

MassHunter 定量ソフトウェア

化合物合計での定量方法

MassHunter 定量ソフトウェアでリテンションタイム (RT) が離れたピークをレスポンス値を合計して検量線を作成し、定量計算をさせるための手順です。

こちらのマニュアルの前提条件として、個別のピークの定量メソッドができていていることとします。

- 1) メソッド編集画面に入り (メソッドメニュー>編集)、合計での定量計算用の化合物を新規で作成します。下の画面上ではもともとある Peak1~4 の設定に加えて「Total compound」という名称で新規化合物を作成しています。

サンプル			
サンプル名	データファイル	タイプ	レベル
demoscan sample	evaldemo.d	サンプル	

定量対象化合物			
化合物名	TS	測定モード	タイプ
Peak1	1	スキャン	ターゲット
Peak2	1	スキャン	ターゲット
Peak3	1	スキャン	ターゲット
Peak4	1	スキャン	ターゲット
Total compound		スキャン	

- 2) 「メソッド設定タスク」の「化合物の設定」もしくは「MRM 化合物設定」の画面で「定量対象化合物」テーブルに「化合物グループ」と「化合物計算」を追加します。(テーブル上で右クリック>「列の追加と削除」から追加できます)

サンプル						
サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定メソッドファイル	測定日時	
demoscan sample	evaldemo.d	サンプル		testAcqFileName...	0001/01...	

定量対象化合物									
化合物名	TS	測定モード	タイプ	m/z	RT	イオン極性	選択基準	化合物グループ	化合物計算
Peak1	1	スキャン	ターゲット	57.1	5.278	ポジティブ	RTが最も近い		
Peak2	1	スキャン	ターゲット	154.1	6.423	ポジティブ	RTが最も近い		
Peak3	1	スキャン	ターゲット	188.2	7.737	ポジティブ	RTが最も近い		
Peak4	1	スキャン	ターゲット	143.2	9.772	ポジティブ	RTが最も近い		
Total compound		スキャン	ターゲット	0.0		ポジティブ	RTが最も近い		

- 3) 新規の化合物の「タイプ」をターゲット、「m/z」もしくは「プリカーサイオン」「プロダクトイオン」にダミーの値 (ここでは m/z に 100) を入力し、新規の化合物と合算して定量したい化合物の「化合物グループ」に同じ名称を入力します (ここでは「Total」)

サンプル						
サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定メソッドファイル	測定日時	
demoscan sample	evaldemo.d	サンプル		testAcqFileName...	0001/01...	

定量対象化合物									
化合物名	TS	測定モード	タイプ	m/z	RT	イオン極性	選択基準	化合物グループ	化合物計算
Peak1	1	スキャン	ターゲット	57.1	5.278	ポジティブ	RTが最も近い	total	
Peak2	1	スキャン	ターゲット	154.1	6.423	ポジティブ	RTが最も近い	total	
Peak3	1	スキャン	ターゲット	188.2	7.737	ポジティブ	RTが最も近い	total	
Peak4	1	スキャン	ターゲット	143.2	9.772	ポジティブ	RTが最も近い	total	
Total compound		スキャン	ターゲット	100.0		ポジティブ	RTが最も近い	total	

4). 新規の化合物の「化合物計算」にプルダウンから「レスポンス合計」を選択します。

サンプル		サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定メソッドファイル	測定日時		
		demoscan sample	evaldemo.d	サンプル		testAcqFileName...	0001/01...		
定量対象化合物									
化合物名	TS	測定モード	タイプ	m/z	RT	イオン極性	選択基準	化合物グループ	化合物計算
Peak 1	1	スキャン	ターゲット	57.1	5.278	ポジティブ	RTが最も近い	total	
Peak 2	1	スキャン	ターゲット	154.1	6.423	ポジティブ	RTが最も近い	total	
Peak 3	1	スキャン	ターゲット	188.2	7.737	ポジティブ	RTが最も近い	total	
Peak 4	1	スキャン	ターゲット	143.2	9.772	ポジティブ	RTが最も近い	total	
▶ Total compound		スキャン	ターゲット	100.0		ポジティブ	RTが最も近い	total	レスポンス合計

5) 新規の化合物には、合算させるピークの間値となる値を入力します（ここでは 7.5 と入力）。

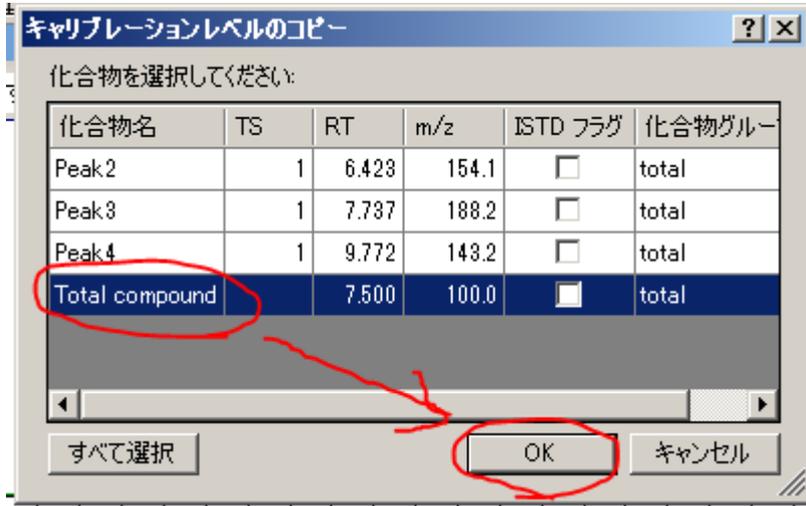
サンプル		サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定メソッドファイル	測定日時		
		demoscan sample	evaldemo.d	サンプル		testAcqFileName...	0001/01...		
定量対象化合物									
化合物名	TS	測定モード	タイプ	m/z	RT	イオン極性	選択基準	化合物グループ	化合物計算
Peak 1	1	スキャン	ターゲット	57.1	5.278	ポジティブ	RTが最も近い	total	
Peak 2	1	スキャン	ターゲット	154.1	6.423	ポジティブ	RTが最も近い	total	
Peak 3	1	スキャン	ターゲット	188.2	7.737	ポジティブ	RTが最も近い	total	
Peak 4	1	スキャン	ターゲット	143.2	9.772	ポジティブ	RTが最も近い	total	
▶ Total compound		スキャン	ターゲット	100.0	7.500	ポジティブ	RTが最も近い	total	レスポンス合計

6) 「メソッド設定タスク」の「リテンションタイムの設定」の画面で「定量対象化合物」テーブルの「RT 左デルタ」と「RT 右デルタ」に、新規の化合物の RT から最も離れたピークの RT との差に約 0.5min 足した値を入力します。例えばここでは、新規化合物の RT を 7.5 とし、最も左側に離れたピークの RT は 5.278 なので、その差は「2.722」です。そこに約 0.5min を足して「3.3」としています。右についても同様の計算をします。

サンプル		サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定メソッドファイル	測定日時
		demoscan sample	evaldemo.d	サンプル		testAcqFileName...	0001/01...
定量対象化合物							
化合物名	TS	測定モード	タイプ	RT	RT左デルタ	RT右デルタ	RTデルタ単位
Peak 1	1	スキャン	ターゲット	5.278	1.000	1.000	分
Peak 2	1	スキャン	ターゲット	6.423	1.000	1.000	分
Peak 3	1	スキャン	ターゲット	7.737	1.000	1.000	分
Peak 4	1	スキャン	ターゲット	9.772	1.000	1.000	分
▶ Total compound		スキャン	ターゲット	7.500	3.300	3.300	分

7)  **Agilent Technologies**

8) 「メソッド設定タスク」の「濃度の設定」の画面で、任意のピークのキャリブレーションテーブルを新規の化合物にコピーします（任意のピークのテーブル上で右クリック>「キャリブレーションレベルのコピー」を選びます）。



9) バリデーションを行ってエラーがないことを確認します。

10) 罰解析画面に戻り、「バッチ処理」を行い、新規の化合物を確認します。一つのウィンドウに複数のピークが確認できれば設定完了です。

