

## Features

- **automatisierte, umfassende Auswertung:**

Schnelle, automatisierte, umfassende Auswertung von Chromatographie/MS-Daten auf Basis von Massenfragmente aus Fullscan und SIM-Messungen.

- **Zeitersparnis bei:**

Auswertung

Methodenentwicklung

- **Neue Applikationen möglich:**

In Kombination mit chemometrischen Auswertetechniken.

Durch weitergehende Nutzung der Informationen aus komplexen Chromatographie/MS-Daten.

- **Nutzung quasi aller Informationen durch Totalintegration für:**

Qualitätssicherung z. B. durch: iO/niO-Vergleiche

Benchmarking

Additivquantifizierung

Andere

## Impressum MS-SIM-Tools

### Kontakt

EMSAT Services GbR

Dr. Jürgen Odermatt, Philipp Hamann, Philip Wenig

Höperfeld 24

21033 Hamburg

Tel. +49 (40) 739 62-528

Fax +49 (40) 739 62-599

[juergen.odermatt@emsat-services.de](mailto:juergen.odermatt@emsat-services.de)

[philip.wenig@emsat-services.de](mailto:philip.wenig@emsat-services.de)

[philipp.hamann@emsat-services.de](mailto:philipp.hamann@emsat-services.de)

<http://www.emsat-services.de>

### Vertrieb durch:

SIM

Scientific Instruments Manufacturer GmbH

Im Erlengrund 21

46149 Oberhausen

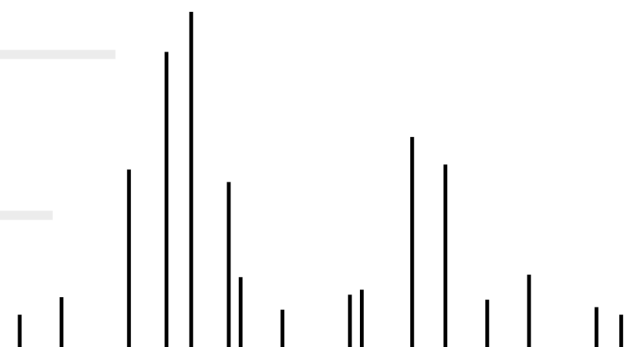
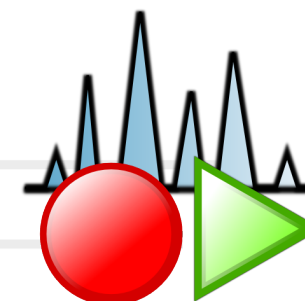
Tel. +49 (208) 94 10 78-0

Fax +49 (208) 94 10 78-88

<http://www.sim-gmbh.de>

# MS-SIM-Tools

**Effiziente Auswertung von Chromatographie/MS-Daten durch Automatisierung**

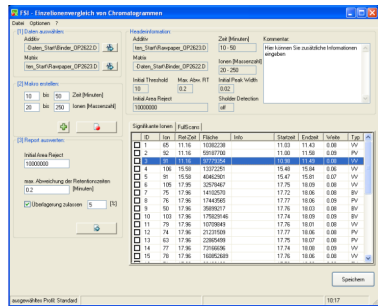


# MS-SIM-Tools

Die MS-SIM-Tools bestehen aus verschiedenen Modulen zur weitgehend automatisierten Auswertung von Chromatographie/MS-Daten. Die MS-SIM-Tools ermöglichen eine schnelle, effiziente Auswertung von Chromatographie/MS-Daten für verschiedenste Zwecke:

- Chromatogrammvergleich**
- Methodenentwicklung**
- Kalibrierung**
- Quantifizierung**
- Overlay**
- Datenvorbereitung für chemometrische Auswertungen**

Automatisch erstellte Ionenlisten mit den problemrelevanten Massenspuren und den dazugehörigen Retentionszeitfenster können für die weitgehend automatische Erstellung von Methoden sowie die anschließende automatisierte Quantifizierung einer großen Anzahl von Chromatogrammen verwendet werden. Die Module können für Full-Scan-Messungen oder auch für Messungen, die im Selective-Ion-Mode aufgenommen wurden, verwendet werden. Automatisch

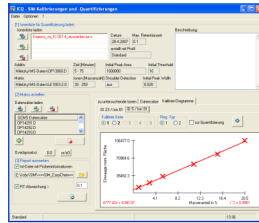


erstellte Ionenlisten können aber auch zur Datenaufbereitung, die für weitergehende chemometrische Auswertungen nötig ist, genutzt werden. Durch die

Verwendung der MS-SIM-Tools ist nicht nur eine schnellere Auswertung einer großen Anzahl von Datensätzen möglich, sondern auch eine wesentlich umfangreichere Nutzung der in den Datensätzen enthaltenen Informationen.

## Chromatogrammvergleich - FSI

Mit dem Modul FSI – find significant ions – wird eine Totalintegration mit einstellbaren Randbedingungen durchgeführt. Hierdurch werden alle Signale, die in einem Chromatographie/MS-Datensatz enthalten sind, berücksichtigt. An zwei Datensätzen durchgeführt, liefert der Vergleich der durch die Totalintegration erhaltenen Informationen eine Ionenliste, die nur die



Unterschiede zwischen den beiden Datensätzen aufweist. Naheliegende Anwendungen sind der Vergleich von iO- und niO- Proben (iO = in Ordnung, niO = nicht in Ordnung) oder auch die Entwicklung von Methoden zur Quantifizierung.

## Datenvorbereitung für chemometrische Auswertungen

Der hohe Aufwand bei der Datenvorbereitung für chemometrische Auswertungen kann durch das Modul MVA – multivariate analysis – stark reduziert werden. Das MVA-Modul sucht aus beliebig vielen Chromatographie/MS-Datensätzen jeweils die wichtigsten Informationen heraus und erstellt eine

entsprechende Ionenliste für jeden untersuchten Datensatz. Diese Datensätze werden zu einer gemeinsamen Ionenliste zusammengeführt, aus der alle doppelt vorkommenden Signale entfernt wurden. Die gemeinsame Ionenliste kann in dem ICQ-Modul zur quantitativen Auswertung beliebig vieler Chromatographie/MS-Datensätze genutzt werden. Die Integrationsergebnisse werden in einer für die weitergehende Chemometrie geeigneten Form aufbereitet.

## Kalibrieren und Quantifizieren

Ionenlisten, die mit den beiden Modulen FSI oder MVA erstellt wurden, können mit dem Modul ICQ – ion calibration and quantification - auf beliebig viele Chromatographie/MS-Datensätze angewendet werden. Das Beispiel zur Entwicklung einer Methode zur Additivquantifizierung zeigt, wie mit Hilfe des ICQ-Moduls viele Massenfragmente über die Qualität ihrer Kalibrierkurven oder durch den Overlaymodus elegant auf Ihre Eignung für quantitative Zwecke überprüft werden können.

