

# Agilent MassHunter ワークステーション 未知サンプルの解析

## ファミリアリゼーションガイド

はじめに	3
実習を開始する前に	4
タスク 1: TIC 解析で化合物を同定	5
タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定	16
タスク 3: レポートの作成	40

TIC 解析で化合物を  
同定

→  
デコンボリューション  
による化合物の同定

→  
レポートの作成



Agilent Technologies

# 注意

© Agilent Technologies, Inc. 2015

この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、このマニュアルの一部または全部をいかなる形態（電子データやデータの抽出または他国語への翻訳など）あるいはいかなる方法によっても複製することが禁止されています。

## マニュアル番号

G3335-96187

## エディション

2015年1月

Printed in USA

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

## 保証

このマニュアルの内容は「現状のまま」提供されることを前提としており、将来の改訂版で予告なく変更されることがあります。また、Agilent は適用される法律によって最大限許される範囲において、このマニュアルおよびそれに含まれる情報に関し、商品の適格性や特定用途に対する適合性への暗黙の保障を含み、また、それに限定されないすべての保証を明示的か暗黙的かを問わず、一切いたしません。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。

## 安全にご使用いただくために

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いた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いた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。

## はじめに

このガイドは、未知サンプルの解析プログラムをステップバイステップで効果的に学習できる実習形式のマニュアルです。実習は、システムインストールディスクに収録されているデモ用の解析ファイル、メソッドファイル、ライブラリファイルを使用して実行することも、実際に測定したデータを使用して実行することもできます。

## 実習を開始する前に

### インストールディスクからハードディスクへのファイルのコピー

1. MassHunter 定量分析インストール DVD をコンピューターに挿入します。
2. DVD ドライブの ¥Data ディレクトリに移動します。
3. フォルダが圧縮形式の場合、データファイルを ZIP 形式から解凍します。
4. インストールディスクから **Data** フォルダを、非圧縮形式でご使用のハードディスクの任意の場所にコピーします。

このフォルダには、実習に必要なデータファイル、メソッドファイル、ライブラリファイルが含まれています。システム上にデモ用データファイルが存在していても、そのデータがディスクからのファイルと同一であることが確認できない場合は、使用しないでください。既存のデモ用データファイルがインストールディスクのファイルと同一でない場合は、実習中に得られる結果がこのガイドで示される結果と一致しくなくなります。

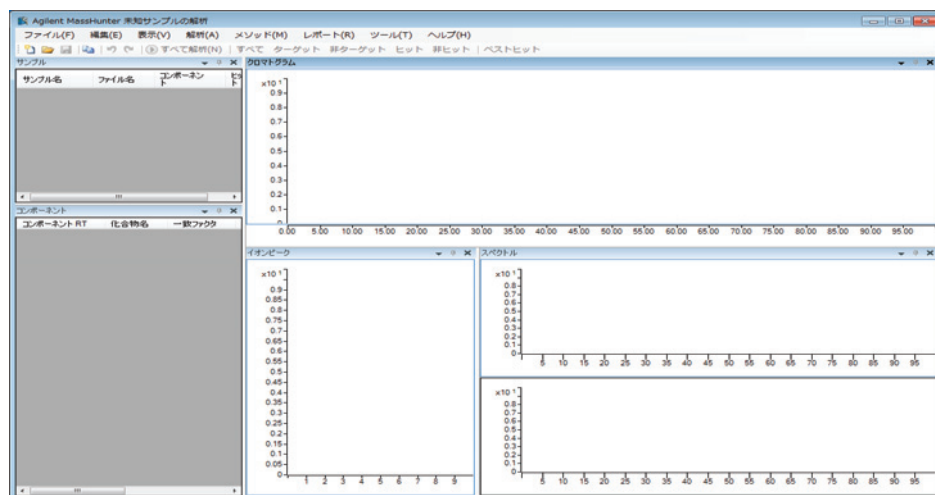
## タスク 1 : TIC 解析で化合物を同定

### 新規解析を作成

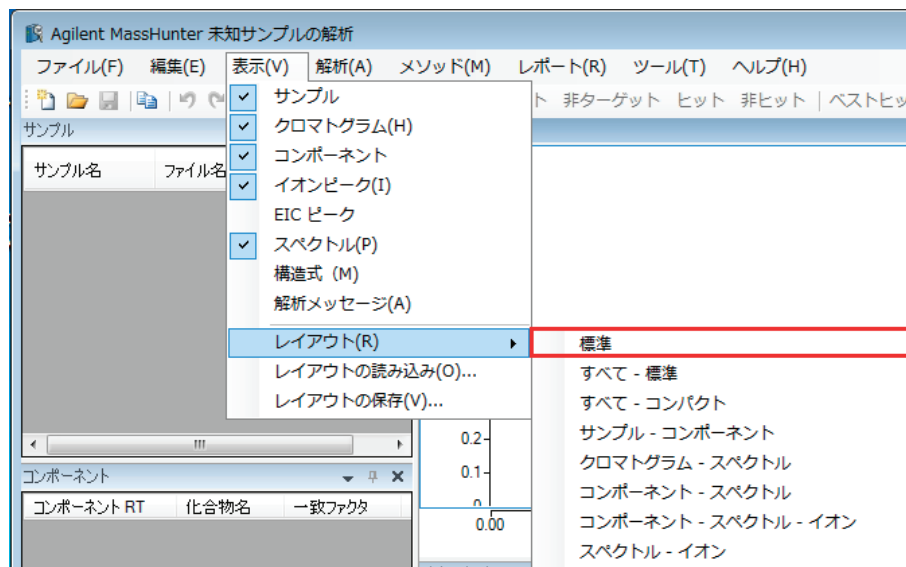
1. デスクトップアイコンをダブルクリックして [未知サンプルの解析] を開始します。  
または  
[スタート] > [Agilent] > [MasHunter Workstation] > [定量ツール] > [未知サンプルの解析] をクリックします。



プログラムを開くと、デフォルトレイアウトが表示されます。



デフォルトレイアウトが表示されない場合は、新規解析を作成する前に [表示] > [レイアウト] > [標準] をクリックしてデフォルトレイアウトを復元します。



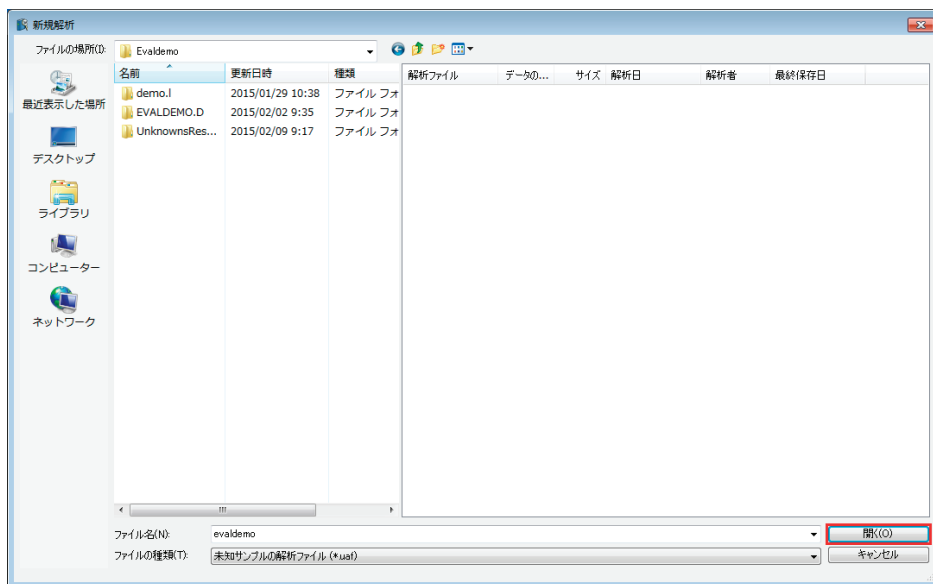
## タスク 1 : TIC 解析で化合物を同定

2. [ファイル] > [新規解析] を選択します。



3. **MassHunter¥Data¥Evaldemo¥**ディレクトリまたは解析するデータファイルが保存されたフォルダに移動します。

4. 解析名 **evaldemo** を入力し、[開く] をクリックします。



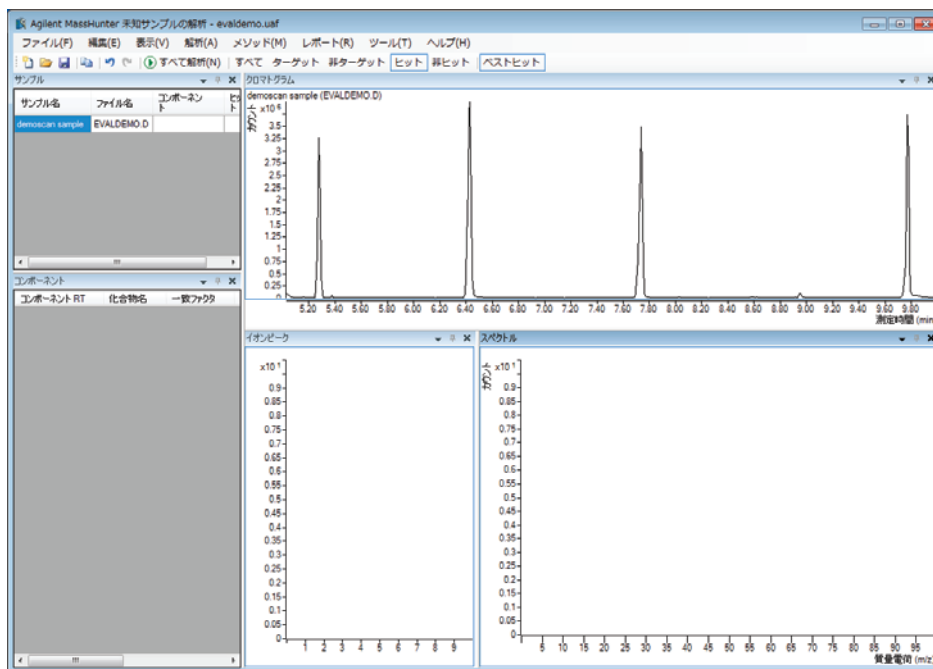
## タスク 1 : TIC 解析で化合物を同定

### 解析にサンプルを追加

1. [ファイル] > [サンプルの追加] を選択します。
2. サンプルファイルを選択し、[OK] をクリックして、バッチにサンプルを追加します。



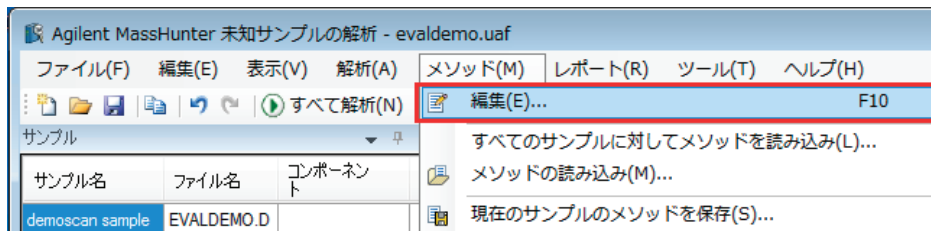
これで解析テーブルは空ではなくなり、デモサンプルが含まれるようになります。



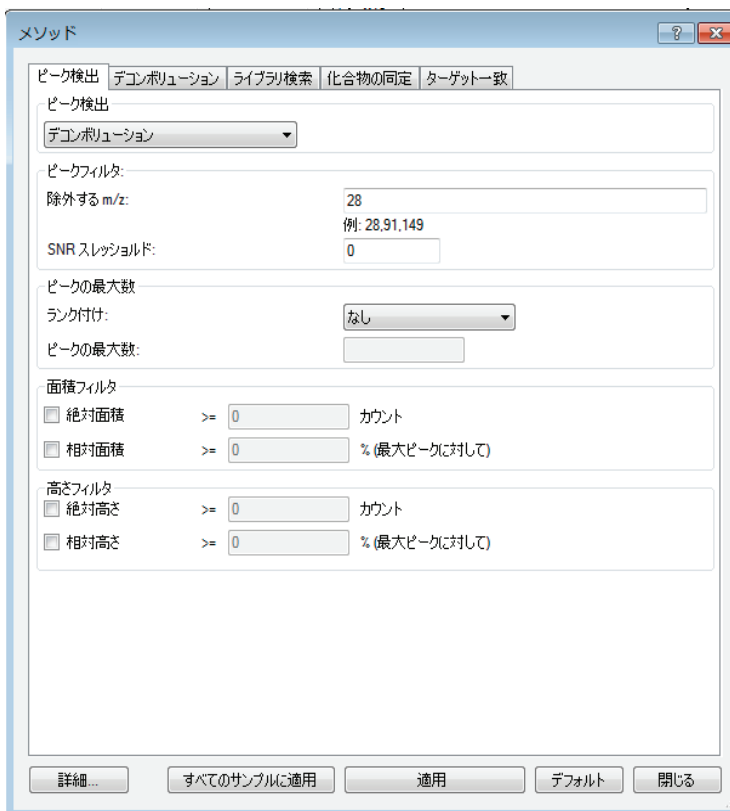
## タスク 1 : TIC 解析で化合物を同定

### 解析メソッドの設定

[メソッド] > [編集] を選択します。



[メソッド] ダイアログボックスの標準ビューが表示されます。このタスクでは、[標準] ビューを使用します。

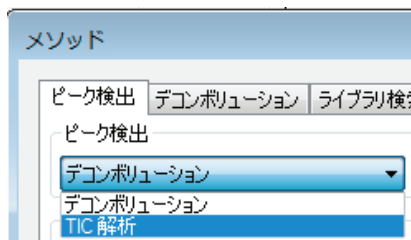


図のパラメータはメソッドのデフォルト設定です。次のステップで新しいメソッドを作成する前に、[メソッド] ダイアログボックス下部にある [デフォルト] をクリックして、パラメータをデフォルトに戻します。

## タスク 1 : TIC 解析で化合物を同定

### ピーク検出オプションの設定

1. **【ピーク検出】** ドロップダウンメニューから **【TIC 解析】** を選択します。
2. **【ピークの最大数】** セクションで、**【ランク付け】** ドロップダウンメニューから **【面積】** を選択し、**【ピークの最大数】** に「5」を入力します。
3. **【面積フィルタ】** セクションで、**【相対面積】** を選択し、**【% (最大ピークに対して)】** に「1」を入力します。



- **TIC 解析** : デコンボリューションではなく、積分を使用してクロマトグラムのピークを同定します。
- **デコンボリューション** : クロマトグラムのコンポーネントをデコンボリューションし、リテンションタイムとピーク形状の両方を利用してバックグラウンドノイズを除き、「クリーンな」スペクトルを抽出します。

ピークの最大数

ランク付け:

ピークの最大数:

面積フィルタ

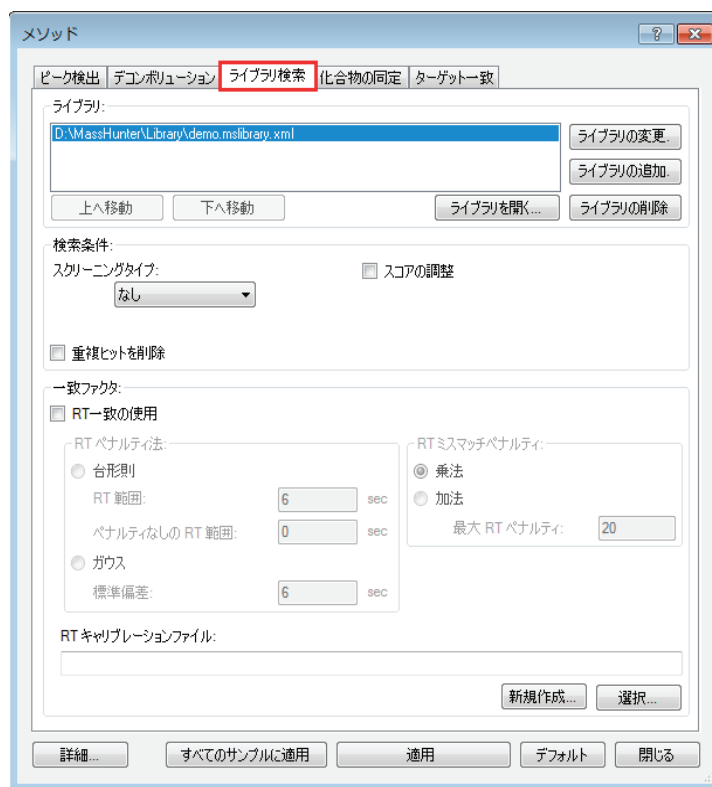
絶対面積 >=  カウント

相対面積 >=  % (最大ピークに対して)

## タスク 1 : TIC 解析で化合物を同定

### ライブラリ検索オプションの設定

1. [ライブラリ検索] タブをクリックします。



2. [ライブラリの変更]をクリックします。



3. **MassHunter\Data\Evaldemo** ディレクトリまたは相当するフォルダに移動し、**demo.L**を選択して [開く] をクリックします。



## タスク 1 : TIC 解析で化合物を同定

4. [検索条件]セクションで、[スクリーニングタイプ] ドロップダウンメニューから[なし]を選択します。

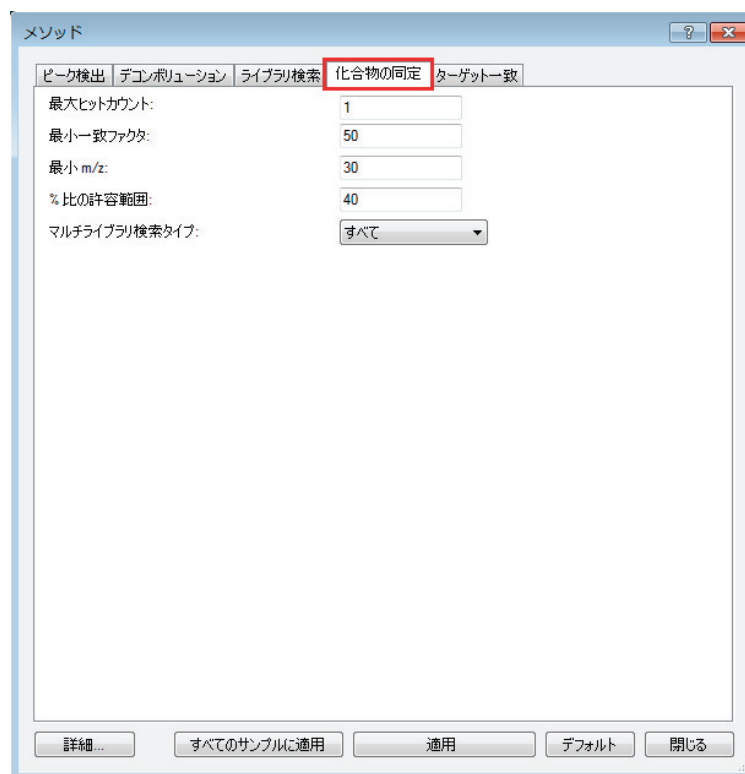


スクリーニングタイプには、[なし]、[標準]、[高速] の3種類があります。未知サンプルの解析のデフォルト設定は【標準】です。

- [なし] : ライブラリ検索で予備スクリーニング処理を行いません。
- [標準] : このスクリーニングアルゴリズムでは、インデックススキーマで十分な候補が見つからない場合、ライブラリ全体を候補のリストとして使用します。予備スクリーニングを行わない場合より 50~100 倍高速になるほか、スコア上位のヒット（一致スコア > 80）の偽陰性率が実質ゼロになります。
- [高速] : このスクリーニングアルゴリズムでは、検出された候補が不十分な場合でも、ライブラリ全体は検索せず、インデックスから得られた候補のリストのみを使用します。予備スクリーニングを行わない場合より 100 ~ 1000 倍高速になるほか、スコア上位のヒットの偽陰性率が 1% になります。

### 化合物の同定オプションの設定

1. [化合物の同定] タブをクリックします。



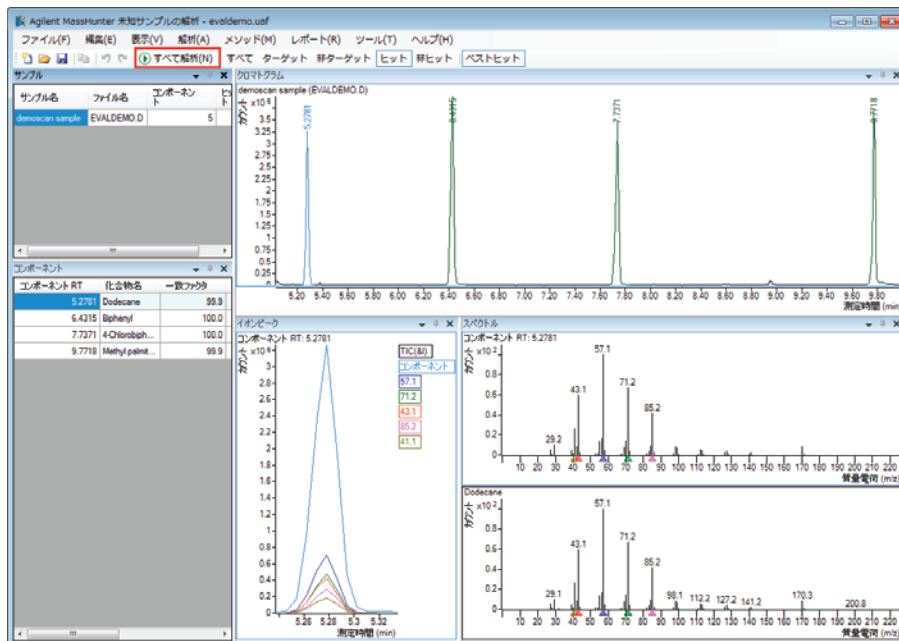
このタスクでは、デフォルトの化合物の同定パラメータを使用します。

2. [すべてのサンプルに適用] をクリックして、[閉じる] をクリックします。

## 結果の解析と確認

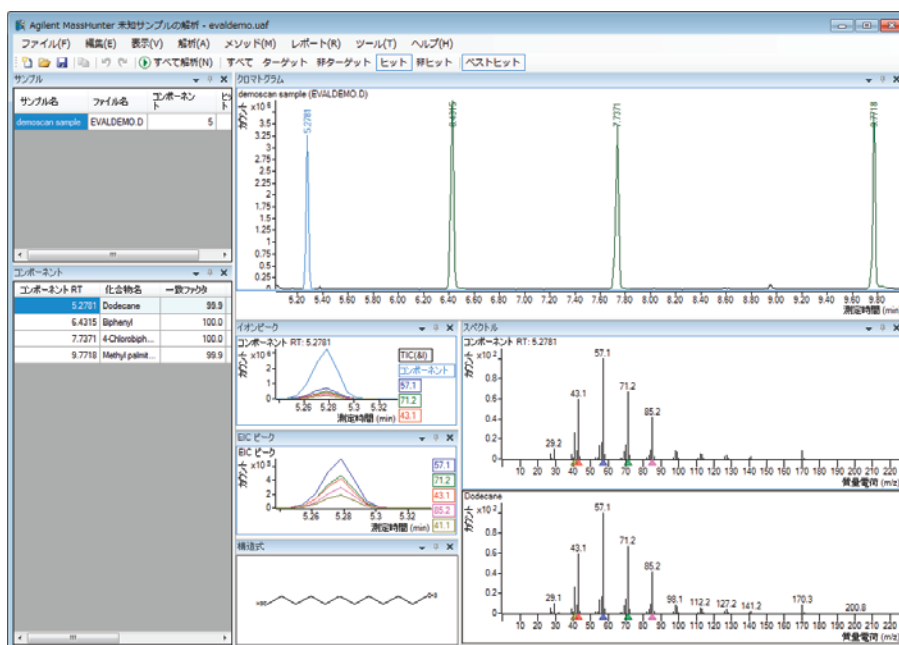
1. [すべて解析] をクリックします。

解析が完了すると、メインビューは、以下の例のようになります。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。以下の例とは違うレイアウトが表示される場合は、[表示] > [レイアウト] > [標準] を選択して標準レイアウトにリセットします。



2. [表示] > [レイアウト] > [すべて - コンパクト] を選択します。

[すべて - コンパクト] ビューが表示されます。



## タスク 1 : TIC 解析で化合物を同定

3. [サンプル] テーブルから **demoscan sample** を選択します。

4. [コンポーネント] ウィンドウの列ヘッダーを右クリックして、[列の追加/削除] を選択します。

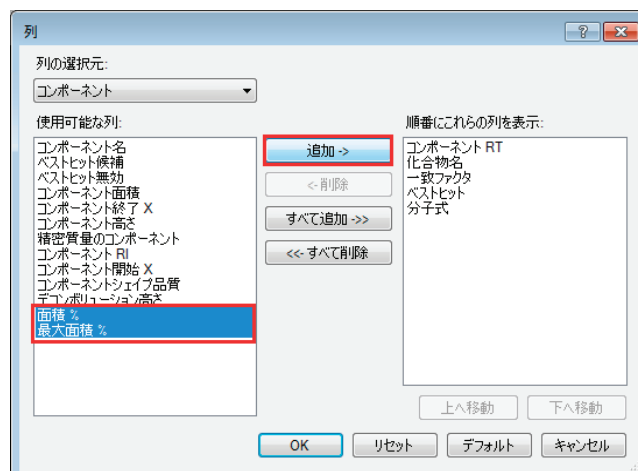
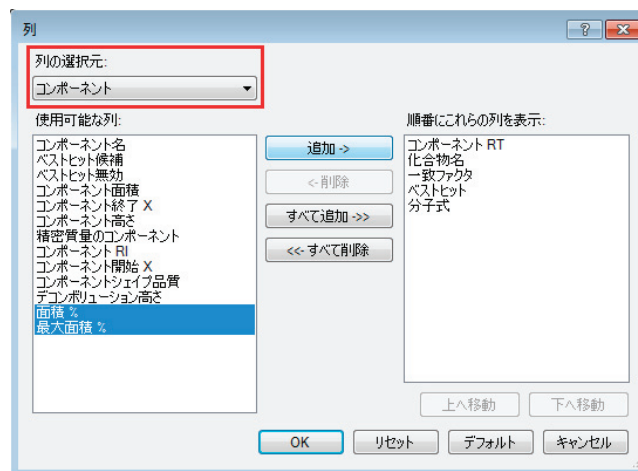
5. [列の選択元] ドロップダウンメニューから [コンポーネント] を選択します。

6. [使用可能な列] リストから [面積 %] と [最大面積 %] を選択し、[追加] をクリックします。

次のツールバーボタンを順にクリックして、[コンポーネント] ウィンドウの表示内容の変化を確認します。

- **すべて** : ピークをすべて表示します。
- **ヒット** : ライブラリ検索で検出されたピークを表示します。
- **非ヒット** : ライブラリ検索で検出されなかったピークを表示します。

コンポーネント RT	化合物名	一致ファクタ	
5.2781	Dodecane	99.1	列の追加/削除(A)...
6.4315	Biphenyl	100.0	コピー(C)
7.7371	4-Chlorobiph...	100.0	ベストヒットに設定
9.7718	Methyl palmit...	99.5	代替ヒットの表示(A)...
			ヒットの削除(D) Del



- **面積 %** : ピーク面積和に対する比率です。
- **最大面積 %** : 最大ピーク面積に対する比率です。

## タスク 1 : TIC 解析で化合物を同定

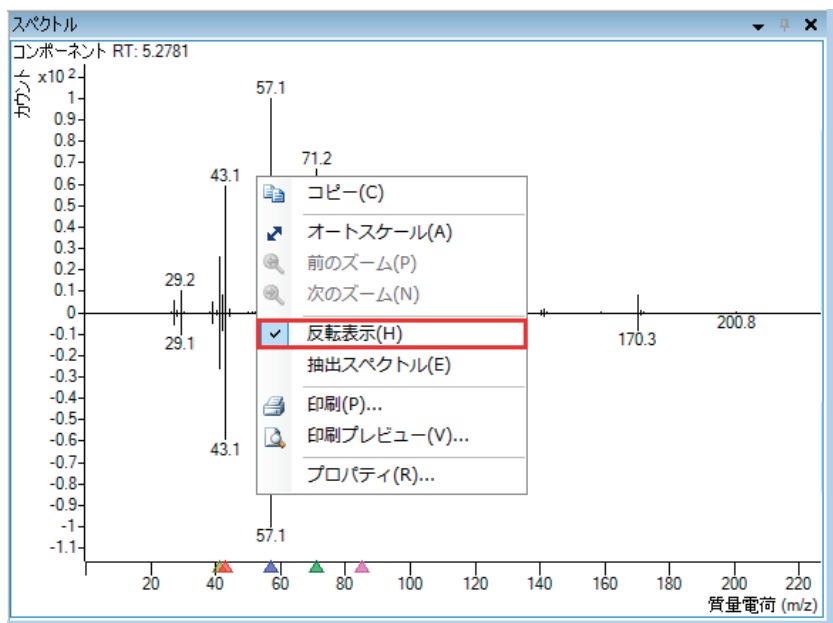
7. 選択した列が【順番にこれらの列を表示】リストに移動したことを確認し、【OK】をクリックします。
8. 【コンポーネント】テーブルで、【コンポーネント RT】列のコンポーネントを選択します。

コンポーネント RT	化合物名	一致ファクタ	ベストヒット	分子式	面積 %	最大面積 %
5.2781	Dodecane	99.9	<input checked="" type="checkbox"/>	C12H26	19.158	63.44
6.4315	Biphenyl	100.0	<input checked="" type="checkbox"/>	C12H10	30.196	100.00
7.7371	4-Chlorobiph...	100.0	<input checked="" type="checkbox"/>	C12H9Cl	25.572	84.69
9.7718	Methyl palmit...	99.9	<input checked="" type="checkbox"/>	C17H34O2	23.731	78.59

選択したコンポーネントの【クロマトグラム】、【スペクトル】、【イオンピーク】、【EIC ピーク】、【構造式】を確認します。

【スペクトル】ウィンドウでは、上部にコンポーネントからのスペクトルが表示され、下部にライブラリからのスペクトルが表示されます。【コンポーネント】テーブルの【一致ファクタ】は、2つのスペクトルがどの程度似通っているかを示しています。

反転表示ビューに変更するには、【スペクトル】ウィンドウ内を右クリックして、【反転表示】を選択します。



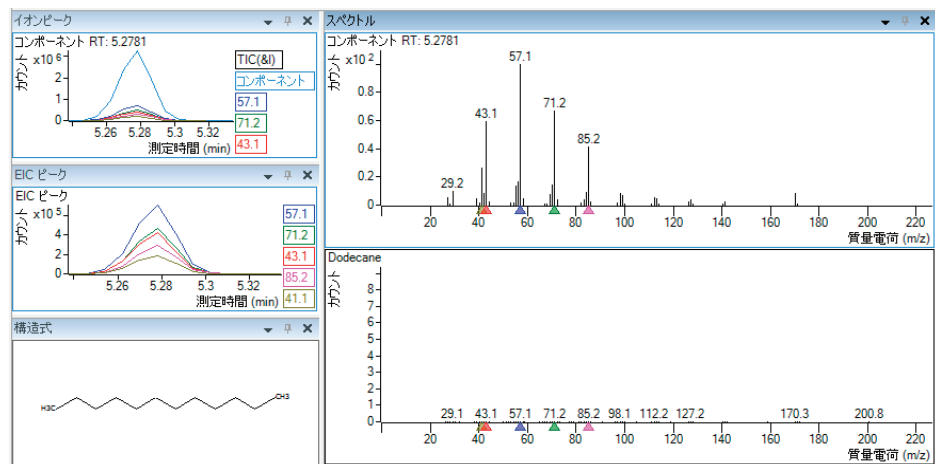
【イオンピーク】ウィンドウと【EIC ピーク】ウィンドウに、選択されたイオンの抽出クロマトグラムが表示されます。EIC トレースとその右側の識別番号は色分けされています。

【イオンピーク】ウィンドウと【EIC ピーク】ウィンドウの表示にイオンクロマトグラムのトレースを手動で追加するには、【スペクトル】ウィンドウのマススペクトル表示領域で任意のスペクトルピークをクリックします。選択した  $m/z$  のクロマトグラムが未表示の場合、【イオンピーク】ウィンドウと【EIC ピーク】ウィンドウにトレースが追加され、トレースと同色の三角マークが該当する  $m/z$  位置（【スペクトル】ウィンドウの X 軸）に表示されます。

## タスク 1 : TIC 解析で化合物を同定

[イオンピーク] ウィンドウと [EIC ピーク] ウィンドウからイオンクロマトグラムトレース（およびその識別番号）を削除するには、識別番号または対応する  $m/z$  値の位置（[スペクトル] ウィンドウ内）をクリックします。

構造式はライブラリからのものです。検索したライブラリのエントリに構造式が含まれていない場合は、[構造式] ウィンドウに何も表示されません。



9. 解析を保存するには、  
[ファイル] > [解析の保存]  
を選択します。
10. [ファイル]>[終了]をクリック  
します。

## タスク 2 : デコンボリューション による化合物の同定

### 新規解析を作成

1. デスクトップアイコンをダブルクリックして [未知サンプルの解析] を開始します。  
または  
[スタート] > [Agilent] > [MasHunter Workstation] > [定量ツール] > [未知サンプルの解析] をクリックします。
2. [ファイル] > [新規解析] を選択します。



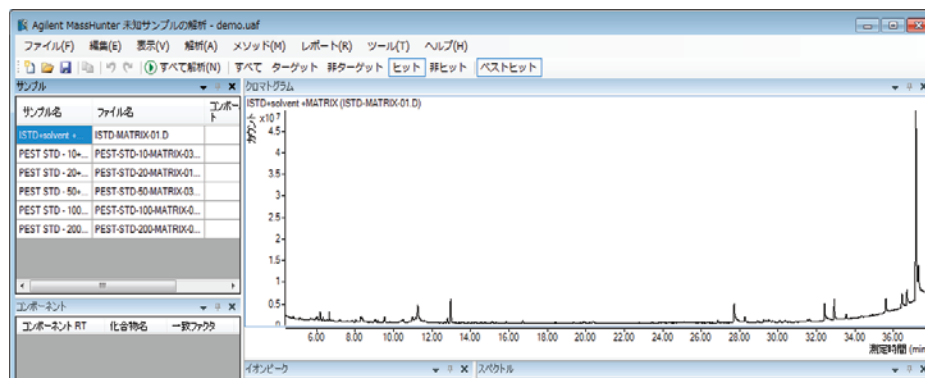
3. ¥デモデータ保存フォルダ¥ に移動します。
4. 解析名 **demo** を入力し、[開く] をクリックします。

## タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定

### 解析にサンプルを追加

1. [ファイル] > [定量分析のインポート] を選択します。
2. **TargetDemo.batch.bin** を選択し、[開く] をクリックします。

バッチがインポートされたことを確認します。[サンプル] ウィンドウに1つのマトリクスブランクと、濃度レベルが異なる5つのスパイクされたサンプルが表示されます。クロマトグラムには、[サンプル] ウィンドウで選択しているサンプルの TIC が表示されます。



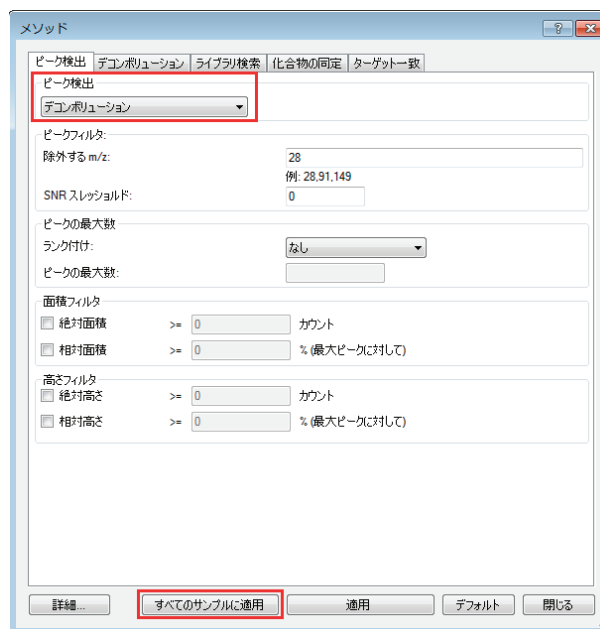
### 解析メソッドの設定

F10 キーを押すか、[メソッド] > [編集] を選択します。

## タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定

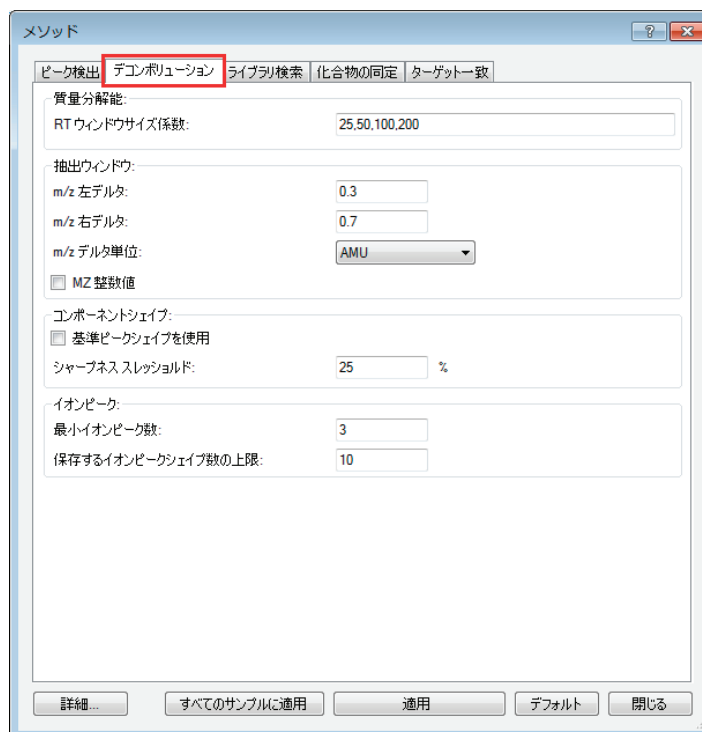
### ピーク検出オプションの設定

[ピーク検出] ドロップダウンメニューから[デコンボリューション]を選択し、[すべてのサンプルに適用]をクリックします。



### デコンボリューションオプションの設定

1. [デコンボリューション] タブをクリックします。



## タスク 2 : デコンボリューションによる化合物の同定

デコンボリューションパラメータのデフォルト設定が表示されます。[RT ウィンドウサイズ係数] には、4つの既定値 (25, 50, 100, 200) が表示されています。ウィンドウサイズ係数 (WSF) 値の任意の組み合わせをコンマ区切り形式で入力します。

Method dialog box showing deconvolution parameters. The 'RT Window Size Coefficient' is set to 25,50,100,200. Other parameters include m/z Left Delta (0.3), m/z Right Delta (0.7), m/z Delta Unit (AMU), Component Shape (Standard Peak Shape), Sharpness Threshold (25%), Minimum Ion Peaks (3), and Maximum Ion Peaks (10).

WSF は、イオンピークをコンポーネントにグループ化するための相関ウィンドウの無次元スケールを示します。AMDIS の分解能に相当します。値を小さく (分解能を高く) すると、間隔の狭いピークが分離されやすく、多くのコンポーネントが検出されますが、処理時間は長くなります。ピーク幅が広がるほど、大きい値を使用します。複数の値を使用すると、手動で最適化することなく、あらゆる種類のピークをカバーできます。

2. [抽出ウィンドウ]セクションで、[m/z 整数値を使用する]を選択します。

Close-up of the 'Component Shape' section. The checkbox 'm/z Integer Value to Use' is checked.

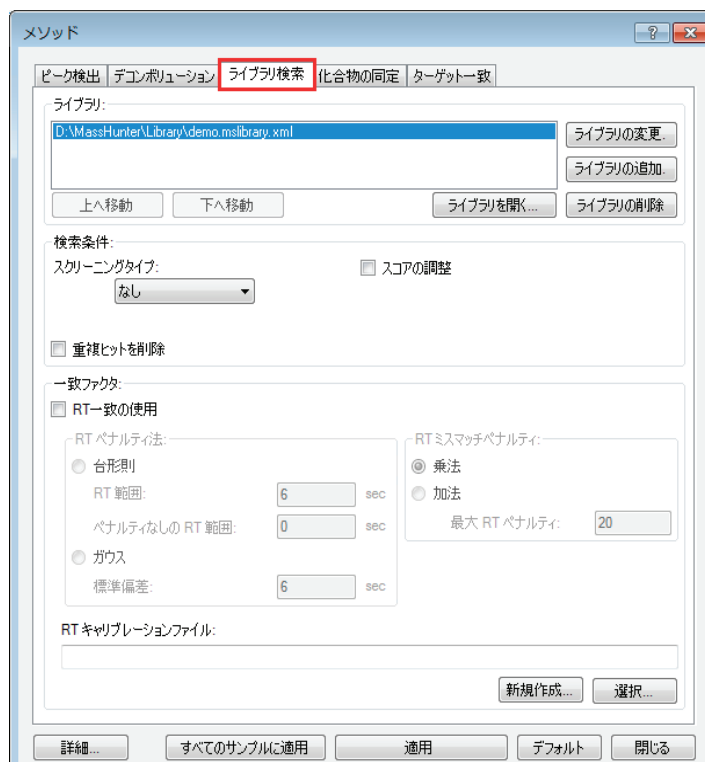
[m/z 整数値を使用する] では、整数とフィルターされた  $m/z$  の両方を使ってデコンボリューションが実行されるため、最良の結果が得られます。

3. [すべてのサンプルに適用]をクリックします。

## タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定

### ライブラリ検索オプションの設定

1. [ライブラリ検索] タブをクリックします。



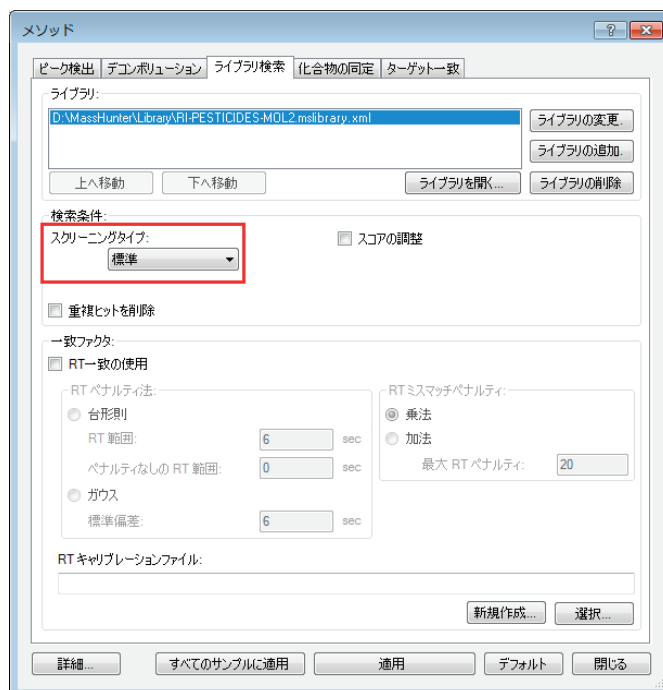
2. [ライブラリの変更]をクリックします。



3. 該当するフォルダに移動し、**RI-PESTICIDES-MOL2.mslibrary.xml** を選択して [開く] をクリックします。

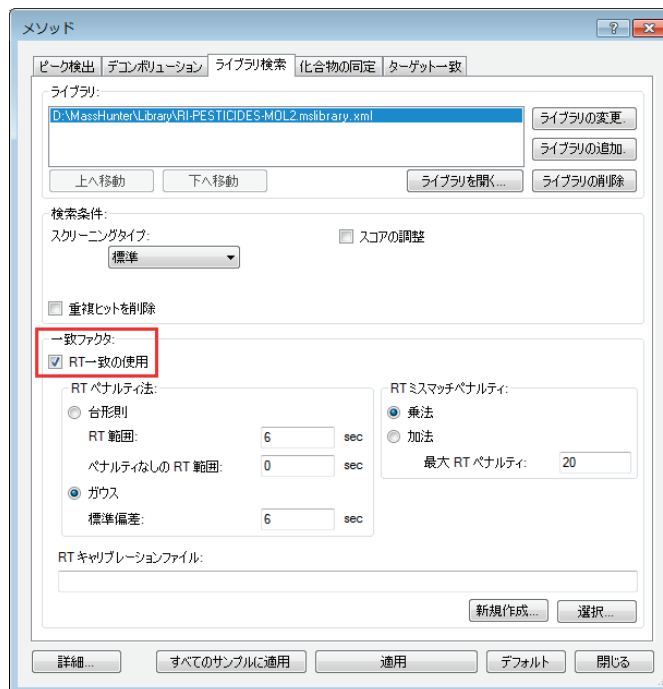
## タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定

4. [検索条件]セクションで、[スクリーニングタイプ] ドロップダウンメニューから[標準]を選択します。



- [スコアの調整] を選択すると、NIST に最も近いライブラリー一致スコアが得られます。
- [重複ヒットを削除] を選択すると、目的のターゲットスペクトルのヒットリストに重複するヒットが表示されなくなります。これは、重複したエントリや、NISTで見られるような類似度が高いライブラリエントリを処理して、一致スコアが最も高いライブラリエントリを1つだけ返します。

5. [一致ファクタ] セクションで、[RT一致の使用] を選択します。



## タスク 2 : デコンボリューションによる化合物の同定

6. [RT ペナルティ法] セクションで、[台形則] を選択し、以下を入力します。

RT範囲 : 9

ペナルティなしのRT範囲 : 9

メソッド

ピーク検出 デコンボリューション ライブラリ検索 化合物の同定 ターゲット一致

ライブラリ:  
D:\MassHunter\Library\RI-PESTICIDES-MOL2.mslibrary.xml

ライブラリの変更  
ライブラリの追加  
上へ移動 下へ移動 ライブラリを開く... ライブラリの削除

検索条件:  
スクリーニングタイプ: 標準 スコアの調整

重複ヒットを削除

一致ファクター:  
 RT一致の使用

RT ペナルティ法:  
 台形則  
RT 範囲: 9 sec  
ペナルティなしの RT 範囲: 9 sec  
 ガウス  
標準偏差: 9 sec

RT ミスマッチペナルティ:  
 乗法  
 加法  
最大 RT ペナルティ: 20

RT キャリブレーションファイル:

新規作成... 選択...

詳細... すべてのサンプルに適用 適用 デフォルト 閉じる

7. [RT キャリブレーションファイル] セクションで、[選択] をクリックします。

メソッド

ピーク検出 デコンボリューション ライブラリ検索 化合物の同定 ターゲット一致

ライブラリ:  
D:\MassHunter\Library\RI-PESTICIDES-MOL2.mslibrary.xml

ライブラリの変更  
ライブラリの追加  
上へ移動 下へ移動 ライブラリを開く... ライブラリの削除

検索条件:  
スクリーニングタイプ: 標準 スコアの調整

重複ヒットを削除

一致ファクター:  
 RT一致の使用

RT ペナルティ法:  
 台形則  
RT 範囲: 9 sec  
ペナルティなしの RT 範囲: 9 sec  
 ガウス  
標準偏差: 9 sec

RT ミスマッチペナルティ:  
 乗法  
 加法  
最大 RT ペナルティ: 20

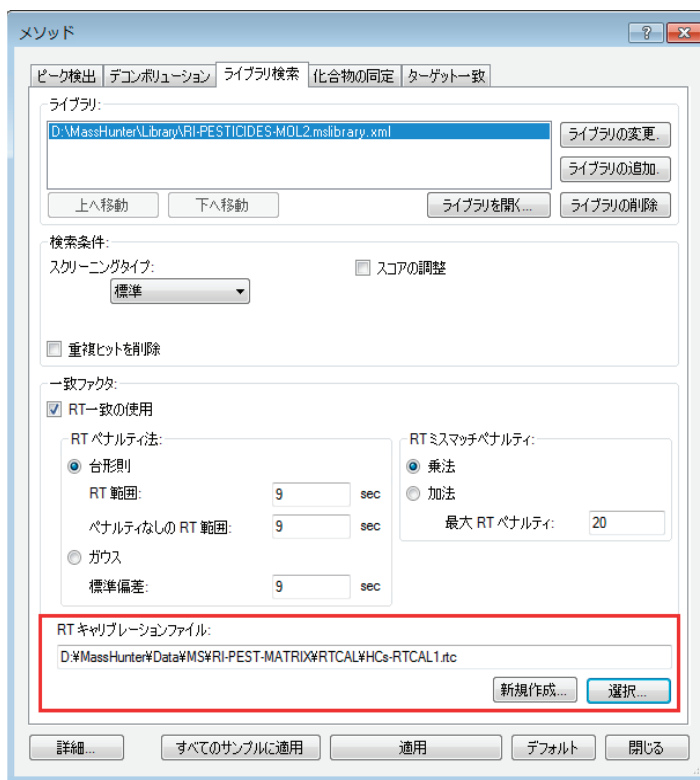
RT キャリブレーションファイル:

新規作成... 選択...

詳細... すべてのサンプルに適用 適用 デフォルト 閉じる

## タスク 2 : デコンボリューションによる化合物の同定

8. 該当するフォルダ (RTCAL) に移動し、**HCS-RTCAL1.rtc** を選択します。



ライブラリー一致に RT/RI 計算が使用され、偽陽性の比率が減少します。ライブラリ検索からのヒットの評価には ±9 秒のウィンドウが設定されています。

9. [ライブラリ] セクションで、[ライブラリの追加] をクリックします。

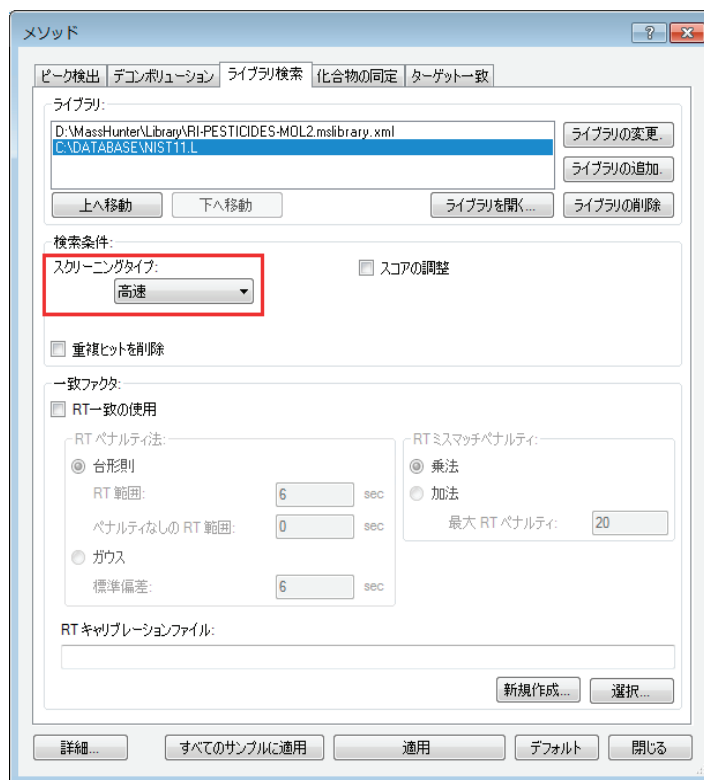


10. 該当するフォルダに移動し、**NIST11.L** を選択します。

ライブラリ検索には複数のライブラリを使用できます。例で使用しているターゲット MS ライブラリには、900 以上の農薬がリテンションインデックス (RI) 情報付きで含まれています。NIST11.L を使用すると、さらに詳細な確認ができます。

## タスク 2 : デコンボリューションによる化合物の同定

11. [スクリーニングタイプ] ドロップダウンメニューから [高速] を選択します。



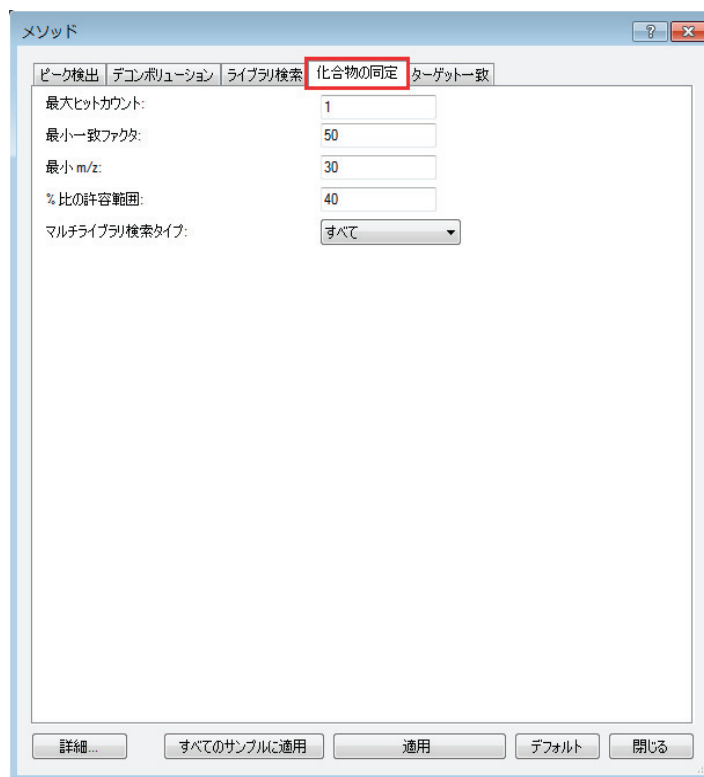
12. [すべてのサンプルに適用] をクリックします。

使用するライブラリごとに異なるライブラリ検索パラメータを設定することができます。

## タスク 2 : デコンボリューションによる化合物の同定

### 化合物の同定オプションの設定

[化合物の同定] タブをクリックします。



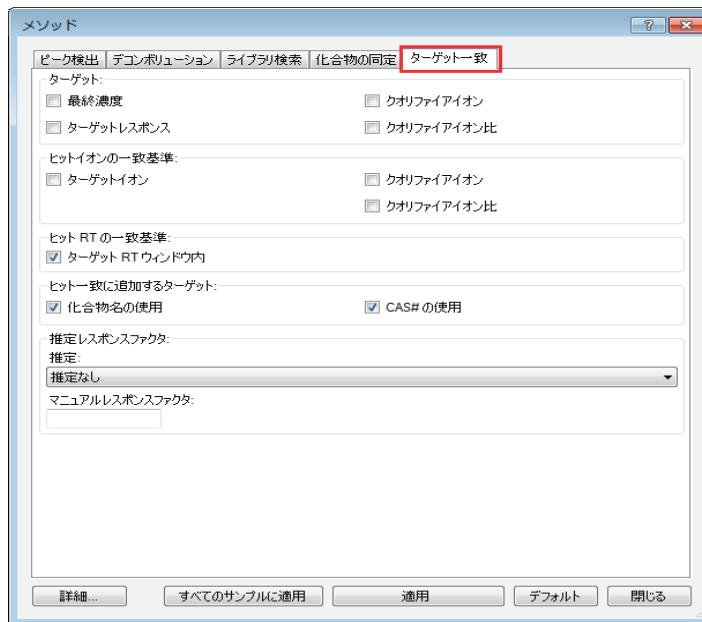
この例では、ライブラリ検索からの化合物同定の [最小一致ファクタ] が 50 に設定されています。

- **最大ヒットカウント** : ライブラリ検索が表示する、コンポーネントあたりの最大ヒット数です。
- **最小 m/z** : ライブラリー一致スコア計算の  $m/z$  の下限です。
- **% 比の許容範囲** : ライブラリ検索で [スクリーニングタイプ] を選択している場合のみ適用できます。値が大きくなるほど、生成されるライブラリ検索の候補が増え、ライブラリ検索の処理時間が長くなります。
- **マルチライブラリ検索タイプ** : 複数のライブラリを使用する場合に、次の 2 つの検索モードが使用できます。
  - **すべて** : すべてのライブラリを検索します (デフォルト)
  - **見つかったら停止** : 十分な数の候補が見つかったら、ライブラリ検索を停止します

## タスク 2 : デコンボリューションによる化合物の同定

### ターゲット一致オプションの設定

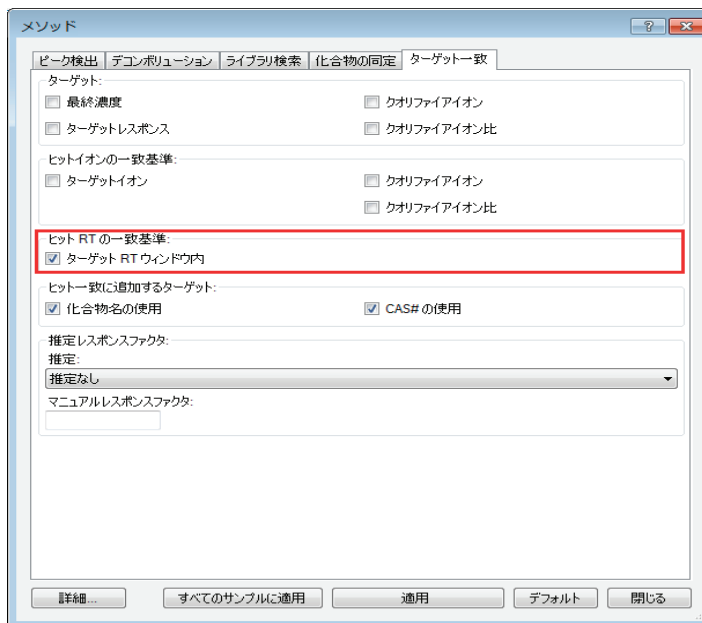
1. [ターゲット一致] タブをクリックします。



[ターゲット一致] では、定量メソッドを使用して定量ターゲットを同定します。ターゲット一致をフィルタすることで、非ターゲット化合物を簡単に判別できるようになります。

[ターゲット一致] には、RT ウィンドウ、化合物名、CAS# を適用できます。

2. [ヒット RT の一致基準] セクションで、[ターゲット RT ウィンドウ内] を選択します。



## タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定

3. [ヒット一致に追加するターゲット] セクションで、[化合物名の使用] と [CAS# の使用] を選択します。

メソッド

ピーク検出 | デコンボリューション | ライブラリ検索 | 化合物の同定 | ターゲット一致

ターゲット:

最終濃度  クオリファイアオン

ターゲットレスポンス  クオリファイアオン比

ヒットイオンの一致基準:

ターゲットイオン  クオリファイアオン

クオリファイアオン比

ヒット RT の一致基準:

ターゲット RT ウィンドウ内

ヒット一致に追加するターゲット:

化合物名の使用  CAS# の使用

推定レスポンスファクタ:

推定:  
推定なし

マニュアルレスポンスファクタ:

詳細... すべてのサンプルに適用 適用 デフォルト 閉じる

4. [推定レスポンスファクタ] セクションで、[推定] ドロップダウンメニューから [相対 ISTD 推定] を選択します。

メソッド

ピーク検出 | デコンボリューション | ライブラリ検索 | 化合物の同定 | ターゲット一致

ターゲット:

最終濃度  クオリファイアオン

ターゲットレスポンス  クオリファイアオン比

ヒットイオンの一致基準:

ターゲットイオン  クオリファイアオン

クオリファイアオン比

ヒット RT の一致基準:

ターゲット RT ウィンドウ内

ヒット一致に追加するターゲット:

化合物名の使用  CAS# の使用

推定レスポンスファクタ:

推定:  
相対 ISTD 推定

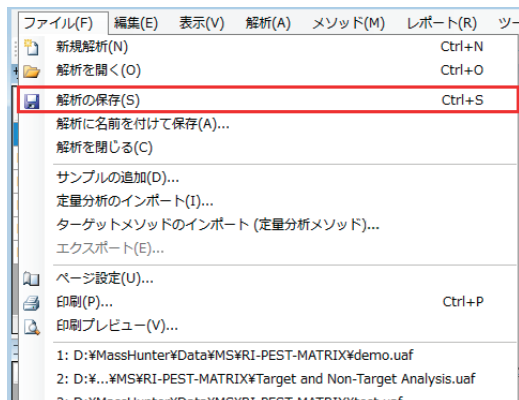
マニュアルレスポンスファクタ:

詳細... すべてのサンプルに適用 適用 デフォルト 閉じる

濃度の推定には、定量ターゲットのレスポンスファクタ (RF) を利用します。これは非ターゲットヒットにも適用されます。特別な解析要求に合わせた調整が可能になるよう、柔軟性のあるレスポンスファクタの推定オプションがあります。

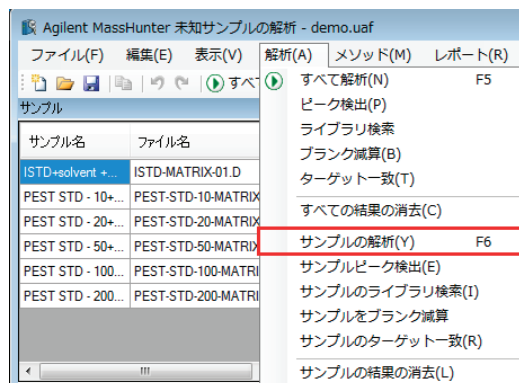
## タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定

5. [すべてのサンプルに適用] をクリックして、[閉じる] をクリックします。
6. 解析を保存するには、[ファイル] > [解析の保存] を選択します。

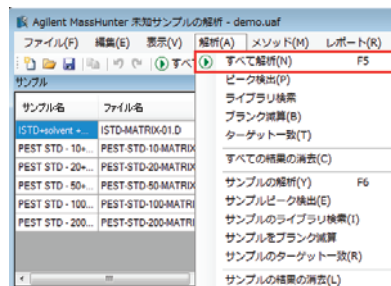


### 結果の解析と確認

1. [サンプル] ウィンドウで、サンプル ISTD+solvent+MATRIX を選択します。
2. [解析] > [サンプルの解析] を選択します。



残りのサンプルを解析するには、[すべて解析] をクリックします。前回終了したところから解析が開始されます。メソッド内のパラメータが変更されていない場合は以前に解析したサンプルはスキップされます。

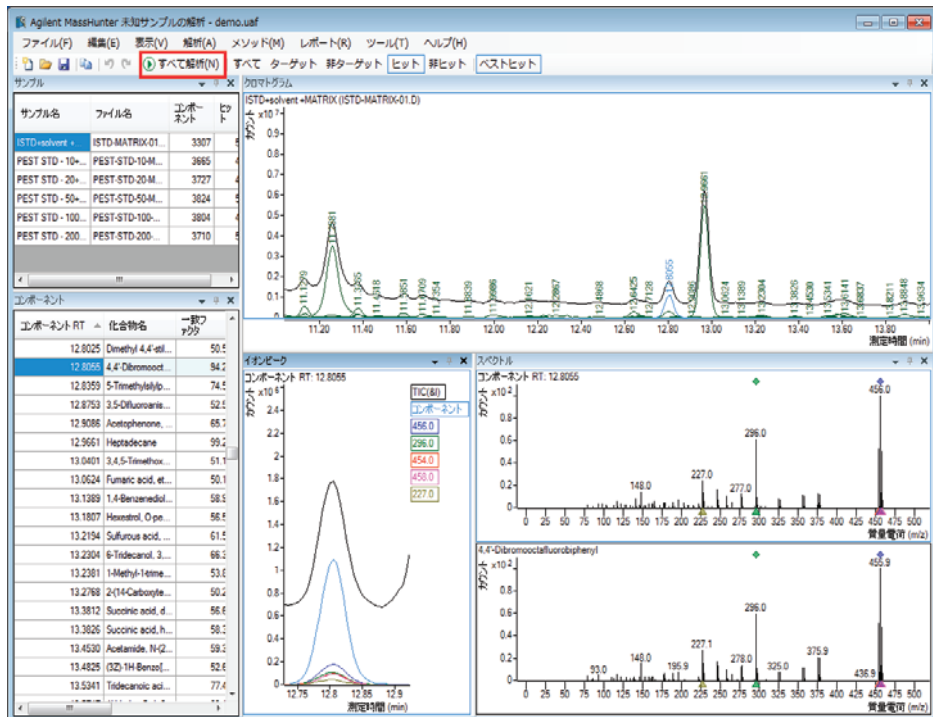


## タスク 2 : デコンボリューションによる化合物の同定

バリデーション情報が解析メッセージに表示されます。

タイプ	ターゲット	メッセージ
①	サンプルISTD+solvent +MATRIX	デコンボリューションプロセスはすでに実行されています。デコンボリューションプロセスをスキップします。
①	サンプルISTD+solvent +MATRIX	ライブラリ検索プロセスはすでに実行されています。ライブラリ検索プロセスをスキップします。
①	サンプルISTD+solvent +MATRIX	プランク減算プロセスはすでに実行されています。プランク減算プロセスをスキップします。
①	サンプルISTD+solvent +MATRIX	ターゲット一致プロセスはすでに実行されています。ターゲット一致プロセスをスキップします。

解析が完了すると、メインビューは、以下の例のようになります。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。

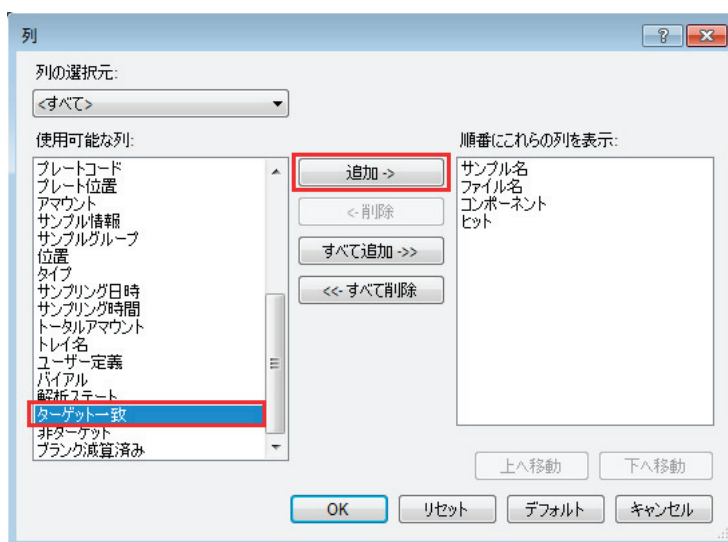


### ベストヒット結果の確認

1. [サンプル] ウィンドウの列ヘッダーを右クリックして、[列の追加/削除] を選択します。

## タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定

2. **【使用可能な列】** リストから **【ターゲット一致】** を選択し、**【追加】** をクリックします。



3. 選択した列が **【順番にこれらの列を表示】** リストに移動したことを確認し、**【OK】** をクリックします。

**【ターゲット一致】** 列が **【サンプル】** ウィンドウに追加されます。

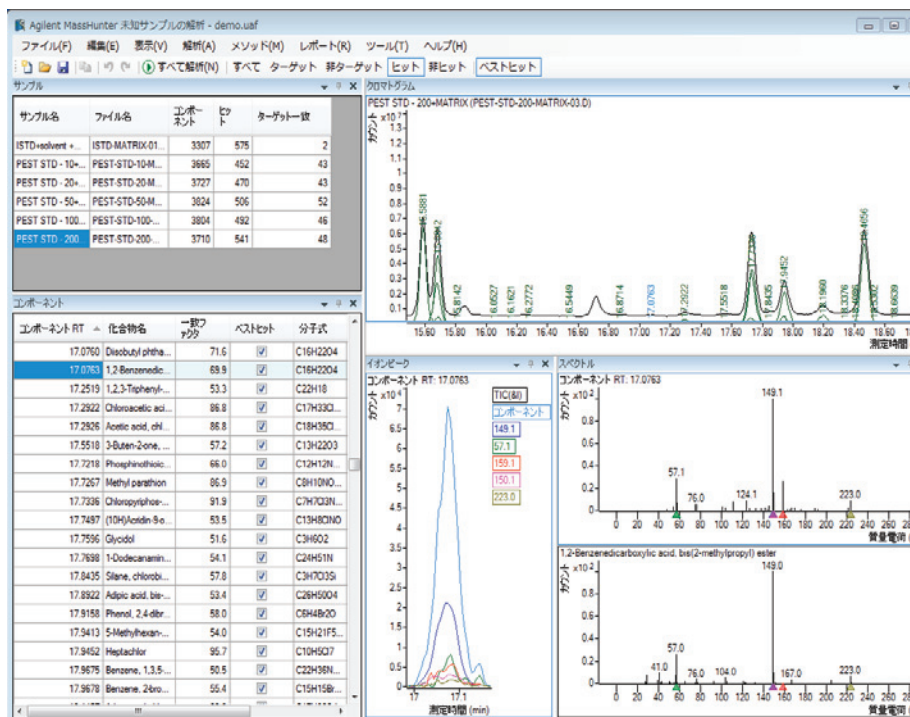
サンプル名	ファイル名	コンポーネント	ヒット	ターゲット一致
ISTD+solvent +...	ISTD-MATRIX-01...	3307	575	2
PEST STD - 10+...	PEST-STD-10-M...	3665	452	43
PEST STD - 20+...	PEST-STD-20-M...	3727	470	43
PEST STD - 50+...	PEST-STD-50-M...	3824	506	52
PEST STD - 100...	PEST-STD-100...	3804	492	46
PEST STD - 200...	PEST-STD-200...	3710	541	48

## タスク 2 : デコンボリューションによる化合物の同定

4. [サンプル]ウィンドウの最後のサンプルを選択します。

次のツールバーボタンを順にクリックして、[コンポーネント]、[クロマトグラム]、[イオンピーク]、[スペクトル] ウィンドウの表示内容の変化を確認します。

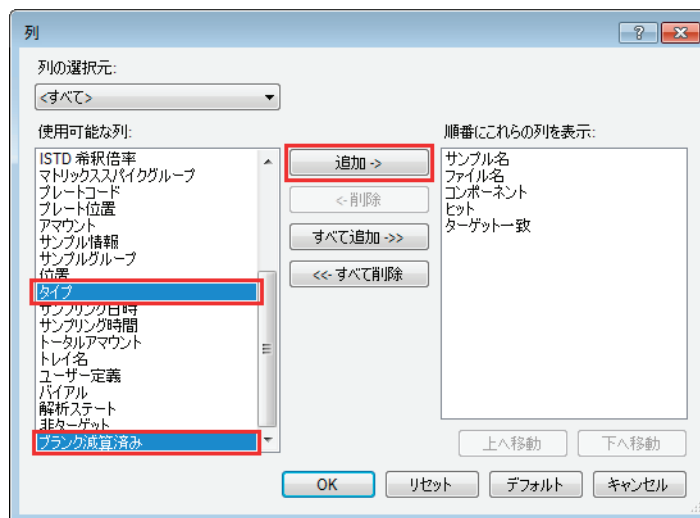
- **すべて** : ピークをすべて表示します。
- **ターゲット** : 定量メソッドにも存在するピークを表示します。
- **非ターゲット** : 定量メソッドに存在しないピークを表示します。
- **ヒット** : ライブラリ検索で検出されたピークを表示します。
- **非ヒット** : ライブラリ検索で検出されなかったピークを表示します。
- **ベストヒット** : 分解能が異なる、同じ化合物の複数ヒットのうち、ライブラリ一致スコアが最大であるコンポーネントを表示します。



## タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定

### ブランクヒット減算結果の確認

1. [サンプル] ウィンドウの列ヘッダーを右クリックして、[列の追加/削除] を選択します。
2. [使用可能な列] リストから [タイプ] と [ブランク減算済み] を選択し、[追加] をクリックします。

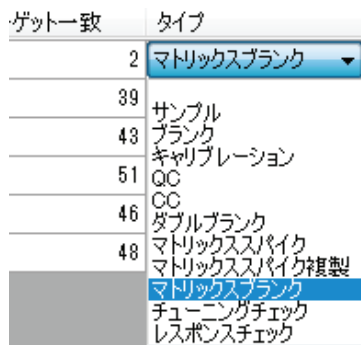


3. 選択した列が [順番にこれらの列を表示] リストに移動したことを確認し、[OK] をクリックします。

[タイプ] 列と [ブランク減算済み] 列が [サンプル] ウィンドウに追加されます。


サンプル名	ファイル名	コンポーネント	ヒット	ターゲット一致	タイプ	ブランク減算済み
ISTD+solvent +...	ISTD-MATRIX-01...	3307	575	2	マト...	0
PEST STD - 10+...	PEST-STD-10-M...	3665	452	43	サン...	182
PEST STD - 20+...	PEST-STD-20-M...	3727	470	43	サン...	164
PEST STD - 50+...	PEST-STD-50-M...	3824	506	52	サン...	153
PEST STD - 100...	PEST-STD-100...	3804	492	46	サン...	161
PEST STD - 200...	PEST-STD-200...	3710	541	48	サン...	148

4. [タイプ] ドロップダウンメニューにある使用可能なサンプルのリストを確認します。



## タスク 2 : デコンボリューションによる化合物の同定

**【サンプル】** ウィンドウの **【ブランク減算済み】** 列に表示されている値は、サンプルからブランク減算されたヒット数を示します。**【解析メッセージ】** ウィンドウの **ISTD+solvent+MATRIX** サンプルに、「このサンプルはブランクサンプルタイプです。ブランク減算プロセスをスキップします。」というメッセージが表示されていることを確認します。

解析メッセージ		
タイプ	ターゲット	メッセージ
	サンプルISTD+solvent +MATRX	このサンプルはブランクサンプルタイプです。ブランク減算プロセスをスキップします。

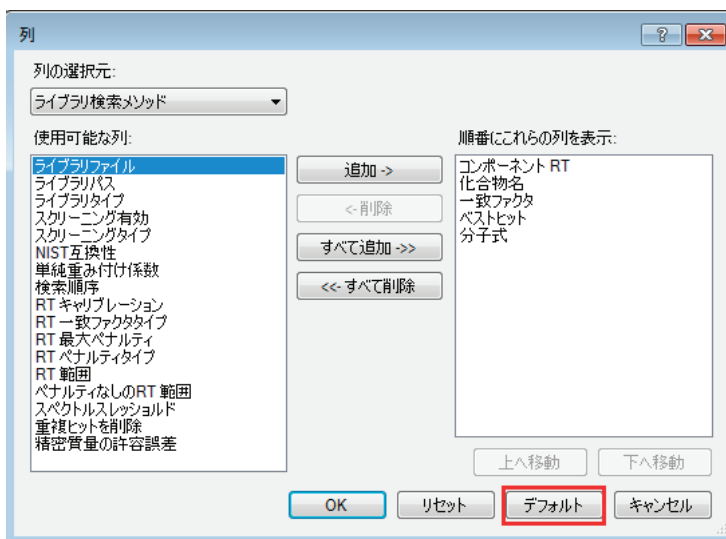
**【解析メッセージ】** ウィンドウを閉じます。

RT±5 FWHM のブランクに同じヒットが検出される場合、サンプルのヒットは **【ブランク減算済み】** とマークされます。通常の GC/MS ピークの半値全幅 (FWHM) は 1 ~ 2 秒です。仮に 2 秒とした場合、5 FWHM = 10 秒 = 0.17 分です。ツールバーの **【すべて】** をクリックしている場合のみ、**【ブランク減算済み】** ヒットを表示できます。

**ブランクヒット減算**は「ブランク」サンプルに対して実行されます。サンプルタイプが**ブランク**、**ダブルブランク**、または**マトリックスブランク**と判定されたサンプルのヒットはすべて、処理中にすべての標準サンプルから自動的に減算されます。「ブランク」サンプルをブランク減算の対象に指定するには、**サンプルウィンドウ**で**【サンプルタイプ】**を変更します。「ブランク」サンプルが存在しない場合、**ブランク減算**は実行されません。**【ブランク減算】**をオフにするには、**サンプルタイプ**を変更します。

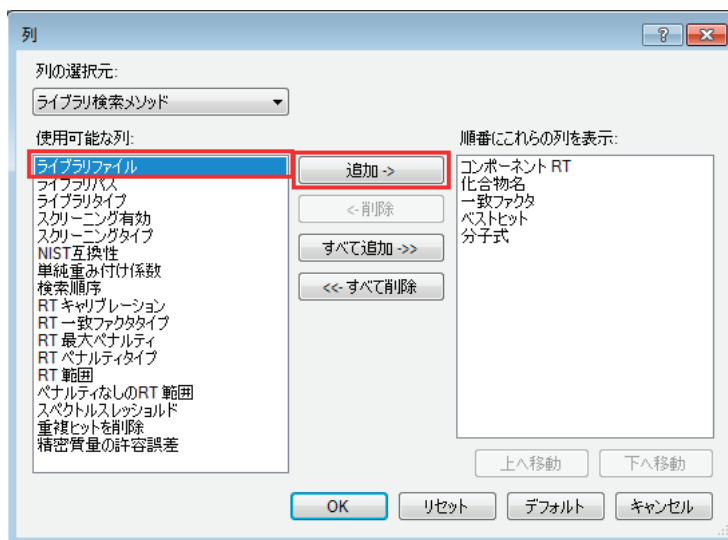
### 代替ヒットの表示による結果の評価

1. **【コンポーネント】** ウィンドウの列ヘッダーを右クリックして、**【列の追加/削除】** を選択します。
2. **【デフォルト】** をクリックします。



## タスク 2 : デコンボリューションによる化合物の同定

3. **【使用可能な列】** リストから **【ライブラリファイル】** を選択し、**【追加】** をクリックします。



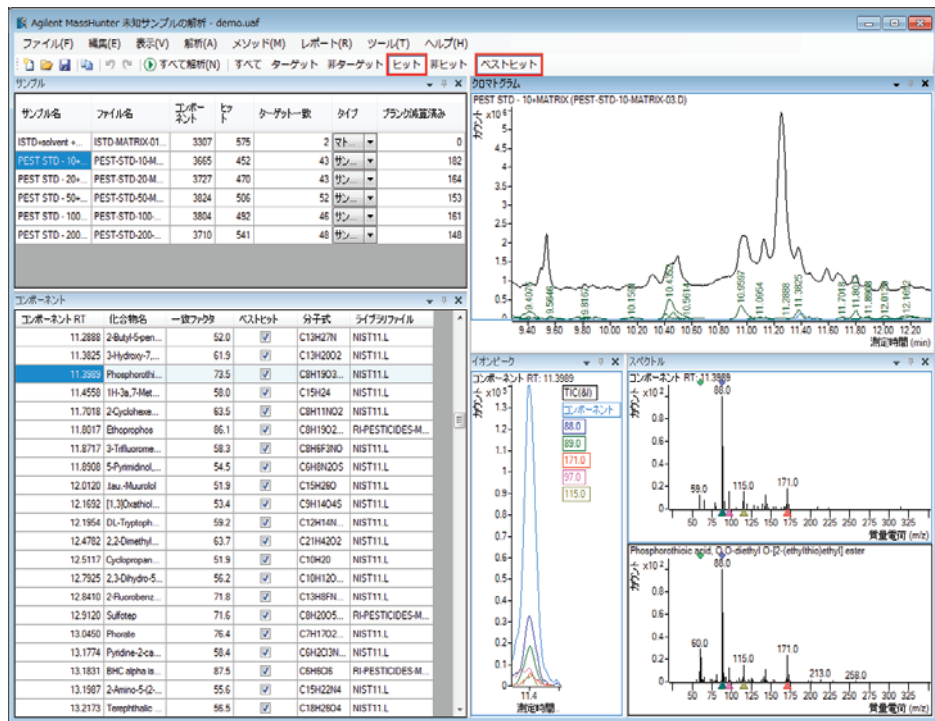
4. 選択した列が **【順番にこれらの列を表示】** リストに移動したことを確認し、**【OK】** をクリックします。

5. **【サンプル】** ウィンドウの **PEST STD-10+MATRIX** サンプルを選択し、ツールバーの **【ヒット】** をクリックして、**【コンポーネント】** ウィンドウの表示内容の変化を確認します。

サンプル名	ファイル名	コンポーネント	ヒット	ターゲット一致	タイプ	ブランク減算済み
ISTD+solvent +...	ISTD-MATRIX-01...	3307	575	2	マト...	0
PEST STD - 10+...	PEST-STD-10-M...	3665	452	43	サン...	182
PEST STD - 20+...	PEST-STD-20-M...	3727	470	43	サン...	164
PEST STD - 50+...	PEST-STD-50-M...	3824	506	52	サン...	153
PEST STD - 100...	PEST-STD-100...	3804	492	46	サン...	161
PEST STD - 200...	PEST-STD-200...	3710	541	48	サン...	148

## タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定

ライブラリごとのベストヒットを確認します。

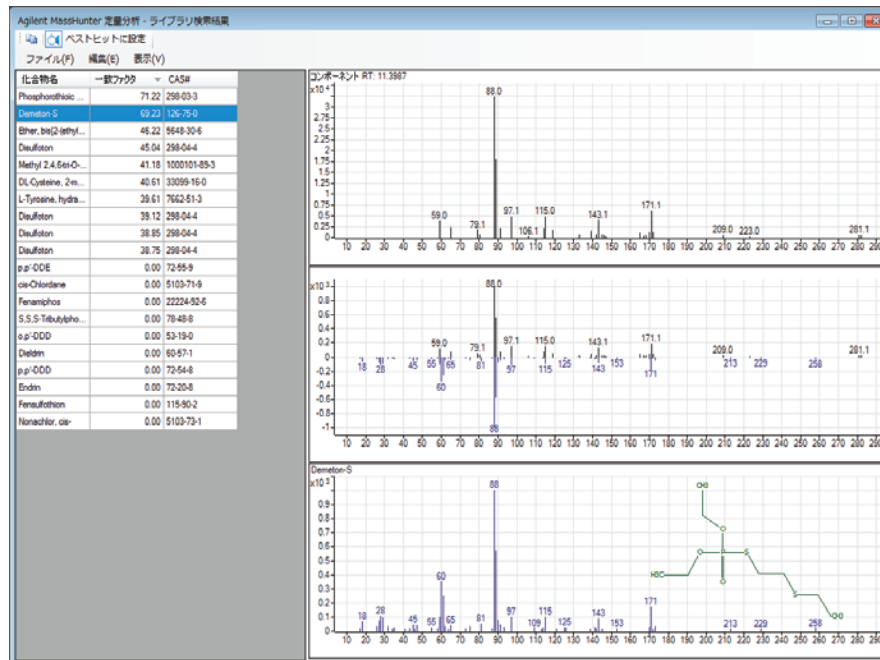


- [コンポーネント]ウィンドウの **Phosphorothioic acid** を右クリックし、[代替ヒットの表示] を選択します。

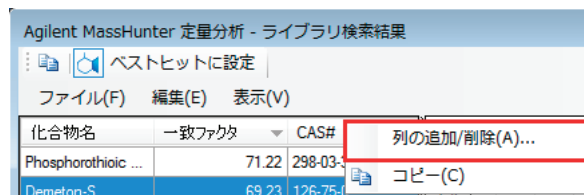


## タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定

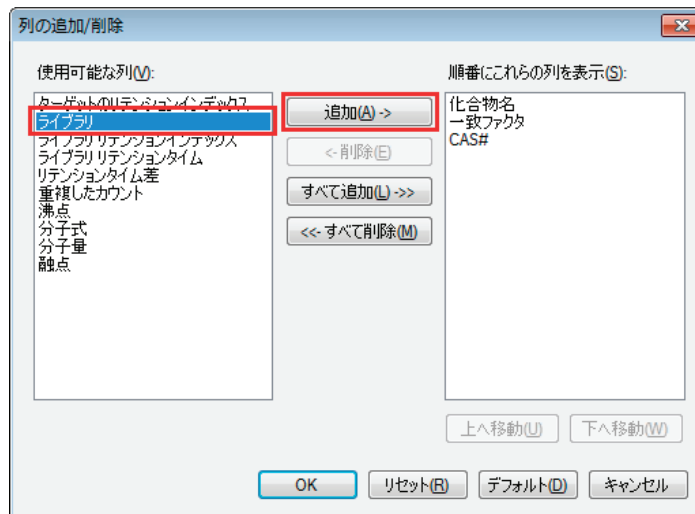
[ライブラリ検索結果] が表示されます。



7. [ライブラリ検索結果] ウィンドウの列ヘッダーを右クリックして、[列の追加/削除] を選択します。



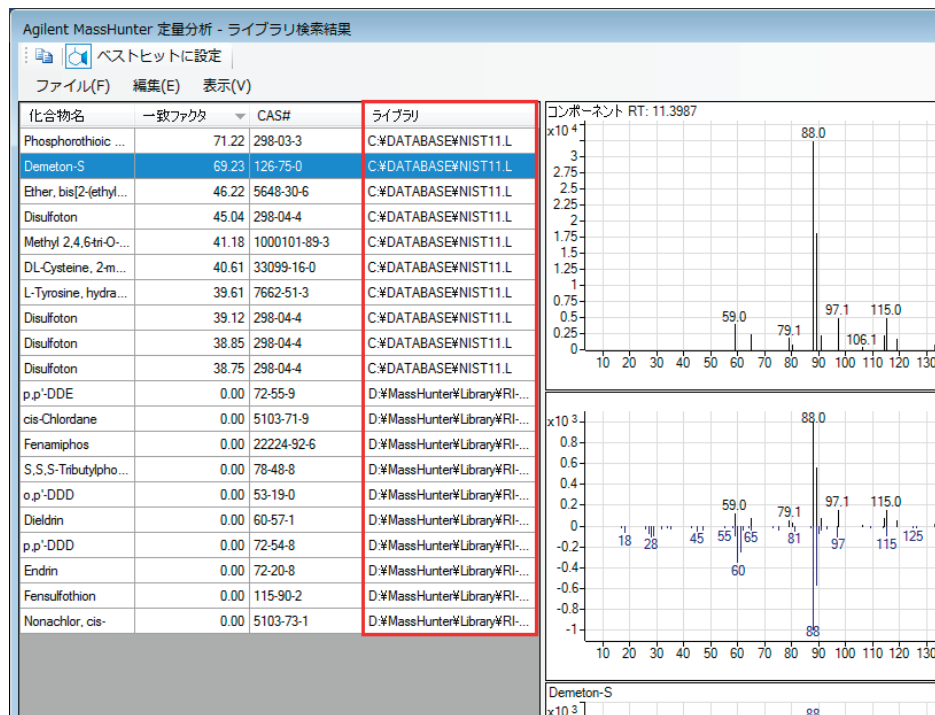
8. [使用可能な列] リストから [ライブラリ] を選択し、[追加] をクリックします。



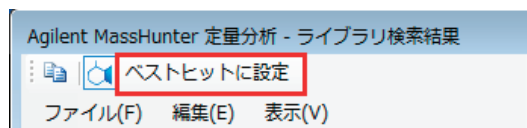
## タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定

9. 選択した列が【順番にこれらの列を表示】リストに移動したことを確認し、【OK】をクリックします。

【ライブラリ】列がテーブルに追加されます。



10. Demeton-S を選択して、【ベストヒットに設定】をクリックします。



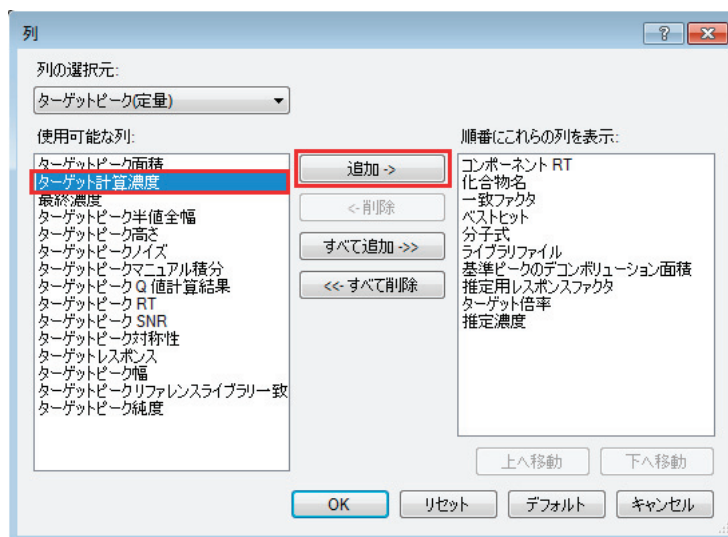
【コンポーネント】テーブルの現在の【ベストヒット】が、前の化合物から、選択した化合物に置き変わったことを確認します。

コンポーネント RT	化合物名	一致ファクタ	ベストヒット	分子式	ライブラリファイル
11.1417	4H-1,3-Dioxi...	50.4	<input checked="" type="checkbox"/>	C9H14O3	NIST11.L
11.2888	2-Butyl-5-pen...	52.0	<input checked="" type="checkbox"/>	C13H27N	NIST11.L
11.3825	3-Hydroxy-7,...	61.9	<input checked="" type="checkbox"/>	C13H20O2	NIST11.L
11.3987	Demeton-S	69.2	<input checked="" type="checkbox"/>	C8H19O3...	NIST11.L
11.4558	1H-3a,7-Met...	58.0	<input checked="" type="checkbox"/>	C15H24	NIST11.L
11.7018	2-Cyclohexe...	63.5	<input checked="" type="checkbox"/>	C8H11NO2	NIST11.L
11.8017	Ethoprophos	86.1	<input checked="" type="checkbox"/>	C8H19O2...	RI-PESTICIDES-M...
11.8717	3-Trifluorome...	58.3	<input checked="" type="checkbox"/>	C8H6F3NO	NIST11.L
11.8908	5-Pyrimidinol...	54.5	<input checked="" type="checkbox"/>	C6H8N2OS	NIST11.L
12.0120	tau.-Muurolol	51.9	<input checked="" type="checkbox"/>	C15H26O	NIST11.L
12.1692	[1,3]Oxathiol...	53.4	<input checked="" type="checkbox"/>	C9H14O4S	NIST11.L
12.1954	DL-Tryptoph...	59.2	<input checked="" type="checkbox"/>	C12H14N...	NIST11.L
12.4782	2,2-Dimethyl...	63.7	<input checked="" type="checkbox"/>	C21H42O2	NIST11.L
12.5117	Cyclopropan...	51.9	<input checked="" type="checkbox"/>	C10H20	NIST11.L
12.7925	2,3-Dihydro-5...	56.2	<input checked="" type="checkbox"/>	C10H12O...	NIST11.L
12.8410	2-Fluorobenz...	71.8	<input checked="" type="checkbox"/>	C13H8FN...	NIST11.L
12.9120	Sulfotep	71.6	<input checked="" type="checkbox"/>	C8H20O5...	RI-PESTICIDES-M...
13.0450	Phorate	76.4	<input checked="" type="checkbox"/>	C7H17O2...	NIST11.L

## タスク 2: デコンボリューションによる化合物の同定

### 濃度推定結果の確認

1. [コンポーネント] ウィンドウの列ヘッダーを右クリックして、[列の追加/削除] を選択します。
2. [基準ピークのデコンボリューション面積]、[推定用レスポンスファクタ]、[ターゲット倍率]、[推定濃度]、[ターゲット計算濃度] を [使用可能な列] リストから選択し、[追加] をクリックします。



3. 選択した列が [順番にこれらの列を表示] リストに移動したことを確認し、[OK] をクリックします。
4. [サンプル] ウィンドウの **PEST STD-200+MATRIX** サンプルを選択し、ツールバーの [ターゲット] をクリックして、[コンポーネント] ウィンドウの表示内容の変化を確認します。

Agilent MassHunter 未知サンプルの解析 - demo.uaf

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 解析(A) メソッド(M) レポート(R) ツール(T) ヘルプ(H)

すべて解析(N) | すべて **ターゲット** 非ターゲット ヒット 非ヒット

サンプル名	ファイル名	コンポーネント	ヒット	ターゲット一致	タイプ	ブランク減算済み
ISTD+solvent +...	ISTD-MATRIX-01...	3307	575	2	マト...	0
PEST STD - 10+...	PEST-STD-10-M...	3665	452	42	サン...	182
PEST STD - 20+...	PEST-STD-20-M...	3727	470	43	サン...	164
PEST STD - 50+...	PEST-STD-50-M...	3824	506	52	サン...	153
PEST STD - 100...	PEST-STD-100...	3804	492	46	サン...	161
<b>PEST STD - 200...</b>	<b>PEST-STD-200...</b>	<b>3710</b>	<b>541</b>	<b>48</b>	<b>サン...</b>	<b>148</b>

## タスク 2 : デコンボリューションによる化合物の同定

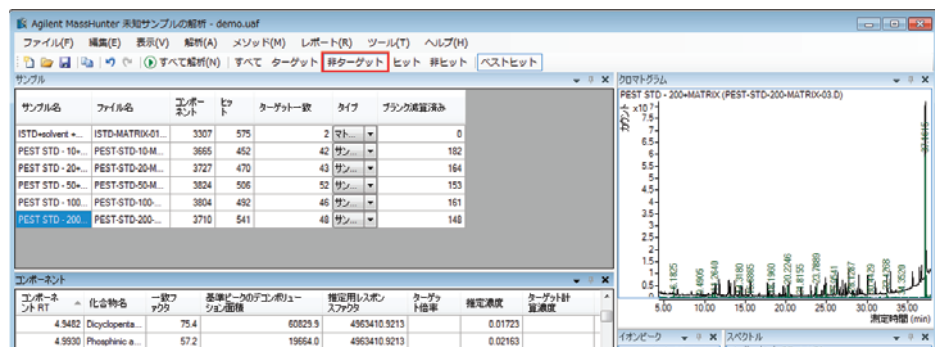
【推定濃度】列に推定濃度結果が表示されています。これをターゲット化合物の定量計算濃度と比較できます。

推定濃度は次の式を使用して計算されます。

$$\text{Estimated Concentration} = \frac{\text{BasePeakDeconvolutedArea}}{\text{RFforEstimation}} \times \text{Multiplier}$$

コンポーネント RT	化合物名	一致ファクタ	基準ピークのデコンボリューション面積	推定用レスポンスファクタ	ターゲット倍率	推定濃度	ターゲット計算濃度
11.4021	Phosphorothi...	94.9	2721304.4	15242.0612	1.0	178.5	142.9
11.7973	Ethoprophos	98.6	2129122.9	23074.7989	1.0	92.27	80.42
12.9031	Sulfotep	97.3	1015154.5	14072.1077	1.0	72.14	60.25
13.0452	Phorate	97.5	3420580.5	37367.4384	1.0	91.54	69.67
13.1816	BHC alpha is...	98.8	1624103.4	30501.9747	1.0	53.25	50.15
13.7016	Pentachloroa...	98.8	1731347.2	31672.4512	1.0	49.85	50.18
13.7651	Dimethoate	96.0	2679103.0	27534.5448	1.0	97.3	79.82
14.3218	BHC beta iso...	98.5	1014024.0	17820.0025	1.0	54.67	49.9
14.5841	Lindane	98.0	1123973.2	20587.9238	1.0	54.59	50.03
15.0133	Fonofos	97.4	2705421.8	36770.1739	1.0	73.58	60.18
15.5881	Diazinon	98.2	2028613.6	19554.1053	1.0	96.89	79.21
15.6787	Disulfoton	85.7	1203625.2	14999.7384	1.0	80.24	61
15.6842	BHC delta is...	96.2	1201797.5	22152.4695	1.0	54.25	50.15
17.7267	Methyl parat...	86.9	1539303.6	7909.0709	1.0	107.8	71.74
17.7336	Chloropyriph...	91.9	2612062.4	25551.5818	1.0	102.2	81.31
17.9452	Heptachlor	95.7	598014.1	9858.2440	1.0	60.66	50.29
18.4656	Fenchlorphos	96.4	4683567.4	57241.7052	1.0	81.82	70.12
19.1939	Fenitrothion	95.7	691056.8	4734.6577	1.0	105.8	71.16
19.6682	Aldrin	96.7	1021692.5	18538.1018	1.0	53.32	49.98
19.9065	Malathion	92.6	1245685.5	11858.6545	1.0	105	81.6

5. ツールバーの[非ターゲット]をクリックして、非ターゲットの推定濃度を表示します。

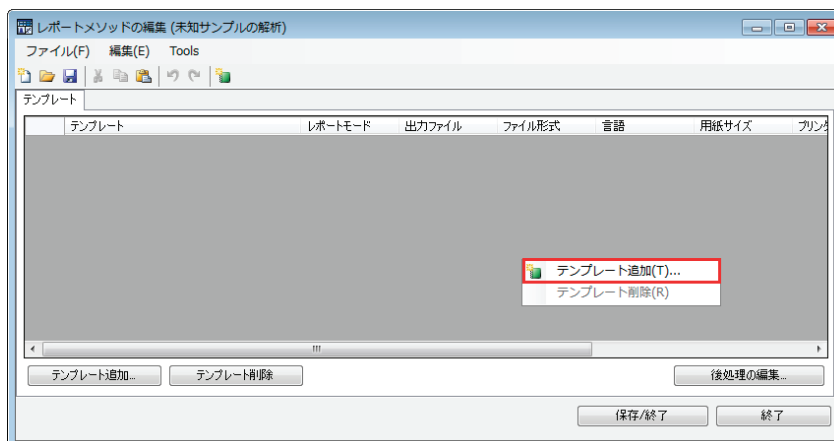
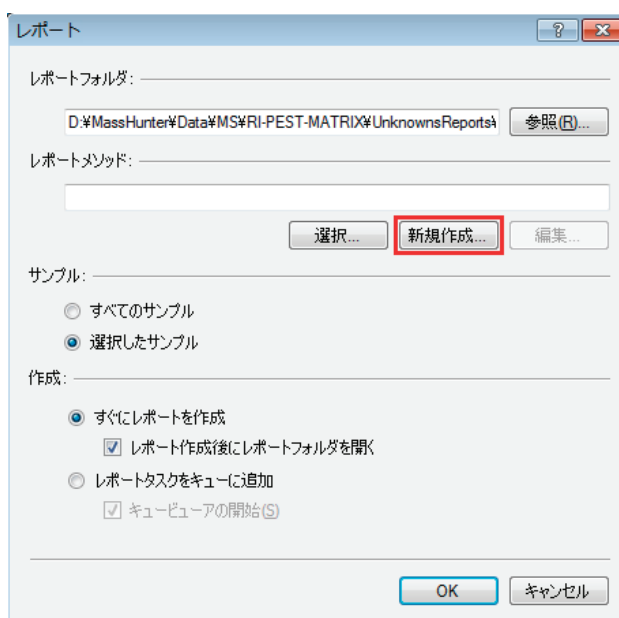
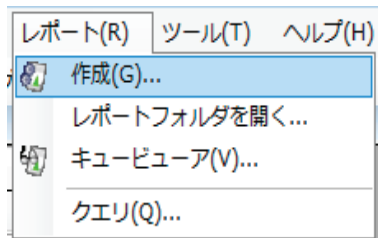


6. 解析を保存するには、[ファイル] > [解析の保存] を選択します。

## タスク 3 : レポートの作成

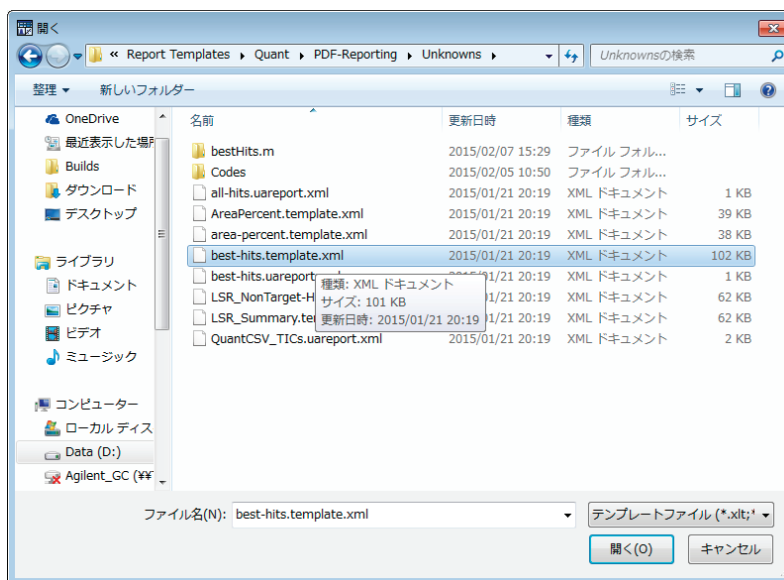
### タスク 3 : レポートの作成

1. [レポート] > [作成] を選択します。
2. [レポートメソッド]の下にある [新規作成] をクリックします。
3. ウィンドウを右クリックして、[テンプレート追加] を選択します。

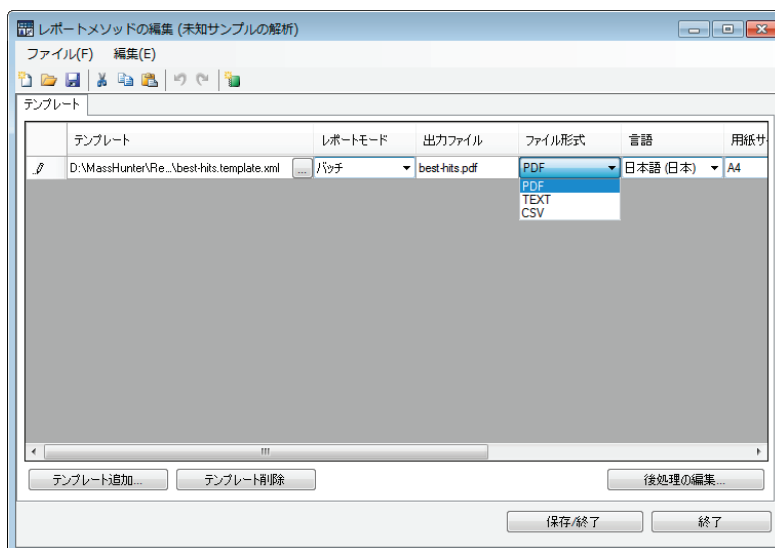


### タスク 3 : レポートの作成

4. D:\MassHunter\Report Templates\Quant\PDF-Reporting\Unknowns ディレクトリに移動し、best-hits.template.xml を選択し、[開く] をクリックします。

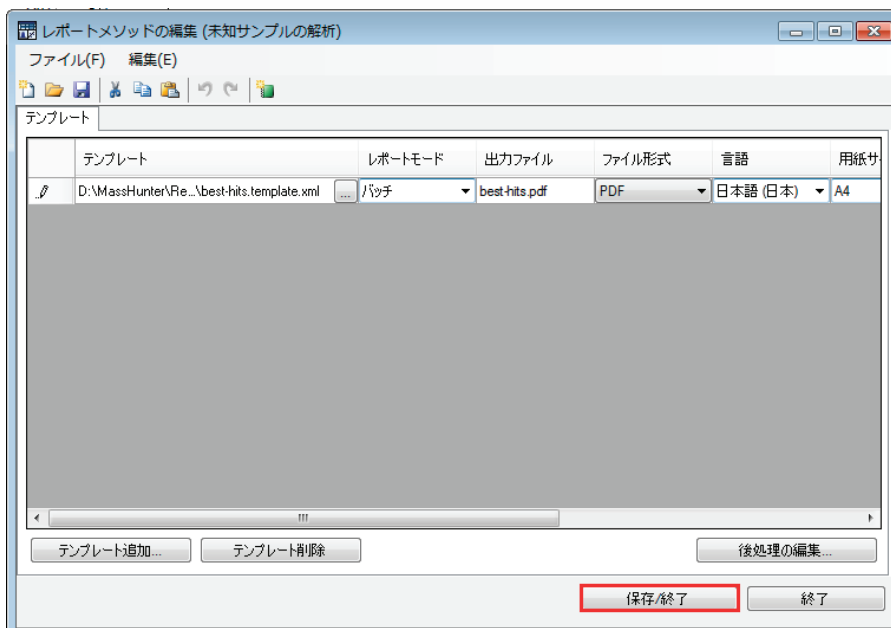


テンプレートの選択後、このページから、レポートの【ファイル形式】(PDF、TEXT、CSV)、【言語】(英語、中国語、日本語、ロシア語)、プリンターの【用紙サイズ】(A4、レター)、および【作成ファイルの表示】(オン、オフ)を指定できます。【後処理】では、レポート作成後に行う詳細なレポート処理を指定することもできます。

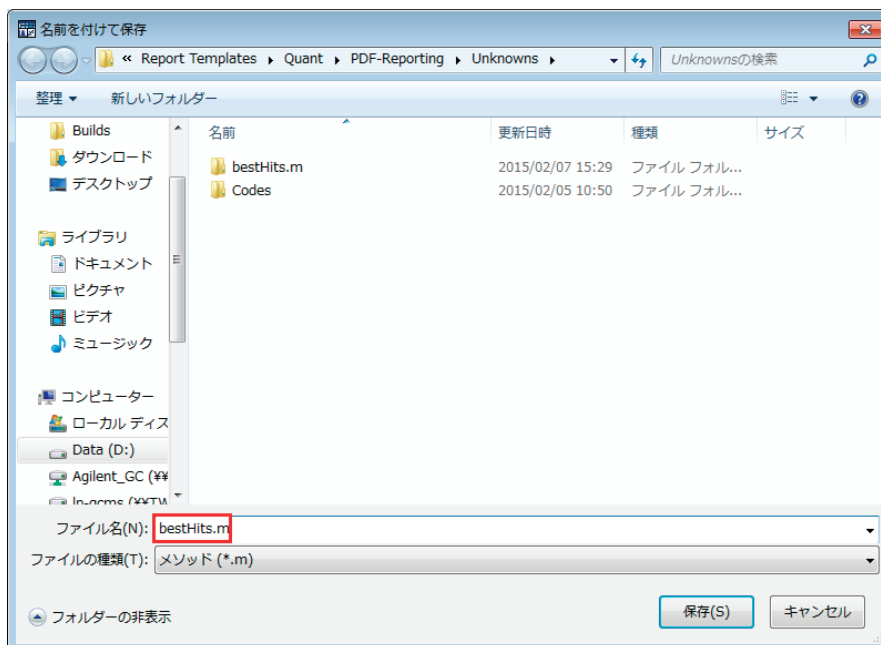


### タスク 3 : レポートの作成

5. **[保存/終了]**をクリックして、適切な場所にレポートメソッドを保存します。



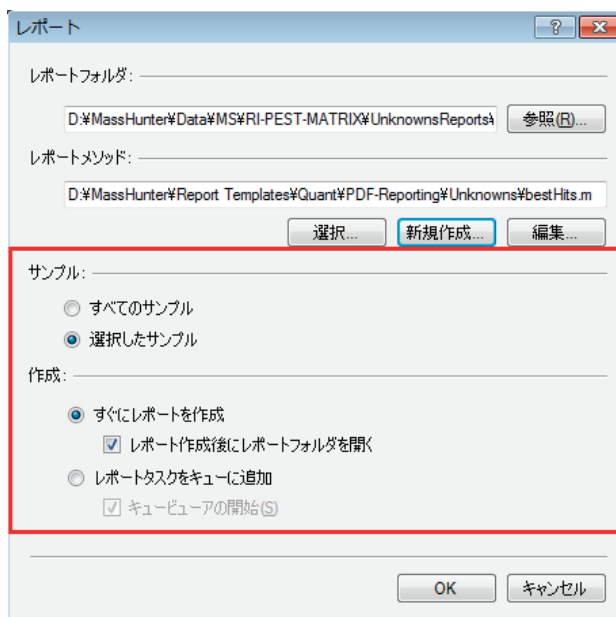
レポートメソッドには拡張子 **.m** が付きます。



### タスク 3 : レポートの作成

6. サンプルセクションでは、作成するレポートについて [すべてのサンプル] または [選択したサンプル] を指定することができます。

また、レポート作成のモードを [すぐにレポートを作成] または [レポートタスクをキューに追加] から選択できます。

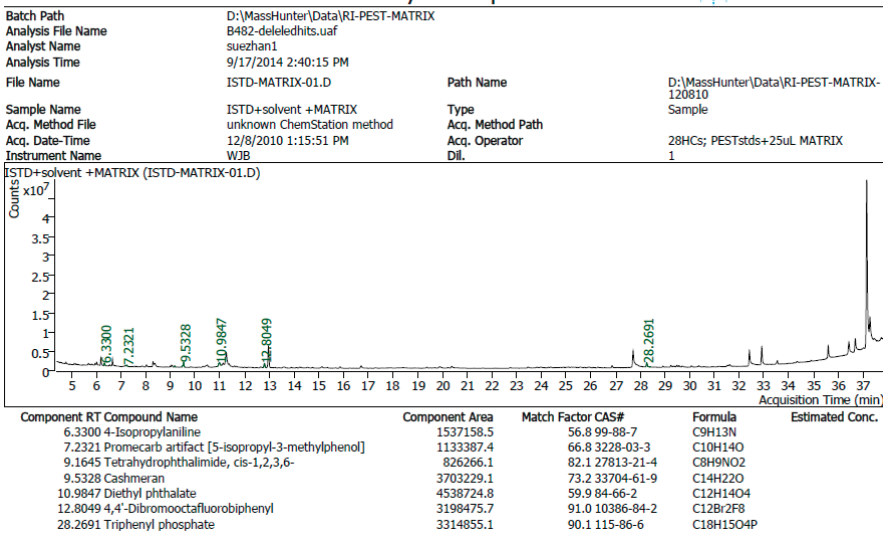


7. [OK] をクリックして、レポートの作成を開始します。

レポートの作成が完了すると、レポートフォルダが自動的に開きます。

または、[レポート] > [レポートフォルダを開く] を選択して、新しく作成した best-hits.pdf レポートを表示することもできます。レポートは Adobe Reader で開きます。

### Unknowns Analysis Report - Best Hits Agilent Technologies



8. レポートを閉じます。
9. プログラムを終了するには、[ファイル] > [終了] を選択します。







© Agilent Technologies, Inc.

Printed in USA、2015年1月

G3335-96187