Agilent G1701FA
GC/MSD マスハンターソフトウェア

Agilent 7890B GC / 5977MSD

マスハンターソフトウェア基本操作マニュアル

Agilent Technologies

Agilent G1701FA
GC/MSD マスハンターソフトウェア

Agilent 7890B GC / 5977MSD
マスハンターソフトウェア基本操作マニュアル

ご注意

© Agilent Technologies, Inc. 2013
このマニュアルは米国著作権法および国際著作権法によって保護されており、
Agilent Technologies, Inc.の書面による事前の許可なく、本書の一部または全部を複製することはいかなる形式や方法（電子媒体による保存や読み出し、外国語への翻訳なども含む）においても、禁止されています。

マニュアル番号

AT2A4F11

エディション

初版, 2013年6月
Printed in Japan
アジレント・テクノロジー株式会社
東京都八王子市高倉町9番1号
192-8510, Japan

ソフトウェアリビジョン

このマニュアルは、

- MassHunter Workstation GC/MS Acquisition Software Version B.07.00
- MassHunter Workstation Qualitative Analysis Software Version B.06.00
- MassHunter Workstation Quantitative Analysis Software Version B.06.00

に対応しています。

保証

このマニュアルに含まれる内容は「現状のまま」提供されるもので、将来のエディションにおいて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に許可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の商品性および特定の目的に対する適合性に関する黙示の保障を含めて（ただしそれだけには限定されません）、いかなる明示的または黙示的な保障も行いません。**Agilent**は、このマニュアルまたはそれに含まれる情報の所有、使用、または実行に付随する過誤、または偶然的または間接的な損害に対する責任を一切負わないものとします。**Agilent**とお客様の間に書面による別の契約があり、本マニュアルの内容に対する保証条項が同文書の条項と矛盾する場合は、別の契約の保証条項が適用されます。

技術ライセンス

このマニュアルで説明され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いて提供され、そのライセンスの条項に従って使用またはコピーできます。

安全に関する注意

注意

注意は、危険を表します。これは、正しく実行されない場合、または指示を順守されない場合に、製品の損害または重要なデータの損失にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起しています。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、危険を表します。これは、正しく実行されない場合、または指示が順守されない場合に、人身への傷害または死亡にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起しています。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、警告を無視して先に進んではなりません。

目次

第1章 システムの立ち上げ方

ページ

1 章－1　GC および MSD の電源を入れる …… 1－3
1 章－2　マスハンター測定ソフトウェアの起動 …… 1－5
1 章－3　測定に使用する解析モードの設定 …… 1－6
1 章－4　真空排気プログラムの実行 …… 1－8
1 章－5　メソッドの読み込み …… 1－10

第2章 チューニング

2 章－1　使用する標準物質 …… 2－2
2 章－2　ゲイン係数 …… 2－2
2 章－3　オートチューニングの実施方法 …… 2－3
2 章－4　チューンレポート …… 2－4
2 章－5　チューニング結果の確認 …… 2－5
2 章－6　マニュアルチューン …… 2－7
2 章－7　チューニング表示 …… 2－9

第3章 定性のための測定条件作成

3 章－1　メソッド編集の開始 …… 3－3
3 章－2　メソッド情報とメソッド実行範囲の設定 …… 3－4
3 章－3　試料導入方法の設定 …… 3－5
3 章－4　GC（Agilent 7890）のパラメータ編集画面 …… 3－6
3 章－5　GC コンフィグレーション …… 3－8
3 章－6　オーブン温度条件の設定 …… 3－13
3 章－7　カラム流量の設定 …… 3－14
3 章－8　注入口条件の設定 …… 3－15
3 章－9　オートサンプラ条件の設定 …… 3－16
3 章－10　Aux 温度条件の設定 …… 3－18
3 章－11　GC 計算ツール …… 3－19
3 章－12　7890GC パラメータ編集画面の終了 …… 3－23
3 章－13　GC リアルタイムプロットの設定 …… 3－23
3 章－14　MSD の測定条件の設定 …… 3－24
3 章－15　モニタ選択 …… 3－26
3 章－16　メソッドの保存 …… 3－27
3 章－17　メソッドの印刷方法 …… 3－28

第4章 メソッドの実行とログブック

4 章－1　測定に使用するメソッドの読み込み …… 4－3
4 章－2　サンプル情報の入力とメソッドの実行（ランメソッド）…… 4－3
4 章－3　測定開始 …… 4－6
4 章－4　ログブックを確認する …… 4－8

第5章 定性のデータ解析

5 章－1　定性解析（Qualitative Analysis）の起動 …… 5－3
5 章－2　解析環境の設定 …… 5－5
5 章－3　ウィンドウ構成と基本操作 …… 5－8
5 章－4　積分 …… 5－11
5 章－5　パーセントレポート …… 5－21
5 章－6　クロマトグラム …… 5－28
5 章－7　スペクトルの取り出し …… 5－37
5 章－8　スペクトルの減算 …… 5－41
5 章－9　スペクトルのライブラリーサーチ …… 5－48
5 章－10　化合物の検出 …… 5－60
5 章－11　自動解析 …… 5－64
5 章－12　SN（シグナル/ノイズ）比の計算 …… 5－72
5 章－13　定性解析の終了 …… 5－80

第6章 定量のための測定条件設定

6 章－1　SIM モードの特徴 …… 6－3
6 章－2　定量イオンとクオリファイアイオン …… 6－3
6 章－3　SIM イオンの選択 …… 6－4
6 章－4　SIM イオンとグループ分け …… 6－5
6 章－5　メソッドの読み込み …… 6－6
6 章－6　SIM 条件の設定 …… 6－7
6 章－7　メソッドの実行範囲を変更する …… 6－10
6 章－8　SIM/Scan 同時取り込みの設定方法 …… 6－11

第7章 シーケンス

7 章－1　シーケンスの作成 …… 7－3
7 章－2　シーケンスの保存 …… 7－9
7 章－3　シーケンスの実行 …… 7－10
7 章－4　シーケンスログの印刷 …… 7－14
7 章－5　その他の使用方法 …… 7－15

第8章 定量データベース（検量線）の作成・定量

8 章－1　バッチ …… 8－3
8 章－2　検量線作成の準備 …… 8－5
8 章－3　化合物の登録 …… 8－10
8 章－4　リテンションタイムの設定 …… 8－15
8 章－5　ISTD の設定 …… 8－16
8 章－6　検量線レベルの作成 …… 8－17
8 章－7　ターゲット、クオリファイアの確認 …… 8－21
8 章－8　検量線の設定 …… 8－23
8 章－9　詳細タスク …… 8－24
8 章－10　バリデーション …… 8－28
8 章－11　検量線の適用 …… 8－30
8 章－12　検量線ウィンドウ …… 8－32
8 章－13　化合物情報ウィンドウ …… 8－38
8 章－14　フラグと外れ値 …… 8－44
8 章－15　バッチの保存 …… 8－47

第9章 レポートの作成

9 章－1　バッチの読み込み …… 9－3
9 章－2　バッチテーブルのエクスポート …… 9－5
9 章－3　グラフィックのエクスポート …… 9－8
9 章－4　化合物クロマトグラムの一覧を印刷 …… 9－11
9 章－5　レポートメソッド …… 9－12
9 章－6　定量レポートの自動化 …… 9－18
9 章－7　定量レポート用テンプレート …… 9－25

第10章 リキャブリレーションとサンプルの定量

10 章－1　バッチの作成 …… 10－4
10 章－2　既存定量データベース（検量線）の読込 …… 10－5
10 章－3　リテンションタイムの更新 …… 10－7
10 章－4　クオリファイア比の更新 …… 10－7
10 章－5　検量線の適用 …… 10－8
10 章－6　定量結果の確認 …… 10－9
10 章－7　レポートの作成 …… 10－10
10 章－8　フォルダーの参照 …… 10－11

第11章 システムの停止方法

11 章－1　ベントメソッドを設定する …… 11－3
11 章－2　ベントサイクルを実行する …… 11－7
11 章－3　機器の停止 …… 11－9
11 章－4　PC のシャットダウンと周辺機器の電源をオフにする …… 11－10

付録A　カラムカタログの管理

付録 A－1　カラム管理の概要 …… A－2
付録 A－2　使用するカラムをカタログに設定する …… A－2
付録 A－3　カラムを追加、修正する方法 …… A－5
付録 A－4　カタログからカラムを選択（インストール）する方法…… A－6
付録 A－5　カラムをキャリブレーションする方法 …… A－9
（長さの実測が分かっている場合）
付録 A－6　カラムカタログに目録を作成する …… A－11
付録 A－7　カタログに新しいカラムモデルを追加する …… A－15

付録B　カラム交換方法

付録 B－1　最初にソフトウェアの設定を変更する方法 …… B－5
付録 B－2　最初にベントサイクルを実施する方法 …… B－12

付録C　測定中のデータを開く

付録 C－1　測定中のデータを開く …… C－2
付録 C－2　データファイルを更新する …… C－3

付録D　リソースの管理

付録 D－1　リソースの管理とは …… D－2
付録 D－2　スケジュールの設定 …… D－2
付録 D－3　ウェイクメソッド（及びスリープメソッド）の設定…… D－4

付録E　定性解析のグラフィックス/その他

付録 E－1 グラフィクスの設定 …… E－2
付録 E－2 結果データの読み込み …… E－8
付録 E－3 ウィンドウレイアウトについて …… E－9
付録 E－4 注釈 …… E－11
付録 E－5 注釈　質量差の表示 …… E－18

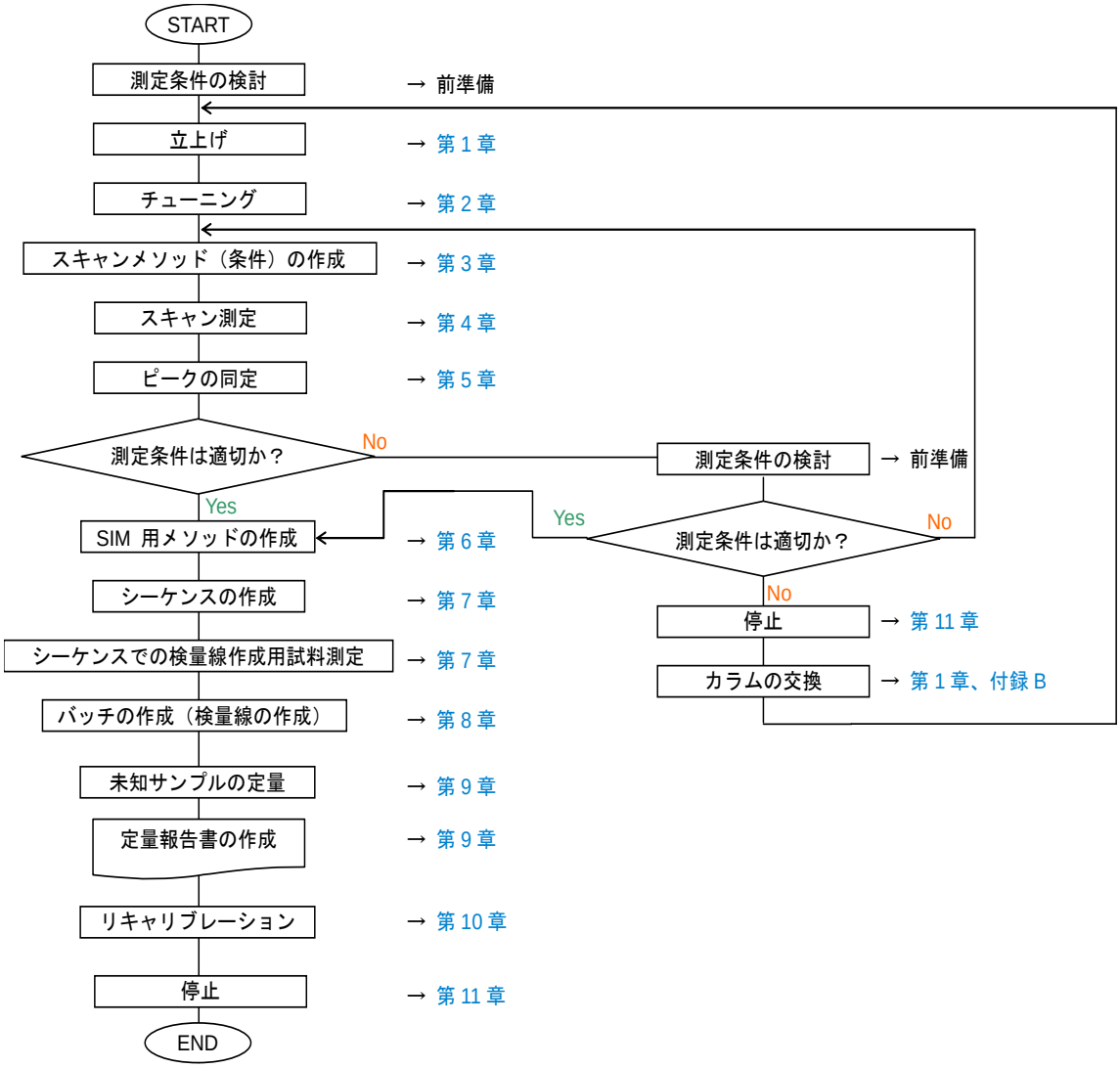
付録F　定量解析のグラフィックス/その他

付録 F-1 ダイアログボックスの表示 …… F－2
付録 F-2 ピークラベルの変更 …… F－3
付録 F-3 その他のプロパティ一覧 …… F－4

付録G　Q&A 集

付録H　GC/MSD 用語集

<定量分析の流れ>



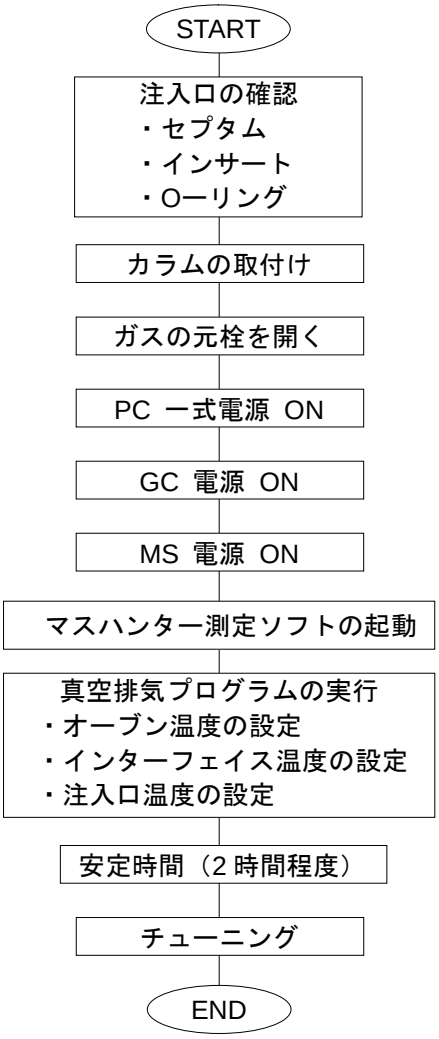
このマニュアルは Agilent 7890B GC / 5977 MSD と G1701FA マスハンターソフトウェアを用い、下記の注入口、カラム、サンプルを使用する前提で作成されています。また、未知サンプルを定量してレポートを出力する方法について必要な手順を習得する目的で作成されています。

使用する GC 注入口 ： EPC 付スプリット／スプリットレス注入口
使用するカラム ： HP-5 MS 30m×250um×0.25um
使用するサンプル ： GC/MSD Demo Sample （P/N 5064-3025）

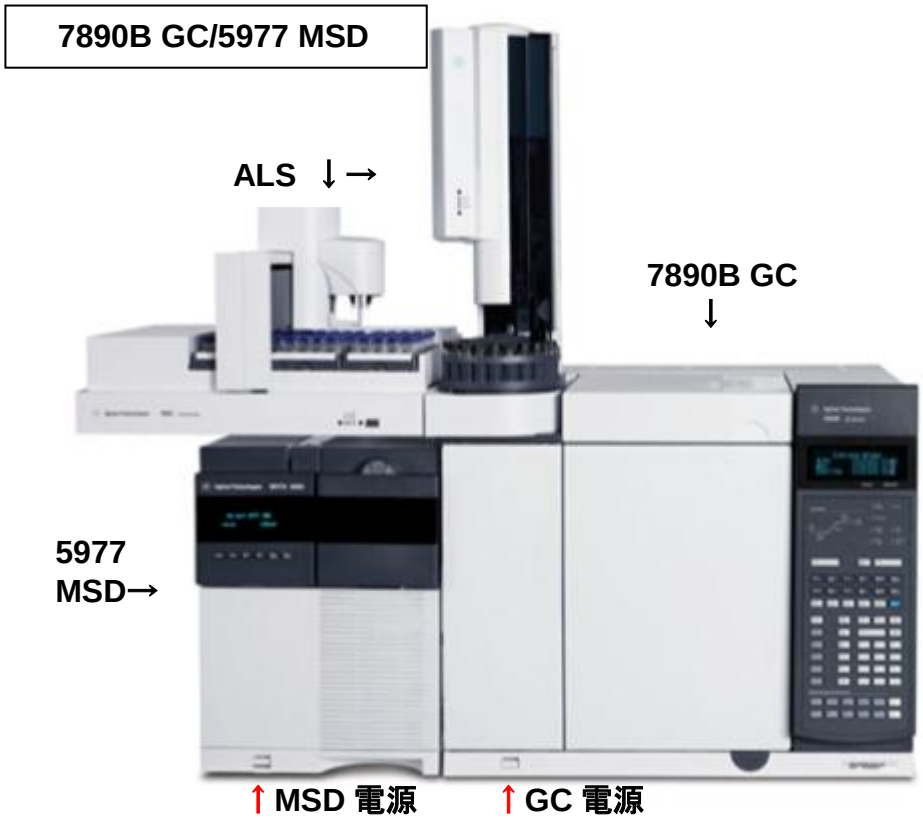
第1章
システムの立ち上げ方

1 章－1	GC および MSD の電源を入れる	1－3
1 章－2	マスハンター測定ソフトウェアの起動	1－5
1 章－3	測定に使用する解析モードの設定	1－6
1 章－4	真空排気プログラムの実行	1－8
1 章－5	メソッドの読み込み	1－10

＜システムの立ち上げ方＞


START
注入口の確認
・セプタム
・インサート
・Oーリング
カラムの取付け
ガスの元栓を開く
PC 一式電源 ON
GC 電源 ON
MS 電源 ON
マスハンター測定ソフトの起動
真空排気プログラムの実行
・オーブン温度の設定
・インターフェイス温度の設定
・注入口温度の設定
安定時間（2 時間程度）
チューニング
END

1章－1　GC および MSD の電源を入れる



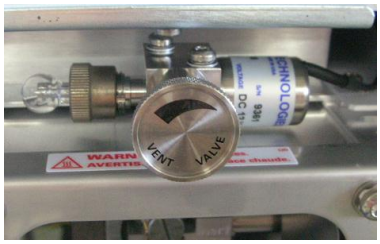
（1）　注入口セプタムとインサート、カラムが正しく取り付けられていることを確認して GC の電源を入れます。

（2）　MSD のサイドカバーを開き、サイドプレートを真空チャンバ側（正面から見て右側）へ押し付けながら MSD の電源を入れます。[注)]

（3）　MS 電源が入り、ロータリーポンプ（以後 R.P）、ターボポンプ（以後 T.P）が回り始めます（サイドパネルは押し続けてください）。

注意

MSD の電源を入れる前に、必ずベントバルブが閉まっていることを確認してください。



＜参考＞
T.P の回転数が上がっていることを MSD 本体前面のディスプレーで確認することができます。

5977 体の操作ボタンでのディスプレー表示の仕方

Menu　「＋MSParameters　」
↓
Item　アナライザー真空度、T.P、イオン源温度、四重極温度が Item ボタンを押す度に切り替わって表示されます。

注意

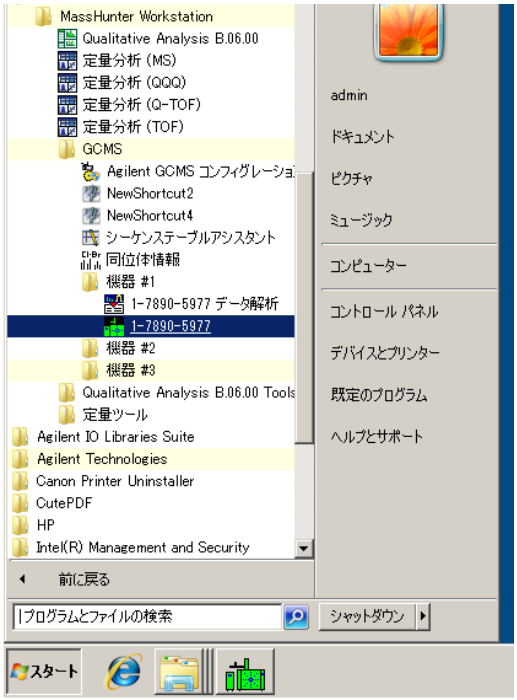
この段階で T.P が止まり、R.P もしばらくすると止まってしまう場合は、MS のどこかがシール出来ずに漏れている可能性があります。漏れ箇所を調べ、MS の電源スイッチを OFF にして再度 MS の起動をやり直してみてください。

1章－2　マスハンター測定ソフトウェアの起動

（1）　デスクトップ上のアイコン

をダブルクリックしてマスハンター測定ソフトウェアを起動します。

アイコンがデスクトップ上にない場合には、タスクバーの［スタート］ボタンから、［プログラム］（［すべてのプログラム］）－［MassHunter Workstation］－［GCMS］－［機器 #1］－［機器名］を選択してソフトウェアを起動します。
（［機器名］は設定により異なります。下記の例では［1-7890-5977］です。）



（2）　デフォルトプリンタの確認画面が表示された場合には OK をクリックします。

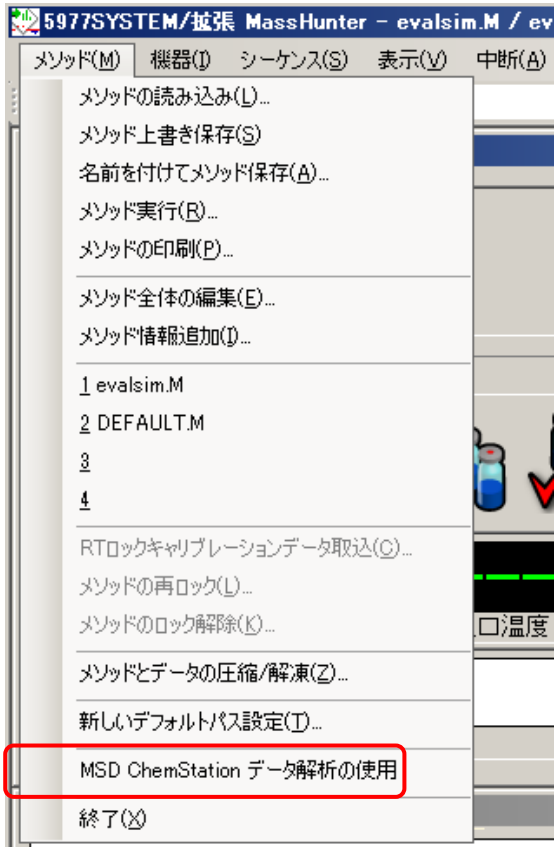
（3）　MS 温度設定画面が表示された場合には 適用(A) をクリックします。

1章－3　測定に使用する解析モードの設定

マスハンター測定ソフトウェアは、マスハンター定性／定量データ解析とケミステーションデータ解析の二つの解析モードが準備されています。モードにより測定ソフトウェアが呼び出す解析ソフトウェアが変わり、解析と関連したメニューで項目に違いがあります。

(1)　マスハンター定性／定量データ解析の使用

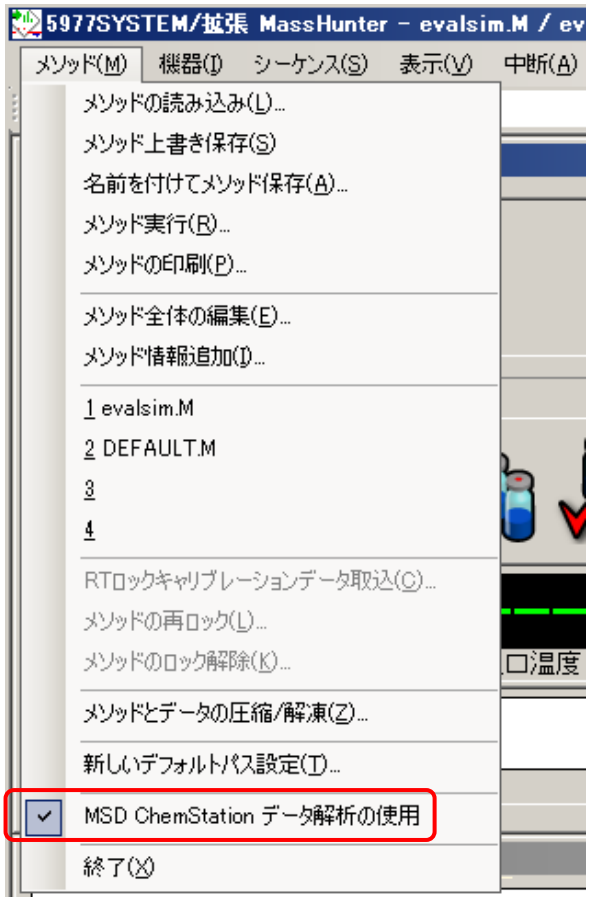
メニューから［メソッド］－［MSD Chemstation データ解析の使用］の項目を確認します。



（チェック）がある時は［MSD Chemstation データ解析の使用］をクリックして、チェックを外します。

（2）　ケミステーションデータ解析の使用

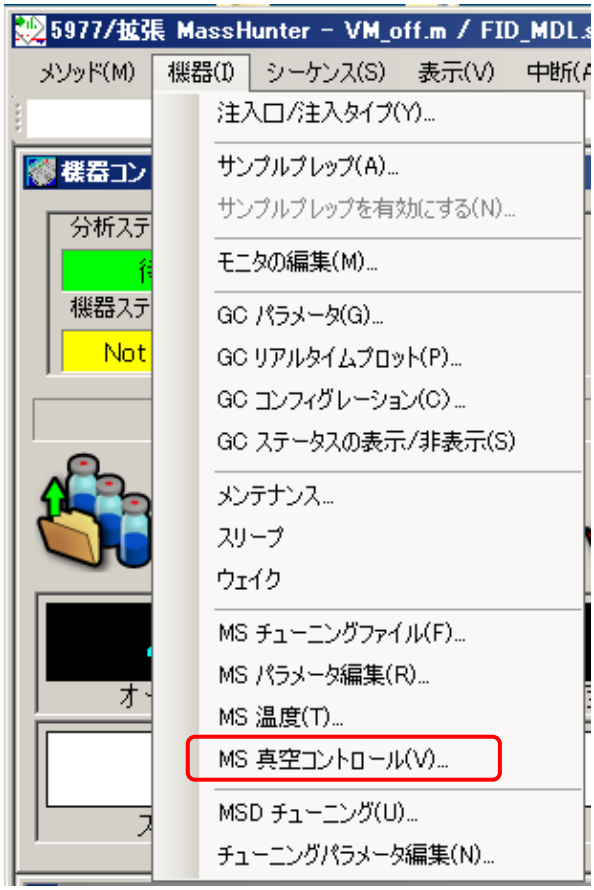
メニューから［メソッド］－［MSD Chemstation データ解析の使用］の項目を確認します。



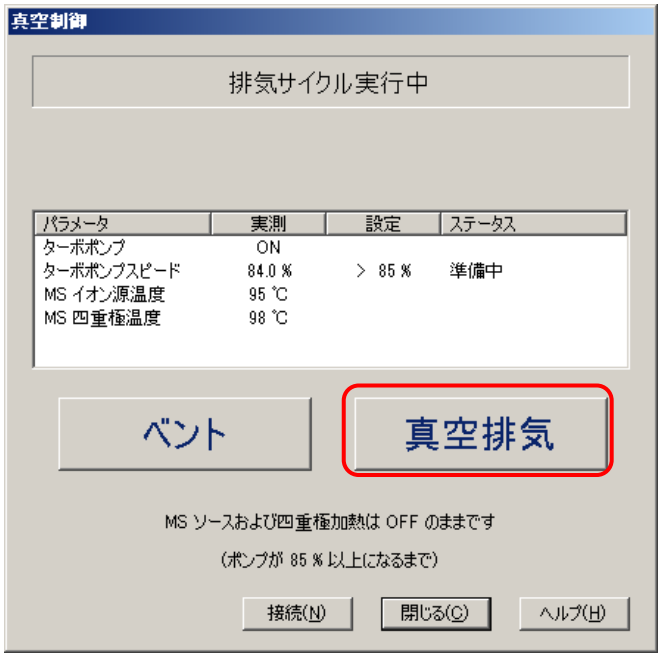
（チェック）がない時は［MSD Chemstation データ解析の使用］をクリックして、チェックを入れます。

1章－4　真空排気プログラムの実行

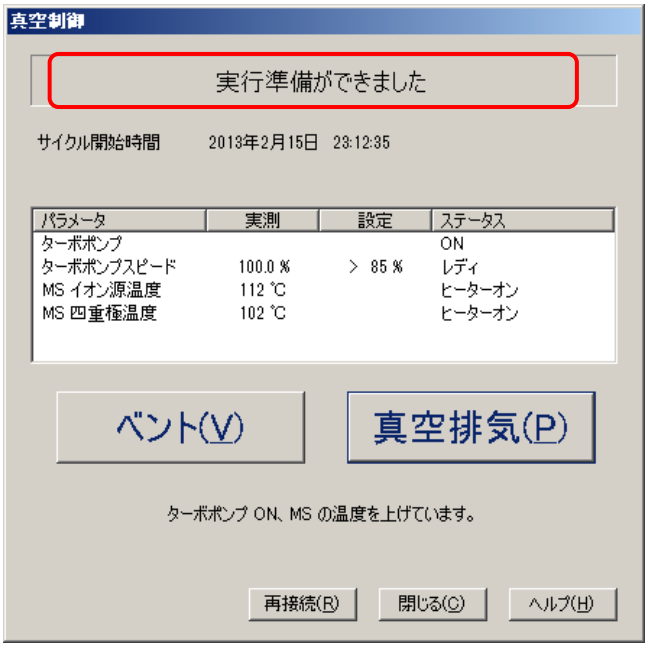
（1）　メニューから［機器］－［MS 真空コントロール…］を選択します。もしくは アイコンを右クリックします。



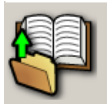
(2)　[真空排気]ウィンドウが表示されるので、真空排気ボタンをクリックします。

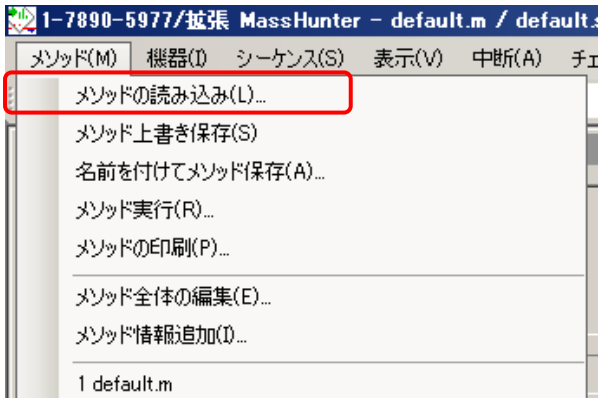


(3)　ステータスが［実行準備ができました］になったら、[閉じる]ボタンを押して、真空制御ウィンドウを閉じます。



1章－5　メソッドの読み込み

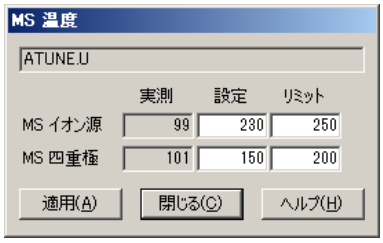
(1)  （メソッド読み込みアイコン）をクリックします。メニューから選択する場合は［メソッド］－［メソッドの読み込み］を選択します。



(2)　［メソッド読み込み］ダイアログボックスから使用するメソッドを選択し、OK をクリックします。

注意

イオン源または四重極の温度がメソッドの設定値と異なると MS 温度設定画面が表示されます。表示された場合には 適用(A) をクリックします。



安定した分析を実行するためには、温度を上げて十分に時間をおいてから測定を開始する様にしてください。

第2章
チューニング

２章－1	使用する標準物質	2－2
２章－2	ゲイン係数	2－2
２章－3	オートチューニングの実施方法	2－3
２章－4	チューンレポート	2－4
２章－5	チューニング結果の確認	2－5
２章－6	マニュアルチューン	2－7
２章－7	チューニング表示	2－9

チューニングとは

質量分析計で測定を開始する前には、既知の標準物質を用いて次のような調整を行う必要があります。

- イオン源各部の電圧調整
- イオンピークの半値幅(分解能)の調整
- 感度の調整
- マス軸の較正

チューニングの良し悪しにより、感度、分解能、マスパターンが変化しますので、チューニングは質量分析計を扱う際に非常に重要な操作です。

2章－1　使用する標準物質

Agilent 5977 MSD の EI モードではチューニング用の標準物質として、PFTBA (PerFluoroTriButylAmine) を用いています。この標準物質の主なフラグメントイオンは、m/z　31、50、69、100、131、219、264、414、464、502、576、614 です。

2章－2　ゲイン係数

G1701 MSD ケミステーション Rev.E.02.00 から拡張された新しい EM 電圧の設定法です。チューニングの度に、EM 電圧に対する MSD のゲイン（増幅率、シグナル値）が測定され、チューニングファイルに保存されます。

ゲイン係数とは、検出器シグナルの増幅を指定する値で、ゲイン係数が 1.00 のときシグナルは 1.00×10^5 倍に増幅されます。

メソッドで使用する EM 電圧の設定が［ゲイン係数］で指定可能になり、EM の使用年数や異なる機器間で一貫性のある MSD 検出器レスポンスが実現可能になりました。

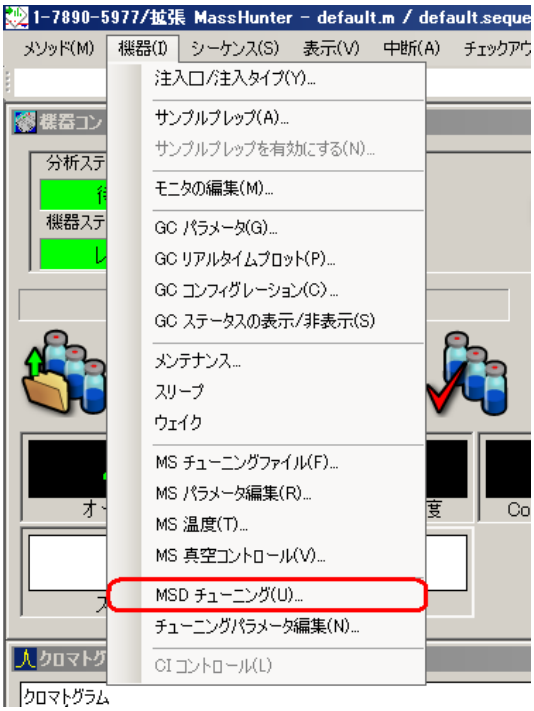
ゲイン係数の設定可能範囲は 0.3～25.00 です。ゲイン係数を 1.00 に設定すると従来のオートチューン結果の EM 電圧よりやや高い値になります。

詳細はオンラインヘルプ、および技術概要「Enhancements to Gain Normalized Instrument Tuning: Understanding the Benefits and Features」（文書番号 5989-7654EN）を参照してください。

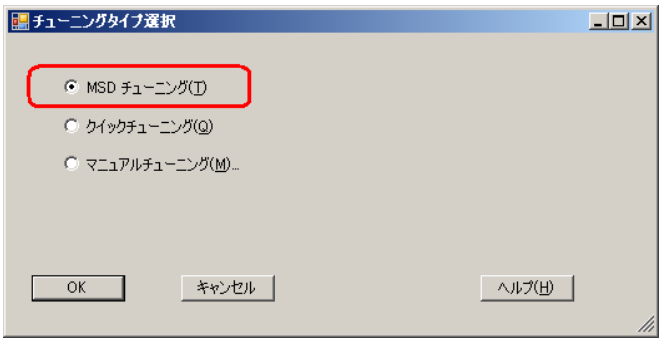
2章－3　オートチューニングの実施方法

次の手順でオートチューニングを実施します。

（1）　［機器］メニューの［MSD チューニング］をクリックします。



（2）　［チューニングタイプ選択］ダイアログボックスで［MSD チューニング］を選択して［OK］をクリックします。

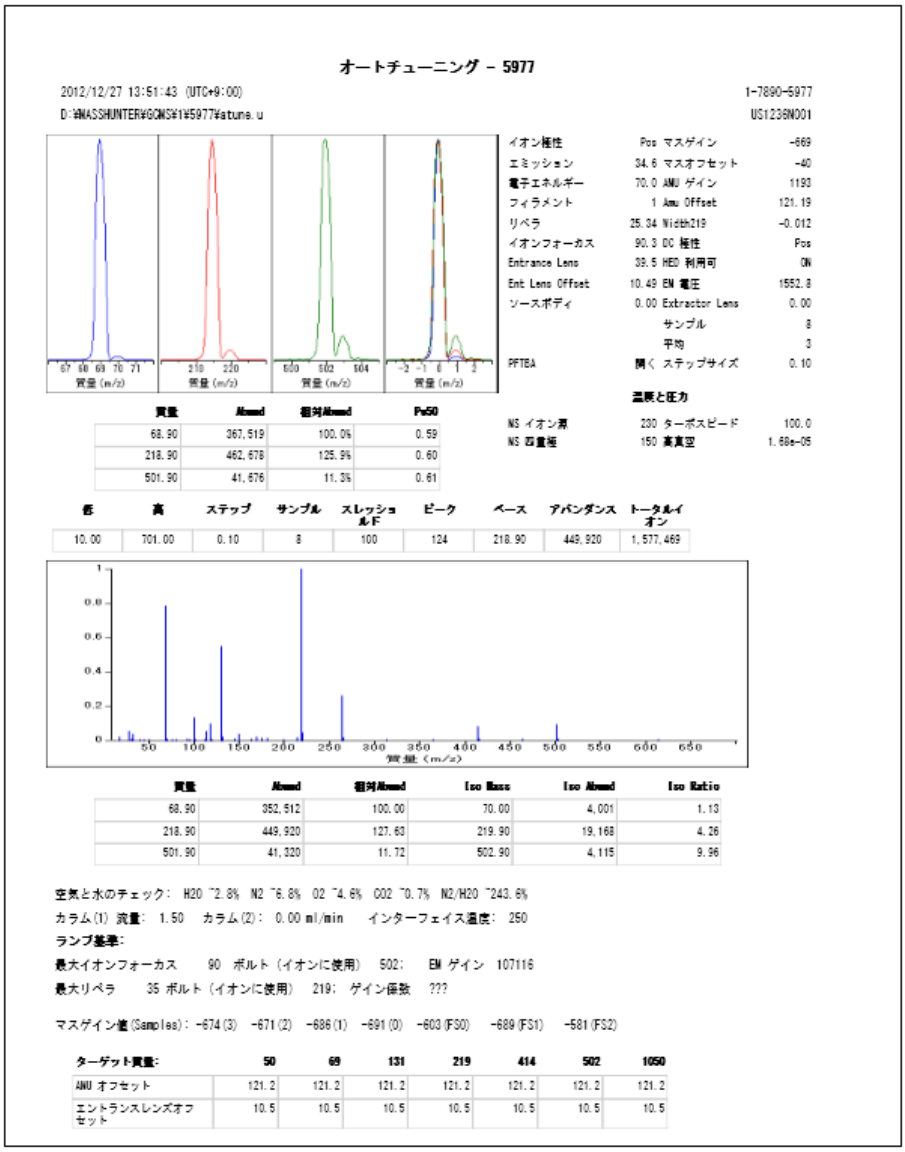


＜参考＞
この手順で MSD チューニングを選択すると、現在読み込まれているメソッドで使用しているチューニングファイル（3 章－14 ①参照）を用いてチューニングが実行･保存されます。
エクストラクタ搭載 EI イオン源の場合は、(1)の［MSD チューニング］を実行する前に［MS チューニングファイル］をクリックして、使用するチューニングファイル(etune.U または atune.U)を選択しておきます。

2章－4　チューンレポート

チューニングが完了するとレポートが印刷されます。

＜オートチューンレポートの例＞



オートチューニング － 5977

2012/12/27 13:51:43 (UTC+9:00)　　1-7890-5977

D:¥MASSHUNTER¥GCMS¥1¥5977¥atune.u　　US1238N001

イオン極性	Pos	マスゲイン	-669
エミッション	34.6	マスオフセット	-40
電子エネルギー	70.0	AMU ゲイン	1193
フィラメント	1	Amu Offset	121.19
リペラ	25.34	Width219	-0.012
イオンフォーカス	90.3	DC 極性	Pos
Entrance Lens	39.5	HED 利用可	ON
Ent Lens Offset	10.49	EM 電圧	1552.8
ソースボディ	0.00	Extractor Lens	0.00
		サンプル	8
		平均	3
PFTBA		開く ステップサイズ	0.10

温度と圧力

MS イオン源	230	ターボスピード	100.0
MS 四重極	150	高真空	1.68e-05

質量	Abund	相対Abund	Pu50
68.90	367,519	100.0%	0.59
218.90	462,678	125.9%	0.60
501.90	41,676	11.3%	0.61

低	高	ステップ	サンプル	スレッショルド	ピーク	ベース	アバンダンス	トータルイオン
10.00	701.00	0.10	8	100	124	218.90	449,920	1,577,469

質量	Abund	相対Abund	Iso Mass	Iso Abund	Iso Ratio
68.90	352,512	100.00	70.00	4,001	1.13
218.90	449,920	127.63	219.90	19,168	4.26
501.90	41,320	11.72	502.90	4,115	9.96

空気と水のチェック：　H20 ~2.8%　N2 ~6.8%　O2 ~4.6%　CO2 ~0.7%　N2/H20 ~243.6%

カラム(1) 流量：　1.50　カラム(2)：　0.00 ml/min　インターフェイス温度：　250

ランプ基準：

最大イオンフォーカス　90　ボルト（イオンに使用）　502：　EM ゲイン　107116

最大リペラ　35 ボルト（イオンに使用）　219：　ゲイン係数　???

マスゲイン値(Samples)：-674(3)　-671(2)　-686(1)　-691(0)　-603(FS0)　-689(FS1)　-581(FS2)

ターゲット質量：	50	69	131	219	414	502	1050
AMU オフセット	121.2	121.2	121.2	121.2	121.2	121.2	121.2
エントランスレンズオフセット	10.5	10.5	10.5	10.5	10.5	10.5	10.5

＜参考＞
チューンレポートは MSD の状態を判別するのに非常に有効です。ファイルして保管しておくことを推奨します。

2章－5　チューニング結果の確認

チューニングの評価メニューを使用してチューン結果を確認することができます。

（1）　メニューから［チェックアウト］－［チューニングの評価］を選択します。

（2）　出力されたチューニング評価レポートの全ての項目が［OK］となっていることを確認します。

評価が良好に完了すると「チューン部のシステム確認はパスしました」とレポート上に印字されます。

＜良いチューニング評価レポートの例＞

システム確認 - チューン（検出器 最適化）部

機器名	: 1-7890-5977	
DC 極性	: ポジティブ	
フィラメント	1	
ベースピークが 69 か 219 である		OK
質量 69 の位置	68.90	OK
質量 219 の位置	218.90	OK
質量 502 の位置	501.90	OK
同位体質量 70 の位置	69.96	OK
同位体質量 220 の位置	219.90	OK
同位体質量 503 の位置	502.90	OK
質量 69 に対する質量 70 の比(0.5～1.6%)	1.14	OK
質量 219 に対する質量 220 の比(3.2～5.4%)	4.31	OK
質量 502 に対する質量 503 の比(7.9～12.3%)	10.13	OK
219 の 69 に対する比は 40% 以上である	127.58	OK
502 の 69 に対する比は 2.4% 以上である	11.46	OK
質量 69 に対する質量 68 の比 (<= 3%)	0.14	OK
質量 219 に対する質量 218 の比 (<= 6%)	0.38	OK
質量 502 に対する質量 501 の比 (<= 12%)	0.50	OK
597x Air and Water Check		
Thu Dec 27 13:56:28 2012	Instrument: 1-7890-5977	
D:¥MASSHUNTER¥GCMS¥1¥5977¥atune.u	US1236N001	
システムのリークテスト中		
質量 69 に対する質量 18 の比(<20%)	3.19	OK
質量 69 に対する質量 28 の比(<10%)	7.26	OK
エレクトロンマルチプライア電圧	1553	OK

チューン部のシステム確認はパスしました。

チューニング評価の項目が規定値に入らない場合にはレポートに「範囲外の設定があります。続行する前に正しくしてください．」と印字され、考えられる要因が表示されます。

＜悪いチューニング評価レポートの例＞

システム確認 － チューン（検出器 最適化）部

機器名	: 1-7890-5977	
DC 極性	: ポジティブ	
フィラメント	1	
ベースピークが 69 か 219 である		OK
質量 69 の位置	69.00	OK
質量 219 の位置	218.91	OK
質量 502 の位置	502.00	OK
同位体質量 70 の位置	70.00	OK
同位体質量 220 の位置	219.97	OK
同位体質量 503 の位置	503.00	OK
質量 69 に対する質量 70 の比(0.5～1.6%)	1.23	OK
質量 219 に対する質量 220 の比(3.2～5.4%)	4.33	OK
質量 502 に対する質量 503 の比(7.9～12.3%)	10.06	OK
219 の 69 に対する比は 40% 以上である	99.64	OK
502 の 69 に対する比は 2.4% 以上である	6.58	OK
質量 69 に対する質量 68 の比 (<= 3%)	0.16	OK
質量 219 に対する質量 218 の比 (<= 6%)	0.18	OK
質量 502 に対する質量 501 の比 (<= 12%)	0.33	OK
597x Air and Water Check		
Thu Dec 27 11:52:59 2012	Instrument: 1-7890-5977	
D:¥MASSHUNTER¥GCMS¥1¥5977¥atune.u	US1236N001	
システムのリークテスト中		
質量 69 に対する質量 18 の比(<20%)	9.12	OK
質量 69 に対する質量 28 の比(<10%)	15.90	高
24時間後にもう一度システム確認を行ってください。		
もし問題があれば、エアーリークまたはガスサプライの汚れを		
チェックしてください。		
エレクトロンマルチプライア電圧	1647	OK

範囲外の設定があります
続行するまえに正しくしてください。

一つ以上のテストに失敗しました。
正しくない DC 極性を選んだ可能性があります。
正しい DC 極性が選択されているかどうか
検出器のカバーをはずして
EID 上部のラベルを確認してください。

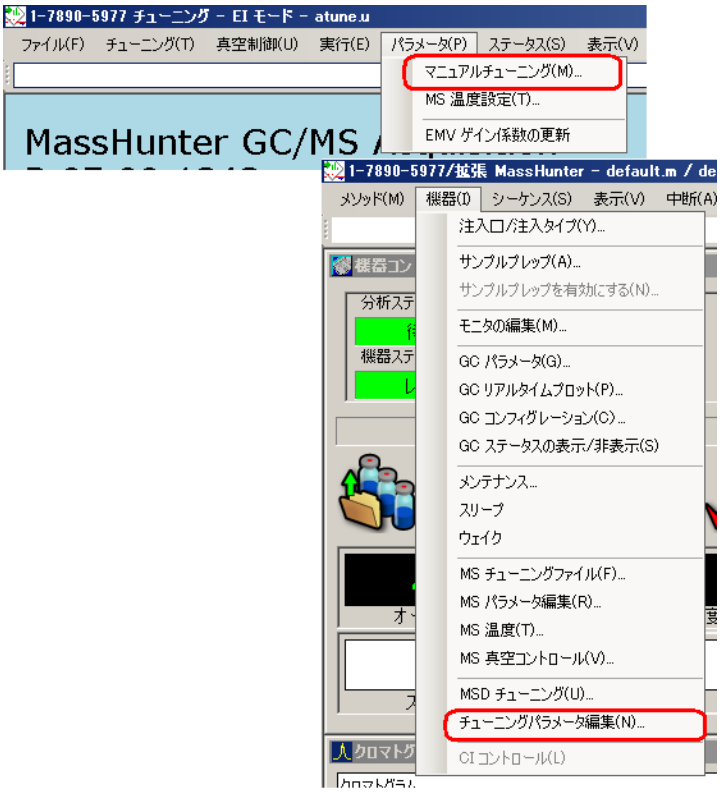
2章－6　マニュアルチューン

マニュアルチューンを使用すると、マスのプロフィールやスペクトルパターンをモニターしながら MSD の各パラメータを調整することができます。特定のパラメータをランプさせてチューンマスへの影響を確認し、チューンニングを微調整することが可能です。

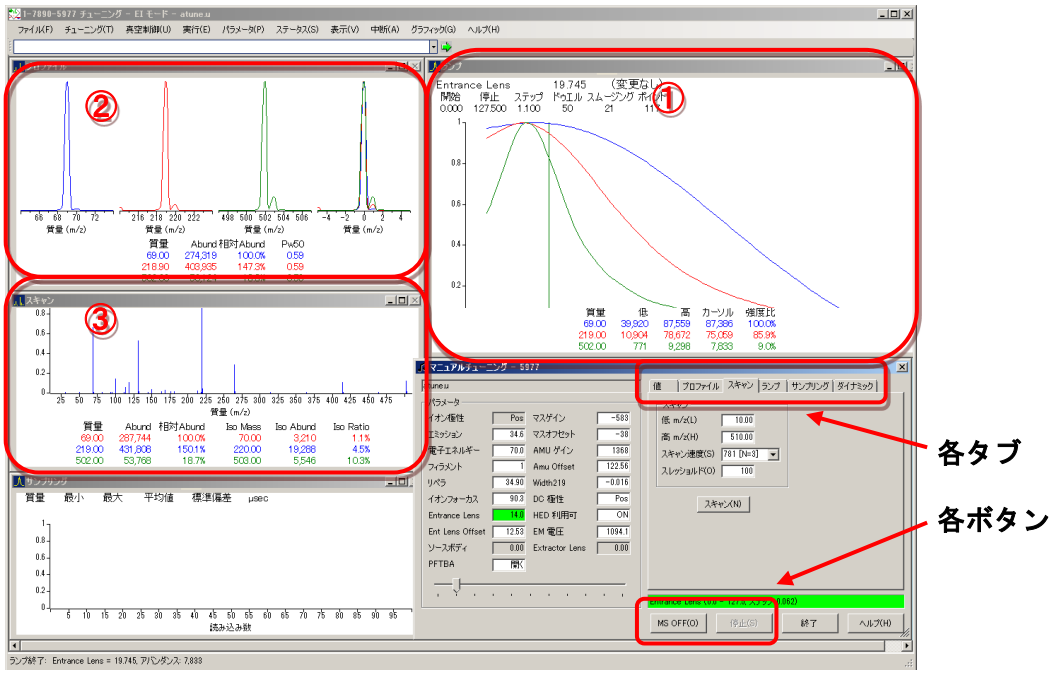
マニュアルチューンではトライ&エラーでチューニングの各設定項目を調整し、分解能やマス軸を許容範囲に保ちつつ、感度を上げたり、スキャンのスペクトルパターンを調整したりすることが可能です。

詳細な使用方法についてはマスハンター測定ソフトウェアのオンラインヘルプを参照して下さい。

（1）[表示]－[チューニングと真空制御]で、チューニングと真空制御画面のメニューに入り、［パラメータ］－［マニュアルチューニング］を選択します。または、機器コントロール画面のメニューから［機器］－［チューニングパラメータ編集］をクリックしてチューニングファイルを選択します。



マニュアルチューニング画面



プロファイル タブ
チューニング&表示パラメータで指定した 3 つのチューニングマスについて継続的なプロファイルスキャンを実行します。結果は、①のプロファイルウィンドウに表示されます。

スキャン タブ
チューニング&表示パラメータの［スキャン範囲］のスペクトルスキャンを連続して実行・表示します。結果は、②のスキャンウィンドウに表示されます。

ランプ タブ
3 つのチューニングマスに対して選択されたパラメータをランプします。結果は、③のランプウィンドウに表示されます。

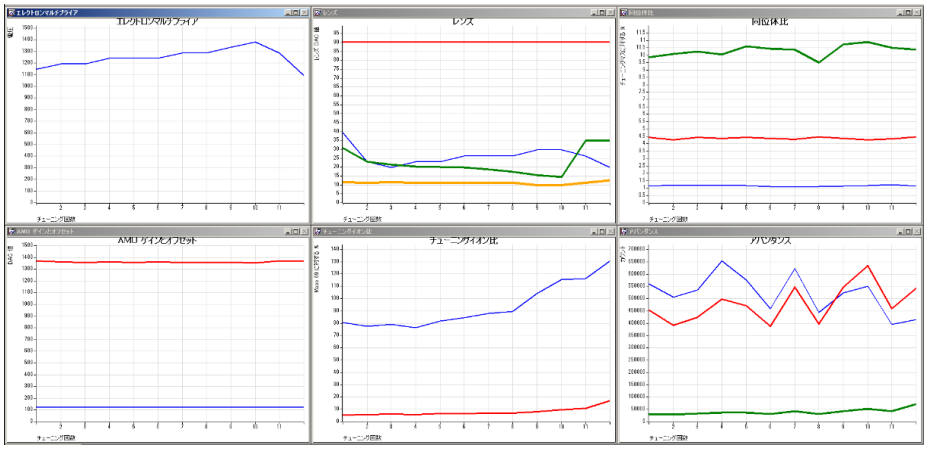
停止(S) ボタン
プロフィールスキャン、スペクトルスキャン、ランプなどを停止します。

MS OFF(O) ボタン
MS をオフにします。

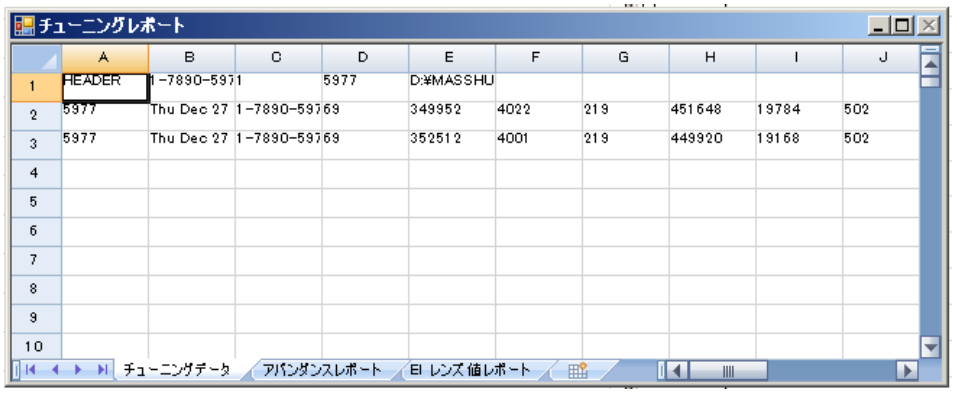
2章－7　チューニング表示

チューニング表示メニューから、チューニングの履歴を表示させることができます。

チューニングと真空制御画面のメニューから［ファイル］－［チューニング表示］をクリックします。



チューニングの各設定項目の履歴がグラフ化されて表示されます。画面左下に最小化されている［チューニングレポート］をクリックすると数値の履歴が表形式で表示されます。



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	HEADER	1-7890-5971		5977	D:¥MASSHU					
2	5977	Thu Dec 27	1-7890-59769		349952	4022	219	451648	19784	502
3	5977	Thu Dec 27	1-7890-59769		352512	4001	219	449920	19168	502
4										
5										
6										
7										
8										
9										
10										

Memo

第3章
定性のための
測定条件作成

3 章－1	メソッド編集の開始	3－3
3 章－2	メソッド情報とメソッド実行範囲の設定	3－4
3 章－3	試料導入方法の設定	3－5
3 章－4	GC（Agilent 7890）のパラメータ編集画面	3－6
3 章－5	GC コンフィグレーション	3－8
3 章－6	オーブン温度条件の設定	3－13
3 章－7	カラム流量の設定	3－14
3 章－8	注入口条件の設定	3－15
3 章－9	オートサンプラ条件の設定	3－16
3 章－10	Aux 温度条件の設定	3－18
3 章－11	GC 計算ツール	3－19
3 章－12	7890GC パラメータ編集画面の終了	3－23
3 章－13	GC リアルタイムプロットの設定	3－23
3 章－14	MSD の測定条件の設定	3－24
3 章－15	モニタ選択	3－26
3 章－16	メソッドの保存	3－27
3 章－17	メソッドの印刷方法	3－28

＜定性のための測定条件作成＞

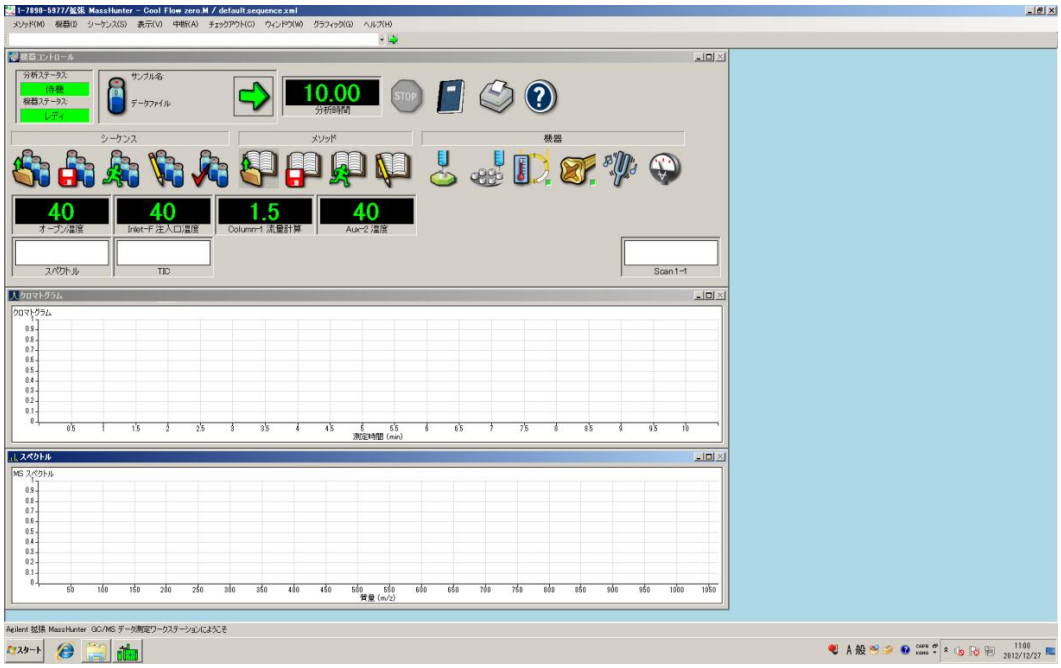
本章には、下記についての説明も含まれています。
・メソッドの印刷方法

本章では、定性のためのスキャン測定条件を作成する方法について説明しています。

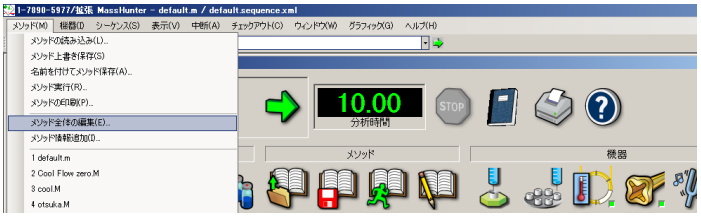
マスハンターソフトウェアでは、測定や解析条件をメソッドと呼んでいます。測定ソフトウェアでは、測定条件を１つのメソッドファイルとして保存して使用します。

3章－1　メソッド編集の開始

（1） を起動します。

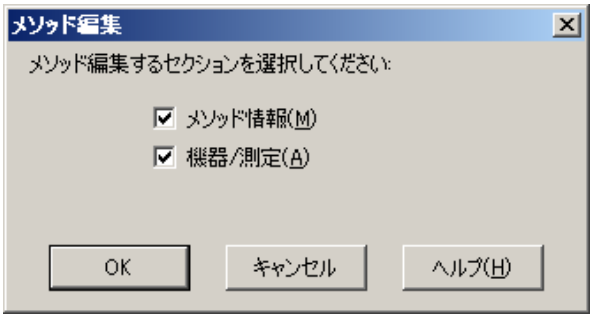


（2） （メソッド全体の編集アイコン）をクリックします。メニューからの場合は［メソッド］－［メソッド全体の編集］を選択します。



（3）　［メソッド編集］ダイアログボックスが表示されます。

［メソッド情報］と［機器/測定］にチェックを付け、OKをクリックします。

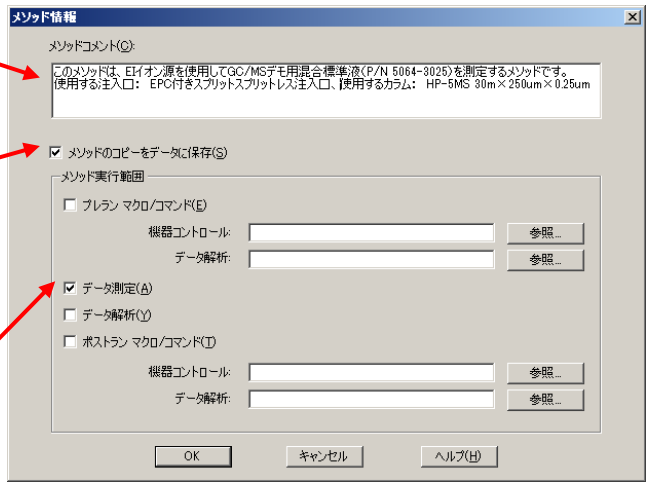


3章－2　メソッド情報とメソッド実行範囲の設定

（1）　メソッドの説明を入力します。

（2）　［メソッドのコピーを保存］にチェックを入れることにより、メソッドのコピーがデータに含まれます。

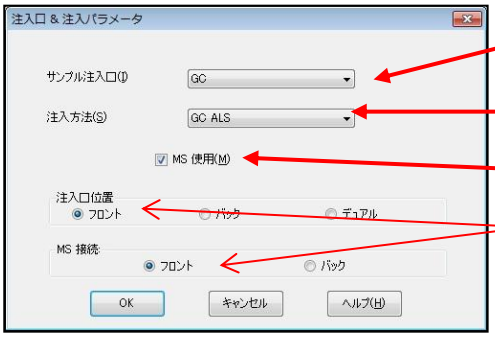
（3）　［データ測定］のみチェックし、その他の項目はチェックを外します。



（4）　OKをクリックします。

3章－3　試料導入方法の設定

（1） Agilent7693 オートサンプラ（ALS）使用の場合



1) GC を選択します。

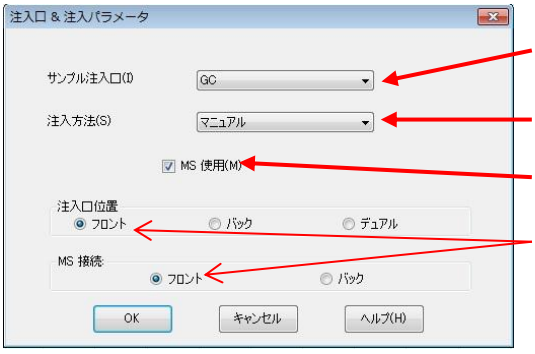
2) GC ALS を選択します。

3) ［MS 使用］にチェックします。

4) 注入口の位置,MS 接続先を選択します.

設定を確認して OK をクリックします。

（2） その他の試料導入装置や手打ちの場合



1)GC を選択します。

2)マニュアルを選択します。

3)［MS 使用］にチェックします。

4)注入口の位置,MS 接続先を選択します

設定を確認して OK をクリックします。

注意

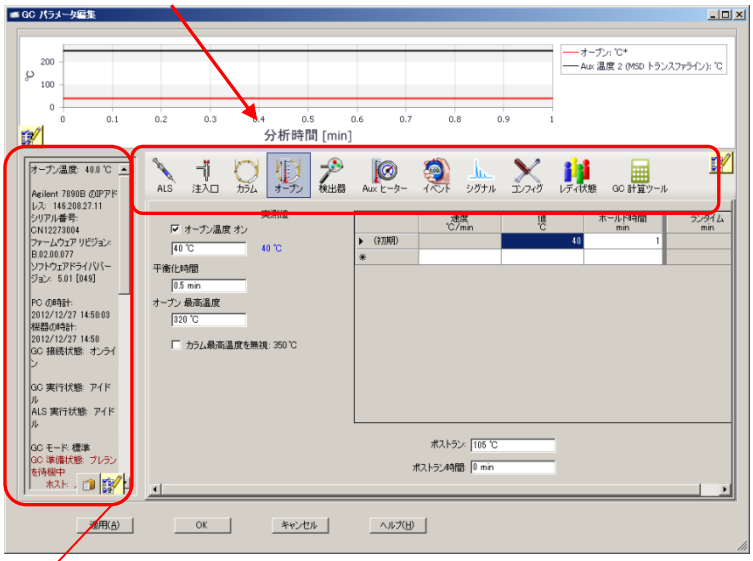
注入方法に［マニュアル］を選択した場合、メソッド実行後にスタートボタンを押すようにメッセージが表示されます。また、試料導入装置（熱分解装置、加熱脱着装置、パージ＆トラップ装置など）を使用する場合は一般的に注入方法に［外部デバイス］を選択しますが、［マニュアル］を選択することもできます。この場合、試料導入装置からのスタート信号が GC へ送信されるまで、注入待ちのメッセージが表示されるようになります。
7697 ヘッドスペースサンプラーの場合は、注入方法に［ヘッドスペース］を選択します。

3章－4　GC（Agilent 7890）のパラメータ編集画面

パラメータ編集画面では、GC の条件を入力します。

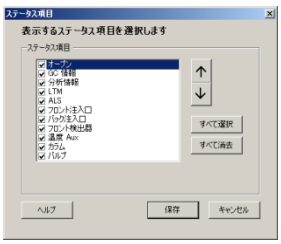
（1） GC パラメータ編集画面に共通した操作

① 上部のアイコンクリックすると、その項目の設定画面が表示されます。
現在選択中の項目は青色で反転表示されます。



② 左側にはステータス（実測値）がリストされます。

をクリックするとステータス項目が選択できます。



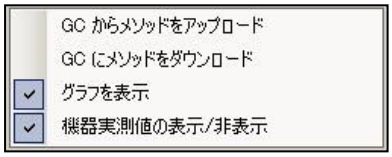
③ 各設定の単位（上の図の平衡化時間では［min］）は自動的に入りますので、設定は数値のみ（上の図の平衡化時間の場合［0］）を入力します。

④ マウスカーソルを設定欄の上に持ってくると、有効な設定範囲の値がポップアップで表示されます。

注意

有効な設定範囲外の値を入力した場合、その値は自動的に取り消されて元の値に再設定されます。設定は必ず有効設定範囲内で設定して下さい。

⑤　右クリックメニュー（パラメータ編集画面上で右クリック）



［GC からメソッドをアップロード］
7890GC の現在の設定値を MassHunter 測定ソフトウェアのメソッド編集画面に読み込み（アップロード）ます。GC のキーボードから設定を入力した場合、この機能を使用すると便利です。

［GC にメソッドをダウンロード］
パラメータ編集画面の設定値を 7890GC へ適用（ダウンロード）します。

ダウンロードが正常に終了すると完了メッセージが表示されます。

[グラフを表示]
温度や圧力･流量のグラフの表示／非表示の切り替えです。

[機器実測値の表示／非表示]
機器実測値のステータスの表示／非表示の切り替えです。

注意

ソフトウェア上のコンフィグレーション（後述）が、機器のコンフィグレーションと一致しない場合、パラメータをダウンロードしても適用されない場合があります。
このような場合には後述のメソッド編集画面上、「コンフィグ」を開いて機器とソフトウェア上のコンフィグレーションを一致させます。

各ボタン

適用　：　設定値を 7890GC へダウンロード（適用）します。

OK　：　設定値を 7890GC へ適用してパラメータ編集画面を閉じます。

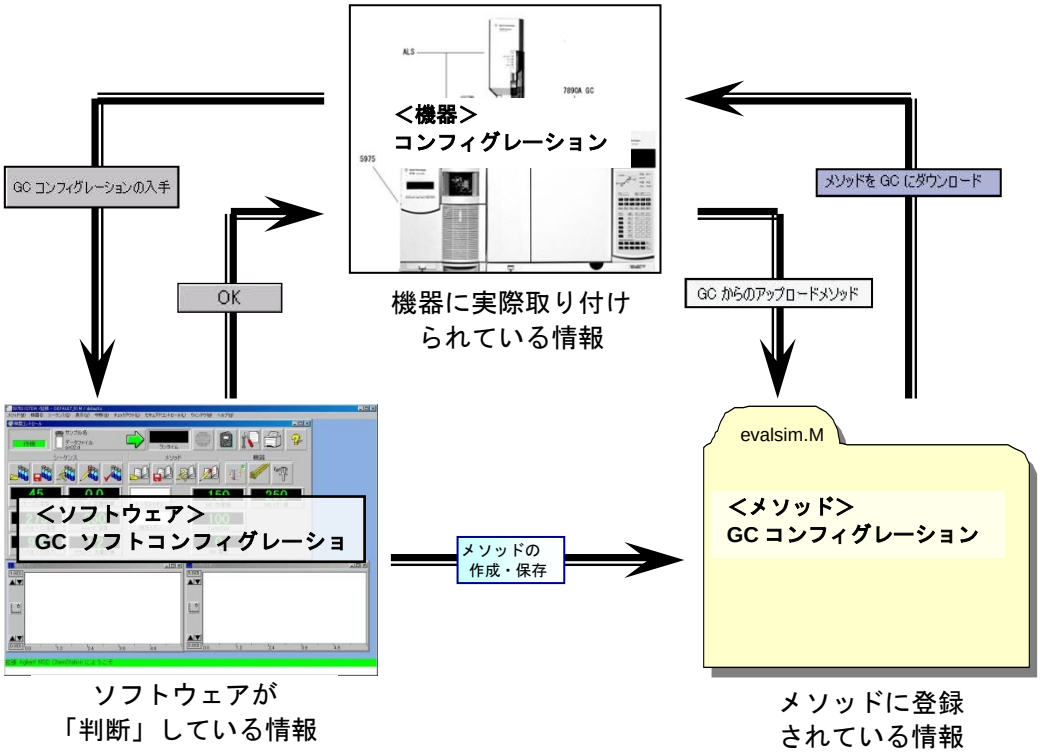
キャンセル　：　変更内容を破棄して機器コントロール画面に戻ります。

ヘルプ　：　現在の設定画面に関するヘルプ情報を表示します。

3章－5　GC コンフィグレーション

マスハンターソフトウェアでは、機器にインストールされたハードウェア（注入口や検出器タイプなど）やリソース（カラムやガスタイプなど）をコンフィグレーションと呼びます。

圧力、流量のコントロールや注入量など、正確なオペレーションを実現するためには、実際の GC ハードウェアのコンフィグレーションとソフトウェア上の「GC コンフィグレーション」が一致している必要があります。
また、機器に設定値をダウンロードするためには、メソッドの「GC コンフィグレーション」が GC ハードウェアのコンフィグレーションに一致している必要があります。

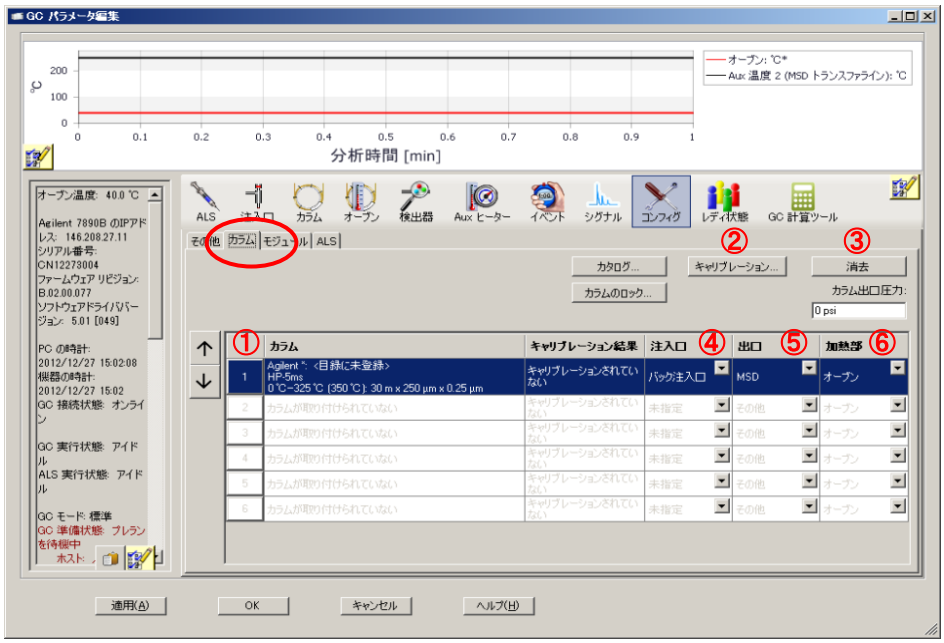


［コンフィグレーション］アイコン

をクリックします。

(1)　［カラム］タブ

GC では、最大 6 つのカラムをコンフィグレーションすることが可能です。
使用するカラムのみを登録します。
このタブでは、カラムの変更やキャリブレーション、接続位置（注入口・出口）、加熱部の設定をします。



①　クリックしてカラムの変更を開始します。

②　カラムをカットした場合にカラムのキャリブレーションを実施します。

③　メソッド上で使用しないカラムが表示されている場合は消去します。

④　ドロップダウンからカラム注入口側の取り付け位置を選択します。

⑤　ドロップダウンからカラム出口の設定を選択します。

⑥　ドロップダウンから加熱部の設定を選択します。

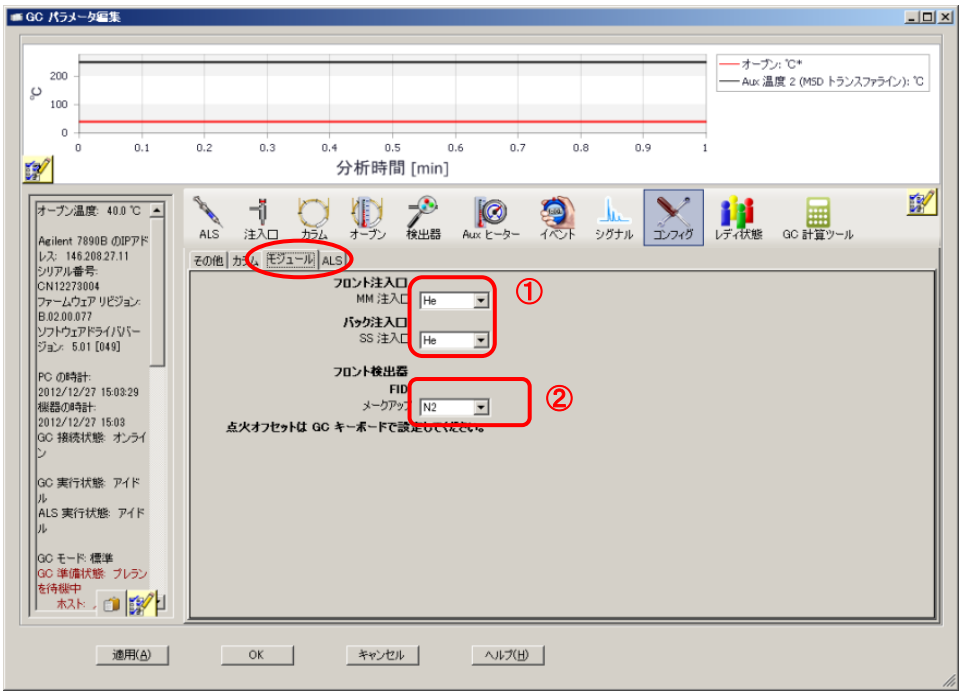
カラムの変更方法については、付録 B に手順が記述されています。

注意

カラムが正しくコンフィグレーションされていることを確認します。正確なカラム情報が入力されていないとカラム流量・圧力の計算が正しくできません。

（2）　［モジュール］タブ

GC に取り付けられている各モジュール（注入口、検出器、Aux 圧力コントローラなどの各デバイス）の設定を実施します。
モジュールの取り付け状況により、項目は増減しますので、必ずしも下図とは一致しません。



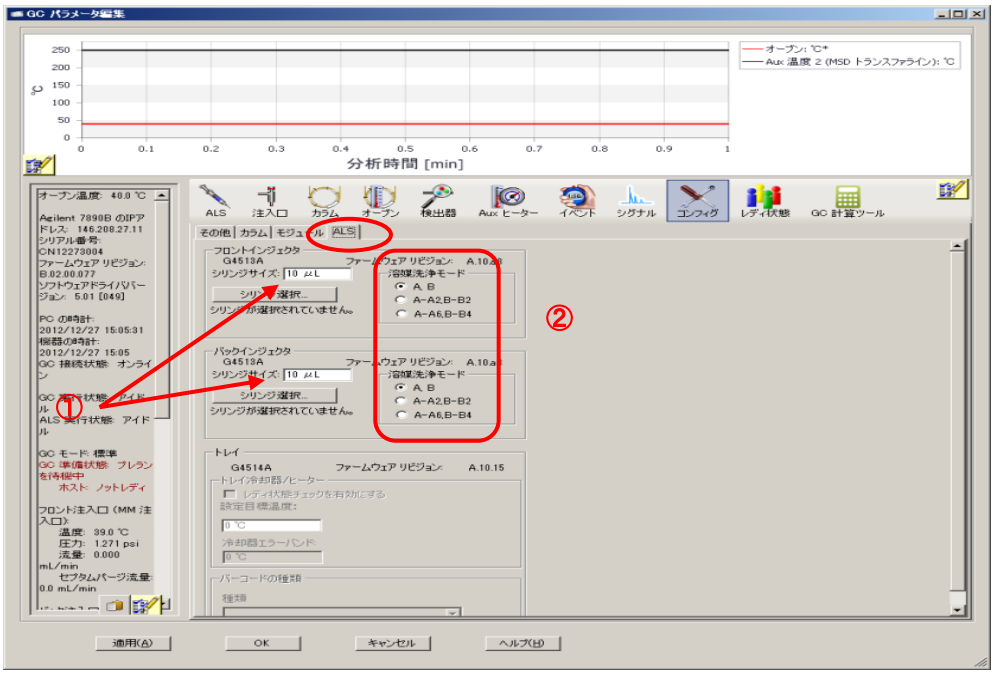
① 現在 GC に配管されているガスタイプをドロップダウンから選択します。

② GC 検出器が付属している場合、各検出器特有の設定やフローモジュールの設定を実施します

警告

火災の危険があります。水素をキャリアガスまたはその他のガスとして使用する場合は、コンフィグレーションのガスタイプを必ず正しく設定し、更新してください。更新しないと不正な流量の原因となるばかりでなく、GCの安全機能が正しく機能しません。

（3）　［ALS］タブ



①　シリンジサイズ欄には、インジェクタに取り付けられているシリンジの最大容量を入力します

アジレント製のシリンジの場合は、

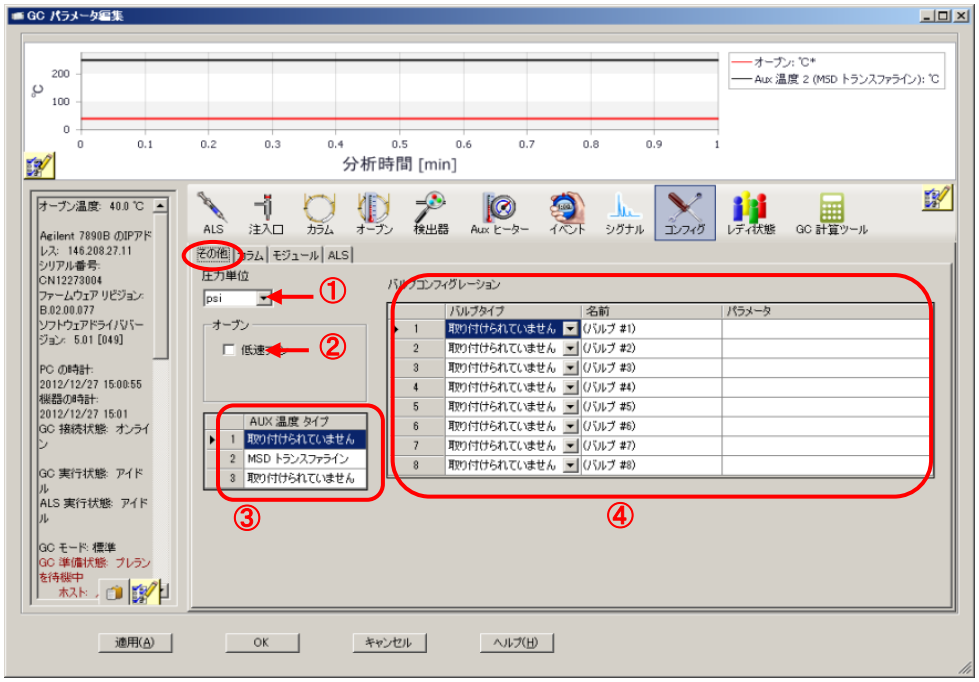
をクリックして、一覧から選択することも出来ます。

②　溶媒洗浄モードで必要に応じたモードを選択します。

注意

シリンジはメーカーによりラベルに注入可能な最大容量を表示している場合があります。シリンジサイズにはシリンジの最大容量を入力します。
なお、Agilent インジェクタにインストールされたシリンジの注入可能な最大容量は、シリンジ最大容量の 50%です。（10μL のシリンジの場合、1 回に注入できる容量は最大 5μL まで。）

（4）　［その他］タブ



①　使用する圧力単位をドロップダウンメニューから選択します。

- 1 kPa = 0.145 psi = 0.01 bar
- 6.895 kPa = 1 psi = 0.06895 bar
- 100 kPa = 14.504 psi = 1 bar

②　オーブンの設定

［低速ファン］をチェックするとファンの速度が低速モードになります。低速モードを使用するとクールダウン時の音は低減しますが、クールダウンに要する時間は長くなります。

③　[AUX 温度タイプ]は、確認のみ可能です。通常 AUX#2 で「MSD　トランスファライン」が使用されます。

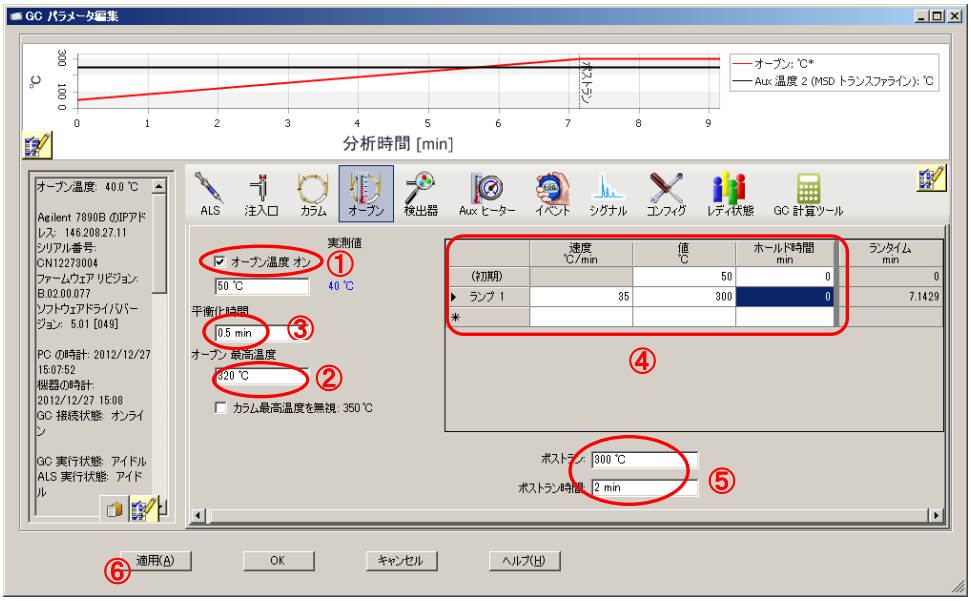
④　バルブがインストールされている場合、そのタイプ、名前、およびパラメータを入力します。（バルブは自動的には認識されません。）

3章－6　オーブン温度条件の設定

オーブン温度条件
　初期温度　：50℃　　ホールド時間：0min
　1 段目昇温：昇温速度 35℃/min　到達温度 300℃ ホールド時間 0min
　2 段目昇温：なし
　ポストラン：温度 300℃ 時間 2min

（1）

をクリックします。



① オーブン温度オンにチェックを入れます。

② ここで設定した値より大きい値がオーブン温度プログラムやポストラン温度で入力できなくなります。

③ 平衡化時間に 0.5 を入力します。

④ テーブルに昇温プログラムを入力します。

⑤ ポストランに 300、ポストラン時間に 2 を入力します。（データは測定されませんが、昇温終了後の焼きだしを行います。）

⑥ 必要に応じて 適用(A) をクリックしオーブンの設定を 7890GC へダウンロードします

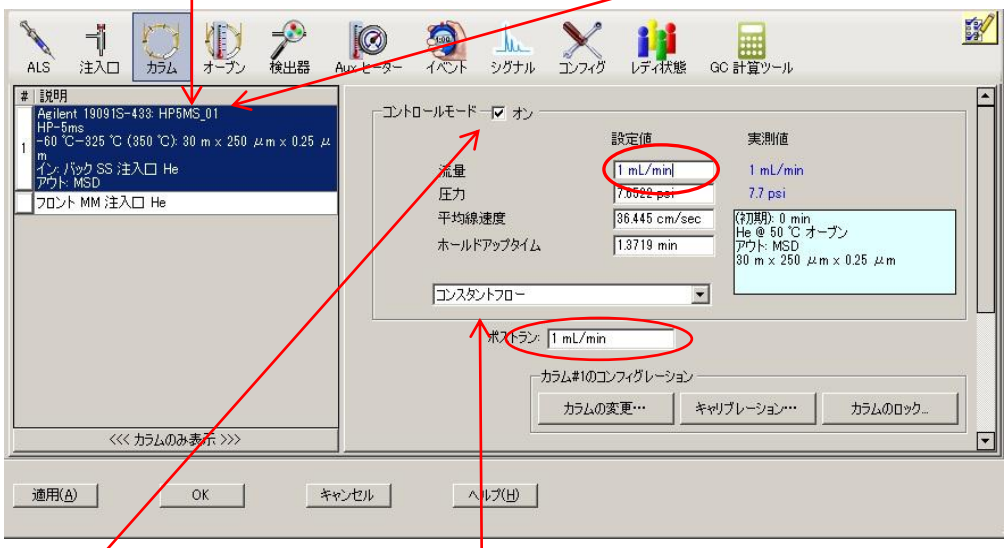
3章－7　カラム流量の設定

カラム流量の条件
　モード　：コンスタントフロー（定流量）
　流量　　：1mL/min
　カラム　：19091S－433（HP－5MS 30m x 250um x 0.25um）
　イン　　：フロントまたはバック（スプリット/スプリットレス注入口の位置）
　アウト　：真空

(1)　

をクリックします。

(2)　カラムの情報を確認します。実際に取り付けられているカラム情報が表示されているか、イン（入口）に使用する注入口とガスの種類が表示され、アウト（出口）がMSD になっていることを確認します。



(3)　オンにチェックを入れます。

(4)　流量モードを選択します。（今回はコンスタントフロー）

(5)　流量の設定値に“１”（単位の入力は不要）を入力します。自動的に圧力、線速度、ホールドアップタイムが計算されます。

(6)　ポストラン流量を入力します。（今回は“１”）

(7)　必要に応じて 適用(A) をクリックしカラム流量の設定を 7890GC へダウンロードします。

3章－8　注入口条件の設定

注入口の条件	
モード	：スプリットレス
ヒーター	：オン、250℃
圧力	：オン（設定値はカラム流量の条件から自動設定）
セプタムパージ流量	：オン、3mL/min（スタンダードモード）
ベントへのパージ流量	：50ml/min、開始時間 1min

(1)

をクリックします。

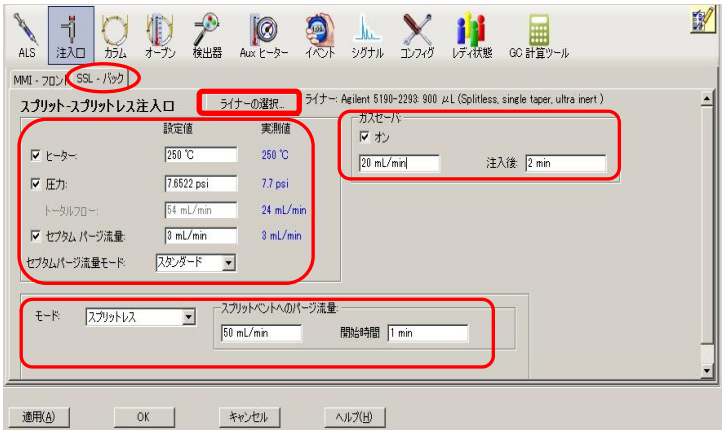
(2) 使用する注入口の位置をタブで選択します。

(3) ヒーターにチェックをして設定欄に 250 を入力します。

(4) ライナーの選択... をクリックし、一覧から、該当するものを選択します。

(5) 圧力にチェックをします。（設定欄はカラム流量の設定時に自動的に入力されます。）

(6) セプタムパージ流量をチェックして設定欄に 3 を入力します。セプタムパージ流量モードは［スタンダード］を選択します。



(7) ガスセーバーは、オンにチェックを入れ、設定欄に 20、注入後に 2 を入力します。

(8) モードは［スプリットレス］を選択し、スプリットベントのパージ流量に 50、開始時間に 1 を入力します。

注意

カラムが接続されている注入口の圧力は、必ずチェックを入れてキャリアガスを流します。
チェックが入っていないとガスが流れません。
使用していない注入口等で、ガスを流さない場合はチェックを外しておきます。

3章－9　　オートサンプラ条件の設定

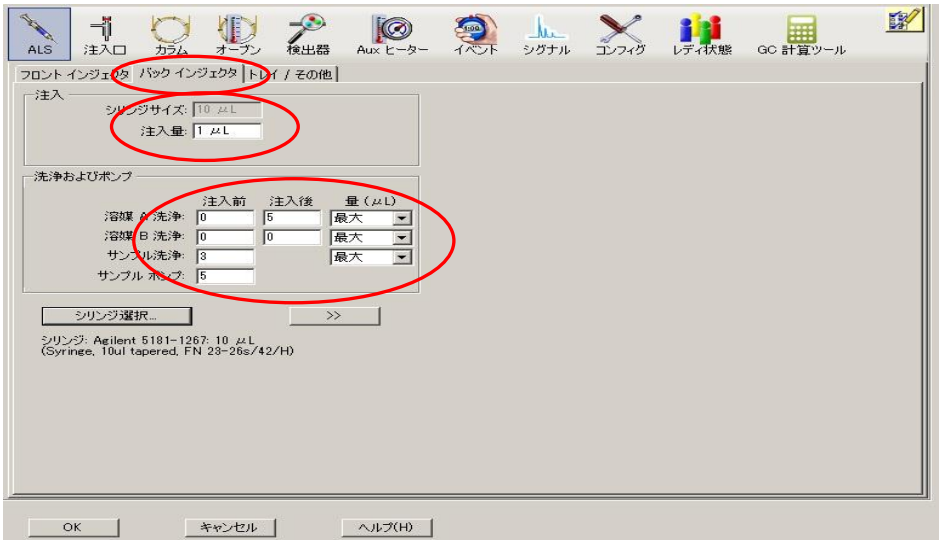
この項目は、オートサンプラを使用する場合のみ設定します。

インジェクタの条件	
注入量	：1uL
溶媒Ａ洗浄回数	：注入前０回 / 注入後５回
溶媒Ｂ洗浄回数	：注入前０回 / 注入後０回
サンプル洗浄（共洗い）	：３回
サンプルポンプ	：５回

(1)　

をクリックします。

(2)　インジェクタのタブ（フロントインジェクタ、またはバックインジェクタ）をクリックします。



(3)　正しいシリンジサイズが表示されていることを確認します。

　　注入量に１を入力します。

(4)　シリンジの選択が出来ます。

(5)　溶媒Ａ洗浄の注入後欄に５を入力します。

(6)　サンプル洗浄に３を入力します。

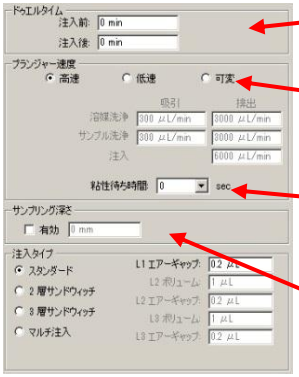
(7)　サンプルポンプに５を入力します。

(8)　量はすべて［最大］を選択します。

＜参考＞
シリンジサイズ（シリンジ容量）はコンフィグレーションに含まれます。
変更はメニューの［機器］－［GC ソフトコンフィグレーション編集］で実施します。

（9）　[>>]ボタンをクリックすると拡張設定画面が表示されます。

必要に応じて拡張設定を行います。



ドゥエルタイム：注入前または注入後にシリンジニードルを注入口に残しておく時間。

プランジャー速度：プランジャーを押すスピード。通常は高速を選択します。

粘性待ち時間は、プランジャーを引いてからの待ち時間です。粘性のあるサンプル時に適宜設定ください。通常は０か１。

サンプリング深さ：サンプリングの際のバイアル内へのニードル先端の深さです。デフォルトはバイアルの底から 3.6 ミリの位置です。

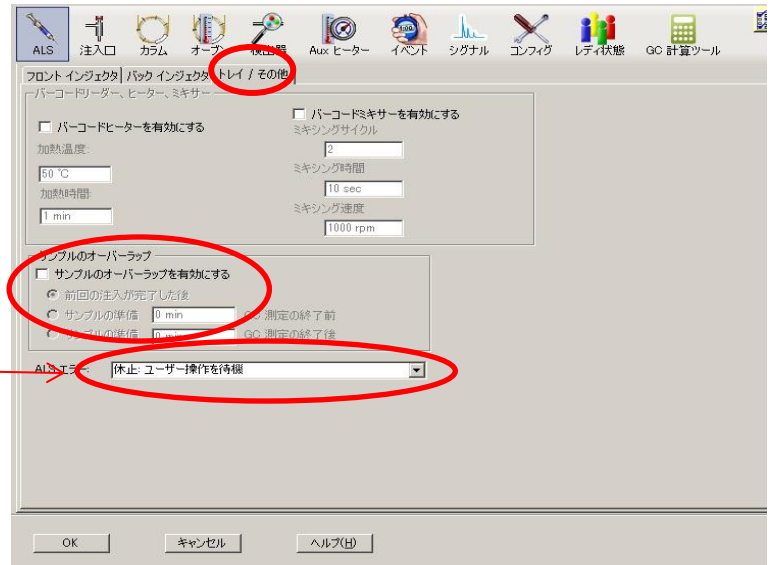
注入タイプ：サンプル吸引後のエアーギャップです。

デフォルトは L1 エアーギャップが 0.2ul です。

（10）　サンプルのオーバーラップ、ALS エラー

サンプルのオーバーラップを実施する場合には、トレイ/その他のタブをクリックします。［サンプルのオーバーラップを有効にする］をチェックし、オプションから次のサンプルを準備するタイミングを選択します。

エラー時の処理を選択します。



注意

分析サイクルがサンプルの準備にかかる時間よりも短い場合にはサンプルのオーバーラップを使用しないでください。このような場合にサンプルのオーバーラップを使用するとシーケンスが停止します。

3章－10 Aux 温度条件の設定

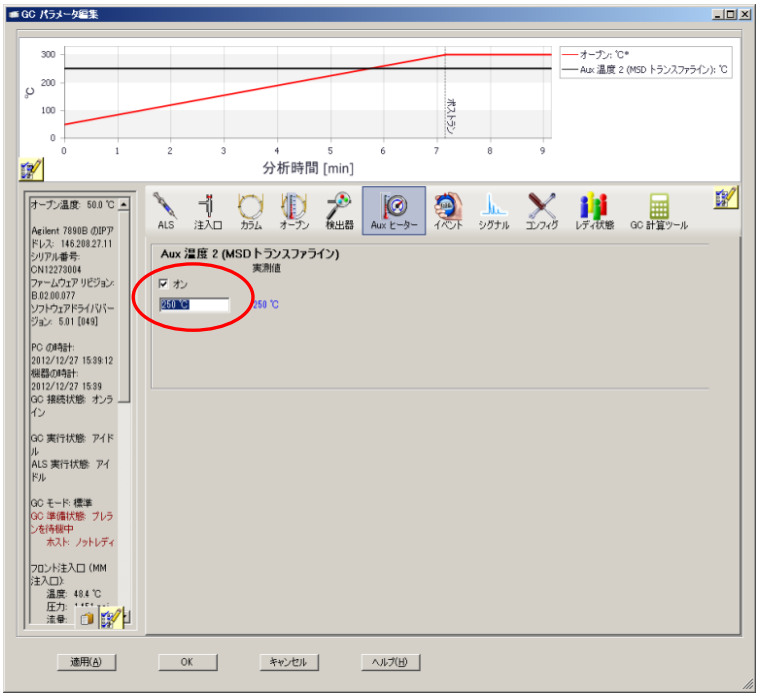
GC/MSD トランスファーライン温度 　Aux 2 温度　：オン、250℃

（1）

をクリックします。

（2） オンにチェックを入れます。

（3） 値に 250 を入力します。

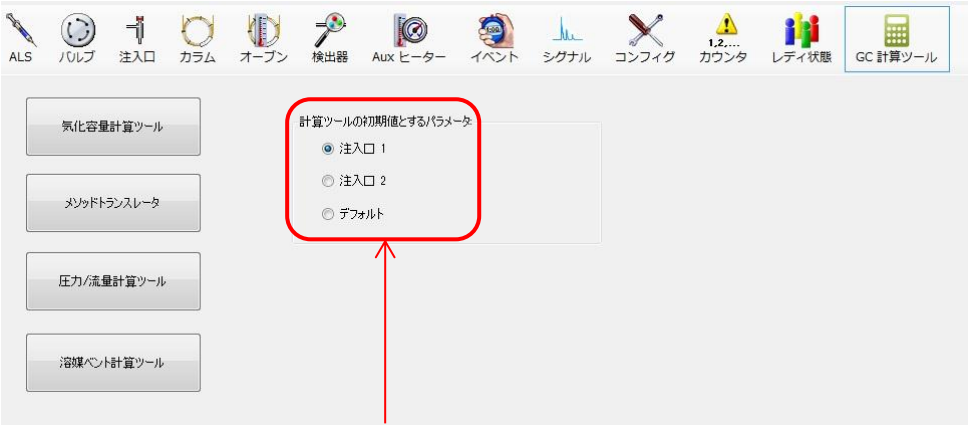


3章－11 GC 計算ツール

測定条件の設定画面ではありませんが、流量や気化体積などが計算できるツール群です。

GC 計算ツールタブ

をクリックします。



注入口のパラメータを選んでおきます。

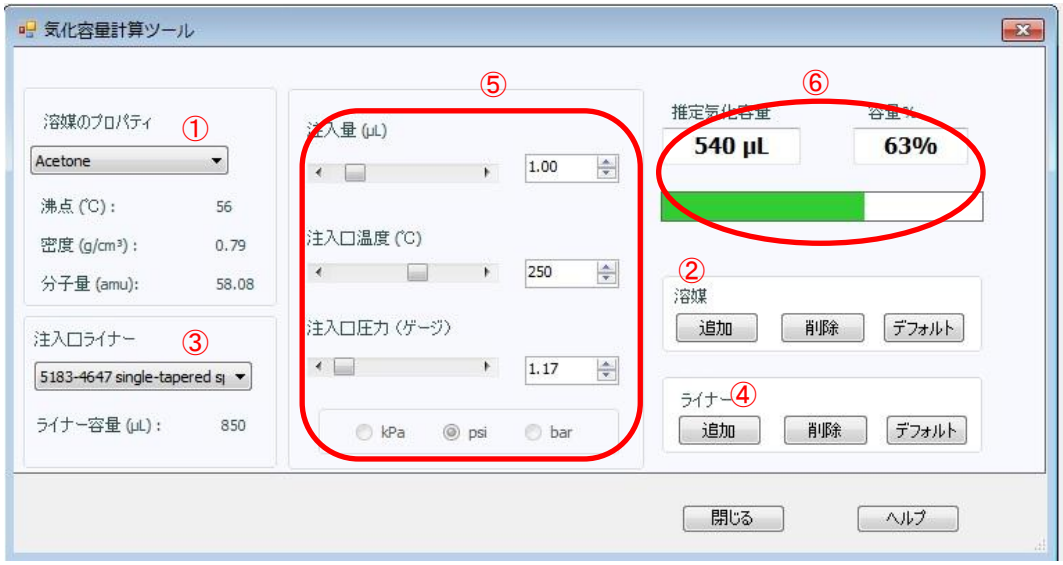
(1) 気化容量計算ツール
：溶媒の気化体積を計算し、ライナーからあふれないか等が計算出来ます。

(2) メソッドトランスレータ
：使用中のメソッドを元に分析時間を短縮させる場合やガスの種類、カラム内径を変更した場合の推奨する測定条件を提案します。

(3) 圧力／流量計算ツール
：カラム流量や圧力を相互に計算出来ます。

(4) 溶媒ベント計算ツール
：オプションの Solvent Vaper Exit (SVE)用の計算ツールです。

(1) 気化容量計算ツール



① 溶媒のプロパティ：溶媒を選択します。

② 溶媒：リストに無い溶媒を追加できます。

③ 注入口ライナー：使用するライナーを選択します。

④ ライナー：リストに無いライナーを追加出来ます。

⑤ 注入量、注入口温度、注入口圧力、圧力単位をそれぞれ入力、選択します。

⑥ 溶媒が気化した体積と、ライナーに対する割合が計算されます。

(2) メソッドトランスレータ

① 項目を選択します。

② 元になるメソッドを入力します（現在の測定条件が入力されて来ます）。

③ 必要なパラメータを選択・入力すると、計算・変換されたメソッドが表示されます。各パラメータは相互に関係しています。

(3) 圧力／流量計算ツール

① カラムの情報を入力します。

② ガスの種類を選びます。

③ カラム出口を設定します。

④ これらは相互に計算されます。

⑤ スプリットベント流量とスプリット比が相互に計算されます。

⑥ ライナー容量から、スプリットレス注入時の推奨パージ時間が計算されます。

※：(4)　溶媒ベント計算ツールの詳細は、オペレーションマニュアルを参照下さい。

3章－12　7890GC パラメータ編集画面の終了

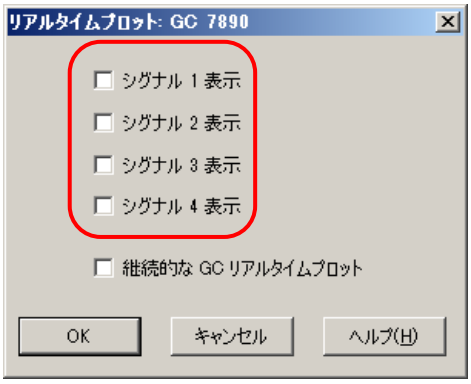
OK をクリックしてパラメータ編集画面を閉じます。

設定値が 7890GC へダウンロードされます。

3章－13　GC リアルタイムプロットの設定

MSD での取り込時には、GC シグナルの表示は必要ありません。
GC 検出器等を使用する場合のみ設定を実施します。

（1）　シグナル 1、2、3、4 のすべての［表示］チェックがオフになっていることを確認します。



> 参考：「継続的な GC リアルタイムプロット」をオンにすると、継続的にクロマトがプロットされます。オフの場合は、分析中のみのプロットになります。

（2）　OK をクリックしてこの画面を閉じます。

3章－14 MSD の測定条件の設定

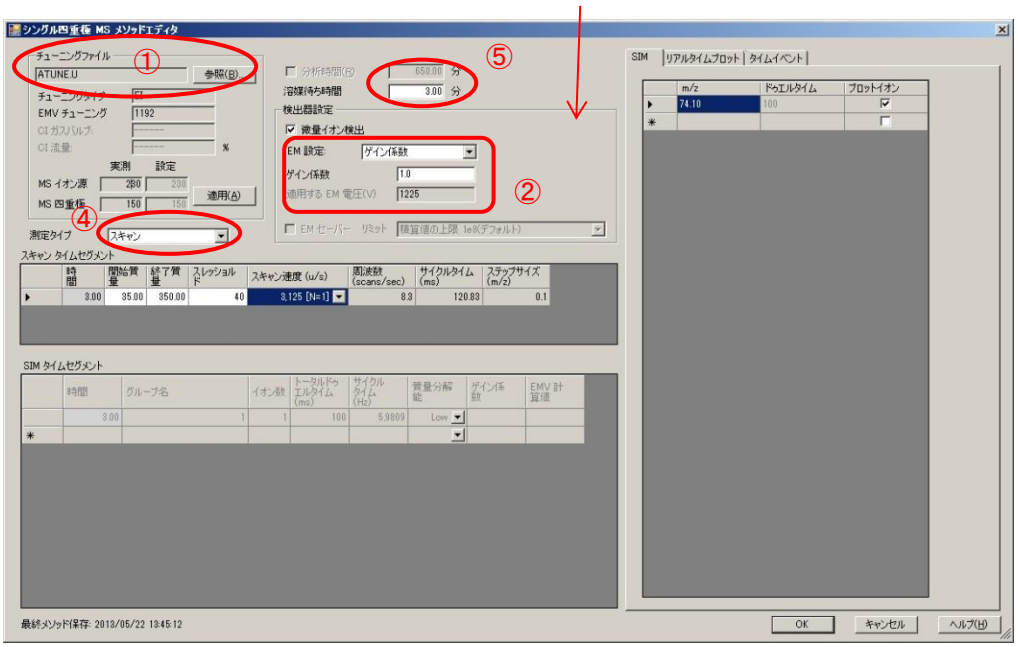
MSD の測定条件①（MS 機器パラメータ）

チューニングファイル	：atune.u
測定タイプ	：スキャン
EM 設定	：ゲイン係数
ゲイン係数	：1.00
溶媒待ち時間	：3 分

① チューニングファイル「atune.u」を、参照(B)... タブより選択します。

② EMV モードの設定では、［ゲイン係数］を選択しゲイン係数には 1.00 を入力します。実際に使用される電圧値が画面上に表示されます。（下記の例では 1225V）

③ 「微量イオン検出」にチェックを入れると、微小なピークが検出され易くなります。

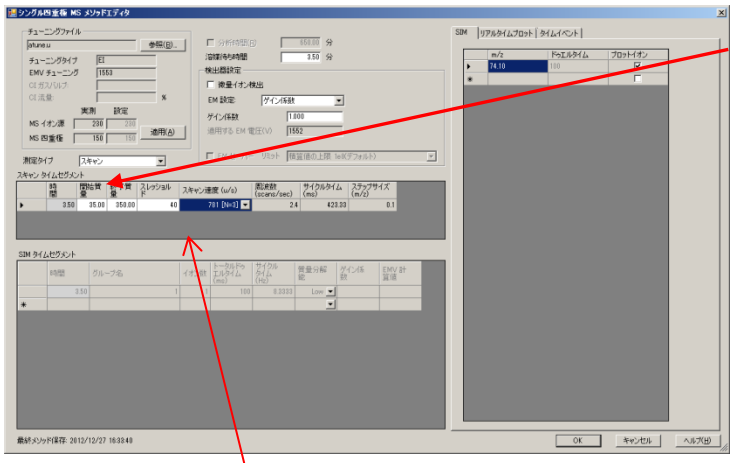


④ 溶媒待ち時間に 3 を入力します。

⑤ 測定モードは、［スキャン］を選択します。

⑥　スキャンタイムセグメントを編集します。

MSD の測定条件②（スキャンパラメータ編集）	
質量範囲	：Low 35、 High 350
スレッショルド	：40
スキャン速度	：781(N＝3)



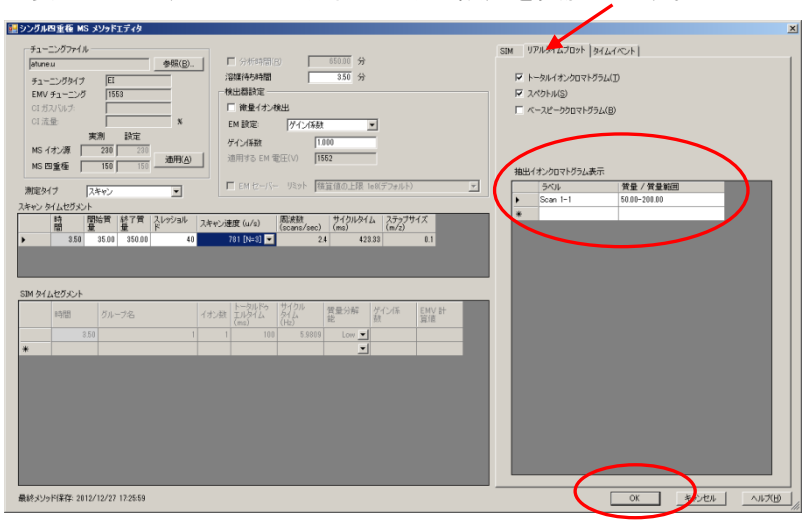
⑦　開始質量(Low)に 35、終了質量(High)に 350 を入力します。

＜参考＞
5977MSD の質量範囲（amu）は 1.6～1050 で指定可能です。

⑧　「スレッショルド」に 40、「スキャン速度」は[781(N=3)]を選択します。

＜参考＞
周波数(scans/sec)が約 1～3 になるような値を設定します。

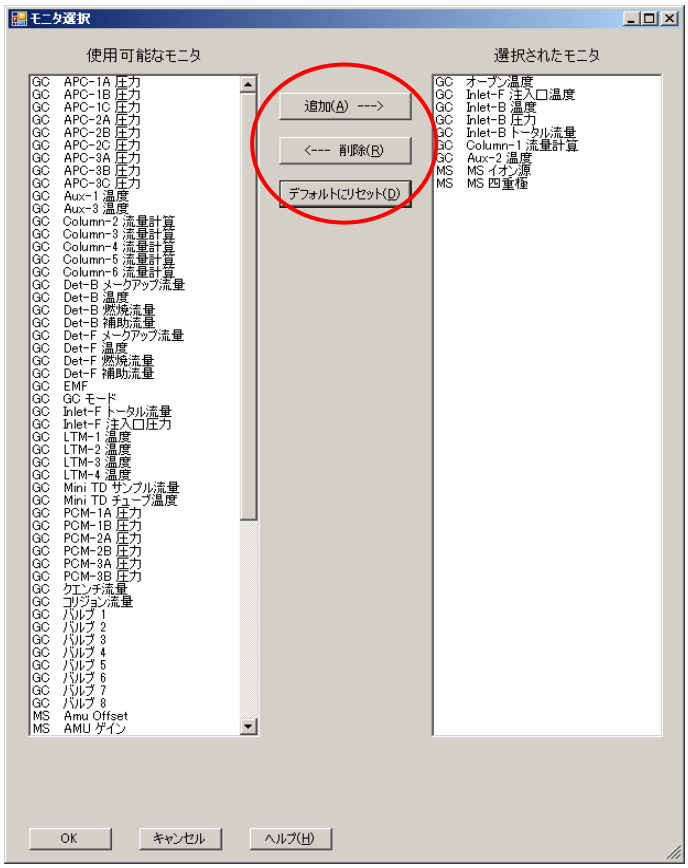
⑨　［リアルタイムプロット］タブをクリックします。
必要に応じて、プロットウィンドウの設定を実施します。



⑩　OK をクリックして MS メソッドエディタの設定を終了します。

3章－15　モニタ選択

機器コントロール画面上で常時モニタされる項目を選択します。



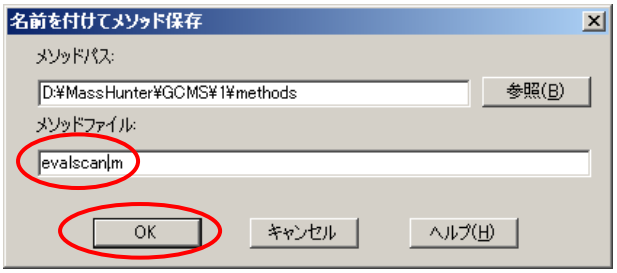
左の項目から、必要な項目を、

タブで追加します。

タブで削除出来ます。

3章－16　メソッドの保存

メソッドファイル欄に evalscan と入力し、 OK をクリックします。



注意

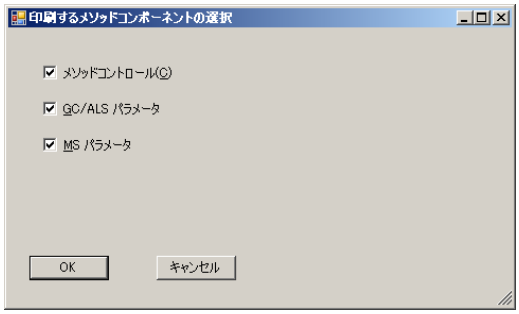
メソッドファイル名に限らず、MicrosoftWindows 上でファイル名をつける場合、記号類を使用することはお奨め出来ません。

ファイル名に以下の記号や、全角のスペースを使用することは避けてください。

¥　/　:　*　|　?　“　<　>

3章－17 メソッドの印刷方法

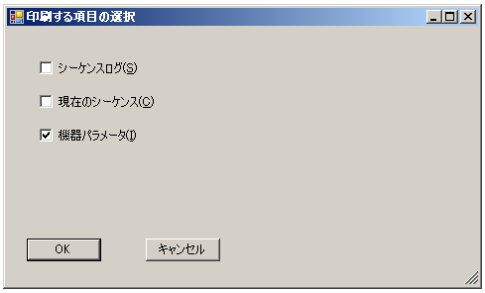
（1）　［メソッド］－［メソッドの印刷］をクリックします。



（2）　印刷したい項目をチェックして OK をクリックします。

＜参考＞

機器コントロール画面上の印刷アイコンをクリックしてメソッドを印刷することが可能です。

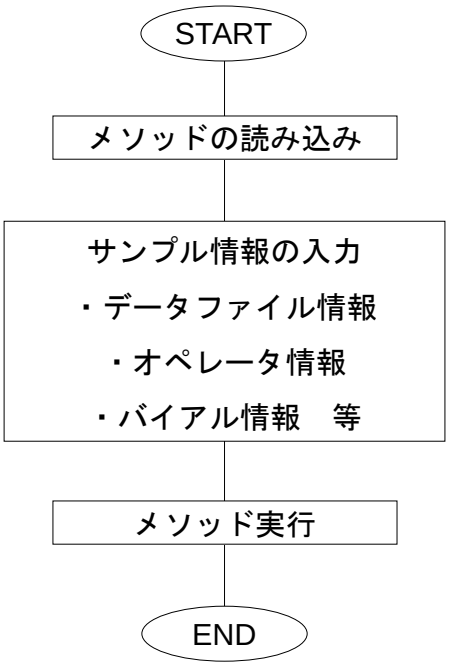


この場合、メソッドコントロールパラメーター（メソッド実行範囲とメソッドコメント）は印刷されません。

第4章
メソッドの実行と
ログブック

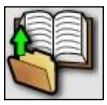
４章－1　測定に使用するメソッドの読み込み　4－3
４章－2　サンプル情報の入力とメソッドの実行（ランメソッド）　4－3
４章－3　測定開始　4－6
４章－4　ログブックを確認する　4－8

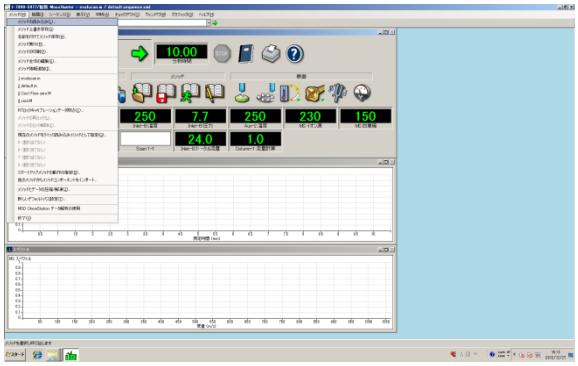
＜メソッドの実行＞



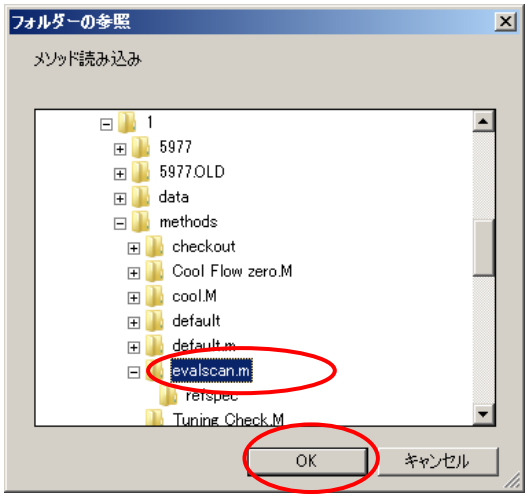
本章には、下記についての説明も含まれています。
・ログブックの確認方法

4章－1　測定に使用するメソッドの読み込み

（1）  （メソッドの読み込みアイコン）をクリックします。メニューから選択する場合は［メソッド］－［メソッドの読み込み］を選択します。



（2）　［フォルダの参照］ダイアログボックスから evalscan.M を選択し、OK をクリックします。



4章－2　サンプル情報の入力とメソッドの実行（ランメソッド）

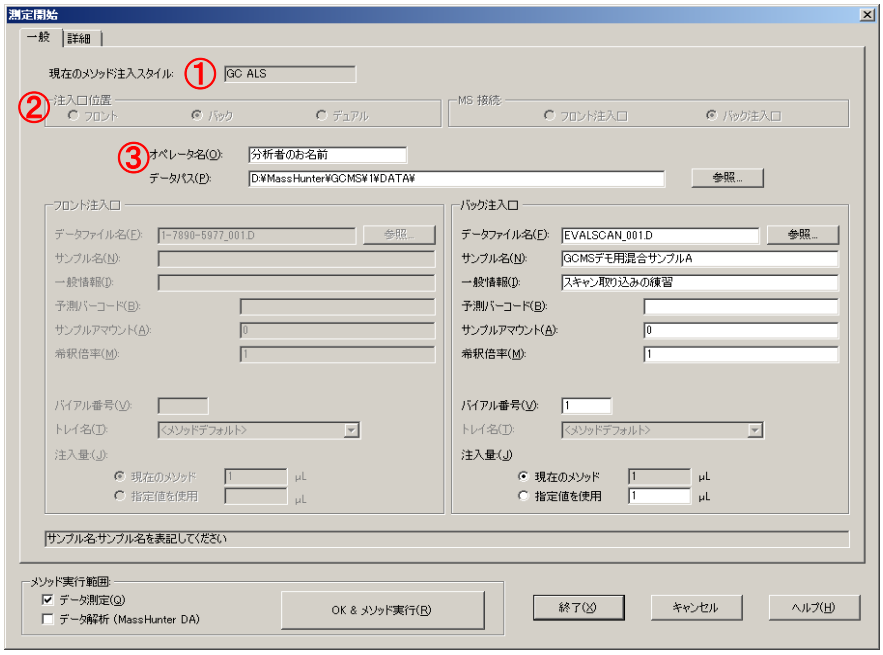
（1） （メソッドの実行アイコン）をクリックします。メニューから選択する場合は［メソッド］－［メソッド実行］を選択します。

（2）　［測定開始］ダイアログボックスが開きます。

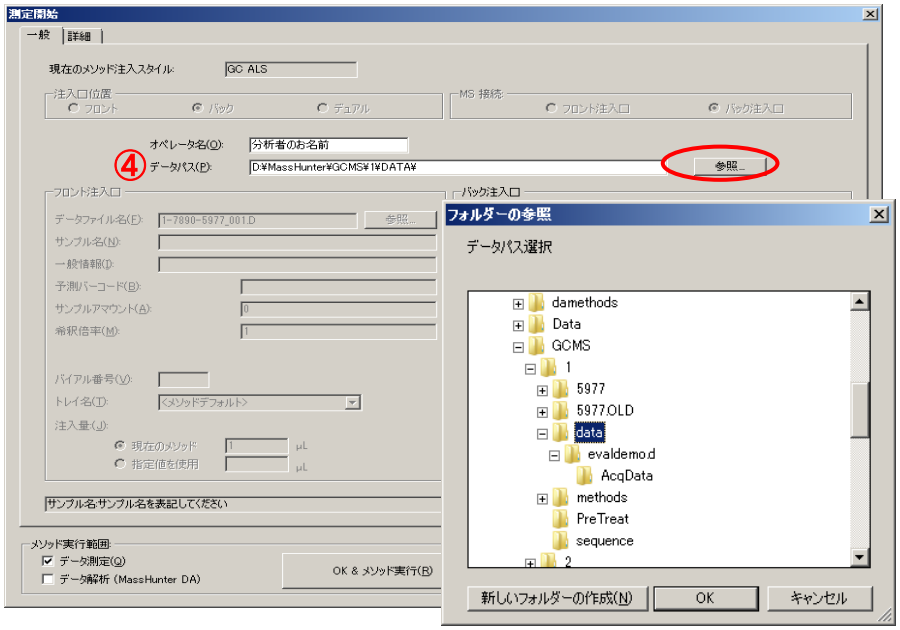
①　試料導入方法が［現在のメソッドの注入スタイル］欄に表示されます。

②　［注入口位置］［MS 接続］欄は、メソッドの設定に従いチェックが入っています。この設定は機器とはリンクせず、メソッド上に記録としてのみ保存されます。

③　［オペレータ名］に分析者のお名前を入力します。



④　［データパス］にデータファイルの保存先（フォルダ）を入力します。 参照... をクリックして選択するか、フォルダを新規作成します。

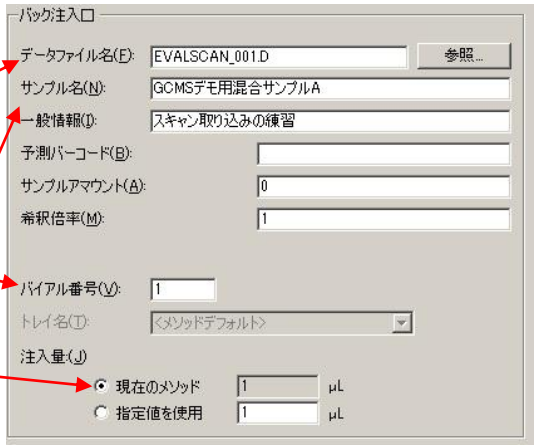


⑤　［データファイル名］に EVALSCAN_001 を入力します。拡張子.D は自動的に追加されます。

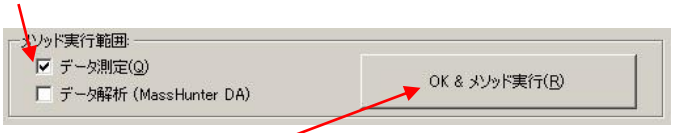
⑥　［サンプル名］、［一般情報］は右例のように入力します。これらの欄の入力は任意です。

⑦　バイアルに 1 を入力します。

⑧　［注入量選択］は［現在のメソッド］を選択します。



⑨　［メソッドの実行範囲］は［データ解析］のチェックを外し、［データ測定］のチェックのみオンにします。

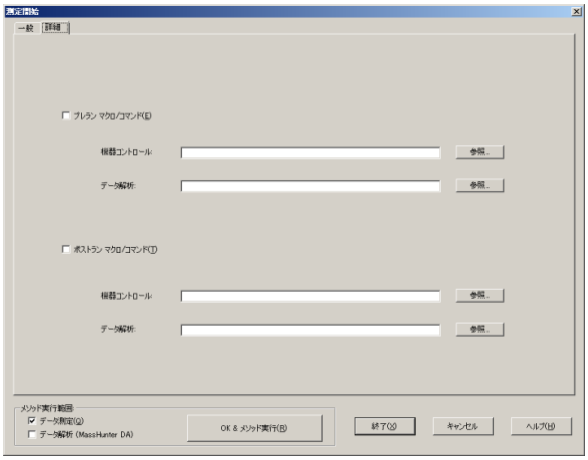


⑩　

をクリックして測定を開始します。

＜参考＞

プレランおよびポストランマクロコマンドは［詳細］タブをクリックして実施出来ます。



メソッド実行前（プレラン）にマクロを実行させたり、メソッド実行後（ポストラン）にマクロを実行させたりすることが出来ます。

4章－3　測定開始

測定を開始すると、以下のような画面が表示されます。

GC がレディーになっていない場合には、準備が完了するまでこのメッセージが表示されます。このメッセージが消えるまで待機します。

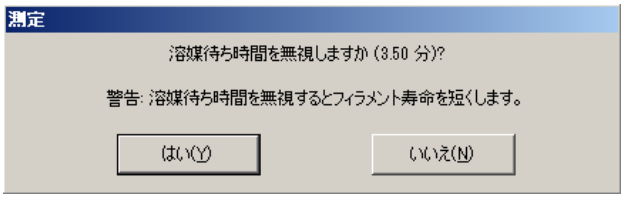
注意

[無視(O)] をクリックすると、無視され、先へ進みます。その場合は、温度が設定に達していない等で分析結果に影響が出る恐れがあります。

※：注入方法が、［マニュアル］の場合は、メソッド実行時、以下のようなダイアログボックスが表示され、スタートボタンが押されるか、外部からのスタート信号を待ちます。（ALS の場合は表示されず、GC が準備出来たら自動で注入プロセスへ進みます。また、［外部デバイス］の場合は、以下は表示されず、外部からのスタート信号待ちとなります。）

GC がスタートすると、溶媒待ち時間の画面が表示されます。
（溶媒待ち時間を設定している場合）

待ち時間終了後、自動でフィラメント・イオン源が ON になります。

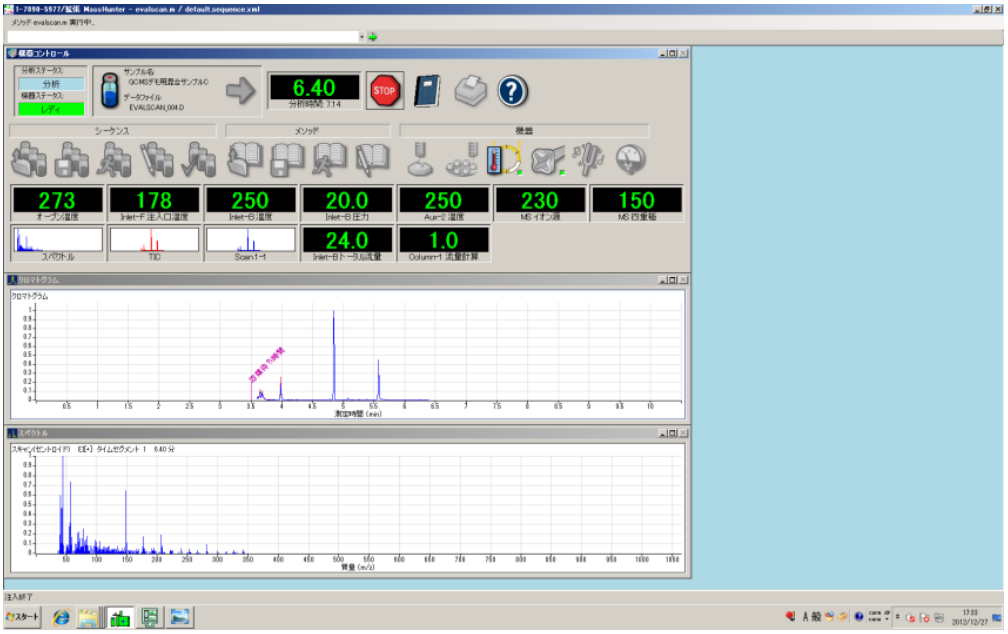


注意

[はい(Y)] をクリックすると溶媒待ち時間が無視され、フィラメント・イオン源が ON になり、測定が開始されます。

溶媒等の過大な成分溶出時に、フィラメント・イオン源が ON になっていると、フィラメントが切れる、イオン源が著しく汚れる等のリスクがあります。

分析中は下図のような画面が表示されます。

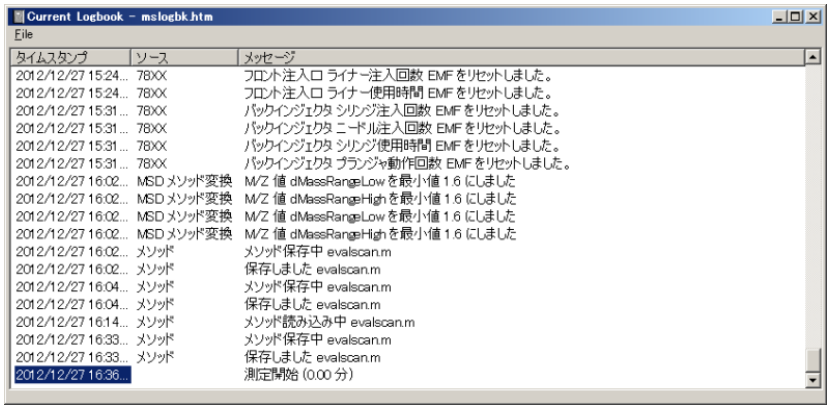


※モニター設定の内容等により、表示イメージは必ずしも上図と同様ではありません。

4章－4　ログブックを確認する

（1）　ログブックアイコンをクリックします。

（2）　画面上にログブックが表示されます。



タイムスタンプ	ソース	メッセージ
2012/12/27 15:24...	78XX	フロント注入口 ライナー注入回数 EMF をリセットしました。
2012/12/27 15:24...	78XX	フロント注入口 ライナー使用時間 EMF をリセットしました。
2012/12/27 15:31...	78XX	バックインジェクタ シリンジ注入回数 EMF をリセットしました。
2012/12/27 15:31...	78XX	バックインジェクタ ニードル注入回数 EMF をリセットしました。
2012/12/27 15:31...	78XX	バックインジェクタ シリンジ使用時間 EMF をリセットしました。
2012/12/27 15:31...	78XX	バックインジェクタ プランジャ動作回数 EMF をリセットしました。
2012/12/27 16:02...	MSD メソッド変換	M/Z 値 dMassRangeLow を最小値 1.6 にしました
2012/12/27 16:02...	MSD メソッド変換	M/Z 値 dMassRangeHigh を最小値 1.6 にしました
2012/12/27 16:02...	MSD メソッド変換	M/Z 値 dMassRangeLow を最小値 1.6 にしました
2012/12/27 16:02...	MSD メソッド変換	M/Z 値 dMassRangeHigh を最小値 1.6 にしました
2012/12/27 16:02...	メソッド	メソッド保存中 evalscan.m
2012/12/27 16:02...	メソッド	保存しました evalscan.m
2012/12/27 16:04...	メソッド	メソッド保存中 evalscan.m
2012/12/27 16:04...	メソッド	保存しました evalscan.m
2012/12/27 16:14...	メソッド	メソッド読み込み中 evalscan.m
2012/12/27 16:33...	メソッド	メソッド保存中 evalscan.m
2012/12/27 16:33...	メソッド	保存しました evalscan.m
2012/12/27 16:36...		測定開始 (0.00 分)

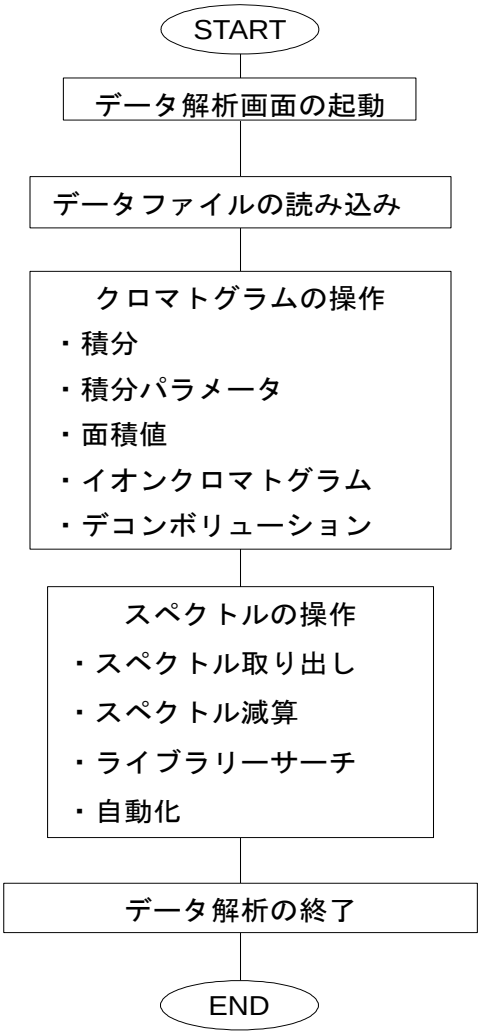
※：現在のログブックは、デフォルトでは、D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥mslogbk.htm に保存されています。

＜参考＞
その他のログブック（一部は別フォルダに保存されています）
- ・MSINSCTL.log　：機器コントロールに関するログブック
- ・MSTUNE.log　：チューニングと真空制御に関するログブック
- ・sequence.log　：シーケンスに関するログブック

第5章
定性のデータ解析

5 章－1	定性解析（Qualitative Analysis）の起動	5－3
5 章－2	解析環境の設定	5－5
5 章－3	ウィンドウ構成と基本操作	5－8
5 章－4	積分	5－11
5 章－5	パーセントレポート	5－21
5 章－6	クロマトグラム	5－28
5 章－7	スペクトルの取り出し	5－37
5 章－8	スペクトルの減算	5－41
5 章－9	スペクトルのライブラリサーチ	5－48
5 章－10	化合物の検出	5－60
5 章－11	自動解析	5－64
5 章－12	SN（シグナル/ノイズ）比の計算	5－72
5 章－13	定性解析の終了	5－80

＜定性のデータ解析＞

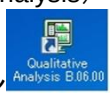


※定性解析環境設定
（コンフィグ設定）

マウス、ウィンドウ基本操作
基本画面構成の説明

本章には、下記についての説明も含まれています。
・画面の印刷方法

5章－1　定性解析（Qualitative Analysis）の起動

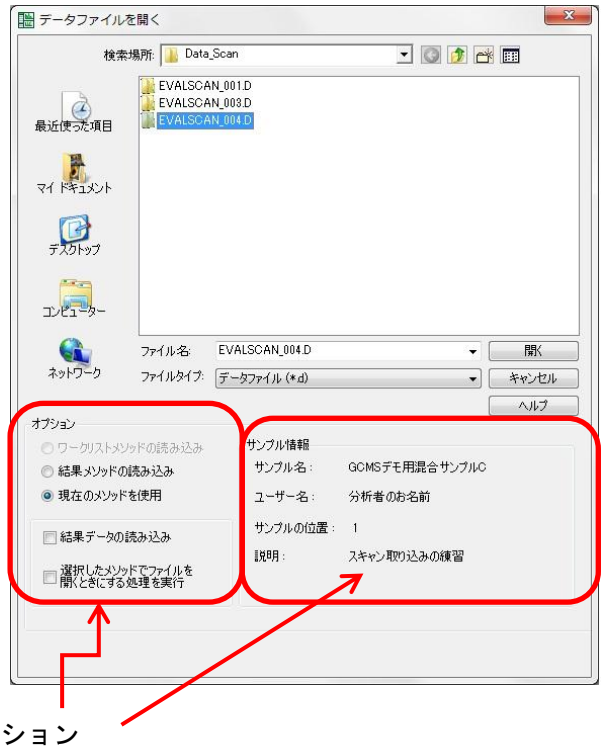
（１）デスクトップ上のアイコン 

をダブルクリックして［定性解析］ソフトウェアを起動します。

デスクトップ上にアイコンがない場合には、タスクバーの［スタート］ボタンから、［プログラム］－［Agilent］－［MassHunter Workstation］－［Qualitative Analysis B.06.00］を選択してソフトウェアを起動します。
（［Qualitative Analysis B.06.00］表示は設定により異なる名前になる時があります。）

（２）最初に起動する時には、「データファイルを開く」画面が表示されます。

解析したいデータファイルを１つもしくは複数指定して呼び込むことが可能です。複数のデータの指定には、マウスのクリックと共に Shift キーもしくは ctrl キーを併用します。

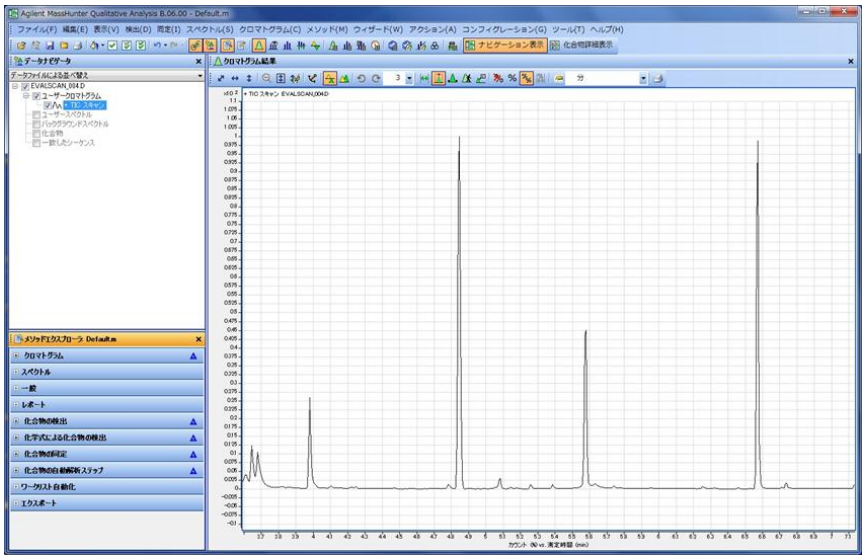


・オプション
通常新規のデータの場合、「現在のメソッドを使用」を選択します。

解析結果が保存されたデータを読み込む場合は、［結果メソッドの読み込み］にチェックを入れられるようになり、チェックを入れると解析時に使用したメソッドが読み込まれます。また、同様に［結果データの読み込み］にチェックを入れると解析済みの状態でデータが読み込まれます。詳細は、5 章-11 自動解析および付録 E 定性解析のグラフィックス/その他を参照願います。

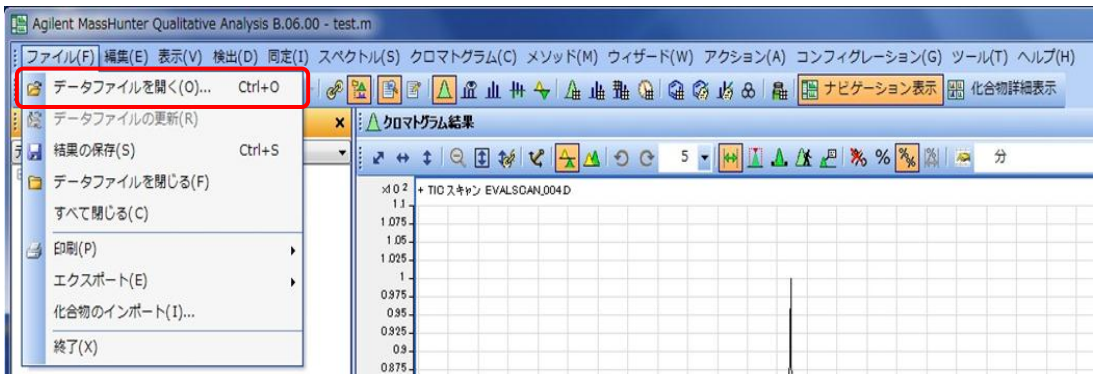
・サンプル情報
データ測定時に入力したサンプル情報が表示されます。

定性解析画面が、指定したデータを読み込んで表示されます。



（３）データファイルの読み込み

解析画面が表示された後で、データを読む場合には、ツールバーの「データファイルを開く」アイコン をクリックするか、メニューの［ファイル(F)］－［データファイルを開く(O)…］を選択し、「データファイルを開く」画面を開きます。

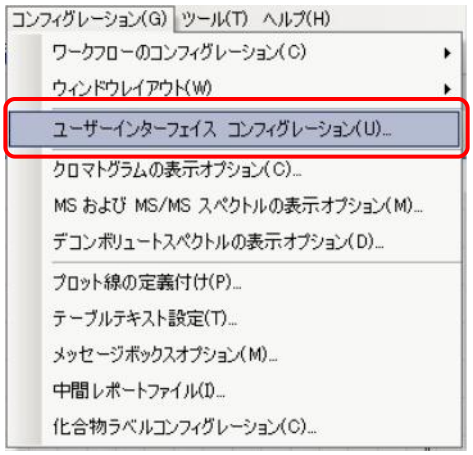


5章－2　解析環境の設定

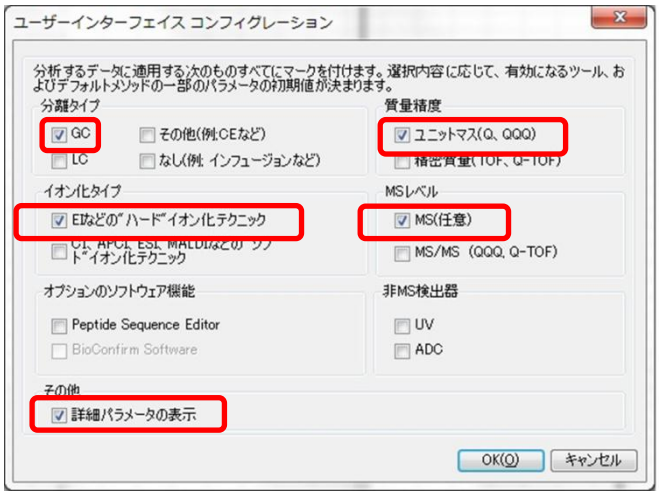
MassHunter 解析ソフトウェアでは、種々な測定装置のデータの解析が可能です。このためご使用の装置、取り扱うデータの種類に合わせて解析環境を設定する必要があります。
解析環境は一度設定されれば、ソフトウェアの更新、再インストール、取り扱うデータの種類の変更等が無ければ、通常再設定は必要ありません。

（1）ユーザーインターフェースコンフィグレーションの設定。

メニューの［コンフィグ(G)］－［ユーザーインターフェースコンフィグレーション(U)…］をクリックします。



ユーザーインターフェースコンフィグレーション画面が開きます。



使用する装置、仕様およびデータの種類を選択します。
一般的にシングル Q ポールの GCMS であれば、次の設定となります。

GC/MS の一般的な設定

- ・分類タイプ　　：GC
- ・質量精度　　：ユニットマス（Q、QQQ）
- ・イオン化タイプ　：EI などのハードイオン化テクニック
  （CI 付の場合は、CI、APCI、MALDI などの
  ソフトイオン化テクニックも選択）
- ・MS レベル　　：MS（任意）
- ・その他　　：詳細パラメータの表示

必要な項目が選択されなかった場合、ソフト上に必要となる機能のメニューが表示されないことがあります。

（２）その他の環境設定

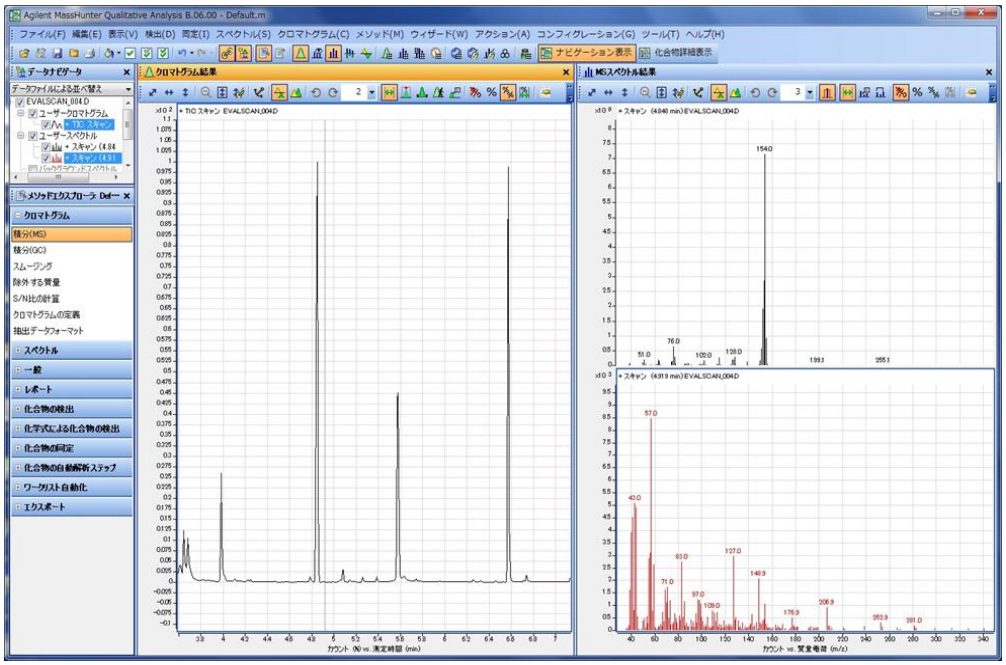
・［クロマトグラムの表示オプション(C)…］
・［MS および MS/MS スペクトルの表示オプション(M)…］
・［デコンボリューションスペクトルの表示オプション(D)…］
・［プロット線の定義付け(P)…］
・［メッセージボックスオプション(M)…］
・［中間レポートファイル(I)…］
・［化合物ラベルコンフィグレーション(C)…］

前頁のメニューはすべて「コンフィグ(G)」メニュー内にありますが、データの表示環境、テンポラリファイルのパス設定、描画するラインの色や太さ等の設定項目となります。通常は初期設定で問題ありません。詳細は付録 E 定性解析のグラフィックス/その他　を参照願います。

（３）ウィンドウレイアウト

クロマト、マススペクトル、積分結果、ライブラリー検索結果、設定条件入力等、MassHunter ソフトでは種々なウィンドウが表示されます。これらウィンドウの配置、積分結果等の表の表示項目は、自由にカスタマイズ可能です。
カスタマイズした配置をレイアウトファイルとして記録しておくことも可能です。またカスタマイズが過ぎて元の配置が判らなくなった場合、デフォルトレイアウトの復元を行い初期画面に戻すことも可能です。

クロマトウィンドウとマススペクトルウィンドウを横に並べたレイアウト例。



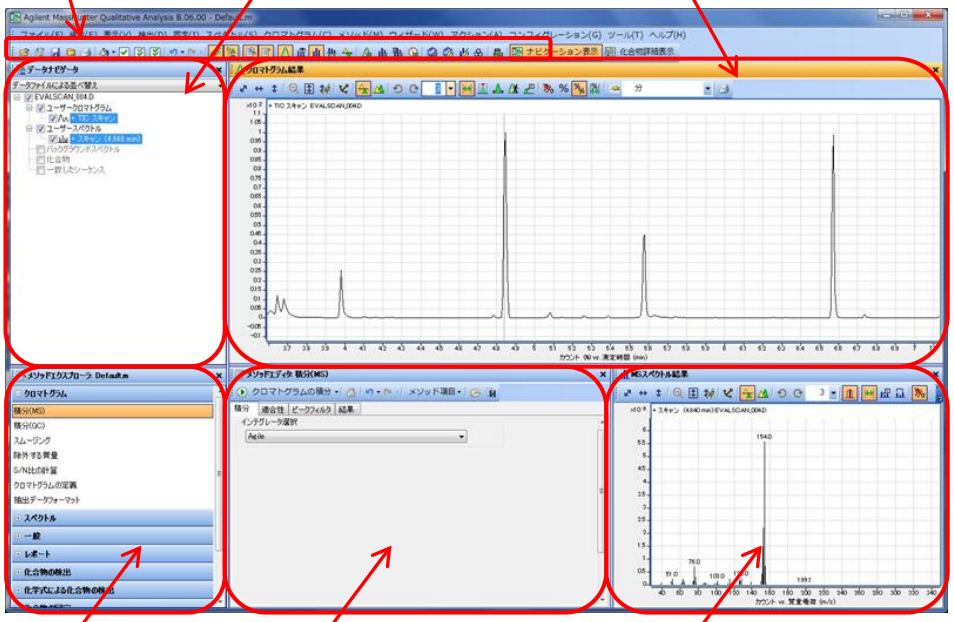
ウィンドウレイアウトのカスタマイズ方法については　付録 E 定性解析のグラフィックス/その他　を参照願います。

5章－3　ウィンドウ構成と基本操作

（１）ウィンドウ構成

基本的なデフォルトレイアウトでの解析画面のウィンドウ構成を以下に示します。

①ツールバー　②ﾃﾞｰﾀﾅﾋﾞｹﾞｰﾀ　③クロマトグラム結果



④ﾒｿｯﾄﾞｴｸｽﾌﾟﾛｰﾗ　⑤ﾒｿｯﾄﾞｴﾃﾞｨﾀ　⑥ﾏｽｽﾍﾟｸﾄﾙ結果

① ツールバー
機能をアイコンで表示したものでクリックすることで実行できます。
クロマトグラム結果、マススペクトル結果ウィンドウにも、そのウィンドウにふさわしい種類の機能のアイコンがついています。

② データナビゲータ
呼び込まれたデータを表示し、把握することができます。クロマトグラム結果やマススペクトル結果等、データから抽出、加工された内容がツリービューに整理され ON/OFF のチェックボックスが表示されます。

③ クロマトグラム結果
データから抽出されたクロマトグラムデータを表示します。

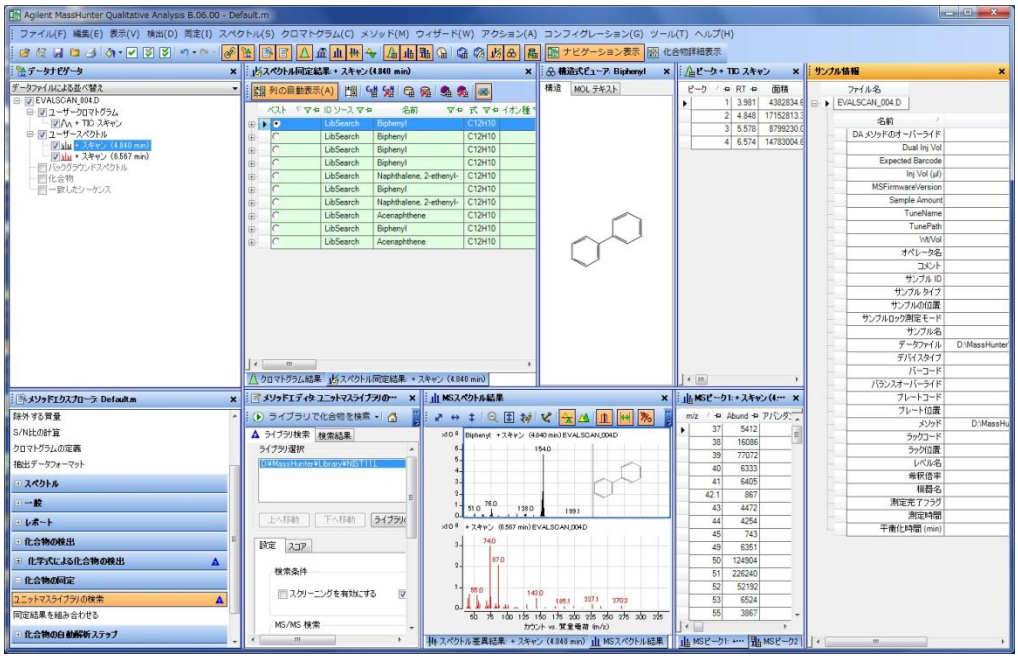
④ メソッドエクスプローラ
現在のメソッドの解析のプログラムを項目毎に分けてナビゲートします。選択された項目は、メソッドエディタに表示されます。

⑤ メソッドエディタ
メソッドの現在の設定の更新、確認、及びその項目の実施ができます。

⑥　マススペクトル結果
　抽出されたマススペクトルや、検索された化合物の構造式が入ったマススペクトルが表示されます。

　ウィンドウの構成は、表示させる項目を選択することによって細分化されて表示ウィンドウが増えてきます。
　種々の項目を表示させると次のような表示になることもあります。

表示項目を多く出した画面例



（２）基本操作

解析操作を行うにあたって、基本的な操作として次の４つの方法があります。

１　メニューから項目を選択して実施する
２　ツールバーのアイコンをクリックする
３　操作したいデータのウィンドウ内でマウスの右クリックしてポップアップメニューを表示させて選択する
４　メソッドエクスプローラからメソッドエディタを表示させ実行させる。

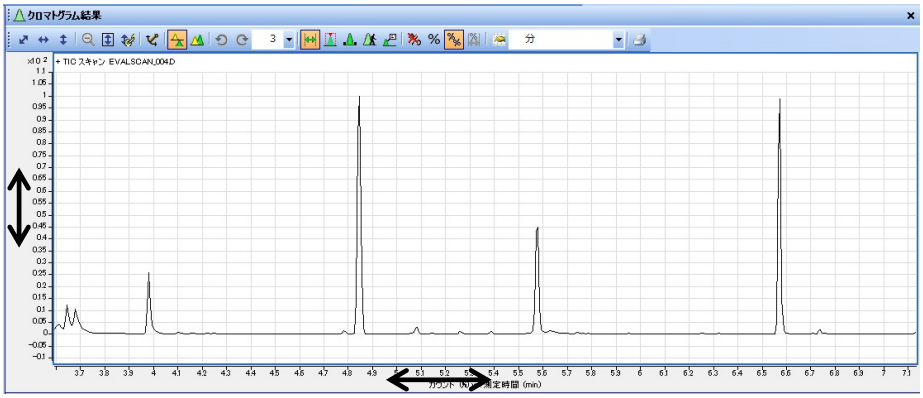
　入力した値をメソッドに保存するためには４番のメソッドエディタからの入力が必要です。既存の設定値を使用する場合や、メソッドへの保存の必要がなければ、２番、３番、の操作が一番容易です。

　本マニュアルでは、４番のメソッドエクスプローラからメソッドエディタを表示させ実行させる操作を主に説明いたします。

（３）マウスの操作方法

クロマトグラムのＸ軸、Ｙ軸はマウスの左右を使ってスケールを拡大・縮小したり、クロマトグラムを進行・後退させたりすることができます。
Ｘ軸もしくはＹ軸のところにカーソルを合わると⇔が表示されます。

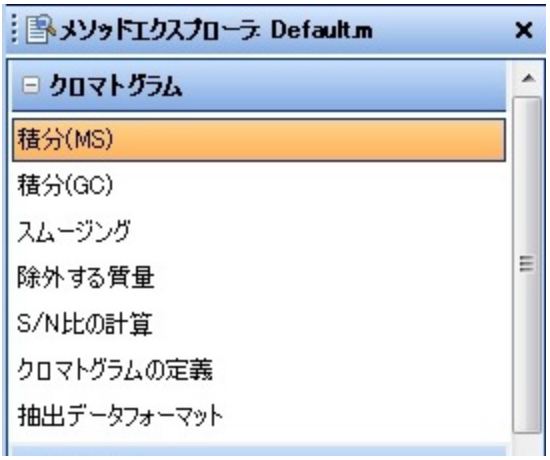
■　左ドラッグ：⇔が表示されている状態でドラッグをするとクロマトグラムを進行・後退することができます。
■　右ドラッグ：⇔が表示されている状態でドラッグをするとクロマトグラムのスケールを変更することができます。



5章－4　積分

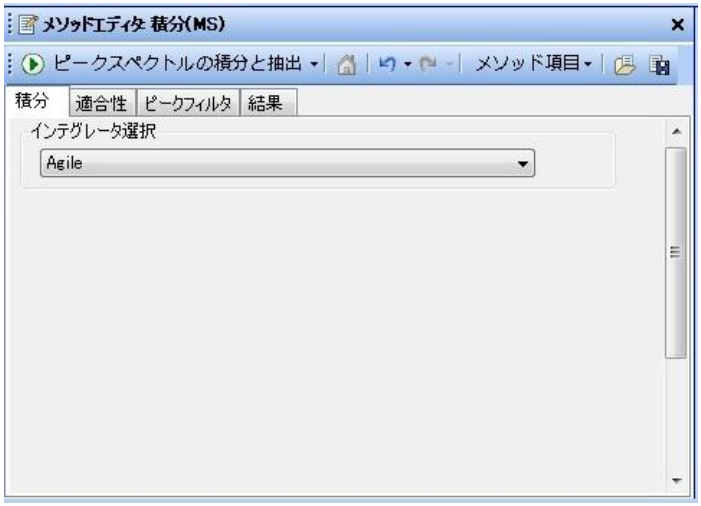
（１）クロマトグラムを積分する

① メソッドエクスプローラの「クロマトグラム」－「積分（MS）」をクリックします。

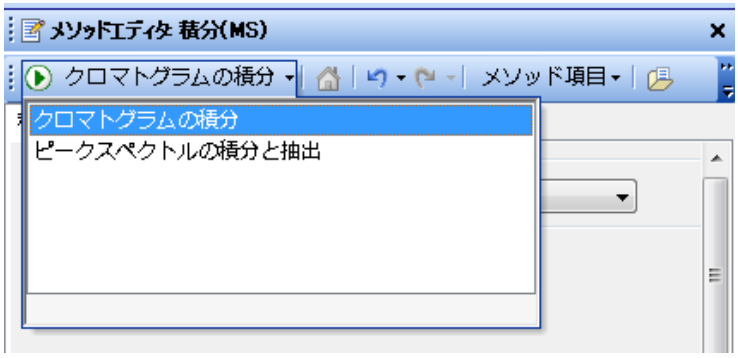


（注意）「積分（GC）」は GC シグナル用の積分条件ですので MS データのクロマトの積分には反映されません。

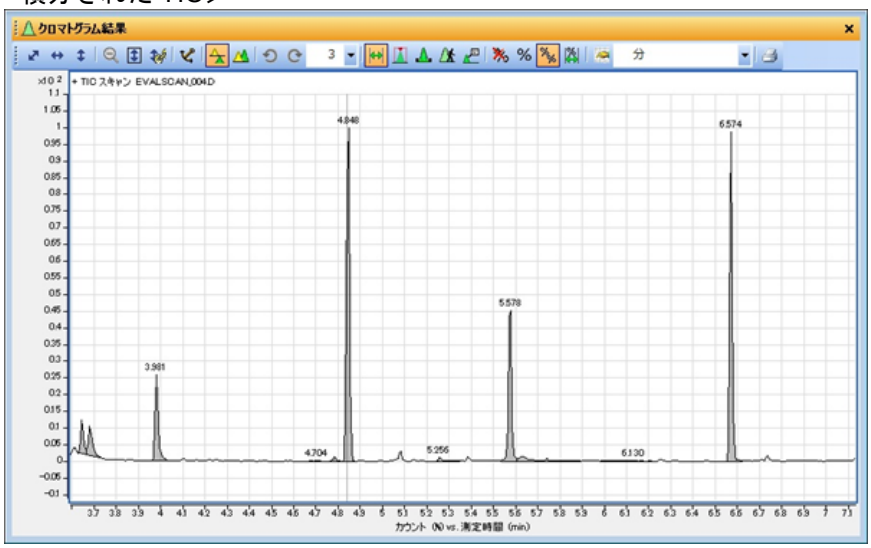
② 「メソッドエディタ　積分（MS）」が開きます。



③　積分するクロマトグラムをクリックしてから「メソッドエディタ積分（MS）」にて クロマトグラムの積分 をクリックします。



<積分された TIC>



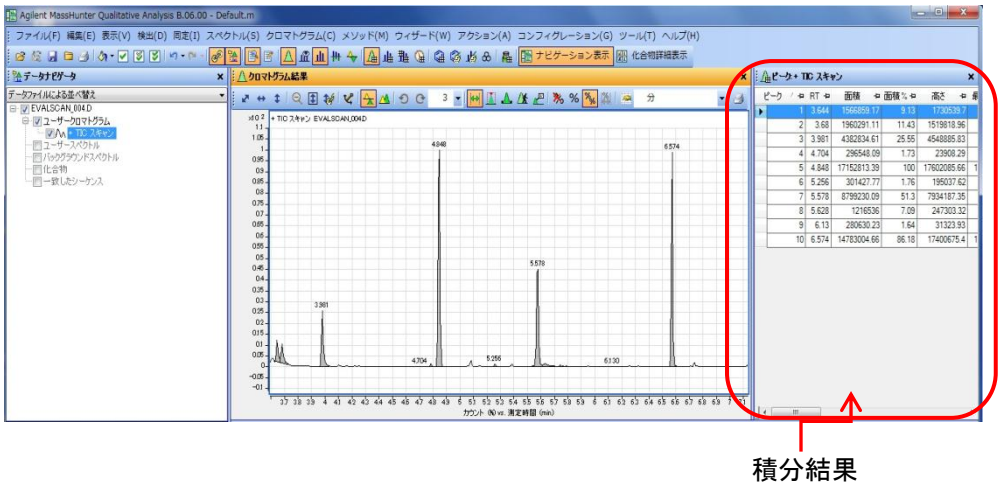
初期設定の積分アルゴリズムはパラメータ設定の無い「Agile」となっています。積分されないピークに関しては、他の積分アルゴリズムに変更するか、マニュアルにて積分を行います。

積分条件に関しては（４）積分条件以降を参照願います。

（２）積分の結果テーブルを確認する

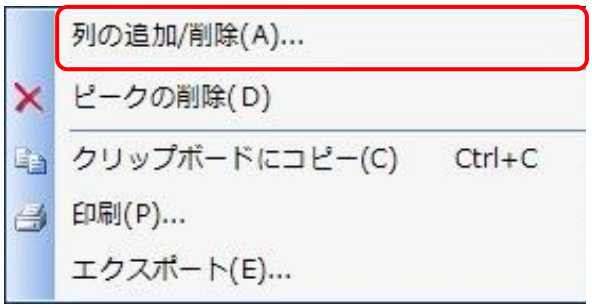
①　ツールバー上の積分ピークリストのアイコン を左クリックします（［表示(V)］メニュー内の［積分ピークリスト(P)］を選択しても、ポップアップメニュー内の［積分ピークリスト(P)］を選択しても同様です）。

② 積分結果が表示されます。

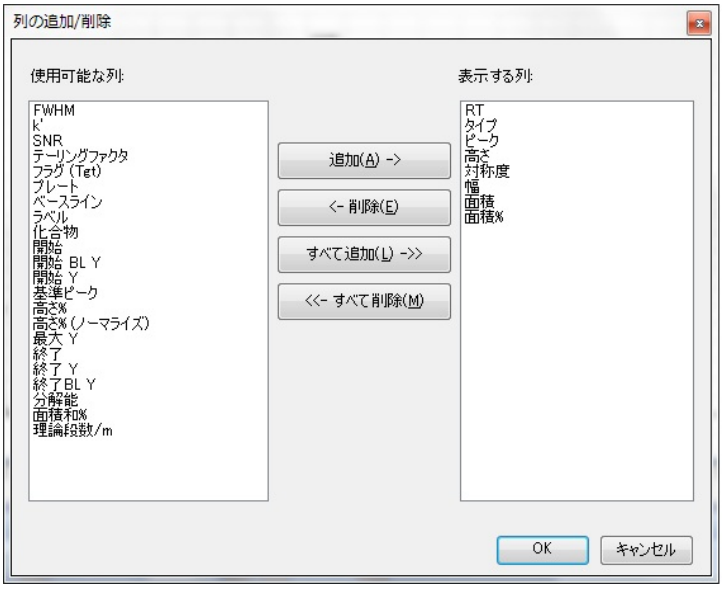


（３） 積分ピークリストの項目編集

① 積分ピークリストのウィンドウ内でマウスの右クリックで、ポップアップメニューを表示させ、［列の追加/削除(A)…］を選択します。



② ［列の追加/削除］ウィンドウが表示されます。



③　「表示する列」に必要な項目を追加(A) ->ボタンで追加し、不要な項目を<- 削除(E)ボタンにて削除し、OKボタンをクリックします。

④　必要項目のみの積分ピークリストが表示されます。

ピーク + TIC スキャン

ピーク	RT	面積	面積 %	高さ	タイプ	幅	対称度
1	3.644	1566859.17	9.13	1730539.7		0.035	1.78
2	3.68	1960291.11	11.43	1519818.96		0.07	1.23
3	3.981	4382834.61	25.55	4548885.83		0.072	1.5
4	4.704	296548.09	1.73	23908.29		0.162	1.38
5	4.848	17152813.39	100	17602085.66		0.057	0.72
6	5.256	301427.77	1.76	195037.62		0.12	1.77
7	5.578	8799230.09	51.3	7934187.35		0.072	0.65
8	5.628	1216536	7.09	247303.32		0.287	10
9	6.13	280630.23	1.64	31323.93		0.244	0.93
10	6.574	14783004.66	86.18	17400675.4		0.079	0.71

⑤　項目の順序を入れ替えたい場合、項目のタイトルをマウスの左ドラッグすると列の狭間で赤い上下の矢印が表示されます。希望の位置までドラッグしてリリースすればその項目の列はその位置へ移動します。

ピーク + TIC スキャン

ピーク	RT	面積	面積 %	高さ	タイプ	幅	対称度
1	3.644	1566859.17	9.13	1730539.7		0.035	1.78
2	3.68	1960291.11	11.43	1519818.96		0.07	1.23
3	3.981	4382834.61	25.55	4548885.83		0.072	1.5
4	4.704	296548.09	1.73	23908.29		0.162	1.38
5	4.848	17152813.39	100	17602085.66		0.057	0.72
6	5.256	301427.77	1.76	195037.62		0.12	1.77
7	5.578	8799230.09	51.3	7934187.35		0.072	0.65
8	5.628	1216536	7.09	247303.32		0.287	10
9	6.13	280630.23	1.64	31323.93		0.244	0.93
10	6.574	14783004.66	86.18	17400675.4		0.079	0.71

項目の順番を整理した積分ピークリスト

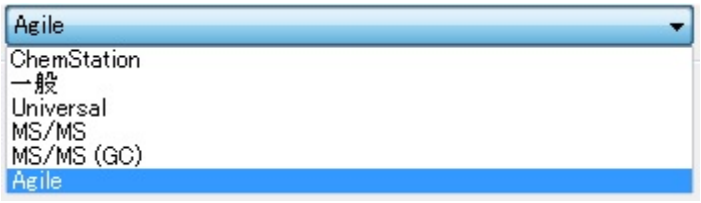
ピーク + TIC スキャン

ピーク	RT	タイプ	幅	対称度	高さ	面積	面積 %	面積和 %
1	3.644		0.035	1.78	1730539.7	1566859.17	9.13	3.09
2	3.68		0.07	1.23	1519818.96	1960291.11	11.43	3.86
3	3.981		0.072	1.5	4548885.83	4382834.61	25.55	8.64
4	4.704		0.162	1.38	23908.29	296548.09	1.73	0.58
5	4.848		0.057	0.72	17602085.66	17152813.39	100	33.81
6	5.256		0.12	1.77	195037.62	301427.77	1.76	0.59
7	5.578		0.072	0.65	7934187.35	8799230.09	51.3	17.34
8	5.628		0.287	10	247303.32	1216536	7.09	2.4
9	6.13		0.244	0.93	31323.93	280630.23	1.64	0.55
10	6.574		0.079	0.71	17400675.4	14783004.66	86.18	29.13

編集されたピークリストは、別のレイアウトファイルを読み込み、復元されるまで基本的に維持されます（編集内容はレイアウトファイルに保存されます）。

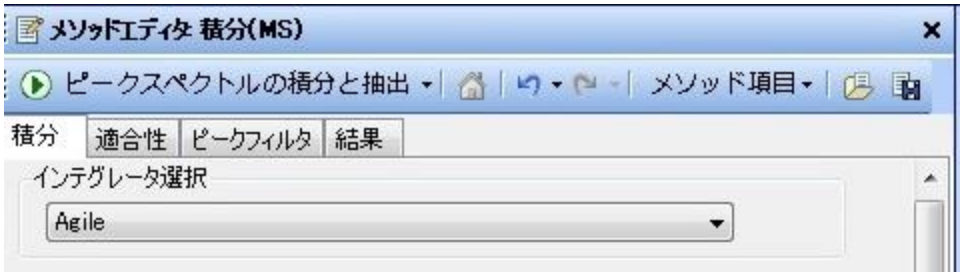
（４）積分条件

MassHunter 定性解析ソフトには、6 種類の積分アルゴリズム（インテグレータソフト）が存在します。



初期設定のインテグレータの「Agile」及び「MS/MS」、「MS/MS(GC)」には積分パラメータはありません。

「ChemiStation」、「一般」、「Universal」の３つにはそれぞれ積分パラメータが存在します。積分パラメータに適切な値を入力することによりほとんどのクロマトは正確な積分が可能です。



・積分（インテグレータ選択）

「ChemStation」は GC のケミステーションのインテグレータと同様です。
「一般」は MS ケミステーションの RTE 積分と同様です。
「Universal」は MS ケミステーションのインテグレータと同様です。

ここでは、「Universal」インテグレータについて説明いたします。

・適合性

システムの適合性の計算を行います（通常使用しません）。

・ピークフィルタ

積分されたピークを面積値、ピーク高さ等でフィルタをかけます。
初期設定はピーク面積値で、相対面積値１%以上のものを表示します。

・結果

前回の結果と新しい結果の認識の設定です。
初期設定は「前のピークスペクトルを消去」で、「最初のピークをハイライト」です（スペクトルの自動抽出を行う場合は「新しい結果」に「すべてのピークをハイライト」を選択する必要があります。）

注意

メソッドエディタ等にて設定を変更すると次のようなアイコンが表示されます。

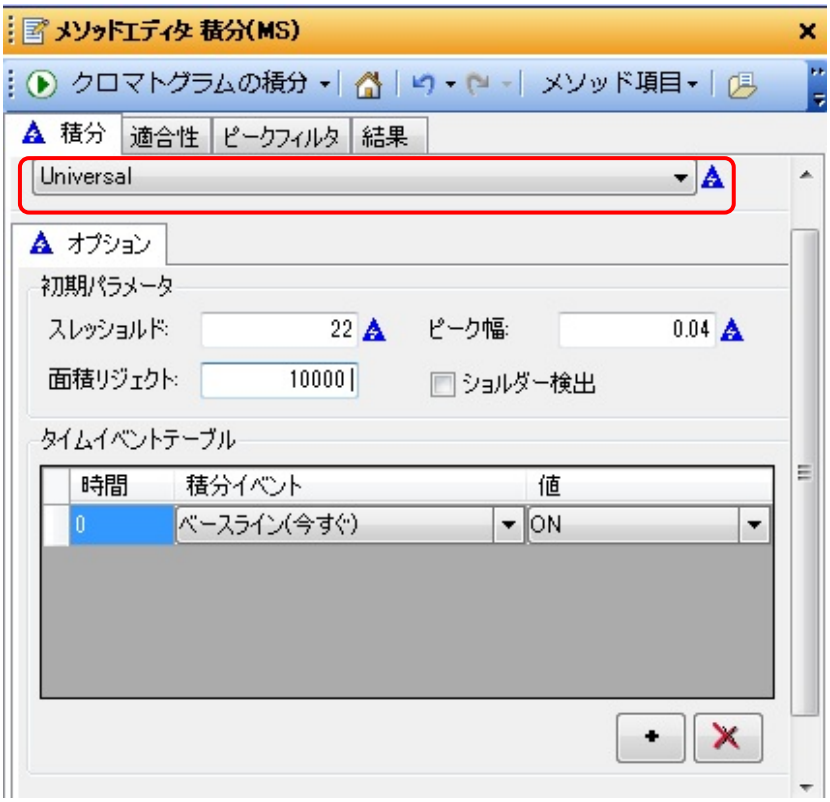
変更のアイコン　：　変更を加えると変更された項目の横に表示されます。
メソッドを保存すると表示は無くなります。

エラーのアイコン：パラメータが入力されていない、もしくは無効な値が入力されている場合表示されます。有効な数値が入力されると表示は無くなります。

警告のアイコン　：フィールドに無効な値を入力すると表示されます。
フィールドは最後に有効だった値に戻されます。

（５）「Universal」インテグレータ選択での積分パラメータ設定

① 「積分(MS)」メソッドエディタの「積分」タブのインテグレータ選択に「Universal」を選択します。



② 初期パラメータに次の値を入力します。

スレッショルド　：　22
ピーク幅　：　0.04
面積リジェクト　：　10000
ショルダー検出　：　チェックしない

・スレッショルド
　積分の感度（しきい値）を決定します。数値を 1 増加する毎に積分の感度は半減します。スレッショルド値が高い程、積分されるピーク数は減少します。

・ピーク幅
　有効なピーク半値幅を分単位で設定します。ピーク検出のフィルタリングとして機能します。ブロードなピークにはピーク幅の設定を大きく、シャープなピークにはピーク幅の設定を小さくすることで、ノイズとピークを的確に区別できます。

・面積リジェクト
　目的の最小ピークの初期面積を設定します。設定値未満の面積のピークを除外します。

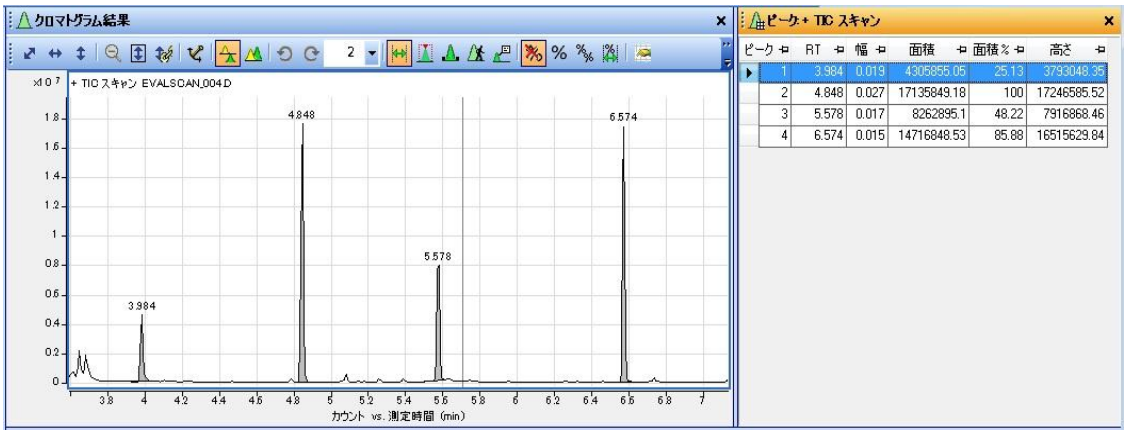
・ショルダー検出
　ピーク肩の検出の ON/OFF

③　積分する予定のクロマトグラムをクリックします。

④　クリックしてから

ボタンをクリックして積分を実施します。

⑤　設定した積分条件で積分され、「Agile」で積分されたピーク数が減少することを確認します。



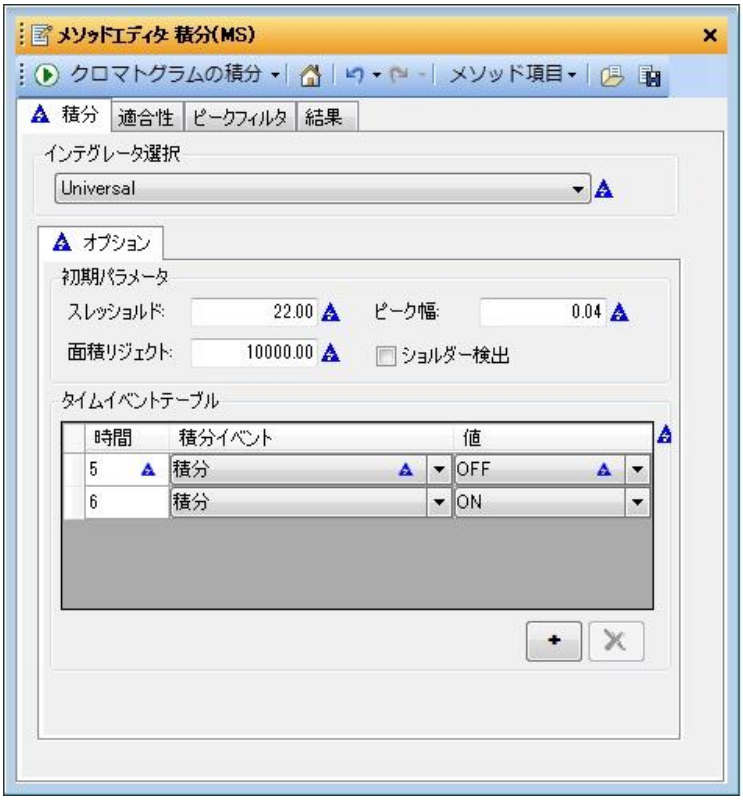
（6）積分条件にタイムイベントを追加する

下記では、積分を指定時間（5 分から 6 分のあいだ）オフにする条件をタイムテーブルに追加する方法について説明しています。

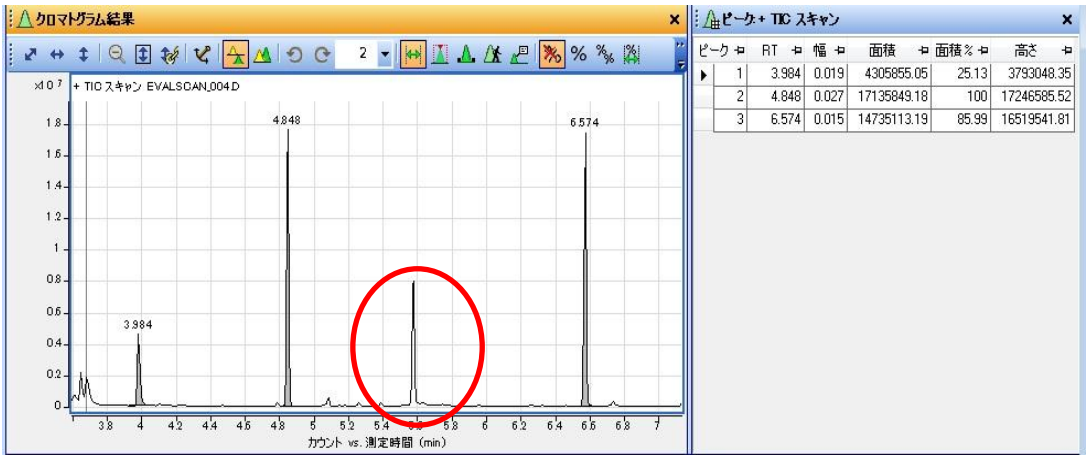
① 積分イベントから［積分］を選択して、時間に 5（分）、値に「OFF」を入力します。

② ボタンをクリックし、行を増やし、積分イベントから［積分］を選択して、時間に 6（分）、値に「ON」を入力します。

（行を削除するにはボタンを使用します。）



③ クロマトグラムの積分 ボタンをクリックして追加したイベントをクロマトグラムに適用します。表示されたクロマトグラムと積分ピークリストを見て条件が適切であることを確認します。



この例では５分から６分の間、積分がオフに設定されているため、３本目のピークは積分されず、ベースラインとリテンションタイムが表示されていません。

（７）積分条件の保存

積分条件は、メソッドファイルに保存されます。

メソッドエディタウィンドウの アイコンは、現在呼び込まれているメソッド（Default.m）上に上書き保存ししてしまいますので、行わないでください。

メソッド名を変えて保存する場合は、メニューの［メソッド(M)］－［名前を付けて保存(A)］を選択して名前を付けてください。

注意

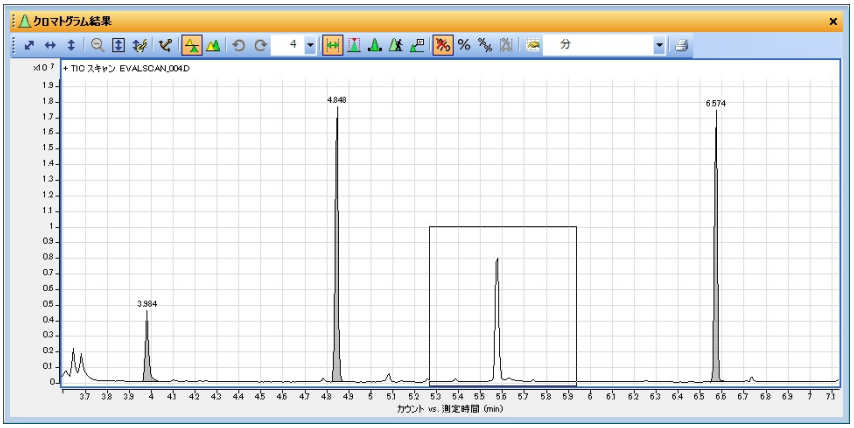
必要に応じてメソッドエディタ積分(MS)のタイムテーブルの積分イベントを元に戻して再度メソッドを保存し直してください。
（この説明書の後半部分を実行するために５分から６分の積分オフ条件をキャンセルしておきます。）

（８）マニュアル積分

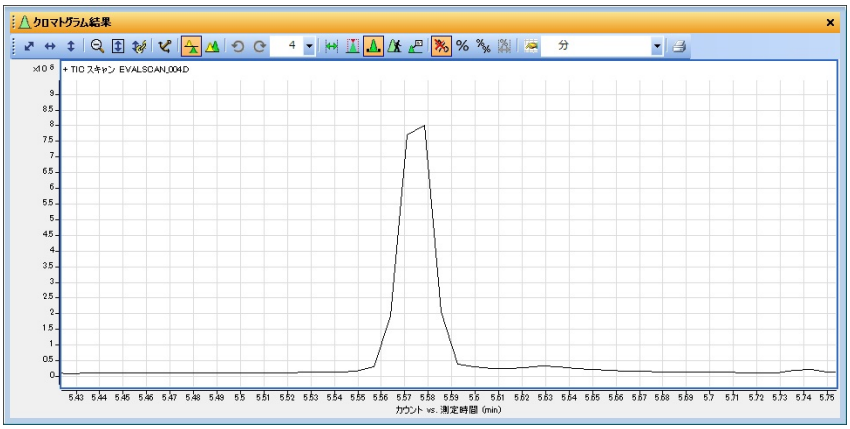
1 本だけピークに R.T の刻印が欲しいだけの時や、ピークが小さすぎてうまく積分ができないような時にマニュアルにて積分ができます。

① ピークを拡大（ズームイン）します。

1) 拡大したい部分をマウスの右ボタンでドラッグし四角で囲みます。

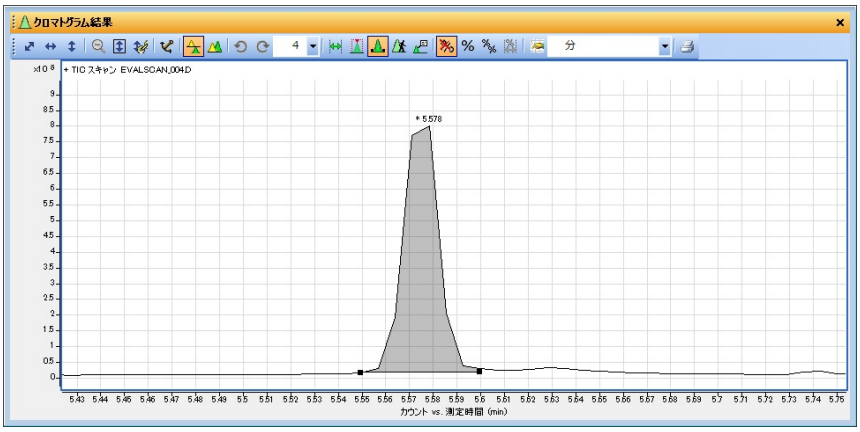


2) 四角で囲まれた部分が拡大表示されます。

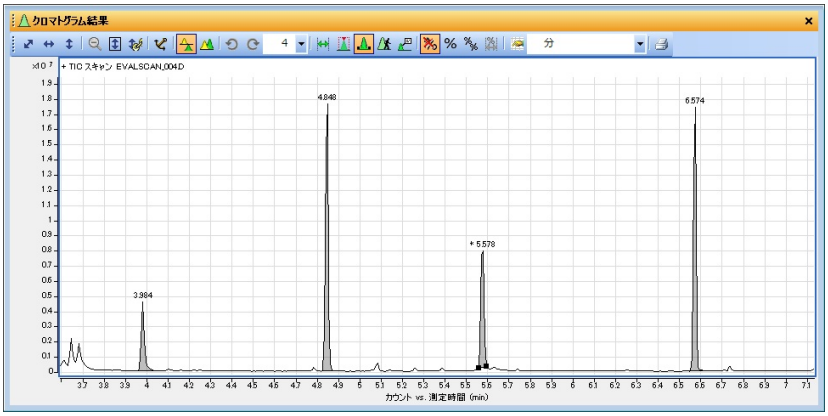


② アイコンをクリックすると、カーソルがマニュアル積分のアイコンへ変化します。

③　積分開始点と終了点を左ドラッグするとマニュアル積分されます。



④　拡大されたクロマトを元に戻すには、アイコンをクリックします。

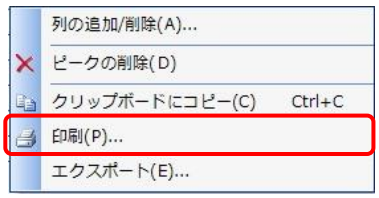


5章－5　パーセントレポート

（１）積分ピークリストのみの印刷

積分ピークリストの項目には面積%の項目もありますので、面積%を調べるだけであれば積分ピークリストのみを印刷すればよいことになります。

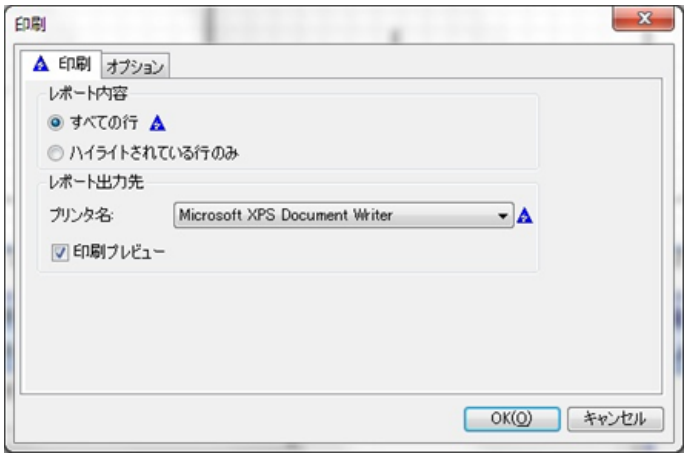
積分ピークリストのウィンドウ内にてマウスを右クリックし、ポップアップメニューを表示させます。



［印刷(P)…］を選択します。

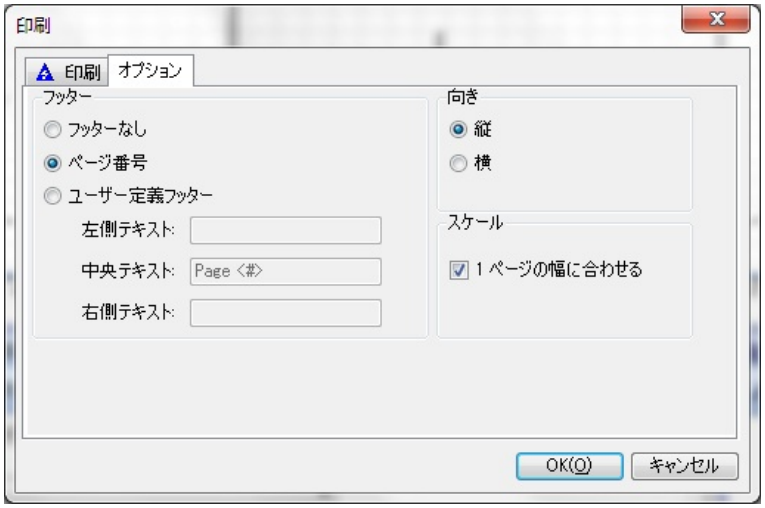
「印刷」ウィンドウが表示されますので、印刷内容を設定します。

すべての行　　：積分ピークリストのすべての行を印刷します。
ハイライトされている行のみ：選択した行のみ印刷します。



印刷プレビュー：印刷前に印刷内容が表示されます。

「オプション」タブをクリックします。



フッターやページ番号、印刷の向き、スケール等の設定をします。
OK ボタンをクリックすると印刷されます。

ピーク: + TIC スキャン (EVALSCAN_004.D)

ピーク	RT	幅	高さ	面積	面積%	面積和%
1	3.984	0.019	3793048.3	4305855.0	25.13	11.9
2	4.848	0.027	17246585.	17135849.	100	47.37
3	6.574	0.015	16519541.	14735113.	85.99	40.73

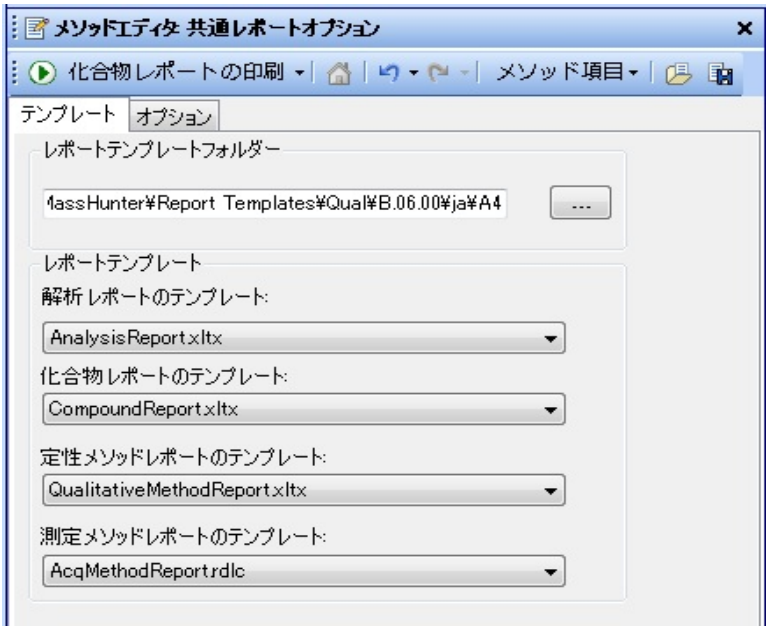
ページ1

（２）解析レポートを印刷する。

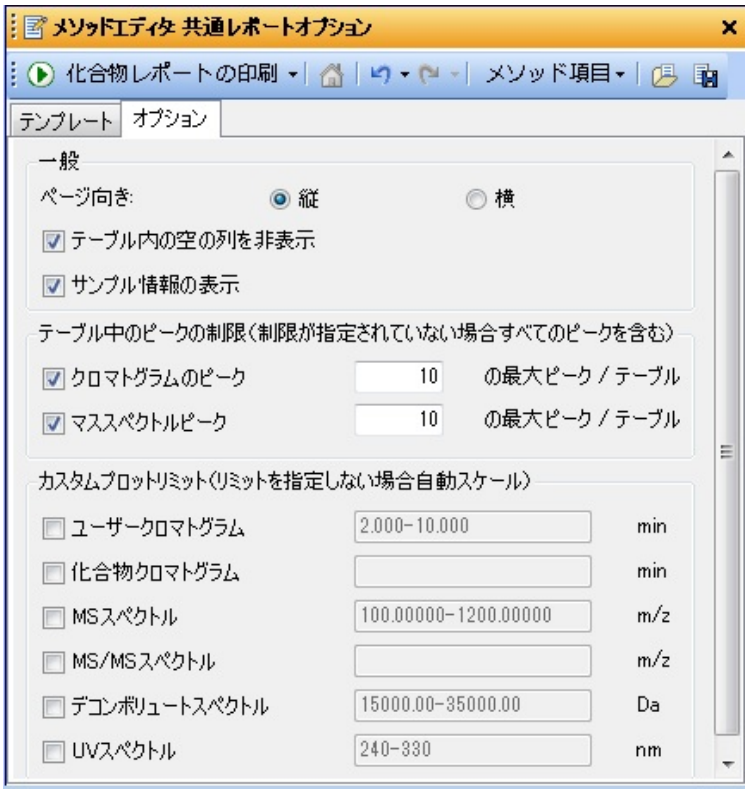
①［メソッドエクスプローラ］内の［レポート］をマウスでクリックして開きます。

②［共通レポートオプション］をクリックします。

＜テンプレート　タブ＞

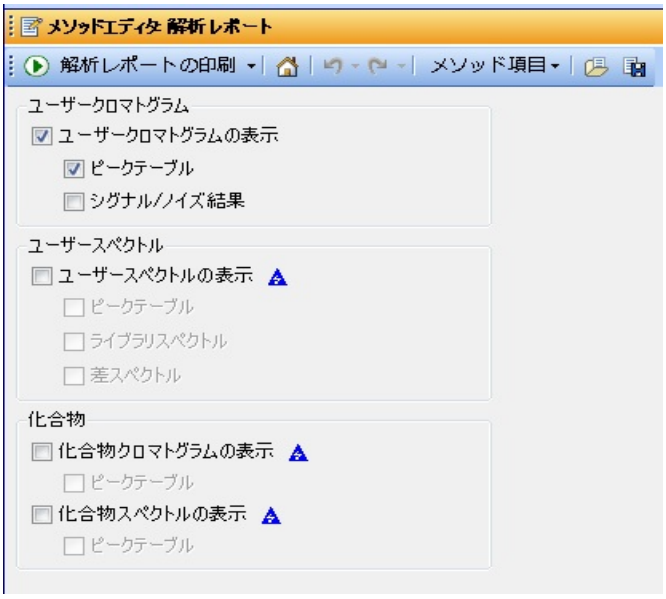


<オプション　タブ>

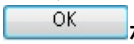


使用するテンプレートを選択し（通常そのまま使用します）、「オプション」タブ内の印刷の向き、空欄の非表示、サンプル情報、クロマトおよびマススペクトルのテーブル上のピーク数のリミット設定、グラフィックのクロマト、マススペクトルの X 軸範囲の設定（必要な場合）します。

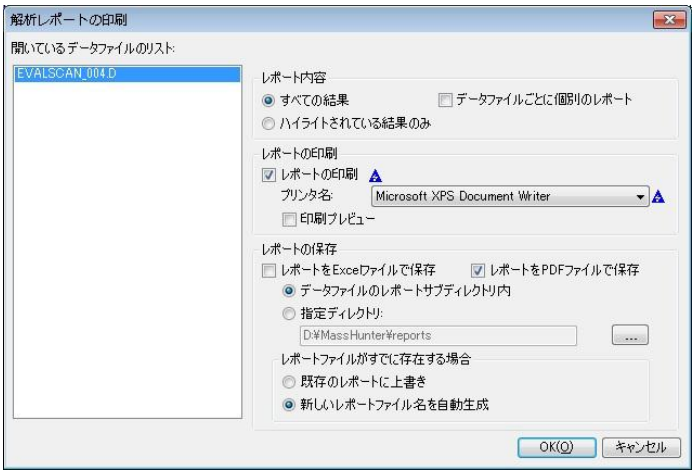
③［解析レポート］をクリックします。



④　印刷したい項目にチェックを付けて

ボタンをクリックします。
「解析レポートの印刷」ダイアグラムが表示されますので、印刷したいファイル、レポート内容、プリンター、レポートの保存、について設定してから 

ボタンをクリックし、印刷します。



＜解析レポートの例＞

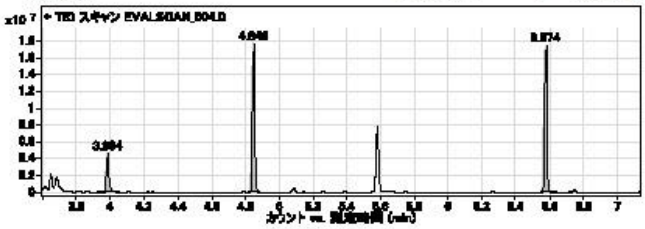
定性分析レポート

データファイル名	EVALSCAN_004.D	サンプル名	GCMSデモ用混合サンプルC
サンプルタイプ		位置	1
機器名	1-7890-5977	ユーザ名	分析者のお名前
測定メソッド	evalscan.m	測定時間	2012/12/27 05:27:35 PM
IRM キャリブレーションステータス	Not Applicable	DAメソッド	Default.m
コメント	スキャン取り込みの練習		

デバイスタイプ	Quadrupole	希釈倍率	1
サンプル ID		サンプル名	GCMSデモ用混合サンプルC
サンプルの位置	1	サンプル タイプ	
データファイル	D:□MassHunter□GCMS□□DATA□EVALSCAN_004.D	メソッド	D:□MassHunter□GCMS□□methods□evalscan.m
DA メソッドのオーバーライド		レベル名	
コメント	スキャン取り込みの練習	バランスオーバーライド	
バーコード		平衡化時間 (min)	0.5
プレートコード		プレート位置	
ラックコード		ラック位置	
Expected Barcode		Sample Amount	
Dual Inj Vol	1	TuneName	atune.u
TunePath	D:□MassHunter□GCMS□□5977□	MSFirmwareVersion	6.00.13
オペレータ名	分析者のお名前	測定時間	41270.72749
サンプルロック測定モード	FALSE	測定完了フラグ	TRUE
機器名	1-7890-5977		

ユーザークロマトグラム

フラグメンタ電圧　　コリジョンエネルギー　0　　イオン化モード　指定なし



積分ピークリスト

ピーク	開始	RT	終了	高さ	面積	面積%
1	3.921	3.984	4.052	3793048.35	4305855.05	25.13
2	4.818	4.848	4.885	17246585.52	17135849.18	100
3	6.545	6.574	6.64	16519541.81	14735113.19	85.99

—レポートの終了—

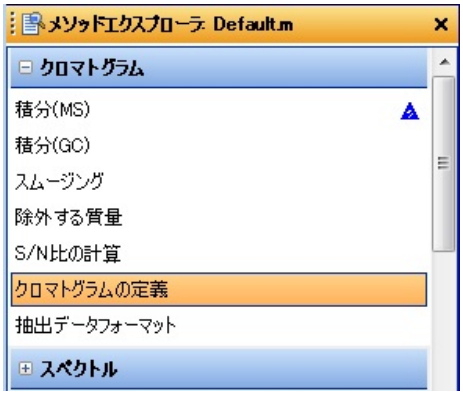
Agilent Technologies　　Page 1 of 1　　Printed at: 03:26 PM on: 2013/6/2

5章－6　クロマトグラム

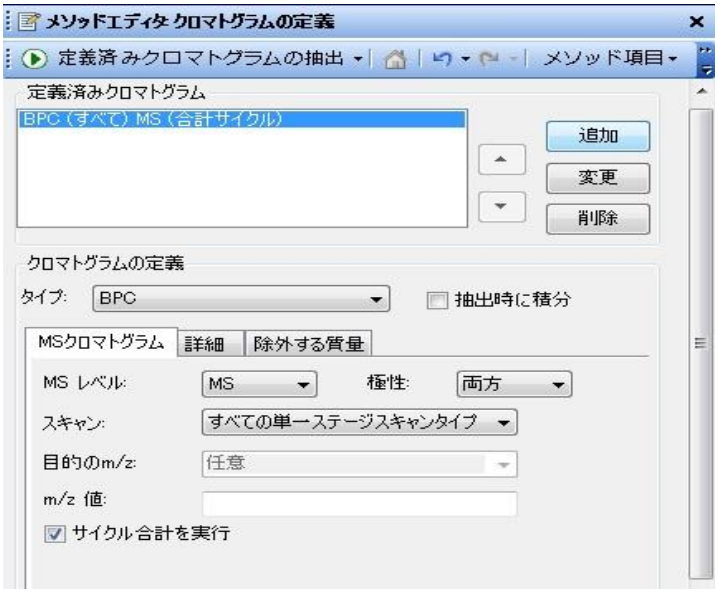
データから全てのイオン強度を合計したクロマトをトータルイオンクロマト（TIC）と呼び、特定質量または質量範囲を指定して取り出したクロマトを EIC（Extracted Ion Chromatogram）と呼びます。イオンクロマトグラム、またはマスクロマトグラムと呼ばれる場合もあります。

（1）　イオンクロマトグラムの抽出

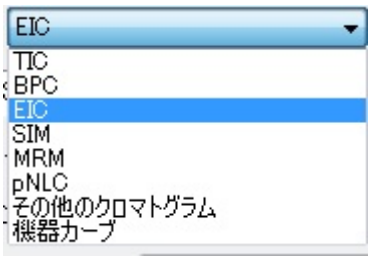
① メソッドエクスプローラの「クロマトグラム」－「クロマトグラムの定義」をクリックします。



② ［メソッドエディタ：クロマトグラムの定義］ダイアログボックスが表示されます。



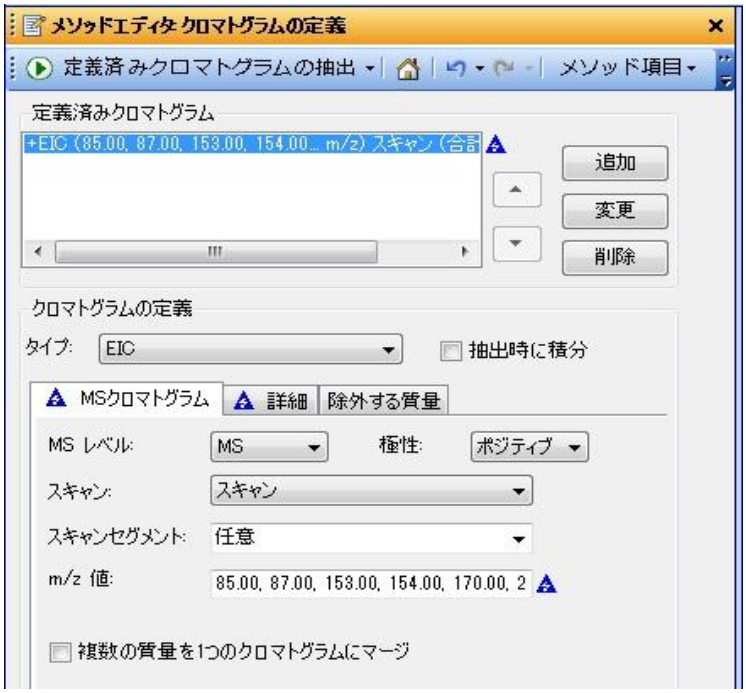
③　抽出したいクロマトグラムのタイプに「EIC」を選択します。
タイプには次の８つが表示されますが、GCMS の SCAN／SIM データでは、「TIC」、「BPC］、「EIC」、「SIM」の４つが選択可能です（「SIM」は SIM データのみ選択可能です）。



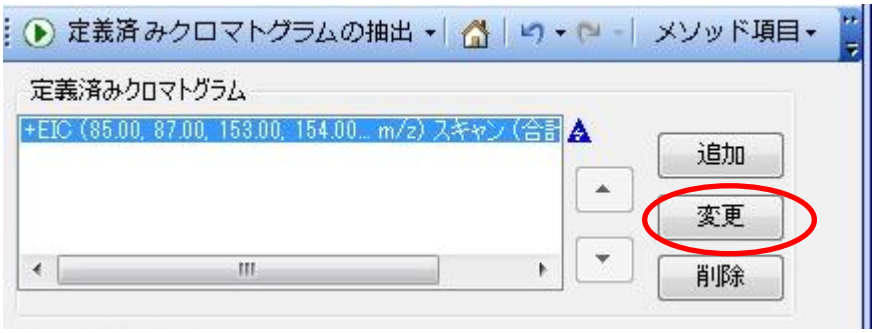
④　「MS クロマトグラム」タブに次の内容を入力します。

MS レベル	: MS
極性	: ポジティブ
スキャン	: スキャン
m/z 値	: 85,87,153,154,170,270

「*m/z* 値」の入力では、各イオンの区切りは「,」（カンマ）を使用します。入力できるイオン数は、欄の入力限界までです（20 以上可能ですが、欄の表示限界を超えてしまいます）。「85-87」と「-」にて抽出するイオン範囲を指定することも可能です。



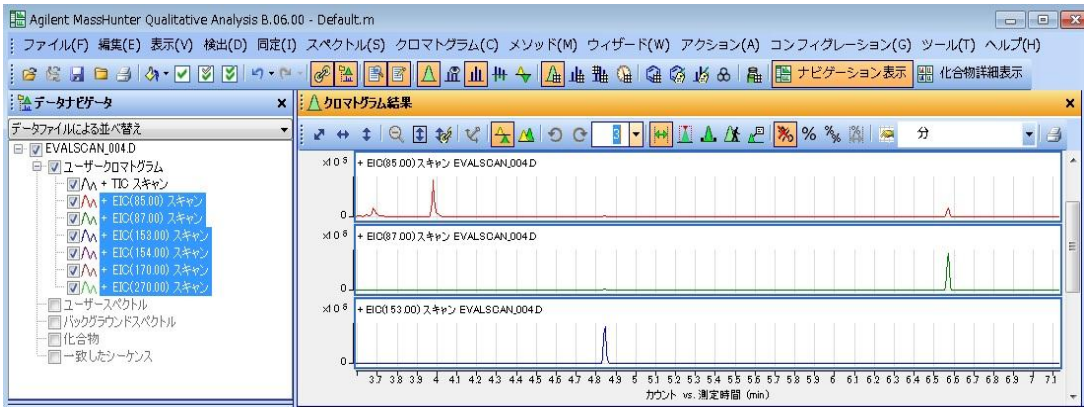
⑤　設定が完了したら、「定義済みクロマトグラム」欄の「BPS（すべて）MS（合計サイクル」をクリックして反転させ、[変更]ボタンをクリックして登録します。



複数のクロマトグラムを「定義済みクロマトグラム」に登録して、実行させることも可能です。その場合は[追加]と[削除]ボタンを使い整理します。

⑥　

ボタンをクリックして EIC を抽出します。



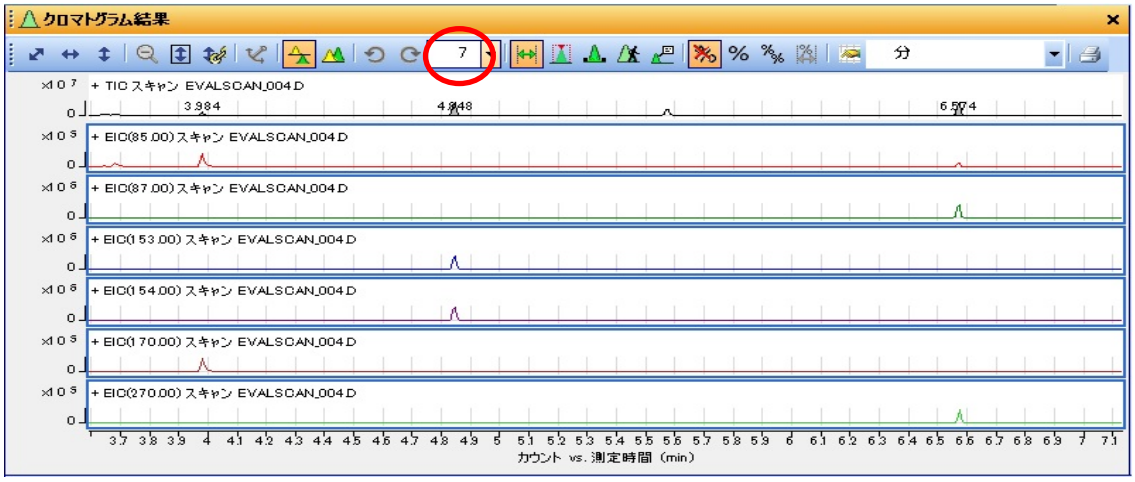
「データナビゲータ」のユーザークロマトの下に抽出された各 EIC データが表示され、「クロマトグラム結果」ウィンドウに入力した数の EIC が表示されます。

次ページからはクロマトグラムの表示の変更の練習となります。不要な場合は、「5 章-7 スペクトルの取出し」へ移動してください。

（２）クロマトグラムの表示数変更

全てのクロマトを表示したい場合は、「クロマトグラムの結果」ウィンドウ内のツールバー上の「リストペインの最大数(M)」を７に変更します（最大 10 まで）。

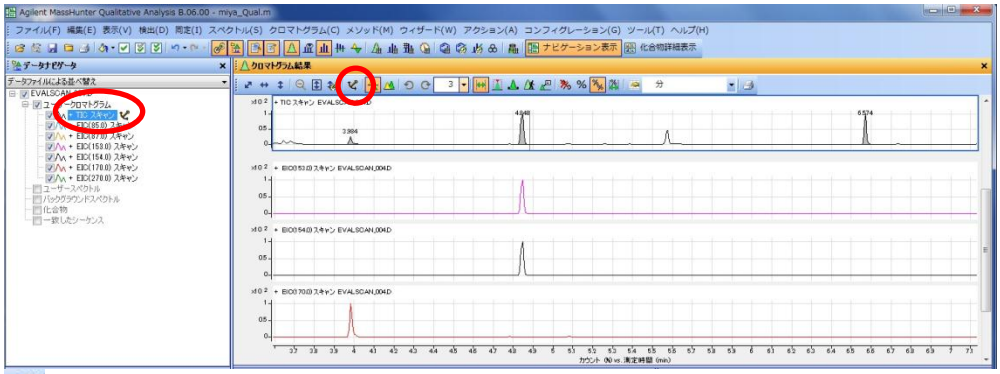
リストペインの最大数



（３）アンカーの設定

①　「リストペインの最大数(M)」を３に復元します。

②　「データナビゲータ」のユーザークロマトの TIC をクリックしてハイライトにし、ツールバーの アイコンをク リックします。



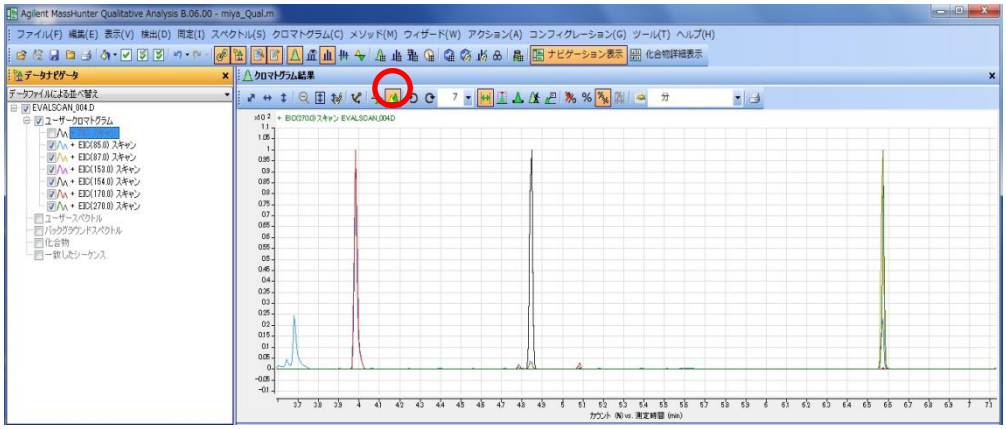
のマークが「データナビゲータ」の TIC 上に表示され、「クロマトグラム結果」ウィンドウの TIC が最上段に表示され、EIC クロマトから分離されます。スクロールを行っても TIC のクロマトは固定されて常に表示されるようになります。
TIC を指標にしたい時等に有効です。

解除するには、メニューの［クロマトグラム(C)］－［固定を解除(N)］をクリックします。

（４）クロマトグラムの重ね描き

① リストペイン数を７に戻し、「データナビゲータ」の TIC のチェックを消して
イオンクロマトの表示のみにします。

② アイコンをクリックします。



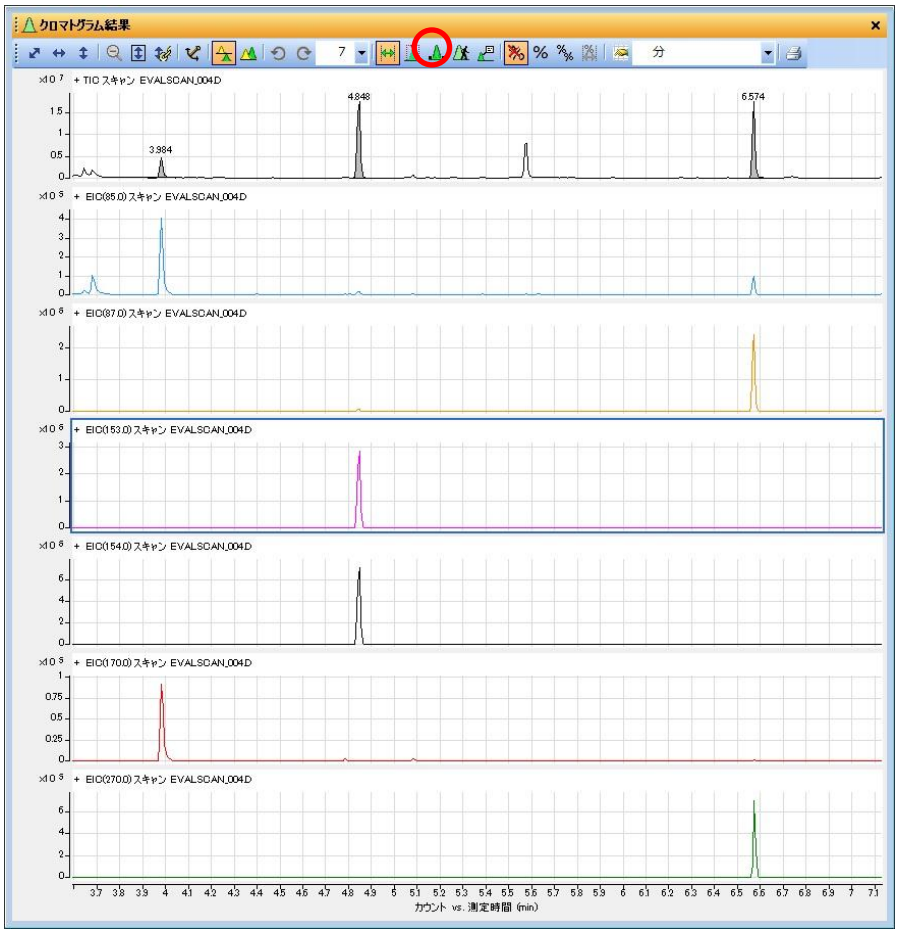
重ね描きモードとなり、EIC が重ね描きで表示されます。

③ アイコンをクリックすると分割された表示に戻ります。

（５）スケール変更

①　Ｙ軸オートスケール

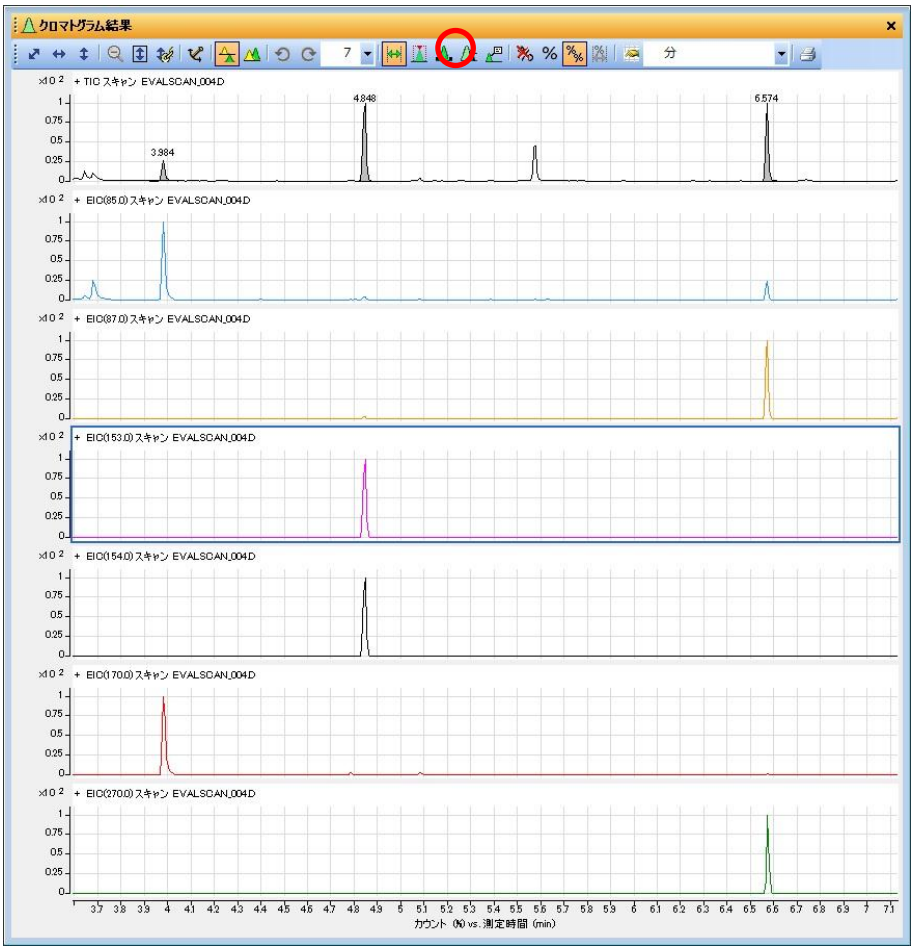
「データナビゲータ」の TIC のチェックボックスをクリックし、チェックを入れて TIC を表示させ、ツールバーの アイコンをクリックします。



Ｙ軸のスケールの最大値が、各クロマトのピークの最大値へと変わります。

② Ｙ軸ノーマライズ（パーセント表示）

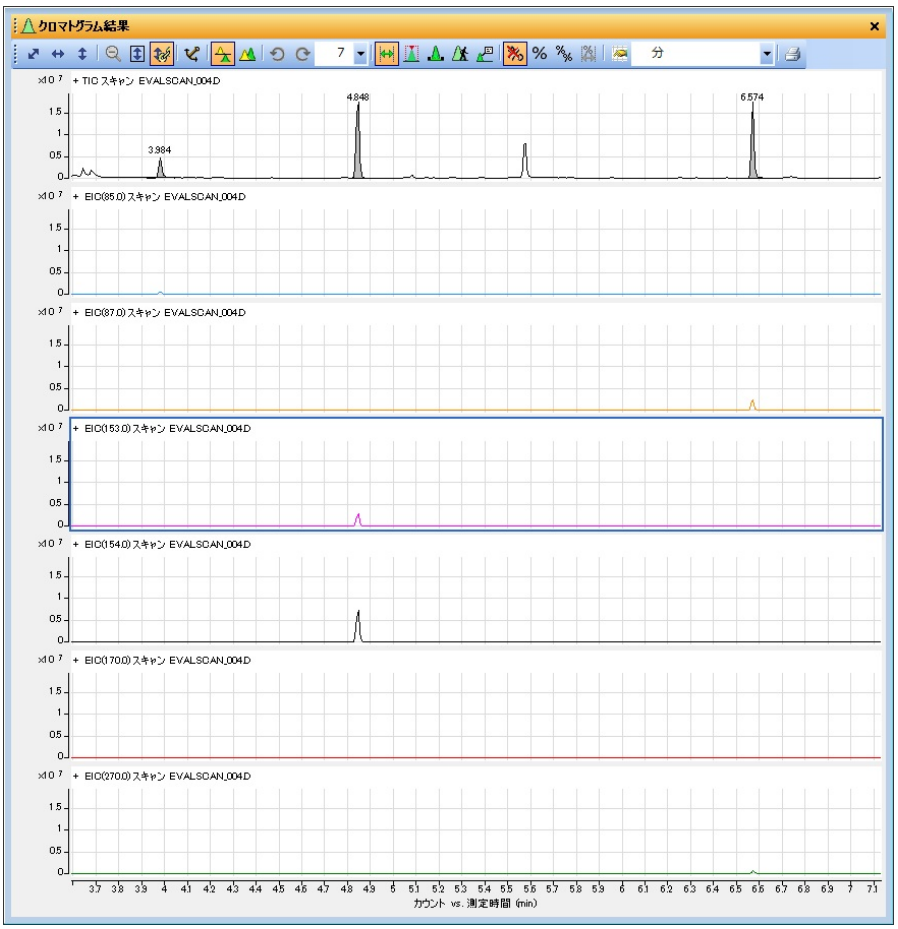
アイコンをクリックします。



Ｙ軸のスケールが各クロマトの最大値でノーマライズされ、100%表示となります。
マウスカーソルをそれぞれのクロマトの Ｙ 軸に合わせると、そのクロマトの最大値と最小値が表示されます。

③　Ｙ軸リンク

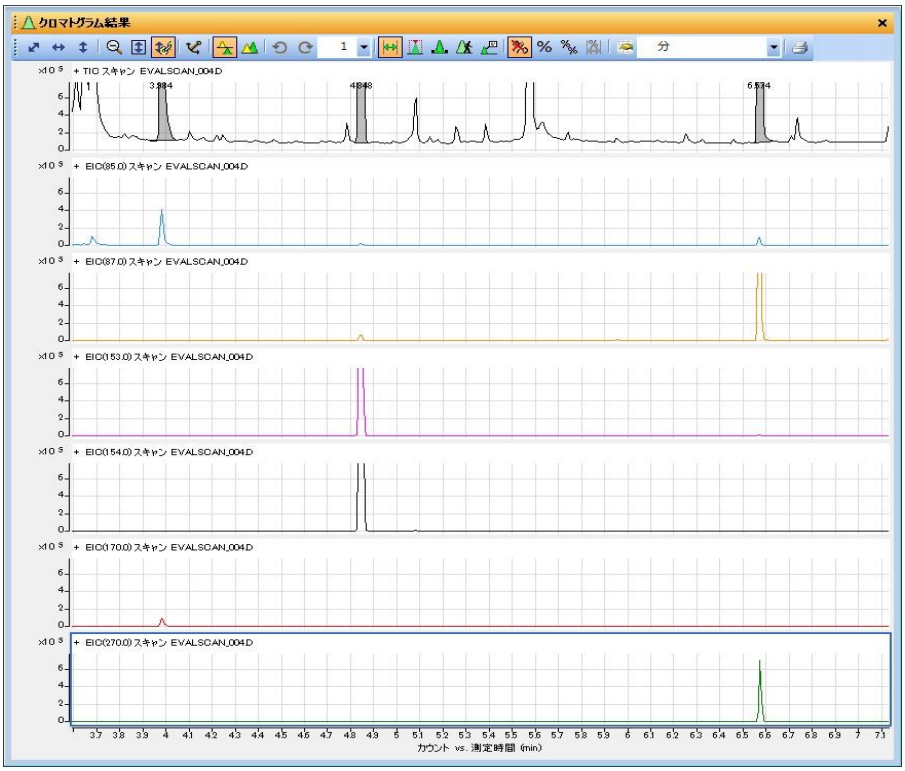
アイコンをクリックして元に復元し、アイコンをクリックします。
アイコンをクリックしてＸ軸Ｙ軸のスケールをオートに復元します。



全てのクロマトのＹ軸が同じスケールでリンクし、全てのクロマトの中で一番大きなピークの高さにＹ軸が揃えられます。

④　マウスアクションでのスケール変更

マウスカーソル を Ｙ軸に移動させるとカーソルの形状が に変化します。さらに上方向に右ドラッグするとカーソルは に変化し、Ｙ軸スケールは拡大し、全てのクロマトはＹ軸方向のみ拡大されます。



アイコンをクリックするとＹ軸は拡大前のスケールに戻ります。

マウスカーソルをＸ軸に移動すると、やはりカーソルの形状はＹ軸の時と同様に変化します。同様に右方向に右ドラッグすると拡大に、左方向に右ドラッグすると縮小されます。また左ドラッグするとドラッグした方向にスケールがシフトします。

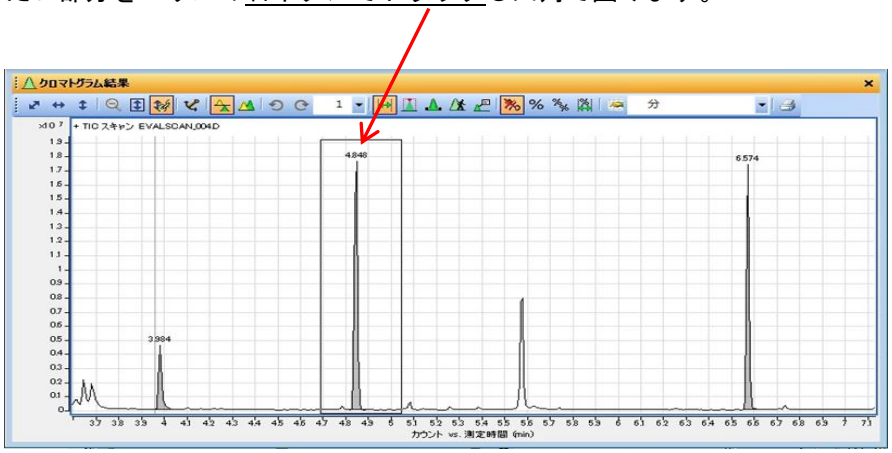
変更されたＸ軸Ｙ軸のスケールをもとに復元するには、アイコンをクリックします。

リンクさせたスケールを元に戻すには、アイコンをクリックしてリンクを解除してから再度アイコンをクリックしてスケールを復元します。

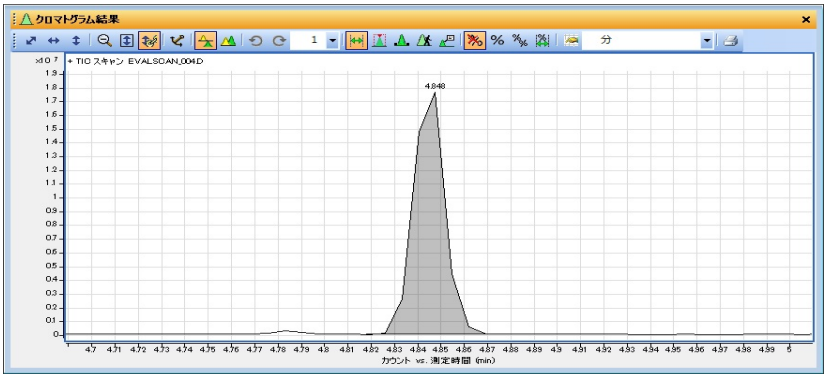
5章－7　スペクトルの取り出し

（１）ピークを拡大（ズームイン）します。

①　拡大したい部分をマウスの右ボタンでドラッグし四角で囲みます。

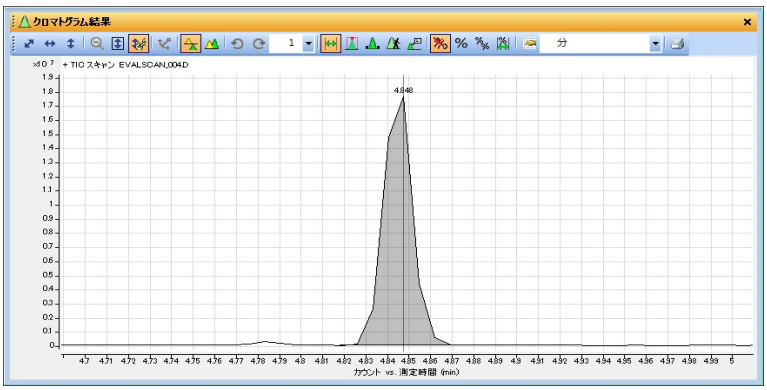


②　四角で囲まれた部分が拡大表示されます。

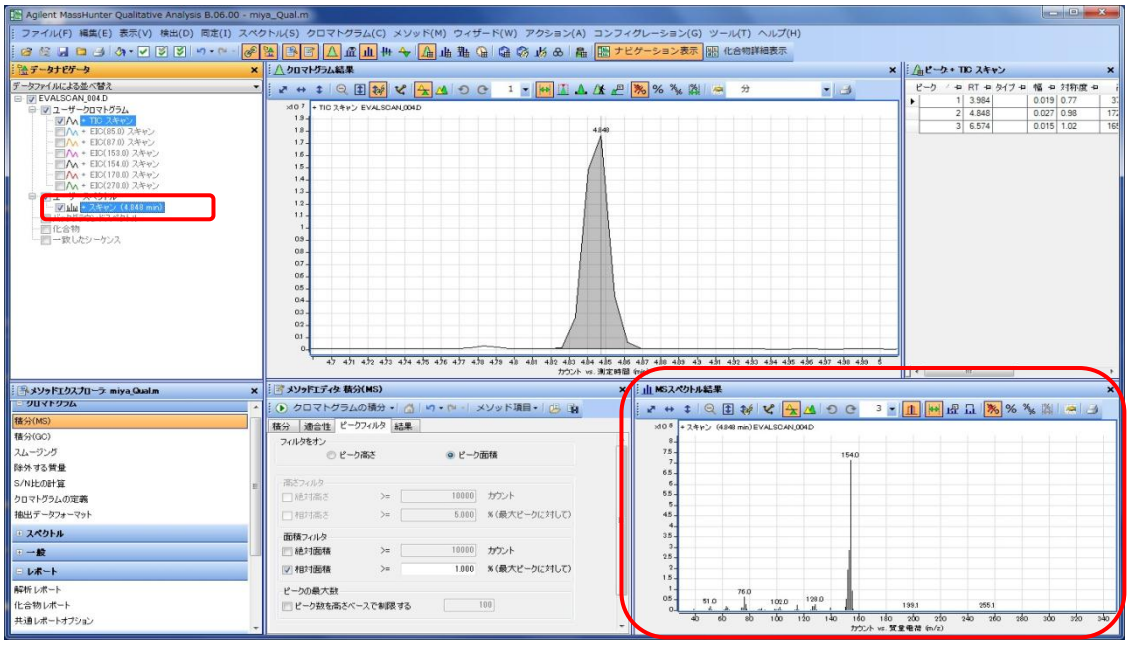


（２）スペクトルの表示（取り出し）

①　ピーク頂点を左クリックすると垂直のラインが表示されます。ピーク頂点に合っているようであれば、マウスを左ダブルクリックします。



② 「データナビゲータ」の「ユーザースペクトル」の下にスペクトルデータが表示され、画面右下のウィンドウにスペクトルが表示されます。



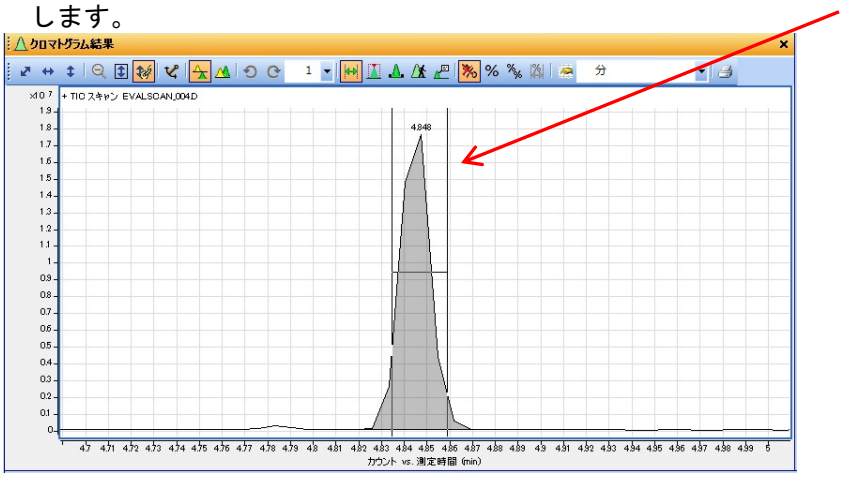
（３）平均スペクトルの選択

特定の時間ではなく、平均のスペクトルを取り出すには、次の２つの方法があります。

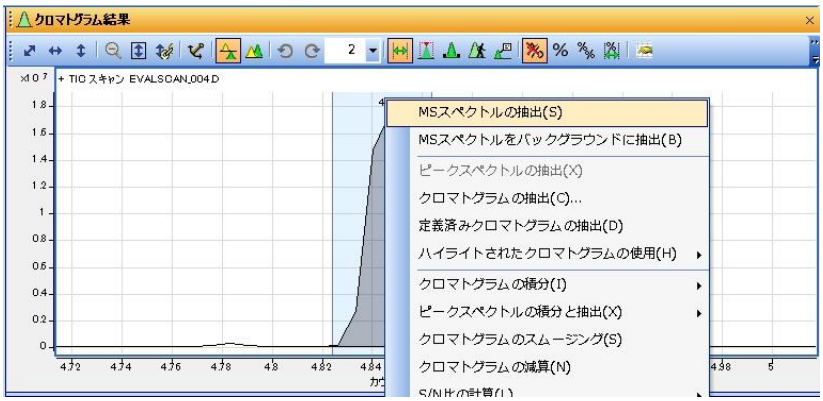
① 範囲選択で指定したスペクトルを取り出す。
② 積分したピークの積分開始点と終了点の範囲のスペクトルを取り出す。

① 範囲選択からの取出し

1) アイコンをクリックし、範囲選択を選びます。カーソルの形状がクロマト結果のウィンドウ内で変わります。クロマトピーク上で時間範囲を<u>左ドラッグ</u>します。



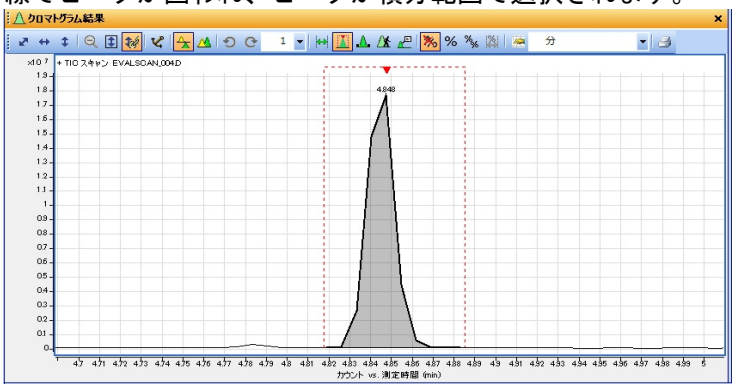
2)　右クリックしてポップアップメニューを表示させます。



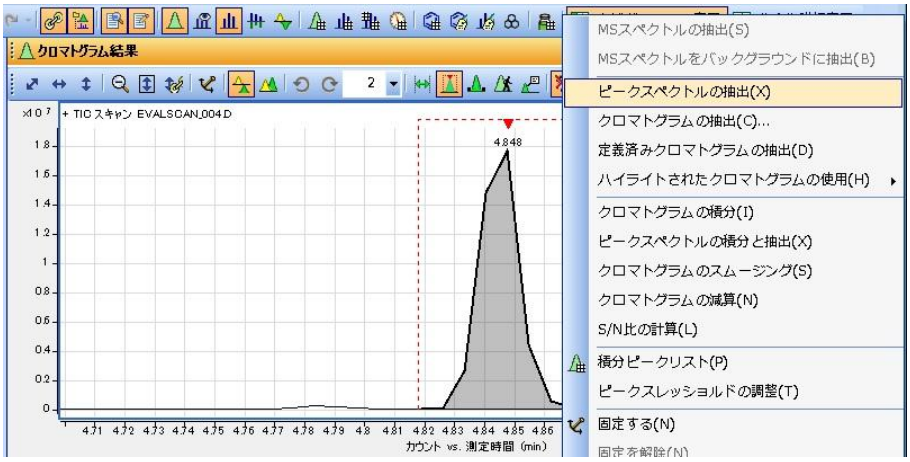
3)　［MS スペクトルの抽出(S)］をクリックします。
　　選択した範囲の平均のマススペクトルが表示されます。

②　積分したピークからの取出し

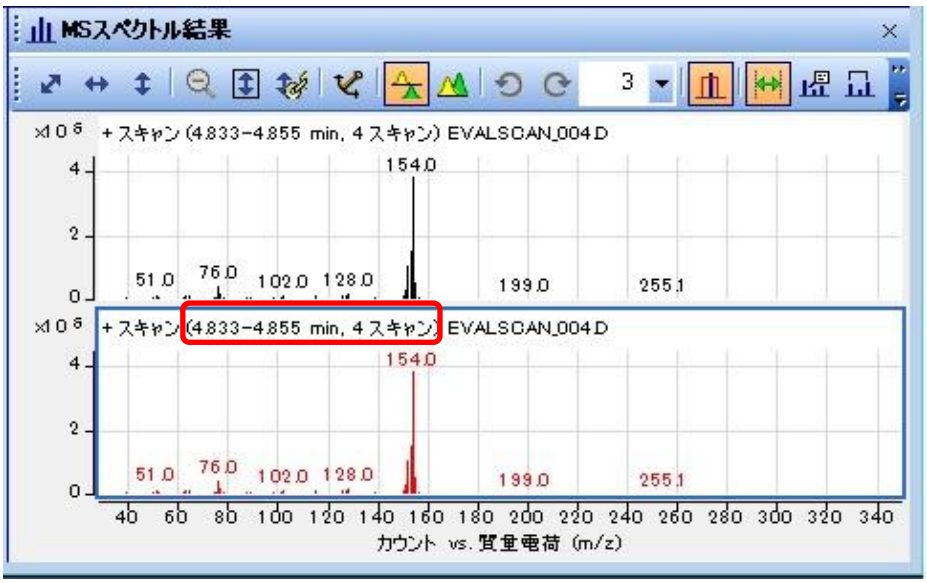
1)　アイコンをクリックし、ピーク選択に変更します。カーソル形状がクロマト結果のウィンドウ内で変わります。積分されたピークを左クリックすると赤い点線でピークが囲われ、ピークが積分範囲で選択されます。



2)　右クリックでポップアップメニューを表示させます。



3)　［ピークスペクトルの抽出(X)］をクリックします。



注意

②　積分したピークからのスペクトルの取出しでは、抽出条件はメソッドの条件に依存します。メソッドの条件を平均のスペクトルの取出しに設定しておく必要があります。

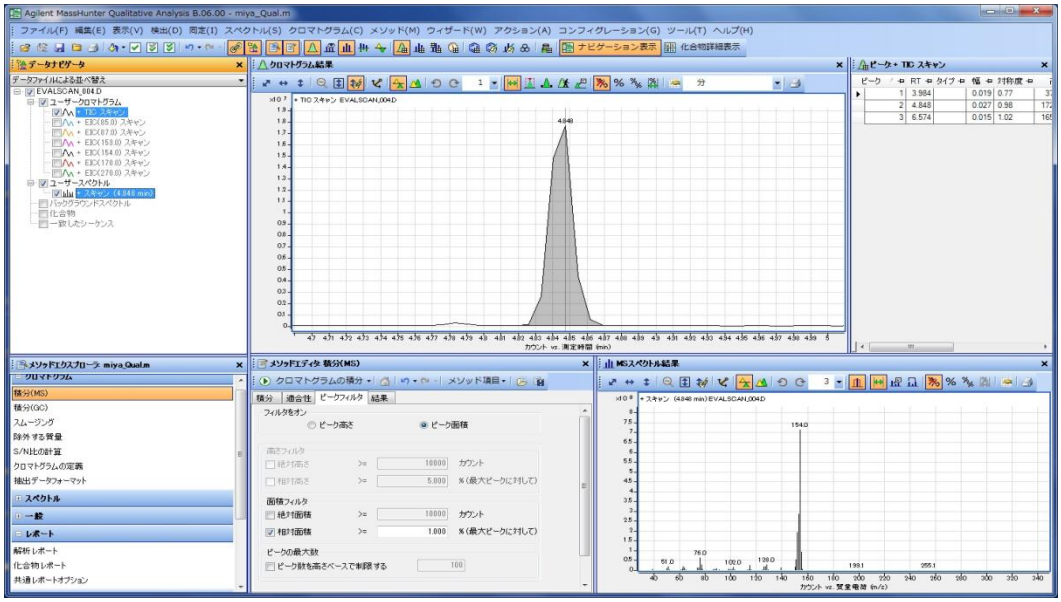
5章－8　スペクトルの減算

品質の良いスペクトルを得るために、バックグラウンドノイズ（ベースラインノイズ）のスペクトルの減算を実行します。特に低濃度のサンプルはバックグラウンドの影響を受けやすいのでこの操作を実施すると効果的です。
バックグランドの減算の方法には次のような方法があります。

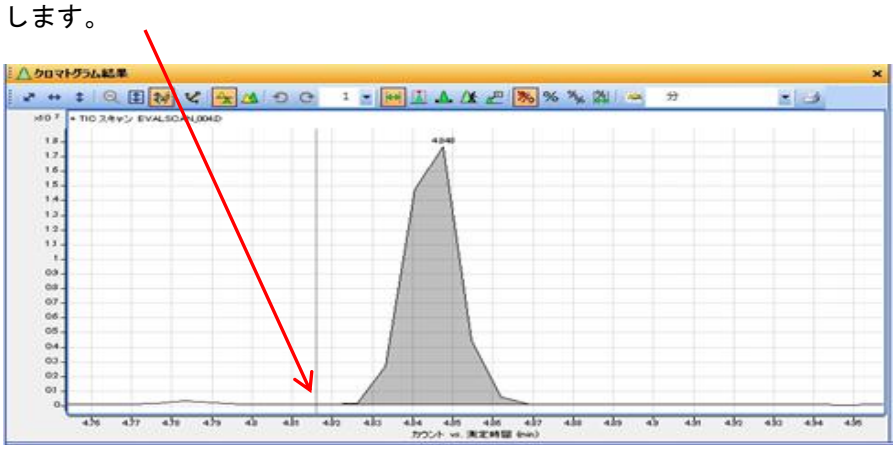
(1)　バックグランドスペクトルをマニュアルにて減算
(2)　データナビゲータのバックグランドスペクトルにスペクトルを登録して減算
(3)　積分ピークに対してスペクトルの抽出時に積分開始点、終了点もしくは両方の平均のスペクトルを減算

（１）バックグランドスペクトルをマニュアルにて減算

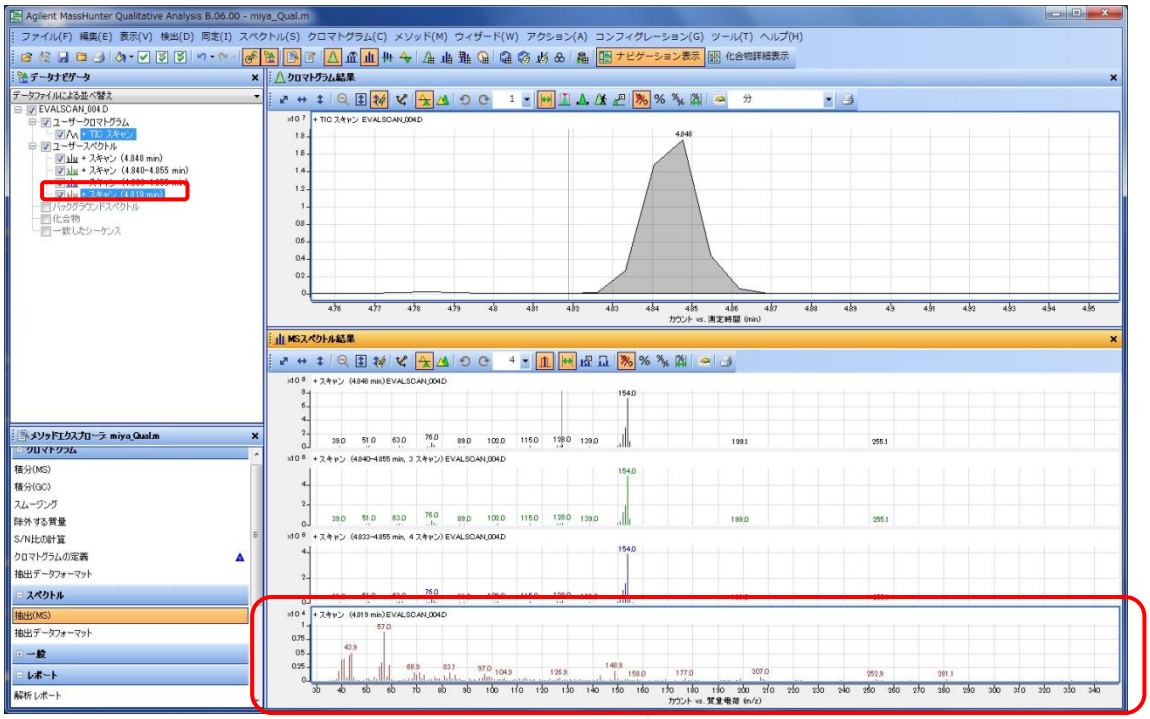
①　減算前のピーク頂点のスペクトル（目的物質のスペクトル）を取り出します。
（今回は既に表示されています）



②　<u>バックグランド（ベースラインの位置）</u>にカーソルを合わせて左ダブルクリックします。

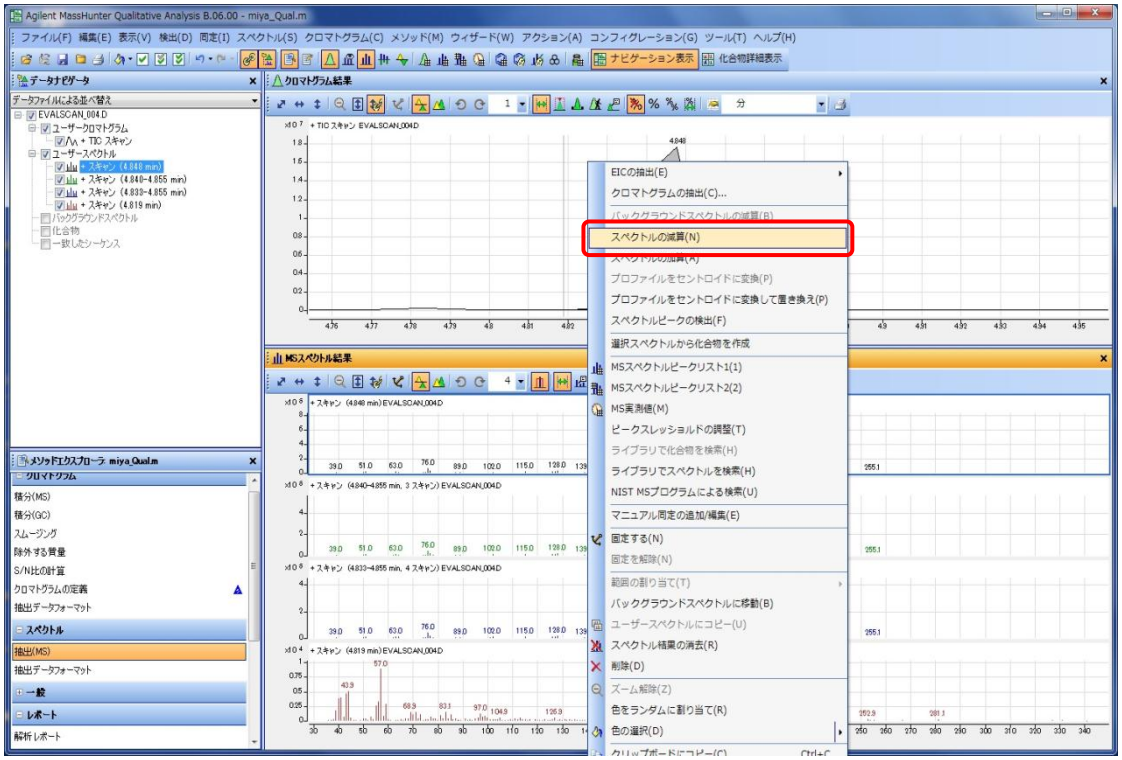


③　バックグランドのスペクトルが抽出されます。



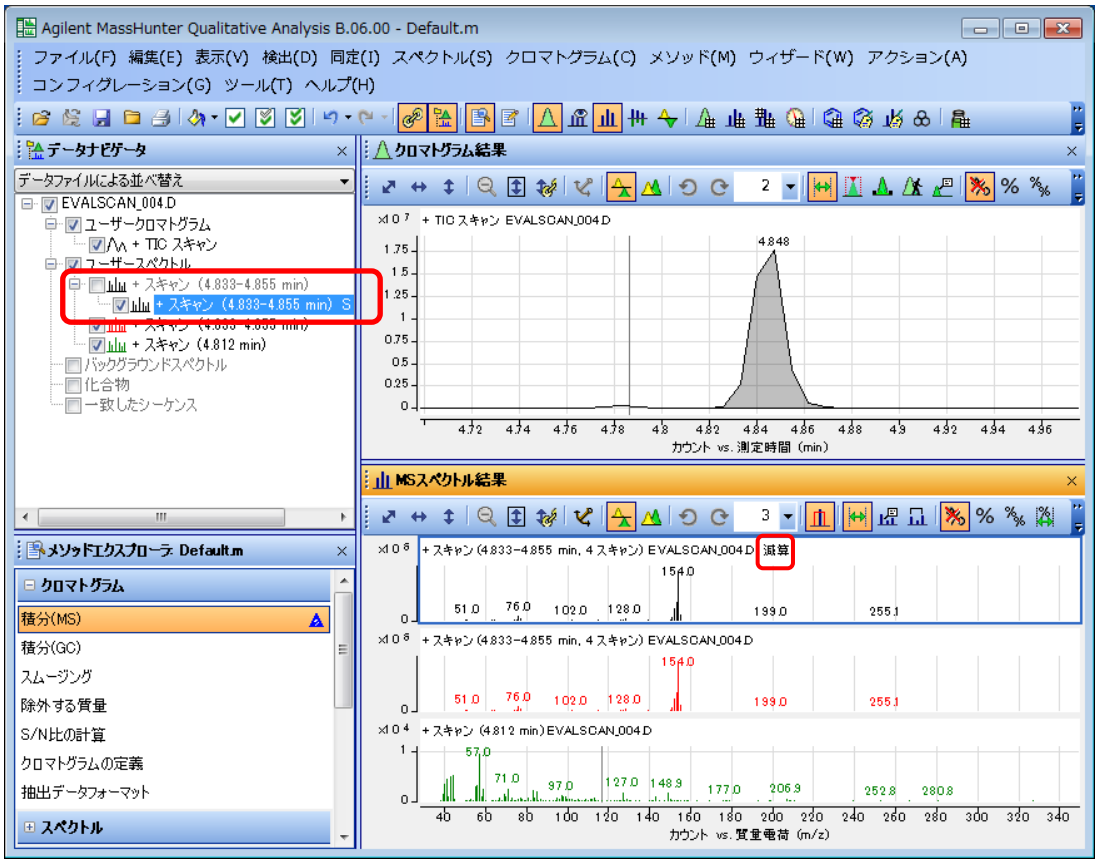
バックグランド用スペクトル

④　ピーク頂点のスペクトルを左クリックしてハイライトに変え、右クリックしてポップアップメニューを表示させます。



⑤　［スペクトルの減算(N)］をクリックします。

⑥　バックグランドスペクトルを左クリックします。

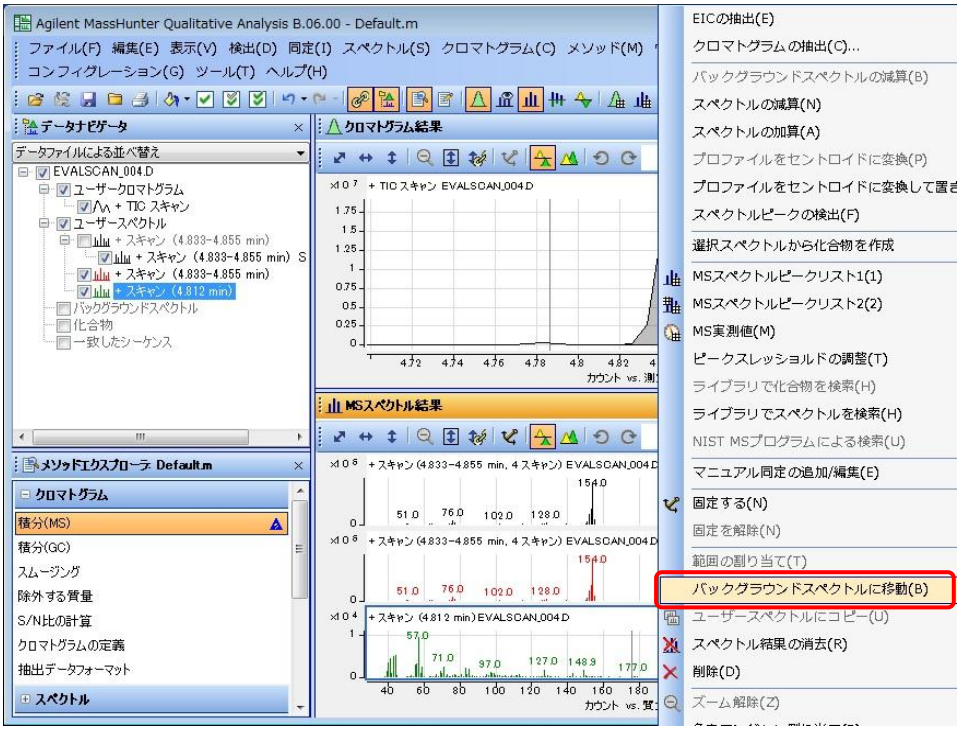


ピークトップのスペクトルが減算され、タイトルに「減算」の表示が出ます。
「データナビゲータ」上ではピークのマススペクトルの下に減算されたマススペクトルが表示されます。

（２）バックグランドスペクトルにスペクトルを登録して、これを減算

① (1)にて実施したようにピーク頂点のスペクトルとバックグランドのスペクトルを抽出します。（すでに抽出されています）

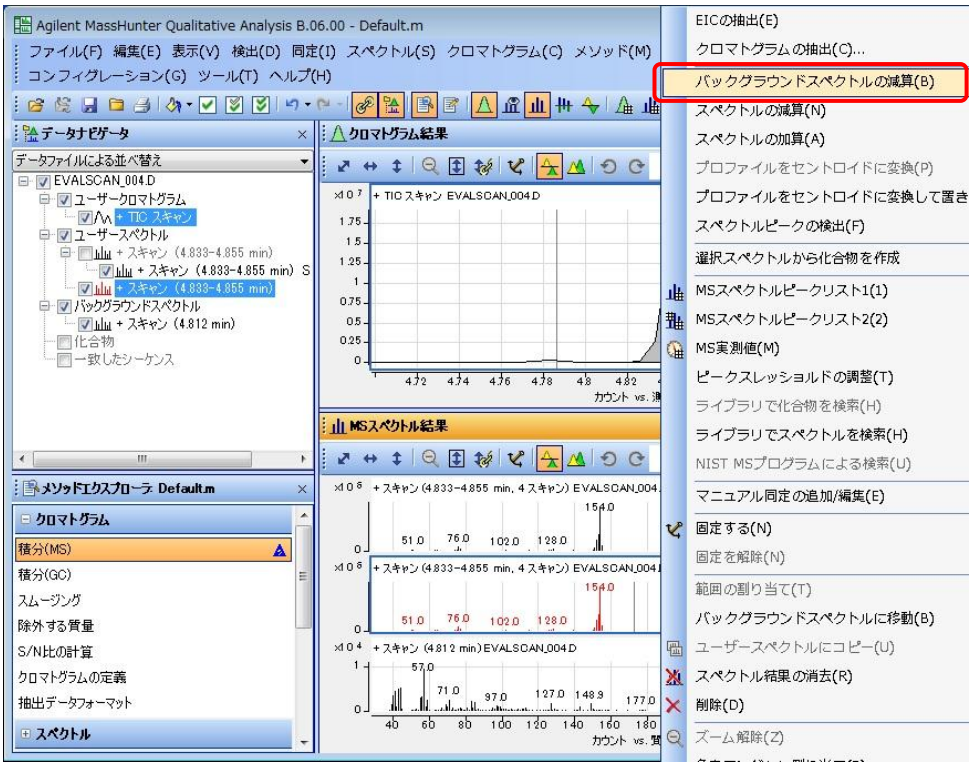
② バックグランドスペクトルを左クリックしてハイライト表示させます。右クリックしてポップアップメニューを表示させます。



③ ［バックグランドスペクトルに移動(B)］をクリックします。

④ データナビゲータ」のバックグランドスペクトルにスペクトルが移動します。

⑤　ピーク頂点のスペクトルを左クリックしてハイライトに変え、右クリックしてポップアップメニューを表示させます。



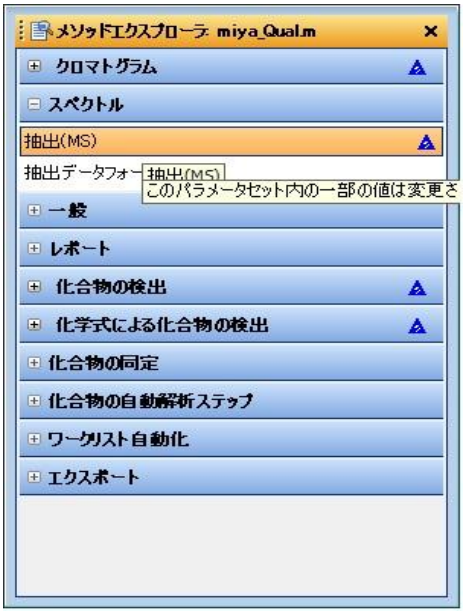
⑥　［バックグランドスペクトルの減算(B)］をクリックします。

減算されたスペクトルが表示されます。

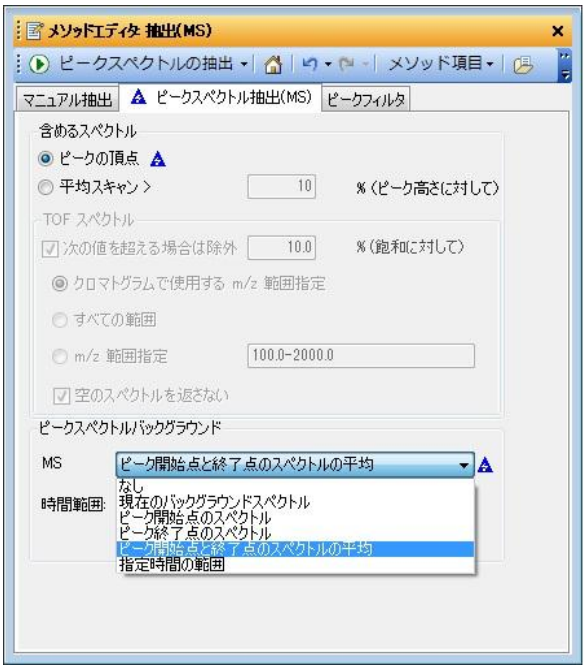
一度バックグランドスペクトルを移動してしまえば、他のスペクトルに対しても同様に減算が可能です。ただし、バックグランドスペクトルは常に１つであるため新規に移動した場合には以前のスペクトルはバックグランドスペクトルから外されます。

（３）積分ピークに対してスペクトルの抽出時に積分開始点、終了点もしくは両方の平均のスペクトルを減算

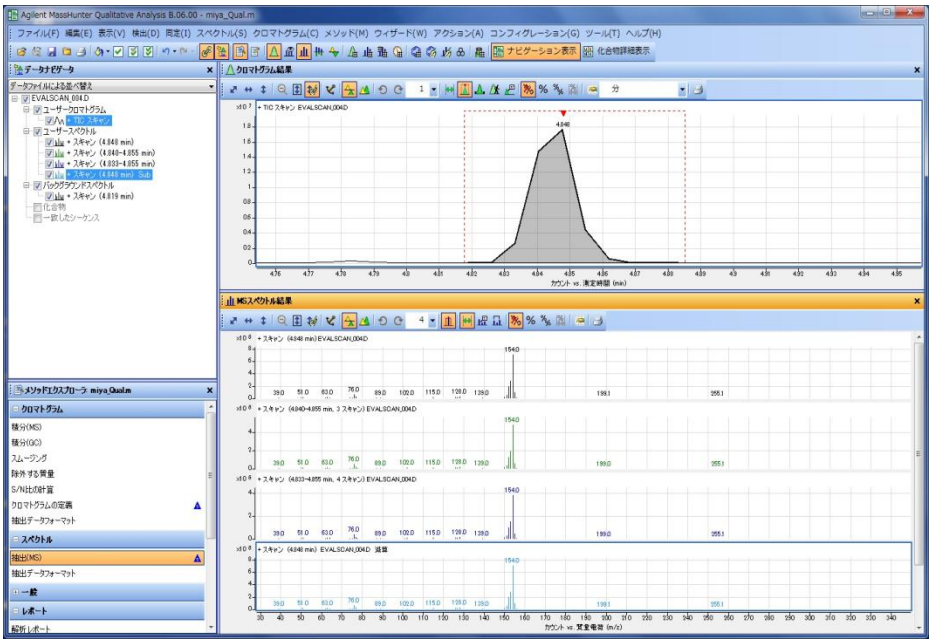
①「メソッドエクスプローラ」の［スペクトル］をクリック、［抽出(MS)］をクリックして「メソッドエディタ抽出(MS)」を表示します。



②　「ピークスペクトル抽出(MS)」タブをクリックします。
「ピークスペクトルバックグランド」を「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。



③　「積分したピークからの取出し」を実施します（p5-39 参照）。



抽出されたスペクトルのタイトルに「減算」と表示され、スペクトルの抽出と減算が同時にされたことがわかります。また「データナビゲータ」上のユーザースペクトルのスペクトルデータにも「sub」と減算されたデータであることの表示が現れます。

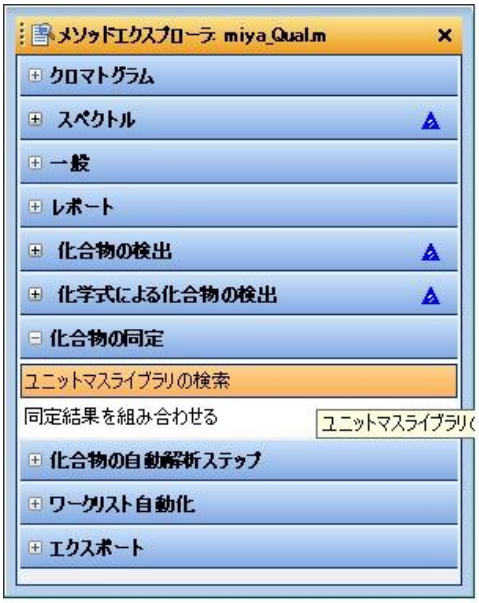
5章－9　スペクトルのライブラリサーチ

同じ条件のもとでイオン化された化合物のスペクトルは、化合物ごとに決まったパターンを示します。このスペクトルパターンをデータベースにしたものをライブラリと呼びます。

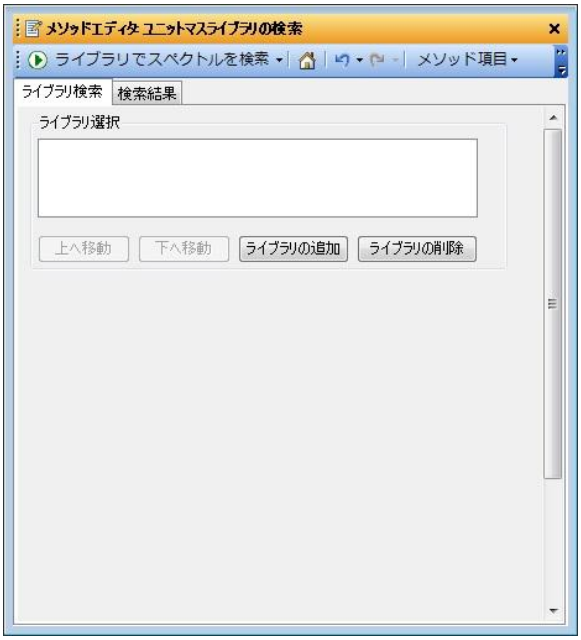
ライブラリサーチ（ライブラリ検索）を実行すると、選択したスペクトルとライブラリに登録されている既知の化合物のスペクトルが比較されます。検索条件に一致する化合物がある場合、そのリストが画面上に表示されます。品質の良いスペクトルを使用するとより良いライブラリサーチを実行できます。

（１）スペクトルライブラリの選択

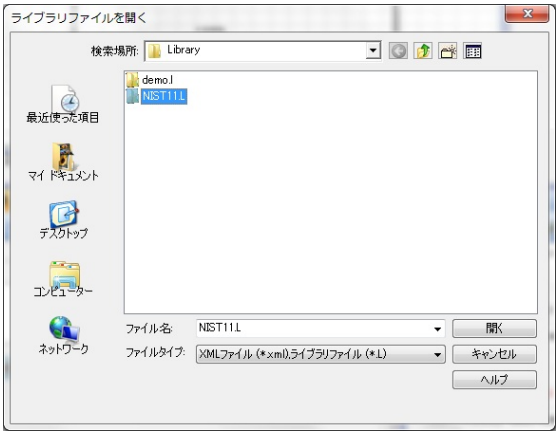
① メソッドエクスプローラ内の［化合物の同定］をクリックして開き、［ユニットマスライブラリの検索］をクリックします



② 「メソッドエディタ　ユニットマスライブラリの検索」ウィンドウが開きましたら、「ライブラリ検索」タブの「ライブラリ選択」の ライブラリの追加 ボタンをクリックします。

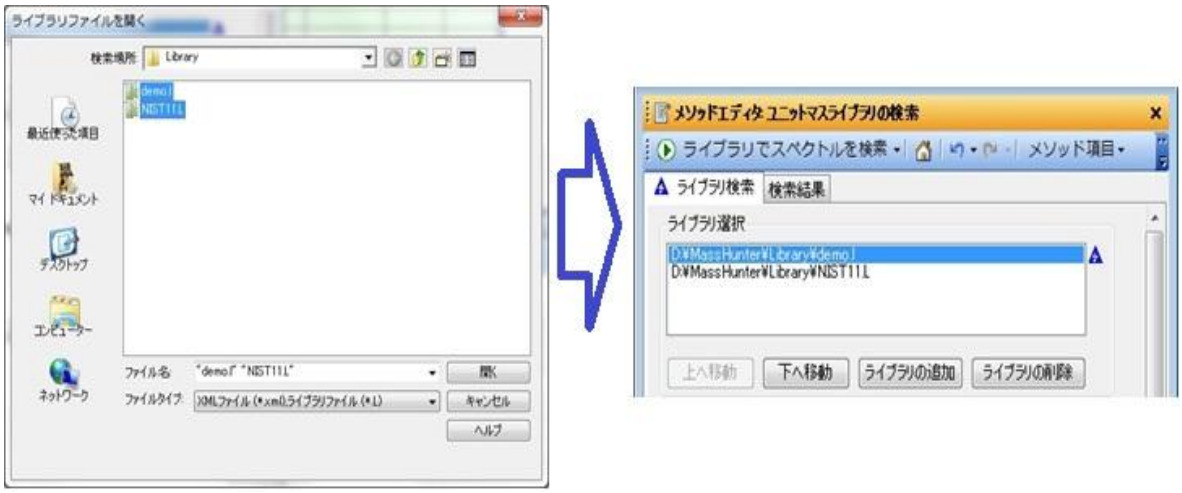


③ 「ライブラリファイルを開く」ウィンドウが表示されますので、ライブラリを選択し、 開く ボタンをクリックします。



登録されたライブラリ

④　複数のライブラリがあり、設定したい場合には上記手順で新たに追加するか、
③のファイル選択時に複数のライブラリファイルを一遍に指定します。



※複数のファイルを指定するには「ctrl」キーを押しながらマウスでクリックします。

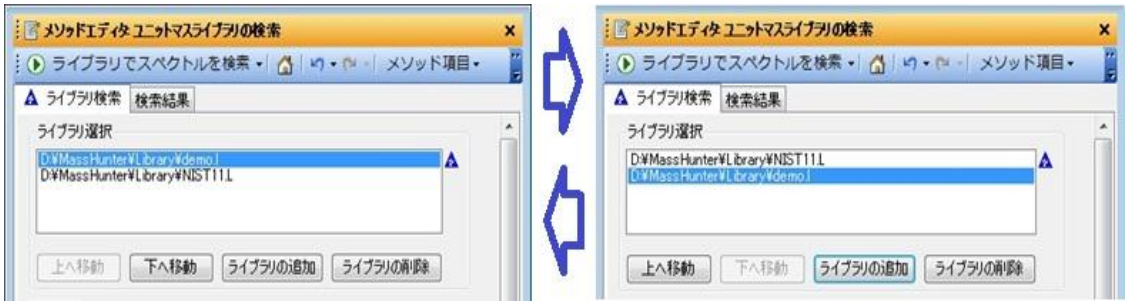
注意

ソフトウェア本体には、デモ用のライブラリ（demo.l）のみ付属します。NIST、WILEYや構造式ライブラリを使用するためには、別途ライブラリソフトウェアを購入する必要があります。

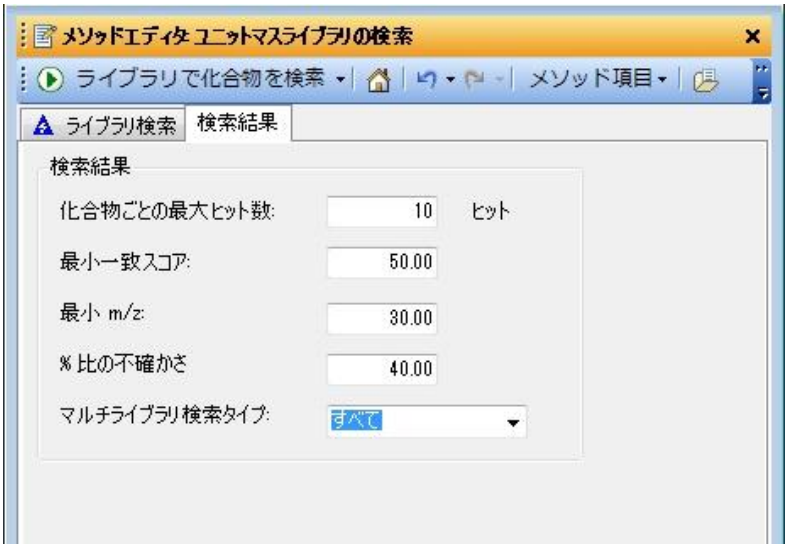
（２）検索条件

①　「メソッドエディタ　ユニットマスライブラリの検索」ウィンドウを開きます。
（(1)スペクトルライブラリの選択を参照）

②　「ライブラリ選択」の欄にて複数のライブラリを選択した場合、上側に登録されたライブラリから検索されます。上へ移動ボタンと下へ移動ボタンを使って、希望の検索順になるようにライブラリファイルを並び替えます。



③　「検索結果」タブをクリックします。5 つのパラメータが表示されます。それぞれ次の意味を持ちますので、希望の設定に変更します（通常、初期値にて可）。



＜　初期値　＞

化合物ごとの最大ヒット数：
　　10　検索結果のヒット順の表示最大数です。

最小一致スコア：
　　50　この値未満の一致率の化合物は表示されません。

最小 m/z：
　　30　この値未満の質量数のイオンは検索に使用されません。

%比の不確かさ：
　　40　ライブラリからの候補スペクトルのスクリーニング時のイオン強度比の信頼性。「ライブラリ検索」タブの「スクリーニングを有効にする」のチェックボックスをオンにした場合に使用されます。

マルチライブラリ検索タイプ：
　　すべて　　「すべて」または「見つかったら停止」の選択となります。「すべて」は、選択したすべてのライブラリを使用して検索します。「見つかったら停止」は、リスト内先頭にあるライブラリで検索します。検索ヒット数が「化合物ごとの最大ヒット数」以上となったら停止します。足りない場合は 2 つ目のライブラリで検索されます。

（３）ライブラリ検索の実施

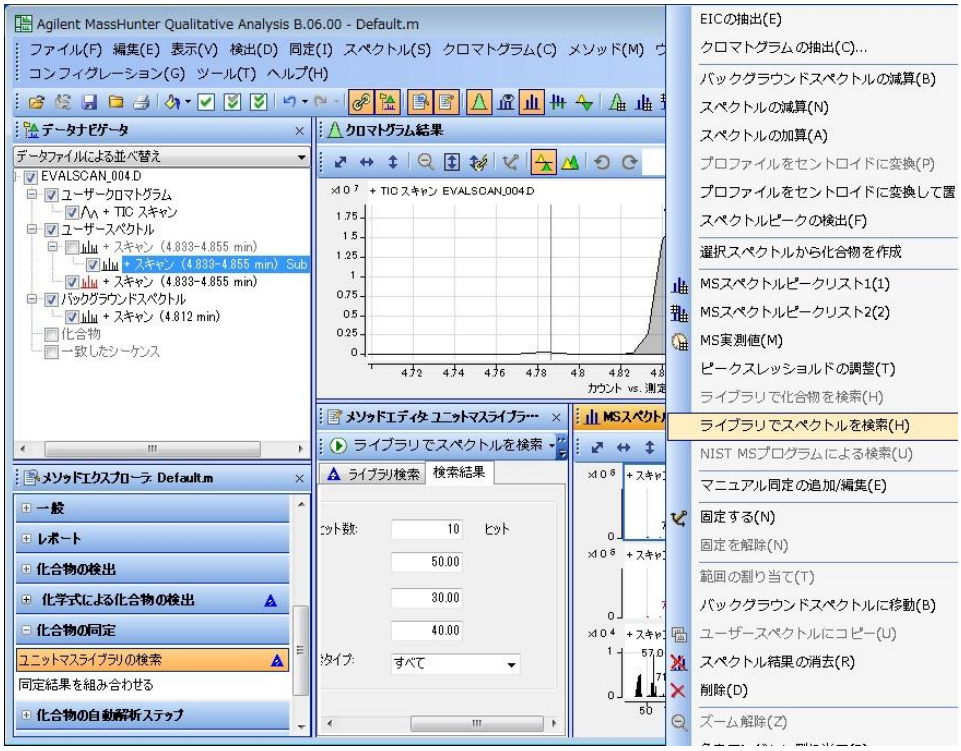
スペクトルのライブラリ検索の実行方法は次の４つになります。

① 「MS スペクトル結果」ウィンドウにてポップアップメニューから実施。
② 「メソッドエディタユニットマスライブラリの検索」から実施。
③ ［スペクトル(S)］メニューから実施。
④ 「データナビゲータ」にてポップアップメニューから実施。

ここでは、代表的に①の「MS スペクトル結果」ウィンドウにてポップアップメニューから実施。と②の「メソッドエディタユニットマスライブラリの検索」から実施。を説明します。

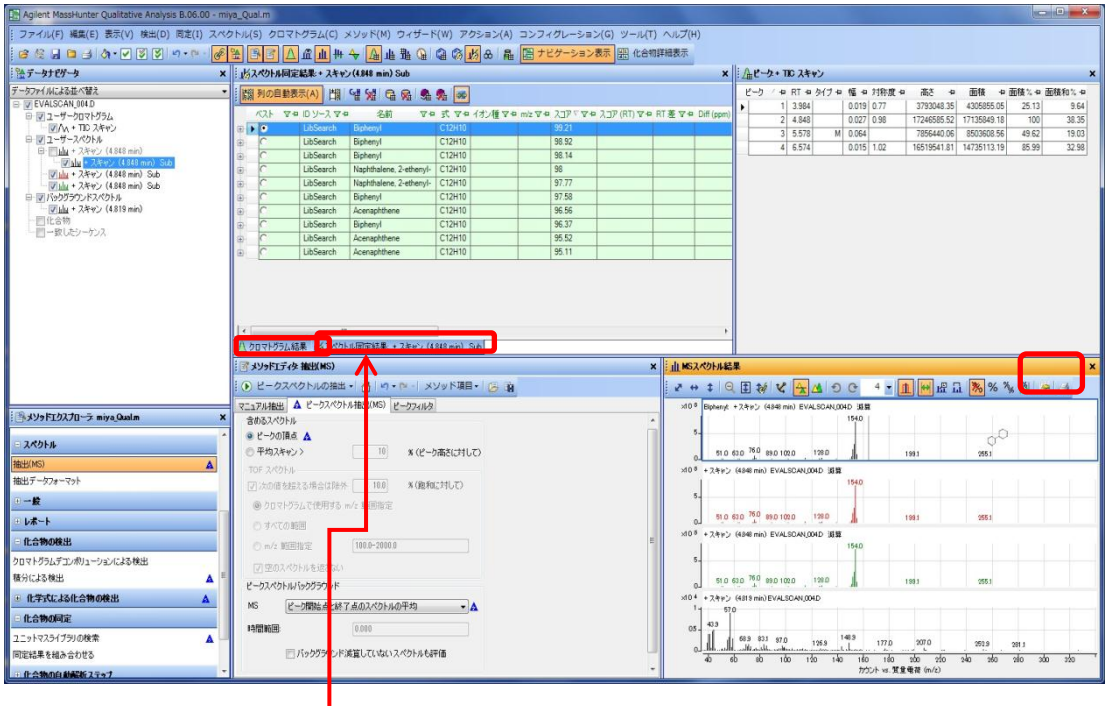
① 「MS スペクトル結果」ウィンドウから実施

1) 「MS スペクトル結果」ウィンドウ内の検索したいスペクトルにて右クリックしポップアップメニューを表示させます。



2) ［ライブラリでスペクトルを検索(H)］］をクリックします。

3) ライブラリ検索が始まり、終了すると検索結果が表示されます。



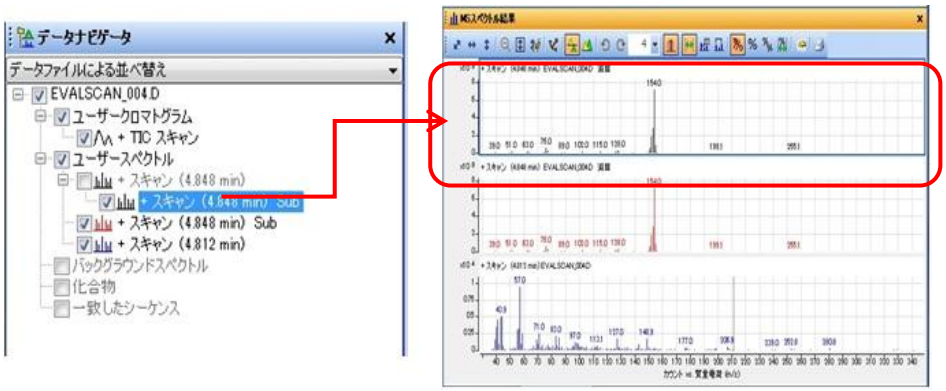
※「スペクトル同定結果」ウィンドウは「クロマト結果」ウィンドウに重なります。「クロマト結果」ウィンドウを見たい時はウィンドウ下部のタブをクリックしてください。

「スペクトル同定結果」の表の「スコア」がライブラリー登録のマススペクトルとの一致率となります。この数値が 100（%)に近い物ほど一致率が高いことになります。

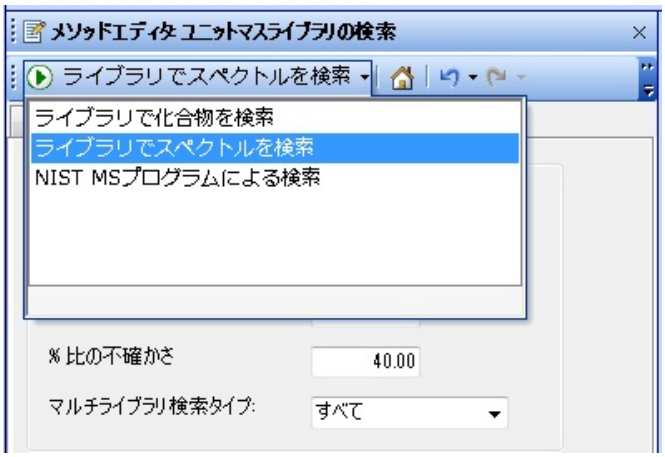
ライブラリーのマススペクトルとの比較をする場合は、（６）ライブラリスペクトルとの比較を参照願います。

② 「メソッドエディタユニットマスライブラリの検索」から実施。

1) 検索したいスペクトルデータをクリックしてハイライト表示に変えます。



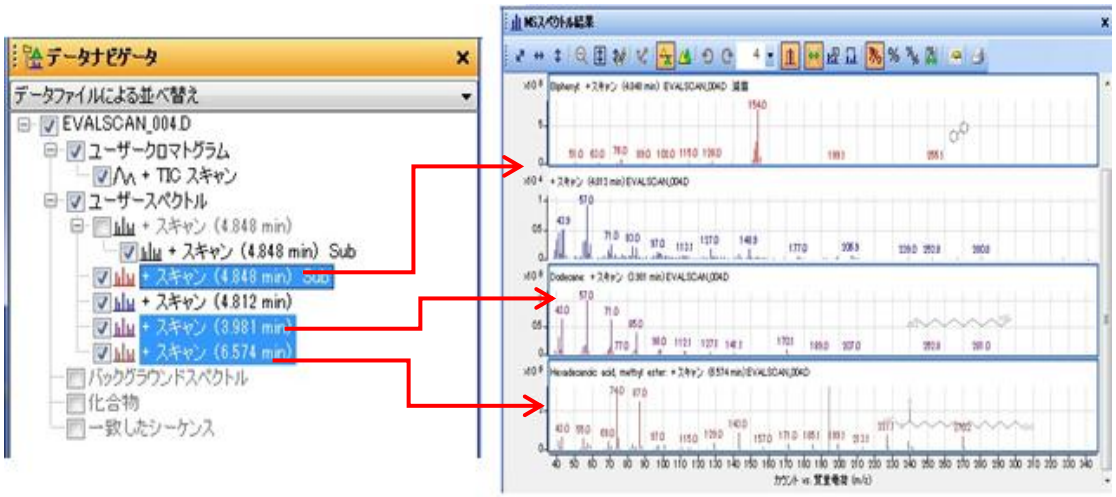
2)　「メソッドエディタ　ユニットマスライブラリの検索」ウィンドウの実行メニューの ライブラリでスペクトルを検索 をクリックします。



3)　ライブラリ検索が始まり終了すると検索結果が表示されます。
（前頁参照）

（4）複数のスペクトルをライブラリ検索

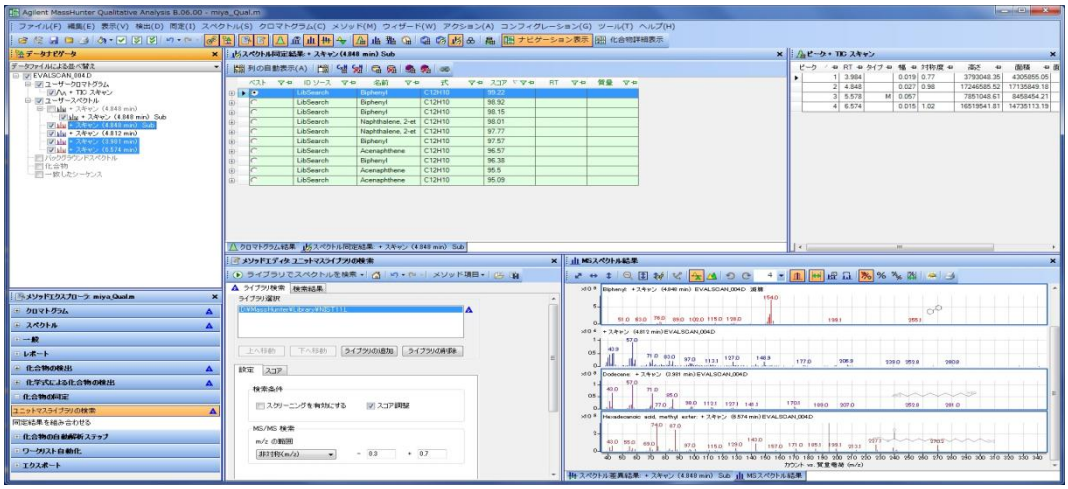
①　検索したいスペクトルをクリックしてハイライト表示に変えます。



※複数のスペクトルを指定するには「ctrl」キーを押しながらマウスで左クリックします。

②　「(3)ライブラリ検索の実施」にて説明した方法で検索を実施します。

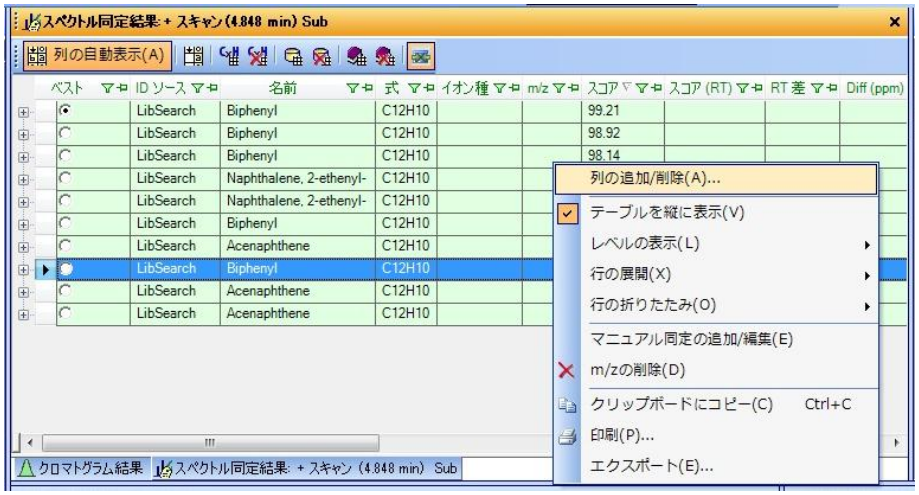
③　ライブラリ検索が始まり終了すると検索結果が表示されます。



※各スペクトルの同定結果は、そのスペクトルをクリックすると表示されます。

（５）「スペクトル同定結果」テーブルの項目整理

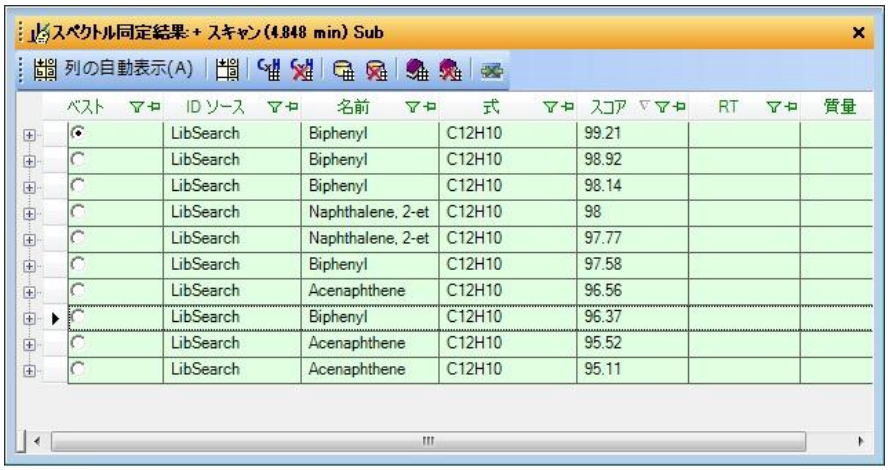
①　「スペクトル同定結果」ウィンドウにて右クリックしてポップアップメニューを表示させます。



②　［列の追加/削除(A)…］をクリックします。

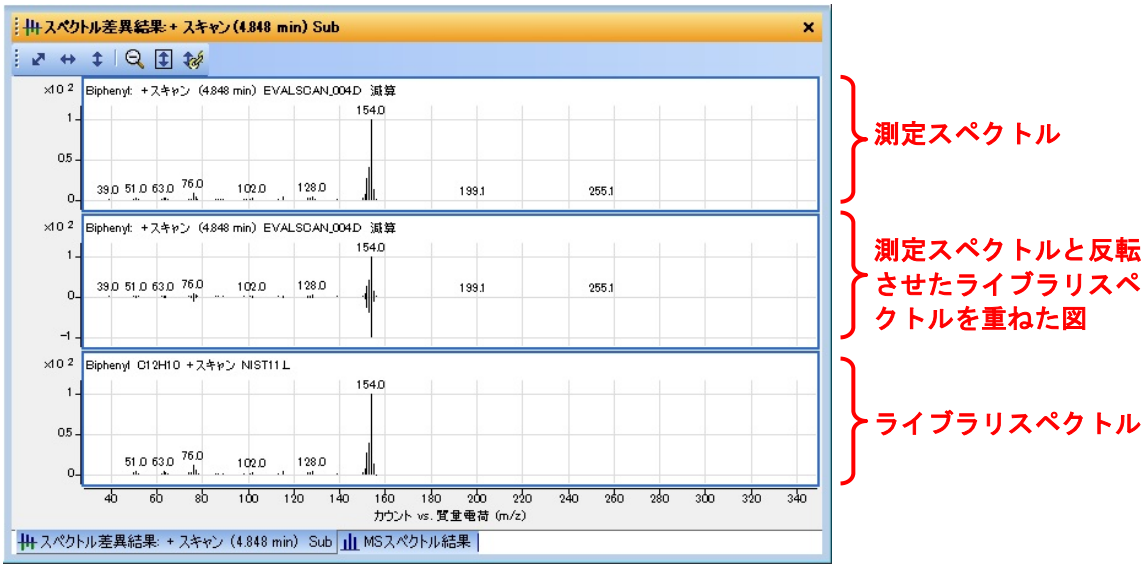
③　表示させたい項目の「選択」チェックボックスをクリックして☑マークを付け、不要な項目の☑マークを消し、OKボタンをクリックします。

④　整理された「スペクトル同定結果」の表が表示されます。



（６）ライブラリスペクトルとの比較

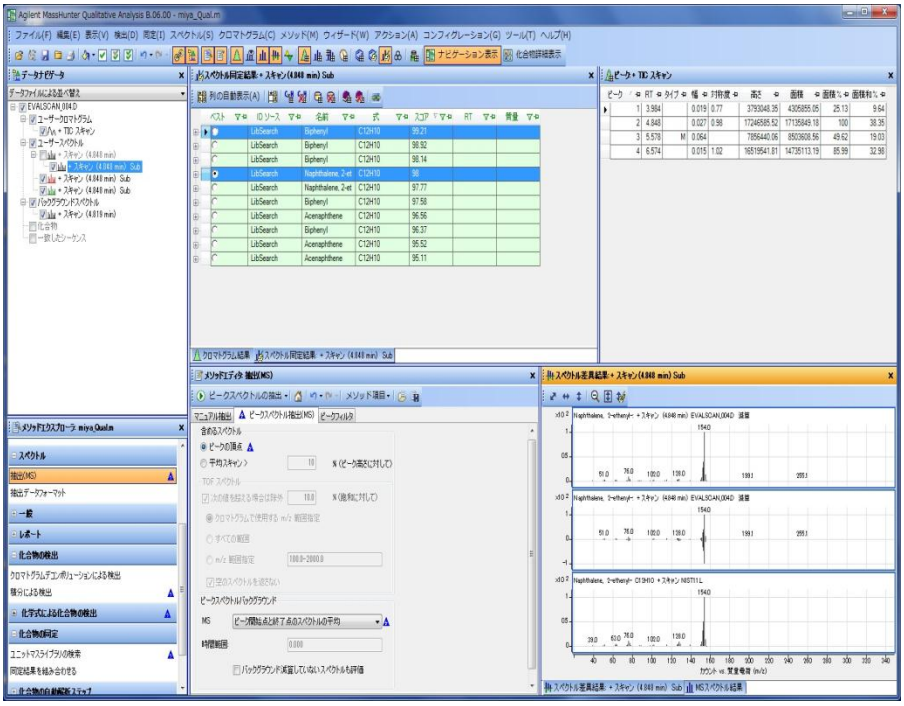
① ツールバー上の アイコンをクリックするか、［表示(V)］メニューの［結果の差(R)］をクリックします。



※「スペクトル差異結果」ウィンドウは「MS スペクトル結果」ウィンドウに重なります。「MS スペクトル結果」ウィンドウを見たい時はウィンドウ下部のタブをクリックしてください。

② 検索結果の他のライブラリスペクトルを表示させる方法

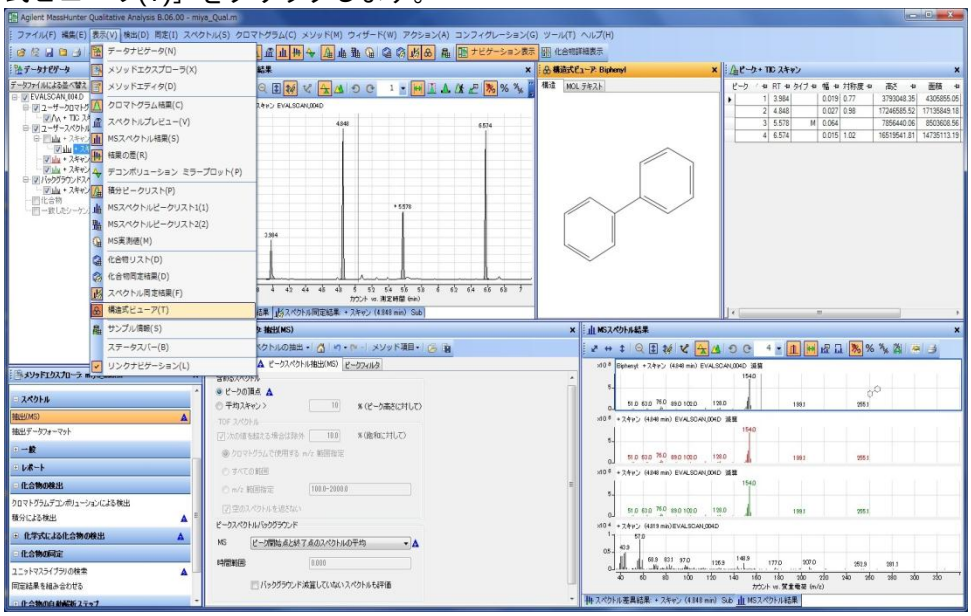
「スペクトル同定結果」の項目の「ベスト」をクリックし、 マークにすると「スペクトルの差異結果」ウィンドウの内容は、指定したライブラリのスペクトルとの比較に代わります。



※測定スペクトルが表示されない時（質量数の数字のみ表示される時）は、アイコンをクリックしてスケールを復元してみてください。

（７）構造式ビューワの表示

ツールバー上の アイコンをクリックするか、［表示(V)］メニューの［構造式ビューワ(T)］をクリックします。

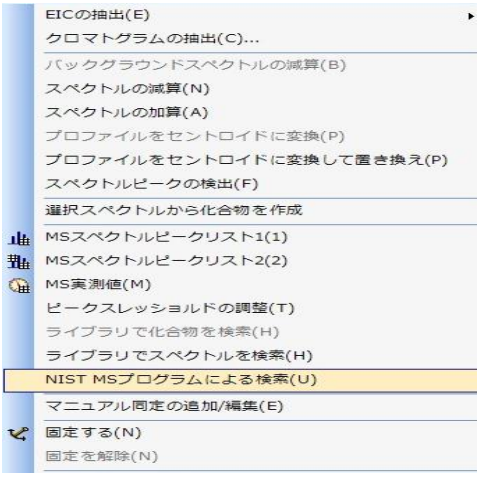


※構造式ビューワも「スペクトルの差異結果」と同様に検索結果の他のライブラリスペクトルに切り替えると、その物質の構造式に替ります。

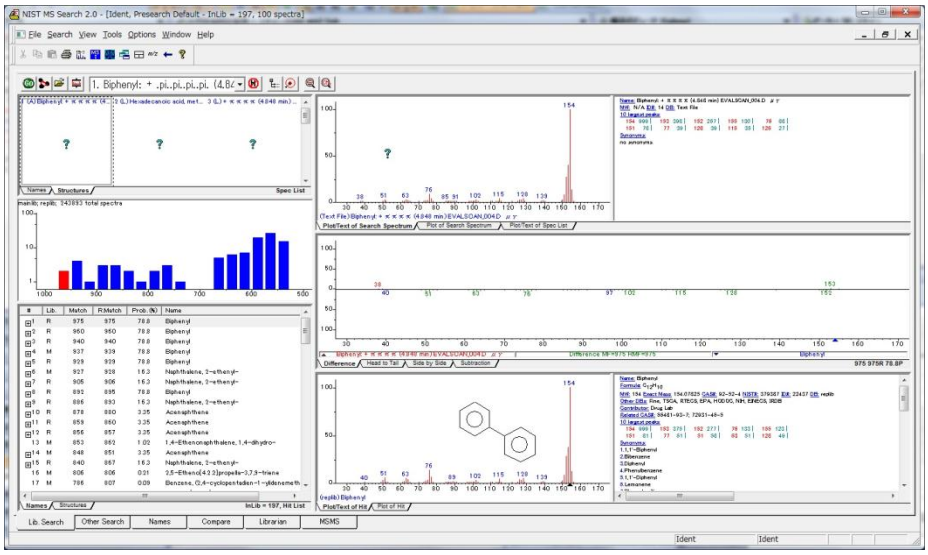
（８）NIST MS プログラムによる検索

NIST MS Search がインストールされている場合、NIST MS プログラムによる検索が本ソフトウェア上から可能となります。

「(3)ライブラリ検索の実施」と同様に、メニューもしくはメソッドエディタより［NIST MS プログラムによる検索(U)］を実施します。



NIST のライブラリ検索プログラムが起動し、検索結果が表示されます。



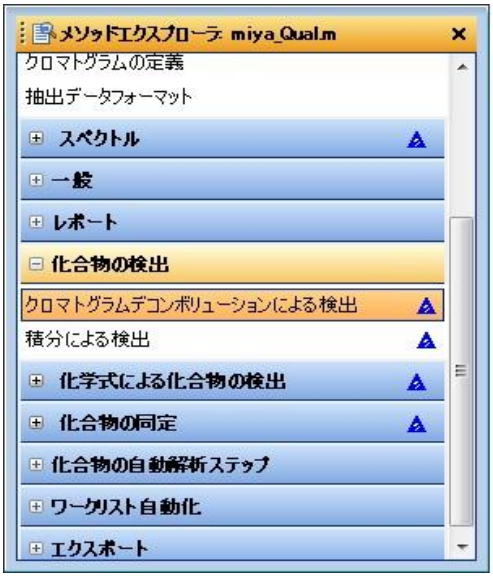
5章－10 化合物の検出

化合物の認識に次の２つが用いられます。
1　クロマトグラムデコンボリューションによる検出
2　積分による検出

（1）クロマトグラムデコンボリューションによる検出

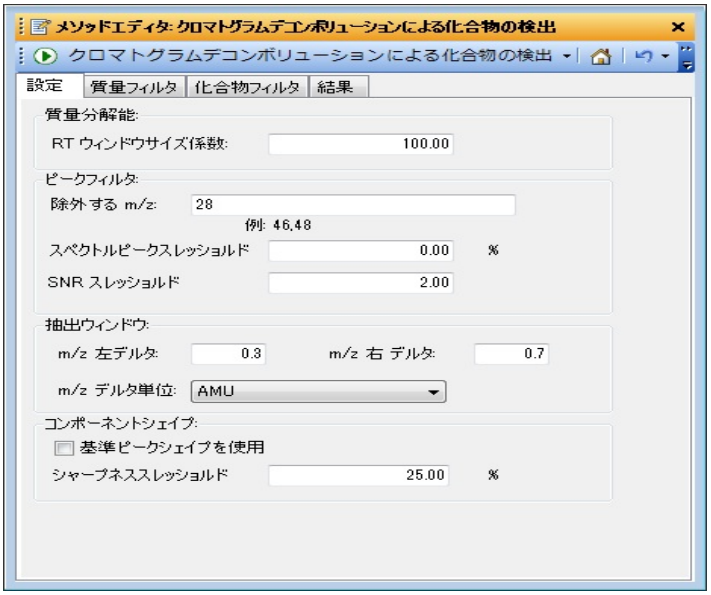
デコンボリューションとは重なり合った複雑なクロマトから成分ピークの情報を抽出するアルゴリズムです。検出された化合物は、その情報、スペクトル、抽出クロマトをグループ化されます。
SCAN データに対して実施可能です。
デコンボリューションにて取り出されたマススペクトルは、ユーザーマススペクトルとは異なり、グループ化されてリンクしています。

① 「メソッドエクスプローラ」の「化合物の検出」をクリックし、［クロマトグラムデコンボリューションによる検出］をクリック。「メソッドエディタ：クロマトグラムデコンボリューションによる化合物の検出」を開きます。

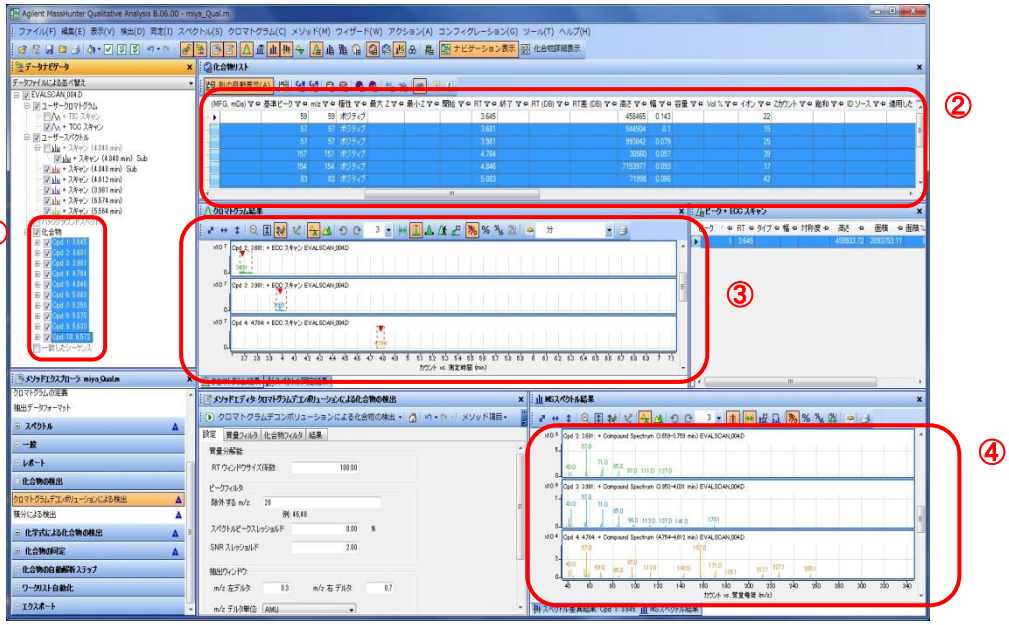


②

ボタンをクリックして
デコンボリューションを実施します。



デコンボリュートされた結果

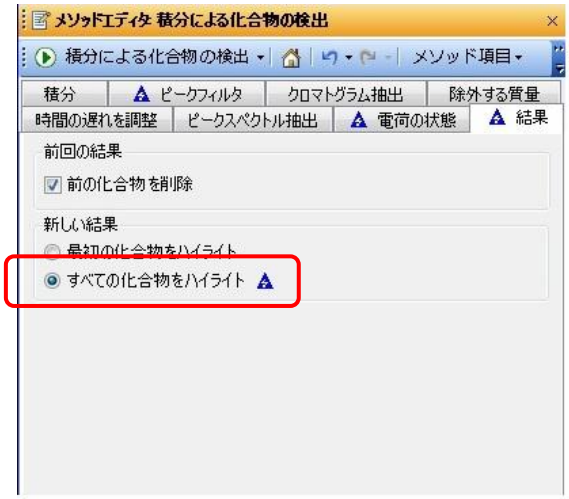


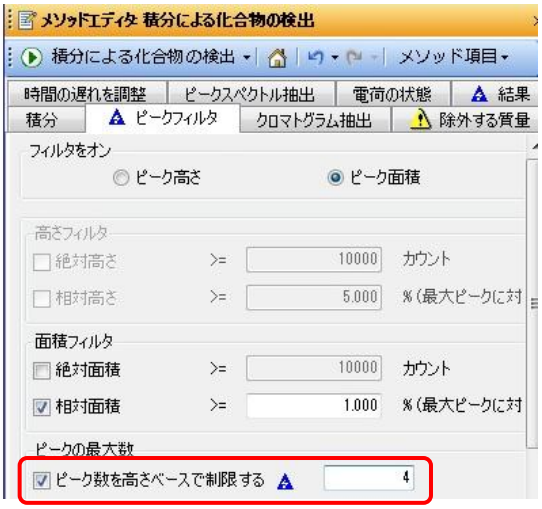
デコンボリュートされますと、データナビゲータの「化合物」にリストアップされ（①）、分離された化合物の情報（②）、「化合物クロマトグラム」（③）、及びそのマススペクトル（④）が表示されます。

（２）積分による検出

積分により検出されたピークを化合物として認識し、そのスペクトル情報を取り出します。

① 「メソッドエクスプローラ」の「化合物の検出」をクリックし、［積分による検出］をクリック。「メソッドエディタ：積分による化合物の検出」を開きます。

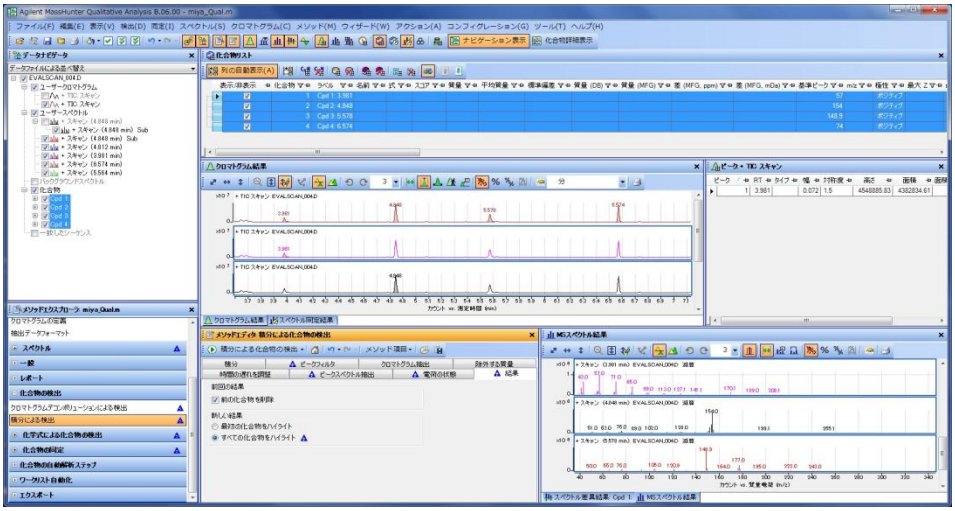




［ピークフィルタ］タブ内の「ピークの最大数」をチェックして４を入力します。
また［結果］タブ内の「新しい結果」を「すべての化合物をハイライト」に変更します（ここでは、積分による最大のピーク検出数を４として実行）。

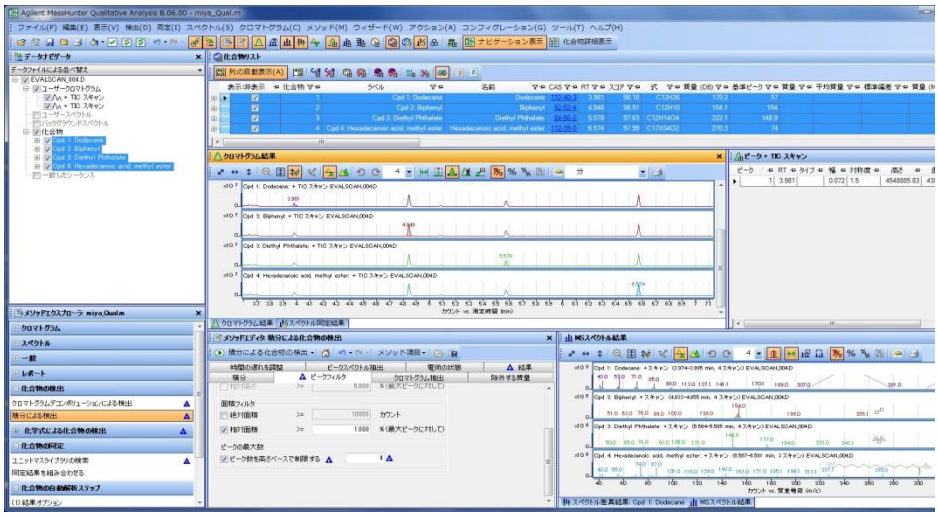
②

ボタンをクリックして化合物の検出を実施します。



（３）検出された化合物のライブラリ検索

ライブラリ検索をかけます。検出全ピークがハイライトされていれば、全化合物に対して一度に検索を掛けられます。
p5-53 では「スペクトルのライブラリサーチ」ですが、ここでは「化合物のライブラリサーチ」を実施します。



化合物の検索を行うと 1 番スコアの良い化合物名がデータナビゲータおよび化合物リストに表示され、スペクトルやクロマトグラムのタイトルにも表示されます。

5章－11 自動解析

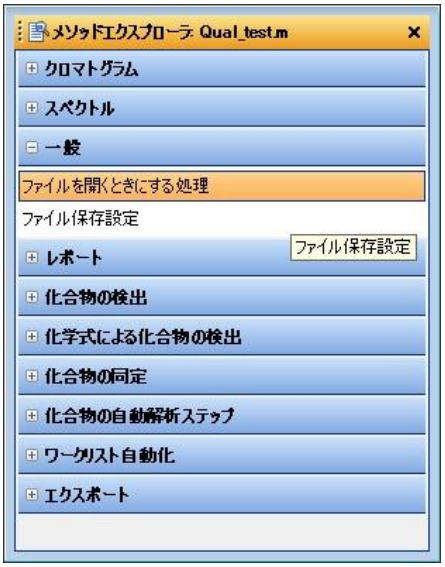
5 章－10 化合物の検出では、化合物の検出と同定を個々に実行しましたが、これらとレポートの出力まで含めた自動化が可能です。データファイルを開く時や、データ取り込み後に自動で実行することができます。

（1）ファイルを開く時にする処理

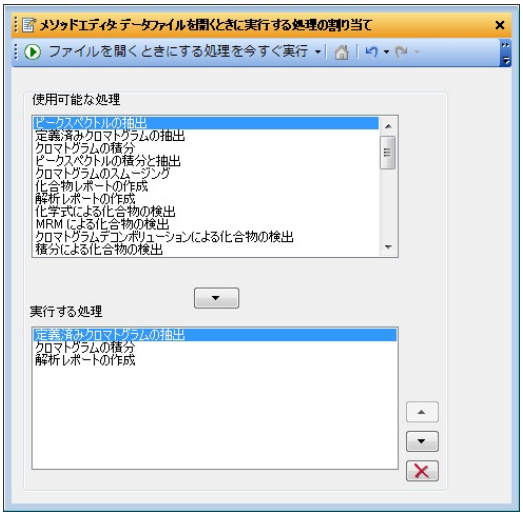
この設定を行うとデータファイルを開く時に自動で処理することが可能です。
Default.m の初期設定は、「定義済みクロマトグラムの抽出」のみが入っています。

① 自動化設定

1) メソッドエクスプローラ内の［一般］をクリックします。



2) ［ファイルを開くときにする処理］をクリックし、「メソッドエディタ：データファイルを開くときに実行する処理の割り当て」を表示させます。



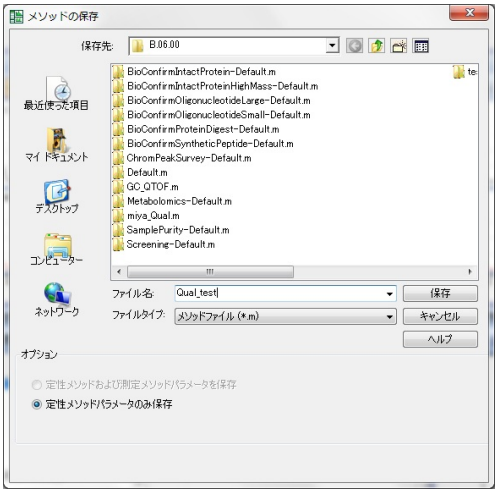
3)　「使用可能な処理」から次の処理を選択し、ボタンで「実行する処理」へ移します。

１、定義済みクロマトグラムの抽出
２、クロマトグラムの積分
３、解析レポートの作成

4)　「実行する処理」の順序の入れ替え、削除
処理は、上から順番に実行されていきます。このため処理の順番は非常に重要です。ボタンを使って希望の順序となるように順番を入れ替えます。
また、間違えて移してしまった処理は、ボタンを使って削除できます

②　メソッド保存
設定はメソッドファイルとして保存されます。

メニューの［メソッド(M)］－［名前を付けて保存(A)…］をクリックします。

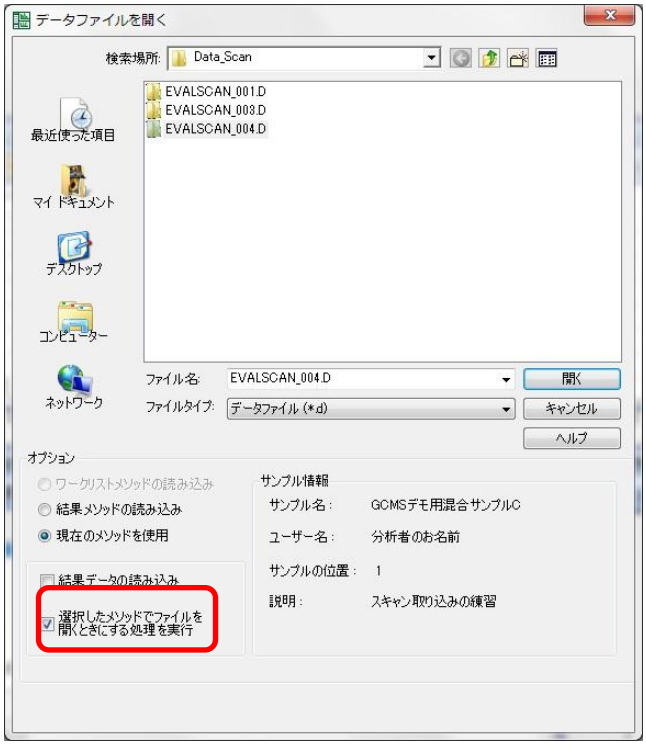


「メソッドの保存」ウィンドウが開きますので「Qual_test」と入力して保存ボタンをクリックします。

③　処理の実施

一旦データをすべて閉じます。次にデータを開きますが、この時「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」のチェックボックスにチェックを入れます。

開く ボタンをクリックしてデータを読み込むと、自動処理が実施されます。



④　作成された解析レポート

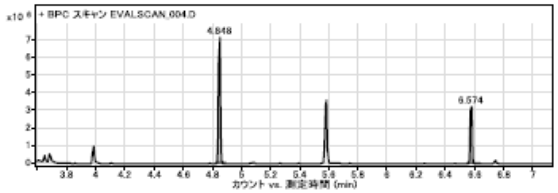
定性分析レポート

データファイル名	EVALSCAN_004.D	サンプル名	GCMSデモ用混合サンプルC
サンプルタイプ		位置	1
機器名	1-7890-5977	ユーザ名	分析者のお名前
測定メソッド	evalscan.m	測定時間	2012/12/27 17:27:35
IRM キャリブレーションステータス	Not Applicable	DAメソッド	Qual_test.m
コメント	スキャン取り込みの練習		

デバイスタイプ	Quadrupole	希釈倍率	1
サンプル ID		サンプル名	GCMSデモ用混合サンプルC
サンプルの位置	1	サンプル タイプ	
データファイル	D:□MassHunter□GCMS□□DATA□EVALSCAN_004.D	メソッド	D:□MassHunter□GCMS□□methods□evalscan.m
DA メソッドのオーバーライド		レベル名	
コメント	スキャン取り込みの練習	バランスオーバーライド	
バーコード		平衡化時間 (min)	0.5
プレートコード		プレート位置	
ラックコード		ラック位置	
Expected Barcode		Sample Amount	
Dual Inj Vol	1	TuneName	atune.u
TunePath	D:□MassHunter□GCMS□□3977□	MSFirmwareVersion	6.00.13
オペレータ名	分析者のお名前	測定時間	41270.72749
サンプルロック測定モード	FALSE	測定完了フラグ	TRUE
機器名	1-7890-5977		

ユーザークロマトグラム

フラグメンタ電圧　　コリジョンエネルギー　0　　イオン化モード　指定なし



積分ピークリスト

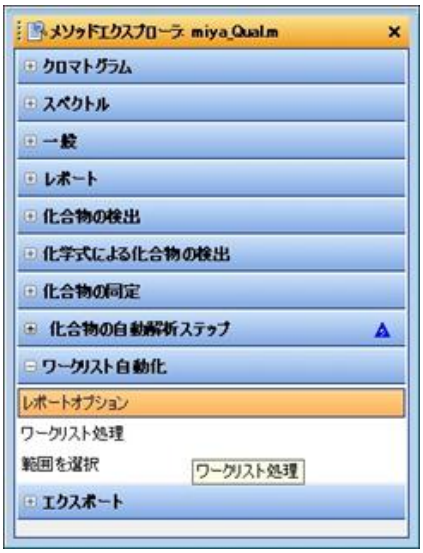
ピーク	開始	RT	終了	高さ	面積	面積%
1	4.82	4.848	4.891	6887376.4	6716081.58	100
2	6.545	6.574	6.64	3253278.19	2925945.82	43.57

---レポートの終了---

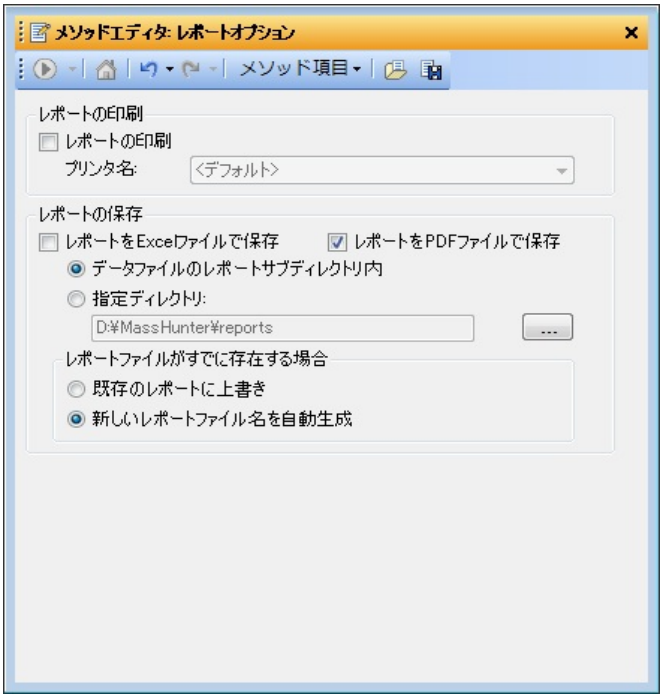
Agilent Technologies　　Page 1 of 1　　Printed at: 17:24 on: 2013/2/18

（２）ワークリスト自動化

① メソッドエクスプローラ内の「ワークリスト自動化」をクリックして開きます。



② ［レポートオプション］をクリックして「メソッドエディタ：レポートオプション」を開きます。

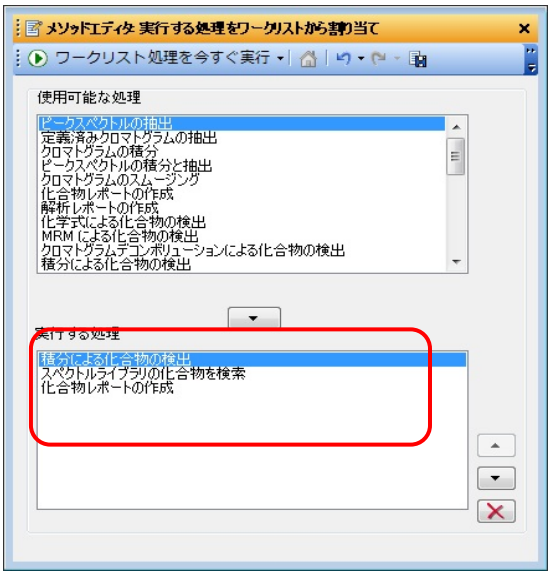


パラメータを次のように設定します。

レポート保存：レポートを PDF ファイルで保存。

レポートがすでに存在する場合：新しいレポートファイル名を自動生成。

③　［ワークリスト処理］をクリックして「メソッドエディタ：実行する処理をワークリストから割り当て」を開きます。



次の処理を選択し、並べます。

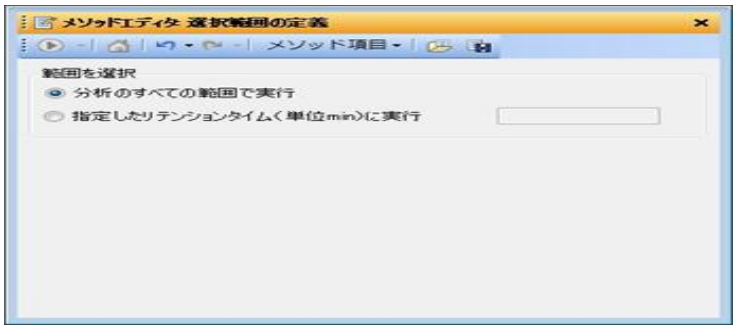
１、積分による化合物の検出
２、スペクトルライブラリの化合物を検索
３、化合物レポートの作成

④　「使用可能な処理」の中から▼ボタンを使って「実行する処理」の欄に希望の処理を移します。

⑤　「実行する処理」の順序の入れ替え、削除

処理は、上から順番に実行されていきます。このため処理の順番は非常に重要です。▲ ▼ボタンを使って希望の順序となるように順番を入れ替えます。また、間違えて移してしまった処理は、✕ボタンを使って削除できます。

⑥　「範囲を選択」をクリックし、「メソッドエディタ：選択範囲の定義」を開きます。

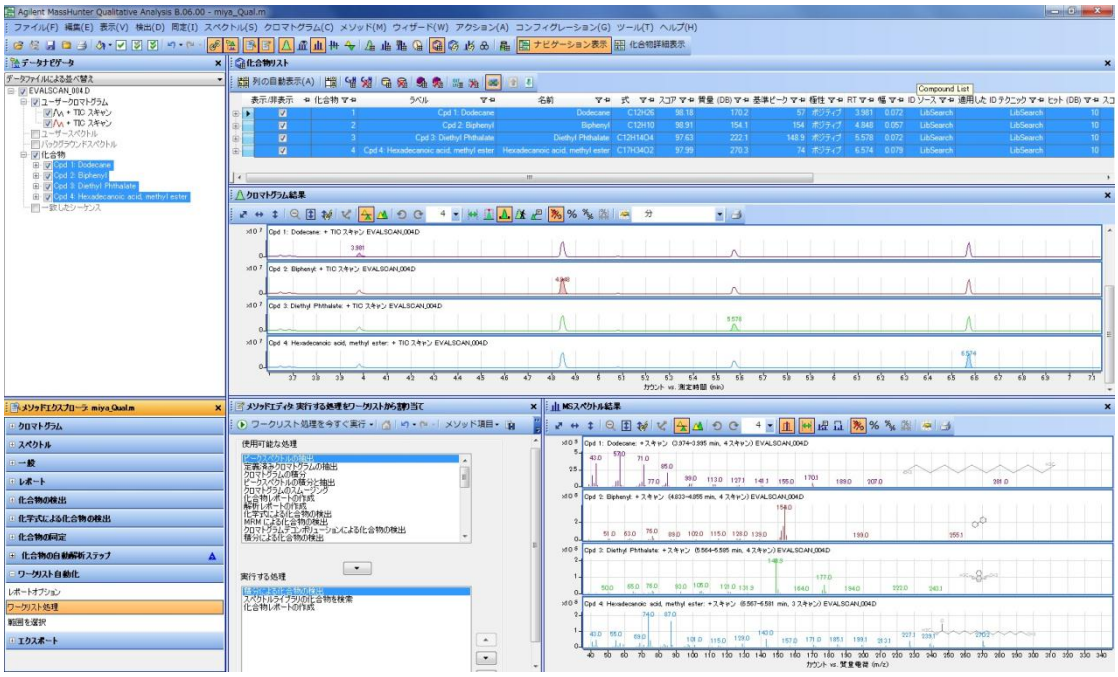


処理する時間範囲を指定します（通常は測定データの全ての範囲で実行します）。

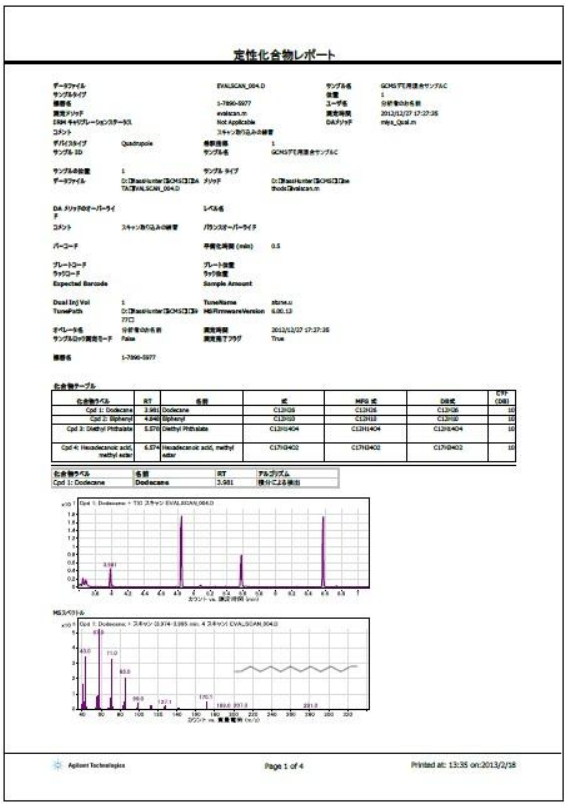
⑦　メニューの［アクション(A)］－［ワークリスト処理の実行(W)］をクリックするか、「メソッドエディタ：実行する処理をワークリストから割り当て」を開き

ボタンをクリックします。

自動解析処理後の画面



⑧　作成された化合物レポート

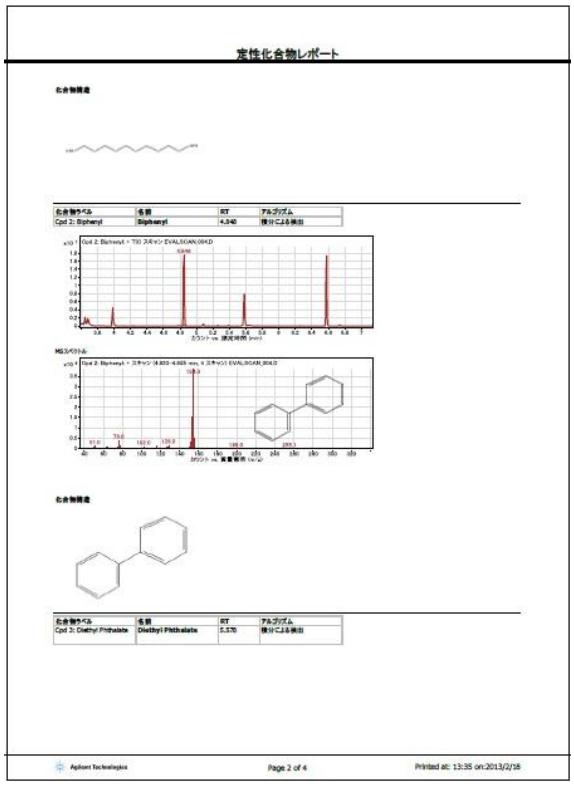


定性化合物レポート

化合物ラベル	RT	名前	MF	MFB 式	DB式	CAS (DB)
Cpd 1: Dodecane	3.981	Dodecane	C12H26	C12H26	C12H26	10
Cpd 2: Biphenyl	4.840	Biphenyl	C12H10	C12H10	C12H10	10
Cpd 3: Diethyl Phthalate	5.570	Diethyl Phthalate	C12H14O4	C12H14O4	C12H14O4	10
Cpd 4: Hexadecanoic acid, methyl ester	6.374	Hexadecanoic acid, methyl ester	C17H34O2	C17H34O2	C17H34O2	10

化合物ラベル	名前	RT	アルゴリズム
Cpd 1: Dodecane	Dodecane	3.981	積分による検出

Page 1 of 4　　Printed at: 13:35 on:2013/2/18



定性化合物レポート

化合物ラベル	名前	RT	アルゴリズム
Cpd 2: Biphenyl	Biphenyl	4.840	積分による検出

化合物ラベル	名前	RT	アルゴリズム
Cpd 3: Diethyl Phthalate	Diethyl Phthalate	5.570	積分による検出

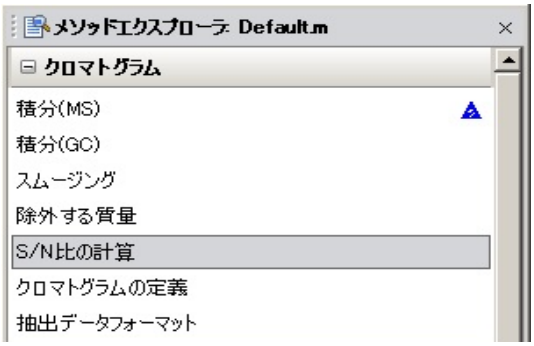
Page 2 of 4　　Printed at: 13:35 on:2013/2/18

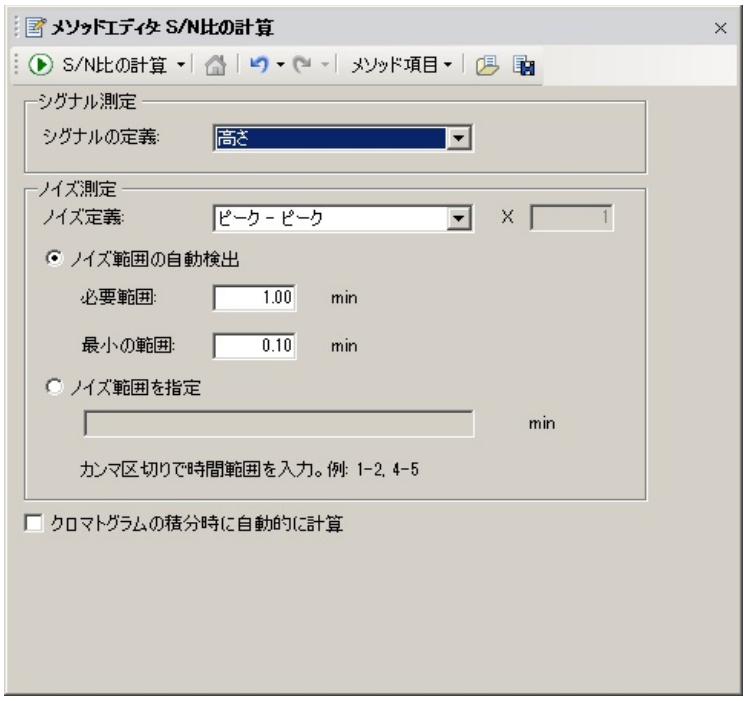
その他２枚有り

5章－12 SN（シグナル/ノイズ）比の計算

クロマトグラムのピークのベースラインノイズとの比である SN 比を計算することができます。

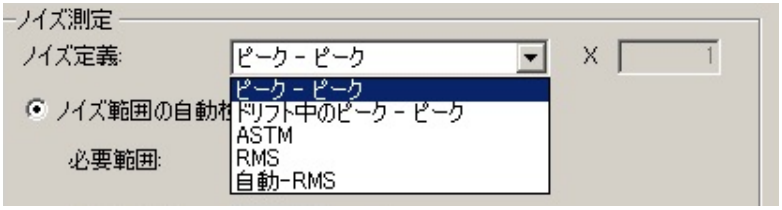
① メソッドエクスプローラの［クロマトグラム］－［SN 比の計算］をクリックし「SN 比の計算」のメソッドエディタ画面を表示させます。





② 「シグナル測定」の「シグナルの定義」を選択します。
通常は「高さ」を選択します。

③　「ノイズの定義」を選択します。



次の５つの選択が可能です。

１　「ピークーピーク」
　最大値と最小値の幅をノイズ幅とします。

２　「ドリフト中のピークーピーク」
　ベースラインがドリフトしているクロマトに使用します。ドリフトしているベースラインを回帰直線で近似し、これを０としてプラス方向の最大値とマイナス方向の最小値の幅をノイズ幅とします。

３　「ASTM」(American Society of Testing and Materials の規格)
　ノイズは「ドリフト中のピークーピーク」と同じ方法で計算されますが、ノイズ幅は最大値ではなく、個々のノイズの平均として計算されます。

４　「RMS」
　二乗平均平方根でノイズ幅を設定します。

５　「自動－RMS」
　「RMS」で計算するノイズが一番少ないベースラインの位置を自動で探します。

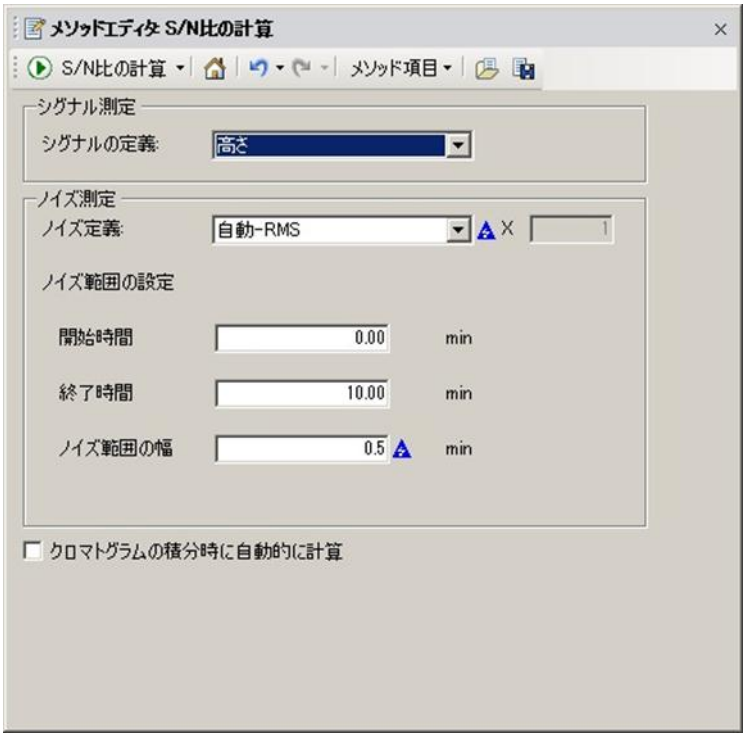
ここでは「自動－RMS」を選択してみます。

④　「ノイズ範囲の設定」を行います。

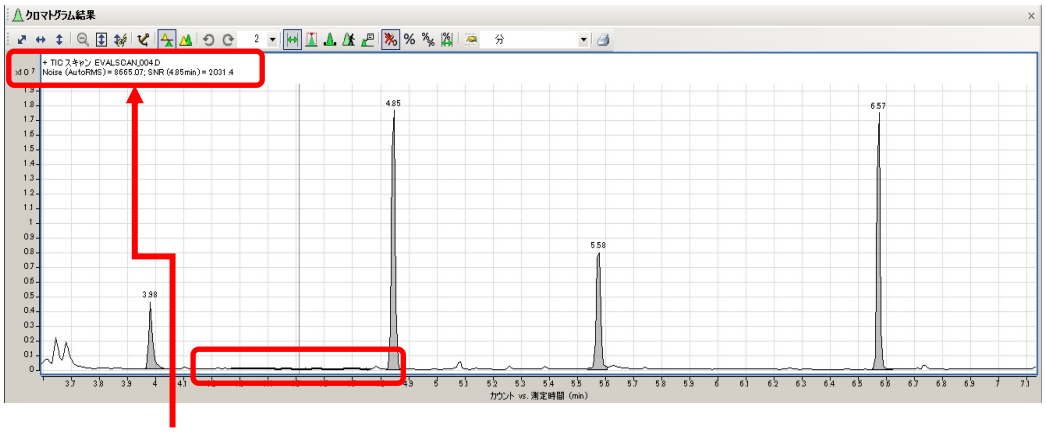
「自動－RMS」の場合、ノイズ幅が最小となる位置を探す範囲である「開始時間」と「終了時間」を設定します（データを読み込まれている場合測定時間の値が初期値として入っています）。

次にノイズの計算に使う「ノイズ範囲の幅」を設定します。

クロマトグラムの積分時に SN 比の計算を自動で行いたい場合には、「□クロマトグラムの積分時に自動的に計算」のチェックボックス（□）をチェックします。



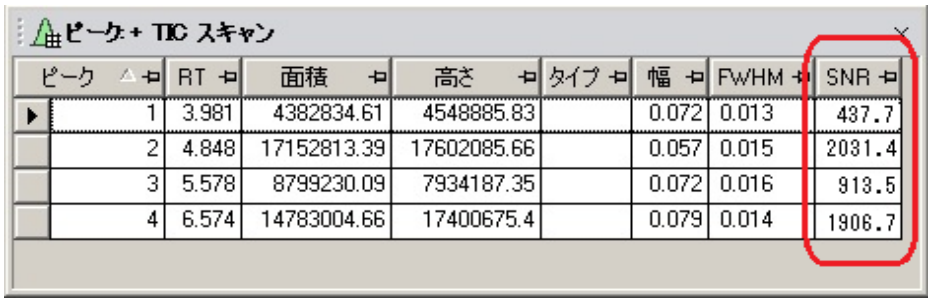
⑤　SN 比の計算を行いたいデータのクロマトグラムをクリックしてハイライト表示に変えてから S/N比の計算 ボタンをクリックし、SN 比の計算を実行します。



Noise(AutoRMS)=8665.07;SNR(4.85min)=2031.4

デフォルトの設定では、タイトルのところにクロマトグラムの中の最大のピークの SN 比が表示されます。
また設定されたノイズの位置は、そこだけベースラインが太く描かれます。

上記の例の自動 RMS にて計算された Noise は 8665.07、4.85min のピークの SNR（Signal Noise Ratio）は 2031.4 となります。
個々のピークの SN 比を表示するには、「積分のピークリスト」を表示させてください。



ピーク + TIC スキャン

ピーク	RT	面積	高さ	タイプ	幅	FWHM	SNR
1	3.981	4382834.61	4548885.83		0.072	0.013	437.7
2	4.848	17152813.39	17602085.66		0.057	0.015	2031.4
3	5.578	8799230.09	7934187.35		0.072	0.016	913.5
4	6.574	14783004.66	17400675.4		0.079	0.014	1906.7

⑥　クロマトグラム表示の変更と積分条件の変更

SN 比の計算は、クロマトグラムを積分し、ピークを検出することによってピークとベースラインの位置を認識します。このため使用する積分条件によっては設定されたノイズの範囲を取ることができない場合も発生します。

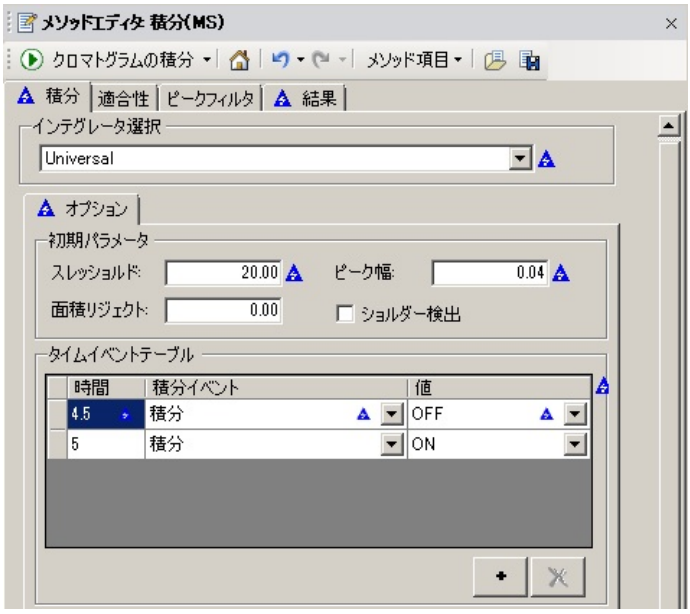
積分条件のタイムイベント等を用いて特定のピークのみを除外したり、特定のピークのみを計算させたりも可能です。

また上記の例ではクロマトグラムの最大ピークの結果のみ表示されていますが各ピークのラベルとしても表示ができます。

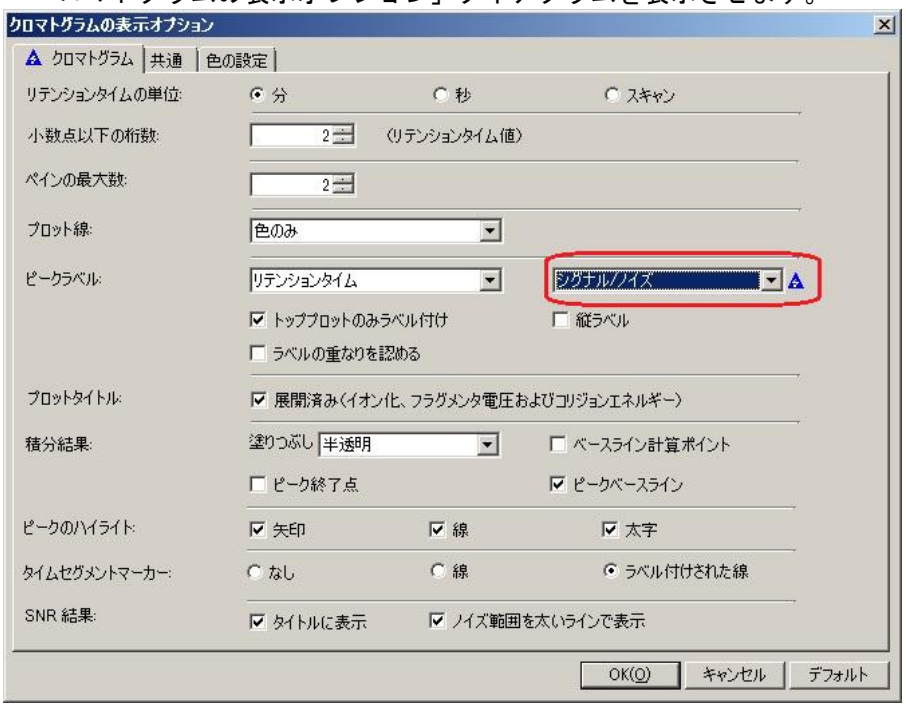
a)　「クロマトグラムの積分時に自動的に計算」のチェックボックス（□）をチェックします。

b)　メソッドエクスプローラの　［ 積分（MS）］をクリックしてメソッドエディタ「積分（MS）」ウィンドウを表示させます。

c)　「インテグレータ選択」に「Universal」を選び、4.85min のピークが積分されないように次のようなパラメータとタイムイベントを設定します。



d)　次に「クロマトグラムの結果」ウィンドウの アイコンをクリックし「クロマトグラムの表示オプション」ダイアグラムを表示させます。



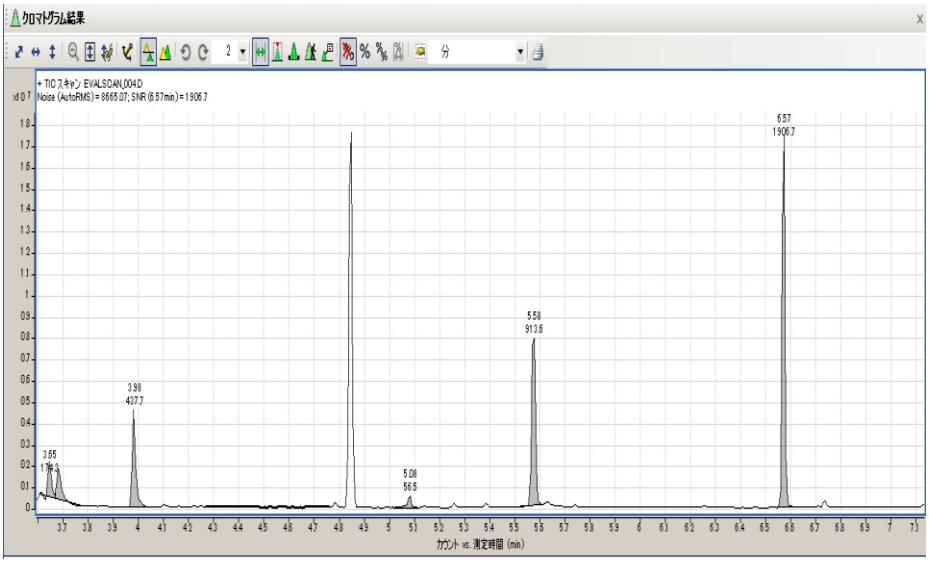
e)　「ピークラベル」の 2 つ目の設定に「シグナル/ノイズ」を選択し、

ボタンをクリックします。

f)　メソッドエディタ「積分（MS）」の

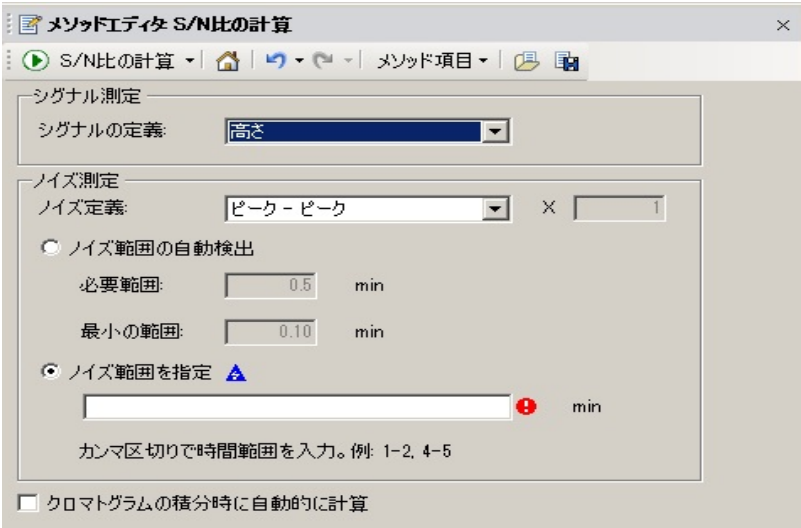
ボタンを押して積分を実行します。

g)　積分のタイムイベントにて設定された 4.85min のピークは除外され、それ以外の積分されたピークにリテンションタイムと RMS　SN 比がピークトップにラベルされます。



⑦　「ノイズの定義」の変更とノイズ範囲のマニュアル設定の仕方

a)　メソッドエディタ「SN 比の計算」にて「ノイズの定義」を「ピーク－ピーク」に設定するとノイズの範囲の設定は、「ノイズ範囲の自動検出」か「ノイズ範囲の指定」となります。



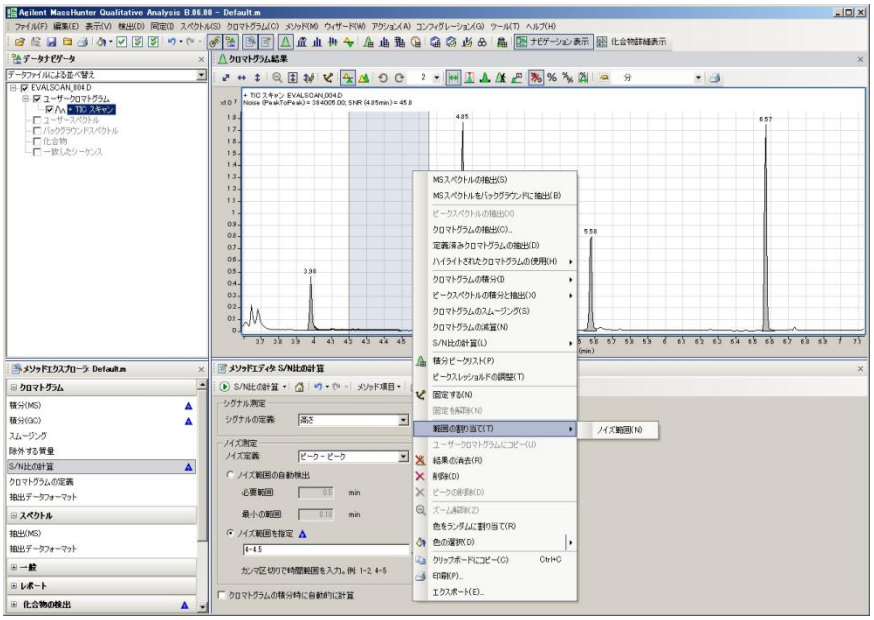
b)　「ノイズ範囲の自動検出」を選択した場合、ノイズ計算に必要とされる時間幅の設定があり、さらに最小の時間幅の設定があります。

c)　「ノイズ範囲の指定」を選択すると入力欄がアクティブとなり何も入力されていないとアイコンが表示されます。

d)　表示されている入力の説明のようにタイピングにて時間の範囲指定が可能で、複数の範囲の設定も可能です。

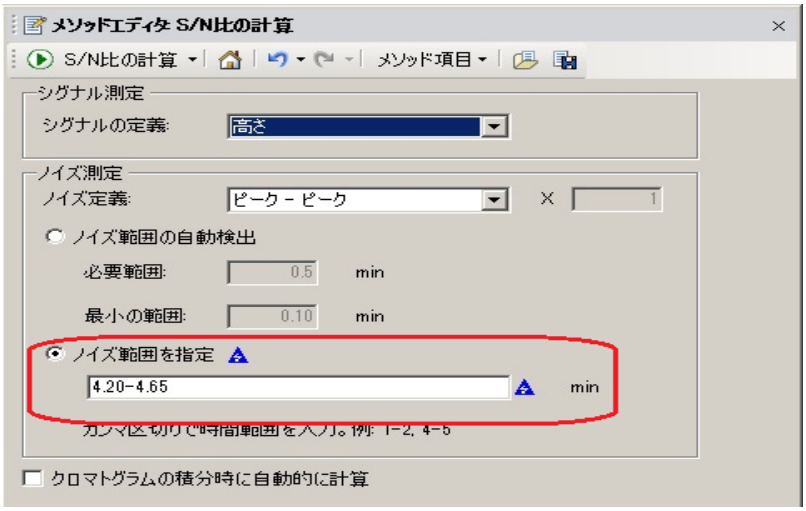
e)　マウスを使ってマニュアルにてノイズの範囲を指定するには、「ノイズ範囲の指定」の時間範囲に適当な時間を一旦入力します。
例

f)　「クロマトグラムの結果」ウィンドウにて範囲指定のアイコン をクリックします。



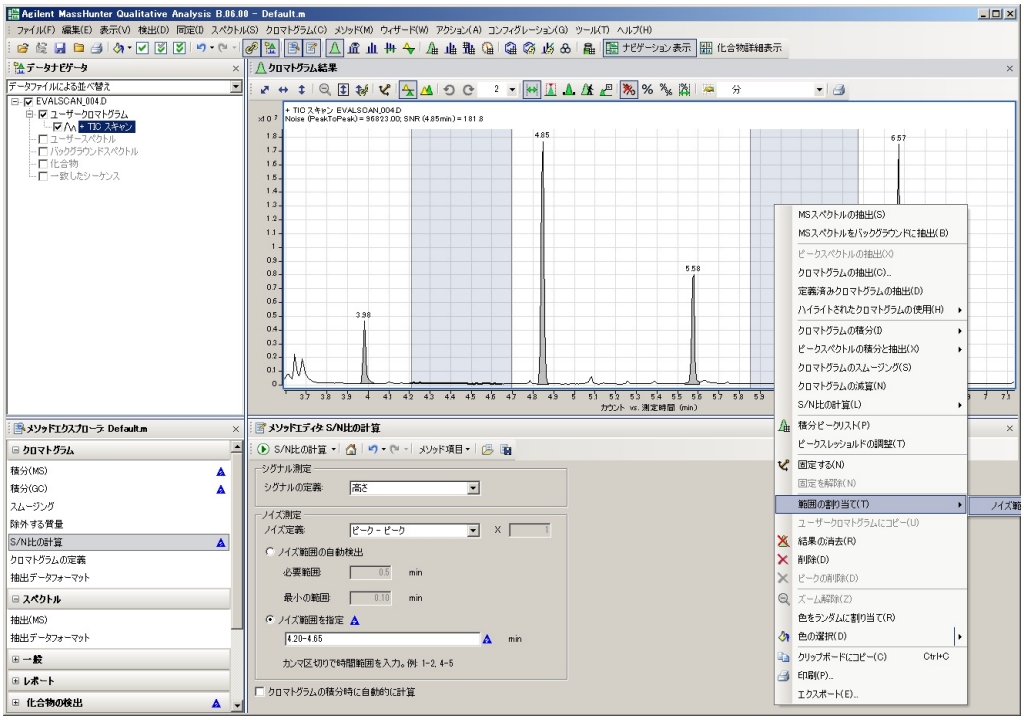
g)　ノイズの範囲として設定したい範囲をマウスで左ドラッグして指定し、右クリックでポップアップメニューを表示させます。

h)　ポップアップメニューの［範囲の割り当て(T)］－［ノイズ範囲(N)］をクリックします。

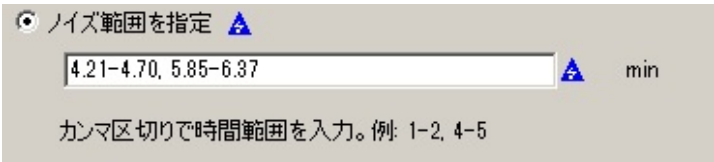


i)　マウスにて指定した時間範囲が、メソッドエディタ「SN 比の計算」の「ノイズ範囲の指定」の時間設定欄に入力されます。

j)　複数のノイズ範囲をマニュアルにて入力したい場合には、Ctrl キーを押しながらマウスにてノイズ範囲として設定したい範囲を左ドラッグし、複数の範囲を指定します。上記と同様に右クリックでポップアップメニューを表示させ、［範囲の割り当て(T)］－［ノイズ範囲(N)］をクリックします。

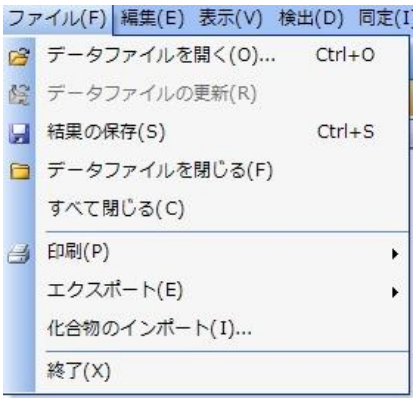


k)　マウスにて指定した時間範囲が、メソッドエディタ「SN 比の計算」の「ノイズ範囲の指定」の時間設定欄に入力されます。



5章－13　定性解析の終了

① 定性解析を終了するにはメニューの［ファイル(F)］をクリックし、プルダウンメニュー内の［終了(X)］をクリックします。



② 次のような「保存」ウィンドウが表示されますので、現在読み出しているデータの処理結果を保存するようであれば はい(Y) ボタンをクリックし、不要であれば いいえ(N) ボタンをクリックしてください。

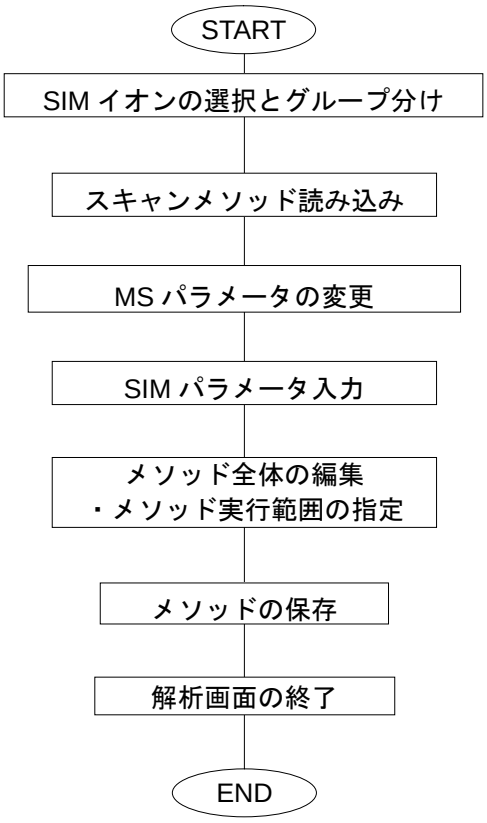
メソッド条件を変更していない場合には、定性解析がクローズされます。

③ メソッド条件が変更されている場合には、「名前を付けて保存」ウィンドウが表示されメソッドの変更の保存を聞いてきます。

第6章
定量のための
測定条件設定

6 章－1	SIM モードの特徴	6－3
6 章－2	ターゲットイオンとクオリファイアイオン	6－3
6 章－3	SIM イオンの選択	6－4
6 章－4	SIM イオンとタイムセグメント	6－5
6 章－5	メソッドの読み込み	6－6
6 章－6	SIM 条件の設定	6－7
6 章－7	メソッドの実行範囲を変更する	6－10
6 章－8	SIM/Scan 同時取り込みの設定方法	6－11

＜定量のための測定条件設定＞



本章には、下記についての説明も含まれています。
・SIM 測定の特徴
・SIM/Scan 同時測定の設定方法

本章では、未知サンプルの定量を実施するための SIM 測定条件を設定します。
未知サンプルの定量を行う場合、一般的に MSD の測定モードは SIM を使用します。

6章－1　SIM モードの特徴

SIM（Selected Ion Monitoring）モードには下記の特徴があります。

・高選択性である
・高感度（シグナル/ノイズ比）が得られる
・ライブラリ検索はできない

6章－2　ターゲットイオンとクオリファイアイオン

・ターゲットイオン（定量イオン）

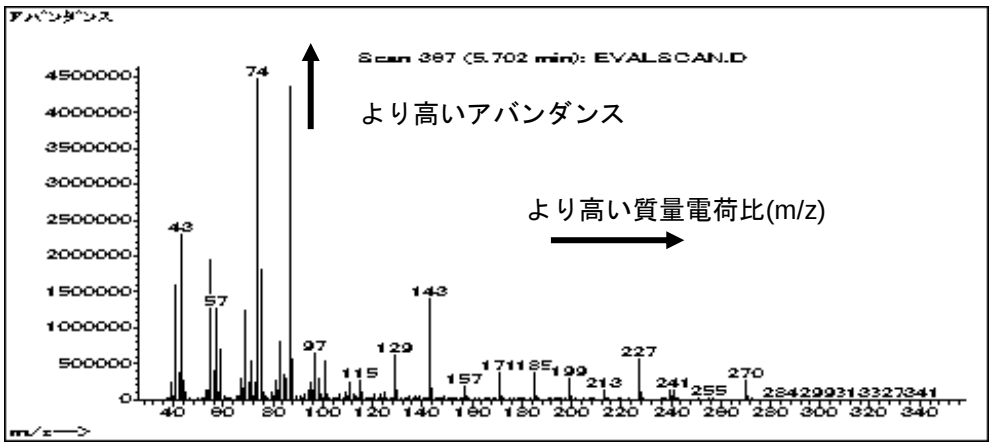
1 つのピークに対して必ず 1 つ必要です。
このイオンの積分結果が定量計算に使用されます。

・クオリファイアイオン（確認イオン）

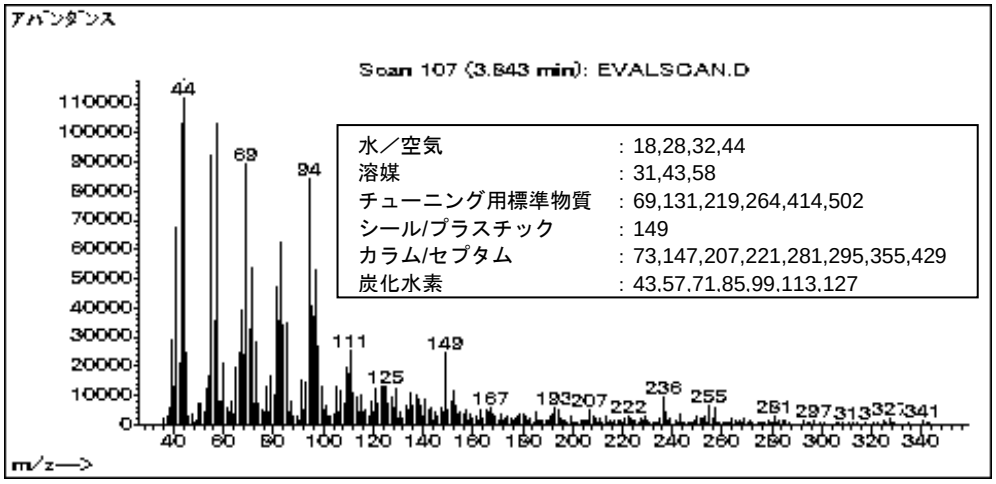
ターゲットイオンとのアバンダンス比から本当にその化合物であるかどうかを確認するために設定するイオンです。

6章－3　SIM イオンの選択

選択する SIM イオンは、そのピークに特徴的（ユニーク）で、より高い質量電荷比(*m/z*)とアバンダンスを持つものが望ましいとされています。



下図は、ベースラインのスペクトルです。これらのイオンを使用すると、ベースラインノイズの影響により、正確な定量が難しくなります。これらのイオンの使用は避けることを推奨します。



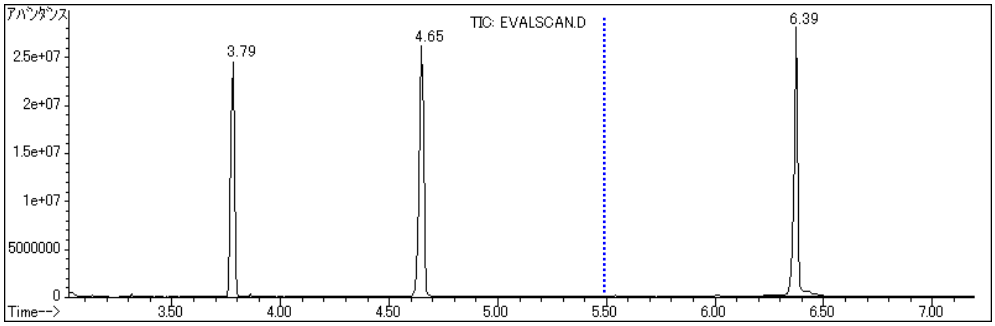
6章－4　SIM イオンとタイムセグメント

同時に取り込めるイオンの数には制限があります。また、同時に取り込むイオンの数が少ないほどシグナル/ノイズ比の値が良くなります。そのため、通常取り込むイオンを時間で区切って切り替えます。1 つの時間で区切られているイオンをグループ化したものをタイムセグメントと呼び、それぞれにグループ名を付けます。

クロマトグラムは、マトリックスの影響などにより、多少リテンションタイムが前後する可能性があります。そのため、タイムセグメントはピークとピークの間が離れているところで分ける事を推奨します。

以下のように、SIM 測定に必要な条件をスキャン測定のデータを元に決定します。

・各ピークでどのイオン（*m/z*）を取り込むか
・クロマトグラムのどの位置（時間）で、タイムセグメントを分けるか



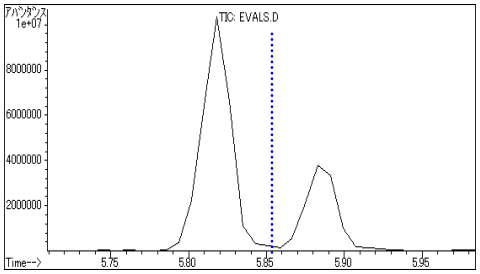
タイムセグメント内のグループ名	1		2
区切りの時間	5.5 分		
ピーク番号	1	2	3
ターゲット	170	154	270
クオリファイア	85	153	87

＜備考＞
1 つのタイムセグメントで取り込むイオンの数が少ない程、ベースラインノイズの変動が小さくなります（微量分析に適します）。

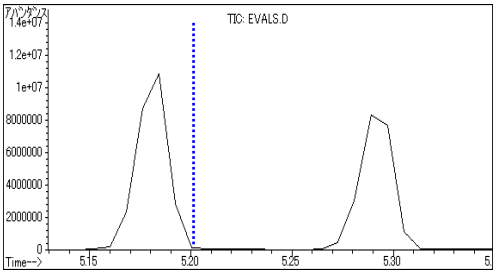
注意

以下の 2 例のようなタイムセグメント分けを実施するとリテンションタイムの変動や濃度によるピーク形状の変化などにより、正確な定量結果が得られない場合があります。

ピークが近接している



分ける時間がピーク間の中心でない

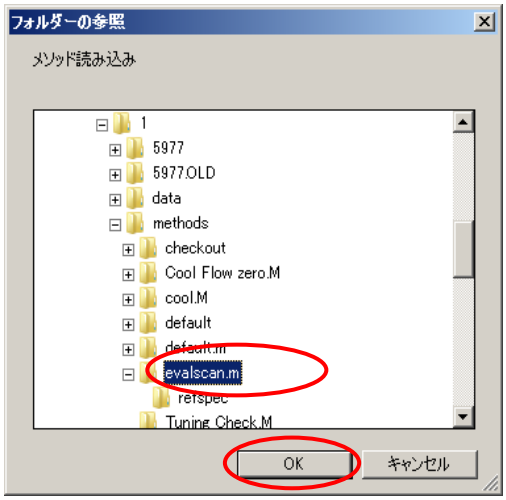


6章－5　メソッドの読み込み

既に作成したスキャン測定用メソッドを使用し、その MSD 取込み条件のみ変更して SIM メソッドを作成します。そのため、まずスキャンで測定したメソッドを読み込みます。

(1) （メソッドの読み込みアイコン）をクリックします。メニューからの場合は、［メソッド］－［メソッドの読み込み］を選択します。

(2) ［フォルダーの参照］ダイアログボックスから evalscan.M を選択し、OK をクリックします。



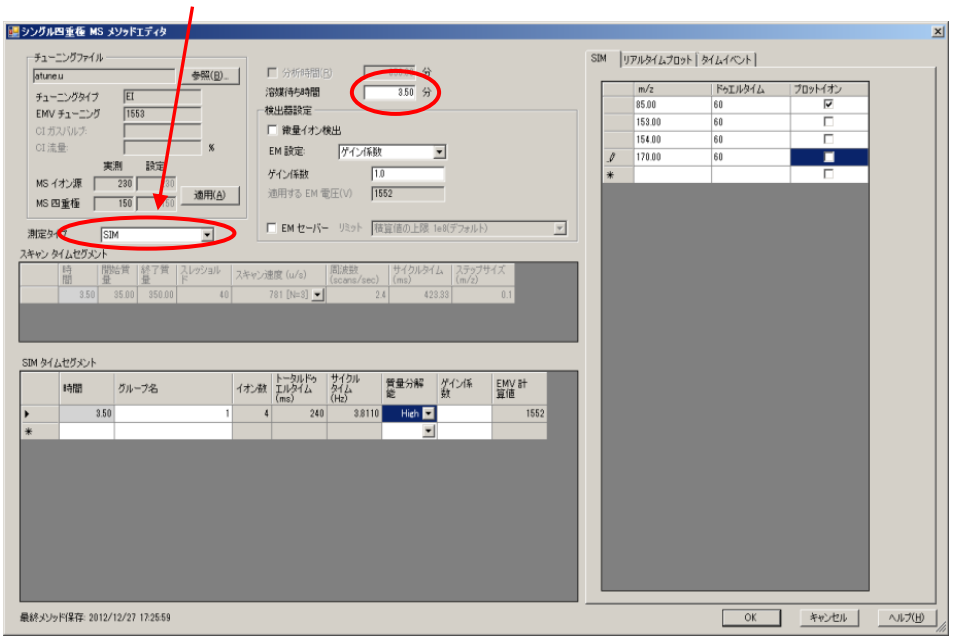
6章－6　SIM 条件の設定

MSD の測定条件 1（MS パラメータ）
測定モード　　：SIM
EM 電圧　　：0、相対
溶媒待ち時間　　：3.5min

(1)

（MS パラメータアイコン）をクリックします。メニューからの場合は、［機器］（Ｉ）－［MS パラメータ編集］をクリックします。［シングル四重極ＭＳメソッドエディタ］ダイアログボックスが開きます。

(2) 測定モードで［SIM］を選択します。



(3) 溶媒待ち時間に 3.5 分を設定します。

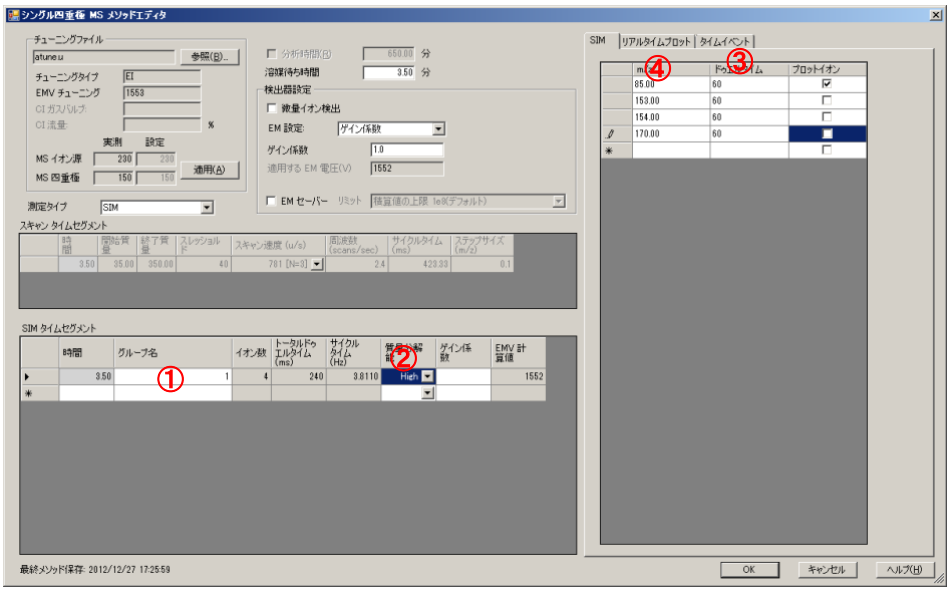
（4）　［SIM タイムセグメント］、［SIM］タブ　にデータを入力します。

MSD の測定条件 2（SIM パラメータ編集：グループ 1）	
グループ名	：1
開始時間	：3.50min（溶媒待ち時間から自動で入力されます）
質量分解能	：High
イオン	：170, 85, 154, 153（ドゥエルタイム各 60）
サイクル/sec	：3～4

① グループ名に［1］を入力します。

② 質量分解能は［High］を選択します。

③ *m/z* に［85］　ドゥエルタイムに［60］を入力します。
同様にイオン 153、154、170 を追加します。



④ ［ＳＩＭ］タブ内で右クリックするとラインの削除などのメニューが出ます。

＜参考＞
ドゥエルタイム（１質量当たりに割り当てる時間 ms）は［サイクルタイム(Hz)］の値が、3～4Hz 程度になるような値を使用します。

※：ゲイン係数や、溶媒待ち時間などの他のパラメータは、スキャン測定時と同様のままにします。

（5）　［SIM タイムセグメント］、［SIM］タブ　でグループ 2 を設定します。

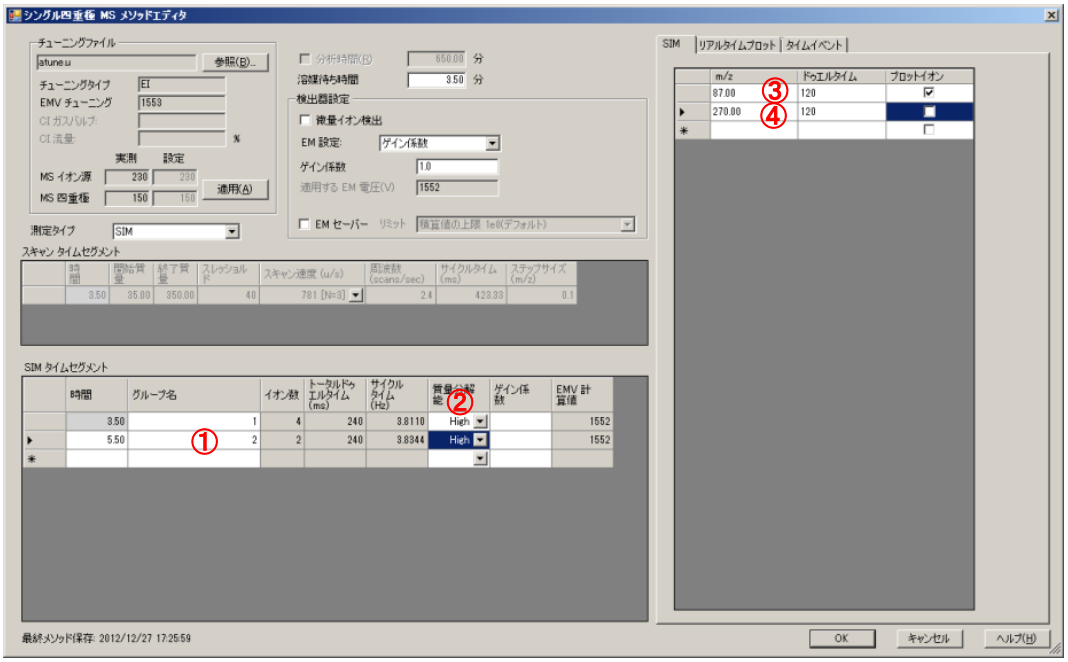
MSD の測定条件 3（SIM パラメータ編集：グループ 2）	
グループ名	：2
開始時間	：5.5min
質量分解能	：High
イオン	：87, 270（ドゥエルタイム各 120）
サイクル/sec	：3～4

①　グループ名に［2］、開始時間に［5.5］を入力します。

②　質量分解能は［High］を選択します。

③　*m/z* に［87］、ドゥエルタイムに［120］を入力します。

④　同様にイオン 270 を追加します。



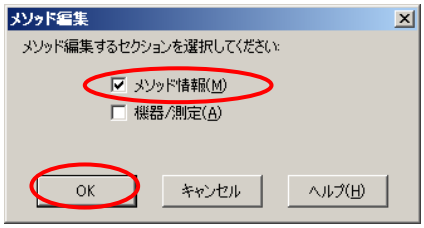
（6）　［シングル四重極ＭＳメソッドエディタ］画面で、 OK をクリックし SIM 設定を終了します。

6章－7　メソッドの実行範囲を変更する

メソッドには、実行範囲の設定があります。メソッド実行範囲は［メソッド情報］画面で設定します。シーケンスを実行する際には、この実行範囲に注意する必要があります。

(1)　（メソッド全体の編集アイコン）をクリックします。メニューの場合には［メソッド］－［メソッド全体の編集］をクリックします。

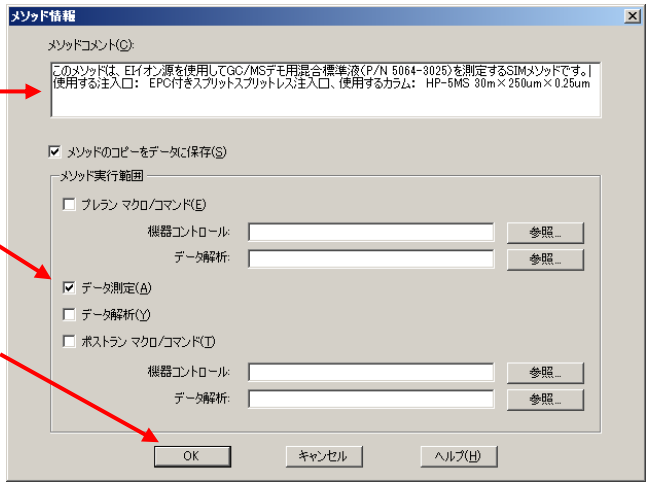
(2)　［メソッド情報］のみチェックして OK をクリックします。



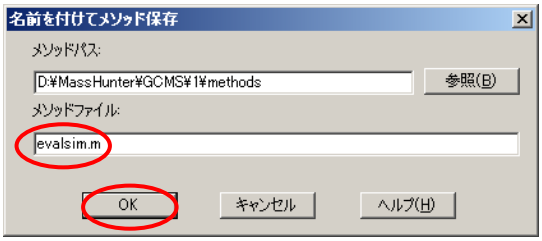
(3)　メソッドのコメントを適宜入力します。

(4)　［データ測定］のチェックのみをオンにします。

(5)　OK をクリックします。



(6)　［メソッドファイル］欄［evalsim］と入力して OK をクリックします。



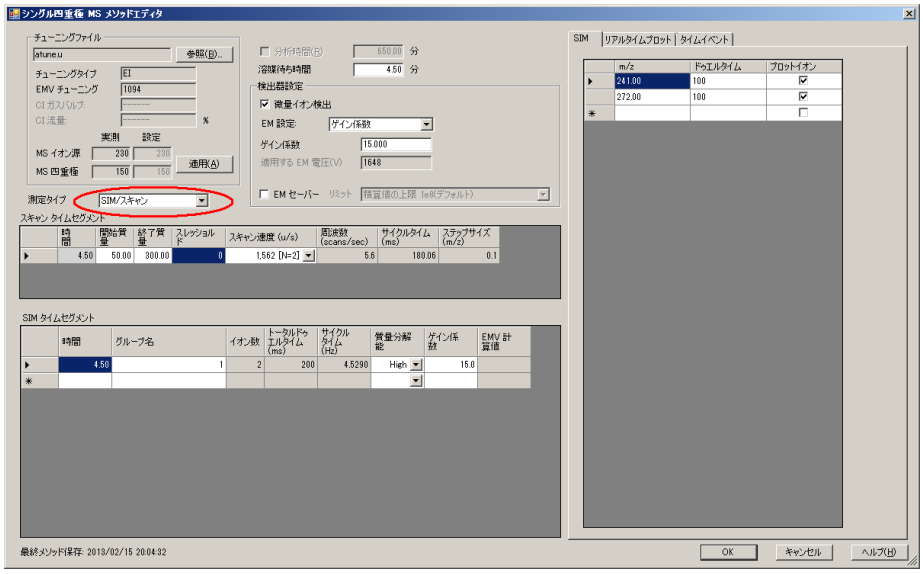
6章－8　SIM/Scan 同時取り込みの設定方法

SIM/Scan 同時取り込みを使用すると、1 回の分析で SIM とスキャンのデータを同時に取得することができます。測定条件は、SIM と Scan の両方を設定する必要があります。

（1）　SIM/Scan 同時取り込みの設定

①　［機器］メニューの［MS パラメータ編集］をクリックし、［シングル四重極 MS メソッドエディタ］ダイアログボックスを開きます。

②　測定タイプを［SIM/スキャン］にします。

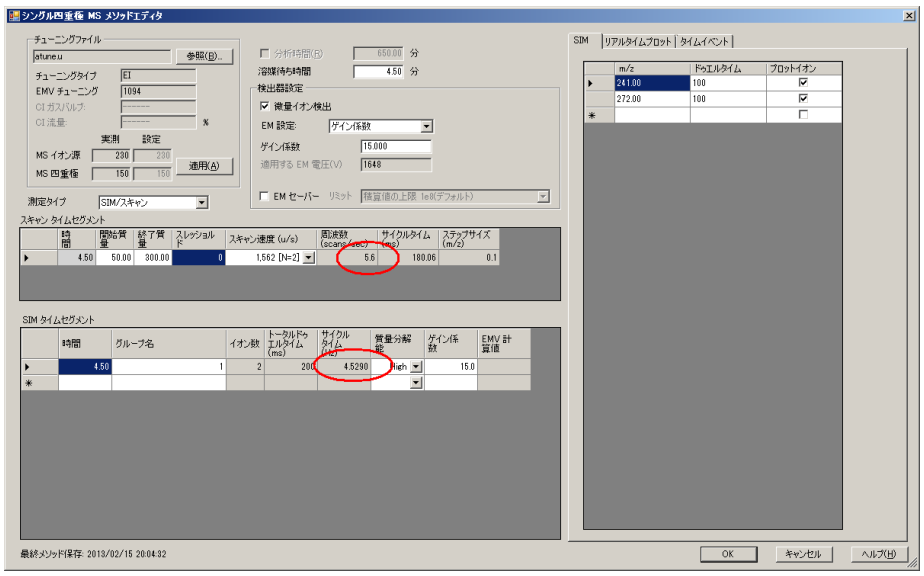


③　これまでに設定してきた、［スキャンタイムセグメント］と［SIM タイムセグメント］、［SIM］タブの両方が設定可能となります。

④　［スキャンタイムセグメント］内の設定を確認します。

⑤　［SIM タイムセグメント］、［SIM］タブ内の設定を確認します。

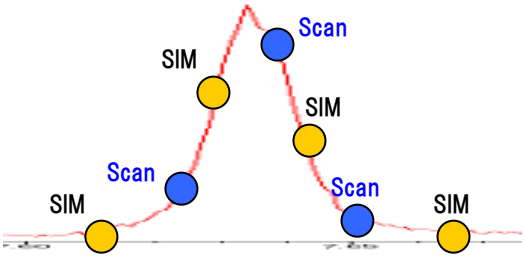
⑥　その際、表示されている周波数及びサイクルタイムは、実際のデータ取り込み周期とは異なりますので注意してください。詳細については後述の「SIM/Scan 同時取り込みでのデータポイント数」を参照してください。



⑦　設定が終了したらメソッドを保存します。

（2） SIM/Scan 同時取り込みでのデータポイント数

SIM/Scan 同時取り込みでは、実際には SIM と Scan のデータを交互に取り込みます。したがって、別々に取り込んだ場合よりも各モードのデータポイントが少なくなります。



実際の取り込みの速度は次式に従います。

SIM/Scan サイクル速度 $= \dfrac{1}{\left(\dfrac{1}{A}+\dfrac{1}{B}\right)\times 1.05}$

A = スキャン速度（スキャン/Sec）
B = SIM サイクル速度（サイクル/Sec）
SIM から Scan への切り替え時間は、実行時間の約 5%

<計算例>

内径 0.25mm の一般的なキャピラリカラムを使用し、下記の取り込み条件におけるサイクル速度の計算例

一般的なピーク幅　　：**6sec** 程度
スキャン設定　　：**35 ~ 550** amu,
　　スレッショルド **40**, サンプリングレート **1** の時 スキャン/Sec = **5.36**
　　スレッショルド **40**, サンプリングレート **2** の時 スキャン/Sec = **2.83**
SIM 設定　　:取込イオン数 **27**, ドゥエル 各 **10** msec の時サイクル/Sec = **3.18**

1 ピークあたりのポイント数を **10** ポイントに調整したい場合

計算式 1　10 ポイント÷6sec = 1.67 Cycle/sec

よって 1 ピークにつき 10 以上のデータポイントを取得するためには、**1.67cycle/sec 以上**のサイクル速度が必要です。次のいずれかの方法でサイクル速度を調整します。

（1）　Scan のサンプリングレートの値を小さくしてスキャン速度を速くする
（2）　SIM のドゥエルタイムを短くする
（3）　上記の両方を実施する

SIM 条件が Dwell Time = 10 msec で最小値の 5msec に近い場合、（1）の Scan のサンプリングレートの値を調整します。

サンプリングレート 2（2^2）の場合
計算式 2　SIM/Scan サイクル速度　= $\dfrac{1}{\left(\dfrac{1}{2.83}+\dfrac{1}{3.18}\right)\times 1.05}$ = **1.43 Cycle/sec**

サンプリングレート 1（2^1）の場合
計算式 3　SIM/Scan サイクル速度　= $\dfrac{1}{\left(\dfrac{1}{5.36}+\dfrac{1}{3.18}\right)\times 1.05}$ = **1.90 Cycle/sec**

計算式 1 より、**1.67Cycle/sec 以上**の速さが必要なため、Scan のサンプリングレートを **1**（2^1）に設定するとピーク幅 6 秒程度のピークのポイント数を 10 ポイント以上に調整することが可能です。

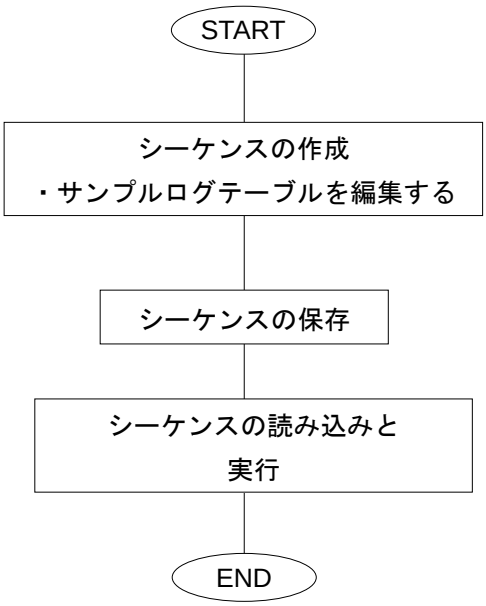
＜参考＞
サイクル速度を増加させると一般的にノイズが増加します。ノイズの増加により S/N 比の低下や、データファイルのサイズの増加などを考慮して、SIM/Scan サイクル速度を調節してください。

第7章
シーケンス

７章－1	シーケンスの作成	7－3
７章－2	シーケンスの保存	7－9
７章－3	シーケンスの実行	7－10
７章－4	シーケンスログの印刷	7－14
７章－5	その他の使用方法	7－15

＜シーケンス＞

本章では、シーケンスの作成および実行方法について説明しています。



本章には、下記についての説明も含まれています。
・サンプルログテーブルへ連続したバイアルを入力する
・行を指定してシーケンスを実行する

指定した順番に指定したメソッドを連続して実行することをシーケンスと呼びます。

シーケンスを用いて、多点検量線用の標準サンプルと未知サンプルの連続分析を行うと効率的です。

本章では前章で作成した SIM メソッドを使用して、下記の表のとおり標準サンプルのシーケンスを作成・連続分析を実施して、検量線作成に必要なデータ取り込みを行います。

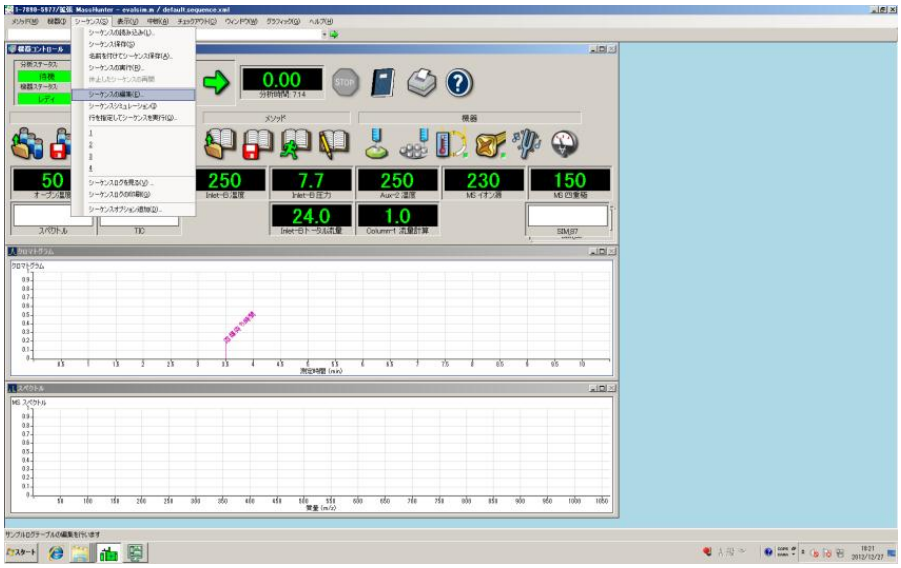
検量線の作成には、濃度のレベル・希釈率の設定も必要です。
今回は、下記の表のとおりに設定します。

ライン	レベル	希釈	タイプ	サンプル名	使用メソッド	データファイル
1	1	1	キャリブレーション	標準試料 A　5ng/uL	evalsim.M	SIM01.D
2	2	1	キャリブレーション	標準試料 B 10ng/uL	evalsim.M	SIM02.D
3	3	1	キャリブレーション	標準試料 C 20ng/uL	evalsim.M	SIM03.D
4		1	サンプル	テスト試料	evalsim.M	Unknown01.D

※：練習では、テスト試料として、標準試料 B を用います。

7章－1　シーケンスの作成

（1） （シーケンスの編集アイコン）をクリックします。メニューからの場合は［シーケンス］－［シーケンス編集］をクリックします。



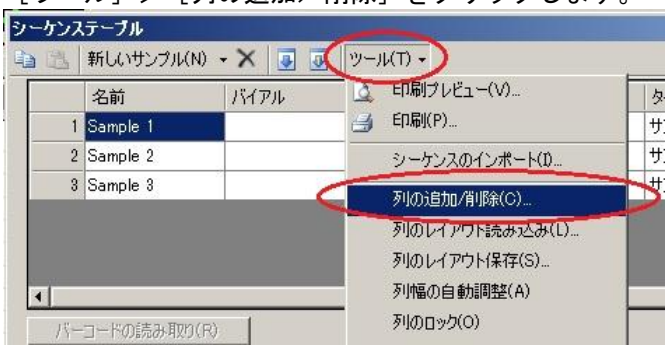
（2）　シーケンステーブルの編集

デフォルトの状態では、下記のようなテーブル編集画面が表示されます。

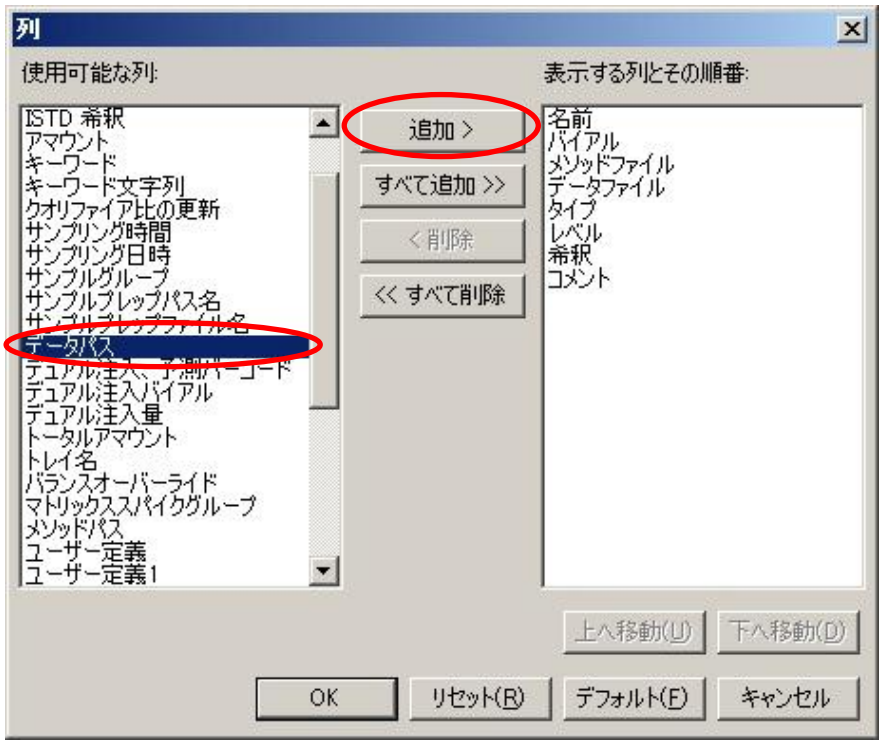
（表示項目などを変更している場合や、現在読み込み中のシーケンスにより、下記と表示内容が異なることがあります。）

：編集しやすくするために、表の表示項目と並びを変更します。

①　［ツール］＞［列の追加／削除］をクリックします。



②　左の［利用可能な列］から項目を選択し、［追加］にて右側の［表示する列とその順番］に追加します。（下記は「データパス」を選択した例）



表示項目は、編集の表の左側からの順番を示しています。

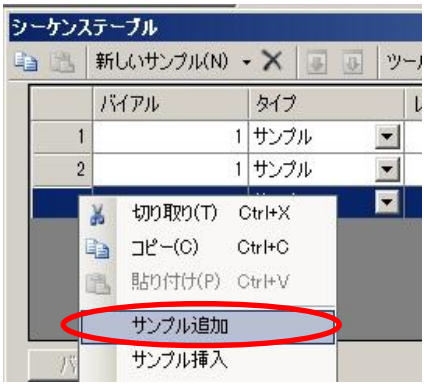
見やすい順番に変更するには、「表示する列とその順番」から項目を選択し、[上へ移動(U)] [下へ移動(D)] ボタンで順番を変更出来ます。

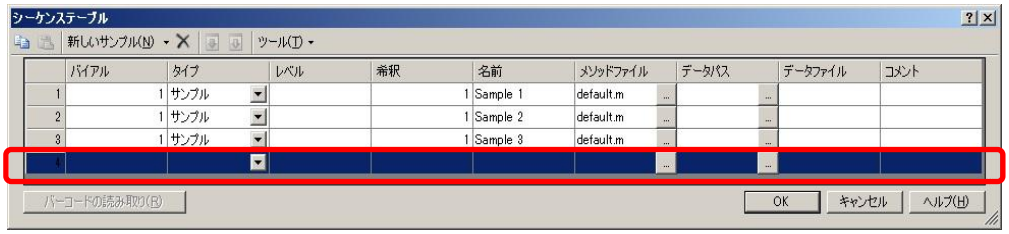
ここでは、最終的に下記のようにすることとします。
（項目は「データパス」を追加。順番は大きく変更）

（「バイアル」-「タイプ」-「レベル」-「希釈」-「名前」-「メソッドファイル」-「データパス」-「データファイル」-「コメント」　の順）

③ [OK] をクリックします。

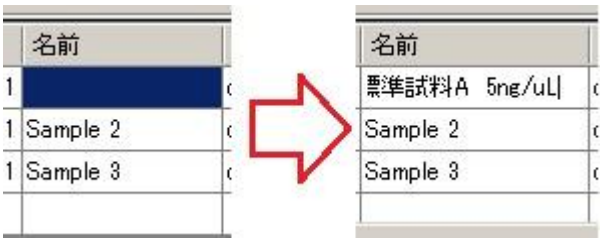
④　一番左のグレーバックの数字欄を右クリックし、「サンプル追加」で行を追加し、全部で 4 行にします。





行が追加されます。

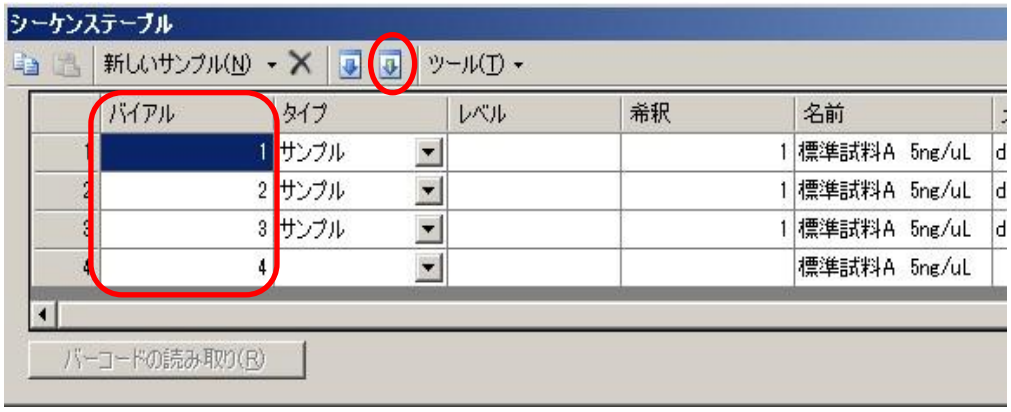
⑤　各セルは、直接編集出来ます。
（例：「名前」列の一番上のセルをクリックしてハイライトさせて、文字を入力すると編集出来ます。）



⑥　セルを選択しハイライトさせた状態で、（下へコピー）をクリックすると、ハイライトさせたセルより下の行に内容がコピーされます。

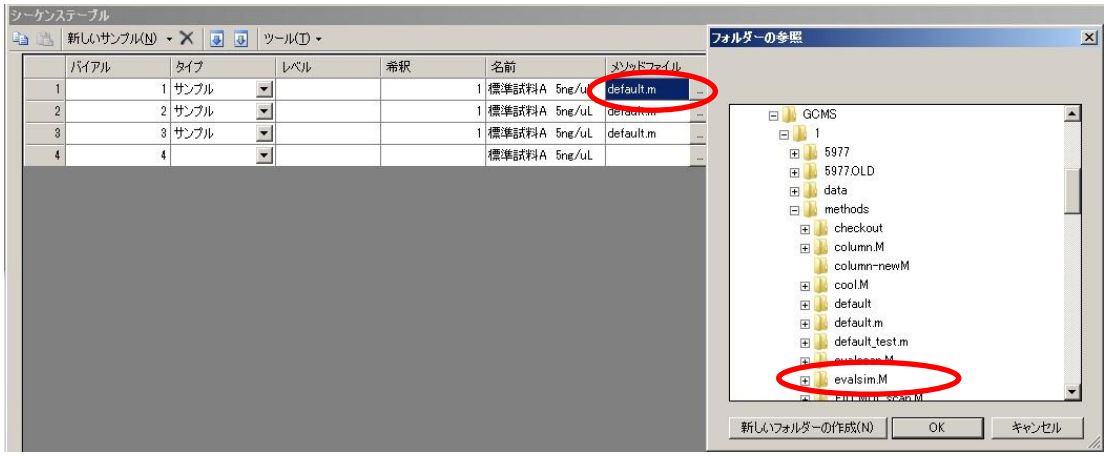
（「名前」列の一番上のセルをコピーした例）

⑦　セルを選択しハイライトさせた状態で、（連続コピー）をクリックすると、ハイライトさせたセルより下の行に、数字が 1 つずつ繰り上がった状態で内容が作成されます。



（「バイアル」列の一番上のセルから連続コピーした例）

⑧　1 行目の［メソッドファイル］セルのプルダウンをクリックして、［フォルダーの参照］から［evalsim.M］を選択します。
（D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥methods がデフォルトの保存先フォルダーです。）



⑨　先の章で作成した SIM メソッド［evalsim.M］を選択して OK をクリックします。

⑩　1 行目の［メソッドファイル］セルを選択し、（下へコピー）をクリックして、他の行へ反映させます。

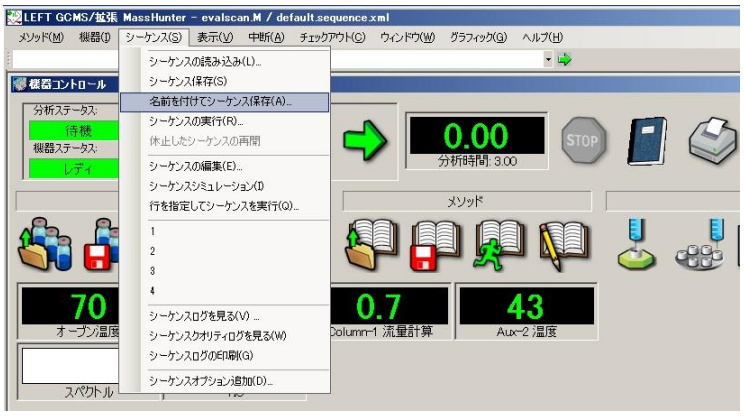
⑪　１行目の［データパス］セルのプルダウンをクリックして、［フォルダーの参照］からデータ保存先フォルダーを選択します。（新しく作ることも出来ます）
データの上書きや、後の分かり易さを考え、必ず何らかのフォルダーを作成することを推奨いたします。（今回は eval とします。）
※：デフォルトは、D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data です。

⑫　１行目の［データパス］の情報を、（下へコピー）をクリックし、他の行へ適用します。

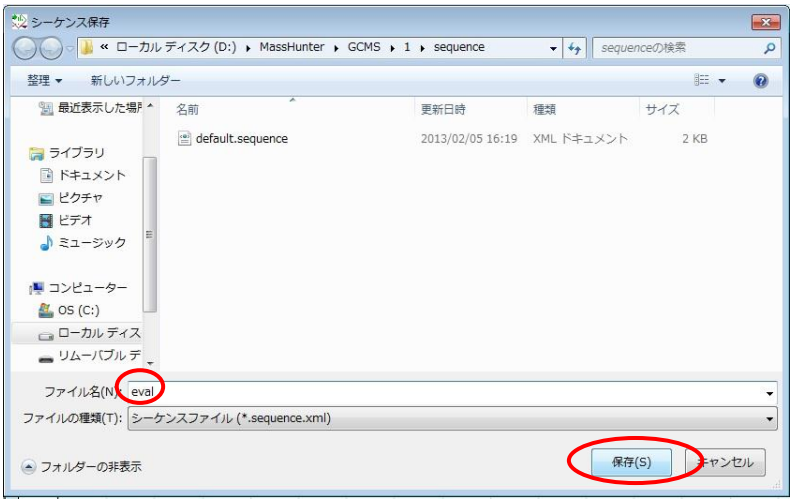
⑬　今までの操作を利用し、下図になるように編集を行います。
なお、「タイプ」セルは、をクリックして、表示候補から選択します。

7章－2 シーケンスの保存

（1） （シーケンスの保存アイコン）をクリックします。メニューの場合は、［シーケンス］－［名前を付けてシーケンス保存］をクリックします。

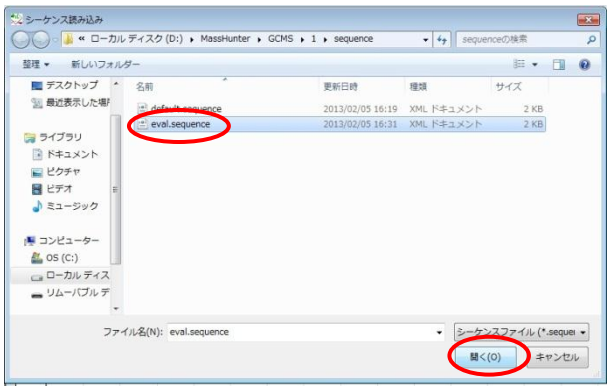


（2） ファイル名に［eval］と入力して［保存(S)］をクリックします。
※：デフォルトの保存先フォルダは、D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥sequence です。



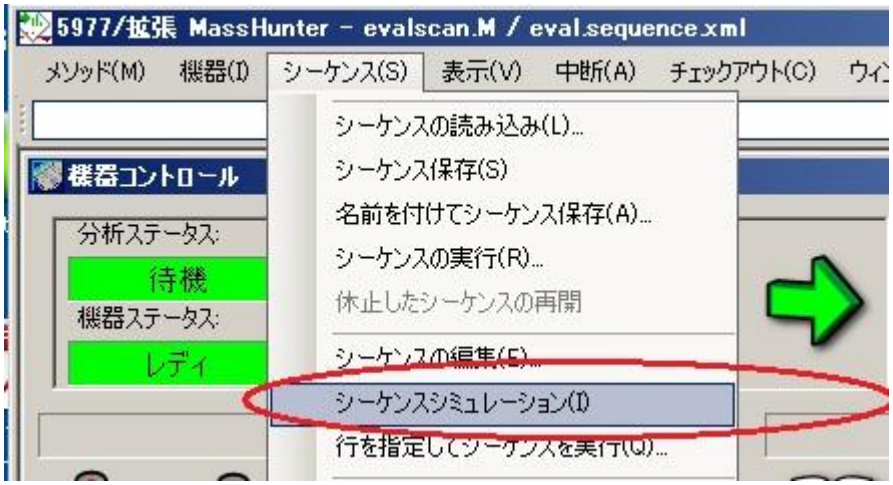
7章－3 シーケンスの実行

(1) （シーケンス読み込みアイコン）をクリックします。



(2)　[eval.sequence] を選び 開く(O) をクリックします。

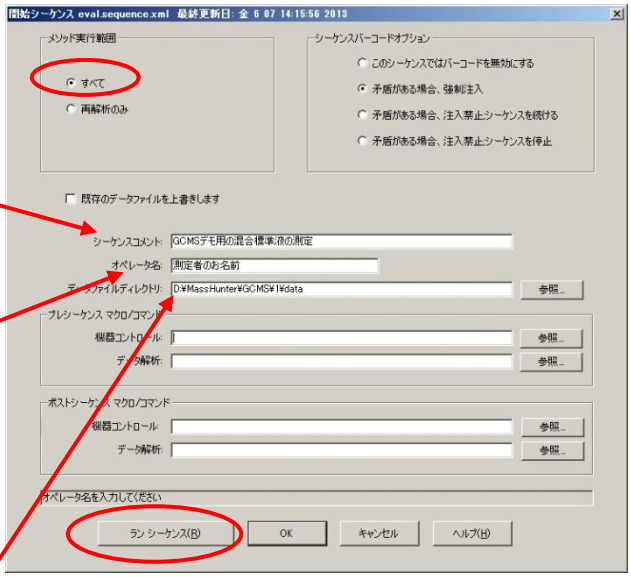
(3) （シーケンスチェック）をクリックします。メニューの場合は、[シーケンス]－[シーケンスシミュレーション]をクリックします。



(4)　メソッドの実行範囲はすべてを選択します。

(5)　コメントを適宜入力します。

(6)　名前を入力します。



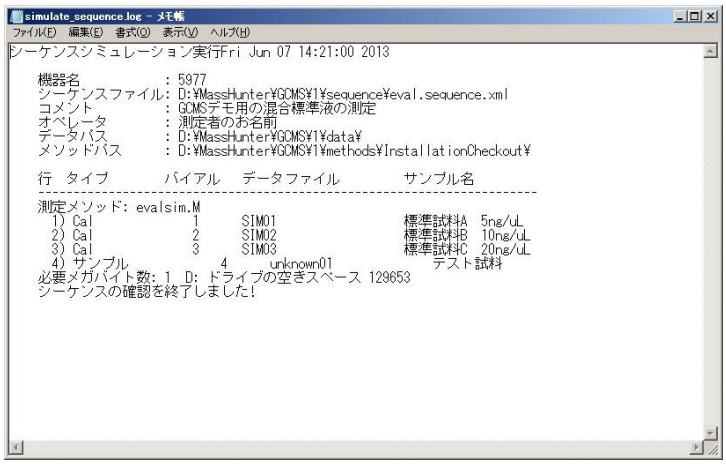
(7)　先の［シーケンステーブルの編集］のデータパスが優先されます。

［シーケンステーブルの編集］のデータパスが空白の場合は、ここでの設定が採用されます。

(8)　ラン シーケンス(R)　をクリックしてシミュレーションを開始します。

(9)　結果の表示を促されますので、[はい]をクリックします。

(10)　シミュレーションの結果が表示されます。（シーケンスの内容により、下図とは必ずしも一致しません。）



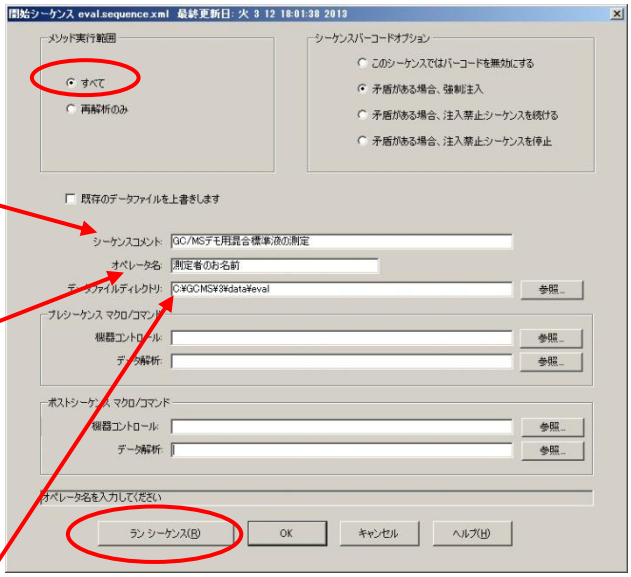
(11)　シミュレーションに問題がなければ、実際の測定に入ります。

(12)　 （シーケンスの実行アイコン）をクリックします。メニューの場合は、［シーケンス］－［シーケンスの実行］をクリックします。

(13)　メソッドの実行範囲は［全て］を選択します。

(14) コメントを適宜入力します。

(15) 名前を入力します。



(16)　先の［シーケンステーブルの編集］のデータパスが優先されます。
［シーケンステーブルの編集］のデータパスが空白の場合は、ここでの設定が採用されます。

（17）　ラン シーケンス(R)　をクリックして測定を開始します。

シーケンス実行中は、装置コントロール画面上部に、ステータス画面が表示されます。

・［STOP］を押すと、測定中の分析が強制的にその段階で STOP します。（シーケンスは次へ進みます。）

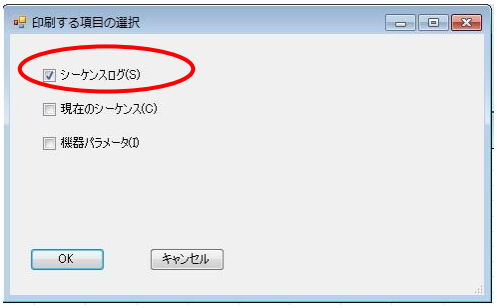
・［休止］を押すと、分析最中のものの測定で一時的に終了します（次へは進みません）。
　［シーケンス］＞［休止したシーケンスの再開］で再開出来ます。

7章－4　シーケンスログの印刷

シーケンスが動作しない場合や、エラーで停止していた場合、ログブックを見ることによって、原因を確認し、修正することが可能です。

(1)　 （機器コントロール画面上の印刷アイコン）をクリックします。

(2)　［シーケンスログ］にチェックをし、OK をクリックします。



［シーケンス］＞［シーケンスログの印刷］からでも印刷できます。

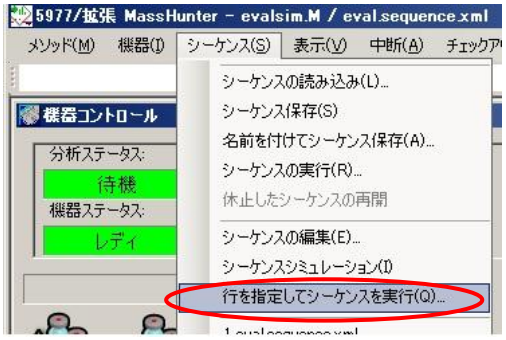
＜シーケンスログの例＞

```
シーケンススタート Fri Jun 07 14:25:50 2013

機器名              : 5977
シーケンスファイル: D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥sequence¥eval.sequence.xml
コメント            : GCMSデモ用の混合標準液の測定
オペレータ          : 測定者のお名前
データパス          : D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥
メソッドパス        : D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥methods¥

行  タイプ        バイアル   データファイル        サンプル名
-----------------------------------------------------------------------
測定メソッド: evalsim.M
  1) Cal              1      SIM01                 標準試料A  5ng/uL
  2) Cal              2      SIM02                 標準試料B  10ng/uL
  3) Cal              3      SIM03                 標準試料C  20ng/uL
  4) サンプル            4      unknown01              テスト試料

シーケンス終了Fri Jun 07 14:39:09 2013

  D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥2013 Jun 07 1425 Quality Log.LOG
  D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥2013 Jun 07 1425 Sequence Log .LOG
```

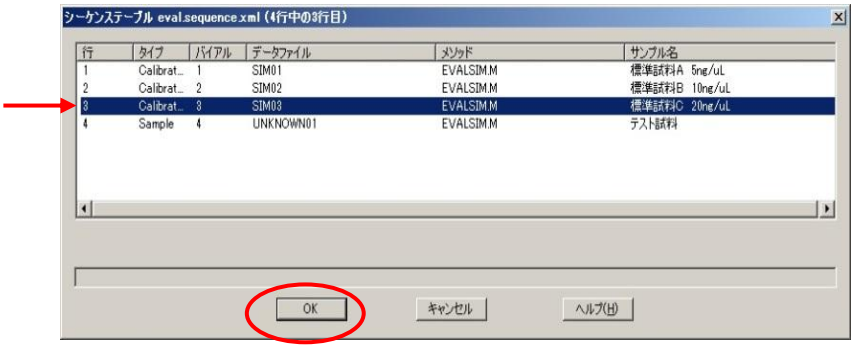
7章－5 その他の使用方法

指定行からシーケンスを実行する方法

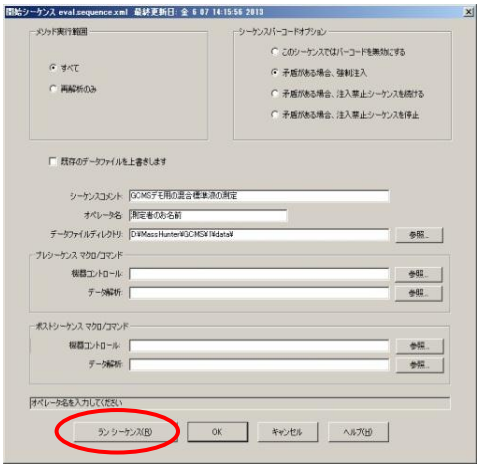
① メニューから［シーケンス］－［行を指定してシーケンスを実行］をクリックします。



② シーケンスを開始させる行を選択して OK をクリックします。



③ 必要事項を入力し、 ラン シーケンス(R) をクリックしてシーケンスを開始します。



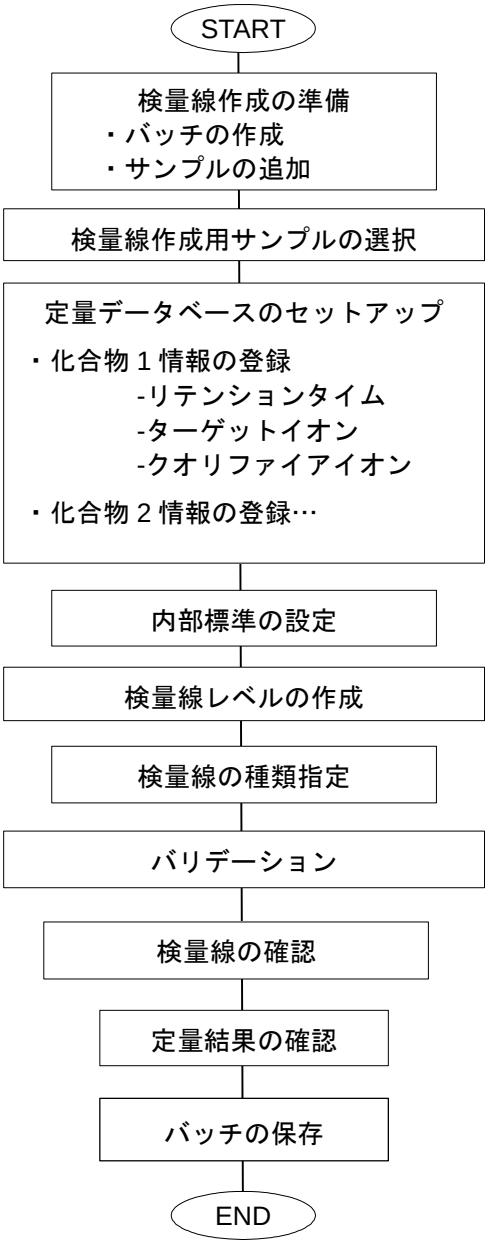
Memo

第8章
定量データベース（検量線）の作成・定量

8 章－1	バッチ	8－3
8 章－2	検量線作成の準備	8－5
8 章－3	化合物の登録	8－10
8 章－4	リテンションタイムの設定	8－15
8 章－5	ISTD の設定	8－16
8 章－6	検量線レベルの作成	8－17
8 章－7	ターゲット、クオリファイアの確認	8－21
8 章－8	検量線の設定	8－23
8 章－9	詳細タスク	8－24
8 章－10	バリデーション	8－28
8 章－11	検量線の適用	8－30
8 章－12	検量線ウィンドウ	8－32
8 章－13	化合物情報ウィンドウ	8－38
8 章－14	フラグと外れ値	8－44
8 章－15	バッチの保存	8－47

＜定量データベース（検量線）の作成・定量＞

本章では、定量データベース（検量線）の作成方法と定量結果の確認方法について説明しています。

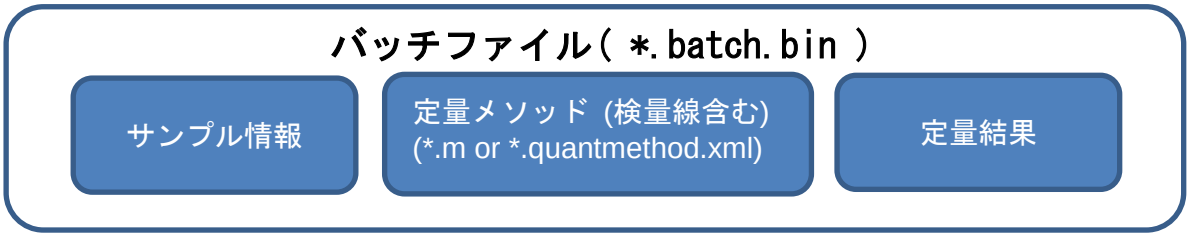


本章では、前章の測定結果を用いて定量に使用する検量線を作成し定量します。検量線情報はすべてバッチの「定量データベース」に保存されます。

8章－1　バッチ

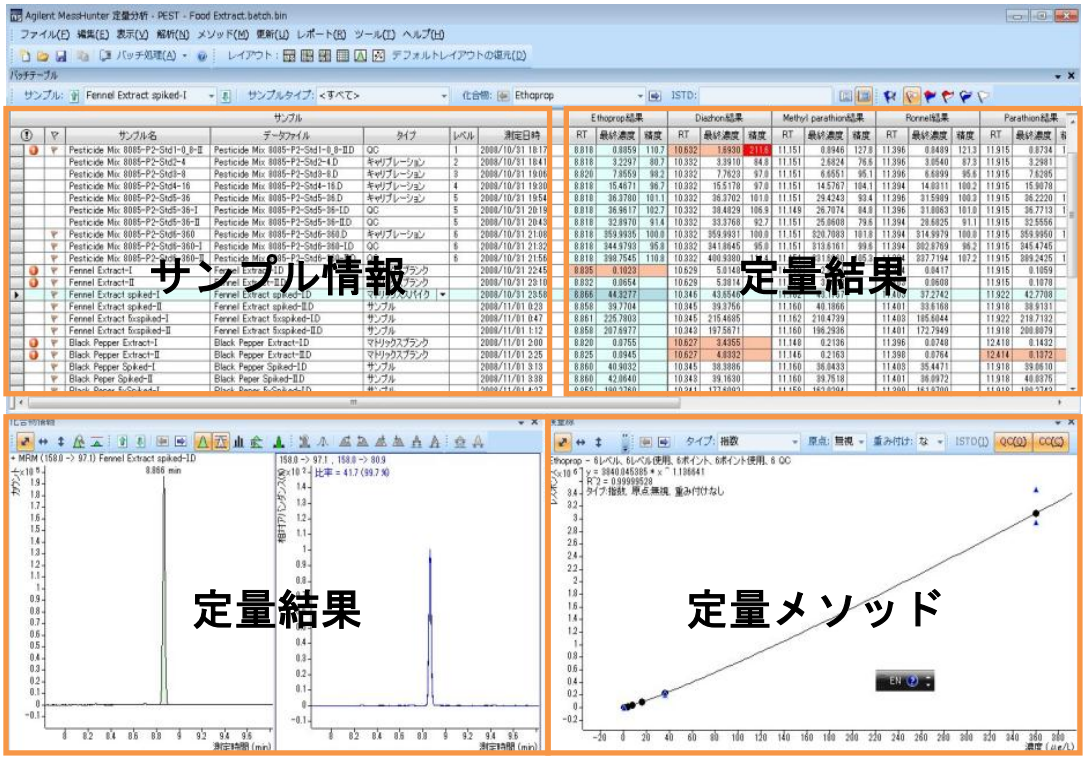
マスハンター定量分析ソフトウェアを使用するうえで、はじめに「バッチ」という概念を理解することが重要です。バッチファイルがなければデータを読み込むことも、定量計算をすることもできません。定量解析を行うには、まずバッチファイルを新規に作成する、もしくは既存のバッチファイルを開くことが必要となります。
バッチとは、一定の条件で取り込み、解析するデータの集まりのことを言います。マスハンター定量分析ソフトウェアにおけるバッチファイルは、下の概念図のようにサンプル情報、定量メソッド（検量線含む）、定量結果から構成されています。バッチファイルに含まれるこれらの情報を元に、定量レポートが作成されます。

バッチファイルの概念図



実際に定量計算させるには「バッチ処理」を行います。バッチ処理とは、複数の手順からなる処理を一括処理する方式で、ピークの積分、検量線の作成及び更新、サンプルの定量から成る処理を連続して行います。ただし、レポート作成はバッチ処理に含まれません。

例えば下のようなレイアウトの場合、各項目は表記された情報を表しています。



8章－2　検量線作成の準備

7 章で測定したデータに含まれる 3 化合物（ドデカン、ビフェニル、パルミチン酸メチル）を使って表に示す内部標準検量線法の定量データベースを作成します。

定量データベース条件

#	内部標準（IS）	化合物 1	化合物 2
名前	ドデカン	ビフェニル	パルミチン酸メチル
リテンションタイム	約 3.7min	約 4.5min	約 6.3min
ターゲットイオン	*m/z* 170	*m/z* 154	*m/z* 270
クオリファイアイオン	*m/z* 85	*m/z* 153	*m/z* 87

検量線のレベルと濃度

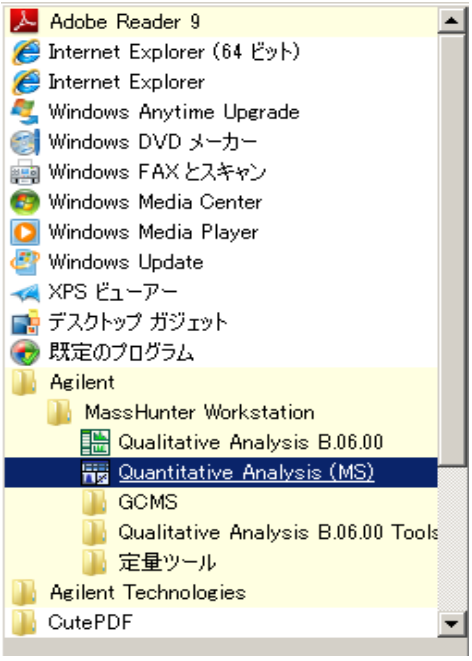
	データファイル名	内部標準（IS）濃度	IS 以外の化合物濃度
レベル 1	SIM01.D	10 ng/uL	5 ng/uL
レベル 2	SIM02.D	10 ng/uL	10 ng/uL
レベル 3	SIM03.D	10 ng/uL	20 ng/uL

（1）　MassHunter 定量分析ソフトウェアの起動

① デスクトップ上の

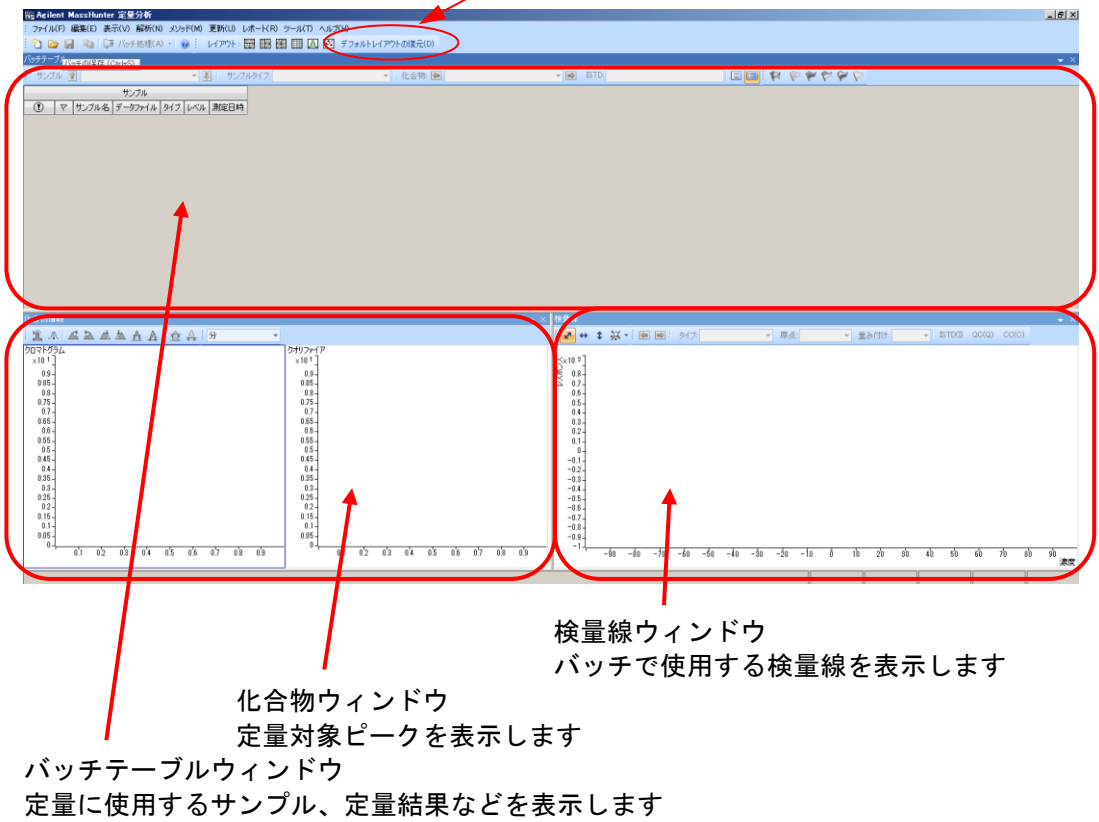
アイコンをクリックして［MassHunter 定量分析］ウィンドウを起動します。

デスクトップ上にアイコンがない場合は、タスクバーの［スタート］ボタンから、［すべてのプログラム］－［Agilent］－［MassHunter Workstation］－［Quantitaive Analysis(MS)］を選択してソフトウェアを起動します。



②　［MassHunter 定量分析］ウィンドウが表示されます。表示設定により、画面の構成が下記スクリーンと異なる場合があります。

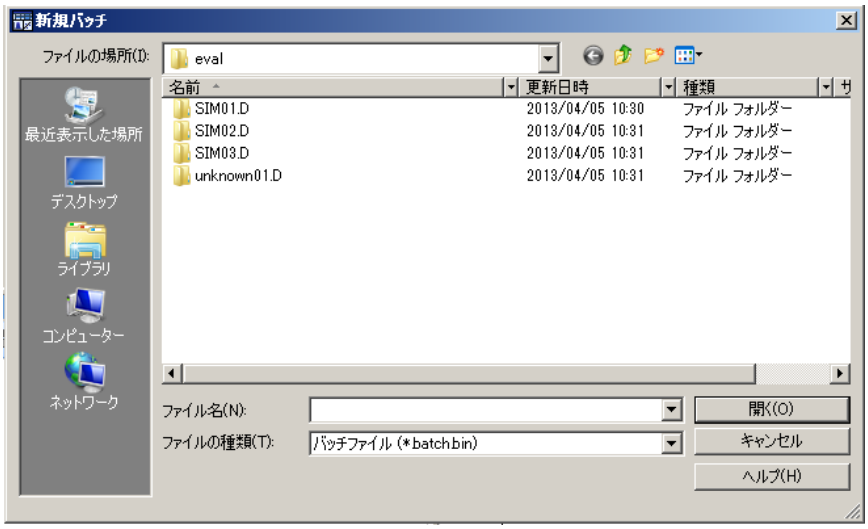
画面構成が違っている時はツールバーの デフォルトレイアウトの復元(D) をクリックして画面表示を初期設定に戻すことができます。



（２）　バッチの新規作成

① （新規バッチアイコン)をクリックします。メニューからの場合は［ファイル］－［新規バッチ］をクリックします。

② ［新規バッチ］ダイアログボックスが開くので、データを保存したフォルダ（D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥eval）を選択します。



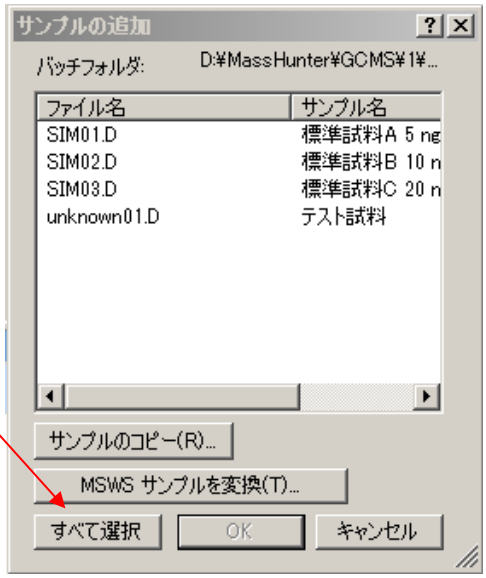
③ バッチ名（基本操作マニュアルでは evalsim というバッチ名を使います）を入力して 開く(O) ボタンをクリックします。

（３）　バッチで使用するデータファイルの追加

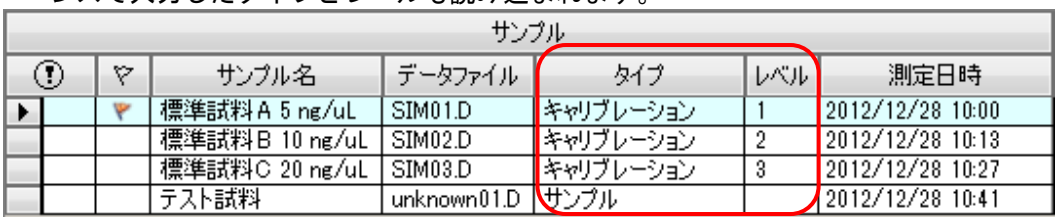
① メニューの［ファイル］－［サンプルの追加］をクリックして、［サンプルの追加］ダイアログボックスを開きます。

② すべて選択 をクリックして全てのサンプルを選択します。

③ OK をクリックしてバッチにサンプルを追加します。



④　バッチテーブルに選択したサンプルが追加されます。サンプル情報として測定シーケンスで入力したタイプとレベルも読み込まれます。



サンプル

		サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時
		標準試料A 5 ng/uL	SIM01.D	キャリブレーション	1	2012/12/28 10:00
		標準試料B 10 ng/uL	SIM02.D	キャリブレーション	2	2012/12/28 10:13
		標準試料C 20 ng/uL	SIM03.D	キャリブレーション	3	2012/12/28 10:27
		テスト試料	unknown01.D	サンプル		2012/12/28 10:41

（４）　サンプルのタイプ、レベルの変更

①　タイプは、バッチテーブルのプルダウンメニューで変更することができます。

サンプル名	データファイル	タイプ	レベル
標準試料A 5 ng/uL	SIM01.D	キャリブレーション	1
標準試料B 10 ng/uL	SIM02.D	サンプル	2
標準試料C 20 ng/uL	SIM03.D	ブランク	3
テスト試料	unknown	キャリブレーション	
		QC	
		CC	
		ダブルブランク	

②　バッチテーブルのレベル列にレベル ID を入力(変更)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	測定日時
		標準試料A 5 ng/uL	SIM01.D	キャリブレーション	1	2012/12/28 10:00
		標準試料B 10 ng/uL	SIM02.D	キャリブレーション	2	2012/12/28 10:13
		標準試料C 20 ng/uL	SIM03.D	キャリブレーション	3	2012/12/28 10:27
		テスト試料	unknown01.D	サンプル		2012/12/28 10:41

（５）　検量線に使用するデータの選択

定量データベースの作成は、どの標準試料のデータでも使用できます。
ただし、ピークが正しく認識されて定量データベースの作成がスムーズに行われるよう、検量線を作成する場合には、もっとも高濃度のサンプルを使用することを推奨します。

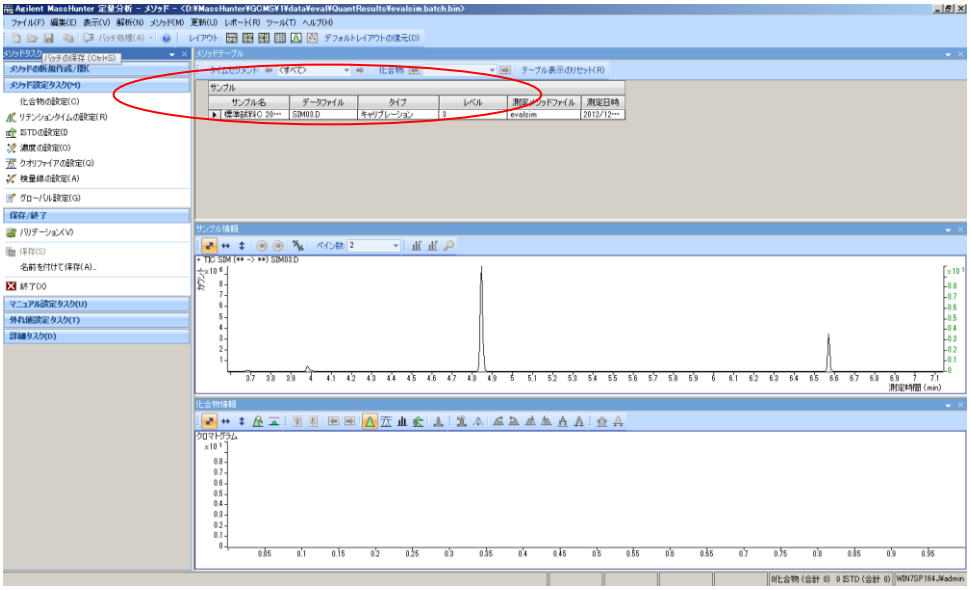
①　バッチテーブル上で SIM03.D を選択します。

サンプル

		サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時
		標準試料A 5 ng/uL	SIM01.D	キャリブレーション	1	2012/12/28 10:00
		標準試料B 10 ng/uL	SIM02.D	キャリブレーション	2	2012/12/28 10:13
		標準試料C 20 ng/uL	SIM03.D	キャリブレーション	3	2012/12/28 10:27
		テスト試料	unknown01.D	サンプル		2012/12/28 10:41

② メニューから［メソッド］－［編集］をクリックします。

［MassHunter 定量分析－メソッド］ウィンドウが開きます。
メソッドテーブルに検量線作成用に選んだデータ（SIM03.D）が表示されていることを確認します。



画面構成が図と異なる時はツールバーの デフォルトレイアウトの復元(D) をクリックして初期設定に戻します。

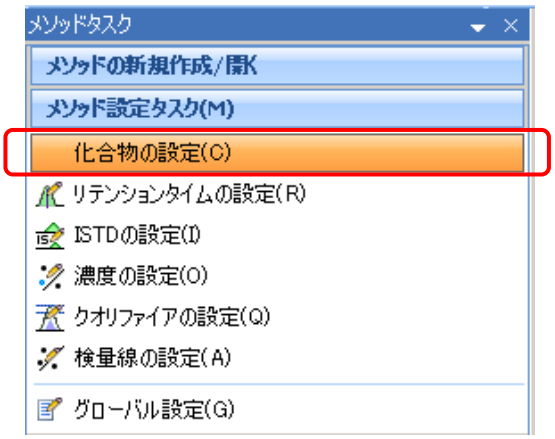
8章－3　化合物の登録

化合物の登録は、メソッド設定タクスの表示順に行います。

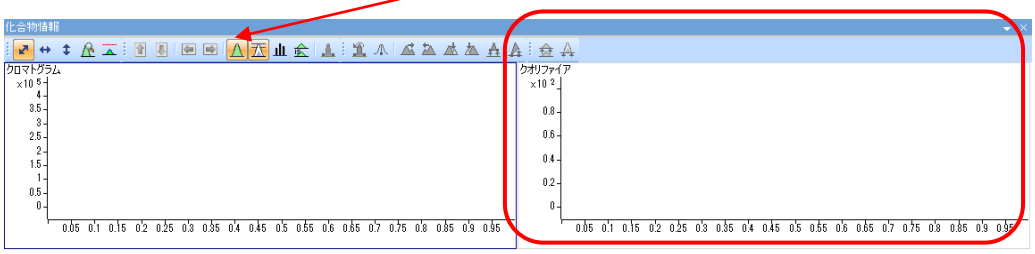
（１）　登録の準備

① メソッドタクス内の［メソッド設定タスク］から［化合物の設定］を選択します。

② メソッドテーブルの表示が、化合物設定用になります。



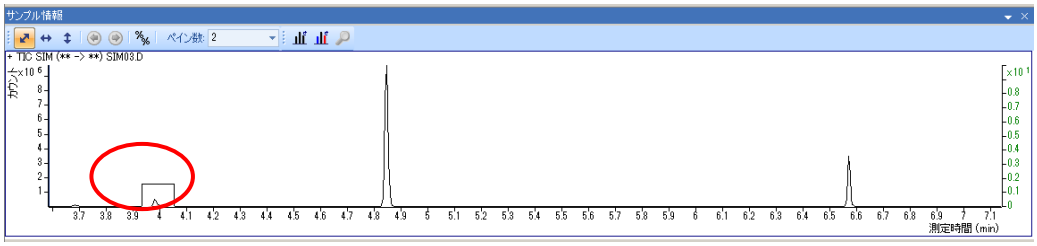
③ 化合物情報ウインドウツールバーの をクリックしてクオリファイアを表示します。



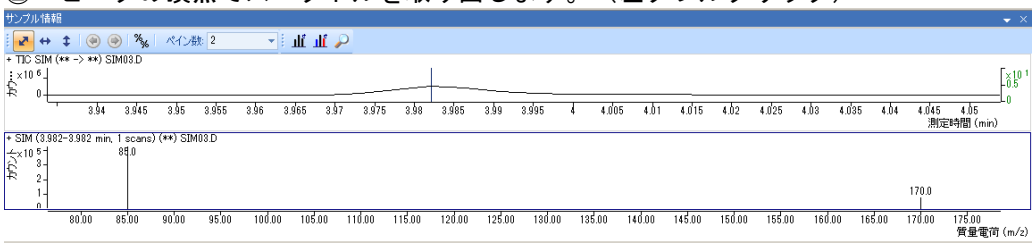
（２）　化合物情報（ドデカン）の登録

（３）

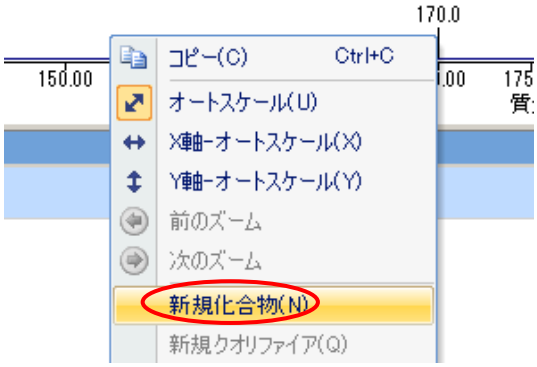
① サンプル情報ウィンドウで登録するピークをズームイン（右ドラッグ）します。ドデカンは１本目、リテンションタイム４分付近のピークです。



② ピークの頂点でスペクトルを取り出します。（左ダブルクリック）

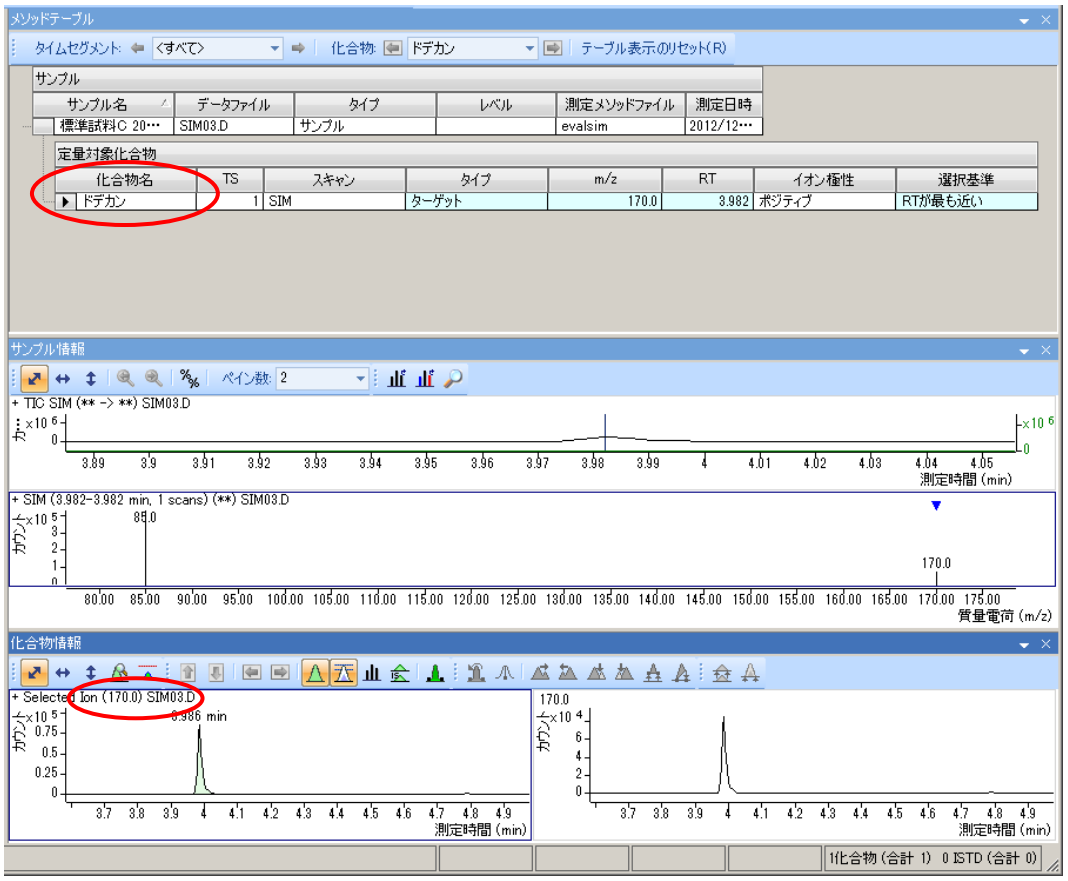


③　ターゲットイオン(*m/z* 170）上で右クリックして、表示されるメニューの［新規化合物］をクリックします。

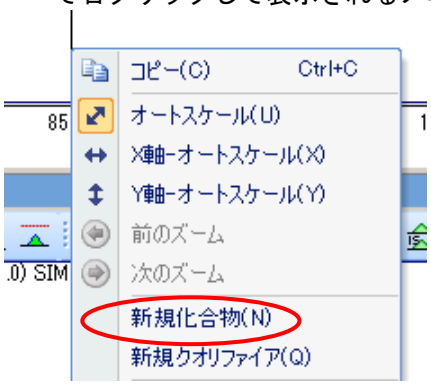


④　メソッドテーブルの化合物名に、ドデカンを入力します。

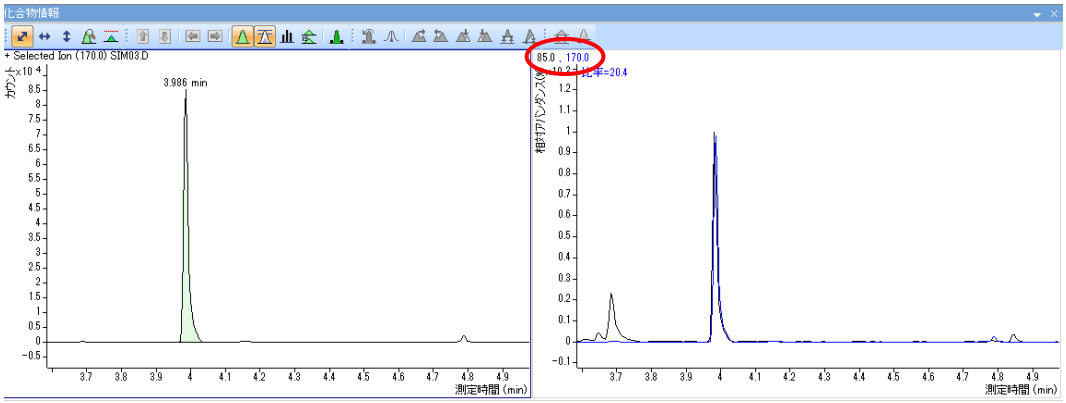
⑤　［化合物情報］ウィンドウにはドデカンのターゲットイオンピークが表示されます。



⑥　同様に［サンプル情報］ウィンドウでドデカンのクオリファイアイオン（*m/z* 85）上で右クリックして表示されるメニューから新規クオリファイアを選択します。

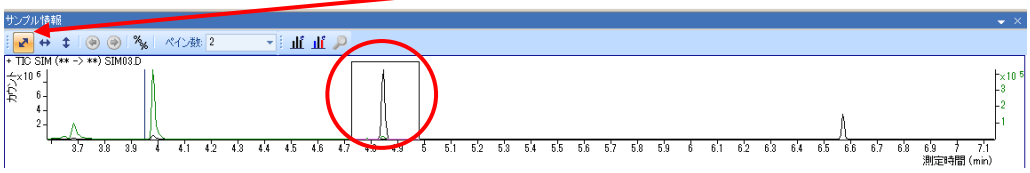


⑦　［化合物情報］ウィンドウ(左下)にターゲットイオン、 (右下)にターゲットとクオリファイアイオンの重ね書き、タイトルに選択した *m/z* 値が表示されます。



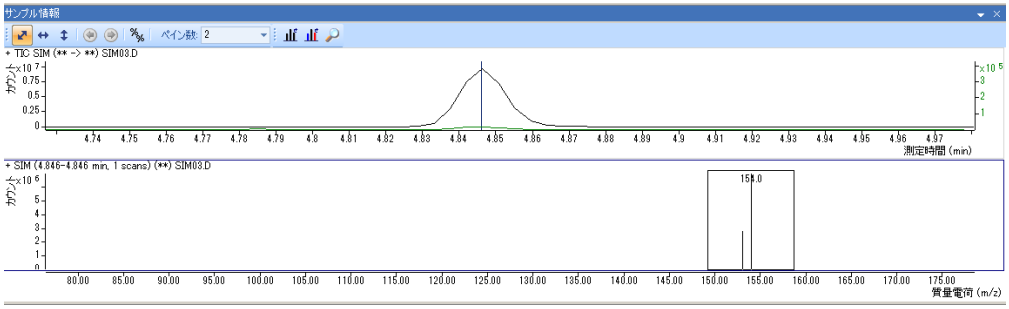
（４）　化合物情報（ビフェニル）の登録

①　TIC をズームアウト（サンプル情報ウィンドウの TIC を選択してツールバーの を クリック）します。



②　次に登録するピークをズームインします。ビフェニルは２本目、リテンションタイム 4.8 分付近のピークです。

③　SIM 取り込みイオンが接近している場合には、スペクトル画面をズーム（右ドラッグ）します。



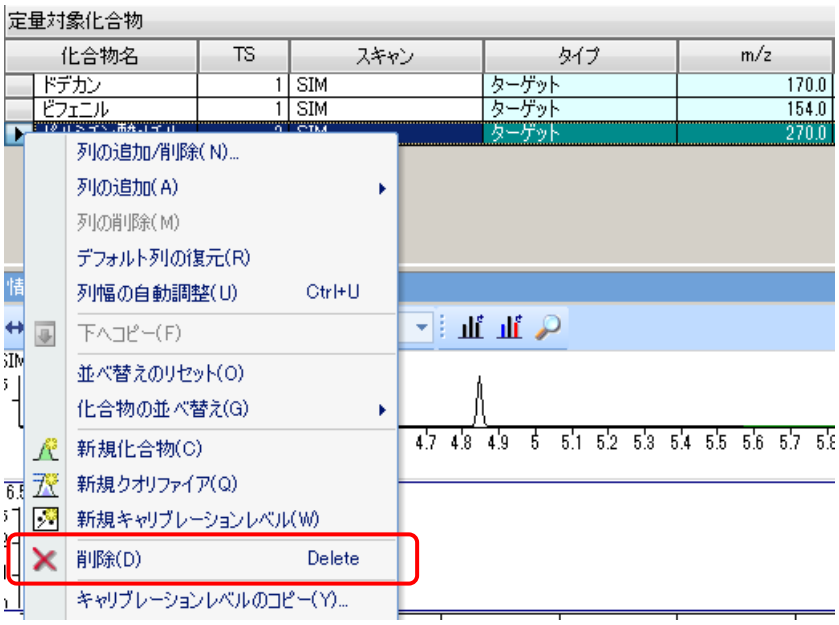
④　ドデカンの登録と同様に、ターゲット（*m/z* 154）、名前（ビフェニル）、クオリファイア（*m/z* 153）を登録します。

（５）　化合物情報（パルミチン酸メチル）の登録

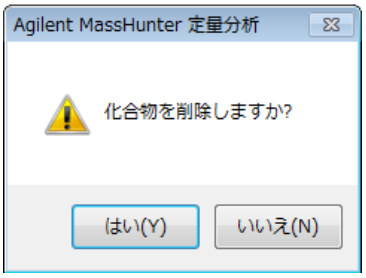
①　同様にパルミチン酸メチル（6.3 分付近のピーク）のターゲット（*m/z* 270）、化合物名（パルミチン酸メチル）、クオリファイア（*m/z* 87）を登録します。

（６）　登録した化合物の削除

①　メソッドテーブル上で削除する化合物を選択します。
②　右クリックメニューから［削除］をクリックします。



③　ポップアップしたダイアログボックスに［はい(Y)］をクリックして化合物を削除します。



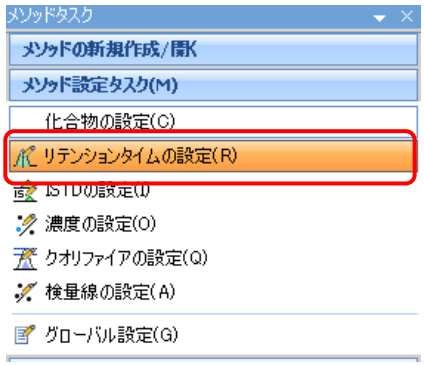
8章－4　リテンションタイムの設定

定量データベースに登録した化合物のリテンションタイムの確認とピーク抽出幅の設定を行います。

（1）　設定の準備

① メソッドタクス内の［メソッド設定タスク］から［リテンションタイムの設定］をクリックします。

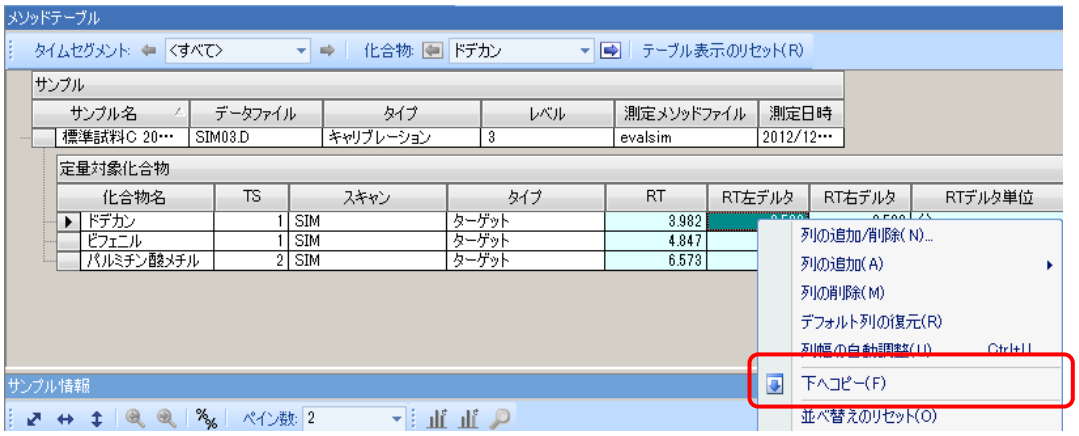
② メソッドテーブルの配置が、リテンションタイム設定用に変わります。



（2）　ピーク抽出幅の設定

① メソッドテーブルでドデカンの RT 左デルタと RT 右デルタを 0.5 分に変更します。

② 変更したセル上でマウスを右クリック、メニューの［下にコピー］を選択して、全ての化合物の RT 左デルタと RT 右デルタを 0.5 分に変更します。

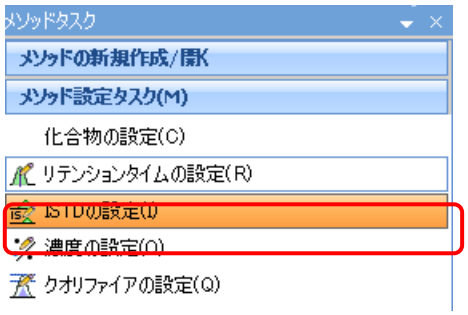


8章－5　ISTD の設定

ISTD を使用している場合は、ここで ISTD と、補正を行う成分の設定を行います。

（１）　設定の準備

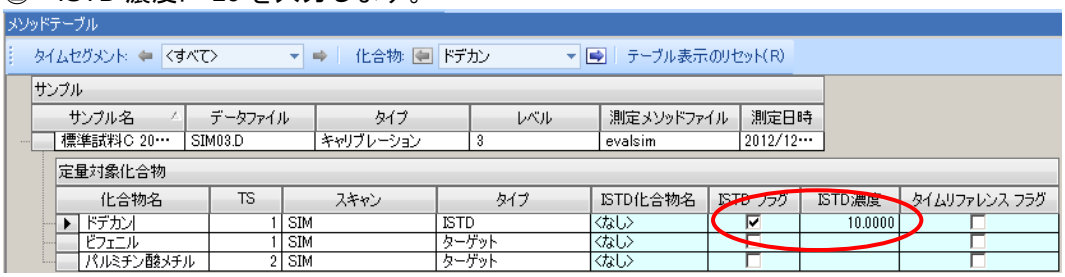
① メソッドタスク内の［メソッド設定タスク］から［ISTD の設定］をクリックします。



② メソッドテーブルの配置が ISTD 設定用に変わります。

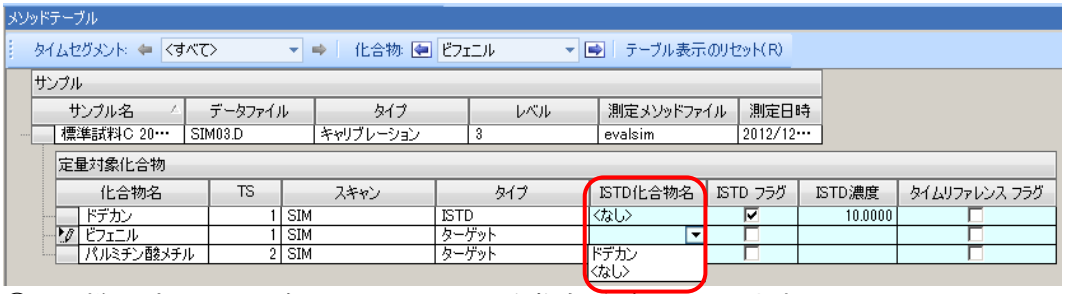
（２）　ISTD 化合物の設定

① ISTD 化合物（ドデカン）の ISTD フラグをチェックします。
② ISTD 濃度に 10 を入力します。



（３）　ISTD で補正する化合物の設定

① ビフェニルの ISTD 化合物名欄のプルダウンメニューからドデカンを選択します。



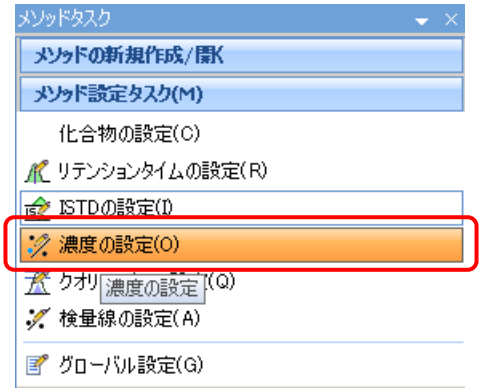
② 同様にパルミチン酸メチルの ISTD 化合物もドデカンにします。

8章－6　検量線レベルの作成

検量線レベルをバッチテーブルから読み込んで、各レベルの濃度を設定します。

（１）　設定の準備

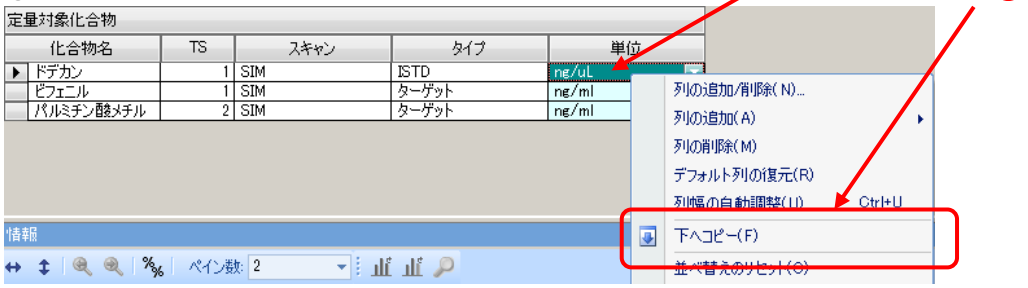
①　メソッドタスク内の［メソッド設定タスク］から［濃度の設定］をクリックします。



②　メソッドテーブルの配置が濃度設定用に変わります。

（２）　単位の入力

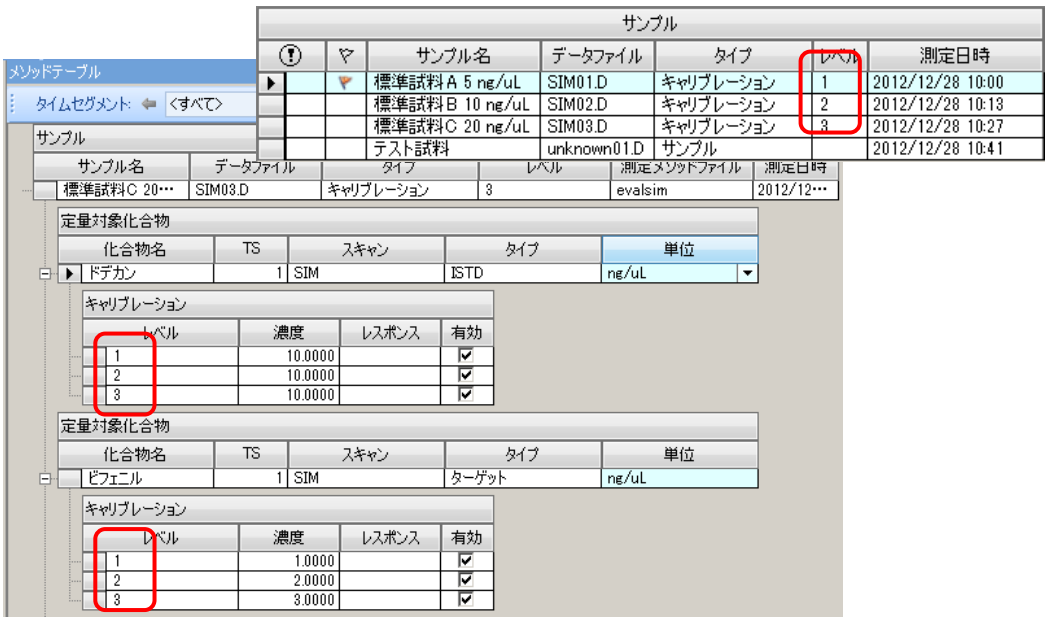
①　ドデカンの単位欄に ng/uL と入力します。
②　ドデカンの単位欄にポインタを合わせて右クリックします。
③　表示されたメニューから［下にコピー］をクリックします。



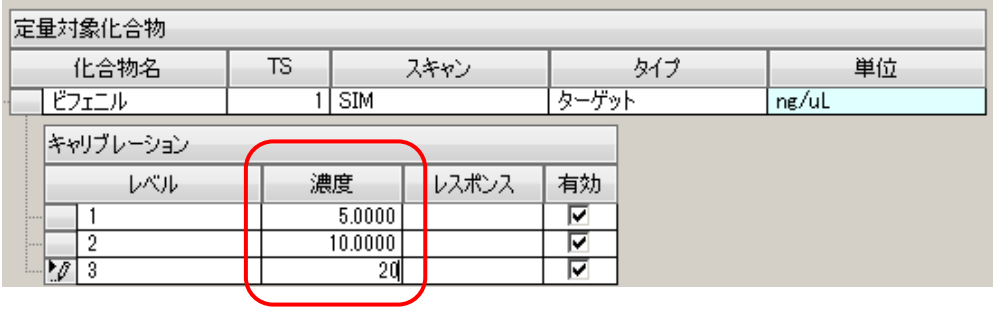
（３）　検量線レベルの読み込み

①　メニューの「メソッド」－「キャリブレーションサンプルからレベルを作成」をクリックします。

バッチテーブルを参照してメソッドテーブルの各化合物にキャリブレーションレベルが設定されます。

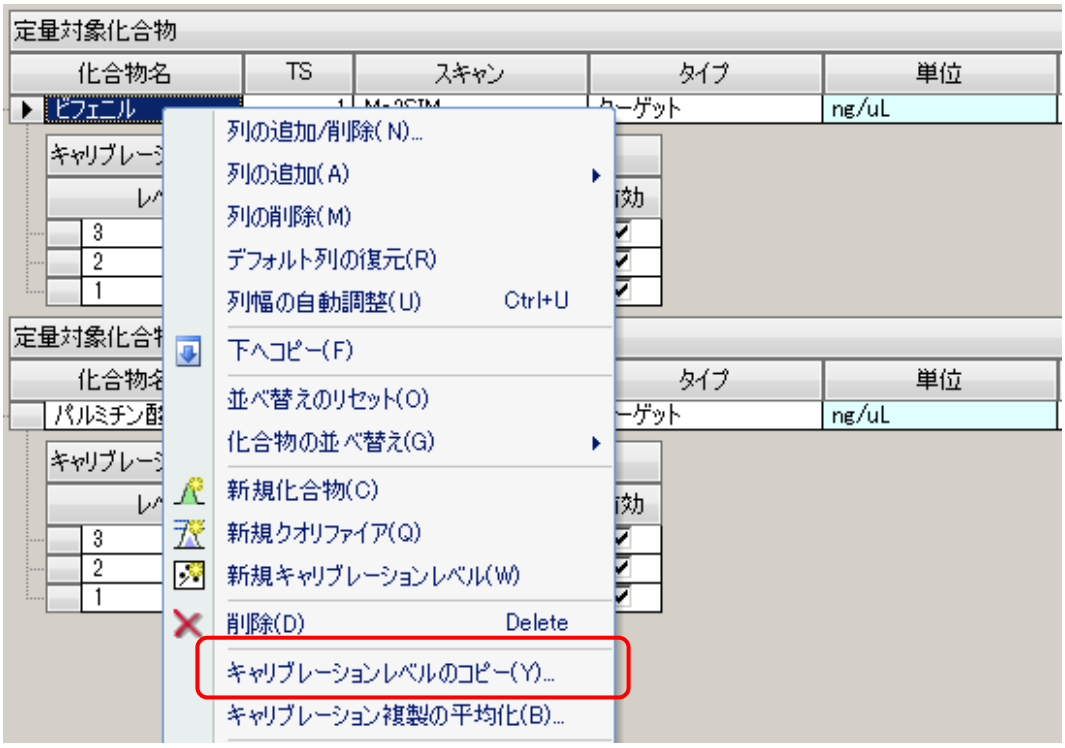


②　ビフェニルの濃度欄に各サンプルの標準試料濃度を入力します。

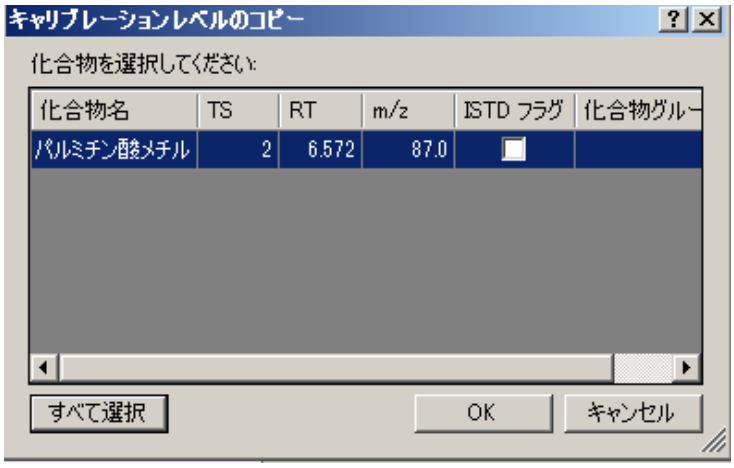


（４）　検量線のコピー

①　化合物名欄のビフェニルにマウスポインタをあわせ右クリックします。表示されたメニューから「キャリブレーションレベルのコピー」を選択します。



②　［キャリブレーションレベルのコピー］ダイアログボックスが開きます。



③　すべて選択 をクリックして全ての化合物を選択します。

④　OK をクリックして、ダイアログボックスを閉じます。ビフェニルで作成した検量線レベル情報が全ての化合物にコピーされました。

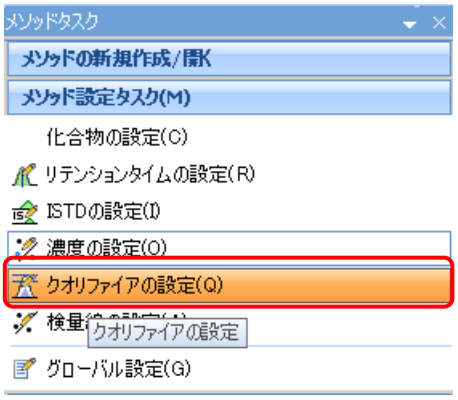
8章－7　ターゲット、クオリファイアの確認

ターゲットとクオリファイアを確認します。設定に間違いがあった時はここで修正します。ここではビフェニルのターゲット、クオリファイアの入れ替えを例に取り、操作を説明します。

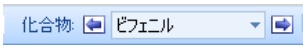
（１）　設定の準備

① メソッドタスク内の［メソッド設定タスク］から［クオリファイアの設定］をクリックします。

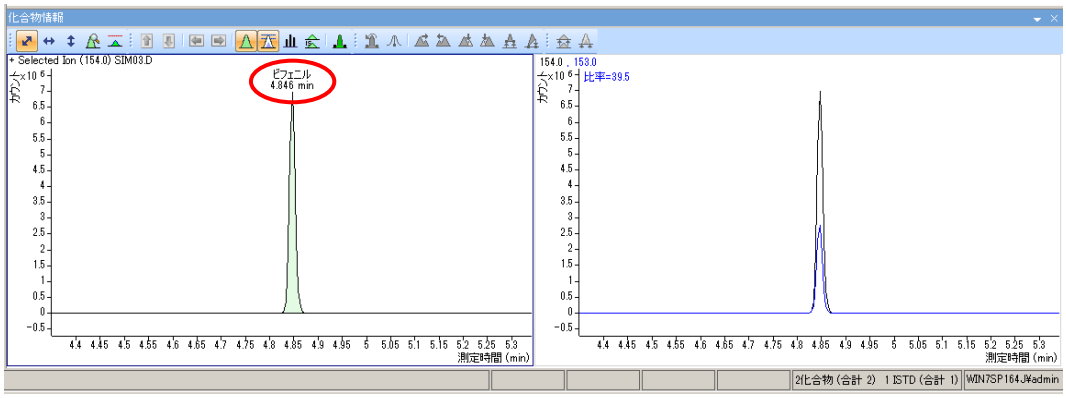
② メソッドテーブルの配置がクオリファイア設定用に変わります。



（２）　ビフェニルの選択

① メソッドテーブルのツールバーにある  を使ってビフェニルを選びます。

② ［化合物情報］ウィンドウにビフェニルが表示されます。
ピークトップには化合物名を表示できます。変更方法は「付録Ｆ　定量解析のグラフィックス/その他」を参照してください。



（３）　ターゲット、クオリファイアの変更

①　メソッドテーブルでビフェニルのターゲットの *m/z* 欄にある 154.0 をポイントします。

定量対象化合物

化合物名	TS	スキャン	タイプ	m/z	許容範囲
ビフェニル	1	SIM	ターゲット	154.0	相対

②　*m/z* 欄に表示されたをクリックします。
③　表示されるイオンのリストから 153.0 をクリックします。

定量対象化合物

化合物名	TS	スキャン	タイプ	m/z	許容範囲
ビフェニル	1	SIM	ターゲット	154.0	相対

クオリファイア

m/z	相対レスポンス	許容範囲	面積和
153.0	39.5	20.0	

85.0
87.0
153.0
154.0
170.0
270.0

定量対象化合物

④　ビフェニルのターゲットが 153.0 になりました。
⑤　同様に、クオリファイアの *m/z* 欄にある 153.0 をポイントし 154.0 を選びます。
⑥　ビフェニルのターゲット、クオリファイアの入れ替えにより、相対レスポンスをアップデートします。（詳細は「10 章－4 クオリファイア比の更新」を参照）

定量対象化合物

化合物名	TS	スキャン	タイプ	m/z	許容範囲
ビフェニル	1	SIM	ターゲット	153.0	相対

クオリファイア

m/z	相対レスポンス	許容範囲	面積和
154.0	39.5	20.0	

⑦　以後の説明の為、ターゲット、クオリファイアを元の値に戻してください。

（４）　クオリファイアの削除

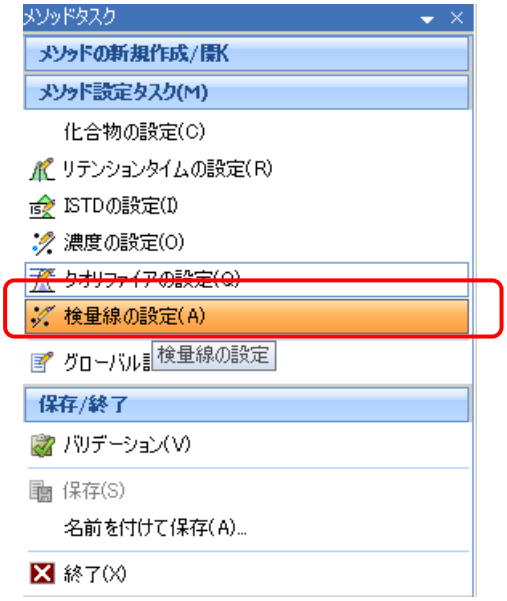
①　削除したいクオリファイアの上を左クリックして選択します。
②　キーボードの［Delete］キーを押して削除を実行します。

8章－8　検量線の設定

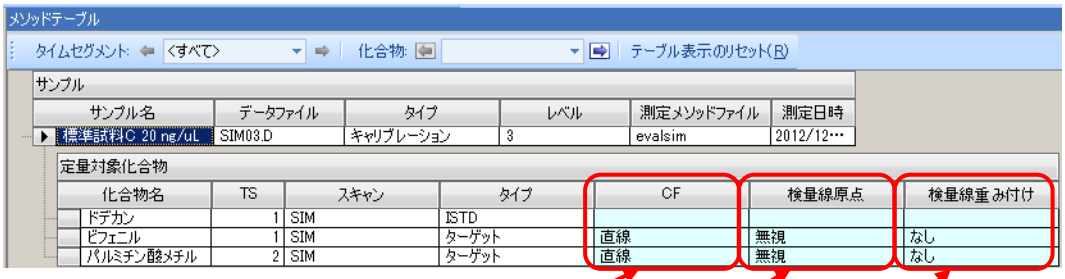
（1）　設定の準備

① メソッドタスク内の［メソッド設定タスク］から［検量線の設定］をクリックします。

② メソッドテーブルの表示が検量線設定用に変わります。



（2）　検量線の設定



① CF 欄（検量線の種類）を「直線」にします。

② 検量線原点欄を「無視」にします。

③ 検量線重み付け欄を「なし」にします。

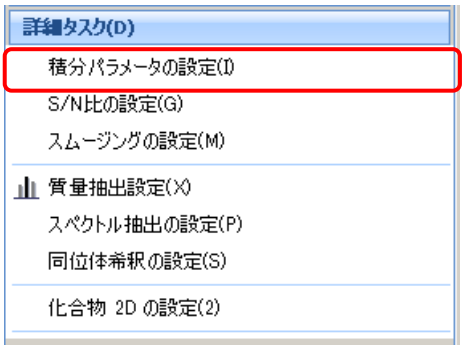
注意

1 点検稜線で検量線原点に無視を選択すると検量線が点になります。一点検稜線を使用する時は、無視以外の設定にしてください。

8章－9　詳細タスク

検量線作成のための基本的な設定はメソッドタクスで行いますが、その他の設定がここに準備されています。
ここでは、積分条件の変更を説明します。

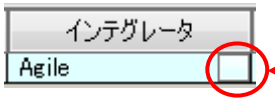
（１）［詳細タスク］－［積分パラメータの設定］をクリックします



（２）メソッドテーブルの設定が積分パラメータの設定用に変わります。

（３）ターゲットの積分条件変更

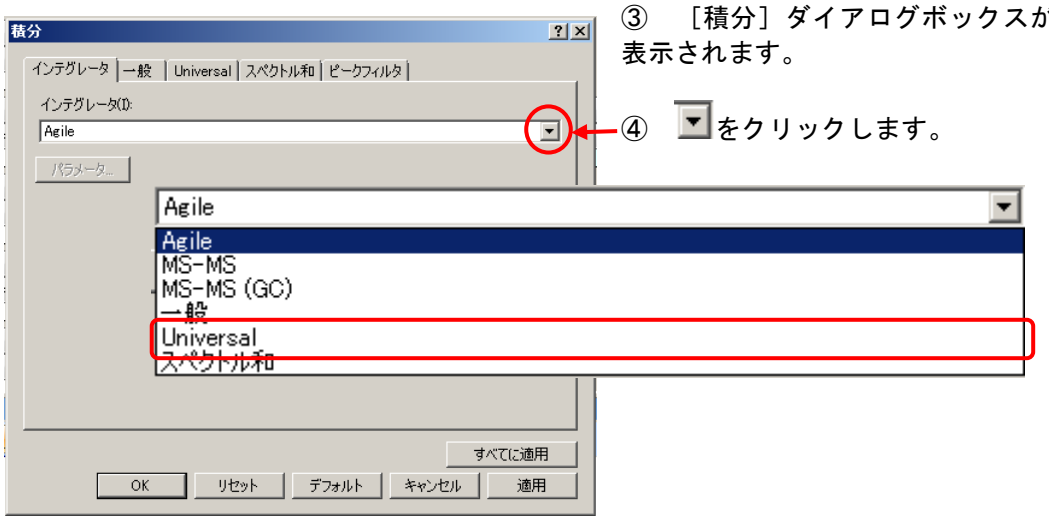
①　ビフェニルのターゲットのインテグレータ欄をマウスでポイントします。



②　部分をクリックします。

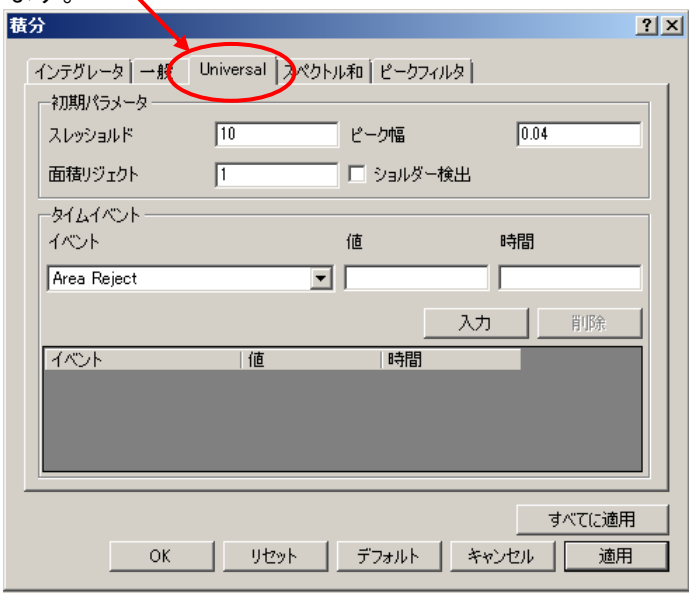
③　［積分］ダイアログボックスが表示されます。

④　をクリックします。

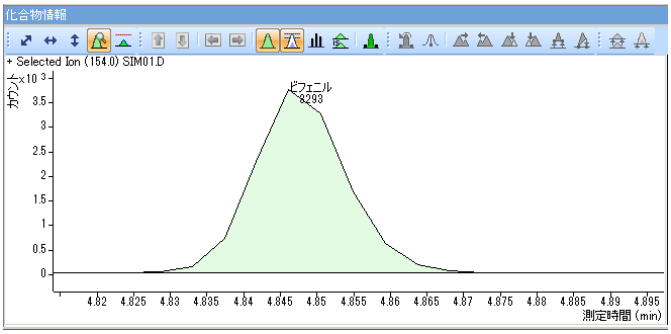


⑤　プルダウンメニューから適切なインテグレータを選択します。（今回は、Universal を選びます。）
積分アルゴリズムは「5 章－4　積分」を参照してください。

⑥　Universal タブの内容が変更できるようになります。ここに適切な積分条件を設定します。



⑦　［適用］をクリックして［化合物情報］ウィンドウに設定条件での積分結果を表示します。



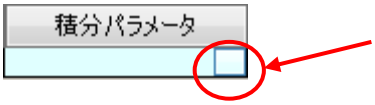
⑧　すべてに適用 をクリックして全ての化合物の積分条件を表示されている積分条件に変更します。

⑨　OK をクリックして［積分］ダイアログボックスを閉じます。

（４）クオリファイアの積分条件設定

クオリファイアはターゲットと同じ積分アルゴリズムが適用されます。

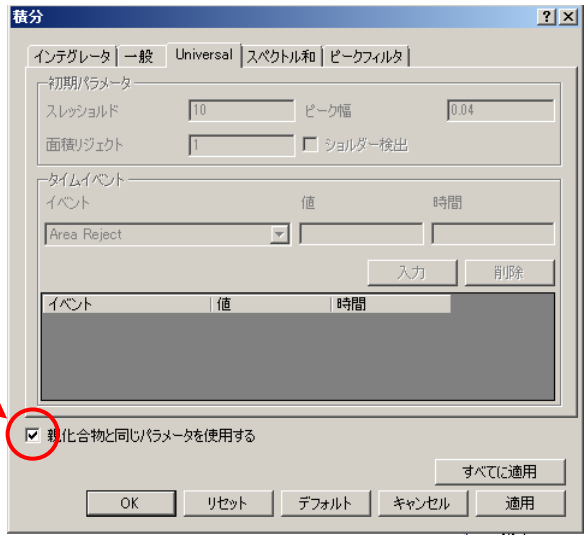
①　ビフェニルのクオリファイアの積分パラメータ欄をマウスでポイントします。



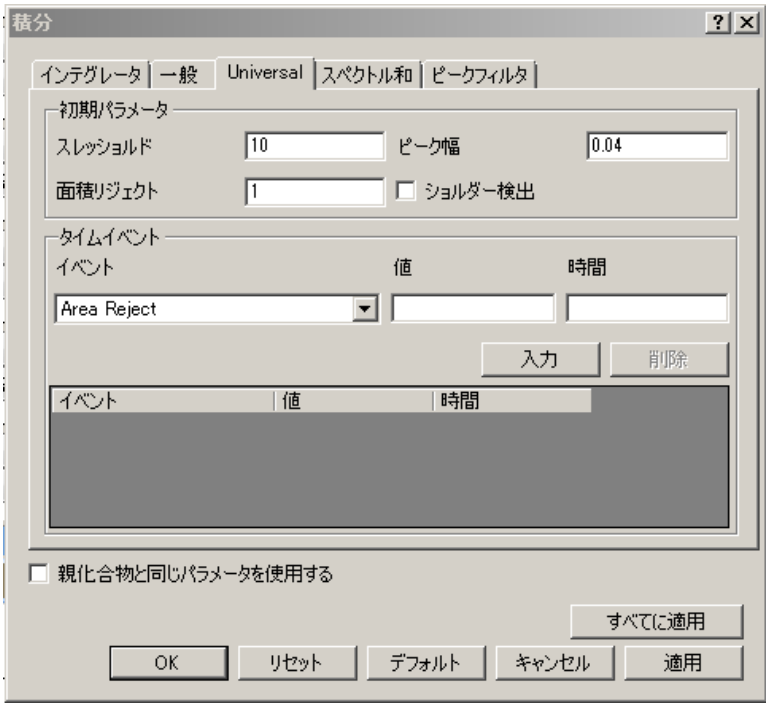
②　□部分をクリックします。

③　［積分］ダイアログボックスが表示されます。

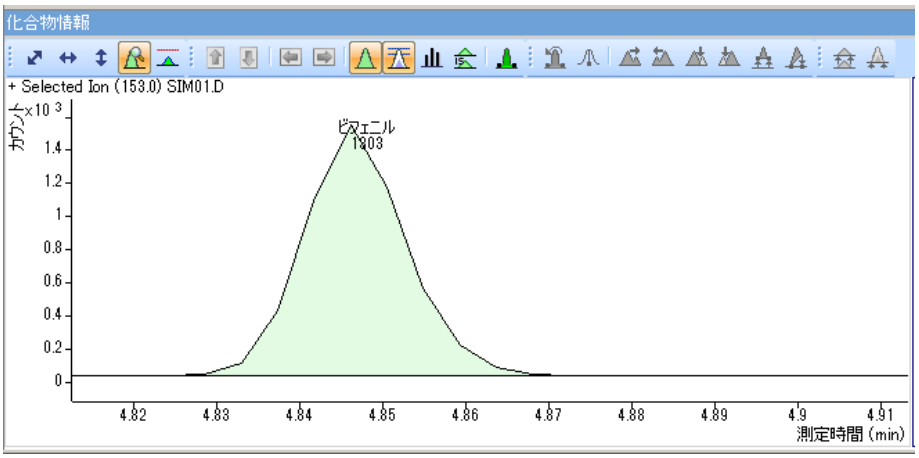
④　［親化合物と同じパラメータを使用する］のチェックボックスのチェックを外します。



⑤　Universal タブの積分条件が設定できるようになります。ここに適切な積分条件を設定します。



⑥　適用 をクリックして［化合物情報］ウィンドウに積分結果を表示します。

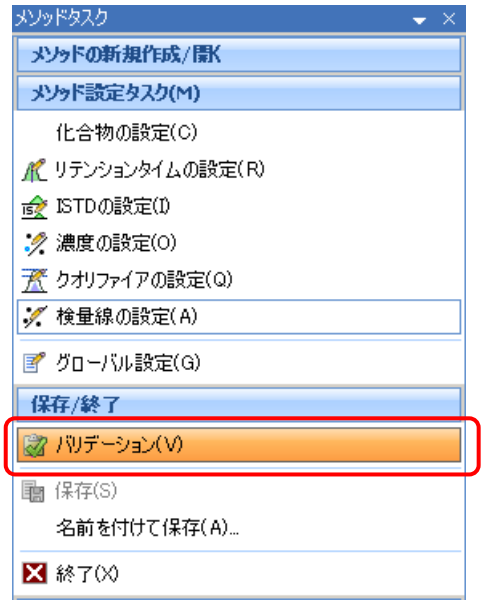


⑦　OK をクリックして［積分］ダイアログボックスを終了します。

8章－10 バリデーション

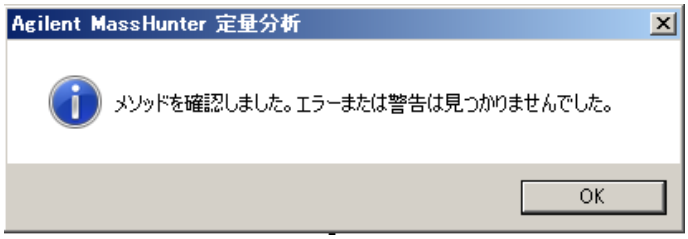
作成した検量線に問題がないかを確認します。

（１）メソッドタスク内の［保存／終了］から［バリデーション］をクリックします。



（２）エラーのない場合

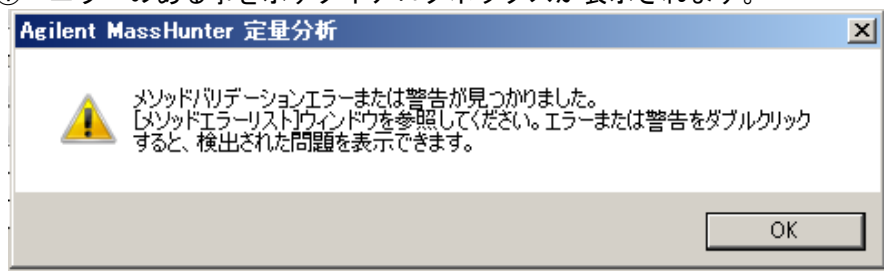
①　エラーの無い事を示すダイアログボックスが表示されます。



②　OK をクリックしてバリデーションを終了します。

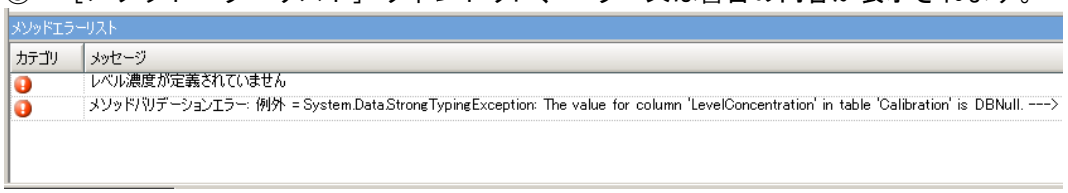
（３）エラーがある場合

①　エラーのある事を示すダイアログボックスが表示されます。

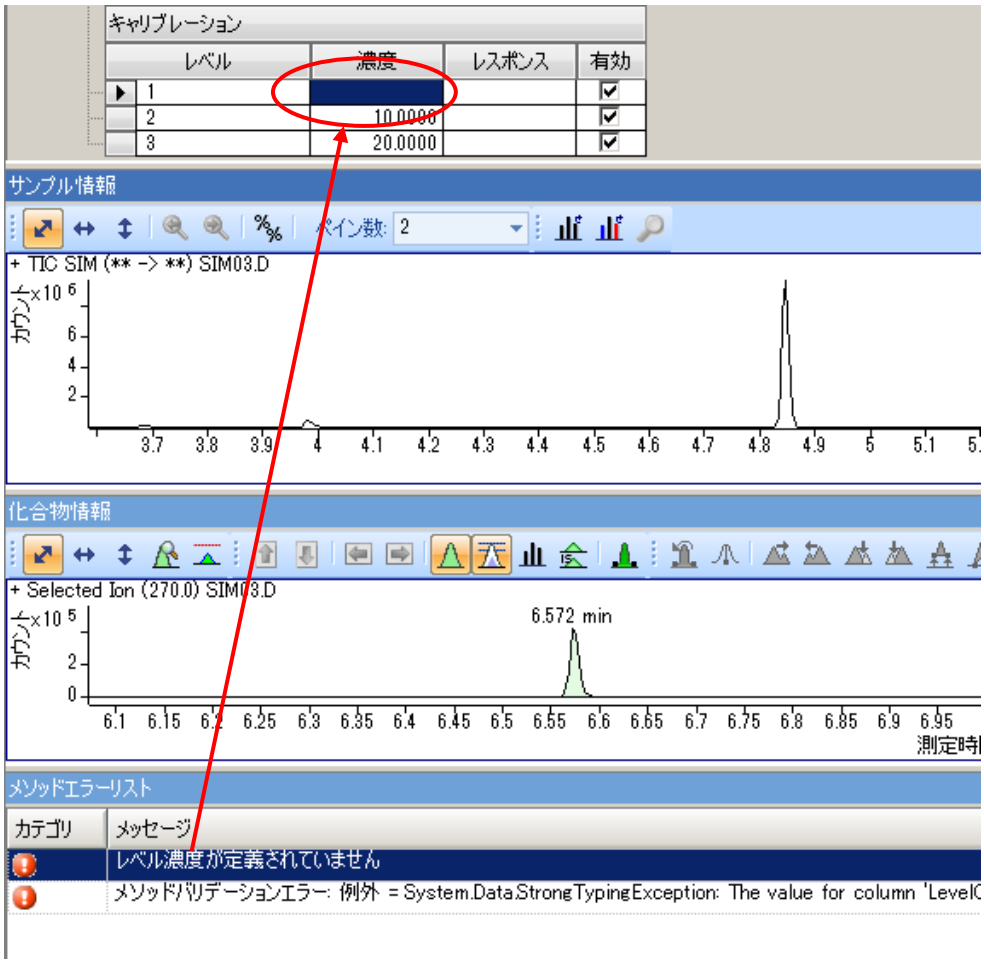


②　OK をクリックしてダイアログボックスを閉じます。

③　［メソッドエラーリスト］ウィンドウに、エラー又は警告の内容が表示されます。



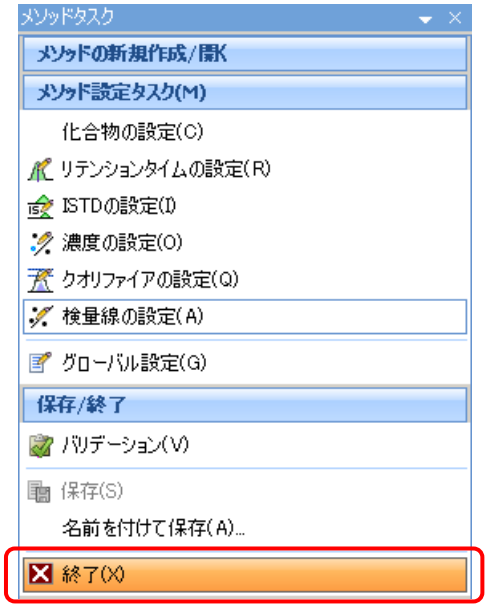
④　確認したいエラーメッセージの上で左ダブルクリックすると、エラーの原因となっている場所が表示されます。



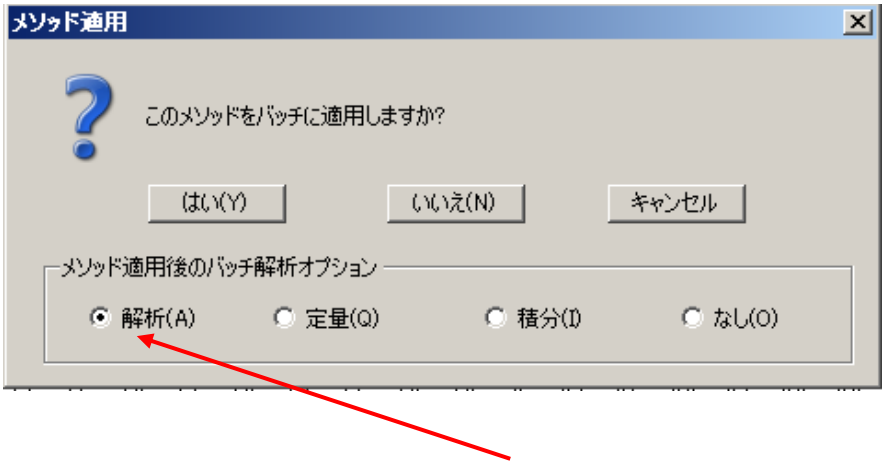
⑤　エラーの原因となっている部分を修正して、再度バリデーションを行います。

8章－11 検量線の適用

① メソッドタスク内の［保存／終了］から［終了］をクリックします。



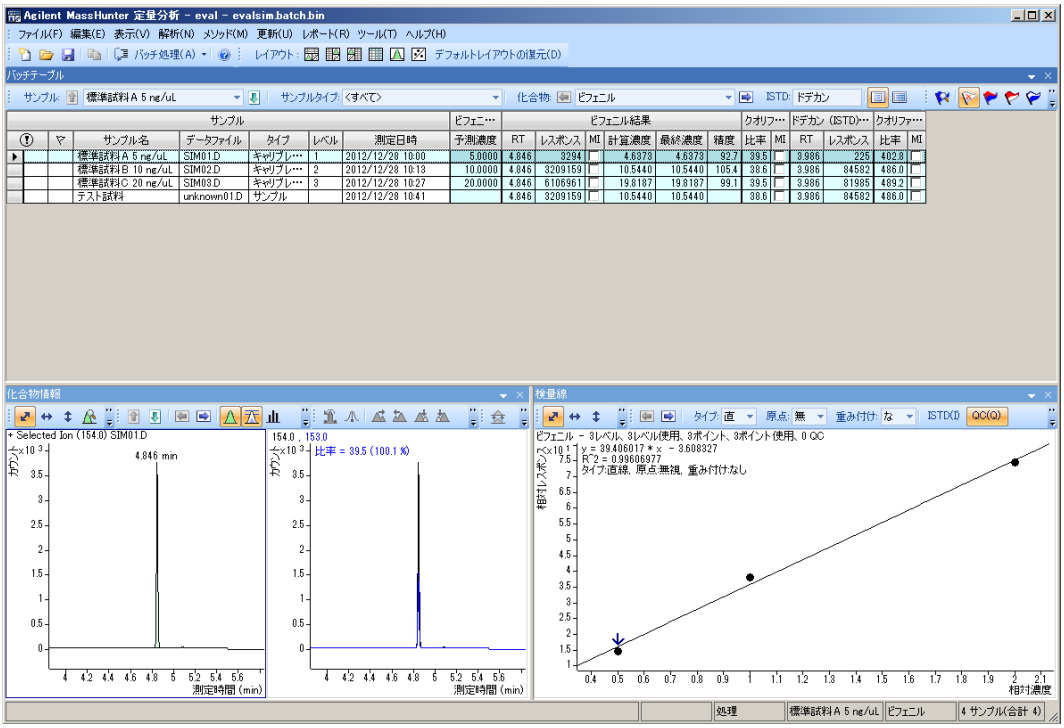
② ［メソッド適用］ダイアログボックスが開きます。



③ メソッド適用後のバッチ解析オプションで解析にチェックします。

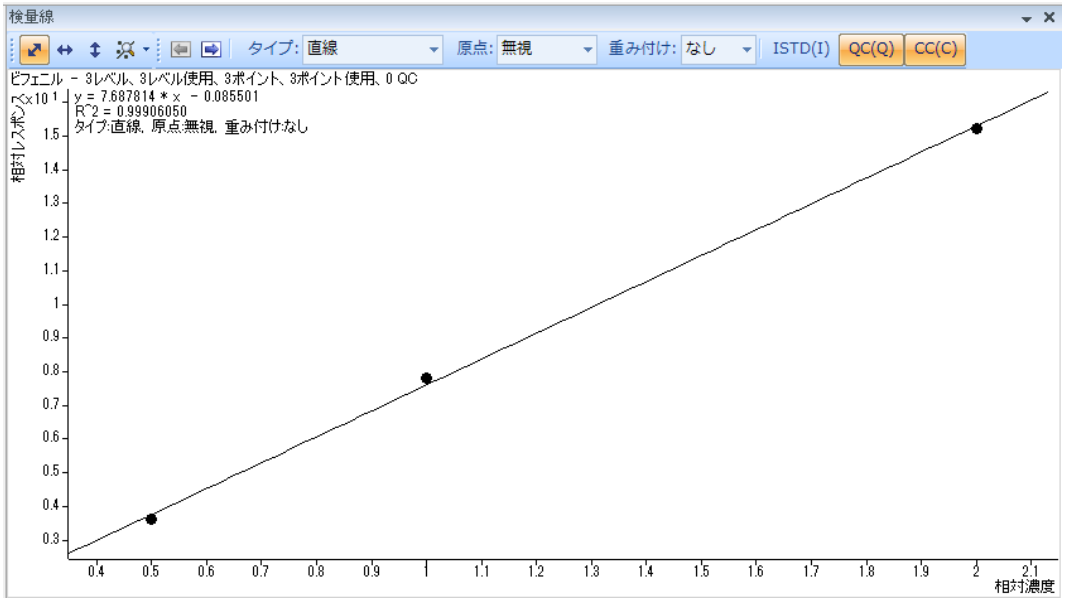
④ はい(Y) をクリックします。

⑤ バッチテーブルに戻り、検量線と定量結果が表示されます。

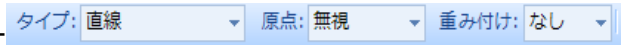

Agilent MassHunter 定量分析 - eval - evalsim.batch.bin
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 解析(N) メソッド(M) 更新(U) レポート(R) ツール(T) ヘルプ(H)
バッチテーブル
サンプル: 標準試料 A 5 ng/uL
サンプルタイプ: <すべて>
化合物: ビフェニル
ISTD: ドデカン
サンプル
ビフェニ…
ビフェニル結果
クオリフ…
ドデカン (ISTD)…
クオリファ…
サンプル名
データファイル
タイプ
レベル
測定日時
予測濃度
RT
レスポンス
MI
計算濃度
最終濃度
精度
比率
標準試料 A 5 ng/uL SIM01.D キャリブレ… 1 2012/12/28 10:00 5.0000 4.846 3294 4.6373 4.6373 92.7 39.5 3.986 225 402.8
標準試料 B 10 ng/uL SIM02.D キャリブレ… 2 2012/12/28 10:13 10.0000 4.846 3209159 10.5440 10.5440 105.4 38.6 3.986 84582 486.0
標準試料 C 20 ng/uL SIM03.D キャリブレ… 3 2012/12/28 10:27 20.0000 4.846 6106961 19.8187 19.8187 99.1 39.5 3.986 81985 489.2
テスト試料 unknown01.D サンプル 2012/12/28 10:41 4.846 3209159 10.5440 10.5440 38.6 3.986 84582 486.0
化合物情報
+ Selected Ion (154.0) SIM01.D
4.846 min
154.0 , 153.0
比率 = 39.5 (100.1 %)
測定時間 (min)
検量線
タイプ: 直
原点: 無
重み付け: な
ISTD(I)
QC(Q)
ビフェニル - 3レベル、3レベル使用、3ポイント、3ポイント使用、0 QC
y = 39.406017 * x - 3.608327
R^2 = 0.99606977
タイプ:直線、原点無視、重み付けなし
相対レスポンス
相対濃度
処理
標準試料 A 5 ng/uL
ビフェニル
4 サンプル(合計 4)

8章－12 検量線ウィンドウ

検量線が上手く作成できているか検量線ウィンドウを使って確認します。

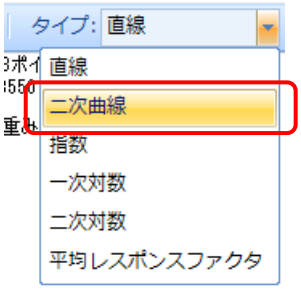


（１）　検量線の変更

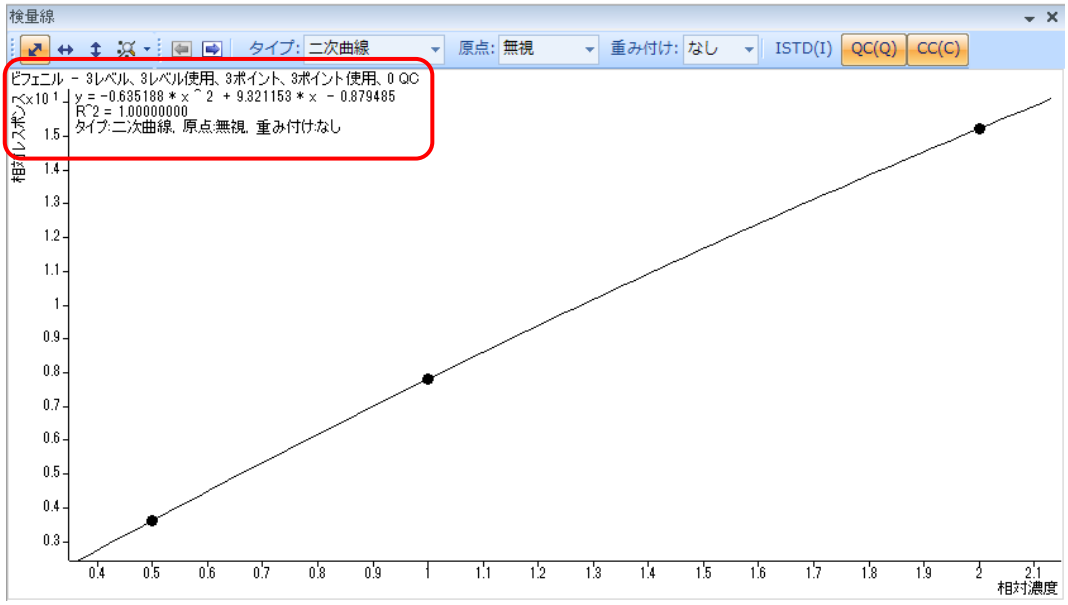
［検量線］ウィンドウのツールバー 

を使って検量線の種類を変更できます。二次曲線へ変更する手順を例にして操作を説明します。

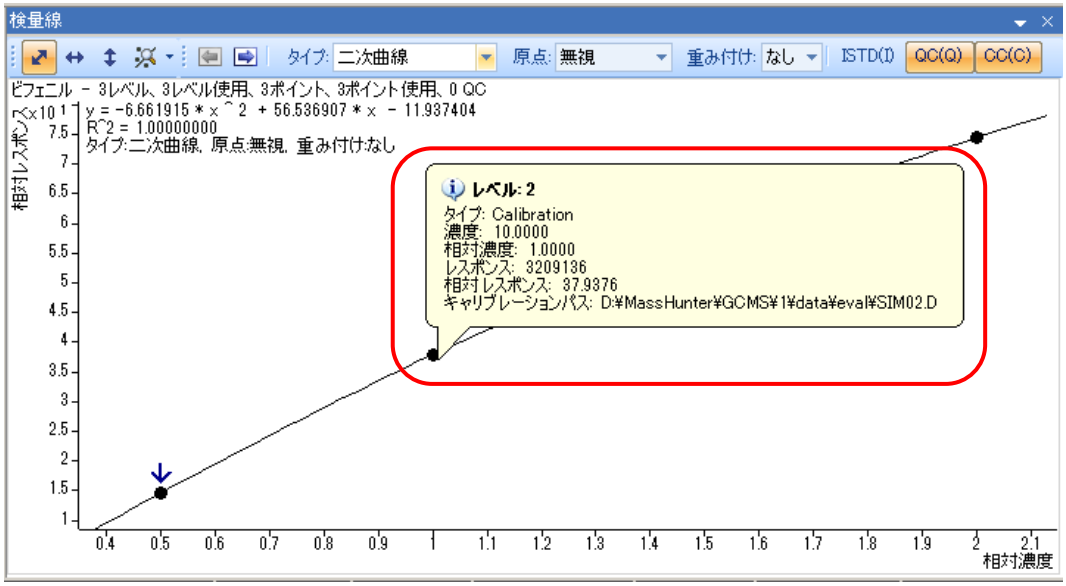
① ツールバーのタイプ欄の をクリックして二次曲線に変更します。



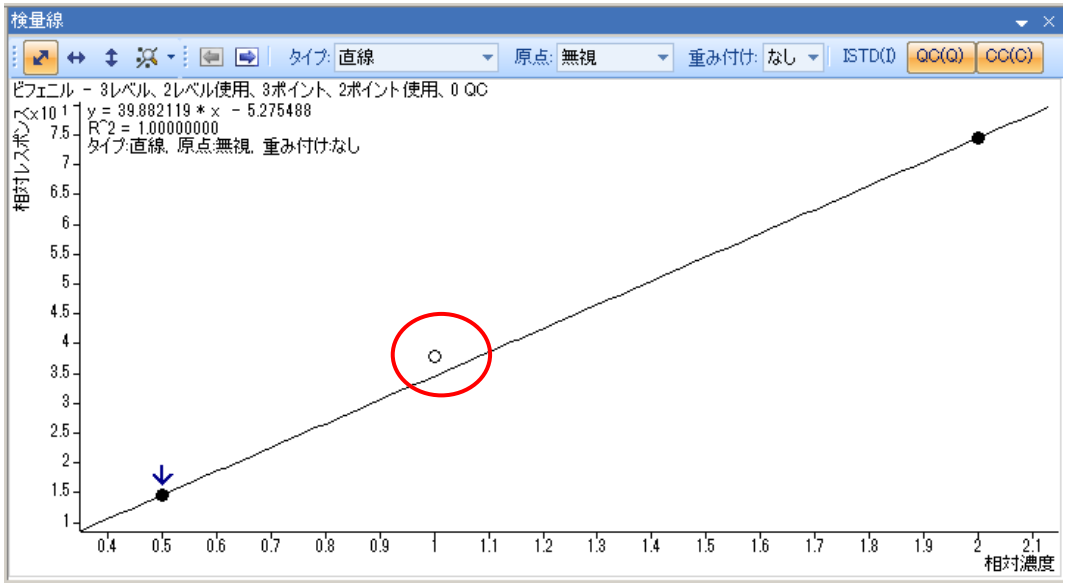
③　検量線ウィンドウで検量線が二次曲線になったことを確認します。

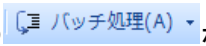


④　検量線上の点を“ポイント”すると、そのレベルの詳細が表示されます。



⑤　検量線上の点を“クリック”すると、そのレベルを外す事ができます。
検量線で使用するレベルは「●」、使用しないレベルは「○」で表示されます。



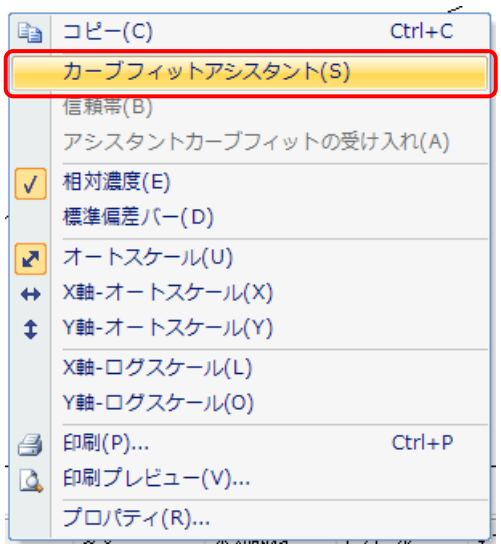
⑥　メニューバーの  ボタンをクリックして検量線変更をバッチに適用します。

（２）カーブフィットアシスタント

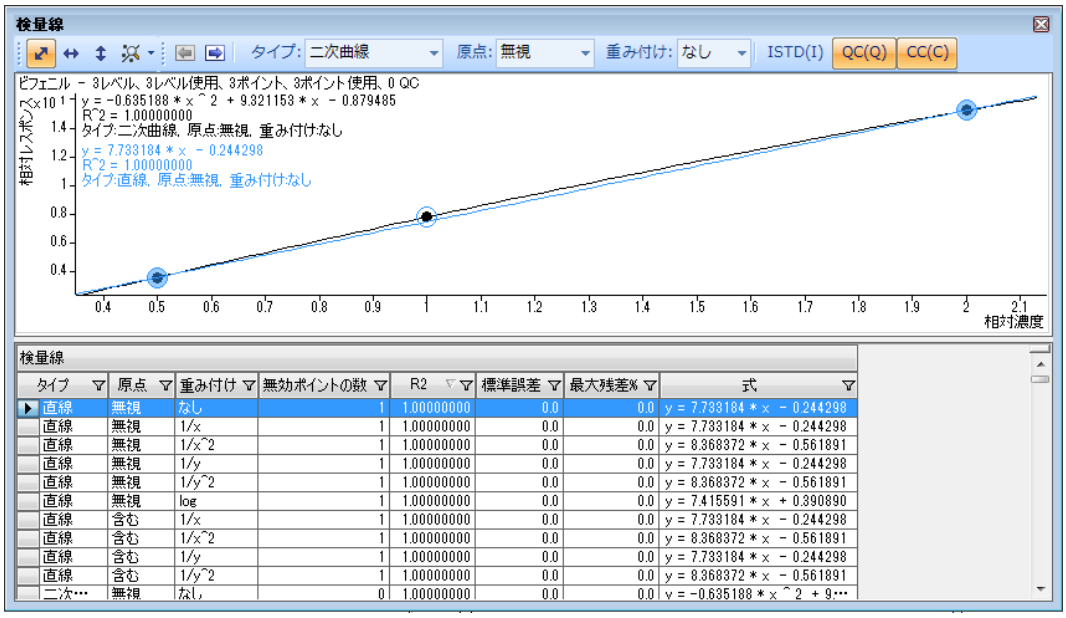
プログラム内に準備されている検量線から最適なものを選ぶツールです。

①　検量線ウィンドウ内で右クリックします。

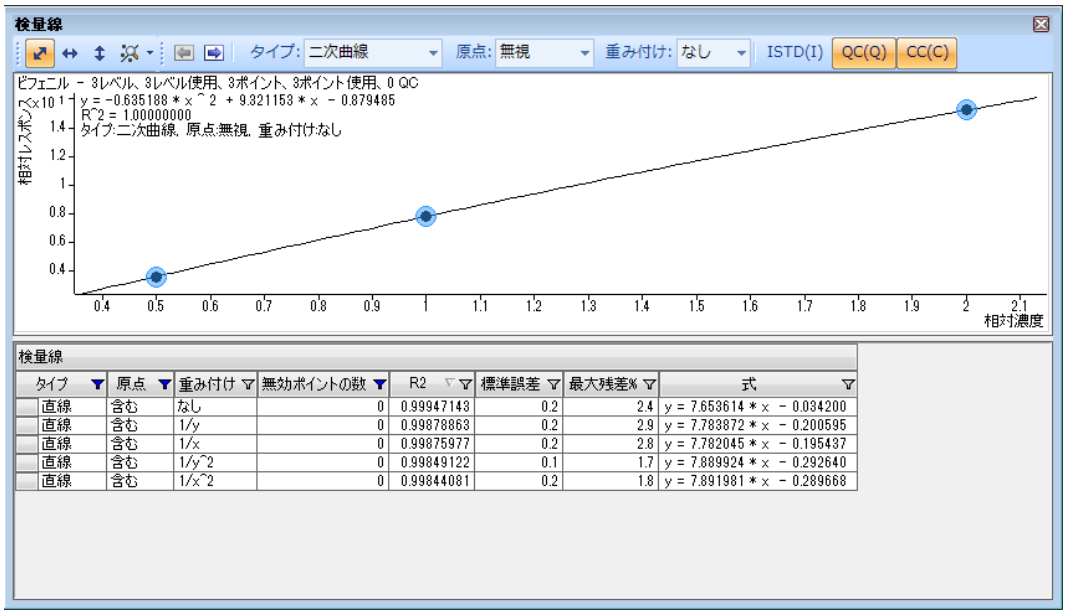
②　メニューから［カーブフィットアシスタント］をクリックします。



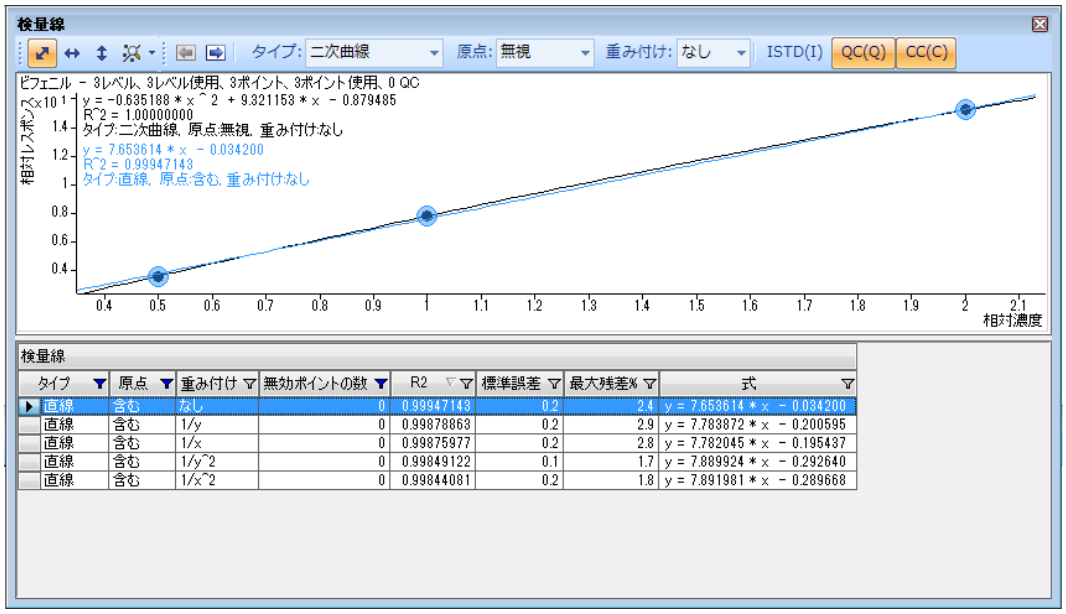
③　［カーブフィットアシスタント］ウィンドウが表示されます。



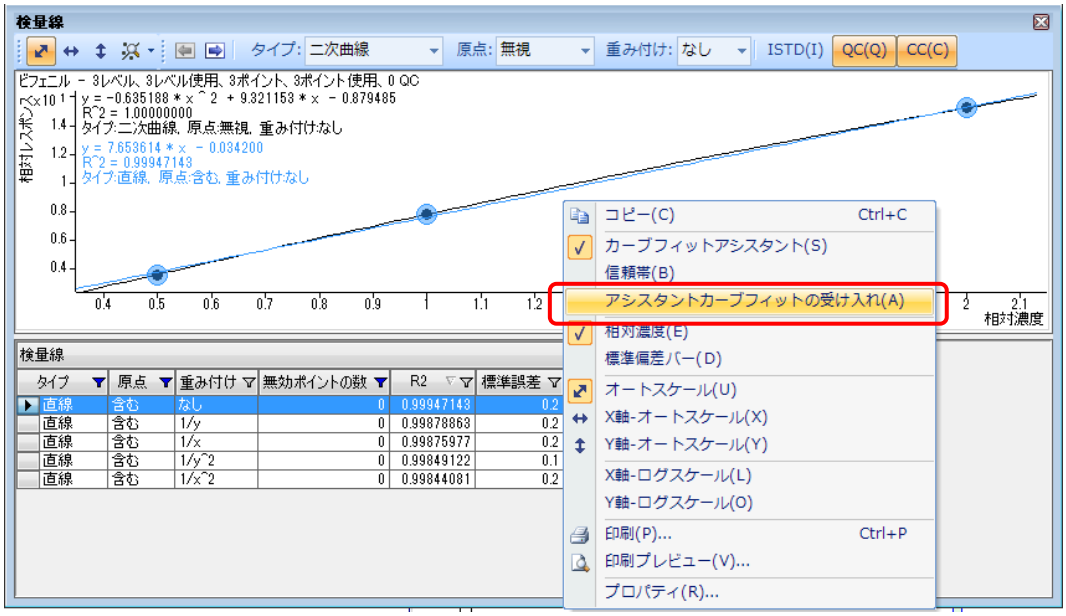
④　各欄の▽をクリックしてフィルターを掛けて検量線を絞り込むことができます。
図は、タイプ：直線、原点：含む、無効ポイントの数：０でフィルターを掛けた例です。



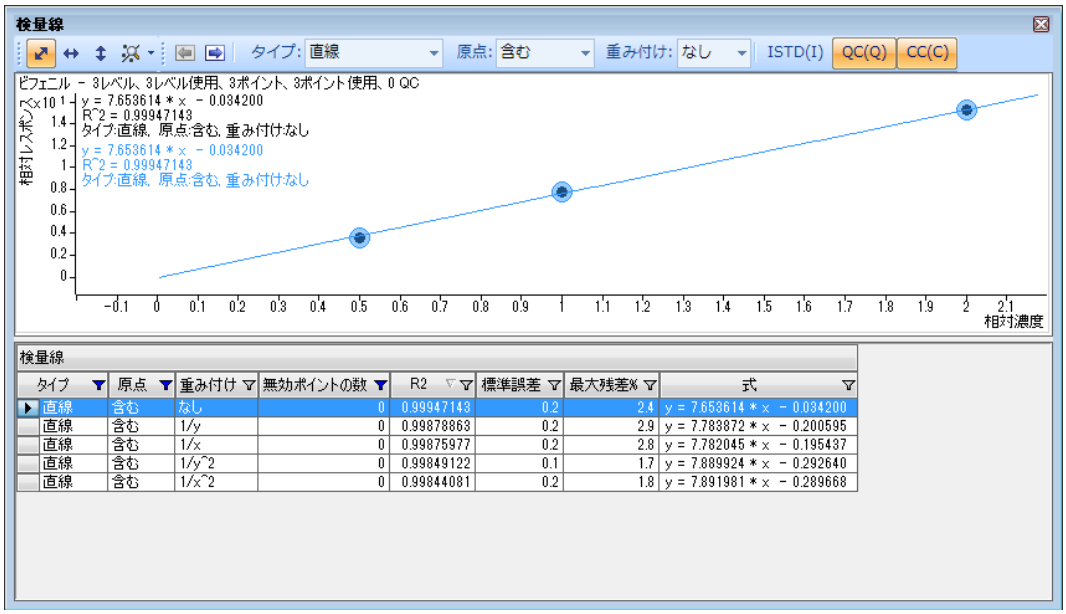
⑤　表内の検量線を選ぶとウィンドウ上段に選んだ検量線と、現在の検量線とが重ね書きで表示されます。

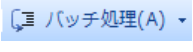


⑥　ウィンドウ上段のグラフ上で右クリックメニューを表示して、［アシスタントカーブフィットの受け入れを］クリックします。



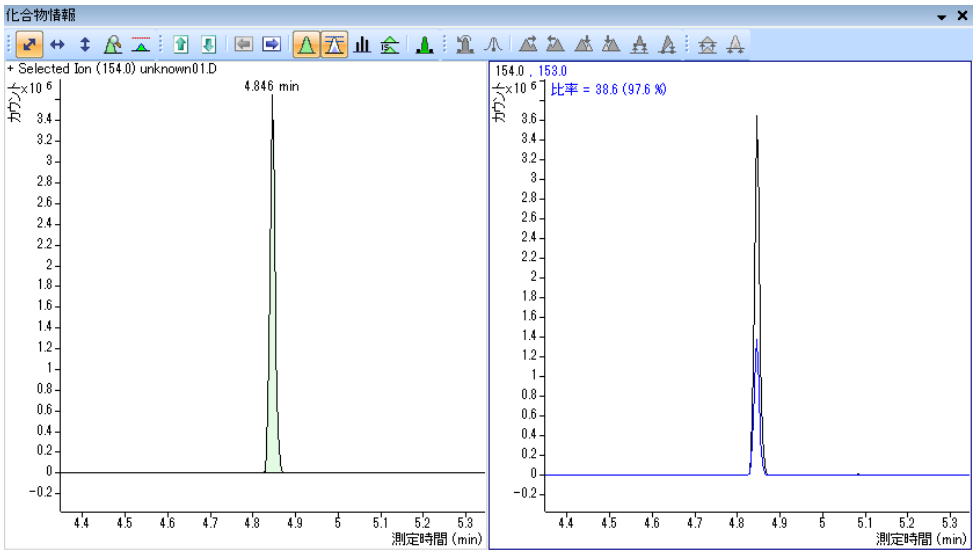
⑦　画面上段のグラフが受け入れた検量線に変わります。



⑧　メニューバーの  をクリックして変更をバッチに適用します。

8章－13 化合物情報ウィンドウ

ピークのクロマトグラムを表示して定量結果の確認・修正を行います。



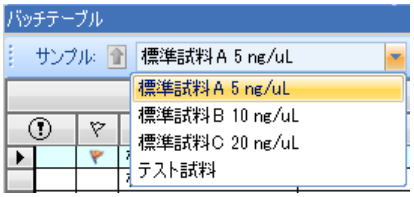
（１）　表示化合物の変更

① 化合物情報ウィンドウツールバーの ボタン群で表示するサンプル、 ボタン群で表示する化合物を変更します。ウィンドウに表示されている化合物はバッチテーブルの上部に表示されます。

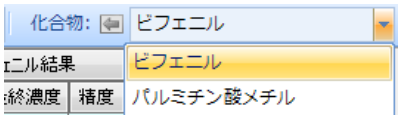
② バッチテーブルの表示したい化合物のセルをクリックすると、その化合物のクロマトグラムを表示します。

③ バッチテーブルツールバーの ボタン群で化合物情報ウィンドウと同様に表示するサンプル、化合物を変更できます。

④ バッチテーブルツールバーのサンプル欄から直接サンプルを選択できます。

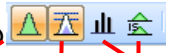


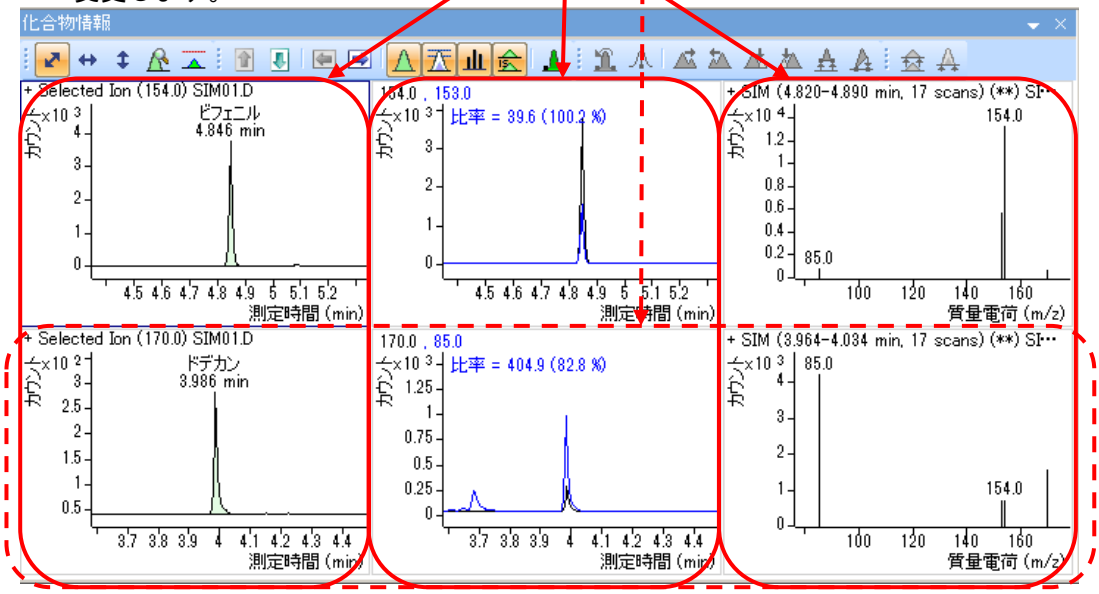
⑤ バッチテーブルツールバーの化合物欄から直接化合物を指定できます。



（２）　クロマトグラム表示の変更

ターゲット、クオリファイア等、表示するクロマトグラムを選択できます。

①　化合物情報ウインドウツールバーの  ボタン群を使って表示する項目を変更します。



表示しているクロマトはオレンジ色のボタンとして表示されます。

②　マウスで右ドラッグしてピークの拡大ができます。

③　化合物情報ウインドウツールバーの ボタン群を使って軸スケールを変更します。

（３）　マニュアル積分

ピークの誤認識、不適切なピーク認識を修正します。

①　化合物情報ウインドウツールバーの ボタンをクリックしてマニュアル積分モードに入ります。

②　ピークを削除する時は ゼロピークをクリックします。

③　 ボタン群を使って、ピークをまとめたり、分けたりできます。

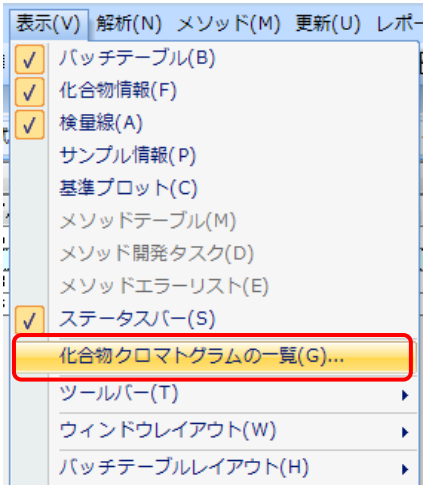
④　マウスの左ドラッグ、 ボタン群を使って、ベースラインを変更できます。

⑤　 ボタンでマニュアル積分結果を取り消すことができます。

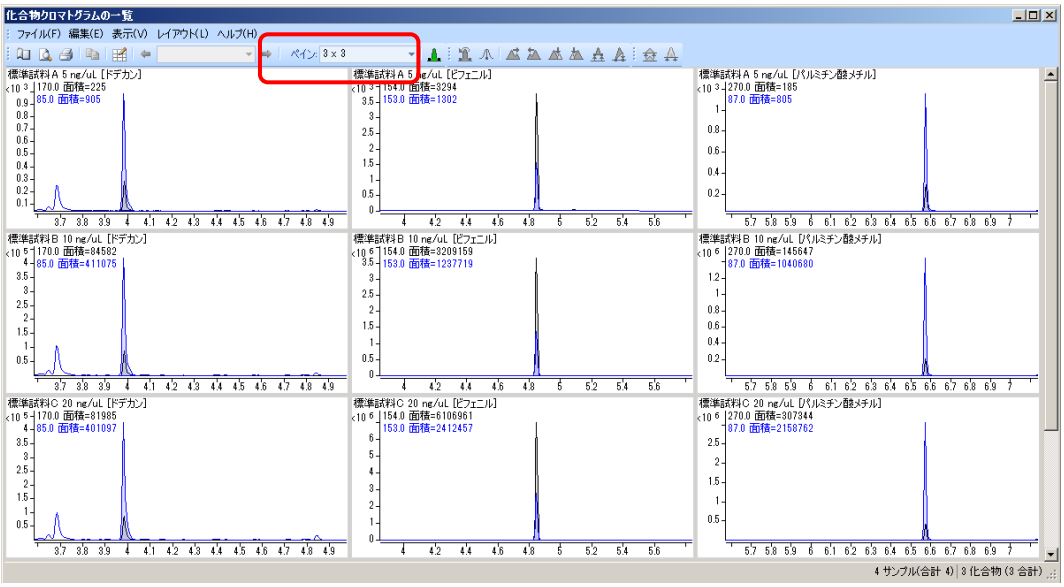
（4）　化合物クロマトグラムの一覧

一覧を使って複数サンプルと複数化合物の定量結果を確認・修正できます。

①　表示メニューの［表示］－［化合物クロマトグラムの一覧］をクリックします。



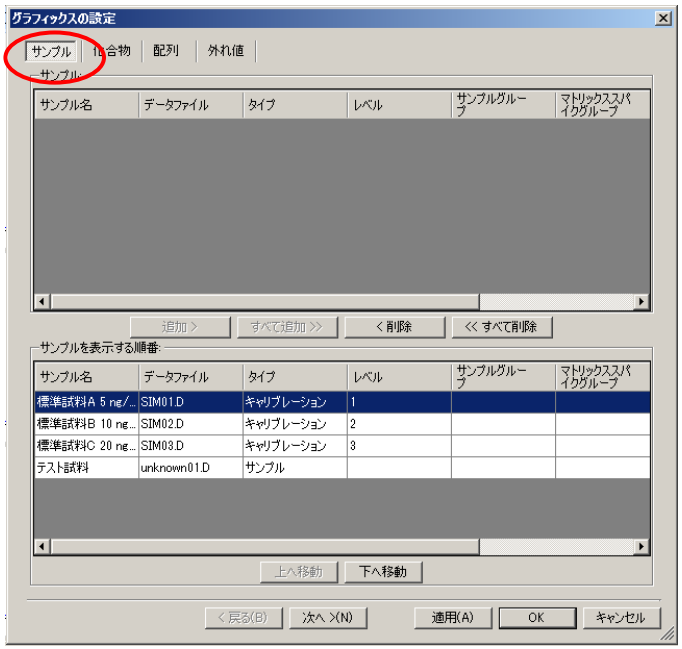
②　［化合物クロマトグラムの一覧］ダイアログボックスが表示されます。一覧で表示されるクロマトの数は、ペインの設定で変更することが可能です。



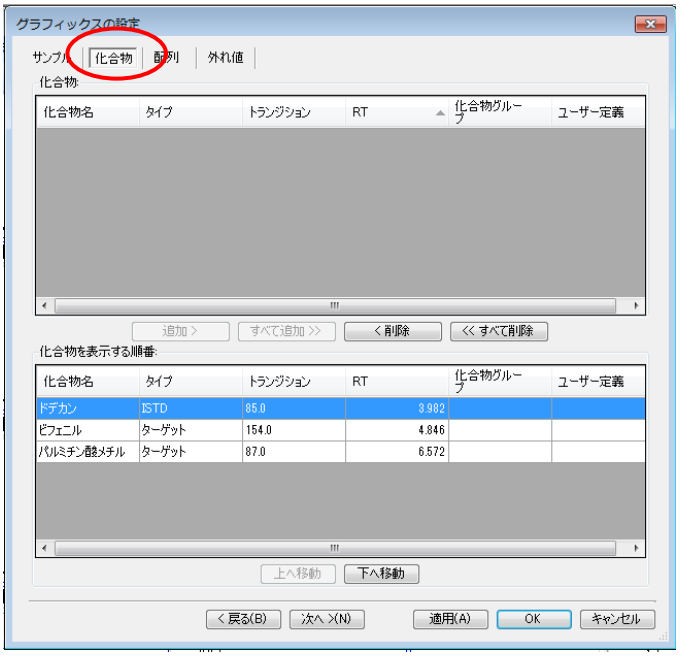
③　ツールバーの をクリックします。

④　［グラフィックスの設定］ダイアログボックスが表示されます。

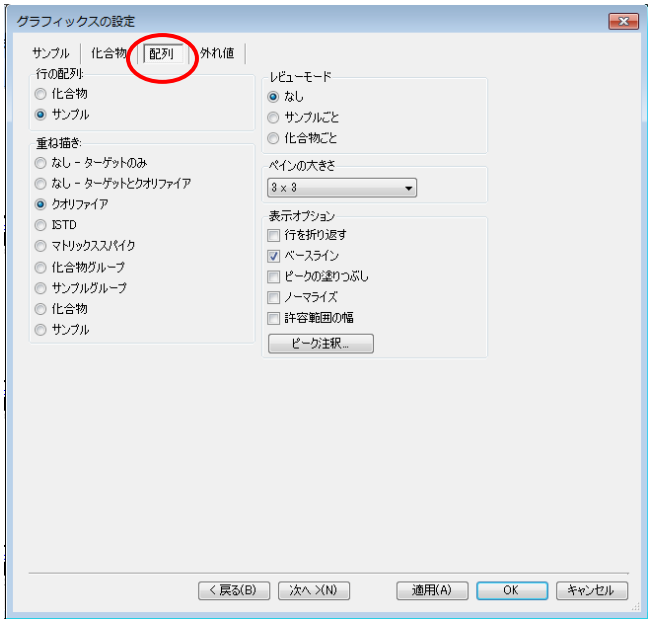
⑤　［サンプル］タブで表示するサンプルと表示順を変更できます。



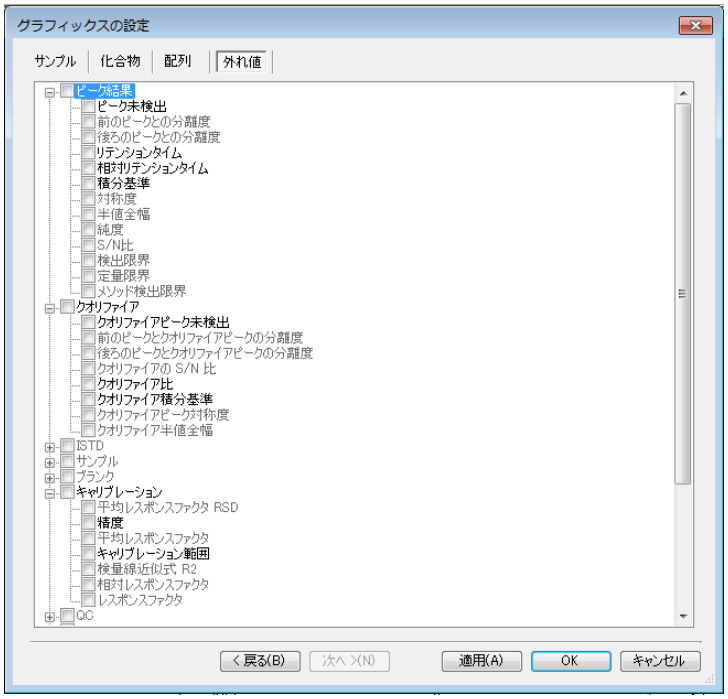
⑥　［化合物］タブで表示する化合物と表示順を変更できます。



⑦　［配列］タブで表示の設定を変更できます。



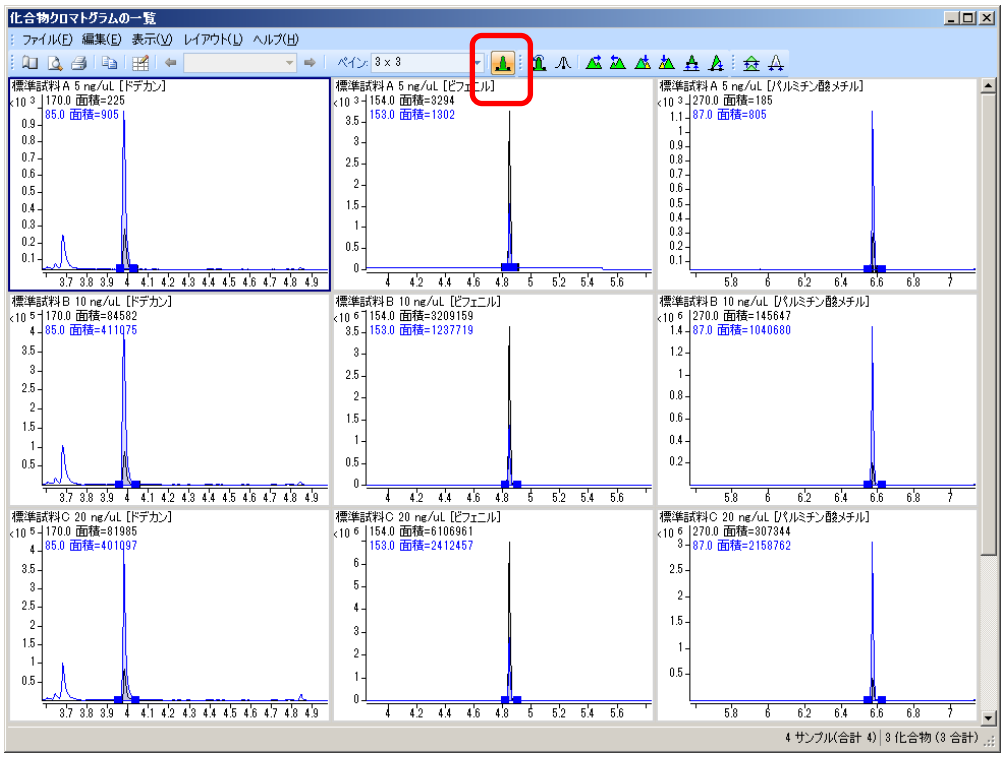
⑧　［外れ値］タブで参照する外れ値を変更できます。



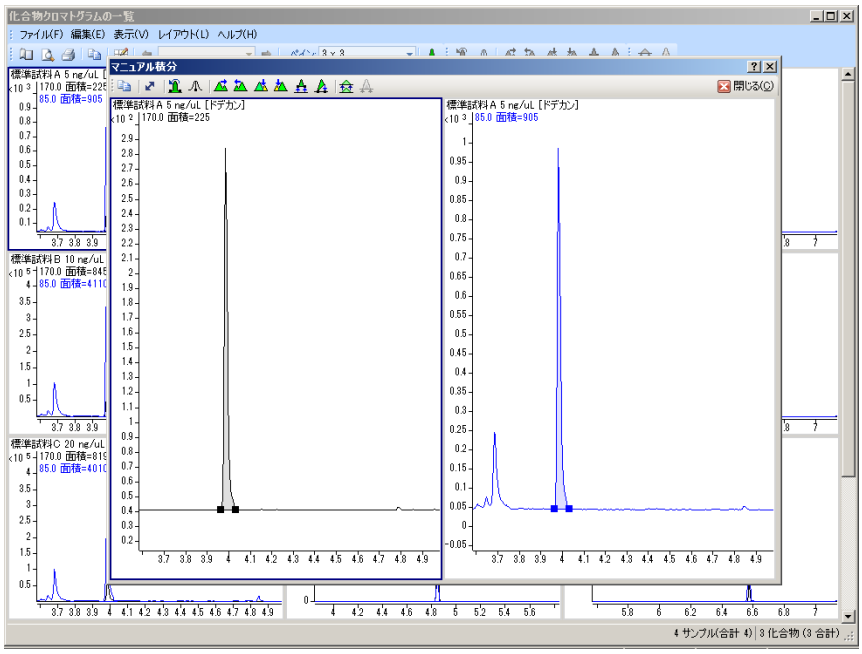
⑨　［適用(A)］をクリックすると［化合物クロマトグラムの一覧］ウィンドウに変更結果が反映されます。

⑩　［OK］をクリックしてダイアログボックスを終了します。

⑪　［化合物クロマトグラムの一覧］ダイアログボックスツールバーの をクリックするとマニュアル積分モードに入り、化合物情報ウィンドウと同様にマニュアル積分を行うことができます。



⑫　［化合物クロマトグラムの一覧］上のクロマトをダブルクリックする[マニュアル積分]ウィンドウが現れ、大きな画面でマニュアル積分することができます。



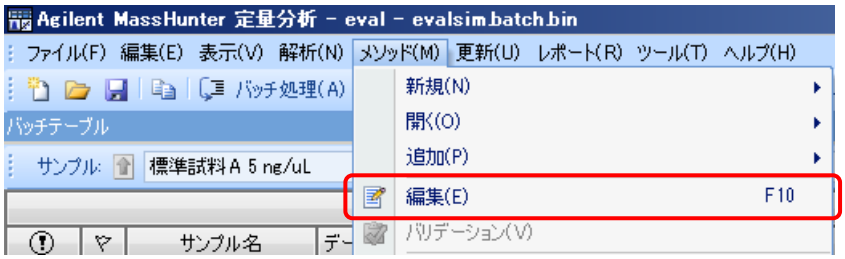
8章－14 フラグと外れ値

外れ値を設定することで設定した基準値内に入らない成分や定量結果に問題のある成分を見つけることができます。

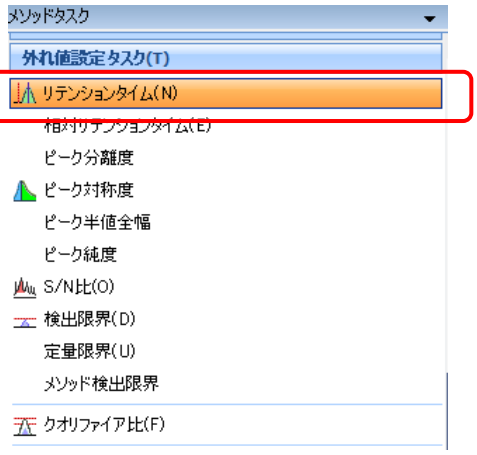
（1）　外れ値の設定

外れ値として多くの設定ができます。
初期設定で、クオリファイア比が 20%、リテンションタイムのズレが 10%に設定されています。リテンションタイムのズレ幅を±0.1 分に設定する例を使って外れ値設定手順を紹介します。

① メニューの［メソッド］－［編集］をクリックして［MassHunter 定量分析　メソッド］ウインドウを開きます。



② ［メソッドタスク］－［外れ値設定タスク］をクリックします。



③ ［リテンションタイム］をクリックします。

④ ［メソッドテーブル］の表示がリテンションタイムの外れ値設定用に変わります。

定量対象化合物

化合物名	TS	スキャン	タイプ	RTウィンドウ	RT単位
ドデカン	1	SIM	ISTD	10.000	パーセント
ビフェニル	1	SIM	ターゲット	10.000	パーセント
パルミチン酸メチル	2	SIM	ターゲット	10.000	パーセント

⑤　ドデカンの RT ウィンドウを「0.1」に、RT 単位を「分」に変更します

定量対象化合物

化合物名	TS	スキャン	タイプ	RTウィンドウ	RT単位
ドデカン	1	SIM	ISTD	0.100	分
ビフェニル	1	SIM	ターゲット	10.000	パーセント
パルミチン酸メチル	2	SIM	ターゲット	10.000	パーセント

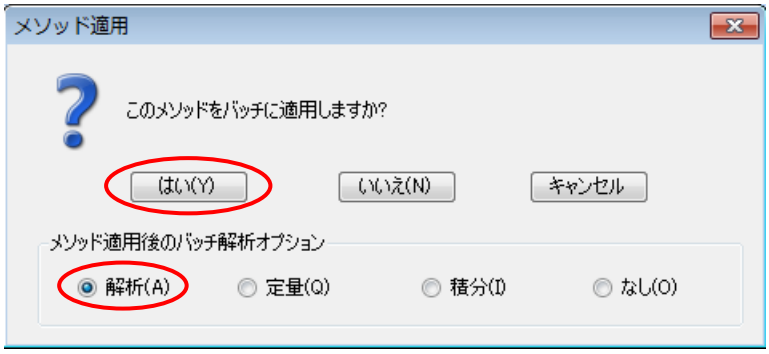
⑥　ドデカンの RT ウィンドウ上で右クリックしてメニューの下へコピーをクリックします。

⑦　全ての化合物の RT ウィンドウが 0.1 になりました。同様にドデカンの RT 単位上で右クリック、下へコピーで単位を分に変更します。

定量対象化合物

化合物名	TS	スキャン	タイプ	RTウィンドウ	RT単位
ドデカン	1	SIM	ISTD	0.100	分
ビフェニル	1	SIM	ターゲット	0.100	分
パルミチン酸メチル	2	SIM	ターゲット	0.100	分

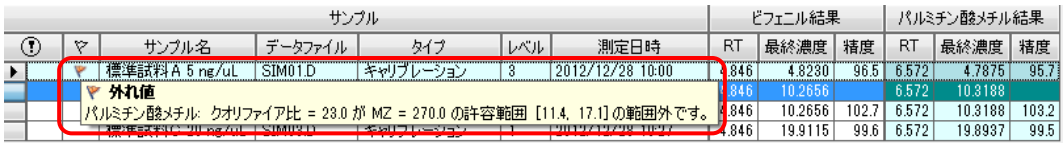
⑧　メソッドタスクの 終了(X) をクリックし、［メソッドの適用］ダイアログボックスのメソッド適用後のバッチ解析オプションの解析をチェック後 はい(Y) をクリックして［MassHunter 定量分析］ウィンドウに戻ります。



（２）　フラグ

バッチ処理結果で外れ値を持つサンプルにフラグが表示されます。

①　フラグをマウスでポイントすると外れ値の内容が表示されます。



②　バッチテーブル上で外れ値は赤（設定を超えた場合）と青（設定に満たない場合）で表示されます。

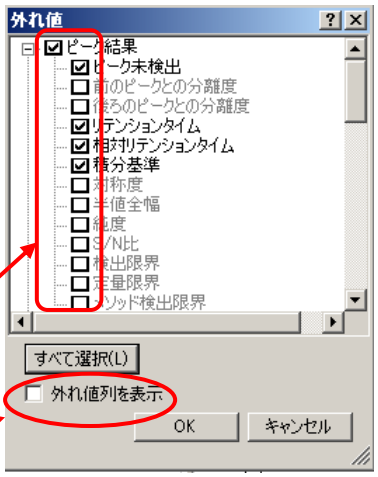
③　バッチテーブルツールバーで ボタン群を使って、外れ値を持つサンプルの表示／非表示を変更することができます。

④　バッチテーブルツールバーの ボタンをクリックします。

⑤　［外れ値］ダイアログボックスが開きます。

⑥　チェックボックスにチェックして使用する外れ値を選択します。

⑦　外れ値列を表示にチェックするとバッチテーブルの列表示にチェックした外れ値の列が表示されます。



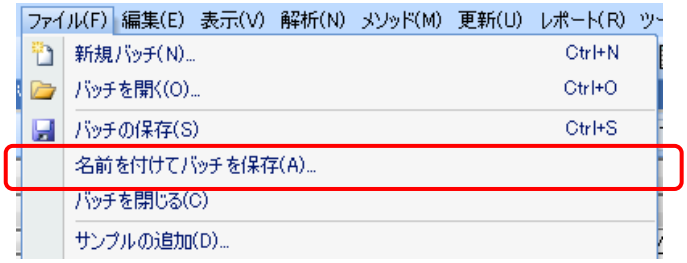
8章－15 バッチの保存

(1)上書き保存

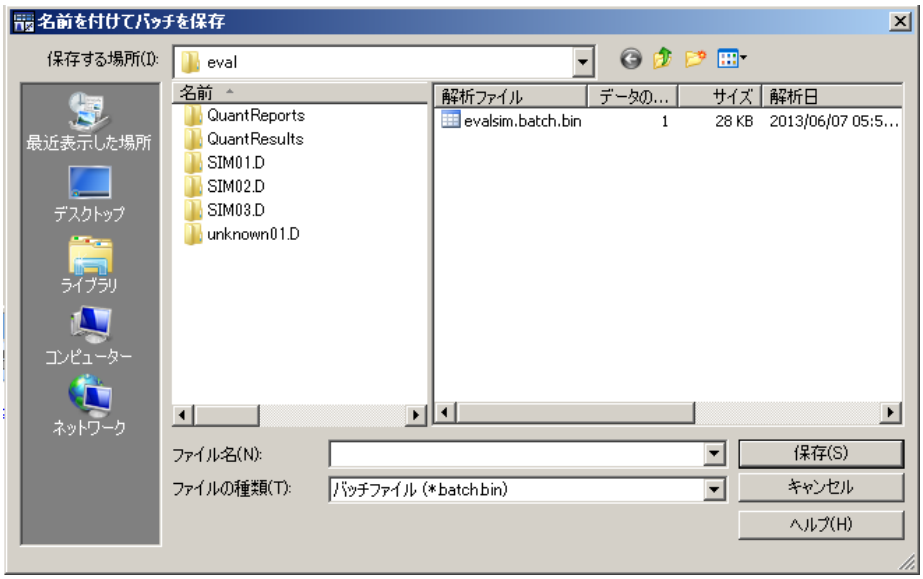
（バッチの保存アイコン）をクリックします。メニューから選択する場合は［ファイル］－［バッチの保存］をクリックします。

（２）別名保存

①メニューから［ファイル］－［名前を付けてバッチを保存］をクリックします。



②［名前を付けてバッチを保存］ダイアログボックスが開きます。



③ファイル名を入力して［保存(S)］をクリックします。

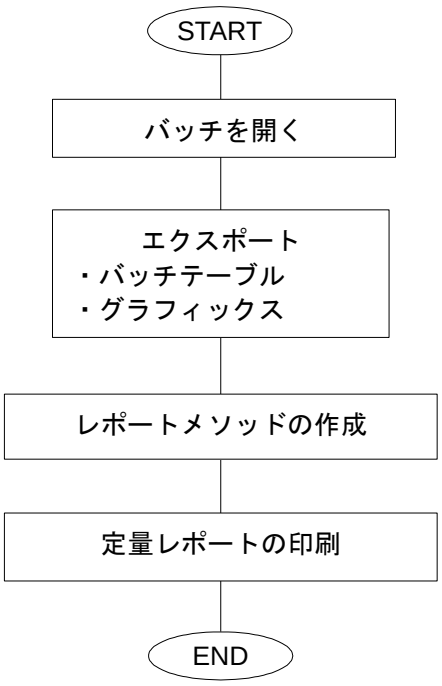
Memo

第9章
レポートの作成

9 章－1	バッチの読み込み	9－3
9 章－2	バッチテーブルのエクスポート	9－5
9 章－3	グラフィックのエクスポート	9－8
9 章－4	化合物クロマトグラムの一覧を印刷	9－11
9 章－5	レポートメソッド	9－12
9 章－6	定量レポートの自動化	9－18
9 章－7	定量レポート用テンプレート	9－25

＜レポートの作成＞

本章では、定量が終わったバッチからレポートを作成・出力する方法について説明しています。

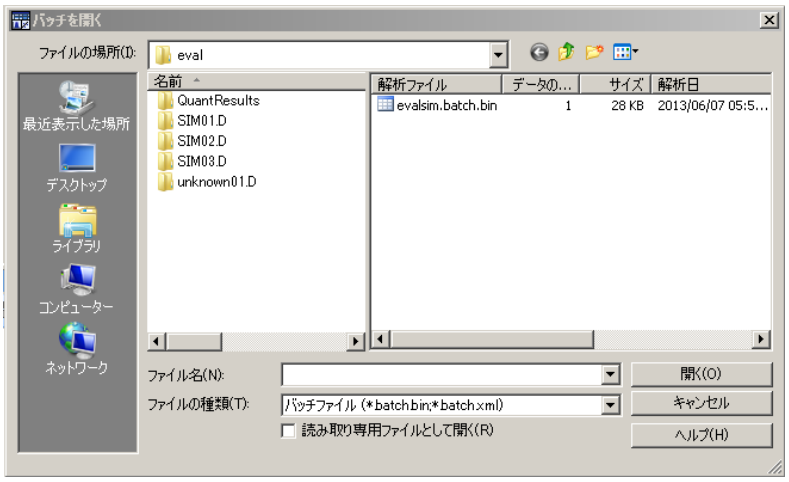


本章には、下記についての説明も含まれています。
・収容されている定量レポート用テンプレートを使った印刷例の使い方
・測定シーケンスで定量レポートを印刷する方法

9章－1　バッチの読み込み

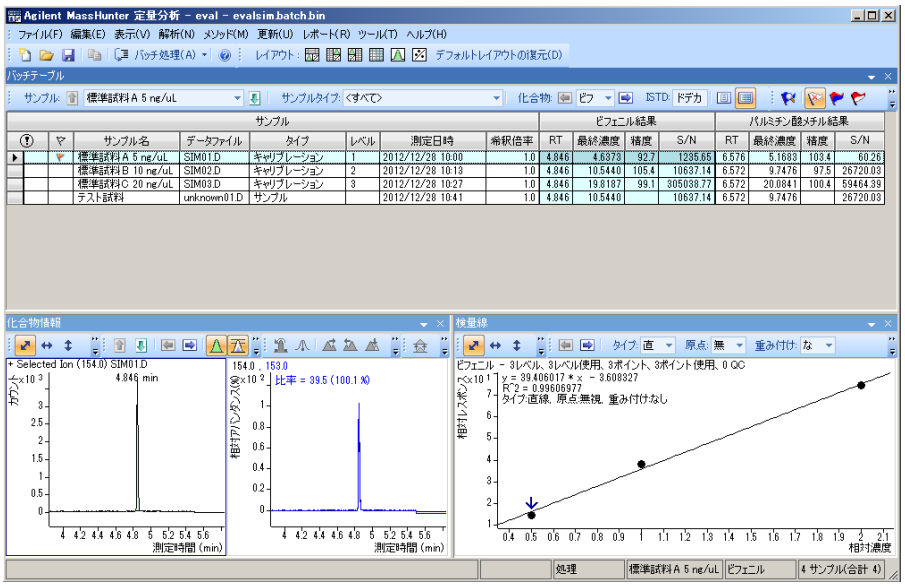
（１）デスクトップの をダブルクリックしてマスハンター定量分析を開きます。

（２）メニューの［ファイル］－［バッチを開く］をクリックします。



（３）D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥eval とフォルダをたどり、evalsim.batch.bin を開きます。

（４）バッチテーブルに保存したバッチ処理結果が読み込まれます。



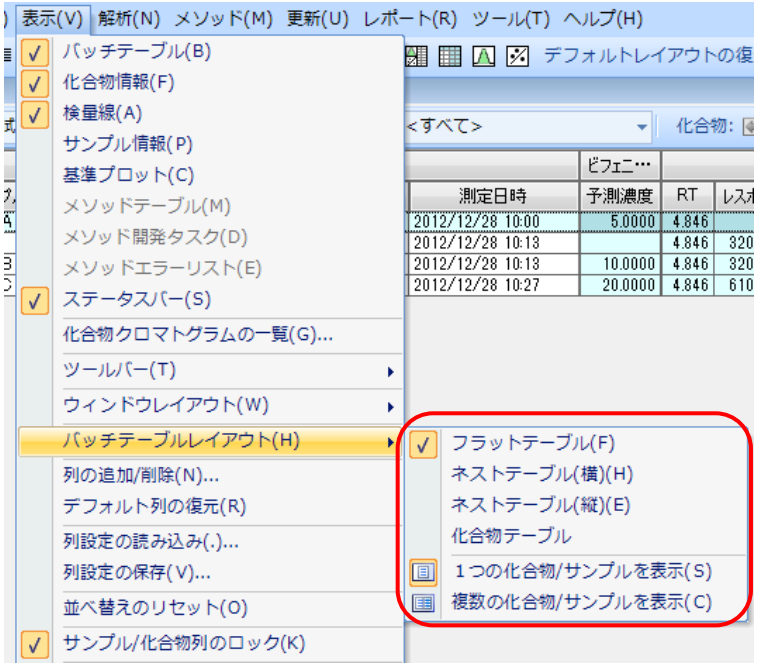
（５）バッチテーブルのレイアウト変更

［MassHunter 定量分析］ウィンドウは、ウィンドウに表示されている状態をエクスポートできます。また、テーブルやグラフィックを見易く表示するためにレイアウト変更を行うことができます。

① ツールバーの レイアウト： ボタン群をクリックして、ウィンドウの配置を変更できます。アイコンをポイントするとレイアウト形式がポップアップで表示されます。

② ［バッチテーブル］ウィンドウのツールバーで をクリックして、複数化合物表示と 1 つの化合物表示を切り換えできます。

③ メニューから［表示］－［バッチテーブルレイアウト］をクリックして、バッチテーブルのレイアウトを変更できます。



一例としてバッチテーブルに複数の化合物／サンプルを表示して化合物テーブルを選んだ時のバッチテーブルの表示です。

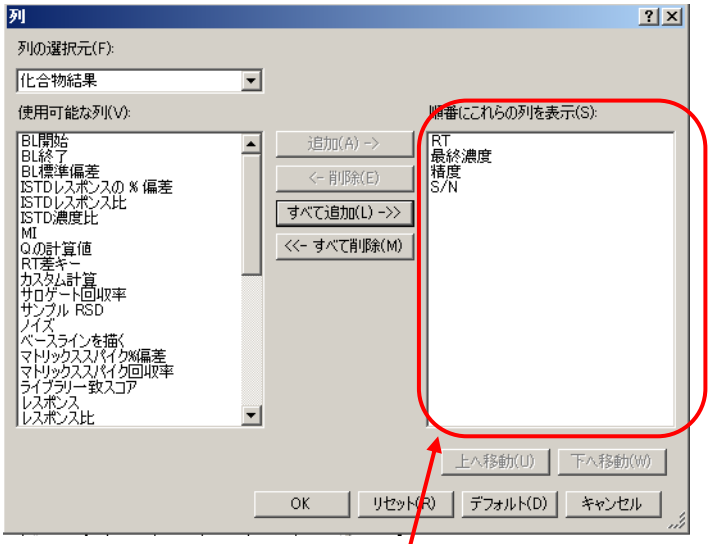
化合物メソッド	標準試料 A 5 ng/uL の…			標準試料 B 10 ng/uL…			標準試料C 20 ng/uL…			テスト試料 の結果		
化合物名	RT	最終濃度	精度	RT	最終濃度	精度	RT	最終濃度	精度	RT	最終濃度	精度
▶ ビフェニル	4.846	4.6373	92.7	4.846	10.5440	105.4	4.846	19.8187	99.1	4.846	10.5440	
パルミチン酸メチル	6.576	5.1683	103.4	6.572	9.7476	97.5	6.572	20.0841	100.4	6.572	9.7476	

9章－2　バッチテーブルのエクスポート

バッチテーブルをエクセルにエクスポートできます。フラットテーブルのエクスポートを例に操作を説明します。

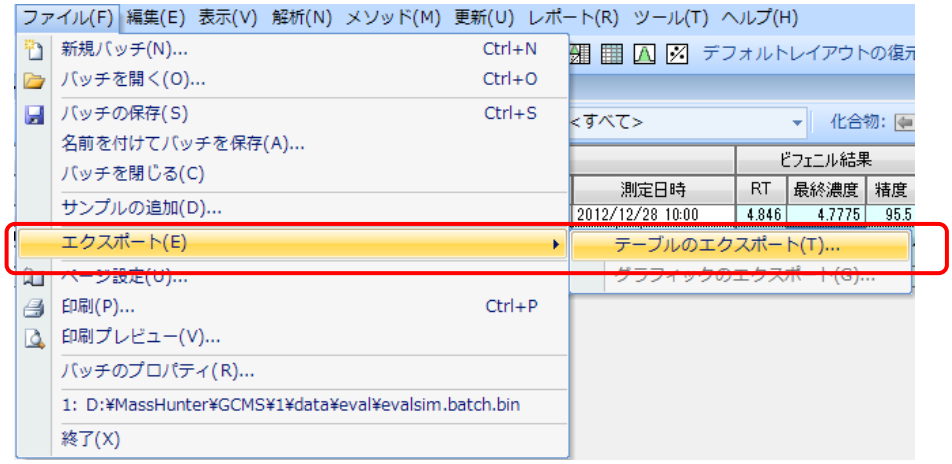
（1）バッチテーブルのタイトル行、ビフェニル結果の上で右クリック、表示されたメニューの［列の追加／削除］をクリックします。

（2）［列］ダイアログボックスが表示されます。



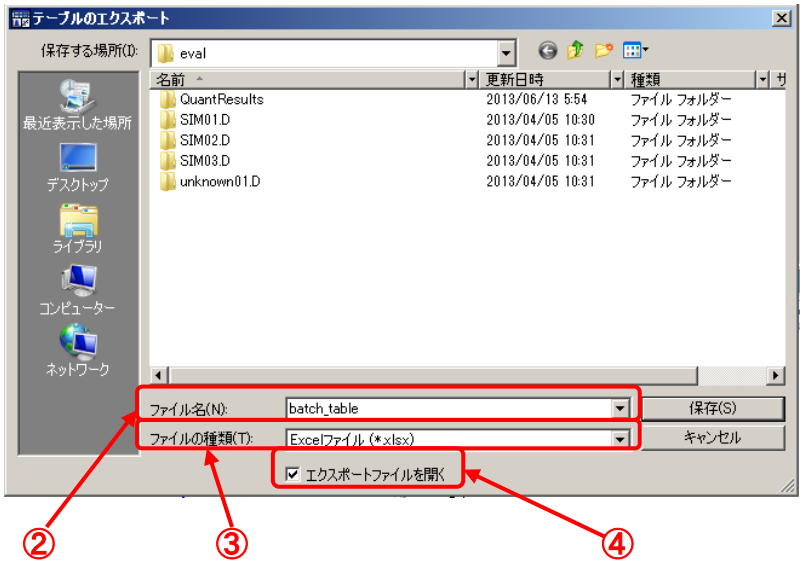
（3）使用可能な列からエクスポートしたい項目を選択して表示列に追加します。
（S/N を追加した例を示します）

（4）メニューの［ファイル］－［エクスポート］－［テーブルのエクスポート］をクリックします。



（5）［テーブルのエクスポート］ダイアログボックスが開きます。

① 保存する場所を確認します。デフォルトの保存先はバッチフォルダ（例では D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥eval）です。



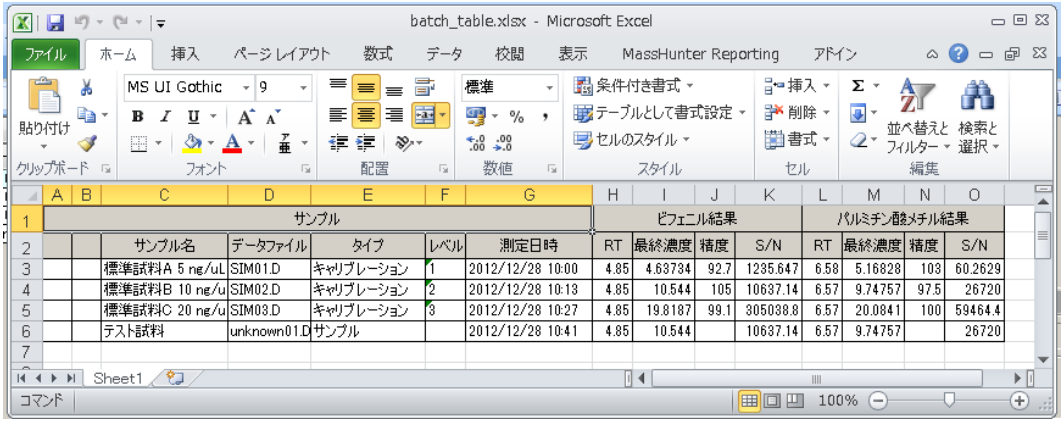
② ファイル名（この例では「batch_table」）を入力します。

③ ファイルの種類はプルダウンメニューから［Excel ファイル(*xlsx)］を選択します。

④ エクスポートファイルを開くにチェックします。

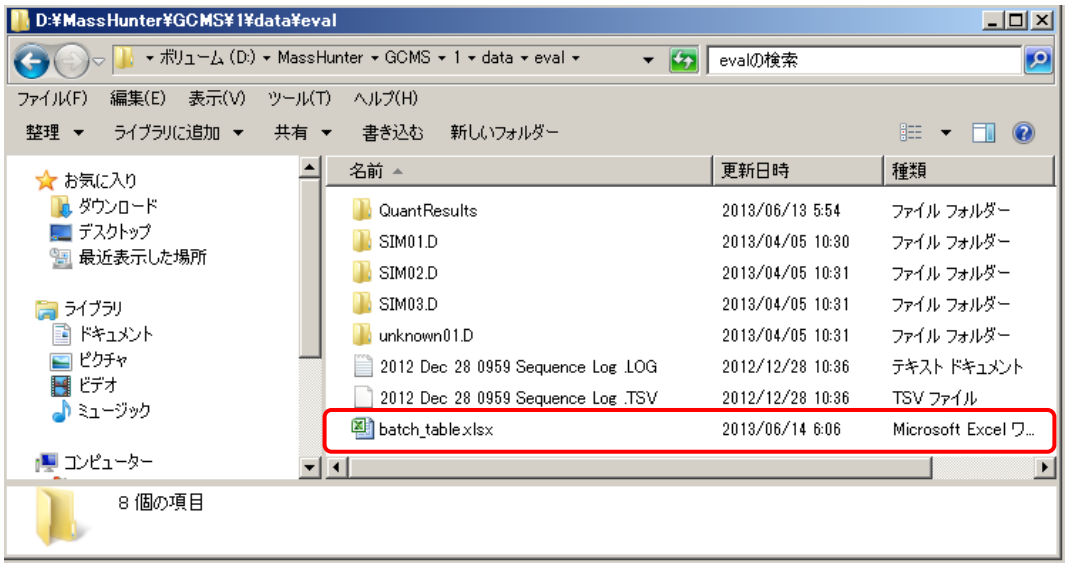
⑤ 保存(S) をクリックします。

（6）エクセルにバッチテーブルの並び順でデータがエクスポートされました。



	サンプル					ビフェニル結果				パルミチン酸メチル結果			
	サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時	RT	最終濃度	精度	S/N	RT	最終濃度	精度	S/N
3	標準試料A 5 ng/uL	SIM01.D	キャリブレーション	1	2012/12/28 10:00	4.85	4.63734	92.7	1235.647	6.58	5.16828	103	60.2629
4	標準試料B 10 ng/u	SIM02.D	キャリブレーション	2	2012/12/28 10:13	4.85	10.544	105	10637.14	6.57	9.74757	97.5	26720
5	標準試料C 20 ng/u	SIM03.D	キャリブレーション	3	2012/12/28 10:27	4.85	19.8187	99.1	305038.8	6.57	20.0841	100	59464.4
6	テスト試料	unknown01.D	サンプル		2012/12/28 10:41	4.85	10.544		10637.14	6.57	9.74757		26720

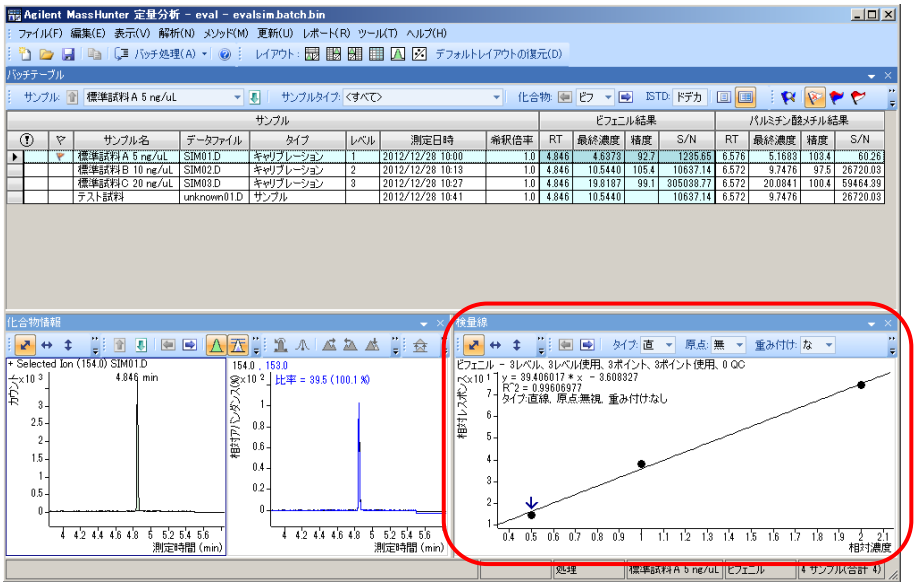
（7）エクスプローラで保存先のフォルダを開くと EXCEL ファイルができていることが確認できます。このファイルを開くとエクスポートしたデータを見ることができます。



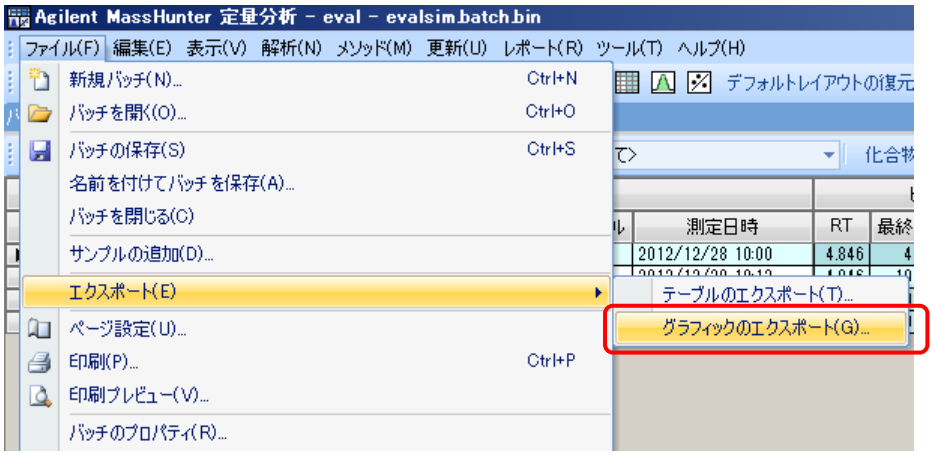
9章－3　グラフィックのエクスポート

化合物情報ウィンドウ、検量線ウィンドウに表示されているグラフィックスをエクスポートできます。

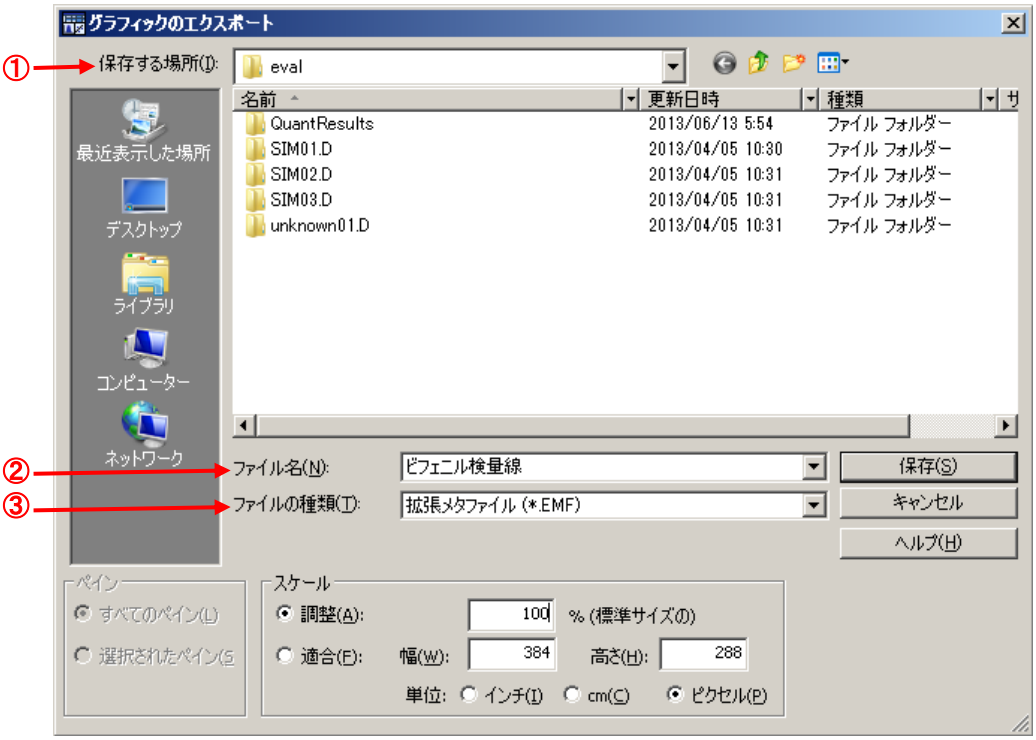
（1）［MassHunter 定量分析］ウィンドウ内の［検量線］ウィンドウをクリックして選択します。



（2）メニューから［ファイル］－［エクスポート］－［グラフィックスのエクスポート］をクリックします。



（3）［グラフィックスのエクスポート］ダイアログボックスが表示されます。



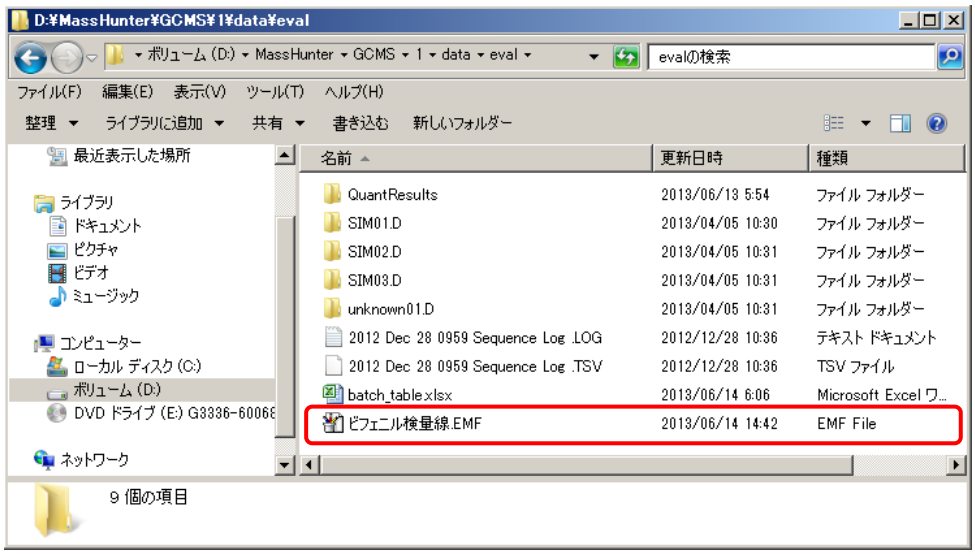
① 保存する場所（デフォルトはバッチフォルダ）を指定します。

② ファイル名（この例では、ビフェニル検量線）を入力します

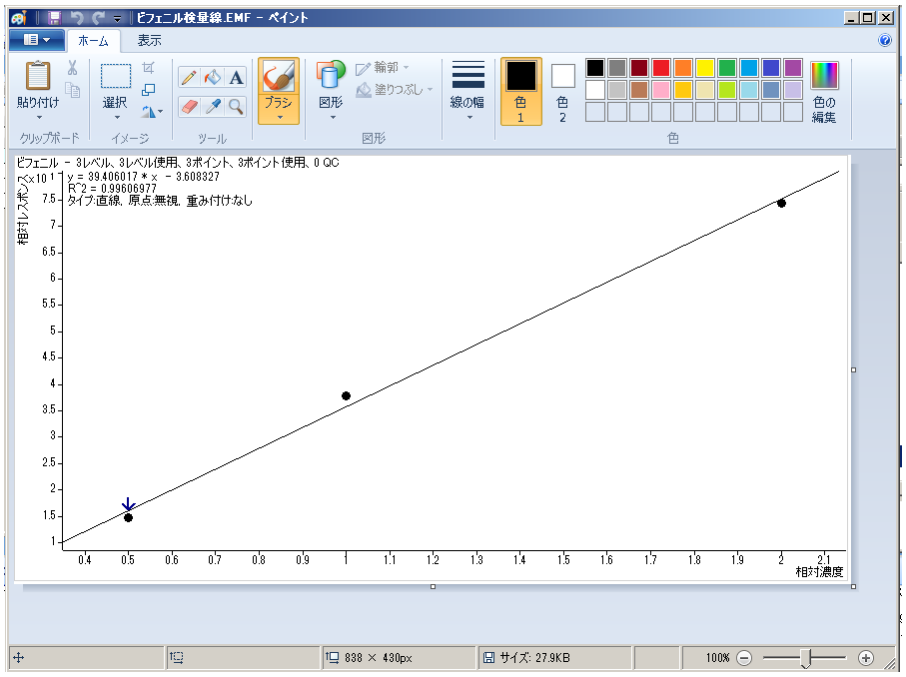
③ ファイルの種類を指定します（この例では、拡張メタファイル（*.EMF））

④ 保存(S) をクリックしてグラフィックを保存します。

（4）エクスプローラで保存先のフォルダを開くと、EMF 形式のファイルが保存されていることが確認できます。



（5）ファイルを開くと、グラフィックスの内容が表示されます。

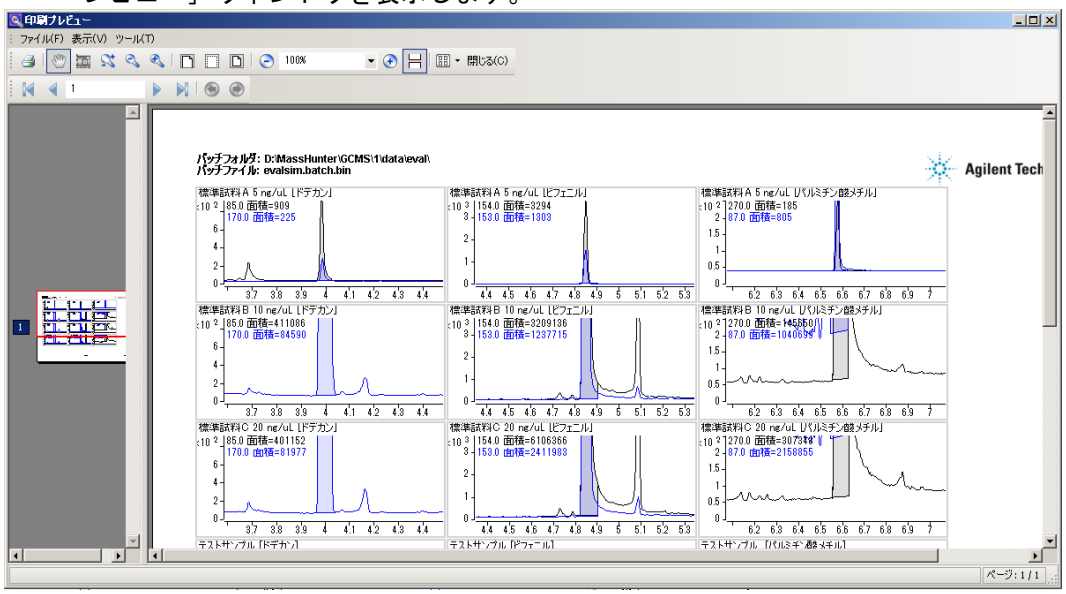


9章－4　化合物クロマトグラムの一覧を印刷

グラフィックスの設定ダイアログボックスでサンプル／化合物を指定して、印刷の必要なクロマトグラムを抜き出して印刷することができます。

（１）メニューから［表示］－［化合物クロマトグラムの一覧］をクリックして［化合物クロマトグラムの一覧］ウィンドウを表示します。

（２）をクリック、又はメニューから［ファイル］－［印刷プレビュー］で［印刷プレビュー］ウィンドウを表示します。



（３）プレビューで印刷内容が適切なことを確認し、をクリックして一覧を印刷します。

9章－5　レポートメソッド

バッチ処理の終わった後、定量レポート用テンプレートを使って定量レポートを作成・印刷します。

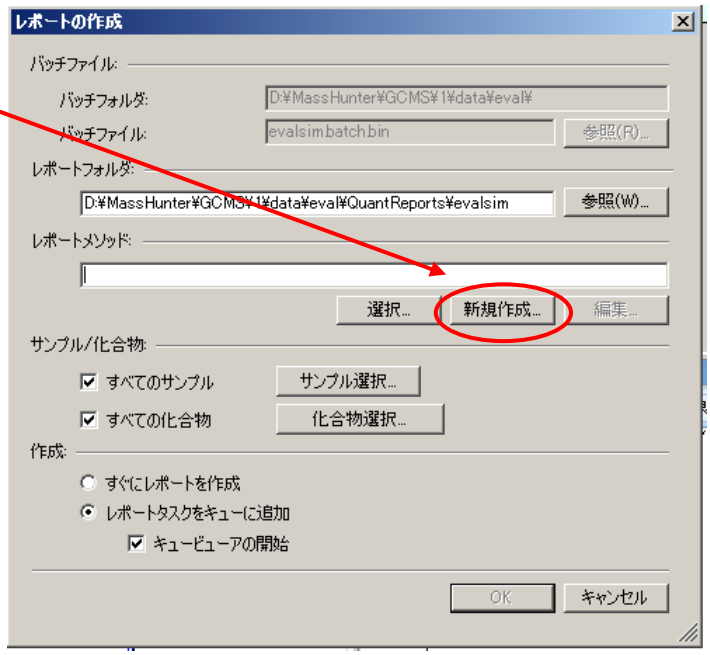
レポートの作成前には をクリックしてバッチを保存します。
普段使用するテンプレートをレポートメソッドとして登録することでバッチ解析結果を簡単に印刷できます。

（1）　レポートメソッドの作成

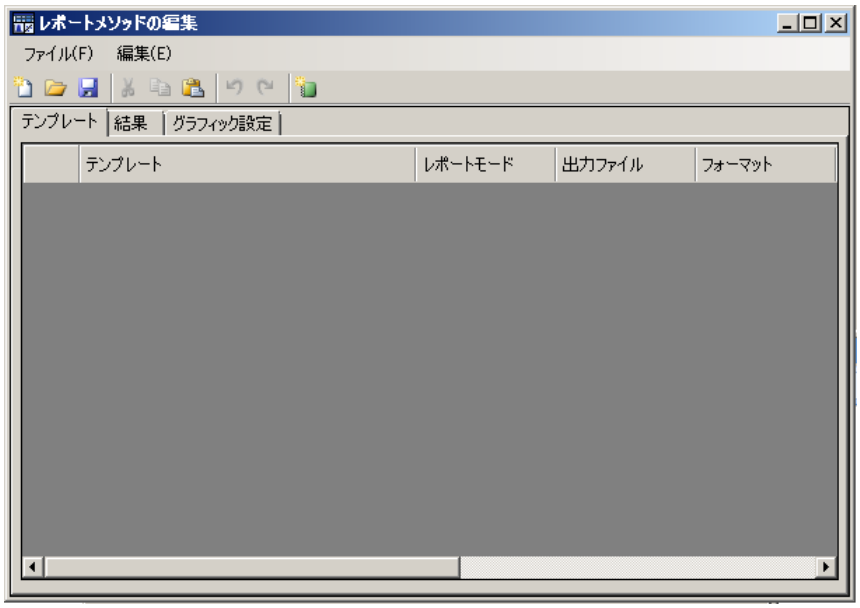
①　メニューから［レポート］－［作成］をクリックします。

②　［レポートの作成］ダイアログボックスが開きます。

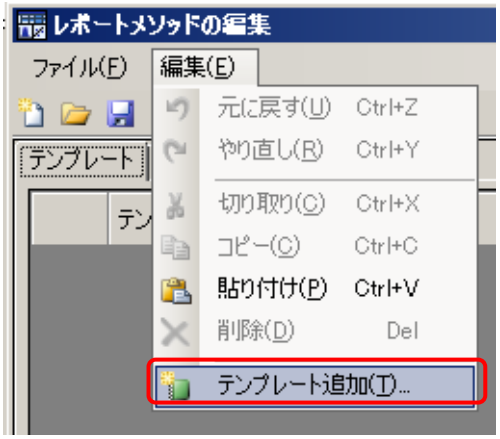
③　新規作成... をクリックして、新しいレポートメソッドを作成します。



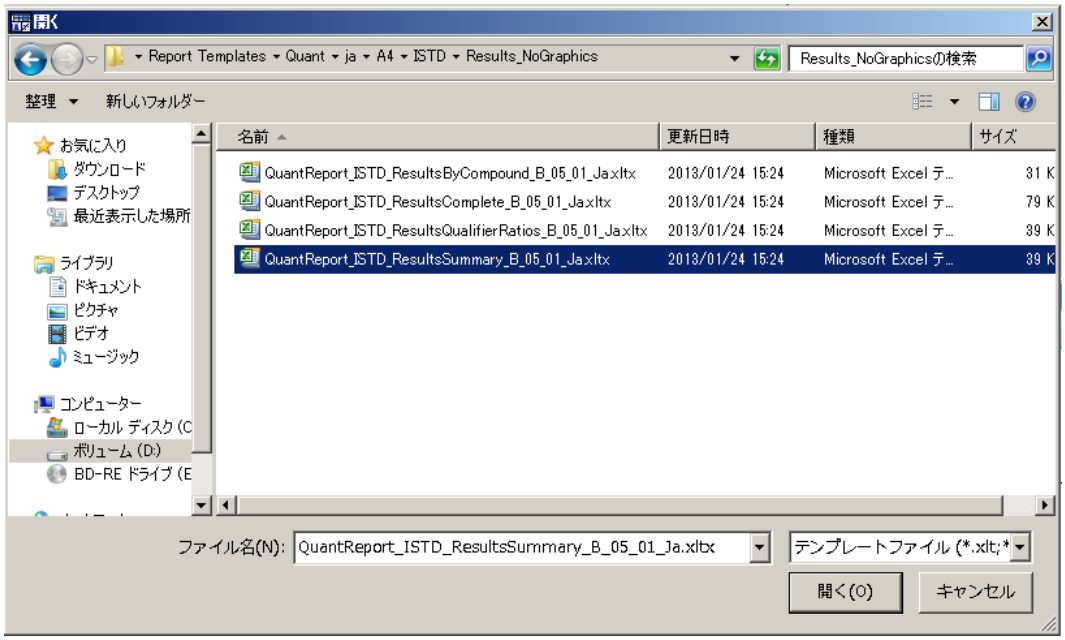
④　［レポートメソッドの編集］ダイアログボックスが開きます。



⑤　メニューから［編集］－［テンプレートの追加］をクリックします。

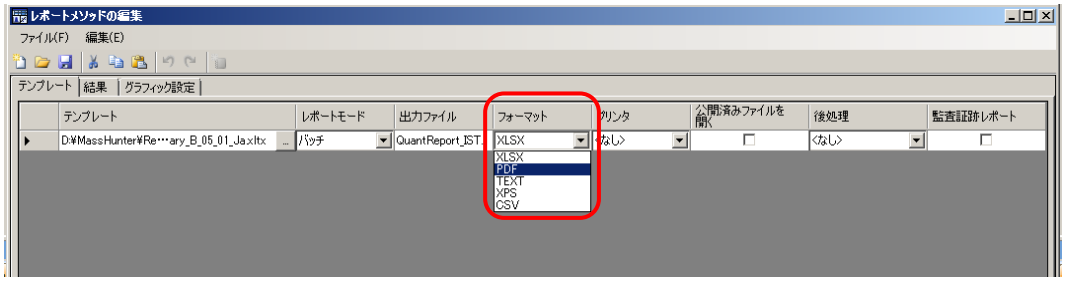


⑥　D:¥MassHunter¥Report Templates¥Quant¥ja¥A4¥ISTD¥Results_NoGraphics とフォルダをたどり、QuantReport_ISTD_ResultsSummary_B_06_00_Ja.xltx を選択し［開く(O)］をクリックします。



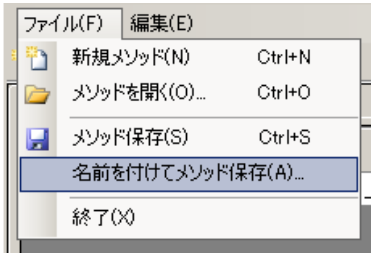
レポートする内容に応じて、多くのの定量レポート用テンプレートが用意されています。テンプレートはカスタマイズすることもできます。印刷用テンプレート例は 9 章－7 を参照してください。

⑦　［レポートメソッドの編集］ダイアログボックスで、フォーマットを PDF に変更します。

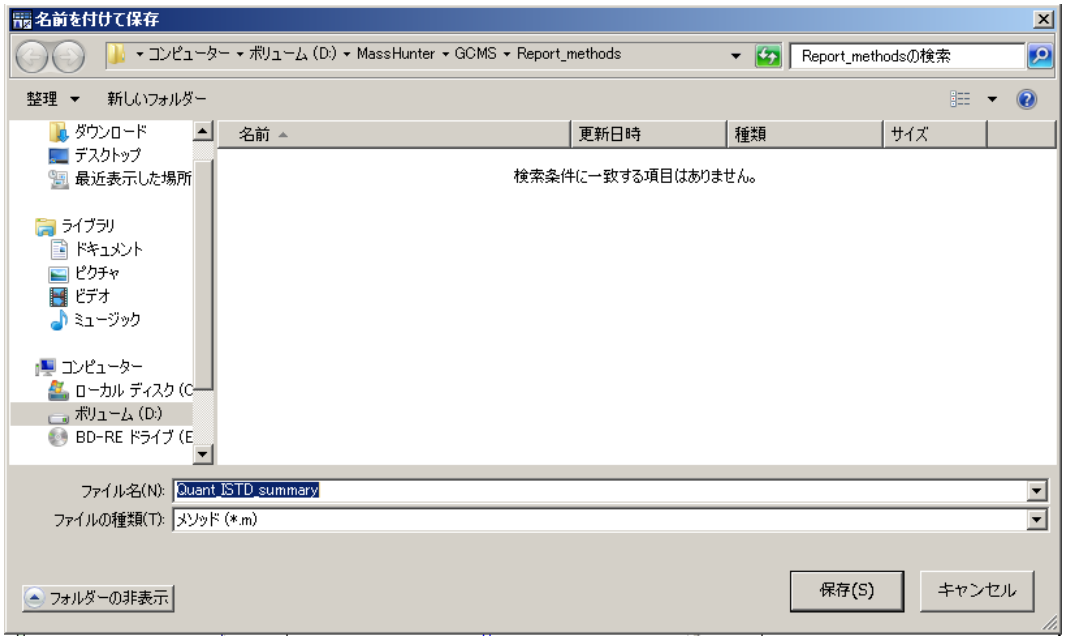


直接紙に出力する時は、プリンタを＜なし＞から使用しているプリンタに変更します。

⑧　メニューから［ファイル］－［名前を付けてメソッド保存］をクリックします。



⑨［名前を付けて保存］ダイアログボックスで
D:¥MassHunter¥GCMS¥Report_methods とフォルダをたどり、
Quant_ISTD_summary と入力して［保存(S)］をクリックします。
（本マニュアルではレポートメソッド保存用フォルダとして Report_methods を作成します。）

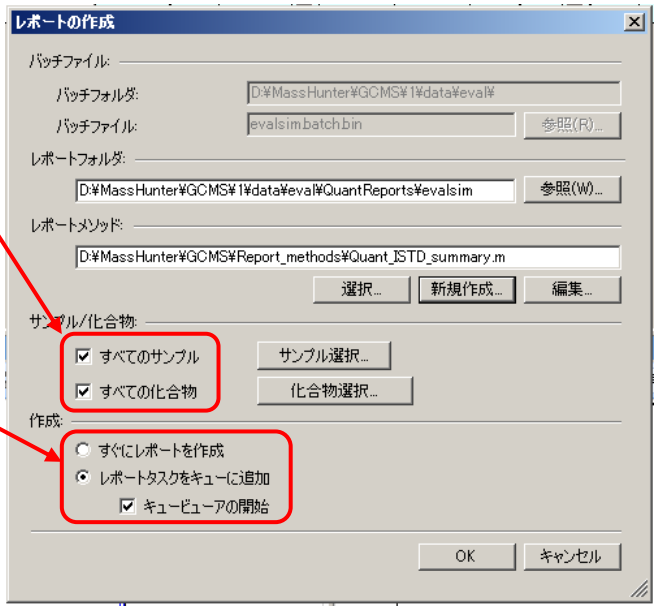


⑩　メニューから［ファイル］－［終了］をクリックして、［レポートの作成］ダイアログボックスに戻ります。

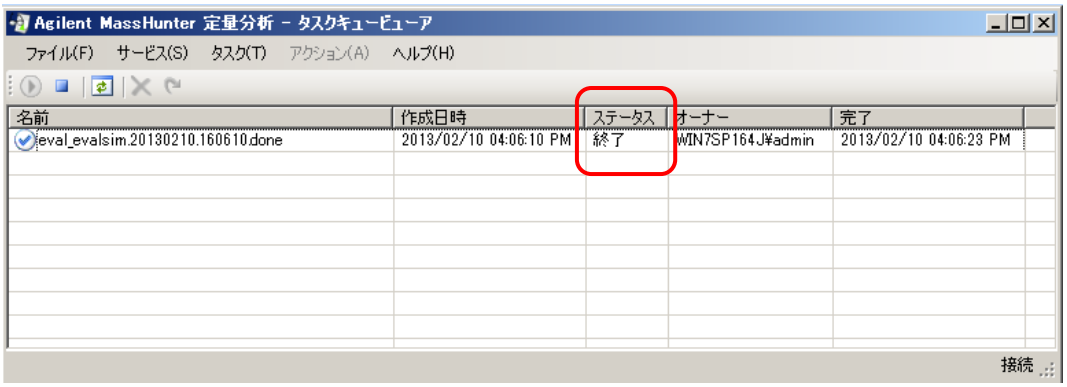
（２）　定量レポートの印刷

①　サンプル/化合物セクションの、すべてのサンプルとすべての化合物をチェックします。

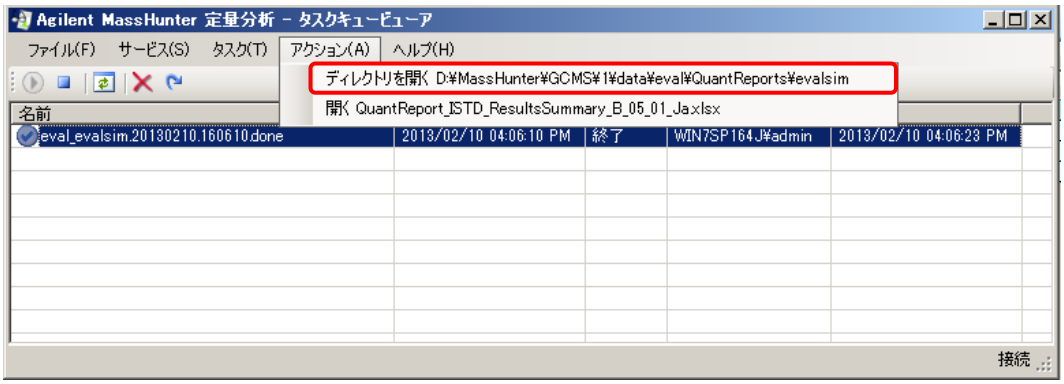
②　作成セクションのレポートタスクをキューに追加とキュービューアの開始をチェックします。



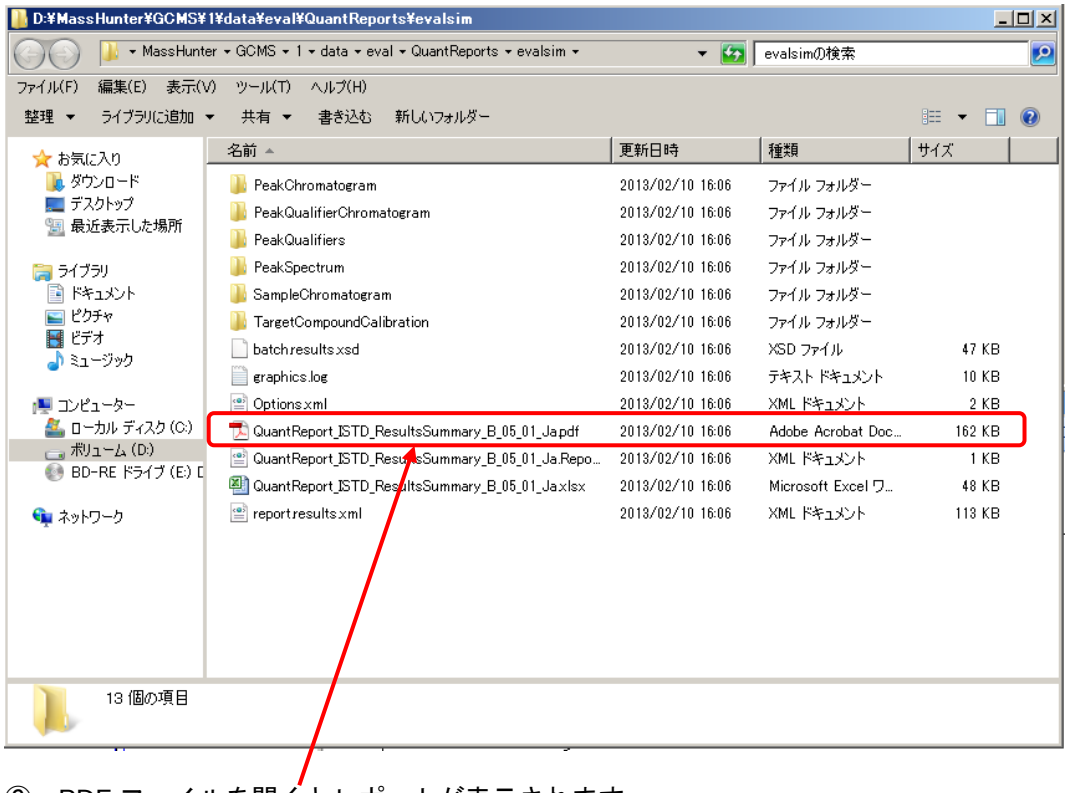
③　OK をクリックしてレポートの印刷を開始します。[タスクキュービューア] ウィンドウが表示され、処理の進捗が確認できます。



④　処理が終了したら、終了したタクスをクリックして、メニューの［アクション］－［ディレクトリを開く］をクリックします。

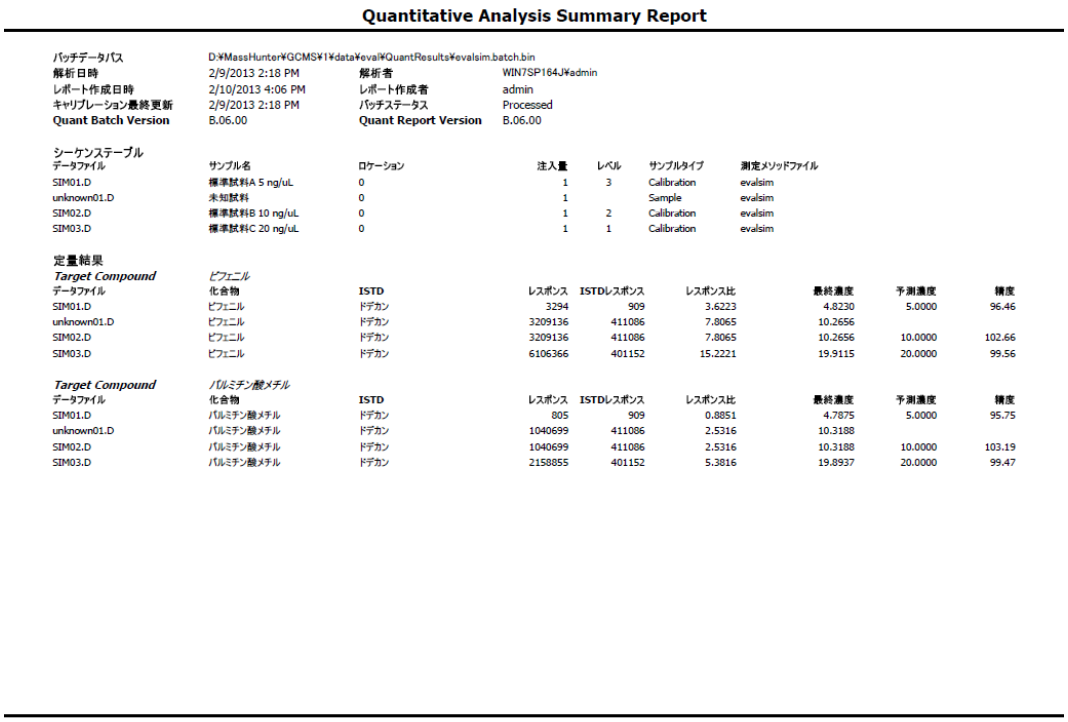


⑤　フォルダ内に、Excel 形式(.xlsx)と PDF 形式(.PDF)のファイルができています。



⑥　PDF ファイルを開くとレポートが表示されます。

このマニュアルで操作手順説明に使用したテンプレート
（QuantReport_ISTD_ResultsSummary_B_06_00_Ja.xltx）を使った時のレポート例です。



Quantitative Analysis Summary Report

バッチデータパス	D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥eval¥QuantResults¥evalsim.batch.bin		
解析日時	2/9/2013 2:18 PM	解析者	WIN7SP164J¥admin
レポート作成日時	2/10/2013 4:06 PM	レポート作成者	admin
キャリブレーション最終更新	2/9/2013 2:18 PM	バッチステータス	Processed
Quant Batch Version	B.06.00	**Quant Report Version**	B.06.00

シーケンステーブル

データファイル	サンプル名	ロケーション	注入量	レベル	サンプルタイプ	測定メソッドファイル
SIM01.D	標準試料A 5 ng/uL	0	1	3	Calibration	evalsim
unknown01.D	未知試料	0	1		Sample	evalsim
SIM02.D	標準試料B 10 ng/uL	0	1	2	Calibration	evalsim
SIM03.D	標準試料C 20 ng/uL	0	1	1	Calibration	evalsim

定量結果

Target Compound	*ビフェニル*							
データファイル	化合物	ISTD	レスポンス	ISTDレスポンス	レスポンス比	最終濃度	予測濃度	精度
SIM01.D	ビフェニル	ドデカン	3294	909	3.6223	4.8230	5.0000	96.46
unknown01.D	ビフェニル	ドデカン	3209136	411086	7.8065	10.2656		
SIM02.D	ビフェニル	ドデカン	3209136	411086	7.8065	10.2656	10.0000	102.66
SIM03.D	ビフェニル	ドデカン	6106366	401152	15.2221	19.9115	20.0000	99.56

Target Compound	*パルミチン酸メチル*							
データファイル	化合物	ISTD	レスポンス	ISTDレスポンス	レスポンス比	最終濃度	予測濃度	精度
SIM01.D	パルミチン酸メチル	ドデカン	805	909	0.8851	4.7875	5.0000	95.75
unknown01.D	パルミチン酸メチル	ドデカン	1040699	411086	2.5316	10.3188		
SIM02.D	パルミチン酸メチル	ドデカン	1040699	411086	2.5316	10.3188	10.0000	103.19
SIM03.D	パルミチン酸メチル	ドデカン	2158855	401152	5.3816	19.8937	20.0000	99.47

QuantReport_ISTD_ResultsSummary_B_05_01_Ja.xlsx　Page 1 of 1　Printed at: 04:06 PM on: 2013/2/10

9章－6　定量レポートの自動化

サンプル測定から定量レポートの印刷までを自動化できます。ここでは自動化の手順を説明します

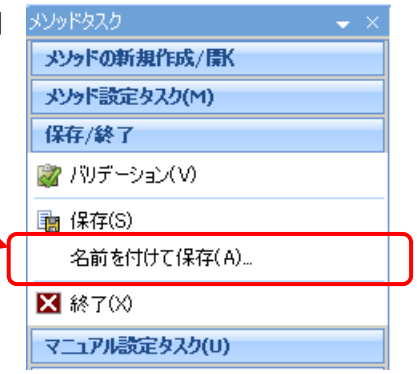
（１）　自動化に使用する定量データベース（検量線）の作成

① デスクトップの をダブルクリックしてマスハンター定量分析ソフトウェアを開きます。

② アイコンをクリックして D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥eval フォルダ内の evalsim.batch.bin を開きます。

③ メニューの［メソッド］－［編集］をクリックして［MassHunter 定量分析　メソッド］ウィンドウを開きます。

④［名前を付けて保存］をクリックします。

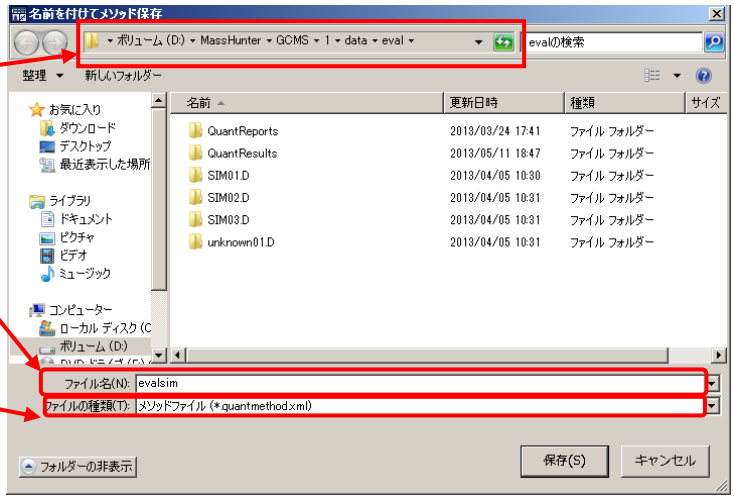


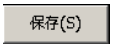
⑤［名前を付けてメソッド保存］ダイアログボックスが開きます。

⑥ メソッド保存ホルダに D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥eval を選択します

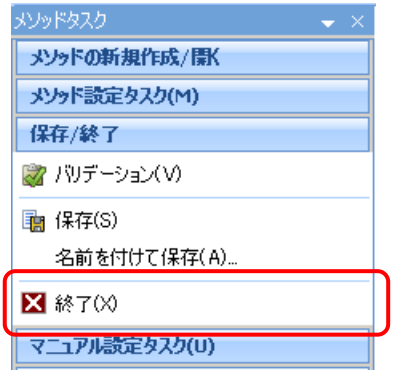
⑦ ファイル名を evalsim にします。

⑧ をクリックして、ファイルの種類を quantmethed.xml にします。

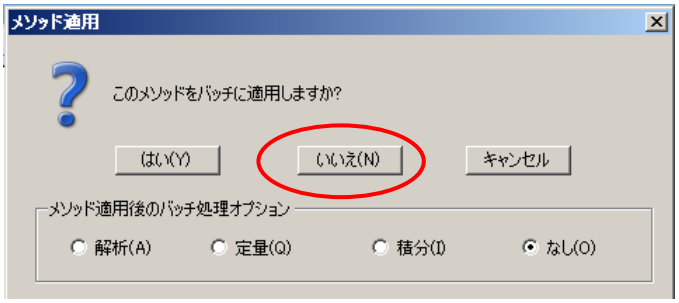


⑨  をクリックします。

⑩［終了］をクリックします。



⑪［メソッド適用］ダイアログボックスで いいえ(N) をクリックして［MassHunter 定量分析］ウィンドウに戻ります。



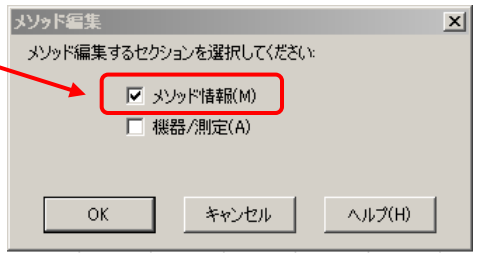
（２）　自動化で使用する測定メソッドの作成

①　デスクトップの をダブルクリックしてマスハンター測定ソフトウェアを起動します。

②　 （メソッドの読み込み）をクリックして evalsim.M を読み込みます。

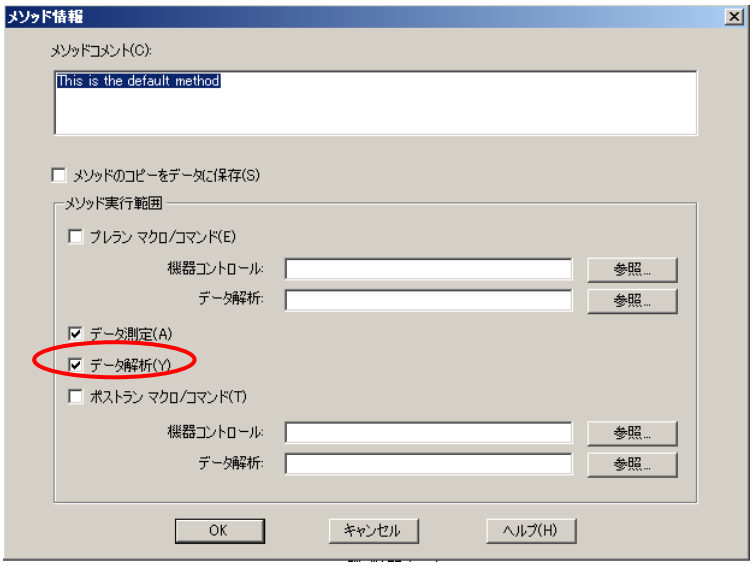
③　 （メソッド情報の編集）をクリックして［メソッド編集］ダイアログボックスを表示します。

④　メソッド情報をチェックして OK をクリックします。



⑤［メソッド情報］ダイアログボックスが開きます。

⑥　メソッド実行範囲のデータ解析をチェックします。

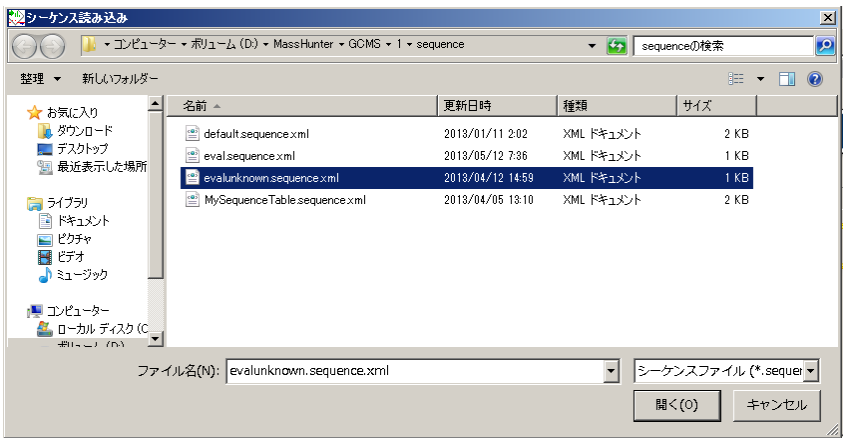


⑦　OK をクリックしてメソッド編集を終わります。

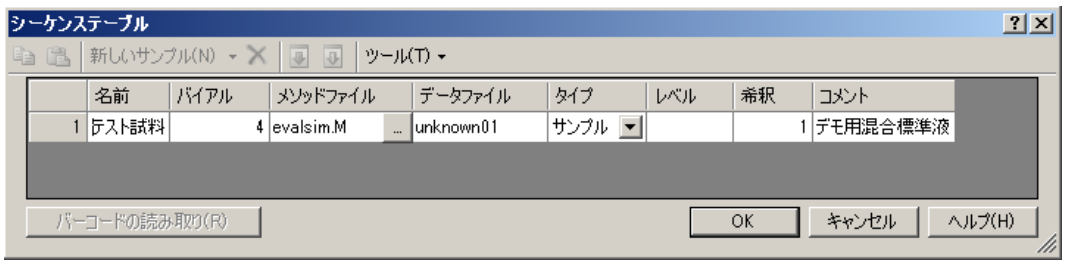
⑧［メソッド保存］ダイアログボックスでメソッド実行範囲を変更したメソッドを（上書き）保存します。

（３）　自動化に使用する測定シーケンスの作成

①　（シーケンス読み込みアイコン）をクリックし、evalsim.sequence.xml を読み込みます。



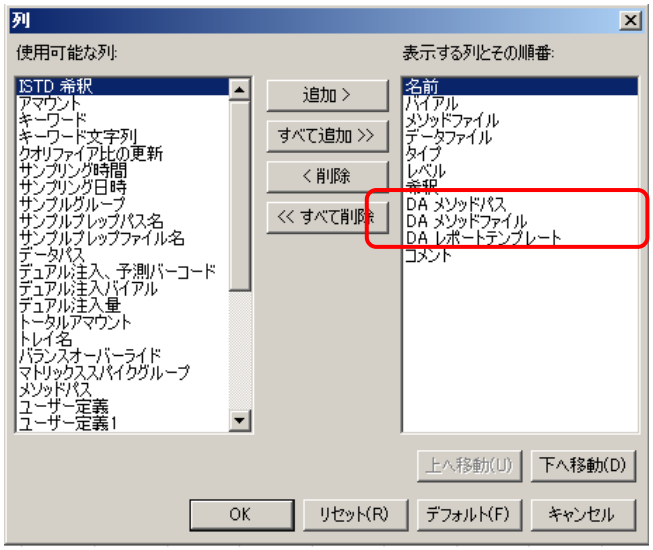
② （シーケンスの編集アイコン）をクリックし、テスト試料の行を残して他の行を削除します。



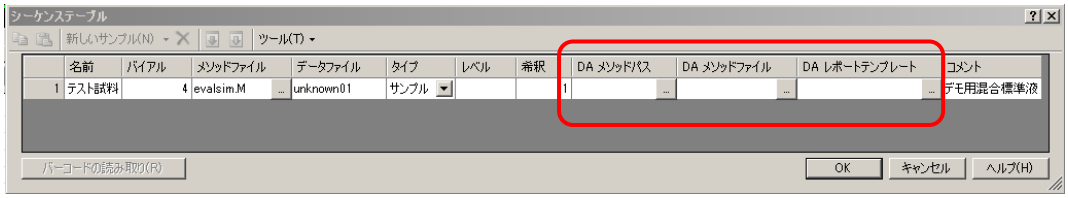
③　メニューの［ツール］－［列の追加と削除］を選択します。

④［列］ダイアログボックスの DA メソッドパス、DA メソッドファイル、DA レポートテンプレートを 追加 > ボタンを使って［表示する列とその順番］欄に追加します。

④　見やすいように、この 3 項目をコメントの前に移動しておきます。

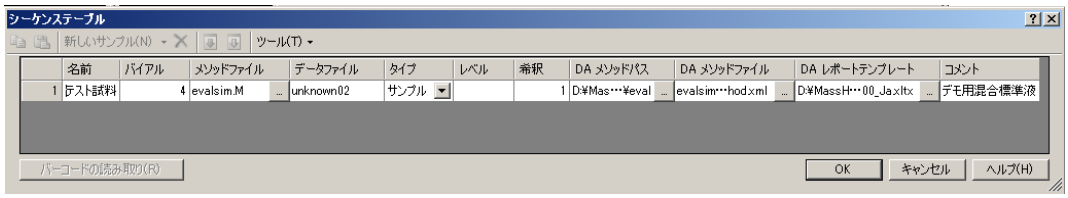


⑤ OK をクリックしてシーケンステーブルに戻ります。追加した 3 つの列がシーケンステーブルに表示されます。



⑥　参照アイコンを使って DA メソッドパスは D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥eval、DA メソッドファイルに evalsim.quantmethod.xml、DA レポートテンプレートに D:¥MassHunter¥ReportTemplete¥Quant¥ja¥A4¥ISTD¥Results_NoGraphics¥QuantReport_ISTD_ResultSummary_B_06_00_ja.xltx を選択します。

⑦　データファイルを unknown02 に変更します。



⑧　OK をクリックしてシーケンス編集を終了します。

⑨　（シーケンス保存アイコン）をクリックして evalunknown.sequence.xml という名前でシーケンスを保存します。

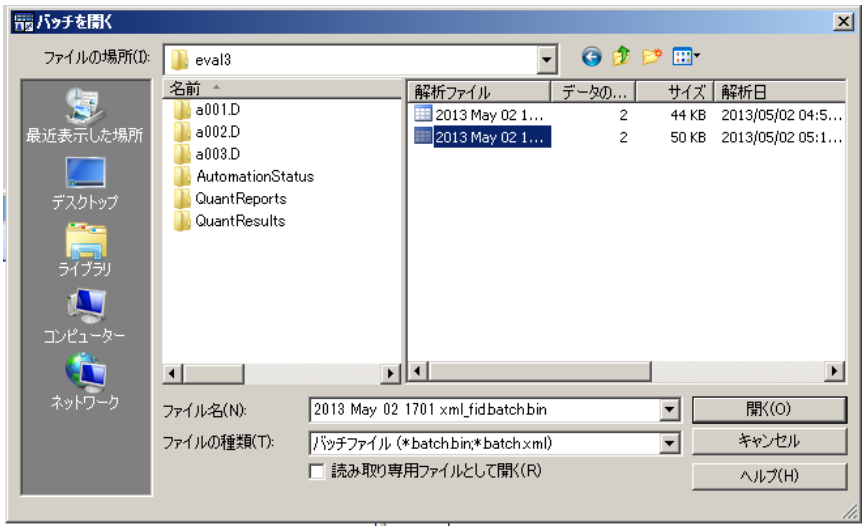
> 注意
> ひとつの自動化シーケンスで使用する DA メソッドとレポートテンプレートは必ず同じものを使ってください。

（４）　自動化シーケンスの実行

（シーケンスの実行アイコン）をクリックしてシーケンスを開始します。
測定が終わる度にマスハンター定量プログラムが自動起動してレポートが印刷されます。

（５）　自動化シーケンスで測定したデータの再解析

測定が終わるとデータフォルダにバッチが作成されます。
マスハンター定量解析プログラムでバッチを読み込むことでデータの再解析ができます。

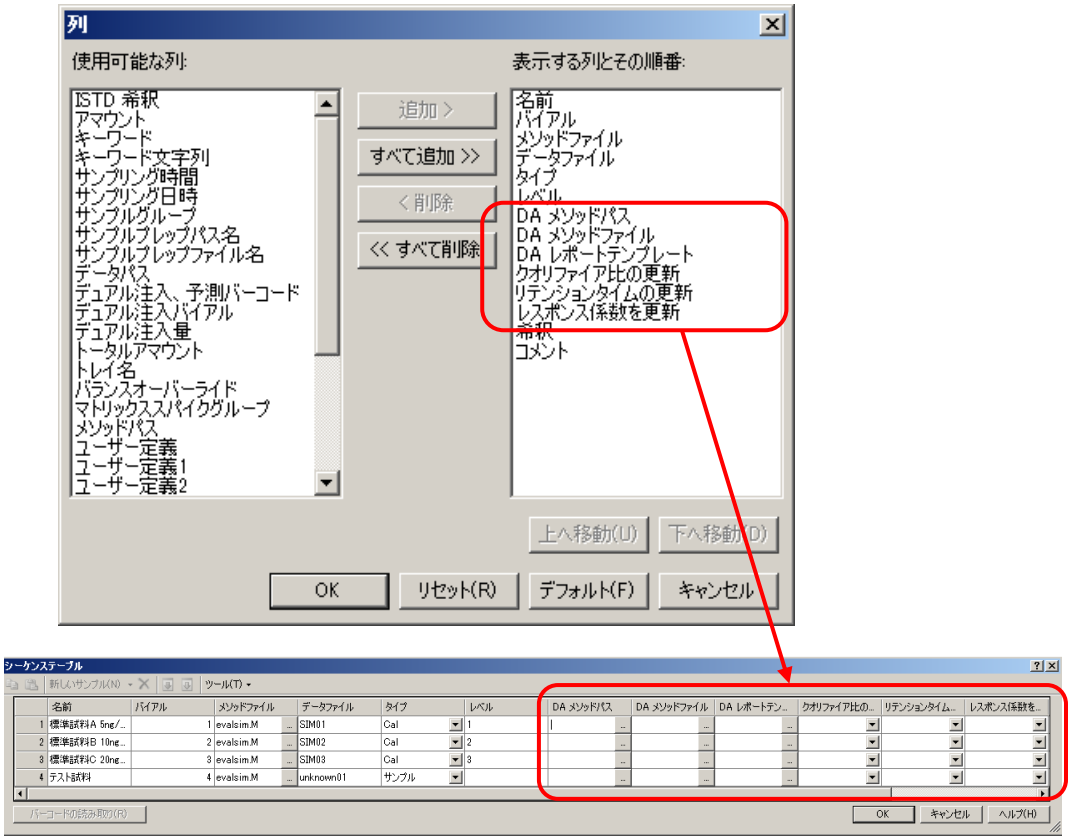


（６）自動化シーケンスを使った検量線更新

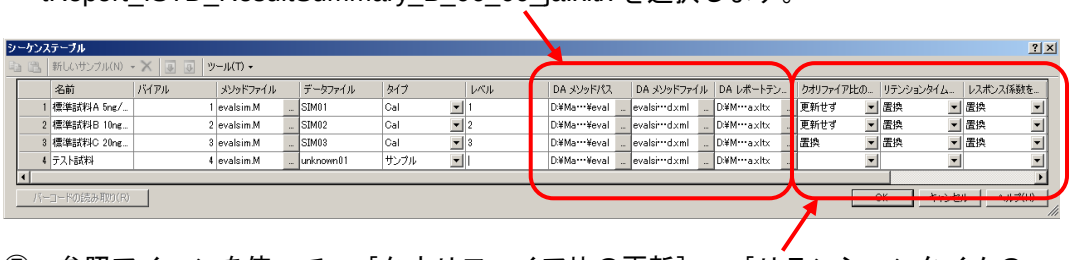
① （シーケンス読み込みアイコン）をクリックし、evalsim.sequence.xml を読み込みます。

② （シーケンスの編集アイコン）をクリックして［シーケンステーブル］ダイアログボックスを開きます。

③　ツールバーの（列の追加と削除）で「DA メソッドパス」、「DA メソッドファイル」「DA レポートテンプレート」、「クオリファイア比の更新」、「リテンションタイムの更新」、「レスポンス係数を更新」の 6 項目の列を追加します。



④　参照アイコンを使って DA メソッドパスは D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥eval、DA メソッドファイルに evalsim.quantmethod.xml、DA レポートテンプレートに D:¥MassHunter¥ReportTemplete¥Quant¥ja¥A4¥ISTD¥Results_NoGraphics¥QuantReport_ISTD_ResultSummary_B_06_00_ja.xltx を選択します。



⑤　参照アイコンを使って、［クオリファイア比の更新］、［リテンションタイムの更新］、［レスポンス係数を更新］を、［更新せず／平均／置換］から選択します。

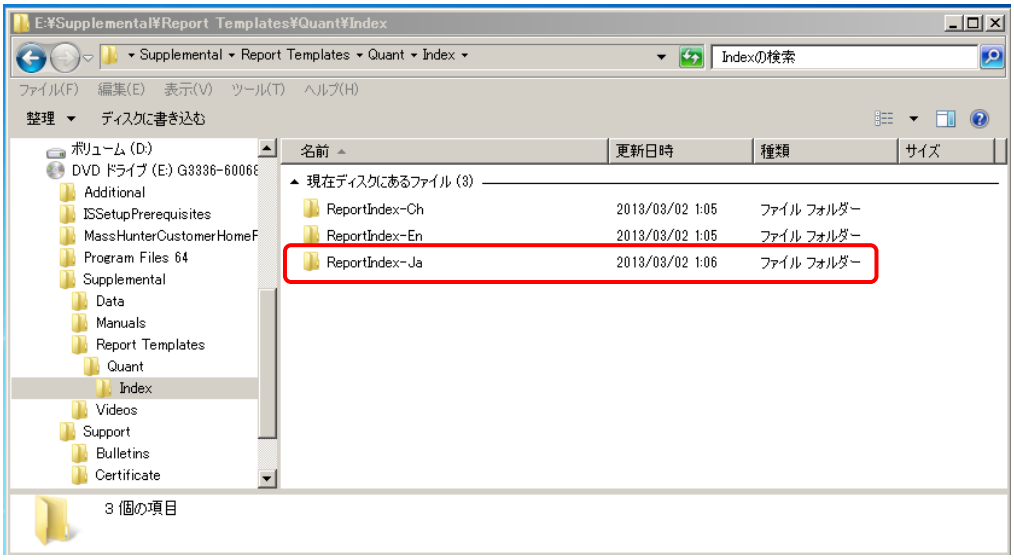
⑥　この自動化シーケンスを実行すると、検量線の更新とレポートの印刷が実行されます。

9章－7　定量レポート用テンプレート

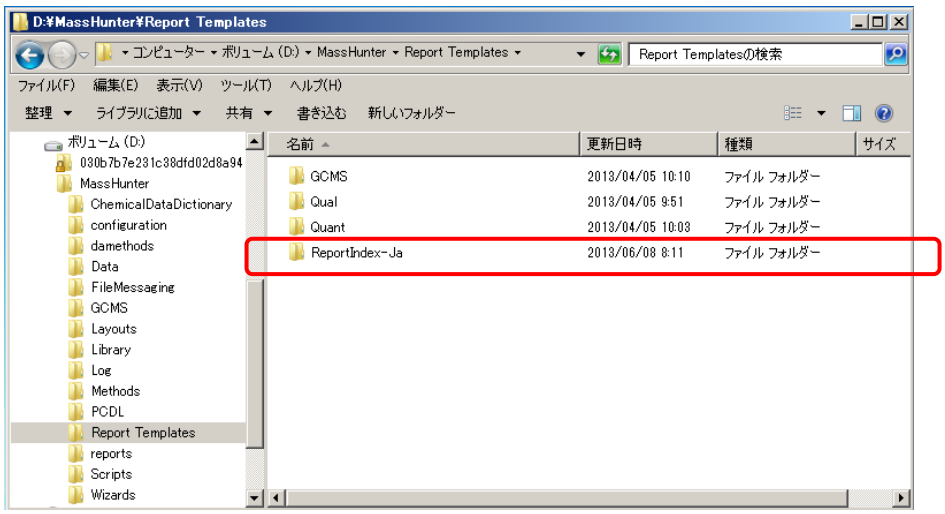
MassHunter 定量解析 DVD 内に、準備されている定量レポート用テンプレートの印刷例が格納されています。使いたいレポートを早く見つけるために、レポート例をハードディスク内にコピーしておくことを推奨します。
ここでは、印刷例をハードディスクにコピーしてから使用する方法を説明します。

（１）　準備
DVD から HDD へファイルを移動して、使いやすく準備する手順を説明します。
既に HDD へのコピーが終わっている時はこの手順は省略できます。

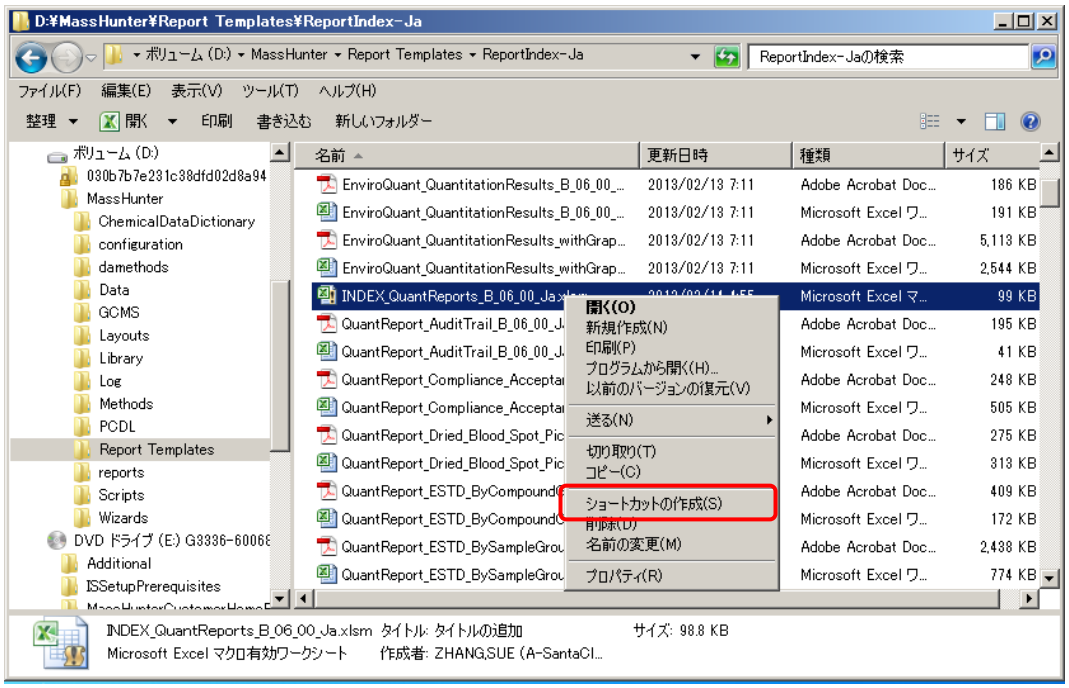
①　MassHunter 定量解析 DVD で E:¥Supplemental¥Report Template¥Quant¥Index¥とフォルダをたどり、表示されるフォルダの ReportIndex-Ja 内に日本語テンプレート印刷例が格納されています。



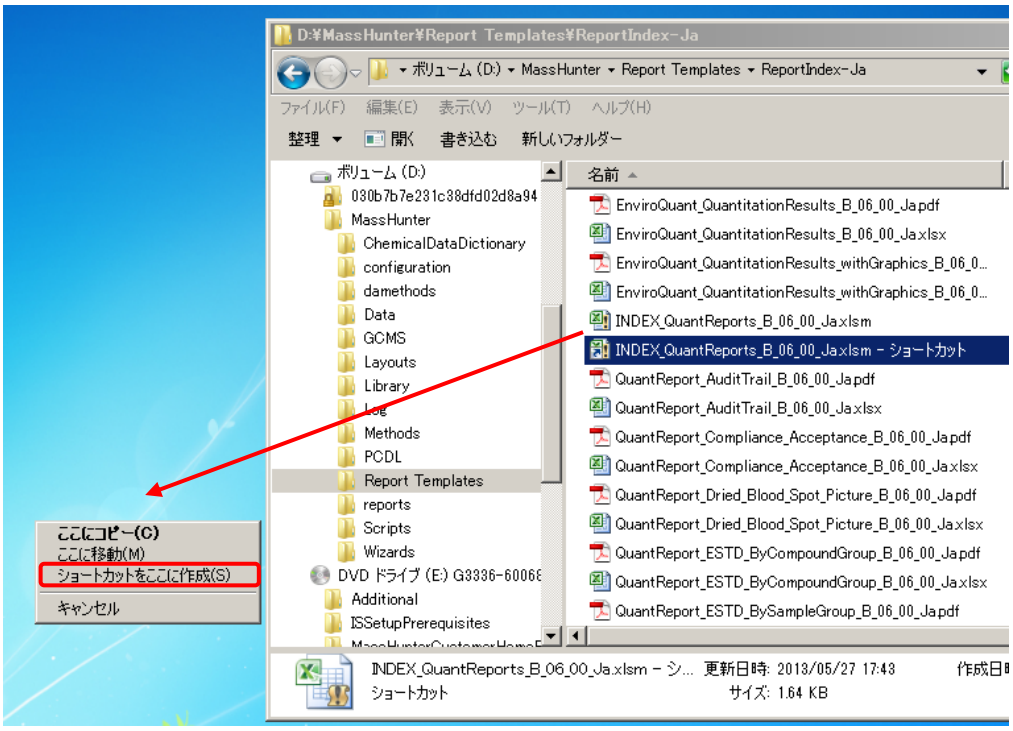
②　DVD 内の ReportIndex-Ja フォルダをハードディスクの D:¥MassHunter¥Report Template フォルダにコピーします。



③　HDD 内の ReportIndex-Ja フォルダを開き Index_QuantReports_B_06_00_ja.xlsm 上でマウスを右クリック、このファイルのショートカットを作成します。

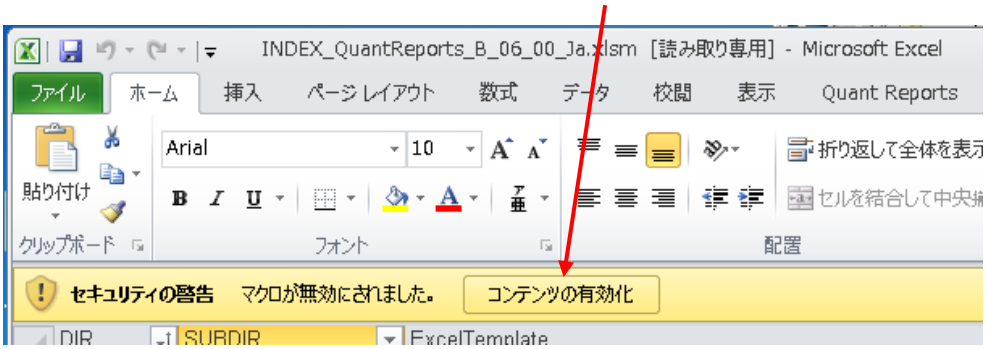


④　ショートカットを右ドラッグしてデスクトップに移動します。



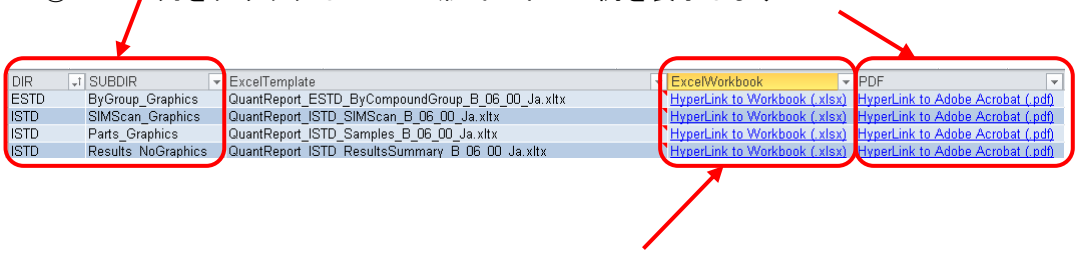
（２）　印刷例の見方

①　デスクトップの をダブルクリックして EXCEL ファイルを開きます。
セキュリティの警告が表示された時は［コンテンツの有効化］をクリックします。



②　DIR、SUBDIR 列がテンプレートの格納されているフォルダ名です

③　PDF 列をクリックして PDF 形式レポート例を表示します



④　ExcelWorkbook 列をクリックして Excel 形式レポート例を表示します

⑤　D:¥MassHunter¥ReportTemplete¥Quant¥ja¥A4¥(DIR)¥(SUBDIR)¥フォルダ内の(ExcelTemplate)がレポートメソッドや、自動化シーケンスで使用するテンプレートとなります。

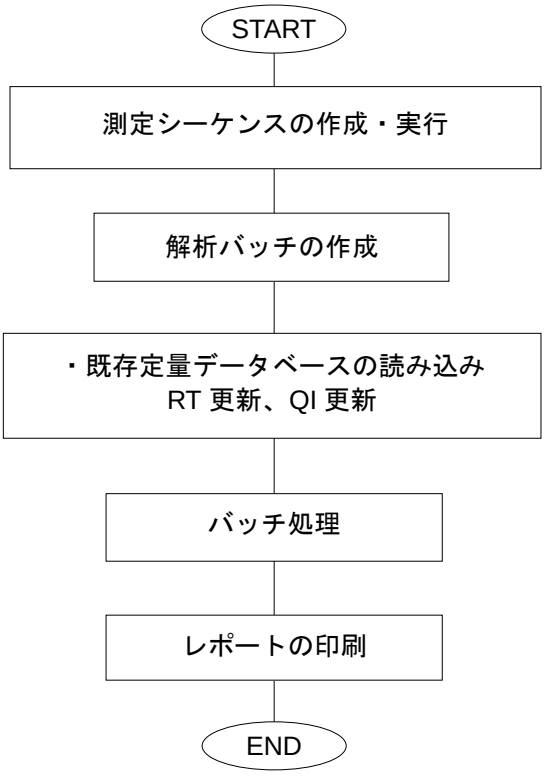
Memo

第10章
リキャリブレーション
とサンプルの定量

10 章－1	バッチの作成	10－4
10 章－2	既存定量データベース（検量線）の読込	10－5
10 章－3	リテンションタイムの更新	10－7
10 章－4	クオリファイア比の更新	10－7
10 章－5	検量線の適用	10－8
10 章－6	定量結果の確認	10－9
10 章－7	レポートの作成	10－10
10 章－8	フォルダーの参照	10－11

＜リキャリブレーションと定量＞

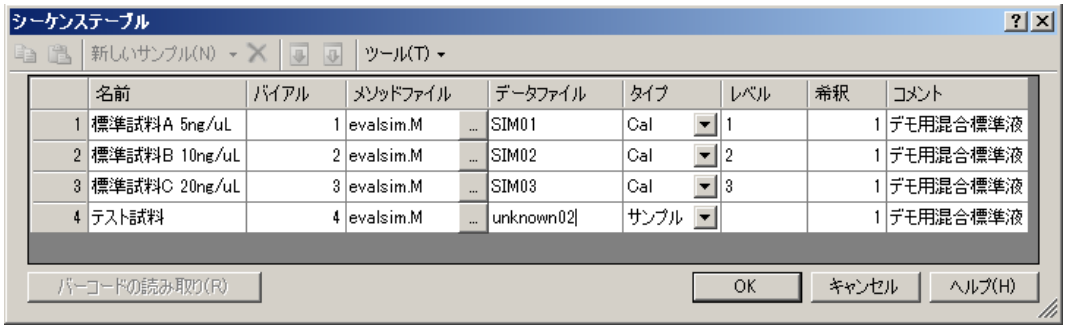
本章では、以前作成したバッチで使用した定量データベース（検量線）を更新してサンプルの定量を行う方法について説明しています。



本章では下記についての説明も含まれます
・複数のフォルダーに分けて測定したデータを、ひとつのバッチで処理する方法

本章では、下表のとおりシーケンスを作成しサンプル測定を行い、eval2 フォルダに測定結果を格納します。このデータと以前のバッチ定量結果（検量線）を使って定量レポートを作成します。

ライン	タイプ	レベル	希釈	サンプル名	使用メソッド	データファイル
1	キャリブレーション	1	1	標準試料 A　5ng/uL	evalsim.M	SIM01.D
2	キャリブレーション	2	1	標準試料 B 10ng/uL	evalsim.M	SIM02.D
3	キャリブレーション	3	1	標準試料 C 20ng/uL	evalsim.M	SIM03.D
4	サンプル	（未入力）	1	テスト試料	evalsim.M	unknown02.D

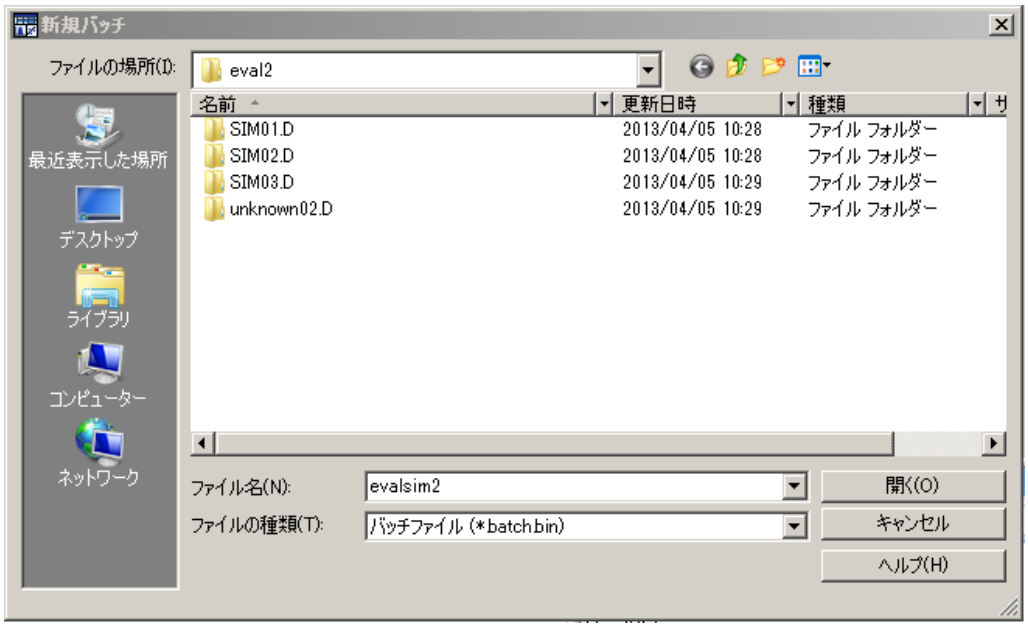


10章－1 バッチの作成

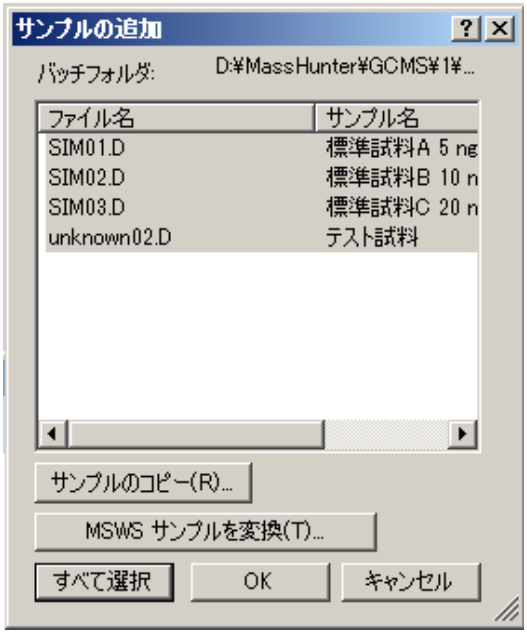
（１）

をクリックしてマスハンター定量解析ソフトウェアを起動します。

（２） をクリックして eval2 フォルダーに新規バッチ(evalsim2)を作成します。



（３）メニューから［ファイル］－［サンプルの追加］をクリックして eval2 フォルダー内の全てのサンプルを追加します。



10章－2 既存定量データベース（検量線）の読込

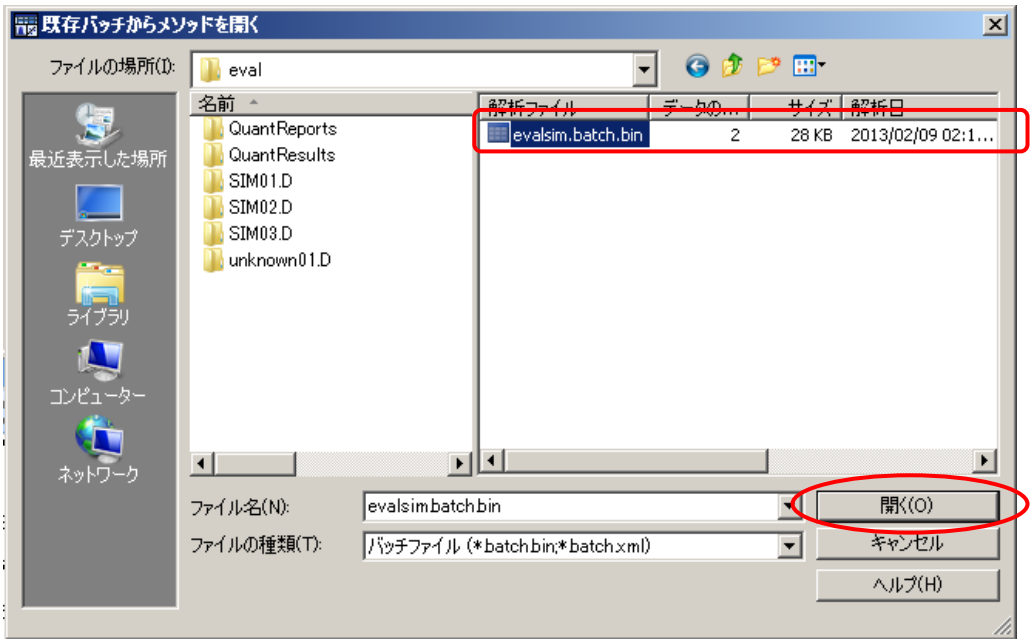
（１）リキャリブレーションに使用するサンプル（今回は SIM03.D）を選択します。

サンプル

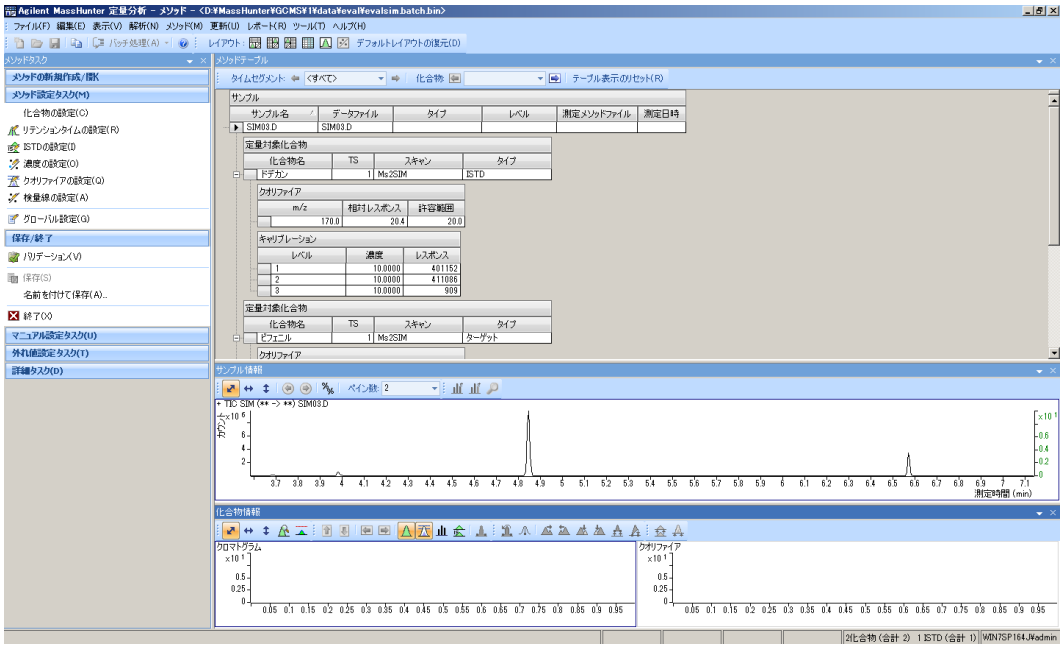
!	▽	サンプル名	データファイル	タイプ	レベル	測定日時
		標準試料 A 5 ng/uL	SIM01.D	キャリブレーション	3	2012/12/29 10:00
		標準試料 B 10 ng/uL	SIM02.D	キャリブレーション	2	2012/12/29 10:13
		標準試料 C 20 ng/uL	SIM03.D	キャリブレーション	1	2012/12/29 10:27
		テスト試料	unknown02.D	サンプル		2012/12/29 10:41

（２）メニューから［メソッド］－［開く］－［既存バッチからメソッドを開く］をクリックします。

（３）既存バッチの evalsim（8 章で使用した D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥eval フォルダー内にあります）を選択し［開く(O)］をクリックします。



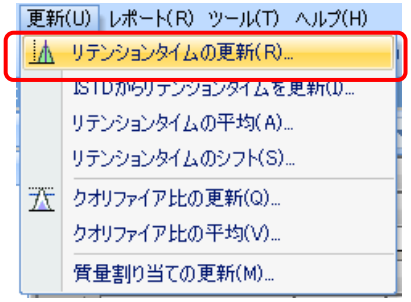
（４）　［MassHunter 定量分析－メソッド］ウィンドウが開きます。



10章－3 リテンションタイムの更新

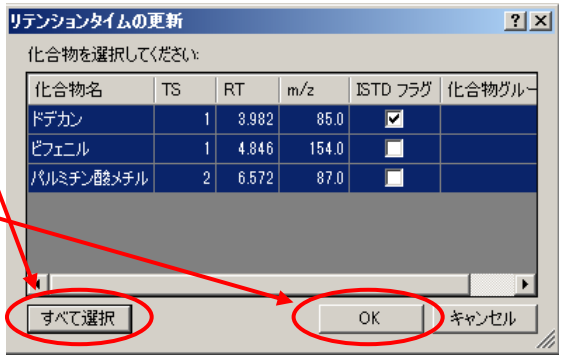
（１）メニューから［更新］－［リテンションタイムの更新］をクリックします。

（２）［リテンションタイムの更新］ダイアログボックスが開きます。



（３）［すべて選択］をクリックし、全ての化合物を選択します。

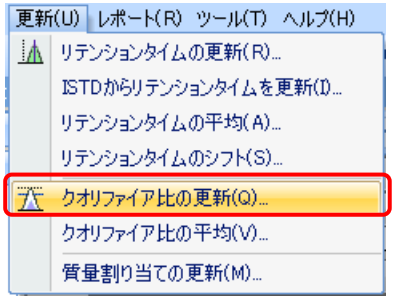
（４）［OK］をクリックします。
リテンションタイムの更新が終わりました。



10章－4 クオリファイア比の更新

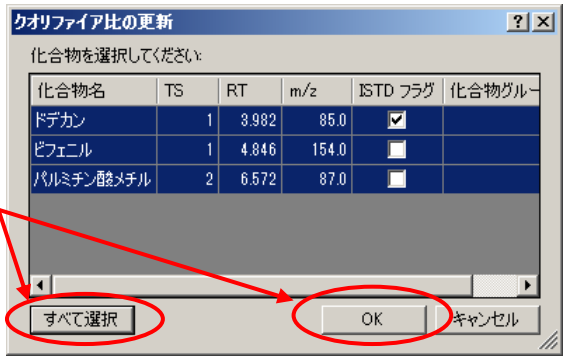
（１）メニューから［更新］－［クオリファイア比の更新］をクリックします。

（２）［クオリファイア比の更新］ダイアログボックスが開きます。



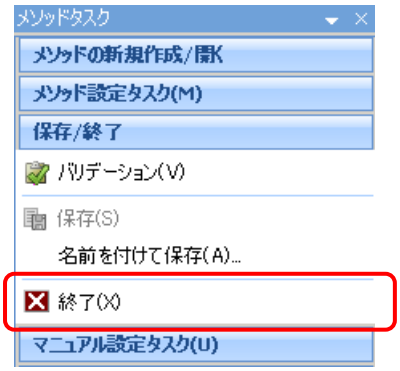
（３）［すべて選択］をクリックし、全ての化合物を選択します。

（４）［OK］をクリックします。
クオリファイア強度比の更新が終わりました。



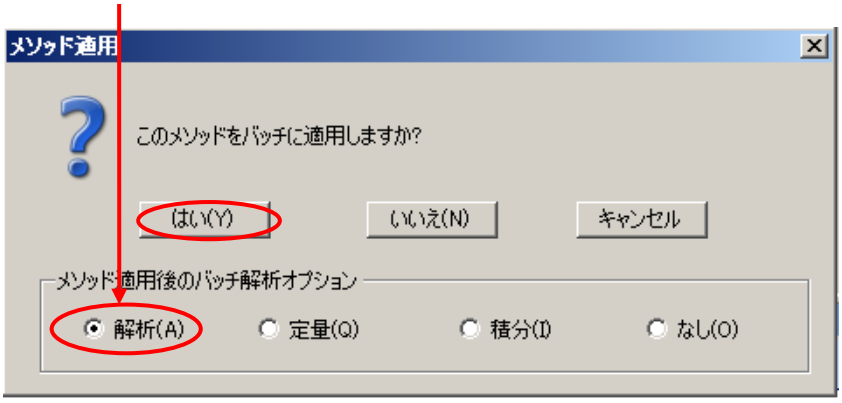
10章－5 検量線の適用

（1）［メソッドタスク］－［終了］をクリックします。



（2）［メソッド適用］ダイアログボックス表示されます。

（3）　解析オプションで解析を選択します。

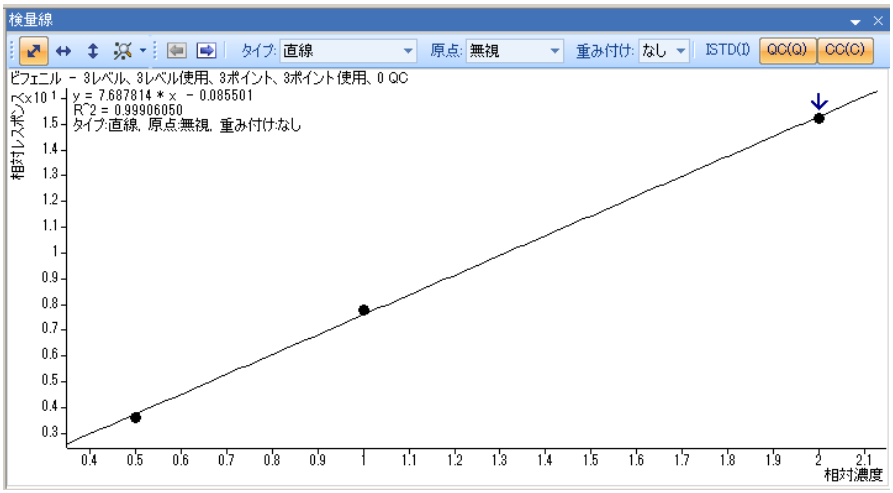


（4）［はい(Y)］をクリックします。

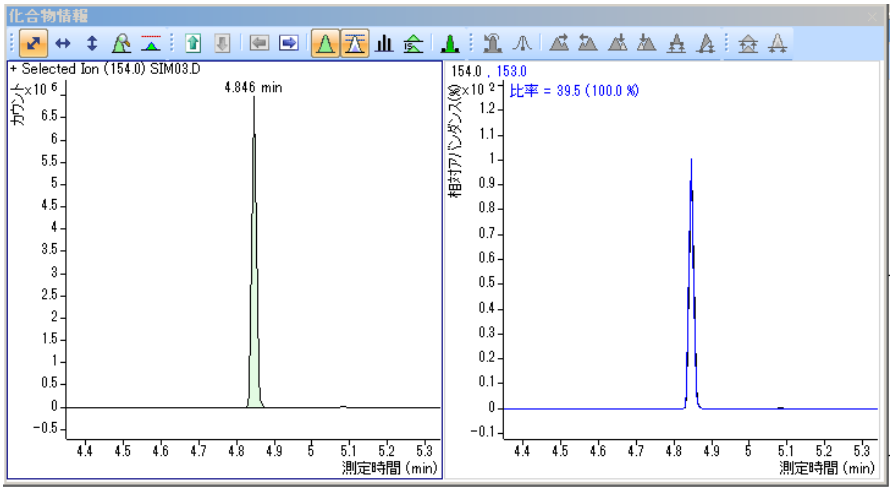
（5）更新されたリテンションタイム、クオリファイア比を使って、検量線の計算が行われ、更新された検量線でサンプルの定量が行われます。

10章－6 定量結果の確認

（１）［検量線］ウィンドウを使って検量線の更新が正しく行われたことを確認します。



（２）［化合物情報］ウィンドウを使って定量が正しく行われたことを確認します。



（３）ツールバーの をクリックして解析の終わったバッチを保存します。

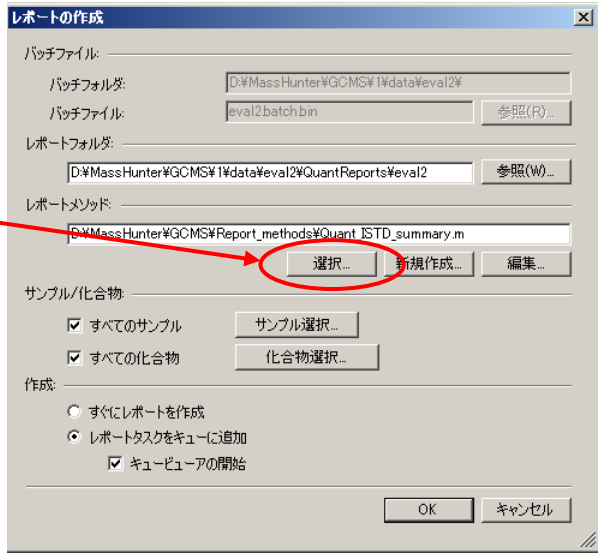
10章－7 レポートの作成

「9 章－5　レポートメソッド」で作成したレポートメソッドを使用してレポートを印刷します。

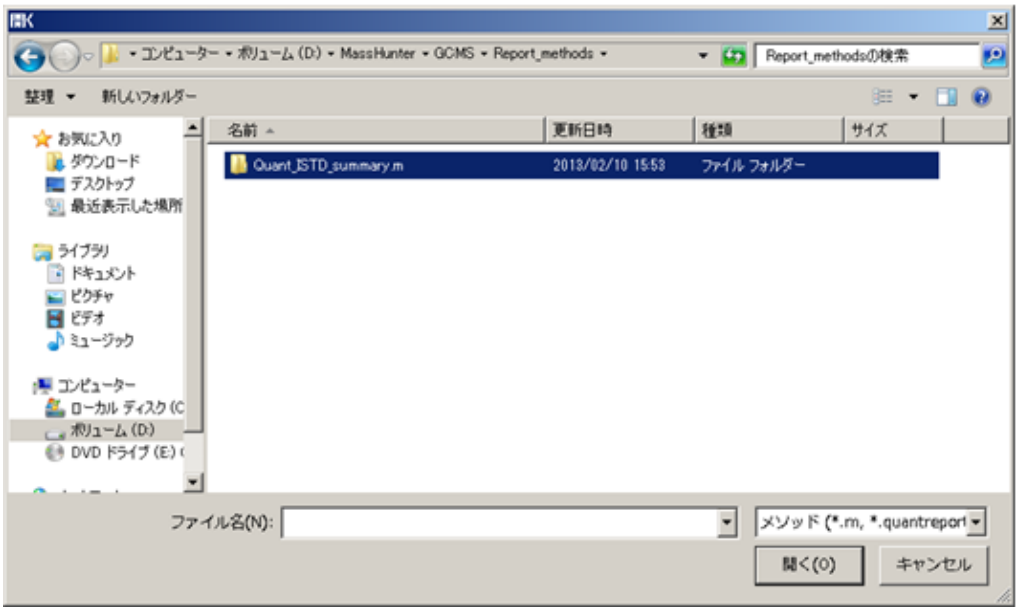
（1）メニューから［レポート］－［作成］をクリックします。

（2）［レポートの作成］ダイアログボックスが表示されます。

（3）レポートメソッドセクションで 選択... をクリックします。



（4）［開く］ダイアログボックスが表示されます。



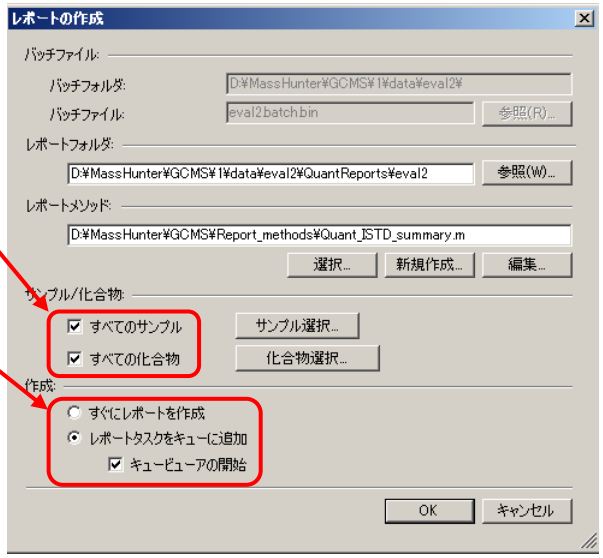
（５）既存のレポートメソッドを選択します。（このマニュアルの説明では、D:¥MassHunter¥GCMS¥Report_methods フォルダー内の Quant_ISTD_summary.m を使用します）

（６）［開く(O)］をクリックして［レポートの作成］ダイアログボックスに戻ります。

（７）サンプル／化合物セクションはすべてのサンプル、すべての化合物を選択します。

（８）作成セクションはレポートタスクをキューに追加を選択します。

（９）［OK］をクリックしてレポートを作成します。

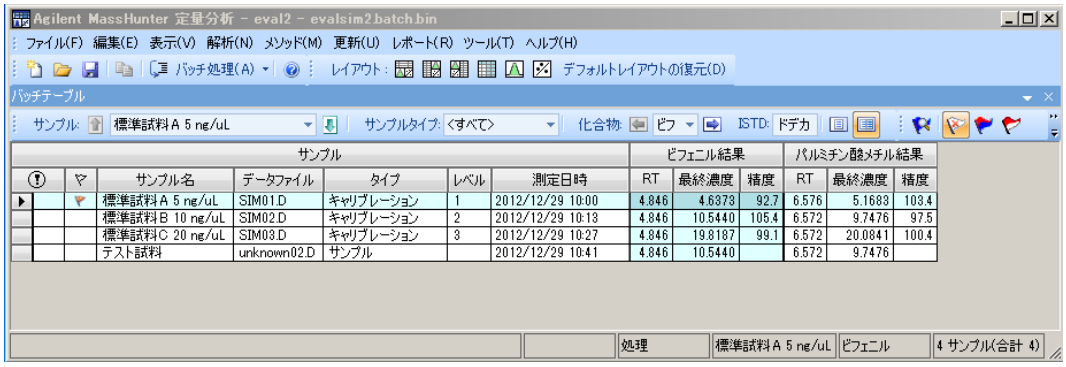


10章－8 フォルダーの参照

マスハンター定量解析ソフトウェアでは、バッチで使用する測定データは全て同じフォルダーに収納されている必要があります。
複数のフォルダーにあるデータをひとつのバッチで解析するためには、データのコピーを行います。この結果コピー元とコピー先に同じデータが出来上がります。
ここでは、eval2 フォルダーに作成した evalsim2 バッチに「第 7 章　シーケンス」で測定した unknown01.d を追加する操作を例にして説明を行います。

（１）バッチを開く

［MassHunter 定量分析］ウィンドウツールバーで をクリックして eval2 フォルダーの evalsim2 バッチを開きます。

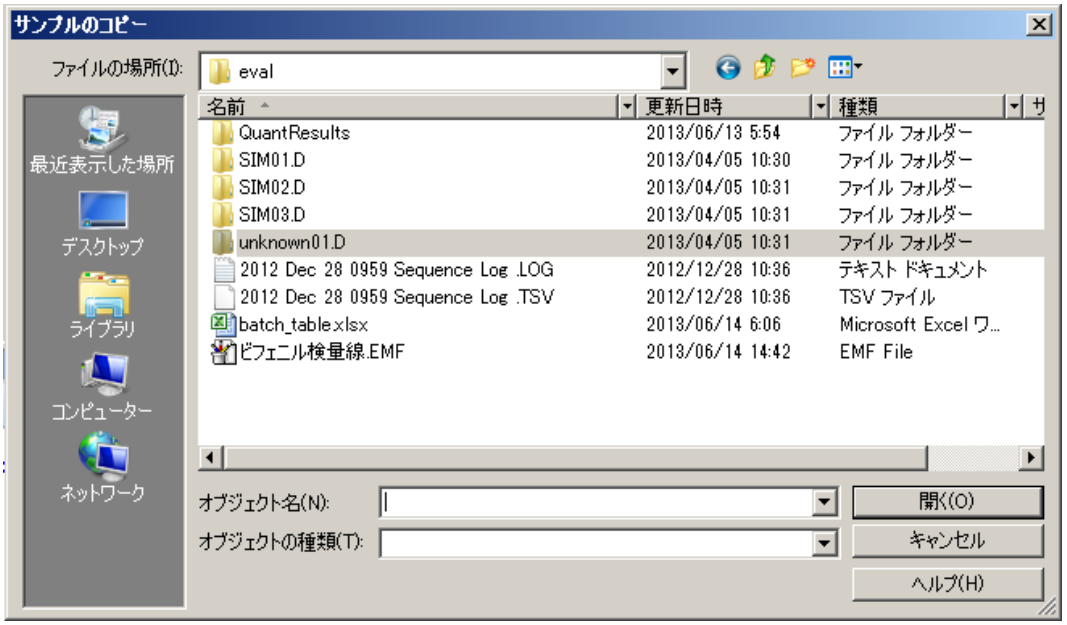


（２）サンプルの追加

① メニューで［ファイル］－［サンプル追加］をクリックします。
ファイル名の前の「*」はデータが既にバッチで使われているデータです。

② ［サンプルのコピー］をクリックします。

③ ［サンプル］ダイアログボックスが開きます。

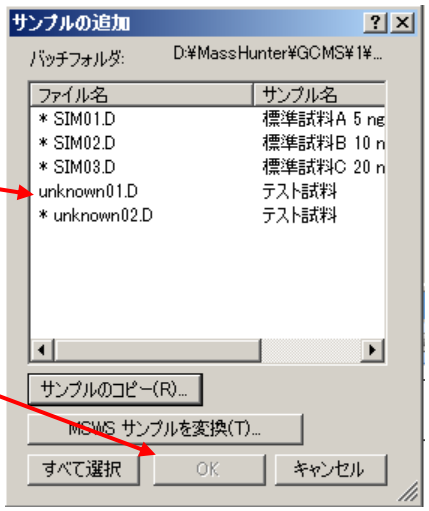


④ D:¥MassHnter¥GCMS¥1¥data¥eval とフォルダーをたどり、unknown01.D を選択して［開く(O)］をクリックします。

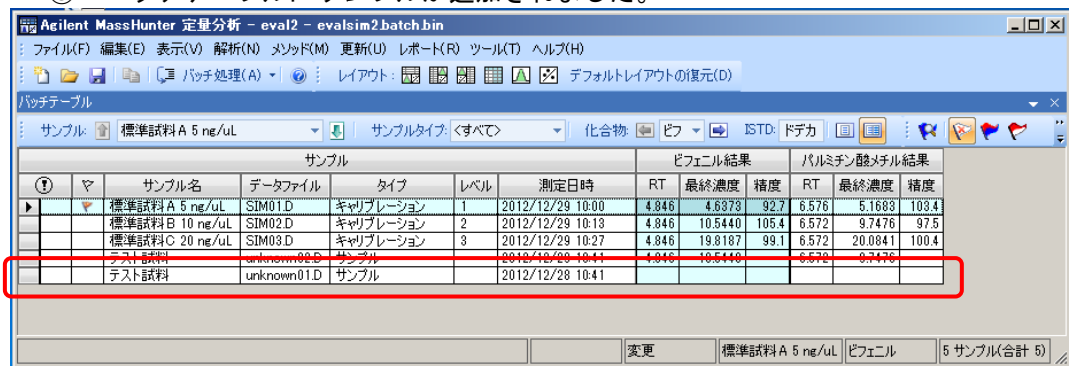
⑤ ［サンプルの追加］ダイアログボックスに戻り、unknown01.D がリストに追加されています。

⑥ unknown01.d を選択します。

⑦ OK をクリックします。

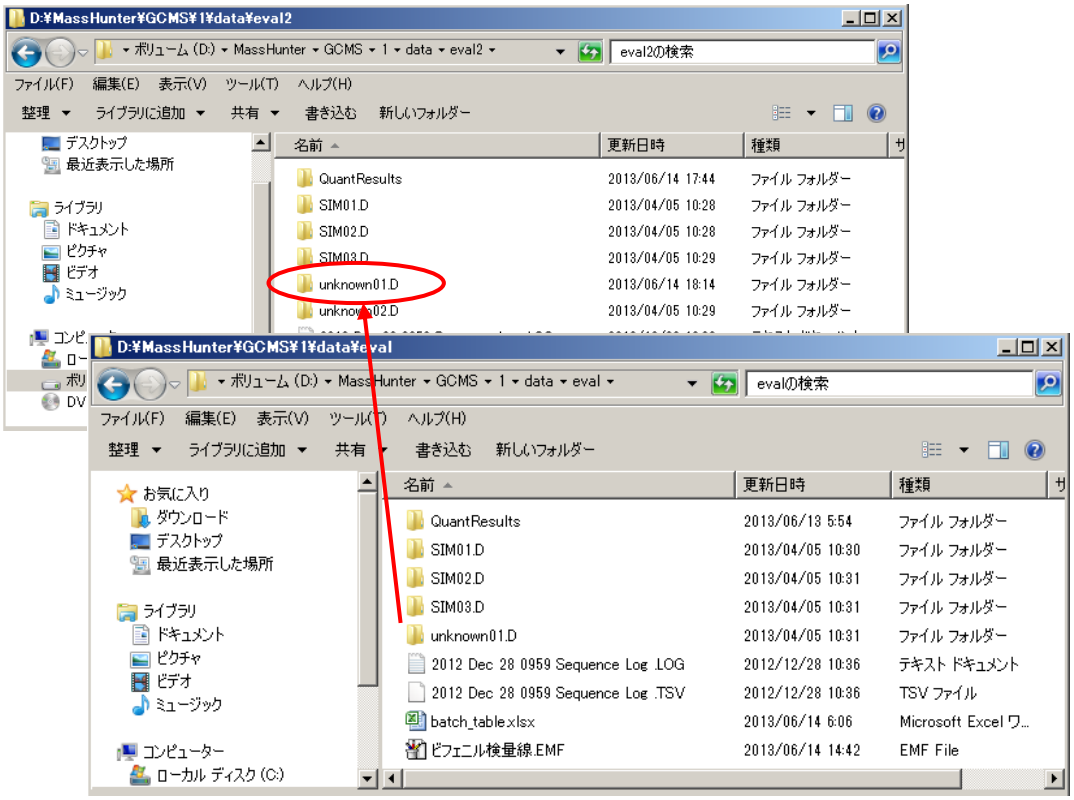


⑧ バッチテーブルにサンプルが追加されました。



（３）フォルダーの確認

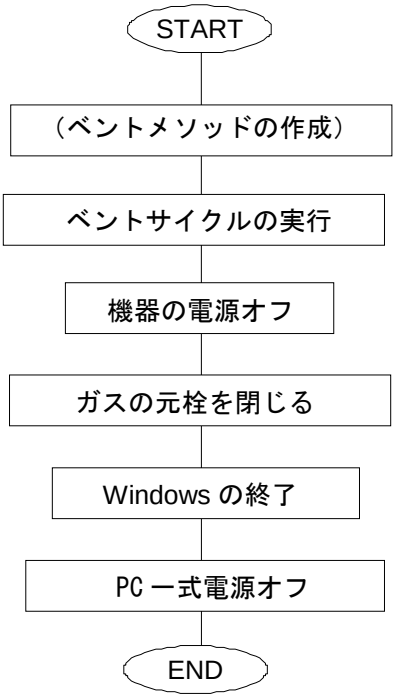
コピー元のフォルダー（D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥eval）とコピー先のフォルダー（D:¥MassHunter¥GCMS¥1¥data¥eval2）に unknown01.d が格納されています。



第11章
システムの停止方法

11 章－1	ベントメソッドを設定する	11－3
11 章－2	ベントサイクルを実行する	11－7
11 章－3	機器の停止	11－9
11 章－4	PC のシャットダウンと周辺機器の電源をオフにする	11－10

＜システムの停止方法＞

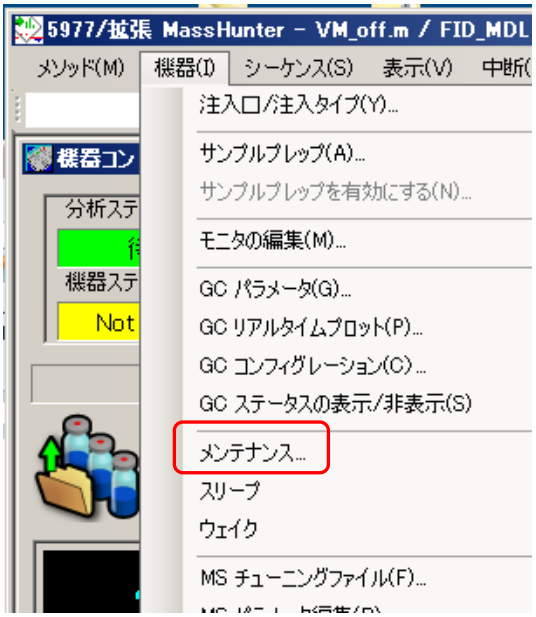

START
（ベントメソッドの作成）
ベントサイクルの実行
機器の電源オフ
ガスの元栓を閉じる
Windows の終了
PC 一式電源オフ
END

システムを停止する場合、あらかじめベントメソッドを設定しておき、ベントサイクルを実行して電源をオフにする準備をします。

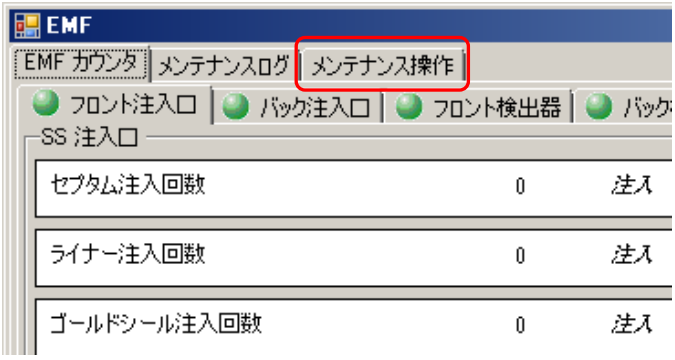
11章－1　ベントメソッドを設定する

（1）　ベントメソッド設定画面を開く。

①　機器メニューの[メンテナンス…]を選択します。

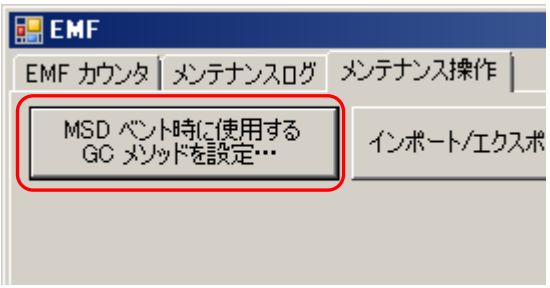


②　[EMF]ダイアログボックスが開くので、[メンテナンス操作]タブを右クリックします。



③　[MSD ベント時に使用する GC メソッドを設定…]ボタンを右クリックすると、GC パラメータ編集画面の様な[MSD ベントメソッド]ウィンドウが開きます。

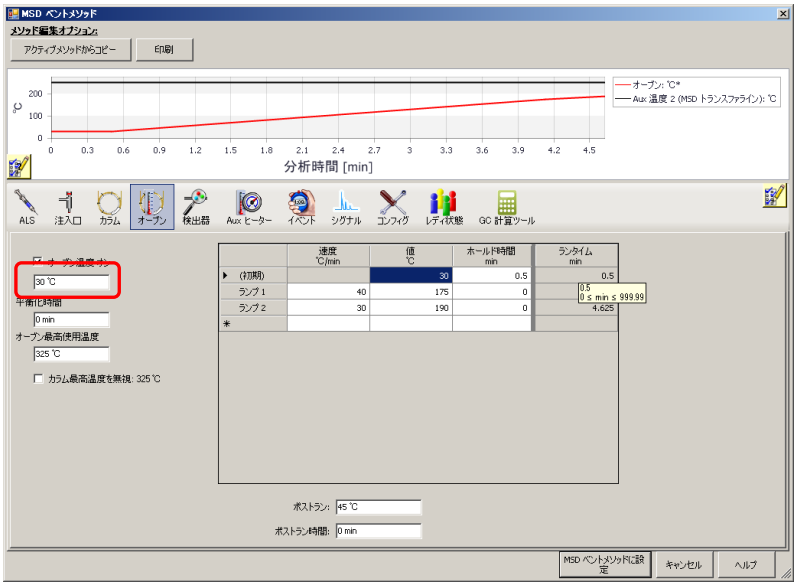
④



（2）　オーブン温度

①　 （GC パラメータアイコン）をクリックします。

②　オーブンの初期温度の［値］欄に冷却に適当な値（30℃など）を入力します。

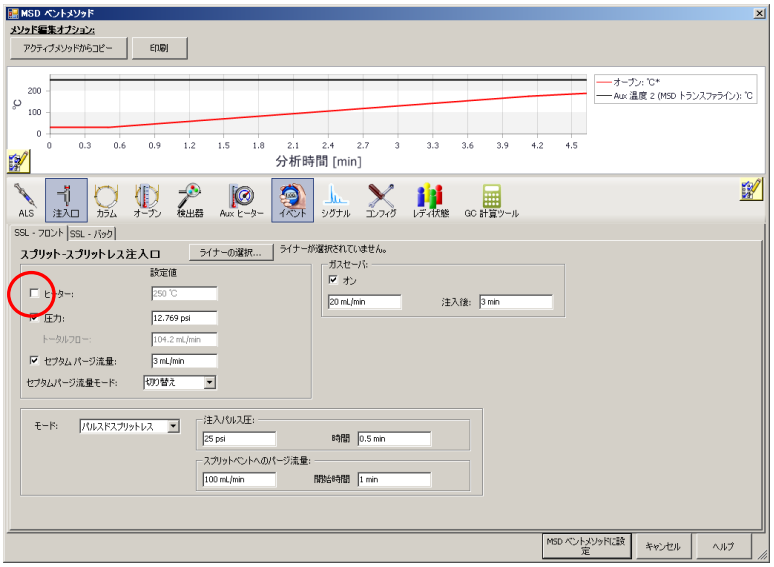


通常、オーブンは低い温度に設定し、オンの状態にしておきますが、必要に応じてオフに設定します。

（3） GC 注入口の温度

① をクリックします。

② 使用している注入口のタブをクリックし、ヒーターのチェックボックスをオフ（チェックを外す）にします。



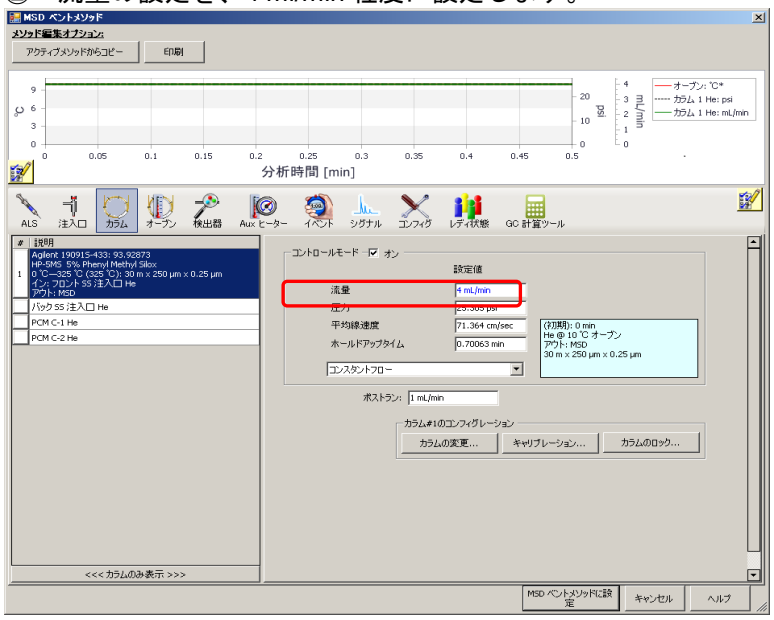
必要に応じてガスセーバーをオンにして流量を調節してください。

（4） カラム流量

①

をクリックします。

② 流量の設定を、4 ml/min 程度に設定します。

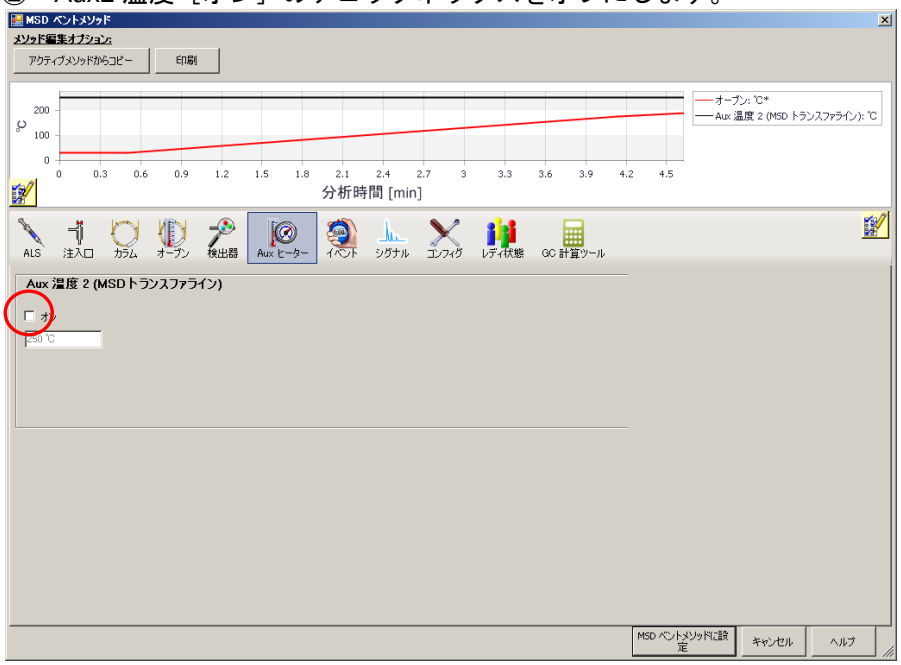


（5）　トランスファーライン温度

①

をクリックします。

② Aux2 温度［オン］のチェックボックスをオフにします。



（6）　ベントメソッドを保存します。

① MSD ベントメソッドウィンドウの右下にある

ボタンを右クリックします。

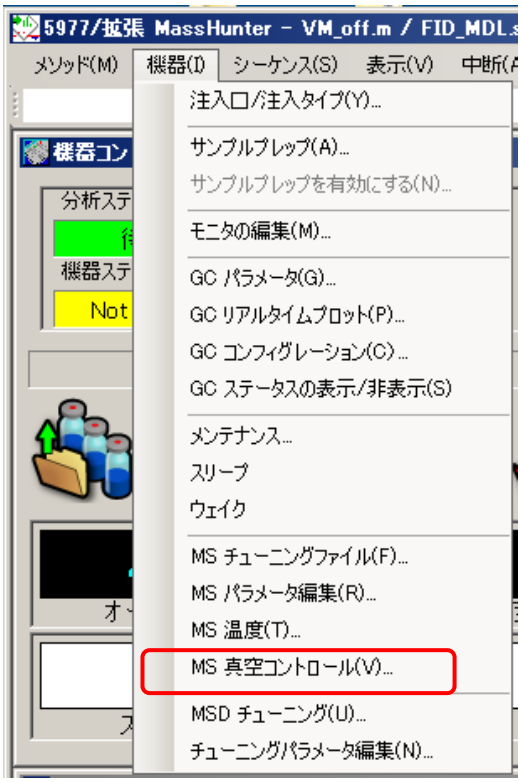
② ウィンドウが閉じますので、EMF ウィンドウも×印をクリックして閉じます。

注意

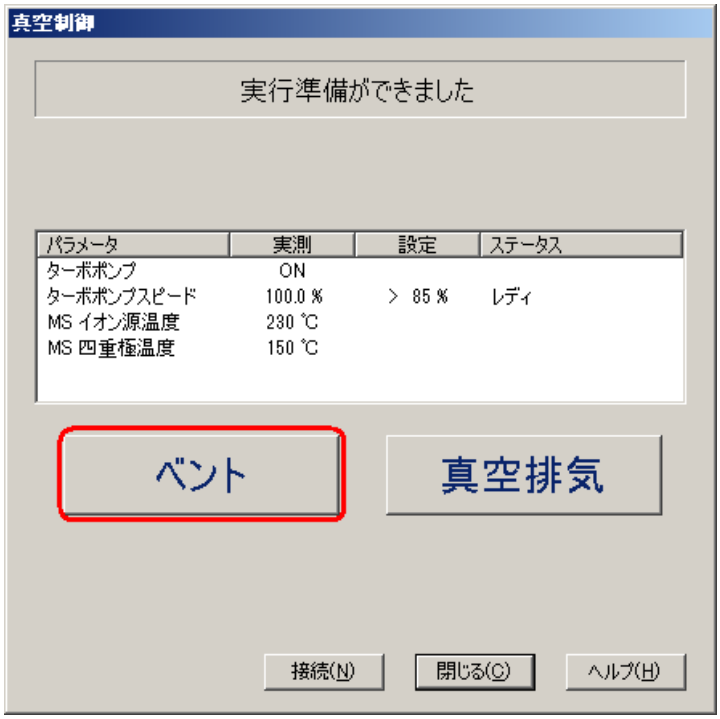
ここで設定したベントメソッドは、GC 本体に保存されます。マスハンターソフトウェアで保存されているメソッドファイルには含まれません。

11章－2　ベントサイクルを実行する

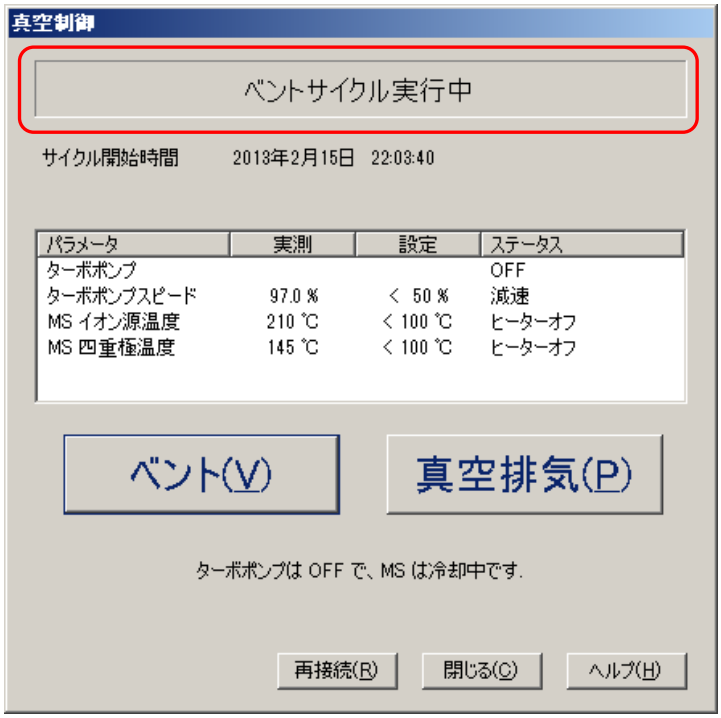
（1）　メニューから［機器］－［MS 真空コントロール...］を選択します。もしくは アイコンを右クリックします。



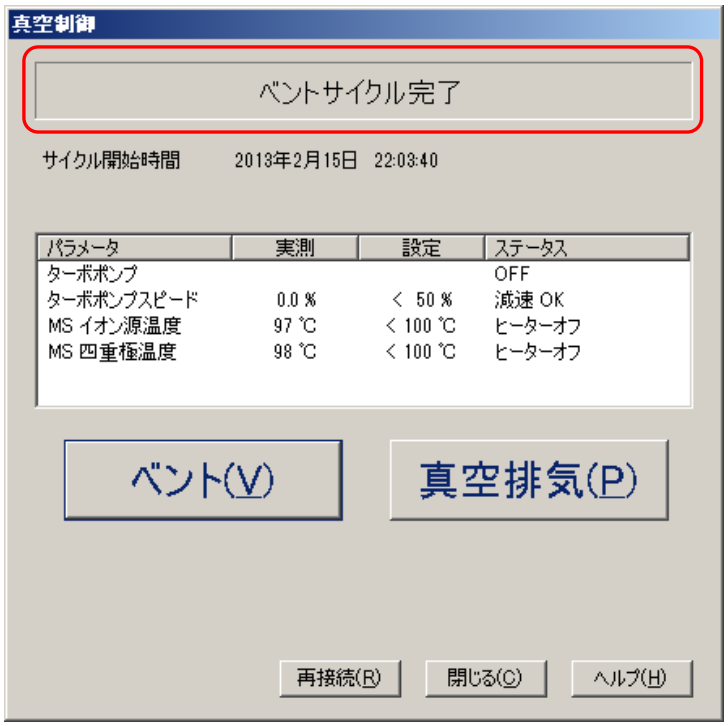
（2）　表示されたウィンドウの[ベント]ボタンをクリックします。



(4)　ベントサイクルのステータスが［ベントサイクル実行中］に変わります。通常、ステータスが［ベントサイクル完了］となるまで待ちます。ベントサイクルを実行すると高真空ポンプ、およびイオン源と四重極の温度は自動的にオフになります。



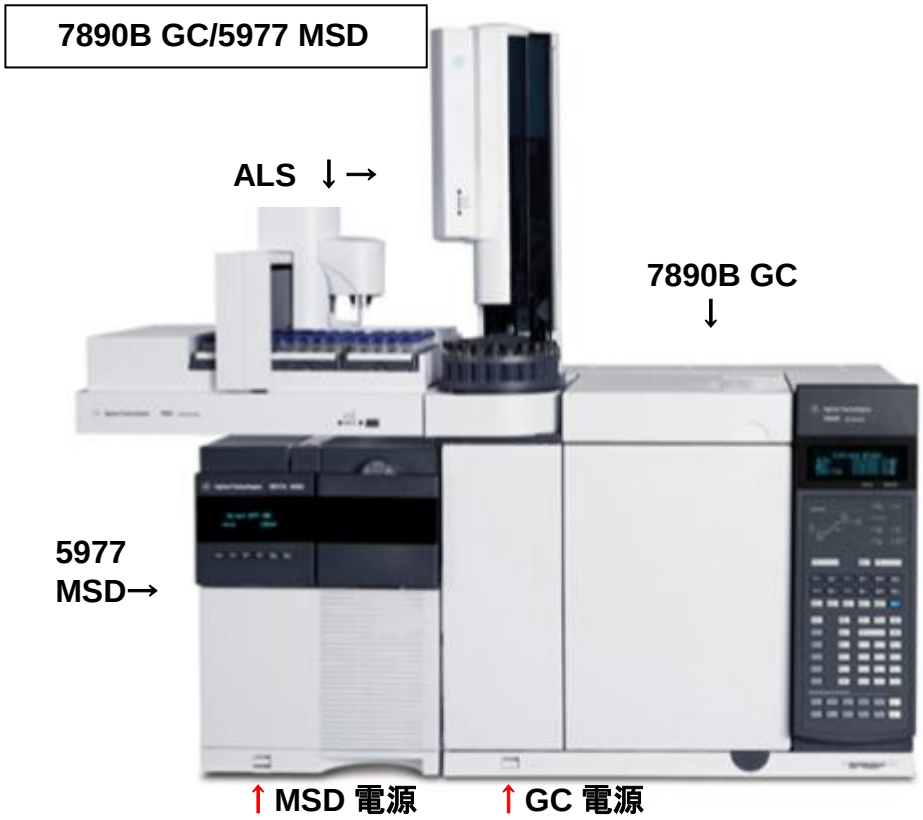
(3)　ステータスが［ベントサイクル完了］になったら、「閉じる」ボタンを押して、真空制御ウィンドウを閉じ、［ファイル］メニューの［終了］をクリックしてマスハンター測定ソフトウェアを終了します。



＜参考＞
ベントサイクルの完了を待たずにマスハンター測定ソフトウェアを終了したい場合には 閉じる(C) をクリックします。
この場合でもベントサイクルは続行されます。ベントサイクルが完了するのに充分な時間、待機してから MSD の電源をオフにします。

11章－3　機器の停止

（1） 必要に応じて MSD、GC の電源をオフにします。また、キャリアガスやその他のサポートガスの元栓を閉じます。



注意

カラムにダメージを与えないよう、GC の電源をオフにする前にオーブン、トランスファーライン、および注入口が充分冷却されていることを確認します。

（2） 必要に応じてフロントウィンドウのカバーを外し、ベントバルブを開けて MSD を大気開放します。

注意

MSD の大気開放を実施する際には、必ずベントサイクルを実行し MSD の電源をオフにします。また、大気開放は必要時のみ実施します。

11章－4　PC のシャットダウンと周辺機器の電源をオフにする

（1） タスクバーの［スタート］ボタンから、［シャットダウン］をクリックして Windows を終了します。

（2） PC、モニタ、プリンタ等の電源をオフにします。

付録A
カラムカタログの管理

付録 A－1 カラム管理の概要　A－2
付録 A－2 使用するカラムをカタログに設定　A－2
付録 A－3 カラムを追加、修正する方法　A－5
付録 A－4 カタログからカラムを選択（インストール）する方法　A－6
付録 A－5 カラムをキャリブレーションする方法（長さの実測が分かっている場合）　A－9
付録 A－6 カラムカタログに目録を作成する　A－11
付録 A－7 カタログに新しいカラムモデルを追加する　A－15

付録A－1　カラム管理の概要

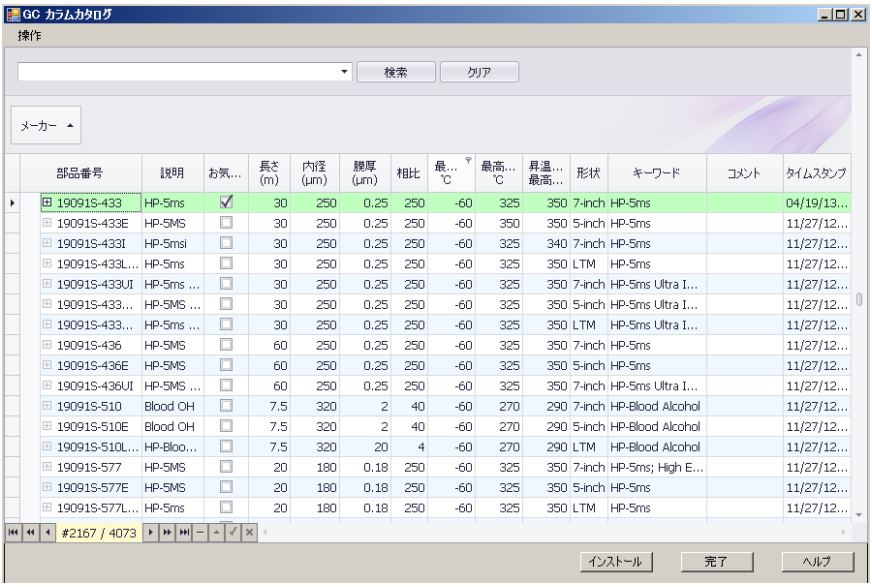
カタログ：
カタログは、ソフトウェアに保存されている、製造元、モデル番号、説明、タイプ（キャピラリまたはパックド）、最高温度、長さ、内径、膜厚など、各モデルの仕様が記載された、Agilent のすべてのカラムのリストです。Agilent 以外のカラムをカタログに追加することもできます。

目録（ローカルの目録）：
目録は、カタログのモデル番号毎にキャリブレーション情報などの詳細情報が保存されます。
目録を作らずにカタログ記載のカラムを使用することもできますが、この場合キャリブレーション情報はカタログに保存されません。

付録A－2　使用するカラムをカタログに設定

お気に入り欄を使って、カタログ内に普段使うカラムを設定します。

（1）カタログ... をクリックして［GC カラムカタログ］ウィンドウを表示します。



（２） 検索ボックスによる絞込み

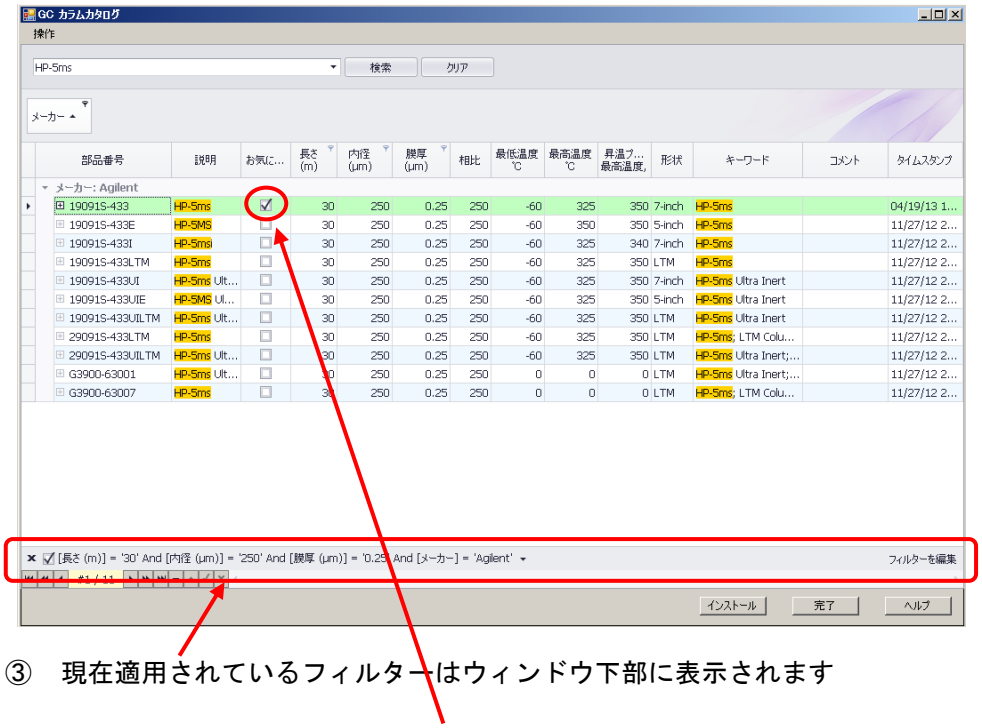
① ボックスに検索する文字列を入力します。（例は HP-5ms）

② カタログ内で HP-5ms という文字列を持つカラムが表示されます。

（３） 列フィルター機能を使用した絞込み

① 列見出しの右上をポイントするとフィルター設定がポップアップします。長さ欄で 30（30m)を選びます。

② 同様に内径で 250μm、膜厚で 0.25μm を選んで、HP5ms　30m×0.25mm ×0.25μm のカラムをカタログから見つけることができます。



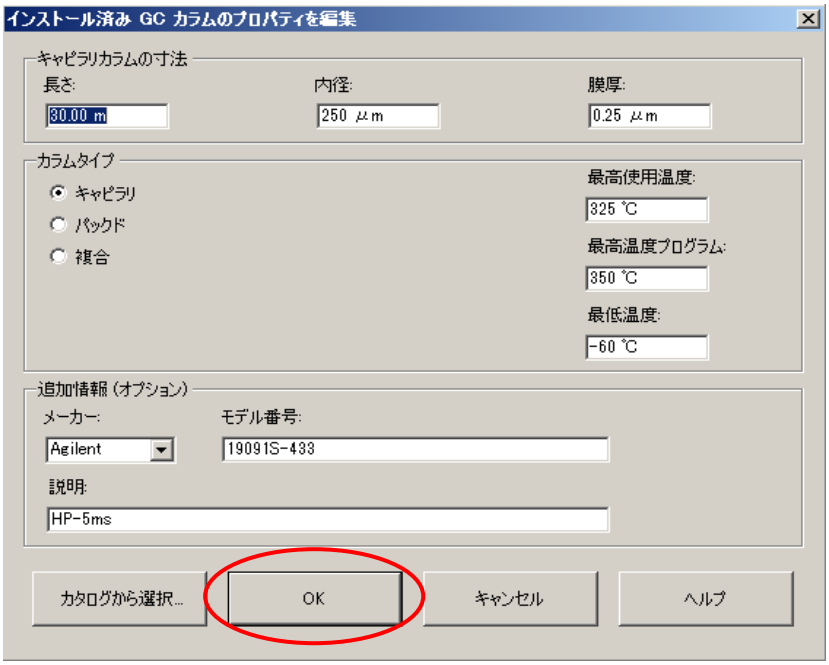
③ 現在適用されているフィルターはウィンドウ下部に表示されます

（４） 目的のカラムが見つかったら、お気に入りにチェック

付録A－3　カラムを追加、修正する方法

① 変更するカラムの番号をクリックします。

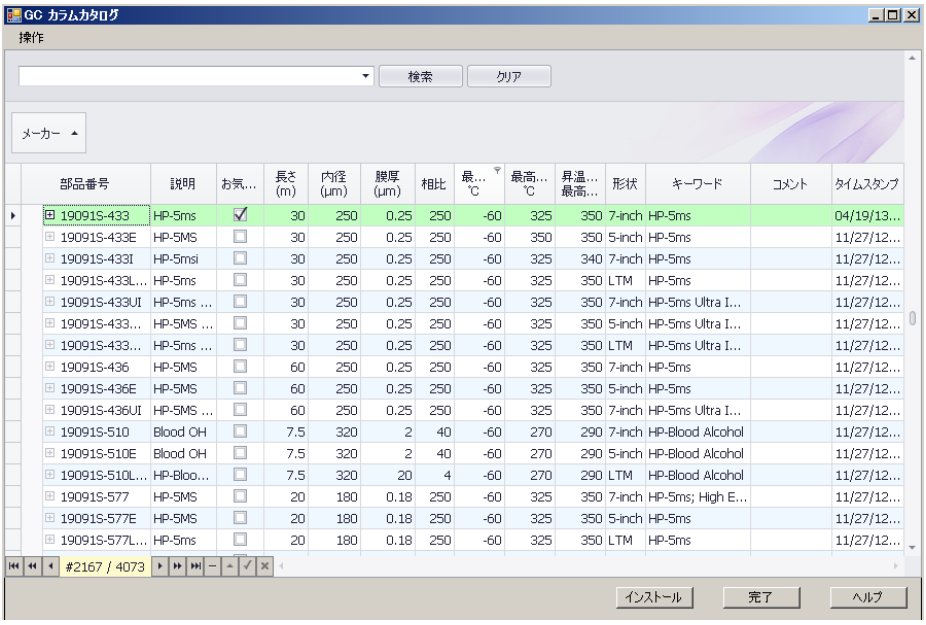
② 変更や修正を実施して OK をクリックします。



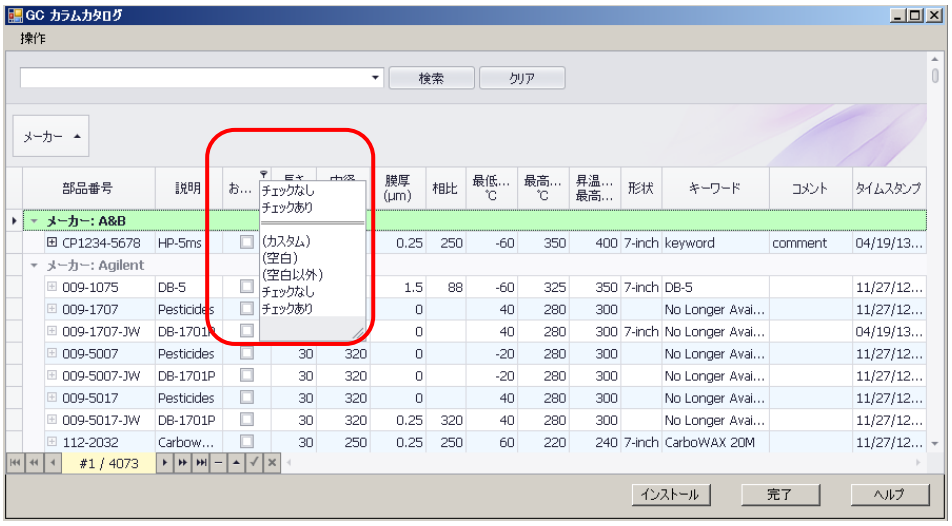
付録A－4　カタログからカラムを選択（インストール）する方法

① 変更するカラムが反転表示されていることを確認して、カタログ... をクリックします。

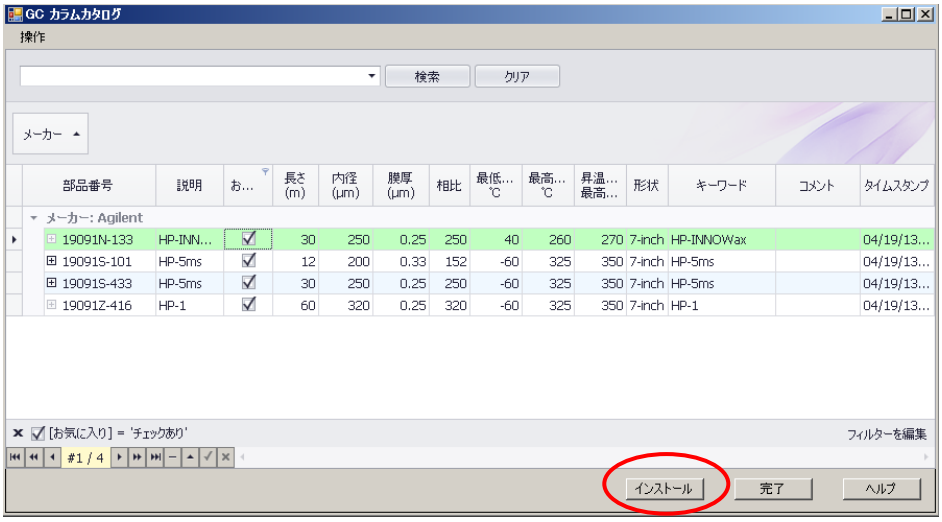
② ［GC カラムカタログ］ウィンドウが表示されます。



③　お気に入りの をクリックして［チェックあり］でフィルターを掛けます。

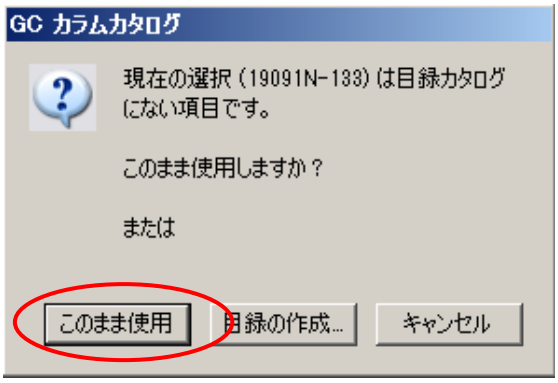


④　リストからインストールしたいカラムを選択します。



⑤　インストール をクリックします。

⑥　［GC カラムカタログ］ダイアログボックスで［このまま使用］をクリックします。



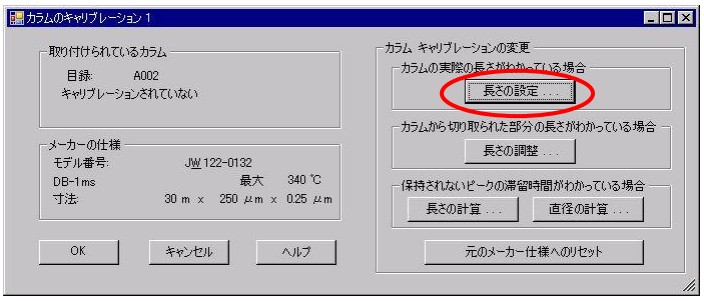
⑦　カタログで選択したカラムが GC ソフトコンフィグレーションにインストールされます。

付録A－5　カラムをキャリブレーションする方法（長さの実測が分かっている場合）

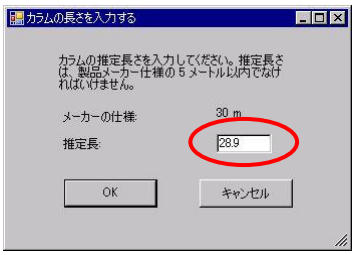
汚染を除去するために端を大きくトリミングするなど、既存のカラムに重大な変更を加えたときには、カラムのキャリブレーションを行います。目録を作成しておく（付録 A－6 参照）と、カタログ内にキャリブレーション結果を保存できます。

① キャリブレーションするカラムを反転表示させ、キャリブレーション... をクリックします。

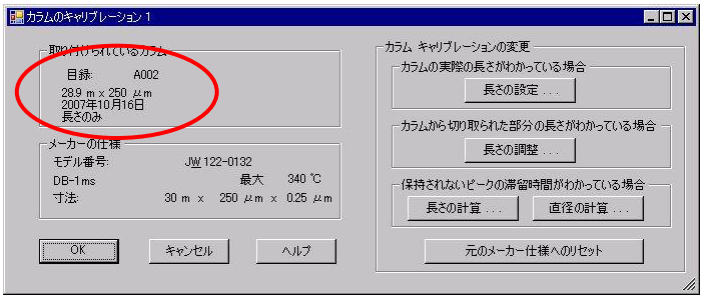
② 長さの設定 . . . をクリックします。



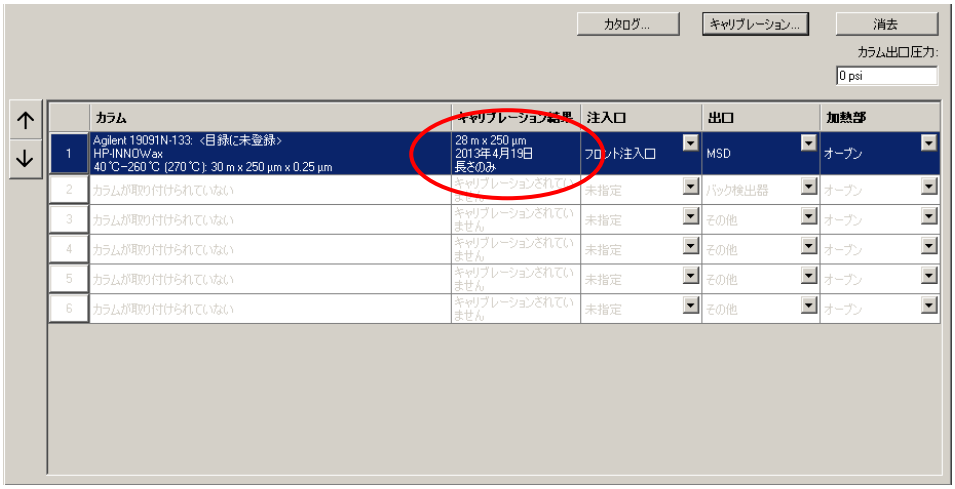
③　［推定長］欄にカラム長さの実測値を入力して OK をクリックします。



④　長さが入力されます。 OK をクリックします。



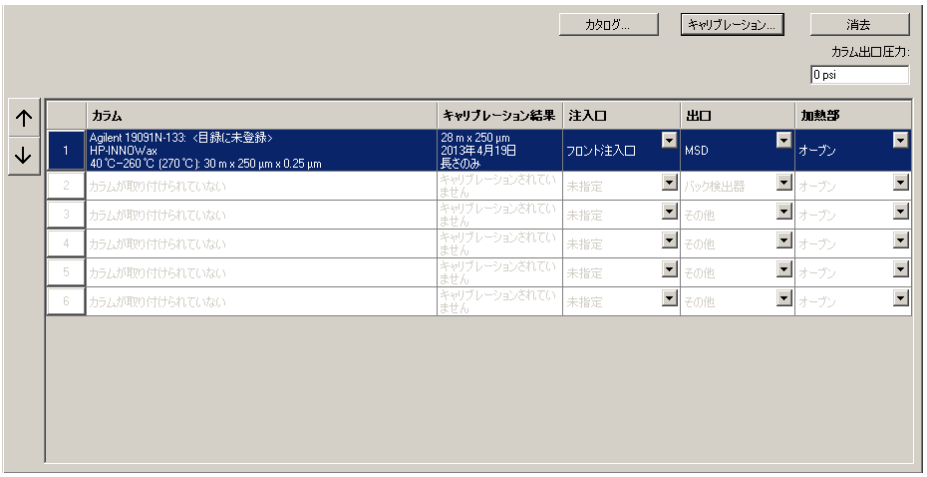
⑤　［キャリブレーション結果］欄にカラムのキャリブレーション内容が反映されます。



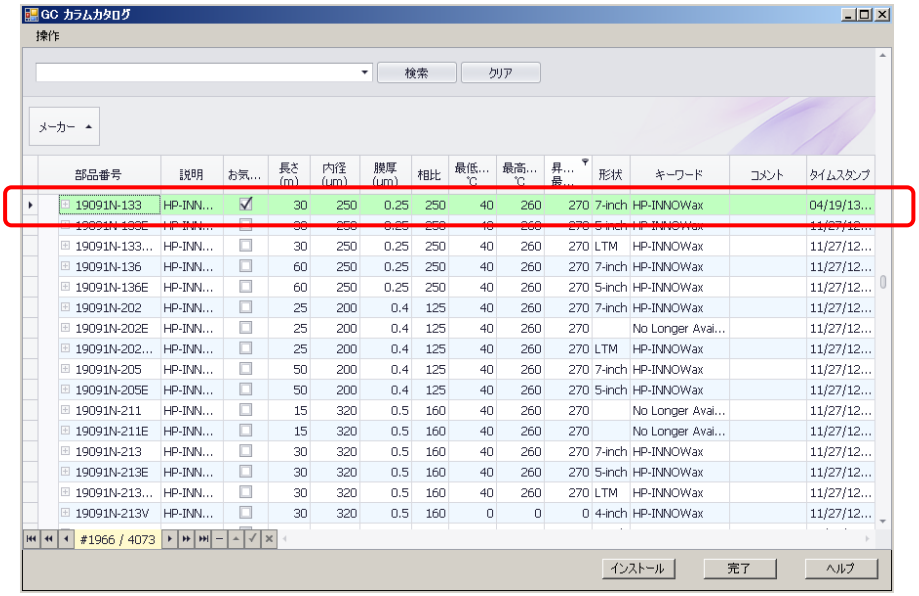
付録A－6　カラムカタログに目録を作成する

目録を作成することで、キャリブレーション結果をカタログ内に保存できます。同じモデル番号のカラムでも、個々のカラムごとにキャリブレーション結果を保存できます。

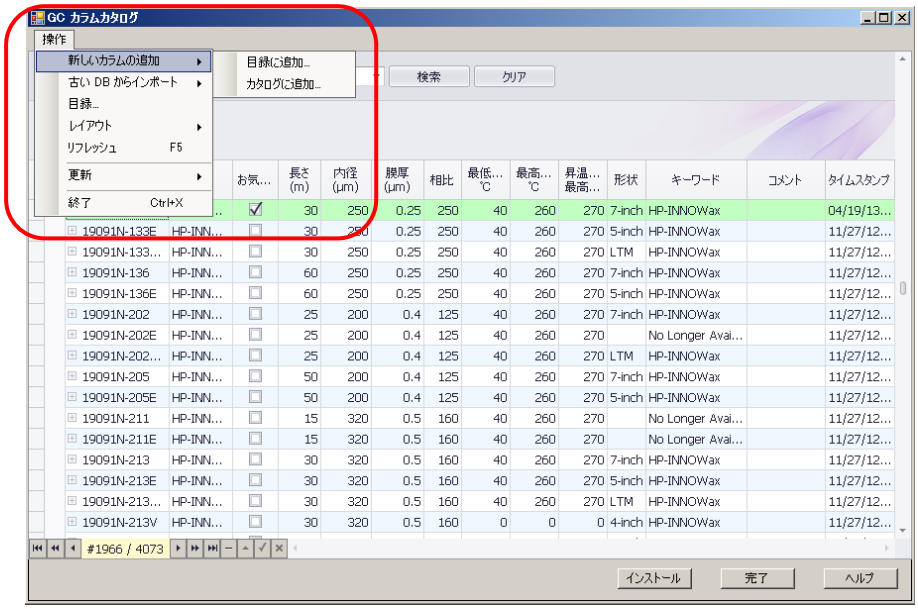
① カタログ... をクリックします。



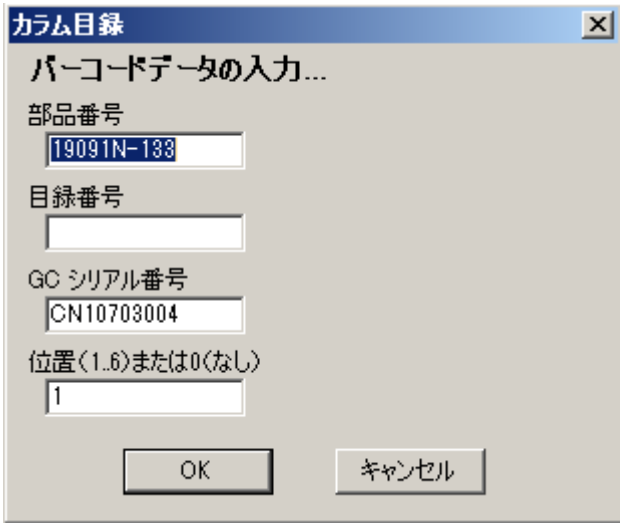
② ［GC カラムカタログ］ウィンドウで目録を作成する部品番号を選択します。



③　メニューの［操作］-［新しいカラムの追加］－［目録に追加］をクリックします。



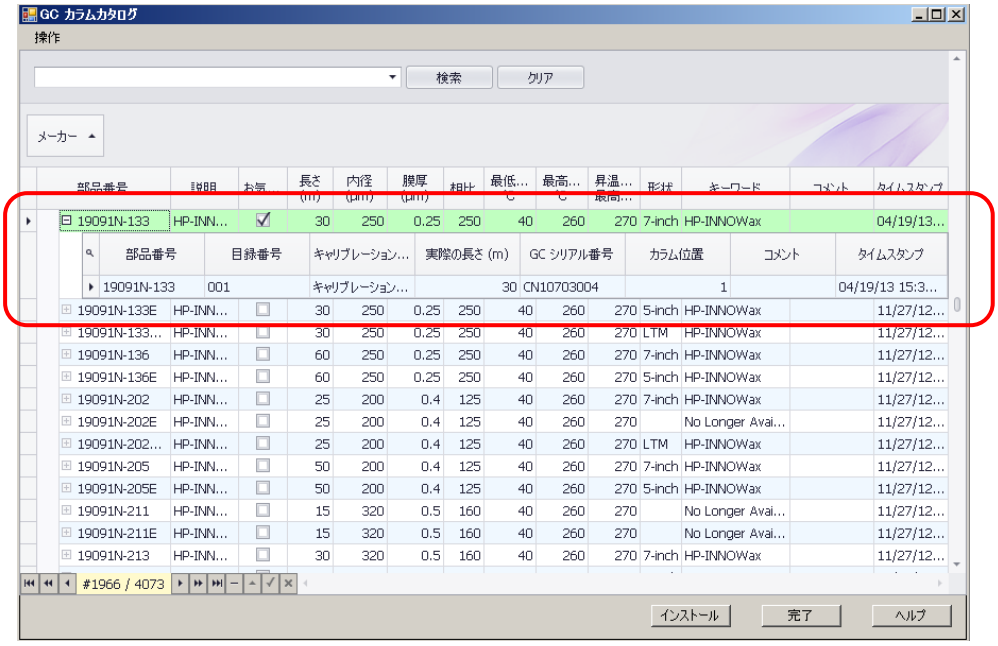
④　［カラム目録］ダイアログボックスが表示されます。



⑤　目録番号（任意）を入力します

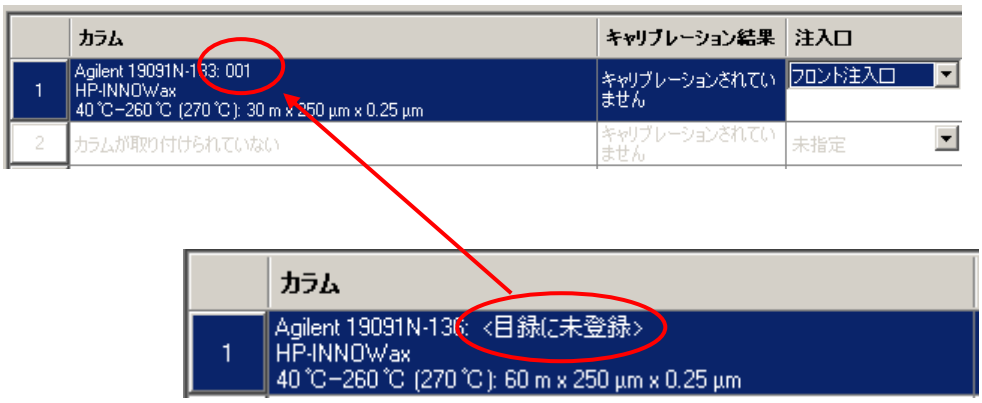
⑥　OK をクリックします。

⑦　［GC カラムカタログ］ウィンドウに目録が作成されました。



⑧　目録のカラムを選択して インストール をクリックします。

⑨　カラム欄に目録番号が表示されます。



カタログに目録があるかどうかの確認

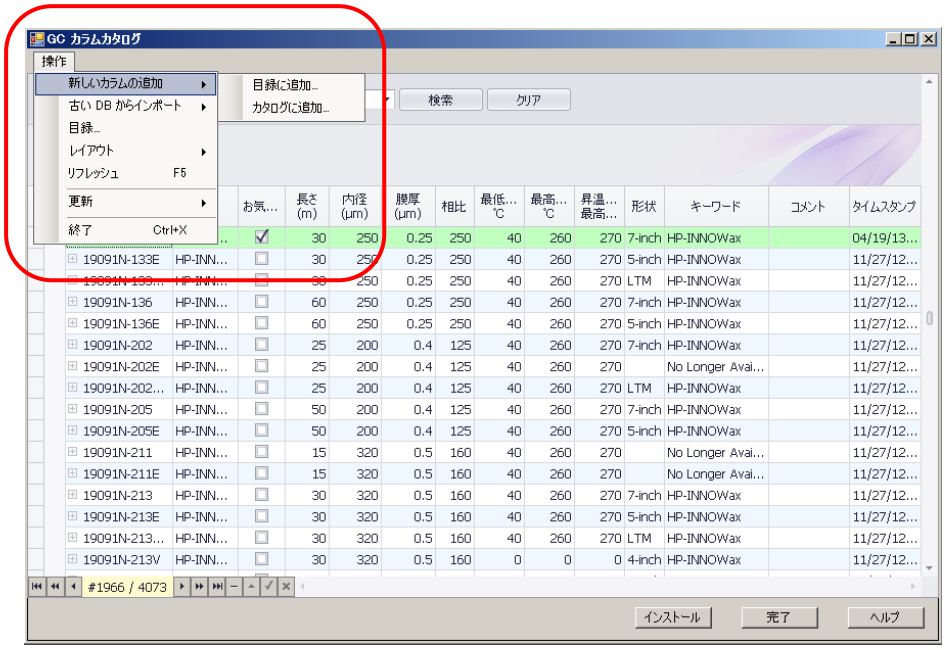
［GC カラムカタログ］ウィンドウの部品番号欄に注目します。
目録が設定されているカラムは ⊞ をクリックして目録が表示できます。

付録A－7　カタログに新しいカラムモデルを追加する

カタログリストに存在しない新しいカラムをカタログに追加する方法を説明します。

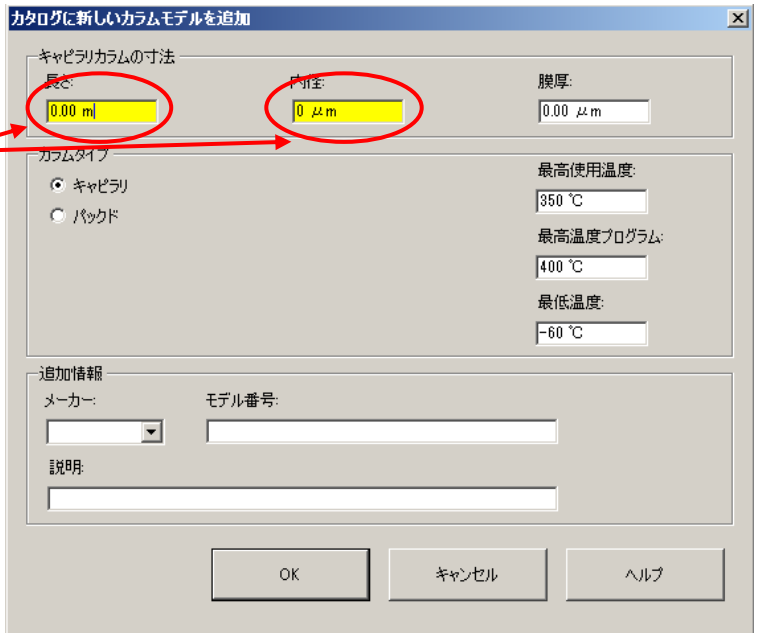
① カタログ... をクリックします。

② メニューの［操作］-［新しいカラムの追加］－［カタログに追加］をクリックします。

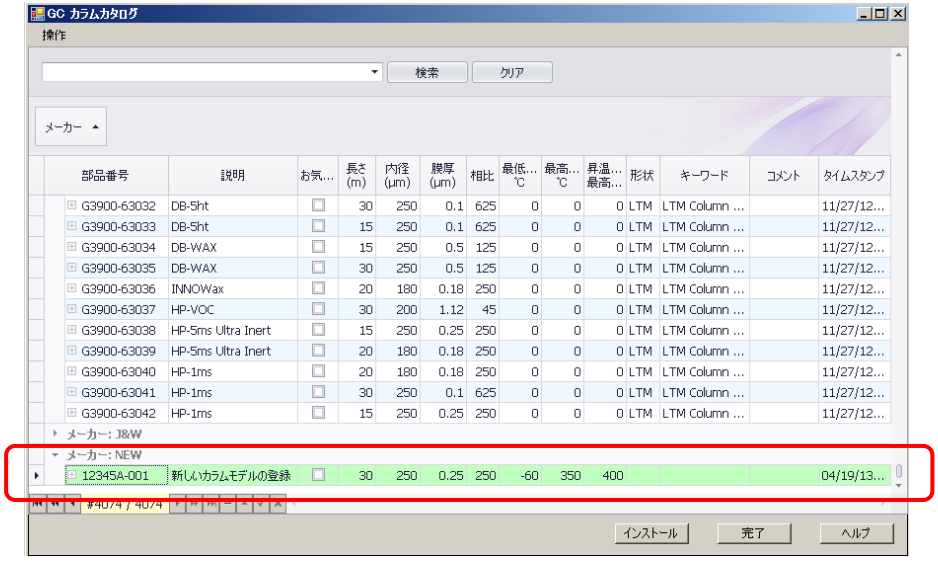


③　開いたダイアログボックスでカラム情報を入力します。
（※下図は、まだパラメーターが未入力です。）

値が適切では無い場合は、黄色になります。

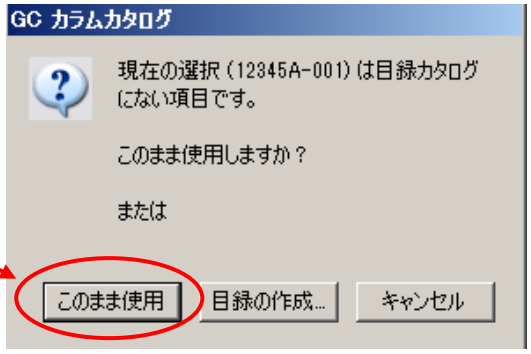


④　OK をクリックします。カタログに新しいカラムモデルが追加されます。

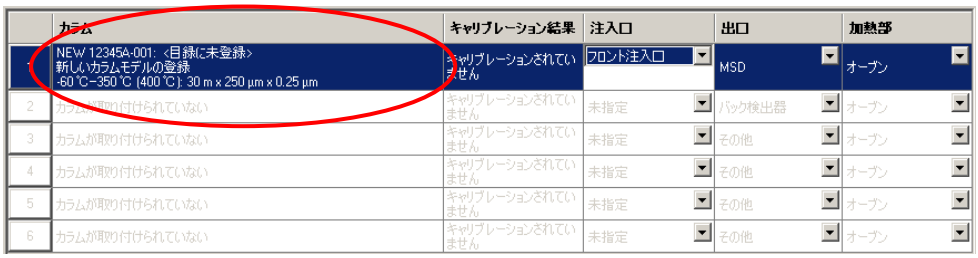


⑤　追加したカラムが選択されていることを確認して インストール をクリックします。

⑥　［GC カラムカタログ］ダイアログボックスに このまま使用 をクリックします。



⑦　新しいカラムが GC ソフトコンフィグレーションにインストールされます。

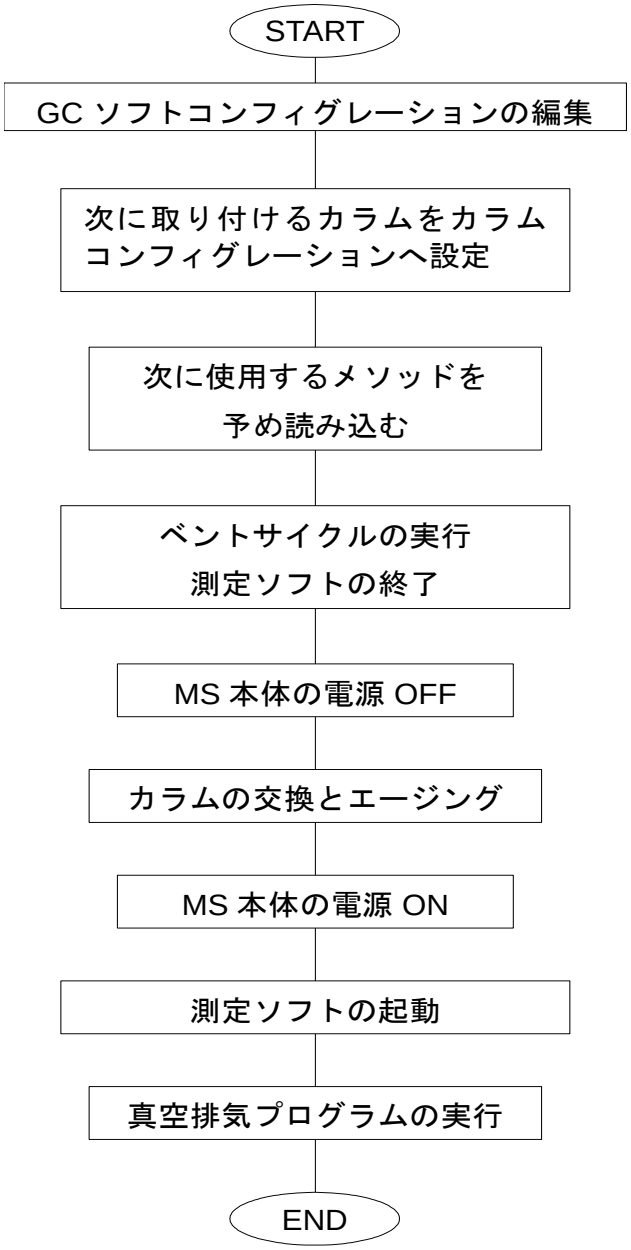


Memo

付録B
カラムの交換手順

付録 B－1　最初にソフトウェアの設定を変更する方法　B－5
付録 B－2　最初にベントサイクルを実施する方法　B－12

＜最初にソフトウェアの設定を変更する方法＞



＜最初にベントサイクルを実施する方法＞

カラムを交換する場合、予め交換するカラムの条件に測定ソフトを設定後、ベントサイクルを実行してカラム交換を実施する方法と、ベントサイクルを実行してカラム交換を実施した後に、マスハンターソフトウェア上で交換したカラムの条件を設定するという 2 つの方法があります。
これらの 2 つの方法は、それぞれ以下のような特徴があります。
それぞれの特徴を理解した上で、お好みの方法でカラム交換を行います。

＜最初にソフトウェアの設定を変更する方法＞
ベントサイクルを実施する前に次に接続するカラムの条件を設定します。

測定ソフトを終了する前に次のメソッドを読み込んでいるため、カラムの交換後にマスハンターソフトウェアを起動した時には、ハードウェアとソフトウェアのコンフィグレーションが一致しています。そのため、測定ソフト起動時にメソッド変換の画面が現れません。カラム交換前に設定を行うので、カラム交換後の作業が簡単でスムーズです。

ただし、カラムを交換する前に次に接続するカラム条件のメソッドを読み込むため、短時間ではありますが、カラムの読み込みからベントサイクル実行までの間、メソッドが実際のカラムとは違う設定になります。

したがって、最高使用温度の低いカラムから最高使用温度の高いカラムへ交換する場合で、インターフェイス温度が現在使用しているカラムに比べて高く設定されている時には、現在取り付けているカラムの液相にダメージを与える恐れがあります。

この方法でカラムの交換を実施する場合には、次に読み込むメソッドの設定を十分理解した上で作業を行う必要があります。

＜最初にベントサイクルを実施する方法＞
前準備をすることなく、ベントサイクルを実行できます。

カラムの交換前に設定の変更がないため、メソッドが実際のカラムと違った設定になることはありません。

カラム交換後にエージングを実施する場合、7890GC 本体には以前のカラム情報が残っているため、GC のキーボードから次のカラム情報を設定する必要があります。

また、カラム交換後の測定ソフト起動時には、ハードウェアとソフトウェアのコンフィグレーションが一致しないため、メソッド変換の画面が表示されます。その際、誤ってメソッドを保存してしまうと、交換前のカラムで使用していたメソッドの内容が変更されてしまいます。

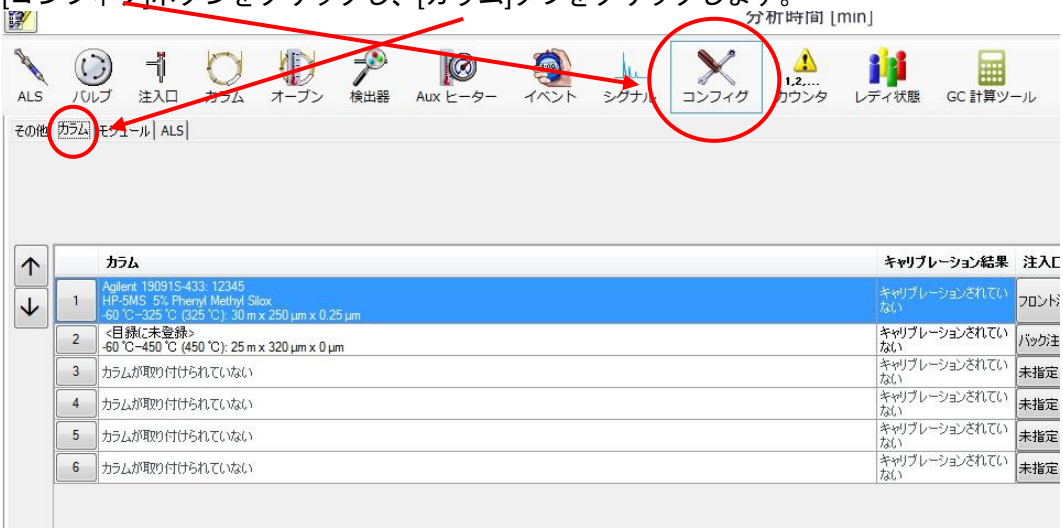
ここにある手順に従って操作を行うことにより、そのような誤操作を回避します。

付録B－1　　最初にソフトウェアの設定を変更する方法

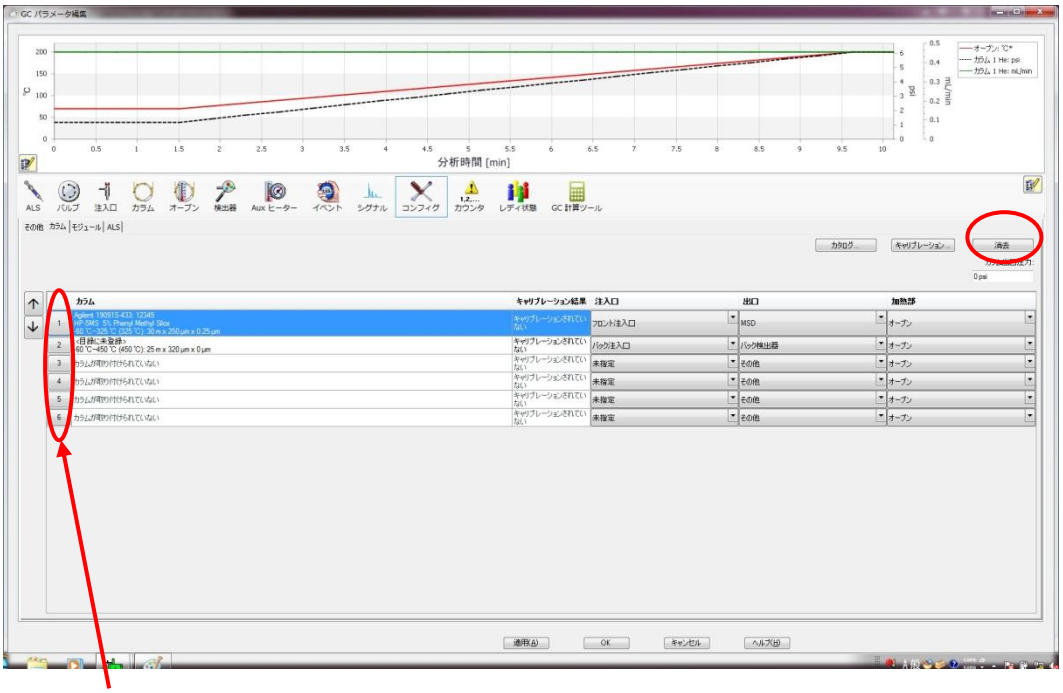
（1）　コンフィグレーションを次に交換するカラムに設定する

メニューから［機器］－［GC パラメータ］を選択します。

[コンフィグ]ボタンをクリックし、[カラム]タブをクリックします。



現在、GC に接続されているカラムが表示されます。



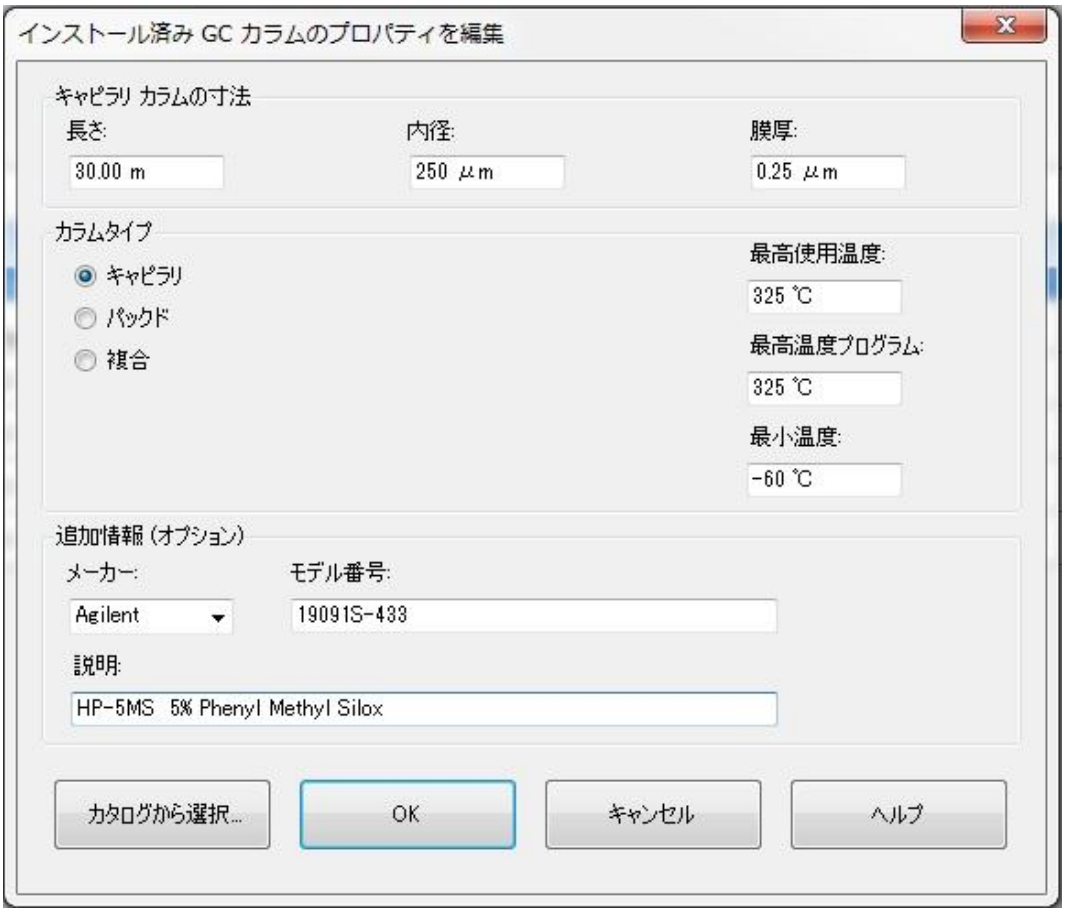
1 から 6 ボタンのうち、変更したいカラムのボタンをクリックします。

注意

コンフィグレーションに表示されているカラムは、実際の状態と同じにしておきます。
注入口に接続されていないカラムは消去して、カラムを未接続な状態でリストに残さないようにしてください。

該当するカラムのボタンを選択後、 消去 ボタンクリックで消去出来ます。

GC カラムのプロパティの編集画面が表示されます。



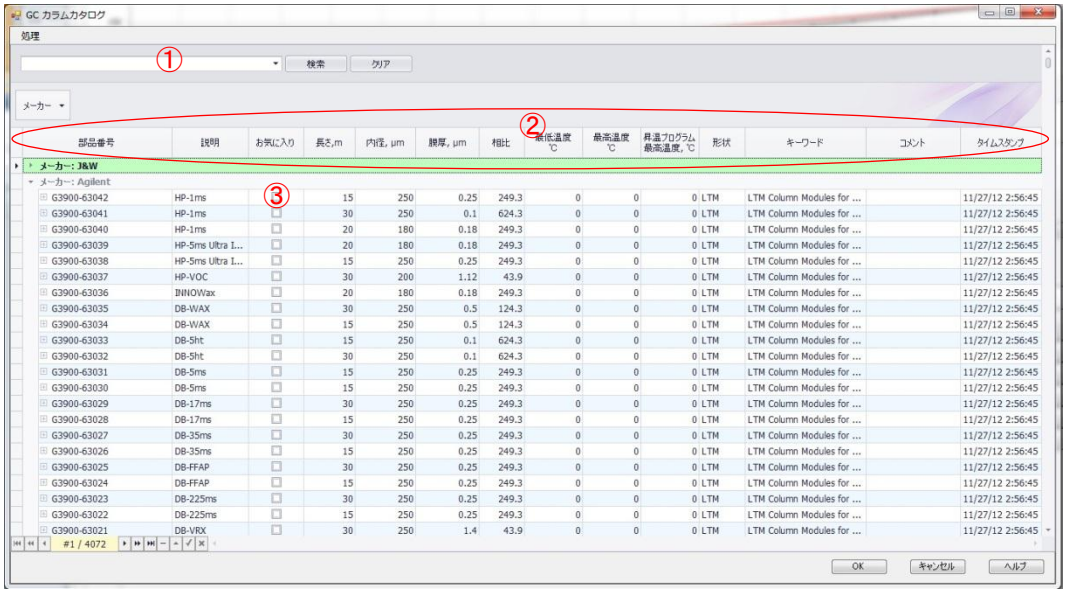
ここで、全ての項目を手動で入力して反映させることが出来ます。

各項目を訂正・入力後、

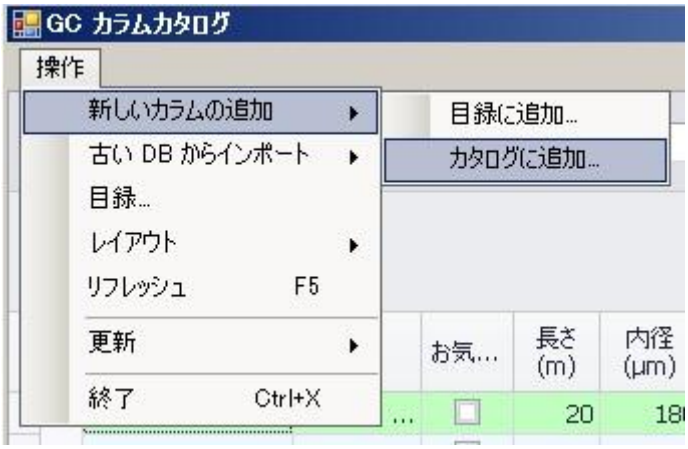
で反映されます。

もうひとつの方法は、

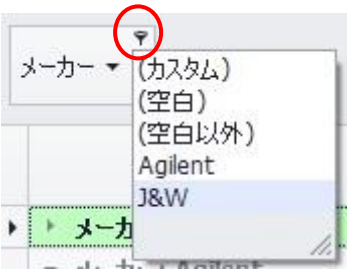
をクリックし、一覧から選択します。



① 色々な文字列で検索できます。（製品番号など）
② 各タブをクリックすると、そのタブの項目で昇順<>降順でソートされます。
③ 所有しているカラムの「お気に入り」にチェックを入れてソートすると便利です。

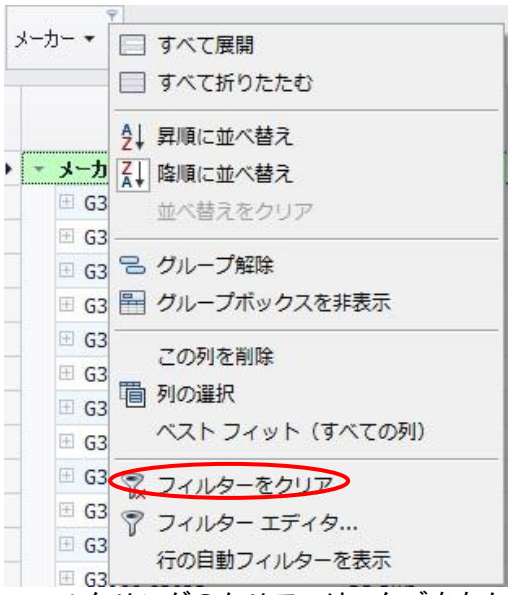


「操作」>「新しいカラムの追加」>「カタログに追加」でデータベースにカラムを追加出来ます。



各タブ（この例では［メーカー］）右上にマウスを持って行き、現れるマークをクリックすると、そのタブ内の一覧が表示されます。

一覧から選択を行うと、フィルタリングをかけることが出来ます。



フィルタリングのクリアーは、タブを右クリックして、現れるメニューから［フィルターをクリアー］を選択します。

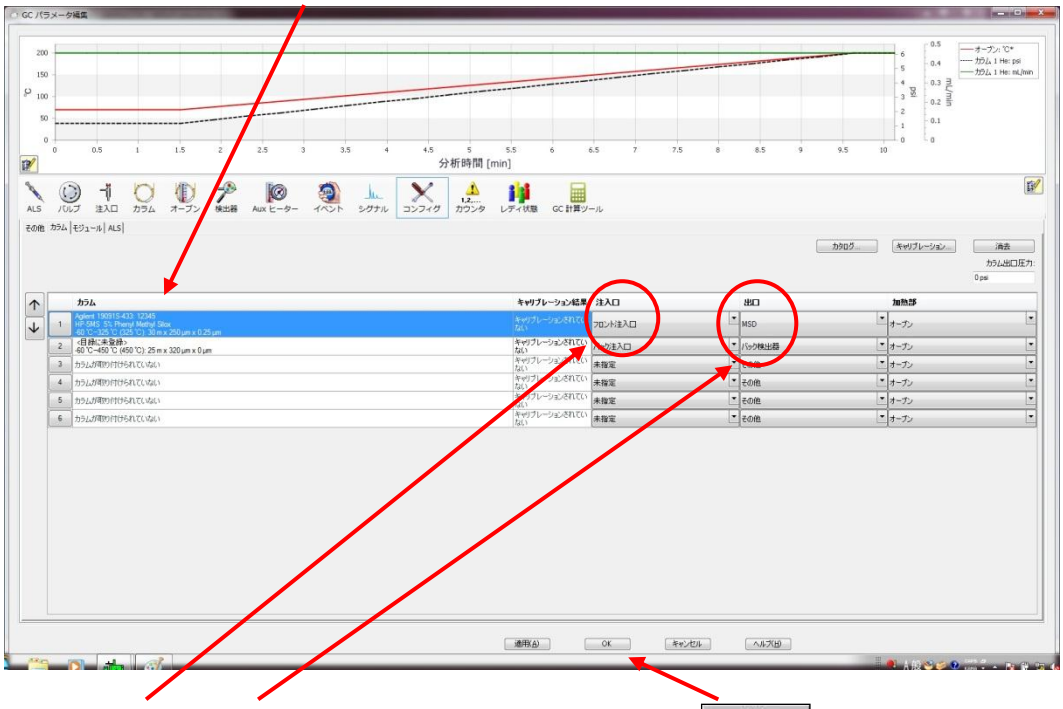
該当するカラムを選んだら、 OK をクリックします。

目録の作成選択が出ますので、 このまま使用 をクリックします。

［目録の作成］を選択すると、同じ型番のカラムを目録として複数設定を持つことが出来ます。（シリアル番号で使い分けたい時など。）

※：カラムカタログにつきましては、付録 A　[カラムカタログの管理]　も参照下さい。

カラム欄に選択したカラムが入力されます。



接続する注入口、出口などに間違えが無いか確認を行い、 OK をクリックします。

カラム情報が正しくダウンロードされたことを、GC 本体から確認します。

（2）　次に使用するメソッドの読み込み

メニューから［メソッド］－［メソッドの読み込み］を選択します。

GC のコンフィグレーションと読み込んだメソッドのコンフィグレーションが一致しているため、メソッド変換の画面（GC パラメータの編集画面）が表示されることなくメソッドが読み込まれます。

メソッド変換の画面（GC パラメータの編集画面）が表示された場合は、 OK や 適用(Y) ボタンをクリックする前に、読み込んだメソッドに間違いが無いか十分確認を行います。

また、すぐにベントサイクルを実施しない場合は、GC 本体もしくは測定ソフトから MS インターフェイスのヒータを OFF にします。

注意

読み込んだメソッドの条件（特に MS インターフェイスの温度）が実際に取り付けられているカラムの最高使用温度を超えている場合、カラムの液相を損傷してしまう恐れがあります。このような恐れを回避するために、ただちに以下のようにベントサイクルを実施するか、MS インターフェイスの温度を OFF にします。

（3）　ベントサイクルの実行
　　１１章－２の手順に従い、ベントサイクルを実施します。

（4）　MS 本体の電源を OFF にし、カラムの交換
　　必要に応じて、カラムのエージングを実施します。
　　エージングの条件は、GC 本体キーボードより設定します。

（5）　MS にカラムの接続

（6）　サイドプレートを押しながら MS 本体電源の ON

（7）　測定ソフトの起動
　　最後に読み込んだメソッド（これから使用するメソッド）が読み込まれます。
　　ハードウェアとソフトウェアのコンフィグレーションが一致しているため、メソッド変換の画面が表示されることはありません。

注意

測定ソフトの終了後、GC のキーボードからコンフィグレーション（カラム情報や最高使用温度など）を変更してしまうと、メソッドのコンフィグレーションと一致しなくなり、マスハンターソフトウェア起動時にメソッド変換の画面が表示されます。

（8）　真空排気プログラムの実行

　　１章－３手順に従い、真空排気プログラムを実施します。

注意

真空排気プログラムが終了しても、真空度が安定するまでには時間がかかります。

付録B－2　　最初にベントサイクルを実施する方法

（1）　ベントサイクルの実行

「第 11 章 システムの停止方法」の手順に従い、ベントサイクルを実施します。

（2）　MS 本体の電源を OFF にし、カラムの交換を行います。
GC 本体には、交換前のカラム情報が登録されているので、カラムの条件をキーボードから変更します。
カラムにキャリアーガスが流れていることを確認して、必要に応じてカラムのエージングを行います。

（3）　MS にカラムを接続し、サイドプレートを押しながら MS 本体の電源を ON にします。

（4）　測定ソフトの起動

ソフトは起動時に、交換前のカラムのメソッドを読み込みます。
ハードウェアとソフトウェアのコンフィグレーションが一致しないため、メソッド変換の画面が表示されます。

キャンセル ボタンが選択できない状態の場合は、 OK をクリックします。
表示されたパラメータが GC 本体へダウンロードされます。

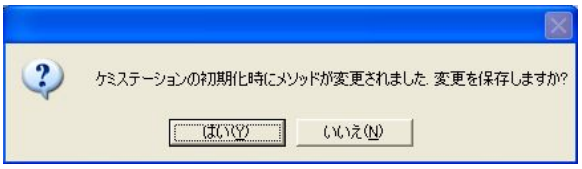
MS 温度の画面が表示されます。

適用(Y) ボタンをクリックすると設定温度が MS 本体へダウンロードされます。

注意

リークの恐れがある場合は、 キャンセル をクリックしてリークチェックを行います。リークが無いことを確認した上で設定温度を MS 本体へダウンロードします。

メソッド変更のメッセージが表示されます。



いいえ(N) を選択し、メソッドの保存をキャンセルします。

注意

ここでは必ず いいえ(N) を選択します。誤って はい(Y) を選択すると交換前のカラムで使用していたメソッドの内容が変更されてしまいます。

（5）　真空排気プログラムの実行

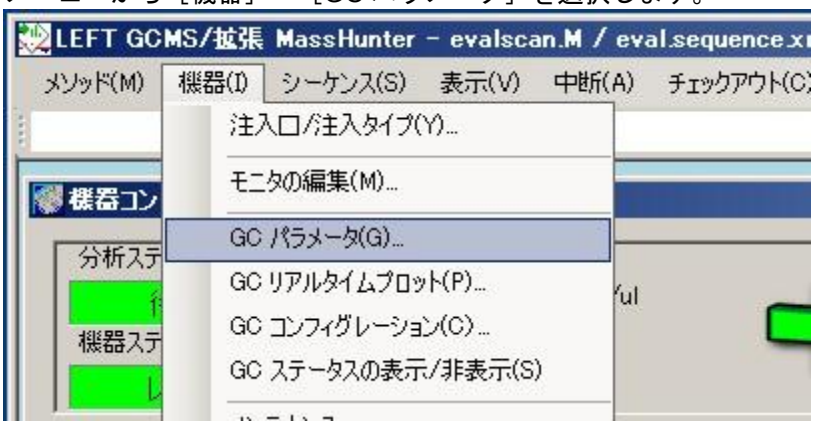
「第 1 章 システムの立ち上げ方」に従い、真空排気プログラムを実施します。

注意

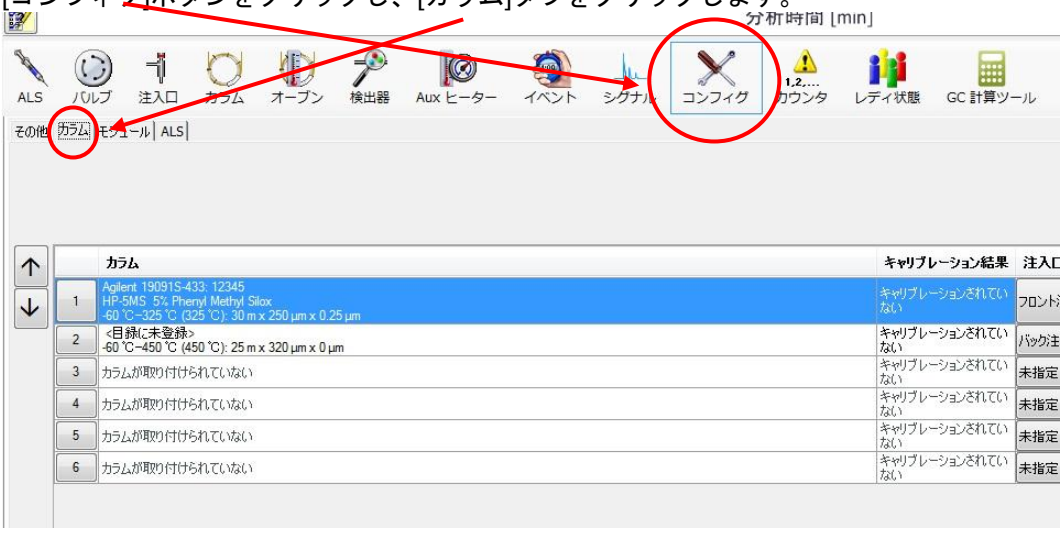
真空排気プログラムが終了しても、真空度が安定するまでには時間がかかります。

（6）　カラムの設定を変更する

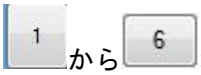
メニューから［機器］－［GC パラメータ］を選択します。



[コンフィグ]ボタンをクリックし、[カラム]タブをクリックします。



カラムを交換した際に GC 本体から入力したカラム情報が表示されます。



から ボタンのうち、該当するカラムのボタンをクリックします。

注意

コンフィグレーションに表示されているカラムは、実際の状態と同じにしておきます。
注入口に接続されていないカラムは消去して、カラムを未接続な状態でリストに残さないようにしてください。

該当するカラムのボタンを選択後、 消去 ボタンクリックで消去出来ます。

GC カラムのプロパティの編集画面が表示されます。

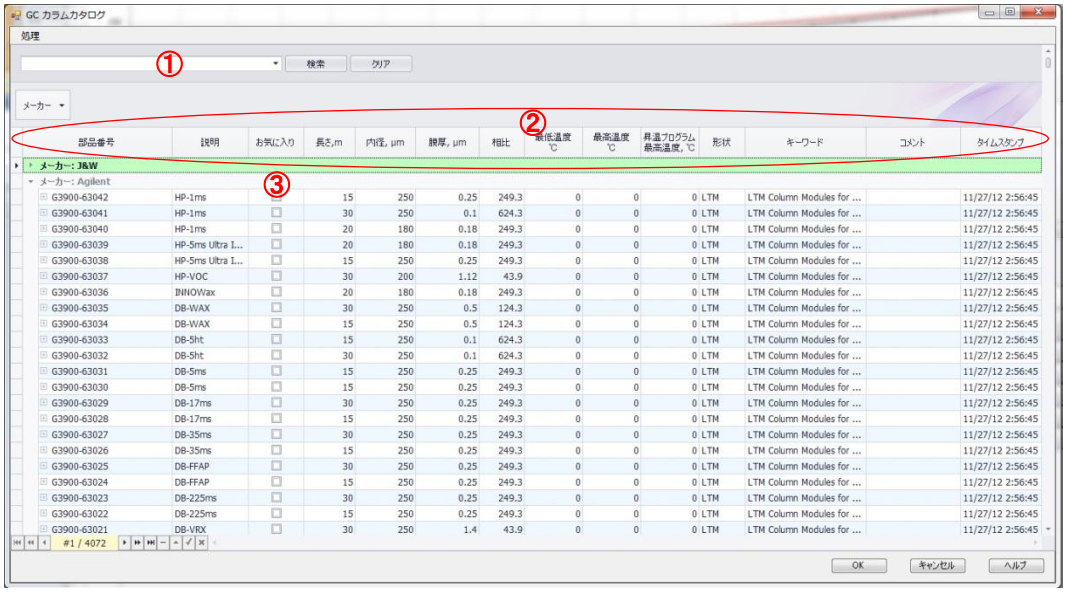
ここで、全て項目を手動で入力して反映させることが出来ます。

各項目を訂正・入力後、

で反映されます。

もうひとつの方法は、

をクリックし、一覧から選択します。

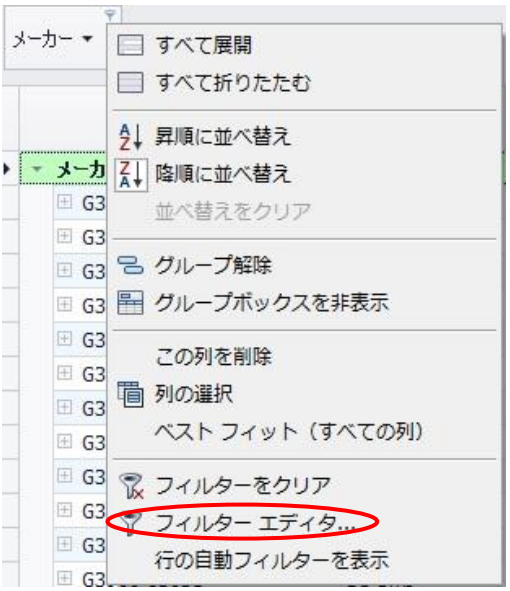


① 色々な文字列で検索できます。（製品番号など）
② 各タブをクリックすると、そのタブの項目で昇順＜＞降順でソートされます。
③ 所有しているカラムの「お気に入り」にチェックを入れてソートすると便利です。

「操作」＞「新しいカラムの追加」＞「カタログに追加」でデータベースにカラムを追加出来ます。

各タブ（この例では「メーカー」）右上にマウスを持って行き、現れるマークをクリックすると、そのタブ内の一覧が表示されます。

一覧から選択を行うと、フィルタリングをかけることが出来ます。



フィルタリングのクリアーは、タブを右クリックして、現れるメニューから「フィルターをクリアー」を選択します。

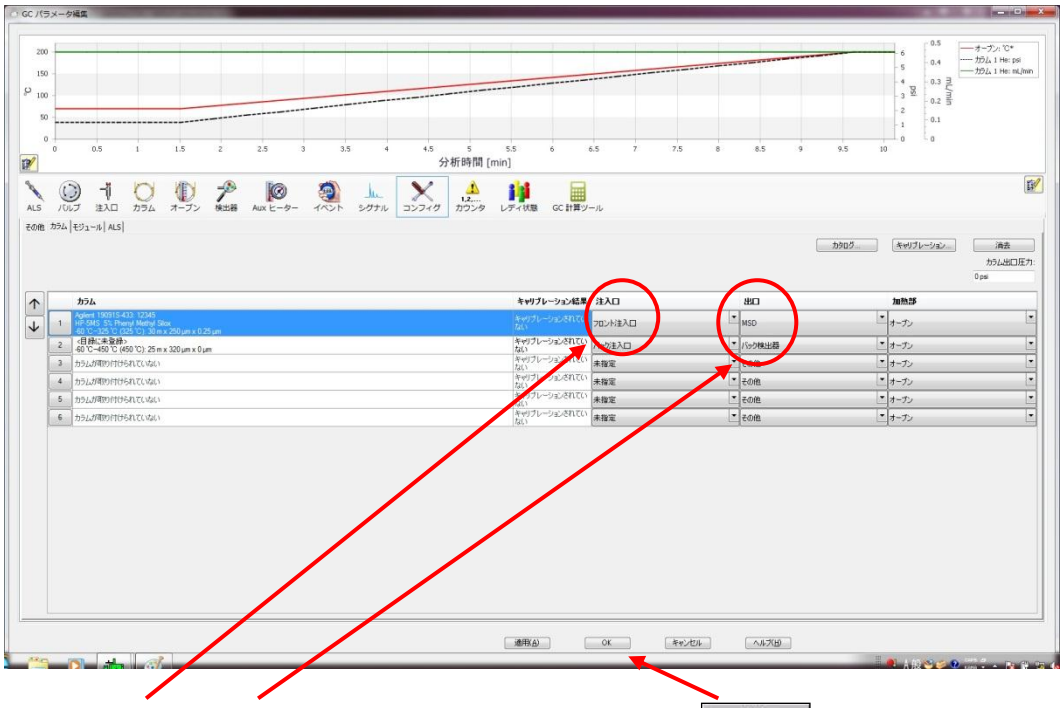
該当するカラムを選んだら、 OK をクリックします。

目録の作成選択が出ますので、 このまま使用 をクリックします。

［目録の作成］を選択すると、同じ型番のカラムを目録として複数設定を持つことが出来ます。（シリアル番号で使い分けたい時など。）

※：カラムカタログにつきましては、「付録 A カラムカタログの管理」も参照下さい。

カラム欄に選択したカラムが入力されます。



接続する注入口、出口などに間違えが無いか確認を行い、 OK をクリックします。

カラム情報が正しくダウンロードされたことを、GC 本体から確認します。

(7)　使用するメソッドの読み込み

メニューから［メソッド］－［メソッドの読み込み］を選択します。

GC のコンフィグレーションと読み込んだメソッドのコンフィグレーションが一致しているため、メソッド変換の画面（GC パラメータの編集画面）が表示されることなくメソッドが読み込まれます。

メソッド変換の画面（GC パラメータの編集画面）が表示された場合は、 OK や 適用(Y) ボタンをクリックする前に、読み込んだメソッドに間違いが無いか十分確認を行います。

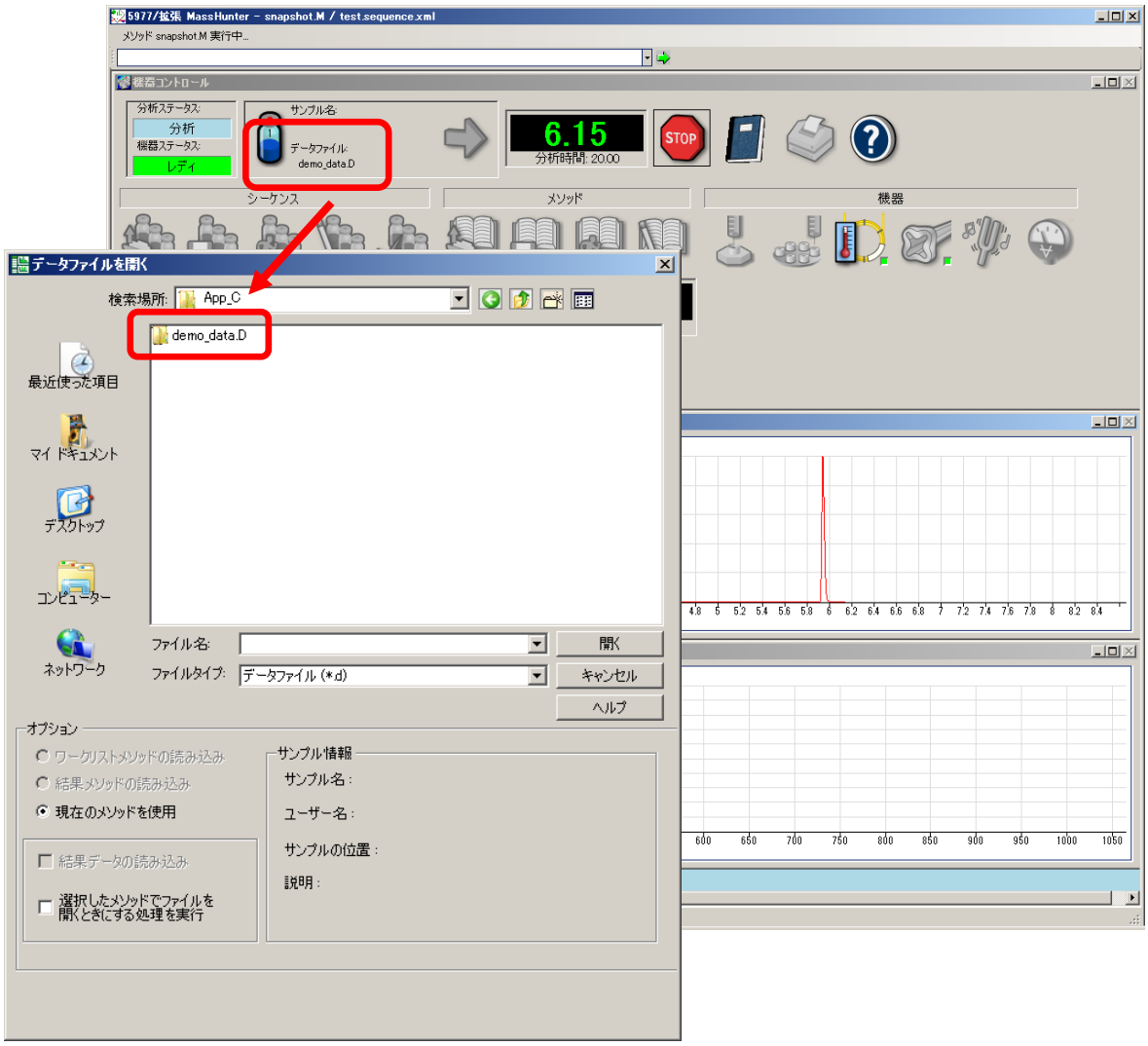
付録C
測定中のデータを開く

付録 C－1　測定中のデータを開く　C－2
付録 C－2　データファイルを更新する　C－3

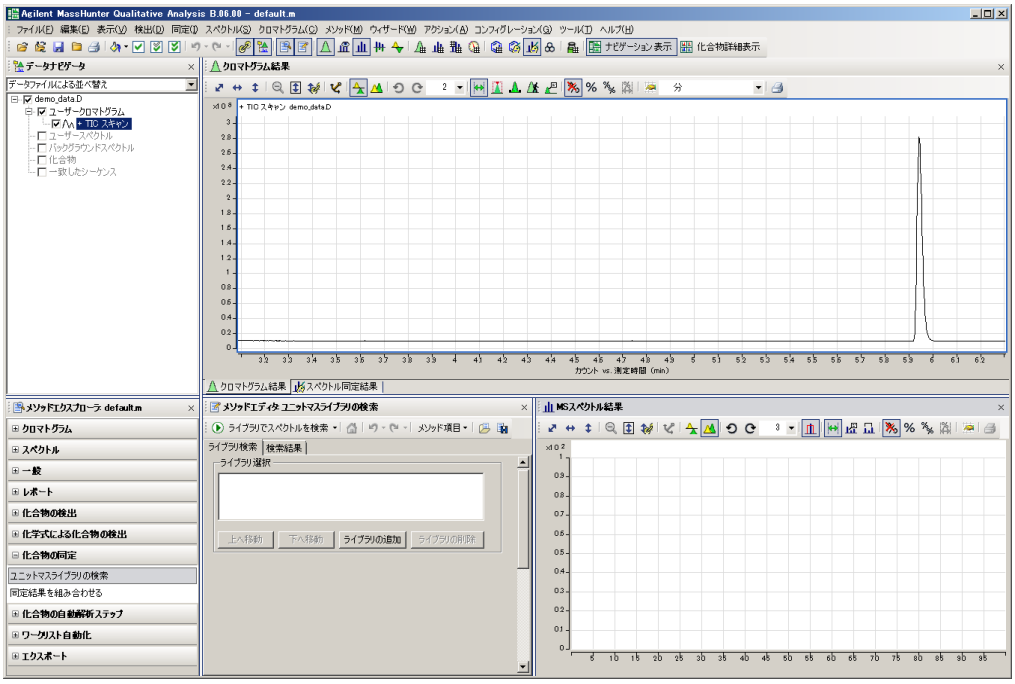
付録C－1　測定中のデータを開く

マスハンター定性解析ソフトウェアでは、今まさに測定中のデータを、測定が終了しているデータと同様に開くことが可能です。

（1）　マスハンター定性解析ソフトウェアを起動させ、測定中のデータを指定する。
（データの開き方は、「第 5 章 定性のデータ解析」を参照してください。）



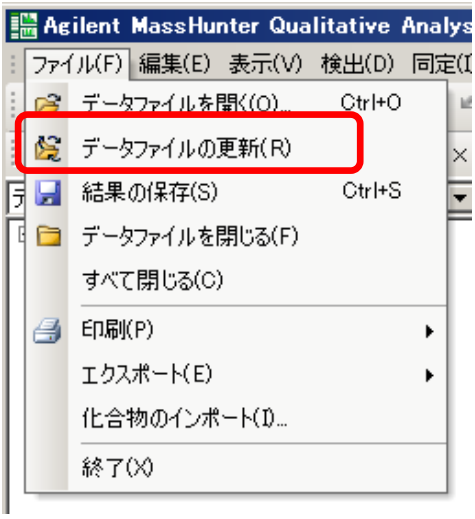
(2)　データファイルを開くまでに得られたデータが読み込まれて表示されます。
下図の例では、ピークが 1 つ見えています。



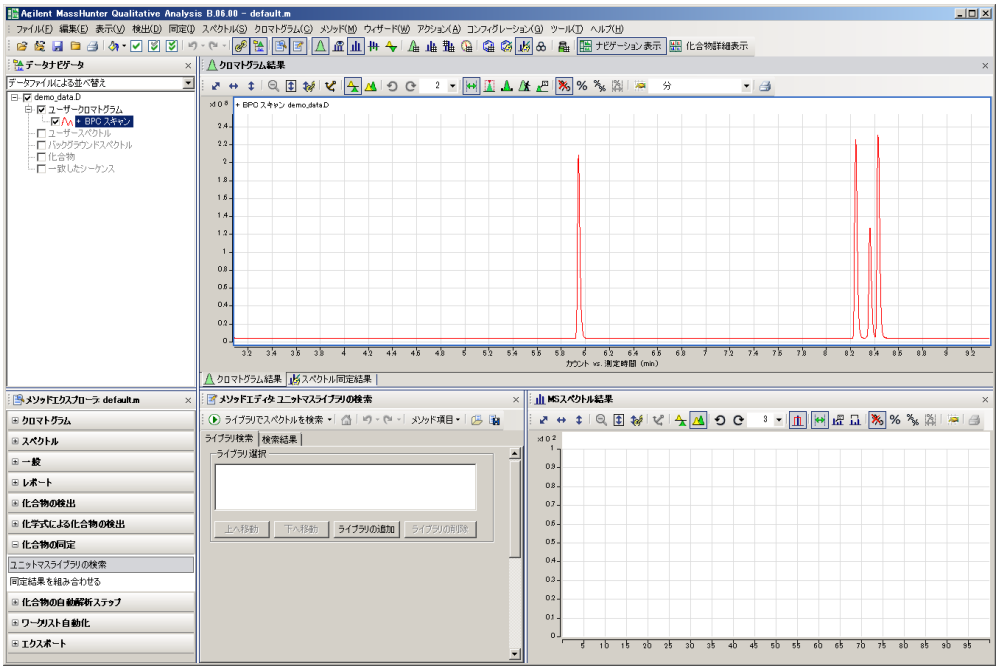
付録C－2　データファイルを更新する

測定中のデータは定性解析ソフトウェアでいつでも更新でき、最新の状態のデータを読み込むことが出来ます。

(1)　[ファイル]メニューの[データファイルの更新]をクリックします。



(2)　その時点までに測定されたデータが読み込まれてきます。
下図では、さらに３つのピークが読み込まれています。



注意

測定中のデータであっても解析を行い、結果を保存することが出来ます。ただし、[データファイルの更新]を行うと、改めて[ファイルを開くときにする処理]に従ってデータが開かれるため、解析結果を含まない状態のデータファイルに更新されます。そのため測定中データの解析結果は一時的な結果としてご利用ください。

付録D
リソースの管理

付録 D－1　リソースの管理とは　D－2
付録 D－2　スケジュールの設定　D－2
付録 D－3　ウェイクメソッド（及びスリープメソッド）の設定　D－4

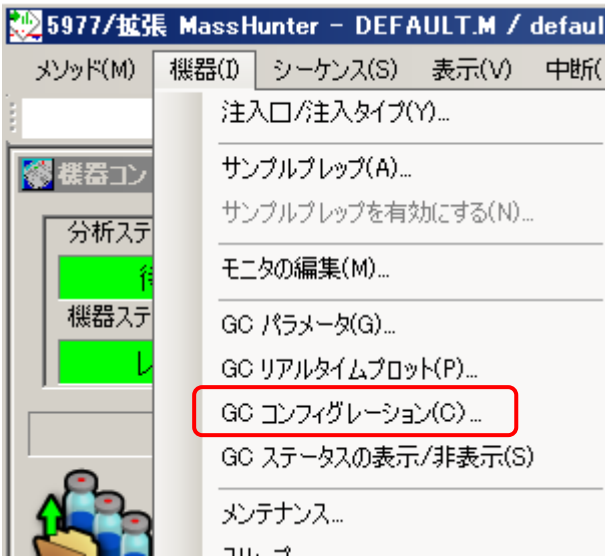
付録 D　リソースの管理

付録D－1　リソースの管理とは

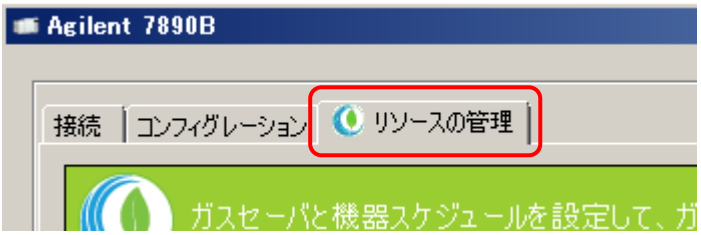
[リソースの管理]では、指定した時刻に 2 つの特別なメソッド（ウェイクメソッド及びスリープメソッド）のいずれかを自動的に読み込む用に GC をプログラムすることが出来ます。
通常、[リソースの管理]は、装置が動作していない時間帯のガスと電力の消費を削減し、次に使用する時間に合わせて GC を準備するために使用します。

付録D－2　スケジュールの設定

（1）　[機器]メニューの[GC コンフィグレーション…]をクリックします。

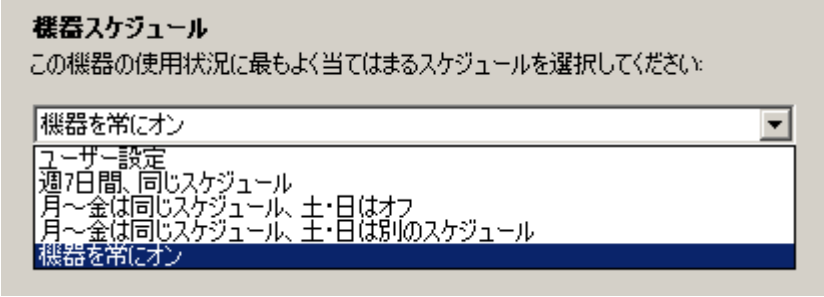


（2）　[Agilent 7890B]ウィンドウが開きますので、[リソースの管理]タブをクリックします。



(3) [機器スケジュール]にあるプルダウンから、使用したいスケジュールを選択します。選択できるスケジュールは以下の通りです。それぞれにウェイクメソッド（及びスリープメソッド）を読み込む時間を入力するフォームが表示されます。

(4)

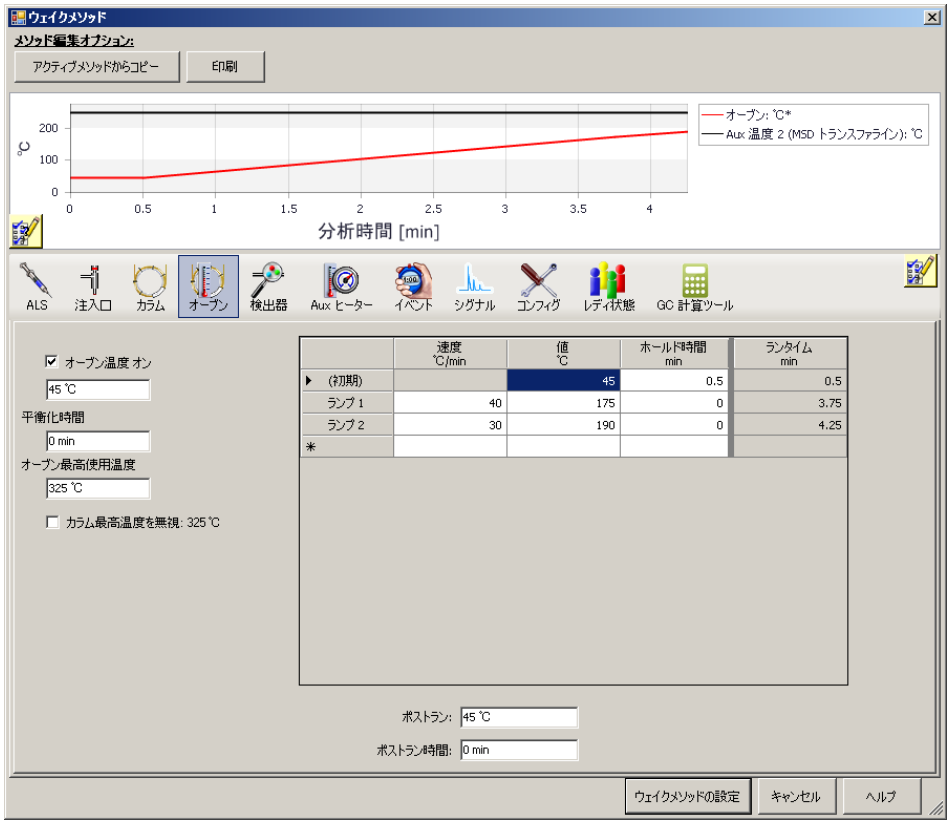


機器スケジュール	コメント
週 7 日間、同じスケジュール	毎日同じ時間にスリープメソッドとウェイクメソッドを読み込みます。
月～金は同じスケジュール、土･日はオフ	月曜日から金曜日まで、平日は同じ時間にスリープメソッドとウェイクメソッドを読み込みます。土曜日と日曜日はスケジュールを使用しません。週末に機器の電源を切る場合には、この選択をお勧めします。
月～金は同じスケジュール、土･日は別のスケジュール	月曜日から金曜日まで、平日は同じ時間にスリープメソッドとウェイクメソッドを読み込みます。土曜日と日曜日は別のスケジュールを使用します。この選択は、週末は作業スケジュールを変えて、GC を週7日間使用する場合に便利です。
ユーザー設定	毎日別の時間にスリープメソッドとウェイクメソッドを読み込みます。
機器を常にオン	GC を常に使用する場合に選択します。これを選択すると、機器スケジュールが無効になります。ウェイクメソッドとスリープメソッドは適用されません。

付録D－3　ウェイクメソッド（及びスリープメソッド）の設定

（1）　ウェイクメソッド（およびスリープメソッド）の編集画面

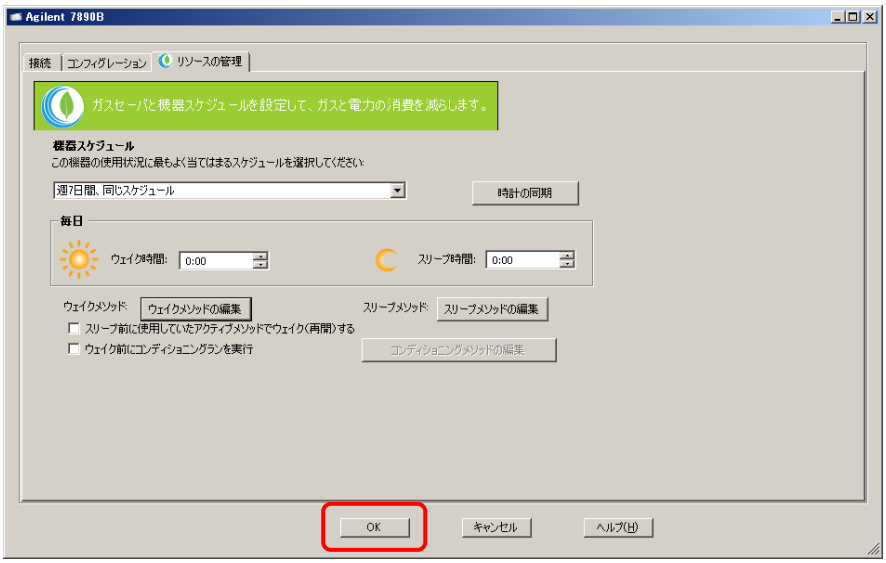
スケジュールで[機器を常にオン]以外を選んでいると、画面上に ウェイクメソッドの編集 ボタンと スリープメソッドの編集 ボタンが表示されます。そのボタンをクリックすると、[ウェイクメソッド]ウィンドウ（もしくは[スリープメソッド]ウィンドウ）が表示されるので、各パラメータを設定します。



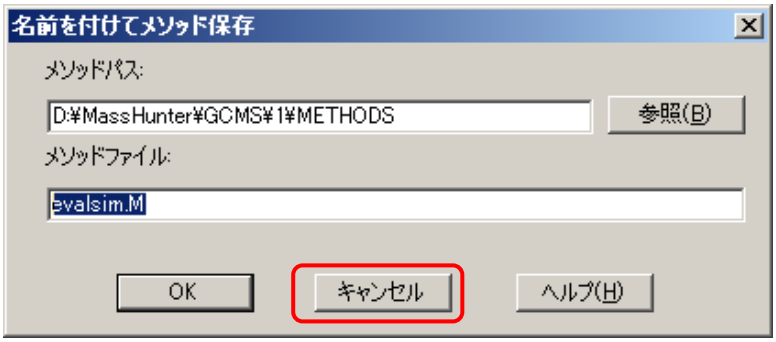
(2) ウェイクメソッド（及びスリープメソッド）の適用

① 各パラメータの設定が終わったら、ウィンドウ右下の ウェイクメソッドの設定 ボタンをクリックします。

② さらに、OK ボタンをクリックすることで、メソッドが GC に送られ設定が完了します。



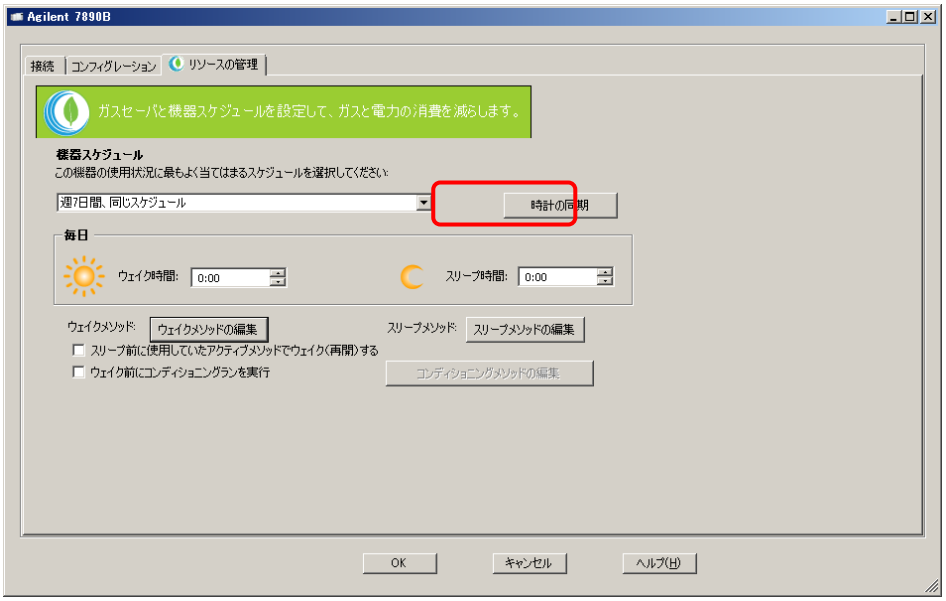
③ メソッドを保存するウィンドウが表示された場合には、キャンセルボタンをクリックしてください。



注意

ウェイクメソッド、スリープメソッドが読み込まれる時間は、GC 本体に設定されている時計の時間となります。もし、GC 本体の時計が本来の時刻とずれていると、期待通りの時間にメソッドが読み込まれませんので、注意してください。

時計の同期 ボタンをクリックすると、PC と GC 本体の時計が同期されます。この場合、PC の時計が優先されることに注意してください。



[スリープ前に使用していたアクティブメソッドでウェイク（再開）する]チェックボックス

：ウェイクメソッドを使用せず、スリープになる直前に設定されていたパラメータを、ウェイク時に読み込む場合にチェックします。

その場合、ウェイクメソッドの編集 ボタンはグレーアウトして選択出来なくなります。

[ウェイク前にコンディショニングランを実行]チェックボックス

：ウェイクメソッドの読み込み時間になると、ウェイクメソッドの前に、コンディショニングメソッドを読み込み、レディになった後に、自動でブランクランを実施します。終了後、ウェイクメソッドが読み込まれます。コンディショニングメソッドの設定方法は、コンディショニングメソッドの編集 ボタンを押して、後はウェイクメソッド（及びスリープメソッド）と同様です。

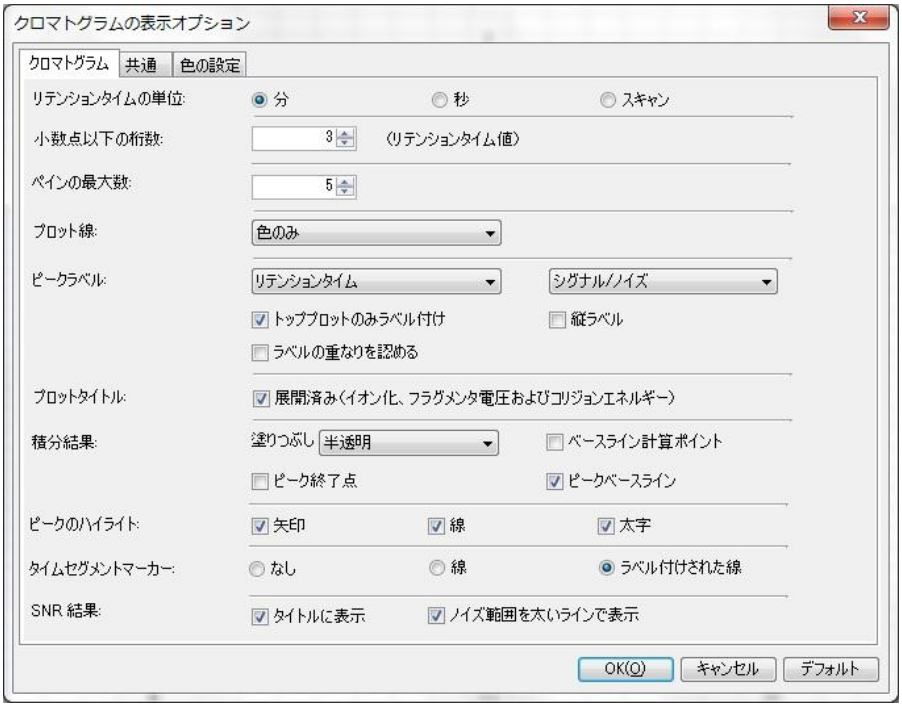
付録E
定性解析の
グラフィックス/その他

付録 E－1 グラフィクスの設定	E－2
付録 E－2 結果データの読み込み	E－8
付録 E－3 ウィンドウレイアウトについて	E－9
付録 E－4 注釈	E－11
付録 E－5 注釈　質量差の表示	E－18

付録E－1 グラフィクスの設定

① クロマトグラムの表示オプション
クロマトグラムの描画の環境設定を行います。

＜クロマトグラム＞　タブ

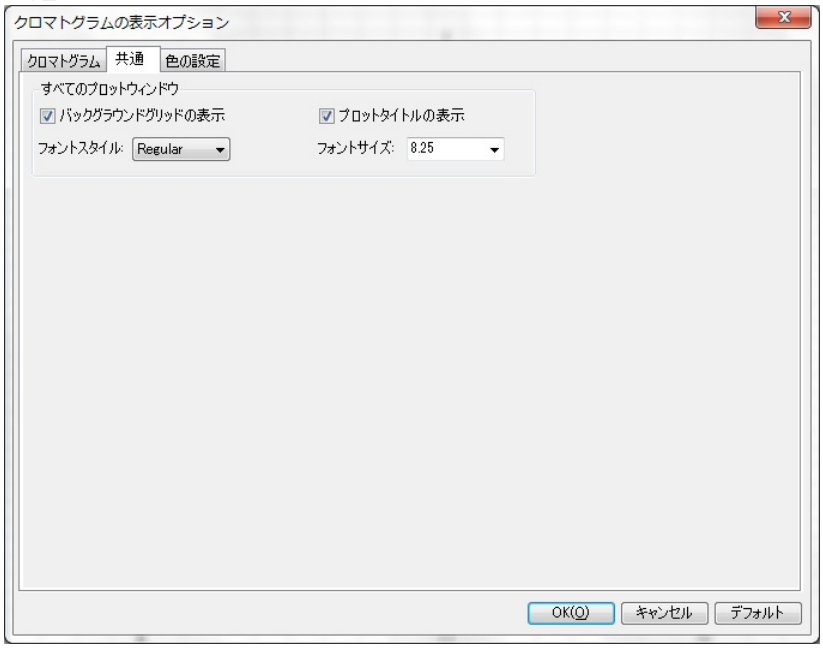


リテンションタイムの単位	：	「分」「秒」「スキャン」の選択 （初期設定「分」）
小数点以下の桁数	：	リテンションタイムの小数点表示の桁数 （初期設定は３、最大２０）
ペインの最大数	：	初期画面でのペイン数 （初期設定２、最大１０）
プロット線	：	「色のみ」「パターンと幅のみ」「色パターンと幅」の選択（初期設定「色のみ」）
ピークラベル	：	2 種類を同時表示可能で、19 種類の選択があります。（初期設定「リテンションタイム」と「化合物ラベル」）
トッププロットのみ ラベル付け	：	クロマトの重ね描きにてトッププロットのピークにのみラベルを付けます。
縦ラベル	：	ラベルを縦に描きます。
ラベルの重なりを認める	：	ピークが密集してラベルが重なる場合もラベルを描きます。
プロットタイトル	：	LCMS や QQQ にてイオン化のモードを表示

積分結果		積分結果の表示
塗りつぶし	:	「なし」、「半透明」、「べた塗」から選択
ベースライン計算ポイント	:	ベースライン計算ポイントの表示
ピーク終了点	:	積分開始点と終了点にチックマークを入れる。
ピークベースライン	:	ピークのベースラインを表示
ピークのハイライト	:	ピーク選択での表示の仕方
タイムセグメントマーカー	:	SIM 等の測定グループの境界表示

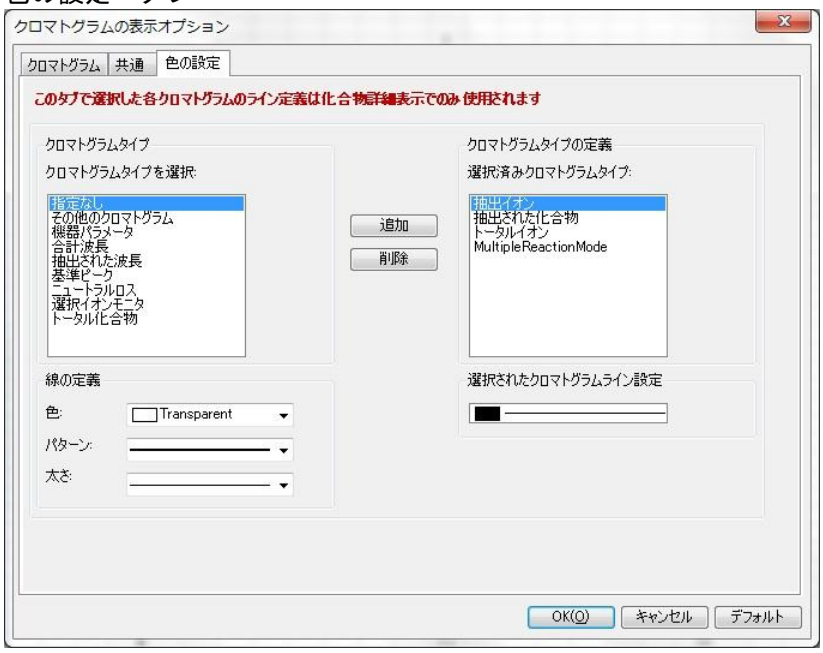
SNR 結果		ノイズの結果の表示
タイトルに表示	:	タイトルに表示。
ノイズ範囲を太いラインで表示	:	SN 計算に使用したノイズの範囲を太線で表示

共通　タブ



バックグランドグリッドの表示	:	「クロマトグラムの結果」、「マススペクトルの結果」ウィンドウのグリッド線の表示／非表示
プロットタイトルの表示	:	タイトルの表示／非表示
フォントの設定	:	スタイル/サイズ

色の設定　タブ



パターンとは、実線、破線、点線、等の種類です。

「クロマトグラムの結果」、「マススペクトルの結果」ウィンドウ等のクロマトのプロット線は、「クロマトタブ」の「プロット線」で定義されます。

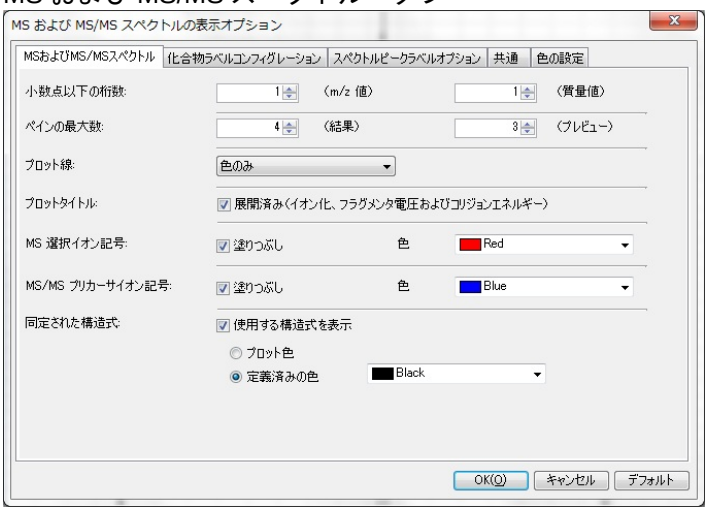
「クロマトグラム結果」ウィンドウ内の アイコンをクリックしても設定ウィンドウが表示され、設定可能です。

② MS および MS/MS スペクトルの表示オプション

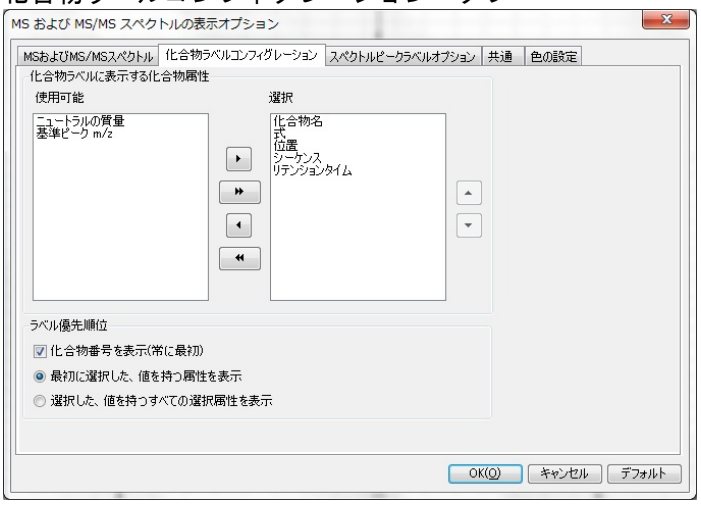
スペクトルの描画の環境設定を行います。スペクトルのラベル、小数点以下の桁数、ラベルの向きからフォントのサイズまで設定可能です。

「クロマトグラムの表示オプション」と同様です。

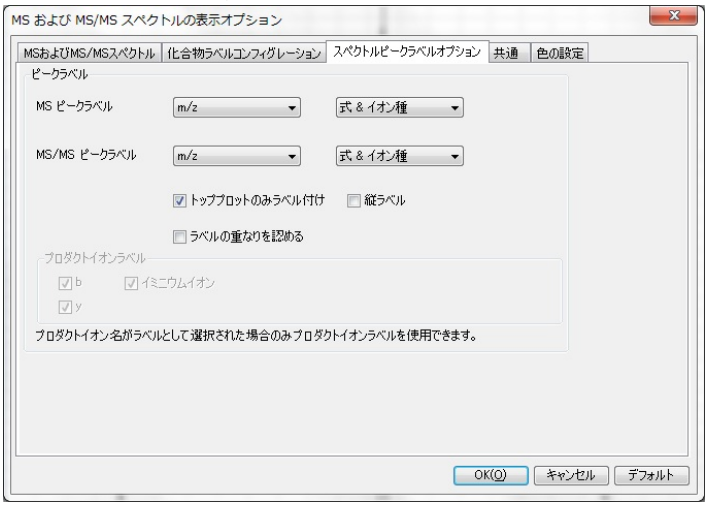
MS および MS/MS スペクトル　タブ



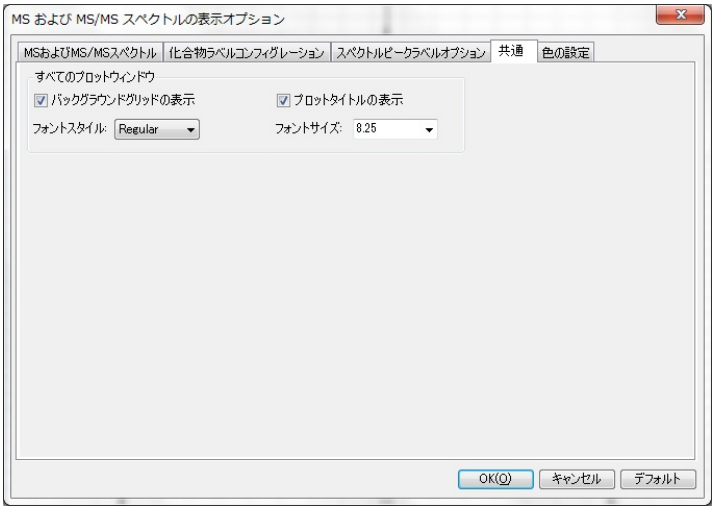
化合物ラベルコンフィグレーション　タブ



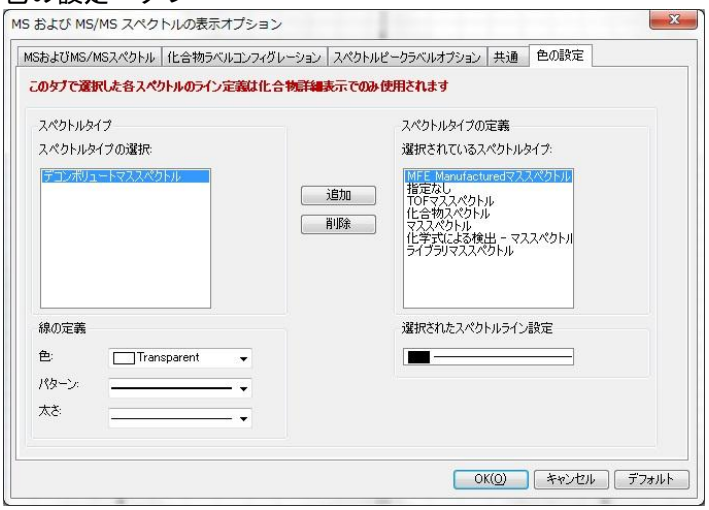
スペクトルピークラベルオプション　タブ



共通　タブ



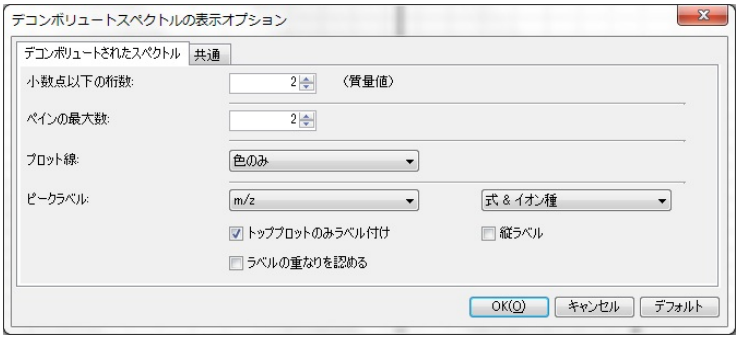
色の設定　タブ



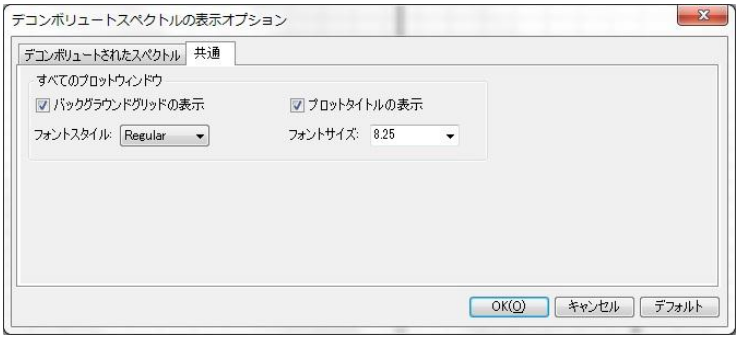
「クロマトグラム結果」ウィンドウの アイコンをクリックしても設定ウィンドウが表示され、設定可能です。

③　デコンボリューションスペクトルの表示オプション
デコンボリュートされた化合物スペクトルの表示設定を行います。

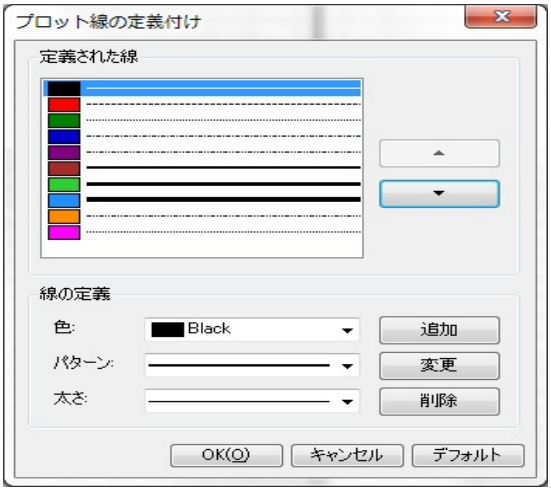
デコンボリュートスペクトル　タブ



共通　タブ



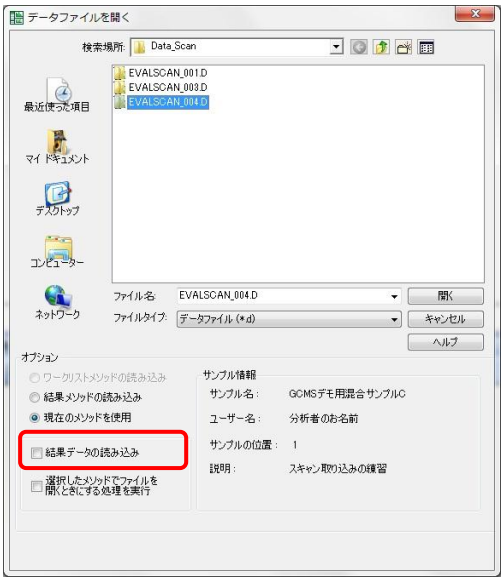
④　プロット線の定義付け
主に色と線の太さと線のパターンを関連付ける所です。
ここで定義された線がそれぞれのクロマトの色の選択で利用できます。



付録E－2 結果データの読み込み

データには１つのみ解析結果を保存可能です。解析結果が保存されている場合、抽出したイオンクロマトグラム、ユーザースペクトル、同定結果など、データファイルを読み込んだ時に復元できます。
保存にはアイコンをクリックするか、[ファイル(F)]－[結果の保存(S)]をクリックする。
もしくはデータを閉じる際に聞いてくるメッセージに はい(Y) ボタンをクリックして保存します。

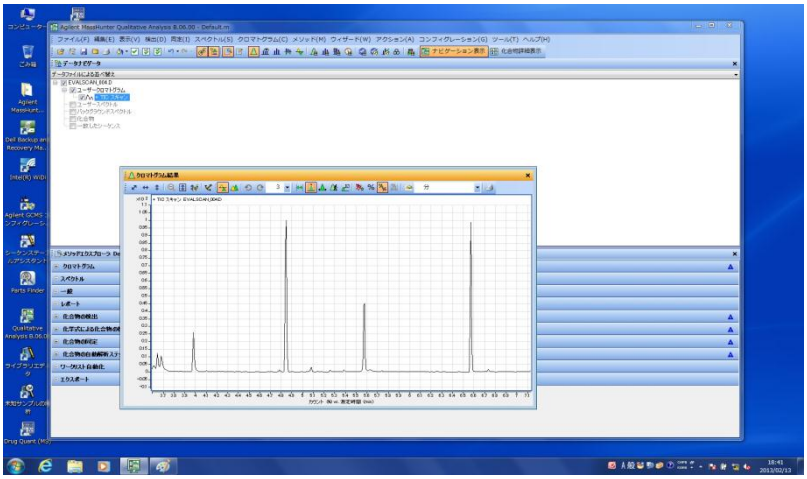
復元するには、データファイルを開く時、「結果データの読み込み」にチェックして開いてください。



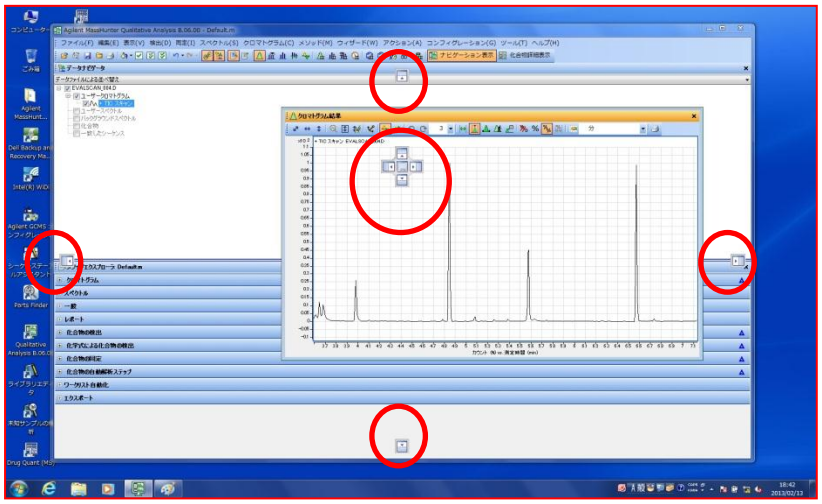
付録E－3 ウィンドウレイアウトについて

① カスタマイズの方法

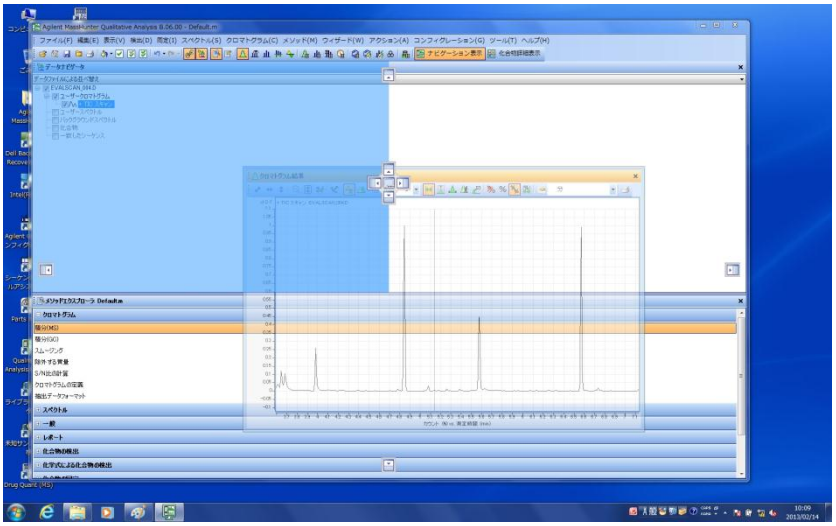
移動したいウィンドウのタイトルバーをマウスの左ダブルクリックすると、そのウィンドウが解析ウィンドウから浮き出します。



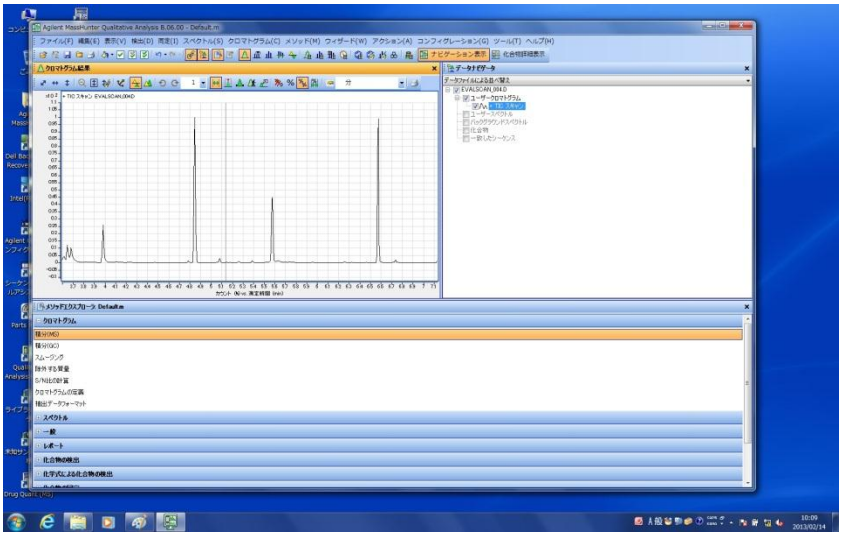
浮き出したウィンドウのタイトルバーをマウスの左ドラッグすると次のようなマークが出てきてウィンドウは移動できます。



そのままマウスカーソルをマークまでドラッグすると設定する場所が青く表示されます。

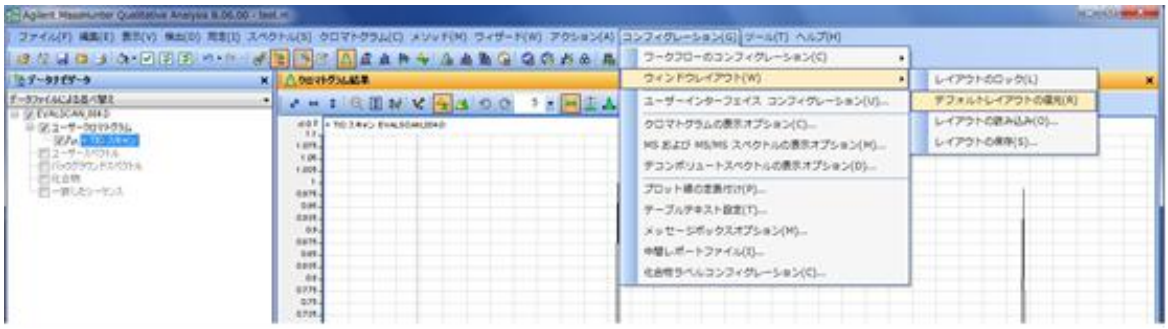


好みの設定位置のマークまでドラッグしてマウスのボタンを離せば、青く表示されていた位置にウィンドウが嵌め込まれます。



② レイアウトの保存と読み込み

[コンフィグレーション(G)]－[ウィンドウレイアウト(W)]－[レイアウトの保存(S)…]　にてファイルとして保存が可能です。
また同様に過去に設定、保存したレイアウトを[レイアウトの読み込み(O)…]にて読み込む事でそのレイアウトへ復元できます。



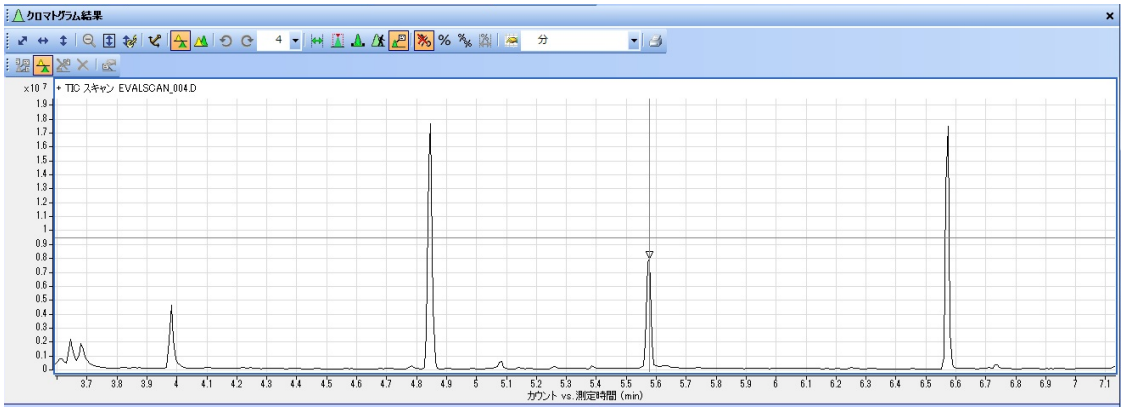
③ デフォルトレイアウトへの復元

[コンフィグ(G)]－[ウィンドウレイアウト(W)]－[デフォルトレイアウトの復元(R)]を実施すると初期画面レイアウトへ復元する事ができます。

付録E－4 注釈

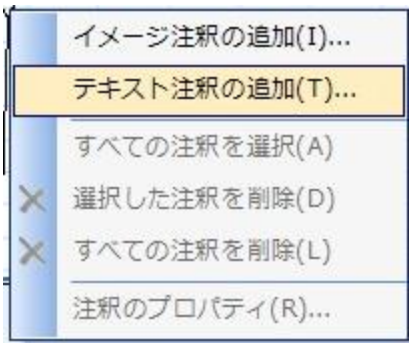
「クロマトグラム結果」ウィンドウや「スペクトル結果」ウィンドウにて画面に注釈を書き込む事が可能です。

① ボタンをクリックします。カーソルの形状が変化し、クロマトグラム上に が表示され、カーソルの動きに追従してクロマトグラム上を動きます。



② クロマトグラムの地点（ピークトップ等）に関連付けたい場合、その地点で右クリックするとポップアップメニューが現れます。

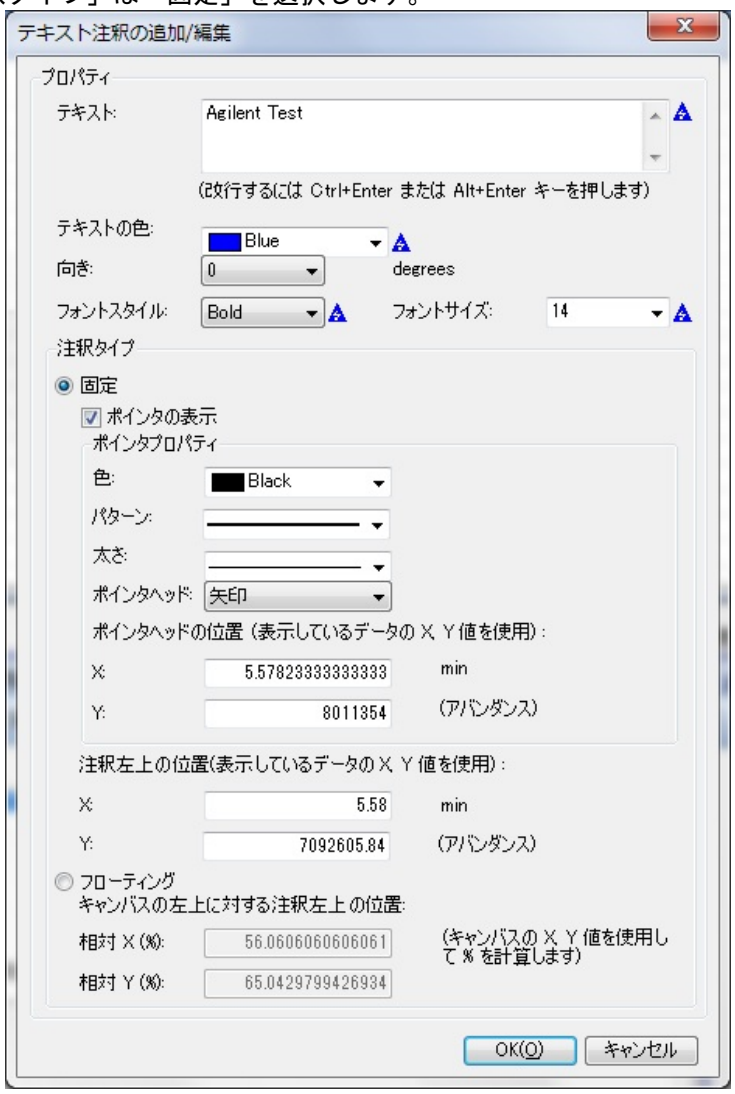
③　[テキスト注釈の追加(T)…]か[イメージ注釈の追加(I)…]の選択となります。



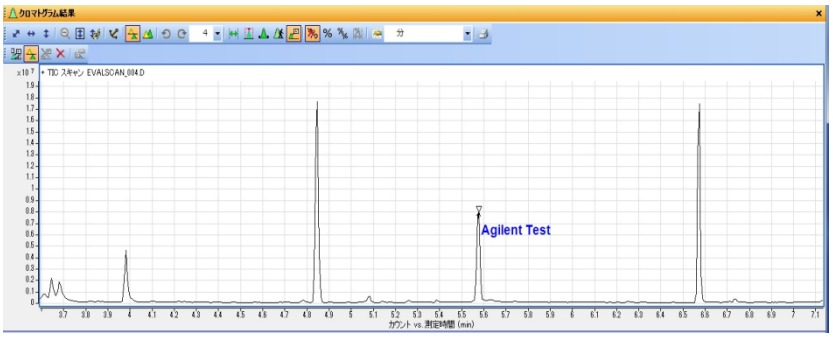
1)　テキスト注釈で固定タイプ（関連付け有）の場合

a)　[テキスト注釈の追加（T）…]をクリックすると「テキスト注釈の追加/編集」ウィンドウが表示されます

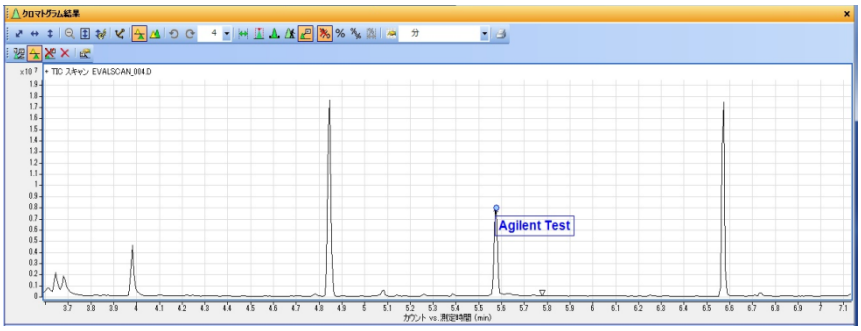
「注釈タイプ」は「固定」を選択します。



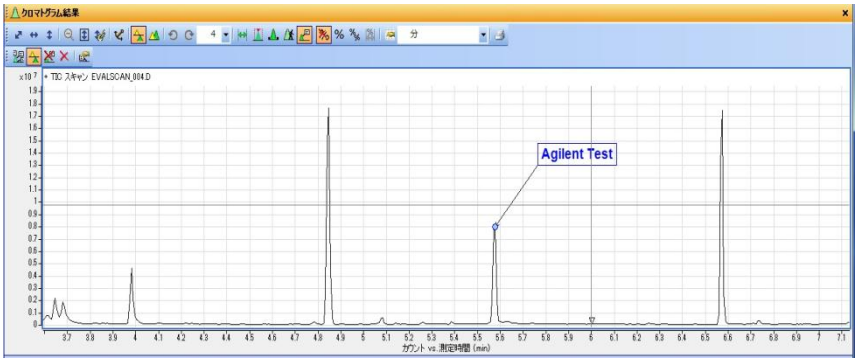
b)　ウィンドウ上に注釈テキスト（Agilent Test）が表示されます



c)　入力されたテキストを左クリックするとテキストが枠で囲まれます



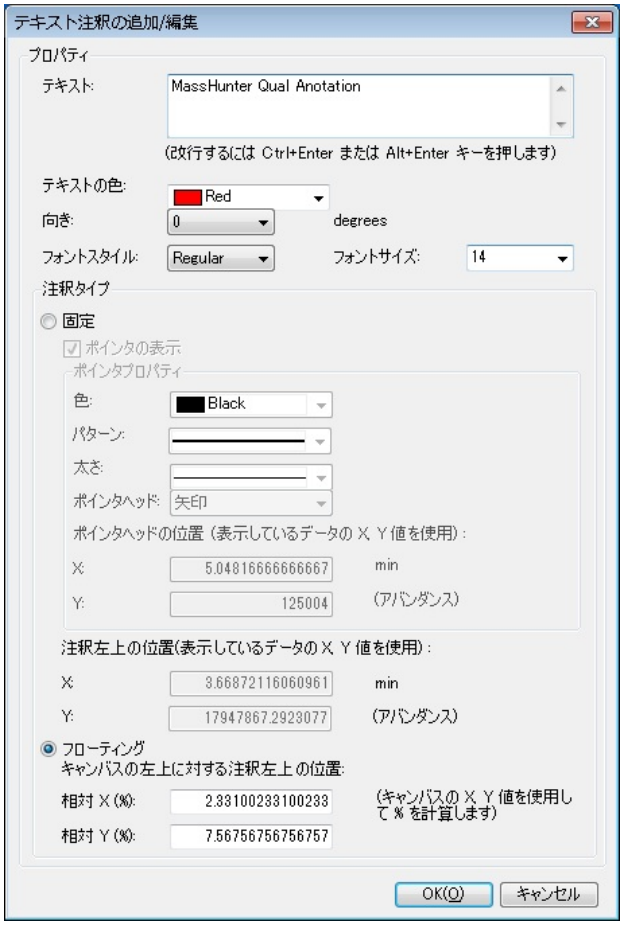
d)　希望の位置まで左ドラッグすると枠で囲まれたテキストが注釈を開始した地点から線を引いて移動しますので、希望の位置まで移動して離してください。



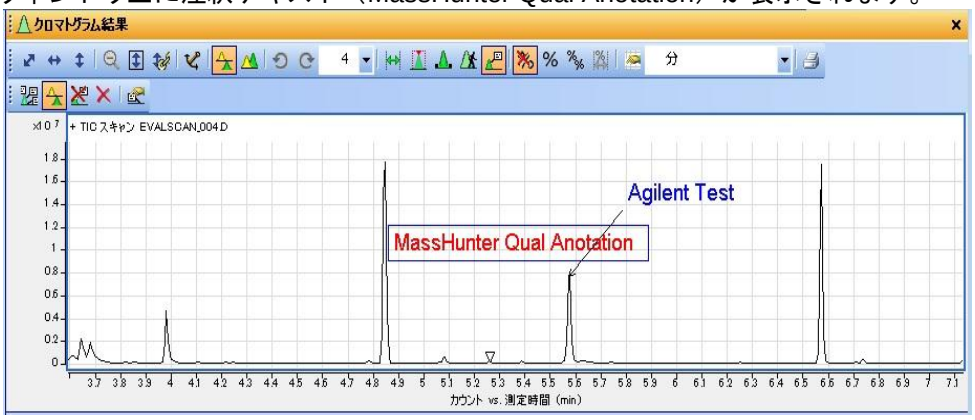
2)　テキスト注釈でフローティングタイプの場合

a)　[テキスト注釈の追加（T）…]をクリックすると「テキスト注釈の追加/編集」ウィンドウが表示されます

「注釈タイプ」に「フローティング」を選択します。

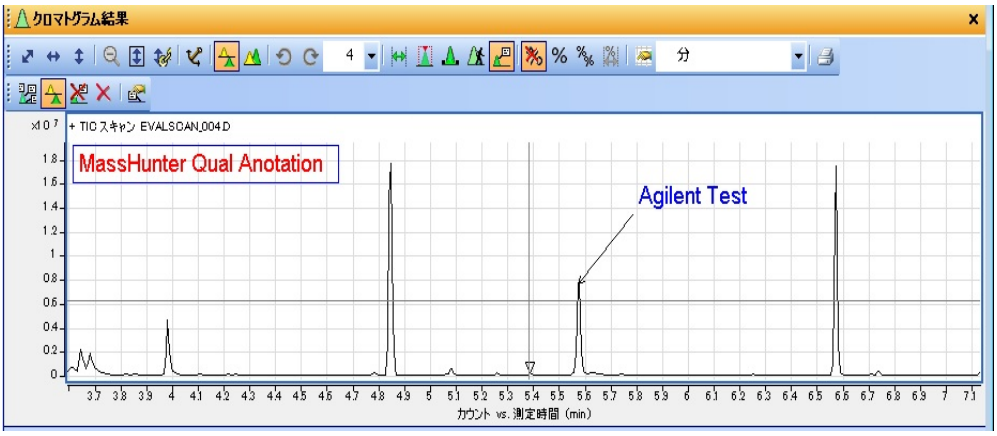


b)　ウィンドウ上に注釈テキスト（MassHunter Qual Anotation）が表示されます。



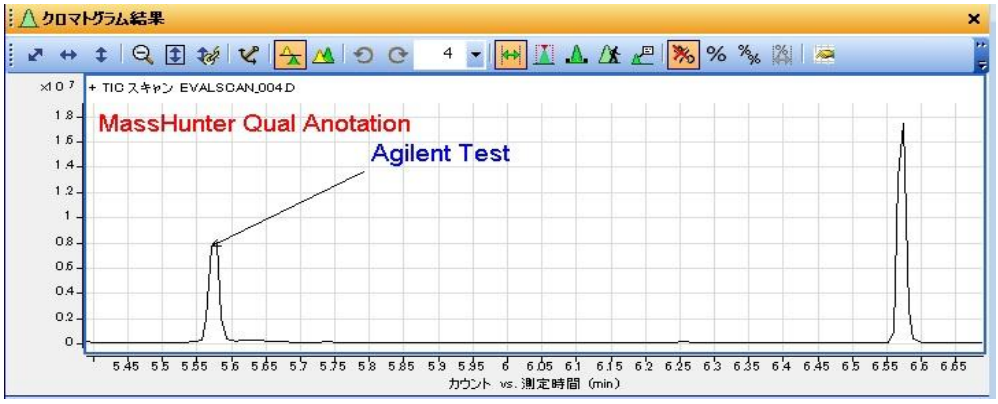
c)　入力されたテキストを左クリックするとテキストが枠で囲まれます。

d)　希望の位置まで左ドラッグすると枠で囲まれたテキストが移動しますので、希望の位置まで移動して離してください。

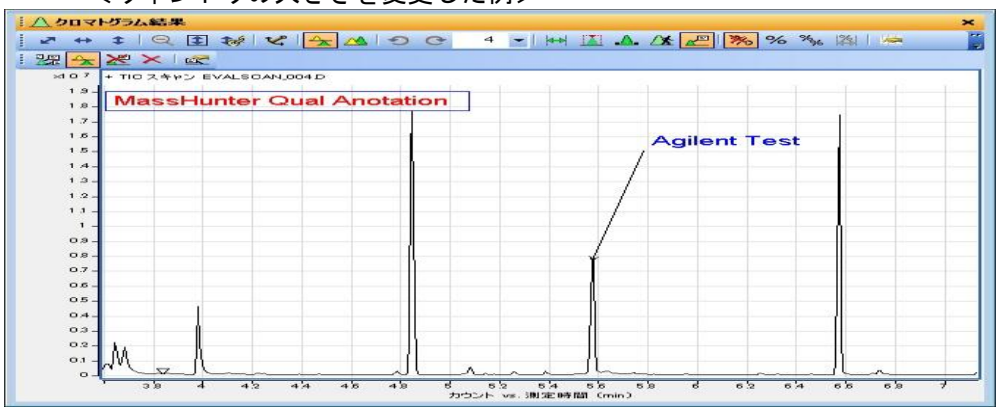


e)　入力された注釈は、ウィンドウを拡大／縮小などを行っても動きません。
ズームした例とウィンドウの形を変更した例を次に表示します。

＜ズーミングした例＞



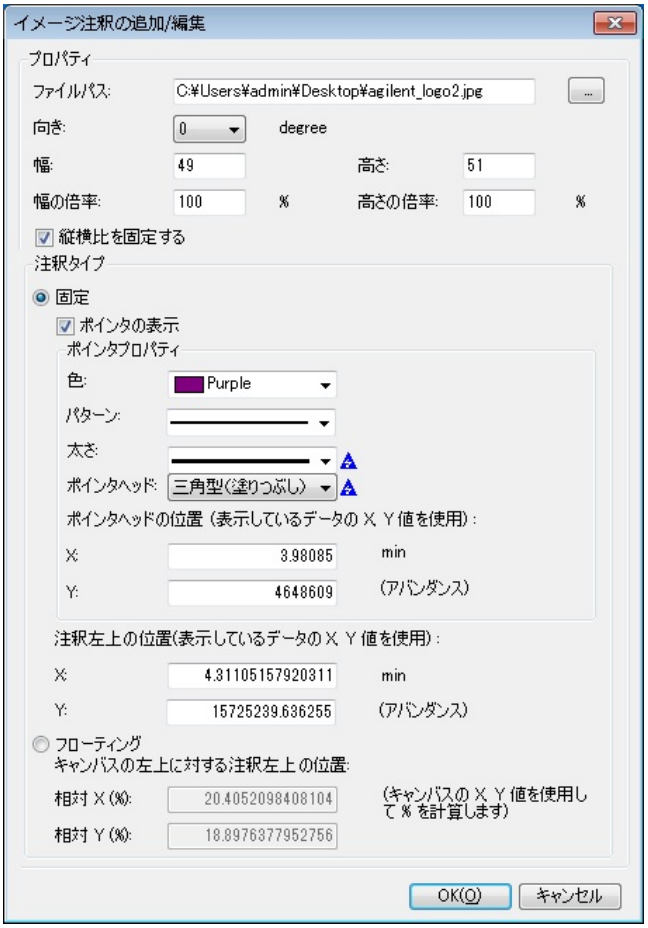
＜ウィンドウの大きさを変更した例＞



3)　イメージ注釈で固定タイプ（関連付け有）の場合

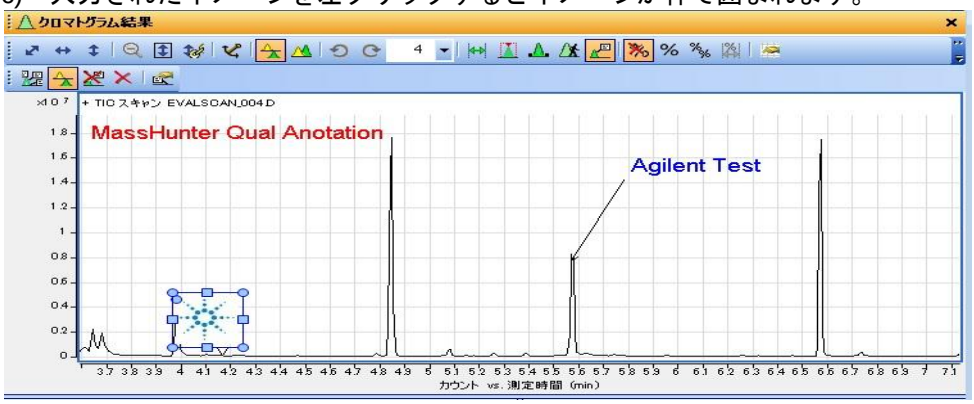
a)　[イメージ注釈の追加（T）...]をクリックすると「イメージ注釈の追加/編集」ウィンドウが表示されます。

「ファイル/パス」の欄に張り付けたいイメージファイル(JPEG 等)を入力し、向きや幅、高さ等を指定します。「注釈タイプ」は「固定」を選択します。

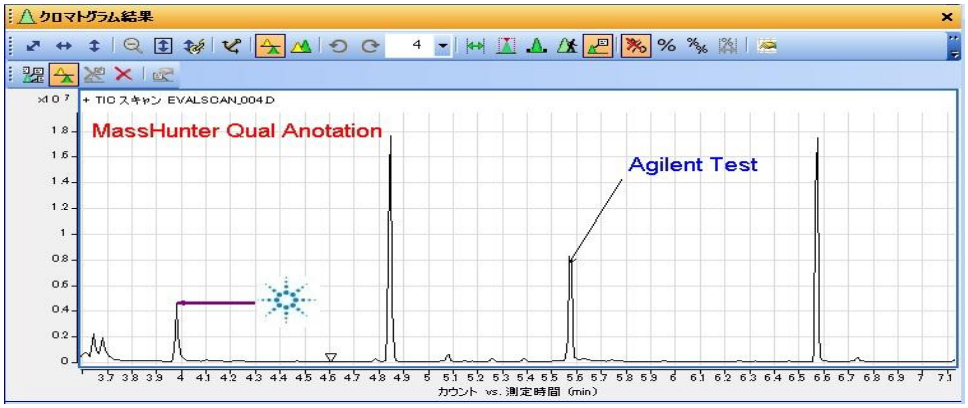


b)　ウィンドウ上に注釈イメージが表示されます。

c)　入力されたイメージを左クリックするとイメージが枠で囲まれます。



d)　希望の位置まで左ドラッグすると枠で囲まれたテキストが注釈を開始した地点から線を引いて移動しますので、希望の位置まで移動して離してください。



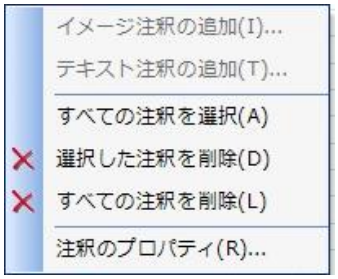
4)　イメージ注釈でフローティングタイプの場合

基本的にテキスト注釈のフローティングタイプと操作は変わりません。
「2)、テキスト注釈でフローティングタイプの場合」を参照願います。

④　注釈の削除／/編集

1)　ボタンをクリックします。カーソルの形状が変化し、クロマトグラム上に が表示され、カーソルの動きに追従してクロマトグラム上を動きます。

2)　既存の注釈の上にて右クリックするとポプアップメニューが現れます。



3)　削除する場合は、「×選択した注釈を削除（D）」もしくは「×すべての注釈を削除（L）」を選択します。

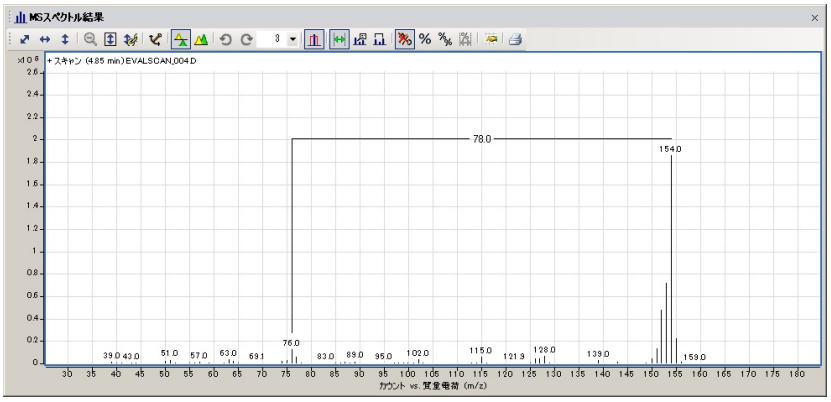
4)　編集する場合は、「注釈のプロパティ(R)…」をクリックすると「注釈の追加／編集」ウィンドウが表示され編集が可能です。

付録E－5 注釈　質量差の表示

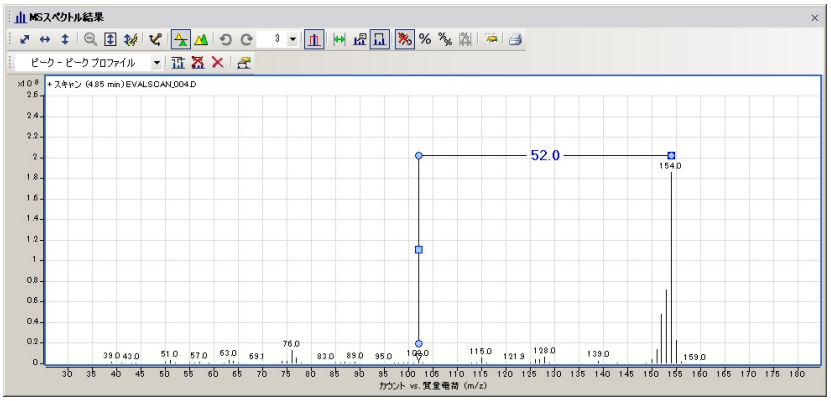
「スペクトルの結果」ウィンドウにも(４)注釈にて記述したものと同じ機能があります（使用するアイコンは を使用します）が、クロマトグラムには無い「質量差表示」という注釈の機能があります。
この機能はフラグメントイオン間の質量差を注釈として図示するもので、そのフラグメントイオンの由来を説明する時になど便利な機能です。

① 「スペクトル結果」ウィンドウの アイコンをクリックします。

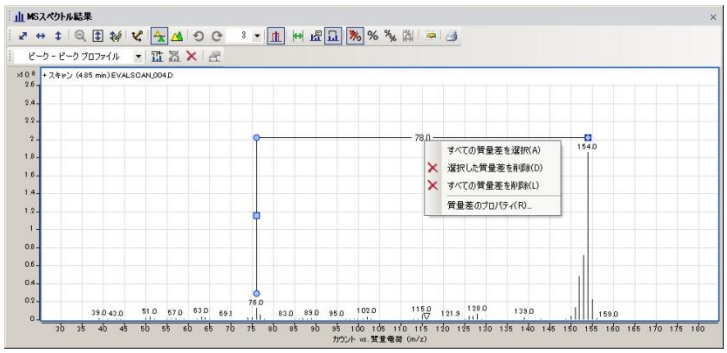
② 質量差を表示させたいイオンをマウスにてドラッグします。



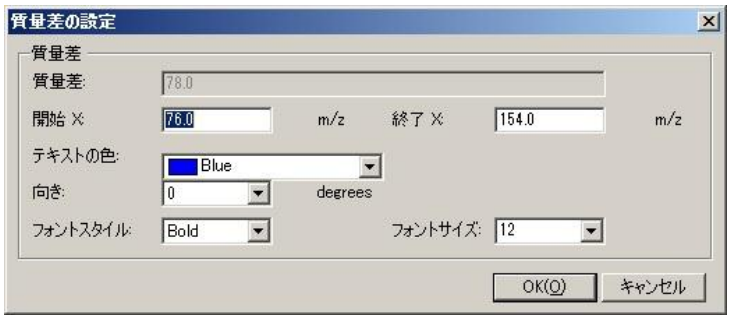
③ 編集する場合は、表示をカーソルにてクリックすると次のように表示に○が付きます。この○にカーソルを合わせてドラッグすると、線は動くと同時に表示されている質量差は、その時のイオンの位置の質量差が表示されます。



④　色や線の太さ、フォントの種類や大きさ、向きを変更する場合には、質量差の上で右クリックしてポップアップメニューを出します。



⑤　[質量差のプロパティ]をクリックします。



⑥　「質量差の設定」ウィンドウが表示されますので、設定を変更して OK ボタンをクリックすると設定した内容が反映されます。

⑦　質量差の注釈を削除する場合、右クリックして出したポップアップメニューの[選択した質量差を削除]または[すべての質量差を削除]をクリックします。

Memo

付録F
定量解析の
グラフィックス/その他

付録 F-1　プロパティの表示　F－2
付録 F-2　ピークラベルの変更　F－3
付録 F-3　その他のプロパティ一覧　F－4

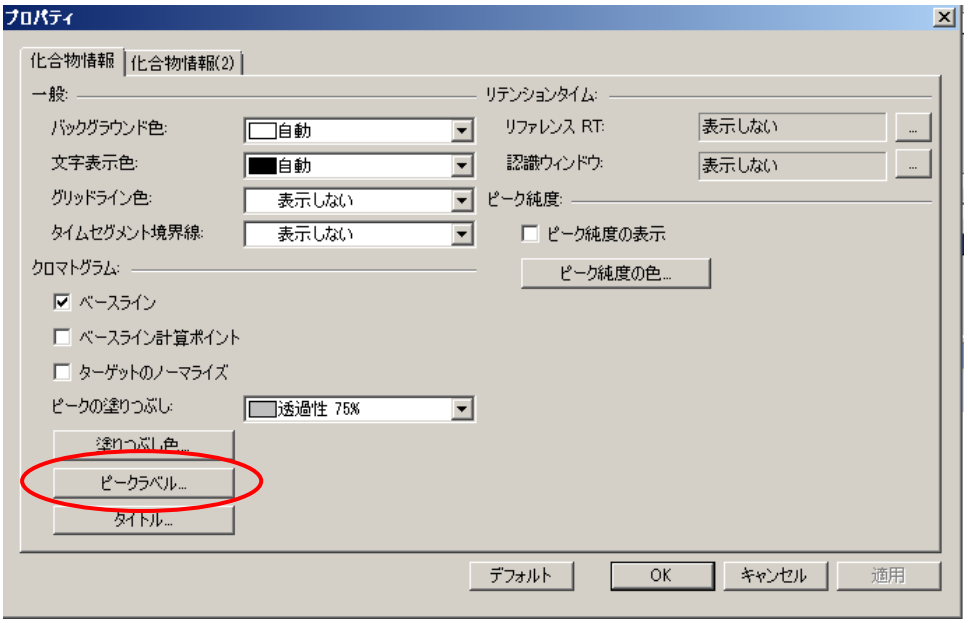
グラフィック画面（グラフやクロマトを表示している画面）は、画面表示（線の色、文字、グリッド線など）の設定を変更できます。
操作は、画面上で右クリックして出てくるメニューから選択します。
設定できる内容はウィンドウ毎に違いますが、ここでは定量分析の化合物情報ウィンドウでピークラベルを変更する手順を例に操作を説明します。

付録F-1　プロパティの表示

（１）［化合物情報］ウィンドウ上で右クリックしてメニューを表示します。

（２）プロパティをクリックします。

（３）［プロパティ］ダイアログボックスが表示されます。



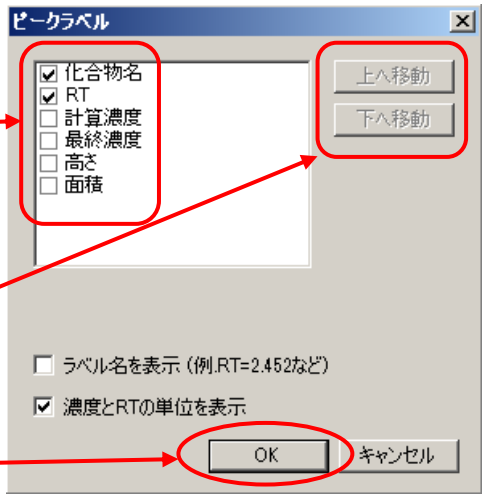
付録F-2　ピークラベルの変更

（1） ピークラベル... をクリックします。

（2）［ピークラベル］ダイアログボックスが表示されます。

（3）表示したいラベルをチェックします。

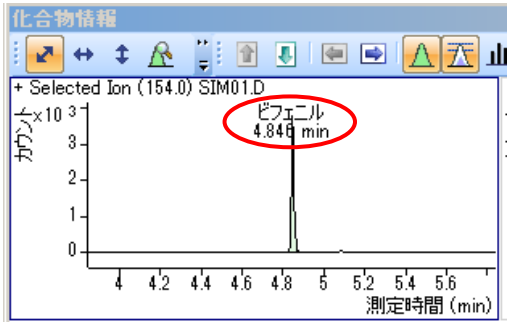
（4）必要に応じて表示順を変更します。



（5） OK で［ピークラベル］ダイアログボックスを閉じ、［プロパティ］ダイアログボックスに戻ります。

（6） OK で［プロパティ］ダイアログボックスを閉じます。

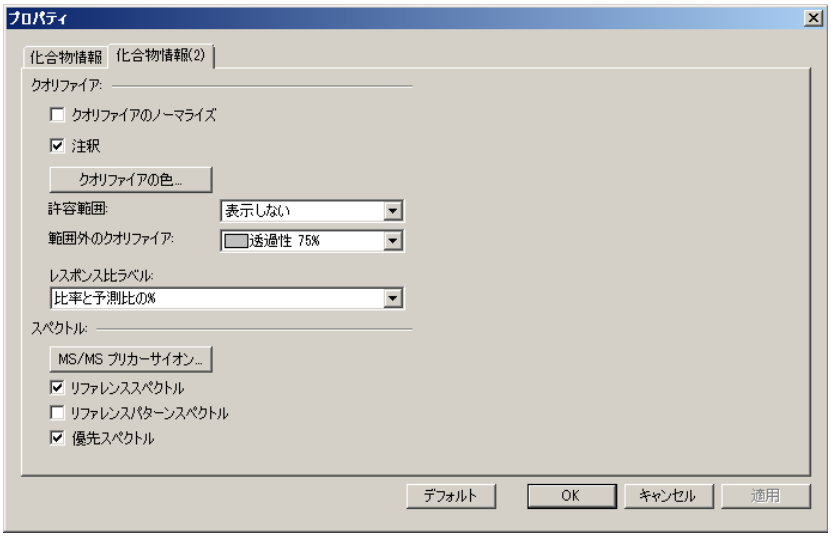
（7）［化合物情報］ウィンドウの軸ラベルが、RT と化合物名に変更されました。



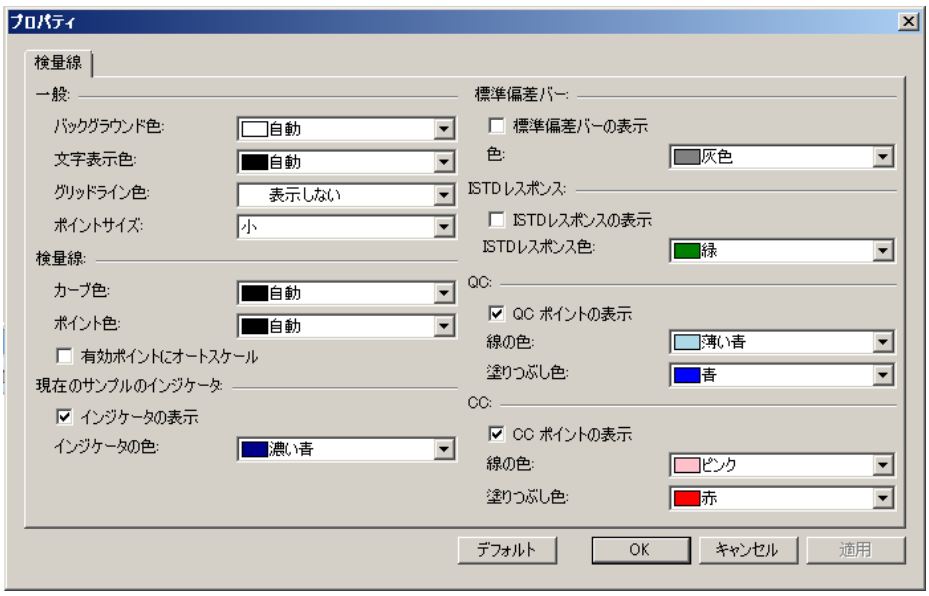
付録F-3　その他のプロパティ一覧

各グラフィックスウィンドウで表示される［プロパティ］ダイアログボックスを示します。

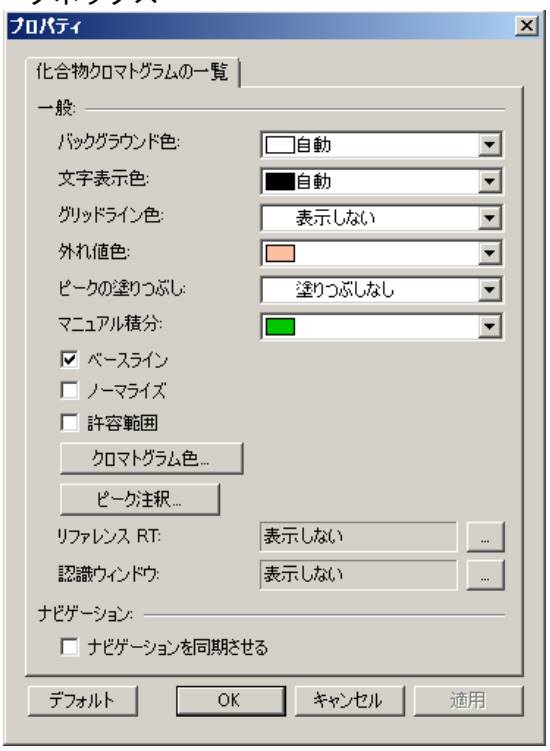
（１）［化合物情報］ウィンドウで表示される［プロパティ］ダイアログボックス
［化合物情報(2)］で表示される画面。



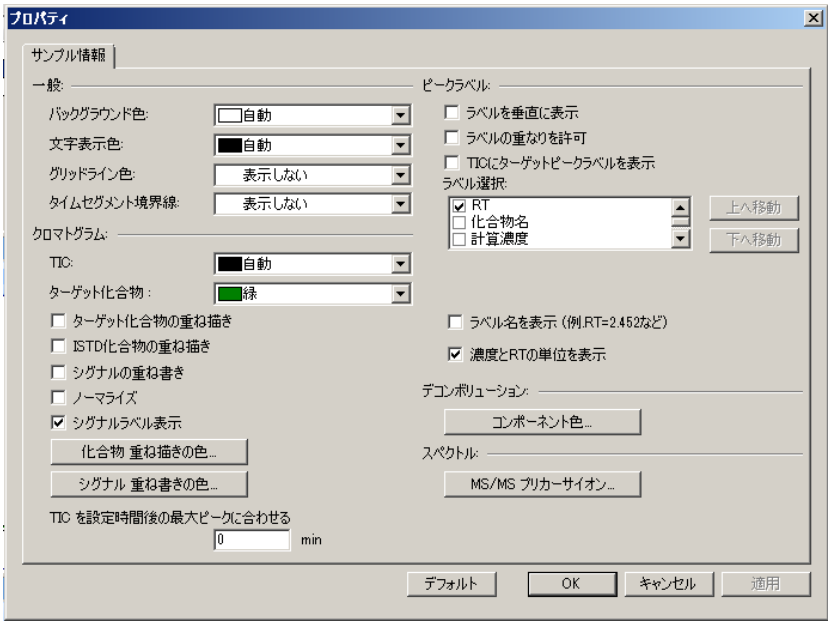
（２）［検量線］ウィンドウで表示される［プロパティ］ダイアログボックス



（３）［化合物クロマトグラムの一覧］ウィンドウで表示される［プロパティ］ダイアログボックス



（４）［サンプル情報］ウィンドウで表示される［プロパティ］ダイアログボックス



Memo

付録G
Q＆A 集

質問の一覧

Q1.　チューニングを行う頻度は？

Q2.　「MSD チューニング」と「クイックチューニング」の使い分け方は？

Q3.　「標準スペクトルチューニング」とは？

Q4.　溶媒ピークの前にも定量しなければならないピークがある。どうすればよいか？

Q5.　感度が悪くなってしまった。どうすれば感度が回復するか？

Q6.　スペクトルを取り出す方法はいろいろある。どのような方法で、スペクトルを取り出すのが一番いいのか？

Q7.　ピークの開始と頂点と最後で取り出したスペクトルの強度比が違っていた。2 つの成分が混ざっているのか？

Q8.　ライブラリ検索の結果、ヒット率が表示されるが、この値がどのくらいだったら、その化合物であると考えてよいか？

Q9.　ライブラリ検索の結果で、同じ化合物が複数表示されるのはどうしてか？

Q10.　SIM 分析でカラムを交換したらピークが現れなくなった。どうしたらいいか？

Q11.　定量を行う際に、TIC ではなくイオンクロマトグラムを使用するのはどうしてか？

Q12.　積分結果を、マイクロソフトのエクセル（表計算ソフト）で処理したい。どのようにすればいいのか？

Q1.　チューニングを行う頻度は、どれくらいか？

A1.　チューニングの頻度は、測定サンプルの特性、濃度、分析回数など、様々な要因によって異なるので、一概に目安を言うことはできません。
しかし、充分安定化させたシステムでは 1 日で MSD の状態が大きく変化することは少ないと思われます。よって通常のチューニングと、クイックチューニングを組み合わせて行うのも一つの手法です。
例えば、連続運転している機器で 2 日毎にクイックチューニングを実施して MSD の状態をチェックし、1 週間毎に通常のチューニングを実行することで、MSD の最適化を図るというような手法です。
ただし、次のようなケースには通常のチューニング実施する必要があります。

1. カラム交換、MS 部のメンテナンス、システム停止を行った場合
2. イオン源温度、MS トランスファーライン温度、カラム流量を変更したメソッドを実行する場合
3. 感度変動試験において、基準を満たさない場合

3.のような基準を特に設けていない場合は、定量分析を開始する前に通常のチューニングを実行すると良いと思われます。また、その際には GC オーブン温度、カラム流量、イオン源温度、MS トランスファーライン温度の条件を常に一定にしておく必要があります。

Q2.　「MSD チューニング」と「クイックチューニング」の使い分け方は？

A2.　通常は、MSD チューニングを使用します。クイックチューニングは、MSD チューニングからイオン源内レンズ類（リペラー/イオンフォーカスレンズ/エントランスレンズ）の電圧調整を取り除いたもので、マス軸、ピーク幅、および EM 電圧のみが調整されます。

Q3.　「標準スペクトルチューニング」とは？

A3.　Agilent 5977 では、EM 検出器の前に HED が付いています。HED が付いていると高質量域の感度が増大します。そのため、HED の付いていない MS（5970/71/72 や他社製磁場型 MS）とスペクトルパターンの比較をしたい時は、そのスペクトルパターンに似たスペクトルパターンを持つよう MSD をチューニングしてやらなければなりません。そのような場合に使用するのが標準スペクトルチューニングです。

Q4.　溶媒ピークの前にも定量しなければならないピークがある。溶媒待ち時間で溶媒ピークの出終わった時間を指定すると溶媒ピークの前に出てくる成分を定量出来ない。どのようにすれば、うまく定量できるのか？

A4.　タイムイベントの設定を行います。例えば、溶媒ピークが 5.5 分～5.7 分に溶出し、4.5 分に溶媒前の目的ピーク A があり、7.5 分に溶媒後の目的ピーク B がある場合を考えます。［機器コントロール］画面の［機器］メニューの「MS パラメータ編集」をクリックし［シングル四重極 MS メソッドエディタ］ダイアログボックスを開きます。溶媒待ち時間を 4min にしておきます（最初の目的ピークが 4.5 分に溶出するため）。画面右部にある［タイムイベント］のタブをクリックし、［時間］の項目に 5.0（分）を入力し、［タイプ］で「検出器 OFF」を選択します。自動的に 1 行空行が追加されますので、同様に、［時間］の項目に 7.0（分）を入力し、［タイプ］で［検出器 ON］を選択します。設定が終わったら、自動的に追加される空行には何も設定せず［OK］をクリックします。この条件でデータ測定すると、溶媒溶出時のみ、検出器がオフになり、フィラメントを傷めずに測定/定量できます。

Q5.　感度が悪くなってしまった。どうすれば感度が回復するか？

A5.　感度が悪くなってしまう原因はいろいろと考えられます。代表的なものは下記のとおりです。

1. サンプルに問題がある場合
   目的成分が揮発して少なくなってしまっている/変質している
2. カラムに問題がある場合
   カラムが汚れている/液相が壊れている等
3. GC 注入口に問題がある場合
   インサートが汚れている/セプタムに穴が空いている/変質している等
4. MSD に問題がある場合
   イオン源が汚れている/マス軸がずれている/リークで真空度が悪い等
5. 接続に問題がある場合
   リークでサンプルが逃げている/注入口フェラルのカラム長さが正確でない等
6. 注入条件に問題がある場合
   スプリット比が変わっている/パージ時間が短い等
7. 注入に問題がある場合
   計量が不正確/ニードルにセプタムかすが詰まりサンプルが吸引できていない等）
8. 故障している場合
   MSD の故障/GC フローシステムの故障等 MSD については、オートチューニングの結果から状態を判断することが可能です。原因と思われるところを順番に調べてゆき、必要に応じて調整します。それでも回復しない場合には、アジレント・テクノロジー（株）のカストマコンタクトセンター（電話番号 0120-477-111）に御連絡下さい。

Q6.　スペクトルを取り出すには、ピーク頂点で取り出したり、ピークが出ている間の平均で取り出したり、あるいは、バックグラウンドを差し引いたりできる。どのような方法で、スペクトルを取り出すのが一番いいのか？

A6.　ピーク頂点付近で取り出して使用することを推奨します。ただし、濃度が低い場合には、ピーク近辺のベースラインのスペクトルをバックグラウンドとして差し引いたものを使用することを推奨します。また、ピークの前（後）方に別のピークがかぶっている場合には、ピーク後（前）方のスペクトルを取り出した方が適切です。

Q7.　ピークのスペクトルを取り出す際に、ピークの立ち上がりと頂点と最後の部分で取り出したスペクトルの強度比が違っていた。2 つの成分が混ざっているのか？

A7.　一般的に、MSD でスペクトルを採取すると、ピーク前半では低質量域の強度が高くなり、ピーク後半では高質量域の強度が高くなります。これは、スキャンする際に高質量側より低質量側へとスキャンするため起こります。GC ではピークは正規分布するため、カラム出口より出てくる分子数はだんだん増えていき、ピーク頂点となり、また減っていきます。
ピーク前半で、高質量側のイオンを測定している時にはイオン源中のサンプル分子数が少ないのですが、低質量側を測定するにつれて、イオン源中のサンプル分子数が多くなります。このため、ピーク前半では、低質量域の強度が高質量域より高くなります。ピーク後半ではこの現象と逆の現象が起こります。強度比が違っていても 2 つの成分が混ざっているとは限りません。

Q8.　ライブラリ検索の結果、ヒット率が表示されるが、この値がどのくらいだったら、その化合物であると考えてよいか？

A8.　ヒット率と言うのは、あるアルゴリズムでスペクトルの一致具合を数値化したものです。この値が 80 以上でしたら、スペクトルのパターンは似ていると考えられます。ただし、高質量側に 1 つ別のスペクトルピークが出てくるだけで、この値はかなり変化します。定性は、そのサンプルの内容を考えて、化合物の沸点や前後のピークとの位置関係より総合的に考えていかなければなりません。

Q9.　ライブラリ検索の結果で、同じ化合物が複数表示されるのはどうしてか？

A9.　NIST や WILEY のライブラリは Agilent 以外の組織が作成しています。そのため、磁場型で採取したスペクトルや、いろいろなメーカーの MS で採取したスペクトルが含まれています。同じ化合物も複数採取されているので、複数表示されます。

Q10. SIM 分析でカラムを交換したらピークが現れなくなった。ピークを元通り出現させるには、どうしたらいいか？

A10. SIM 分析では一般的にグループ分けを行い、時間を区切って取り込むイオンを変えていきます。カラムを交換すると、ほとんどの場合ピークのリテンションタイムが変化します。ある化合物ピークのリテンションタイムが変わり、別の SIM グループまで移動してしまうと、その化合物ピークを取り込むのに必要なイオンが設定されていなければピークは出現しなくなってしまいます。この様な場合は、もう一度スキャンモードで測定し、そのデータを基に SIM 取込みのグループ分けを実施しなおしてから SIM 測定をします。

Q11. 定量を行う際に、TIC ではなくイオンクロマトグラムを使用するのはどうしてか？

A11. TIC よりもイオンクロマトグラムの方がマトリックスの影響が少なく、S/N 比も良くなります。そのため、イオンクロマトグラムを使用すると定量値が安定するため、通常は定量にイオンクロマトグラムの積分結果を使用します。

Q12. 積分結果を、マイクロソフトのエクセル（表計算ソフト）で処理したい。どのようにすればいいのか？

A12. クロマトグラム結果画面上で、マウスの右ボタンをクリックし、[エクスポート]をクリックします。「ファイルタイプ」で[Excel ファイル形式]を選択し、エクスポート先を指定して、[OK]をクリックします。

※：最新の FAQ は、http://www.chem-agilent.com/contents.php?id=1000524　をご参照下さい。

付録H
GC/MSD 用語集

amu　（Atomic Mass Unit）
^{12}C の質量の 1/12 を 1 とした質量単位。（古い用語）

BPC(Base Peak Chromatogram)
各データポイントで、一番強度の高い *m/z* をプロットしたクロマトグラム。

CI (Chemical Ionization)
化学イオン化法。試薬ガスをイオン化し、生成した反応イオンと試料分子のイオン－分子反応により試料のイオン化を行う。

EI (Electron Ionaization)
電子イオン化法。加速した電子を試料分子などに衝突させることによりイオン化する方法。

EM (Electron Multiplier)
エレクトロンマルチプライヤー。二次電子倍増管。イオンの検出を行う。

EPC (Electronic Pneumatics Control)
ガスクロマトグラフのガス圧力コントロールを電子的に行う。

m/z
イオンの質量を電荷数で割ったもの。マススペクトルの横軸の単位。

Q ポール
四重極のこと。
四重極型質量分析計を参照のこと

SIM (Selected Ion Monitoring)
化合物に特有なイオンを選択してモニターすること。スキャンでモニターするより、選択的で高感度に分析する事が出来る。

TIC (Total Ion Chromatogram)
トータルイオンクロマトグラム。
正式には TICC（Total Ion Current Chromatogram）と言う。

u
amu を参照のこと。最近では”u”と記述するのが正式な表記方法である。

アイソトープ
同位体。

アナライザー
質量分析装置において、*m/z* ごとに分離する部分。特定の成分を分析する装置を総称してアナライザーと呼ぶこともある。

イオン源
質量分析装置の中で試料をイオン化するための部屋。

イオン化エネルギー
基底状態にある気体分子、原子、または原子団から一個の電子を無限遠に引き離すのに要するエネルギー。イオン化電圧、イオン化ポテンシャルとも呼ばれる。

イオンクロマトグラム
トータルイオンクロマトグラムから、指定した *m/z* のクロマトグラムを取り出したもの。マスクロマトグラムあるいは抽出イオンクロマトグラムが正しい表記である。

オートチューニング
質量分析計でマス軸、分解能の校正、イオン源の電圧調整、感度の調整を自動で行うこと。

開裂
結合の切断の事。

化学イオン化
CI を参照のこと。

ガスクロマトグラフ質量分析計
ガスクロマトグラフと質量分析計を結合した装置。GC/MS。

クオリファイアイオン（確認イオン）
SIM モードを用いて定量分析を行う場合、ターゲットイオンの他に 1～3 本、その化合物に固有なイオンを指定する。この化合物確認用イオンをクオリファイアイオンという。目的の化合物であるかどうかは、ターゲット、クオリファイアイオンのリテンションタイムとその強度比が標準物質と同じであるかどうかで判断される。
→ターゲットイオン。

ゲイン
検出器シグナルの増幅を指定する値で、ゲイン係数が 1.00 のときシグナルは 1.00 x 10^5 倍に増幅されます。

コンスタントフローモード
ガスクロマトグラフのキャリアガスを一定流量に保つこと。昇温分析を行うとキャリアガスの流量は次第に減少するので、EPC の機能を用いて、昇温と共にカラムヘッド圧を昇圧し、一定流量に保てるように制御する。

四重極型質量分析計
直流と高周波を重ね合わせた電圧を双曲線断面を持つ四重極電極に印加し、それによって生成した四重極電場により、*m/z* ごとに分離する装置。

質量数
^{12}C を 12 とした質量単位で原子の質量を表した時の最も近い整数。原子核を構成する核子の数。すなわち、陽子の数と中性子の数との和に等しい。質量分析では、イオンなどを構成する原子の質量数の和こと。

質量スペクトル
各イオンの強度を棒グラフなどで表わし、これを *m/z* 順にならべたもの。

スキャン
質量スペクトルを測定するために、磁場や電場の強さを一方向に連続的に変化させる。

相対強度
質量スペクトルにおいて、ある質量のイオンビームの強度と最大強度のイオンビームとの比、通常この比は質量スペクトルの各ピークの高さを、最大ピーク高さを 100 として表わす。

ターゲットイオン（定量イオン）
質量分析計で定量分析を行う場合に、検量線を作成するのに用いられるイオン。
→ クオリファイアイオン。

ディフュージョンポンプ
拡散ポンプ。油または水銀の蒸気の流れが気体分子の拡散を一方向に抑えることを利用した真空ポンプ。一般的に 10^{-5}～10^{-8}Torr 程度に排気できるが 10^{-2}Torr まで排気できる補助ポンプを必要とする。

同位体イオン
存在比が最大ではない同位体を含むイオン。ハロゲン化合物では顕著に観察できる。

同位体ピーク
同位体イオンが与えるピーク。

バッチ
一定の条件で取り込んだデータの集まりを言い、マスハンター定量解析ソフトウェアにおけるバッチファイルは、サンプル情報、定量メソッド（検量線含む）、定量結果から構成されています。バッチファイルに含まれるこれらの情報を元に、定量レポートが作成されます。

ピーク
質量分離されたイオンを検出、倍増してチャートとして表わした時、*m/z* に対して得られた棒グラフの一本一本をいう。また、GC/MS の場合には、クロマトグラム中の山形の形状のものを指すこともある。

フォアラインポンプ
拡散ポンプなどの高真空用ポンプを作動させるのに必要な真空度まで排気するための補助ポンプ。GC/MS では、ロータリーポンプを使用している。

フラグメント
フラグメンテーションにより生じたイオン。

フラグメントピーク
フラグメントイオンが与えるピーク。

フラグメンテーション
イオンが一つまたはいくつかの結合開裂によって、より小さい質量のイオンを生成する反応。

分子イオン
分子内の結合が切れることなく、電子を失うかまたは付加することによって生じたイオンのうち、存在比の最も多い同位体からなるイオン。EI でイオン化した場合には M+で表される。

ベースピーク
質量スペクトルにおいて各イオンの相対強度を求める際基準に用いるピーク。通常最大強度のピークを用いる。ベースピーク。

マスクロマトグラム
イオンクロマトグラムを参照。

改訂履歴

版（Rev.）	内容	日付	改訂者
初版	・新規作成 *電子ファイルのみ。	2013/06/25	TO

本書の内容の一部または全部を無断で複写・転載することは禁止されています。

本書に記載されている情報は予告なく変更されることがあります。

Agilent Technologies

© Agilent Technologies, Inc. 2013

Printed in Japan
Rev. 1 (Jun 2013)
AT2A4F11