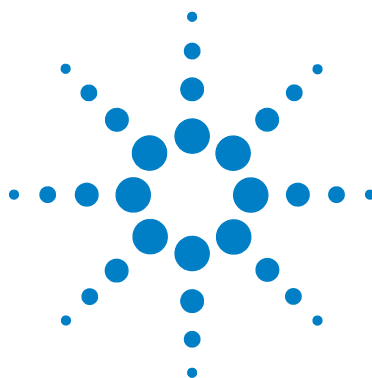




Agilent MassHunter
ワークステーション
ソフトウェア
定量分析

ファミリアリゼーション
ガイド



Agilent Technologies

注意

© Agilent Technologies, Inc. 2017

本マニュアルの内容は米国著作権法および国際著作権法によって保護されており、Agilent Technologies, Inc. の書面による事前の許可なく、本書の一部または全部を複製することはいかなる形態や方法（電子媒体への保存やデータの抽出または他国語への翻訳など）によっても禁止されています。

マニュアル番号

G3335-96152

エディション

2017年9月

Printed in USA

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Blvd.
Santa Clara, CA USA 95051

ソフトウェアリビジョン

このガイドは改訂版が作成されるまで、Agilent MassHunter ワークステーションソフトウェア- 定量分析 プログラムのリビジョン B.07.xx 以上に対して有効です。

このガイドに関するご質問は、feedback_lcms@agilent.com 宛に電子メールでお問い合わせください。

保証

このマニュアルの内容は「現状有姿」提供されるものであり、将来の改訂版で予告なく変更されることがあります。Agilent は、法律上許容される最大限の範囲で、このマニュアルおよびこのマニュアルに含まれるいかなる情報に関しても、明示黙示を問わず、商品性の保証や特定目的適合性の保証を含むいかなる保証も行いません。Agilent は、このマニュアルまたはこのマニュアルに記載されている情報の提供、使用または実行に関連して生じた過誤、付随的損害あるいは間接的損害に対する責任を一切負いません。Agilent とお客様の間に書面による別の契約があり、このマニュアルの内容に対する保証条項がここに記載されている条件と矛盾する場合は、別に合意された契約の保証条項が適用されます。

技術ライセンス

本書で扱っているハードウェアおよびソフトウェアは、ライセンスに基づき提供されており、それらのライセンス条項に従う場合のみ使用または複製することができます。

権利の制限

米国政府の制限付き権利について：連邦政府に付与されるソフトウェアおよび技術データに係る権利は、エンドユーザーのお客様に通例提供されている権利に限定されています。Agilent は、FAR 12.211（技術データ）および 12.212（コンピュータソフトウェア）、国防総省に対しては DFARS 252.227-7015（技術データ- 市販品）および DFARS 227.7202-3（市販コンピュータまたはコンピュータソフトウェア付属書類の権利）に準じて、ソフトウェアの本慣例的市販ライセンスと技術データを提供します。

安全にご使用いただくために

注意

注意は、取り扱い上、危険があることを示します。正しく実行しなかったり、指示を遵守しないと、製品の破損や重要なデータの損失に至るおそれのある操作手順や行為に対する注意を促すマークです。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、注意を無視して先に進んではなりません。

警告

警告は、取り扱い上、危険があることを示します。正しく実行しなかったり、指示を遵守しないと、人身への傷害または死亡に至るおそれのある操作手順や行為に対する注意を促すマークです。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、警告を無視して先に進んではなりません。

このガイドでは...

ファミリアリゼーションガイドでは、定量分析プログラムの学習に役立つ実習方法を示します。実習は、システム付属のデモバッチ（インストールメディアの **Data** フォルダ内）の **DrugsOfAbuse** および **LC-QTOF Pesticide**、またはご自身で取り込んだデータを用いて行うことができます。

1 MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

この実習では、取り込んだデータファイルを用いて、バッチテーブル、定量メソッド、ターゲット化合物を設定します。最後にバッチを解析し、結果を保存します。この章は、**Agilent 6400** シリーズトリプル四重極 LC/MS システムと **Agilent 7000** シリーズトリプル四重極 GC/MS システムをご使用のユーザーが対象です。

2 Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量

取り込んだデータファイルを用いて、バッチテーブル、定量メソッド、ターゲット化合物を設定します。最後にバッチを解析し、結果を保存します。

3 定量結果のレビュー

実習バッチファイルのサンプルと化合物のデータ確認方法、レイアウトのカスタマイズ、バッチ結果を **Microsoft Excel** ファイルにエクスポートする方法について学習します。

4 ツールを使用した結果の評価

ツールにより、定量結果の評価やより精度の高い結果をより簡単に得ることができます。

5 定量レポートを用いた作業

指定されたテンプレートを使用してレポートを作成した後、これらのレポートを **Microsoft Excel** でレビューします。

6 リファレンス

定量分析の特殊機能の概要について説明します。

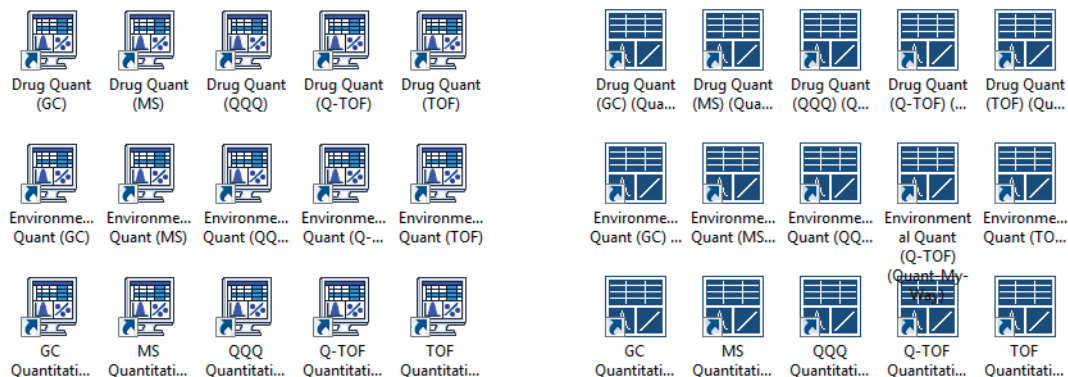
定量分析のデスクトップアイコン

定量分析 B.09.00 には、**クラシック**と、**Quant-My-Way** の 2 つのユーザーインターフェイスがあり、それぞれ対応するデスクトップアイコンがあります。**クラシック**ユーザーインターフェイスは、定量分析 B.08.00 のユーザーインターフェイスと同様の外観でメニューバーにツールとオプションがあります。**Quant-My-Way**ユーザーインターフェイスには、リボンがあり、メニューバーではなくタブとリボンにツールとオプションがあります。**クラシック**ユーザーインターフェイスのデスクトップアイコン、**Quant-My-Way**ユーザーインターフェイスのデスクトップアイコン、または両方を組み合わせて選択し、インストールすることが可能です。

定量分析プログラムのインストール方法に応じて、デスクトップにいくつかの異なるアイコン（機器タイプ別のアイコン）が表示される場合があります。これらのアイコンから定量分析プログラムを起動すると、選択した機器タイプに合わせて、デフォルト値と機能の一部がカスタマイズされます。

いずれかのアイコンをクリックすると、インストールされたプログラムのフルネームが表示されます。解析するデータのタイプに一致するアイコンを選択してください。

この『ファミリーゼーションガイド』では、**クラシック**ユーザーインターフェイスを使用して説明していますが、**Quant-My-Way**ユーザーインターフェイスで操作方法が異なる場合は、青でハイライトした **Quant-My-Way** の操作ステップを併記しています。



実習を開始する前に

本書の実習に使用するデータファイルが、ご使用の PC に存在することを確認してください。

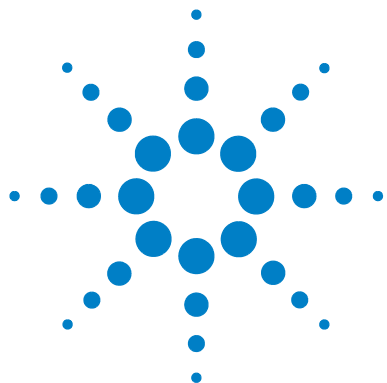
- 付属の MassHunter Quantitative Analysis Software Supplemental (MassHunter 定量分析 追加ディスク) のインストールが完了している場合、実習に必要なデータファイルは **MassHunter¥Data¥QuantExamples** にあります。
- MassHunter Quantitative Analysis Software Supplemental をインストールしていない場合は、データをインストールメディア (**Supplemental¥MassHunter¥Data¥QuantExamples**) から PC 上の任意の場所にコピーしてください。

目次

実習 1	MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量	9
	タスク 1. 新規バッチの作成	11
	タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する	14
	タスク 3. ターゲット化合物の設定	17
	タスク 4. 定量の設定	20
	タスク 5. インテグレータの設定	26
	タスク 6. バッチの解析と保存	28
実習 2	Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量	29
	タスク 1. 新規バッチの作成	31
	タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する	34
	タスク 3. ターゲット化合物の設定	38
	タスク 4. 定量の設定	39
	タスク 5. バッチの解析と保存	41
実習 3	定量結果のレビュー	43
	タスク 1. バッチテーブル結果のナビゲーション	44
	タスク 2. 結果ウィンドウレイアウトの変更	48
	タスク 3. 結果のエクスポートと印刷	56
実習 4	3 つのツールを使用した結果の評価	59
	タスク 1. 検量線近似の調整	60
	タスク 2. パラメータを用いない積分	63
	タスク 3. 外れ値の検出	78
実習 5	定量レポートの作成	83
リファレンス		89
	10 の主要機能	90

目次

定量メソッド	94
パラメータレス積分	95
バッチ一覧: 結果	97
化合物クロマトグラムの一覧	98
化合物の確認	100
化合物キャリブレーション	101



実習1

MRM データファイルを使用した バッチの設定と定量

タスク 1. 新規バッチの作成	11
タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する	14
タスク 3. ターゲット化合物の設定	17
タスク 4. 定量の設定	20
タスク 5. インテグレータの設定	26
タスク 6. バッチの解析と保存	28

この実習では、測定したデータファイルを使用して定量メソッドを設定します。**DrugsOfAbuse** データファイルを用いて実習を行い（5 ページの「[実習を開始する前に](#)」を参照）、以下のタスクの実施方法を学習します。

- 依存性薬物（アンフェタミン (amphetamine)、コカイン (cocaine)、メタンフェタミン (methamphetamine)、MDMA）の未知サンプルとキャリブレーションデータファイルを含むバッチテーブルの設定。
- 最高濃度キャリブレーション標準サンプルに基づく新規定量メソッドの設定。
- ターゲット化合物の設定。
 - データファイル中の化合物の MRM トランジションとクロマトグラフパラメータの表示。
 - 各化合物に対する内部標準の設定。
- メソッドの定量データベースの設定。
 - キャリブレーションサンプルからのレベルの作成。
 - クオリファイアイオンと検量線の設定。
- バッチの定量および結果の保存。



1 MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

実習方法を示す表は、以下の 3 列に分けて表示されています。

- ステップ - 操作概要です。各自でプログラムを実行します。
- 詳細説明 - ステップの実行に必要な手順を示しています。この『ファミリーアリゼーションガイド』は、**クラシック**ユーザーインターフェイスを使用して説明していますが、**Quant-My-Way** ユーザーインターフェイスで操作方法が異なる場合は、青でハイライトした **Quant-My-Way** の操作ステップを併記しています。
- コメント - 実習の各ステップに関するヒントや追加情報を記します。

タスク 1. 新規バッチの作成

このタスクでは、依存性薬物（アンフェタミン (amphetamine)、コカイン (cocaine)、メタンフェタミン (methamphetamine)、MDMA）の 3 つの未知サンプルと複数のキャリブレーションサンプルに対するデータファイルを含むバッチテーブルを設定します。

ステップ	詳細説明	コメント
1 サンプルを登録する新規バッチを作成します。	a デスクトップの [QQQ 定量分析] アイコンをクリックしてプログラムを起動します。 プログラムを初めて使用する場合、図 1のようにデフォルトレイアウトが表示されます。	・ [スタート] メニューから [すべてのプログラム] > [Agilent] > [MassHunter Workstation] > [定量分析 (QQQ)] をクリックしてプログラムにアクセスすることもできます。 ・ QQQ データ向けの機能を使用できます。

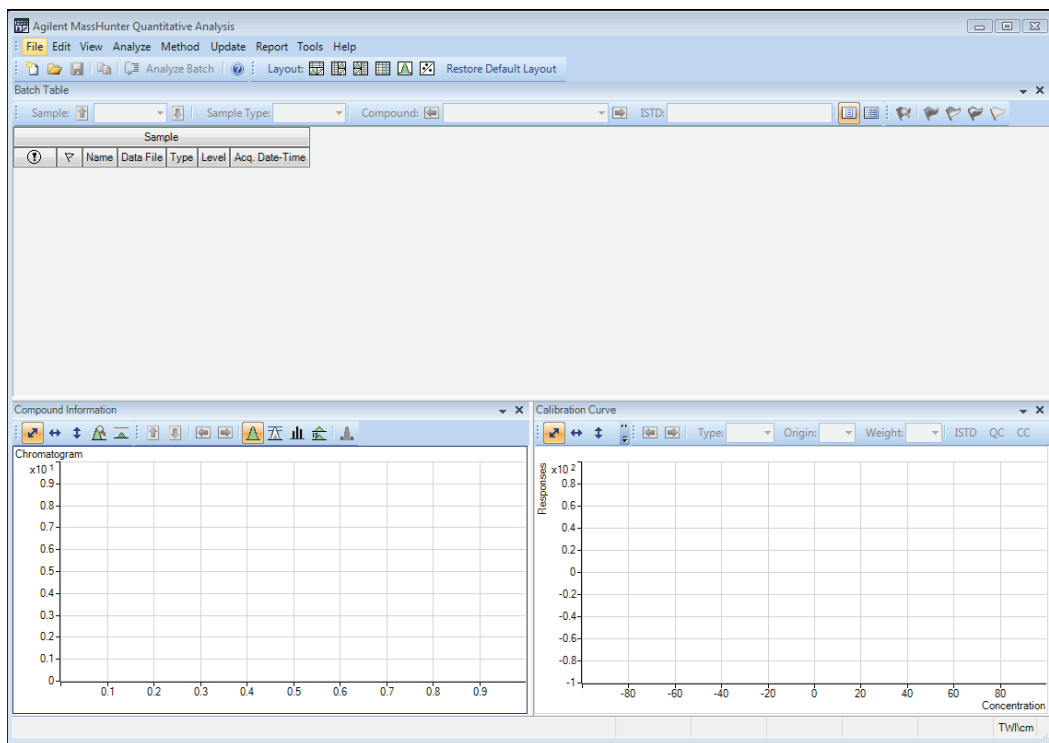
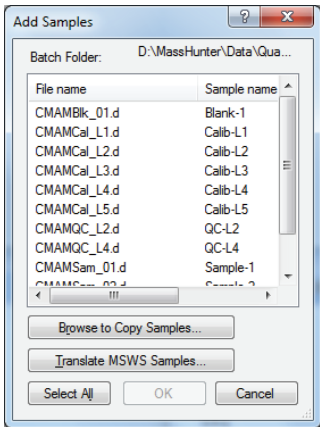


図 1 デフォルトレイアウト

1 MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 1. 新規バッチの作成

ステップ	詳細説明	コメント
	b [ファイル] > [新規バッチ] をクリックします。[新規バッチ] ダイアログボックスが開きます。 c フォルダ ¥Your Directory¥DrugsOfAbuse¥ に移動します。 d バッチファイル名として「iii_Test_01」を入力し、[作成] をクリックします。	- デフォルトレイアウトが表示されない場合、新規バッチを作成する前にツールバーの[デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。 Restore Default Layout - Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。
2	DrugsOfAbuse フォルダ内のすべてのサンプルをバッチに追加します。 [すべて選択] をクリックします。[OK] をクリックしてサンプルをバッチに追加します。 これで、[バッチテーブル] は空ではなくなります。この段階で、キャリブレーションサンプル、QC サンプル、未知サンプルがバッチに含まれます。図 2 を参照してください。	未知サンプルは 3 つのファイルのみで、1 つはブランクサンプル、5 つは異なるレベルのキャリブレーションファイル、2 つは QC サンプルのファイルです。



MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量 1

タスク 1. 新規バッチの作成

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

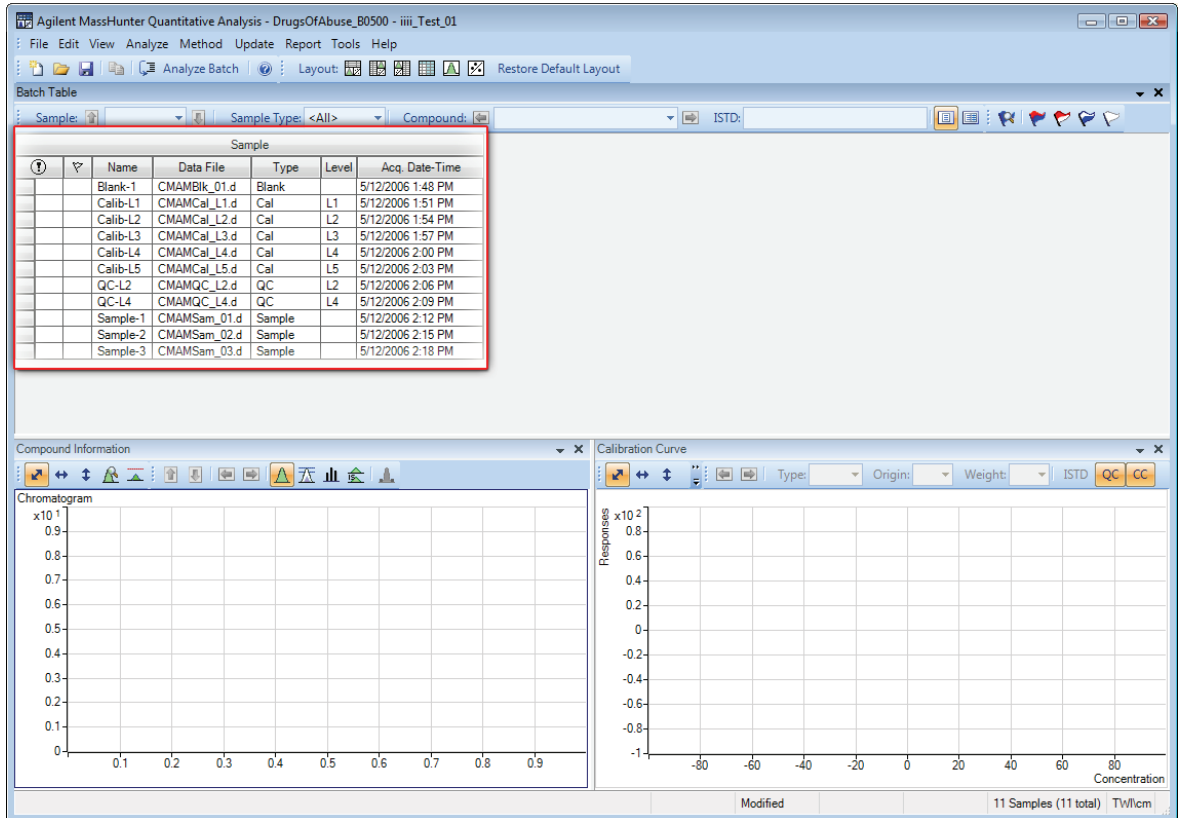


図 2 定量前の DrugsOfAbuse サンプルのバッチテーブル

1 MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量
タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する

タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する

このタスクでは、最も高濃度のキャリブレーションサンプルのデータファイルに基づき、新規の定量用メソッドを設定する方法を示します。

ステップ	詳細説明	コメント
・ 取り込まれた MRM データから新規メソッドを作成します。	a カーソルを用いて、下図のように濃度レベルの最も高いキャリブレーションサンプルを強調表示させます。	・ 高濃度キャリブレーションサンプル等の、化合物に対してシグナル強度の高いサンプルを用いることで、適正なリテンションタイムとクオリファイア比がメソッドへ設定されるようにします。

Agilent MassHunter Quantitative Analysis - Drug

File Edit View Analyze Method Update Report

Analyze Batch Layout

Batch Table

Sample: Sample Type: <All>

Sample

Name Type Level Acq. Date-Time

Blank Blan 5/12/2006 1:48

Calib- Cal L1 5/12/2006 1:51

Calib- Cal L2 5/12/2006 1:54

Calib- Cal L3 5/12/2006 1:57

Calib- Cal L4 5/12/2006 2:00

Calib- Cal L5 5/12/2006 2:03

QC-L QC L2 5/12/2006 2:06

QC-L QC L4 5/12/2006 2:09

Samp Sam 5/12/2006 2:12

Samp Sam 5/12/2006 2:15

Samp Sam 5/12/2006 2:18

MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量 1

タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する

ステップ	詳細説明	コメント
	b [メソッド] > [編集] をクリックし、メソッド編集モードに切り替えます。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：メソッドタブで、[編集] をクリックします。 メソッドタスクが、図 3 のようにビューの左側に表示されます。	- 図 3 はメソッド編集のデフォルトレイアウトを示しています。 - デフォルトレイアウトが表示されない場合、次のステップで新規メソッドを作成する前にツールバーの [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。 Restore Default Layout - Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。

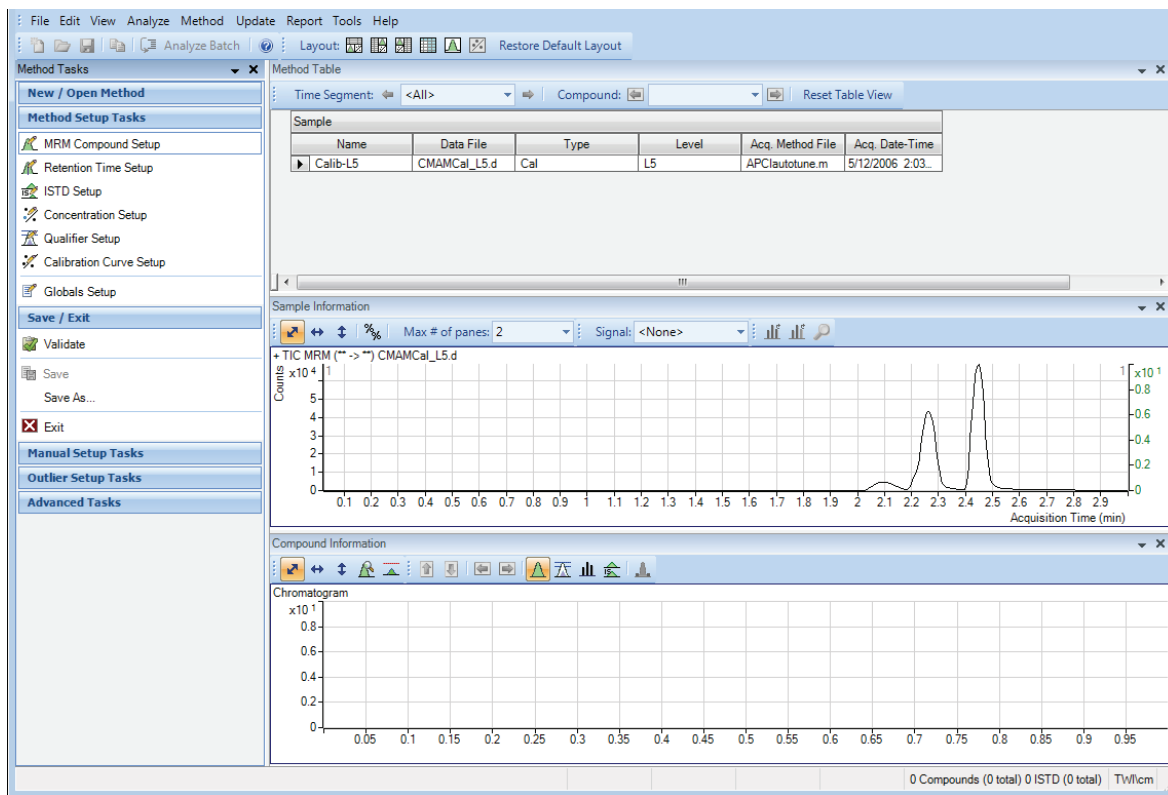


図 3 メソッド編集モード

1 MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する

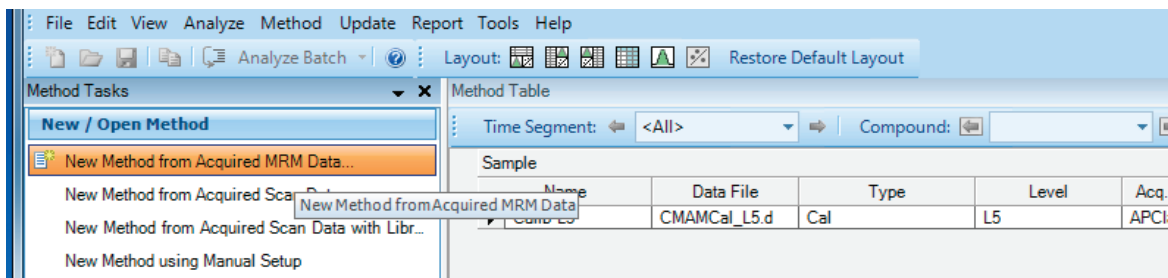
ステップ

詳細説明

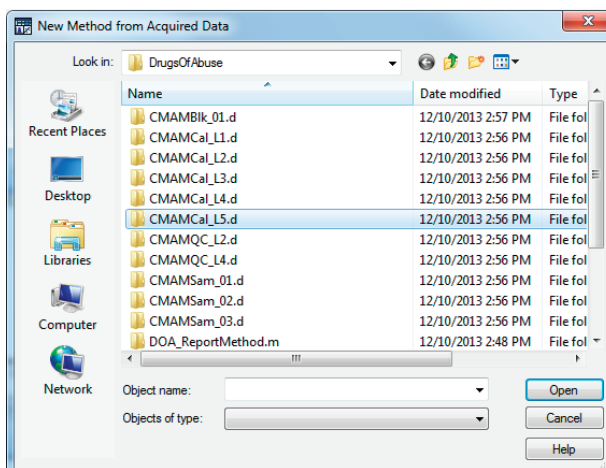
コメント

- c [メソッドテーブル] の左側のサイドバーのメソッドタスクで、[新規/メソッドを開く] > [MRM データから新規メソッドを作成] をクリックします。

- [メソッド] > [新規] > [MRM データから新規作成] をクリックすることもできます。
- Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：メソッドタブで、[新規] > [MRM データから新規作成] を選択します。



- d プロンプトの[このメソッドをバッチに適用しますか?] で [いいえ] を選択します。[測定したデータから新規メソッド作成] ダイアログが表示されます。
- e CMAMCal_L5.d をクリックし、[開く] をクリックして、測定メソッド情報をインポートします。



タスク 3. ターゲット化合物の設定

このタスクを用いて、個々のターゲット化合物に対して設定可能な、新規定量メソッドの MRM トランジションとリテンションタイムの確認方法を学習します。また、各ターゲット化合物に対する ISTD 化合物の設定方法も学習します。

ステップ	詳細説明	コメント
1	インポートされた MRM トランジションの測定メソッドから作成された新規定量メソッドを確認します。	a 【メソッドテーブル】 ウィンドウの左側のサイドバーのメソッドタスクで、【メソッド設定タスク】 > 【MRM 化合物の設定】 をクリックします。 ・ 測定メソッドには MRM トランジションに関連する化合物名が入力されています。デフォルトでは、最大シグナルが定量イオンとして選択されます。

Agilent MassHunter Quantitative Analysis - [New Method]

File Edit View Analyze Method Update Report Tools Help

Layout: [Icons] Restore Default Layout

Method Tasks

New / Open Method

- New Method from Acquired MRM Data
- New Method from Acquired Scan Data
- New Method from Acquired Scan Data with Library Se...
- New Method using Manual Setup

Open Method from Existing File...

Open Method from Existing Batch...

Method Setup Tasks

- MRM Compound Setup
- Retention Time Setup
- ISTD Setup
- Concentration Setup
- Qualifier Setup
- Calibration Curve Setup

Method Table

Level Name Prefix: # of Levels: 10 Create Levels Time Segment: <All> Compound: [Dropdown]

Sample

Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
CHAMCal_L5.d	CHAMCal_L5.d				

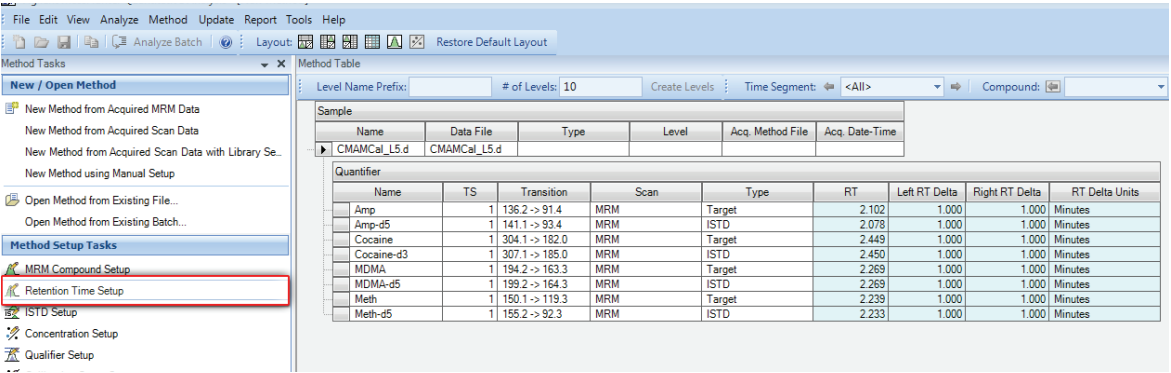
Quantifier

Name	TS	Transition	Scan	Type	Precursor Ion	Product Ion	RT	Ion Polarity
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Target	136.2	91.4	2.102	Positive
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	141.1	93.4	2.078	Positive
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Target	304.1	182.0	2.449	Positive
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	307.1	185.0	2.450	Positive
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	Target	194.2	163.3	2.269	Positive
MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	199.2	164.3	2.269	Positive
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	Target	150.1	119.3	2.239	Positive
Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	155.2	92.3	2.233	Positive

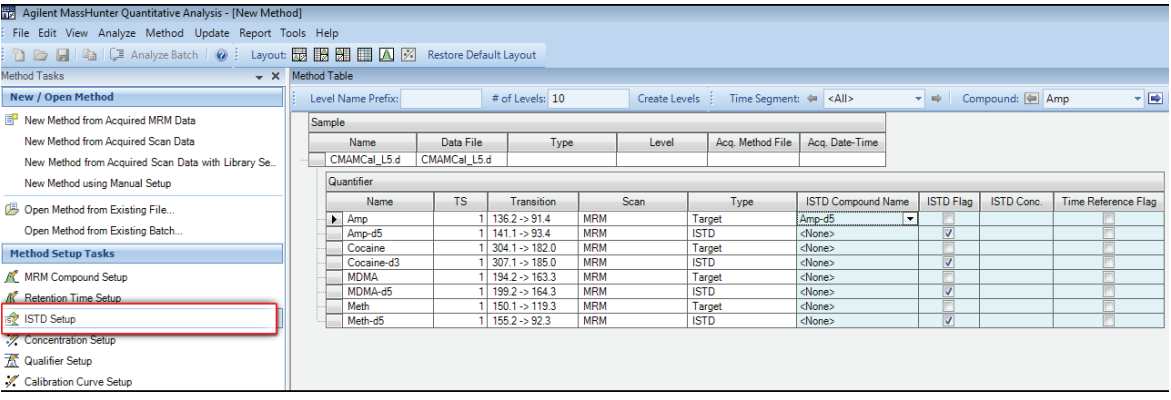
1 MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 3. ターゲット化合物の設定

ステップ	詳細説明	コメント
	b インポートされたリテンションタイムを確認するには、[メソッド設定タスク] > [リテンションタイムの設定] をクリックします。	・ 各化合物の水色のデータフィールドは変更することが可能です。



- 2 ISTD 化合物を設定します。
- 各ターゲット化合物の内部標準 (ISTD) として、対応する重水素化合物を割り当てます。
- a [メソッド設定タスク] > [ISTD の設定] をクリックします。
- b 各ターゲット化合物行で、[ISTD 化合物名] セルの下矢印をクリックします。
- ・ ISTD 化合物行に ISTD 名を直接入力することはできません。



MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量 1

タスク 3. ターゲット化合物の設定

ステップ

詳細説明

コメント

- c ターゲット化合物に対応する ISTD 名をクリックします。
- d 各 ISTD 化合物の [ISTD 濃度] を入力します（この例では 50.0000）。

The screenshot shows the 'Agilent MassHunter Quantitative Analysis - [New Method]' window. The 'Method Setup Tasks' pane on the left has 'ISTD Setup' selected. The main window displays the 'Method Table' with a 'Sample' section and a 'Quantifier' section. The 'Quantifier' table has columns: Name, TS, Transition, Scan, Type, ISTD Compound Name, ISTD Flag, ISTD Conc., and Time Reference Flag. The 'ISTD Conc.' column is highlighted with a red box, showing values of 50.0000 for several compounds.

Name	TS	Transition	Scan	Type	ISTD Compound Name	ISTD Flag	ISTD Conc.	Time Reference Flag
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Target	Amp-d5	☐		☐
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	<None>	☒	50.0000	☐
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Target	Cocaine-d3	☐		☐
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	<None>	☒	50.0000	☐
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	Target	MDMA-d5	☐		☐
MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	<None>	☒	50.0000	☐
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	Target	Meth-d5	☐		☐
Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	<None>	☒	50.0000	☐

1 MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量
タスク 4. 定量の設定

タスク 4. 定量の設定

このタスクでは、以下の定量パラメータをメソッドに設定する方法について説明します。

- キャリブレーションレベル
- クオリファイアイオン
- 検量線のカーブフィット

ステップ	詳細説明	コメント
1 最初の化合物に5つのキャリブレーションレベルを作成します。	a メインメニューで、[メソッド]>[キャリブレーションサンプルからレベルを作成]を選択します。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：メソッドタブで、[検量線]>[キャリブレーションサンプルからレベルを作成]を選択します。メソッドテーブルの各定量対象化合物の下に [キャリブレーション] テーブルが開きます。 b いずれかの定量対象化合物のデフォルト濃度を、各レベルの実際の濃度に変更します。 • L1-2.5000 • L2-5.0000 • L3-12.5000 • L4-25.0000 • L5-125.0000	

Method Tasks

New / Open Method

Method Setup Tasks

MRM Compound Setup

Retention Time Setup

ISTD Setup

Concentration Setup

Qualifier Setup

Calibration Curve Setup

Globals Setup

Save / Exit

Validate

Save

Save As...

Exit

Manual Setup Tasks

Outlier Setup Tasks

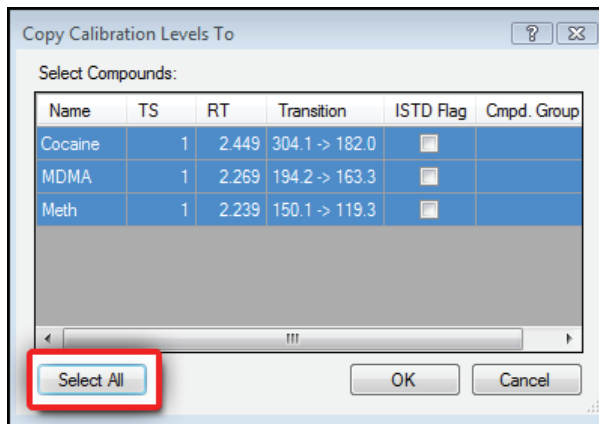
Advanced Tasks

Layout:

</

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

- | | | |
|---|--|--|
| 2 | <p>キャリブレーションレベルと濃度を他の化合物にコピーします。</p> <p>a [メソッド] > [キャリブレーションレベルのコピー] をクリックします。</p> <p>Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：定量対象化合物テーブルを右クリックして、[キャリブレーションレベルのコピー] を選択します。</p> <p>[キャリブレーションレベルのコピー] ダイアログボックスが表示されます。</p> <p>b [すべて選択] をクリックした後、[OK] をクリックします。</p> | |
|---|--|--|



- c 定量分析メインビューの下半分の [化合物情報] ウィンドウと [サンプル情報] ウィンドウを閉じます。

1 MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量
タスク 4. 定量の設定

ステップ	詳細説明	コメント
	d 【メソッドテーブル】を参照して、4つのターゲット化合物（アンフェタミン(Amp)、コカイン(Cocaine)、メタンフェタミン(Meth)、MDMA）のキャリブレーション濃度設定を確認します。	

Method Table

Time Segment: <All> Compound: Amp Reset Table View

Sample	Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
	CMAMCal_L5.d	CMAMCal_L5.d				

Quantifier

Name	TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Target	2.102	1.000	1.000	Minutes

Calibration

Level	Conc.	Response
L1	2.5000	
L2	5.0000	
L3	12.5000	
L4	25.0000	
L5	125.0000	

Quantifier

Name	TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MPM	ISTD	2.078	1.000	1.000	Minutes

Calibration

Level	Conc.	Response
L1	50.0000	
L2	50.0000	
L3	50.0000	
L4	50.0000	
L5	50.0000	

Quantifier

Name	TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Target	2.449	1.000	1.000	Minutes

Calibration

Level	Conc.	Response
L1	2.5000	
L2	5.0000	
L3	12.5000	
L4	25.0000	
L5	125.0000	

Quantifier

Name	TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	2.450	1.000	1.000	Minutes

Calibration

Level	Conc.	Response
L1	50.0000	
L2	50.0000	
L3	50.0000	
L4	50.0000	
L5	50.0000	

これが、Cocaine、MDMA、METH にコピーされました。

MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量 1

タスク 4. 定量の設定

ステップ

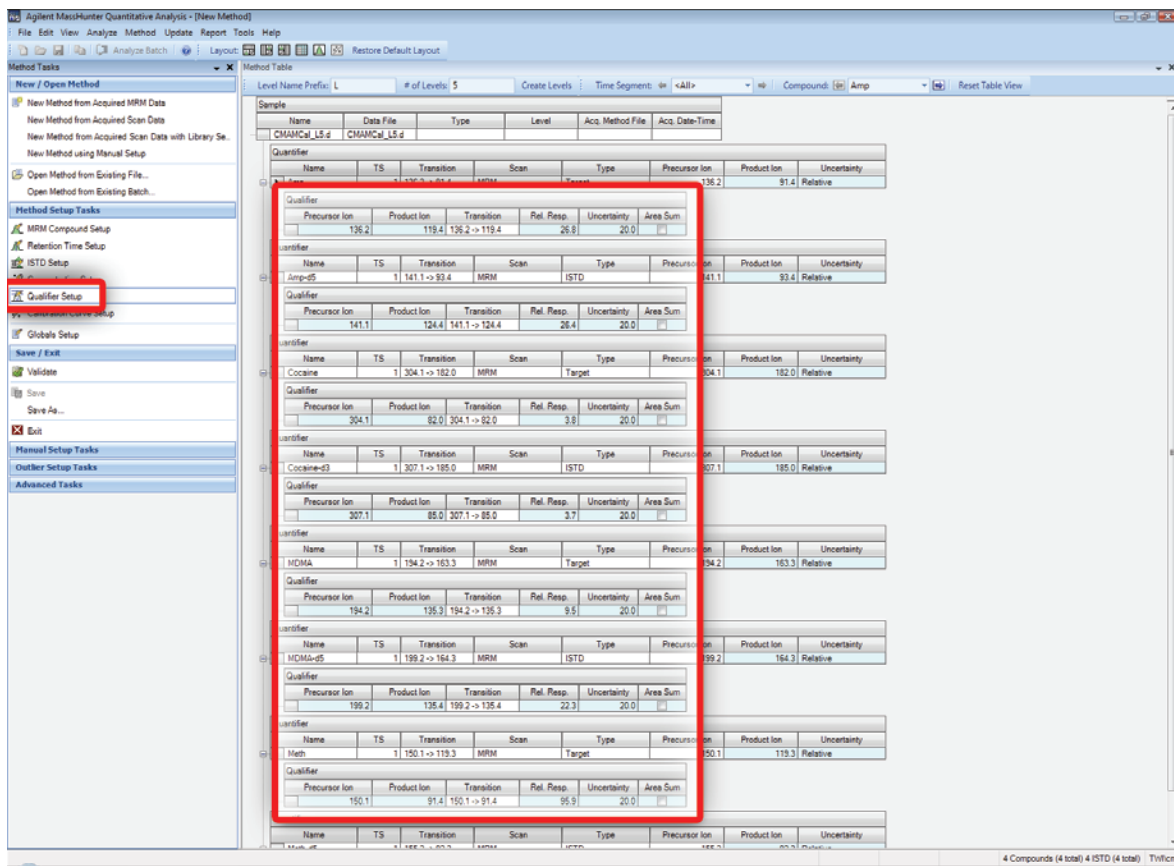
詳細説明

コメント

3 クオリファイアイオンと検量線を設定します。

a [メソッド設定タスク] の下の [クオリファイアの設定] をクリックし、クオリファイア設定パラメータを確認します。

・ クオリファイア設定パラメータは、MRM 測定情報をインポートした際に自動的に入力されます。
・ メソッド作成時に、化合物の定量イオンに対する追加の MRM トランジションがクオリファイアイオンとして割り当てられます。



1 MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 4. 定量の設定

ステップ	詳細説明	コメント
	b [メソッド設定タスク] の下の [検量線の設定] をクリックします。 c 各ターゲット化合物の [検量線原点] を [強制通過] に変更します。	

Agilent MassHunter Quantitative Analysis - [New Method]

File Edit View Analyze Method Update Report Tools Help

Analyze Batch Layout Restore Default Layout

Method Tasks

New / Open Method

New Method from Acquired MRM Data

New Method from Acquired Scan Data

New Method from Acquired Scan Data with Library Se...

New Method using Manual Setup

Open Method from Existing File...

Open Method from Existing Batch...

Method Setup Tasks

MRM Compound Setup

Retention Time Setup

ISTD Setup

Concentration Setup

Level Name Prefix: L # of Levels: 5 Create Levels Time Segment: <All> Compound: Meth

Sample

Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
CMAMCal_L5.d	CMAMCal_L5.d				

Quantifier

Name	TS	Transition	Scan	Type	CF	CF Origin	CF Weight
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Target	Linear	Force	None
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD			
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	Target	Linear	Force	None
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD			
MDMA	1	194.2 -> 163.3	MRM	Target	Linear	Force	None
MDMA-d5	1	199.2 -> 164.3	MRM	ISTD			
Meth	1	150.1 -> 119.3	MRM	Target	Linear	Force	None
Meth-d5	1	155.2 -> 92.3	MRM	ISTD			

MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

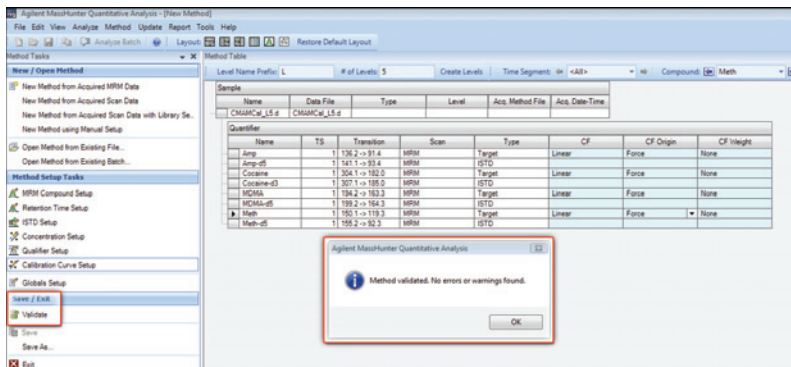
1 タスク 4. 定量の設定

ステップ

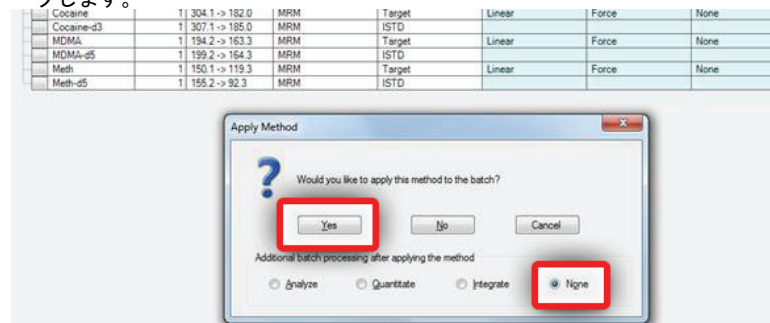
詳細説明

コメント

- 4 メソッドのバリデーションを行います。
- a **【保存/終了】**の下の**【バリデーション】**をクリックし、メソッド設定を検証します。
- ・画面下に、発生したバリデーションエラーが表示されます。



- b バリデーションメッセージが表示されたら、**【OK】**をクリックします。
- c **【保存/終了】** > **【終了】** をクリックします。
- d **【メソッド適用後のバッチ処理オプション】**の**【なし】**を選択し、**【このメソッドをバッチに適用しますか?】**というメッセージで**【はい】**をクリックします。



1 MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量
タスク 5. インテグレータの設定

タスク 5. インテグレータの設定

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

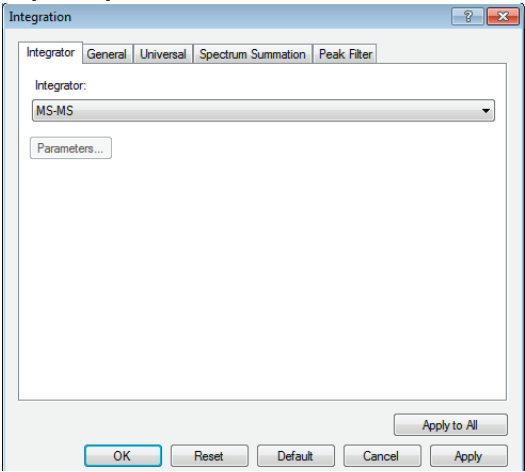
- 1 デフォルトのインテグレータを MS-MS に変更します。
- a [メソッド] > [編集] をクリックするか、F10 を押します。
Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：メソッドタブで、[編集] をクリックします。
- b [メソッド] > [詳細タスク] > [積分パラメータの設定] をクリックします。
Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：メソッドタブで、[詳細タスク] > [積分パラメータの設定] を選択します。
- c [メソッドテーブル] で、[インテグレータ] 値の右側にあるボックスをクリックします。

Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Cal	L5	APClautotune.m	5/12/2006 2:03 PM

Quantifier							
Name	TS	Transition	Scan	Type	RT	Int.	Int. Params.
▶ Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	Target	2.102	Agile2	

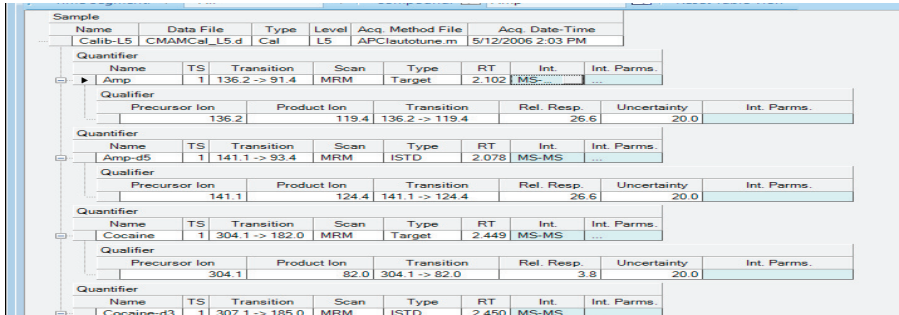
Qualifier					
Precursor Ion	Product Ion	Transition	Rel. Resp.	Uncertainty	Int. Par
136.2	119.4	136.2 -> 119.4	26.6	20.0	

- d ドロップダウンメニューから [MS-MS] を選択します。



ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

- e [すべてに適用] をクリックします。
- f [OK] をクリックします。

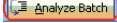


- 2 メソッドを保存します。
- a 【保存/終了】の【終了】をクリック
 します。
- b 【メソッド適用後のバッチ処理オプション】の【なし】を選択し、【この
 メソッドをバッチに適用しますか?】
 というメッセージで【はい】をクリッ
 クします。

1 MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量
タスク 6. バッチの解析と保存

タスク 6. バッチの解析と保存

この実習では、バッチを定量し、結果を保存します。

ステップ	詳細説明	コメント
1 バッチを解析し、各化合物の結果を確認します。	a ツールバーの【バッチ処理】アイコン  をクリックし、バッチ解析を開始します。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：ホーム タブで、【バッチ処理】をクリックします。 b Sample-1 の定量メッセージの上にカーソルを動かします。 c 最初の 2 つのキャリブレーションサンプルのフラグの上にカーソルを動かします。	2 つのキャリブレーションサンプルには外れ値データが含まれていることを確認してください。 - プログラムにより、Sample-1 の中にアンフェタミン (Amp) が検出されなかったことを確認してください。

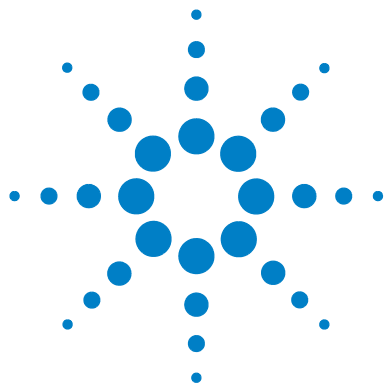
Sample:  Calib-L5  Sample Type: <All>

Sample							Amp Met...	
		Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time	Exp. Conc.	F
		Blank-1	CMAMBIk_01.d	Blank		5/12/2006 1:48 PM		
		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Cal	L1	5/12/2006 1:51 PM	2.5000	2.
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Cal	L2	5/12/2006 1:54 PM	5.0000	2.
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Cal	L3	5/12/2006 1:57 PM	12.5000	2.
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Cal	L4	5/12/2006 2:00 PM	25.0000	2.
		Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Cal	L5	5/12/2006 2:03 PM	125.0000	2.
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	5/12/2006 2:06 PM	5.0000	2.
		QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	5/12/2006 2:09 PM	25.0000	2.
		Sample-1	CMAMSam_01.d	Sample		5/12/2006 2:12 PM		2.
		Sample-2	CMAMSam_02.d	Sample		5/12/2006 2:15 PM		2.
		Sample-3	CMAMSam_03.d	Sample		5/12/2006 2:18 PM		2.

外れ値フラグメッセージ

定量メッセージ

- 2 バッチを保存します。
- a 【ファイル】 > 【バッチの保存】をクリックします。
- Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：ホーム タブで、【バッチの保存】をクリックします。
- b 【ファイル】 > 【バッチを閉じる】をクリックし、バッチを閉じます。



実習2

Q-TOF データファイルを使用した バッチの設定と定量

タスク 1. 新規バッチの作成	31
タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する	34
タスク 3. ターゲット化合物の設定	38
タスク 4. 定量の設定	39
タスク 5. バッチの解析と保存	41

この実習では測定した Q-TOF データファイルを使用して定量メソッドを設定します。インストールメディアの **LC-QTOF Pesticide** データファイルを用いて実習を行い、以下のタスクの実施方法を学習します。

- 溶媒のサンプルとキャリブレーションデータファイルを含むバッチテーブルの設定。
- 最高濃度キャリブレーション標準サンプルに基づく新規定量メソッドの設定。
- ターゲット化合物の設定。
 - データファイルにある溶媒中の化合物のプロダクトイオンとクロマトグラフパラメータの表示。
- メソッドの定量データベースの設定。
 - キャリブレーションサンプルからのレベルの作成。
 - クオリファイアイオンと検量線の設定。
- バッチの定量および結果の保存。



2 Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量

実習方法を示す表は、以下の 3 列に分けて表示されています。

- ステップ - 操作概要です。各自でプログラムを実行します。
- 詳細説明 - ステップの実行に必要な手順を示しています。
- コメント - 実習の各ステップに関するヒントや追加情報を記します。

始める前に...

インストールメディアの **Supplemental¥Data¥Quant Examples¥Q-TOF** フォルダからお客様のシステムのフォルダに、**LC-QTOF Pesticide** フォルダがコピーされていることを確認します。デフォルトの **MassHunter Quantitative Analysis Software Supplemental** のインストールが完了している場合、実習に必要なデータファイルは **MassHunter¥Data¥QuantExamples** にあります。

タスク 1. 新規バッチの作成

このタスクでは、溶媒のキャリブレーションサンプル用データファイルを含むバッチテーブルを作成します。このセクションのタスクの多くは、実習 1 のタスクと似ています。

ステップ	詳細説明	コメント
1 サンプルを登録する新規バッチを作成します。	a 定量分析プログラムを起動するには、デスクトップの [Q-TOF 定量分析] アイコン  をクリックします。プログラムを初めて使用する場合は、図 4 のようにデフォルトレイアウトが表示されます。	• [スタート] メニューから [すべてのプログラム] > [Agilent] > [MassHunter Workstation] > [定量分析 (Q-TOF)] をクリックしてプログラムにアクセスすることもできます。
- LC-QTOF Pesticide フォルダからすべてのデータファイルを選択します。 - バッチファイルに iii_test_01 という名前を付けます。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。		

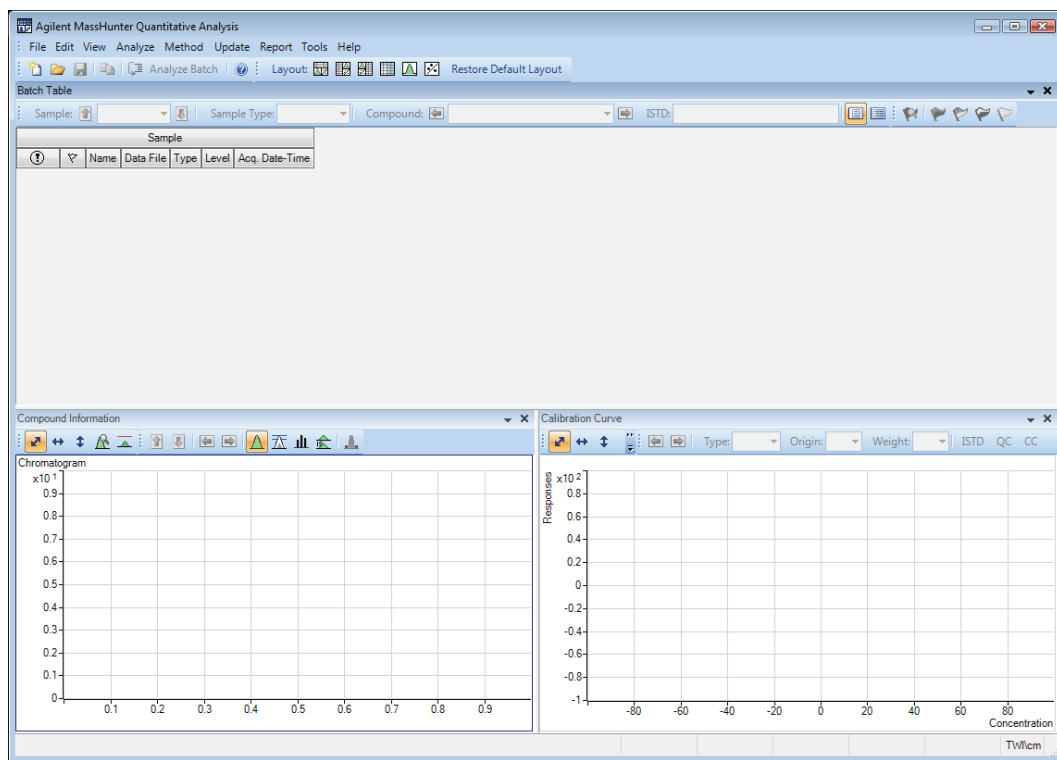
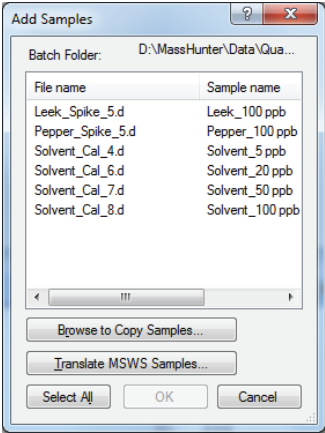


図 4 デフォルトレイアウト

2 Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量
タスク 1. 新規バッチの作成

ステップ	詳細説明	コメント
	b [ファイル] > [新規バッチ] をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合: ホーム タブで、[新規バッチ] をクリックします。 [新規バッチ] ダイアログボックスが開きます。 c ¥Your Directory¥LC-QTOF Pesticide¥ フォルダに移動します。 d バッチファイル名として「iii_Test_01」を入力し、[作成] をクリックします。	- デフォルトレイアウトが表示されない場合、新規バッチを作成する前にツールバーの[デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。 Restore Default Layout - Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合: 表示 タブで、[デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。
2 LC-QTOF Pesticide フォルダ内のすべてのサンプルをバッチに追加します。	[サンプルの追加] ダイアログボックスが表示されます。[すべて選択] をクリックします。[OK] をクリックしてサンプルをバッチに追加します。 これで、[バッチテーブル] は空ではなくなり、サンプルが含まれるようになります。図 5 を参照してください。	4つのキャリブレーションサンプルがあります。



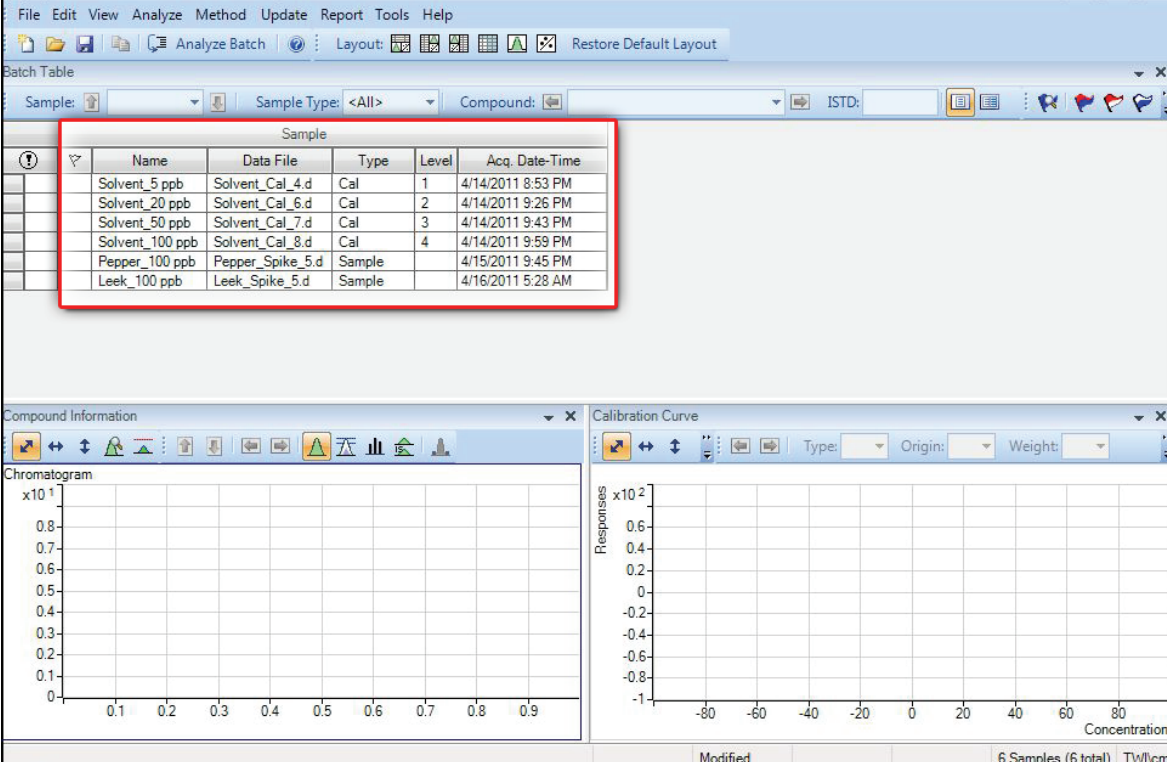
ステップ	詳細説明	コメント																																			
 The screenshot shows the Agilent MassHunter software interface. The 'Batch Table' window is open, displaying a table with 6 samples. The table is highlighted with a red box. Below the table, the 'Compound Information' window is open, showing the 'Chromatogram' and 'Calibration Curve' plots. The 'Chromatogram' plot shows a y-axis labeled 'x10¹' and an x-axis labeled 'Concentration'. The 'Calibration Curve' plot shows a y-axis labeled 'Responses x10²' and an x-axis labeled 'Concentration'. <table border="1"> <thead> <tr> <th>Name</th> <th>Data File</th> <th>Type</th> <th>Level</th> <th>Acq. Date-Time</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Solvent_5 ppb</td> <td>Solvent_Cal_4.d</td> <td>Cal</td> <td>1</td> <td>4/14/2011 8:53 PM</td> </tr> <tr> <td>Solvent_20 ppb</td> <td>Solvent_Cal_6.d</td> <td>Cal</td> <td>2</td> <td>4/14/2011 9:26 PM</td> </tr> <tr> <td>Solvent_50 ppb</td> <td>Solvent_Cal_7.d</td> <td>Cal</td> <td>3</td> <td>4/14/2011 9:43 PM</td> </tr> <tr> <td>Solvent_100 ppb</td> <td>Solvent_Cal_8.d</td> <td>Cal</td> <td>4</td> <td>4/14/2011 9:59 PM</td> </tr> <tr> <td>Pepper_100 ppb</td> <td>Pepper_Spike_5.d</td> <td>Sample</td> <td></td> <td>4/15/2011 9:45 PM</td> </tr> <tr> <td>Leek_100 ppb</td> <td>Leek_Spike_5.d</td> <td>Sample</td> <td></td> <td>4/16/2011 5:28 AM</td> </tr> </tbody> </table>			Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time	Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4.d	Cal	1	4/14/2011 8:53 PM	Solvent_20 ppb	Solvent_Cal_6.d	Cal	2	4/14/2011 9:26 PM	Solvent_50 ppb	Solvent_Cal_7.d	Cal	3	4/14/2011 9:43 PM	Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	Cal	4	4/14/2011 9:59 PM	Pepper_100 ppb	Pepper_Spike_5.d	Sample		4/15/2011 9:45 PM	Leek_100 ppb	Leek_Spike_5.d	Sample		4/16/2011 5:28 AM
Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time																																	
Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4.d	Cal	1	4/14/2011 8:53 PM																																	
Solvent_20 ppb	Solvent_Cal_6.d	Cal	2	4/14/2011 9:26 PM																																	
Solvent_50 ppb	Solvent_Cal_7.d	Cal	3	4/14/2011 9:43 PM																																	
Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	Cal	4	4/14/2011 9:59 PM																																	
Pepper_100 ppb	Pepper_Spike_5.d	Sample		4/15/2011 9:45 PM																																	
Leek_100 ppb	Leek_Spike_5.d	Sample		4/16/2011 5:28 AM																																	

図 5 定量前のサンプルのバッチテーブル

2 Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する

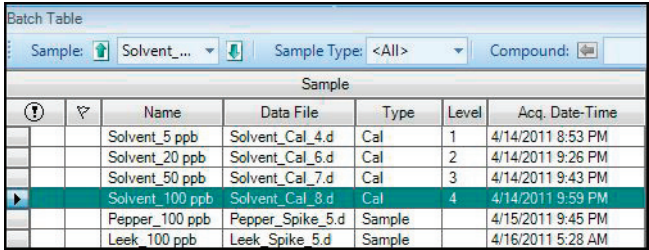
タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する

このタスクでは、キャリブレーションサンプルのデータファイルを含むバッチに基づいて、新規の定量用メソッドを設定する方法を示します。このタスクでは、シングルキャリブレーションサンプルを使用し、そこから必要なデータを抽出して、キャリブレーション化合物をメソッドに追加します。

タスク 2 では、手動で設定する手順を示します。**MassHunter** には自動手順も用意されています。自動手順では、測定したスキャンデータとライブラリ検索により、多数のキャリブレーション化合物をワンステップで定量メソッドに追加して作成することができます。自動メソッドでは、データファイルを解析すると同時に、ユーザーが指定した検索や同定パラメータに基づいて化合物名、ターゲットイオン、クオリファイアイオンとクオリファイア比、リテンションタイムが特定されます。その後、特定された情報と、その他のデフォルトパラメータに基づいて、定量メソッドの初期値が自動設定されます。この自動メソッドにより、メソッド作成に必要な時間を大幅に短縮できます。

さらに、**CEF** ファイルを使用して定性プログラムから定量プログラムにデータを転送することにより、定性データ分析で見つかった化合物を追加できます。詳細についてはオンラインヘルプを参照してください。

ステップ	詳細説明	コメント
・ 取り込まれた Q-TOF データから新規メソッドを作成します。	a カーソルを用いて、下図のように濃度レベルの最も高いキャリブレーションサンプルを強調表示させます。	・ 高濃度キャリブレーションサンプル等の、化合物に対してシグナル強度の高いサンプルを用いることで、適正なリテンションタイムとクオリファイア比がメソッドへ設定されるようにします。



Sample					
	Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time
	Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4.d	Cal	1	4/14/2011 8:53 PM
	Solvent_20 ppb	Solvent_Cal_6.d	Cal	2	4/14/2011 9:26 PM
	Solvent_50 ppb	Solvent_Cal_7.d	Cal	3	4/14/2011 9:43 PM
	Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	Cal	4	4/14/2011 9:59 PM
	Pepper_100 ppb	Pepper_Spike_5.d	Sample		4/15/2011 9:45 PM
	Leek_100 ppb	Leek_Spike_5.d	Sample		4/16/2011 5:28 AM

ステップ	詳細説明	コメント
b	【メソッド】>【編集】をクリックし、メソッド編集モードに切り替えます。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：メソッドタブで、【編集】をクリックします。 メソッドタスクが、図 6 のようにビューの左側に表示されます。	- 図 6 はメソッド編集のデフォルトレイアウトを示しています。 - デフォルトレイアウトが表示されない場合、次のステップで新規メソッドを作成する前にツールバーの【デフォルトレイアウトの復元】をクリックします。 Restore Default Layout - Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、【デフォルトレイアウトの復元】をクリックします。

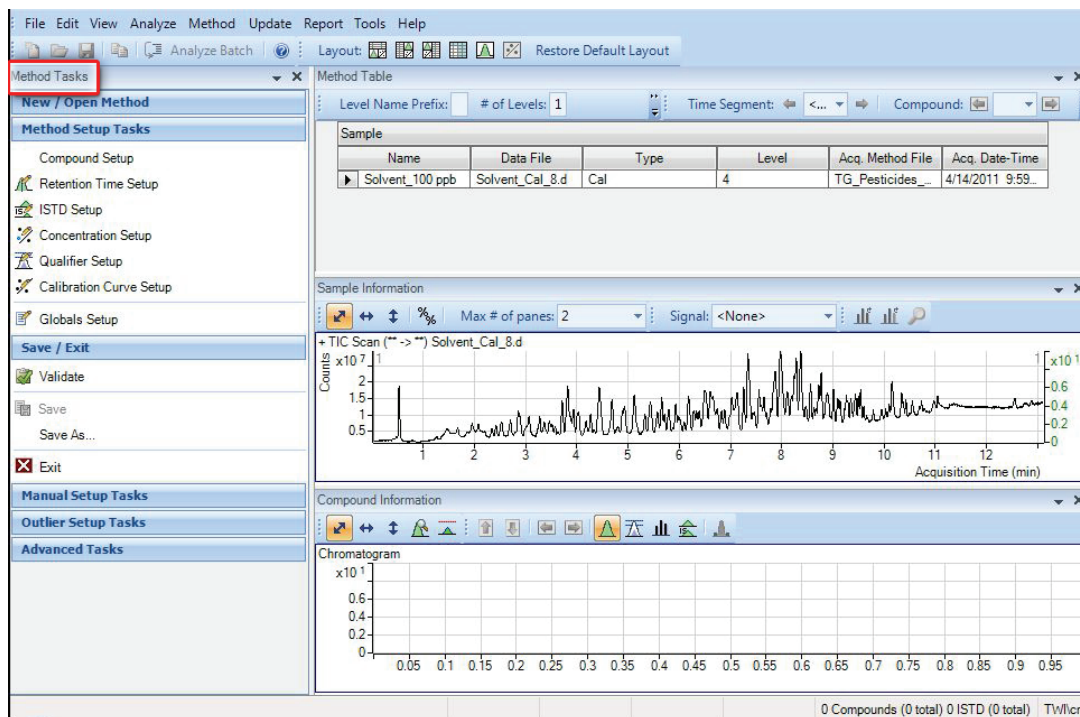
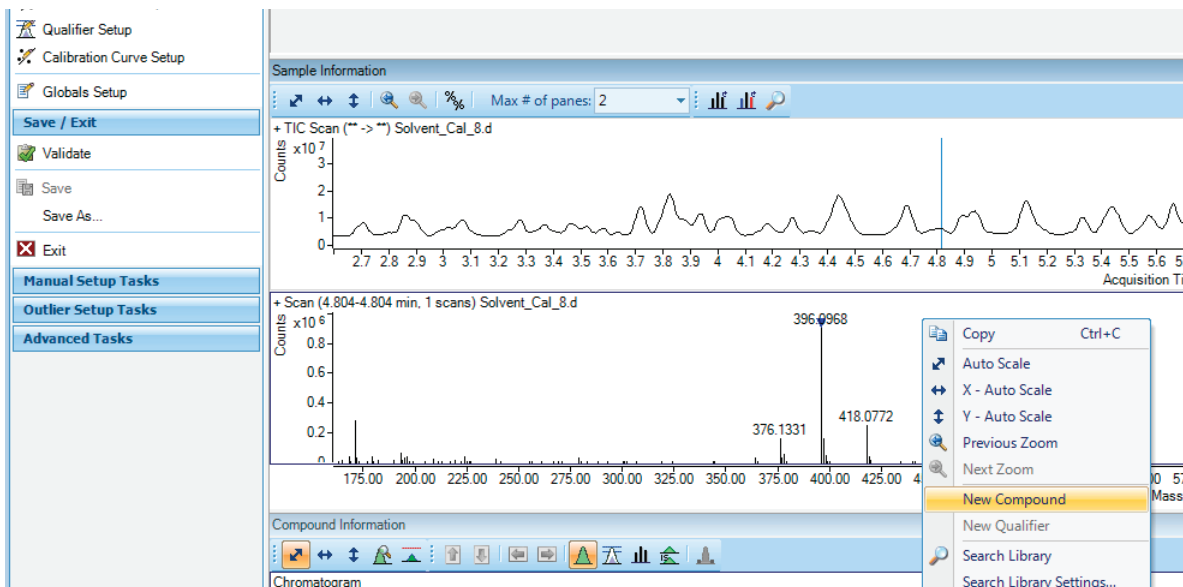


図 6 メソッド編集モード

2 Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する

ステップ	詳細説明	コメント
	c 【サンプル情報】 ウィンドウで、ピークの中央 (X 軸上の約 4.82 min) をクリックします。右クリックし、【スペクトルの抽出】 をクリックします。 d 最大イオンの、396.0966 をクリックします。同じ場所で右クリックし、【新規化合物】 をクリックします。	・ イオンを正確に選択するには、マウスの右ボタンを押したままマウスカーソルをスペクトルの上に移動して、選択対象イオンの周囲の領域を拡大します。

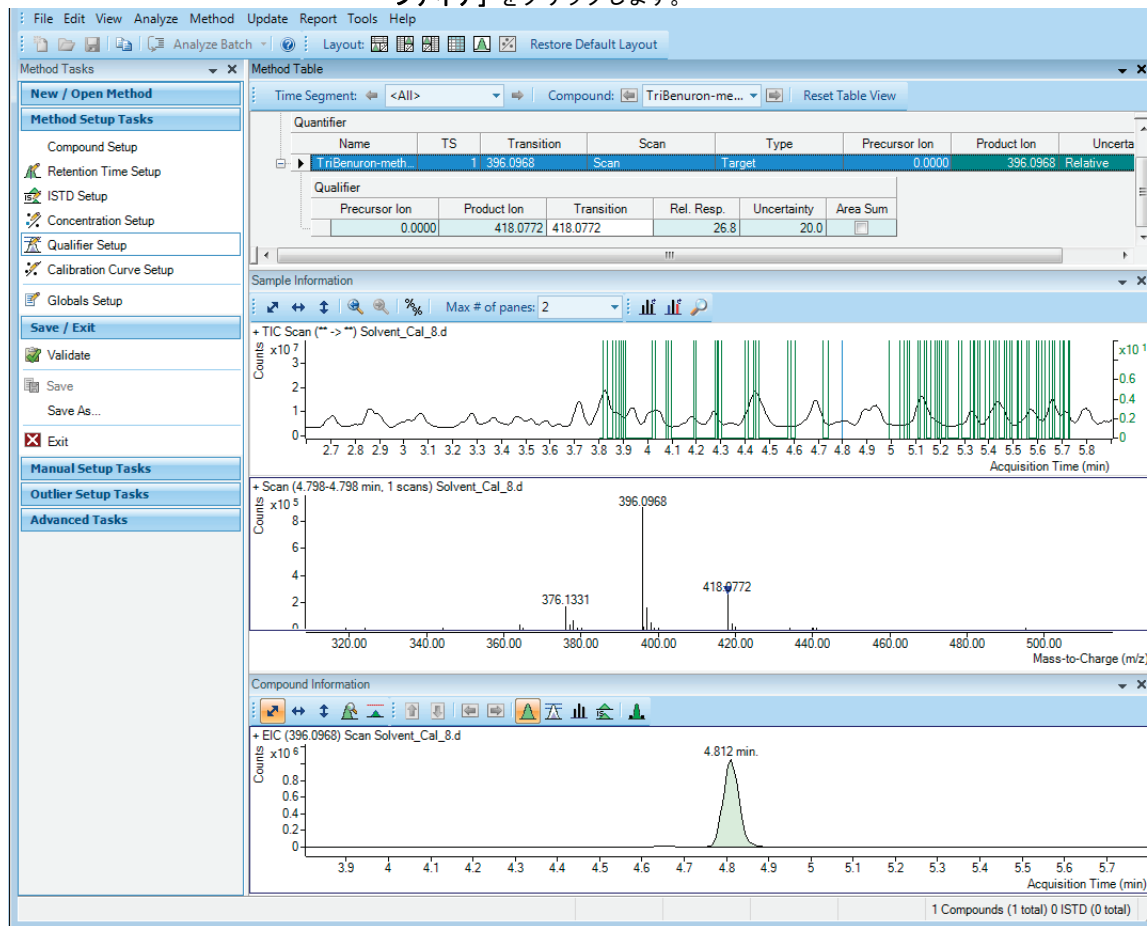


ステップ

詳細説明

コメント

- e [メソッドテーブル] の [化合物名] に「Tribenuron-methyl」と入力します。次のステップでクオリファイアを追加するため、メソッドテーブルでこの化合物を選択した状態にしておきます。
- f Tribenuron-methyl のスペクトルを再び表示するため、ピーク頂点をクリックして、頂点を通過する線を表示します。
- g 418.0776 をクリックして、このイオンを選択します（青色の三角形）。同じ場所で右クリックし、[新規クオリファイア] をクリックします。
- 複数のクオリファイアイオンを選択できます。
 - 青色の三角形は、スペクトルで選択している m/z を示します。
- 図に示すように、クオリファイアがメソッドテーブルに追加されます。



2 Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 3. ターゲット化合物の設定

タスク 3. ターゲット化合物の設定

このタスクを用いて、個々のターゲット化合物に対して変更可能な、新規定量メソッドのプロダクトイオンとリテンションタイムの確認方法を学習します。

ステップ	詳細説明	コメント
・ [サンプル情報] ウィンドウから作成したプロダクトイオンの新規定量メソッドを確認します。	a スペクトルから設定されたリテンションタイムを確認するには、[メソッド設定タスク] > [リテンションタイムの設定] をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：メソッド タブで、[メソッド設定タスク] > [リテンションタイムの設定] を選択します。 b [RT 左デルタ] 列に「0.2」を入力します。 c [RT 右デルタ] 列に「0.2」を入力します。	・ 各化合物の水色のデータフィールドは変更することが可能です。

Method Table

Level Name Prefix: # of Levels: 10 Create Levels Time Segment: <All> Compound: Tribenuron-me...

Sample

Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	Cal	4	TG_Pesticides_	4/14/2011 9:59

Quantifier

Name	TS	Transition	Scan	Type	RT	Left RT Delta	Right RT Delta	RT Delta Units
Tribenuron-meth...	1	396.0966	Scan	Target	4.813	0.200	0.200	Minutes

タスク 4. 定量の設定

このタスクでは、以下の定量パラメータをメソッドに設定する方法について説明します。

- キャリブレーションレベル
- クオリファイアイオン
- 検量線のカーブフィット

ステップ	詳細説明	コメント
1 4つのキャリブレーションレベルを作成します。	a メインメニューで、[メソッド]>[キャリブレーションサンプルからレベルを作成]を選択します。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：メソッドタブで、[検量線]>[キャリブレーションサンプルからレベルを作成]を選択します。 メソッドテーブルの各定量対象化合物の下に[キャリブレーション]テーブルが開きます。 b いずれかの定量対象化合物のデフォルト濃度を、各レベルの実際の濃度に変更します。 • L1-2.5000 • L2-20.0000 • L3-50.0000 • L4-100.0000	

The screenshot displays the 'Method Table' window. At the top, 'Time Segment' is set to '<All>' and 'Compound' is 'TriBenuron-me...'. Below this, a table lists sample information. A 'Quantifier' table shows a single entry for 'TriBenuron-meth...' with a transition of 396.0968. The 'Calibration' table is expanded, showing four levels (1-4) with concentrations of 2.5000, 20.0000, 50.0000, and 100.0000 respectively, all with 'Enable' checkboxes checked.

Sample	Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
-	Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	Cal	4	TG_Pesticides_TOF_3Hz_DD.m	4/14/2011 9:59 PM

Quantifier					
Name	TS	Transition	Scan	Type	Units
TriBenuron-meth...	1	396.0968	Scan	Target	ng/ml

Calibration			
Level	Conc.	Response	Enable
1	2.5000		☒
2	20.0000		☒
3	50.0000		☒
4	100.0000		☒

2 Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 4. 定量の設定

ステップ

詳細説明

コメント

- 2 メソッドを検証し、保存します。
- a **【保存/終了】 > 【バリデーション】** をクリックし、メソッド設定を検証します。
- ・ 画面下に、発生したバリデーションエラーが表示されます。

The screenshot shows the Agilent MassHunter software interface. The 'Method Table' pane displays the following information:

Sample	Name	Data File	Type	Level	Acq. Method File	Acq. Date-Time
1	Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	Cal	4	TG_Pesticides_TOF_3Hz_DD.m	4/14/2011 9:59 PM

The 'Quantifier' pane displays the following information:

Name	TS	Transition	Scan	Type	Units
TrnBenuron-meth...	1	396.0968	Scan	Target	ng/ml

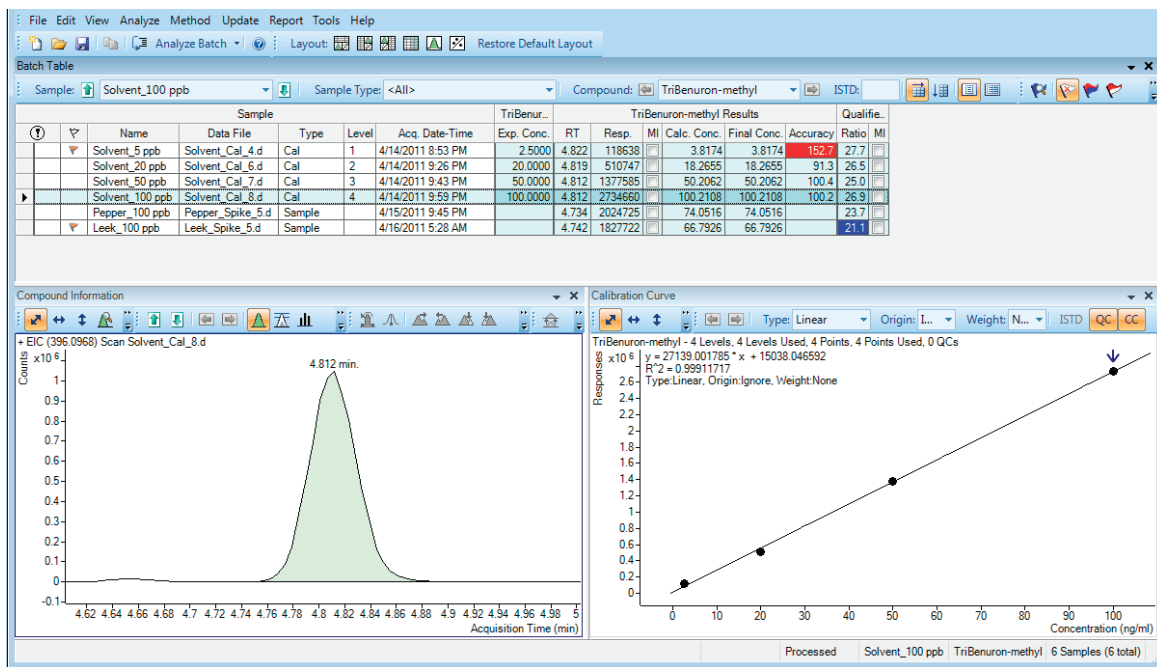
The 'Sample Information' pane shows a chromatogram with peaks at 396.0966 and 418.0776 m/z. A dialog box titled 'Agilent MassHunter Quantitative Analysis' is displayed, indicating 'Method validated. No errors or warnings found.' The 'Method Error List' pane at the bottom is empty.

- b バリデーションメッセージが表示されたら、**【OK】** をクリックします。
- c **【保存/終了】** の **【終了】** をクリックし、**【メソッド適用後のバッチ処理オプション】** の **【なし】** を選択し、**【このメソッドをバッチに適用しますか?】** というメッセージで **【はい】** をクリックします。

タスク 5. バッチの解析と保存

この実習では、バッチを自動的に定量し、結果を保存します。

ステップ	詳細説明	コメント
1	バッチを解析し、各化合物の結果を確認します。 定量シグナルのないサンプルを識別した定量メッセージを調べます。	ツールバーの [バッチ処理] アイコン  Analyze Batch をクリックし、バッチ解析を開始します。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合: ホーム タブで、[バッチ処理] をクリックします。



- 2 バッチを保存します。
 - a [ファイル] > [バッチの保存] をクリックします。
Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合: ホーム タブで、[バッチの保存] をクリックします。
 - b [ファイル] > [バッチを閉じる] をクリックし、バッチを閉じます。

2 Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 5. バッチの解析と保存



実習3 定量結果のレビュー

タスク 1. バッチテーブル結果のナビゲーション	44
タスク 2. 結果ウィンドウレイアウトの変更	48
タスク 3. 結果のエクスポートと印刷	56

この実習のタスクでは、バッチファイル内のサンプルと化合物データの検査、結果レイアウトのカスタマイズ、データの **Microsoft Excel** へのエクスポート、データのプレビューと印刷方法などを示します。

この実習では **DrugsOfAbuse** バッチを使用します。トリプル四重極データファイル、**Q-TOF** データファイル、**TOF** データファイルを用いて同じタスクを実行できます。

実習方法を示す表は、以下の 3 列に分けて表示されています。

- ステップ - 操作概要です。各自でプログラムを実行します。
- 詳細説明 - ステップの実行に必要な手順を示しています。
- コメント - 実習の各ステップに関するヒントや追加情報を記します。



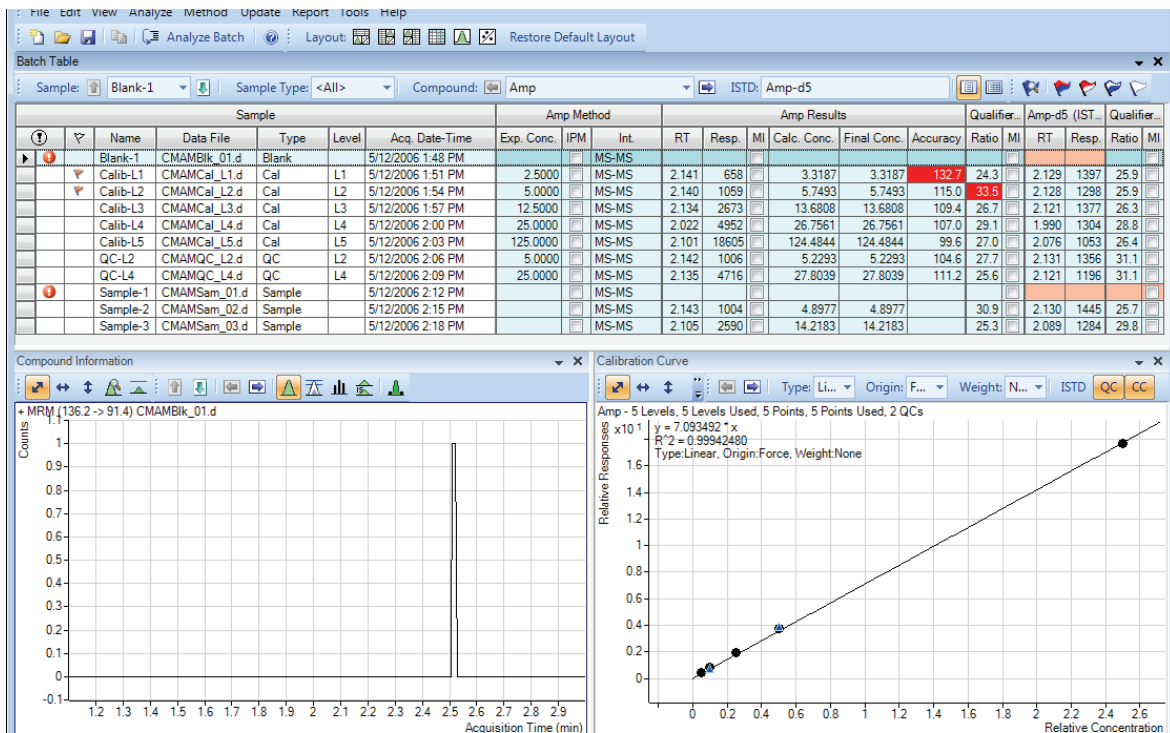
3 定量結果のレビュー

タスク 1. バッチテーブル結果のナビゲーション

タスク 1. バッチテーブル結果のナビゲーション

このタスクでは、ご使用のサンプルと化合物の最初から最後までスクロールして、[バッチテーブル] と [化合物情報] のデータの変化を観察する方法を示します。また、さまざまなサンプルタイプの表示方法を示します。

ステップ	詳細説明	コメント
1 実習 1 で作成したバッチファイル iii_Test_01.batch.bin を開きます。	a デスクトップの [定量分析] アイコン  をクリックしてプログラムを起動します。 b ツールバーの [バッチを開く]  をクリックし、[バッチを開く] ダイアログボックスを表示します。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：ホーム タブで、[バッチを開く] をクリックします。 c ¥Your Directory¥DrugsOfAbuse に移動し、iii_Test_01.batch.bin をクリックします。	表示されるメインのビューは、下記のようになります。この図はデフォルトの列が設定されているデフォルトレイアウトです。



ステップ	詳細説明	コメント
2 (オプション) 前ページの図と異なるレイアウトが表示される場合、	- メインビューに 2 つ以下のウィンドウしか表示されない場合や異なる配置の場合、デフォルトレイアウトを復元します。 - 列設定が違う場合、デフォルトの列設定を復元します。 - クロマトグラムペイン以外のペインが【化合物情報】ウィンドウに表示される場合、他のペインを非表示にします。	デフォルトレイアウトは工場出荷時に設定され、変更できません。独自のレイアウトを作成する方法は、48 ページの「タスク 2. 結果ウィンドウレイアウトの変更」を参照してください。
	- デフォルトレイアウトを復元するには、サンプルをスクロールする前に、ツールバーの【デフォルトレイアウトの復元】をクリックします。 Restore Default Layout - Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示タブで、【デフォルトレイアウトの復元】をクリックします。 - デフォルト列設定を復元するには、【バッチテーブル】ウィンドウのどこかを右クリックし、【デフォルト列の復元】をクリックします。 - 余分なペインを非表示にするには、【化合物情報】ツールバーの【クロマトグラムの表示 / 非表示】アイコン  のみが強調表示されるよう、その他のアイコンをクリックして非表示にします。	
3 【バッチテーブル】の最後に達するまでサンプルをスクロールした後、Cal-L5 に戻ります。	- 希望するサンプルが表示されるまで、【バッチテーブル】ツールバーの【次のサンプル】矢印  をクリックします。【化合物情報】ウィンドウの変化を確認します。 - Cal-L5 に戻るには、【バッチテーブル】ツールバーの【前のサンプル】アイコン  をクリックします。 【バッチテーブル】ウィンドウでサンプル Calib_L4 の行の任意のセルをクリックし、変化を見ます。	【バッチテーブル】で強調表示されたデータファイルと【化合物情報】ウィンドウのクロマトグラムがリンクされていることを確認してください。 - 各サンプルのアンフェタミン (Amp) の【バッチテーブル】と【化合物情報】の変化に注目してください。
4 4 つのすべての化合物をスクロールします。	- 希望する化合物が表示されるまで、ツールバーの【次の化合物】または【前の化合物】矢印をクリックします。 Compound:  1: Meth  【バッチテーブル】、【化合物情報】、【検量線】ウィンドウの変化を確認します。 【化合物名】リストの隣の下矢印をクリックします。 【Cocaine】をクリックします。	

3 定量結果のレビュー

タスク 1. バッチテーブル結果のナビゲーション

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

- 5 複数の化合物の結果を調べます。
- Cal-L4 サンプルの各化合物のリテンションタイムを表示します。
 - すべての化合物の結果をレビューした後、コカインの結果の表示に戻ります。

- a ツールバーの【バッチテーブルに複数の化合物/サンプルを表示】アイコンをクリックし、すべてのターゲット化合物の定量結果を表示します。【表示】>【バッチテーブルレイアウト】>【複数の化合物/サンプルを表示】メニューも使用できます。



【1つの化合物を表示】モードと【複数の化合物/サンプルを表示】モードでは、異なる列が表示されます。【複数の化合物/サンプルを表示】モードのテーブルに列を追加しても、その変更内容は【1つの化合物/サンプルを表示】モードには自動的に適用されません。

Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合: 表示 タブで、【バッチテーブルレイアウト】>【複数の化合物/サンプルを表示】を選択します。

- b 【Cal-L4】セルをクリックし、各化合物の【化合物情報】ウィンドウの【RT】の差に注目します。

Agilent MassHunter Quantitative Analysis - DrugsOfAbuse_B05000 - iii_Test_01

File Edit View Analyze Method Update Report Tools Help

Analyze Batch Layout: [Icons] Restore Default Layout

Batch Table

Sample: Calib-L4 Sample Type: <All> Compound: Cocaine ISTD: Cocaine-d3

Sample				Cocaine Method				Cocaine Results				Qualifier			
?	▼	Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time	Exp. Conc.	IPM	Int.	RT	Resp.	MI	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy
		Blank-1	CMAMBlk_01.d	Blank		5/12/2006 1:48 PM			MS-MS	2.433	20		11.8235	11.8235	
		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Cal	L1	5/12/2006 1:51 PM	2.5000		MS-MS	2.453	5189		2.3087	2.3087	92.3
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Cal	L2	5/12/2006 1:54 PM	5.0000		MS-MS	2.454	9716		4.2682	4.2682	85.4
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Cal	L3	5/12/2006 1:57 PM	12.5000		MS-MS	2.459	25187		11.5607	11.5607	92.5
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Cal	L4	5/12/2006 2:00 PM	25.0000		MS-MS	2.449	50649		25.2511	25.2511	101.0
		Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Cal	L5	5/12/2006 2:03 PM	125.0000		MS-MS	2.448	199967		125.0768	125.0768	100.1
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	5/12/2006 2:06 PM	5.0000		MS-MS	2.453	9246		4.2831	4.2831	85.7
		QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	5/12/2006 2:09 PM	25.0000		MS-MS	2.455	48582		24.5377	24.5377	98.2
		Sample-1	CMAMSam_01.d	Sample		5/12/2006 2:12 PM			MS-MS						
		Sample-2	CMAMSam_02.d	Sample		5/12/2006 2:15 PM			MS-MS	2.460	9735		4.3735	4.3735	
		Sample-3	CMAMSam_03.d	Sample		5/12/2006 2:18 PM			MS-MS	2.445	24841		10.0700	10.0700	

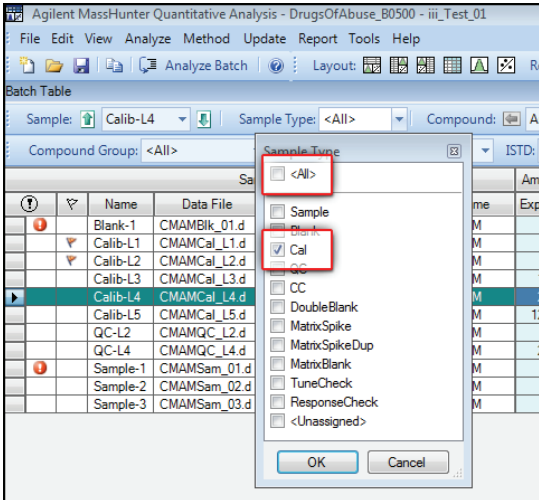
- c 選択したターゲット化合物の詳細定量結果の表示に戻るには、ツールバーの【バッチテーブルに1つの化合物/サンプルを表示】アイコンをクリックします。



Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合: 表示 タブで、【バッチテーブルレイアウト】>【1つの化合物/サンプルを表示】を選択します。

- d 必要に応じて、【化合物】リスト隣の下矢印をクリックし、【Cocaine】をクリックします。

タスク 1. バッチテーブル結果のナビゲーション

ステップ	詳細説明	コメント
6	選択したサンプルタイプを表示します。 - キャリブレーションサンプルのみを表示します。 - 次に、すべてのサンプルタイプを表示します。	
a	[サンプルタイプ] ドロップダウンリストの下矢印をクリックします。[サンプルタイプ] ダイアログボックスが表示されます。	
b	[<すべて>] チェックボックスをオフにし、[キャリブレーション] チェックボックスをオンにします。	
		
c	[OK] をクリックします。[バッチテーブル] には、Cocaineのキャリブレーションサンプルのみが表示されます。	
d	[サンプルタイプ] ドロップダウンリストの下矢印をクリックします。	
e	[<すべて>] をクリックした後、[OK] をクリックします。 自動的にすべてのチェックボックスがオンになり、すべてのサンプルタイプが表示されます。	

3 定量結果のレビュー

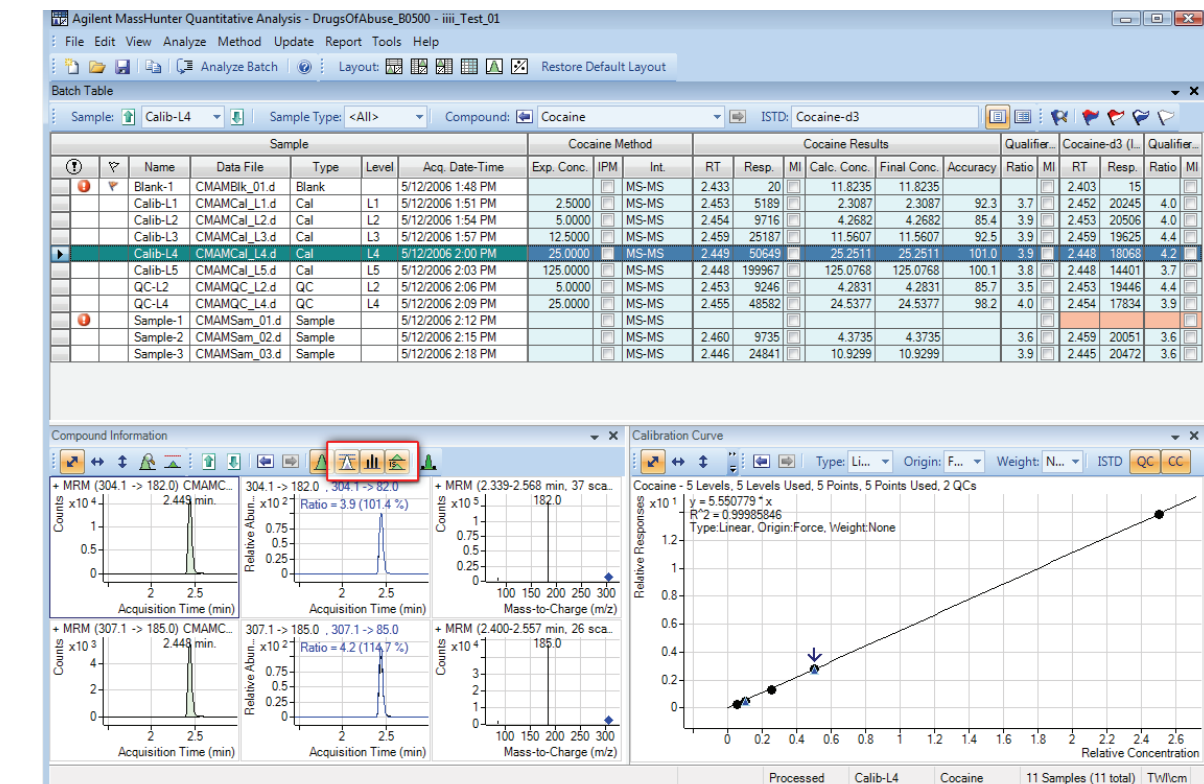
タスク 2. 結果ウィンドウレイアウトの変更

タスク 2. 結果ウィンドウレイアウトの変更

このタスクでは、レイアウトをカスタマイズする方法とデフォルトレイアウトの再作成方法を示します。

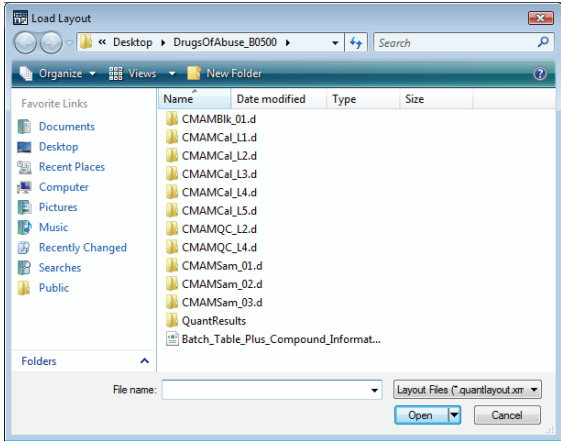
ステップ	詳細説明	コメント
1 ツールバーのレイアウトアイコンを使用し、[パッチテーブル]、[化合物情報]、[検量線] ウィンドウの位置を合わせます。	a ツールバーの [レイアウト - テーブル左] アイコン  をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[レイアウト] > [テーブル左] を選択します。 b ツールバーの [レイアウト - テーブル右] アイコン  をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[レイアウト] > [テーブル右] を選択します。 c [レイアウト - テーブル上] アイコン  をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[レイアウト] > [テーブル上] を選択します。	
2 ツールバーのレイアウトアイコンを使用し、個々のウィンドウを最大化します。	a ツールバーの [テーブルの最大化] アイコン  をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[ペインを最大化] > [テーブルの最大化] を選択します。 b ツールバーの [化合物情報の最大化] アイコン  をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[ペインを最大化] > [化合物情報の最大化] を選択します。 c ツールバーの [検量線の最大化] アイコン  をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[ペインを最大化] > [検量線の最大化] を選択します。 d デフォルトレイアウトに戻るには、ツールバーの [デフォルトレイアウトの復元] アイコンをクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。	

ステップ	詳細説明	コメント
3 Cal-L4 の [化合物情報] ウィンドウのペインを変更します。	a [バッチテーブル] で、[Cal-L4] 行を選択します。 b [化合物情報] ツールバーで、[クオリファイアの表示/非表示] アイコン  をクリックします。 c [スペクトルの表示/非表示] アイコン  をクリックします。 d [ISTD の表示/非表示] アイコン  をクリックします。 レイアウトと結果は、次の図のようになります。	このステップでは、[化合物情報] ウィンドウのクロマトグラムペインだけが表示されている状態からタスクを開始してください。 これらの変更は、6つのペインの配置と表示のみを変更します。[化合物情報] ウィンドウのペインは、レイアウトを変更しても影響を受けません。



3 定量結果のレビュー

タスク 2. 結果ウィンドウレイアウトの変更

ステップ	詳細説明	コメント
4 検量線なしでデフォルトレイアウトを保存します。	a [検量線] ウィンドウを閉じます。 b [表示] > [ウィンドウレイアウト] > [レイアウトの保存] をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[レイアウトの読み込み/保存] > [レイアウトの保存] を選択します。[レイアウトファイルの保存] ダイアログボックスが表示されます。 c ファイル名に「パッチテーブルと化合物情報」と入力し、[保存] をクリックします。	
5 新たに作成したレイアウトを読み込みます。	a ツールバーの[デフォルトレイアウトの復元]をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。 b [表示] > [ウィンドウレイアウト] > [レイアウトの読み込み] をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[レイアウトの読み込み/保存] > [レイアウトの読み込み] を選択します。 [レイアウトの読み込み] ダイアログボックスが表示されます。	
		
	c [パッチテーブルと化合物情報] を選択し、[開く] をクリックします。 結果のウィンドウは、図 7 のようになります。	

ステップ

詳細説明

コメント

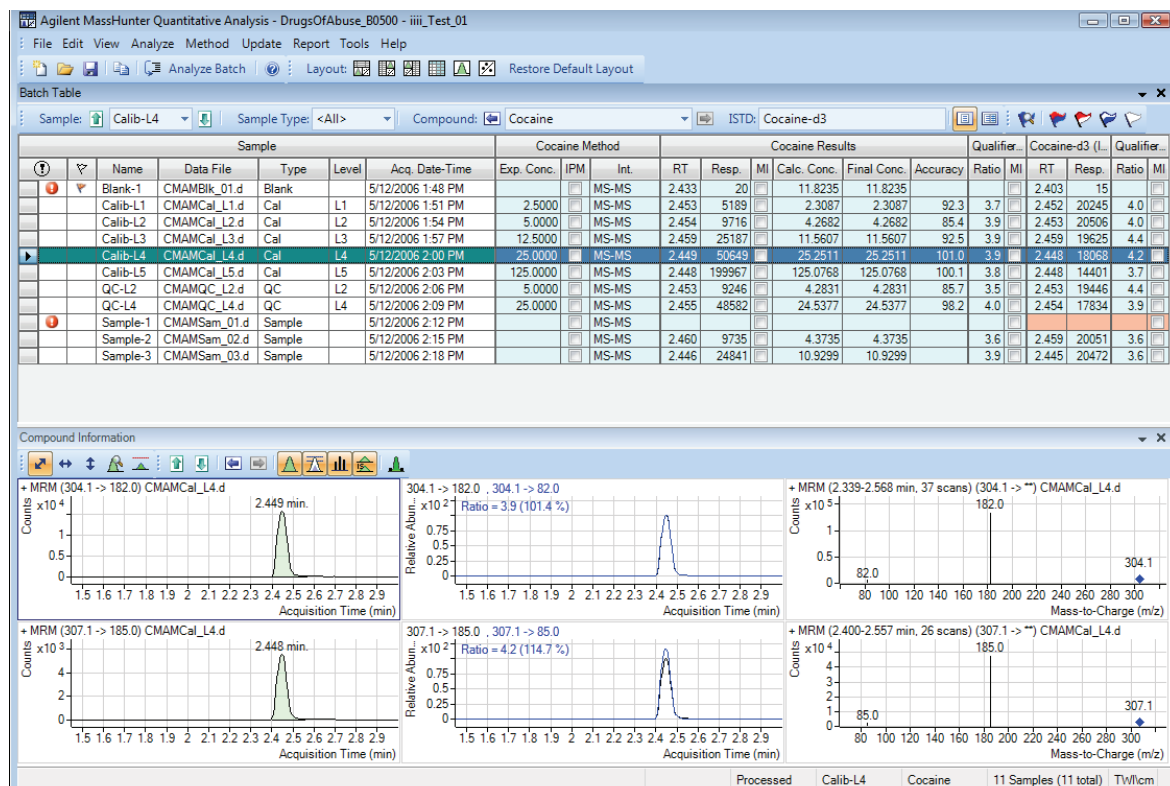


図7 結果のウィンドウ

3 定量結果のレビュー

タスク 2. 結果ウィンドウレイアウトの変更

ステップ	詳細説明	コメント
6 53 ページの図 8 のようにレイアウトを作成します。	a デフォルトレイアウトを復元します（ツールバーの 【デフォルトレイアウトの復元】 をクリックします）。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、【デフォルトレイアウトの復元】 をクリックします。 b 【検量線】 ウィンドウのタイトルバー内を右クリックした後、【フローティング】 チェックボックスをオンにします。  c 【化合物情報】 ウィンドウのタイトルバーを右クリックし、【フローティング】 チェックボックスをクリックしてオンにします。 d ウィンドウのサイズを変更し、図 8 のレイアウトに合わせます。	• 【バッチテーブル】 は、左に配置します。

ステップ

詳細説明

コメント

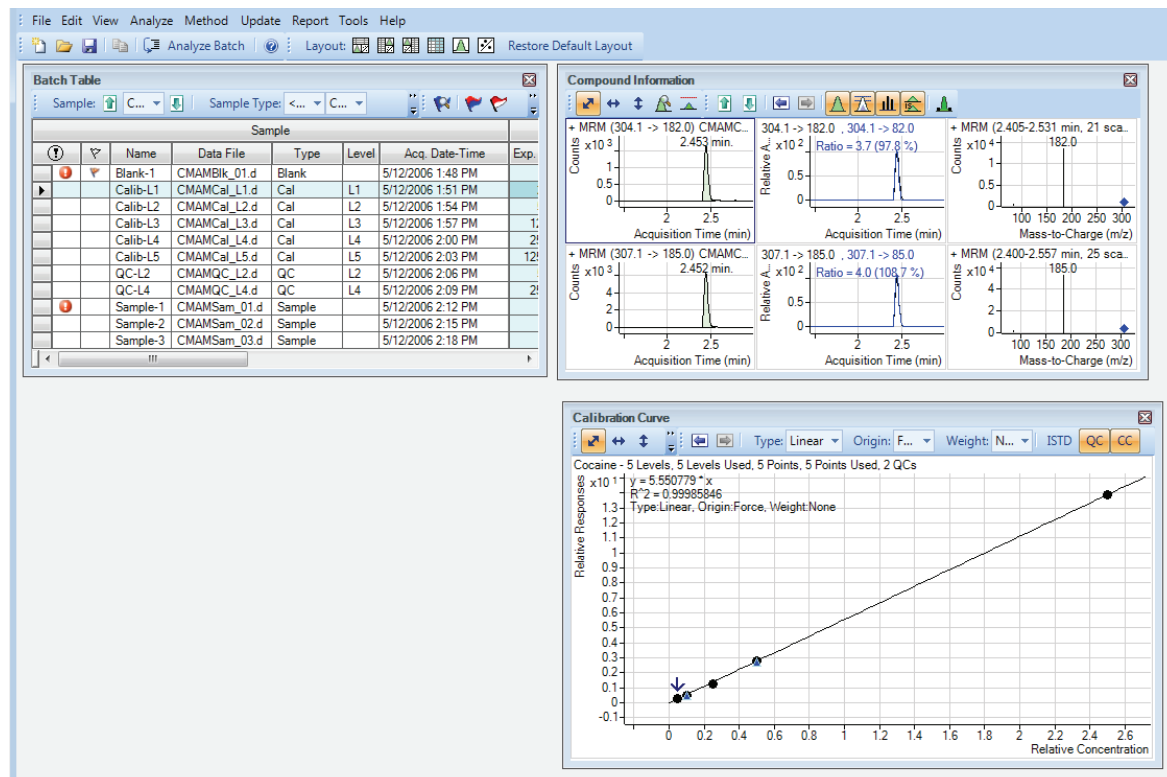


図 8 検量線と化合物情報ウィンドウ-フローティングを用いた表示

- e [化合物情報] ウィンドウのタイトルバー内を右クリックした後、[フローティング] チェックボックスをオフにします。
- f ウィンドウのサイズを変更し、図 9 のレイアウトに合わせます。

3 定量結果のレビュー

タスク 2. 結果ウィンドウレイアウトの変更

ステップ

詳細説明

コメント

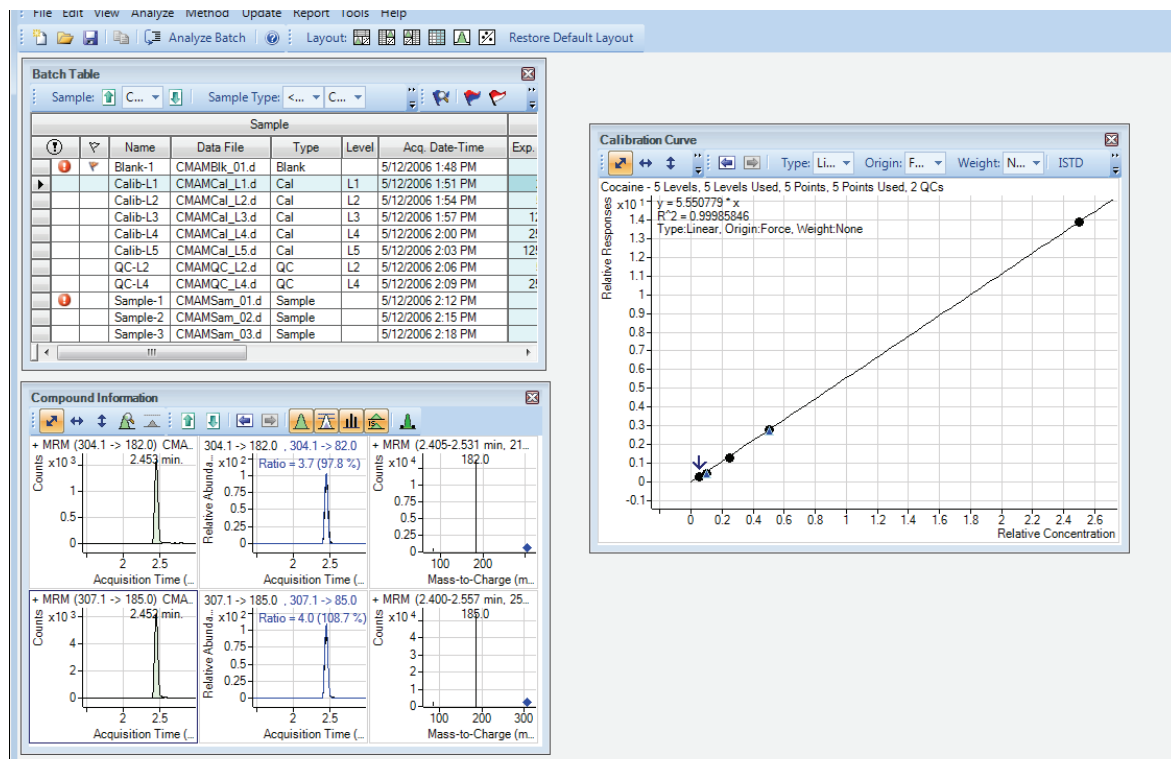


図9 サイズ変更したウィンドウ

- g [検量線] ウィンドウのタイトルバー内を右クリックした後、[フローティング] チェックボックスをオフにします。
- h タスク開始時に示したレイアウトと一致するように[化合物情報] ウィンドウを移動します。

ステップ	詳細説明	コメント
7 デフォルトレイアウトを再作成します（復元ではない）。	- プログラムのメインビューを最大化します。 - まず 〔検量線〕 ウィンドウを固定した後、〔化合物情報〕 ウィンドウを固定し、デフォルトレイアウトを再作成します。 2 つのウィンドウの固定後、検量線が左側にある場合、〔検量線〕 ウィンドウのタイトルバーを右クリックし、右にドラッグします。このウィンドウのメインビュー内の配置場所が、灰色の長方形によって示されます。 - メインビュー右下隅に 〔検量線〕 ウィンドウをドラッグします。	

3 定量結果のレビュー

タスク 3. 結果のエクスポートと印刷

タスク 3. 結果のエクスポートと印刷

この練習では、Microsoft Excel ファイルにデータをエクスポートする方法と、[バッチテーブル] と [化合物情報] データのプレビューおよび印刷方法を示します。

ステップ	詳細説明	コメント
1 バッチファイル iii_Test_01 をエクスポートします。	a [バッチテーブル] ウィンドウのタイトルバーをクリックして、[バッチテーブル] ウィンドウを有効にします。 b [ファイル] > [エクスポート] > [テーブルのエクスポート] をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合: バッチテーブル ウィンドウを右クリックして、[テーブルのエクスポート] を選択します。 c 出力先ディレクトリとして My Documents を指定します。 d エクスポートファイル名として 「iii_Test_01.xlsx」 と入力します。 e [保存] をクリックします。Excel ファイル My Documents\iii_Test_01.xlsx が自動的に開きます。	• iii = ユーザーのイニシャル

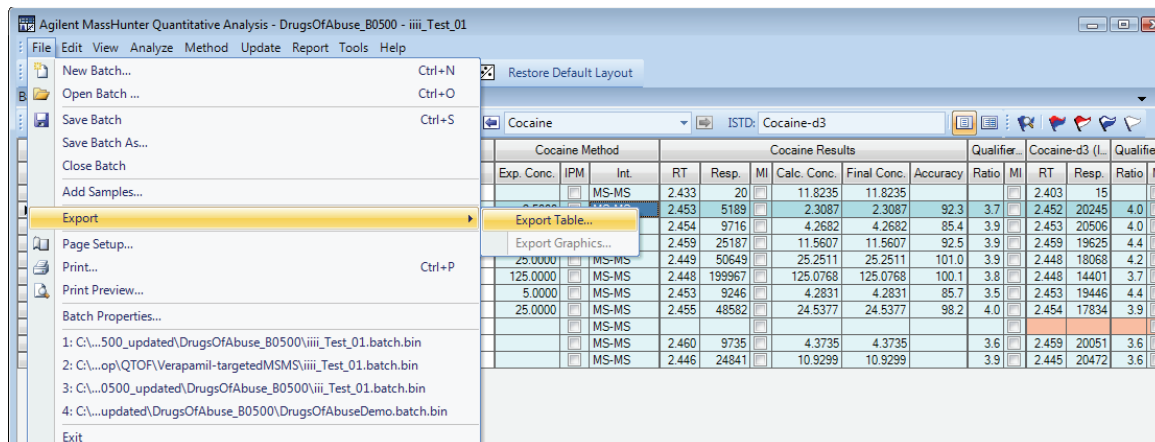


図 10 エクスポート結果

- | | |
|-----------------------------------|--------------------------------------|
| 2 バッチ結果を Excel で確認し、Excel を終了します。 | a エクスポートされる内容とエクスポートされない内容を確認してください。 |
| | b 終了したら、Excel を閉じます。 |

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

iii_Test_01.xlsx - Microsoft Excel

FileHomeInsertPage LayoutFormulasDataReviewViewMASSHUNTER REPORTINGAdd-InsAcrobat

Cut

Copy

Format Painter

Paste

Clipboard

Microsoft Sans Ser

8

A

A

図 11 Excel 形式のバッチテーブル

- 3 [バッチテーブル] と [化合物情報] データのプリントアウトをレビューします。
- Excel で、[ファイル] > [印刷] をクリックします。
 - [印刷プレビュー] ウィンドウで、希望通りに表示されているかを確認します。
 - [ファイル] > [印刷] をクリックします。
 - 化合物情報について、ステップ a ~ e を繰り返します。
 - 実習 4 に進まない場合は、[ファイル] > [バッチ保存] をクリックします。
Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：ホーム タブで、[バッチの保存] をクリックします。
 - [ファイル] > [終了] をクリックします。
- [印刷プレビュー] プログラムの [ファイル] > [印刷] メニューをクリックして、[印刷プレビュー] プログラムからバッチテーブルを印刷することもできます。

3 定量結果のレビュー

タスク 3. 結果のエクスポートと印刷



実習4

3つのツールを使用した結果の評価

タスク 1. 検量線近似の調整	60
タスク 2. パラメータを用いない積分	63
タスク 3. 外れ値の検出	78

この実習では、3つのツールを用いて結果を評価し、さらに正確な定量結果を得ます。

- カーブフィットアシスタントは、すべての組み合わせの検量線を計算し、方程式と信頼帯を用いて結果を示します
- パラメータレス積分により、積分を改善するためのパラメータを特定する必要がなくなりました
- 外れ値メッセージは、指定範囲外の結果を簡単に検出するのに役立ちます

この実習では、**DrugsOfAbuse** バッチを使用します。トリプル四重極データファイル、**Q-TOF** データファイル、**TOF** データファイルを用いて同じタスクを実行できます。

実習方法を示す表は、以下の3列に分けて表示されています。

- ステップ - 操作概要です。各自でプログラムを実行します。
- 詳細説明 - ステップの実行に必要な手順を示しています。
- コメント - 実習の各ステップに関するヒントや追加情報を記します。



4 3つのツールを使用した結果の評価

タスク 1. 検量線近似の調整

タスク 1. 検量線近似の調整

このタスクでは、化合物精度の外れ値を見つけ、検量線カーブフィットを調整し、バッチを再処理する方法を説明します。

ステップ	詳細説明	コメント
1 必要に応じて、バッチファイル <code>iii_Test_01.batch.bin</code> を開きます。	a デスクトップの [QQQ 定量分析] アイコン  をクリックしてプログラムを起動します。 b ツールバーの [バッチを開く]  をクリックし、[バッチを開く] ダイアログボックスを表示します。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：ホーム タブで、[バッチを開く] をクリックします。 c <code>%Your Directory%\DrugsOfAbuse</code> に移動し、<code>iii_Test_01.batch.bin</code> をクリックします。	• [スタート] メニューから [すべてのプログラム] > [Agilent] > [MassHunter Workstation] > [定量分析 (QQQ)] をクリックしてプログラムにアクセスすることもできます。 • デフォルトレイアウトが表示されない場合、バッチを開く前にツールバーの [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。 Restore Default Layout • Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。

- 2 アンフェタミン (Amp) の精度外れ値を探し、検量線を変更します。
- a **[バッチテーブル]** が 1 つの化合物を表示するモードに設定され、アンフェタミン (Amp) が表示されていることを確認します。下図の囲われた部分を参照してください。



- b **Calib-L1** 行のセルと **[精度]** 列をポイントし、下記のように外れ値メッセージを表示させます。
- 外れ値を含むセルは赤色 (高) または青色 (低) になります。

Agilent MassHunter Quantitative Analysis (for QQQ) - iii_Test_01.batch.bin

File Edit View Analyze Method Update Report Tools Help

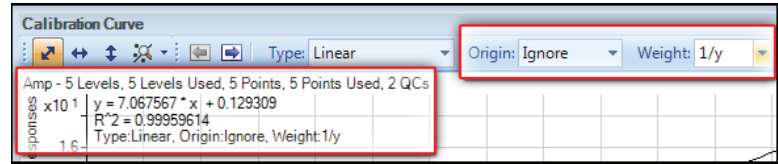
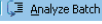
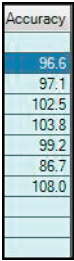
Analyze Batch Restore Default Layout

Batch Table

Sample: C... Sample Type: <All> Compound: Amp

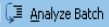
Sample					Amp Met.	Amp Results					Qualif.	Amp-d5 (IS.	Qualif.				
Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time	Exp. Conc.	RT	Resp.	MI	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy	Ratio	MI	RT	Resp.	Ratio	MI
Blank-1	CMAMBik_01.d	Blank		5/12/2006 1:48 PM													
Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Cal	L1	5/12/2006 1:51 PM	2.5000	2.140	658		3.1761	3.1761	127.0	24.3		2.128	1412	25.6	
Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Cal	L2	5/12/2006 1:54 PM	5.0000	2.140	1073		5.6092	5.6092							
Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Cal	L3	5/12/2006 1:57 PM	12.5000	2.134	2686		13.2419	13.2419							

Outlier(s)
Amp: Accuracy value = 127.0 is outside the allowed range [80.0, 120.0]

ステップ	詳細説明	コメント
	c [検量線] ウィンドウで、[原点] を[無視] に、[重み付け] を $1/y$ に設定します。 プログラムに新しい検量線近似式と決定係数 R^2 が表示されます。	検量線の原点 - 強制通過 - 強制的に検量線が原点 ($X = 0, Y = 0$) を通過するようにします。 - 無視 - 検量線が原点 ($X = 0, Y = 0$) を使用するようには強制しません。 検量線の重み付け - なし - すべてのデータポイントに同等の重み付けを行います。 $1/y$ - データポイントに式 $1/y$ を適用します。この式により、y の値が大きいと影響が弱まりますが、y の値が小さいと影響が強くなります。
		
3 [バッチテーブル] でバッチを解析し、結果を調べます。	a ツールバーの [バッチ処理] アイコン  をクリックし、バッチを解析します。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合: ホーム タブで、[バッチ処理] をクリックします。 b バッチ解析後、[バッチテーブル] の結果を確認します。	
		
4 他の化合物がある場合、精度外れ値を検索します。	a [バッチテーブル] ツールバーの [次の化合物]  をクリックし、コカイン (Cocaine)、MDMA、メタンフェタミン (Meth) などの個々の化合物を表示します。 b 定量結果、特に [精度] 列の値を確認します。	メタンフェタミン (Meth) の Calib-L3 標準サンプルの [精度] 値は、指定範囲外であることに注目してください。

4 3つのツールを使用した結果の評価

タスク 1. 検量線近似の調整

ステップ	詳細説明	コメント
5	メタンフェタミン (Meth) の検量線を変更し、バッチを解析します。 a 【検量線近似】 ウィンドウで、【原点】 を 【無視】 に、【重み付け】 を 【1/y】 に設定します。 [定量分析] プログラムに、新しい検量線近似式と決定係数 R2 が表示されます。 b メインツールバーの 【バッチ処理】 アイコン  をクリックし、バッチを解析します。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合： ホーム タブで、【バッチ処理】 をクリックします。 バッチ解析後、【バッチテーブル】 に新しい結果が表示されます。	

タスク 2. パラメータを用いない積分

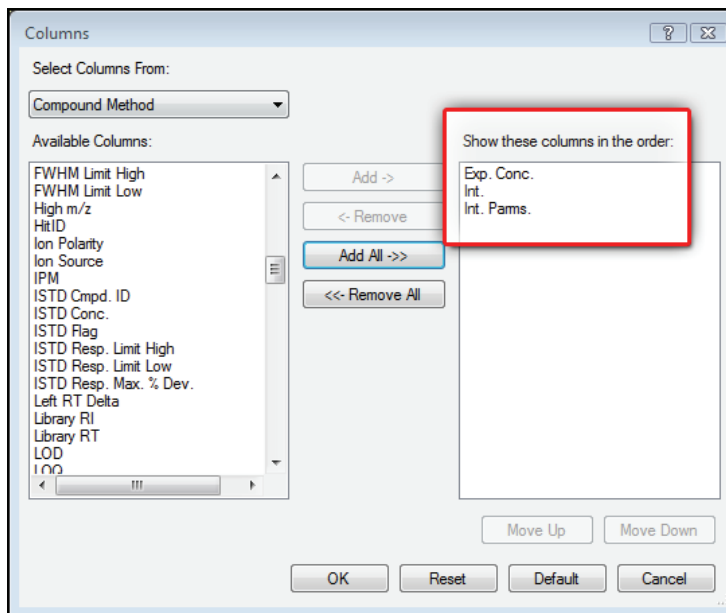
このタスクでは、データが正しく積分されていることを調べる方法を示します。以下のタスクの実行方法を学習します。

- [バッチテーブル] への積分列の追加
- デフォルト積分値の表示
- 以下の項目を確認し、クロマトグラムを詳細に調べる
 - 外れ値メッセージ
 - ベースラインパラメータ
 - ピークラベル

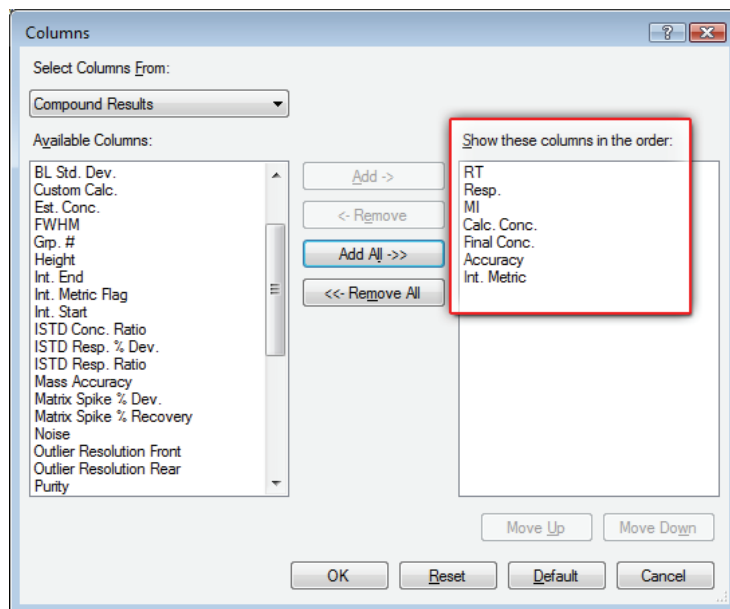
4 3つのツールを使用した結果の評価

タスク 2. パラメータを用いない積分

ステップ	詳細説明	コメント
1 [バッチテーブル] に積分関連の列を追加します。	a [バッチテーブル] のどこかを右クリックし、[列の追加/削除] をクリックします。 [列] ダイアログボックスが表示されます。 b [列の選択元] ドロップダウン リストから[化合物メソッド]を選択します。 c [使用可能な列] リストから[インテグレータ] と [積分パラメータ] を選択して、[追加] をクリックします。 選択された列が [順番にこれらの列を表示] リストに移動します。	このタスクは、バッチ iii_Test_01 が表示されている状態から開始してください。開いていない場合、タスク1のステップ1を参照してください。



ステップ	詳細説明	コメント
d	【列の選択元】 ドロップダウンリストから【化合物結果】を選択します。	
e	【使用可能な列】 リストから【積分基準】を選択して、【追加】をクリックします。 選択された列が【順番にこれらの列を表示】 リストに移動します。	
f	【OK】 をクリックします。	



4 3つのツールを使用した結果の評価

タスク 2. パラメータを用いない積分

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

- 2 アンフェタミン (Amp) のデフォルト積分値を確認します。
- a [バッチテーブル] ツールバーの [前の化合物]  をクリックし、アンフェタミン (Amp) を表示します。
 - b [バッチテーブル] の [インテグレータ] と [積分パラメータ] 列のデフォルト値を確認します。
- ・ 使用されるインテグレータは、パラメータを入力する必要のない MS-MS インテグレータであることに注目してください。そのため、[積分パラメータ] 列は空白です。

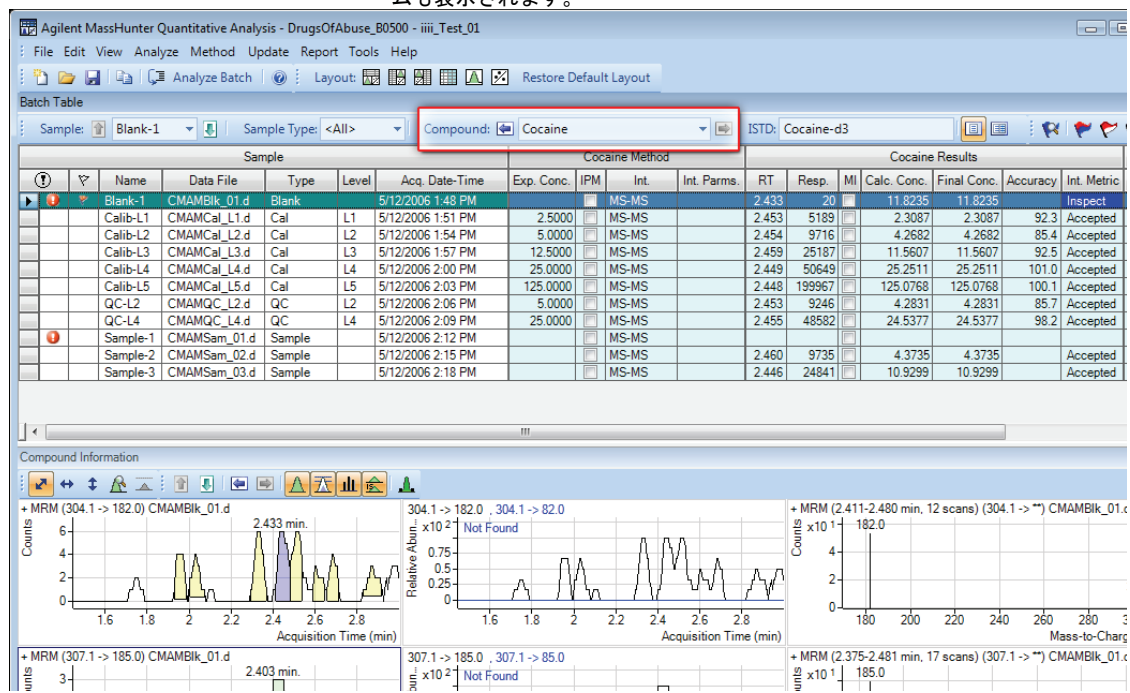
Int.	Int. Params.
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	

- c [バッチテーブル] の [積分基準] 列
- ・ これらの値は、ターゲット化合物アンフェタミンに使用されたデフォルトの積分品質基準を反映しています。

Amp Method			Amp Results							
Exp. Conc.	Int.	Int. Params.	RT	Resp.	MI	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy	Int. Metric	
	MS-MS				☐					
2.5000	MS-MS		2.141	658	☐	2.4161	2.4161	96.6	Accepted	
5.0000	MS-MS		2.140	1059	☐	4.8556	4.8556	97.1	Accepted	
12.5000	MS-MS		2.134	2673	☐	12.8162	12.8162	102.5	Accepted	
25.0000	MS-MS		2.022	4952	☐	25.9394	25.9394	103.8	Accepted	
125.0000	MS-MS		2.101	18605	☐	124.0262	124.0262	99.2	Accepted	
5.0000	MS-MS		2.142	1006	☐	4.3336	4.3336	86.7	Accepted	
25.0000	MS-MS		2.135	4716	☐	26.9911	26.9911	108.0	Accepted	
	MS-MS				☐					
	MS-MS		2.143	1004	☐	4.0008	4.0008		Accepted	
	MS-MS		2.105	2590	☐	13.3556	13.3556		Accepted	

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

- | | | |
|---|--|---|
| 3 | <p>コカインと MDMA に関する積分の問題を表示します。</p> <ul style="list-style-type: none"> 【Blank-1】サンプル行の【積分基準】列にある外れ値メッセージを探します。 | <p>a 【検量線】ウィンドウを閉じます。</p> <p>b 定量イオンとクオリファイアのクロマトグラムだけが表示されるように、【化合物情報】のクロマトグラム部分を拡大します。【スペクトルの表示/非表示】アイコンをクリックします。</p> <p>c 【ISTD の表示/非表示】アイコンをクリックします。</p> <p>d 化合物 Cocaine が表示されるまで、パッチテーブルツールバーの【次の化合物】アイコンをクリックします。</p> <p>e 【Blank-1】の行を選択し、その行の【積分基準】列の「Inspect」にマウスカーソルを置きます。
そのデータの外れ値メッセージの他、コカインの積分されたクロマトグラムも表示されます。</p> |
|---|--|---|



4 3つのツールを使用した結果の評価
タスク 2. パラメータを用いない積分

ステップ

詳細説明

コメント

f

化合物 MDMA が表示されるまで、[パッチテーブル] ツールバーの [次の化合物] アイコン または [前の化合物] アイコン をクリックします。

g

[Blank-1] 行を選択し、その行の [積分基準] 列にマウスカーソルを置きます。システムにはそのデータの外れ値メッセージの他、MDMA の積分されたクロマトグラムも表示されます。

・

外れ値メッセージには、「MDMA: 積分で、RT = 2.4664のピークに次の問題が見つかりました: 干渉エラー」と表示されます。

・

積分基準に対して以下の色が表示されることに注目してください。
緑 – Accepted (OK)
青 – Inspect (要調査)
赤 – Rejected (却下)
これらの色は、ピークの色にも反映されます。

4

ノイズアルゴリズムを変更します。

a

[パッチテーブル] のどこかを右クリックし、[列の追加/削除] をクリックします。
[列] ダイアログボックスが表示されます。

b

[列の選択元] ドロップダウン リストから [化合物メソッド] を選択します。

c

[使用可能な列] リストから [ノイズアルゴリズム] を選択して、[追加] をクリックします。
選択された列が [順番にこれらの列を表示] リストに移動します。

d

[OK] をクリックします。

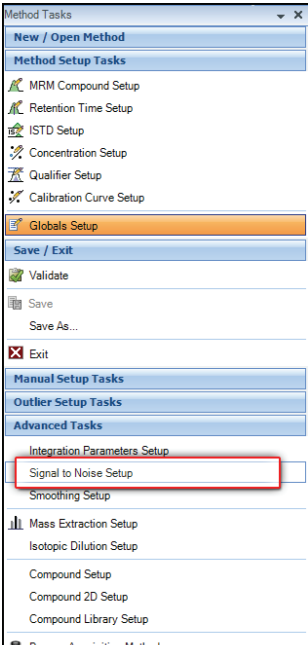
e

化合物 Amp が表示されるまで、[パッチテーブル] ツールバーの [前の化合物] アイコン をクリックします。

f

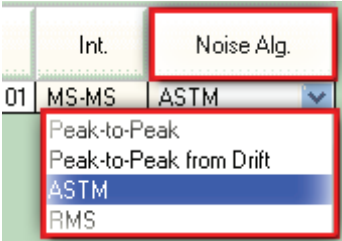
[ノイズアルゴリズム] 列と [S/N] (S/N比) 列の値を確認します。

Amp Method				Amp Results							Qualifier..	Amp-d5 (IST..		Qualifier..		
Exp. Conc.	Int.	Int. Params.	Noise Alg.	RT	Resp.	MI	Calc. Conc.	Final Conc.	Accuracy	Int. Metric	Ratio	MI	RT	Resp.	Ratio	MI
	MS-MS		RMS													
2.5000	MS-MS		RMS	2.141	658		2.1151	2.1151	84.6	Accepted	24.3		2.129	1397	25.9	
5.0000	MS-MS		RMS	2.140	1059		4.5770	4.5770	91.5	Accepted	33.5		2.128	1298	25.9	
12.5000	MS-MS		RMS	2.134	2673		12.6107	12.6107	100.9	Accepted	26.7		2.121	1377	26.3	
25.0000	MS-MS		RMS	2.022	4952		25.8545	25.8545	103.4	Accepted	29.1		1.990	1304	28.8	
125.0000	MS-MS		RMS	2.101	18605		124.8426	124.8426	99.9	Accepted	27.0		2.076	1053	26.4	
5.0000	MS-MS		RMS	2.142	1006		4.0502	4.0502	81.0	Accepted	27.7		2.131	1356	31.1	
25.0000	MS-MS		RMS	2.135	4716		26.9159	26.9159	107.7	Accepted	25.6		2.121	1196	31.1	
	MS-MS		RMS													
	MS-MS		RMS	2.143	1004		3.7144	3.7144		Accepted	30.9		2.130	1445	25.7	

ステップ	詳細説明	コメント
5	メソッドのアンフェタミンに対するノイズアルゴリズムを RSM から ASTM に変更する方法を実習します。 メソッドを終了しますが、保存しません。 a [メソッド] > [編集] をクリックし、メソッド編集モードに切り替えます。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合: メソッドタブで、[編集] をクリックします。 b メソッドタスクの [詳細タスク] > [S/N 比の設定] をクリックします。 [メソッドテーブル] のノイズ関連パラメータが表示されます。  c [メソッドテーブル] の Amp の [ノイズアルゴリズム] 列の下矢印をクリックします。 使用可能なノイズアルゴリズムのリストが表示されます。 d [ASTM] をクリックします。	

4 3つのツールを使用した結果の評価
タスク 2. パラメータを用いない積分

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------



- e メソッドタスクで [保存/終了] > [終了] をクリックします。
- f 終了プロンプトの [このメソッドをバッチに適用しますか?] で [いいえ] をクリックします。[バッチ解析] モードが表示されます。
- 6 アンフェタミン (amphetamine) に対してベースライン (最高濃度の標準サンプル) をオフに切り替えた後、オンに戻します。
- ベースラインのオン/オフを切り替えて2つのクロマトグラムを比較します。
- a サンプル [Calib-L5] を選択して (まだ選択されていない場合)、ツールバーの [化合物情報の最大化] アイコンをクリックします。
- Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合: 表示 タブで、[ペインを最大化] > [化合物情報の最大化] を選択します。
- ウィンドウに [化合物情報] ウィンドウのみが表示されていることを確認します。
- デフォルト設定として、ベースラインは定量イオンのクロマトグラムに対して描かれることに注目してください。

Agilent MassHunter Quantitative Analysis - DrugsOfAbuse_B0500 - iii_Test_01

File Edit View Analyze Method Update Report Tools Help

Analyze Batch Layout:  Restore Default Layout

Batch Table

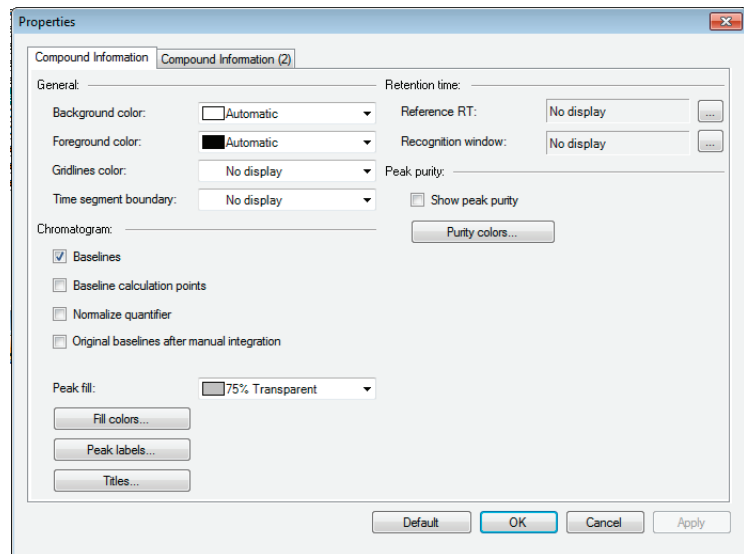
Sample:  Calib-L5 Sample Type: <All> Compound:  Amp ISTD

Compound Group: <All> Sample Group: <All> ISTD: <All> Time Segment: <All>

Sample						Amp Method				
?	▼	Name	Data File	Type	Level	Acq. Date-Time	Exp. Conc.	Int.	Int. Params.	Noise Alg
1	!	Blank-1	CMAMBlk_01.d	Blank		5/12/2006 1:48 PM		MS-MS		RMS
		Sample-1	CMAMSam_01.d	Sample		5/12/2006 2:12 PM		MS-MS		RMS
		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	Cal	L1	5/12/2006 1:51 PM	2.5000	MS-MS		RMS
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	Cal	L2	5/12/2006 1:54 PM	5.0000	MS-MS		RMS
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	Cal	L3	5/12/2006 1:57 PM	12.5000	MS-MS		RMS
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	Cal	L4	5/12/2006 2:00 PM	25.0000	MS-MS		RMS
		Calib-L5	CMAMCal_L5.d	Cal	L5	5/12/2006 2:03 PM	125.0000	MS-MS		RMS
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	5/12/2006 2:06 PM	5.0000	MS-MS		RMS
		QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	5/12/2006 2:09 PM	25.0000	MS-MS		RMS
		Sample-2	CMAMSam_02.d	Sample		5/12/2006 2:15 PM		MS-MS		RMS
		Sample-3	CMAMSam_03.d	Sample		5/12/2006 2:18 PM		MS-MS		RMS

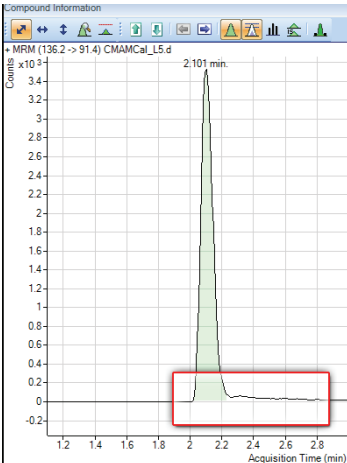
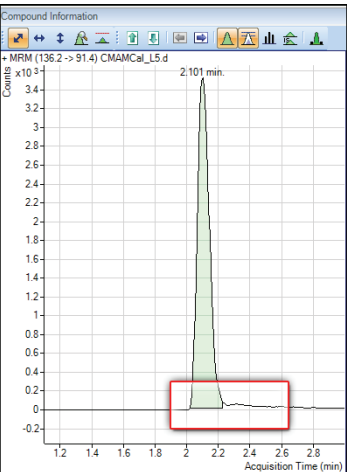
ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

- b いずれか一方のクロマトグラムを右クリックし、ショートカットメニューを開きます。
- c ショートカットメニュー下の【プロパティ】をクリックして、【プロパティ】ダイアログボックスを開きます。



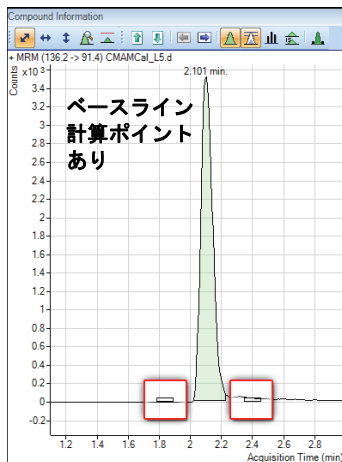
4 3つのツールを使用した結果の評価

タスク 2. パラメータを用いない積分

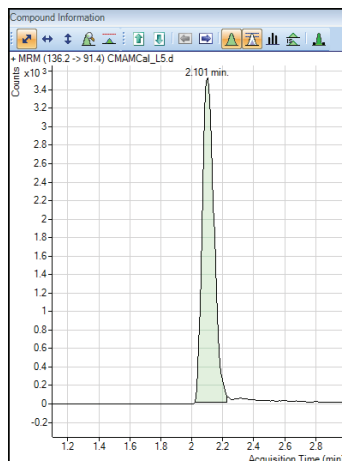
ステップ	詳細説明	コメント
	d [プロパティ] ダイアログボックスの [ベースライン] チェックボックスをオフにします。 e [適用] ボタンをクリックして、ベースラインのないピークを確認します。	・ ベースラインのチェックボックスをオフにすると、ベースラインが表示されなくなること注目してください。 
	f [プロパティ] ダイアログボックスの [ベースライン] チェックボックスをオンにします。 g [適用] ボタンをクリックして、ベースラインのあるピークを確認します。	

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

- 7 アンフェタミンのベースライン計算ポイントを調べます。
- a **【プロパティ】** ダイアログボックスの**【ベースライン計算ポイント】** チェックボックスをオンにします。
 - b **【適用】** をクリックして、ベースラインの開始位置と終了位置を確認します。



- c **【プロパティ】** ダイアログボックスの**【ベースライン計算ポイント】** チェックボックスをオフにします。
- d **【適用】** をクリックして、クロマトグラムを確認します。
- e ベースライン計算ポイントが描かれているクロマトグラムと描かれていないクロマトグラムを比較します。

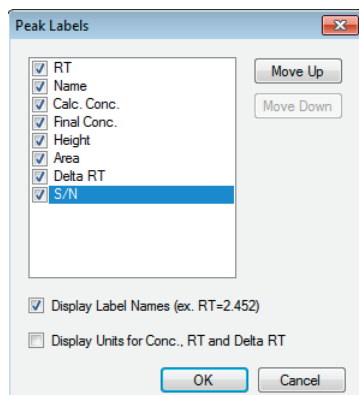


4 3つのツールを使用した結果の評価

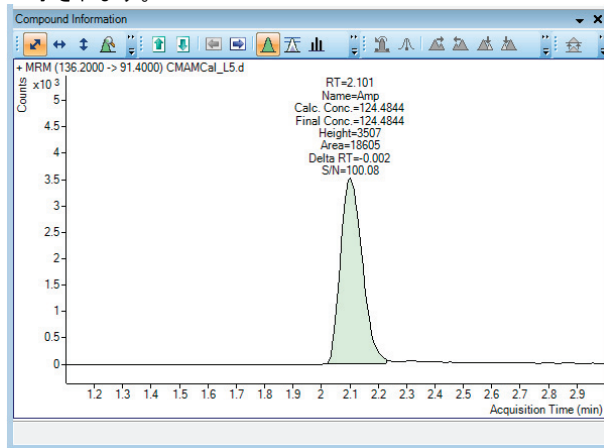
タスク 2. パラメータを用いない積分

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

- | | | |
|-------------------------|--|--|
| 8 アンフェタミンのピークラベルを表示します。 | <p>a 【プロパティ】 ダイアログボックスの【ピークラベル】 をクリックします。
【ピークラベル】 ダイアログボックスが表示されます。</p> <p>b すべての【ピークラベル】 チェックボックスと【ラベル名を表示】 チェックボックスをオンにします。</p> <p>c 【OK】 をクリックします。</p> | |
|-------------------------|--|--|



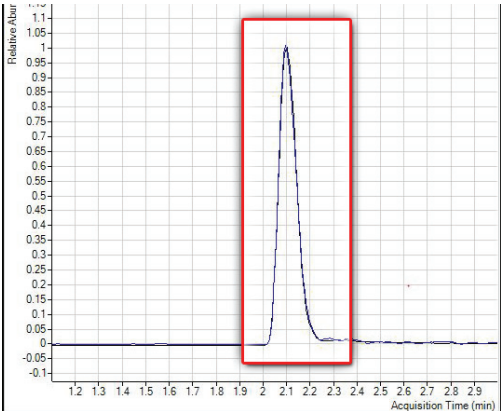
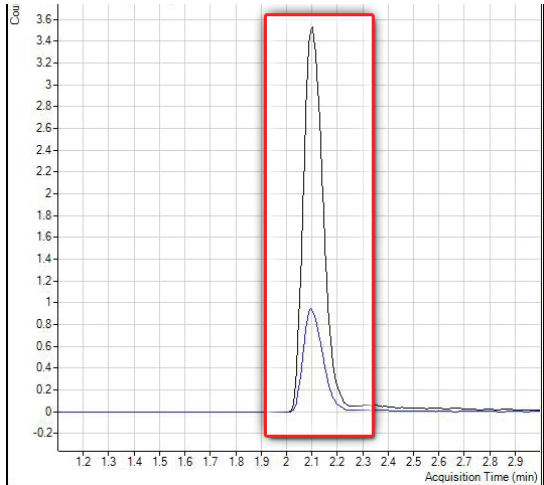
- d **【プロパティ】** ダイアログボックスの**【適用】** ボタンをクリックします。
ピークラベルは下記の例のように表示されます。

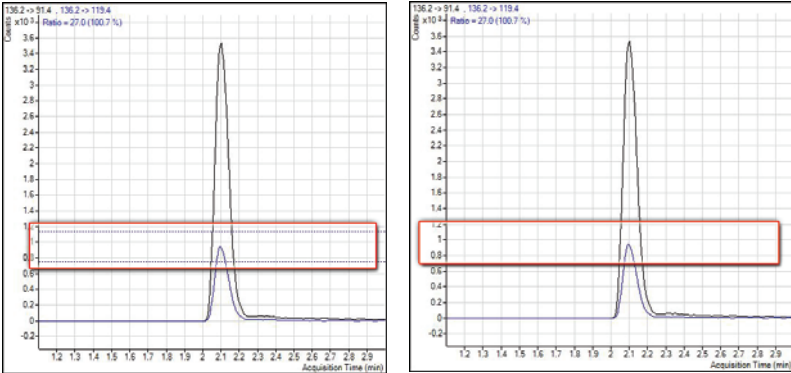


ステップ	詳細説明	コメント
	e 【プロパティ】 ダイアログボックスの【ピークラベル】 をクリックします。 【ピークラベル】 ダイアログボックスが表示されます。 f RT（リテンションタイム）を除き、すべての【ピークラベル】 をオフにします。【ラベル名を表示】 チェックボックスをオフにし、【OK】 をクリックします。 g 【プロパティ】 ダイアログボックスの【適用】 をクリックし、ピークラベルが変更されることを確認します。	

4 3つのツールを使用した結果の評価

タスク 2. パラメータを用いない積分

ステップ	詳細説明	コメント
9	クオリファイアのクロマトグラムをノーマライズの前後で比較します。 a 【化合物情報 (2)】 タブをクリックします。【クオリファイア】 セクションにある【ノーマライズ】 チェックボックスをオンにします。 b 【適用】 をクリックし、2つのピークが収束し、1つのピークとして表示されることを確認します。	• B.04.01 以降のリビジョンの場合：デフォルト設定では、ノーマライズされたクオリファイアピークが定量ピークに重ね書きされて表示されます。
	 c 【プロパティ】 ダイアログボックスの【クオリファイアのノーマライズ】 チェックボックスをオフにします。 d 【適用】 をクリックして、クオリファイアピークと定量対象化合物ピークを別々に再表示します。	
		

ステップ	詳細説明	コメント
10 許容範囲の幅を表示します。	a 表示する許容範囲のタイプを【プロパティ】ダイアログボックスの【許容範囲】フィールドのドロップダウンメニューから選択します。【適用】をクリックすると、クオリファイアクロマトグラムに許容範囲の幅が表示されます。 b 【プロパティ】ダイアログボックスの【許容範囲】ドロップダウンメニューから【表示しない】を選択します。【適用】をクリックすると、クオリファイアクロマトグラムから許容範囲の幅が削除されます。 c 【OK】をクリックして、【プロパティ】ダイアログボックスを閉じます。 d 許容範囲の幅の有無によるクオリファイアクロマトグラムの変化を比較します。	許容範囲の幅-クオリファイアバンドランスの上限と下限を示す点線の幅
		
11 【バッチテーブル】から【インテグレータ】および【積分パラメータ】列を削除します。	a 【デフォルトレイアウトの復元】ボタンをクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合: 表示タブで、【デフォルトレイアウトの復元】をクリックします。 b 【バッチテーブル】の【化合物メソッド】セクションを右クリックし、【列の追加/削除】をクリックします。 c 右側のリストから、【インテグレータ】と【積分パラメータ】(化合物メソッド)を選択します。 d 【削除】をクリックした後、【OK】をクリックします。	

4 3つのツールを使用した結果の評価

タスク 3. 外れ値の検出

タスク 3. 外れ値の検出

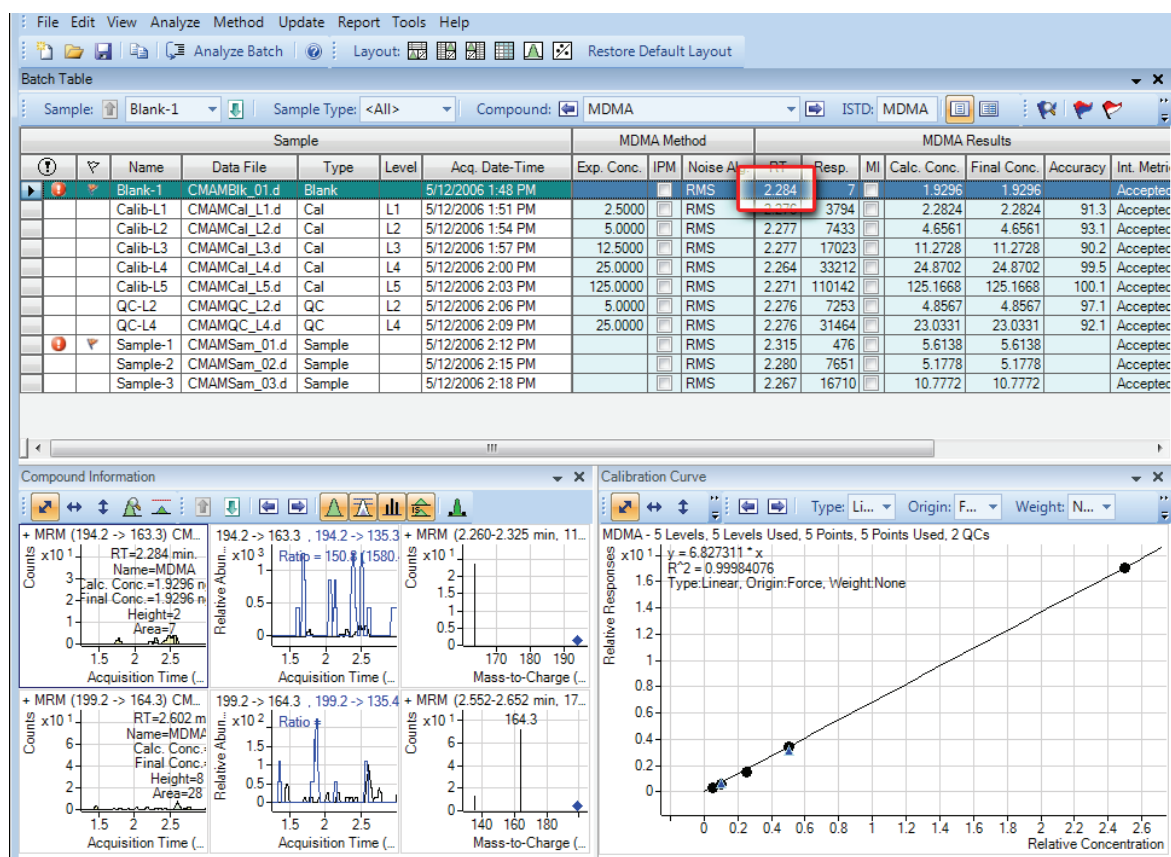
このタスクでは、化合物の精度範囲の微調整と、外れ値フラグの付いた結果を表示および非表示にする方法を示します。

ステップ

詳細説明

コメント

- 1 MDMA の外れ値情報を表示します。
 - a 化合物 MDMA が表示されるまで、[バッチテーブル] ツールバーの [次の化合物] をクリックします。
 - b [Blank-1] 行を選択し、下記のように [RT] 列をマウスカーソルで指します。

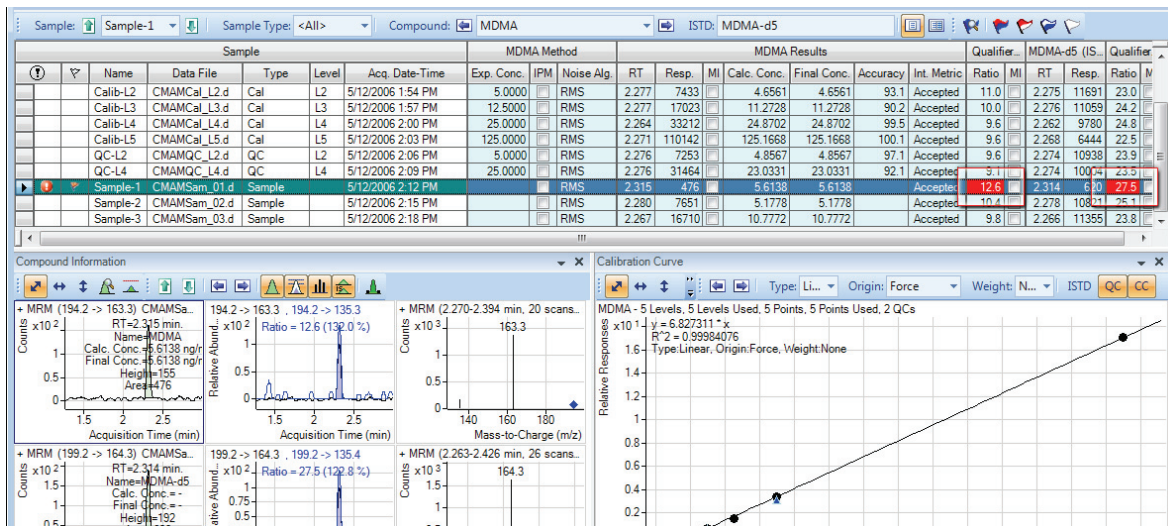


ステップ

詳細説明

コメント

- c 下記の例のように、サンプル1の【クオリファイアの結果】>【比率】列の外れ値情報を確認します。



- 2 メソッドのアンフェタミンの精度範囲を変更し、バッチを再解析します。

- a 化合物 Amp が表示されるまで、ツールバーの【前の化合物】アイコン  をクリックします。
- b テーブルの【Calib-L5】行を選択します。
- c 【メソッド】>【編集】をクリックし、メソッド編集モードに切り替えます。
Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合: メソッドタブで、【編集】をクリックします。
- d メソッドタスクの【外れ値設定タスク】>【精度】をクリックします。
- e Amp に対して、【精度%偏差の上限】を5%に設定します。

スクロールバーの左側の小さな長方形をドラッグすることで、【メソッドテーブル】を分割できます。下記の例では、下のスクロールバーの長方形を使用して、【メソッドテーブル】を分割表示しています。2つのセクションの情報はまったく同じです。この2つのペインを使用して、テーブルの2つのセクションを同時に見ることができます。

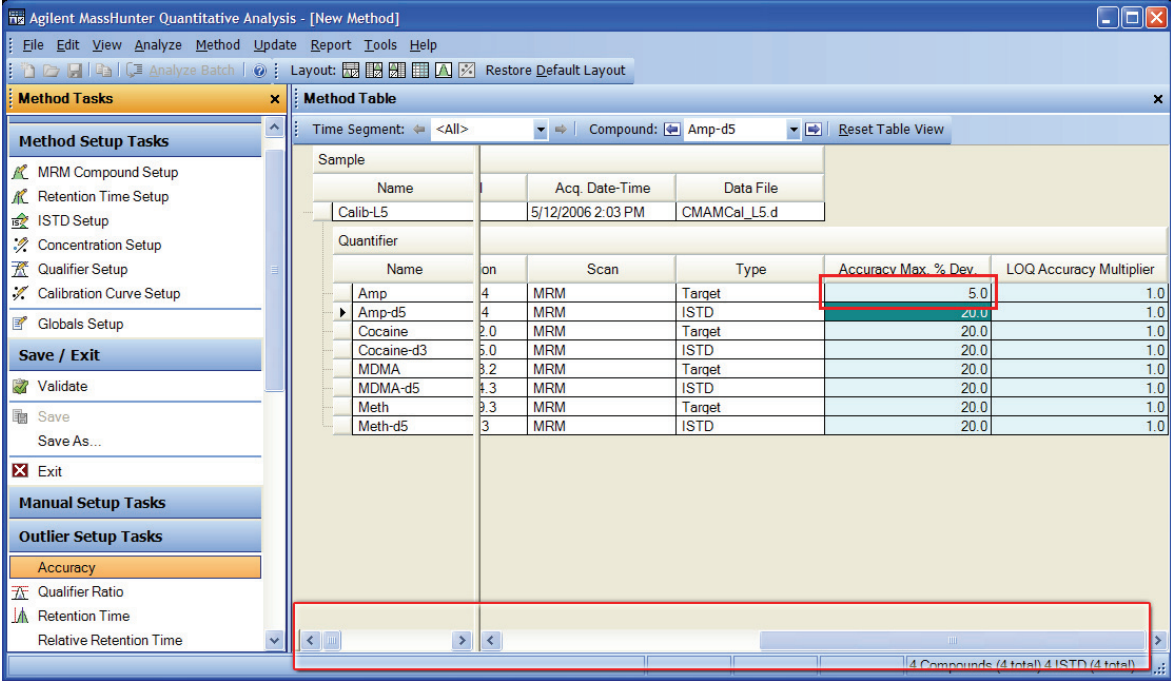
4 3つのツールを使用した結果の評価

タスク 3. 外れ値の検出

ステップ

詳細説明

コメント



The screenshot displays the Agilent MassHunter Quantitative Analysis - [New Method] interface. The 'Method Table' is visible, showing a list of compounds and their associated data. The table includes columns for Name, Acq. Date-Time, Data File, and a table of quantifier data (Name, on, Scan, Type, Accuracy Max. % Dev, LOQ Accuracy Multiplier). The 'Accuracy Max. % Dev' column is highlighted with a red box, showing values ranging from 5.0 to 20.0. The 'LOQ Accuracy Multiplier' column shows values of 1.0 for all entries. The table is filtered by 'Time Segment: <All>' and 'Compound: Amp-d5'. The 'Method Setup Tasks' pane on the left shows various setup options, including 'MRM Compound Setup', 'Retention Time Setup', 'ISTD Setup', 'Concentration Setup', 'Qualifier Setup', 'Calibration Curve Setup', 'Globals Setup', 'Save / Exit', 'Validate', 'Save', 'Save As...', 'Exit', 'Manual Setup Tasks', 'Outlier Setup Tasks', 'Accuracy', 'Qualifier Ratio', 'Retention Time', and 'Relative Retention Time'.

Sample	Name	Acq. Date-Time	Data File		
Calib-L5		5/12/2006 2:03 PM	CMAMCal_L5.d		
Quantifier					
	Name	on	Scan	Type	Accuracy Max. % Dev
	Amp	4	MRM	Target	5.0
	Amp-d5	4	MRM	ISTD	20.0
	Cocaine	2.0	MRM	Target	20.0
	Cocaine-d3	5.0	MRM	ISTD	20.0
	MDMA	3.2	MRM	Target	20.0
	MDMA-d5	4.3	MRM	ISTD	20.0
	Meth	9.3	MRM	Target	20.0
	Meth-d5	3	MRM	ISTD	20.0

ステップ	詳細説明	コメント
f	メソッドタスクで [保存/終了] > [終了] をクリックし、[メソッド適用後のパッチ処理オプション] の [なし] を選択し、[このメソッドをパッチに適用しますか?] というメッセージで [はい] をクリックします。	[パッチテーブル] も2つのセクションに分割できます。デフォルトでは [サンプル] 列の位置がロックされ、他の列だけスクロールします。テーブルを2つのセクションに分割する場合、各セクションに表示する列を指定できます。[パッチテーブル] を分割する場合、[パッチテーブル] ショートカットメニューの [サンプル列のロック] メニュー項目の選択を解除する必要があります。
g	F5 を押し、パッチを解析します。 これで、赤（高）と青（低）の外れ値が、Amp の [精度] 列に表示されます	

Agilent MassHunter Quantitative Analysis - DrugsOfAbuse - jmt_test_01

File Edit View Analyze Method Update Report Tools Help

Analyze Batch Layout: [Icons]

Batch Table

Sample: [Icon] Sample Type: <...> Compound: [Icon] 1... [Icons]

Compound Group: <All> Sample Group: <All>

	Name	Data File	Final Conc.	Accuracy	Ratio	MI	RT	Amp-d5
Sample-1	CMAMSam_01.d							
Sample-2	CMAMSam_02.d		4.8422		31.0		2.130	
Sample-3	CMAMSam_03.d		14.1047		25.3		2.089	
Sample-added	CMAMSam_added.d							
QC-L2	CMAMQC_L2.d		5.173	103.7	27.5		2.131	
QC-L4	CMAMQC_L4.d		27.614	110.6	25.5		2.121	
Calib-L1	CMAMCal_L1.d		3.292	131.6	24.5		2.129	
Calib-L2	CMAMCal_L2.d		5.770	114.1	33.5		2.128	
Calib-L3	CMAMCal_L3.d		13.510	108.5	26.5		2.121	
Calib-L4	CMAMCal_L4.d		26.517	106.2	29.5		1.990	
Calib-L5	CMAMCal_L5.d		124.565	99.5	27.5		2.076	

Sample-1 Amp 12 Samples (12 total)

4 3つのツールを使用した結果の評価

タスク 3. 外れ値の検出

ステップ	詳細説明	コメント
3 次の外れ値フラグアイコンセットを使用します。 	a ツールバーの【上側の外れ値を持つサンプルを表示】アイコンをクリックし、上側の外れ値を持つサンプルだけを表示します。 b 【外れ値のフィルタを解除】アイコンをクリックし、すべてのサンプルを表示します。 c ツールバーの【上側 / 下側の外れ値を持つサンプルを表示】アイコンをクリックし、上側と下側の外れ値を持つサンプルだけを表示します。 d 【上側 / 下側の外れ値を持つサンプルを表示】アイコンを再びクリックし、すべてのサンプルを表示します。 e 【外れ値の選択】アイコンをクリックし、【外れ値】ダイアログボックスを呼び出します。 f 【精度】チェックボックスと【リテンションタイム】チェックボックスをオフにし、【OK】をクリックします。 g 【外れ値の選択】アイコンをクリックし、【外れ値】ダイアログボックスを呼び出します。 h 【精度】チェックボックスと【リテンションタイム】チェックボックスをオンにし、【OK】をクリックします。	・【バッチテーブル】を復元して、外れ値あり / なしのすべてのデータファイルを表示するには、外れ値をフィルタするために選択したアイコンをもう一度クリックしてフィルタを解除します。

実習5 定量レポートの作成

この実習は、以下の実行方法を学習します。

- 1 つまたは複数のレポートテンプレートを使用したレポートメソッドの作成
- レポートの作成

この実習では、**DrugsOfAbuse** バッチを使用します。トリプル四重極データファイル、**Q-TOF** データファイル、**TOF** データファイルを用いて同じタスクを実行できます。

実習方法を示す表は、以下の 3 列に分けて表示されています。

- ステップ - 操作概要です。各自でプログラムを実行します。
- 詳細説明 - ステップの実行に必要な手順を示しています。
- コメント - 実習の各ステップに関するヒントや追加情報を記します。

レポートメソッドは、**MassHunter** で作成するレポートを指定するものです。レポートメソッドを作成するには、1 つまたは複数のレポートテンプレートを組み合わせ、それぞれのレポートの必要事項に合わせてテンプレートを編集します。レポートメソッドを開発する際、**Excel** テンプレートまたは **PDF** テンプレートを使用できます。**PDF** テンプレートはこのリリースに含まれており、**Excel** テンプレートの 20 倍の速さでレポートを作成できます。さらに、拡張性やパフォーマンスを向上するために、**PDF** テンプレートにはより多くのオプションが用意されています。

この実習では、まず **PDF** テンプレートを使用してレポートメソッドを作成した後、そのメソッドを使用してシングルサンプルレポートとバッチレポートを作成します。



5 定量レポートの作成

ステップ	詳細説明	コメント
1 バッチファイル iii_Test_01.batch.bin を開きます。	a デスクトップの [QQQ 定量分析] アイコンをクリックしてプログラムを起動します。 b ツールバーの [バッチを開く]  をクリックし、[バッチを開く] ダイアログボックスを表示します。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：ホーム タブで、[バッチを開く] をクリックします。 c ¥Your Directory¥DrugsOfAbuse に移動し、iii_Test_01.batch.bin をクリックします。	• バッチが既に開いている場合、ステップ2に進みます。 • [スタート] メニューから、すべてのプログラム > Agilent > MassHunter Workstation > 定量分析 (QQQ) をクリックしてプログラムにアクセスすることもできます。 • デフォルトレイアウトが表示されない場合、バッチを開く前にツールバーの[デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。 Restore Default Layout Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：表示 タブで、[デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。
2 このバッチのサンプルを定量し、結果を保存します。	a バッチテーブルを開いた状態で、ツールバーの [バッチ処理] ボタンをクリックして結果を作成します。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：ホーム タブで、[バッチ処理] をクリックします。 b [ファイル] > [保存] をクリックしてバッチを保存します。	• 定量レポートには、バッチ実行中に作成されたサンプル情報が含まれています。レポート機能は、サンプル結果が定量され、保存されるまで動作しません。 • バッチが既に定量されている場合、ステップ3に進みます。

ステップ	詳細説明	コメント
3 PDFレポートメソッドを作成します。	a ツールバーの [レポート]>[作成] をクリックします。 Quant-My-Way ユーザーインターフェイスの場合：ホーム タブで、[レポートの作成] をクリックします。 [レポートの作成] ダイアログボックスが表示されます。 b このレポートのデフォルトレポートフォルダディレクトリを受け入れます。 c [レポートメソッド] フィールド下の [新規作成] ボタンをクリックし、新しいレポートメソッドを作成します。 d [レポートメソッドの編集] ダイアログボックスの [テンプレート追加] ボタンをクリックしてブラウザを開きます。 e MassHunter/Report Templates/Quant/PDF-Reporting ディレクトリに移動し、DrugAnalysis.report.xml を選択して、[開く] をクリックします。 このテンプレートが [レポートメソッドの編集] ペインの [テンプレート] フィールドに追加されます。 f ステップ d と e を繰り返して DrugAnalysis_DopingScreening.report.xml を追加します。	• [レポートフォルダ] フィールドで、レポートを保存するディレクトリを変更できます。 • ソフトウェアのレポートメソッド編集機能を使用すると、Excel レポート、PDF レポート、またはその両方を作成するためのレポートメソッドに、既存のテンプレートを組み合わせることができます。 • デフォルトは、前回のレポート作成で使用されたレポートメソッドです。適切なデフォルトメソッドならば、新規メソッドを作成せずにそのまま使用することができますし、別の既存メソッドを選択することも可能です。 • 既存のレポートメソッドを選択するには、[レポートメソッド] フィールド下の [選択] ボタンをクリックし、フォルダに移動してメソッドを選択します。
4 レポートメソッドを編集して、シングルサンプル PDF レポートとバッチ PDF レポートを作成します。	a [レポートメソッドの編集] ダイアログボックスで、DrugAnalysis.report テンプレートの [レポートモード] フィールドのドロップダウンメニューから [シングルサンプル] を選択します。 b DrugAnalysis_Doping Screening. report テンプレートの [レポートモード] フィールドのドロップダウンメニューから [バッチ] を選択します。 c [言語] フィールドのドロップダウンメニューから言語を選択します。 d [用紙サイズ] フィールドのドロップダウンメニューから用紙サイズを選択します。	• [レポートメソッドの編集] ダイアログボックスを使って、レポートメソッドに含めるテンプレートの特長機能を編集できます。 • PDF レポートオプションでは、英語、中国語、日本語のレポートを作成できます。Excel レポートは英語のみ対象であるため、このオプションはグレースアウトになります。 • Excel レポートでは用紙サイズに制限があります。PDF レポートの場合は自由に選択できます。 • [ファイル形式] を選択することもできます。PDF レポートのファイル形式は 1 つしかないため、この例ではフィールドがグレースアウトになっています。

5 定量レポートの作成

ステップ	詳細説明	コメント
5 システムによるレポート結果の処理方法を選択します。	- a 【レポートメソッドの編集】 ウィンドウの【結果】 タブを選択します。 - b 【レポート結果ファイルの作成】 フィールド下の【自動】 をクリックします。 - c 【機器】 フィールドのドロップダウンメニューからQQQを選択します。	・ほとんどの場合【自動】をお勧めします。自動を選択すると、Excel レポートを選択した場合のみ、レポートと一緒に Excel ファイルが作成されます。Excel ファイルを作成する必要がない場合は、PDF レポートの方が迅速で、効率的です。
6 メソッドのグラフィック設定オプションを設定します。	- a 【グラフィック設定】 タブをクリックして、グラフィック設定を確認します。 - b 【グラフィックファイルの作成】 チェックボックスをオンにして、グラフィックをレポートに追加します。 - c グラフィック設定フィールドの残りフィールドはデフォルト設定のままにします。	・【グラフィック設定】 タブでは、【ターゲット/クオリファイアの重ね書きクロマトグラム】、【スペクトル】、【サンプルのクロマトグラム】、【検量線】、【固定範囲のグラフィック】 設定を使用して、レポートのグラフィック表示を指定することができます。設定を変更しないと、データに適したデフォルト設定が使用されます。
7 レポートメソッドを保存します。	- a 【レポートメソッドの編集】 ウィンドウの保存アイコンをクリックします。 - b レポートメソッドに D0A.m という名前を付けます。	・ウィンドウを閉じてレポートを作成するには、メソッドを保存する必要があります。

ステップ	詳細説明	コメント
8	【レポートメソッドの編集】ウィンドウを閉じます。 【保存/終了】をクリックして【レポートメソッドの編集】ダイアログボックスを閉じ、【レポートの作成】ウィンドウに戻ります。	

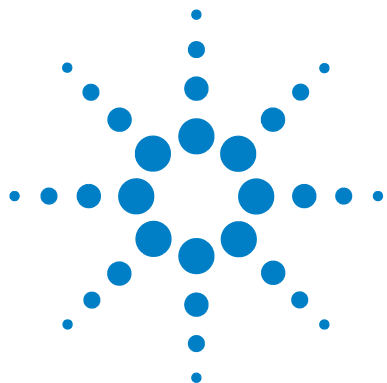
The screenshot shows the 'Generate Report' dialog box with the following details:

- Batch file:** Empty text field.
- Batch folder:** C:\MassHunter\Data\DrugsOfAbuse\
- Batch file:** DOA_Demo.batch.bin, with a 'Browse...' button.
- Report folder:** C:\MassHunter\Data\DrugsOfAbuse\QuantReports\DOA_Demo-60, with a 'Browse...' button.
- Report method:** C:\MassHunter\Report Templates\Quant\PDF-Reporting\DOA.m, with 'Choose...', 'New...', and 'Edit...' buttons.
- Samples/Compounds:**
 - ☒ All samples, with a 'Choose samples...' button.
 - ☒ All compounds, with a 'Choose compounds...' button.
- Generate:**
 - ☒ Generate reports now
 - ☐ Queue report task
 - ☒ Start Queue Viewer
- Buttons:** 'OK' and 'Cancel' at the bottom right.

5 定量レポートの作成

ステップ	詳細説明	コメント
9 メソッドからレポートを作成します。	a 作成したメソッドが 【レポートメソッド】 フィールドに存在することを確認します。 b 【サンプル/化合物】 フィールドの 【すべてのサンプル】 のチェックを解除し、バッチテーブルを開きます。 c バッチテーブルウィンドウのサンプルの1つをハイライトし、【OK】 をクリックします。 d 【すべての化合物】 をクリックし、選択したサンプル内のすべての化合物を表示します。 e 【すぐにレポートを作成】 を選択し、【OK】 をクリックしてレポートを作成します。	• バッチのすべてのサンプルと化合物を表示することも、特定のサンプルや化合物をレポートに表示させるようバッチテーブルで選択することもできます。 • PDF レポートは迅速に作成できるため、【すぐにレポートを作成】 オプションを選択して、レポートをすぐに入手することをお勧めします。レポートと一緒に Excel ファイルを作成する場合、【レポートタスクをキューに追加】 を選択してレポート作成の進行状況を表示できます。 • 作成されるレポートはすべて、ビューアに表示されます。最新のレポートがリストの一番上に表示されます。 • レポートの表示や印刷は、作成した Excel ファイルまたは PDF ファイルから行います。
10 レポートを表示します。	ファイルをダブルクリックし、レポートを開いて表示します。	• Windows Explorer からファイルを選択してレポートを開くこともできます。

Name	Date modified	Type	Size
 DrugAnalysis_000_CMAMBIk_01.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	95 KB
 DrugAnalysis_001_CMAMCal_L1.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_002_CMAMCal_L2.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_003_CMAMCal_L3.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	100 KB
 DrugAnalysis_004_CMAMCal_L4.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	100 KB
 DrugAnalysis_005_CMAMCal_L5.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	100 KB
 DrugAnalysis_006_CMAMQC_L2.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_007_CMAMQC_L4.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_008_CMAMSam_01.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	98 KB
 DrugAnalysis_009_CMAMSam_02.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_010_CMAMSam_03.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	99 KB
 DrugAnalysis_DopingScreening.pdf	2/5/2013 10:56 AM	PDF Complete Do...	166 KB



リファレンス

10 の主要機能	90
定量メソッド	94
パラメータレス積分	95
バッチ一覧: 結果	97
化合物クロマトグラムの一覧	98
化合物の確認	100
化合物キャリブレーション	101



10 の主要機能

定量分析には、データをより簡単かつ強力に積分、定量、レビューするために、次の 10 の機能が搭載されています。

バッチ一覧: バッチテーブル設定

- 新規バッチ - サンプルと化合物について 1 つのビューから操作できるバッチテーブルを作成します。
- バッチ処理 - 現在開かれているメソッドを用いて、検量線を再作成し、すべてのサンプルを再定量します。
- 定量 - 現在のバッチ、サンプル、化合物に既存の検量線を適用します。

定量の適用が細分化されているため、特定シグナルをすばやく操作できます。

- 積分 - 現在のバッチ、サンプル、化合物シグナルを積分します。

メソッドエディタ

- MRM 設定 - シンプルな段階的方法で定量メソッドを示します。
- 測定済み MRM データからのメソッド作成 - ISTD の関係と濃度の割り当てを設定すると、測定メソッドから定量メソッドを自動的に作成します。
- [サンプル情報] ウィンドウのグラフィックを用いて、メソッドを自動的に作成します。
- 時間区分によるグループ - 時間区分順の化合物によりメソッドを整理します。
- 検証 - 定量メソッドが厳しい基準を満たすようにします。
- 同位体希釈 - (Rx、Ry) Colby 定数計算による調整をサポートします。

キャリブレーション

- カーブフィットアシスタント - すべての検量線の組み合わせを計算し、無効なポイントを選択します。検量線の方程式とともに、ソートやカスタムフィルタが可能な信頼帯、 R^2 (決定係数)、標準誤差、最大残差 % 等の結果を表示します。
- 希釈アシスタント - デフォルトまたは指定した連続希釈法に基づき、キャリブレーションレベルを計算および作成します。

- キャリブレーションレベルのコピー - ある化合物から別の化合物にキャリブレーションレベルをコピーします。
- キャリブレーションポイントの無効 - レベルまたは表の個々の化合物に基づくか、グラフから対話形式でキャリブレーションポイントを無効にします。
- カーブフィット - 以下の検量線タイプをサポートしています。
 - タイプ: 直線、二次曲線、一次対数、二次対数、平均レスポンスファクタ
 - 原点: 無視、含む、強制通過、ブランクオフセット
 - 重み付け: なし、 $1/x$ 、 $1/x^2$ 、 $1/y$ 、 $1/y^2$ 、 $\log$ 、 $1/SD^2$
- 曲線の置き換え - 既存のキャリブレーションサンプルから検量線を作成します。
- 複製の平均化 - メソッドのキャリブレーションテーブルの複製レベルを平均化します。
- レベルのインポート - ファイルからキャリブレーションレベルと濃度をインポートします。
- グラフのズーム - X、Y、X-log、Y-log の自動拡大、縮小が可能です。さらに指定されたレベルに自動調整するインテリジェントなズーム機能でグラフを表示できます。

インテグレーター

- Agile および Agile2 積分 - すべてのレベルのシグナルでパラメータレス積分を提供し、手動での積分作業を減らします。
- 積分基準 - シグナルの積分結果を、OK、要調査、却下、の3段階で評価する品質基準を設けます。
- S/N 比 - ピークの S/N 比を計算します。
- グラフ - 化合物の図示とピーク情報の表示の優れた相互作用を示します。

バッチ一覧: 結果

- ナビゲーション - サンプル、化合物、タイムセグメント、化合物グループ間をすばやく移動します（前、次、直接）。
- 化合物ビュー - 現在の化合物/サンプルの詳細または複数の化合物/サンプルのサマ리를切り替えます。
- バッチテーブルビュー - フラットテーブルレイアウトや、縦または横のネストテーブルへの変更による詳細表示、化合物テーブルレイアウトが可能です。

- ウィンドウレイアウト - 画面をデフォルトに再整理するか、カスタムウィンドウレイアウトを保存するか読み込みます。
- 自動レビュー - 詳細に検討するためにいつでも停止できる、対話形式のサンプル自動スクロール表示ツールです。
- 列 - 列の追加、削除、並べ替え、保存、読み込み、復元、リセットを可能にします。
- ペインを浮かせる - デュアルモニター表示を有効にするため、ペインを別のモニター上に浮かせます。
- テーブルのエクスポート - バッチ一覧テーブルを **Excel** ファイルに直接エクスポートします。
- グラフィックのエクスポート - 複数の形式でカスタマイズしたサイズにグラフをエクスポートします。
- コピー/貼り付け - **Word**、**PowerPoint**、**Excel** などの **Microsoft Office** アプリケーションにグラフを直接コピーまたは貼り付けます。
- 印刷/印刷プレビュー - 印刷、または WYSIWYG (what-you-see-is-what-you-get [実際のイメージで表示する]) 形式で画面内容をプレビュー表示します。
- フィルタ - サンプルタイプのどんな組み合わせも表示します。
- ソート - テーブルに表示される任意の列をソートします。

化合物クロマトグラムの一覧: 結果

- 印刷/印刷プレビュー - 化合物クロマトグラムを印刷またはプレビュー表示します。
- コピー/ページのコピー - 選択した化合物クロマトグラムまたは画面上のすべての化合物クロマトグラムを、**Microsoft Office** アプリケーション (**Word**、**PowerPoint**、**Excel** など) にコピーします。
- 化合物クロマトグラムの編集 - データをマニユアル積分したり、ゼロピーク化合物として選択することができます。
- 表示 - クロマトグラムの詳細 (ベースライン、ピークの塗りつぶしなど) を表示します。
- 軸調整 - **X** または **Y** 軸のリンク/リンク解除、ペインに合わせたオートスケール、ピークまたはキャリブレーションレベルへのオートスケールを行います。
- レイアウト - 化合物またはサンプルによる行の構成、クロマトグラムの重ね描きの選択、サンプルごとあるいは化合物ごとのレビュー選択、および表示オプションの設定を行います。
- 外れ値のハイライト - 外れ値を持つ化合物をハイライトします。

外れ値検出

- 管理 - それぞれ個別に管理できる特定の外れ値検出を設定および選択します。
- 強調表示 - 結果テーブルの外れ値を強調表示します（上側 - 赤、下側 - 青）。
- フィルタ - 選択したタイプのフィルタ結果を表示します。
- 外れ値 - 外れ値（アウトライヤ）検出のための特定タイプのデータをサポートしています。
- 定量メッセージ - 定量中に深刻な問題に直面したサンプルの警告を警告します。

レポート

- 作成 - Excel XML にインポートおよびフォーマットするためのグラフとレポート結果を作成します。
- カスタム - Excel テンプレートをカスタマイズできます。
- PDF レポート - PDF レポートをカスタマイズおよび作成できます。

更新

- リテンションタイムの更新/平均化 - 化合物のリテンションタイムの更新または重み付け平均を計算します。
- クオリファイア比の更新 - サンプルに基づき化合物のクオリファイア比を更新します。
- 質量割り当ての更新 - サンプルに基づき化合物の質量割り当てを更新します。

定性

- サンプル情報 - サンプルのクロマトグラムと抽出スペクトルを表示します。
- クロマトグラム/スペクトル - さまざまなタイプのシグナルのスペクトルを検索するために使用できる重要な機能を提供します。

定量メソッド

メソッドエディタにより、測定した MRM データファイル (図 12)、SIM データファイル、スキャンデータファイル、またはマニュアル設定により新規定量メソッドを作成できます。

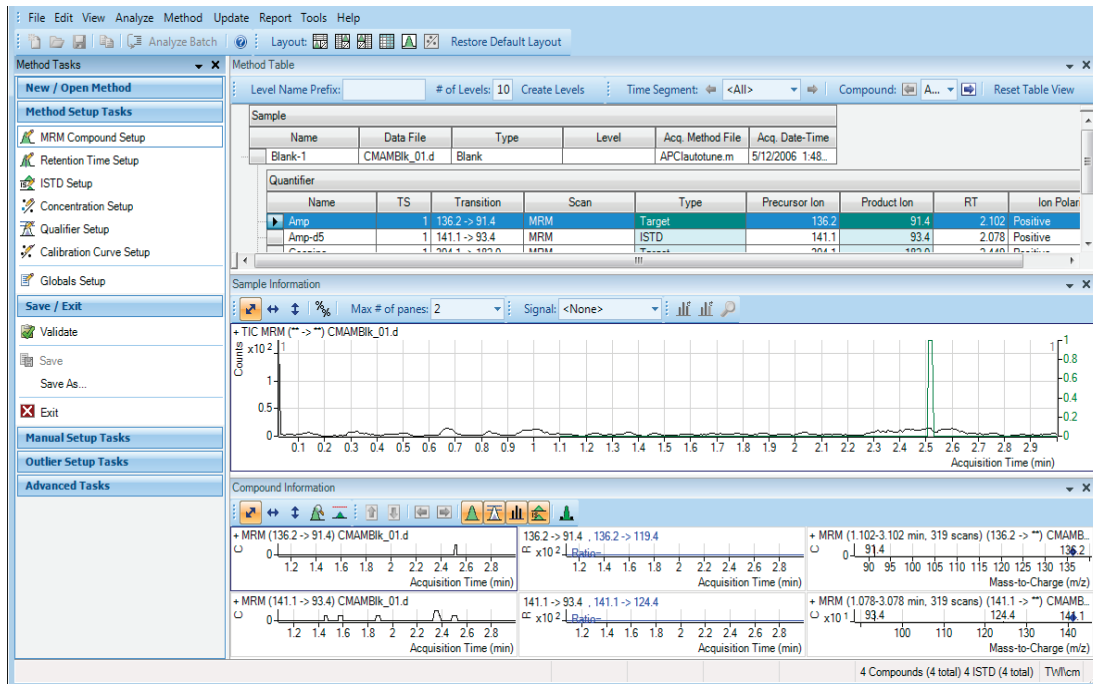


図 12 定量ビュー - メソッドエディタ

メソッド設定を行うための参考として、バッチテーブルから選択されたファイルを使用します。次にこれらの設定を使用して検量線を作成し、キャリブレーションサンプル、QC サンプル、サンプルを定量します。

パラメータレス積分

パラメータレス積分とは

アジレントは、MS/MS データに対して特に効果的に機能する新しいピークインテグレーションアルゴリズムを開発しました。パラメータレス積分には以下の利点があります。

- ピークの開始点と終了点を統計的に設定することで、ノイズレベルの低いデータを扱います。
- スレッシュホールドを自動的に調整します。
- 低い MRM シグナルのピークを手動で再積分する必要がなくなります。
- 信頼性が高いと思われるピークと却下すべきピークを識別します。

積分結果の例

図 13 に、両極端なデータを示します。

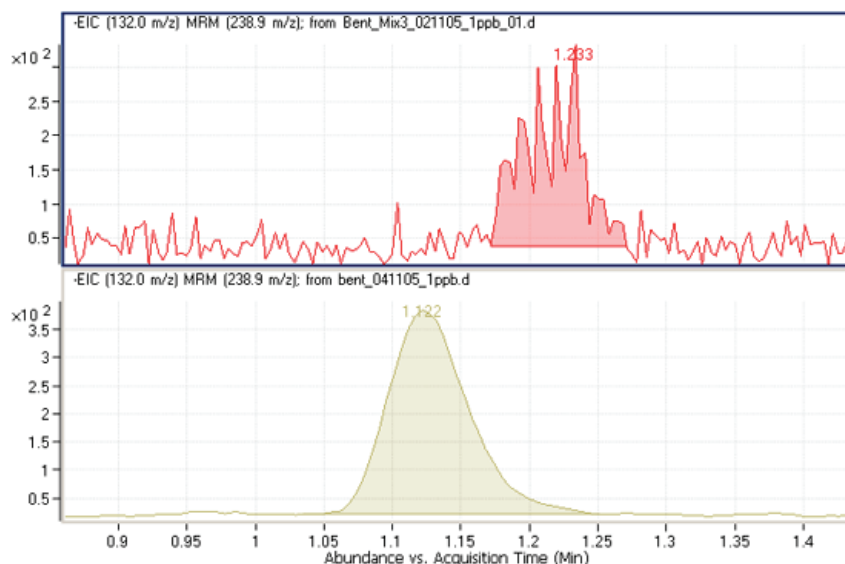


図 13 パラメータレス積分 - 両極端なデータ

6 リファレンス

パラメータレス積分

下のクロマトグラフピークは良いガウス形状のピークをしているため簡単に積分できますが、上のピークのベースラインを定義するのは困難です。実際、多くのインテグレートアルゴリズムでは、これらの結果を複数のピークとして積分する場合があります。

しかし、アジレントの新しいアルゴリズムはベースラインの定義に問題はなく、これを 1 つのピークと認識します。実際、図で示すようにベースラインが水平ではなく上昇していたとしても、新しいインテグレートアルゴリズムでは 1 つのピークとして積分します。

バッチ一覧: 結果

アンフェタミン (Amp) の分析から得られた積分結果を、図 14 に示します。これは [バッチテーブル]、[化合物情報]、[検量線] のフラットビューです。

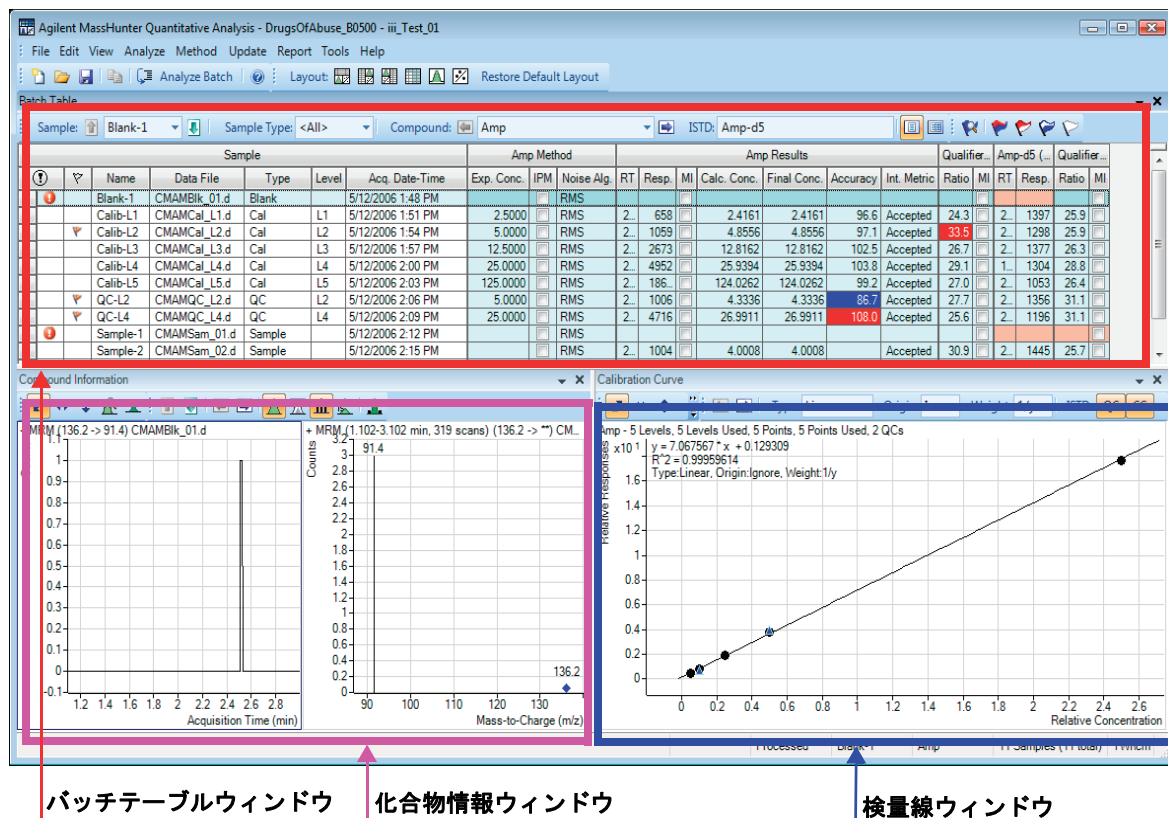


図 14 Amp 結果

- [バッチテーブル] には、各データファイルへ定量メソッドを適用した積分結果が表示されます。色付きの強調表示は、予測より低い (青) または高い (赤) 結果を示します。
- 左下の [化合物情報] ウィンドウには、積分されたクロマトグラフピークが表示されます。
- [検量線] は右下に表示されます。

化合物クロマトグラムの一覧

化合物クロマトグラムの一覧ビューは、各サンプルで検出された化合物クロマトグラムを表示します (図 15)。この機能により、化合物クロマトグラムを表示させ、データ解析が容易になるように表示方法を調整することができます。サンプルバッチ内の化合物の傾向を見つける食品安全検査分野で、特に有用です。

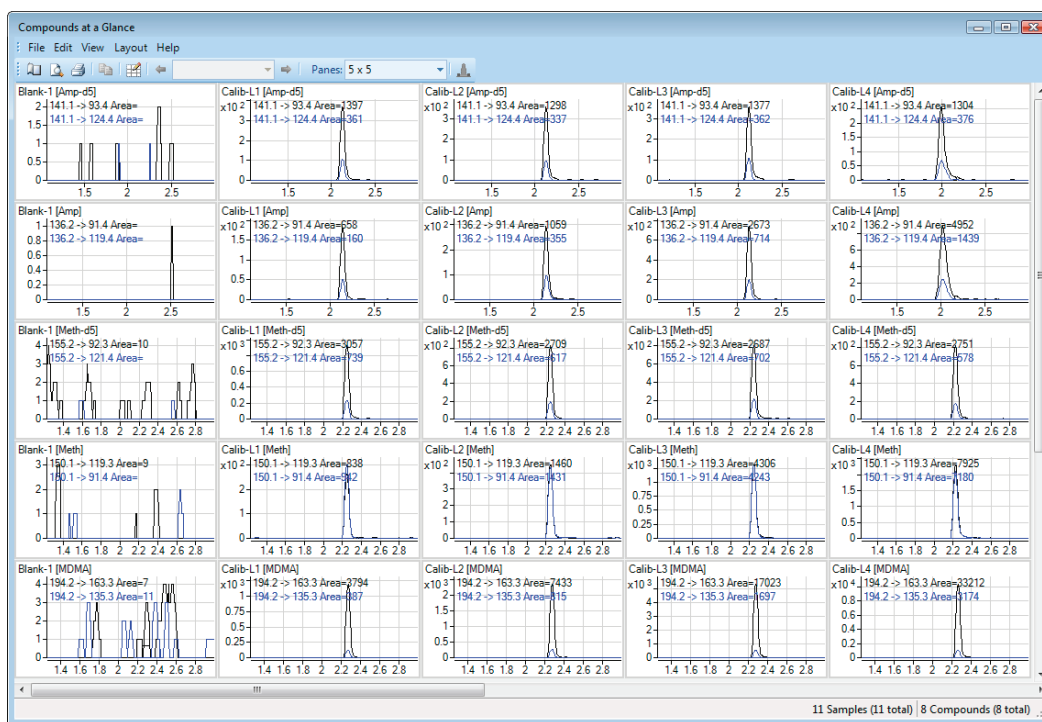


図 15 定量分析における化合物一覧

化合物クロマトグラムの一覧の設定を使用して、ビューに含める化合物やサンプルを選択することができます。図 16 に示すように、**[グラフィックスの設定]** ボックスの上部に表示されているタブを使用して、クロマトグラムの選択と並べ替えに関するさまざまなオプションを設定します。

- **[サンプル]** タブには、バッチ内のすべてのサンプルリストがあり、すべてのサンプルを表示させたり、特定のサンプルを表示させたりするオプションを設定します。

- **[化合物]** タブには、バッチ内で検出された化合物リストがあります。表示する化合物が選択できます。
- **[配列]** タブでは、クロマトグラムの列配置をサンプルまたは化合物に指定できます。また、化合物、サンプル、および外れ値の重ね描きオプションを提供します。タブには、ベースラインの表示やピークの塗りつぶしなど、化合物の検出傾向を最適に表示するためのクロマトグラム調整オプションが用意されています。
- **[外れ値]** タブには、データ内の外れ値の表示オプションが用意されています。

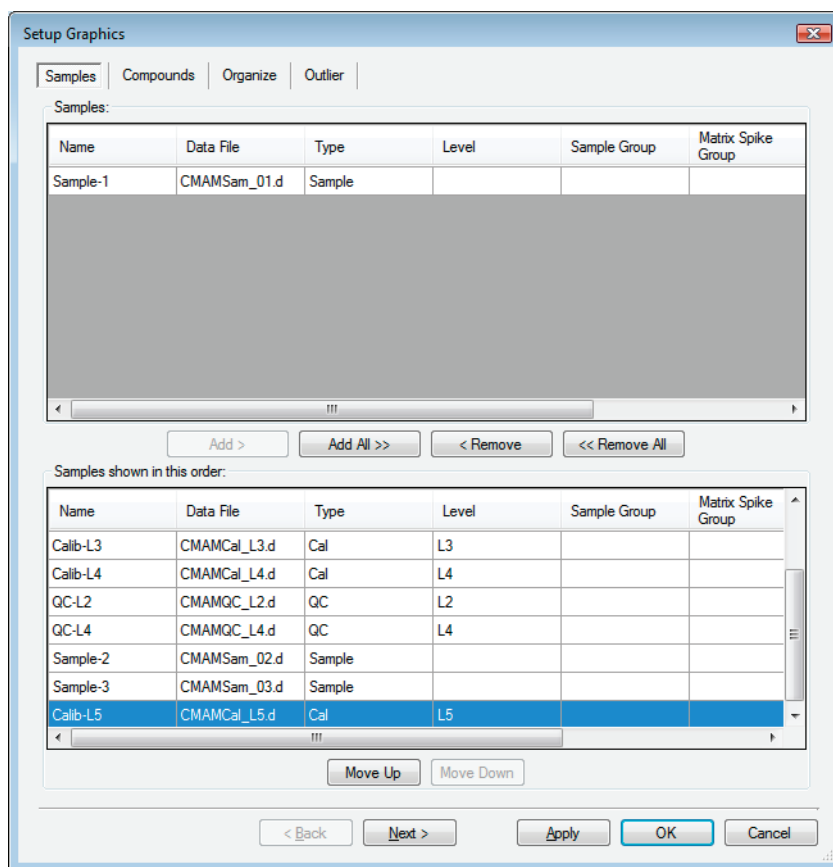


図 16 化合物クロマトグラムの一覧の設定オプション

化合物の確認

図 17 に示す図は、認定された薬物検査研究所にとって付加価値の高いものです。これは、THC 分析から得た 2 組のプロットを示しています。

定量イオンとクオリファイアイオンの重ね書き

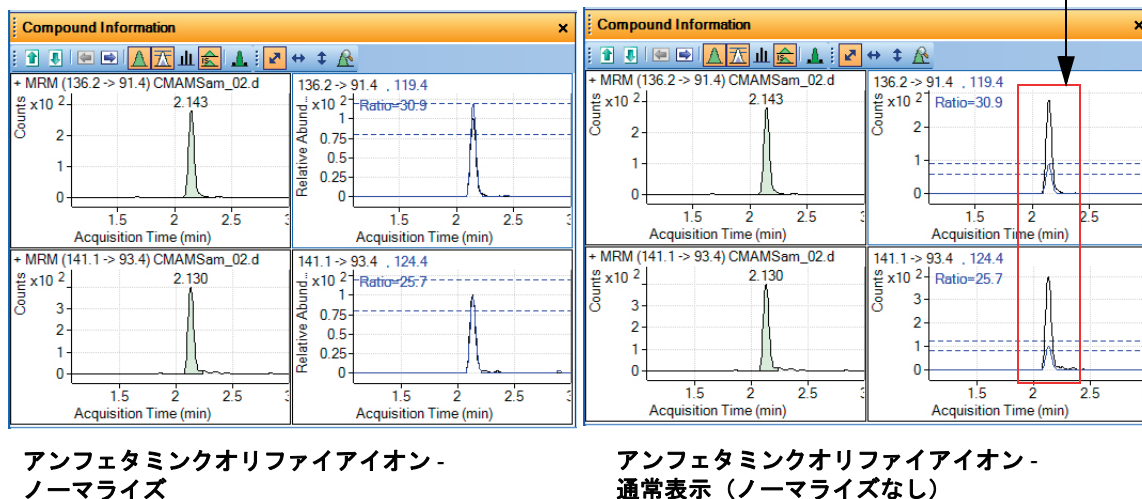


図 17 定量分析の Amp

確認のために、定量イオンとクオリファイアイオンの、2 つのプロダクトイオンを取り込む必要があります。通常、定量に使用するイオンは、2 つのプロダクトイオンの内強度の高い方です。

アンフェタミンの存在を確認するためには、クオリファイアイオンピーク面積が定量イオンの特定パーセント内になる必要があります。この数値は定量メソッドで設定します。この例では、26.5% を使用し、ウィンドウを $\pm 20\%$ にしています。これは、クオリファイアイオンの面積が、ターゲット化合物 Amp の定量イオンの 21.2% ~ 31.8% の範囲になる必要があることを意味します。ISTD のクオリファイア、つまり Amp-d5 にも面積がおさまるべき特定の許容範囲が指定されています。

クオリファイアピークは 1/0.265 の係数でノーマライズされるため、左の図からクオリファイアイオンが許容範囲に入るか、入らないかを簡単には決定できません。右の図では、許容範囲は定量イオンピークの 26.5% に中心があり、

クオリファイアイオンはノーマライズされずに、定量イオンと同じスケールで描かれます。イオンが許容範囲外の場合、定量イオンが隠れてしまわないよう、半透明の紫色でピークが塗りつぶされます。これにより、化合物を視覚的に容易に確認することができます。

化合物キャリブレーション

定量分析プログラムには、化合物のキャリブレーションや定量に役立ついくつかのツールが搭載されています。

- カーブフィットアシスタント
- データポイント情報用カーソルポインタ
- データポイントズーム

カーブフィットアシスタント

カーブフィットアシスタントにより、すべての検量線タイプを評価するための画面を提供します (図 18)。

6 リファレンス 化合物キャリブレーション

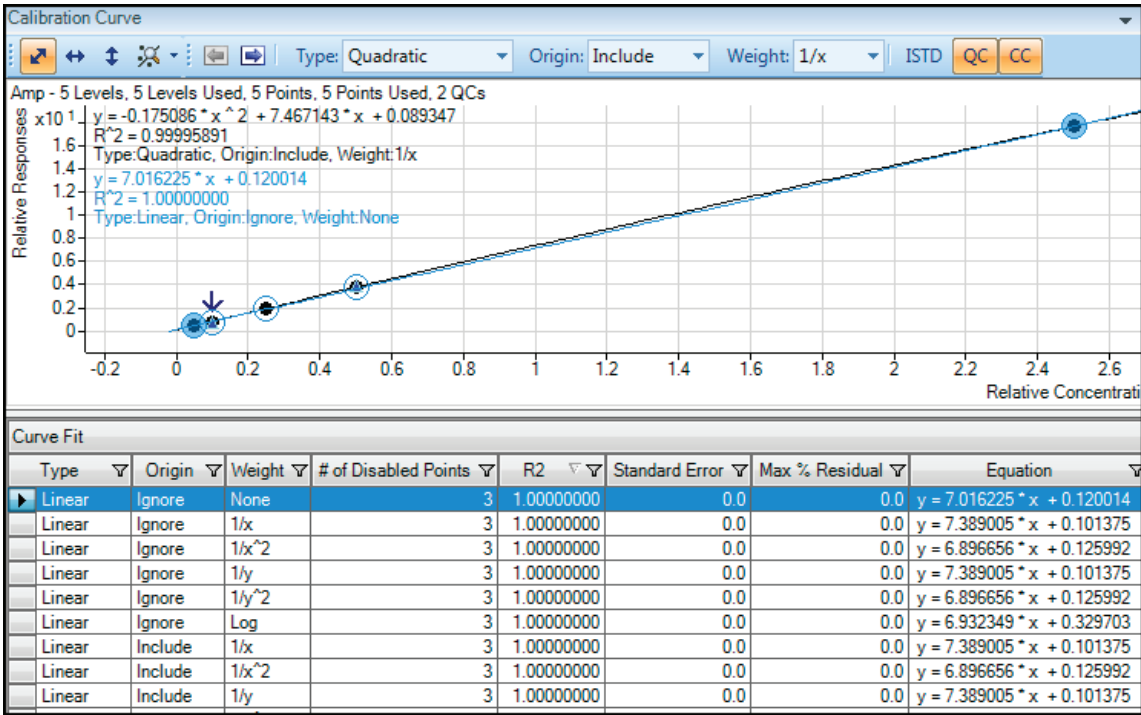


図 18 カーブフィットアシスタント

データポイントを用いて描かれた黒い線はフィットタイプに [二次曲線]、重み付けに [1/x]、原点に [含める] を用いています。青く強調表示されて選択した線とともに、その他多くのカーブフィット設定の組み合わせが検量線の下に記載されます。強調表示した設定内容もカーブフィットウィンドウに表示されます。

最良から最悪まですべての R^2 の結果をソートし、いくつかのデータポイントを外れ値とみなすかを決定することにより、最も良い R^2 値を持つ検量線を見つけ出すことができます。

たとえば、リストの最初のパラメータは、直線近似、原点無視、均等重み付けです。対応する R^2 値は 0.9998001477 で、非常に良い値です。テーブル上でこのエントリをクリックするだけで、対応するカーブをプロットさせることができます。

これらの設定を用いて、データを再定量できます。外れ値の排除は、一部のラボに共通する標準的な操作手順（SOP）です。

データポイント情報

データポイントの重なりは、検量線、特に %RSD 値が非常に良いトリプル四重極 MS データを用いた場合では珍しいことではありません (図 19)。マウスカーソルをデータポイント上に移動すると、個々のデータポイントを区別できる詳細情報が表示されます。

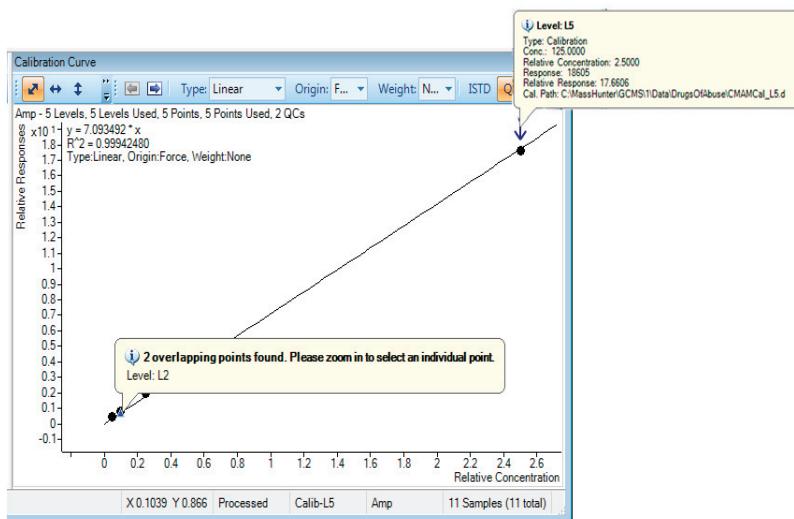


図 19 Amp 結果: キャリブレーションデータポイント情報

図に、そのような詳細情報の 2 つの例を示します。左側の例では、データポイントが重なっており、拡大してそれらを個別に確認する必要があることを示しています。右側の例では、データポイント自体の情報が示されています。

データポイントズーム

重なったデータポイントを拡大し、視覚的には見えない個々のデータポイントを確認できます。

6 リファレンス

化合物キャリブレーション



© Agilent Technologies, Inc.
Printed in USA 2017年9月



G3335-96152