



Agilent MassHunter ワークステーションソフトウェア

定量分析

Quant My Way ファミリアリゼーションガイド

注意

© Agilent Technologies, Inc. 2021

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

マニュアル番号

G3336-96057

エディション

第1版 2021年11月

Printed in USA

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

保証

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

技術ライセンス

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

権利の制限

米国政府の制限付き権利について：連邦政府に付与されるソフトウェアおよび技術データに係る権利は、エンドユーザーのお客様に通例提供されている権利に限定されています。Agilent は、ソフトウェアおよび技術データに係る通例の本商用ライセンスを、FAR 12.211 (Technical Data) および 12.212 (Computer Software)、並びに、国防総省に対しては、DFARS 252.227-7015 (Technical Data -Commercial Items) および DFARS 227.7202-3 (Rights in Commercial Computer Software or Computer Software Documentation) の規定に従い提供します。

安全にご使用いただくために

注意

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

警告

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

目次

はじめに

定量分析のデスクトップアイコン **6**

実習を開始する前に **6**

実習 1：MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 1. 新規バッチの作成 **8**

タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する **11**

タスク 3. ターゲット化合物の設定 **14**

タスク 4. 定量の設定 **16**

タスク 5. インテグレータの設定 **21**

タスク 6. バッチの解析と保存 **23**

実習 2：Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 1. 新規バッチの作成 **27**

タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する **30**

タスク 3. ターゲット化合物の設定 **34**

タスク 4. 定量の設定 **35**

タスク 5. バッチの解析と保存 **37**

実習 3：定量結果のレビュー

タスク 1. バッチテーブル結果のナビゲーション **40**

タスク 2. 結果ウィンドウレイアウトの変更 **44**

タスク 3. 結果のエクスポートと印刷 **50**

実習 4：3つのツールを使用した結果の評価

タスク 1. 検量線の変更 **54**

タスク 2. パラメータを用いない積分 **57**

タスク 3. 外れ値の検出 **71**

実習 5：定量レポートの作成

リファレンス

10 の主要機能	86
定量メソッド	90
パラメータレス積分	91
バッチ一覧: 結果	93
化合物クロマトグラムの一覧	94
化合物の確認	96
化合物キャリブレーション	98

はじめに

定量分析のデスクトップアイコン 6

実習を開始する前に 6

1 はじめに 定量分析のデスクトップアイコン

定量分析のデスクトップアイコン

定量分析では、**クラシック**タイプのユーザーインターフェイスと **Quant-My-Way** タイプのユーザーインターフェイスのデスクトップアイコンを使用できます。クラシックユーザーインターフェイスは、従来の定量分析のユーザーインターフェイスと同様の外観と使い勝手で、メニューバーにツールとオプションがあります。**Quant-My-Way** ユーザーインターフェイスには、リボンがあり、メニューバーではなくタブとリボンにツールとオプションがあります。**クラシック**ユーザーインターフェイスのデスクトップアイコン、**Quant-My-Way** ユーザーインターフェイスのデスクトップアイコン、または両方を組み合わせて選択し、インストールすることが可能です。

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

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

この『ファミリアリゼーションガイド』では、**Quant-My-Way** ユーザーインターフェイスを使用して説明しています。

実習を開始する前に

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

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

実習 1：MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

- タスク 1. 新規バッチの作成 8
- タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する 11
- タスク 3. ターゲット化合物の設定 14
- タスク 4. 定量の設定 16
- タスク 5. インテグレータの設定 21
- タスク 6. バッチの解析と保存 23


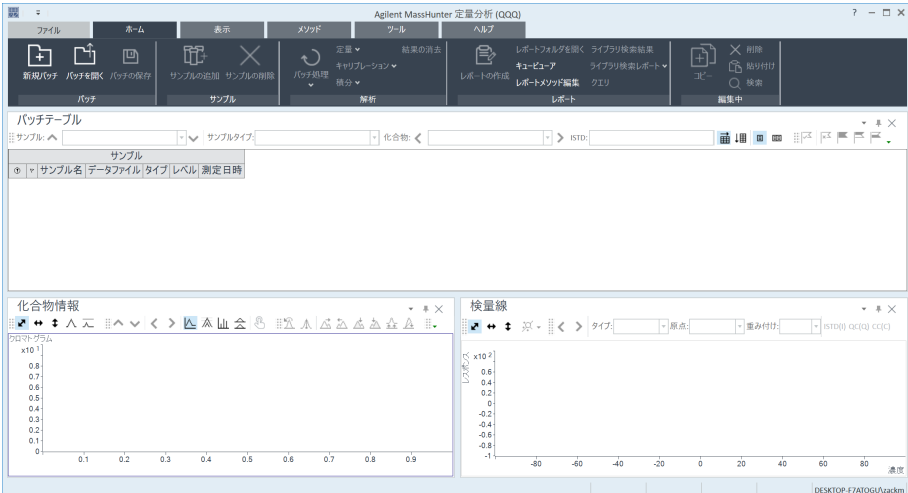
この実習では、測定したデータファイルを使用して定量メソッドを設定します。**DrugsOfAbuse** データファイルを用いて実習を行い（6 ページの「**実習を開始する前に**」を参照）、以下のタスクの実施方法を学習します。

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

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

タスク 1. 新規バッチの作成

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

- 1 デスクトップの **QQQ 定量分析** アイコン  をクリックして、定量分析プログラムを開始します。
プログラムを初めて使用する場合、 のようにデフォルトレイアウトが表示されます。

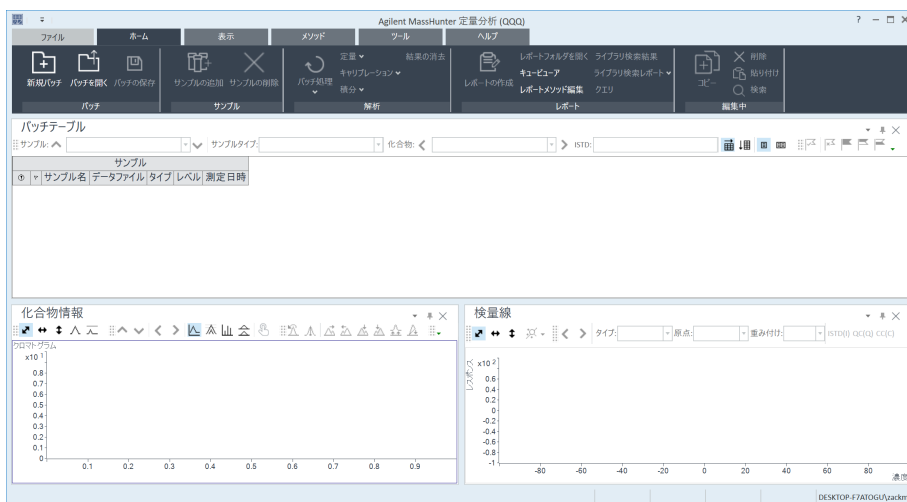


図 1. デフォルトレイアウト

スタートメニューから **Agilent MassHunter Quantitative > 定量分析 (QQQ) (Quant-My-Way)** をクリックしてプログラムにアクセスすることもできます。

QQQ データ向けの機能を使用できます。

デフォルトレイアウトが表示されない場合、新規バッチを作成する前に **[表示]** タブの **[デフォルトレイアウトの復元]** をクリックします。

デフォルトレイアウトの復元

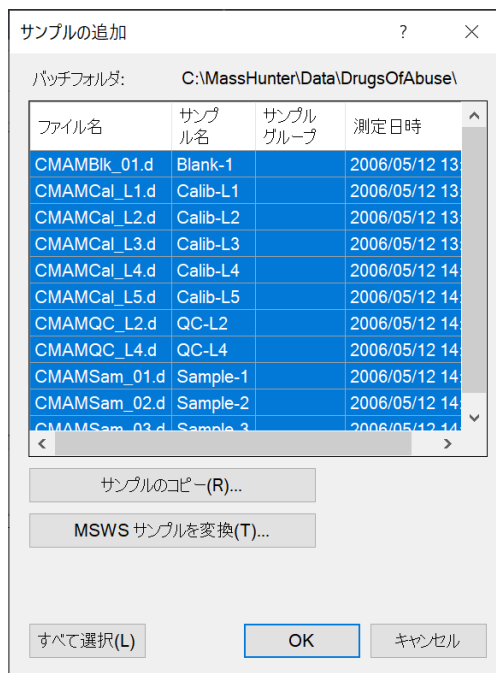
- 2 **[ファイル]** > **[新規バッチ]** をクリックします。**[新規バッチ]** ダイアログボックスが開きます。

2 実習 1 : MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 1. 新規バッチの作成

- 3 フォルダ `\Your Directory\DrugsOfAbuse\` に移動します。
- 4 バッチファイル名として「`iii_Test_01`」を入力し、**[バッチ作成]** をクリックします。
- 5 **[すべて選択]** をクリックします。**[OK]** をクリックしてサンプルをバッチに追加します。

これで、**[バッチテーブル]** は空ではなくなります。この段階で、キャリブレーションサンプル、QC サンプル、未知サンプルがバッチに含まれます。図 2 を参照してください。



2 実習 1：MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 1. 新規バッチの作成

未知サンプルは 3 つのファイルのみで、1 つはブランクサンプル、5 つは異なるレベルのキャリブレーションファイル、2 つは QC サンプルのファイルです。

The screenshot shows the Agilent MassHunter software interface. The main window is titled "Agilent MassHunter 定量分析 (QQQ) - DrugsOfAbuse - iii_Test_01.batch.bin". The "Batch Table" (バッチテーブル) is the central focus, displaying a list of samples. The table has the following columns: Sample Name (サンプル名), Data File (データファイル), Type (タイプ), Level (レベル), and Measurement Time (測定日時). The samples listed are:

サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時
Blank-1	CMAMBk_01.d	ブランク		2006/05/12 13:48
Calib-L1	CMAMCal_L1.d	キャリブレーション	L1	2006/05/12 13:51
Calib-L2	CMAMCal_L2.d	キャリブレーション	L2	2006/05/12 13:54
Calib-L3	CMAMCal_L3.d	キャリブレーション	L3	2006/05/12 13:57
Calib-L4	CMAMCal_L4.d	キャリブレーション	L4	2006/05/12 14:00
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	キャリブレーション	L5	2006/05/12 14:03
QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	2006/05/12 14:06
QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	2006/05/12 14:09
Sample-1	CMAMSam_01.d	サンプル		2006/05/12 14:12
Sample-2	CMAMSam_02.d	サンプル		2006/05/12 14:15

Below the table, there are two empty plots: "Compound Information" (化合物情報) on the left and "Check Line" (検量線) on the right. The status bar at the bottom indicates "11 サンプル(合計 11) | DESKTOP-FZATOGU\zackm".

図 2. 定量前の DrugsOfAbuse サンプルのバッチテーブル

2 実習 1 : MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

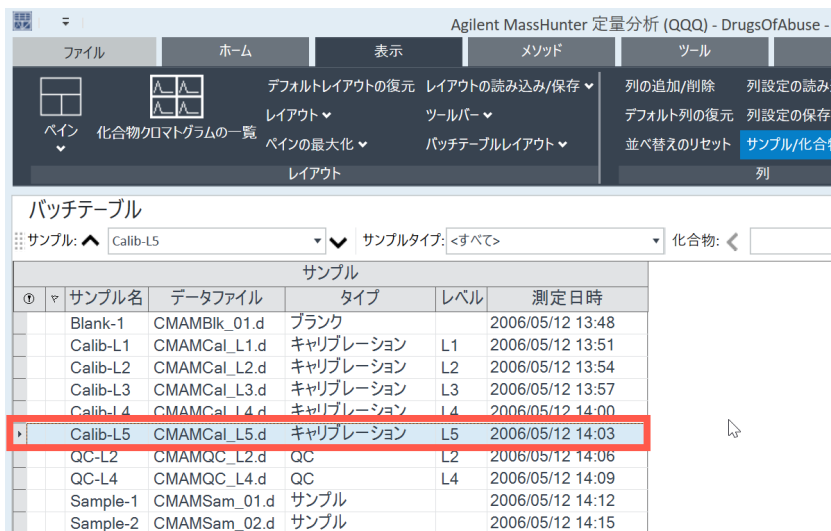
タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する

タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する

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

- 1 カーソルを用いて、下図のように濃度レベルの最も高いキャリブレーションサンプルを強調表示させます。

高濃度キャリブレーションサンプル等の、化合物に対してシグナル強度の高いサンプルを用いることで、適正なりテンションタイムとクオリフィア比がメソッドへ設定されるようにします。



The screenshot shows the Agilent MassHunter software interface. The top menu bar includes 'ファイル', 'ホーム', '表示', 'メソッド', and 'ツール'. Below the menu is a toolbar with icons for 'ペイン', '化合物クロマトグラムの一覧', 'レイアウト', 'ツールバー', and 'バッチテーブルレイアウト'. The main window displays the 'バッチテーブル' (Batch Table) with the following data:

サンプル						
①	▼	サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時
		Blank-1	CMAMBIk_01.d	ブランク		2006/05/12 13:48
		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	キャリブレーション	L1	2006/05/12 13:51
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	キャリブレーション	L2	2006/05/12 13:54
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	キャリブレーション	L3	2006/05/12 13:57
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	キャリブレーション	L4	2006/05/12 14:00
		Calib-L5	CMAMCal_L5.d	キャリブレーション	L5	2006/05/12 14:03
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	2006/05/12 14:06
		QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	2006/05/12 14:09
		Sample-1	CMAMSam_01.d	サンプル		2006/05/12 14:12
		Sample-2	CMAMSam_02.d	サンプル		2006/05/12 14:15

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

2 [メソッド] タブで、[編集] をクリックします

メソッドタスクが、**図 3** のようにビューの左側に表示されます。

図 3 はメソッド編集のデフォルトレイアウトを示しています。

デフォルトレイアウトが表示されない場合、新規バッチを作成する前に [表示] タブの [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。

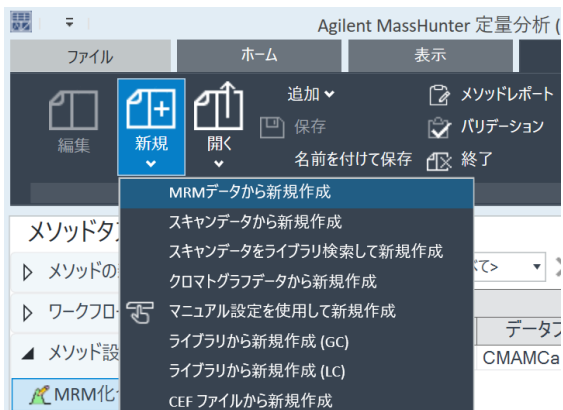
図 3. メソッド編集モード

2 実習 1 : MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

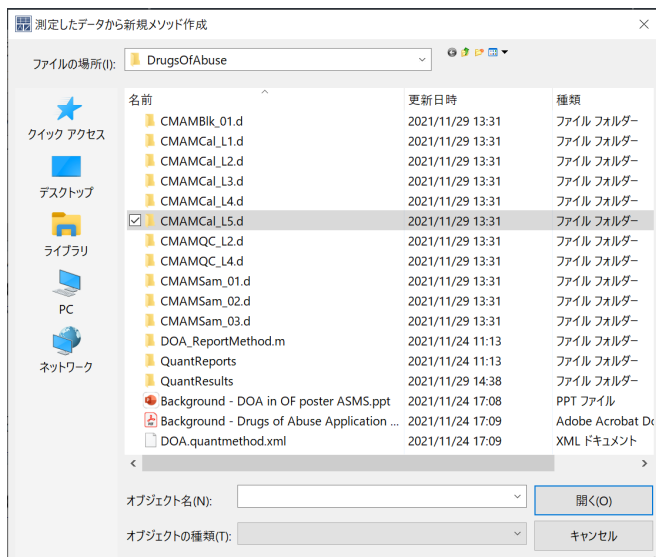
タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する

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

または、メソッドタブから [新規作成] > [MRM データから新規作成] を選択します。



- 4 [メソッドファイルに変更内容を保存しますか?] で [いいえ] を選択します。[測定したデータから新規メソッド作成] ダイアログが表示されます。
- 5 CMAMCaL5.d をクリックし、[開く] をクリックして、測定メソッド情報をインポートします。



2 実習1：MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量 タスク3. ターゲット化合物の設定

タスク3. ターゲット化合物の設定

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

1 [メソッドテーブル] ウィンドウの左側のサイドバーのメソッドタスクで、[メソッド設定タスク] > [MRM化合物の設定] をクリックします。

測定メソッドにはMRMトランジションに関連する化合物名が入力されています。デフォルトでは、最大シグナルが定量イオンとして選択されます。

The screenshot shows the 'Method Table' window. In the left sidebar, 'MRM Compound Settings (M)' is highlighted with a red box. The main table displays the following data:

化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	プリカーサイオン	プロダクトイオン	RT	イオン極性
Amp	1 136.2	-> 91.4	MRM	ターゲット	136.2	91.4	2.102	ポジティブ
Amp-d5	1 141.1	-> 93.4	MRM	ISTD	141.1	93.4	2.078	ポジティブ
Cocaine	1 304.1	-> 182.0	MRM	ターゲット	304.1	182.0	2.449	ポジティブ
Cocaine-d3	1 307.1	-> 185.0	MRM	ISTD	307.1	185.0	2.450	ポジティブ
MDMA	1 194.2	-> 163.3	MRM	ターゲット	194.2	163.3	2.269	ポジティブ

2 インポートされたリテンションタイムを確認するには、[メソッド設定タスク] > [リテンションタイムの設定] をクリックします。

各化合物の水色のデータフィールドは変更することが可能です。

The screenshot shows the 'Method Table' window with 'Retention Time Settings (R)' highlighted in the sidebar. The main table displays the following data:

化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	RT	RT左デルタ	RT右デルタ	RTデルタ単位
Amp	1 136.2	-> 91.4	MRM	ターゲット	2.102	1.000	1.000	分
Amp-d5	1 141.1	-> 93.4	MRM	ISTD	2.078	1.000	1.000	分
Cocaine	1 304.1	-> 182.0	MRM	ターゲット	2.449	1.000	1.000	分
Cocaine-d3	1 307.1	-> 185.0	MRM	ISTD	2.450	1.000	1.000	分

2 実習 1 : MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 3. ターゲット化合物の設定

3 各ターゲット化合物の内部標準 (ISTD) として、対応する重水素化化合物を割り当てます。

a [メソッド設定タスク] > [ISTD の設定] をクリックします。

b 各ターゲット化合物行で、[ISTD 化合物名] セルの下矢印をクリックします。ISTD 化合物行に ISTD 名を直接入力することはできません。

化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	ISTD 化合物名	ISTD フラグ	ISTD 濃度	タイムリファレンス フラグ
Amp	1 136.2 -> 91.4	MRM	ターゲット	<なし>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>	
Amp-d5	1 141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	<なし>	<input checked="" type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>	
Cocaine	1 304.1 -> 182.0	MRM	ターゲット	<なし>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>	
Cocaine-d3	1 307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	<なし>	<input checked="" type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>	
MDMA	1 194.2 -> 163.3	MRM	ターゲット	<なし>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>	

c ターゲット化合物に対応する ISTD 名をクリックします。

d 各 ISTD 化合物の [ISTD 濃度] を入力します (この例では 50.0000)。

化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	ISTD 化合物名	ISTD フラグ	ISTD 濃度	タイムリファレンス フラグ
Amp	1 136.2 -> 91.4	MRM	ターゲット	Amp-d5	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>	
Amp-d5	1 141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	<なし>	<input checked="" type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>	
Cocaine	1 304.1 -> 182.0	MRM	ターゲット	Cocaine-d3	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>	
Cocaine-d3	1 307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	<なし>	<input checked="" type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>	
MDMA	1 194.2 -> 163.3	MRM	ターゲット	MDMA-d5	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>	
MDMA-d5	1 199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	<なし>	<input checked="" type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>	
Meth	1 150.1 -> 119.3	MRM	ターゲット	MDMA-d5	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>	
Meth-d5	1 155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	<なし>	<input checked="" type="checkbox"/>	50.0000	<input type="checkbox"/>	

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

タスク4. 定量の設定

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

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

1 [メソッド] タブから [検量線] > [キャリブレーションサンプルからレベルを作成] を選択します。

メソッドテーブルの各定量対象化合物の下に [キャリブレーション] テーブルが開きます。

2 いずれかの定量対象化合物のデフォルト濃度を、各レベルの実際の濃度に変更します。

- L1-2.5000
- L2-5.0000
- L3-12.5000
- L4-25.0000
- L5-125.0000

サンプル	データファイル	タイプ	レベル	測定メソッドファイル	測定日時
CMAMCal_L5.d	CMAMCal_L5.d				
定量対象化合物					
化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	単位
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	ターゲット	ng/ml
キャリブレーション					
レベル	濃度	レスポンス	有効		
L1	2.5000		<input checked="" type="checkbox"/>		
L2	5.0000		<input checked="" type="checkbox"/>		
L3	12.5000		<input checked="" type="checkbox"/>		
L4	25.0000		<input checked="" type="checkbox"/>		
L5	125.0000		<input checked="" type="checkbox"/>		
L2	2.0000		<input type="checkbox"/>		

3 定量対象化合物テーブルで右クリックして、[キャリブレーションレベルのコピー] を選択します。

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

[キャリブレーションレベルのコピー] ダイアログボックスが表示されます。

- 4 [すべて選択] をクリックした後、[OK] をクリックします。



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

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

- 6 [メソッドテーブル] を参照して、4つのターゲット化合物（アンフェタミン (Amp)、コカイン (Cocaine)、メタンフェタミン (Meth)、MDMA）のキャリブレーション濃度設定を確認します。

The screenshot shows the Agilent MassHunter software interface. The main window displays the 'Method Table' for the compound 'Cocaine'. The table is organized into several sections: 'Sample', 'Quantification Compound', and 'Calibration'. The 'Calibration' section is highlighted with a red box, showing the following data:

レベル	濃度	レスポンス	有効
L1	2.5000		<input checked="" type="checkbox"/>
L2	5.0000		<input checked="" type="checkbox"/>
L3	12.5000		<input checked="" type="checkbox"/>
L4	25.0000		<input checked="" type="checkbox"/>
L5	125.0000		<input checked="" type="checkbox"/>
L2	2.0000		<input checked="" type="checkbox"/>
L4	4.0000		<input checked="" type="checkbox"/>

A red arrow points from the text 'Cocaine, MDMA, METH にコピーされています' to the highlighted calibration table. The software interface also shows a 'Quantification Compound' table with columns for 'Compound Name', 'TS', 'Transition', 'Measurement Mode', 'Type', and 'Unit'. The 'Cocaine' entry is highlighted in blue.

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

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

クオリファイア設定パラメータは、MRM 測定情報をインポートした際に自動的に入力されます。

メソッド作成時に、化合物の定量イオンに対する追加の MRM トランジションがクオリファイアイオンとして割り当てられます。

メソッド設定タスク

メソッドテーブル

サンプル	データファイル	タイプ	レベル	測定メソッドファイル	測定日時		
CMAMCal LS.d	CMAMCal LS.d						
定量対象化合物							
化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	プリカーイオン	プロダクトイオン	許容範囲
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	ターゲット	136.2	91.4	相対
クオリファイア							
プリカーイオン	プロダクトイオン	トランジション	相対レスポンス	許容範囲	面積和		
136.2	119.4	136.2 -> 119.4	28.3	20.0			
定量対象化合物							
化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	プリカーイオン	プロダクトイオン	許容範囲
Amp-d5	1	141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	141.1	93.4	相対
Cocaine	1	304.1 -> 182.0	MRM	ターゲット	304.1	182.0	相対
クオリファイア							
プリカーイオン	プロダクトイオン	トランジション	相対レスポンス	許容範囲	面積和		
304.1	82.0	304.1 -> 82.0	3.8	20.0			
定量対象化合物							
化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	プリカーイオン	プロダクトイオン	許容範囲
Cocaine-d3	1	307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	307.1	185.0	相対
クオリファイア							
プリカーイオン	プロダクトイオン	トランジション	相対レスポンス	許容範囲	面積和		
307.1	85.0	307.1 -> 85.0	3.7	20.0			
定量対象化合物							
化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	プリカーイオン	プロダクトイオン	許容範囲

8 [メソッド設定タスク] の下の [検量線の設定] をクリックします。

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

9 各ターゲット化合物の [検量線原点] を [強制通過] に変更します。

サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定メソッドファイル	測定日時		
CMAMCal_L5.d	CMAMCal_L5.d						
定量対象化合物							
化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	CF	検量線原点	検量線重み付け
Amp	1 136.2 -> 91.4	MRM	ターゲット	直線	強制通過	なし	
Amp-d5	1 141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	直線	強制通過	なし	
Cocaine	1 304.1 -> 182.0	MRM	ターゲット	直線	強制通過	なし	
Cocaine-d3	1 307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	直線	強制通過	なし	
MDMA	1 194.2 -> 163.3	MRM	ターゲット	直線	強制通過	なし	
MDMA-d5	1 199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	直線	強制通過	なし	
Meth	1 150.1 -> 119.3	MRM	ターゲット	直線	強制通過	なし	
Meth-d5	1 155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	直線	強制通過	なし	

10 [保存 / 終了] の下の [バリデーション] をクリックし、メソッド設定を検証します。画面下に、発生したバリデーションエラーが表示されます。

11 バリデーションメッセージが表示されたら、[OK] をクリックします。

12 [保存 / 終了] > [終了] をクリックします。

13 [メソッド適用後のバッチ処理オプション] で [なし] を選択し、[このメソッドをバッチに適用しますか?] というメッセージで [はい] をクリックします。

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

タスク 5. インテグレータの設定

ステップ 1：デフォルトのインテグレータを MS-MS に変更

MassHunter 定量プログラムのデフォルトのインテグレータは、Agilent が推奨する Agile2 パラメーターレスインテグレータです。このタスクでは、定量メソッドのすべての化合物に対するインテグレータの変更手順を示します。デフォルトの Agile2 インテグレータを MS-MS インテグレータに変更します。

- 1 [メソッド] タブで、[編集] をクリックします。
- 2 [詳細タスク] > [積分パラメータの設定] を選択します。
- 3 [メソッドテーブル] で、[インテグレータ] 値の右側にあるボックスをクリックします。



サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定メソッドファイル	測定日時
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	キャリブレーション	L5	APC1autotune.m	2006/05/12...

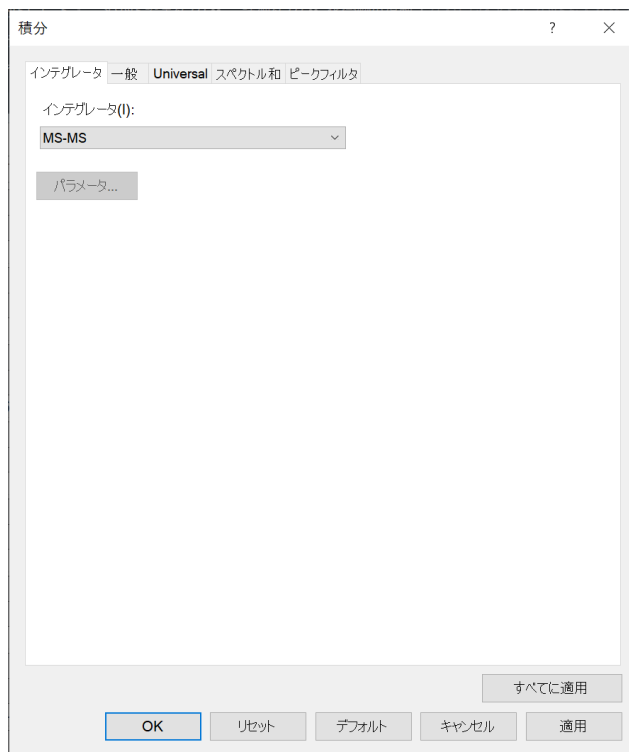
化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	RT	インテグレータ	積分パラメータ
Amp	1	136.2 -> 91.4	MRM	ターゲット	2.102	Agile2	...

化合物名	プロトタイプ	トランジション	相対レスポンス	許容範囲	積分パラメータ
プリカーサイオン	136.2	119.4 136.2 -> 119.4	28.3	20.0	

2 実習 1 : MRM データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 5. インテグレータの設定

4 ドロップダウンメニューから **[MS-MS]** を選択します。



5 **[すべてに適用]** をクリックします。

6 **[OK]** をクリックします。

7 **[保存 / 終了]** > **[終了]** をクリックします。

8 **[メソッド適用後のバッチ処理オプション]** で **[なし]** を選択し、**[このメソッドをバッチに適用しますか?]** というメッセージで **[はい]** をクリックします。

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

タスク6. バッチの解析と保存

この実習では、バッチを定量し、結果を保存します。

- 1 [ホーム] タブで、[バッチ処理] をクリックします。
- 2 Sample-1 の定量メッセージの上にカーソルを動かします。
- 3 最初の2つのキャリブレーションサンプルのフラグの上にカーソルを動かします。

2つのキャリブレーションサンプルには外れ値データが含まれていることを確認してください。

プログラムにより、Sample-1 の中にアンフェタミン (Amp) が検出されなかったことを確認してください。

バッチテーブル

サンプル: ▲ Calib-L5 ▼ サンプルタイプ: <すべて> ▼ 化合物: < Amp

サンプル							Ampメソ...		
①	▼	サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時	予測濃度	RT	レス
	▼	Blank-1	CMAMBik_01.d	ブランク		2006/05/12 13:48			
	▼	Calib-L1	CMAMCal_L1.d	キャリブレーション	L1	2006/05/12 13:51	2.5000	2...	
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	キャリブレーション	L2	2006/05/12 13:54	5.0000	2...	
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	キャリブレーション	L3	2006/05/12 13:57	12.5000	2...	
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	キャリブレーション	L4	2006/05/12 14:00	25.0000	2...	
	▶	Calib-L5	CMAMCal_L5.d	キャリブレーション	L5	2006/05/12 14:03	125.0000	2...	
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	2006/05/12 14:06	5.0000	2...	
		QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	2006/05/12 14:09	25.0000	2...	
	▼	Sample-1	CMAMSam_01.d	サンプル		2006/05/12 14:12		2...	
		Sample-2	CMAMSam_02.d	サンプル		2006/05/12 14:15		2...	

外れ値フラグ
メッセージ

定量メッセージ

- 4 [ホーム] タブで [バッチの保存] をクリックします。
- 5 [ファイル] > [バッチを閉じる] をクリックし、バッチを閉じます。

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

実習 2：Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 1. 新規バッチの作成 27

タスク 2. バッチに新規メソッドを設定する 30

タスク 3. ターゲット化合物の設定 34

タスク 4. 定量の設定 35

タスク 5. バッチの解析と保存 37

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

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

3 実習 2 : Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量


始める前に ...

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

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

タスク 1. 新規バッチの作成

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

- 1 デSKTOPの **Q-TOF 定量分析** アイコン  をクリックしてプログラムを起動します。プログラムを初めて使用する場合は、**図4**のようにデフォルトレイアウトが表示されます。

[スタート] メニューから **Agilent MassHunter Quantitative > 定量分析 (Q-TOF)** をクリックしてプログラムにアクセスすることもできます。

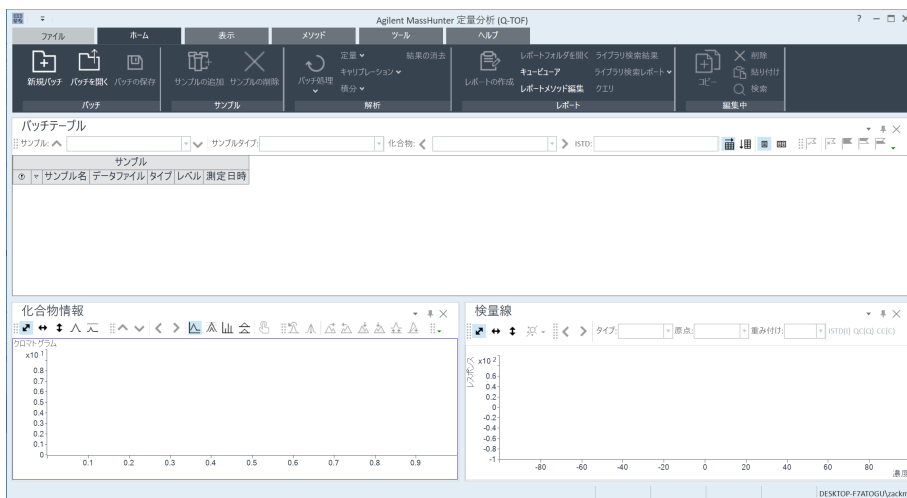


図4. デフォルトレイアウト

- 2 [ホーム] タブで、[新規バッチ] をクリックします。
[新規バッチ] ダイアログボックスが開きます。
- 3 **\Your Directory\LC-QTOF Pesticide** フォルダに移動します。
- 4 バッチファイル名として「**iii_Test_01**」を入力し、[バッチ作成] をクリックします。


3 実習 2 : Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量

タスク 1. 新規バッチの作成

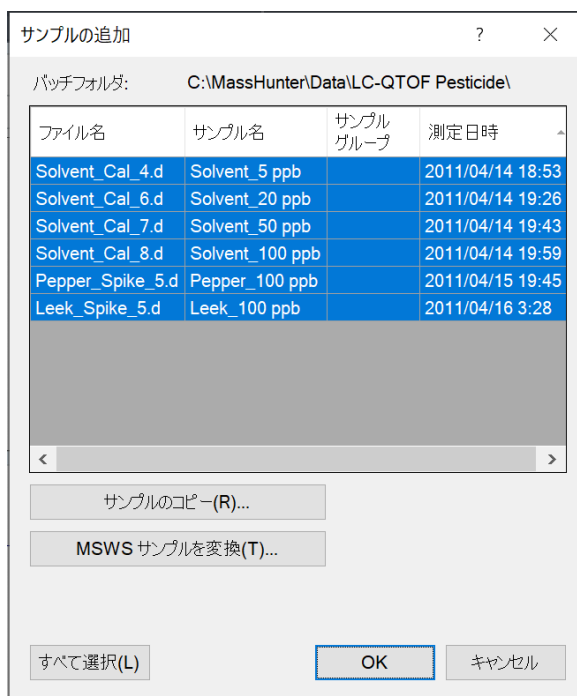
デフォルトレイアウトが表示されない場合、[表示] タブの [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。

[サンプルの追加] ダイアログボックスが表示されます。[すべて選択] をクリックします。

5 [OK] をクリックしてサンプルをバッチに追加します。

これで、[バッチテーブル] は空ではなくなり、サンプルが含まれるようになります。29 ページの  5 を参照してください。

- 4 つのキャリブレーションサンプルが含まれていることを確認してください。



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

The screenshot shows the Agilent MassHunter software interface. The main window displays a 'Batch Table' (バッチテーブル) with the following data:

サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時
Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4.d	キャリブレーション	1	2011/04/14 18:53
Solvent_20 ppb	Solvent_Cal_5.d	キャリブレーション	2	2011/04/14 19:26
Solvent_50 ppb	Solvent_Cal_7.d	キャリブレーション	3	2011/04/14 19:43
Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	キャリブレーション	4	2011/04/15 19:59
Pepper_100 ppb	Pepper_Spike_5.d	サンプル		2011/04/15 19:45
Leek_100 ppb	Leek_Spike_5.d	サンプル		2011/04/16 3:28

The table is highlighted with a red box. Below the table, there are two empty plots: '化合物情報' (Compound Information) and '検量線' (Calibration Curve). The status bar at the bottom indicates '変更されています Solvent_5 ppb' and '6 サンプル(合計 6) DESKTOP-F7ATOGU\zackm'.

図5. 定量前のサンプルのバッチテーブル

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

タスク2. バッチに新規メソッドを設定する

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

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

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

- 1 カーソルを用いて、下図のように濃度レベルの最も高いキャリブレーションサンプルを強調表示させます。

高濃度キャリブレーションサンプル等の、化合物に対してシグナル強度の高いサンプルを用いることで、適正なりテンションタイムとクオリファイア比がメソッドへ設定されるようにします。

バッチテーブル						
サンプル:		Solvent_100 ppb	▼	サンプルタイプ:	<すべて>	化合物:
サンプル						
①	▼	サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時
		Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4.d	キャリブレーション	1	2011/04/14 18:53
		Solvent_20 ppb	Solvent_Cal_6.d	キャリブレーション	2	2011/04/14 19:26
		Solvent_50 ppb	Solvent_Cal_7.d	キャリブレーション	3	2011/04/14 19:43
	▶	Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	キャリブレーション	4	2011/04/14 19:59
		Pepper_100 ppb	Pepper_Spike_5.d	サンプル		2011/04/15 19:45
		Leek_100 ppb	Leek_Spike_5.d	サンプル		2011/04/16 3:28

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

2 [メソッド] タブで、[編集] をクリックします。

メソッドタスクが、31 ページの図 6 のようにビューの左側に表示されます。

図 6 はメソッド編集のデフォルトレイアウトを示しています。

3 デフォルトレイアウトが表示されない場合、[表示] タブの [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。

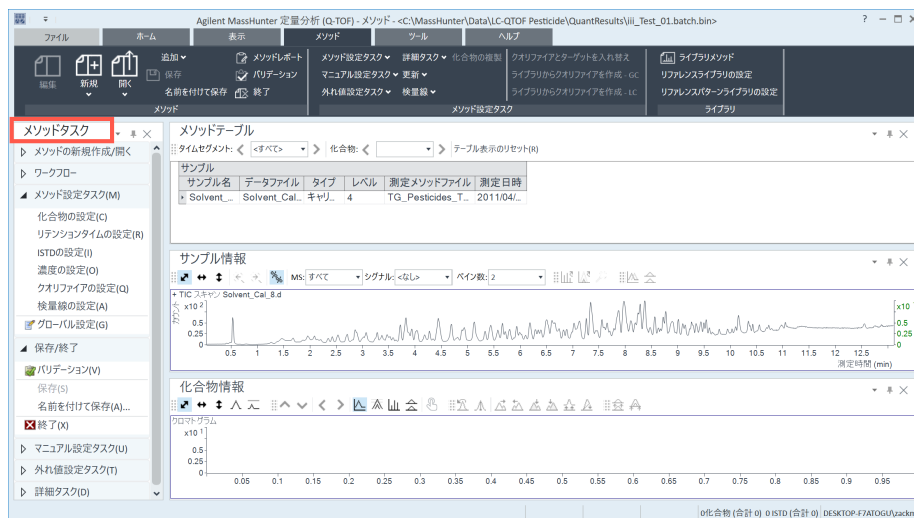


図 6. メソッド編集モード

4 [サンプル情報] ウィンドウで、ピークの中央 (X 軸上の約 4.82 min) をクリックします。右クリックし、[スペクトルの抽出] をクリックします。

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

- 5 最大イオンの、**396.0966** をクリックします。同じ場所で右クリックし、**【新規化合物】** をクリックします。

イオンを正確に選択するには、マウスの右ボタンを押したままマウスカーソルをスペクトルの上に移動して、選択対象イオンの周囲の領域を拡大します。



- 6 **【メソッドテーブル】** の **【化合物名】** に「Tribenuron-methyl」と入力します。次のステップでクオリファイアを追加するため、メソッドテーブルでこの化合物を選択した状態にしておきます。
- 7 **Tribenuron-methyl** のスペクトルを再び表示するため、ピーク頂点をクリックして、頂点を通過する線を表示します。

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

8 418.0776 をクリックして、このイオンを選択します (青色の三角形)。同じ場所で右クリックし、**[新規クオリファイア]** をクリックします。

複数のクオリファイアイオンを選択できます。

青色の三角形は、スペクトルで選択している m/z を示します。

図に示すように、クオリファイアがメソッドテーブルに追加されます。

メソッドテーブル

定量対象化合物	TS	トランジション	測定モード	タイプ	プリカーサイオン	プロダクトイオン	許容範囲
Tribenuron-meth...	1	396.0961	スキャン	ターゲット	0.0000	396.0961	相対

クオリファイア

プリカーサイオン	プロダクトイオン	トランジション	相対レスポンス	許容範囲	面積和
0.0000	418.0771	418.0771	26.8	20.0	<input type="checkbox"/>
0.0000	418.0771	418.0771	26.8	20.0	<input type="checkbox"/>
0.0000				20.0	<input type="checkbox"/>

サンプル情報

+ TIC スキャン Solvent_Cal_8.d

+ スキャン (t: 4.817 min) Solvent_Cal_8.d

化合物情報

+ EIC(418.0771) スキャン Solvent_Cal_8.d

1化合物 (合計 1) 0ISTD (合計 0) DESKTOP-F7AT0GU\zackm

3 実習2：Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量 タスク3. ターゲット化合物の設定

タスク3. ターゲット化合物の設定

このタスクを用いて、個々のターゲット化合物に対して変更可能な、新規定量メソッドのプロダクトイオンとリテンションタイムの確認方法を学習します。**[サンプル情報]** ウィンドウから作成したプロダクトイオンの新規定量メソッドを確認します。

- 1 スペクトルから設定されたリテンションタイムを確認するには、**[メソッド]** タブで **[メソッド設定タスク]** > **[リテンションタイムの設定]** をクリックします。
- 2 **[RT 左デルタ]** 列に「0.2」を入力します。
- 3 **[RT 右デルタ]** 列に「0.2」を入力します。

各化合物の水色のデータフィールドは変更することが可能です。

メソッドテーブル

タイムセグメント: < <すべて> > 化合物: < Tribenuron- > テーブル表示のリセット(R)

サンプル								
サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定メソッドファイル	測定日時			
Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	キャリブレーション	4	TG_Pesticides_T...	2011/04/14...			
定量対象化合物								
化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	RT	RT左デルタ	RT右デルタ	RTデルタ単位
Tribenuron-meth...	1	396.0961	スキャン	ターゲット	4.817	0.200	0.200	分

3 実習2：Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量 タスク4. 定量の設定

タスク4. 定量の設定

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

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

1 [メソッド] タブから [検量線] > [キャリブレーションサンプルからレベルを作成] を選択します。

メソッドテーブルの各定量対象化合物の下に [キャリブレーション] テーブルが開きます。

2 いずれかの定量対象化合物のデフォルト濃度を、各レベルの実際の濃度に変更します。

- L1-2.5000
- L2-20.0000
- L3-50.0000
- L4-100.0000

メソッドテーブル

タイムセグメント: < <すべて> > 化合物: < Tribenuron- > テーブル表示のリセット(R)

サンプル						
サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定メソッドファイル	測定日時	
Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	キャリブレーション	4	TG_Pesticides_T...	2011/04/14...	
定量対象化合物						
化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	単位	
Tribenuron-meth...	1	396.0961	スキャン	ターゲット	ng/ml	
キャリブレーション						
レベル	濃度	レスポンス	有効			
1	2.5000		<input checked="" type="checkbox"/>			
2	20.0000		<input checked="" type="checkbox"/>			
3	50.0000		<input checked="" type="checkbox"/>			
4	100.0000		<input checked="" type="checkbox"/>			

3 実習 2 : Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量 タスク 4. 定量の設定

3 [保存 / 終了] > [バリデーション] をクリックし、メソッド設定を検証します。

画面下に、発生したバリデーションエラーが表示されます。

The screenshot shows the Agilent MassHunter software interface. The main window displays the 'Method Table' (メソッドテーブル) for a method named 'Tribenuron'. The table lists parameters such as '化合物名' (Compound Name), 'TS' (Retention Time), 'トランジション' (Transition), '測定モード' (Measurement Mode), 'タイプ' (Type), and '単位' (Unit). Below the table, there are sections for 'クオリファイア' (Qualifiers), 'キヤリブレーション' (Calibration), and 'サンプリング' (Sampling). A validation error message is displayed in the center, stating 'メソッドを確認しました。エラーまたは警告はありません。' (Method checked. No errors or warnings). The 'Method Error List' (メソッドエラーリスト) at the bottom is currently empty.

化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	単位
Tribenuron-meth...	1.396.0961	スキャン	ターゲット		ng/ml

クオリファイア	プロダクトイオン	トランジション	相対レスポンス	許容範囲
0.0000	418.0771	418.0771	26.8	20.0

キヤリブレーション	濃度	レスポンス	有効
1	2.5000		<input checked="" type="checkbox"/>
2	20.0000		<input checked="" type="checkbox"/>
3	50.0000		<input checked="" type="checkbox"/>

4 バリデーションメッセージが表示されたら、[OK] をクリックします。

5 [保存 / 終了] > [終了] をクリックし、[メソッド適用後のバッチ処理オプション] で [なし] を選択し、[このメソッドをバッチに適用しますか?] というメッセージで [はい] をクリックします。

3 実習2：Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量 タスク5. バッチの解析と保存

タスク5. バッチの解析と保存

この実習では、バッチを自動的に定量し、結果を保存します。

1 [ホーム] タブで、[バッチ処理] をクリックします。

The screenshot displays the Agilent MassHunter software interface. The main window is titled "Agilent MassHunter 定量分析 (Q-TOF) - LC-QTOF Pesticide - iii_Test_01_batch.bin". The interface is divided into several sections:

- Batch Table:** A table listing samples and their analysis results. The columns include Sample Name, Data File, Type, Level, Measurement Time, Prediction, RT, Tribenuron-methyl Results (Response, Calculation, Final Temperature, Precision), and Quality Factor.
- Chromatogram (Bottom Left):** A plot showing a single peak at 4.812 minutes. The x-axis is "測定時間 (min)" and the y-axis is "強度 x10⁶".
- Calibration Curve (Bottom Right):** A plot showing a linear relationship between concentration and response. The x-axis is "濃度 (ng/ml)" and the y-axis is "強度 x10⁶". The regression equation is $y = 27211.621637 \cdot x + 14744.368301$ with $R^2 = 0.99907828$.

サンプル	サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時	予測濃度	RT	Tribenuron-methyl レスポンス [M]	Tribenuron-methyl 計算濃度	最終濃度	精度	クオリティ
1	Solvent_5 ppb	Solvent_Cal_4.d	キャリブレーション	1	2011/04/14 18:53	25000	4.	120055	3.8701	3.8701	15%	28.1
2	Solvent_20 ppb	Solvent_Cal_6.d	キャリブレーション	2	2011/04/14 19:26	200000	4.	511172	18.2432	18.2432	91.2	26.7
3	Solvent_50 ppb	Solvent_Cal_7.d	キャリブレーション	3	2011/04/14 19:43	500000	4.	1379115	50.1392	50.1392	10.	24.8
4	Solvent_100 ppb	Solvent_Cal_8.d	キャリブレーション	4	2011/04/14 19:59	1000000	4.	2742641	100.2475	100.2475	10.	26.8
5	Pepper_100 ppb	Pepper_Spike_5.d	サンプル		2011/04/15 19:45		4.	2025820	73.9050	73.9050		23.7
6	Leek_100 ppb	Leek_Spike_5.d	サンプル		2011/04/16 3:28		4.	1828327	66.6474	66.6474		21.1

2 [ホーム] タブで [バッチの保存] をクリックします。

3 [ファイル] > [バッチを閉じる] をクリックし、バッチを閉じます。

3 実習 2 : Q-TOF データファイルを使用したバッチの設定と定量 タスク 5. バッチの解析と保存

実習 3：定量結果のレビュー

タスク 1. バッチテーブル結果のナビゲーション 40

タスク 2. 結果ウィンドウレイアウトの変更 44

タスク 3. 結果のエクスポートと印刷 50

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

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



4 実習3：定量結果のレビュー

タスク1. バッチテーブル結果のナビゲーション

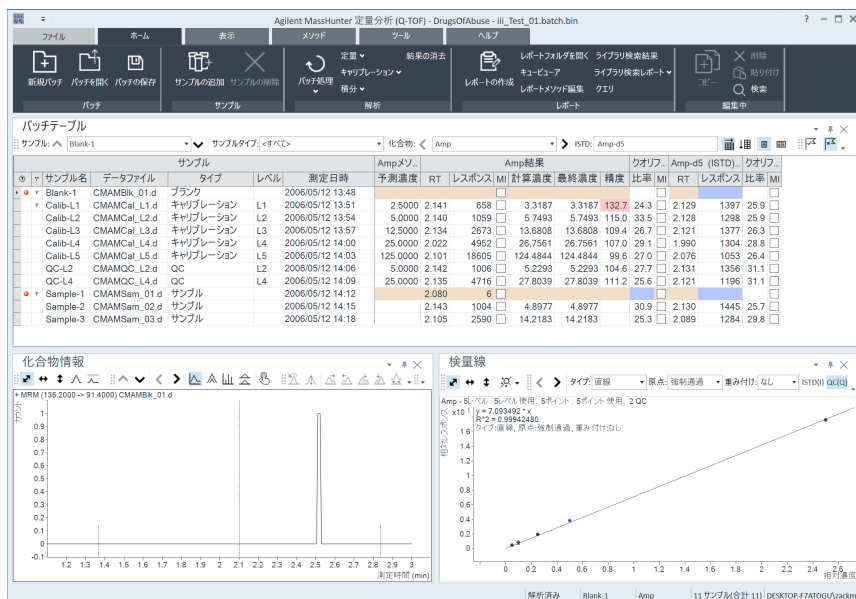
タスク1. バッチテーブル結果のナビゲーション

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

ステップ1： 実習1 で作成したバッチファイル *iii_Test_01.batch.bin* を開く

- 1 デスクトップの [定量分析] アイコンをクリックしてプログラムを起動します。
- 2 [ホーム] タブで [バッチを開く] をクリックし、[バッチを開く] ダイアログボックスを表示します。
- 3 *Your Directory\DrugsOfAbuse* に移動し、*iii_Test_01.batch.bin* をクリックします。


表示されるメインのビューは、下記のようになります。この図はデフォルトの列が設定されているデフォルトレイアウトです。





4 実習3：定量結果のレビュー

タスク1. バッチテーブル結果のナビゲーション

ステップ2：（オプション）前ページの図と異なるレイアウトが表示される場合

- メインビューに2つ以下のウィンドウしか表示されない場合や異なる配置の場合、デフォルトレイアウトを復元します。
- 列設定が違う場合、デフォルトの列設定を復元します。
- クロマトグラムペイン以外のペインが **[化合物情報]** ウィンドウに表示される場合、他のペインを非表示にします。
- デフォルトレイアウトを復元するには、サンプルをスクロールする前に、ツールバーの **[デフォルトレイアウトの復元]** をクリックします。
- **Quant-My-Way** ユーザーインターフェイスの場合：**表示** タブで、**[デフォルトレイアウトの復元]** をクリックします。
- デフォルト列設定を復元するには、**[バッチテーブル]** ウィンドウのどこかを右クリックし、**[デフォルト列の復元]** をクリックします。
- 余分なペインを非表示にするには、**[化合物情報]** ツールバーの **[クロマトグラムの表示 / 非表示]** アイコン  のみが強調表示されるよう、その他のアイコンをクリックして非表示にします。
- デフォルトレイアウトは工場出荷時に設定され、変更できません。独自のレイアウトを作成する方法は、44ページの **「タスク2. 結果ウィンドウレイアウトの変更」** を参照してください。

ステップ3：バッチテーブルの最後までサンプルをスクロールして、Cal-L5に戻る

- 1 希望するサンプルが表示されるまで、**[バッチテーブル]** ツールバーの **[次のサンプル]** 矢印  をクリックします。
[化合物情報] ウィンドウの変化を確認します。
- 2 Cal-L5に戻るには、**[バッチテーブル]** ツールバーの **[前のサンプル]** アイコン  をクリックします。
- 3 **[バッチテーブル]** ウィンドウでサンプル **Calib_L4** の行の任意のセルをクリックし、変化を見ます。

[バッチテーブル] で強調表示されたデータファイルと **[化合物情報]** ウィンドウのクロマトグラムがリンクされていることを確認してください。

各サンプルのアンフェタミン (Amp) の **[バッチテーブル]** と **[化合物情報]** の変化に注目してください。

4 実習3：定量結果のレビュー

タスク1. バッチテーブル結果のナビゲーション

ステップ4：4つのすべての化合物をスクロールして確認

- 1 希望する化合物が表示されるまで、ツールバーの [次の化合物] または [前の化合物] 矢印をクリックします。

化合物: < Meth >

- 2 [バッチテーブル]、[化合物情報]、[検量線] ウィンドウの変化を確認します。
- 3 [化合物名] リストの隣の下矢印をクリックします。
- 4 [Cocaine] をクリックします。

ステップ5：各化合物の結果を確認

Cal-L4 サンプルの各化合物のリテンションタイムを表示します。

すべての化合物の結果をレビューした後、コカインの結果の表示に戻ります。

- 1 [表示] タブで、[バッチテーブルレイアウト] > [複数の化合物/サンプルを表示] を選択します。
- 2 [Cal-L4] セルをクリックし、各化合物の [化合物情報] ウィンドウの [RT] の差に注目します。

バッチテーブル							Cocaine-d3											
サンプル							Amp結果			Meth結果			MDMA結果			Cocaine結果		
①	▼	サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時	RT	最終濃度	精度	RT	最終濃度	精度	RT	最終濃度	精度	RT	最終濃度	精度
▼		Blank-1	CMAMBik_01.d	ブランク		2006/05/12 13:48							2.284	1.9296		2.433	11.8235	
▼		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	キャリブレーション	L1	2006/05/12 13:51	2.141	3.3187	132.7	2.247	2.5936	103.7	2.276	2.2824	91.3	2.453	2.3087	92.3
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	キャリブレーション	L2	2006/05/12 13:54	2.140	5.7493	115.0	2.248	5.1011	102.0	2.277	4.6561	93.1	2.454	4.2682	85.4
▼		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	キャリブレーション	L3	2006/05/12 13:57	2.134	13.6808	109.4	2.247	15.1623	121.3	2.277	11.2728	90.2	2.459	11.5607	92.5
▼		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	キャリブレーション	L4	2006/05/12 14:00	2.022	26.7561	107.0	2.228	27.2574	109.0	2.264	24.8702	99.5	2.449	25.2511	101.0
		Calib-L5	CMAMCal_L5.d	キャリブレーション	L5	2006/05/12 14:03	2.101	124.4844	99.6	2.237	124.2764	99.4	2.271	125.1668	100.1	2.448	125.0768	100.1
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	2006/05/12 14:06	2.142	5.2293	104.6	2.248	5.2414	104.8	2.276	4.8567	97.1	2.453	4.2831	85.7
		QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	2006/05/12 14:09	2.135	27.8039	111.2	2.246	27.7713	111.1	2.276	23.0331	92.1	2.455	24.5377	98.2
▼		Sample-1	CMAMSam_01.d	サンプル		2006/05/12 14:12	2.080			2.286	3.2639		2.315	5.6138		2.408		
		Sample-2	CMAMSam_02.d	サンプル		2006/05/12 14:15	2.143	4.8977		2.250	5.8102		2.280	5.1778		2.460	4.3735	
		Sample-3	CMAMSam_03.d	サンプル		2006/05/12 14:18	2.105	14.2183		2.236	14.1876		2.267	10.7772		2.446	10.9299	

4 実習3：定量結果のレビュー

タスク1. バッチテーブル結果のナビゲーション

- 3 [表示] タブで、[バッチテーブルレイアウト] > [1つの化合物/サンプルを表示] を選択して、選択したターゲット化合物の詳細な定量結果の表示に戻ります。
- 4 必要に応じて、[化合物] リスト隣の下矢印をクリックし、[Cocaine] をクリックします。[1つの化合物を表示] モードと [複数の化合物/サンプルを表示] モードでは、異なる列が表示されます。[複数の化合物/サンプルを表示] モードのテーブルに列を追加しても、その変更内容は [1つの化合物/サンプルを表示] モードには自動的に適用されません。

ステップ6：選択したサンプルタイプを表示。キャリブレーションサンプルだけを表示してから、すべてのサンプルタイプを表示

- 1 [サンプルタイプ] ドロップダウンリストの下矢印をクリックします。
[サンプルタイプ] ダイアログボックスが表示されます。
- 2 <すべて> チェックボックスをオフにし、キャリブレーション チェックボックスをオンにします。

The screenshot shows the 'Batch Table' window with a 'Sample Type' dialog box open. The dialog box has a dropdown menu set to 'All' and a list of sample types with checkboxes. The 'Calibration' checkbox is checked, while others are unchecked. The background table shows columns for 'Sample Name', 'Data File', 'Type', 'Predicted Concentration', and 'RT'.

サンプル名	データファイル	タイプ	予測濃度	RT
Blank-1	CMAMBIk_01.d	ブランク		2.433
Calib-L1	CMAMCal_L1.d	キャリブレーション	2.5000	2.453
Calib-L2	CMAMCal_L2.d	キャリブレーション	5.0000	2.454
Calib-L3	CMAMCal_L3.d	キャリブレーション	12.5000	2.459
Calib-L4	CMAMCal_L4.d	キャリブレーション	25.0000	2.449
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	キャリブレーション	125.0000	2.448
QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	5.0000	2.453
QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	25.0000	2.455
Sample-1	CMAMSam_01.d	サンプル		2.408
Sample-2	CMAMSam_02.d	サンプル		2.460
Sample-3	CMAMSam_03.d	サンプル		2.446

- 3 [OK] をクリックします。
[バッチテーブル] には、Cocaine のキャリブレーションサンプルのみが表示されます。
- 4 [サンプルタイプ] ドロップダウンリストの下矢印をクリックします。
- 5 <すべて> をクリックした後、[OK] をクリックします。
自動的にすべてのチェックボックスがオンになり、すべてのサンプルタイプが表示されます。

4 実習3：定量結果のレビュー

タスク2. 結果ウィンドウレイアウトの変更

タスク2. 結果ウィンドウレイアウトの変更

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




ステップ1： ツールバーのレイアウトアイコンを使用し、[バッチテーブル]、[化合物情報]、[検量線] ウィンドウの配置を調整

- 1 [表示] タブで、[レイアウト] > [テーブル左] を選択します。
- 2 [表示] タブで、[レイアウト] > [テーブル右] を選択します。
- 3 [表示] タブで、[レイアウト] > [テーブル上] を選択します。

ステップ2： ツールバーのレイアウトアイコンを使用して個々のウィンドウを最大化

- 1 [表示] タブで、[ペインの最大化] > [テーブルの最大化] を選択します。
- 2 [表示] タブで、[ペインの最大化] > [化合物情報の最大化] を選択します。
- 3 [表示] タブで、[ペインの最大化] > [検量線の最大化] を選択します。
- 4 デフォルトのレイアウトに戻すには、[表示] タブで、[デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。

ステップ3： Cal-L4 の [化合物情報] ウィンドウのペインを変更

- 1 [バッチテーブル] で、[Cal-L4] 行を選択します。
- 2 [化合物情報] ツールバーで、[クオリファイアの表示 / 非表示] アイコン  をクリックします。
- 3 [スペクトルの表示 / 非表示] アイコン  をクリックします。
- 4 [ISTDの表示 / 非表示] アイコン  をクリックします。
レイアウトと結果は、次の図のようになります。

4 実習3：定量結果のレビュー

タスク2. 結果ウィンドウレイアウトの変更

このステップでは、**[化合物情報]** ウィンドウのクロマトグラムペインだけが表示されている状態からタスクを開始してください。

The screenshot shows the Agilent MassHunter interface. The 'Batch Table' window displays a table of sample results for Cocaine. The 'Compound Information' window shows chromatograms and a calibration line for Cocaine-d3.

サンプル					Cocaine...		Cocaine結果				Cocaine-d3 (IS...)		Cocaine-d3 (IS...)					
①	サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時	予測濃度	RT	レスポンス	MI	計算濃度	最終濃度	精度	比率	MI	レスポンス	比率	MI	
	Calib-L1	CMAMCal_L1.d	キャリブレーション	L1	2006/05/12 13:51	2.5000	2.453	5189		2.3087	2.3087	92.3	3.7		2.452	20245	4.0	
	Calib-L2	CMAMCal_L2.d	キャリブレーション	L2	2006/05/12 13:54	5.0000	2.454	9716		4.2682	4.2682	85.4	3.9		2.453	20506	4.0	
	Calib-L3	CMAMCal_L3.d	キャリブレーション	L3	2006/05/12 13:57	12.5000	2.459	25187		11.5607	11.5607	92.5	3.9		2.459	19625	4.4	
	Calib-L4	CMAMCal_L4.d	キャリブレーション	L4	2006/05/12 14:00	25.0000	2.449	50649		25.2511	25.2511	101.0	3.9		2.448	18068	4.2	
	Calib-L5	CMAMCal_L5.d	キャリブレーション	L5	2006/05/12 14:03	125.0000	2.448	199967		125.0768	125.0768	100.1	3.8		2.448	14401	3.7	

これらの変更は、6つのペインの配置と表示のみを変更します。**[化合物情報]** ウィンドウのペインは、レイアウトを変更しても影響を受けません。

ステップ4：検量線なしでデフォルトレイアウトを保存

- [検量線]** ウィンドウを閉じます。
- [表示]** タブで、**[レイアウトの読み込み/保存]** > **[レイアウトの保存]** を選択します。
[レイアウトの保存] ダイアログボックスが表示されます。
- ファイル名に「**バッチテーブルと化合物情報**」と入力し、**[保存]** をクリックします。

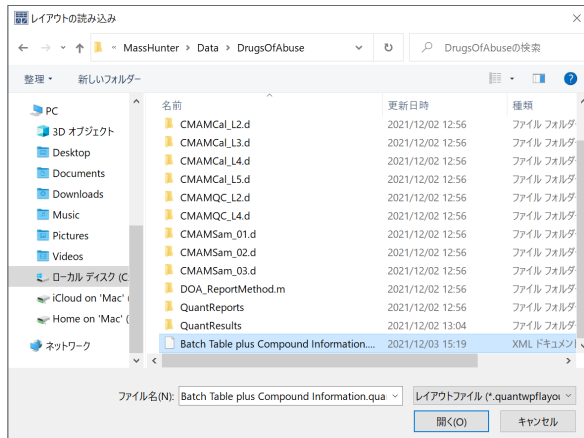
4 実習3：定量結果のレビュー

タスク2. 結果ウィンドウレイアウトの変更

ステップ5：新たに作成したレイアウトを読み込む

- 1 [表示] タブで、[デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。
- 2 [表示] タブで、[レイアウトの読み込み / 保存] > [レイアウトの読み込み] を選択します。

[レイアウトの読み込み] ダイアログボックスが表示されます。



4 実習3：定量結果のレビュー

タスク2. 結果ウィンドウレイアウトの変更

- 3 [バッチテーブルと化合物情報] を選択し、[開く] をクリックします。
結果のウィンドウは、47 ページの図7 のようになります。

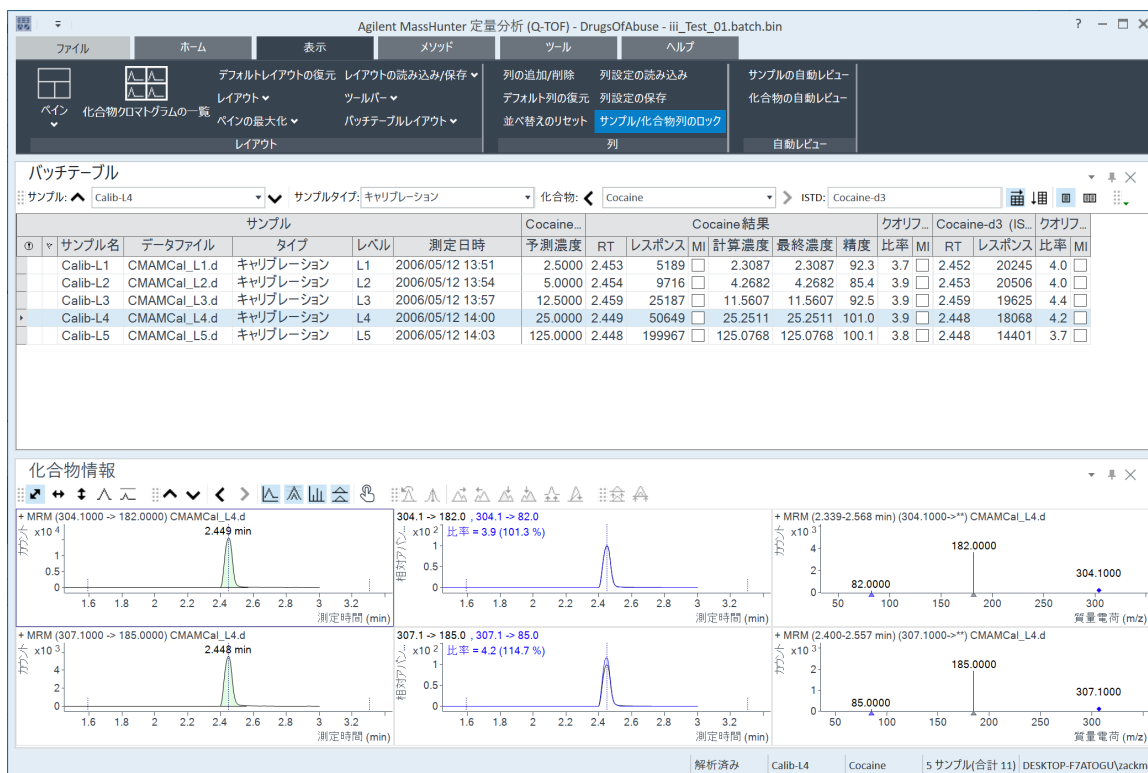
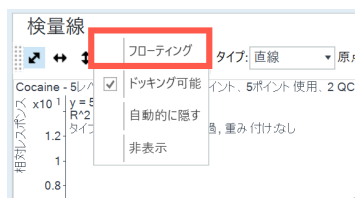


図7. 結果のウィンドウ

ステップ6：48 ページの図8 のレイアウトを作成

- 1 デフォルトのレイアウトに戻します（[表示] タブで [デフォルトレイアウトの復元] をクリック）。
- 2 [検量線] ウィンドウのタイトルバー内を右クリックした後、[フローティング] チェックボックスをオンにします。



4 実習3：定量結果のレビュー

タスク2. 結果ウィンドウレイアウトの変更

- 3 [化合物情報] ウィンドウのタイトルバーを右クリックし、[フローティング] チェックボックスをクリックしてオンにします。
- 4 ウィンドウのサイズを変更し、**図8**のレイアウトに合わせます。

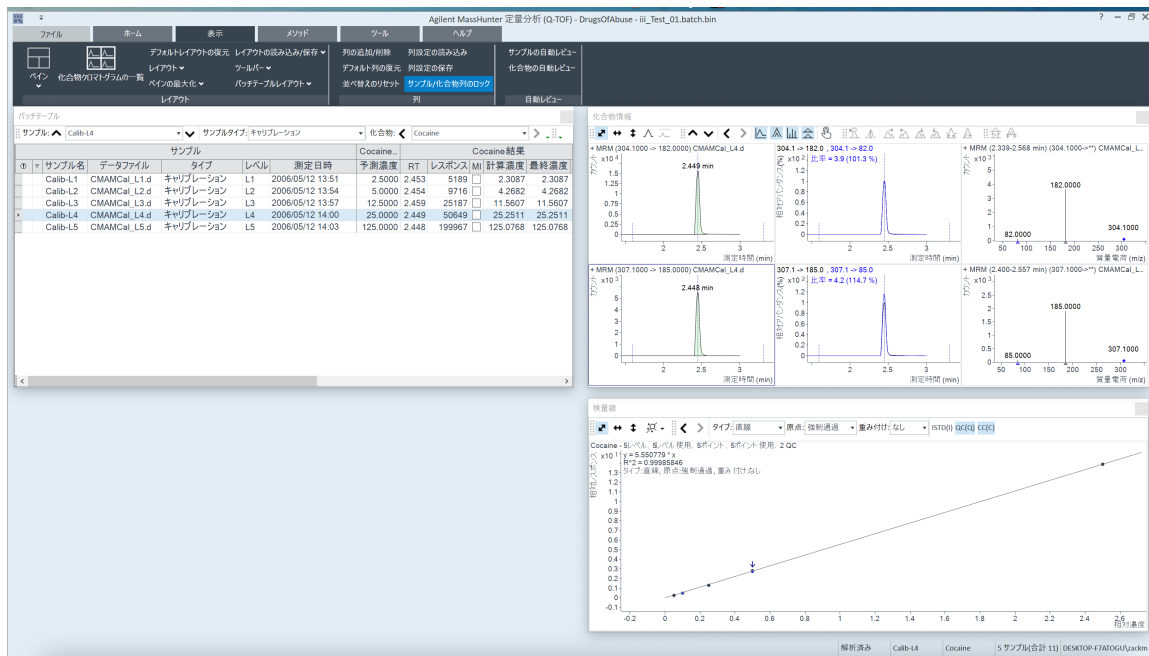


図8. 検量線と化合物情報ウィンドウ - フローティングを用いた表示

- 5 [化合物情報] ウィンドウのタイトルバー内を右クリックした後、[ドッキング] チェックボックスをオンにします。

4 実習3：定量結果のレビュー

タスク2. 結果ウィンドウレイアウトの変更

6 ウィンドウのサイズを変更し、図9のレイアウトに合わせます。

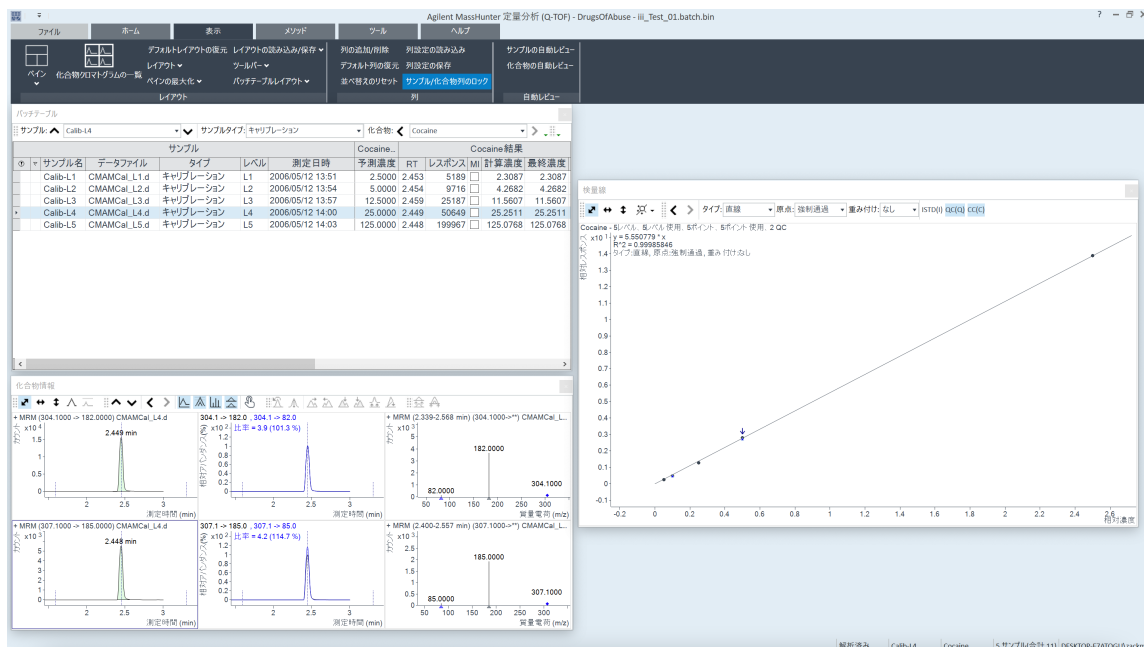


図9. サイズ変更したウィンドウ

7 **[検量線]** ウィンドウのタイトルバー内を右クリックした後、**[ドッキング]** チェックボックスをオンにします。

8 タスク開始時に示したレイアウトと一致するように **[化合物情報]** ウィンドウを移動します。

ステップ7：デフォルトレイアウトを（復元せずに）再作成

1 プログラムのメインビューを最大化します。

- まず **[検量線]** ウィンドウを固定した後、**[化合物情報]** ウィンドウを固定し、デフォルトレイアウトを再作成します。
- 2つのウィンドウの固定後、検量線が左側にある場合、**[検量線]** ウィンドウのタイトルバーを右クリックし、右にドラッグします。このウィンドウのメインビュー内の配置場所が、灰色の長方形によって示されます。
- メインビュー右下隅に **[検量線]** ウィンドウをドラッグします。

4 実習3：定量結果のレビュー タスク3. 結果のエクスポートと印刷

タスク 3. 結果のエクスポートと印刷

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

ステップ1：バッチファイル iii_Test_01 をエクスポート

- 1 [バッチテーブル] ウィンドウのタイトルバーをクリックして、[バッチテーブル] ウィンドウを有効にします。
- 2 [バッチテーブル] ウィンドウを右クリックし、[テーブルのエクスポート] を選択します。
- 3 出力先ディレクトリとして **My Documents** を指定します。
- 4 エクスポートファイル名として「*iii_Test_01.xlsx*」と入力します。
- 5 [保存] をクリックします。Excel ファイル **My Documents\iii_Test_01.xlsx** が自動的に開きます (*iii* = ユーザーのイニシャル)。

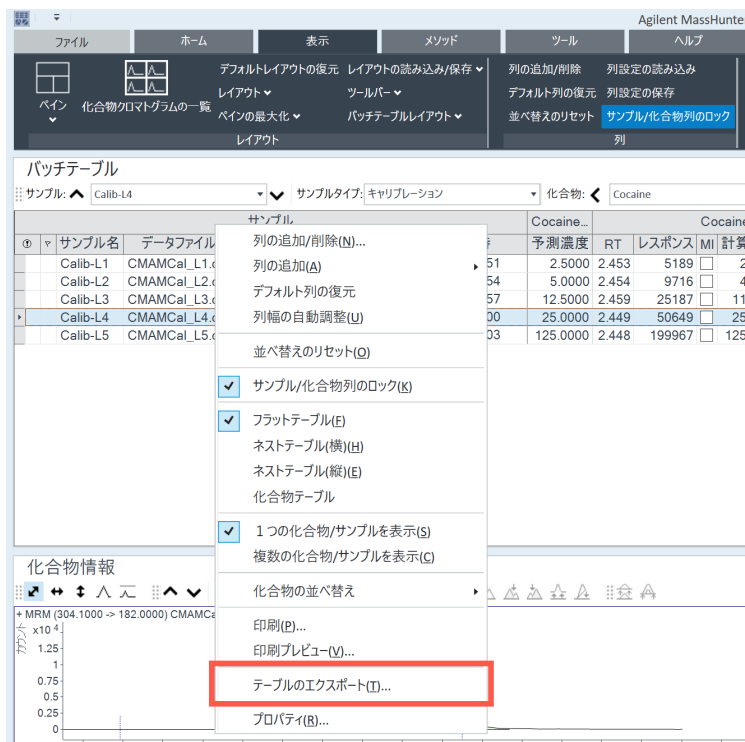


図 10. エクスポート結果

4 実習3：定量結果のレビュー

タスク3. 結果のエクスポートと印刷

実習 4 : 3 つのツールを使用した結果の評価

タスク 1. 検量線の変更 54

タスク 2. パラメータを用いない積分 57

タスク 3. 外れ値の検出 71

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

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

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



5 実習4：3つのツールを使用した結果の評価

タスク1. 検量線の変更

タスク1. 検量線の変更

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

ステップ1：必要に応じて、バッチファイル *iii_Test_01.batch.bin* を開く


- 1 デSKTOPの **QQQ 定量分析** アイコン  をクリックして定量分析プログラムを起動します。
- 2 [ホーム] タブで [バッチを開く]  をクリックし、[バッチを開く] ダイアログボックスを表示します。
- 3 `\Your Directory\DrugsOfAbuse` に移動し、*iii_Test_01.batch.bin* をクリックします。

[スタート] メニューから **Agilent MassHunter Quantitative > 定量分析 (QQQ)** をクリックしてプログラムにアクセスすることもできます。

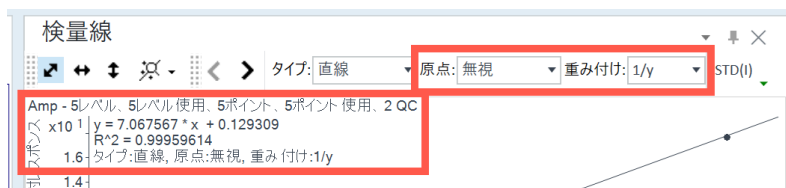
デフォルトレイアウトが表示されない場合、バッチを開く前に [表示] タブの [デフォルトレイアウトの復元] をクリックします。

ステップ2：アンフェタミン (Amp) の精度外れ値を探し、検量線を変更

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

化合物: < Amp > ISTD: Amp-d5 

- 2 Calib-L1 行のセルと [精度] 列をポイントし、下記のように外れ値メッセージを表示させます。外れ値を含むセルは赤色 (高) または青色 (低) になります。
- 3 [検量線] ウィンドウで、[原点] を [無視] に、[重み付け] を [1/y] に設定します。
プログラムに新しい検量線近似式と決定係数 R^2 が表示されます。



5 実習 4 : 3つのツールを使用した結果の評価

タスク 1. 検量線の変更


検量線の原点

- **強制通過** - 強制的に検量線が原点 ($X = 0$ 、 $Y = 0$) を通過するようにします。
- **無視** - 検量線が原点 ($X = 0$ 、 $Y = 0$) を使用するようには強制しません。

検量線の重み付け

- **なし** - すべてのデータポイントに同等の重み付けを行います。
- **1/y** - データポイントに式 $1/y$ を適用します。この式により、 y の値が大きいと影響が弱まりますが、 y の値が小さいと影響が強くなります。

ステップ 3 : [バッチテーブル] でバッチを解析し、結果を確認

- 1 [ホーム] タブで [バッチ処理]  をクリックし、バッチ処理を実行します。
- 2 バッチ解析後、[バッチテーブル] の結果を確認します。

精度
96.6
97.1
102.5
103.8
99.2
86.7
108.0

ステップ 4 : 他の化合物に精度外れ値があるかどうかを検索

- 1 [バッチテーブル] ツールバーの [次の化合物] > をクリックし、コカイン (Cocaine)、MDMA、メタンフェタミン (Meth) などの個々の化合物を表示します。
- 2 定量結果、特に [精度] 列の値を確認します。
メタンフェタミン (Meth) の Calib-L3 標準サンプルの [精度] 値は、指定範囲外であることに注目してください。

5 実習 4 : 3 つのツールを使用した結果の評価

タスク 1. 検量線の変更

ステップ 5 : メタンフェタミン (Meth) の検量線を変更しバッチを解析

1 **[検量線]** ウィンドウで、**[原点]** を **[無視]** に、**[重み付け]** を **[1/y]** に設定します。
[定量分析] プログラムに、新しい検量線近似式と決定係数 R^2 が表示されます。

2 **[ホーム]** タブで、**[バッチ処理]** をクリックしてバッチ処理を実行します。

バッチ解析後、**[バッチテーブル]** に新しい結果が表示されます。

5 実習4：3つのツールを使用した結果の評価

タスク2. パラメータを用いない積分

タスク2. パラメータを用いない積分

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

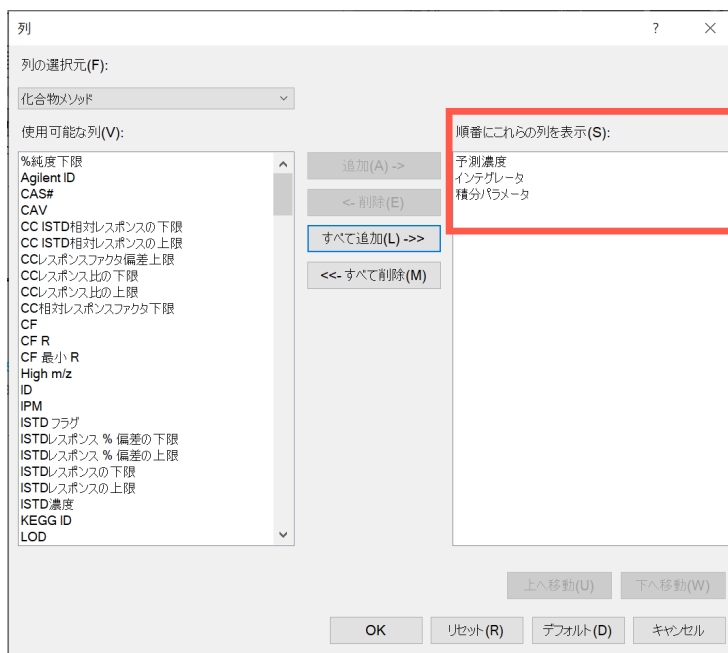
- [バッチテーブル] に積分列を追加
- デフォルト積分値の表示
- 以下の項目を確認し、クロマトグラムを詳細に調べる
 - 外れ値メッセージ
 - ベースラインパラメータ
 - ピークラベル

ステップ1：バッチテーブルに積分列を追加

- 1 [バッチテーブル] のどこかを右クリックし、[列の追加 / 削除] をクリックします。
[列] ダイアログボックスが表示されます。
- 2 [列の選択元] ドロップダウンリストから [化合物メソッド] を選択します。

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

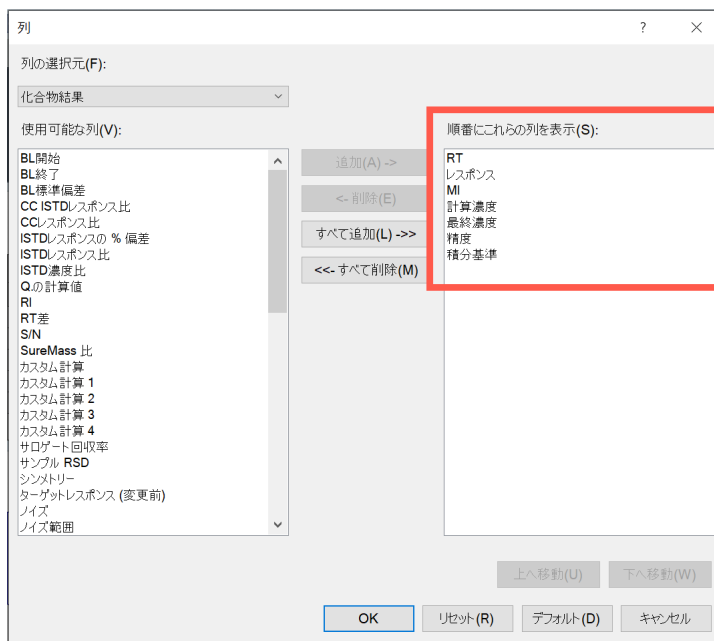
- 3 [使用可能な列] リストから [インテグレータ] と [積分パラメータ] を選択して、[追加] をクリックします。
選択された列が [順番にこれらの列を表示] リストに移動します。
 - このタスクは、バッチ *iii_Test_01* が表示されている状態から開始してください。開いていない場合は、54 ページの「**タスク1. 検量線の変更**」の**ステップ1**を参照してください。



- 4 [列の選択元] ドロップダウンリストから [化合物結果] を選択します。
- 5 [使用可能な列] リストから [積分基準] を選択して、[追加] をクリックします。
選択された列が [順番にこれらの列を表示] リストに移動します。

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

6 [OK] をクリックします。



ステップ 2：アンフェタミン (Amp) のデフォルトの積分値を確認

- 1 [バッチテーブル] ツールバーの [前の化合物] < をクリックし、アンフェタミン (**Amp**) を表示します。
- 2 [バッチテーブル] の [インテグレータ] と [積分パラメータ] 列のデフォルト値を確認します。

使用されるインテグレータは、パラメータを入力する必要のない MS-MS インテグレータであることに注目してください。そのため、[積分パラメータ] 列は空白です。

インテグレータ	積分パラメータ
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	
MS-MS	

5 実習 4 : 3 つのツールを使用した結果の評価

タスク 2. パラメータを用いない積分


- 3 [バッチテーブル] の [積分基準] 列のデフォルト値を確認します。

これらの値は、ターゲット化合物アンフェタミンのデフォルトの積分品質基準です。

Ampメソッド			Amp結果						
予測濃度	インテグレート	積分パラメータ	RT	レスポンス	MI	計算濃度	最終濃度	精度	積分基準
MS-MS					<input type="checkbox"/>				
2.5000	MS-MS		2.141	658	<input type="checkbox"/>	2.4161	2.4161	96.6	Accepted
5.0000	MS-MS		2.140	1059	<input type="checkbox"/>	4.8556	4.8556	97.1	Accepted
12.5000	MS-MS		2.134	2673	<input type="checkbox"/>	12.8162	12.8162	102.5	Accepted
25.0000	MS-MS		2.022	4952	<input type="checkbox"/>	25.9394	25.9394	103.8	Accepted
125.0000	MS-MS		2.101	18605	<input type="checkbox"/>	124.0262	124.0262	99.2	Accepted
5.0000	MS-MS		2.142	1006	<input type="checkbox"/>	4.3336	4.3336	86.7	Accepted
25.0000	MS-MS		2.135	4716	<input type="checkbox"/>	26.9911	26.9911	108.0	Accepted
MS-MS					<input type="checkbox"/>				
	MS-MS		2.080	6	<input type="checkbox"/>				Rejected
	MS-MS		2.143	1004	<input type="checkbox"/>	4.0008	4.0008		Accepted
	MS-MS		2.105	2590	<input type="checkbox"/>	13.3556	13.3556		Accepted

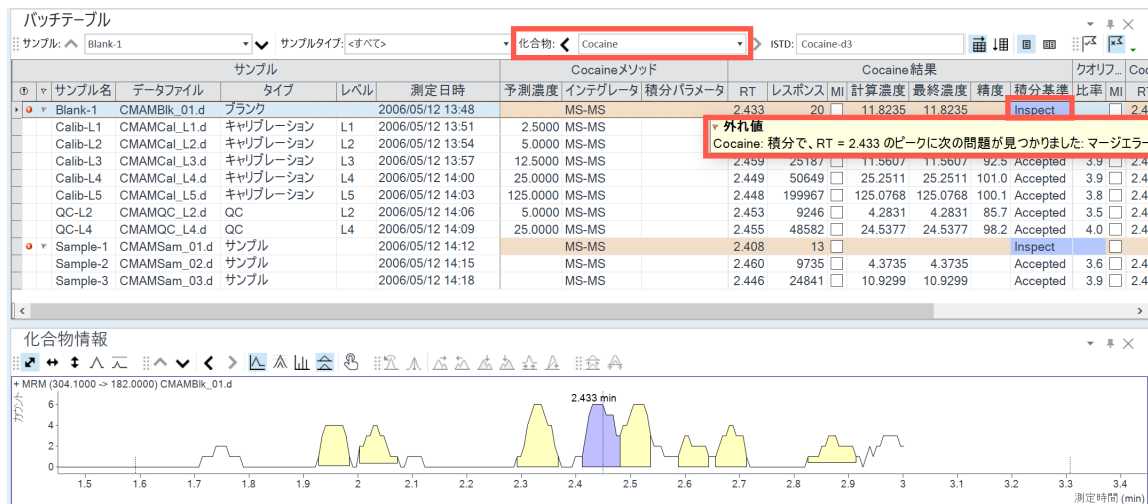
ステップ 3 : コカインと MDMA に関する積分の問題を表示

[Blank-1] サンプル行の [積分基準] 列にある外れ値メッセージを探します。

- 1 [検量線] ウィンドウを閉じます。
- 2 定量イオンとクオリファイアのクロマトグラムだけが表示されるように、[化合物情報] のクロマトグラム部分を拡大します。[スペクトルの表示 / 非表示] アイコンをクリックします。
- 3 [ISTD の表示 / 非表示] アイコンもクリックします。
- 4 化合物 **Cocaine** が表示されるまで、バッチテーブルツールバーの [次の化合物] アイコン  をクリックします。

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

- 5 [Blank-1] の行を選択し、その行の [積分基準] 列の「要調査 (Inspect)」にマウスカーソルを合わせます。そのデータの外れ値メッセージの他、コカインの積分されたクロマトグラムも表示されます。



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

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

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


積分基準は以下の色で表示されます。

- 緑 - Accepted (OK)
- 青 - Inspect (要調査)
- 赤 - Rejected (却下)

これらの色は、ピークの色にも反映されます。

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

ステップ 4：ノイズアルゴリズムの変更

- 1 [バッチテーブル] のどこかを右クリックし、[列の追加 / 削除] をクリックします。
[列] ダイアログボックスが表示されます。
- 2 [列の選択元] ドロップダウンリストから [化合物メソッド] を選択します。
- 3 [使用可能な列] リストから [ノイズアルゴリズム] を選択して、[追加] をクリックします。
選択された列が [順番にこれらの列を表示] リストに移動します。
- 4 [OK] をクリックします。
- 5 化合物 **Amp** が表示されるまで、[バッチテーブル] ツールバーの [前の化合物] アイコン  をクリックします。
- 6 [ノイズアルゴリズム] 列と [S/N] (S/N 比) 列の値を確認します。

Ampメソッド			Amp結果							
予測濃度	インテグレータ	ノイズアルゴリズム	RT	レスポンス	MI	計算濃度	最終濃度	精度	S/N	積分基準
	MS-MS	RMS			<input type="checkbox"/>					
2.5000	MS-MS	RMS	2.141	658	<input type="checkbox"/>	3.3187	3.3187	132.7	138.42	Accepted
5.0000	MS-MS	RMS	2.140	1059	<input type="checkbox"/>	5.7493	5.7493	115.0	294.00	Accepted
12.5000	MS-MS	RMS	2.134	2673	<input type="checkbox"/>	13.6808	13.6808	109.4	742.40	Accepted
25.0000	MS-MS	RMS	2.022	4952	<input type="checkbox"/>	26.7561	26.7561	107.0	423.60	Accepted
125.0000	MS-MS	RMS	2.101	18605	<input type="checkbox"/>	124.4844	124.4844	99.6	100.08	Accepted
5.0000	MS-MS	RMS	2.142	1006	<input type="checkbox"/>	5.2293	5.2293	104.6	113.03	Accepted
25.0000	MS-MS	RMS	2.135	4716	<input type="checkbox"/>	27.8039	27.8039	111.2	1242.00	Accepted
	MS-MS	RMS	2.080	6	<input type="checkbox"/>				0.90	Rejected
	MS-MS	RMS	2.143	1004	<input type="checkbox"/>	4.8977	4.8977		138.39	Accepted
	MS-MS	RMS	2.105	2590	<input type="checkbox"/>	14.2183	14.2183		340.74	Accepted

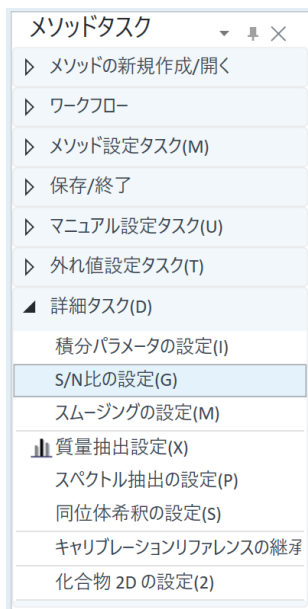
ステップ 5：メソッドのアンフェタミンのノイズアルゴリズムを RSM から ASTM に変更し、保存せずにメソッド編集を終了

- 1 [メソッド] タブで、[編集] をクリックします。

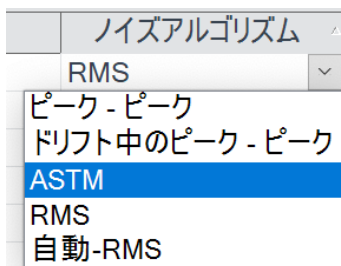
5 実習 4 : 3 つのツールを使用した結果の評価

タスク 2. パラメータを用いない積分

- 2 メソッドタスクの [詳細タスク] > [S/N 比の設定] をクリックします。
[メソッドテーブル] のノイズ関連パラメータが表示されます。



- 3 [メソッドテーブル] の Amp の [ノイズアルゴリズム] 列の下矢印をクリックします。
使用可能なノイズアルゴリズムのリストが表示されます。
- 4 [ASTM] をクリックします。



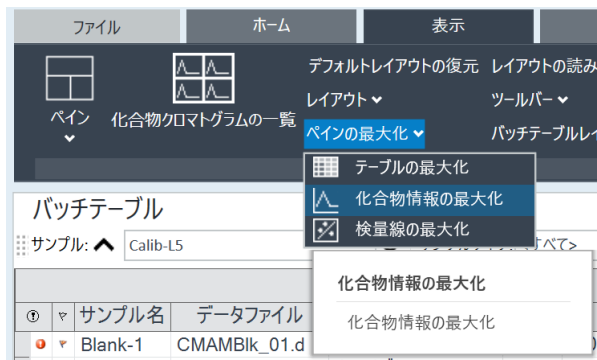
- 5 メソッドタスクで [保存 / 終了] > [終了] をクリックします。
- 6 終了プロンプトの [このメソッドをバッチに適用しますか?] で [いいえ] をクリックします。[バッチ解析] モードが表示されます。

5 実習4：3つのツールを使用した結果の評価

タスク2. パラメータを用いない積分

ステップ6：アンフェタミン (amphetamine) の (最高濃度の標準サンプルの) ベースラインをオフに切り替えた後、オンに戻して確認。ベースラインのオン/オフを切り替えて2つのクロマトグラムを比較

- 1 選択されていない場合は、サンプル **Calib-L5** を選択し、**[表示]** タブで **[ペインの最大化]** > **[化合物情報の最大化]** を選択します。



ウィンドウに [化合物情報] ウィンドウのみが表示されていることを確認します。

デフォルト設定として、ベースラインは定量イオンのクロマトグラムに対して描かれることに注目してください。

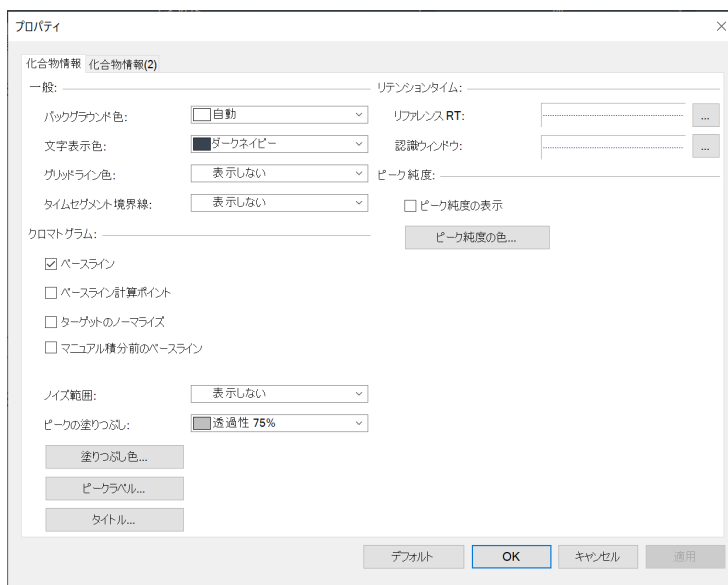
バッチテーブル							
サンプル:		Calib-L5	サンプルタイプ:	<すべて>	化合物:	Amp	
サンプル						Ampメソ...	
①	▼	サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時	予測濃度 RT レス
	▼	Blank-1	CMAMBIk_01.d	ブランク		2006/05/12 13:48	
	▼	Calib-L1	CMAMCal_L1.d	キャリブレーション	L1	2006/05/12 13:51	2.5000 2...
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	キャリブレーション	L2	2006/05/12 13:54	5.0000 2...
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	キャリブレーション	L3	2006/05/12 13:57	12.5000 2...
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	キャリブレーション	L4	2006/05/12 14:00	25.0000 2...
	▶	Calib-L5	CMAMCal_L5.d	キャリブレーション	L5	2006/05/12 14:03	125.0000 2...
		QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	2006/05/12 14:06	5.0000 2...
		QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	2006/05/12 14:09	25.0000 2...
	▼	Sample-1	CMAMSam_01.d	サンプル		2006/05/12 14:12	2...
		Sample-2	CMAMSam_02.d	サンプル		2006/05/12 14:15	2...

- 2 いずれか一方のクロマトグラムを右クリックし、ショートカットメニューを開きます。

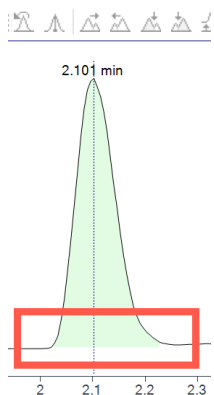
5 実習 4 : 3つのツールを使用した結果の評価

タスク 2. パラメータを用いない積分

- 3 ショートカットメニュー下の **【プロパティ】** をクリックして、**【プロパティ】** ダイアログボックスを開きます。



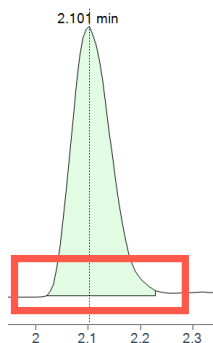
- 4 **【プロパティ】** ダイアログボックスの **【ベースライン】** チェックボックスをオフにします。
- 5 **【適用】** ボタンをクリックして、ベースラインのないピークを確認します。ベースラインのチェックボックスをオフにすると、ベースラインが表示されなくなることに注目してください。



5 実習4：3つのツールを使用した結果の評価

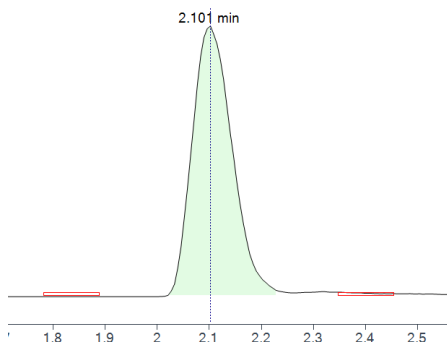
タスク2. パラメータを用いない積分

- 6 **[プロパティ]** ダイアログボックスの **[ベースライン]** チェックボックスをオンにします。
- 7 **[適用]** ボタンをクリックして、ベースラインのあるピークを確認します。



ステップ7：アンフェタミンのベースライン計算ポイントを確認

- 1 **[プロパティ]** ダイアログボックスの **[ベースライン計算ポイント]** チェックボックスをオンにします。
- 2 **[適用]** をクリックして、ベースラインの開始位置と終了位置を確認します。



- 3 **[プロパティ]** ダイアログボックスの **[ベースライン計算ポイント]** チェックボックスをオフにします。
- 4 **[適用]** をクリックして、クロマトグラムを確認します。

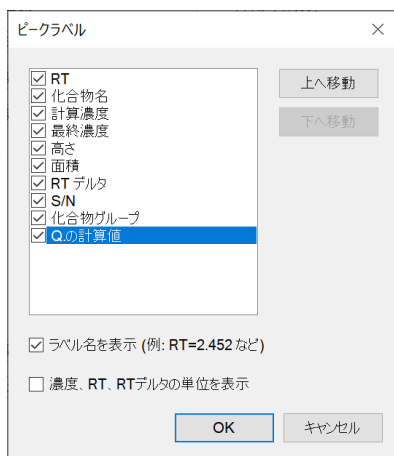
5 実習4：3つのツールを使用した結果の評価

タスク2. パラメータを用いない積分

- 5 ベースライン計算ポイントが描かれているクロマトグラムと描かれていないクロマトグラムを比較します。

ステップ8：アンフェタミンのピークラベルを表示

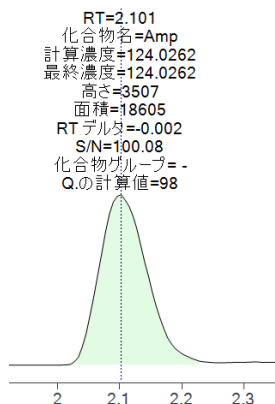
- 1 **[プロパティ]** ダイアログボックスの **[ピークラベル]** をクリックします。
[ピークラベル] ダイアログボックスが表示されます。
- 2 すべての **[ピークラベル]** チェックボックスと **[ラベル名を表示]** チェックボックスをオンにします。
- 3 **[OK]** をクリックします。



5 実習 4 : 3 つのツールを使用した結果の評価

タスク 2. パラメータを用いない積分

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



- 5 **[プロパティ]** ダイアログボックスの **[ピークラベル]** をクリックします。**[ピークラベル]** ダイアログボックスが表示されます。
- 6 RT (リテンションタイム) を除き、すべての **[ピークラベル]** をオフにします。**[ラベル名を表示]** チェックボックスをオフにし、**[OK]** をクリックします。
- 7 **[プロパティ]** ダイアログボックスの **[適用]** をクリックし、ピークラベルが変更されることを確認します。

ステップ 9: クオリファイアのクロマトグラムをノーマライズの有り / 無しで比較

- 1 **[化合物情報 (2)]** タブをクリックします。**[クオリファイア]** セクションにある **[ノーマライズ]** チェックボックスをオンにします。

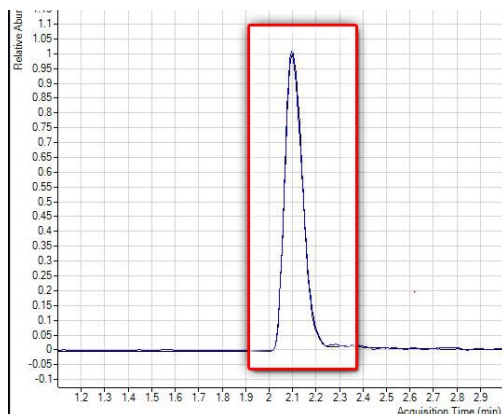


5 実習4：3つのツールを使用した結果の評価

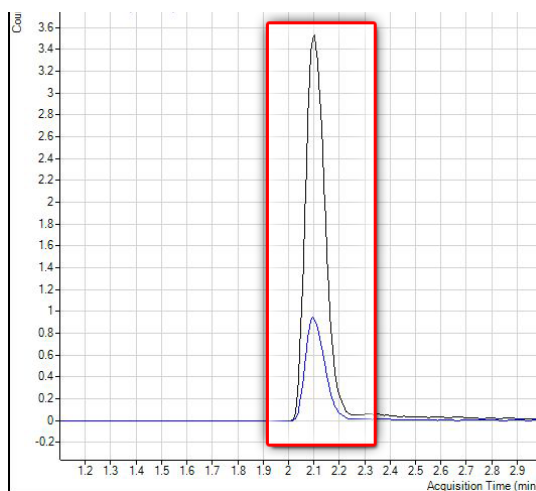
タスク2. パラメータを用いない積分

- 2 [適用] をクリックし、2つのピークが収束し、1つのピークとして表示されることを確認します。

B.04.01 以降のリビジョンの場合：デフォルト設定では、ノーマライズされたクオリファイアピークが定量ピークに重ね書きされて表示されます。



- 3 [プロパティ] ダイアログボックスの [クオリファイアのノーマライズ] チェックボックスをオフにします。
- 4 [適用] をクリックして、クオリファイアピークと定量対象化合物ピークを別々に再表示します。

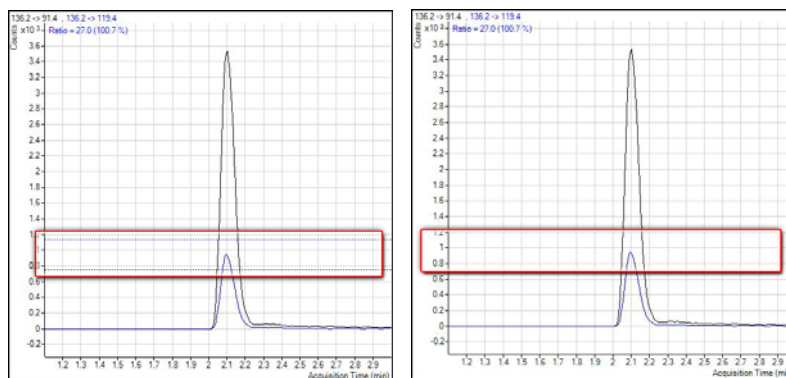


5 実習4：3つのツールを使用した結果の評価

タスク2. パラメータを用いない積分

ステップ10：許容範囲の幅を表示

- 1 表示する許容範囲のタイプを【プロパティ】ダイアログボックスの【許容範囲】フィールドのドロップダウンメニューから選択します。【適用】をクリックすると、クオリファイアクロマトグラムに許容範囲の幅が表示されます。
- 2 【プロパティ】ダイアログボックスの【許容範囲】ドロップダウンメニューから【表示しない】を選択します。【適用】をクリックすると、クオリファイアクロマトグラムから許容範囲の幅が削除されます。
- 3 【OK】をクリックして、【プロパティ】ダイアログボックスを閉じます。
- 4 許容範囲の幅の有無によるクオリファイアクロマトグラムの変化を比較します。
許容範囲の幅は、クオリファイアのアバンドランスの上限と下限を示す点線の幅です。



ステップ11：バッチテーブルから【インテグレータ】および【積分パラメータ】列を削除

- 1 【表示】タブで、【デフォルトレイアウトの復元】をクリックします。
- 2 【バッチテーブル】の【化合物メソッド】セクションを右クリックし、【列の追加/削除】をクリックします。
- 3 右側のリストから、【インテグレータ】と【積分パラメータ】（化合物メソッド）を選択します。
- 4 【削除】をクリックした後、【OK】をクリックします。

5 実習4：3つのツールを使用した結果の評価 タスク3. 外れ値の検出

タスク3. 外れ値の検出

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

ステップ1：MDMAの外れ値情報を表示

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

The screenshot displays the Agilent MassHunter software interface. The main window shows a 'Batch Table' for sample 'Blank-1' with MDMA results. The table includes columns for sample name, data file, type, level, measurement time, predicted concentration, noise algorithm, RT, response, MI, calculation concentration, final concentration, precision, integration base, ratio, RT, response, ratio, and MI. The RT column for the first MDMA result is highlighted in red.

サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時	MDMAメソッド	RT	レスポンス	MI	計算濃度	最終濃度	精度	積分基準	比率	RT	レスポンス	比率	MI
Blank-1	CMAMBIk_01.d	ブランク		2006/05/12 13:48	RMS	2.284	7		1.9296	1.9296	Accepted	15.0	2.602	28			
Calib-L1	CMAMCal_L1.d	キャリブレーション	L1	2006/05/12 13:51	2.5000 RMS	2.276	3794		2.2824	2.2824	91.3	Accepted	10.2	2.275	12175	25.2	
Calib-L2	CMAMCal_L2.d	キャリブレーション	L2	2006/05/12 13:54	5.0000 RMS	2.277	7433		4.6561	4.6561	93.1	Accepted	11.0	2.275	11691	23.0	
Calib-L3	CMAMCal_L3.d	キャリブレーション	L3	2006/05/12 13:57	12.5000 RMS	2.277	17023		11.2728	11.2728	90.2	Accepted	10.0	2.276	11059	24.2	
Calib-L4	CMAMCal_L4.d	キャリブレーション	L4	2006/05/12 14:00	25.0000 RMS	2.264	33212		24.8702	24.8702	99.5	Accepted	9.6	2.262	9780	24.8	
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	キャリブレーション	L5	2006/05/12 14:03	125.0000 RMS	2.271	110142		125.1668	125.1668	100.1	Accepted	9.6	2.268	6444	22.5	
QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	2006/05/12 14:06	5.0000 RMS	2.276	7253		4.8567	4.8567	97.1	Accepted	9.6	2.274	10938	23.9	
QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	2006/05/12 14:09	25.0000 RMS	2.276	31464		23.0331	23.0331	92.1	Accepted	9.1	2.274	10004	23.5	
Sample-1	CMAMSam_01.d	サンプル		2006/05/12 14:12	RMS	2.315	476		5.6138	5.6138	Accepted	12.6	2.314	620	27.5		
Sample-2	CMAMSam_02.d	サンプル		2006/05/12 14:15	RMS	2.280	7651		5.1778	5.1778	Accepted	10.4	2.278	10821	25.1		
Sample-3	CMAMSam_03.d	サンプル		2006/05/12 14:18	RMS	2.267	16710		10.7772	10.7772	Accepted	9.8	2.266	11355	23.8		

The bottom section of the screenshot shows chromatograms and a calibration curve. The chromatograms display peaks at retention times 2.284 min, 194.2 min, 194.2 min, 199.2 min, and 199.2 min. The calibration curve shows a linear relationship between relative concentration and relative response for MDMA.

5 実習 4 : 3つのツールを使用した結果の評価 タスク 3. 外れ値の検出

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

バッチテーブル

サンプル: Blank-1 サンプルタイプ: <すべて> 化合物: MDMA ISTD: MDMA-d5

サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時	MDMAメソッド			MDMA結果			クオリフ.		MDMA-d5 (IST.)		クオリフ.		
					予測濃度	ノイズアルゴリズム	RT	レスポンス	MI	計算濃度	最終濃度	精度	積分基準	比率	MI	RT	レスポンス
Blank-1	CMAMBik_01.d	ブランク		2006/05/12 13:48		RMS	2.284	7		1.9296	1.9296	Accepted	15.1	2.602	28		
Calib-L1	CMAMCal_L1.d	キャリブレーション	L1	2006/05/12 13:51	2.5000	RMS	2.276	3794		2.2824	2.2824	91.3	Accepted	10.2	2.275	12175	25.2
Calib-L2	CMAMCal_L2.d	キャリブレーション	L2	2006/05/12 13:54	5.0000	RMS	2.277	7433		4.6561	4.6561	93.1	Accepted	11.0	2.275	11691	23.0
Calib-L3	CMAMCal_L3.d	キャリブレーション	L3	2006/05/12 13:57	12.5000	RMS	2.277	17023		11.2728	11.2728	90.2	Accepted	10.0	2.276	11059	24.2
Calib-L4	CMAMCal_L4.d	キャリブレーション	L4	2006/05/12 14:00	25.0000	RMS	2.264	33212		24.8702	24.8702	99.5	Accepted	9.6	2.262	9780	24.8
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	キャリブレーション	L5	2006/05/12 14:00	125.0000	RMS	2.271	110142		125.1668	125.1668	100.1	Accepted	9.6	2.268	6444	22.5
QC-L2	CMAMQC_L2.d	QC	L2	2006/05/12 14:06	5.0000	RMS	2.276	7253		4.8567	4.8567	97.1	Accepted	9.6	2.274	10938	23.9
QC-L4	CMAMQC_L4.d	QC	L4	2006/05/12 14:09	25.0000	RMS	2.276	31464		23.0331	23.0331	92.1	Accepted	9.1	2.274	10004	23.5
Sample-1	CMAMSam_01.d	サンプル		2006/05/12 14:12		RMS	2.315	476		5.6138	5.6138	Accepted	12.6	2.314	62	27.5	
Sample-2	CMAMSam_02.d	サンプル		2006/05/12 14:15		RMS	2.280	7651		5.1778	5.1778	Accepted	10.4	2.278	10821	25.1	
Sample-3	CMAMSam_03.d	サンプル		2006/05/12 14:18		RMS	2.267	16710		10.7772	10.7772	Accepted	9.8	2.266	11355	23.8	

ステップ 2: メソッドのアンフェタミンの精度範囲を変更してバッチを再解析

- 化合物 **Amp** が表示されるまで、ツールバーの [前の化合物] アイコン < をクリックします。
- テーブルの [Calib-L5] 行を選択します。
- [メソッド] タブで、[編集] をクリックします
- メソッドタスクの [外れ値設定タスク] > [精度] をクリックします。

5 実習 4 : 3つのツールを使用した結果の評価 タスク 3. 外れ値の検出

5 Amp の、[精度 % 偏差の上限] を 5% に設定します。

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

メソッドテーブル

サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定メソッドファイル	測定日時
Calib-L5	CMAMCal_L5.d	キャリブレーション	L5	APClautotune.m	2006/05/12...

化合物名	TS	トランジション	測定モード	タイプ	精度%偏差の上限	LOQ精度の
Amp	1 136.2 -> 91.4	MRM	ターゲット	5.0	20.0	
Amp-d5	1 141.1 -> 93.4	MRM	ISTD	20.0	20.0	
Cocaine	1 304.1 -> 182.0	MRM	ターゲット	20.0	20.0	
Cocaine-d3	1 307.1 -> 185.0	MRM	ISTD	20.0	20.0	
MDMA	1 194.2 -> 163.3	MRM	ターゲット	20.0	20.0	
MDMA-d5	1 199.2 -> 164.3	MRM	ISTD	20.0	20.0	
Meth	1 150.1 -> 119.3	MRM	ターゲット	20.0	20.0	
Meth-d5	1 155.2 -> 92.3	MRM	ISTD	20.0	20.0	

サンプル情報

TIC MRM ("*" -> **) CMAMCal_L5.d

化合物情報

+ MRM (136.2000 -> 91.4000) CMAMCal_L5.d
 2.101 min
 136.2 -> 91.4, 136.2 -> 119.4
 比率 = 27.0 (95.5%)

+ MRM (141.1000 -> 93.4000) CMAMCal_L5.d
 2.076 min
 141.1 -> 93.4, 141.1 -> 124.4
 比率 = 26.4 (100.0%)

6 メソッドタスクで [保存 / 終了] > [終了] をクリックし、[メソッド適用後のバッチ処理オプション] の [なし] を選択し、[このメソッドをバッチに適用しますか?] というメッセージで [はい] をクリックします。







5 実習 4 : 3つのツールを使用した結果の評価 タスク 3. 外れ値の検出

- F5 を押し、バッチを解析します。これで、赤（高）と青（低）の外れ値が、Amp の [精度] 列に表示されます

[バッチテーブル] も 2 つのセクションに分割できます。デフォルトでは [サンプル] 列の位置がロックされ、他の列だけスクロールします。テーブルを 2 つのセクションに分割する場合、各セクションに表示する列を指定できます。[バッチテーブル] を分割する場合、[バッチテーブル] ショートカットメニューの [サンプル列のロック] メニュー項目の選択を解除する必要があります。

Ampメソッド		Amp結果					クオリ...		Amp-d5 (ISTD)...		クオリフ...								
φ	▼	サンプル名	データファイル	測定日時	予測濃度	ノイズアルゴリズム	RT	レスポンス	MI	計算濃度	最終濃度	精度	積分基準	比率	MI	RT	レスポンス	比率	MI
	▼	Blank-1	CMAMBik_01.d	5/12 13:48		RMS													
		Calib-L1	CMAMCal_L1.d	5/12 13:51	2.5000	RMS	2.141	658		2.4161	2.4161	96.6	Accepted	24.3		2.129	1397	25.9	
		Calib-L2	CMAMCal_L2.d	5/12 13:54	5.0000	RMS	2.140	1059		4.8556	4.8556	97.1	Accepted	33.5		2.128	1298	25.9	
		Calib-L3	CMAMCal_L3.d	5/12 13:57	12.5000	RMS	2.134	2673		12.8162	12.8162	102.5	Accepted	26.7		2.121	1377	26.3	
		Calib-L4	CMAMCal_L4.d	5/12 14:00	25.0000	RMS	2.022	4952		25.9394	25.9394	103.8	Accepted	29.1		1.990	1304	28.8	
		Calib-L5	CMAMCal_L5.d	5/12 14:03	125.0000	RMS	2.101	18605		124.0262	124.0262	99.2	Accepted	27.0		2.076	1053	26.4	
	▼	QC-L2	CMAMQC_L2.d	5/12 14:06	5.0000	RMS	2.142	1006		4.3336	4.333	86.7	Accepted	27.7		2.131	1356	31.1	
	▼	QC-L4	CMAMQC_L4.d	5/12 14:09	25.0000	RMS	2.135	4716		26.9911	26.991	108.0	Accepted	25.6		2.121	1196	31.1	
	▼	Sample-1	CMAMSam_01.d	5/12 14:12		RMS	2.080	6					Rejected						
		Sample-2	CMAMSam_02.d	5/12 14:15		RMS	2.143	1004		4.0008	4.0008		Accepted	30.9		2.130	1445	25.7	
		Sample-3	CMAMSam_03.d	5/12 14:18		RMS	2.105	2590		13.3556	13.3556		Accepted	25.3		2.089	1284	29.8	

ステップ 3 : 外れ値フラグアイコンセット の使用方法

- ツールバーの [上側の外れ値を持つサンプルを表示] アイコン  をクリックし、上側の外れ値を持つサンプルだけを表示します。
- [外れ値のフィルタを解除] アイコン  をクリックし、すべてのサンプルを表示します。
- ツールバーの [上側 / 下側の外れ値を持つサンプルを表示] アイコン  をクリックし、上側と下側の外れ値を持つサンプルだけを表示します。
- [上側 / 下側の外れ値を持つサンプルを表示] アイコン  を再びクリックし、すべてのサンプルを表示します。
- [外れ値の選択] アイコン  をクリックし、[外れ値] ダイアログボックスを呼び出します。
- [精度] チェックボックスと [リテンションタイム] チェックボックスをオフにし、[OK] をクリックします。
- [外れ値の選択] アイコン  をクリックし、[外れ値] ダイアログボックスを呼び出します。

5 実習4：3つのツールを使用した結果の評価

タスク3. 外れ値の検出

- 8 **【精度】** チェックボックスと **【リテンションタイム】** チェックボックスをオンにし、**【OK】** をクリックします。
 - **【バッチテーブル】** を復元して、外れ値あり / なしのすべてのデータファイルを表示するには、外れ値をフィルタするために選択したアイコンをもう一度クリックしてフィルタを解除します。

5 実習4：3つのツールを使用した結果の評価
タスク3. 外れ値の検出

実習 5：定量レポートの作成

この実習は、以下の実行方法を学習します。

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

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

実習方法を示す表は、以下の 3 列に分けて表示されています。

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

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

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

ステップ 1：バッチファイル *iii_Test_01.batch.bin* を開く

- 1 デスクトップの **QQQ 定量分析** アイコンをクリックしてプログラムを起動します。
- 2 **[ホーム]** タブで **[バッチを開く]** をクリックし、**[バッチを開く]** ダイアログボックスを表示します。

6 実習 5：定量レポートの作成

- 3 **\\Your Directory\DrugsOfAbuse** に移動し、**iii_Test_01.batch.bin** をクリックします。

バッチが既に開いている場合、ステップ 2 に進みます。

[スタート] メニューから **Agilent MassHunter Quantitative > 定量分析 (QQQ)** をクリックしてプログラムにアクセスすることもできます。

デフォルトレイアウトが表示されない場合、バッチを開く前に **[表示]** タブの **[デフォルトレイアウトの復元]** をクリックします。

ステップ 2：バッチのサンプルを定量し、結果を保存

- 1 バッチテーブルを開き、**[ホーム]** タブの **[バッチ処理]** をクリックして結果を作成します。

- 2 **[ファイル]** > **[バッチの保存]** をクリックしてバッチを保存します。

定量レポートには、バッチ実行中に作成されたサンプル情報が含まれています。レポート機能は、サンプル結果が定量され、保存されるまで動作しません。

バッチが既に定量されている場合、「**PDF レポートメソッドの作成**」に進みます。

ステップ 3：PDF レポートメソッドの作成

- 1 **[ホーム]** タブで、**[レポートの作成]** をクリックします。

[レポートの作成] ダイアログボックスが表示されます。

- 2 このレポートのデフォルト**レポートフォルダ** ディレクトリを受け入れます。

- 3 **[レポートメソッド]** フィールド下の **[新規作成]** ボタンをクリックし、新しいレポートメソッドを作成します。

- 4 **[レポートメソッドの編集]** ダイアログボックスの **[テンプレート追加]** ボタンをクリックしてブラウザを開きます。

- 5 **MassHunter/Report Templates/Quant/PDF-Reporting** ディレクトリに移動し、**DrugAnalysis.report.xml** を選択して、**[開く]** をクリックします。テンプレートが **[レポートメソッドの編集]** ペインの **[テンプレート]** フィールドに追加されます。

- 6 **ステップ 4** と **ステップ 5** を繰り返して

DrugAnalysis_DopingScreening.report.xml を追加します。

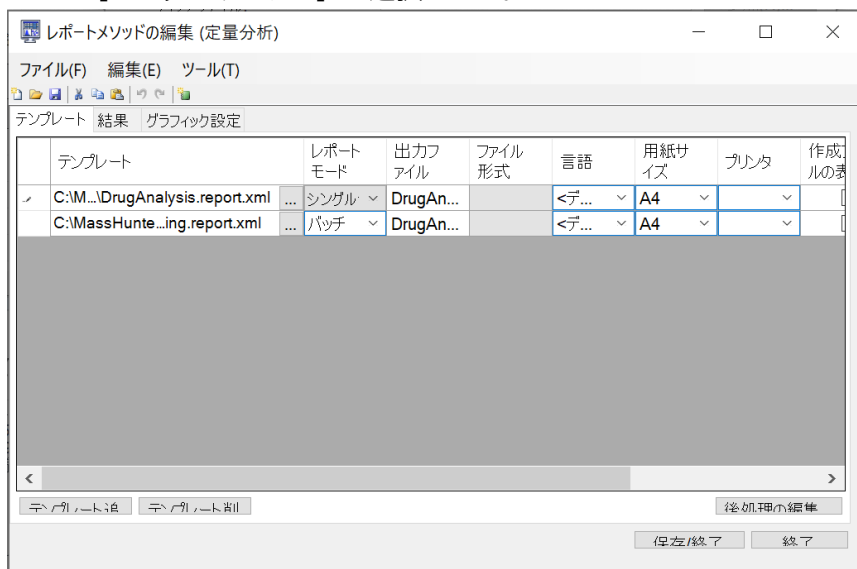
- **[レポートフォルダ]** フィールドで、レポートを保存するディレクトリを変更できます。

6 実習 5：定量レポートの作成

- ソフトウェアのレポートメソッド編集機能を使用すると、Excel レポート、PDF レポート、またはその両方を作成するためのレポートメソッドに、既存のテンプレートを組み合わせることができます。
- デフォルトは、前回のレポート作成で使用されたレポートメソッドです。適切なデフォルトメソッドならば、新規メソッドを作成せずにそのまま使用することができますし、別の既存メソッドを選択することも可能です。
- 既存のレポートメソッドを選択するには、[レポートメソッド] フィールド下の [選択] ボタンをクリックし、フォルダに移動してメソッドを選択します。

ステップ 4：レポートメソッドを編集して、シングルサンプルの PDF レポートとバッチの PDF レポートを作成

- 1 [レポートメソッドの編集] ダイアログボックスで、**DrugAnalysis.report** テンプレートの [レポートモード] フィールドのドロップダウンメニューから [シングルサンプル] を選択します。



- 2 **DrugAnalysis_Doping Screening.report** テンプレートの [レポートモード] フィールドのドロップダウンメニューから [バッチ] を選択します。
- 3 [言語] フィールドのドロップダウンメニューから言語を選択します。

6 実習 5：定量レポートの作成

- 4 **【用紙サイズ】** フィールドのドロップダウンメニューから用紙サイズを選択します。
 - **【レポートメソッドの編集】** ダイアログボックスでは、レポートメソッドに含めるテンプレートとその詳細を編集できます。
 - PDF レポートオプションでは、英語、中国語、日本語のレポートを作成できます。Excel レポートは英語のみ対象であるため、このオプションはグレーアウトになります。
 - Excel レポートでは用紙サイズに制限があります。PDF レポートの場合は自由に選択できます。
 - **【ファイル形式】** を選択することもできます。PDF レポートのファイル形式は1つしかないため、この例ではフィールドがグレーアウトになっています。

ステップ 5：レポート結果の処理方法を選択

- 1 **【レポートメソッドの編集】** ウィンドウの **【結果】** タブを選択します。
- 2 **【レポート結果ファイルの作成】** フィールドで **【自動】** をクリックします。



6 実習 5：定量レポートの作成

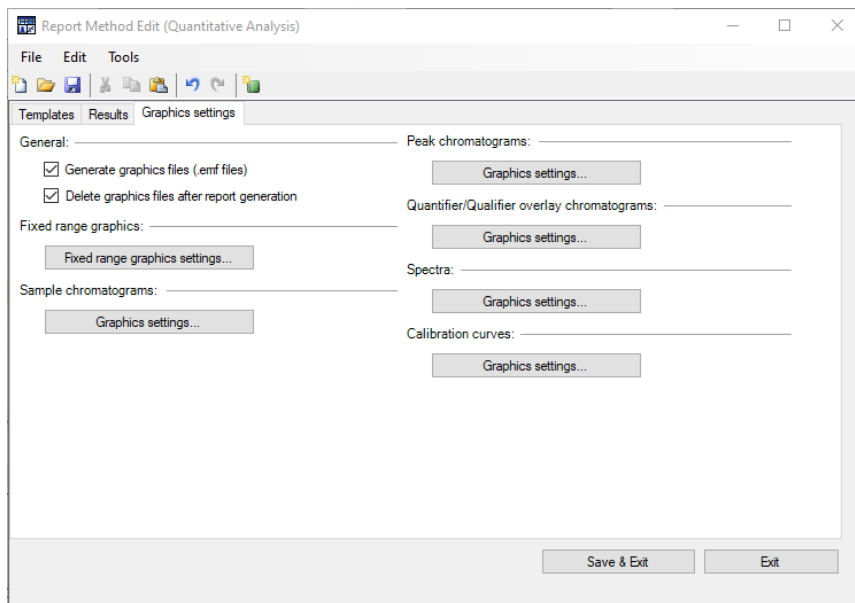
- 3 [機器] フィールドのドロップダウンメニューから **QQQ** を選択します。

ほとんどの場合 [自動] をお勧めします。自動を選択すると、Excel レポートを選択した場合のみ、レポートと一緒に Excel ファイルが作成されます。Excel ファイルを作成する必要がない場合は、PDF レポートの方が迅速で、効率的です。

ステップ 6：メソッドのグラフィック設定オプションを設定

- 1 [グラフィック設定] タブをクリックして、グラフィック設定を確認します。
- 2 [グラフィックファイルの作成] チェックボックスをオンにして、グラフィックをレポートに追加します。
- 3 グラフィック設定フィールドの残りフィールドはデフォルト設定のままにします。

[グラフィック設定] タブでは、[ターゲット/クオリファイアの重ね書きクロマトグラム]、[スペクトル]、[サンプルのクロマトグラム]、[検量線]、[固定範囲のグラフィック] 設定を使用して、レポートのグラフィック表示を指定することができます。設定を変更しないと、データに適したデフォルト設定が使用されます。



6 実習 5：定量レポートの作成

ステップ 7：レポートメソッドを保存

- 1 **【レポートメソッドの編集】** ウィンドウの保存アイコンをクリックします。
- 2 レポートメソッドに **DOA.m** という名前を付けます。

ウィンドウを閉じてレポートを作成するには、メソッドを保存する必要があります。

ステップ 8：レポートメソッドの編集 ウィンドウを閉じる

- 1 **【保存 / 終了】** をクリックして **【レポートメソッドの編集】** ダイアログボックスを閉じ、**【レポートの作成】** ウィンドウに戻ります。

レポートの作成

バッチファイル:

バッチフォルダ: C:\MassHunter\Data\DrugsOfAbuse\

バッチファイル: iii_Test_01.batch.bin 参照(R)...

レポートフォルダ: C:\MassHunter\Data\DrugsOfAbuse\QuantReports\iii_Test_01 参照(W)...

レポートメソッド: \\Mac\Home\Documents\Quant\Report Templates\Quant\PDF-Reporting\DOA.m

選択... 新規作成... 編集...

サンプル/化合物:

すべてのサンプル サンプル選択...

すべての化合物 化合物選択...

作成:

すぐにレポートを作成

レポート作成後にレポートフォルダを開く

レポートタスクをキューに追加

キュービューアの開始

OK キャンセル

6 実習 5：定量レポートの作成

ステップ 9：メソッドからレポートを作成

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

<input type="checkbox"/> 名前	更新日時	種類	サイズ
 DrugAnalysis_000_CMAMBIk_01.pdf	2021/12/06 18:30	Adobe Acrobat D...	247 KB
 DrugAnalysis_DopingScreening.pdf	2021/12/06 18:30	Adobe Acrobat D...	201 KB

ステップ 10：レポートを表示

- 1 ファイルをダブルクリックし、レポートを開いて表示します。

Windows Explorer からファイルを選択してレポートを開くこともできます。

6 実習 5：定量レポートの作成

リファレンス

10 の主要機能	86
定量メソッド	90
パラメータレス積分	91
バッチ一覧:結果	93
化合物クロマトグラムの一覧	94
化合物の確認	96
化合物キャリブレーション	98

10の主要機能

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

バッチ一覧: バッチテーブル設定

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

定量の適用が細分化されているため、特定シグナルをすばやく操作できます。

- 積分 - 現在のバッチ、サンプル、化合物シグナルを積分します。

メソッドエディタ

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

キャリブレーション

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

7 リファレンス

10の主要機能

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

インテグレータ

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

バッチ一覧: 結果

- ナビゲーション - サンプル、化合物、タイムセグメント、化合物グループ間をすばやく移動します (前、次、直接)。
- 化合物ビュー - 現在の化合物 / サンプルの詳細または複数の化合物 / サンプルのサマリを切り替えます。
- バッチテーブルビュー - フラットテーブルレイアウトや、縦または横のネストテーブルへの変更による詳細表示、化合物テーブルレイアウトが可能です。
- ウィンドウレイアウト - 画面をデフォルトに再整理するか、カスタムウィンドウレイアウトを保存するか読み込みます。

7 リファレンス

10の主要機能

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

化合物クロマトグラムの一覧：結果

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

外れ値検出

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

レポート

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

更新

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

定性

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

定量メソッド

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

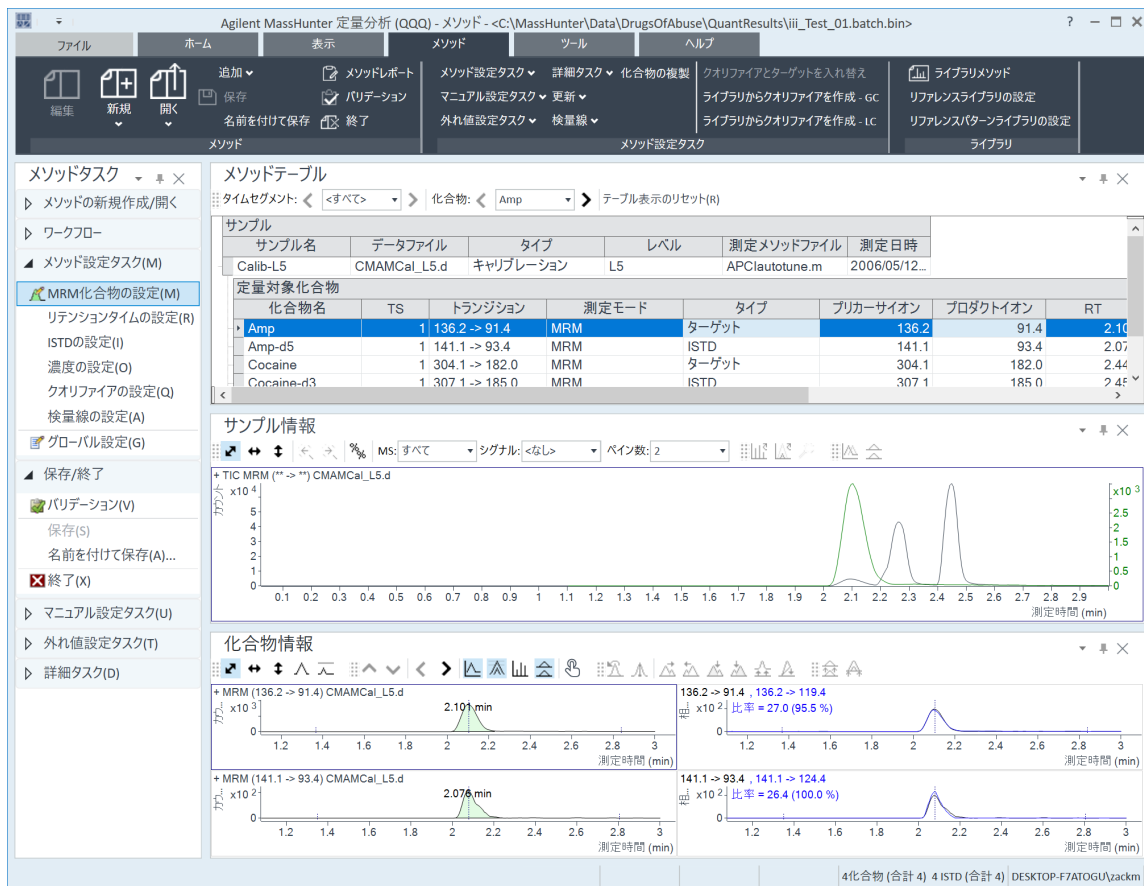


図 12. 定量ビュー - メソッドエディタ

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

パラメータレス積分

パラメータレス積分とは

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

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

積分結果の例

図 13 に、両極端なデータを示します。

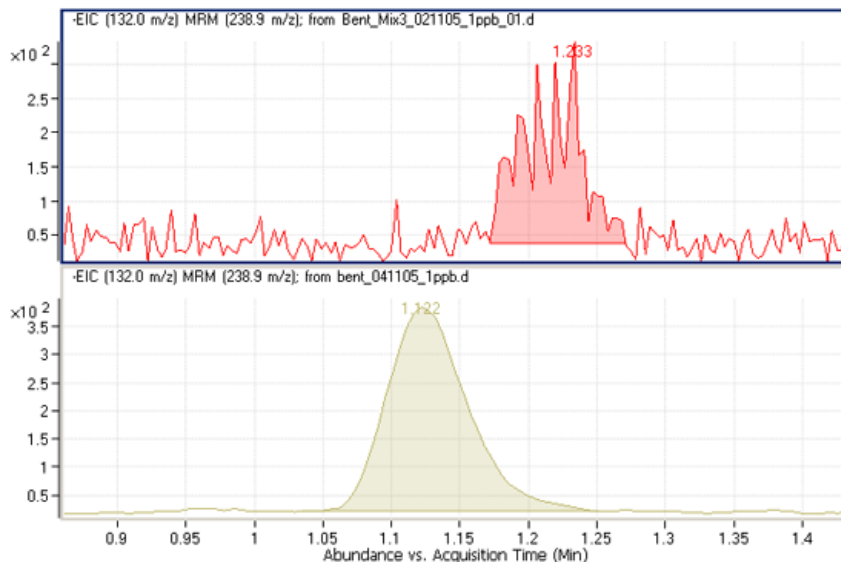


図 13. パラメータレス積分 - 両極端なデータ

7 リファレンス パラメータレス積分

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

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

7 リファレンス バッチ一覧：結果

バッチ一覧：結果

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

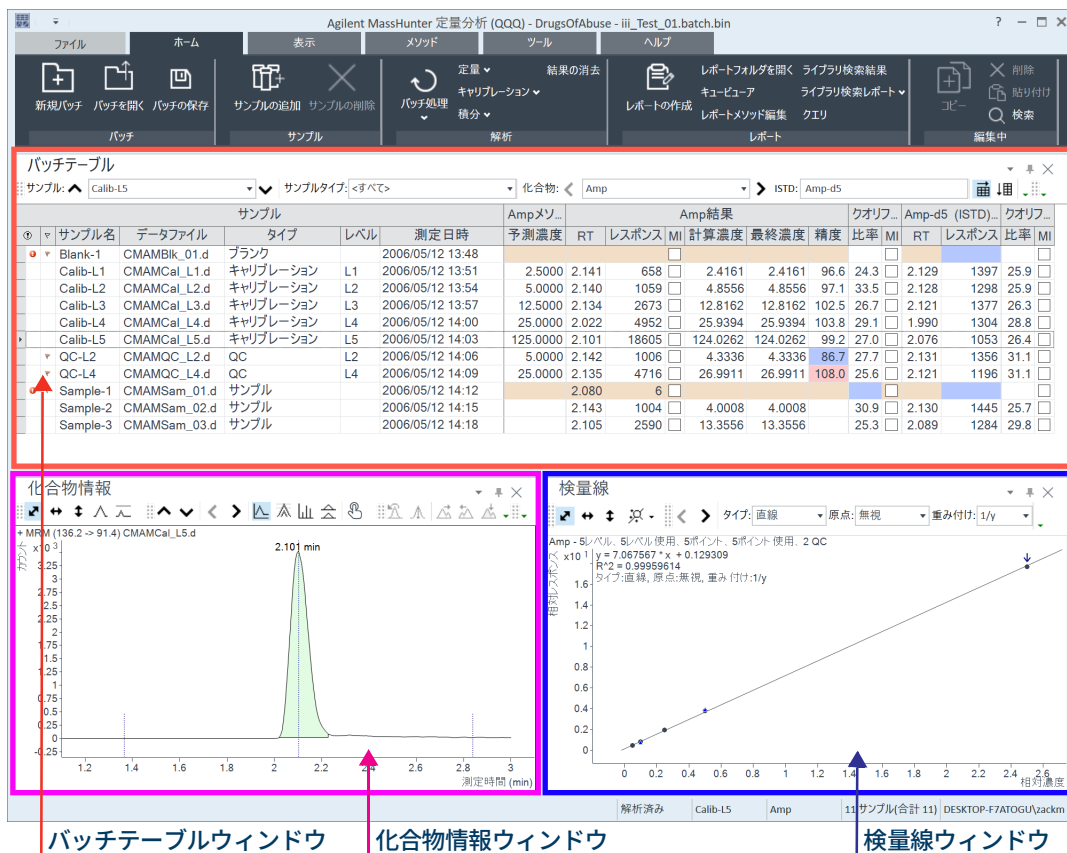


図 14. Amp 結果

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

化合物クロマトグラムの一覧

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

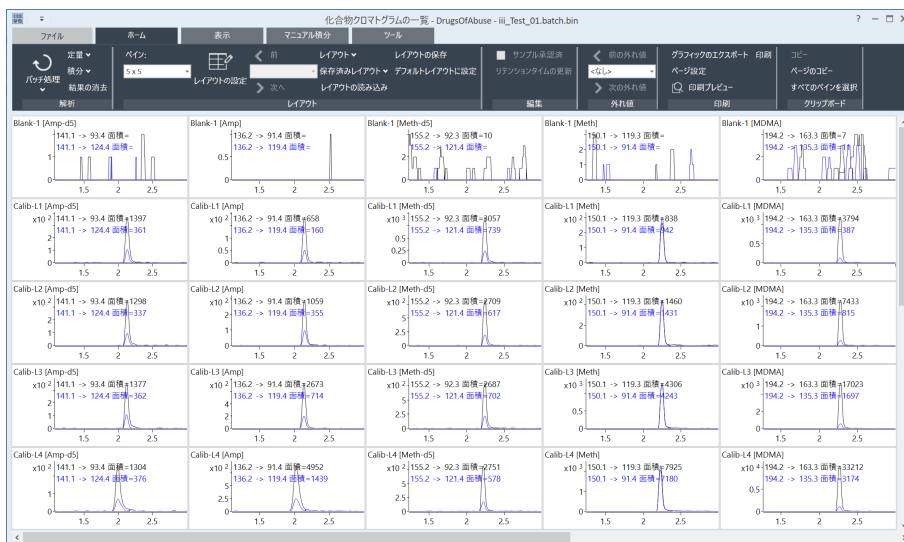


図 15. 定量分析における化合物一覧

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

- [サンプル] タブには、バッチ内のすべてのサンプルリストがあり、すべてのサンプルを表示させたり、特定のサンプルを表示させたりするオプションを設定します。
- [化合物] タブには、バッチ内で検出された化合物リストがあります。表示する化合物が選択できます。

7 リファレンス

化合物クロマトグラムの一覧

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

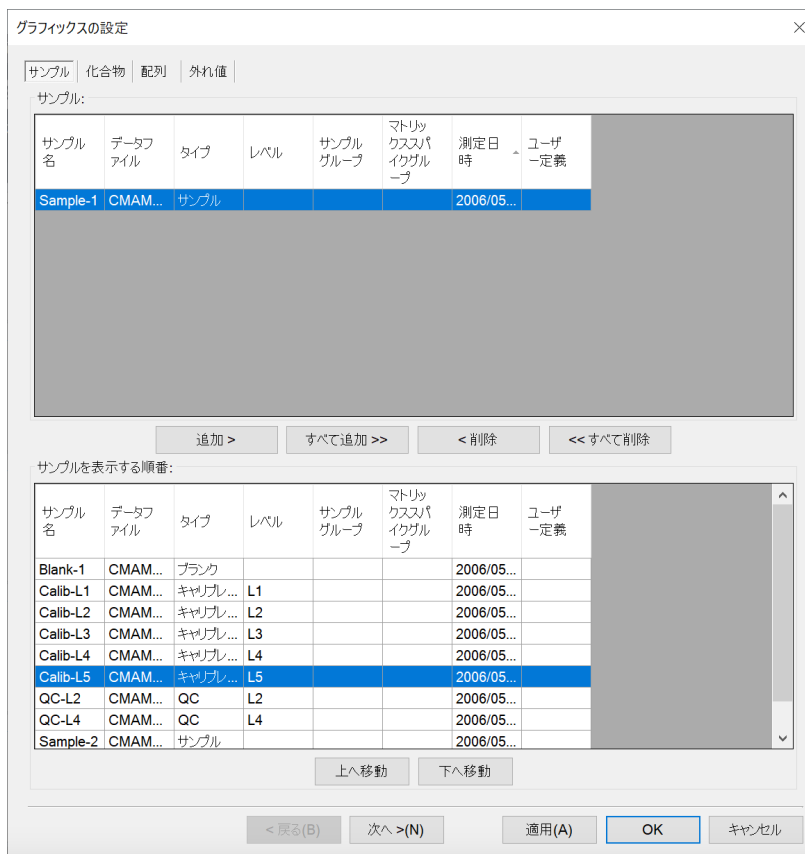
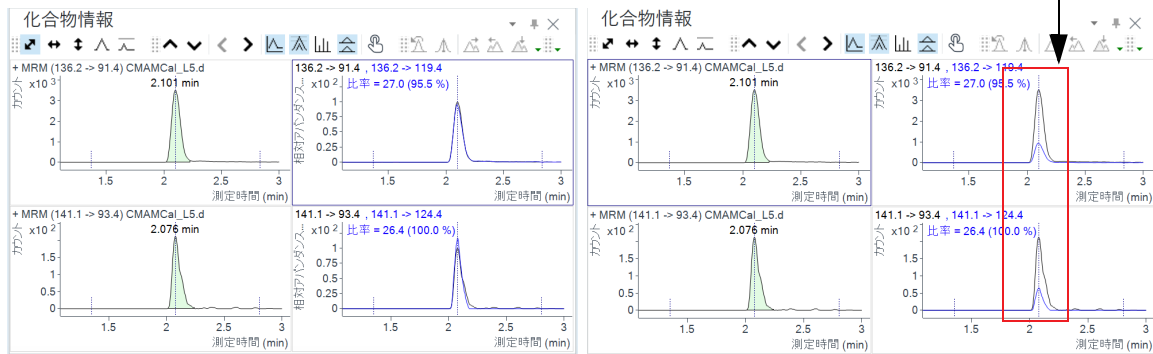


図 16. 化合物クロマトグラムの一覧の設定オプション

化合物の確認

図 17 に示す図は、認定された薬物検査ラボでは、特に有用な機能を表示しています。これは、THC 分析から得た 2 組のプロットを示しています。

定量イオンとクオリファイアイオンの重ね書き



Amp クオリファイアイオン - ノーマライズ

Amp クオリファイアイオン - 通常表示 (ノーマライズなし)

図 17. 定量分析の Amp (アンフェタミン)

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

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

7 リファレンス 化合物の確認

クオリファイアピークは $1/0.265$ の係数でノーマライズされるため、左の図からクオリファイアイオンが許容範囲に入るか、入らないかを簡単には決定できません。右の図では、許容範囲は定量イオンピークの 26.5% に中心があり、クオリファイアイオンはノーマライズされずに、定量イオンと同じスケールで描かれます。イオンが許容範囲外の場合、定量イオンが隠れてしまわないよう、半透明の紫色でピークが塗りつぶされます。これにより、化合物を視覚的に容易に確認することができます。

化合物キャリブレーション

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

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

カーブフィットアシスタント

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

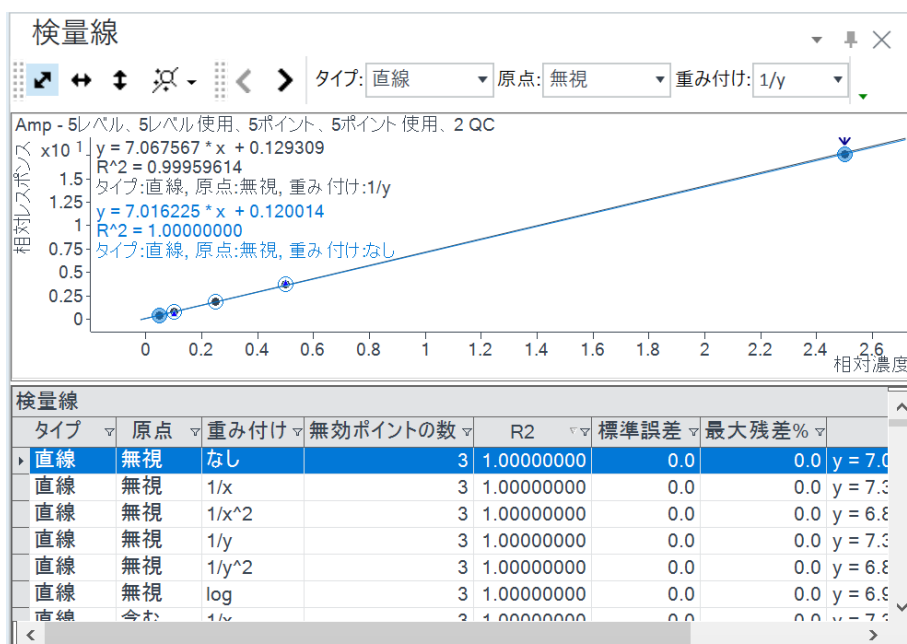


図 18. カーブフィットアシスタント

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

7 リファレンス 化合物キャリブレーション

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

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

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

データポイント情報

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

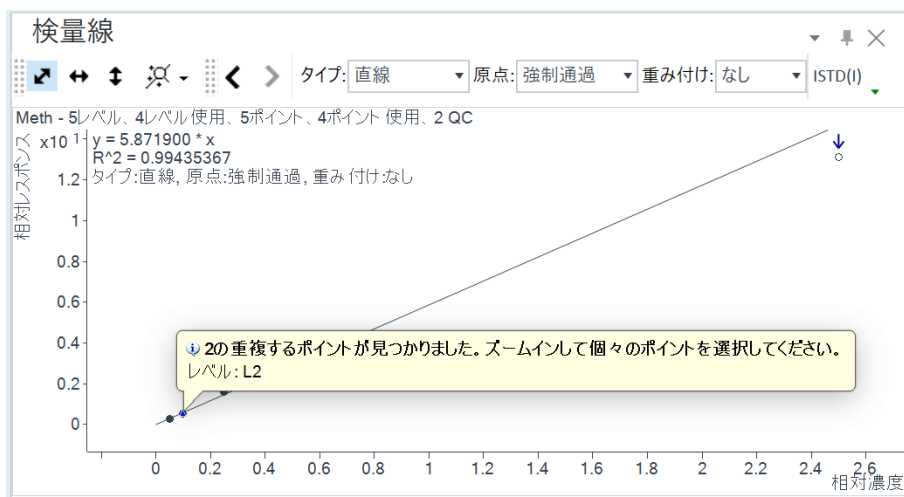


図 19. Amp 結果 : キャリブレーションデータポイント情報

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

7 リファレンス 化合物キャリブレーション

データポイントズーム

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

www.agilent.com

© Agilent Technologies, Inc. 2021

第 1 版 2021 年 11 月



G3336-96057

