungsschwellenwerts von  $1,8^6$  cps liegt.

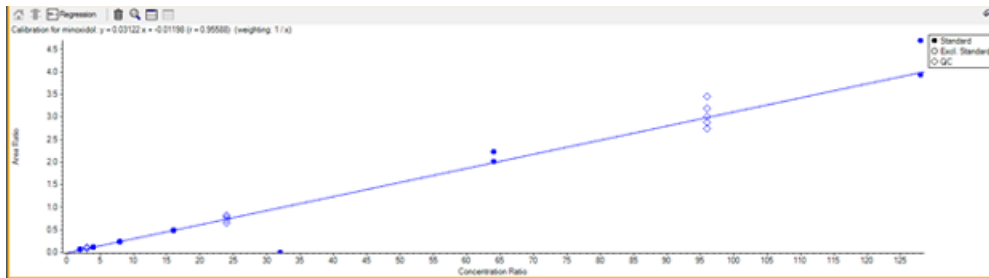
**Hinweis:** Die repräsentative Probe ist möglicherweise nicht für alle Komponenten geeignet. Während der Peak-Bewertung eine neue repräsentative Probe ausgewählt und ein neues Modell erstellt werden.

8. Um ein neues Modell zu erstellen, wählen Sie einen neuen Peak und klicken Sie dann auf das Symbol **Update Peak Model (Peak-Modell aktualisieren)**. Wählen Sie einen Peak, dessen Form jener anderer Peaks ähnelt und der nicht gesättigt ist.
9. Klicken Sie mit der rechten Maustaste und klicken Sie danach auf **Update Quantitation Method for Component (Quantifizierungsmethode für Komponente aktualisieren)**, um die Änderungen auf alle Proben der Komponente anzuwenden.

## Ändern der Kalibrierkurve

1. Klicken Sie auf **Show Calibration Curve**, um die Kalibrierkurve anzuzeigen.
2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste im Fenster **Calibration** und klicken Sie dann auf **Show Legend**.

Abbildung 14-7 Kalibrierkurve



3. Klicken Sie mit der rechten Maustaste erneut im Fenster **Calibration** und klicken Sie dann auf **Show QCs**.

---

**Tipp!** Um einen Punkt der Kurve auszuschließen, klicken Sie mit der rechten Maustaste einen Punkt auf der Kurve an und klicken Sie dann auf **Exclude**.

---

4. Um die Regressionsparameter für einen einzelnen Analyten zu berechnen oder zu ändern, wählen Sie in der Liste **Components and Group** den Analyten aus und klicken Sie dann in der Symbolleiste auf die Schaltfläche **Regression**.

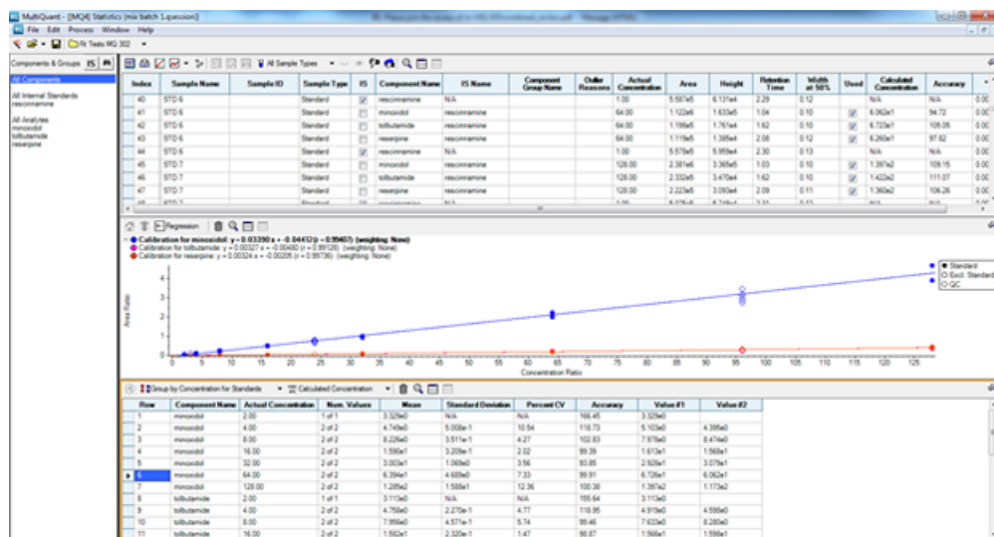
## Überprüfen von Probenstatistiken

Benutzer können Statistiken für eine einzelne Ergebnistabelle bewerten. Die Überprüfung der Peak-Integration, der Kalibrierkurve und der Probenstatistiken ist ein iterativer Prozess.

1. Klicken Sie bei geöffneter Ergebnistabelle auf das Symbol **Show Statistics Table**.
2. Klicken Sie in der Liste **Sample Grouping** auf ein Element, um zu spezifizieren, wie die Probe (für einen bestimmten Analyten) zur Berechnung der Statistik gruppiert werden soll.



Abbildung 14-8 Teilfenster „Statistics“



3. Klicken Sie in der Liste **Metric** auf ein Element, um die Metrik zur Berechnung der Statistik einzustellen.
4. Überprüfen Sie die **Value**-Spalten. Die ausgestrichenen Punkte zeigen ausgeschlossene Datenpunkte an.

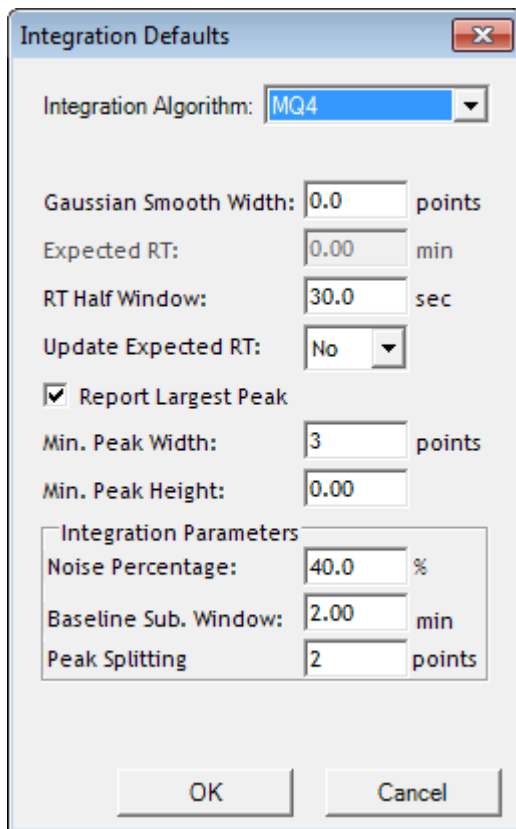
## Verarbeiten von Daten mit dem MQ4-Integrationsalgorithmus

### Peak-Integrationsparameter festlegen

Verwenden Sie das folgende Verfahren, um den Integrationsalgorithmus zu überprüfen oder festzulegen, bevor die Daten verarbeitet werden. Siehe [Parameter bei MQ4-Integrationsalgorithmus auf Seite 121](#).

1. In der Analyst<sup>®</sup> MD-Software, in der **Navigationsleiste** unter **Companion Software** auf **MultiQuant 3.0.3**.
2. Klicken Sie auf **Edit > Project Integration Defaults**.
3. Wählen Sie im Dialog **Integration Defaults MQ4** aus der Liste **Integration Algorithm**.

Abbildung 14-9 Dialog „Integration Defaults“



4. Ändern Sie die Parameter für das Projekt, falls erforderlich, und klicken Sie dann auf **OK**.

Der MQ4 Integrationsalgorithmus und die Parametereinstellungen werden für alle neuen Methoden verwendet, die in diesem Ordner **Example** erstellt werden. Diese Standardeinstellungen sind projektbasiert. Um die Standardeinstellungen für andere Projekte zu ändern, wiederholen Sie dieses Verfahren für das ausgewählte Projekt.

## Erstellen einer Ergebnistabelle

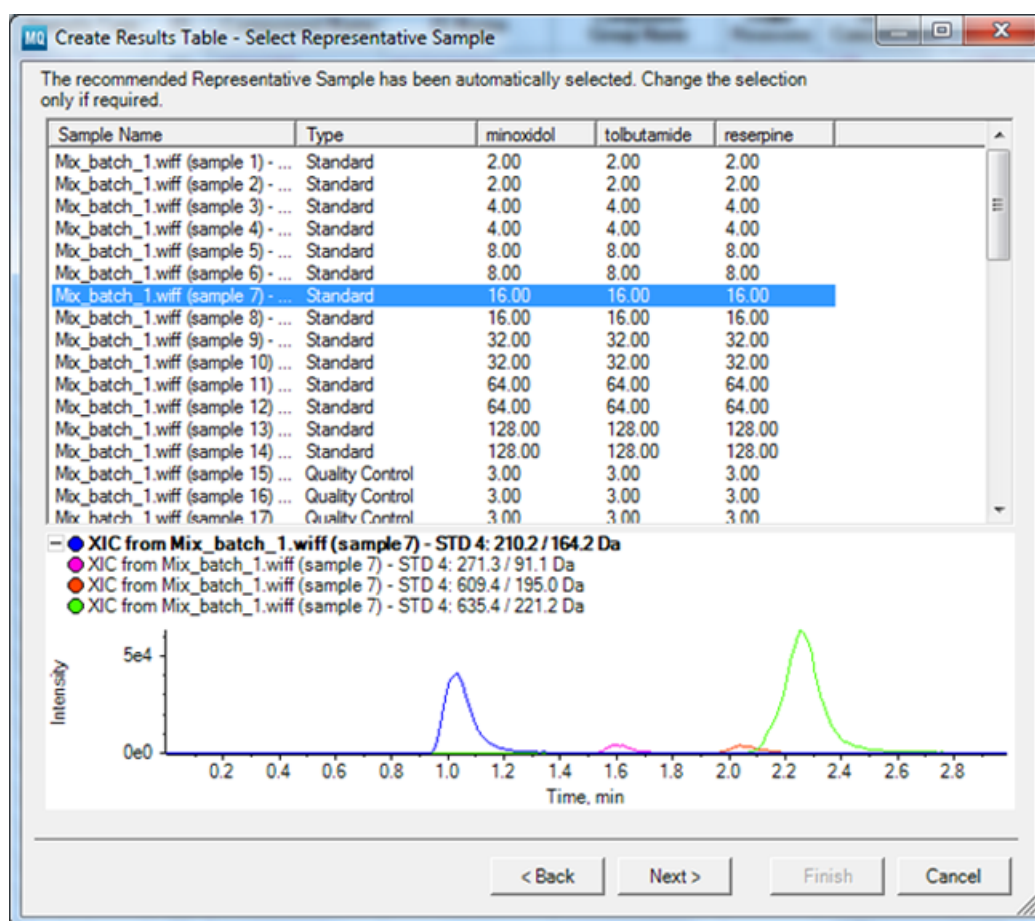
1. Klicken Sie auf **File > New Results Table (Datei > Neue Ergebnistabelle)**.
2. Erweitern Sie auf der Seite **Create Results Table - Select Samples (Ergebnistabelle erstellen - Proben auswählen)** den Ordner **Example Data (Beispieldaten)** und ziehen Sie dann die Datei **Mix\_batch\_1.wiff** in das Fenster **Selected (Ausgewählt)**.
3. Klicken Sie auf **Next (Weiter)**.
4. Klicken Sie auf die Option **Create New Method (MQ4) (Neue Methode erstellen (MQ4))**.
5. Klicken Sie auf **New (Neu)**.
6. Geben Sie einen Namen für die Methode im Dialog **Save Quantitation Method As (Quantifizierungsmethode speichern unter)** ein und klicken Sie auf **Save (Speichern)**.

In diesem Tutorial wird eine Methode erstellt. Beim Erstellen von Methoden haben Sie die Gelegenheit, für die Integration der Daten verschiedene Parameter zu überprüfen und anzuwenden.

Wenn eine vorhandene Methode vorliegt, wählen Sie die Option **Choose Existing Method (Vorhandene Methode auswählen)** und markieren Sie danach das Kontrollkästchen **Edit Method (Methode bearbeiten)**, um verschiedene Parameter zu bewerten und auf die Methode anzuwenden. Wenn das Kontrollkästchen **Edit Method** nicht markiert wird, erstellt der Assistent die Ergebnistabelle anhand der vorhandenen Methode.

7. Auf der Seite **Create Results Table - Select Representative Sample (Ergebnistabelle erstellen - Repräsentative Probe auswählen)** wurde eine repräsentative Probe empfohlen und ausgewählt.

**Abbildung 14-10 Seite „Create Results Table - Select Representative Sample“ (Ergebnistabelle erstellen - Repräsentative Probe auswählen)**



8. Klicken Sie auf **Next**.

Die Software empfiehlt eine repräsentative Probe basierend auf der Auswahl eines Chromatogramms, das die beste Möglichkeit bietet, Integrationsparameter auszuwählen, die für den gesamten Batch passend sind. Es wird empfohlen, den zweitniedrigsten Konzentrationsstandard oder QC-Probe für den MQ4-Integrationsalgorithmus auszuwählen, wenn die Analyt-Konzentrationsinformation in die .wiff-Datei eingebettet ist. Wenn der Konzentrationsbereich von eins bis acht reicht, ist der zweitniedrigste zwei. Wenn

die repräsentative Standardprobe nicht intensiv genug ist, wählen Sie eine andere repräsentative Probe, indem Sie auf die Schaltfläche **Back (Zurück)** im Assistenten klicken und dann eine andere Probe auswählen. Während der Peak-Bewertung kann eine andere Probe ausgewählt werden. Siehe [Peaks bewerten auf Seite 110](#).

9. Bestätigen Sie auf der Seite **Create Results Table - Define Components (Ergebnistabelle erstellen - Komponenten definieren)** die internen Standards und die Analyten.

**Abbildung 14-11** Seite „Create Results Table - Define Components“ (Ergebnistabelle erstellen - Komponenten definieren)

MQ Create Results Table - Define Components

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: MRM (4 transitions)

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinnamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinnamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinnamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinnamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

< Back   Next >   Finish   Cancel

10. Klicken Sie auf **Next**.

---

**Hinweis:** Wenn eine Erfassungsmethode erstellt wird und der Komponentennamen in der Spalte **ID** der Tabelle „Massenbereiche“ aufgenommen ist, wird dieser Name automatisch auf der Seite **Define Components (Komponenten definieren)** ausgefüllt. Wenn der Komponentennamen nicht aufgenommen wurde, aktualisieren Sie die Tabelle manuell mit dem Komponentennamen. Wenn ein Komponentennamen mit der Erweiterung .IS versehen ist, identifiziert die Software die Komponente als einen internen Standard und ordnet die .IS-Komponente als internen Standard ihrem entsprechenden Analyt zu.

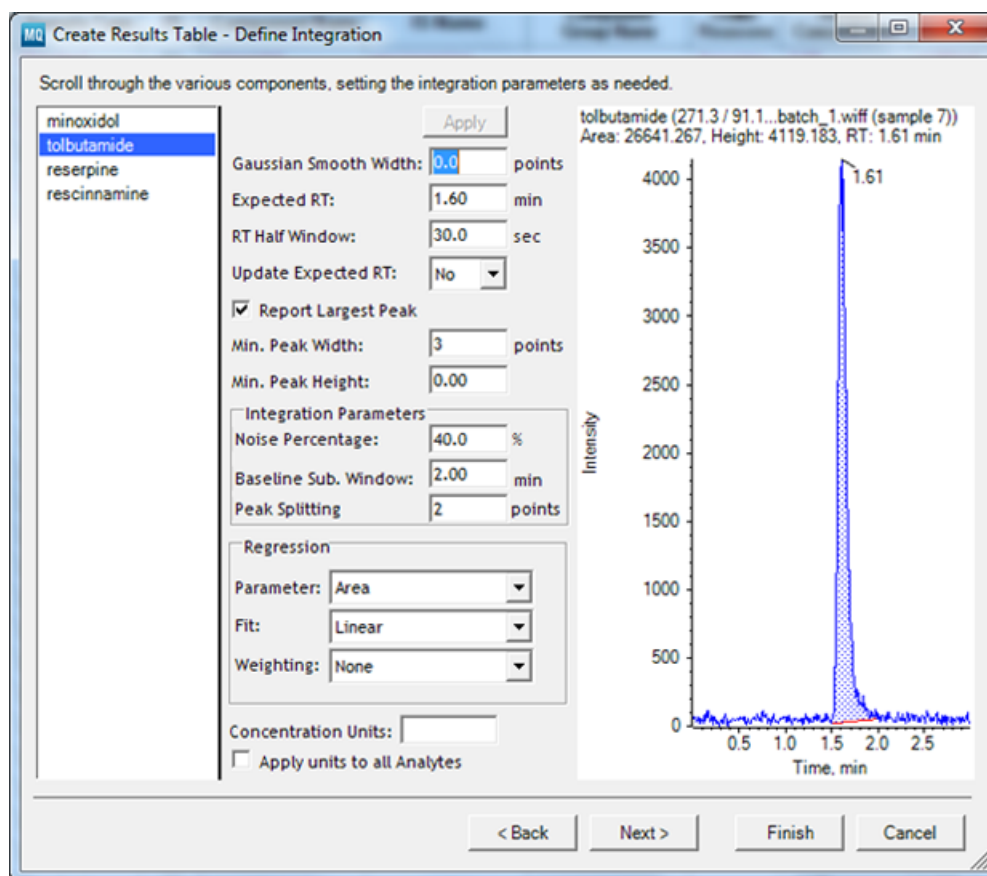
---

Auf der Seite **Create Results Table - Define Integration (Ergebnistabelle erstellen - Integration definieren)** werden die Analyten und internen Standards auf der linken Seite dargestellt. Die aktuellen Integrationsparameter wurden für die repräsentative Probe übernommen und das Chromatogramm wird angezeigt.

Die Komponenten der zuvor ausgewählten repräsentativen Probe erscheinen im Fenster **Integration**. Die Peaks in dieser repräsentativen Probe werden anhand der im Dialog **Integration Defaults (Integrationsstandards)** eingestellten Parameter ermittelt und integriert.

11. Prüfen Sie durch Anklicken der Komponentennamen im linken Bereich die Peak-Integration jeder Komponente. Passen Sie die Integrationsparameter an, damit der repräsentative Peak richtig integriert wird. Siehe [Peak-Integrationsparameter festlegen auf Seite 105](#).

**Abbildung 14-12 Seite „Create Results Table - Define Integration“ (Ergebnistabelle erstellen - Integration definieren)**



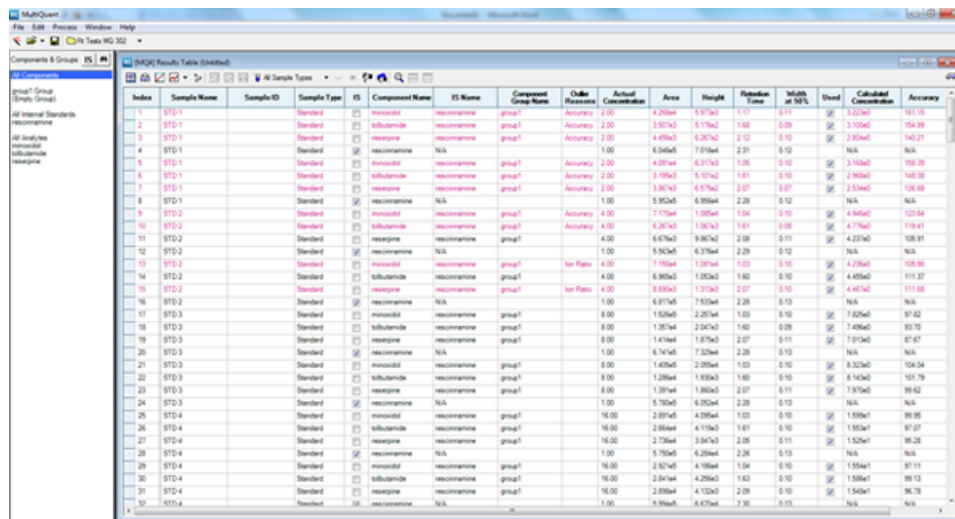
12. Verwenden Sie für die Komponenten **Minoxidol Tolbutamid** und **Reserpin** die Parameter der Gruppe **Regression**, um Folgendes festzulegen, und klicken Sie dann auf **Apply (Anwenden)**:

- **Parameter:** Area (Fläche)
- **Fit:** Linear
- **Weighting (Gewichtung):** Keine

- Legen Sie die **Concentration Units (Konzentrationseinheiten)** auf **ng/ml** fest und wählen Sie dann das Kontrollkästchen **Apply units to all Analytes (Einheiten auf alle Analyten anwenden)**.
- Klicken Sie auf **Apply (Anwenden)**.
- Klicken Sie auf **Finish (Beenden)**.

Die Beispieldateien werden automatisch eingebunden und eine Ergebnistabelle erzeugt.

Abbildung 14-13 Ergebnistabelle



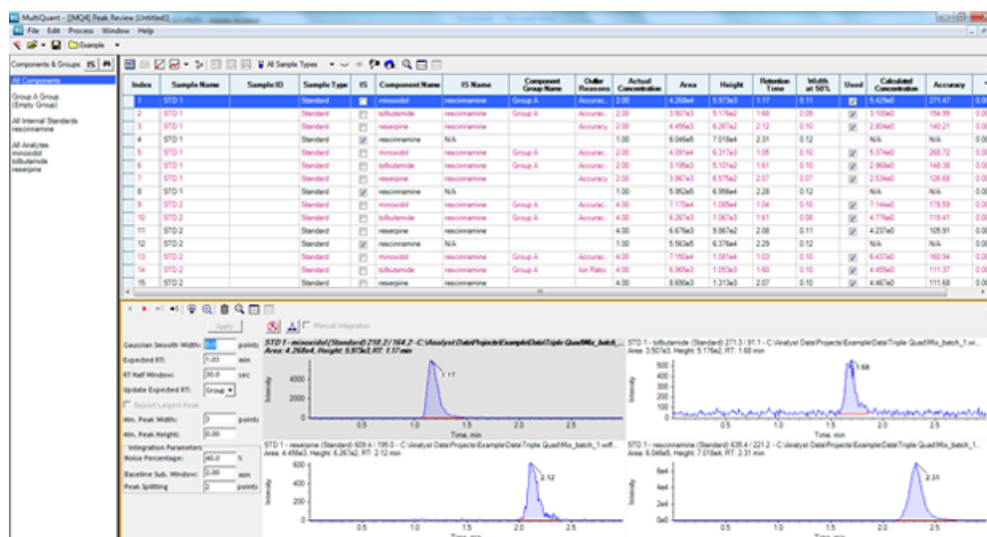
Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	ID Name	Component Group Name	Outer Reason	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.25e4	5.91e4	1.17	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	3.23e4	161.16
2	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.92e4	5.17e4	1.60	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.10e4	154.99
3	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.49e4	6.26e4	2.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.89e4	140.21
4	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.64e4	7.81e4	2.31	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
5	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.07e4	6.31e4	1.08	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.18e4	158.39
6	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.19e4	5.10e4	1.01	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.86e4	148.38
7	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.92e4	6.57e4	2.07	0.07	<input checked="" type="checkbox"/>	2.53e4	126.68
8	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.92e4	6.99e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
9	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	7.17e4	1.08e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.94e4	123.64
10	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.24e4	1.36e4	1.01	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.16e4	116.41
11	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		4.00	6.67e4	9.36e4	2.18	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.22e4	108.91
12	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.92e4	6.57e4	2.29	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
13	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	7.10e4	1.01e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.29e4	105.30
14	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recombinant	group1		4.00	6.90e4	1.03e4	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.49e4	111.37
15	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.62e4	1.33e4	2.07	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.40e4	111.68
16	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.61e4	7.83e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
17	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.52e4	2.25e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.62e4	87.62
18	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recombinant	group1		8.00	1.30e4	2.24e4	1.60	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	7.49e4	83.70
19	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.47e4	1.87e4	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.01e4	87.67
20	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.14e4	7.32e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
21	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.43e4	2.35e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.32e4	104.54
22	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recombinant	group1		8.00	1.28e4	1.83e4	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.14e4	101.79
23	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.38e4	1.86e4	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.97e4	88.62
24	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.70e4	6.92e4	2.29	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
25	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.89e4	4.28e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.19e4	89.95
26	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recombinant	group1		16.00	2.88e4	4.11e4	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.93e4	87.07
27	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.73e4	3.36e4	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	1.52e4	85.28
28	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.70e4	6.28e4	2.26	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
29	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.82e4	4.18e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.85e4	97.11
30	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recombinant	group1		16.00	2.84e4	4.29e4	1.63	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.98e4	88.13
31	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.89e4	4.12e4	2.09	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.94e4	96.78
32	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.19e4	6.67e4	2.30	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A

Siehe [Peaks bewerten auf Seite 102](#) zum Verwalten von Daten in der Ergebnistabelle. Für weitere Informationen zum Erstellen von Projekten siehe [Berichte auf Seite 138](#).

## Peaks bewerten

- Klicken Sie auf das Symbol **Peak Review (Peak-Bewertung)**.

Abbildung 14-14 Teilfenster „Peak Review“



2. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Tabelle und danach auf **Column Settings (Spalteneinstellungen)**.
3. Klicken Sie im Fenster **Peak Review (Peak-Bewertung)** mit der rechten Maustaste und klicken Sie danach auf **Options (Optionen)**.
4. Ändern Sie in der Registerkarte **Zooming** die Option **Zoom time axis to view peak (Zeitachse vergrößern, um Peak anzuzeigen)** zu **3RT Windows**.
5. Falls ein Chromatogramm verschiedene Peaks enthält und ein inkorrekt integrierter Peak wurde, ziehen Sie über den korrekten Peak, um eine neue **Expected RT (Erwartete Retentionszeit)** einzustellen. Passen Sie gegebenenfalls die Parameter zum Finden von Peaks sowie die Integrationsparameter an. Siehe [Integrationsalgorithmen auf Seite 114](#).
6. Um die neuen Parameter für dieselbe Komponente für alle anderen Proben zu übernehmen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Chromatogramm und dann auf **Update Quantitation Method for Component**.
7. Die eingebettete Quantifizierungsmethode kann während des Betrachtens der **Ergebnistabelle** durch Klicken auf **Edit (Bearbeiten) > Modify Results Table Method (Methode für Ergebnistabelle ändern)** geändert werden. Der Benutzer kann die Regressionsoptionen der Integrationsparameter sowie die Komponenteninformationen für jede Komponente ändern.

Wenn die Regressionsoptionen der Integrationsparameter sowie die Komponenteninformationen geändert werden, wird nur die Quantifizierungsmethode geändert, die in der **Ergebnistabelle** eingebettet ist. Die Quantifizierungsmethodendatei selbst, welche zum Erstellen der **Ergebnistabelle** verwendet wird, bleibt unverändert. Um diese eingebettete Quantifizierungsmethode zur Verarbeitung anderer Dateien zu verwenden, exportieren Sie diese eingebettete Methode mithilfe der Funktion **Export (Exportieren)** in eine Methodendatei.



---

**Hinweis:** Löschen Sie die Integration, indem Sie auf **Set Peak to Not Found (Peak auf „Nicht gefunden“ einstellen)** klicken, um die Rohdaten anzuzeigen, bevor der Peak manuell integriert wird.

---

- Um den manuellen Integrationsmodus zu verwenden, klicken Sie auf das Symbol **Enable Manual Integration Mode (Manuellen Integrationsmodus aktivieren)** im Fenster **Peak Review (Peak-Bewertung)**, um den manuellen Integrationsmodus zu verwenden. Ziehen Sie den Cursor von der Basis der einen Seite des relevanten Peaks auf die andere Seite. Der Peak wird jetzt manuell integriert und die vorher verwendeten Integrationsparameter stehen nicht mehr zur Verfügung.

---

**Tipp!** Falls der Peak gerade modifiziert worden ist, setzen Sie ihn durch Rechtsklicken und anschließendes Klicken auf **Revert Peak to Original Method** zur ursprünglichen Methode zurück.

---

---

**Hinweis:** Das Feld **Calculated Concentration** in der **Ergebnistabelle** zeigt alle Änderungen an, die sich aus der Anpassung der Kurve an die Punkte des Standards ergeben.

---

## Ändern der Kalibrierkurve

- Klicken Sie auf **Show Calibration Curve (Kalibrierkurve anzeigen)**, um die Kalibrierkurve anzuzeigen.
- Klicken Sie mit der rechten Maustaste im Fenster **Calibration (Kalibrierung)** und klicken Sie dann auf **Show Legend (Legende anzeigen)**.
- Klicken Sie mit der rechten Maustaste erneut im Fenster **Calibration (Kalibrierung)** und klicken Sie dann auf **Show QCs (QCs anzeigen)**.

---

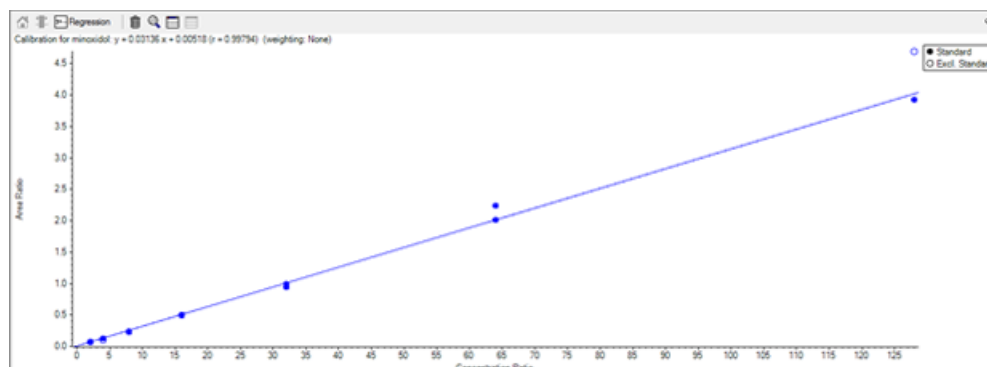
**Tipp!** Um einen Punkt der Kurve auszuschließen, klicken Sie mit der rechten Maustaste einen Punkt auf der Kurve an und klicken Sie dann auf **Exclude**.

---

- Um die Regressionsparameter für einen einzelnen Analyten zu berechnen oder zu ändern, wählen Sie im Fenster **Components and Group (Komponenten und Gruppe)** den Analyten aus und klicken Sie dann in der Symbolleiste auf die Schaltfläche **Regression**.
- Um die Kalibrierkurve besser anzupassen, schließen Sie die zweite STD-2-Probe (Konzentration 4,00 ng/ml) und die erste STD-7-Probe (Konzentration 128,00 ng/ml) aus. Verwenden Sie dazu die Spalte **Actual Concentration (Ist-Konzentration)** und die Spalte **Used (Verwendet)**, um die Proben zu entfernen. Das Häkchen im Kontrollkästchen in der Spalte „Used“ (Verwendet) muss gelöscht werden, um den Punkt aus der Kurve zu entfernen. Die Kalibrierkurve sollte jetzt wie jene in [Abbildung 14-15](#) aussehen.



Abbildung 14-15 Kalibrierkurve mit ausgeschlossenen Proben



## Überprüfen von Probenstatistiken

Benutzer können Statistiken für eine einzelne Ergebnistabelle bewerten. Die Überprüfung der Peak-Integration, der Kalibrierkurve und der Probenstatistiken ist ein iterativer Prozess.

1. Klicken Sie bei geöffneter Ergebnistabelle auf das Symbol **Show Statistics Table (Statistiktabelle anzeigen)**.

Abbildung 14-16 Statistiktabelle

MultiQuant - [MQL] Statistics (Untitled) [x]

File Edit Process Window Help

Components & Groups

All Components

Group & Group (Empty Group)

All Internal Standards

ibuprofen

All Analysis

ibuprofen

ibuprofen

Index

Sample Name

Sample ID

Sample Type

IS

Component Name

IS Name

Component Group Name

Order

Actual Concentration

Area

Height

Retention Time

Weight 100%

Used

Calculated Concentration

Accuracy

2	STD 1		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Accurate	2.00	3.50763	5.17662	1.68	0.08		2.42740	121.33	0.00
6	STD 1		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	2.00	3.10563	5.10762	1.61	0.10		2.29240	114.59	0.00
16	STD 2		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	4.00	6.26763	1.06762	1.61	0.08		4.13740	103.43	0.00
14	STD 2		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	4.00	6.90663	1.06362	1.60	0.10		3.80960	99.23	0.00
18	STD 3		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	8.00	1.36764	2.04763	1.60	0.08		6.91240	96.40	0.00
22	STD 3		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	8.00	1.20664	1.83063	1.60	0.10		7.57240	94.68	0.00
26	STD 4		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	16.00	2.68464	4.11063	1.61	0.10		1.51161	94.44	0.00
30	STD 4		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	16.00	2.84764	4.20663	1.63	0.10		1.54561	96.54	0.00
34	STD 5		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	32.00	5.67064	8.42763	1.61	0.08		2.88761	90.23	0.00
38	STD 5		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	32.00	5.61764	8.42763	1.62	0.08		3.05061	99.59	0.00
42	STD 6		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	64.00	1.11065	1.76264	1.61	0.08		6.30461	99.50	0.00
46	STD 6		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	64.00	1.10865	1.76164	1.62	0.10		6.76261	105.97	0.00
50	STD 7		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	128.00	2.33065	3.47064	1.62	0.10		1.44462	112.83	0.00
54	STD 7		Standard		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Ion Ratio	128.00	2.20565	3.45064	1.60	0.08		1.19562	90.28	0.00
58	QC 1		Quality Control		ibuprofen	ibuprofen	Group A	Accurate	1.00	5.75063	8.70762	1.60	0.08		3.79560	125.16	0.00

Group by Concentration for Standards

Row

Component Name

Actual Concentration

Num. Values

Mean

Standard Deviation

Percent CV

Accuracy

Value #1

Value #2

1	ibuprofen	2.00	2 of 2	2.3060	9.547e-2	4.04	117.96	2.42740	2.29240
2	ibuprofen	4.00	2 of 2	3.97360	2.305e-1	5.84	99.33	4.13740	3.80940
3	ibuprofen	8.00	2 of 2	7.24240	4.670e-1	6.45	90.52	6.91240	7.57240
4	ibuprofen	16.00	2 of 2	1.52061	2.371e-1	1.55	95.49	1.51161	1.54561
5	ibuprofen	32.00	2 of 2	2.97061	1.21060	4.08	92.91	2.88761	3.05061
6	ibuprofen	64.00	2 of 2	6.54061	3.38060	5.17	102.23	6.30461	6.76261
7	ibuprofen	128.00	2 of 2	1.30062	2.04761	15.70	101.95	1.44462	1.19562

2. Klicken Sie in der Liste **Sample Grouping** auf ein Element, um zu spezifizieren, wie die Probe (für einen bestimmten Analyten) zur Berechnung der Statistik gruppiert werden soll
3. Klicken Sie auf die Spalte **Value #1 (Wert Nr. 1)**.

---

**Hinweis:** Die Option **Group by Concentration for Standards and QCs (Gruppe nach Konzentration für Standards und QCs)** basiert auf der **Displayed Actual Concentration (Angezeigten Ist-Konzentration)** und nicht auf der in der Ergebnistabelle gespeicherten **Actual Concentration (Ist-Konzentration)**. Falls die Std 1 Konzentration 0,001, die Std 2 Konzentration 0,005 beträgt und für das Anzeigeformat 0 eingestellt ist, werden Std 1 und Std 2 zusammen gruppiert, da sie beide als 0 behandelt werden. Um sie getrennt zu gruppieren, stellen Sie die Genauigkeit der Option **Analyte Concentration (Analyt-Konzentration)** im Dialog **Column Settings (Spalteneinstellungen)** auf 0,000 ein. Falls Std 1 den Wert 0,500 und Std 2 den Wert 0,499 hat, stellen Sie die Genauigkeit auf 0,00 ein, um sie zusammen zu gruppieren. Siehe [Ändern der in der Ergebnistabelle angezeigten Spalten auf Seite 95](#).

---

4. Klicken Sie in der Liste **Metric (Metrik)** auf ein Element, um die Metrik zur Berechnung der Statistik einzustellen.
5. Überprüfen Sie die **Value**-Spalten. Die ausgestrichenen Punkte zeigen ausgeschlossene Datenpunkte an.

## Integrationsalgorithmen

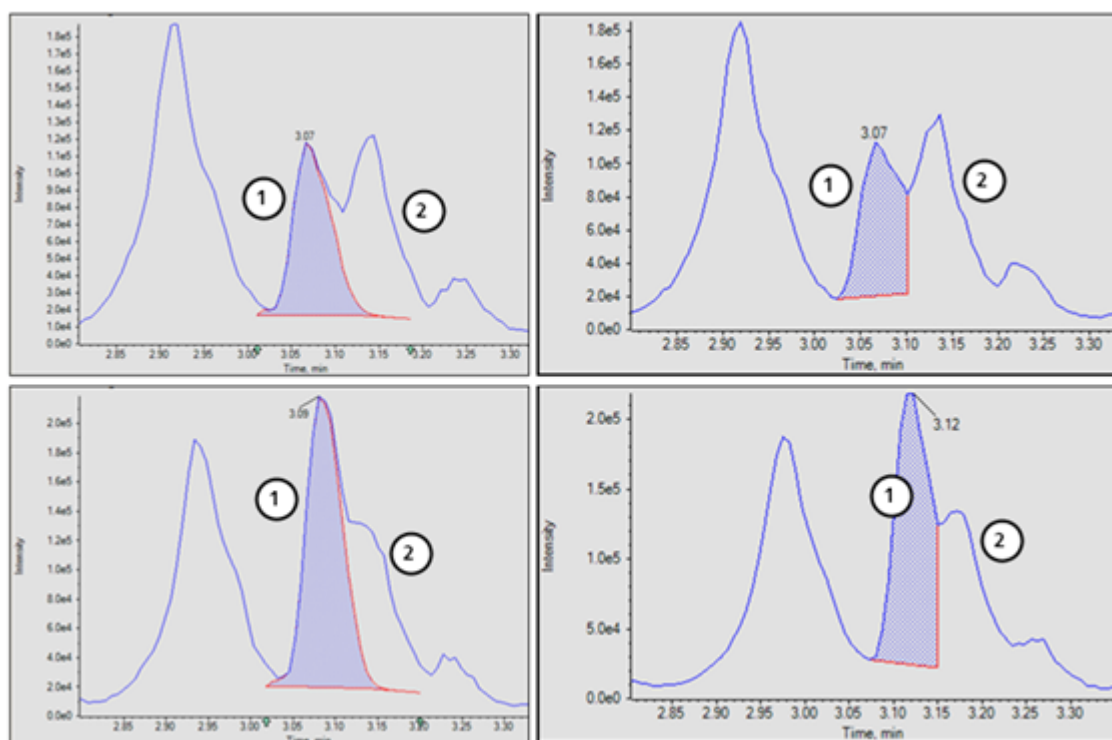
Dieser Abschnitt beschreibt die verschiedenen Parameter, die für jeden Algorithmus verfügbar sind.

### Über den SignalFinder Integrationsalgorithmus

#### Eng eluierende Peaks

Der SignalFinder™ bietet eine genauere Darstellung des Peak-Bereichs von eng eluierenden Peaks. [Abbildung 14-17](#) enthält ein Beispiel dafür, wie die Integrationsalgorithmen MQ4 (Diagramm rechts) und SignalFinder (Diagramm links) eng eluierende Peaks verarbeiten. In diesem Beispiel stört der Hintergrund-Peak (Element 2) den interessierenden Peak (Element 1). Da der störende Peak entweder aus dem LC oder der Matrix stammt, ist er im gesamten Batch relativ konsistent. Die Intensität des Analyt-Peaks steigt jedoch mit der Analyt-Konzentration, was zu einer drastischen Veränderung der kombinierten Peaks führt. Der SignalFinder Integrationsalgorithmus, der auf einem benutzerdefinierten Peak-Modell basiert, kann den interessierenden Peak konsistent bei allen Konzentrationsstufen identifizieren, während der MQ4-Integrationsalgorithmus nur eine vertikale Linie vom Tal zur Basislinie zeichnen kann. Dies weist nur auf einen partiellen Peak hin, der Fehler in die Peakfläche einführt.

Abbildung 14-17 Eng eluierende Peaks



Position	Beschreibung
1	Interessierender Peak
2	Ko-eluierender Hintergrund-Peak

### Tailing-Peaks

Bei „Tailing“-Peaks sind frühere Algorithmen oft inkonsistent bei der Auswahl der Retentionszeit, zu der der Peak endet. Abhängig von der genauen Art des Rauschens in diesem Bereich können zwei Peaks, die ähnlich aussehen, verschiedene berichtete Peak-Enden haben. Die Integration kann normalerweise konsistenter gestaltet werden, indem die Parameter zur Peak-Ermittlung angepasst werden. Dies kostet jedoch Zeit und Arbeit. Mit einem Modellierungsansatz wird die Integration abgeschnitten, wenn das Modell unter einen bestimmten Schwellenwert fällt, sodass sie weniger stark durch Rauschen betroffen ist.

### Gesättigte Peaks

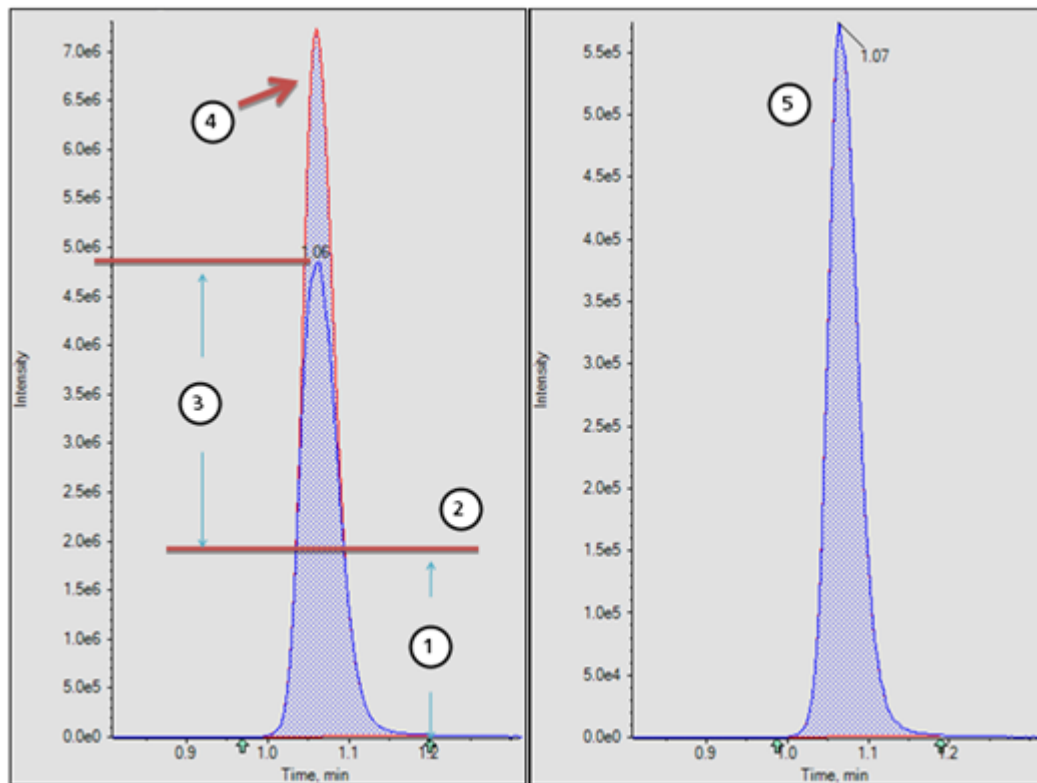
Wenn der Algorithmus ermittelt, dass ein Peak gesättigt ist, verwendet er ein Modell, um vorherzusagen, wie der Peak aussehen könnte, wenn der Detektor nicht gesättigt ist. Dies wird als rotes Profil dargestellt, das über den Peak hinausreicht, um die Reaktion anzunähern, die erhalten worden wäre, wenn der Detektor nicht gesättigt wäre. Diese Funktion korrigiert nur die Sättigung des Detektors, aber nicht die Sättigung der Ionenquelle oder der Säule. [Abbildung 14-18](#) zeigt ein Beispiel für die Sättigungskorrektur.

Bevor Sie den SignalFinder™-Algorithmus verwenden, wählen Sie eine nicht gesättigte Probe, um das Peak-Modell zu erstellen, und legen Sie den Sättigungsschwellenwert auf einen Wert fest, der für den Detektor

angemessen ist. In diesem Beispiel wird ein Sättigungsschwellenwert von  $1.8\text{E}+006$  cps verwendet. Der Algorithmus gleicht den verbleibenden ungesättigten Teil des Peaks, den Peak unter  $1.8\text{E}+006$  cps, mit dem Peak-Modell ab. Der Algorithmus sagt dann den Rest des Peaks basierend auf dem ausgewählten Peak-Modell voraus, was durch die rote Kurve angegeben wird.

**Hinweis:** Der Sättigungsschwellenwert hängt von einer Reihe von Faktoren ab, unter anderem der Art des Detektors, dem Alter des Detektors und der interessierenden Verbindung. Für optimale Ergebnisse muss der Sättigungsschwellenwert entsprechend angepasst werden.

**Abbildung 14-18 Sättigungskorrektur des Detektors**



Position	Beschreibung
1	Nicht gesättigter Teil (mit Peak-Modell abgleichen)
2	Schwellenwert $1.8\text{e}6$ cps
3	Gesättigter Teil
4	Korrigiertes Peak-Profil
5	Peak-Modell

## Hinweise zur Verwendung

Einige Abläufe haben keine typische Probe, die alle interessierenden Komponenten enthält. Bei der Arbeit zur Ermittlung von Medikamenten können Benutzer zum Beispiel nach Oxidationsmetaboliten suchen, indem sie +16 zur Q1-Masse des Ursprungsmedikaments und entweder +0 oder +16 zur Q3-Masse addieren. Diese Metaboliten liegen normalerweise für einige Proben vor, aber nicht unbedingt in der als Modell ausgewählten Probe zur Erstellung der Quantifizierungsmethode. In diesem Fall das SignalFinder™-Algorithmus ein Standardmodell, wenn für einen bestimmten MRM-Übergang kein angemessener Peak vorliegt. In vielen Fällen wird dieses Standardmodell ausreichend genau sein. Es besteht jedoch ebenfalls die Möglichkeit, während der darauf folgenden Peak-Bewertung ein neues Modell zu erstellen, indem eine Probe verwendet wird, die den interessierenden Peak nicht enthält.

## SignalFinder™ Integrationsalgorithmus-Parameter

Die folgenden Parameter werden verwendet, um den Peak von Interesse zu identifizieren und zu berichten. Eine vollständige Liste aller Symbole, finden Sie unter [Integrationsalgorithmusparameter auf Seite 126](#).

### Use Saturation Correction (Sättigungskorrektur verwenden)

Diese Option ist nur verfügbar, wenn die allgemeinen Standardwerte des Algorithmus festgelegt werden, aber nicht bei der Erstellung der Quantifizierungsmethode oder der Bewertung einzelner Peaks, da es nicht sinnvoll ist, diese Einstellung nur für einige Peaks zu verwenden.

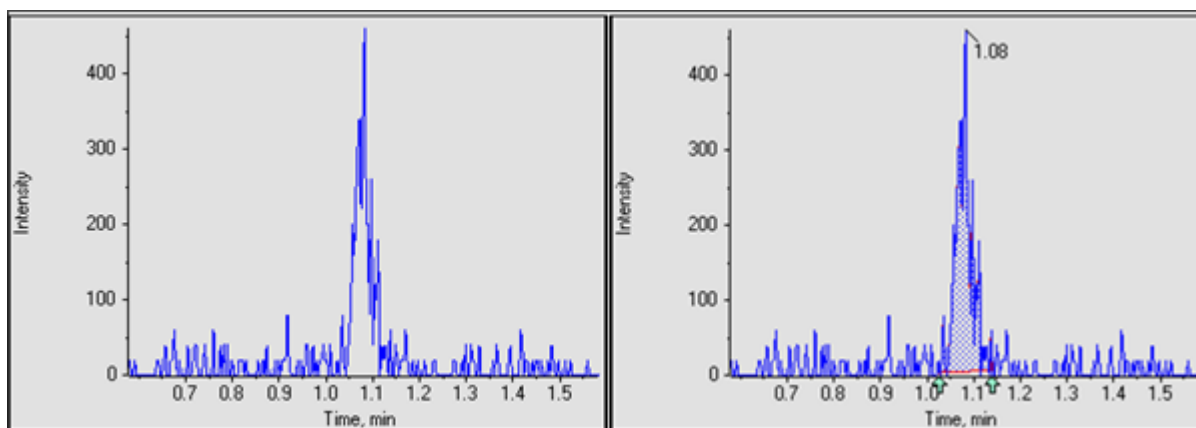
### Sättigungsschwellenwert

Peaks oberhalb des Schwellenwerts werden als gesättigt betrachtet. Dieser Wert ist sensorabhängig.

### S/N-Schwellenwert

Wenn in [Abbildung 14-19](#) der S/N-Schwellenwert auf sieben eingestellt ist (Diagramm links), wird der Peak nicht berichtet. Wenn der S/N-Schwellenwert auf zwei eingestellt ist (Diagramm rechts), wird der Peak berichtet. Dieser Parameter hat keine Auswirkungen auf die Integration.

Abbildung 14-19 S/N-Schwellenwert



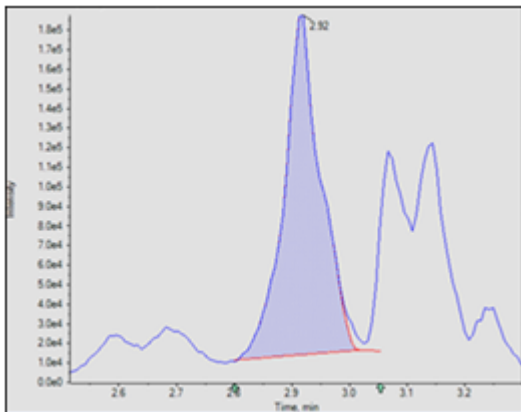
### Confidence Threshold

Dieser Parameter dient dazu, potenzielle falsch-positive Peaks zu filtern. Der Standardwert beträgt 50 %, was normalerweise angemessen ist. Allerdings sollte der Benutzer bei stark verrauschten Daten oder bei Daten, deren Peak-Breite von Probe zu Probe stark variiert, eventuell einen größeren Wert verwenden.

Abbildung 14-20 und Abbildung 14-21 zeigen, wie der **Confidence Threshold** die Zahl der ermittelten Peaks beeinflusst. Wenn der **Confidence Threshold** auf 50 % eingestellt ist, wird der Peak mit der kleinen „Schulter“ als ein einziger Peak identifiziert. Wenn der **Confidence Threshold** auf 16 % gesenkt wird, ermittelt der SignalFinder™-Algorithmus zwei Peaks. Ziehen Sie die Maus über die Peak-Bereiche, um die zwei Peaks zu betrachten.

Um zu bestimmen, welche weiteren Peaks potenziell in diesem einen Peak vorliegen und wenn der korrekte **Confidence Threshold** unbekannt ist, drücken Sie auf **Ctrl** und ziehen Sie die Maus über den Peak-Bereich von Interesse. Dadurch senkt sich der **Confidence Threshold** automatisch und bringt den zweiten Peak von Interesse zum Vorschein, der mit einem **Confidence Threshold** von 50 % nicht auszumachen war.

Abbildung 14-20 50 % Konfidenz



Bei 16 % Konfidenz werden zwei Peaks ermittelt. Ziehen Sie die Maus über die Peak-Fläche, um die zwei Peaks zu identifizieren

Abbildung 14-21 16 % Konfidenz

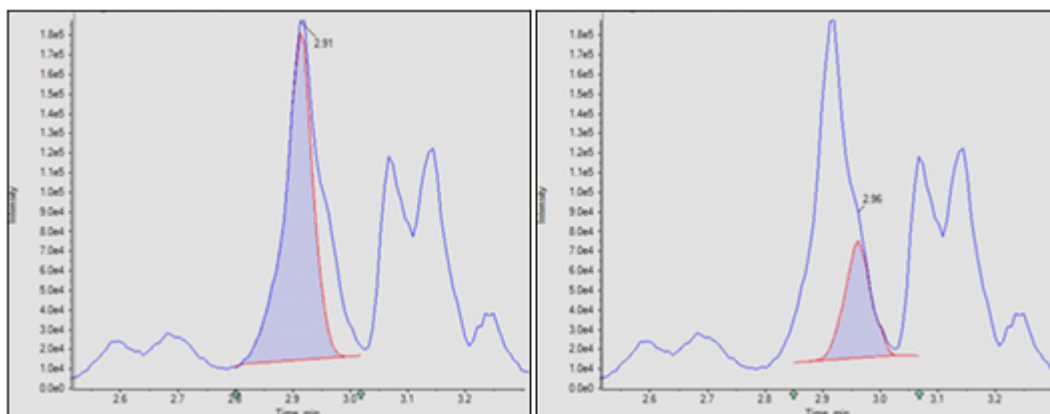
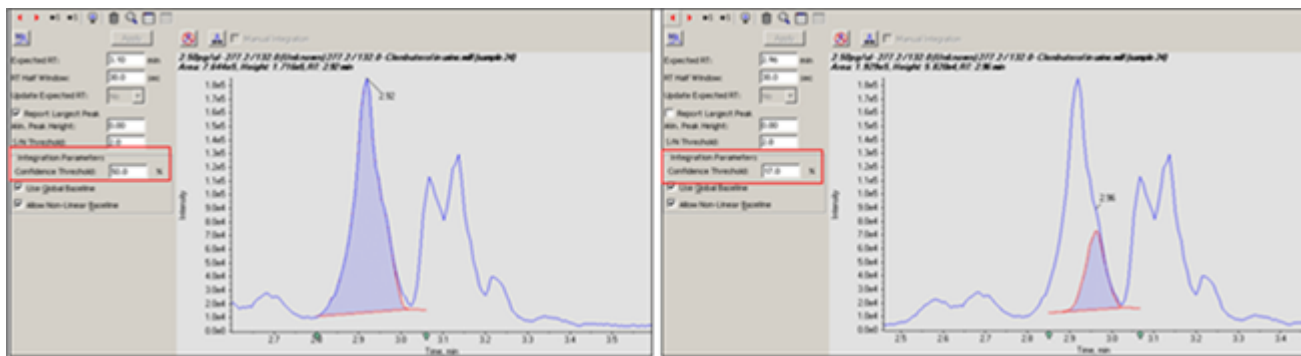


Abbildung 14-22 Parameter für den Confidence Threshold

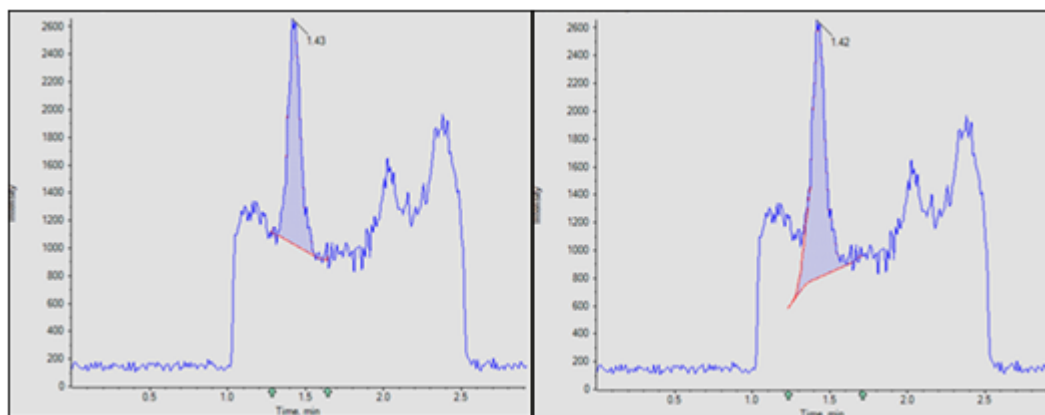


### Globale Basislinie verwenden

Wählen Sie diese Option, um das gesamte Chromatogramm als Basislinie zu nutzen. Falls diese Option nicht ausgewählt wird, bewertet die Quantifizierungssoftware die Änderungen an der Basislinie lokal. [Abbildung 14-23](#) zeigt ein Beispiel für einen Fall, für den die lokale Basislinie verwendet werden sollte.

Das linke Diagramm zeigt ein Chromatogramm, das mit der lokalen Basislinie korrekt integriert wurde. Das rechte Diagramm zeigt dasselbe Chromatogramm, das mithilfe der globalen Basislinie nicht korrekt integriert wurde.

Abbildung 14-23 Globale Basislinie verwenden



### Allow Non-Linear Baseline (Nicht lineare Basislinie zulassen)

Mit dieser Option können Sie zwischen einer linearen oder nicht linearen Basislinie wählen. Eine nicht lineare Basislinie schätzt die Basislinie unter jedem Peak. Die lineare Option platziert eine Linie zwischen den Punkten am Anfang und am Ende dieser spezifischen Gruppe von Peaks. [Abbildung 14-24](#) und [Abbildung 14-25](#) zeigen Beispiele für lineare und nicht lineare Basislinien für koeluiierende Peaks an. Die Elemente 1 bis 4 sind gefaltete Peaks.

Bei mehreren Peaks wird eine nicht lineare Basislinie empfohlen. Bei einem einzelnen Peak ist der Unterschied zwischen linear und nicht linear nicht signifikant.

Abbildung 14-24 Beispiel für eine lineare Basislinie

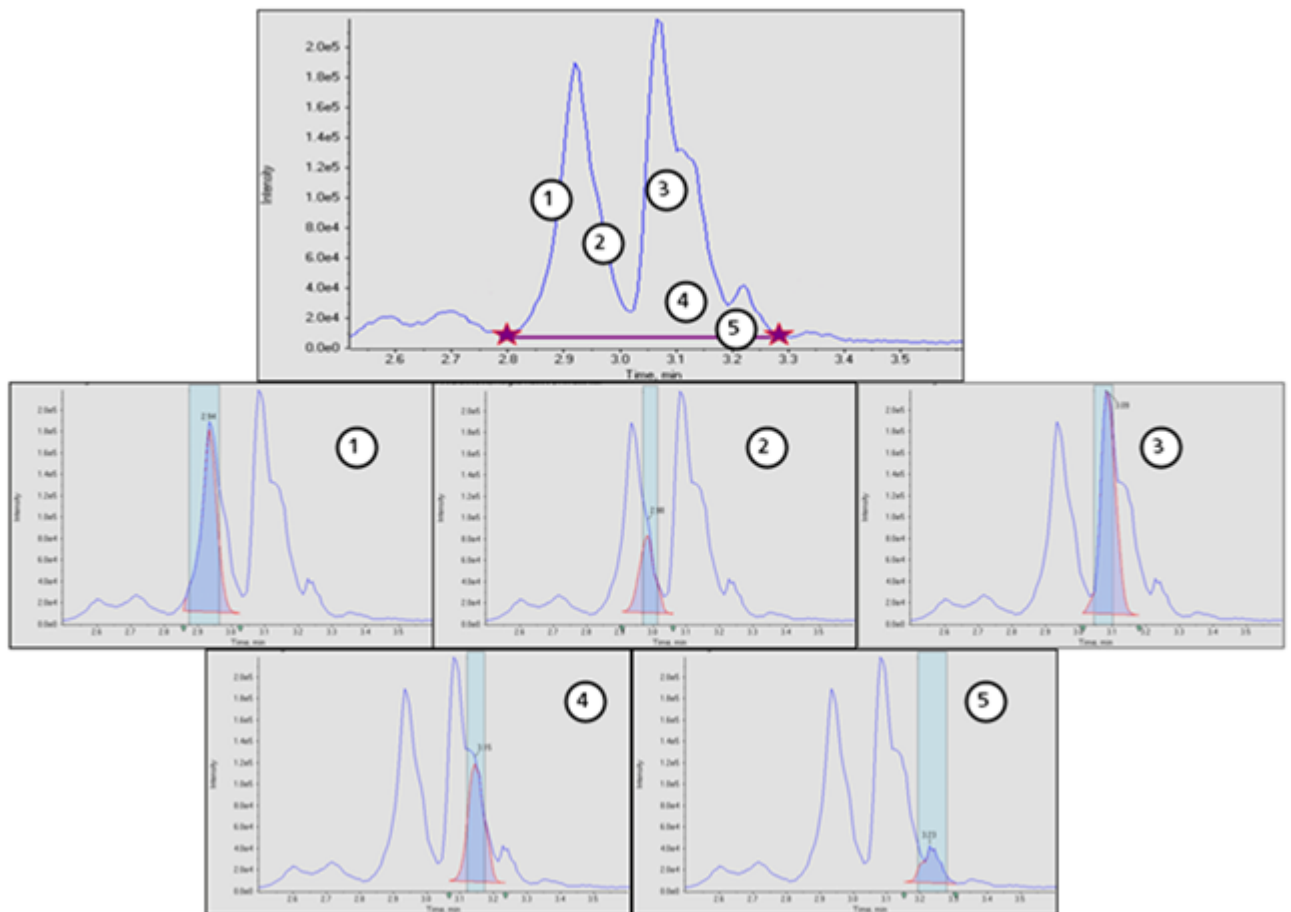
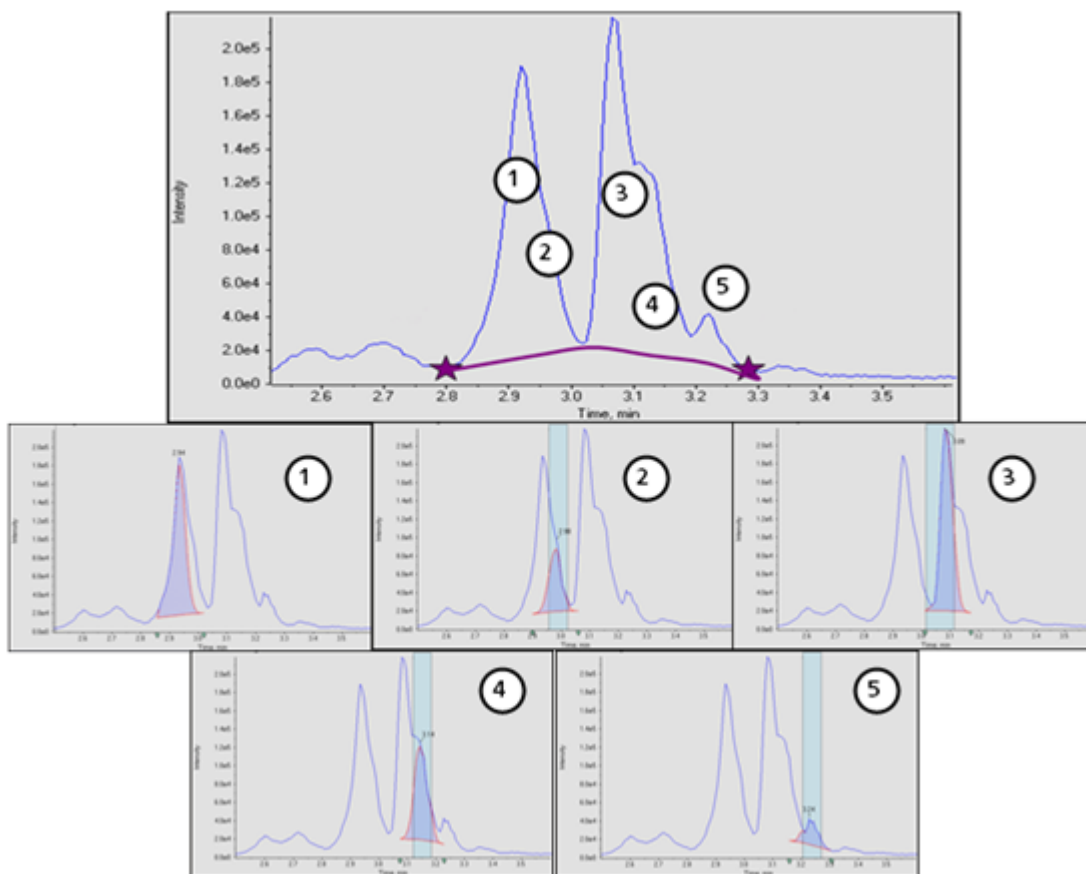




Abbildung 14-25 Beispiel für eine nicht lineare Basislinie



### Tipps zur Verwendung des SignalFinder™ Integrationsalgorithmus

- Zwei Peaks zusammenfassen: Gelegentlich erkennt der SignalFinder Integrationsalgorithmus zwei Peaks. Um die beiden Peaks zusammenzufassen, drücken Sie **Strg** und ziehen Sie dann die Maus über die beiden Peaks. Die Software versucht, die Peaks zusammenzufassen, indem sie die Faltungsempfindlichkeit reduziert, außer, wenn die beiden Peaks zu weit voneinander entfernt sind.
- Start- und Endzeiten des Peaks ändern: Um die Start- und Endzeiten des Peaks entweder bei der Erstellung einer **Ergebnistabelle** oder während der Peak-Bewertung zu ändern, ziehen Sie die Start- und Endpfeile des Peaks.

**Hinweis:** Der Benutzer kann die Start- und Endpfeile nur innerhalb von angemessenen Grenzwerten ändern.

### Parameter bei MQ4-Integrationsalgorithmus

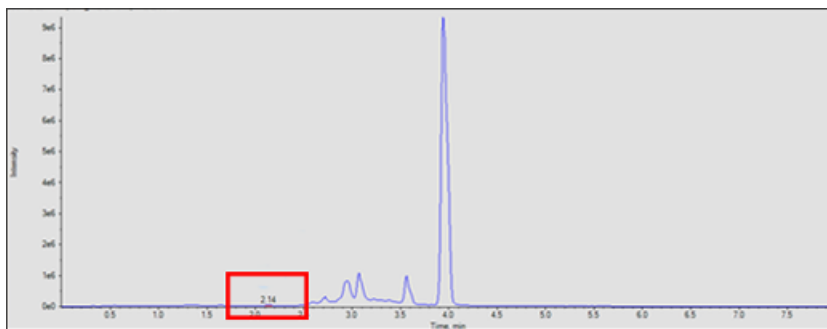
Die folgenden Parameter werden verwendet, um den Peak von Interesse zu identifizieren und zu berichten. Eine vollständige Liste aller Symbole, finden Sie unter [Integrationsalgorithmusparameter auf Seite 126](#).

### Noise Percentage

Dieser Parameter wird verwendet, um den Rauschpegel in den Chromatogrammen zu schätzen. Beim angegebenen Prozentsatz der Datenpunkte mit der niedrigsten Intensität wird davon ausgegangen, dass es sich bei diesen um Rauschen handelt.

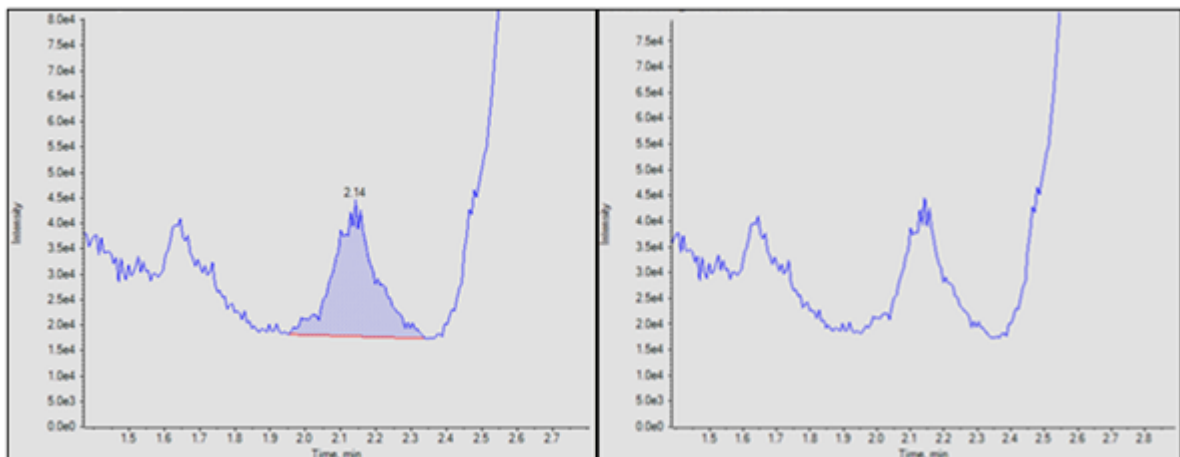
Typische Werte liegen zwischen 20 % und 60 %. Falls kleine Peaks aufgrund des Vorhandenseins größerer Peaks nicht ausgemacht werden können, sollte der Prozentsatz des Rauschens verringert werden. [Abbildung 14-26](#) ist ein Beispiel für einen kleinen Peak bei Vorhandensein eines extrem großen Peaks. Dieser Peak kann nicht ausgemacht werden, wenn der Prozentsatz des Rauschens auf 90 % eingestellt ist, ist allerdings erkennbar, wenn der Prozentsatz des Rauschens auf 40 % eingestellt ist.

**Abbildung 14-26 Interessierender Peak**



In [Abbildung 14-27](#) zeigt das linke Diagramm den Prozentsatz des Rauschens auf 40 % eingestellt. Das rechte Diagramm ist auf 90 % eingestellt.

**Abbildung 14-27 Rauschen**



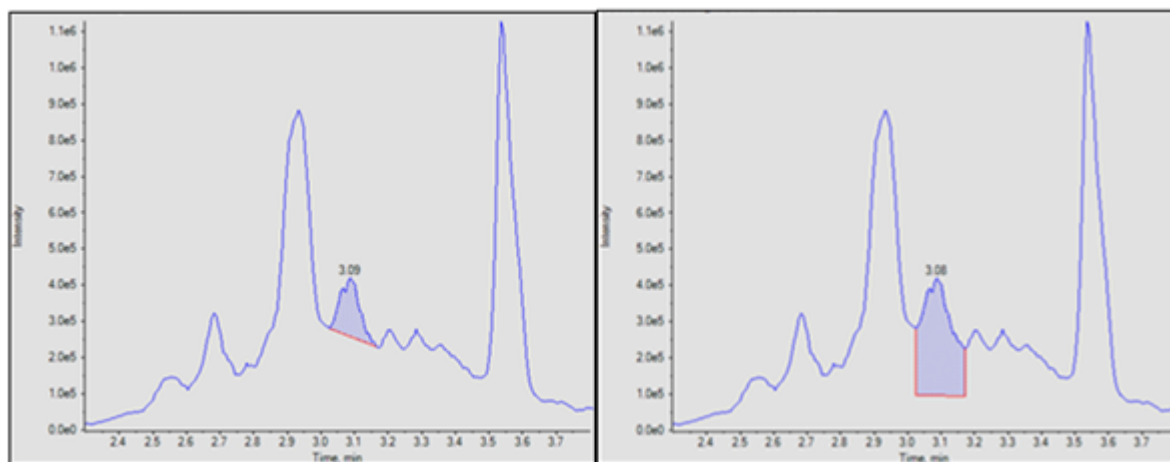
### Baseline Sub. Window

Nach der Glättung, jedoch vor der weiteren Verarbeitung werden Chromatogramme Basislinien-subtrahiert, um Datenhöcker zu entfernen. Für jeden Datenpunkt wird die Basislinie mithilfe der Datenpunkte sowohl der

linken als auch der rechten Seite des derzeitigen Punktes mit minimaler Intensität (innerhalb des Subtraktionsfensters) berechnet.

Der genaue Wert dieses Parameters ist nicht wesentlich, da er mindestens auf ein Mehrfaches der erwarteten Peak-Breite eingestellt wird.

**Abbildung 14-28 Baseline Subtraction Window**



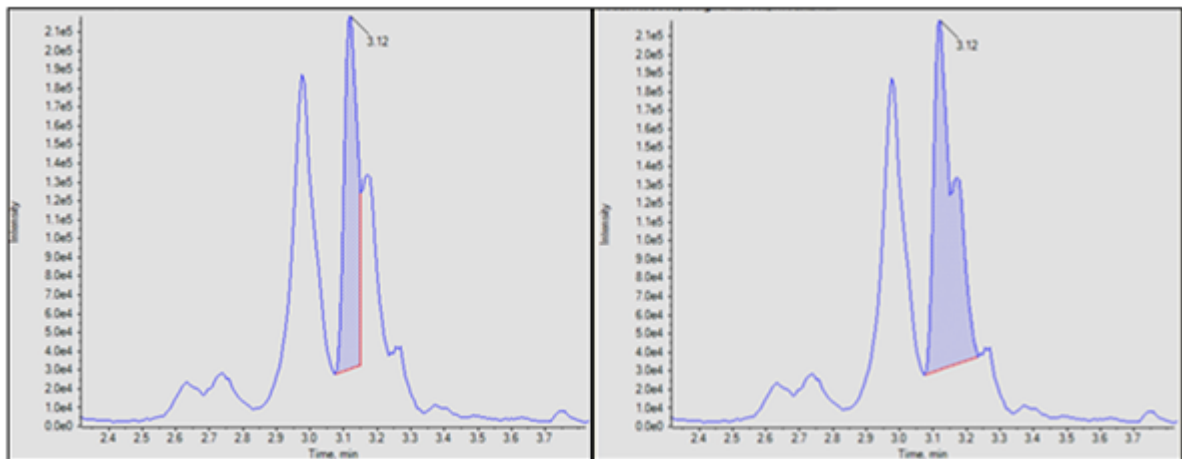
## Peak Splitting

Dieser Parameter steuert, ob ein potenziell verrauschter Peak als einzelner Peak oder als zwei (oder mehr) separate Peaks erfasst wird. Wenn die „Senke“ zwischen zwei potenziellen Peaks geringer als der angegebene Wert ist, wird ein einzelner Peak ermittelt. Andernfalls sind es zwei.

Wenn ein hoher Wert für diesen Parameter eingestellt wird, werden verrauschte Peaks nicht geteilt und als zwei separate Peaks erfasst. Es muss jedoch ein niedrigerer Wert eingestellt werden, wenn zwei eluierende (überlappende) zu unterscheidende Peaks vorhanden sind.

Das Diagramm links zeigt eine Peak-Teilung mit zwei Punkten. Das Diagramm rechts zeigt eine Peakteilung mit drei Punkten.

Abbildung 14-29 Peak Splitting



## Optionale Aufgaben

Dieser Abschnitt enthält optionale Aufgaben, die verwendet werden können, um die Datenanalyse zu verbessern.

### Metrische Kurven erstellen

Verwenden Sie eine **Metric Plot**, um die Werte in einer Spalte der **Results Table** in Abhängigkeit von der Zeilennummer oder einer anderen Spalte abzubilden. Diese Kurven sind bei der Sichtprüfung der Daten sehr hilfreich, insbesondere wenn nicht jedes Chromatogramm manuell mithilfe des Fensters **Peak Review** geprüft werden muss.

---

**Hinweis:** Metrische Kurven nutzen dieselben Regressionsformeln wie Kalibrierkurven. Für metrische Kurven gibt es zwei zusätzliche Formeln: Durchschnitt und Median.

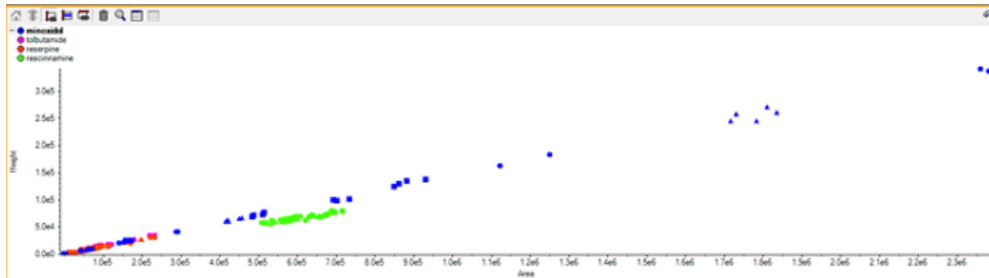
---

1. Öffnen Sie eine **Results Table**.
2. Wählen Sie eine oder zwei Spalten aus und klicken Sie auf das Symbol **Metric Plot**. Für dieses Beispiel wählen Sie die Spalte **IS Area**.

Wenn eine Spalte ausgewählt wird, zeigt die Kurve die Werte der Spalte in Abhängigkeit von der Zeilennummer in der Tabelle an. Wenn zwei Spalten ausgewählt werden, dann werden die Werte beider Spalten vergleichend abgebildet. Die zuerst ausgewählte Spalte enthält die X-Werte und die zweite Spalte die Y-Werte.

3. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Teilfenster der Kurve und danach auf **Show Legend**, um eine Erklärung der für die Kurve verwendeten Symbole anzuzeigen.

Abbildung 14-30 Metrische Kurven



## Benutzerdefinierte Spalten erstellen

1. In einer geöffneten und aktiven **Results Table** klicken Sie mit der rechten Maustaste und klicken dann auf **Add Custom Column**.

Eine neue Spalte wird am Ende der Tabelle hinzugefügt.

2. Geben Sie den Namen der Spalte im Dialog **Custom Column Name** ein.
3. Klicken Sie auf **OK**.

## Über Quantitation Methods (Quantifizierungsmethoden) und Embedded Methods (Eingebettete Methoden)

Quantifizierungsmethoden können mit einer der folgenden Optionen erstellt werden:

- Verwenden Sie den **Quantitation Wizard (Quantifizierungs-Assistenten)**.
- Bearbeiten Sie eine bestehende Methode mit dem **Quantitation wizard (Quantifizierungs-Assistenten)**, wenn das Kontrollkästchen **Edit (Bearbeiten)** aktiviert ist.
- Öffnen und bearbeiten Sie eine bestehende Quantifizierungsmethode.

Quantifizierungsmethoden werden im Ordner **Quantitation Methods (Quantifizierungsmethoden)** gespeichert.

Wenn eine **Ergebnistabelle** erstellt wird, wird die zur Erstellung der **Ergebnistabelle** verwendete Quantifizierungsmethode in die **Ergebnistabellen**-Datei eingebettet. Bearbeiten Sie die eingebettete Quantifizierungsmethode; Änderungen an der Quantifizierungsmethode werden jedoch nur auf die in der **Ergebnistabelle** eingebettete Methode angewendet, nicht auf die Methoden im Ordner **Quantitation Method (Quantifizierungsmethode)**.

---

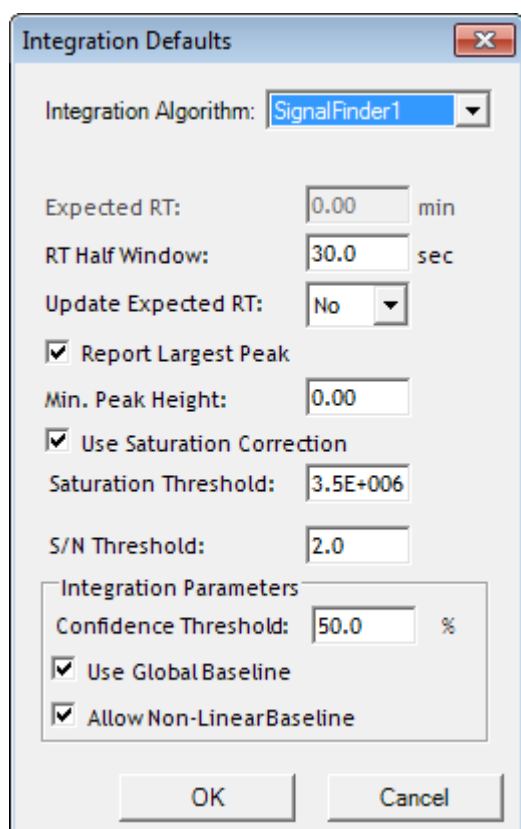
**Tipp!** Diese geänderte eingebettete Methode kann zur weiteren Verwendung exportiert werden.

---

## SignalFinder Integrationsalgorithmus-Parameter

Die SignalFinder™ Integrationsalgorithmus erstellt bei der Erstellung einer neuen Quantifizierungsmethode ein Peak-Modell unter Verwendung der ausgewählten Probe. Dieses Modell beschreibt die Form des ausgewählten Peaks, der verwendet wird, um den Algorithmus zu schulen.

**Abbildung A-1 Dialog „Integration Defaults“**



Label	Beschreibung
Integration Algorithm	Der ausgewählte Integrationsalgorithmus.
Expected RT	Die erwartete Retentionszeit in Minuten. Diese wird zu Beginn auf die Retentionszeit des größten Peaks des Chromatogramms der repräsentativen Probe eingestellt, die zur Erstellung der Quantifizierungsmethode verwendet wurde. Dieses Feld kann nicht verändert werden. Es wird abhängig von der Verbindung in der Quantifizierungsmethode aktualisiert.
RT Half Window	Die Hälfte des Zeitfensters der Retentionszeit in Sekunden. Damit ein Peak erkannt und wiedergegeben werden kann, muss der Unterschied zwischen seiner Spitze und der erwarteten Retentionszeit kleiner oder gleich diesem Wert sein.
Update Expected RT	<p>Zeigt an, ob die erwartete Retentionszeit mithilfe anderer Komponenten On-the-Fly angepasst werden sollte. Verwendet Zusatzinformationen, um die Veränderungen der Retentionszeit zwischen den Proben zu kompensieren. Zur Auswahl stehen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>No:</b> Die erwartete Retentionszeit wird unverändert genutzt.</li> <li>• <b>Group:</b> Anwendbar für Komponenten, die Gruppen zugeordnet wurden, bei denen alle Komponenten einer Gruppe dieselbe Retentionszeit haben (d. h. verschiedene Übertragungen für dieselbe Verbindung). Die erwartete Retentionszeit wird anhand der Position der maximalen Überlappung der einzelnen Chromatogramme der Gruppe (für eine bestimmte Probe) innerhalb des Retentionszeit-Zeitfensters aktualisiert. Hierdurch soll die erwartete Retentionszeit auf die wahrscheinliche Retentionszeit für die betrachtete Komponente (wobei ein Peak in jedem Chromatogramm erwartet wird) eingestellt werden.</li> </ul> <p>Wenn mindestens zwei interne Standards für eine Gruppe definiert wurden, werden ausschließlich deren Chromatogramme zur Bestimmung der neuen Retentionszeit verwendet. Andernfalls werden alle Chromatogramme der Gruppe verwendet. Es ist vorgesehen, ausschließlich Chromatogramme zu verwenden, deren Komponenten sehr wahrscheinlich in einem angemessenen Niveau vorhanden sind.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>IS:</b> Für Analyten, die einen internen Standard verwenden, wird zunächst die tatsächliche Retentionszeit des Peaks des internen Standards (für die entsprechende Probe) ermittelt. Die erwartete Retentionszeit des Analyten wird durch Multiplizieren der angegebenen erwarteten Retentionszeit mit dem Verhältnis zwischen tatsächlicher und erwarteter Retentionszeit des internen Standards bestimmt. Diese Option wird manchmal als relative Retentionszeit bezeichnet.</li> </ul> <hr/> <p><b>Hinweis:</b> Diese Option findet keine Anwendung auf die internen Standards selbst oder auf Analyten, die keine internen Standards verwenden.</p>

## Integrationsalgorithmusparameter

Label	Beschreibung
Report Largest Peak	<p>Falls in einem Chromatogramm mehr als ein Peak innerhalb des Retentionszeit-Zeitfensters und oberhalb der Mindestbreite und -höhe anzutreffen ist, wird mit diesem Parameter bestimmt, welcher Peak ausgegeben wird. Wenn das Kontrollkästchen aktiviert ist, wird der Peak mit der größten Fläche ausgegeben. Wenn das Kontrollkästchen geleert wird, wird der Peak ausgegeben, dessen Retentionszeit der erwarteten Retentionszeit am nächsten ist.</p> <p>Es wird empfohlen, diese Option zu aktivieren, es sei denn, die Retentionszeiten sind sehr reproduzierbar.</p>
Min. Peak Height	<p>Dieser Parameter hat keine Auswirkungen auf die Integration. Wird ausschließlich zur Berichterstellung genutzt. Alle potenziellen Peaks, deren Intensität niedriger als dieser Wert ist, werden als nicht interessant angesehen und nicht verwendet.</p>
Use Saturation Correction	<p>Wenn der Algorithmus ermittelt, dass ein Peak gesättigt ist, verwendet er das Modell, um vorherzusagen, wie der Peak aussehen könnte, wenn der Sensor nicht gesättigt wäre. Dadurch reicht das Profil über den höchsten Punkt des Peaks hinaus bis die Reaktion angenähert wird, die erhalten worden wäre, wenn der Sensor nicht gesättigt wäre. Das kann den linearen dynamischen Bereich der Kalibrierkurven erweitern. Diese Option ist nur verfügbar, wenn die allgemeinen Standardwerte des Algorithmus festgelegt werden, aber nicht bei der Erstellung der Quantifizierungsmethode oder der Bewertung einzelner Peaks, da es nicht sinnvoll ist, diese Einstellung nur für einige Peaks zu verwenden.</p>
Saturation Threshold	<p>Peaks oberhalb des Schwellenwerts werden als gesättigt betrachtet. Dieser Wert ist sensorabhängig.</p>
S/N Threshold	<p>Dieser Parameter hat keine Auswirkungen auf die Integration. Wird ausschließlich zur Berichterstellung genutzt. Peaks, die unterhalb des Schwellenwerts liegen, werden nicht berichtet.</p>
Confidence Threshold	<p>Wird verwendet, um potenzielle falsch-positive Peaks zu filtern. Der Standardwert beträgt 50 %, was normalerweise angemessen ist. Sie können jedoch einen höheren Wert für stark verrauschte Daten oder für Daten, deren Peak-Breite von Probe zu Probe stark variiert, verwenden.</p>
Use Global Baseline	<p>Wählen Sie diese Option, um das gesamte Chromatogramm als Basislinie zu nutzen. Falls dieses Kontrollkästchen nicht aktiviert ist, bewertet die Software Änderungen von der Basislinie lokal.</p>
Allow Non-Linear Baseline	<p>Wählen Sie zwischen einer linearen oder nicht linearen Basislinien. Eine nicht lineare Basislinie schätzt die Basislinie unter jedem Peak. Eine lineare Basislinie platziert eine Linie zwischen den Punkten am Anfang und am Ende dieser spezifischen Gruppe von Peaks.</p>



## Parameter bei MQ4-Integrationsalgorithmus

Abbildung A-2 Dialog „Integration Defaults“

The screenshot shows the 'Integration Defaults' dialog box with the following settings:

- Integration Algorithm: MQ4
- Gaussian Smooth Width: 0.0 points
- Expected RT: 0.00 min
- RT Half Window: 30.0 sec
- Update Expected RT: No
- ☒ Report Largest Peak
- Min. Peak Width: 3 points
- Min. Peak Height: 0.00
- Integration Parameters:
  - Noise Percentage: 40.0 %
  - Baseline Sub. Window: 2.00 min
  - Peak Splitting: 2 points

Buttons: OK, Cancel

Label	Beschreibung
Integration Algorithm	Der ausgewählte Integrationsalgorithmus.
Gaussian Smoothing Width	Es wird ein standardmäßiger Gauß-Glättungsalgorithmus verwendet, wobei die halbe Breite gleich dem spezifizierten Wert (in Punkten) ist. Für verrauschte Chromatogramme wird ein Wert nahe der tatsächlichen Peak-Breite (auf halber Höhe) empfohlen. Bei geringerem Rauschen können kleinere Werte verwendet werden.
Expected RT	Die erwartete Retentionszeit in Minuten. Diese wird zu Beginn auf die Retentionszeit des größten Peaks des Chromatogramms der repräsentativen Probe eingestellt, die zur Erstellung der Quantifizierungsmethode verwendet wurde.
RT Half Window	Die Hälfte des Zeitfensters der Retentionszeit in Sekunden. Damit ein Peak erkannt und wiedergegeben werden kann, muss der Unterschied zwischen seiner Spitze und der erwarteten Retentionszeit kleiner oder gleich diesem Wert sein.

Label	Beschreibung
Update Expected RT	<p>Zeigt an, ob die erwartete Retentionszeit mithilfe anderer Komponenten On-the-Fly angepasst werden sollte. Verwendet Zusatzinformationen, um die Veränderungen der Retentionszeit zwischen den Proben zu kompensieren. Zur Auswahl stehen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>No:</b> Die erwartete Retentionszeit wird unverändert genutzt.</li> <li>• <b>Group:</b> Anwendbar für Komponenten, die Gruppen zugeordnet wurden, bei denen alle Komponenten einer Gruppe dieselbe Retentionszeit haben (d. h. verschiedene Übertragungen für dieselbe Verbindung). Die erwartete Retentionszeit wird anhand der Position der maximalen Überlappung der einzelnen Chromatogramme der Gruppe (für eine bestimmte Probe) innerhalb des Retentionszeit-Zeitfensters aktualisiert. Hierdurch soll die erwartete Retentionszeit auf die wahrscheinliche Retentionszeit für die betrachtete Komponente (wobei ein Peak in jedem Chromatogramm erwartet wird) eingestellt werden.</li> </ul> <p>Wenn mindestens zwei interne Standards für eine Gruppe definiert wurden, werden ausschließlich deren Chromatogramme zur Bestimmung der neuen Retentionszeit verwendet. Andernfalls werden alle Chromatogramme der Gruppe verwendet. Es ist vorgesehen, ausschließlich Chromatogramme zu verwenden, deren Komponenten sehr wahrscheinlich in einem angemessenen Niveau vorhanden sind.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>IS:</b> Für Analyten, die einen internen Standard verwenden, wird zunächst die tatsächliche Retentionszeit des Peaks des internen Standards (für die entsprechende Probe) ermittelt. Die erwartete Retentionszeit des Analyten wird durch Multiplizieren der angegebenen erwarteten Retentionszeit mit dem Verhältnis zwischen tatsächlicher und erwarteter Retentionszeit des internen Standards bestimmt. Diese Option wird manchmal als relative Retentionszeit bezeichnet.</li> </ul>
Report Largest Peak	<p>Falls in einem Chromatogramm mehr als ein Peak innerhalb des Retentionszeit-Zeitfensters und oberhalb der Mindestbreite und -höhe anzutreffen ist, wird mit diesem Parameter bestimmt, welcher Peak ausgegeben wird. Wenn das Kontrollkästchen aktiviert ist, wird der Peak mit der größten Fläche ausgegeben. Wenn das Kontrollkästchen geleert wird, wird der Peak ausgegeben, dessen Retentionszeit der erwarteten Retentionszeit am nächsten ist.</p> <p>Es wird empfohlen, diese Option zu aktivieren, es sei denn, die Retentionszeiten sind sehr reproduzierbar.</p>
Min. Peak Height	Dieser Parameter hat keine Auswirkungen auf die Integration. Wird ausschließlich zur Berichterstellung genutzt. Alle potenziellen Peaks, deren Intensität niedriger als dieser Wert ist, werden als nicht interessant angesehen und nicht verwendet.
Min. Peak Width	Alle potenziellen Peaks, die enger als dieser Wert sind, werden als Rauschen angesehen und nicht verwendet.

Label	Beschreibung
Noise Percentage	<p>Dieser Parameter wird verwendet, um den Rauschpegel in den Chromatogrammen zu schätzen. Beim angegebenen Prozentsatz der Datenpunkte mit der niedrigsten Intensität wird davon ausgegangen, dass es sich bei diesen um Rauschen handelt.</p> <p>Typische Werte liegen zwischen 20 % und 60 %. Falls kleine Peaks aufgrund des Vorhandenseins größerer Peaks nicht gefunden werden, sollte dieser Wert verringert werden.</p>
Baseline Sub. Window	<p>Nach der Glättung, jedoch vor der weiteren Verarbeitung werden Chromatogramme Basislinien-subtrahiert, um Datenhöcker zu entfernen. Für jeden Datenpunkt wird die Basislinie mithilfe der Datenpunkte sowohl der linken als auch der rechten Seite des derzeitigen Punktes mit minimaler Intensität (innerhalb des Subtraktionsfensters) berechnet.</p> <p>Der genaue Wert dieses Parameters ist nicht wesentlich, da er mindestens auf ein Mehrfaches der erwarteten Peak-Breite eingestellt wird.</p>
Peak Splitting	<p>Dieser Parameter steuert, ob ein potenziell verrauschter Peak als einzelner Peak oder als zwei (oder mehr) separate Peaks erfasst wird. Wenn die „Senke“ zwischen zwei potenziellen Peaks geringer als der angegebene Wert ist, wird ein einzelner Peak ermittelt. Andernfalls sind es zwei.</p> <p>Wenn ein hoher Wert für diesen Parameter eingestellt wird, werden verrauschte Peaks nicht geteilt und somit nicht als zwei separate Peaks erfasst. Es muss jedoch ein niedrigerer Wert eingestellt werden, wenn zwei eluierende (überlappende) zu unterscheidende Peaks vorhanden sind.</p>

# Regressionsgleichungen

# B

Dieser Abschnitt beschreibt die Gleichungen, die zur Berechnung der Regressionskurven verwendet werden. In den folgenden Gleichungen stellt x die Analytenkonzentration für **Standard** und y die entsprechende Peak-Fläche oder -Höhe dar. Die genauen Variablen für die Regression hängen davon ab, ob der interne Standard verwendet wird oder ob Peak-Fläche oder -Höhe wie in [Tabelle B-1](#) gezeigt verwendet werden.

**Tabelle B-1 Regressionsvariablen**

Interner Standard verwendet?	Fläche verwendet?	x	y
Ja	Ja	$C_a/C_{IS}/DF$	$A_a/A_{IS}$
Ja	Nein	$C_a/C_{IS}/DF$	$H_a/H_{IS}$
Nein	Ja	$C_a/DF$	$A_a$
Nein	Nein	$C_a/DF$	$H_a$

wobei Folgendes gilt:

- $C_a$  = tatsächliche Analytenkonzentration
- $C_{IS}$  = interne Standardkonzentration
- DF = Verdünnungsfaktor
- $A_a$  = Analyt-Peak-Fläche
- $A_{IS}$  = interne Analyt-Peak-Fläche
- $H_a$  = Analyt-Peak-Höhe
- $H_{IS}$  = interne Analyt-Peak-Höhe

## Gewichtungsfaktoren

Tabelle B-2 zeigt, wie der Gewichtungsfaktor (w in den folgenden Gleichungen) für jede der sieben Gewichtungsarten berechnet wird.

Tabelle B-2 Gewichtungsfaktoren

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

## Regressionen

Dieser Bereich gibt die Gleichungen für alle Regressionsarten an. In den folgenden Gleichungen werden x, y und w wie zuvor definiert angenommen. Alle Summen werden an Proben vom Typ **Standard** berechnet, mit Ausnahme der **Standard**proben, die als „nicht verwendet“ gekennzeichnet sind.

Der Korrelationskoeffizient wird wie folgt berechnet:

$$r = (\sum w \sum w y y_c - \sum w y \sum w y_c) / \sqrt{(D_y D_{y_c})}$$

wobei folgendes gilt:

$$D_y = \sum w \sum w y^2 - (\sum w y)^2$$

$y_c$  = mithilfe der entsprechenden Gleichung unten berechneter y-Wert

$$D_{y_c} = \sum w \sum w y_c^2 - (\sum w y_c)^2$$

### Linear

Die lineare Kalibrierungsgleichung lautet:

$$y = mx + b$$

Steigung und Achsenabschnitt werden wie folgt berechnet:

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

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

wobei Folgendes gilt:

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

### Linear durch Null

Die Kalibrierungsgleichung Linear durch Null lautet:

$$y = mx$$

Die Steigung wird wie folgt berechnet:

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

### Mittlerer Reaktionsfaktor

Der mittlere Reaktionsfaktor beträgt:

$$y = mx$$

Diese Gleichung entspricht der Gleichung für den Fall Linear durch Null. Die Steigung wird jedoch anders berechnet:

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

und die Standardabweichung des Reaktionsfaktors:

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

wobei folgendes gilt:

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

---

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

---

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

## Quadratisch

Die quadratische Kalibrierungsgleichung lautet:

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

Die Polynomkoeffizienten werden wie folgt berechnet:

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

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

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

wobei Folgendes gilt:

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

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

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

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

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

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

## Potenz

Die Potenzfunktionskalibrierungsgleichung lautet:

$$y = ax^p$$

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

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Wenn einer der Werte x oder y negativ oder Null ist, wird ein Fehler berichtet.

## Wagner

Die Wagner-Kalibrierungsgleichung lautet:

$$\ln y = a_2 (\ln x)^2 + a_1 (\ln x) + a_0$$

Die Gleichungen für die quadratische Kalibrierung werden wie oben beschrieben für die Berechnung von  $a_0$ ,  $a_1$  und  $a_2$  verwendet. Der Unterschied besteht jedoch darin, dass x in diesen Gleichungen ersetzt wird durch  $\ln x$  und y durch  $\ln y$ .

Wenn einer der Werte x oder y negativ oder Null ist, wird ein Fehler berichtet.

### Hill

Die Hill-Kalibrierungsgleichung lautet:

$$y = (a + bx^n) / (c + x^n)$$

Es ist nicht möglich, eine analytische Funktion für die Lösung von a, b, c und n bereitzustellen. Stattdessen werden die Koeffizienten mit der iterativen Levenberg-Marquardt Methode ermittelt.

## Endgültige Konzentrationen berechnen

Dieser Abschnitt erklärt wie die endgültige Konzentration aus den entstandenen Regressionsgleichungen mit der IS-Konzentration und dem Verdünnungsfaktor, die in der ursprünglichen Konzentration verwendet wurden, berechnet wird.

### Linear

$$x = (y - b) / m$$

### Linear Through Zero (Linear durch Null) und Mean Response Factor (Durchschnittlicher Ansprechfaktor)

$$x = y / m$$

### Quadratisch

$$x = (-a_1 \pm (a_1^2 - 4 \times a_2 \times (a_0 - y))^{0,5}) / (2 \times a_2)$$

- Wenn sowohl die + als auch die – Wurzeln innerhalb des Bereichs des Standards liegen, wird ein Fehler erzeugt, da keine eindeutige Lösung existiert.
- Wenn genau eine der beiden Wurzeln innerhalb des Konzentrationsbereichs der Standards liegt, wird der Wert berichtet.
- Wenn beide Wurzeln unterhalb des niedrigsten Konzentrationsstandards liegen, wird die + Wurzel berichtet.
- Wenn beide Wurzeln oberhalb des niedrigsten Konzentrationsstandards liegen, wird die – Wurzel berichtet.
- Wenn die – Wurzel unter dem niedrigsten Standard und die + Wurzel über dem höchsten Standard liegt, wird die – Wurzel berichtet, wenn die Differenz vom niedrigsten Konzentrationsstandard niedriger als die Differenz der + Wurzel von der höchsten Konzentration ist. Andernfalls wird die + Wurzel berichtet.

### Potenz

$$x = (y / a)^{(1 / p)}$$

### Wagner

Dieselbe Gleichung wie für die quadratische Kalibrierung wird auch für die Hauptberechnung verwendet. Der Unterschied besteht jedoch darin, dass x ersetzt wird durch ln x und y durch ln y.



## Hill

$$x = ((a - y \times c) / (y - b))^{(1 / n)}$$

Dieser Abschnitt beschreibt die Verwendung der Berichtsfunktion der Software, um formatierte Berichte aus **Ergebnistabellen** zu erstellen.

## Create Reports (Berichte erstellen)

Diese Software benutzt Microsoft Word-Dokumente als vordefinierte Vorlagen. Wird ein Bericht erstellt, werden die Werte aus der aktuellsten Ergebnistabelle und den zugehörigen Dateien extrahiert.

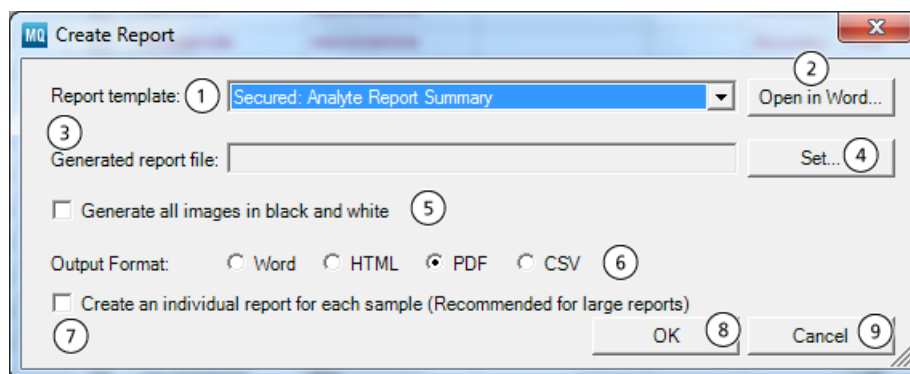
Die Benutzer sind dafür verantwortlich, die benutzerdefinierten Vorlagen zu validieren. Das Zahlenformat kann im Vorlagen-Editor geändert werden. Falls in der Vorlage kein Zahlenformat spezifiziert wird, wird das Format der **Spalteneinstellungen** der **Ergebnistabelle** für den Bericht genutzt. Stellen Sie sicher, dass die korrekte Anzahl von Dezimalstellen verwendet wird.

Exportieren einer **Ergebnistabelle**, Übertragung an LIMS und Berichterstellung sind die kontrollierten Methoden, um Daten aus der Software auszugeben. Andere Methoden zur Datenausgabe wie das Kopieren und Einfügen von der **Ergebnistabelle** aus werden nicht kontrolliert. Die Benutzer sollten davon absehen, für reguläre Arbeitsabläufe unkontrollierte Ausgabemethoden zu verwenden.

Navigieren Sie zu einem beliebigen Ordner, um auf Daten zuzugreifen und sie zu speichern. Die früheren Speicherplätze, von denen Vorlagen geöffnet und in denen Berichte gespeichert wurden, werden standardmäßig gespeichert.

1. Öffnen Sie eine **Ergebnistabelle**.
2. Klicken Sie auf **File (Datei) > Create Report and Save Results Table (Bericht erstellen und Ergebnistabelle speichern)**.

Abbildung C-1 Der Dialog „Create Report“



Position	Beschreibung
1	Berichtsvorlage: Wählen Sie eine Vorlage aus der Liste aus.
2	Open in Word (In Word öffnen): Anklicken, um die gewählte Berichtsvorlage direkt in Microsoft Word zu öffnen, um sie zu überprüfen oder zu bearbeiten.
3	Generated report file (Erzeugte Berichtsdatei): Zeigt die Bezeichnung der Berichtsdatei an.
4	Set (Festlegen): Anklicken, um den Dateinamen des zu erzeugenden Berichts anzugeben.
5	Generate all images in black and white (Alle Bilder in Schwarz-Weiß generieren): Markieren Sie dieses Kontrollkästchen, um in Schwarz-Weiß zu drucken.
6	Ausgabeformat: Word, HTML, PDF oder CSV. Ein PDF ist die sicherste Ausgabemethode, da der Bericht in diesem Format nicht mehr bearbeitet werden kann.
7	Einen getrennten Bericht für jede Probe erstellen (Für große Berichte empfohlen)
8	Klicken Sie auf <b>OK</b> , um den Bericht auszudrucken.
9	Klicken Sie auf <b>Cancel (Abbrechen)</b> , um den Dialog zu schließen, ohne einen Bericht zu generieren.

3. Wählen Sie eine Vorlage aus der Liste Report template. Die Berichtsvorlagen sind an den folgenden Speicherplätzen gespeichert:

- Für Windows 7 und 10: C:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

Eine Beschreibung der verschiedenen Vorlagen finden Sie unter [Berichtsvorlagen auf Seite 140](#).

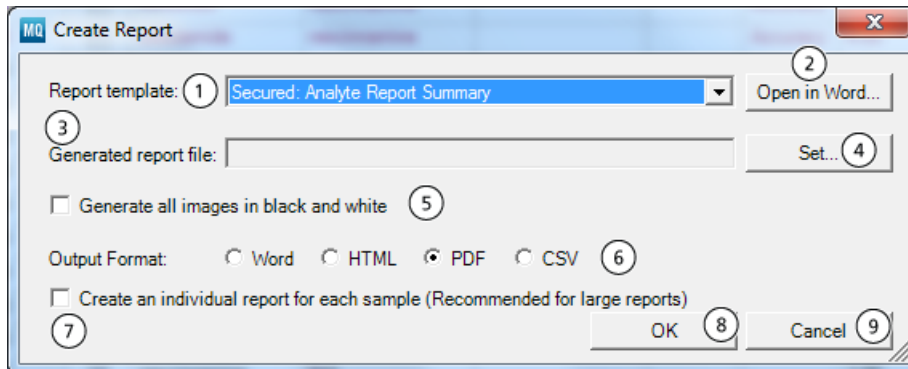
4. Klicken Sie auf **Set (Festlegen)**, um den Namen und den Speicherplatz des Berichts zu erstellen.
5. Klicken Sie auf **OK**, um den Bericht zu erzeugen.

## Benutzerdefinierte Berichtsvorlagen erstellen

Exportieren einer **Results Table**, Übertragung an LIMS und Berichterstellung sind die kontrollierten Methoden, um Daten aus der Software auszugeben. Andere Methoden zur Datenausgabe wie das Kopieren und Einfügen von der **Results Table** aus werden nicht kontrolliert. Die Benutzer sollten davon absehen, für reguläre Arbeitsabläufe unkontrollierte Ausgabemethoden zu verwenden.

1. Öffnen oder erstellen Sie eine **Results Table**.
2. Klicken Sie auf **File > Create Report and Save Results Table**.

Abbildung C-2 Der Dialog „Create Report“



Position	Beschreibung
1	Berichtsvorlage: Wählen Sie eine Vorlage aus der Liste aus.
2	In Word öffnen: Anklicken, um die gewählte Berichtsvorlage direkt in Microsoft Word zu öffnen, um sie zu überprüfen oder zu bearbeiten.
3	Erzeugte Berichtsdatei: Zeigt die Bezeichnung der Berichtsdatei an.
4	Festlegen: Anklicken, um den Dateinamen des zu erzeugenden Berichts anzugeben.
5	Alle Bilder in Schwarz-Weiß generieren: Markieren Sie dieses Kontrollkästchen, um in Schwarz-Weiß zu drucken.
6	Ausgabeformat: Word, HTML, PDF oder CSV. Ein PDF ist die sicherste Ausgabemethode, da der Bericht in diesem Format nicht mehr bearbeitet werden kann.
7	Einen getrennten Bericht für jede Probe erstellen (Für große Berichte empfohlen)
8	Klicken Sie auf <b>OK</b> , um den Bericht auszudrucken.
9	Klicken Sie auf <b>Cancel</b> , um den Dialog zu schließen, ohne einen Bericht zu generieren.

3. Wählen Sie eine Vorlage aus der Liste **Report template**.
4. Klicken Sie auf **Open in Word**.

Die .docx Vorlage öffnet sich und der Berichtsvorlagen-Editor wird auf der rechten Seite angezeigt. Die Hinweisinformation wird automatisch in den Vorlagen-Editor übertragen.

5. Bearbeiten Sie die Vorlage wie gewünscht.
6. Speichern Sie die Vorlage.

## Berichtsvorlagen

Die folgende Tabelle beschreibt die verfügbaren Vorlagen in <drive>:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

Im Fall der Erstellung einer benutzerdefinierten Berichtsvorlage ist der Benutzer für die Validierung der Vorlage verantwortlich. Das Zahlenformat kann im Vorlagen-Editor geändert werden. Falls in der Vorlage kein Zahlenformat spezifiziert wird, wird das Format im Dialog **Column Settings** der **Results Table** für den Bericht genutzt. Der Benutzer ist dafür verantwortlich, die benutzerdefinierte Berichtsvorlage zu validieren.

Manche Berichtsvorlagen verwenden Queries. Der Benutzer kann mithilfe von Microsoft Excel-basierten Formeln Queries erstellen, um die Daten aus der Ergebnistabelle in einem Bericht zu bewerten, zu ändern und zu präsentieren. Das Feld MetaField in der Berichtsvorlage beinhaltet den Namen der .query-Datei, der im Bericht verwendet werden soll. Um Queries zu verwenden, muss im Feld MetaField in der Berichtsvorlage der Name der Querydatei angegeben sein. Queries müssen außerdem über die Dateierweiterung „.query“ verfügen, um als Queries erkannt zu werden. Die Queries müssen im Reporter-Ordner gespeichert werden, wo auch die Berichtsvorlagen gespeichert sind.

Es wird empfohlen, dass der Benutzer bei der Verwendung einer Reporter-Vorlage die generierten Ergebnisse validiert, insbesondere dann, wenn in einer Vorlage Queries verwendet werden. Wenn nach der Validierung noch Änderungen an der Berichtsvorlage vorgenommen werden, sollte die Berichtsvorlage neu validiert werden. Änderungen an der Berichtsvorlage umfassen auch Änderungen an Reporter-Markierungen oder Queries.

**Tabelle C-1 Berichtsvorlagen-Beschreibungen**

<b>Vorlage</b>	<b>Beschreibung</b>
Analyte Report Summary	Sicherer Bericht, der für jeden Analyten eine Proben-Zusammenfassungstabelle anzeigt. Diese Berichtsvorlage eignet sich für eine Ergebnistabelle mit definierten Gruppen.
Calibration Curves Template	Bericht, der die Dateiinformatoren, Statistiktabelle (Standards) und Kalibrierkurve für Analyten anzeigt, eine Seite pro Analyt.
Metric Plot_IS Area	Sicherer Bericht, der für jeden internen Standard einen Abschnitt einschließlich der Dateiinformatoren und der metrischen Kurve des IS-Peak-Bereichs anzeigt.
Per Analyte Ion Ratio Report	Sicherer Bericht, der für jeden Analyten einen Abschnitt einschließlich der Dateiinformatoren, Ergebnistabelle, Kalibrierkurven für jeden Analyten und Chromatogramme einschließlich IS und jeden Analyten anzeigt. Diese Vorlage eignet sich für eine Ergebnistabelle mit definierten Gruppen.
Per Analyte Report	Sicherer Bericht, der für jeden Analyten einen Abschnitt einschließlich der Dateiinformatoren, Ergebnistabelle, Kalibrierkurven für jeden Analyten und Chromatogramme einschließlich IS und jeden Analyten anzeigt. Diese Vorlage eignet sich für eine Ergebnistabelle ohne definierte Gruppen.
Per Analyt Ion Ratio Report	Sicherer Bericht, der für jede Probe einen Abschnitt einschließlich der Dateiinformatoren, Probeninformationen, Analyt-Ergebnistabelle, Kalibrierkurven für jeden Analyten und Chromatogramme einschließlich IS und jeden Analyten anzeigt. Diese Vorlage eignet sich für eine Ergebnistabelle mit definierten Gruppen.
Per Sample Report	Sicherer Bericht, der für jede Probe einen Abschnitt einschließlich der Dateiinformatoren, Probeninformationen, Analyt-Ergebnistabelle, Kalibrierkurven für jeden Analyten und Chromatogramme einschließlich IS und jeden Analyten anzeigt. Diese Vorlage eignet sich für eine Ergebnistabelle ohne definierte Gruppen.

**Tabelle C-1 Berichtsvorlagen-Beschreibungen (Fortsetzung)**

Vorlage	Beschreibung
Sample Report Summary	Sicherer Bericht, der für jede Probe eine Analyten-Zusammenfassungstabelle anzeigt. Diese Berichtsvorlage eignet sich für eine Ergebnistabelle mit definierten Gruppen.
Sample Report with Concentration Threshold.docx	Bericht, der für jede unbekannte Probe die Dateinformationen, Probeninformationen und eine Ergebniszusammenfassungstabelle enthält. Die Ergebniszusammenfassungstabelle umfasst Analyt-spezifische Konzentrationsschwellenwerte. Analyten werden als positiv markiert, wenn die Konzentration über dem Schwellenwert liegt. Diese Vorlage bezieht sich auf die Datei Sample Report With Concentration Threshold.query. Der Benutzer kann die Abfragedatei bearbeiten, um die Namen und Gruppen der Analyten (z. B. Verbindungsklasse) sowie die Konzentrationsschwellenwerte anzugeben.

## Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags)

**Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags)**

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
Tags aus dem Analyst <sup>®</sup> MD-Software-Datenlieferantenschema		
Analyt	ForEach (Für jedes)	Erstellt eine Schleife über allen Analyten in der Reihenfolge, in der sie in der Ergebnistabelle definiert sind.
AnalyteGroup	ForEach (Für jedes)	Erstellt eine Schleife nur über den verschiedenen Analyt-Gruppen. Die Tags TextField (Textfeld) oder PictureField (Bildfeld) rufen Werte für das Quantifizierungs-Ion ab. Wenn solche Tags einen zusätzlichen Tag „For_Each (Für jedes)“ enthält, der das Attribut Ratiolons (Verhältnis-Ionen) angibt, gilt die innere Schleife nur für Qualifizierungs-Ionen, die Teil der aktuellen Gruppe sind.
InternalStandard	ForEach (Für jedes)	Erstellt eine Schleife über allen internen Standards.
QCStatistics	ForEach (Für jedes)	Erstellt eine Schleife über allen Qualitätskontroll-Statistiken.
Ratiolons	ForEach (Für jedes)	Siehe AnalyteGroup.

Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
Test	ForEach (Für jedes)	Erstellt eine Schleife über jeder einzelnen Probe. Dies wird zum Beispiel in Kombination mit der Einrichtung eines Tags „TextField“ (Testfeld) verwendet, um den Probennamen einzufügen.
Statistics	ForEach (Für jedes)	Erstellt eine Schleife über allen Standard-Statistiken.
MQ_Group	ForEach (Für jedes)	Erstellt eine Schleife über den verschiedenen Gruppen, einschließlich IS Gruppen und Untergruppen. Die Tags TextField (Textfeld) oder PictureField (Bildfeld) rufen Werte für das Quantifizierungs-Ion ab. Wenn solche Tags einen zusätzlichen Tag „For_Each (Für jedes)“ enthält, der das Attribut RationIons (Verhältnis-Ionen) angibt, gilt die innere Schleife nur für Qualifizierungs-Ionen, die Teil der aktuellen Gruppe sind.
MQ_AnalyteRatiolons	ForEach (Für jedes)	Nur für Analyt-Qualifier siehe MQ_Group.
MQ_ISRatiolons	ForEach (Für jedes)	Nur für IS-Qualifikator siehe MQ_Group.
AnalyteRatio	PictureField (Bildfeld)	Zeigt Überlagerungen von Chromatogrammen von Quantifier und Qualifier der Analyt-Untergruppe an. Zeigt die durchgezogene Linie in der Mitte, die das erwartete Ionenverhältnis angibt, an. Die Mittellinie = die Peak-Höhe des Quantifiers x Erwartetes Ionenverhältnis. Zeigt die Unter- und Obergrenzen des akzeptablen Ionenverhältnis-Bereichs durch Punktlinien an. Unterer Grenzwert = Peak-Höhe des Quantifiers x Erwartetes Ionenverhältnis x ((100-Toleranz)/100). Oberer Grenzwert = Peak-Höhe des Quantifiers x Erwartetes Ionenverhältnis x ((100+Toleranz)/100).
AnalyteRatioNoLines	PictureField (Bildfeld)	Zeigt die Überlagerungen von Chromatogrammen von Quantifier und Qualifier der Analyt-Untergruppe ohne die Linien an.
Calibration	PictureField (Bildfeld)	Zeigt die Kalibrierkurve des Analyten an.

**Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)**

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
IS_AnalyteRatio	PictureField (Bildfeld)	Zeigt die Überlagerungen von Chromatogrammen von Quantifier und Qualifier der Untergruppe „Interner Standard“ an. Zeigt die durchgezogene Linie in der Mitte, die das erwartete Ionenverhältnis angibt, an. Die Mittellinie = die Peak-Höhe des Quantifiers x Erwartetes Ionenverhältnis. Zeigt die Unter- und Obergrenzen des akzeptablen Ionenverhältnis-Bereichs durch Punktklinien an. Unterer Grenzwert = Peak-Höhe des Quantifiers x Erwartetes Ionenverhältnis x ((100-Toleranz)/100) Oberer Grenzwert = Peak-Höhe des Quantifiers x Erwartetes Ionenverhältnis x ((100+Toleranz)/100).
IS_AnalyteRatioNoLines	PictureField (Bildfeld)	Zeigt die Überlagerungen von Chromatogrammen von Quantifier und Qualifier der Untergruppe „Interner Standard“ ohne die Linien an.
IS_PeakReview	PictureField (Bildfeld)	Zeigt das Chromatogramm des internen Standards an.
Overlay_All_XIC	PictureField (Bildfeld)	Zeigt die Überlagerung der Chromatogramme aller Analyten in der Probe an.
Overlay_All_XIC_with_IntStd	PictureField (Bildfeld)	Zeigt die Überlagerung der Chromatogramme aller Analyten und der internen Standards in der Probe an.
Overlay_All_XIC_with_IntStd_NoLegend	PictureField (Bildfeld)	Zeigt die Überlagerung der Chromatogramme aller Analyten und der internen Standards in der Probe ohne die Legende an.
Overlay_All_XIC_NoLegend	PictureField (Bildfeld)	Zeigt die Überlagerung der Chromatogramme aller Analyten in der Probe ohne die Legende an.
PeakReview	PictureField (Bildfeld)	Zeigt das Chromatogramm des Analyten an.
TIC	PictureField (Bildfeld)	Zeigt das TIC der Probe an.
Acquisition_Date	TextField (Textfeld)	Das Datum, an dem die Probe erfasst wurde. Zeigt "Erfassungsdatum und -zeit".
Acquisition_Duration_Minutes	TextField (Textfeld)	Zeigt den Zeitraum der erfassten Daten der Probe in Minuten an.



**Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)**

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
Acquisition_Method	TextField (Textfeld)	Die Erfassungsmethode, die zur Erfassung der Probandaten verwendet wurde.  Zeigt "Acq. Method Name".
Analyte_AnalyteAnnotation	TextField (Textfeld)	Zeigt "Komponentenkommentar".
Analyte_AnalyteCorrelation	TextField (Textfeld)	Zeigt den R-Wert der Regression an.
Analyte_AnalyteRegression	TextField (Textfeld)	Zeigt die Regressionsgleichung mit Wert und Gewichtung von r an.
Analyte_Concentration	TextField (Textfeld)	Die tatsächliche Konzentration des Analyten, wie vom Benutzer in der Ergebnistabelle definiert.  Zeigt "Aktuelle Konzentration".
Analyte_Expected_RT	TextField (Textfeld)	Die erwartete Retentionszeit für einen bestimmten Analyten in Minuten.  Zeigt die „erwartete RT“ (Retentionszeit) an.
Analyte_Integration_Type	TextField (Textfeld)	Die Art der für bestimmte Analyten-Peaks verwendeten Integration. Peaks können manuell oder unter Verwendung der verfügbaren Parameter integriert werden.  Zeigt "Integrationstyp".
Analyte_IS_Area_Ratio	TextField (Textfeld)	Das Verhältnis der Fläche des Analyten-Peaks zur Fläche des Peaks einer internen Standardlösung. Berechnet als Analyten-Peakfläche/IS-Peakfläche.  Zeigt "Flächenverhältnis".
Analyte_IS_Height_Ratio	TextField (Textfeld)	Das Verhältnis der Höhe in Zählimpulsen pro Sekunde (cps) des Analyten-Peaks zur Höhe des Peaks einer internen Standardlösung. Berechnet als Analyten-Peakhöhe/IS-Peakhöhe.  Zeigt "Höhenverhältnis".
Analyte_Mass_Ranges	TextField (Textfeld)	Der benutzerdefinierte MRM-Übergang für einen Analyten, definiert in der verwendeten Erfassungsmethode.  Zeigt "Masseinformation".

**Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)**

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
Analyte_Peak_Area	TextField (Textfeld)	Die Peak-Fläche eines Analyten in einem Chromatogramm. Zeigt "Fläche".
Analyte_Peak_Height	TextField (Textfeld)	Die Höhe des Analyten-Peaks, in Zählimpulsen pro Sekunde (cps). Zeigt "Höhe".
Analyte_Peak_Name	TextField (Textfeld)	Der benutzerdefinierte Name, der bei der Erstellung der Ergebnistabelle bestimmten Proben zugeordnet wird. Zeigt "Komponentenname".
Analyte_Peak_Width	TextField (Textfeld)	Die Breite eines Analyten-Peaks in Minuten. Zeigt "Breite gesamt".
Analyte_Peak_Width_at_50%_Height	TextField (Textfeld)	Die Breite eines Analyten-Peaks bei 50 % der Peak-Höhe, in Minuten. Zeigt "Breite bei 50 %".
AnalyteQuantPeak_info	TextField (Textfeld)	Zeigt die Integrationsinformationen einschließlich Algorithmus und Parameter an.
Analyte_QTY	TextField (Textfeld)	Die Analytenmenge, berechnet aus der berechneten Konzentration des Analyten und dem Gewicht-zu-Volumen-Verhältnis (z. B. ng Analyt pro Gramm Probe). Zeigt „Qualität“.
isCurrentAnalyteQuantifier	TextField (Textfeld)	Ist der erste Analyt in der Gruppe.
Analyte_Processing_Algo	TextField (Textfeld)	Zeigt Integrationsalgorithmus.
Analyte_Retention_Time	TextField (Textfeld)	Die tatsächliche Retentionszeit für einen Analyten in einem Chromatogramm, die zur Erzeugung einer Ergebnistabelle verwendet wird. Zeigt "Retentionszeit".
Analyte_R_Squared	TextField (Textfeld)	Zeigt den $R^2$ -Wert der Regression an.

**Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)**

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
Analyte_RT_Window	TextField (Textfeld)	Die Zeitspanne, in Sekunden, in dem ein Analyten-Peak erwartet wird. Die Mitte dieser Zeitspanne stellt die erwartete Retentionszeit für den Analyten dar.  Zeigt den Wert von „RT Half Window“ (RT-Fenster halbe Breite) der Integrationsparameter an.
Analyte_Signal_To_Noise	TextField (Textfeld)	Das Signal-Rausch-Verhältnis für einen bestimmten Analyten-Peak.  Zeigt "Signal / Rauschen".
Analyte_Slope_of_Baseline	TextField (Textfeld)	Die Steigung von der Basislinie für einen Analyten, angegeben in % Intensität/Minuten.  Zeigt „Steigung von der Basislinie“ für einen Analyten.
Analyte_Start_Scan	TextField (Textfeld)	Analyt-Scan-Start.
Analyte_Start_Time	TextField (Textfeld)	Der Zeitpunkt, an dem der Analyten-Peak beginnt, in Minuten.  Zeigt "Startzeit".
Analyte_Stop_Scan	TextField (Textfeld)	Analyt-Scan-Stopp.
Analyte_Stop_Time	TextField (Textfeld)	Der Zeitpunkt, an dem der Analyten-Peak endet, in Minuten.  Zeigt "Endzeit".
Analyte_Unit	TextField (Textfeld)	Die zur Darstellung der Konzentration von Analyten verwendeten Einheiten. Die standardmäßige Einheit für Ergebnistabellen ist ng/ml.  Zeigt "Conc. Units".
Analyte_Use_Record	TextField (Textfeld)	Ein Auswahlfeld, das festlegt, ob ein bestimmter Datensatz für nachfolgende Analysen, beispielsweise Kalibrierungskurven, verwendet wird.  Zeigt "In Gebrauch".
Analyte_Count	TextField (Textfeld)	Zeigt die Gesamtanzahl der Analyten an.

**Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)**

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
Analyte_Index	TextField (Textfeld)	Zeigt die Nummer der Reihenfolge des Analyten in der Probe an, beginnend mit 0.
Calculated_Accuracy	TextField (Textfeld)	Die Genauigkeit für den Analyten-Peak, abgeleitet durch den Vergleich der tatsächlichen Analytenkonzentration mit der berechneten Analytenkonzentration. Zeigt "Genauigkeit".
Calculated_Concentration	TextField (Textfeld)	Die berechnete Konzentration für den Analyt-Peak, anhand des Peak-Bereichs ermittelt von der Analyst <sup>®</sup> MD-Software. Zeigt "Berechnete Konzentration".
Calculated_Relative_Retention_Time	TextField (Textfeld)	Die Retentionszeit für einen bestimmten Datensatz für einen Analyten oder internen Standard in einer Ergebnistabelle. Zeigt "Relative RT".
IS_Concentration	TextField (Textfeld)	Die tatsächliche Konzentration eines internen Standards, wie vom Benutzer in der Ergebnistabelle definiert. Zeigt "Ist-Konzentration IS".
IS_Expected_RT	TextField (Textfeld)	Die erwartete Retentionszeit eines internen Standards in Minuten. Zeigt "Erwartete RT für IS".
IS_Integration_Type	TextField (Textfeld)	Die Art der für bestimmte interne Standards verwendeten Integration. Peaks können manuell oder unter Verwendung der verfügbaren Parameter integriert werden. Zeigt "IS-Integrationstyp".
IS_Mass_Ranges	TextField (Textfeld)	Der benutzerdefinierte MRM-Übergang für einen internen Standard, definiert in der verwendeten Erfassungsmethode. Zeigt "IS-Masseinformation".
IS_Peak_Area	TextField (Textfeld)	Die Peak-Fläche für einen internen Standard. Zeigt "IS-Fläche".
IS_Peak_Height	TextField (Textfeld)	Die Höhe des Peaks des internen Standards, in Zählimpulsen pro Sekunde (cps). Zeigt "IS-Höhe".

**Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)**

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
IS_Peak_Name	TextField (Textfeld)	Der benutzerdefinierte Name, der bei der Erstellung der Ergebnistabelle einem bestimmten internen Standard verliehen wird.  Zeigt "IS Name".
IS_Peak_Width	TextField (Textfeld)	Die Breite eines Analyten-Peaks in Minuten.  Zeigt "IS-Breite gesamt".
IS_Peak_Width_at_50%_Height	TextField (Textfeld)	Die Peakbreite in Minuten für den Peak eines internen Standards auf der Hälfte seiner Höhe, in Zählimpulsen pro Sekunde (cps).  Zeigt „IS-Breite bei 50 %“.
IS_Retention_Time	TextField (Textfeld)	Die aktuelle Retentionszeit für einen internen Standard.  Zeigt "IS-Retentionszeit".
IS_RT_Window	TextField (Textfeld)	Die Zeitspanne in Sekunden, in der ein Peak eines internen Standards erwartet wird. Die Mitte dieser Zeitspanne stellt die erwartete Retentionszeit für den internen Standard dar.  Zeigt den Wert von „RT-Fenster halbe Breite“ der Integrationsparameter für den IS an.
ISQuantPeak_Info	TextField (Textfeld)	Zeigt die Integrationsinformationen einschließlich Algorithmus und Parameter an.
IS_Signal_To_Noise	TextField (Textfeld)	Das Signal-Rausch-Verhältnis eines Peaks des internen Standards.  Zeigt „IS-Signal/-Rauschen“.
IS_Slope_of_Baseline	TextField (Textfeld)	Die Steigung von der Basislinie für einen internen Standard, angegeben in % Intensität/Minuten.  Zeigt „Steigung von der Basislinie“ für den internen Standard.
IS_Start_Scan	TextField (Textfeld)	Interner Standard Scan-Start.
IS_Start_Time	TextField (Textfeld)	Der Zeitpunkt, an dem der Peak des internen Standards beginnt, in Minuten.  Zeigt "IS-Startzeit".
IS_Stop_Scan	TextField (Textfeld)	Interner Standard Stopp-Zeit.

**Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)**

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
IS_Stop_Time	TextField (Textfeld)	Der Zeitpunkt, an dem der Peak des internen Standards endet, in Minuten.  Zeigt "IS-Endzeit".
IS_Units	TextField (Textfeld)	Die zur Darstellung der Konzentration von internen Standards verwendeten Einheiten. Die standardmäßige Einheit für Ergebnistabellen ist ng/ml.  Zeigt "Conc. Units" (Konzentrationseinheiten) der Ergebnistabelle für IS an.
MQ_Accuracy_Tolerance_LLOQ	TextField (Textfeld)	Zeigt den Wert der Max. Genauigkeitstoleranz für LLOQ im Dialog „Outlier Setting“ (Ausreißer-Einstellung) der Quantifizierungsmethode an.
MQ_Accuracy_Tolerance_STD	TextField (Textfeld)	Zeigt den Wert der Max. Genauigkeitstoleranz für Standards im Dialog „Outlier Setting“ (Ausreißer-Einstellung) der Quantifizierungsmethode an.
MQ_Accuracy_Tolerance_QC	TextField (Textfeld)	Zeigt den Wert der Max. Genauigkeitstoleranz für QCs im Dialog „Outlier Setting“ (Ausreißer-Einstellung) der Quantifizierungsmethode an.
MQ_Analyte_Group_Name	TextField (Textfeld)	Zeigt den Namen des Analyten-Gruppennamens an.
MQ_Created_With	TextField (Textfeld)	Zeigt den Namen des Produkts an, das verwendet wird, um den Bericht zu erstellen.
MQ_Expected_Ion_Ratio	TextField (Textfeld)	Zeigt „Erwartetes Ionenverhältnis“.
MQ_Group_Index	TextField (Textfeld)	Zeigt die Nummer der Reihenfolge der Gruppe in der Probe an, beginnend mit 1. Zu verwenden mit Schleife ForEach MQ_Group.
MQ_Group_Name	TextField (Textfeld)	Zeigt den Namen der Gruppe an. Zu verwenden mit Schleife ForEach MQ_Group.
MQ_Ion_Ratio	TextField (Textfeld)	Zeigt „Ionenverhältnis“.
MQ_IonRatio_Tolerance	TextField (Textfeld)	Zeigt den Wert der Max. Ionenverhältnistoleranz für den Analyten im Dialog „Outlier Setting“ (Ausreißer-Einstellung) der Quantifizierungsmethode an.

Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
MQ_IS_Group_Name	TextField (Textfeld)	Zeigt den Namen der Gruppe von internen Standards an.
MQ_IsRowHidden	TextField (Textfeld)	Zeigt die in der Ergebnistabelle ausgeblendete Zeile an.
MQ_Lower_Limit_Concentration	TextField (Textfeld)	Zeigt den Wert des unteren Grenzwerts der berechneten Konzentration im Dialog „Outlier Setting“ (Ausreißer-Einstellung) der Quantifizierungsmethode an.
MQ_Outlier_Reasons	TextField (Textfeld)	Zeigt "Ursachen für Ausreißerwerte".
MQ_Peak_Asymmetry_Factor	TextField (Textfeld)	Zeigt "Asymmetriefaktor".
MQ_Peak_BaselineDelta_to_Height	TextField (Textfeld)	Zeigt „Baseline Delta/Height“ (Basislinien-Delta/-Höhe).
MQ_Peak_End_at_10pct	TextField (Textfeld)	Zeigt "Endzeit bei 10 %".
MQ_Peak_End_at_5pct	TextField (Textfeld)	Zeigt "Endzeit bei 5 %".
MQ_Peak_Points_Across_Baseline	TextField (Textfeld)	Zeigt "Punkte im Bereich der Grundlinie".
MQ_Peak_Points_Across_Half_Height	TextField (Textfeld)	Zeigt "Punkte im Bereich halbe Höhe".
MQ_Peak_Start_at_10pct	TextField (Textfeld)	Zeigt "Startzeit bei 10 %".
MQ_Peak_Start_at_5pct	TextField (Textfeld)	Zeigt "Startzeit bei 5 %".
MQ_Peak_Tailing_Factor	TextField (Textfeld)	Zeigt "Rückstandsfaktor".
MQ_Peak_Width_at_10pct	TextField (Textfeld)	Zeigt "Breite bei 10 %".
MQ_Peak_Width_at_5pct	TextField (Textfeld)	Zeigt "Breite bei 5 %".
MQ_Quantifier_Mass_Ranges	TextField (Textfeld)	Zeigt „Mass Range“ (Massenbereich) für den Quantifier in der Analytengruppe.
MQ_Quantifier_Peak_Area	TextField (Textfeld)	Zeigt „Area“ (Fläche) für den Quantifier in der Analytengruppe.

**Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)**

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
MQ_Quantifier_Calculated_Concentration	TextField (Textfeld)	Zeigt „Calculated Concentration“ (Berechnete Konzentration) für den Quantifier in der Analytengruppe.
MQ_Report_Generation_Date	TextField (Textfeld)	Zeigt das Datum der Berichterstellung an, das die Kultureinstellungen der Software widerspiegelt.
MQ_Upper_Limit_Concentration	TextField (Textfeld)	Zeigt den Wert des oberen Grenzwerts der berechneten Konzentration im Dialog „Outlier Setting“ (Ausreißer-Einstellung) der Quantifizierungsmethode an.
Query_Name	TextField (Textfeld)	Der Name der in der Berichtsvorlage aufgeführten Abfrage (falls anwendbar).
Record_Modified	TextField (Textfeld)	Zeigt "Geändert".
Reporter_Template_Name	TextField (Textfeld)	Die Bezeichnung der für die Probenerfassung verwendeten Berichtsvorlage.
ResultTbl_CreateDate	TextField (Textfeld)	Zeigt das Datum der Erstellung der Ergebnistabelle an.
ResultTbl_IntegrAlgorithm	TextField (Textfeld)	Zeigt den zur Verarbeitung der Ergebnistabelle verwendeten Verarbeitungs-Algorithmus (z. B. MQ4, SignalFinder1) an.
ResultTbl_Name	TextField (Textfeld)	Zeigt den Dateinamen der Ergebnistabelle an.
ResultTbl_ProjName	TextField (Textfeld)	Zeigt den Namen des Projekts, in dem die Ergebnistabelle gespeichert wurde, an.
Sample_Comment	TextField (Textfeld)	Ein Kommentar in Bezug auf die Probe. Zeigt "Probenkommentar".
Sample_Dilution_Factor	TextField (Textfeld)	Die Gesamtanzahl der Einheitsvolumina, in dem die Probe aufgelöst wurde. Zeigt "Verdünnungsfaktor".
Sample_File_Name	TextField (Textfeld)	Der Name der Datendatei, in dem die Rohdaten für die spezifische Probe gespeichert werden. Zeigt "Ursprünglicher Dateiname".



**Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)**

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
Sample_ID	TextField (Textfeld)	Ein benutzerdefinierter Wert zur Auflistung bestimmter IDs für jede Probe oder jeden Analyten in der Ergebnistabelle. Zeigt "Proben-ID".
Sample_Index	TextField (Textfeld)	Zeigt "Index".
Sample_Count	TextField (Textfeld)	Zeigt die Gesamtanzahl der Analyten an.
Sample_InjectionVolume	TextField (Textfeld)	Das im Autosampler bei der Injektion der Originalprobe verwendete Injektionsvolumen, wie in der Erfassungsmethode definiert. Zeigt "Injektionsvolumen".
Sample_Instrument	TextField (Textfeld)	Zeigt die Art des Instruments an, das verwendet wurde, um die Probe zu erfassen, die aus der .wiff-Datei extrahiert wird.
Sample_InstrumentSerialNumber	TextField (Textfeld)	Zeigt die Seriennummer des Instruments an, das verwendet wurde, um die Probe zu erfassen, die aus der .wiff-Datei extrahiert wird.
Sample_Name	TextField (Textfeld)	Der benutzerdefinierte Name, der bei der Erstellung der Ergebnistabelle der bestimmten Probe zugeordnet wird. Zeigt "Probenname".
Sample_Operator	TextField (Textfeld)	Der zur Zeit der Erfassung angemeldete Benutzer. Zeigt "Bedienername".
Sample_Plate_Number	TextField (Textfeld)	Die bei der Erfassung der Proben verwendete Position der Probenplatte. Zeigt "Plattennummer".
Sample_Rack_Number	TextField (Textfeld)	Die bei der Erfassung der Proben verwendete Position des Proben-Racks. Zeigt "Racknummer".
Sample_Type	TextField (Textfeld)	Der benutzerdefinierte Wert, der die Probenart für jede spezifische Injektion angibt. Beispielsweise Leerprobe, Standard usw. Zeigt "Probenart".

**Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)**

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
Sample_Vial_Position	TextField (Textfeld)	Die im Erfassungsbatch definierte Fläschchenposition, die im Autosampler verwendet wird, um zu bestimmen, welches Fläschchen die Probe enthält.  Zeigt "Fläschchennummer".
Sample_File_Full_Name	TextField (Textfeld)	Zeigt den Dateinamen mit dem vollständigen Pfad an.
Sample_Index _ In _ Wiff	TextField (Textfeld)	Zeigt die Nummer der Reihenfolge der Probe in der .wiff-Datei an, beginnend mit 0.
Sta_Accuracy	TextField (Textfeld)	Die Genauigkeit für den Analyten-Peak, bestimmt durch den Vergleich der tatsächlichen Analytenkonzentration mit der berechneten Analytenkonzentration.  Zeigt "Genauigkeit".
Sta_CV	TextField (Textfeld)	Zeigt die bedingte Variation in Prozent an, die vorgibt, wie weit ein berechneter Konzentrationswert prozentual vom mittleren Konzentrationswert abweicht. Mithilfe der Standardabweichung/Mittelwert berechnet.
Sta_ExpectedConcent	TextField (Textfeld)	Die erwartete Konzentration für den durch den Analyst <sup>®</sup> MD-Software berechneten Analyten verwendet den Peak-Bereich.  Zeigt "Aktuelle Konzentration".
Sta_Mean	TextField (Textfeld)	Zeigt den Mittelwert (Durchschnitt) der berechneten Konzentrationen an, die vom Analyst <sup>®</sup> MD Software berechnet wurde konfigurieren.
Sta_NumVal	TextField (Textfeld)	Zeigt die Anzahl der Werte für die statistische Berechnung an. Wie viele Proben bei der Ermittlung eines Durchschnitts einbezogen werden.
Sta_QCAccuracy	TextField (Textfeld)	Die Genauigkeit, die durch den Vergleich der erwarteten Konzentration mit der tatsächlichen Konzentration für eine Qualitätskontrollprobe bestimmt wird, wie durch den Benutzer in der Spalte „Probentyp“ bestimmt.  Zeigt "Genauigkeit".

**Tabelle C-2 Report Templates Tags (Berichtsvorlagen-Tags) (Fortsetzung)**

Type	Feldart	Tag-Beschreibung
Sta_QCCV	TextField (Textfeld)	Zeigt die bedingte Variation in Prozent an, die vorgibt, wie weit ein berechneter Konzentrationswert prozentual vom mittleren Konzentrationswert abweicht. Mithilfe der Standardabweichung/Mittelwert berechnet. Gilt für eine Qualitätskontrolle.
Sta_QCExpectedConcent	TextField (Textfeld)	Die erwartete Konzentration für eine Qualitätskontrollprobe, wie durch den Benutzer bestimmt.  Zeigt „Tatsächliche Konzentration“ für die Qualitätskontrolle.
Sta_QCMean	TextField (Textfeld)	Zeigt den Mittelwert (Durchschnitt) der berechneten Konzentrationen an, die vom Analyst <sup>®</sup> MD-Software berechnet wurde für eine Qualitätskontrolle.
Sta_QCNumVal	TextField (Textfeld)	Zeigt die Anzahl der bei der Ermittlung des Mittelwerts einer Qualitätskontrollkonzentration einbezogenen Werte an.
Sta_QCStdDev	TextField (Textfeld)	Zeigt die Standardabweichung der Konzentrationswerte für jede Probe an. Die Standardabweichung stellt eine Messung der Streuung einer Reihe von Werten vom Mittelwert dar.
Sta_StdDev	TextField (Textfeld)	Zeigt die Standardabweichung für eine Standardprobe an. Die Standardabweichung stellt eine Messung der Streuung einer Reihe von Werten vom Mittelwert dar.
CUSTOM	TextField (Textfeld)	Zeigt den Wert der benutzerdefinierten Spalten der Ergebnistabelle an.

# Relatives Rauschen und Signal-zu-Rauschen-Berechnungen

# D

Bei der Verarbeitung von qualitativen Massenspektrometrie-Daten ist es wichtig, zu ermitteln, ob ein bestimmter Peak signifikant ist oder nicht, wobei „signifikant“ normalerweise bedeutet, dass das Signal das Hintergrund-Rauschen übertrifft.

Normalerweise wird die Peak-Höhe mit dem gemessenen Hintergrund-Rauschen in einer Region ohne Peak verglichen, wobei das Rauschen normalerweise auf das Ein- bis Dreifache der Standardabweichung der Datenpunkte in diesem Bereich geschätzt wird. Dieser Ansatz ist aus den folgenden Gründen nicht ideal:

- Er ist subjektiv, da der Bereich für Rauschen manuell ausgewählt wird.
- Ein Hintergrundbereich ohne Peak kann nicht vorliegen oder der Bereich kann zu eng sein, um das Rauschen genau zu schätzen.
- Das Rauschen an der Peak-Position kann sich stark von jenem in dem für das Rauschen ausgewählten Bereich unterscheiden.
- Der Faktor „Eins bis Drei“ ist ebenfalls subjektiv und verschiedene Stellen geben unterschiedliche Empfehlungen.
- Das scheinbare Rauschen kann verfälscht sein, wenn die Daten vorverarbeitet wurden. Zum Beispiel, wenn sie geglättet oder durch Grenzwerte angepasst wurden.

Durch das Konzept des relativen Rauschens ( $R_n$ ) ist es einfach, eine einfache Methode zur Berechnung des erwarteten Rauschens an einem beliebigen Punkt in den Daten zu entwickeln, das mit dem gemessenen Signal verglichen wird. Hierbei handelt es sich um eine robuste, objektive Metrik zur Berechnung des Signal-zu-Rauschen-Verhältnisses ( $S/N$ ) und zur Bewertung und zum Vergleich der Instrumenten- und Assay-Leistung. Es gibt viele Anwendungsmöglichkeiten für das Konzept des relativen Rauschens, und eine davon ist die Berechnung des  $S/N$ .

Der grundlegende Algorithmus funktioniert folgendermaßen:

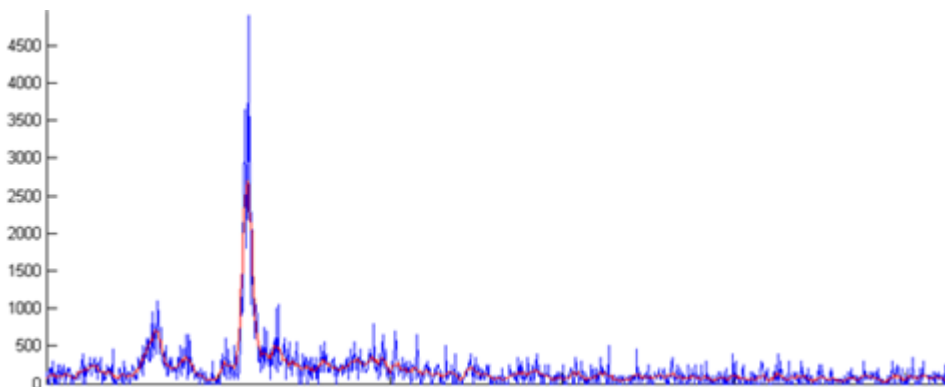
1. Entwickeln Sie ein Rauschen-Modell, das es dem Benutzer ermöglicht, das erwartete Rauschen an jedem Punkt im Datensatz zu berechnen, unter Berücksichtigung der Stärke des zugrunde liegenden Signals an diesem Punkt.

Das Rauschen-Modell kann basierend auf theoretischen Aspekten ermittelt werden oder basierend auf realen Messungen für ein bestimmtes System modelliert werden. Für Impulszählungs-Sensoren ist die Standardabweichung eines Signals, und darum das erwartete Rauschen, proportional zur Quadratwurzel des Signals und variiert darum entsprechend dem Signal. In anderen Systemen wird eine konstante Komponente für „weißes Rauschen“ möglicherweise mit einer intensitätsabhängigen Komponente kombiniert.

2. Schätzung des zugrunde liegenden Signals basierend auf dem gemessenen Signal.

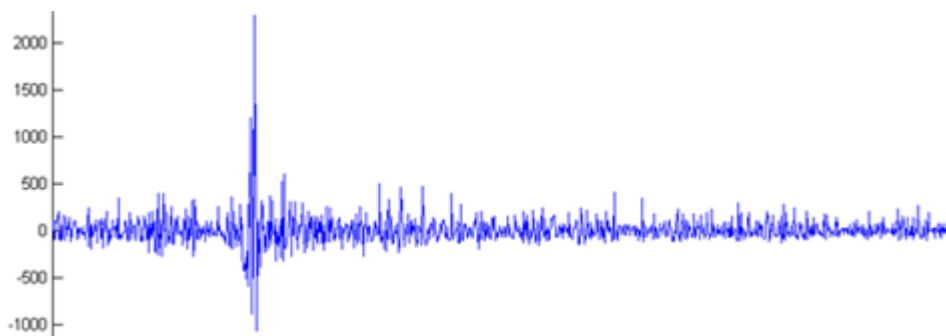
Dies kann auf verschiedene Arten erfolgen, aber die einfachste ist, eine geglättete Version der Daten zu erzeugen, wie dargestellt in [Abbildung D-1](#).

**Abbildung D-1 Überlagern von Roh- und geglätteten Daten**



3. Messung des tatsächlichen Rauschens unter Verwendung aller Punkte (Peaks und Hintergrund). Dies erfolgt durch Subtraktion der Schätzung des zugrunde liegenden Signals vom gemessenen Signal an jedem Punkt der Daten, an dem das geglättete Signal vom Original subtrahiert wird. Dies ist als Delta-Rauschen bekannt. Der Bereich des Delta-Rauschens ist einigermaßen konstant, außer an großen Peaks, da das Rauschen vom Signal abhängt und darum dort stärker ist, wo das Signal größer ist. Siehe [Abbildung D-2](#).

**Abbildung D-2 Grafische Darstellung der Werte für Delta-Rauschen an jedem Datenpunkt**



4. Berechnung des Verhältnisses des gemessenen Rauschens zum erwarteten Rauschen an jedem Datenpunkt.

Das heißt, das wir an jedem Datenpunkt das in Schritt 3 gemessene Rauschen durch den Wert teilen, den unser Rauschen-Modell vorhersagt (in unserem Fall die Quadratwurzel der Intensität). Wenn das Rauschen-Modell gut ist, erzeugt es eine Reihe von Werten, die meist von einigen Grenzwerten begrenzt bleiben, wie dargestellt in [Abbildung D-3](#). [Abbildung D-3](#) zeigt ebenfalls die grafische Darstellung von

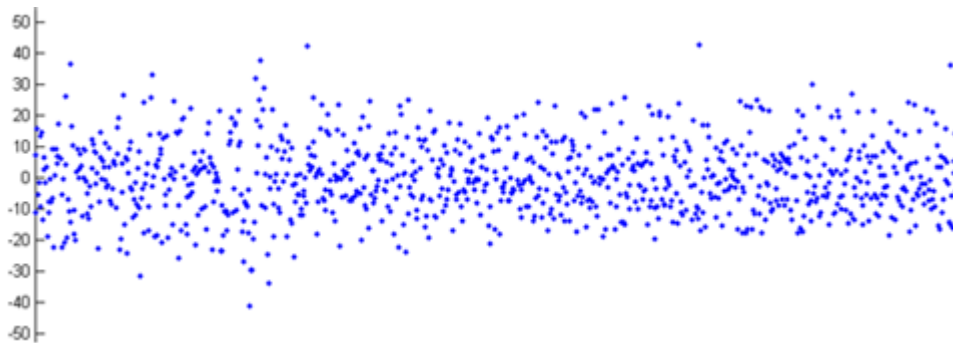
$$\Delta noise / \sqrt{intensity}$$

---

**Hinweis:** Dies reduziert die starke Schwankung des Delta-Rauschens und führt zu einer gut eingeschränkten Reihe von Werten.

---

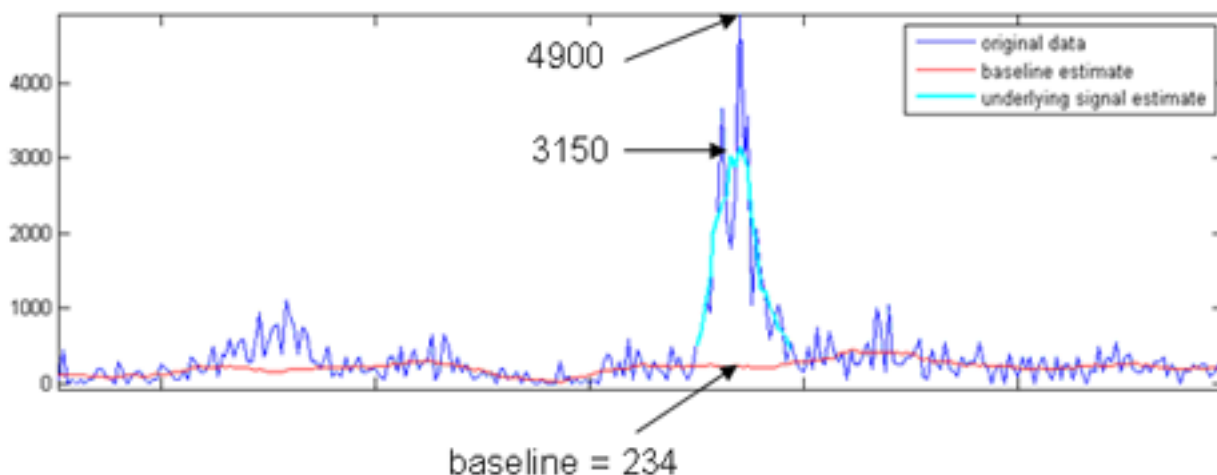
**Abbildung D-3 Rauschen-Modell**



5. Berechnen der Standardabweichung der Verhältniswerte. Dies ist das  $R_n$ , eine Schätzung der wahrscheinlichsten Beziehung zwischen dem tatsächlichen Delta-Rauschen und jenem, das von dem Modell vorhergesagt wurde. In [Abbildung D-3](#) ergibt dies einen Wert von 9,5.

[Abbildung D-4](#) zeigt ein Beispiel dafür, wie das relative Rauschen zur Berechnung von S/N eingesetzt werden kann.

**Abbildung D-4 Überlagern von Rohdaten, Schätzungen des zugrunde liegenden Signals und der Basislinien-Schätzungen**



Wie oben beschrieben:

$$noise = R_n \times \sqrt{(baseline)}$$

in diesem konkreten Beispiel:

$$noise = 9.5 \times \sqrt{234} = 145$$

Wenn der Scheitelpunkt des Peaks als Signal verwendet wird, ergibt dies ein S/N von 34 (4900/145), und wenn die Höhe des geglätteten Signals verwendet wird, ergibt dies ein S/N von 22 (3150/145).

Wenn das S/N berichtet wird, verwendet der MQ4-Integrationsalgorithmus das hier beschriebene Verfahren und den Scheitelpunkt des Peak als Signal. Da der SignalFinder™ Integrationsalgorithmus ein Modell an den Peak anpasst, verwendet er die Höhe des angepassten Profils. Dies führt zu einem kleineren berichteten S/N. Hierbei handelt es sich jedoch um einen genaueren Wert, da er weniger von möglichen Rauschspitzen betroffen ist. Außerdem bietet der SignalFinder-Integrationsalgorithmus einen differenzierteren Ansatz für die Basislinien-Schätzung. Aus diesen beiden Gründen sind die von den beiden Algorithmen berichtete S/N-Werte nicht identisch, obwohl sie normalerweise ähnlich ausfallen.

Zusammenfassend hat der Ansatz zum relativen Rauschen zur Berechnung des S/N im Vergleich zum normalen Ansatz zur Schätzung des Rauschens als Standardabweichung eines Hintergrund-Bereichs die folgenden Vorteile:

- Er ist wesentlich weniger subjektiv, da kein Hintergrundbereich manuell ausgewählt werden muss.

- Ein akkurater S/N kann auch dann vorhergesagt werden, wenn keine Bereiche ohne Peak im Chromatogramm existieren.
- Die Basislinie und dadurch das Rauschen werden neben dem Peak geschätzt, der von Interesse ist. Hierbei kann eine große Differenz zu dem berichteten S/N-Wert vorliegen, da der für den üblichen Ansatz ausgewählte Hintergrund-Bereich möglicherweise viel ruhiger ist als der Hintergrund in der Nähe des Peaks. Wie oben beschrieben kann der mit dem Ansatz **Relatives Rauschen** berechnete S/N niedrigere Werte als der übliche Ansatz ergeben. Diese Werte sind jedoch genauer und hilfreicher. Siehe [Abbildung D-4](#).

Um die Spalte **Signal / Noise (Signal / Rauschen)** in der **Ergebnistabelle** anzuzeigen, siehe [Ändern der in der Ergebnistabelle angezeigten Spalten auf Seite 95](#).

## Hinweis zu Signal-zu-Rauschen bei Verwendung des SignalFinder™ Integrationsalgorithmus

Da der SignalFinder™ Integrationsalgorithmus Signal-zu-Rauschen genauer berechnet (und daher CVs genauer vorhersagen kann), sollten Sie bei Verwendung des 1-Sigma-Signal-zu-Rauschen-Ansatzes in Betracht ziehen, den minimalen annehmbaren Signal-zu-Rauschen-Wert einer Standard-Betriebsanweisung (SOP) basierend auf empirischen Daten aus dem Labor zu verringern.



Es ist jeweils immer nur ein Teilfenster aktiv. Aktive Teilfenster sind durch einen orangefarbenen Rand gekennzeichnet und der Benutzer kann ein Teilfenster aktivieren, indem er es an irgendeiner Stelle anklickt. Viele Menübefehle wirken auf das aktive Teilfenster.

Die Symbole der Werkzeugleiste, die in diesem Abschnitt beschrieben werden, erscheinen in der Werkzeugleiste des jeweiligen Teilfensters für alle Teilfensterarten. Daneben gibt es zusätzliche Symbole nur für einen bestimmten Teilfenstertyp.

**Tabelle E-1 Symbole der Werkzeugleiste**









Symbol	Name	Beschreibung
	New Results Table	Öffnet den <b>New Results Table Wizard</b> .
	Open	Öffnet eine <b>Results Table</b> .
	Save	Speichert alle offenen Dateien.
	Select Analyst Project	Wählt einen Projektordner aus.
	Screen Lock	Sperrt den Bildschirm. Diese Funktion ist nur verfügbar, wenn die Analyst <sup>®</sup> MD Software im gemischten Modus ausgeführt wird und die Funktion zur Bildschirmsperre aktiviert ist.
	Show Internal Standard with Analyte	Zeigt die Zeilen in der <b>Results Table</b> für den aktuell ausgewählten Analyten und seinen entsprechenden internen Standard an. Wenn diese Funktion ausgewählt ist, kann der Benutzer auf einen Analytnamen klicken, um ihn mit dem internen Standard anzuzeigen. Dies entspricht dem Klicken auf den Analyten und anschließenden Klicken auf den internen Standard bei gleichzeitigem Drücken der <b>Ctrl</b> -Taste (sodass beide ausgewählt werden).
	Find Component or Group	Wählt die Elemente in der Liste aus, die mit dem angegebenen Text übereinstimmen.
	Arranging Panes	Ändert die relativen Positionen der Teilfenster. Klicken Sie auf das Symbol in einem Teilfenster und ziehen Sie es zum oberen, unteren, linken oder rechten Abschnitt eines zweiten Teilfensters. Je nachdem, wo der Cursor losgelassen wird, ändert das erste Teilfenster seine relative Position zum zweiten Teilfenster. Während der Mauszeiger gezogen wird, wird eine Seite des zweiten Teilfensters Rot markiert, um anzuzeigen, wohin das erste Teilfenster gezogen wird.

Tabelle E-1 Symbole der Werkzeugleiste (Fortsetzung)





Symbol	Name	Beschreibung
	Delete Pane	Löscht das Fenster. Wenn eine <b>Results Table</b> gelöscht wird, werden andere zugehörige Teilfenster ( <b>Peak Review</b> und <b>Calibration</b> ) ebenfalls gelöscht und das gesamte Fenster wird geschlossen.
	Toggles tab mode	Vergrößert den Bereich auf das gesamte Fenster (oder umgekehrt). Dies ist hilfreich, wenn es mehrere Teilfenster in dem Fenster gibt, sodass der Benutzer sich vorübergehend auf eines konzentrieren kann.  Im gezoomten Modus erscheint eine eigene Registerkarte im oberen Teil des Fensters für jedes Teilfenster. Durch Klicken auf die entsprechende Registerkarte wechseln Sie zwischen den Teilfenstern. Kehren Sie aus dem gezoomten Modus zur ursprünglichen Ansicht zurück, in der alle Teilfenster angezeigt werden, indem Sie ein zweites Mal auf <b>Zoom Pane</b> klicken. Durch Klicken auf das Symbol können Sie zwischen den beiden Status umschalten.
	Hide Pane	Blendet das Teilfenster aus, sodass andere Teilfenster in dem Fenster den verfügbaren Platz ausfüllen.
	Show Hidden Panes	Zeigt alle Teilfenster an, die zuvor ausgeblendet wurden.

Tabelle E-2 Symbole der Peak Review-Werkzeugleiste





Symbol	Name	Beschreibung
	Display Previous Page	Zeigt den vorherigen Chromatogramm-Satz an. Dies entspricht dem Drücken auf den Pfeil nach oben oder nach links bzw. dem Klicken auf den oberen Pfeil auf dem Rollbalken.
	Display Next Page	Zeigt den nächsten Chromatogramm-Satz an. Dies entspricht dem Drücken auf den Pfeil nach unten oder nach rechts bzw. dem Klicken auf den unteren Pfeil auf dem Rollbalken.
	Display Next Page	Blättert zurück im Fenster <b>Peak Review</b> . Dies entspricht dem Klicken auf den Pfeil nach oben auf dem Rollbalken, bis die erste Probe, die sich von dem ersten aktuell sichtbaren Chromatogramm unterscheidet, angezeigt wird.
	Display Next Sample	Blättert zur nächsten Probe.

Tabelle E-2 Symbole der Peak Review-Werkzeugleiste (Fortsetzung)







Symbol	Name	Beschreibung
	Starts Slide Show Peak Review mode	Startet die Bildschirmpräsentation. Beim ersten Gebrauch öffnet sich das Dialogfeld <b>Slide Show Options</b> . Stellen Sie die Verzögerungszeit in Sekunden zwischen Peaks ein. Um zu vermeiden, dass sich dieser Dialog erneut öffnet, wählen Sie das Kontrollkästchen <b>Only show this dialog again if the shift key is down</b> . Klicken Sie an irgendeiner Stelle des Teilfensters <b>Peak Review</b> , um die Bildschirmpräsentation anzuhalten.
	Peak Magnifier	Vergrößert den ausgewählten Peak.
	Peak Demagnifier	Bringt den vergrößerten Peak in seine ursprüngliche Größe.
	Set Peak to 'Not Found'	Klicken Sie auf dieses Symbol, um anzugeben, dass in dem aktiven Chromatogramm kein Peak vorliegt. In manchen Fällen, wenn tatsächlich kein wesentlicher Peak vorhanden ist, können kleine Rausch-Peaks integriert und berichtet werden. Klicken Sie auf dieses Symbol, um dieses Verhalten auszuschalten. Der Peak-Bereich wird in der <b>Results Table</b> als N/A angezeigt.  Nachdem der Benutzer den Peak als <b>Not Found</b> markiert hat, sind die Peak-Findungs-Parameter links vom Fenster für das Chromatogramm nicht verfügbar, da sie nicht verwendet werden. Klicken Sie erneut auf das Symbol, um zum Automatik-Modus zurückzukehren.
	Enable Manual Integration Mode	Klicken Sie auf dieses Symbol, um in den manuellen Integrationsmodus zu gehen. Wenn die Software sich im manuellen Integrationsmodus befindet, ziehen Sie die Maus über einer Chromatogrammkurve, um den genauen Bereich, der integriert werden soll, zu bestimmen. Die Integration beginnt ab dem (Zeit-, Intensitäts-) Punkt, zu dem der Cursor zum ersten Mal geklickt wird, und wird so lange fortgesetzt, bis der Cursor losgelassen wird. Klicken Sie erneut auf das Symbol, um den manuellen Integrationsmodus zu beenden.  Nachdem der Benutzer den Peak manuell integriert hat, sind die Peak-Findungs-Parameter links von dem Teilfenster für das Chromatogramm nicht verfügbar, da sie nicht verwendet werden. Klicken Sie erneut auf das Symbol, um zum Automatik-Modus zurückzukehren.
	Recalculate Peak Model	Berechnet das Peak-Modell mithilfe des aktiven Chromatogramms und wendet es auf dieses Chromatogramm an (nur SignalFinder™ Integrationsalgorithmus).

Tabelle E-3 Symbole der Kalibrierungs-Werkzeuggeste


Symbol	Name	Beschreibung
	Regression und Gewichtung bearbeiten	Wird zum Ändern der Kalibrierungsparameter verwendet. Hierzu zählen sowohl der tatsächlich für die Regression verwendete Parameter (Bereich oder Höhe) als auch die Regressionsart und Gewichtung. Siehe <a href="#">Regressionsgleichungen auf Seite 132</a> .

Tabelle E-4 Symbole der Statistik-Werkzeuggeste



Symbol	Name	Beschreibung
	Remove Trailing Index from Sample Name	Die <b>Statistiktafel</b> kann so angeordnet werden, dass Proben (für einen bestimmten Analyten) nach Ist-Konzentration oder nach Probenamen gruppiert werden. Bei Gruppieren nach Probenname wird über die Option <b>Remove Trailing Index from Sample Name</b> gesteuert, ob Probenamen genau übereinstimmen müssen, um gruppiert zu werden, oder ob ein nachgestellter numerischer Index hinter einem Bindestrich (-) entfernt werden soll. Beispielsweise würden zwei Proben mit den Namen von Probe 1 - 001 und Probe 1 - 002 zusammen gruppiert werden, wenn diese Option ausgewählt ist, andernfalls jedoch nicht.
	Sample Grouping	Die Elemente in dieser Liste bestimmen, wie die Probe (für einen bestimmten Analyten) für die Berechnung der Statistik gruppiert werden sollte. Die folgenden Wahlmöglichkeiten sind verfügbar: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Group by Concentration for Standards:</b> Proben vom Typ <b>Standard</b> werden nach Ist-Konzentration gruppiert.</li> <li>• <b>Group by Concentration for QCs:</b> Proben vom Typ <b>Quality Control</b> werden nach Ist-Konzentration gruppiert.</li> <li>• <b>Group by Sample Name for Standards:</b> Wiederholungsproben vom Typ <b>Standard</b> werden nach dem Feld <b>Probenname</b> gruppiert. Wie oben beschrieben, müssen die Probenamen genau übereinstimmen, wenn die Option <b>Remove Trailing Index from Sample Name</b> nicht verwendet wird. Andernfalls können sich die Namen durch eine nachgestellte Zahl (hinter einem Bindestrich) unterscheiden.</li> <li>• <b>Group by Sample Name for QCs:</b> Ähnlich wie die vorherige Option, außer dass nur Proben vom Typ <b>Quality Control</b> verwendet werden.</li> <li>• <b>Group by Sample Name for All Samples:</b> Ähnlich wie die vorherige Option, außer dass alle Proben verwendet werden.</li> </ul>

Tabelle E-4 Symbole der Statistik-Werkzeugleiste (Fortsetzung)


Symbol	Name	Beschreibung
	Metric	<p>Die Elemente in dieser Liste bestimmen die tatsächliche Metrik, die für die Berechnung der Statistik verwendet wird. Die folgenden Wahlmöglichkeiten sind verfügbar:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Calculated Concentration:</b> Das Feld <b>Calculated Concentration</b> der <b>Results Table</b> wird verwendet.</li> <li>• <b>Area:</b> Das Feld <b>Area</b> der <b>Results Table</b> wird verwendet.</li> <li>• <b>Height:</b> Das Feld <b>Height</b> der <b>Results Table</b> wird verwendet.</li> <li>• <b>Calibration Y-Value:</b> Der für den Analyten bestimmte Regressionsparameter wird verwendet. Dies ist entweder <b>Area</b> oder <b>Height</b> für einen Analyten, der keinen entsprechenden internen Standard besitzt, oder <b>Area Ratio</b> oder <b>Height Ratio</b> für einen Analyten, der einen internen Standard besitzt.</li> </ul>

Tabelle E-5 Werkzeugleisten-Symbole der Ergebnistabelle





Symbol	Werkzeugspitze	Beschreibung
	Zeigt die Peak Review (Peak-Bewertung) an.	Zeigt das Teilfenster <b>Peak Review (Peak-Bewertung)</b> an, sodass die Qualität der Peak-Integrationen geprüft und bei Bedarf geändert werden kann.
	Zeigt die gegenüberstellende Probenprüfung an	Zeigt zwei Probenlisten an, aus denen Benutzer bis zu sechs Proben zum Vergleich der Peak-Reaktionen zwischen den Proben wählen können.
	Zeigt die Kalibrierkurve an	Zeigt die Kalibrierkurve an (dies gilt nur, wenn <b>Standard</b> proben einer bekannten Konzentration verwendet werden). Dieses Fenster gibt Benutzern die Möglichkeit, die Kalibrierung zu überprüfen und die Regressionsart und Gewichtung einzustellen.
	Erstellt einen Metric Plot (Metrische Kurve)	Zeigt eine metrische Kurve für die aktuell ausgewählte(n) Spalte bzw. Spalten an. Diese Kurven können zum Auffinden von Ausreißern sehr nützlich sein. Das Menü direkt rechts neben der Schaltfläche enthält eine Liste der gespeicherten Kurveneinstellungen.

Tabelle E-5 Werkzeugleisten-Symbole der Ergebnistabelle (Fortsetzung)




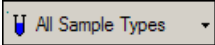






Symbol	Werkzeugspitze	Beschreibung
	Zeigt das Statistik-Fenster an	Zeigt das <b>Statistik</b> -Fenster an. Diese Tabelle zeigt die durchschnittliche berechnete Konzentration, Standardabweichung und CV für jede Konzentration an.
	Ausgewählte Spalte vom niedrigsten zum höchsten Wert sortieren	Sortiert die <b>Ergebnistabelle</b> so, dass die Werte in der ausgewählten Spalte in aufsteigender Reihenfolge aufgeführt werden. Dieses Symbol steht erst zur Verfügung, nachdem die Kopfzeile der Spalte angeklickt wurde.
	Ausgewählte Spalte vom höchsten zum niedrigsten Wert sortieren	Sortiert die <b>Ergebnistabelle</b> so, dass die Werte in der ausgewählten Spalte in absteigender Reihenfolge aufgeführt werden. Dieses Symbol steht erst zur Verfügung, nachdem die Kopfzeile der Spalte angeklickt wurde.
	Entfernt alle vorherigen Sortierungen	Wenn die Tabelle sortiert worden ist, wird die <b>Ergebnistabelle</b> durch Klicken auf dieses Symbol wieder in der Standardreihenfolge angezeigt.
	Zeigt nur den/die ausgewählten Probentypen an	Filtert die <b>Results Table</b> , sodass nur Proben eines bestimmten Typs sichtbar sind. Dies ist nur dann hilfreich, wenn es <b>Standard</b> proben mit bekannter Konzentration gibt und nicht alle Proben <b>Unbekannte</b> sind.

Tabelle E-5 Werkzeugleisten-Symbole der Ergebnistabelle (Fortsetzung)

Symbol	Werkzeugspitze	Beschreibung
	Ausgewählte Zeile(n) ausblenden	<p>Blendet die ausgewählten Zeilen in der <b>Ergebnistabelle</b> aus. Wählen Sie die auszublendenden Zeilen aus und klicken Sie dann auf das Symbol.</p> <p>Das Fenster <b>Peak Review (Peak-Bewertung)</b> wird mit der <b>Ergebnistabelle</b> synchronisiert. Aus diesem Grund führt das Ausblenden der Zeilen für Peaks, die nicht überprüft werden müssen, dazu, dass die Überprüfung schneller durchgeführt werden kann. Beispielsweise kann der Benutzer die Tabelle nach der Spalte <b>Qualität</b> sortieren und diejenigen Zeilen ausblenden, deren Wert in dieser Spalte einen bestimmten Wert übersteigt (z. B. 0,8). Dann kann er die Tabelle nach der Spalte <b>Region Height (Bereichshöhe)</b> sortieren und alle Zeilen mit einem niedrigen Wert ausblenden (Zeilen bei denen der Peak definitiv nicht vorhanden ist). Daraufhin werden nur Peaks mit niedriger Qualität angezeigt, bei denen jedoch tatsächlich ein Peak vorhanden ist. Der Benutzer hat dann die Möglichkeit, diese angezeigten Zeilen im Fenster <b>Peak Review (Peak-Bewertung)</b> durchzugehen, was weniger Zeit in Anspruch nimmt, als alle möglichen Peaks zu überprüfen.</p>
	Zuvor ausgeblendete Zeile(n) anzeigen	Zeigt alle Zeilen an. Die angezeigten Zeilen sind durch den <b>Sample Type Filter (Probenartfilter)</b> und die Auswahl aus der <b>Components &amp; Groups List (Liste der Komponenten und Gruppen)</b> eventuell noch immer eingeschränkt.
	Nur Ausreißer anzeigen	Zeigt die Zeilen an, die Ausreißer enthalten.
	Gehe zu nächstem Ausreißer	Geht zum nächsten Ausreißer in der <b>Ergebnistabelle</b> .
	Sperrern und Speichern	Sperrt die <b>Results Table</b> , nachdem diese gespeichert wurde. Änderungen in der <b>Results Table</b> werden erst nach Entsperren der Tabelle gespeichert.
	Überprüfen und Speichern	Klicken Sie auf dieses Symbol, um die <b>Results Table</b> zu speichern, nachdem diese überprüft wurde. Das Symbol steht nicht zur Verfügung, wenn die <b>Results Table</b> schreibgeschützt ist.

# MultiQuant™ MD

## Software-Zugriff

# F

**Hinweis:** Wenn die MultiQuant™ MD-Software entfernt wird, verbleiben die MultiQuant™ MD-Software-Sicherheitselemente in der Analyst® MD-Software. Sicherheitsberechtigungen finden Sie in der Registerkarte **Security** im Dialog **Security Configuration**.

Voreinstellung Zugriff	Beschreibung
Create session file	Ermöglicht es den Benutzern, eine <b>Results Table</b> zu erstellen.
Create quantitation method	Ermöglicht es den Benutzern, Quantifizierungsmethoden zu erstellen.
Modify quantitation method files	Ermöglicht es den Benutzern, die Quantifizierungsmethoden im Ordner <b>Quantitation Methods</b> im Ordner <b>Analyst Data</b> zu ändern.
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	Ermöglicht es den Benutzern, Berichte aus nicht gesperrten <b>Results Tables</b> zu erstellen oder exportieren.
Replace existing Results Table when saved	Ermöglicht es den Benutzern, vorhandene <b>Results Tables</b> zu aktualisieren, aber erlaubt ihnen nicht, eine neue <b>Results Table</b> mit dem Namen einer vorhandenen <b>Results Table</b> zu erstellen. Wenn zum Beispiel eine <b>Results Table</b> mit dem Namen RT1 erstellt wird, können die Benutzer sie aktualisieren, aber sie können keine neue <b>Results Table</b> mit dem Namen RT1 erstellen. Die Benutzer können keine unbenannte <b>Results Table</b> mit dem Namen einer vorhandenen <b>Results Table</b> benennen.
Change default quantitation method integration algorithm	Ermöglicht es den Benutzern, den Algorithmus im Dialog <b>Integration Default</b> zu ändern. Klicken Sie auf <b>Edit &gt; Project Integration Defaults</b> .
Change default quantitation method integration parameters	Ermöglicht es den Benutzern, die Standardparameter des Algorithmus im Dialog <b>Integration Default</b> zu ändern. <b>Edit &gt; Project Integration Defaults</b> .
Allow Enable Project Modified Peak Warning	Ermöglicht es den Benutzern, die Kennzeichnung zu aktivieren, die die Option <b>Project Modified Peak Warning</b> im Menü <b>Edit</b> aktiviert.
Project Secure Export Settings	Falls diese Option aktiviert wird, werden die Daten in der Textdatei beim Exportieren verschlüsselt. Legen Sie ein Passwort fest, um die Verschlüsselung zu aktivieren.
Add samples to Results Table	Ermöglicht Benutzern das Hinzufügen von Proben. Klicken Sie auf <b>Process &gt; Add Samples</b> .
Remove samples from Results Table	Ermöglicht es den Benutzern, ausgewählte Proben zu entfernen. Klicken Sie auf <b>Process &gt; Remove Selected Samples</b> .



Voreinstellung Zugriff	Beschreibung
Export, import, or remove External Calibration	Ermöglicht es den Benutzern, eine externe Kalibrierung mit einer der folgenden Optionen zu exportieren, zu importieren oder zu entfernen: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Klicken Sie auf <b>Process &gt; Export Calibration</b>.</li> <li>• Klicken Sie auf <b>Process &gt; Import Calibration</b>.</li> <li>• Klicken Sie auf <b>Process &gt; Remove External Calibration</b>.</li> </ul>
Change Audit Map settings	Ermöglicht es den Benutzern, die Audit-Vorgaben des Projekts und die Audit-Vorgabendefinition zu ändern. Klicken Sie auf <b>Audit Trail &gt; Audit Map Manager</b> .
Modify Sample Name	Ermöglicht es den Benutzern, den Probenamen in der <b>Results Table</b> zu ändern.
Modify Sample Type	Ermöglicht es den Benutzern, die Probenart ( <b>Standard, QC, Unknown</b> ) in der <b>Results Table</b> zu ändern.
Modify Sample ID	Ermöglicht es den Benutzern, die Proben-ID in der <b>Results Table</b> zu ändern.
Modify Actual Concentration	Ermöglicht es den Benutzern, die Ist-Konzentration von <b>Standard</b> und <b>QC</b> in der <b>Results Table</b> zu ändern.
Modify Dilution Factor	Ermöglicht es den Benutzern, den Verdünnungsfaktor in der <b>Results Table</b> zu ändern.
Modify Comment Fields	Ermöglicht es den Benutzern, Kommentarfelder zu ändern: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Component Comment</b></li> <li>• <b>IS Comment</b></li> <li>• <b>IS Peak Comment</b></li> <li>• <b>Peak Comment</b></li> <li>• <b>Sample Comments</b></li> </ul>
Allow manual integration	Ermöglicht es den Benutzern, den manuellen Integrationsmodus im Fenster <b>Peak Review</b> zu aktivieren. Wenn diese Berechtigung aktiviert ist, muss die Berechtigung <b>Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram</b> ebenfalls aktiviert werden. Der Befehl <b>Allow manual integration</b> kann deaktiviert werden, wenn <b>Modify Results Table integration parameters</b> aktiviert ist.
Allow set to Peak Not Found	Ermöglicht es den Benutzern, <b>Set peak to not found</b> zu verwenden. Klicken Sie dazu mit der rechten Maustaste im Fenster <b>Peak Review</b> .
Include or exclude a peak from the Results Table	Ermöglicht es den Benutzern, Peaks aus <b>Results Tables, Statistics Tables</b> und Kalibrierkurven ein- oder auszuschließen.

Voreinstellung Zugriff	Beschreibung
Modify regression settings for fit and weight	Ermöglicht es den Benutzern, die Regressionseinstellungen im Fenster Kalibrierkurve zu ändern, wenn die Funktion <b>Modify Results Table Method</b> und der <b>New Quantitation Method wizard</b> verwendet werden.
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	Ermöglicht es dem Benutzer, ein einzelnes Chromatogramm zu ändern.
Modify quantitation method for the Results Table component	Ermöglicht es dem Benutzer, die Änderungen von den einzelnen Chromatogrammen auf die Komponente anzuwenden.  Die Benutzer müssen über diese Berechtigung verfügen und die Berechtigung <b>Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram</b> muss aktiviert sein, wenn sie einzelne Änderungen auf Komponenten anwenden möchten.
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Ermöglicht es den Benutzern, metrische Kurven in der <b>Results Table</b> zu erstellen und zu verwenden (Schaltfläche <b>Metric Plot</b> ist aktiviert) oder metrische Kurven zu exportieren. Klicken Sie auf <b>File &gt; Export</b> .
Set Peak Review Title Format	Ermöglicht es den Benutzern, das <b>Peak Review Title Format in Peak Review</b> zu ändern. Klicken Sie dazu mit der rechten Maustaste im Fenster <b>Peak Review</b> .
Add, Rename, or Modify custom column	Ermöglicht es den Benutzern, benutzerdefinierte Spalten hinzuzufügen, umzubenennen oder zu modifizieren. Auch ohne diese Berechtigung können Benutzer Abfragen ausführen, die automatisch benutzerdefinierte Spalten erstellen.  Wenn diese Berechtigung deaktiviert ist, muss die Berechtigung <b>Remove custom column</b> ebenfalls deaktiviert werden. <b>Remove custom column</b> kann deaktiviert werden, wenn die Berechtigung <b>Add, Rename, or Modify custom column</b> aktiviert ist.
Remove Custom Column	Ermöglicht es den Benutzern, eine benutzerdefinierte Spalte in der <b>Results Table</b> zu löschen.
Modify Results Table column settings	Ermöglicht es den Benutzern, Spalteneinstellungen der <b>Results Table</b> in einer <b>Results Table</b> zu ändern.
Save Column Settings as Project Default	Ermöglicht es den Benutzern, die Spalteneinstellungen auf das Projekt anzuwenden.
Lock and save Results Table	Ermöglicht es den Benutzern, eine <b>Results Table</b> zu sperren und zu speichern.
Unlock and save Results Table	Ermöglicht es den Benutzern, eine <b>Results Table</b> zu entsperren und zu speichern.
Review and save Results Table	Ermöglicht es den Benutzern, die <b>Results Table</b> zu überprüfen und zu speichern.

Voreinstellung Zugriff	Beschreibung
Edit Report Template	Ermöglicht es den Benutzern, die Berichtsvorlagen zu bearbeiten.
Transfer to LIMS	Ermöglicht es den Benutzern, eine gespeicherte und gesperrte <b>Results Table</b> in ein LIMS zu übertragen. Das Ereignis wird im Prüfprotokoll aufgezeichnet.

## Sicherheitseinstellungen

Tabelle F-1 enthält die empfohlenen Sicherheitseinstellungen für die Benutzerrollen.

**Tabelle F-1 Sicherheitseinstellungen basierend auf Benutzerrollen**

Sicherheitseinstellung	Administrator	Supervisor (Vorgesetzter)	Analyst	Prüfer
Create session file	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff
Create quantitation methods	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Modify quantitation method files	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Replace existing Results Table when saved	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Zugriff
Change default quantitation method integration algorithm	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Change default quantitation method integration parameters	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Allow Enable Project Modified Peak Warning	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Project Secure Export Settings	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Add samples to Results Table	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff
Remove samples from Results Table	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff

Tabelle F-1 Sicherheitseinstellungen basierend auf Benutzerrollen (Fortsetzung)

Sicherheitseinstellung	Administrator	Supervisor (Vorgesetzter)	Analyst	Prüfer
Modify Sample Name	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Modify Sample Type	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff
Modify Sample ID	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Modify Actual Concentration	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff
Modify Dilution Factor	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff
Modify Comment Fields	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Allow manual integration	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff
Allow set to Peak Not Found	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff
Include or exclude a peak from the Results Table	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff
Modify regression settings for fit and weight	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff
Modify quantitation method for the Results Table component	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Zugriff
Set Peak Review Title Format	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Add, Rename, or Modify custom column	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Remove Custom Column	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Modify Results Table column settings	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff

Tabelle F-1 Sicherheitseinstellungen basierend auf Benutzerrollen (Fortsetzung)

<b>Sicherheitseinstellung</b>	<b>Administrator</b>	<b>Supervisor (Vorgesetzter)</b>	<b>Analyst</b>	<b>Prüfer</b>
Save Column Settings as Project Default	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Lock and save Results Table	Zugriff	Zugriff	Zugriff	Zugriff
Unlock and save Results Table	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Review and save Results Table	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Zugriff
Modify Report Template	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Transfer to LIMS (Controls Initiate Transfer to Watson LIMS as well)	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Zugriff
Export, import, or remove External Calibration	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff
Change Audit Map Setting	Zugriff	Zugriff	Kein Zugriff	Kein Zugriff

# Revisionen

---

Revision	Grund für Änderung	Datum
A	Erste Veröffentlichung des Dokuments.	September 2013
B	Abschnitt Updated File Menu (Aktualisiertes Datei-Menü). Abschnitt Updated Audit Trail Menu (Aktualisiertes Prüfprotokoll-Menü). Tabelle Updated Results Table Columns (Aktualisierte Spalten der Ergebnistabelle). Abschnitt Updated Reports (Aktualisierte Berichte).	Januar 2015
C	Das AB SCIEX-Logo auf dem Deckblatt wurde zum SCIEX Diagnostics-Logo geändert. Die Copyright-Seite wurde aktualisiert und AB Sciex wurde soweit erforderlich zu SCIEX geändert. Windows 10 wurde zur Einführung des Software-Kapitels hinzugefügt. Der Abschnitt mit den Kontaktangaben wurde aktualisiert. Der Titel des Themas Audit Map Manager wurde zu Infos zu Audit Maps geändert. Die Beschreibung des Set Last Component der Gruppe wurde durch die IS-Menüoption im Abschnitt des Untermenüs der internen Standards aktualisiert. „Gesamtbereich-Prozentwertparameter“ wurde im Bereich „Aktualisierung der Retentionszeit“ durch „Retentionszeit“ ersetzt. Die Beschreibung des erwarteten RT im Bereich der SignalFinder-Integrationsalgorithmus-Parameter wurde aktualisiert. Windows 10 wurde zum Abschnitt „Berichte erstellen“ hinzugefügt. Die Inhalte im Abschnitt Berichtsvorlagen-Tags wurden aktualisiert. Der Screenshot in Abbildung 7-3 wurde geändert. Es wurden neue Vorlagen auf die Inhalte angewendet, was zu einigen Bearbeitungsänderungen im Inhalt geführt hat. Alle Referenzen für Windows XP wurden entfernt.	Juni 2017