

KnowItAll ソフトウェアのトレーニング

質量分析計検索

質量分析計によるスペクトル検索の方法

質量分析計によるスペクトル検索を行う方法

目的

この演習では、質量分析計によるスペクトル検索の方法を説明します。

目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- 簡単な検索方法の実行
- 逆検索の方法
- 混合物の分析方法
- 適応的検索（類似化合物の検索）の実行
- 複数の質量スペクトルを同時に検索する方法

背景

参照データベースに対するスペクトル検索は、未知の化合物の解析において頻繁に使用されます。KnowItAll は、この目的に特化した充実した質量スペクトル比較ツールを提供しています。

このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples フォルダー内です

- MS\1,1,1-Trichlorobutane - Adaptive Search demo
- MS\2-Hydroxybenzoic acid
- Mixture Analysis\MS Examples\MS Mixture of Two 1
- Mixture Analysis\MS Examples\MS Mixture of Two 2
- Mixture Analysis\MS Examples\MS Mixture of Three
- \GC-MS\Barbiturate GC-MS.d
- Mixture Analysis\MS Examples\Components.SDBX

KnowItAll 使用アプリケーション

- SearchIt™
- MinelT™

アルゴリズム

Research article

Journal of
MASS
SPECTROMETRY

Received: 5 October 2014

Revised: 16 February 2015

Accepted: 5 March 2015

Published online in Wiley Online Library

(wileyonlinelibrary.com) DOI 10.1002/jms.3591

Evaluation of mass spectral library search algorithms implemented in commercial software

Andrey Samokhin,^{a*} Ksenia Sotnezova,^a Vitaly Lashin^b and Igor Revelsky^a

MS SEARCH

Composite algorithm

$$SI = \frac{N_U \cdot \left[\frac{\left(\sum W_L \cdot W_U \right)^2}{\sum W_L^2 \cdot \sum W_U^2} \right] + \left[\sum \left(\frac{R_U}{R_L} \right)^n \right]}{N_U + N_{U\&L}}$$

Spectrum search type – identity (normal)

Presearch – default

Included Libs – MainLib

Apply limits – unchecked

Use constraints – unchecked

Dot-product algorithm²

$$SI = \frac{\left(\sum W_L \cdot W_U \right)^2}{\sum W_L^2 \cdot \sum W_U^2}$$

Spectrum search type – similarity (simple)

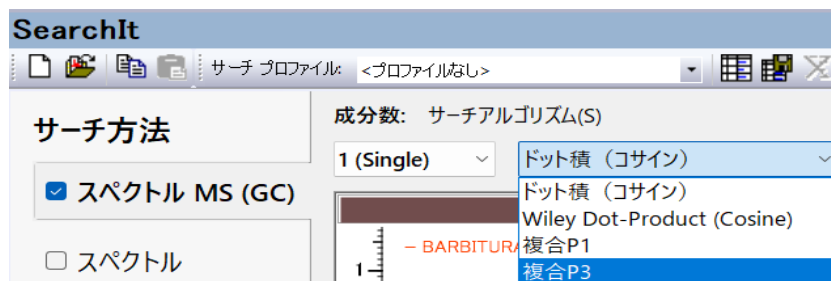
Presearch – default

Included Libs – MainLib

Apply limits – unchecked

Use constraints – unchecked

A. Samokhin, K. Sotnezova, V. Lashin, I. Revelsky による論文「商用ソフトウェアに実装された質量スペクトルライブラリ検索アルゴリズムの評価」(質量分析計雑誌、2015年、50、820-825)

**検索方法:**

- ドット積 (コサイン) : 上記のグラフの 2 番目の方程式を使用します
 - Wiley ドット積 (コサイン) : Finnigan アルゴリズムにより、最大 16 個のピークのうち少なくとも 12 個が一致し、さらにベースピークが一致している場合に、ドット積の計算を続行します
 - 複合 P1 : 上記のグラフの最初の式を指します
 - 複合 P3 : 上記のグラフの最初の式を指します
- P1 と P3 は、ピークの重み付き強度に適用されるパワーが異なることによって異なります。

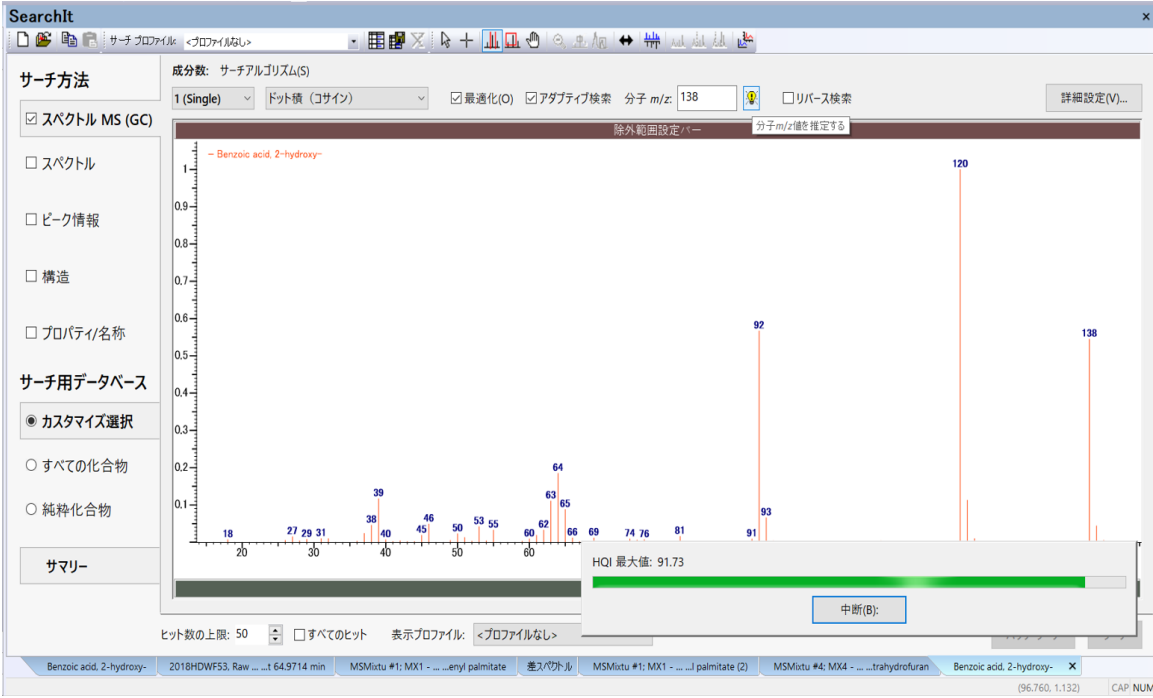
最適化された補正:

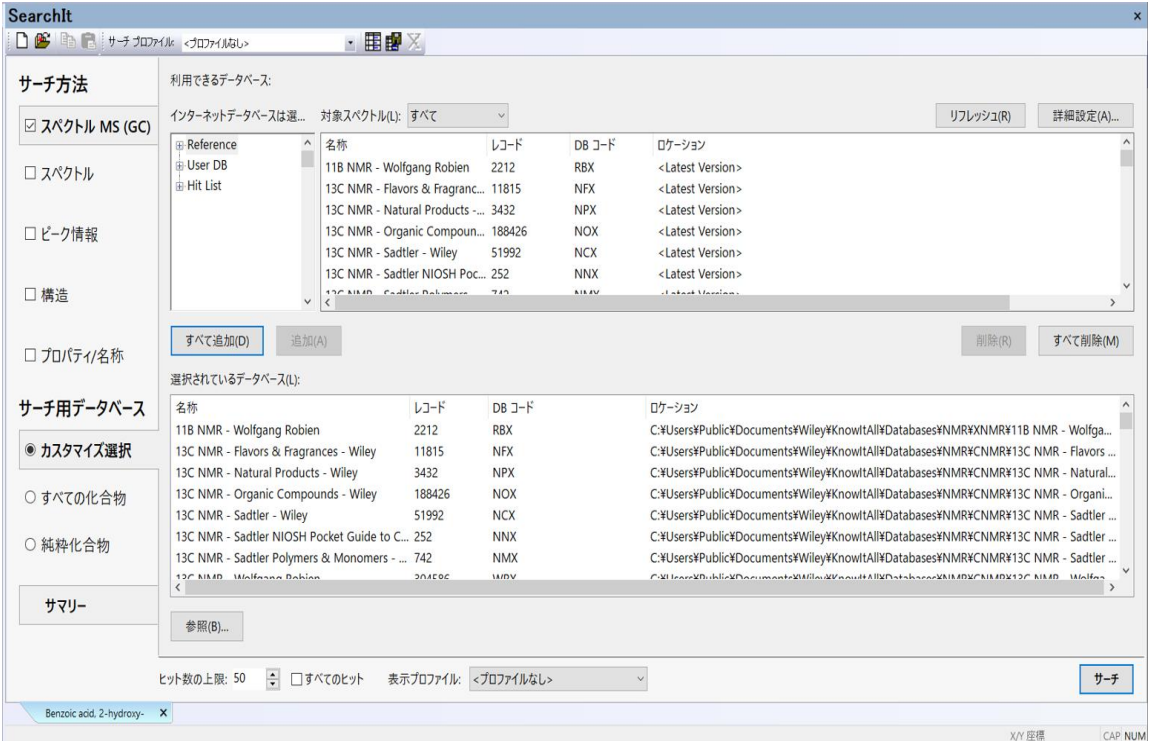
- 質量欠損 (Mass Defection) は、化合物の正確な質量と名目質量の差です。MS 検索では、自動的に適用されます。以下は例です:
 - 炭化水素化合物の場合、 m/z 値が 500 を超える場合には 0.99888 を使用します。
 - ポリ臭素化合物の場合、臭素原子が 5 個以上存在し、 m/z 値が 800 を超える場合には 1.00087 を使用します。
- スペクトルの歪みは、スキャン中に解析物の濃度が変化することによって引き起こされます。各検索結果に対して、直線補正係数 (昇順の場合は正の値、降順の場合は負の値) が計算されます。この補正係数は以下の式で強度を補正します:

$$I(\text{補正後}) = I * f * m、$$

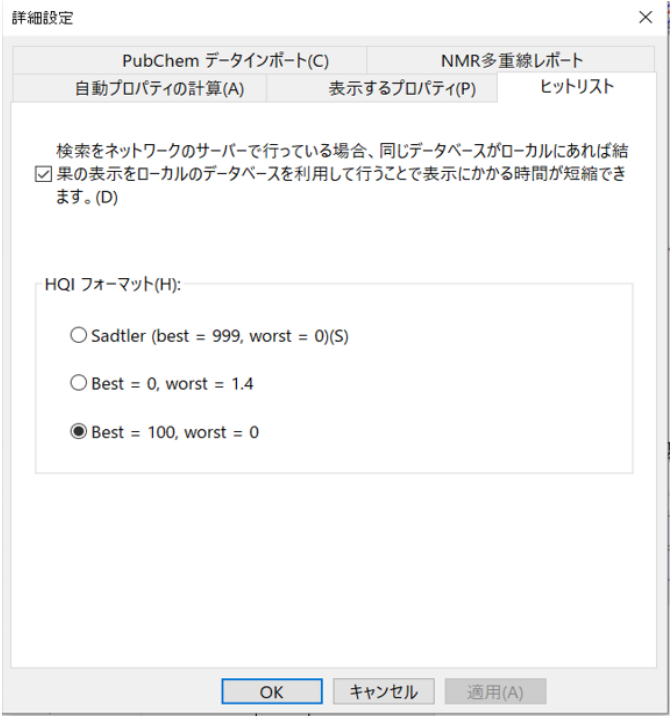
ここで I=強度、f=OC 係数、m= m/z 値となります

直接的な検索


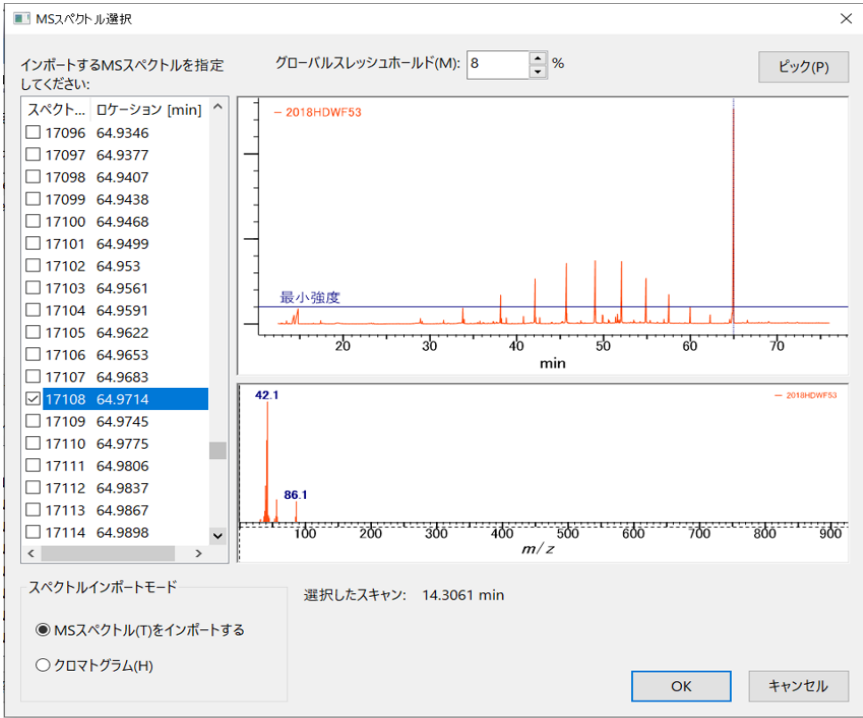
アクション	結果
<p>1 KnowItAll アプリケーション内の KnowItAll SearchIt アプリケーションのアイコンをクリックして、KnowItAll SearchIt アプリケーションを開きます。</p> <p>スペクトルを確認し、 C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\MS フォルダに移動します。</p> <p>2-Hydroxybenzoic acid というファイルを選択します。</p> <p>「Open」をクリックします。</p> <p>Adaptive Search または Reverse Search のチェックが外れていることを確認します。</p>	 <p>The screenshot shows the SearchIt application window. The title bar reads 'SearchIt'. The search method is set to '1 (Single)' and 'ドット積 (コサイン)'. The molecular weight is set to '分子 m/z: 138'. The search target is 'Benzoic acid, 2-hydroxy-'. The mass spectrum shows a base peak at m/z 120 and other significant peaks at m/z 92 and 138. The HQI maximum value is 91.73. The interface also shows search options like 'Adaptive Search' and 'Reverse Search'.</p>

アクション	結果																																																																												
<p>2 「User-Select」をクリックします。</p> <p>選択されたデータベースをすべて削除するには、「Remove All」を使用します。</p> <p>すべての MS (GC) データベースを追加するには、「Add All」を使用します。</p> <p>「Search」をクリックします。</p>	 <p>SearchIt</p> <p>検索プロファイル: <プロファイルなし></p> <p>検索方法</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> スペクトル MS (GC)</p> <p><input type="checkbox"/> スペクトル</p> <p><input type="checkbox"/> ピーク情報</p> <p><input type="checkbox"/> 構造</p> <p><input type="checkbox"/> プロパティ/名称</p> <p>検索用データベース</p> <p><input checked="" type="radio"/> カスタマイズ選択</p> <p><input type="radio"/> すべての化合物</p> <p><input type="radio"/> 純粋化合物</p> <p>サマリー</p> <p>参照(B)...</p> <p>利用できるデータベース:</p> <p>インターネットデータベースは選... 対象スペクトル(L): すべて</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Reference</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ローション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>User DB</td> <td>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>Hit List</td> <td>13C NMR - Flavors & Fragranc...</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Natural Products - ...</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Organic Compoun...</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td></td> <td>13C NMR - Sadtler Polymers & ...</td> <td>742</td> <td>NMX</td> <td><Latest Version></td> </tr> </tbody> </table> <p>すべて追加(D) 追加(A) 削除(R) すべて削除(M)</p> <p>選択されているデータベース(L):</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ローション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\11B NMR - Wolfga...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Flavors ...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Natural Products - Wiley</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Natural...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Organic Compounds - Wiley</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Organi...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Sadtler ...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to C...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Sadtler ...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers - ...</td> <td>742</td> <td>NMX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Sadtler ...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Wolfgang Robien</td> <td>204586</td> <td>WPX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Wolfga...</td> </tr> </tbody> </table> <p>ヒット数の上限: 50 <input type="checkbox"/> すべてのヒット 表示プロファイル: <プロファイルなし> サーチ</p> <p>Benzoic acid, 2-hydroxy- X</p> <p>XY座標 CAP NUM</p>	Reference	名称	レコード	DB コード	ローション	User DB	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>	Hit List	13C NMR - Flavors & Fragranc...	11815	NFX	<Latest Version>		13C NMR - Natural Products - ...	3432	NPX	<Latest Version>		13C NMR - Organic Compoun...	188426	NOX	<Latest Version>		13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>		13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...	252	NNX	<Latest Version>		13C NMR - Sadtler Polymers & ...	742	NMX	<Latest Version>	名称	レコード	DB コード	ローション	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\11B NMR - Wolfga...	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Flavors ...	13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Natural...	13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Organi...	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Sadtler ...	13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to C...	252	NNX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Sadtler ...	13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers - ...	742	NMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Sadtler ...	13C NMR - Wolfgang Robien	204586	WPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Wolfga...
Reference	名称	レコード	DB コード	ローション																																																																									
User DB	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>																																																																									
Hit List	13C NMR - Flavors & Fragranc...	11815	NFX	<Latest Version>																																																																									
	13C NMR - Natural Products - ...	3432	NPX	<Latest Version>																																																																									
	13C NMR - Organic Compoun...	188426	NOX	<Latest Version>																																																																									
	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>																																																																									
	13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...	252	NNX	<Latest Version>																																																																									
	13C NMR - Sadtler Polymers & ...	742	NMX	<Latest Version>																																																																									
名称	レコード	DB コード	ローション																																																																										
11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\11B NMR - Wolfga...																																																																										
13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Flavors ...																																																																										
13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Natural...																																																																										
13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Organi...																																																																										
13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Sadtler ...																																																																										
13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to C...	252	NNX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Sadtler ...																																																																										
13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers - ...	742	NMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Sadtler ...																																																																										
13C NMR - Wolfgang Robien	204586	WPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\CNMR\13C NMR - Wolfga...																																																																										

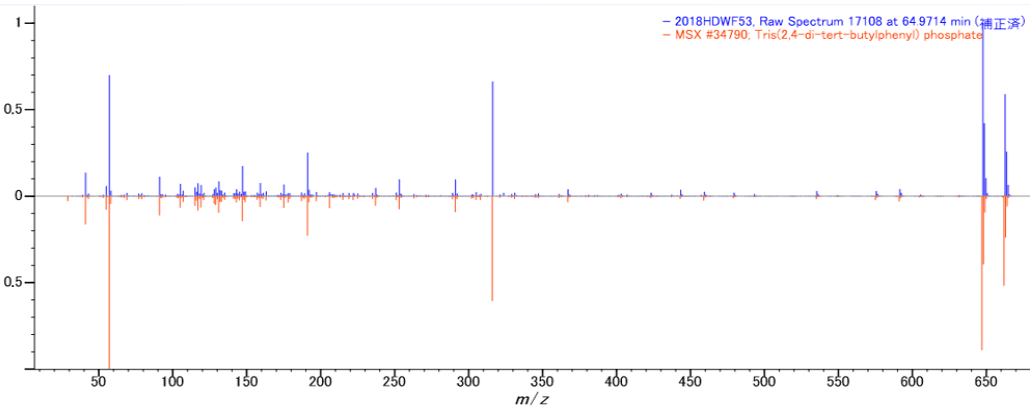
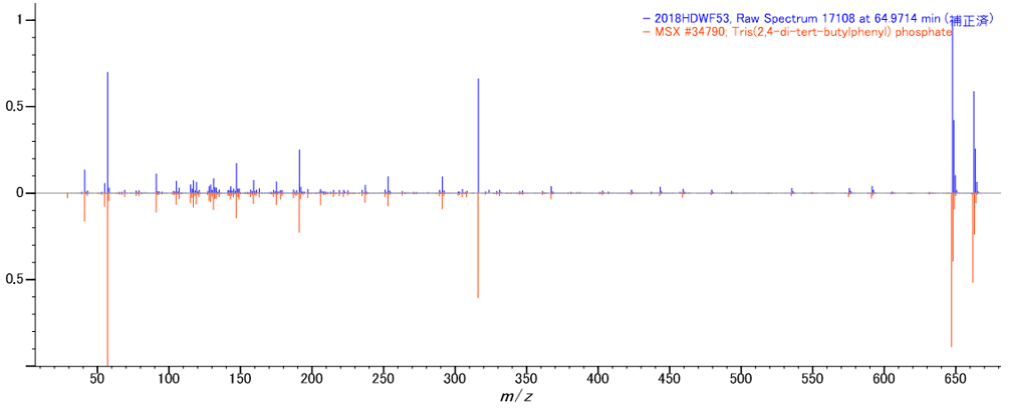
アクション	結果
<p>3 バタフライビューのアイコンをクリックして、未知のスペクトルと参照スペクトルを Y 軸の逆方向に配置します。</p>	<p>データベースからターゲットが見つかりました。</p>  <p>ヒットは最初にヒット品質指数 (HQI) によってソートされます。また、各参照スペクトルには逆ヒット品質指数 (R.HQI) も計算されます。</p>

	アクション	結果
4	ヒット品質指数 (HQI)	<p>HQI の値は、参照スペクトルがクエリのスペクトルにどれだけ近いかを評価します。HQI のデフォルトのスケールは 0 から 100 ですが、Minelt メニューの「ファイル」>「設定」>「ヒットリスト」からスケールを変更することができます。</p>  <p>注意：逆検索では、未知のスペクトルに存在するピークが参照スペクトルに存在しないピークは無視されます。これは、未知のスペクトルが混合物であり、参照スペクトルがその成分である可能性がある場合などに適用されます。</p>

最適化された補正:


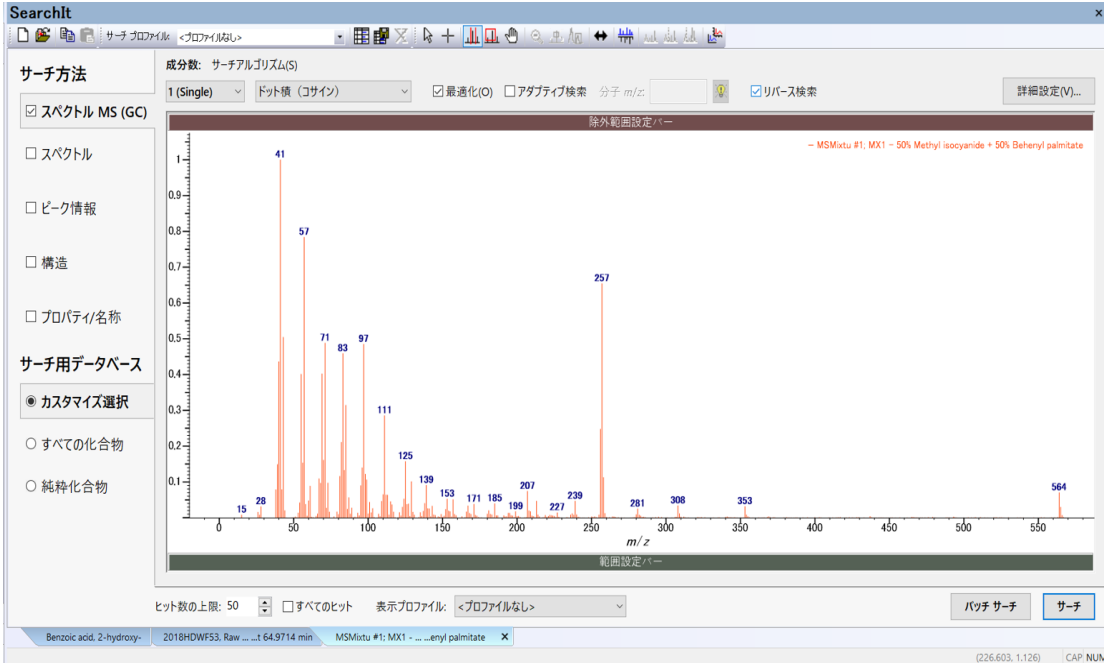
アクション	結果
<p>1 SearchIt に戻ります。</p> <p>新しい検索を開始するために  をクリックしてください。</p> <p>「Spectrum」をクリックし、 C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\MS に移動してください。</p> <p>「Mass defect correction example」というファイルを選択し、「Open」をクリックしてください。</p> <p>「OK」をクリックしてください。(デフォルトの MS 17108 を使用する)</p>	 <p>MSスペクトル選択</p> <p>インポートするMSスペクトルを指定してください: グローバルスレッシュホールド(M): 8 % ピック(P)</p> <p>スペクトル... ロケーション [min] ^</p> <ul style="list-style-type: none"><input type="checkbox"/> 17096 64.9346<input type="checkbox"/> 17097 64.9377<input type="checkbox"/> 17098 64.9407<input type="checkbox"/> 17099 64.9438<input type="checkbox"/> 17100 64.9468<input type="checkbox"/> 17101 64.9499<input type="checkbox"/> 17102 64.953<input type="checkbox"/> 17103 64.9561<input type="checkbox"/> 17104 64.9591<input type="checkbox"/> 17105 64.9622<input type="checkbox"/> 17106 64.9653<input type="checkbox"/> 17107 64.9683<input checked="" type="checkbox"/> 17108 64.9714<input type="checkbox"/> 17109 64.9745<input type="checkbox"/> 17110 64.9775<input type="checkbox"/> 17111 64.9806<input type="checkbox"/> 17112 64.9837<input type="checkbox"/> 17113 64.9867<input type="checkbox"/> 17114 64.9898 <p>スペクトルインポートモード 選択したスキャン: 14.3061 min</p> <p><input checked="" type="radio"/> MSスペクトル(T)をインポートする</p> <p><input type="radio"/> クロマトグラム(H)</p> <p style="text-align: right;">OK キャンセル</p>

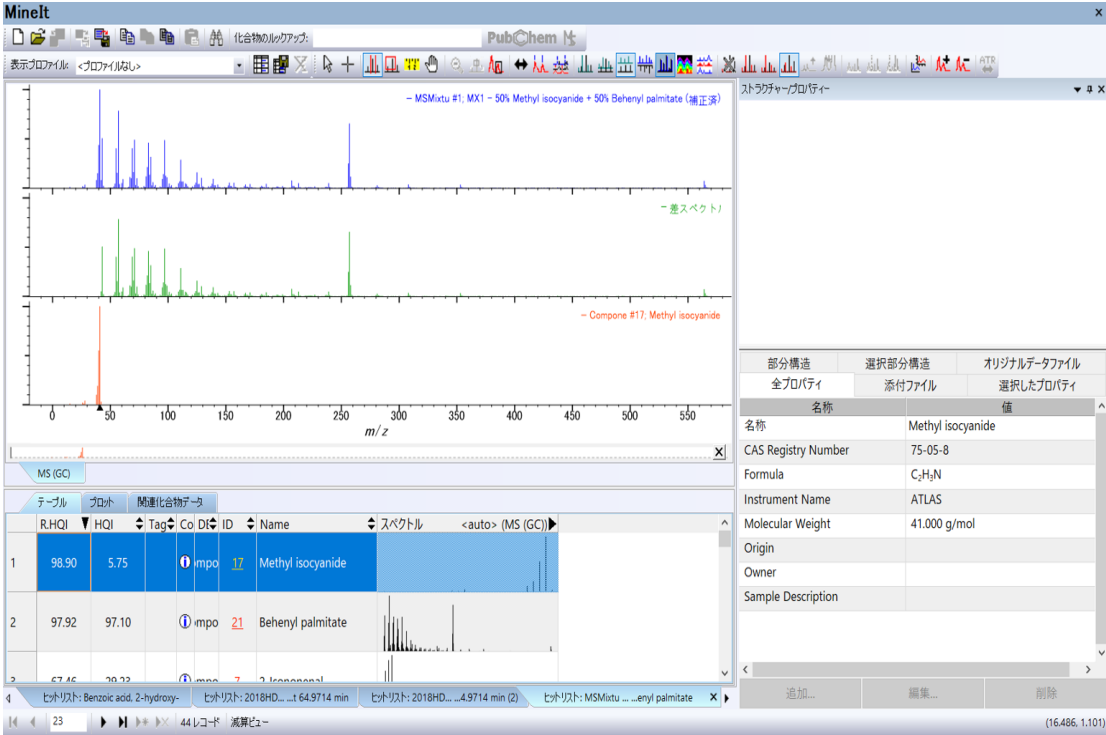
アクション	結果
<p>2 MS スペクトルの最適化補正はデフォルトでチェックされています。</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> Optimized Corrections</p> <p>「詳細設定」ボタンをクリックしてください</p> <p>Advanced Settings...</p> <p>このダイアログを閉じるために「OK」をクリックしてください</p> <p>「Search」ボタンをクリックしてください</p>	<p>化合物の正確な質量と名目的な質量との差である質量欠損は、自動的に適用されています。また、ユーザーは選択によって、スペクトルの歪み（スキャン中に分析物の濃度が増加すること）など、他のさまざまな基準を適用することができ、検索の改善が可能です。</p> <div data-bbox="856 527 1864 1360" style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> <p>詳細設定 ×</p> <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; margin-bottom: 10px;"> <p>最適化</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> 有効にする(E)</p> <p><input type="checkbox"/> スペクトル歪み</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> 質量欠損の補正</p> </div> <p><input checked="" type="checkbox"/> 重複するスペクトルを除外する(D)</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> 重複する化合物を除外する(R)</p> <p><input type="checkbox"/> 手動での質量欠損の補正: <input type="text" value="1"/> ⓘ</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> 必要最小限のピークカウント: <input type="text" value="5"/> ▲▼</p> <p><input type="checkbox"/> 最小存在量: <input type="text" value="0"/> %</p> <p><input type="checkbox"/> 最小 m/z: <input type="text" value="0"/></p> <p><input type="checkbox"/> 最大(X) m/z: <input type="text" value="0"/></p> <p>アダプティブ検索に関し、クエリの質量が不明の場合、最大 Δm: <input type="text" value="200"/> u</p> <p style="text-align: right;"> <input type="button" value="デフォルト値に設定(F)"/> <input type="button" value="デフォルト値にリセット(S)"/> <input type="button" value="OK"/> <input type="button" value="キャンセル"/> </p> </div>

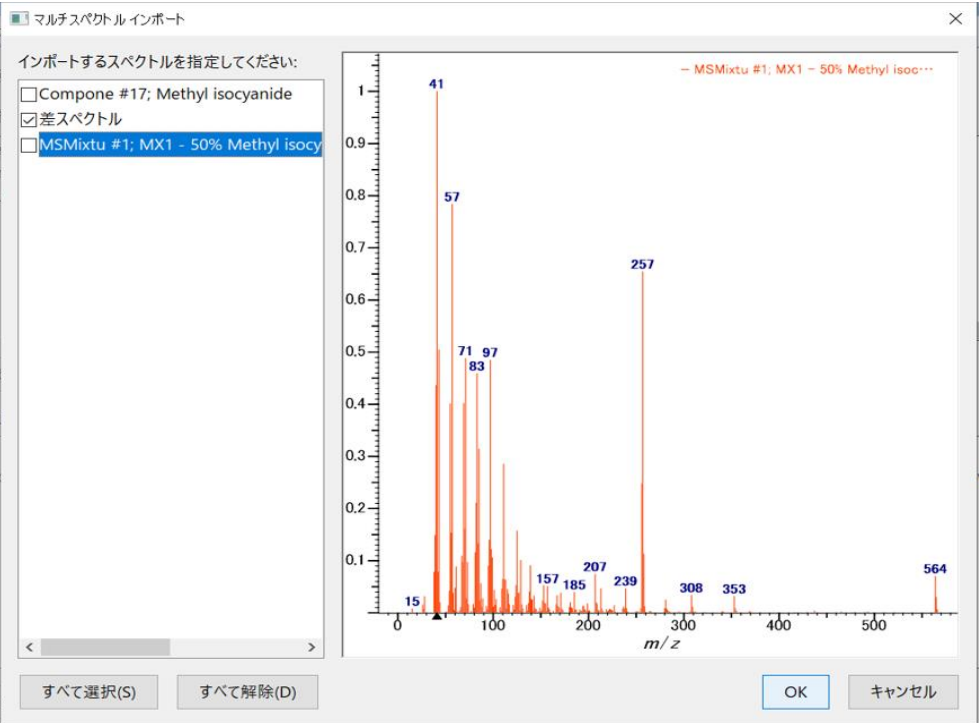
アクション	結果
3	 <p data-bbox="856 771 1696 795">分析物の MS と参照 MS は、m/z 662 で完全に整列していることがわかります。</p>
4 SearchIt に戻ります 最適化補正のチェックを外してください 再度検索を行ってください	 <p data-bbox="856 1258 1680 1282">高い m/z 範囲では、分析物のピークと参照ピークがうまく整列していません。</p>

逆検索

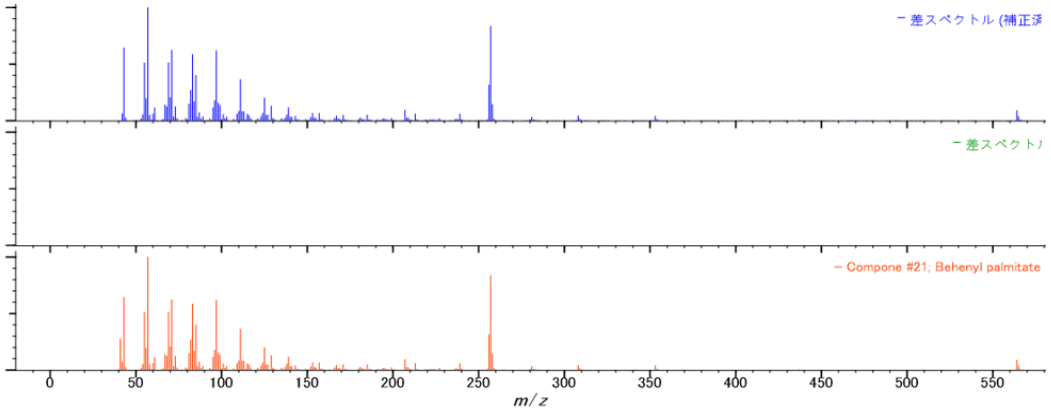
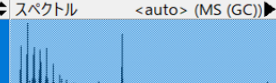
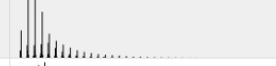
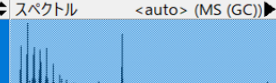
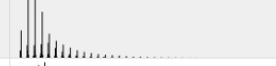
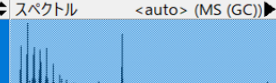
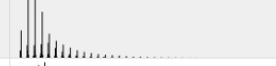
この検索では、未知のスペクトルに存在するピークが参照スペクトルに存在しないピークは無視されます

	アクション	結果
<p>1 SearchIt に戻ります</p> <p>新しい検索を開始するために  をクリックしてください。</p> <p>「Spectrum」をクリックし、 C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Mixture Analysis\MS Examples フォルダに移動してください</p> <p>「MS Mixture of Two 1」を選択して開いてください</p> <p>逆検索をチェックしてください。</p>		
<p>2 「User-Select」 ボタンをクリックしてください</p> <p>「Remove All」 ボタンを使って現在のデータベースの選択をクリアしてください。</p> <p>そして、「Select by Browsing」 ボタンを使って例のデータベースを追加してください: C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Mixture</p>		

アクション	結果
<p>Analysis\MS Examples\Components.SDBX</p> <p>検索</p>	
<p>3 Minelt で、引き算表示 (囲まれた部分) が選択されていることを確認してください。</p> <p>スペクトルペインでは、最初の行が未知のスペクトル、最後の行が参照スペクトル、中央の行が両者の差分となります。</p>	 <p>The screenshot shows the Minelt software interface. At the top, there are three stacked mass spectra plots. The top plot is labeled '- MSMixtu #1, MX1 - 50% Methyl isocyanide + 50% Behenyl palmitate (補正済)'. The middle plot is labeled '- 差スペクトル' (Difference Spectrum). The bottom plot is labeled '- Compone #17, Methyl isocyanide'. The x-axis for all plots is m/z, ranging from 0 to 550. Below the plots is a table with columns: R.HQI, HQI, Tag, Co. DI, ID, Name, and スペクトル. The table is sorted by R.HQI in descending order. The first row is highlighted in blue and contains: 1, 98.90, 5.75, mpo, 17, Methyl isocyanide. The second row is: 2, 97.92, 97.10, mpo, 21, Behenyl palmitate. To the right of the table is a 'Properties' panel for the selected compound, 'Methyl isocyanide', showing details like CAS Registry Number (75-05-8), Formula (C₂H₃N), Instrument Name (ATLAS), and Molecular Weight (41.000 g/mol).</p> <p>ヒットは最初に逆検索 HQI (R.HQI) でソートされます。</p>


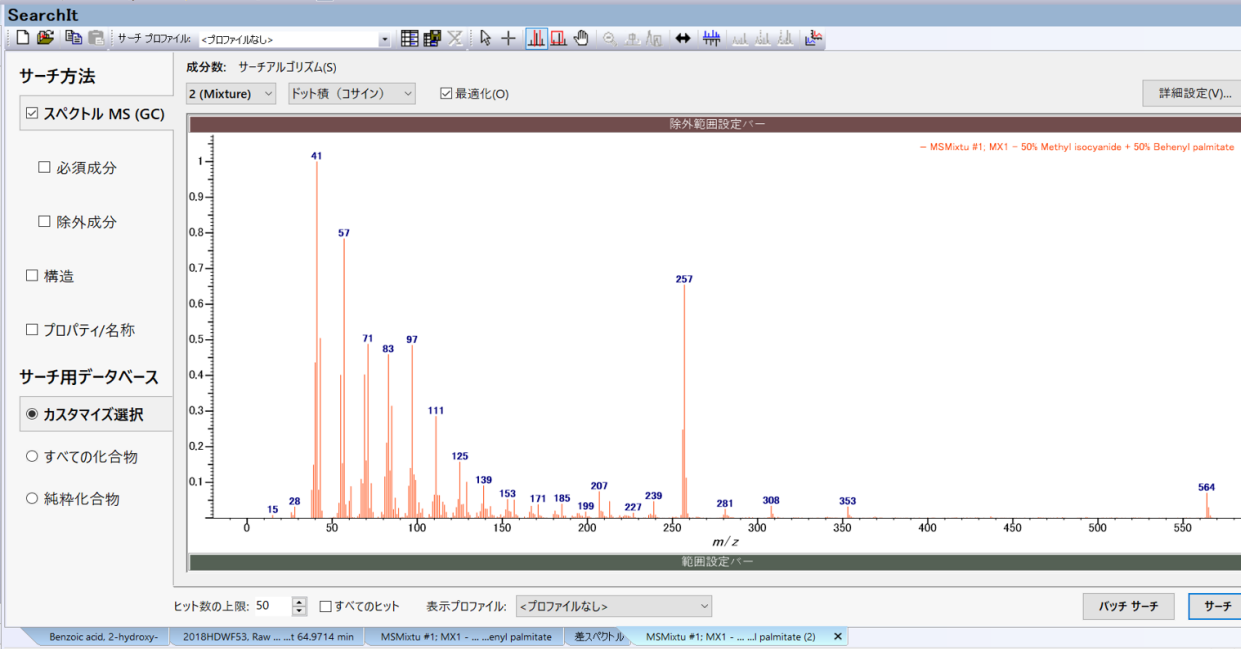
	結果
<p>4 スペクトルペインのスペクトルを、アプリケーションの上部にある「Transfer to:」メニューを使って SearchIt に転送してください。</p> <p>転送するのは差分スペクトルのみになるように選択し、「OK」をクリックしてください。</p> <p>SearchIt からのプロンプトが表示されたら、「Start a new search」を選択してください。</p>	

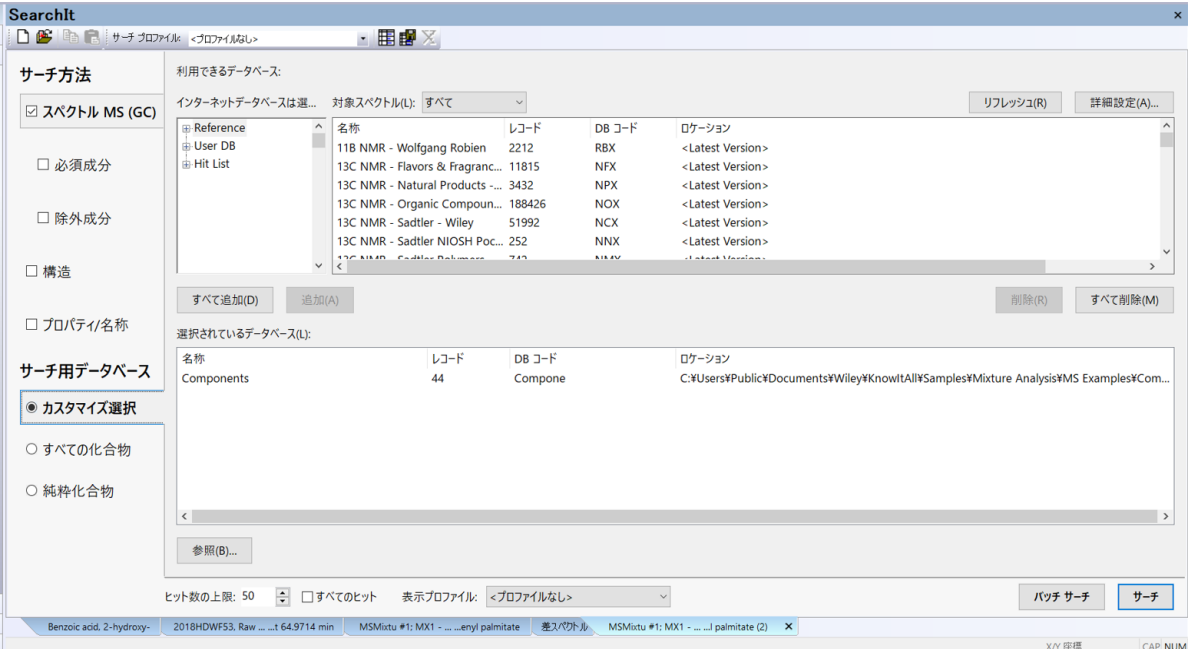
アクション	結果
<p>5 「Search」 をクリックします。</p>	<p>The screenshot shows the SearchIt software interface. On the left, there are search method options: スペクトル MS (GC) (checked), スペクトル, ピーク情報, 構造, and プロパティ/名称. Below these are search database options: カスタマイズ選択 (selected), すべての化合物, and 純粋化合物. The main area displays a mass spectrum plot with the x-axis labeled <i>m/z</i> and the y-axis representing relative intensity. The base peak is at <i>m/z</i> 57. Other significant peaks are labeled at <i>m/z</i> 43, 71, 83, 97, 111, 125, 139, 153, 171, 185, 199, 207, 227, 239, 257, 281, 308, 353, and 564. At the bottom, there are search parameters: ヒット数の上限: 50, すべてのヒット (unchecked), and 表示プロファイル: <プロフィールなし>. A 検索 button is visible on the right.</p>

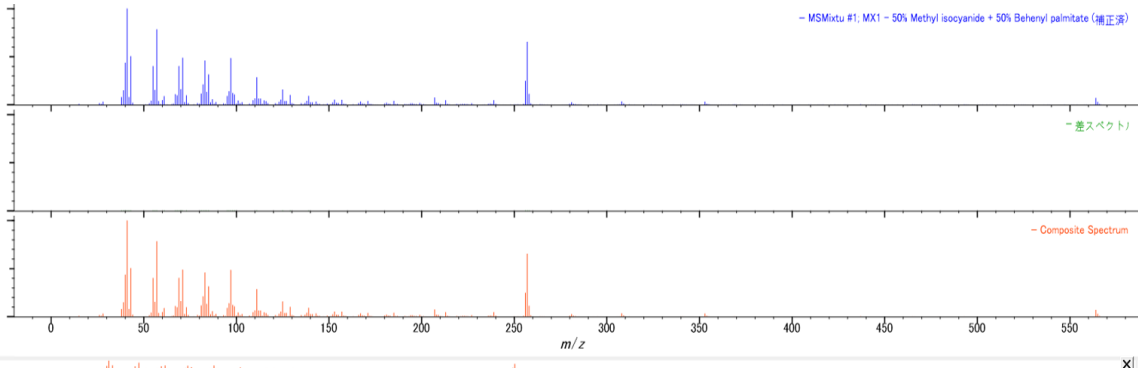
アクション	結果																						
5	 <p>MS (GC)</p> <table border="1" data-bbox="903 787 1953 982"> <thead> <tr> <th>HQI</th> <th>R.HQI</th> <th>Tag</th> <th>Co</th> <th>DI</th> <th>ID</th> <th>Name</th> <th>スペクトル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>99.23</td> <td>99.23</td> <td>impo</td> <td>21</td> <td>Behenyl palmitate</td> <td></td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>45.45</td> <td>68.48</td> <td>impo</td> <td>38</td> <td>Octatriacontane</td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <p>第 2 の成分が特定されます。</p> <p>差分スペクトルが空であることに注意してください。これは、これ以上の成分が存在しないことを意味します。</p>	HQI	R.HQI	Tag	Co	DI	ID	Name	スペクトル	1	99.23	99.23	impo	21	Behenyl palmitate		2	45.45	68.48	impo	38	Octatriacontane	
HQI	R.HQI	Tag	Co	DI	ID	Name	スペクトル																
1	99.23	99.23	impo	21	Behenyl palmitate																		
2	45.45	68.48	impo	38	Octatriacontane																		

混合物の解析


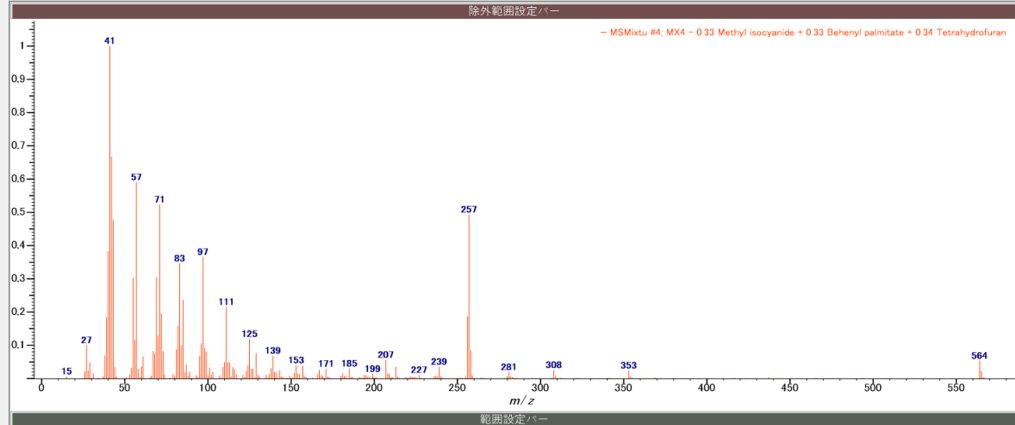
2 成分の MS スペクトルがほとんど重ならず、そのうちの 1 つが広い MS 範囲を持つ混合物です

アクション	結果
<p>1 SearchIt に戻ります。</p> <p> をクリックすることで新しい検索を開始してください。</p> <p>「MS Mixture of Two 1」を選択してください。</p> <p>逆検索または適応的検索がチェックされていないことを確認してください。</p> <p>ドロップダウンメニューを使用して、成分の数を 2 に設定してください。</p>	

アクション	結果																																								
<p>2 「User-Select」をクリックしてください。</p> <p>Components データベースが選択されていることを確認して、それを使用してください。</p> <p>「Search」をクリックします。</p>	 <p>The screenshot shows the SearchIt application window. On the left, under '検索方法' (Search Method), 'スペクトル MS (GC)' (Spectrum MS (GC)) is selected. Under '検索用データベース' (Search Database), 'カスタマイズ選択' (Custom Selection) is chosen, and 'Components' is selected. The main area displays a table of search results:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Flavors & Fragranc...</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Natural Products ...</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Organic Compoun...</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler Reference</td> <td>743</td> <td>NPX</td> <td><Latest Version></td> </tr> </tbody> </table> <p>Below this table, another table shows the selected database 'Components':</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Components</td> <td>44</td> <td>Compone</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Mixture Analysis\MS Examples\Com...</td> </tr> </tbody> </table> <p>At the bottom, the search criteria are shown: 'ヒット数の上限: 50' (Hit limit: 50), 'すべてのヒット' (All hits), and '表示プロファイル: <プロフィールなし>' (Display profile: <no profile>). The '検索' (Search) button is highlighted.</p>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>	13C NMR - Flavors & Fragranc...	11815	NFX	<Latest Version>	13C NMR - Natural Products ...	3432	NPX	<Latest Version>	13C NMR - Organic Compoun...	188426	NOX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...	252	NNX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler Reference	743	NPX	<Latest Version>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	Components	44	Compone	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Mixture Analysis\MS Examples\Com...
名称	レコード	DB コード	ロケーション																																						
11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>																																						
13C NMR - Flavors & Fragranc...	11815	NFX	<Latest Version>																																						
13C NMR - Natural Products ...	3432	NPX	<Latest Version>																																						
13C NMR - Organic Compoun...	188426	NOX	<Latest Version>																																						
13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>																																						
13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...	252	NNX	<Latest Version>																																						
13C NMR - Sadtler Reference	743	NPX	<Latest Version>																																						
名称	レコード	DB コード	ロケーション																																						
Components	44	Compone	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Mixture Analysis\MS Examples\Com...																																						

アクション	結果																																
	 <p data-bbox="676 695 1806 722">Raman MS (GC) NMR</p> <table border="1" data-bbox="676 727 1806 933"> <thead> <tr> <th>テーブル</th> <th>プロット</th> <th>関連化合物データ</th> <th>Co</th> <th>DE</th> <th>ID</th> <th>Name</th> <th>スペクトル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>100.00</td> <td>N.A.</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>Composite Spectrum</td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>0.50</td> <td><input type="radio"/></td> <td>impo</td> <td>17</td> <td>Methyl isocyanide</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>0.50</td> <td><input type="radio"/></td> <td>impo</td> <td>21</td> <td>Behenyl palmitate</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <p data-bbox="661 1039 1921 1128">KnowItAll による 2 成分の検索結果が表示されます。上のスペクトルは未知のものであり、下のスペクトルは 2 つの成分の合成スペクトルです。中央のスペクトルは、両者の差分を表します。この場合、差分スペクトルはほとんど存在せず、残存するピークはほとんどありません。</p> <p data-bbox="661 1169 1921 1193">注意：これは、2 成分の MS スペクトルがほとんど重ならず、そのうちの 1 つが広い MS 範囲を持つ例です。</p>	テーブル	プロット	関連化合物データ	Co	DE	ID	Name	スペクトル	1	100.00	N.A.				Composite Spectrum			0.50	<input type="radio"/>	impo	17	Methyl isocyanide				0.50	<input type="radio"/>	impo	21	Behenyl palmitate		
テーブル	プロット	関連化合物データ	Co	DE	ID	Name	スペクトル																										
1	100.00	N.A.				Composite Spectrum																											
	0.50	<input type="radio"/>	impo	17	Methyl isocyanide																												
	0.50	<input type="radio"/>	impo	21	Behenyl palmitate																												

より複雑な例

アクション	結果
<p>1 SearchIt に戻ります。</p> <p> をクリックすることで新しい検索を開始してください。</p> <p>「MS Mixture of Three」のファイルを選択してください。</p> <p>ドロップダウンメニューを使用して、成分の数を 3 (混合物) に設定してください。</p>	<div style="border: 1px solid gray; padding: 5px;"> <p>検索方法</p> <p>成分数: サーチアルゴリズム(S) 3 (Mixture) ドット積 (コサイン) <input checked="" type="checkbox"/> 最適化(O) 詳細設定(V)...</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> スペクトル MS (GC)</p> <p><input type="checkbox"/> 必須成分</p> <p><input type="checkbox"/> 除外成分</p> <p><input type="checkbox"/> 構造</p> <p><input type="checkbox"/> プロパティ/名称</p> <p>サーチ用データベース</p> <p><input checked="" type="radio"/> カスタマイズ選択</p> <p><input type="radio"/> すべての化合物</p> <p><input type="radio"/> 純粋化合物</p> </div> <div style="border: 1px solid gray; padding: 5px; margin-top: 5px;"> <p style="text-align: right;">除外範囲設定バー</p>  <p style="text-align: center;">m/z</p> <p style="text-align: center;">範囲設定バー</p> <p>ヒット数の上限: 50 <input type="checkbox"/> すべてのヒット 表示プロファイル: <プロフィールなし> バッチ サーチ サーチ</p> <p style="font-size: small; border-top: 1px solid gray; padding-top: 2px;">Benzoic acid, 2-hydroxy- 2016HDWF53, Raw ... 64.9714 min MSMixtu #1: MX1 - ... enyl palmitate 遷スペクトル MSMixtu #1: MX1 - ... palmitate (2) MSMixtu #4: MX4 - ... trahydrofuran X (176.987, 0.911) CAP NUM</p> </div>


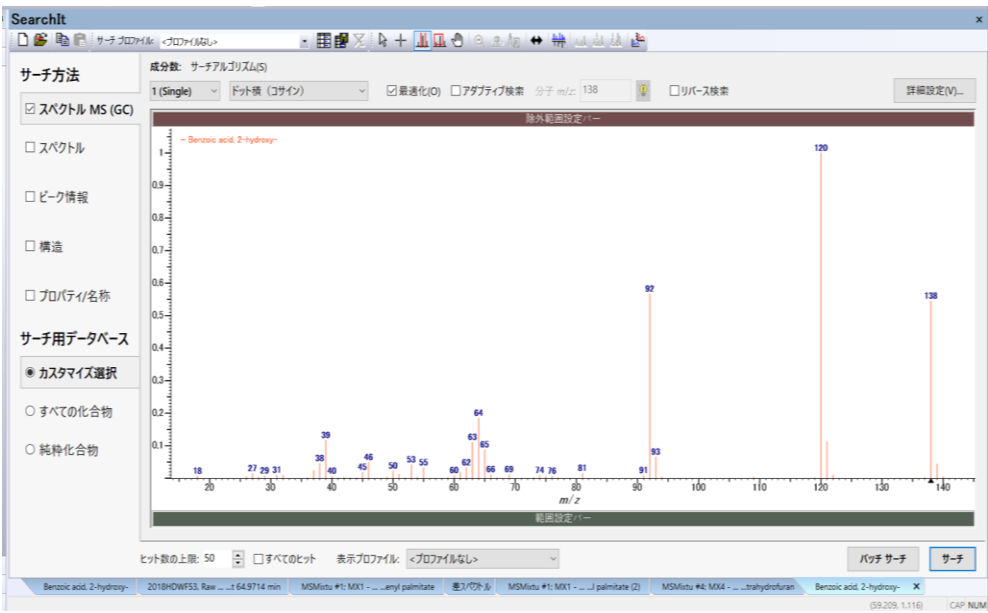
アクション	結果																																
<p>2 「User-Select」をクリックしてください。</p> <p>使用するために Components データベースが選択されていることを確認してください。</p> <p>「Search」をクリックします。</p>	 <p>The screenshot shows the SearchIt application window. On the left, under '検索方法' (Search Method), 'スペクトル MS (GC)' (Spectrum MS (GC)) is selected. Under '検索用データベース' (Search Database), 'カスタマイズ選択' (Custom Selection) is chosen, and 'Components' is selected. The main area shows a table of search results:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Flavors & Fragranc...</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Natural Products ...</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Organic Compoun...</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler Reference</td> <td>742</td> <td>NMX</td> <td><Latest Version></td> </tr> </tbody> </table> <p>Below this table, '選択されているデータベース(L):' (Selected Database(L)) shows 'Components' with 44 records and DB code 'Compone'. At the bottom, the '検索' (Search) button is highlighted.</p>	名称	レコード	DB コード	ロケーション	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>	13C NMR - Flavors & Fragranc...	11815	NFX	<Latest Version>	13C NMR - Natural Products ...	3432	NPX	<Latest Version>	13C NMR - Organic Compoun...	188426	NOX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...	252	NNX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler Reference	742	NMX	<Latest Version>
名称	レコード	DB コード	ロケーション																														
11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>																														
13C NMR - Flavors & Fragranc...	11815	NFX	<Latest Version>																														
13C NMR - Natural Products ...	3432	NPX	<Latest Version>																														
13C NMR - Organic Compoun...	188426	NOX	<Latest Version>																														
13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>																														
13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...	252	NNX	<Latest Version>																														
13C NMR - Sadtler Reference	742	NMX	<Latest Version>																														

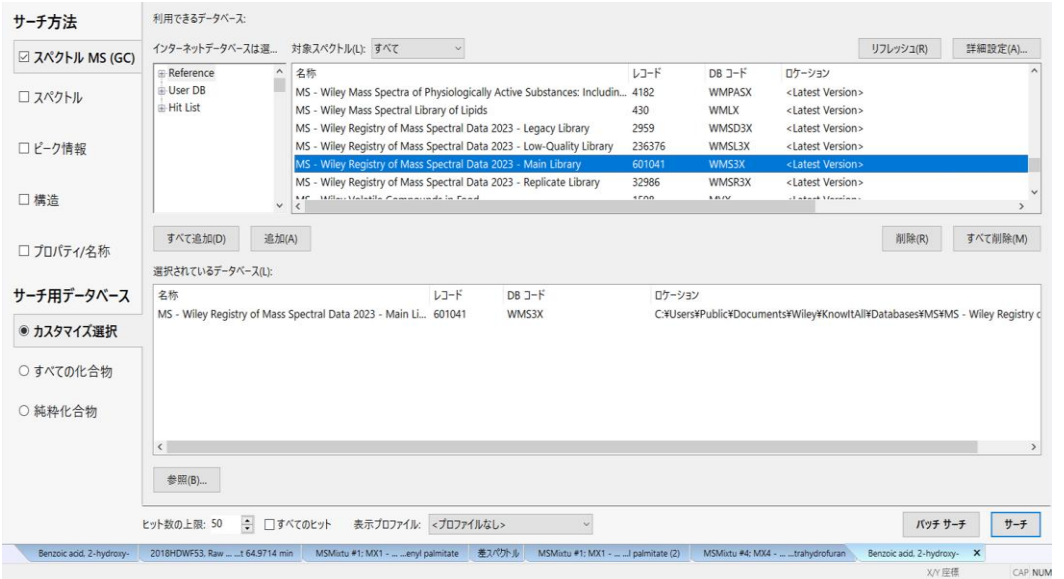
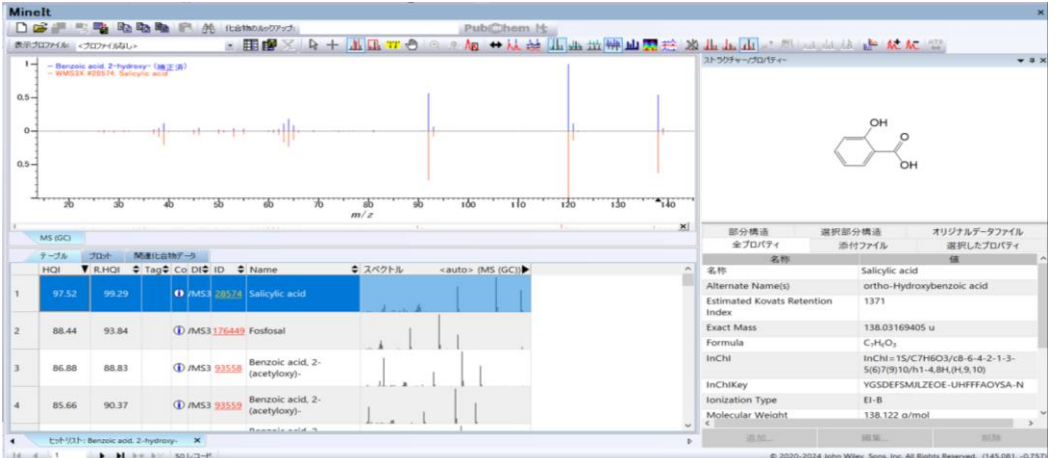
アクション	結果																																																				
	 <p style="text-align: right;">- MS Mixtu #4: MX4 - 0.33 Methyl isocyanide + 0.33 Behenyl palmitate + 0.34 Tetrahydrofuran (補正済)</p> <p style="text-align: right;">- 差スペクトル</p> <p style="text-align: right;">- Composite Spectrum</p> <p style="text-align: center;">m/z</p> <table border="1" data-bbox="703 552 1869 836"> <thead> <tr> <th colspan="2">Raman</th> <th colspan="2">MS (GC)</th> <th colspan="2">NMR</th> </tr> <tr> <th colspan="2">テーブル</th> <th colspan="2">プロット</th> <th colspan="2">関連化合物データベース</th> </tr> <tr> <th>HQI</th> <th>▼ 構成比</th> <th>除く</th> <th>Co</th> <th>DI</th> <th>ID</th> <th>Name</th> <th>スペクトル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>100.00</td> <td>N.A.</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>Composite Spectrum</td> <td><auto> (Raman)</td> </tr> <tr> <td></td> <td>0.34</td> <td><input type="radio"/></td> <td></td> <td></td> <td>mpo 44</td> <td>Tetrahydrofuran</td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>0.33</td> <td><input type="radio"/></td> <td></td> <td></td> <td>mpo 17</td> <td>Methyl isocyanide</td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>0.33</td> <td><input type="radio"/></td> <td></td> <td></td> <td>mpo 21</td> <td>Behenyl palmitate</td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <p>KnowItAll による 3 成分の検索結果が表示されます。上のスペクトルは未知のものであり、下のスペクトルは 3 つの成分の合成スペクトルです。中央のスペクトルは、両者の差分を表します。この場合、差分スペクトルはほとんど存在せず、残存するピークはほとんどありません。</p> <p>このプロセスにより、多くの手順が一度に行われます。また、スペクトルの引き算による負のピークも回避されます。</p>	Raman		MS (GC)		NMR		テーブル		プロット		関連化合物データベース		HQI	▼ 構成比	除く	Co	DI	ID	Name	スペクトル	1	100.00	N.A.				Composite Spectrum	<auto> (Raman)		0.34	<input type="radio"/>			mpo 44	Tetrahydrofuran			0.33	<input type="radio"/>			mpo 17	Methyl isocyanide			0.33	<input type="radio"/>			mpo 21	Behenyl palmitate	
Raman		MS (GC)		NMR																																																	
テーブル		プロット		関連化合物データベース																																																	
HQI	▼ 構成比	除く	Co	DI	ID	Name	スペクトル																																														
1	100.00	N.A.				Composite Spectrum	<auto> (Raman)																																														
	0.34	<input type="radio"/>			mpo 44	Tetrahydrofuran																																															
	0.33	<input type="radio"/>			mpo 17	Methyl isocyanide																																															
	0.33	<input type="radio"/>			mpo 21	Behenyl palmitate																																															

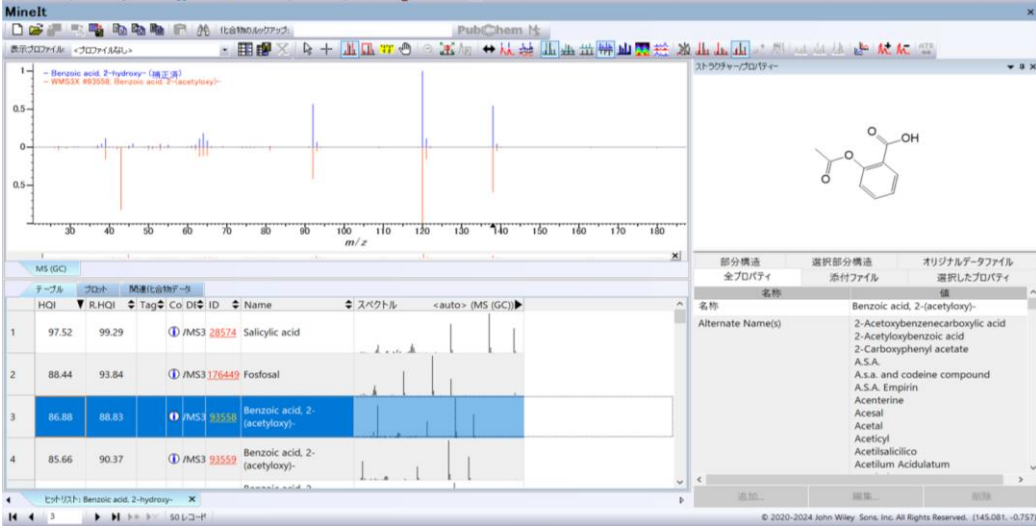
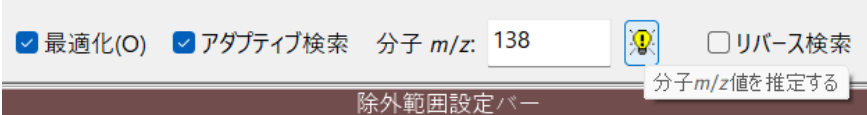
アダプティブ検索

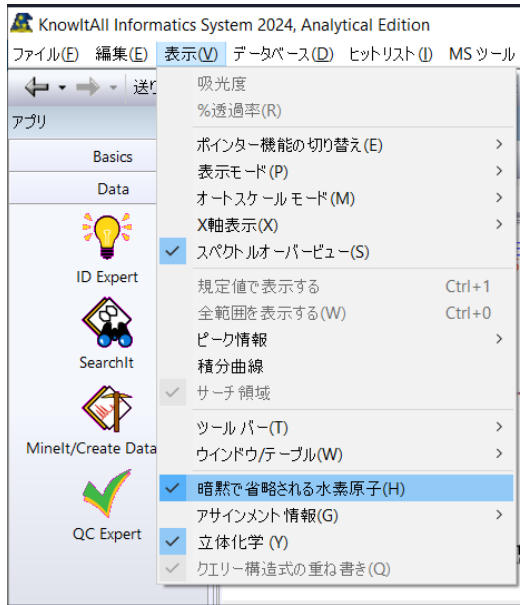
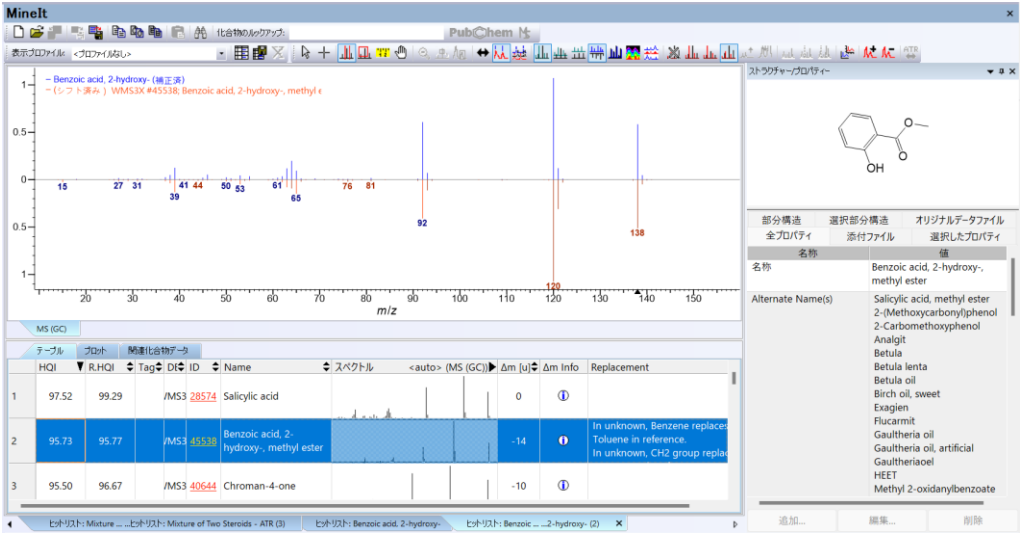
アダプティブ検索は、未知の化合物と比較して、フラグメントグループの存在や欠落によって類似した化合物を見つけます。参照 MS の一部のピーク位置が未知のピーク位置と Δm (デルタマス) と呼ばれる質量差で異なる場合があります。KnowItAll は、 Δm の値に基づいて一部のピークをシフトさせ、より良いマッチングスコアを実現します。マッチングスコアが向上することで、類似した化合物がヒットリストの上位に表示されます。アダプティブ検索によるシフトは、参照スペクトルのシフト前後を明確にするために、ヒットの(i)ボタンをクリックするとポップアップウィンドウで点線で表示されます。

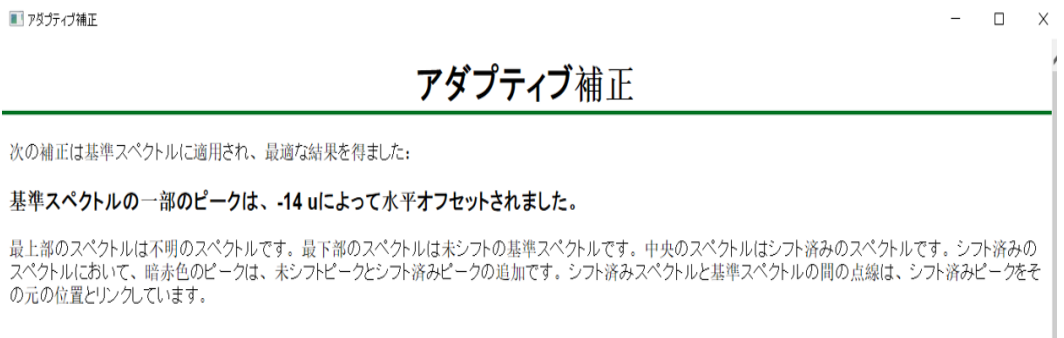
正確な質量がスペクトル上に存在する例

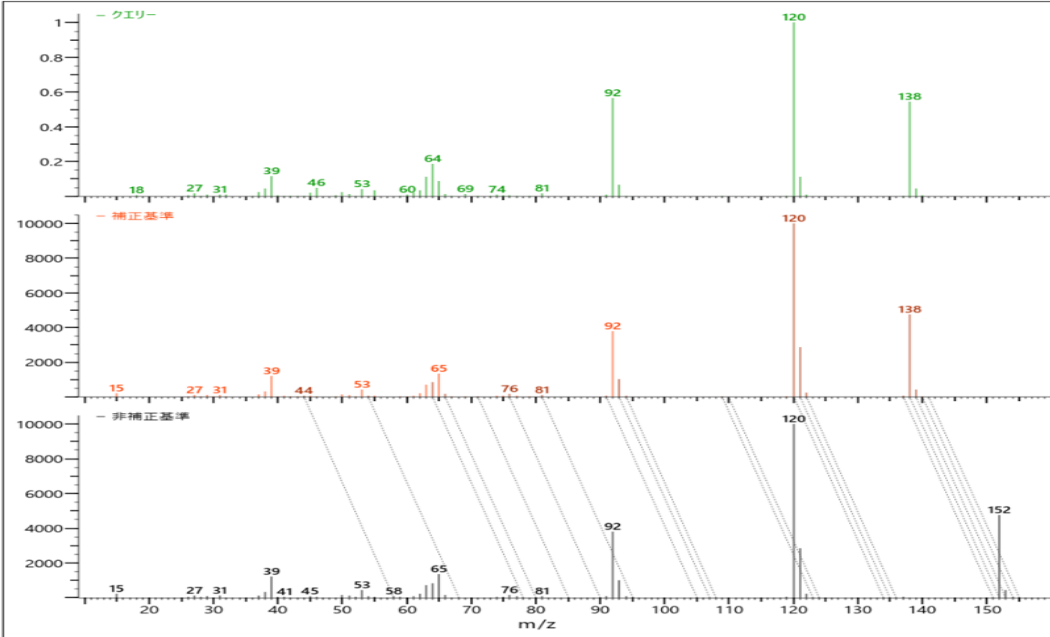
	アクション	結果
1	<p> をクリックすることで新しい検索を開始してください。</p> <p>「Spectrum」をクリックして、 C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\MS フォルダに移動します</p> <p>2-Hydroxybenzoic acid というファイルを選択します。</p> <p>ドロップダウンメニューを使用して、成分の数を 1 (単一) に設定してください。</p> <p>Adaptive Search または Reverse Search のチェックが外れていることを確認します。</p>	 <p>このスペクトルファイルには、分子イオンの質量が 138 と記載されています。KnowItAll はこの値をアダプティブ検索に使用します。</p>

アクション	結果																																											
<p>2 「User-Select」 ボタンをクリックしてください</p> <p>選択されたデータベースをすべて削除するには、「Remove All」を使用します。</p> <p>「Add」をクリックして、コード WMS3X で MS (GC) データベースを追加します。</p> <p>「Search」をクリックします。</p>	 <p>利用できるデータベース:</p> <p>インターネットデータベースは選... 対象スペクトル(L): すべて</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Reference</th> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ローション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>MS - Wiley Mass Spectra of Physiologically Active Substances: Includin...</td> <td></td> <td>4182</td> <td>WMPASX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>MS - Wiley Mass Spectral Library of Lipids</td> <td></td> <td>430</td> <td>WMLX</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Legacy Library</td> <td></td> <td>2959</td> <td>WMSD3X</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Low-Quality Library</td> <td></td> <td>236376</td> <td>WMSL3X</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Main Library</td> <td></td> <td>601041</td> <td>WMS3X</td> <td><Latest Version></td> </tr> <tr> <td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Replicate Library</td> <td></td> <td>32986</td> <td>WMSR3X</td> <td><Latest Version></td> </tr> </tbody> </table> <p>すべて追加(D) 追加(A) 削除(R) すべて削除(M)</p> <p>選択されているデータベース(L):</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>レコード</th> <th>DB コード</th> <th>ローション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Main Li...</td> <td>601041</td> <td>WMS3X</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\MS\MS - Wiley Registry c...</td> </tr> </tbody> </table> <p>検索用データベース</p> <p><input checked="" type="radio"/> カスタマイズ選択</p> <p><input type="radio"/> すべての化合物</p> <p><input type="radio"/> 純粋化合物</p> <p>ヒット数の上限: 50 <input type="checkbox"/> すべてのヒット 表示プロファイル: <プロファイルなし></p> <p>バッチサーチ サーチ</p>	Reference	名称	レコード	DB コード	ローション	MS - Wiley Mass Spectra of Physiologically Active Substances: Includin...		4182	WMPASX	<Latest Version>	MS - Wiley Mass Spectral Library of Lipids		430	WMLX	<Latest Version>	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Legacy Library		2959	WMSD3X	<Latest Version>	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Low-Quality Library		236376	WMSL3X	<Latest Version>	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Main Library		601041	WMS3X	<Latest Version>	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Replicate Library		32986	WMSR3X	<Latest Version>	名称	レコード	DB コード	ローション	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Main Li...	601041	WMS3X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\MS\MS - Wiley Registry c...
Reference	名称	レコード	DB コード	ローション																																								
MS - Wiley Mass Spectra of Physiologically Active Substances: Includin...		4182	WMPASX	<Latest Version>																																								
MS - Wiley Mass Spectral Library of Lipids		430	WMLX	<Latest Version>																																								
MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Legacy Library		2959	WMSD3X	<Latest Version>																																								
MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Low-Quality Library		236376	WMSL3X	<Latest Version>																																								
MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Main Library		601041	WMS3X	<Latest Version>																																								
MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Replicate Library		32986	WMSR3X	<Latest Version>																																								
名称	レコード	DB コード	ローション																																									
MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Main Li...	601041	WMS3X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\MS\MS - Wiley Registry c...																																									
<p>3 バタフライビューアイコンをクリックします。</p>	 <p>Minelt</p> <p>1 - Benzoic acid, 2-hydroxy- (純正) WMS3X 9353.74 Salicylic acid</p> <p>名前 Salicylic acid</p> <p>Alternate Name(s) ortho-Hydroxybenzoic acid</p> <p>Estimated Kovats Retention 1371</p> <p>Index</p> <p>Exact Mass 138.03169405 u</p> <p>Formula C₇H₆O₃</p> <p>InChI InChI=1S/C7H6O3/c8-6-4-2-1-3-5(7)/9-10/1-4,8-10</p> <p>InChIKey YGSDFSMILZEO-UHFFFAOYSA-N</p> <p>Ionization Type EI-B</p> <p>Molecular Weight 138.122 g/mol</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名前</th> <th>スペクトル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1 97.52 99.29 <input checked="" type="radio"/> /MS3 26524 Salicylic acid</td> <td></td> </tr> <tr> <td>2 88.44 93.84 <input type="radio"/> /MS3 176449 Fosfosal</td> <td></td> </tr> <tr> <td>3 86.88 88.83 <input type="radio"/> /MS3 93558 Benzoic acid, 2-(acetyloxy)-</td> <td></td> </tr> <tr> <td>4 85.66 90.37 <input type="radio"/> /MS3 93559 Benzoic acid, 2-(acetyloxy)-</td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	名前	スペクトル	1 97.52 99.29 <input checked="" type="radio"/> /MS3 26524 Salicylic acid		2 88.44 93.84 <input type="radio"/> /MS3 176449 Fosfosal		3 86.88 88.83 <input type="radio"/> /MS3 93558 Benzoic acid, 2-(acetyloxy)-		4 85.66 90.37 <input type="radio"/> /MS3 93559 Benzoic acid, 2-(acetyloxy)-																																		
名前	スペクトル																																											
1 97.52 99.29 <input checked="" type="radio"/> /MS3 26524 Salicylic acid																																												
2 88.44 93.84 <input type="radio"/> /MS3 176449 Fosfosal																																												
3 86.88 88.83 <input type="radio"/> /MS3 93558 Benzoic acid, 2-(acetyloxy)-																																												
4 85.66 90.37 <input type="radio"/> /MS3 93559 Benzoic acid, 2-(acetyloxy)-																																												


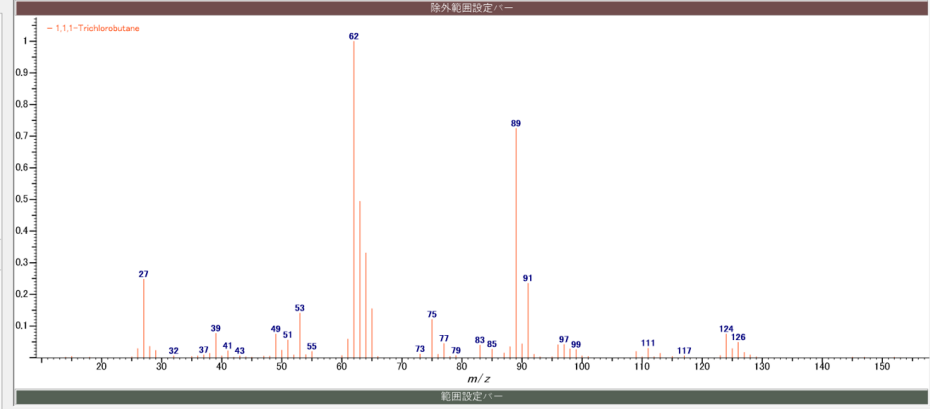
アクション	結果
<p>4 2番目のヒットをハイライトし、次に3番目のヒットをハイライトします。</p>	 <p>データベースには最初のヒットが存在しないと仮定します。2番目と3番目のヒットの HQI 値は完全には納得できるものではありません。</p>
<p>5 SearchIt に戻ります。</p> <p>「Spectrum MS(GC)」をクリックしてください</p> <p>「Adaptive Search」をチェックしてください。</p> <p>「Search」をクリックします。</p>	 <ul style="list-style-type: none"> • スペクトルファイルに分子イオンの質量が含まれている場合、「分子 m/z:」ボックスに表示され、スペクトルパネル上にはその位置を示す実心の三角形が表示されます。 • 適切な値を入力することもできます。この値はアダプティブ検索の支援に使用されます。 • または、電球アイコンをクリックして KnowItAll に分子質量の推定を依頼することもできます。 • ただし、分子イオンの質量が不明な場合、このボックスは空白のままになります。KnowItAll のアダプティブ検索は、入力された未知の MS スペクトルからこの値を推定します。


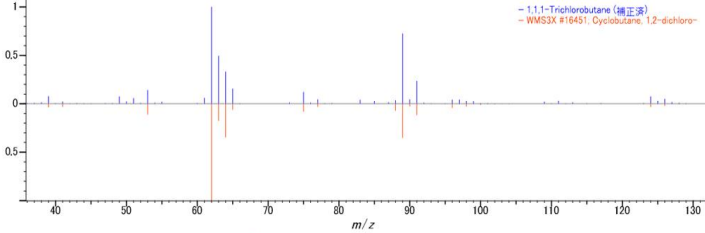
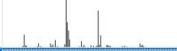
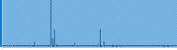
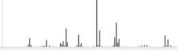
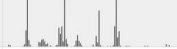
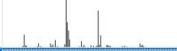
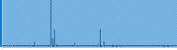
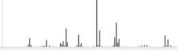
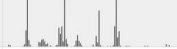
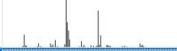
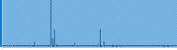
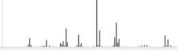
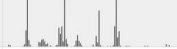
アクション	結果
<p>6 1番目のヒットを無視して、2番目のヒットに進んでください。</p> <p>KnowItAll が暗黙の水素を表示するには、View メニューに移動し、「Implicit Hydrogens」をチェックしてください</p> 	<p>結果</p>  <p>結果は良さそうです。 Δm が 1 であることから、未知の分子イオンの質量 (m/z) が参照のものより 1 単位大きい可能性がいくつか考えられます。その中には、「未知の中で酸素が参照の窒素に置換されている」という可能性もあります。</p> <p>興味のある列は以下の通りです：</p> <ul style="list-style-type: none"> • Δm : 未知の分子イオンの質量から参照の分子イオンの質量を引いた値 • Δm 情報 : マッチングを行うために参照ピークがシフトされた詳細情報 • 置換 : 未知と参照の分子イオンの質量の違いを引き起こす可能性のあるグループ交換の提案


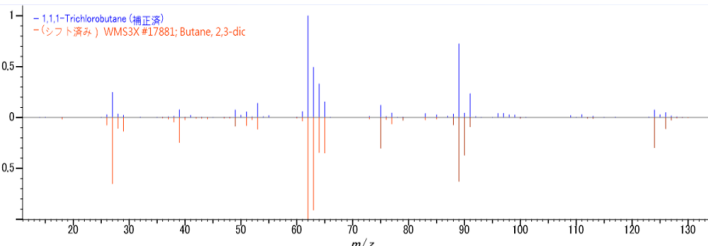

	アクション	結果
7	<p>「Δm 情報」列の(i)をクリックしてください。これにより、「Adaptive Corrections」の HTML ページが表示されます。このページでは、選択的なピークがどのようにシフトされ、良好なヒット品質指数 (HQI) を得るために調整されたかが説明されています。</p>	 <p>アダプティブ補正</p> <p>次の補正は基準スペクトルに適用され、最適な結果を得ました:</p> <p>基準スペクトルの一部のピークは、-14 uによって水平オフセットされました。</p> <p>最上部のスペクトルは不明のスペクトルです。最下部のスペクトルは未シフトの基準スペクトルです。中央のスペクトルはシフト済みのスペクトルです。シフト済みのスペクトルにおいて、暗赤色のピークは、未シフトピークとシフト済みピークの追加です。シフト済みスペクトルと基準スペクトルの間の点線は、シフト済みピークをその元の位置とリンクしています。</p>

アクション	結果
8	 <ul style="list-style-type: none">• 上部のスペクトルは未知のスペクトルです• 下部のスペクトルはシフトされていない参照スペクトルです• 中央の「スペクトル」にはシフトされたピークが含まれています• 点線は、Δmによって移動したピークを示しています• 中央の「スペクトル」では、濃い赤色のピークは既存のピークに追加されたものや移動したピークを表しています


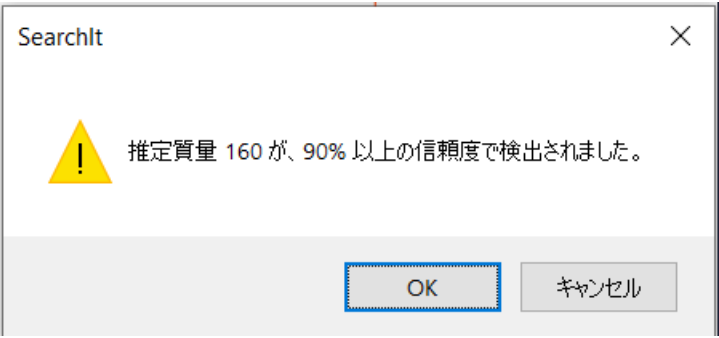

スペクトルに正確な質量が含まれていない例を見てみましょう

	アクション	結果
1	<p> をクリックすることで新しい検索を開始してください。</p> <p>「Spectrum」をクリックし、 C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\MS に移動してください。</p> <p>「1,1,1-Trichlorobutane」のファイルを選択します。</p> <p>ドロップダウンメニューを使用して、成分の数を 1 (単一) に設定してください。</p> <p>Adaptive Search または Reverse Search のチェックが外れていることを確認します。</p> <p>「User-Select」をクリックします。</p> <p>選択されたデータベースをすべて削除するには、 「Remove All」を使用します。</p> <p>「Add」をクリックして、コード WMS3X で MS (GC) データベースを追加します。</p> <p>「Search」をクリックします。</p>	<p>検索方法</p> <p>成分数: サーチアルゴリズム(5) 1 (Single) ドット積 (コサイン) <input checked="" type="checkbox"/> 最適化(O) <input type="checkbox"/> アダプティブ検索 分子 m/z: <input type="text"/> <input type="button" value="リバース検索"/> <input type="button" value="詳細設定(V)..."/></p> <p><input checked="" type="checkbox"/> スペクトル MS (GC)</p> <p><input type="checkbox"/> スペクトル</p> <p><input type="checkbox"/> ピーク情報</p> <p><input type="checkbox"/> 構造</p> <p><input type="checkbox"/> プロパティ/名称</p> <p>サーチ用データベース</p> <p><input checked="" type="radio"/> カスタマイズ選択</p> <p><input type="radio"/> すべての化合物</p> <p><input type="radio"/> 純粋化合物</p>  <p>ヒット数の上限: 50 <input type="checkbox"/> すべてのヒット 表示プロファイル: <プロフィールなし> <input type="button" value="パッチサーチ"/> <input type="button" value="サーチ"/></p> <p>このスペクトルには分子イオンの質量が含まれていないことがわかります。KnowItAll はこの値を推定し、アダプティブ検索に使用します。</p>

アクション	結果																																																																				
<p>2</p> <p>バタフライビューアイコン  をクリックします。</p> <p>1 番目のヒットは完全一致ですが（データベースに完全一致がない場合を想定して）、2 番目のヒットに進んでください。</p>	 <table border="1" data-bbox="856 568 1556 857"> <thead> <tr> <th>MS (GC)</th> <th>名前</th> <th>HQI</th> <th>R.HQI</th> <th>Tag</th> <th>Co</th> <th>DI</th> <th>ID</th> <th>Name</th> <th>スペクトル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>1,1,1-Trichlorobutane</td> <td>100.00</td> <td>100.00</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>57526</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>Cyclobutane, 1,2-dichloro-</td> <td>78.93</td> <td>92.51</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>16451</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>2-Butene, 1,4-dichloro-</td> <td>64.80</td> <td>65.18</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>16447</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>1-Butene, 3,4-dichloro-</td> <td>64.23</td> <td>64.59</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>16461</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <div data-bbox="1564 324 1938 857"> <p>部分構造 選択部分構造 オリジナルデータファイル</p> <p>全プロパティ 添付ファイル 選択したプロパティ</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>値</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>名称</td> <td>Cyclobutane, 1,2-dichloro-</td> </tr> <tr> <td>Alternate Name(s)</td> <td>1,2-Dichlorocyclobutane 1,2-Bis(chloranyl)cyclobutane</td> </tr> <tr> <td>CAS Registry Number</td> <td>17437-39-7</td> </tr> <tr> <td>Estimated Kovats Retention Index</td> <td>813</td> </tr> <tr> <td>Exact Mass</td> <td>123.984656 u</td> </tr> <tr> <td>Formula</td> <td>C₄H₆Cl₂</td> </tr> <tr> <td>InChI</td> <td>InChI=1S/C4H6Cl2/c5-3-1-2-4(3)/h3-4H,1-2H2</td> </tr> <tr> <td>InChIKey</td> <td>MPWHMPULOPKVQ-UHFFFAOYSA-1</td> </tr> </tbody> </table> </div> <p>MS (GC) のバタフライビュー</p> <p><chem>ClC1CC(Cl)C1</chem></p> <p>HQI を見ても、未知の物質と構造的に類似したヒットがあるかどうかは確信が持てません。</p>	MS (GC)	名前	HQI	R.HQI	Tag	Co	DI	ID	Name	スペクトル	1	1,1,1-Trichlorobutane	100.00	100.00				57526			2	Cyclobutane, 1,2-dichloro-	78.93	92.51				16451			3	2-Butene, 1,4-dichloro-	64.80	65.18				16447			4	1-Butene, 3,4-dichloro-	64.23	64.59				16461			名称	値	名称	Cyclobutane, 1,2-dichloro-	Alternate Name(s)	1,2-Dichlorocyclobutane 1,2-Bis(chloranyl)cyclobutane	CAS Registry Number	17437-39-7	Estimated Kovats Retention Index	813	Exact Mass	123.984656 u	Formula	C ₄ H ₆ Cl ₂	InChI	InChI=1S/C4H6Cl2/c5-3-1-2-4(3)/h3-4H,1-2H2	InChIKey	MPWHMPULOPKVQ-UHFFFAOYSA-1
MS (GC)	名前	HQI	R.HQI	Tag	Co	DI	ID	Name	スペクトル																																																												
1	1,1,1-Trichlorobutane	100.00	100.00				57526																																																														
2	Cyclobutane, 1,2-dichloro-	78.93	92.51				16451																																																														
3	2-Butene, 1,4-dichloro-	64.80	65.18				16447																																																														
4	1-Butene, 3,4-dichloro-	64.23	64.59				16461																																																														
名称	値																																																																				
名称	Cyclobutane, 1,2-dichloro-																																																																				
Alternate Name(s)	1,2-Dichlorocyclobutane 1,2-Bis(chloranyl)cyclobutane																																																																				
CAS Registry Number	17437-39-7																																																																				
Estimated Kovats Retention Index	813																																																																				
Exact Mass	123.984656 u																																																																				
Formula	C ₄ H ₆ Cl ₂																																																																				
InChI	InChI=1S/C4H6Cl2/c5-3-1-2-4(3)/h3-4H,1-2H2																																																																				
InChIKey	MPWHMPULOPKVQ-UHFFFAOYSA-1																																																																				

アクション	結果																																																																		
<p>3 SearchIt に戻ります</p> <p>アダプティブ検索をチェックします</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> 最適化(O) <input checked="" type="checkbox"/> アダプティブ検索 分子 m/z: <input type="text"/></p> <p>検索</p> <p>Minelt で、パタフライビューアイコン  をクリックします。</p> <p>2 番目のヒットに移動します (1 番目は既にデータベースに存在する未知の物質です)。</p>	<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="width: 60%;">  </div> <div style="width: 35%;">  </div> </div> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th colspan="2">MS (GC)</th> <th>部分構造</th> <th>選択部分構造</th> <th>オリジナルデータファイル</th> </tr> <tr> <th>テーブル</th> <th>プロット</th> <th>関連化合物データ</th> <th>全プロパティ</th> <th>添付ファイル</th> </tr> <tr> <th>HQI</th> <th>R.HQI</th> <th>Tag</th> <th>ID</th> <th>Name</th> <th>スペクトル</th> <th><auto> (MS (GC))</th> <th>Δm [u]</th> <th>Δm Info</th> <th>Replacement</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>100.00</td> <td>100.00</td> <td>/MS3 57526</td> <td>1,1,1-Trichlorobutane</td> <td></td> <td><auto></td> <td>0</td> <td>①</td> <td></td> </tr> <tr style="background-color: #e0f0ff;"> <td>2</td> <td>82.79</td> <td>67.26</td> <td>/MS3 17881</td> <td>Butane, 2,3-dichloro-</td> <td></td> <td><auto></td> <td>34</td> <td>①</td> <td>In unknown, Cl Hydrogen in re In unknown, -C</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>80.65</td> <td>24.63</td> <td>/MS3 78912</td> <td>Benzenamine, 4-chloro-2-nitro-</td> <td></td> <td><auto></td> <td>-37</td> <td>①</td> <td></td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>80.59</td> <td>63.52</td> <td>/MS3 16455</td> <td>(Z)-1,3-Dichloro-2-butene</td> <td></td> <td><auto></td> <td>9</td> <td>①</td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <div style="margin-top: 10px;"> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>名称</th> <th>値</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>名称</td> <td>Butane, 2,3-dichloro-</td> </tr> <tr> <td>Alternate Name(s)</td> <td>2,3-Dichlorobutane (+/-)-2,3-Dichlorobutane 2,3-Bis(chloranyl)butane Butane, 2,3-dichloro-, (+/-)- Butane, 2,3-dichloro-, (R*,S*)- Butane, 2,3-dichloro-, (R*,R*)-(+/-)- Butane, 2,3-dichloro-, meso- di-2,3-Dichlorobutane meso-2,3-Dichlorobutane racemic-2,3-Dichlorobutane EINECS 231-486-4</td> </tr> </tbody> </table> </div> <p>「置換」の欄にある提案の中で、1つは意味をなしています。未知の物質には1つの塩素がもう1つ必要であり、Δm は 34 になります。</p>	MS (GC)		部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル	テーブル	プロット	関連化合物データ	全プロパティ	添付ファイル	HQI	R.HQI	Tag	ID	Name	スペクトル	<auto> (MS (GC))	Δm [u]	Δm Info	Replacement	1	100.00	100.00	/MS3 57526	1,1,1-Trichlorobutane		<auto>	0	①		2	82.79	67.26	/MS3 17881	Butane, 2,3-dichloro-		<auto>	34	①	In unknown, Cl Hydrogen in re In unknown, -C	3	80.65	24.63	/MS3 78912	Benzenamine, 4-chloro-2-nitro-		<auto>	-37	①		4	80.59	63.52	/MS3 16455	(Z)-1,3-Dichloro-2-butene		<auto>	9	①		名称	値	名称	Butane, 2,3-dichloro-	Alternate Name(s)	2,3-Dichlorobutane (+/-)-2,3-Dichlorobutane 2,3-Bis(chloranyl)butane Butane, 2,3-dichloro-, (+/-)- Butane, 2,3-dichloro-, (R*,S*)- Butane, 2,3-dichloro-, (R*,R*)-(+/-)- Butane, 2,3-dichloro-, meso- di-2,3-Dichlorobutane meso-2,3-Dichlorobutane racemic-2,3-Dichlorobutane EINECS 231-486-4
MS (GC)		部分構造	選択部分構造	オリジナルデータファイル																																																															
テーブル	プロット	関連化合物データ	全プロパティ	添付ファイル																																																															
HQI	R.HQI	Tag	ID	Name	スペクトル	<auto> (MS (GC))	Δm [u]	Δm Info	Replacement																																																										
1	100.00	100.00	/MS3 57526	1,1,1-Trichlorobutane		<auto>	0	①																																																											
2	82.79	67.26	/MS3 17881	Butane, 2,3-dichloro-		<auto>	34	①	In unknown, Cl Hydrogen in re In unknown, -C																																																										
3	80.65	24.63	/MS3 78912	Benzenamine, 4-chloro-2-nitro-		<auto>	-37	①																																																											
4	80.59	63.52	/MS3 16455	(Z)-1,3-Dichloro-2-butene		<auto>	9	①																																																											
名称	値																																																																		
名称	Butane, 2,3-dichloro-																																																																		
Alternate Name(s)	2,3-Dichlorobutane (+/-)-2,3-Dichlorobutane 2,3-Bis(chloranyl)butane Butane, 2,3-dichloro-, (+/-)- Butane, 2,3-dichloro-, (R*,S*)- Butane, 2,3-dichloro-, (R*,R*)-(+/-)- Butane, 2,3-dichloro-, meso- di-2,3-Dichlorobutane meso-2,3-Dichlorobutane racemic-2,3-Dichlorobutane EINECS 231-486-4																																																																		

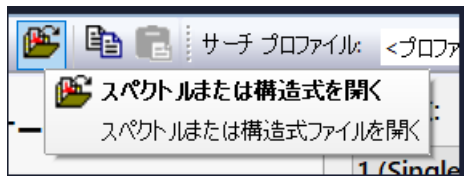
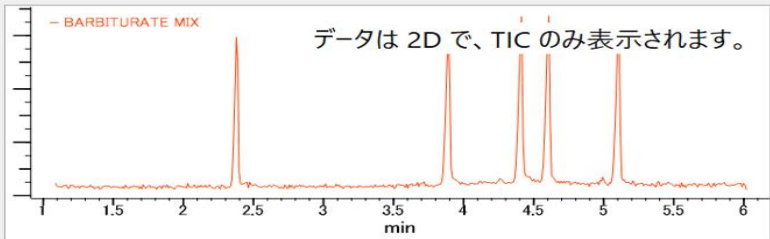
または、分子イオンの質量を推定するために分子イオンの質量推定アイコン  を使用することもできます：

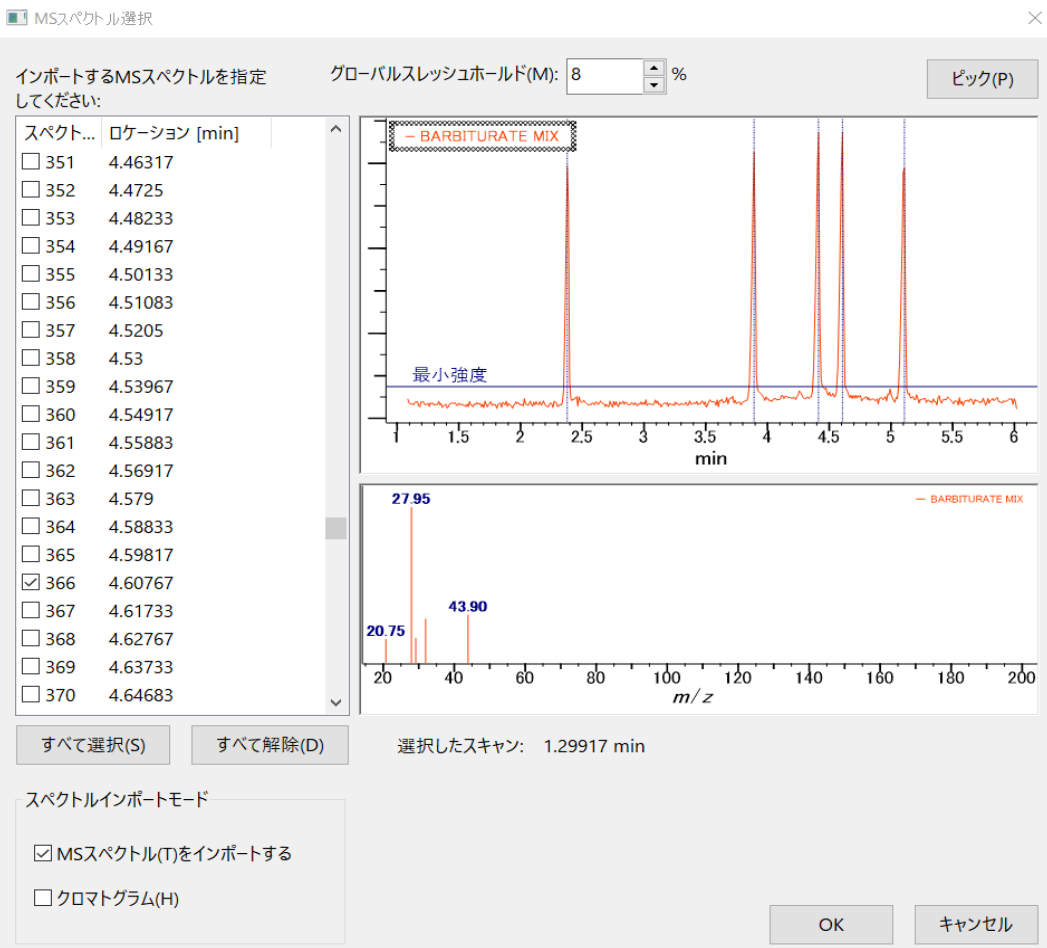
	アクション	結果
1	<p>SearchIt に戻ります。</p> <p> アイコンをクリックします</p> <p>計算が完了するのを待ちます</p>	
3	<p>OK ボタンをクリックします</p>	<p>推定された分子イオンの質量の値がボックスに入力されます。</p> <p>分子 m/z: <input type="text" value="160"/> </p>

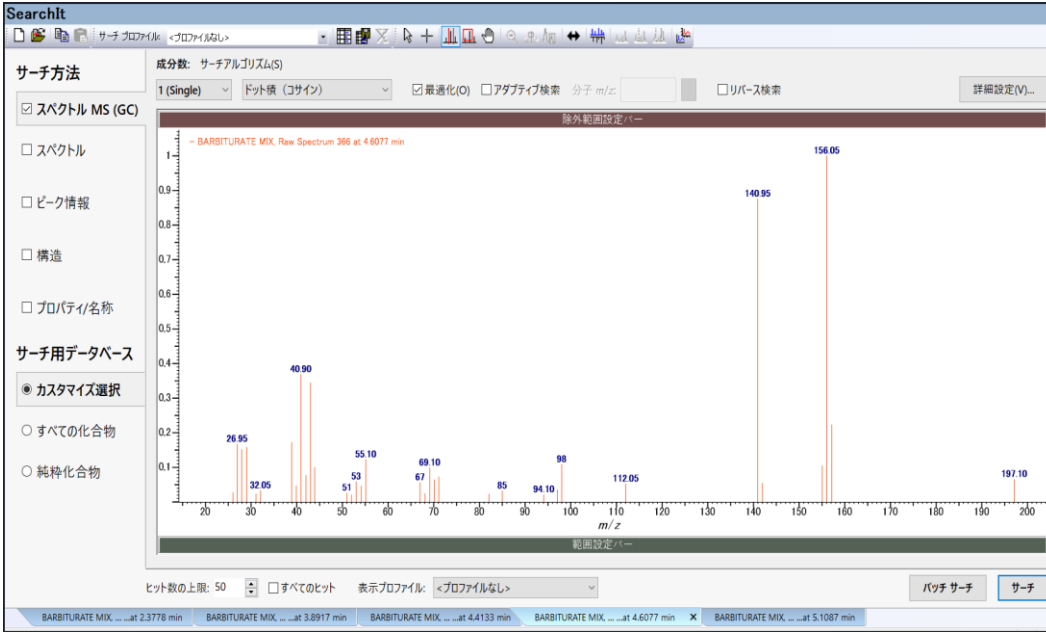
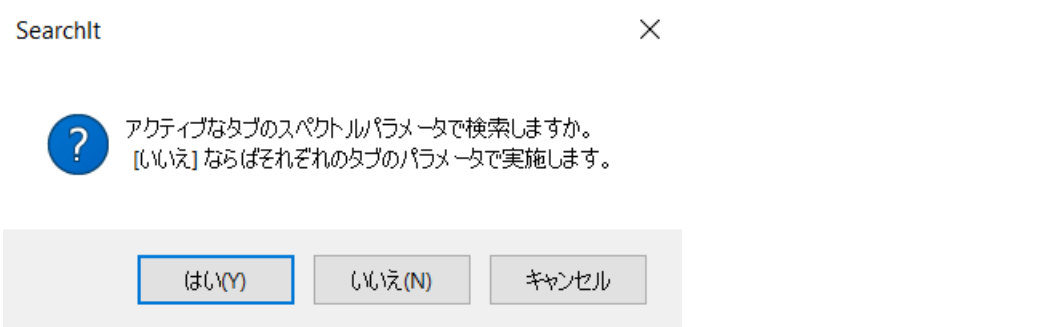
注意： KnowItAllは、未知の物質をすべてのMSデータベースに対してアダプティブ検索を実行します。その後、得られたヒットリストは段階的に分析されます。ヒットリストの各エントリの質量は、データベースレコード中の化合物の名目質量にマッチングのために見つかった Δm を加えた値として計算されます。同じ質量のマッチは、クラスターとしてまとめられます。見つかったHQIが高いほど、個々のマッチのスコアも高くなります。クラスターのスコアは、個々のマッチのスコアを基に、クラスター内のエントリ数や次に優れたクラスターとの差などの追加情報も考慮して計算されます。最もスコアの高いクラスターが見つかった質量を決定します。この手順によって、見つかった質量が正しいかどうかの信頼度の情報も報告されます。

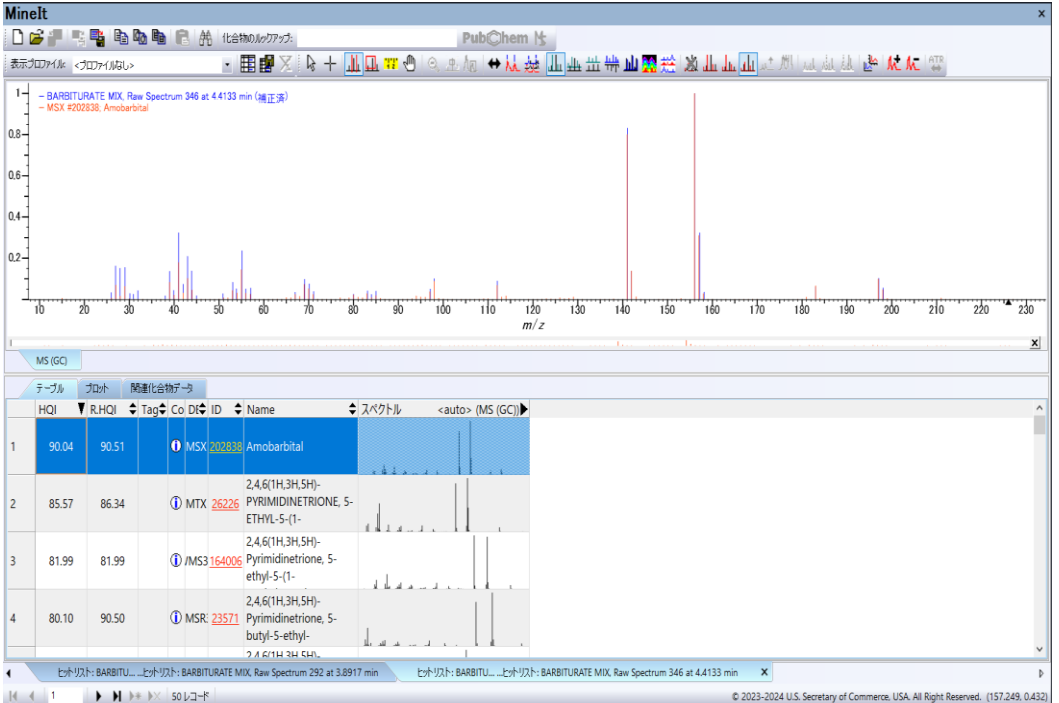
アルゴリズムによって得られた信頼度の値は、非常に多様な化合物のスペクトルを数千回も実行し、それらをMSデータと比較して統計的に算出されました。

同時多重 MS スペクトラ検索

アクション	結果																					
<p>1 SearchIt で、「Open Spectrum or Structure」を選択します</p>  <p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\GC-MS\Barbiturate GC-MS.d に移動します</p> <p>前のダイアログで「Open」をクリックします</p>	<p>ファイルを開く</p> <p>ファイルの場所(I): GC-MS</p> <table border="1"><thead><tr><th>Name</th><th>Date modified</th><th>Type</th></tr></thead><tbody><tr><td>Barbiturate GC-MS.d</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>D File</td></tr><tr><td>Structure 1 - Barbitol</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 2 - Butethal</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 3 - Amobarbital</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 4 - Pentobarbital</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 5 - Secobarbital</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>DSF File</td></tr></tbody></table> <p>ファイル名(N): Barbiturate GC-MS 開く(O)</p> <p>ファイルの種類(T): すべてのファイル (*.*) キャンセル</p> <p>インポートされたスペクトル(I)</p>  <p>データは 2D で、TIC のみ表示されます。</p> <p>エンコード(E): <default></p>	Name	Date modified	Type	Barbiturate GC-MS.d	17-11-2022 23:41	D File	Structure 1 - Barbitol	17-11-2022 23:41	DSF File	Structure 2 - Butethal	17-11-2022 23:41	DSF File	Structure 3 - Amobarbital	17-11-2022 23:41	DSF File	Structure 4 - Pentobarbital	17-11-2022 23:41	DSF File	Structure 5 - Secobarbital	17-11-2022 23:41	DSF File
Name	Date modified	Type																				
Barbiturate GC-MS.d	17-11-2022 23:41	D File																				
Structure 1 - Barbitol	17-11-2022 23:41	DSF File																				
Structure 2 - Butethal	17-11-2022 23:41	DSF File																				
Structure 3 - Amobarbital	17-11-2022 23:41	DSF File																				
Structure 4 - Pentobarbital	17-11-2022 23:41	DSF File																				
Structure 5 - Secobarbital	17-11-2022 23:41	DSF File																				

アクション	結果
<p>2 MS Spectra Scan Selection ダイアログで、複数の MS スペクトラを選択します</p> <p>例えば、292、346、366 のように選びます</p> <p>OK ボタンをクリックします</p>	 <p>The screenshot shows the 'MS Spectra Scan Selection' dialog box. It features a list of retention times and their corresponding scan numbers. Scan 366 at 4.60767 min is selected. The dialog also includes a chromatogram plot showing peaks at various retention times, with a '最小強度' (Minimum Intensity) line. Below the chromatogram is a mass spectrum plot for the selected scan at 1.29917 min, showing peaks at m/z 20.75, 27.95, and 43.90. The mass spectrum is labeled '- BARBITURATE MIX'. The dialog has buttons for 'すべて選択(S)', 'すべて解除(D)', 'OK', and 'キャンセル'. A 'グローバルスレッシュホールド(M): 8 %' and a 'ピック(P)' button are also visible.</p>


アクション	結果
<p>3 すると、複数の検索タブが作成されます</p>	
<p>4 これらの MS スペクトラを個別に検索するには、各タブの「Search」ボタンをクリックします</p> <p>または、「Do BatchSearch」ボタンを使用し、プロンプトが表示されたら「Yes」と回答します</p>	
<p>5</p>	<p>「Do BatchSearch」を選択した場合、複数のヒットが Minelt に転送されます</p>

アクション	結果																																								
	 <p>The screenshot displays the Minelt software interface. At the top, there is a title bar and a menu bar. Below that is a toolbar with various icons. The main area shows a mass spectrum plot with the x-axis labeled 'm/z' ranging from 10 to 230 and the y-axis representing relative intensity from 0 to 1.0. The plot shows several peaks, with the most prominent ones around m/z 140 and 150. Below the plot is a table with the following columns: HQI, R.HQI, Tag, Co, Di, ID, Name, and スペクトル. The table contains four rows of search results:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>HQI</th> <th>R.HQI</th> <th>Tag</th> <th>Co</th> <th>Di</th> <th>ID</th> <th>Name</th> <th>スペクトル</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>90.04</td> <td>90.51</td> <td>MSX 207838</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>Amobarbital</td> <td></td> </tr> <tr> <td>85.57</td> <td>86.34</td> <td>MTX 26226</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>2,4,6(1H,3H,5H)-PYRIMIDINETRIONE, 5-ETHYL-5-(1-</td> <td></td> </tr> <tr> <td>81.99</td> <td>81.99</td> <td>JMS3 164006</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>Pyrimidinetrione, 5-ethyl-5-(1-</td> <td></td> </tr> <tr> <td>80.10</td> <td>90.50</td> <td>MSR: 23571</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>2,4,6(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-butyl-5-ethyl-</td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <p>At the bottom of the interface, there is a status bar with navigation controls and a copyright notice: © 2023-2024 U.S. Secretary of Commerce, USA, All Right Reserved. (157,249, 0,432)</p>	HQI	R.HQI	Tag	Co	Di	ID	Name	スペクトル	90.04	90.51	MSX 207838				Amobarbital		85.57	86.34	MTX 26226				2,4,6(1H,3H,5H)-PYRIMIDINETRIONE, 5-ETHYL-5-(1-		81.99	81.99	JMS3 164006				Pyrimidinetrione, 5-ethyl-5-(1-		80.10	90.50	MSR: 23571				2,4,6(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-butyl-5-ethyl-	
HQI	R.HQI	Tag	Co	Di	ID	Name	スペクトル																																		
90.04	90.51	MSX 207838				Amobarbital																																			
85.57	86.34	MTX 26226				2,4,6(1H,3H,5H)-PYRIMIDINETRIONE, 5-ETHYL-5-(1-																																			
81.99	81.99	JMS3 164006				Pyrimidinetrione, 5-ethyl-5-(1-																																			
80.10	90.50	MSR: 23571				2,4,6(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-butyl-5-ethyl-																																			

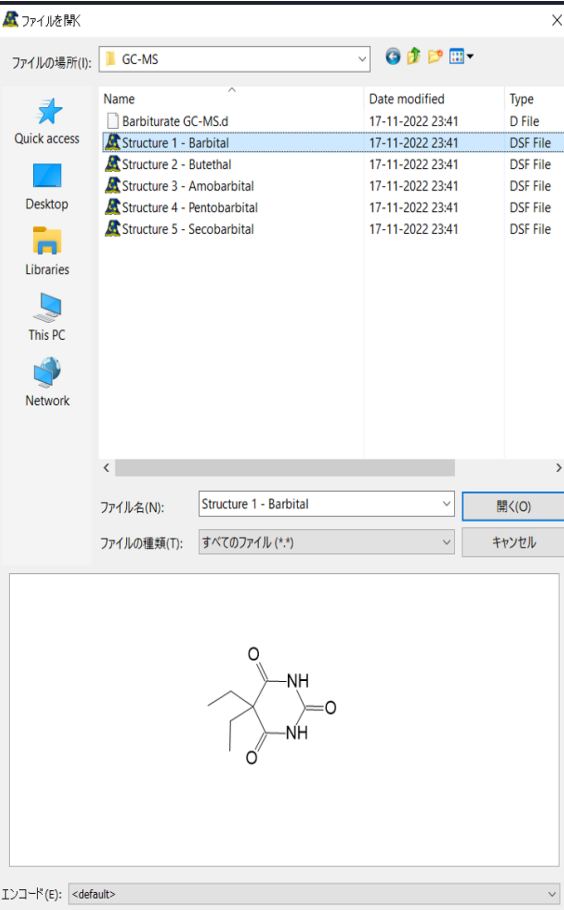
質量分析計のための他のツール

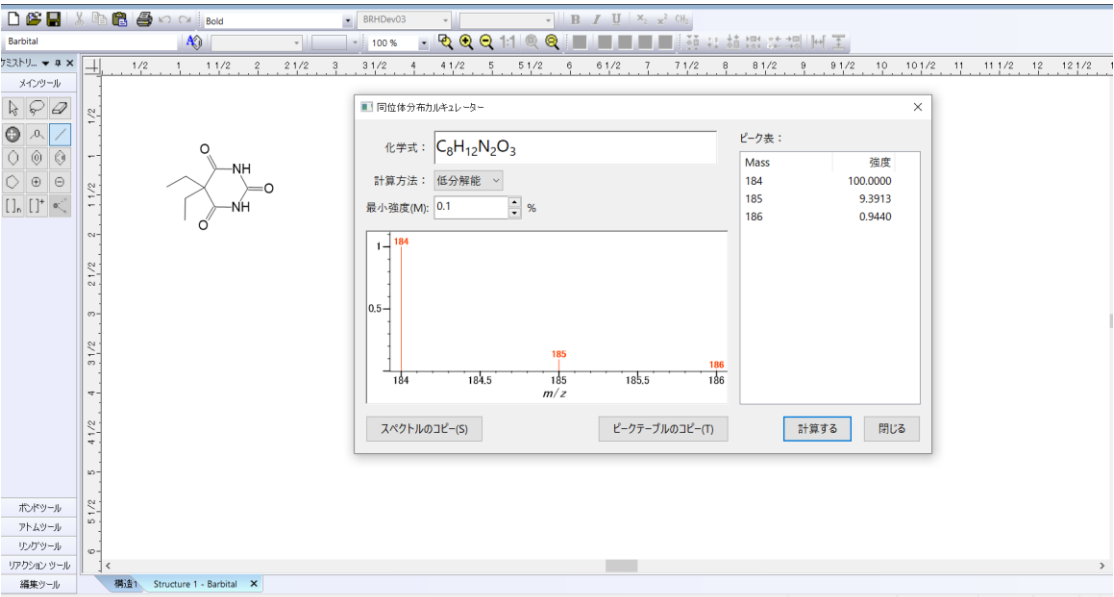
元素組成

	アクション	結果																																			
1	メニューから、 MS ツール > 元素組成の計算 に進んでください。	<p>元素構成カルキュレーター ×</p> <p>標的質量: 388 ± 0.5 u</p> <table border="1"><thead><tr><th>元素:</th><th>質量:</th><th>最小カウント:</th><th>最大カウント:</th><th>電荷(C):</th></tr></thead><tbody><tr><td>C</td><td>12</td><td>1</td><td>20</td><td><input type="radio"/> -1 <input checked="" type="radio"/> 0 <input type="radio"/> +1</td></tr><tr><td>H</td><td>1.0078250322</td><td>1</td><td>36</td><td></td></tr><tr><td>O</td><td>15.994914619</td><td>1</td><td>2</td><td></td></tr><tr><td>I</td><td>126.90447</td><td>0</td><td>1</td><td></td></tr><tr><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr></tbody></table> <p><input type="button" value="リセット(E)"/> <input type="button" value="計算する"/> <input type="button" value="閉じる(C)"/></p> <p>このダイアログに目標とする質量と元素情報を入力してください。</p>	元素:	質量:	最小カウント:	最大カウント:	電荷(C):	C	12	1	20	<input type="radio"/> -1 <input checked="" type="radio"/> 0 <input type="radio"/> +1	H	1.0078250322	1	36		O	15.994914619	1	2		I	126.90447	0	1											
元素:	質量:	最小カウント:	最大カウント:	電荷(C):																																	
C	12	1	20	<input type="radio"/> -1 <input checked="" type="radio"/> 0 <input type="radio"/> +1																																	
H	1.0078250322	1	36																																		
O	15.994914619	1	2																																		
I	126.90447	0	1																																		

	アクション	結果																																																	
2	Calculate ボタンをクリックします。	 <p>元素構成結果</p> <p>標的質量: 388 ± 0.5 u 電荷(C): 0 結果カウント 6</p> <table border="1"><thead><tr><th>C</th><th>H</th><th>O</th><th>I</th><th>m</th><th>Δm [u]</th><th>Δm [ppm]</th></tr></thead><tbody><tr><td>18</td><td>13</td><td>2</td><td>1</td><td>387.9960</td><td>-0.0040</td><td>-10.2457</td></tr><tr><td>19</td><td>17</td><td>1</td><td>1</td><td>388.0324</td><td>0.0324</td><td>83.5314</td></tr><tr><td>20</td><td>5</td><td>1</td><td>1</td><td>387.9385</td><td>-0.0615</td><td>-158.4799</td></tr><tr><td>17</td><td>25</td><td>2</td><td>1</td><td>388.0899</td><td>0.0899</td><td>231.7656</td></tr><tr><td>19</td><td>1</td><td>2</td><td>1</td><td>387.9021</td><td>-0.0979</td><td>-252.2570</td></tr><tr><td>18</td><td>29</td><td>1</td><td>1</td><td>388.1263</td><td>0.1263</td><td>325.5427</td></tr></tbody></table> <p>クリップボードにコピー(C) 閉じる</p> <p>KnowItAll は、これらの元素の組み合わせを提供します。</p>	C	H	O	I	m	Δm [u]	Δm [ppm]	18	13	2	1	387.9960	-0.0040	-10.2457	19	17	1	1	388.0324	0.0324	83.5314	20	5	1	1	387.9385	-0.0615	-158.4799	17	25	2	1	388.0899	0.0899	231.7656	19	1	2	1	387.9021	-0.0979	-252.2570	18	29	1	1	388.1263	0.1263	325.5427
C	H	O	I	m	Δm [u]	Δm [ppm]																																													
18	13	2	1	387.9960	-0.0040	-10.2457																																													
19	17	1	1	388.0324	0.0324	83.5314																																													
20	5	1	1	387.9385	-0.0615	-158.4799																																													
17	25	2	1	388.0899	0.0899	231.7656																																													
19	1	2	1	387.9021	-0.0979	-252.2570																																													
18	29	1	1	388.1263	0.1263	325.5427																																													


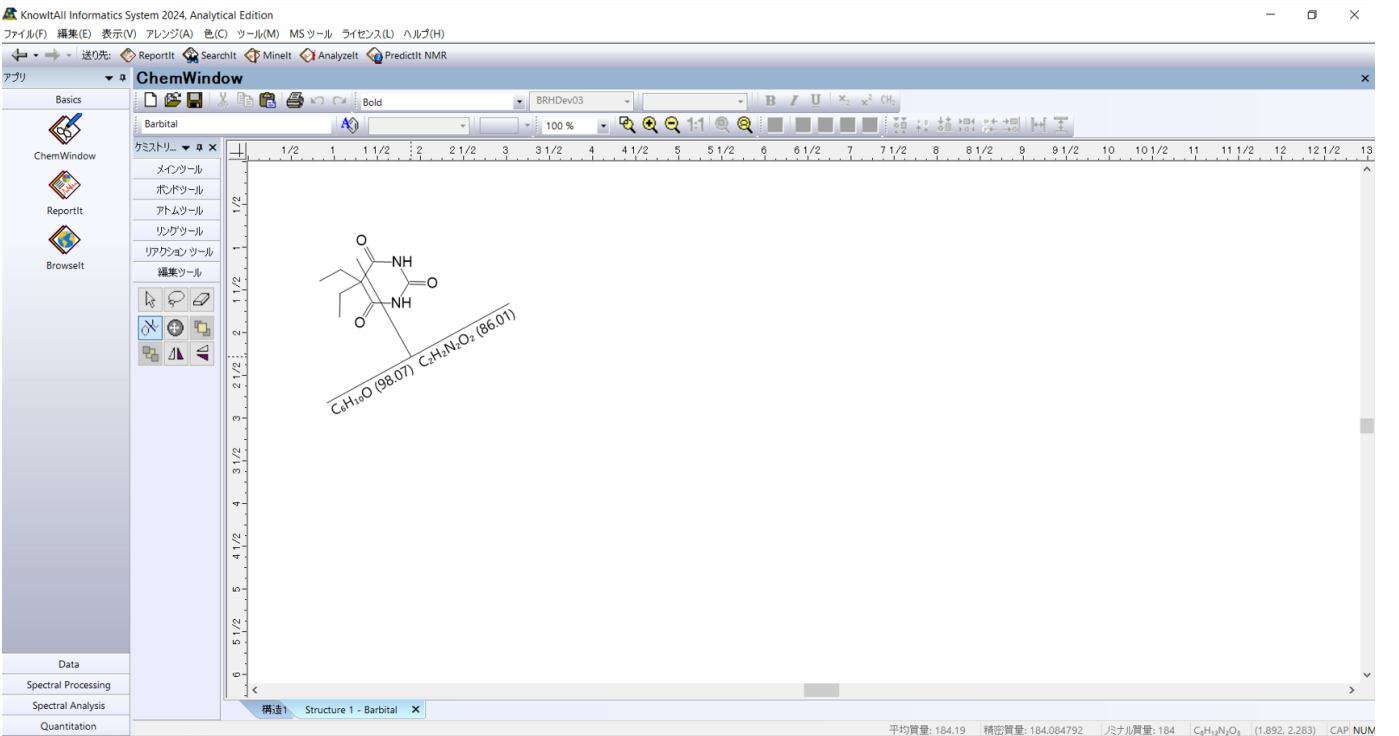
同位体分布

	アクション	結果																					
1	<p>構造パネルをダブルクリックするか、Transfer to: バーを使用して ChemWindow を起動します。アプリケーションの上部で ChemWindow を選択します。</p> <p>[File] > [Open] をクリックします。</p> <p>Samples > GC-MS フォルダから構造を選択します。</p>	 <p>ファイルを開く</p> <p>ファイルの場所(I): GC-MS</p> <table border="1"><thead><tr><th>Name</th><th>Date modified</th><th>Type</th></tr></thead><tbody><tr><td>Barbiturate GC-MS.d</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>D File</td></tr><tr><td>Structure 1 - Barbital</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 2 - Butethal</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 3 - Amobarbital</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 4 - Pentobarbital</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 5 - Secobarbital</td><td>17-11-2022 23:41</td><td>DSF File</td></tr></tbody></table> <p>ファイル名(N): Structure 1 - Barbital 開く(O)</p> <p>ファイルの種類(T): すべてのファイル (*.*) キャンセル</p> <p>Chemical structure: <chem>CC1(C)C(=O)NC(=O)NC1=O</chem></p> <p>エンコード(E): <default></p>	Name	Date modified	Type	Barbiturate GC-MS.d	17-11-2022 23:41	D File	Structure 1 - Barbital	17-11-2022 23:41	DSF File	Structure 2 - Butethal	17-11-2022 23:41	DSF File	Structure 3 - Amobarbital	17-11-2022 23:41	DSF File	Structure 4 - Pentobarbital	17-11-2022 23:41	DSF File	Structure 5 - Secobarbital	17-11-2022 23:41	DSF File
Name	Date modified	Type																					
Barbiturate GC-MS.d	17-11-2022 23:41	D File																					
Structure 1 - Barbital	17-11-2022 23:41	DSF File																					
Structure 2 - Butethal	17-11-2022 23:41	DSF File																					
Structure 3 - Amobarbital	17-11-2022 23:41	DSF File																					
Structure 4 - Pentobarbital	17-11-2022 23:41	DSF File																					
Structure 5 - Secobarbital	17-11-2022 23:41	DSF File																					

アクション	結果								
<p>2 MS ツール > 同位体分布の計算に進んでください。</p> <p>Calculate ボタンをクリックします。</p>	 <p>同位体分布計算機</p> <p>化学式: $C_8H_{12}N_2O_3$</p> <p>計算方法: 低分解能</p> <p>最小強度(M): 0.1 %</p> <table border="1"><thead><tr><th>Mass</th><th>強度</th></tr></thead><tbody><tr><td>184</td><td>100.0000</td></tr><tr><td>185</td><td>9.3913</td></tr><tr><td>186</td><td>0.9440</td></tr></tbody></table> <p>平均質量: 184.19 精細質量: 184.084792 分子質量: 184 $C_8H_{12}N_2O_3$ XY 座標 CAP N</p>	Mass	強度	184	100.0000	185	9.3913	186	0.9440
Mass	強度								
184	100.0000								
185	9.3913								
186	0.9440								

分子の断片化

ChemWindow では、MS 断片化ツールを使用して可能な断片とそれに対応する質量を表示することができます。

アクション	結果
<p>1 左側の編集ツールバーで、MS 断片化ツールをクリックします。</p>  <p>位置を指定してから、線をドラッグします—これが断片化ラインです。</p>	

実線の三角形は名目質量を示します

- スペクトル表示では、KnowItAll はスペクトルに対応する構造の名目質量を黒い三角形で表示します。
- データファイルからスペクトルをインポートする際、多くのインポート形式では分子の m/z （一部の場合は前駆物質の m/z やベースピークの m/z と呼ばれます）と分子イオンの電荷に対応するフィールドが定義されています。分子の m/z を正確な質量に変換するためには、以下の式が使用されます：
 - 正の電荷の場合：
 - $M_{\text{exact}} = (Mz - M(\text{H}) + M(\text{e})) * \text{電荷}$
ここで、 $M(\text{H})$ は水素原子の質量、 $M(\text{e})$ は電子の質量です。
 - 負の電荷の場合：
 - $M_{\text{exact}} = (Mz - M(\text{e})) * (-\text{電荷})$ 。
 - 電荷が定義されていない場合、デフォルトで+1 の電荷を仮定します。
- データファイルに分子の m/z フィールドが定義されていない場合、利用可能な場合は式フィールドから正確な質量が計算されます。