

文献等にあるスペクトルをスペクトルライブラリに登録する方法

水(H2O)のスペクトルを、ユーザーライブラリに登録する方法を紹介します。

諸語デーが解析 - DEFAULT.M / EVALDEMO.D (MS データ マルチ Pt 定量 Not Reviewed) ファイル(P) メソッド(M) 再解析(P) クロマトグラム(Q) スペクトル(S) キャリブレーション(B) 定量(Q) レポートをエクスポート(P) ツール(D) オプション(Q) 表示(V) ヘル 気い(D) (G) (G) (G) (G) (G) (G) (G) (G) (G) (G	- D 🛛 .7 (H) D
(2) III III III III III III III III III I	
3000000 2000000 1000000 ⊫⇒RB> 5.50 6.60 6.50 7.00 7.50 8.60 8.50 9.00 9.50	

1. ライブラリの作成

新しいライブラリを作成します。

VALDEMO.D (M	S データ: マルチ Pt 定量, Not Reviewed)	
クロマトグラム(C)	スペクトル(S) キャリブレーション(B) 定量(Q) レポー	トをエクスポート(<u>R</u>)
) 🔊 🕬 🖓 (a	加算(A) 減算(S) テーブル表示(T) ライブラリの選択(E)) in 🔛 💈
	検索ストラテジ編集(D)	▼ 実行
	ライブラリの編集 Ф	
	ライブラリ検索レポート(L) 複数ライブラリによる検索レポート ライブラリエントリのリスト表示 レコード番号表示 選択したライブラリ結果により PBM ライブラリ更新 相関クロマトグラムのライブラリスペクトルの作成	
6.00	スペクトル表示変更(<u>C</u>) マススペクトル検索(<u>F</u>)	0 8.50
PBM ライブ:	刊編集	
○ ライブ ○ 新規 ○ エント © <u>ライブ</u> ○ ライブ	(ラリ選択(S) エントリ追加(A) リ編集(E) (ラリ作成(O)) (ラリ削除(D) OK キャンセル ヘ	ルブ(円)

ご不明な点は、カストマコンタクトセンタまで(電話受付 9:00~12:00、13:00~18:00 土、日、祝日は除きます)

電話 . 0120-477-111 FAX . 0120-565-154



新しく作成するライブラリ名を入力し[OK]をクリックします。

新規 PBM デ	ータベース名選択			
CHEATAE	BASE¥ <mark>user.I</mark>			参照(<u>B</u>)
1.411	ОК	キャンセル	ヘルプ(円)	

2. 登録したいファイルを JCAMP ファイルとして用意します。 そのファイルの中に、水(H2O)の情報を入力します。 (JCAMP ファイルとは下記形式のテキストファイル)

JCAMP ファイル 右記例では、ファイル名を、 JCAMPADD.TXT としました。	JCAMPADD.TXT ##DATA TYPE=MASS SPECTRUM ##CAS NAME=Water ##MOLFORM=H2O ##CAS REGISTRY NO=007789-20-0
化合物名	##MP=0.0
分子式	##BP=100.0
CAS 番号	##MW=18.011
融点	##\$RETENTION INDEX=0
沸点	##NPOINTS=4
分子量	##XYDATA=(XYXY)
相対保持指標(RI)	1 500
登録マスフラグメント数	16 300
M/Z と 強度比率	17 1000
	18 9999

ユーザーライブラリへのスペクトル登録は、パラメーター検索モード画面の中で実施します。

まず、パラメータ検索モード画面に入ります。 オブション(2) 表示(2) ヘルプ(出) イージーID(E) 3 74 7 定量結果の編集(Qe<u>d</u>it) 一旦、下記画面は[キャンセル]をクリックし終了します。 ッターゲットピーク編集(N) 剧 パラメータ検索(<u>R</u>) ピーク純度レビュー(い)... 結果スクリーナ(S) RT ロック設定(U) 複数データファイルの解析... |複数スペクトルの解析.. 71

検索バラメータ			
ライブラリ(L) C¥DATAE	ASE¥DEMO.L		
リトリーバルヒット数(山)	10		
- 検索パラメータ			
□ 化合物名(N)	Dodecane	□ 融点(M) 0 ~ 20	
□ CAS 番号(<u>C</u>)	112403	□沸点(8) 210 ~ 220	
□ 分子式(E)	C12H26	□ Ret. Index(<u>R</u>) 0.0 ~ 10.0	
□ 分子量(₩)	160.0 ~ 180.0		
🗖 エントリ #(E)	15 ~ 20	□ マス <u>67</u> ア/52 <i>\$</i> 22ス <u>190</u> ~ <u>1100</u> %	
□ 一般情報①	evaluation	□ マス 71 アパンダンス 60 ~ 70 %	
カンパニー I(D)	HP	□ マス 85 アパンダンス 40 ~ 50 %	
検索(S) キャンセル ヘルブ(H)			

ご不明な点は、カストマコンタクトセンタまで(電話受付 9:00~12:00、13:00~18:00 土、日、祝日は除きます)

電話 🚾 0120-477-111 FAX 🕮 0120-565-154



3. 作成したライブラリに、JCAMP ファイルを用いて、化合物情報とマススペクトルを登録します。



JCAMP 用のテキスト	ファイル名を入力			23
ファイルの場所の	MSexe		+ 🗈 e	* 💷 •
 Interop.HPCTU Interop.IWshRu intsel.mac jcamp.mac JCAMPADD.T jcampout.mac 	IStatusInterfaces.dll ntimeLibrary.dll			junk.tmp keyput.mac keywd7x.mac keywdins.mac lagfact.mac lagfact.mac
<	10-	<u>II</u>		>
ファイル名(N):	JCAMPADD.TXT		•	開((())
ファイルの種類(①)	力スタム (*.*)		•	キャンセル
	□ 読み取り専用ファイルと	cUC開((<u>R</u>)		

C¥DATABASE¥	
User.1 OK キャンセル ヘルプ	ധ
SD ケミステーション 📧	MSD ケミステーション
	・ 完了! 登録 1
(mmm24973)3300mmm1 (1.575 = 761)	[m

上記手順により、ユーザーライブラリへのマススペクトル登録は完了します。

ご不明な点は、カストマコンタクトセンタまで(電話受付 9:00~12:00、13:00~18:00 土、日、祝日は除きます)

電話 0120-477-111 FAX 0120-565-154



4. 下記手順により、登録されたスペクトルを確認することができます。

検索パラメータ			
ライブラリ(L) C¥DATAB	ASE¥user.L		
リトリーバルヒット数(山)	10		
┌検索パラメータ			
□ 化合物名(N)	Dodecane	🗖 融点(M) 🛛 🔽 ~ 🛛 20	
_ CAS 番号(<u>C</u>)	112403	□沸点图) 210 ~ 220	
□ 分子式(E)	C12H26	□ Ret. Index(<u>R</u>) 0.0 ~ 10.0	
□ 分子量(₩)	160.0 ~ 180.0		
■ エントリ #(E)	1 ~ 1		%
□ →般情報型	evaluation	□ マス [71 P/Yンダンス 60 ~ [70 :	%
□ カンパニー I(D)	HP	 マス 135 アバンダンス 140 ~ 150 	%
検索(2) キャンセル ヘルブ(H)			



上記手順により、ユーザーライブラリに登録されていることが確認できます。

ご不明な点は、カストマコンタクトセンタまで(電話受付 9:00~12:00、13:00~18:00 土、日、祝日は除きます)

電話 0120-477-111 FAX 0120-565-154