

Agilent MassHunter Workstation Software

Qualitative Analyse

**Einarbeitungshandbuch für
GC/MS**



Agilent Technologies

Hinweise

© Agilent Technologies, Inc. 2012

Gemäß der Urheberrechtsgesetzgebung in den USA und internationaler Urheberrechtsgesetzgebung darf dieses Handbuch, auch auszugsweise, nicht ohne vorherige Vereinbarung und schriftliche Genehmigung seitens Agilent Technologies, Inc. vervielfältigt werden (darunter fällt auch die Speicherung auf elektronischen Medien sowie die Übersetzung in eine Fremdsprache).

Handbuch Teile-Nr.

G3335-92147

Ausgabe

Revision A, November 2012

Gedruckt in USA

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Blvd.
Santa Clara, CA 95051 USA

Microsoft[®], Windows 7[®] und Excel[®] sind in den USA eingetragene Marken der Microsoft Corporation in den USA und/oder anderen Ländern.

Softwarerevision

Dieses Handbuch gilt für B.06.00 und höhere Revisionen des Programms Agilent MassHunter Workstation Software - Qualitative Analyse, bis es durch ein aktuelleres Handbuch ersetzt wird.

Gewährleistung

Das in diesem Dokument enthaltene Material wird ohne Mängelgewähr bereitgestellt. Änderungen in nachfolgenden Ausgaben vorbehalten. Darüber hinaus übernimmt Agilent im gesetzlich maximal zulässigen Rahmen keine Garantien, weder ausdrücklich noch stillschweigend, bezüglich dieses Handbuchs und beliebiger hierin enthaltener Informationen, inklusive aber nicht beschränkt auf stillschweigende Garantien hinsichtlich Marktgängigkeit und Eignung für einen bestimmten Zweck. Agilent übernimmt keine Haftung für Fehler oder beiläufig entstandene Schäden oder Folgeschäden in Verbindung mit Einrichtung, Nutzung oder Leistung dieses Dokuments oder beliebiger hierin enthaltener Informationen. Falls zwischen Agilent und dem Benutzer eine separate schriftliche Vereinbarung mit Garantiebedingungen bezüglich des in diesem Dokument enthaltenen Materials besteht, die zu diesen Bedingungen im Widerspruch stehen, gelten die Garantiebedingungen in der separaten Vereinbarung.

Technologielizenzen

Die in dieser Dokumentation beschriebene Hardware und/oder Software wird unter Lizenz hergestellt und darf nur gemäß den jeweils geltenden Lizenzbedingungen verwendet und kopiert werden.

Rechtsbeschränkung

Rechtsbeschränkungen für die US-Regierung. Der Bundesregierung werden nur die Rechte an Software und technischen Daten gewährt, die Endkunden üblicherweise gewährt werden. Agilent gewährt diese übliche kommerzielle Lizenz für Software und technische Daten gemäß FAR 12.211 (technische Daten) und 12.212 (Computersoftware) und, für das Verteidigungsministerium, DFARS

252.227-7015 (technische Daten – kommerzielles Gut) und DFARS 227.7202-3 (Rechte an kommerzieller Computersoftware oder Computersoftwareokumentation).

Sicherheitshinweise

VORSICHT

Der Hinweis **VORSICHT** weist auf eine Gefahr hin. Er macht auf einen Betriebsablauf oder ein Verfahren aufmerksam, der bzw. das bei unsachgemäßer Durchführung zur Beschädigung des Produkts oder zum Verlust wichtiger Daten führen kann. Setzen Sie den Vorgang nach einem Hinweis mit der Überschrift **VORSICHT** erst fort, wenn Sie die darin aufgeführten Hinweise vollständig verstanden haben und einhalten können.

WARNUNG

WARNUNG weist auf eine Gefahr hin. Sie macht auf einen Betriebsablauf oder ein Verfahren aufmerksam, der bzw. das bei unsachgemäßer Durchführung zu Verletzungen oder zum Tod führen kann. Arbeiten Sie im Falle eines Hinweises **WARNUNG** erst dann weiter, wenn Sie die angegebenen Bedingungen vollständig verstehen und erfüllen.

Inhalt dieses Handbuchs...

Dieses Handbuch enthält Informationen, die Sie kennen müssen, um Agilent MassHunter Workstation Software - Qualitative Analyse mit GC/MS-Daten einsetzen zu können.

Bitte lesen Sie vor Beginn der Übungen die Anweisungen in „Bevor Sie mit diesen Übungen beginnen...“ auf Seite 5.

Übung 1 **Lerngrundlagen der qualitativen Analyse**

In dieser Übung lernen Sie einige der vielen leistungsfähigen Funktionen des Programms zur qualitativen Analyse kennen. Diese Aufgaben sind wichtig, unabhängig vom Datentyp, den Sie benutzen.

Übung 2 **Finden und identifizieren**

In den ersten beiden Aufgabenbereichen finden und identifizieren Sie niedrig konzentrierte Sulfonamide innerhalb einer komplexen Matrix und generieren ihre Formeln sowohl für TOF- als auch für Q-TOF-Daten. Außerdem führen Sie eine Erkennung von molekularen Merkmalen an einem Proteinauszug sowohl mit TOF- als auch mit Q-TOF-Daten aus. Diese Aufgaben können auch an Triple Quad-Daten durchgeführt werden.

Übung 3 **Verwenden von Workflows, Exportieren und Drucken**

Im Rahmen dieser Aufgaben lernen Sie, wie Sie eine qualitative Analysemethode einrichten und ausführen. Außerdem erfahren Sie, wie eine Methode so bearbeitet wird, dass die Analyse und/oder Verbindungsidentifikation automatisch abläuft. Anschließend führen Sie die Aktionen innerhalb der automatisierten Methode beim Öffnen einer Datendatei aus. Es wird erklärt, wie eine Methode zum Durchführen automatisierter Aktionen anhand einer Arbeitsliste erstellt wird. Jede dieser Aufgaben wird mit einem anderen Arbeitsablauf durchgeführt.

Referenz

In diesem Kapitel lernen Sie einige Grundlagen des Programms zur qualitativen Analyse kennen.

Neu

in B.06.00

- In der Compound Details View können Sie Verbindungen überprüfen. Vier weitere Fenster sind in der Compound Details View verfügbar.
- Für die Compound Details View können Sie verschiedene Liniendefinitionen für verschiedene Typen von Chromatogrammen und Spektren festlegen.
- Der Find Compounds by Integration-Algorithmus ist verfügbar.
- Sie können mehrere Bibliotheken mit dem Masseneinheiten-Bibliothekensuchalgorithmus durchsuchen.
- Im Algorithmus Generate Formulas können Sie auswählen, ob Sie Formeln zu Fragmentspektrum-Peaks anmerken möchten. Bei der Fragmentanmerkung werden Spektren, die mit Anmerkungen versehen werden, nach einem Algorithmus zum Finden von Verbindungen ausgewählt.
- Der Algorithmus Generate Formulas kann für Verbindungen ausgeführt werden, die Sie mit dem Algorithmus Find by Chromatogram Deconvolution gefunden haben.
- Der Algorithmus Generate Formulas wurde so geändert, dass Sie für jeden Ladungsträger eine Maximalzahl von Treffern eingeben können.
- Im Algorithmus Generate Formulas können Sie Treffer mit derselben Formel, aber verschiedenen Ladungsträgern gruppieren.
- Verbindungen können aus einem beliebigen Benutzerspektrum erstellt werden. Der Algorithmus zum Finden von Verbindungen für diese Verbindungen ist Spectrum Extraction.
- Wenn Sie Ergebnisse in einer Datendatei speichern, können Sie wählen, ob alle Verbindungsergebnisse in einer Datendatei oder eine kleinere Gruppe von Ergebnissen für jede Verbindung gespeichert werden soll. Alle Benutzerchromatogramme und Benutzerspektren werden stets gespeichert.
- Das Format der CEF-Datei wurde geändert, sodass mehr Informationen einbezogen werden.
- Die m/z- und Ionenarteninformationen sind auf der ersten Ebene der Spectrum Identification Results-Tabelle verfügbar.

- Die Spectrum Identification-Tabelle wurde geändert. Sie können einer Säule einen Filter hinzufügen und eine Zeile löschen.
- Sie können einen Peak jetzt mit Formula & Ion Species beschriften.
- Bei einer großen Zahl von Einträgen können Sie jetzt das im Fenster Spectrum Identification Results mit Best bezeichnete Spektrum bedeutend schneller ändern.
- Im Compound Report können Sie festlegen, dass Verbindungschromatogramme überlagert werden.
- Die Standardreportvorlage zur Formelbestätigung wurde geändert, sodass sie jetzt die farbige Spalte Flags (Tgt) und die Fragmenttabelle mit der farbigen Spalte Flags (FIs) enthält.

Bevor Sie mit diesen Übungen beginnen...

- Installieren Sie die Software. Beachten Sie die Anweisungen im Installationshandbuch.
- Kopieren Sie den Ordner **Data** in unkomprimiertem Format an einen beliebigen Speicherort auf Ihrer Festplatte.

Dieser Ordner enthält alle für diese Übungen benötigten Datendateien. Zunächst müssen Sie die Datendateien aus dem ZIP-Format extrahieren.

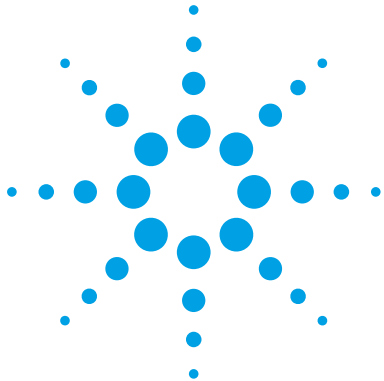
HINWEIS

Sie dürfen die bereits auf Ihrem System befindlichen Beispieldatendateien nur dann wiederverwenden, wenn Sie sicher sind, dass Sie sie von den Originalen auf dem Datenträger kopiert haben und Sie der einzige sind, der sie benutzt. Wenn die bereits auf dem System befindlichen Beispieldatendateien nicht exakt den Originalen auf dem Datenträger entsprechen, entsprechen die während dieser Übungen erzielten Ergebnisse nicht den im Handbuch dargestellten.

Inhalt

Übung 1	Lerngrundlagen der qualitativen Analyse	9
	Aufgabe 1. Aufruf des Programms zur qualitativen Analyse	10
	Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC/MS-Daten konfigurieren	12
	Aufgabe 3. In das Chromatogramm hinein- und daraus herauszoomen	16
	Aufgabe 4. Ein Chromatogramm verankern	17
	Aufgabe 5. Fensterlayouts ändern	19
	Aufgabe 6. Chromatogramme extrahieren	21
	Aufgabe 7. Ein GC/MS-Chromatogramm interaktiv integrieren	23
	Aufgabe 8. Systemeignungswerte berechnen	28
	Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren	32
	Aufgabe 10. Anmerkungen hinzufügen	43
	Aufgabe 11. Massenmessschieber hinzufügen	48
Übung 2	Finden und identifizieren	51
	Aufgabe 12. Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution finden	52
	Aufgabe 13. Verbindungen mit dem Search Library-Algorithmus identifizieren	56
	Aufgabe 14. Verbindungen finden durch MRM (nur MRM)	61
	Aufgabe 15. Verbindungen durch Integration finden	65
	Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen	68
	Aufgabe 17. Ergebnisse speichern	74
Übung 3	Verwenden von Workflows, Exportieren und Drucken	79
	Aufgabe 18. Qualitative Analysemethode mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen	80
	Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen	86
	Aufgabe 20. CEF-Datei exportieren	90
	Aufgabe 21. Analysebericht drucken	92
	Aufgabe 22. Verbindungsbericht drucken	95

Referenz	99
Arbeiten mit Fenstern	100
Arbeiten mit Ergebnisdaten im Data Navigator	103
Durchführen von Operationen am Chromatogramm	104
Durchführen von Operationen an einem MS- oder MS/MS-Spektrum	105
Arbeiten mit chromatografischen visuellen Daten	106
Arbeiten mit visuellen Spektrumdaten	108
Arbeitsabläufe	109
Anpassen einer Reportvorlage	113



1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 1. Aufruf des Programms zur qualitativen Analyse	10
Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC/MS-Daten konfigurieren	12
Aufgabe 3. In das Chromatogramm hinein- und daraus herauszoomen	16
Aufgabe 4. Ein Chromatogramm verankern	17
Aufgabe 5. Fensterlayouts ändern	19
Aufgabe 6. Chromatogramme extrahieren	21
Aufgabe 7. Ein GC/MS-Chromatogramm interaktiv integrieren	23
Aufgabe 8. Systemeignungswerte berechnen	28
Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren	32
Aufgabe 10. Anmerkungen hinzufügen	43
Aufgabe 11. Massenmessschieber hinzufügen	48

In dieser Übung lernen Sie einige der vielen leistungsfähigen Funktionen des Programms zur qualitativen Analyse zum Arbeiten mit GC/Q-TOF- und GC/QQQ-Daten kennen.

Jede Übung wird in einer dreispaltigen Tabelle dargestellt:

- Schritte – lernen Sie das Programm mit diesen allgemeinen Anweisungen selbstständig kennen.
- Ausführliche Anweisungen – benutzen Sie sie, wenn Sie Hilfe benötigen oder einen schrittweisen Lernprozess bevorzugen.
- Anmerkungen – lesen Sie sie, um Tipps und weitere Informationen zu den einzelnen Schritten der Übung zu erfahren.




1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 1. Aufruf des Programms zur qualitativen Analyse

Aufgabe 1. Aufruf des Programms zur qualitativen Analyse

In dieser Aufgabe öffnen Sie mehrere Datendateien mit der gängigen Methode.

Aufgabe 1. Aufruf des Programms zur qualitativen Analyse mit mehreren Datendateien

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>1 Rufen Sie das Programm zur qualitativen Analyse auf.</p> <ul style="list-style-type: none">Öffnen Sie die Datendateien Pest - 200 - Scan.d, Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d und MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d im Ordner \\MassHunter\Data bzw. in dem Ordner, in den Sie sie kopiert haben.	<p>a Doppelklicken Sie auf das Symbol Agilent MassHunter Qualitative Analysis B.06.00 . Das System zeigt das Dialogfeld Open Data Files an.</p> <p>b Wechseln Sie zum Ordner \\MassHunter\Data\GC bzw. dem Ordner, in dem die Beispieldateien gespeichert sind.</p>	<ul style="list-style-type: none">Die Datei Pest - 200 - Scan.d enthält MS-Daten und die Dateien Pest - STD 200 MRM.d und Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d enthalten sowohl MS- als auch MS/MS-Daten (alle GC/QQQ). MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d enthält GC/Q-TOF-Daten.Zu den meisten Fenstern, Dialogfeldern und Registerkarten erhalten Sie Hilfe, wenn Sie F1 drücken, während das Fenster aktiv ist.

- Achten Sie darauf, dass die Schaltfläche **Use current method** aktiviert ist.
- Achten Sie darauf, dass das Kontrollkästchen **Load result data** nicht aktiviert ist. Wenn das Kontrollkästchen **Load result data** nicht verfügbar ist, wurden keine Ergebnisse in der Datendatei gespeichert. In „Aufgabe 17. Ergebnisse speichern“ auf Seite 74 lernen Sie, wie Sie Ergebnisse speichern.
- Achten Sie darauf, dass das Kontrollkästchen **Run 'File Open' actions from selected method** nicht aktiviert ist.

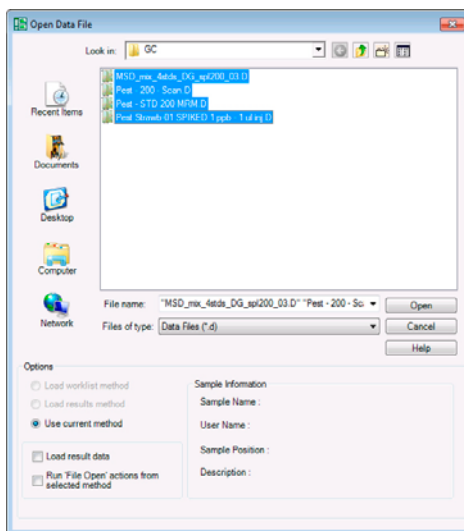



Abb. 1 Öffnen von Datendateien beim Aufruf der Software

Aufgabe 1. Aufruf des Programms zur qualitativen Analyse mit mehreren Datendateien (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
	<p>c Halten Sie die Umschalt-Taste gedrückt, während Sie auf Pest - 200 - Scan.d, Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d und MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d klicken.</p> <p>d Klicken Sie auf Open. Alle vier Datendateien werden im Fenster Data Navigator angezeigt, und im Fenster Chromatogram Results werden die Chromatogramme 1 bis 3 angezeigt.</p> <p>e Klicken Sie in der Symbolleiste Chromatogram Results auf das Symbol List Mode .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Wenn Sie die Strg-Taste drücken, können Sie Dateien auswählen, die sich nicht direkt nebeneinander in der Liste befinden. • Was Sie an diesem Punkt im Hauptfenster sehen, hängt davon ab, welche Methode, welches Layout, welche Anzeige- und Ploteinstellungen Sie vor Öffnen dieser Dateien verwendet haben. • Wenn Sie auf das Symbol List Mode klicken, wird der Hintergrund des Symbols orange.

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC/MS-Daten konfigurieren

Aufgabe 1. Aufruf des Programms zur qualitativen Analyse mit mehreren Datendateien (Fortsetzung)

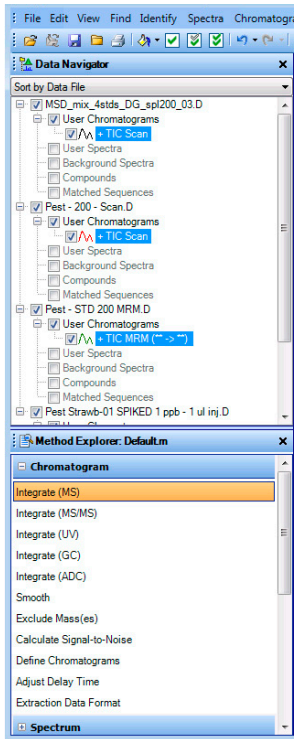
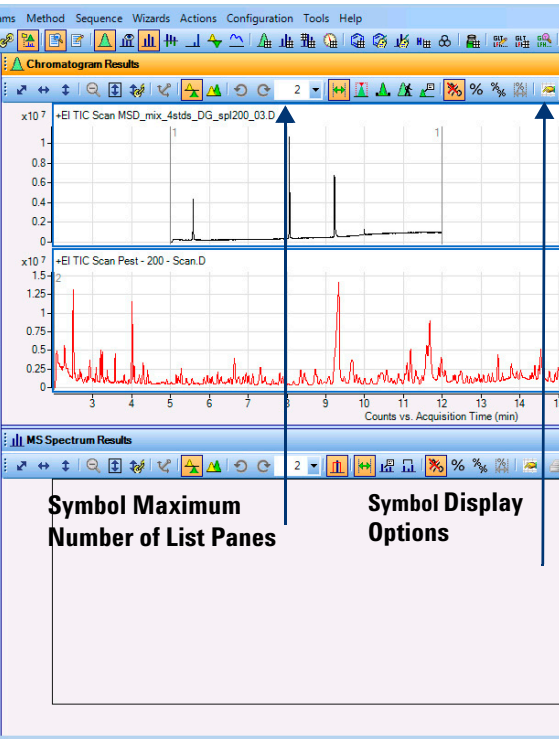
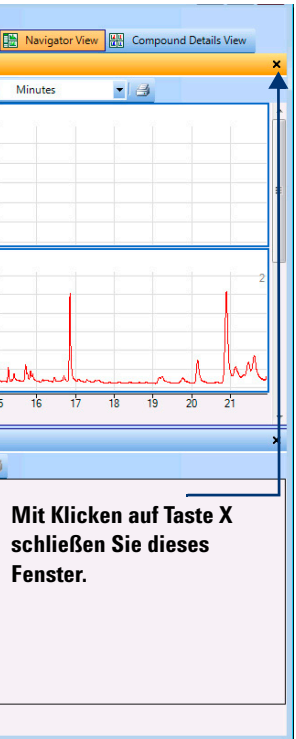


Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
		 <p data-bbox="475 835 701 892">Symbol Maximum Number of List Panes</p> <p data-bbox="791 835 946 892">Symbol Display Options</p> <p data-bbox="993 847 1219 930">Mit Klicken auf Taste X schließen Sie dieses Fenster.</p>

Abb. 2 Hauptfenster der qualitativen Analyse mit geladenem GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablauf.

Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC/MS-Daten konfigurieren

In dieser Aufgabe wechseln Sie entweder zum allgemeinen Arbeitsablauf (GC/QQQ-Kunden) oder dem GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablauf (GC/Q-TOF-Kunden). Diese beiden Arbeitsabläufe sind die einzigen, die die Analyse von GC/MS-Daten unterstützen. Dann öffnen Sie das Dialogfeld User Interface Configuration und markieren die entsprechenden Kontrollkästchen für ein GC/QQQ- oder GC/Q-TOF-System.

Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC konfigurieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1 Rufen Sie ggf. das Programm zur qualitativen Analyse auf.	<p>a Doppelklicken Sie auf das Symbol Agilent MassHunter Qualitative Analysis  . Das System zeigt das Dialogfeld Open Data Files an.</p> <p>b Klicken Sie im Dialogfeld Open Data Files auf Cancel.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Zu beliebigen Fenstern, Dialogfeldern und Registerkarten erhalten Sie Hilfe, wenn Sie F1 drücken, während das Fenster aktiv ist.
2 Wechseln Sie entweder zum allgemeinen Arbeitsablauf oder dem GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablauf.	<p>a Wenn Sie ein GC/QQQ-Gerät haben, klicken Sie auf den Befehl Configuration > Configure for Workflow > General. Wenn Sie ein GC/Q-TOF-Gerät haben, klicken Sie auf den Befehl Configuration > Configure for Workflow > GC/Q-TOF Compound Screening.</p> <p>b Klicken Sie auf die Schaltflächen Load workflow's default method und Load workflow's default layout.</p> <p>c Klicken Sie auf OK.</p> <p>d Klicken Sie in der Symbolleiste Chromatogram Results auf das Symbol List Mode .</p>	<ul style="list-style-type: none"> Wenn das Data Acquisition-Programm für GC/QQQ oder GC/Q-TOF auf demselben Computer installiert ist, konfiguriert die Software die Benutzeroberfläche automatisch. Der GC/Q-TOF Compound Screening-Abschnitt könnte bereits im Method Explorer-Fenster verfügbar sein. Standardmäßig werden Chromatogramme überlagert. Für diese Beispiele werden die Chromatogramme im List Mode angezeigt.

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC/MS-Daten konfigurieren

Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC konfigurieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
3 Wenn Sie einen GC/QQQ haben, konfigurieren Sie die Benutzeroberfläche so, dass nur GC/QQQ-Funktionen angezeigt werden.	<p>a Klicken Sie auf Configuration > User Interface Configuration.</p> <p>b Markieren Sie unter Separation types nur das Kontrollkästchen GC.</p> <p>c Wenn Sie ein GC/QQQ-Gerät haben, markieren Sie unter Ionization type das Kontrollkästchen EI or other „hard“ ionization technique und deaktivieren Sie das Kontrollkästchen CI, APCI, ESI, MALDI or other „soft“ ionization technique.</p> <p>d Deaktivieren Sie unter Mass accuracy das Kontrollkästchen Accurate mass (TOF, Q-TOF). Markieren Sie das Kontrollkästchen Unit mass (Q, QQQ).</p> <p>e Deaktivieren Sie unter Optional software features die Kontrollkästchen Peptide Sequence Editor und BioConfirm Software.</p> <p>f Deaktivieren Sie unter Non-MS detectors die Kontrollkästchen UV und ADC.</p> <p>g Markieren Sie das Kontrollkästchen Show advanced parameters.</p> <p>h Klicken Sie auf OK.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Im Dialogfeld User Interface Configuration legen Sie fest, welche Befehle verfügbar sind.• Wenn eine Funktion nicht sichtbar ist, wurde sie vielleicht ausgeblendet, als ein Kontrollkästchen im Dialogfeld User Interface Configuration deaktiviert wurde.

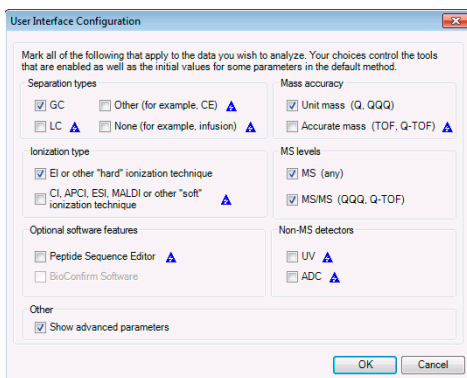


Abb. 3 Konfigurieren der Benutzeroberfläche zum Einsatz mit GC/QQQ-Daten

Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC konfigurieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
4	<p>Wenn Sie ein GC/Q-TOF-Gerät haben, konfigurieren Sie die Benutzeroberfläche so, dass nur GC/Q-TOF-Funktionen angezeigt werden.</p> <p>a Klicken Sie auf Configuration > User Interface Configuration.</p> <p>b Markieren Sie unter Separation types nur das Kontrollkästchen GC.</p> <p>c Markieren Sie unter Ionization type beide Kontrollkästchen.</p> <p>d Markieren Sie unter MS levels beide Kontrollkästchen.</p> <p>e Markieren Sie unter Mass accuracy das Kontrollkästchen Accurate mass (TOF, Q-TOF). Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Unit mass (Q, QQQ).</p> <p>f Deaktivieren Sie unter Optional software features die Kontrollkästchen Peptide Sequence Editor und BioConfirm Software.</p> <p>g Deaktivieren Sie unter Non-MS detectors die Kontrollkästchen UV und ADC.</p> <p>h Markieren Sie das Kontrollkästchen Show advanced parameters.</p> <p>i Klicken Sie auf OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Im Dialogfeld User Interface Configuration legen Sie fest, welche Befehle verfügbar sind. Wenn eine Funktion nicht sichtbar ist, wurde sie vielleicht ausgeblendet, als ein Kontrollkästchen im Dialogfeld User Interface Configuration deaktiviert wurde.

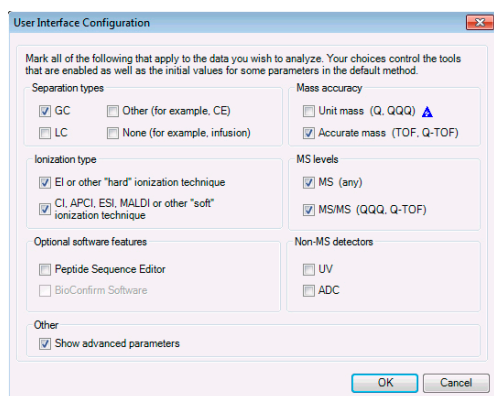


Abb. 4 Konfigurieren der Benutzeroberfläche für ein GC/Q-TOF

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 3. In das Chromatogramm hinein- und daraus herauszoomen

Aufgabe 3. In das Chromatogramm hinein- und daraus herauszoomen

In dieser Aufgabe werden Sie mit den Funktionen zum Hinein- und Herauszoomen des Programms zur qualitativen Analyse vertraut.

Aufgabe 4. Ein Chromatogramm verankern

In dieser Aufgabe verankern Sie ein Chromatogramm. Wenn Sie ein Chromatogramm verankern, bleibt das verankerte Chromatogramm permanent in der Anzeige, wenn Sie durch die anderen Chromatogramme scrollen, um sie anzuzeigen.

Aufgabe 4. Ein Chromatogramm verankern

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<ul style="list-style-type: none"> • Verankern Sie ein Chromatogramm. <ul style="list-style-type: none"> • Zeigen Sie alle Chromatogramme an. • Achten Sie darauf, dass die Chromatogrammanzeigeliste auf 1 gesetzt ist. • Wählen Sie im Fenster Chromatogram Results das zweite TIC. • Verankern Sie dieses TIC. • Scrollen Sie durch die Chromatogramme. • Löschen Sie den Anker. 	<ul style="list-style-type: none"> a Markieren Sie im Data Navigator die Kontrollkästchen für die Chromatogramme, die Sie in der vorherigen Aufgabe ausgeblendet haben. b Achten Sie darauf, dass die maximale Anzahl von Fensterausschnitten im Fenster Chromatogram Results auf 1 gesetzt ist. c Wählen Sie im Fenster Chromatogram Results das zweite TIC. d Klicken Sie mit der rechten Maustaste in das Chromatogramm und klicken Sie auf Set Anchor. e Scrollen Sie mit der Scrollleiste im Fenster Chromatogram Results durch die Liste der Chromatogramme. Das zweite TIC bleibt stets als erstes Chromatogramm sichtbar. f Klicken Sie auf Chromatograms > Clear Anchor. 	<ul style="list-style-type: none"> • Wenn Sie einen Anker für ein Chromatogramm festlegen, wird im Fenster Data Navigator ein Ankersymbol neben dem Namen des verankerten Chromatogramms angezeigt. • Zwei Chromatogramme werden im Fenster Chromatogram Results angezeigt, nachdem Sie eines verankert haben, obwohl die Anzeigeliste 1 angibt. Dies bedeutet nun, dass Sie ein Chromatogramm zusätzlich zum verankerten Chromatogramm anzeigen. • Sie können auch mit der rechten Maustaste auf das Chromatogramm klicken und im Kontextmenü auf Clear Anchor klicken.

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 4. Ein Chromatogramm verankern

Aufgabe 4. Ein Chromatogramm verankern (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
----------	--------------------------	-------------

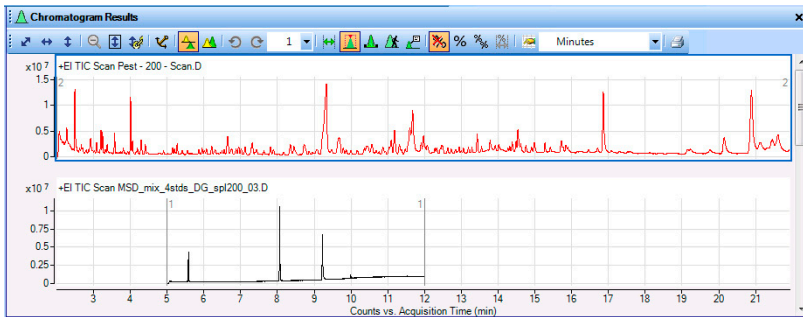


Abb. 5 Verankertes TIC im Fenster Chromatogram Results

Aufgabe 5. Fensterlayouts ändern

In dieser Aufgabe verschieben Sie Fenster innerhalb der Hauptansicht und erstellen verschiedene Fensterlayouts.

Aufgabe 5. Fensterlayouts ändern

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>1 Ändern Sie das Fensterlayout:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Ändern Sie die Fenstergröße. • Speichern Sie ein Fensterlayout. • Geben Sie das Layout frei. • Legen Sie fest, dass das Fenster Chromatogram Results frei beweglich ist. • Verschieben Sie das Fenster Chromatogram Results. • Zeigen Sie die Tools zum Neupositionieren der Fenster an. 	<ul style="list-style-type: none"> • Um die Größe eines Fensters zu ändern, ziehen Sie die Begrenzung zwischen den Fenstern. • Um ein Fensterlayout zu speichern, klicken Sie auf Configuration > Window Layouts > Save Layout. • Um ein Layout freizugeben, klicken Sie auf Configuration > Window Layouts > Lock Layout. • Um ein Fenster frei beweglich zu machen, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Titelleiste des Fensters und klicken dann im Kontextmenü auf Floating. • Um ein Fenster zu verschieben, klicken Sie auf die Titelleiste des Fensters und ziehen es an die gewünschte Position. • Um die Tools zum Neupositionieren anzuzeigen, ziehen Sie das Fenster über eines der anderen Fenster. Wenn ein Fenster das andere überlappt, zeigt das Programm mehrere Layouttools an, wie in Abb. 6 gezeigt. 	<ul style="list-style-type: none"> • Wenn das Layout freigegeben ist, zeigt das System kein Häkchen neben dem Menü Lock Layout an. • Sie können die Tools zum Neupositionieren nur verwenden, wenn das Layout freigegeben ist. • Sie können ein Fenster auch frei beweglich machen, indem Sie auf die Titelleiste des Fensters doppelklicken. • In der Software stehen viele verschiedene Layouts zur Verfügung. Sie können auch versuchen, andere Layouts zu laden. • Die Software bietet mehrere verschiedene Arbeitsabläufe. Jeder Arbeitsablauf lädt ein anderes Layout. Beim Wechsel zu einem anderen Arbeitsablauf ändert sich auch das Layout.

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 5. Fensterlayouts ändern

Aufgabe 5. Fensterlayouts ändern (Fortsetzung)

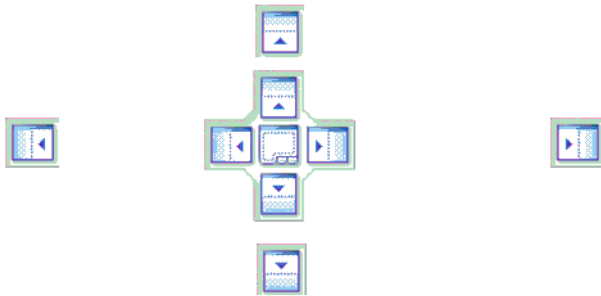
Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>2 Positionieren Sie das Fenster Chromatogram Results neu.</p> <ul style="list-style-type: none">• Verschieben Sie das Fenster, sodass es sich über, links von, rechts von und dann unter den anderen Fenstern befindet.• Verschieben Sie zwei Fenster gemeinsam, sodass sie sich übereinander befinden und nur über die Tabs am unteren Rand verfügbar sind.• Stellen Sie das Standardlayout wieder her.		<ul style="list-style-type: none">• Wenn Sie den Cursor über eines der kleineren Symbole ziehen, wird das von Ihnen gezogene Fenster über, rechts von, unter oder links von allen anderen Fenstern platziert.• Ziehen Sie den Cursor über das größere Symbol. Das Fenster kann durch Ziehen des Cursors über die Kanten des größeren Symbols auch über, rechts von, unter oder links von den anderen Fenstern platziert werden.• Um zwei Fenster übereinander zu legen, ziehen Sie den Cursor über die Mitte des größeren Symbols. Sie sehen eine Schattenversion der beiden übereinander gelegten Fenster. Beenden Sie das Ziehen der Maus. Die beiden Fenster werden übereinander gelegt.• Klicken Sie auf Configuration > Window Layouts > Restore Default Layout. <ul style="list-style-type: none">• Der Cursor muss sich über einem der Pfeile in einem Feld befinden, damit die Neupositionierung durchgeführt werden kann.• Durch Klicken auf den Befehl Restore Default Layout wird das im allgemeinen Arbeitsablauf und GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablauf verwendete Layout wiederhergestellt. Wenn Sie einen anderen Arbeitsablauf verwenden, müssen Sie das mit diesem Arbeitsablauf verwendete Layout laden.

Abb. 6 Tools zum Neupositionieren von Fenstern

Aufgabe 6. Chromatogramme extrahieren

In dieser Aufgabe extrahieren und verbinden Sie Chromatogramme aus dem originalen TIC.

Aufgabe 6. Chromatogramme extrahieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>1 Extrahieren und verbinden Sie zwei extrahierte Ionenchromatogramme (EICs) aus zwei Massen in der Datendatei Pest - 200 Scan.d.</p> <ul style="list-style-type: none"> Die m/z-Werte sind 129,0 und 414,2. Verbinden Sie die Peaks der einzelnen Massen nicht in einem Chromatogramm. 	<p>a Deaktivieren Sie im Fenster Data Navigator die Kontrollkästchen für die Datendateien außer Pest - 200 Scan.d.</p> <p>b Öffnen Sie mithilfe der Option unten oder einer der Optionen rechts das Dialogfeld Extract Chromatograms:</p> <ul style="list-style-type: none"> Klicken Sie auf Chromatograms > Extract Chromatograms <p>c Klicken Sie in der List of opened data files auf Pest - 200 - Scan.d.</p> <p>d Wählen Sie im Listenfeld Type den Eintrag EIC.</p> <p>e Geben Sie im Feld m/z value(s) den Wert 129.0, 414.2 ein.</p> <p>f Deaktivieren Sie ggf. das Kontrollkästchen Merge multiple masses into one chromatogram, um die EICs zu verbinden.</p> <p>g Klicken Sie auf OK.</p> <p>h Setzen Sie in der Symbolleiste Chromatogram Results die Option Maximum number of list panes auf 3.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Sie können Chromatogramme auch mit einer der folgenden Methoden extrahieren: <ul style="list-style-type: none"> Klicken Sie mit der rechten Maustaste in das Chromatogramm und klicken Sie auf Extract Chromatograms. Markieren Sie im Data Navigator die Option TIC Scan für sulfas_PosMS.d, klicken Sie dann mit der rechten Maustaste auf TIC Scan und klicken Sie auf Extract Chromatograms. Sie können die MS-Stufe All oder MS verwenden. Beachten Sie, dass Sie das extrahierte Chromatogramm wahlweise auch nach der Extrahierung automatisch integrieren lassen können. Sie können auch ein Chromatogramm aus einem Massenspektrum extrahieren.

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 6. Chromatogramme extrahieren

Aufgabe 6. Chromatogramme extrahieren (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
----------	--------------------------	-------------

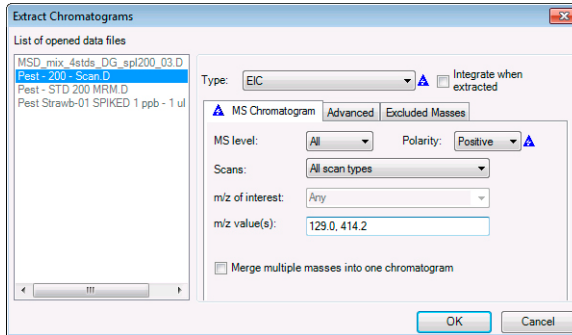


Abb. 7 Das Dialogfeld Extract Chromatograms

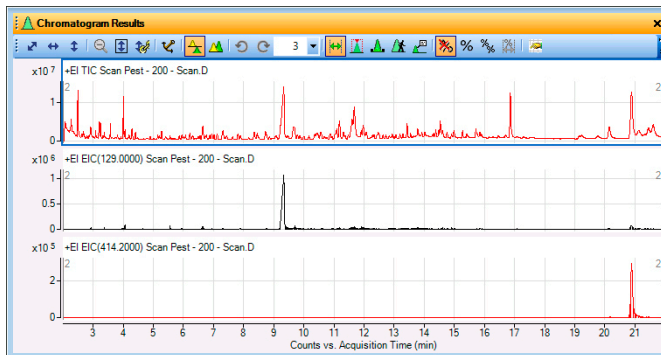


Abb. 8 Verbundene extrahierte Ionenchromatogramme (EICs) verglichen mit dem originalen TIC

Aufgabe 7. Ein GC/MS-Chromatogramm interaktiv integrieren

In dieser Aufgabe lernen Sie verschiedene Möglichkeiten kennen, ein Chromatogramm zu integrieren, Integrationsparameter zu ändern, um die Ergebnisse zu modifizieren, und das Signal-Rausch-Verhältnis für die integrierten Peaks für MS/MS-Daten zu berechnen.

Aufgabe 7. Ein Chromatogramm interaktiv integrieren (GC/MS)

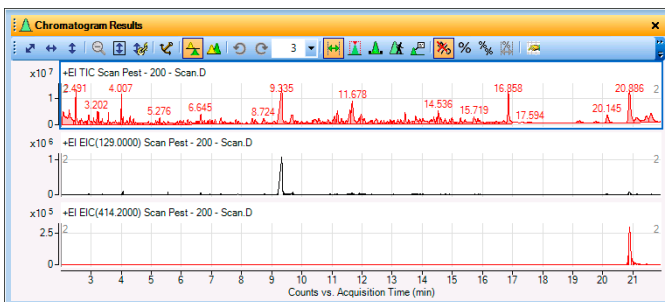
Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1 Integrieren Sie das TIC-Scan-Chromatogramm für die Datendatei Pest - 200 - Scan.d mit einer beliebigen der rechts aufgelisteten Optionen.	<p>a Markieren Sie die Datendatei Pest - 200 - Scan.D im Fenster Data Navigator.</p> <p>b Markieren Sie das TIC-Scan-Chromatogramm und verwenden Sie einen der folgenden Befehle:</p> <ul style="list-style-type: none"> Klicken Sie in der Menüleiste auf Chromatograms > Integrate Chromatogram. Klicken Sie mit der rechten Maustaste an beliebiger Stelle in das Chromatogramm und klicken Sie auf Integrate Chromatograms. Wählen Sie im Fenster Data Navigator die Option Pest - 200 - Scan.D > User Chromatograms > TIC Scan, klicken Sie dann mit der rechten Maustaste auf den TIC-Scan, und klicken Sie auf Integrate Chromatogram. 	<ul style="list-style-type: none"> Beachten Sie, dass das Programm praktisch alle Peaks im Chromatogramm integriert hat. Sie wählen den für MS-, MS/MS- und GC-Daten zu verwendenden Integrator im Fenster Method Editor. Dieses Chromatogramm ist ein MS-Chromatogramm, sodass die im Abschnitt Integrate (MS) des Method Editor eingestellten Werte beim Integrieren dieses Chromatogramms verwendet werden.
2 Zeigen Sie nur zwei Chromatogramme gleichzeitig an.	<ul style="list-style-type: none"> Wählen Sie in der Symbolleiste Chromatogram Results im Feld Maximum number of list panes den Wert 2. 	

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 7. Ein GC/MS-Chromatogramm interaktiv integrieren

Aufgabe 7. Ein Chromatogramm interaktiv integrieren (GC/MS) (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
----------	--------------------------	-------------



Viele kleine Peaks werden integriert.

Abb. 9 Integriertes TIC-Scan-Chromatogramm mit vielen kleinen Peaks

- 3 Ändern Sie den Schwellenwert, um weniger Peaks zu integrieren.
- Ändern Sie den Schwellenwert, um nur die drei größten Peaks beizubehalten.
- a Klicken Sie im Fenster Method Explorer auf **Chromatogram** > **Integrate (MS)**, um das Fenster Integrate (MS) anzuzeigen.
- b Wählen Sie den Integrator **Agile**.
- c Klicken Sie auf die Registerkarte **Peak Filters**.
- d Markieren Sie unter Maximum number of peaks die Option **Limit (by height) to the largest** und geben Sie 3 ein.
- Beachten Sie das blaue Dreieck, das angezeigt wird, wenn Sie eine Einstellung vom in der aktuellen Methode gespeicherten Wert abweichend ändern. Wenn Sie die Methode speichern, wird das Dreieck nicht mehr angezeigt.

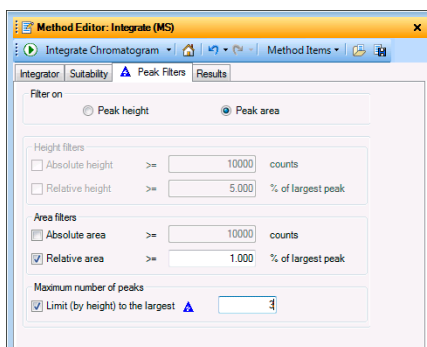



Abb. 10 Registerkarte Peak Filters mit markiertem **Limit (by height) to the largest**

Aufgabe 7. Ein Chromatogramm interaktiv integrieren (GC/MS) (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
4 Integrieren Sie das Chromatogramm neu.	e Klicken Sie in der Symbolleiste Method Editor auf die Schaltfläche  , um unter Verwendung der neuen Einstellung zu integrieren.	<ul style="list-style-type: none"> • Beachten Sie, dass jetzt nur die drei größten Peaks integriert werden. • Der Peak bei 2,491 ist höher als der Peak bei 16,858 Minuten, also wird er als dritter Peak gewählt.

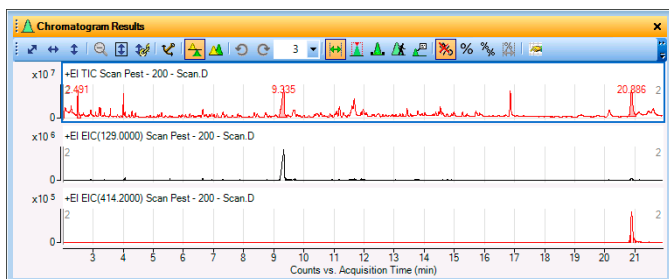


Abb. 11 Integriertes TIC-Scan-Chromatogramm bei Begrenzung der Anzahl von Peaks

5 Integrieren Sie das TIC-MRM-Chromatogramm für die Datendatei Pest - STD 200 MRM.D .	<p>a Wählen Sie im Fenster Data Navigator die Option TIC MRM für die Datendatei Pest - STD 200 MRM.d.</p> <p>b Integrieren Sie die Chromatogramme mit einem der folgenden Befehle.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Klicken Sie in der Menüleiste auf Chromatograms > Integrate Chromatogram. • Klicken Sie mit der rechten Maustaste an beliebiger Stelle in das Chromatogramm und klicken Sie auf Integrate Chromatograms. • Klicken Sie im Fenster Data Navigator mit der rechten Maustaste auf das markierte Chromatogramm und klicken Sie auf Integrate Chromatogram. <p>c Zoomen Sie von 5,8 auf 8,5 Minuten.</p> <p>d Setzen Sie Maximum number of list panes auf 2.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Drücken Sie die Taste Strg, um mehrere Chromatogramme im Fenster Data Navigator zu markieren. • Beachten Sie, dass das Programm praktisch alle Peaks im Chromatogramm integriert hat. • Diese Chromatogramme sind MS/MS-Chromatogramme, sodass die im Abschnitt Integrate (MS/MS) des Method Editor eingestellten Werte beim Integrieren dieses Chromatogramms verwendet werden. Sie können einen zum Integrieren von MS-Chromatogrammen zu verwendenden Integrator und einen anderen, zum Integrieren von MS/MS-Chromatogrammen zu verwendenden Integrator auswählen.
--	--	---

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 7. Ein GC/MS-Chromatogramm interaktiv integrieren

Aufgabe 7. Ein Chromatogramm interaktiv integrieren (GC/MS) (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
----------	--------------------------	-------------

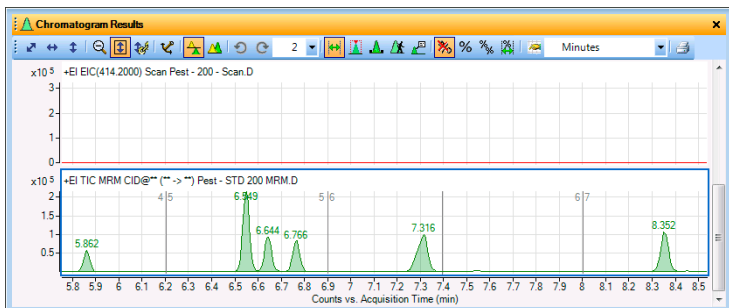


Abb. 12 Integrierte MRM-Chromatogramme

- | | | |
|---|--|---|
| <p>6 Wählen Sie den Integrator MS/MS (GC). Ändern Sie den Filter, sodass nur Peaks mit einer absoluten Höhe von mindestens 20.000 akzeptiert werden.</p> | <p>a Wählen Sie im Fenster Method Explorer die Option Chromatogram > Integrate (MS/MS).</p> <p>b Wählen Sie MS/MS (GC) als Integrator.</p> <p>c Klicken Sie auf die Registerkarte Peak Filters.</p> <p>d Klicken Sie unter Filter on auf Peak height.</p> <p>e Markieren Sie unter Height filters das Kontrollkästchen Absolute height.</p> <p>f Geben Sie 60000 als Absolute height ein.</p> | <ul style="list-style-type: none">• Beachten Sie das blaue Dreieck, das angezeigt wird, wenn Sie eine Einstellung vom in der aktuellen Methode gespeicherten Wert abweichend ändern. Wenn Sie die Methode speichern, wird das Dreieck nicht mehr angezeigt. |
|---|--|---|

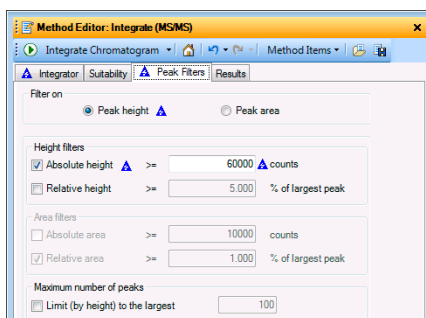

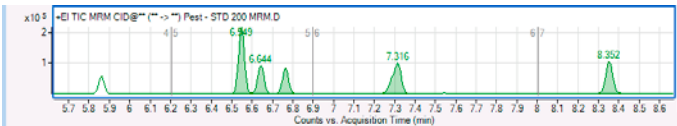





Abb. 13 Registerkarte Peak Filters mit aktiviertem **Absolute height**

Aufgabe 7. Ein Chromatogramm interaktiv integrieren (GC/MS) (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
7 Integrieren Sie das Chromatogramm neu.	g Klicken Sie in der Symbolleiste Method Editor auf die Schaltfläche  .	• Beachten Sie, dass jetzt nur die größten Peaks integriert werden.
		Der kleinere Peak bei 5,8 Minuten wird nicht mehr in die Integrierungsergebnisse einbezogen, weil die absolute Höhe für diesen Peak unter 60.000 liegt.
Abb. 14 Integrierte TIC- und EIC-MS/MS-Chromatogramme mit höherer Schwellenwerteinstellung		
8 Stellen Sie die Einstellungen wieder her, die für die aktuelle Methode gespeichert werden, und schließen Sie den Method Editor.	<p>a Wählen Sie im Method Explorer den Abschnitt Chromatogram > Integrate (MS/MS).</p> <p>b Klicken Sie im Method Editor auf das Symbol .</p> <p>c Wählen Sie im Method Explorer den Abschnitt Chromatogram > Integrate (MS).</p> <p>d Klicken Sie im Method Editor auf das Symbol .</p> <p>e Schließen Sie das Fenster Method Editor.</p>	• Um Ihre Änderungen zu widerrufen und die Werte der geladenen Methode wiederherzustellen, klicken Sie in der Symbolleiste Method Editor auf das Symbol Restore to last saved values from file  .
9 Löschen Sie alle Chromatogramme mit Ausnahme des ursprünglichen. Löschen Sie die Integrierungsergebnisse aus dem ursprünglichen Chromatogramm.	<p>a Markieren Sie im Fenster Data Navigator unter Under User Chromatograms alle Chromatogramme mit Ausnahme des ursprünglichen.</p> <p>b Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die markierten Chromatogramme und klicken Sie auf Delete.</p> <p>c Wählen Sie alle TIC-Chromatogramme aus.</p> <p>d Klicken Sie auf Chromatograms > Clear Results.</p>	• Bei Verwendung des Befehls Clear Results werden die Chromatogramme nicht gelöscht; die mit den Chromatogrammen verbundenen Ergebnisse werden entfernt. In diesem Fall werden die Integrationswerte gelöscht.

Aufgabe 8. Systemeignungswerte berechnen

In dieser Aufgabe lernen Sie verschiedene Möglichkeiten kennen, interaktiv ein Chromatogramm zu integrieren, Integrationsparameter zu ändern, um die Ergebnisse zu modifizieren, und das Signal-Rausch-Verhältnis für jeden Peak anzuzeigen. Außerdem lernen Sie, Systemeignungsberechnungen zu aktivieren.

Aufgabe 8. Ein Chromatogramm (MS) interaktiv integrieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>1 Integrieren Sie das MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d - und Pest - 200 - Scan.d-Chromatogramm und verwenden Sie dazu beliebige der rechts aufgelisteten Optionen.</p>	<p>a Markieren Sie im Fenster Data Navigator das Kontrollkästchen neben der Datendatei MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d.</p> <p>b Markieren Sie im Fenster Data Navigator das Kontrollkästchen neben der Datendatei Pest - 200 - Scan.d.</p> <p>c Markieren Sie beide TICs.</p> <p>d Integrieren Sie den TIC Scan für diese beiden Dateien unter Verwendung beliebiger der folgenden Optionen.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Klicken Sie im Hauptmenü auf Chromatograms > Integrate Chromatogram. • Markieren Sie das Chromatogramm. Klicken Sie dann mit der rechten Maustaste in das Chromatogramm und klicken Sie auf Integrate Chromatogram. • Markieren Sie im Data Navigator die Option TIC Scan für beide Datendateien. Klicken Sie dann mit der rechten Maustaste auf eines der Chromatogramme und klicken Sie auf Integrate Chromatogram. 	<ul style="list-style-type: none"> • Im allgemeinen Arbeitsablauf wird der Integrator General zur Integration verwendet, weil dieser Integrator in der Methode default.m ausgewählt ist. Für den GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablauf verwendet die Integration den Integrator Agile. • Sie können diesen Wert auf der Registerkarte Chromatogram > Integrate (MS) > Integrator ändern. • Beachten Sie, dass die Integration mit Standardparametern sehr kleine Peaks erkennt.

Aufgabe 8. Ein Chromatogramm (MS) interaktiv integrieren (Fortsetzung)

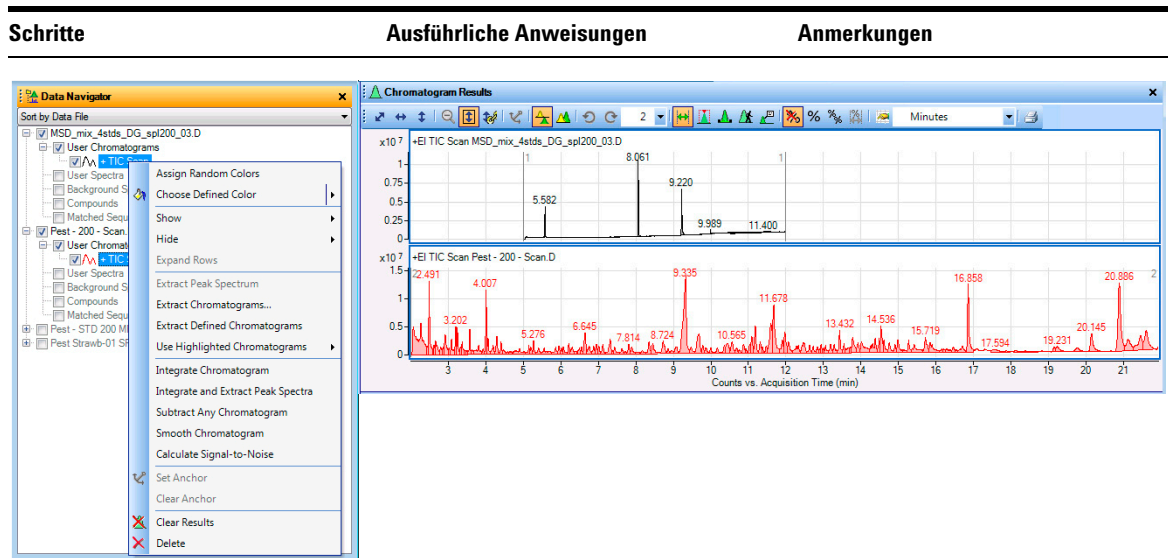


Abb. 15 Eines der Kontextmenüs im Data Navigator und die integrierten Chromatogramme

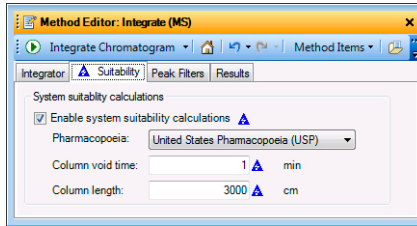
- 2 Aktivieren Sie Systemeignungsberechnungen für die MS-Chromatogramme.
- Wählen Sie im Method Explorer **Chromatogram > Integrate (MS)**, um die Registerkarte Integrator anzuzeigen.
 - Klicken Sie auf die Registerkarte **Suitability**.
 - Markieren Sie **Enable system suitability calculations**.
 - Wählen Sie **United States Pharmacopoeia (USP)**.
 - Geben Sie im Feld **Column void time** den Wert 1 ein.
 - Geben Sie im Feld **Column length** den Wert 3000 ein.
- Beachten Sie das blaue Dreieck, das angezeigt wird, wenn Sie eine Einstellung vom in der aktuellen Methode gespeicherten Wert abweichend ändern. Wenn Sie die Methode speichern, wird das Dreieck nicht mehr angezeigt.
 - Die zum Einstellen mehrerer Spalten in der Integration Peak List verwendeten Algorithmen sind je nach ausgewähltem Arzneibuch unterschiedlich. Weitere Informationen finden Sie in der Online-Hilfe.

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 8. Systemeignungswerte berechnen

Aufgabe 8. Ein Chromatogramm (MS) interaktiv integrieren (Fortsetzung)


Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
----------	--------------------------	-------------



Tatsächliche Säulenunwirksamkeitszeit und Säulenlänge für diese Datendateien unterscheiden sich von diesen Werten. Diese werden nur für dieses Beispiel verwendet.

Abb. 16 Registerkarte Chromatogramm > Integrate (MS) Suitability

3 Integrieren Sie das Chromatogramm neu.

- Klicken Sie in der Symbolleiste Method Editor auf das Symbol **Integrate Chromatogramm** , um unter Verwendung der neuen Einstellung zu integrieren.

4 Zeigen Sie die Systemeignungsberechnungen an.


- Öffnen Sie das Fenster Integration Peak List.
- Prüfen Sie die Werte für den Rauschbereich und berechnen Sie das Signal-Rausch-Verhältnis für die integrierten Peaks.

- a Klicken Sie auf **View > Integration Peak List**.
 - b Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Kopfzeile des Fensters Peaks und klicken Sie auf **Floating**.
 - c Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Kopf einer beliebigen Spalte, die Sie nicht sehen möchten, und klicken Sie auf **Remove Column**.
 - d Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf einen beliebigen Spaltenkopf und klicken Sie auf **Add/Remove Columns**, um die sichtbaren Spalten zu ändern.
- Die Systemeignungsberechnungen werden in die Tabelle Integration Peak List einbezogen.
 - Diese Werte umfassen k' , Tailing factor, Plates, Plates/M und Symmetry.
 - Sie können Systemeignungsberechnungen auch für MS-, MS/MS- und GC-Chromatogramme aktivieren.

Peak	RT	Area	Height	Width	Symmetry	k'	Plates	Plates/M	Resolution	Tailing factor
1	5.582	3333448.49	3945598.34	0.032	1	4.6	1059692	35323.1	514.7	1
2	8.061	9681480.76	10226836.53	0.081	0.8	7.1	1912708	63756.9	110.2	1.1
3	9.22	7942683.71	6210356.23	0.097	0.5	8.2	1697500	56583.3	44.9	2
4	9.989	510635.36	513381.88	0.06	0.8	9	3265667	108852.2	30.5	2
5	11.4	7358659.58	122897.42	1.216	0.43	10.4	473932	15797.7	31.9	1.7

Abb. 17 Tabelle Integrated Peaks mit Systemeignungswerten

Aufgabe 8. Ein Chromatogramm (MS) interaktiv integrieren (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>5 Stellen Sie die Einstellungen für die Standardmethode wieder her und schließen Sie die Fenster Method Editor und Integration Peak List.</p>	<p>a Um Ihre Änderungen zu widerrufen und die Werte der Standardmethode wiederherzustellen, klicken Sie in der Symbolleiste Method Editor auf das Symbol Restore to last saved values from file .</p> <p>b Schließen Sie das Fenster Method Editor.</p> <p>c Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Titel des Fensters Integration Peak List und klicken Sie auf Floating.</p> <p>d Klicken Sie auf View > Integration Peak List.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Wenn Sie im Kontextmenü zum zweiten Mal auf den Befehl Floating klicken, wird das Fenster Integration Peak List dort angedockt, wo es sich ursprünglich befand.

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

In dieser Aufgabe extrahieren Sie ein Spektrum exakt aus dem Bereich eines Chromatogramms, den Sie angeben. Das Programm zur qualitativen Analyse extrahiert ein Spektrum aus einem spezifischen Datenpunkt oder ein Durchschnittsspektrum aus einem Durchschnitt mehrerer Datenpunkte oder -bereiche.

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>1 Untersuchen Sie ein Chromatogramm, um das Präkursor-Ion und Produkt-Ion für die letzten paar Peaks von Pest - STD 200 MRM.d anzuzeigen.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Zoomen Sie auf den Bereich zwischen 13 und 16 Minuten. • Verwenden Sie das Symbol Walk Chromatogram. • Untersuchen Sie die etwa bei 13 Minuten beginnenden Spektren und bewegen Sie den Pfeil nach rechts. 	<p>a Markieren Sie die Zeile Pest - 200 - MRM.D im Fenster Data Navigator.</p> <p>b Schließen Sie das Fenster Method Editor.</p> <p>c Schließen Sie das Fenster MS Spectrum Results.</p> <p>d Klicken Sie im Fenster Data Navigator auf das TIC MRM-Chromatogramm.</p> <p>e Klicken Sie in der Symbolleiste Chromatogram Results auf das Symbol Autoscale Y-axis during Zoom .</p> <p>f Wählen Sie 1 für Maximum number of list panes.</p> <p>g Um auf ein paar Peaks zu zoomen, klicken Sie mit der rechten Maustaste über den Peak bei 13 Minuten, ziehen ihn zu 16 Minuten und geben ihn frei.</p> <p>h Klicken Sie in der Symbolleiste Chromatogram Results auf das Symbol Walk Chromatogram .</p> <p>i Bewegen Sie den Walk Chromatogram-Cursor bei etwa 13 Minuten über die X-Achse und klicken Sie.</p> <p>j Um von Spektrum zu Spektrum zu navigieren, verwenden Sie die Rechts- und Links-Pfeiltaste der Tastatur.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Das Walk Chromatogram-Tool ist besonders bei MS/MS-Daten zur Identifikation von Präkursor- und Produkt-Ionen von Nutzen. • Das Spektrum wird für jeden Punkt, auf den Sie im Fenster Chromatogram Results klicken, automatisch im Fenster Spectrum Preview angezeigt, das automatisch geöffnet wird. • Manchmal werden zwei Spektren im Fenster Spectrum Preview angezeigt. Beispielsweise werden im Fenster Spectrum Preview zwei Spektren für jeden Punkt angezeigt, auf den Sie in der Nähe des bei 13,431 Minuten liegenden Peaks klicken.

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
----------	--------------------------	-------------

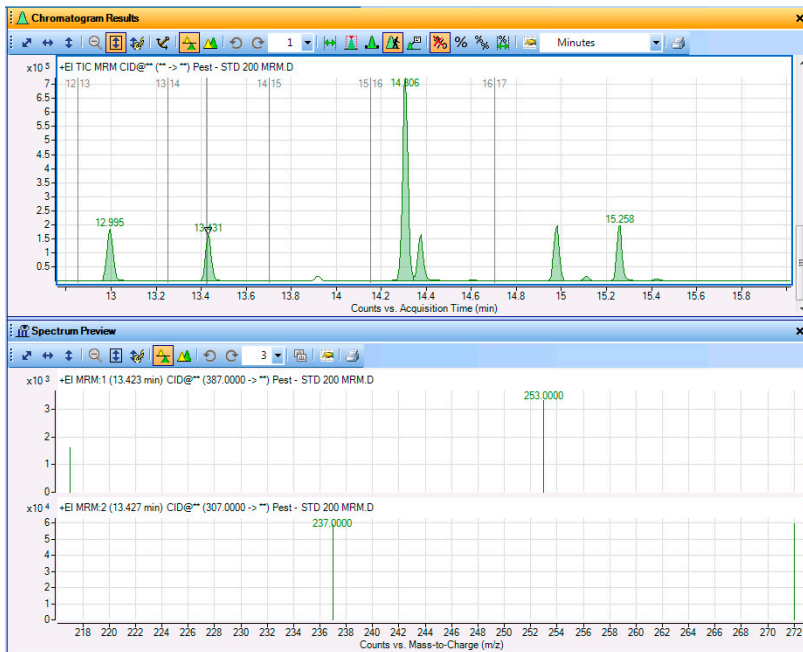






Abb. 18 Untersuchen Sie das Chromatogramm, um die beiden MRM-Spektren für den Peak bei 13,43 Minuten anzuzeigen

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>2 Extrahieren Sie Spektren bei spezifischen Datenpunkten für den Peak bei 5,2 Minuten und den Peak bei 14,3 Minuten der Datendatei Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none">Extrahieren Sie ein Spektrum aus dem Peak bei oder in der Nähe von 5,2 Minuten und dann bei einem der Täler unter Verwendung einer beliebigen der unter „Anmerkungen“ beschriebenen Optionen.Extrahieren Sie ein Spektrum aus dem Peak bei oder in der Nähe von 14,3 Minuten (noch nicht das Tal).Ändern Sie die Anzeige, sodass mindestens drei Spektren angezeigt werden.	<p>a Klicken Sie in der Symbolleiste Chromatogram Results auf das Symbol Range Select .</p> <p>b Schließen Sie das Fenster Spectrum Preview.</p> <p>c Klicken Sie in der Symbolleiste Chromatogram Results auf das Symbol Zoom Out .</p> <p>d Um auf den Peak bei 5,2 Minuten zu zoomen, klicken Sie mit der rechten Maustaste über den Peak bei 4,0 Min., ziehen ihn auf 6,0 Min. und geben ihn frei.</p> <p>e Extrahieren Sie mit einer der in der Spalte „Anmerkungen“ aufgelisteten Methoden ein Spektrum aus einem Peak in der Nähe von 5,2 Min.</p> <p>f Extrahieren Sie das Spektrum aus einem Tal in der Nähe von 5,1 Min.</p> <p>g Klicken Sie in der Symbolleiste Chromatogram Results auf das Symbol Zoom Out .</p> <p>h Zoomen Sie auf den Bereich zwischen 14 und 15 Min.</p> <p>i Extrahieren Sie mit einer der in der Spalte „Anmerkungen“ aufgelisteten Methoden ein Spektrum aus einem Peak in der Nähe von 14,3 Min. (Extrahieren Sie noch nicht das Talspektrum.)</p> <p>j Wählen Sie ggf. in der Symbolleiste MS Spectrum Results im Symbol Maximum number of list panes den Wert 4.</p>	<ul style="list-style-type: none">Achten Sie beim Zoomen darauf, dass das Symbol AutoScale Y-axis during Zoom  aktiviert ist. Der Hintergrund des Symbols ist orange, wenn es aktiviert ist.Sie können ein Spektrum auch mit einer der folgenden Methoden extrahieren:<ul style="list-style-type: none">Doppelklicken Sie im Chromatogramm auf den Datenpunkt.Klicken Sie im Chromatogramm auf den Datenpunkt und dann mit der rechten Maustaste an beliebiger Stelle in das Chromatogramm. Klicken Sie auf Extract MS Spectrum. Das Dialogfeld Extract Spectrum wird geöffnet. Achten Sie darauf, dass die Datei Pest - STD 200 MRM.d ausgewählt ist, und klicken Sie im Dialogfeld Extract Spectrum auf Extract.Beachten Sie, dass beim ersten Extrahieren eines Spektrums das Fenster MS Spectrum Results mit dem Spektrum angezeigt wird und Typ und Retentionszeit des Spektrums unter User Spectra angezeigt werden. Alle in der Folge extrahierten Spektren werden ebenfalls an beiden Positionen angezeigt.Wenn Sie ein MS-Spektrum aus dem Peak in der Nähe von 14,3 Minuten extrahieren, werden zwei Spektren extrahiert, weil bei diesem Peak zwei Übergänge stattfinden.

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
----------	--------------------------	-------------

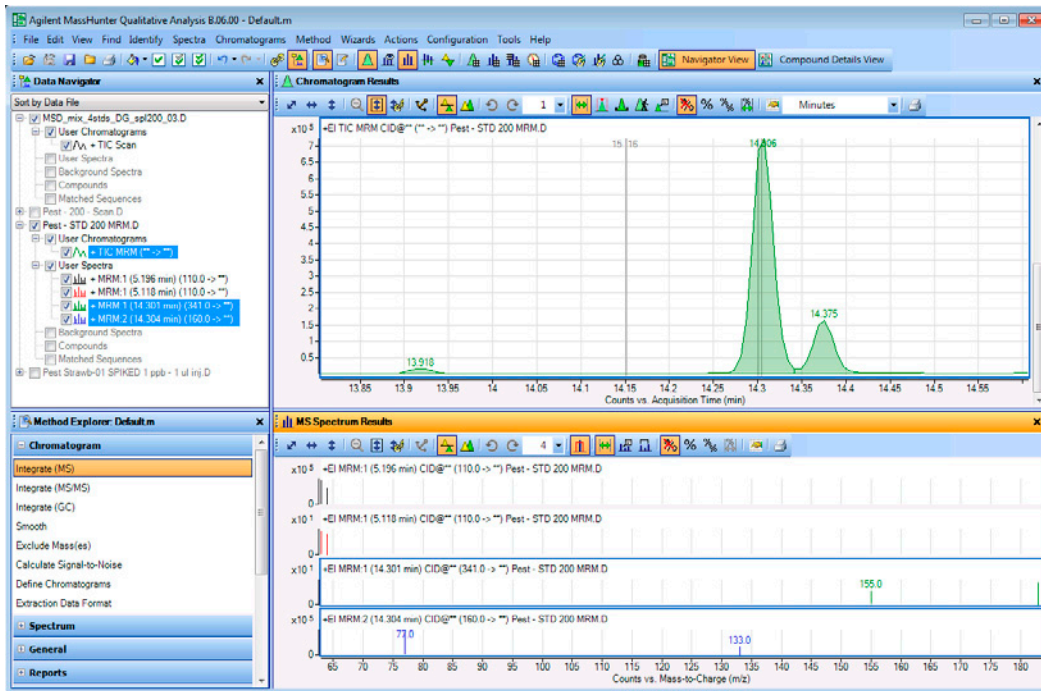



Abb. 19 Hauptfenster mit zwei MRM-Spektren aus dem Peak in der Nähe von 5,2 Minuten und zwei MRM-Spektren aus dem Peak bei 14,3 Minuten

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>3 Extrahieren Sie ein MS-Spektrum für das Tal bei 14,35 Minuten der Datendatei Pest - STD 200 MRM.d.</p> <ul style="list-style-type: none">• Rufen Sie Spectrum Preview auf.• Extrahieren Sie ein Spektrum aus dem Tal bei RT 14,3 Minuten.• Kopieren Sie dieses Spektrum in den Ordner User Spectra.• Ändern Sie die Anzeige, sodass 6 Spektren angezeigt werden.• Schließen Sie Spectrum Preview.	<p>a Klicken Sie auf das Symbol Spectrum Preview .</p> <p>b Extrahieren Sie ein Spektrum aus einem Tal bei 14,3 Minuten.</p> <p>c Klicken Sie mit der rechten Maustaste im Fenster Spectrum Preview auf das Spektrum und klicken Sie auf Copy to User Spectra. Die Spektren werden im Data Navigator in den Abschnitt User Spectra kopiert und im Fenster MS Spectrum Results angezeigt.</p> <p>d Klicken Sie auf den Abwärtspfeil neben der Spektrumfensterauschnitt-Liste und wählen Sie 6.</p> <p>e Schließen Sie das Fenster Spectrum Preview.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Wenn Spectrum Preview aktiviert ist, zeigt das System jedes manuell ausgewählte Spektrum im Fenster Spectrum Preview an, aber nicht im Abschnitt User Spectra des Data Navigator.• Wenn Spectrum Preview aktiviert ist, überschreibt die qualitative Analyse das vorherige Spektrum, wenn Sie ein neues Spektrum extrahieren.• Der Modus Spectrum Preview ist von Nutzen, wenn Sie schnell die Spektren in Ihrem Chromatogramm überprüfen und nur einen Teil der Spektren speichern möchten.

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

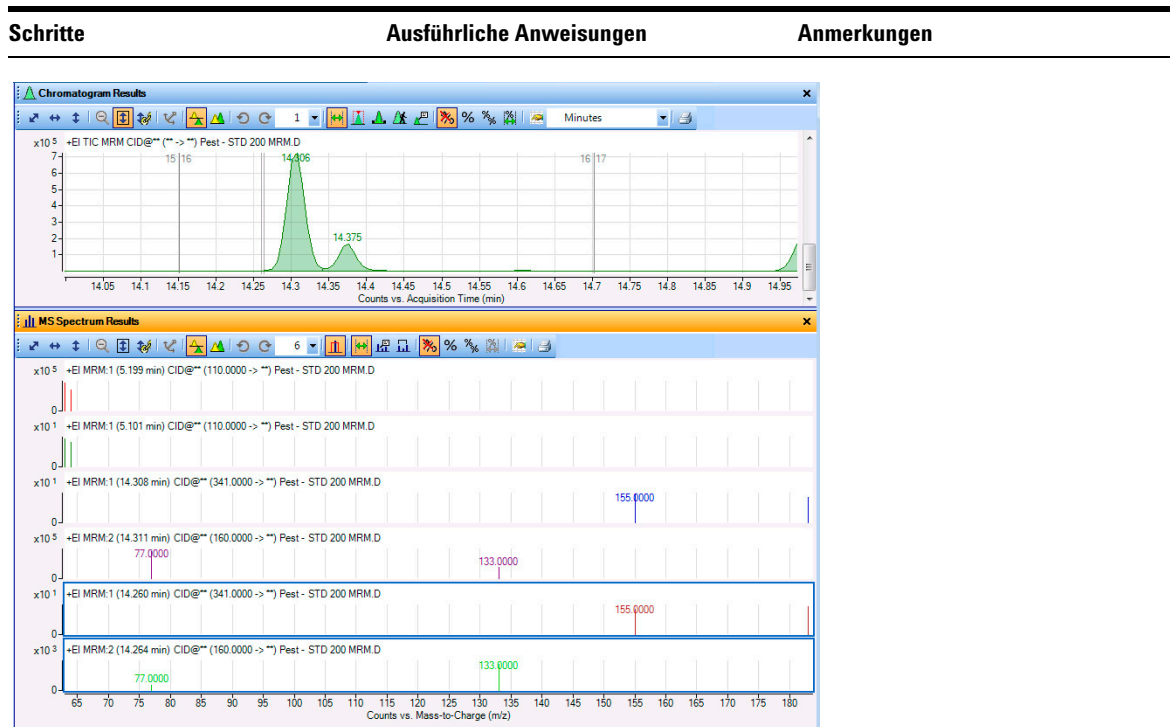


Abb. 20 Fenster Chromatogram Results und MS Spectrum Results

- 4** Extrahieren Sie ein Spektrum, das den Durchschnitt aller Punkte innerhalb eines angegebenen Bereichs für den Peak bei 14,3 Minuten für die Datendatei **Pest - STD 200 MRM.d** bildet:
- Zoomen Sie heraus.
 - Verwenden Sie in der Symbolleiste Chromatogram das Symbol Range Select.
 - Legen Sie den Bereich über den gesamten Peak hinweg fest.
 - Extrahieren Sie das Spektrum mit beliebigen der aufgelisteten Optionen.
- a** Klicken Sie in der Symbolleiste Chromatogram auf das Symbol **Range Select**.
- b** Klicken Sie links von der Basis des Peaks bei 14,3 Minuten und ziehen Sie nach rechts zur Basis des Peaks.
- c** Extrahieren Sie das Durchschnittsspektrum mit einer der Optionen rechts.
- d** Wählen Sie im Fenster MS Spectrum Results im Feld **Maximum number of list panes** den Wert **2**.
- Sie können durch Doppelklicken auf den gewählten Bereich im Chromatogramm ein Durchschnittsspektrum extrahieren.
 - Oder klicken Sie mit der rechten Maustaste an beliebiger Stelle in das Chromatogramm und klicken Sie im Kontextmenü auf **Extract MS Spectrum**.
 - Beachten Sie, dass zwei Durchschnitts-MRM-Spektren angezeigt werden.

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

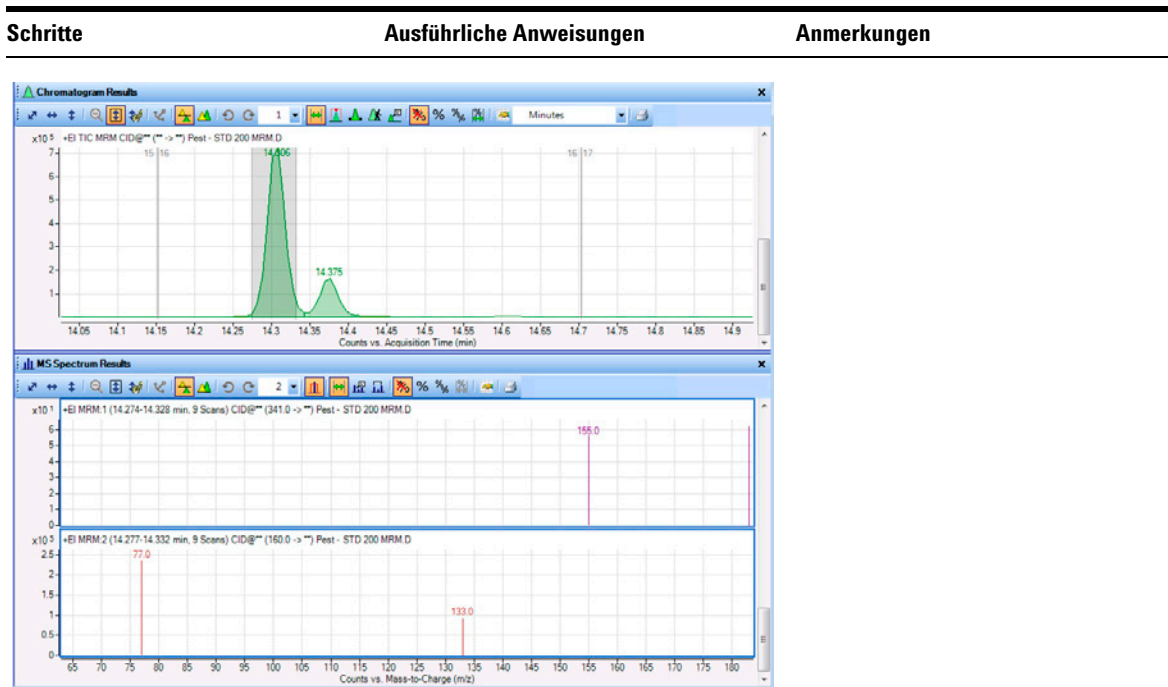
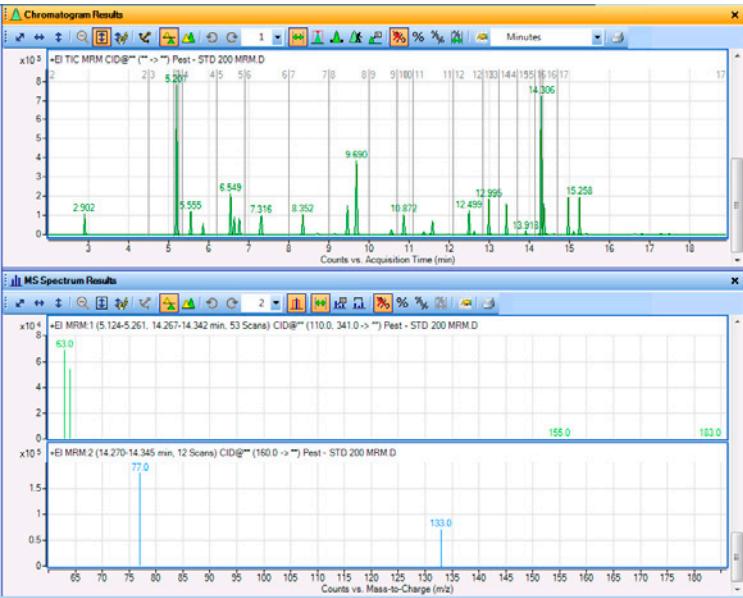


Abb. 21 Chromatogram Results und MS Spectrum Results zeigen zwei Durchschnittsspektren an

- 5** Extrahieren Sie Spektren, die den Durchschnitt der Bereiche von Peaks bei 5,2 Minuten und 14,3 Minuten für die Datendatei **Pest - STD 200 MRM.d** zusammen darstellen.
- Hinweis: Verwenden Sie das Symbol Range Select und die Taste **Strg** zur Auswahl des Peak 1-Bereichs, der bei dem auf halbem Wege liegenden Punkt festgelegt wird.
 - Extrahieren Sie die Spektren mit einer der Optionen rechts.
- a** Klicken Sie in der Symbolleiste Chromatogram Results auf das Symbol **Zoom Out**.
- b** Drücken Sie die Taste **Strg**.
- c** Klicken Sie an der linken Seite des Peaks bei 5,2 Minuten, ziehen Sie nach rechts von diesem Peak und geben Sie die Maus frei.
- d** Geben Sie die Taste **Strg** frei.
- e** Extrahieren Sie die Durchschnittsspektren mit dieser Option oder der Option rechts:
- Doppelklicken Sie in einem der Peaks in den ausgewählten Bereich.
- Denken Sie daran, dass für den zweiten Peak bereits in Schritt 4 ein Bereich ausgewählt wurde.
 - Um Spektren zu extrahieren, können Sie auch mit der rechten Maustaste an beliebiger Stelle in das Chromatogramm klicken und auf **Extract MS Spectrum** klicken. Das Dialogfeld Extract Spectrum wird angezeigt. Klicken Sie auf **Extract**.


Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
	<p>Das erste Spektrum weist Übergänge von beiden Zeiträumen auf. Das zweite Spektrum hat nur einen Zeitraum, weil der 160,00 -> **-Übergang in dem Peak bei 5,2 Minuten nicht vorhanden ist.</p>	
Abb. 22	Zwei Durchschnittsspektren aus zwei verschiedenen Bereichen im Chromatogramm	

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>6 Subtrahieren Sie stets ein Hintergrundspektrum, wenn Sie ein Peak-Spektrum aus Pest - STD 200 MRM.d extrahieren.</p> <ul style="list-style-type: none">• Löschen Sie im Data Navigator jegliche Scans unter User Spectra.• Extrahieren Sie ein Hintergrundspektrum, das den Durchschnitt eines Spektrums am Beginn des Peaks und eines Spektrums am Ende des Peaks darstellt.• Extrahieren Sie ein Peak-Spektrum aus den integrierten Peaks.	<p>a Klicken Sie im Data Navigator auf die Zeile User Spectra. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Zeile User Spectra und klicken Sie auf Delete.</p> <p>b Klicken Sie auf Yes.</p> <p>c Wählen Sie im Method Explorer die Option Spectrum > Extract (MS/MS).</p> <p>d Klicken Sie auf die Registerkarte Peak Spectrum Extraction (MS/MS), falls nicht sichtbar.</p> <p>e Wählen Sie im Feld Peak spectrum background MS/MS die Option Average of spectra at peak start and end.</p> <p>f Klicken Sie in der Symbolleiste Chromatogram Results auf das Symbol Peak Select .</p> <p>g Klicken Sie auf den Befehl Chromatograms > Integrate.</p> <p>h Wählen Sie den Peak bei 5,206 Minuten.</p> <p>i Klicken Sie mit der rechten Maustaste und klicken Sie im Kontextmenü auf Extract Peak Spectrum.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Beachten Sie, dass am Ende dieses Prozesses von allen extrahierten Peak-Spektren automatisch das zugewiesene Hintergrundspektrum subtrahiert wird.

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
----------	--------------------------	-------------

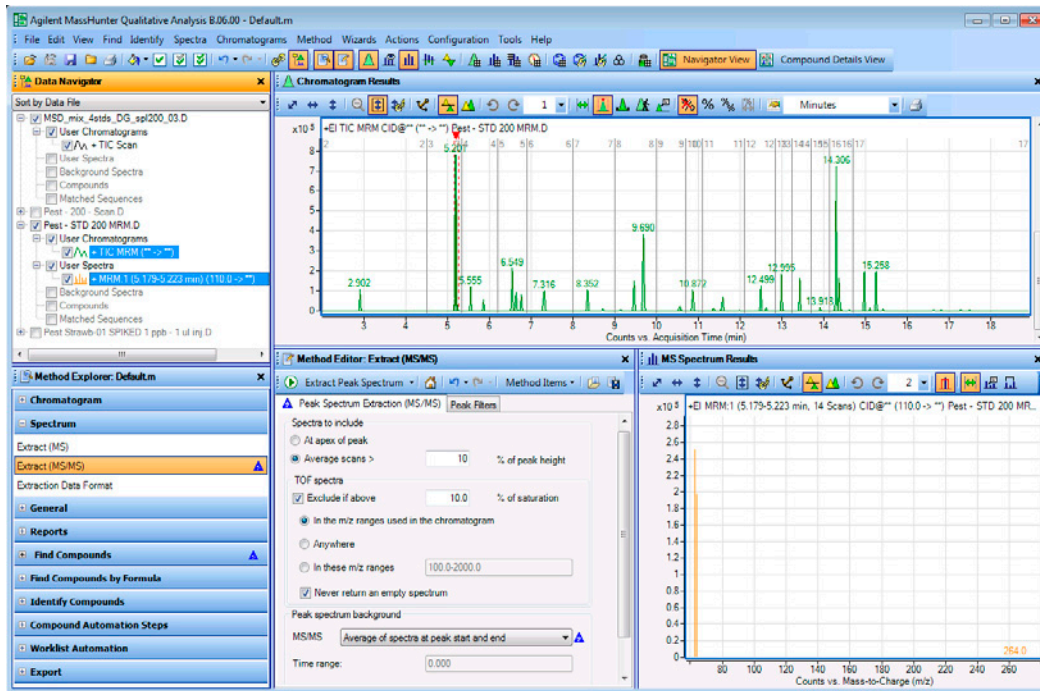


Abb. 23 Peak-Spektren, von denen ein Hintergrundspektrum subtrahiert ist

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Aufgabe 9. Spektren aus einem Chromatogramm extrahieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
7 Integrieren und extrahieren Sie Peak-Spektren von der Datendatei Pest - STD 200 MRM.d.	<p>a Klicken Sie im Fenster Data Navigator auf das TIC MRM-Chromatogramm.</p> <p>b Klicken Sie auf Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra.</p>	<ul style="list-style-type: none">Die Peak-Spektren, die Sie im vorherigen Schritt manuell extrahiert haben, werden automatisch gelöscht, weil standardmäßig das Kontrollkästchen Clear previous peak spectra auf der Registerkarte Chromatograms > Integrate (MS/MS) > Results markiert wird.

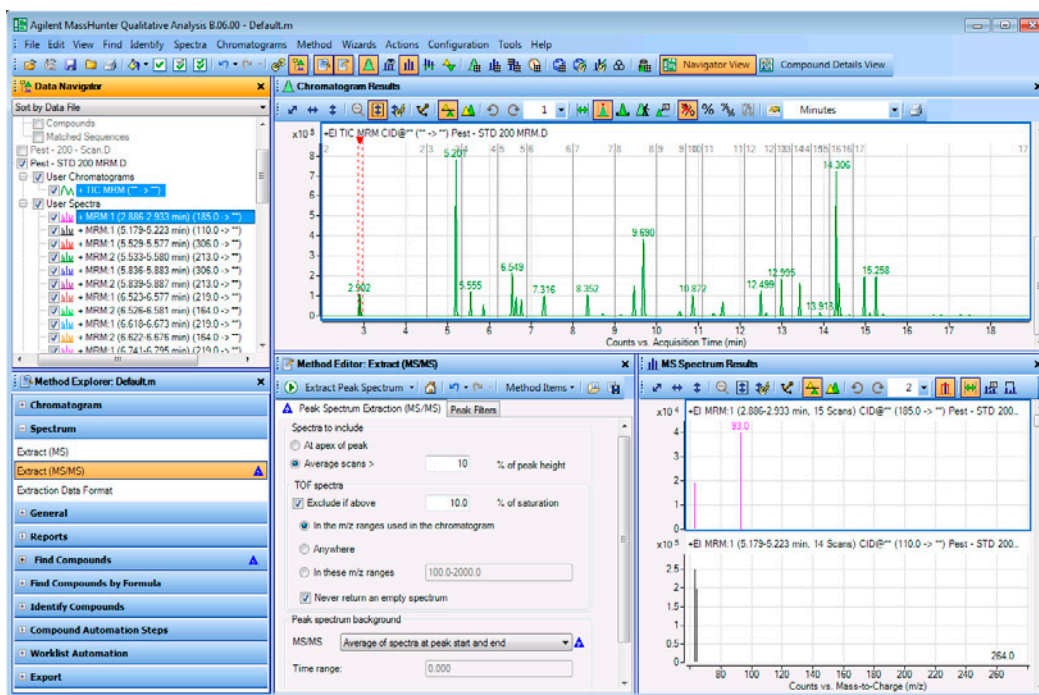


Abb. 24 Peak-Spektren integrieren und extrahieren

8 Entfernen Sie Integrationsergebnisse und Peak-Spektren.	<p>a Wählen Sie die Datendatei Pest - Std 200 MRM.d.</p> <p>b Klicken Sie auf Chromatograms > Clear Results > Include Peak Spectra.</p>	<ul style="list-style-type: none">Stattdessen können Sie auf Chromatograms > Clear Results > Only Chromatograms klicken, wenn Sie die Peak-Spektren nicht löschen möchten.
---	--	---


Aufgabe 10. Anmerkungen hinzufügen

Folgenden Grafikfenstern können Sie eine Bild- oder Textanmerkung hinzufügen:

- Fenster Chromatogram Results
- Fenster MS Spectrum Results

Wenn Sie die Ergebnisse für die Datendatei speichern, werden Anmerkungen auch gespeichert.

Aufgabe 10. Eine Anmerkung hinzufügen

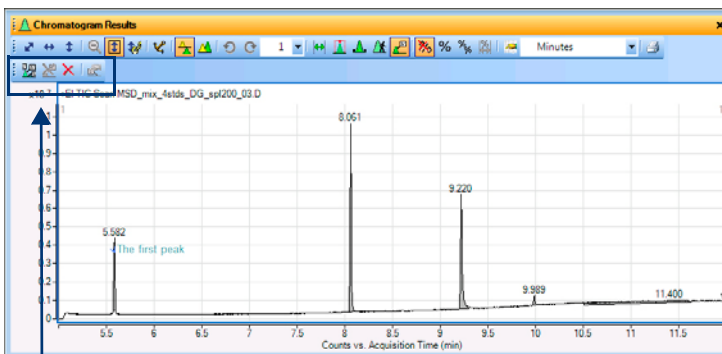
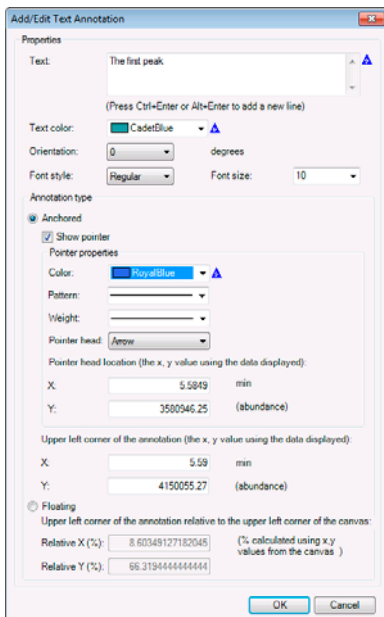
Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1 Wählen Sie die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d aus. Blenden Sie die übrigen Chromatogramme aus.	<p>a Markieren Sie im Fenster Data Navigator das Kontrollkästchen neben MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d.</p> <p>b Klicken Sie auf Edit > Show > Only Highlighted.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Die Chromatogramme für die anderen Datendateien werden automatisch ausgeblendet.
2 Wählen Sie die Stelle im Chromatogramm, an der Sie eine Textanmerkung hinzufügen möchten.	<p>a Klicken Sie in der Symbolleiste des Fensters Chromatogram Results auf das Tool Annotation (.</p> <p>b Bewegen Sie den Cursor an die Stelle im Chromatogramm-Fensterausschnitt, wo Sie die Anmerkung hinzufügen möchten.</p> <p>c Klicken Sie mit der rechten Maustaste und dann auf Add Text Annotation.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Der Cursor wird zu einem Fadenkreuz. Wählen Sie mit diesem Cursor die exakte Position aus, an der Sie die Anmerkung hinzufügen möchten. • Die Symbolleiste Annotate ist im Fenster Chromatogram Results verfügbar. • Sie können auch im Fenster MS Spectrum Results Anmerkungen hinzufügen.

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 10. Anmerkungen hinzufügen

Aufgabe 10. Eine Anmerkung hinzufügen (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
3	<p>Fügen Sie die Informationen zur Textanmerkung im Dialogfeld Add/Edit Text Annotation hinzu.</p> <p>a Geben Sie den Text für die Anmerkung ein.</p> <p>b Wählen Sie die Text color.</p> <p>c Wählen Sie die Orientation.</p> <p>d Wählen Sie Font style und Font size aus.</p> <p>e Klicken Sie entweder auf Anchored oder Floating. Wenn Sie auf Anchored klicken, wählen Sie die Optionen für den Zeiger auf die Textanmerkung. Wenn Sie auf Floating klicken, können Sie die relative Position ändern. Es ist einfacher, die Position interaktiv im Grafikenfenster zu ändern.</p> <p>f Klicken Sie auf OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Sie können einem Chromatogramm oder Spektrum mehrere Anmerkungen hinzufügen. Mithilfe der Symbole in der Symbolleiste Annotate können Sie alle Anmerkungen auswählen, Anmerkungen löschen und bearbeiten.



Die Symbolleiste Annotate ist nur verfügbar, wenn das Tool Annotate ausgewählt ist.

Abb. 25 Dialogfeld Add/Edit Text Annotation und Fenster Chromatogram Results

Aufgabe 10. Eine Anmerkung hinzufügen (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
4 Wählen Sie die Stelle im Chromatogramm, an der Sie eine Bildanmerkung hinzufügen möchten.	<p>a Bewegen Sie den Cursor an die Stelle im Chromatogramm-Fensterausschnitt, wo Sie die Anmerkung hinzufügen möchten.</p> <p>b Klicken Sie mit der rechten Maustaste und dann auf Add Image Annotation.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Sie können eine JPG- oder MOL-Bilddatei hinzufügen.
5 Fügen Sie die Informationen zur Textanmerkung im Dialogfeld Add/Edit Text Annotation hinzu.	<p>a Geben Sie den Text für die Anmerkung ein.</p> <p>b Geben Sie 50 für die Scale width ein.</p> <p>c Markieren Sie das Kontrollkästchen Lock aspect ratio.</p> <p>d Klicken Sie auf Floating. Sie können die relative Position ändern. Es ist einfacher, die Position interaktiv im Grafikfenster zu ändern.</p> <p>e Klicken Sie auf OK.</p> <p>f Verschieben Sie das Bild zur oberen, rechten Ecke des Chromatogramms.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Die Datei Agilent_Logo.tif ist im Ordner \\MassHunter\Report Templates\Qual\B.05.00\en-US\Letter enthalten. Sie müssen Sie in eine JPG-Datei umwandeln. • Sie können einem Chromatogramm oder Spektrum mehrere Anmerkungen hinzufügen.

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse

Aufgabe 10. Anmerkungen hinzufügen

Aufgabe 10. Eine Anmerkung hinzufügen (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
----------	--------------------------	-------------

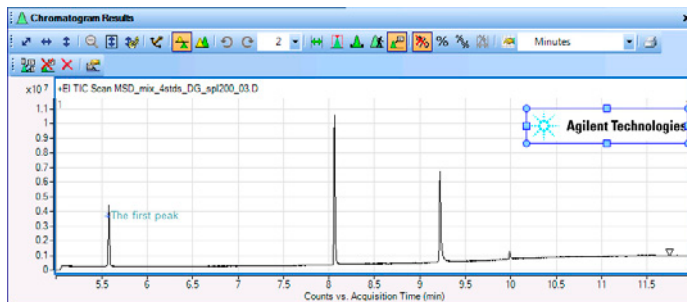
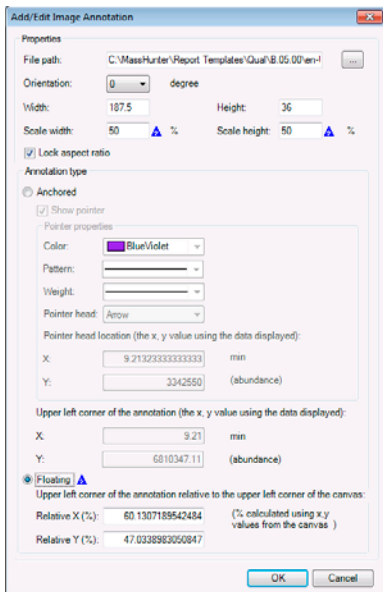
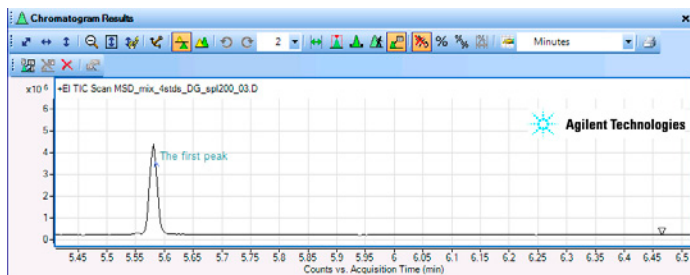


Abb. 26 Dialogfeld Add/Edit Image Annotation und Fenster Chromatogram Results



- 6 Zoomen Sie auf den ersten Peak. • Zoomen Sie auf einen Bereich um den ersten Peak bei 5,5 Minuten.



Wenn eine Anmerkung verankert ist, bleibt sie an der entsprechenden Position. Wenn Sie auf einen anderen Peak zoomen, ist eine verankerte Anmerkung möglicherweise nicht sichtbar. Wenn eine Anmerkung frei beweglich ist, wird die Anmerkung immer relativ zur oberen linken Ecke des Fensters an derselben Position angezeigt.

Abb. 27 Dialogfeld Add/Edit Image Annotation und Fenster Chromatogram Results

Aufgabe 10. Eine Anmerkung hinzufügen (Fortsetzung)


Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
7 Wechseln Sie wieder zum Tool Range Select im Fenster Chromatogram Results. Löschen Sie zuvor die Anmerkung.	<p>a Klicken Sie auf das Symbol , um alle Anmerkungen zu entfernen.</p> <p>b Klicken Sie in der Symbolleiste Chromatogram Results auf das Symbol  (Range Select).</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Wenn Sie die Anmerkungen mit den Datendateiergebnissen speichern möchten, siehe „Aufgabe 17. Ergebnisse speichern“ auf Seite 74. • Sie können in der Symbolleiste Chromatogram Results zwischen fünf verschiedenen Tools wechseln. Weitere Informationen finden Sie in der Online-Hilfe. Die fünf Tools sind: <ul style="list-style-type: none"> • Range Select • Peak Select • Manual Integration • Walk Chromatogram • Annotation Mouse

Aufgabe 11. Massenmessschieber hinzufügen

Ein Messschieber zeigt den Unterschied zwischen zwei Punkten in einem Spektrum. Sie können im Fenster MS Spectrum Results einen Messschieber hinzufügen.

Wenn Sie die Ergebnisse für die Datendatei speichern, werden Messschieber auch gespeichert.

Aufgabe 11. Massenmessschieber hinzufügen

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1 Integrieren und extrahieren Sie Peak-Spektren aus MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.	<p>a Markieren Sie im Fenster Data Navigator das Kontrollkästchen neben MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d.</p> <p>b Klicken Sie auf Edit > Show > Only Highlighted.</p> <p>c Klicken Sie auf Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra.</p> <p>d Schließen Sie das Fenster Method Editor.</p>	
2 Fügen Sie den Messschieber dem in der vorherigen Aufgabe erstellten Peak-Spektrum hinzu.	<p>a Klicken Sie in der Symbolleiste des Fensters MS Spectrum Results auf das Tool Delta Mass Caliper ().</p> <p>b (Optional) Wählen Sie in der Messschieber-Symbolleiste Profile Point to Point als Messschiebertyp aus.</p> <p>c Zoomen Sie auf 66 bis 132 <i>m/z</i>.</p> <p>d Bewegen Sie den Cursor an die Stelle im Spektrumfensterausschnitt, wo Sie den Messschieber hinzufügen möchten.</p> <p>e Ziehen Sie den Cursor zum Endpunkt des Messschiebers im Spektrum. Beim Ziehen des Cursors ändert sich der Deltamassenwert. Wenn Sie die Maustaste freigeben, wird der Messschieber hinzugefügt.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Der Cursor nimmt Pfeilform an. Mit diesem Cursor wählen Sie Start- und Endpunkt des Messschiebers. • Sie können den Messschiebertyp nicht auswählen, wenn im Spektrum ein Schwerpunkt liegt, weil Profile Point to Point keine Wirkung auf Schwerpunktdaten hat. • Der „Dreieck“-Cursor wird an die Spitze des ausgewählten Peaks gesetzt.

Aufgabe 11. Massenmessschieber hinzufügen (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
3	<p>Ändern Sie den Messschieber derart, dass eine andere Farbe verwendet wird.</p> <p>a Klicken Sie auf den im vorherigen Schritt erstellten Messschieber.</p> <p>b Klicken Sie in der Symbolleiste MS Spectrum Results Caliper auf die Schaltfläche Caliper Properties ().</p> <p>c (Optional) Geben Sie die Werte Start X und Start Y ein.</p> <p>d Wählen Sie die Text color.</p> <p>e Wählen Sie Font style und Font size aus.</p> <p>f Klicken Sie auf OK.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Sie können einem Spektrum mehrere Messschieber hinzufügen. Mithilfe der Symbole in der Messschieber-Symbolleiste können Sie alle Messschieber auswählen, Messschieber löschen und bearbeiten.

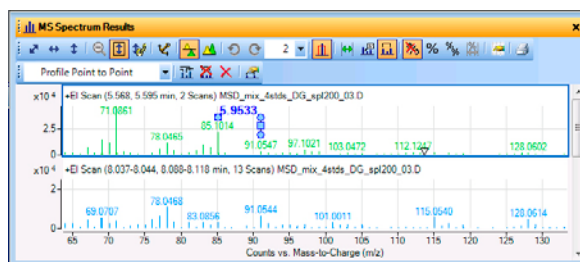
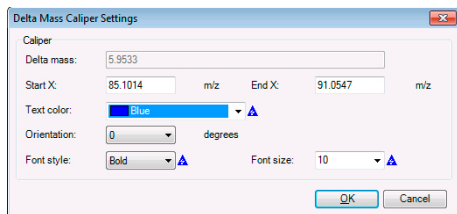
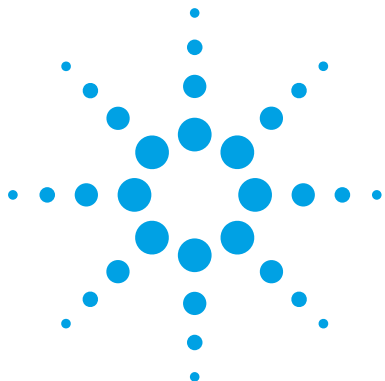


Abb. 28 Dialogfeld Delta Mass Caliper Settings und Fenster MS Spectrum Results

4	<p>Löschen Sie Integrationsergebnisse und Spektren.</p> <p>a Klicken Sie auf Chromatograms > Clear Results > Include Peak Spectra.</p> <p>b Klicken Sie auf das Tool Range Select.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Wenn Sie die Messschieber mit den Datendateiergebnissen speichern möchten, siehe „Aufgabe 17. Ergebnisse speichern“ auf Seite 74.
---	--	---

1 Lerngrundlagen der qualitativen Analyse
Aufgabe 11. Massenmessschieber hinzufügen



2 Finden und identifizieren

Aufgabe 12. Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution
finden 52

Aufgabe 13. Verbindungen mit dem Search Library-Algorithmus
identifizieren 56

Aufgabe 14. Verbindungen finden durch MRM (nur MRM) 61

Aufgabe 15. Verbindungen durch Integration finden 65

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren
durchsuchen 68

Aufgabe 17. Ergebnisse speichern 74

In diesen Aufgaben finden und identifizieren Sie Verbindungen in
GC/MS-Datendateien.

Jede Übung wird in einer dreispaltigen Tabelle dargestellt:

- Schritte – lernen Sie das Programm mit diesen allgemeinen Anweisungen selbstständig kennen.
- Ausführliche Anweisungen – benutzen Sie sie, wenn Sie Hilfe benötigen oder einen schrittweisen Lernprozess bevorzugen.
- Anmerkungen – lesen Sie sie, um Tipps und weitere Informationen zu den einzelnen Schritten der Übung zu erfahren.



2 Finden und identifizieren

Aufgabe 12. Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution finden

Aufgabe 12. Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution finden

Dieser Algorithmus zum Finden von Verbindungen identifiziert Verbindungen in GC/MS-Daten und erstellt für jede Verbindung ein bereinigtes MS-Spektrum. Mit dieser Funktionalität können Sie mühelos Informationen aus komplexen Daten gewinnen. Sie können den Algorithmus zum Finden von Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution nur auf GC/MS-Probanddaten anwenden, die mittels Scan, Produkt-Ionen-Scan oder Neutralverlust-Scan erfasst wurden.

Diese Aufgabe zeigt, wie Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution mit präzisen Massendaten gefunden werden. Sie können Verbindungen auch durch Chromatogrammdekonvolution mit Masseneinheitendaten finden, nachdem Sie das Extrahierungsfenster gewechselt haben.

Aufgabe 12. Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution finden (GC/MS)

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1 Öffnen Sie das TIC für die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d .	<p>a Wenn das Programm nicht geöffnet ist, doppelklicken Sie auf das Symbol MassHunter Qualitative Analysis. Klicken Sie andernfalls auf File > Open Data File.</p> <p>b Klicken Sie im GC-Beispieldatendatei-Ordner auf die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>c Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Load result data und klicken Sie auf Open.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Der Algorithmus zum Finden von Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution ist mit beiden GC/QQQ- und GC/Q-TOF-Datendateien einsetzbar.

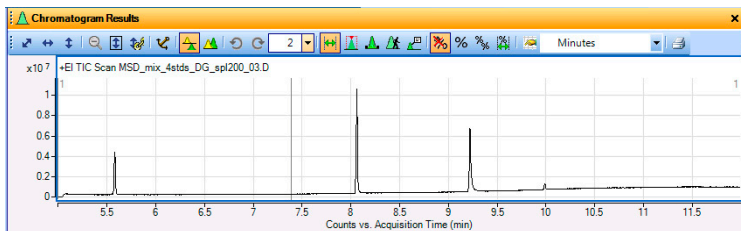


Abb. 29 TIC-Chromatogramm aus Pest - 200 - Scan.d

Aufgabe 12. Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution finden

Aufgabe 12. Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution finden (GC/MS)

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
2	<p>Konfigurieren Sie die Benutzeroberfläche zum Einsatz mit GC-Daten.</p> <ul style="list-style-type: none"> Folgen Sie den Anweisungen in „Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC/MS-Daten konfigurieren“ auf Seite 12. 	<ul style="list-style-type: none"> Laden Sie für diese Beispiele den GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablauf.
3	<p>Finden Sie Verbindungen mit dem Algorithmus zur Chromatogrammdekonvolution.</p> <ul style="list-style-type: none"> Wählen Sie den Integrator Agile. Geben Sie einen SNR-Schwellenwert von 20 ein. Geben Sie 100 ppm für Left m/z delta und Right m/z delta ein. <p>a Wählen Sie im Fenster Method Explorer die Option Find Compounds > Find by Chromatogram Deconvolution.</p> <p>b Geben Sie auf der Registerkarte Settings unter Peak filter den Wert 20 für SNR threshold ein.</p> <p>c Wählen Sie PPM für m/z delta units.</p> <p>d Geben Sie 100 für Left m/z delta und 100 für Right m/z delta ein.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Der Abschnitt Find by Chromatogram Deconvolution ist auch im Abschnitt GC/Q-TOF Compound Screening verfügbar. Wenn Sie Masseneinheitendaten haben, geben Sie 0.3 AMU für Left m/z delta und 0.7 AMU für Right m/z delta ein. Sie können den gesamten Ergebnissatz für eine gefundene Verbindung extrahieren, wenn Sie die Verbindung markieren und die Menüoption Compounds > Extract Complete Result Set wählen.

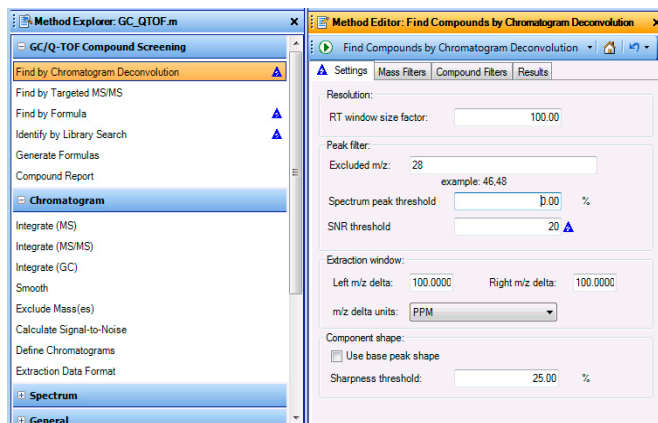



Abb. 30 Registerkarte Settings im Abschnitt Find Compounds by Chromatogram Deconvolution

2 Finden und identifizieren

Aufgabe 12. Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution finden

Aufgabe 12. Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution finden (GC/MS)

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<ul style="list-style-type: none">Wählen Sie das Extrahieren von EIC-, MS- und MS/MS-Spektren.	<p>e Klicken Sie auf die Registerkarte Results.</p> <p>f Markieren Sie die Kontrollkästchen Extract EIC, Extract ECC, Extract cleaned spectrum und Extract raw spectrum.</p> <p>g Klicken Sie auf  um den Find Compounds by Chromatogram Deconvolution-Algorithmus auf die Datendatei anzuwenden.</p> <p>h Klicken Sie ggf. auf den Befehl View > Compound List.</p>	<ul style="list-style-type: none">Das Programm zur qualitativen Analyse findet unter diesen Bedingungen 4 Verbindungen.Wenn die Datendatei nicht indiziert ist, kann die Ausführung dieses Algorithmus viel Zeit kosten.
<p>4 Untersuchen Sie die Verbindungen. Siehe Abbildung 31 auf Seite 55.</p>	<p>a Wählen Sie in der Symbolleiste MS Spectrum Results im Feld Maximum number of list panes den Wert 2.</p> <p>b Klicken Sie im Fenster Compound List auf das Symbol Hide Empty Columns.</p> <p>c Klicken Sie im Fenster Data Navigator auf die erste Verbindung.</p> <p>d Wenn das Fenster Data Navigator ausgewählt ist, wechseln Sie die Verbindungen mit den Pfeiltasten.</p>	<ul style="list-style-type: none">Die Anzeige beider Spektren ist eine komfortable Möglichkeit, alle Informationen für eine einzelne Verbindung anzuzeigen.Beachten Sie, dass sowohl das bereinigte als auch das unbereinigte Spektrum angezeigt wird.

Aufgabe 12. Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution finden

Aufgabe 12. Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution finden (GC/MS)

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
---------	--------------------------	-------------

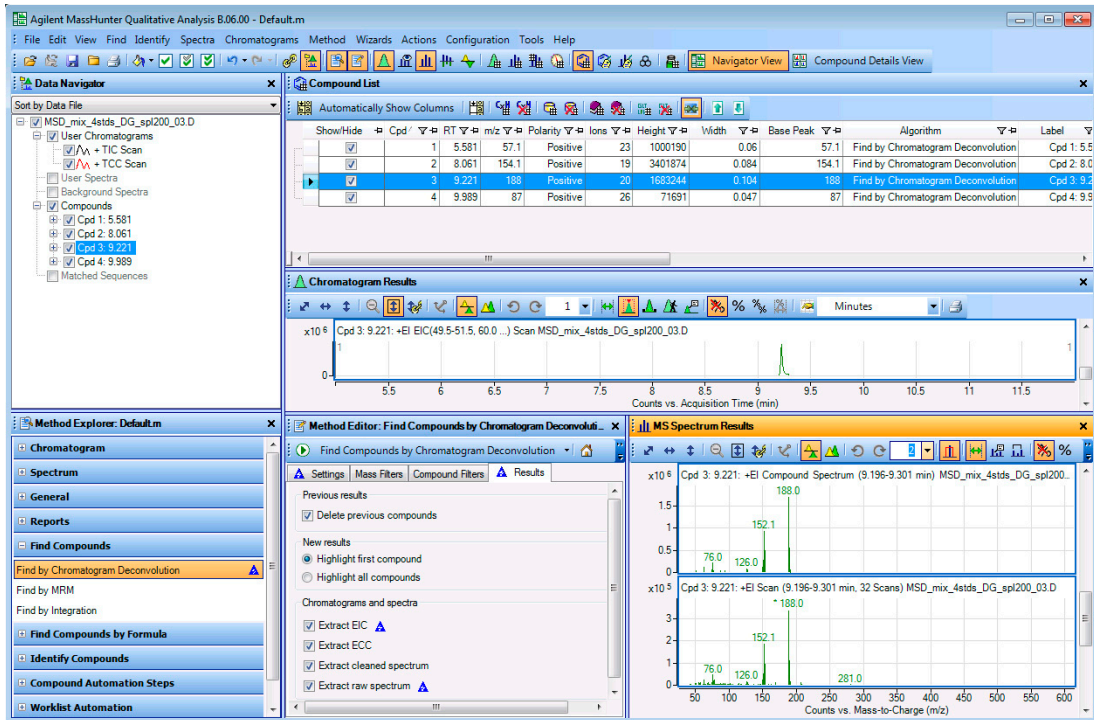


Abb. 11 Ergebnisse des Findens von Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution

2 Finden und identifizieren

Aufgabe 13. Verbindungen mit dem Search Library-Algorithmus identifizieren

Aufgabe 13. Verbindungen mit dem Search Library-Algorithmus identifizieren

In dieser Aufgabe identifizieren Sie die in „[Aufgabe 12. Verbindungen durch Chromatogrammdekonvolution finden](#)“ auf Seite 52 gefundenen Verbindungen und erzeugen Formeln für sie. Sie können diese Aufgabe ausführen, wenn Sie die Bibliothek *NIST08.l* erworben haben oder die Bibliothek *demo.l* verwenden. Wenn Sie zwei Bibliotheken besitzen, können Sie auch beide Bibliotheken auswählen.

Aufgabe 13. Verbindungen mit dem Search Library-Algorithmus identifizieren



Aufgabe 13. Verbindungen mit dem Search Library-Algorithmus identifizieren

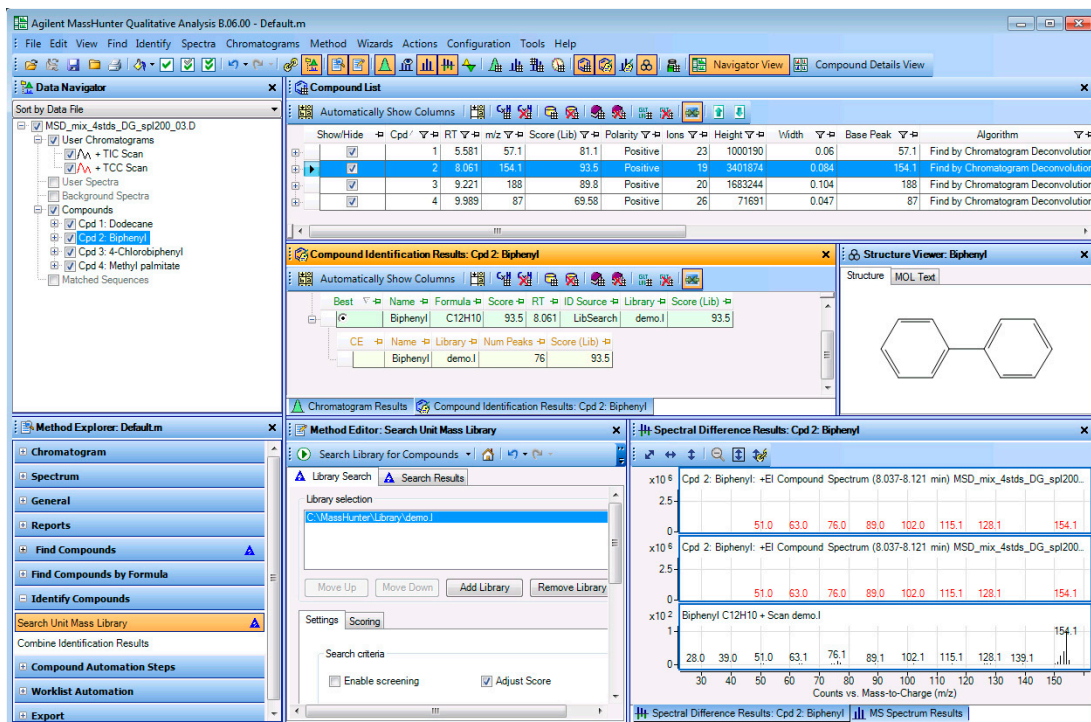
Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1	<p>Führen Sie eine Bibliothekssuche aller Verbindungen in der Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d durch.</p> <p>a Markieren Sie im Fenster Data Navigator die Verbindungen in der Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D.</p> <p>b Klicken Sie im Fenster Method Explorer auf Identify Compounds > Search Unit Mass Library.</p> <p>c Klicken Sie in der Registerkarte Settings auf die Schaltfläche Add Library. Wählen Sie die Bibliothek demo.I und klicken Sie auf die Schaltfläche OK.</p> <p>d (Optional) Klicken Sie in der Registerkarte Settings auf die Schaltfläche Add Library. Wählen Sie die Bibliothek NIST08.I und klicken Sie auf die Schaltfläche OK.</p> <p>e Klicken Sie auf die Registerkarte Search Results.</p> <p>f (Optional) Wählen Sie Stop When Found als Multi-Library search type.</p> <p>g Klicken Sie im Hauptmenü auf Identify > Search Library for Compounds. Stattdessen können Sie auf das Symbol Search Library for Compounds  klicken, um den Algorithmus auszuführen.</p> <p>h Klicken Sie auf View > Difference Results.</p> <p>i Klicken Sie auf View > Structure Viewer.</p> <p>j Klicken Sie ggf. auf View > Compound Identification Results, um dieses Fenster anzuzeigen.</p> <p>k Klicken Sie ggf. auf den Tab für das Fenster Compound Identification Results. Dieses Fenster und das Fenster Chromatogram Results sind übereinander gelegt.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Sie können auch im Method Explorer auf GC/Q-TOF Compound Screening > Identify by Library Search klicken. Derselbe Abschnitt wird im Fenster Method Editor angezeigt. Demo.I und Nist08 sollten im Ordner \MassHunter\Library installiert sein. Beachten Sie, dass viele Verbindungen nach Durchsuchen der Bibliothek NIST08.I identifiziert werden. Wenn Sie die Bibliothek NIST08.I nicht besitzen, wählen Sie eine zweite Bibliothek, falls Sie eine zur Verfügung haben. Wenn Sie mindestens zwei Bibliotheken ausgewählt haben und Stop When Found wählen, durchsucht der Bibliothekssuchalgorithmus die erste Bibliothek in der Liste. Wird die Verbindung identifiziert, stoppt er. Wird die Verbindung nicht identifiziert, durchsucht er die nächste Bibliothek, bis die Verbindung identifiziert oder die letzte Bibliothek durchsucht ist. Mit dem Programm Library Editor ändern Sie Bibliotheken, die Sie mit dem Algorithmus Search Unit Mass Library verwenden. Dieses Programm wird mit dem Programm Agilent MassHunter Quantitative Analysis installiert. Zum Starten dieses Programms klicken Sie auf das Symbol .

2 Finden und identifizieren

Aufgabe 13. Verbindungen mit dem Search Library-Algorithmus identifizieren

Aufgabe 13. Verbindungen mit dem Search Library-Algorithmus identifizieren

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
2	<p>Zeigen Sie die Spalte Spectral Library Results im Fenster Compound List und Compound Identification Results an.</p> <p>a Klicken Sie in den Symbolleisten Compound List und Compound Identification Results auf die Schaltfläche Show Library Search Columns ().</p> <p>b Klicken Sie in den Symbolleisten Compound List und Compound Identification Results auf die Schaltfläche Hide Empty Columns ().</p>	



The screenshot displays the Agilent MassHunter Qualitative Analysis 8.06.00 - Default.m interface. The main window is divided into several panes:

- Data Navigator:** Shows the project structure for MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D, including User Chromatograms, User Spectra, Background Spectra, and Compounds (Cpd 1: Dodecane, Cpd 2: Biphenyl, Cpd 3: 4-Chlorobiphenyl, Cpd 4: Methyl palmitate).
- Compound List:** A table showing search results for Cpd 2: Biphenyl. The table has columns for Cpd, RT, m/z, Score (Lib), Polarity, Ions, Height, Width, Base Peak, and Algorithm. The results are as follows:


Cpd	RT	m/z	Score (Lib)	Polarity	Ions	Height	Width	Base Peak	Algorithm
1	5.581	57.1	81.1	Positive	23	1000190	0.06	57.1	Find by Chromatogram Deconvolution
2	8.061	154.1	93.5	Positive	19	3401874	0.084	154.1	Find by Chromatogram Deconvolution
3	9.221	188	89.8	Positive	20	1683244	0.104	188	Find by Chromatogram Deconvolution
4	9.989	87	69.58	Positive	26	71691	0.047	87	Find by Chromatogram Deconvolution

- Compound Identification Results: Cpd 2: Biphenyl:** Shows the best match for Biphenyl (C12H10) with a score of 93.5 and a retention time of 8.061. The library source is LibSearch demo.1.
- Structure Viewer: Biphenyl:** Displays the chemical structure of Biphenyl (two benzene rings connected by a single bond).
- Method Explorer:** Shows the current method configuration for Search Unit Mass Library.
- Spectral Difference Results: Cpd 2: Biphenyl:** Compares the experimental mass spectrum (8.037-8.121 min) with the library reference spectrum (8.037-8.121 min) for Biphenyl. The x-axis is Counts vs. Mass-to-Charge (m/z) from 30 to 150. The y-axis is relative intensity from 0 to 2.5 x 10⁶. Key peaks are labeled at m/z 51.0, 63.0, 76.0, 89.0, 102.0, 115.1, 128.1, and 154.1.

Abb. 32 Verbindungen in der Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D und die Ergebnisse der Bibliothekssuche

Aufgabe 13. Verbindungen mit dem Search Library-Algorithmus identifizieren

Aufgabe 13. Verbindungen mit dem Search Library-Algorithmus identifizieren

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
3	<p>Wechseln Sie zur Compound Details View, um die Verbindungen zu prüfen.</p> <p>a Klicken Sie in der Hauptsymbolleiste auf  Compound Details View.</p> <p>b Schließen Sie das Fenster Compound Fragment Spectrum Results.</p>	
4	<p>Prüfen Sie die Ergebnisse in der Compound Details View.</p> <p>a Klicken Sie im Fenster Compound Chromatogram Results auf das Symbol Overlaid.</p> <p>b Blenden Sie die Ergebnisse im Fenster Compound Identification Results ein.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Weitere Informationen zur Compound Details View finden Sie in der Online-Hilfe. Die Compound Details View ist sehr hilfreich, wenn Sie die Ergebnisse des Find by Formula-Algorithmus mit einer im All Ions-Modus erfassten Datendatei betrachten.

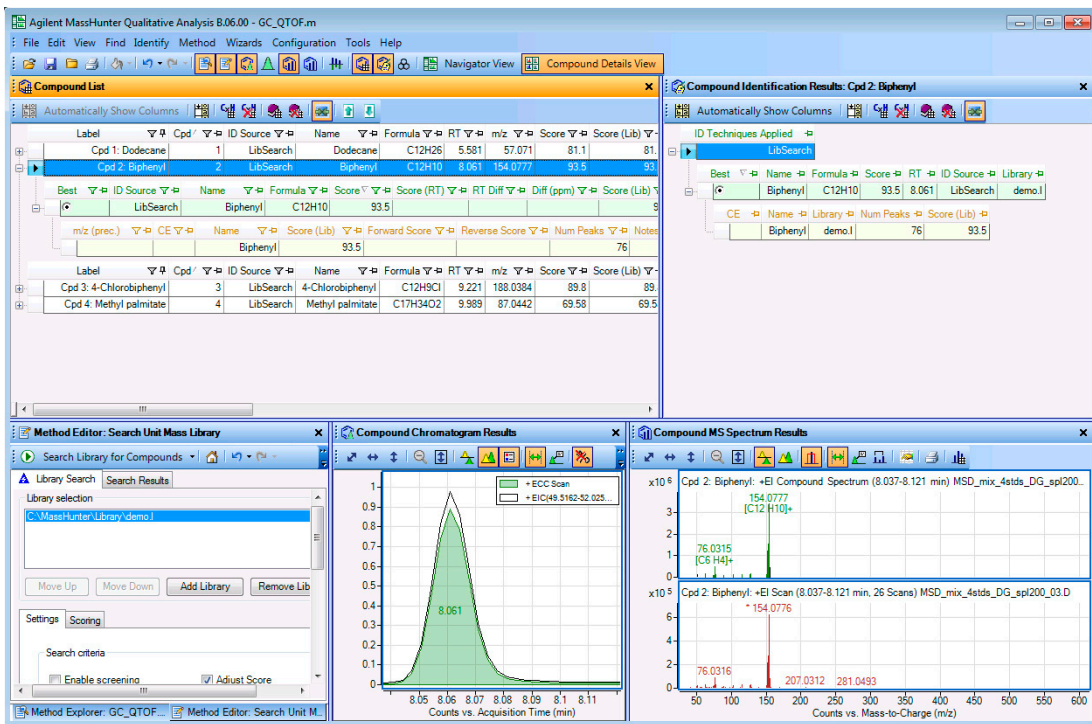



Abb. 33 Compound Details View mit Verbindungen in Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D

2 Finden und identifizieren

Aufgabe 13. Verbindungen mit dem Search Library-Algorithmus identifizieren

Aufgabe 13. Verbindungen mit dem Search Library-Algorithmus identifizieren

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
5 Wechseln Sie wieder zur Navigator View.	<ul style="list-style-type: none">Klicken Sie in der Hauptsymboleiste auf die Schaltfläche  Compound Details View .	
6 Schließen Sie die Datendatei.	<ol style="list-style-type: none">Klicken Sie auf File > Close Data File.Klicken Sie auf No.	<ul style="list-style-type: none">Wenn Sie diese Ergebnisse speichern möchten, siehe „Aufgabe 17. Ergebnisse speichern“ auf Seite 74.

Aufgabe 14. Verbindungen finden durch MRM (nur MRM)

Der Find Compounds by MRM-Algorithmus identifiziert Verbindungen in MRM-Daten aus einem Triple-Quadrupol. Der Algorithmus sucht mithilfe der MRM-Übergänge nach Verbindungen. Alle Verbindungen in der Erfassungsmethode werden extrahiert und in der Compound List angezeigt. Verbindungen werden nicht auf Basis der Ergebnisse der Chromatogrammintegration eliminiert. Sie können den Find Compounds by MRM-Algorithmus nur auf Daten anwenden, die mit MRM-Übergängen erfasst wurden. Der MRM-Algorithmus nutzt Informationen, die in der Datendatei vorliegen, wenn die Datendatei eine MRM-Datendatei ist.

Aufgabe 14. Verbindungen finden durch MRM (nur MRM)

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1	<p>Öffnen Sie das TIC für die Datendatei Pest - STD 200 MRM.d.</p> <p>a Wenn das Programm nicht geöffnet ist, doppelklicken Sie auf das Symbol MassHunter Qualitative Analysis. Klicken Sie andernfalls auf File > Open Data File.</p> <p>b Klicken Sie im GC-Beispieldatendatei-Ordner auf die Datendatei Pest - STD 200 MRM.d.</p> <p>c Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Load result data und klicken Sie auf Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Beim Arbeiten mit GC/QQQ-Daten verwenden Sie den allgemeinen Arbeitsablauf. Beim Arbeiten mit GC/Q-TOF-Daten können Sie entweder den allgemeinen Arbeitsablauf oder den GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablauf verwenden.

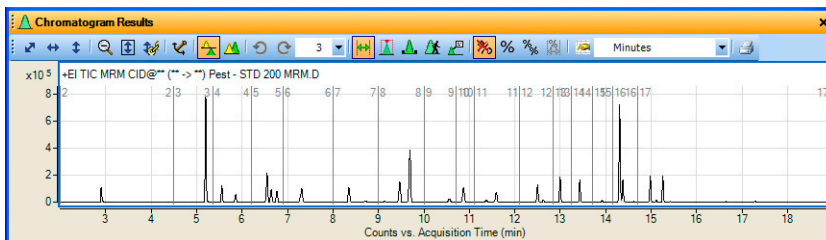


Abb. 34 TIC-Chromatogramm aus Pest - STD 200 MRM.d

- | | | |
|---|---|---|
| 2 | <p>Konfigurieren Sie die Benutzeroberfläche zum Einsatz mit GC-Daten.</p> | <ul style="list-style-type: none"> Folgen Sie den Anweisungen in „Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC/MS-Daten konfigurieren“ auf Seite 12. |
|---|---|---|

2 Finden und identifizieren

Aufgabe 14. Verbindungen finden durch MRM (nur MRM)

Aufgabe 14. Verbindungen finden durch MRM (nur MRM)

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
3 Finden Sie Verbindungen mit dem MRM-Algorithmus.	<ol style="list-style-type: none">Wählen Sie im Fenster Method Explorer die Option Find Compounds > Find by MRM.Klicken Sie auf die Schaltfläche Group transitions by compound name.Klicken Sie auf die Registerkarte Integrator.Wählen Sie den Integrator Agile.	<ul style="list-style-type: none">Sie können den Bereich des Chromatogramms auswählen, wo Sie Verbindungen finden möchten.Sie können den gesamten Ergebnissatz für eine gefundene Verbindung extrahieren, wenn Sie die Verbindung markieren und die Menüoption Compounds > Extract Complete Result Set wählen.

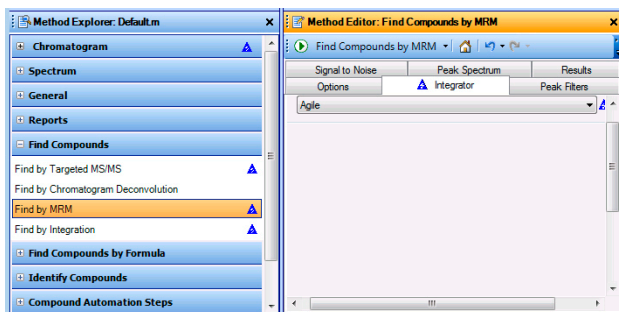



Abb. 35 Registerkarte Integrator im Abschnitt Find by MRM des Method Editor

- Klicken Sie auf , um den **Find Compounds by MRM**-Algorithmus auf die Datendatei anzuwenden.
 - Klicken Sie ggf. auf den Befehl **View > Compound List**.
 - Klicken Sie ggf. auf den Befehl **View > Compound Identification Results**.
- Das Programm zur qualitativen Analyse findet unter diesen Bedingungen 28 Verbindungen.

Aufgabe 14. Verbindungen finden durch MRM (nur MRM)

Aufgabe 14. Verbindungen finden durch MRM (nur MRM)

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
4	<p>Untersuchen Sie die Verbindungen. Siehe Abbildung 36 auf Seite 63.</p> <p>a Wählen Sie in der Symbolleiste MS Spectrum Results im Feld Maximum number of list panes den Wert 2.</p> <p>b Klicken Sie in den Fenstern Compound List und Compound Identification Results auf das Symbol Automatically Show Columns.</p> <p>c Klicken Sie im Fenster Data Navigator auf die erste Verbindung.</p> <p>d Wenn das Fenster Data Navigator ausgewählt ist, wechseln Sie die Verbindungen mit den Pfeiltasten.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Das Präkursor-Ion wird in der Spalte Precursor (Acq Method) und das Produkt-Ion in der Spalte Product (Acq Method) im Fenster Compound Identification Results angezeigt.

The screenshot shows the Agilent MassHunter software interface. The 'Data Navigator' on the left lists various compounds, with 'Cpd 6: Carbolfuran' selected. The 'Compound List' window displays a table of compounds with the following data:

Show/Hide	Cpd	ID Source	Name	RT	m/z	Polarity	Height	Width	m/z (prod.)	CE	Algorithm
<input checked="" type="checkbox"/>	3	Acq	triflualin	5.863	306	Positive	57386	0.184	264	10	MF
<input checked="" type="checkbox"/>	4	Acq	chlorpropham	5.56	213	Positive	76755	0.143	171	5	MF
<input checked="" type="checkbox"/>	5	Acq	BHC Beta	6.645	219	Positive	65588	0.122	183	10	MF
<input checked="" type="checkbox"/>	6	Acq	Carbolfuran	6.554	154	Positive	154510	0.191	149	10	MF
<input checked="" type="checkbox"/>	7	Acq	diazinon	7.288	304	Positive	45147	0.17	179	15	MF

The 'Compound Identification Results' window for 'Cpd 6: Carbolfuran' shows the following table:

Score (Acq)	Precursor (Acq)	Find by MRM Product Ion	Best	Name	Score	RT	ID Source
100	164	149	✓	Carbolfuran	100	6.554	Acq

The 'MS Spectrum Results' window displays the mass spectrum for 'Cpd 6: Carbolfuran' with peaks at m/z 131, 149, and 183. The x-axis is labeled 'Counts vs. Mass-to-Charge (m/z)' and the y-axis is labeled 'x10^4'.

Abb. 36 Finden durch MRM-Ergebnisse

2 Finden und identifizieren

Aufgabe 14. Verbindungen finden durch MRM (nur MRM)

Aufgabe 14. Verbindungen finden durch MRM (nur MRM)

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
5 Schließen Sie die Datendatei.	<ul style="list-style-type: none">a Klicken Sie auf File > Close Data File.b Klicken Sie auf Close.	<ul style="list-style-type: none">• Wenn Sie diese Ergebnisse speichern möchten, siehe „Aufgabe 17. Ergebnisse speichern“ auf Seite 74.

Aufgabe 15. Verbindungen durch Integration finden

Der Find Compounds by Integration-Algorithmus identifiziert Verbindungen auf Basis der Integrationsergebnisse. Eine Verbindung wird für jeden Peak erstellt, der vom Integrator identifiziert wird.

Aufgabe 15. Verbindungen durch Integration finden

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1 Öffnen Sie das TIC für die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d .	<p>a Wenn das Programm nicht geöffnet ist, doppelklicken Sie auf das Symbol MassHunter Qualitative Analysis. Klicken Sie andernfalls auf File > Open Data File.</p> <p>b Klicken Sie im GC-Beispieldatendatei-Ordner auf die Datendatei Pest - STD 200 MRM.d.</p> <p>c Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Load result data und klicken Sie auf Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Beim Arbeiten mit GC/QQQ-Daten verwenden Sie den allgemeinen Arbeitsablauf. Beim Arbeiten mit GC/Q-TOF-Daten können Sie entweder den allgemeinen Arbeitsablauf oder den GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablauf verwenden.

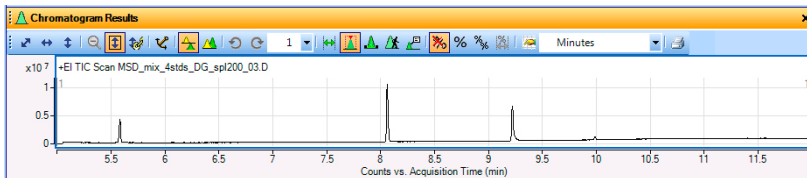


Abb. 37 TIC-Chromatogramm aus MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d

2 Konfigurieren Sie die Benutzeroberfläche zum Einsatz mit GC-Daten.	<ul style="list-style-type: none"> Folgen Sie den Anweisungen in „Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC/MS-Daten konfigurieren“ auf Seite 12. 	
3 Finden Sie Verbindungen mit dem Integrationsalgorithmus.	<p>a Wählen Sie im Fenster Method Explorer die Option Find Compounds > Find by Integration.</p> <p>b Wählen Sie den Integrator MS/MS (GC).</p>	<ul style="list-style-type: none"> Sie können den Bereich des Chromatogramms auswählen, wo Sie Verbindungen finden möchten. Sie können den gesamten Ergebnissatz für eine gefundene Verbindung extrahieren, wenn Sie die Verbindung markieren und die Menüoption Compounds > Extract Complete Result Set wählen.

2 Finden und identifizieren

Aufgabe 15. Verbindungen durch Integration finden

Aufgabe 15. Verbindungen durch Integration finden

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
---------	--------------------------	-------------

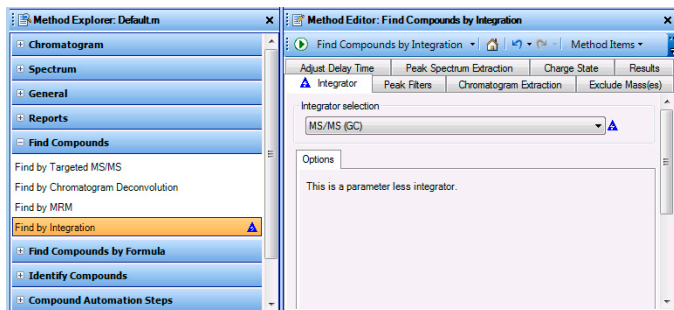

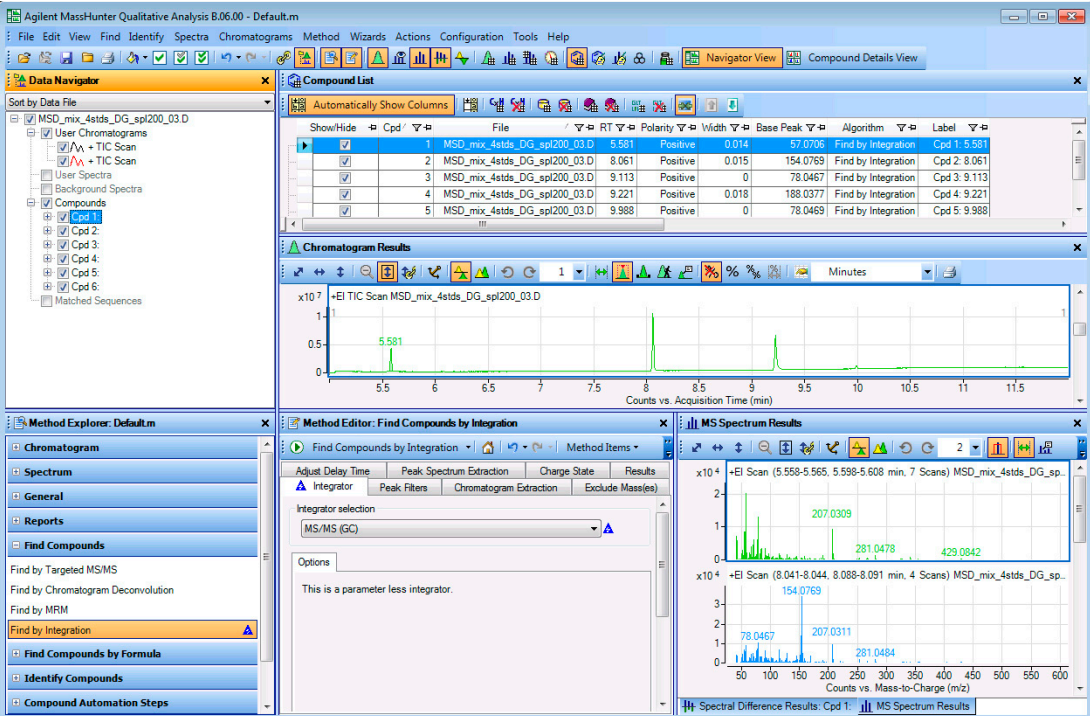


Abb. 38 Registerkarte Integrator im Abschnitt Find by Integration des Method Editor

- c** Klicken Sie auf  um den **Find Compounds by Integration**-Algorithmus auf die Datendatei anzuwenden.
 - d** Klicken Sie ggf. auf den Befehl **View > Compound List**.
- 4** Untersuchen Sie die Verbindungen. Siehe [Abbildung 36](#) auf Seite 63.
- a** Wählen Sie in der Symbolleiste MS Spectrum Results im Feld **Maximum number of list panes** den Wert **2**.
 - b** Klicken Sie im Fenster Compound List auf das Symbol **Automatically Show Columns**.
 - c** Klicken Sie im Fenster Data Navigator auf die erste Verbindung.
 - d** Wenn das Fenster Data Navigator ausgewählt ist, wechseln Sie die Verbindungen mit den Pfeiltasten.
- Das Programm zur qualitativen Analyse findet unter diesen Bedingungen 6 Verbindungen.

Aufgabe 15. Verbindungen durch Integration finden

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
		
Abb. 39	Finden durch Integrationsergebnisse	
5	Schließen Sie die Datendatei. <ul style="list-style-type: none"> a Klicken Sie auf File > Close Data File. b Klicken Sie auf Close. 	
		<ul style="list-style-type: none"> • Wenn Sie diese Ergebnisse speichern möchten, siehe „Aufgabe 17. Ergebnisse speichern“ auf Seite 74.

2 Finden und identifizieren

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen





In dieser Aufgabe integrieren und extrahieren Sie zuerst Peak-Spektren aus einer GC/Q-TOF-Datendatei. Dann erzeugen Sie für jedes der Peak-Spektren mögliche Formeln.

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1 Öffnen Sie das TIC für die Datendatei MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d .	<ul style="list-style-type: none">a Wenn das Programm nicht geöffnet ist, doppelklicken Sie auf das Symbol MassHunter Qualitative Analysis. Klicken Sie andernfalls auf File > Open Data File.b Klicken Sie im GC-Beispieldatendatei-Ordner auf die Datendatei MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d.c Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Load result data und klicken Sie auf Open.	<ul style="list-style-type: none">• Wenn das Kontrollkästchen Load result data nicht verfügbar ist, wurden keine Ergebnisse in der Datendatei gespeichert. Anweisungen zum Speichern von Ergebnissen siehe „Aufgabe 17. Ergebnisse speichern“ auf Seite 74.
2 Integrieren und extrahieren Sie Peak-Spektren.	<ul style="list-style-type: none">a Klicken Sie im Fenster Method Explorer auf den Abschnitt Chromatogram > Integrate (MS).b Klicken Sie auf die Registerkarte Peak Filters.c Klicken Sie auf die Schaltfläche Peak height.d Markieren Sie das Kontrollkästchen Relative height.e Markieren Sie das Kontrollkästchen Limit (by height) to the largest und geben Sie 4 ein.f Klicken Sie auf Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra.	

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>3 Erzeugen Sie Formeln für jedes der Peak-Spektren.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Zeigen Sie die Spectrum Identification Results List an. • Schließen Sie das Fenster MS Spectrum Results. <p>Hinweis: Um dieselben Ergebnisse wie in Abb. 41 zu erhalten, achten Sie darauf, dass Sie Common organic molecules als Isotope model gewählt haben.</p>	<p>a Klicken Sie im Fenster Method Explorer auf Identify Compounds > Generate Formulas.</p> <p>b Klicken Sie im Fenster Method Editor auf die Registerkarte Charge State und wählen Sie Common organic molecules als Isotope model.</p> <p>c Markieren Sie im Fenster Data Navigator alle Spektren im Abschnitt User Spectra.</p> <p>d Klicken Sie auf den Befehl Identify > Generate Formulas from Spectrum Peaks oder die Schaltfläche Generate Formulas from Spectrum Peaks  um den Algorithmus auszuführen.</p> <p>e Klicken Sie ggf. auf das Symbol Spectrum Identification Results  oder den Befehl View > Spectrum Identification Results.</p> <p>f Klicken Sie in der Symbolleiste des Fensters Spectrum Identification Results auf die Schaltfläche Automatically Show Columns.</p> <p>g Klicken Sie im Fenster Spectrum Identification Results auf das Symbol Hide Empty Columns .</p> <p>h Wählen Sie C6 H13 als bestes Ergebnis (Best).</p> <p>i Blenden Sie die Tabelle für diese Zeile ein.</p> <p>j Schließen Sie das Fenster Method Editor.</p> <p>k Prüfen Sie die Formeln und Ionenarten, die über vielen Peaks im Fenster MS Spectrum Results angezeigt werden. Alle Formeln und Ionenarten haben dieselbe Farbe wie das Spektrum.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Sie können die vorhergesagten Isotopenhäufigkeitsverhältnisse im Spektrumplot sehen, wenn Sie auf das entsprechende m/z zoomen. Weitere Informationen finden Sie in der Online-Hilfe. • Das Symbol Run  in der Symbolleiste Method Editor ermöglicht Ihnen manchmal, eine Aktion aus einem Satz möglicher Aktionen auszuwählen. Beispielsweise sind zwei verschiedene Aktionen möglich, wenn Sie in diesem Abschnitt auf das Symbol Run klicken. Wenn Sie auf den Pfeil klicken, wird eine Liste möglicher Aktionen angezeigt, und Sie können wählen, welche Aktion ausgeführt werden soll. Bei Auswahl einer anderen Aktion aus der Liste ändert sich die Standardaktion. Wenn Sie einfach auf die Schaltfläche Run klicken, wird die Standardaktion ausgeführt. • Sie können die Breite einer Spalte ändern, indem Sie die Linie ziehen, die benachbarte Spalten trennt. • Sie können eine Spalte durch Ziehen des Spaltenkopfes verschieben. • Sie können eine Spalte löschen, indem Sie in der Tabelle im Kontextmenü auf Remove column klicken.

2 Finden und identifizieren

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen

Schritt

Ausführliche Anweisungen

Anmerkungen

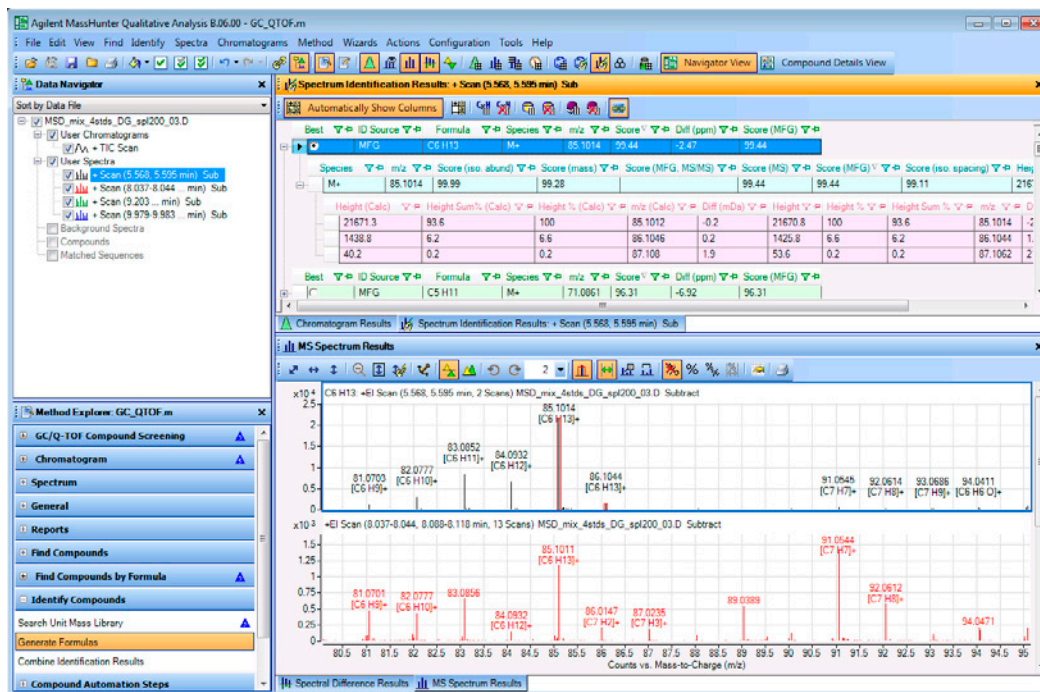


Abb. 40 Formelergbnisse für Peaks 1 bis 4 erzeugen


4 Führen Sie eine Bibliothekssuche für die Peak-Spektren 1 bis 4 durch.

- Klicken Sie im Fenster Data Navigator auf **User Spectra**.
- Klicken Sie im Fenster Method Explorer auf **Identify Compounds > Search Unit Mass Library**.
- Achten Sie darauf, dass eine gültige Bibliothek ausgewählt ist.
- Klicken Sie im Hauptmenü auf **Identify > Search Library for Spectra**.
- Schließen Sie das Fenster Method Editor.

• Der Method Editor wird automatisch geöffnet, wenn Sie auf einen Abschnitt im Method Explorer klicken.

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
5	<p>Ändern Sie die sichtbaren Spalten.</p> <p>a Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Fenster Spectrum Identification Results und klicken Sie auf Add/Remove Columns. Markieren Sie im Dialogfeld (Enhanced) Add/Remove Columns die Spalten, die Sie anzeigen möchten. Klicken Sie auf OK.</p> <p>b Schließen Sie das Fenster Method Editor.</p> <p>c Klicken Sie im Fenster Spectrum Identification Results auf das Symbol Hide Empty Columns .</p> <p>d Prüfen Sie die Formeln und Ionenarten, die über jedem Peak im Fenster MS Spectrum Results angezeigt werden.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Wenn Sie den Befehl Remove Column verwenden und eine Daten enthaltende Spalte entfernen, zeigt die Software diese Spalte automatisch neu an, wenn die Funktion Automatically Show Columns aktiviert ist. • Der LibSearch-Algorithmus wird im Abschnitt Combine Identification Results der Methode stark gewichtet. Sie können das beste MFG-Ergebnis manuell wählen oder die Art ändern, in der Identifizierungsergebnisse kombiniert werden.

2 Finden und identifizieren

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
---------	--------------------------	-------------

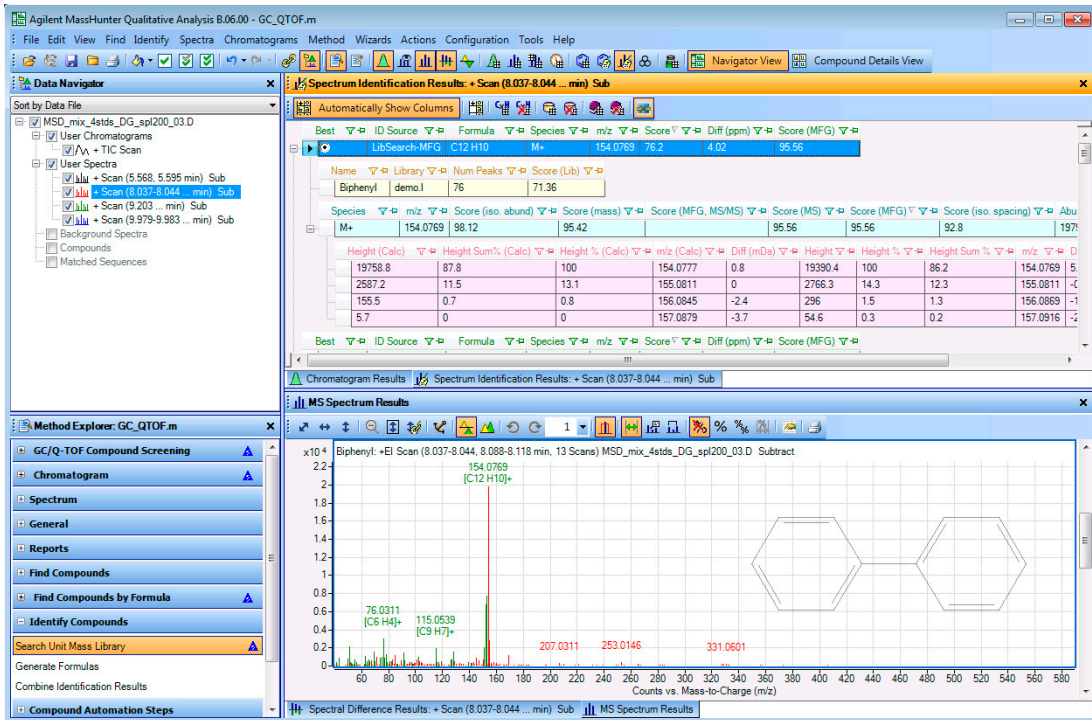


Abb. 41 Ergebnisse für Bibliothekssuche und Erzeugen von Formeln für die ersten Peak-Spektren

6 Prüfen Sie die Ergebnisse für jedes Spektrum im Fenster MS Peaks One.

- Klicken Sie auf **View > MS Spectrum Peak List 1**.
- Klicken Sie mit der rechten Maustaste und klicken Sie auf Add/Remove Columns.
- Achten Sie darauf, dass die in [Abb. 42](#) gezeigten Spalten in der Liste **Show these columns** enthalten sind.
- Sortieren Sie nach der Spalte **Ion Type**.
- Wenn Ion Type den Inhalt Fragment Ion hat, werden die Formula & Ion Species im Fenster MS Spectrum Results in Grün über jedem Peak angezeigt.

- Die Fragmentationen werden im Fenster MS Spectrum Results in Grün angezeigt
- Ion Type** kann den Inhalt Molecular Ion oder Fragment Ion haben oder leer sein. Im Falle von Fragment Ion zeigen die Spalten Loss Formula und Loss Mass die Formeln und Masse an, mit denen vom Molekular-Ion aus dieses Ion ermittelt wird. Die Spalte Formula & Ion Species zeigt die Formeln und Ionenarten für dieses Ion an.

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen

Aufgabe 16. Formeln erzeugen und Bibliothek nach Peak-Spektren durchsuchen

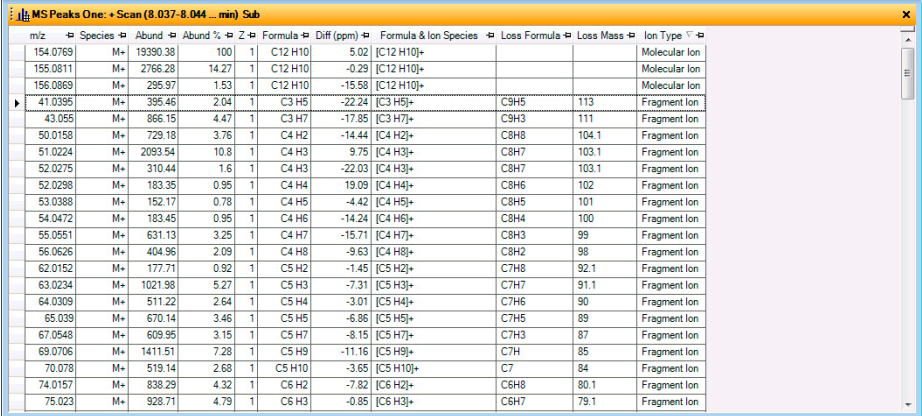
Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen																																																																																																																																																																																																																																																													
 <table border="1"> <thead> <tr> <th>m/z</th> <th>Species</th> <th>Abund</th> <th>Abund %</th> <th>Z</th> <th>Formula</th> <th>Diff (ppm)</th> <th>Formula & Ion Species</th> <th>Loss Formula</th> <th>Loss Mass</th> <th>Ion Type</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>154.0769</td><td>M+</td><td>19390.38</td><td>100</td><td>1</td><td>C12 H10</td><td>5.02</td><td>[C12 H10]+</td><td></td><td></td><td>Molecular Ion</td></tr> <tr><td>155.0811</td><td>M+</td><td>2766.28</td><td>14.27</td><td>1</td><td>C12 H10</td><td>-0.29</td><td>[C12 H10]+</td><td></td><td></td><td>Molecular Ion</td></tr> <tr><td>156.0869</td><td>M+</td><td>295.97</td><td>1.53</td><td>1</td><td>C12 H10</td><td>-15.58</td><td>[C12 H10]+</td><td></td><td></td><td>Molecular Ion</td></tr> <tr><td>41.0395</td><td>M+</td><td>395.46</td><td>2.04</td><td>1</td><td>C3 H5</td><td>-22.24</td><td>[C3 H5]+</td><td>C9H5</td><td>113</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>43.055</td><td>M+</td><td>866.15</td><td>4.47</td><td>1</td><td>C3 H7</td><td>-17.85</td><td>[C3 H7]+</td><td>C9H3</td><td>111</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>50.0158</td><td>M+</td><td>729.18</td><td>3.76</td><td>1</td><td>C4 H2</td><td>-14.44</td><td>[C4 H2]+</td><td>C8H8</td><td>104.1</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>51.0224</td><td>M+</td><td>2093.54</td><td>10.8</td><td>1</td><td>C4 H3</td><td>9.75</td><td>[C4 H3]+</td><td>C8H7</td><td>103.1</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>52.0275</td><td>M+</td><td>310.44</td><td>1.6</td><td>1</td><td>C4 H3</td><td>-22.03</td><td>[C4 H3]+</td><td>C8H7</td><td>103.1</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>52.0298</td><td>M+</td><td>183.35</td><td>0.95</td><td>1</td><td>C4 H4</td><td>19.09</td><td>[C4 H4]+</td><td>C8H6</td><td>102</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>53.0388</td><td>M+</td><td>152.17</td><td>0.78</td><td>1</td><td>C4 H5</td><td>-4.42</td><td>[C4 H5]+</td><td>C8H5</td><td>101</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>54.0472</td><td>M+</td><td>183.45</td><td>0.95</td><td>1</td><td>C4 H6</td><td>-14.24</td><td>[C4 H6]+</td><td>C8H4</td><td>100</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>55.0551</td><td>M+</td><td>631.13</td><td>3.25</td><td>1</td><td>C4 H7</td><td>-15.71</td><td>[C4 H7]+</td><td>C8H3</td><td>99</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>56.0626</td><td>M+</td><td>404.96</td><td>2.09</td><td>1</td><td>C4 H8</td><td>-9.63</td><td>[C4 H8]+</td><td>C8H2</td><td>98</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>62.0152</td><td>M+</td><td>177.71</td><td>0.92</td><td>1</td><td>C5 H2</td><td>-1.45</td><td>[C5 H2]+</td><td>C7H8</td><td>92.1</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>63.0234</td><td>M+</td><td>1021.98</td><td>5.27</td><td>1</td><td>C5 H3</td><td>-7.31</td><td>[C5 H3]+</td><td>C7H7</td><td>91.1</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>64.0309</td><td>M+</td><td>511.22</td><td>2.64</td><td>1</td><td>C5 H4</td><td>-3.01</td><td>[C5 H4]+</td><td>C7H6</td><td>90</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>65.039</td><td>M+</td><td>670.14</td><td>3.46</td><td>1</td><td>C5 H5</td><td>-6.86</td><td>[C5 H5]+</td><td>C7H5</td><td>89</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>67.0548</td><td>M+</td><td>609.95</td><td>3.15</td><td>1</td><td>C5 H7</td><td>-8.15</td><td>[C5 H7]+</td><td>C7H3</td><td>87</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>69.0706</td><td>M+</td><td>1411.51</td><td>7.28</td><td>1</td><td>C5 H9</td><td>-11.16</td><td>[C5 H9]+</td><td>C7H</td><td>85</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>70.078</td><td>M+</td><td>519.14</td><td>2.68</td><td>1</td><td>C5 H10</td><td>-3.65</td><td>[C5 H10]+</td><td>C7</td><td>84</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>74.0157</td><td>M+</td><td>838.29</td><td>4.32</td><td>1</td><td>C6 H2</td><td>-7.82</td><td>[C6 H2]+</td><td>C6H8</td><td>80.1</td><td>Fragment Ion</td></tr> <tr><td>75.023</td><td>M+</td><td>928.71</td><td>4.79</td><td>1</td><td>C6 H3</td><td>-0.85</td><td>[C6 H3]+</td><td>C6H7</td><td>79.1</td><td>Fragment Ion</td></tr> </tbody> </table>			m/z	Species	Abund	Abund %	Z	Formula	Diff (ppm)	Formula & Ion Species	Loss Formula	Loss Mass	Ion Type	154.0769	M+	19390.38	100	1	C12 H10	5.02	[C12 H10]+			Molecular Ion	155.0811	M+	2766.28	14.27	1	C12 H10	-0.29	[C12 H10]+			Molecular Ion	156.0869	M+	295.97	1.53	1	C12 H10	-15.58	[C12 H10]+			Molecular Ion	41.0395	M+	395.46	2.04	1	C3 H5	-22.24	[C3 H5]+	C9H5	113	Fragment Ion	43.055	M+	866.15	4.47	1	C3 H7	-17.85	[C3 H7]+	C9H3	111	Fragment Ion	50.0158	M+	729.18	3.76	1	C4 H2	-14.44	[C4 H2]+	C8H8	104.1	Fragment Ion	51.0224	M+	2093.54	10.8	1	C4 H3	9.75	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion	52.0275	M+	310.44	1.6	1	C4 H3	-22.03	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion	52.0298	M+	183.35	0.95	1	C4 H4	19.09	[C4 H4]+	C8H6	102	Fragment Ion	53.0388	M+	152.17	0.78	1	C4 H5	-4.42	[C4 H5]+	C8H5	101	Fragment Ion	54.0472	M+	183.45	0.95	1	C4 H6	-14.24	[C4 H6]+	C8H4	100	Fragment Ion	55.0551	M+	631.13	3.25	1	C4 H7	-15.71	[C4 H7]+	C8H3	99	Fragment Ion	56.0626	M+	404.96	2.09	1	C4 H8	-9.63	[C4 H8]+	C8H2	98	Fragment Ion	62.0152	M+	177.71	0.92	1	C5 H2	-1.45	[C5 H2]+	C7H8	92.1	Fragment Ion	63.0234	M+	1021.98	5.27	1	C5 H3	-7.31	[C5 H3]+	C7H7	91.1	Fragment Ion	64.0309	M+	511.22	2.64	1	C5 H4	-3.01	[C5 H4]+	C7H6	90	Fragment Ion	65.039	M+	670.14	3.46	1	C5 H5	-6.86	[C5 H5]+	C7H5	89	Fragment Ion	67.0548	M+	609.95	3.15	1	C5 H7	-8.15	[C5 H7]+	C7H3	87	Fragment Ion	69.0706	M+	1411.51	7.28	1	C5 H9	-11.16	[C5 H9]+	C7H	85	Fragment Ion	70.078	M+	519.14	2.68	1	C5 H10	-3.65	[C5 H10]+	C7	84	Fragment Ion	74.0157	M+	838.29	4.32	1	C6 H2	-7.82	[C6 H2]+	C6H8	80.1	Fragment Ion	75.023	M+	928.71	4.79	1	C6 H3	-0.85	[C6 H3]+	C6H7	79.1	Fragment Ion
m/z	Species	Abund	Abund %	Z	Formula	Diff (ppm)	Formula & Ion Species	Loss Formula	Loss Mass	Ion Type																																																																																																																																																																																																																																																					
154.0769	M+	19390.38	100	1	C12 H10	5.02	[C12 H10]+			Molecular Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
155.0811	M+	2766.28	14.27	1	C12 H10	-0.29	[C12 H10]+			Molecular Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
156.0869	M+	295.97	1.53	1	C12 H10	-15.58	[C12 H10]+			Molecular Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
41.0395	M+	395.46	2.04	1	C3 H5	-22.24	[C3 H5]+	C9H5	113	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
43.055	M+	866.15	4.47	1	C3 H7	-17.85	[C3 H7]+	C9H3	111	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
50.0158	M+	729.18	3.76	1	C4 H2	-14.44	[C4 H2]+	C8H8	104.1	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
51.0224	M+	2093.54	10.8	1	C4 H3	9.75	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
52.0275	M+	310.44	1.6	1	C4 H3	-22.03	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
52.0298	M+	183.35	0.95	1	C4 H4	19.09	[C4 H4]+	C8H6	102	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
53.0388	M+	152.17	0.78	1	C4 H5	-4.42	[C4 H5]+	C8H5	101	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
54.0472	M+	183.45	0.95	1	C4 H6	-14.24	[C4 H6]+	C8H4	100	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
55.0551	M+	631.13	3.25	1	C4 H7	-15.71	[C4 H7]+	C8H3	99	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
56.0626	M+	404.96	2.09	1	C4 H8	-9.63	[C4 H8]+	C8H2	98	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
62.0152	M+	177.71	0.92	1	C5 H2	-1.45	[C5 H2]+	C7H8	92.1	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
63.0234	M+	1021.98	5.27	1	C5 H3	-7.31	[C5 H3]+	C7H7	91.1	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
64.0309	M+	511.22	2.64	1	C5 H4	-3.01	[C5 H4]+	C7H6	90	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
65.039	M+	670.14	3.46	1	C5 H5	-6.86	[C5 H5]+	C7H5	89	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
67.0548	M+	609.95	3.15	1	C5 H7	-8.15	[C5 H7]+	C7H3	87	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
69.0706	M+	1411.51	7.28	1	C5 H9	-11.16	[C5 H9]+	C7H	85	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
70.078	M+	519.14	2.68	1	C5 H10	-3.65	[C5 H10]+	C7	84	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
74.0157	M+	838.29	4.32	1	C6 H2	-7.82	[C6 H2]+	C6H8	80.1	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					
75.023	M+	928.71	4.79	1	C6 H3	-0.85	[C6 H3]+	C6H7	79.1	Fragment Ion																																																																																																																																																																																																																																																					

Abb. 42 Tabelle MS Peaks One mit den Spalten **Ion Type**, **Loss Formula**, **Loss Mass** und **Formula & Ion Species**

- 7** (Optional) Schließen Sie die Datendatei.
- Sie können mit der nächsten Aufgabe fortfahren, um das Speichern von Ergebnissen zu lernen.
 - **a** Klicken Sie auf **File > Close Data File**.
 - **b** Klicken Sie auf **Close**.
 - Wenn Sie diese Ergebnisse speichern möchten, siehe „Aufgabe 17. Ergebnisse speichern“ auf Seite 74.

Aufgabe 17. Ergebnisse speichern

In dieser Aufgabe speichern Sie die Ergebnisse für die aktuelle Datendatei.

Aufgabe 17. Ergebnisse speichern

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1 Speichern Sie die Ergebnisse für die aktuelle Datendatei und schließen Sie die Datei.	<p>a Klicken Sie auf File > Save Results.</p> <p>b Klicken Sie auf File > Close Data File.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Sie können nur einen Satz von Ergebnissen mit einer Datendatei speichern. Wenn Sie bereits Ergebnisse mit der aktuellen Datendatei gespeichert haben, werden diese Ergebnisse überschrieben, wenn Sie auf File > Save Results klicken.
2 Öffnen Sie die Datendatei und laden Sie die Ergebnisse.	<p>a Klicken Sie auf File > Open Data File. Das Dialogfeld Open Data File wird geöffnet.</p> <p>b Wählen Sie eine Datendatei. Wählen Sie für dieses Beispiel die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>c Markieren Sie das Kontrollkästchen Load result data.</p> <p>d Klicken Sie auf die Schaltfläche Open.</p>	

Aufgabe 17. Ergebnisse speichern

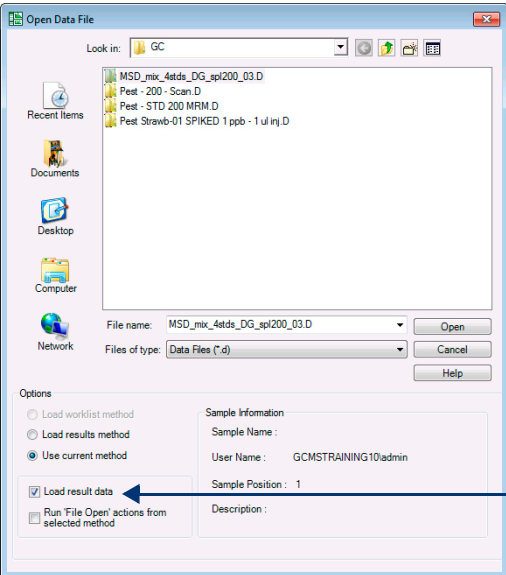
Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
	<p>Das Kontrollkästchen Load result data ist markiert.</p>	

Abb. 43 Dialogfeld Open Data File

- 3 Untersuchen Sie die Ergebnisse.
- a Klicken Sie auf das Fenster **Spectrum Identification Results**.
 - b Prüfen Sie die Ergebnisse.

2 Finden und identifizieren

Aufgabe 17. Ergebnisse speichern

Aufgabe 17. Ergebnisse speichern

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
---------	--------------------------	-------------

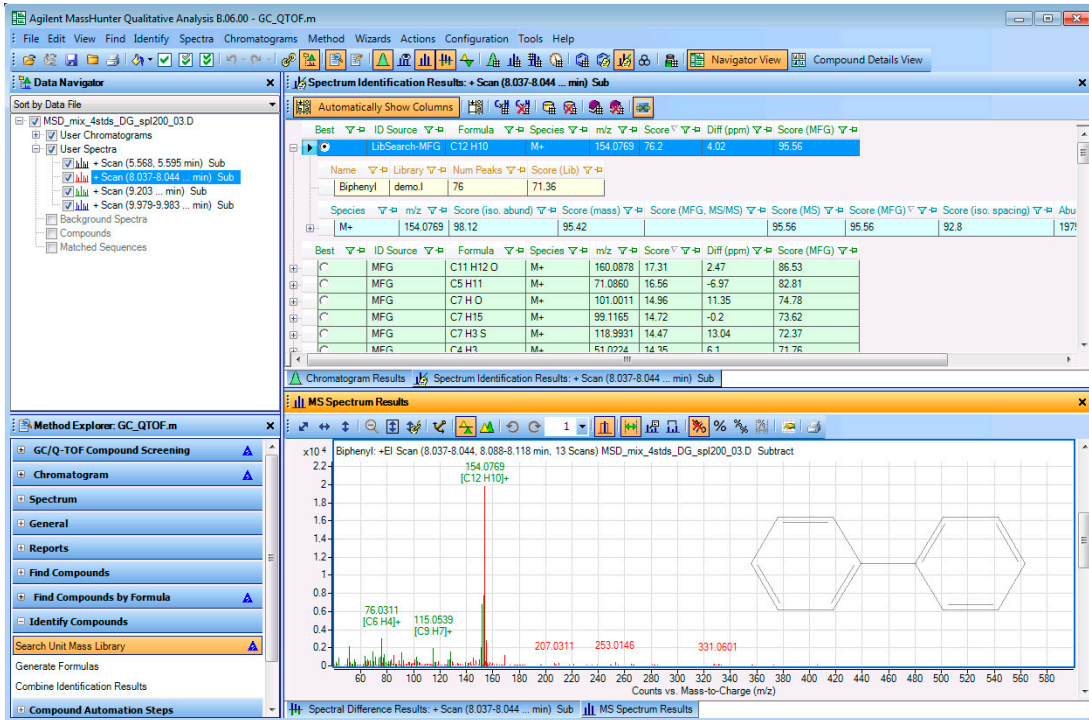


Abb. 44 Ergebnisse für Bibliothekssuche und Erzeugen von Formeln für die ersten Peak-Spektren

- | | | |
|--|--|---|
| <p>4 Schließen Sie die Datendatei.</p> | <p>a Klicken Sie auf File > Close Data File.</p> <p>b Klicken Sie auf Close.</p> | |
| <p>5 Öffnen Sie die Datendatei erneut und laden Sie die Ergebnisse nicht.</p> | <p>a Klicken Sie auf File > Open. Das Dialogfeld Open Data File wird geöffnet.</p> <p>b Wählen Sie eine Datendatei. Wählen Sie für dieses Beispiel die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>c Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Load result data.</p> <p>d Klicken Sie auf die Schaltfläche Open.</p> | <ul style="list-style-type: none"> Wenn Sie keine Ergebnisse laden, wird standardmäßig ein TIC geöffnet, wenn Sie eine Datendatei öffnen. Wenn Sie das Kontrollkästchen Run 'File Open' actions from selected method markieren, werden stattdessen die Dateiöffnungsaktionen ausgeführt. Weitere Informationen finden Sie in der Online-Hilfe. |

Aufgabe 17. Ergebnisse speichern

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
Abb. 45	Ergebnisse für Bibliothekssuche und Erzeugen von Formeln für die ersten Peak-Spektren	
6	Schließen Sie die Datendatei. a Klicken Sie auf File > Close Data File. b Klicken Sie auf Close.	

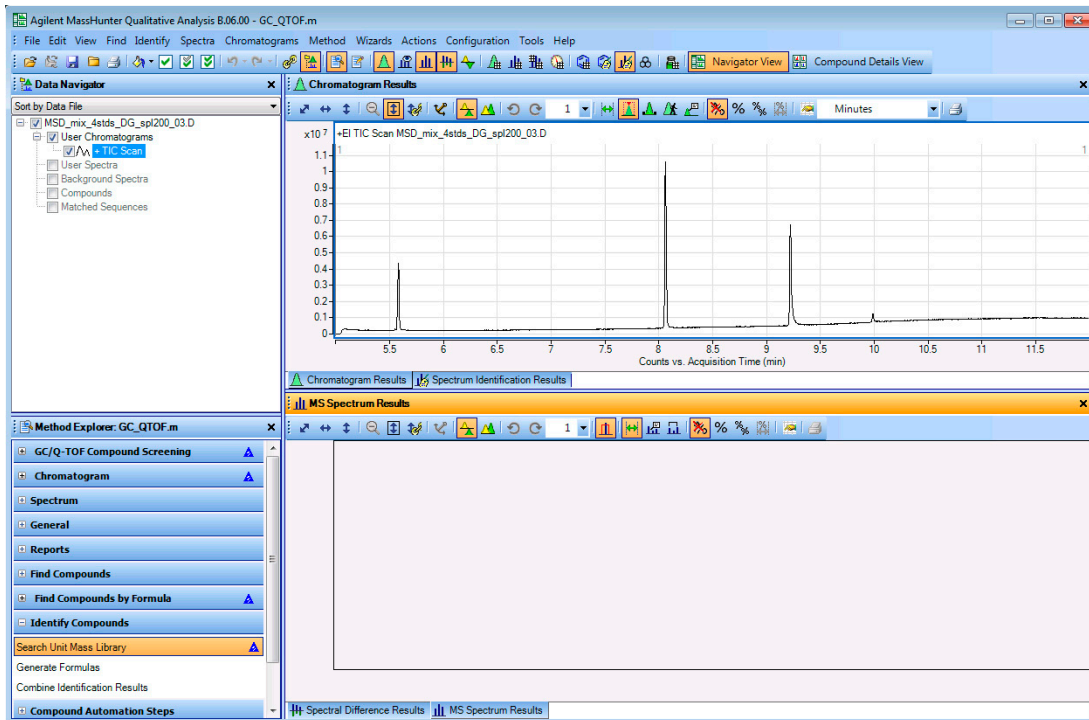
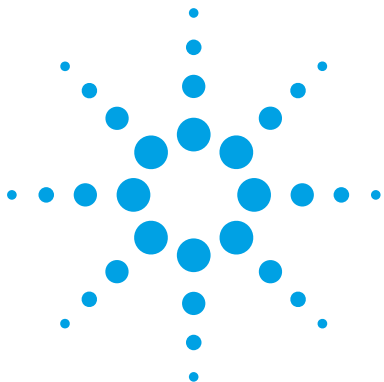


Abb. 45 Ergebnisse für Bibliothekssuche und Erzeugen von Formeln für die ersten Peak-Spektren

- 6** Schließen Sie die Datendatei.
- a Klicken Sie auf **File > Close Data File.**
 - b Klicken Sie auf **Close.**

2 Finden und identifizieren

Aufgabe 17. Ergebnisse speichern



3 Verwenden von Workflows, Exportieren und Drucken

- Aufgabe 18. Qualitative Analyse mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen 80
- Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen 86
- Aufgabe 20. CEF-Datei exportieren 90
- Aufgabe 21. Analysebericht drucken 92
- Aufgabe 22. Verbindungsbericht drucken 95

Im Rahmen dieser Aufgaben lernen Sie, wie Sie eine qualitative Analysemethode einrichten und ausführen. Anschließend öffnen Sie eine Datendatei, um die Aktionen innerhalb der automatisierten Methode auszuführen.

Für diese Beispiele werden zwei verschiedene Arbeitsabläufe verwendet. Weitere Informationen finden Sie unter „Arbeitsabläufe“ auf Seite 109.

Der allgemeine Arbeitsablauf unterstützt GC/QQQ-, GC/Q-TOF- und LC/MS-Daten. Der GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablauf unterstützt GC/Q-TOF-Daten.

Jede Übung wird in einer dreispaltigen Tabelle dargestellt:

- Schritte – Lernen Sie das Programm mit diesen allgemeinen Anweisungen selbständig kennen.
- Ausführliche Anweisungen – Verwenden Sie diese, wenn Sie Hilfe benötigen oder beim Lernen lieber schrittweise vorgehen möchten.
- Anmerkungen – Hier finden Sie Tipps und weitere Informationen zu den einzelnen Übungsschritten.



3 Verwenden von Workflows, Exportieren und Drucken

Aufgabe 18. Qualitative Analyse mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Aufgabe 18. Qualitative Analyse mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Wenn Sie das Programm Qualitative Analyse zum ersten Mal verwenden, wird die Methode default.m geladen. Sie können entweder die geöffnete Methode ändern und speichern oder aber eine neue Methode öffnen, ändern und speichern. Die Methode default.m kann nicht überschrieben werden.

Sie können auch festlegen, beim Öffnen einer Datendatei bestimmte Aktionen in der Methode auszuführen. Beim Öffnen einer Datendatei können Sie auch die Methode laden, die zum Erstellen der mit der Datendatei gespeicherten Ergebnisse verwendet wurde. Diese Methode wird beim Speichern der Ergebnisse mit der Datendatei automatisch gespeichert. Der allgemeine Arbeitsablauf kann mit GC/MS- oder LC/MS-Datendateien verwendet werden.

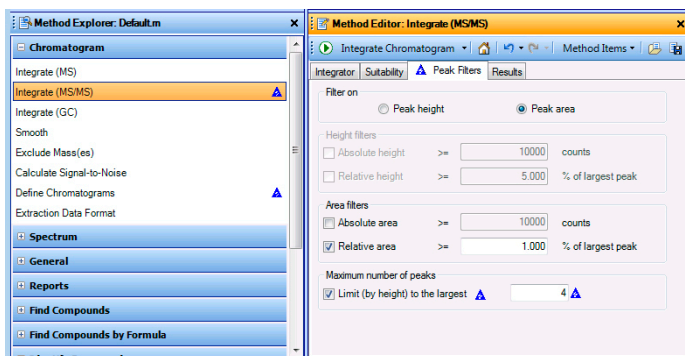
Aufgabe 18. Qualitative Analyse mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1 Öffnen Sie das TIC für die Datendatei Pest - STD 200 MRM.d .	<ul style="list-style-type: none">a Wenn das Programm nicht geöffnet ist, doppelklicken Sie auf das Symbol MassHunter Qualitative Analysis. Klicken Sie andernfalls auf File > Open Data File.b Klicken Sie im GC-Beispieldatendatei-Ordner auf die Datendatei Pest - STD 200 MRM.d.c Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Load result data und klicken Sie auf Open.	<ul style="list-style-type: none">• Beim Arbeiten mit GC/MS-Daten können Sie entweder den allgemeinen Arbeitsablauf oder den GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablauf verwenden.
2 Konfigurieren Sie die Benutzeroberfläche zum Einsatz mit GC-Daten.	<ul style="list-style-type: none">• Folgen Sie den Anweisungen in „Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC/MS-Daten konfigurieren“ auf Seite 12.	<ul style="list-style-type: none">• Wählen Sie für dieses Beispiel den allgemeinen Arbeitsablauf aus.

Aufgabe 18. Qualitative Analyse mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen


Aufgabe 18. Qualitative Analyse mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>3 Richten Sie die Methode zum Extrahieren eines TIC-Chromatogramms ein.</p> <ul style="list-style-type: none"> Definieren Sie ein TIC-Chromatogramm für MS-Daten. 	<p>a Wählen Sie im Fenster Method Explorer die Option Chromatogram > Define Chromatograms aus.</p> <p>b Löschen Sie das BPC-Chromatogramm.</p> <p>c Wählen Sie unter Type die Option TIC aus.</p> <p>d Stellen Sie sicher, dass MS Level auf MS/MS gesetzt ist.</p> <p>e Klicken Sie auf Add.</p>	
<p>4 Bearbeiten Sie die Methode, um die Daten zu integrieren.</p> <ul style="list-style-type: none"> Beschränken Sie die Integration auf die vier höchsten Peaks. 	<p>a Klicken Sie im Fenster Method Explorer auf Chromatogram > Integrate (MS/MS).</p> <p>b Klicken Sie auf die Registerkarte Peak Filters.</p> <p>c Aktivieren Sie im Bereich Maximum number of peaks das Kontrollkästchen Limit (by height) to the largest.</p> <p>d Geben Sie 4 ein.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Beim Aktualisieren eines Werts im Bereich Chromatogram > Integrate (MS) der Registerkarte Peak Filters werden automatisch auch Werte in anderen Bereichen des Method Explorer aktualisiert. Diese Bereiche werden mit blauen Dreiecken gekennzeichnet.



Sie können auf das Symbol **Save Method klicken, um die aktuelle Methode zu speichern.**

Abb. 46 Registerkarte Chromatogram > Integrate (MS/MS) > Peak Filters

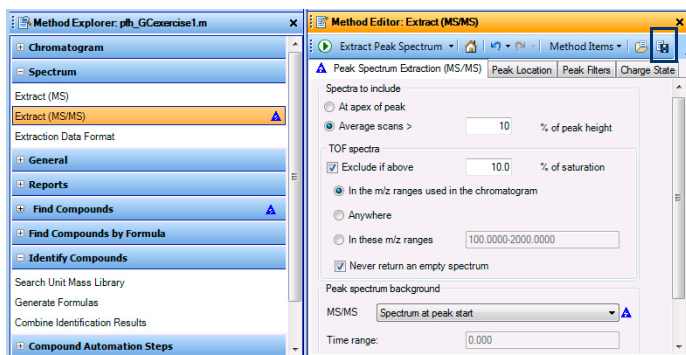
- 5** Testen Sie die Integration, um sicherzustellen, dass nur 4 integrierte Peaks angezeigt werden.
- Klicken Sie auf das Symbol **Integrate Chromatogram** , um die Datendatei zu integrieren.

3 Verwenden von Workflows, Exportieren und Drucken

Aufgabe 18. Qualitative Analyseverfahren mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen


Aufgabe 18. Qualitative Analyseverfahren mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
6 Speichern Sie die Methode unter <i>iii_GCexercise1</i> , wobei Sie "iii" durch Ihre Initialen ersetzen.	<ul style="list-style-type: none">a Klicken Sie im oberen Menü auf Method > Save As.b Geben Sie <i>iii_GCexercise1</i> ein.c Klicken Sie auf die Schaltfläche Save.	<ul style="list-style-type: none">• Beachten Sie, dass beim Speichern der Methode alle blauen Dreiecke, die auf Wertänderungen in der geöffneten Methode hinweisen, verschwinden.
7 Ändern Sie den Peak-Spektrumhintergrund, um das Spektrum zu verwenden, das zu Beginn eines Peaks dargestellt wird.	<ul style="list-style-type: none">a Klicken Sie im Fenster Method Explorer auf Spectrum > Extract (MS/MS).b Klicken Sie auf Peak Spectrum Extraction (MS/MS).c Wählen Sie für den Peak-Spektrumhintergrund Spectrum at peak start aus.	<ul style="list-style-type: none">• Falls Sie nach dem Speichern der Methode weitere Änderungen vornehmen, werden blaue Dreiecke hinzugefügt.






Sie können auf das Symbol **Save Method** klicken, um die aktuelle Methode zu speichern.

Abb. 47 Registerkarte > Extract (MS/MS) > Peak Spectrum Extraction (MS/MS)

- 8 Testen Sie die MS-Spektrumextraktion, um sicherzustellen, dass ein Hintergrundspektrum subtrahiert wird.
 - Klicken Sie auf das Symbol **Extract Peak Spectrum** , um die Aktion für den ausgewählten Peak in der Datendatei auszuführen.

Aufgabe 18. Qualitative Analysemethode mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

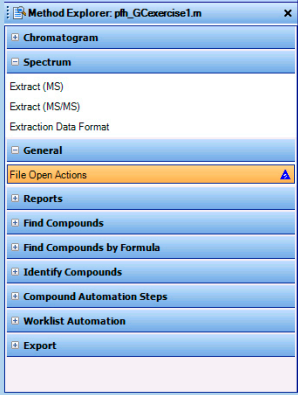
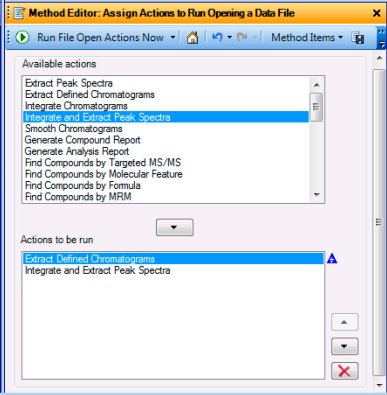

Aufgabe 18. Qualitative Analysemethode mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>9 Speichern Sie die Methode.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Zum Speichern der Methode stehen drei Möglichkeiten zur Verfügung: <ul style="list-style-type: none">  Klicken Sie im Method Editor auf das Symbol Save Method. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Method Editor, und klicken Sie dann auf Save Method. Klicken Sie im oberen Menü auf Method > Save. 	<ul style="list-style-type: none"> Das Symbol Save Method wird in Abbildung 47 auf Seite 82 gezeigt.
<p>10 Richten Sie die Methode so ein, dass die Aktionen, deren Parameter Sie soeben geändert haben, beim Öffnen einer Datendatei automatisch ausgeführt werden.</p> <ul style="list-style-type: none"> Listen Sie die Aktionen auf, die beim Öffnen dieser oder einer anderen Datendatei ausgeführt werden sollen. <p>Hinweis: Schauen Sie im Method Explorer unter General nach.</p>	<p>a Wählen Sie im Fenster Method Explorer die Option General > File Open Actions aus.</p> <p>b Wählen Sie in der Liste Available actions die Option Integrate and Extract Peak Spectra aus.</p> <p>c Klicken Sie auf die Schaltfläche Add , um die ausgewählte Aktion in die Liste Actions to be run zu verschieben. Sie können auch auf die ausgewählte Aktion doppelklicken, um sie in die andere Liste zu verschieben.</p>	
<p>11 Testen Sie die unter File Open Actions eingerichteten Aktionen.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Klicken Sie auf das Symbol Run File Open Actions Now , um die Aktionen für die Datendatei auszuführen. 	<ul style="list-style-type: none"> Die Chromatogramme und Spektren werden nicht überschrieben. Neue Chromatogramme und Spektren werden hinzugefügt.

3 Verwenden von Workflows, Exportieren und Drucken

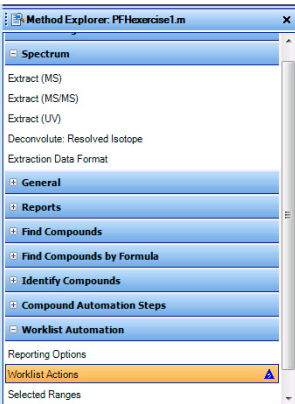
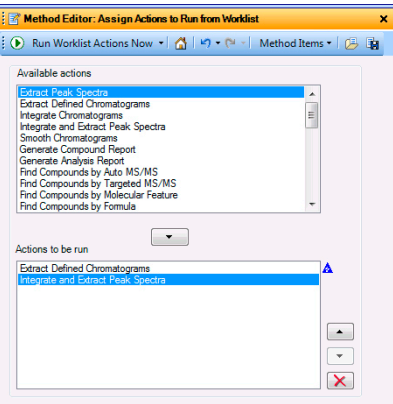
Aufgabe 18. Qualitative Analyse mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Aufgabe 18. Qualitative Analyse mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
		<p>Die Liste Actions to be run enthält zwei verschiedene Aktionen. Die erste Aktion dient zum Extrahieren der definierten Chromatogramme. Anschließend wird das betreffende Chromatogramm integriert und Peaks werden extrahiert.</p>
<p>Abb. 48 Bereich General > File Open Actions im Method Editor</p>	<p>12 Speichern Sie die Methode.</p> <ul style="list-style-type: none">• Klicken Sie im Fenster Method Editor auf das Symbol Save Method.	
<p>13 Richten Sie die Methode so ein, dass die Aktionen automatisch ausgeführt werden, wenn sie während einer Arbeitsliste ausgeführt wird.</p> <ul style="list-style-type: none">• Listen Sie die Aktionen auf, die beim Öffnen dieser oder einer anderen Datendatei ausgeführt werden sollen.	<p>a Wählen Sie im Fenster Method Explorer die Option Worklist Automation > Worklist Actions aus.</p> <p>b Entfernen Sie Generate Analysis Report aus der Liste Actions to be run.</p>	
<p>Hinweis: Schauen Sie im Fenster Method Explorer unter Worklist Automation nach.</p>	<p>14 Testen Sie die unter Worklist Actions eingerichteten Aktionen.</p> <ul style="list-style-type: none">• Klicken Sie auf das Symbol Run Worklist Actions Now , um die Aktionen für die Datendatei auszuführen.	<ul style="list-style-type: none">• Die Chromatogramme und Spektren werden nicht überschrieben. Neue Chromatogramme und Spektren werden hinzugefügt.

Aufgabe 18. Qualitative Analyse mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Aufgabe 18. Qualitative Analyse mithilfe des allgemeinen Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
		<p>Eine Methode enthält zwei verschiedene Aktionslisten. Die erste Aktionsliste (File Open Actions) kann beim Öffnen einer Datendatei ausgeführt werden. Die zweite Aktionsliste (Worklist Actions) wird beim Ausführen der Methode ausgeführt.</p>
Abb. 49	Bereich Worklist Automation > Worklist Actions im Method Editor	
<p>15 Speichern Sie die Methode, und schließen Sie die Datendatei, ohne die Ergebnisse zu speichern.</p>	<p>a Klicken Sie im Method Editor auf das Symbol Save Method.</p> <p>b Klicken Sie auf File > Close Data File. Wenn Sie zum Speichern der Ergebnisse aufgefordert werden, klicken Sie auf No.</p>	

3 Verwenden von Workflows, Exportieren und Drucken

Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Im Rahmen dieser Aufgabe richten Sie eine qualitative Analysemethode ein, die eine Liste von Analyseaktionen enthält, welche in einer bestimmten Reihenfolge ausgeführt werden sollen. Dazu gehören das Extrahieren und Integrieren von Chromatogrammen, das Extrahieren von Spektren, das Suchen einer Bibliothek für Peak-Spektren, das Generieren von Formeln für Spektren sowie das Drucken eines Analyseberichts.

Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1 Öffnen Sie das TIC für die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d .	<ul style="list-style-type: none">a Wenn das Programm nicht geöffnet ist, doppelklicken Sie auf das Symbol MassHunter Qualitative Analysis. Klicken Sie andernfalls auf File > Open Data File.b Klicken Sie im GC-Beispieldatendatei-Ordner auf die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.c Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Load result data und klicken Sie auf Open.	
2 Konfigurieren Sie die Benutzeroberfläche zum Einsatz mit GC-Daten.	<ul style="list-style-type: none">• Folgen Sie den Anweisungen in „Aufgabe 2. Benutzeroberfläche für GC/MS-Daten konfigurieren“ auf Seite 12.	<ul style="list-style-type: none">• Wählen Sie für dieses Beispiel den GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablauf aus.
3 Stellen Sie sicher, dass ein TIC extrahiert wird.	<ul style="list-style-type: none">a Wählen Sie im Fenster Method Explorer die Option Chromatogram aus.b Klicken Sie auf den Bereich Define Chromatograms.c Überprüfen Sie im Method Editor, ob es sich bei dem Chromatogramm im Bereich Defined chromatograms um ein TIC handelt. Falls nicht, wählen Sie unter Type die Option TIC aus. Klicken Sie auf die Schaltfläche Change.	<ul style="list-style-type: none">•

Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen


Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
4 Überprüfen Sie die Parameter für den Algorithmus Find by Chromatogram Deconvolution.	<p>a Klicken Sie im Fenster Method Explorer auf den Bereich GC/Q-TOF Compound Screening > Find by Chromatogram Deconvolution.</p> <p>b Klicken Sie auf die Registerkarte Mass Filter.</p> <p>c Setzen Sie den Wert Absolute height auf 13000.</p> <p>d Klicken Sie auf die Registerkarte Results.</p> <p>e Klicken Sie auf die Schaltfläche Highlight all compounds.</p> <p>f Überprüfen Sie die Ergebnisse auf den einzelnen Registerkarten.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Sehen Sie sich die Bereiche für den GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablauf an. • Beachten Sie die sechs Bereiche in diesem Arbeitsablauf. Alle diese Bereiche sind Duplikate der Bereiche, die bereits im Method Explorer enthalten sind. • Beachten Sie, dass in anderen Bereichen des Method Explorer blaue Dreiecke angezeigt werden. Diese Dreiecke weisen darauf hin, dass dieselben Parameterwerte auch an anderer Stelle geändert wurden.
5 Überprüfen Sie die Parameter für den Algorithmus Identify by Library Search.	<p>a Klicken Sie im Fenster Method Explorer auf den Bereich GC/Q-TOF Compound Screening > Identify by library search.</p> <p>b Klicken Sie auf die Schaltfläche Add Library. Wählen Sie eine Bibliothek aus, und klicken Sie auf Open.</p> <p>c (optional) Zum Entfernen einer nicht benötigten Bibliothek klicken Sie auf die Schaltfläche Remove Library.</p> <p>d Überprüfen Sie die Parameter auf den einzelnen Registerkarten.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Im Ordner \MassHunter\Library ist entweder die Bibliothek demo.l library oder die Bibliothek NIST08.l (bzw. eine andere Version der NIST-Bibliothek) installiert.
6 Speichern Sie die Methode unter <i>iii_GCexercise2</i> , wobei Sie "iii" durch Ihre Initialen ersetzen.	<p>a Klicken Sie im oberen Menü auf Method > Save As.</p> <p>b Geben Sie <i>iii_GCexercise2</i> ein.</p> <p>c Klicken Sie auf die Schaltfläche Save.</p>	

3 Verwenden von Workflows, Exportieren und Drucken

Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>7 Richten Sie die Methode so ein, dass die Aktionen beim Öffnen einer Datendatei automatisch ausgeführt werden.</p> <ul style="list-style-type: none">Listen Sie die Aktionen auf, die beim Öffnen dieser oder einer anderen Datendatei ausgeführt werden sollen. <p>Hinweis: Schauen Sie im Fenster Method Explorer unter General nach.</p>	<ul style="list-style-type: none">a Wählen Sie im Fenster Method Explorer die Option General > File Open Actions aus.b Entfernen Sie Generate Analysis Report aus der Liste Actions to be run.c Entfernen Sie Integrate and Extract Peak Spectra.d Entfernen Sie ggf. andere Aktionen aus der Liste.e Fügen Sie Extract Defined Chromatograms hinzu.f Fügen Sie Find Compounds by Chromatographic Deconvolution hinzu.g Fügen Sie Search Spectral Library for Compound hinzu.	
<p>8 Testen Sie die unter File Open Actions eingerichteten Aktionen.</p>	<ul style="list-style-type: none">Klicken Sie auf das Symbol Run File Open Actions Now , um die Aktionen für die Datendatei auszuführen.	<ul style="list-style-type: none">Die Chromatogramme und Spektren werden nicht überschrieben. Neue Chromatogramme und Spektren werden hinzugefügt.

Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen

Schritte Ausführliche Anweisungen Anmerkungen

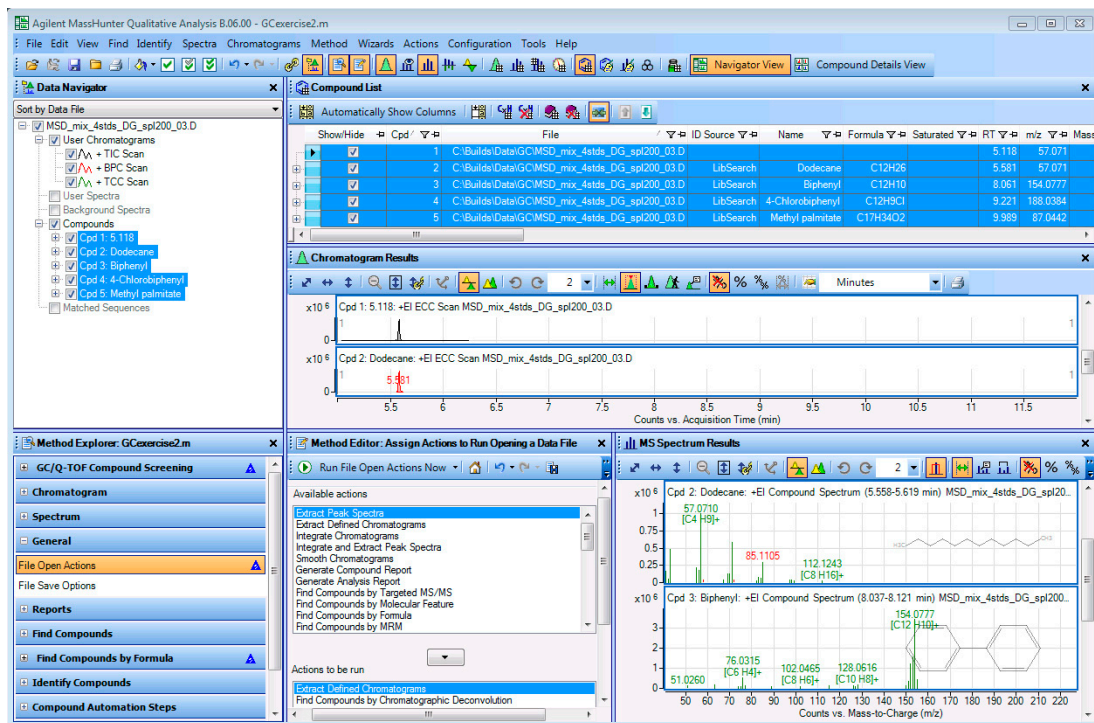


Abb. 50 Ergebnisse ausgeführter Arbeitslistenaktionen für die GC/Q-TOF-Daten

- 9 Speichern Sie die Methode unter *iii_GCexercise2*, wobei Sie "*iii*" durch Ihre Initialen ersetzen.
- a Klicken Sie im Menü auf **Method > Save As**.
 b Geben Sie *iii_GCexercise2* ein.
 c Klicken Sie auf **Save**.
- Falls diese Methode während einer Data Acquisition-Arbeitsliste ausgeführt wird, werden die Arbeitslistenaktionen auf dieser Registerkarte in der angegebenen Reihenfolge ausgeführt.
- 10 Schließen Sie die Datendatei, ohne die Ergebnisse zu speichern.
- a Klicken Sie auf **File > Close Data File**.
 b Wenn Sie zum Speichern der Ergebnisse aufgefordert werden, klicken Sie auf **No**.

3 Verwenden von Workflows, Exportieren und Drucken

Aufgabe 20. CEF-Datei exportieren

Aufgabe 20. CEF-Datei exportieren

Sie können eine CEF-Datei mit Verbindungsinformationen exportieren. Diese CEF-Datei kann in andere Programme wie MassHunter Quantitative Analysis und Mass Profiler Professional importiert werden. Sie können auch Verbindungen importieren, die in eine CEF-Datei exportiert wurden.

Aufgabe 20. CEF-Datei exportieren

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
1 Öffnen Sie die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d , und führen Sie die unter File Open Actions eingerichteten Aktionen für die Methode iii_GCexercise2.m aus, die in „Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen“ auf Seite 86 erstellt wurde.	<p>a Wenn das Programm nicht geöffnet ist, doppelklicken Sie auf das Symbol MassHunter Qualitative Analysis. Klicken Sie andernfalls auf File > Open Data File.</p> <p>b Klicken Sie im GC-Beispieldatendatei-Ordner auf die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>c Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Load result data.</p> <p>d Aktivieren Sie das Kontrollkästchen Run File Open actions from selected method.</p> <p>e Klicken Sie auf die Schaltfläche Use current method und dann auf Open.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Wenn Sie „Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen“ auf Seite 86 abgeschlossen haben, lautet die aktuelle Methode iii_GCexercise2.m. Diese Methode ist so eingerichtet, dass zunächst der Algorithmus Find Compounds by Chromatogram Deconvolution und dann für jede Verbindung der Algorithmus Search Library ausgeführt wird.
2 Exportieren Sie eine CEF-Datei.	<p>a Zum interaktiven Exportieren der Datei klicken Sie auf File > Export > as CEF.</p> <p>b Klicken Sie auf die Schaltfläche All results.</p> <p>c Wählen Sie den Speicherort der Exportdatei aus.</p> <p>d Klicken Sie auf OK.</p>	<ul style="list-style-type: none">• Eine CEF-Datei wird zum Exportieren von Verbindungen verwendet.

Aufgabe 20. CEF-Datei exportieren (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
----------	--------------------------	-------------

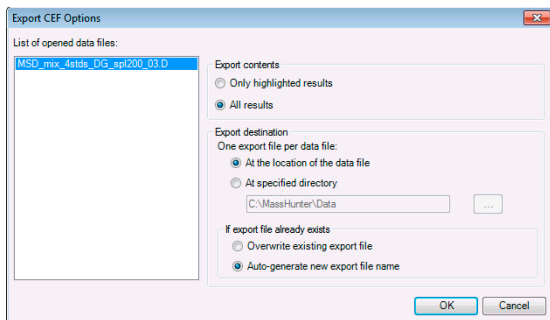


Abb. 51 Dialogfeld Export CEF Options

Aufgabe 21. Analysebericht drucken

Wenn Sie einen Analysebericht drucken möchten, nachdem Sie die Aufgaben in dieser oder der nächsten Übung ausgeführt haben, befolgen Sie diese Anweisungen.

Ein Analysebericht kann die Ergebnisse von Aktionen wie dem Extrahieren und Integrieren von Chromatogrammen, dem Extrahieren von Spektren, der Suche nach einer Bibliothek für Peak-Spektren und dem Generieren von Formeln für Spektren enthalten.

Aufgabe 21. Analysebericht drucken

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>1 Wenn die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d nicht geladen ist, öffnen Sie diese und führen Sie die unter File Open Actions eingerichteten Aktionen für die Methode iii_GCexercise2.m aus, die in „Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen“ auf Seite 86 erstellt wurde.</p>	<p>a Wenn das Programm nicht geöffnet ist, doppelklicken Sie auf das Symbol MassHunter Qualitative Analysis. Klicken Sie andernfalls auf File > Open Data File.</p> <p>b Klicken Sie im GC-Beispieldatendatei-Ordner auf die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>c Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Load result data.</p> <p>d Aktivieren Sie das Kontrollkästchen Run File Open actions from selected method.</p> <p>e Klicken Sie auf die Schaltfläche Use current method und dann auf Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Wenn Sie „Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen“ auf Seite 86 abgeschlossen haben, lautet die aktuelle Methode iii_GCexercise2.m. Diese Methode ist so eingerichtet, dass zunächst der Algorithmus Find Compounds by Chromatogram Deconvolution und dann für jede Verbindung der Algorithmus Search Library ausgeführt wird.
<p>2 Ändern Sie die Auswahl der Analyseberichte in der Methode:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Aktivieren Sie die Kontrollkästchen für die Chromatogramm, Spektren oder Tabellen, die gedruckt werden sollen. • Deaktivieren Sie die Kontrollkästchen für die Chromatogramm, Spektren oder Tabellen, die nicht gedruckt werden sollen. 	<p>a Klicken Sie im Fenster Method Explorer auf Reports > Analysis Report.</p> <p>b Aktivieren Sie die Kontrollkästchen für alle weiteren Elemente, die gedruckt werden sollen.</p> <p>c Deaktivieren Sie die ausgewählten Chromatogramme und Spektren, die nicht gedruckt werden sollen.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Der Analysebericht enthält nur die Informationen, die Sie in diesem Bereich auswählen. • Elemente, für die keine Ergebnisse verfügbar sind, werden nicht in den Bericht aufgenommen, auch wenn sie in diesem Bereich ausgewählt wurden. Wenn Sie beispielsweise das Chromatogramm nicht integriert haben, wird die Peak-Tabelle nicht in den Bericht aufgenommen.

Aufgabe 21. Analysebericht drucken (Fortsetzung)

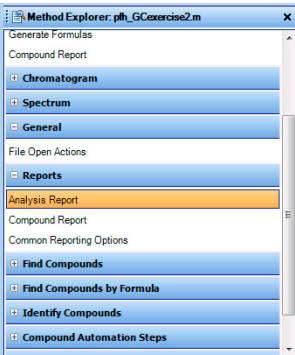
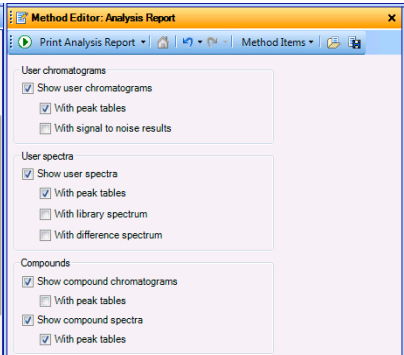
Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
		<p>Das Fenster Method Editor ist standardmäßig frei beweglich. Es wird als separates Fenster getrennt vom übrigen Programm zur qualitativen Analyse angezeigt. Zum Verankern des Fensters klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den Titel des Fensters und wählen dann Floating. Sie können auch auf die Titelleiste doppelklicken, um das Fenster zu verankern.</p>

Abb. 52 Bereich Analysis Report in den Fenstern Method Explorer und Method Editor

3 Drucken Sie den Bericht.

- a Zum interaktiven Drucken des Berichts stehen mehrere Möglichkeiten zur Verfügung:
 - Klicken Sie im Hauptmenü auf **File > Print > Analysis Report**.
 - Klicken Sie in der Hauptsymbolleiste auf das Druckersymbol.
 - Klicken Sie nach Auswahl des Bereichs Analysis Report in der Symbolleiste des Method Editor auf das Symbol **Print Analysis Report** .
 - Klicken Sie im Method Editor mit der rechten Maustaste auf den Bereich Analysis Report, und wählen Sie dann **Print Analysis Report**.
 - Klicken Sie im Data Navigator im Datendatei-Kontextmenü auf **Analysis Report**.
 - b Klicken Sie auf **Report contents**.
 - c Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Print report**, und wählen Sie einen Drucker aus.
 - d Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Print preview**.
 - e Klicken Sie auf die Schaltfläche **OK**.
- Das Symbol Run  in der Symbolleiste Method Editor ermöglicht Ihnen manchmal, eine Aktion aus einem Satz möglicher Aktionen auszuwählen. Wenn Sie beispielsweise zum Bereich Reports > Common Reporting Options des Fensters Method Editor wechseln, sind vier verschiedene Aktionen möglich, wenn Sie auf das Symbol Run klicken. Wenn Sie auf den Pfeil klicken, wird eine Liste möglicher Aktionen angezeigt, und Sie können wählen, welche Aktion ausgeführt werden soll. Bei Auswahl einer anderen Aktion aus der Liste ändert sich die Standardaktion. Wenn Sie einfach auf die Schaltfläche Run klicken, wird die Standardaktion ausgeführt.

3 Verwenden von Workflows, Exportieren und Drucken

Aufgabe 21. Analysebericht drucken

Aufgabe 21. Analysebericht drucken (Fortsetzung)

Schritte	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
----------	--------------------------	-------------

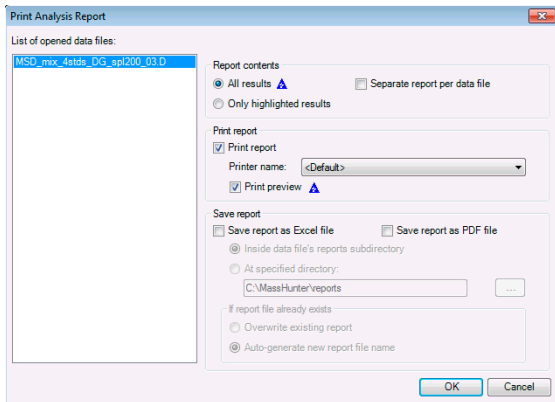


Abb. 53 Dialogfeld Print Analysis Report

- f Überprüfen Sie den Bericht.
- g Klicken Sie in der Symbolleiste auf das Symbol **Close Print Preview**.

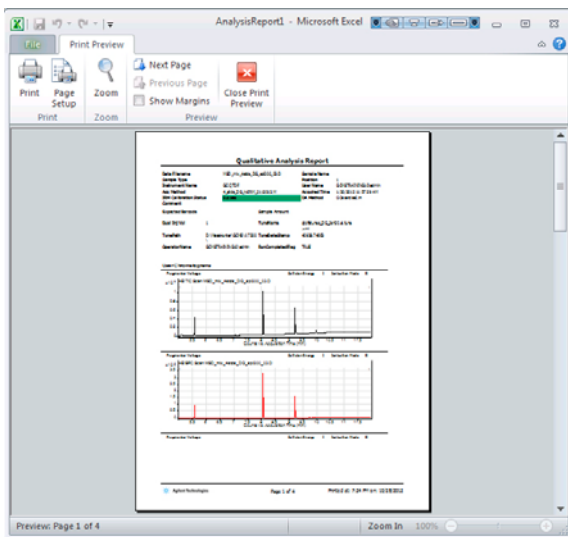


Abb. 54 Fenster Print Preview mit Analysebericht

Aufgabe 22. Verbindungsbericht drucken

Zum Drucken eines Verbindungsberichts befolgen Sie diese Anweisungen.

Aufgabe 22. Verbindungsbericht drucken

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
<p>1 Wenn die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d nicht geladen ist, öffnen Sie diese und führen Sie die unter File Open Actions eingerichteten Aktionen für die Methode iii_GCexercise2.m aus, die in „Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen“ auf Seite 86 erstellt wurde.</p>	<p>a Wenn das Programm nicht geöffnet ist, doppelklicken Sie auf das Symbol MassHunter Qualitative Analysis. Klicken Sie andernfalls auf File > Open Data File.</p> <p>b Klicken Sie im GC-Beispieldatendatei-Ordner auf die Datendatei MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d.</p> <p>c Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Load result data.</p> <p>d Aktivieren Sie das Kontrollkästchen Run File Open actions from selected method.</p> <p>e Klicken Sie auf die Schaltfläche Use current method und dann auf Open.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Wenn Sie „Aufgabe 19. Methode mithilfe des GC/Q-TOF Compound Screening-Arbeitsablaufs einrichten und ausführen“ auf Seite 86 abgeschlossen haben, lautet die aktuelle Methode iii_GCexercise2.m. Diese Methode ist so eingerichtet, dass zunächst der Algorithmus Find Compounds by Chromatogram Deconvolution und dann für jede Verbindung der Algorithmus Search Library ausgeführt wird.
<p>2 Ändern Sie die Auswahl der Verbindungsberichte in der Methode:</p> <ul style="list-style-type: none"> Deaktivieren Sie die vergrößerte Anzeige von MS-Spektren für besondere Peaks. Deaktivieren Sie die MS/MS-Optionen im Bericht. 	<p>a Klicken Sie im Method Explorer auf Reports > Compound Report.</p> <p>b Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Show MS spectrum.</p> <p>c Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Show MS/MS spectrum.</p> <p>d Deaktivieren Sie das Kontrollkästchen Show MS/MS peak table.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Über diese Kontrollkästchen können Sie festlegen, welche Informationen ggf. in einen Bericht aufgenommen werden sollen. Falls die Informationen nicht verfügbar sind, wird der betreffende Bereich automatisch übersprungen. Beispielsweise werden MS/MS-Ergebnisse nicht aufgenommen, wenn die Datendatei nur MS-Daten enthält.

3 Verwenden von Workflows, Exportieren und Drucken

Aufgabe 22. Verbindungsbericht drucken

Aufgabe 22. Verbindungsbericht drucken

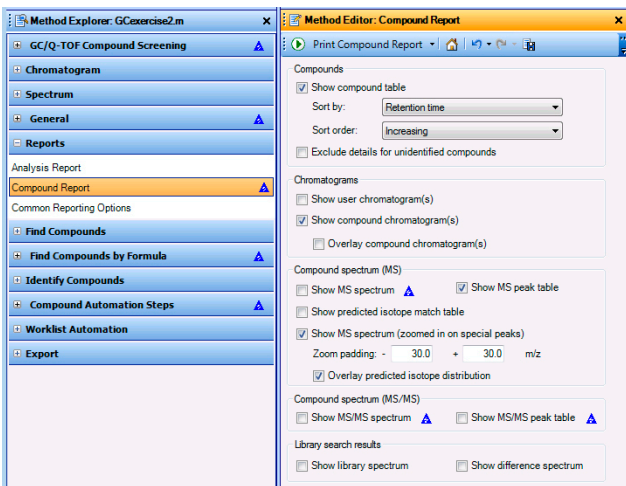
Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
		<p>Das Kontrollkästchen Overlay compound chromatograms sollte für GC/Q-TOF-Daten deaktiviert werden.</p>

Abb. 55 Klicken Sie im Method Editor auf den Bereich Compound Report.

3 (optional) Wählen Sie eine andere Verbindungsvorlage aus.

- Klicken Sie im Fenster Method Explorer auf **Reports > Common Reporting Options**.
- Wählen Sie **CompoundReportWithIdentificationHits.xlsx** als Verbindungsvorlage aus.

- In der Software sind verschiedene Berichtsvorlagen enthalten.
- Berichtsvorlagen können mit Excel und dem Report Designer-Add-in angepasst werden.

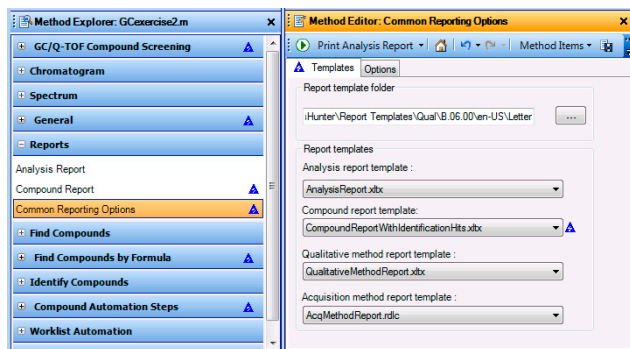



Abb. 56 Bereich Common Reporting Options im Method Editor

Alle Vorlagen mit der Dateierweiterung XLTX können mit Excel und dem Report Designer-Add-in angepasst werden. Der Erfassungsmethodenbericht kann nicht angepasst werden.

Aufgabe 22. Verbindungsbericht drucken

Schritt	Ausführliche Anweisungen	Anmerkungen
4 Drucken Sie den Bericht.	<p>a Klicken Sie auf File > Print > Compound Report oder auf den Pfeil im Symbol Print Analysis Report , und wählen Sie dann Print Compound Report, um den Verbindungsbericht zu drucken.</p> <p>b Aktivieren Sie das Kontrollkästchen Print preview.</p> <p>c Klicken Sie auf OK. Überprüfen Sie den Bericht.</p> <p>d Klicken Sie auf das Symbol Close Print Preview.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Im Dialogfeld Print Compound Report können Sie einen anderen Drucker auswählen und festlegen, dass der Bericht in einer PDF- oder Excel-Datei gespeichert werden soll. Außerdem können Sie hier auswählen, ob alle oder nur die markierten Ergebnisse gedruckt werden sollen und ob verschiedene Datendateien in einem Bericht kombiniert werden sollen. Weitere Informationen finden Sie in der Online-Hilfe oder auf der Report Designer-Schulungs-DVD.

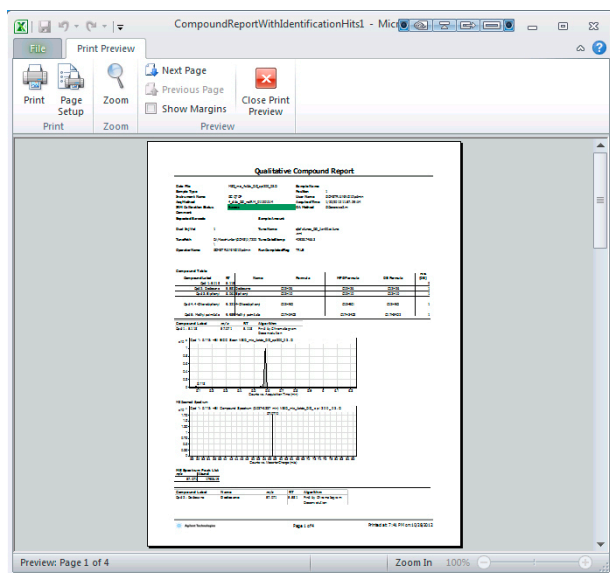
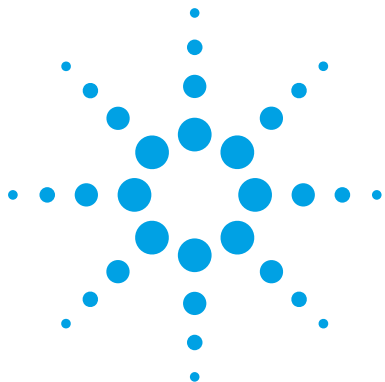


Abb. 57 Fenster Print Preview mit Verbindungsbericht

- | | |
|---|---|
| <p>5 Schließen Sie die Datendatei, ohne die Ergebnisse zu speichern.</p> | <p>a Klicken Sie auf File > Close Data File.</p> <p>b Wenn Sie zum Speichern der Ergebnisse aufgefordert werden, klicken Sie auf No.</p> |
|---|---|

3 Verwenden von Workflows, Exportieren und Drucken

Aufgabe 22. Verbindungsbericht drucken



Referenz

- Arbeiten mit Fenstern 100
- Arbeiten mit Ergebnisdaten im Data Navigator 103
- Durchführen von Operationen am Chromatogramm 104
- Durchführen von Operationen an einem MS- oder MS/MS-Spektrum 105
- Arbeiten mit chromatografischen visuellen Daten 106
- Arbeiten mit visuellen Spektrumdaten 108
- Arbeitsabläufe 109
- Anpassen einer Reportvorlage 113



Arbeiten mit Fenstern

Wenn Sie das Programm Qualitative Analyse erstmals öffnen, werden im Standardlayout vier Fenster angezeigt: Data Navigator, Method Explorer, Chromatogram Results und MS Spectrum Results. Sie können zwischen der Navigator View und der Compound Details View umschalten.

Über das Menü „View“ können Sie in der Navigator View siebzehn weitere Fenster einblenden:

- Method Editor – ermöglicht Ihnen das Bearbeiten von Methodenparametern, unterteilt in verschiedene Registerkarten
- Spectrum Preview – ermöglicht Ihnen das schnelle Scannen der Spektren in einer Datendatei
- MS Spectrum Results – zeigt die MS- und MS/MS-Spektren an
- Difference Results – zeigt die Differenzergebnisse nach einer Bibliothekssuche an
- Deconvolution Results – zeigt die dekonvolvierten Spektren an
- Deconvolution Mirror Plot – zeigt zwei dekonvolvierte Spektren in einem Spiegelbild an
- UV Spectrum Results – zeigt die UV-Spektren an – nur verfügbar für LC/MS-Daten
- Integration Peak List – zeigt die Integrationsergebnisse in einer Tabelle an
- MS Spectrum Peak List 1 – zeigt die Peak-Tabelle für das erste ausgewählte Spektrum an
- MS Spectrum Peak List 2 – zeigt die Peak-Tabelle für das zweite ausgewählte Spektrum an
- MS Actuals – zeigt Erfassungsinformationen für das markierte Spektrum an
- Compound List – zeigt die Verbindungen an, die über einen der Find Compounds-Algorithmen gefunden werden
- Compound Identification Results – zeigt die Identifikationsinformationen für die ausgewählte Verbindung an
- Spectrum Identification Results – zeigt die Identifikationsinformationen für die ausgewählten Spektren an
- MS/MS Formula Details – zeigt eine Tabelle mit möglichen Formeln an, die für die in einem MS/MS-Spektrum erkannten Fragmente berechnet werden

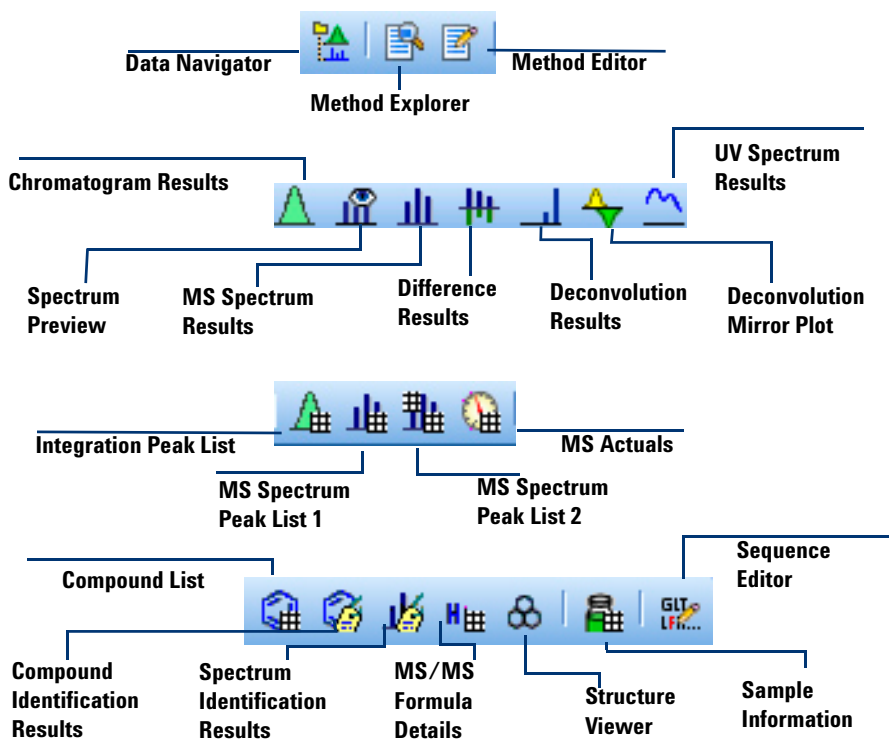
- Structure Viewer – zeigt die mit der aktuellen Verbindung oder den aktuellen Spektren verbundene Struktur an
- Sample Information – zeigt Informationen über die markierte Datendatei an
- Sequence Editor – ermöglicht Ihnen die Bearbeitung einer Methodensequenz

Ferner können Sie drei Toolfenster anzeigen, die beim Starten des jeweiligen Tools eingeblendet werden:

- Formula Calculator
- Mass Calculator
- Recalibrate

Fenstersymbole in der Hauptsymboleiste

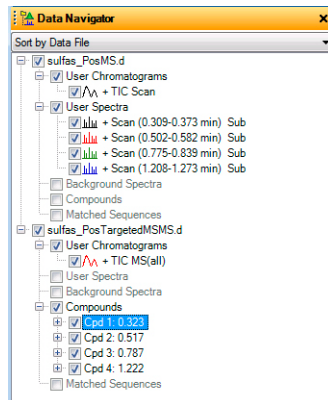
Mit diesen Symbolen in der Hauptsymboleiste werden die Fenster geöffnet und geschlossen. Zusätzliche Symbole sind verfügbar, wenn die MassHunter BioConfirm-Software installiert wird. Befehle im Menü „View“ können ebenfalls zum Öffnen dieser Fenster verwendet werden.



Arbeiten mit Ergebnisdaten im Data Navigator

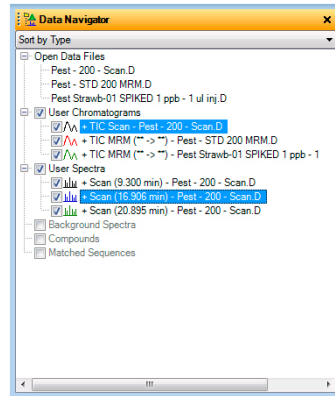
Das Fenster „Data Navigator“ und zugehörige Tools

Der Data Navigator organisiert alle Ergebnisse der Extraktion und Spektrumauswahl entweder nach Datendatei oder nach Datentyp.



Symbol „Verknüpfte Navigation“

Ist dieses Symbol aktiviert (Standardeinstellung), werden durch Markierung eines Chromatogramms im Data Navigator auch die zugehörigen Spektren markiert. Die entsprechenden Grafikergebnisse für Chromatogramm und Spektrum werden ebenfalls hervorgehoben. Die verknüpfte Navigation funktioniert nur, wenn Sie den Menüeintrag „Integrate and Extract Peak Spectra“ im Menü „Chromatograms“ verwendet oder einen der Compounds-Algorithmen ausgeführt haben.



Aktivierungstools

Einzelnes Häkchen – Aktiviert die Kontrollkästchen aller markierten Daten.

Zwei Häkchen, eines davon grau – Aktiviert die Kontrollkästchen markierter Daten und deaktiviert die übrigen Kontrollkästchen.

Zwei Häkchen – Aktiviert alle Kontrollkästchen.

Chromatogramme und Spektren werden angezeigt, wenn die entsprechenden Kontrollkästchen aktiviert sind.


Durchführen von Operationen am Chromatogramm

Sie können am gesamten Chromatogramm oder an einem ausgewählten Bereich des Chromatogramms mit diesen Menüeinträgen folgende Operationen durchführen:


Aktion	Menüeintrag
Peak-Beschriftungen im Chromatogramm ändern	Configuration > Chromatogram Display Options
Ein Chromatogramm extrahieren	Chromatograms > Extract Chromatograms
Definierte Chromatogramme extrahieren	Chromatograms > Extract Defined Chromatograms
Das Chromatogramm integrieren	Chromatograms > Integrate Chromatogram
Peak-Spektren integrieren und extrahieren	Chromatograms > Integrate and Extract Peak Spectra
Peak-Spektren integrieren und dekonvolvieren	Chromatograms > Integrate and Deconvolute Peak Spectra
Das Chromatogramm glätten	Chromatograms > Smooth Chromatogram
Ein beliebiges Chromatogramm subtrahieren	Chromatograms > Subtract Any Chromatogram
Das Signal-Rausch-Verhältnis berechnen	Chromatograms > Calculate Signal-to-Noise
Verbindungen nach automatischen MS/MS-Daten suchen	Find > Find Compounds by Auto MS/MS
Verbindungen nach MS/MS-Zieldaten suchen	Find > Find Compounds by Targeted MS/MS
Verbindungen für MS(1)-Daten suchen	Find > Find Compounds by Molecular Feature
Verbindungen für GC/MS-Daten suchen	Find > Find Compounds by Chromatogram Deconvolution
Verbindungen für MRM-Daten suchen	Find > Find Compounds by MRM
Verbindungen nach Integrationsergebnissen suchen	Find > Find Compounds by Integration
Verbindungen suchen, die bestimmten Formeln entsprechen	Find > Find Compounds by Formula

Auswählen von Bereichsoperationen aus dem Kontextmenü

Wenn Sie einen chromatografischen Bereich ausgewählt haben, können Sie zusätzlich zu den oben erwähnten und noch weiteren Operationen auch ein Spektrum extrahieren und ein Spektrum in den Hintergrund extrahieren.

- 1 Klicken Sie zum Durchführen dieser Operationen in der Symbolleiste „Chromatogram Results“ auf das Tool „Range Select“ ().
- 2 Klicken Sie auf die Stelle, an der der Bereich beginnen soll, ziehen Sie den Cursor über einen Bereich, und lassen Sie die Maustaste los.
- 3 Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf eine beliebige Stelle im Chromatogramm, und klicken Sie im Kontextmenü auf die Operation.

Speichern von Ergebnissen in Datendateien

- Klicken Sie auf das Symbol **Save** () , oder klicken Sie auf **File > Save Results**.

Beim Beenden des Programms werden Sie ebenfalls gefragt, ob Sie die Ergebnisse in der Datendatei speichern möchten, sofern Sie diese Funktion nicht deaktiviert haben. (Die Funktion kann über das Dialogfeld „Message Box Options“ deaktiviert werden.)

Durchführen von Operationen an einem MS- oder MS/MS-Spektrum

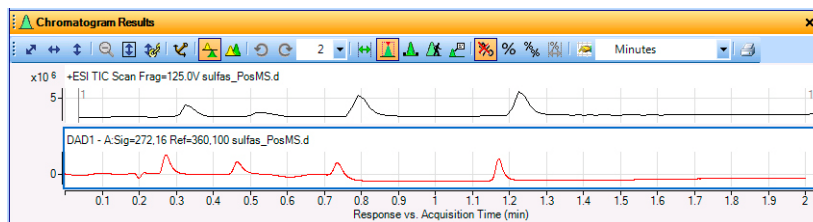
Mit diesen Menüeinträgen können Sie die folgenden Operationen an einem MS- oder MS/MS-Spektrum oder an einem ausgewählten Bereich eines MS- oder MS/MS-Spektrums durchführen:

Aktion	Menüeintrag
m/z, Isotopenhäufigkeit, Ladungsstatus und weitere Informationen über Peaks in einem Spektrum anzeigen	View > MS Spectrum Peak List 1
Peak-Beschriftungen in einem Spektrum ändern	Configuration > MS and MS/MS Spectra Display Options
Das Hintergrundspektrum subtrahieren	Spectra > Subtract Background Spectrum
Ein beliebiges Spektrum subtrahieren	Spectra > Subtract Any Spectrum (und dann auf ein weiteres Spektrum klicken)
Zwei Spektren addieren	Spectra > Add Any Spectrum (und dann auf ein weiteres Spektrum klicken)

Aktion	Menüeintrag
Eine Datenbank nach Einträgen durchsuchen, die bestimmten Massen in einem Spektrum entsprechen	Spectra > Search Database for Spectrum Peaks
Formeln für die Massen im ausgewählten Bereich eines Spektrums generieren	Spectra > Generate Formulas from Spectrum Peaks (wenn ein Bereich im MS-Spektrum ausgewählt ist)
Dekonvolvieren anhand des Resolved Isotope-Algorithmus	Spectra > Deconvolute (Resolved Isotope)
Bibliothek durchsuchen	Identify > Search Library for Spectra oder Spectra > Search Library for Spectra

Arbeiten mit chromatografischen visuellen Daten

Das Fenster „Chromatogram Results“



Chromatogrammergebnis-Tools

Zoomtools in ihrer Reihenfolge



Auswahltools in ihrer Reihenfolge



Eines dieser Tools muss immer ausgewählt sein.

Autoscale X-axis and Y-axis

Autoscale X-axis

Autoscale Y-axis

Unzoom

Autoscale Y-axis during Zoom

Linked Y-Axis-Modus

Range Select – Ist dieses Tool **aktiviert**, können Sie einen Bereich für ein Chromatogramm auswählen, an dem Sie Aktionen durchführen können.

Peak Select – Ist dieses Tool **aktiviert**, können Sie ein Spektrum eines integrierten Peaks am Scheitelpunkt auswählen.

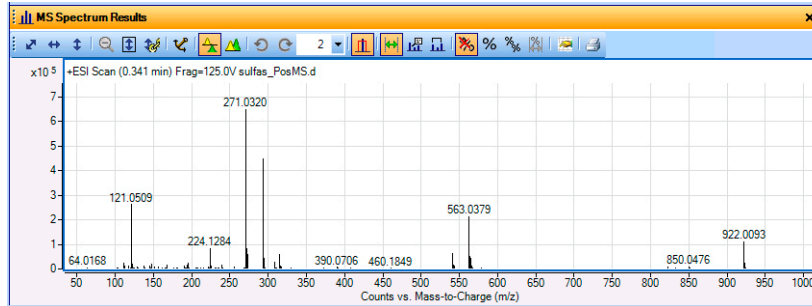
Manual Integration – Ist dieses Tool **aktiviert**, können Sie eine interaktive Integration durchführen.

Walk Chromatogram – Ist dieses Tool **aktiviert**, können Sie einzelne Spektren anzeigen, indem Sie auf die einzelnen Punkte klicken oder die linke und rechte Pfeiltaste auf der Tastatur verwenden.

Annotation – Ist dieses Tool **aktiviert**, können Sie den Chromatogrammen Bild- und Textanmerkungen hinzufügen.

Arbeiten mit visuellen Spektrumdaten

Das Fenster „MS Spectrum Results“



MS-Spektrumergebnis-Tools

Zoomtools in ihrer Reihenfolge



Auswahltools in ihrer Reihenfolge



Zum Aufheben einer Toolauswahl klicken Sie auf ein anderes Tool oder Symbol.

Autoscale X-axis and Y-axis

Autoscale X-axis

Autoscale Y-axis

Unzoom

Autoscale Y-axis during Zoom

Linked Y-Axis-Modus

Range Select – Ist dieses Tool **aktiviert**, können Sie einen Bereich für ein Chromatogramm auswählen, an dem Sie Aktionen durchführen können.

Annotation – Ist dieses Tool **aktiviert**, können Sie den Chromatogrammen Bild- und Textanmerkungen hinzufügen.

Calipers – Ist dieses Tool **aktiviert**, können Sie dem ausgewählten Spektrum einen Deltamassen-Messschieber hinzufügen. Im Fenster „Deconvolution Results“ können Sie zudem einen Aminosäuren-Messschieber oder einen Modifikationsmessschieber hinzufügen. Weitere Informationen finden Sie in der Online-Hilfe.

Arbeitsabläufe

Mit Arbeitsabläufen können Sie die Benutzeroberfläche für Ihre Anwendung anpassen. Jeder Arbeitsablauf lädt eine andere Methode mit den für diesen Arbeitsablauf geeigneten Parametern. Außerdem lädt jeder Arbeitsablauf ein anderes Layout; zu diesen Layouts gehört die Anpassung der in den einzelnen Tabellen aufgeführten Spalten. In vier der Layouts wird außerdem ein besonderer Method Editor-Abschnitt hinzugefügt, der Kopien der Abschnitte im Method Editor enthält, die für den jeweiligen Arbeitsablauf wichtig sind. Durch das Gruppieren der Funktionen, die in einem bestimmten Arbeitsablauf verwendet werden, können Sie Ihre Methode einfacher anpassen.

Mehrere verschiedene Arbeitsabläufe stehen im Programm zur qualitativen Analyse zur Verfügung. Diese sind:

- General
- BioConfirm – Diese Arbeitsabläufe sind nur dann verfügbar, wenn die BioConfirm-Software installiert und im Dialogfeld „User Interface Configuration“ markiert ist. BioConfirm umfasst mehrere mögliche Arbeitsabläufe, je nach Art der Analyse, die Sie durchführen möchten. BioConfirm wird mit LC/MS-Datendateien verwendet.
- Chromatogram Peak Survey
- Formula Confirmation and Sample Purity
- MS Target Compound Screening
- GC/Q-TOF Compound Screening

Wenn Sie mit GC/MS-Daten arbeiten, können Sie den Arbeitsablauf „General“ oder den Arbeitsablauf „GC/Q-TOF Compound Screening“ auswählen. Wenn Sie mit LC/MS-Daten arbeiten, können Sie einen beliebigen Arbeitsablauf außer „GC/Q-TOF Compound Screening“ auswählen.

Spezifische Methode

Jeder Arbeitsablauf lädt eine spezifische Standardmethode mit den entsprechenden Einstellungen für den jeweiligen Arbeitsablauf. Wenn Sie beispielsweise zu einem der BioConfirm-Arbeitsabläufe wechseln, wird der **Target data type** für den Algorithmus „Find Compounds by Molecular Feature“ auf **Large molecules (proteins, oligos)** gesetzt. Diese Einstellung eignet sich für den BioConfirm-Arbeitsablauf, jedoch nicht standardmäßig für die übrigen Arbeitsabläufe.

Spezifisches Layout

Zusätzlich lädt jeder Arbeitsablauf ein spezifisches Layout. Ein Layout besteht aus folgenden Elementen:

- Position und Größe der einzelnen Fenster
- Welche Fenster Registerkarten aufweisen
- Welche Fenster frei beweglich sind
- Welches Registerkartenfenster sich oben befindet
- Welche Fenster standardmäßig sichtbar sind
- Ob die Statusleiste angezeigt wird

Für jedes Plotfenster („Chromatogram Results“, „Spectrum Preview“, „MS Spectrum Results“, „Deconvolution“ und „UV Results“) werden folgende Einstellungen gespeichert:

- Ob die Grafiken sich überlagern
- Ob der Modus „Autoscale Y-Axis during Zoom“ aktiviert ist
- Ob der Modus „Linked Y-Axis“ aktiviert ist

Für jedes Tabellenfenster werden folgende Einstellungen gespeichert

- Sichtbare Spalten
- Reihenfolge der Spalten
- Breite der einzelnen Spalten
- Alle der Tabelle hinzugefügten Filter (nur verfügbar für die Tabellen „Compound List“ und „Compound Identification Results“ sowie das Fenster „Spectrum Identification Results“).

Spezifischer Abschnitt im Method Explorer und Method Editor

Durch die Verwendung des Method Editors mit dem Arbeitsablauf „General“ können Sie nahezu alle Parameter in der Methode ändern.

Durch jeden der vier übrigen Arbeitsabläufe werden die im Method Explorer verfügbaren Abschnitte geändert. Jeder neue Abschnitt enthält nur diejenigen Method Editor-Registerkarten und -Abschnitte, die für den jeweiligen Arbeitsablauf relevant sind. Durch das Ändern eines Parameters im Arbeitsablaufabschnitt wird auch der Parameter im entsprechenden Abschnitt in den allgemeinen Method Editor-Abschnitten geändert.

Zwei Registerkarten werden in den allgemeinen Method Editor-Abschnitten nicht wiederholt. Der Abschnitt **Chromatogram Peak Survey Workflow > Spectrum Peak Identification** und die Registerkarte **Chromatogram Peak Survey Workflow > Chromatogram Extraction > Chromatograms** sind nur im Arbeitsablauf „Chromatogram Peak Survey“ enthalten. Diese Abschnitte wirken sich nur auf den Algorithmus „Chromatogram Peak Survey“ aus. Dieser Algorithmus wird nur in diesem Arbeitsablauf verwendet sowie in der Aktion **Chromatogram Peak Survey without Report** und in der Aktion **Chromatogram Peak Survey with Analysis Report**.

Arbeitsablaufmethoden und -layouts

Zusätzliche Standardmethoden und -layouts werden für die einzelnen Arbeitsabläufe bereitgestellt.

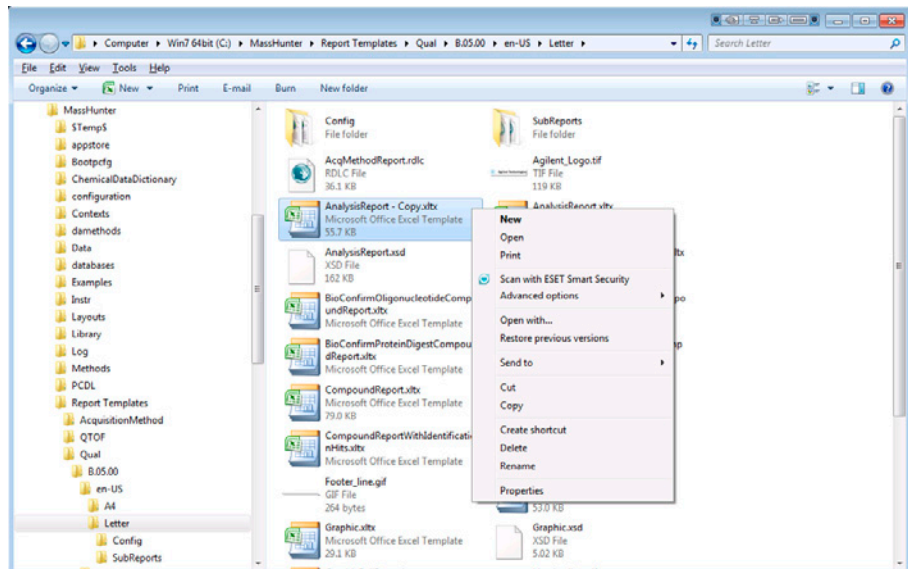
Arbeitsablauf	Methode	Layout	Method Editor-Abschnitt
General	default.m	Default.xml	Kein
BioConfirm Intact Protein	BioConfirm IntactProtein-Default.m	BioConfirm-IntactProtein-MaximumEntropy-Default.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm High Mass Intact Protein	BioConfirm IntactProtein HighMass Default.m	BioConfirm IntactProtein LMFE.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm Small Oligonucleotides	BioConfirmOligo nucleotideSmall.m	BioConfirmOligo-nucleotide.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm Large Oligonucleotides	BioConfirmOligo nucleotideLarge-Default.m	BioConfirmOligo-nucleotide.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm Protein Digest	BioConfirmProtein Digest-Default.m	BioConfirm ProteinDigest.xml	BioConfirm Workflow
BioConfirm Synthetic Peptide	BioConfirmSynthetic Peptide-Default.m	BioConfirm SyntheticPeptide.xml	BioConfirm Workflow
Chromatogram Peak Survey	ChromPeakSurvey-Default.m	Default.xml	Chromatogram Peak Survey Workflow

Arbeitsablauf	Methode	Layout	Method Editor-Abschnitt
Formula Confirmation and Sample Purity	SamplePurity-Default.m	SamplePurity-Default.xml	Formula Confirmation and Sample Purity Workflow
MS Target Compound Screening	Screening-Default.m	Screening-Default.xml	MS Target Compound Screening Workflow
GC Q-TOF Compound Screening	GC_Q-TOF.m	QTOFData.xml	GC/Q-TOF Compound Screening

Anpassen einer Reportvorlage

Detaillierte Informationen zum Ändern einer Reportvorlage finden Sie entweder in der Online-Hilfe für das Add-In „MassHunter Report Designer“, im Einarbeitungshandbuch für den Report Designer oder auf der Schulungs-DVD zur Reporterstellung. Die folgenden Schritte geben Ihnen einen kurzen Einblick in die Auswirkungen der Anpassung einer Vorlage.

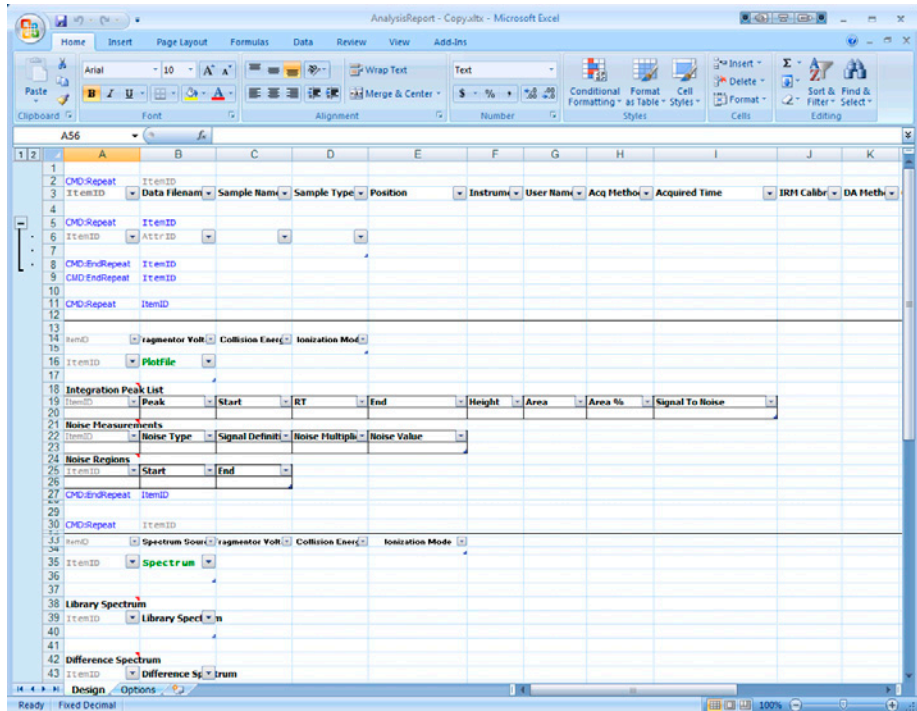
- 1 Wechseln Sie zu dem Ordner mit den Reportvorlagen. Standardmäßig handelt es sich um folgenden Ordner:
\MassHunter\Report Templates\Qual\B.05.00\en-US\Letter. Im Method Explorer auf der Registerkarte „General > Common Reporting Options > Templates“ können Sie einen anderen Ordner auswählen.
- 2 Erstellen Sie eine Kopie der Vorlage, die Sie ändern möchten. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf die Kopie, und klicken Sie auf **Eigenschaften**. Deaktivieren Sie ggf. das Kontrollkästchen **Schreibgeschützt**. Klicken Sie anschließend mit der rechten Maustaste auf die Kopie, und klicken Sie im Kontextmenü auf **Öffnen**.



Indem Sie die Vorlage auf diese Weise öffnen, teilen Sie Excel mit, dass es sich um eine Vorlagendatei handelt. Ist die Vorlage geöffnet, können Sie die Kopf- und Fußzeilen ändern und Parameterspalten hinzufügen, entfernen oder verschieben. Weitere Informationen finden Sie in der Online-Hilfe. Alle Vorlagen zur qualitativen Analyse sind schreibgeschützt. Sie ändern diese Eigenschaft, bevor Sie eine Vorlage bearbeiten.

Anpassen einer Reportvorlage

Viele Vorlagen werden mit dem Programm zur qualitativen Analyse installiert. In der Online-Hilfe zur qualitativen Analyse finden Sie weitere Informationen zum Inhalt der einzelnen Reportvorlagen.



3 Nehmen Sie die gewünschten Änderungen vor.

Weitere Informationen zum Bearbeiten einer Vorlage finden Sie entweder in der Online-Hilfe für das Add-In „MassHunter Report Designer“ oder auf der *Agilent MassHunter Reporting - Training DVD*.

4 Klicken Sie zum Speichern der neuen Vorlage entweder auf **Speichern**, oder klicken Sie über die Microsoft Office-Schaltfläche auf **Speichern unter > Andere Formate**.

5 Geben Sie einen aussagekräftigen Namen ein, und klicken Sie auf **Speichern**.

File name:	AnalysisReport - Copy.xlsx
Save as type:	Excel Template (*.xltx)

www.agilent.com

Inhalt dieses Buchs

Dieses Handbuch enthält Informationen, die Sie kennen müssen, um Agilent MassHunter Workstation Software - Qualitative Analyse mit GC/MS-Daten einsetzen zu können.

© Agilent Technologies, Inc. 2012

Revision A, November 2012



G3335-92147



Agilent Technologies