

## Kurzfassung

### Graphische Benutzeroberfläche für MS<sup>n</sup> Lipidfragmentierungsregeln

Lipide sind wichtige Biomoleküle und spielen in der Pathogenese diverser Krankheiten eine Rolle. Informationen über die Lipidzusammensetzungen (Lipidom) von Geweben, Organen oder Körperflüssigkeiten erlauben uns tiefere Einblicke in die Mechanismen der Physiologie und der Pathogenese.

Die sensitivste Methode zur Detektion von intakten Lipiden in komplexen biologischen Proben ist die Massenspektrometrie (MS oder MS<sup>1</sup>). Um strukturelle Erkenntnisse zu gewinnen, wird zusätzlich die Tandem-Massenspektrometrie (MS<sup>n</sup>) verwendet, bei der die Lipide fragmentiert werden.

Für die automatisierte Identifikation von Lipidstrukturen über MS<sup>n</sup>-Spektren wurde eine Software namens Lipid Data Analyzer (LDA) entwickelt. Diese ermöglicht es, MS<sup>n</sup>-Spektren anhand von benutzerdefinierbaren Regeln zu interpretieren.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Benutzeroberfläche (GUI) entwickelt, um Regeln für die Interpretation von MS<sup>n</sup>-Spektren einzugeben. Das hier präsentierte Interface unterstützt den Benutzer bei Aufgaben wie Syntaxprüfung durch visuelle Hervorhebungen der Resultate auf experimentellen Spektren und in der Bereitstellung detaillierter Informationen über die Entscheidungsfindung. Dies ermöglicht Endbenutzern das erleichterte Erstellen von Regeln, ohne dass spezifische Vorkenntnisse in der Informatik vorhanden sein müssen.

Die in dieser Bakkalaureatsarbeit präsentierte Entwicklung ermöglicht es, die Einarbeitungszeit in den LDA wesentlich zu reduzieren und erleichtert es somit anderen Institutionen die Software für Ihre Forschungszwecke einzusetzen.

**Schlüsselwörter:** Lipidom, Lipidomik, Fragmentierungsspektren, Tandem-Massenspektrometrie (MS<sup>n</sup>), Lipid Data Analyzer, Graphische Benutzeroberfläche (GUI)

## **Abstract**

### **Graphical Userinterface for MS<sup>n</sup> lipid-fragmentation rules**

Lipids are important biomolecules in metabolism, and involved in the pathogenesis of various diseases. The elucidation of lipid compositions (lipidomes) in tissues, organs or body fluids offers complementary insights in the understanding of health and disease. The most sensitive analytical method for detecting intact lipid molecules in a complex biological sample is mass spectrometry (MS or MS<sup>1</sup>), usually followed by tandem MS (or MS<sup>n</sup>) spectra for structural elucidation. For the automated identification of lipid structures by MS<sup>n</sup> spectra, the Java software Lipid Data Analyzer (LDA) was developed which interprets MS<sup>n</sup> spectra based on generic rules.

In the course of this thesis, a graphical userinterface (GUI) was developed for entering generic rules for MS<sup>n</sup> spectra interpretation of lipids. The developed interface supports users in this task by syntax verification, visual highlighting of results directly on experimental spectra, and providing detailed information about the decision finding process. Thus, users from non-technical sciences can easily work with the software without informatics support. The work presented in this thesis will effectively decrease the training period for novice LDA users and as such aid in the distribution of the software in the research community.

**Key Words:** lipidome, lipidomics, fragmentation spectra, tandem mass spectrometry (MS<sup>n</sup>), Lipid Data Analyzer, Graphical User Interface (GUI)