

Agilent MassHunter 워크
스테이션 소프트웨어
정성 분석

GC/MS 기초 설명서



Agilent Technologies

공지사항

© Agilent Technologies, Inc. 2012

미국 및 국제 저작권법에 의거하여 Agilent Technologies, Inc. 의 사전 서면 동의 없이는 어떠한 형식 또는 수단 (전자 저장 및 검색 또는 다른 언어로 번역함) 으로도 이 설명서의 전부 또는 일부를 복제할 수 없습니다 .

설명서 부품 번호

G3335-99147

판

개정 A, 2012 년 11 월

미국에서 인쇄

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

Microsoft[®], Windows 7[®] 및 Excel[®] 은 미국 및 / 또는 기타 국가에서 Microsoft Corporation 의 미국 등록 상표입니다 .

소프트웨어 버전

이 설명서는 대체될 때까지 Agilent MassHunter 워크스테이션 소프트웨어 - 정성 분석 프로그램의 B.06.00 이상의 버전에 유효합니다 .

보증

이 문서에 포함된 자료는 " 있는 그대로 " 제공되며 추후 개정판에서 사전 공지 없이 변경될 수 있습니다 . 또한 Agilent 는 관련 법률이 허용하는 범위에 묵시적인 상품성 보증 및 특정 목적에 대한 적합성을 포함하되 이에 제한되지 않고 이 설명서와 여기에 포함된 모든 정보에 관한 명시적 또는 묵시적인 모든 보증을 부인합니다 . Agilent 는 이 설명서 또는 이 설명서에 포함된 정보의 제공 , 사용 또는 적용과 관련된 오류나 부수적이고 결과적인 손해에 대해 책임지지 않습니다 . 만약 이 문서 내의 약관과 충돌하는 내용이 포함된 보증 조건에 대해 Agilent 와 사용자가 별도의 서면 동의를 가지고 있다면 별도의 동의서에 있는 보증 조건이 적용됩니다 .

기술 라이선스

이 문서에 설명된 하드웨어 및 / 또는 소프트웨어는 라이선스 하에 제공되며 , 해당 라이선스의 이용 약관에 따라 사용 또는 복사할 수 있습니다 .

제한된 권리 범위

미국 정부 제한된 권리 . 연방 정부에게 승인된 소프트웨어 및 기술 데이터 권리에는 최종 사용자 고객에게 관례적으로 제공된 권리들만 포함됩니다 . Agilent 는 소프트웨어 및 기술 데이터 안의 이 관례적인 상업용 라이선스를 FAR 12.211 (기술 데이터) 및 12.212(컴퓨터 소프트웨어) 에 의거하여 , 그리고 국방부 , DFARS 252.227-7015(기술 데이터 - 상업용 항목) 및 DFARS 227.7202-3(상업용 컴퓨터 소프트웨어 또는 컴퓨터 소프트웨어 문서 안의 권리들) 에 대하여 공합니다 .

안전 고지

주의

주의 표시는 위험을 나타냅니다 . 이는 올바로 이행하거나 지키지 않을 경우 제품이 손상되거나 중요 데이터가 손실될 수 있는 작동 절차나 사용 방식 등에 대한 주의를 환기시키는 표시입니다 . 주의 내용을 완전히 이해하지 못하거나 조건이 만족되지 않을 경우 작업을 진행하지 마십시오 .

경고

경고 표시는 위험을 나타냅니다 . 이는 올바로 이행하거나 지키지 않을 경우 신체 상해나 사망에 이를 수 있는 작동 절차나 사용 방식 등에 대한 주의를 환기시키는 표시입니다 . 경고 내용을 완전히 이해하지 못하거나 조건이 만족되지 않을 경우 작업을 진행하지 마십시오 .

이 설명서에서는 ...

이 안내서에는 Agilent MassHunter 워크스테이션 소프트웨어 - LC/MS 데이터로 정성 분석을 사용하는 방법에 대한 정보를 포함하고 있습니다.

연습을 시작하기 전에 “이들 연습을 시작하기 전에 ...”(5 페이지)에 있는 지침을 읽으십시오.

연습 1 정성 분석의 기본 배우기

이 연습에서는 Qualitative Analysis(정성 분석) 프로그램의 많은 강력한 기능 중 일부를 탐구해 봅니다. 이들 작업은 사용 중인 데이터 유형에 상관 없이 중요합니다.

연습 2 찾고 식별하기

작업의 첫 2 세트에서 복잡한 매트릭스 내 낮은 농도의 설과제를 찾고 식별합니다. 그리고 TOF 및 Q-TOF 데이터에 대한 공식을 생성합니다. 또한 TOF 및 Q-TOF 데이터로 단백질 소화에서 분자 특징 추출을 할 수 있습니다. 이 작업은 Triple Quad 데이터에서 수행할 수도 있습니다.

연습 3 워크플로 사용, 내보내기 및 인쇄

이들 작업에서는 정성 분석 분석법을 설정 및 실행하는 방법을 배웁니다. 또한 분석 및 / 또는 화합물 식별을 자동화하기 위해 분석법을 편집하는 방법을 배웁니다. 그런 다음 데이터 파일을 열 때 자동화된 분석법 내에서 작업을 실행합니다. 그리고 작업 목록으로 자동화된 작업을 수행하는 분석법을 생성하는 방법도 배울 수 있습니다. 이들 작업은 각각 다른 워크플로를 사용하여 실행됩니다.

참조

이 장에서는 Qualitative Analysis(정성 분석) 프로그램의 기본 사항에 관하여 배웁니다.

B.06.00 의

새로운 기능

- **Compound Details View**(화합물 세부사항 보기) 에서 화합물들을 검토할 수 있습니다 . **Compound Details View**(화합물 세부사항 보기) 에는 추가 창이 4 개 있습니다 .
- **Compound Details View**(화합물 세부사항 보기) 에서는 , 여러 유형의 크로마토그램 및 스펙트럼에 대해 여러 라인 정의를 지정할 수 있습니다 .
- **Find Compounds by Integration**(적분으로 화합물 찾기) 알고리즘을 사용 가능합니다 .
- 여러 라이브러리에서 단위 질량 라이브러리 검색 알고리즘을 검색할 수 있습니다 .
- **Generate Formulas**(일반 공식) 알고리즘에서 공식이 있는 토막 스펙트럼 피크에 주석을 기록할 것인지 여부를 선택할 수 있습니다 . 토막 주석은 화합물 이닝 알고리즘을 기반으로 주석을 기록할 스펙트럼을 선택합니다 .
- **Generate Formulas**(일반 공식) 알고리즘은 **Find by Chromatogram Deconvolution algorithm**(크로마토그램 디콘볼루션으로 찾기) 알고리즘으로 찾아 낸 화합물에 대해 실행할 수 있습니다 .
- **Generate Formula**(일반 공식) 알고리즘이 각 전하 운반체에 대한 최대 히트 수를 입력할 수 있도록 수정되었습니다 .
- **Generate Formula**(일반 공식) 알고리즘에서 히트를 동일한 공식으로 , 그러나 다른 전하 운반체로 그룹화할 수 있습니다 .
- 화합물은 모든 사용자 스펙트럼에서 생성할 수 있습니다 . 이들 화합물에 대한 화합물 마이닝 알고리즘은 “**Spectrum Extraction**(스펙트럼 추출)” 입니다 .
- 결과를 데이터 파일로 저장할 때 , 데이터 파일 하나와 함께 모든 화합물 결과를 저장할 것인지 , 아니면 각 화합물에 대해 적은 결과 세트를 저장할 인지 선택할 수 있습니다 . 모든 사용자 크로마토그램 및 사용자 스펙트럼은 항상 저장됩니다 .
- **CEF** 파일의 형식이 추가 정보를 포함할 수 있도록 수정되었습니다 .
- **m/z** 및 이온 계열 정보는 **Spectrum Identification Results**(스펙트럼 식별 결과) 표의 첫 번째 레벨에 있습니다 .
- **Spectrum Identification**(스펙트럼 식별) 표가 수정되었습니다 . 열에 필터를 추가하고 행을 삭제할 수 있습니다 .
- 이제 **Formula & Ion Species**(공식 & 이온 계열) 로 피크에 레이블을 달 수 있습니다 .

- 이제 항목이 많을 때 **Spectrum Identification Results**(스펙트럼 식별 결과) 창에서 **Best**(최고) 레이블이 있는 스펙트럼을 변경하는 작업이 현저하게 빨라졌습니다.
- **Compound Report**(화합물 보고서)에서 화합물 크로마토그램을 오버레이하도록 지정할 수 있습니다.
- 기본 **Formula Confirmation**(공식 확인) 보고서 템플릿이 수정되어 이제 **Flags (Tgt) 컬러 열과 Fragment Table with the colored Flags**(컬러 플래그가 있는 토막 표)(FIs)이 포함됩니다.

이들 연습을 시작하기 전에 ...

- 소프트웨어를 설치합니다. 지침은 **Installation Guide**(설치 설명서)를 참조합니다.
- 설치 디스크에 있는 **Data** 폴더를 비압축 형식으로 하드 디스크의 아무 위치에나 복사합니다.

이 폴더에는 이들 연습에 필요한 모든 데이터 파일이 들어 있습니다. 먼저 **.zip** 형식에서 데이터 파일을 추출해야 할 수 있습니다.

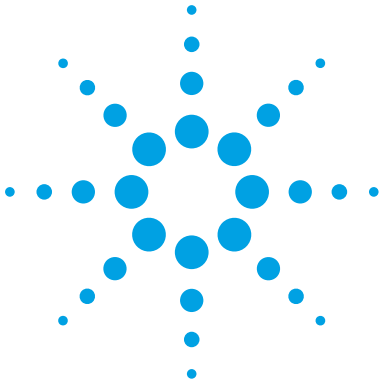
참고

이미 시스템에 있는 예제 데이터 파일이 디스크에 있는 원본으로부터 복사한 것인지 확실치 않으며 자신이 이들 파일의 유일한 사용자가 아니라면, 이들 파일을 다시 사용하지 마십시오. 이미 시스템에 있는 예제 데이터 파일이 디스크에 있는 원본과 정확하게 일치하지 않는다면 이들 연습으로 성된 결과가 설명서에 있는 결과와 일치하지 않게 됩니다.

목차

연습 1	정성 분석의 기본 배우기	9
	작업 1. 정성 분석 프로그램 열기	10
	작업 2. GC/MS 데이터용으로 사용자 인터페이스 구성	12
	작업 3. 크로마토그램 확대 및 축소	15
	작업 4. 크로마토그램 고정	16
	작업 5. 창 레이아웃 변경	17
	작업 6. 크로마토그램 추출	19
	작업 7. GC/MS 크로마토그램 대화식으로 적분	21
	작업 8. 시스템 적합성 값 계산	26
	작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출	30
	작업 10. 주석 추가	41
	작업 11. 질량 캘리퍼 추가	45
연습 2	찾고 식별하기	47
	작업 12. 크로마토그램 디콘볼루션으로 화합물 찾기	48
	작업 13. Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 사용하여 화합물 식별	52
	작업 14. MRM 으로 화합물 찾기 (MRM 만)	58
	작업 15. 적분으로 화합물 찾기	62
	작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색	65
	작업 17. 결과 저장	71
연습 3	워크플로 사용, 내보내기 및 인쇄	75
	작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및 실행	76
	작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행	81
	작업 20. CEF 파일 내보내기	85
	작업 21. 분석 보고서 인쇄	87
	작업 22. 화합물 보고서 인쇄	92

참조	95
창으로 작업	96
Data Navigator(데이터 탐색기) 에서 결과 데이터로 작업	98
크로마토그램에서 작동 실행	99
MS 또는 MS/MS 스펙트럼에서 작업 수행	100
크로마토그램 시각 데이터로 작업	101
스펙트럼 시각 데이터로 작업	102
워크플로	103
보고서 템플릿 사용자 지정	107



1

정성 분석의 기본 배우기

작업 1. 정성 분석 프로그램 열기	10
작업 2. GC/MS 데이터용으로 사용자 인터페이스 구성	12
작업 3. 크로마토그램 확대 및 축소	15
작업 4. 크로마토그램 고정	16
작업 5. 창 레이아웃 변경	17
작업 6. 크로마토그램 추출	19
작업 7. GC/MS 크로마토그램 대화식으로 적분	21
작업 8. 시스템 적합성 값 계산	26
작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출	30
작업 10. 주석 추가	41
작업 11. 질량 캘리퍼 추가	45

이 연습 과정에서는 GC/Q-TOF 및 GC/QQQ 데이터로 작업하기 위해 정성 분석 프로그램의 많은 강력한 기능 중 일부를 탐구해 봅니다.

각 연습 과정은 3 개의 열이 있는 표로 표시됩니다.

- 단계 - 이들 일반 지침을 사용하여 스스로 프로그램을 탐구해 보십시오.
- 자세한 지침 - 도움이 필요하거나 단계별 학습 과정을 원한다면 이용하십시오.
- 주석 - 연습 과정의 각 단계에 대한 추가 정보 및 팁을 제공합니다.




1 정성 분석의 기본 배우기
 작업 1. 정성 분석 프로그램 열기

작업 1. 정성 분석 프로그램 열기

이 작업에서는 현재 분석법을 사용하여 여러 데이터 파일을 엽니다.

작업 1. 여러 데이터 파일과 함께 정성 분석 프로그램 열기

단계	자세한 지침	주석
1	<p>정성 분석 프로그램을 엽니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> 데이터 파일인 Pest - 200 - Scan.d, Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d 및 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d (\\MassHunter\Data 폴더 나 복사한 폴더 안에서) 를 엽니다. <p>a Agilent MassHunter Qualitative Analysis B.06.00 아이콘  을 더블 클릭합니다 . 그러면 시스템에서 Open Data Files (데이터 파일 열기) 대화 상자를 표시합니다 .</p> <p>b \\MassHunter\Data\GC 또는 예제 파일이 있는 폴더로 이동합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> Pest - 200 - Scan.d 파일에는 MS 데이터가 있고 , Pest - STD 200 MRM.d 및 Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d 파일에는 MS 와 MS/MS 데이터가 모두 들어 있습니다 (모든 GC/QQQ). MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 에는 GC/Q-TOF 데이터가 들어 있습니다 . 창이 활성화 중일 때 F1 키를 누르면 대부분의 창 , 대화 상자 및 탭에 대한 도움말을 볼 수 있습니다 .

- **Use current method(현재 분석법 사용)** 단추가 클릭되어 있는지 확인합니다 .
- **Load result data(결과 데이터 로드)** 확인란이 선택 해제되어 있어야 합니다 . **Load result data(결과 데이터 로드)** 확인란이 없다면 데이터 파일에 저장된 결과가 없는 것입니다 . “작업 17. 결과 저장”(71 페이지) 에서 결과를 저장하는 방법을 배울 수 있습니다 .
- **Run 'File Open' actions from selected method(선택한 분석법에서 '파일 열기' 작업 실행)** 확인란이 선택 해제되어 있어야 합니다 .

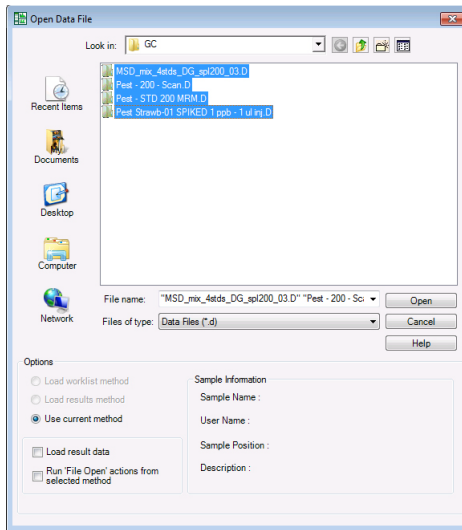



그림 1 소프트웨어를 열 때 데이터 파일 열기

작업 1. 여러 데이터 파일과 함께 정성 분석 프로그램 열기 (계속)

단계	자세한 지침	주석
	<p>c Shift 키를 누른 상태로 Pest - 200 - Scan.d, Pest - STD 200 MRM.d, Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d 및 MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d 를 클릭합니다 .</p> <p>d Open(열기) 을 누릅니다 . 4 개의 모든 데이터 파일이 Data Navigator(데이터 탐색기) 창에 표시되며 , 1 에서 3 개의 크로마토그램이 Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창에 표시됩니다 .</p> <p>e Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에서 List Mode (목록 모드) 아이콘  을 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Ctrl 키를 누르면 목록 안에서 바로 옆에 있지 않은 파일들을 선택할 수 있습니다 . • 이 시점에서 기본 창에 표시되는 항목은 이들 파일을 열기 전에 사용한 분석법, 레이아웃, 표시 및 플롯 설정에 따라 다릅니다 . • List Mode(목록 모드) 아이콘을 클릭하면 아이콘의 배경이 주황색으로 변경됩니다 .

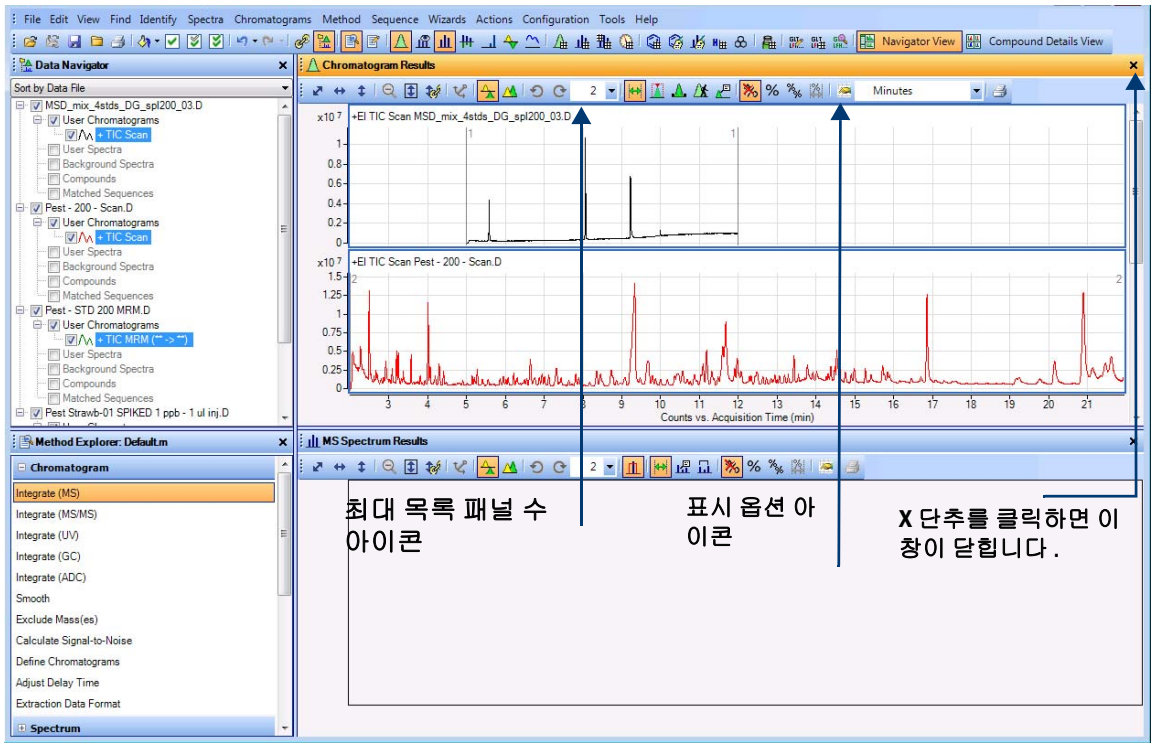


그림 2 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로가 로드된 Qualitative Analysis(정성 분석) 기본 창

1 정성 분석의 기본 배우기

작업 2. GC/MS 데이터용으로 사용자 인터페이스 구성

작업 2. GC/MS 데이터용으로 사용자 인터페이스 구성

이 작업에서는 General(일반) 워크플로 (GC/QQQ 고객용) 또는 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로 (GC/Q-TOF 고객용) 로 전환해봅니다 . 이들 2 개의 워크플로는 GC/MS 데이터 분석을 지원하는 유일한 워크플로입니다 . 그런 다음 , User Interface Configuration(사용자 인터페이스 구성) 대화 상자를 열고 GC/QQQ 시스템 또는 GC/Q-TOF 시스템에 대해 적절한 확인란을 선택합니다 .

작업 2. GC 용 사용자 인터페이스 구성

단계	자세한 지침	주석
1	<p>필요하다면 정성 분석 프로그램을 엽니다 .</p> <p>a Agilent MassHunter Qualitative Analysis 아이콘  을 더블 클릭합니다 . 그러면 시스템에서 Open Data Files (데이터 파일 열기) 대화 상자를 표시합니다 .</p> <p>b Open Data Files(데이터 파일 열기) 대화 상자에서 Cancel(취소) 을 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 창이 활성화 중일 때 F1 키를 누르면 모든 창 , 대화 상자 및 탭에 대한 도움말을 볼 수 있습니다 .
2	<p>General(일반) 워크플로 또는 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로로 전환합니다 .</p> <p>a GC/QQQ 기기가 있다면 Configuration(구성) > Configure for Workflow(워크플로 구성) > General(일반) 명령을 클릭합니다 . GC/Q-TOF 기기가 있다면 Configuration(구성) > Configure for Workflow(워크플로 구성) > GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 명령을 클릭합니다 .</p> <p>b Load workflow's default method(워크플로의 기본 분석법 로드) 단추와 Load workflow's default layout(워크플로의 기본 레이아웃 로드) 단추를 클릭합니다 .</p> <p>c OK(확인) 를 클릭합니다 .</p> <p>d Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에서 List Mode(목록 모드) 아이콘  을 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 동일한 컴퓨터에 GC/QQQ 또는 GC/Q-TOF 용 Data Acquisition(데이터 수집) 프로그램이 설치되어 있다면 소프트웨어에서 사용자 인터페이스를 자동으로 구성합니다 . Method Explorer(분석법 탐색기) 창에 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 부분이 이미 존재할 수 있습니다 . 기본적으로 크로마토그램은 겹쳐져 있습니다 . 이들 예제를 위해 크로마토그램이 List Mode(목록 모드) 에 표시됩니다 .

작업 2. GC 용 사용자 인터페이스 구성

단계	자세한 지침	주석
<p>3 GC/QQQ 를 가지고 있다면 GC/QQQ 기능만 표시하도록 사용자 인터페이스를 구성하십시오 .</p>	<p>a Configuration (구성) > User Interface Configuration (사용자 인터페이스 구성) 을 클릭합니다 .</p> <p>b Separation types (분리 유형) 아래에서 GC 확인란만 선택합니다 .</p> <p>c GC/QQQ 기기가 있다면 Ionization type (이온화 유형) 아래에서 EI or other "hard" ionization technique (EI 또는 기타 " 강한 " 이온화 기술) 확인란을 선택하고 CI, APCI, ESI, MADLDI or other "soft" ionization technique (CI, APCI, ESI, MADLDI 또는 기타 " 부드러운 " 이온화 기술) 확인란을 선택 해제합니다 .</p> <p>d Mass accuracy (질량 정확도) 아래에서 Accurate mass (정확한 질량) (TOF, Q-TOF) 확인란을 선택 해제합니다 . Unit mass (단위 질량) (Q, QQQ) 확인란을 선택합니다 .</p> <p>e Optional software (선택사항 소프트웨어) 기능 아래에서 Peptide Sequence Editor (펩티드 시퀀스 편집기) 확인란과 BioConfirm Software (BioConfirm 소프트웨어) 확인란을 선택 해제합니다 .</p> <p>f Non-MS detectors (비 MS 감지기) 아래에서 UV 및 ADC 확인란을 선택 해제합니다 .</p> <p>g Show advanced parameters (고급 파라미터 보기) 확인란을 선택합니다 .</p> <p>h OK (확인) 를 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • User Interface Configuration (사용자 인터페이스 구성) 대화 상자에서 사용 가능한 명령을 변경할 수 있습니다 . • 어떤 기능이 보이지 않는다면 User Interface Configuration (사용자 인터페이스 구성) 대화 상자에서 확인란을 지웠을 때 숨겨진 것일 수 있습니다 .

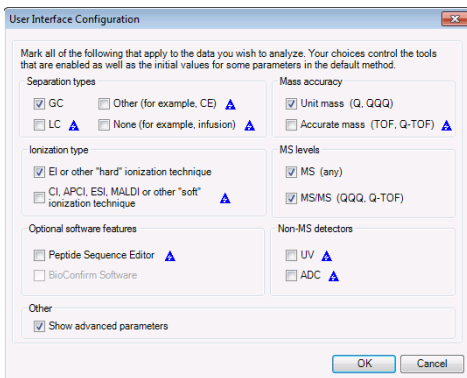


그림 3 GC/QQQ 데이터와 사용하도록 사용자 인터페이스 구성

1 정성 분석의 기본 배우기

작업 2. GC/MS 데이터용으로 사용자 인터페이스 구성

작업 2. GC 용 사용자 인터페이스 구성

단계	자세한 지침	주석
4	<p>GC/Q-TOF 기기를 가지고 있다면 GC/Q-TOF 기능만 표시하도록 사용자 인터페이스를 구성하십시오 .</p> <p>a Configuration(구성) > User Interface Configuration(사용자 인터페이스 구성) 을 클릭합니다 .</p> <p>b Separation types(분리 유형) 아래에서 GC 확인란만 선택합니다 .</p> <p>c Ionization type(이온화 유형) 아래에서 확인란 2 개를 모두 선택합니다 .</p> <p>d MS levels(MS 레벨) 아래에서 확인란 2 개를 모두 선택합니다 .</p> <p>e Mass accuracy(질량 정확도) 아래에서 Accurate mass(정확한 질량) (TOF, Q-TOF) 확인란을 선택합니다 . Unit mass(단위 질량) (Q, QQQ) 확인란을 선택 해제합니다 .</p> <p>f Optional software(선택사항 소프트웨어) 기능 아래에서 Peptide Sequence Editor(펩티드 시퀀스 편집기) 확인란과 BioConfirm Software(BioConfirm 소프트웨어) 확인란을 선택 해제합니다 .</p> <p>g Non-MS detectors(비 MS 감지기) 아래에서 UV 및 ADC 확인란을 선택 해제합니다 .</p> <p>h Show advanced parameters(고급 파라미터 보기) 확인란을 선택합니다 .</p> <p>i OK(확인) 를 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • User Interface Configuration(사용자 인터페이스 구성) 대화 상자에서 사용 가능한 명령을 변경할 수 있습니다 . • 어떤 기능이 보이지 않는다면 User Interface Configuration(사용자 인터페이스 구성) 대화 상자에서 확인란을 지웠을 때 숨겨진 것일 수 있습니다 .

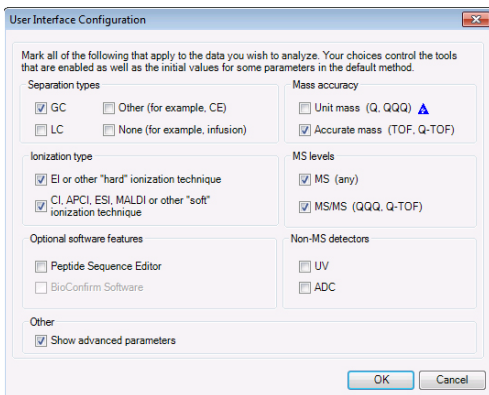


그림 4 GC/Q-TOF 용 사용자 인터페이스 구성

작업 3. 크로마토그램 확대 및 축소

이 작업에서는 정성 분석 프로그램의 확대 및 축소 기능을 배우게 됩니다.

작업 4. 크로마토그램 고정

이 작업에서는 크로마토그램을 고정합니다. 크로마토그램을 고정하면 다른 크로마토그램을 스크롤하여 표시하려고 해도 고정된 크로마토그램이 스플레이에 영구적으로 남게 됩니다.

작업 4. 크로마토그램 고정

단계	자세한 지침	주석
• 크로마토그램을 고정합니다. • 모든 크로마토그램을 표시합니다. • 크로마토그램 보기 목록이 1로 설정되어 있어야 합니다. • Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창에서 두 번째 TIC 를 선택합니다. • 이 TIC 를 고정합니다. • 다른 크로마토그램을 스크롤합니다. • 고정을 푼니다.	<p>a Data Navigator(데이터 탐색기) 에서 이전 작업에서 숨긴 크로마토그램의 확인란을 선택합니다.</p> <p>b Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창에서 최대 패널 수가 1로 설정되어 있어야 합니다.</p> <p>c Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창에서 두 번째 TIC 를 선택합니다.</p> <p>d 크로마토그램 내부를 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Set Anchor(고정 설정) 를 클릭합니다.</p> <p>e Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창에서 스크롤 막대를 사용하여 크로마토그램 목록을 스크롤합니다. 두 번째 TIC 가 첫 번째 크로마토그램으로 상 보이는 상태가 됩니다.</p> <p>f Chromatograms(크로마토그램) > Clear Anchor(고정 지우기) 를 클릭합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 크로마토그램에 고정을 설정하면 Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 고정된 크로마토그램 이름 옆에 고정 아이콘이 나타납니다. • 1 개의 크로마토그램을 고정한 후에는 보기 목록에서 1로 표시되어도 Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창에 2 개의 크로마토그램이 나타납니다. 이것은 고정된 크로마토그램 이외에 1 개의 크로마토그램이 표시됨을 의미합니다. • 또는 해당 크로마토그램을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 바로 가기 메뉴에서 Clear Anchor(고정 지우기) 를 클릭해도 됩니다.

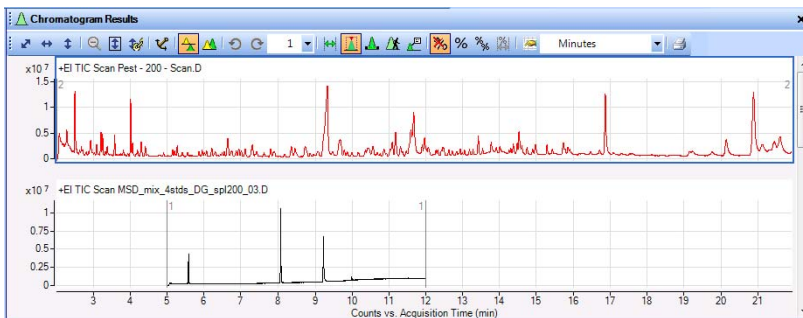


그림 5 Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창에 고정된 TIC

작업 5. 창 레이아웃 변경

이 작업에서는 기본 보기 내에서 창들을 움직이고 다양한 창 레이아웃을 만들어 봅니다.

작업 5. 창 레이아웃 변경

단계	자세한 지침	주석
1	<p>창 레이아웃 변경 :</p> <ul style="list-style-type: none"> 창 크기를 변경합니다 . 창 레이아웃을 저장합니다 . 레이아웃을 잠금 해제합니다 . Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창을 유동으로 변경합니다 . Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창을 움직입니다 . 창의 위치를 변경하기 위한 도구를 표시합니다 . 	<ul style="list-style-type: none"> 레이아웃이 잠금 해제되면 시스템에서 Lock Layout(레이아웃 잠금) 메뉴 옆에 확인 표시가 나타나지 않습니다 . 레이아웃이 잠금 해제되어 있을 때는 위치 변경 도구만 사용할 수 있습니다 . 또한 , 창의 제목 표시줄을 더블 클릭하여 창을 유동으로 만들 수 있습니다 . 소프트웨어에는 많은 다양한 레이아웃이 생성되어 있습니다 . 여러 레이아웃의 로드를 시도해 볼 수도 있습니다 . 소프트웨어에는 몇 가지 다른 워크플로는 각기 다른 레이아웃을 로드합니다 . 다른 워크플로로 전환하면 레이아웃도 변경니다 .

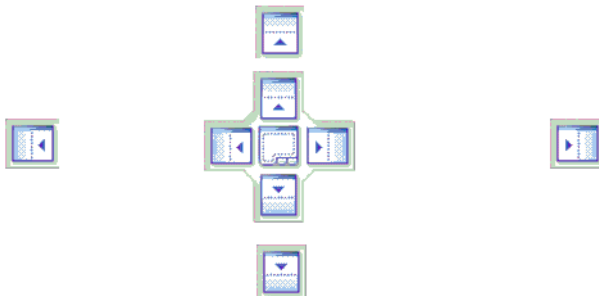


그림 6 창 위치 변경 도구

1 정성 분석의 기본 배우기

작업 5. 창 레이아웃 변경

작업 5. 창 레이아웃 변경 (계속)

단계	자세한 지침	주석
2	<p>Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창의 위치를 변경합니다 .</p> <ul style="list-style-type: none"> 창을 다른 창의 위 , 왼쪽 , 오른쪽 , 아래로 움직입니다 . 창 2 개를 함께 움직여서 서로의 위에 오도록 하고 아래의 탭을 통해서만 보이도록 합니다 . 기본 레이아웃을 복원합니다 . 	<ul style="list-style-type: none"> 위치를 변경하려면 커서가 상자 안에 있는 화살표 하나 위에 있어야 합니다 . Restore Default Layout(기본 레이아웃 복원) 명령을 클릭하면 General(일반) 워크플로와 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로가 함께 사용되는 레이아웃이 복원됩니다 . 다른 워크플로를 사용한다면 해당 워크플로와 함께 사용되는 레이아웃을 로드해야 합니다 .
	<ul style="list-style-type: none"> 커서를 작은 아이콘 하나 위로 그레그하면 , 드래그하고 있는 창이 다른 모든 창의 위 , 오른쪽 , 아래쪽 또는 왼쪽에 위치하게 됩니다 . 커서를 더 큰 아이콘 위로 드래그합니다 . 커서를 큰 아이콘의 가장자리 위로 드래그해서 창을 다른 창의 위 , 오른쪽 , 아래 또는 왼쪽에 배치할 수도 있습니다 . 창 2 개를 함께 탭하려면 커서를 큰 아이콘의 중앙으로 드래그하십시오 . 그러면 2 개의 창이 함께 탭된 그림자 버전이 나타납니다 . 마우스의 드래그를 중단합니다 . 이제 창 2 개가 함께 탭됩니다 . Configuration(구성) > Window Layouts(창 레이아웃) > Restore Default Layout(기본 레이아웃 복원) 을 클릭합니다 . 	

작업 6. 크로마토그램 추출

이 작업에서는 원본 TIC 에서 크로마토그램을 추출하고 병합합니다.

작업 6. 크로마토그램 추출

단계	자세한 지침	주석
1	<p>Pest - 200 Scan.d 데이터 파일 내 2 개의 질량에서 추출된 이온 크로마토그램 (EIC) 을 추출 및 병합합니다 .</p> <ul style="list-style-type: none"> • m/z 값은 129.0 및 414.2 입니다 . • 개별 질량으로부터의 피크를 하나의 크로마토그램으로 병합하지 마십시오 . <p>a Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 Pest - 200 Scan.d 를 제외하고 데이터 파일에 대한 확인란을 선택 해제합니다 .</p> <p>b 아래의 옵션이나 오른쪽에 있는 옵션 하나를 사용하여 Extract Chromatograms(크로마토그램 추출) 대화 상자를 엽니다 .</p> <ul style="list-style-type: none"> • Chromatograms(크로마토그램) > Extract Chromatograms(크로마토그램 추출) 를 클릭합니다 . <p>c List of opened data files(열린 데이터 파일 목록) 에서 Pest - 200 - Scan.d 를 클릭합니다 .</p> <p>d Type(유형) 목록 상자에서 EIC 를 선택합니다 .</p> <p>e m/z value(s)(m/z 값) 필드에 129.0 , 414.2 를 입력합니다 .</p> <p>f 필요하다면 Merge multiple masses into one chromatogram(여러 질량을 하나의 크로마토그램으로 병합) 확인란을 선택 해제하여 EIC 를 병합합니다 .</p> <p>g OK(확인) 를 클릭합니다 .</p> <p>h Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에서 Maximum number of list panes(최대 목록 패널 수) 를 3 으로 설정합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 또한 , 다음 방법 중 하나로 크로마토그램을 추출할 수도 있습니다 . • 크로마토그램 내부를 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Extract Chromatograms(크로마토그램 추출) 를 클릭합니다 . • Data Navigator(데이터 탐색기) 에서 sulfas_PosMS.d 용 TIC Scan(TIC 스캔) 을 강조 표시 하고 TIC Scan(TIC 스캔) 을 마우스 오른쪽 단추로 클릭한 다음 , Extract Chromatograms(크로마토그램 추출) 를 클릭합니다 . • All(모두) 또는 MS 의 MS level(MS 레벨) 을 사용할 수 있습니다 . • 추출 후에 추출한 크로마토그램이 자동으로 적분되도록 선택할 수도 있습니다 . • 또한 , 질량 스펙트럼에서 크로마토그램을 추출할 수도 있습니다 .

1 정성 분석의 기본 배우기
작업 6. 크로마토그램 추출

작업 6. 크로마토그램 추출 (계속)

단계

자세한 지침

주석

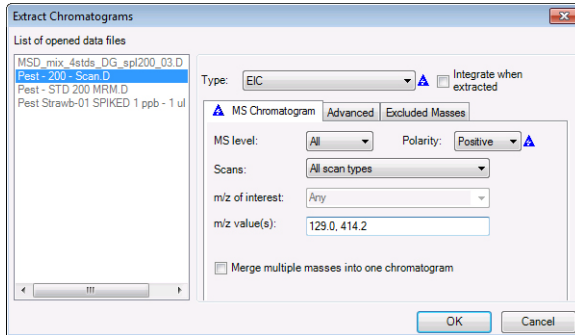


그림 7 Extract Chromatograms(크로마토그램 추출) 대화 상자

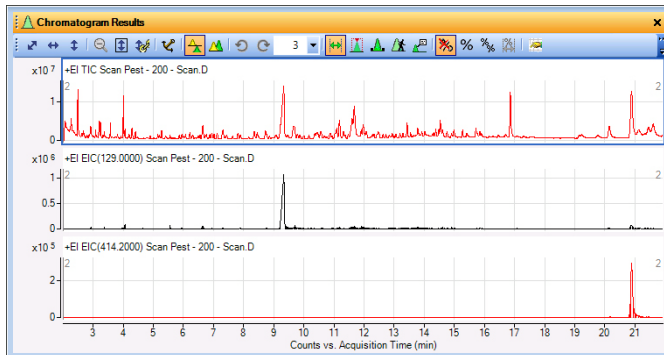


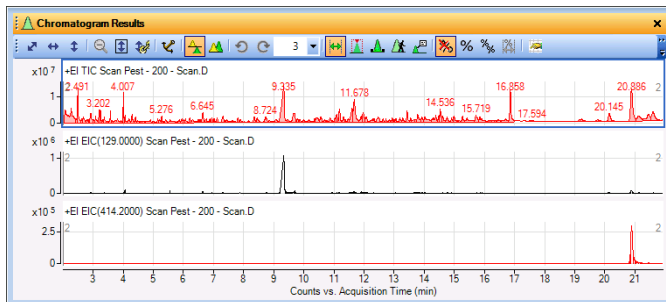
그림 8 원본 TIC 와 비교한 병합 및 추출된 이온 크로마토그램 (EIC)

작업 7. GC/MS 크로마토그램 대화식으로 적분

이 작업에서는 MS/MS 데이터용 적분 피크에 대해 시그널 대 노이즈를 계산하고 크로마토그램을 적분하며, 결과를 수정하도록 적분 파라미터를 변경하는 여러 방법을 배웁니다.

작업 7. 크로마토그램 대화식으로 적분 (GC/MS)

단계	자세한 지침	주석
1	<p>오른쪽에 나열된 옵션 중 하나를 사용하여 Pest - 200 - Scan.d 데이터 파일에 대한 TIC Scan 크로마토그램을 적분합니다.</p> <p>a Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 Pest - 200 - Scan.D 데이터 파일을 선택합니다.</p> <p>b TIC Scan 크로마토그램을 강조 표시하고 다음 명령 중 하나를 사용합니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> 메뉴 모음에서 Chromatograms (크로마토그램) > Integrate Chromatogram (크로마토그램 적분) 을 클릭합니다. 크로마토그램 창 안의 아무 곳이나 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Integrate Chromatograms (크로마토그램 적분) 를 클릭합니다. Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 Pest - 200 - Scan.D > User Chromatograms (사용자 크로마토그램) > TIC Scan (TIC 스캔) 을 선택하고 TIC Scan (TIC 스캔) 을 마우스 오른쪽 단추로 클릭한 다음, Integrate Chromatogram (크로마토그램 적분) 을 클릭합니다. 	<ul style="list-style-type: none"> 프로그램은 사실상 크로마토그램 안의 모든 피크를 적분함을 유의하십시오. Method Editor (분석법 편집기) 창에서 MS 데이터, MS/MS 데이터 및 GC 데이터에 사용할 적분기를 선택합니다. 이 크로마토그램은 MS 크로마토그램이므로, 이 크로마토그램을 적분할 때는 Method Editor(분석법 편집기) 의 Integrate(적분)(MS) 부분에 설정된 값들이 사됩니다.
2	<p>한 번에 2 개의 크로마토그램만 표시합니다.</p> <p>Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에서 Maximum number of list panes (최대 목록 패널 수) 를 2 로 설정합니다.</p>	



많은 작은 피크들이 적분됩니다.

그림 9 많은 작은 피크들이 적분된 TIC 스캔 크로마토그램

1 정성 분석의 기본 배우기

작업 7. GC/MS 크로마토그램 대화식으로 적분

작업 7. 크로마토그램 대화식으로 적분 (GC/MS) (계속)

단계	자세한 지침	주석
3	<p>작은 피크들을 적분하도록 임계값을 변경합니다 .</p> <ul style="list-style-type: none"> 가장 큰 피크 3 개만 보유하도록 임계값을 변경합니다 . <p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Chromatogram(크로마토그램) > Integrate(적분)(MS) 를 클릭하여 Integrate(적분)(MS) 탭을 표시합니다 .</p> <p>b Agile 적분기를 선택합니다 .</p> <p>c Peak Filters(피크 필터) 탭을 클릭합니다 .</p> <p>d Maximum number of peaks(최대 피크 수) 아래에서 Limit (by height) to the largest(큰 피크로 제한 (높이)) 를 선택하고 3 을 입력합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 현재 분석법에 저장된 값의 설정을 변경하면 파란색 삼각형이 나타납니다 . 분석법을 저장하면 이 삼각형이 사라집니다 .

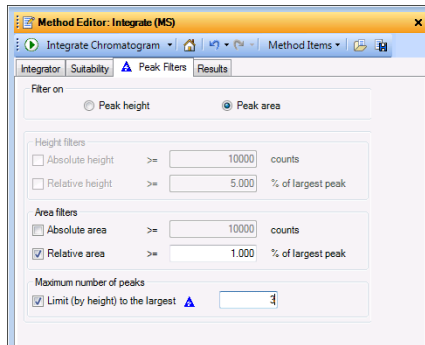


그림 10 Limit (by height) to the largest(큰 피크로 제한 (높이)) 가 선택된 Peak Filters(피크 필터) 탭

4 크로마토그램 다시 적분

- e Method Editor(분석법 편집기) 도구 모음에서 단추를 클릭하여 새로운 설정을 사용하여 적분합니다 .
- 이제 가장 큰 3 개의 피크만 적분됩니다 .
 - 2.491 에서의 피크가 16.858 분에서의 피크보다 높으므로 세 번째 피크로 선택됩니다 .

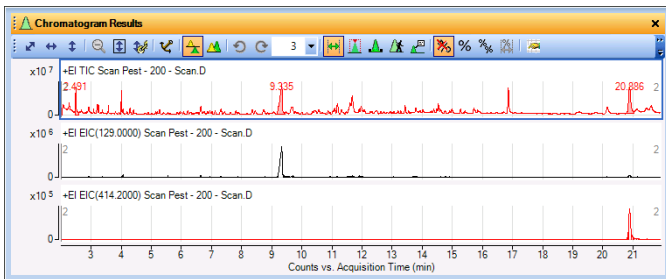


그림 11 피크 수 제한 시 적분된 TIC 스캔 크로마토그램

작업 7. 크로마토그램 대화식으로 적분 (GC/MS) (계속)

단계	자세한 지침	주석
5	<p>Pest - STD 200 MRM.D 데이터 파일에 대해 TIC MRM 크로마토그램을 적분합니다 .</p> <p>a Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 Pest - STD 200 MRM.d 데이터 파일에 대해 TIC MRM 을 선택합니다 .</p> <p>b 다음 명령 중 하나를 사용하여 크로마토그램을 적분합니다 .</p> <ul style="list-style-type: none"> 메뉴 모음에서 Chromatograms (크로마토그램) > Integrate Chromatogram(크로마토그램 적분) 을 클릭합니다 . 크로마토그램 창 안의 아무 곳이나 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Integrate Chromatograms(크로마토그램 적분) 를 클릭합니다 . Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 강조 표시된 크로마토그램을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Integrate Chromatogram(크로마토그램 적분) 을 클릭합니다 . <p>c 5.8 에서 8.5 분까지 확대합니다 .</p> <p>d Maximum number of list panes(최대 목록 패널 수) 를 2 로 설정합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> Ctrl 키를 누르면 Data Navigator (데이터 탐색기) 창에서 하나 이상의 크로마토그램을 강조 표시할 수 있습니다 . 프로그램은 사실상 크로마토그램 안의 모든 피크를 적분함을 유의하십시오 . 이들 크로마토그램은 MS/MS 크로마토그램이므로 , 이 크로마토그램을 적분할 때는 Method Editor(분석법 편집기) 창의 Integrate(적분)(MS/MS) 부분에 설정된 들이 사용됩니다 . MS 크로마토그램의 적분에 하나의 적분기를 , MS/MS 크로마토그램의 적분에 다른 적분기를 사용하도록 선택할 수 있습니다 .

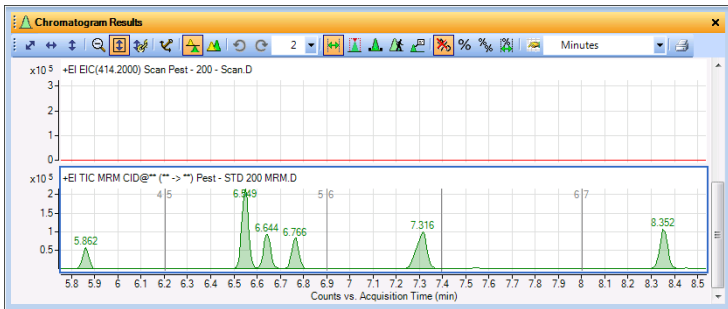


그림 12 적분된 MRM 크로마토그램

1 정성 분석의 기본 배우기

작업 7. GC/MS 크로마토그램 대화식으로 적분

작업 7. 크로마토그램 대화식으로 적분 (GC/MS) (계속)

단계	자세한 지침	주석
6	<p>MS/MS (GC) 적분기를 선택합니다 . 절대 높이가 20,000 이상인 피크만 수용하도록 필터를 변경합니다 .</p> <p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Chromatogram(크로마토그램) > Integrate(적분) (MS/MS) 를 선택합니다 .</p> <p>b MS/MS (GC) 를 Integrator(적분기) 로 선택합니다 .</p> <p>c Peak Filters(피크 필터) 탭을 클릭합니다 .</p> <p>d Filter on(필터 켜기) 아래에서 Peak height(피크 높이) 을 클릭합니다 .</p> <p>e Height(높이) 필터 아래에서 Absolute height(절대 높이) 확인란을 선택합니다 .</p> <p>f 60000을 Absolute height(절대 높이) 로 입력합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 현재 분석법에 저장된 값의 설정을 변경하면 파란색 삼각형이 나타납니다 . 분석법을 저장하면 이 삼각형이 사라집니다 .

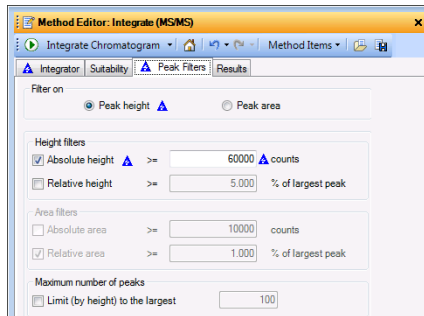

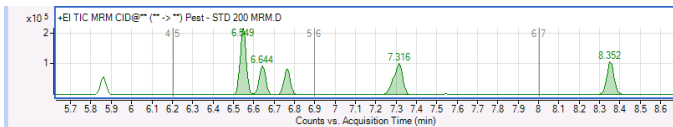


그림 13 Absolute height(절대 높이) 가 선택된 Peak Filters(피크 필터) 탭

7 크로마토그램 다시 적분




- g** Method Editor(분석법 편집기) 도 구 모음에서  단추를 클릭합니다 .
- 이제 가장 큰 피크들만 적분됩니다 .



이 피크에 대한 절대 높이가 60000 보다 낮으므로 5.8 분에서 더 낮은 피크는 더 이상 적분 결과에 포함되지 않습니다 .

그림 14 높은 임계값 설정으로 적분된 TIC 및 EIC MS/MS 크로마토그램

작업 7. 크로마토그램 대화식으로 적분 (GC/MS) (계속)

단계	자세한 지침	주석
8 현재 분석법에 대해 저장된 설정을 복원하고 Method Editor(분석법 편집기) 를 닫습니다 .	<p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 에서 Chromatogram(크로마토그램) > Integrate(적분)(MS/MS) 부분을 선택합니다 .</p> <p>b Method Editor(분석법 편집기) 에서  아이콘을 클릭합니다 .</p> <p>c Method Explorer(분석법 탐색기) 에서 Chromatogram(크로마토그램) > Integrate(적분)(MS) 부분을 선택합니다 .</p> <p>d Method Editor(분석법 편집기) 에서  아이콘을 클릭합니다 .</p> <p>e Method Editor(분석법 편집기) 창을 닫습니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 변경을 취소하고 로드된 분석법에서 값을 복원하려면 , Method Editor(분석법 편집기) 도구 모음에 있는 Restore to last saved values from file(파일에서 마지막 저장한 값 복원) 아이콘  을 클릭합니다 .
9 원래의 크로마토그램을 제외한 모든 크로마토그램을 삭제합니다 . 원래의 크로마토그램에서 적분 결과를 삭제합니다 .	<p>a Data Navigator(데이터 탐색기) 창의 User Chromatograms(사용자 크로마토그램) 창 아래에서 원래의 크로마토그램을 제외한 모든 크로마토그램을 강조 표시합니다 .</p> <p>b 강조 표시한 크로마토그램을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Delete (삭제) 를 클릭합니다 .</p> <p>c 모든 TIC 크로마토그램을 선택합니다 .</p> <p>d Chromatograms(크로마토그램) > Clear Results(결과 지우기) 를 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> Clear Results(결과 지우기) 명령을 사용할 때는 크로마토그램은 삭제되지 않으며 , 해당 크로마토그램에 연결된 결과가 제거됩니다 . 이 경우 적분 값이 지워집니다 .

작업 8. 시스템 적합성 값 계산

이 작업에서는 크로마토그램을 대화식으로 적분하고 결과를 수정하도록 적분 파라미터를 변경하며, 각 피크에 대한 시그널 대 노이즈를 계산하는 러 방법을 배웁니다. 또한, 시스템 적합성 계산을 활성화하는 방법을 배웁니다.

작업 8. 크로마토그램 대화식으로 적분 (MS)

단계	자세한 지침	주석
1	<p>오른쪽에 나열된 옵션 하나를 사용하여 MSD_mix_4stds_DB_spi200_03.d 및 Pest - 200 - Scan.d 크로마토그램을 적분합니다.</p> <p>a Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 MSD_mix_4stds_DB_spi200_03.d 데이터 파일 옆에 있는 확인란을 선택합니다.</p> <p>b Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 Pest - 200 - Scan.d 데이터 파일 옆에 있는 확인란을 선택합니다.</p> <p>c 2 개의 TIC 를 모두 강조 표시합니다.</p> <p>d 다음 옵션 하나를 사용하여 이들 2 개의 파일에 대한 TIC Scan(TIC 스캔) 을 적분합니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> 기본 메뉴에서 Chromatograms (크로마토그램) > Integrate Chromatogram(크로마토그램 적분) 을 클릭합니다. 해당 크로마토그램을 강조 표시합니다. 그런 다음, 해당 크로마토그램을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Integrate Chromatogram(크로마토그램 적분) 을 클릭합니다. Data Navigator(데이터 탐색기) 에서 2 개의 데이터 파일 모두에 대한 TIC Scan(TIC 스캔) 을 강조 표시합니다. 그런 다음, 양 크로마토그램을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Integrate Chromatogram(크로마토그램 적분) 을 클릭합니다. 	<ul style="list-style-type: none"> General(일반) 워크플로의 경우, 분석법 적분 시 method default.m 에서 선택한 적분기인 General (일반) 적분기를 사용합니다. GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로의 경우에는 적분에 Agile 적분기를 사용합니다. Chromatogram(크로마토그램) > Integrate(적분)(MS) > Integrator (적분기) 탭에서 이 값을 변경할 수 있습니다. 기본 파라미터를 사용한 적분은 매우 작은 피크를 감지함에 유의하십시오.

작업 8. 크로마토그램 대화식으로 적분 (MS) (계속)

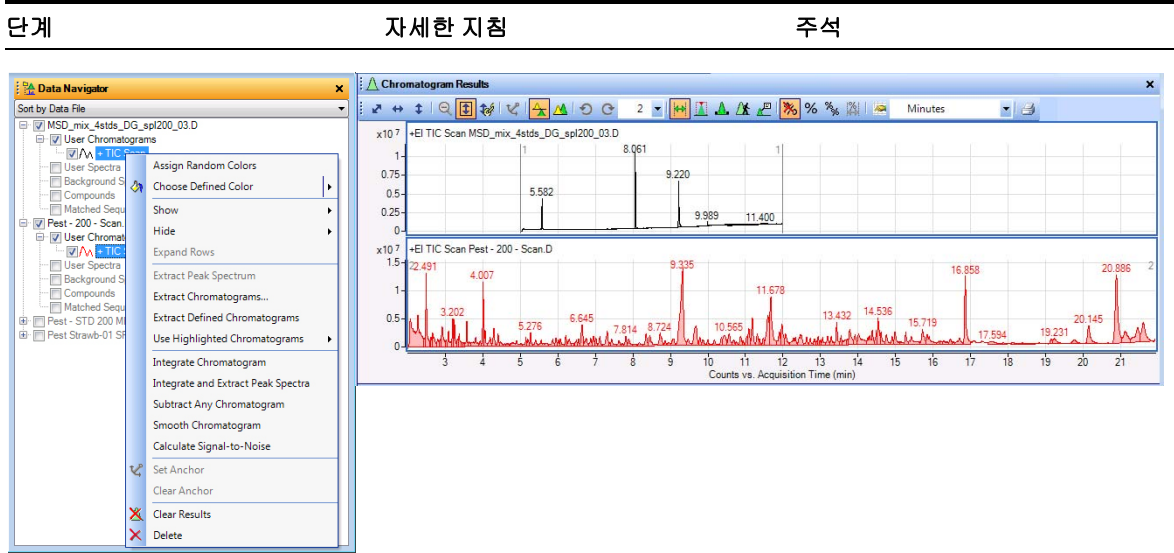



그림 15 Data Navigator(데이터 탐색기) 의 바로 가기 메뉴 한 개 및 적분된 크로마토그램

2 MS 크로마토그램에 대한 시스템 적합성 계산을 활성화합니다.

- a Method Explorer(분석법 탐색기) 에서 **Chromatogram(크로마토그램) > Integrate(적분)(MS)** 를 클릭하여 Integrater(적분기) 탭을 표시합니다.
- b **Suitability(적합성)** 탭을 클릭합니다.
- c **Enable system suitability calculations(시스템 적합성 계산 활성화)** 를 선택합니다.
- d **United States Pharmacopoeia(USP) (미국 약전)** 를 선택합니다.
- e **Column void time(컬럼 공극 시간)** 상자에 1 을 입력합니다.
- f **Column length(컬럼 길이)** 상자에 3000 을 입력합니다.

- 현재 분석법에 저장된 값의 설정을 변경하면 파란색 삼각형이 나타납니다. 분석법을 저장하면 이 삼각형이 사라집니다.
- **Integration Peak List(적분 피크 목록)** 에 몇 개의 컬럼을 설정하는데 사용되는 알고리즘이 선택한 약전에 따라 변경됩니다. 추가 정보는 온라인 도움말 참조하십시오.

작업 8. 크로마토그램 대화식으로 적분 (MS) (계속)

단계	자세한 지침	주석
5	<p>기본 분석법에 대한 설정을 복원하고 Method Editor(분석법 편집기) 창과 Integration Peak List(적분 피크 목록) 창을 닫습니다 .</p> <p>a 변경을 취소하고 기본 분석법에서 값을 복원하려면 , Method Editor(분석법 편집기) 도구 모음에 있는 Restore to last saved values from file (파일에서 마지막 저장한 값 복원) 아이콘  을 클릭합니다 .</p> <p>b Method Editor(분석법 편집기) 창을 닫습니다 .</p> <p>c Peaks List(피크 목록) 창의 제목을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Floating(유동) 을 클릭합니다 .</p> <p>d View(보기) > Integration Peak List (적분 피크 목록) 를 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 바로 가기 메뉴에 있는 Floating (유동) 명령을 한 번 더 클릭하면 Integration Peak List(적분 피크 목록) 창이 원래 있던 곳에 고정됩니다 .

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

이 작업에서는 크로마토그램에서 지정한 바로 그 곳에서 스펙트럼을 추출합니다. 정성 분석 프로그램이 특정 데이터 지점에서 스펙트럼을 추출하나, 여러 데이터 지점 또는 범위의 평균에서 평균 스펙트럼을 추출합니다.

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

단계	자세한 지침	주석
1	<p>크로마토그램을 Walk 하여 Pest - STD 200 MRM.d의 마지막 몇 개의 피크에 대한 전구 이온과 생성 이온을 볼 수 있습니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • 13 분과 16 분 사이의 영역을 확대합니다. • Walk Chromatogram(Walk 크로마토그램) 아이콘을 사용합니다. • 13 분 경에서 시작되는 스펙트럼을 검토하고 화살표를 오른쪽으로 움직입니다. 	<ul style="list-style-type: none"> • Walk Chromatogram(Walk 크로마토그램) 도구는 특히 MS/MS 데이터에 대해서 전구 이온과 생성 이온을 식별하는 데 유용합니다. • Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창에서 클릭하는 각 지점에 대한 스펙트럼이 자동으로 열리는 Spectrum Preview(스펙트럼 미리 보기) 창에서 자동으로 표시됩니다. • 때때로 스펙트럼 미리 보기 창에 스펙트럼 2 개가 표시되기도 합니다. 예를 들어, 13.431 분의 피크 가까이에서 클릭하는 각 지점에 대한 스펙트럼 미리 보기 창에 2 개의 스펙트럼이 표시됩니다.
	<p>a Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 Pest - 200 - MRM.D 라인을 선택합니다.</p> <p>b Method Editor(분석법 편집기) 창을 닫습니다.</p> <p>c MS Spectrum Results(스펙트럼 결과) 창을 닫습니다.</p> <p>d Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 TIC MRM 크로마토그램을 클릭합니다.</p> <p>e Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에서 Autoscale Y-axis during Zoom(확대 / 축소 시 Y 축 크기 자동 조정) 아이콘  을 클릭합니다.</p> <p>f Maximum number of list pane(최대 목록 패널 수)에서는 1 을 선택합니다.</p> <p>g 몇몇 피크를 확대하려면 13 분에 있는 피크 위에서 마우스 오른쪽 단추를 클릭하고 16 분으로 드래그한 다음 마우스 단추를 놓습니다.</p> <p>h Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에서 Walk Chromatogram(Walk 크로마토그램) 아이콘  을 클릭합니다.</p> <p>i Walk Chromatogram(Walk 크로마토그램) 커서를 13 분 경에서 X 축 위로 가져가서 클릭합니다.</p> <p>j 스펙트럼 사이를 탐색하려면 키보드에 있는 오른쪽 및 왼쪽 화살표를 사용합니다.</p>	

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

단계

자세한 지침

주석

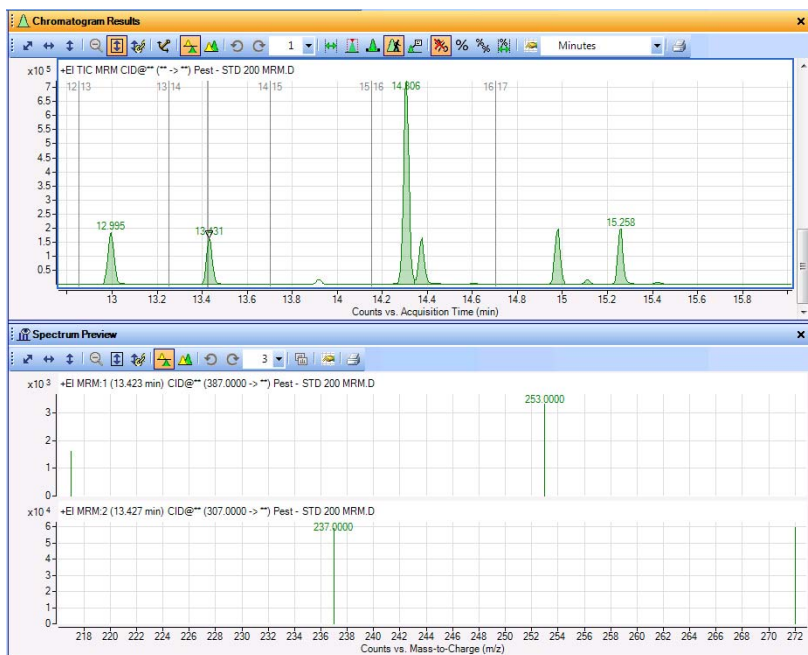


그림 18 크로마토그램을 Walk 하여 13.43 분의 피크에 대한 MRM 스펙트럼 2 개 보기

1 정성 분석의 기본 배우기

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

단계	자세한 지침	주석
<p>2 Pest - STD 200 MRM.d 데이터 파일의 5.2 분에서의 피크와 14.3 분에서의 피크에 대한 특정 데이터 지점에서 스펙트럼을 추출합니다 .</p> <ul style="list-style-type: none"> • Comments(주석) 아래에 설명된 옵션 중 하나를 사용하여 5.2 분에서 또는 그 가까이에서 , 그 다음에는 골짜기점 중 하나에서 스펙트럼을 추출합니다 . • 14.3 분 또는 그 가까이에서 스펙트럼을 추출합니다 . (골짜기점은 아직 제외) • 최소 3 개의 스펙트럼을 표시하도록 디스플레이를 변경합니다 . 	<p>a Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에서 Range Select(범위 선택) 아이콘  을 클릭합니다 .</p> <p>b Spectrum Preview(스펙트럼 미리 보기) 창을 닫습니다 .</p> <p>c Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에서 Zoom Out(축소) 아이콘  을 클릭합니다 .</p> <p>d 5.2 분에서의 피크를 확대하려면 4.0 분 피크 위에서 마우스 오른쪽 단추를 클릭하고 6.0 분으로 드래그한 후 놓습니다 .</p> <p>e 5.2 분 근처의 피크에서 Comments(주석) 옆에 나열된 방법 중 하나로 스펙트럼을 추출합니다 .</p> <p>f 5.1 분 근처의 골짜기점에서 스펙트럼을 추출합니다 .</p> <p>g Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에서 Zoom Out(축소) 아이콘  을 클릭합니다 .</p> <p>h 14 분과 15 분 사이의 영역을 확대합니다 .</p> <p>i 14.3 분 근처의 피크에서 Comments(주석) 옆에 나열된 방법 중 하나로 스펙트럼을 추출합니다 . (골짜기점 스펙트럼은 아직 추출하지 않음)</p> <p>j 필요하다면 MS Spectrum Results(스펙트럼 결과) 도구 모음에 있는 Maximum number of list panes(최대 목록 패널 수) 아이콘에서 4 를 선택합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 확대 / 축소할 때는 AutoScale Y-axis during Zoom(확대 / 축소 시 Y 축 크기 자동 조정) 아이콘  이 “ 켜져 있는지 ” 확인합니다 . 켜져 있으면 아이콘의 배경이 주황색입니다 . • 다음 방법 중 하나로 스펙트럼을 추출할 수도 있습니다 . <ul style="list-style-type: none"> • 크로마토그램에서 데이터 지점을 더블 클릭합니다 . • 크로마토그램에서 해당 데이터 지점을 클릭한 다음 , 크로마토그램 안의 아무 곳이나 마우스 오른쪽 단추로 클릭합니다 . Extract MS Spectrum(MS 스펙트럼 추출) 을 클릭합니다 . 그러면 Extract Spectrum(스펙트럼 추출) 대화 상자가 표시됩니다 . Pest - STD 200 MRM.d 파일이 선택되어 있는지 확인하고 Extract Spectrum(스펙트럼 추출) 대화 상자에서 Extract(추출) 을 클릭합니다 . • 처음으로 스펙트럼을 추출할 때는 해당 스펙트럼이 포함된 MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 창이 나타나고 , User Spectra(사용자 스펙트럼) 아래에 스펙트럼의 유형과 머무름 시간이 나타납니다 . 그 후 추출된 모든 스펙트럼이 두 곳 모두에도 나타납니다 . • 14.3 분 근처의 피크에서 MS 스펙트럼을 추출하면 해당 피크에서 2 개의 변화가 발생하기 때문에 2 개의 스펙트럼이 추출됩니다 .

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

단계

자세한 지침

주석

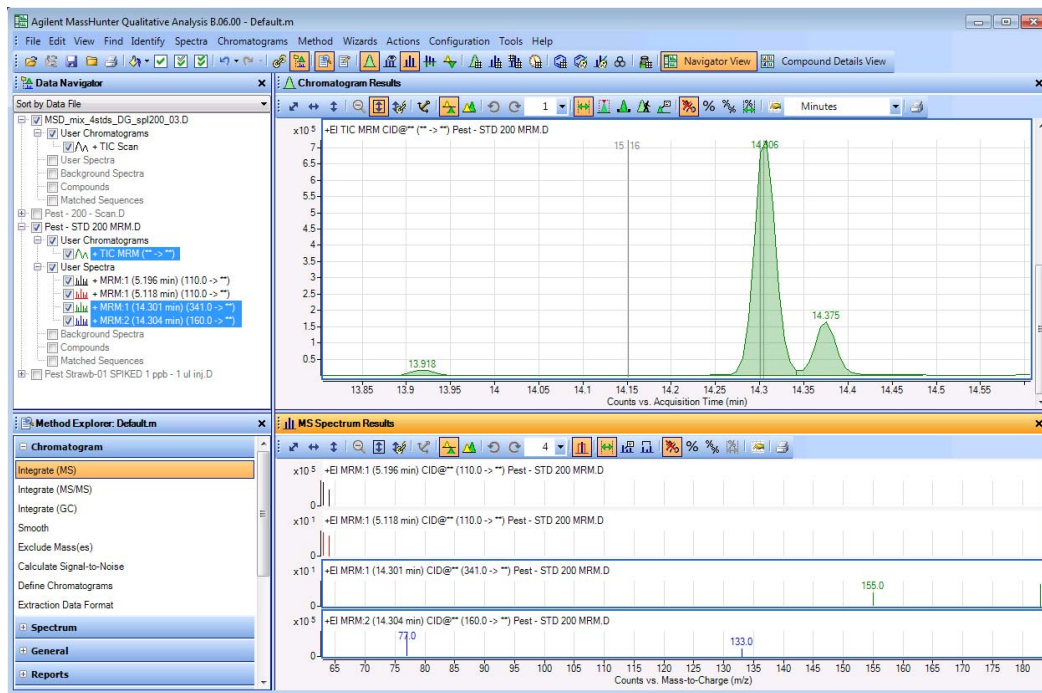



그림 19 5.2 분 피크로부터의 MRM 스펙트럼 2 개와 14.3 분 피크에서 MRM 스펙트럼 2 개가 있는 기본 창

1 정성 분석의 기본 배우기

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

단계	자세한 지침	주석
<p>3 Pest - STD 200 MRM.d 데이터 파일의 14.35 분에서의 골짜기점에 대한 MS 스펙트럼을 추출합니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Spectrum Preview(스펙트럼 미리 보기)를 표시합니다. • RT 14.3 분의 골짜기점에서 스펙트럼을 추출합니다. • 이 스펙트럼을 User Spectra(사용자 스펙트럼) 폴더에 복사합니다. • 6 개의 스펙트럼을 표시하도록 디스플레이를 변경합니다. • 스펙트럼 미리 보기를 끕니다. 	<p>a Spectrum Preview(스펙트럼 미리 보기) 아이콘  을 클릭합니다.</p> <p>b 14.3 분 근처의 골짜기점에서 스펙트럼을 추출합니다.</p> <p>c Spectrum Preview(스펙트럼 미리 보기) 창에서 해당 스펙트럼을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Copy to User Spectra(사용자 스펙트럼에 복사) 를 클릭합니다. 그러면 해당 스펙트럼이 Data Navigator(데이터 탐색기)에 있는 User Spectra(사용자 스펙트럼) 부분에 복사되어 MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 창에 나타납니다.</p> <p>d 스펙트럼 패널 목록에 있는 아래 방향 화살표를 클릭하고 6 을 선택합니다.</p> <p>e Spectrum Preview(스펙트럼 미리 보기) 창을 닫습니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Spectrum Preview(스펙트럼 미리 보기)가 활성화되어 있으면 시스템에서 Spectrum Preview(스펙트럼 미리 보기) 창에 수동으로 선택한 모든 스펙트럼을 표시합니다. 하지만 Data Navigator(데이터 탐색기)의 User Spectra(사용자 스펙트럼) 부분에는 표시되지 않습니다. • Spectrum Preview(스펙트럼 미리 보기)가 켜져 있으면 새로운 스펙트럼 추출 시 Qualitative Analysis(정성 분석)에서 이전 스펙트럼을 덮어씁니다. • Spectrum Preview(스펙트럼 미리 보기)모드는 크로마토그램 내에서 스펙트럼을 빠르게 검토하고 몇몇 스펙트럼만 저장하고자 할 때 유용합니다.

1 정성 분석의 기본 배우기

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

단계

자세한 지침

주석

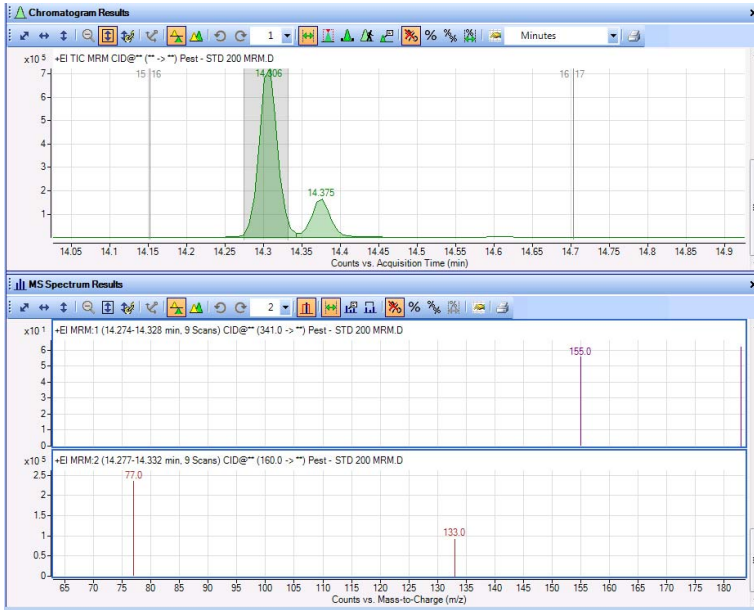



그림 21 2 개의 평균 스펙트럼이 표시된 Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 및 MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과)

5 Pest - STD 200 MRM.d 데이터 파일에 대하여 5.2 분과 14.3 분 피크 범위의 평균치인 스펙트럼을 추출합니다.

- 힌트 : Range Select(범위 선택) 아이콘 및 **Ctrl** 키를 사용하여 절반 지점으로부터 계산한 피크 1 범위를 선택합니다.
- 오른쪽에 있는 옵션 하나를 사용하여 스펙트럼을 추출합니다.

a Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에서 **Zoom Out (축소)** 아이콘  을 클릭합니다.

b Ctrl 키를 누릅니다.

c 5.2 분 피크의 왼쪽을 클릭하여 해당 피크의 오른쪽으로 드래그해서 놓습니다.

d Ctrl 키에서 손가락을 땁니다.

e 이 옵션이나 오른쪽에 있는 옵션을 사용하여 평균치 스펙트럼을 추출합니다.

- 양쪽 피크 안에서 선택한 범위 안을 더블 클릭합니다.

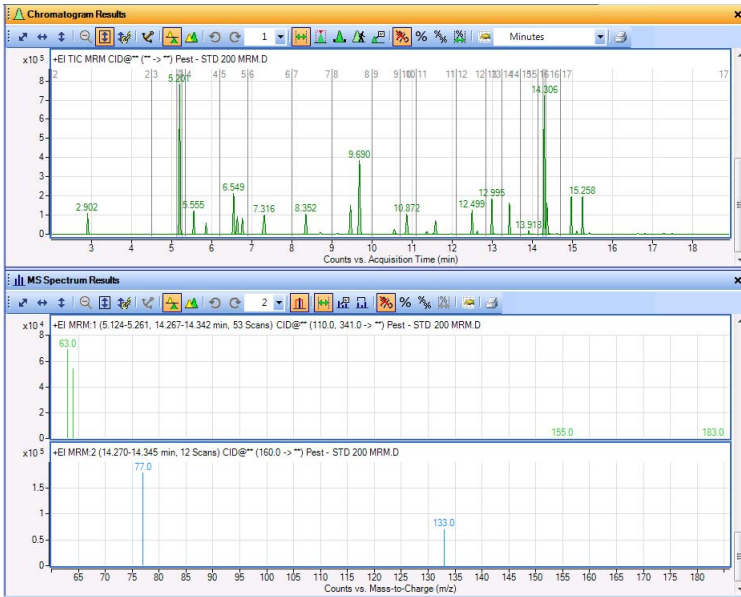
- 두 번째 피크는 4 단계에서 선택한 범위를 이미 가지고 있음을 기억하십시오.
- 스펙트럼을 추출하려면 크로마토그램 안의 아무 곳이나 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 **Extract MS Spectrum(MS 스펙트럼 추출)** 을 클릭합니다. 그러면 **Extract Spectrum(스펙트럼 추출)** 대화 상자가 표시됩니다. **Extract(추출)** 를 클릭합니다.

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

단계

자세한 지침

주석



첫 번째 스펙트럼은 2 개의 시간 범위 모두로부터 변화를 가지고 있습니다 . 두 번째 스펙트럼은 160.00 -> ** 변화가 5.2 분 피크에 없기 때문에 1 개의 시범위만 가지고 있습니다 .

그림 22 크로마토그램 안의 범위 2 개로부터의 평균 스펙트럼 2 개

1 정성 분석의 기본 배우기

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

단계	자세한 지침	주석
6	<p>Pest - STD 200 MRM.d 에서 피크 스펙트럼을 추출할 때마다 배경 스펙트럼을 뺍니다 .</p> <ul style="list-style-type: none"> • Data Navigator(데이터 탐색기) 안의 User Spectra(사용자 스펙트럼) 아래에 있는 모든 스캔을 삭제합니다 . • 피크 시작에서의 스펙트럼과 피크 끝 스펙트럼의 평균인 배경 스펙트럼을 추출합니다 . • 적분된 피크로부터 피크 스펙트럼 하나를 추출합니다 . <p>a Data Navigator(데이터 탐색기) 에서 User Spectra(사용자 스펙트럼) 를 클릭합니다 . User Spectra(사용자 스펙트럼) 라인을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Delete(삭제) 를 클릭합니다 .</p> <p>b Yes(예) 를 클릭합니다 .</p> <p>c Method Explorer(분석법 탐색기) 에서 Spectrum(스펙트럼) > Extract(추출)(MS/MS) 을 선택합니다 .</p> <p>d 보이지 않는다면 Peak Spectrum Extraction(피크 스펙트럼 추출)(MS/MS) 탭을 클릭합니다 .</p> <p>e Peak spectrum background(피크 스펙트럼 배경) MS/MS 상자에서 Average of spectra at peak start and end(피크 시작 및 끝 스펙트럼의 평균) 를 선택합니다 .</p> <p>f Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에서 Peak Select(피크 선택) 아이콘  을 클릭합니다 .</p> <p>g Chromatograms(크로마토그램) > Integrate(적분) 명령을 클릭합니다 .</p> <p>h 5.206 분의 피크를 선택합니다 .</p> <p>i 마우스 오른쪽 단추를 클릭하고 바로 가기 메뉴에서 Extract Peak Spectrum(피크 스펙트럼 추출) 을 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 이 과정의 끝에서는 추출된 모든 피크 스펙트럼에서 지정된 배경 스펙트럼이 자동으로 제외됨을 주의하십시오 .

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

단계

자세한 지침

주석

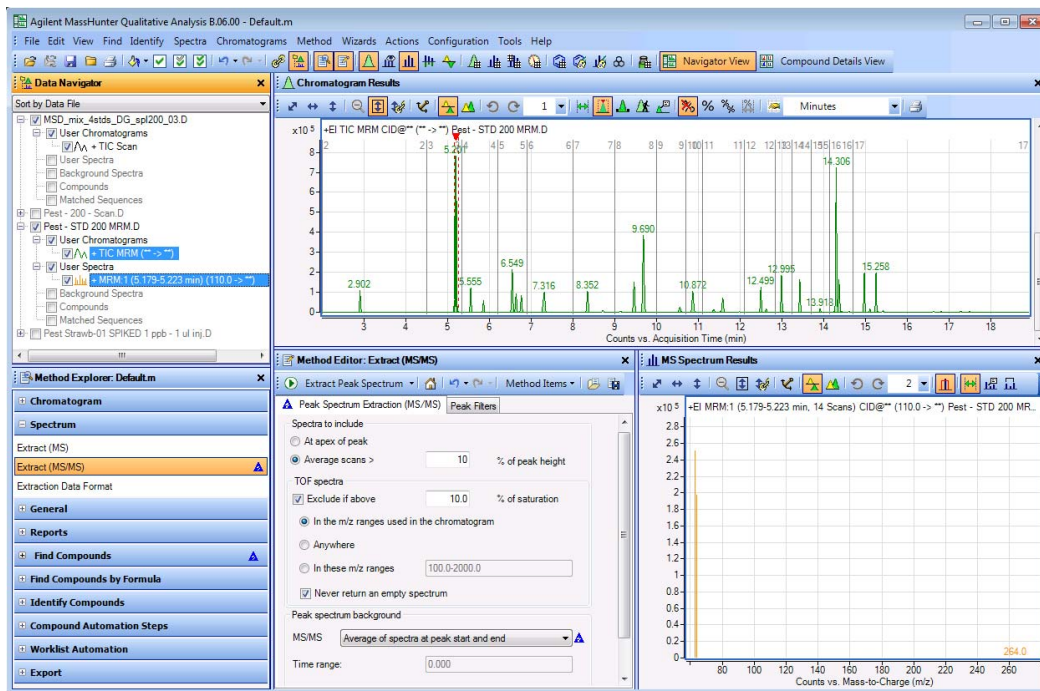


그림 23 배경 피크 스펙트럼이 제외된 피크 스펙트럼

1 정성 분석의 기본 배우기

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

작업 9. 크로마토그램에서 스펙트럼 추출

단계	자세한 지침	주석
7	<p>a Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 TIC MRM 크로마토그램을 클릭합니다 .</p> <p>b Chromatograms(크로마토그램) > Integrate and Extract Peak Spectra (피크 스펙트럼 적분 및 추출) 를 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 기본적으로 Chromatograms(크로마토그램) > Integrate(적분) (MS/MS) > Results(결과) 탭에서 Clear previous peak spectra(이전 피크 스펙트럼 지우기) 확인란이 선택되어 있으므로, 이전 단계에서 수동으로 추출된 피크 스펙트럼이 자동으로 삭제됩니다 .

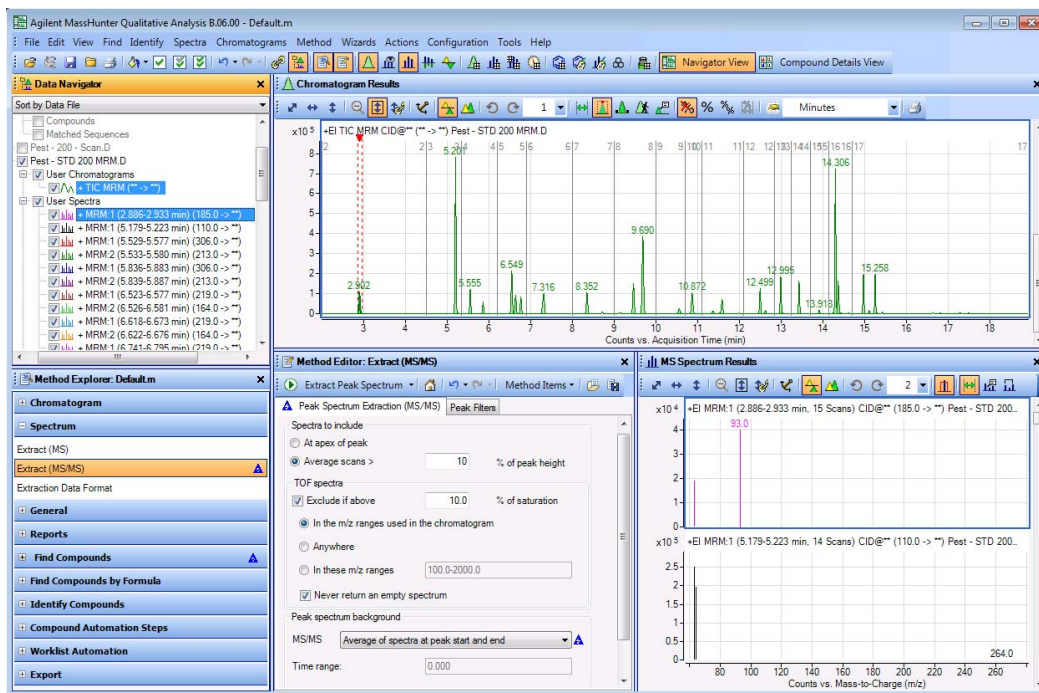


그림 24 피크 스펙트럼 적분 및 추출

8	<p>적분 결과 및 피크 스펙트럼을 제거합니다 .</p> <p>a Pest - Std 200 MRM.d 데이터 파일을 선택합니다 .</p> <p>b Chromatograms(크로마토그램) > Clear Results(결과 지우기) > Include Peak Spectra(피크 스펙트럼 포함) 를 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 해당 피크 스펙트럼을 삭제하고 싶지 않다면 대신에 Chromatograms(크로마토그램) > Clear Results(결과 지우기) > Only Chromatograms(크로마토그램만) 를 클릭합니다 .
---	---	--

작업 10. 주석 추가

이미지 주석이나 텍스트 주석을 다음 그래픽 창에 추가할 수 있습니다.

- Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창
- MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 창

데이터 파일에 대한 결과를 저장하면 주석도 저장됩니다.

작업 10. 주석 추가

단계	자세한 지침	주석
1 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일을 선택합니다. 다른 크로마토그램을 숨깁니다.	<p>a Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 옆에 있는 확인란을 선택합니다.</p> <p>b Edit(편집) > Show(보기) > Only Highlighted(강조 표시된 항목만) 를 클릭합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 다른 데이터 파일의 크로마토그램은 자동으로 숨겨집니다.
2 크로마토그램 안에서 해당 위치를 선택하여 텍스트 주석을 추가합니다.	<p>a Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창에서 도구 모음에 있는 Annotation(주석) 도구 () 를 클릭합니다.</p> <p>b 커서를 크로마토그램 패널 안에서 주석을 추가하려는 위치로 움직입니다.</p> <p>c 마우스 오른쪽 단추를 클릭하고 Add Text Annotation(텍스트 주석 추가) 을 클릭합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 그러면 커서가 십자 모양으로 바뀝니다. 이 커서를 사용하면 주석을 추가하기 위한 정확한 위치를 선택할 수 있습니다. • 주석 도구 모음은 Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창에 있습니다. • 또한, MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 창에도 주석을 추가할 수 있습니다.
3 Add/Edit Text Annotation(텍스트 주석 추가 / 편집) 대화 상자에서 텍스트 주석에 대한 정보를 추가합니다.	<p>a 주석에 대한 Text(텍스트) 를 입력합니다.</p> <p>b Text color(텍스트 색상) 를 선택합니다.</p> <p>c Orientation(방향) 을 선택합니다.</p> <p>d Font style(글꼴 스타일) 과 Font size(글꼴 크기) 를 선택합니다.</p> <p>e Anchored(고정) 또는 Floating(유동) 을 클릭합니다. Anchored(고정) 를 클릭했다면 텍스트 주석에 대한 포인터 옵션을 선택합니다. Floating(유동) 을 클릭했다면 상대적인 위치를 변경할 수 있습니다. 그래픽 창에서 대화식으로 위치를 변경하는 것이 더 쉽습니다.</p> <p>f OK(확인) 를 클릭합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 크로마토그램 또는 스펙트럼에 여러 주석을 추가할 수 있습니다. • Annotate(주석) 도구 모음에 있는 아이콘들을 사용하여 모든 주석을 선택하고 주석을 삭제하거나 편집할 수 있습니다.

1 정성 분석의 기본 배우기

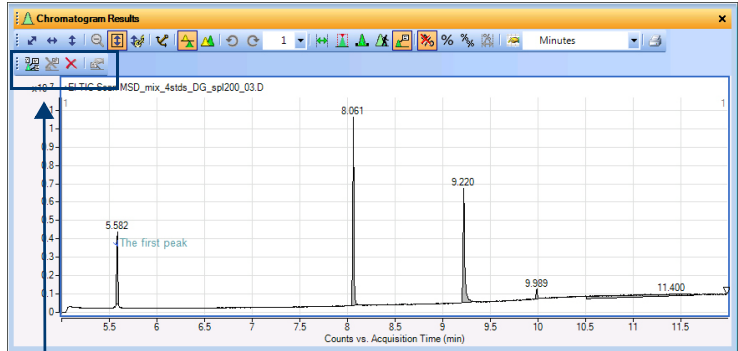
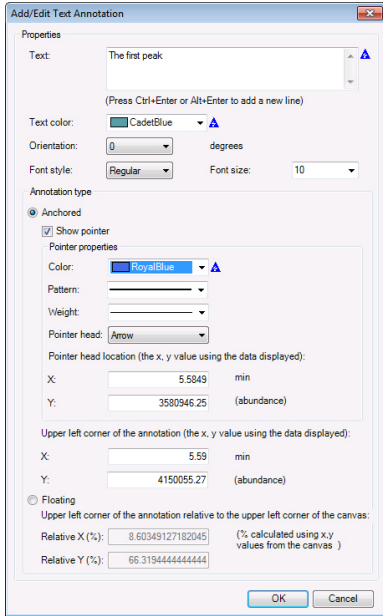
작업 10. 주석 추가

작업 10. 주석 추가 (계속)

단계

자세한 지침

주석



주석 도구 모음은 주석 도구가 선택되어 있을 때만 사용 가능합니다 .

그림 25 Add/Edit Text Annotation(텍스트 주석 추가 / 편집) 대화 상자 및 Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창

- 4 크로마토그램 안에서 해당 위치를 선택하여 이미지 주석을 추가합니다 .
 - a 커서를 크로마토그램 패널 안에서 주석을 추가하려는 위치로 움직입니다 .
 - b 마우스 오른쪽 단추를 클릭하고 **Add Image Annotation(이미지 주석 추가)** 을 클릭합니다 .
- JPG 또는 MOL 이미지 파일을 추가할 수 있습니다 .

작업 10. 주석 추가 (계속)

단계	자세한 지침	주석
5	<p>Add/Edit Text Annotation(텍스트 주석 추가 / 편집) 대화 상자에서 텍스트 주석에 대한 정보를 추가합니다 .</p> <p>a 주석에 대한 Text(텍스트) 를 입력합니다 .</p> <p>b Scale width(크기 조정 너비) 에 50 을 입력합니다 .</p> <p>c Lock aspect ratio(종횡비 잠금) 확인란을 선택합니다 .</p> <p>d Floating(유동) 을 클릭합니다 . 상대적인 위치를 변경할 수 있습니다 . 그래픽 창에서 대화식으로 위치를 변경하는 것이 더 쉽습니다 .</p> <p>e OK(확인) 를 클릭합니다 .</p> <p>f 이미지를 크로마토그램의 상단 오른쪽 모서리로 이동합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> Agilent_Logo.tif 파일은 \\MassHunter\Report Templates\Qual\B.05.00\en-US\Letter 폴더에 들어 있습니다 . 이것은 JPG 파일로 변환해야 합니다 . 크로마토그램 또는 스펙트럼에 여러 주석을 추가할 수 있습니다 .

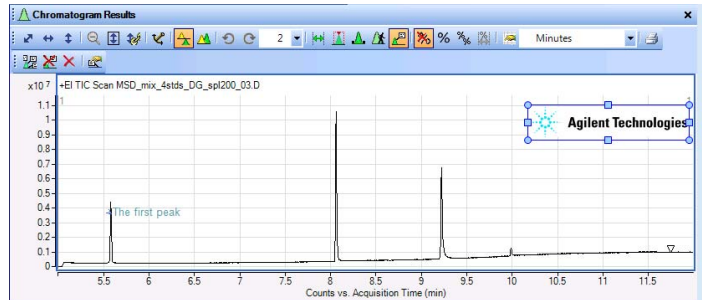
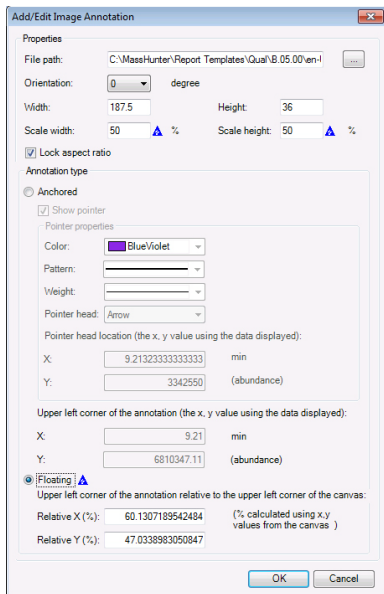


그림 26 Add/Edit Image Annotation(이미지 주석 추가 / 편집) 대화 상자 및 Chromatogram Results (크로마토그램 결과) 창

- 6 첫 번째 피크를 확대합니다 .
- 5.5 분의 첫 번째 피크 주변 영역을 확대합니다 .

1 정성 분석의 기본 배우기

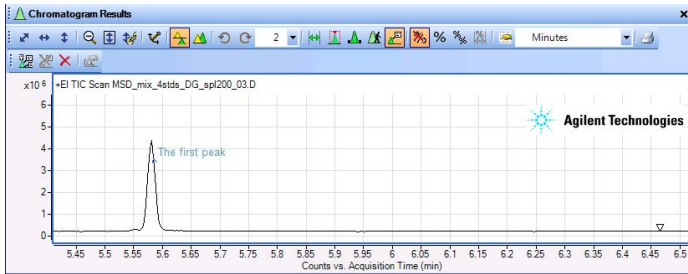
작업 10. 주석 추가

작업 10. 주석 추가 (계속)

단계

자세한 지침



주석



주석이 고정되어 있다면 고정된 위치에 그대로 유지됩니다. 다른 피크를 확대하면 고정된 주석이 보이지 않을 수 있습니다. 주석이 유동이라면, 주이 항상 창의 상단 왼쪽 모서리에 대해 동일한 위치에 표시됩니다.

그림 27 Add/Edit Image Annotation(이미지 주석 추가 / 편집) 대화 상자 및 Chromatogram Results (크로마토그램 결과) 창

7 Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창에서 Range Select (범위 선택) 도구로 다시 전환합니다. 먼저 주석을 삭제합니다.

- a  아이콘을 클릭하여 모든 주석을 제거합니다.
- b Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에서  (범위 선택) 아이콘을 클릭합니다.


- 데이터 파일 결과가 있는 주석을 저장하려면 “작업 17. 결과 저장”(71 페이지)을 참조하십시오.
- 크로마토그램 결과 도구 모음에서 5 개의 도구 사이를 전환할 수 있습니다. 추가 정보는 온라인 도움말을 참조하십시오. 5 개 도구는 다음과 같습니다.
 - Range Select(범위 선택)
 - Peak Select(피크 선택)
 - Manual Integration(수동 적분)
 - Walk Chromatogram(Walk 크로마토그램)
 - Annotation Mouse(주석 마우스)

작업 11. 질량 캘리퍼 추가

캘리퍼는 한 스펙트럼 내에서 두 지점 사이의 차이를 보여줍니다. 또한, MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 창에도 캘리퍼를 추가할 수 있습니다.

데이터 파일에 대한 결과를 저장하면 캘리퍼도 저장됩니다.

작업 11. 질량 캘리퍼 추가

단계	자세한 지침	주석
1	<p>MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 에서 피크 스펙트럼을 적분하고 추출합니다.</p> <p>a Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 옆에 있는 확인란을 선택합니다.</p> <p>b Edit(편집) > Show(보기) > Only Highlighted(강조 표시된 항목만) 를 클릭합니다.</p> <p>c Chromatograms(크로마토그램) > Integrate and Extract Peak Spectra (피크 스펙트럼 적분 및 추출) 를 클릭합니다.</p> <p>d Method Editor(분석법 편집기) 창을 닫습니다.</p>	
2	<p>이전 작업에서 생성한 피크 스펙트럼에 캘리퍼를 추가합니다.</p> <p>a MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 창에서 도구 모음에 있는 Delta Mass Caliper(델타 질량 캘리퍼) 도구 () 를 클릭합니다.</p> <p>b (선택사항) 캘리퍼 도구 모음에 있는 캘리퍼 유형에 대한 Profile Point to Point(프로파일 포인트 투 포인트) 를 선택합니다.</p> <p>c 66 에서 132m/z 로 확대합니다.</p> <p>d 커서를 스펙트럼 패널 안에서 캘리퍼를 추가하려는 위치로 움직입니다.</p> <p>e 커서를 스펙트럼 안에 있는 캘리퍼의 끝 지점으로 드래그합니다. 커서를 드래그하면 델타 질량 값이 변경됩니다. 마우스 단추에서 손을 떼면 해당 리퍼가 추가됩니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> 커서가 화살표로 바뀝니다. 이 커서를 사용하여 캘리퍼의 시작 및 끝 지점을 선택할 수 있습니다. Profile Point to Point(프로파일 포인트 투 포인트) 는 중심 데이터에 영향이 없으므로 스펙트럼이 중심에 있을 때는 캘리퍼 유형을 선택할 수 없습니다. “삼각형” 커서는 선택한 피크의 상단으로 설정됩니다.

1 정성 분석의 기본 배우기
작업 11. 질량 캘리퍼 추가

작업 11. 질량 캘리퍼 추가 (계속)

단계	자세한 지침	주석
3	<p>다른 색상을 사용하도록 캘리퍼를 수정합니다 .</p> <p>a 이전 단계에서 생성한 캘리퍼를 클릭합니다 .</p> <p>b MS Spectrum Results Caliper(MS 스펙트럼 결과 캘리퍼) 도구 모음에서 Caliper Properties(캘리퍼 등록 정보) 단추 () 를 클릭합니다 .</p> <p>c (선택사항) Start X 및 Start Y 값을 입력합니다 .</p> <p>d Text color(텍스트 색상) 를 선택합니다 .</p> <p>e Font style(글꼴 스타일) 과 Font size(글꼴 크기) 를 선택합니다 .</p> <p>f OK(확인) 를 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 한 스펙트럼에 여러 캘리퍼를 추가할 수 있습니다 . • Caliper(캘리퍼) 도구 모음에 있는 아이콘들을 사용하여 모든 캘리퍼를 선택하고 캘리퍼를 삭제하거나 편집할 수 있습니다 .

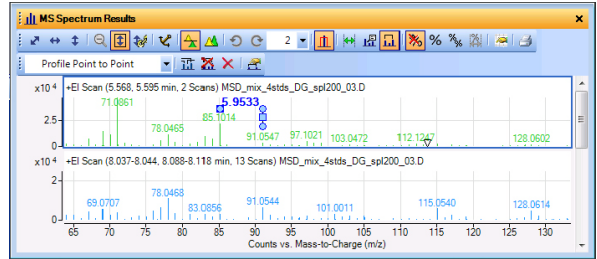
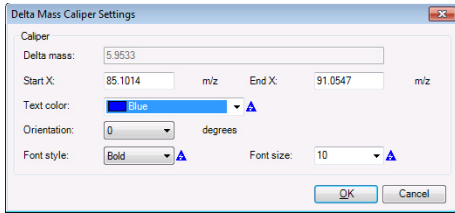


그림 28 Mass Caliper Settings(질량 캘리퍼 설정) 대화 상자 및 MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 창

4	<p>적분 결과 및 스펙트럼을 삭제합니다 .</p> <p>a Chromatograms(크로마토그램) > Clear Results(결과 지우기) > Include Peak Spectra(피크 스펙트럼 포함) 를 클릭합니다 .</p> <p>b Range Select(범위 선택) 도구를 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 데이터 파일 결과가 있는 캘리퍼를 저장하려면 “ 작업 17. 결과 저장 ”(71 페이지) 을 참조하십시오 .
---	---	---

2 찾고 식별하기

- 작업 12. 크로마토그램 디콘볼루션으로 화합물 찾기 48
- 작업 13. Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 사용하여 화합물 식별 52
- 작업 14. MRM 으로 화합물 찾기 (MRM 만) 57
- 작업 15. 적분으로 화합물 찾기 61
- 작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색 64
- 작업 17. 결과 저장 70

이들 작업에서는 GC/MS 데이터 파일에서 화합물을 찾고 식별합니다.

각 연습 과정은 3 개의 열이 있는 표로 표시됩니다.

- 단계 - 이들 일반 지침을 사용하여 스스로 프로그램을 탐구해보십시오.
- 자세한 지침 - 도움이 필요하거나 단계별 학습 과정을 원한다면 이용하십시오.
- 주석 - 연습 과정의 각 단계에 대한 추가 정보 및 팁을 제공합니다.



2 찾고 식별하기

작업 12. 크로마토그램 디콘볼루션으로 화합물 찾기

작업 12. 크로마토그램 디콘볼루션으로 화합물 찾기

FindCompounds(화합물 찾기) 알고리즘은 GC/MS 데이터에서 화합물을 식별하고 각 화합물에 대해 깨끗한 MS 스펙트럼을 생성합니다. 이 기능은 복잡한 데이터로부터 손쉽게 정보를 “캐낼 수 있는” 방법입니다. Scan(스캔), Product Ion(생성 이온) 스캔 또는 Neutral Loss(중성 손실) 스캔 모드에서 얻은 GC/MS 시료 데이터에서 크로마토그램 디콘볼루션 알고리즘에 의해서만 Find Compounds(화합물 찾기)를 사용할 수 있습니다.

이 작업은 정확한 질량 데이터를 가지고 크로마토그램 디콘볼루션을 통해 화합물을 찾는 방법을 보여줍니다. 또한, 먼저 추출 창을 변경한 후에 단 질량 데이터를 가지고 크로마토그램 디콘볼루션을 통해 화합물을 찾을 수도 있습니다.

작업 12. 크로마토그램 디콘볼루션을 사용하여 화합물 찾기 (GC/MS)

단계	자세한 지침	주석
1 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일에 대한 TIC 을 열니다 .	<p>a 프로그램이 열리지 않는다면 MassHunter Qualitative Analysis(정성 분석) 아이콘을 더블 클릭합니다 . 그렇지 않다면 File(파일) > Open Data File(데이터 파일 열기) 을 클릭합니다 .</p> <p>b GC 예제 데이터 파일 폴더 안에 있는 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일을 클릭합니다 .</p> <p>c Load result data(결과 데이터 로드) 확인란을 지우고 Open(열기) 을 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 크로마토그램 디콘볼루션 알고리즘에 의한 화합물 찾기는 GC/QQQ 및 GC/Q-TOF 데이터 파일과 모두 작동합니다 .

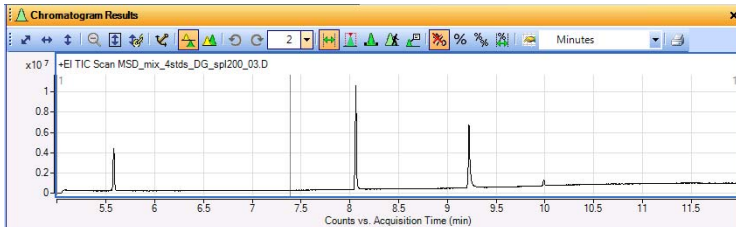


그림 29 Pest - 200 - Scan.d 로부터의 TIC 크로마토그램

- | | | |
|---|--|--|
| <p>2 GC 데이터와 작동되도록 사용자 인터페이스를 구성합니다 .</p> | <ul style="list-style-type: none"> “ 작업 2. GC/MS 데이터용으로 사용자 인터페이스 구성 ”(12 페이지)의 지침을 따릅니다 . | <ul style="list-style-type: none"> 이들 예제의 경우 , GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로를 로드합니다 . |
|---|--|--|

작업 12. 크로마토그램 디콘볼루션을 사용하여 화합물 찾기 (GC/MS)

단계	자세한 지침	주석
3	<p>크로마토그램 디콘볼루션 알고리즘을 사용하여 화합물을 찾습니다 .</p> <ul style="list-style-type: none"> Agile 적분기를 선택합니다 . SNR 임계값 20 을 입력합니다 . Left m/z delta(왼쪽 m/z 델타) 및 Right m/z delta(오른쪽 m/z 델타) 값에 100ppm 을 입력합니다 . <p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Find(찾기) Compounds(화합물) > Find by Chromatogram Deconvolution(크로마토그램 디콘볼루션으로 찾기) 을 선택합니다 .</p> <p>b Peak(피크) 필터 아래의 Settings(설정) 탭에서 SNR threshold(SNR 임계값) 에 20 을 입력합니다 .</p> <p>c m/z delta units(m/z 델타 단위) 에 대해서는 PPM 을 선택합니다 .</p> <p>d Left m/z delta(왼쪽 m/z 델타) 에 100 을 , Right m/z delta(오른쪽 m/z 델타) 에 100 을 입력합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> Find by Chromatogram Deconvolution(크로마토그램 디콘볼루션으로 찾기) 부분은 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 부분에도 있습니다 . 단위 질량 데이터가 있다면 Left m/z delta(왼쪽 m/z 델타) 값은 0.3 AMU 를 , Right m/z delta(오른쪽 m/z 델타) 값은 0.7 AMU 를 입력합니다 . 화합물을 찾은 후에 화합물이 강조 표시되어 있을 때 Compounds (화합물) > Extract Complete Result Set(전체 결과 세트 추출) 메뉴 항목을 사용하여 이에 대한 전체 결과 세트를 추출할 수 있습니다 .

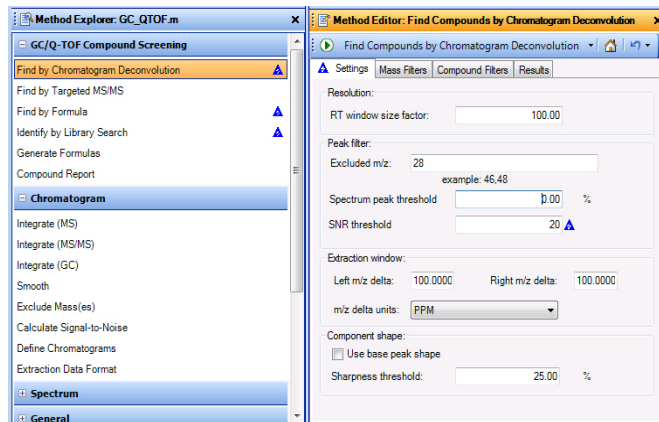


그림 30 Find by Chromatogram Deconvolution(크로마토그램 디콘볼루션으로 찾기) 부분의 Settings(설정) 탭

2 찾고 식별하기

작업 12. 크로마토그램 디콘볼루션으로 화합물 찾기

작업 12. 크로마토그램 디콘볼루션을 사용하여 화합물 찾기 (GC/MS)

단계	자세한 지침	주석
<ul style="list-style-type: none">선택하여 EIC, MS 스펙트럼 및 MS/MS 스펙트럼을 추출합니다.	<ul style="list-style-type: none">e Results(결과) 탭을 클릭합니다.f Extract EIC(EIC 추출), Extract ECC(ECC 추출), Extract cleaned spectrum(깨끗한 스펙트럼 추출) 및 Extract raw spectrum(원시 스펙트럼 추출) 확인란을 선택합니다.g  을 클릭하여 데이터 파일에 대해 Find Compounds by Chromatogram Deconvolution(크로마토그램 디콘볼루션으로 화합물 찾기) 알고리즘을 실행합니다.h 필요하다면 View(보기) > Compound List(화합물 목록) 명령을 클릭합니다.	<ul style="list-style-type: none">정성 분석 프로그램이 이들 조건에서 4 개의 화합물을 찾습니다.데이터 파일이 인덱스화되지 않았다면 이 알고리즘을 실행하면 시간이 오래 걸릴 수 있습니다.
4 화합물을 검사합니다. 그림 31(51 페이지) 을 참조하십시오.	<ul style="list-style-type: none">a MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 도구 모음에서 Maximum number of list panes(최대 목록 패널 수) 를 2 로 선택합니다.b Compound List(화합물 목록) 창에서 Hide Empty Columns(빈 열 숨기기) 아이콘을 클릭합니다.c Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 첫 번째 화합물을 클릭합니다.d Data Navigator(데이터 탐색기) 창이 선택되어 있을 때 화살표 키를 사용하여 화합물을 전환하십시오.	<ul style="list-style-type: none">스펙트럼 2 개를 모두 표시하면 하나의 화합물에 대한 모든 정보를 편리하게 볼 수 있습니다.깨끗한 스펙트럼과 원시 스펙트럼이 모두 표시됩니다.

2 찾고 식별하기

작업 13. Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 사용하여 화합물 식별

작업 13. Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 사용하여 화합물 식별

이 작업에서는 “작업 12. 크로마토그램 디콘볼루션으로 화합물 찾기”(48 페이지)에서 발견되는 화합물에 대한 공식을 식별 및 생성합니다. *NIST08.l* 라이브러리를 구입했거나 *demo.l* 라이브러리를 사용한다면 이 작업을 실행할 수 있습니다. 라이브러리가 2 개 있다면 2 개 모두 선택할 수도 있습니다.

작업 13. Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 사용하여 화합물 식별



작업 13. Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 사용하여 화합물 식별

단계	자세한 지침	주석
<p>1 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일에서 모든 화합물에 대해 라이브러리 검색을 실행합니다 .</p>	<p>a Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 데이터 파일에 있는 화합물을 강조 표시합니다 .</p> <p>b Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Identify Compounds(화합물 식별) > Search Unit Mass Library(단위 질량 라이브러리 검색) 를 클릭합니다 .</p> <p>c Settings(설정) 탭에서 Add Library(라이브러리 추가) 단추를 클릭합니다 . demo.1 라이브러리를 선택하고 OK(확인) 단추를 클릭합니다 .</p> <p>d Settings(설정) 탭에서 Add Library(라이브러리 추가) 단추를 클릭합니다 . NIST08.1 라이브러리를 선택하고 OK(확인) 단추를 클릭합니다 .</p> <p>e Search Results(검색 결과) 탭을 클릭합니다 .</p> <p>f (선택사항) Multi-Library search type(다중 라이브러리 검색 유형) 에서 Stop When Found(찾으면 중단) 를 선택합니다 .</p> <p>g 기본 메뉴에서 Identify(식별) > Search Library for Compounds(화합물에 대해 라이브러리 검색) 를 클릭합니다 . 또는 Search Library for Compounds(화합물에 대해 라이브러리 검색) 아이콘  을 클릭하여 알고리즘을 실행할 수도 있습니다 .</p> <p>h 이제 View(보기) > Difference Results(차이점 결과) 를 클릭합니다 .</p> <p>i View(보기) > Structure Viewer(구조 뷰어) 를 클릭합니다 .</p> <p>j 필요하다면 View(보기) > Compound Identification Results(화합물 식별 결과) 를 클릭하여 이 창을 표시합니다 .</p> <p>k 필요하다면 Compound Identification Results(화합물 식별 결과) 창에 대한 탭을 클릭합니다 . 이 창은 Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창과 탭으로 결합되어 있습니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 또한 , Method Explorer(분석법 탐색기) 에서 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) > Identify by Library Search(라이브러리 검색으로 식별) 를 클릭해도 됩니다 . Method Editor(분석법 편집기) 창에서 같은 부분이 표시됩니다 . Demo.1 및 Nist08 이 \MassHunter\Library 폴더에 설치되어 있어야 합니다 . NIST08.1 라이브러리를 검색한 후에는 많은 화합물이 식별됩니다 . NIST08.1 라이브러리가 없다면 해당되는 경우 두 번째 라이브러리를 선택합니다 . 2 개 이상의 라이브러리를 선택했고 Stop When Found(찾으면 중단) 를 선택하면 , 라이브러리 검색 알고리즘이 목록에서 첫 번째 라이브러리를 검색합니다 . 화합물이 식별되면 중단됩니다 . 화합물이 식별되지 않았다면 화합물이 식별되거나 마지막 라이브러리가 검색될 때까지 다음 라이브러리를 검색합니다 . Library Editor(라이브러리 편집기) 프로그램을 사용하여 Search Unit Mass Library(단위 질량 라이브러리 검색) 알고리즘을 사용할 라이브러리를 수정합니다 . 이 프로그램은 Agilent MassHunter Quantitative Analysis(정량 분석) 프로그램과 함께 설치되어 있습니다 .  아이콘을 클릭하면 이 프로세스가 시작됩니다 .

2 찾고 식별하기

작업 13. Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 사용하여 화합물 식별

작업 13. Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 사용하여 화합물 식별

단계	자세한 지침	주석
2	<p>Compound List(화합물 목록) 창 및 Compound Identification Results(화합물 식별 결과) 창에 Spectral Library Results(스펙트럼 라이브러리 결과) 열을 표시합니다 .</p> <p>a Compound List(화합물 목록) 도구 모음과 Compound Identification Results(화합물 식별 결과) 도구 모음에서 Show Library Search Columns(라이브러리 검색 열 보기) 단추 () 를 클릭합니다 .</p> <p>b Compound List(화합물 목록) 도구 모음과 Compound Identification Results(화합물 식별 결과) 창에서 Hide Empty Columns(빈 열 숨기기) 단추 () 를 클릭합니다 .</p>	

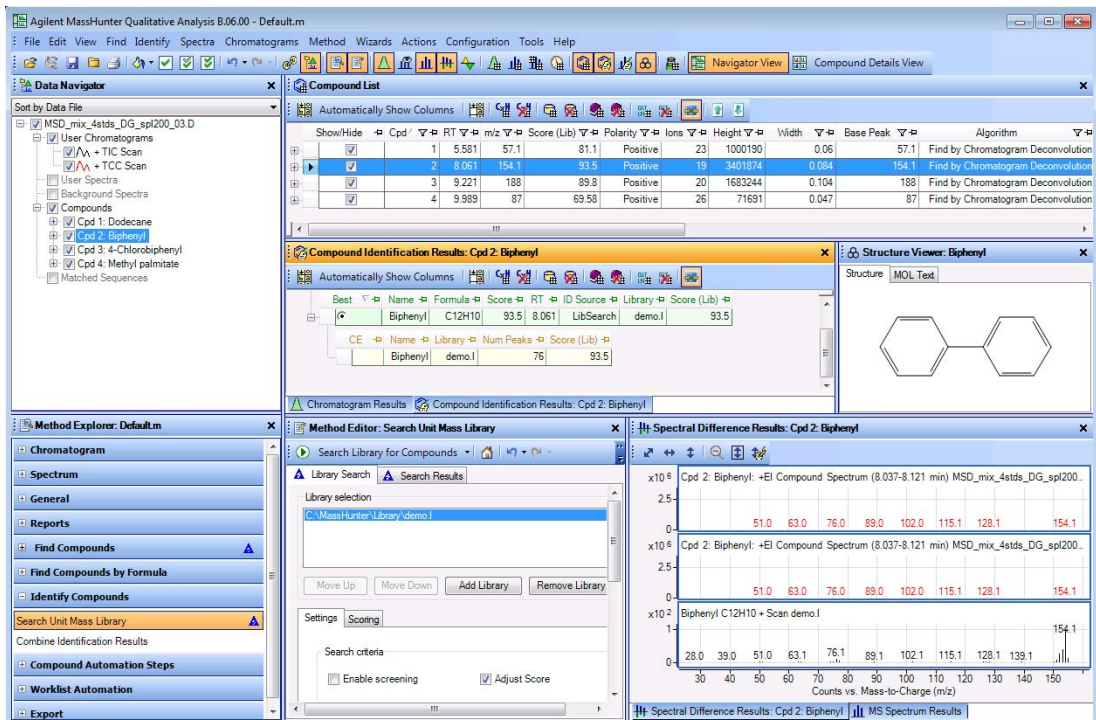



그림 32 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 데이터 파일과 라이브러리 검색 결과 내의 화합물

작업 13. Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 사용하여 화합물 식별

작업 13. Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 사용하여 화합물 식별

단계	자세한 지침	주석
3	<p>Compound Details View(화합물 세부사항 보기) 로 전환하여 화합물을 검토합니다 .</p> <p>a 기본 도구 모음에서  Compound Details View 를 클릭합니다 .</p> <p>b Compound Fragment Spectrum Results(화합물 토막 스펙트럼 결과) 창을 닫습니다 .</p>	
4	<p>Compound Details View(화합물 세부사항 보기) 에서 결과를 검토합니다 .</p> <p>a Compound Chromatogram Results(화합물 크로마토그램 결과) 창에서 Overlaid(오버레이드) 아이콘을 클릭합니다 .</p> <p>b Compound Identification Results(화합물 식별 결과) 창에서 결과를 확장합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 온라인 도움말에서 Compound Details View(화합물 세부사항 보기) 에 대한 추가 정보를 볼 수 있습니다 . Compound Details View(화합물 세부사항 보기) 는 All Ions(모든 이온) 모드에서 입수한 데이터 파일을 통한 Find by Formula(공식으로 찾기) 알고리즘의 결과를 볼 때 매우 유용합니다 .

2 찾고 식별하기

작업 13. Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 사용하여 화합물 식별

작업 13. Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 사용하여 화합물 식별

단계

자세한 지침

주석

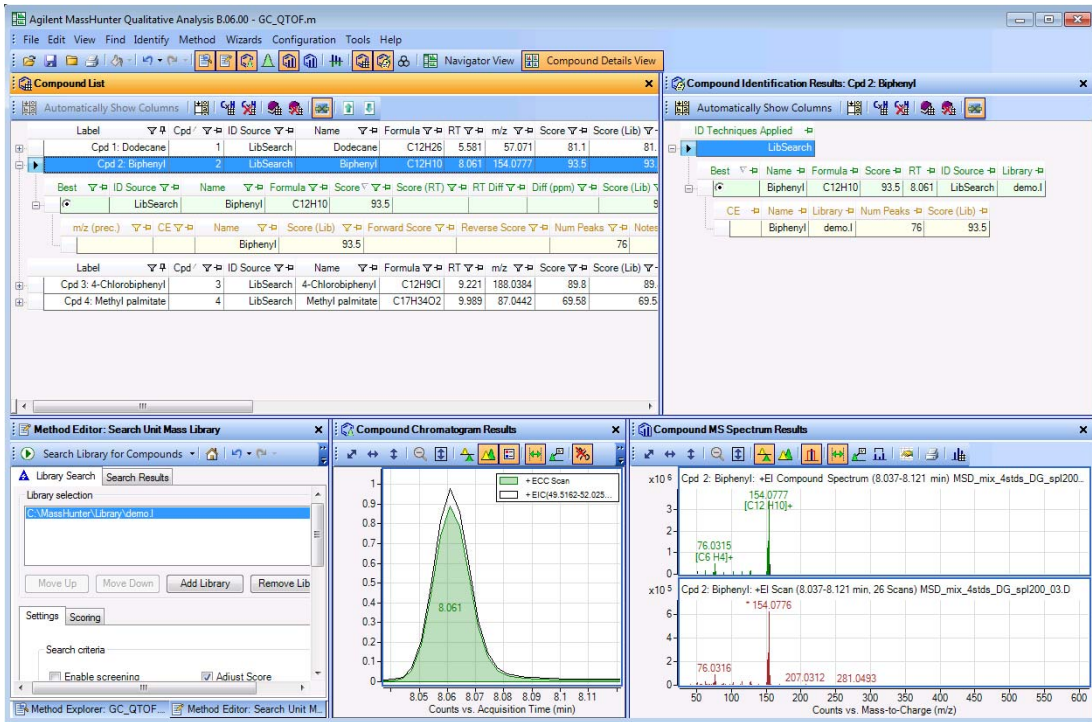


그림 33 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D 데이터 파일 내의 화합물을 보여주는 화합물 세부사항 보기

5 Navigator View(탐색기 보기) 로 기본 도구 모음에서 전환합니다. [Compound Details View](#) 단추를 클릭합니다.

6 데이터 파일을 닫습니다. **a File(파일) > Close Data File(데이터 파일 닫기)** 을 클릭합니다. **b No(아니요)** 를 클릭합니다. • 이들 결과를 저장하려면 "작업 17. 결과 저장"(70 페이지)을 참조하십시오.

작업 14. MRM 으로 화합물 찾기 (MRM 만)

Find Compounds by MRM(MRM 으로 화합물 찾기) 알고리즘은 Triple Quadrupole(삼중 사중극자)의 MRM 데이터에서 화합물을 식별합니다. 이 알고리즘은 MRM 변화를 사용하여 화합물을 검색합니다. 수집 분석법 내의 모든 화합물이 추출되어 Compound List(화합물 목록)에 표시됩니다. 화합물은 크로마토그램 적분 결과를 바탕으로 제거되지 않습니다. MRM 변화를 사용하여 입수한 데이터에 대해서만 MRM 으로 화합물 찾기 알고리즘을 사용할 수 있습니다. 데이터 파일이 MRM 데이터 파일이라면 MRM 알고리즘이 데이터 파일에서 발견된 정보를 사용합니다.

작업 14. MRM 으로 화합물 찾기 (MRM 만 해당)

단계	자세한 지침	주석
1	<p>Pest - STD 200 MRM.d 데이터 파일에 대해 TIC 를 엽니다.</p> <p>a 프로그램이 열리지 않는다면 MassHunter Qualitative Analysis(정성 분석) 아이콘을 더블 클릭합니다. 그렇지 않다면 File(파일) > Open Data File(데이터 파일 열기) 을 클릭합니다.</p> <p>b GC 예제 데이터 파일 폴더 안에 있는 Pest - STD 200 MRM.d 데이터 파일을 클릭합니다.</p> <p>c Load result data(결과 데이터 로드) 확인란을 지우고 Open(열기) 을 클릭합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> GC/QQQ 데이터로 작업할 때는 General(일반) 워크플로를 사용하십시오. GC/Q-TOF 데이터로 작업할 때는 General(일반) 워크플로나 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로를 사용할 수 있습니다.

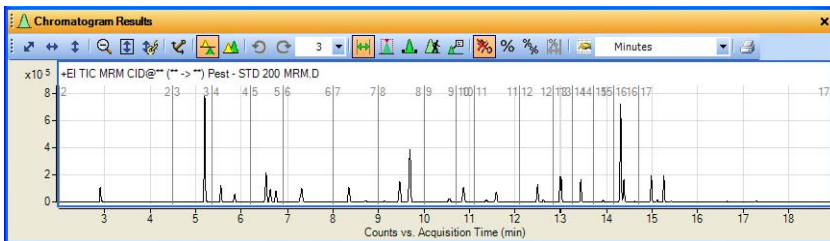


그림 34 Pest - STD 200 MRM.d 의 TIC 크로마토그램

2	<p>GC 데이터와 작동되도록 사용자 인터페이스를 구성합니다.</p> <p>“작업 2. GC/MS 데이터용으로 사용자 인터페이스 구성”(12 페이지)의 지침을 따릅니다.</p>
---	--

2 찾고 식별하기

작업 14. MRM 으로 화합물 찾기 (MRM 만)

작업 14. MRM 으로 화합물 찾기 (MRM 만 해당)

단계	자세한 지침	주석
3	<p>MRM 알고리즘을 사용하여 화합물을 찾습니다.</p> <p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Find(찾기) Compounds(화합물) > Find by MRM(MRM 으로 찾기) 을 선택합니다 .</p> <p>b Group transitions by compound name(화합물 이름으로 변화 그룹화) 단추를 클릭합니다 .</p> <p>c Integrator(적분기) 탭을 클릭합니다 .</p> <p>d Agile 적분기를 선택합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 화합물을 찾고자 하는 크로마토그램의 영역을 선택할 수 있습니다 . • 화합물을 찾은 후에 화합물이 강조 표시되어 있을 때 Compounds (화합물) > Extract Complete Result Set(전체 결과 세트 추출) 메뉴 항목을 사용하여 이에 대한 전체 결과 세트를 추출할 수 있습니다 .

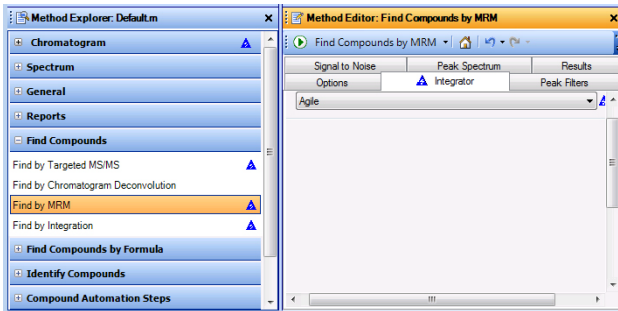



그림 35 Method Editor(분석법 편집기) 의 Find by MRM(MRM 으로 찾기) 부분에 있는 Integrator(적분기) 탭

- e  을 클릭하여 데이터 파일에 대해 **Find Compounds by MRM(MRM 으로 화합물 찾기)** 알고리즘을 실행합니다 .
- 정성 분석 프로그램이 이들 조건에서 28 개의 화합물을 찾습니다 .
- f 필요하다면 **View(보기) > Compound List(화합물 목록)** 명령을 클릭합니다 .
- g 필요하다면 **View(보기) > Compound Identification Results(화합물 식별 결과)** 를 클릭합니다 .

작업 14. MRM 으로 화합물 찾기 (MRM 만 해당)

단계	자세한 지침	주석
<p>4 화합물을 검사합니다. 그림 36(60 페이지) 을 참조하십시오.</p>	<ul style="list-style-type: none"> a MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 도구 모음에서 Maximum number of list panes(최대 목록 패널 수) 를 2 로 선택합니다. b Compound List(화합물 목록) 도구 모음과 Compound Identification Results(화합물 식별 결과) 도구 모음에서 Automatically Show Columns(자동으로 열 보기) 아이콘을 클릭합니다. c Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 첫 번째 화합물을 클릭합니다. d Data Navigator(데이터 탐색기) 창이 선택되어 있을 때 화살표 키를 사용하여 화합물을 전환하십시오. 	<ul style="list-style-type: none"> • Compound Identification Results (화합물 식별 결과) 창에서 전구 이온은 Precursor (Acq Method) (전구 (수집 분석법)) 열에 표시되며, 생성 이온은 Product (Acq Method)(생성 (수집 분석법)) 열에 표시됩니다.

2 참고 식별하기

작업 14. MRM 으로 화합물 찾기 (MRM 만)

작업 14. MRM 으로 화합물 찾기 (MRM 만 해당)

단계

자세한 지침

주석

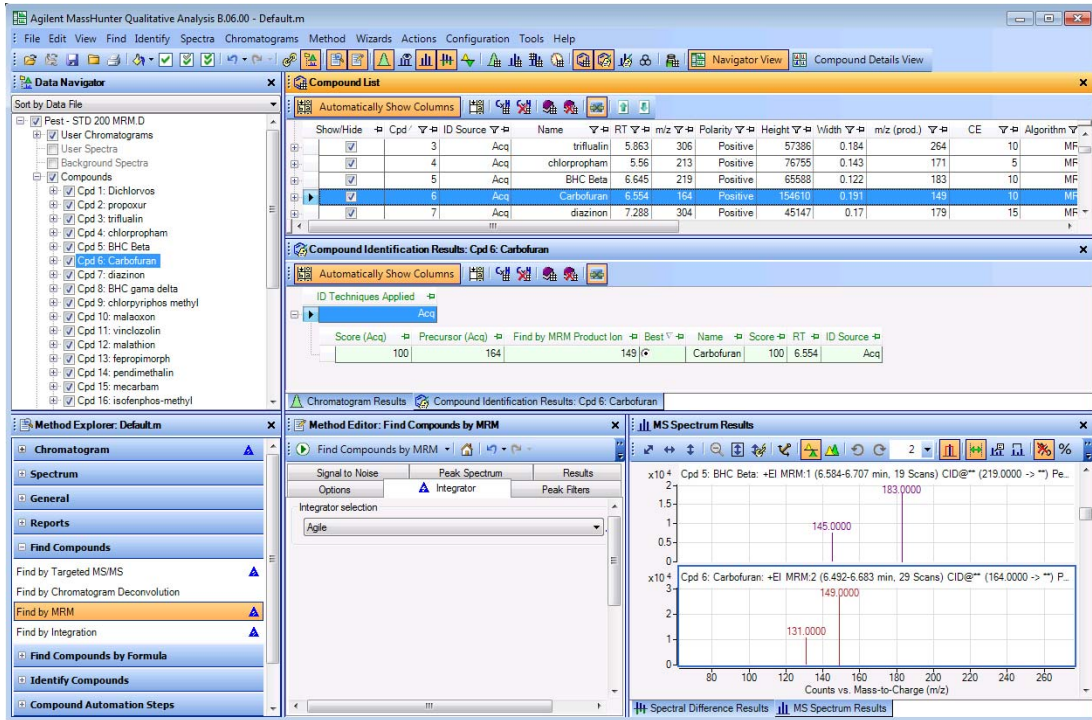


그림 36 MRM 으로 찾기 결과

5 데이터 파일을 닫습니다.

- File(파일) > Close Data File(데이터 파일 닫기)** 을 클릭합니다.
 - Close(닫기)** 를 클릭합니다.
- 이 결과를 저장하려면 "작업 17. 결과 저장"(70 페이지)을 참조하십시오.

작업 15. 적분으로 화합물 찾기

Find Compounds by Integration(적분으로 화합물 찾기) 알고리즘은 적분 결과에 따라 화합물을 식별합니다. 적분기에서 식별한 각 피크에 대해 화합물이 생됩니다.

작업 15. 적분으로 화합물 찾기

단계	자세한 지침	주석
1 MSD_mix_4stds_DG_spi200_03.D 데이터 파일에 대한 TIC 를 엽니다.	<p>a 프로그램이 열리지 않는다면 MassHunter Qualitative Analysis(정성 분석) 아이콘을 더블 클릭합니다. 그렇지 않다면 File(파일) > Open Data File(데이터 파일 열기) 을 클릭합니다.</p> <p>b GC 예제 데이터 파일 폴더 안에 있는 Pest - STD 200 MRM.d 데이터 파일을 클릭합니다.</p> <p>c Load result data(결과 데이터 로드) 확인란을 지우고 Open(열기) 을 클릭합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> GC/QQQ 데이터로 작업할 때는 General(일반) 워크플로를 사용하십시오. GC/Q-TOF 데이터로 작업할 때는 General(일반) 워크플로나 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로를 사용할 수 있습니다.

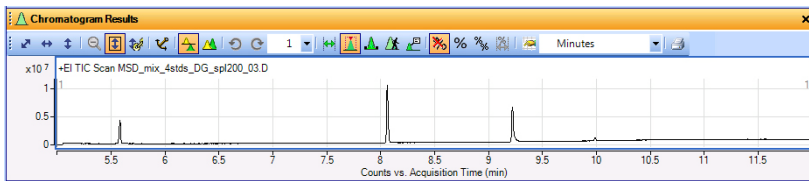


그림 37 MSD_mix_4stds_DG_spi200_03.d 의 TIC 크로마토그램

2 GC 데이터와 작동되도록 사용자 인터페이스를 구성합니다.	<ul style="list-style-type: none"> “작업 2. GC/MS 데이터용으로 사용자 인터페이스 구성”(12 페이지)의 지침을 따릅니다. 	
3 적분 알고리즘을 사용하여 화합물을 찾습니다.	<p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Find(찾기) Compounds(화합물) > Find by Integration(적분으로 찾기) 을 선택합니다.</p> <p>b MS/MS (GC) 적분기를 선택합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> 화합물을 찾고자 하는 크로마토그램의 영역을 선택할 수 있습니다. 화합물을 찾은 후에 화합물이 강조 표시되어 있을 때 Compounds (화합물) > Extract Complete Result Set(전체 결과 세트 추출) 메뉴 항목을 사용하여 이에 대한 전체 결과 세트를 추출할 수 있습니다.

2 찾고 식별하기

작업 15. 적분으로 화합물 찾기

작업 15. 적분으로 화합물 찾기

단계

자세한 지침

주석

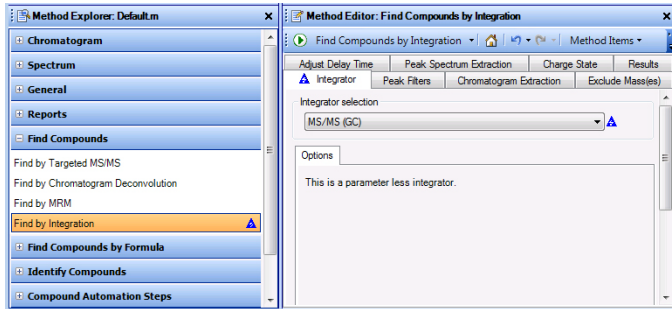



그림 38 Method Editor(분석법 편집기) 의 Find by Integration(적분으로 찾기) 부분에 있는 Integrator(적분기) 탭

- c  을 클릭하여 데이터 파일에 대해 **Find Compounds by Integration(적분으로 화합물 찾기)** 알고리즘을 실행합니다 .
 - d 필요하다면 **View(보기) > Compound List(화합물 목록)** 명령을 클릭합니다 .
- 정성 분석 프로그램이 이들 조건에서 6 개의 화합물을 찾습니다 .

4 화합물을 검사합니다 . 그림 36(60 페이지) 을 참조하십시오 .

- a MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 도구 모음에서 **Maximum number of list panes(최대 목록 패널 수)** 를 2 로 선택합니다 .
- b Compound List(화합물 목록) 창에서 **Automatically Show Columns(자동으로 열 보기)** 아이콘을 클릭합니다 .
- c Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 첫 번째 화합물을 클릭합니다 .
- d Data Navigator(데이터 탐색기) 창이 선택되어 있을 때 화살표 키를 사용하여 화합물을 전환하십시오 .

2 찾고 식별하기

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

이 작업에서는 먼저 GC/Q-TOF 데이터 파일에서 피크 스펙트럼을 적분하고 추출합니다. 그런 다음, 각 피크 스펙트럼에 대해 가능한 공식을 생성합니다.

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

단계	자세한 지침	주석
1	<p>MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d 데이터 파일에 대한 TIC 을 열니다 .</p> <p>a 프로그램이 열리지 않는다면 MassHunter Qualitative Analysis(정성 분석) 아이콘을 더블 클릭합니다 . 그렇지 않다면 File(파일) > Open Data File(데이터 파일 열기) 을 클릭합니다 .</p> <p>b GC 예제 데이터 파일 폴더 안에 있는 MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d 데이터 파일을 클릭합니다 .</p> <p>c Load result data(결과 데이터 로드) 확인란을 지우고 Open(열기) 을 클릭합니다 .</p>	<p>• Load result data(결과 데이터 로드) 확인란이 없다면 데이터 파일에 저장된 결과가 없는 것입니다 . 결과 저장 방법에 대한 지침은 “ 작업 17. 결과 저장 ”(70 페이지) 에서 참조하십시오 .</p>
2	<p>피크 스펙트럼을 적분 및 추출합니다 .</p> <p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Chromatogram(크로마토그램) > Integrate(적분)(MS) 부분을 클릭합니다 .</p> <p>b Peak Filters(피크 필터) 탭을 클릭합니다 .</p> <p>c Peak height(피크 높이) 단추를 클릭합니다 .</p> <p>d Relative height(상대 높이) 확인란을 선택합니다 .</p> <p>e Limit (by height) to the largest(최대치 높이로 제한) 확인란을 선택하고 4 를 입력합니다 .</p> <p>f Chromatograms(크로마토그램) > Integrate and Extract Peak Spectra(피크 스펙트럼 적분 및 추출) 를 클릭합니다 .</p>	

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

단계	자세한 지침	주석
<p>3 각 피크 스펙트럼에 대한 공식을 생성합니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Spectrum Identification Results List(스펙트럼 식별 결과 목록)를 봅니다. • MS Spectrum Results(스펙트럼 결과) 창을 닫습니다. 	<p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Identify Compounds(화합물 식별) > Generate Formulas(공식 생성) 를 클릭합니다.</p> <p>b Method Editor(분석법 편집기) 창에서 Charge State(전하 상태) 탭을 클릭하고 Common organic molecules(공통 유기 분자) 를 Isotope(동위 원소) 모델로 선택합니다.</p> <p>c Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 User Spectra(사용자 스펙트럼) 부분에 있는 모든 스펙트럼을 강조 표시합니다.</p> <p>d Identify(식별) > Generate Formulas from Spectrum Peaks(스펙트럼 피크에서 공식 생성) 명령이나 Generate Formulas from Spectrum Peaks(스펙트럼 피크에서 공식 생성) 단추  를 클릭하여 알고리즘을 실행합니다.</p> <p>e 필요하다면 스펙트럼 식별 결과 아이콘  을 클릭하거나, View(보기) > Spectrum Identification Results(스펙트럼 식별 결과) 명령을 클릭합니다.</p> <p>f Spectrum Identification Results(스펙트럼 식별 결과) 창에서 Automatically Show Columns(자동으로 열 보기) 단추를 클릭합니다.</p> <p>g Spectrum Identification Results(스펙트럼 식별 결과) 창에 있는 Hide Empty Columns(빈 열 숨기기) 아이콘  을 클릭합니다.</p> <p>h C6 H13 을 Best(최상) 결과로 선택합니다.</p> <p>i 해당 행에 대하여 표를 확장합니다.</p> <p>j Method Editor(분석법 편집기) 창을 닫습니다.</p> <p>k MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 창에서 많은 피크 위에 표시된 공식과 이온 계열을 검토합니다. 모든 공식과 이온 계열은 스펙트럼과 동일한 색상입니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 적절한 m/z 로 확대하면 스펙트럼 플롯에서 예측되는 동위 원소 존재비를 볼 수 있습니다. 추가 정보는 온라인 도움말에서 참조하십시오. • Method Editor(분석법 편집기) 도구 모음의 실행 아이콘  은 때때로 일련의 가능한 작업 중에서 하나를 선택할 수 있게 해줍니다. 예를 들어, 이 부분에서 Run(실행) 아이콘을 클릭하면 2 가지 작업이 가능합니다. 화살표를 클릭하면 가능한 작업 목록이 나타나며, 어떤 작업을 실행할지 선택할 수 있습니다. 목록에서 다른 작업을 선택하면 기본 작업이 변경됩니다. Run(실행) 단추를 클릭하기만 하면 기본 작업이 실행됩니다. • 근접한 열을 분리하는 선을 드래그해서 열의 너비를 변경할 수 있습니다. • 열의 헤더를 드래그해서 열이 동할 수도 있습니다. • 표 안에서 바로 가기 메뉴에 있는 Remove column(열 제거) 을 클릭하면 열을 삭제할 수 있습니다.

힌트 : 그림 41 에서와 동일한 결과를 얻으려면 **Common organic molecules(공통 유기 분자)** 를 Isotope(동위 원소) 모델로 선택했는지 확인합니다.

2 찾고 식별하기

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

단계

자세한 지침

주석

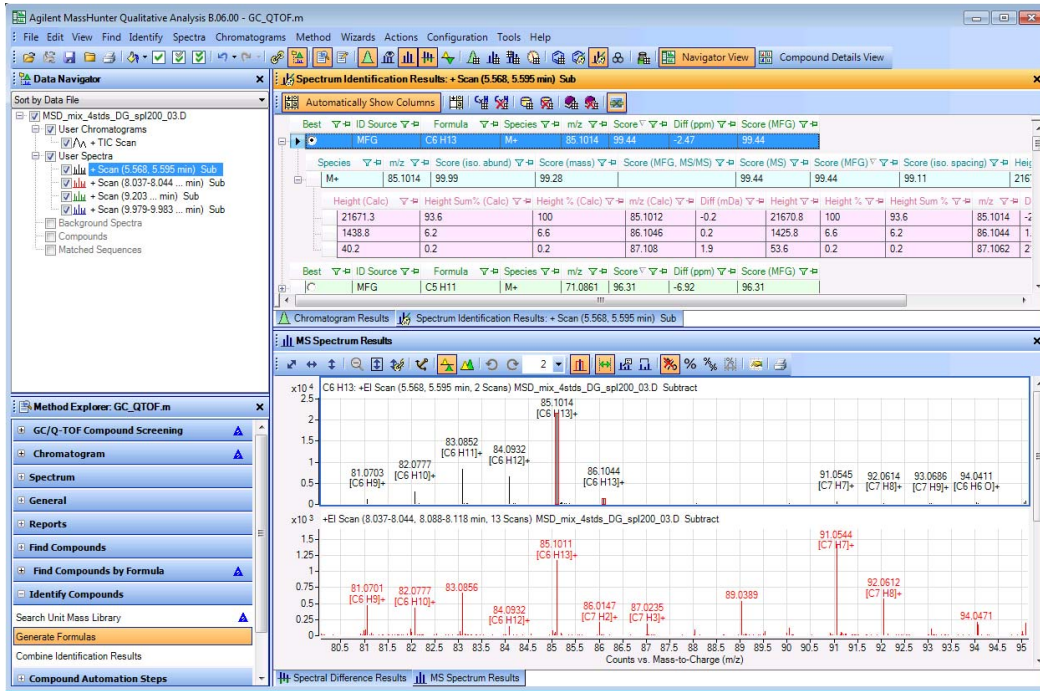


그림 40 피크 1에서 4에 대한 공식 생성 결과

4 피크 스펙트럼 1에서 4에 대하여 라이브러리 검색을 실행하십시오.

- Data Navigator(데이터 탐색기) 창에서 **User Spectra(사용자 스펙트럼)** 를 클릭합니다 .
- Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 **Identify Compounds(화합물 식별) > Search Unit Mass Library(단위 질량 라이브러리 검색)** 를 클릭합니다 .
- 유효한 라이브러리가 선택되어 있는지 확인합니다 .
- 기본 메뉴에서 **Identify(식별) > Search Library for Spectra(라이브러리에서 스펙트럼 검색)** 를 클릭합니다 .
- Method Editor(분석법 편집기) 창을 닫습니다 .

- Method Explorer(분석법 탐색기)에서 부분 하나를 클릭하면 Method Editor(분석법 편집기)가 자동으로 열립니다 .

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

단계	자세한 지침	주석
5	<p>보이는 열을 수정합니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> a Spectrum Identification Results(스펙트럼 식별 결과) 창을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Add/Remove Columns(열 추가 / 제거) 를 클릭합니다 .“(Enhanced)(향상된) Add/Remove Columns(열 추가 / 제거)” 대화 상자에서 표시하려는 열을 선택합니다 . OK(확인) 를 클릭합니다 . b Method Editor(분석법 편집기) 창을 닫습니다 . c Spectrum Identification Results(스펙트럼 식별 결과) 창에 있는 Hide Empty Columns(빈 열 숨기기) 아이콘  를 클릭합니다 . d MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 창에서 각 피크 위에 표시된 공식과 이온 계열을 검토합니다 . 	<ul style="list-style-type: none"> • Remove Column(열 제거) 명령을 사용하여 데이터가 포함된 열을 제거하면 , Automatically Show Columns(자동으로 열 보기) 기능이 켜져 있는 경우 소프트웨어에서 이 열을 다시 포함합니다 . • 해당 분석법의 Combine Identification Results(식별 결과 결합) 부분에서 LibSearch(라이브러리 검색) 알고리즘이 심하게 편중됩니다 . 수동으로 최상의 MFG 결과를 선택하거나 식별 결과의 결합 방법을 변경할 수 있습니다 .

2 찾고 식별하기

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

단계

자세한 지침

주석

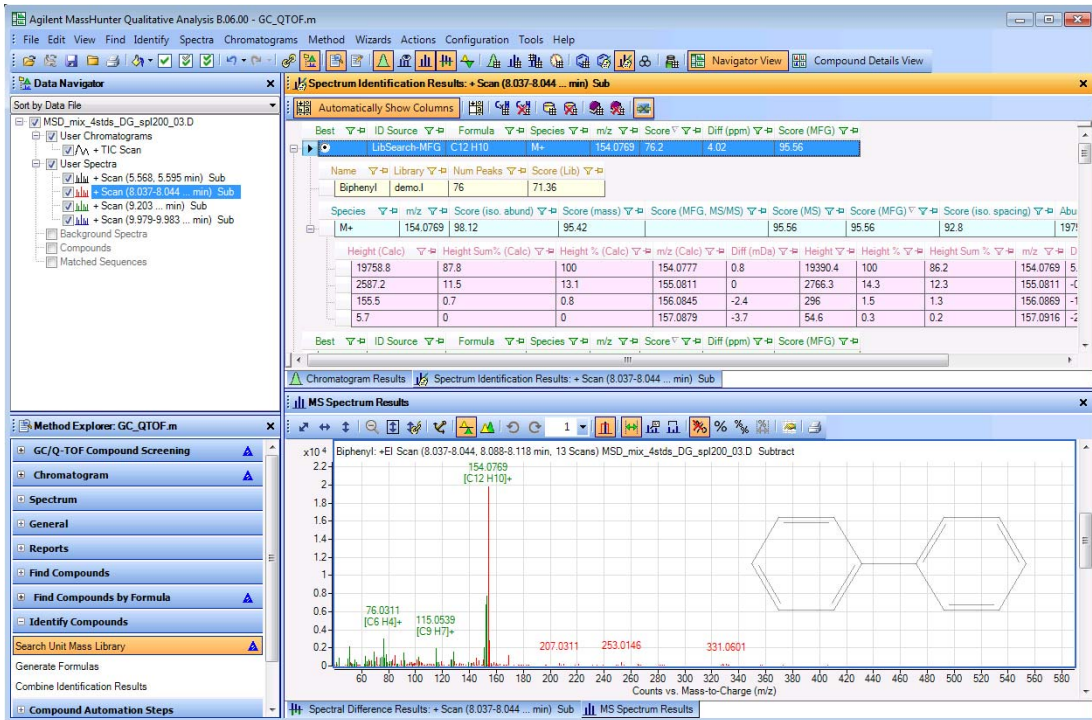


그림 11 첫 번째 피크 스펙트럼의 라이브러리 검색 및 공식 생성 결과

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

작업 16. 피크 스펙트럼에 대한 공식 생성 및 라이브러리 검색

단계	자세한 지침	주석
6	<p>MS Peaks One(MS 피크 1) 창에서 각 스펙트럼에 대한 결과를 검토합니다 .</p> <p>a View(보기) >MS Spectrum Peak List 1(MS 스펙트럼 피크 목록 1) 을 클릭합니다 .</p> <p>b 마우스 오른쪽 단추를 클릭하고 Add/Remove Columns(열 추가 / 제거) 를 클릭합니다 .</p> <p>c 그림 42에 보이는 열이 Show these columns(이들 열 보기) 목록에 있는지 확인합니다 .</p> <p>d Ion Type(이온 유형) 열로 정렬합니다 .</p> <p>e 이온 유형이 Fragment Ion(토막 이온) 이라면 Formula & Ion Species(공식 & 이온 계열) 가 MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 창 안의 각 피크에서 녹색으로 표시니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 토막 이온은 MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 창에 녹색으로 표시됩니다 . • Ion Type(이온 유형) 은 Molecular Ion(분자 이온), Fragment Ion(토막 이온) 또는 비워 둘 수 있습니다 . Fragment Ion(토막 이온) 이라면 Loss Formula(손실 방정식) 및 Loss Mass(손실 질량) 에서 분자 이온 으로부터 해당 이온에 이르게 하는 공식과 질량을 표시합니다 . Formula & Ion Species(공식 & 이온 계열) 에서는 해당 이온에 대한 공식과 온 계열을 표시합니다 .

m/z	Species	Abund	Abund %	Z	Formula	Diff (ppm)	Formula & Ion Species	Loss Formula	Loss Mass	Ion Type
154.0769	M+	19390.38	100	1	C12 H10	5.02	[C12 H10]+			Molecular Ion
185.0811	M+	2766.28	14.27	1	C12 H10	-0.29	[C12 H10]+			Molecular Ion
196.0869	M+	295.97	1.53	1	C12 H10	-15.58	[C12 H10]+			Molecular Ion
41.0395	M+	395.46	2.04	1	C3 H5	-22.24	[C3 H5]+	C8H5	113	Fragment Ion
43.055	M+	866.15	4.47	1	C3 H7	-17.85	[C3 H7]+	C8H3	111	Fragment Ion
50.0158	M+	729.18	3.76	1	C4 H2	-14.44	[C4 H2]+	C8H8	104.1	Fragment Ion
51.0224	M+	2093.54	10.8	1	C4 H3	9.75	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion
52.0275	M+	310.44	1.6	1	C4 H3	-22.03	[C4 H3]+	C8H7	103.1	Fragment Ion
52.0298	M+	183.35	0.95	1	C4 H4	19.09	[C4 H4]+	C8H6	102	Fragment Ion
53.0388	M+	152.17	0.78	1	C4 H5	-4.42	[C4 H5]+	C8H5	101	Fragment Ion
54.0472	M+	183.45	0.95	1	C4 H6	-14.24	[C4 H6]+	C8H4	100	Fragment Ion
55.0551	M+	631.13	3.25	1	C4 H7	-15.71	[C4 H7]+	C8H3	99	Fragment Ion
56.0626	M+	404.96	2.09	1	C4 H8	-9.63	[C4 H8]+	C8H2	98	Fragment Ion
62.0162	M+	177.71	0.92	1	C5 H2	-1.45	[C5 H2]+	C7H8	92.1	Fragment Ion
63.0234	M+	1021.98	5.27	1	C5 H3	-7.31	[C5 H3]+	C7H7	91.1	Fragment Ion
64.0309	M+	511.22	2.64	1	C5 H4	-3.01	[C5 H4]+	C7H6	90	Fragment Ion
65.039	M+	670.14	3.46	1	C5 H5	-6.86	[C5 H5]+	C7H5	89	Fragment Ion
67.0548	M+	609.95	3.15	1	C5 H7	-8.15	[C5 H7]+	C7H3	87	Fragment Ion
69.0706	M+	1411.51	7.28	1	C5 H9	-11.16	[C5 H9]+	C7H	85	Fragment Ion
70.078	M+	519.14	2.68	1	C5 H10	-3.65	[C5 H10]+	C7	84	Fragment Ion
74.0157	M+	838.29	4.32	1	C6 H2	-7.82	[C6 H2]+	C6H8	80.1	Fragment Ion
75.023	M+	928.71	4.79	1	C6 H3	-0.85	[C6 H3]+	C6H7	79.1	Fragment Ion

그림 42 Ion Type(이온 유형), Loss Formula(손실 방정식), Loss Mass(손실 질량) 및 Formula & Ion Species(공식 & 이온 계열) 열이 있는 MS Peaks One(MS 피크 1) 표

- 7 (선택사항) 데이터 파일을 닫습니다 .
- 다음 작업으로 진행하여 결과 저장 방법을 배울 수 있습니다 .
- a File(파일) > Close Data File(데이터 파일 닫기)** 을 클릭합니다 .
- b Close(닫기)** 를 클릭합니다 .
- 이들 결과를 저장하려면 “작업 17. 결과 저장”(70 페이지) 을 참조하십시오 .

작업 17. 결과 저장

이 작업에서는 현재 데이터 파일에 대한 결과를 저장할 수 있습니다.

작업 17. 결과 저장

단계	자세한 지침	주석
1 현재 데이터 파일에 대한 결과를 저장하고 데이터 파일을 닫을 수 있습니다.	<p>a File(파일) > Save Results(결과 저장) 를 클릭합니다.</p> <p>b File(파일) > Close Data File(데이터 파일 닫기) 을 클릭합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> 하나의 데이터 파일로는 하나의 결과 세트만 저장할 수 있습니다. 이미 현재 데이터 파일로 결과를 저장한 경우에는 File(파일) > Save Results(결과 저장) 를 클릭하면 이들 결과가 덮어쓰기 됩니다.
2 데이터 파일을 열고 결과를 로드합니다.	<p>a File(파일) > Open Data File(데이터 파일 열기) 을 클릭합니다. 그러면 "Open Data File(데이터 파일 열기)" 대화 상자가 열립니다.</p> <p>b 데이터 파일을 선택합니다. 이 예제의 경우에는 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일을 선택합니다.</p> <p>c Load result data(결과 데이터 로드) 확인란을 선택합니다.</p> <p>d Open(열기) 단추를 클릭합니다.</p>	

작업 17. 결과 저장

단계	자세한 지침	주석
5	<p>데이터 파일을 다시 열고 결과를 로드하지 않습니다.</p> <p>a File(파일) > Open(열기) 을 클릭 합니다 . 그러면 “Open Data File(데이터 파일 열기)” 대화 상자가 열립니다 .</p> <p>b 데이터 파일을 선택합니다 . 이 예제의 경우에는 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일을 선택합니다 .</p> <p>c Load result data(결과 데이터 로드) 확인란을 선택 해제합니다 .</p> <p>d Open(열기) 단추를 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 결과를 로드하지 않는 경우 , 데이터 파일 하나를 열면 기본적으로 TIC 가 열립니다 . 선택한 분석법 확인란에서 'File Open(파일 열기)' Run(실행) 을 선택하면 그 대신 File Open(파일 열기) 작업이 실행됩니다 . 추가 정보는 온라인 도움말을 참조하십시오 .

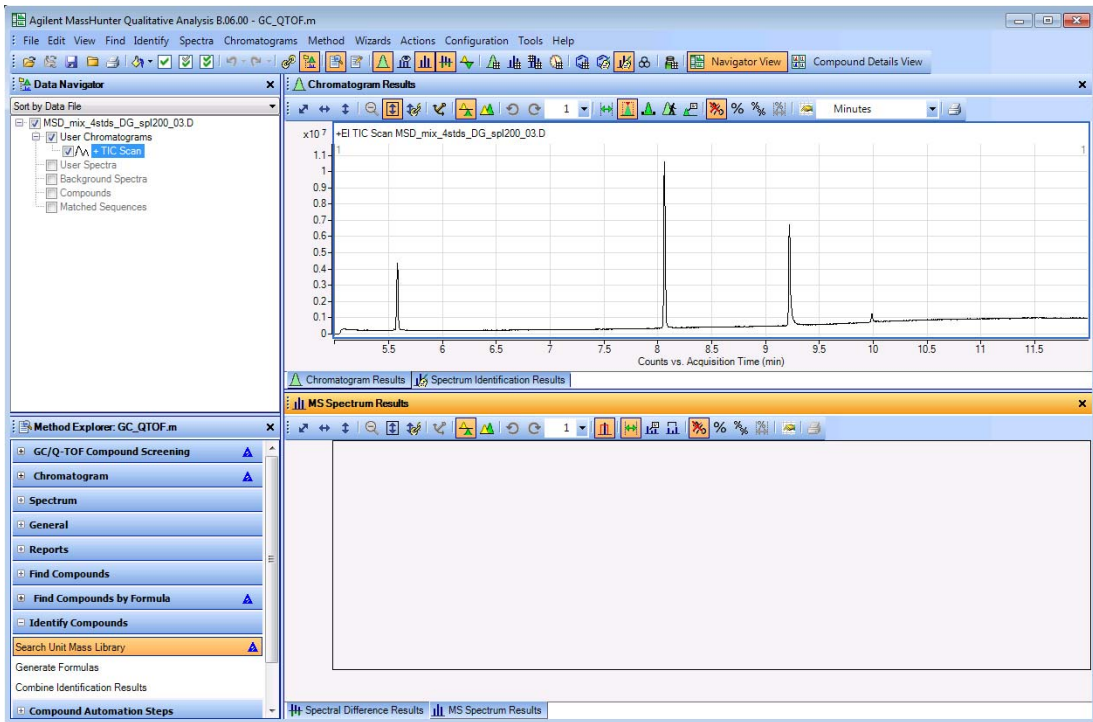


그림 45 첫 번째 피크 스펙트럼의 라이브러리 검색 및 공식 생성 결과

2 찾고 식별하기

작업 17. 결과 저장

작업 17. 결과 저장

단계	자세한 지침	주석
6	데이터 파일을 닫습니다. a File(파일) > Close Data File(데이터 파일 닫기) 을 클릭합니다. b Close(닫기) 를 클릭합니다.	

3 워크플로 사용, 내보내기 및 인쇄

작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및
실행 76

작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정
및 실행 81

작업 20. CEF 파일 내보내기 85

작업 21. 분석 보고서 인쇄 87

작업 22. 화합물 보고서 인쇄 92

이들 작업에서는 정성 분석 분석법을 설정 및 실행하는 방법을 배웁니다. 그런 다음 데이터 파일을 열 때 자동화된 분석법 내에서 작업을 실행합니다.

이들 예제에는 2 가지 워크플로가 사용됩니다. 추가 정보는 “워크플로”(103 페이지)에서 확인하십시오.

General(일반) 워크플로는 GC/QQQ, GC/Q-TOF 및 LC/MS 데이터를 지원합니다. **GC/Q-TOF Compound Screening**(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로는 GCQ-TOF 데이터를 지원합니다.

각 연습 과정은 3 개의 열이 있는 표로 표시됩니다.

- 단계 - 이들 일반 지침을 사용하여 스스로 프로그램을 탐구해보십시오.
- 자세한 지침 - 도움이 필요하거나 단계별 학습 과정을 원한다면 이용하십시오.
- 주석 - 연습 과정의 각 단계에 대한 추가 정보 및 팁을 제공합니다.



3 워크플로 사용, 내보내기 및 인쇄

작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및 실행

작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및 실행

처음으로 정성 분석 프로그램을 사용하면 `method default.m` 이 로드됩니다. 열린 분석법을 변경하고 저장하거나, 새로운 분석법을 열고 변경한 다음 저장할 수 있습니다. `method default.m` 은 덮어쓸 수 없습니다.

또한, 데이터 파일을 열 때 분석법에서 특정 작업을 실행하도록 설정할 수 있습니다. 데이터 파일을 열 때 해당 데이터 파일과 함께 저장된 결과를 성하는 데 사용한 분석법을 로드할 수도 있습니다. 이 분석법은 해당 데이터 파일과 함께 결과를 저장할 때마다 자동 저장됩니다. **General**(일반) 워크플로는 **GC/MS** 또는 **LC/MS** 데이터 파일과 함께 사용할 수 있습니다.

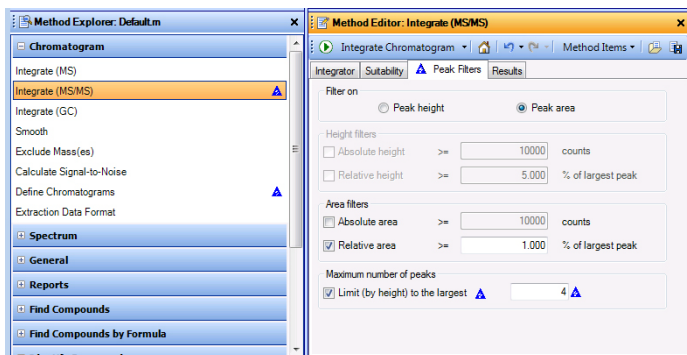
작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및 실행

단계	자세한 지침	주석
1 Pest - STD 200 MRM.d 데이터 파일에 대해 TIC 를 엽니다 .	<p>a 프로그램이 열리지 않는다면 MassHunter Qualitative Analysis(정성 분석) 아이콘을 더블 클릭합니다 . 그렇지 않다면 File(파일) > Open Data File(데이터 파일 열기) 을 클릭합니다 .</p> <p>b GC 예제 데이터 파일 폴더 안에 있는 Pest - STD 200 MRM.d 데이터 파일을 클릭합니다 .</p> <p>c Load result data(결과 데이터 로드) 확인란을 지우고 Open(열기) 을 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • GC/MS 데이터로 작업할 때는 General(일반) 워크플로나 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로를 사용할 수 있습니다 .
2 GC 데이터와 작동되도록 사용자 인터페이스를 구성합니다 .	<ul style="list-style-type: none"> • “작업 2. GC/MS 데이터용으로 사용자 인터페이스 구성”(12 페이지)의 지침을 따릅니다 . 	<ul style="list-style-type: none"> • 이 예제의 경우에는 General(일반) 워크플로를 선택합니다 .
3 TIC 크로마토그램을 추출하도록 분석법을 설정합니다 . <ul style="list-style-type: none"> • MS 데이터에 대한 TIC 크로마토그램을 지정합니다 . 	<p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Chromatogram(크로마토그램) > Define Chromatograms(크로마토그램 정의) 를 선택합니다 .</p> <p>b BPC 크로마토그램을 삭제합니다 .</p> <p>c TIC 를 Type(유형) 으로 선택합니다 .</p> <p>d MS Level(MS 레벨) 이 MS/MS 인지 확인합니다 .</p> <p>e Add(추가) 를 클릭합니다 .</p>	

작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및 실행


작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및 실행

단계	자세한 지침	주석
4	<p>데이터를 적분하도록 분석법을 편집합니다 .</p> <ul style="list-style-type: none"> 적분을 최고 피크 4 개로 제한합니다 . <p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Chromatogram(크로마토그램) > Integrate(적분)(MS/MS) 를 클릭합니다 .</p> <p>b Peak Filters(피크 필터) 탭을 클릭합니다 .</p> <p>c Maximum number of peaks(최대 피크 수) 부분에서 Limit (by height) to the largest(최대치 높이로 제한) 확인란을 선택합니다 .</p> <p>d 4 를 입력합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> Chromatogram(크로마토그램) > Integrate(적분)(MS) 부분에 있는 Peak Filters(피크 필터) 탭에서 값을 업데이트하면 Method Explorer(분석법 탐색기) 의 다른 부분의 도 업데이트됩니다 . 파란색 삼각형이 나타나서 이들 다른 부분을 표시합니다 .



Save Method(분석법 저장) 아이콘을 클릭하여 현재 분석법을 저장합니다 .

그림 46 Chromatogram(크로마토그램) > Integrate(적분)(MS/MS) > Peak Filters(피크 필터) 탭

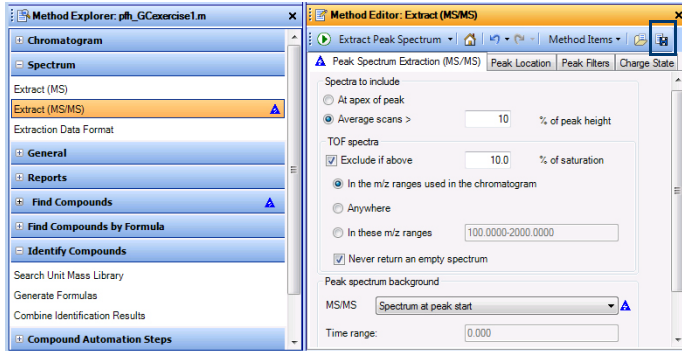
5	<p>적분을 테스트하여 적분된 4 개의 피크만 나타나는지 확인합니다 .</p> <p>a Integrate Chromatogram(크로마토그램 적분) 아이콘  을 클릭하여 데이터 파일을 적분합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 분석법을 저장하면 열린 분석법에서 변경된 값을 표시하는 모든 파란색 삼각형이 사라집니다 .
6	<p>분석법을 <i>iii_GCexercise1</i> 에 저장합니다 . 여기서 “iii” 는 사용자의 이니셜입니다 .</p> <p>a 상단 메뉴에서 Method(분석법) > Save As(다른 이름으로 저장) 를 클릭합니다 .</p> <p>b <i>iii_GCexercise1</i> 을 입력합니다 .</p> <p>c Save(저장) 단추를 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 분석법을 저장한 후 추가 변경을 하면 파란색 삼각형이 추가됩니다 .
7	<p>피크 스펙트럼 배경을 변경하여 피크의 시작에서 스펙트럼을 사용합니다 .</p> <p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Spectrum(스펙트럼) > Extract(추출)(MS/MS) 을 클릭합니다 .</p> <p>b Peak Spectrum Extraction(피크 스펙트럼 추출)(MS/MS) 을 클릭합니다 .</p> <p>c 피크 스펙트럼 배경에 대해서는 Spectrum at peak start(피크 시작에서 스펙트럼) 를 선택합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> 분석법을 저장한 후 추가 변경을 하면 파란색 삼각형이 추가됩니다 .

3 워크플로 사용, 내보내기 및 인쇄

작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및 실행

작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및 실행

단계	자세한 지침	주석
----	--------	----



Save Method(분석법 저장)
아이콘을 클릭하여 현재 분석법을 저장합니다.

그림 47 Spectrum(스펙트럼) > Extract(추출)(MS/MS) > Peak Spectrum Extraction(피크 스펙트럼 추출)(MS/MS) 탭

8 MS 스펙트럼 추출을 테스트하여 배경 스펙트럼이 제외되었는지 확인합니다.

- **Extract Peak Spectrum(피크 스펙트럼 추출)** 아이콘을 클릭하여 데이터 파일에서 선택한 피크에 대해 작업을 실행합니다.

9 분석법을 저장합니다.

- 분석법을 다음 3 가지 방법 중 하나로 저장합니다.
 - **Method Editor(분석법 편집기)** 에서 **Save Method(분석법 저장)** 아이콘을 클릭합니다.
 - 분석법 편집기를 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 **Save Method(분석법 저장)** 를 클릭합니다.
 - 상단 메뉴에서 **Method(분석법) > Save As(다른 이름으로 저장)** 를 클릭합니다.
- **Save Method(분석법 저장)** 아이콘이 그림 47(78 페이지) 에 표시되어 있습니다.

10 데이터 파일을 열 때 방금 변경한 파라미터가 있는 작업을 자동화하도록 분석법을 설정합니다.



- 이 데이터 파일이나 다른 데이터 파일을 열었을 때 실행할 작업을 나열합니다.

- Method Explorer(분석법 탐색기)** 창에서 **General(일반) > File Open Actions(파일 열기 작업)** 를 선택합니다.
- Available actions(사용 가능한 작업)** 목록에서 **Integrate and Extract Peak Spectra(피크 스펙트럼 적분 및 추출)** 를 선택합니다.
- Add(추가)** 단추, 를 클릭하여 선택한 작업을 **Actions to be run(실행할 작업)** 목록으로 이동합니다. 또한 선택한 작업을 더블 클릭하면 다른 목록으로 이동됩니다.

힌트 : Method Explorer(분석법 편집기) 에서 General(일반) 아래를 봅니다.

작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및 실행

작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및 실행

단계	자세한 지침	주석
<p>11 File Open Actions(파일 열기 작업) 를 테스트합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Run File Open Actions Now(지금 파일 열기 작업 실행) 아이콘  을 클릭하여 데이터 파일에 대해 작업을 실행합니다 . 	<ul style="list-style-type: none"> • 크로마토그램 및 스펙트럼은 덮어쓰기되지 않습니다 . 새로운 크로마토그램 및 스펙트럼이 추가됩니다 .
		
<p>서로 다른 작업 2 개가 실행 목록이 될 작업들의 일부입니다 . 첫 번째 작업은 지정된 크로마토그램을 추출하는 것입니다 . 그런 다음 , 해당 크로마토램이 적분되고 피크가 추출됩니다 .</p>		
<p>그림 48 Method Editor(분석법 편집기) 의 General(일반) > File Open Actions(파일 열기 작업) 부분</p>		
<p>12 분석법을 저장합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Method Editor(분석법 편집기) 에서 Save Method(분석법 저장) 아이콘 을 클릭합니다 . 	
<p>13 작업 목록 중에 해당 분석법이 실행 중일 때 작업을 자동화할 분석법을 설정합니다 .</p> <ul style="list-style-type: none"> • 이 데이터 파일이나 다른 데이터 파일을 열었을 때 실행할 작업을 나열합니다 . 	<ol style="list-style-type: none"> Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Worklist Automation(작업 목록 자동화) > Worklist Actions(작업 목록 작업) 를 선택합니다 . Actions to be run(실행할 작업) 목록에서 Generate Analysis Report(일반 분석 보고) 를 제거합니다 . 	
<p>힌트 : Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Worklist Automation(작업 목록 자동화) 아래 보기</p>		
<p>14 Worklist Actions(작업 목록 작업) 를 테스트합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Run Worklist Actions Now(지금 작업 목록 작업 실행) 아이콘  을 클릭하여 데이터 파일에 대한 작업을 실행합니다 . 	<ul style="list-style-type: none"> • 크로마토그램 및 스펙트럼은 덮어쓰기되지 않습니다 . 새로운 크로마토그램 및 스펙트럼이 추가됩니다 .

3 워크플로 사용, 내보내기 및 인쇄

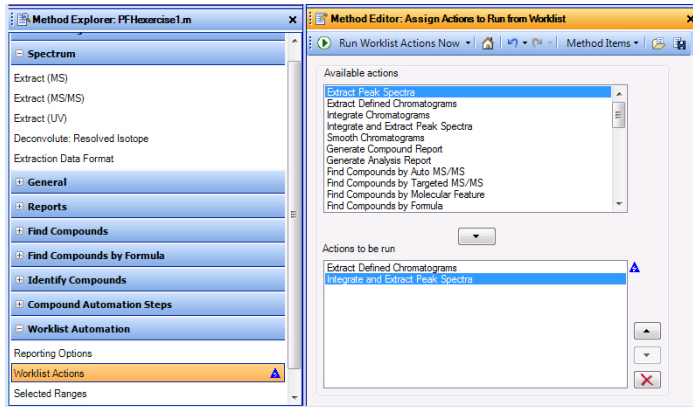
작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및 실행

작업 18. 일반 워크플로를 사용하여 정성 분석 분석법 설정 및 실행

단계

자세한 지침

주석



2 개의 작업 목록이 한 분석법에 포함되어 있습니다. 첫 번째 작업 목록 (파일 열기 작업) 은 데이터 파일이 열려 있을 때 실행할 수 있습니다. 두 번째 작업 목록 (작업 목록 작업) 은 해당 분석법이 실행 중일 때 실행됩니다.

그림 49 Method Editor(분석법 편집기) 내의 Worklist Automation(작업 목록 자동화) > Worklist Actions(작업 목록 작업) 부분

15 분석법을 저장하고 결과를 저장하지 않고 데이터 파일을 닫습니다 .

- a Method Editor(분석법 편집기) 에서 **Save Method(분석법 저장)** 아이콘을 클릭합니다 .
- b **File(파일) > Close Data File(데이터 파일 닫기)** 을 클릭하고 결과 저장 이 요청되면 **No(아니요)** 를 클릭합니다 .

작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행

이 작업에서는 특정 순서로 실행할 분석 작업 목록이 들어 있는 정성 분석 분석법을 설정합니다. 여기에는 크로마토그램의 추출 및 적분, 스펙트럼 추출, 라이브러리에서 피크 스펙트럼 검색, 스펙트럼용 공식 생성 및 분석 보고서 인쇄가 포함됩니다.

작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행

단계	자세한 지침	주석
1 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일에 대한 TIC 을 열 니다 .	<p>a 프로그램이 열리지 않는다면 MassHunter Qualitative Analysis(정성 분석) 아이콘을 더블 클릭합니다 . 그렇지 않다면 File(파일) > Open Data File(데이터 파일 열기) 을 클릭합니다 .</p> <p>b GC 예제 데이터 파일 폴더 안에 있는 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일을 클릭합니다 .</p> <p>c Load result data(결과 데이터 로드) 확인란을 지우고 Open(열기) 을 클릭합니다 .</p>	
2 GC 데이터와 작동되도록 사용자 인터페이스를 구성합니다 .	<ul style="list-style-type: none"> “ 작업 2. GC/MS 데이터용으로 사용자 인터페이스 구성 ”(12 페이지) 의 지침을 따릅니다 . 	<ul style="list-style-type: none"> 이 예제의 경우 , GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로를 선택합니다 .
3 TIC 가 추출되었는지 확인합니다 .	<p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Chromatogram(크로마토그램) 을 선택합니다 .</p> <p>b Define Chromatograms(크로마토그램 정의) 부분을 클릭합니다 .</p> <p>c Method Editor(분석법 편집기) 창에서 , Defined chromatograms(정의된 크로마토그램) 부분 안의 크로마토그램이 TIC 인지 확인합니다 . 그렇지 않다면 TIC 를 Type(유형) 으로 선택합니다 . Change(변경) 단추를 클릭합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none">

3 워크플로 사용, 내보내기 및 인쇄

작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행

작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행

단계	자세한 지침	주석
4 Find by Chromatogram Deconvolution(크로마토그램 디콘볼루션으로 찾기) 알고리즘에 대한 파라미터를 검토합니다 .	<p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) > Find by Chromatogram Deconvolution(크로마토그램 디콘볼루션으로 찾기) 부분을 클릭합니다 .</p> <p>b Mass Filter(질량 필터) 탭을 클릭합니다 .</p> <p>c Absolute height(절대 높이) 값을 13000 으로 설정합니다 .</p> <p>d Results(결과) 탭을 클릭합니다 .</p> <p>e Highlight all compounds(모든 화합물 강조 표시) 단추를 클릭합니다 .</p> <p>f 각 탭에서 결과를 검토합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로에 대한 부분을 봅니다 . 이 워크플로에는 6 개의 부분이 있습니다 . 이들 부분은 모두 , 이미 분석법 탐색기의 일부인 부분을 복제한 것입니다 . 분석법 탐색기의 다른 부분들에 파란색 삼각형이 나타납니다 . 이들은 동일한 파라미터 값들이 다른 곳에서도 변경되었음을 나타냅니다 .
5 Identify by Library Search(라이브러리 검색으로 식별) 알고리즘에 대한 파라미터를 검토합니다 .	<p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) > Identify by Library Search(라이브러리 검색으로 식별) 부분을 클릭합니다 .</p> <p>b Add Library(라이브러리 추가) 단추를 클릭합니다 . 라이브러리 하나를 선택하고 Open(열기) 을 누릅니다 .</p> <p>c (선택사항) 라이브러리를 사용하고 싶지 않다면 Remove Library(라이브러리 제거) 단추를 클릭하여 제거하십시오 .</p> <p>d 각 탭에서 파라미터를 검토합니다 .</p>	<ul style="list-style-type: none"> demo.1 라이브러리나 NIST08.I(또는 기타 버전의 NIST 라이브러리) 는 \MassHunter\Library 폴더에 설치되어 있습니다 .
6 분석법을 <i>iii_GCexercise2</i> 에 저장합니다 . 여기서 "iii" 는 사용자 의 이니셜입니다 .	<p>a 상단 메뉴에서 Method(분석법) > Save As(다른 이름으로 저장) 를 클릭합니다 .</p> <p>b <i>iii_GCexercise2</i> 를 입력합니다 .</p> <p>c Save(저장) 단추를 클릭합니다 .</p>	

작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행

작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행

단계	자세한 지침	주석
<p>7 데이터 파일이 열렸을 때 작업을 자동화할 분석법을 설정합니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> 이 데이터 파일이나 다른 데이터 파일을 열었을 때 실행할 작업을 나열합니다. 	<p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 General(일반) > File Open Actions(파일 열기 작업) 를 선택합니다.</p> <p>b Actions to be run(실행할 작업) 목록에서 Generate Analysis Report(일반 분석 보고) 를 제거합니다.</p> <p>c Integrate and Extract Peak Spectra (피크 스펙트럼 적분 및 추출) 를 제거합니다.</p> <p>d 목록에서 다른 모든 작업을 제거합니다.</p> <p>e Extract Defined Chromatograms(정의된 크로마토그램 추출) 를 추가합니다.</p> <p>f Find Compounds by Chromatographic Deconvolution(크로마토그램 디콘볼루션으로 화합물 찾기) 을 추가합니다.</p> <p>g Search Spectral Library for Compound(화합물에 대해 스펙트럼 라이브러리에서 검색) 를 추가합니다.</p>	
<p>힌트 : Method Explorer(분석법 편집기) 창에서 General(일반) 아래를 봅니다.</p>		
<p>8 File Open Actions(파일 열기 작업) 를 테스트합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> Run 'File Open' Actions Now(지금 '파일 열기' 작업 실행) 아이콘  을 클릭하여 데이터 파일에 대해 작업을 실행합니다. 	<ul style="list-style-type: none"> 크로마토그램 및 스펙트럼은 덮어쓰기되지 않습니다. 새로운 크로마토그램 및 스펙트럼이 추가됩니다.

작업 20. CEF 파일 내보내기

화합물 정보가 포함된 CEF 파일을 내보낼 수 있습니다. 이 CEF 파일을 MassHunter Quantitative Analysis(정량 분석) 및 Mass Profiler Professional 과 같은 다른 프로그램으로 가져올 수 있습니다. 또한 CEF 파일로 내보낸 화합물을 가져올 수도 있습니다.

작업 20. CEF 파일 내보내기

단계	자세한 지침	주석
1	<p>MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일을 열고 “작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행”(81 페이지)에서 생성한 <i>iii_GCexercise2.m</i> 분석법에 대해 File Open(파일 열기) 작업을 실행합니다.</p> <p>a 프로그램이 열리지 않는다면 MassHunter Qualitative Analysis(정성 분석) 아이콘을 더블 클릭합니다. 그렇지 않다면 File(파일) > Open Data File(데이터 파일 열기)을 클릭합니다.</p> <p>b GC 예제 데이터 파일 폴더 안에 있는 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일을 클릭합니다.</p> <p>c Load result data(결과 데이터 로드) 확인란을 선택 해제합니다.</p> <p>d Run 'File Open' actions from selected method(선택한 분석법에서 '파일 열기' 작업 실행) 확인란을 선택합니다.</p> <p>e Use current method(현재 분석법 사용) 단추를 클릭하고 Open(열기)을 클릭합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> “작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행”(81 페이지)을 완료하면, 현재 분석법은 <i>iii_GCexercise2.m</i>입니다. 이 분석법은 Find Compounds by Chromatogram Deconvolution(크로마토그램 디콘볼루션으로 화합물 찾기) 알고리즘을 실행한 다음, 각 화합물에 대해 Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 실행하도록 설정되어 있습니다.
2	<p>CEF 파일을 내보냅니다.</p> <p>a 파일을 대화식으로 내보내려면 File(파일) > Export(내보내기) > as CEF(CEF 로)를 클릭합니다.</p> <p>b All results(모든 결과) 단추를 클릭합니다.</p> <p>c 내보내기할 파일의 위치를 선택합니다.</p> <p>d OK(확인)를 클릭합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> 화합물을 내보내는 데 CEF 파일이 사용됩니다.

3 워크플로 사용, 내보내기 및 인쇄

작업 20. CEF 파일 내보내기

작업 20. CEF 파일 내보내기 (계속)

단계	자세한 지침	주석
----	--------	----

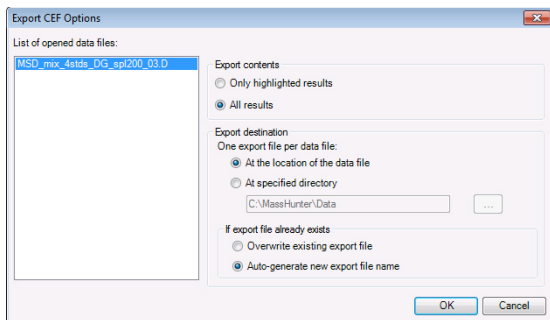


그림 51 Export CEF Options(CEF 옵션 내보내기) 대화 상자

작업 21. 분석 보고서 인쇄

이 연습이나 다음 연습에서 아무 작업이나 실행한 후에 분석 보고서를 인쇄하고 싶다면 다음 지침을 따르십시오.

분석 보고서에는 크로마토그램 추출 및 적분, 스펙트럼 추출, 화합물 찾기, 데이터베이스에서 피크 스펙트럼 검색 또는 피크 스펙트럼에서 공식 생성 실행한 결과가 포함될 수 있습니다.

작업 21. 분석 보고서 인쇄

단계	자세한 지침	주석
1	<p>MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일이 로드되지 않는다면, 이 데이터 파일을 열고 “작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행”(81 페이지)에서 생성한 <i>iii_GCexercise2.m</i> 분석법에 대해 File Open(파일 열기) 작업을 실행합니다.</p> <p>a 프로그램이 열리지 않는다면 MassHunter Qualitative Analysis(정성 분석) 아이콘을 더블 클릭합니다. 그렇지 않다면 File(파일) > Open Data File(데이터 파일 열기) 을 클릭합니다.</p> <p>b GC 예제 데이터 파일 폴더 안에 있는 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일을 클릭합니다.</p> <p>c Load result data(결과 데이터 로드) 확인란을 선택 해제합니다.</p> <p>d Run 'File Open' actions from selected method(선택한 분석법에서 '파일 열기' 작업 실행) 확인란을 선택합니다.</p> <p>e Use current method(현재 분석법 사용) 단추를 클릭하고 Open(열기) 을 클릭합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> “작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행”(81 페이지)을 완료하면, 현재 분석법은 <i>iii_GCexercise2.m</i> 입니다. 이 분석법은 Find Compounds by Chromatogram Deconvolution(크로마토그램 디콘볼루션으로 화합물 찾기) 알고리즘을 실행한 다음, 각 화합물에 대해 Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 실행하도록 설정되어 있습니다.
2	<p>분석법에서 분석 보고서 선택 변경:</p> <ul style="list-style-type: none"> 인쇄하려는 크로마토그램, 스펙트럼 또는 표의 확인란을 선택합니다. 인쇄하지 않으려는 크로마토그램, 스펙트럼 또는 표의 확인란을 지웁니다. <p>a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 Reports(보고서) > Analysis Report(분석 보고서) 를 선택합니다.</p> <p>b 인쇄하려는 추가 선택사항에 대한 확인란을 선택합니다.</p> <p>c 인쇄하지 않으려는 모든 크로마토그램 및 스펙트럼 선택사항을 지웁니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> 분석 보고서에는 이 부분에서 선택한 정보만 포함됩니다. 일부 결과가 없다면, 이 부분에서 그러한 결과를 선택해도 결과가 포함되지 않은 것입니다. 예를 들어, 크로마토그램을 적분하지 않았다면 피크가 포함되지 않습니다.

3 워크플로 사용, 내보내기 및 인쇄

작업 21. 분석 보고서 인쇄

작업 21. 분석 보고서 인쇄 (계속)

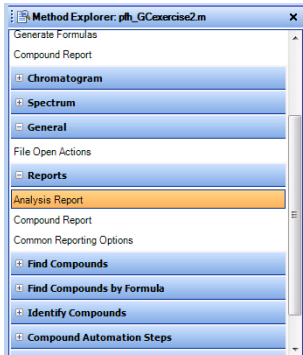
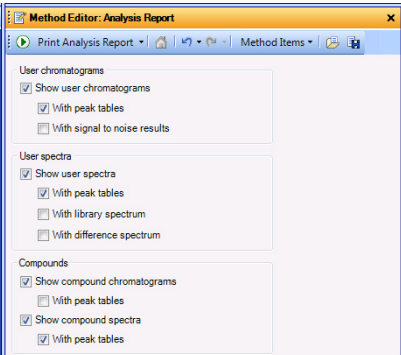


단계	자세한 지침	주석
		<p>기본적으로 Method Editor(분석법 편집기) 창은 유동입니다. 이 창은 Qualitative Analysis(정성 분석) 프로그램의 나머지와는 다른 별도의 창으로 나타납니다. 창을 고정하려면 창의 제목을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Floating(유동) 을 클릭합니다. 또는 제목 표시줄을 더블 클릭하여 창을 고정할 수도 있습니다.</p>

그림 52 Method Explorer(분석법 탐색기) 와 Method Editor(분석법 편집기) 창의 Analysis Report(분석 보고서) 부분

작업 21. 분석 보고서 인쇄 (계속)

단계	자세한 지침	주석
3	<p>보고서를 인쇄합니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> a 보고서를 여러 방식으로 대화식으로 인쇄할 수 있습니다. <ul style="list-style-type: none"> • 기본 메뉴에서 File(파일) > Print(인쇄) > Analysis Report(분석 보고서) 를 클릭합니다. • 기본 도구 모음에서 Printer(프린터) 아이콘을 클릭합니다. • Analysis Report(분석 보고서) 부분이 선택되어 있을 때 Method Editor(분석법 편집기) 도구 모음에서 Print Analysis Report(분석 보고서 인쇄) 아이콘  을 클릭합니다. • Method Editor(분석법 편집기) 에서 Analysis Report(분석 보고서) 부분을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 Print Analysis Report(분석 보고서 인쇄) 를 클릭합니다. • Data Navigator(데이터 탐색기) 에 있는 데이터 파일 바로 가기 메뉴에서 Analysis Report(분석 보고서) 를 클릭합니다. b Report contents(보고서 내용) 를 클릭합니다. c Print report(보고서 인쇄) 확인란을 선택하고 프린터를 선택합니다. d Print preview(인쇄 미리 보기) 확인란을 선택합니다. e OK(확인) 단추를 클릭합니다. 	<ul style="list-style-type: none"> • Method Editor(분석법 편집기) 도구 모음의 실행 아이콘  은 때때로 일련의 가능한 작업 중에서 하나를 선택할 수 있게 해줍니다. 예를 들어, Method Editor(분석법 편집기) 창의 Reports(보고서) > Common Reporting Options(일반 보고 옵션) 부분으로 전환하면 Run(실행) 아이콘을 클릭할 때 4 가지 다른 작업이 가능합니다. 화살표를 클릭하면 가능한 작업 목록이 나타나, 어떤 작업을 실행할지 선택할 수 있습니다. 목록에서 다른 작업을 선택하면 기본 작업이 변경됩니다. Run(실행) 단추를 클릭하기만 하면 현재 기본 작업이 실행됩니다.

3 워크플로 사용, 내보내기 및 인쇄

작업 21. 분석 보고서 인쇄

작업 21. 분석 보고서 인쇄 (계속)

단계

자세한 지침

주석

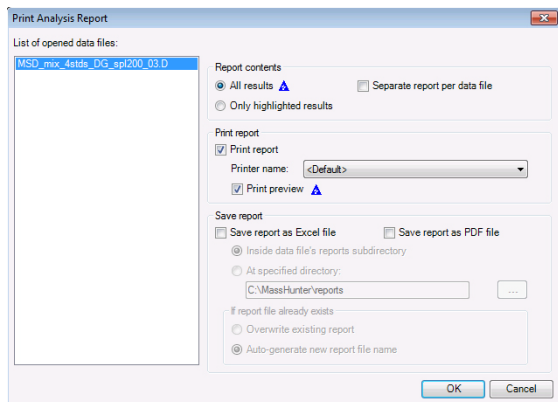


그림 53 Print Analysis Report(분석 보고서 인쇄) 대화 상자

작업 22. 화합물 보고서 인쇄

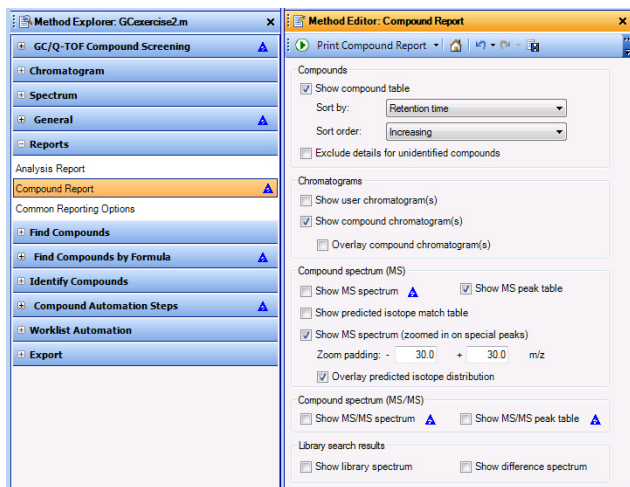
화합물 보고서를 인쇄하고 싶을 때는 다음 지침을 따르십시오.

작업 22. 화합물 보고서 인쇄

단계	자세한 지침	주석
1	<p>MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일이 로드되지 않는다면, 이 데이터 파일을 열고 “작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행”(81 페이지)에서 생성한 <i>iii_GCexercise2.m</i> 분석법에 대해 File Open(파일 열기) 작업을 실행합니다.</p> <p>a 프로그램이 열리지 않는다면 MassHunter Qualitative Analysis(정성 분석) 아이콘을 더블 클릭합니다. 그렇지 않다면 File(파일) > Open Data File(데이터 파일 열기) 을 클릭합니다.</p> <p>b GC 예제 데이터 파일 폴더 안에 있는 MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d 데이터 파일을 클릭합니다.</p> <p>c Load result data(결과 데이터 로드) 확인란을 선택 해제합니다.</p> <p>d Run ‘File Open’ actions from selected method(선택한 분석법에서 '파일 열기' 작업 실행) 확인란을 선택합니다.</p> <p>e Use current method(현재 분석법 사용) 단추를 클릭하고 Open(열기) 을 클릭합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> “작업 19. GC/Q-TOF 성분 스크리닝 워크플로를 사용한 분석법 설정 및 실행”(81 페이지)을 완료하면, 현재 분석법은 <i>iii_GCexercise2.m</i> 입니다. 이 분석법은 Find Compounds by Chromatogram Deconvolution(크로마토그램 디콘볼루션으로 화합물 찾기) 알고리즘을 실행한 다음, 각 화합물에 대해 Search Library(라이브러리 검색) 알고리즘을 실행하도록 설정되어 있습니다.
2	<p>화합물 보고서에 대한 분석법에서 일부 선택 변경:</p> <ul style="list-style-type: none"> 특별 피크에서 확대된 MS 스펙트럼 보기를 끕니다. 보고서에서 MS/MS 옵션을 끕니다. <p>a Method Explorer(분석법 탐색기)에서 Reports(보고서) > Compound Report(화합물 보고서) 를 클릭합니다.</p> <p>b Show MS spectrum(MS 스펙트럼 보기) 확인란을 선택 해제합니다.</p> <p>c Show MS/MS spectrum(MS/MS 스펙트럼 보기) 확인란을 선택 해제합니다.</p> <p>d Show MS/MS peak table(MS/MS 피크 표 보기) 확인란을 선택 해제합니다.</p>	<ul style="list-style-type: none"> 이들 확인란을 통해 가능한 경우 보고서에 포함할 정보를 지정할 수 있습니다. 정보가 없다면 해당 부분이 자동으로 건너뛰기 됩니다. 예를 들어, 이터 파일에 MS 데이터만 있다면 MS/MS 결과는 포함되지 않습니다.

작업 22. 화합물 보고서 인쇄

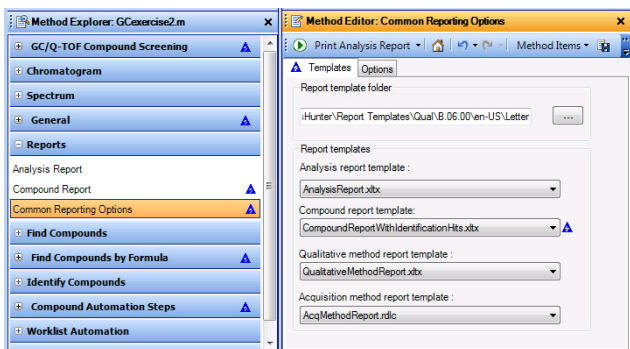
단계	자세한 지침	주석
----	--------	----



GC/Q-TOF 데이터에 대해 Overlay(오버레이) 화합물 크로마토그램 확인란이 선택 해제되어 있어야 합니다 .

그림 55 Method Editor(분석법 편집기) 의 Compound Report(화합물 보고서) 부분

- 3 (선택사항) 다른 화합물 보고서 템플릿을 선택합니다 .
- a Method Explorer(분석법 탐색기) 창에서 **Reports(보고서) > Common Reporting Options(일반 보고 옵션)** 를 클릭합니다 .
 - b **CompoundReport WithIdentificationHits.xlsx** 를 화합물 보고서 템플릿으로 선택합니다 .
- 몇 가지 다양한 보고서 템플릿들이 소프트웨어에 포함되어 있습니다 .
 - Excel 과 Report Designer add-in 을 사용하여 보고서 템플릿을 사용자 지정할 수 있습니다 .



Excel 및 Report Designer add-in 을 사용하여 확장자가 **XLTX** 인 모든 템플릿을 사용자 지정할 수 있습니다 . 수집 분석법 보고서는 사용자 지정할 수 없습니다 .

그림 56 Method Editor(분석법 편집기) 의 Common Reporting Options(일반 보고 옵션) 부분


3 워크플로 사용, 내보내기 및 인쇄 작업 22. 화합물 보고서 인쇄

작업 22. 화합물 보고서 인쇄

단계

4 보고서를 인쇄합니다.

자세한 지침

- a **File(파일) > Print(인쇄) > Compound Report(화합물 보고서)** 를 클릭하거나 **Print Analysis Report(분석 보고서 인쇄)** 아이콘  에 있는 화살표를 클릭하고 **Print Compound Report(화합물 보고서 인쇄)** 를 클릭하여 화합물 보고서를 인쇄합니다.
- b **Print preview(인쇄 미리 보기)** 확인란을 선택합니다.
- c **OK(확인)** 를 클릭합니다. 보고서를 검토합니다.
- d **Close Print Preview(인쇄 미리 보기 닫기)** 아이콘을 클릭합니다.

주석

- **Print Compound Report(화합물 보고서 인쇄)** 대화 상자에서 다른 프린터를 선택하거나, PDF 또는 Excel 파일로 보고서를 저장하도록 선택하거나, 모든 결과는 강조 표시된 결과만 인쇄하도록 선택하거나, 여러 데이터 파일을 한 보고서로 결합할 것인지를 선택할 수 있습니다.
- 추가 정보는 온라인 도움말이나 **Report Designer Training DVD(보고서 디자이너 교육 DVD)** 를 참조하십시오.

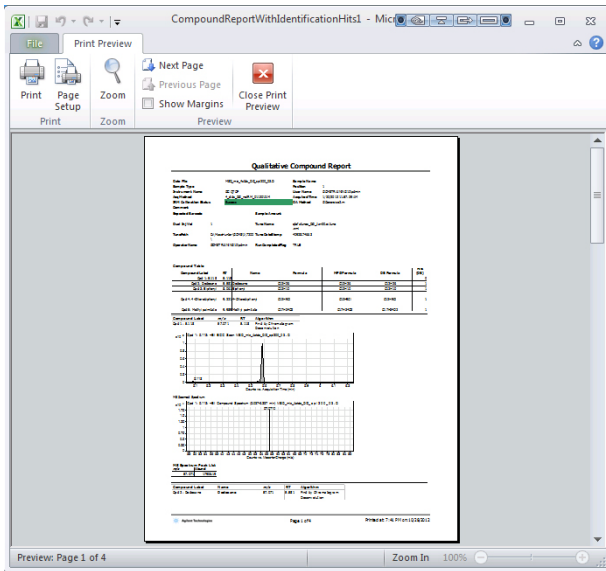
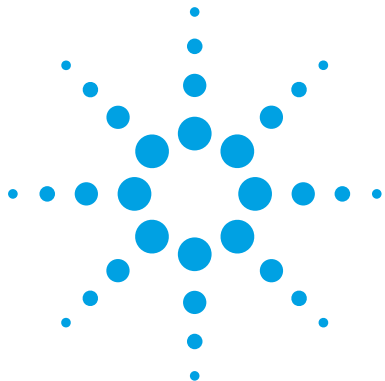


그림 57 Compound Report(화합물 보고서) 가 있는 Print Preview(인쇄 미리 보기) 창

5 결과를 저장하지 않고 데이터 파일을 닫습니다.

- a **File(파일) > Close Data File(데이터 파일 닫기)** 을 클릭합니다.
- b 결과를 저장할 것인지 묻는 메시지가 나타나면 **No(아니요)** 를 클릭합니다.



참조

창으로 작업	96
Data Navigator(데이터 탐색기) 에서 결과 데이터로 작업	98
크로마토그램에서 작동 실행	99
MS 또는 MS/MS 스펙트럼에서 작업 수행	100
크로마토그램 시각 데이터로 작업	101
스펙트럼 시각 데이터로 작업	102
워크플로	103
보고서 템플릿 사용자 지정	107



창으로 작업

처음으로 정성 분석 프로그램을 열면 기본 레이아웃에 다음 4개 창이 보입니다. **Data Navigator**(데이터 탐색기), **Method Explorer**(분석법 탐색기), **Chromatogram Results**(크로마토그램 과) 및 **MS Spectrum Results**(MS 스펙트럼 결과). **Navigator View**(탐색기 보기) 와 **Compound Details View**(화합물 세부사항 보기) 사이를 전환할 수 있습니다 .

View(보기) 메뉴를 사용하여 **Navigator View**(탐색기 보기) 에서 17 개의 다른 창을 표시할 수 있습니다 .

- **Method Editor**(분석법 편집기) - 여러 탭으로 분리된 분석법 파라미터를 편집 가능
- **Spectrum Preview**(스펙트럼 미리 보기) - 데이터 파일에서 빠르게 스펙트럼 스캔 가능
- **MS Spectrum Results**(MS 스펙트럼 결과) - MS 및 MS/MS 스펙트럼 표시
- **Difference Results**(차이 결과) - 라이브러리 검색 후 여러 결과 표시
- **Deconvolution Results**(디콘볼루션 결과) - 디콘볼루션 처리된 스펙트럼 표시
- **Deconvolution Mirror Plot**(디콘볼루션 미리 플롯) - 미리 이미지에 디콘볼루션 처리된 스펙트럼 2 개 표시
- **UV Spectrum Results**(UV 스펙트럼 결과) - UV 스펙트럼 표시 - LC/MS 데이터만 해당
- **Integration Peak List**(적분 피크 목록) - 표에 적분 결과 표시
- **MS Spectrum Peak List 1**(MS 스펙트럼 피크 목록 1) - 선택한 첫 번째 스펙트럼에 대한 피크 표 표시
- **MS Spectrum Peak List 2**(MS 스펙트럼 피크 목록 2) - 선택한 두 번째 스펙트럼에 대한 피크 표 표시
- **MS Actuals**(MS 실제) - 강조 표시된 스펙트럼에 대한 수집 정보 표시
- **Compound List**(화합물 목록) - **Find Compounds**(화합물 찾기) 알고리즘 중 하나를 사용하여 찾은 화합물 표시
- **Compound Identification Results**(화합물 식별 결과) - 선택한 화합물에 대한 식별 정보 표시
- **Spectrum Identification Results**(스펙트럼 식별 결과) - 선택한 스펙트럼에 대한 식별 정보 표시
- **MS/MS Formula Details**(MS/MS 공식 세부사항) - MS/MS 스펙트럼에 나타나는 토막들에 대해 계산된 가능한 공식이 포함된 표 표시

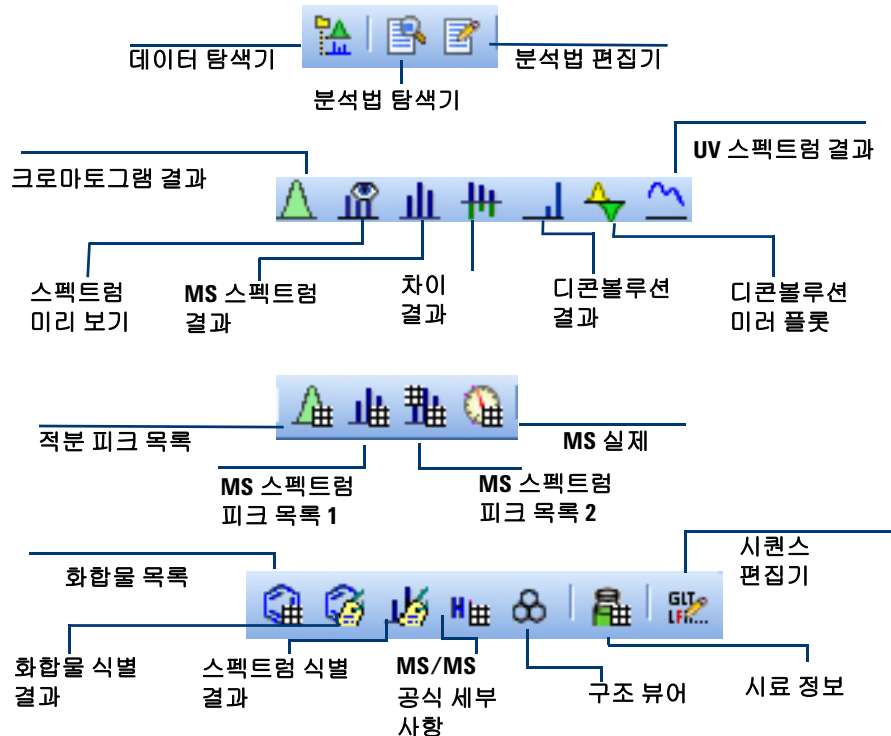
- Structure Viewer(구조 뷰어) - 현재 화합물 또는 스펙트럼과 연관된 구조 표시
- Sample Information(시료 정보) - 강조 표시된 데이터 파일에 대한 정보 표시
- Sequence Editor(시퀀스 편집기) - 분석법 시퀀스 편집 가능

또한 관련 도구의 사용을 시작할 때 표시되는 3 개의 도구 창을 표시할 수도 있습니다.

- Formula Calculator(공식 계산기)
- Mass Calculator(질량 계산기)
- Recalibrate(재검량)

Main Toolbar(기본 도구 모음) 의 창 아이콘

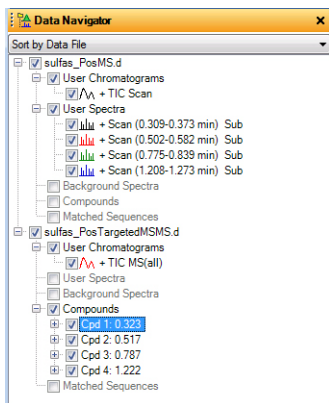
기본 도구 모음에 있는 이들 아이콘으로 창을 열고 닫습니다. MassHunter BioConfirm 소프트웨어가 설치되어 있다면 추가 아이콘들도 볼 수 있습니다. View(보기) 메뉴 안의 명령들을 사용하여 이들 창을 열 수도 있습니다.



Data Navigator(데이터 탐색기) 에서 결과 데이터로 작업

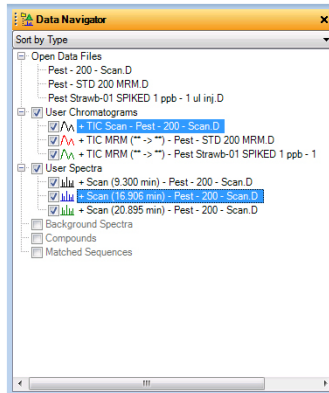
Data Navigator(데이터 탐색기) 창 및 도구

Data Navigator(데이터 탐색기) 는 데이터 파일이나 데이터 유형에 따라 스펙트럼 선택사항과 모든 추출 결과를 정리합니다.



연결된 탐색 아이콘

활성 상태일 때 (기본) Data Navigator(데이터 탐색기) 에서 크로마토그램 하나를 강조 표시하면 해당되는 스펙트럼이 강조 표시됩니다 . 해당되는 크로마토그램과 스펙트럼 그래픽 결과도 강조 표시됩니다 . **Linked Navigation** (연결된 탐색) 은 **Chromatograms Menu** (크로마토그램 메뉴) 에서 **Integrate and Extract Peak Spectra** (크 스펙트럼 적분 및 추출) 메뉴 항목을 사용했거나 화합물 알고리즘을 하나라도 실행한 적이 있을 때만 동작합니다 .



선택 표시 도구

단일 선택 표시 - 강조 표시된 모든 데이터의 확인란을 선택합니다 .

이중 선택 표시 , 회색 1 개 - 강조 표시된 데이터의 확인란을 선택하고 다른 확인란은 선택 해제합니다 .

이중 선택 표시 - 모든 확인란을 표시합니다 .

각각의 확인란이 선택되어 있을 때 해당 크로마토그램 및 스펙트럼이 표시됩니다 .

크로마토그램에서 작동 실행

메뉴 항목들을 사용하여 전체 크로마토그램이나 크로마토그램의 선택한 영역에서 다음 작동을 실행할 수 있습니다.


동작	메뉴 항목
크로마토그램에서 피크 레이블 변경	Configuration(구성) > Chromatogram Display Options(크로마토그램 표시 옵션)
크로마토그램 추출	Chromatograms(크로마토그램) > Extract Chromatograms(크로마토그램 추출)
정의된 크로마토그램 추출	Chromatograms(크로마토그램) > Extract Defined Chromatograms(정의된 크로마토그램 추출)
크로마토그램 적분	Chromatograms(크로마토그램) > Integrate Chromatogram(크로마토그램 적분)
피크 스펙트럼 적분 및 추출	Chromatograms(크로마토그램) > Integrate and Extract Peak Spectra(피크 스펙트럼 적분 및 추출)
피크 스펙트럼 적분 및 디콘볼루션	Chromatograms(크로마토그램) > Integrate and Deconvolute Peak Spectra(피크 스펙트럼 적분 및 디콘볼루션)
크로마토그램 매끄럽게 하기	Chromatograms(크로마토그램) > Smooth Chromatogram(크로마토그램 매끄럽게 하기)
크로마토그램 제외하기	Chromatograms(크로마토그램) > Subtract Any Chromatogram(크로마토그램 제외)
시그널 대 노이즈 계산	Chromatograms(크로마토그램) > Calculate Signal-to-Noise(시그널 대 노이즈 계산)
자동 MS/MS 데이터에서 화합물 찾기	Find(찾기) > Find Compounds by Auto MS/MS(자동 MS/MS 로 화합물 찾기)
대상 MS/MS 데이터에서 화합물 찾기	Find(찾기) > Find Compounds by Targeted MS/MS(대상 MS/MS 로 화합물 찾기)
MS(1) 데이터용 화합물 찾기	Find(찾기) > Find Compounds by Molecular Feature(분자 특징으로 화합물 찾기)
GC/MS 데이터용 화합물 찾기	Find(찾기) > Find Compounds by Chromatogram Deconvolution(크로마토그램 디콘볼루션으로 화합물 찾기)
MRM 데이터용 화합물 찾기	Find(찾기) > Find Compounds by MRM(MRM 으로 화합물 찾기)

MS 또는 MS/MS 스펙트럼에서 작업 수행


동작	메뉴 항목
적분 결과로 화합물 찾기	Find(찾기)> Find Compounds by Integration(적분으로 화합물 찾기)
특정 공식과 일치하는 화합물 찾기	Find(찾기)> Find Compounds by Formula(공식으로 화합물 찾기)

바로 가기 메뉴에서 범위 작업 선택

크로마토그램 범위를 선택했다면 위에서 언급한 작업 및 언급하지 않은 작업 이외에도 스펙트럼을 추출하거나 배경에 스펙트럼을 추출할 수 있습니다.

- 1 이들 작업에 액세스하려면 Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구 모음에 있는 범위 선택 도구 () 를 클릭합니다.
- 2 범위를 시작하려는 지점을 클릭하고 커서를 해당 위에 걸쳐 드래그한 후 놓습니다.
- 3 크로마토그램 안의 아무 곳이나 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 바로 가기 메뉴에서 해당 작업을 클릭합니다.

결과를 데이터 파일에 저장

- **Save(저장)** 아이콘 () 을 클릭하거나 **File(파일)> Save Results(결과 저장)** 를 클릭합니다

프로그램을 종료하면 해당 기능을 꺼두지 않은 경우 (이 기능을 Message Box Options(메시지 상자 옵션) 대화 상자에서 끌 수 있음) 결과를 데이터 파일에 저장할 것인지 묻습니다.

MS 또는 MS/MS 스펙트럼에서 작업 수행

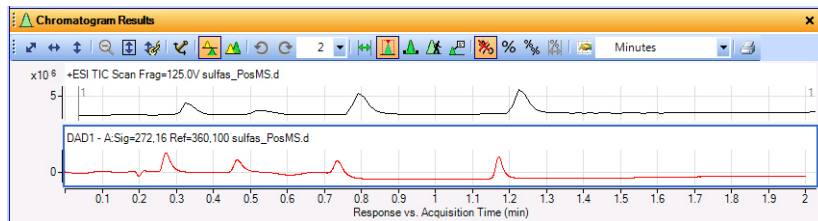
메뉴 항목들을 사용하여 MS 또는 MS/MS 스펙트럼이나 MS 또는 MS/MS 스펙트럼의 선택한 영역에서 다음 작업을 실행할 수 있습니다.

동작	메뉴 항목
m/z 존재비, 전하 상태 및 스펙트럼 내 피크에 대한 기타 정보 보기	View(보기)> MS Spectrum Peak List 1(스펙트럼 피크 목록 1)
스펙트럼 피크 레이블 변경	Configuration(구성)> MS and MS/MS Spectra Display Options(MS 및 MS/MS 스펙트럼 표시 옵션)
배경 스펙트럼 제외	Spectra(스펙트럼)> Subtract Background Spectrum(배경 스펙트럼 제외)

동작	메뉴 항목
스펙트럼 제외	Spectra(스펙트럼) > Subtract Any Spectrum(스펙트럼 제외)(그리고 다른 스펙트럼 클릭)
스펙트럼 2 개 함께 추가	Spectra(스펙트럼) > Add Any Spectrum(모든 스펙트럼 추가)(그리고 다른 스펙트럼 클릭)
스펙트럼 안에서 특정 질량과 일치하는 항목을 데이터베이스에서 검색	Spectra(스펙트럼) > Search Database for Spectrum Peaks(스펙트럼 피크에 대해 데이터베이스 검색)
스펙트럼 안의 선택한 범위에서 질량에 대한 공식 생성	Spectra(스펙트럼) > Generate Formulas from Spectrum Peaks(스펙트럼 피크에서 공식 생성) (MS 스펙트럼에서 범위가 선택되어 있을 때)
분리된 동위원소 알고리즘을 사용하여 디콘볼루션	Spectra(스펙트럼) > Deconvolute(디콘볼루션)(분리된 동위원소)
라이브러리 검색	Identify(식별) > Search Library for Spectra(스펙트럼에 대해 라이브러리 검색) 또는 Spectra(스펙트럼) > Search Library for Spectra(스펙트럼에 대해 라이브러리 검색)

크로마토그램 시각 데이터로 작업

Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 창



Chromatogram Results(크로마토그램 결과) 도구

확대 / 축소 도구
(순서대로)



선택 도구 (순서대로)



이들 도구 중 하나는 항상
선택되어 있어야 합니다.

X 축 및 Y 축 자동 눈금 조절

X 축 자동 눈금 조절

Y 축 자동 눈금 조절

확대 / 축소 취소

확대 / 축소 중에 Y 축 자동 눈금 조절

연결된 Y 축 모드

범위 선택 - 켜져 있으면 작업을 실행하려는 크로마토그램에 대한 범위를 그릴 수 있습니다.

피크 선택 - 켜져 있으면 정점에서 적분된 피크의 스펙트럼을 선택할 수 있습니다.

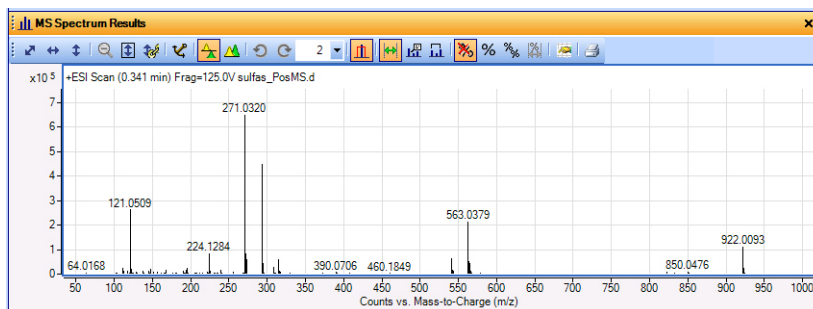
수동 적분 - 켜져 있으면 대화식으로 적분할 수 있습니다.

Walk 크로마토그램 - 켜져 있으면 각 지점을 클릭하거나 키보드의 왼쪽 및 오른쪽 화살표를 클릭할 때 개별 스펙트럼을 볼 수 있습니다.

주석 - 켜져 있으면 크로마토그램에 이미지와 텍스트 주석을 추가할 수 있습니다.

스펙트럼 시각 데이터로 작업

MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 창



MS Spectrum Results(MS 스펙트럼 결과) 도구

확대 / 축소 도구
(순서대로)



X 축 및 Y 축 자동 눈금 조절

X 축 자동 눈금 조절

Y 축 자동 눈금 조절

확대 / 축소 취소

확대 / 축소 중에 Y 축 자동 눈금 조절

연결된 Y 축 모드

선택 도구 (순서대로)



도구 선택을 선택 해
제하려면 다른 도구
나 아이콘을 클릭합
니다 .

범위 선택 - 켜져 있으면 작업을 실행하려는 크로마토그램에 대한 범위를 그릴 수 있습니다 .

주석 - 켜져 있으면 크로마토그램에 이미지와 텍스트 주석을 추가할 수 있습니다 .

캘리퍼 - 켜져 있으면 선택한 스펙트럼에 델타 질량 캘리퍼를 추가할 수 있습니다 . **Deconvolution Results** (디콘볼루션 결과) 창에서 **Amino Acid**(아미노산) 캘리퍼나 **Modifications**(수정) 캘리퍼를 추가할 수 있습니다 . 추가 정보는 온라인 도움말을 참조하십시오 .

워크플로

워크플로를 통해 적용 상황에 맞게 사용자 인터페이스를 사용자 지정할 수 있습니다 . 각 워크플로는 해당 워크플로에 대해 적절한 파라미터가 있는 각기 다른 분석법을 로드합니다 . 또한 각 워크플로는 각기 다른 레이아웃을 로드하며 , 이들 레이아웃에는 각 표에 표시된 열들의 사용자 지정이 포함됩니다 . 마지막으로 4 개의 레이아웃은 또한 분석법 편집기 안에 해당 워크플로에 중요한 부분들의 사본이 포함된 특별한 분석법 편집기 부분을 가합니다 . 특정 워크플로에 사용되는 기능들을 하나로 그룹화하면 분석법을 쉽게 사용자 지정할 수 있습니다 .

정성 분석 프로그램에는 몇 가지 다양한 워크플로를 이용할 수 있습니다 . 이들은 다음과 같습니다 .

- 일반

- BioConfirm - 이들 워크플로는 BioConfirm 소프트웨어가 설치되어 있고 User Interface Configuration(사용자 인터페이스 구성) 대화 상자에 선택되어 있을 때만 사용 가능합니다 . BioConfirm 에는 실행하고자 하는 분석 유형에 따라 몇 가지 가능한 워크플로가 있습니다 . BioConfirm 은 LC/MS 데이터 파일과 함께 사용됩니다 .
- 크로마토그램 피크 조사
- 공식 확인 및 시료 순도
- MS 대상 성분 스크리닝
- GC/Q-TOF 성분 스크리닝

GC/MS 데이터로 작업할 때는 General(일반) 워크플로나 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 워크플로를 선택할 수 있습니다 . LC/MS 데이터로 작업 때는 GC/Q-TOF Compound Screening(GC/Q-TOF 성분 스크리닝) 을 제외한 모든 워크플로를 선택할 수 있습니다 .

특정 분석법

각 워크플로는 해당 워크플로에 대한 적절한 설정이 있는 특정 기본 분석법을 로드합니다 . 예를 들어 BioConfirm 워크플로 중 하나로 전환하면 , Find Compounds by Molecular Feature(분자 특징으로 화합물 찾기) 알고리즘에 대한 Target data type(대상 데이터 유형) 이 Large molecules(큰 분자)(단백질 , 올리고) 로 설정됩니다 . 이 설정은 BioConfirm 워크플로에 대해서는 적합하지만 기본적으로 다른 워크플로에 대해서는 적합하지 않습니다 .

특정 레이아웃

또한 각 워크플로는 특정 레이아웃을 로드합니다. 레이아웃은 다음으로 구성되어 있습니다.

- 각 창의 위치 및 크기
- 어떤 창이 탭 되었는지
- 어떤 창이 유통인지
- 어떤 탭 창이 위에 있는지
- 어떤 창이 기본적으로 보이는지
- 상태 표시줄이 보이는지

각 플롯 창 (크로마토그램 결과 창, 스펙트럼 미리 보기 창, MS 스펙트럼 결과 창, 디콘블루션 창 및 UV 결과 창)에 대해 다음이 저장됩니다.

- 그래픽이 오버레이되었는지 여부
- 확대 / 축소 모드 시 Y 축 자동 눈금 조절이 켜져 있는지 여부
- 연결된 Y 축 모드가 켜져 있는지 여부

각 표 창에 대해 다음이 저장됩니다.

- 어떤 열이 보이는지
- 열의 순서
- 각 열의 너비
- 표에 추가된 필터 (화합물 목록 표, 화합물 식별 결과 표 및 스펙트럼 식별 결과 창에만 사용 가능)

분석법 탐색기 및 분석법 편집기 내의 특정 부분

Method Editor(분석법 편집기) 와 General(일반) 워크플로를 사용하여 Method(분석법) 안에서 거의 모든 파라미터를 변경할 수 있습니다.

다른 4 개의 워크플로는 각각 Method Explorer(분석법 탐색기)에서 사용 가능한 부분들을 변경합니다. 각각의 새로운 부분에는 해당 워크플로에서 유용한 Method Editor(분석법 편집기) 탭 및 부분만 포함되어 있습니다. 워크플로 부분 내에서 파라미터를 변경하면 일반 Method Editor(분석법 편집기) 부분에서 당 부분에 있는 파라미터도 변경됩니다.

2 개의 탭은 일반 Method Editor(분석법 편집기) 부분에서 반복되지 않습니다 .
Chromatogram Peak Survey Workflow(크로마토그램 피크 조사 워크플로) > Spectrum Peak Identification(스펙트럼 피크 식별) 부분 및 **Chromatogram Peak Survey Workflow(크로마토그램 피크 조사 워크플로) > Chromatogram Extraction(크로마토그램 추출) > Chromatograms(크로마토그램)** 탭은 Chromatogram Peak Survey(크로마토그램 피크 조사) 워크플로 안에만 포함되어 있습니다 . 이들 부분은 Chromatogram Peak Survey(크로마토그램 피크 조사) 알리즘에만 영향이 있습니다 . 이 알고리즘은 이 워크플로 , **Chromatogram Peak Survey without Report(보고서 없이 크로마토그램 피크 조사)** 작업 및 **Chromatogram Peak Survey with Analysis Report(분석 보고서와 함께 크로마토그램 피크 조사)** 작업에서만 사용됩니다 .

워크플로 분석법 및 레이아웃

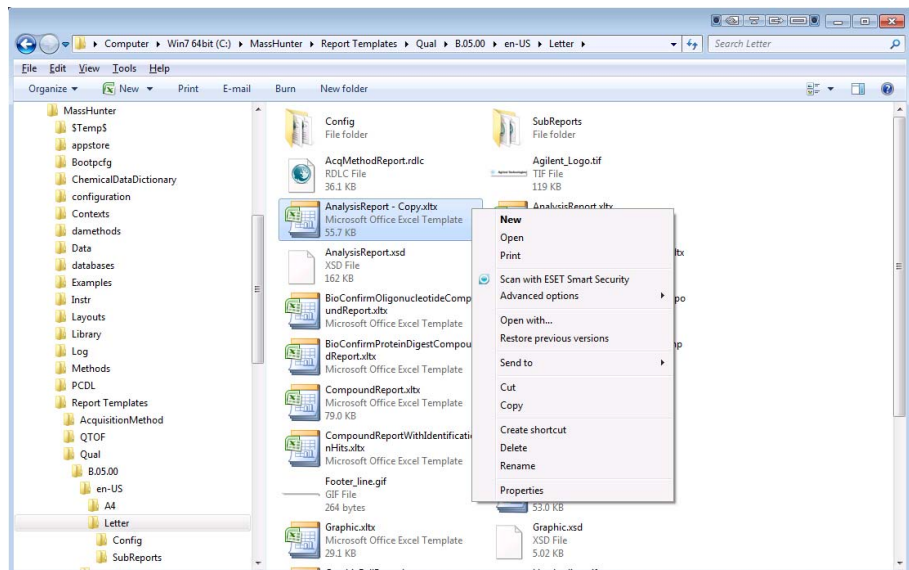
각 워크플로에 대해 추가 기본 분석법 및 레이아웃이 제공됩니다 .

워크플로	분석법	레이아웃	분석법 편집기 선택
일반	default.m	Default.xml	없음
BioConfirm 원형 단백질	BioConfirm IntactProtein-Default.m	BioConfirm-IntactProtein-MaximumEntropy-Default.xml	BioConfirm 워크플로
BioConfirm 고질량 원형 단백질	BioConfirm IntactProtein HighMass Default.m	BioConfirm IntactProtein LMFE.xml	BioConfirm 워크플로
BioConfirm 소형 올리고핵산염	BioConfirmOligo nucleotideSmall.m	BioConfirmOligo-nucleotide.xml	BioConfirm 워크플로
BioConfirm 대형 올리고핵산염	BioConfirmOligo nucleotideLarge-Default.m	BioConfirmOligo-nucleotide.xml	BioConfirm 워크플로
BioConfirm 단백질 소화	BioConfirmProtein Digest-Default.m	BioConfirm ProteinDigest.xml	BioConfirm 워크플로
BioConfirm 합성 펩티드	BioConfirmSynthetic Peptide-Default.m	BioConfirm SyntheticPeptide.xml	BioConfirm 워크플로
크로마토그램 피크 조사	ChromPeakSurvey-Default.m	Default.xml	크로마토그램 피크 조사 워크플로
공식 확인 및 시료 순도	SamplePurity-Default.m	SamplePurity-Default.xml	공식 확인 및 시료 순도 워크플로
MS 대상 성분 스크리닝	Screening-Default.m	Screening-Default.xml	MS 대상 성분 스크리닝 워크플로
GC Q-TOF 성분 스크리닝	GC_Q-TOF.m	QTOFData.xml	GC/Q-TOF 성분 스크리닝

보고서 템플릿 사용자 지정

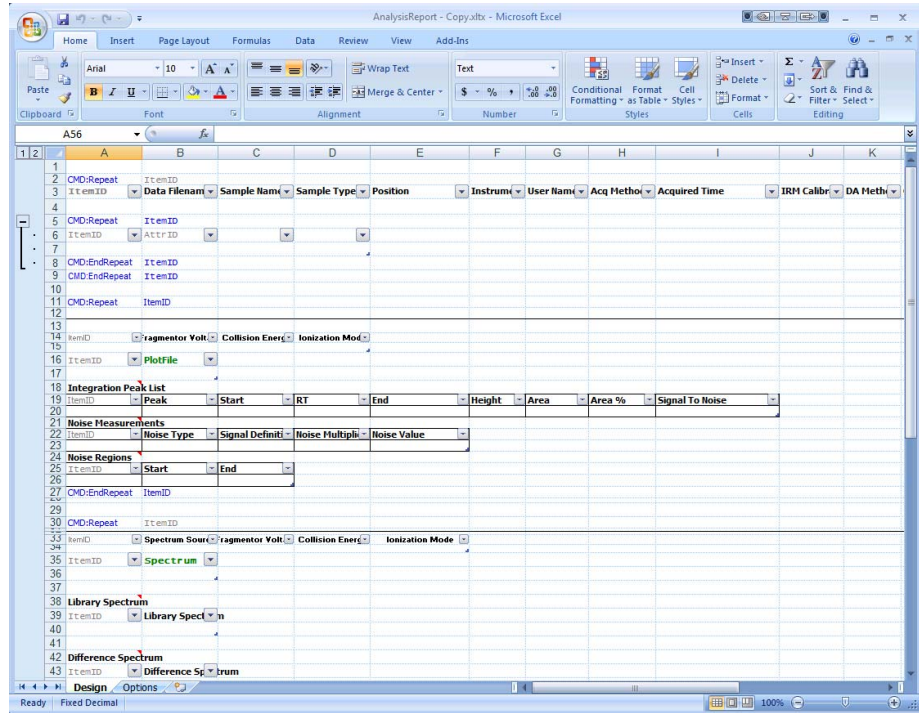
보고서 템플릿을 수정하는 방법에 대한 자세한 정보는 **MassHunter Report Designer Add-in** 온라인 도움말, **Report Designer Familiarization Guide**(보고서 디자이너 기초 설명서) 또는 **Reporting Training**(보고 학습) DVD 에서 참조하십시오 . 다음 단계들을 통해 템플릿 사용자 지정에 대해 간단히 살펴볼 수 있습니다 .

- 1 해당 보고서 템플릿이 들어 있는 폴더로 이동합니다 . 기본적으로 이 폴더는 **\MassHunter\Report Templates\Qual\B.05.00\en-US\Letter** 입니다 . **General**(일반) > **Common Reporting Options**(일반 보고 옵션) > **Templates**(템플릿) 탭에서 다른 폴더를 선택할 수 있습니다 .
- 2 수정하고자 하는 템플릿의 사본을 만드십시오 . 해당 사본을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 **Properties**(등록 정보) 를 클릭합니다 . 필요하다면 **Read-only**(읽기 전용) 확인란을 선택 해제합니다 . 그런 다음 해당 사본을 마우스 오른쪽 단추로 클릭하고 바로 가기 메뉴에서 **Open**(열기) 을 클릭합니다 .



이 방식으로 템플릿을 열면 **Excel** 에서 이 파일이 템플릿 파일인지 파악할 수 있습니다 . 템플릿이 열려 있을 때 머리글 및 바닥글을 수정하고 파악미 열을 추가, 제거 또는 이동할 수 있습니다 . 추가 정보는 온라인 도움말을 참조하십시오 . 모든 **Qualitative Analysis**(정성 분석) 템플릿은 **Read-only**(읽기 전용) 로 표시되어 있습니다 . 템플릿을 편집하기 전에 이 등록 정보를 변경할 수 있습니다 .

많은 템플릿이 **Qualitative Analysis**(정성 분석) 프로그램과 함께 설치되어 있습니다 . 각 보고서 템플릿의 내용에 대한 추가 정보는 **Qualitative Analysis**(정성 분석) 온라인 도움말을 참조하십시오 .



3 원하는 대로 변경합니다.

템플릿 수정 방법에 관한 추가 정보는 MassHunter Report Designer add-in의 온라인 도움말이나 *Agilent MassHunter Reporting - Training DVD*에서 참조하십시오.

4 새로운 템플릿을 저장하려면 Microsoft Office 단추에서 **Save(저장)**를 클릭하거나 **Save As(다른 이름으로 저장) > Other Formats(기타 형식)**를 클릭합니다.

5 이름을 입력하고 **Save(저장)**를 클릭합니다.

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

www.agilent.com

이 책에는

이 안내서에는 Agilent
MassHunter 워크스테이션
소프트웨어 - LC/MS 데이터
로 정성 분석을 사용하는 방
법에 대한 정보를 포함하고
있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2012

개정 A, 2012 년 11 월



G3335-99147



Agilent Technologies