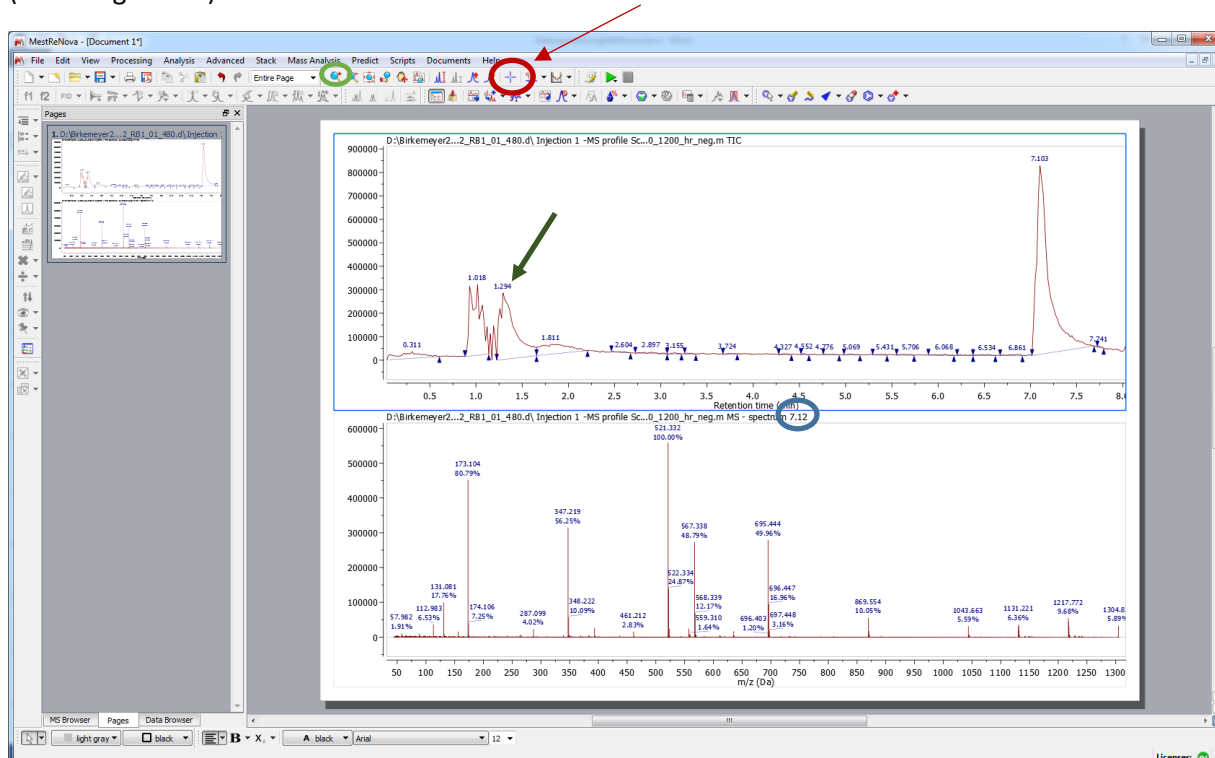


Datenauswertung mit Mnova

1. Öffnen des Datenfiles und Ansehen der Spektren

Nach Öffnen der Software können Sie Ihren kalibrierten Datenfile unter: "File/Open" öffnen. Dabei den gewünschten Datenfile (.d) mit Doppelklick öffnen und darin Analysis.baf (Impact oder micrOTOF) oder Analysis.yep (Esquire) mit Doppelklick anwählen. Die Software zeigt Ihnen den Totalionenstrom TIC (Gesamtintensität über die Zeit) im oberen Bereich und das Massenspektrum zu einer bestimmten Zeit (blau eingekreist) im unteren:



Aktivieren Sie den "crosshair" Button von der Toolbar (roter Pfeil). Erstellen Sie Ihr Massenspektrum zur gewünschten Zeit durch Klicken der linken Maustaste auf die gewünschte Region im TIC; das Massenspektrum dazu erscheint dann im unteren Panel. **Wir empfehlen, Ihr Massenspektrum entweder vom Peak Apex (höchster Punkt des Signals, grüner Pfeil) oder das Signal über die Peakbreite zwischen 0.7-2 min zu mitteln um Messvarianzen zu minimieren und ein besseres Isotopenverhältnis zu erhalten. Dazu drücken Sie den linken Mausbutton während Sie über die gewünschte Region im TIC ziehen, bevor Sie den Button wieder freigeben.** Der hintere Peak bei 7.1 min zeigt unsere Kontroll- und Kalibriersubstanz und kann von Ihnen vernachlässigt werden.

2. Bearbeiten des Massenspektrums

Das erstellte Massenspektrum können Sie aus der kombinierten Übersicht in eine Einzelansicht extrahieren, indem Sie es durch Anklicken des Spektrums aktivieren und nach Klicken der rechten Maustaste den Befehl „Extract Plot“ anwählen. Nun können Sie das Spektrum nach Belieben bearbeiten. Für adäquate Ergebnisse können Sie Unter „Edit/Properties/Mass Spectrum“ folgende Änderungen vornehmen:

- „Line“: die Farbe der Isotopenpeaks in schwarz ändern

- „Peaks“: eventuell die Farbe der Peakbeschriftung in schwarz ändern; die Dezimalstellen für hochaufgelöste Messungen auf vier erhöhen und für niederaufgelöste Messungen auf null setzen*; den Haken bei „Show Second Line Label“ entfernen
- „Axes/Vertical“: einen Haken bei „Label“ einfügen
- Die Änderungen mit OK oder Apply übernehmen

* Bitte bedenken Sie, dass die Anzahl der Kommastellen nicht höher als die Präzision des Instrumentes sein sollte (5 ppm für hochauflösende Analysen (micrOTOF und Impact) und 1 amu für Niederauflösung (Esquire)). Beachten Sie bitte ebenfalls, dass die Identität Ihrer Substanz in einer hochauflösenden Messung nicht bestätigt ist, wenn die Abweichung mehr als 5 ppm ist, in einer niederauflösenden Messung darf die Abweichung max. 0,5 amu betragen.

3. Exportieren Sie das Massenspektrum als Grafik

Aktivieren Sie den „zoom“ Button der Toolbar (grün eingekreist). Ziehen Sie ein Rechteck um den gewünschten Ausschnitt Ihres Massenspektrums, während Sie die linke Maustaste gedrückt halten. Nun können Sie das Spektrum exportieren, indem Sie „copy“ vom Dropdown-Menü wählen (rechte Maustaste im unteren Panel drücken) und die Zwischenablage in die gewünschte Zielsoftware einfügen oder indem Sie „Save as...“ oder „Export pdf“ vom „File“-Menü wählen.

4. Datenauswertung:

Die ESI MS Analyse produziert im positiven Modus m/z Werte, die den Addukten einer Substanz mit Protonen $m/z = [M+1]^+$, Natrium-Ionen $m/z = [M+23]^+$ oder Kalium-Ionen $m/z = [M+39]^+$ entsprechen. Wenn mehr als eines dieser Ionen oder Mischungen davon (evtl. erfolgt jedoch auch ein Proton-Ion Austausch) mit der Substanz assoziiert sind, trägt das Molekül eine Mehrfachladung und Sie werden das sich daraus ergebende m/z beobachten, z.B. $m/z = ([M+23+23]/2)^{2+}$ für die Anlagerung zweier Natriumionen. Der Abstand der Isotopenpeaks beträgt dabei 1/Ladungszahl.

Im negativen Modus kommen Deprotonierungen oder Anlagerungen negativer, in der Lösung vorhandener Ionen in Frage.

Darüber hinaus kann Ihr Zielmolekül auch mit neutralen Lösemittelmolekülen oder anderen Additiven Ihrer Probenmischung kombinieren.

Bei der Identifizierung der Anlagerungen kann das Isotopenmuster der Substanz wertvolle Hinweise geben. Sie können das erwartete Isotopenmuster über Mass analysis/Spectrum prediction/predict simulieren.

Die mögliche elementare Zusammensetzung einer unbekanntes Substanz können Sie über Mass analysis/Elemental composition/Calculate from m/z ermitteln; wir empfehlen dazu eine vorherige Einstellung der Mass analysis/Elemental composition/Constraints.

Wenn Sie weitere Hilfestellung bei der Interpretation Ihrer Daten benötigen, können Sie sich gern auch weiterhin an uns wenden. Unsere Kontaktdaten sind:

Frau Oehme (Tel. 36095), Frau Billig (Tel. 36077), Frau Birkemeyer (Leiterin, Tel. 36092).

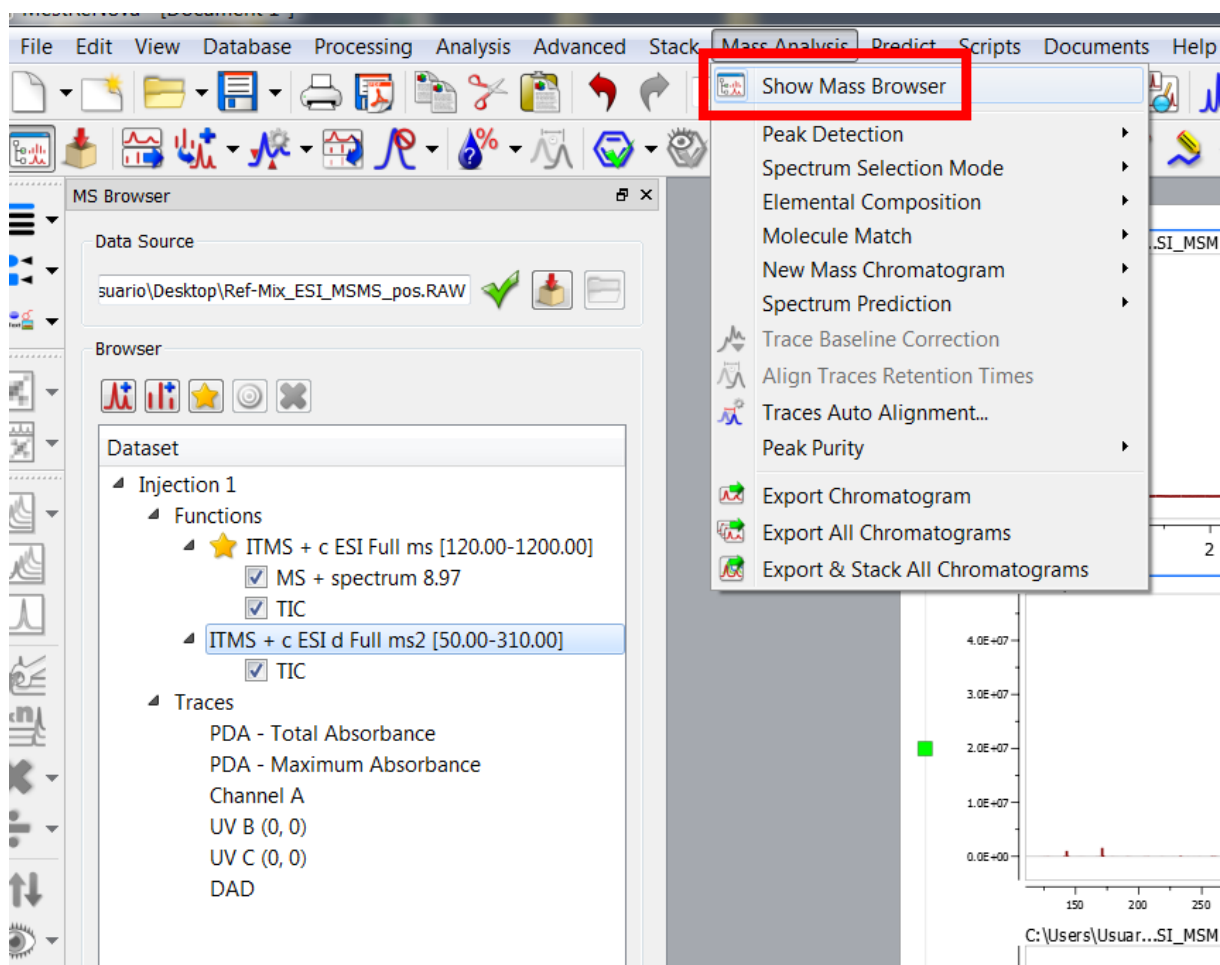
GC-MS, LC-MS und MSMS Daten

Sie können Ihren Messfile öffnen und sich die Spektren an den Peakapices (höchster Punkt des Signals) wie oben beschrieben ansehen.

Den zeitlichen Verlauf bestimmter Ionen können Sie sich ansehen, indem Sie im Dropdown-Menü 'Mass Analysis/New Mass Chromatogram' (s. Abbildung) die gewünschte m/z eingeben. Damit können Sie überprüfen, ob ein bestimmtes Ion auch tatsächlich zum Signal gehört.

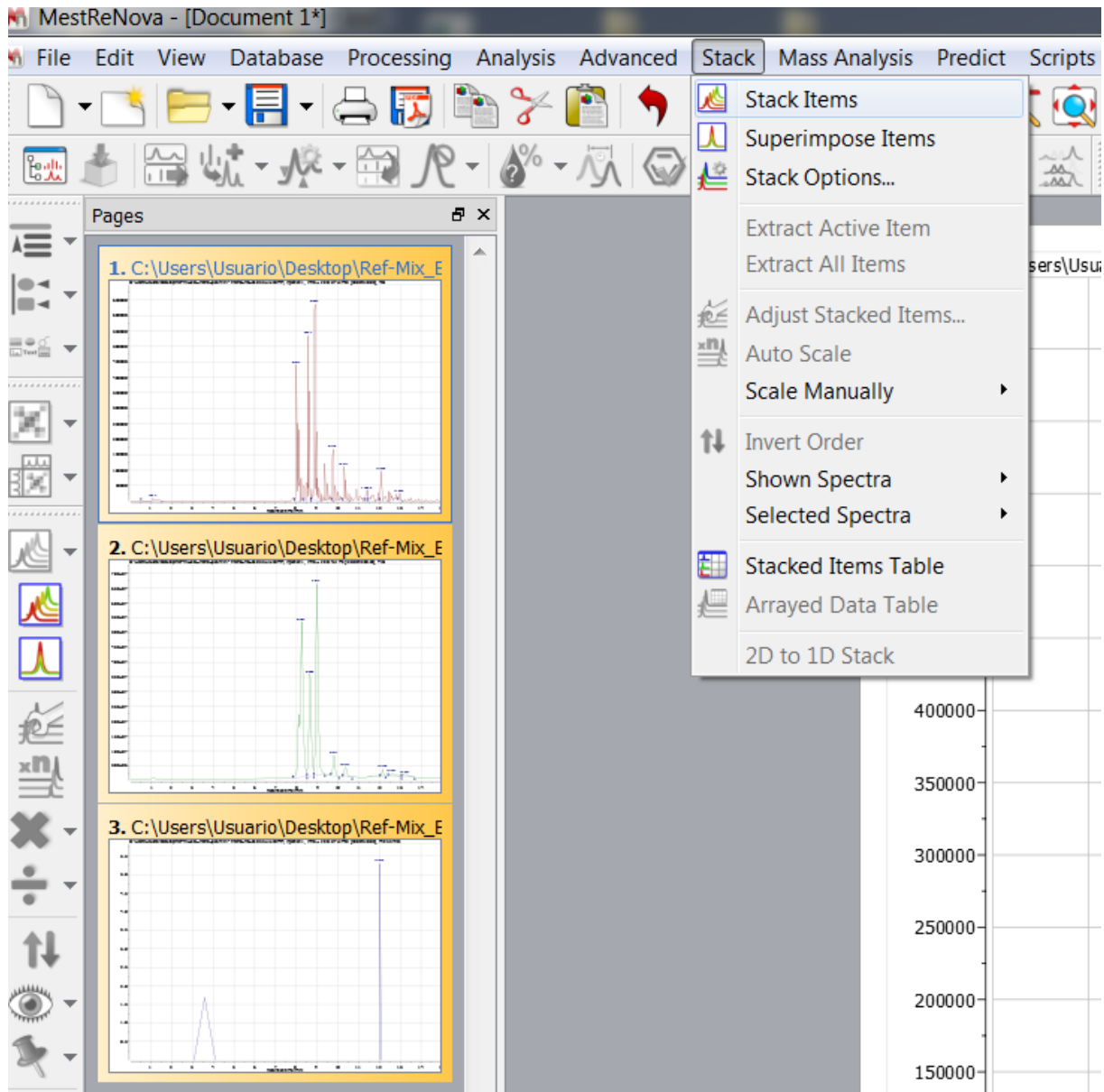
Die Software besitzt eine automatische Peakdetektion für jede angezeigte Chromatogrammspur (zeitlicher Verlauf der Signalintensität, Totalionenstrom oder auch einzelne Ionen). Diese können Sie vom Dropdown-Menü (Drücken der rechten Maustaste im oberen rechten Panel) „detect peaks“ aktivieren.

Für die Auswertung von MSMS Analysen öffnen Sie am besten den MS Browser, 'Mass Analysis/Show Mass Browser'; dieser erscheint dann z.B. in der Explorerleiste (s. Abbildung linke Seite) bzw. kann dort hingezogen werden. Doppelklicken Sie die "ms2"-Funktion um das entsprechende Totalionenchromatogramm zu öffnen (in der Abb. unten blau hinterlegt):



Sie können Ihre Chromatogrammspuren übereinanderlegen, indem Sie 'Mass Analysis/Export&Stack Chromatograms' wählen. Wenn Sie Chromatogramme aus verschiedenen Datenfiles

übereinanderlegen wollen, müssen Sie sie in dasselbe Mnova-Dokument kopieren/einladen, alle Seiten im „Page Navigator“ markieren und dem Menu ‘Stack/Stack Items’ folgen (s. Abbildung unten):



Grafiken können Sie sich wie im oberen Abschnitt bereits beschrieben erzeugen.

Wenn Sie bei der Auswertung der Daten unsere Hilfe benötigen, können Sie gern unsere Kooperation in Anspruch nehmen. Insbesondere benötigen Sie diese für den Bibliotheksabgleich von EI-Spektren, da diese Bibliotheken aus Kostengründen nicht als Campuslizenz zur Verfügung gestellt werden können.

Eine ausführlichere Anleitung für die Anwendung der Software erhalten Sie im Mnova Manual (<http://research.uni-leipzig.de/nmr/MNOVA/>).