

Agilent MassHunter ワークステーション ソフトウェア

定性分析

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

G3336-96023

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

実習を始める前に、6 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　化合物の検出と同定

最初の 2 つのタスクでは、複雑なマトリックス中の低濃度サルファ剤を検出および同定し、TOF と Q-TOF の両データに対して化学式を作成します。TOF と Q-TOF の両データを用いた、タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction も行います。トリプル四重極データでも、これらのタスクを実行できます。

実習 3　ワークフローを使用した定性分析メソッドの設定と実行

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。また、解析や化合物同定を自動化するためのメソッド編集も学習します。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。そして、ワークリストを用いて自動化を実行するメソッドの作成も学習します。各タスクは異なるワークフローを使用して行います。

実習 4　定性分析のウィザード

定性分析プログラムには複数のウィザードがあります。これらのウィザードは、特定タスクの実行に必要な一連のステップをガイドします。

［クロマトグラムピークの同定］ウィザード - このウィザードは、［クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）］処理の実行前に変更するメソッドエディタのさまざまなセクションとタブをガイドします。

［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］ウィザード - このウィザードは、［Molecular Feature による検出］アルゴリズムおよび［データベース検索］アルゴリズムの実行前に変更するメソッドエディタのさまざまなセクションとタブをガイドします。

実習 5　全イオン MS/MS モードで測定したデータファイルの解析

データファイルが全イオン MS/MS モードで測定された場合、プログラムは［化学式による化合物の検出］アルゴリズムの実行時にフラグメントイオンを評価することができます。

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　11

すべてのデータの基本タスク　13

タスク 1. 定性分析プログラムを開く　13
タスク 2. クロマトグラムの拡大/縮小　16
タスク 3. クロマトグラムの固定　18
タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更　19
タスク 5. 解析レポートの印刷　21
タスク 6. 注釈の追加　23

MSのみのデータのタスク（TOF、Q-TOF、トリプル四重極）　26

タスク 7. クロマトグラムの抽出（MSのみ）　26
タスク 8. クロマトグラムの積分（MSのみ）　28
タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSのみ）　31
タスク 10. 質量差の追加　38

LC/MS/MSデータのタスク（Q-TOFとトリプル四重極）　40

タスク 11. クロマトグラムの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）　40
タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MSとLC/MS/MS）　42
タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）　47

MSデータとUVデータのタスク　58

タスク 14. クロマトグラムの抽出（MSとUV）　58
タスク 15. クロマトグラムの積分（UV）とシステム適合性の計算（MSとUV）　60
タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（UV）　63

実習 2　化合物の検出と同定　69

MSデータのタスク（LC/MS - TOF、Q-TOF、トリプル四重極）　70

タスク 1. Molecular Featureによる化合物の検出（LC/MS - MSのみ）　70

タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MSのみ） 74
タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MSのみ） 79
タスク 4. 化学式による化合物の検出とサンプル純度の計算（LC/MS - MSのみ） 81
タスク 5. タンパク質消化物のMolecular Feature Extraction（LC/MS - MSのみ） 86

MS/MSデータのタスク（LC/MS - Q-TOF、トリプル四重極） 89
タスク 6. 化合物の検出（LC/MS - MSとMS/MS） 89
タスク 7. 化合物の同定と化学式の推定（LC/MS - MS と MS/MS） 92
タスク 8. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS/MS） 95
タスク 9. 化合物の検出とライブラリの検索（LC/MS - MS/MS） 97
タスク 10. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS と MS/MS） 100

実習 3 ワークフローを使用した定性分析メソッドの設定と実行 103
タスク 1. 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 104
タスク 2. クロマトグラムピーク調査ワークフローによる自動解析メソッドの設定と実行 110
タスク 3. MS ターゲット化合物のスクリーニングワークフローにより化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行 116
タスク 4. ワークリストで実行する定性メソッドの設定 121

実習 4 定性分析のウィザード 125
タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行 126
タスク 2.［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］ウィザードの実行 133

実習 5 全イオン MS/MS モードで測定したデータファイルの解析 137
タスク 1. 構造異性体があるデータファイルに対して化学式による検出を実行 138
タスク 2. 全イオン MS/MS モードで測定したデータを使用した化学式（データベース）による検出を実行 144
タスク 3. 化合物詳細表示で結果を確認する 149

リファレンス 155

ナビゲーション表示と化合物詳細表示 156
ウィンドウの操作 157
データナビゲータにおける結果データの操作 160
クロマトグラムの操作 161
MSまたはMS/MSスペクトルの操作 162
クロマトグラフ表示データの操作 163
スペクトル表示データの操作 165
ワークフロー 166
レポートテンプレートのカスタマイズ 171

目次

実習 1
定性分析の基礎の学習

すべてのデータの基本タスク 13
- タスク 1. 定性分析プログラムを開く 13
- タスク 2. クロマトグラムの拡大/縮小 16
- タスク 3. クロマトグラムの固定 18
- タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更 19
- タスク 5. 解析レポートの印刷 21
- タスク 6. 注釈の追加 23

MSのみのデータのタスク（TOF、Q-TOF、トリプル四重極） 26
- タスク 7. クロマトグラムの抽出（MSのみ） 26
- タスク 8. クロマトグラムの積分（MSのみ） 28
- タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSのみ） 31
- タスク 10. 質量差の追加 38

LC/MS/MSデータのタスク（Q-TOFとトリプル四重極） 40
- タスク 11. クロマトグラムの抽出（LC/MSとLC/MS/MS） 40
- タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MSとLC/MS/MS） 42
- タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS） 47

MSデータとUVデータのタスク 58
- タスク 14. クロマトグラムの抽出（MSとUV） 58
- タスク 15. クロマトグラムの積分（UV）とシステム適合性の計算（MSとUV） 60
- タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（UV） 63

この実習では、TOF、Q-TOF、トリプル四重極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。

すべてのデータの基本タスク

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

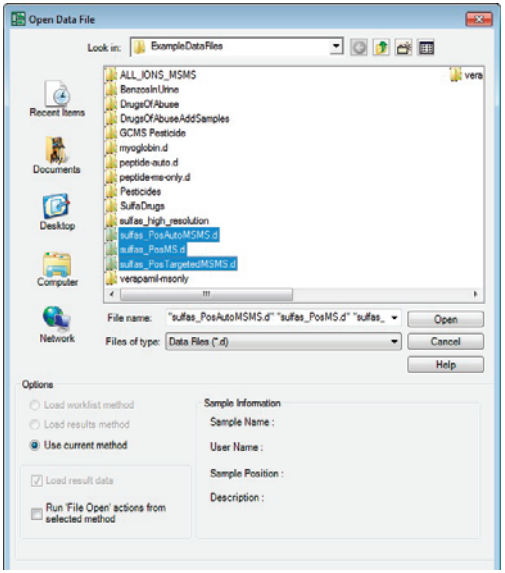
ステップ	詳細説明	コメント
1 定性分析プログラムを開きます。 • データファイル **sulfas_PosAutoMSMS.d**、**sulfas_PosMS.d**、**sulfas_PosTargetedMSMS.d** を、**¥¥MassHunter¥Data** フォルダまたはファイルをコピーしたフォルダから開きます。	a **Agilent MassHunterの［Qualitative Analysis B.06.00］**アイコン をダブルクリックします。［データファイルを開く］ダイアログボックスが表示されます。 b フォルダ **¥¥MassHunter¥Data** またはデモファイルを置いたフォルダに移動します。	• sulfas_PosMS.d ファイルには MS（TOF または Q-TOF）データが、sulfas_PosAutoMSMS.d と sulfas_PosTargetedMSMS.d ファイルには MS と MS/MS（Q-TOF）の両方のデータが含まれます。 • ウィンドウがアクティブの時に F1 キーを押すと、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。
• **［現在のメソッドを使用］**ボタンが選択されていることを確認します。 • **［結果データの読み込み］**チェックボックスがオフになっていることを確認します。 • **［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〉キーを押したまま、**sulfas_PosAutoMSMS.d**、**sulfas_PosMS.d**、**sulfas-PosTargetedMSMS.d** をクリックします。 d **［開く］**をクリックします。3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。 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。 • この時点でメインウィンドウに表示される内容は、これらのファイルを開く前に使用されたメソッド、レイアウト、表示、プロット設定によって異なります。 • ［リストモード］アイコンをクリックすると、アイコンの背景色がオレンジ色に変わります。

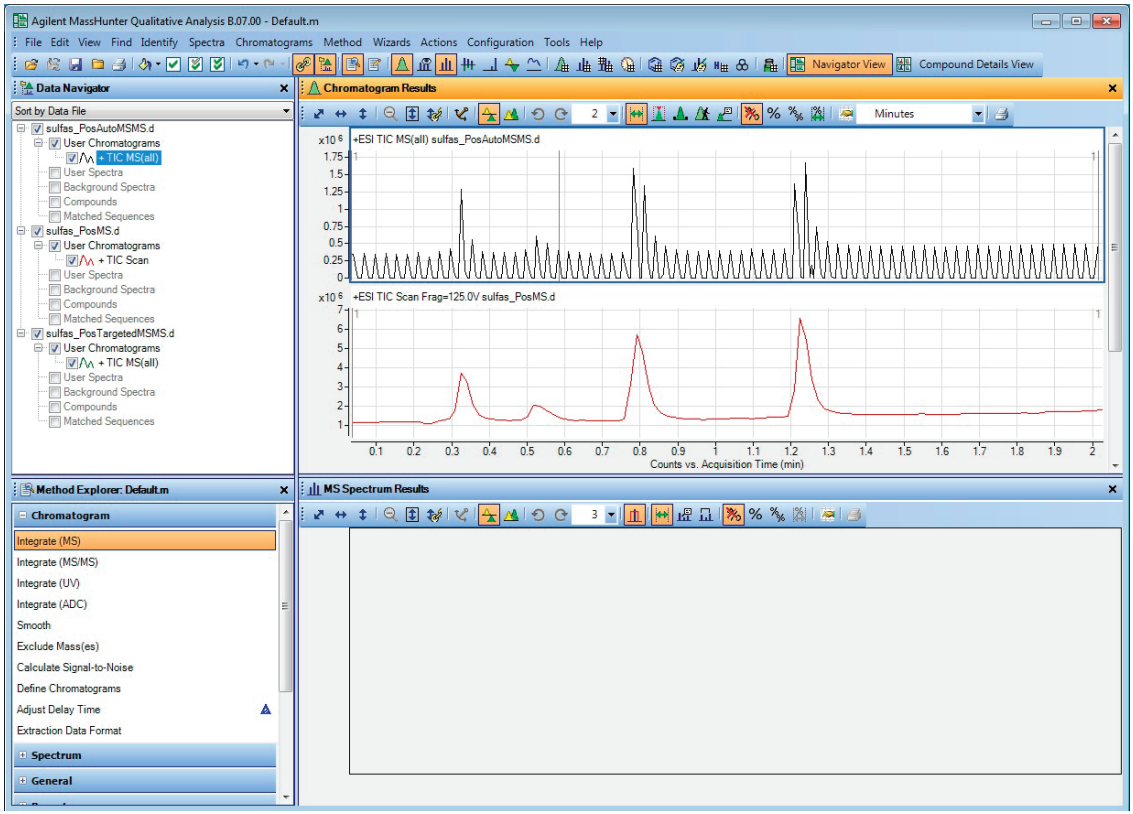


図 2 定性分析メインウィンドウ

タスク 1. 複数のデータファイルを用いて定性分析プログラムを開く（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
2 メインウィンドウをデフォルトワークフローの［一般］に戻します。デフォルトのメソッドとレイアウトが読み込まれます。 • 3つのクロマトグラムすべてが見えることを確認します。	**a** 必要に応じて**［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］**をクリックします。 **b** ［ワークフロー コンフィグレーション］ダイアログボックスで**［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。**［現在のメソッドを保存する］**チェックボックスをオフにします。**［OK］**ボタンをクリックします。 **c** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［リストペインの最大数］アイコン隣の下矢印をクリックし、**3**を選択します。	• ［一般］ワークフローに切り替えた後でも、表示とプロット設定は同じままです。表示とプロットの設定は、各データタイプの［表示オプション］ダイアログボックスから指定します。表示オプションを変更するには、グラフィックウィンドウの  ボタンをクリックします。 • **［コンフィグレーション］**>**［ウィンドウレイアウト］**>**［レイアウトの読み込み］**をクリックして、レイアウトを変更することができます。

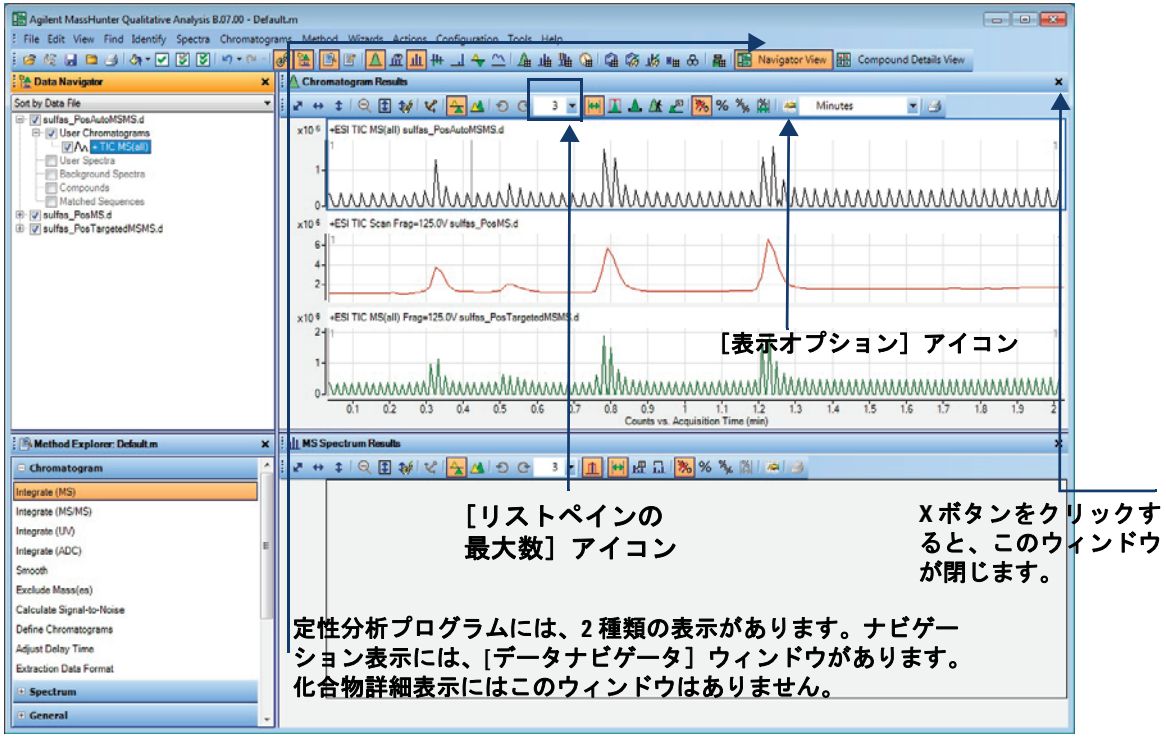


図 3　定性分析メインウィンドウのデータナビゲータ表示で一般ワークフローを選択したところ

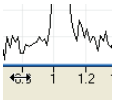
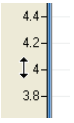
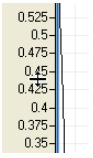
タスク 2. クロマトグラムの拡大/縮小

このタスクでは、定性分析プログラムの拡大/縮小機能について学習します。

タスク 2. クロマトグラムの拡大/縮小

ステップ	詳細説明	コメント
1 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）。 • その他を非表示にします。 • 最後のピークを2回拡大します。 • Y軸をオートスケールでもう1回拡大します。 • 1回縮小して、前の倍率に戻します。 • 元のクロマトグラムに完全に戻します。	**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。 **b** 最後のピークの領域を右クリックし、ドラッグします。 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。 **c** ステップbを繰り返します。 **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。 **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。 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。 **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。 **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。 • ［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結果］ウィンドウ、［UV 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。 • 選択したアイコンの背景色はオレンジ色です。

タスク 2. クロマトグラムの拡大/縮小（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
2 別々に拡大/縮小を実習します。 • X軸に沿ってのみ拡大します。 ヒント：X軸の値を右クリックし、カーソルを左から右に移動させます。 • X軸を部分的に縮小します。 ヒント：反対方向にカーソルを移動させます。 • X軸のズームを完全に解除します。 • Y軸に対して同じステップを繰り返します。	**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。 **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。 **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。 **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。	 **水平二重矢印**  **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。**
	a Y軸を拡大するには、垂直の二重矢印が表示されるまでY軸値にカーソルを移動させます。 **b** Y 軸の値を右クリックし、新しいカーソルをY軸全域で下から上にドラッグします。 **c** Y軸を縮小するには、Y軸値を右クリックし、上から下に向かってドラッグします。 **d** **[Y軸のオートスケール]** アイコンをクリックし、Y軸のズームを完全に解除します。	 **垂直二重矢印**  **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 3. クロマトグラムの固定

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

タスク 3. クロマトグラムの固定

ステップ	詳細説明	コメント
• クロマトグラムを固定します。 ◦ 3つのクロマトグラムすべてを表示します。 ◦ クロマトグラム表示リストを1に設定していることを確認します。 ◦ ［クロマトグラム結果］ウィンドウで、2番目のTICを選択します。 ◦ このTICを固定します。 ◦ クロマトグラム全域をスクロールします。 ◦ 固定を解除します。	**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。 **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。 **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。 **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。 **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は常に表示されます。 **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。 • 表示リストが1の場合でもクロマトグラムを1つ固定した後は［クロマトグラム結果］ウィンドウに2つのクロマトグラムが表示されます。これは、固定したクロマトグラムに加えて、1つのクロマトグラムを表示することを意味しています。 • クロマトグラムを右クリックし、ショートカットメニューの**［固定を解除］**をクリックすることもできます。

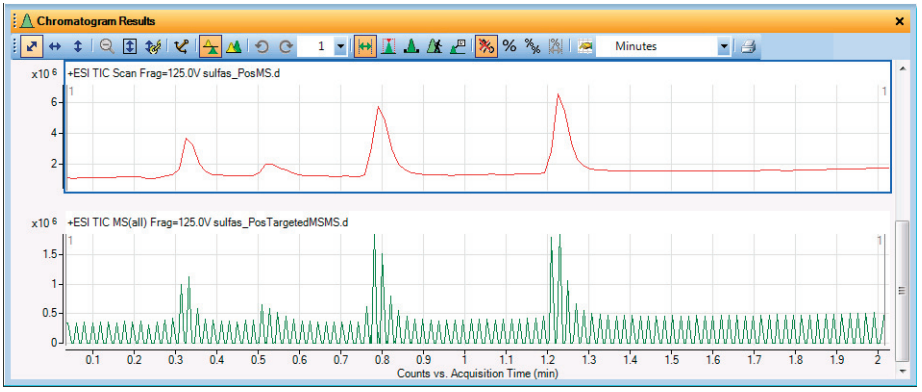


図 4 ［クロマトグラム結果］ウィンドウでの固定したTIC

タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更

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

タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更

ステップ	詳細説明	コメント
1 以下の、ウィンドウレイアウトを変更します。 • ウィンドウサイズの変更。 • ウィンドウレイアウトの保存。 • レイアウトのロック解除。 • ［クロマトグラム結果］ウィンドウをフローティングに変更。 • ［クロマトグラム結果］ウィンドウの移動。 • ウィンドウ位置変更用ツールの表示。	• 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。 • 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。 • 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。 • 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。 • 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。 • 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 5 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。 • 位置変更ツールは、レイアウトのロックが解除されている場合に限り使用できます。 • ウィンドウのタイトルバーをダブルクリックすることでも、ウィンドウをフローティングに設定できます。 • ソフトウェアには、事前に作成されたさまざまなレイアウトが用意されています。それとは異なるレイアウトを読み込むこともできます。 • ソフトウェアには複数の異なるワークフローがあります。各ワークフローは異なるレイアウトを読み込みます。異なるワークフローに切り替えると、レイアウトも変更されます。 • BioConfirm プログラムがインストールされている場合、さらにいくつかの追加ワークフローとレイアウトを使用できます。

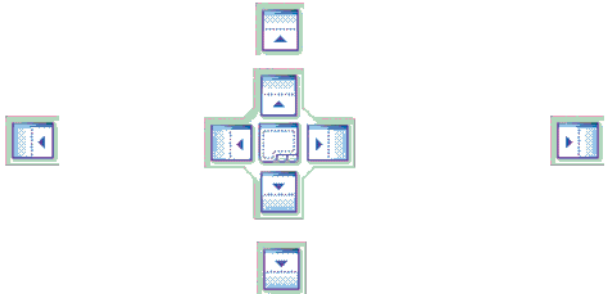


図 5　ウィンドウ位置変更ツール

タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
2 ［クロマトグラム結果］ウィンドウの位置を変えます。 • ウィンドウを他のウィンドウの上、左、右、下になるように移動させます。 • 2つのウィンドウが上下に重なるように移動させ、下のウィンドウのタブによってのみ使用できるようにします。 • デフォルトレイアウトを復元します。	• 小さなアイコンのいずれかの上にカーソルをドラッグすると、ドラッグしているウィンドウは他のすべてのウィンドウの上、右、下、または左に置かれます。 • 大きなアイコンの上にカーソルをドラッグします。大きなアイコンの端の上にカーソルをドラッグすることでも、他のウィンドウの上、右、下、左にウィンドウを置くことができます。 • 2つのウィンドウを一緒にタブ付けするには、大きなアイコンの中心にカーソルをドラッグします。一緒にタブ付けされた2つのウィンドウには影が付けられます。マウスのドラッグを止めます。2つのウィンドウが一緒にタブ付けされます。 • **［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。 • **［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、一般ワークフローで使用されるレイアウトが復元します。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。

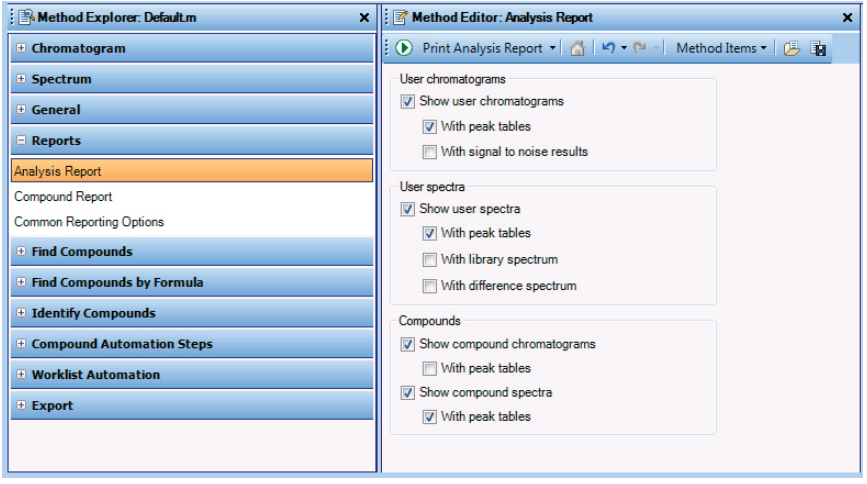
タスク 5. 解析レポートの印刷

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 5. 解析レポートの印刷

ステップ	詳細説明	コメント
1 解析レポートの選択を変更します。 • 印刷するクロマトグラム、スペクトル、またはテーブルのチェックボックスをオンにします。 • 印刷しないクロマトグラム、スペクトル、またはテーブルのチェックボックスの選択を解除します。	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。 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。 c 印刷しないクロマトグラムとスペクトルの選択を解除します。	• 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。 • 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。



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または浮動にすることもできます。

図 6　[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

タスク 5. 解析レポートの印刷（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
2 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］** をクリックします。 c **［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。 d **［印刷プレビュー］** チェックボックスをオンにします。 e **［OK］** ボタンをクリックします。 f レポートを確認します。 g 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。	• ［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。

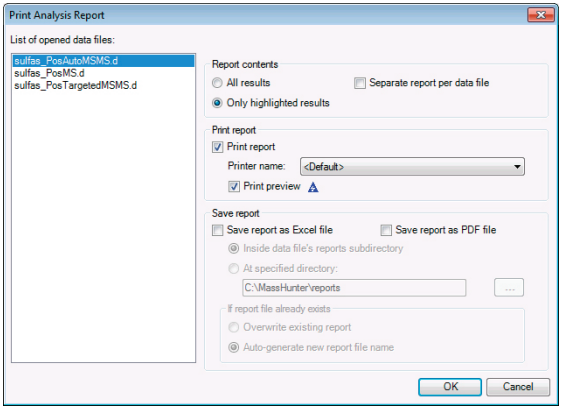


図 7 ［解析レポートの印刷］ダイアログボックス

タスク 6. 注釈の追加

ナビゲーション表示では、以下のグラフィックウィンドウにイメージ注釈またはテキスト注釈を追加することができます。

- クロマトグラム結果ウィンドウ
- MS スペクトル結果ウィンドウ
- 結果の差ウィンドウ
- デコンボリューション結果ウィンドウ
- UV スペクトル結果ウィンドウ

化合物詳細表示のみ

- 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

タスク 6. 注釈の追加

ステップ	詳細説明	コメント
1 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。 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。 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。

タスク 6. 注釈の追加（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
2 ［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。 b ［テキストの色］を選択します。 c ［向き］を選択します。 d ［フォントスタイル］と［フォントサイズ］を選択します。 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。 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。 • ［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。

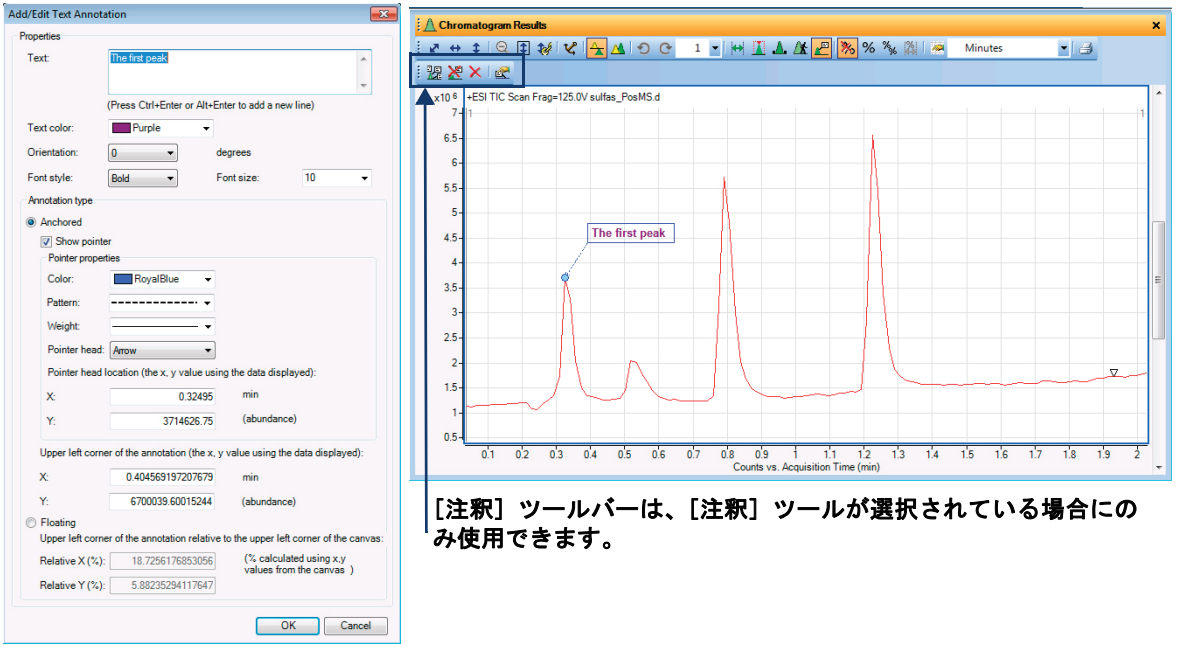


図 8 ［テキスト注釈の追加/編集］ダイアログと［クロマトグラム結果］ウィンドウ

タスク 6. 注釈の追加（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
3 ［クロマトグラム結果］ウィンドウで［範囲選択］ツールに切り替えます。最初に注釈を削除します。	**a**  アイコンをクリックし、すべての注釈を削除します。 **b** ［クロマトグラム結果］ツールバーの （範囲選択）アイコンをクリックします。	• ［クロマトグラム結果］ツールバーでは 5 つのツールを切り替えることができます。詳細は、オンラインヘルプを参照してください。5 つのツールは以下の通りです。 ◦ 範囲選択 ◦ ピーク選択 ◦ マニュアル積分 ◦ クロマトグラムを進める ◦ 注釈

MSのみのデータのタスク（TOF、Q-TOF、トリプル四重極）

TOFのMSデータと、Q-TOFまたはトリプル四重極のMSのみのデータを用いて、これらのタスクを実行します。

タスク 7. クロマトグラムの抽出（MSのみ）

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。EIC（抽出イオンクロマトグラム）を抽出し、複数の *m/z* 値を 1 つのクロマトグラムにマージします。

タスク 7. クロマトグラムの抽出（MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosMS.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。 • *m/z* 値は 279.09102 と 311.08085 を使用してください。 • 個別の質量からのピークを 1 つのクロマトグラムにマージ（統合）します。	**a** ［データナビゲータ］ウィンドウで、**sulfas_PosMS.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。 **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。 • **［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。 **c** **開いているデータファイルのリスト**で、**sulfas_PosMS.d** をクリックします。 **d** **［タイプ］**リストボックスで、**［EIC］**を選択します。 **e** **［*m/z* 値］**ボックスで、279.09102, 311.08085 を入力します。 **f** **［複数の質量を 1 つのクロマトグラムにマージ］**チェックボックスをオンにして、EIC をマージします（複数の EIC を統合してひとつのクロマトグラムとして表示します）。 **g** **［OK］**をクリックします。 **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］**が3に設定されていることを確認します。	• 以下の方法でもクロマトグラムを抽出できます。 ◦ クロマトグラム内を右クリックし、**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。 ◦ ［データナビゲータ］から、**sulfas_PosMS.d** の**［TICスキャン］**をハイライトした後、**［TICスキャン］**を右クリックし**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。 • MS レベルとしては**［すべて］**または**［MS］**が使用できます。 • 抽出後、抽出したクロマトグラムを自動的に積分するように選択することもできます。 • マススペクトルからクロマトグラムを抽出することもできます。

タスク 7. クロマトグラムの抽出（MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント

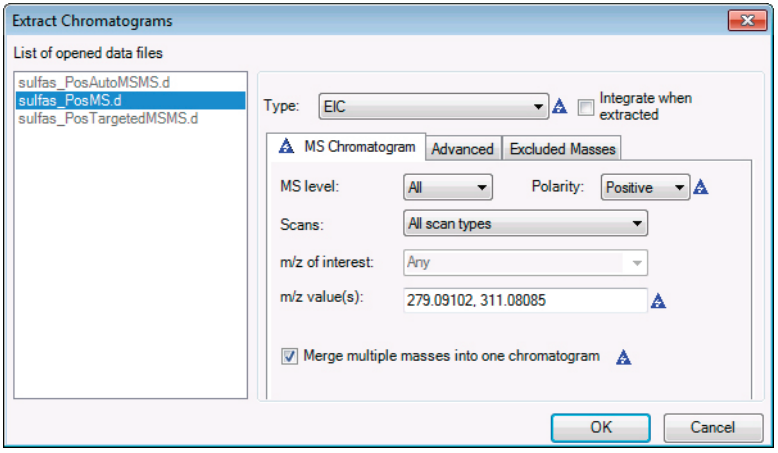


図 9　［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックス

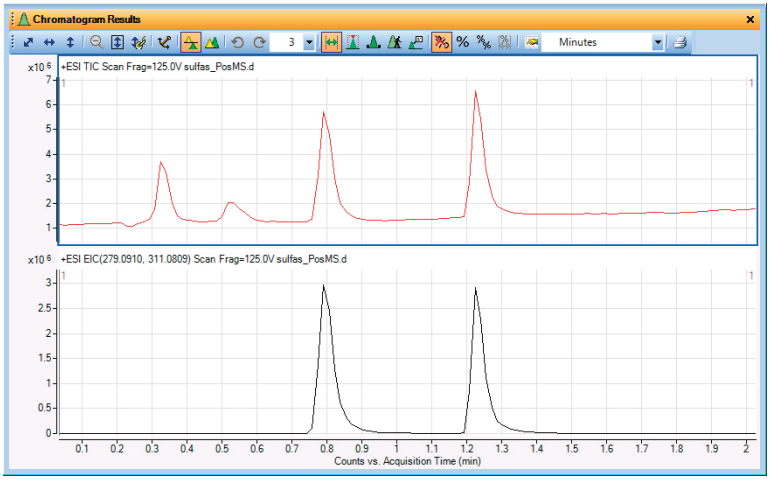


図 10　元のTICとマージされた抽出イオンクロマトグラム（EIC）の比較

タスク 8. クロマトグラムの積分（MSのみ）

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。

タスク 8. クロマトグラムの積分（MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosMS.d** TIC クロマトグラムを積分します。	• 以下のいずれかの方法で、**sulfas_PosMS.d** クロマトグラムを積分します。 ◦ メインメニューから **[クロマトグラム]** > **[クロマトグラムの積分]** をクリックします。 ◦ クロマトグラムをハイライトします。次に、クロマトグラムを右クリックし **[クロマトグラムの積分]** をクリックします。 ◦ [データナビゲータ] で、**sulfas_PosMS.d** > [ユーザークロマトグラム] セクションの **[TIC スキャン]** をハイライトします。次に、[TIC スキャン] 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。	• 積分では、default.m メソッドで選択されている **[Agile 2]** インテグレータが使用されます。[メソッドエディタ] ウィンドウの [クロマトグラム] > [積分（MS）] > [積分] タブで、この値を変更することができます。 • インテグレータの違いにより、検出されるピークが異なります。**[Agile 2]** インテグレータは 4 つの最大ピークのみを特定します。 • 積分するには、[メソッドエディタ] ウィンドウの **[クロマトグラムの積分]** ボタンをクリックします。

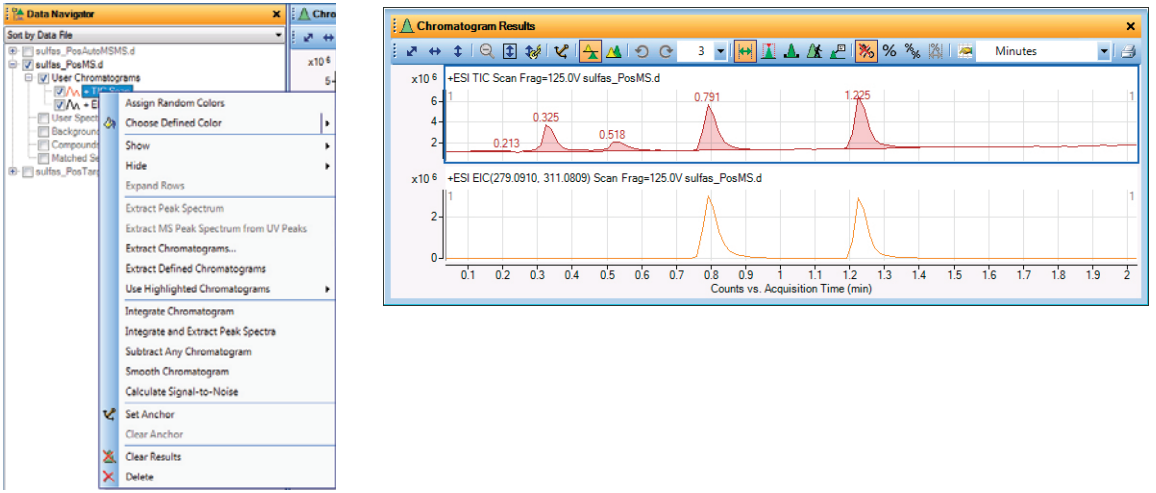


図 11 ［データナビゲータ］のショートカットメニューと、積分された sulfas_PosMS.d のTIC

タスク 8. クロマトグラムの積分（MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
2 タスク 1で抽出した抽出イオンクロマトグラム（EIC）を積分します。	• ［EIC］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。	• 抽出の設定時に［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックスで **［抽出時に積分］**チェックボックスをオンにすることができます。
3 積分したTICのフィルタパラメータを変更します。 • MS データの［メソッドエクスプローラ］から積分メソッドエディタウィンドウを表示します。 • スレッショルドを変更し、2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］から **［クロマトグラム］** > **［積分 (MS)］**をクリックし、［積分］タブを表示します。 **b** **［ピークフィルタ］**タブをクリックします。 **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、2 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。

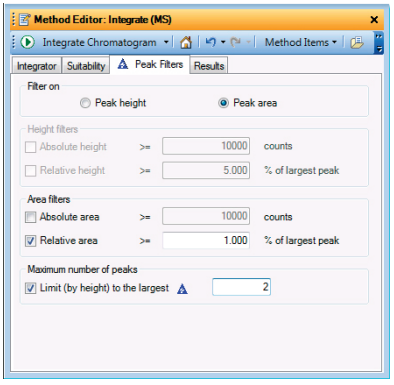


図 12　**［ピーク数を高さベースで制限する］**がオンの状態の［ピークフィルタ］タブ

4 クロマトグラムを再積分します。	**a** ［データナビゲータ］ウィンドウで**［TIC スキャン］**をクリックします。 **b** **［クロマトグラムの積分］**アイコンをクリックします。	• これで、2 つの最大ピークのみが積分されます。

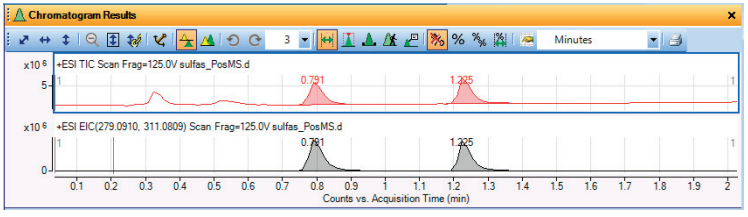
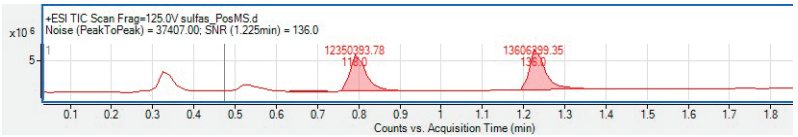


図 13　ピーク数が限定された積分結果

タスク 8. クロマトグラムの積分（MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
5 シグナル/ノイズ比を計算します。 • **sulfas_PosMS.d** TICを選択します。 • 最初の［ピークラベル］を**［面積］**に、クロマトグラフピークに対する2番目の［ピークラベル］を**［シグナル/ノイズ］**に設定します。 • ［メソッドエディタ］を開きます。 • ノイズ範囲に0.63～0.73を用いて、積分したピークのシグナル/ノイズ比を計算します。	**a** **［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］**をクリックします。 **b** **［クロマトグラム］**タブをクリックします。 **c** 最初の**［ピークラベル］**を**［面積］**に、2番目の**［ピークラベル］**を**［シグナル/ノイズ］**に設定します。 **d** **［OK］**をクリックします。 **e** ［メソッドエクスプローラ］で**［クロマトグラム］**>**［S/N比の計算］**をクリックします。 **f** **［ノイズ範囲を指定］**ボタンをクリックします。 **g** ノイズ範囲として**0.63** - **0.73**を入力し、**［S/N比の計算］**アイコン をクリックします。	• ［クロマトグラム結果］ウィンドウで アイコンをクリックして、**［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表示することもできます。 • ほとんどのウィンドウやダイアログボックスでは、**F1**キーを押してヘルプを表示することができます。 • シグナル / ノイズ比を計算する前に、TICがハイライトされていることを確認します。 • クロマトグラム上のノイズ範囲に指定した部分が、［クロマトグラム結果］ウィンドウに太字で描かれます。
		
	図 14 ［面積］と［シグナル/ノイズ］のラベルが付いた積分済みTIC	
6 デフォルトメソッドの設定を復元し、［メソッドエディタ］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］**ボタン をクリックします。 **b** **［メソッドエディタ］**ウィンドウを閉じます。	• シグナル/ノイズ計算の各アルゴリズムの詳細はオンラインヘルプを参照してください。
7 ピークラベルを［リテンションタイム］に戻します。	**a** **［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］**をクリックします。 **b** **［クロマトグラム］**タブをクリックします。 **c** 最初の［ピークラベル］を**［リテンションタイム］**に、2番目の［ピークラベル］を**［化合物ラベル］**に設定します。 **d** **［OK］**をクリックします。	• **［デフォルト］**ボタンをクリックすると、このダイアログボックスのデフォルト値に復元されます。復元された値は、最初にダイアログボックスを開いたときに選択されていた値と異なる場合があります。

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSのみ）

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。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。このタスクでは、スペクトル表示オプションの変更方法とバックグラウンドスペクトルの減算方法も示します。

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosMS.d**データファイルの 0.79 分のピークと最後のピークの特定のデータポイントのスペクトルを抽出します。 • 0.7 ～ 1.0 分の範囲を拡大した後、コメントで説明している方法のいずれかを用いて、0.79分近辺のピークからスペクトルを抽出します。 • ［スペクトルプレビュー］を開きます。 • 1.1 ～ 1.4 分の範囲を拡大した後、1.22 分近辺ピーク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］セクションにコピーします。 • 表示を変更し、2つ以上のスペクトルを表示します。	**a** 0.79 分のピークを拡大するには、0.70 分のピークの上で右クリックし、1.0 分にドラッグした後、離します。 **b** 0.79 分近辺のピークで、コメント列に記載したいずれかの方法でスペクトルを抽出します。 **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。 **d** ［MS スペクトル結果］ツールバーの**［範囲選択］**アイコン をクリックします。 **e** ［スペクトルプレビュー］を開くには、**［スペクトルプレビュー］**ボタン をクリックします。 **f** 1.1～1.4分の範囲を拡大します。 **g** 1.22 分近辺のピークで、コメント列に記載したいずれかの方法でスペクトルを抽出します。スペクトルは［スペクトルプレビュー］ウィンドウに表示されます。 **h** ［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。 ［スペクトルプレビュー］ウィンドウは開いたままです。 **i** 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］**アイコン隣の矢印をクリックし、**２**を選択します。 **j** **［メソッドエディタ］**ウィンドウを閉じます。	• 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。 • 以下のいずれかの方法でスペクトルを抽出できます。 ◦ クロマトグラムのデータポイントをダブルクリックします。 ◦ クロマトグラムのデータポイントをクリックします。次に、クロマトグラム内の任意の場所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。**［クロマトグラム分析の抽出］**ダイアログボックスが表示されます。**sulfas_PosMS.d**ファイルが選択されていることを確認し**［抽出］**をクリックします。 • スペクトルを初めて抽出した時に、［MSスペクトル結果］ウィンドウが表示され、スペクトルが表示されます。［データナビゲータ］ウィンドウの**［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。 • ［スペクトルプレビュー］ウィンドウが開いている場合、［スペクトルプレビュー］ウィンドウにはマニュアルで選択したスペクトルが表示されますが、そのスペクトルは［ユーザースペクトル］セクションには保管されません。 • ［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。

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント

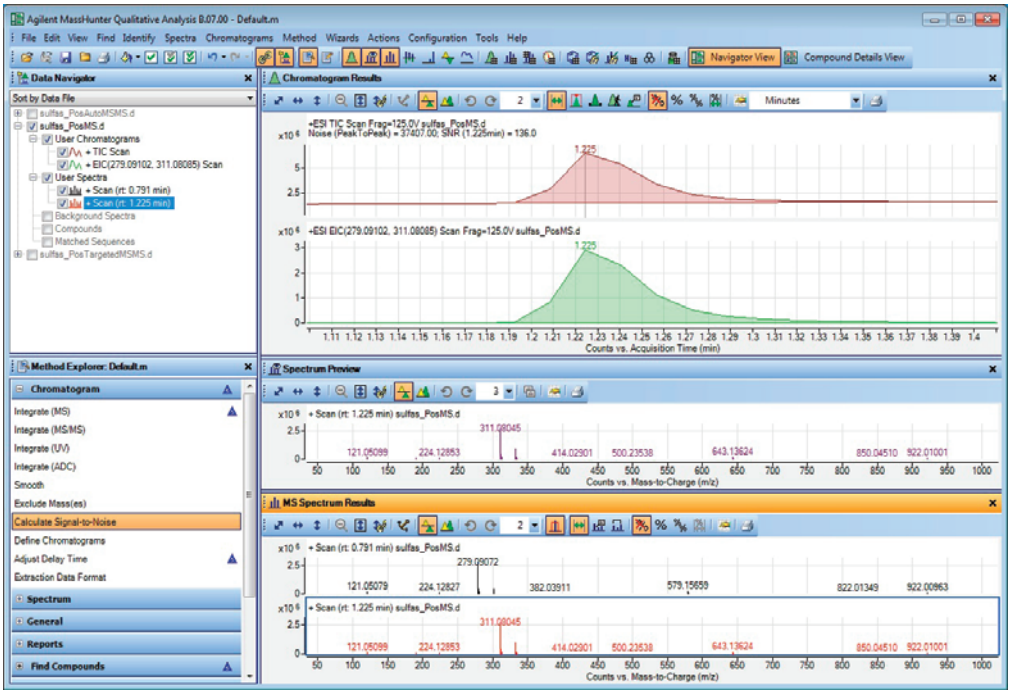


図 15 sulfas_PosMS.dファイルの二つの積分されたピークから抽出したスペクトルを表示するメインウィンドウ

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
2 **sulfas_PosMS.d** データファイルで、最後の積分ピークの指定範囲内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。 • 既存の［ユーザースペクトル］すべてを削除します。 • クロマトグラムのズームを解除します。 • ［スペクトルプレビュー］をオフにします。 • ［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。 • 範囲設定でピークを選択します。 • 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** 削除するユーザースペクトルをハイライトします（複数のスペクトルをハイライトするには**〈Ctrl〉**キーを使用します）。 **b** 選択した［ユーザースペクトル］を右クリックし**［削除］**をクリックします。 **c** ［削除］ダイアログボックスが表示される場合**［はい］**をクリックします。 **d** ［クロマトグラム結果］ウィンドウの をクリックして、ズームを完全に解除します。 **e** **［スペクトルプレビュー］**ウィンドウを閉じます。 **f** ［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。 **g** 最後の積分ピークの左側をクリックし、ピークの右側までドラッグします。 **h** 下記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。 • ピークの範囲内を右クリックし、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。 • ［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。	• ［データナビゲータ］ウィンドウのユーザースペクトル行を右クリックして**［削除］**からでも、すべてのユーザースペクトルを削除できます。 • クロマトグラムの選択した範囲をダブルクリックしても、平均スペクトルを抽出できます。 • ［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、クロマトグラムを削除するときに、確認を求められるかどうかを変更できます。このダイアログボックスは**［コンフィグレーション］**>**［メッセージボックスオプション］**コマンドをクリックすると表示されます。 • 複数のデータファイルが読み込まれている場合に限り、［スペクトルの抽出］ダイアログボックスが表示されます。

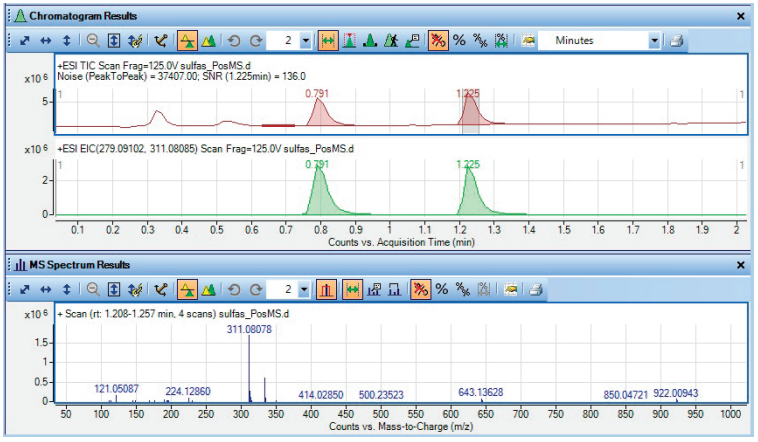


図 16　最後のピークの選択範囲から抽出した平均スペクトル

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
3 **sulfas_PosMS.d** データファイルに対して積分したピーク 1 とピーク 2 の範囲を一緒に平均したスペクトルを抽出します。 • ヒント：**［範囲選択］**アイコンと**〈Ctrl〉**キーを用いて、まず 1 つ目のピーク範囲を選択します。 • 右記のいずれかの方法で、スペクトルを抽出します。	**a** **［クロマトグラム結果］**ウィンドウのタイトルバーをクリックします。［クロマトグラム結果］ウィンドウがアクティブウィンドウになりますが、選択したエリアは失われません。 **b** **〈Ctrl〉**キーを押したままにします。 **c** 最初の積分ピークの左側をクリックし、ピークの右側までドラッグします。 **d** マウスを離します。 **e** **〈Ctrl〉**キーを離します。 **f** 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。 • 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 2 で既に範囲が選択されています。 • 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。

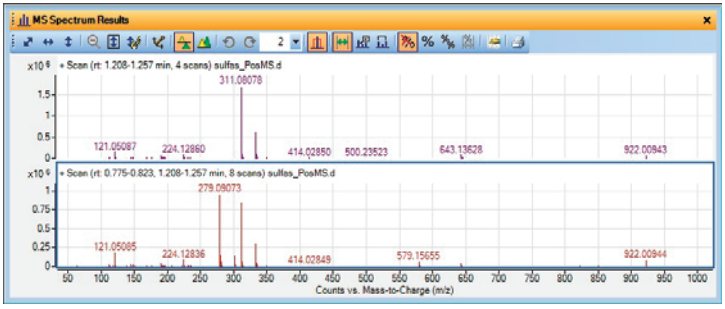
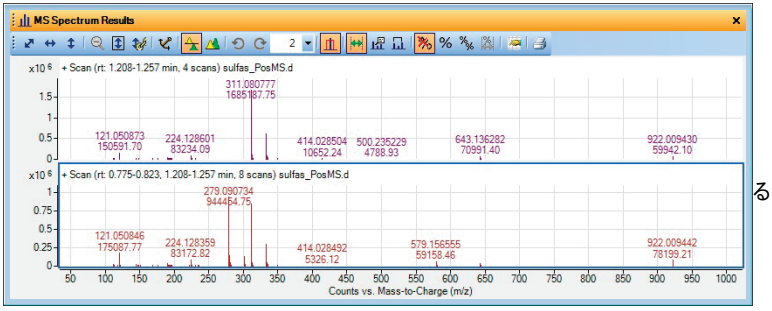


図 17 複数の範囲から作成された、平均スペクトル

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
4 **sulfas_PosMS.d** のスペクトル表示オプションを変更します。 • 小数点以下の桁数を現在の設定より1桁大きく変更します。 • 元の桁数に戻します。	**a** **［コンフィグレーション］** > **［MS および MS/MS スペクトルの表示オプション］** をクリックします。 **b** **［MSおよびMS/MSスペクトル］** タブをクリックします。 **c** *m/z* 値の **［小数点以下の桁数］** を現在の設定より1桁大きく変更します。 **d** **［スペクトルピークラベルオプション］** タブをクリックします。 **e** **［アバンダンス］** を2番目の **［MS ピークラベル］** として選択します。 **f** **［OK］** をクリックします。  **g** a と b のステップを繰り返した後、**［小数点以下の桁数］** を現在の設定より1桁小さく設定します。 **h** **［スペクトルピークラベルオプション］** タブをクリックします。 **i** **［式＆イオン種］** を2番目の **［MS ピークラベル］** として選択します。 **j** **［OK］** をクリックします。	• ［MS スペクトル結果］ウィンドウで［表示オプション］アイコン をクリックすることもできます。 • ラベルには1桁多い *m/z* が表示されることを確認してください。

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
5 MSピークスペクトルが抽出されるたびに、バックグラウンドスペクトルを減算します。 • ［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。 • 0.0 ～ 0.25 分の範囲のバックグラウンドスペクトルを抽出し、［データナビゲータ］のバックグラウンドスペクトルフォルダに表示させます。 • 減算には現在のバックグラウンドMSスペクトルを使用します。 • クロマトグラムを積分し、積分したピークを4つに制限します。 • 3番目の積分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］**にある、削除する［ユーザースペクトル］をハイライトします（**〈Ctrl〉**キーを押す）。 **b** スペクトルを右クリックし**［削除］**をクリックします。**［はい］**をクリックします。 **c** カーソルを 0.0 分から 0.25 分までドラッグします。 **d** 範囲内を右クリックし、**［MSスペクトルをバックグラウンドに抽出］**をクリックします。 **e** ダイアログボックスが表示されたら、Sulfas_PosMS.d データファイルを選択して**［抽出］**をクリックします。 **f** ［メソッドエクスプローラ］で**［スペクトル］**>**［抽出(MS)］**をクリックします。 **g** **［ピークスペクトル抽出 (MS)］**タブをクリックします。 **h** **［ピークスペクトルバックグラウンド］**で、MS スペクトルの**［現在のバックグラウンドスペクトル］**を選択します。 **i** ［メソッドエクスプローラ］で**［クロマトグラム］**>**［積分 (MS)］**をクリックします。 **j** **［ピークフィルタ］**タブをクリックします。 **k** **［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。 **l** 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］**>**［クロマトグラム全体］**をクリックします。 **m** ［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。 **n** 3 番目の積分ピークを選択し、次のいずれかの方法でピークスペクトルを抽出します。 • ピークをダブルクリックします。 • ピークを右クリックし**［ピークスペクトルの抽出］**をクリックします。 • **［クロマトグラム］**>**［ピークスペクトルの抽出］**をクリックします。 • ［データナビゲータ］ウィンドウでクロマトグラムを右クリックし、**［ピークスペクトルの抽出］**をクリックします。	• 手動でスペクトルを抽出する場合に減算するスペクトルを設定するには、［マニュアル抽出］タブで**［手動スペクトルバックグラウンド］**を選択します。このタブは、抽出されるピークスペクトルには影響しません。 • 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。 • バックグラウンドスペクトルをバックグラウンドスペクトルフォルダに移動させる別の方法は、以下のステップのとおりです。 • 選択した範囲をダブルクリックし、平均化したスペクトルを抽出します。 • スペクトルウィンドウ内を右クリックし**［バックグラウンドスペクトルに移動］**をクリックします。

タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント

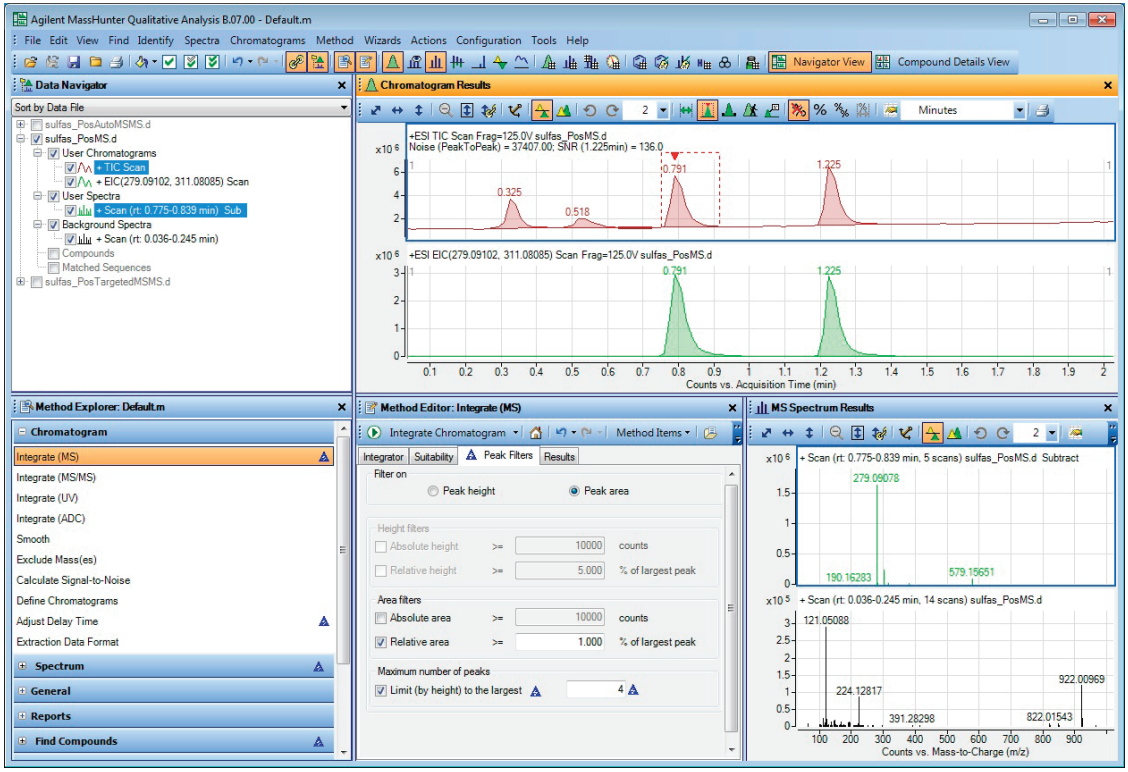


図 18　バックグラウンドが減算されたスペクトル

タスク 10. 質量差の追加

質量差は、スペクトルの 2 点間の差異を示します。以下のグラフィックウィンドウに質量差を追加できます。

- ［MS スペクトル結果］ウィンドウ
- デコンボリューション結果ウィンドウ

化合物詳細表示では、2 つのウィンドウに質量差を追加することもできます。この表示の詳細については、149 ページの「タスク 3. 化合物詳細表示で結果を確認する」を参照してください。

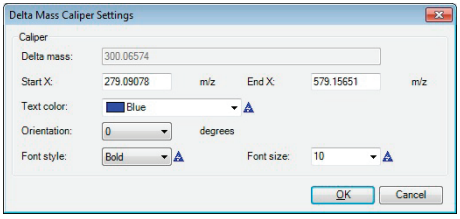
修飾の質量差および**アミノ酸**の質量差は［デコンボリューション結果］ウィンドウに表示されるデコンボリュートスペクトルに追加することもできます。修飾またはアミノ酸が原因で質量が変更されている場合、質量差のラベルは修飾またはアミノ酸になります。その他の場合は、単純な質量差をレポートします。

タスク 10. 質量差の追加

ステップ	詳細説明	コメント
1 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。 b ［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。 c 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。 d 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。	• MS スペクトルの抽出については、31 ページの「タスク 9. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MS のみ）」を参照してください。 • 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。

タスク 10. 質量差の追加（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
2 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。 **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。**［質量差の設定］**ダイアログボックスが表示されます。 **c**（オプション）**［開始 X］**値と**［開始 Y］**値を入力します。 **d** **［テキストの色］**を選択します。 **e** **［フォントスタイル］**と**［フォントサイズ］**を選択します。 **f** **［OK］**をクリックします。 **g**（オプション）質量差を削除します。［MS スペクトル結果］の［質量差］ツールバーの  ボタンをクリックします。 **h** 範囲選択ツールに切り替えます。［MS スペクトル結果］ツールバーの  ツールをクリックします。	• 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。 • ［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。



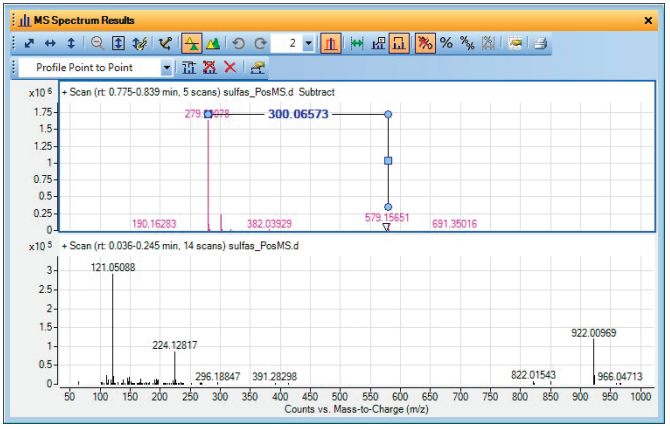


図 19　［質量差の設定］ダイアログボックスと［MS スペクトル結果］ウィンドウ

LC/MS/MSデータのタスク（Q-TOFとトリプル四重極）

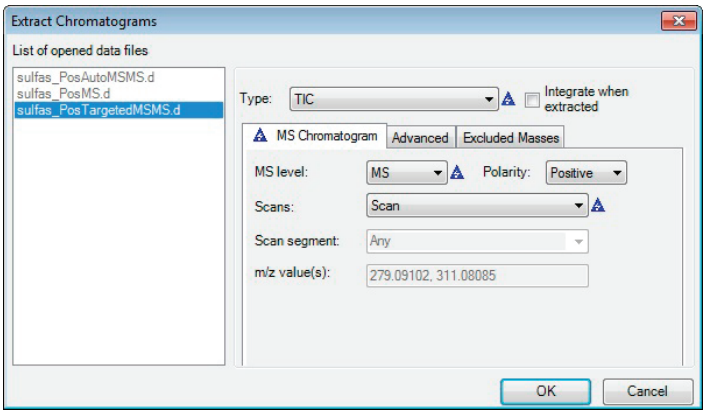
タスク 11. クロマトグラムの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）

このタスクでは、ピークを積分するために、MSデータのクロマトグラム1つとMS/MSデータのクロマトグラム1つを抽出します。オリジナルのクロマトグラムのTICにはMSとMS/MSの両データが含まれるため、積分できません。

タスク 11. クロマトグラムの抽出（MSとMS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosTargetedMSMS.d**データファイルのMSデータのTICを抽出します。	a ［データナビゲータ］ウィンドウで、**sulfas_PosTargetedMSMS.d** のチェックボックスをオンにし、その他のデータファイルのチェックボックスをオフにします。 b 下記または右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。 • **［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。 c **［開いているデータファイルのリスト］**から、必要に応じて**sulfas_PosTargetedMSMS.d** をクリックします。 d **［タイプ］**が**［TIC］**になっていることを確認します。 e ［MS レベル］リストから、**［MS］**をクリックします。 f **［OK］**をクリックします。	• 以下の方法でもクロマトグラムを抽出できます。 ◦ クロマトグラムを右クリックし、**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。 ◦ ［データナビゲータ］から、**［ユーザークロマトグラム］>［TIC MS (すべて)］**をクリックした後、**［TIC MS (すべて)］**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。 • マススペクトルを起点としてクロマトグラムを抽出することもできます。

タスク 11. クロマトグラムの抽出（MSとMS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
		
2 MS/MS データのプロダクトイオンに基づく別のクロマトグラムを抽出します。 • 今回は抽出したクロマトグラムの積分を選択します。 • プロダクトイオン EIC の 279.091 -> 186.03299 を抽出します。	**a** ステップ 1 のステップ b と c を繰り返します。 **b** ［タイプ］に**EIC**をクリックします。 **c** **［MSレベル］**リストから **［MS/MS］**をクリックします。 **d** **［スキャン］**リストから **［プロダクトイオン］**をクリックします。 **e** **［プリカーサイオン*m/z*］**で、279.09100を選択します。 **f** ［*m/z*値］テキストボックスに、186.03299を入力します。 **g** **［抽出時に積分］**チェックボックスをオンにします。 **h** **［OK］**をクリックします。	• 最初に EIC を選択すると、エラーアイコンが［*m/z* 値］ボックスの横に表示されます。**［*m/z* 値］**はステップ e とステップ f で指定します。 • ［*m/z*値］テキストボックスには、範囲を入力することもできます（例：100 - 300）。

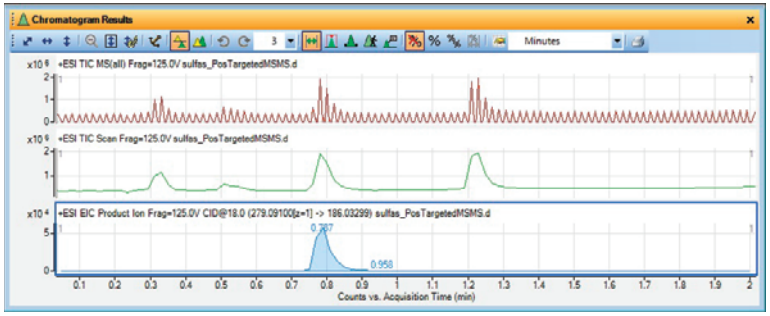


図 21　元のTICとMSデータのTIC、MS/MSデータのEICの比較

タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MSとLC/MS/MS）

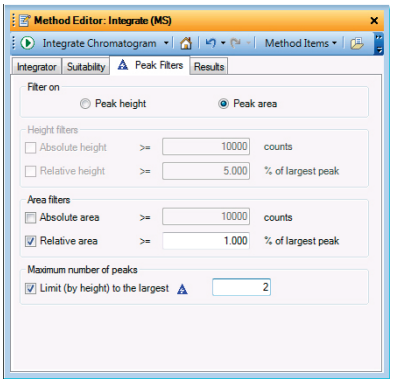
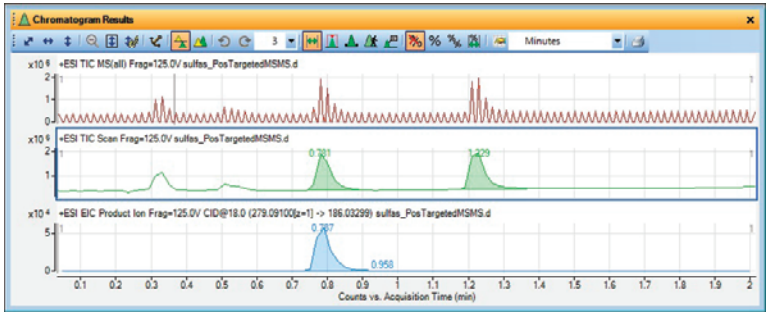
このタスクでは、クロマトグラムを積分する方法、積分パラメータを変更して結果を変更する方法、そしてMS/MSデータに対して積分したピークのS/N比を計算するさまざまな方法を学習します。

オリジナルのQ-TOF TICクロマトグラムには、特定の順序になっていない可能性のあるMSとMS/MSの両データが含まれるので、積分できません。

タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MSとLC/MS/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、**sulfas_PosTargetedMSMS.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** TICスキャンクロマトグラムをハイライトし、以下のコマンドのいずれかを選択し、クロマトグラムを積分します。 • メニューバーから **[クロマトグラム] > [クロマトグラムの積分]** をクリックします。 • ［クロマトグラム］ウィンドウ内を右クリックし **[クロマトグラムの積分]** をクリックします。 • ［データナビゲータ］ウィンドウで、**sulfas_PosTargetedMSMS.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４つのピークが積分されたことを確認してください。 • MSデータ、MS/MSデータ、UVデータ、ADC 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。 • **[TIC MS (すべて)]** クロマトグラムを積分することはできません。MS データと MS/MS データの両方があるクロマトグラムを積分することはできません。
2 スレッショルドを変更し、積分するピークを減らします。 • スレッショルドを変更し、2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］タブを表示します。 **b** ［積分］タブで、パラメータを確認します。 **c** **[ピークフィルタ]** タブをクリックします。 **d** [ピークの最大数］セクションで、必要に応じて **[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、2 を入力します。	• **F1** を押すとオンラインヘルプが表示され、積分の詳細を確認できます。 • 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 12. クロマトグラムの積分（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
		
	図 22　［ピーク数を高さベースで制限する］チェックボックスがオンの状態の［ピークフィルタ］タブ	
3 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、2つの最大ピークのみが積分されます。
		
	図 23　ピーク数を制限して積分された TIC MS と MS/MS のクロマトグラム	

タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
4 右記のいずれかの方法で、**sulfas_PosTargetedMSMS.d** データファイルの EIC プロダクトイオンクロマトグラムを積分します。	**a** EIC プロダクトイオンクロマトグラムをハイライトし、以下のコマンドのいずれかを選択し、クロマトグラムを積分します。 • メニューバーから **[クロマトグラム] > [クロマトグラムの積分]** をクリックします。 • [クロマトグラム] ウィンドウ内を右クリックし **[クロマトグラムの積分]** をクリックします。 • [データナビゲータ] ウィンドウで、**sulfas_PosTargetedMSMS.d > [ユーザークロマトグラム] > [EICプロダクトイオン]** を選択し、**[EICプロダクトイオン]** 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。 • MSデータ、MS/MSデータ、UV データ、GCデータ、ADCデータに使用するインテグレータは［メソッドエディタ］ウィンドウの［積分］タブで選択します。MS データ、MS/MS データ、UV データ、GC データ、ADC データに対して、それぞれ異なるインテグレータを選択することができます。
5 フィルタを高さフィルタに変更し、絶対高さの制限値を設定します。	**a** ［メソッドエクスプローラ］から、**[クロマトグラム] > [積分 (MS/MS)]** をクリックし、[積分] タブを表示します。 **b** **[ピークフィルタ]** タブをクリックします。 **c** **[フィルタをオン]** で、**[ピーク高さ]** をクリックします。 **d** ［高さフィルタ］で、**[絶対高さ]** チェックボックスをオンにします。	• MS/MSデータのデフォルトにより、MS/MS インテグレータが選択されます。 • 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。
6 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 アイコンをクリックし、新しい設定を用いて積分します。	• 最大ピークのみが積分されたことを確認してください。

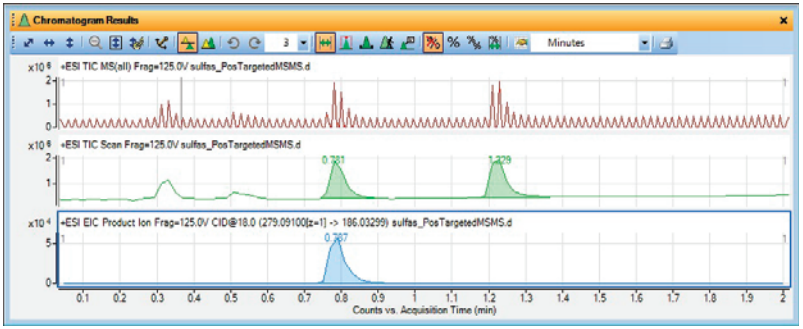


図 24 積分された MS および MS/MS クロマトグラム

タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
7 プロダクトイオンのEICのシグナル/ノイズ比を計算します。 • 最初の［ピークラベル］を**［面積］**に、クロマトグラフピークに対する2番目の［ピークラベル］を**［シグナル/ノイズ］**に設定します。 • ［メソッドエディタ］を開きます。 • ノイズ範囲に0.0～0.76を用いて、積分したピークのシグナル/ノイズ比を計算します。	**a** **［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］**をクリックし、最初の［ピークラベル］を**［面積］**に、2番目の［ピークラベル］を**［シグナル/ノイズ］**に設定します。**［OK］**をクリックします。 **b** ［メソッドエクスプローラ］の［クロマトグラム］セクションで、**［S/N比の計算］**を選択します。 **c** **［ノイズ範囲を指定］**ボタンをクリックします。**ノイズ範囲**として0.0 – 0.76を入力し、**［S/N比の計算］**アイコン をクリックします。	• シグナル/ノイズ比を計算する前に、EIC がハイライトされていることを確認します。 • デフォルトの**［ノイズ定義］**アルゴリズムは［ピーク - ピーク］です。各**ノイズ定義**に関する情報は、オンラインヘルプを参照してください。 • クロマトグラム上のノイズ範囲に指定した部分が、［クロマトグラム結果］ウィンドウに太字で描かれます。

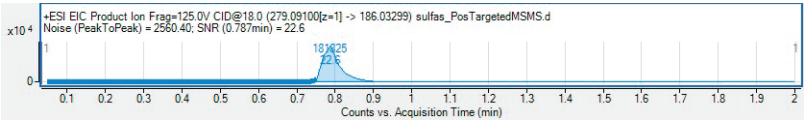


図 25　MS/MS EICプロダクトイオンのシS/N比結果

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］**>**［S/N 比の計算］**セクションをクリックします。 **b** ［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。 **c** ［メソッドエクスプローラ］の**［クロマトグラム］**>**［積分 (MS/MS)］**セクションをクリックします。 **d** アイコンをクリックします。 **e** ［メソッドエクスプローラ］の**［クロマトグラム］**>**［積分 (MS)］**セクションをクリックします。 **f** アイコンをクリックします。 **g** **［メソッドエディタ］**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 クロマトグラムのピークラベルを［リテンションタイム］に戻します。	**a** **［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］**をクリックします。 **b** 最初のピークラベルに**［リテンションタイム］**を選択し、2番目のピークラベルに**［なし］**を選択します。 **c** **［OK］**をクリックします。	• ［クロマトグラム結果］ウィンドウで［表示オプション］アイコン をクリックして、［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くこともできます。

タスク 12. クロマトグラムの積分（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
10 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。	**a** ［データナビゲータ］ウィンドウで［タイプによる並べ替え］を選択した場合、［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。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。 **b** ［データナビゲータ］ウィンドウで［データによる並べ替え］を選択した場合、［ユーザークロマトグラム］の Sulfas_PosTargetedMSMS.d データファイルセクションの下で、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。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。 **c** **［削除］**メッセージボックスが表示されたら、**［はい］**をクリックします。	

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）

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。

このタスクでは、クロマトグラムを進める方法、スペクトル表示オプションの変更方法、そしてバックグラウンドスペクトルの減算方法も説明します。

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント
1 クロマトグラムを進め、**sulfas_PosTargetedMSMS.d**の最後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。 • 1.15～1.35分の範囲を拡大します。 • ［クロマトグラムを進める］アイコンを使用します。 • 約 1.15 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、sulfas_PosTargetedMSMS.d データファイルの**［TIC MS (すべて)］**クロマトグラムをクリックします。 **b** 最後のピークを拡大するには、1.15 分のピークの上で右クリックし、1.35 分にドラッグした後、離します。 **c** ［メソッドエディタ］ウィンドウを閉じます。 **d** ［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。 **e** ［クロマトグラムを進める］カーソルを X 軸上の約 1.15 分に移動させ、クリックします。その時間のスペクトルが、［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。 **f** 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押します。	• ［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。 • ［クロマトグラムを進める］アイコンをクリックすると、［スペクトルプレビュー］ウィンドウが自動的に開きます。 • ［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、［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。 • ボタン（ズーム中にY軸をオートスケール）をクリックすると、X 軸範囲を選択してズームしたときに Y 軸が自動的に調整されます。

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント

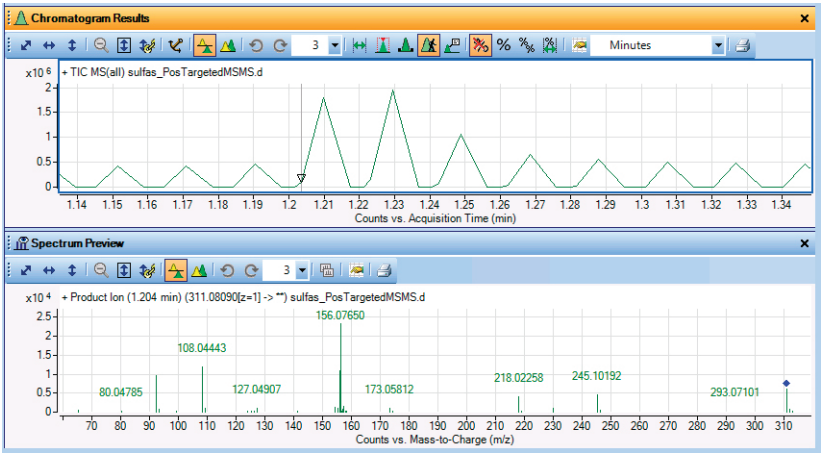
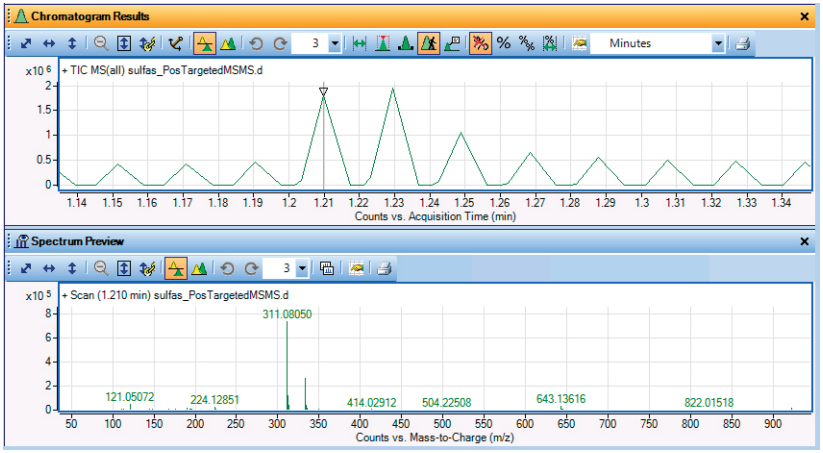


図 26 ［クロマトグラムを進める］アイコンで、1.204 分のMS/MSプロダクトイオンを表示



クロマトグラムタイトルおよびスペクトルタイトルにフラグメンタ電圧を含める場合は［クロマトグラムの表示オプション］および［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の［展開済み］チェックボックスをオンにします。

図 27 ［クロマトグラムを進める］アイコンで、1.210分のピークのMSスキャンを表示

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
2 **sulfas_PosTargetedMSMS.d**データファイルの0.33分のピークと最後のピークの特定のデータポイントのスペクトルを抽出します。 • 0.3 ～ 0.4 分の範囲を拡大した後、コメントで説明している方法のいずれかを用いて、0.33分近辺のピーク（MS）の1つからスペクトルを抽出した後、谷（MS/MS）の1つからのスペクトルを抽出します。 • 1.15 ～ 1.25 分の範囲を拡大した後、1.23分近辺のピークの1つ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）。 • 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。 **b** ［スペクトルプレビュー］ウィンドウを閉じます。 **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。 **d** 最初のピークを拡大するには、0.3分のピークの上で右クリックし、0.4分にドラッグした後、離します。 **e** 0.33 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。 **f** 0.34 分近辺の谷からスペクトルを抽出します。 **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。 **h** 1.15～1.25分の範囲を拡大します。 **i** 1.23 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）。 **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］**アイコン隣の矢印をクリックし、**3**を選択します。	• ［ズーム中にY軸をオートスケール］アイコン の背景色がオレンジ色の場合、アイコンは「オン」です。 • 以下のいずれかの方法でスペクトルを抽出できます。 ◦ クロマトグラムのデータポイントをダブルクリックします。 ◦ クロマトグラムのデータポイントをクリックした後、クロマトグラム内を右クリックします。**［MSスペクトルの抽出］**をクリックします。［スペクトルの抽出］ダイアログボックスが表示されます。**sulfas_PosTargetedMSMS.d** ファイルが選択されていることを確認し［スペクトルの抽出］ダイアログボックスの **［抽出］** をクリックします。 • スペクトルを初めて抽出する場合、［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。［データナビゲータ］ウィンドウの **［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。

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント

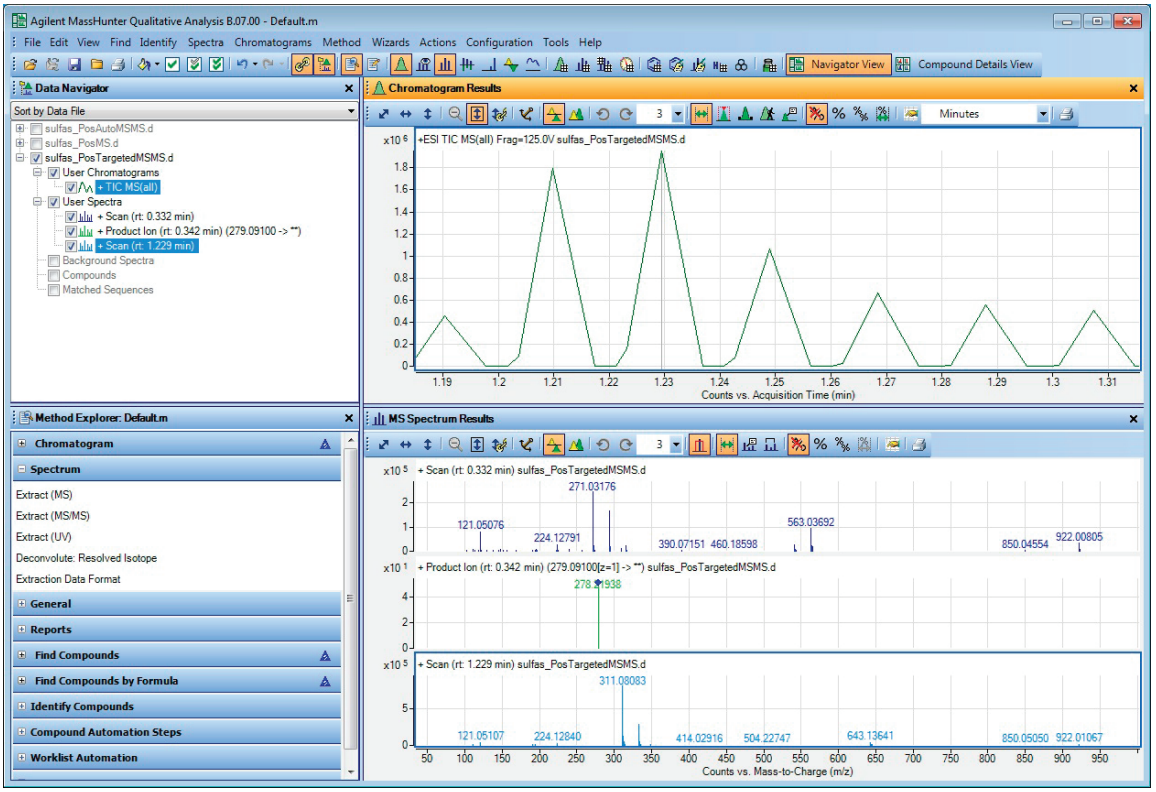


図 28 最初のピークのMSスキャンとプロダクトイオンスペクトル、および最後のピークのMSスキャンスペクトルが表示された定性分析プログラム

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
3 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** データファイルの最後のピークのプロダクトイオンスペクトルを抽出します。 • ［スペクトルプレビュー］ウィンドウを表示します。 • リテンションタイム 1.237 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、4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** メインツールバーの**［スペクトルプレビュー］**アイコン をクリックします。 **b** 1.23 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。 **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4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］ウィンドウが開いている場合、新しいスペクトルを抽出すると、定性分析プログラムにより前のスペクトルが上書きされます。 • 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。

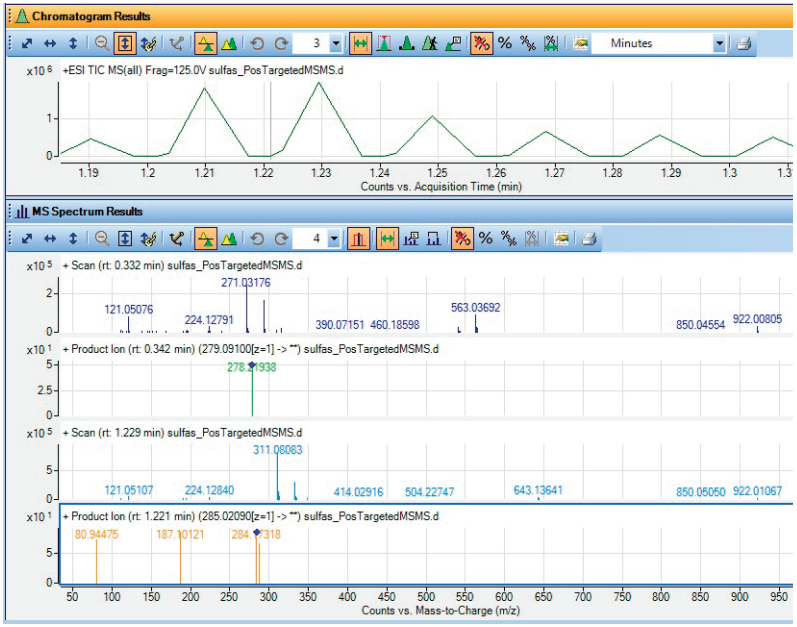


図 29　クロマトグラムの最後のピークのプロダクトイオンスペクトルを表示した［クロマトグラム結果］および［MS スペクトル結果］ウィンドウ

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
4 **sulfas_PosTargeted.d** データファイルから、最後のピークの指定範囲内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** ［クロマトグラム結果］ツールバーの**［X軸とY軸のオートスケール］**アイコン をクリックし、完全にズーム解除します。 **b** ［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。 **c** 最後のピークの約1.21分をクリックし、右の約1.229分の上にドラッグします。 **d** 右記のいずれかの方法で、平均スペクトルを抽出します。 **e** ツールバーの［リストペインの最大数］アイコン隣の下矢印をクリックし、**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。その後、**［抽出］**をクリックします。 • 平均MSスペクトルと平均MS/MSスペクトルの両方が表示されます。

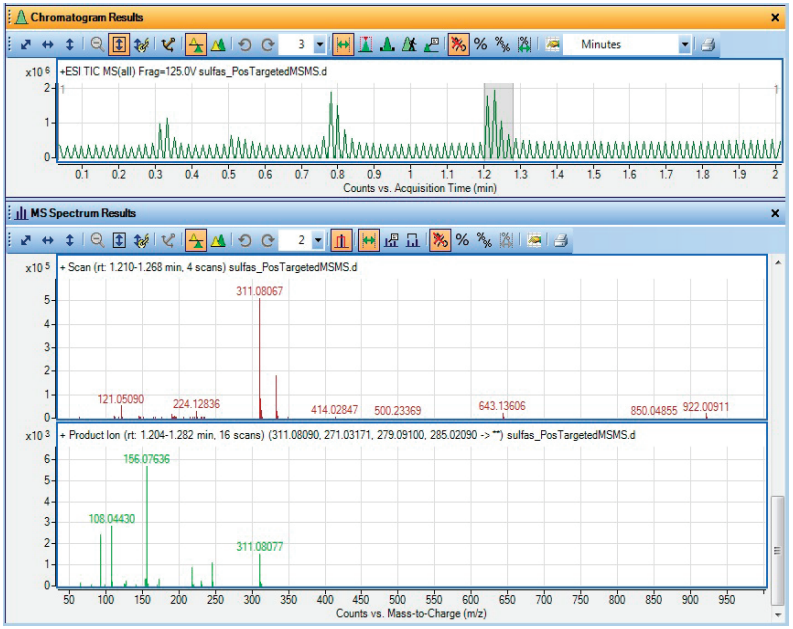


図 30 最後のピークの選択範囲から抽出した平均スペクトル

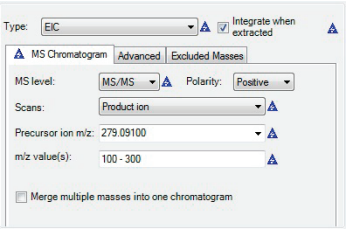
タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
5 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** データファイルのピーク 1 と 4 の範囲を一緒に平均したスペクトルを抽出します。 • ヒント：［範囲選択］アイコンと**〈Ctrl〉**キーを用いて、まず1つ目のピーク範囲を選択します。 • 右記のいずれかの方法で、スペクトルを抽出します。	**a** **〈Ctrl〉**キーを押したままにします。 **b** 最初のピーク左側の約 0.3 分をクリックし、右側の約 0.33 分の上にドラッグし、マウスを離します。 **c** **〈Ctrl〉**キーを離します。 **d** 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。 • 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。 • 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。 • 選択範囲が青色で表示されます。この範囲を使用すると、実際に使用された範囲として表示が青色から灰色に変わります。



図 31　複数の範囲から作成された平均MSとMS/MSスペクトル

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
6 **sulfas_PosTargetedMSMS.d**から抽出されたMS/MS TICの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。 • ［データナビゲータ］の［ユーザースペクトル］にあるスキャンをすべて削除します。 • ピークの開始とピークの終了のスペクトルの平均であるバックグラウンドスペクトルを抽出します。 • 積分したピークのピークスペクトルを抽出します。	**a** ［データナビゲータ］の**［ユーザースペクトル］**にあるスペクトルを右クリックし、**［削除］**をクリックします。 **b** ［削除］メッセージボックスで**［はい］**をクリックします。 **c** イオン 279.09100 の積分された MS/MS EICを 100 ～ 300 の *m/z* 範囲で抽出します（40 ページの「タスク 11. クロマトグラムの抽出（LC/MS と LC/MS/MS）」を参照）。 **d** ［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。 **e** **［ピークスペクトル抽出 (MS/MS)］**タブをクリックします。 **f** **［ピークスペクトルバックグラウンド］**で**［ピーク開始点と終了点のスペクトルの平均］**をクリックします。 **g** ［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。 **h** 約 0.8 分のピークを選択します。 **i** 右クリックし**［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。 • **［クロマトグラムの抽出］**ダイアログボックスに対して以下の変更を行います。  • プリカーサイオン 279.09100、プロダクトイオン 100 ～ 300 の範囲のトランジションを抽出しています。

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント

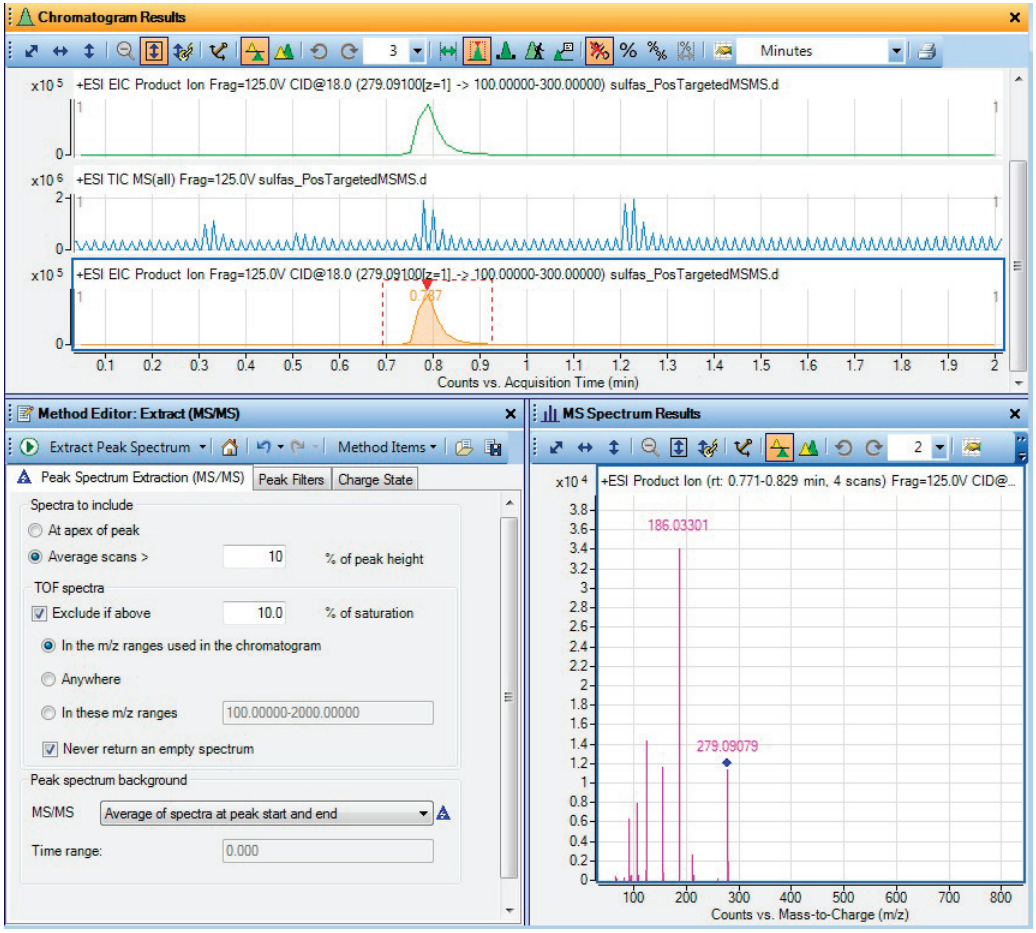


図 32　バックグラウンド減算されたプロダクトイオン（MS/MS）スペクトル

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
7 プロダクトイオン 186.03396 および 156.07760 を指定して MS/MS EIC プロダクトイオンクロマトグラムを抽出します。 • クロマトグラムの抽出時に積分を実行しないでください。	a プロダクトイオンスペクトルを右クリックします。 b **[クロマトグラムの抽出]** をクリックします。 c **[タイプ]** リストで **[EIC]** を選択します。 d **[抽出時に積分]** チェックボックスをオフにします。 e **[MSレベル]** リストから **[MS/MS]** を選択します。 f **[プリカーサイオン *m/z*]** で **[任意]** を選択します。 g *m/z*値のボックスに`186.03396, 156.07760`を入力します。 h **[複数の質量を 1 つのクロマトグラムにマージ]** チェックボックスをオンにします。 i **[OK]** をクリックします。	• 複数の*m/z*値を指定する場合、カンマ区切りで入力します。 • 単一の*m/z*値を入力した場合、その値は［詳細］タブで設定されている **[このクロマトグラムの*m/z*の範囲]** パラメータにより、自動的に範囲へ変換されます。 • プリカーサイオンが任意で、プロダクトイオン 186.03396 または 156.07760 のみのクロマトグラムを抽出しています。

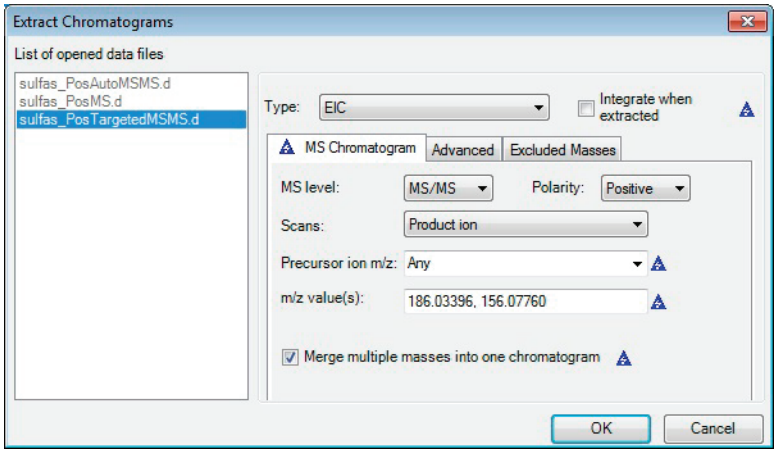


図 33 プロダクトイオン EIC に対する **[クロマトグラムの抽出]** ダイアログボックス

タスク 13. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（LC/MSとLC/MS/MS）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント

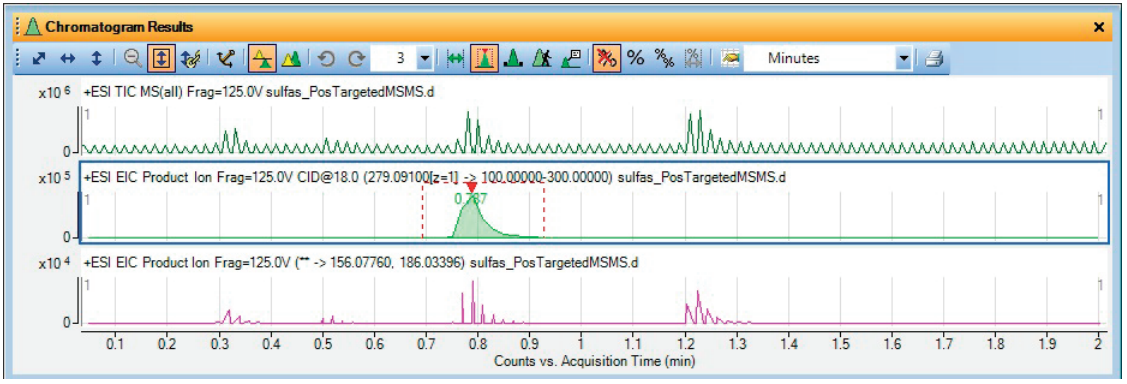


図 34　プロダクトイオン EIC

8 ステップ６のプロダクトイオンスペクトル 279.091-> ** を使用して MS/MS EIC を抽出します。

a ［MS スペクトル結果］ウィンドウで、ピーク 279.09079 付近の範囲を選択します。
b **〈Ctrl〉** キーを押したままにします。
c ピーク 186.03301 付近の範囲を選択します。
d スペクトルを右クリックし、**［EIC の抽出］> ［選択範囲］** をクリックします。

- スペクトルの各範囲に、別々のクロマトグラムが抽出されます。
- プリカーサイオンの範囲が、［MS スペクトル結果］ウィンドウで選択した範囲（複数の範囲を選択可能）に設定されます。



展開されたタイトルを有効にするには［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使用します。展開されたタイトルには、イオン化、フラグメンタ電圧、コリジョンエネルギー電圧が含まれます。

図 35　プロダクトイオンスペクトルから直接作成したプロダクトイオン EIC

MSデータとUVデータのタスク

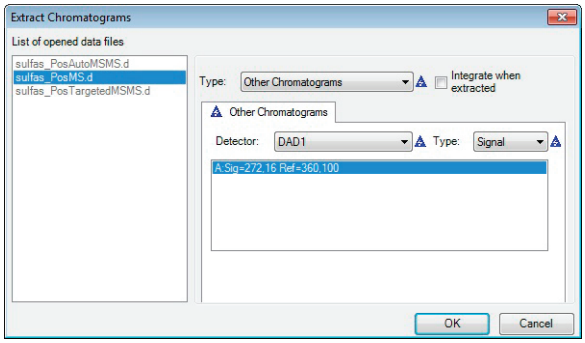
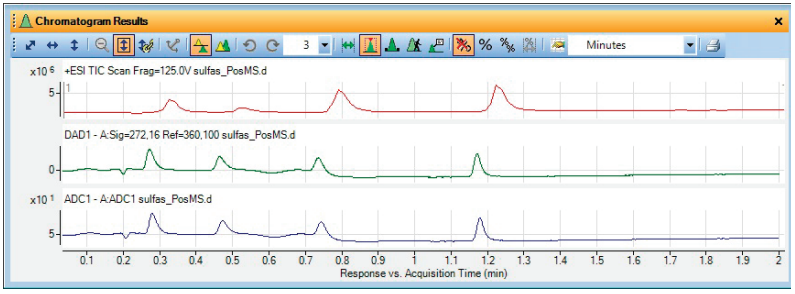
タスク 14. クロマトグラムの抽出（MSとUV）

このタスクでは、MSとUVのクロマトグラムをデータファイルから抽出します。

タスク 14. クロマトグラムの抽出（MSとUV）

ステップ	詳細説明	コメント
1 UVクロマトグラム（DAD1とADC1）を**sulfas_PosMS.d**データファイルから抽出します。 • sulfas_PosMS.d 以外のすべてのデータファイルを非表示にします。 • TICスキャン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。 • DAD1クロマトグラムを抽出します。 • ADC1クロマトグラムを抽出します。 • 表示されるペインの数を 3 に変更します。	**a** ［データナビゲータ］ウィンドウで、**sulfas_PosMS.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。 **b** sulfas_PosMS.d データファイルのチェックボックスをオンにします。 **c** **TICスキャン**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。 **d** 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。 • **［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。 **e** **開いているデータファイルのリスト**で、**sulfas_PosMS.d** をクリックします。 **f** **［タイプ］**リストで**［その他のクロマトグラム］**をクリックします。 **g** **［検出器］**リストから［DAD1］を選択します。 **h** **［OK］**をクリックします。 **i** ［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックスを開きます。 **j** **開いているデータファイルのリスト**で、**sulfas_PosMS.d** をクリックします。 **k** **［タイプ］**リストで**［その他のクロマトグラム］**を選択します。 **l** **［検出器］**リストから［ADC1］を選択します。 **m** **［OK］**をクリックします。 **n** ［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］**が3に設定されていることを確認します。	• 以下の方法でもクロマトグラムを抽出できます。 ◦ クロマトグラムを右クリックし、**［クロマトグラムの抽出］**をクリックします。 ◦ ［データナビゲータ］ウィンドウで、**sulfas_PosMS.d** の**［TIC スキャン］**をハイライトします。次に**［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。 • 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。

タスク 14. クロマトグラムの抽出（MSとUV）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
	 **図 36**　［クロマトグラムの抽出］ダイアログボックス **［その他のクロマトグラム］**タイプ	
	 **図 37**　元の TIC、DAD1、ADC1 を表示した［クロマトグラム結果］ウィンドウ	

タスク 15. クロマトグラムの積分（UV）とシステム適合性の計算（MSとUV）

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 15. クロマトグラムの積分（MSとUV）

ステップ	詳細説明	コメント
1 右のいずれかの方法で、**sulfas_PosMS.d** の UV クロマトグラムを積分します。 • DAD1 と ADC1 のクロマトグラムをハイライトします。 • クロマトグラムを積分します。	**a** DAD1 と ADC1 のクロマトグラムをハイライトします。 **b** ［メソッドエクスプローラ］で、**［クロマトグラム］** > **［積分 (UV)］**を選択します。 **c** **［一般］**インテグレータを選択します。 **d** 以下のいずれかの方法で、**sulfas_PosMS.d** の UV クロマトグラムを積分します。 • メインメニューから **［クロマトグラム］** > **［クロマトグラムの積分］**をクリックします。 • クロマトグラムをハイライトします。次に、クロマトグラムを右クリックし **［クロマトグラムの積分］**をクリックします。 • ［データナビゲータ］で、**sulfas_PosMS.d** > **［ユーザークロマトグラム］**セクションの **DAD1** と **ADC1** 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。 **e** 必要に応じて、MSクロマトグラムをハイライトし、積分します。	• 積分では、default.m メソッドで選択されている［Agile 2］積分方式（インテグレータ）ではなく、［一般］インテグレータが使用されます。 • ［クロマトグラム］>［積分（UV）］セクションが使用できない場合は、［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の［UV］チェックボックスをオンにする必要があります。 • デフォルトパラメータを用いた［一般］インテグレータ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。
2 クロマトグラムのピークが揃うように、時間の遅れを調整します。	**a** ［メソッドエクスプローラ］で、**［クロマトグラム］** > **［時間の遅れを調整］**を選択します。 **b** **［MS1］**チェックボックスをオンにします。 **c** **［リテンションタイム］**に 0.325 を入力します。 **d** ［DAD1］チェックボックスをオンにします。 **e** ［リテンションタイム］に 0.272 を入力します。 **f** **［RT から時間の遅れを計算］**をクリックします。 **g** ［メソッドエディタ］ツールバーで **［データ内の時間の遅れを調整］**をクリックします。	• この実習では、MS データのリテンションタイムが UV トレースに合わせて調整されるため、本書の他の部分にある未調整の時間とは一致しなくなります。

タスク 15. クロマトグラムの積分（MSとUV）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント

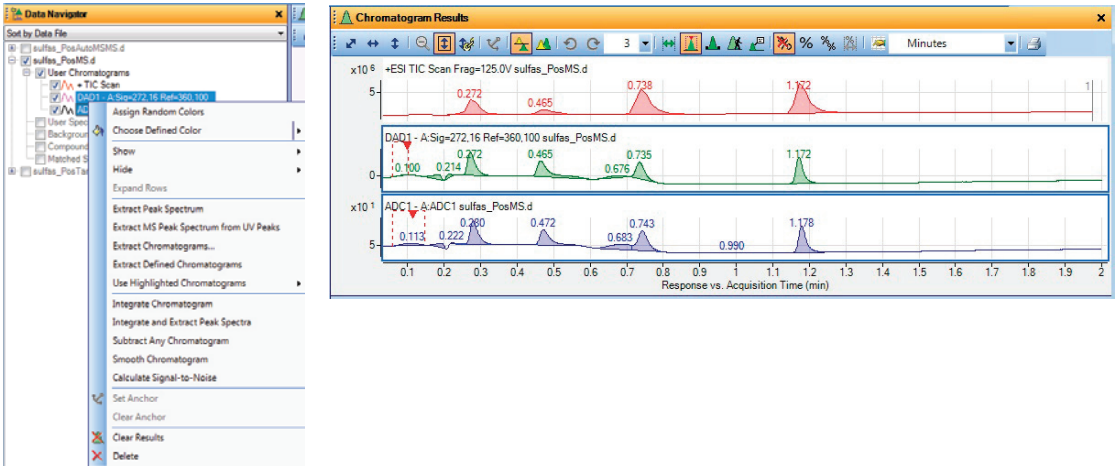


図 38　［データナビゲータ］のショートカットメニューの1つと、積分されたsulfas_PosMS.d TIC クロマトグラム

3 UV 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 (UV)］** 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、0.15 を入力します。
f ［カラム長さ］ボックスに、5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。

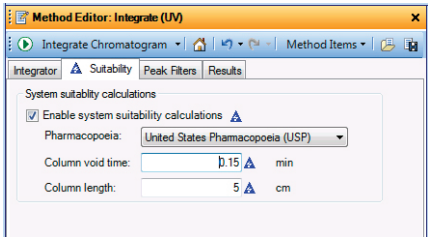
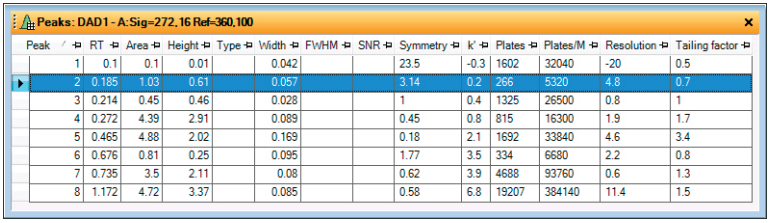


図 39　［クロマトグラム］＞［積分（UV）］＞［適合性］タブ

タスク 15. クロマトグラムの積分（MSとUV）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
4 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。	
5 システム適合性の計算結果を表示します。 • ［積分ピークリスト］ウィンドウを開きます。 • 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。 **b** ［積分ピークリスト］ウィンドウのヘッダーを右クリックし **［Floating］** をクリックします。 **c** 表示しない列の列ヘッダーを右クリックし **［列の削除］** をクリックします。 **d** 任意の列ヘッダーを右クリックし **［列の追加 / 削除］** をクリックして表示する列を変更します。	• システム適合性の計算結果が［積分ピークリスト］テーブルに含まれるようになります。 • 適合性の値は **[k']**、**［テーリングファクタ］**、**［プレート］**、**［理論段数/m］**、**［対称度］** などがあります。 • システム適合性の計算結果は、MS、MS/MS、ADC、GC クロマトグラムでも有効にすることができます。



Peaks: DAD1 - A:Sig=272, 16 Ref=360,100

Peak	RT	Area	Height	Type	Width	FWHM	SNR	Symmetry	k'	Plates	Plates/M	Resolution	Tailing factor
1	0.1	0.1	0.01		0.042			23.5	-0.3	1602	32040	-20	0.5
2	0.185	1.03	0.61		0.057			3.14	0.2	266	5320	4.8	0.7
3	0.214	0.45	0.46		0.028			1	0.4	1325	26500	0.8	1
4	0.272	4.39	2.91		0.089			0.45	0.8	815	16300	1.9	1.7
5	0.465	4.88	2.02		0.169			0.18	2.1	1692	33840	4.6	3.4
6	0.676	0.81	0.25		0.095			1.77	3.5	334	6680	2.2	0.8
7	0.735	3.5	2.11		0.08			0.62	3.9	4688	93760	0.6	1.3
8	1.172	4.72	3.37		0.085			0.58	6.8	19207	384140	11.4	1.5

図 40 システム適合性の値を表示した積分ピークテーブル

6 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。 **b** **［メソッドエディタ］** ウィンドウを閉じます。 **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。 **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。 • **［表示］** > **［積分ピークリスト］** をもう一度クリックすると、ウィンドウが表示されなくなります。

タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（UV）

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 UV 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 UV スペクトルを抽出したり、あるいはピークスペクトルを抽出することができます。

タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSとUV）

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosMS.d** データファイルの 0.27 分のピークと最後のピーク（1.22 分）の特定のデータポイントのスペクトルを抽出します。 • ADC1 クロマトグラムを削除します。 • 0.17 ～ 0.31 分の範囲を拡大した後、コメントで説明している方法のいずれかを用いて、0.27分近辺のピークからスペクトルを抽出します。 • ［スペクトルプレビュー］を開きます。 • 1.1 ～ 1.3 分の範囲を拡大した後、1.17 分近辺ピーク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］セクションにコピーします。 • 表示を変更し、2つ以上のスペクトルを表示します。	**a** ADC1 クロマトグラムを削除します。 **b** ［クロマトグラム結果］ツールバーの**［X軸とY軸のオートスケール］**アイコン をクリックし、完全にズーム解除します。 **c** ［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。 **d** DAD1 クロマトグラムをハイライトします。 **e** 0.272 分のピークを拡大するには、0.2 分のピークの上で右クリックし、0.31 分のカーブの下までドラッグした後、離します。 **f** 0.27 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UVスペクトルを抽出します。 **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。 **h** ［スペクトルプレビュー］を開くには、**［スペクトルプレビュー］**アイコンをクリックします。 **i** 1.1～1.3分の範囲を拡大します。 **j** 1.17 分近辺のピークから UV スペクトルを抽出します。スペクトルは［スペクトルプレビュー］ウィンドウに表示されます。 **k** 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。［スペクトルプレビュー］ウィンドウは［UV スペクトル結果］と同じウィンドウにタブ表示されます。 **l** 必要に応じて［UV スペクトル結果］ツールバーの**［リストペインの最大数］**アイコン隣の矢印をクリックし、**2**を選択します。 **m** ［MS スペクトル結果］ウィンドウを閉じます。	• ADC クロマトグラムからスペクトルを抽出することはできません。 • 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。 • 以下のいずれかの方法でスペクトルを抽出できます。 ◦ クロマトグラムのデータポイントをダブルクリックします。 ◦ クロマトグラムのデータポイントをクリックした後、クロマトグラム内を右クリックします。**［UV 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。**sulfas_PosMS.d** ファイルが選択されていることを確認し**［抽出］**をクリックします。 • スペクトルを初めて抽出する場合、［UV 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。［データナビゲータ］の［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。 • ［スペクトルプレビュー］が有効の場合、手動で選択したスペクトルが表示されますが［ユーザースペクトル］セクションには保存されません。 • ［スペクトルプレビュー］ウィンドウが開いている場合、新しいスペクトルを抽出すると、定性分析プログラムにより［スペクトルプレビュー］ウィンドウの前のスペクトルが上書きされます。

タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSとUV）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント

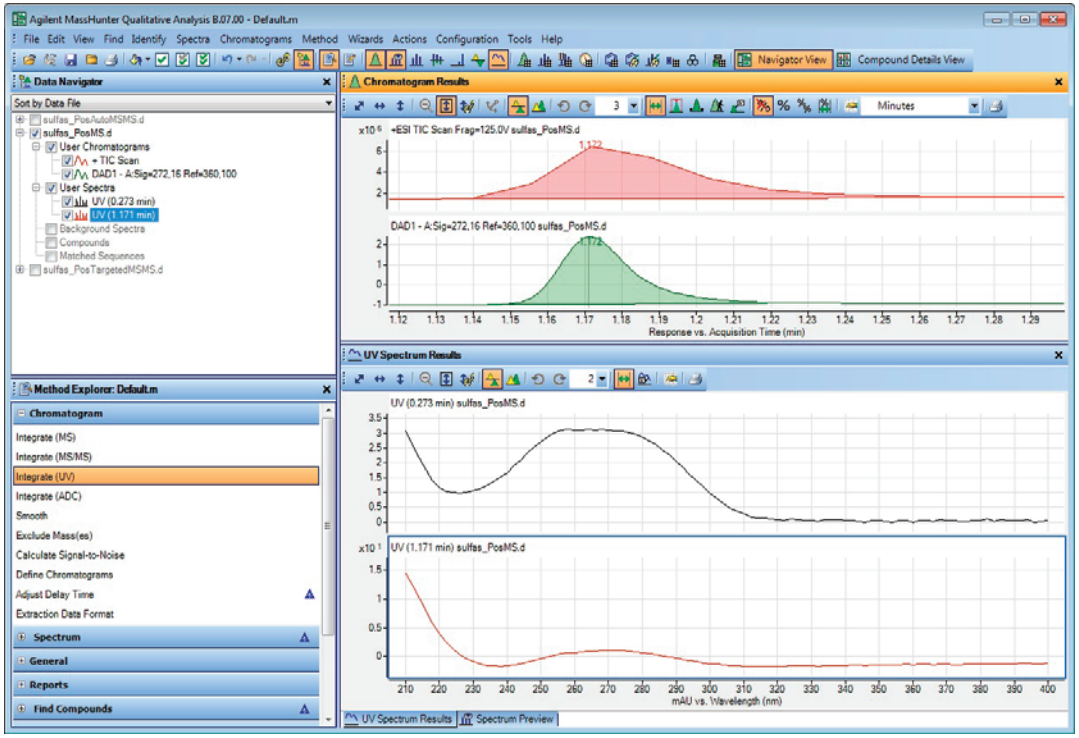


図 41 sulfas_PosMS.d ファイルの積分した2つのピークから抽出したUVスペクトルを表示

タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSとUV）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
2 **sulfas_PosMS.d** データファイルで、最後のUV積分ピークの指定範囲内のすべてのUVポイントを平均したスペクトルを抽出します。 • 既存の［ユーザースペクトル］すべてを削除します。 • クロマトグラムのズームを解除します。 • ［スペクトルプレビュー］をオフにします。 • ［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。 • 範囲設定でピークを選択します。 • 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** 削除する［ユーザースペクトル］をハイライトします（**〈Ctrl〉** キーを使用）。 **b** 選択した［ユーザースペクトル］を右クリックし **［削除］** をクリックします。 **c** ［削除］ダイアログボックスが表示される場合 **［はい］** をクリックします。 **d** **［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。 **e** **［スペクトルプレビュー］** ウィンドウをクリックした後、ウィンドウを閉じます。 **f** ［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。 **g** DAD1クロマトグラムで最後の積分ピークをクリックし、ピークの右側までドラッグします。 **h** 下記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。 • ピークの範囲内で右クリックし、ショートカットメニューから **［UV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の **［抽出］** をクリックします。	• クロマトグラムの選択した範囲をダブルクリックしても、平均スペクトルを抽出できます。 • ［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、クロマトグラムを削除するときに、確認を求められるかどうかを変更できます。このダイアログボックスは、**［ツール］** > **［メッセージボックスオプション］** コマンドを使用して表示できます。 • 複数のデータファイルが読み込まれている場合に限り、［スペクトルの抽出］ダイアログボックスが表示されます。

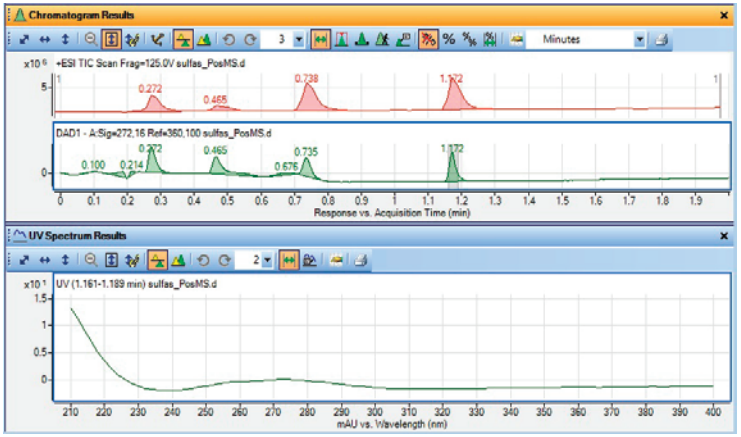


図 42 最後のピークの選択範囲から抽出した平均スペクトル

タスク 16. クロマトグラムからのスペクトルの抽出（MSとUV）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
3 **sulfas_PosMS.d** の UV ピークスペクトルを抽出します。 • ［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。 • DAD1 クロマトグラムを積分します。 • 3番目の積分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］**で、削除するユーザースペクトルをハイライトします。 **b** スペクトルを右クリックし **［削除］**をクリックします。 **c** **［はい］**をクリックします。 **d** DAD1 クロマトグラムをハイライトします。 **e** **［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。 **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。 **g** DAD1 クロマトグラムの 0.272 分の積分ピークをクリックします。 **h** ピークを右クリックし **［ピークスペクトルの抽出］**をクリックします。	• 抽出されたピークスペクトルは、［スペクトルプレビュー］ウィンドウが開いている場合でも、常に［UVスペクトル結果］ウィンドウまたは［MSスペクトル結果］ウィンドウに入ります。 • UV クロマトグラムからピークスペクトルを抽出する場合、ピークが［UVスペクトル結果］ウィンドウに入ります。 • クロマトグラムで領域を選択した場合、**［クロマトグラム全体］**または **［選択範囲］**で積分できます。

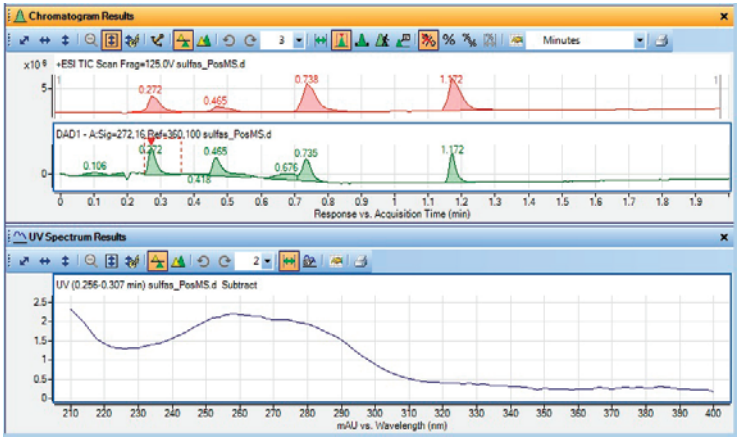


図 43　積分された DAD1クロマトグラムと UVピークスペクトル

4 3つすべてのデータファイルを閉じます。	**a** **［ファイル］**>**［すべて閉じる］**をクリックします。 **b** 結果の保存を求められたら **［いいえ］**をクリックします。	

実習 2
化合物の検出と同定

MSデータのタスク（LC/MS - TOF、Q-TOF、トリプル四重極） 70
タスク 1. Molecular Featureによる化合物の検出（LC/MS - MSのみ） 70
タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定(LC/MS - MSのみ） 74
タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MSのみ） 79
タスク 4. 化学式による化合物の検出とサンプル純度の計算（LC/MS - MSのみ） 81
タスク 5. タンパク質消化物のMolecular Feature Extraction（LC/MS - MSのみ） 86
MS/MSデータのタスク（LC/MS - Q-TOF、トリプル四重極） 89
タスク 6. 化合物の検出（LC/MS - MSとMS/MS） 89
タスク 7. 化合物の同定と化学式の推定（LC/MS - MS と MS/MS） 92
タスク 8. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS/MS） 95
タスク 9. 化合物の検出とライブラリの検索（LC/MS - MS/MS） 97
タスク 10. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS と MS/MS） 100

最初の2つのタスクでは、複雑なマトリックス中の低濃度サルファ剤を検出および同定し、TOFとQ-TOFの両データに対して化学式を作成します。TOFとQ-TOFの両データを用いた、タンパク質消化物のMolecular Feature Extractionも行います。トリプル四重極データでも、これらのタスクを実行できます。

実習方法を示す表は、以下の 3 列に分けて表示されています。

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

MSデータのタスク（LC/MS - TOF、Q-TOF、トリプル四重極）

タスク 1. Molecular Featureによる化合物の検出（LC/MS - MSのみ）

［化合物の検出］アルゴリズムにより、データ中の化合物を検出し、各化合物の平均MSスペクトルを作成します。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。このアルゴリズムは、MS スキャンデータを含むデータのみに使用できます。ユニットマス分解能を含むデータ（トリプル四重極データなど）では動作しません。

タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosMS.d**クロマトグラムを開きます。 • 一般ワークフローを使用します。 • 0.24～1.5分の範囲を選択します。	**a** **［MassHunter 定性分析］**アイコンをダブルクリックします。 **b** デモデータファイルのディレクトリの **sulfa_PosMS.d** データファイルを選択します。**［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。 **c** **［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］**をクリックします。［ワークフロー コンフィグレーション］ダイアログボックスが開きます。 **d** メソッドの変更を保存しない場合は、**［現在のメソッドを保存する］**チェックボックスをオフにします。 **e** **［ワークフローのデフォルトメソッドを読み込む］**ボタンをクリックします。 **f** **［ワークフローのデフォルレイアウトを読み込む］**ボタンをクリックします。 **g** **［OK］**をクリックします。 **h** **［範囲選択］**ツールをクリックし、0.24～1.5分の範囲を選択します。	• Default.m メソッドが自動的に読み込まれます。このメソッドを対話的に読み込むには、**［メソッド］** > **［開く］**をクリックします。Default.mを選択し、**［開く］**をクリックします。 • ウィンドウがアクティブの時に F1 キーを使用すると、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。 • ワークフローを切り替える際には［ワークフロー コンフィグレーション］ダイアログボックスが開きます。 • **［現在のメソッドを保存する］**チェックボックスをオンにすると、メソッドは現在のメソッドに自動的に保存されます。メソッドがdefault.m の場合は、［メソッドの保存］ダイアログボックスが開きます（デフォルトメソッドは上書きできません）。

タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MSのみ）（続き）

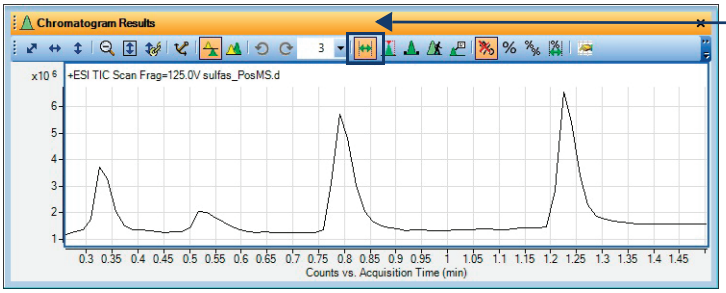
ステップ	詳細説明	コメント
		［範囲選択］ツール

図 44　TICクロマトグラムで時間範囲を選択

2 クロマトグラムの化合物を検出します。
- *m/z*を100～350に制限します。
- すべての化合物のクロマトグラムとスペクトルが見え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、**[化合物の検出] > [Molecular Featureによる検出]** をクリックします。
b **[ターゲットデータタイプ]** として **[低分子(クロマトグラフ)]** を選択します。
c **[*m/z*の制限]** チェックボックスをオンにします。
d 100 – 350を入力します。

- **[ターゲット] のデータタイプ**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。
- 化合物を検出するクロマトグラム範囲を選択します。図 44 を参照してください。
- **[*m/z* の制限]** ボックスに値が入力されるまで、ボックスの隣には赤い丸が表示されます。値を入力すると青色の三角形に変わります。メソッドを保存すると、青色の三角形は削除されます。

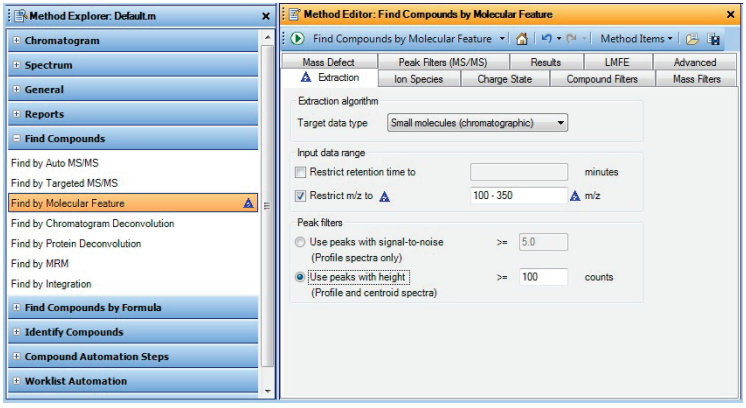


図 45　Molecular Featureによる化合物の検出 - 質量範囲の制限

[LMFE] および [詳細] タブは、[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で [詳細] チェックボックスがオンの場合にのみ使用できます。

[LMFE] タブは、MassHunter BioConfirm ソフトウェアがインストールされている場合にのみ使用できます。

タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
	e **［結果］**タブをクリックします。 f **［MFE スペクトルの抽出］**および**［ECC の抽出］**チェックボックスをオンにします。 g **［最大のものから指定数のみ表示］**チェックボックスをオンにして、化合物の数に 4 を入力します。	• 1 つまたは複数の化合物がハイライトされている場合、**［検出］**>**［完全な結果セットを抽出］**コマンドを用いて検出した後、化合物の結果一式を抽出できます。［データナビゲータ］ウィンドウで 1 つまたは複数の化合物を選択し、ショートカットメニューで**［完全な結果セットを抽出］**コマンドをクリックすることもできます。

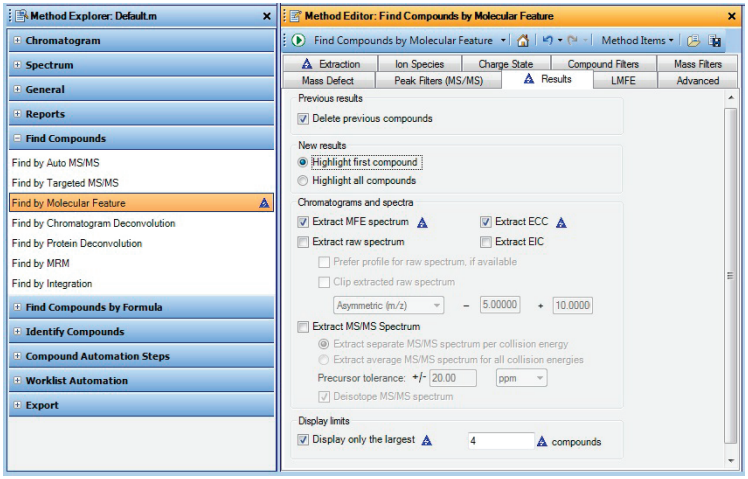


図 46　［Molecular Feature による化合物の検出］>［結果］タブの値を変更

タスク 1. 化合物の検出（LC/MS - MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
	h をクリックして、データファイルに対して **[Molecular Feature による化合物の検出]** アルゴリズムを実行します。 **i** ［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4を選択します。 **j** ［MS スペクトル結果］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。 **k** 270～350の*m/z*範囲を拡大します。 **l** ［クロマトグラム結果］ツールバーのボタンをクリックします。	• 選択した範囲から4つの主要化合物が検出されます。 • ［メソッドエディタ］ツールバーで をクリックすると、選択した範囲が使用されます。**[検出]** > **[Molecular Feature による化合物の検出]** メニューコマンドでは、**[クロマトグラム全体]** または **[選択範囲]** のいずれかをクリックします。 • **[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]** コマンドをクリックして、**[トッププロットのみラベル付け]** を変更します。 • 化合物リストが変更され、異なる列が表示されます。

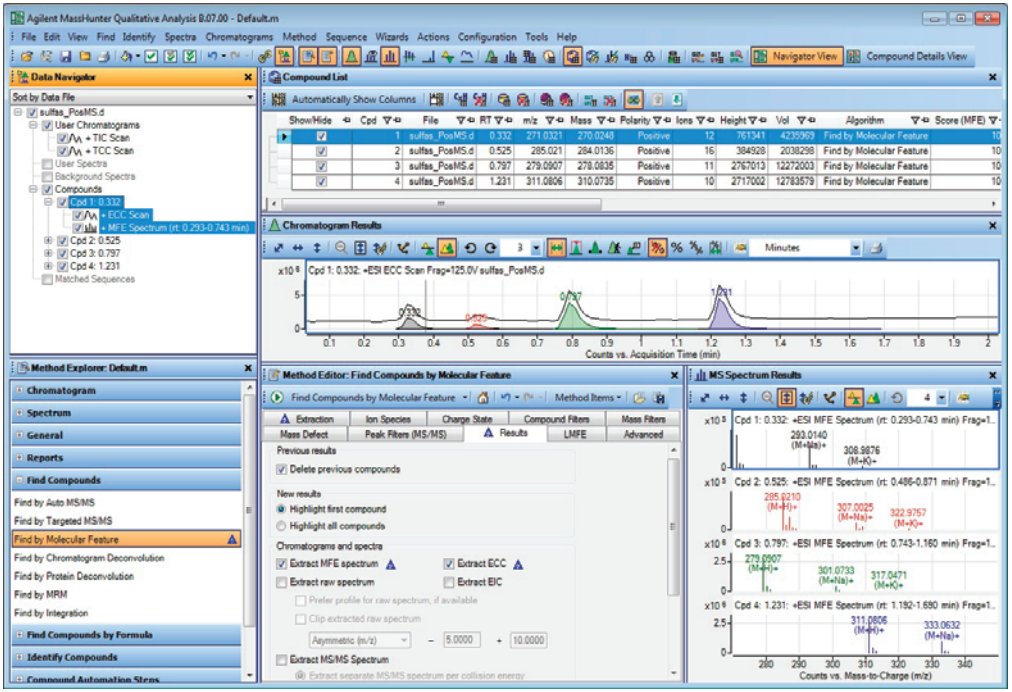


図 47　サルファ剤混合物中の4つの化合物すべてを検出

タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MSのみ）

このタスクでは、使用できる可能性のある化学式を作成し、タスク 1 で検出された各化合物を検索します。

タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
1 化合物1～4の化学式を作成します。 • 各化合物の［MS化学式結果］を表示します。 • ［化合物リスト］を表示します。 • ［MSスペクトル結果］ウィンドウを閉じます。 ヒント：図 49 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。 **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。 **c** ［データナビゲータ］ウィンドウで **［化合物］** をクリックしてすべての化合物をハイライトします。 **d** **［同定］** > **［化合物から化学式を作成］** コマンドまたは **［化合物から化学式を作成］** アイコンをクリックします。 **e** 必要に応じて、［化合物同定結果］アイコン をクリックするか、または **［表示］** > **［化合物同定結果］** コマンドをクリックします。 **f** 必要に応じて **［表示］** > **［化合物リスト］** をクリックします。 **g** ［化合物リスト］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。 **h** ［化合物同定結果］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。 **i** ［化合物リスト］および［化合物同定結果］ウィンドウで、［データを含まない列を隠す］アイコン をクリックします。 **j** ［メソッドエディタ］ウィンドウと［MS スペクトル結果］ウィンドウを閉じます。	• デフォルトでは［MS/MS化学式の詳細］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。ウィンドウの下にあるタブをクリックし、ウィンドウを切り替えます。 • 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。 • ［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。 • 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。 • 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。 • ショートカットメニューから **［列の削除］** を選択して、列を非表示にできます。

タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント

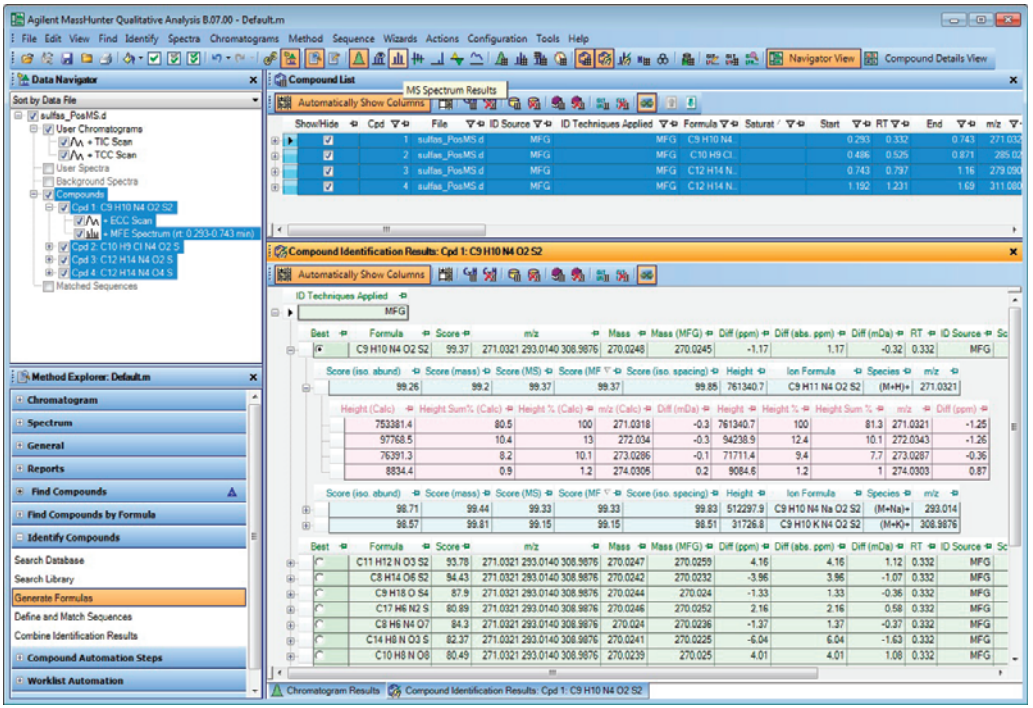


図 48　sulfas_PosMS.dにおける化合物1～4の化学式の作成結果

2 化合物 1 ～ 4 の化学式に基づき、データベース検索を実行します。

- 化学式のデータベース検索を行います。

a ［データナビゲータ］ウィンドウで **［化合物］** をクリックします。

b ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［化合物の同定］** > **［データベース検索］** をクリックします。

c **［一致させる値］** の **［分子式］** をクリックします。

d メインメニューで **［同定］** > **［データベースで化合物を検索］** をクリックします。

e ［メソッドエディタ］ウィンドウと［MS スペクトル結果］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。
- ［化合物リスト］の4つのサルファ剤がすべて同定されたことを確認してください（図 49 を参照）。
- 化合物のすべての同定結果が［化合物同定結果］ウィンドウに表示されます。
- 一部の同定結果は［化合物リスト］ウィンドウにも表示されます。

タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
3 表示されている列を変更します。	**a** ［化合物リスト］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。 **b** 列名 CAS の横のチェックボックスをオンにし、**［OK］**をクリックします。CAS 列が空の場合は、情報を含む列が自動的に表示されます。 **c** 化合物リストの［データを含まない列を隠す］アイコン をクリックします。	• ［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、［列の自動表示］機能をオフにしてからオンにすると、この列が自動的に再表示されます。

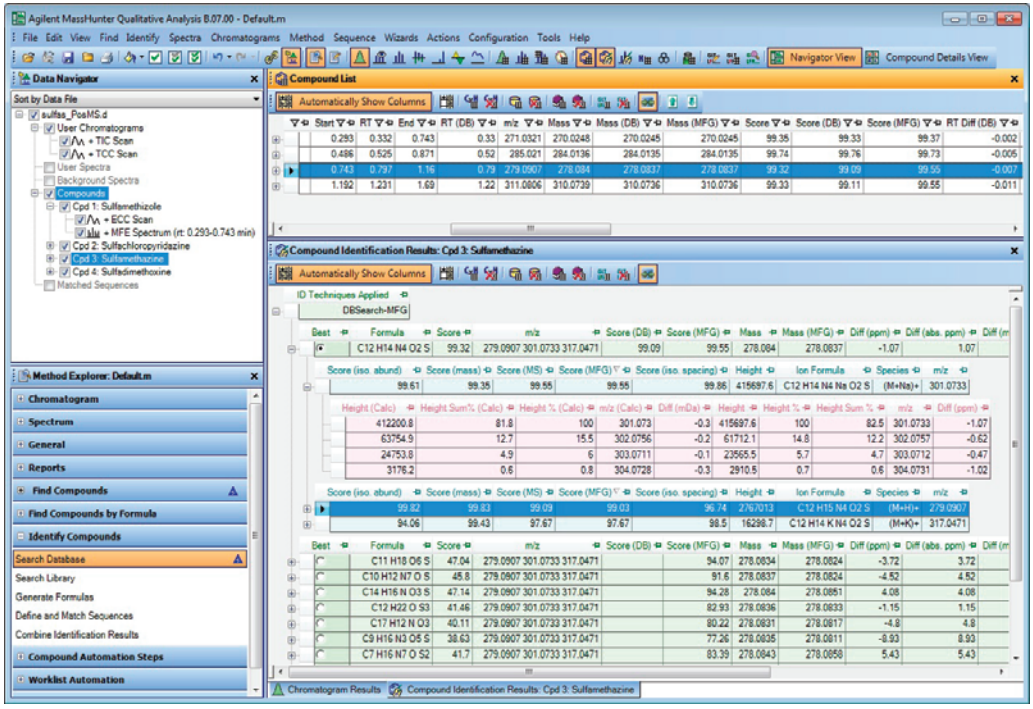


図 49 sulfas_PosMS.dにおける化合物1～4のデータベース検索と化学式作成の結果

タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MSのみ）

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** メインツールバーの Compound Details View ボタンをクリックします。 **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。**［表示］> ［化合物フラグメントスペクトル結果］**をクリックします。 **c** データのないウィンドウをすべて閉じます。 **d** 化合物リストウィンドウで、削除する列のヘッダーを右クリックし、**［列の削除］**をクリックします。 **e** 化合物リストウィンドウで、化合物を切り替えます。	• 全イオン MS/MS データの分析中でない限り、［化合物フラグメントスペクトル結果］ウィンドウは空です。137 ページの「全イオン MS/MS モードで測定したデータファイルの解析」を参照してください。 • 化合物リストウィンドウで化合物を切り替えると、他のウィンドウの内容が自動的に更新され、選択した化合物に関する情報が表示されます。 • 詳細は、オンラインヘルプを参照してください。

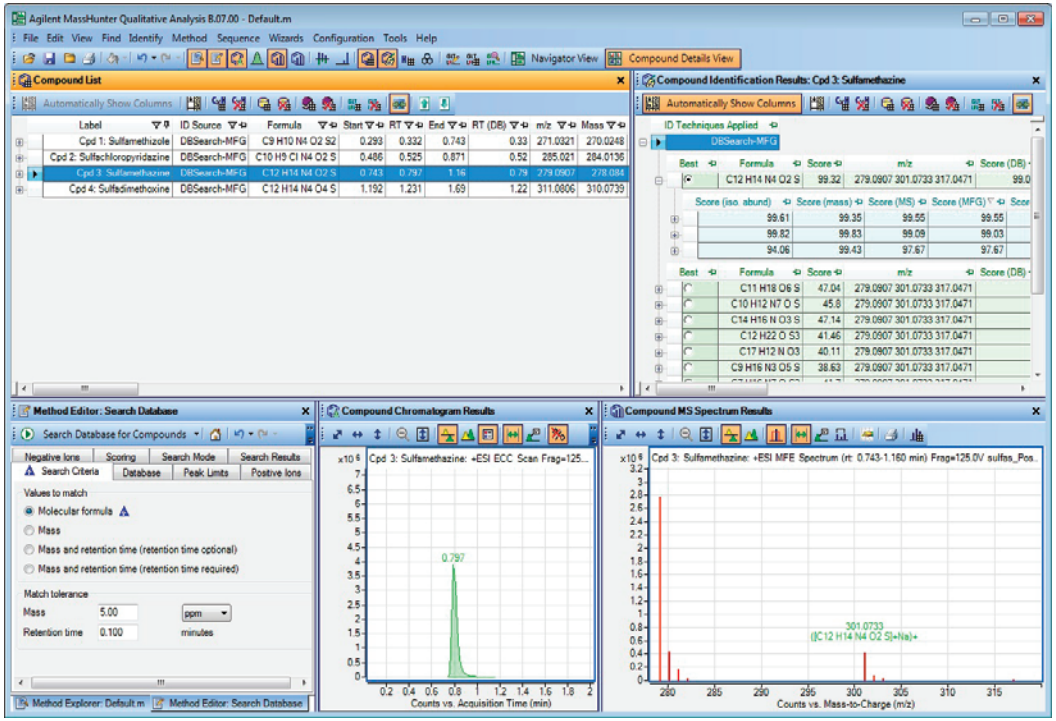
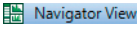


図 50　化合物詳細表示での sulfas_PosMS.d の化合物 1 ～ 4 の確認

タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
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  ボタンをクリックします。	• 化合物詳細表示とナビゲーション表示は、いつでも切り替えることができます。同時に複数のデータファイルを開いている場合は、ナビゲーション表示を使用します。開いているデータファイルが 1 つの場合は、どちらの表示も使用できます。

タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MSのみ）

70 ページの「タスク 1. Molecular Featureによる化合物の検出（LC/MS - MSのみ）」ページで検出し、74 ページの「タスク 2. 化学式の作成と化合物の同定（LC/MS - MSのみ）」ページで同定した各化合物のレポートを作成します。

タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
1 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。 • 拡大された指定ピークの MS スペクトルの表示をオフにします。 • レポートの MS/MS オプションをオフにします。	**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。 **b** **［MSスペクトルの表示］**チェックボックスの選択を解除します。 **c** **［MS/MSスペクトルの表示］**チェックボックスの選択を解除します。 **d** **［MS/MSピークテーブルの表示］**チェックボックスの選択を解除します。	• 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。

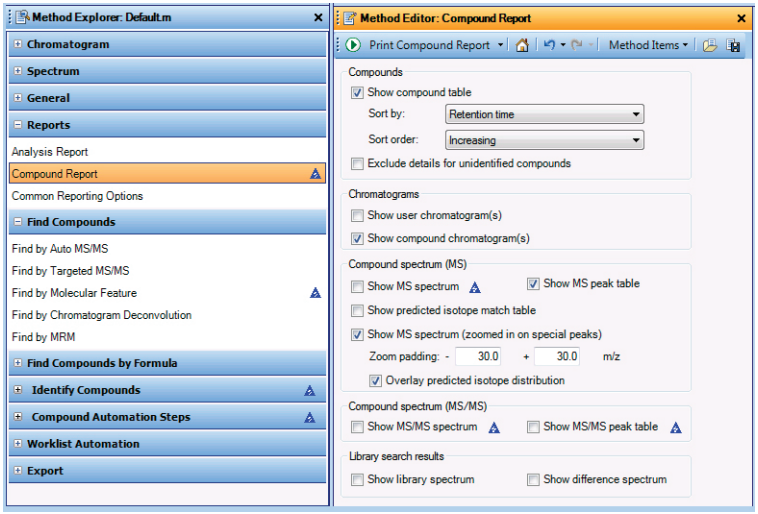
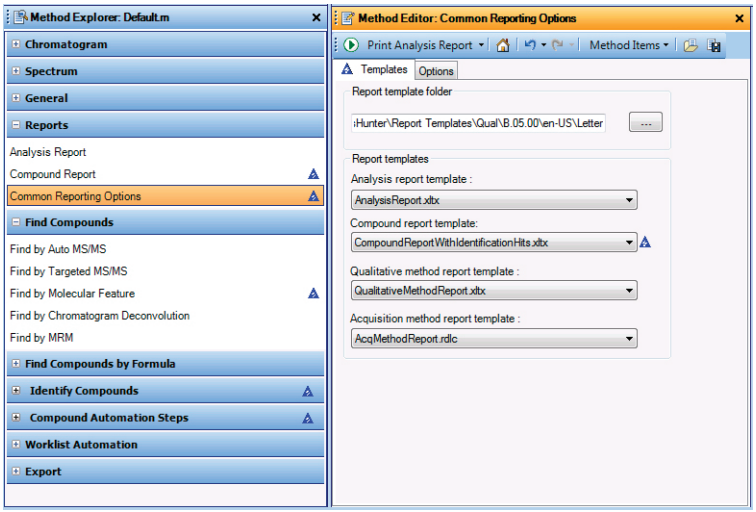


図 51　［メソッドエディタ］の ［化合物レポート］セクション

タスク 3. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
2 （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.xlsx** 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。171 ページの「レポートテンプレートのカスタマイズ」を参照してください。



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 52 ［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

3 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。 b **［印刷プレビュー］**チェックボックスをオンにします。 c **［OK］**をクリックします。レポートを確認します。 d **［印刷プレビューを閉じる］**アイコンをクリックします。	• ［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。 • 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。
4 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。	a **［ファイル］** > **［データファイルを閉じる］**をクリックします。 b 結果の保存を求められたら **［いいえ］**をクリックします。	

タスク 4. 化学式による化合物の検出とサンプル純度の計算（LC/MS - MSのみ）

［化合物の検出］アルゴリズムにより、データ中の化合物を検出し、各化合物の平均MSスペクトルを作成します。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。また、サンプルの純度も計算できます。サンプルの純度を計算する前に、異なるクロマトグラムを整列させます。

タスク 4. 化学式による化合物の検出（LC/MS - MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosMS.d** クロマトグラムを開きます。 • 一般ワークフローを使用します。 • 0.2～1.5分の範囲を選択します。	**a** **［ファイル］>［データファイルを開く］**をクリックします。 **b** **sulfas_PosMS.d** を選択して **［OK］** をクリックします。 **c** **［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］**をクリックします。詳細は、70 ページの「sulfas_PosMS.dクロマトグラムを開きます。」を参照してください。 **d** ［クロマトグラム結果］ツールバーの **［ズーム中に Y 軸をオートスケール］** アイコン をクリックします。 **e** **［範囲選択］** ツールをクリックし、0.2～1.5分の範囲を選択します。	• 化学式の確認とサンプル純度のワークフローに切り替える場合、［化合物リスト］テーブルは自動的にサンプル純度の列を表示します。 • **［式の確認とサンプル純度ワークフロー］** セクションには［化学式による検出］セクションがあります。
2 クロマトグラムの指定された範囲内で［化学式による検出］アルゴリズムを実行するために、パラメータを設定します。 • サンプル純度の計算を有効にします。 • TIC %、ADC %、UV A% の純度値を計算します。 • 純度値には最大値を使用します。	**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］**セクションをクリックします。 **b** **［確認する式のソース］** として **［データベース/ライブラリ］** をクリックし、default.csv を選択します。 **c** ［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 - サンプル純度］**セクションをクリックします。 **d** **［サンプル純度の計算］** チェックボックスをオンにします。 **e** **［TIC %］**、**［ADC %］**、**［UV A%］** チェックボックスをオンにします。 **f** **［選択したすべてのアルゴリズムの最大値］** をクリックします。 **g** **［最小許容純度］** ボックスに20を入力します。	• タイトルバーをダブルクリックすると、フローティングウィンドウが固定されます。一般ワークフローのデフォルトでは、［メソッドエディタ］ウィンドウはフローティングです。ウィンドウのタイトルを右クリックして **［Floating］** をクリックすることもできます。 • 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。 • このデータファイルには複数のサルファ剤が含まれるため、予想される純度は20%程度です。

タスク 4. 化学式による化合物の検出（LC/MS - MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
• MS シグナルの時間の遅れを 0.045 分に調整します。	**h** メソッドエクスプローラウィンドウの **[化学式による検出 - サンプル純度] > [時間の遅れ]** セクションをクリックします。 **i** **[時間の遅れを使用する]** チェックボックスをオンにします。 **j** **[時間の遅れ（分）]** パラメータに 0.045 を入力します。	• 複数のシグナルを使用してサンプル純度を計算する場合、異なるシグナルのピークが自動的に照合されるので、シグナルを整列させてからアルゴリズムを実行することをお勧めします。
• クロマトグラムに相対高さフィルタを追加します。	**k** メソッドエクスプローラウィンドウの **[化学式による検出 - クロマトグラム] > [EICピークフィルタ]** セクションをクリックします。 **l** **[相対高さ]** チェックボックスをオンにします。 **m** **[%（最大ピークに対して）]** パラメータに 5 を入力します。デフォルトメソッドでは、この値がデフォルトです。	• 積分アルゴリズムから返されるピークを限定することができます。

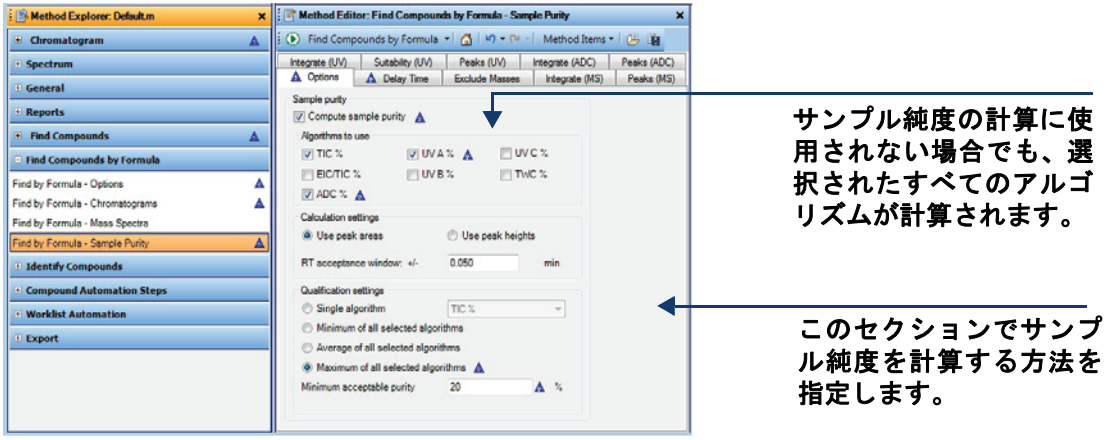


図 53 ［化学式による化合物の検出］アルゴリズム - サンプル純度オプションの設定

タスク 4. 化学式による化合物の検出（LC/MS - MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント
3 指定した範囲内で化学式による検出アルゴリズムを実行し、結果を確認します。	**a** **[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]** タブをクリックします。 **b**  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。 **c** [MS　スペクトル結果] ウィンドウの [リストペインの最大数] を 3 に変更します。 **d** **[表示]** > **[化合物リスト]** をクリックし、[化合物リスト] ウィンドウを開きます。 **e** [化合物リスト] ウィンドウで、ツールバーの **[列の自動表示]** アイコンがオフになっている場合は、アイコンをクリックします。 **f** [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。 **g** [化合物リスト] ウィンドウで、[列の自動表示] アイコンをクリックします。 **h** 含めない列をテーブルから削除します。	• 定性分析プログラムにより、選択した範囲から 4 つの化合物が検出されます。 • [カテゴリ] 列をクリックすると、列は同じアルゴリズムごとに表示されます。列は、各セクションの中でアルファベット順に表示されます。 • [化合物リスト] は [定性分析] ウィンドウの上部にドッキングされ、さらに多くの列が表示できるようになります。ウィンドウの移動の詳細については、19 ページの「タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更」を参照してください。
4 サンプル純度列を表示します。 • [列の自動表示] アイコンがオフになっている場合は、以下の手順で [純度] 列を手動で表示します。	**a** 列を右クリックし、**[列の追加 / 削除]** をクリックして [列の追加 / 削除（拡張設定）] ダイアログボックスを開きます。 **b** **[カテゴリ]** 列ヘッダーをクリックして、列を並べ替えます。 **c** **[純度値]**、**[純度結果]**、**[ADC% 面積]**、**[TIC% 面積]**、**[UVA% 面積]**、**[UVB% 面積]** の各列をオンにします。 **d** **[OK]** ボタンをクリックします。	

タスク 4. 化学式による化合物の検出（LC/MS - MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント

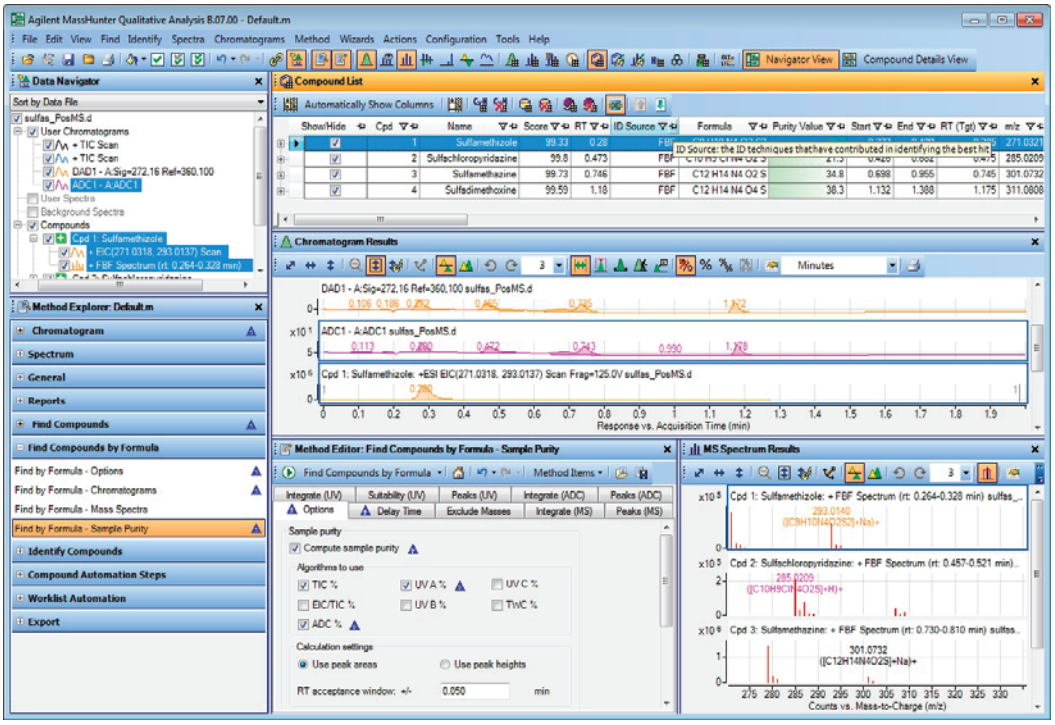


図 54 サルファ剤混合物中の4つの化合物すべてを検出

- ［データナビゲータ］の［化合物］のアイコンは、化合物がサンプル純度テストに合格したかどうかを示します。

- ［純度値］列は次のように色分けされています。
  - 緑 - 合格
  - 黄色 - 不合格
  - 赤 - 測定不可

5 化合物詳細表示で、結果を確認します。

a メインツールバーの Compound Details View ボタンをクリックします。
b データのないウィンドウをすべて閉じます。
c 化合物リストウィンドウで、化合物を切り替えます。

- 全イオン MS/MS データの分析中でない限り、［化合物フラグメントスペクトル結果］ウィンドウは空です。137 ページの「全イオン MS/MS モードで測定したデータファイルの解析」を参照してください。

タスク 4. 化学式による化合物の検出（LC/MS - MSのみ）（続き）

ステップ	詳細説明	コメント

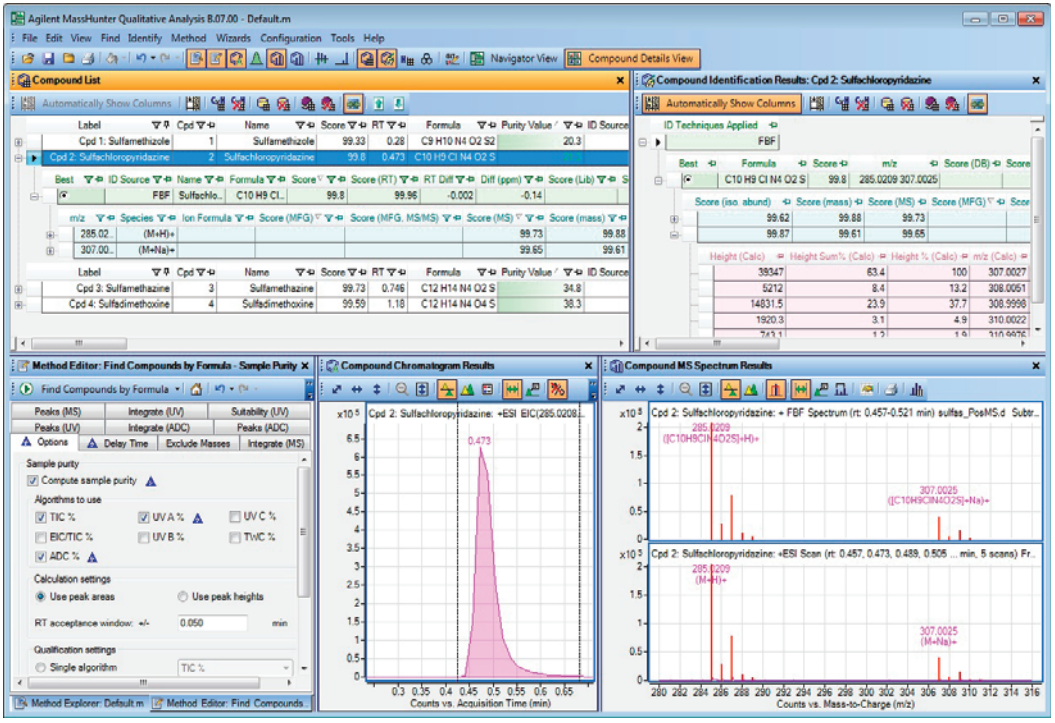


図 55　サルファ剤混合物中の4つの化合物すべてを検出

6 ナビゲーション表示に戻り、結果を保存せずにデータファイルを閉じます。

a メインツールバーの Navigator View ボタンをクリックします。
b **［ファイル］> ［データファイルを閉じる］**をクリックします。
c 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 5. タンパク質消化物のMolecular Feature Extraction（LC/MS - MSのみ）

このタスクでは、MSデータのみを用いてタンパク質消化物のMolecular Feature Extractionを行います。

タスク 5. タンパク質消化物のMolecular Feature Extraction（LC/MS - MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
1 Peptide Sequence Editor機能を有効にします。	**a** **[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]** をクリックします。 **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。 **c** **[OK]** ボタンをクリックします。 **d** **[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。 **e** **[Peptide Sequence Editor]** チェックボックスをオンにします。 **f** **[OK]** をクリックします。	• ［電荷の状態］タブの［ペプチド］オプションは、**[Peptide Sequence Editor]** または **[BioConfirm]** チェックボックスがオンになっている場合以外は使用できません。 • 一般ワークフローに切り替えて、レイアウトおよび表示されている［化合物］列をデフォルトに変更します。
2 以下のパラメータを用いて、データファイル **peptide-ms-only.d** のMolecular Feature Extractionを行います。 • 時間範囲は2.5～4分です。 • 同位体モデルをペプチドに指定します。 • アバンダンスの高いものから 20 化合物のみを表示するようにフィルタをかけます。 • ウィンドウレイアウトを変更し、図 56（次ページ）に合わせます。	**a** **peptide-ms-only.d** データファイルを開きます。 **b** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**[化合物の 検出]** > **[Molecular Feature による検出]** をクリックし、［メソッドエディタ］ウィンドウにパラメータを表示します。 **c** **[抽出]** タブで、**[リテンションタイムの制限]** チェックボックスをオンにします。 **d** 2.5 – 4を入力します。 **e** 必要に応じて **[*m/z* の制限]** チェックボックスをオフにします。 **f** **[電荷の状態]** タブの **[同位体モデル]** リストで **[ペプチド]** を選択します。 **g** **[化合物フィルタ]** タブで、**[化合物の数を制限する]** チェックボックスをオンにし、化合物数に20を入力します。 **h** **[結果]** タブで **[MFE スペクトルの抽出]** と **[ECC の抽出]** チェックボックスをオンにします。 **i**  をクリックして、データファイルに対して **[Molecular Feature による化合物の検出]** アルゴリズムを実行します。	• **[化合物の数を制限する]** フィルタでは、抽出されるFeature数は制限されません。定性分析プログラムに表示される化合物数を制限するだけです。 • ［定性分析Molecular Feature］アルゴリズムを用いて、Feature を抽出します。さらに、Agilent Mass Profiler Professional ソフトウェアを使用すると、さまざまな化合物を比較できます。 • **[ファイル]** > **[エクスポート]** > **[CEF 形式]** コマンドを使用して、化合物を CEF ファイルにエクスポートすることができます。 • ［シーケンスと照らし合わせる］アルゴリズムを使用する場合は、**[MS/MS スペクトルの抽出]** チェックボックスもオンにします。このチェックボックスをオフにすると、列は［化合物リスト］ウィンドウと［化合物同定結果］ウィンドウに表示されません。

タスク 5. タンパク質消化物のMolecular Feature Extraction（LC/MS - MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
3 *m/z* 570.7362イオンの化合物スペクトルを検出し、電荷の状態、質量、イオン種を特定します。	**a** ［MS スペクトル結果］ウィンドウで、スクロールして*m/z* 570.7362.+3166のイオンを含むスペクトルを探します。 **b** 電荷状態を確認します。 **c** イオン種を検出します。 **d** ［化合物リスト］ウィンドウでこの化合物を検索します。 **e** 質量を確認します。	• 化合物3には、電荷状態が+2のイオンを含むスペクトルがあります。 • 質量は 1139.4578 です。イオン種は (M+2H)+2 です。イオン種は［MS スペクトル結果］ウィンドウに表示されます。また［スペクトルピークリスト］ウィンドウの**［イオン種］**列にも表示されます。

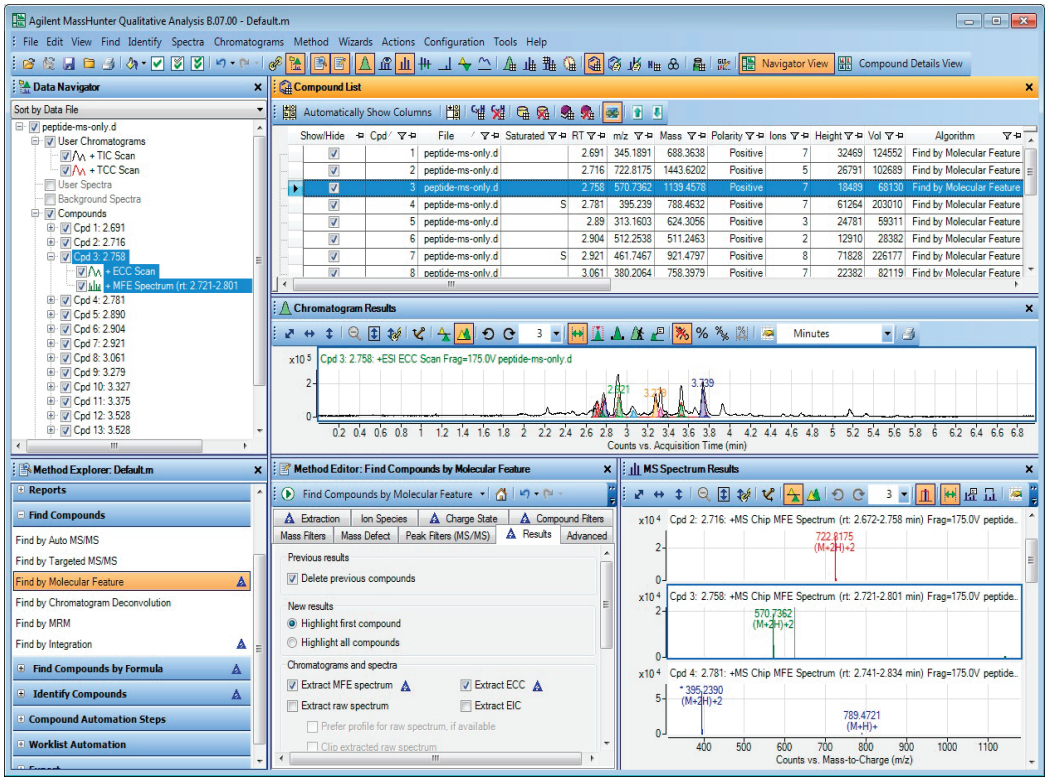
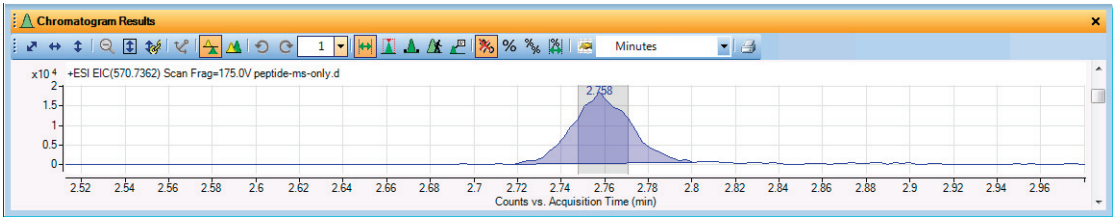
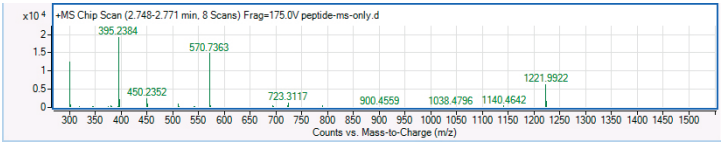


図 56　定性分析のMolecular Featureによる化合物の検出

タスク 5. タンパク質消化物のMolecular Feature Extraction（LC/MS - MSのみ）

ステップ	詳細説明	コメント
4 このペプチドでEIC（積分済み）を抽出します。 • *m/z*値として570.7362を使用します。	**a** データファイルのTIC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。 **b** **[タイプ]** リストで**[EIC]**を選択します。 **c** **[抽出時に積分]** チェックボックスをオンにします。 **d** *m/z*値として570.7362を入力します。 **e** **[詳細]** タブをクリックします。 **f** **[対称(ppm)]** を選択し、**[OK]** をクリックします。	データファイルに対して［このクロマトグラムの*m/z*の範囲］が適切に設定されている必要があります。このQ-TOFデータファイルには、+/- 100 ppmの範囲が適しています。
5 EICの最初の積分ピークの平均スペクトルを抽出します。 • 最初の積分ピークであると思われる物を拡大します。 • 最高ピークを中間点とした範囲を選択します。	**a** ［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。 **b** EIC を右クリックし、カーソルをドラッグして 2.76 分のピーク周辺を拡大します。 **c** **[範囲選択]** ツールが選択されていることを確認し、ピークトップを中心とした範囲を選択します。	
		
	d ピークの影の付いた領域をダブルクリックし、平均スペクトルを抽出します。	
		
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。 **b** 結果の保存を求められたら、**[いいえ]** をクリックします。	

MS/MSデータのタスク（LC/MS - Q-TOF、トリプル四重極）

タスク 6. 化合物の検出（LC/MS - MSとMS/MS）

［化合物の検出］アルゴリズムにより、MS/MS データ中の化合物を同定し、各化合物の平均MSスペクトルとMS/MSスペクトルを作成します。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。

タスク 6. 化合物の検出（LC/MS - MSとMS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosAutoMSMS.d** データファイルの TIC を開き、0.2 ～ 1.3 分の範囲を選択します。 • 一般ワークフローを使用します。 • 0.2～1.3分の範囲をハイライトします。	**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。 **b** デモデータファイルのディレクトリの **sulfas_PosAutoMSMS.d** データファイルをクリックし、**［開く］** をクリックします。 **c** **［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。 **d** **［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。 **e** **［OK］** ボタンをクリックします。 **f** **［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。 **g** **［GC］** チェックボックスをオフにします。 **h** **［OK］** をクリックします。 **i** 必要に応じて［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ます。 **j** 必要に応じて［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］** ツールをクリックします。 **k** クリック＆ドラッグで、0.2 分 ～ 1.3 分の範囲を選択します。	• default.m メソッドが自動的に開きます。別のメソッドを開くには **［メソッド］** > **［開く］** をクリックしてメソッドを選択し、**［開く］** をクリックします。 • このデータファイルを開くと、青色の三角形が［メソッドエクスプローラ］の［時間の遅れを調整］タブに自動的に表示されます。このデータファイルにはDADデータとADCデータも含まれています。時間の遅れを調整しない場合は、この青色の三角形は無視してかまいません。 • いくつかの化合物の検出アルゴリズムは、GC/MS データファイルに対してのみ動作します。［GC］チェックボックスをオフにすると、これらのアルゴリズムは表示されません。

タスク 6. 化合物の検出（LC/MS - MSとMS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント

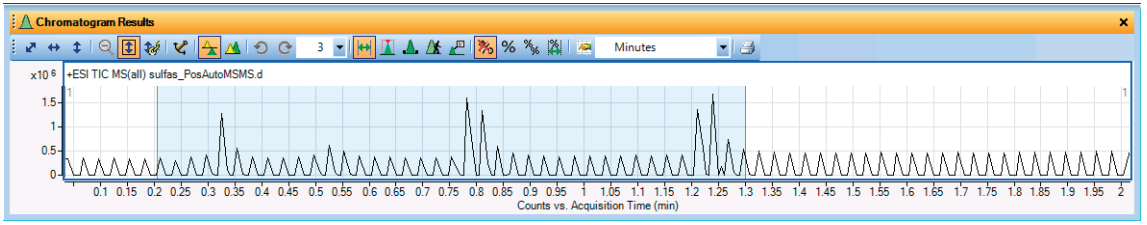


図 57 sulfas_PosAutoMSMS.d データファイルの TIC クロマトグラム - 選択された範囲

2 クロマトグラムの 0.2 ～ 1.3 分から化合物を検出します。
- 正の MS/MS TIC スレッショルドに100,000を入力します。
- 121.0504 と 922.0097 の質量を除外します。

a ［メソッドエクスプローラ］で **［化合物の検出］** > **［自動MS/MSによる検出］** をクリックします。
b ［処理］タブの **［正のMS/MS TICスレッショルド］** に、100000 と入力します。
c **［除外する質量］** タブをクリックします。
d **［すべての新しいクロマトグラムから質量（または *m/z* 範囲）を除外する］** をクリックします。
e 値に 121.0504, 922.009 を入力します。
f **［対称(ppm)］** を選択します。
g **20**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。図 57 を参照してください。
- 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。

注記：［除外する質量］タブを変更すると、［メソッドエクスプローラ］の［クロマトグラム］、［化学式による化合物の検出］、［化合物の自動解析ステップ］の各セクションにも青色の三角形が表示されます。これらの同じ値がメソッドのその他のセクションでも使用されているからです。

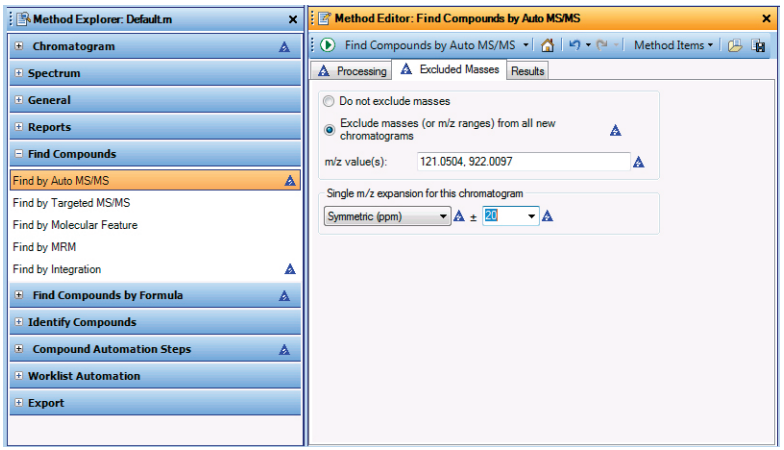


図 58 ［自動MS/MSによる化合物の検出］の［除外する質量］タブ

タスク 6. 化合物の検出（LC/MS - MSとMS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント
• EIC、MSスペクトル、MS/MSスペクトルの抽出を選択します。	**h** **［結果］**タブをクリックします。 **i** **［EIC の抽出］**、**［MS の抽出］**、および**［MS/MS の抽出］**をチェックをオンにします。 **j** **［ECCの抽出］**チェックをオフにします。 **k**  をクリックして、データファイルに対して**［自動MS/MSによる化合物の検出］**アルゴリズムを実行します。	• **［検出］**＞**［自動MS/MSによる化合物の検出］**＞**［選択範囲］**から実行することもできます。 • 定性分析プログラムにより、この設定では選択範囲から4つの化合物が検出されます。 • 次のタスクでは、どの化合物がサルファ剤かを同定します。
3 化合物4のみのMS、MS/MS両スペクトルを表示します。図 59 を参照してください。	**a** 化合物4のみをハイライトします。 **b** メインツールバーの**［ハイライトされた項目のみを表示］**ツールをクリックします。 **c** 化合物4を展開し、クロマトグラムと2つのスペクトルを表示します。［データナビゲータ］ウィンドウの化合物の + サインをクリックして、クロマトグラムとスペクトルのラベルを表示します。	• 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。 • プリカーサとプロダクトの両スペクトルが各化合物から抽出されることに注目してください。ひし形のマークはプリカーサイオンを表します。［MS および MS/MS スペクトルの表示オプション］ダイアログボックスから、MS/MS プリカーサイオン記号に使用する色を変更できます。

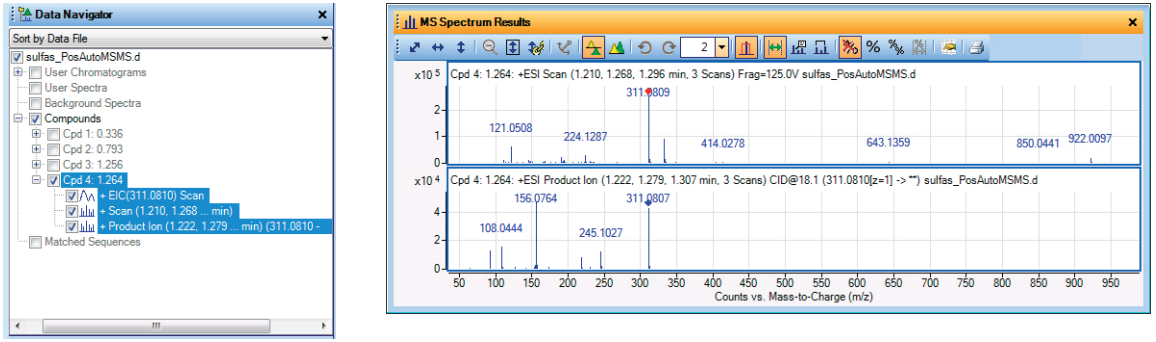


図 59　化合物4のMSスペクトルとMS/MSスペクトルを表示した［データナビゲータ］ウィンドウと［MSスペクトル結果］ウィンドウ

タスク 7. 化合物の同定と化学式の推定（LC/MS - MS と MS/MS）

このタスクでは、タスク 6 で検出された化合物の化学式を同定および推定します。

タスク 7. 化合物の同定と化学式の推定（LC/MS - MS と MS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント
1 質量に基づき化合物 1 ～ 4 のデータベース検索を行います。93 ページの図 60 を参照してください。	a ［データナビゲータ］ウィンドウのすべての化合物をハイライトします。 b ［メソッドエクスプローラ］で **［化合物の同定］** > **［データベース検索］** をクリックします。 c ［メソッドエディタ］ウィンドウの［検索基準］タブで、**［質量］** をクリックします。 d **［データベース］** タブをクリックします。 e **［データベースパス］** が **default.csv** であることを確認します。 f メインメニューから **［同定］** > **［データベースで化合物を検出］** をクリックします。**［データベースで化合物を検索］** 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。 g ［化合物リスト］が表示されていない場合は、**［表示］** > **［化合物リスト］** をクリックします。 h ［化合物同定結果］ウィンドウが表示されていない場合は、**［表示］** > **［化合物同定結果］** をクリックします。 i ［化合物リスト］の化合物 1 ～ 3 の **［表示 / 非表示］** チェックボックスをオンにします。以前のタスクにより化合物 1 ～ 3 は非表示にされていました。メインツールバーの **［ハイライトされた項目をすべて表示］** ツールをクリックすることもできます。	• ［化合物リスト］で 3 つのサルファ剤が同定されたことを確認してください（94 ページの図 61 を参照）。 • ［データベース検索］アルゴリズムを実行しても、化合物 3 の化合物名は検出されていないことを確認してください。

タスク 7. 化合物の同定と化学式の推定（LC/MS - MS と MS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント

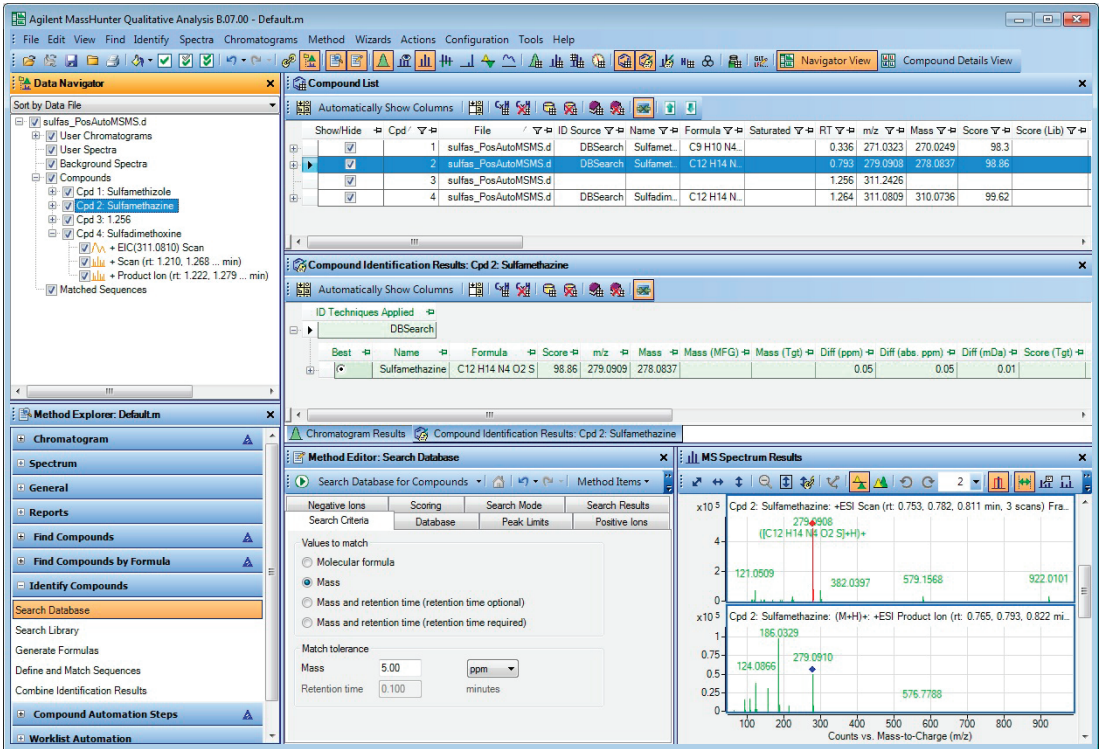
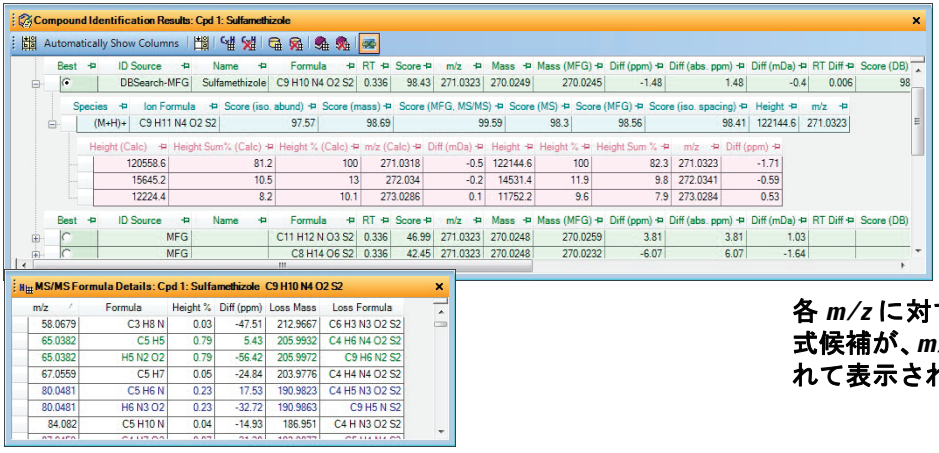


図 60　データベース検索で同定された sulfas_PosAutoMSMS.d データファイルの化合物

タスク 7. 化合物の同定と化学式の推定（LC/MS - MS と MS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント
2 化合物1～4の化学式を作成します。 • ［化合物リスト］を表示します。 • ［化合物同定結果］リストを表示します。 • ［MSスペクトル結果］ウィンドウを閉じます。 ヒント：図 61 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。 **b** **［電荷の状態］** タブをクリックし **［一般的な有機分子］** を選択します。 **c** 4つの化合物すべてをハイライトします。 **d** **［化合物から化学式を作成］** ツール（）をクリックしてアルゴリズムを実行するか、**［同定］** > **［化合物から化学式を作成］** コマンドをクリックします。 **e** ［データナビゲータ］ウィンドウで、表示する化合物をハイライトします。 **f** ［化合物同定結果］ウィンドウのスクロールバーを用いて、化学式の作成結果（MFG）を表示します。テーブルの第 2 レベルに複数の［スコア］列が表示されます。［ID ソース］列に、［データベース検索（DB-Search）］アルゴリズムおよび［化学式の作成（MFG）］アルゴリズムの双方により結果が検出されたことが表示されます。	• デフォルトでは、［化合物同定結果］ウィンドウは［クロマトグラム結果］と同じウィンドウにタブ表示されます。ウィンドウの下にあるタブをクリックし、ウィンドウを切り替えます。 • 該当する *m/z* で拡大すると、スペクトルプロット上に予測同位体存在比が見えます。 • すべての化合物に関して 1 つ以上の化学式が検出されます。 • ［データを含まない列を隠す］アイコンをクリックすると、自動的に空の列が非表示になります。［列の削除］ショートカットコマンドも使用できます。 • データベース検索で検出された化学式は［化学式の作成］アルゴリズムで特定された化学式と同じです。 • **［コンフィグレーション］** > **［化合物ラベルコンフィグレーション］** から化合物ラベルを変更することができます。



各 *m/z* に対するすべての化学式候補が、*m/z* ごとに色分けされて表示されます。

図 61 化合物 1 の［化合物同定結果］ウィンドウと［MS/MS 化学式の詳細］ウィンドウ

タスク 8. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS/MS）

このタスクでは、タスク 6 で検出し、タスク 7 で同定した各化合物のレポートを作成します。

タスク 8. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント
1 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。 • 必要に応じて、拡大された指定ピークのMSスペクトルの表示をオフにします。 • レポートのMS/MSオプションをオンにします。	a ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［レポート］**>**［化合物レポート］**をクリックします。 b 必要に応じて、**［MSスペクトルの表示（指定ピークの拡大表示）］**チェックボックスをオフにします。 c **［MS/MSスペクトルの表示］**と**［MS/MSピークテーブルの表示］**チェックボックスをオンにします。	• このタブでオンにしたセクションのみがレポートに含まれます。 • レポートの印刷に使用するテンプレートを変更するには、［メソッドエクスプローラ］ウィンドウの**［レポート］**>**［共通レポートオプション］**をクリックします。レポートに使用する別のテンプレートを選択します。

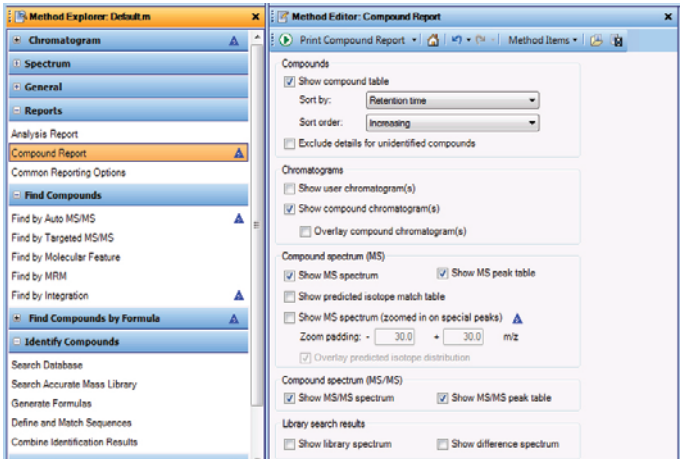
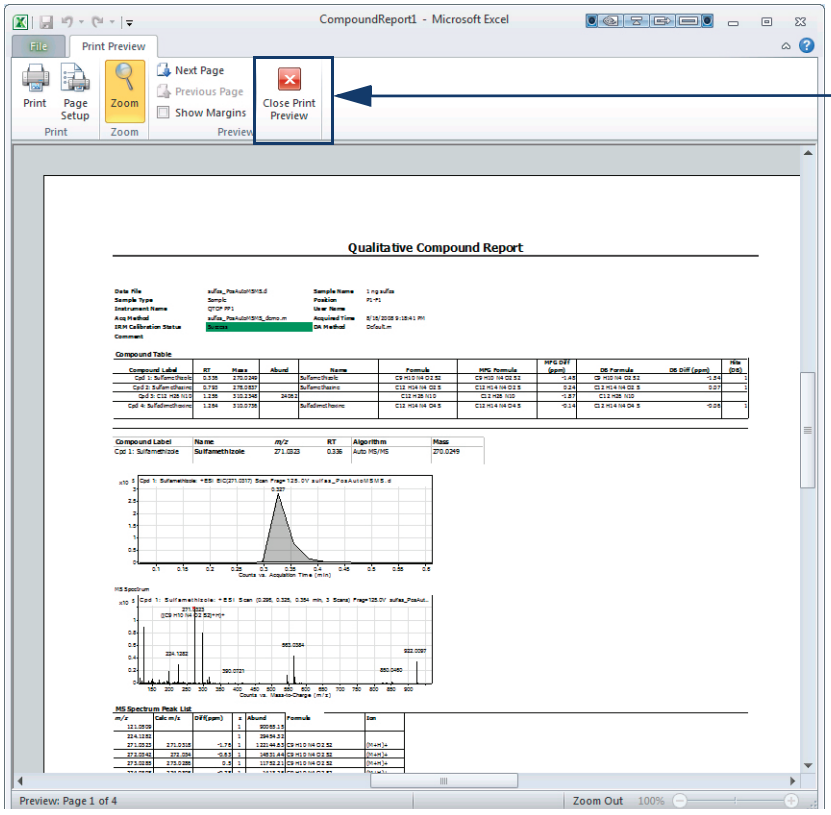


図 62　［メソッドエディタ］の［化合物レポート］ウィンドウ

2 レポートを印刷します。 • レポートをプレビューします。	a **［化合物レポートの印刷］**アイコン をクリックし、レポートを印刷します。 b ［化合物レポートの印刷］ダイアログボックスで、**［すべての結果］**ボタンをクリックします。 c **［レポートの印刷］**をオンにします。 d プリンタを選択します。 e **［印刷プレビュー］**をオンにします。 f **［OK］**をクリックします。	• **［レポートを PDF ファイルで保存］**チェックボックスをオンにすると、PDF ファイルが作成されます。この方法は、Excel のインストール後に Microsoft Excel PDF のアドインをインストールしている場合にのみ使用できます。

タスク 8. 化合物レポートの印刷（LC/MS - MS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント



このボタンを押すと、レポートはプリンタに送信されずに［印刷プレビュー］ウィンドウが終了します。

図 63 化合物レポートの印刷プレビュー

3 ［印刷プレビュー］ウィンドウを閉じます。

a ツールバーで**［印刷プレビューを閉じる］**をクリックします。

- レポートを印刷するには［印刷］ボタンをクリックします。レポートはステップ 2 の［化合物レポートの印刷］ダイアログボックスで選択したプリンタを使用して印刷されます。

4 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。

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

タスク 9. 化合物の検出とライブラリの検索（LC/MS - MS/MS）

［ターゲット MS/MS による化合物の検出］アルゴリズムでは MS/MS データの化合物を同定し、各化合物の MS と MS/MS スペクトルを抽出します。複数のコリジョンエネルギーからの MS/M スペクトルを使用する場合、すべてのコリジョンエネルギーの平均 MS/M スペクトルを抽出したり、各コリジョンエネルギーの MS/M スペクトルを個別に抽出することができます。

［精密質量ライブラリの検索］アルゴリズムではプロダクトイオンスペクトルのライブラリファイル（CDB）を検索できます。セントロイドスペクトルのみが検索できるので、すべてのプロファイルスペクトルは最初にセントロイドスペクトルに変換しておく必要があります。

タスク 9. 化合物の検出と精密質量ライブラリの検索（LC/MS - MS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosTargetedMSMS.d** データファイルの TIC を開きます。 • 一般ワークフローを使用します。	**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。［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。 **b** **［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。 **c** **［OK］**をクリックします。 **d** **［ファイル］** > **［データファイルを開く］**をクリックします。 **e** **sulfas_PosTargetedMSMS.d** をクリックし **［開く］**をクリックします。 **f** 必要に応じて、［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。 **g** 必要に応じて、［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。	• **［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。 • 別のメソッドを開くには **［メソッド］** > **［開く］**をクリックしてメソッドを選択し、**［開く］**をクリックします。 • 青色の三角形が［メソッドエクスプローラ］の［時間の遅れを調整］タブに自動的に表示されます。このデータファイルには DAD データと ADC データも含まれています。時間の遅れを調整しない場合は、この青色の三角形は無視してかまいません。

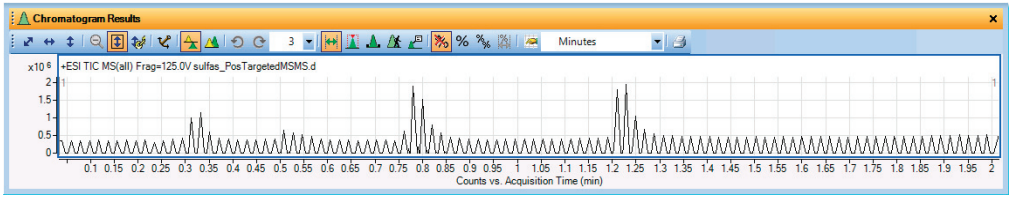


図 64　sulfas_PosTargetedMSMS.d データファイルの TIC クロマトグラム

タスク 9. 化合物の検出と精密質量ライブラリの検索（LC/MS - MS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント
2 ターゲットMS/MSアルゴリズムを使用して化合物を検出します。 • MS/MSクロマトグラムとMS/MSスペクトルの抽出を選択します。	**a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［化合物の検出］** > **［ターゲット MS/MS による検出］**をクリックします。 **b** **［結果］**タブをクリックします。 **c** **［MS/MSクロマトグラムの抽出］**と**［MS/MSスペクトルの抽出］**のチェックボックスをオンにします。 **d** **［検出］** > **［ターゲット MS/MS による化合物の検出］**をクリックします。	• 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。 • 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。
3 ［精密質量ライブラリの検索］アルゴリズムを使用して各化合物を検索します。 • Sulfas_AM_PCDL.cdb ライブラリを選択します。 • このライブラリが使用できない場合は、Personal Compound Database and Library（PCDL）プログラムをインストールしてください。 • 最小一致スコアを50に下げます。	**a** ［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。 **b** **［ライブラリの追加］**ボタンをクリックします。 **c** **［Sulfas_AM_PCDL.cdb］**を選択します。 **d** **［開く］**ボタンをクリックします。 **e** ［スコア (fwd)］に **20** を入力します。 **f** このタブの他のパラメータを確認します。 **g** ［検索基準］タブで、パラメータを確認します。 **h** ［データナビゲータ］ウィンドウのすべての化合物をハイライトします。 **i** **［同定］** > **［ライブラリで化合物を検索］**をクリックします。 **j** 化合物リストが表示されていない場合は、**［表示］** > **［化合物リスト］**をクリックします。 **k** 化合物同定結果が表示されていない場合は、**［表示］** > **［化合物同定結果］**をクリックします。	• 拡張子が CDB のライブラリを選択してい場合、ライブラリを検索すると［精密質量ライブラリの検索］アルゴリズムが実行されます。拡張子が L のライブラリを選択した場合、ライブラリを検索すると［ユニットマスライブラリの検索］アルゴリズムが実行されます。 • ［データナビゲータ］ウィンドウで化合物を右クリックして、**［ライブラリで化合物を検索］**をクリックして実行することもできます。 • ［検索基準］タブを使用すると、**イオン化モード**、**機器タイプ**、**コリジョンエネルギー**によって、検索するライブラリエントリを絞り込むことができます。 • 利用可能な場合、構造式が自動的に［MSスペクトル結果］ウィンドウに表示されます。

タスク 9. 化合物の検出と精密質量ライブラリの検索（LC/MS - MS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント

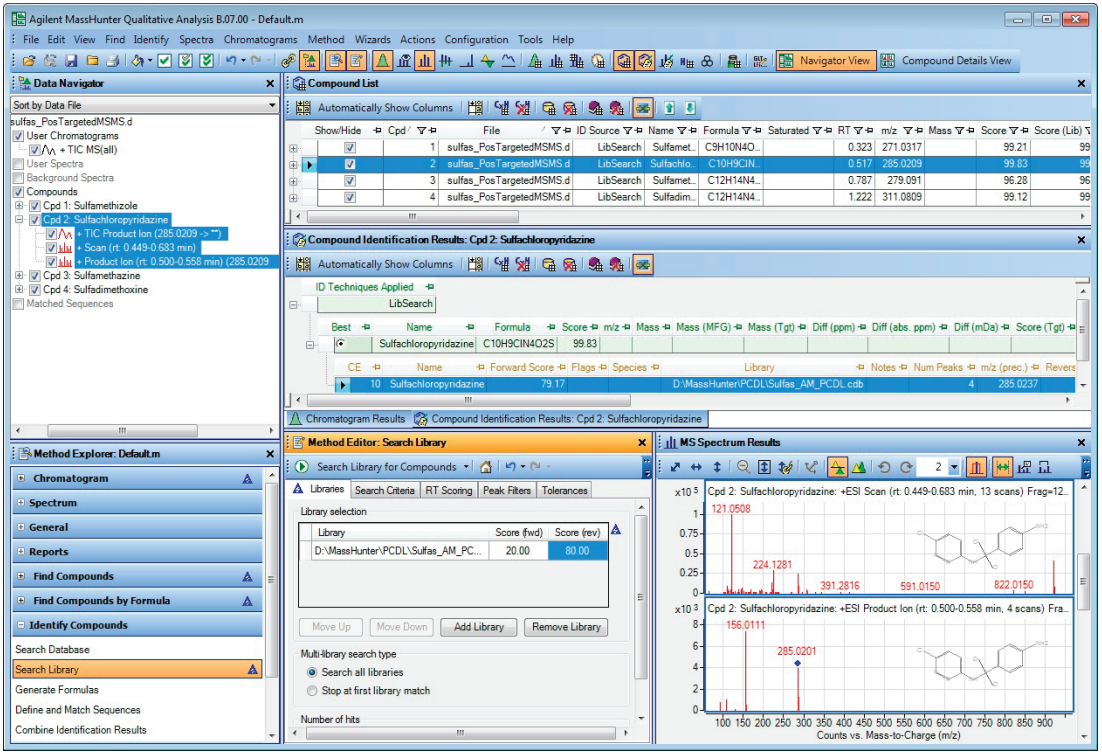


図 65　［精密質量ライブラリの検索］アルゴリズムの実行結果

4 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。

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

タスク 10. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS と MS/MS）

このタスクでは［オートMS/MS］モードの Q-TOF で得られたタンパク質消化物データの Molecular Feature Extractionを実行します。

タスク 10. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS と MS/MS）

ステップ	詳細説明	コメント
1 以下のパラメータを用いて、データファイル **peptide-auto.d** の Molecular Feature Extractionを行います。 • レイアウトがデフォルトレイアウトに戻っていることを確認します。 • 時間範囲は2.5～4分です。 • 同位体モデルにペプチドを設定します。 • アバンダンスの高いものから 20 化合物のみを表示するようにフィルタをかけます。 • ウィンドウレイアウトを変更し、図 66（次ページ）に合わせます。	**a** **peptide-auto.d**データファイルを開きます。 **b** **［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。 **c** **［OK］** をクリックします。 **d** ［メソッドエクスプローラ］で **［化合物の検出］** > **［Molecular Featureによる検出］** をクリックし、［メソッドエディタ］ウィンドウにパラメータを表示します。 **e** **［抽出］** タブで［ターゲット］のデータタイプに **［低分子(クロマトグラフ)］** を選択します。 **f** **［リテンションタイムの制限］** チェックボックスをオンにします。次に 2.5 – 4を入力します。 **g** **［電荷の状態］** タブで **［同位体モデル］** に **［ペプチド］** を選択します。 **h** **［化合物フィルタ］** タブで、**［化合物の数を制限する］** チェックボックスをオンにし、化合物数に20を入力します。 **i** ［結果］タブで **［MFE スペクトルの抽出］** と **［ECC の抽出］** チェックボックスをオンにします。 **j**  をクリックして、データファイルに対して **［Molecular Feature による化合物の検出］** アルゴリズムを実行します。 **k** ［クロマトグラム結果］ツールバーの［リストモード］ツールをクリックします。 **l** 必要に応じて［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］** で**1**を選択します。	• デフォルトレイアウトに戻すには、**［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。 • **［化合物の数を制限する］** フィルタでは、抽出されるFeature数は制限されません。定性分析プログラムに表示される化合物数を制限するだけです。 • **［同位体モデル］** のリストにペプチドがない場合は、［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で **［Peptide Sequence Editor］** チェックボックスをオンにして、この機能を有効にします。**［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］** をクリックして、このダイアログボックスを表示します。［Molecular Featureによる検出］セクションの［詳細］タブを表示するには、**［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。LMFE タブを表示するには、**［BioConfirm］** チェックボックスをオンにします。 • ［Molecular Feature］アルゴリズムを用いて、Feature を抽出します。この後、Agilent MassHunter Profiling ソフトウェアまたは GeneSpring MS ソフトウェアを用いて、異なる抽出からのデータを比較できます。
2 *m/z* 625.31585 イオンの化合物スペクトルを検出し、電荷状態を確認します。	**a** ［MS スペクトル結果］ウィンドウで、スクロールして *m/z* 625.3166 のイオンを含むスペクトルを探します。 **b** 電荷状態を確認します。	• 化合物7には、電荷状態が+1のイオンを含むスペクトルがあります。

タスク 10. タンパク質消化物の Molecular Feature Extraction の実行（LC/MS - MS と MS/MS）

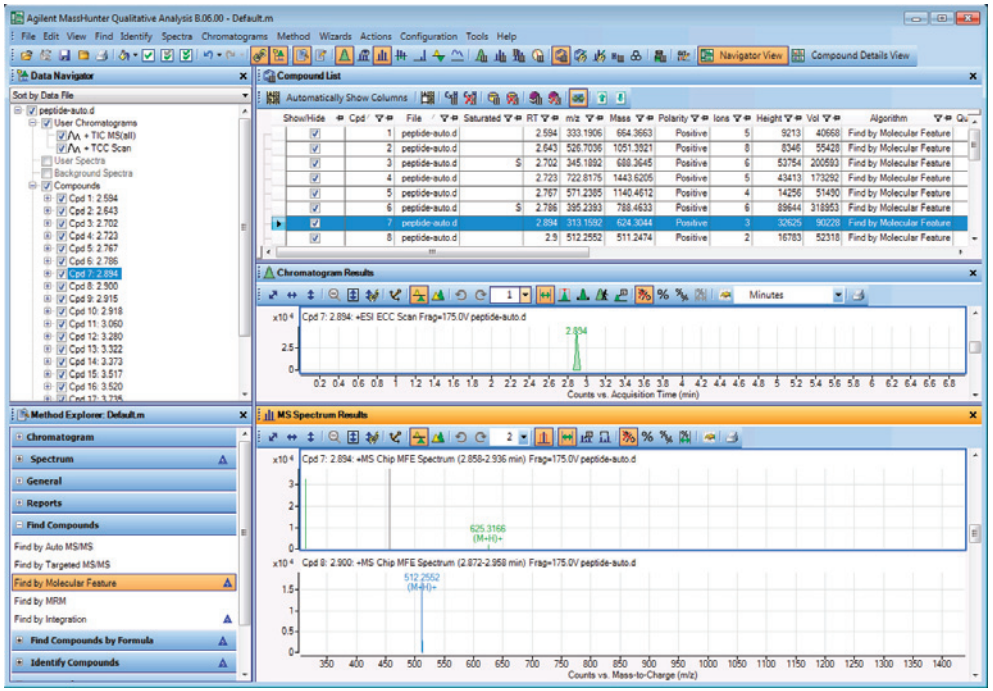
ステップ	詳細説明	コメント
		

図 66　自動MS/MSデータを用いたタンパク質消化物のMolecular Featureによる化合物の検出

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

実習 3
ワークフローを使用した定性分析メソッドの設定と実行

タスク 1. 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 104
タスク 2. クロマトグラムピーク調査ワークフローによる自動解析メソッドの設定と実行 110
タスク 3. MS ターゲット化合物のスクリーニングワークフローにより化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行 116
タスク 4. ワークリストで実行する定性メソッドの設定 121

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。また、解析や化合物同定を自動化するためのメソッド編集も学習します。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。そして、ワークリストを用いて自動化を実行するメソッドの作成も学習します。

定性分析パラメータのみ、または測定パラメータと定性分析パラメータの両方を用いたワークリストメソッドの作成方法を学習します。

説明には、MSのみのデータファイル（Q-TOF）を使用しますが、すべてのタスクはQ-TOFまたはトリプル四重極のどちらのMS/MSデータにも適用できます。

この章の例ではいくつかのワークフローを使用します。さまざまなワークフローの概要を把握して、実行するタスクに最も適したワークフローを決定することができます。詳細は、166 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/MS データと LC/MS データの両方をサポートします。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。他のワークフローでサポートされるのはLC/MSデータのみです。

BioConfirm ワークフローについては、オンラインヘルプ、ならびに『BioConfirm Quick Start Guide』および『BioConfirm Familiarization Guide』を参照してください。

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. 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 1. 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 **sulfas_PosMS.d**データファイルを開きます。 • データファイルが開かれたときに、プログラムによる自動ファイル処理が実行されないことを確認します。 • メソッドが Default.m であることを確認します。 • ウィンドウレイアウトがデフォルトレイアウトであることを確認します。	**a** デスクトップの **[Qualitative Analysis]** アイコンをダブルクリックします。 **b** [データファイルを開く]ダイアログボックスで**sulfas_PosMS.d**を選択します。 **c** **[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フにします。 **d** 必要に応じて **[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。 **e** **[開く]** をクリックします。 **f** **[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。 **g** **[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。 **h** **[OK]** をクリックします。 **i** **[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。 **j** すべてのチェックボックスをオンにして、すべてのオプションが使用できるようにします。 **k** **[OK]** ボタンをクリックします。	• 一般ワークフローのデフォルトのレイアウトが自動的に読み込まれます。このデフォルトレイアウトに戻すには、**[表示] > [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。このコマンドは常に、一般ワークフローに使用されるレイアウトに復元します。 • メソッドを読み込むには、以下の操作を行います。 ◦ **[メソッド]>[開く]** をクリックします。 ◦ メソッドを選択します。 ◦ **[開く]**をクリックします。 • 先の実習で述べたように、メソッドに変更を加えると、変更された項目の横と［メソッドエクスプローラ］の変更されたセクションの横に青色三角形が表示されます。
2 メソッドを設定し、TICクロマトグラムを抽出します。 • MS データに TIC クロマトグラムを定義します。 • MSのみのデータファイルであるため、サイクル合計をオフにします。	**a** [メソッドエクスプローラ] ウィンドウで、**[クロマトグラム] > [クロマトグラムの定義]** を選択します。 **b** **BPC**クロマトグラムを削除します。 **c** **[タイプ]**リストで**[TIC]**を選択します。 **d** ［MSレベル］が **[MS]** であることを確認します。 **e** **[サイクル合計を実行]** チェックボックスをオフにします。 **f** **[追加]** をクリックします。	
3 メソッドを編集し、データを積分します。 • 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)]** をクリックします。 **b** **[ピークフィルタ]** タブをクリックします。 **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。 **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。

タスク 1. 定性分析メソッドの設定と実行

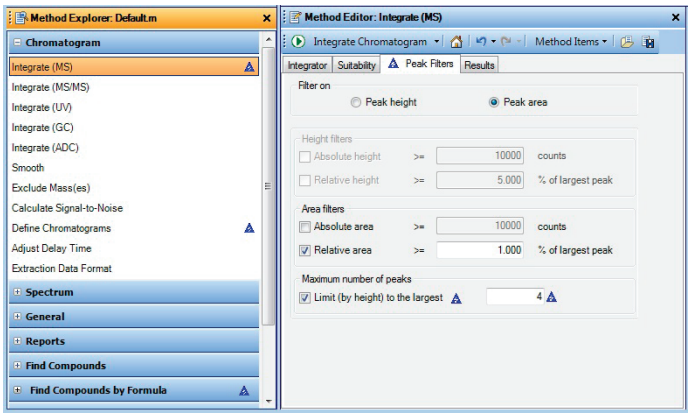
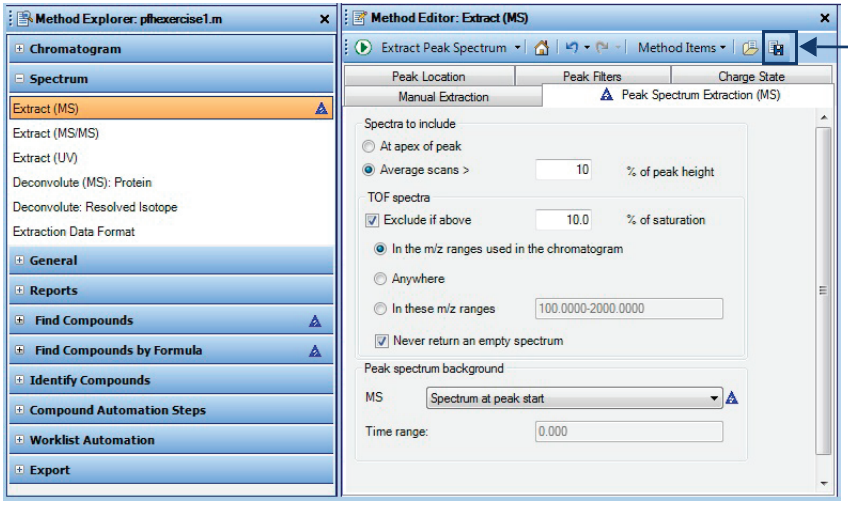
ステップ	詳細説明	コメント
		**[メソッドの保存]アイコンをクリックすると、現在のメソッドが保存されます。**

図 67 ［クロマトグラム］>［積分（MS）］>［ピークフィルタ］タブ

4 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。	
5 メソッドを iiiexercise1 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。 **b** **iiiexercise1**を入力します。 **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。
6 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）]** をクリックします。 **b** **[ピークスペクトル抽出（MS）]** タブをクリックします。 **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。	• メソッドを保存した後に変更を行った場合、現在のメソッドがコンピュータに保存されているメソッドと異なることを示すため、青色の三角形が追加されます。

タスク 1. 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



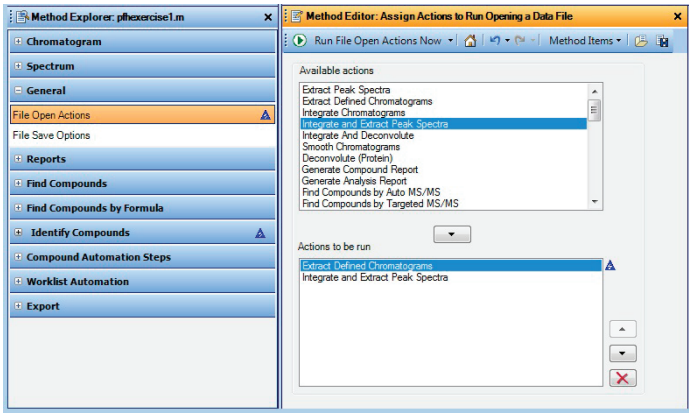
[メソッドの保存]アイコンをクリックすると、現在のメソッドが保存されます。

図 68 ［スペクトル］>［抽出(MS)］>［ピークスペクトル抽出(MS)］タブ

7 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。	• このスペクトルのラベルには、何かがスペクトルから減算されていることを示すため「減算」という文字が入っています。
8 メソッドを保存します。	• 以下の3つの方法のいずれかで、メソッドを保存します。 ◦  [メソッドエディタ］の**[メソッドの保存]** アイコン をクリックします。 ◦ ［メソッドエディタ］を右クリックし**[メソッドの保存]** をクリックします。 ◦ トップメニューから**[メソッド]>[保存]**をクリックします。	• ［メソッドの保存］アイコンは 107 ページの図 68 に示されています。

タスク 1. 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
9 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。 • 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。 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。 **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。 **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。 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。	• ［実行する処理］リスト内の処理は、リストに表示されている順序で実行されます。まず定義済みクロマトグラムを抽出する必要があるため、**［定義済みクロマトグラムの抽出］**がリストの最初の処理になります。次にピークスペクトルの積分と抽出を実行するので、**［ピークスペクトルの積分と抽出］**がリストの 2 番目に来ます。
10 ［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。



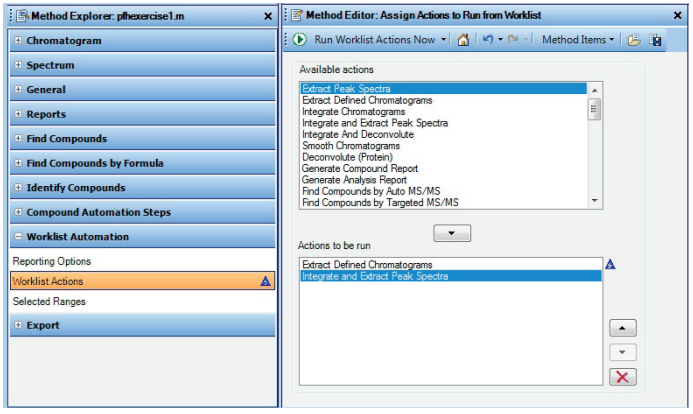
[実行する処理] リストには、２つの処理があります。最初の処理では定義済みのクロマトグラムを抽出します。その後、そのクロマトグラムが積分され、ピークが抽出されます。

図 69 [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

11 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。

タスク 1. 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
12 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。 • 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。 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。 **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。	• ワークリストでメソッドを実行している場合は、レポートの作成や結果のエクスポートを頻繁に行います。このデモのためにのみ、レポートの作成や結果のエクスポートオプションを削除しています。
13 [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。



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、ワークリストの一部としてメソッドを実行するときに実行されます。

図 70 [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

14 [ワークリスト処理] セクションのメソッドの変更を元に戻します。	**a** [メソッドエディタ] の アイコンをクリックします。	• タブでの変更を元に戻すと、青色の三角形が削除されます。
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。 **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 2. クロマトグラムピーク調査ワークフローによる自動解析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データベース検索、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。

このメソッドはクロマトグラムピーク調査ワークフローに切り替えて設定します。データファイルを開いたときに、メソッドでこの自動解析を実行するようにも設定します。

［クロマトグラムピーク調査］ワークフローで使用できるのは、LC/MS データファイルのみです。

タスク 2. 自動解析メソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosMS.d**を再び開きます。 • ファイルを開く際に、メソッドによってデータファイルの処理が実行されないことを確認します。 • メソッドがiiiexercise1.mであることを確認します。	a **［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］**>**［クロマトグラムピーク調査］**コマンドをクリックします。 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。 c **［OK］**をクリックします。 d **［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。 e すべてのチェックボックスをオンにして、すべてのオプションが使用できるようにします。 f **［OK］**ボタンをクリックします。 g **［ファイル］**>**［データファイルを開く］**をクリックします。 h ［データファイルを開く］ダイアログボックスで**sulfas_PosMS.d**を選択します。 i **［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フにします。 j **［開く］**をクリックします。 k **［メソッド］**>**［開く］**をクリックしてiiiexercise1.mメソッドを選択し**［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オフか灰色表示のどちらかになっていることを確認します。 • 異なるワークフローに切り替えると、新しいメソッドと新しいウィンドウレイアウトが読み込まれ、新しいセクションが［メソッドエクスプローラ］に追加されます。 • メソッドへの変更を保存を求められたら、保存するかどうかを決定します。 • メソッドを読み込んだときに、赤い感嘆符が表示される場合があります。これらのエラーは、MassHunter フォルダが D：ドライブにない場合に発生することがあります。エラーを修正するには、データベースとライブラリの指定フォルダを変更します。

タスク 2. 自動解析メソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
2 ［クロマトグラムピーク調査］アルゴリズムのセクションを参照してください。	• ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［クロマトグラムピーク調査ワークフロー］**をクリックします。	• このワークフローにはセクションが 11 個あります。ほとんどのセクションは、一般ワークフローのセクションと同じです。 • 各セクションを確認するためのワークフローが設計されています。
3 新しい結果で前の結果を上書きす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、**［前の結果］**を選択します。 **b** **［前の結果をすべて削除］**チェックボックスをオンにします。	• 変更したときに、［メソッドエクスプローラ］ウィンドウの別のセクションに青色の三角形が表示される場合があります。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。
4 TICを抽出し、4つの大きなピークを積分します。	**a** **［クロマトグラムの抽出］**を選択します。 **b** **［クロマトグラム］**タブをクリックします。 **c** マススペクトルの検索に使用されるクロマトグラムに **TIC** が選択されていることを確認します。 **d** ［抽出する追加のクロマトグラム］で**［シグナルA］**をオンにします。 **e** **［シグナルAの取得元］**リストから**［DAD1］**を選択します。 **f** ［メソッドエクスプローラ］の**［クロマトグラムの積分］**セクションを選択します。 **g** **［ピーク（MS）］**タブをクリックし、**［ピーク数を高さベースで制限する］**をオンにして 4 を入力します。	• **［クロマトグラムの抽出］**セクションは他の場所には存在しないセクションです。そのためこの情報は［メソッドエディタ］の他の箇所からは入力できません。このワークフローを選択したときだけ使用することができます。
5 MSスペクトルを抽出し、ピーク前後のスペクトルの平均ピークスペクトルバックグラウンドを減算するように設定します。	**a** **［マススペクトルの抽出］**を選択します。 **b** **［ピークスペクトル］**タブをクリックします。 **c** **［ピークスペクトルバックグラウンド］**で**［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。	
6 すべてのスペクトルピークに対してデータベースを検索し、化学式を作成するように設定します。 • ［分子式作成］および［データベース検索］のパラメータ値は変更しないでください。	**a** ［メソッドエクスプローラ］で**［スペクトルピーク同定］**を選択します。 **b** **［ピークをデータベースで検索］**チェックボックスをオンにします。 **c** **［各ピークの化学式を作成］**チェックボックスをオンにします。 **d** **［すべてのピーク］**ボタンをクリックします。	• **［スペクトルピーク同定］**セクションは他の場所には存在しないセクションです。そのためこの情報は［メソッドエディタ］の他の箇所からは入力できません。

タスク 2. 自動解析メソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
7 この時点までの自動解析プロセスをテストします。	• ［スペクトルピーク同定］セクションから**［クロマトグラムピーク調査の実行］**アイコン をクリックします。	• ［分子式作成］セクションから アイコンをクリックする場合、矢印をクリックし、適用可能な処理のリストから**［クロマトグラムピーク調査の実行］**を選択します。このセクションで実行されるデフォルトの処理は**［スペクトルピークから化学式を作成］**です。その他のセクションでも異なるデフォルト処理が設定されている場合があります。
8 ［スペクトル同定結果］ウィンドウを開き、以下を表示します。 ◦ このウィンドウは、図 71 のように［クロマトグラム結果］ウィンドウと一緒にタブ表示されます。	**a** 必要に応じて、**［表示］> ［スペクトル同定結果］**をクリックします。 **b** 各 MS スキャンの結果をレビューして［クロマトグラムピーク調査］アルゴリズムのすべての処理が実行されたことを確認します。	• メイン画面内でウィンドウを移動させる方法については、19 ページの「タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更」ページ を参照してください。 • ［スペクトル同定結果］ウィンドウは［クロマトグラム結果］と同じウィンドウにタブ表示されます。［スペクトル同定結果］ウィンドウが表示されていない場合は、タブをクリックします。 • メインツールバーのアイコンを使用してこれらのウィンドウを表示させることもできます。

タスク 2. 自動解析メソッドの設定と実行

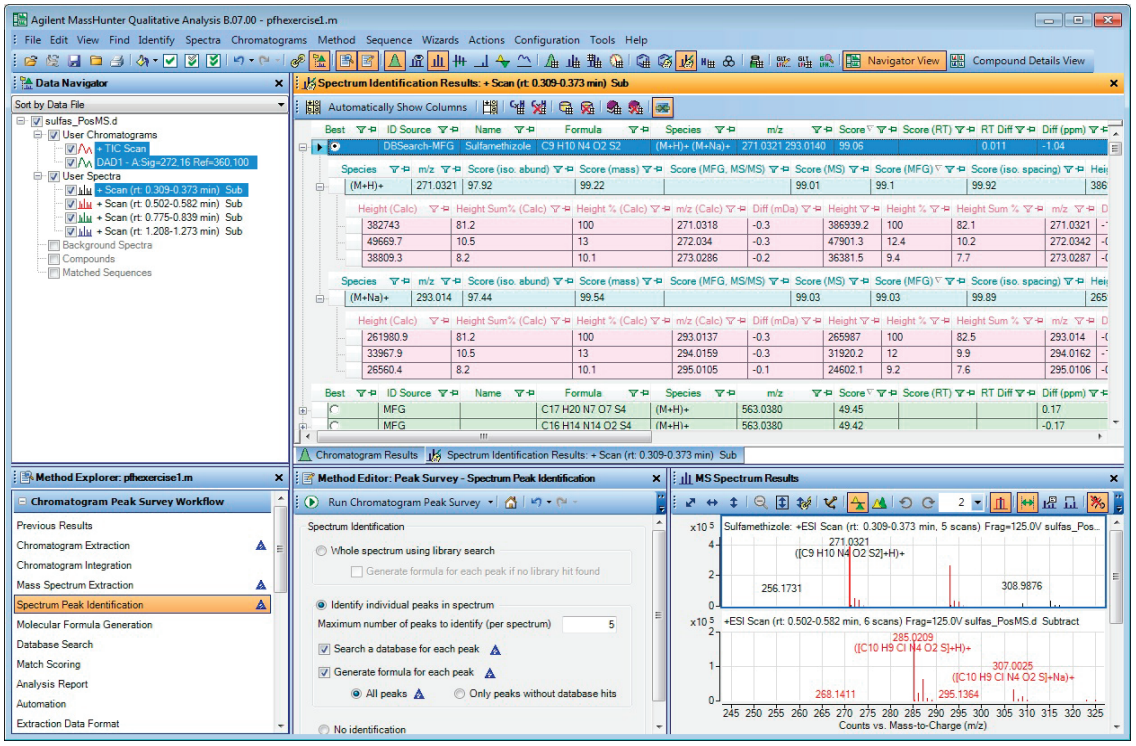
ステップ	詳細説明	コメント
		

図 71 自動解析ステップを実行してタブ表示された結果

9 メソッドを iiiexercise2 に保存します。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。	**a** メニューから**[メソッド]>[名前を付けて保存]**をクリックします。 **b** **iiiexercise2**を入力します。 **c** **[保存]** 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。
10 解析レポートを設定し、この実習で印刷するセクションを指定します。 • メソッドを保存します。	**a** ［メソッドエクスプローラ］で **[解析レポート]** を選択します。 **b** **[コンテンツ]** タブをクリックします。 **c** 必要な変更を行います。 **d** **[解析レポートの印刷]** アイコンをクリックします。 **e** 必要に応じて［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。	• 実行する処理を選択する際に、レポートを印刷するかどうかを選択します。 • ［解析レポートの印刷］アイコンをクリックすると、**[解析レポートの印刷]** ダイアログボックスが開きます。

タスク 2. 自動解析メソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
11 データファイルを開くときに自動解析を実行するメソッドを設定します。 • メソッドを保存します。	**a** ［メソッドエクスプローラ］で**［自動化］**を選択します。 **b** **［ファイルを開くときにする処理］**タブをクリックします。 **c** **［実行する処理］**リストの各項目を選択し**［削除］**アイコン をクリックします。 **d** **［使用可能な処理］**リストで**［クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）］**を選択し**［追加］**ボタン をクリックします。 **e** ［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。	• 必要に応じて、これらの処理をテストします。 • **［クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）］**と**［クロマトグラムピーク調査（解析レポートを作成する）］**の両方を実行する際、それぞれに対してクロマトグラムを抽出する必要はありません。その他のほとんどの処理では、最初にクロマトグラムを抽出する必要があります。
12 ［メソッドエディタ］、［メソッドエクスプローラ］、［データナビゲータ］ウィンドウを閉じます。 • 図 72 のレイアウトと同じになるように、ウィンドウを移動します。 • 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］、［メソッドエクスプローラ］、［データナビゲータ］ウィンドウの**［閉じる］**ボタンをクリックします。 **b** ウィンドウが図 72 と同じになるように、ウィンドウを移動します。 **c** **［ファイル］＞［データファイルを閉じる］**をクリックします。 **d** 結果の保存を求められたら、**［いいえ］**をクリックします。	• 新しいデータファイルを開いたときに表示されるウィンドウレイアウトは、最後に使用したウィンドウレイアウトです。
13 **sulfas_PosMS.d**データファイルを再び開き、自動解析を実行します。 • 図 72 と同様の結果になることを確認します。	**a** **［ファイル］＞［データファイルを開く］**をクリックします。 **b** sulfas_PosMS.dを選択します。 **c** **［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。 **d** [**開く**]をクリックします。 **e** ［スペクトル同定結果］ウィンドウの行内のラジオボタンをクリックして、**［ベスト］**結果をマークします。	

タスク 2. 自動解析メソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント

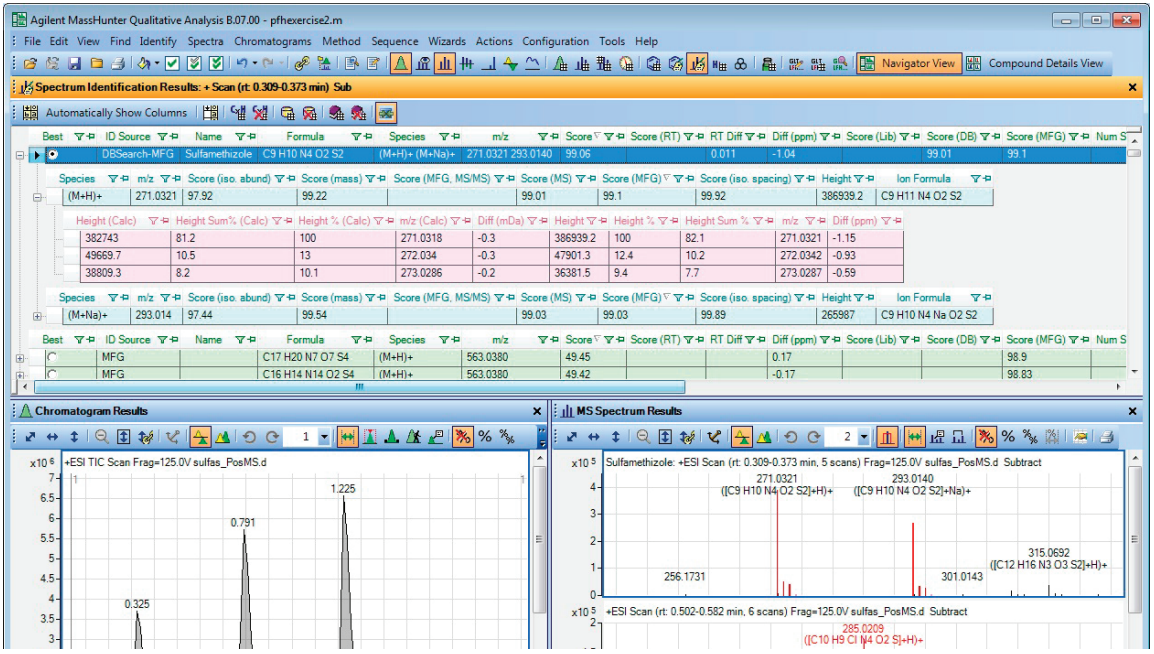


図 72 sulfas_PosMS.dデータファイルを開くときにクロマトグラムピーク調査処理をした結果

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

タスク 3. MS ターゲット化合物のスクリーニングワークフローにより化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行

このタスクでは、化合物の検出し同定する処理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、選択したアルゴリズムに基づき化合物を検出、化合物をデータベースで検索、特定化合物の化学式を作成、化合物レポートの作成を行います。

このメソッドはMS ターゲット化合物のスクリーニングワークフローに切り替えて設定します。このメソッドは［化合物の自動解析ステップ］セクションを使用して設定することもできます。データファイルを開いたときにメソッドで化合物の自動化を実行するようにも設定します。

MSターゲット化合物のスクリーニングワークフローで使用できるのは、LC/MS データファイルのみです。

タスク 3. 化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosMS.d**を再び開きます。 • ファイルを開く際に、メソッドによってデータファイルの処理が実行されないことを確認します。 • メソッドがiiiexercise2.mであることを確認します。 • MSターゲット化合物のスクリーニングワークフローで作業を開始します。	**a** **［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］**>**［MS ターゲット化合物のスクリーニング］**をクリックします。 **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。 **c** **［OK］**ボタンをクリックします。 **d** **［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。 **e** すべてのチェックボックスをオンにして、すべてのオプションが使用できるようにします。 **f** **［OK］**ボタンをクリックします。 **g** **［ファイル］**>**［データファイルを開く］**をクリックします。 **h** ［データファイルを開く］ダイアログボックスで**sulfas_PosMS.d**を選択します。 **i** **［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］**チェックボックスと**［結果データの読み込み］**チェックボックスをオフにし、**［開く］**をクリックします。 **j** **［メソッド］**>**［開く］**をクリックします。iiiexercise2.mメソッドを選択します。 **k** **［開く］**をクリックします。 **l** メソッドの変更を保存するかどうかのダイアログでは**［いいえ］**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オフか灰色表示のどちらかになっていることを確認します。 • MS ターゲット化合物のスクリーニングワークフローに切り替えると、Screening-Default.m メソッドが読み込まれます。 • MassHunter フォルダが D: ドライブのデフォルト位置にない場合は、このワークフローに切り替えるとメソッドでエラーが発生します。データベースのフォルダは、適切な位置に変更することができます。

タスク 3. 化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
2 化合物の検出と同定に関する自動化ステップを開きます。 • ［メソッドエディタ］ウィンドウを任意の場所にタブ付けします。	**a** ［メソッドエクスプローラ］ウィンドウで、**［MS ターゲット化合物スクリーニングワークフロー］** > **［自動化］** をクリックします。 **b** （オプション）［メソッドエディタ］ウィンドウを［データナビゲータ］と同じウィンドウにタブ付けします。 **c** **［化合物リスト］**ウィンドウを閉じます。	• このワークフローでは［メソッドエディタ］はフローティングウィンドウです。フローティングウィンドウのままにしておくことも［データナビゲータ］ウィンドウなどの別のウィンドウにタブ表示することもできます。
3 すべての化合物に対してデータベースを検索し、化学式を作成するように選択します。 • Molecular Feature で化合物を検出していることを確認します。	**a** **［解析オプション］** タブをクリックします。 **b** **［Molecular Feature による検出］** を選択します。 **c** **［化合物をデータベースで検索］** チェックボックスをオンにします。 **d** **［各化合物の化学式を作成］** チェックボックスをオンにします。 **e** **［すべての化合物］** をクリックします。 **f** **［同定された化合物のみを表示］** チェックボックスをオンにします。	• 化合物は［データベースの検索］、［化学式の作成］、［ライブラリの検索］のアルゴリズム、または化合物が検出されている場合は［化学式による検出］アルゴリズムを使用して同定することができます。MassHunter BioConfirm ソフトウェアがインストールされている場合は、化合物は［シーケンスの照らし合わせ］アルゴリズムでも同定できます。
4 新しい結果で前の結果を上書きすることを確認します。	**a** **［結果］**タブをクリックします。 **b** **［前の結果をすべて削除］** チェックボックスをオンにします。	
5 この時点までの自動化プロセスをテストします。	• ［MS ターゲット化合物スクリーニングワークフロー］［自動化］セクションのいずれかから **［化合物の自動解析ステップの実行］** アイコン をクリックします。	
6 以下のウィンドウを開いて表示します。 • 化合物リスト • 化合物同定結果 • ウィンドウが図 73のように表示されていることを確認します。 • 各化合物（化合物1と2を除く）の各リストをレビューします。	**a** （必要に応じて）**［表示］** > **［化合物リスト］** をクリックします。 **b** （必要に応じて）**［表示］** > **［化合物同定結果］** をクリックします。 **c** ［データナビゲータ］で化合物1と化合物2のチェックボックスをオフにします。［化合物リスト］ウィンドウの **［表示/非表示］** 列でも、化合物1と化合物2のチェックボックスをオフにすることができます。 **d** 同定済み化合物の各テーブルを確認して、［化合物の自動解析ステップ］のすべての処理が実行されたことを確認します。	• メイン画面内でウィンドウを移動させる方法については、19 ページの「タスク 4. ウィンドウレイアウトの変更」を参照してください。 • ［化合物同定結果］ウィンドウは［クロマトグラム結果］と同じウィンドウにタブ表示されます（図 73）。

タスク 3. 化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
7 メソッドを iiiexercise3 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。 **b** **iiiexercise3**を入力します。 **c** **[保存]** 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。

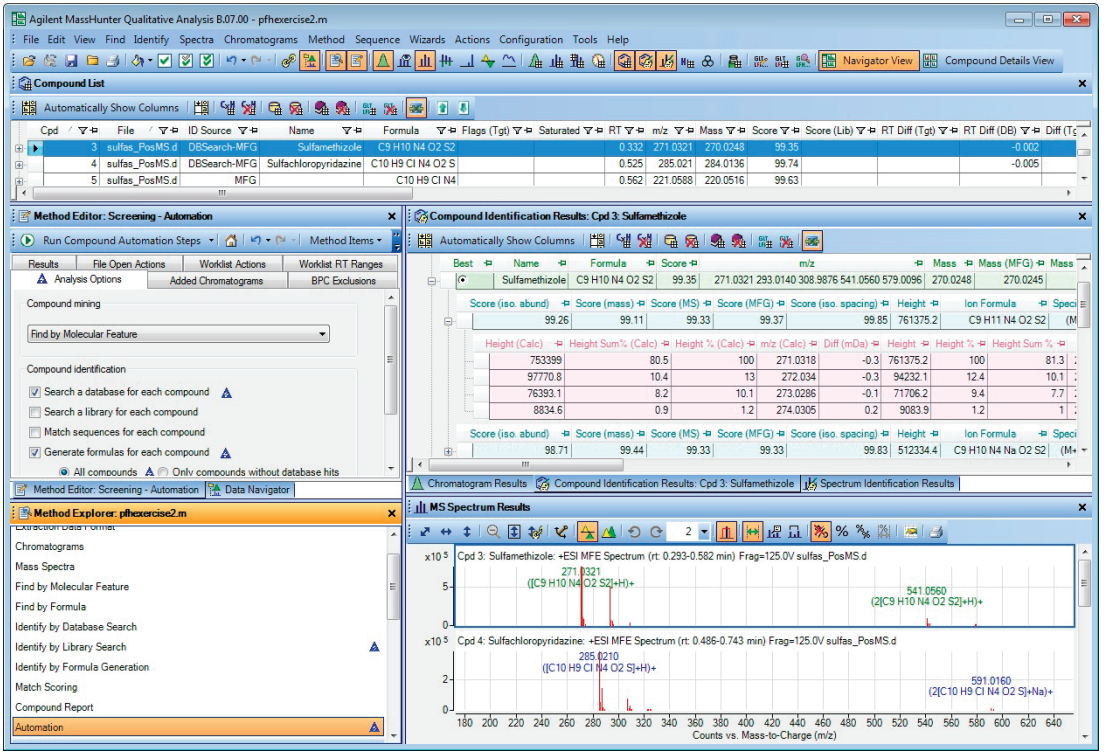


図 73 化合物の自動解析ステップを実行してタブ表示された結果

8 この実習用の化合物レポートを設定します。 • 必要に応じて、メソッドを保存します。	**a** **[化合物レポート]** を選択します。 **b** 必要な変更を行います。 **c** **[テンプレート]** タブをクリックします。 **d** （オプション）**[化合物レポートのテンプレート]** として、TargetCompoundScreeningReport.xltxを選択します。 **e** 必要に応じて［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。	• このワークフローのデフォルト化合物レポートテンプレートは、「TargetCompoundScreeningReport.xltx」です。読み込んだ iiiExercise2.m メソッドは、一般ワークフローのデフォルトメソッドから開始されています。どちらのレポートテンプレートを選択してもかまいません。

タスク 3. 化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント
9 データファイルが開くと化合物同定を自動実行するメソッドを設定します。 • メソッドを保存します。	**a** **[MSターゲット化合物スクリーニングワークフロー]** > **[自動化]** > **[ファイルを開くときにする処理]** を選択します。 **b** **[実行する処理]** リストの各処理を選択し **[削除]** アイコン をクリックします。 **c** **[使用可能なアクション]** リストで **[化合物の自動解析（レポートなし）]** を選択し **[追加]** ボタン をクリックします。 **d** [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。	• 必要に応じて、これらの処理をテストします。
10 [メソッドエディタ]、[メソッドエクスプローラ]、[データナビゲータ] を閉じます。 • 図 74 のレイアウトと同じになるように、ウィンドウを移動します。 • 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]、[メソッドエクスプローラ]、[データナビゲータ] の **[閉じる]** ボタンをクリックします。 **b** ウィンドウが図 74 と同じになるように、ウィンドウを移動します。 **c** **[ファイル]** > **[データファイルを閉じる]** をクリックします。 **d** 結果の保存を求められたら、**[いいえ]** をクリックします。	• ウィンドウを移動させる方法については、実習1のタスク 4を参照します。
11 **sulfas_PosMS.d** データファイルを再び開き、化合物同定を自動実行します。 • 図 74と同様の結果になることを確認します。 • [化合物リスト] の化合物 1 と化合物2 を非表示にします。	**a** **[ファイル]** > **[データファイルを開く]** をクリックします。 **b** sulfas_PosMS.d データファイルを選択します。 **c** **[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。 **d** [**開く**]をクリックします。 **e** [化合物リスト]の化合物1と化合物2の **[表示/非表示]** 列のチェックボックスをオフにします。	• 化合物 1、2、5、6、および 8 は [データベース検索] アルゴリズムで検出されていませんが [化学式の作成] アルゴリズムにより化学式が作成されています。

タスク 3. 化合物同定を自動化するメソッドの設定と実行

ステップ	詳細説明	コメント

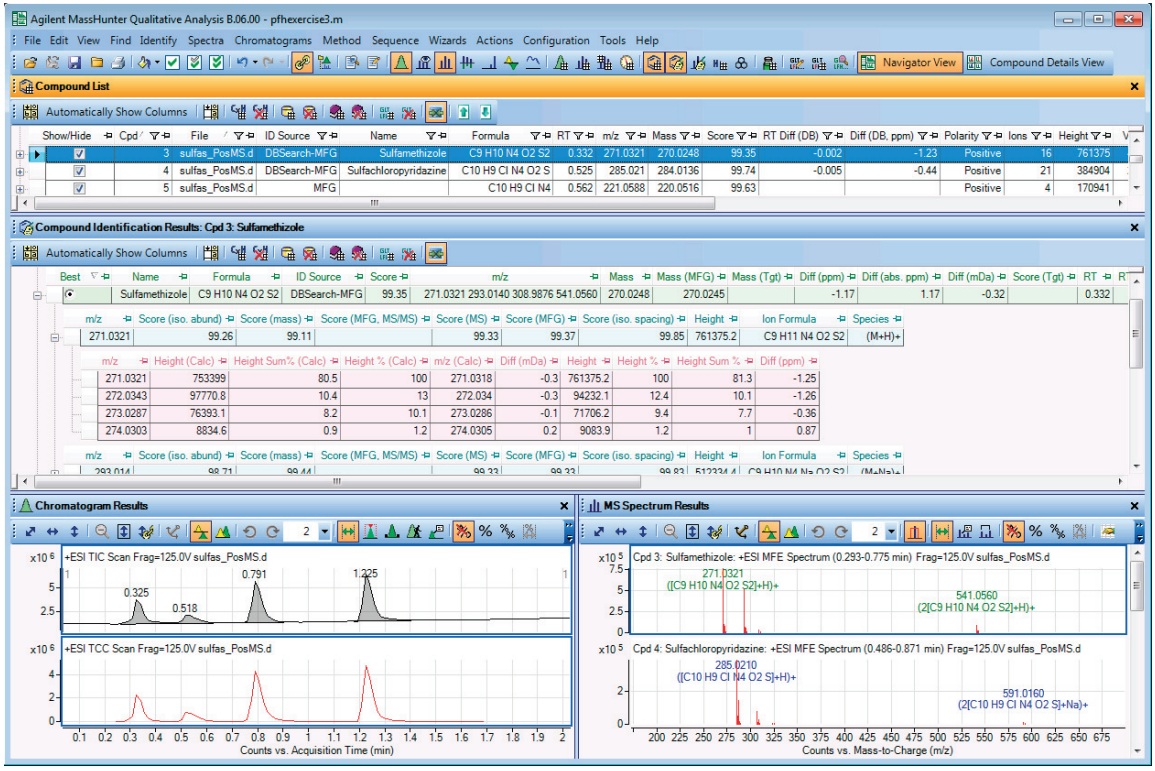


図 74 sulfas_PosMS.dデータファイルを開くときに化合物同定を自動実行した結果

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

タスク 4. ワークリストで実行する定性メソッドの設定

このタスクでは、ワークリストを実行する際に行う処理リストを含む定性分析メソッドを設定します。測定パラメータと定性分析パラメータの両方を含むメソッドの保存方法を学習しますが、このタスクでは実際には行いません。

データ測定ソフトウェア リビジョンB.05.00を開始します。データ測定ソフトウェアでデータ測定を実行します。そのデータ測定メソッドから定性メソッドを自動的に実行することができます。詳細は、[データ測定] のオンラインヘルプを参照してください。

タスク 4. ワークリストで実行する定性メソッドの設定

ステップ	詳細説明	コメント
1 sulfas_PosMS.d データファイルを読み込みます。 • タスク 2 で保存したメソッドを開きます。 • ファイルを開くときにする処理が実行されないことを確認します。 • デフォルトのウィンドウレイアウトを復元します。	**a** デフォルトワークフローに戻すには **[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]** をクリックします。 **b** **[OK]** をクリックして続行します。 **c** **[ファイル]** > **[データファイルを開く]** をクリックします。 **d** [データファイルを開く] ダイアログボックスで **sulfas_PosMS.d** を選択します。 **e** **[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フにします。 **f** **[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。 **g** **[開く]** をクリックします。 **h** **iiiExercise2.m**メソッドを読み込みます。	• このタスクでは、定性分析パラメータのみを含むメソッドを作成します。 • このメソッドからワークリストメソッドを作成するには、測定プログラムを使用して、このメソッドに測定パラメータを追加する必要があります。 • [データファイルを開く] ダイアログボックスの **[ワークリストメソッドの読み込み]**（使用可能と仮定する）を選択すると、データファイルを作成した測定メソッドのワークリストの定性分析部分を用いて、データファイルが開かれます。 • 既存の測定メソッドに定性分析パラメータを保存することで、測定パラメータと定性分析パラメータの両方を含むワークリストメソッドを作成できます。 • すべての解析を自動ステップにしたメソッドを設定することもできます。設定後に、これらの自動解析処理を削除することも、再度追加することもできます。 • [化合物の自動解析] でも同じ操作が可能です。

タスク 4. ワークリストで実行する定性メソッドの設定

ステップ	詳細説明	コメント
2 ワークリストの各解析完了時に自動的に実行されるメソッドを設定します。 以下のタスクを実行するようにメソッドを設定します。 • 定義済みクロマトグラムの抽出 • ピークスペクトルの積分と抽出 • 解析レポートの作成 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］で［**ワークリスト自動化**］>［**ワークリスト処理**］を選択して［**実行する処理をワークリストから割り当て**］セクションを表示します。 **b** 以下の処理が、この順番で**［実行する処理］**リストにあることを確認します。 • 定義済みクロマトグラムの抽出 • ピークスペクトルの積分と抽出 • 解析レポートの作成 **c** 必要に応じて**［使用可能な処理］**リストからそれぞれの処理を選択し**［追加］**ボタン をクリックして選択した処理を**［実行する処理］**リストに移動します。選択した処理をダブルクリックしてリスト間を移動させることもできます。 **d** 不要な処理がある場合は**［実行する処理］**リストで該当する処理を選択し**［削除］**アイコン をクリックします。	

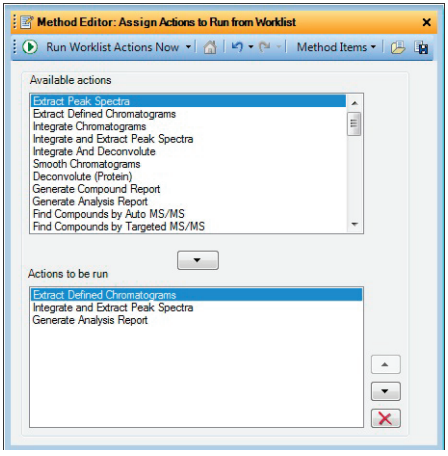


図 75 ［メソッドエディタ］の［ワークリスト処理］セクション

タスク 4. ワークリストで実行する定性メソッドの設定

ステップ	詳細説明	コメント
3 メソッドを **iiiexercise 2worklist.m**に保存します。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。 • 結果を保存せずに、プログラムを閉じます。	**a** メソッドを保存するには [**メソッド**] > [**名前を付けて保存**] をクリックします。 **b** **iiiexercise2worklist.m**と入力します。 **c** [**保存**] をクリックします。 **d** [**ファイル**] > [**終了**] をクリックします。 **e** 結果の保存を求められたら **[いいえ]** をクリックします。	• 測定プログラムを使用して、メソッドに測定パラメータを追加した後、同じ名前または名前を付けてメソッドを保存することができます。 • ワークリストから実行するときに、（測定パラメータを追加している場合）このメソッドはデータを連続して自動的に測定、解析します。[ワークリスト処理] セクションの **[実行する処理]** リストにある処理が自動的に実行されます。

実習 4
定性分析のウィザード

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行 126
タスク 2.［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］ウィザードの実行 133

定性分析プログラムには複数のウィザードがあります。これらのウィザードは、特定タスクの実行に必要な一連のステップをガイドします。

- **［クロマトグラムピークの同定］ウィザード** - このウィザードは、**［クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）］**処理の実行前に変更するメソッドエディタのさまざまなセクションとタブをガイドします。
- **［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］ウィザード** - このウィザードは、**［Molecular Feature による検出］アルゴリズム**および**［データベース検索］アルゴリズム**の実行前に変更するメソッドエディタのさまざまなセクションとタブをガイドします。

表示されるメソッドエディタセクションは、［メソッドエディタ］ウィンドウでも更新することができます。

BioConfirm をインストールすると、さらに複数のウィザードが追加されます。追加されるその他のウィザードは、**『BioConfirm Familiarization Guide』**で説明されています。

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.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

このウィザードを実行すると、**［クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）］**処理に影響を与えるメソッドエディタセクションとその他のページのすべてが表示されます。さらに**［完了］**ボタンをクリックすると、メソッドの変更が保存され、**［クロマトグラムピーク調査（解析レポートなし）］**処理が実行されます。

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosMS.d** データファイルを開きます。 • データファイルが開かれたときに、プログラムによる自動ファイル処理が実行されないことを確認します。 • メソッドが Default.m であることを確認します。 • ウィンドウレイアウトがデフォルトレイアウトであることを確認します。	**a** デスクトップの**［Qualitative Analysis］**アイコンをダブルクリックします。 **b** ［データファイルを開く］ダイアログボックスで**sulfas_PosMS.d**を選択します。 **c** **［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フにします。 **d** 必要に応じて**［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。 **e** **［開く］**をクリックします。 **f** **［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。 **g** **［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。 **h** **［OK］**ボタンをクリックします。 **i** **［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。 **j** すべてのチェックボックスをオンにして、すべてのオプションが使用できるようにします。 **k** **［OK］**ボタンをクリックします。	• 一般ワークフローのデフォルトのレイアウトが自動的に読み込まれます。このデフォルトレイアウトに戻るには、**［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。このコマンドは常に、一般ワークフローに使用されるレイアウトに復元します。 • 前のタスクと同様に、メソッドに変更を加えると、変更された項目の横と［メソッドエクスプローラ］の変更されたセクションの横に青い三角形が表示されます。
2 ［クロマトグラムピークの同定］ウィザードを開始します。パラメータを変更して、前の結果を削除します。	**a** **［ウィザード］**>**［クロマトグラムピークの同定］**コマンドをクリックします。 **b** ［前回の結果］ページで、**［前の結果をすべて削除］**チェックボックスをオンにします。 **c** **［次へ］**をクリックします。	• ウィザードは、一連のページを順にガイドします。各ページでタスクのパラメータを設定します。これらのページの多くは、［メソッドエディタ］ウィンドウのセクションおよびタブと重複しています。 • クロマトグラム、スペクトル、化合物が削除されます。

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

ステップ	詳細説明	コメント
3 ［クロマトグラム抽出］ページを編集します。パラメータを変更して、BPC およびシグナル A クロマトグラムを抽出します。	**a** ［クロマトグラム］ページの［抽出する追加のクロマトグラム］で、**[BPC]** チェックボックスと **[シグナル A]** チェックボックスをオンにします。 **b** **[シグナルAの取得元]** リストから［DAD1］を選択します。 **c** **[次へ]** をクリックします。	• **[完了]** をクリックすると、現在のメソッドが変更されます。［メソッドエディタ］では、メソッドに保存されている値を変更すると青い三角形が表示されます。ただしウィザードの場合、メソッドの現在の値から変更されたウィザードの値が青い三角形で表示されます。

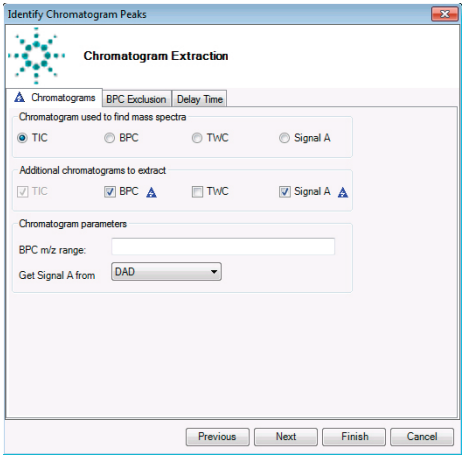


図 76　［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［クロマトグラム抽出］ページ

4 ［クロマトグラムの積分］ページを編集します。パラメータを変更して、大きい順に 4 つの MS ピークのみが積分されるようにします。	**a** ［クロマトグラムの積分］ページで、**[ピーク(MS)]** タブをクリックします。 **b** **[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。 **c** **[次へ]** をクリックします。	• ウィザードはどのページからでも **[完了]** ボタンをクリックできます。ウィザード実行時には、メソッドの現在の値が使用されます。

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

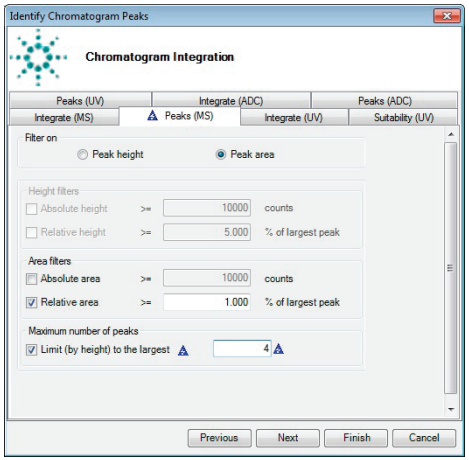
ステップ	詳細説明	コメント
		

図 77　［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［クロマトグラムの積分］ページ

5 ［抽出データフォーマット］ページのパラメータを確認します。	**a** ［抽出データフォーマット］ページで、パラメータを確認します。 **b** **［次へ］**をクリックします。	• ウィザードの最後のページでは、**［次へ］**ボタンが灰色表示になります。ウィザードを完了させるか、前のページに戻ります。

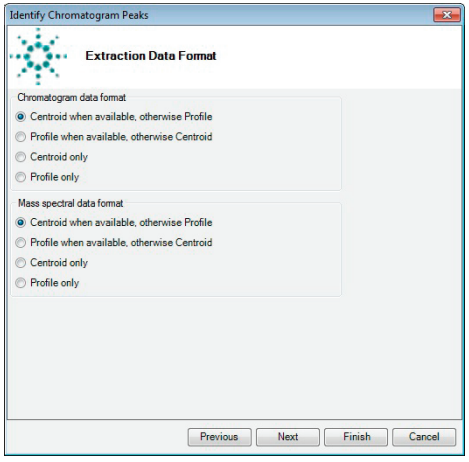


図 78　［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［抽出データフォーマット］ページ

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

ステップ	詳細説明	コメント
6 ［マススペクトルの抽出］ページを編集して、各ピークから減算するスペクトルをピーク開始点のスペクトルに変更します。	**a** ［マススペクトルの抽出］ページで、MS ピークスペクトルバックグラウンドに **［ピーク開始点のスペクトル］**を選択します。 **b** **［次へ］**をクリックします。	

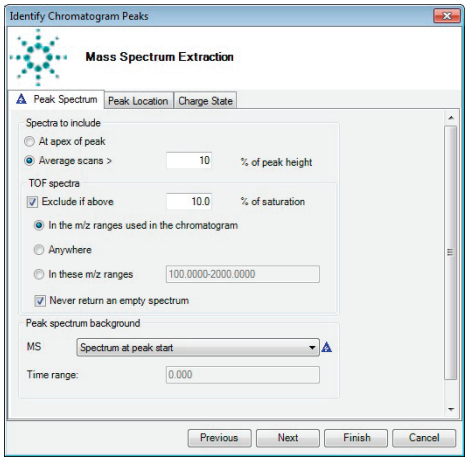


図 79　［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［マススペクトルの抽出］ページ

7 ［スペクトルピーク同定］ページを編集します。パラメータを変更して、データベースを検索し、すべてのピークの化学式を作成します。	**a** ［スペクトルピーク同定］ページで、**［スペクトル内の各ピークを同定］**をクリックします。 **b** **［ピークをデータベースで検索］**チェックボックスをオンにします。 **c** **［各ピークの化学式を作成］**チェックボックスをオンにします。 **d** **［すべてのピーク］**ボタンをクリックします。 **e** **［次へ］**をクリックします。	

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

ステップ	詳細説明	コメント

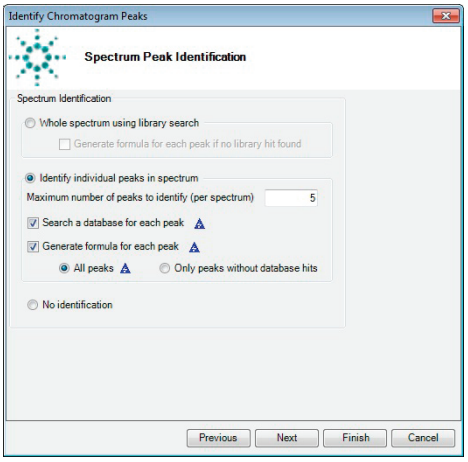


図 80 ［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［スペクトルピーク同定］ページ

8 ［データベース検索］ページのパラメータを確認します。	**a** ［データベース検索］ページで、パラメータを確認します。 **b** **［次へ］**ボタンをクリックします。	

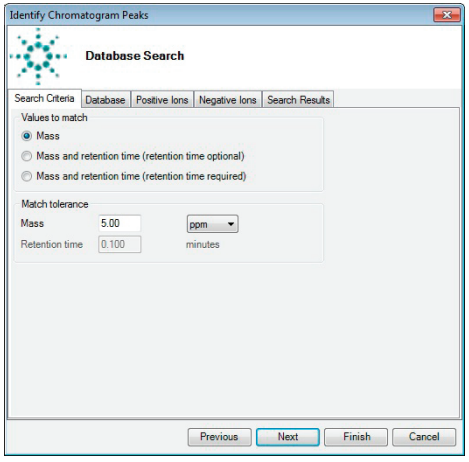


図 81 ［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［データベース検索］ページ

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

ステップ	詳細説明	コメント
9 ［分子式作成］ページを編集します。最小総合スコアを 25 に変更します。	**a** ［分子式作成］ページで、**［制限］**タブをクリックします。 **b** **［最小総合スコア］**チェックボックスをオンにします。 **c** ［最小総合スコア］に **25** を入力します。 **d** **［次へ］**ボタンをクリックします。	

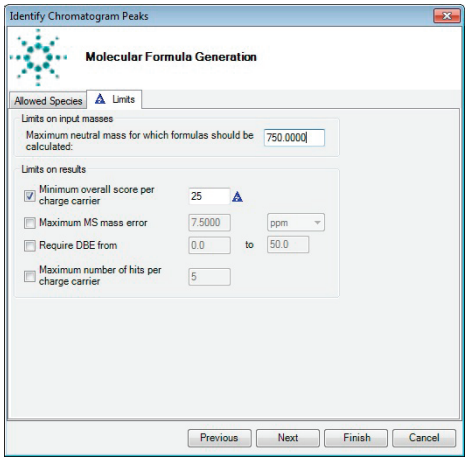


図 82　［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［分子式作成］ページ

10 ［一致スコア］ページのパラメータを確認します。	**a** ［一致スコア］ページで、パラメータを確認します。 **b** **［完了］**ボタンをクリックします。	

タスク 1.［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの実行

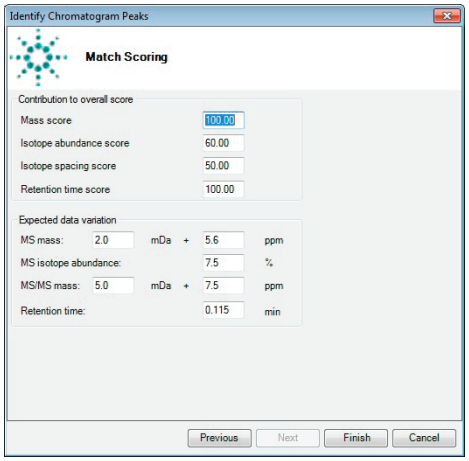
ステップ	詳細説明	コメント
		

図 83 ［クロマトグラムピークの同定］ウィザードの［一致スコア］ページ

11 結果を確認します。	• まず、現在のメソッドに対しメソッド変更が適用されます。これらの変更は、ディスク上のメソッドに自動的には保存されません。 • 次に、クロマトグラムピーク調査処理が実行されます。	• ウィザードの変更がディスク上の変更と異なる場合は、**［完了］**をクリックすると［メソッドエクスプローラ］ウィンドウセクションおよび［メソッドエディタ］ウィンドウに青い三角形が追加されます。
12 メソッドをiiiexercise4に保存し（ここで「iii」はユーザーのイニシャル）、結果を保存せずにデータファイルを閉じます。	**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。 **b** **iiiexercise4.m** と入力します。 **c** **［保存］**ボタンをクリックします。 **d** **［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。	• 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。

タスク 2.［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］ウィザードの実行

このウィザードは、［**Molecular Feature による検出**］アルゴリズムと［**データベース検索**］アルゴリズムの実行前に変更するメソッドエディタのさまざまなセクションとタブをガイドします。

タスク 2.［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］

ステップ	詳細説明	コメント
1 **sulfas_PosMS.d**を再び開きます。 • ファイルを開く際に、メソッドによってデータファイルの処理が実行されないことを確認します。 • メソッドがiiiexercise1.mであることを確認します。	**a** **［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。 **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。 **c** **［OK］**をクリックします。 **d** **［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。 **e** すべてのチェックボックスをオンにして、すべてのオプションが使用できるようにします。 **f** **［OK］**ボタンをクリックします。 **g** **［ファイル］**>**［データファイルを開く］**をクリックします。 **h** ［データファイルを開く］ダイアログボックスで**sulfas_PosMS.d**を選択します。 **i** **［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フにします。 **j** **［開く］**をクリックします。 **k** **［メソッド］**>**［開く］**をクリックしてiiiexercise1.mメソッドを選択し**［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オフか灰色表示のどちらかになっていることを確認します。 • 異なるワークフローに切り替えると、新しいメソッドと新しいウィンドウレイアウトが読み込まれ、新しいセクションが［メソッドエクスプローラ］に追加されます。 • メソッドへの変更の保存を求められたら**［いいえ］**をクリックします。 • このウィザードは、他のワークフローを読み込んでいる時にも実行することができます。
2 **［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］**ウィザードを開始します。低分子（クロマトグラフ）アルゴリズムを使用するよう、パラメータを変更します。	**a** **［ウィザード］**>**［ターゲットの検出 : MFE + データベース検索 + MFG］**をクリックします。 **b** ［Molecular Feature による検出］ページで、**［ターゲットデータタイプ］**に**［低分子（クロマトグラフ）］**を選択します。 **c** **［次へ］**ボタンをクリックします。	• MFE アルゴリズムは、選択する**［ターゲットデータタイプ］**に応じて変更されます。

タスク 2.［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］

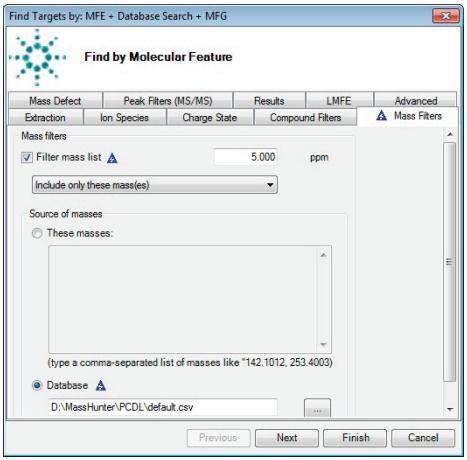
ステップ	詳細説明	コメント
	**3** ［質量リストによるフィルタ］ページを編集します。最小総合スコアを 25 に変更します。 **a** ［質量リストによるフィルタ］ページで、**［質量リストでフィルタする］**チェックボックスをオンにします。 **b** **［リストの質量のみを含める］**を選択します。 **c** **［OK］**ボタンをクリックします。 **d** default.csv ファイルを選択します。 **e** **［次へ］**ボタンをクリックします。	• このウィザードページは、前のウィザードページにタブの 1 つとして含まれています。このタスクでは、質量リストによるフィルタが非常に重要です。 • 質量リストの代わりに、データベース例の default.csv を選択することもできます。

図 84 ［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］ウィザードの［Molecular Featureによる検出］ページ

タスク 2.［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］

ステップ	詳細説明	コメント

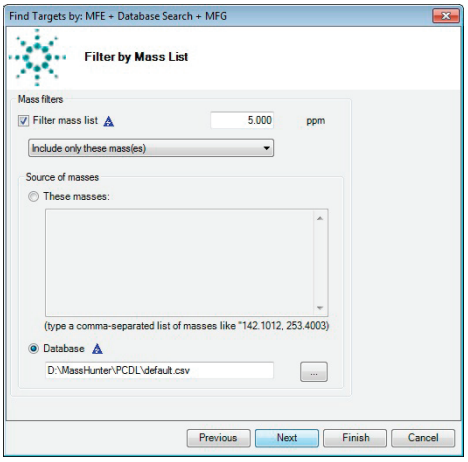


図 85　［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］ウィザードの［質量リストでフィルタ］ページ

4	［データベース検索］ページのパラメータを確認します。	**a** パラメータを確認します。 **b** **［次へ］**ボタンをクリックします。

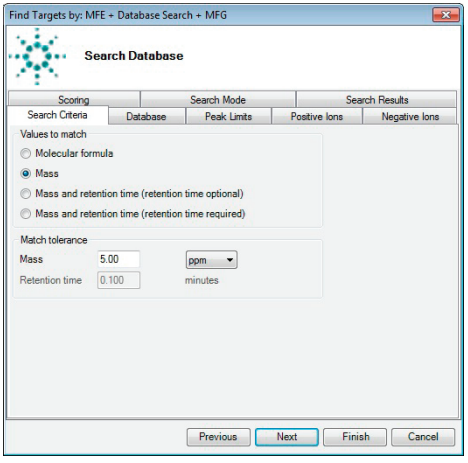


図 86　［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］ウィザードの［データベース検索］ページ

タスク 2.［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］

ステップ	詳細説明	コメント
5 ［化学式の作成］ページを編集します。最小総合スコアを 25 に変更します。	**a** **［制限］**タブをクリックします。 **b** **［最小総合スコア］**に 25 を入力します。 **c** **［完了］**ボタンをクリックします。	

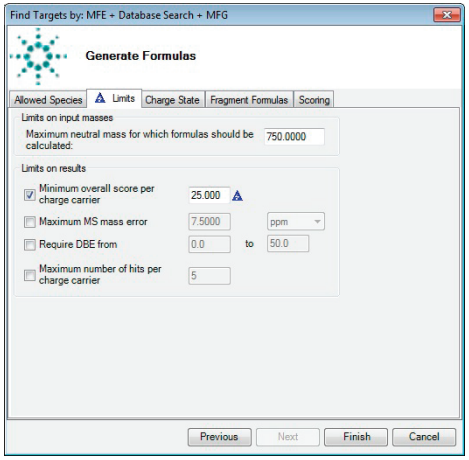


図 87 ［ターゲットの検出: MFE + データベース検索 + MFG］ウィザードの［化学式の作成］ページ

6 定性分析プログラムの結果をレビューします。	• レポートは作成されません。 • ［化合物リスト］ウィンドウおよび［化合物同定結果］ウィンドウを使用して結果をレビューしてください。	
7 メソッドを iiiexercise5 に保存します。ここで、「iii」はユーザーのイニシャルです。	**a** メニューから **［メソッド］** > **［名前を付けて保存］**をクリックします。 **b** **iiiexercise5.m** と入力します。 **c** **［保存］**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。
8 結果を保存せずに、データファイルを閉じます。	**a** **［ファイル］** > **［データファイルを閉じる］**をクリックします。 **b** 結果の保存を求められたら、**［いいえ］**をクリックします。	

実習 5
全イオン MS/MS モードで測定したデータファイルの解析

タスク 1. 構造異性体があるデータファイルに対して化学式による検出を実行 138
タスク 2. 全イオン MS/MS モードで測定したデータを使用した化学式（データベース）による検出を実行 144
タスク 3. 化合物詳細表示で結果を確認する 149

データファイルが全イオン MS/MS モードで測定された場合、プログラムは［化学式による化合物の検出］アルゴリズムの実行時にフラグメントイオンを評価することができます。

タスク 1 では、構造異性体がある場合に結果を作成する方法を示します。構造異性体を区別する方法の 1 つは、リテンションタイムを使用することです。

タスク 2では、全イオン MS/MS モードで測定されたデータファイルで結果を作成する方法を示します。まず低いフラグメンタ電圧またはコリジョンエネルギー電圧でデータを測定し、次に 1 つまたは複数の高いフラグメンタ電圧またはコリジョンエネルギー電圧で測定したデータを使用します。MS の情報は、［化学式による検出］アルゴリズムで使用されます。MS/MS の情報は、フラグメントイオンの評価に用いられます。

タスク 3 では、フラグメントの確認を有効にして［化学式による検出］アルゴリズムを実行した後で、化合物詳細表示を使用して結果を確認する方法を示します。新しい機能の 1 つとして、共溶出プロットがあります。これは［化合物クロマトグラム結果］ウィンドウにあります。

実習方法を示す表は、以下の3列に分けて表示されています。

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

タスク 1. 構造異性体があるデータファイルに対して化学式による検出を実行

タスク 1. 構造異性体があるデータファイルに対して化学式による検出を実行

ステップ	詳細説明	コメント
1 **AIM_3CE(0-20-40).d** データファイルを開きます。 • 一般ワークフローを使用します。	a **[ファイル]** > **[データファイルを開く]** をクリックします。 b **AIM_3CE(0-20-40).d** を選択し、**[OK]** をクリックします。 c **[表示]** > **[ワークフローのコンフィグレーション]** > **[一般]** をクリックします。 d [クロマトグラム結果] ツールバーの **[ズーム中に Y 軸をオートスケール]** アイコン をクリックします。 e **[範囲選択]** ツールをクリックします。	• **[式の確認とサンプル純度ワークフロー]** セクションには [化学式による検出] セクションがあります。 • フラグメントの確認は、全イオン MS/MS モードで測定されたデータファイルに対してのみ可能です。 • **AIM_3CE(0-20-40).d** は、全イオン MS/MS データファイルです。

タスク 1. 構造異性体があるデータファイルに対して化学式による検出を実行

ステップ	詳細説明	コメント
2 ［化学式による検出 - オプション］セクションを確認します。 • このデータファイルに対しては、PestMix_AIM_PCDL_SP1.cdb ライブラリを選択します。	**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］**セクションをクリックします。 **b** **［式のソース］**タブをクリックします。 **c** **［確認する式のソース］**として**［データベース］**をクリックし、PestMix_AIM_PCDL_SP1.cdb を選択します。 **d** **［異性体化合物の場合は自動的に増やす］**チェックボックスをオンにします。 **e** **［正イオン］**タブをクリックします。 **f** **［+H］**および**［+Na］**チェックボックスをオンにします。 **g** **［結果］**タブをクリックします。 **h** **［ECCの抽出］**チェックボックスをオンにします。 **i** **［補正スペクトルの抽出］**チェックボックスをオンにします。 **j** **［構造式を含める］**チェックボックスをオンにします。 **k** **［結果フィルタ］**タブをクリックします。 **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フにします。 **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］**チェックボックスをオフにします。	• 前のタスクと同様に、メソッドに変更を加えると、変更された項目の横と［メソッドエクスプローラ］の変更されたセクションの横に青い三角形が表示されます。 • ［異性体化合物の場合は自動的に増やす］チェックボックスをオフにすると、化合物リストテーブルの各化合物にすべての異性体の情報が含まれなくなります。 • １回目は、フラグメントイオンによる確認を行わずに、化学式による化合物の検出アルゴリズムを実行します。
3 ［化学式による化合物の検出］アルゴリズムを実行します。	**a** **［検出］**>**［化学式による化合物の検出］**コマンドをクリックします。 **b** ［メソッドエクスプローラ］と［メソッドエディタ］ウィンドウを閉じます。 **c** ［クロマトグラム結果］ウィンドウを閉じます。	• 2 つの化学式を確認できませんでした。それぞれの化学式の名前は、山かっこで囲んで表示されます。「Cpd 10: < Chloropropham (Chlorpropham)>」と「Cpd 11: < Monolinuron (phenylurea)>」は現在のパラメータでは確認されていません。

タスク 1. 構造異性体があるデータファイルに対して化学式による検出を実行

ステップ	詳細説明	コメント
4 結果をレビュー **Cpd 10:<Chloropropham>** • この化合物は検出されていません。 • **Cpd 11:<Monolinuron (phenylurea)>** も検出されていません。	**a** **Cpd 10: <Chloropropham> (Chlorpropham)** をクリックします。 **b** 化合物リストテーブルを展開して、**Cpd 10** のテーブルで 2 つのレベルを表示します。 **c** **Cpd 11: <Monolinuron (phenylurea)>** をクリックします。 **d** 化合物リストテーブルを展開して、**Cpd 11** のテーブルで 3 つのレベルを表示します。	• Cpd 11 の場合、**[スコア（質量）]** は良好（95% 以上）ですが、**[スコア（同位体，アバンダンス）]** と **[スコア（同位体，質量差）]** はともに 0 です。このため、**[スコア (MS)]** が［結果フィルタ］タブで設定されたリミットよりも低くなっています。その結果、化合物が適格と判定されませんでした。 • この化合物には対応するスペクトルがないので、**[MS スペクトル結果]** ウィンドウには前に選択した化合物の結果がまだ表示されています。

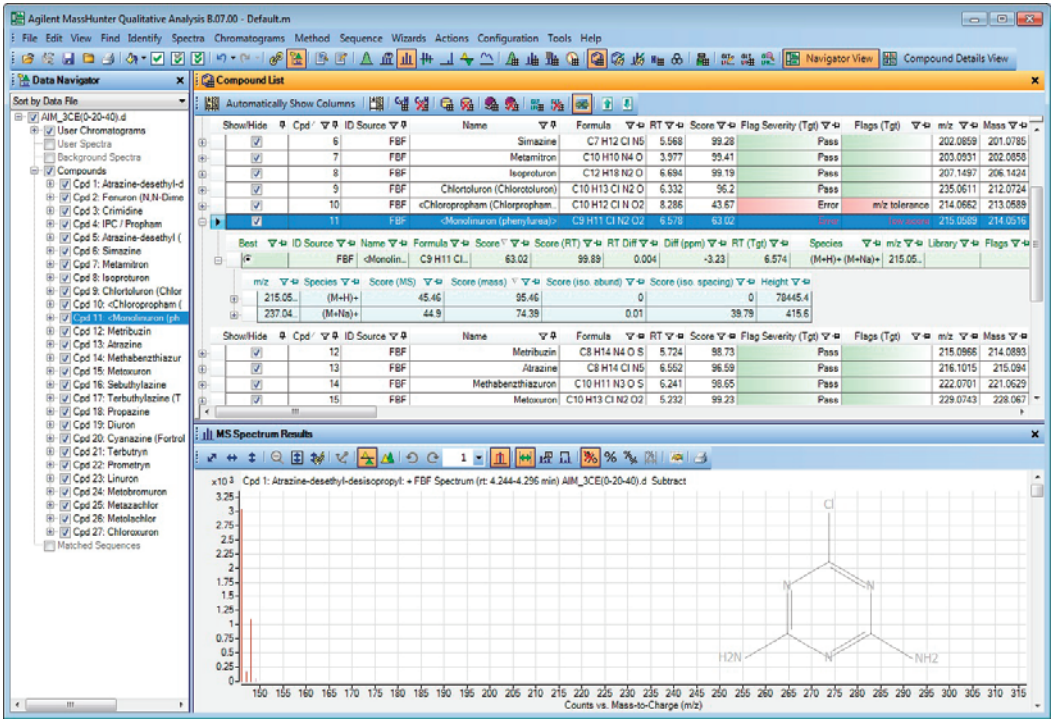


図 88 化合物が検出されない場合の結果

タスク 1. 構造異性体があるデータファイルに対して化学式による検出を実行

ステップ	詳細説明	コメント
5 Cpd 7: Metamitron の結果を確認します。 • この化合物は検出されています。	**a** ［データナビゲータ］ウィンドウで **Cpd 7: Metamitron** をクリックします。 **b** ［化合物リスト］ウィンドウで結果を展開して、化合物リストテーブルの最初の 4 つのレベルを表示します。 **c** **［スコア (Tgt)］**の値を確認します。	• 表示する列は、ショートカットメニューから変更できます。 • 全体的な **［スコア (Tgt)］**の値は、**［スコア (MS)］**と **［スコア (RT)］**から計算されます。 • **［スコア (MS)］**は、**［スコア (質量)］**、**［スコア（同位体，アバンダンス）］**、**［スコア（同位体，質量差）］**の値から計算されます。

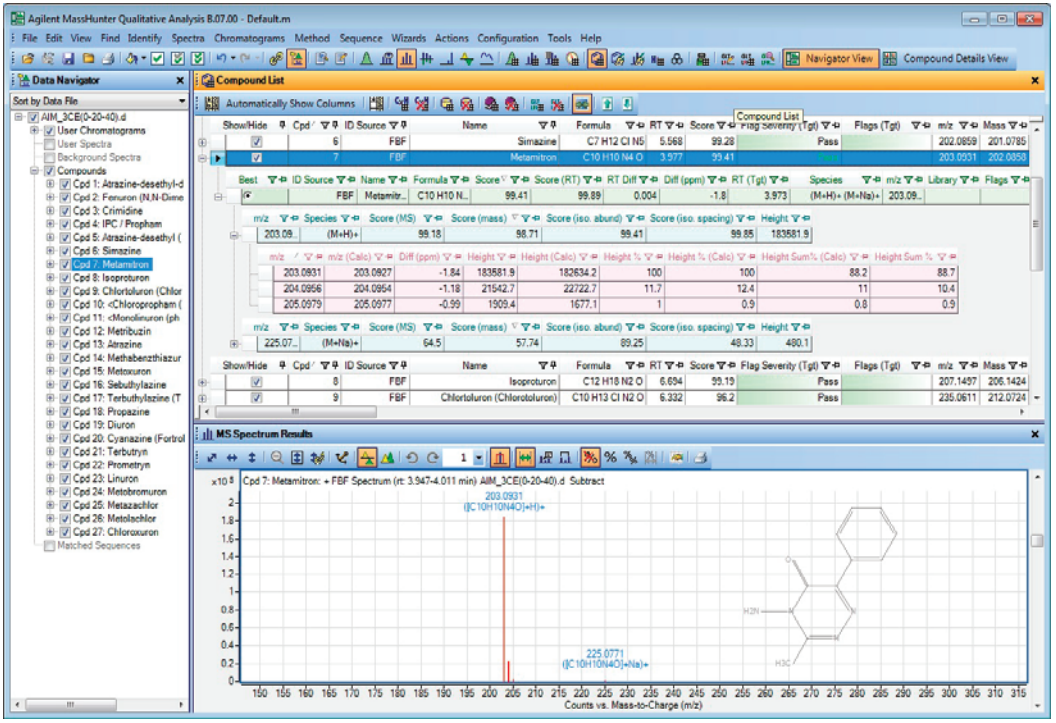


図 89 化学式による検出結果: ［データナビゲータ］、［化合物リスト］、［MSスペクトル結果］ウィンドウ

タスク 1. 構造異性体があるデータファイルに対して化学式による検出を実行

ステップ	詳細説明	コメント
6 Cpd 18: Propazine の結果を確認します。 • Propazine は **Cpd 16: Sebuthylazine** および **Cpd 19: Diuron** と化学式が同じなので、構造異性体です。 • 異性体は手動で選択することができます。	**a** ［データナビゲータ］ウィンドウで **Cpd 18: Propazine** をクリックします。 **b** ［化合物リスト］ウィンドウで結果を展開して、化合物リストテーブルの最初の 2 つのレベルを表示します。 **c** **［表示］>［クロマトグラム結果］**をクリックします。 **d** この化合物の **［スコア］**と **［スコア (RT)］**の値を確認します。 **e** **［フラグ (Tgt)］**の値を確認します。構造異性体の場合、ここに **［複数 ID ヒット］**が表示されます。**［フラグ重要度 (Tgt)］**値は**［情報］**に設定されています。	• ［化学式による検出］アルゴリズムは、質量とリテンションタイムがデータベースに記録されており、アルゴリズムで使用されていれば、構造異性体を区別することができます。 • MS/MS 情報も、構造異性体の区別に利用できます。 • **［スコア (RT)］**の値は化合物 Propazine のほうが明らかに大きいので、Propazine が **［ベスト］**ヒットとして選択されています。

タスク 1. 構造異性体があるデータファイルに対して化学式による検出を実行

ステップ	詳細説明	コメント
7 メソッドを iiiAll_Ions1 に保存し（ここで「iii」はユーザーのイニシャル）、結果を保存せずにデータファイルを閉じます。	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。 b **iiiAll_Ions1.m** と入力します。 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。

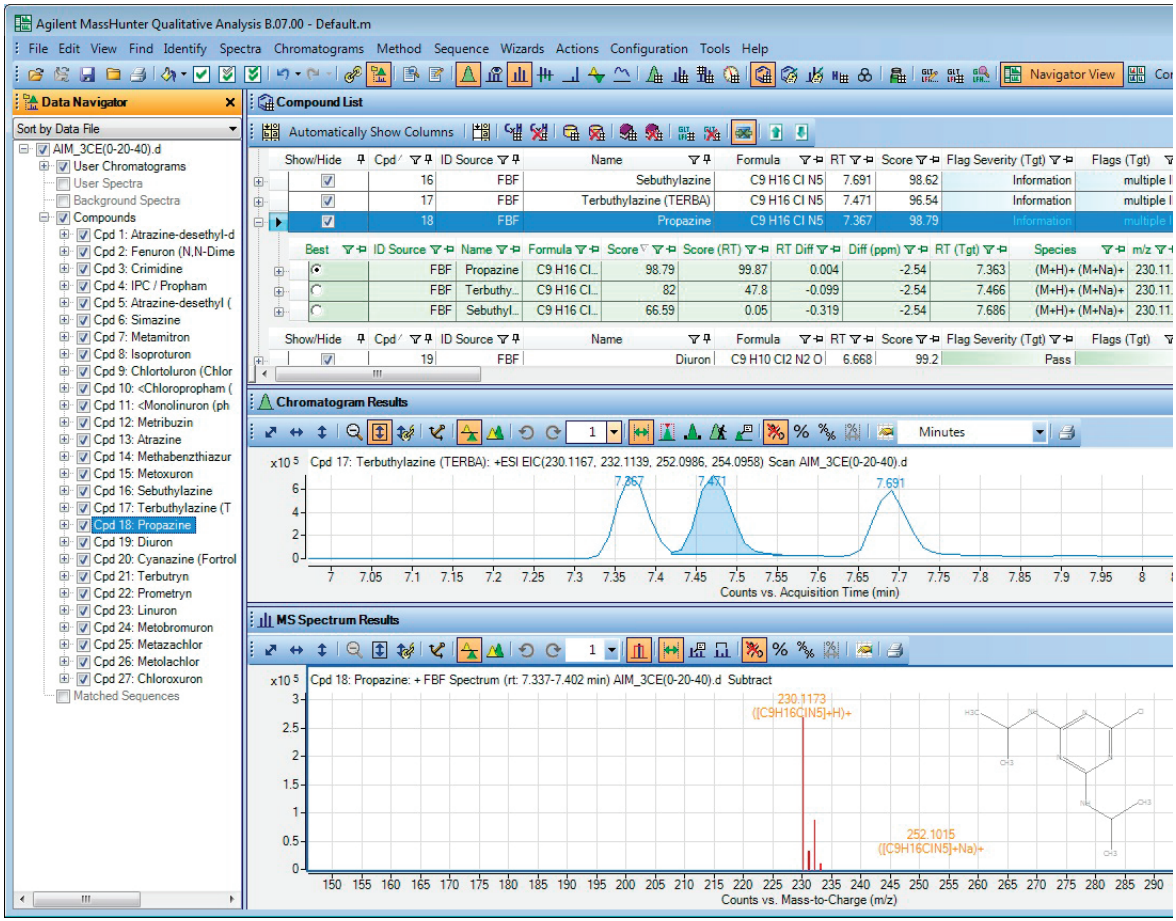


図 90 Cpd 18: Propazine などの構造異性体の結果を確認

タスク 2. 全イオン MS/MS モードで測定したデータを使用した化学式（データベース）による検出を実行

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] モードをオンにする必要があります。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 2. 全イオン MS/MS モードで測定したデータを使用した化学式（データベース）による検出を実行

ステップ	詳細説明	コメント
1 ［化学式による化合物の検出］アルゴリズムをフラグメントの確認付きで実行します。 • フラグメントの確認では、高エネルギー（High-E）チャンネルの情報が使用されます。	**a** 138 ページの「タスク 1. 構造異性体があるデータファイルに対して化学式による検出を実行」の手順を実行します。 **b** ［メソッドエクスプローラ］の［化学式による検出 - オプション］セクションで **［フラグメントの確認］** タブをクリックします。 **c** **［フラグメントイオンで確認する］** チェックボックスをオンにします。 **d** **［スペクトルライブラリが使用できない場合は平均フラグメントスペクトルを使用］** ボタンをクリックします。 **e** **［フラグメントイオン EIC の条件］** のパラメータを確認します。**［共溶出スコア］** に 90 を入力します。 **f** **［フラグメントイオン確認の条件］** のパラメータを確認します。**［最小確認フラグメント数］** をクリックし、1 を入力します。	• ［使用するフラグメントイオン］は、PCDL ライブラリの MS/MS スペクトルか、データファイルの高エネルギーチャンネルのフラグメントスペクトルのどちらかです。 • フラグメントスペクトルの場合、これはプリカーサイオンの溶出プロファイルの平均フラグメントスペクトルです。 • **［S/N 比］** は少なくとも 5 以上に設定します。 • **［最低限必要な確認フラグメントのパーセント］** ボタンをクリックして **［スペクトルライブラリから使用するイオン数（アバンダンスの高い順に使用）］** を 5 に設定し、最小パーセントが 75% の場合、イオンのうち 4 つが適格と判定される必要があります（4/5 = 80% なので、75% より高くなる）。

タスク 2. 全イオン MS/MS モードで測定したデータを使用した化学式（データベース）による検出を実行

ステップ	詳細説明	コメント

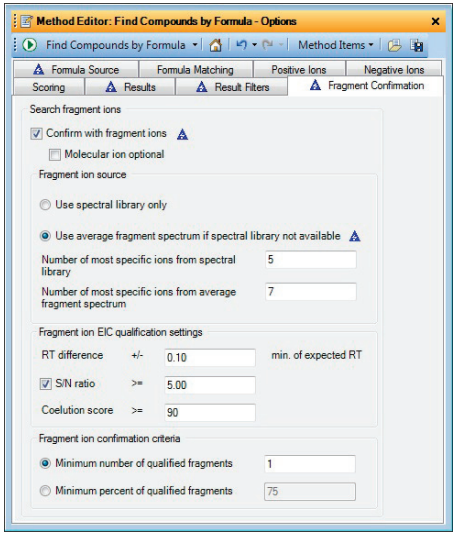
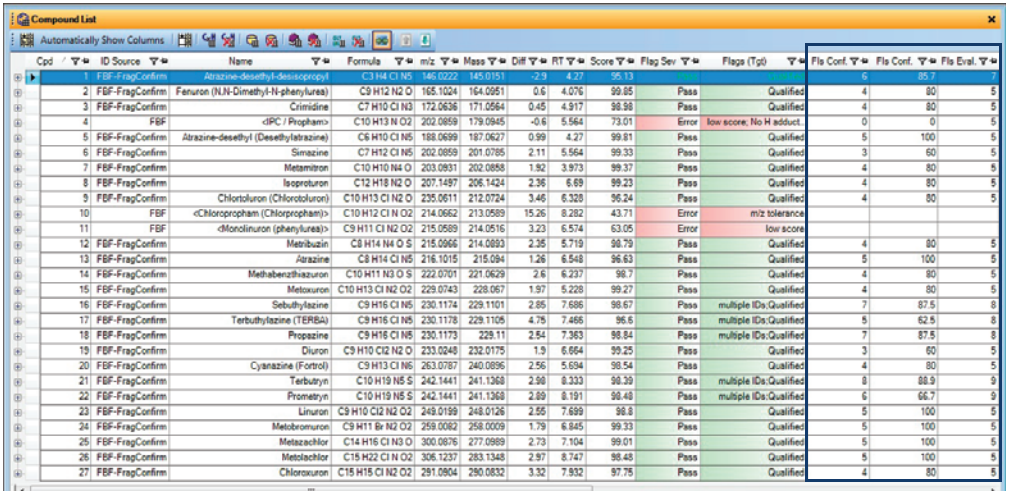


図 91 ［化学式による化合物の検出］>［フラグメントの確認］タブ

2 ［化学式による化合物の検出］アルゴリズムを実行します。	• **［検出］>［化学式による化合物の検出］**をクリックします。 • ［メソッドエディタ］ウィンドウの ボタンをクリックします。 • ［メソッドエディタ］ウィンドウを右クリックし、**［化学式による化合物の検出］**をクリックします。	• フラグメントの確認では、全リテンションタイム、S/N 比、共溶出スコアが考慮されます。

タスク 2. 全イオン MS/MS モードで測定したデータを使用した化学式（データベース）による検出を実行

ステップ	詳細説明	コメント
3 化合物リストウィンドウで、結果を確認します。	**a** ［化合物リスト］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。 **b** ショートカットメニューを使用してテーブルの列を追加または削除します。 **c** **［評価 FI］** 列を確認します。 **d** **［確認 FI］** 列を確認します。 **e** **［確認 FI %］** 列を確認します。 **f** **［フラグ (Tgt)］** 列の値を確認します。	• **FI** はフラグメントイオンの略です。 • １つ目の化合物には PCDL スペクトルがないので、データファイルからの平均フラグメントスペクトルが使用されています。評価されたフラグメントイオンの数は 7 です。 • 構造異性体に対して評価されたフラグメントイオンの数も、5 を超えています。 • **［フラグ (Tgt)］**列には、低エネルギーチャンネルからの情報と、高エネルギーチャンネルからの MS/MS 情報を総合した結果が表示されます。



Cpd	ID Source	Name	Formula	m/z	Mass	Diff	RT	Score	Flag Sev	Flags (Tgt)	Fls Conf.	Fls Conf.	Fls Eval.
1	FBF-FragConfirm	Atrazine-desethyl-desisopropyl	C3 H4 Cl N5	146.0222	145.0151	-2.9	4.27	95.13	Pass	Qualified	6	85.7	7
2	FBF-FragConfirm	Fenuron (N,N-Dimethyl-N-phenylurea)	C9 H12 N2 O	165.1024	164.0951	0.6	4.076	99.85	Pass	Qualified	4	80	5
3	FBF-FragConfirm	Crimidine	C7 H10 Cl N3	172.0636	171.0564	0.45	4.917	98.98	Pass	Qualified	4	80	5
4	FBF	<IPC / Propham>	C10 H13 N O2	202.0859	179.0945	-0.6	5.564	73.01	Error	low score; No H adduct.	0	0	5
5	FBF-FragConfirm	Atrazine-desethyl (Desethylatrazine)	C6 H10 Cl N5	188.0699	187.0627	0.99	4.27	99.81	Pass	Qualified	5	100	5
6	FBF-FragConfirm	Simazine	C7 H12 Cl N5	202.0859	201.0785	2.11	5.564	99.33	Pass	Qualified	3	60	5
7	FBF-FragConfirm	Metamitron	C10 H10 N4 O	203.0931	202.0858	1.92	3.973	99.37	Pass	Qualified	4	80	5
8	FBF-FragConfirm	Isoproturon	C12 H18 N2 O	207.1497	206.1424	2.36	6.69	99.23	Pass	Qualified	4	80	5
9	FBF-FragConfirm	Chlortoluron (Chlorotoluron)	C10 H13 Cl N2 O	235.0611	212.0724	3.46	6.328	96.24	Pass	Qualified	4	80	5
10	FBF	<Chloropropham (Chlorpropham)>	C10 H12 Cl N O2	214.0662	213.0589	15.26	8.282	43.71	Error	m/z tolerance			
11	FBF	<Monolinuron (phenylurea)>	C9 H11 Cl N2 O2	215.0589	214.0516	3.23	6.574	63.05	Error	low score			
12	FBF-FragConfirm	Metribuzin	C8 H14 N4 O S	215.0966	214.0893	2.35	5.719	98.79	Pass	Qualified	4	80	5
13	FBF-FragConfirm	Atrazine	C8 H14 Cl N5	216.1015	215.094	1.26	6.548	96.63	Pass	Qualified	5	100	5
14	FBF-FragConfirm	Methabenzthiazuron	C10 H11 N3 O S	222.0701	221.0629	2.6	6.237	98.7	Pass	Qualified	4	80	5
15	FBF-FragConfirm	Metoxuron	C10 H13 Cl N2 O2	229.0743	228.067	1.97	5.228	99.27	Pass	Qualified	4	80	5
16	FBF-FragConfirm	Sebuthylazine	C9 H16 Cl N5	230.1174	229.1101	2.85	7.686	98.67	Pass	multiple IDs;Qualified	7	87.5	8
17	FBF-FragConfirm	Terbuthylazine (TERBA)	C9 H16 Cl N5	230.1178	229.1105	4.75	7.466	96.6	Pass	multiple IDs;Qualified	5	62.5	8
18	FBF-FragConfirm	Propazine	C9 H16 Cl N5	230.1173	229.11	2.54	7.363	98.84	Pass	multiple IDs;Qualified	7	87.5	8
19	FBF-FragConfirm	Diuron	C9 H10 Cl2 N2 O	233.0248	232.0175	1.9	6.664	99.25	Pass	Qualified	3	60	5
20	FBF-FragConfirm	Cyanazine (Fortrol)	C9 H13 Cl N6	263.0787	240.0896	2.56	5.694	98.54	Pass	Qualified	4	80	5
21	FBF-FragConfirm	Terbutryn	C10 H19 N5 S	242.1441	241.1368	2.98	8.333	98.39	Pass	multiple IDs;Qualified	8	88.9	9
22	FBF-FragConfirm	Prometryn	C10 H19 N5 S	242.1441	241.1368	2.89	8.191	98.48	Pass	multiple IDs;Qualified	6	66.7	9
23	FBF-FragConfirm	Linuron	C9 H10 Cl2 N2 O2	249.0199	248.0126	2.55	7.699	98.8	Pass	Qualified	5	100	5
24	FBF-FragConfirm	Metobromuron	C9 H11 Br N2 O2	259.0082	258.0009	1.79	6.845	99.33	Pass	Qualified	5	100	5
25	FBF-FragConfirm	Metazachlor	C14 H16 Cl N3 O	300.0876	277.0989	2.73	7.104	99.01	Pass	Qualified	5	100	5
26	FBF-FragConfirm	Metolachlor	C15 H22 Cl N O2	306.1237	283.1348	2.97	8.747	98.48	Pass	Qualified	5	100	5
27	FBF-FragConfirm	Chloroxuron	C15 H15 Cl N2 O2	291.0804	290.0832	3.32	7.932	97.75	Pass	Qualified	4	80	5

図 92　フラグメントイオンに関する３つの新しい列がある［化合物リスト］ウィンドウ

タスク 2. 全イオン MS/MS モードで測定したデータを使用した化学式（データベース）による検出を実行

ステップ	詳細説明	コメント
4 化合物リストテーブルの他のレベルを確認します。	• 化合物19の化合物リストテーブルを展開します。	• 3 つのフラグメントイオンが確認されました。**[フラグ(FI)]** 列にフラグメントイオンが確認されているかどうかが示されます。フラグメントイオンが確認されなかった場合、**[フラグ(FI)]** 列にフラグメントイオンが確認されなかった理由が示されます。

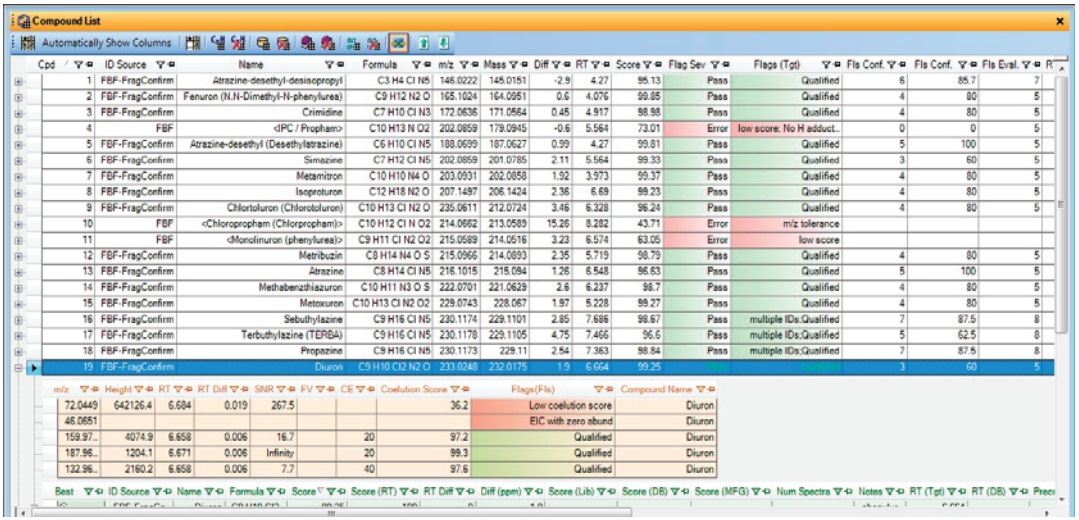


図 93 フラグメントイオンテーブルを含む化合物リストテーブル

5 メソッドを iiiAll_Ions2 に保存します（ここで、「iii」はユーザーのイニシャル）。	**a** メニューから **[メソッド]** > **[名前を付けて保存]** をクリックします。 **b** **iiiAll_Ions2.m** と入力します。 **c** **[保存]** をクリックします。

タスク 3. 化合物詳細表示で結果を確認する

化合物詳細表示では、１つのデータファイルのみを表示して、データファイル中の個々の化合物を詳細に観察することができます。化合物詳細表示では、フラグメントイオンの共溶出の程度を共溶出プロットで視覚的に確認できます。

タスク 2. 化合物詳細表示で結果を確認する

ステップ	詳細説明	コメント
1 **化合物詳細表示**に切り替えます。	**a** 144 ページの「タスク 2. 全イオン MS/MS モードで測定したデータを使用した化学式（データベース）による検出を実行」の手順を実行します。 **b** メインツールバーの Compound Details View ボタンをクリックします。 **c** ［化合物リスト］ウィンドウで別の化合物に切り替えます。［化合物リスト］ツールバーの矢印ボタンをクリックするか、［化合物リスト］ウィンドウの各行をクリックするか、キーボードの矢印キーを押します。	• ［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と、共溶出プロットが表示されます。 • ［化合物 MS スペクトル結果］には、低エネルギーチャンネルのスペクトルが表示されます。 • ［化合物フラグメントスペクトル結果］ウィンドウには、すべての高エネルギーチャンネルの平均スペクトルが表示されます。

タスク 2. 化合物詳細表示で結果を確認する

ステップ	詳細説明	コメント

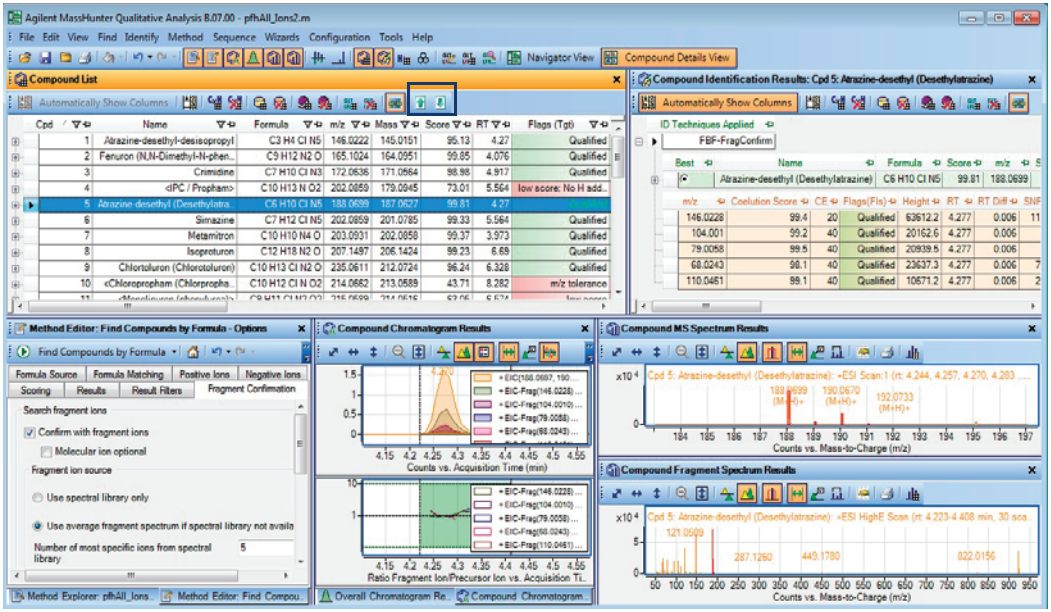


図 94 化合物詳細表示

タスク 2. 化合物詳細表示で結果を確認する

ステップ	詳細説明	コメント
2 **Cpd 3: Crimidine** の結果を確認します。	**a** **Cpd 3: Crimidine** を［化合物リスト］ウィンドウでクリックします。 **b** ［化合物同定結果］ウィンドウで、**［共溶出スコア］**、**［CE］**、**［フラグ（FI）］**、**［SNR］** の各列を確認します。 **c** ［化合物 MS スペクトル結果］ウィンドウで、MS スペクトルを確認します。	• この化合物の 5 つのフラグメントイオンのうち 4 つが「確認できました」と判定されています。 • 5 つのフラグメントイオンのうち 4 つの S/N 比（SNR）値が 5 を超えています。 • フラグメントイオンのコリジョンエネルギーはすべて同じではありません。 • ［化合物 MS スペクトル結果］ウィンドウには、化学式による検出の補正スペクトル（化学式と付加イオンの注釈付き）と生スペクトルが表示されています。



図 95 低 SNR のフラグメントイオンが 1 つある化合物 3

タスク 2. 化合物詳細表示で結果を確認する

ステップ	詳細説明	コメント
3 ［化合物同定結果］ウィンドウで、他のレベルを確認します。	**a** ［化合物同定結果］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。 **b** 化合物 2 の［化合物同定結果］ウィンドウを開きます。 **c** **[スコア (MS)]** の結果を確認します。 **d** **[共溶出スコア]** 値を確認します（2 つの確認されたフラグメントイオンで 99 % を超えています）。**[共溶出スコア]** は、**[スコア (Tgt)]** の値に直接影響しません。	• **[スコア (MS)]** は、**[スコア（質量）]**、**[スコア（同位体, アバンダンス）]**、**[スコア（同位体, 質量差）]** の値から決定されます。 • **[スコア (Tgt)]** は、**[スコア (RT)]** と **[スコア (MS)]** に基づいて、99.85 となっています。 • この化合物は、定量分析プログラムのフラグメントイオンの確認によって、TOF または Q-TOF システムでのターゲット分析に使用するのに適格と判定されました。

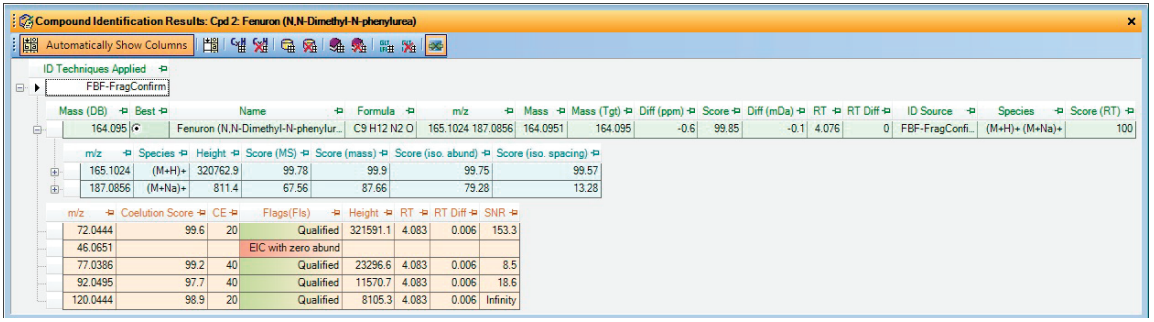


図 96 フラグメントイオンテーブルを含む化合物リストテーブル

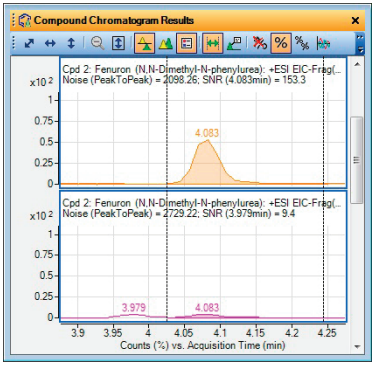
4 ［化合物フラグメントスペクトル結果］ウィンドウで、結果を確認します。	**a** ［化合物フラグメントスペクトル結果］ウィンドウで、 ボタンをクリックします。 **b** *m/z* 30 ～ 190 の範囲を拡大します。 **c** 適格と判定されたフラグメントイオンは緑色の注釈が付けられていることに注意してください。	• 近くに他のラベル付きピークがある場合、フラグメントイオンにはラベルが付けられていないことがあります。 • スペクトルは、2 つの CE 値、20 V と 40 V から構成される平均スペクトルです。



図 97 化合物フラグメントスペクトル結果ウィンドウ

タスク 2. 化合物詳細表示で結果を確認する

ステップ	詳細説明	コメント
5 ［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。	**a** ［化合物 クロマトグラム結果］ツールバーの ボタンをクリックします。 **b** ボタンをクリックします。 **c** 各フラグメントイオンの EIC とプリカーサイオンの EIC をスクロールして確認します。 **d** ［化合物 クロマトグラム結果］ツールバーの をクリックして、［共溶出プロット］ペインを表示します。 **e** クロマトグラムを重ね描きするには、 ボタンをクリックします。 **f** クロマトグラムのスケールを設定するには、% ボタンをクリックします。 **g** 凡例で、［共溶出プロット］ペインで各フラグメントイオンとプリカーサイオンの EIC を識別する色を調べます。	• ［EIC-Flag］が、各フラグメントイオンクロマトグラムのタイトルに含まれています。これらの EIC は、ベストなコリジョンエネルギー電圧チャンネルから抽出されています。 • 重ね描きクロマトグラムのグラフでは、クロマトグラムの共溶出を視覚的に確認できます。これは、共溶出スコアの大きさにも反映されます。 • 共溶出スコアは、フラグメントイオンとプリカーサイオンのリテンションタイム、ピーク幅、ピークの対称性を比較します。 • フラグメントが共溶出している場合、クロマトグラムのピークの大部分でイオン比が 1 に近くなるはずです。 • 共溶出プロットの最初と最後でいくつか値が大きくなっているのは、ノイズ値が強調されているからです。



共溶出プロットで、1 の位置に引かれた黒い線は、正確に共溶出しているピークの値を示しています。他の 5 本の線はそれぞれ、プリカーサの時間範囲内でノーマライズされたフラグメントイオンとプリカーサのアバンダンス比を示します。緑の部分が信頼領域です。

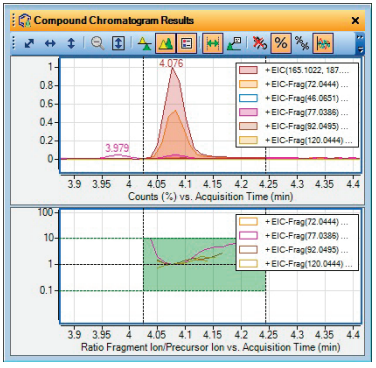


図 98 化合物クロマトグラム結果ウィンドウ

6 データファイルを閉じ、ナビゲーション表示に戻ります。	**a** **［ファイル］>［データファイルを閉じる］**をクリックします。 **b** メインツールバーの Navigator View ボタンをクリックします。

リファレンス

ナビゲーション表示と化合物詳細表示 156
ウィンドウの操作 157
データナビゲータにおける結果データの操作 160
クロマトグラムの操作 161
MSまたはMS/MSスペクトルの操作 162
クロマトグラフ表示データの操作 163
スペクトル表示データの操作 165
ワークフロー 166
レポートテンプレートのカスタマイズ 171

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。

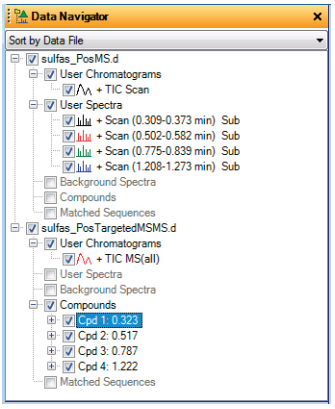
ツールバーアイコン	ウィンドウ
	データナビゲータウィンドウ メソッドエクスプローラウィンドウ メソッドエディタウィンドウ
	クロマトグラム結果ウィンドウ スペクトルプレビューウィンドウ MS スペクトル結果ウィンドウ 結果の差ウィンドウ デコンボリューション結果ウィンドウ デコンボリューション ミラープロット ウィンドウ UV スペクトル結果ウィンドウ
	積分ピークリストウィンドウ MSスペクトルピークリスト1ウィンドウ MSスペクトルピークリスト2ウィンドウ MS実測値ウィンドウ

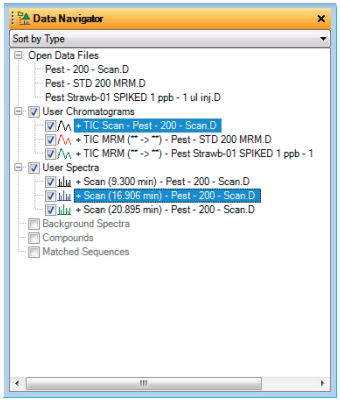
ツールバーアイコン	ウィンドウ
	化合物リストウィンドウ 化合物同定結果ウィンドウ スペクトル同定結果ウィンドウ MS/MS化学式の詳細ウィンドウ 構造式ビューアウィンドウ サンプル情報ウィンドウ シーケンスエディタウィンドウ

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

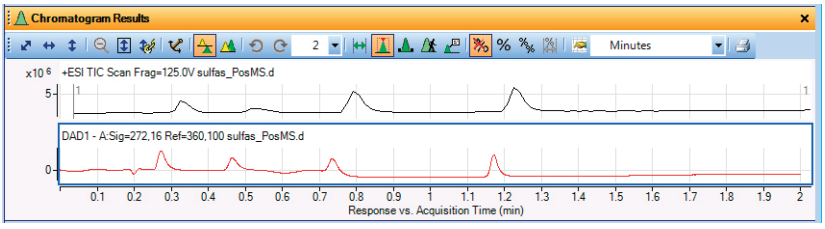
メニュー項目を用いて、MSまたはMS/MSスペクトル、あるいはそれらのスペクトルの選択範囲で以下の操作を行うことができます。

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）
デコンボリュート(同位体分離)アルゴリズムの使用	[スペクトル] > [デコンボリュート(同位体分離)]

処理	メニュー項目
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］

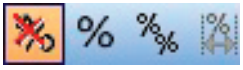
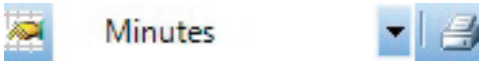
クロマトグラフ表示データの操作

［クロマトグラム結果］ウィンドウ



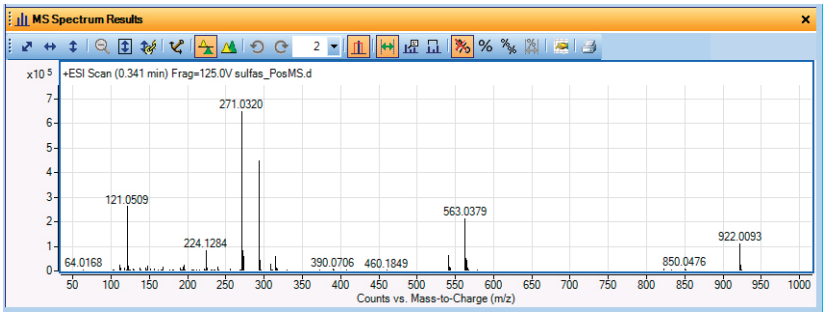
クロマトグラム結果ツール

ツールバーアイコン	処理
ズームツール 	• X軸とY軸のオートスケール • X軸のオートスケール • Y軸のオートスケール • ズーム解除 • ズーム中にY軸をオートスケール • Y軸リンクモード
	• **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。 • **リストモード** - 各クロマトグラムは、それぞれの Y 軸で描かれます。 • **重ね描きモード** - 複数のクロマトグラムが、1 つのX軸とY軸上に描かれます。 • **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。 • **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。 • 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  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。 • **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。 • **マニュアル積分** - オンにすると、対話形式で積分できます。 • **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。 • **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 	• クロマトグラムのノーマライズを停止します。 • すべてのクロマトグラムを、任意のクロマトグラムの最大ピークに合わせてノーマライズします。 • すべてのクロマトグラムを、各クロマトグラムの最大ピークに合わせてノーマライズします。 • 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 	• **[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。 • クロマトグラムの表示に使用する単位を設定します。 • 表示されているクロマトグラムを印刷します。

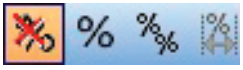
スペクトル表示データの操作

[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 	• X軸とY軸のオートスケール • X軸のオートスケール • Y軸のオートスケール • ズーム解除 • ズーム中にY軸をオートスケール • Y軸リンクモード
	• **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。 • **リストモード** - 各スペクトルは、それぞれの Y 軸に描かれます。 • **重ね描きモード** - 複数のスペクトルが、1 つの X 軸と Y 軸上に描かれます。 • **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。 • **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。 • 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  常にどちらか 1 つのツールが選択されています。この図では、範囲選択ツールが選択されています。選択したツールの背景色はオレンジ色です。	• **範囲選択** - **オン**にすると、処理を実行したいスペクトルの範囲を選択できます。 • **注釈** - **オン**にすると、スペクトルにイメージやテキスト注釈を追加できます。 • **質量差** - **オン**にすると、選択したスペクトルに質量差を追加できます。[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 	• スペクトルのノーマライズを停止します。 • 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。 • 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。 • 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 	• **[MS および MS/MS スペクトルの表示オプション]** ダイアログボックスを開きます。 • 表示されているスペクトルを印刷します。

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
BioConfirm 未消化タンパク質	BioConfirm IntactProtein-Default.m	BioConfirm-IntactProtein-MaximumEntropy-Default.xml	BioConfirm ワークフロー
BioConfirm 高質量未消化タンパク質	BioConfirm IntactProtein HighMass Default.m	BioConfirm IntactProtein LMFE.xml	BioConfirm ワークフロー
BioConfirm スモールオリゴヌクレオチド	BioConfirmOligo nucleotideSmall.m	BioConfirmOligo-nucleotide.xml	BioConfirm ワークフロー
BioConfirm ラージオリゴヌクレオチド	BioConfirmOligo nucleotideLarge-Default.m	BioConfirmOligo-nucleotide.xml	BioConfirm ワークフロー
BioConfirm タンパク質消化物	BioConfirmProtein Digest-Default.m	BioConfirm ProteinDigest.xml	BioConfirm ワークフロー
BioConfirm 合成ペプチド	BioConfirmSynthetic Peptide-Default.m	BioConfirm SyntheticPeptide.xml	BioConfirm ワークフロー
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

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
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

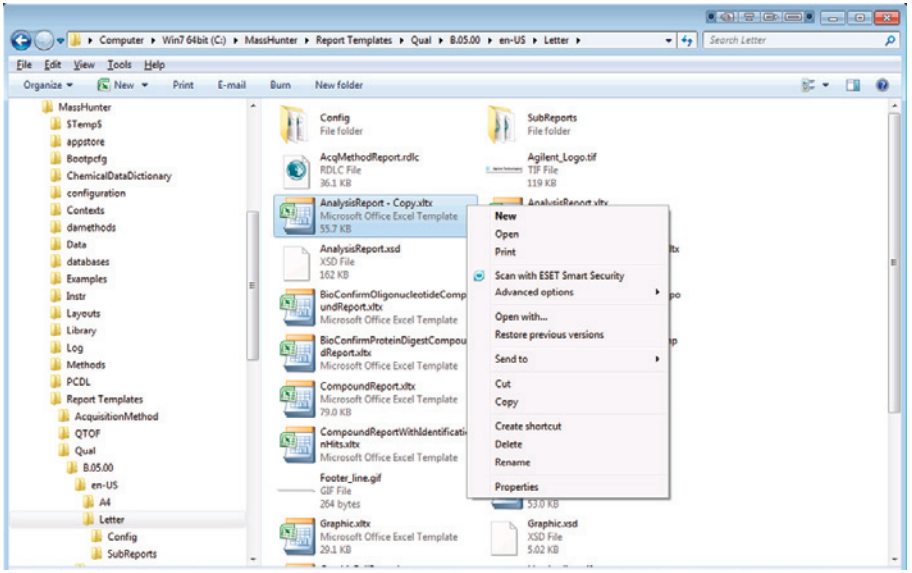
レポートテンプレートのカスタマイズ

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。

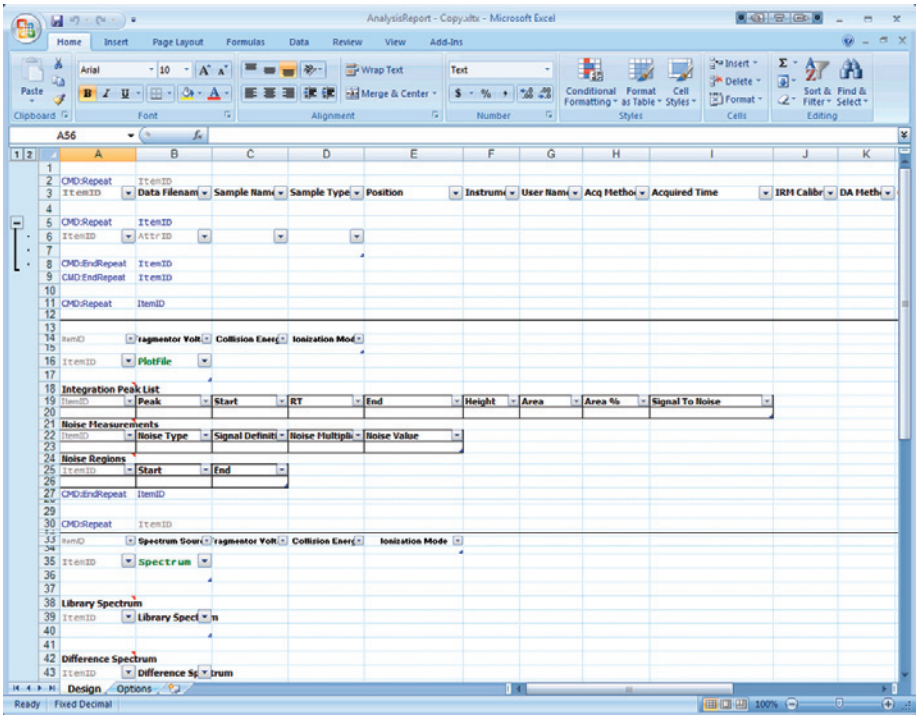
2 変更するテンプレートのコピーを作成します。

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。



www.agilent.com

本書の内容

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

© Agilent Technologies, Inc. 2014

リビジョンA、2014年9月

G3336-96023

Agilent Technologies