

# Mestre Nova

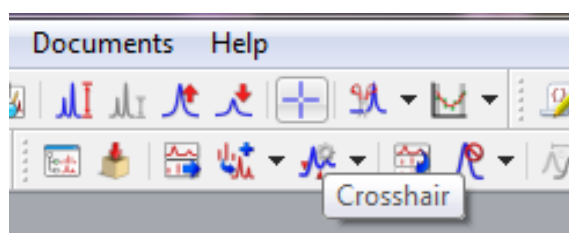
## Daten öffnen

File -> Open Directory -> ESI Datenfile auswählen

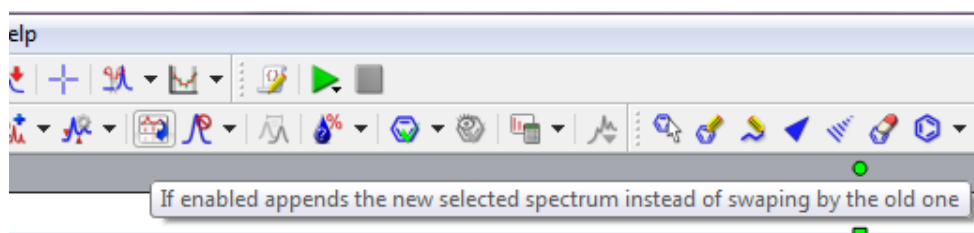
Oder

Per drag and drop reinziehen (auch mehrere möglich)

Mit dem Crosshair kann man Bereiche markieren und sich die Spektren anzeigen lassen



## Zweites Spektrum darunter anzeigen lassen

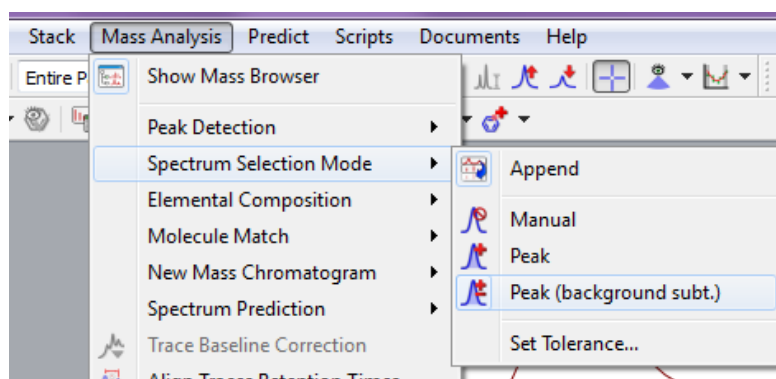


Aktivieren und einen Bereich mit dem Crosshair aufziehen (so kann man sich auch den Background ansehen)

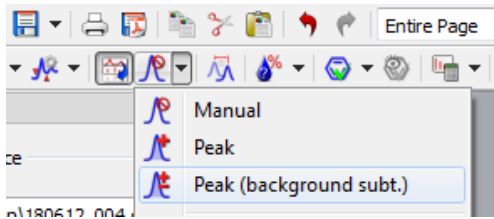
## Background abziehen

Der Peak muss als solcher definiert sein (meist automatisch, wenn nicht über rechte Maustaste -> add Peak -> mit der linken Maustaste den Bereich markieren)

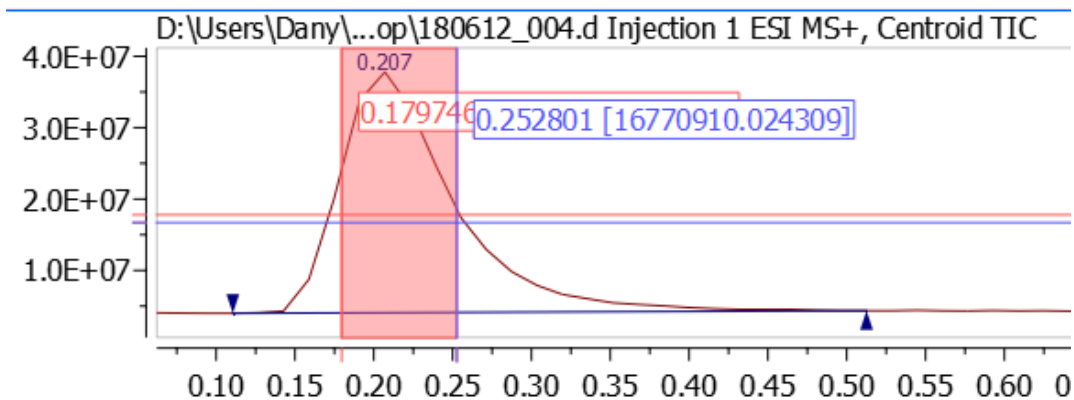
Das Crosshair aktivieren, anschließend entweder über das Menü



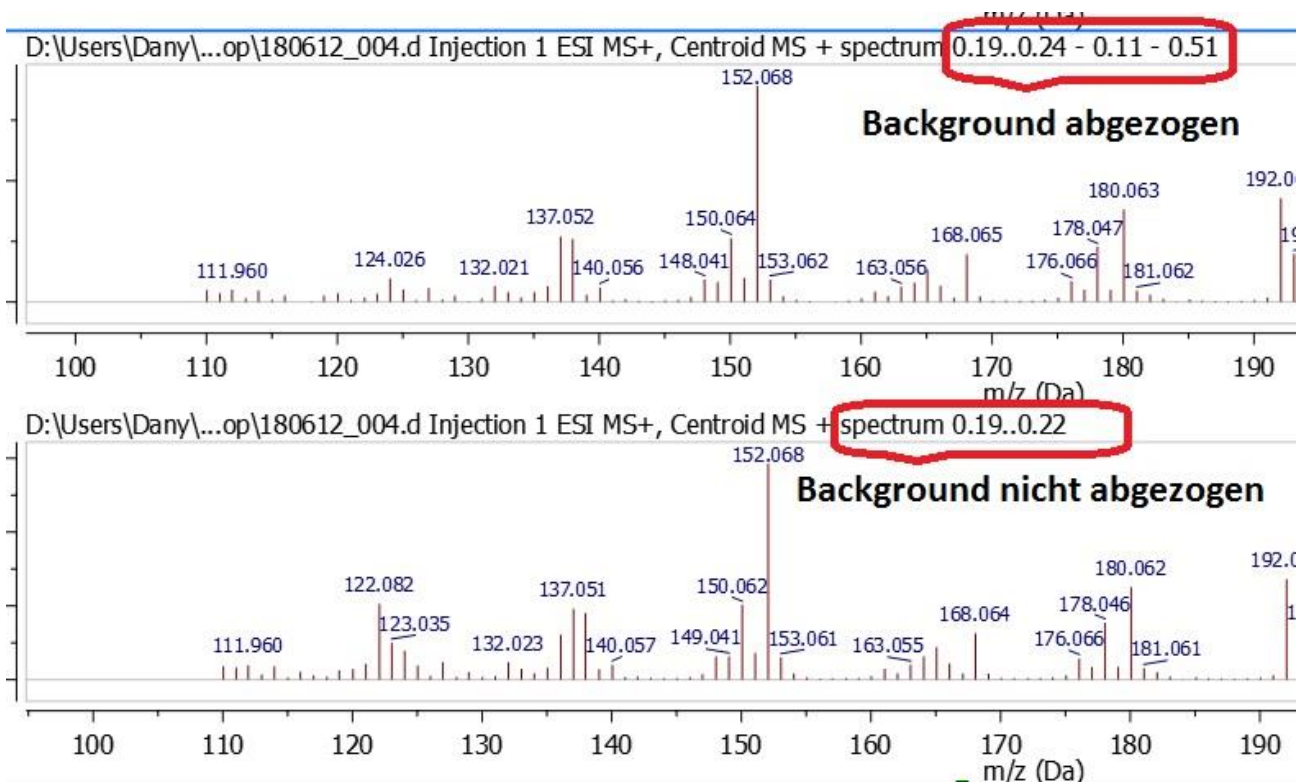
Oder direkt über die Schaltfläche



Die Funktion aktivieren, anschließend mit der linken Maustaste einen Bereich im Peak markieren oder einfach in den Peak klicken.

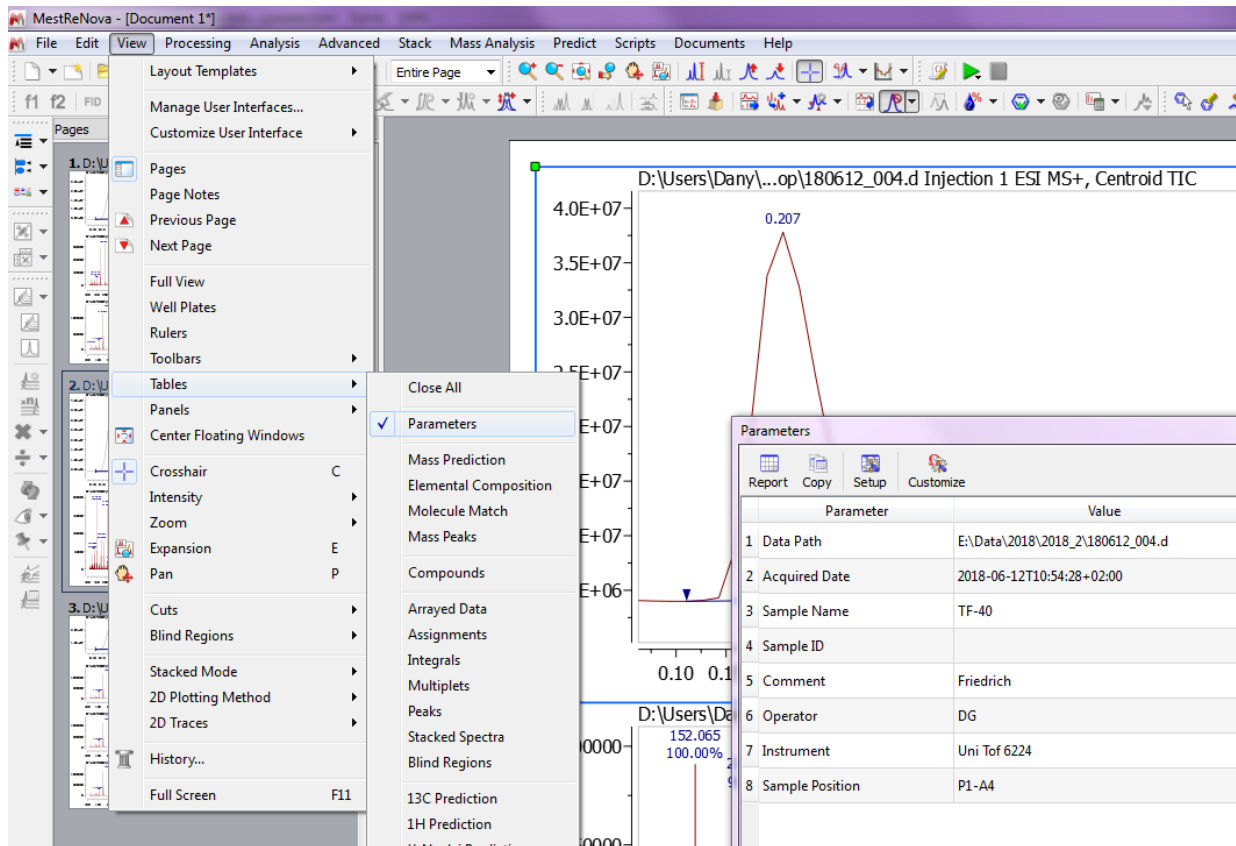


Er zieht nun automatisch das MS-Spektrum raus und zieht den Background (links und rechts vom Peak einen Datenpunkt) ab



## Probeninformationen anzeigen lassen

Auf View -> Tables -> Parameters



The screenshot shows the MestReNova software interface. The 'View' menu is open, and the path 'View -> Tables -> Parameters' is highlighted. In the background, a chromatogram plot is visible with a peak at 0.207 minutes. The y-axis ranges from 0 to 4.0E+07. A 'Parameters' dialog box is open in the foreground, displaying the following data:

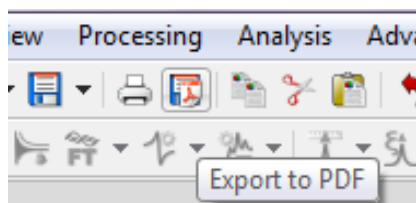
| Parameter         | Value                            |
|-------------------|----------------------------------|
| 1 Data Path       | E:\Data\2018\2018_2\180612_004.d |
| 2 Acquired Date   | 2018-06-12T10:54:28+02:00        |
| 3 Sample Name     | TF-40                            |
| 4 Sample ID       |                                  |
| 5 Comment         | Friedrich                        |
| 6 Operator        | DG                               |
| 7 Instrument      | Uni ToF 6224                     |
| 8 Sample Position | P1-A4                            |

## PDF generieren:

Links die „Seite“ mit Linksklick markieren, dann auf File -> Export to PDF klicken

Oder

Auf die Schaltfläche klicken



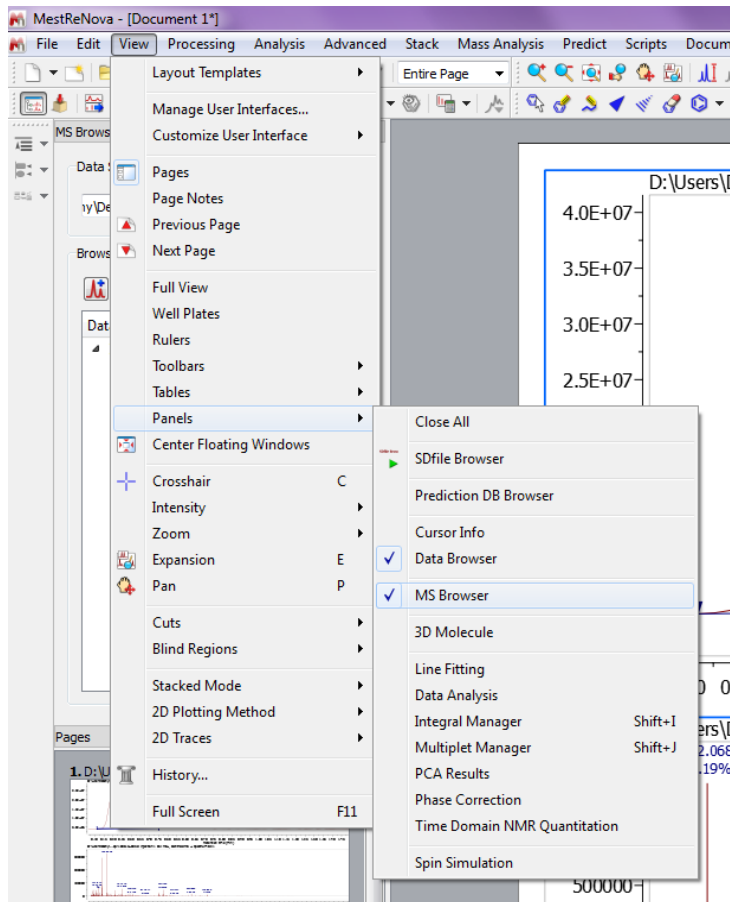
Oder

Auf Print und dann PDF als Drucker einstellen

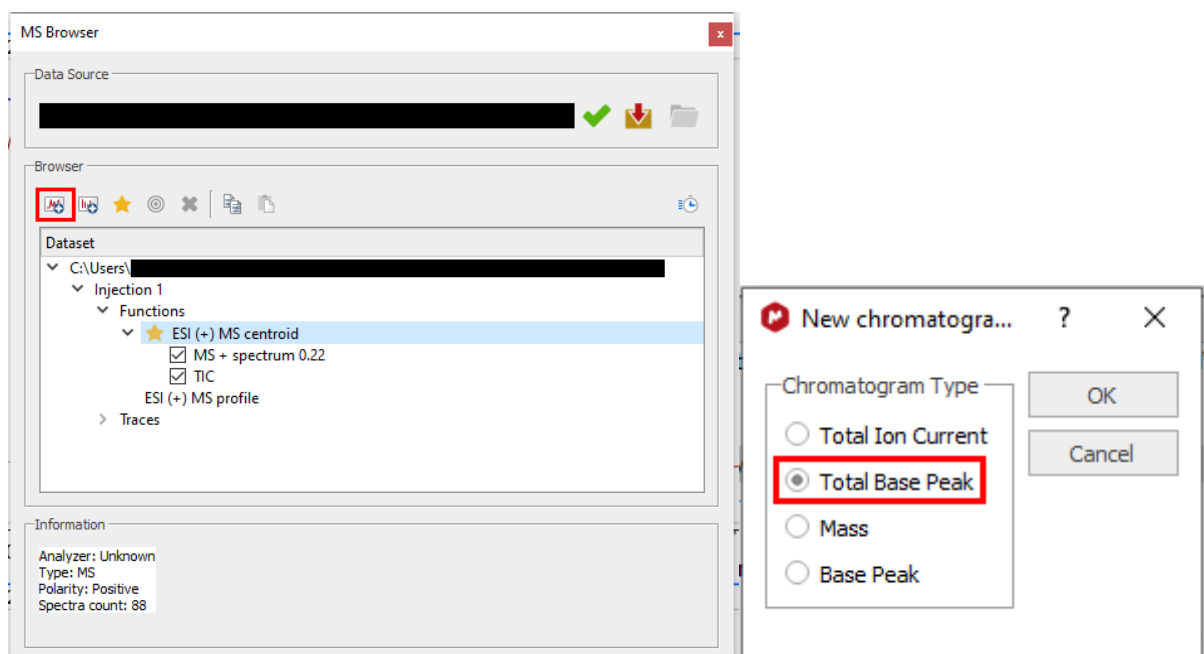
## Andere Messwerte anzeigen lassen

(z.B. BPC oder UV-Spuren)

View -> Panels -> MS Browser

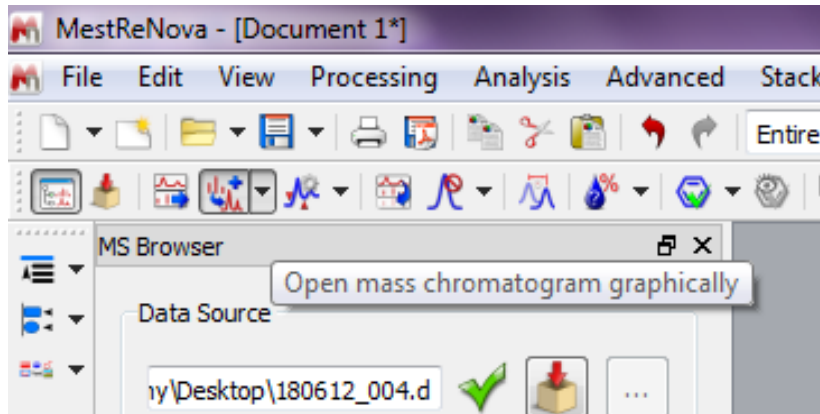


Dann „Open new chromatogram“ (Rot umrandet) anklicken und „Total Base Peak“ auswählen.

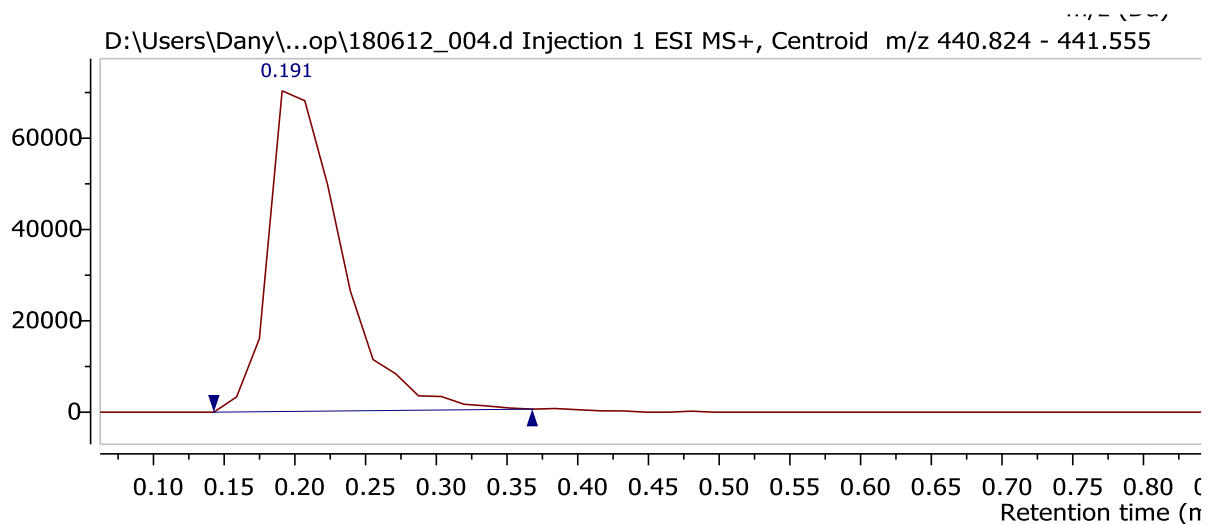
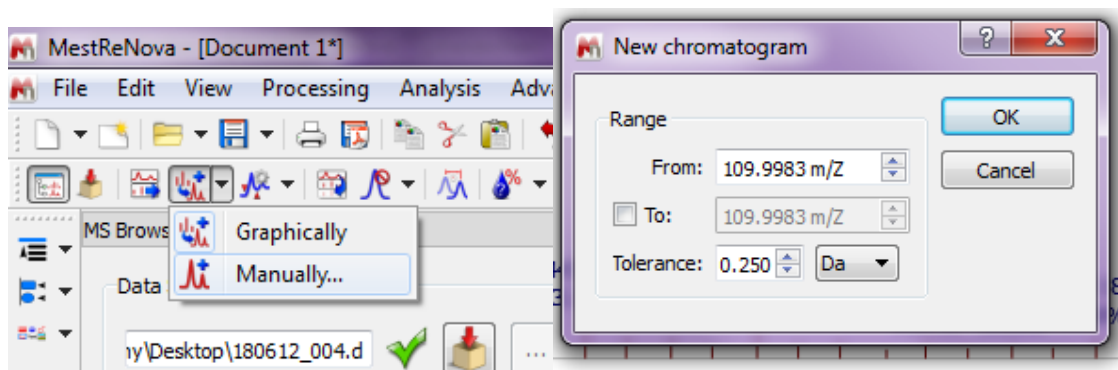


## EIC erstellen

Im Spektrum ranzoomen bis man bequem den gewünschten Peak sieht -> auf die Schaltfläche „Open mass chromatogram graphically“ klicken und gewünschten Peak/-bereich markieren. Anschließend erscheint unten das EIC

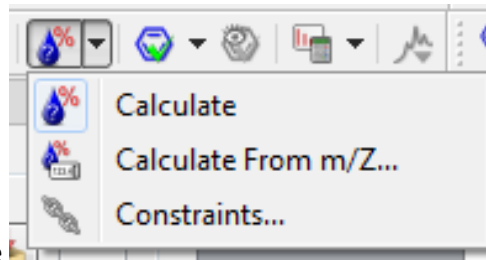


Oder manuell einen Bereich angeben



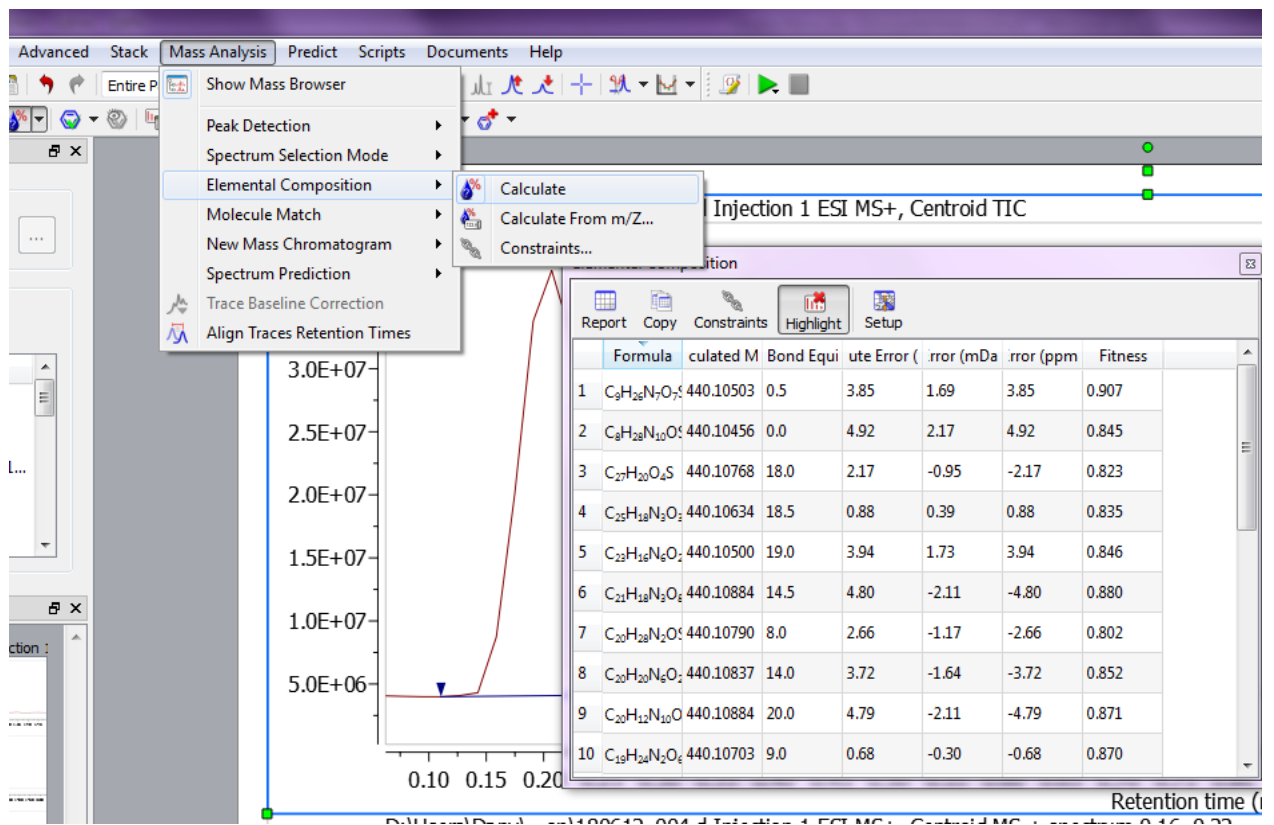
## Summenformeln berechnen

Unter Mass Analysis -> elemental Composition -> calculate klicken und den Peak anklicken



Oder direkt über die Schaltfläche

Einstellungen bzw. Eingrenzungen unter Constraints sehen / ändern



0.10 0.15 0.20 0.25 0.30 0.35 0.40 0.45 0.50 0.55 0.60 0.65 0.70 0.75 0.80 0.85 0.90 (min)

D:\Users\Dany\...op\180612\_004.d Injection 1 ESI MS+, Centroid MS + spectrum 0.17..0.29

