

Bachelor-Abschlussarbeit

Thema: Vergleich von Software-Tools zur Optimierung der Quantifizierung von MDR-regulierten Substanzen

Zusammenfassung:

Das Ziel dieser Arbeit war die Erstellung eines Optimierungskonzepts und den damit einhergehenden Vergleich unterschiedlicher gängiger Software-Tools zur Auswertung analytischer Daten von MDR-regulierten Substanzen. Für die Erstellung des Konzeptes erfolgte die Datensammlung mittels UHPLC-QTOF und GC-MS mit vier ausgewählten MDR-regulierten Reinsubstanzen unterschiedlicher Substanzgruppen. Diese sind 2-Naphthylamin, Phthalsäure-bis-methylglykolester, Azobenzen und Anthrachinon. Als dazugehöriger Qualitätsstandard fungierte die MDR-regulierte interne Standardsubstanz 4-Aminobiphenyl. Untersucht wurde die Quantifizierung mithilfe des Peakflächen-Quotienten von interner Standardsubstanz und Analyten und die Daten wurden mittels DIN 32645 validiert. Die Faktoren der Substanzverschleppung, Wiederholbarkeit, Mess-Reproduzierbarkeit und Auswerte-Reproduzierbarkeit wurden geprüft, um ausschlaggebende Faktoren durch die Substanzen und Auswerte-Bias zu erkennen. Anschließend wurde diese Datensammlung mit den sechs Software-Tools MassHunter Qualitative Analysis, OpenChrom, AMDIS_32, MZmine3, Enhanced Chemstation MSD Chemstation und MassHunter Quantitative Analysis ausgewertet. Die Ergebnisse wurden jeweils unter Werkseinstellungen verglichen, wobei die MassHunter Quantitative Analysis, als geeignetstes Software-Tool für die Quantifizierung befunden wurde.

Verfasser/in: Gordon Lukas Rowecki
Betreuer/in: Prof. Dr. rer. nat. Dipl.-Chem. Veronika Hellwig
Datum der Abgabe: 30.01.2024