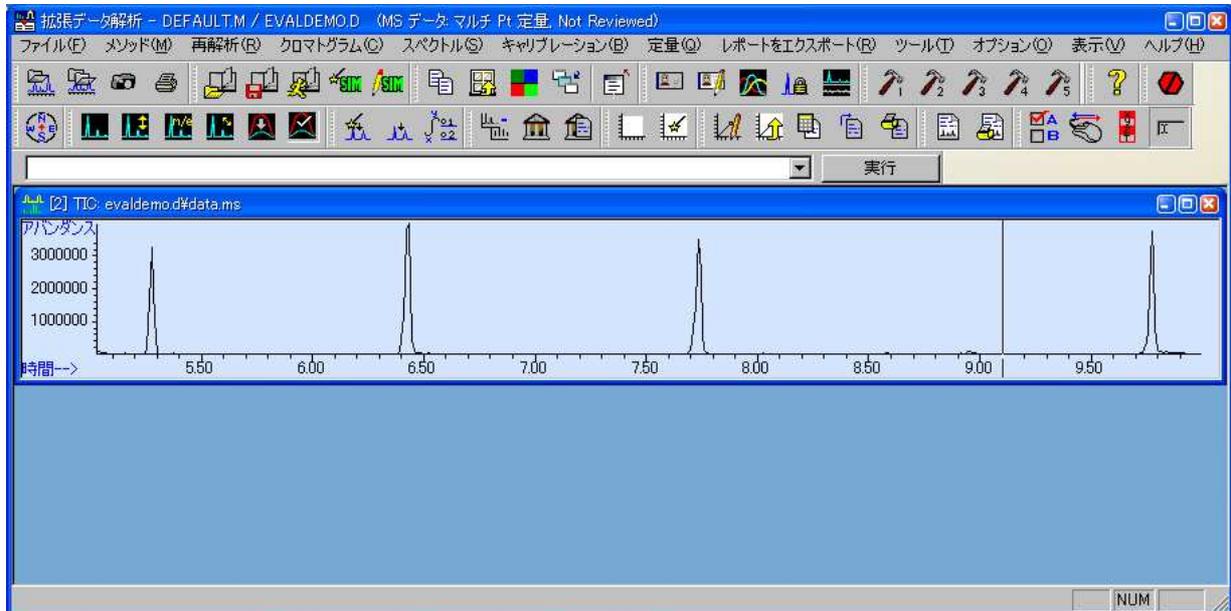




文献等にあるスペクトルをスペクトルライブラリに登録する方法

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。



1. ライブラリの作成

新しいライブラリを作成します。



ご不明な点は、カスタム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

E-mail: email_japan@agilent.com

FAX  0120-565-154

<http://www.agilent.com/chem/jp>

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。



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。

化合物名
分子式
CAS 番号
融点
沸点
分子量
相対保持指標(RI)
登録マスフラグメント数
M/Z と 強度比率

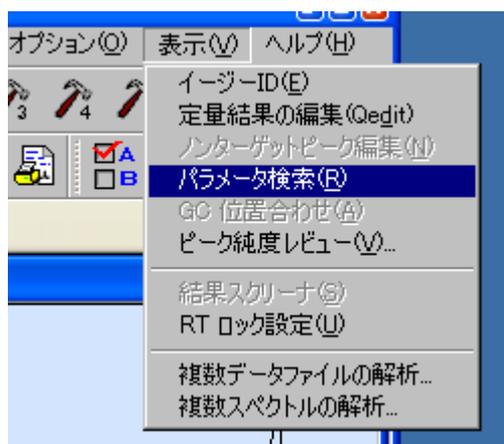
JCAMPADD.TXT

```

##DATA TYPE=MASS SPECTRUM
##CAS NAME=Water
##MOLFORM=H2O
##CAS REGISTRY NO=007789-20-0
##MP= 0.0
##BP= 100.0
##MW= 18.011
##$RETENTION INDEX=0
##NPOINTS= 4
##XYDATA=(XY..XY)
      1      500
      16     300
      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。



一旦、下記画面は[キャンセル]をクリックし終了します。



ご不明な点は、カスタム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)

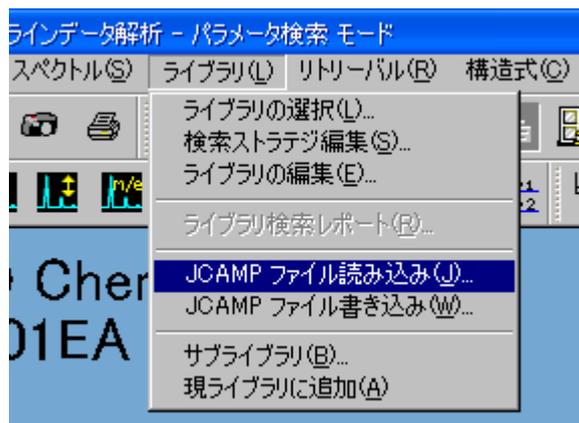
電話  0120-477-111

FAX  0120-565-154

E-mail: email_japan@agilent.com

<http://www.agilent.com/chem/jp>

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。



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、カスタム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

E-mail: email_japan@agilent.com

FAX  0120-565-154

<http://www.agilent.com/chem/jp>

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。

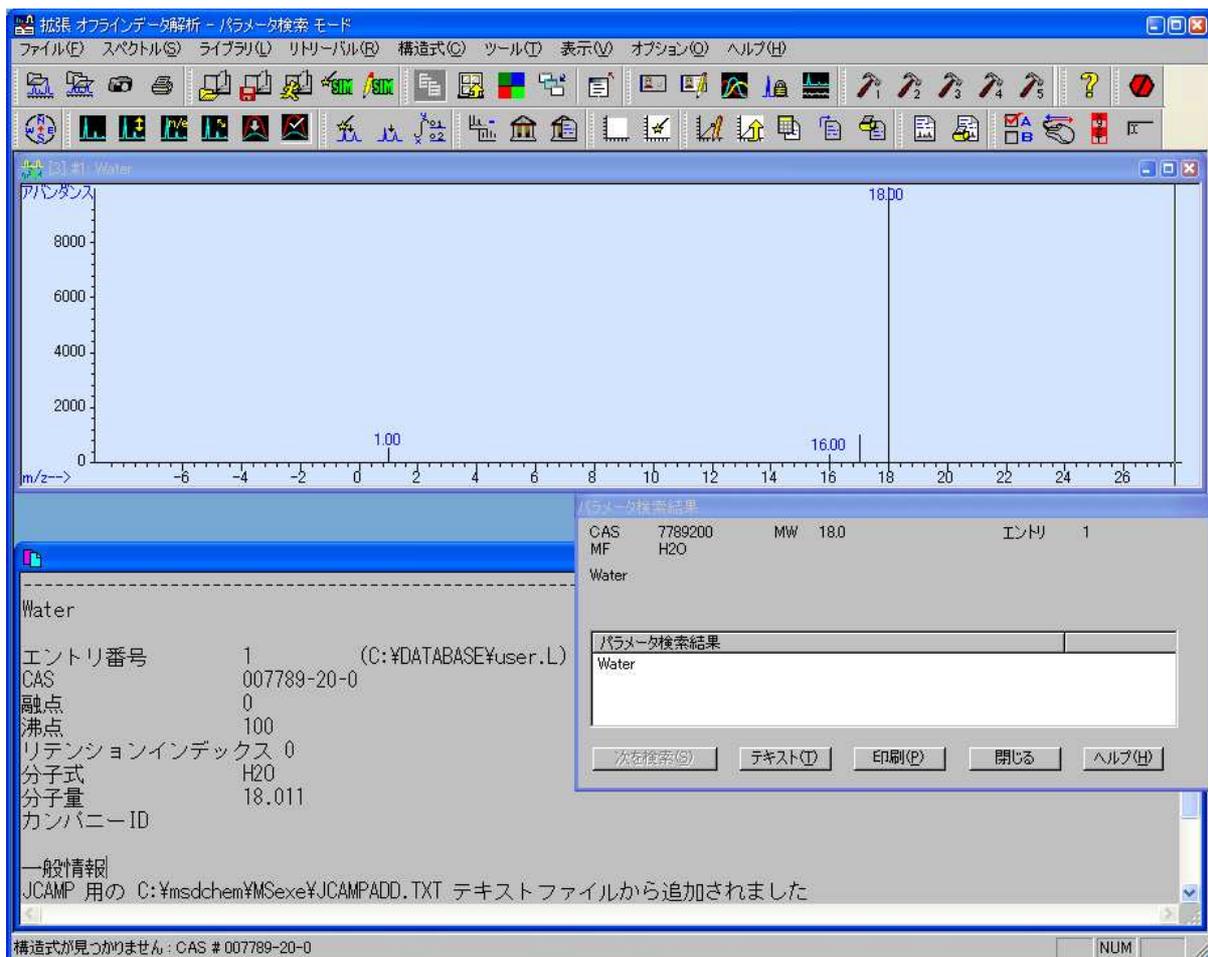
検索パラメータ

ライブラリ(L)

リトリバルヒット数(U)

検索パラメータ

<input type="checkbox"/> 化合物名(N)	<input type="text" value="Dodecane"/>	<input type="checkbox"/> 融点(M)	<input type="text" value="0"/> ~ <input type="text" value="20"/>
<input type="checkbox"/> CAS 番号(Q)	<input type="text" value="112403"/>	<input type="checkbox"/> 沸点(B)	<input type="text" value="210"/> ~ <input type="text" value="220"/>
<input type="checkbox"/> 分子式(F)	<input type="text" value="C12H26"/>	<input type="checkbox"/> Ret. Index(R)	<input type="text" value="0.0"/> ~ <input type="text" value="10.0"/>
<input type="checkbox"/> 分子量(W)	<input type="text" value="160.0"/> ~ <input type="text" value="180.0"/>	イオン検索(O)	
<input checked="" type="checkbox"/> エントリ # (E)	<input type="text" value="1"/> ~ <input type="text" value="1"/>	<input type="checkbox"/> マス <input type="text" value="57"/> アブダンス <input type="text" value="90"/> ~ <input type="text" value="100"/> %	
<input type="checkbox"/> 一般情報(I)	<input type="text" value="evaluation"/>	<input type="checkbox"/> マス <input type="text" value="71"/> アブダンス <input type="text" value="60"/> ~ <input type="text" value="70"/> %	
<input type="checkbox"/> カンパニー ID	<input type="text" value="HP"/>	<input type="checkbox"/> マス <input type="text" value="85"/> アブダンス <input type="text" value="40"/> ~ <input type="text" value="50"/> %	



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、カスタム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

E-mail: email_japan@agilent.com

FAX  0120-565-154

<http://www.agilent.com/chem/jp>