

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

GC/MS 用
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

G3335-96197

エディション

リビジョン A、2017年1月

Printed in USA

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

Microsoft®、Windows 7®、および Excel® は、米国およびその他の国における Microsoft Corporation の米国の登録商標です。

ソフトウェアリビジョン

このガイドは、改訂されるまで Agilent MassHunterワークステーションソフトウェア – 定性分析 ソフトウェアの B.08.00 以降のリビジョンに対応しています。

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は一切負いません。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常提供されている権利に限定されています。Agilent は、ソフトウェアおよび技術データに係る通常の本商用ライセンスを、FAR 12.211 (Technical Data) および 12.212 (Computer Software)、並びに、国防総省に対しては、DFARS 252.227-7015 (Technical Data -Commercial Items) および DFARS 227.7202-3 (Rights in Commercial Computer Software or Computer Software Documentation) の規定に従い提供します。

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...

このガイドには、GC/MS データに対する Agilent MassHunter ワークステーション ソフトウェア – 定性分析 の使い方を学習するための情報が含まれています。定性分析には 2 つのメインプログラムがあります。

- 定性分析ナビゲータ - このプログラムを使用して、クロマトグラムとスペクトルの確認、マススペクトルのイオンの同定を行います。データをマニュアルで特定な問題に対して専門的に検討する場合に特に有効です。
- 定性分析ワークフロー - このプログラムの化合物検出アルゴリズムを使用して、データから化合物を検出します。その同定アルゴリズムを使用して、未知の化合物を同定することもできます。

それぞれのプログラムで、使用できるウィンドウが異なります。以下のウィンドウは、両方の表示で使用することができます。

- メソッドエディタ
- 結果の差
- 構造式ビューア
- 化学式計算ツール
- 質量計算ツール

定性分析ナビゲータ プログラム

このプログラムでは、[データナビゲータ] ウィンドウを使用してさまざまなスペクトルとクロマトグラムを対話形式で選択できます。スペクトルに対して化学式の作成またはライブラリ/データベースの検索が行えます。

マニュアル抽出したスペクトル、または [ピークスペクトルの積分と抽出] アルゴリズムによって抽出したスペクトルを表示する場合、このプログラムを使用できます。

定性分析ワークフロー プログラム

1 つ以上のデータファイルの、1 つの化合物を中心に表示します。ある化合物に関する情報をさまざまなウィンドウで確認できます。選択する化合物を、化合物リストウィンドウで変更します。データファイルをサンプルテーブルで切り替えます。

化合物検出アルゴリズムを使用する必要がある場合、このプログラムを使用します。

どちらかのプログラムを使用中に、もう一方のプログラムで提供されるツールも必要になった場合は、[起動]メニューからそのプログラムを起動できます。現在開いているデータファイルのうち、どのファイルを起動したプログラムで開くかを指定することもできます。

実習を始める前に、7 ページの「**実習を開始する前に**」の説明を読んでください。

実習 1 定性分析の基礎の学習

この実習では、定性分析ナビゲータプログラムの多くの機能の一部を学習します。使用するデータタイプに関わらず、これらのタスクは重要です。

実習 2 検出と同定

これらのタスクでは、GC/MS データファイルの化合物を検出および同定します。定性分析ワークフロープログラムを使用して、化合物検出を実行します。このプログラムでは、それらの化合物を同定することもできます。

実習 3 ワークフロー、エクスポート、および印刷

これらのタスクでは、ワークフローの設定および実行方法を学習します。各タスクは異なるワークフローを使用して行います。

リファレンス

この章では、定性分析プログラムに関する基本の一部を学習します。

新機能

B.08.00

以下の機能は、定性分析ナビゲータプログラムと定性分析ワークフロープログラムの両方に適用されます。

- **Windows 10** と **Windows 7** がサポートされています。
- **Microsoft Excel 2016** をサポートします。
- メニューとウィンドウがシンプルになりました。
- [メソッドエクスプローラ] ウィンドウと [メソッドエディタ] ウィンドウが 1 つのウィンドウに統合されました。
- すべてのツールバーがシンプルになりました。
- 読み込んだファイルに基づいて、ユーザーインターフェイス コンフィグレーションは自動的に設定されます。
- 読み込んだデータファイルのタイプに関連するメニューとウィンドウのみが使用可能になります。
- データベース検索とライブラリ検索が統合され、1 つのアクションとして実行されます。データおよび選択されたデータベース/ライブラリに基づいて、ソフトウェアが適切なアクションを自動的に実行します。
- 自動化メソッドには [ターゲット/候補化合物スクリーニング]、[サンプル純度]、[化合物の探索]、[カスタム] の 4 つのワークフローがあります。定性ナビゲータプログラムでは、カスタムワークフローのみ実行できます。定性分析ワークフロープログラムでは、すべてのワークフローを実行できます。
- ワークフローを実行すると、追加クロマトグラムが抽出されます。
- ワークフローは [メソッド] メニューからも実行できます。
- 最後にクリックした位置を示していた灰色の線はプロットに表示されなくなりました。プロット内の現在の位置は灰色の縦線で示されますが、カーソルがウィンドウにないときは、その線は表示されません。
- 最新バージョンのアルゴリズムは、**MassHunter** 定性分析と定量分析プログラムの両方で使用されます。
- 定性分析のメソッドと結果は、下位互換性があります。

- **BioConfirm** 機能は定性分析プログラムから表示されなくなりました。

以下の機能は、定性分析ナビゲータプログラムに適用されます。

- [ピーク選択] ツールが [クロマトグラム結果] ウィンドウのデフォルトツールです。
- [ピーク選択] ツールの動作は [範囲選択] ツールとほぼ同じです。クロマトグラムが積分されていない場合、どちらかのツールで任意の範囲を選択できます。ただし、クロマトグラムが積分されており、取り出した範囲に 1 つ以上のピークのオーバーラップがある場合、[ピーク選択] ツールではこれらのピークの RT 範囲を選択します。
- [スペクトルプレビュー] ウィンドウは自動的に閉じます。
- **BioConfirm** がインストールされている場合、定性分析ナビゲータプログラムから **BioConfirm** を起動できます。

以下の機能は、定性分析ワークフロープログラムで使用可能です。

- 定性分析ワークフローソフトウェアには、化合物の検出に関連するすべての機能があります。
- ターゲット/候補化合物スクリーニングワークフローと化合物の探索ワークフローに対して [化合物検出の自動選択] を選択できます。
- 化合物の探索ワークフローによって化合物の同定ワークフローが自動的に実行されます。
- [フラグメントによる検出] アルゴリズムが、GC/TOF データまたは GC/Q-TOF データに対して実行されます。
- ワークフローごとに異なるレポートテンプレートを指定できます。
- [化合物リスト] ウィンドウに [スコア (フラグメント比)] 列が追加されました。
- GC/Q-TOF 全イオンワークフローは CI をサポートします。
- GC/Q-TOF EI データを使ってフラグメントの確認を実行するとき、CEF ファイルを作成できます。
- 選択した化合物からのクロマトグラムをサンプルクロマトグラムに重ね描きできます。
- [サンプルクロマトグラム結果] ウィンドウで [クロマトグラムの抽出] ボタンが使用できます。

- 化合物の MS または MS/MS スペクトル内でダブルクリックしたとき、EIC を抽出できます。
- サンプルクロマトグラム内をダブルクリックしたとき、化合物が抽出され、[化合物リスト] ウィンドウに追加されます。[検出アルゴリズム] は [スペクトル抽出] です。
- [化合物 クロマトグラム結果] ウィンドウに相対ズーム機能があります。
- [サンプルテーブル] ウィンドウにサンプル情報の詳細と結果サマリーが表示されます。サンプルプレップパラメータが編集可能です。
- [化合物リスト] ウィンドウのタイトルバーにサマリーの詳細が表示されます。
- 化合物リストでは、列がカテゴリ別にグループ化されます。
- 化合物リストのレベルは一つだけです。
- [Molecular Feature]による検出] アルゴリズムは、GC/MSD および GC/Q-TOF データの検出機能をサポートします。
- MFE 化合物で CEF ファイルを作成するとき、Q スコアが含まれます。
- Agilent Walkup プログラムに、定性分析列が追加されました。
- Agilent Data Acquisition for TOF/Q-TOF プログラムに、定性分析列が追加されました。

実習を開始する前に

- ソフトウェアをインストールします。説明については、『インストールガイド』を参照してください。
- インストールディスクから **Data** という名前のフォルダを、非圧縮形式で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すべてが含まれています。まず、.zip フォーマットからデータファイルを展開する必要がある場合もあります。

注記

システムにある既存の実習用データファイルの使用は避けてください。ディスク上のオリジナルからコピーされており、自分以外には使用しておらず、変更されていないデータの場合のみ既存データを使用できます。システムに既にある実習用データファイルがディスク上のオリジナルファイルから変更されており同一でない場合は、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なくなります。

目次

実習 1	定性分析の基礎の学習	11
	タスク 1. 定性分析ナビゲータプログラムを開く	12
	タスク 2. クロマトグラムの拡大/縮小	15
	タスク 3. クロマトグラムの固定	17
	タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更	18
	タスク 5. クロマトグラムの抽出	20
	タスク 6. GC/MS クロマトグラムの積分	23
	タスク 7. システム適合性の計算	28
	タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出	32
	タスク 9. 注釈の追加	42
	タスク 10. 質量差の追加	46
実習 2	検出と同定	49
	タスク 11. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出	50
	タスク 12. ライブラリ検索/データベース検索アルゴリズムによる化合物の同定	54
	タスク 13. MRM を使用した化合物の検出 (MRM のみ)	57
	タスク 14. 積分による化合物の検出	61
	タスク 15. フラグメントによる検出	64
	タスク 16. ライブラリでマススペクトルを検索	71
	タスク 17. 結果の保存	75
実習 3	ワークフロー、エクスポート、および印刷	79
	タスク 18. ターゲット / 候補化合物スクリーニングワークフローの設定と実行	79
	タスク 19. 化合物の探索ワークフローによるメソッドの設定と実行	83
	タスク 20. カスタムワークフローによるメソッドの設定と実行	87

目次

タスク 21. CEF ファイルのエクスポート	90
タスク 22. 解析レポートの印刷	93
タスク 23. 化合物レポートの印刷	97

リファレンス 101

定性分析ナビゲータプログラム	102
主要な機能	102
ウィンドウ - 定性分析ナビゲータプログラム	106
定性分析ワークフロープログラム	116
主要な機能	116
ウィンドウ - 定性分析ワークフロー	118
定性分析ナビゲータとワークフロー	130
レイアウト	130
レポートテンプレートのカスタマイズ	132



実習1 定性分析の基礎の学習

タスク 1. 定性分析ナビゲータプログラムを開く	12
タスク 2. クロマトグラムの拡大/縮小	15
タスク 3. クロマトグラムの固定	17
タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更	18
タスク 5. クロマトグラムの抽出	20
タスク 6. GC/MS クロマトグラムの積分	23
タスク 7. システム適合性の計算	28
タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出	32
タスク 9. 注釈の追加	42
タスク 10. 質量差の追加	46

この実習では、GC/Q-TOF および GC/QQQ データを用いて作業するための定性分析ナビゲータプログラムの多くの機能の一部を学習します。定性ワークフロープログラムでは多くの基本タスクを実行できますが、実際のステップは異なる場合があります。

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ています。




1 定性分析の基礎の学習

タスク 1. 定性分析ナビゲータプログラムを開く

タスク 1. 定性分析ナビゲータプログラムを開く

このタスクでは、現在のメソッドを用いて、定性分析ナビゲータプログラムで複数のデータファイルを開きます。

タスク 1. 複数のデータファイルを用いて定性分析プログラムを開く

ステップ	詳細説明	コメント
1 定性分析プログラムを開きます。 <ul style="list-style-type: none">データファイル Pest - 200 - Scan.d、Pest - STD 200 MRM.d、Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d、MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d を、¥¥MassHunter¥¥Data フォルダまたはファイルをコピーしたフォルダから開きます。	<p>a Agilent MassHunter の [Qualitative Analysis Navigator B.08.00] アイコン  をダブルクリックします。</p> <p>[データファイルを開く] ダイアログボックスが表示されます。</p> <p>b フォルダ ¥¥MassHunter¥¥Data¥¥GCMS Pesticide またはデモファイルを置いたフォルダに移動します。</p>	<ul style="list-style-type: none">Pest - 200 - Scan.d ファイルには MS データが、Pest - STD 200 MRM.d および Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d ファイルには MS と MS/MS の両方のデータ（すべて GC/QQQ）が含まれます。MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d には GC/Q-TOF データが含まれます。ウィンドウがアクティブの時に F1 キーを押すと、ほとんどのウィンドウ、ダイアログボックス、タブに関するヘルプが表示できます。ファイルが別のフォルダにある場合、[ファイル] > [データファイルを開く] をクリックします。

- **[現在のメソッドを使用]** ボタンが選択されていることを確認します。
- **[結果データの読み込み]** チェックボックスがオフまたは灰色表示になっていることを確認します。**[結果データの読み込み]** チェックボックスが使用できない場合、データファイルには結果が保存されていません。75 ページの「**タスク 17. 結果の保存**」で結果の保存方法を学習します。

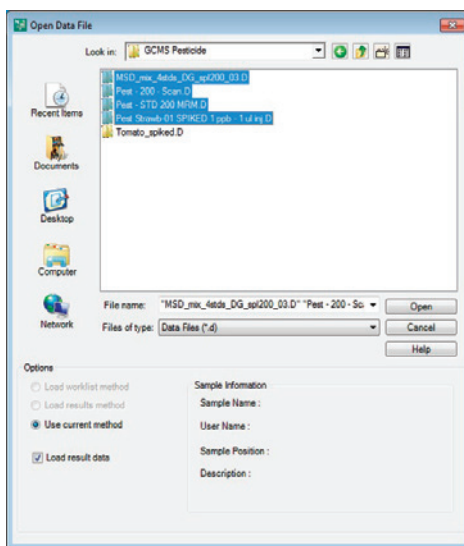



図1 ソフトウェアを開く際にデータファイルを開く

タスク 1. 複数のデータファイルを用いて定性分析プログラムを開く (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
	<p>c Shiftキーを押しながら、MSD_mix_4stds_DB_spi200_03.d、Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d をクリックします。</p> <p>d 【開く】をクリックします。4つのデータファイルすべてが [データナビゲータ] ウィンドウに表示され、1~4のクロマトグラムが [クロマトグラム結果] ウィンドウに表示されます。</p> <p>e [クロマトグラム結果] ツールバーの [リストモード] アイコン () をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ <Ctrl> キーを押しながら選択することで、連続していない複数のファイルをリストから選択できます。 ・ この時点でメインウィンドウに表示される内容は、これらのファイルを開く前に使用されたメソッド、レイアウト、表示、プロット設定によって異なります。 ・ [リストモード] アイコンをクリックすると、アイコンの背景色がオレンジ色に変わります。

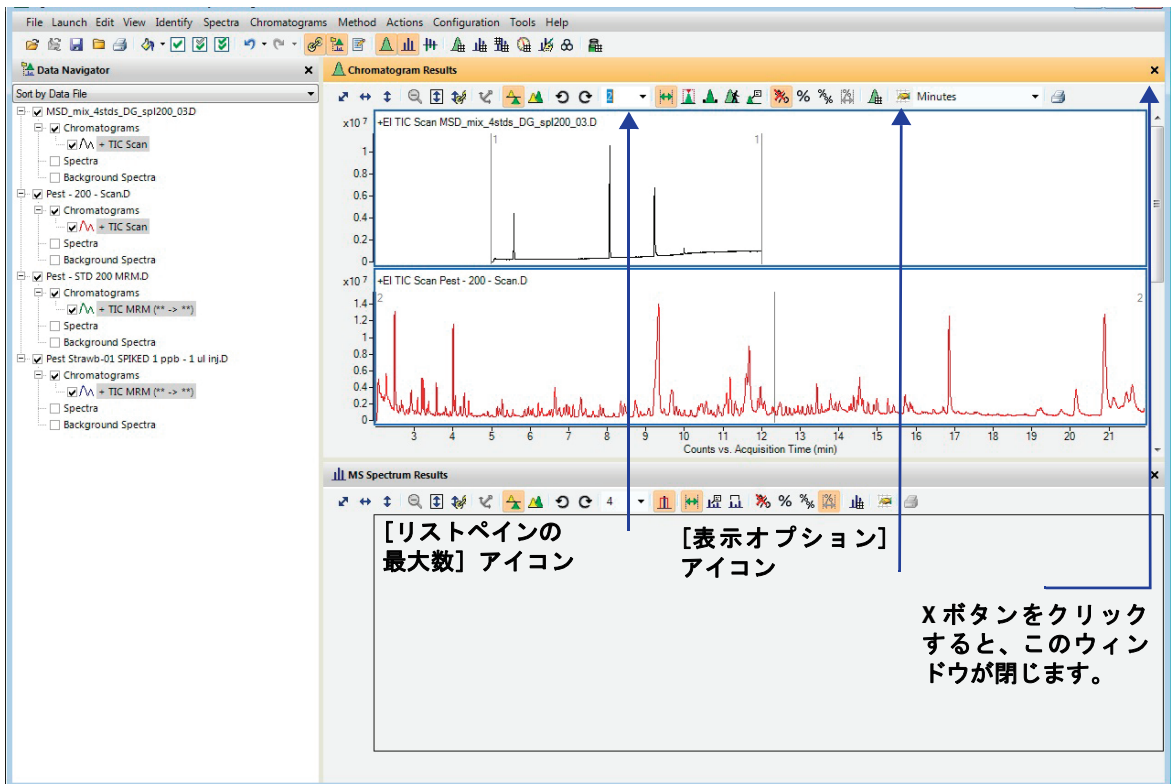


図2 定性分析メインウィンドウ

1 定性分析の基礎の学習

タスク 1. 定性分析ナビゲータプログラムを開く





タスク 1. 複数のデータファイルを用いて定性分析プログラムを開く（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
2	<p>メインウィンドウをデフォルトレイアウトとメソッドに復元します。</p> <ul style="list-style-type: none">4つのクロマトグラムすべてが見えることを確認します。	<ul style="list-style-type: none">定性ナビゲータプログラムのユーザーインターフェイスは、開くデータファイルのタイプに基づいて自動的にコンフィグレーションされます。
	<ul style="list-style-type: none">a 必要に応じて、[コンフィグレーション] > [ウィンドウレイアウト] > [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。b [クロマトグラム結果] ツールバーの [リストペインの最大数] アイコン隣の下矢印をクリックし、4 を選択します。c [メソッド] > [開く] をクリックします。d default-GCMS.m を選択します。e [開く] をクリックします。f 現在のメソッドのメソッドの変更を保存するかどうか確認を求められる場合があります。[はい] または [いいえ] をクリックします。	

タスク 2. クロマトグラムの拡大/縮小

このタスクでは、定性分析ナビゲータプログラムの拡大/縮小機能について学習します。ズーム機能は、定性分析ワークフロープログラムでも使用できます。





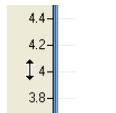
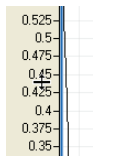
タスク 2. クロマトグラムの拡大/縮小

ステップ	詳細説明	コメント
1	<p>4つのクロマトグラムのうち1つのみを拡大/縮小します (X軸とY軸両方)。</p> <ul style="list-style-type: none"> • その他を非表示にします。 • 最後のピークを2回拡大します。 • Y軸をオートスケールでもう1回拡大します。 • 1回縮小して、前の倍率に戻します。 • 元のクロマトグラムに完全に戻します。 <p>a 非表示にするクロマトグラムのチェックボックスを [データナビゲータ] ウィンドウでオフにします。</p> <p>b 次のステップで 【ズーム中に Y 軸をオートスケール】 アイコン  が選択されていないことを確認します。</p> <p>c 最後のピークの領域を右クリックし、ドラッグします。</p> <p>d ステップ c を繰り返します。</p> <p>e ツールバーの 【ズーム中に Y 軸をオートスケール】 アイコン  をクリックします。</p> <p>f 3 回目として最後のピークの領域を右クリックし、ドラッグします。 定性分析ナビゲータプログラム、定性分析ワークフロープログラムにより、範囲の最大ポイントに合わせて、Y軸が自動的に拡大されます。</p> <p>g 【ズーム解除】 アイコン  をクリックし、直前のズーム操作を取り消します。過去15回のズーム操作を取り消すことができます。</p> <p>h 【X軸とY軸のオートスケール】 アイコン  をクリックし、完全にズームを解除します。</p>	<ul style="list-style-type: none"> • [データナビゲータ] ウィンドウでその行がチェックされていない場合、その行の情報は定性分析プログラムのすべてのウィンドウで表示されません。[データナビゲータ] ウィンドウでその情報のチェックボックスをオンにすると、情報は他のウィンドウでも再度表示されるようになります。 • 選択したアイコンの背景色はオレンジ色です。 • 定性分析ナビゲータプログラムでは、他のプロットウィンドウのスペクトルでもズーム機能を使用できます。 • 定性分析ワークフロープログラムでは、[サンプルクロマトグラム結果] ウィンドウ、[化合物クロマトグラム結果] ウィンドウ、[化合物 MS スペクトル結果] ウィンドウ、[化合物フラグメントスペクトル結果] ウィンドウ、[スペクトル結果の差] ウィンドウでもこれらの機能を使用できます。

1 定性分析の基礎の学習

タスク 2. クロマトグラムの拡大/縮小

タスク 2. クロマトグラムの拡大/縮小 (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
2 別々に拡大/縮小を実習します。 <ul style="list-style-type: none">・ X軸に沿ってのみ拡大します。 ヒント: X軸の値を右クリックし、カーソルを左から右に移動させます。・ X軸を部分的に縮小します。 ヒント: 反対方向にカーソルを移動させます。・ X軸のズームを完全に解除します。・ Y軸に対して同じステップを繰り返します。	<p>a X軸を拡大するには、水平の二重矢印が表示されるまでX軸値にカーソルを移動させます。</p> <p>b X軸値を右クリックし、新しいカーソルをX軸全域で左から右にドラッグします。</p> <p>c X軸を縮小するには、X軸値を右クリックし、左から右にドラッグします。</p> <p>d [X軸のオートスケール] アイコン  をクリックし、X軸のズームを完全に解除します。</p> <p>a Y軸を拡大するには、垂直の二重矢印が表示されるまでY軸値にカーソルを移動させます。</p> <p>b Y軸の値を右クリックし、新しいカーソルをY軸全域で下から上にドラッグします。</p> <p>c Y軸を縮小するには、Y軸値を右クリックし、上から下に向かってドラッグします。</p> <p>d [Y軸のオートスケール] アイコン  をクリックし、Y軸のズームを完全に解除します。</p>	<p>水平二重矢印</p>  <p>X軸値を右クリックすると新しいカーソルが表示されます。</p>  <p>垂直二重矢印</p>  <p>Y軸値を右クリックすると新しいカーソルが表示されます。</p> 

タスク 3. クロマトグラムの固定

このタスクでは、クロマトグラムを固定します。クロマトグラムを固定すると、他のクロマトグラムを表示するためにスクロールしても、固定されたクロマトグラムは常に表示されたままとなります。

タスク 3. クロマトグラムの固定

ステップ	詳細説明	コメント
<ul style="list-style-type: none"> クロマトグラムを固定します。 すべてのクロマトグラムを表示します。 クロマトグラム表示リストを1に設定していることを確認します。 [クロマトグラム結果] ウィンドウで、2番目のTICを選択します。 このTICを固定します。 クロマトグラム全域をスクロールします。 固定を解除します。 	<p>a [データナビゲータ] で、前のタスクで非表示にしたクロマトグラムのチェックボックスをオンにします。</p> <p>b [クロマトグラム結果] ウィンドウでペインの最大数を1に設定します。</p> <p>c [クロマトグラム結果] ウィンドウで、必要に応じてスクロールし、2番目のTICを選択します。</p> <p>d クロマトグラム内を右クリックし [固定する] をクリックします。</p> <p>e [クロマトグラム結果] ウィンドウのスクロールバーを用いて、クロマトグラムのリスト全体をスクロールします。2番目の TIC は、最初のクロマトグラムとして常に表示されます。</p> <p>f [クロマトグラム] > [固定を解除] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> クロマトグラムを固定すると、[データナビゲータ] ウィンドウの固定されているクロマトグラムの名前の隣に固定アイコンが表示されます。 表示リストが1の場合でもクロマトグラムを1つ固定した後は [クロマトグラム結果] ウィンドウに2つのクロマトグラムが表示されます。これは、固定したクロマトグラムに加えて、1つのクロマトグラムを表示することを意味しています。 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の [固定を解除] をクリックすることもできます。 定性分析ワークフロープログラムでは、クロマトグラムやスペクトルを固定することはできません。

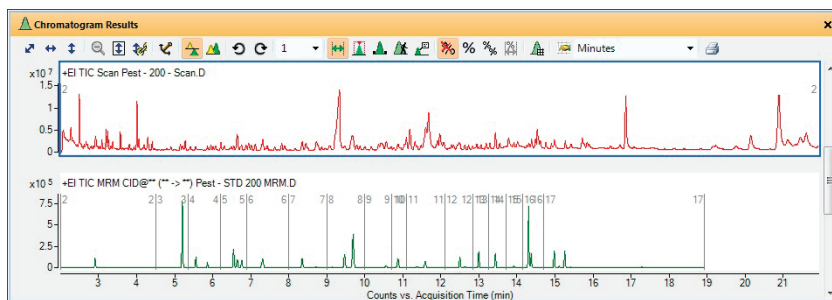


図3 [クロマトグラム結果] ウィンドウでの固定したTIC

1 定性分析の基礎の学習

タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更

タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更

このタスクでは、メインビューにウィンドウを移動させ、さまざまなウィンドウレイアウトを作成します。定性分析ナビゲータ、定性分析ワークフローの両方のプログラムでレイアウトを保存できます。

タスク 4. 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
1	<p>以下の、ウィンドウレイアウトを変更します。</p> <ul style="list-style-type: none">ウィンドウサイズの変更。ウィンドウレイアウトの保存。レイアウトのロック解除。[クロマトグラム結果] ウィンドウをフローティングに変更。[クロマトグラム結果] ウィンドウの移動。ウィンドウ位置変更用ツールの表示。	<ul style="list-style-type: none">レイアウトのロックを解除すると [レイアウトのロック] メニュー横のチェックマークは消えます。位置変更ツールは、レイアウトのロックが解除されている場合に限り使用できます。ウィンドウのタイトルバーをダブルクリックすることでも、ウィンドウをフローティングに設定できます。ソフトウェアには、事前に作成されたさまざまなレイアウトが用意されています。それとは異なるレイアウトを読み込むこともできます。ソフトウェアには複数の異なるワークフローがあります。各ワークフローは異なるレイアウトを読み込みます。異なるワークフローに切り替えると、レイアウトも変更されます。

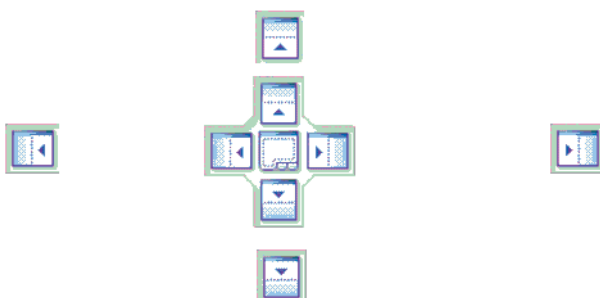


図4 ウィンドウ位置変更ツール

タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
<p>2 [クロマトグラム結果] ウィンドウの位置を変えます。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ ウィンドウを他のウィンドウの上、左、右、下になるように移動させます。 ・ 2つのウィンドウが上下に重なるように移動させ、下のウィンドウのタブによってのみ使用できるようにします。 ・ デフォルトレイアウトを復元します。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ ウィンドウのタイトルバーで左マウスをクリックしたまま、小さなアイコンのいずれかの上にカーソルをドラッグすると、ドラッグしているウィンドウは他のすべてのウィンドウの上、右、下、または左に置かれます。 ・ 大きなアイコンの上にカーソルをドラッグします。大きなアイコンの端の上にカーソルをドラッグすることでも、他のウィンドウの上、右、下、左にウィンドウを置くことができます。 ・ 2 つのウィンドウを一緒にタブ付けするには、大きなアイコンの中心にカーソルをドラッグします。一緒にタブ付けされた2つのウィンドウには影が付けられます。マウスのドラッグを止めます。2つのウィンドウが一緒にタブ付けされます。 ・ フローティングウィンドウを最後のドッキング位置に戻すには、ウィンドウのタイトルバーをダブルクリックするか、タイトルバーで右クリックして [フローティング] をクリックします。 ・ [コンフィグレーション] > [ウィンドウレイアウト] > [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 位置を変更するには、ボックス内の矢印の1つの上にカーソルを置く必要があります。 ・ [デフォルトレイアウトの復元] コマンドをクリックすると、デフォルトレイアウトが復元されます。別のレイアウトを読み込んでいて、さらに違うレイアウトを読み込む必要があるとします。レイアウトを読み込むには、[コンフィグレーション] > [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。

1 定性分析の基礎の学習

タスク 5. クロマトグラムの抽出

タスク 5. クロマトグラムの抽出

このタスクでは、定性分析ナビゲータプログラムを使用して、元の TIC からクロマトグラムの抽出およびマージ（統合）します。定性分析ワークフロープログラムでは、[サンプルクロマトグラム結果] ウィンドウのツールバーの [クロマトグラムの抽出] ツールを使用すると、追加クロマトグラムを抽出できます。

タスク 5. クロマトグラムの抽出

ステップ	詳細説明	コメント
1 Pest - 200 - Scan.d データファイルの 2 つの質量から、抽出イオンクロマトグラム (EIC) を抽出します。 <ul style="list-style-type: none">m/z 値は 129.0 と 414.2 を使用してください。個別の質量からのピークを 1 つのクロマトグラムにマージ（統合）しないでください。	<p>a [データナビゲータ] ウィンドウで、Pest - 200 - Scan.d 以外のデータファイルのチェックボックスをオフにします。</p> <p>b 下記または右記のいずれかの方法で、[クロマトグラムの抽出] ダイアログボックスを表示します。</p> <ul style="list-style-type: none">[クロマトグラム] > [クロマトグラムの抽出] をクリックします。 <p>c [開いているデータファイルのリスト] で、Pest - 200 - Scan.d をクリックします。</p> <p>d [タイプ] リストボックスで、[EIC] を選択します。</p> <p>e [m/z 値] ボックスで、129.0, 414.2 と入力します。</p> <p>f 必要に応じて、[複数の質量を1つのクロマトグラムにマージ] チェックボックスをオフにします。</p> <p>g 必要に応じて、[抽出時に積分] チェックボックスをオフにします。</p> <p>h [OK] をクリックします。</p> <p>i [クロマトグラム結果] ツールバーで [リストページの最大数] を 4 以上に設定します。</p>	<ul style="list-style-type: none">以下の方法でもクロマトグラムを抽出できます。<ul style="list-style-type: none">クロマトグラム内を右クリックし、[クロマトグラムの抽出] をクリックします。[データナビゲータ] から、Pest - 200 - Scan.d の [TIC スキャン] をハイライトした後、[TIC スキャン] を右クリックし、[クロマトグラムの抽出] をクリックします。MS レベルとしては [すべて] または [MS] が使用できます。抽出後、抽出したクロマトグラムを自動的に積分するように選択することもできます。マススペクトルからクロマトグラムを抽出することもできます。使用できるクロマトグラムは 3 つだけなので、[クロマトグラム結果] ウィンドウには、3 つのクロマトグラムだけが表示されます。

タスク 5. クロマトグラムの抽出 (続き)

ステップ

詳細説明

コメント

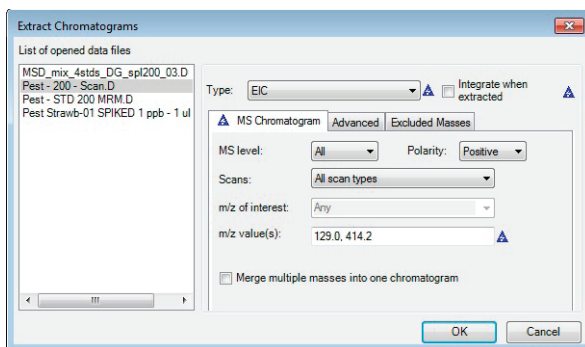


図5 [クロマトグラムの抽出] ダイアログボックス

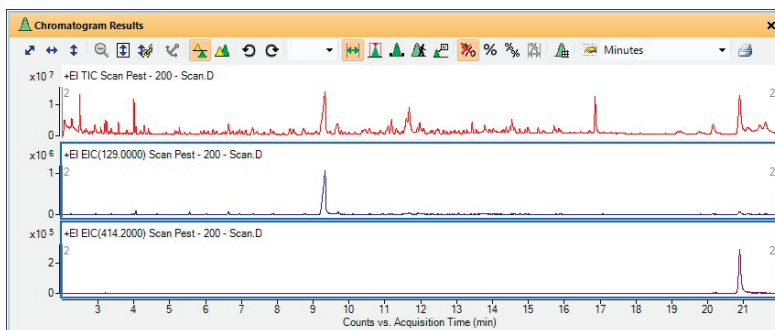


図6 元のTICとマージされた抽出イオンクロマトグラム (EIC) の比較

- 2 **Pest - 200 - Scan.d** データファイルの2つの質量から、抽出イオンクロマトグラム (EIC) を抽出します。
- ・ m/z 値は 129.0 と 414.2 を使用してください。
 - ・ 個別の質量からのピークを1つのクロマトグラムにマージ (統合) します。
- a [クロマトグラムの抽出] ダイアログボックスを開きます。[クロマトグラム] > [クロマトグラムの抽出] をクリックします。
- b [開いているデータファイルのリスト] で、**Pest - 200 - Scan.d** をクリックします。
- c [複数の質量を1つのクロマトグラムにマージ] チェックボックスをオンにして、EICをマージします (複数のEICを統合してひとつのクロマトグラムとして表示します)。
- d [OK] をクリックします。
- ・ 4つのクロマトグラムは、自動的に [クロマトグラム結果] ウィンドウに表示されます。
 - ・ 4番目のクロマトグラムのタイトルは、「+EI EIC(129.0000, 414.2000) Scan Pest - 200 - Scan.D」です。両方のイオンがこのクロマトグラムにマージされます。

1 定性分析の基礎の学習

タスク 5. クロマトグラムの抽出

タスク 5. クロマトグラムの抽出 (続き)

ステップ

詳細説明

コメント

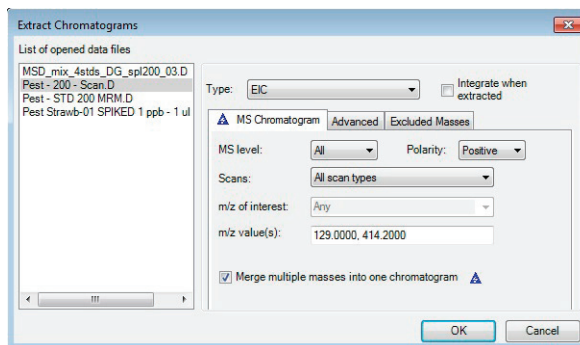


図7 「複数の質量を1つのクロマトグラムにマージ」がオンになっている「クロマトグラムの抽出」ダイアログボックス

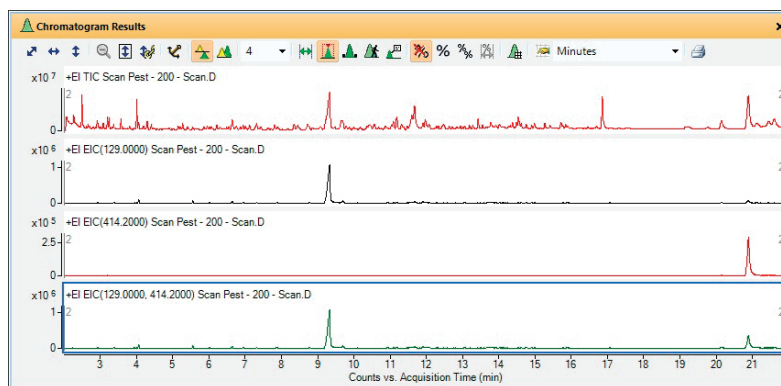


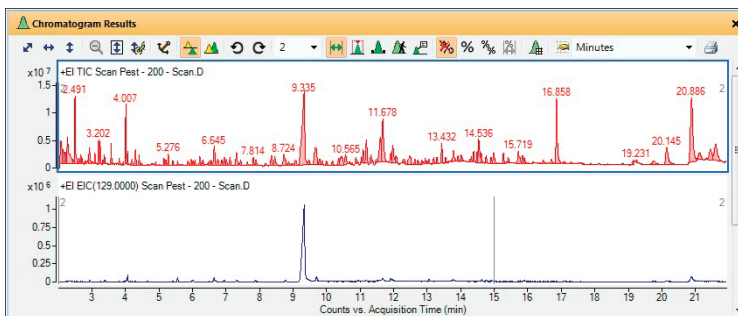
図8 元の TIC および2つの抽出されたイオンクロマトグラムと、1つのマージされた抽出イオンクロマトグラム (EIC) の比較

タスク 6. GC/MS クロマトグラムの積分

このタスクでは、定性分析ナビゲータプログラムを使用して、MS/MSデータを使用してクロマトグラムの積分する方法、積分パラメータを変更して結果を変更する方法、そして積分したピークの S/N 比を計算するさまざまな方法を学習します。

タスク 6. クロマトグラムの積分 (GC/MS)

ステップ	詳細説明	コメント
1	<p>右記のいずれかの方法で Pest - 200 - Scan.d データファイルの TIC スキャンクロマトグラムを積分します。</p> <p>a [データナビゲータ] ウィンドウで [Pest - 200 - Scan.D] データファイルをオンにします。</p> <p>b TIC スキャンクロマトグラムをハイライトし、次のコマンドのいずれかを使用します。</p> <ul style="list-style-type: none"> メニューバーから [クロマトグラム] > [クロマトグラムの積分] をクリックします。 [クロマトグラム] ウィンドウ内を右クリックし [クロマトグラムの積分] をクリックします。 [データナビゲータ] ウィンドウで、[Pest - 200 - Scan.D] > [クロマトグラム] > [TIC スキャン] を選択し、[TIC スキャン] を右クリックして [クロマトグラムの積分] をクリックします。 	<ul style="list-style-type: none"> クロマトグラムのすべてのピークが積分されたことを確認してください。 MS データ、MS/MS データ、GC データに使用する積分を [メソッドエディタ] ウィンドウで選択します。 このクロマトグラムは MS クロマトグラムなので、メソッドエディタの [積分 (MS)] セクションに設定されている値がこのクロマトグラムの積分に使用されます。
2	同時に 2 つのクロマトグラムしか表示しないようにします。	[クロマトグラム結果] ツールバーの [リストペインの最大数] ボックスで 2 を選択します。



多数の小さいピークが積分されます。

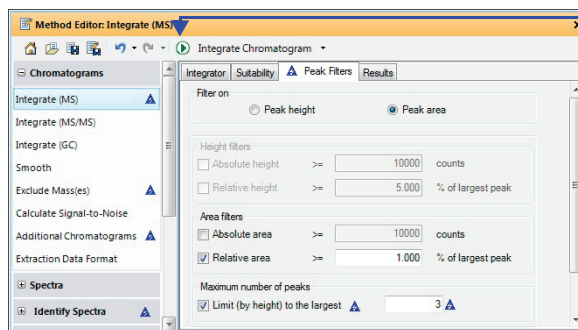
図9 多数の小さいピークも積分されたTICスキャンクロマトグラム

1 定性分析の基礎の学習

タスク 6. GC/MS クロマトグラムの積分


タスク 6. クロマトグラムの積分 (GC/MS) (続き)

ステップ	詳細説明	コメント	
3	<p>スレッシュホールドを変更し、積分するピークを減らします。</p> <ul style="list-style-type: none">スレッシュホールドを変更し、3つの最大ピークのみ積分されるようにします。	<p>a [表示] > [メソッドエディタ] をクリックします。</p> <p>b [メソッドエディタ] ウィンドウで、[クロマトグラム] > [積分(MS)] をクリックします。</p> <p>c [積分] タブをクリックします。</p> <p>d パラメータを確認します。</p> <p>e [ピークフィルタ] タブをクリックします。</p> <p>f [ピークの最大数] で、[ピーク数を高さベースで制限する] をオンにして、3を入力します。</p>	<ul style="list-style-type: none">現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。



実行ボタンには、[クロマトグラムの積分]ラベルが付けられています。[メソッドエディタ]に表示されているタブや、選択した処理によって、ラベルは異なります。

図10 [ピーク数を高さベースで制限する] がオンの状態の [ピークフィルタ] タブ

4	<p>クロマトグラムを再積分します。</p>	<p>g 新しい設定を使用して積分するには、 をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none">これで、ピークの高さが最も高い3つのピークのみが積分されます。
---	------------------------	---	---

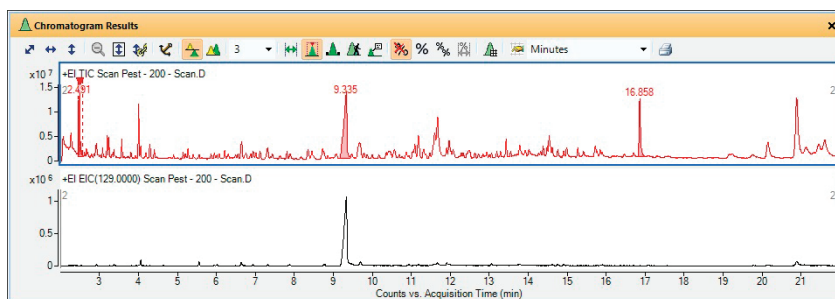



図11 ピーク数を制限して積分したTICスキャンクロマトグラム

タスク 6. クロマトグラムの積分 (GC/MS) (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
5	<p>Pest - STD 200 MRM.D データファイルの TIC MRM クロマトグラムを積分します。</p> <p>a [データナビゲータ] ウィンドウで、Pest - STD 200 MRM.d データファイルをマークします。</p> <p>b [データナビゲータ] ウィンドウで、Pest - STD 200 MRM.d データファイルの TIC MRM を選択します。</p> <p>c クロマトグラムを積分するには、次のコマンドのいずれかを使用します。</p> <ul style="list-style-type: none"> メニューバーから [クロマトグラム] > [クロマトグラムの積分] をクリックします。 [クロマトグラム] ウィンドウ内を右クリックし [クロマトグラムの積分] をクリックします。 [データナビゲータ] ウィンドウで、ハイライトされたクロマトグラムを右クリックし、[クロマトグラムの積分] をクリックします。 <p>d [クロマトグラム結果] ツールバーの [ズーム中にY軸をオートスケール] アイコン  をクリックします。</p> <p>e 5.8分から8.5分に拡大します。</p> <p>f [リストペインの最大数] を2に設定します。</p>	<ul style="list-style-type: none"> クロマトグラムのすべてのピークが積分されたことを確認してください。 これらのクロマトグラムは MS/MS クロマトグラムなので、メソッドエディタの [積分 (MS/MS)] セクションに設定されている値がこのクロマトグラムの積分に使用されます。MS クロマトグラムの積分にインテグレータを1つ選択し、MS/MS クロマトグラムの積分には別のインテグレータを選択することができます。

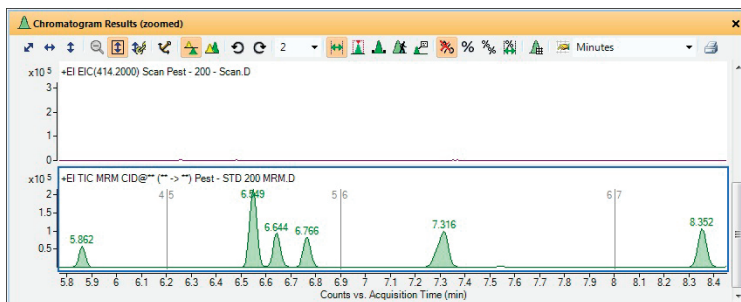


図12 積分されたMRMクロマトグラム

1 定性分析の基礎の学習

タスク 6. GC/MS クロマトグラムの積分

タスク 6. クロマトグラムの積分 (GC/MS) (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
6	<p>[MS/MS (GC)] インテグレータを選択します。絶対高さが 60,000 以上のピークのみを受け入れるようにフィルタを変更します。</p> <p>a [メソッドエディタ] ウィンドウで、[クロマトグラム] > [積分 (MS/MS)] を選択します。</p> <p>b [ピークフィルタ] タブをクリックします。</p> <p>c [フィルタをオン] で、[ピーク高さ] をクリックします。</p> <p>d [高さフィルタ] で、[絶対高さ] チェックボックスをオンにします。</p> <p>e [絶対高さ] に 60000 を入力します。</p>	<ul style="list-style-type: none">現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。

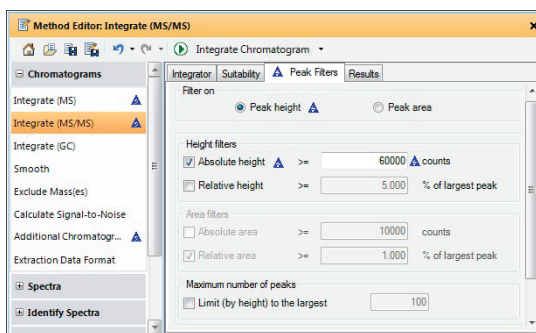

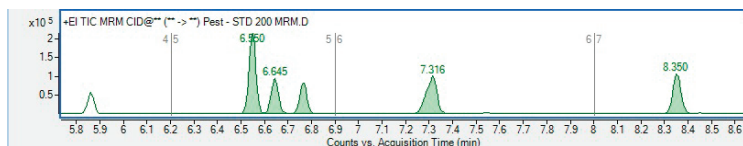


図13 [絶対高さ] をオンにした [ピークフィルタ] タブ




7	<p>クロマトグラムを再積分します。</p> <p>f [メソッドエディタ] ツールバーの  ボタンをクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none">これで、指定した最大ピークのみが積分されます。
---	--	---



5.8 分の小さいピークが積分結果に含まれなくなります。これは、このピークの絶対高さが 60000 カウントよりも小さいためです。

図14 大きいスレッショルド設定で積分された TIC のクロマトグラム


タスク 6. クロマトグラムの積分 (GC/MS) (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
8 現在のメソッドに保存されている設定を復元し [メソッドエディタ] を閉じます。	<p>a [メソッドエディタ] の [クロマトグラム] > [積分 (MS/MS)] セクションを選択します。</p> <p>b [メソッドエディタ] の  アイコンをクリックします。</p> <p>c [クロマトグラム] > [積分 (MS)] セクションを選択します。</p> <p>d [メソッドエディタ] の  アイコンをクリックします。</p> <p>e [メソッドエディタ] ウィンドウを閉じます。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 変更をキャンセルし、読み込まれたメソッドから値を復元するには、[メソッドエディタ] ツールバーの [最後に保存したファイルの値に復元] アイコン  をクリックします。
9 オリジナルのクロマトグラムを除き、すべてのクロマトグラムを削除します。オリジナルのクロマトグラムから積分結果を削除します。	<p>a [データナビゲータ] ウィンドウの [クロマトグラム] の下で、オリジナルのクロマトグラムを除きすべてのクロマトグラムをハイライトします。</p> <p>b ハイライトしたクロマトグラムを右クリックし、[削除] をクリックします。</p> <p>c すべての TIC クロマトグラムを選択します。</p> <p>d [クロマトグラム] > [結果の消去] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> [結果の消去] コマンドを使用する場合、クロマトグラムは削除されません。クロマトグラムに関連する結果が削除されます。この場合は、積分値が消去されます。 [データナビゲータ] ウィンドウで複数のクロマトグラムをハイライトするには <Ctrl> キーを押します。

タスク 7. システム適合性の計算

このタスクでは、クロマトグラムを積分する方法、積分パラメータを変更して結果を変更する方法、各ピークのシグナル/ノイズ比を表示するさまざまな方法を学習します。システム適合性の計算結果を有効にする方法も学習します。

タスク 7. クロマトグラムの積分 (MS)

ステップ	詳細説明	コメント
1 右記のいずれかのオプションを用いて、 MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d および Pest - 200 - Scan.d クロマトグラムを積分します。	<p>a [データナビゲータ] ウィンドウで MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d データファイルの隣のチェックボックスをオンにします。</p> <p>b [データナビゲータ] ウィンドウで [Pest - 200 - Scan.D] データファイルの隣のチェックボックスをオンにします。</p> <p>c 両方の TIC をハイライトします。</p> <p>d [クロマトグラム結果] ウィンドウで縮小します。[クロマトグラム結果] で  アイコンをクリックします。</p> <p>e これら 2 つのファイルの TIC スキャン を、次のいずれかの方法で積分します。</p> <ul style="list-style-type: none">メインメニューから [クロマトグラム] > [クロマトグラムの積分] をクリックします。クロマトグラムをハイライトします。次に、クロマトグラムを右クリックし [クロマトグラムの積分] をクリックします。[データナビゲータ] で、両方のデータファイルの TIC スキャン をハイライトします。次に、いずれかのクロマトグラムを右クリックし、[クロマトグラムの積分] をクリックします。	<ul style="list-style-type: none">[クロマトグラム] > [積分 (MS)] > [積分] タブで、積分を変更できます。デフォルトパラメータを用いた積分では非常に小さなピークも検出されることに注意してください。

タスク 7. クロマトグラムの積分 (MS) (続き)

ステップ

詳細説明

コメント

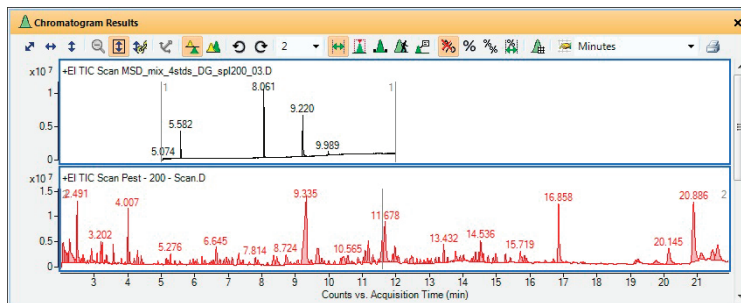
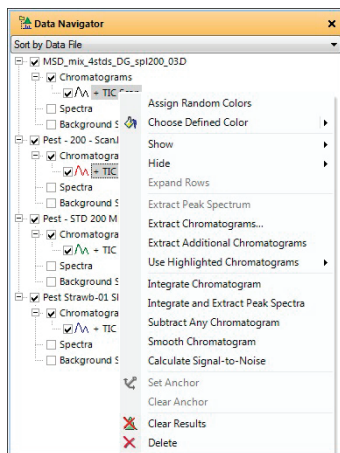


図15 [データナビゲータ] のショートカットメニューの1つと、積分されたクロマトグラム

2 MSクロマトグラムのシステム適合性の計算結果を有効にします。

- a [メソッドエディタ] で [クロマトグラム] > [積分 (MS)] を選択し、[積分] タブを表示します。
- b [適合性] タブをクリックします。
- c [システム適合性の計算結果を有効にする] をオンにします。
- d [米国薬局方 (USP)] を選択します。
- e [カラム空隙時間] ボックスに、1を入力します。
- f [カラム長さ] ボックスに、3000を入力します。

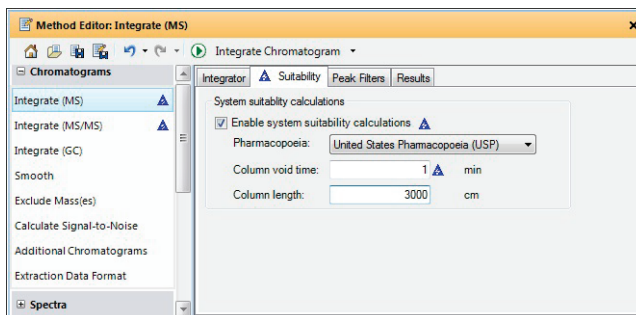
現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。
 選択している薬局方によって、アルゴリズムで計算される [積分ピークリスト] 列が異なります。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。

1 定性分析の基礎の学習

タスク 7. システム適合性の計算


タスク 7. クロマトグラムの積分 (MS) (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------



データファイルの実際のカラム空隙時間とカラム長さは、設定した値


図16 [クロマトグラム] > [積分 (MS)] > [適合性] タブ

- 3 クロマトグラムを再積分します。
- ・ [メソッドエディタ] ツールバーの [クロマトグラムの積分] アイコン  をクリックし、新しい設定を用いて積分します。
- 4 システム適合性の計算結果を表示します。
- ・ [積分ピークリスト] ウィンドウを開きます。
 - ・ システム適合性の値を確認します。
- a [表示] > [積分ピークリスト] をクリックします。
- b [ピーク] ウィンドウのヘッダーを右クリックし、[Floating] をクリックします。
- c 表示しない列の列ヘッダーを右クリックし [列の削除] をクリックします。
- d 任意の列ヘッダーを右クリックし [列の追加 / 削除] をクリックして表示する列を変更します。
- ・ システム適合性の計算結果が [積分ピークリスト] テーブルに含まれるようになります。
 - ・ 適合性の値は [k'], [テーリングファクタ], [プレート], [理論段数/m], [対称度] などがあります。
 - ・ システム適合性の計算結果は、MS、MS/MS、GC クロマトグラムでも有効にすることができます。

Peak	RT	Area	Height	Width	FWHM	Symmetry	k'	Plates	Plates/M	Resolution	Tailing factor
1	5.074	1039700.77	126775.42	0.31	0.244	0.07	4.1	1438	47.9		7.5
2	5.582	3852463.81	4145026.61	0.064	0.014	1	4.6	965321	32177.4	1.8	1
3	8.061	9689994.54	10233941.28	0.077	0.014	0.8	7.1	1910057	63668.6	107.7	1.1
4	9.22	8044493.21	6233260.26	0.101	0.017	0.5	8.2	1686157	56205.2	44.8	2
5	9.989	536162.3	521023.47	0.063	0.014	0.8	9	3177938	105931.3	30.3	1.4

図17 システム適合性の値を表示した積分ピークテーブル

タスク 7. クロマトグラムの積分 (MS) (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
5 デフォルトメソッドの設定を復元し、[メソッドエディタ] と [積分ピークリスト] のウィンドウを閉じます。	<p>a 変更をキャンセルし、デフォルトメソッドから値を復元するには [メソッドエディタ] ツールバーの 【最後に保存したファイルの値に復元】 アイコン  をクリックします。</p> <p>b 【メソッドエディタ】 ウィンドウを閉じます。</p> <p>c 【積分ピークリスト】 ウィンドウのタイトルを右クリックし、【Floating】 をクリックします。</p> <p>d 【表示】 > 【積分ピークリスト】 をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ショートカットメニューから 【Floating】 コマンドをもう一度クリックすると、【積分ピークリスト】 ウィンドウが元の位置にドッキングします。




1 定性分析の基礎の学習

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

このタスクでは、クロマトグラムで指定したスペクトルを抽出します。定性分析ナビゲータプログラムでは、特定のデータポイントからスペクトルを抽出したり、複数のデータポイントまたは範囲の平均から平均スペクトルを抽出したりすることができます。

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

ステップ	詳細説明	コメント
1	<p>[クロマトグラムを進める] を使用して Pest - STD 200 MRM.d の最後の 2、3 個のピークのプリカーサイオンとプロダクトイオンを表示します。</p> <ul style="list-style-type: none">13~16分の範囲を拡大します。[クロマトグラムを進める] アイコンを使用します。約 13 分に始まるスペクトルをレビューし、矢印を右に移動させます。	<ul style="list-style-type: none">[クロマトグラムを進める] アイコン () をクリックすると、[スペクトルプレビュー] ウィンドウが開きます。[クロマトグラムを進める] ツールは、MS/MS データでプリカーサイオンとプロダクトイオンを識別する際には特に便利です。
a	[データナビゲータ] ウィンドウで Pest - STD 200 - MRM.D をオンにします。	
b	[メソッドエディタ] ウィンドウを閉じます。	
c	[データナビゲータ] ウィンドウで TIC MRM クロマトグラムをクリックします。	
d	[クロマトグラム結果] ツールバーの [ズーム中にY軸をオートスケール] アイコン () をクリックします。	
e	[リストペインの最大数] で 1 を選択します。	
f	いくつかのピークを拡大するには、13 分のピークの上で右クリックし、16 分にドラッグした後、離します。	
g	[クロマトグラム結果] ツールバーの [クロマトグラムを進める] アイコン () をクリックします。	
h	[クロマトグラムを進める] カーソルを X 軸上の約 13 分に移動させ、クリックします。	

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

ステップ	詳細説明	コメント
i	スペクトル間を移動するには、クロマトグラムをクリックしてキーボードの左右の矢印キーを押します。これらの矢印キーの1つを押し続けて、リテンションタイム範囲をすばやくスキャンすることもできます。	<ul style="list-style-type: none"> ・ [クロマトグラム結果] ウィンドウでクリックする各ポイントのスペクトルは、自動的に開く [スペクトルプレビュー] ウィンドウに自動的に表示されます。 ・ 複数のスペクトルが [スペクトルプレビュー] ウィンドウに表示されることもあります。たとえば、13.431分のピーク近辺でクリックする各ポイントに対して [スペクトルプレビュー] ウィンドウには2つのスペクトルが表示されます。

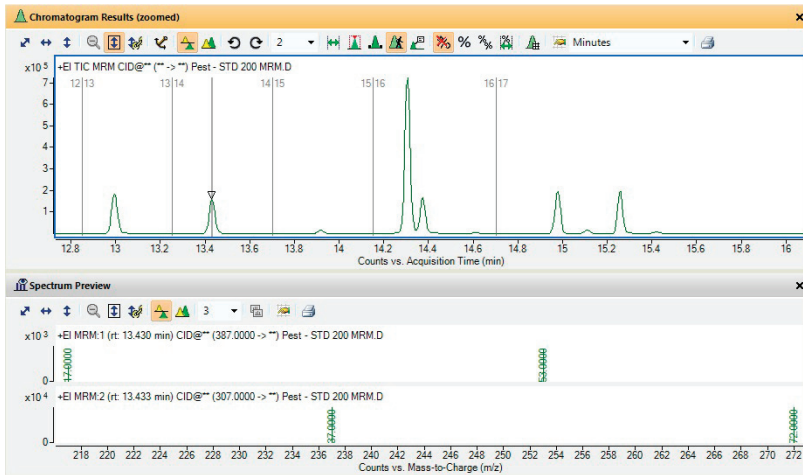



図18 [クロマトグラムを進める] を使用して13.43分のピークの2つのMRMスペクトルを表示する

1 定性分析の基礎の学習

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

ステップ	詳細説明	コメント
2	<p>Pest - STD 200 MRM.d データファイルの 5.2 分と 14.3 分のピークで、特定のデータポイントのスペクトルを抽出します。</p> <ul style="list-style-type: none">「コメント」で説明しているオプションのいずれかを用いて、5.2 分または 5.2 分付近のピーク、および谷のいずれかからスペクトルを抽出します。14.3 分または 14.3 分付近のピークからスペクトルを抽出します（谷からはまだ抽出しません）。	<ul style="list-style-type: none">ズームする場合 [ズーム中に Y 軸をオートスケール] アイコン  がオレンジ色の背景になっていることを確認します。以下のいずれかの方法でスペクトルを抽出できます。<ul style="list-style-type: none">クロマトグラムのデータポイントをダブルクリックします。クロマトグラムのデータポイントをクリックした後、クロマトグラム内を右クリックします。[MS スペクトルの抽出] をクリックします。[スペクトルの抽出] ダイアログボックスが表示されます。Pest - STD 200 MRM.d ファイルが選択されていることを確認し、[スペクトルの抽出] ダイアログボックスの [抽出] をクリックします。スペクトルを初めて抽出した時に、[MS スペクトル結果] ウィンドウが表示され、スペクトルが表示されます。[スペクトル] の下にそのスペクトルのタイプとリテンションタイムが表示されます。抽出したスペクトルは、すべて両方の場所に表示されます。14.3 分付近のピークに対して MS スペクトルを抽出すると、2 つのスペクトルが抽出されます。これは、このピークで 2 つのトランジションが発生しているからです。

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

ステップ	詳細説明	コメント
<ul style="list-style-type: none"> 表示を変更し、4つ以上のスペクトルを表示します。 	<ul style="list-style-type: none"> 必要に応じて [MSスペクトル結果] ツールバーの [リストペインの最大数] アイコンで4を選択します。 	<ul style="list-style-type: none"> スペクトルを初めて抽出した時に、[MSスペクトル結果] ウィンドウが表示され、スペクトルが表示されず。[スペクトル] の下にそのスペクトルのタイプとリテンションタイムが表示されます。抽出したスペクトルは、すべて両方の場所に表示されます。 14.3 分付近のピークに対して MS スペクトルを抽出すると、2つのスペクトルが抽出されます。これは、このピークで2つのトランジションが発生しているからです。

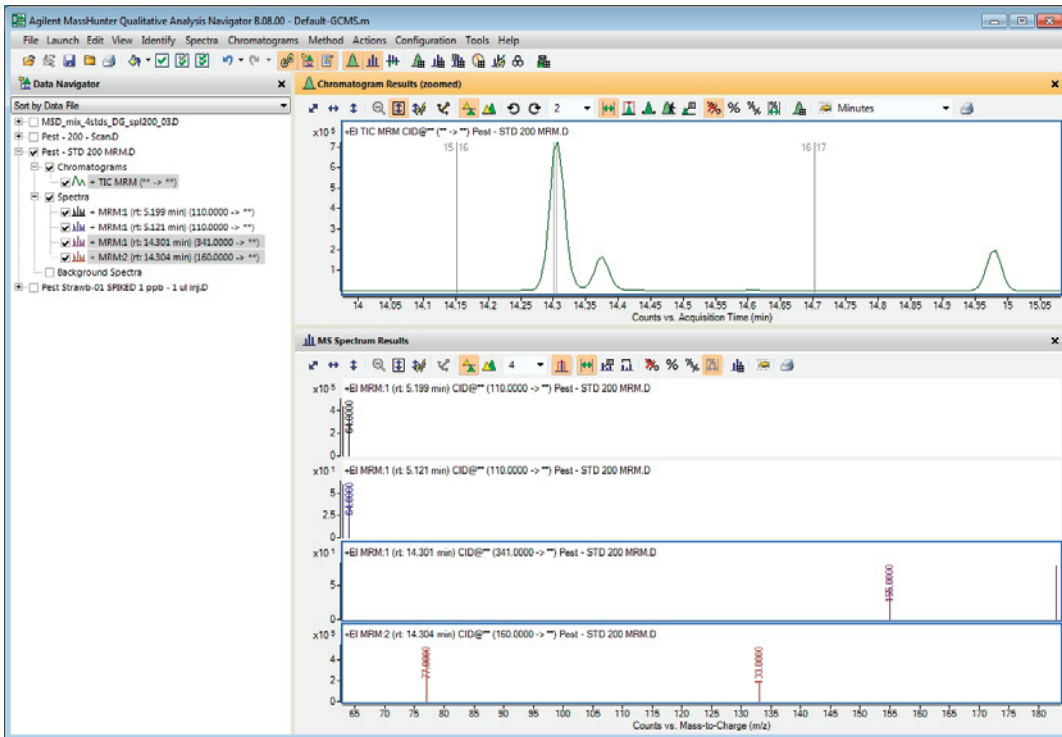


図19 5.2分のピークからの2つのMRMスペクトルと、14.3分のピークからの2つのMRMスペクトルを表示したメインウィンドウ

1 定性分析の基礎の学習

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出



ステップ	詳細説明	コメント	
3	<p>Pest - STD 200 MRM.d データファイルから 14.35 分の谷の MS スペクトルを抽出します。</p> <ul style="list-style-type: none">・ [スペクトルプレビュー] を表示します。・ リテンションタイム 14.3 分の谷からスペクトルを抽出します。・ このスペクトルをユーザースペクトルフォルダにコピーします。・ 表示を変更し、6つのスペクトルを表示します。・ [スペクトルプレビュー] をオフにします。	<p>a [クロマトグラム結果] で [クロマトグラムを進める] アイコン  をクリックします。</p> <p>b 14.3 分近辺の谷からスペクトルを抽出します。</p> <p>c スペクトルプレビューウィンドウで両方のスペクトルを選択します。</p> <p>d [スペクトルプレビュー] ウィンドウでスペクトルを右クリックし [スペクトルにコピー] をクリックします。スペクトルは [データナビゲータ] の [スペクトル] セクションにコピーされ [MS スペクトル結果] ウィンドウに表示されます。</p> <p>e [クロマトグラム] ツールバーの [範囲選択] アイコン  をクリックします。</p> <p>f [スペクトルペイン] リスト隣の下矢印をクリックし、6を選択します。</p>	<ul style="list-style-type: none">・ [クロマトグラムを進める] が選択されている場合、手動で選択したスペクトルは [データナビゲータ] の [スペクトル] セクションではなく、[スペクトルプレビュー] ウィンドウに表示されます。・ [クロマトグラムを進める] がオンの場合、新しいスペクトルを抽出すると、前のスペクトルは上書きされます。・ クロマトグラムのスペクトルを素早くレビューしたり、保存するスペクトルを少なくしたい場合は [クロマトグラムを進める] モードが便利です。



図20 [クロマトグラム結果] ウィンドウと [MSスペクトル結果] ウィンドウ

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

ステップ	詳細説明	コメント
4	<p>Pest - STD 200 MRM.d データファイルで、14.3分のピークの指定範囲のすべてのポイントを平均したスペクトルを抽出します。</p> <ul style="list-style-type: none"> ズームを解除します。 [クロマトグラム] ツールバーの [範囲選択] アイコンを使用します。 範囲をピーク全体に設定します。 説明されているいずれかの方法でスペクトルを抽出します。 <p>a 14.3 分のピークの底の左側をクリックし、同じピークの底の右側にドラッグします。</p> <p>b [MSスペクトル結果] ウィンドウの [リストペインの最大数] で 2 を選択します。</p> <p>c 右記のいずれかの方法で、平均スペクトルを抽出します。</p>	<ul style="list-style-type: none"> クロマトグラム内の選択範囲をダブルクリックすると、平均スペクトルを抽出できます。 あるいは、クロマトグラム内を右クリックし、ショートカットメニューから [MSスペクトルの抽出] をクリックします。 2つの平均MRMスペクトルが表示されます。

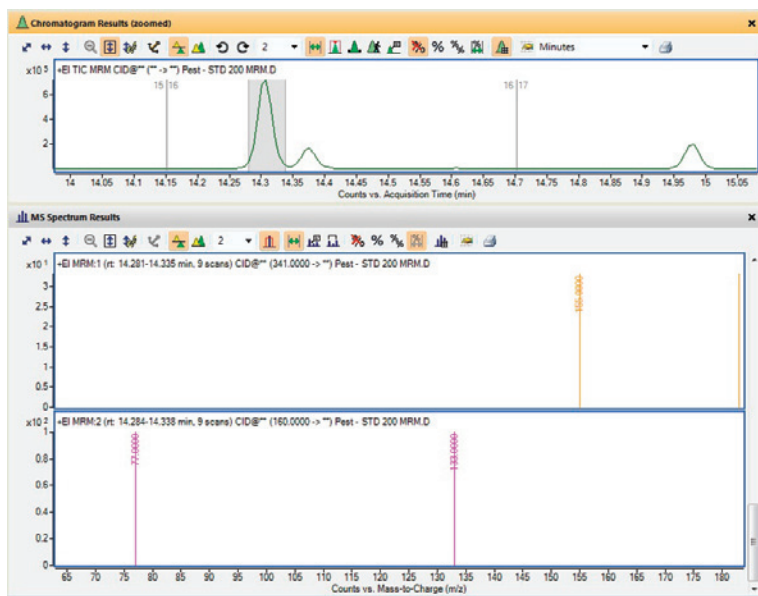



図21 [クロマトグラム結果] と2つの平均スペクトルを表示した [MSスペクトル結果]

1 定性分析の基礎の学習

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

ステップ	詳細説明	コメント	
5	<p>Pest - STD 200 MRM.d データファイルの 5.2 分と 14.3 分のピーク範囲を一緒に平均したスペクトルを抽出します。</p> <ul style="list-style-type: none">ヒント: [範囲選択] アイコンと <Ctrl> キーを用いて、まず 1 つ目のピーク範囲を選択します。右記のいずれかの方法で、スペクトルを抽出します。	<p>a [クロマトグラム結果] ツールバーの【オートスケール (ズーム解除)】アイコン  をクリックします。</p> <p>b <Ctrl> キーを押します。</p> <p>c 5.2 分のピークの左側をクリックして、ピークの右側までドラッグし、マウスを放します。</p> <p>d <Ctrl> キーを離します。</p> <p>e 以下または右記のいずれかの方法で、平均スペクトルを抽出します。</p> <ul style="list-style-type: none">いずれかのピークの選択範囲内をダブルクリックします。	<ul style="list-style-type: none">2 番目のピークはステップ 4 で既に範囲が選択されています。スペクトルを抽出するには、クロマトグラム内を右クリックした後、【MS スペクトルの抽出】をクリックしてスペクトルを抽出する方法もあります。[スペクトルの抽出] ダイアログボックスが表示されます。【抽出】をクリックします。

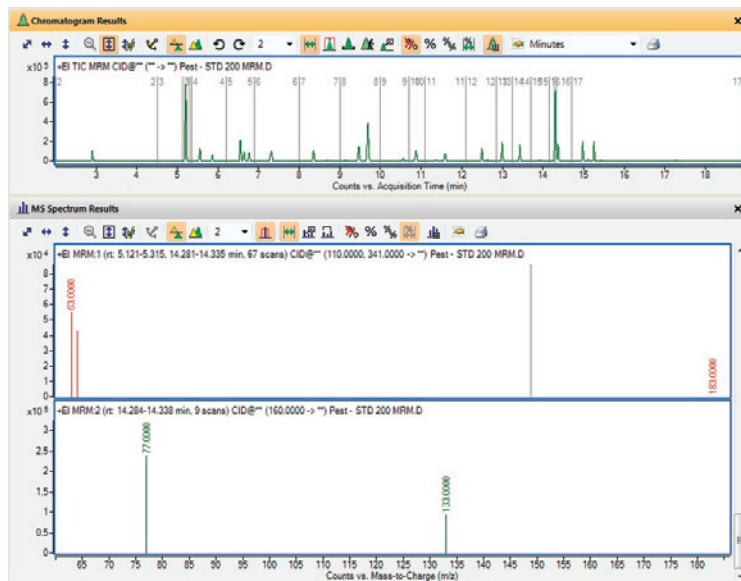



図22 クロマトグラムの2つの異なる範囲からの2つの平均スペクトル

1つ目のスペクトルには、両方の時間範囲にトランジションがあります。2つ目のスペクトルには、1つの時間範囲しかありません。160.00 -> ** のトランジションは 5.2 分のピークには存在しないためです。

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

ステップ	詳細説明	コメント
<p>6 Pest - STD 200 MRM.dからピークスペクトルを抽出する際、バックグラウンドスペクトルを減算します。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ [データナビゲータ] の [ユーザースペクトル] にあるスキャンをすべて削除します。 ・ ピークの開始とピークの終了のスペクトルの平均であるバックグラウンドスペクトルを抽出します。 ・ 積分したピークのピークスペクトルを抽出します。 	<p>a [データナビゲータ] の [スペクトル] 行をクリックします。[スペクトル] 行を右クリックし [削除] をクリックします。</p> <p>b 【はい】 をクリックします。</p> <p>c [メソッドエディタ] で 【スペクトル】 > 【抽出 (MS/MS)】 を選択します。</p> <p>d 【ピークスペクトル抽出 (MS/MS)】 タブをクリックします。</p> <p>e 【ピークスペクトルバックグラウンド MS/MS】 リストから 【ピーク開始点と終了点のスペクトルの平均】 を選択します。</p> <p>f [クロマトグラム結果] ツールバーの 【ピーク選択】 アイコン、 をクリックします。</p> <p>g 【クロマトグラム】 > 【積分】 コマンドをクリックします。</p> <p>h 5.2分のピークを選択します。</p> <p>i 右クリックし、ショートカットメニューから 【ピークスペクトルの抽出】 をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ この処理の最後に、抽出したピークスペクトルすべてに対して、指定したバックグラウンドスペクトルが自動的に減算されることを確認してください。

1 定性分析の基礎の学習

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

ステップ

詳細説明

コメント

- ピークスペクトルを抽出してもポイントがない場合は、抽出データフォーマットの変更が必要な場合があります。[メソッドエディタ] ウィンドウで、[スペクトラム] > [抽出データフォーマット] をクリックします。マスマスペクトルデータフォーマットの場合は、抽出できるどちらかのフォーマットオプションをクリックします。これらの例では、[使用可能な場合はプロファイル、それ以外はセントロイド] をクリックします。

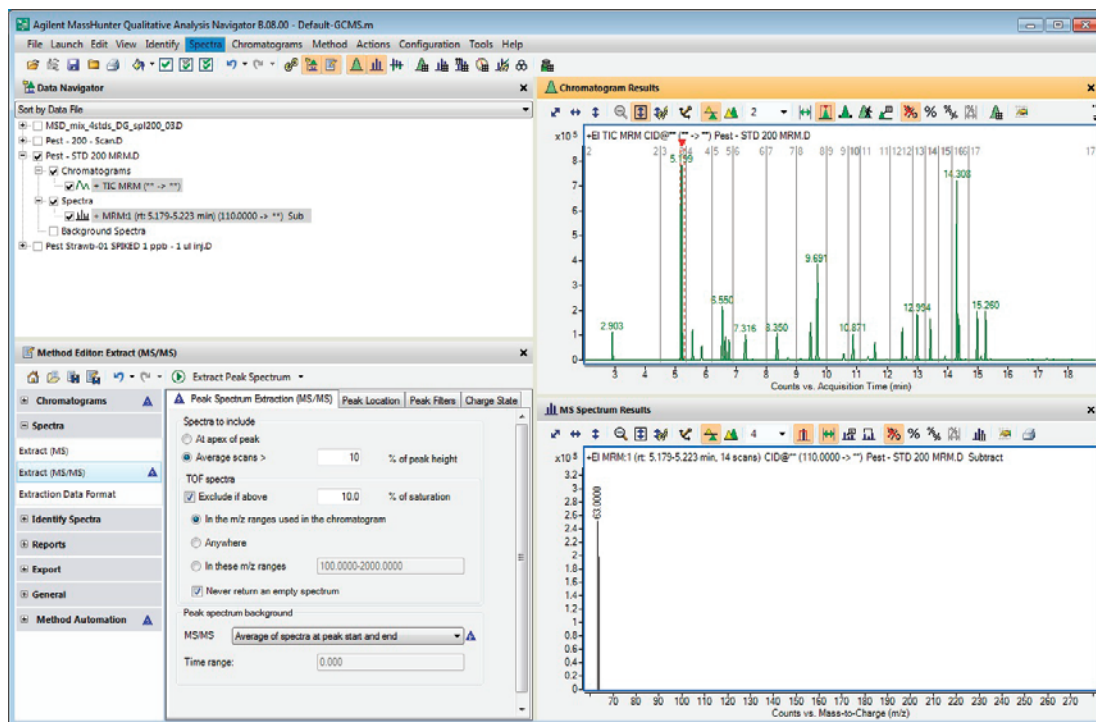


図23 バックグラウンドピークスペクトルを減算したピークスペクトル

タスク 8. クロマトグラムからスペクトルを抽出

ステップ	詳細説明	コメント
7	<p>Pest - STD 200 MRM.d データファイルからのピークスペクトルの積分と抽出を行います。</p> <p>a [データナビゲータ] ウィンドウで TIC MRM クロマトグラムをクリックします。</p> <p>b [クロマトグラム] > [ピークスペクトルの積分と抽出] をクリックします。</p>	<p>前のステップでマニュアル抽出したピークスペクトルは、自動的に削除されます。これは、[クロマトグラム] > [積分 (MS/MS)] > [結果] タブで [前のピークスペクトルを消去] チェックボックスがデフォルトでオンになっているためです。</p>

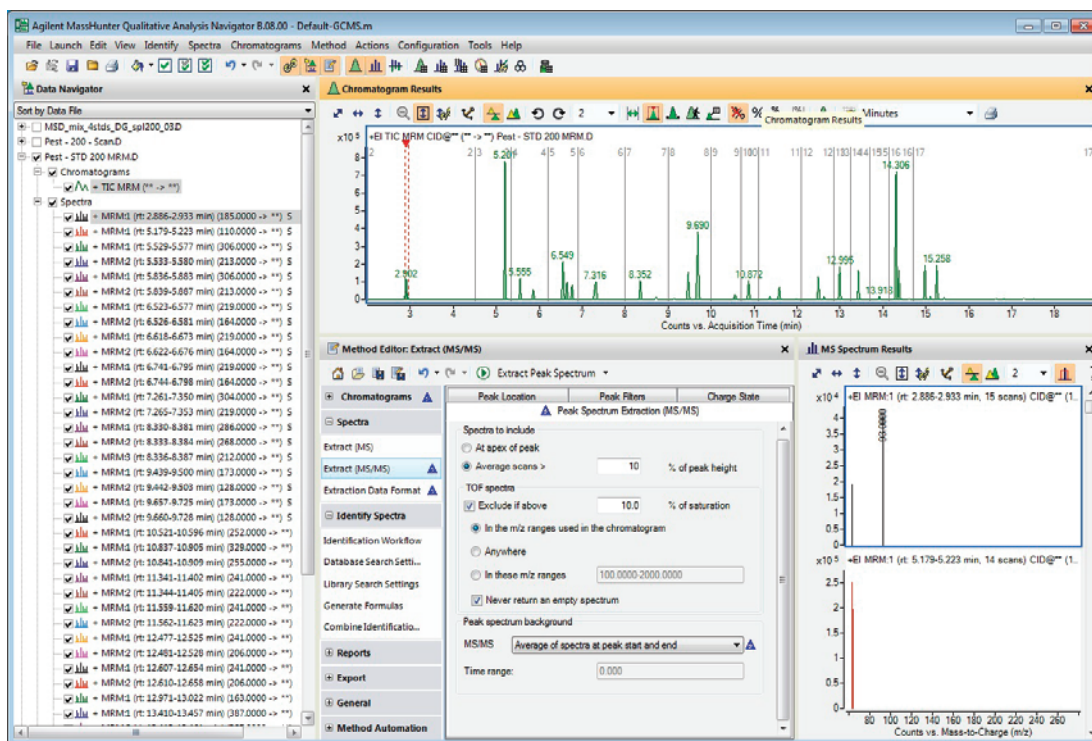


図24 ピークスペクトルの積分と抽出

8	<p>積分結果とピークスペクトルを削除します。</p> <p>a Pest - Std 200 MRM.d データファイルを選択します。</p> <p>b [クロマトグラム] > [結果の消去] > [ピークスペクトルを含める] をクリックします。</p>	<p>ピークスペクトルを削除したくない場合は、代わりに [クロマトグラム] > [結果の消去] > [クロマトグラムのみ] をクリックします。</p>
---	--	---


タスク 9. 注釈の追加

定性分析ナビゲータウィンドウでは、以下のグラフィックウィンドウにイメージ注釈またはテキスト注釈を追加することができます。

- クロマトグラム結果ウィンドウ
- MS スペクトル結果ウィンドウ
- UV スペクトル結果ウィンドウ

定性分析ナビゲータワークフロープログラムでは、ウィンドウに注釈を追加することができます。データファイルの結果を保存すると、注釈も保存されます。

タスク 9. 注釈の追加

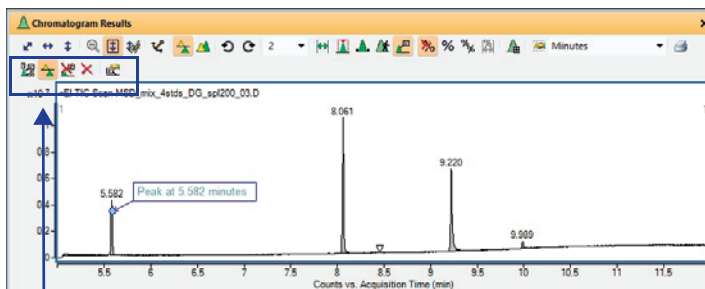
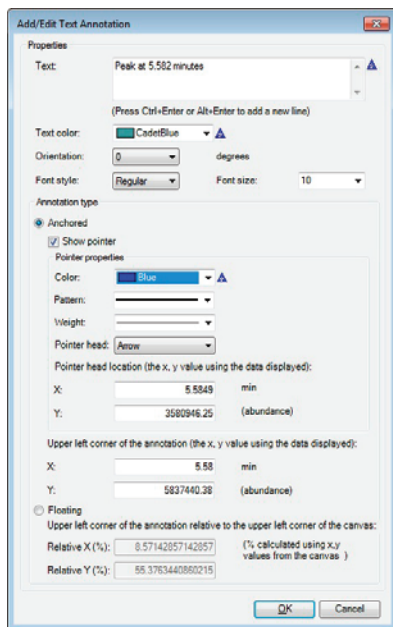
ステップ	詳細説明	コメント
1 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d データファイルを選択します。他のクロマトグラムを非表示にします。	<p>a [データナビゲータ] ウィンドウで、MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D の隣のチェックボックスをオンにします。</p> <p>b [編集] > [表示] > [ハイライトされたもののみ] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 他のデータファイルのクロマトグラムは自動的に非表示になります。
2 テキスト注釈を追加するクロマトグラム内の位置を選択します。	<p>a [クロマトグラム結果] ウィンドウのツールバーで [注釈] ツール () をクリックします。</p> <p>b 注釈を追加するクロマトグラムペインの位置にカーソルを移動します。</p> <p>c 右クリックして [テキスト注釈の追加] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> • カーソルが十字線に変更されます。このカーソルを使用して、注釈を追加する位置を選択します。 • [クロマトグラム結果] ウィンドウでは [注釈] ツールバーが使用できません。 • MS スペクトル結果ウィンドウおよび UV スペクトル結果ウィンドウで、注釈を追加できます。
3 [テキスト注釈の追加/編集] ダイアログボックスにテキスト注釈に関する情報を入力します。	<p>a 注釈の [テキスト] を入力します。</p> <p>b [テキストの色] を選択します。</p> <p>c [向き] を選択します。</p> <p>d [フォントスタイル] と [フォントサイズ] を選択します。</p> <p>e [固定] または [フローティング] をクリックします。[固定] を選択する場合は、テキスト注釈のポインタのオプションを選択します。[フローティング] を選択する場合は、相対位置を設定します。位置の移動はグラフィックウィンドウを使用するとより簡単に変更できます。</p> <p>f [OK] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> • クロマトグラムおよびスペクトルには、複数の注釈を追加できます。 • [注釈] ツールバーのアイコンを使用して、注釈の削除や編集、あるいはすべての注釈を選択することができます。

タスク 9. 注釈の追加 (続き)

ステップ

詳細説明

コメント



[注釈] ツールバーは、[注釈] ツールが選択されている場合にのみ使用できます。

注釈をクリックしてドラッグすると、注釈を新しい位置に移動できます。

図25 [テキスト注釈の追加/編集] ダイアログと [クロマトグラム結果] ウィンドウ

- 4 イメージ注釈を追加するクロマトグラム内の位置を選択します。
 - a 注釈を追加するクロマトグラムペインの位置にカーソルを移動します。
 - b 右クリックして [イメージ注釈の追加] をクリックします。
- ・ JPG または MOL イメージファイルを追加できます。

1 定性分析の基礎の学習

タスク 9. 注釈の追加

タスク 9. 注釈の追加 (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
5	<p>[テキスト注釈の追加/編集] ダイアログボックスにテキスト注釈に関する情報を入力します。</p> <p>a [イメージ注釈] を選択します。</p> <p>b [幅の倍率] に 50 を入力します。</p> <p>c [縦横比を固定する] チェックボックスをオンにします。</p> <p>d [フローティング] をクリックします。相対位置を変更できます。位置の移動はグラフィックウィンドウを使用するとより簡単に変更できます。</p> <p>e [OK] をクリックします。</p> <p>f イメージをクロマトグラムの右上隅に移動します。</p>	<ul style="list-style-type: none"> Agilent_Logo.tif ファイルは、¥¥ MassHunter¥Report Templates¥Qual¥ B.08.00¥en-US¥Letter フォルダにあります。ファイルは JPG ファイルに変換する必要があります。 クロマトグラムおよびスペクトルには、複数の注釈を追加できます。

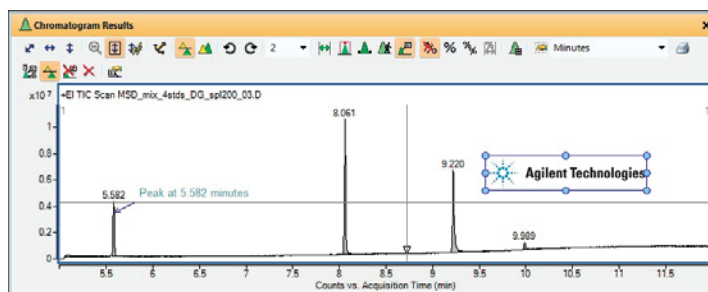
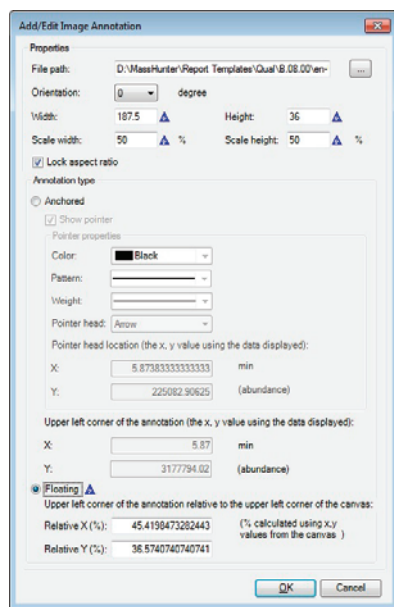
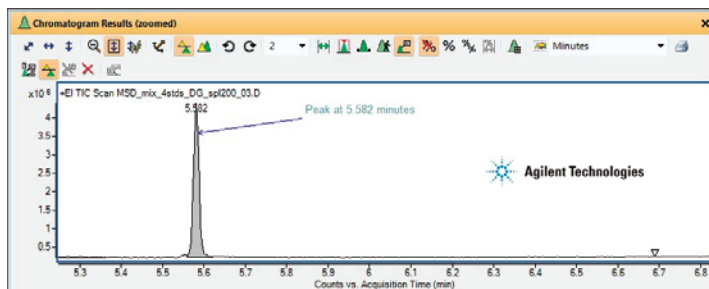


図26 [イメージ注釈の追加/編集] ダイアログボックスと [クロマトグラム結果] ウィンドウ

タスク 9. 注釈の追加 (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
6	1つ目のピークを拡大します。	5.5分にある1つ目のピークの前後の領域を拡大します。



注釈を固定すると、表示位置が固定されたままになります。別のピークを拡大すると、固定された注釈は見えなくなることがあります。注釈がフローティングの場合、注釈は常にウィンドウの左上隅に対して同じ位置に表示されます。

図27 [クロマトグラム結果] ウィンドウの固定された注釈とフローティングしている注釈




- 7 [クロマトグラム結果] ウィンドウで [範囲選択] ツールに切り替えます。最初に注釈を削除します。
- a アイコンをクリックし、すべての注釈を削除します。
 - b [クロマトグラム結果] ツールバーの (範囲選択) アイコンをクリックします。
- 注釈をデータファイルに結果と一緒に保存したい場合は、75 ページの「タスク 17. 結果の保存」を参照してください。
 - [クロマトグラム結果] ツールバーでは5つのツールを切り替えることができます。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。5つのツールは以下の通りです。
 - 範囲選択
 - ピーク選択
 - マニュアル積分
 - クロマトグラムを進める
 - 注釈マウス

タスク 10. 質量差の追加

質量差は、スペクトルの 2 点間の差異を示します。[MSスペクトル結果] ウィンドウに質量差を追加することができます。

データファイルの結果を保存すると、質量差も保存されます。

タスク 10. 質量差の追加

ステップ	詳細説明	コメント
1 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d から積分してピークスペクトルを抽出します。	<p>a [データナビゲータ] ウィンドウで、MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D の隣のチェックボックスをオンにします。</p> <p>b [編集] > [表示] > [ハイライトされたもののみ] をクリックします。</p> <p>c [クロマトグラム] > [ピークスペクトルの積分と抽出] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> メインツールバーの [ハイライトされた項目のみを表示] () ボタンをクリックすることもできます。
2 前のタスクで作成されたピークスペクトルに質量差を追加します。	<p>a [MS スペクトル結果] ウィンドウで、ツールバーの [質量差] ツール () をクリックします。</p> <p>b (オプション) [質量差] ツールバーで質量差のタイプとして [ポイント-ポイントプロファイル] を選択します。</p> <p>c m/z 79 ~ 99 を拡大します。</p> <p>d 質量差を追加するスペクトルペインの位置にカーソルを移動します。</p> <p>e スペクトルの質量差の終了点までカーソルをドラッグします。カーソルをドラッグすると、質量差の値が変化します。マウスボタンを離すと、質量差が追加されます。</p>	<ul style="list-style-type: none"> カーソルが矢印に変更されます。このカーソルを使用して、質量差の開始点と終了点を選択します。 スペクトルがセントロイドである場合は、質量差のタイプは選択できません。[ポイント-ポイントプロファイル] はセントロイドデータに対しては効果がないからです。 「三角」カーソルは、選択したポイントに設定されます。または [ピーク-ピークプロファイル] を使用している場合は、ピークの頂点に設定されます。
3 質量差の色を別の色に変更します。	<p>a 前のステップで作成した質量差をクリックします。</p> <p>b [MS スペクトル結果] の質量差ツールバーで [質量差のプロパティ] ボタン () をクリックします。</p> <p>c (オプション) [開始 X] 値と [開始 Y] 値を入力します。</p> <p>d [テキストの色] を選択します。</p> <p>e [フォントスタイル] と [フォントサイズ] を選択します。</p> <p>f [OK] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> スペクトルには複数の質量差を追加することができます。 [質量差] ツールバーのアイコンを使用して、質量差の削除や編集、あるいはすべての質量差を選択することができます。

タスク 10. 質量差の追加 (続き)

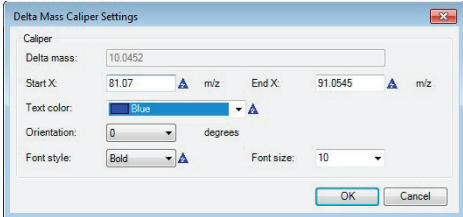
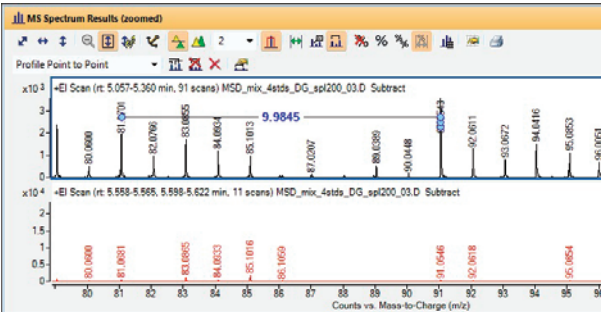
ステップ	詳細説明	コメント
		

図28 [質量差の設定] ダイアログボックスと [MS スペクトル結果] ウィンドウ

- 4 積分結果とスペクトルを削除し
 a [クロマトグラム] > [結果の消去] > [ピークスペクトルを含める] をクリックします。
 b [MS スペクトル結果] ウィンドウの [範囲選択] ツールをクリックします。
- ・ 質量差をデータファイルに結果と一緒に保存したい場合は、75 ページの「タスク 17. 結果の保存」を参照してください。

1 定性分析の基礎の学習

タスク 10. 質量差の追加



実習2 検出と同定

タスク 11. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出	50
タスク 12. ライブラリ検索/データベース検索アルゴリズムによる化合物の同定	54
タスク 13. MRM を使用した化合物の検出 (MRM のみ)	57
タスク 14. 積分による化合物の検出	61
タスク 15. フラグメントによる検出	64
タスク 16. ライブラリでマススペクトルを検索	71
タスク 17. 結果の保存	75

これらのタスクでは、GC/MS データファイルの化合物を検出および同定します。定性分析ワークフロープログラムを使用して、化合物検出を実行します。このプログラムでは、それらの化合物を同定することもできます。

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ています。



2 検出と同定


タスク 11. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出

タスク 11. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出

この化合物検出アルゴリズムでは GC/MS データの化合物を同定し、各化合物の補正 MS スペクトルを作成できます。この機能は、複雑なデータから情報を「採掘」するための簡単な方法です。[クロマトグラムデコンボリューションによる検出] アルゴリズムは、スキャンモード、プロダクトイオンスキャンモード、またはニュートラルロススキャンモードで取得された GC/MS サンプルデータでのみ使用できます。

このタスクは、精密質量データによるクロマトグラムデコンボリューションで化合物を検出する方法を示します。最初に抽出ウィンドウを変更した後で、ユニットマスデータを使用してクロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出を行うこともできます。

タスク 11. クロマトグラムデコンボリューションを使用した化合物の検出 (GC/MS)

ステップ	詳細説明	コメント
1 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d データファイルの TIC を開きます。	<p>a プログラムが開いていない場合、[MassHunter Qualitative Workflows] アイコン  をダブルクリックします。</p> <p>開いている場合は、[ファイル] > [データファイルを開く] をクリックします。</p> <p>b GC デモデータファイルフォルダの MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d データファイルをクリックします。</p> <p>c [結果データの読み込み] チェックボックスをオフにして [開く] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none">クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出アルゴリズムは、GC/QQQ と GC/Q-TOF の両方のデータファイルに対して動作します。ユーザーインターフェイスは、読み込まれるデータファイルのタイプに応じて自動的に更新されます。

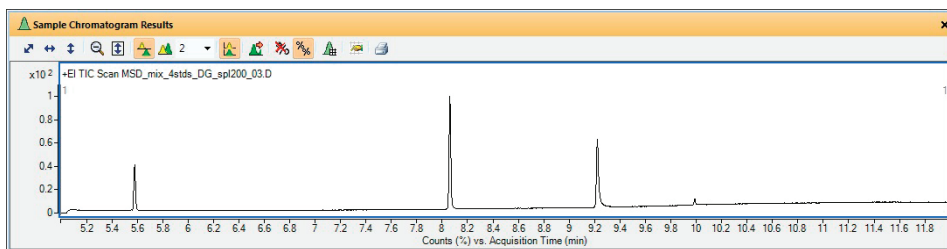


図29 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d の TIC クロマトグラム

タスク 11. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出

タスク 11. クロマトグラムデコンボリューションを使用した化合物の検出 (GC/MS)

ステップ	詳細説明	コメント
2	<p>ユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。</p> <p>a [コンフィグレーション] > [ウィンドウレイアウト] > [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。</p> <p>b [メソッド] > [開く] をクリックします。</p> <p>c Default-GCMS.m を選択します。</p> <p>d [OK] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> これらの例では、Default-GCMS.m メソッドから始めます。
3	<p>クロマトグラムデコンボリューションアルゴリズムを使用して化合物を検出します。</p> <ul style="list-style-type: none"> インテグレータに [Agile] を選択します。 SNR スレッシュホールドに 20 を入力します。 [m/z 左デルタ] および [m/z 右デルタ] の値として 100 ppm を入力します。 <p>a [メソッドエディタ] ウィンドウで、[化合物の探索] > [クロマトグラムデコンボリューションによる検出] を選択します。</p> <p>b [設定] タブの [ピークフィルタ] で、[SNR スレッシュホールド] に 20 を入力します。</p> <p>c [m/z デルタ単位]、[m/z 左デルタ]、[m/z 右デルタ] のパラメータを確認します。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ユニットマステーデータがある場合、[m/z 左デルタ] の値として 0.3 AMU、[m/z 右デルタ] の値として 0.7 AMU を入力します。

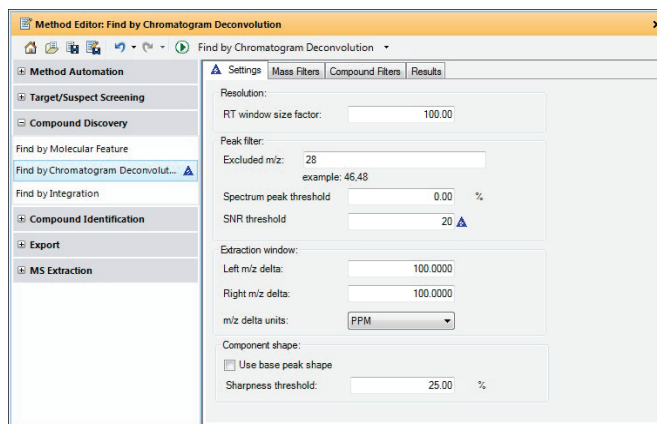



図30 [クロマトグラムデコンボリューションによる検出] の [設定] タブ

2 検出と同定

タスク 11. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出

タスク 11. クロマトグラムデコンボリューションを使用した化合物の検出 (GC/MS)

ステップ	詳細説明	コメント
<ul style="list-style-type: none">EIC、MSスペクトル、MS/MSスペクトルの抽出を選択します。	<p>d  をクリックして、データファイルに対して [クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出] アルゴリズムを実行します。</p> <p>e 必要に応じて、[表示]>[化合物リスト] コマンドをクリックします。</p> <p>f [メソッドエディタ] ウィンドウと [構造式ビューア] ウィンドウを閉じます。</p>	<ul style="list-style-type: none">定性分析ワークフロープログラムにより、この設定では5つの化合物が検出されます。[検出] > [クロマトグラムデコンボリューションによる検出] をクリックすることもできます。データファイルにインデックスが付けられていない場合、このアルゴリズムの実行には時間がかかることがあります。

タスク 11. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出

タスク 11. クロマトグラムデコンボリューションを使用した化合物の検出 (GC/MS)

ステップ	詳細説明	コメント
4	化合物を確認します。図 31 を参照してください。	<p>a [化合物リスト] ウィンドウの [データを含まない列を隠す] アイコンをクリックします。</p> <p>b [化合物リスト] ウィンドウで最初の化合物をクリックします。</p> <p>c [化合物リスト] ウィンドウでは、矢印キーを使用して化合物を切り替えることができます。</p>

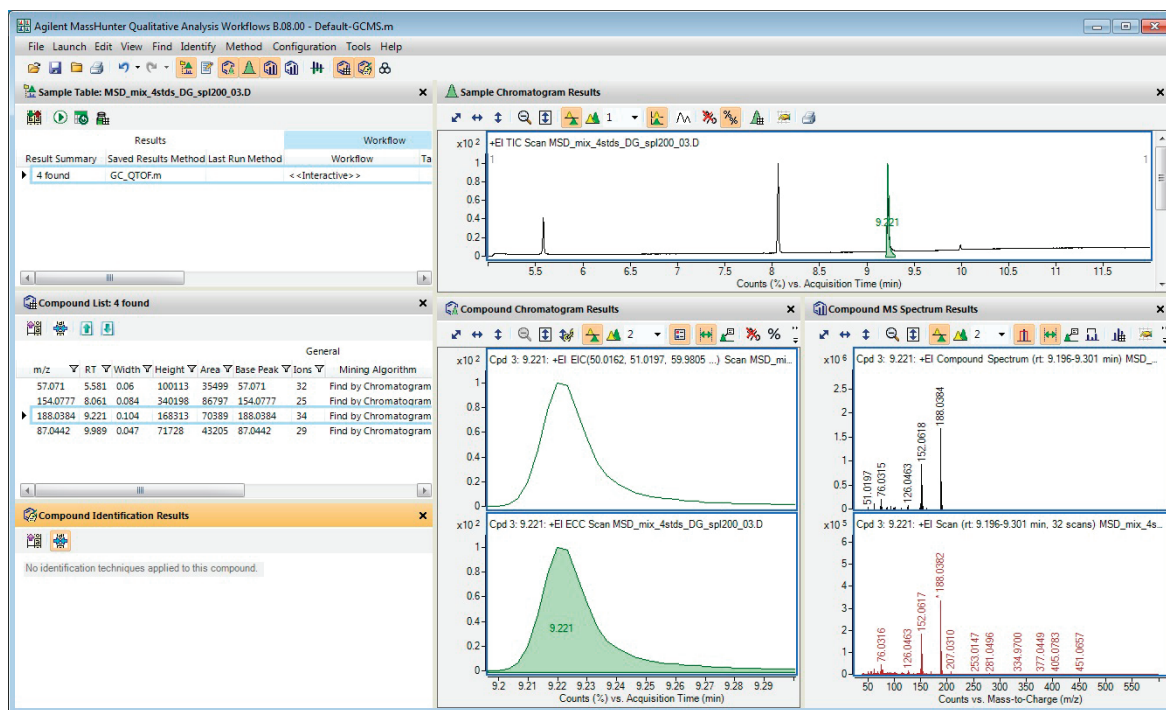


図31 [クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出]の結果



2 検出と同定

タスク 12. ライブラリ検索/データベース検索アルゴリズムによる化合物の同定

タスク 12. ライブラリ検索/データベース検索アルゴリズムによる化合物の同定

このタスクでは、50 ページの「[タスク 11. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出](#)」で検出された化合物を同定し、化学式を推定します。購入した NIST11.1 ライブラリ (または最新バージョン)、または demo.l ライブラリを使用してこのタスクを実行することができます。2つのライブラリがある場合、両方を選択することもできます。

タスク 12. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定

ステップ	詳細説明	コメント
1 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d データファイル内の全化合物のライブラリ検索/データベース検索を実行します。	<p>a [表示] > [メソッドエディタ] をクリックします。</p> <p>b [メソッドエディタ] ウィンドウで、[化合物の同定] > [同定ワークフロー] をクリックします。</p> <p>c [ライブラリ / データベース検索による同定] チェックボックスがオンになっていることを確認してください。</p> <p>d (オプション) [追加] ボタンをクリックします。NIST11.1 ライブラリを選択し、[OK] ボタンをクリックします。</p> <p>e (オプション) [複数のライブラリ検索タイプ] で [最初のライブラリー致で停止する] をクリックします。</p> <p>f メインメニューで [同定] > [すべての化合物の同定] をクリックします。[すべての化合物の同定] アイコン  をクリックしてアルゴリズムを実行することもできます。</p>	<ul style="list-style-type: none">• Demo.l および Nist11 は、¥MassHunter¥Library フォルダにインストールされています。• 多くの化合物は、NIST11.1 ライブラリ検索により同定されます。• NIST11.1 ライブラリがなく、別のライブラリがある場合は、そのライブラリを選択します。• 複数のライブラリを選択していて、[最初のライブラリー致で停止する] を選択した場合、ライブラリ検索アルゴリズムはリスト中の最初のライブラリを検索します。化合物が同定された場合は、そこで停止します。化合物が同定されなかった場合は、化合物が同定されるか最後のライブラリが検索されるまで、次のライブラリを順に検索します。• ユニットマスライブラリの検索アルゴリズムで使用する .l ライブラリを変更するには、ライブラリエディタプログラムを使用します。このプログラムは、Agilent MassHunter 定量分析プログラムと一緒にインストールされています。このプログラムを開始するには、 アイコンをクリックします。

タスク 12. ライブラリ検索/データベース検索アルゴリズムによる化合物の同定

タスク 12. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定

ステップ	詳細説明	コメント
2	表示ウィンドウを変更します。	
	<p>a [表示]>[結果の差]をクリックします。</p> <p>b [表示]>[構造式ビューア]をクリックします。</p> <p>c 必要に応じて[化合物同定結果]ウィンドウのタブをクリックし、ウィンドウを表示させます。</p> <p>d [化合物リスト]で同定されている化合物の行をハイライトします。</p> <p>e [化合物リスト]ツールバーと[化合物同定結果]ウィンドウで、[空の列を非表示]ボタン()をクリックします。</p> <p>f 各化合物をクリックして結果を確認します。</p>	<p>化合物が同定された場合、[式]列に値が含まれます。</p>

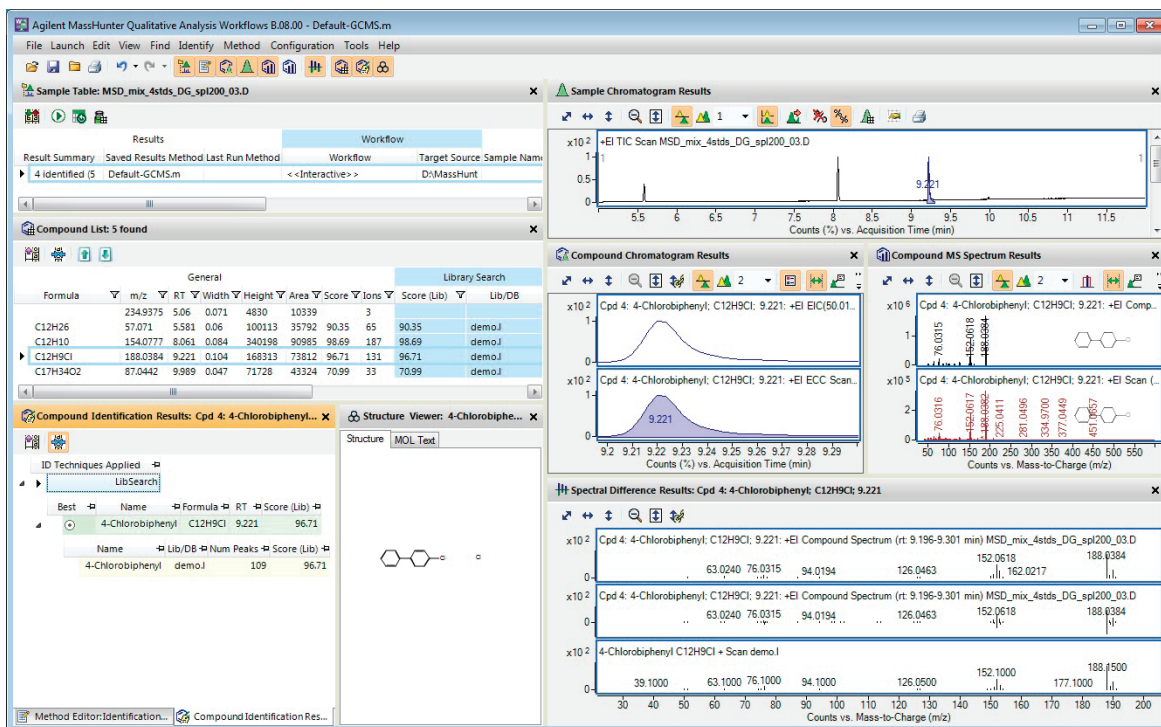


図32 化合物とライブラリ/データベース検索結果

2 検出と同定

タスク 12. ライブラリ検索/データベース検索アルゴリズムによる化合物の同定

タスク 12. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定

ステップ	詳細説明	コメント
3 データファイルを閉じます。	<p>a [ファイル] > [データファイルを閉じる] をクリックします。</p> <p>b 結果の保存を求められたら [いいえ] をクリックします。</p>	<p>・ これらの結果を保存する方法については、75 ページの「タスク 17. 結果の保存」を参照してください。</p>

タスク 13. MRM を使用した化合物の検出 (MRM のみ)

MRM による化合物の検出アルゴリズムは、トリプル四重極からの MRM データ内の化合物を同定します。アルゴリズムは、MRM トランジションを使用して化合物を検索します。測定メソッドにあるすべての化合物が抽出され、化合物リストに表示されます。化合物は、クロマトグラムの積分結果にもとづき消去されることはありません。MRM トランジションを使用して測定されたデータに使用できるアルゴリズムは [MRM による化合物の検出] のみです。データファイルが MRM データファイルの場合、MRM アルゴリズムはデータファイル内の情報を使用します。

タスク 13. MRM を使用した化合物の検出 (MRM のみ)

ステップ	詳細説明	コメント
1 Pest - STD 200 MRM.d データファイルの TIC を開きます。	<p>a プログラムが開いていない場合、[MassHunter Qualitative Workflows] アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、[ファイル] > [データファイルを開く] をクリックします。</p> <p>b GC Pesticides デモデータファイルフォルダの Pest - STD 200 MRM.d データファイルをクリックします。</p> <p>c [結果データの読み込み] チェックボックスをオフにして [開く] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ユーザーインターフェイスは、開いたデータファイルに応じて、最適な機能を表示するように自動的に更新されます。

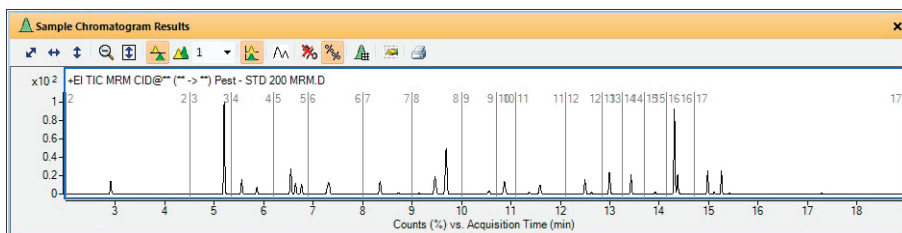


図33 Pest - STD 200 MRM.d の TIC クロマトグラム

2 ユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。	<p>a [コンフィグレーション] > [ウィンドウレイアウト] > [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。</p> <p>b [メソッド] > [開く] をクリックします。</p> <p>c Default-GCMS.m を選択します。</p> <p>d [OK] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> これらの例では、Default-GCMS.m メソッドから始めます。
-------------------------------	--	--

2 検出と同定

タスク 13. MRM を使用した化合物の検出 (MRM のみ)

タスク 13. MRM を使用した化合物の検出 (MRM のみ)

ステップ	詳細説明	コメント
3	MRM アルゴリズムを使用して化合物を検出します。 a [メソッドエディタ] ウィンドウで、 [ターゲット / 候補化合物スクリーニング] > [MRM による検出] セクションを選択します。 b パラメータを確認します。	

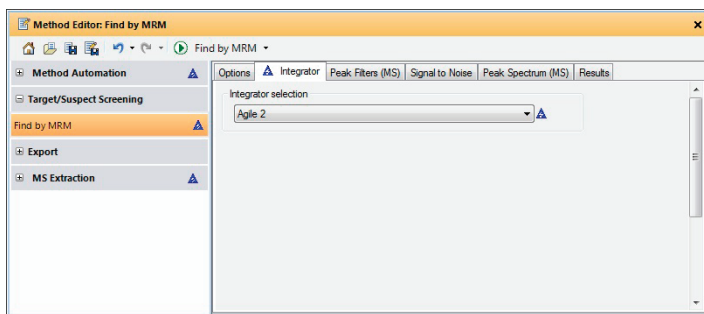





図34 [メソッドエディタ] の [MRM による検出] セクションの [積分] タブ

- c  をクリックして、データファイルに対して **[MRM による検出]** アルゴリズムを実行します。
 - d 必要に応じて、**[表示]>[化合物リスト]** コマンドをクリックします。
 - e 必要に応じて、**[化合物同定結果]** ウィンドウのタブをクリックして表示します。[メソッドエディタ] ウィンドウと同じウィンドウにタブ表示されます。
- 4 化合物を確認します。59 ページの  35 を参照してください。
- a **[化合物 MS スペクトル結果]** ツールバーの **[リストペインの最大数]** で 2 を選択します。
 - b **[化合物リスト]** ツールバーの **[データを含まない列を隠す]** ボタン  をクリックします。
 - c **[化合物リスト]** ウィンドウで最初の化合物をクリックします。
 - d **[化合物リスト]** ウィンドウでは、矢印キーを使用して化合物を切り替えることができます。
- 定性分析ワークフロープログラムにより、この設定では 28 の化合物が検出されます。
 - 「データを含まない列を隠す」アルゴリズムは、テーブルの第 1 レベルに対して実行されます。

タスク 13. MRM を使用した化合物の検出 (MRM のみ)

タスク 13. MRM を使用した化合物の検出 (MRM のみ)

ステップ	詳細説明	コメント
5	<p>[化合物同定結果] ウィンドウの表示列を変更します。</p> <p>a テーブルの行を右クリックし、[列の追加/削除] をクリックします。</p> <p>b [すべて選択] をクリックし、[OK] をクリックします。</p> <p>c [化合物リスト] ツールバーの [データを含まない列を隠す] ボタン (🔍) をクリックします。</p> <p>d 削除する列を右クリックします。その列を右クリックし、[列の削除] をクリックして列を削除します。</p> <p>e いくつかのウィンドウを閉じます。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 最初にすべての列を表示してから、値を含まない列を非表示にすると、値を含むすべての列のみが表示されます。 プリカーサイオンが [プリカーサ (測定)] 列に表示され、プロダクトイオンが [化合物同定結果] ウィンドウの [MRM 検索のプロダクトイオン] 列に表示されます。 [サンプルテーブル] ウィンドウの [結果サマリー] 列に化合物数が表示されます。

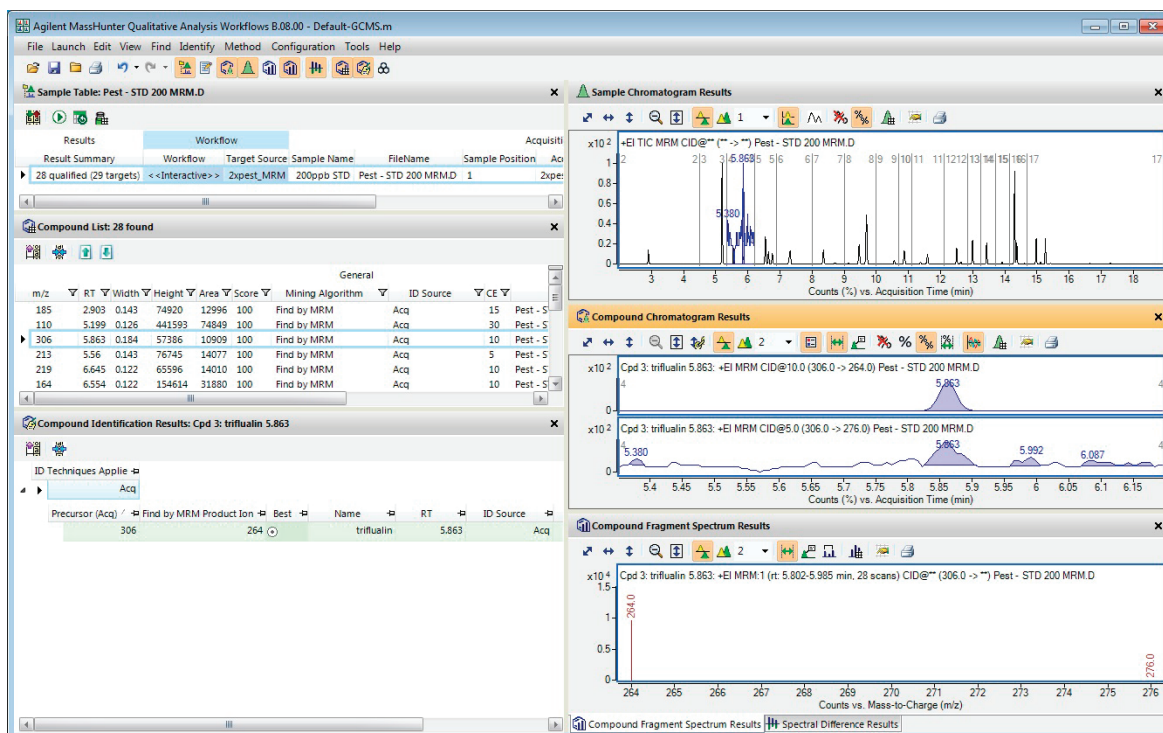


図35 MRM による検出の結果

2 検出と同定

タスク 13. MRM を使用した化合物の検出 (MRM のみ)

タスク 13. MRM を使用した化合物の検出 (MRM のみ)

ステップ	詳細説明	コメント
6 データファイルを閉じます。	<p>a [ファイル] > [データファイルを閉じる] をクリックします。</p> <p>b [閉じる] をクリックします。</p>	<p>・ これらの結果を保存する方法については、75 ページの「タスク 17. 結果の保存」を参照してください。</p>

タスク 14. 積分による化合物の検出

積分による化合物の検出アルゴリズムは、積分の結果に基づいて化合物を同定します。積分によって同定された各ピークに対して、1つずつ化合物が作成されます。

タスク 14. 積分による化合物の検出

ステップ	詳細説明	コメント
1	<p>MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D データファイルの TIC を開きます。</p> <p>a プログラムが開いていない場合、[MassHunter Qualitative Workflows] アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、[ファイル] > [データファイルを開く] をクリックします。</p> <p>b GC デモデータファイルフォルダの MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d データファイルをクリックします。</p> <p>c [結果データの読み込み] チェックボックスをオフにして [開く] をクリックします。</p>	

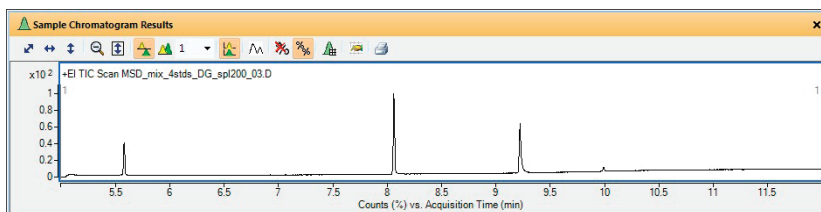


図36 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d の TIC クロマトグラム

- | | | |
|---|---|---|
| 2 | <p>ユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。</p> <p>a [コンフィグレーション] > [ウィンドウレイアウト] > [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。</p> <p>b [メソッド] > [開く] をクリックします。</p> <p>c Default-GCMS.m を選択します。</p> <p>d [OK] をクリックします。</p> | <p>これらの例では、Default-GCMS.m メソッドから始めます。</p> |
|---|---|---|

2 検出と同定

タスク 14. 積分による化合物の検出

タスク 14. 積分による化合物の検出

ステップ	詳細説明	コメント
3	<p>[積分による検出] アルゴリズムを使用して、化合物を検出します。</p> <p>a [メソッドエディタ] ウィンドウで、【化合物の探索】 > 【積分による検出】 を選択します。</p> <p>b パラメータを確認します。</p>	<ul style="list-style-type: none">化合物を検出するクロマトグラム範囲を選択します。

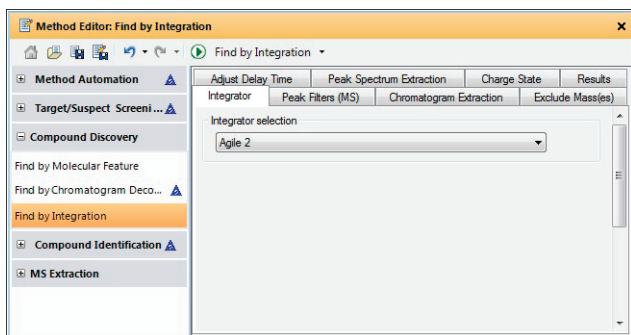



図37 [メソッドエディタ] の [積分による検出] セクションの [積分] タブ

- c  をクリックして、データファイルに対して **【積分による化合物の検出】** アルゴリズムを実行します。
- d 必要に応じて、**【表示】>【化合物リスト】** コマンドをクリックします。
- 定性分析ワークフロープログラムにより、この設定では 10 の化合物が検出されます。
-
- 4 化合物を確認します。63 ページの [図 38](#) を参照してください。
- a [化合物リスト] ウィンドウの **【データを含まない列を隠す】** アイコンをクリックします。
- b [化合物リスト] ウィンドウで最初の化合物をクリックします。

タスク 14. 積分による化合物の検出

ステップ

詳細説明

コメント

- c [化合物リスト] ウィンドウでは、矢印キーを押して化合物を切り替えることができます。

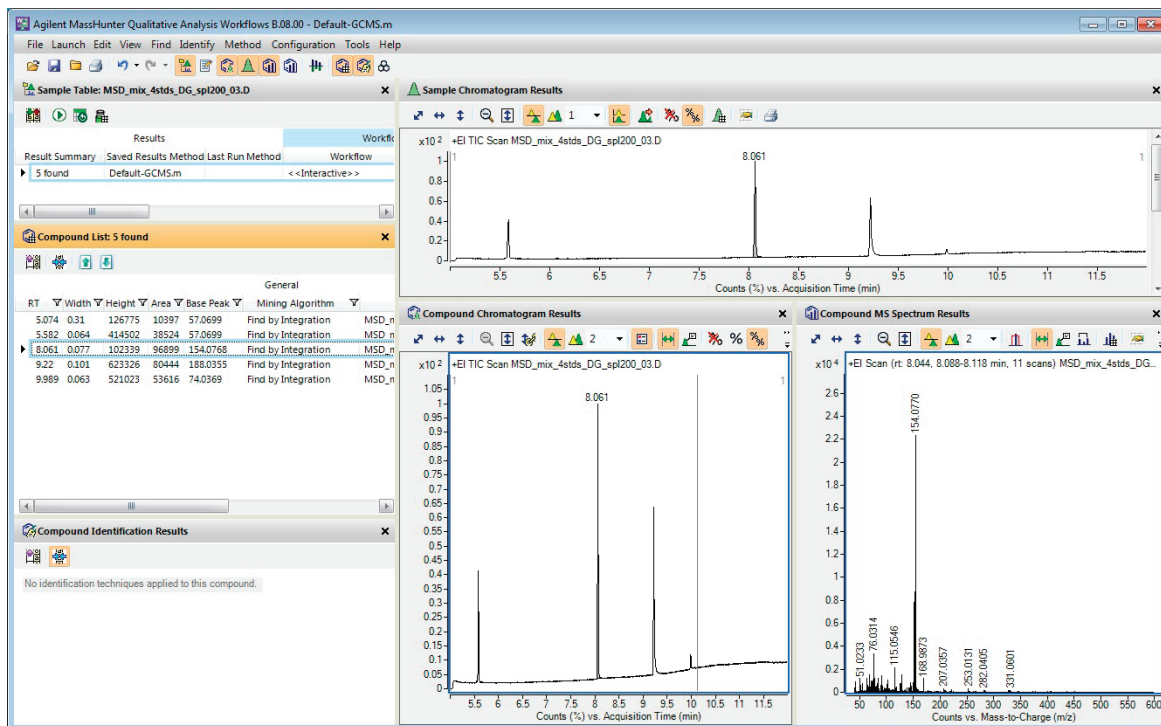


図38 積分による検出の結果

- 5 データファイルを閉じます。
- a [ファイル] > [データファイルを閉じる] をクリックします。
 - b 結果を保存するかどうか尋ねられたら、[いいえ] をクリックします。
 - c [閉じる] をクリックします。
- これらの結果を保存する方法については、75 ページの「タスク 17. 結果の保存」を参照してください。

2 検出と同定

タスク 15. フラグメントによる検出

タスク 15. フラグメントによる検出

全イオン MS/MS モードで測定された LC/MS TOF、Q-TOF データでは、化学式による検出アルゴリズムによりフラグメントの確認ステップがサポートされます。このステップでは、分子イオンと共溶出し、また、その化合物のライブラリスペクトルでのフラグメントイオンによって示唆されている、高エネルギースペクトル中のフラグメントイオンを探すことで、アルゴリズムは化合物の同定を確認します。

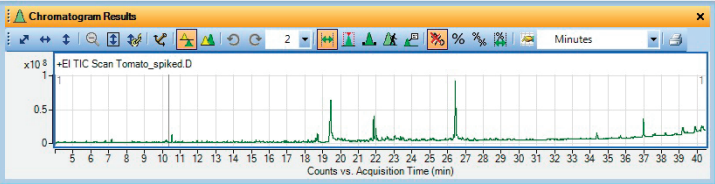
フラグメントによる検出は、主にフラグメントイオンが見られ、通常、分子イオンの出現が少ない、高エネルギースペクトルのみを含む GC/Q-TOF EI データの特性に合わせて調整されるアルゴリズムです。このアルゴリズムは、まずアバンドランスと m/z 値に基づいて EI-MS スペクトルライブラリから「n」個のフラグメントイオンを選択します (m/z の大きいフラグメントイオンを優先します。大きい方が、より多くの構造情報が含まれるためです)。次に、ライブラリで指定したターゲット リテンションタイムの時間幅で、これらのイオンのクロマトグラムを抽出し、クロマトグラムのターゲットピークのリストを作成します。さらに、RT ごとに一団となっているピークのグループを検出し、リファレンスイオンと確認フラグメントイオンを選択します。分子イオンが存在する場合、分子イオンがリファレンスイオンになる可能性はあります。次に、クロマトグラムの選択したピークの共溶出の程度を計算します。設定した数以上のイオンで、設定されたスレッシュホールドを超える共溶出スコアを持っていると、ターゲット化合物は「確認」されたこととなります。

すべての場合において、「補正 HighE (高エネルギー) スキャン」が生成されません。これにはリファレンスイオンと確認フラグメントイオンのみ (オプションで、減算式の注釈) が表示されます。

タスク 15. フラグメントによる検出

ステップ	詳細説明	コメント
1 Tomato_spiked.D データファイルの TIC を開きます。	<p>a プログラムが開いていない場合、[MassHunter Qualitative Workflows] アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、[ファイル] > [データファイルを開く] をクリックします。</p> <p>b GCMS Pesticide デモデータファイルフォルダの Tomato_spiked.d データファイルをクリックします。</p> <p>c [結果データの読み込み] チェックボックスをオフにして [開く] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none">GC/MS データの作業では、一般ワークフローを使用します。GC/Q-TOF データの作業では、一般ワークフローまたは GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローが使用できます。

タスク 15. フラグメントによる検出

ステップ	詳細説明	コメント
		
図39	Tomato_spiked.d の TIC クロマトグラム	
2 ユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。	<ul style="list-style-type: none"> ・ 【コンフィグレーション】 > 【ウィンドウレイアウト】 > 【デフォルトレイアウトの復元】 をクリックします。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ これらの例では、Default-GCMS.m メソッドから始めます。
3 GCQTOF_Pesticide_Example.m メソッドファイルを読み込みます。	<ul style="list-style-type: none"> a 【メソッド】>【開く】 をクリックします。 b GCQTOF_Pesticide_Example.m メソッドを選択し、【開く】 をクリックします。 c プログラムの左下隅にある 【メソッドエディタ】 タブをクリックします。 d 【ターゲット / 候補化合物スクリーニング】 > 【フラグメントによる検出】 の 【ターゲットソース】 でエラーが発生した場合は、パスを修正します。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ このメソッドは、¥¥MassHunter¥methods¥B.08.00 フォルダにあります。 ・ メソッドを読み込んだときに青色の三角形が表示されても、この時点では無視します。 ・ 赤いエラーが表示されたら、問題を解決してください。
4 メソッドを iii_GCQTOF_Pesticide_Example.m に保存します。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。	<ul style="list-style-type: none"> a トップメニューから 【メソッド】 > 【名前を付けて保存】 をクリックします。 b iii_GCQTOF_Pesticide_Example.m と入力します。 c 【保存】 ボタンをクリックします。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ メソッドを保存すると、メソッドの値が変更されたことを示す青色三角形がすべて消えることを確認します。
5 【フラグメントによる検出】 のパラメータを確認します。	<ul style="list-style-type: none"> a 【メソッドエディタ】 ウィンドウで、【ターゲット / 候補化合物スクリーニング】 > 【フラグメントによる検出】 セクションを選択します。 b 【ターゲットソース】 タブをクリックします。 c PCDL フォルダで Pesticide_Example.cdb ライブラリを選択します。 d 【一致の許容誤差】 タブをクリックします。 e 【m/z 候補】 に対して 【対称(ppm)】 を選択し、値を確認します。 f 【EIC 抽出範囲の制限】 チェックボックスをオンにし、【対称】 を選択した後、【予測リテンションタイム】 に 1.0 を入力します。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ このデモメソッドでは、これらの値は既に設定されています。 ・ 【m/z 候補】 に対して選択する値は、測定メソッドを高分解能モードで実行しているか、デュアルゲインモードで実行しているかによって異なります。

2 検出と同定

タスク 15. フラグメントによる検出

タスク 15. フラグメントによる検出

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

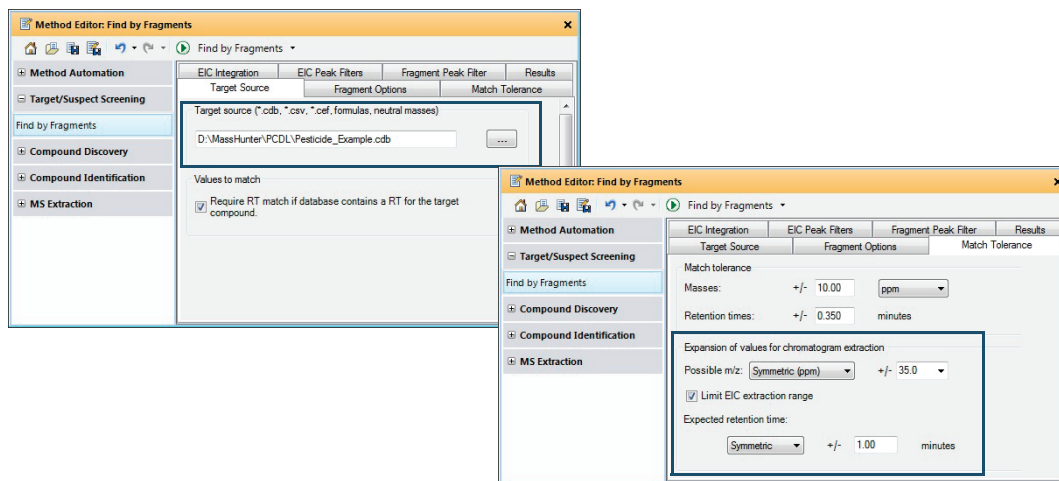


図40 [フラグメントによる検出] セクションの [ターゲットソース] タブと [一致の許容誤差] タブ

- | | |
|---|---|
| <ul style="list-style-type: none">g [フラグメントオプション] タブをクリックします。h [スペクトルライブラリのみを使用する] をクリックし、[スペクトルライブラリから使用するイオンの数] に 7 を入力します。i [RT 差] に 0.2 を入力します。 | <ul style="list-style-type: none">・ イオン数が多いほど特異性が高まり、結果の信頼性が向上しますが、プログラムの分析時間が長くなります。・ [RT 差] の推奨範囲は 0.1 ~ 0.2 です。この値は、リファレンスイオンのリテンションタイムシフトに許容される差です。リファレンスイオンは、定性ワークフロープログラムによって自動的に選択されます。 |
|---|---|

タスク 15. フラグメントによる検出

ステップ	詳細説明	コメント
j	[S/N 比] チェックボックスをオフにします。	<ul style="list-style-type: none"> [S/N 比] チェックボックスをオンにすると、偽陰性を生成する確率が高くなります(比が低すぎる場合)。 推奨開始値は 1~3 です。1 を設定するには、2 つの適格と判定されたイオン(リファレンスイオンと適格と判定されたイオン)が必要です。 その他のタブの値は変更せずにそのままにします。
k	[共溶出スコア] に 70 を入力します。	
l	[最小確認フラグメント数] をクリックし、1 を入力します。	

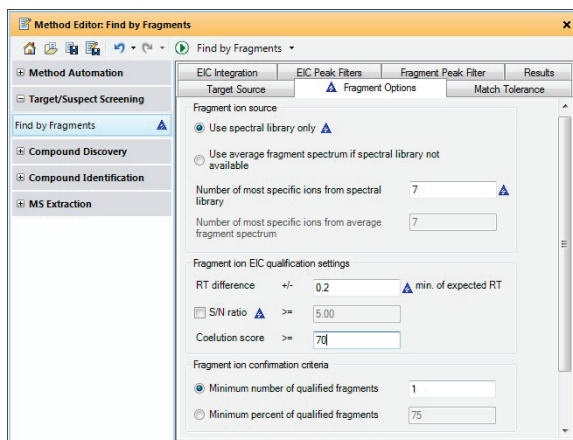



図41 [フラグメントによる検出] セクションの [フラグメントオプション] タブ

- 6 [フラグメントによる検出] アルゴリズムを実行します。
- ▶ をクリックして、データファイルに対して [フラグメントによる検出] アルゴリズムを実行します。
 - [検出] > [フラグメントによる検出] をクリックします。
- 7 メソッドを保存します。
- 以下の3つの方法のいずれかで、メソッドを保存します。
 -  [メソッドエディタ] の [メソッドの保存] アイコン をクリックします。
 - [メソッドエディタ] を右クリックし [メソッドの保存] をクリックします。
 - トップメニューから [メソッド] > [保存] をクリックします。

2 検出と同定

タスク 15. フラグメントによる検出

タスク 15. フラグメントによる検出

ステップ	詳細説明	コメント
8	化合物を確認します。図 42 を参照してください。	<p>a 【化合物同定結果】 タブをクリックします (表示されていない場合)。</p> <p>b 【構造式ビューア】 ウィンドウを閉じます。</p> <p>c 【表示】 > 【化合物フラグメントスペクトル結果】 をクリックします。</p> <p>d 化合物リストウィンドウで、削除する列のヘッダーを右クリックし、【列の削除】 をクリックします。</p>

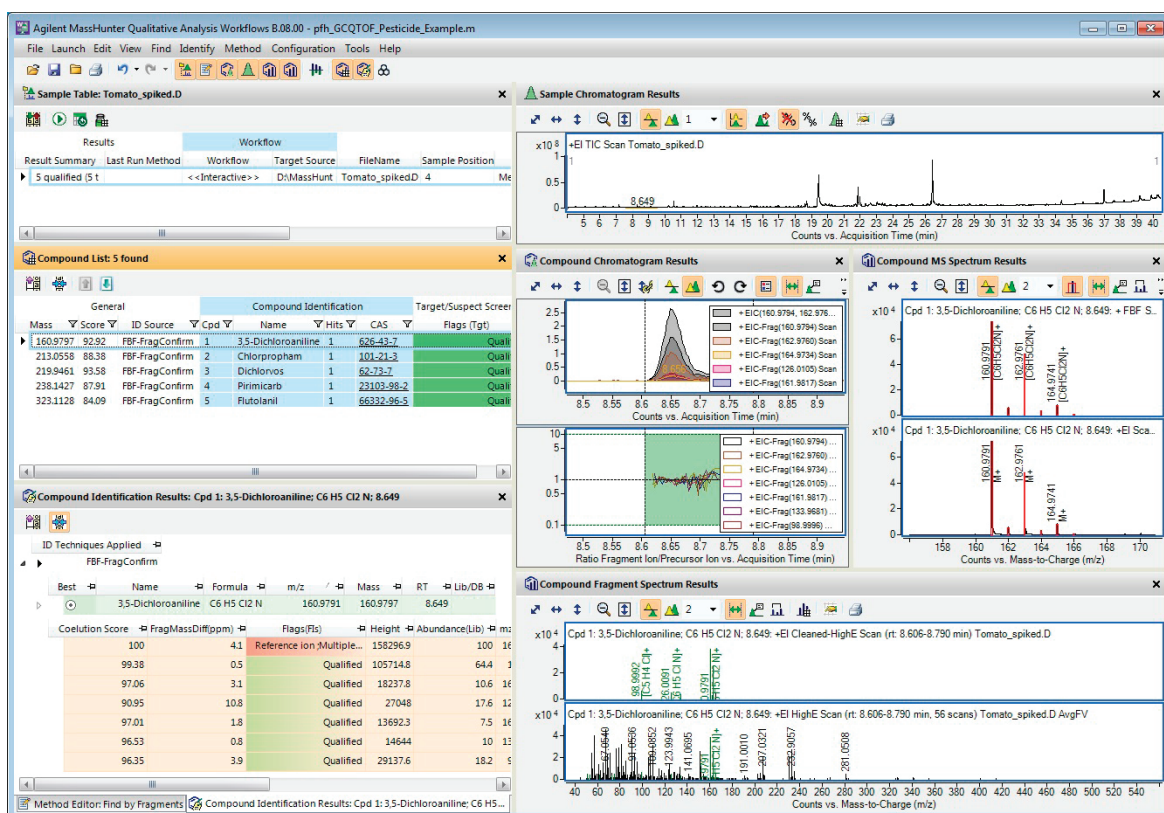


図42 フラグメントによる検出の結果

タスク 15. フラグメントによる検出

ステップ	詳細説明	コメント
e	クリックするか、矢印キーを押して化合物リストの化合物を変更し、化合物を一つずつ確認します。	<ul style="list-style-type: none"> ・ テーブルの最初のレベルには、実行したすべての同定アルゴリズムのサマリー情報が表示されます。 ・ レベル2（青色）には、総合スコアを算出するために使用された個別のスコアが示されます。この行は、分子イオンが見つかった場合にのみ表示され、ターゲット化合物の予測質量、RT、同位体分布と分子イオンの一致の程度を示します。 ・ 一番下のテーブルにフラグメントイオンとその共溶出スコアが表示されます。ここには、フラグメントイオンが確認されているかどうかも示されます。
f	[化合物同定結果] ウィンドウで、情報を確認します。	
g	行の先頭にある矢印アイコンをクリックして、テーブルのレベルを展開します。テーブルのレベルが展開されると、▲ - アイコンに変わります。	

Compound Identification Results: Cpd 1: 3,5-Dichloroaniline; C6 H5 Cl2 N; 8.649

ID Techniques A ▾
 ▶ FBF-FragCo...

Best	Name	Formula	m/z	Mass	Mass (Tgt)	Diff (ppm)	Score (Tgt)	RT
▶	3,5-Dichloroaniline	C6 H5 Cl2 N	160.9791	160.9797	160.9799	1.56	92.92	8.649

Coelution Sc	FragMassDiff(ppm)	Flags(FIs)	Height	Abundance(Lib)	mz(Lib)	m/z	ObsPkHeight(MS)	Compound
100	4.1	Reference ion ;...	158296.9	100	160.9794	160.98	19070.9	3,5-Dichlor...
99.38	0.5	Qualified	105714.8	64.4	162.976	162.9761	25291.8	3,5-Dichlor...
97.06	3.1	Qualified	18237.8	10.6	164.9734	164.9739	4460.7	3,5-Dichlor...
90.95	10.8	Qualified	27048	17.6	126.0105	126.0091	4817.5	3,5-Dichlor...
97.01	1.8	Qualified	13692.3	7.5	161.9817	161.982	2825	3,5-Dichlor...
96.53	0.8	Qualified	14644	10	133.9681	133.968	3383.4	3,5-Dichlor...
96.35	3.9	Qualified	29137.6	18.2	98.9996	98.9992	6066.9	3,5-Dichlor...

図43 化合物同定結果ウィンドウ

2 検出と同定

タスク 15. フラグメントによる検出

タスク 15. フラグメントによる検出

ステップ	詳細説明	コメント
h	[化合物 クロマトグラム結果] ウィンドウで結果を確認します。	<ul style="list-style-type: none"> ・ [化合物 クロマトグラム結果] ウィンドウに、各フラグメントイオンの個々のイオントレースが表示されます。 ・ フラグメントイオンが化合物とどれだけ近接して共溶出したかを表示する、[共溶出プロット] も表示されます。参照用に、Y=1の直線が黒で表示されます。値が1であることは、クオリファイアイオンの共溶出が、リファレンスイオンクロマトグラムと正確に一致することを示します。比が1に近づくほど、クオリファイアイオンとリファレンスイオンの共溶出が近接しています。
i	[共溶出プロット] ペインが表示されていることを確認します。	
j	クロマトグラムが重ね描きされていることを確認します。ツールバーのアイコンは以下のように設定されています。	

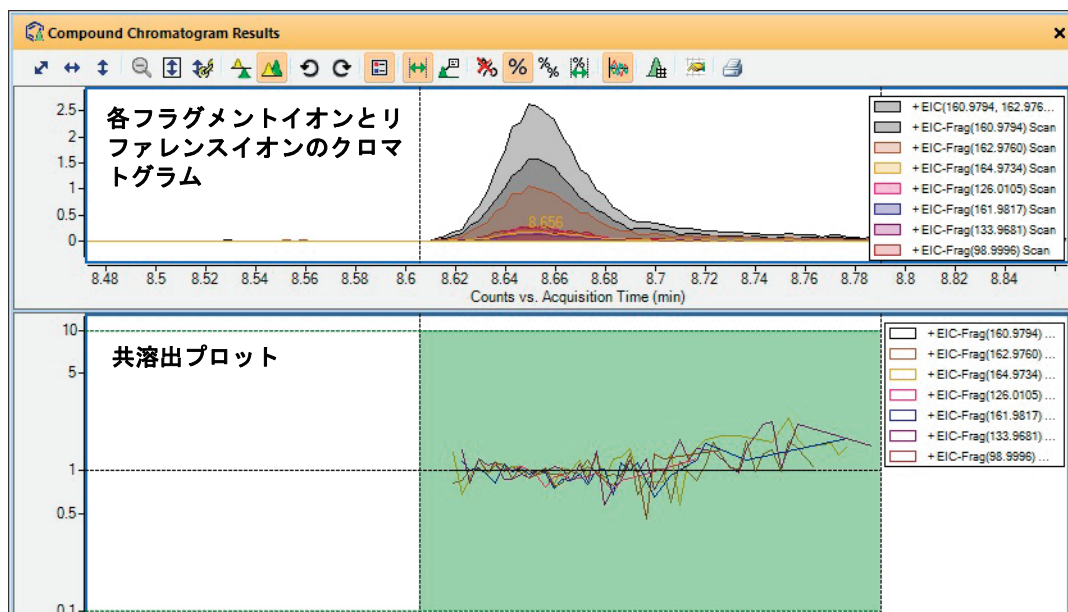
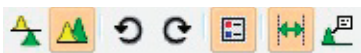


図44 化合物同定結果ウィンドウ

- 9 データファイルを閉じます。
- a [ファイル] > [データファイルを閉じる] をクリックします。
 - b 結果を保存するかどうか尋ねられたら、[いいえ] をクリックします。
- これらの結果を保存する方法については、75 ページの「タスク 17. 結果の保存」を参照してください。

タスク 16. ライブラリでマススペクトルを検索

このタスクでは、まず GC/Q-TOF データファイルからのピークスペクトルの積分と抽出を行います。MassHunter 定性分析ナビゲータプログラムを使用します。次に、各ピークスペクトルに対する化学式を作成します。


タスク 16. ライブラリでマススペクトルを検索

ステップ	詳細説明	コメント
1 MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d データファイルの TIC を開きます。	<p>a プログラムが開いていない場合、[MassHunter Qualitative Navigator] アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、[ファイル] > [データファイルを開く] をクリックします。</p> <p>b GC デモデータファイルフォルダの MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d データファイルをクリックします。</p> <p>c [結果データの読み込み] チェックボックスをオフにして [開く] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> • [結果データの読み込み] チェックボックスが使用できない場合、データファイルには結果が保存されていません。結果を保存する方法については、75 ページの「タスク 17. 結果の保存」を参照してください。 • 一般ワークフローが読み込まれます。
2 ユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。	<p>a [コンフィグレーション] > [ウィンドウレイアウト] > [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。</p> <p>b [メソッド] > [開く] をクリックします。</p> <p>c Default-GCMS.m を選択します。</p> <p>d [OK] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> • これらの例では、Default-GCMS.m メソッドから始めます。
3 ピークスペクトルを積分して抽出します。	<p>a [表示] > [メソッドエディタ] をクリックします。</p> <p>b [メソッドエディタ] ウィンドウの [クロマトグラム] > [積分 (MS)] セクションをクリックします。</p> <p>c [ピークフィルタ] タブをクリックします。</p> <p>d [ピーク高さ] ボタンをクリックします。</p> <p>e [相対高さ] チェックボックスをオンにします。</p> <p>f [クロマトグラム] > [ピークスペクトルの積分と抽出] をクリックします。</p>	

2 検出と同定

タスク 16. ライブラリでマススペクトルを検索

タスク 16. ライブラリでマススペクトルを検索

ステップ	詳細説明	コメント
4	ピークスペクトル 1～4 に対してライブラリ検索を実行します。	
	<p>a [データナビゲータ] ウィンドウで [スペクトル] をクリックします。</p> <p>b [メソッドエディタ] ウィンドウで、[スペクトルの同定] > [同定ワークフロー] をクリックします。</p> <p>c [ライブラリ / データベース検索による同定] チェックボックスをオンにします。</p> <p>d demo.1 の [スコア (rev)] に 50 を入力します。</p> <p>e [スペクトルの同定] > [ライブラリ検索設定] セクションを選択します。</p> <p>f [ピークフィルタ] タブをクリックします。</p> <p>g [ピークフィルタ] タブの [絶対高さ] チェックボックスをオフにします。</p> <p>h [メソッドエディタ] で、[スペクトルの同定] > [化学式の作成] をクリックします。</p> <p>i [フラグメントの式] タブをクリックします。</p> <p>j [スペクトルピークに式の注釈を表示] チェックボックスをオンにします。</p> <p>k メインメニューで [同定] > [ライブラリ/DB でスペクトルを検索] をクリックします。</p> <p>l [メソッドエディタ] ウィンドウを閉じます。</p>	<ul style="list-style-type: none">• 複数のライブラリおよびデータベースを [同定ワークフロー] に含めることができます。• [すべてのライブラリ / データベースを検索する] をクリックすると、アルゴリズムは、すべてのライブラリから一致するものを返します。• [スペクトルの同定] > [化学式の作成] セクションの [フラグメントの式] タブの [スペクトルピークに式の注釈を表示] チェックボックスをオンにした場合、[同定] > [ライブラリ/DB でスペクトルを検索] をクリックすると、[MS スペクトル結果] ウィンドウのスペクトルにピーク注釈が追加されます。• [スコア (fwd)] は、Forward 検索スコアの最小値です。[スコア (rev)] は、Reverse 検索スコアの最小値です。
5	表示されている列を変更します。	
	<p>a [スペクトル同定結果] ウィンドウを右クリックし、[列の追加 / 削除] をクリックします。[列の追加 / 削除] ダイアログボックスで、表示したい列のチェックボックスをオンにします。[OK] をクリックします。</p> <p>b [スペクトル同定結果] ウィンドウの [データを含まない列を隠す] アイコン  をクリックします。</p>	

タスク 16. ライブラリでマススペクトルを検索

ステップ	詳細説明	コメント
6 結果を確認します。	<ul style="list-style-type: none"> [MSスペクトル結果] ウィンドウのピークの上に表示されている化学式とイオン種を確認します。 	<ul style="list-style-type: none"> データナビゲータにフォーカスがある場合は、上下の矢印キーを押してスペクトル間を移動できます。 注釈が表示されたフラグメントイオン（緑）とその他のイオン（この場合は赤）の2色表示は、フラグメント注釈がオンの場合にのみ見られます。緑しか表示されていない場合、2つの色を表示するには、スペクトルの色を変更します（[編集]>[色の選択] をクリックします）。

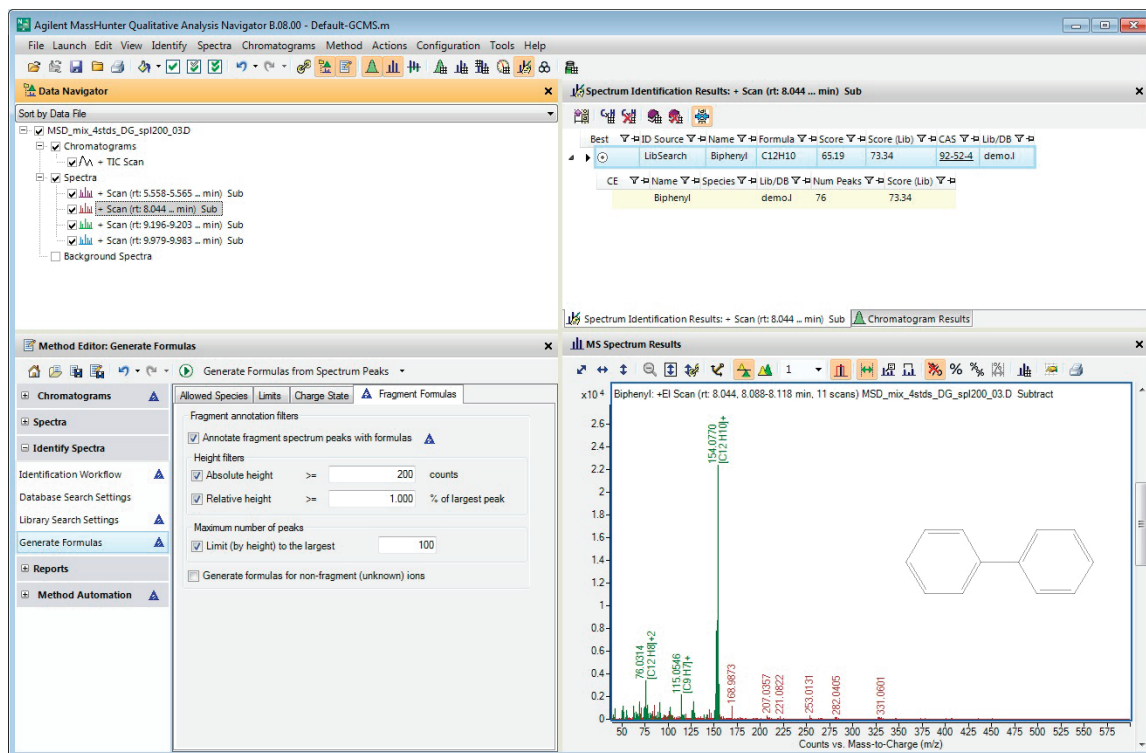


図45 1 番目のピークスペクトルに対するライブラリ検索と化学式作成の結果

2 検出と同定

タスク 16. ライブラリでマススペクトルを検索

タスク 16. ライブラリでマススペクトルを検索

ステップ	詳細説明	コメント
7 [MS ピーク 1] ウィンドウで各スペクトルの結果を確認します。	<p>a [表示] > [MS スペクトルピークリスト 1] をクリックします。</p> <p>b 右クリックして [列の追加 / 削除] をクリックします。</p> <p>c 図 46 に示されている列が [表示する列] リストに存在することを確認します。</p> <p>d [イオンタイプ] 列で並べ替えます。</p> <p>e イオンタイプがフラグメントイオンの場合、[MS スペクトル結果] ウィンドウの各ピークの化学式とイオン種は緑で表示されます。</p>	<p>・ [イオンタイプ] は、分子イオン、フラグメントイオン、または空白です。フラグメントイオンの場合、[ニュートラルロスの式] 列と [ニュートラルロスの質量] 列に、分子イオンからそのイオンに至るために使用された化学式と質量が表示されます。[式 & イオン種] には、そのイオンの化学式とイオン種が表示されます。</p>

m/z	Species	Abund	Formula & Ion Species	Diff (ppm)	Loss Formula	Loss Mass	Ion Type	Area	End	Start
77.0383	M+2	911.4	2 [C12 H10]+2	3.71			Molecular Ion	18	77.0791	77.0185
154.077	M+	22388.05	1 [C12 H10]+	4.28			Molecular Ion	669	154.1769	153.9911
155.0808	M+	3071.64	1 [C12 H10]+	1.64			Molecular Ion	98	155.1362	155.0143
41.0405	M-	395.33	1 [C3 H5]-	-46.69	C9H5	113	Fragment Ion	5	41.0629	41.0297
43.0548	M+	958.64	1 [C3 H7]+	-12.17	C9H3	111	Fragment Ion	15	43.0979	43.0375
50.0157	M+	794.64	1 [C4 H2]+	-12.68	C8H8	104.1	Fragment Ion	11	50.0588	50.0018
51.0233	M+	1233.15	1 [C4 H3]+	-6.79	C8H7	103.1	Fragment Ion	21	51.0781	50.9917
52.0299	M+	627.86	1 [C4 H4]+	17.02	C8H6	102	Fragment Ion	12	52.062	52.0163
55.0553	M+	832.37	1 [C4 H7]+	-19.56	C8H3	99	Fragment Ion	15	55.0913	55.0229
56.0599	M+	332.43	1 [C4 H8]+	37.83	C8H2	98	Fragment Ion	5	56.0956	56.0353
63.0231	M+2	1192.42	2 [C10 H6]+2	-3.04	C2H4	28	Fragment Ion	20	63.0735	63.0004
63.5252	M+2	124.88	2 [C10 H6]+2	-9.52	C2H4	28	Fragment Ion	2	63.5407	63.504
64.0316	M+	536.52	1 [C5 H4]+	-13.2	C7H6	90	Fragment Ion	10	64.0741	64.0188
65.0385	M+	646.84	1 [C5 H5]+	0.98	C7H5	89	Fragment Ion	13	65.0826	65.0129
66.0461	M+	391.73	1 [C5 H6]+	5.3	C7H4	88	Fragment Ion	8	66.0943	66.0287
67.0542	M+	448.98	1 [C5 H7]+	0.52	C7H3	87	Fragment Ion	6	67.0807	67.043
68.0586	M+	226.76	1 [C5 H8]+	50.16	C7H2	86	Fragment Ion	6	68.084	68.027

図46 [MS ピーク 1] テーブルでの [イオンタイプ]、[ニュートラルロスの式]、[ニュートラルロスの質量]、[式 & イオン種] 列の表示

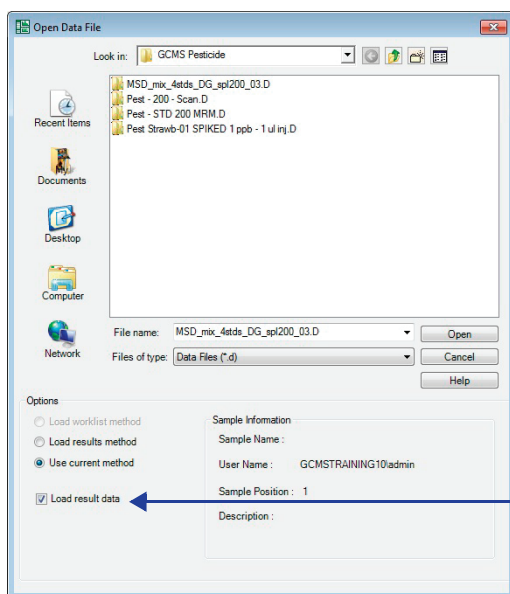
- 8 (オプション) データファイルを閉じます。
- a [ファイル] > [データファイルを閉じる] をクリックします。
- b [閉じる] をクリックします。
- ・ これらの結果を保存する方法については、75 ページの「タスク 17. 結果の保存」を参照してください。
- ・ 結果の保存方法を学習するには、次のタスクに進んでください。

タスク 17. 結果の保存

このタスクでは、現在のデータファイルの結果を保存します。

タスク 17. 結果の保存

ステップ	詳細説明	コメント
1	現在のデータファイルの結果を保存してデータファイルを閉じます。 a 【ファイル】 > 【結果の保存】 をクリックします。 b 【ファイル】 > 【データファイルを閉じる】 をクリックします。	<ul style="list-style-type: none"> データファイルとともに保存できる結果は1組だけです。現在のデータファイルにすでに結果が保存されている場合、【ファイル】 > 【結果の保存】 をクリックするとこれらの結果は上書きされます。
2	データファイルを開き、結果を読み込みます。 a 【ファイル】 > 【データファイルを開く】 をクリックします。 【データファイルを開く】 ダイアログボックスが開きます。 b データファイルを選択します。この例では、データファイル MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d を選択します。 c 【結果データの読み込み】 チェックボックスをオンにします。 d 【開く】 ボタンをクリックします。	



【結果データの読み込み】 チェックボックスをオンにします。

図47 **【データファイルを開く】** ダイアログボックス

2 検出と同定

タスク 17. 結果の保存

タスク 17. 結果の保存

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

- | | | |
|-------------|---|--|
| 3 結果を確認します。 | <ul style="list-style-type: none"> a [スペクトル同定結果] ウィンドウをクリックします。 b 結果を確認します。 | |
|-------------|---|--|

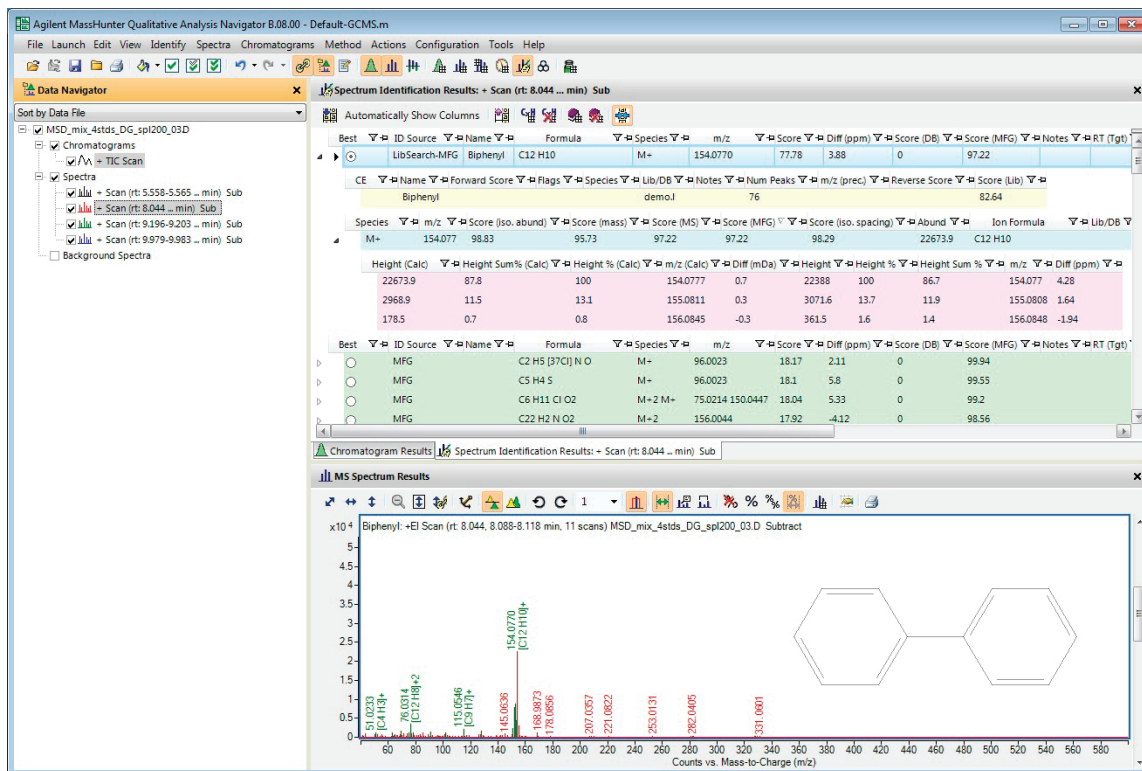


図48 1 番目のピークスペクトルに対するライブラリ検索と化学式作成の結果

- | | | |
|-----------------|--|--|
| 4 データファイルを閉じます。 | <ul style="list-style-type: none"> a [ファイル] > [データファイルを閉じる] をクリックします。 b 結果を保存するかどうか尋ねられたら、[いいえ] をクリックします。 | |
|-----------------|--|--|

タスク 17. 結果の保存

ステップ	詳細説明	コメント
5	<p>データファイルをもう一度開きます。結果は読み込みません。</p> <p>a [ファイル] > [開く] をクリックします。[データファイルを開く] ダイアログボックスが開きます。</p> <p>b データファイルを選択します。この例では、データファイル MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d を選択します。</p> <p>c [結果データの読み込み] チェックボックスをオフにします。</p> <p>d [開く] ボタンをクリックします。</p>	<p>結果を読み込まない場合、データファイルを開いたときにデフォルトで TIC が開かれます。</p>

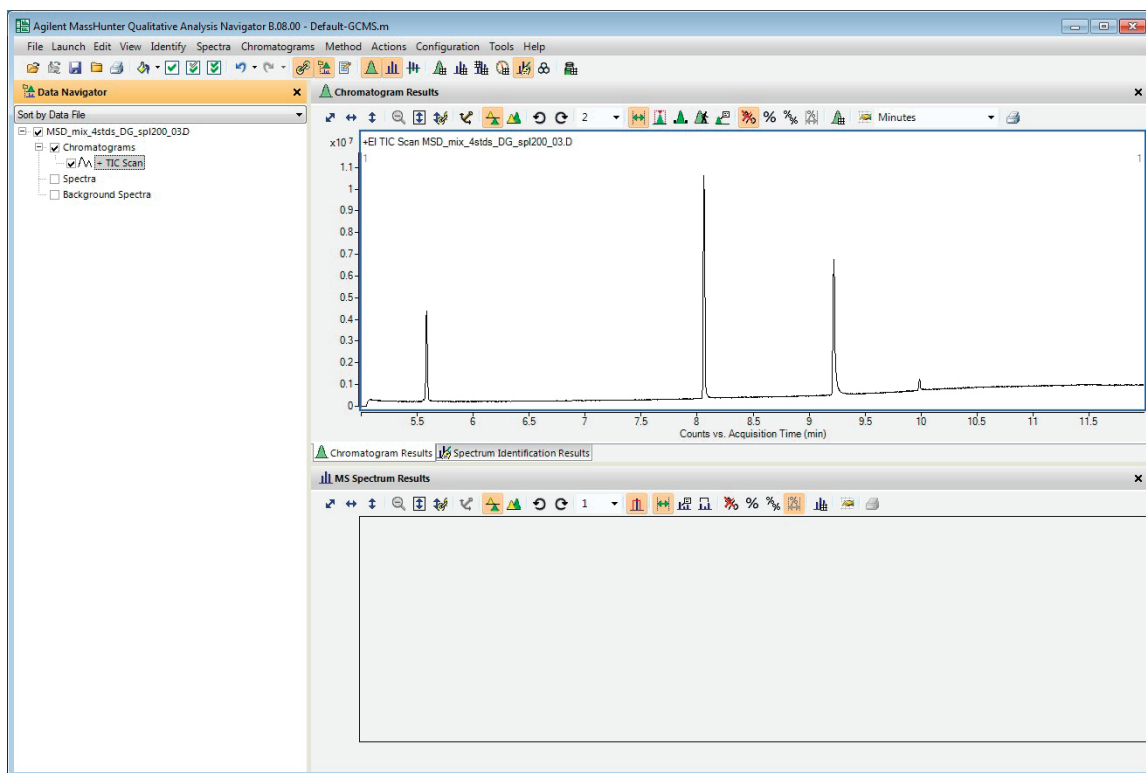


図49 1 番目のピークスペクトルに対するライブラリ検索と化学式作成の結果

- 6 データファイルを閉じます。
- a **[ファイル] > [データファイルを閉じる]** をクリックします。
- b **[いいえ]** をクリックします。

2 検出と同定

タスク 17. 結果の保存



実習3 ワークフロー、エクスポート、 および印刷

タスク 18. ターゲット/候補化合物スクリーニングワークフローの設定と実行	79
タスク 19. 化合物の探索ワークフローによるメソッドの設定と実行	83
タスク 20. カスタムワークフローによるメソッドの設定と実行	87
タスク 21. CEF ファイルのエクスポート	90
タスク 22. 解析レポートの印刷	93
タスク 23. 化合物レポートの印刷	97

これらのタスクでは、ワークフローの設定および実行方法を学習します。

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ています。

タスク 18. ターゲット/候補化合物スクリーニング ワークフローの設定と実行

定性分析ワークフロープログラムを初めて起動した場合、`default.m` メソッドが読み込まれます。GC/MS の場合、`Default-GCMS.m` メソッドから始めるのが最適です。開いたメソッドは変更して保存したり、新しいメソッドを開き、変更を加えて保存したりすることができます。`Default.m` メソッドまたは `Default-GCMS.m` メソッドを上書きすることはできません。



3 ワークフロー、エクスポート、および印刷

タスク 18. ターゲット/候補化合物スクリーニングワークフローの設定と実行

定性分析ナビゲータプログラムでは、カスタムワークフローのみ実行できます。定性分析ワークフロープログラムでは、任意のワークフローを実行できますが、カスタムワークフローの一部の処理は実行できません。化合物検出パラメータは、定性ワークフロープログラムでのみ編集できます。このタスクでは、定性ワークフロープログラムを使用します。

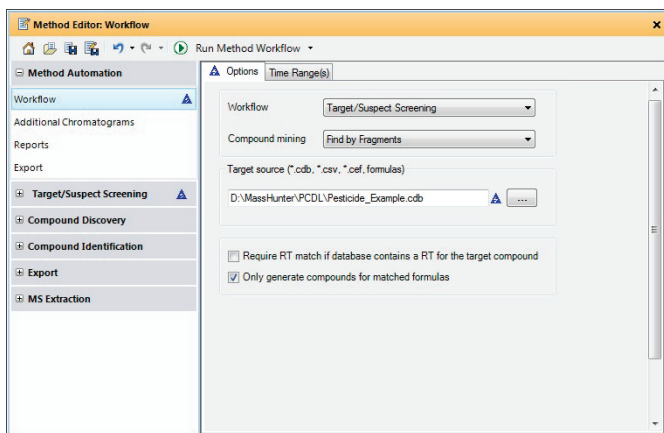
タスク 18. ターゲット/候補化合物スクリーニングワークフローの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
1 Tomato_spiked.d データファイルの TIC を開きます。	<p>a プログラムが開いていない場合、[MassHunter Qualitative Workflows] アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、[ファイル] > [データ ファイルを開く] をクリックします。</p> <p>b GCMS Pesticide デモデータファイル フォルダの Tomato_spiked.d データ ファイルをクリックします。</p> <p>c [結果データの読み込み] チェック ボックスをオフにして、[開く] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> GC/MRM データファイルには、[ターゲット/候補化合物スクリーニング] または [カスタム] ワークフローを使用できます。 GC/TOF および GC/Q-TOF ファイルには、[ターゲット/候補化合物スクリーニング]、[化合物の探索]、[カスタム] ワークフローを使用できます。 [カスタム] を選択した場合は、一部の処理は定性ワークフロープログラムでは実行できません。
2 ユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。	<p>a [コンフィグレーション] > [ウィンドウレイアウト] > [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。</p> <p>b [メソッド] > [開く] をクリックします。</p> <p>c Default-GCMS.m を選択します。</p> <p>d [OK] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> これらの例では、Default-GCMS.m メソッドから始めます。
3 ターゲット/候補化合物スクリーニングワークフローを実行するメソッドを設定します。 <ul style="list-style-type: none"> default_GC.csv をターゲットとして選択します。 	<p>a [メソッドエディタ] ウィンドウで、[自動化メソッド] > [ワークフロー] を選択します。</p> <p>b [ターゲット/候補化合物スクリーニング] をワークフローとして選択します。</p> <p>c 必要に応じて [化合物検出] アルゴリズムを選択します。この例では、[フラグメントによる検出] のみがオプションとしてあります。</p> <p>d [Pesticide_Example.cdb] を [ターゲットソース] として選択します。</p> <p>e [確認できた化合物のみレポートする] チェックボックスをオンにします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 開いているデータファイルが GC/Q-TOF または GC/TOF データファイルだけの場合、[ターゲット/候補化合物スクリーニング] ワークフローの [化合物検出] アルゴリズムのオプションとして利用できるのは、[フラグメントによる検出] のみです。 開いているデータが MRM データファイルだけの場合、[ターゲット/候補化合物スクリーニング] ワークフローの [化合物検出] アルゴリズムのオプションとして利用できるのは、[MRMによる検出] のみです。 [自動化メソッド] > [ワークフロー] セクションの [ターゲットソース] を更新すると、[ターゲット/候補化合物スクリーニング] > [フラグメントによる検出] > [ターゲットソース] タブの [ターゲットソース] も更新されます。

タスク 18. ターゲット/候補化合物スクリーニングワークフローの設定と実行

タスク 18. ターゲット/候補化合物スクリーニングワークフローの設定と実行


ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------



[ターゲット/候補化合物スクリーニング] セクションのパラメータは変更できません。

[メソッドの保存] アイコンをクリックすると、現在のメソッドが保存されます。


図50 [自動化メソッド] > [ワークフロー] セクション

- | | | |
|---|---|---|
| <p>4 ワークフローをテストして、5つの化合物が検出および確認できたことを確かめます。</p> | <ul style="list-style-type: none"> • [メソッドワークフロー実行] アイコン  をクリックします。[メソッド] > [メソッドワークフロー実行] をクリックすることもできます。 | <ul style="list-style-type: none"> • [メソッド] > [自動化メソッドの実行(ワークフロー+レポート)] をクリックすると、まずメソッドワークフローが実行され、次にレポートが作成されます。 |
| <p>5 メソッドを iii_GCexercise1 に保存します。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。</p> | <ul style="list-style-type: none"> a トップメニューから [メソッド] > [名前を付けて保存] をクリックします。 b iii_GCexercise1.m と入力します。 c [保存] ボタンをクリックします。 | <ul style="list-style-type: none"> • メソッドを保存すると、メソッドの値が変更されたことを示す青色三角形がすべて消えることを確認します。 • [メソッドの保存] アイコンをクリックすると、現在のメソッドが保存されます。 |

3 ワークフロー、エクスポート、および印刷

タスク 18. ターゲット/候補化合物スクリーニングワークフローの設定と実行

タスク 18. ターゲット/候補化合物スクリーニングワークフローの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
6	結果を確認します。	
	a [構造式ビューア] ウィンドウを閉じます。	<ul style="list-style-type: none"> 化合物重ね描きモードがオンになっています。[サンプルクロマトグラム結果] ウィンドウの赤いクロマトグラムは、2番目の化合物の化合物クロマトグラムです。
	b [表示] > [化合物フラグメントスペクトル結果] をクリックします。	
	c 必要に応じて、[化合物 クロマトグラム結果] ウィンドウで [重ね描き] アイコン  をクリックします。	
	d [化合物リスト] ウィンドウで 2 番目の化合物をクリックします。	
	e 他の化合物を確認し、結果を調べます。	
	f データファイルを閉じます。	

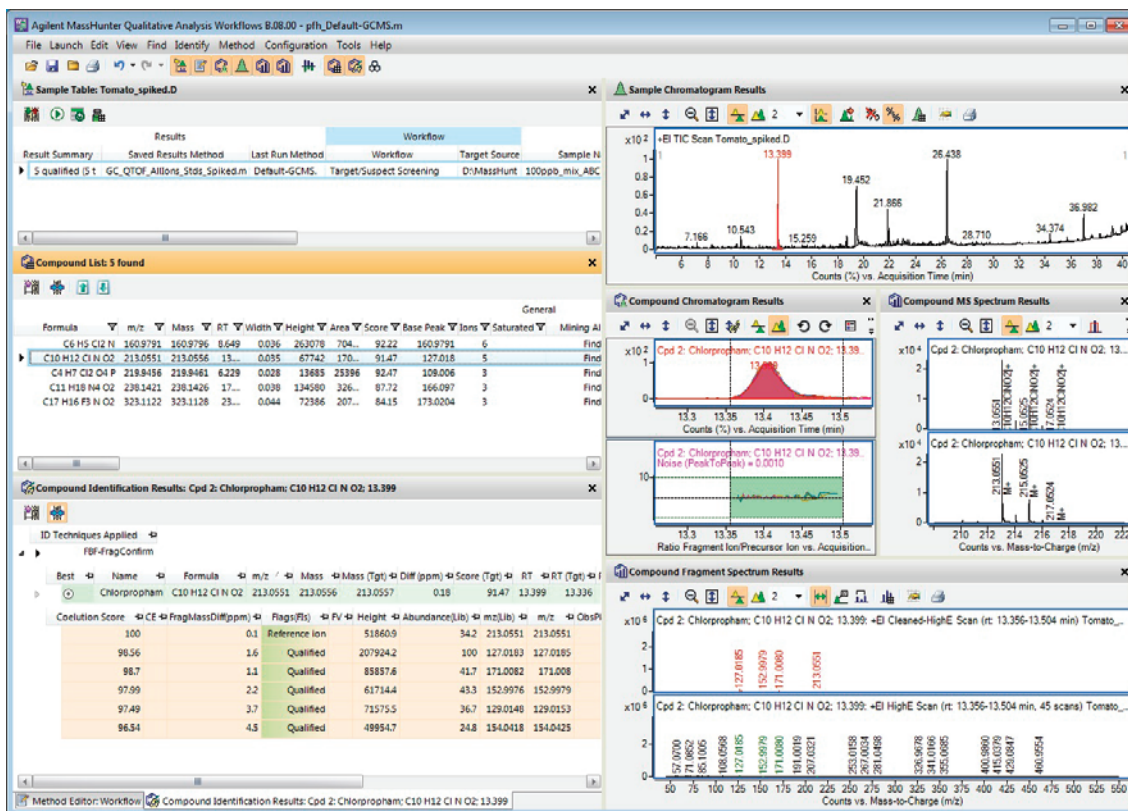


図51 ターゲット/候補化合物スクリーニングワークフローの実行後

タスク 19. 化合物の探索ワークフローによるメソッドの設定と実行

このタスクでは、化合物の探索ワークフローを実行する定性分析メソッドを設定します。このワークフローでは、選択した化合物検出アルゴリズムと同定アルゴリズムが実行されます。

定性分析ナビゲータプログラムでは、カスタムワークフローのみ実行できます。定性分析ワークフロープログラムでは、任意のワークフローを実行できますが、カスタムワークフローの一部の処理は実行できません。化合物検出パラメータは、定性ワークフロープログラムでのみ編集できます。このタスクでは、定性ワークフロープログラムを使用します。

タスク 19. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
1 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d データファイルの TIC を開きます。	<p>a プログラムが開いていない場合、【Masshunter Qualitative Analysis】 アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、【ファイル】 > 【データファイルを開く】 をクリックします。</p> <p>b GCMS Pesticide デモデータファイルフォルダの MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d をクリックします。</p> <p>c 【結果データの読み込み】 チェックボックスをオフにして 【開く】 をクリックします。</p>	
2 ユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。	<p>a 【コンフィグレーション】 > 【ウィンドウレイアウト】 > 【デフォルトレイアウトの復元】 をクリックします。</p> <p>b 【メソッド】 > 【開く】 をクリックします。</p> <p>c Default-GCMS.m を選択します。</p> <p>d 【OK】 をクリックします。</p>	<p>• これらの例では、Default-GCMS.m メソッドから始めます。</p>

3 ワークフロー、エクスポート、および印刷

タスク 19. 化合物の探索ワークフローによるメソッドの設定と実行

タスク 19. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
3 化合物の探索ワークフローを実行するメソッドを設定します。	<p>a [メソッドエディタ] ウィンドウで、[自動化メソッド] > [ワークフロー] をクリックします。</p> <p>b [化合物の探索] をワークフローとして選択します。</p> <p>デフォルトでは、[化合物検出] アルゴリズムは [化合物検出の自動選択] で、[ライブラリ/データベース検索による同定] がオンになっています。デフォルトでは、[化学式の作成による同定] の選択はオフになっています。</p>	<ul style="list-style-type: none">化合物検出の自動選択では、分析対象のデータファイルのタイプに基づいて、使用可能な化合物検出アルゴリズムの中から最適なアルゴリズムが選択されます。2つのライブラリ/データベースファイルがこのメソッドのテーブルに表示されています。

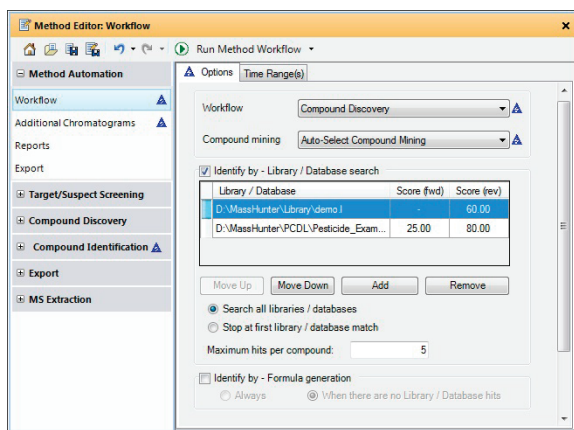


図52 ワークフローが化合物の探索の場合の [自動化メソッド] > [ワークフロー] セクション

- 4 メソッドを iii_GCexercise2 に保存します。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。
- トップメニューから **[メソッド]** > **[名前を付けて保存]** をクリックします。
 - iii_GCexercise2 と入力します。
 - [保存]** ボタンをクリックします。

タスク 19. 化合物の探索ワークフローによるメソッドの設定と実行

タスク 19. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行


ステップ	詳細説明	コメント
5 ワークフローをテストします。	<p>a [メソッドワークフロー実行] アイコン  をクリックして、ワークフローを実行します。[メソッド] > [メソッドワークフロー実行] をクリックするか、[メソッド] > [自動化メソッドの実行(ワークフロー+レポート)] をクリックすることもできます。</p> <p>b 結果を確認します。26の化合物が検出され、アバンダンスが最も高い4つの化合物が同定されました。この情報は、サンプルテーブルの【結果サマリー】列に表示されます。</p>	<ul style="list-style-type: none"> メソッドを測定ワークフローの一部として実行すると、ワークフローが実行され、レポートが作成されます。 メソッドを設定したら、[実行] ボタンをクリックします。[化合物検出] アルゴリズムが実行されます。精密質量データベース検索とスペクトルライブラリ的一致確認を組み合わせることで、すべての化合物の同定も実行されます。



図53 化合物スクリーニングワークフローの実行結果

3 ワークフロー、エクスポート、および印刷

タスク 19. 化合物の探索ワークフローによるメソッドの設定と実行

タスク 19. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
6 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。	<p>a [ファイル] > [データファイルを閉じる] をクリックします。</p> <p>b 結果の保存を求められたら、[いいえ] をクリックします。</p>	

タスク 20. カスタムワークフローによるメソッドの設定と実行

このタスクでは、特定の順序で実行する解析処理のリストを含む定性分析メソッドを設定します。処理のリストは、定性ナビゲータプログラムと定性ワークフロープログラムで異なります。

定性分析ナビゲータプログラムでは、カスタムワークフローのみ実行できます。定性分析ワークフロープログラムでは、任意のワークフローを実行できますが、カスタムワークフローの一部の処理は実行できません。化合物検出パラメータは、定性ワークフロープログラムでのみ編集できます。このタスクでは、定性分析ナビゲータプログラムを使用します。


タスク 20. カスタムワークフローによるメソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
1 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d データファイルの TIC を開きます。	<p>a プログラムが開いていない場合、[MassHunter Qualitative Navigator] アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、[ファイル] > [データファイルを開く] をクリックします。</p> <p>b GC デモデータファイルフォルダの MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d データファイルをクリックします。</p> <p>c [結果データの読み込み] チェックボックスをオフにして [開く] をクリックします。</p>	
2 ユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。	<p>a [コンフィグレーション] > [ウィンドウレイアウト] > [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。</p> <p>b [メソッド] > [開く] をクリックします。</p> <p>c Default-GCMS.m を選択します。</p> <p>d [OK] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> これらの例では、Default-GCMS.m メソッドから始めます。
3 処理をカスタムワークフローに追加します。	<p>a 必要に応じて [表示] > [メソッドエディタ] をクリックします。</p> <p>b [メソッドエディタ] ウィンドウで、[自動化メソッド] > [ワークフロー] を選択します。</p> <p>c [ワークフロー] として [カスタム] を選択します。 デフォルトでは、カスタムワークフローは、追加クロマトグラムを抽出し、ピークスペクトルを積分および抽出し、選択されたスペクトルを同定します。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 処理は、実行する処理リストに示されている順序で実行されます。リストの項目の順序は、[オプション] タブの矢印ボタンを使用して変更できます。

3 ワークフロー、エクスポート、および印刷

タスク 20. カスタムワークフローによるメソッドの設定と実行

タスク 20. カスタムワークフローによるメソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
4 [選択スペクトルの同定] 処理のパラメータを確認します。	<p>a [メソッドエディタ] ウィンドウで [スペクトルの同定] > [同定ワークフロー] セクションをクリックします。</p> <p>b パラメータを確認します。</p> <p>c [データベース検索設定] タブをクリックします。</p> <p>d パラメータを確認します。</p> <p>e [ライブラリ検索設定] タブをクリックします。</p> <p>f パラメータを確認します。</p>	<p>• [メソッドエクスプローラ] の他のセクションに、青色三角形が表示されていることを確認してください。これは、他の場所でも同じパラメータ値が変更されたことを示します。</p>
5 メソッドを iii_GCexercise3 に保存します。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。	<p>a トップメニューから [メソッド] > [名前を付けて保存] をクリックします。</p> <p>b iii_GCexercise3 と入力します。</p> <p>c [保存] ボタンをクリックします。</p>	
6 カスタムワークフローをテストします。	<p>a [メソッドエディタ] ウィンドウで [自動化メソッド] > [ワークフロー] セクションをクリックします。</p> <p>b [メソッドワークフロー実行] アイコン  をクリックし、データファイルでワークフローを実行します。[メソッド] > [メソッドワークフロー実行] をクリックすることもできます。</p>	

タスク 20. カスタムワークフローによるメソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
7	<p>結果を確認します。</p> <p>a [スペクトル同定結果] タブをクリックして、[スペクトル同定結果] ウィンドウを表示します。このウィンドウは、[クロマトグラム結果] と同じウィンドウにタブ表示されます。</p> <p>b 9.2 分のスペクトルをクリックします。</p> <p>c [表示] > [結果の差] をクリックします。</p> <p>d [表示] > [構造式ビューア] をクリックします。</p> <p>e 結果を確認します。</p>	<ul style="list-style-type: none"> カスタムワークフローを実行した場合、[自動化メソッドの実行(ワークフロー+レポート)] をクリックすると、レポートが作成されます。 [スペクトル差異結果] ウィンドウは [MSスペクトル結果] と同じウィンドウにタブ表示されます。

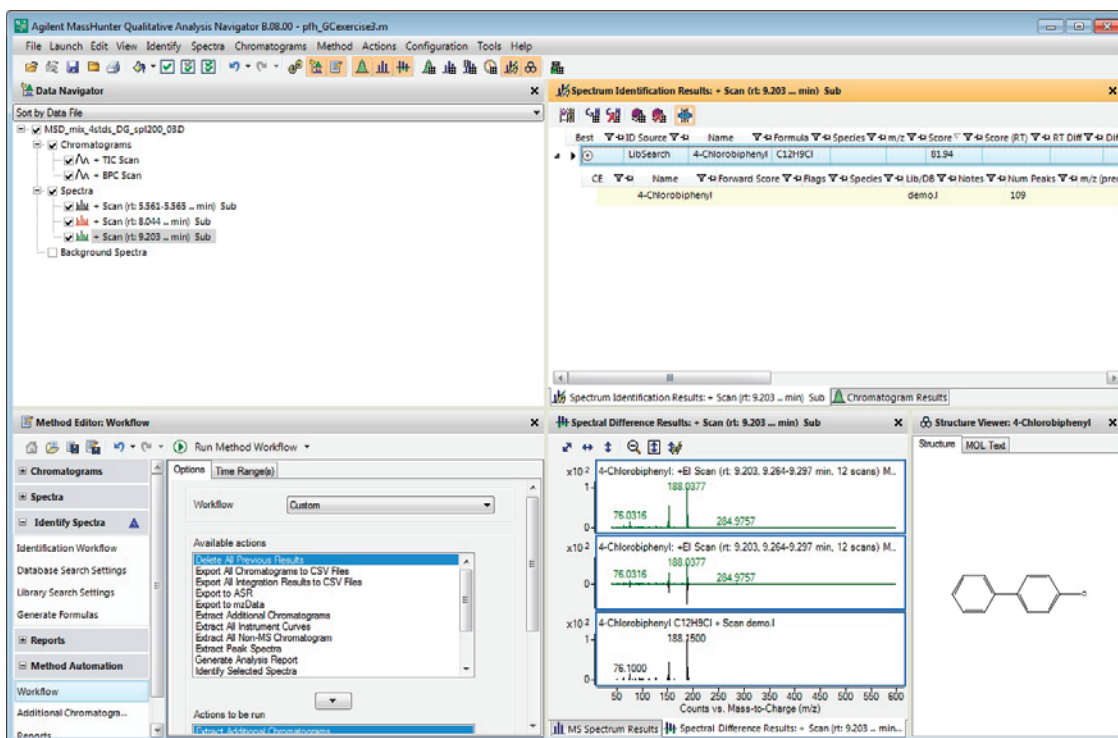


図54 定性分析ナビゲータプログラムでのカスタムワークフローの実行結果

- 8 結果を保存せずに、データファイル
- [ファイル] > [データファイルを閉じる] をクリックします。
 - 結果の保存を求められたら、[いいえ] をクリックします。

3 ワークフロー、エクスポート、および印刷 タスク 21. CEF ファイルのエクスポート

タスク 21. CEF ファイルのエクスポート

化合物情報を記録した CEF ファイルをエクスポートできます。この CEF ファイルは、MassHunter Mass Profiler や Mass Profiler Professional などの他のプログラムにインポートできます。CEF ファイルは、MassHunter 定性ワークフロープログラムからのみエクスポートできます。

タスク 21. CEF ファイルのエクスポート

ステップ	詳細説明	コメント
1 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d データファイルを開きます。	<p>a プログラムが開いていない場合、[MassHunter Qualitative Workflows] アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、[ファイル] > [データファイルを開く] をクリックします。</p> <p>b GCMS Pesticide フォルダの MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d をクリックします。</p> <p>c [結果データの読み込み] チェックボックスをオフにします。</p> <p>d [開く] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none">• CEF ファイルは、対話形式、または [自動化メソッドの実行(ワークフロー+レポート)] の実行時にエクスポートできます。
2 ユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。	<p>a [コンフィグレーション] > [ウィンドウレイアウト] > [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。</p> <p>b [メソッド] > [開く] をクリックします。</p> <p>c Default-GCMS.m を選択します。</p> <p>d [OK] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none">• これらの例では、Default-GCMS.m メソッドから始めます。
3 化合物を検出します。	<ul style="list-style-type: none">• 化合物検出アルゴリズムを実行します。たとえば、[検出] > [Molecular Featureによる検出] をクリックします。	<ul style="list-style-type: none">• CEF ファイルを使用して化合物がエクスポートされます。

タスク 21. CEF ファイルのエクスポート (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
4	<p>CEF ファイルをエクスポートします。</p> <p>a ファイルを対話的にエクスポートするには、[ファイル] > [エクスポート] > [CEF形式] をクリックします。</p> <p>b [すべての結果] オプションをクリックします。</p> <p>c エクスポートファイルの保存先を選択します。</p> <p>d [OK] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> CEF ファイルは、Mass Profiler Professional ソフトウェアや MassHunter Mass Profiler ソフトウェアにインポートできます。

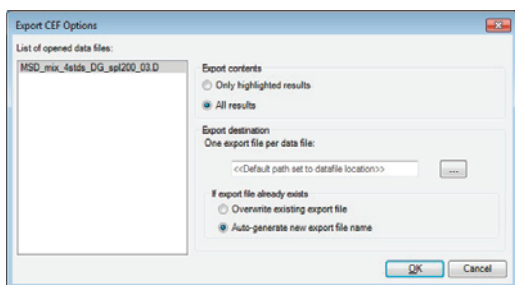


図55 [CEFエクスポートオプション] ダイアログボックス

5	<p>CEF ファイルをエクスポートするメソッドを編集します。</p> <p>a [メソッドエディタ] タブをクリックして、[メソッドエディタ] ウィンドウを表示します。デフォルトでは、[化合物同定結果] ウィンドウは [クロマトグラム結果] と同じウィンドウにタブ表示されます。</p> <p>b [自動化メソッド] > [エクスポート] をクリックします。</p> <p>c [CEF] チェックボックスをオンにします。</p> <p>d このセクションで他のパラメータを確認します。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 結果は複数のフォーマットでエクスポートできます。 一部のアルゴリズムについては、エクスポートパラメータを変更できません。CEF ファイルをエクスポートする場合は、追加パラメータを指定しません。
---	---	---

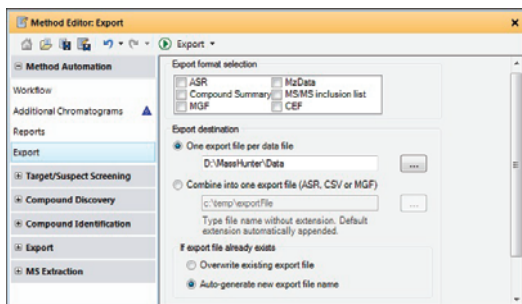



図56 [メソッドエディタ] ウィンドウの [自動化メソッド] > [エクスポート] セクション

3 ワークフロー、エクスポート、および印刷 タスク 21. CEF ファイルのエクスポート

タスク 21. CEF ファイルのエクスポート (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
6 自動化メソッドの実行 (ワークフロー+レポート)アルゴリズムを実行します。	<p>a [自動化メソッド] > [ワークフロー] をクリックします。</p> <p>b [メソッド] > [自動化メソッドの実行 (ワークフロー+レポート)] をクリックします。実行アイコン  矢印をクリックして、データファイルでワークフローを実行することもできます。</p>	<ul style="list-style-type: none"> • [自動化メソッドの実行 (ワークフロー+レポート)] を実行すると、以下のアルゴリズムが実行されます。 <ul style="list-style-type: none"> • メソッドワークフロー • 追加クロマトグラムの抽出 • レポートの作成 • エクスポート結果

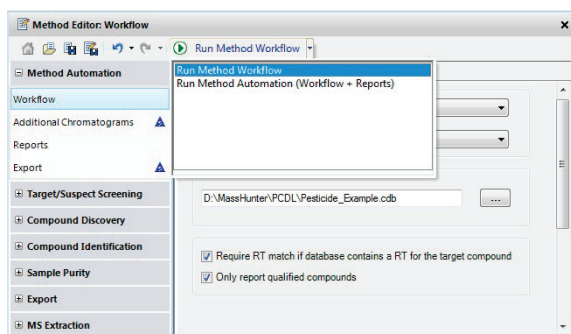


図57 [自動化メソッド] > [ワークフロー] セクションの実行オプションの表示。

- | | |
|--|---|
| 7 メソッドを iii_GCexercise4 に保存します。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。 | <p>a トップメニューから [メソッド] > [名前を付けて保存] をクリックします。</p> <p>b iii_GCexercise4 と入力します。</p> <p>c [保存] ボタンをクリックします。</p> |
|--|---|

タスク 22. 解析レポートの印刷

定性分析ナビゲータプログラムで解析レポートを印刷する際には、この説明を参照してください。

解析レポートには、クロマトグラムの抽出や積分、スペクトルの抽出、ピークスペクトルに関するデータベースの検索、またはピークスペクトルからの化学式の作成の結果を含めることができます。

タスク 22. 解析レポートの印刷

ステップ	詳細説明	コメント
1	<p>MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d が読み込まれていない場合は、このデータファイルを開き 87 ページの「タスク 20. カスタムワークフローによるメソッドの設定と実行」で作成した iii_GCexercise3.m メソッドのワークフローを実行します。</p> <p>a プログラムが開いていない場合は、[MassHunter Qualitative Navigator] アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、[ファイル] > [データファイルを開く] をクリックします。</p> <p>b GC デモデータファイルフォルダの MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d データファイルをクリックします。</p> <p>c [結果データの読み込み] チェックボックスをオフにします。</p> <p>d [現在のメソッドを使用] ボタンをクリックして [開く] をクリックします。</p> <p>e [メソッド] > [メソッドワークフロー実行] をクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 87 ページの「タスク 20. カスタムワークフローによるメソッドの設定と実行」を完了している場合、現在のメソッドは iii_GCexercise3.m になっています。このメソッドは、追加クロマトグラムを抽出し、ピークスペクトルを積分および抽出し、選択されたスペクトルを同定するように設定されています。 解析レポートには、積分情報とスペクトル情報が含まれます。スペクトルを同定したら、このレポートにその情報を含めることができます。
2	<p>メソッドの解析レポートの選択を変更します。</p> <ul style="list-style-type: none"> 印刷するクロマトグラム、スペクトル、またはテーブルのチェックボックスをオンにします。 印刷しないクロマトグラム、スペクトル、またはテーブルのチェックボックスをオフにします。 <p>a [表示] > [メソッドエディタ] をクリックします。</p> <p>b [メソッドエディタ] ウィンドウで [レポート] > [解析レポート] をクリックします。</p> <p>c 印刷する追加選択項目のチェックボックスをオンにします。</p> <p>d 印刷しない項目のチェックボックスをオフにします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 解析レポートには、このセクションで選択した情報のみが含まれます。 [自動化メソッド] > [レポート] をクリックして、レポートパラメータを設定することもできます。ここで行った変更は [レポート] セクションに反映されます。逆の場合も同じです。 このセクションで選択されている場合でも、結果データでその情報が得られないときは、その結果はレポートに含まれません。たとえば、クロマトグラムを積分していない場合、積分ピークテーブルはレポートに含まれません。

3 ワークフロー、エクスポート、および印刷 タスク 22. 解析レポートの印刷

タスク 22. 解析レポートの印刷 (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

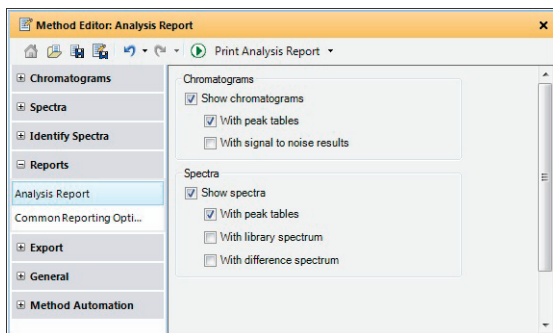
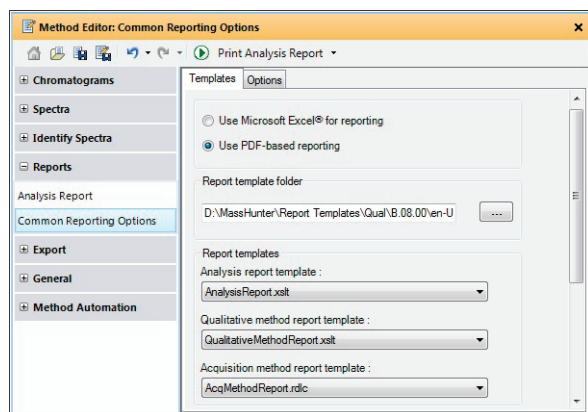


図58 [メソッドエディタ] ウィンドウの [解析レポート] セクション

- 3 テンプレートパラメータを確認し
ます。
- a [メソッドエディタ]ウィンドウで、[レ
ポート]>[共通レポートオプション]を
クリックします。
- b (オプション) 異なる解析レポートテ
ンプレートを選択します。
- ・ さまざまなレポートテンプレート
を使用できます。これらのテンプ
レートにはさまざまな情報が含ま
れています。





Microsoft Excel レポートを使用するか、PDF レポートを使用するか選択できます。

[Microsoft Excel レポートを使用する] をクリックした場合、さらに、さまざまなテンプレートを選択できます。Excel を使用して選択したテンプレートを変更することができません。テンプレートの変更方法の詳細については、レポートデザイナのオンラインヘルプを参照してください。

図59 [メソッドエディタ] ウィンドウの [共通レポートオプション] > [テンプレート] タブ

タスク 22. 解析レポートの印刷 (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
4 レポートを印刷します。	<p>a 以下のいずれかの方法で、レポートを印刷します。</p> <ul style="list-style-type: none"> • メインメニューから [ファイル] > [印刷] > [解析レポート] をクリックします。 • メインツールバーから [プリンタ] アイコンをクリックします。 • [解析レポート] セクションが選択されている状態で [メソッドエディタ] ツールバーの [解析レポートの印刷] アイコン  をクリックします。 • [メソッドエディタ] の [解析レポート] セクションをクリックし [解析レポートの印刷] をクリックします。 • [データナビゲータ] のデータファイルショートカットメニューから、[解析レポート] をクリックします。 <p>b [レポート内容] のいずれかのオプションをクリックします。</p> <p>c (オプション) [データファイルごとに個別のレポート] チェックボックスをオンにします。</p> <p>d [レポートの印刷] チェックボックスをオンにして、プリンタを選択します。</p> <p>e [印刷プレビュー] チェックボックスをオンにします。</p> <p>f [OK] ボタンをクリックします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> • [メソッドエディタ] ツールバーの [実行] アイコン  では、複数のアイテムから実行する処理を選択できる場合もあります。たとえば、[メソッドエディタ] ウィンドウの [レポート] > [共通レポートオプション] セクションに切り替えた場合、[実行] アイコンでは4つの異なる処理が使用可能です。矢印をクリックすると、可能な処理のリストが示され、どの処理を実行するかを選択できます。リストから違う処理を選択すると、デフォルトの処理が変更されます。[実行] ボタンをクリックすると、現在のデフォルトの処理が実行されます。 • [メソッド] > [自動化メソッドの実行(ワークフロー+レポート)] をクリックすると、メソッドワークフローが実行されます。次に、追加クロマトグラムが抽出され、レポートが印刷されます。最後に、エクスポートファイルが作成されます ([自動化メソッド] > [エクスポート] セクションで選択されている場合)。

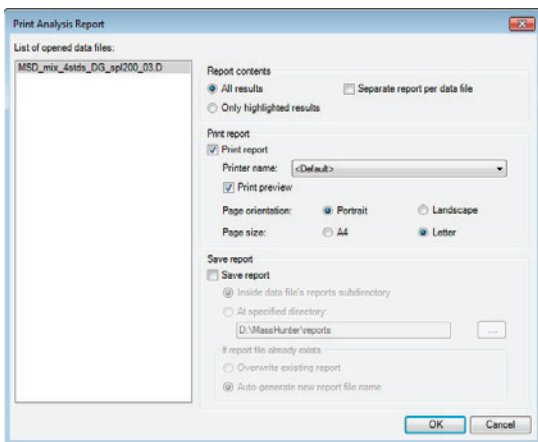


図60 [解析レポートの印刷] ダイアログボックス

3 ワークフロー、エクスポート、および印刷 タスク 22. 解析レポートの印刷

タスク 22. 解析レポートの印刷 (続き)

ステップ	詳細説明	コメント
------	------	------

- | | | |
|---|------------------------------------|--|
| g | レポートを確認します。 | |
| h | ツールバーで [印刷プレビューを閉じる] アイコンをクリックします。 | |

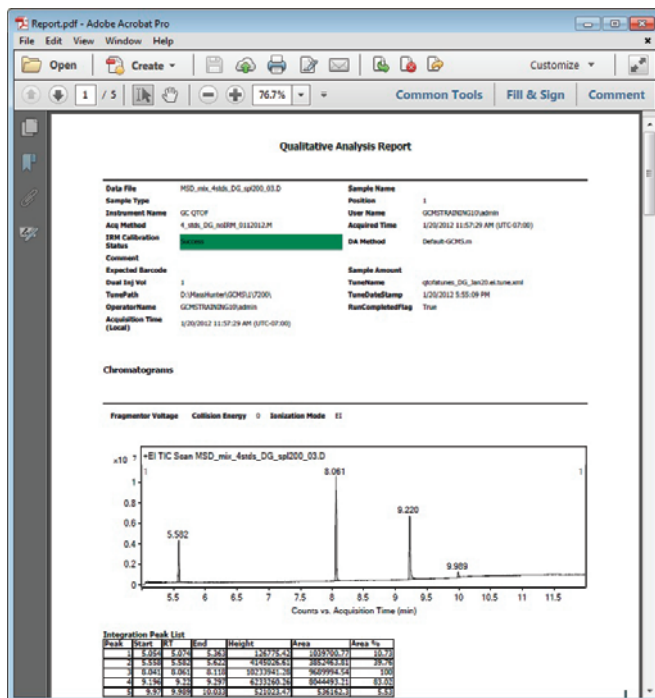


図61 解析レポートのプレビュー

タスク 23. 化合物レポートの印刷

化合物レポートを印刷する際には、以下の手順を実行します。定性ワークフロープログラムから化合物レポートを印刷します。

タスク 23. 化合物レポートの印刷

ステップ	詳細説明	コメント	
1	<p>MSD_mix_4stds_DG_spi200_03.d が読み込まれていなければ、このデータファイルを開き 83 ページの「タスク 19. 化合物の探索ワークフローによるメソッドの設定と実行」で作成した iii_GCexercise2.m メソッドのワークフローを実行します。</p>	<p>a プログラムが開いていない場合、[MassHunter Qualitative Workflows] アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、[ファイル] > [データファイルを開く] をクリックします。</p> <p>b GC デモデータファイルフォルダの MSD_mix_4stds_DG_spi200_03.d データファイルをクリックします。</p> <p>c [結果データの読み込み] チェックボックスをオフにします。</p> <p>d [現在のメソッドを使用] ボタンをクリックして [開く] をクリックします。</p>	<p>• 83 ページの「タスク 19. 化合物の探索ワークフローによるメソッドの設定と実行」を完了している場合、現在のメソッドは iii_GCexercise2.m になっています。このメソッドのワークフローは化合物の探索です。化合物検出アルゴリズムが自動的に選択され、[ライブラリ/データベース検索による同定] オプションが選択されます。</p>
2	<p>ワークフローを実行します。</p> <ul style="list-style-type: none"> 化合物レポートには化合物テーブルが含まれます。 	<p>• [メソッド] > [メソッドワークフロー実行] をクリックします。</p>	<p>• 化合物検出アルゴリズムが自動的に選択されます。</p> <p>• ライブラリ/データベース検索アルゴリズムが化合物に対して実行されます。</p>
3	<p>選択したテンプレートを確認します。</p> <ul style="list-style-type: none"> 別のテンプレートを選択する場合は、選択されているワークフローを理解し、どのレポートテンプレートのパラメータを変更するか知っている必要があります。 [Microsoft Excel レポートを使用する] をクリックすると、Excel および Report Designer アドインを使用して、拡張子 XLTX を持つテンプレートをカスタマイズすることができます。測定メソッドレポートのカスタマイズはできません。 	<p>a [メソッドエディタ] で、[自動化メソッド] > [レポート] をクリックします。</p> <p>b [テンプレート] タブをクリックします。</p> <p>c (オプション) [ターゲットスクリーニングレポートのテンプレート] として、別のレポートテンプレートを選択します。</p> <p>d (オプション) [化合物の探索レポートのテンプレート] として、別のレポートテンプレートを選択します。</p> <p>e (オプション) [サンプル純度レポートのテンプレート] として、別のレポートテンプレートを選択します。</p> <p>f (オプション) [化合物レポートのテンプレート] として、別のレポートテンプレートを選択します。</p>	<p>• 化合物レポートを印刷する場合に使用できるレポートテンプレートは、現在のワークフローによって異なります。</p> <p>• ターゲットスクリーニングレポートのテンプレートは、ターゲット/候補化合物スクリーニングワークフローで使用されます。</p> <p>• 化合物の探索レポートのテンプレートは、化合物の探索ワークフローで使用されます。</p> <p>• 化合物レポートのテンプレートは、カスタムワークフローで使用されます。</p> <p>• 現在のワークフローは、[自動化メソッド] > [ワークフロー] セクションで選択されます。</p>

3 ワークフロー、エクスポート、および印刷 タスク 23. 化合物レポートの印刷

タスク 23. 化合物レポートの印刷

ステップ	詳細説明	コメント
4	<p>化合物レポートに対するメソッド設定の一部を変更します。</p> <ul style="list-style-type: none"> 拡大された指定ピークの MS スペクトルの表示をオフにします。 レポートの MS/MS オプションをオフにします。 <p>a [コンテンツ] タブをクリックします。</p> <p>b [MSスペクトルの表示 (指定ピークの拡大表示)] チェックボックスをオフにします。</p> <p>c 表示されている場合、[MS/MSスペクトルの表示] チェックボックスをオフにします。</p> <p>d 表示されている場合、[MS/MSピークテーブルの表示] チェックボックスをオフにします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> これらのチェックボックスから、レポートに含める情報を指定します (情報が使用できる場合)。情報が使用できない場合、該当セクションは自動的に省略されます。たとえば、データファイルに MS データしかない場合、MS/MS結果がレポートに含まれることはありません。 開いているデータファイルに MS データしか含まれていない場合は、[化合物スペクトル (MS/MS)] セクションは表示されません。 GC/MS データの場合、[化合物クロマトグラムの重ね描き] チェックボックスをオフにします。

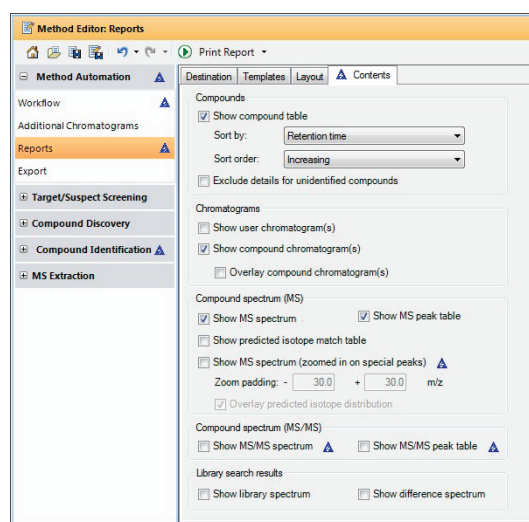
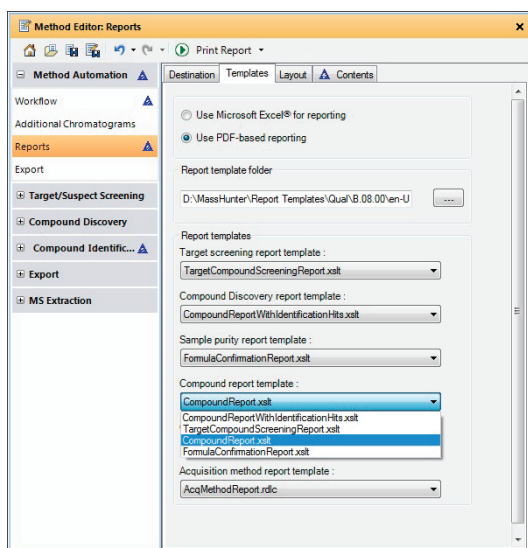



図62 [メソッドエディタ]の[化合物レポート]セクション

タスク 23. 化合物レポートの印刷

ステップ

5 レポートを印刷します。

詳細説明

- a **【ファイル】 > 【印刷】 > 【化合物レポート】** をクリックします。**【レポートの印刷】** アイコン  をクリックして化合物レポートを印刷する場合、レポートはすぐに印刷されます。
- b **【印刷プレビュー】** 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。レポートを確認します。
- d **【印刷プレビューを閉じる】** アイコンをクリックします。

コメント

・【化合物レポートの印刷】ダイアログボックスでは、プリンタの選択、PDF または Excel ファイルへのレポートの保存の選択、すべての結果またはハイライトした結果のみの内容の選択、およびさまざまなデータファイルを 1 つのレポートにまとめるかどうかの選択ができます。

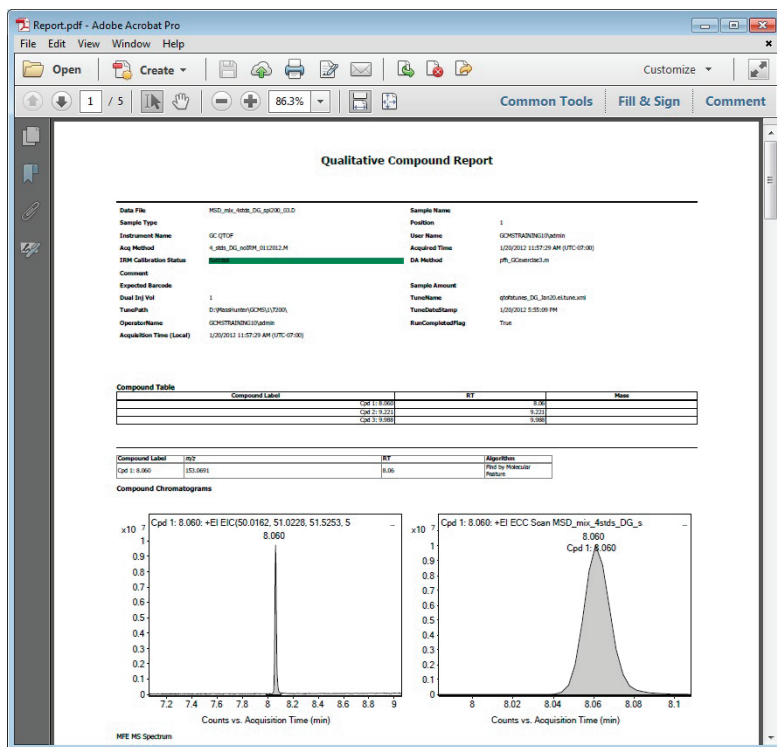


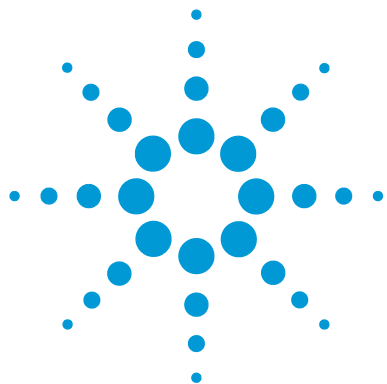
図63 化合物レポートの【印刷プレビュー】ウィンドウ

6 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。

- a **【ファイル】 > 【データファイルを閉じる】** をクリックします。
- b 結果の保存を求められたら **【いいえ】** をクリックします。

3 ワークフロー、エクスポート、および印刷

タスク 23. 化合物レポートの印刷



リファレンス

定性分析ナビゲータプログラム	102
主要な機能	102
ウィンドウ - 定性分析ナビゲータプログラム	106
定性分析ワークフロープログラム	116
主要な機能	116
ウィンドウ - 定性分析ワークフロー	118
定性分析ナビゲータとワークフロー	130
レイアウト	130
レポートテンプレートのカスタマイズ	132



定性分析ナビゲータプログラム

主要な機能

定性分析ナビゲータプログラムを初めて開いたとき、3つのパートが表示されます。(1)メニューバー(2)ツールバー(3)メインウィンドウです。主要機能の画面を図64に示します。

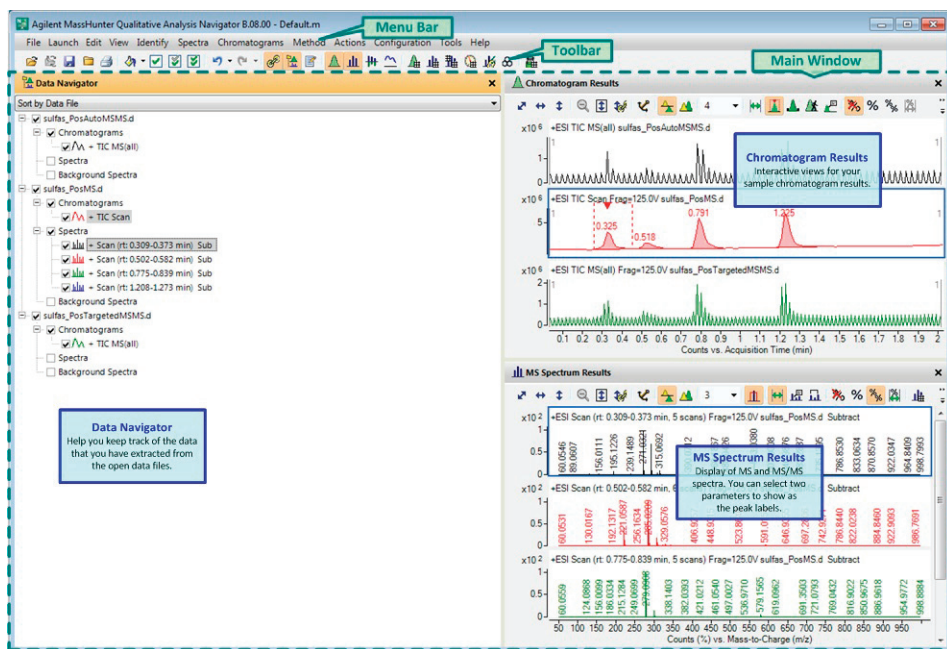


図64 定性分析ナビゲータプログラムの概要

1. メニューバー

メニューバー (図 65) には、クロマトグラムとスペクトルの抽出、スペクトルの同定、レポートの印刷とエクスポート、定性分析ワークフロープログラムまたは BioConfirm プログラムの起動に使用するアクションが表示されます。各メニューについては、オンラインヘルプで説明されています。

File Launch Edit View Identify Spectra Chromatograms Method Actions Configuration Tools Help

図65 定性分析ナビゲータプログラムのメニューバー

2. ツールバー

ツールバーには、データファイルを開いたり閉じたりするのに使用するアクションが表示されます。また、ツールバーでは、メソッドのオープンと保存、化合物レポートの印刷、ウィンドウの表示または非表示の切り替えも可能です。



図66 定性分析ナビゲータプログラムのツールバー

ツールバーアイコン	処理
	[ファイル] > [データファイルを開く] [ファイル] > [データファイルの更新] [ファイル] > [結果の保存] [ファイル] > [データファイルを閉じる] [ファイル] > [印刷] > [解析レポート] [編集] > [色の選択]
	[編集] > [表示] > [ハイライト] [編集] > [表示] > [ハイライトされたもののみ] [編集] > [表示] > [すべての項目] [編集] > [元に戻す] [編集] > [やり直し]
	[表示] > [リンクナビゲーション] [表示] > [データナビゲータ] [表示] > [メソッドエディタ]

ツールバーアイコン	処理
	クロマトグラム結果ウィンドウ MS スペクトル結果ウィンドウ 結果の差ウィンドウ UV スペクトル結果ウィンドウ
	積分ピークリストウィンドウ MSスペクトルピークリスト1ウィンドウ MSスペクトルピークリスト2ウィンドウ MS実測値ウィンドウ
	スペクトル同定結果ウィンドウ 構造式ビューアウィンドウ サンプル情報ウィンドウ

3. メインウィンドウ

メインウィンドウ（102 ページの  64 を参照）は、さらに以下のウィンドウに分割されます（最大 17 個）。

- データナビゲータ
- メソッドエディタ
- クロマトグラム結果
- スペクトルプレビュー
- MS スペクトル結果
- 再キャリブレーション
- 結果の差
- UVスペクトル結果
- 積分ピークリスト
- MSスペクトルピークリスト1
- MSスペクトルピークリスト2
- MS実測値
- スペクトル同定結果
- 構造式ビューア
- サンプル情報
- 化学式計算ツール
- 質量計算ツール

上記のウィンドウのうち、スペクトルプレビューと再キャリブレーションの2つは、他のウィンドウから開始されます。また、上記のウィンドウのうち、化学式計算ツールと質量計算ツールの2つは、[ツール]メニューから開始されず。定性分析ナビゲータプログラムを初めて開いたとき、デフォルトレイアウトとして表示されるのは、[データナビゲータ]、[クロマトグラム結果]、[MSスペクトル結果]の3つのウィンドウです。

ウィンドウ - 定性分析ナビゲータ プログラム

データナビゲータ [データナビゲータ] では、データファイルまたはデータタイプを使用して、抽出やスペクトルなどの結果すべてを並べ替えることができます。データファイルで並べ替えた場合、抽出されたすべてのクロマトグラムが、各データファイルの [クロマトグラム] の下に表示されます。抽出されたスペクトルのすべてが、[スペクトル] または [バックグラウンドスペクトル] の下に表示されます。

クロマトグラムまたはスペクトルをクリックすると、対応するプロットがプロットウィンドウ内で自動的にハイライトされ、テーブルを含むウィンドウが更新されます。リンクナビゲーションを有効にすると（[表示] > [リンクナビゲーション]）、追加クロマトグラムのクロマトグラムから抽出されたスペクトルもアクティブになります。（またはその反対）[データナビゲータ] のクロマトグラムをハイライトすると、対応するスペクトルもハイライトされます。対応するクロマトグラムとスペクトルグラフィック結果もハイライトされます。[リンクナビゲーション] は、[クロマトグラム] メニューの [ピークスペクトルの積分と抽出] コマンドを使用した場合に限り機能します。

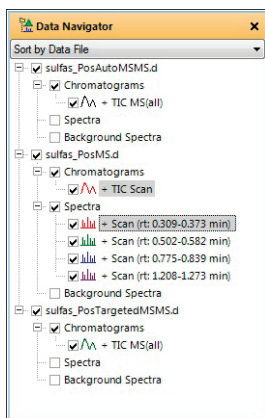


図67 3つのデータファイルが開いている状態の [データナビゲータ] ウィンドウ

メソッドエディタ このウィンドウでは、メソッドパラメータを編集できます。これらのパラメータは異なるタブに分かれており、関連するタブがさまざまなセクションにグループ分けされています。ウィンドウの左側には、さまざまなセクションが表示されます。F1 キーを押すと、現在のセクションで表示されているタブに関するヘルプを表示できます。

ウィンドウ - 定性分析ナビゲータプログラム

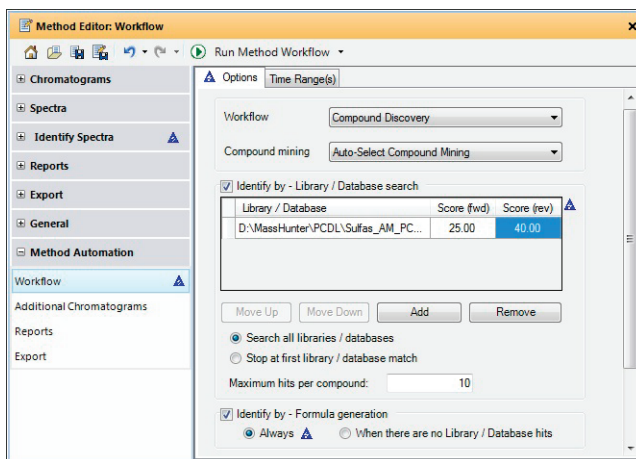


図68 メソッドエディタウィンドウ

クロマトグラム結果 このウィンドウには、任意のクロマトグラムが表示されます。異なるファイルからの複数のクロマトグラムを同時に表示できます。これらのクロマトグラムは、重ね描きモードまたはリストモードで表示できます。図 69 には、リストモードのクロマトグラムが示されています。



図69 3つのクロマトグラムをリストモードで表示している [クロマトグラム結果] ウィンドウ

クロマトグラムの操作


クロマトグラムに対して多くの操作を実行できます。

ウィンドウ - 定性分析ナビゲータプログラム

- ウィンドウのプロット表示は、[クロマトグラム結果] ツールバーのアイコンを使用して変更できます。
- [クロマトグラム] メニューを使用すると、その他のクロマトグラム、マススペクトル、プロセスクロマトグラムを抽出できます。
- ショートカットメニューを使用して多くの操作を開始できます。[クロマトグラム結果] ウィンドウでクロマトグラムを右クリックすると、ショートカットメニューが表示されます。

詳細は、オンラインヘルプを参照してください。以下のテーブルに使用可能な操作の一部を示します。

処理	操作方法
クロマトグラムのピークラベルの変更	[クロマトグラム結果] ツールバーの  をクリックします。
クロマトグラムの抽出	[クロマトグラム] > [クロマトグラムの抽出]
追加クロマトグラムの抽出	[クロマトグラム] > [追加クロマトグラムの抽出]
クロマトグラムの積分	[クロマトグラム] > [クロマトグラムの積分]
ピークスペクトルの積分と抽出	[クロマトグラム] > [ピークスペクトルの積分と抽出]
クロマトグラムのスムージング	[クロマトグラム] > [クロマトグラムのスムージング]
S/N比の計算	[クロマトグラム] > [S/N比の計算]

スペクトルプレビュー データファイルのスペクトルを素早くスキャンするのに使用します。[クロマトグラム結果] ウィンドウで [クロマトグラムを進める] ツール () を選択すると、このウィンドウが開きます。このウィンドウに表示されたスペクトルは、スペクトルをスペクトルセクションにコピーしなければ [データナビゲータ] ウィンドウには保持されません。

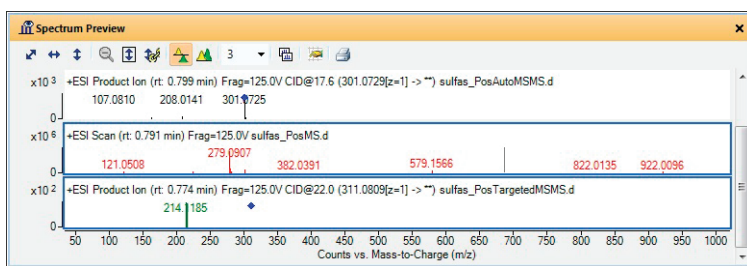


図70 3つのデータファイルのスペクトルが表示されている [スペクトルプレビュー] ウィンドウ

MS スペクトル結果 このウィンドウには MS および MS/MS スペクトルが表示されます。注釈と質量差をこれらのスペクトルに追加できます。[MS および MS/MS スペクトルの表示オプション] ダイアログボックスで、ピークラベルおよびフォントを変更できます。ライブラリ検索を実行してスペクトルを同定した場合、そのスペクトルのペインに構造式が表示される場合があります。また、(化学式の作成からの) 予測同位体分布、テキストまたはグラフィックの注釈、質量の差を計測する「質量差」などを表示することができます。

スペクトルに対して多くの操作を実行できます。

- [MS スペクトル結果] ツールバーのアイコンを使用して、ウィンドウのプロット表示を変更できます。また、ツールバーを使用して注釈および質量差を追加することもできます。
- [スペクトル] メニューを使用して、スペクトルの追加と削除、PCDL へのスペクトルの送信、およびスペクトルの再キャリブレーションを実行できます。
- ショートカットメニューを使用して多くの操作を開始できます。[クロマトグラム結果] ウィンドウでクロマトグラムを右クリックすると、ショートカットメニューが表示されます。

ツールバー、メニュー、ショートカットメニューについての詳細は、オンラインヘルプを参照してください。

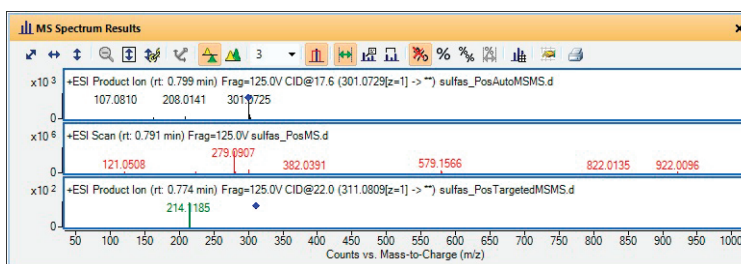


図71 3つのMSスペクトルを表示している [MS スペクトル結果] ウィンドウ

再キャリブレーション TOF または Q-TOF データの質量キャリブレーションをこのウィンドウから再キャリブレーションします。リファレンス質量リストを指定すると、システムはウィンドウを開始したスペクトルでそのリファレンス質量への一致を探します。これらの値はデータファイルへ適用できます。[MS スペクトル結果] ウィンドウのショートカットメニューからこのウィンドウを開始します。

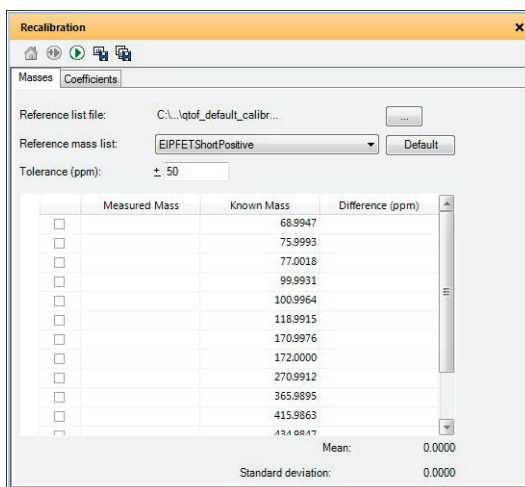


図72 再キャリブレーションウィンドウ

スペクトル結果の差 ライブラリ検索アルゴリズムを実行してライブラリ検索によりスペクトルを同定すると、ウィンドウに3つのスペクトルが表示されます。最初のスペクトルは検索されたスペクトルです。2つめのスペクトルは差スペクトルです。ライブラリからのスペクトルをユーザースペクトルから引いて、差スペクトルを作成します。3つめのスペクトルは、[スペクトル同定結果] ウィンドウで現在選択されているライブラリからのスペクトルです。

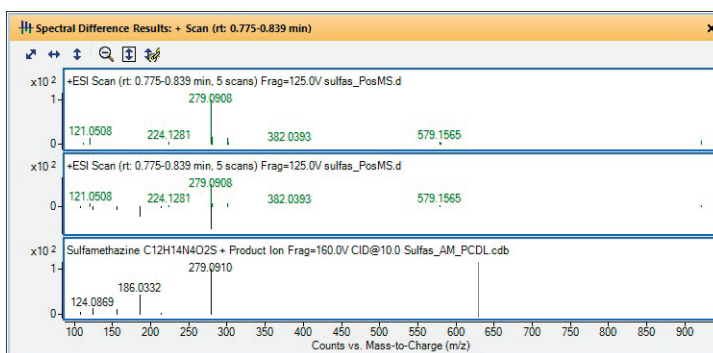


図73 スペクトル結果の差ウィンドウ

ウィンドウ - 定性分析ナビゲータプログラム

UVスペクトル結果 このウィンドウには UV スペクトルが表示されます。UV スペクトルは、MS クロマトグラムまたは UV クロマトグラム（UV データを測定してある場合）から抽出できます。UV スペクトルには、注釈を追加できます。

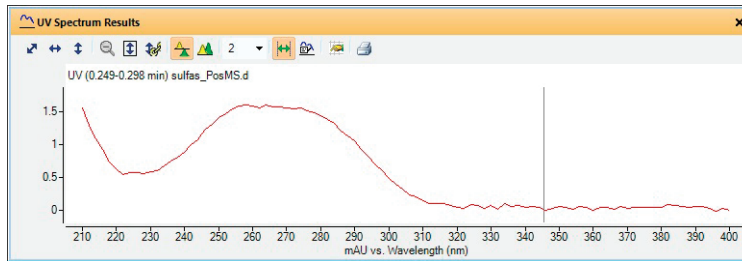


図74 UVスペクトル結果

積分ピークリスト このウィンドウには、選択したクロマトグラムの積分結果のテーブルが表示されます。クロマトグラムの各ピークは、テーブルの各行に表示されます。複数のクロマトグラムがハイライトされている場合は、データナビゲータウィンドウ上でハイライトされている最初のクロマトグラムが [積分ピークリスト] テーブルに表示されます。ショートカットメニューのコマンドを使用して、テーブルの内容を並べ替えたり、表示される列を変更したりすることができます。列をテーブル内の別の位置にドラッグできます。列のヘッダーおよびその他のセルにはさまざまなショートカットメニューがあります。

Peak	RT	Area	Area %	Height	Max Y	Base Peak	Width	Symmetry	FWHM
1	0.325	6620637.37	48.22	2518629.43	3714626.75	271.0316	0.193	1.93	0.037
2	0.518	2989417.09	21.77	805897.31	2046221.12	285.0203	0.171	2.92	0.058
3	0.791	12361740.51	90.03	4415680.64	5718803.5	279.0899	0.166	2.14	0.041
4	1.225	13731361.99	100	5097321.16	6556291	311.0796	0.244	2.31	0.038

図75 積分ピークリストウィンドウ

MS スペクトルピークリスト1とMS スペクトルピークリスト2 このテーブルには、スペクトルに含まれるピークが表示されます。スペクトルの各ポイントは、テーブルの各行に表示されます。複数のスペクトルがハイライトされている場合、このテーブルには最初のスペクトルが表示され、その他のスペクトルは [MS スペクトルピークリスト 2] ウィンドウに表示されます。ショートカットメニューのコマンドを使用して、テーブルの内容を並べ替えたり、表示

ウィンドウ - 定性分析ナビゲータプログラム

される列を変更したりすることができます。列をテーブル内の別の位置にドラッグできます。列のヘッダーおよびその他のセルにはさまざまなショートカットメニューがあります。

m/z	Abund	Max Abund	Z	Species	Formula & Ion Species	Label	Diff (ppm)
279.0908	1633490.62	1633490.62	1	(M+H) ⁺	[[C12 H14 N4 O2 S]+H] ⁺	Sulfamethazine	0.88
301.0732	233028.03	233028.03	1	(M+Na) ⁺	[[C12 H14 N4 O2 S]+Na] ⁺	Sulfamethazine	-0.67
64.0164	5103.09	5103.09					
102.127	4332.73	4332.73	1	(M+H) ⁺	[[C6 H15 N]+H] ⁺		7.39
103.9557	4402.08	4402.08					
111.0917	25555.48	25555.48		(M+H) ⁺	[[C6 H10 N2]+H] ⁺		0.07
112.0844	3044.42	3044.42					
113.1074	12734.43	12734.43	1	(M+H) ⁺	[[C6 H12 N2]+H] ⁺		-0.78
118.0865	10598.28	10598.28	1	(M+H) ⁺	[[C5 H11 N O2]+H] ⁺		-2.49

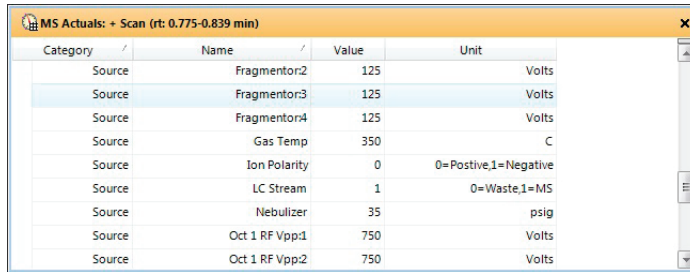
図76 MSピーク 1 ウィンドウ

m/z	Abund	Max Abund	Z	Species	Formula & Ion Species	Label	Diff (ppm)
311.0808	1446947.88	1446947.88	1	(M+H) ⁺	[[C12 H14 N4 O4 S]+H] ⁺	Sulfadimethoxine	0.19
333.0631	518946.81	518946.81	1	(M+Na) ⁺	[[C12 H14 N4 O4 S]+Na] ⁺	Sulfadimethoxine	-1
64.0163	7478.46	7478.46					
102.1272	4186.65	4186.65	1	(M+H) ⁺	[[C6 H15 N]+H] ⁺		5.59
103.9557	7038.45	7038.45					
105.9539	3094.65	3094.65					
111.0917	28786.58	28786.58	1	(M+H) ⁺	[[C6 H10 N2]+H] ⁺		-0.08
112.0857	2982.13	2982.13	1	(M+H) ⁺	[[C6 H10 N2]+H] ⁺		77.93
113.1072	15174.63	15174.63	1	(M+H) ⁺	[[C6 H12 N2]+H] ⁺		1.42

図77 MSピーク 2 ウィンドウ

MS実測値 このウィンドウはハイライトされたスペクトルの測定情報を表示します。MS実測値ウィンドウを閉じると、パフォーマンスが向上します。このテーブルでは以下の4つの列のみが使用できます。**カテゴリ**、**名前**、**値**、**単位**。

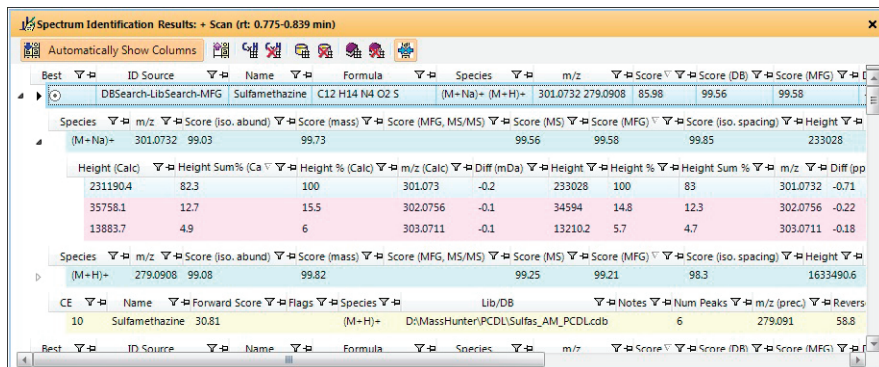
ウィンドウ - 定性分析ナビゲータプログラム



Category	Name	Value	Unit
Source	Fragmentor2	125	Volts
Source	Fragmentor3	125	Volts
Source	Fragmentor4	125	Volts
Source	Gas Temp	350	C
Source	Ion Polarity	0	0=Positive,1=Negative
Source	LC Stream	1	0=Waste,1=MS
Source	Nebulizer	35	psig
Source	Oct 1 RF Vpp1	750	Volts
Source	Oct 1 RF Vpp2	750	Volts

図78 現在のスペクトルの機器パラメータを表示している MS 実測値ウィンドウ

スペクトル同定結果 このウィンドウには、スペクトルに対する同定アルゴリズムの結果が表示されます。化学式の作成 (MFG) またはライブラリ検索/DB を実行する場合、それらの結果がこのウィンドウに表示されます。このウィンドウに表示されるのは、1つのスペクトルの結果です。異なるスペクトルをハイライトすると、このウィンドウ内の結果が変更され、新しいスペクトルのすべての結果が表示されます。このテーブルには最大3つのレベルがあります。レベル1にはスペクトルの全体的な結果が表示されます。レベル2には、アルゴリズムの総合スコアを算出するために使用された個別のスコアが示されます。テーブルのレベル3には、高さ m/z の値 (計算値と実測値の両方) が示されます。このレベルは、化学式の作成アルゴリズムとデータベース検索アルゴリズムで使用されます。



Best	ID Source	Name	Formula	Species	m/z	Score	Score (DB)	Score (MFG)	
DBSearch-LibSearch-MFG	Sulfamethazine	C12 H14 N4 O2 S	(M+Na)+ (M+H)+	301.0732	279.0908	85.98	99.56	99.58	
Species	m/z	Score (iso. abund)	Score (mass)	Score (MFG, MS/MS)	Score (MS)	Score (MFG)	Score (iso. spacing)	Height	
(M+Na)+	301.0732	99.03	99.73	99.56	99.58	99.85	233028		
Height (Calc)	Height Sum% (Ca)	Height % (Calc)	m/z (Calc)	Diff (mDa)	Height	Height %	Height Sum %	m/z	Diff (pp)
231190.4	82.3	100	301.073	-0.2	233028	100	83	301.0732	-0.71
35758.1	12.7	15.5	302.0756	-0.1	34594	14.8	12.3	302.0756	-0.22
13883.7	4.9	6	303.0711	-0.1	13210.2	5.7	4.7	303.0711	-0.18
Species	m/z	Score (iso. abund)	Score (mass)	Score (MFG, MS/MS)	Score (MS)	Score (MFG)	Score (iso. spacing)	Height	
(M+H)+	279.0908	99.08	99.82	99.25	99.21	98.3	1633490.6		
CE	Name	Forward Score	Flags	Species	Lib/DB	Notes	Num Peaks	m/z (prec)	Revers
10	Sulfamethazine	30.81	(M+H)+		D:\MassHunter\PCDL\Sulfaz_AM_PCDLcdb		6	279.091	58.8

図79 スペクトル同定結果ウィンドウ

構造式ビューア 構造は、ライブラリ検索/DB アルゴリズムを実行するときに、スペクトルに添付することができ、データベースまたはライブラリは、ベストヒットの構造を含みます。構造式は、スペクトルへのマニュアル同定を追加または編集する際にも添付できます。構造式ビューアには2つのタブがあります。[構造] タブは、構造のグラフィカルな表示をします。[MOL テキスト] タブには構造を説明するテキストが表示されます。

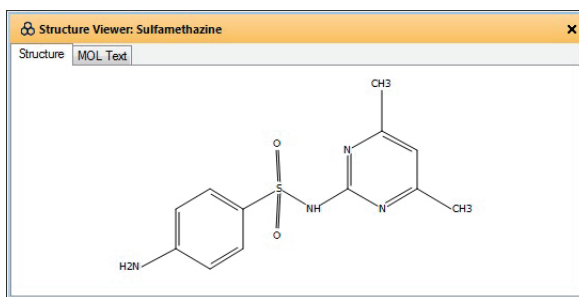


図80 構造式ビューアウィンドウ

化学式計算ツール このツールは、入力した質量、また質量電荷に対応する実験式を計算します。結果を対話形式で確認、印刷またはエクスポートできます。

Element	Minimum	Maximum
C	3	60
H	0	120
O	0	30
N	0	30
S	0	5
Cl	0	3
[13C]	0	1

Formula (M)	Score (MFG)	Mass	Mass (MFG)	m/z (Calc)	Dif
C12 H14 N4 O2 S	100	278.0837	278.0837	279.091	
C6 [13C] H18 Cl N2 O7	99.95	278.0837	278.0836	279.0909	
C5 [13C] H12 Cl N9 O2	99.95	278.0837	278.0836	279.0909	
C10 [13C] H19 N O3 S2	99.73	278.0837	278.084	279.0913	
C13 H20 Cl2 O2	99.64	278.0837	278.084	279.0913	
C16 [13C] H13 N2 S	99.33	278.0837	278.0833	279.0906	
C12 H22 O S3	99.26	278.0837	278.0833	279.0906	
C9 H17 Cl N5 O S	99.03	278.0837	278.0842	279.0915	
C9 [13C] H15 N O8	98.65	278.0837	278.0831	279.0904	
C8 [13C] H9 N8 O3	98.63	278.0837	278.0831	279.0904	
C20 H10 N2	98.32	278.0837	278.0844	279.0917	
C10 [13C] H11 N5 O4	98.01	278.0837	278.0845	279.0917	
C7 H15 Cl N8 S	97.46	278.0837	278.0829	279.0902	
C11 H18 Cl2 N3 O	96.16	278.0837	278.0827	279.09	
C8 [13C] H17 N4 O2 S2	95.83	278.0837	278.0826	279.0899	
C7 [13C] H14 Cl N6 O3	94.7	278.0837	278.0849	279.0922	
C11 H18 O6 S	93.92	278.0837	278.0824	279.0897	

図81 化学式計算ツールウィンドウ

ウィンドウ - 定性分析ナビゲータプログラム

質量計算ツール このツールを使って基準式とイオン種（正または負イオン）のリストを入力できます。質量計算ツールアルゴリズムを実行する際、質量計算ツールテーブルに各イオン種の行が作成され、それぞれのイオン種の質量が計算されます。

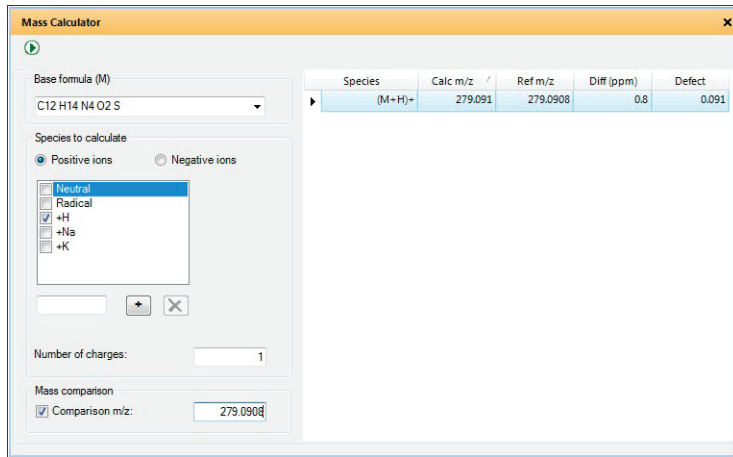


図82 質量計算ツールウィンドウ

定性分析ワークフロープログラム

主要な機能

定性分析ワークフロープログラムを初めて開いたとき、3つのパートが表示されます。(1)メニューバー(2)ツールバー(3)メインウィンドウです。主要機能の画面を図83に示します。

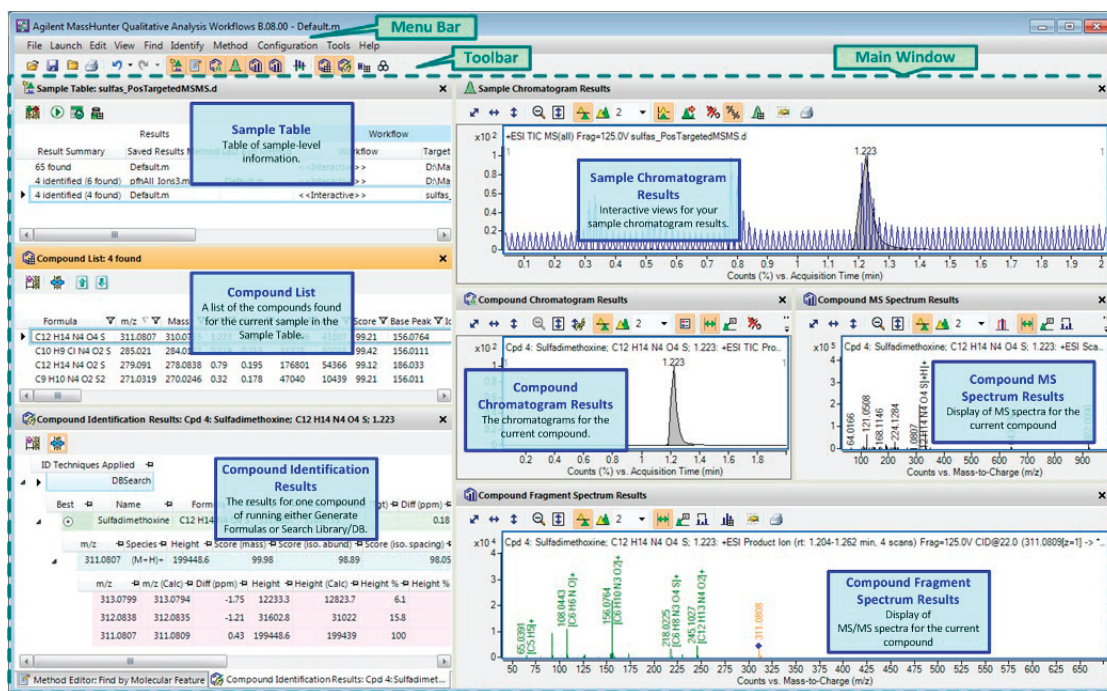


図83 定性分析ワークフロープログラムの概要

1. メニューバー

メニューバー (図 84) には、化合物の検索と同定、レポートの印刷とエクスポート、定性分析ナビゲータプログラムの起動に使用するアクションが表示されます。各メニューの詳細については、オンラインヘルプで説明されています。

File Launch Edit View Find Identify Method Configuration

図84 定性分析ワークフロープログラムのメニューバー

2. ツールバー

ツールバーには、データファイルを開いたり閉じたりするのに使用するアクションが表示されます。また、ツールバーでは、メソッドのオープンと保存、化合物レポートの印刷、ウィンドウの表示または非表示の切り替えも可能です。



図85 定性分析ワークフロープログラムのツールバー

ツールバーアイコン	処理
	[ファイル] > [データファイルを開く] [ファイル] > [結果の保存] [ファイル] > [データファイルを閉じる] [ファイル] > [印刷] > [化合物レポート] [編集] > [元に戻す] [編集] > [やり直し]
	[表示] > [サンプルテーブル] [表示] > [メソッドエディタ]
	[表示] > [化合物クロマトグラム結果] [表示] > [サンプルクロマトグラム結果] [表示] > [化合物 MS スペクトル結果] [表示] > [化合物フラグメントスペクトル結果] [表示] > [結果の差]
	[表示] > [化合物リスト] [表示] > [化合物同定結果] [表示] > [MS/MS化学式の詳細] [表示] > [構造式ビューア]

3. メインウィンドウ

メインウィンドウ (116 ページの図 83 を参照) は、さらに以下のウィンドウに分割されます (最大 13 個)。定性分析ワークフロープログラムを初めて開いたとき、デフォルトレイアウトとして表示されるのは、以下のウィンドウです。

- サンプルテーブル
- 化合物リスト
- 化合物同定結果
- メソッドエディタ
- 構造式ビューア
- サンプルクロマトグラム結果ウィンドウ
- 化合物クロマトグラム結果
- 化合物 MS スペクトル結果
- 化合物フラグメントスペクトル結果
- 結果の差
- MS/MS化学式の詳細
- 化学式計算ツール
- 質量計算ツール

ウィンドウ - 定性分析ワークフロー

サンプルテーブル サンプルテーブルには、開いている各サンプル (データファイル) の情報が示されます。このウィンドウ内で選択したサンプルのデータが、他のウィンドウに表示されます。選択したサンプルは再処理できます。

Results	Workflow	Target Source	Sample Name	FileName	Sample Position	Acquisition Time
65 found	Default.m	<<Interact	1 ng sulfas	sulfas_Name of the Data file	P1-F1	8/16/2008 9:18:41 PM (UTC-06:00)
10 found	pHexercise2.m	<<Interact	1 ng sulfas	sulfas_PosMS.d	P1-F1	8/16/2008 9:29:01 PM (UTC-06:00)
4 found	Default.m	<<Interact	1 ng sulfas	sulfas_PosTargetedMSMS.d	P1-F1	8/16/2008 9:39:19 PM (UTC-06:00)

図86 サンプルテーブル

ウィンドウ - 定性分析ワークフロー

化合物リスト このウィンドウには、選択したサンプルファイルで見つかったすべての化合物が表示されます。このテーブルでは列の追加と削除ができ、カテゴリ内の列の順序を変更できます。

[化合物リスト] ウィンドウ内の列は、カテゴリに分けられます。カテゴリ内の列の順序を変更できます。これらの列は、[列の追加/削除] ダイアログボックスにも表示されます。カテゴリは以下の通りです。

- 一般
- 化合物の同定
- 化学式の作成
- **Molecular Feature Extraction**
- データベース検索
- ライブラリ検索
- サンプル純度
- ターゲット/候補化合物スクリーニング

化合物リストツールバー

ツールバーアイコン	処理
	<ul style="list-style-type: none"> • データを含まない列を隠します
	<ul style="list-style-type: none"> • 列幅の自動調整をするかどうかを切り替えます。オンにすると、その列に情報が表示されるように列の幅が自動的に変更されます。
	<ul style="list-style-type: none"> • 前の化合物に切り替えます。最初の化合物が選択されている場合、このアイコンは使用できません。 • 次の化合物に切り替えます。最後の化合物が選択されている場合、このアイコンは使用できません。

Compound List: 12 found										
General					Compound Identification		Formula Generation	Molecular Feature Extraction		Database Search
Formula	m/z	RT	Score	Mining Algorithm	Cpd	Name	Score (MFG)	Vol	Score (MFE)	Score (DB)
C6 H14 O4	151.0963	0.268	23.65	Find by Molecular	1		47.31	60075	98.2	0
C7 H12 N7	195.1225	0.297	23.75	Find by Molecular	2		47.5	109096	98.6	0
C9 H10 N4 O2 S2	271.0324	0.326	66.76	Find by Molecular	3	Sulfamethizole		1222686	94.1	66.76
C5 H11 Cl N5 O4 S	273.0283	0.326	23.81	Find by Molecular	4		47.62	107190	86.7	0
C9 H16 N7 O	256.1751	0.35	45.02	Find by Molecular	5		90.03	23265	93.9	0
C9 H10 N4 O2 S2	271.0321	0.416	47.29	Find by Molecular	6	Sulfamethizole		32976	98.1	47.29
C10 H9 Cl N4 O2 S	285.0204	0.525	98.67	Find by Molecular	7	Sulfachloropyrid		594994	100	98.67
C12 H14 N4 O2 S	279.0908	0.792	98.87	Find by Molecular	8	Sulfamethazine		4432850	86.4	98.87
C12 H14 N4 O4 S	311.0805	1.231	99.09	Find by Molecular	9	Sulfadimethoxin		4220612	94.4	99.09
C12 H14 N4 O4 S	311.0805	1.331	95.81	Find by Molecular	10	Sulfadimethoxin		142298	100	95.81
C25 H26 N3 O2	401.2105	1.732	29.56	Find by Molecular	11		59.11	21433	100	0
C24 H26 N8 O	443.2296	1.738	39.22	Find by Molecular	12		78.44	36420	99.8	0

図87 5つのカテゴリの列を表示している [化合物リスト] ウィンドウ

メソッドエディタ メソッドとは、さまざまなアルゴリズムに関連するパラメータのセットです。これらのパラメータを含むメソッドは一意的なファイル名を付けて保存できます。

左側のペインに表示するメソッドのセクションを選択します。右側のペインには、1つのセクションまたは複数のタブのいずれかが含まれています。**F1**を押すと、メソッドエディタで現在選択しているタブまたはセクションのヘルプを表示できます。

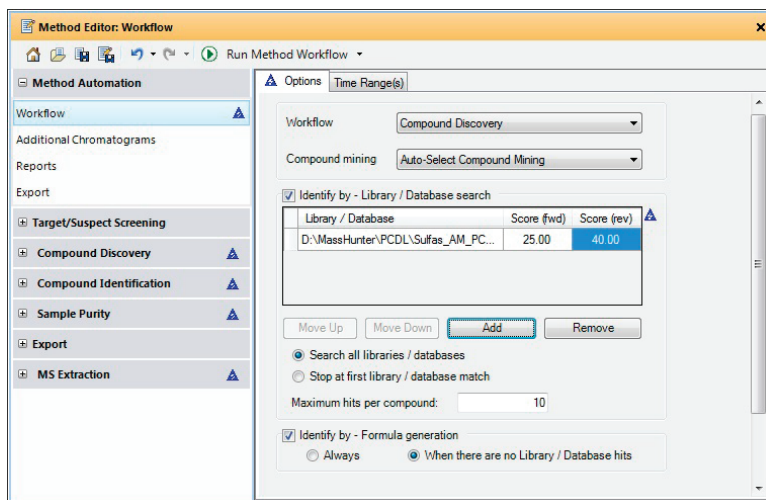


図88 メソッドエディタウィンドウ

化合物クロマトグラム結果 このウィンドウには、抽出イオンクロマトグラム (EIC) を含む [化合物リスト] ウィンドウで選択した化合物に関連するクロマトグラムが表示されます。クロマトグラムの重ね描きモードを選択した場合、グラフィックの右上隅に凡例が表示されます。グラフィックには、注釈を追加できます。また、グラフィックをエクスポートまたは印刷することもできます。

クロマトグラムの操作

クロマトグラムに対して多くの操作を実行できます。

- ウィンドウのプロット表示は、[化合物クロマトグラム結果] ツールバーのアイコンを使用して変更できます。
- [注釈] ツールを使用してクロマトグラムに注釈を追加できます。
- ショートカットメニューを使用して多くの操作を開始できます。[化合物クロマトグラム結果] ウィンドウでクロマトグラムを右クリックすると、ショートカットメニューが表示されます。

詳細は、オンラインヘルプを参照してください。

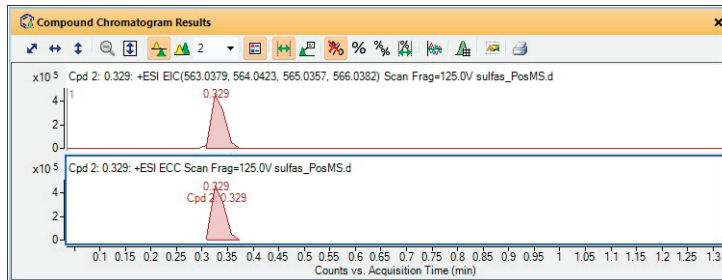
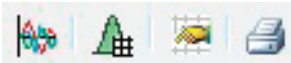


図89 化合物クロマトグラム結果ウィンドウ

化合物クロマトグラム結果ツール

ツールバーアイコン	処理
ズームツール 	<ul style="list-style-type: none"> • X軸とY軸のオートスケール • X軸のオートスケール • Y軸のオートスケール • ズーム解除 • ズーム中にY軸をオートスケール • Y軸リンクモード
 または 	<ul style="list-style-type: none"> • リストモード - 各クロマトグラムは、それぞれのY軸で描かれます。 • 重ね描きモード - 複数のクロマトグラムが、1つのX軸とY軸上に描かれます。 • スクロールバーがない状態で、一度に表示できるクロマトグラムの数です。このオプションは、【リストモード】 をクリックすると表示されます。 • 【前のプロットにサイクル】 または 【次のプロットにサイクル】。これらのオプションは、【重ね描き】 モードをクリックすると表示されます。
	<ul style="list-style-type: none"> • 重ね描きモードで凡例を表示 - 「重ね描きモード」を選択する場合、凡例を表示するかどうかを選択できます。共溶出プロットが表示されている場合、凡例の表示/非表示も制御されます。 • 範囲選択 - オンにすると、処理を実行したいクロマトグラムの範囲を選択できます。 • 注釈 - オンにすると、クロマトグラムにイメージやテキスト注釈を追加できます。
スケールツール 	<ul style="list-style-type: none"> • クロマトグラムのスケールを停止します。 • すべてのクロマトグラムを、任意のクロマトグラムの最大ピークに合わせてスケールします • すべてのクロマトグラムを、各クロマトグラムの最大ピークに合わせてスケールします。 • 選択範囲の最大ピークに合わせてそれぞれのクロマトグラムをスケールします。

ツールバーアイコン	処理
その他のツール 	<ul style="list-style-type: none"> 共溶出プロットの表示または非表示を切り替えます。 積分ピークリストの表示または非表示を切り替えます。 [クロマトグラムの表示オプション] ダイアログボックスを開きます。 表示されているクロマトグラムを印刷します。

サンプルクロマトグラム結果ウィンドウ このウィンドウには、[サンプルテーブル] ウィンドウで選択する各サンプルのクロマトグラムが表示されます。このクロマトグラムは、トータルイオンクロマトグラム (TIC)、または基準ピーククロマトグラム (BPC) のどちらかです。また、化合物クロマトグラムを重ね描きすることもできます。[化学式による検出] アルゴリズムの一部として抽出される UV クロマトグラムも、このウィンドウに表示されます。グラフィックをエクスポートまたは印刷することができます。

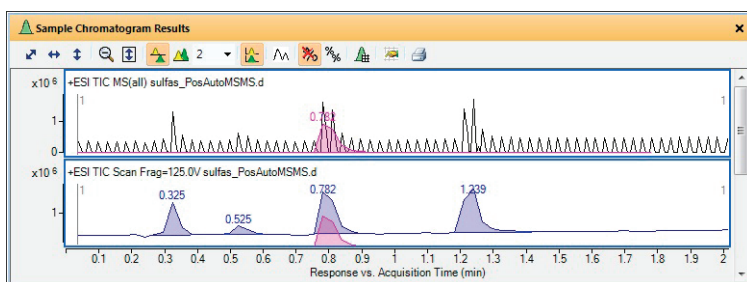



図90 サンプルクロマトグラム結果ウィンドウ

サンプルクロマトグラム結果ツール

ツールバーアイコン	処理
ズームツール 	<ul style="list-style-type: none"> X軸とY軸のオートスケール X軸のオートスケール Y軸のオートスケール ズーム解除 ズーム中にY軸をオートスケール

ツールバーアイコン	処理
 <p>または</p> 	<ul style="list-style-type: none"> ・ リストモード - 各クロマトグラムは、それぞれの Y 軸で描かれます。 ・ 重ね描きモード - 複数のクロマトグラムが、1つのX軸とY軸上に描かれます。 ・ スクロールバーがない状態で、一度に表示できるクロマトグラムの数です。このオプションは、[リストモード] をクリックすると表示されます。 ・ [前のプロットにサイクル] または [次のプロットにサイクル]。これらのオプションは、[重ね描き] モードをクリックすると表示されます。
	<ul style="list-style-type: none"> ・ 化合物重ね描きモード - 化合物クロマトグラムは [サンプルクロマトグラム結果] ウィンドウにも表示されます。 ・ クロマトグラムの抽出 - [クロマトグラムの抽出] ダイアログボックスが開きます。
<p>スケールツール</p> 	<ul style="list-style-type: none"> ・ クロマトグラムのスケールを停止します。 ・ すべてのクロマトグラムを、各クロマトグラムの最大ピークに合わせてスケールします。
<p>その他のツール</p> 	<ul style="list-style-type: none"> ・ クロマトグラムのピークリストテーブルが表示されます。 ・ [クロマトグラムの表示オプション] ダイアログボックスを開きます。 ・ 表示されているクロマトグラムを印刷します。

化合物 MS スペクトル結果 1つまたは2つの化合物を選択すると、このウィンドウには選択した化合物に関連するマススペクトルが表示されます。3つ以上の化合物を選択すると、最初の2つのハイライトされた化合物のスペクトルのみが表示されます。MS/MS スペクトルは、**[化合物フラグメントスペクトル]** ウィンドウに表示されます。このウィンドウ内のスペクトルには、注釈および質量差を追加できます。このウィンドウの右側には、テーブルに表示されるピークリストを表示できます。表示される各スペクトルには、タブが追加されます。スペクトルの PCDL への送信、スペクトルのエクスポートと印刷を行うことができます。

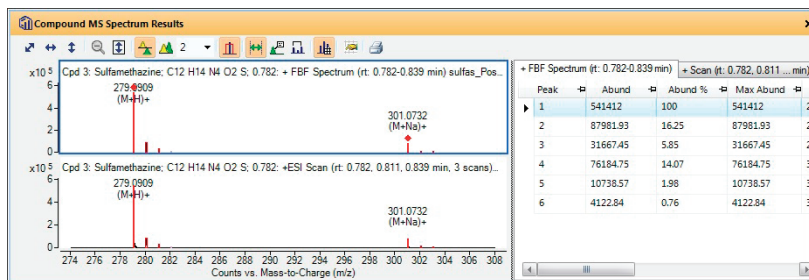


図91 化合物 MS スペクトル結果ウィンドウ

化合物 MS スペクトル結果ツール

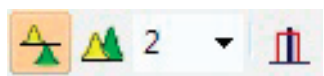
ツールバーアイコン

処理

ズームツール



- X軸とY軸のオートスケール
- X軸のオートスケール
- Y軸のオートスケール
- ズーム解除
- ズーム中にY軸をオートスケール



または




- **リストモード** - 各スペクトルは、それぞれのY軸に描かれます。
- **重ね描きモード** - 複数のスペクトルが、1つのX軸とY軸上に描かれます。
- スクロールバーを追加する前に同時に表示できる**スペクトルの数**です。このオプションは、[リストモード] をクリックすると表示されます。
- **[前のプロットにサイクル]** または **[次のプロットにサイクル]**。これらのオプションは、[重ね描き] モードをクリックすると表示されます。
- **予想同位体分布を表示**

選択ツールアイコン



常にどちらか 1 つのツールが選択されています。この図では、範囲選択ツールが選択されています。選択したツールの背景色はオレンジ色です。

- **範囲選択** - オンにすると、処理を実行したいスペクトルの範囲を選択できます。
- **注釈** - オンにすると、スペクトルにイメージやテキスト注釈を追加できます。
- **質量差** - オンにすると、選択したスペクトルに質量差を追加できます。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。

ツールバーアイコン	処理
その他のツール 	<ul style="list-style-type: none"> • スペクトルのピークリストテーブルを表示します。 • [MS および MS/MS スペクトルの表示オプション] ダイアログボックスを開きます。 • 表示されているスペクトルを印刷します。

化合物フラグメントスペクトル結果 1つまたは2つの化合物を選択すると、このウィンドウには選択した化合物に関連する MS/MS スペクトルが表示されます。3つ以上の化合物を選択すると、最初の2つのハイライトされた化合物の MS/MS スペクトルのみが表示されます。[化合物 MS スペクトル結果] ウィンドウに、MS スペクトルが表示されます。化合物フラグメントスペクトルには注釈および質量差を追加することもできます。

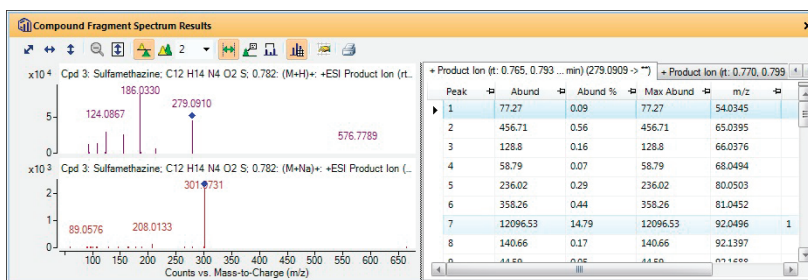





図92 対応するピークリストを表示する [化合物フラグメントスペクトル結果] ウィンドウ

化合物フラグメントスペクトル結果ツール

ツールバーアイコン	処理
ズームツール 	<ul style="list-style-type: none"> • X軸とY軸のオートスケール • X軸のオートスケール • Y軸のオートスケール • ズーム解除 • ズーム中にY軸をオートスケール

ウィンドウ - 定性分析ワークフロー

ツールバーアイコン	処理
	<ul style="list-style-type: none"> ・ リストモード - 各スペクトルは、それぞれのY軸に描かれます。 ・ 重ね描きモード - 複数のスペクトルが、1つのX軸とY軸上に描かれます。 ・ スクロールバーを追加する前に同時に表示できるスペクトルの数です。このオプションは、【リストモード】 をクリックすると表示されます。 ・ 【前のプロットにサイクル】 または 【次のプロットにサイクル】。これらのオプションは、【重ね描き】 モードをクリックすると表示されます。
または	
	
選択ツールアイコン	<ul style="list-style-type: none"> ・ 範囲選択 - オンにすると、処理を実行したいスペクトルの範囲を選択できます。 ・ 注釈 - オンにすると、スペクトルにイメージやテキスト注釈を追加できます。 ・ 質量差 - オンにすると、選択したスペクトルに質量差を追加できます。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。
<p>常にどちらか1つのツールが選択されています。この図では、範囲選択ツールが選択されています。選択したツールの背景色はオレンジ色です。</p>	
その他のツール	<ul style="list-style-type: none"> ・ スペクトルのピークリストテーブルを表示します。 ・ 【MS および MS/MS スペクトルの表示オプション】 ダイアログボックスを開きます。 ・ 表示されているスペクトルを印刷します。

結果の差 ライブラリ検索アルゴリズムを実行してライブラリ検索によりスペクトルを同定すると、ウィンドウに3つのスペクトルが表示されます。最初のスペクトルは検索されたスペクトルです。2つめのスペクトルは差スペクトルです。ライブラリからのスペクトルをユーザースペクトルから引いて、差スペクトルを作成します。3つめのスペクトルは、**【スペクトル同定結果】** ウィンドウで現在選択されているライブラリからのスペクトルです。

ウィンドウ - 定性分析ワークフロー

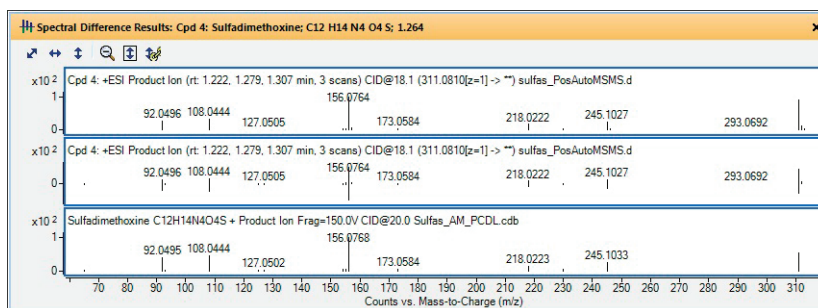


図93 結果の差ウィンドウ

化合物同定結果 このウィンドウには、化学式の作成やライブラリ検索/DB などの同定アルゴリズムの実行結果が表示されます。

Best	Name	Formula	m/z	Mass	Mass (Tgt)	Diff (ppm)	Score (Tgt)	RT	RT (Tgt)	RT Diff	Score (RT)	Species	Flags	Notes
	Sulfamethizole	C9 H10 N4 O2 S2	271.0319	271.0319	270.0245	-0.12	0.326		0.326			(M+H)+		
			Score (iso. abund)	Score (mass)	Score (MFG, MS/MS)	Score (MFG)	Score (iso. spacing)	Height	Ion Formula	Species	Lib/DB			
			30.11	99.99	99.48	73.98	49.44	247946.8	C9 H11 N4 O2 S2	(M+H)+	D:\MassHunter\PCDL\Sulfas_AM_PCDL			
			30.11	99.98	99.48	73.98	49.44	247946.8	C9 H11 N4 O2 S2	(M+H)+	D:\MassHunter\PCDL\default			
			CE	Name	Forward Score	Flags	Species	Lib/DB	Notes	Num Peaks	m/z (prec.)	Reverse Score	Score (Lib)	
			10	Sulfamethizole	87.84		(M+H)+	D:\MassHunter\PCDL\Sulfas_AM_PCDLcdb		4	271.0318	99.65	99.65	

図94 化合物同定結果ウィンドウ

MS/MS化学式の詳細 このウィンドウには、MSMS スペクトルで見られるフラグメントに対して計算された化学式が表示されます。この化学式は、提示された化学式と統一されたものです。この内容は、化合物同定結果テーブルで選択されている化学式行に関連する結果です。このテーブル内のデータは、化合物同定結果テーブルの [スコア (MFG, MS/MS)] 列を計算するのに使用します。

ウィンドウ - 定性分析ワークフロー

m/z	Formula	Height %	Diff (ppm)	Loss Mass	Loss Formula
64.0193	C4 H2 N	0.07	-17.85	207.0127	C4 H5 N3 O7
64.0193	C H4 O3	0.07	-59.71	207.0154	C7 H3 N4 O4
65.0388	C5 H5	0.47	-3.22	205.9923	C3 H2 N4 O7
69.0694		0.11			
80.0486	C5 H6 N	0.26	11.38	190.9814	C3 H N3 O7
80.0486	H6 N3 O2	0.26	-38.88	190.9855	C8 H N O5
87.0429	C2 H5 N3 O	0.22	-2.34	183.9882	C6 H2 N O6
87.0429	C4 H7 O2	0.22	13.09	183.9869	C4 N4 O5
89.0599	C2 H7 N3 O	0.19	-17.21	181.9726	C6 N O6
92.0494	C6 H6 N	7.71	0.5	178.9814	C2 H N3 O7
92.0494	C H6 N3 O2	7.71	-43.2	178.9855	C7 H N O5
107.0716		0.07			

図95 MS/MS化学式の詳細ウィンドウ

構造式ビューア 構造は、ライブラリ検索/DB アルゴリズムを実行するとき、スペクトルに添付することができ、データベースまたはライブラリは、ベストヒットの構造を含みます。構造式は、スペクトルへのマニュアル同定を追加または編集する際にも添付できます。[構造式ビューア] ウィンドウには2つのタブがあります。[構造] タブは、構造のグラフィカルな表示をします。[MOLテキスト] タブには構造を説明するテキストが表示されます。

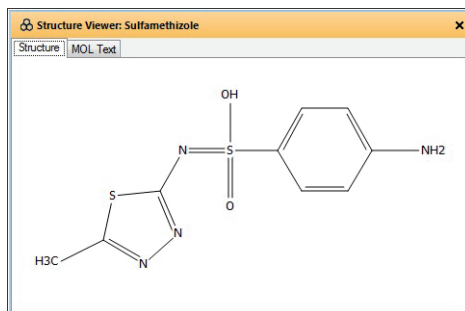


図96 構造式ビューアウィンドウ

定性分析ナビゲータとワークフロー

レイアウト

さまざまなレイアウトを開いて保存できます。以下の属性を変更できます。属性はレイアウト内に保存されます。ソフトウェアには 2 つのデフォルトレイアウト、**default.xml**（定性分析ワークフロープログラム用）と **CDN_Default.xml**（定性分析ナビゲータプログラム用）があります。

レイアウトは以下から構成されます。

- 各ウィンドウの位置とサイズ
- タブ付けするウィンドウの指定
- フローティングウィンドウの指定
- タブ付けされているウィンドウのうちどのウィンドウを一番上に表示するか
- デフォルトで表示するウィンドウの指定
- ステータスバーを表示するかどうか

それぞれのプロットウィンドウ（定性分析ナビゲータの場合、[クロマトグラム結果] ウィンドウ、[スペクトルプレビュー] ウィンドウ、[MS スペクトル結果] ウィンドウ、[結果の差異] ウィンドウ、[UV 結果] ウィンドウ。定性分析ワークフローの場合、[サンプルクロマトグラム結果] ウィンドウ、[化合物クロマトグラム結果] ウィンドウ、[化合物 MS スペクトル結果] ウィンドウ、[化合物フラグメントスペクトル結果] ウィンドウ、および [結果の差異] ウィンドウ）では、以下の内容が保存されます。

- グラフィックを重ね描きするかどうか
- [ズーム中にY軸のオートスケール] モードをオンにするかどうか
- [Y軸リンクモード] をオンにするかどうか

各テーブルウィンドウでは、以下が指定されています。

- 表示する列の指定
- 列の順番
- 各列の幅

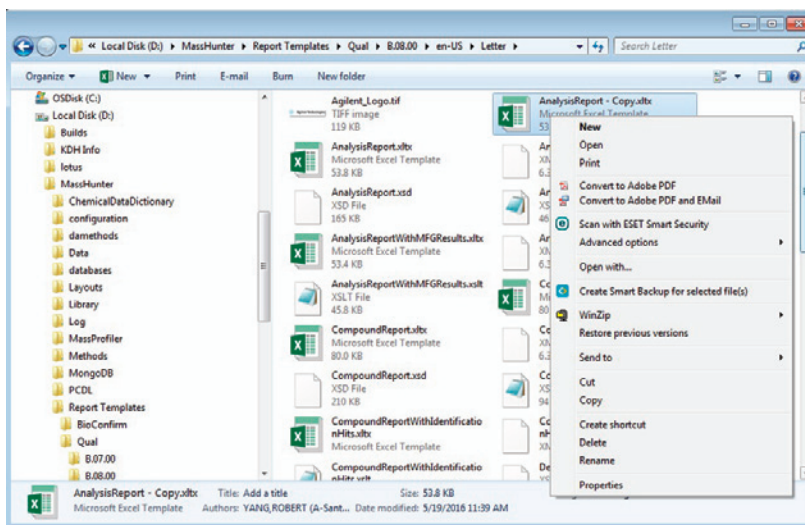
レイアウト

- テーブルに追加されたフィルタ（[化合物リスト] テーブル、[化合物同定結果] テーブル、[スペクトル同定結果] ウィンドウでのみ使用可能）。

レポートテンプレートのカスタマイズ

レポートテンプレートの変更方法の詳細については、MassHunter Report Designer アドインのオンラインヘルプ、『Report Designer Familiarization Guide』、または「Reporting Training DVD」を参照してください。次のステップでは、テンプレートのカスタマイズの概要を示します。これらの説明は、Microsoft Excel レポートテンプレートにのみ適用されます。

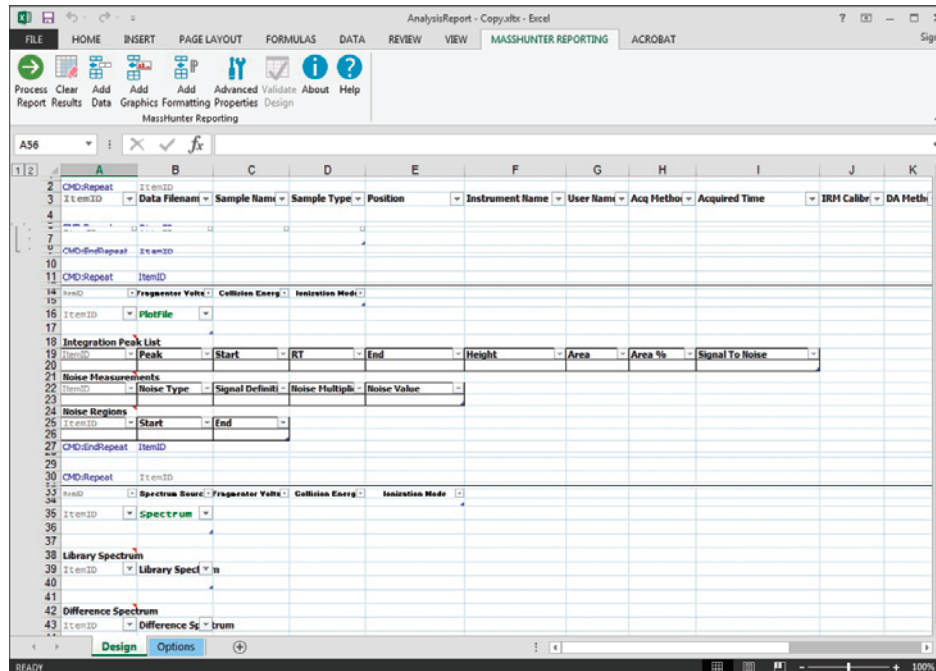
- 1 レポートテンプレートのフォルダに移動します。デフォルトでは、このフォルダは **¥MassHunter¥Report Templates¥Qual¥B.08.00¥ja¥A4** になります。メソッドエディタで [自動化メソッド] の [レポート] > [テンプレート] タブをクリックして、別のフォルダを選択することができます。
- 2 変更するテンプレートのコピーを作成します。
- 3 コピーを右クリックし、[プロパティ] をクリックします。必要に応じて、[読み取り専用] チェックボックスをオフにします。コピーを右クリックし、ショートカットメニューから [開く] をクリックします。



テンプレートが開いている場合、ヘッダーとフッターを変更できます。パラメータ列の追加、削除、移動も行えます。詳細は、オンラインヘルプをご参照ください。

定性分析プログラムには多数のテンプレートがインストールされています。

レポートテンプレートのカスタマイズ



4 必要な変更を加えます。

テンプレートの変更方法の詳細については、MassHunter Report Designer アドインのオンラインヘルプ、または「Agilent MassHunter Reporting - Training DVD」を参照してください。

- 5 新しいテンプレートを保存するには、[Microsoft Office] ボタンから **[保存]** をクリックするか、[名前を付けて保存]>[その他の形式] をクリックします。
- 6 識別できるよう名前を入力し、[保存] をクリックします。

File name: AnalysisReport - Copy.xlsx
 Save as type: Excel Template (*.xltx)

4

レポートテンプレートのカスタマイズ

本書の内容

このガイドには、LC/MS データに対する Agilent MassHunter ワークステーション ソフトウェア – 定性分析 の使い方を学習するための情報が含まれています。定性分析には 2 つのメイン プログラムがあります。

このガイドには、GC/MS データに対する Agilent MassHunter ワークステーション ソフトウェア – 定性分析 の使い方を学習するための情報が含まれています。定性分析には 2 つのメイン プログラムがあります。

© Agilent Technologies, Inc. 2017

リビジョン A、2017年1月



G3335-96197