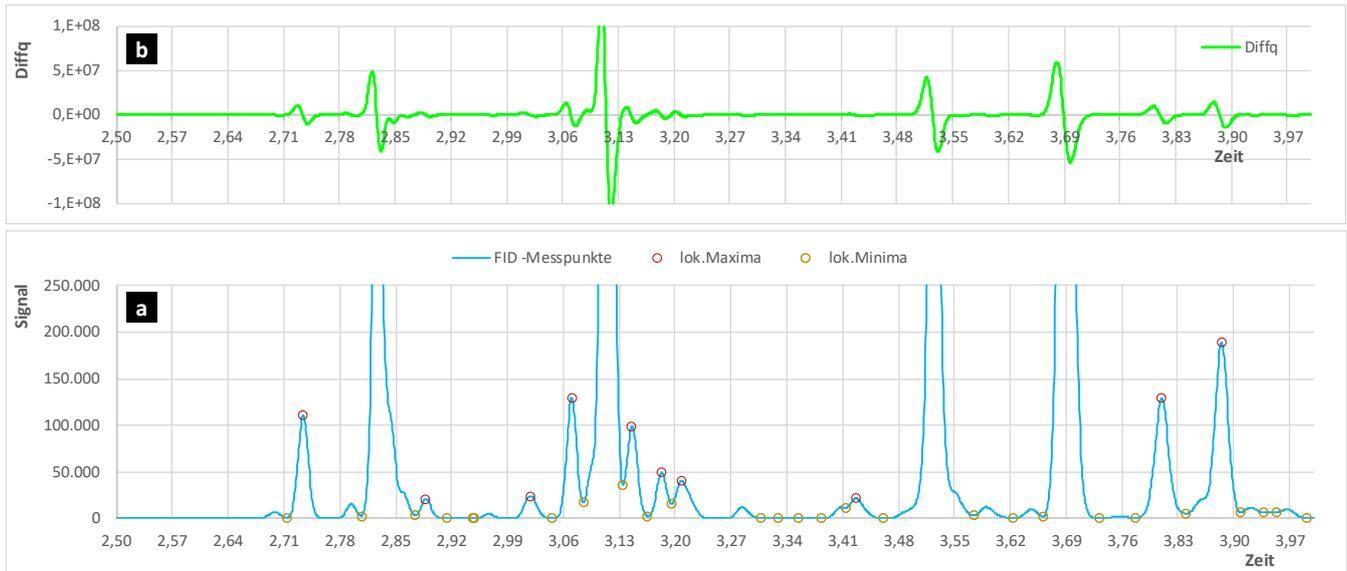


# GC-Chromatogramm



		LetzteZeile 27614				Anzahl MinPeaks# 1000				Anzahl MaxPeaks# 77		
Kriteriumspalten		FID -Messpunkte		Min/MaxSuche		Minima			Maxima			
PeakMin- kriterium #	PeakMax- kriterium #	Zeit	Signal	Zeit	Diffq	Peak#	Zeit	Signal	IntMinIndex	Zeit	Signal	IntMaxIndex
0	0	0,0000	-81	0,0004	-136800	1	2,713	851	3257	2,734	111042	3282
0	0	0,0008	-195	0,0013	24000	2	2,807	2709	3369	2,827	461121	3393
0	0	0,0017	-175	0,0021	58800	3	2,874	3396	3450	2,888	21106	3466
0	0	0,0025	-126	0,0029	55200	4	2,914	507	3498	3,019	24157	3624
0	0	0,0033	-80	0,0038	27600	5	2,947	114	3537	3,071	129675	3686

Gegeben sind die Ausgabedaten eines Gaschromatographen mit einem FID-Detektor. Diese beinhalten die Signalwerte des Detektors und eine Peakauswertung der internen GC-Software.

Wir wollen die Peakauswertung ( $t_{\text{PeakExtremum}}$ ,  $A_{\text{Peak}}$ ) einmal mit Excel durchführen und diese dann mit dem Ergebnis der GC-Software vergleichen. Wir teilen die Aufgabe dafür in 2 Teile auf.

## 1. Teil: Ermittlung der lokalen Minima und Maxima (Extrema)

**a** Wir importieren zunächst die Rohdaten des FIDs aus der Datei "FID\_Signal.txt" (-> über Textimportassistent). Anschließend stellen wir das Chromatogramm graphisch dar (x,y-Diagramm).

**b** Für die Suche nach den Extrema nutzen wir den Differenzenquotienten (1.Abl.). Wir brauchen dafür zwei Spalten. Eigentlich brauchen wir nur eine, die gemittelten Zeitwerte dienen nur der grafischen Anschauung im Diagramm.

$$\text{Diffq} = \Delta(\text{Signal})/\Delta(\text{Zeit})$$

**c** Der Diffq zeigt bei jedem Nulldurchgang ein Extremum an:

Minimum ->  $y'_{i-1} \leq 0$  und  $y'_i > 0$

Maximum ->  $y'_{i-1} > 0$  und  $y'_i \leq 0$

Für jedes Extremum erstellen wir nun eine Kriteriumspalte und bauen uns einen Zähler, der sich bei jeder wahren Prüfung (Auftreten von Extremum) um 1 erhöht.

$$\text{PeakMinKriterium\#} = \text{WENN}(\text{UND}(y'_{i-1} \leq 0; y'_i > 0; \dots); \text{ZelleDarüber} + 1; \text{ZelleDarüber})$$

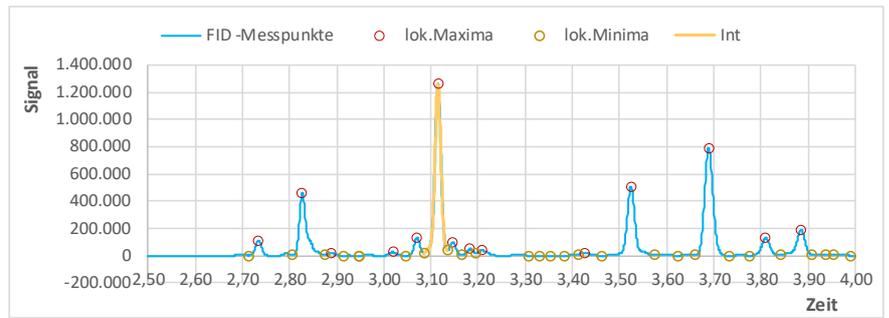
Als weitere Prüfung in der UND-Funktion können wir eine maximale Peakhöhe angeben. Dadurch können wir uns nur die signifikanten Peaks darstellen lassen.

**d** Diese beiden Zähler nutzen wir nun um jedes Extremum zu finden. Das Ganze machen wir mit dem SVERWEIS, wodurch eine Spalte für das Suchkriterium (Peak#) nötig wird. Nun sehen wir auch, weshalb die Kriteriumspalten vorne stehen.

$$\text{Zeit} = \text{SVERWEIS}(\text{Peak\#}; \$A\$xx; \$D\$xx; 3; \text{FALSCH}) \rightarrow \text{für Minimum}$$

Wir stellen für beide Extrema je 1000 Zeilen zur Verfügung und lassen uns das Ergebnis im Diagramm a) anzeigen.

IntPeak#	a	6	
Min. Peakhöhe Minimum		100	
Min. Peakhöhe Maximum	c	20000	
IntMin1Index		3703	
IntMin2Index		3763	Vergleich
PeakZeitMax		3,115	3,12
PeakHöheMax		1260546	1260494
Summe Teilintegrale	k	20275	21839



FID Messpunkte		Integration (Trapez)			GC Messprotokoll						
Zeit	Signal	IntIndex	Zeit	Signal	Teilintegrale	Index	Name	Time	Height	Area	Area %
0,0000	-81	3703	3,085	17447		1	JNKNOWN	2,73	111057,2	1849,7	0,64
0,0008	-195	3704	3,086	17879	14,7	2	JNKNOWN	2,83	461119,8	9148	3,165
0,0017	-175	3705	3,087	19305	15,5	3	JNKNOWN	3,02	24121,6	450,6	0,156
0,0025	-126	3706	3,088	21571	17,0	4	JNKNOWN	3,07	129630,5	1961,6	0,679
0,0033	-80	3707	3,088	24593	19,2	5	JNKNOWN	3,12	1260494	21838,8	7,556
0,0042	-57	3708	3,089	28137	22,0	6	JNKNOWN	3,18	48914,5	1657,3	0,573
0,0050	-39	3709	3,090	32137	25,1	7	JNKNOWN	3,43	21869,8	641,4	0,222
0,0058	-34	3710	3,091	36369	28,5	8	JNKNOWN	3,53	506991	10151	3,512
0,0067	-28	3711	3,092	40689	32,1	9	JNKNOWN	3,69	791520,6	16865,3	5,835

## 2. Teil: Flächenintegration eines auswählbaren Peaks

Damit die Aufgabe nicht explodiert, betrachten wir im Weiteren immer nur einen einzelnen ausgewählten Peak (**IntPeak#**), dessen Werte wir für die Integration aus den FID Messpunkten extrahieren müssen. Als Referenz/Suchkriterium nehmen wir den Zeitpunkt des ausgewählten Maximums (**PeakZeitMax**). Dadurch das auf ein Maximum immer ein Minimum folgt und umgekehrt, können wir davon ausgehen das jeweils vor und hinter einem Maximum immer ein Minimum liegt. Diese beiden Minima, vor und hinter einem Maximum, nehmen wir als Integrationsgrenzen. Als Positionsbestimmung der Peakwerte im Messpunktdatensatz erstellen wir zwei Indizes (**IntMin1Index**, **IntMin2Index**). Mit diesen können wir uns nun die peakrelevanten Messpunkte ausgeben lassen die wir danach integrieren.

**f** Als erstes erweitern wir unseren Spaltenbereich der Extrema in Teil 1 um eine Spalte (**IntMinIndex**), um uns dann die Minimapositionen innerhalb des Messpunktdatensatzes ausgeben zu lassen (**IntMaxIndex** nur zur Vervollständg.).

**IntMinIndex** = VERGLEICH(Peak#; \$A\$xx; \$A\$xx; 0)

**g** Nun erstellen wir ein neues Tabellenblatt und fügen die FID-Rohdaten wie in a) erneut dort ein - die Peakintegration wollen wir aufgrund der vielen Messpunkte separat bearbeiten.

**h** Als nächstes berechnen wir unsere benötigten Parameter und ordnen sie übersichtlich an.

**IntPeak#** -> Eingabe: 1,2,...,nPeak#

**PeakZeitMax** = INDEX(Maxima(Zeit); IntPeak#)

**PeakHöheMax** = INDEX(Maxima(Signal); IntPeak#)

**IntMin1Index** = INDEX(IntMinIndex; VERGLEICH(PeakZeitMax; Minima(Zeit); 1))

**IntMin2Index** = INDEX(IntMinIndex; VERGLEICH(PeakZeitMax; Minima(Zeit); 1)+1)

**i** Jetzt erstellen wir den Integrationsbereich für unseren ausgewählten Peak. Wir beginnen mit dem Startwert **IntMin1Index** und erhöhen den laufenden Wert (**IntIndex**) mit jeder weiteren Zeile um (+1). Hier müssen wir die Erhöhung mit einer WENN-Prüfung ab dem Grenzwert **IntMin2Index** limitieren.

**Bsp.:** WENNNV(WENN(ZelleDarüber<IntMin2Index; ZelleDarüber+1; NV()); NV())

(hier wird bei Überschreitung der Fehler #NV zurückgegeben. Das Diagramm kann damit besser umgehen.)

Zudem müssen immer ausreichend Zeilen für den Integrationsbereich vorhanden sein)

**j** Über **IntIndex** können wir uns nun die peakrelevanten Messpkt. (Zeit; Signal) mit der Funktion INDEX ausgeben lassen.

**Zeit** = INDEX(Messpunkte(Zeit); IntIndex) -> für Integration

**k** Zu guter Letzt können wir die Teilintegrale ausrechnen. Hierfür nehmen wir die Trapezformel.

**Teilintegrale** = WENNFEHLER(Delta(Zeit)\*Delta(Signal)/2; 0) -> für Integration

Die Summe dieser Teilintegrale ergibt abschließend die Peakfläche.

Schlussendlich können wir die ausgewählten Peaks mit dem Ergebnis der GC-Software vergleichen.

Durch Variation von Min. Peakhöhe Minimum können auch die Integrationsgrenzen gut eingestellt werden, ohne dass sich der ausgewählte Peak ändert. Flächenabweichungen können durch Wahl einer genaueren Integrationsmethode weiter minimiert werden. Glückwunsch, Sie können stolz auf sich sein!