

# Agilent MassHunter ワークステーション ソフトウェア

## 定性分析

## GC/MS 用ファミリアリゼーションガイド

Agilent Technologies

# 注意

© Agilent Technologies, Inc. 2014

このマニュアルの内容は米国著作権法および国際著作権法によって保護されており、Agilent Technologies, Inc. の書面による事前の許可なく、このマニュアルの一部または全部をいかなる形態（電子データやデータの抽出または他国語への翻訳など）あるいはいかなる方法によっても複製することが禁止されています。

## マニュアル番号

G3336-96024

## エディション

リビジョンA、2014年9月

Printed in USA

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

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

## ソフトウェアリビジョン

このガイドは、改訂されるまで Agilent MassHunterワークステーション ソフトウェア – 定性分析 プログラムの B.07.00 以降のリビジョンに対応しています。

## 保証

**このマニュアルの内容は「現状のまま」提供されることを前提としており、将来の改訂版で予告なく変更されることがあります。また、Agilent は適用される法律によって最大限許される範囲において、このマニュアルおよびそれに含まれる情報に関し、商品の適格性や特定用途に対する適合性への暗黙の保障を含み、また、それに限定されないすべての保証を明示的か暗黙的かを問わず、一切いたしません。Agilent は、このマニュアルまたはこのマニュアルに記載されている情報の提供、使用または実行に関連して生じた過誤、付随的損害あるいは間接的損害に対する責任を一切負いません。Agilent とお客様の間に書面による別の契約があり、このマニュアルの内容に対する保証条項がここに記載されている条件と矛盾する場合は、別に合意された契約の保証条項が適用されます。**

## 技術ライセンス

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

## 安全にご使用いただくために

**注意**

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

**警告**

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

# このガイドでは...

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

実習を始める前に、5 ページの「実習を開始する前に」の説明を読んでください。

## 実習 1　定性分析の基礎の学習

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

## 実習 2　検出と同定

これらのタスクでは、GC/MS データファイルの化合物を検出および同定します。

## 実習 3　ワークフロー、エクスポート、および印刷

これらのタスクでは、定性分析メソッドの設定および実行方法を学習します。その後、データファイルを開くときに、メソッドから自動的に処理を実行します。各タスクは異なるワークフローを使用して行います。

## リファレンス

この章では、定性分析プログラムに関する基本の一部を学習します。

# 新機能

## B.07.00

- Agile 2 インテグレータをサポートします。
- スペクトルライブラリで化合物ごとに複数イオン種をサポートします。[化学式による化合物の検出] でのフラグメントの確認アルゴリズム、[MFE による化合物の検出] アルゴリズム、[自動 MS/MS による化合物の検出] アルゴリズム、[ターゲット MS/MS による化合物の検出] アルゴリズムで、PCDL のイオン種情報が使用されます。
- EI データに対する MFG フラグメント注釈が向上しました。
- フラグメントの確認で GC/Q-TOF の EI データをサポートします。
- [Molecular Feature による化合物の検出] アルゴリズムで、全イオン MS/MS データがサポートされます。
- [フラグメントの確認] アルゴリズムで、確認されたイオンを含む補正 HighE（高エネルギー）スペクトルが作成されます。
- [化学式による検出] の [フラグメントの確認] で、[使用するフラグメントイオン] のオプションとして、スペクトルライブラリのみか、またはスペクトルライブラリのほかに平均フラグメントスペクトルを選択できるようになりました。
- 分子イオンが存在していない場合でも、フラグメントの確認が可能です。
- 化合物テーブルに**スコア（フラグメント）**列が追加されました。
- 化合物テーブルに**ソース**列が追加されました。
- ライブラリ検索のユーザーインターフェイスがシンプルになりました。LC または GC 専用のワークフローにカスタマイズすることができます。
- ユニットマスライブラリと精密質量ライブラリの両方で、ライブラリのチェイン検索をサポートします。
- ユニットマスライブラリと精密質量ライブラリの両方に対して、精密質量データの検索を実行できます。
- ライブラリ検索アルゴリズムに Reverse スコアの計算ルールを追加しました（1 回限りの結果を回避するため）。
- IM-MS ブラウザのデータファイルを開くことができます。

- IM-MS ブラウザからスペクトルとクロマトグラムをインポートできます。
- MS/MS スペクトルまたはフラグメントスペクトル（GC EI）を定性分析からスペクトルライブラリに簡単に送信できます。
- 次のデバイスのクロマトグラムが表示できるようになりました。Compact LC 1220 DAD、High Dynamic Range DAD、Compact LC VWD、Compact LC 1220 VWD。
- 定性分析から MassHunter 定量分析を自動的に起動し、定量メソッドを作成できます。

### B.06.00 サービスパック 1

- Excel 2013 と Excel 2010 がサポートされています。
- ライブラリ PestMix_AIM_PCDL_SP1.cdb を追加しています。
- 新しい全イオン MS/MS データファイル（AIM_3CE(0-20-40).d）を追加しています。新しいサンプルメソッドも追加しています。

## 実習を開始する前に

- ソフトウェアをインストールします。説明については、『インストールガイド』を参照してください。
- インストールディスクから **Data** という名前のフォルダを、非圧縮形式でハードディスクの任意の場所にコピーします。

  このフォルダには、実習に必要なデータファイルすべてが含まれています。まず、.zipフォーマットからデータファイルを展開する必要がある場合もあります。

**注記**

**システムにある既存の実習用データファイルの使用は避けてください。ディスク上のオリジナルからコピーされており、自分以外には使用しておらず、変更されていないデータの場合のみ既存データを使用できます。システムに既にある実習用データファイルがディスク上のオリジナルファイルから変更されており同一でない場合は、実習中に得られる結果がこのガイドで示される結果と一致しなくなります。**

# 目次


**実習 1　定性分析の基礎の学習**　9

タスク 1. 定性分析プログラムを開く　10

タスク 2. GC/MS データ用にユーザーインターフェイスを コンフィグレーション　12

タスク 3. クロマトグラムの拡大/縮小　15

タスク 4. クロマトグラムの固定　17

タスク 5. ウィンドウレイアウトの変更　18

タスク 6. クロマトグラムの抽出　20

タスク 7. GC/MS クロマトグラムの積分　22

タスク 8. システム適合性の計算　26

タスク 9. クロマトグラムからスペクトルを抽出　29

タスク 10. 注釈の追加　38

タスク 11. 質量差の追加　42

**実習 2　検出と同定**　45

タスク 12. クロマトグラムデコンボリューションによる 化合物の検出　45

タスク 13. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定　49

タスク 14. MRM を使用した化合物の検出（MRM のみ）　52

タスク 15. 積分による化合物の検出　55

タスク 16. フラグメントの確認を使用した化学式による化合物の 検出　58

タスク 17. ピークスペクトルに対する化学式の作成とライブラリの 検索　66

タスク 18. 結果の保存　72

**実習 3　ワークフロー、エクスポート、および印刷**　75

タスク 19. 一般ワークフローによる定性分析メソッドの 設定と実行　76

タスク 20. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによる メソッドの設定と実行　81

タスク 21. CEF ファイルのエクスポート　84
タスク 22. 解析レポートの印刷　85
タスク 23. 化合物レポートの印刷　88

リファレンス　93

ナビゲーション表示と化合物詳細表示　94
ウィンドウの操作　95
データナビゲータにおける結果データの操作　98
クロマトグラムの操作　99
MSまたはMS/MSスペクトルの操作　100
クロマトグラフ表示データの操作　101
スペクトル表示データの操作　103
ワークフロー　104
レポートテンプレートのカスタマイズ　108

# 実習 1
# 定性分析の基礎の学習

タスク 1. 定性分析プログラムを開く 10
タスク 2. GC/MS データ用にユーザーインターフェイスを コンフィグレーション 12
タスク 3. クロマトグラムの拡大/縮小 15
タスク 4. クロマトグラムの固定 17
タスク 5. ウィンドウレイアウトの変更 18
タスク 6. クロマトグラムの抽出 20
タスク 7. GC/MS クロマトグラムの積分 22
タスク 8. システム適合性の計算 26
タスク 9. クロマトグラムからスペクトルを抽出 29
タスク 10. 注釈の追加 38
タスク 11. 質量差の追加 42

この実習では、GC/Q-TOF および GC/QQQ データを用いて作業するための定性分析プログラムの多くの機能の一部を学習します。

実習方法を示す表は、以下の3列に分けて表示されています。

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

# タスク 1. 定性分析プログラムを開く

このタスクでは、現在のメソッドを用いて複数のデータファイルを開きます。

## タスク 1. 複数のデータファイルを用いて定性分析プログラムを開く

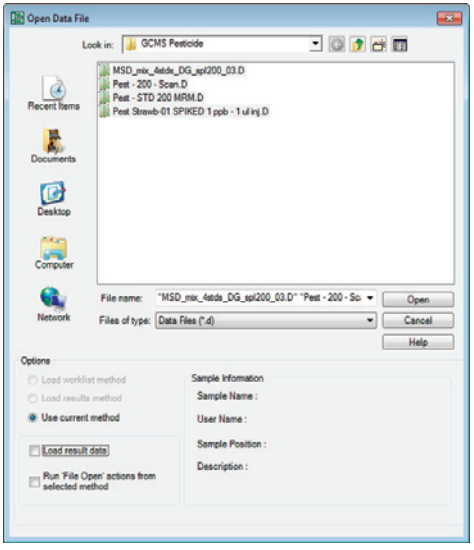
| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 定性分析プログラムを開きます。<br>• データファイル **Pest - 200 - Scan.d**、**Pest - STD 200 MRM.d**、**Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d**、**MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** を、**¥¥MassHunter¥Data** フォルダまたはファイルをコピーしたフォルダから開きます。 | a **Agilent MassHunter の［Qualitative Analysis B.07.00］**アイコン をダブルクリックします。［データファイルを開く］ダイアログボックスが表示されます。<br>b フォルダ **¥¥MassHunter¥Data¥GCMS Pesticide** またはデモファイルを置いたフォルダに移動します。 | • Pest - 200 - Scan.d ファイルには MS データが、Pest - STD 200 MRM.d および Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d ファイルには MS と MS/MS の両方のデータ（すべて GC/QQQ）が含まれます。MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d には GC/Q-TOF データが含まれます。<br>• ウィンドウがアクティブの時に F1 キーを押すと、ほとんどのウィンドウ、ダイアログボックス、タブに関するヘルプが表示できます。<br>• ファイルが別のフォルダにある場合、**［ファイル］> ［データファイルを開く］**をクリックします。 |
| • **［現在のメソッドを使用］**ボタンが選択されていることを確認します。<br>• **［結果データの読み込み］**チェックボックスがオフまたは灰色表示になっていることを確認します。**［結果データの読み込み］**チェックボックスが使用できない場合、データファイルには結果が保存されていません。72 ページの「タスク 18. 結果の保存」で結果の保存方法を学習します。<br>• **［選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行］**チェックボックスがオフになっていることを確認します。 |  | |

**図 1** ソフトウェアを開く際にデータファイルを開く

タスク 1. 複数のデータファイルを用いて定性分析プログラムを開く（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| | c 〈Shift〉キーを押しながら、**Pest - 200 - Scan.d**、**Pest - STD 200 MRM.d**、**Pest Strawb-01 SPIKED 1 ppb - 1 ul inj.d**、**MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d** をクリックします。<br>d **［開く］**をクリックします。<br>４つのデータファイルすべてが［データナビゲータ］ウィンドウに表示され、１～３のクロマトグラムが［クロマトグラム結果］ウィンドウに表示されます。<br>e ［クロマトグラム結果］ツールバーの**［リストモード］**アイコン をクリックします。 | • 〈Ctrl〉キーを押しながら選択することで、連続していない複数のファイルをリストから選択できます。<br>• この時点でメインウィンドウに表示される内容は、これらのファイルを開く前に使用されたメソッド、レイアウト、表示、プロット設定によって異なります。<br>• ［リストモード］アイコンをクリックすると、アイコンの背景色がオレンジ色に変わります。 |

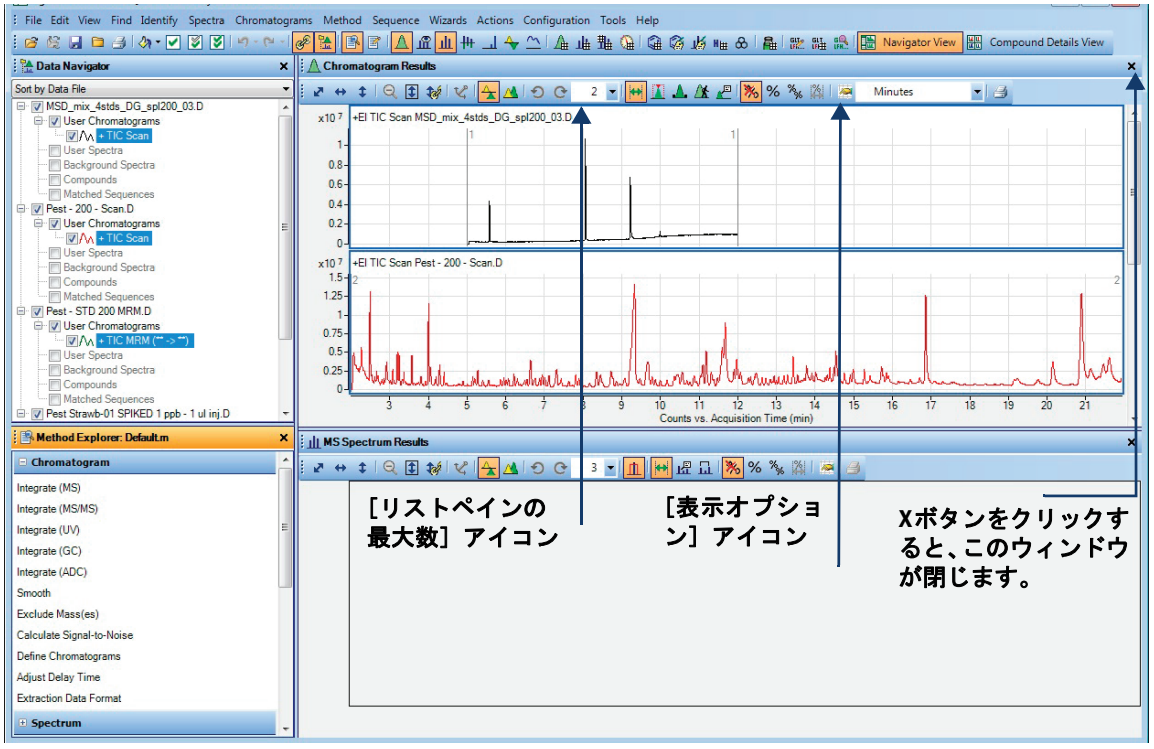



**図 2**　一般ワークフローを読み込んだ状態の定性分析メインウィンドウ

# タスク 2. GC/MS データ用にユーザーインターフェイスをコンフィグレーション

このタスクでは、一般ワークフロー（GC/QQQ の場合）または GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフロー（GC/Q-TOF の場合）に切り替えてください。GC/MS データの分析をサポートするワークフローはこの 2 つだけです。その後、**[ユーザーインターフェイス コンフィグレーション]** ダイアログボックスを開き、GC/QQQ システムまたは GC/Q-TOF システムに対する適切なチェックボックスをオンにします。

タスク 2. GC 用にユーザーインターフェイスをコンフィグレーション

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 必要に応じて、定性分析プログラムを開きます。 | a **Agilent MassHunterの［Qualitative Analysis］**アイコン をダブルクリックします。［データファイルを開く］ダイアログボックスが表示されます。<br>b ［データファイルを開く］ダイアログボックスで **［キャンセル］** をクリックします。 | • ウィンドウがアクティブの時に F1 キーを押すと、ウィンドウ、ダイアログボックス、タブに関するヘルプが表示できます。 |
| 2 一般ワークフローまたは GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローに切り替えます。 | a GC/QQQ 機器をお使いの場合、**[コンフィグレーション] > [ワークフローのコンフィグレーション] > [一般]** コマンドをクリックします。GC/Q-TOF 機器をお使いの場合、**[コンフィグレーション] > [ワークフローのコンフィグレーション] > [GC/Q-TOF 化合物スクリーニング]** コマンドをクリックします。<br>b **[ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む]** ボタンと **[ワークフローのデフォルトレイアウトを読み込む]** ボタンをクリックします。<br>c **[OK]** をクリックします。<br>d ［クロマトグラム結果］ツールバーの **[リストモード]** アイコン をクリックします。 | • GC/QQQ または GC/Q-TOF データ測定プログラムが同じコンピュータにインストールされている場合、ユーザーインターフェイスはソフトウェアによって自動的にコンフィグレーションされます。[ メソッドエクスプローラ ] ウィンドウには、[GC/Q-TOF 化合物スクリーニング ] セクションがすでに用意されている場合もあります。<br>• デフォルトでは、クロマトグラムは重ね描きモードになっています。この例ではクロマトグラムは **[リストモード]** で表示されています。 |

## タスク 2. GC 用にユーザーインターフェイスをコンフィグレーション

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** GC/QQQ をお使いの場合、GC/QQQ 機能のみを表示するようにユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。 | **a** **[コンフィグレーション]** > **[ユーザーインターフェイス コンフィグレーション]** をクリックします。<br>**b** [分離タイプ] で **[GC]** チェックボックスのみをオンにします。<br>**c** GC/QQQ 機器をお使いの場合、[イオン化タイプ] の下で、**[EIなどの"ハード"イオン化テクニック]** チェックボックスをオンにし、**[CI、APCI、ESI、MALDIなどの"ソフト"イオン化テクニック]** チェックボックスをオフにします。<br>**d** [質量精度] で **[精密質量(TOF、Q-TOF)]** チェックボックスをオフにします。**[ユニットマス（Q、QQQ）]** チェックボックスをオンにします。<br>**e** [オプションのソフトウェア機能] で **[Peptide Sequence Editor]** チェックボックスと **[BioConfirm Software]** チェックボックスをオフにします。<br>**f** [非MS検出器] で **[UV]** と **[ADC]** のチェックボックスをオフにします。<br>**g** **[詳細パラメータの表示]** チェックボックスをオンにします。<br>**h** **[OK]** をクリックします。 | • 使用可能なコマンドは、**[ユーザーインターフェイス コンフィグレーション]** ダイアログボックスから変更します。<br>• 機能が表示されていない場合、[ユーザーインターフェイス コンフィグレーション] ダイアログボックスでチェックボックスがオフになっている可能性があります。 |

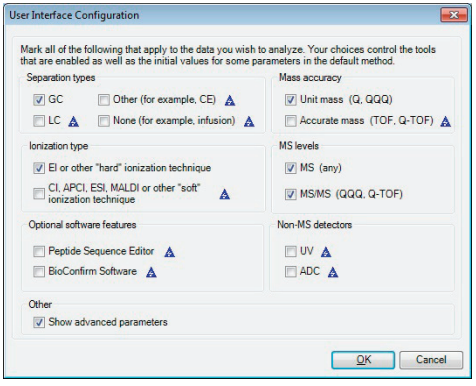



**図 3**　GC/QQQ データを使用するためのユーザーインターフェイスのコンフィグレーション

## タスク 2. GC 用にユーザーインターフェイスをコンフィグレーション

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** GC/Q-TOF 機器をお使いの場合、GC/Q-TOF 機能のみを表示するようにユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。 | **a** **[コンフィグレーション]** > **[ユーザーインターフェイス コンフィグレーション]** をクリックします。<br>**b** [分離タイプ] で **[GC]** チェックボックスのみをオンにします。<br>**c** [イオン化タイプ] の下で、両方のチェックボックスをオンにします。<br>**d** [MS レベル] の下で、両方のチェックボックスをオンにします。<br>**e** [質量精度] で **[精密質量(TOF、Q-TOF)]** チェックボックスをオンにします。**[ユニットマス(Q、QQQ)]** チェックボックスをオフにします。<br>**f** [オプションのソフトウェア機能] で **[Peptide Sequence Editor]** チェックボックスと **[BioConfirm Software]** チェックボックスをオフにします。<br>**g** [非MS検出器] で **[UV]** と **[ADC]** のチェックボックスをオフにします。<br>**h** **[詳細パラメータの表示]** チェックボックスをオンにします。<br>**i** **[OK]** をクリックします。 | • 使用可能なコマンドは、**[ユーザーインターフェイス コンフィグレーション]** ダイアログボックスから変更します。<br>• 機能が表示されていない場合、[ユーザーインターフェイス コンフィグレーション] ダイアログボックスでチェックボックスがオフになっている可能性があります。 |

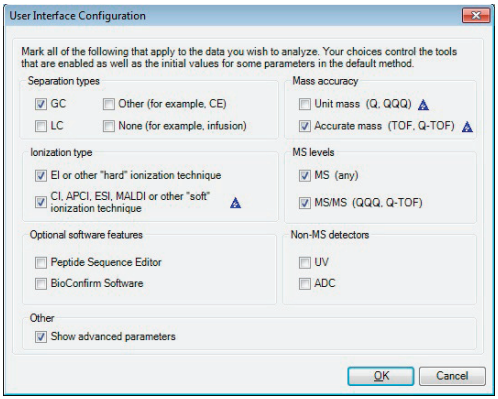



**図 4** GC/Q-TOF のユーザーインターフェイスのコンフィグレーション

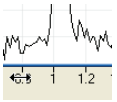
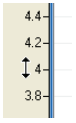
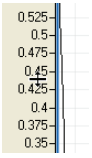
# タスク 3. クロマトグラムの拡大/縮小

このタスクでは、定性分析プログラムの拡大/縮小機能について学習します。

タスク 3. クロマトグラムの拡大/縮小

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** 3つのクロマトグラムのうち1つのみを拡大/縮小します（X軸とY軸両方）。<br>• その他を非表示にします。<br>• 最後のピークを2回拡大します。<br>• Y軸をオートスケールでもう1回拡大します。<br>• 1 回縮小して、前の倍率に戻します。<br>• 元のクロマトグラムに完全に戻します。 | **a** 非表示にするクロマトグラムのチェックボックスを［データナビゲータ］ウィンドウでオフにします。<br>**b** 最後のピークの領域を右クリックし、ドラッグします。<br>この段階で **［ズーム中にY軸をオートスケール］**アイコン が選択されていないことを確認します。<br>**c** ステップbを繰り返します。<br>**d** ツールバーの **［ズーム中にY軸をオートスケール］**アイコン をクリックします。<br>**e** 3 回目として最後のピークの領域を右クリックし、ドラッグします。<br>定性分析プログラムにより、範囲の最大ポイントに合わせて、Y軸が自動的に拡大されます。<br>**f** **［ズーム解除］**アイコン をクリックし、直前のズーム操作を取り消します。過去15回のズーム操作を取り消すことができます。<br>**g** **［X軸とY軸のオートスケール］**アイコン をクリックし、完全にズームを解除します。 | • ［データナビゲータ］ウィンドウでその行がチェックされていない場合、その行の情報は定性分析プログラムのすべてのウィンドウで表示されません。［データナビゲータ］ウィンドウでその情報のチェックボックスをオンにすると、情報は他のウィンドウでも再度表示されるようになります。<br>• ［スペクトルプレビュー］ウィンドウ、［MS スペクトル結果］ウィンドウ、および［結果の差］ウィンドウのスペクトルにもこれらのズーム機能を使用できます。<br>• 選択したアイコンの背景色はオレンジ色です。 |

## タスク 3. クロマトグラムの拡大/縮小（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2** 別々に拡大/縮小を実習します。<br>• X 軸に沿ってのみ拡大します。<br>ヒント：X 軸の値を右クリックし、カーソルを左から右に移動させます。<br>• X軸を部分的に縮小します。<br>ヒント：反対方向にカーソルを移動させます。<br>• X軸のズームを完全に解除します。<br>• Y軸に対して同じステップを繰り返します。 | **a** X 軸を拡大するには、水平の二重矢印が表示されるまでX軸値にカーソルを移動させます。<br>**b** X 軸値を右クリックし、新しいカーソルをX軸全域で左から右にドラッグします。<br>**c** X軸を縮小するには、X軸値を右クリックし、左から右にドラッグします。<br>**d** **[X軸のオートスケール]** アイコン をクリックし、X軸のズームを完全に解除します。 | <br>**水平二重矢印**<br><br>**X軸値を右クリックすると新しいカーソルが表示されます。** |
| | **e** Y軸を拡大するには、垂直の二重矢印が表示されるまでY軸値にカーソルを移動させます。<br>**f** Y 軸の値を右クリックし、新しいカーソルをY軸全域で下から上にドラッグします。<br>**g** Y軸を縮小するには、Y軸値を右クリックし、上から下に向かってドラッグします。<br>**h** **[Y軸のオートスケール]** アイコン をクリックし、Y軸のズームを完全に解除します。 | <br>**垂直二重矢印**<br><br>**Y軸値を右クリックすると新しいカーソルが表示されます。** |

# タスク 4. クロマトグラムの固定

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

## タスク 4. クロマトグラムの固定

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| • クロマトグラムを固定します。<br>◦ すべてのクロマトグラムを表示します。<br>◦ クロマトグラム表示リストを1に設定していることを確認します。<br>◦ ［クロマトグラム結果］ウィンドウで、2番目のTICを選択します。<br>◦ このTICを固定します。<br>◦ クロマトグラム全域をスクロールします。<br>◦ 固定を解除します。 | **a** ［データナビゲータ］で、前のタスクで非表示にしたクロマトグラムのチェックボックスをオンにします。<br>**b** ［クロマトグラム結果］ウィンドウで、ペインの最大数が1に設定されていることを確認します。<br>**c** ［クロマトグラム結果］ウィンドウで、2番目のTICを選択します。<br>**d** クロマトグラム内を右クリックし**［固定する］**をクリックします。<br>**e** ［クロマトグラム結果］ウィンドウのスクロールバーを用いて、クロマトグラムのリスト全体をスクロールします。２番目の TIC は、最初のクロマトグラムとして常に表示されます。<br>**f** **［クロマトグラム］＞［固定を解除］**をクリックします。 | • クロマトグラムを固定すると、［データナビゲータ］ウィンドウの固定されているクロマトグラムの名前の隣に固定アイコンが表示されます。<br>• 表示リストが1の場合でもクロマトグラムを1つ固定した後は［クロマトグラム結果］ウィンドウに2つのクロマトグラムが表示されます。これは、固定したクロマトグラムに加えて、1つのクロマトグラムを表示することを意味しています。<br>• クロマトグラムを右クリックし、ショートカットメニューの**［固定を解除］**をクリックすることもできます。 |

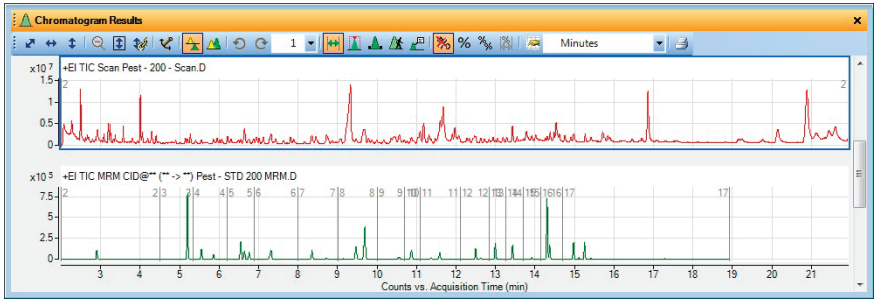



**図 5**　［クロマトグラム結果］ウィンドウでの固定したTIC

# タスク 5. ウィンドウレイアウトの変更

このタスクでは、メインビューにウィンドウを移動させ、さまざまなウィンドウレイアウトを作成します。

## タスク 5. ウィンドウレイアウトの変更

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 以下の、ウィンドウレイアウトを変更します。<br>• ウィンドウサイズの変更。<br>• ウィンドウレイアウトの保存。<br>• レイアウトのロック解除。<br>• [クロマトグラム結果] ウィンドウをフローティングに変更。<br>• [クロマトグラム結果] ウィンドウの移動。<br>• ウィンドウ位置変更用ツールの表示。 | • ウィンドウのサイズを変更するには、ウィンドウ間の境界線をドラッグします。<br>• ウィンドウレイアウトを保存するには **[コンフィグレーション] > [ウィンドウレイアウト] > [レイアウトの保存]** をクリックします。<br>• レイアウトのロックを解除するには、**[コンフィグレーション] > [ウィンドウレイアウト] > [レイアウトのロック]** をクリックします。<br>• ウィンドウをフローティング表示するには、ウィンドウのタイトルバーを右クリックし、ショートカットメニューから **[Floating]** をクリックします。<br>• ウィンドウを移動するには、ウィンドウのタイトルバーをクリックし、移動したい位置にウィンドウをドラッグします。<br>• 位置変更ツールを表示するには、ウィンドウを他のウィンドウの上にドラッグします。ウィンドウを別のウィンドウに重ねると、図 6 のように、プログラムにはいくつかのレイアウトツールが表示されます。 | • レイアウトのロックを解除すると [レイアウトのロック] メニュー横のチェックマークは消えます。<br>• 位置変更ツールは、レイアウトのロックが解除されている場合に限り使用できます。<br>• ウィンドウのタイトルバーをダブルクリックすることでも、ウィンドウをフローティングに設定できます。<br>• ソフトウェアには、事前に作成されたさまざまなレイアウトが用意されています。それとは異なるレイアウトを読み込むこともできます。<br>• ソフトウェアには複数の異なるワークフローがあります。各ワークフローは異なるレイアウトを読み込みます。異なるワークフローに切り替えると、レイアウトも変更されます。 |

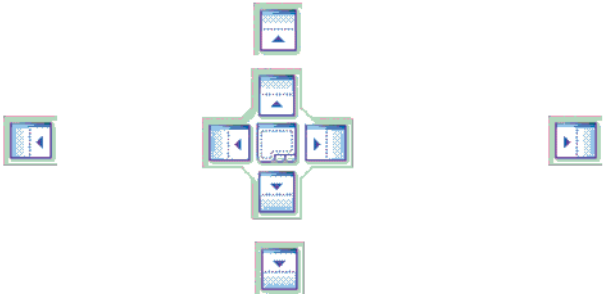


**図 6** ウィンドウ位置変更ツール

タスク 5. ウィンドウレイアウトの変更（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
| --- | --- | --- |
| **2** ［クロマトグラム結果］ウィンドウの位置を変えます。<br>• ウィンドウを他のウィンドウの上、左、右、下になるように移動させます。<br>• 2 つのウィンドウが上下に重なるように移動させ、下のウィンドウのタブによってのみ使用できるようにします。<br>• デフォルトレイアウトを復元します。 | • 小さなアイコンのいずれかの上にカーソルをドラッグすると、ドラッグしているウィンドウは他のすべてのウィンドウの上、右、下、または左に置かれます。<br>• 大きなアイコンの上にカーソルをドラッグします。大きなアイコンの端の上にカーソルをドラッグすることでも、他のウィンドウの上、右、下、左にウィンドウを置くことができます。<br>• 2 つのウィンドウを一緒にタブ付けするには、大きなアイコンの中心にカーソルをドラッグします。一緒にタブ付けされた 2 つのウィンドウには影が付けられます。マウスのドラッグを止めます。2つのウィンドウが一緒にタブ付けされます。<br>• **［コンフィグレーション］> ［ウィンドウレイアウト］> ［デフォルトレイアウトの復元］**をクリックします。 | • 位置を変更するには、ボックス内の矢印の 1 つの上にカーソルを置く必要があります。<br>• **［デフォルトレイアウトの復元］**コマンドをクリックすると、一般ワークフロー、または GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローで使用されるレイアウトが復元されます。異なるワークフローを使用している場合、そのワークフローで使用されるレイアウトを読み込む必要があります。 |

# タスク 6. クロマトグラムの抽出

このタスクでは、元のTICからクロマトグラムを抽出およびマージ（統合）します。

## タスク 6. クロマトグラムの抽出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** **Pest - 200 - Scan.d** データファイルの 2 つの質量から、抽出イオンクロマトグラム（EIC）を抽出およびマージします。<br>• *m/z* 値は 129.0 と 414.2 を使用してください。<br>• 個別の質量からのピークを 1 つのクロマトグラムにマージ（統合）しないでください。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで、**Pest - 200 - Scan.d** 以外のデータファイルのチェックボックスをオフにします。<br>**b** 下記または右記のいずれかの方法で、［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックスを表示します。<br>• **［クロマトグラム］>［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>**c** **［開いているデータファイルのリスト］**で、**Pest - 200 - Scan.d** をクリックします。<br>**d** **［タイプ］**リストボックスで、**［EIC］**を選択します。<br>**e** **［*m/z* 値］**ボックスで、`129.0, 414.2` と入力します。<br>**f** 必要に応じて、**［複数の質量を1つのクロマトグラムにマージ］**チェックボックスをオフにします。<br>**g** **［OK］**をクリックします。<br>**h** ［クロマトグラム結果］ツールバーで**［リストペインの最大数］**を 3 に設定します。 | • 以下の方法でもクロマトグラムを抽出できます。<br>◦ クロマトグラム内を右クリックし、**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>◦ ［データナビゲータ］から、**Pest - 200 - Scan.d** の **［TICスキャン］**をハイライトした後、**［TIC スキャン］**を右クリックし、**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。<br>• MS レベルとしては **［すべて］**または **［MS］**が使用できます。<br>• 抽出後、抽出したクロマトグラムを自動的に積分するように選択することもできます。<br>• マススペクトルからクロマトグラムを抽出することもできます。 |

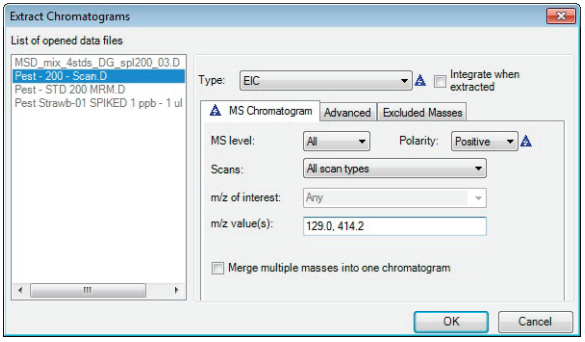
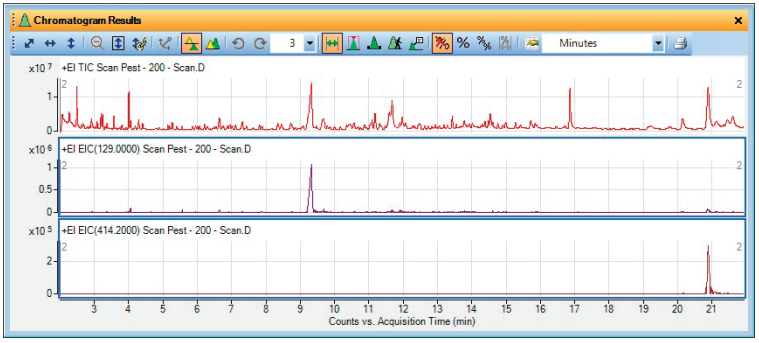



**図 7** ［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックス

タスク 6. クロマトグラムの抽出（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| | <br>**図 8** 元のTICとマージされた抽出イオンクロマトグラム（EIC）の比較 | |

# タスク 7. GC/MS クロマトグラムの積分

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

タスク 7. クロマトグラムの積分 (GC/MS)

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 右記のいずれかの方法で **Pest - 200 - Scan.d** データファイルの TIC スキャンクロマトグラムを積分します。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで［Pest - 200 - Scan.D］データファイルをオンにします。<br>**b** TIC スキャンクロマトグラムをハイライトし、次のコマンドのいずれかを使用します。<br>• メニューバーから **［クロマトグラム］** > **［クロマトグラムの積分］** をクリックします。<br>• ［クロマトグラム］ウィンドウ内を右クリックし **［クロマトグラムの積分］** をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］ウィンドウで、**［Pest - 200 - Scan.D］** > **［ユーザークロマトグラム］** > **［TICスキャン］** を選択し、**［TIC スキャン］** を右クリックして **［クロマトグラムの積分］** をクリックします。 | • クロマトグラムのすべてのピークが積分されたことを確認してください。<br>• MS データ、MS/MS データ、GC データに使用する積分を［メソッドエディタ］ウィンドウで選択します。<br>• このクロマトグラムは MS クロマトグラムなので、メソッドエディタの［積分 (MS)］セクションに設定されている値がこのクロマトグラムの積分に使用されます。 |
| 2 同時に 2 つのクロマトグラムしか表示しないようにします。 | • ［クロマトグラム結果］ツールバーの **［リストペインの最大数］** ボックスで **2** を選択します。 | |




**多数の小さいピークが積分されます。**

**図 9** 多数の小さいピークも積分されたTICスキャンクロマトグラム

タスク 7. クロマトグラムの積分 (GC/MS)（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** スレッショルドを変更し、積分するピークを減らします。<br>• スレッショルドを変更し、3つの最大ピークのみ積分されるようにします。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウから **［クロマトグラム］>［積分 (MS)］** をクリックし、［積分（MS）］タブを表示します。<br>**b** インテグレータに **［Agile 2］** を選択します。<br>**c** **［ピークフィルタ］** タブをクリックします。<br>**d** ［ピークの最大数］で、**［ピーク数を高さベースで制限する］** をオンにして、3 を入力します。 | • 現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。 |

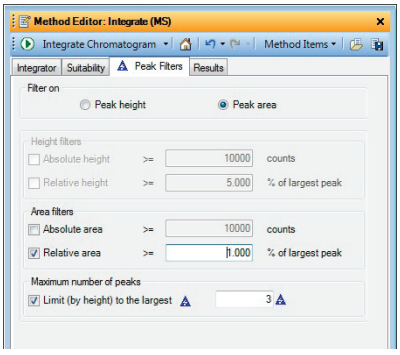



**図 10**　**［ピーク数を高さベースで制限する］** がオンの状態の［ピークフィルタ］タブ

| | | |
|---|---|---|
| **4** クロマトグラムを再積分します。 | **e** ［メソッドエディタ］ツールバーの ボタンをクリックし、新しい設定を用いて積分します。 | • これで、ピークの高さが最も高い 3 つのピークのみが積分されます。 |

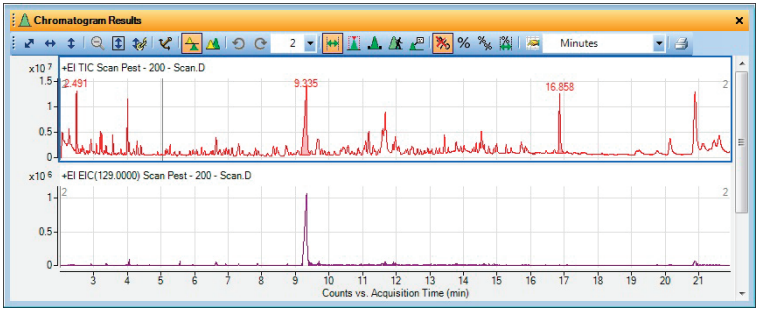



**図 11**　ピーク数を制限して積分したTICスキャンクロマトグラム

タスク 7. クロマトグラムの積分 (GC/MS)（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **5** **Pest - STD 200 MRM.D** データファイルの TIC MRM クロマトグラムを積分します。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで、Pest - STD 200 MRM.d データファイルの**TIC MRM**を選択します。<br>**b** クロマトグラムを積分するには、次のコマンドのいずれかを使用します。<br>• メニューバーから **［クロマトグラム］** > **［クロマトグラムの積分］** をクリックします。<br>• ［クロマトグラム］ウィンドウ内を右クリックし **［クロマトグラムの積分］** をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］ウィンドウで、ハイライトされたクロマトグラムを右クリックし、**［クロマトグラムの積分］** をクリックします。<br>**c** 5.8 分から 8.5 分に拡大します。<br>**d** **［リストペインの最大数］** を 2 に設定します。 | • ［データナビゲータ］ウィンドウで複数のクロマトグラムをハイライトするには **〈Ctrl〉** キーを押します。<br>• クロマトグラムのすべてのピークが積分されたことを確認してください。<br>• これらのクロマトグラムは MS/MS クロマトグラムなので、メソッドエディタの［積分 (MS/MS)］セクションに設定されている値がこのクロマトグラムの積分に使用されます。MS クロマトグラムの積分にインテグレータを 1 つ選択し、MS/MS クロマトグラムの積分には別のインテグレータを選択することができます。 |

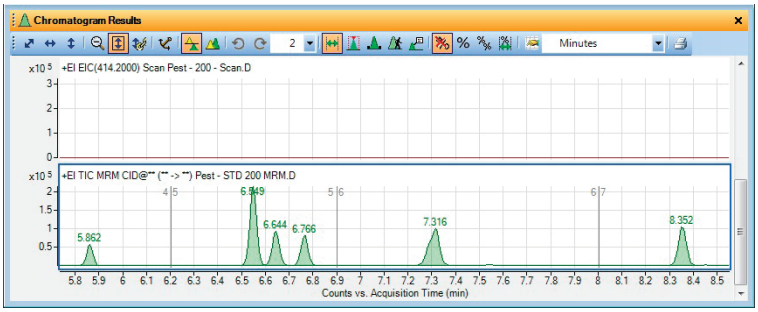
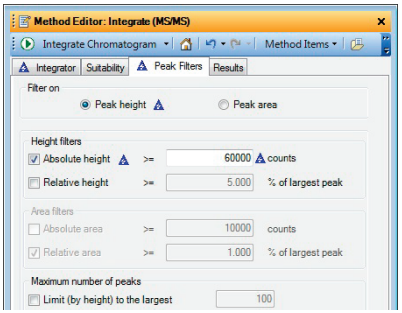
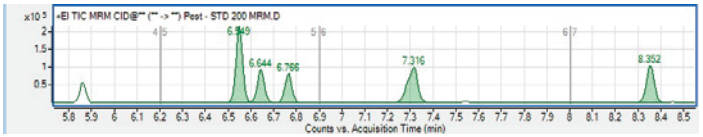



**図 12** 積分されたMRMクロマトグラム

| | | |
|---|---|---|
| **6** **［MS/MS (GC)］** インテグレータを選択します。絶対高さが 60,000 以上のピークのみを受け入れるようにフィルタを変更します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［クロマトグラム］** > **［積分 (MS/MS)］** を選択します。<br>**b** **インテグレータ選択**で **［MS/MS (GC)］** を選択します。<br>**c** **［ピークフィルタ］** タブをクリックします。<br>**d** **［フィルタをオン］** で、**［ピーク高さ］** をクリックします。<br>**e** ［高さフィルタ］で、**［絶対高さ］** チェックボックスをオンにします。<br>**f** ［絶対高さ］に**60000**を入力します。 | • 現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。 |

タスク 7. クロマトグラムの積分 (GC/MS)（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| | <br>**図 13　［絶対高さ］をオンにした［ピークフィルタ］タブ** | |
| **7** クロマトグラムを再積分します。 | **g** ［メソッドエディタ］ツールバーの ボタンをクリックします。 | • これで、指定した最大ピークのみが積分されます。 |
| | <br>**図 14　最大ピーク表示のスレッショルドを設定して積分された TIC と EIC の MS/MS クロマトグラム** | **5.8 分の小さいピークが積分結果に含まれなくなります。これは、このピークの絶対高さが 60000 カウントよりも小さいためです。** |
| **8** 現在のメソッドに保存されている設定を復元し［メソッドエディタ］を閉じます。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］の［クロマトグラム］>［積分 (MS/MS)］セクションを選択します。<br>**b** ［メソッドエディタ］の アイコンをクリックします。<br>**c** ［メソッドエクスプローラ］の［クロマトグラム］>［積分 (MS)］セクションを選択します。<br>**d** ［メソッドエディタ］の アイコンをクリックします。<br>**e** **［メソッドエディタ］**ウィンドウを閉じます。 | • 変更をキャンセルし、読み込まれたメソッドから値を復元するには、［メソッドエディタ］ツールバーの **［最後に保存したファイルの値に復元］** アイコン をクリックします。 |
| **9** オリジナルのクロマトグラムを除き、すべてのクロマトグラムを削除します。オリジナルのクロマトグラムから積分結果を削除します。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウの［ユーザークロマトグラム］の下で、オリジナルのクロマトグラムを除きすべてのクロマトグラムをハイライトします。<br>**b** ハイライトしたクロマトグラムを右クリックし、**［削除］**をクリックします。<br>**c** すべての TIC クロマトグラムを選択します。<br>**d** **［クロマトグラム］**>**［結果の消去］**をクリックします。 | • **［結果の消去］**コマンドを使用する場合、クロマトグラムは削除されません。クロマトグラムに関連する結果が削除されます。この場合は、積分値が消去されます。 |

# タスク 8. システム適合性の計算

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

## タスク 8. クロマトグラムの積分 (MS)

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** 右記のいずれかのオプションを用いて、**MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d** および **Pest - 200 - Scan.d** クロマトグラムを積分します。 | **a** [データナビゲータ] ウィンドウで MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d データファイルの隣のチェックボックスをオンにします。<br>**b** ［データナビゲータ］ウィンドウで[Pest - 200 - Scan.D］データファイルの隣のチェックボックスをオンにします。<br>**c** 両方の TIC をハイライトします。<br>**d** これら２つのファイルの **TIC スキャン**を、次のいずれかの方法で積分します。<br>• メインメニューから **［クロマトグラム］ > ［クロマトグラムの積分］** をクリックします。<br>• クロマトグラムをハイライトします。次に、クロマトグラムを右クリックし **［クロマトグラムの積分］** をクリックします。<br>• ［データナビゲータ］で、両方のデータファイルの **TIC スキャン**をハイライトします。次に、いずれかのクロマトグラムを右クリックし、**［クロマトグラムの積分］** をクリックします。 | • 一般ワークフローと GC/Q-TOF ワークフローの場合、積分には **Agile 2** インテグレータが使われます。これは、ワークフローのデフォルトメソッドで Agile 2 が選択されているためです。<br>• この値は、［クロマトグラム］ > ［積分 (MS)］ > ［積分］ タブで変更できます。<br>• デフォルトパラメータを用いた積分では非常に小さなピークも検出されることに注意してください。 |

タスク 8. クロマトグラムの積分 (MS)（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

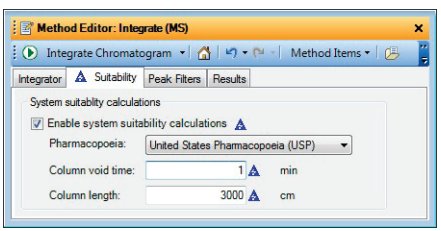



**図 15**　［データナビゲータ］のショートカットメニューの 1 つと、積分されたクロマトグラム

**2** MS クロマトグラムのシステム適合性の計算結果を有効にします。

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

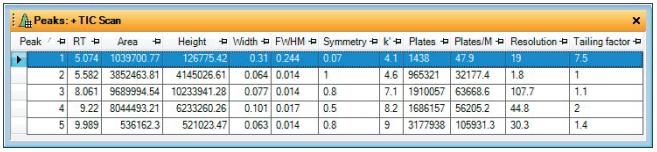
- 現在のメソッドに保存されている値から設定を変更すると、青色三角形が表示されます。メソッドを保存すると、三角形は消えます。
- 選択している薬局方によって、アルゴリズムで計算される［積分ピークリスト］列が異なります。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。




**データファイルの実際のカラム空隙時間とカラム長さは、設定した値とは異なります。これらの値は例としてのみ使用しています。**

**図 16**　［クロマトグラム］>［積分（MS)］>［適合性］タブ

## タスク 8. クロマトグラムの積分 (MS)（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** クロマトグラムを再積分します。 | • ［メソッドエディタ］ツールバーの **［クロマトグラムの積分］** アイコン をクリックし、新しい設定を用いて積分します。 | |
| **4** システム適合性の計算結果を表示します。<br>• ［積分ピークリスト］ウィンドウを開きます。<br>• ノイズ範囲の値をレビューし、積分したピークのシグナル / ノイズ比を計算します。 | **a** **［表示］** > **［積分ピークリスト］** をクリックします。<br>**b** ［ピーク］ウィンドウのヘッダーを右クリックし、**［Floating］** をクリックします。<br>**c** 表示しない列の列ヘッダーを右クリックし **［列の削除］** をクリックします。<br>**d** 任意の列ヘッダーを右クリックし **［列の追加 / 削除］** をクリックして表示する列を変更します。 | • システム適合性の計算結果が［積分ピークリスト］テーブルに含まれるようになります。<br>• 適合性の値は[k']、[テーリングファクタ]、[プレート]、[理論段数/m]、[対称度］などがあります。<br>• システム適合性の計算結果は、MS、MS/MS、GC クロマトグラムでも有効にすることができます。 |
| |  | |
| | **図 17** システム適合性の値を表示した積分ピークテーブル | |
| **5** デフォルトメソッドの設定を復元し、［メソッドエディタ］と［積分ピークリスト］のウィンドウを閉じます。 | **a** 変更をキャンセルし、デフォルトメソッドから値を復元するには［メソッドエディタ］ツールバーの **［最後に保存したファイルの値に復元］** アイコン をクリックします。<br>**b** **［メソッドエディタ］** ウィンドウを閉じます。<br>**c** ［積分ピークリスト］ウィンドウのタイトルを右クリックし、**［Floating］** をクリックします。<br>**d** **［表示］** > **［積分ピークリスト］** をクリックします。 | • ショートカットメニューから［Floating］コマンドをもう一度クリックすると、［積分ピークリスト］ウィンドウが元の位置にドッキングします。 |

Peaks: + TIC Scan

| Peak | RT | Area | Height | Width | FWHM | Symmetry | k' | Plates | Plates/M | Resolution | Tailing factor |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 5.074 | 1039700.77 | 126775.42 | 0.31 | 0.244 | 0.07 | 4.1 | 1438 | 47.9 | 19 | 7.5 |
| 2 | 5.582 | 3852463.81 | 4145026.61 | 0.064 | 0.014 | 1 | 4.6 | 965321 | 32177.4 | 1.8 | 1 |
| 3 | 8.061 | 9689994.54 | 10233941.28 | 0.077 | 0.014 | 0.8 | 7.1 | 1910057 | 63668.6 | 107.7 | 1.1 |
| 4 | 9.22 | 8044493.21 | 6233260.26 | 0.101 | 0.017 | 0.5 | 8.2 | 1686157 | 56205.2 | 44.8 | 2 |
| 5 | 9.989 | 536162.3 | 521023.47 | 0.063 | 0.014 | 0.8 | 9 | 3177938 | 105931.3 | 30.3 | 1.4 |

# タスク 9. クロマトグラムからスペクトルを抽出

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

タスク 9. クロマトグラムからスペクトルを抽出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** ［クロマトグラムを進める］を使用して **Pest - STD 200 MRM.d** の最後の 2、3 個のピークのプリカーサイオンとプロダクトイオンを表示します。<br>• 13～16分の範囲を拡大します。<br>• ［クロマトグラムを進める］アイコンを使用します。<br>• 約 13 分に始まるスペクトルをレビューし、矢印を右に移動させます。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで **Pest - STD 200 - MRM.D** をオンにします。<br>**b** ［メソッドエディタ］ウィンドウを閉じます。<br>**c** ［MS スペクトル結果］ウィンドウを閉じます。<br>**d** ［データナビゲータ］ウィンドウで **TIC MRM** クロマトグラムをクリックします。<br>**e** ［クロマトグラム結果］ツールバーの **［ズーム中にY軸をオートスケール］** アイコン をクリックします。<br>**f** ［リストペインの最大数］で **1** を選択します。<br>**g** いくつかのピークを拡大するには、13 分のピークの上で右クリックし、16 分にドラッグした後、離します。<br>**h** ［クロマトグラム結果］ツールバーの **［クロマトグラムを進める］** アイコン をクリックします。<br>**i** ［クロマトグラムを進める］カーソルを X 軸上の約 13 分の位置に移動させ、クリックします。<br>**j** スペクトル間を移動するには、キーボードの左右の矢印キーを使用します。 | • ［クロマトグラムを進める］ツールは、MS/MS データでプリカーサイオンとプロダクトイオンを識別する際には特に便利です。<br>• ［クロマトグラム結果］ウィンドウでクリックする各ポイントのスペクトルは、自動的に開く［スペクトルプレビュー］ウィンドウに自動的に表示されます。<br>• 2 つのスペクトルが［スペクトルプレビュー］ウィンドウに表示されることもあります。たとえば、13.431 分のピーク近辺でクリックする各ポイントに対して［スペクトルプレビュー］ウィンドウには 2 つのスペクトルが表示されます。 |

タスク 9. クロマトグラムからスペクトルを抽出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

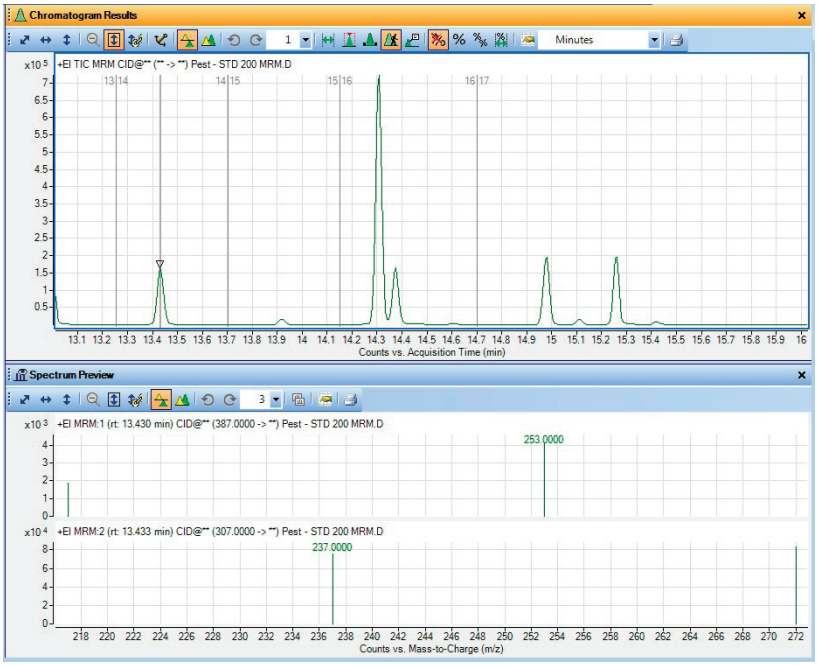



**図 18** ［クロマトグラムを進める］を使用して13.43分のピークの2つのMRMスペクトルを表示する

## タスク 9. クロマトグラムからスペクトルを抽出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2** **Pest - STD 200 MRM.d** データファイルの 5.2 分と 14.3 分のピークで、特定のデータポイントのスペクトルを抽出します。<br>• 「コメント」で説明しているオプションのいずれかを用いて、5.2分または5.2分付近のピーク、および谷のいずれかからスペクトルを抽出します。<br>• 14.3分または14.3分付近のピークからスペクトルを抽出します。（谷からはまだ抽出しません）。<br>• 表示を変更し、3つ以上のスペクトルを表示します。 | **a** ［クロマトグラム結果］ツールバーの**［範囲選択］**アイコン をクリックします。<br>**b** ［スペクトルプレビュー］ウィンドウを閉じます。<br>**c** ［クロマトグラム結果］ツールバーの**［オートスケール（ズーム解除）］**アイコン をクリックします。<br>**d** 5.2分のピークを拡大するには、4.0分のピークの上で右クリックし、6.0分にドラッグした後、離します。<br>**e** 5.2分近辺のピークから、コメントで説明している方法のいずれかを用いてスペクトルを抽出します。<br>**f** 5.1分近辺の谷で、スペクトルを抽出します。<br>**g** ［クロマトグラム結果］ツールバーの**［オートスケール（ズーム解除）］**アイコン をクリックします。<br>**h** 14～15分の範囲を拡大します。<br>**i** 14.3 分近辺のピークから、コメントで説明している方法のいずれかを用いてスペクトルを抽出します（谷のスペクトルはまだ抽出しません）。<br>**j** 必要に応じて［MSスペクトル結果］ツールバーの**［リストペインの最大数］**アイコンで 4 を選択します。 | • ズームする場合［ズーム中にY軸をオートスケール］アイコン がオンになっていることを確認します。オンの場合、アイコンの背景色はオレンジ色です。<br>• 以下のいずれかの方法でスペクトルを抽出できます。<br>◦ クロマトグラムのデータポイントをダブルクリックします。<br>◦ クロマトグラムのデータポイントをクリックした後、クロマトグラム内を右クリックします。**［MSスペクトルの抽出］**をクリックします。［スペクトルの抽出］ダイアログボックスが表示されます。**Pest - STD 200 MRM.d** ファイルが選択されていることを確認し、［スペクトルの抽出］ダイアログボックスの**［抽出］**をクリックします。<br>• スペクトルを初めて抽出した時に、［MSスペクトル結果］ウィンドウが表示され、スペクトルが表示されます。［ユーザースペクトル］の下にそのスペクトルのタイプとリテンションタイムが表示されます。抽出したスペクトルは、すべて両方の場所に表示されます。<br>• 14.3 分付近のピークに対して MS スペクトルを抽出すると、２つのスペクトルが抽出されます。これは、このピークで２つのトランジションが発生しているからです。 |

## タスク 9. クロマトグラムからスペクトルを抽出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

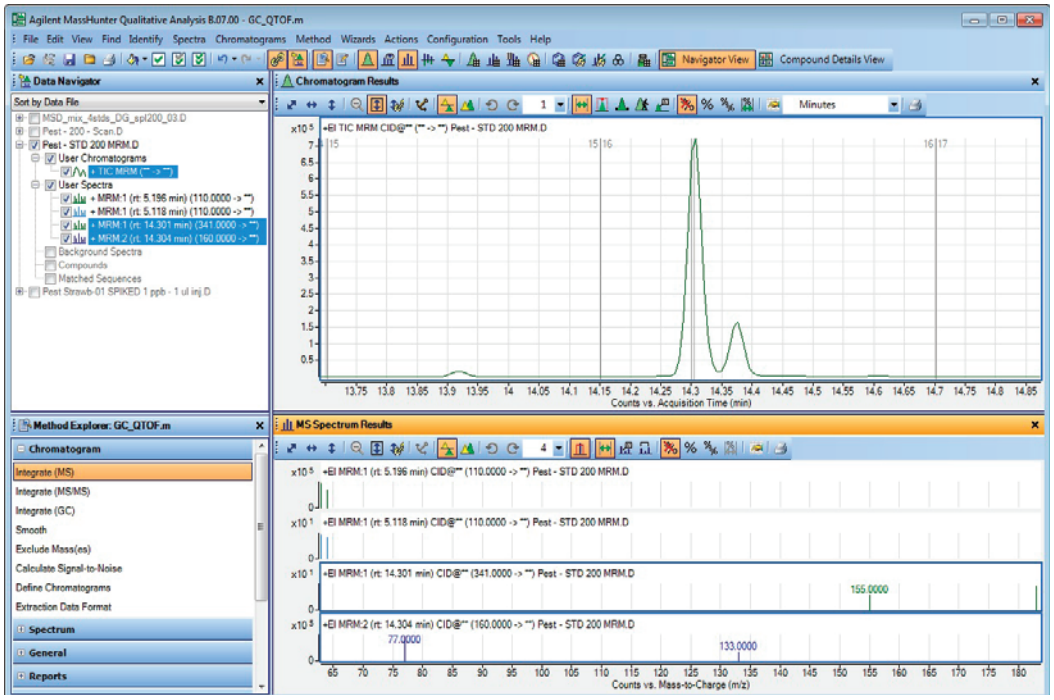



**図 19** 5.2分のピークからの2つのMRMスペクトルと、14.3分のピークからの2つのMRMスペクトルを表示したメインウィンドウ

**3** **Pest - STD 200 MRM.d** データファイルから 14.35 分の谷の MS スペクトルを抽出します。
- ［スペクトルプレビュー］を表示します。
- リテンションタイム 14.3 分の谷からスペクトルを抽出します。
- このスペクトルをユーザースペクトルフォルダにコピーします。
- 表示を変更し、6つのスペクトルを表示します。
- ［スペクトルプレビュー］をオフにします。

**a** **[スペクトルプレビュー]**アイコン をクリックします。

**b** 14.3 分近辺の谷からスペクトルを抽出します。

**c** ［スペクトルプレビュー］ウィンドウでスペクトルを右クリックし **[ユーザースペクトルにコピー]** をクリックします。スペクトルは［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］セクションにコピーされ［MS スペクトル結果］ウィンドウに表示されます。

**d** ［スペクトルペイン］リスト隣の下矢印をクリックし、**6**を選択します。

**e** ［スペクトルプレビュー］ウィンドウを閉じます。

- ［スペクトルプレビュー］が有効な場合、手動で選択したスペクトルは［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］セクションではなく、［スペクトルプレビュー］ウィンドウに表示されます。
- ［スペクトルプレビュー］がオンの場合、新しいスペクトルを抽出すると、前のスペクトルは上書きされます。
- クロマトグラムのスペクトルを素早くレビューしたり、保存するスペクトルを少なくしたい場合は［スペクトルプレビュー］モードが便利です。

## タスク 9. クロマトグラムからスペクトルを抽出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|




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

**4** **Pest - STD 200 MRM.d** データファイルで、14.3分のピークの指定範囲のすべてのポイントを平均したスペクトルを抽出します。

- ズームを解除します。
- ［クロマトグラム］ツールバーの［範囲選択］アイコンを使用します。
- 範囲をピーク全体に設定します。
- 説明されているいずれかの方法でスペクトルを抽出します。

**a** ［クロマトグラム］ツールバーの**［範囲選択］**アイコン をクリックします。

**b** 14.3 分のピークの底の左側をクリックし、同じピークの底の右側にドラッグします。

**c** 右記のいずれかの方法で、平均スペクトルを抽出します。

**d** ［MS スペクトル結果］ウィンドウの［リストペインの最大数］で **2** を選択します。

- クロマトグラム内の選択範囲をダブルクリックすると、平均スペクトルを抽出できます。
- あるいは、クロマトグラム内を右クリックし、ショートカットメニューから**［MS スペクトルの抽出］**をクリックします。
- 2つの平均MRMスペクトルが表示されます。

## タスク 9. クロマトグラムからスペクトルを抽出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 5 **Pest - STD 200 MRM.d** データファイルの 5.2 分と 14.3 分のピーク範囲を一緒に平均したスペクトルを抽出します。<br>• ヒント：［範囲選択］アイコンと **〈Ctrl〉** キーを用いて、まず1つ目のピーク範囲を選択します。<br>• 右記のいずれかの方法で、スペクトルを抽出します。 | **a** ［クロマトグラム結果］ツールバーの **［オートスケール（ズーム解除）］** アイコン をクリックします。<br>**b** **〈Ctrl〉** キーを押します。<br>**c** 5.2 分のピークの左側をクリックして、ピークの右側までドラッグし、マウスを放します。<br>**d** **〈Ctrl〉** キーを離します。<br>**e** 以下または右記のいずれかの方法で、平均スペクトルを抽出します。<br>• いずれかのピークの選択範囲内をダブルクリックします。 | • 2 番目のピークはステップ 4 で既に範囲が選択されています。<br>• スペクトルを抽出するには、クロマトグラム内を右クリックした後、**［MS スペクトルの抽出］** をクリックしてスペクトルを抽出する方法もあります。［スペクトルの抽出］ダイアログボックスが表示されます。**［抽出］** をクリックします。 |

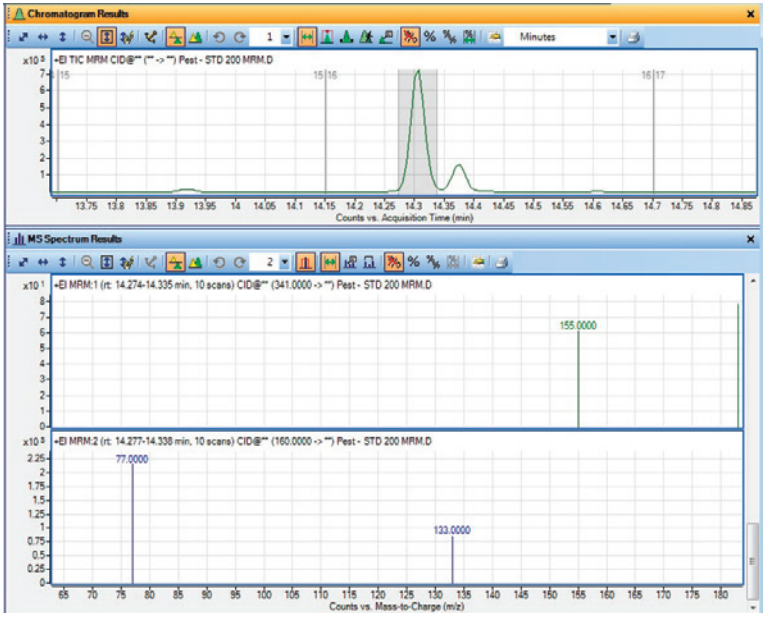



**図 21** ［クロマトグラム結果］と2つの平均スペクトルを表示した［MSスペクトル結果］

## タスク 9. クロマトグラムからスペクトルを抽出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 6 **Pest - STD 200 MRM.d** からピークスペクトルを抽出する際、バックグラウンドスペクトルを減算します。<br>• ［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］にあるスキャンをすべて削除します。<br>• ピークの開始とピークの終了のスペクトルの平均であるバックグラウンドスペクトルを抽出します。<br>• 積分したピークのピークスペクトルを抽出します。 | **a** ［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］行をクリックします。［ユーザースペクトル］行を右クリックし **［削除］** をクリックします。<br>**b** **［はい］** をクリックします。<br>**c** ［メソッドエクスプローラ］で **［スペクトル］** > **［抽出 (MS/MS)］** を選択します。<br>**d** **［ピークスペクトル抽出 (MS/MS)］** タブをクリックします。<br>**e** **［ピークスペクトルバックグラウンド MS/MS］** リストから **［ピーク開始点と終了点のスペクトルの平均］** を選択します。<br>**f** ［クロマトグラム結果］ツールバーの **［ピーク選択］** アイコン、 をクリックします。<br>**g** **［クロマトグラム］** > **［積分］** コマンドをクリックします。<br>**h** 5.206分のピークを選択します。<br>**i** 右クリックし、ショートカットメニューから **［ピークスペクトルの抽出］** をクリックします。 | • この処理の最後に、抽出したピークスペクトルすべてに対して、指定したバックグラウンドスペクトルが自動的に減算されることを確認してください。 |

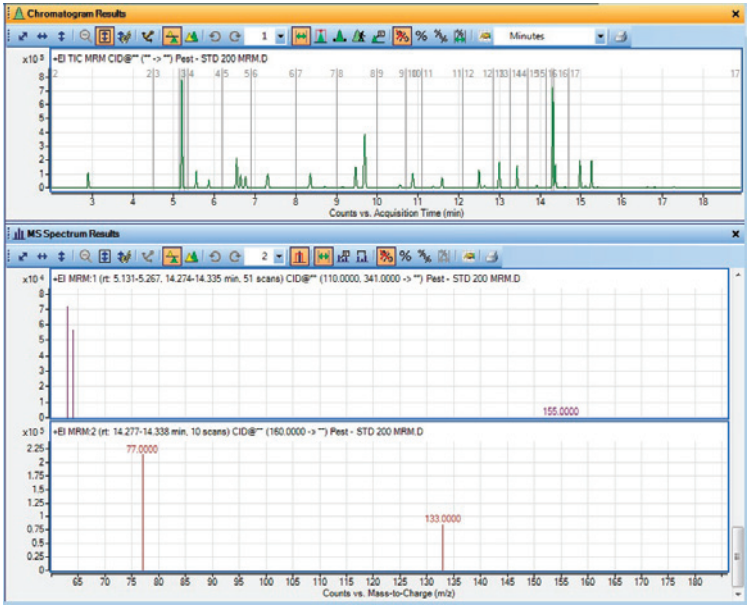



**図 22**　クロマトグラムの2つの異なる範囲からの2つの平均スペクトル

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

## タスク 9. クロマトグラムからスペクトルを抽出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

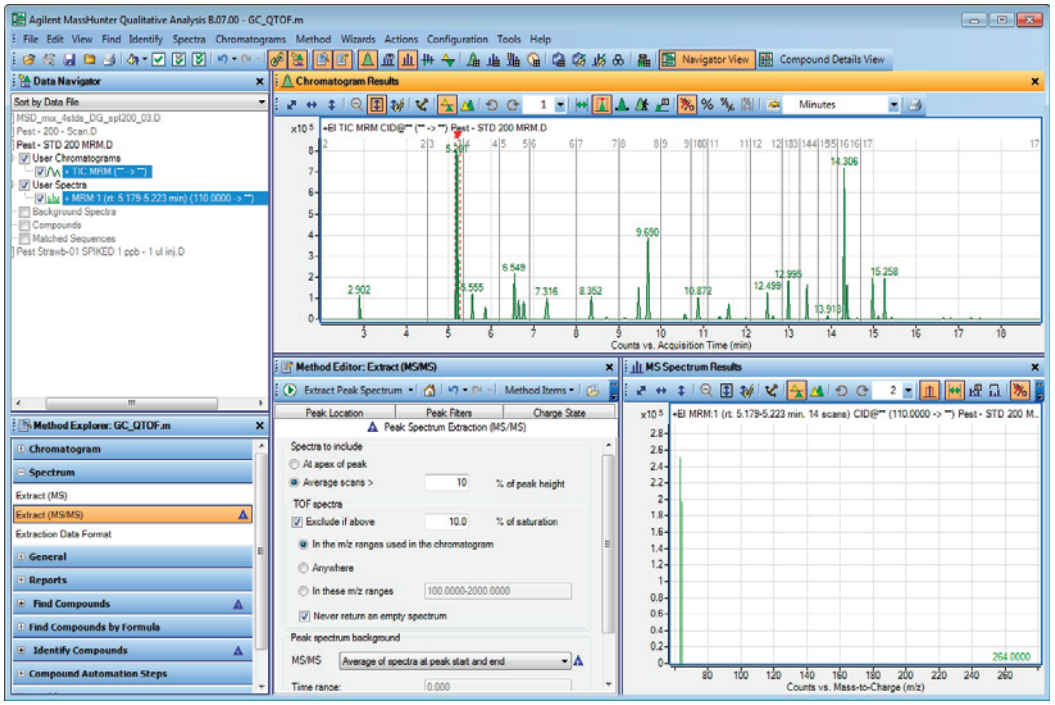



**図 23** バックグラウンドピークスペクトルを減算したピークスペクトル

## タスク 9. クロマトグラムからスペクトルを抽出

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

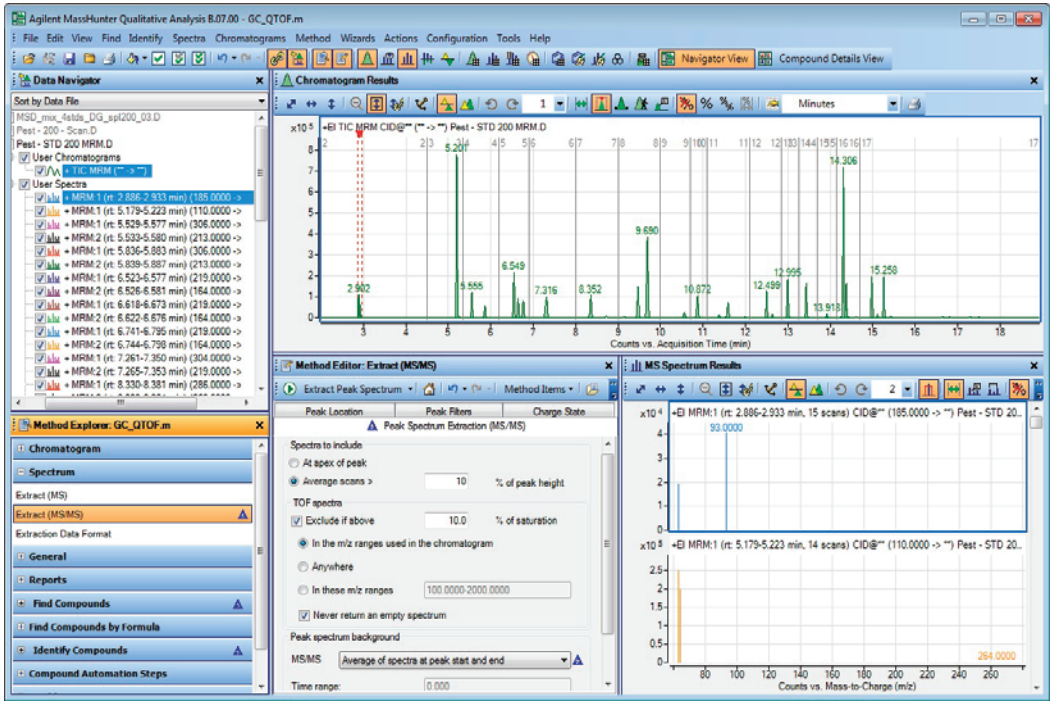



**図 24**　ピークスペクトルの積分と抽出

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

# タスク 10. 注釈の追加

以下のグラフィックウィンドウにはイメージ注釈またはテキスト注釈を追加することができます。

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

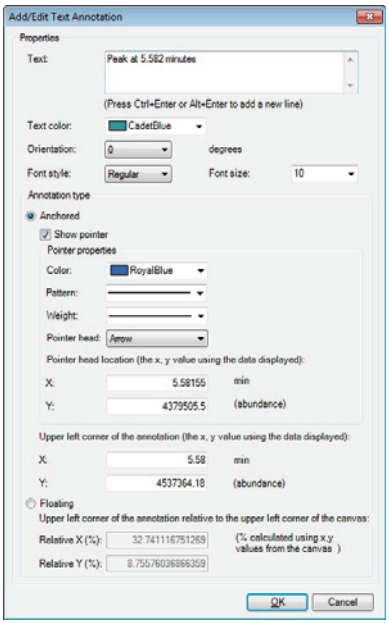
データファイルの結果を保存すると、注釈も保存されます。

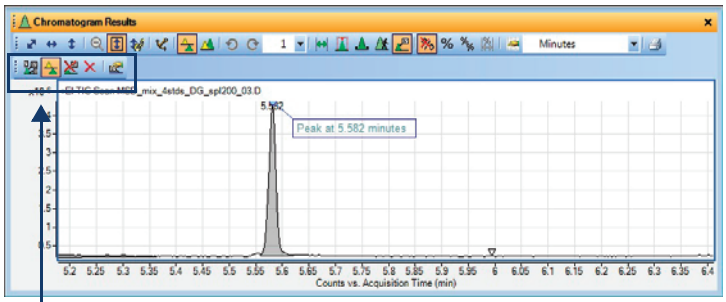
タスク 10. 注釈の追加

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d データファイルを選択します。他のクロマトグラムを非表示にします。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで、MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D の隣のチェックボックスをオンにします。<br>**b** **［編集］＞［表示］＞［ハイライトされたもののみ］**をクリックします。 | • 他のデータファイルのクロマトグラムは自動的に非表示になります。 |
| **2** テキスト注釈を追加するクロマトグラム内の位置を選択します。 | **a** ［クロマトグラム結果］ウィンドウのツールバーで**［注釈］**ツール（）をクリックします。<br>**b** 注釈を追加するクロマトグラムペインの位置にカーソルを移動します。<br>**c** 右クリックして**［テキスト注釈の追加］**をクリックします。 | • カーソルが十字線に変更されます。このカーソルを使用して、注釈を追加する正確な位置を選択します。<br>• ［クロマトグラム結果］ ウィンドウでは［注釈］ツールバーが使用できます。<br>• ［MS スペクトル結果］ウィンドウに注釈を追加することもできます。 |
| **3** ［テキスト注釈の追加 / 編集］ダイアログボックスにテキスト注釈に関する情報を入力します。 | **a** 注釈の**［テキスト］**を入力します。<br>**b** **［テキストの色］**を選択します。<br>**c** **［向き］**を選択します。<br>**d** **［フォントスタイル］**と**［フォントサイズ］**を選択します。<br>**e** **［固定］**または**［フローティング］**をクリックします。**［固定］**を選択する場合は、テキスト注釈のポインタのオプションを選択します。**［フローティング］**を選択する場合は、相対位置を設定します。位置の移動はグラフィックウィンドウを使用するとより簡単に変更できます。<br>**f** **［OK］**をクリックします。 | • クロマトグラムおよびスペクトルには、複数の注釈を追加できます。<br>• ［注釈］ツールバーのアイコンを使用して、注釈の削除や編集、あるいはすべての注釈を選択することができます。 |

タスク 10. 注釈の追加（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|




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

**注釈をクリックしてドラッグすると、注釈を新しい位置に移動できます。**

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

| | | |
|---|---|---|
| **4** イメージ注釈を追加するクロマトグラム内の位置を選択します。 | **a** 注釈を追加するクロマトグラムペインの位置にカーソルを移動します。<br>**b** 右クリックして **［イメージ注釈の追加］** をクリックします。 | • JPG または MOL イメージファイルを追加できます。 |
| **5** ［テキスト注釈の追加 / 編集］ダイアログボックスにテキスト注釈に関する情報を入力します。 | **a** ［イメージ注釈］を選択します。<br>**b** [幅の倍率] に 50 を入力します。<br>**c** **［縦横比を固定する］** チェックボックスをオンにします。<br>**d** **［フローティング］** をクリックします。相対位置を変更できます。位置の移動はグラフィックウィンドウを使用するとより簡単に変更できます。<br>**e** **［OK］** をクリックします。<br>**f** イメージをクロマトグラムの右上隅に移動します。 | • Agilent_Logo.tif ファイルは、¥¥MassHunter¥Report Templates¥Qual¥B.07.00¥en-US¥Letter フォルダにあります。ファイルは JPG ファイルに変換する必要があります。<br>• クロマトグラムおよびスペクトルには、複数の注釈を追加できます。 |

タスク 10. 注釈の追加（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

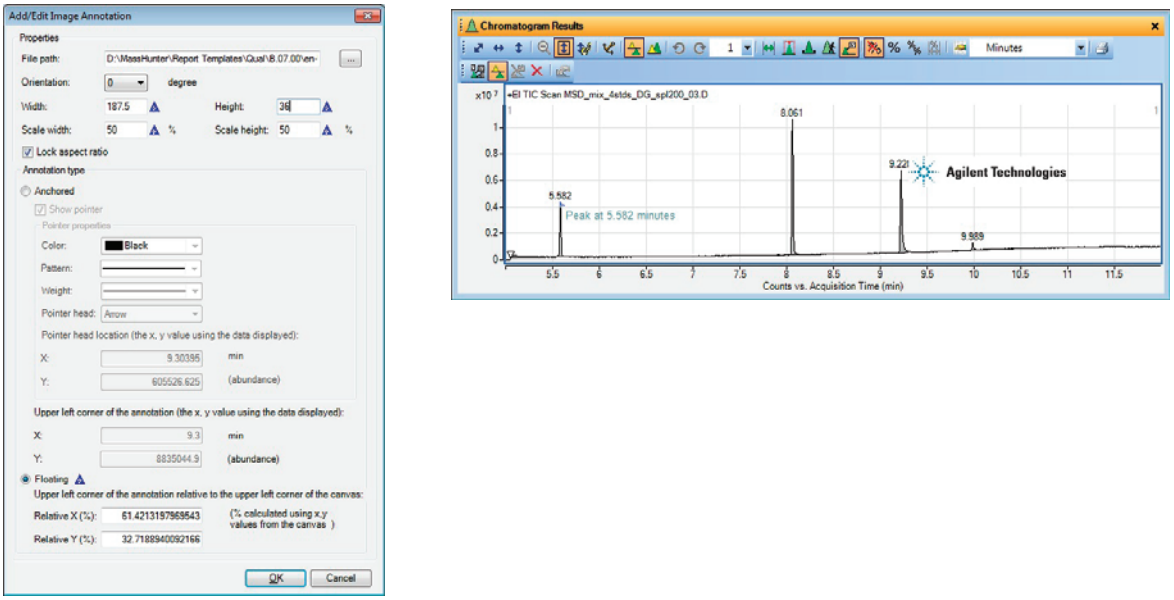
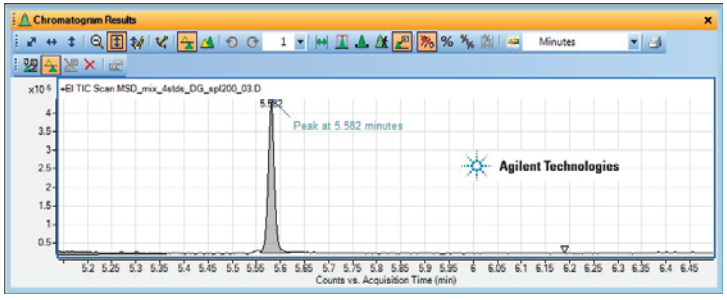



**図 26** ［イメージ注釈の追加/編集］ダイアログボックスと［クロマトグラム結果］ウィンドウ

**6** 1 つめのピークを拡大します。

- 5.5 分にある 1 つ目のピークの前後の領域を拡大します。




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

**図 27** ［イメージ注釈の追加/編集］ダイアログボックスと［クロマトグラム結果］ウィンドウ

タスク 10. 注釈の追加（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **7** ［クロマトグラム結果］ウィンドウで［範囲選択］ツールに切り替えます。最初に注釈を削除します。 | **a**  アイコンをクリックし、すべての注釈を削除します。<br>**b** ［クロマトグラム結果］ツールバーの  （範囲選択）アイコンをクリックします。 | • 注釈をデータファイルに結果と一緒に保存したい場合は、72 ページの「タスク 18. 結果の保存」を参照してください。<br>• ［クロマトグラム結果］ツールバーでは 5 つのツールを切り替えることができます。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。5 つのツールは以下の通りです。<br>◦ 範囲選択<br>◦ ピーク選択<br>◦ マニュアル積分<br>◦ クロマトグラムを進める<br>◦ 注釈マウス |

# タスク 11. 質量差の追加

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

データファイルの結果を保存すると、質量差も保存されます。

タスク 11. 質量差の追加

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d から積分してピークスペクトルを抽出します。 | **a** ［データナビゲータ］ウィンドウで、MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D の隣のチェックボックスをオンにします。<br>**b** **［編集］** > **［表示］** > **［ハイライトされたもののみ］** をクリックします。<br>**c** **［クロマトグラム］** > **［ピークスペクトルの積分と抽出］** をクリックします。<br>**d** ［メソッドエディタ］ウィンドウを閉じます。 | |
| **2** 前のタスクで作成されたピークスペクトルに質量差を追加します。 | **a** ［MS スペクトル結果］ウィンドウで、ツールバーの **［質量差］** ツール（ ）をクリックします。<br>**b** （オプション）［質量差］ツールバーで質量差のタイプとして **［ポイント - ポイント プロファイル］** を選択します。<br>**c** *m/z* 79 ～ 99 を拡大します。<br>**d** 質量差を追加するスペクトルペインの位置にカーソルを移動します。<br>**e** スペクトルの質量差の終了点までカーソルをドラッグします。カーソルをドラッグすると、質量差の値が変化します。マウスボタンを離すと、質量差が追加されます。 | • カーソルが矢印に変更されます。このカーソルを使用して、質量差の開始点と終了点を選択します。<br>• スペクトルがセントロイドである場合は、質量差のタイプは選択できません。**［ポイント - ポイント プロファイル］** はセントロイドデータに対しては効果がないからです。<br>•「三角」カーソルは、選択されているピークの頂点に設定されます。 |
| **3** 質量差の色を別の色に変更します。 | **a** 前のステップで作成した質量差をクリックします。<br>**b** ［MS スペクトル結果］の質量差ツールバーで［質量差のプロパティ］ボタン（ ）をクリックします。<br>**c** （オプション）**［開始 X］** 値と **［開始 Y］** 値を入力します。<br>**d** **［テキストの色］** を選択します。<br>**e** **［フォントスタイル］** と **［フォントサイズ］** を選択します。<br>**f** **［OK］** をクリックします。 | • スペクトルには複数の質量差を追加することができます。<br>• ［質量差］ツールバーのアイコンを使用して、質量差の削除や編集、あるいはすべての質量差を選択することができます。 |

タスク 11. 質量差の追加（続き）

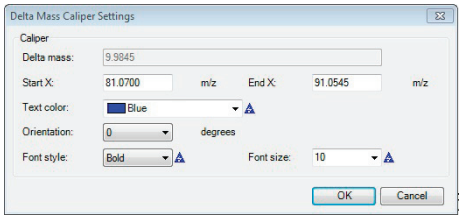
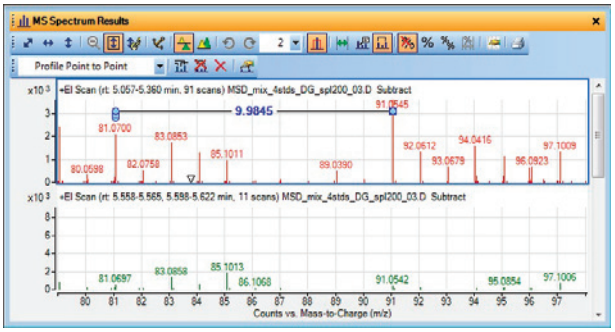
| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
|  | |  |
| **4** 積分結果とスペクトルを削除します。 | **a** **[クロマトグラム]** > **[結果の消去]** > **[ピークスペクトルを含める]** をクリックします。<br>**b** [MS スペクトル結果] ウィンドウの **[範囲選択]** ツールをクリックします。 | • 質量差をデータファイルに結果と一緒に保存したい場合は、72 ページの「タスク 18. 結果の保存」を参照してください。 |

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

# 実習 2
# 検出と同定

タスク 12. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出 45
タスク 13. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定 49
タスク 14. MRM を使用した化合物の検出（MRM のみ） 52
タスク 15. 積分による化合物の検出 55
タスク 16. フラグメントの確認を使用した化学式による化合物の検出 58
タスク 17. ピークスペクトルに対する化学式の作成とライブラリの検索 66
タスク 18. 結果の保存 72

これらのタスクでは、GC/MS データファイルの化合物を検出および同定します。

実習方法を示す表は、以下の3列に分けて表示されています。

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

## タスク 12. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出

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

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

## タスク 12. クロマトグラムデコンボリューションを使用した化合物の検出（GC/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** データファイルの TIC を開きます。 | **a** プログラムが開いていない場合、**[Masshunter Qualitative Analysis]** アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、**[ファイル]** > **[データファイルを開く]** をクリックします。<br>**b** **GC** デモデータファイルフォルダの **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** データファイルをクリックします。<br>**c** **[結果データの読み込み]** チェックボックスをオフにして **[開く]** をクリックします。 | • クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出アルゴリズムは、GC/QQQ と GC/Q-TOF の両方のデータファイルに対して動作します。 |

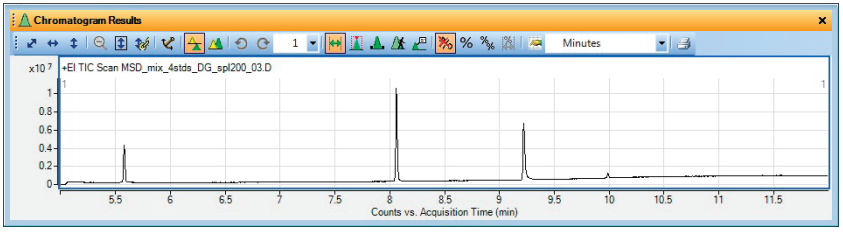



**図 29** Pest - 200 - Scan.dのTICクロマトグラム

| | | |
|---|---|---|
| **2** GCデータを使用するようにユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。 | • 12 ページの「タスク 2. GC/MS データ用にユーザーインターフェイスをコンフィグレーション」ページを参照します。 | • これらの例に対しては、GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローを読み込みます。 |

## タスク 12. クロマトグラムデコンボリューションを使用した化合物の検出（GC/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** クロマトグラムデコンボリューションアルゴリズムを使用して化合物を検出します。<br>• インテグレータに [Agile] を選択します。<br>• SNR スレッショルドに 20 を入力します。<br>• **[*m/z* 左デルタ]** および **[*m/z* 右デルタ]** の値として 100 ppm を入力します。 | **a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで、**[化合物の検出]** > **[クロマトグラムデコンボリューションによる検出]** を選択します。<br>**b** ［設定］タブの［ピークフィルタ］で、**[SNR スレッショルド]** に20を入力します。<br>**c** **[*m/z* デルタ単位]** として **[ppm]** を選択します。<br>**d** **[*m/z* 左デルタ]** に 100、**[*m/z* 右デルタ]** に 100 を入力します。 | • [クロマトグラムデコンボリューションによる検索] セクションは、[GC/Q-TOF 化合物スクリーニング] セクションでも使用できます。<br>• ユニットマスデータがある場合、**[*m/z* 左デルタ]** の値として 0.3 AMU、**[*m/z* 右デルタ]** の値として 0.7 AMU を入力します。<br>• 化合物の完全な結果セットは、化合物の検出後に化合物をハイライトした状態で **[ 検出 ]>[ 完全な結果セットを抽出 ]** メニュー項目を用いて抽出することができます。 |

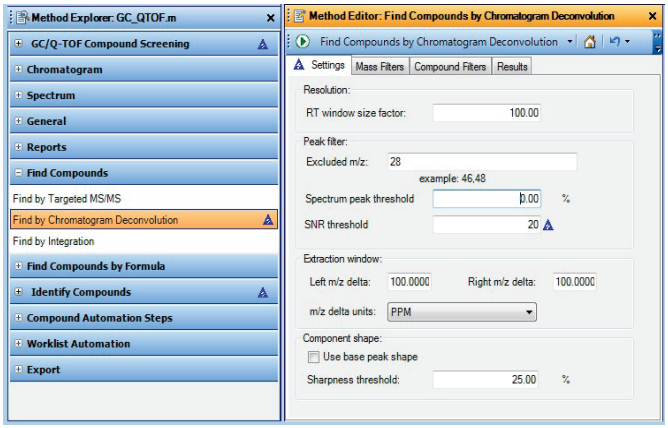



**図 30**　［クロマトグラムデコンボリューションによる検索］の［設定］タブ

| | | |
|---|---|---|
| • EIC、MSスペクトル、MS/MSスペクトルの抽出を選択します。 | **e** **[結果]** タブをクリックします。<br>**f** **[EICの抽出]**、**[ECCの抽出]**、**[補正スペクトルの抽出]**、**[生のスペクトルを抽出]** チェックボックスをオンにします。<br>**g** をクリックして、データファイルに対して **[クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出]** アルゴリズムを実行します。<br>**h** 必要に応じて、**[表示]>[化合物リスト]** コマンドをクリックします。 | • 定性分析プログラムにより、この設定では 4 つの化合物が検出されます。<br>• データファイルにインデックスが付けられていない場合、このアルゴリズムの実行には時間がかかることがあります。 |

## タスク 12. クロマトグラムデコンボリューションを使用した化合物の検出（GC/MS）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** 化合物を確認します。48 ページの 図 31 を参照してください。 | **a** ［MS スペクトル結果］ツールバーの **［リストペインの最大数］**で**2**を選択します。<br>**b** ［化合物リスト］ウィンドウの **［データを含まない列を隠す］**アイコンをクリックします。<br>**c** ［データナビゲータ］ウィンドウで最初の化合物をクリックします。<br>**d** ［データナビゲータ］ウィンドウでは、矢印キーを使用して化合物を切り替えることができます。 | • 両方のスペクトルを表示しておくと、化合物についてのすべての情報が表示されるため便利です。<br>• 補正スペクトルと生スペクトルの両方が表示されます。 |

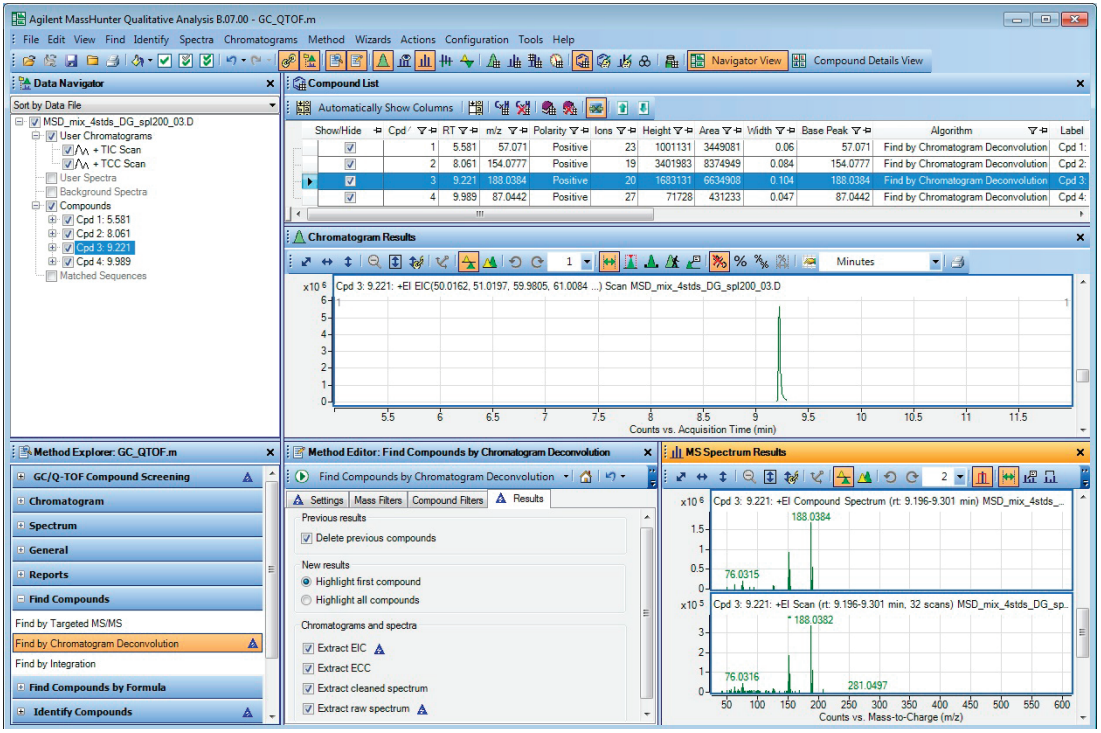



**図 31**　［クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出］の結果

# タスク 13. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定

このタスクでは、45 ページの「タスク 12. クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出」で検出された化合物を同定し、化学式を推定します。購入した NIST11.l ライブラリ（または最新バージョン）、または demo.l ライブラリを使用してこのタスクを実行することができます。２つのライブラリがある場合、両方を選択することもできます。

タスク 13. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d データファイル内の全化合物のライブラリ検索を実行します。 | **a** MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D データファイル内の化合物を [データナビゲータ] ウィンドウでハイライトします。<br>**b** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで、**[化合物の同定] > [ライブラリ検索]** をクリックします。<br>**c** [設定] タブで **[ライブラリの追加]** ボタンをクリックします。**demo.l** ライブラリを選択し、**[OK]** ボタンをクリックします。<br>**d** （オプション）[設定] タブで **[ライブラリの追加]** ボタンをクリックします。**NIST11.l** ライブラリを選択し、**[OK]** ボタンをクリックします。<br>**e** （オプション）**[複数のライブラリ検索タイプ]** で **[最初のライブラリー致で停止する]** を選択します。<br>**f** メインメニューで **[同定] > [ライブラリで化合物を検索]** をクリックします。**[ライブラリで化合物を検索]** アイコン  をクリックしてアルゴリズムを実行することもできます。<br>**g** **[表示] > [結果の差]** をクリックします。<br>**h** **[表示] > [構造式ビューア]** をクリックします。<br>**i** 必要に応じて **[表示] > [化合物同定結果]** をクリックし、ウィンドウを表示させます。<br>**j** 必要に応じて、**[化合物同定結果]** ウィンドウのタブをクリックします。このウィンドウは、[クロマトグラム結果] と同じウィンドウにタブ表示されます。 | • [メソッドエクスプローラ] で [GC/Q-TOF 化合物スクリーニング] > [ ライブラリ検索による同定] をクリックすることもできます。[ メソッドエディタ ] ウィンドウの同じセクションが表示されます。<br>• Demo.l および Nist11 は、¥MassHunter¥Library フォルダにインストールされています。<br>• 多くの化合物は、NIST11.l ライブラリ検索により同定されます。<br>• NIST11.l ライブラリがなく、別のライブラリがある場合は、そのライブラリを選択します。<br>• 複数のライブラリを選択していて、**[最初のライブラリー致で停止する]** を選択した場合、ライブラリ検索アルゴリズムはリスト中の最初のライブラリを検索します。化合物が同定された場合は、そこで停止します。化合物が同定されなかった場合は、化合物が同定されるか最後のライブラリが検索されるまで、次のライブラリを順に検索します。<br>• ユニットマスライブラリの検索アルゴリズムで使用する .L ライブラリを変更するには、ライブラリエディタプログラムを使用します。このプログラムは、Agilent MassHunter 定量分析プログラムと一緒にインストールされています。このプログラムを開始するには、 アイコンをクリックします。 |

## タスク 13. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **2** [化合物リスト] ウィンドウと [化合物同定結果] ウィンドウに [スペクトルライブラリ結果] 列を表示します。 | **a** [化合物リスト] ツールバーと [化合物同定結果] ツールバーで、[ライブラリ検索列を表示] ボタン ( ) をクリックします。<br>**b** [化合物リスト] ツールバーと [化合物同定結果] ウィンドウで、[空の列を非表示] ボタン ( ) をクリックします。 | |

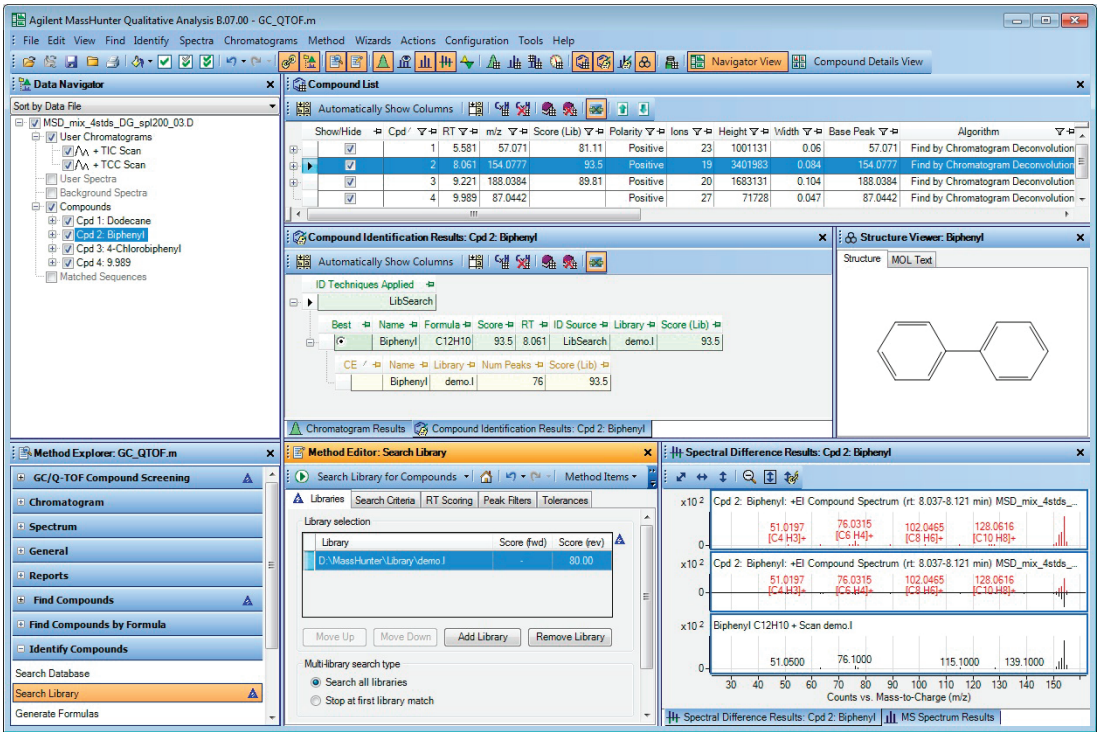



**図 32** MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D データファイル内の化合物とライブラリ検索結果

| | | |
|---|---|---|
| **3** [化合物詳細表示] に切り替えて、化合物を確認します。 | **a** メインツールバーの Compound Details View をクリックします。<br>**b** **[化合物フラグメントスペクトル結果]** ウィンドウを閉じます。 | • [化合物フラグメントスペクトル結果] ウィンドウには、[化学式による検出] アルゴリズムで [フラグメントの確認] を使用した場合にのみ結果が表示されます。 |

## タスク 13. ライブラリ検索アルゴリズムによる化合物の同定

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** 化合物詳細表示で、結果を確認します。 | **a** [化合物 クロマトグラム結果] ウィンドウで [重ね描き] アイコンをクリックします。<br>**b** [化合物同定結果] ウィンドウで、結果を展開します。 | • 化合物詳細表示の詳細については、オンラインヘルプを参照してください。化合物詳細表示は、[すべてのイオン] モードで測定されたデータファイルに対する [化学式による検出] アルゴリズムの結果を観察するのに便利です。 |

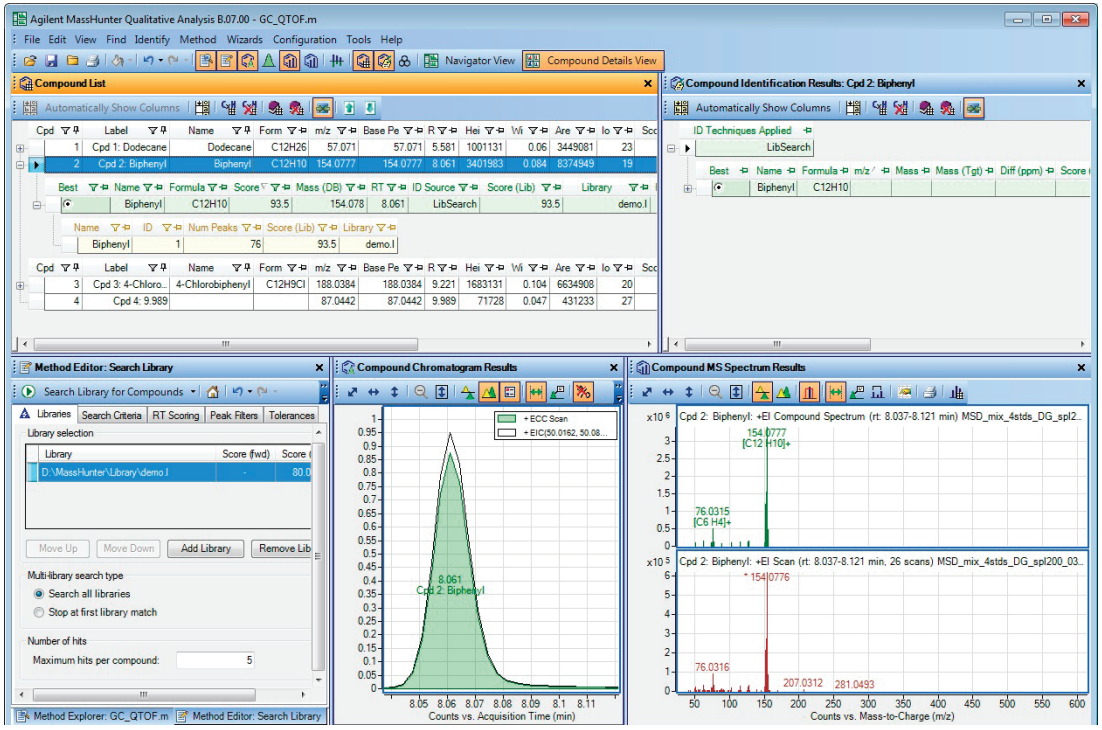



**図 33**　MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D データファイルの化合物を表示した化合物詳細表示

| | | |
|---|---|---|
| **5** ナビゲーション表示に切り替えます。 | • メインツールバーの Navigator View ボタンをクリックします。 | |
| **6** データファイルを閉じます。 | **a** **[ファイル] > [データファイルを閉じる]** をクリックします。<br>**b** 結果の保存を求められたら **[いいえ]** をクリックします。 | • これらの結果を保存する方法については、72 ページの「タスク 18. 結果の保存」を参照してください。 |

# タスク 14. MRM を使用した化合物の検出（MRM のみ）

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

タスク 14. MRM を使用した化合物の検出（MRM のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 **Pest - STD 200 MRM.d** データファイルの TIC を開きます。 | a プログラムが開いていない場合、**［Masshunter Qualitative Analysis］**アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、**［ファイル］> ［データファイルを開く］**をクリックします。<br>b **GC Pesticides** デモデータファイルフォルダの **Pest - STD 200 MRM.d** データファイルをクリックします。<br>c **［結果データの読み込み］**チェックボックスをオフにして **［開く］**をクリックします。 | • GC/QQQ データの作業では、一般ワークフローを使用します。GC/Q-TOF データの作業では、一般ワークフローまたは GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローが使用できます。 |

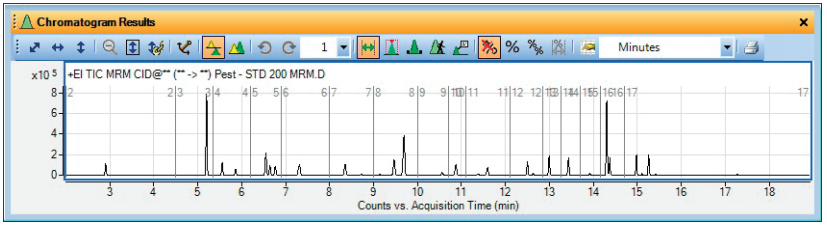



**図 34** Pest - STD 200 MRM.d の TIC クロマトグラム

| | | |
|---|---|---|
| 2 GC QQQ データを使用するようにユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。 | • 12 ページの「タスク 2. GC/MS データ用にユーザーインターフェイスをコンフィグレーション」ページを参照します。 | |

タスク 14. MRM を使用した化合物の検出（MRM のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** MRM アルゴリズムを使用して化合物を検出します。 | **a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで、**[化合物の検出]** > **[MRM による検出]** を選択します。<br>**b** **[化合物名によるグループトランジション]** ボタンをクリックします。<br>**c** **[積分]** タブをクリックします。<br>**d** インテグレータに **[Agile 2]** を選択します。 | • 化合物を検出するクロマトグラム範囲を選択します。<br>• 化合物の完全な結果セットは、化合物の検出後に化合物をハイライトした状態で **[検出]** > **[完全な結果セットを抽出]** メニュー項目を用いて抽出することができます。 |

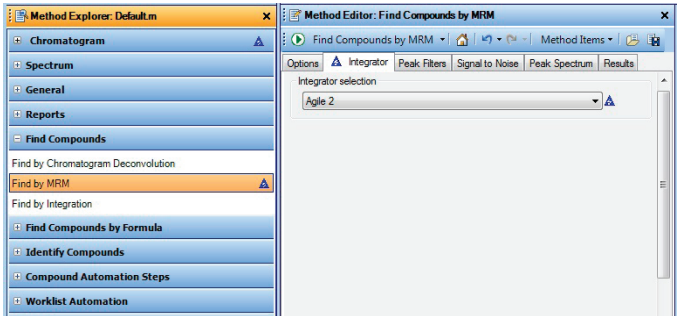
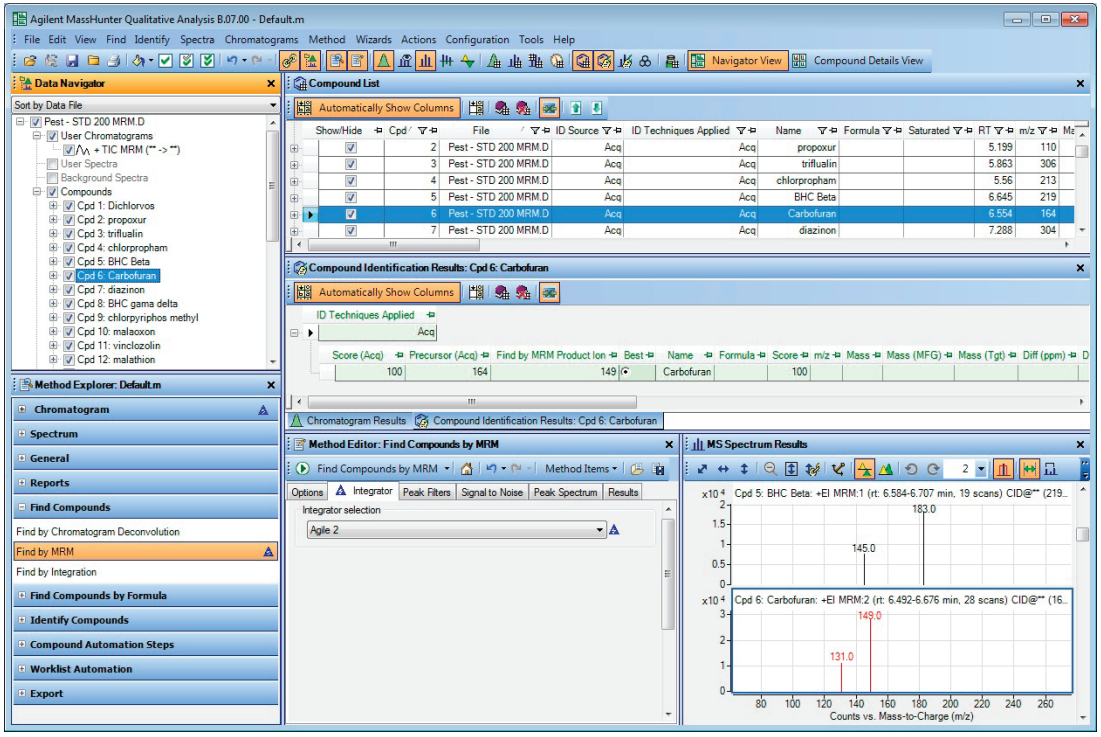



**図 35**　［メソッドエディタ］の［MRM による検出］セクションの［積分］タブ

| | | |
|---|---|---|
| | **e** をクリックして、データファイルに対して **[MRM による化合物の検出]** アルゴリズムを実行します。<br>**f** 必要に応じて、**[表示]** > **[化合物リスト]** コマンドをクリックします。<br>**g** 必要に応じて **[表示]** > **[化合物同定結果]** をクリックします。 | • 定性分析プログラムにより、この設定では28の化合物が検出されます。 |
| **4** 化合物を確認します。54 ページの図 36 を参照してください。 | **a** [MS スペクトル結果] ツールバーの **[リストペインの最大数]** で2を選択します。<br>**b** [化合物リスト] および [化合物同定結果] ウィンドウで、**[列の自動表示]** アイコンをクリックします。<br>**c** [データナビゲータ] ウィンドウで最初の化合物をクリックします。<br>**d** [データナビゲータ] ウィンドウでは、矢印キーを使用して化合物を切り替えることができます。 | • プリカーサイオンが［プリカーサ（測定）］列に表示され、プロダクトイオンが［化合物同定結果］ウィンドウの［MRM 検索のプロダクトイオン］列に表示されます。 |

## タスク 14. MRM を使用した化合物の検出（MRM のみ）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| |  | |
| | **図 36** MRM による検出の結果 | |
| **5** データファイルを閉じます。 | **a** **[ファイル] > [データファイルを閉じる]** をクリックします。<br>**b** **[閉じる]**をクリックします。 | • これらの結果を保存する方法については、72 ページの「タスク 18. 結果の保存」を参照してください。 |

# タスク 15. 積分による化合物の検出

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

## タスク 15. 積分による化合物の検出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.D** データファイルの TIC を開きます。 | **a** プログラムが開いていない場合、**[Masshunter Qualitative Analysis]** アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、**[ファイル]** > **[データファイルを開く]** をクリックします。<br>**b** **GC** デモデータファイルフォルダの **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** データファイルをクリックします。<br>**c** **[結果データの読み込み]** チェックボックスをオフにして **[開く]** をクリックします。 | • GC/QQQ データの作業では、一般ワークフローを使用します。GC/Q-TOF データの作業では、一般ワークフローまたは GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローが使用できます。 |

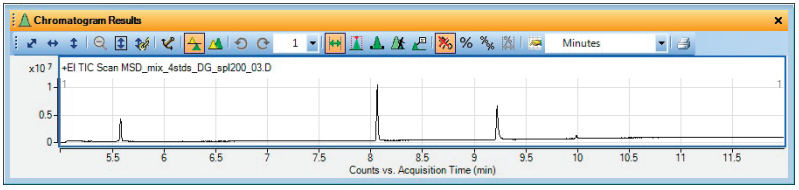



**図 37**　MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d の TIC クロマトグラム

| | | |
|---|---|---|
| **2** GCデータを使用するようにユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。 | • 12 ページの「タスク 2. GC/MS データ用にユーザーインターフェイスをコンフィグレーション」ページを参照します。 | |
| **3** [積分による検出] アルゴリズムを使用して、化合物を検出します。 | **a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで、**[化合物の検出]** > **[積分による検出]** を選択します。<br>**b** **[MS/MS (GC)]** インテグレータを選択します。 | • 化合物を検出するクロマトグラム範囲を選択します。<br>• 化合物の完全な結果セットは、化合物の検出後に化合物をハイライトした状態で **[化合物]** > **[完全な結果セットを抽出]** コマンドを用いて抽出することができます。 |

## タスク 15. 積分による化合物の検出

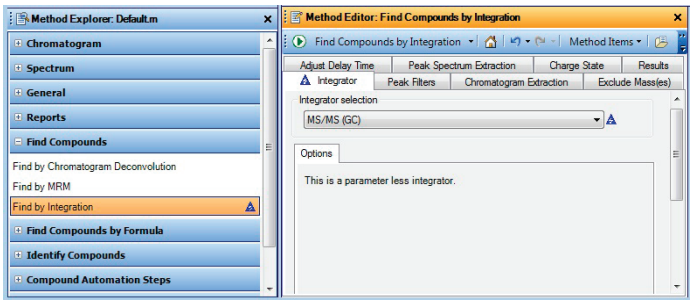
| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| |  | |

**図 38** ［メソッドエディタ］の［積分による検出］セクションの［積分］タブ

| | | |
|---|---|---|
| | **c** をクリックして、データファイルに対して**［積分による化合物の検出］**アルゴリズムを実行します。<br>**d** 必要に応じて、**[表示]>[化合物リスト]**コマンドをクリックします。 | • 定性分析プログラムにより、この設定では6つの化合物が検出されます。 |
| **4** 化合物を確認します。54 ページの図 36 を参照してください。 | **a** ［MS スペクトル結果］ツールバーの**［リストペインの最大数］**で**2**を選択します。<br>**b** ［化合物リスト］ウィンドウの**［列の自動表示］**アイコンをクリックします。<br>**c** ［化合物リスト］ウィンドウの**［データを含まない列を隠す］**アイコンをクリックします。<br>**d** ［データナビゲータ］ウィンドウで最初の化合物をクリックします。<br>**e** ［データナビゲータ］ウィンドウでは、矢印キーを使用して化合物を切り替えることができます。 | |

## タスク 15. 積分による化合物の検出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 5 データファイルを閉じます。 | a **［ファイル］**>**［データファイルを閉じる］**をクリックします。<br>b 結果を保存するかどうか尋ねられたら、**［いいえ］**をクリックします。<br>c **［閉じる］**をクリックします。 | • これらの結果を保存する方法については、72 ページの「タスク 18. 結果の保存」を参照してください。 |

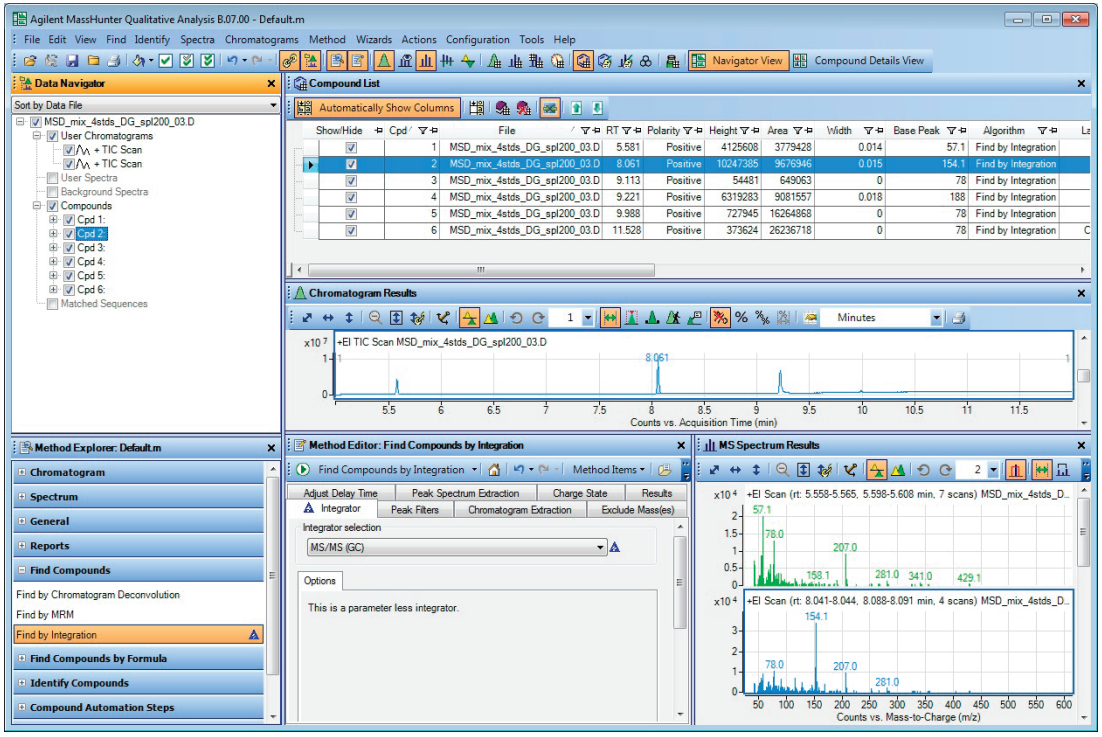



**図 39**　積分による検出の結果

# タスク 16. フラグメントの確認を使用した化学式による化合物の検出

全イオン MS/MS モードで測定した LC/MS データファイルに対して、ターゲット化合物のフラグメントの確認を実行できます。LC/Q-TOF でフラグメントを確認するには、最大で 4 個の異なるコリジョンエネルギーを切り替えて測定します。使用するコリジョンエネルギーは、0 V、20 V、40 V をお勧めします。0 V で得られたスペクトルは、溶出している化合物のプリカーサイオンを主に示す「低エネルギーチャンネル」、20 V と 40 V で得られたスペクトルは、その時点で溶出しているすべての化合物のフラグメントイオンを示す「高エネルギーチャンネル」と考えられます。「全イオン MS/MS」と呼ばれるのはそのためです。同様の実験を LC/TOF でも実行できます。その際には、最大 4 個のフラグメンタ電圧（たとえば、125 V、200 V、275 V）を切り替えて測定します。「低エネルギーチャンネル」では、ターゲット化合物がソース内でフラグメントイオンが形成されないようにフラグメンタ電圧を設定します。一方「高エネルギーチャンネル」では、ターゲット化合物のフラグメントイオンが形成されるように設定します。複数の高エネルギーチャンネルを使用することで、化合物の安定性を変えてフラグメント化を行えます。

フラグメントの確認は GC/Q-TOF の EI データでも可能です。その場合、各スペクトルでは、主にフラグメントイオンが表示されています。この場合は高エネルギーチャンネルのみとなります。分子イオンはスペクトルにわずかな時間しか存在しません。そのため、[分子イオンオプション] チェックボックスをオンにしておく必要があります。このアルゴリズムは、まずアバンダンスと *m/z* 値に基づいて EI-MS スペクトルライブラリから「n」個のフラグメントイオンを選択します（*m/z* の大きいフラグメントイオンを優先します。大きい方が、より多くの構造情報が含まれるためです）。次に、ライブラリで指定したターゲット リテンションタイムの時間幅で、これらのイオンのクロマトグラムを抽出し、クロマトグラムのターゲットピークのリストを作成します。さらに、RT ごとに一団となっているピークのグループを検出し、リファレンスイオンと確認フラグメントイオンを選択します。分子イオンが存在する場合、分子イオンがリファレンスイオンになる可能性はあります。次に、クロマトグラムの選択したピークの共溶出の程度を計算します。設定した数以上のイオンで、設定されたスレッショルドを超える共溶出スコアを持っていると、ターゲット化合物は「確認」されたことになります。

「低エネルギーチャンネル」で化合物のプリカーサイオンが、飽和によるピークの分割を示す場合、[分子イオンオプション] モードを LC/MS データに使用することもできます。その場合、分子イオンはリファレンスイオンとして使用されません。代わりに、リファレンスイオンと確認フラグメントイオンが高エネルギーチャンネルから選択されます。

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

## タスク 16. フラグメントの確認を使用した化学式による化合物の検出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** **Tomato_spiked.D** データファイルの TIC を開きます。 | **a** プログラムが開いていない場合、**[Masshunter Qualitative Analysis]** アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、**[ファイル]** > **[データファイルを開く]** をクリックします。<br>**b** **GCMS Pesticide** デモデータファイルフォルダの **Tomato_spiked.d** データファイルをクリックします。<br>**c** **[結果データの読み込み]** チェックボックスをオフにして **[開く]** をクリックします。 | • GC/QQQ データの作業では、一般ワークフローを使用します。<br>• GC/Q-TOF データの作業では、一般ワークフローまたは GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローが使用できます。 |
| **2** GCデータを使用するようにユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。 | • 12 ページの「タスク 2. GC/MS データ用にユーザーインターフェイスをコンフィグレーション」ページを参照します。 | |
| **3** GCQTOF_Pesticide_Example.m メソッドファイルを読み込みます。 | **a** **[メソッド]**>**[開く]**をクリックします。<br>**b** **GCQTOF_Pesticide_Example.m** メソッドを選択し、**[開く]** をクリックします。 | • このメソッドは、¥¥MassHunter¥methods¥B.07.00 フォルダにインストールされています。<br>• メソッドを読み込んだときに青色の三角形が表示されても、この時点では無視します。 |
| **4** メソッドを iii_GCQTOF_Pesticide_Example.m に保存します。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。 | **a** トップメニューから **[メソッド]** > **[名前を付けて保存]** をクリックします。<br>**b** **iii_GCQTOF_Pesticide_Example.m** と入力します。<br>**c** **[保存]** ボタンをクリックします。 | • メソッドを保存すると、メソッドの値が変更されたことを示す青色三角形がすべて消えることを確認します。 |

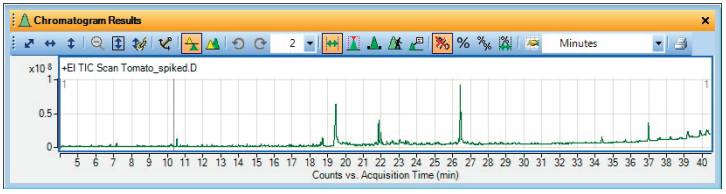



**図 40**　Tomato_spiked.d の TIC クロマトグラム

## タスク 16. フラグメントの確認を使用した化学式による化合物の検出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **5** ［化学式による化合物の検出］のパラメータを確認します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［化学式による化合物の検出］**>**［化学式による検出 - オプション］**を選択します。<br>**b** **［式のソース］**タブをクリックします。<br>**c** **［データベース/ライブラリ］**をクリックします。<br>**d** PCDL フォルダで **Pesticide_Example.cdb** ライブラリを選択します。<br>**e** **［式の一致］**タブをクリックします。<br>**f** **［*m/z* 候補］**に対して **［対称(ppm)］**を選択し、値を確認します。<br>**g** **［EIC 抽出範囲の制限］**チェックボックスをオンにし、**［対称］**を選択した後、**［予測リテンションタイム］**に 1.0 を入力します。 | • ［化学式による化合物の検出（FbF）］アルゴリズムは、GC/Q-TOF EI データファイルに対して実行できます。このアルゴリズムは、全イオン MS/MS モードで測定された LC/MS データファイルにも使用することができます。<br>• このデモメソッドでは、これらの値は既に設定されています。<br>• **［*m/z* 候補］**に対して選択する値は、測定メソッドを高分解能モードで実行しているか、デュアルゲインモードで実行しているかによって異なります。 |

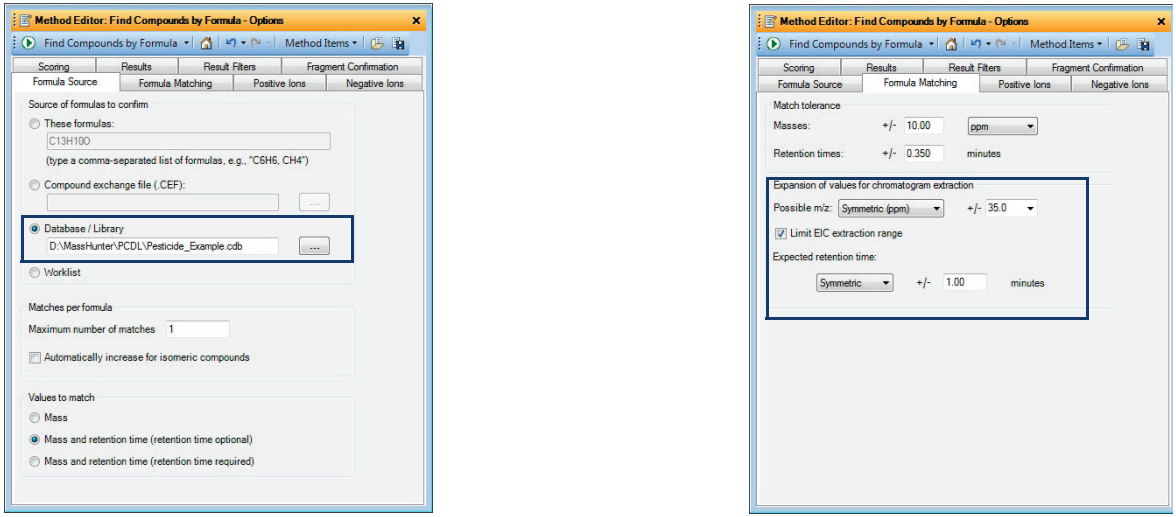
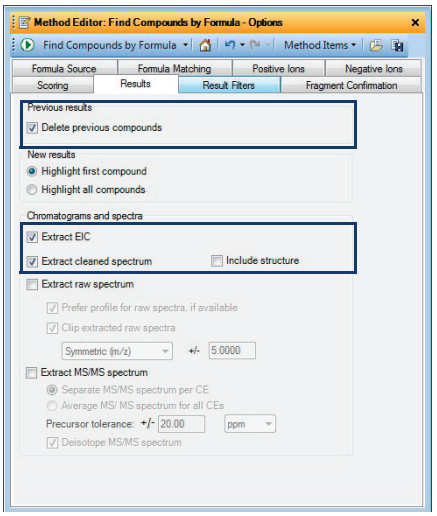



**図 41** ［化学式による検出 - オプション］セクションの **［式のソース］**タブと **［式の一致］**タブ

| | | |
|---|---|---|
| | **h** **［結果］**タブをクリックします。<br>**i** **［前の化合物を削除］**をオンにします。<br>**j** **［EIC の抽出］**と **［補正スペクトルの抽出］**をオンにします。<br>**k** **［結果フィルタ］**タブをクリックします。<br>**l** **［式の一致した化合物のみを作成］**チェックボックスをオンにします。 | • **［式の一致した化合物のみを作成］**をオフにすると、検出されなかった化合物も結果に表示されます。 |

タスク 16. フラグメントの確認を使用した化学式による化合物の検出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|



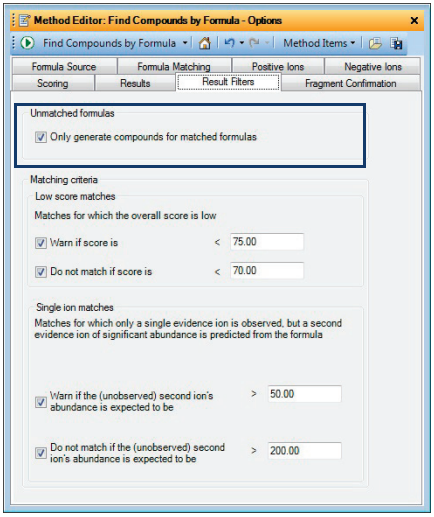




**図 42**　［化学式による検出 - オプション］セクションの［**結果**］タブと［**結果フィルタ**］タブ

m ［**フラグメントの確認**］タブをクリックします。

n ［**フラグメントイオンで確認する**］をオンにします。

o ［**分子イオンオプション**］をオンにします。

p ［**スペクトルライブラリのみを使用する**］をクリックし、［**スペクトルライブラリから使用するイオンの数**］に 7 を入力します。

q ［**RT 差**］に 0.2 を入力します。

- GC/Q-TOF データの場合、［**分子イオンオプション**］チェックボックスをオンにします。
- イオン数が多いほど特異性が高まり、結果の信頼性が向上しますが、プログラムの分析時間が長くなります。
- ［**RT 差**］の推奨範囲は 0.1 ～ 0.2 です。この値は、リファレンスイオンのリテンションタイムシフトに許容される差です。リファレンスイオンは、定性分析プログラムによって自動的に選択されます。

## タスク 16. フラグメントの確認を使用した化学式による化合物の検出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| | r **[S/N 比]** チェックボックスをオフにします。<br>s **[共溶出スコア]** に 70 を入力します。<br>t **[最小確認フラグメント数]** をクリックし、1 を入力します。 | • **[S/N 比]** チェックボックスをオンにすると、偽陰性を生成する確率が高くなります（比が低すぎる場合）。<br>• 推奨開始値は 1 ～ 3 です。1 を設定するには、2 つの確認フラグメント（リファレンスイオンと確認されたイオン）が必要です。 |

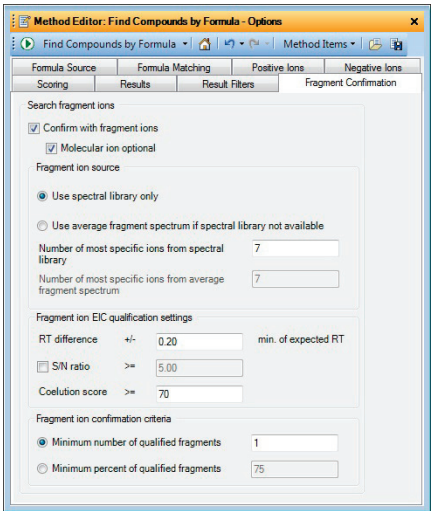



**図 43** ［化学式による検出 - オプション］セクションの［**フラグメントの確認**］タブ

| | | |
|---|---|---|
| **6** ［化学式による化合物の検出］アルゴリズムを実行します。 | • をクリックして、データファイルに対して **[化学式による化合物の検出]** アルゴリズムを実行します。<br>• **[検出]** > **[化学式による化合物の検出]** をクリックします。 | • 定性分析プログラムにより、これらのパラメータ値では 5 つの化合物が検出されます。<br>• その他のタブの値は変更せずにそのままにします。 |
| **7** メソッドを保存します。 | • 以下の3つの方法のいずれかで、メソッドを保存します。<br>◦ ［メソッドエディタ］の **［メソッドの保存］** アイコン をクリックします。<br>◦ ［メソッドエディタ］を右クリックし **［メソッドの保存］** をクリックします。<br>◦ トップメニューから **［メソッド］** > **［保存］** をクリックします。 | |

## タスク 16. フラグメントの確認を使用した化学式による化合物の検出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **8** 化合物を確認します。54 ページの図 36 を参照してください。 | **a** メインツールバーの Compound Details View をクリックします。<br>**b** **[メソッドエディタ]** ウィンドウと **[メソッドエクスプローラ]** ウィンドウを閉じます（表示されている場合）。<br>**c** 化合物リストウィンドウで、削除する列のヘッダーを右クリックし、[列の削除] をクリックします。<br>**d** 化合物リストウィンドウの **[フラグ (Tgt)]** 列を **[ラベル]** の横に移動します。 | • 化合物リストウィンドウから化合物を選択すると、このビューの他のウィンドウに結果が表示されます。<br>• 詳細は、オンラインヘルプを参照してください。<br>• 2 つのウィンドウには、さらに詳細に表示されます。 |

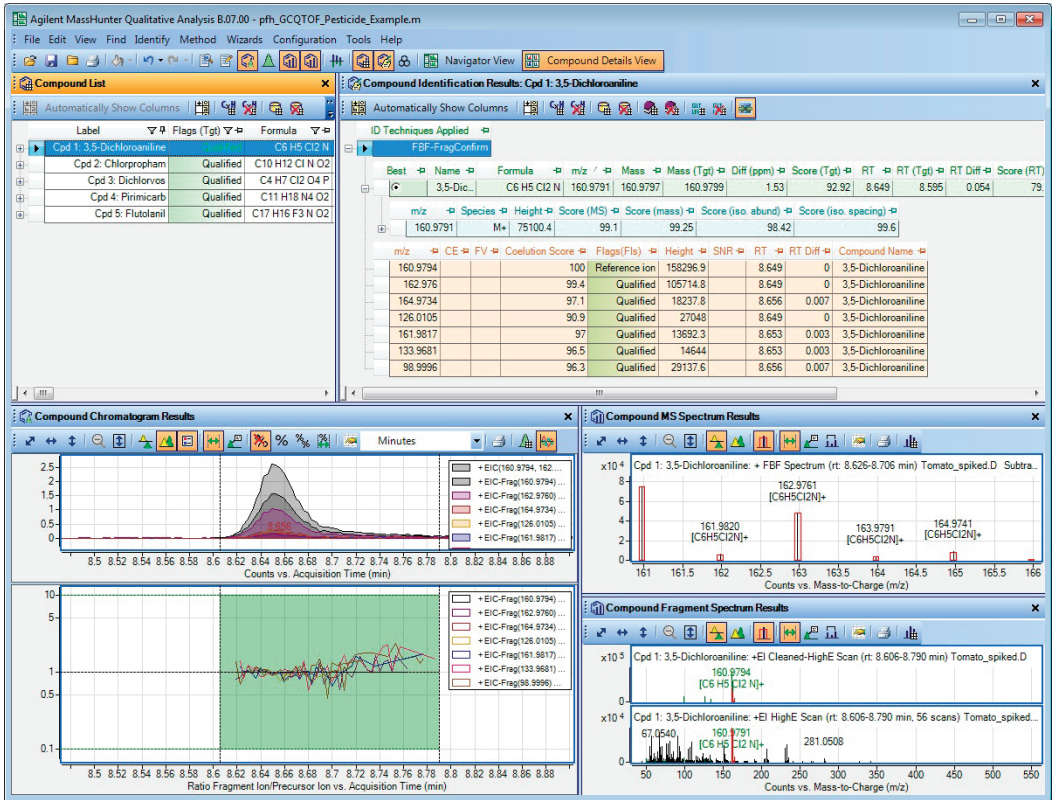



**図 44**　［フラグメントの確認］の結果を含む［化学式による検出］の結果

タスク 16. フラグメントの確認を使用した化学式による化合物の検出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| | e クリックするか、矢印キーを使用して化合物リストの化合物を変更し、化合物を 1 つずつ確認します。<br>f ［化合物同定結果］ウィンドウで、情報を確認します。<br>g テーブルのレベルを展開するには + アイコンをクリックします。テーブルのレベルが展開されると、- アイコンに変わります。 | • テーブルの最初のレベルには、実行したすべての同定アルゴリズムのサマリ情報が表示されます。<br>• レベル 2（青色）には、総合スコアを算出するために使用された個別のスコアが示されます。この行は分子イオンが見つかったときにのみ表示され、［化学式による検出］の結果が反映されます。<br>• 一番下のテーブルにフラグメントイオンとその共溶出スコアが表示されます。ここには、フラグメントイオンが確認されているかどうかも示されます。 |

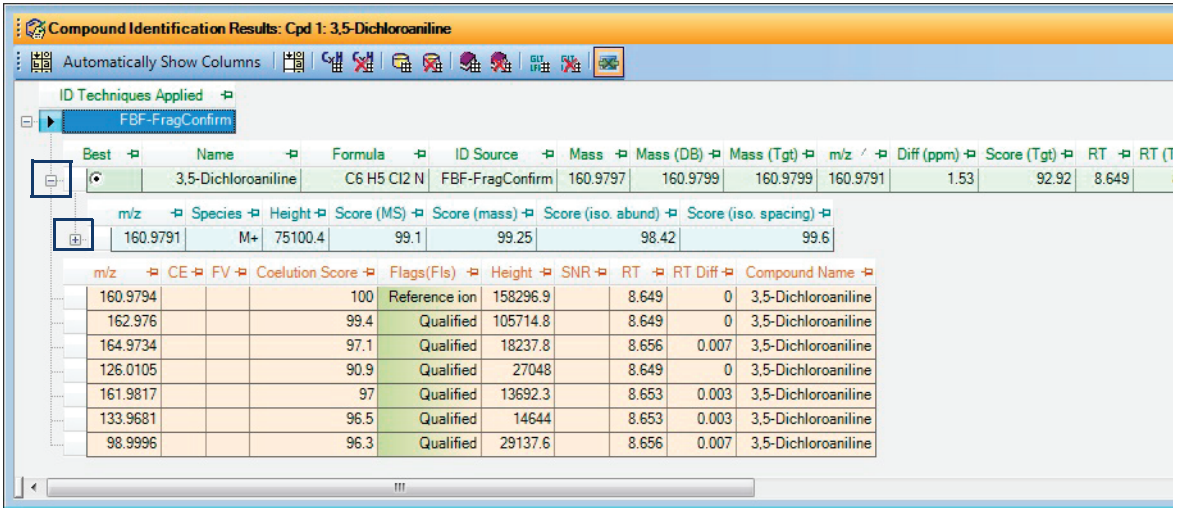



**図 45** 化合物同定結果ウィンドウ

タスク 16. フラグメントの確認を使用した化学式による化合物の検出

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| | **h** ［化合物 クロマトグラム結果］ウィンドウで結果を確認します。<br>**i** ［共溶出プロット］ペインが表示されていることを確認します。<br>**j** クロマトグラムが重ね描きされていることを確認します。ツールバーのアイコンは以下のように設定されています。<br> | • ［化合物 クロマトグラム結果］ウィンドウに、各フラグメントイオンの個々のイオントレースが表示されます。<br>• フラグメントイオンが化合物とどれだけ近接して共溶出したかを表示する、［共溶出プロット］も表示されます。参照用に、Y = 1 の直線が黒で表示されます。値が 1 であることは、クオリファイアイオンの共溶出が、リファレンスイオン クロマトグラムと正確に一致することを示します。比が 1 に近づくほど、クオリファイアイオンとリファレンスイオンの共溶出が近接しています。 |

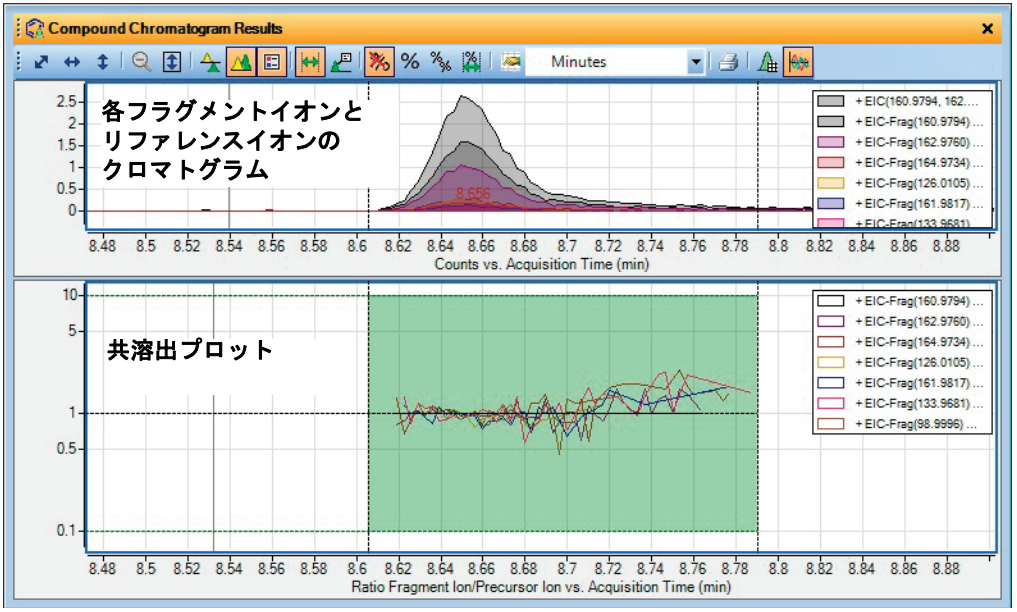



**図 46**　化合物同定結果ウィンドウ

| | | |
|---|---|---|
| **9** データファイルを閉じます。 | **a** **［ファイル］> ［データファイルを閉じる］**をクリックします。<br>**b** 結果を保存するかどうか尋ねられたら、**［いいえ］**をクリックします。 | • これらの結果を保存する方法については、72 ページの「タスク 18. 結果の保存」を参照してください。 |

# タスク 17. ピークスペクトルに対する化学式の作成とライブラリの検索

このタスクでは、まず GC/Q-TOF データファイルからのピークスペクトルの積分と抽出を行います。次に、各ピークスペクトルに対する化学式を作成します。

タスク 17. ピークスペクトルに対する化学式の作成とライブラリの検索

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 **MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d** データファイルの TIC を開きます。 | a プログラムが開いていない場合、**[Masshunter Qualitative Analysis]** アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、**[ファイル]** > **[データファイルを開く]** をクリックします。<br>b **GC** デモデータファイルフォルダの **MSD_mix_4stds_DB_spl200_03.d** データファイルをクリックします。<br>c **[結果データの読み込み]** チェックボックスをオフにして **[開く]** をクリックします。 | • **[結果データの読み込み]** チェックボックスが使用できない場合、データファイルには結果が保存されていません。結果を保存する方法については、72 ページの「タスク 18. 結果の保存」を参照してください。<br>• 一般ワークフローが読み込まれます。 |
| 2 ピークスペクトルを積分して抽出します。 | a [メソッドエクスプローラ] ウィンドウの [クロマトグラム] > [積分 (MS)] セクションをクリックします。<br>b **[ピークフィルタ]** タブをクリックします。<br>c **[ピーク高さ]** ボタンをクリックします。<br>d **[相対高さ]** チェックボックスをオンにします。<br>e **[ピーク数を高さベースで制限する]** チェックボックスをオンにし、4 と入力します。<br>f **[クロマトグラム]**>**[ピークスペクトルの積分と抽出]**をクリックします。 | |

# タスク 17. ピークスペクトルに対する化学式の作成とライブラリの検索

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** 各ピークスペクトルに対する化学式を作成します。<br>• [スペクトル同定結果] リストを表示します。<br>• [MSスペクトル結果]ウィンドウを閉じます。<br><br>ヒント: 図 48 と同じ結果を得るには、同位体モデルに **[一般的な有機分子]** を選択してください。 | **a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで、**[化合物の同定] > [化学式の作成]** をクリックします。<br>**b** [メソッドエディタ] ウィンドウで、**[電荷の状態]** タブをクリックし、**同位体モデル**に **[一般的な有機分子]** を選択します。<br>**c** [データナビゲータ] ウィンドウで、**[ユーザースペクトル]** セクションのすべてのスペクトルをハイライトします。<br>**d** **[同定] > [スペクトルピークから化学式を作成]** コマンドまたは **[スペクトルピークから化学式を作成]** ボタン をクリックして、アルゴリズムを実行します。<br>**e** 必要に応じて、[スペクトル同定結果] アイコン をクリックするか、または **[表示] > [スペクトル同定結果]** コマンドをクリックします。<br>**f** [スペクトル同定結果] ウィンドウで、ツールバーの **[列の自動表示]** ボタンをクリックします。<br>**g** [スペクトル同定結果] ウィンドウの [空の列を非表示] アイコン をクリックします。<br>**h** [データナビゲータ] ウィンドウで、約 5.558分のスペクトルを選択します。<br>**i** **C6 H7** を **[ベスト]** 結果として選択します。<br>**j** テーブルの該当する行を展開します。<br>**k** [メソッドエディタ] ウィンドウを閉じます。<br>**l** [MS スペクトル結果] ウィンドウの多数のピークの上に表示されている化学式とイオン種を確認します。化学式とイオン種はすべてスペクトルと同じ色で表示されています。 | • 該当する *m/z* で拡大すると、スペクトルプロットの予測同位体存在比を確認できます。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。<br>• [メソッドエディタ] ツールバーの [実行] アイコン では、複数のアイテムから実行する処理を選択できる場合もあります。たとえば、このセクションの [実行] アイコンをクリックすると、2 つの異なる処理が行えます。矢印をクリックすると、可能な処理のリストが示され、どの処理を実行するかを選択できます。リストから違う処理を選択すると、デフォルトの処理が変更されます。実行ボタンをクリックすると、デフォルトの処理が実行されます。<br>• 列と列の境界線をドラッグして、列の幅を変更することができます。<br>• 列のヘッダーをドラッグして、列を移動することができます。<br>• テーブルのショートカットメニューから **[列の削除]** をクリックして、列を削除できます。 |

## タスク 17. ピークスペクトルに対する化学式の作成とライブラリの検索

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

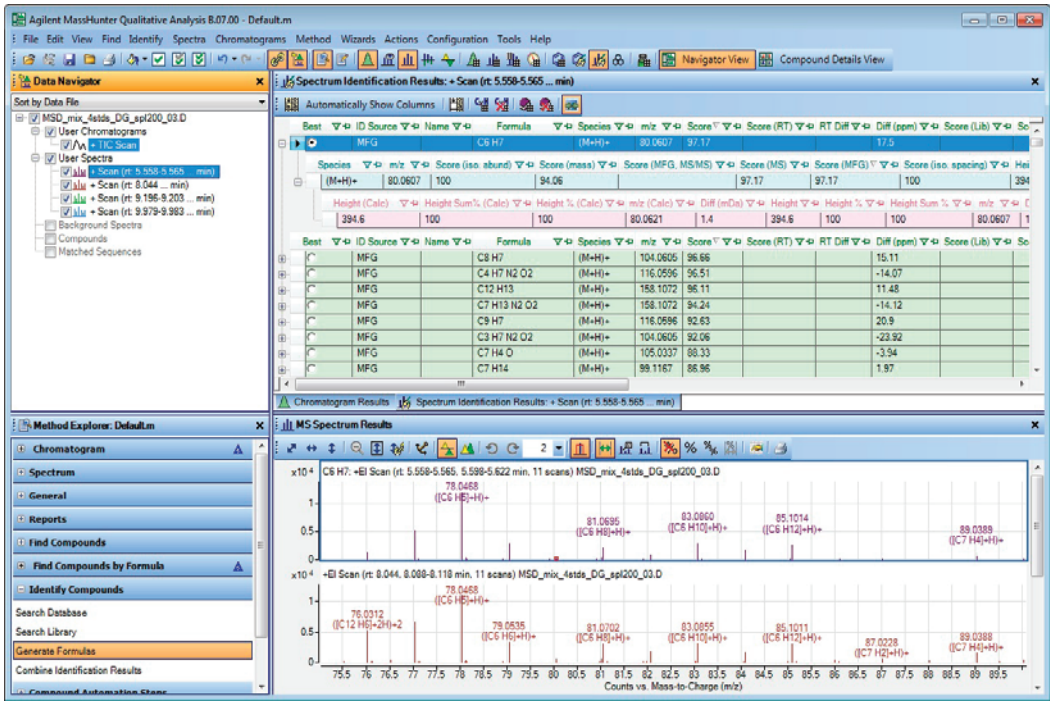



**図 47** ピーク 1 ～ 4 に対する化学式の作成結果

## タスク 17. ピークスペクトルに対する化学式の作成とライブラリの検索

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** ピークスペクトル 1 ～ 4 に対してライブラリ検索を実行します。 | **a** [データナビゲータ] ウィンドウで **[ユーザースペクトル]** をクリックします。<br>**b** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**[化合物の同定]** > **[ライブラリ検索]** をクリックします。<br>**c** 有効なライブラリを追加します。GCQTOF_pesticide_matrix_RT.cdb ライブラリが選択されます。<br>**d** ［スコア (rev)］に **50** を入力します。<br>**e** ［検索基準］タブの **[機器タイプ]** チェックボックスと **[コリジョンエネルギー]** チェックボックスをオフにします。<br>**f** ［ピークフィルタ］タブの **[絶対高さ]** チェックボックスと **[相対高さ]** チェックボックスをオフにします。<br>**g** メインメニューで **[同定]** > **[ライブラリでスペクトルを検索]** をクリックします。<br>**h** ［メソッドエディタ］ウィンドウを閉じます。 | • ［メソッドエクスプローラ］のセクションをクリックすると、［メソッドエディタ］が自動的に開きます。 |
| **5** 表示されている列を変更します。 | **a** [スペクトル同定結果] ウィンドウを右クリックし、**[列の追加 / 削除]** をクリックします。[列の追加/削除(拡張設定)] ダイアログボックスで、表示したい列のチェックボックスをオンにします。**[OK]**をクリックします。<br>**b** ［メソッドエディタ］ウィンドウを閉じます。<br>**c** [スペクトル同定結果] ウィンドウの [空の列を非表示] アイコン をクリックします。<br>**d** [MS スペクトル結果］ウィンドウの各ピークの上に表示されている化学式とイオン種を確認します。 | • **[列の削除]** コマンドを使用してデータを含む列を削除した場合でも［列の自動表示］機能をオンにするとこの列は自動的に再表示されます。<br>• メソッドの [同定結果を組み合わせる] セクションでは、LibSearch アルゴリズムに高い重みが付けられています。手動で最善の MFG 結果を選択するか、同定結果の組み合わせ方法を変更することができます。 |

## タスク 17. ピークスペクトルに対する化学式の作成とライブラリの検索

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

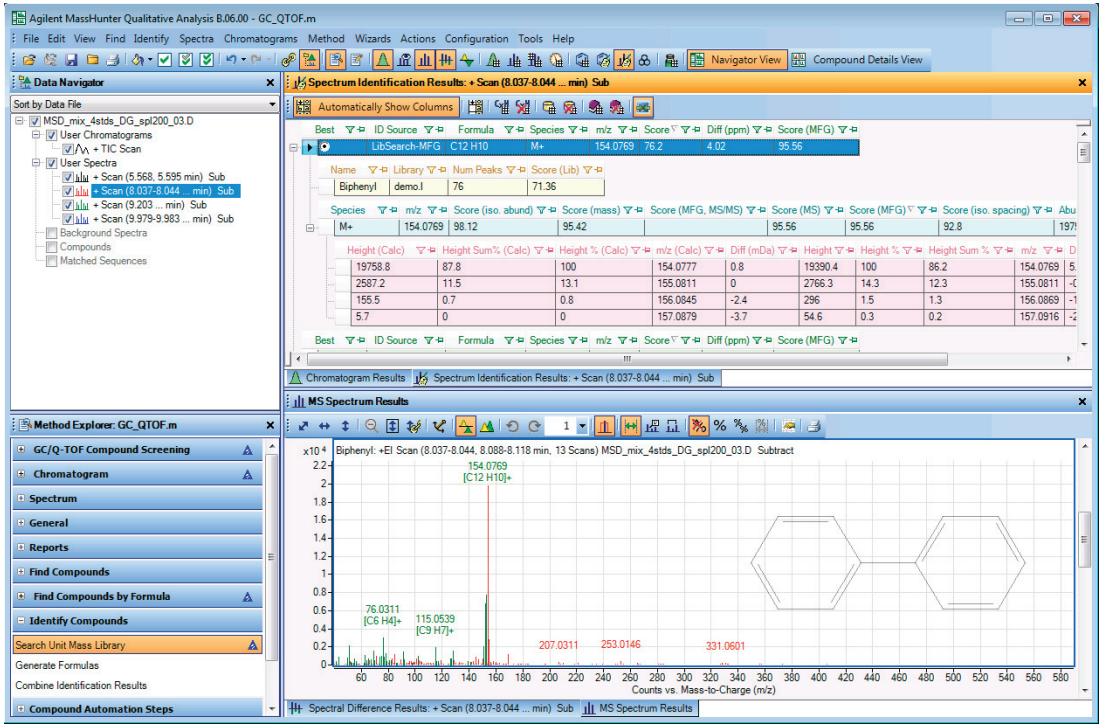



**図 48** 1 番目のピークスペクトルに対するライブラリ検索と化学式作成の結果

**6** [MS ピーク 1] ウィンドウで各スペクトルの結果を確認します。

**a** **[表示] > [MS スペクトルピークリスト 1]** をクリックします。

**b** 右クリックして [列の追加/削除] をクリックします。

**c** 図 49 に示されている列が **[表示する列]** リストに存在することを確認します。

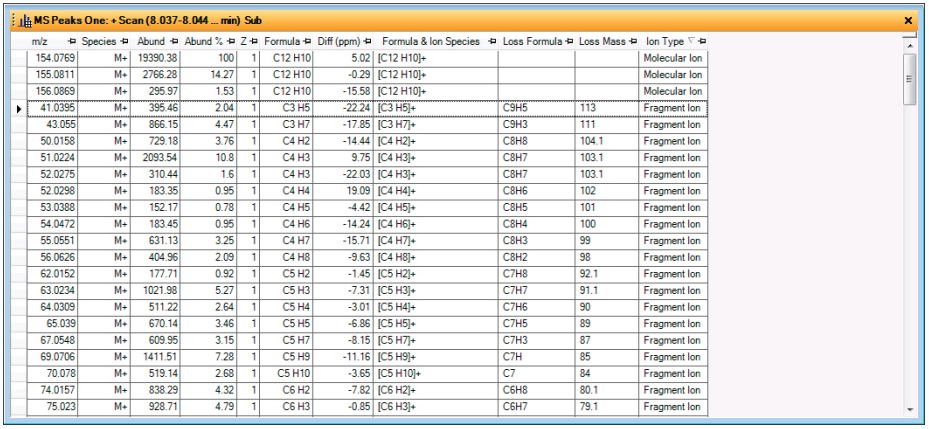
**d** **[イオンタイプ]** 列で並べ替えます。

**e** イオンタイプがフラグメントイオンの場合、[MS スペクトル結果] ウィンドウの各ピークの化学式とイオン種は緑で表示されます。

- フラグメントイオンは [MS スペクトル結果] ウィンドウで緑で表示されます。
- **[イオンタイプ]** は、分子イオン、フラグメントイオン、または空白です。フラグメントイオンの場合、[ニュートラルロスの式] 列と [ニュートラルロスの質量] 列に、分子イオンからそのイオンに至るために使用された化学式と質量が表示されます。[式 & イオン種] には、そのイオンの化学式とイオン種が表示されます。

## タスク 17. ピークスペクトルに対する化学式の作成とライブラリの検索

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|



MS Peaks One: + Scan (8.037-8.044 ... min) Sub

| m/z | Species | Abund | Abund % | Z | Formula | Diff (ppm) | Formula & Ion Species | Loss Formula | Loss Mass | Ion Type |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 154.0769 | M+ | 19390.38 | 100 | 1 | C12 H10 | 5.02 | [C12 H10]+ | | | Molecular Ion |
| 155.0811 | M+ | 2766.28 | 14.27 | 1 | C12 H10 | -0.29 | [C12 H10]+ | | | Molecular Ion |
| 156.0869 | M+ | 295.97 | 1.53 | 1 | C12 H10 | -15.58 | [C12 H10]+ | | | Molecular Ion |
| 41.0395 | M+ | 395.46 | 2.04 | 1 | C3 H5 | -22.24 | [C3 H5]+ | C9H5 | 113 | Fragment Ion |
| 43.055 | M+ | 866.15 | 4.47 | 1 | C3 H7 | -17.85 | [C3 H7]+ | C9H3 | 111 | Fragment Ion |
| 50.0158 | M+ | 729.18 | 3.76 | 1 | C4 H2 | -14.44 | [C4 H2]+ | C8H8 | 104.1 | Fragment Ion |
| 51.0224 | M+ | 2093.54 | 10.8 | 1 | C4 H3 | 9.75 | [C4 H3]+ | C8H7 | 103.1 | Fragment Ion |
| 52.0275 | M+ | 310.44 | 1.6 | 1 | C4 H3 | -22.03 | [C4 H3]+ | C8H7 | 103.1 | Fragment Ion |
| 52.0298 | M+ | 183.35 | 0.95 | 1 | C4 H4 | 19.09 | [C4 H4]+ | C8H6 | 102 | Fragment Ion |
| 53.0388 | M+ | 152.17 | 0.78 | 1 | C4 H5 | -4.42 | [C4 H5]+ | C8H5 | 101 | Fragment Ion |
| 54.0472 | M+ | 183.45 | 0.95 | 1 | C4 H6 | -14.24 | [C4 H6]+ | C8H4 | 100 | Fragment Ion |
| 55.0551 | M+ | 631.13 | 3.25 | 1 | C4 H7 | -15.71 | [C4 H7]+ | C8H3 | 99 | Fragment Ion |
| 56.0626 | M+ | 404.96 | 2.09 | 1 | C4 H8 | -9.63 | [C4 H8]+ | C8H2 | 98 | Fragment Ion |
| 62.0152 | M+ | 177.71 | 0.92 | 1 | C5 H2 | -1.45 | [C5 H2]+ | C7H8 | 92.1 | Fragment Ion |
| 63.0234 | M+ | 1021.98 | 5.27 | 1 | C5 H3 | -7.31 | [C5 H3]+ | C7H7 | 91.1 | Fragment Ion |
| 64.0309 | M+ | 511.22 | 2.64 | 1 | C5 H4 | -3.01 | [C5 H4]+ | C7H6 | 90 | Fragment Ion |
| 65.039 | M+ | 670.14 | 3.46 | 1 | C5 H5 | -6.86 | [C5 H5]+ | C7H5 | 89 | Fragment Ion |
| 67.0548 | M+ | 609.95 | 3.15 | 1 | C5 H7 | -8.15 | [C5 H7]+ | C7H3 | 87 | Fragment Ion |
| 69.0706 | M+ | 1411.51 | 7.28 | 1 | C5 H9 | -11.16 | [C5 H9]+ | C7H | 85 | Fragment Ion |
| 70.078 | M+ | 519.14 | 2.68 | 1 | C5 H10 | -3.65 | [C5 H10]+ | C7 | 84 | Fragment Ion |
| 74.0157 | M+ | 838.29 | 4.32 | 1 | C6 H2 | -7.82 | [C6 H2]+ | C6H8 | 80.1 | Fragment Ion |
| 75.023 | M+ | 928.71 | 4.79 | 1 | C6 H3 | -0.85 | [C6 H3]+ | C6H7 | 79.1 | Fragment Ion |

**図 49**　[MSピーク1] テーブルでの [**イオンタイプ**]、[**ニュートラルロスの式**]、[**ニュートラルロスの質量**]、［**式 & イオン種**］列の表示

**7** （オプション）データファイルを閉じます。
- 結果の保存方法を学習するには、次のタスクに進んでください。

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

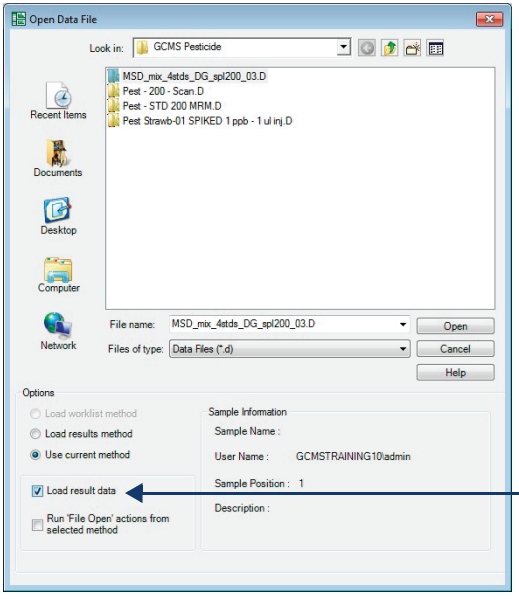
- これらの結果を保存する方法については、72 ページの「タスク 18. 結果の保存」を参照してください。

# タスク 18. 結果の保存

このタスクでは、現在のデータファイルの結果を保存します。

タスク 18. 結果の保存

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 現在のデータファイルの結果を保存してデータファイルを閉じます。 | a **[ファイル] > [結果の保存]** をクリックします。<br>b **[ファイル] > [データファイルを閉じる]** をクリックします。 | • データファイルとともに保存できる結果は 1 組だけです。現在のデータファイルにすでに結果が保存されている場合、**[ファイル] > [結果の保存]** をクリックするとこれらの結果は上書きされます。 |
| 2 データファイルを開き、結果を読み込みます。 | a **[ファイル] > [データファイルを開く]** をクリックします。[データファイルを開く] ダイアログボックスが開きます。<br>b データファイルを選択します。この例では、データファイル MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d を選択します。<br>c **[結果データの読み込み]** チェックボックスをオンにします。<br>d **[開く]** ボタンをクリックします。 | |




**[結果データの読み込み] チェックボックスをオンにします。**

**図 50** [データファイルを開く] ダイアログボックス

## タスク 18. 結果の保存

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **3** 結果を確認します。 | **a** **［スペクトル同定結果］**ウィンドウをクリックします。<br>**b** 結果を確認します。 | |

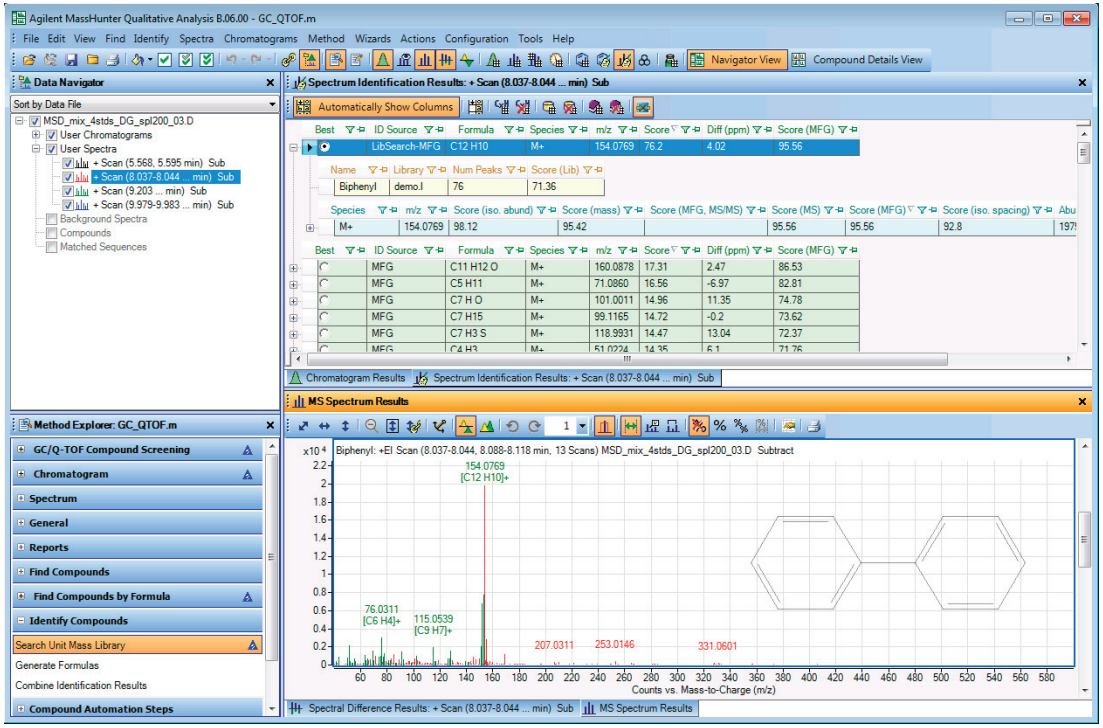



**図 51**　　1 番目のピークスペクトルに対するライブラリ検索と化学式作成の結果

| | | |
|---|---|---|
| **4** データファイルを閉じます。 | **a** **［ファイル］** > **［データファイルを閉じる］**をクリックします。<br>**b** 結果を保存するかどうか尋ねられたら、**［いいえ］**をクリックします。 | |

## タスク 18. 結果の保存

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 5 データファイルをもう一度開きます。結果は読み込みません。 | a [ファイル] > [開く] をクリックします。[データファイルを開く] ダイアログボックスが開きます。<br>b データファイルを選択します。この例では、データファイル MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d を選択します。<br>c [結果データの読み込み] チェックボックスをオフにします。<br>d [開く] ボタンをクリックします。 | • 結果を読み込まない場合、データファイルを開いたときにデフォルトで TIC が開かれます。[選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行] チェックボックスをオンにした場合、代わりにファイルを開くで指定した処理が実行されます。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。 |

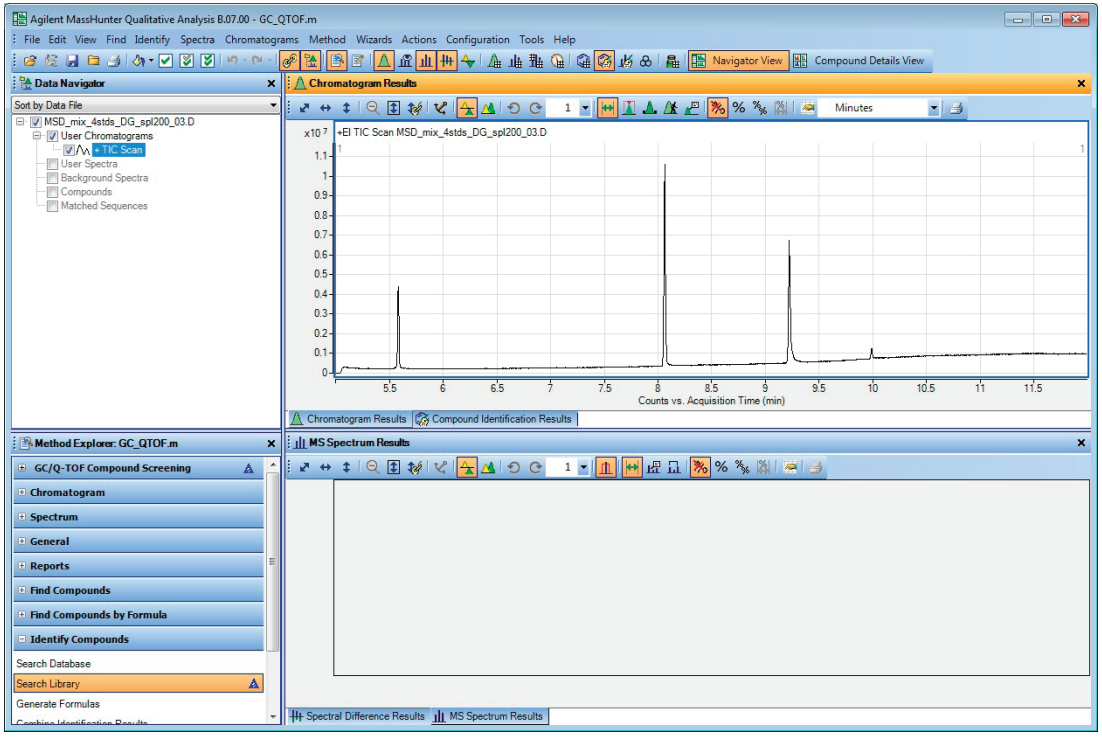



**図 52** 1 番目のピークスペクトルに対するライブラリ検索と化学式作成の結果

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

# 実習 3
# ワークフロー、エクスポート、および印刷

タスク 19. 一般ワークフローによる定性分析メソッドの設定と実行 76
タスク 20. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行 81
タスク 21. CEF ファイルのエクスポート 84
タスク 22. 解析レポートの印刷 85
タスク 23. 化合物レポートの印刷 88

これらのタスクでは、定性分析メソッドの設定および実行方法を学習します。その後、データファイルを開くときに、メソッドから自動的に処理を実行します。

この章の例では２つの異なるワークフローを使用します。詳細は、104 ページの「ワークフロー」を参照してください。

一般ワークフローは、GC/QQQ、GC/Q-TOF、LC/MS データをサポートします。GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローは、GC/Q-TOF データをサポートします。

実習方法を示す表は、以下の3列に分けて表示されています。

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

# タスク 19. 一般ワークフローによる定性分析メソッドの設定と実行

定性分析プログラムを初めて起動した場合、default.mメソッドが読み込まれます。開いたメソッドは変更して保存したり、新しいメソッドを開き、変更を加えて保存したりすることができます。default.mメソッドを上書きすることはできません。

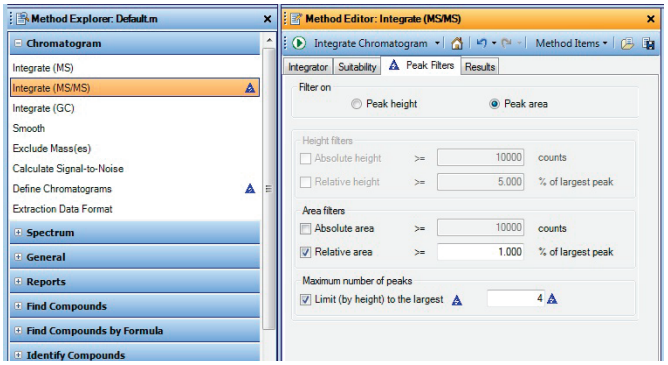
データファイルを開いた際に、メソッドで特定の処理を実行するように設定することもできます。データファイルを開く際に、データファイルに保存されている結果の作成に使用したメソッドを読み込むこともできます。データファイルに結果を保存するたびに、このメソッドは自動的に保存されます。一般ワークフローは、GC/MSデータファイルとLC/MSデータファイルの両方で使用できます。

タスク 19. 一般ワークフローによる定性分析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 **Pest - STD 200 MRM.d** データファイルの TIC を開きます。 | **a** プログラムが開いていない場合、**[Masshunter Qualitative Analysis]** アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、**[ファイル]** > **[データファイルを開く]** をクリックします。<br>**b** **GCMS Pesticide** デモデータファイルフォルダの **Pest - STD 200 MRM.d** データファイルをクリックします。<br>**c** **[結果データの読み込み]** チェックボックスをオフにして **[開く]** をクリックします。 | • GC/MS データの作業には、一般ワークフローまたは GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローを使用します。 |
| 2 GCデータを使用するようにユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。 | • 12 ページの「タスク 2. GC/MS データ用にユーザーインターフェイスをコンフィグレーション」ページを参照します。 | • この例では、一般ワークフローを選択します。 |
| 3 メソッドを設定し、TICクロマトグラムを抽出します。<br>• MS/MS データに TIC クロマトグラムを定義します。 | **a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで、**[クロマトグラム]** > **[クロマトグラムの定義]** を選択します。<br>**b** **[BPC]** クロマトグラムを **[クロマトグラムの定義]** リストから削除します。<br>**c** **[タイプ]** リストで **[TIC]** を選択します。<br>**d** [MSレベル] が **[MS/MS]** であることを確認します。<br>**e** **[追加]** をクリックします。 | |

## タスク 19. 一般ワークフローによる定性分析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** メソッドを編集し、データを積分します。<br>• 4つの最大ピークのみ積分します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［クロマトグラム］**>**［積分 (MS/MS)］**をクリックします。<br>**b** **［ピークフィルタ］**タブをクリックします。<br>**c** ［ピークの最大数］セクションで、**［ピーク数を高さベースで制限する］**チェックボックスをオンにします。<br>**d** 4を入力します。 | • ［クロマトグラム］>［積分(MS)］セクションの［ピークフィルタ］タブの値を更新すると、［メソッドエクスプローラ］の他のセクションの値も更新されます。青色三角形が表示されたセクションが、その他の更新されたセクションです。 |




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

**図 53**　［クロマトグラム］>［積分（MS/MS）］>［ピークフィルタ］タブ

| | | |
|---|---|---|
| **5** 積分を実行して積分された 4 つのピークのみが表示されることを確認します。 | • **［クロマトグラムの積分］**アイコン をクリックし、データファイルを積分します。 | |
| **6** メソッドを iii_GCexercise1 に保存します。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。 | **a** トップメニューから**［メソッド］**>**［名前を付けて保存］**をクリックします。<br>**b** **iii_GCexercise1** と入力します。<br>**c** **［保存］**ボタンをクリックします。 | • メソッドを保存すると、メソッドの値が変更されたことを示す青色三角形がすべて消えることを確認します。 |
| **7** ピーク開始時のスペクトルを使用するようピークスペクトルバックグラウンドを変更します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［スペクトル］**>**［抽出 (MS/MS)］**をクリックします。<br>**b** **［ピークスペクトル抽出 (MS/MS)］**をクリックします。<br>**c** ピークスペクトルバックグラウンドで**［ピーク開始点のスペクトル］**を選択します。 | • メソッド保存後に追加の変更を行うと、青色三角形が表示されます。 |

タスク 19. 一般ワークフローによる定性分析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

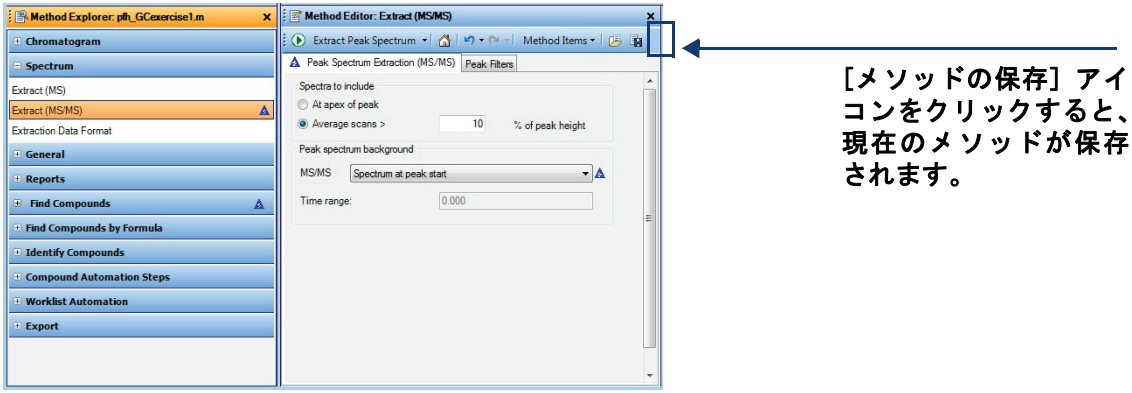
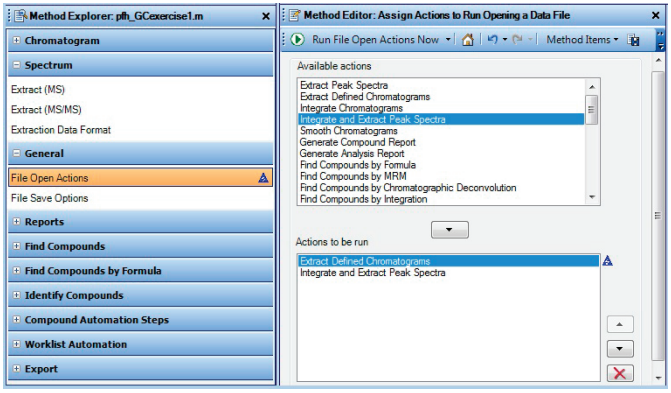



**図 54** [スペクトル] > [抽出（MS/MS）] > [ピークスペクトル抽出（MS/MS）] タブ

| | | |
|---|---|---|
| **8** MSスペクトルの抽出を実行してバックグラウンドスペクトルが減算されることを確認します。 | • **[ピークスペクトルの抽出]** アイコン をクリックし、データファイルの選択されたピークで処理を実行します。 | |
| **9** メソッドを保存します。 | • 以下の3つの方法のいずれかで、メソッドを保存します。<br>◦ [メソッドエディタ] の **[メソッドの保存]** アイコン をクリックします。<br>◦ [メソッドエディタ] を右クリックし **[メソッドの保存]** をクリックします。<br>◦ トップメニューから **[メソッド]** > **[保存]** をクリックします。 | • [メソッドの保存] アイコンは 78 ページの図 54 に示されています。 |
| **10** データファイルを開くときに、ここまでに変更したパラメータ処理を自動的に実行するメソッドを設定します。<br>◦ このデータファイルやその他のデータファイルを開く際に、実行する処理のリストを作成します。<br><br>ヒント：[メソッドエクスプローラ] の [一般] を使用します。 | **a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで、**[一般]** > **[ファイルを開くときにする処理]** を選択します。<br>**b** **[使用可能な処理]** リストから **[ピークスペクトルの積分と抽出]** を選択します。<br>**c** **追加**ボタン をクリックし、選択した処理を **[実行する処理]** リストに移動します。<br>選択したアクションをダブルクリックし、それを他のリストに移動させることもできます。 | • [定義済みクロマトグラムの抽出] アクションは、[実行する処理] リストにデフォルトで入っています。[定義済みクロマトグラムの抽出] アクションはリストの最初になければなりません。まずクロマトグラムを抽出しないと、ピークスペクトルの積分と抽出を実行できないからです。 |

## タスク 19. 一般ワークフローによる定性分析メソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **11** ［ファイルを開くときにする処理］をテストします。 | • **［ファイルを開くときにする処理を今すぐ実行］**アイコン をクリックし、データファイルの処理を実行します。 | • クロマトグラムとスペクトルは上書きされません。新しいクロマトグラムとスペクトルが追加されます。 |




**［実行する処理］リストには、2つの処理があります。最初の処理では定義済みのクロマトグラムを抽出します。その後、そのクロマトグラムが積分され、ピークが抽出されます。**

**図 55**　［メソッドエディタ］の［一般］>［ファイルを開くときにする処理］セクション

| | | |
|---|---|---|
| **12** メソッドを保存します。 | • ［メソッドエディタ］の**［メソッドの保存］**アイコンをクリックします。 | |
| **13** ワークリストでメソッドを実行するときに、処理を自動的に実行するメソッドを設定します。<br>• このデータファイルやその他のデータファイルを開く際に、実行する処理のリストを作成します。<br><br>ヒント：［メソッドエクスプローラ］の［ワークリスト自動化］を使用します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［ワークリスト自動化］**>**［ワークリスト処理］**を選択します。<br>**b** **実行する処理**リストの**［解析レポートの作成］**を削除します。 | |
| **14** ［ワークリスト処理］をテストします。 | • **［ワークリスト処理を今すぐ実行］**アイコン をクリックし、データファイルの処理を実行します。 | • クロマトグラムとスペクトルは上書きされません。新しいクロマトグラムとスペクトルが追加されます。 |

タスク 19. 一般ワークフローによる定性分析メソッドの設定と実行

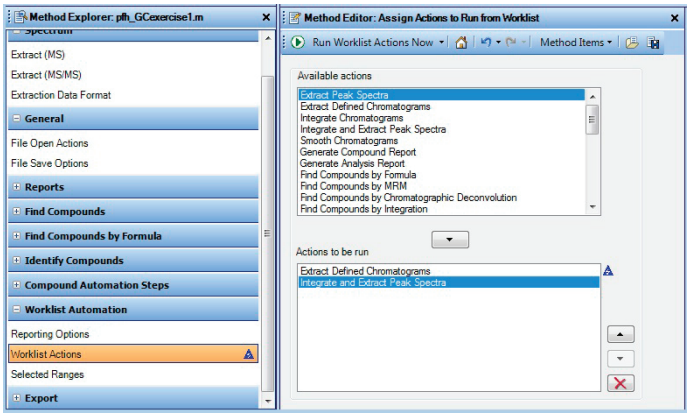
| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
|  | | **メソッドには２つの異なる処理リストが含まれます。1つ目の処理リスト（ファイルを開くときにする処理）は、データファイルを開くときに実行できます。２つ目の処理リスト（ワークリスト処理）は、メソッドの実行時に実行されます。** |

**図 56** ［メソッドエディタ］の［ワークリスト自動化］>［ワークリスト処理］セクション

| | | |
|---|---|---|
| **15** メソッドを保存し、結果を保存せずにデータファイルを閉じます。 | **a** ［メソッドエディタ］の **［メソッドの保存］** アイコンをクリックします。<br>**b** **［ファイル］** > **［データファイルを閉じる］** をクリックし、結果の保存を求められたら **［いいえ］** をクリックします。 | |

# タスク 20. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行

このタスクでは、特定の順序で実行する解析処理のリストを含む定性分析メソッドを設定します。この設定では、クロマトグラムの抽出と積分、スペクトルの抽出、ピークスペクトルのライブラリ検索、スペクトルの化学式の作成、解析レポートの印刷を行います。

タスク 20. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** データファイルの TIC を開きます。 | **a** プログラムが開いていない場合、**[Masshunter Qualitative Analysis]** アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、**[ファイル]** > **[データファイルを開く]** をクリックします。<br>**b** **GC** デモデータファイルフォルダの **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** データファイルをクリックします。<br>**c** **[結果データの読み込み]** チェックボックスをオフにして **[開く]** をクリックします。 | |
| 2 GCデータを使用するようにユーザーインターフェイスをコンフィグレーションします。 | • 12 ページの「タスク 2. GC/MS データ用にユーザーインターフェイスをコンフィグレーション」ページを参照します。 | • この例では、GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローを選択します。 |
| 3 TIC が抽出されていることを確認します。 | **a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで、**[クロマトグラム]** を選択します。<br>**b** **[クロマトグラムの定義]** セクションをクリックします。<br>**c** [メソッドエディタ] ウィンドウで、**[定義済みクロマトグラム]** セクションのクロマトグラムが TIC であることを確認します。そうでない場合は、**[タイプ]** で **[TIC]** を選択します。**[変更]** ボタンをクリックします。 | • |

## タスク 20. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** クロマトグラムデコンボリューションによる検出アルゴリズムのパラメータを確認します。 | **a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウの **[GC/Q-TOF 化合物スクリーニング]** > **[ クロマトグラムデコンボリューションによる検出 ]** セクションをクリックします。<br>**b** **[質量フィルタ]** タブをクリックします。<br>**c** **[絶対高さ]** の値を 13000 に設定します。<br>**d** **[結果]** タブをクリックします。<br>**e** **[すべての化合物をハイライト]** ボタンをクリックします。<br>**f** 各タブで結果を確認します。 | • GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローのセクションを見てみます。<br>• このワークフローにはセクションが６個あります。これらのセクションはすべて、メソッドエクスプローラにすでに含まれるセクションです。<br>• ［メソッドエクスプローラ］の他のセクションに、青色三角形が表示されていることを確認してください。これは、他の場所でも同じパラメータ値が変更されたことを示します。 |
| **5** ライブラリ検索による同定アルゴリズムのパラメータを確認します。 | **a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウの **[GC/Q-TOF 化合物スクリーニング]** > **[ ライブラリ検索による同定 ]** セクションをクリックします。<br>**b** **[ライブラリの追加]** ボタンをクリックします。ライブラリを選択して、**[ 開く ]** をクリックします。<br>**c** （オプション）使用したくないライブラリがある場合は、**[ ライブラリの削除]** ボタンをクリックして削除します。<br>**d** 各タブでパラメータを確認します。 | • demo.l ライブラリは、¥MassHunter¥Library フォルダにインストールされています。<br>• NIST11.l（または NIST ライブラリの別のバージョン）もこのフォルダにインストールされている場合があります。 |
| **6** メソッドを iii_GCexercise2 に保存します。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。 | **a** トップメニューから **[メソッド]** > **[名前を付けて保存]** をクリックします。<br>**b** **iii_GCexercise2** と入力します。<br>**c** **[保存]** ボタンをクリックします。 | |
| **7** データファイルを開いたときの操作を自動化するメソッドを設定します。<br>• このデータファイルやその他のデータファイルを開く際に、実行する処理のリストを作成します。<br><br>ヒント : [ メソッドエクスプローラ ] ウィンドウの [一般] を使用します。 | **a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**[一般]** > **[ファイルを開くときにする処理]** を選択します。<br>**b** **[実行する処理]** リストから、すべての処理を削除します。<br>**c** **[定義済みクロマトグラムの抽出]** を追加します。<br>**d** **[クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出]** を追加します。<br>**e** **[ライブラリの化合物を検索]** を追加します。 | |
| **8** ［ファイルを開くときにする処理］をテストします。 | • **[ファイルを開くときにする処理を今すぐ実行]** アイコン  をクリックし、データファイルの処理を実行します。 | • クロマトグラムとスペクトルは上書きされません。新しいクロマトグラムとスペクトルが追加されます。 |

## タスク 20. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行

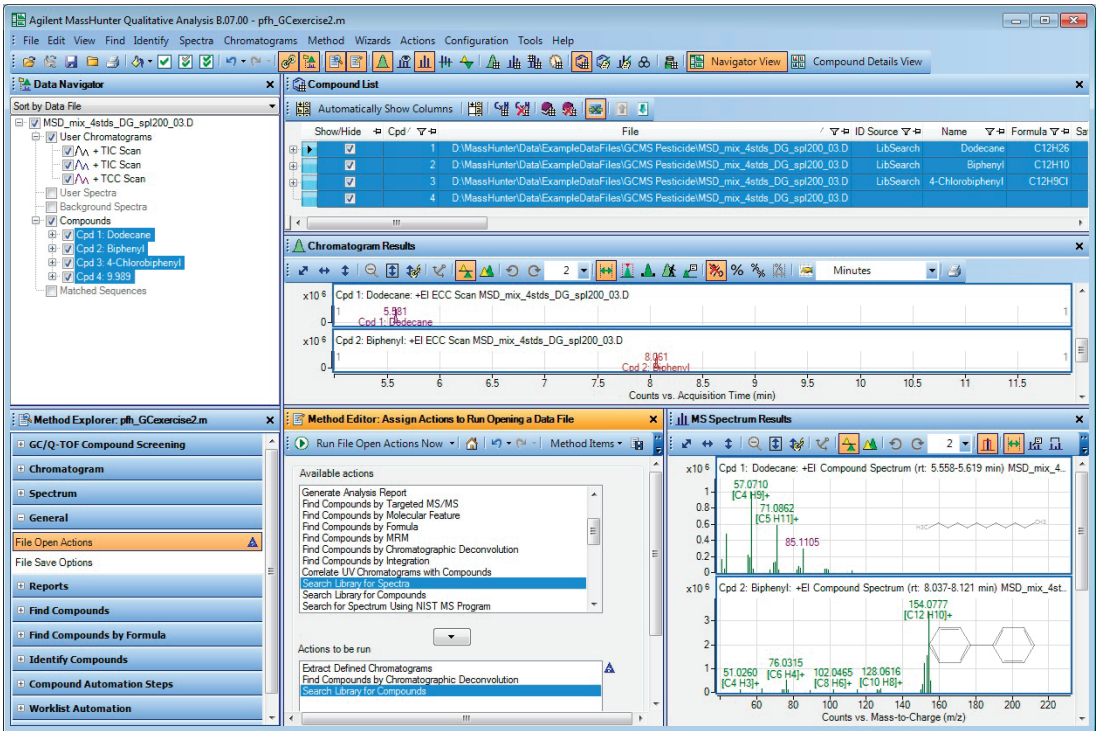
| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
|  | | |

**図 57** GC/Q-TOF データに対してワークリスト処理を実行した結果

| | | |
|---|---|---|
| **9** メソッドを iii_GCexercise2 に保存します。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。 | • 以下の3つの方法のいずれかで、メソッドを保存します。<br><br>◦[メソッドエディタ]の**[メソッドの保存]**アイコン をクリックします。<br>• [メソッドエディタ]を右クリックし**[メソッドの保存]**をクリックします。<br>• トップメニューから**[メソッド]** > **[保存]**をクリックします。 | • データ測定ワークリスト中にこのメソッドが実行された場合、このタブのワークリスト処理が指定された順序で実行されます。 |
| **10** 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。 | **a** **[ファイル]** > **[データファイルを閉じる]**をクリックします。<br>**b** 結果の保存を求められたら、**[いいえ]**をクリックします。 | |

# タスク 21. CEF ファイルのエクスポート

化合物情報を記録した CEF ファイルをエクスポートできます。この CEF ファイルは、MassHunter 定量分析や Mass Profiler Professional などの他のプログラムにインポートできます。CEF ファイルにエクスポートされた化合物をインポートすることもできます。

タスク 21. CEF ファイルのエクスポート

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** データファイルを開き、81 ページの「タスク 20. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行」で作成した iii_GCexercise2.m メソッドのファイルを開くときにする処理を実行します。 | a プログラムが開いていない場合、**[Masshunter Qualitative Analysis]** アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、**[ファイル] > [データファイルを開く]** をクリックします。<br>b **GC** デモデータファイルフォルダの **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** データファイルをクリックします。<br>c **[結果データの読み込み]** チェックボックスをオフにします。<br>d **[選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行]** チェックボックスをオンにします。<br>e **[現在のメソッドを使用]** ボタンをクリックして **[開く]** をクリックします。 | • 81 ページの「タスク 20. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行」を完了している場合、現在のメソッドは iii_GCexercise2.m になっています。このメソッドは、[クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出] アルゴリズムを実行するように設定されており、各化合物に対してライブラリ検索アルゴリズムを実行します。 |
| 2 CEF ファイルをエクスポートします。 | a ファイルを対話的にエクスポートするには、**[ファイル] > [エクスポート] > [CEF形式]** をクリックします。<br>b **[すべての結果]** ボタンをクリックします。<br>c エクスポートファイルの保存先を選択します。<br>d **[OK]**をクリックします。 | • CEF ファイルを使用して化合物がエクスポートされます。 |

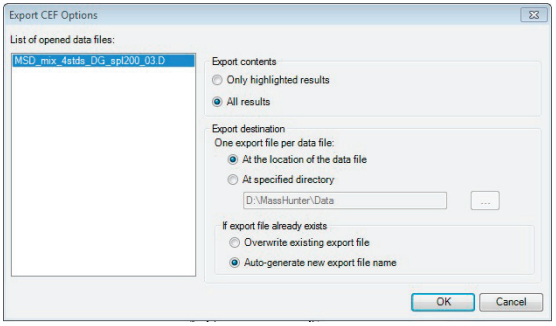



**図 58** [CEFエクスポートオプション] ダイアログボックス

# タスク 22. 解析レポートの印刷

この実習または次の実習のタスクを実行した後に解析レポートを印刷する際には、この説明を参照してください。

解析レポートには、クロマトグラムの抽出や積分、スペクトルの抽出、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。

タスク 22. 解析レポートの印刷

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| 1 **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** が読み込まれていなければ、このデータファイルを開き 81 ページの「タスク 20. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行」で作成した iii_GCexercise2.m メソッドのファイルを開くときにする処理を実行します。 | **a** プログラムが開いていない場合、**[Masshunter Qualitative Analysis]** アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、**[ファイル]** > **[データファイルを開く]** をクリックします。<br>**b** **GC** デモデータファイルフォルダの **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** データファイルをクリックします。<br>**c** **[結果データの読み込み]** チェックボックスをオフにします。<br>**d** **[選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行]** チェックボックスをオンにします。<br>**e** **[現在のメソッドを使用]** ボタンをクリックして **[開く]** をクリックします。 | • 81 ページの「タスク 20. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行」を完了している場合、現在のメソッドは iii_GCexercise2.m になっています。このメソッドは、[クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出] アルゴリズムを実行するように設定されており、各化合物に対してライブラリ検索アルゴリズムを実行します。 |
| 2 メソッドの解析レポートの選択を変更します。<br>• 印刷するクロマトグラム、スペクトル、またはテーブルのチェックボックスをオンにします。<br>• 印刷しないクロマトグラム、スペクトル、またはテーブルのチェックボックスをオフにします。 | **a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで **[レポート]**>**[解析レポート]** をクリックします。<br>**b** 印刷する追加選択項目のチェックボックスをオンにします。<br>**c** 印刷しない項目のチェックボックスをオフにします。 | • 解析レポートには、このセクションで選択した情報のみが含まれます。<br>• このセクションで選択されている場合でも、結果データでその情報が得られないときは、その結果はレポートに含まれません。たとえば、クロマトグラムを積分していない場合、積分ピークテーブルはレポートに含まれません。 |

タスク 22. 解析レポートの印刷（続き）

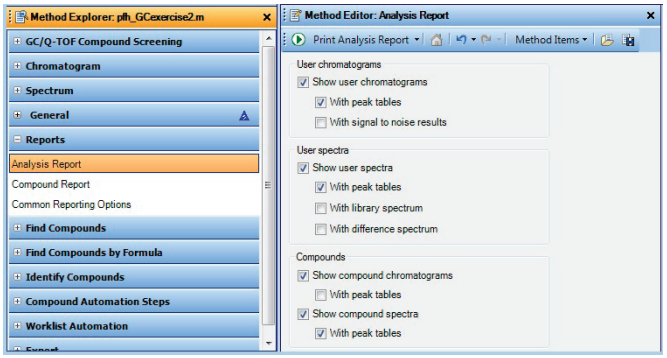
| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
|  | | **デフォルトでは、[メソッドエディタ]ウィンドウはフローティングです。定性分析プログラムのメインウィンドウから独立したウィンドウとして表示されます。ウィンドウを固定するには、ウィンドウタイトルを右クリックし[Floating]をクリックします。タイトルバーをダブルクリックしてウィンドウを固定することもできます。** |

**図 59** [メソッドエクスプローラ]ウィンドウと[メソッドエディタ]ウィンドウの[解析レポート]セクション

**3** レポートを印刷します。

**a** 以下の複数の方法で、レポートを印刷できます。
- メインメニューから **[ファイル]** > **[印刷]** > **[解析レポート]** をクリックします。
- メインツールバーから[プリンタ]アイコンをクリックします。
- [解析レポート] セクションが選択されている状態で [メソッドエディタ] ツールバーの **[解析レポートの印刷]** アイコン をクリックします。
- [メソッドエディタ] の [解析レポート] セクションをクリックし **[解析レポートの印刷]** をクリックします。
- [データナビゲータ] のデータファイルショートカットメニューから、**[解析レポート]** をクリックします。

**b** **[レポート内容]** のいずれかのオプションをクリックします。

**c** （オプション）**[データファイルごとに個別のレポート]** チェックボックスをオンにします。

**d** **[レポートの印刷]** チェックボックスをオンにして、プリンタを選択します。

**e** **[印刷プレビュー]** チェックボックスをオンにします。

**f** **[OK]** ボタンをクリックします。

- [メソッドエディタ] ツールバーの [実行] アイコン では、複数のアイテムから実行する処理を選択できる場合もあります。たとえば、[メソッドエディタ]ウィンドウの[レポート]>[共通レポートオプション]セクションに切り替えた場合、[実行]アイコンでは4つの異なる処理が使用可能です。矢印をクリックすると、可能な処理のリストが示され、どの処理を実行するかを選択できます。リストから違う処理を選択すると、デフォルトの処理が変更されます。[実行]ボタンをクリックすると、現在のデフォルトの処理が実行されます。

タスク 22. 解析レポートの印刷（続き）

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|

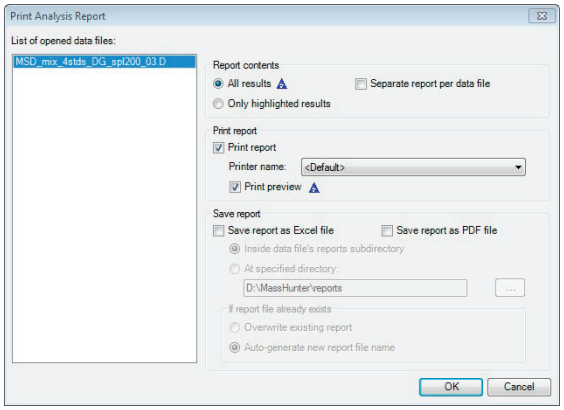



**図 60** [解析レポートの印刷]ダイアログボックス

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

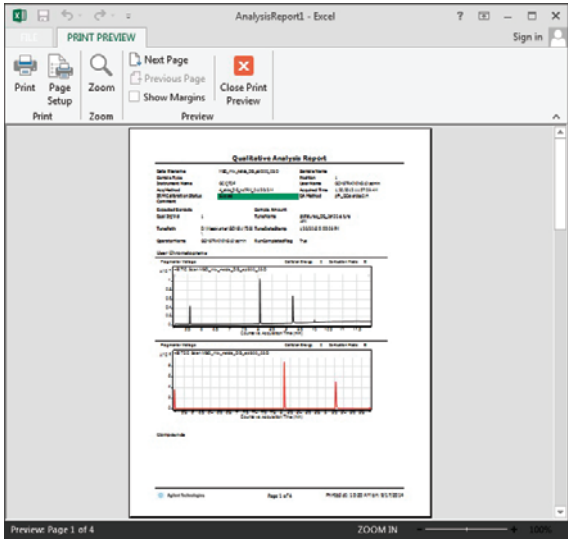



**図 61** 解析レポートの [印刷プレビュー ] ウィンドウ

# タスク 23. 化合物レポートの印刷

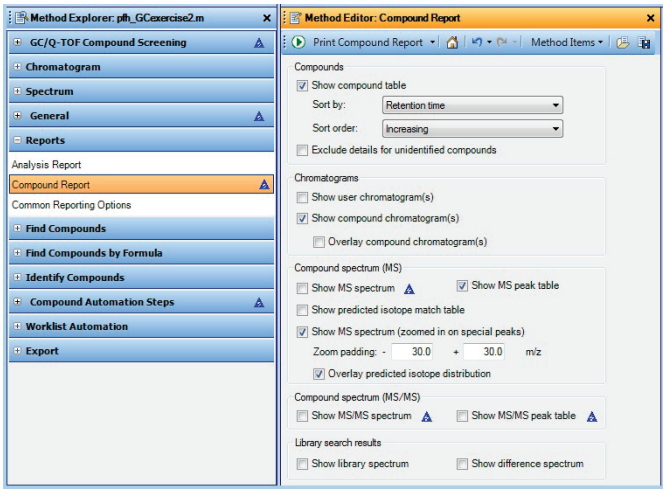
化合物レポートを印刷する際には、以下の手順を実行します。

タスク 23. 化合物レポートの印刷

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **1** **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** が読み込まれていなければ、このデータファイルを開き 81 ページの「タスク 20. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行」で作成した iii_GCexercise2.m メソッドのファイルを開くときにする処理を実行します。 | **a** プログラムが開いていない場合、**[Masshunter Qualitative Analysis]** アイコンをダブルクリックします。開いている場合は、**[ファイル]** > **[データファイルを開く]** をクリックします。<br>**b** **GC** デモデータファイルフォルダの **MSD_mix_4stds_DG_spl200_03.d** データファイルをクリックします。<br>**c** **[結果データの読み込み]** チェックボックスをオフにします。<br>**d** **[選択したメソッドでファイルを開くときにする処理を実行]** チェックボックスをオンにします。<br>**e** **[現在のメソッドを使用]** ボタンをクリックして **[開く]** をクリックします。 | • 81 ページの「タスク 20. GC/Q-TOF 化合物スクリーニングワークフローによるメソッドの設定と実行」を完了している場合、現在のメソッドは iii_GCexercise2.m になっています。このメソッドは、[クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出] アルゴリズムを実行するように設定されており、各化合物に対してライブラリ検索アルゴリズムを実行します。 |
| **2** 化合物レポートに対するメソッド設定の一部を変更します。<br>• 拡大された指定ピークの MS スペクトルの表示をオフにします。<br>• レポートの MS/MS オプションをオフにします。 | **a** [メソッドエクスプローラ]で、**[レポート]**>**[化合物レポート]** をクリックします。<br>**b** （オプション）**[MSスペクトルの表示]** チェックボックスをオフにします。<br>**c** （オプション）**[MS/MSスペクトルの表示]** チェックボックスをオフにします。<br>**d** （オプション）**[MS/MSピークテーブルの表示]** チェックボックスをオフにします。 | • これらのチェックボックスから、レポートに含める情報を指定します（情報が使用できる場合）。情報が使用できない場合、該当セクションは自動的に省略されます。たとえば、データファイルに MS データしかない場合、MS/MS結果がレポートに含まれることはありません。 |

タスク 23. 化合物レポートの印刷

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|




**GC/Q-TOF データの場合、[ 化合物クロマトグラムの重ね描き ] チェックボックスはオフにする必要があります。**

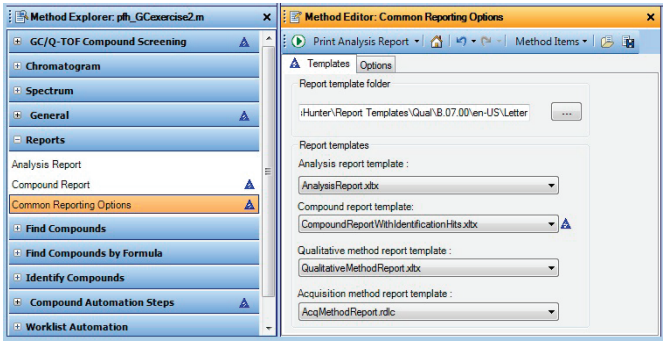
**図 62** [メソッドエディタ] の [化合物レポート]セクション

**3** （オプション）別の化合物レポートテンプレートを選択します。

**a** [メソッドエクスプローラ]ウィンドウで、[ **レポート** ]>[ **共通レポートオプション**]をクリックします。

**b** **CompoundReport WithIdentificationHits.xltx** を **化合物レポートのテンプレート**として選択します。

- ソフトウェアには、複数のレポートテンプレートが含まれています。
- Excel および Report Designer アドインを使用して、レポートテンプレートをカスタマイズすることができます。




**Excel および Report Designer アドインを使用して、拡張子 XLTX を持つテンプレートをカスタマイズすることができます。測定メソッドレポートのカスタマイズはできません。**

**図 63** [メソッドエディタ] の [共通レポートオプション] セクション

## タスク 23. 化合物レポートの印刷

| ステップ | 詳細説明 | コメント |
|---|---|---|
| **4** レポートを印刷します。 | **a** **[ファイル]** > **[印刷]** > **[化合物レポート]** をクリックするか、**[解析レポートの印刷]** アイコン の矢印をクリックして **[化合物レポートの印刷]** をクリックし、化合物レポートを印刷します。<br>**b** **[印刷プレビュー]** チェックボックスをオンにします。<br>**c** **[OK]** をクリックします。レポートを確認します。<br>**d** **[印刷プレビューを閉じる]** アイコンをクリックします。 | • [化合物レポートの印刷]ダイアログボックスでは、プリンタの選択、PDF または Excel ファイルへのレポートの保存の選択、すべての結果またはハイライトした結果のみの内容の選択、およびさまざまなデータファイルを 1 つのレポートにまとめるかどうかの選択ができます。<br>• 詳しい情報については、オンラインヘルプまたは「Report Designer Training DVD」を参照してください。 |

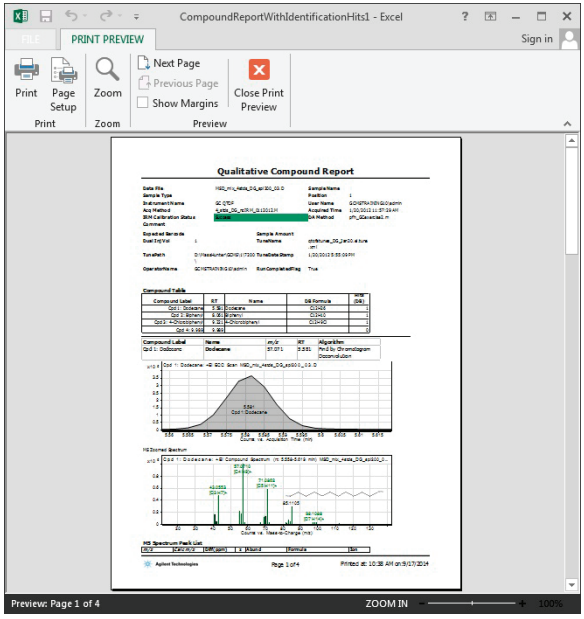



**図 64** 化合物レポートの [印刷プレビュー ] ウィンドウ

| | |
|---|---|
| **5** 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。 | **a** **[ファイル]** > **[データファイルを閉じる]** をクリックします。<br>**b** 結果の保存を求められたら **[いいえ]** をクリックします。 |

# リファレンス

ナビゲーション表示と化合物詳細表示 94
ウィンドウの操作 95
データナビゲータにおける結果データの操作 98
クロマトグラムの操作 99
MSまたはMS/MSスペクトルの操作 100
クロマトグラフ表示データの操作 101
スペクトル表示データの操作 103
ワークフロー 104
レポートテンプレートのカスタマイズ 108

# ナビゲーション表示と化合物詳細表示

定性分析ソフトウェアには、2 種類の表示があります。それぞれの表示で、使用できるウィンドウが異なります。どちらの表示を使用するかは、メインツールバーで選択します。以下のウィンドウは、両方の表示で使用することができます。

- メソッドエクスプローラ
- メソッドエディタ
- 結果の差
- 化合物リスト
- 化合物同定結果
- MS/MS化学式の詳細
- 構造式ビューア

## ナビゲーション表示

ナビゲーション表示はデフォルトの表示です。ナビゲーション表示では、[データナビゲータ] ウィンドウを使用してさまざまな化合物、スペクトル、クロマトグラムを選択できます。

複数のデータファイルまたはスペクトルを確認している場合は、ナビゲーション表示を使用します。化合物を確認している場合は、この表示または化合物詳細表示を使用できます。

## 化合物詳細表示

1 つのデータファイルの、1 つの化合物を中心に表示します。ある化合物に関する情報をさまざまなウィンドウで確認できます。選択する化合物を、化合物リストウィンドウで変更します。

[化学式による検出] アルゴリズムで検出された化合物を確認している場合（特に、化合物が [フラグメントの確認] で検出された場合）、この表示を使用します。その他のタイプの化合物を確認している場合も、この表示を使用できます。

# ウィンドウの操作

定性分析 プログラムを初めて開いたときには、4 つのウィンドウ［データナビゲータ］、［メソッドエクスプローラ］、［クロマトグラム結果］、［MSスペクトル結果］がデフォルトレイアウトで表示されます。ナビゲーション表示と化合物詳細表示を切り替えることができます。

［表示］メニューを用いて、その他 17 のウィンドウをナビゲーション表示に表示することが可能です。

- メソッドエディタ - さまざまなタブを含む、メソッドパラメータの編集ウィンドウです
- スペクトルプレビュー - データファイルのスペクトルを迅速に確認できます
- MS スペクトル結果 - MS および MS/MS スペクトルを表示します
- 結果の差 - ライブラリ検索後の結果の差を表示します
- デコンボリューション結果 - デコンボリュートスペクトルを表示します
- デコンボリューション ミラープロット - 2 つのデコンボリュートされたスペクトルをミラーイメージで表示します。
- UV スペクトル結果 - UV スペクトルを表示します - LC/MS データに対してのみ使用できます
- 積分ピークリスト - テーブルに積分結果を表示します
- MS スペクトルピークリスト 1 - 選択された最初のスペクトルのピークテーブルを表示します
- MS スペクトルピークリスト 2 - 選択された 2 番目のスペクトルのピークテーブルを表示します
- MS実測値 - ハイライトされたスペクトルの測定情報を表示します
- 化合物リスト - ［化合物の検出］アルゴリズムの 1 つを使用して検出した化合物を表示します
- 化合物同定結果 - 選択された化合物の同定情報を表示します
- スペクトル同定結果 - 選択されたスペクトルの同定情報を表示します
- MS/MS 化学式の詳細 - MS/MS スペクトルに表示されたフラグメントについて計算された化学式の候補をテーブル表示します

- 構造式ビューア - 現在の化合物またはスペクトルに関連する構造式を表示します
- サンプル情報 - ハイライトしたデータファイルに関する情報を表示します
- シーケンスエディタ - メソッドシーケンスの編集ウィンドウです

関連ツールを開始すると次の 3 つのツールウィンドウも表示されます。

- 化学式計算ツール
- 質量計算ツール
- 再キャリブレーション

## メインツールバーのウィンドウアイコン

メインツールバーの以下のアイコンを用いて、ウィンドウの表示/非表示を切り替えることができます。MassHunter BioConfirm ソフトウェアがインストールされている場合は、使用できるアイコンが追加されます。[表示] メニューのコマンドを使用してこれらのウィンドウを開くこともできます。

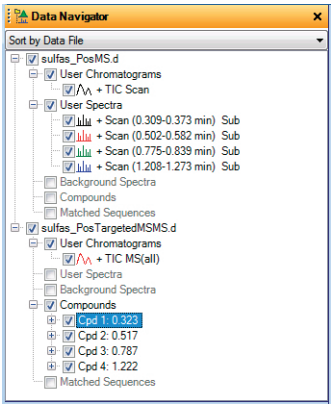
| ツールバーアイコン | ウィンドウ |
|---|---|
|  | データナビゲータウィンドウ<br>メソッドエクスプローラウィンドウ<br>メソッドエディタウィンドウ |
|  | クロマトグラム結果ウィンドウ<br>スペクトルプレビューウィンドウ<br>MS スペクトル結果ウィンドウ<br>結果の差ウィンドウ<br>デコンボリューション結果ウィンドウ<br>デコンボリューション ミラープロット ウィンドウ<br>UV スペクトル結果ウィンドウ |
|  | 積分ピークリストウィンドウ<br>MSスペクトルピークリスト1ウィンドウ<br>MSスペクトルピークリスト2ウィンドウ<br>MS実測値ウィンドウ |

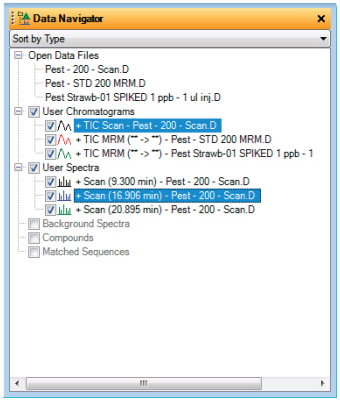
| ツールバーアイコン | ウィンドウ |
| --- | --- |
|  | 化合物リストウィンドウ<br>化合物同定結果ウィンドウ<br>スペクトル同定結果ウィンドウ<br>MS/MS化学式の詳細ウィンドウ<br>構造式ビューアウィンドウ<br>サンプル情報ウィンドウ<br>シーケンスエディタウィンドウ |

# データナビゲータにおける結果データの操作

## ［データナビゲータ］ウィンドウとツール

［データナビゲータ］では、データファイルまたはデータタイプを使用して、抽出やスペクトルなどの結果すべてを並べ替えることができます。このウィンドウはナビゲーション表示でのみ使用することができます。






**［リンクナビゲーション］アイコン**

有効な場合（デフォルト）、［データナビゲータ］のクロマトグラムをハイライトすると、対応するスペクトルもハイライトされます。対応するクロマトグラムとスペクトルグラフィック結果もハイライトされます。［リンクナビゲーション］は、［クロマトグラム］メニューの［ピークスペクトルの積分と抽出］メニューを使用した場合か、［化合物］アルゴリズムのいずれかを実行した場合に限り機能します。



**チェックマークツール**

**シングルチェックマーク** - ハイライトしたデータすべてのチェックボックスをオンにします。

**ダブルチェックマーク、1つ灰色** - ハイライトしたデータのチェックボックスをオンにして、その他のチェックボックスの選択を解除します。

**ダブルチェックマーク** - すべてのチェックボックスをオンにします。

チェックボックスがオンの場合のみ、クロマトグラムとスペクトルが表示されます。

# クロマトグラムの操作

メニュー項目を用いて、クロマトグラム全体、あるいはクロマトグラムの選択範囲で、以下の操作を行えます。

| 処理 | メニュー項目 |
|---|---|
| クロマトグラムのピークラベルの変更 | [コンフィグレーション] > [クロマトグラムの表示オプション] |
| クロマトグラムの抽出 | [クロマトグラム] > [クロマトグラムの抽出] |
| 定義済みクロマトグラムの抽出 | [クロマトグラム] > [定義済みクロマトグラムの抽出] |
| クロマトグラムの積分 | [クロマトグラム] > [クロマトグラムの積分] |
| ピークスペクトルの積分と抽出 | [クロマトグラム] > [ピークスペクトルの積分と抽出] |
| ピークスペクトルの積分とデコンボリュート | [クロマトグラム] > [ピークスペクトルの積分とデコンボリュート] |
| クロマトグラムのスムージング | [クロマトグラム] > [クロマトグラムのスムージング] |
| クロマトグラムの減算 | [クロマトグラム] > [クロマトグラムの減算] |
| S/N比の計算 | [クロマトグラム] > [S/N比の計算] |
| 自動MS/MSデータからの化合物の検出 | [検出] > [自動MS/MSによる化合物の検出] |
| ターゲットMS/MSデータからの化合物の検出 | [検出] > [ターゲットMS/MSによる化合物の検出] |
| MS（1）データの化合物の検出 | [検出] > [Molecular Featureによる化合物の検出] |
| GC/MS データの化合物の検出 | [検出] > [クロマトグラム デコンボリューションによる化合物の検出] |
| MRM データの化合物を検出 | [検出] > [MRM による化合物の検出] |
| 積分による化合物の検出結果 | [検出] > [積分による化合物の検出] |
| 特定化学式に一致する化合物の検出 | [検出] > [化学式による化合物の検出] |

## 選択範囲に対するショートカットメニュー

クロマトグラフ範囲を選択した場合、上記に記載されている操作と記載されていないその他の操作に加えて、スペクトルを抽出することや、バックグラウンドにスペクトルを抽出することもできます。

1 これらの操作は、[クロマトグラム結果] ツールバーの [範囲選択] ツール（）をクリックして実行します。
2 範囲の開始点をクリックし、範囲をドラッグして、マウスボタンを離します。
3 クロマトグラム内を右クリックし、ショートカットメニューから操作をクリックします。

### データファイルに結果を保存

- [保存] アイコン（）をクリックするか、[ファイル] > [結果の保存] をクリックします。

  プログラムを終了する際に、結果をデータファイルに保存するか問われます（この機能は、[メッセージボックスオプション] ダイアログボックスからオフに設定できます）。

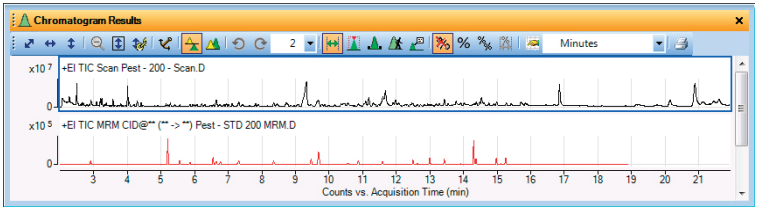
## MSまたはMS/MSスペクトルの操作

メニュー項目を用いて、MSまたはMS/MSスペクトル、あるいはそれらのスペクトルの選択範囲で以下の操作を行うことができます。

| 処理 | メニュー項目 |
|---|---|
| スペクトルのピークに関する *m/z*、アバンダンス、電荷の状態、その他の情報の表示 | [表示] > [MSスペクトルピークリスト1] |
| スペクトルピークラベルの変更 | [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] |
| バックグラウンドスペクトルの減算 | [スペクトル] > [バックグラウンドスペクトルの減算] |
| スペクトルの減算 | [スペクトル] > [スペクトルの減算]（メニュー項目を選択後、別のスペクトルをクリック） |
| 2つのスペクトルをひとつにする | [スペクトル] > [スペクトルの加算]（その後、別のスペクトルをクリック） |
| スペクトルの特定質量に一致するエントリをデータベースで検索 | [スペクトル] > [データベースでスペクトルピークを検索] |
| スペクトルの選択範囲の質量から化学式を作成 | [スペクトル] > [スペクトルピークから化学式を作成]（MS スペクトルで範囲が選択された場合） |
| ライブラリの検索 | [同定] > [ライブラリでスペクトルを検索] または [スペクトル] > [ライブラリでスペクトルを検索] |

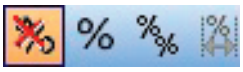
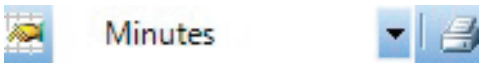
# クロマトグラフ表示データの操作

## ［クロマトグラム結果］ウィンドウ



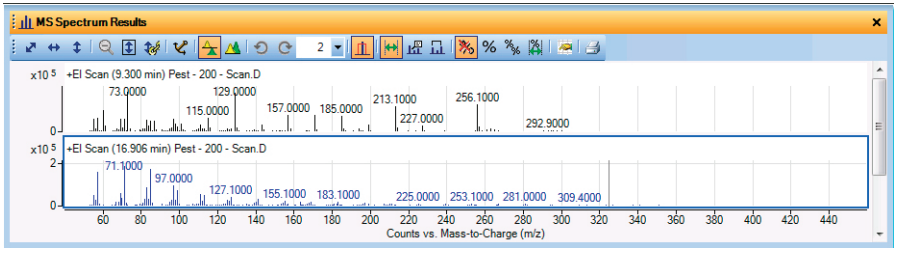

## クロマトグラム結果ツール

| ツールバーアイコン | 処理 |
|---|---|
| ズームツール<br> | • X軸とY軸のオートスケール<br>• X軸のオートスケール<br>• Y軸のオートスケール<br>• ズーム解除<br>• ズーム中にY軸をオートスケール<br>• Y軸リンクモード |
|  | • **クロマトグラムの固定** - **［固定を解除］**コマンドをクリックするまで、現在のクロマトグラムが常に表示されます。<br>• **リストモード** - 各クロマトグラムは、それぞれの Y 軸で描かれます。<br>• **重ね描きモード** - 複数のクロマトグラムが、1 つのX軸とY軸上に描かれます。<br>• **前のプロットに切り替えます**。このボタンは重ね描きモードでのみ使用できます。<br>• **次のプロットに切り替えます**。このボタンは重ね描きモードでのみ使用できます。<br>• スクロールバーを追加する前に同時に**表示できるスペクトルの数**です。 |

| ツールバーアイコン | 処理 |
| --- | --- |
| 選択ツールアイコン<br><br>常にどちらか 1 つのツールが選択されています。この図では、範囲選択ツールが選択されています。選択したツールの背景色はオレンジ色です。 | • **範囲選択** - オンにすると、処理を実行したいクロマトグラムの範囲を選択できます。<br>• **ピーク選択** - オンにすると、積分ピークの頂点のスペクトルを選択できます。<br>• **マニュアル積分** - オンにすると、対話形式で積分できます。<br>• **クロマトグラムを進める** - オンにすると、各ポイントをクリックするか、キーボードの左右矢印キーを用いて、個々のスペクトルを確認できます。<br>• **注釈** - オンにすると、クロマトグラムにイメージやテキスト注釈を追加できます。 |
| ノーマライズツール<br> | • クロマトグラムのノーマライズを停止します。<br>• すべてのクロマトグラムを、任意のクロマトグラムの最大ピークに合わせてノーマライズします。<br>• すべてのクロマトグラムを、各クロマトグラムの最大ピークに合わせてノーマライズします。<br>• それぞれのクロマトグラムを選択範囲の最大ピークに合わせてノーマライズします。 |
| その他のツール<br> | • **[クロマトグラムの表示オプション]** ダイアログボックスを開きます。<br>• クロマトグラムの表示に使用する単位を設定します。<br>• 表示されているクロマトグラムを印刷します。 |

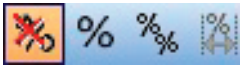
# スペクトル表示データの操作

## [MS スペクトル結果] ウィンドウ




## MS スペクトル結果ツール

| ツールバーアイコン | 処理 |
|---|---|
| ズームツール<br> | • X軸とY軸のオートスケール<br>• X軸のオートスケール<br>• Y軸のオートスケール<br>• ズーム解除<br>• ズーム中にY軸をオートスケール<br>• Y軸リンクモード |
|  | • **スペクトルの固定** - [固定を解除] コマンドをクリックするまで、現在のスペクトルが常に表示されます。<br>• **リストモード** - 各スペクトルは、それぞれの Y 軸に描かれます。<br>• **重ね描きモード** - 複数のスペクトルが、1 つの X 軸と Y 軸上に描かれます。<br>• **前のプロットに切り替えます**。このボタンは重ね描きモードでのみ使用できます。<br>• **次のプロットに切り替えます**。このボタンは重ね描きモードでのみ使用できます。<br>• スクロールバーを追加する前に同時に表示できる**スペクトルの数**です。 |

| ツールバーアイコン | 処理 |
| --- | --- |
| 選択ツールアイコン<br><br>常にどちらか１つのツールが選択されています。この図では、範囲選択ツールが選択されています。選択したツールの背景色はオレンジ色です。 | • **範囲選択** - **オン**にすると、処理を実行したいスペクトルの範囲を選択できます。<br>• **注釈** - **オン**にすると、スペクトルにイメージやテキスト注釈を追加できます。<br>• **質量差** - **オン**にすると、選択したスペクトルに質量差を追加できます。［デコンボリューション結果］ウィンドウでは、［アミノ酸］質量差または［修飾］質量差を追加することもできます。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。 |
| ノーマライズツール<br> | • スペクトルのノーマライズを停止します。<br>• すべてのスペクトルを、任意のスペクトルの最大ピークに合わせてノーマライズします。<br>• すべてのスペクトルを、各スペクトルの最大ピークに合わせてノーマライズします。<br>• それぞれのスペクトルを選択範囲の最大ピークに合わせてノーマライズします。 |
| その他のツール<br> | • **［MS および MS/MS スペクトルの表示オプション］**ダイアログボックスを開きます。<br>• 表示されているスペクトルを印刷します。 |

## ワークフロー

ワークフローを使用すると、アプリケーションのユーザーインターフェイスをカスタマイズできます。各ワークフローは、それぞれのワークフローに適切なパラメータを持つ異なるメソッドを読み込みます。また、各ワークフローは異なるレイアウトを読み込みます。レイアウトでは各テーブルに表示される列のカスタマイズが可能です。最後に、レイアウトのうちの４つには、特別なメソッドエディタのセクションが追加されており、各ワークフローに重要なメソッドエディタのセクションがコピーされています。特殊なワークフローで使用する機能をまとめてグループ化すると、メソッドのカスタマイズに便利です。

定性分析プログラムでは、複数の異なるワークフローが利用できます。ワークフローは以下のとおりです。

- 一般

- **BioConfirm** - これらのワークフローは、BioConfirm ソフトウェアがインストールされ、**[ユーザーインターフェイス コンフィグレーション]** ダイアログボックスで BioConfirm チェックボックスがオンになっている場合に限り使用できます。BioConfirm には、実行する分析のタイプに応じた複数のワークフローが準備されています。BioConfirm は LC/MS データファイルに対して使用します。
- **クロマトグラムピーク調査**
- **化学式の確認とサンプル純度**
- **MSターゲット化合物スクリーニング**
- **GC/Q-TOF 化合物スクリーニング**

GC/MS データの作業を行う場合、**[一般]** ワークフローまたは **[GC/Q-TOF 化合物スクリーニング]** ワークフローを選択できます。LC/MS データの作業を行う場合、**[GC/Q-TOF 化合物スクリーニング]** ワークフロー以外の任意のワークフローを選択できます。

## 特有のメソッド

各ワークフローは、そのワークフロー用に適切に設定された特定のデフォルトメソッドを読み込みます。たとえば、BioConfirm ワークフローの 1 つに切り替えると、[Molecular Feature による化合物の検出] アルゴリズムの **[ターゲットデータタイプ]** が **[高分子（タンパク質、オリゴ核酸）]** に設定されます。この設定は BioConfirm ワークフローには適切ですが、デフォルトでは他のワークフローには適切ではありません。

## 特有のレイアウト

各ワークフローでは、特有のレイアウトが読み込まれます。レイアウトは以下から構成されます。

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

それぞれのプロットウィンドウ（クロマトグラム結果ウィンドウ、スペクトルプレビューウィンドウ、MSスペクトル結果ウィンドウ、デコンボリューションウィンドウ、UV結果ウィンドウ、化合物クロマトグラム結果ウィンドウ、すべてのクロマトグラム結果ウィンドウ、化合物 MS スペクトル結果ウィンドウ、化合物フラグメントスペクトル結果ウィンドウ）では、以下の内容が保存されます。

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

各テーブルウィンドウでは、以下が指定されています。

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

## ［メソッドエクスプローラ］と［メソッドエディタ］の特有のセクション

一般ワークフローで［メソッドエディタ］を使用すると、そのメソッドのほとんどすべてのパラメータが変更できます。

その他のワークフローではそれぞれ［メソッドエクスプローラ］にセクションが追加されています。それらのセクションには、そのワークフローに役立つ［メソッドエディタ］のタブとセクションのみが含まれています。ワークフローセクションのパラメータを変更すると、一般ワークフローのメソッドエディタセクションの該当するセクションのパラメータも自動的に変更されます。

一般ワークフローの［メソッドエディタ］セクションには、存在しないタブもあります。**［クロマトグラムピーク調査ワークフロー］> ［スペクトルピーク同定］**セクションおよび**［クロマトグラムピーク調査ワークフロー］> ［クロマトグラム抽出］> ［クロマトグラム］**タブは、［クロマトグラムピーク調査ワークフロー］のみに含まれます。これらのセクションは、［クロマトグラムピーク調査］アルゴリズムのみに影響します。このアルゴリズムはこのワークフローと**［クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）］**処理および**［クロマトグラムピーク調査（解析レポートを作成する）］**処理のみで使用されています。

## ワークフローのメソッドとレイアウト

各ワークフローで指定されているデフォルトのメソッドとレイアウトは次のとおりです。

| ワークフロー | メソッド | レイアウト | メソッドエディタのセクション |
|---|---|---|---|
| 一般 | default.m | Default.xml | なし |
| クロマトグラムピーク調査 | ChromPeakSurvey-Default.m | Default.xml | クロマトグラムピーク調査ワークフロー |
| 化学式の確認とサンプル純度 | SamplePurity-Default.m | SamplePurity-Default.xml | 化学式の確認とサンプル純度ワークフロー |
| MSターゲット化合物スクリーニング | Screening-Default.m | Screening-Default.xml | MSターゲット化合物スクリーニングワークフロー |
| GC Q-TOF 化合物スクリーニング | GC_Q-TOF.m | QTOFData.xml | GC/Q-TOF 化合物スクリーニング |

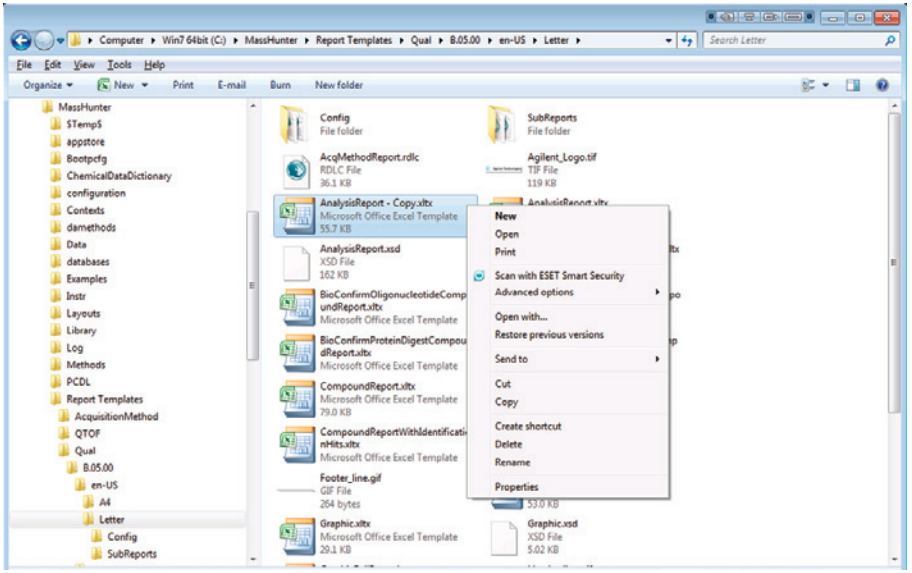
# レポートテンプレートのカスタマイズ

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

1 レポートテンプレートのフォルダに移動します。デフォルトでは、次のフォルダです。
**¥MassHunter¥Report Templates¥Qual¥B.07.00¥en-US¥Letter**.［メソッドエクスプローラ］の［レポート］>［共通レポートオプション］>［テンプレート］タブから異なるフォルダを選択することができます。

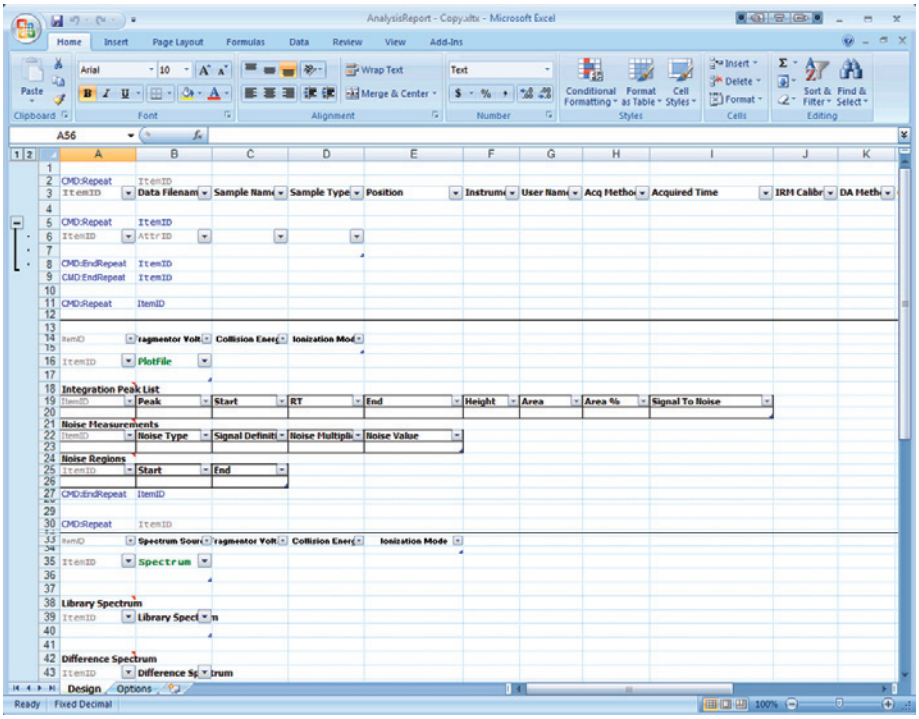
2 変更するテンプレートのコピーを作成します。

3 コピーを右クリックし、**［プロパティ］**をクリックします。必要に応じて、**［読み取り専用］**チェックボックスをオフにします。コピーを右クリックし、ショートカットメニューから **［開く］**をクリックします。




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

定性分析プログラムには多数のテンプレートがインストールされています。




4 必要な変更を加えます。

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

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

6 識別できるよう名前を入力し、**[保存]** をクリックします。



4

# レポートテンプレートのカスタマイズ

www.agilent.com

## 本書の内容

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

© Agilent Technologies, Inc. 2014

リビジョンA、2014年9月

G3336-96024

Agilent Technologies