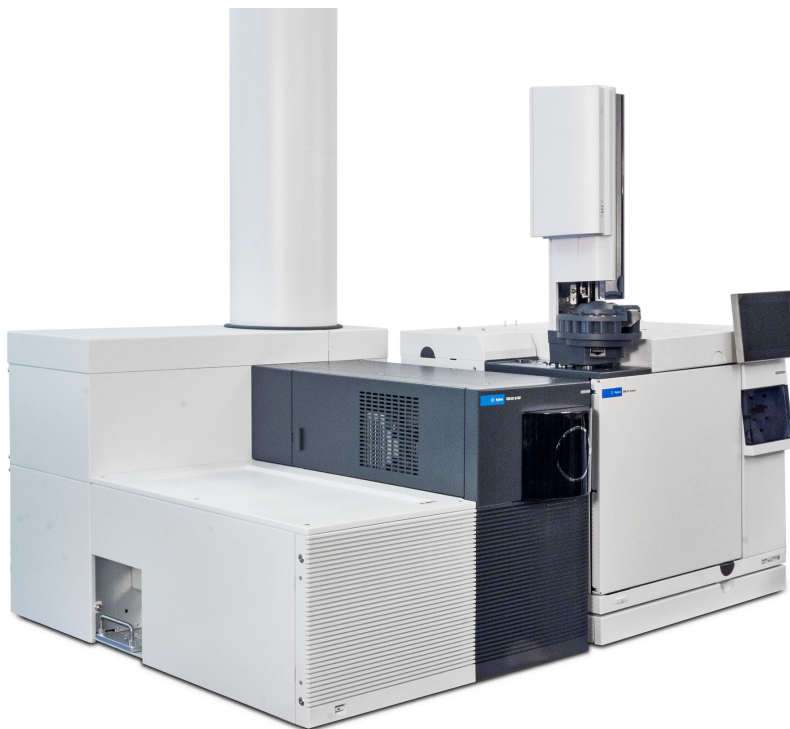




Agilent MassHunter Workstation ソフトウェア -  
7250 Accurate-Mass 四重極飛行時間型 GC/MS  
ファミリアリゼーションガイド



## 注意

© Agilent Technologies, Inc. 2019

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

G7250-96013

## エディション

第1版 2019年1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せん。

## 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。

# 目次

## ファミリアリゼーションガイド

始める前に	6
実習 - 7250 用取り込みメソッドの開発	9
タスク 1. 注入口と注入パラメータの設定	10
タスク 2. GC コンフィグレーションの確認	11
タスク 3. ベースイオンアバンドランスの最適化と 質量キャリブレーションの実行	13
タスク 4. GC 測定パラメータの設定	17
タスク 5. イオンスキャンの定性測定メソッドの作成	21
タスク 6. MS スキャンデータの取り込み（オプション）	24
タスク 7. シーケンスを使用した質量キャリブレーションの スケジュール	26
実習 - データの解析	28
タスク 1. 定性ナビゲータプログラムでデータファイルを開く	29
タスク 2. 定性分析ユーザーインターフェイスの コンフィグレーション	31
タスク 3. 定性ナビゲータでのピークの同定	34
タスク 4. 定性分析ワークフローを使用した化合物の同定	36
タスク 5. 自動化メソッドレポートのコンフィグレーション	39
タスク 6. 自動化メソッドワークフローの作成	42
タスク 7. 結果のレビュー	45
タスク 8. Unknowns Analysis を使用した化合物の同定	49



# ファミリーリゼーションガイド

このガイドは、Agilent 7250 Q-TOF GC/MS システムを使用して、サンプルデータを取り込み、解析する方法を説明しています。このガイドのデータ取り込みステップを省略する場合は、MassHunter 付属のデモデータファイルを使用してください（6 ページの「[参考資料](#)」を参照）。

このガイドでは、対象化合物を分析するのに最適な測定パラメータを決定する方法を学習します。これらの説明から、最高感度のデータを取得するために、機器パラメータを最適化するメソッドの設定方法や、定性分析プログラムを使用して、最適なシグナルレスポンスを得るためのパラメータ値を特定する方法を学習できます。

## 始める前に

### 参考資料

以下は MassHunter ソフトウェアユーザー情報 DVD の 7250 Q-TOF インストールに収録されています。このドキュメントアプリケーションは、MassHunter ソフトウェアの一部として提供されます。

- GC/MS 用 MassHunter 定性分析ファミリアリゼーションガイド；定性分析ナビゲータプログラムなど、このガイドに記載されていない多くの定性分析プログラム機能を紹介しています。
- 定性分析トレーニングビデオ；MassHunter 定性分析ナビゲータおよび MassHunter 定性ワークフローの総合的な使用方法について説明したビデオレッスンになります。
- オンラインヘルプ；定性分析の仕組みに関する詳細情報です。
- デモデータファイルおよび精密質量マスマイブラリ；測定化合物データやライブラリライセンスをお持ちでない場合でも、ここで説明するすべての分析ステップを実行することができます。
- クイックスタートガイド；アプリケーションにどのようなドキュメントが含まれるか、また各ドキュメントにどのような情報が記載されているかを説明しています。

以下はユーザーマニュアル & ツール DVD の 7250 Q-TOF インストールに収録されています。このドキュメントアプリケーションは、7250 Q-TOF 機器に添付されてきます。

- コンセプトガイド；7250 Q-TOF GC/MS システムの仕組みについてさらに詳しく学習します。
- クイックスタートガイド；アプリケーションにどのようなドキュメントが含まれるか、また各ドキュメントにどのような情報が記載されているかを説明しています。
- ハードウェアマニュアル；7250 Q-TOF の操作方法やメンテナンスの実施方法について学習します。

## システムの準備

- 1 以下を確認します。
  - MassHunter 測定、MassHunter 定性分析、および MassHunter 定量分析がインストールされている。
  - スプリット / スプリットレス注入口またはマルチモード注入口 (MMI) およびオートサンプラを備えた Agilent 8890 または 7890 シリーズ GC システムを使用している。
  - 10  $\mu$ L ALS シリンジ (23-26s ニードル) を使用している。適切なシリンジで代用可能です。
  - 7250 Q-TOF GC/MS システムがコンフィグレーションされていて、チューニングされている。
  - 性能を検証してある。
  - システムの電源が入っている。
  - 適切なカラムが取り付けられている。J&W モデル 122-3832 DB-35MS : このガイドでは、30 m x 250  $\mu$ m、0.25  $\mu$ m カラムを使用しています。
- 2 取り付けられているカラムに対して GC をコンフィグレーションします。
- 3 必要に応じて、6 ページの「**参考資料**」に記載されているデモデータファイルと精密質量マスマスライブラリをハードディスクの任意の場所にコピーしてください。測定データや 8 ページの**表 1** に示されている化合物の精密質量マスマスライブラリがない場合は、このデータファイルと精密質量マスマスライブラリファイルをこの実習で使用します。

## データ取り込みに必要なサンプルの準備

データ取り込みを行わずに定性分析プログラムの使用方法を学習する場合は、サンプルの準備と実際の測定を省略して、このガイドに付属しているデータファイルを使用することができます。9 ページの「**実習 - 7250 用取り込みメソッドの開発**」を読み、Agilent の機器に固有の設定について理解することをお勧めします。

サンプルの準備に必要なもの：

- サンプル (p/n 05970-60045 または p/n 5074-3025 (日本のみ))
- サンプル希釈用イソオクタン
- サンプルバイアル

サンプル化合物は、イソオクタン溶媒の 1 mL アンプル (濃度 10 ng/μL、100ng/μL、および 100 pg/μL) に入っています。**表 1** を参照してください。

**表 1** サンプル化合物リスト

化合物	m/z	式
ドデカン	170.2029	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>
ビフェニル	154.0777	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub>
4-クロロビフェニル (p/n 05970-60045 のみ)	188.0387	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> Cl
パルミチン酸メチル	270.2553	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>

10 ng/μL アンプルの中身を ALS サンプルバイアルに移し換えて定性分析サンプルを準備し、バイアルにキャップを付けます。

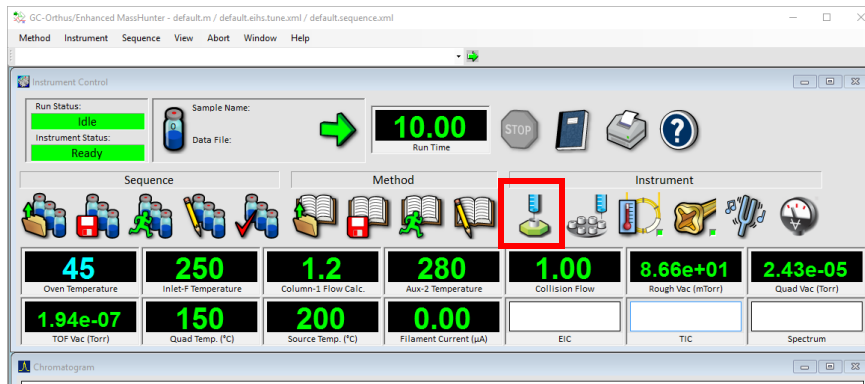
ALS 洗浄バイアルにイソオクタンを充てんします。

## 実習 - 7250 用取り込みメソッドの開発

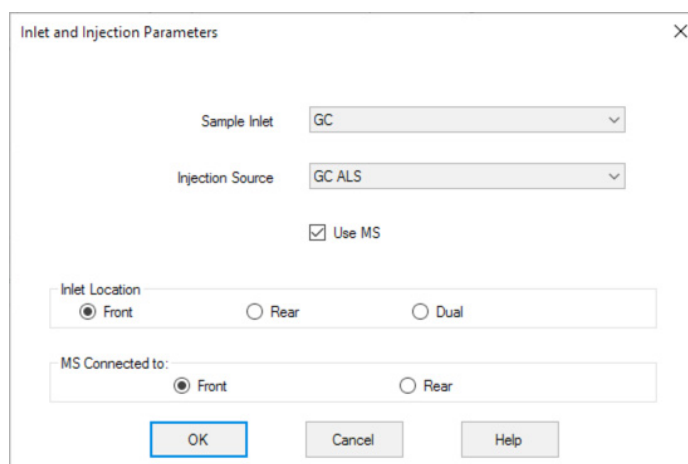
- タスク 1. 注入口と注入パラメータの設定 10
- タスク 2. GC コンフィグレーションの確認 11
- タスク 3. ベースイオンアバンドランスの最適化と質量キャリブレーションの実行 13
- タスク 4. GC 測定パラメータの設定 17
- タスク 5. イオンスキャンの定性測定メソッドの作成 21
- タスク 6. MS スキャンデータの取り込み（オプション） 24
- タスク 7. シーケンスを使用した質量キャリブレーションのスケジュール 26

## タスク 1. 注入口と注入パラメータの設定

- 1 Windows デスクトップの [データ測定] アイコンをダブルクリックします。
- 2 [注入口と注入パラメータ] アイコンをクリックします。アイコンの上にポインタを合わせると、アイコンを説明するタグが表示されます。



[注入口と注入パラメータ] ダイアログボックスが表示されます。

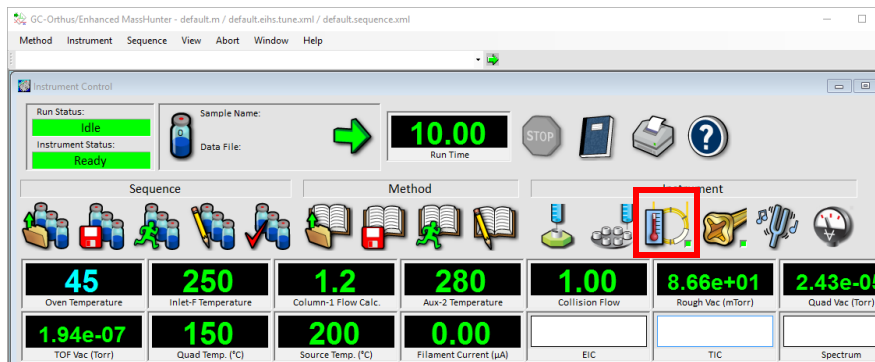


- 3 サンプル注入口に [GC] を、注入方法に ALS を選択します。
- 4 [MS 使用] ボックスをオンにします。

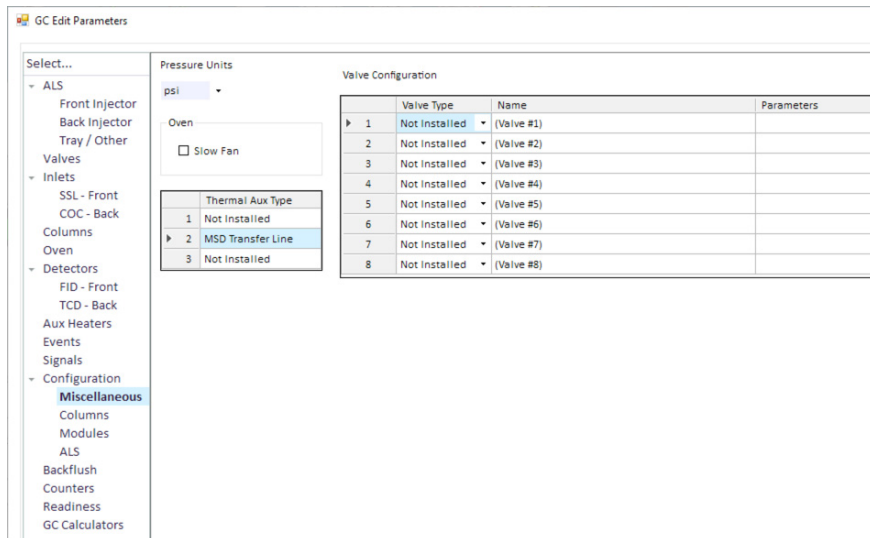
## タスク 2.GC コンフィグレーションの確認

この実習では、分析用 GC ハードウェアのセットアップについて確認します。

- 1 [GC パラメータ編集] アイコンをクリックします。



- 1 [GC パラメータ編集] ウィンドウが表示されます。



- 2 ナビゲーションメニューで、[コンフィグレーション] > [その他] を選択します。
- 3 [圧力単位] を [psi] に設定します。
- 4 [オープン] 領域の [低速ファン] モードのチェックを外します。

- 5 ナビゲーションメニューで、**[コンフィグレーション]** > **[カラム]** を選択し、**[カラム 1]** を J&W 122-3832 カラム、またはそれと同等なカラムに設定します。**[注入口]** を **[フロント注入口 (またはバック注入口)]** に設定し、**[出口]** を **[MSD]** に設定します。**[加熱部]** を **[オープン]** に設定します。

別のカラムを使用している場合は、クロマトグラフィに合わせて GC パラメータ設定を調整する必要があります。

- 6 ナビゲーションメニューで、**[コンフィグレーション]** > **[モジュール]** を選択し、**[SS 注入口]** のガスを **[He]** に設定し、**[コリジョンセル EPC]** のガスを **[N2]** に設定します。
- 7 ナビゲーションメニューで、**[コンフィグレーション]** > **[ALS]** を選択し、**[シリンジサイズ]** を **[10 uL ALS シリンジ (23-26s ニードル)]** に設定し、**[溶媒洗浄モード]** を **[A、B]** に設定します。

適切なシリンジで代用可能です。

- 8 **[OK]** をクリックします。

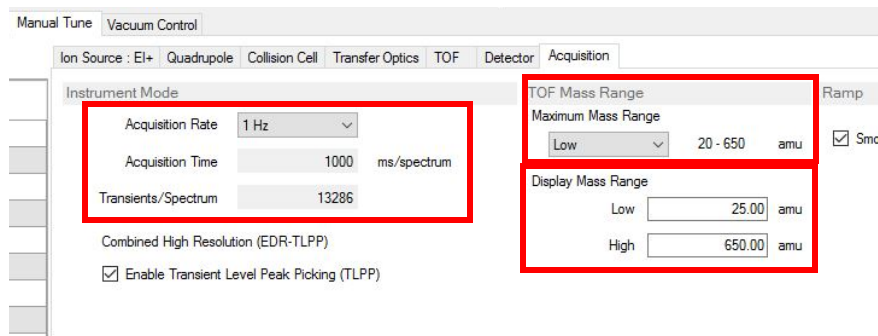
GC パラメータが GC にダウンロードされ、ウィンドウが閉じます。

## タスク 3. ベースイオンアバンドランスの最適化と質量キャリブレーションの実行

この実習では、ベースイオンのアバンドランスを最適化し、質量キャリブレーションを実行します。質量キャリブレーションは2分以内に完了します。毎日または数時間ごとに機器をキャリブレーションするようにしてください。シーケンステーブルのキーワードを使って、シーケンスでサンプル測定を行っている途中に、自動質量キャリブレーションを行うことができます。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。

### ステップ 1 測定データの $m/z$ 範囲と、分析のために保存するデータ範囲を設定します。

- 1 [MassHunter 機器コントロール] 画面で、[MS チューニング] アイコンをクリックします。[GC/Q-TOF チューニング] ウィンドウが表示されます。
- 2 [マニュアルチューニング] タブをクリックし、[測定] タブをクリックします。



- 3 [測定速度] ドロップダウンから [1 Hz] を選択します。これはキャリブレーション中の速度です。
- 4 [最大質量範囲] ドロップダウンから [低] を選択します。  
データは 20 ~ 650  $m/z$  の範囲でスキャンされます。データのスキャンには他に 2 つの質量範囲が利用できます。[標準] 範囲は 20 ~ 1200  $m/z$  で、[拡張] 範囲は 20 ~ 3000  $m/z$  です。[低] 範囲を選択して、実習データで最高感度が得られるようにします。
- 5 質量範囲の低に 25 と入力し、[高] に 650 と入力します。

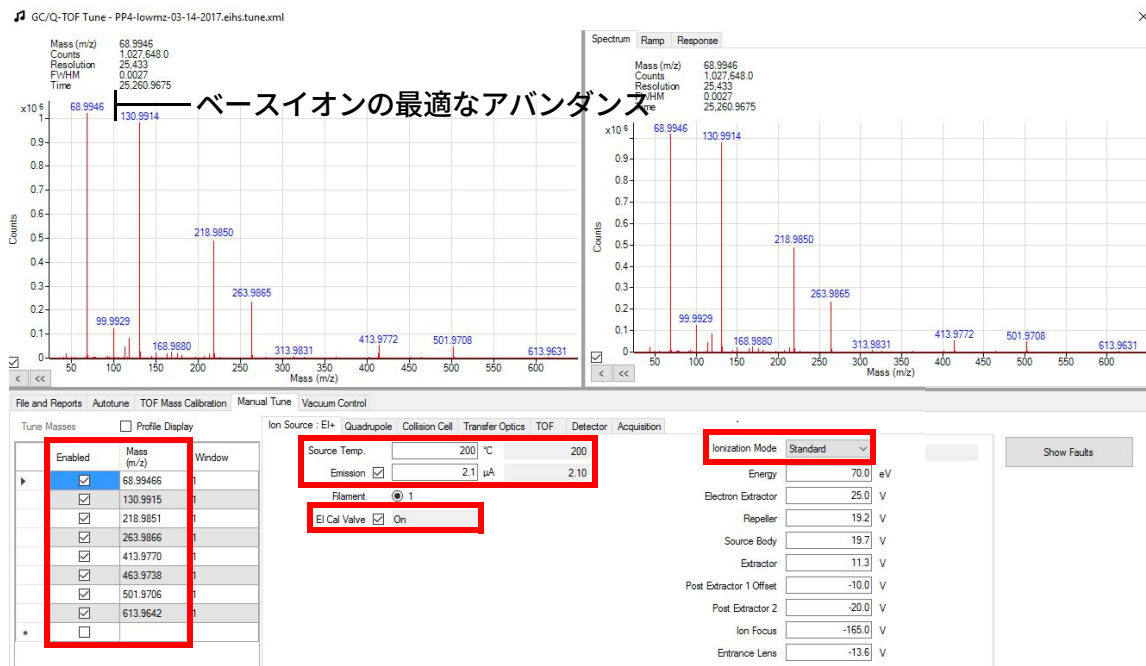
25 ~ 650  $m/z$  の範囲で取り込まれたデータが、チューニングスペクトルウィンドウに表示されます。

## ファミリーリゼーションガイド

### タスク 3. ベースイオンアバンドランスの最適化と質量キャリブレーションの実行

ステップ 2 ベースイオンのアバンドランスを最適化します。  
このステップは通常、キャリブレーションを実行する前に行います。

- 1 [イオン源] タブをクリックし、[チューニング質量] を [有効] にします。



- 2 キャリブラントフローのイオン化を有効にするには、[エミッション] および [EI Cal バルブ] を有効にします。
- 3 対象となるイオンのアバンドランスが理想的に  $0.8 \times 10^6$  から  $1.2 \times 10^6$  の間に収まるように、エミッション電流を調整します。値が大きすぎると信号が飽和状態になり、値が小さすぎると最適な質量精度に関するイオン統計情報が十分に得られません。

ステップ 3 質量キャリブレーションを実行します。

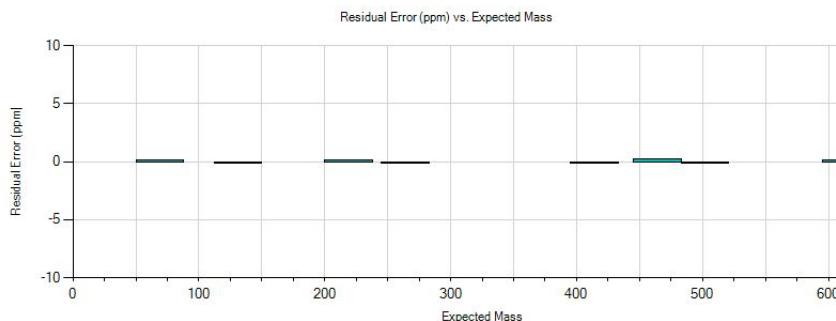
- 1 [GC/Q-TOF チューニング] ウィンドウから [TOF 質量キャリブレーション] タブを選択します。

24 ページの「タスク 6.MS スキャンデータの取り込み（オプション）」を参照してください。

2 [キャリブレーション実行] をクリックします。

キャリブレーションが完了すると、[TOF 質量キャリブレーション結果] ウィンドウが表示されます。キャリブレーションに使用されるすべてのイオンに対して [質量精度 (ppm)] が通常 1 PPM 以下になっている必要があります。

 TOF Mass Calibration Results



A = 0.000345801089478936, T0 = 1240.52592904741

Target Mass	Actual Mass	Accuracy (PPM)	Previous Mass	Previous Accuracy (ppm)
✓ 68.9947	68.9947	0.01	68.9949	3.27
✓ 130.9915	130.9915	-0.03	130.9918	2.29
✓ 218.9851	218.9851	0.09	218.9856	2.25
✓ 263.9866	263.9866	-0.07	263.9871	2.03
✓ 413.9770	413.9769	-0.12	413.9776	1.62
✓ 463.9739	463.9739	0.27	463.9747	2.06
✓ 501.9706	501.9705	-0.17	501.9715	1.82
✓ 613.9642	613.9642	0.01	613.9666	3.99

For enabled m/z values over 50, average PPM error 0.00, maximum PPM error 0.3  
limits for average PPM error 3.0, maximum PPM error 8.0

Show Detailed Chart

Close

3 [閉じる] をクリックします。

4 [ファイルとレポート] タブをクリックし、チューニングファイルを保存します。チューニングファイルを atune-lowmz\_date.ei.tune.xml という名前で保存します。date には、今日の日付が入ります。

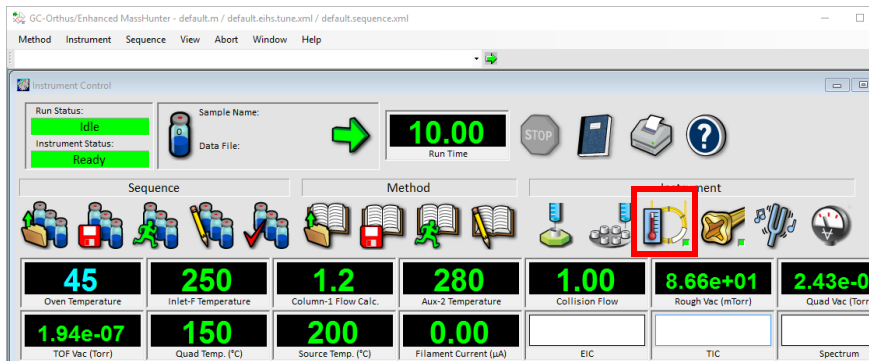
5 [閉じる] をクリックします。

[GC/Q-TOF チューニング] ウィンドウが閉じ、[機器コントロール] 画面に戻ります。

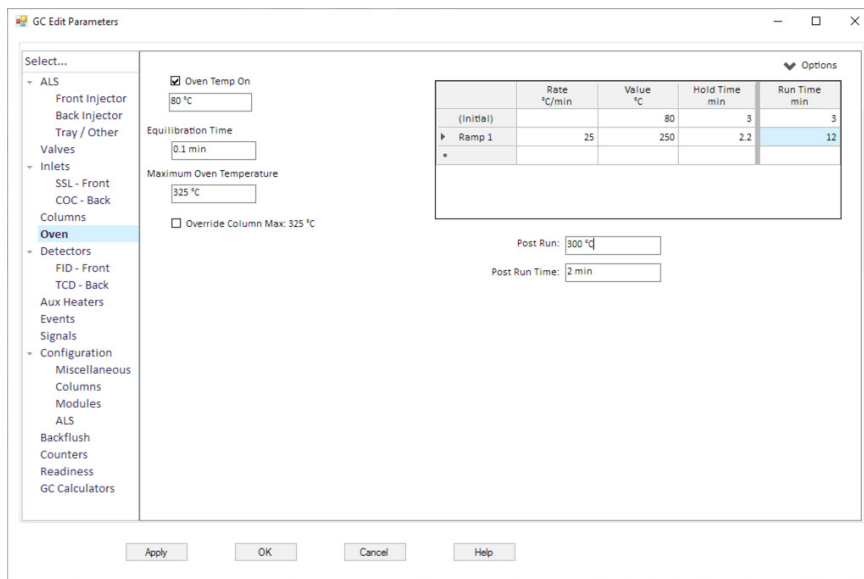
## タスク 4.GC 測定パラメータの設定

この実習では、分析する GC の条件を設定します。

- 1 [GC パラメータ編集] アイコンをクリックします。ウィンドウが選択された状態で、アイコンの上にマウスを移動すると、アイコンを特定できるツールのヒントが表示されます。



[GC パラメータ編集] ウィンドウが表示されます。



- 2 ナビゲーションメニューで [カラム] を選択し、[選択] 列で [カラム 1] を選択します。

## ファミリアリゼーションガイド

### タスク 4.GC 測定パラメータの設定

- 3 コントロールモード [オン] を選択してから、[ **コンスタントフロー** ] モードを選択します。流量として 「1.1 mL/min」 を入力します。
- 4 [説明] 列で [ **コリジョンセル EPC** ] を選択し、[ **コリジョンセル EPC** ] エリアで、[ **N2 コリジョンガス** ] を 1.5 mL/min に設定します。  
  
コリジョンセル N2 ガスの現在の流量値を 1.5 mL/min に変更した場合は、オートチューニングが必要になります。
- 5 [ **コリジョンセル EPC** ] エリアで、[ **He クエンチングガス** ] のチェックを外します。
- 6 ナビゲーションメニューで [ **注入口** ] > [ **SSL** ] を選択し、19 ページの **表 2** にリストされている注入口パラメータを入力します。
- 7 [ **オープン** ] アイコンをクリックし、19 ページの **表 2** にリストされているオープンパラメータを入力します。
- 8 [ **ALS** ] > [ **フロントインジェクタ** ] を選択し、19 ページの **表 2** にリストされているインジェクタパラメータを入力します。  
  
ALS が **バック注入口** に接続されている場合は、[ **バックインジェクタ** ] タブを選択します。
- 9 ナビゲーションメニューで [ **Aux ヒーター** ] アイコンを選択し、Aux 温度を ON にして、温度を 280 °C に設定します。これは MSD トランスファラインヒーターです。
- 10 [ **OK** ] をクリックします。GC パラメータが GC にダウンロードされ、ウィンドウが閉じます。

表2 データ測定メソッドの GC パラメータ

パラメータ	値
オープン	
平衡化時間	0.1 min
オープンプログラム	80 °C でホールド時間 3 min、 25 °C/min で 250 °C まで昇温し、 さらにホールド時間 2.2 min
ランタイム	12 min
フロント SS 注入口	He
モード	スプリット
ヒーター	オン、250 °C
圧力	オン、この値はカラム流量によって自動的に設定 されます
セブタムパージ流量	オン、3 mL/min
ガスセーバー	オン、20 mL/min ; 注入後 3 min
スプリットフロー	220 mL/min
スプリット比	200:1
Aux 2 温度 (MSD トランスファライン)	
ヒーター	オン
温度	280 °C
カラム #1	J&W 122-3832 DB-35ms : 30 m x 250 µm、0.25 µm
イン	フロント SS 注入口 He
アウト	真空
(初期)	80 °C
流量	1.1 mL/min
流量プログラム	オフ
フロントインジェクタ	
シリンジサイズ	10 µL
注入量	1 µL
溶媒 A 洗浄 (注入前)	2
溶媒 A 洗浄 (注入後)	2

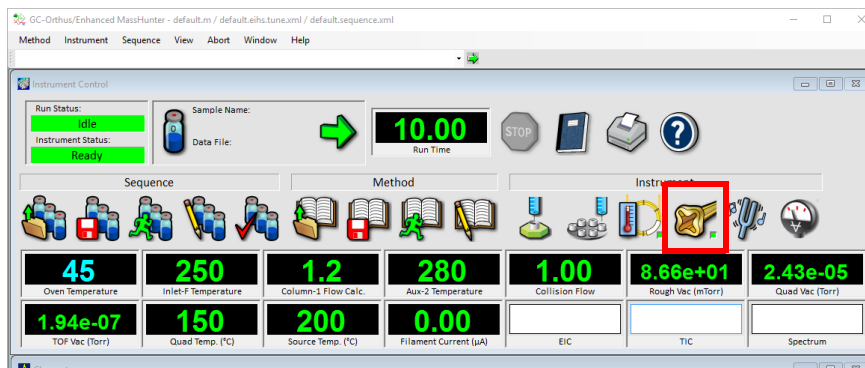
表2 データ測定メソッドの GC パラメータ (続き)

パラメータ	値
溶媒 A 量	8 $\mu$ L
溶媒 B 洗浄 (注入前)	2
溶媒 B 洗浄 (注入後)	2
溶媒 B 量	8
サンプル洗浄	0
サンプル洗浄量	8 $\mu$ L
サンプルポンプ	4
ドゥエルタイム (注入前)	0 min
ドゥエルタイム (注入後)	0 min
溶媒洗浄吸引速度	300 $\mu$ L/min
溶媒洗浄排出速度	6000 $\mu$ L/min
サンプル洗浄吸引速度	300 $\mu$ L/min
サンプル洗浄排出速度	6000 $\mu$ L/min
注入分注速度	6000 $\mu$ L/min
粘性待ち時間	0 秒
サンプリング深さ	無効
コリジョンセル EPC モジュール	
窒素	オン、1.5 mL/min
ヘリウム	オフ

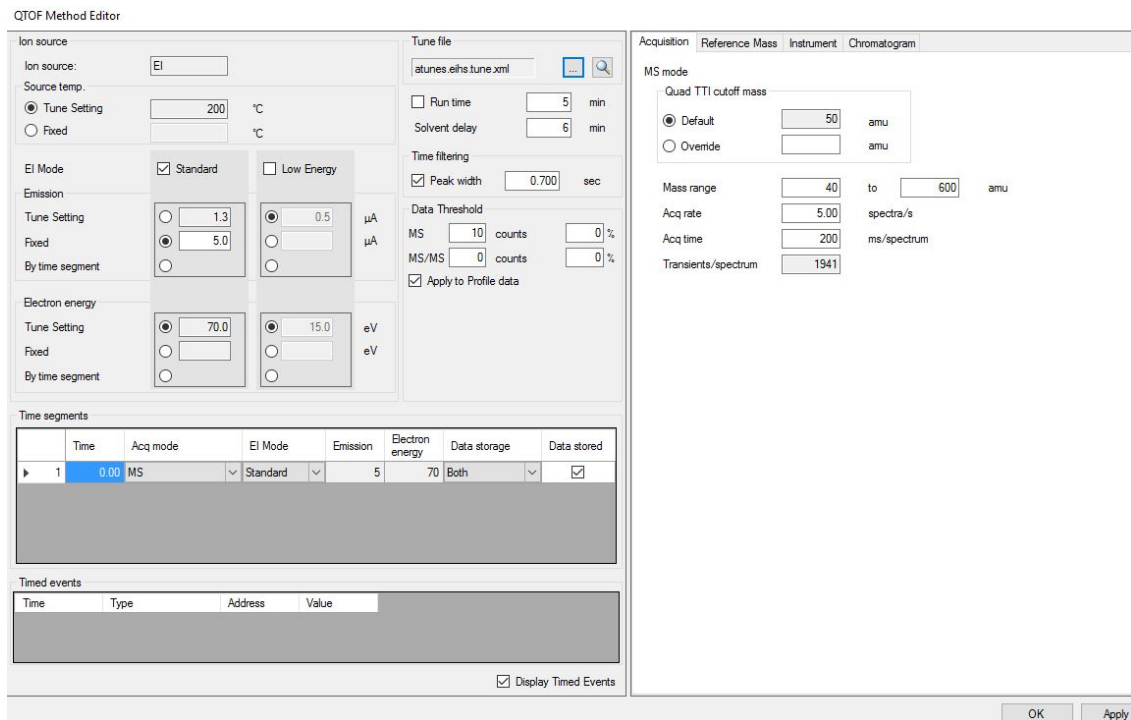
## タスク 5. イオンスキャンの 定性測定メソッドの作成


このタスクでは、タスク 4 で既にメソッドに入力されている GC パラメータを使用します。このタスクでは、イオンスキャン用の 7250 パラメータを入力してメソッドに保存します。

- 1 [QTOF メソッドエディタ] アイコンをクリックします。



[QTOF メソッドエディタ] ウィンドウが開きます。



- 2 [チューニングファイル] エリアで、 アイコンをクリックします。タスク 3 の最後に作成したチューニングファイルを選択します。
- 3 [イオン源] エリアで、[イオン源温度] を 200 °C に設定し、[エミッション] を [固定] に設定して値「5.0」を入力します。さらに、[電子エネルギー] を [チューニング設定] に設定します。
- 4 [溶媒待ち時間] を 5 分に設定します。[溶媒待ち時間] 設定により、5 分後から 7250 のデータ取り込みが開始されます。
- 5 [タイムフィルタリング] エリアで、[ピーク幅] を選択して 0.7 秒に設定します。これにより不要なピークが除去されて、保存するデータ量を減らせます。
- 6 [データのスレッシュホールド] エリアで、[カウント] に 10 を入力します。これにより不要なノイズが除去されて、保存するデータ量を減らせます。
- 7 [プロファイルデータへ適用] を選択します。これにより [データのスレッシュホールド] フィルターがプロファイルデータに適用されて、データの保存量を減らせます。

- 8 [タイムセグメント] エリアで、[測定モード] ドロップダウンリストから **MS スキャンタイプ** を選択します。

MS/MS 測定を行っている場合は、ここにカウントを入力するとデータの保存量を減らせます。
- 9 [データの保存] で [両方] を選択します。

[両方] を選択すると、ピークのプロファイルデータとセントロイドデータがデータ解析用に保存されます。
- 10 [MS モード] セクションで、[質量範囲] の [開始質量] に「40」を入力し、[終了質量] に「600」を入力して、[測定速度] の [スペクトル/s] に「5.00」を入力します。

650  $m/z$  までのすべてのデータが常に測定の対象となりますが、ディスクに保存されるのはここで選択したデータ（40～600）だけです。
- 11 [OK] をクリックして、ウィンドウを閉じます。
- 12 メインウィンドウから [メソッド] > [名前を付けてメソッド保存] を選択し、メソッドを **OFN EI 70eV.M** として保存します。

## タスク 6.MS スキャンデータの取り込み（オプション）

このタスクでは、前のタスクで開発したメソッドを使用して、スキャンデータを取り込みます。このタスクはオプションです。6 ページの「[参考資料](#)」に示す MassHunter 付属のデータファイル例を用いて以下のタスクは実行できます。ただし、必要に応じて、このタスクで説明するとおりに実行して独自のデータファイルを測定することもできます。

- 1 **[分析開始]**（緑の矢印）アイコンをクリックします。**[測定開始]** ダイアログボックスが表示されます。

- 2 **[データパス]** にこの分析で測定するデータファイルを保存するディレクトリを入力します。
- 3 使用する **[注入口]** セクションの **[データファイル名]** に **[SoL\_A.D]** と入力します。

## ファミリアリゼーションガイド

### タスク 6.MS スキャンデータの取り込み（オプション）

- 4 [バイアル番号] にオートサンプルトレイのロケーション番号を入力します。
- 5 [注入量] に [現在のメソッド] を選択します。タスク 4 で入力した [注入量] が使用されます。
- 6 [メソッド実行範囲] セクションで、[データ測定] を選択します。
- 7 [OK & メソッド実行] をクリックします。

GC と Q-TOF にメソッドが送信されます。機器の準備ができると、サンプルが注入されてデータが取り込まれ、指定されたデータディレクトリに保存されます。

## タスク 7. シーケンスを使用した 質量キャリブレーションのスケジュール

サンプル分析シーケンスの開始時および分析中に指定した時間間隔で質量キャリブレーションをスケジュールすることができます。連続してサンプル分析を行うときは、約 2 時間ごとに質量キャリブレーションを行うことをお勧めします。質量キャリブレーションに必要な時間は数分です。実行することで、高い質量精度を維持しドリフトを回避することができます。

### ステップ 1 シーケンスの開始時に質量キャリブレーションを追加します。

- 1 質量キャリブレーションの実行エントリを挿入します。このエントリはサンプルブランクの実行の後に挿入してもかまいません。
- 2 このエントリに **MASSCAL** キーワードを追加します。

The screenshot shows a 'Sequence Table' window with a toolbar and a table of sequence entries. The table has columns for Name, Vial, Type, Keyword, Method Path, Method File, and Data Path. Row 2 is highlighted in blue, showing a 'Cal' type entry with the keyword 'MassCal'.

	Name	Vial	Type	Keyword	Method Path	Method File	Data Path
1	Hexane	1	DoubleBlank		D:\MassHunter\GCMS\1\methods	OFN EI 70eV.m	D:\MassHunter\GCMS\1\data
2			Cal	MassCal	D:\MassHunter\GCMS\1\methods	OFN EI 70eV.m	D:\MassHunter\GCMS\1\data
3	OFN 100fg-1	5	Sample		D:\MassHunter\GCMS\1\methods	OFN EI 70eV.m	D:\MassHunter\GCMS\1\data
4	OFN 100fg-2	6	Sample			OFN EI 70eV.m	D:\MassHunter\GCMS\1\data
5	OFN 100fg-3	7	Sample			OFN EI 70eV.m	D:\MassHunter\GCMS\1\data
6	OFN 100fg-4	8	Sample			OFN EI 70eV.m	D:\MassHunter\GCMS\1\data

- 3 以降のサンプル分析のための **メソッド** を入力し、[タイプ] ドロップダウンから **[CAL]** を選択します。このエントリは、サンプル分析開始後もシーケンス内で 2 時間ごとに実行されます。

- 4 シーケンスを保存します。

### ステップ 2 このステップを省略して、代わりにステップ 3 で説明するランタイム手順を使用することもできます。

このステップでは、サンプル分析中に 2 時間間隔で質量キャリブレーションエントリが実行するように、シーケンステーブルに質量キャリブレーションエントリを作成できます。

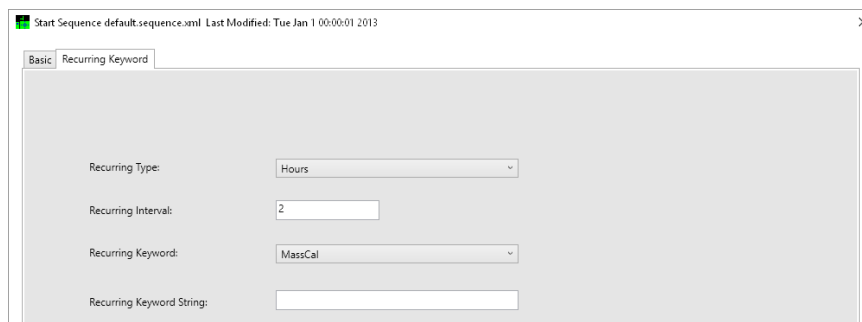
- 1 質量キャリブレーションを実行する前に、分析するサンプル数を計算します。
  - (120 min / サンプル分析時間) サンプル分析時間が 10 分の場合、質量キャリブレーションを実行する前に 12 サンプルを測定できます。
  - 実習例では、2+12+1=15 エントリ。空白のエントリが作成されます。

- 2 上記のステップで追加した質量キャリブレーションエントリをコピーします。
- 3 質量キャリブレーションを行うエントリ行を選択し、コンテキストメニューから **[サンプル挿入]** を選択します。
- 4 このエントリが選択された状態で **[貼り付け]** をクリックします。
- 5 必要に応じてステップ2を繰り返します。
- 6 シーケンスを保存します。

**ステップ3** 上記のステップで作成した質量キャリブレーションの定期的実行は、以下のように設定することもできます。

- 1 **[シーケンス]** > **[シーケンスの実行]** を選択します。
  - **[シーケンス開始]** ダイアログが開きます。
  - 詳細については、オンラインヘルプを参照してください。
- 2 **[一般]** タブに必要な情報を入力します。
- 3 **[キーワードの繰り返し]** タブをクリックします。
- 4 **[タイプ]** で、**[時間]** を選択します。

メソッドが変更したときや、時間間隔で再キャリブレーションする場合は、**[メソッドが変更した、または経過時間]** を選択することもできます。



- 5 **[間隔]** に2時間と入力します。
- 6 繰り返すキーワード文字列として **[MassCal]** を選択します。指定の間隔で質量キャリブレーションが実行されます。
- 7 **[シーケンスの実行]** をクリックします。

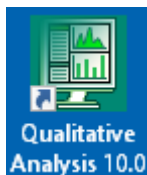
## 実習 - データの解析

- タスク 1. 定性ナビゲータプログラムで データファイルを開く 29
- タスク 2. 定性分析ユーザー インターフェイスのコンフィグレーション 31
- タスク 3. 定性ナビゲータでのピークの同定 34
- タスク 4. 定性分析ワークフローを使用した化合物の同定 36
- タスク 5. 自動化メソッドレポートの コンフィグレーション 39
- タスク 6. 自動化メソッドワークフローの 作成 42
- タスク 7. 結果のレビュー 45
- タスク 8. Unknowns Analysis を使用した 化合物の同定 49

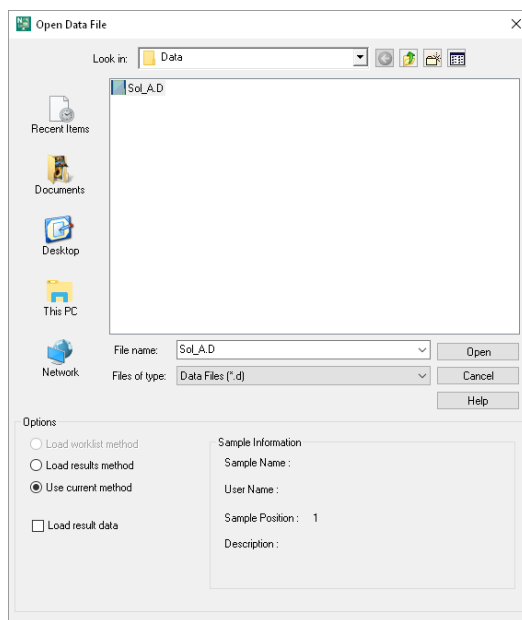
この実習では、このマニュアルの前の実習で測定しておいたデータを解析します。このデータを測定しなかった場合、6 ページの「**参考資料**」に示すロケーションにあるデータファイル例 SolA.D を使用できます。このプログラムの使用についての詳細は、6 ページの「**参考資料**」に示す MassHunter に付属の GC/MS 用 *MassHunter Workstation* 定性分析ファミリアリゼーションガイドおよび定性分析トレーニングビデオを参照してください。

## タスク 1. 定性ナビゲータプログラムでデータファイルを開く

- 1 デスクトップ上の [定性ナビゲータ] ショートカットをダブルクリックして、定性分析プログラムを開始します。



[データファイルを開く] ダイアログが表示されます。

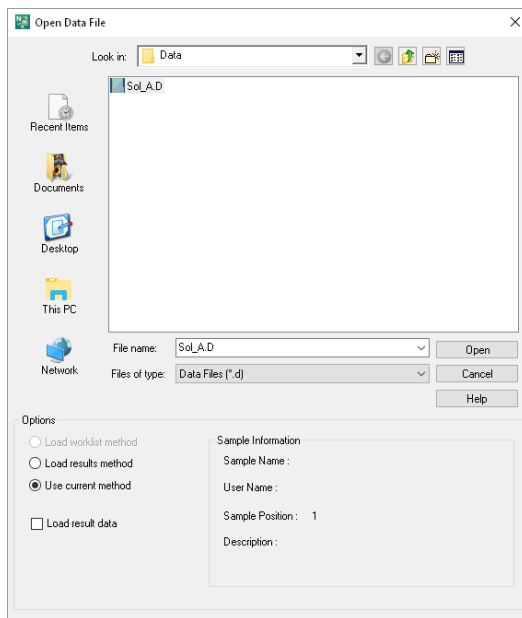


ヘルプを表示する場合は、次の操作を行います。

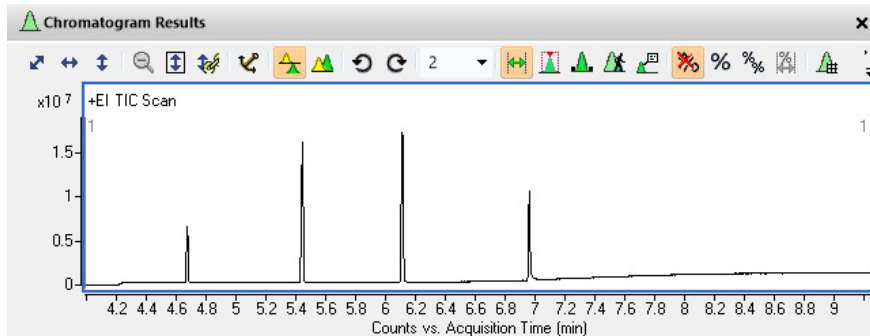
- ウィンドウがアクティブになっている状態で **F1** キーを押します。
  - メインメニューで [ヘルプ] > [目次] の順にクリックします。
  - アクティブな状態のウィンドウの [ヘルプ] アイコンをクリックします。
- 2 データファイルのある場所に移動し、取り込んだデータファイルか、この実習用に提供されたデモ ファイル **Sol\_A.D** を選択します。

## ファミリーリゼーションガイド

### タスク 1. 定性ナビゲータプログラムでデータファイルを開く



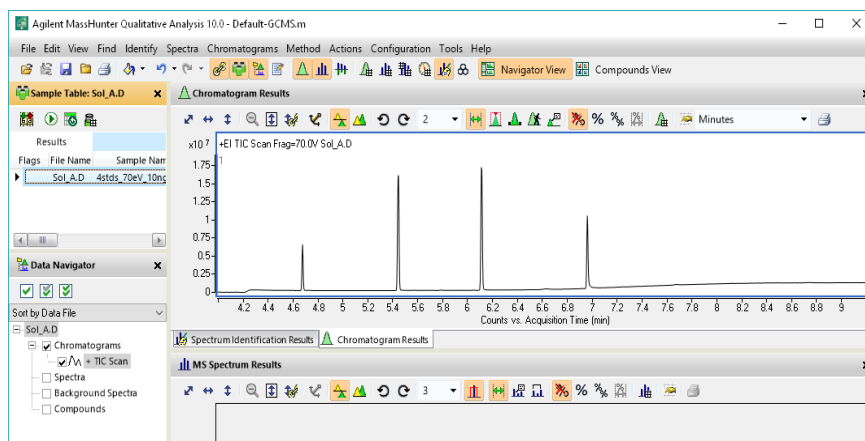
- 3 [オプション] で、[現在のメソッドを使用] を選択し、[結果データの読み込み] をオフにします。
- 4 [開く] をクリックします。データファイルが読み込まれ、データの TIC が表示されます。



## タスク 2. 定性分析ユーザー インターフェイスのコンフィグレーション

ステップ 1 定性分析メソッドを作成します。

- 1 メインメニューから、[メソッド] > [開く] を選択します。
- 2 **default-GCMS.m** を選択し、[開く] をクリックします。

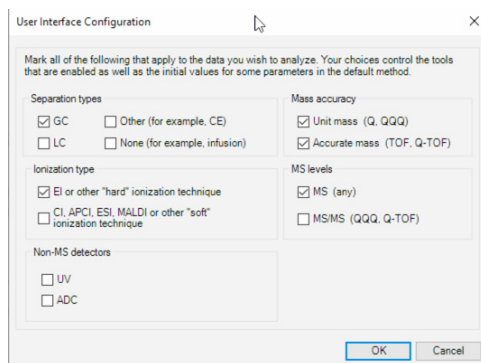


- 3 メインメニューで、[コンフィグレーション] > [詳細設定の表示] の順に選択します。
- 4 メインメニューで、[コンフィグレーション] > [ユーザーインターフェイスのコンフィグレーション] の順に選択します。

[ユーザーコンフィグレーション] ダイアログボックスが開きます。ここで選択される設定は、読み込まれたデータファイルおよび前に選択したデフォルトメソッドに基づいています。必要に応じてこれらは編集できます。

## ファミリーリゼーションガイド

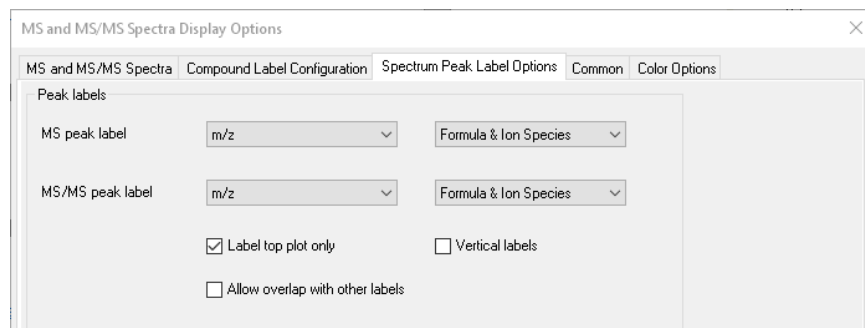
### タスク 2. 定性分析ユーザー インターフェイスのコンフィグレーション



- 5 [OK] をクリックします。
- 6 メインメニューから、[メソッド]>[名前を付けて保存]を選択します。デフォルトメソッドは上書きできないので、メソッド名を変更します。
- 7 [ファイル名] に QTOF-GCMS.m と入力し、[OK] をクリックします。

### ステップ 2 MS および MS/MS スペクトルの表示オプションをコンフィグレーションします。

- 1 メインメニューから、[コンフィグレーション] > [MS および MS/MS スペクトルの表示オプション] を選択します。
- 2 [スペクトルピークラベルオプション] タブをクリックし、ピークラベルの値を設定します。以下に表示された値を使用します。これらの値によって、上記で同定されたスペクトルの  $m/z$  および式とイオン種の値が表示されます。



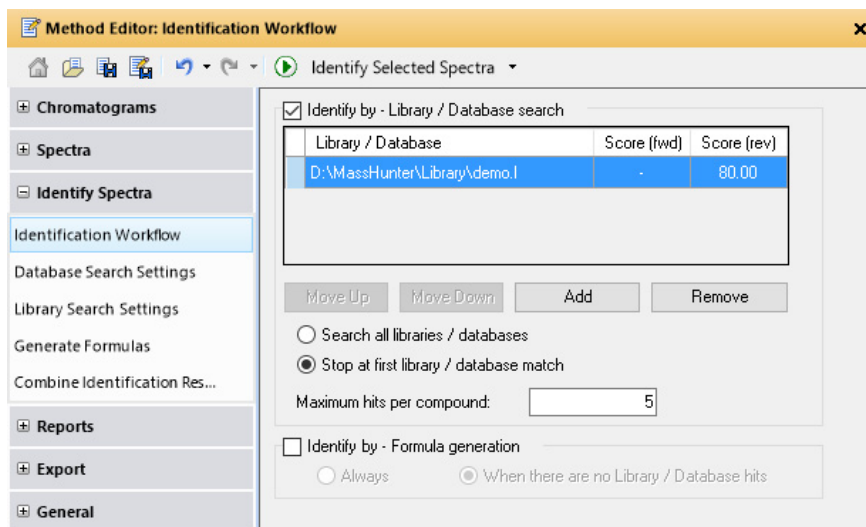
- 3 メソッドを保存します。

ステップ 3 スペクトルを同定するためのライブラリを割り当てます。




- 1 [メソッドエディタ] アイコンをクリックして [メソッドエディタ] を開き、[同定] > [同定ワークフロー] をクリックします。

簡単に確認できるように、[定性分析ナビゲータ] ウィンドウの外側にエディタペインをフローティングさせます。

- 2 スペクトルを同定するためのライブラリの値を設定します。Solo.cdb ライブラリが MassHunter に付属しており、実習サンプルで使用する 4 つの化合物を含んでいます。以下に表示された値を使用します。



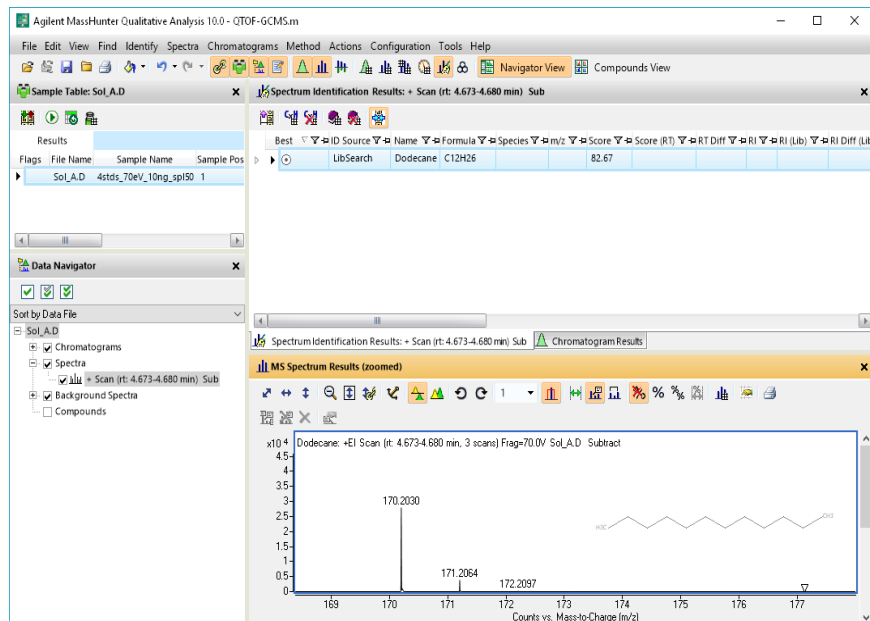
## タスク 3. 定性ナビゲータでのピークの同定

- 1 **[クロマトグラム結果]** ペイン内で右クリックし、RT 4.676 のピーク周辺をドラッグします。ズームされたシングルピークが表示されます。
- 2 **[範囲選択]**  が選択された状態で、マウスをクリックおよびドラッグして、RT 4.7 から 4.71 までのバックグラウンドを選択します。この選択されたエリアはバックグラウンドスペクトルとなります。
- 3 影の付いた範囲内で右クリックし、コンテキストメニューから **[MS スペクトルをバックグラウンドに抽出]** を選択します。  
抽出されたスペクトルが **[MS スペクトル結果]** ペインに表示されます。  
**[データナビゲータ]** の **[バックグラウンドスペクトル]** でも選択できます。  
以降の抽出された MS スペクトルから自動的に減算されます。
- 4 マウスをクリックおよびドラッグして、RT 4.75 から 4.68 までのピークトップを含むエリアを選択します。
- 5 影の付いた範囲内で右クリックし、コンテキストメニューから **[MS スペクトルの抽出]** を選択します。  
このスペクトルが抽出され、**[MS スペクトル結果]** トップペインに表示され、**[データナビゲータ]** の **[スペクトル]** でも選択されます。バックグラウンドスペクトルが減算されており、**[MS スペクトル結果]** トップペインの **[減算]** ラベルによって示されます。
- 6 **[MS スペクトル結果]** タブで、**[ズーム中に Y 軸をオートスケール]**  および **[予想同位体分布を表示]**  が選択された状態で、メインメニューから **[同定] > [ライブラリ/DB でスペクトルを検索]** を選択します。このスキャンの **[スペクトル同定結果]** タブに、ライブラリによって検索された化合物としてドデカンが表示されます。

## ファミリーリゼーションガイド

### タスク 3. 定性ナビゲータでのピークの同定

- 7  $m/z$  軸をズームして、168 から 179 までの範囲の値を表示します。ドデカンに対して予測される同位体が、赤い輪郭で囲まれて表示され、ドデカンの同位体であることが示されます。



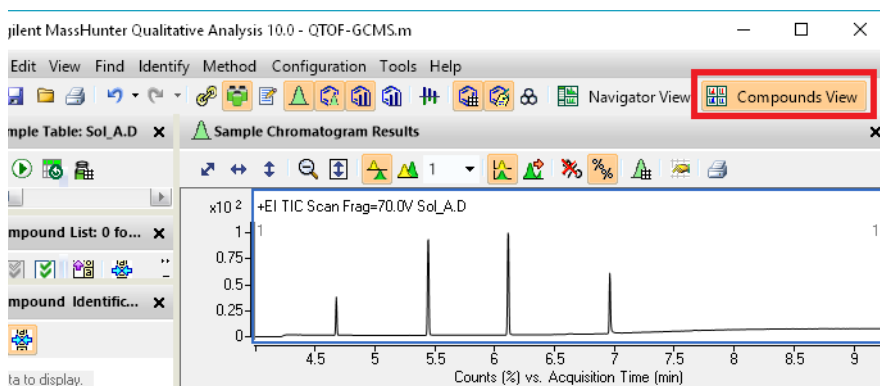
- 8 必要に応じて、この手順を繰り返して、このサンプル内の他のピークを同定します。
- 9 [メソッド] メニューで [保存] を選択します。

## タスク 4. 定性分析ワークフローを使用した化合物の同定

**ステップ 1 [化合物の同定] ワークフローの定性分析メソッド設定を編集します。**

このタスクは、定性分析プログラムを開いた状態で、データファイル SOL\_A.d の分析がタスク 3 の最後のステップで完了した状態から開始すると仮定しています。

- 1 メインツールバーエリアの **[化合物ビュー]** タブをクリックします。  
**SOL\_A.D** データファイルがサンプルクロマトグラムに表示されます。



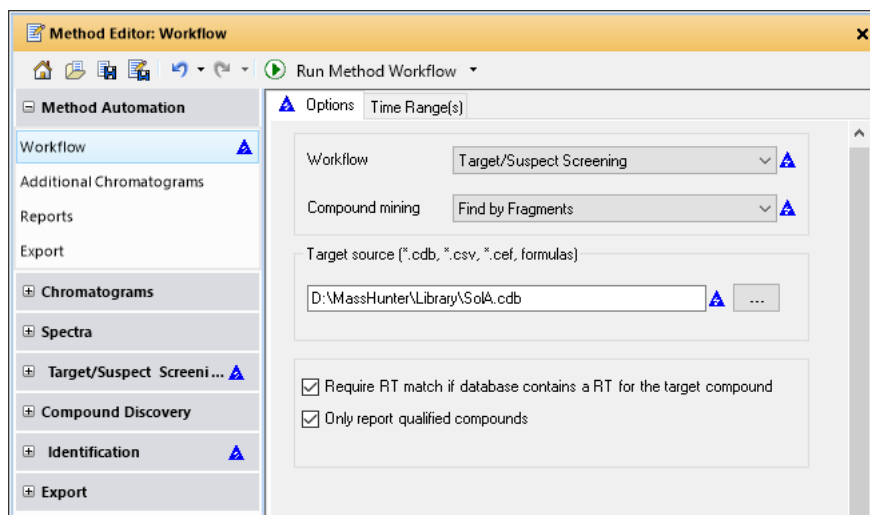
- 2 メインツールバーの **[メソッドエディタ]** アイコンが選択されていない場合、選択して **[メソッドエディタ]** を開きます。

簡単に確認できるように、**[定性分析ナビゲータ]** ウィンドウの外側にエディタペインをフローティングさせます。

- 3 **[メソッドエディタ]** で、**[自動化メソッド/ワークフロー]** をクリックします。**[オプション]** タブが表示されます。
- 4 **[オプション]** タブで、ワークフローの **[ターゲット/Suspect スクリーニング]** を選択し、**[化合物検出]** の **[フラグメントによる検出]** を選択します。
- 5 **[メソッドエディタ]** で、**[ターゲット/Suspect スクリーニング]** > **[フラグメントによる検出]** をクリックし、**[ターゲットソース]** タブをクリックします。
- 6 **[...]** をクリックし、**SolA.cdb** をターゲットソースとして選択します。このファイルは、6 ページの「**参考資料**」に示すロケーションから検索できます。

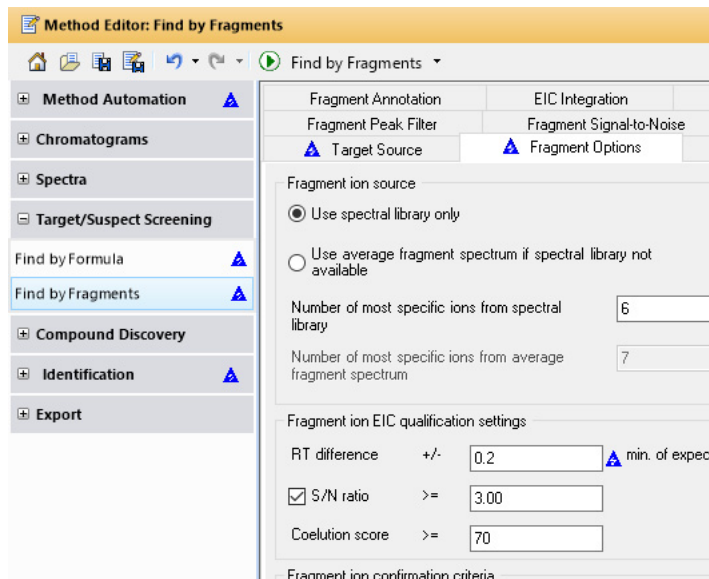
## ファミリーリゼーションガイド

### タスク 4. 定性分析ワークフローを使用した化合物の同定



ステップ 2 [フラグメントによる検出] アルゴリズムを設定します。

- 1 [メソッドエディタ] で、[フラグメントオプション] をクリックし、値を設定します。表示される値を使用します。これらの値は正しく設定してください。このサンプルの解析では、その他のタブの値はデフォルト値で OK です。




## ファミリアリゼーションガイド

### タスク 4. 定性分析ワークフローを使用した化合物の同定

- 2 [メソッドエディタ] ツールバーの [フラグメントによる検出] アイコンをクリックします。

結果は [サンプルテーブル]、[化合物リスト]、[サンプルクロマトグラム結果]、[化合物クロマトグラム結果]、[化合物 MS スペクトル結果] ペインに表示されます。

#### ステップ 3 メソッドを保存します。

- 1 [メソッドエディタ] ツールバーで [メソッドの保存]  をクリックします。

## タスク 5. 自動化メソッドレポートの コンフィグレーション

解析レポートを対話形式で印刷するか、ここで行うように**自動化メソッド**ワークフローの一環としてレポートを作成することができます。解析レポートには、クロマトグラムの抽出や積分、スペクトルの抽出、化合物の検出、ピークスペクトルに関するデータベースの検索、またはピークスペクトルからの化学式の作成の結果を含めることができます。

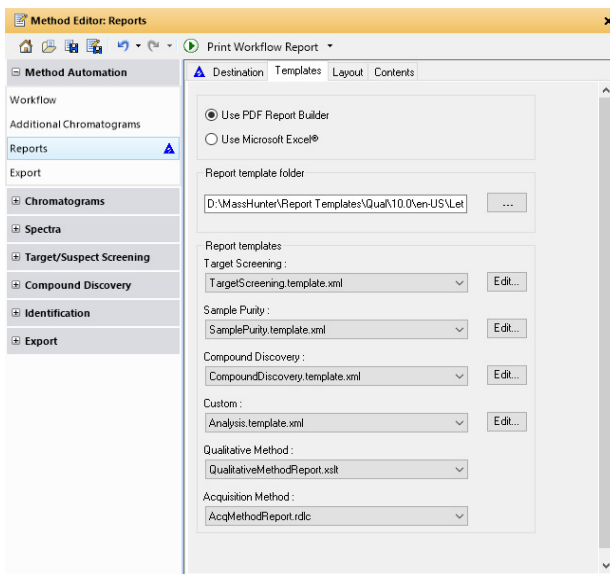
**ステップ1 レポートワークフローを含めるように定性分析メソッドを編集します。**

- 1 [メソッドエディタ] で、[自動化メソッド] をクリックし、[レポート] を選択します。
- 2 [出力先] タブのエントリを、以下に表示された値に設定します。

The screenshot shows a configuration window titled 'Destination' with four tabs: 'Destination', 'Templates', 'Layout', and 'Contents'. The 'Destination' tab is active. It contains two main sections: 'Print report' and 'Save report'. In the 'Print report' section, the 'Print report' checkbox is unchecked, and the 'Printer name' is set to '<Default>'. In the 'Save report' section, the 'Save report' checkbox is checked. Underneath, there are three radio button options: 'Inside data file's reports subdirectory' (unchecked), 'At specified directory:' (checked), and 'If report file already exists'. The 'At specified directory:' option has a text input field containing 'D:\MassHunter\reports' and a browse button (...). Under the 'If report file already exists' section, there are two radio button options: 'Overwrite existing report' (unchecked) and 'Auto-generate new report file name' (checked).

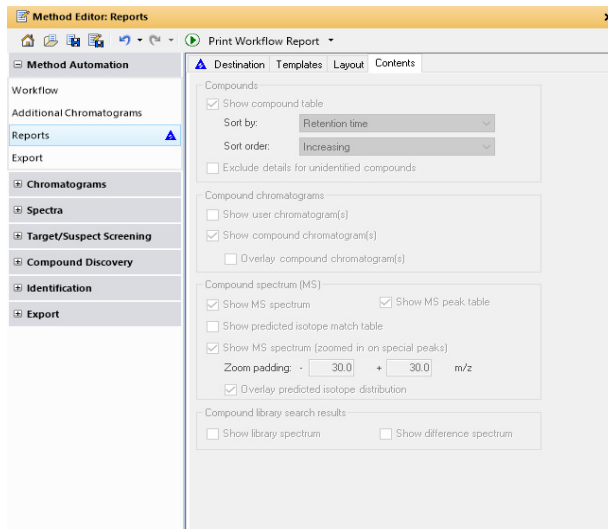
[レポートの保存] を選択し、PDF 形式のレポートを保存するフォルダー位置を入力します。

- 3 [テンプレート] タブのエントリを、以下に表示された値に設定します。

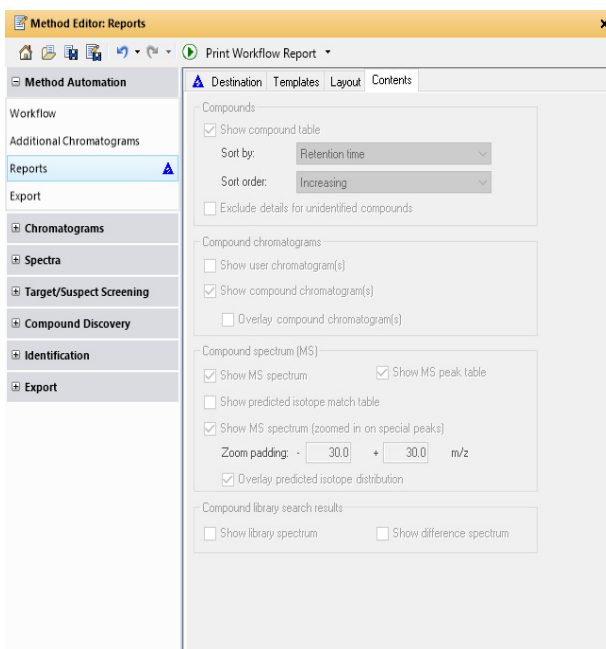


この実習では、c ワークフローの選択に基づいて、ターゲットスクリーニングレポートテンプレートを使用しています。

- 4 [レイアウト] タブのエントリを、以下に表示された値に設定します。




- 5 [コンテンツ] タブのエントリを、以下に表示された値に設定します。



化合物テーブル、クロマトグラム、スペクトルタイプ、ピークテーブル、含めるライブラリ検索結果スペクトルタイプを選択します。

### ステップ2 メソッドを保存します。

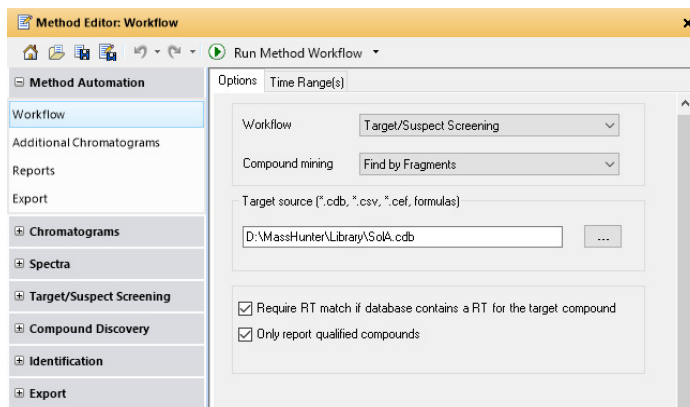
- 1 [メソッドエディタ] ツールバーで [メソッドの保存]  をクリックします。

## タスク 6. 自動化メソッドワークフローの作成

このタスクでは、保存されたシングルメソッド内で、フラグメントによる検出ワークフローとレポートワークフローの自動化を行います。ここでは、前のタスクで作成したメソッドに基づいて解析を実行します。サンプルデータ測定ランの終了時に、複数のワークフローを含む保存されたデータ解析メソッドを使用して、自動的に解析を行うようにすることもできます。

- 1 [メソッドエディタ] で、[自動化メソッド] > [ワークフロー] を選択します。

このワークフローはすでにコンフィグレーションされています。36 ページの「[タスク 4. 定性分析ワークフローを使用した化合物の同定](#)」を参照してください。

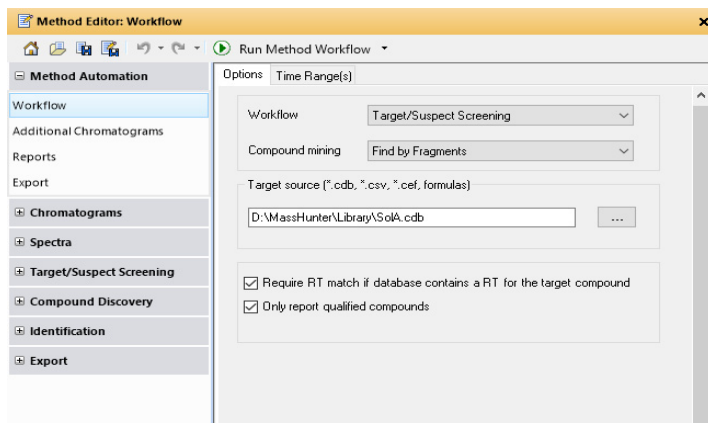


## ファミリーリゼーションガイド

### タスク 6. 自動化メソッドワークフローの作成

- 2 [メソッドエディタ] で、[自動化メソッド] > [ワークフロー] を選択します。

このワークフローはすでにコンフィグレーションされています。39 ページの「[タスク 5. 自動化メソッドレポートのコンフィグレーション](#)」を参照してください。



3 ツールバーのドロップダウンメニューから、[自動化メソッド実行]

 Run Method Automation (Workflow + Reports) を選択します。

化合物が検出、同定され、レポートが作成されて、指定されたロケーションに PDF として保存されます。

Target Compound Screening Report

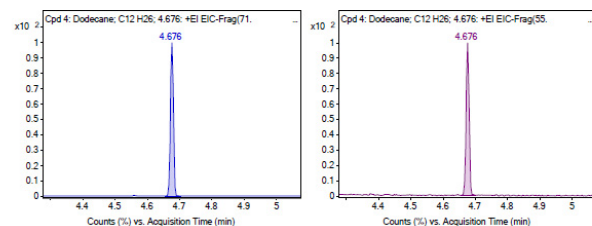
<b>Data File</b>	SdA_70eV_2.D	<b>Sample Name</b>	466a_70eV_10ng_sp50
<b>Sample Type</b>		<b>Position</b>	1
<b>Instrument Name</b>	7250 Marketing	<b>User Name</b>	
<b>Acq Method</b>	4_sds-70eV_SdA_033017.M	<b>Acquired Time</b>	3/30/2017 1:41:10 PM (UTC-07:00)
<b>IRM Calibration Status</b>	Success	<b>DA Method</b>	QTOF-GCMS.m
<b>Comment</b>			
<b>Expected Barcode</b>		<b>Sample Amount</b>	
<b>Dual Inj Vol</b>	1	<b>TuneName</b>	PN4-03-14-2017_allhs.tune.xml
<b>TunePath</b>	D:\MassHunter\GCMS\117250\	<b>TuneDateStamp</b>	2017-03-30T19:40:19-07:00
<b>MSFirmwareVersion</b>	G.7250.02.01E	<b>OperatorName</b>	
<b>RunCompletedFlag</b>	True	<b>Acquisition Time (Local)</b>	3/30/2017 4:41:10 PM (UTC-04:00)
<b>Acquisition SW Version</b>	MassHunter GC/MS Acquisition B.07.06.2628 28-Mar-2017 Copyright © 1989-2016 Agilent Technologies, Inc.	<b>QuadrupoleTimeOFF light Driver Version</b>	MSQTOFDriver 7.6.0.0
<b>QuadrupoleTimeOFF light Firmware Version</b>	G.7250.02.01E		

Compound Table

Label	Tgt Name	Tgt Score	RT Diff	Mass Error (ppm)	Tgt Formula	Tgt RT	Obs. RT	Ref. Mass	Obs. Mass
Cpd 4: Dodecane; C12 H26; 4.676	Dodecane	99.99	0	0.29	C12 H26	4.674	4.674	170.2035	170.2035
Cpd 1: Biphenyl; C13 H10; 5.445	Biphenyl	98.26	-0.003	-2.03	C12 H10	5.449	5.445	154.0783	154.0779
Cpd 2: 4-Chlorobiphenyl; C12 H9 Cl; 6.111	4-Chlorobiphenyl	95.29	-0.008	-2.46	C12 H9 Cl	6.119	6.111	186.0393	186.0388
Cpd 3: Methyl palmitate; C17 H34 O2; 6.960	Methyl palmitate	96.08	-0.002	-3.22	C17 H34 O2	6.962	6.96	270.2559	270.255

Name	Obs. m/z	Obs. RT	Obs. Mass	Tgt RT	Tgt Formula	Tgt Mass	Tgt Mass Error (ppm)	RT Diff.	Find Cpd Algorithm
Dodecane	170.203	4.676	170.2035	4.676	C12 H26	170.2035	0.29	0	Find By Fragment

Compound Chromatograms



## タスク 7. 結果のレビュー

このタスクでは、定性分析ワークフロープログラムのさまざまなウィンドウに表示される結果を簡単に見ていきます。すべてのウィンドウにさまざまな結果データが表示されています。

**ステップ 1** 検出された化合物の数と、これらのうちで同定されたものの数を確認します。


- 1 [サンプルテーブル] セクションの [結果サマリー] 列に、適切な 4 つのターゲットが検出されたことが示されています。

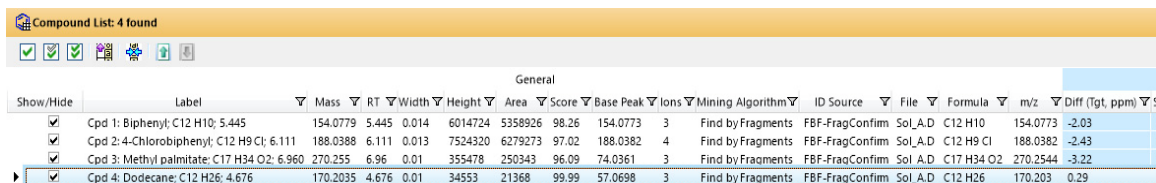


Result Summary	File Name	Last Run	Method	Saved Results	Method	Flags	Workflow	Target Source	Sample Name	Sample Position	Acquisition Method	Acquisition Time
4 qualified (4 targets)	SoL_A.D		QTOF-GCMS.m		Target/Suspect Screening		D:\MassHunter\Library\SoLA.cdb	4stds_70eV_10mg_spl90	1		4_std5-70eV_S5L_033017.M	3/30/2017 4:41:10 PM (UTC-04:00)


- 2 右にスクロールして、他の列のデータをレビューします。

**ステップ 2** 同定された化合物のプロパティが [化合物リスト] に表示されています。

- 1 [化合物リスト] ツールバーで、[データを含まない列を隠す]  をクリックします。



Show/Hide	Label	Mass	RT	Width	Height	Area	Score	Base Peak	Ions	Mining Algorithm	ID Source	File	Formula	m/z	Diff (Tgt, ppm)
<input checked="" type="checkbox"/>	Cpd 1: Biphenyl; C12 H10; 5.445	154.0779	5.445	0.014	6014724	5358926	98.26	154.0773	3	Find by Fragments	FBF-FragConfirm	SoL_A.D	C12 H10	154.0773	-2.03
<input checked="" type="checkbox"/>	Cpd 2: 4-Chlorobiphenyl; C12 H9 Cl; 6.111	188.0388	6.111	0.013	7524320	6279273	97.02	188.0382	4	Find by Fragments	FBF-FragConfirm	SoL_A.D	C12 H9 Cl	188.0382	-2.43
<input checked="" type="checkbox"/>	Cpd 3: Methyl palmitate; C17 H34 O2; 6.960	270.255	6.96	0.01	355478	250343	96.09	74.0361	3	Find by Fragments	FBF-FragConfirm	SoL_A.D	C17 H34 O2	270.2544	-3.22
<input checked="" type="checkbox"/>	Cpd 4: Dodecane; C12 H26; 4.676	170.2035	4.676	0.01	34553	21368	99.99	57.0698	3	Find by Fragments	FBF-FragConfirm	SoL_A.D	C12 H26	170.203	0.29

- 不要な列を非表示にし、幅を調整することで、
  - パラメータが確認しやすくなります。
- 2 [化合物リスト] ツールバーで、[列幅の自動調整]  をクリックします。
  - 3 右にスクロールして、同定された 4 つの化合物の結果をレビューします。

### ステップ 3 [化合物同定結果] を表示します。

- 1 ウィンドウの下部にある [化合物同定結果] タブをクリックします。
- 2 [化合物リスト] で、右にスクロールして [化合物の同定] セクションを表示し、[ドデカン] を選択します。

ドデカンが [化合物同定結果] ウィンドウに表示されている化合物です。

Compound Identification Results: Cpd 4: Dodecane; C12 H26; 4.676

ID Techniques Applied: FBF-FragConfirm

Best	Name	Formula	m/z	Mass	Mass (Tgt)	Diff (ppm)	Score (Tgt)	RT	RI (Lib)	RI Diff (Lib)	RI Diff % (Lib)	RT (Tgt)	RT Diff	Score (RT)	Species	Score (DB)	Score (Lib)	Score	Flags	Notes
100	Dodecane	C12 H26	170.2030	170.2035	170.2035	0.29	99.99	4.676				4.676	0	100	M+			99.99		SoIA_70eV_2.D

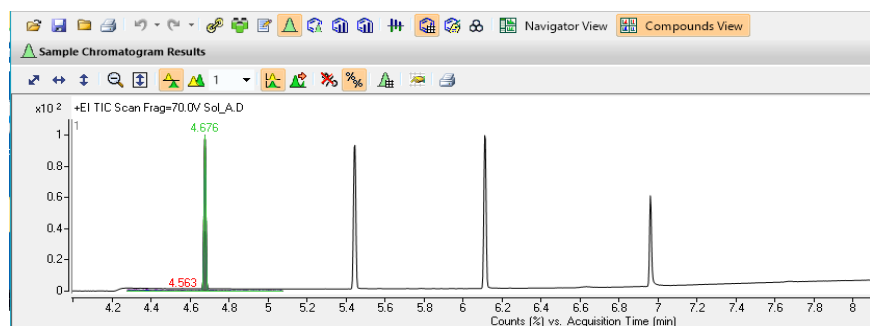
Coelution Score	CE	FragMassDiff(ppm)	Flags(Fis)	FV	Height	Abundance(Lib)	mz(Lib)	m/z	ObsPkHeight(MS)	Compound Name	RT	RT Diff	SNR
100		0.5	Reference ion		1348610.6	73.1	71.0855	71.0855	292281.5	Dodecane	4.676	0	955.3
99.95		1.1	Qualified		1844515	100	57.0699	57.0698	412740.6	Dodecane	4.676	0	483

- 3 右にスクロールし、ドデカンの結果をレビューします。
- 4 このリストの他の3つの化合物も選択し、結果ペインでそれらのプロットの表示を確認します。


### ステップ 4 [サンプルクロマトグラム結果] ウィンドウをレビューします。

- 1 [化合物の重ね描きモード] をクリックします。

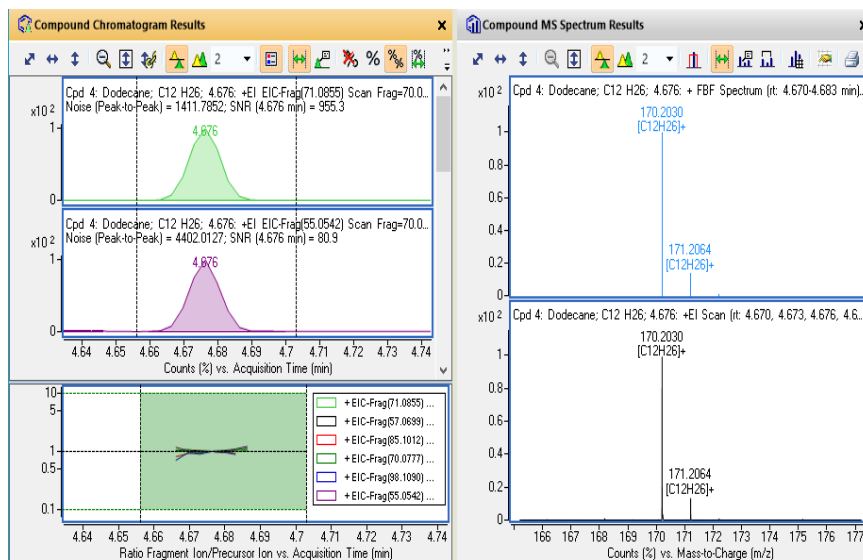
TIC の RT 4.676 min に化合物ドデカンが主要ピークとして表示されています。



ステップ 5 [化合物クロマトグラム結果] ウィンドウをレビューし、その重ね描きモードを表示します。

- 1 [化合物クロマトグラム結果] ウィンドウで、 をクリックしてリストモードから重ね描きモードに変更します。

重ね描きモードでは、EIC はピーク輪郭の線として、ECC は塗りつぶされたピークとして示されます。今回の実習例では、これらのピーク位置は揃っています。



## ステップ 6 化合物同定レポートをレビューします。

- 1 ファイルエクスプローラで、化合物同定レポートの PDF ファイルがあるフォルダーへ移動して開きます。実習のデモでは、D:\MassHunter\reports に保存するよう指定しています。

### Target Compound Screening Report

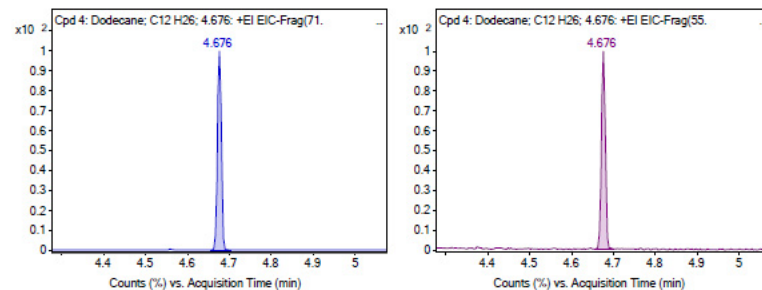
<b>Data File</b>	SOA_70eV_2.D	<b>Sample Name</b>	4stds_70eV_10ng_sp50
<b>Sample Type</b>		<b>Position</b>	1
<b>Instrument Name</b>	7250A Marketing	<b>User Name</b>	
<b>Acq Method</b>	4_std5-70eV_SSL_033017.M	<b>Acquired Time</b>	3/30/2017 1:41:10 PM (UTC-07:00)
<b>IRM Calibration Status</b>	Success	<b>DA Method</b>	QTOF-GCMS.m
<b>Comment</b>			
<b>Expected Barcode</b>		<b>Sample Amount</b>	
<b>Dual Inj Vol</b>	1	<b>TuneName</b>	PP4-03-14-2017_eihs.tune.xml
<b>TunePath</b>	D:\MassHunter\GCMS\1\7250\	<b>TuneDateStamp</b>	2017-03-30T19:40:19-07:00
<b>MSFirmwareVersion</b>	G.7250.02.01E	<b>OperatorName</b>	
<b>RunCompletedFlag</b>	True	<b>Acquisition Time (Local)</b>	3/30/2017 4:41:10 PM (UTC-04:00)
<b>Acquisition SW Version</b>	MassHunter GC/MS Acquisition B.07.06.2628 28-Mar-2017 Copyright © 1989-2016 Agilent Technologies, Inc.	<b>QuadrupoleTimeOff Light Driver Version</b>	MSQTOFDriver 7.6.0.0
<b>QuadrupoleTimeOff Light Firmware Version</b>	G.7250.02.01E		

#### Compound Table

Label	Tgt Name	Tgt Score	RT Diff	Mass Error (ppm)	Tgt Formula	Tgt RT	Obs. RT	Ref. Mass	Obs. Mass
Cpd 4: Dodecane; C12 H26; 4.676	Dodecane	99.99	0	0.29	C12 H26	4.676	4.676	170.2035	170.2035
Cpd 1: Biphenyl; C12 H10; 5.445	Biphenyl	98.26	-0.003	-2.03	C12 H10	5.449	5.445	154.0783	154.0779
Cpd 2: 4-Chlorobiphenyl; C12 H9 Cl; 6.111	4-Chlorobiphenyl	95.29	-0.008	-2.46	C12 H9 Cl	6.119	6.111	188.0393	188.0388
Cpd 3: Methyl palmitate; C17 H34 O2; 6.960	Methyl palmitate	96.08	-0.002	-3.22	C17 H34 O2	6.962	6.96	270.2559	270.255

Name	Obs. m/z	Obs. RT	Obs. Mass	Tgt RT	Tgt Formula	Tgt Mass	Tgt Mass Error (ppm)	RT Diff.	Find Cpd's Algorithm
Dodecane	170.203	4.676	170.2035	4.676	C12 H26	170.2035	0.29	0	Find By Fragment

#### Compound Chromatograms

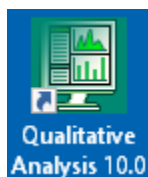


## タスク 8. Unknowns Analysis を使用した 化合物の同定

このタスクでは、MassHunter 定量分析に含まれる Unknowns Analysis アプリケーションを使用し、SureMass を用いて未知の化合物を検出します。

### ステップ 1 Unknowns Analysis アプリケーションを起動します。

- 1 デスクトップの [Unknowns Analysis] ショートカットをダブルクリックします。



- 2 メインメニューから [ファイル] > [新規解析] を選択します。
- 3 [ファイル名] に UnknownsDemo.uaf と入力します。アプリケーションのタイトルバーに、この解析名が表示されます。

### ステップ 2 新規解析にサンプルを追加します。

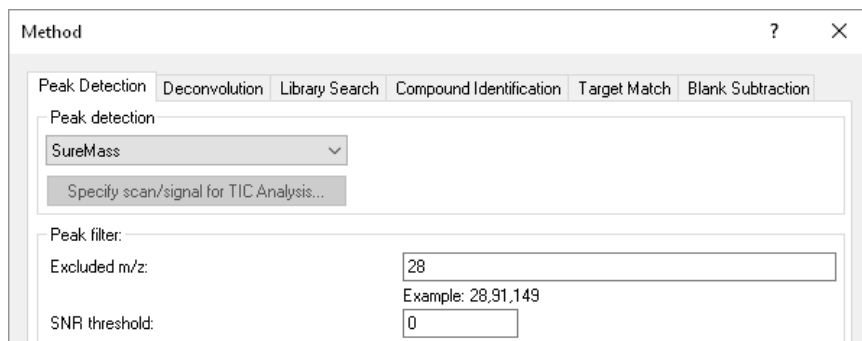
- 1 メインメニューから [ファイル] > [サンプルの追加] を選択します。  
定量バッチフォルダーにデータファイルが存在しない場合は、[サンプルのコピー] をクリックし、別のロケーションからサンプルを選択します。定量バッチフォルダーにサンプルがコピーされます。
- 2 定量バッチフォルダーから Sol\_A.D ファイルを選択し、[OK] をクリックします。

### ステップ 3 サンプルデータを SureMass 形式に変換します。

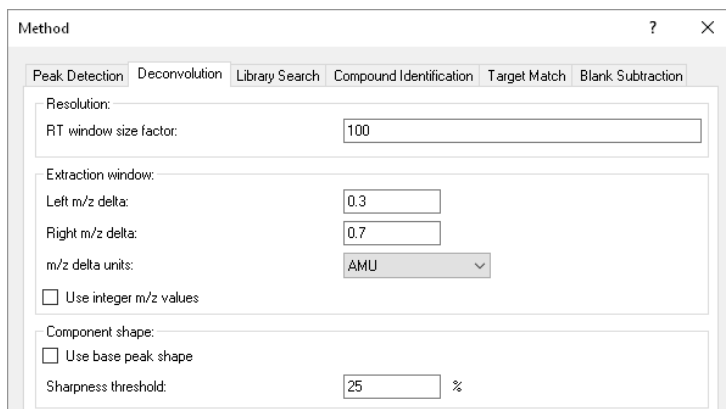
- 1 メインメニューから [ツール] > [精密質量サンプルの変換] を選択します。
- 2 上記で読み込んだサンプルのバッチフォルダーに移動します。ステップ 2 **新規解析にサンプルを追加します。** を参照してください。
- 3 バッチフォルダーから Sol\_A.D ファイルを選択し、[OK] をクリックします。
- 4 ダイアログの [変換] セクションで、[SureMass 形式に変換] を選択し、[変換] をクリックします。データファイルが SureMass 形式に変換されます。完了したら [閉じる] をクリックします。

**ステップ 4 解析メソッドを編集します。**

- 1 メインメニューから [メソッド] > [編集] を選択します。
- 2 [ピーク検出] タブの [ピーク検出] で、[SureMass] を選択します。



- 3 [デコンボリューション] タブをクリックし、[質量分解能] で [RT ウィンドウサイズ係数] を 100 に設定します。

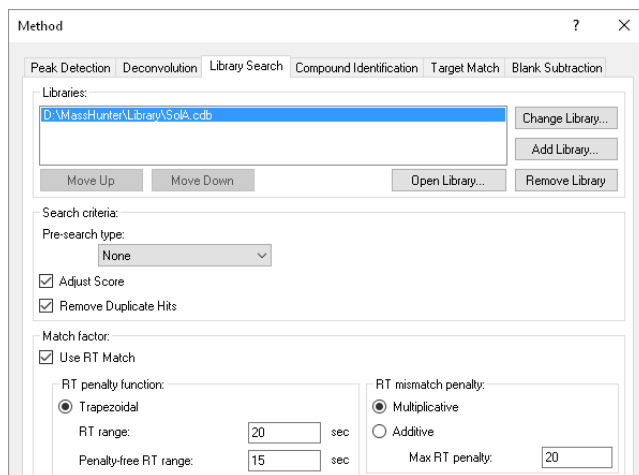


- 4 [コンポーネントシェイプ] で、[基準ピークシェイプを使用] をオフにします。

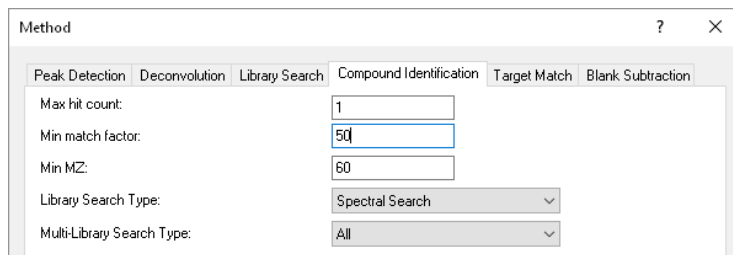
## ファミリーリゼーションガイド

### タスク 8. Unknowns Analysis を使用した 化合物の同定

- 5 [ライブラリ検索] タブをクリックし、[ライブラリの変更] をクリックします。



- 6 SolA.cdb ファイルのロケーションへ移動し、SolA.cdb ファイルを選択します。
- 7 [検索条件] で、[スクリーニングタイプ] タイプに [なし] を選択し、[重複ヒットを削除] を選択します。
- 8 [一致ファクタ] で [RT 一致の使用] を選択します。
- 9 [RT ペナルティ法] で [台形則] を選択し、[RT 範囲] を 20 sec に、[ペナルティなしの RT] 範囲を 15 sec に設定します。
- 10 [化合物の同定] タブをクリックし、[最小 m/z] を 60 に設定します。

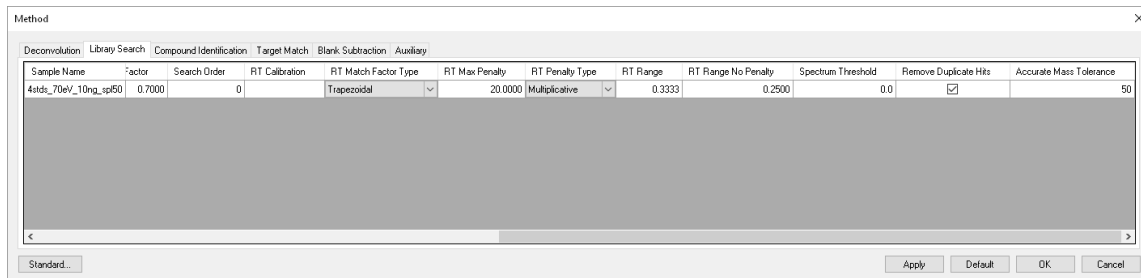


## ファミリアリゼーションガイド

### タスク 8. Unknowns Analysis を使用した化合物の同定

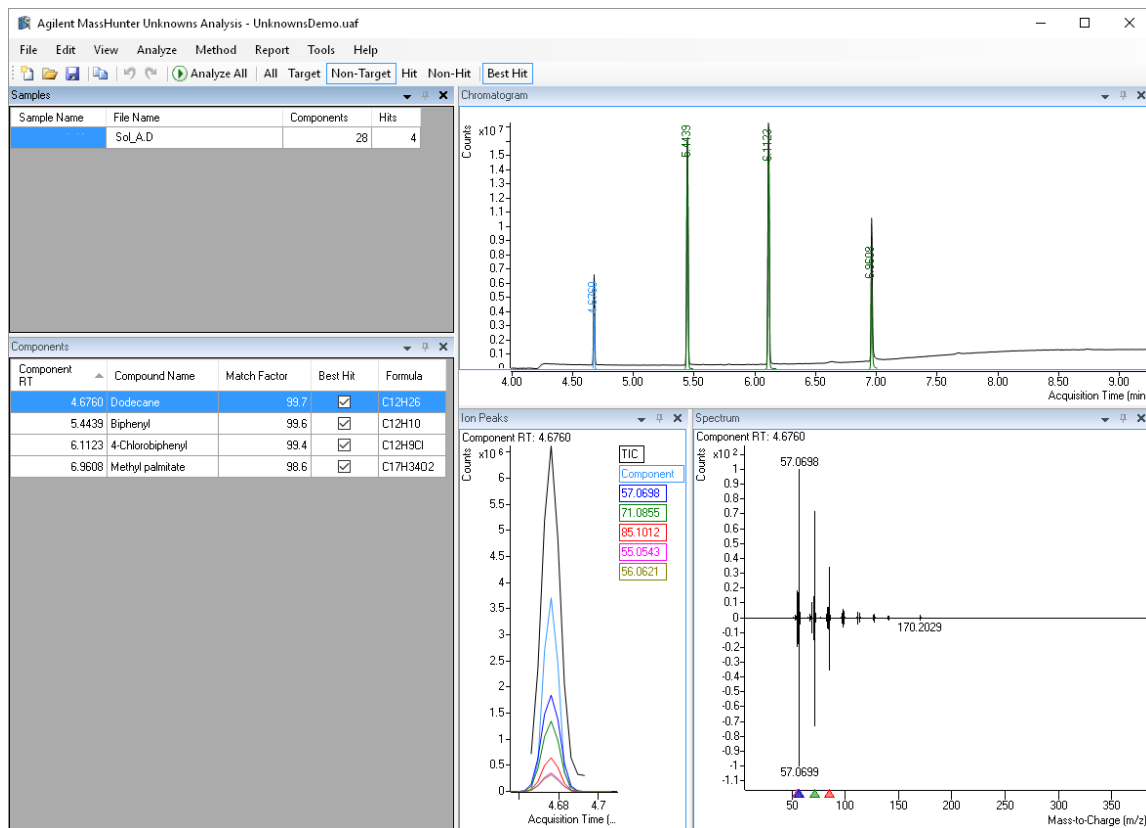
- 11 [すべてのサンプルに適用] をクリックします。
- 12 [詳細] をクリックし、[ライブラリ検索] タブをクリックします。
- 13 [精密質量許容値] を 50 に設定し、[OK] をクリックします。

テーブルの最後の列までスクロールします。[メソッドエディタ] が閉じます。



ステップ 5 解析を実行します。

- 1 [Unknowns Analysis] ツールバーの [すべて解析] アイコンをクリックします。メソッドで設定されたパラメータに従ってサンプルファイルが解析されます。
- 2 ツールバーの [非ターゲット] をクリックして、同定された化合物を表示します。



- 3 まだ選択されていない場合は、[スペクトル] ウィンドウ内を右クリックして [反転表示] を選択します。これにより、サンプルデータと比較したライブラリスペクトルが表示されます。





[www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp)

© Agilent Technologies, Inc. 2019

第 1 版 2019年1月



G7250-96013

