

# **KnowItAll** ソフトウェア トレーニング

---

## KnowItAll MS Expert および SearchIt を使用した GC-MS 分析

# 自動デコンボリューションによる GC-MS 分析

## 自動デコンボリューションを用いた GC-MS 分析の実施方法

### 目的

これらの演習は、KnowItAll MS Expert を使用して GC-MS のデコンボリューションおよび分析を自動的に実行する方法を示します。

### 目標

これらの演習を通じて、以下を学びます：

- KnowItAll MS Expert を使用して GC-MS データを自動デコンボリューションし、化学成分ごとの MS スペクトルを生成し、それを数百万件の参照データと自動的に照合する方法
- レポートを作成する方法

### 背景

GC-MS データは情報量が非常に多く、特に複雑な分析物を調べる場合、分析には時間がかかることがあります。本システムでは、高速で柔軟な自動デコンボリューションと、自動データベース検索を組み合わせることで、既知および未知の化合物を特定します。新規化合物については、フラグメンテーションデータや構造データを活用する MS アダプティブ検索を適用することで、未知物質の構造的特徴を推測し、同定を行うことが可能です。

#### このレッスンで使用するトレーニングファイル

- C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Sample s\MS Expert フォルダ内のファイル

KnowItAll アプリケーションを使用する

- KnowItAll MS Expert

## GC-MS デコンボリューションアルゴリズム

本システムでは、複数のスペクトルにわたる個別の  $m/z$  値を追跡し、各成分ごとの純粋なスペクトルをデータから抽出します。同時に、 $m/z$  値ピークが重なり合う成分を分離するよう試みます。正確な  $m/z$  値データが利用可能であり、ユーザーがそれをユニット  $m/z$  値の代わりに選択した場合、選択された装置の精度（自動、ppm、または固定値）を使用して、GC-MS 分析全体を通じて正確な  $m/z$  値が決定されます。生データ内の  $m/z$  値は、装置の分解能を考慮して最も近い値を基に正確な値に変換されます。この補正された  $m/z$  値が、以下のデコンボリューションの基礎となります。

デコンボリューションのステップでは、複数の生スペクトルにわたって個別の  $m/z$  値が追跡され、成分スペクトルが抽出されます。この際、 $m/z$  値ピークが重なる成分を分離するよう試みます。また、低強度の再構成総イオン電流（RTIC）クロマトグラフィーピークを持つ成分も、隣接する成分から十分に分離できる場合は、自動的に検出される追加ステップが加えられます。

アルゴリズムは非常に複雑ですが、その詳細は以下の論文で広く要約されています：

1. S. E. Stein. An Integrated Method for Spectrum Extraction and Compound Identification from Gas Chromatography/Mass Spectrometry Data. *J Am Soc Mass Spectrom* 1999, **10**, 770–781.
2. R. G. Dromey, M. J. Stefik, T. C. Rindfleisch, A. M. Duffield. Extraction of Mass Spectra Free of Background and Neighboring Component Contributions from Gas Chromatography Mass Spectrometry Data. *Analytical Chemistry*, 1976, **48(9)**, 1368-1375.
3. J. E. Biller, K. Biemann. Reconstructed Mass Spectra, A Novel Approach For The Utilization Of Gas Chromatography-Mass Spectrometer Data. *Analytical Letters* 1974, **7**, 515-28.
4. B. N. Colby. Spectral Deconvolution for Overlapping GC/MS Components. *J Am sot Mass Spectrom* 1992, **3**, 558-562.

## MS スペクトル比較アルゴリズム

## 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,<sup>a\*</sup> Ksenia Sotnezova,<sup>a</sup> Vitaly Lashin<sup>b</sup> and Igor Revelsky<sup>a</sup>

MS SEARCH

Composite algorithm

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

Dot-product algorithm<sub>2</sub>

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

スペクトル検索タイプ - 一致 (通常)

ブレ検索: デフォルト

含まれるライブラリ: メインライブラリ

制限の適用: オフ

制約の使用: オフ

スペクトル検索タイプ - 類似性 (簡易)

ブレ検索: デフォルト

含まれるライブラリ: MainLib

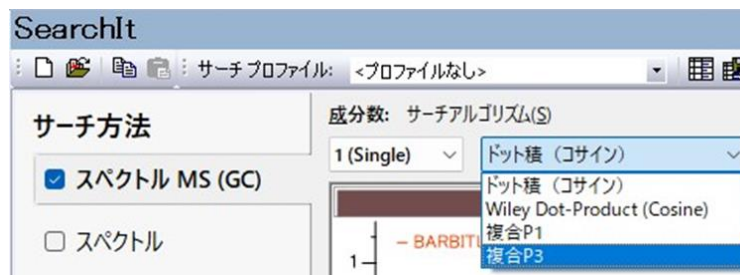
制限の適用: オフ

制約の使用: オ

Samokhin, K. Sotnezova, V. Lashin, I. Revelsky. Evaluation of mass spectral library search algorithms implemented in commercial software. *J. Mass Spectrom.* 2015, **50**, 820-825.

WILEY

KnowItAll には 4 つの異なるアルゴリズムがあります:



どこで使用されるか

- ドットプロダクト (コサイン): 上記の画像にある 2 番目の式
- Wiley ドットプロダクト (コサイン) (旧 KnowItAll アルゴリズム) -これは旧 Finnigan アルゴリズムで、ドットプロダクト計算を続行する前に、最大 16 のピークのうち少なくとも 12 のピークおよびベースピークが一致することを検証していました。
- Composite P1: 上記の画像にある 1 番目の式
- Composite P3: 上記の画像にある 1 番目の式  
P1 と P3 は、ピークの加重強度に適用されるべきべき乗 (累乗) が異なります。

## 例 1: ユニット $m/z$ 値の GC-MS

### GUI の説明

下の画像は、ユニット  $m/z$  値のデコンボリューションを行った **GC-MS** データと、各成分に対する膨大な **Wiley GC-MS** データベース内での検索結果を示しています。

- A – GC パネル: デコンボリューションされた成分ピークを表示。右側の GC パネルのチェックボックスを使用して、クロマトグラムの表示をオン/オフにできます。選択した成分ピークに対応するクロマトグラムのボックスが選択されると、そのボックスの色が濃くなります。
- B – 成分プロファイルパネル, クロマトグラムで選択されたイオンや成分を強調表示します;
- C – 成分モデルパネル, 成分をモデル化するために使用された参照イオンを識別します;
- D – データベース一致パネル, 抽出されたスペクトル (上) と参照スペクトル (下) を比較して表示します;
- E – 成分パネル, スコアは、結合されたスペクトル検索と逆検索のヒット品質指数 (HQI) で、各成分の GC 下の曲線面積 (AUC) 値が表示されます;
- G – アルゴリズムで調整可能なパラメータを設定するパネル。

**MS Expert**

分析手法: デコンボリューション    解析プロファイル: <プロフィールなし>

範囲設定バー

未加工スペクトル

抽出したスペクトル (赤線) / 未加工スペクトル (青線)

m/z: 31, 51, 55, 69, 82, 85, 94, 98, 112, 141, 156, 197

データベースの一致

抽出したスペクトル (赤線) / データベースの一致 (青線)

m/z: 112, 141, 156, 197

マスクロマトグラム m/z 範囲

**構成分子**

RT [m...]	#	一致	スコア	H
3.5145	1	Hydrogen sulfide ...	67.52	67.
3.5927	1	2-(Acryloyloxy)et...	76.06	75.
3.6707	1	Methane, diazo-	55.78	53.
3.6920	1	5,5,6-Trimethyl-7-...	74.92	74.
3.8911	1	Butethal	94.28	94.
3.9882	1	3-(Allyloxy)nitrob...	58.82	56.
4.1140	1	6-Ketohexanenitrile	65.18	64.
4.2779	1	n-Butylamine-D9	55.10	54.
4.4107	1	Amobarbital	90.87	90.
4.4725	1	2-Propyn-1-ol	62.63	61.
4.5013	1	3,4-Pentadienal	55.36	53.
4.6051	1	2,4,6-Trinitrophenol	92.85	92.

**構成分子モデル**

参照イオン(I): 141 - 26

パラメータ(P):

要因イオン: 141 156 41  
 エネルギー: 0.5724  
 面積: 5875146.9  
 ベースピーク頂点: 139777.7

分解能(R): 50     自動検索(A)

感度(S): 50

## MS Expert の機能

成分テーブル (E) には便利な情報が含まれています:

- 各成分の推定面積が表示されます。
- 致した成分の行で「Notes」欄の下をクリックすることで、マッチに **Notes** を追加できます。
- 右クリックをすると、ユーザーが実行できるアクションが表示されます。その中には、「**Edit Component Columns**」などがあり、表示の並べ替えを行うことができます。

RT [m...]	#	一致	スコア	HQI	R.HQI	特長	面積%
3.5927	1	2-(Acryloyloxy)ethyl acrylate	76.06	75.21	83.72		0.38
3.6707	1	Methane, diazo-	55.78	53.33	77.82		0.61
3.6920	1	5,5,6-Trimethyl-7-phenyl-3,4,5,7,8,8a-hexahydrocyclopenta[b]ox...	74.92	74.14	81.97		0.04
3.8911	1	Butethal	94.28	94.12	95.73		10.39
3.9882	1	3-(Allyloxy)nitrobenzene	58.82	56.85	76.60		0.02
4.1140	1	6-Ketohexanenitrile	65.18	64.16	74.33		0.30
4.2779	1	n-Butylamine-D9	55.10	54.29	62.36		0.19
4.4107	1	Amobarbital	90.87	90.87	90.87		16.47
4.4725	1	2-Propyn-1-ol	62.63	61.60	71.84		0.22
4.5013	1	3,4-Pentadienal	55.36	53.14	75.39		0.01
4.6051	1	2,4,6(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-ethyl			94.58		14.93
4.6887	1	Hydrocyanic acid			85.28		0.02
4.7147	1	Ethane, iodo-			75.71		0.38
4.7338	1	Hydrocyanic acid			85.28		0.02
4.8007	1	(1R,5SR,7RS)-2-Ethoxycarbonyl-7-phenyl-1,2,3,4-tetrahydro-1H-benzodiazepin-5-one			60.02		0.34
4.9260	1	3-(2'-Thienyl)trimethylsilane			80.48		0.03
4.9545		一致するものが見つかりません					0.16
4.9928	1	1,3-Dihydroindene-2,2-dicarbonitrile			80.10		0.77
5.0419	1	1-Oxaspiro[4.5]decan-7-ol, 2,6,10,10-tetra-			75.12		0.05
5.0838	1	1-Chloro-4-(phenylsulfonyl)but-2-yne			83.86		1.59
5.1053	1	Secobarbital			93.71		14.03
5.2078	1	1-[(t-butoxycarbonyl)amino]-3,4-dimethyl-2-piperidinecarboxamide			73.48		0.56
5.2693	1	4-Penten-2-one, 4-methyl-			70.97		0.11
5.3447	1	Methyl borane-as positive ion / Ethylborane-as positive ion			87.23		0.07
5.3913	1	Neopentyl amine	42.95	59.25	76.04		0.83
5.4487	1	Ethane, 1,1',1''-[methylidynetris(oxy)]tris-	74.22	74.22	74.22		0.27
5.5547	1	Methyl borane-as positive ion / Ethylborane-as positive ion	73.03	70.61	94.74		0.03
5.5835	1	Hydrocyanic acid	85.28	85.28	85.28		0.00

- 選択した構成分子を削除する(R)
- 選択した最も高い一致をランク付けする(H)
- Mineltの構成分子のヒットした一覧を表示する(V)
- 構成分子テーブルの列の編集(C)...
- 構成分子情報をコピーする(I)
- すべての構成分子コンポーネント情報をコピーする(A)
- Floating
- Docking
- Tabbed Document
- Auto Hide
- Hide



隠れた機能として、表示されているプロパティを検索するために **Control + F** アクションを使用することができます。例えば、**Lookup** 機能を使って、CAS Numbers (例えば、CAS Numbers329-7105) に一致する情報を見つけることができます。

RT [m...	#	一致	スコア	HQI	R.HQI	特長	面積%
3.5927	1	2-(Acryloyloxy)ethyl acrylate	76.06	75.21	83.72		0.38
3.6707	1	Methane, diazo-	55.78	53.33	77.82		0.61
3.6920	1	5,5,6-Trimethyl-7-phenyl-3,4,5,7,8,8a-hexahydrocyclopenta[b]ox...	74.92	74.14	81.97		0.04
3.8911	1	Butethal	94.28	94.12	95.73		10.39
3.9882	1	3-(Allyloxy)nitrobenzene	58.82	56.85	76.60		0.02
4.1140	1	6-Ketohexanenitrile	65.18	64.16	74.33		0.30
4.2779	1	n-Butylamine-D9	55.10	54.29	62.36		0.19
4.4107	1	Amobarbital					16.47
4.4725	1	2-Propyn-1-ol					0.22
4.5013	1	3,4-Pentadienal					0.01
4.6051	1	2,4,6(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-ethy					14.93
4.6887	1	Hydrocyanic acid					0.02
4.7147	1	Ethane, iodo-					0.38
4.7338	1	Hydrocyanic acid					0.02
4.8007	1	(1R,5SR,7RS)-2-Ethoxycarbonyl-7-phen					0.34
4.9260	1	3-(2'-Thienyl)trimethylsilane	80.48	80.48	80.48		0.03
4.9545		一致するものがありません					0.16
4.9928	1	1,3-Dihydroindene-2,2-dicarbonitrile	61.45	59.37	80.10		0.77
5.0419	1	1-Oxaspiro[4.5]decan-7-ol, 2,6,10,10-tetramethyl-, [5R-[5.alpha.(...	71.01	70.55	75.12		0.05
5.0838	1	1-Chloro-4-(phenylsulfonyl)but-2-yne	42.74	38.17	83.86		1.59
5.1053	1	Secobarbital	91.69	91.47	93.71		14.03
5.2078	1	1-[(t-butoxycarbonyl)amino]-3,4-dimethylazetid-2-one	46.09	43.05	73.48		0.56
5.2693	1	4-Penten-2-one, 4-methyl-	61.47	60.41	70.97		0.11
5.3447	1	Methyl borane-as positive ion / Ethylborane-as positive ion	54.86	51.26	87.23		0.07
5.3913	1	Neopentyl amine	42.93	39.25	76.04		0.83
5.4487	1	Ethane, 1,1',1''-[methylidynetris(oxy)]tris-	74.22	74.22	74.22		0.27
5.5547	1	Methyl borane-as positive ion / Ethylborane-as positive ion	73.03	70.61	94.74		0.03
5.5835	1	Hydrocyanic acid	65.28	65.28	65.28		0.02

テキストの検索

検索テキスト(N): 329-71-5

次を検索(E)

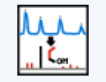
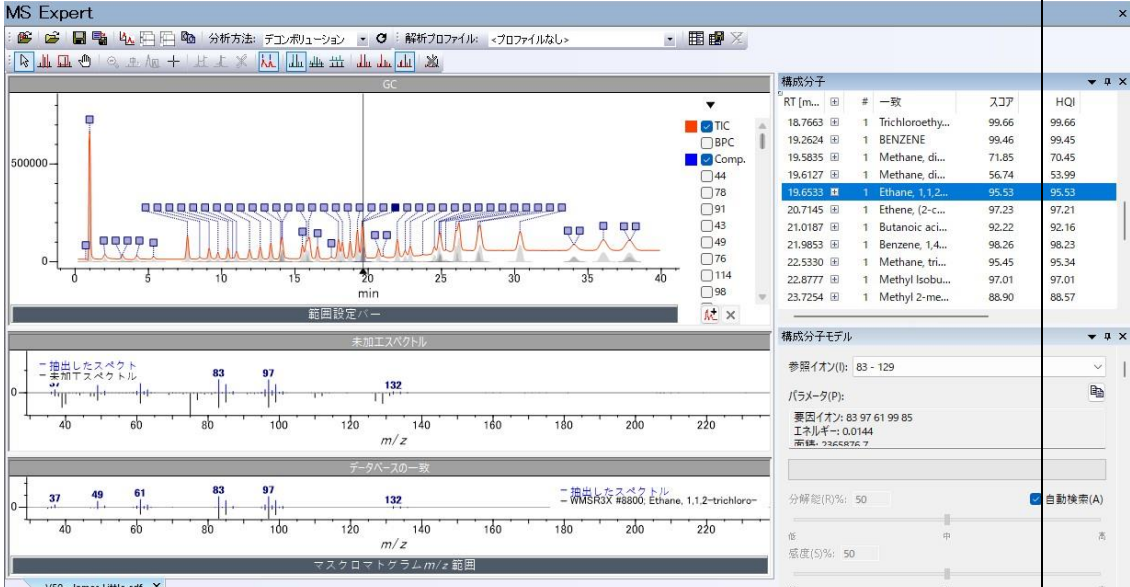
キャンセル

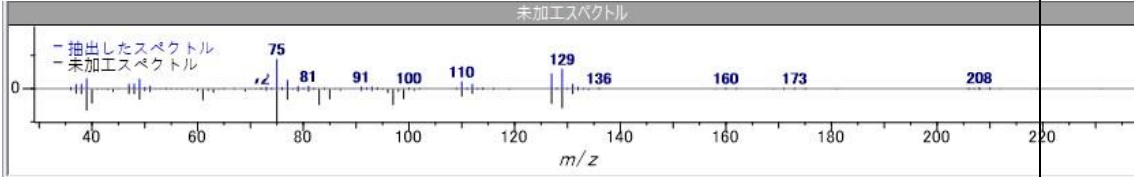
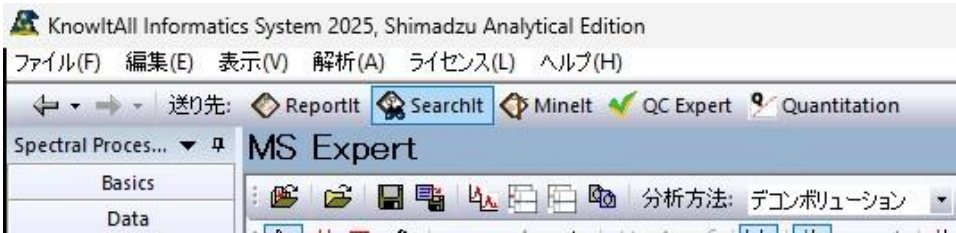
検索順

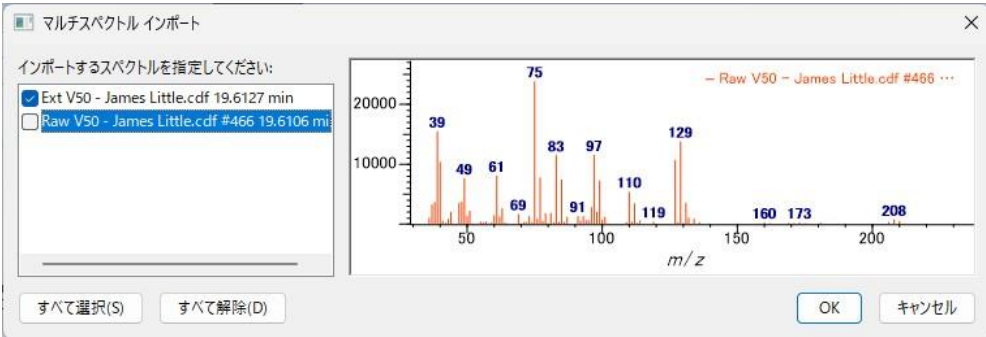
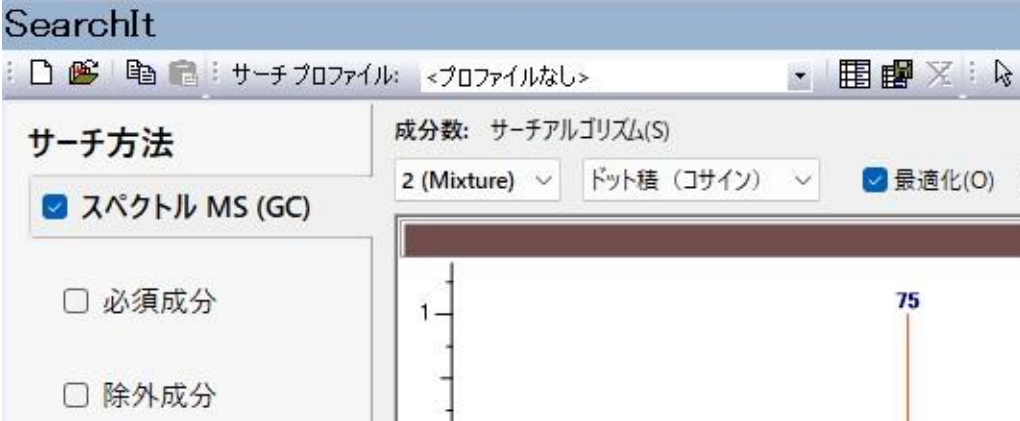
↑ (U)  ↓ (D)

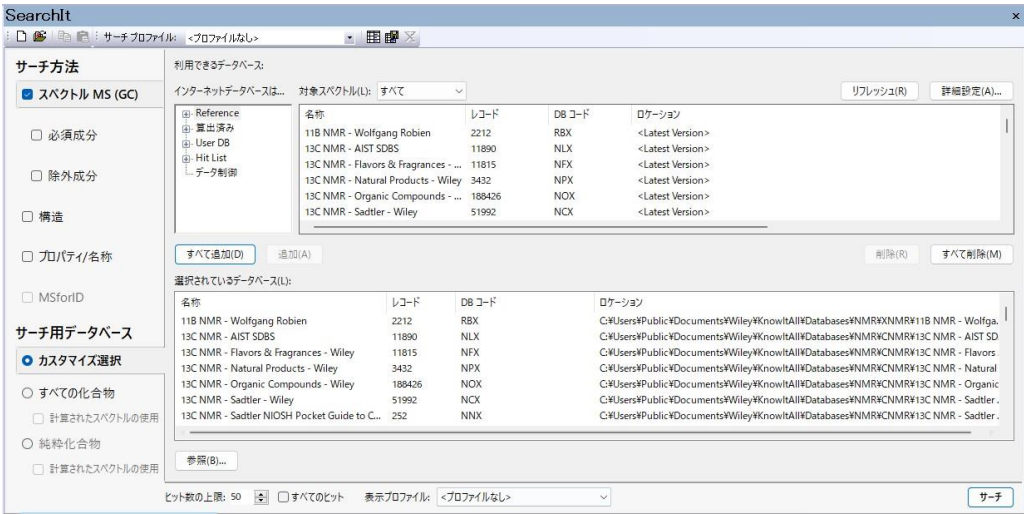
大文字小文字区別(O)

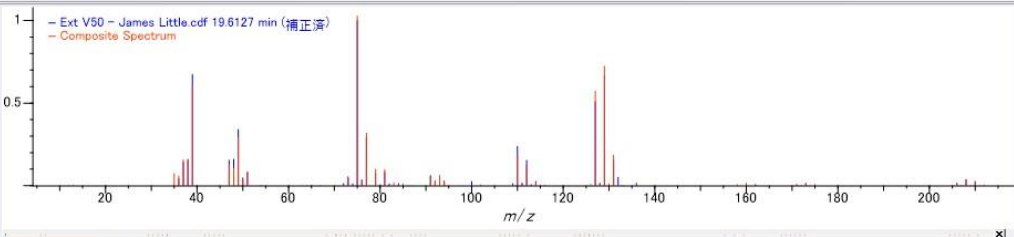
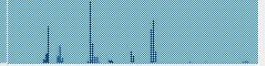


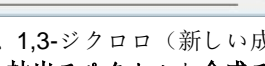
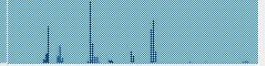


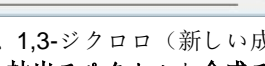
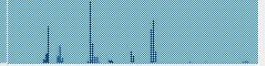


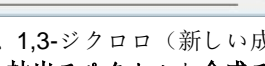
それでは、これから完全なプロセスを通じて説明します。

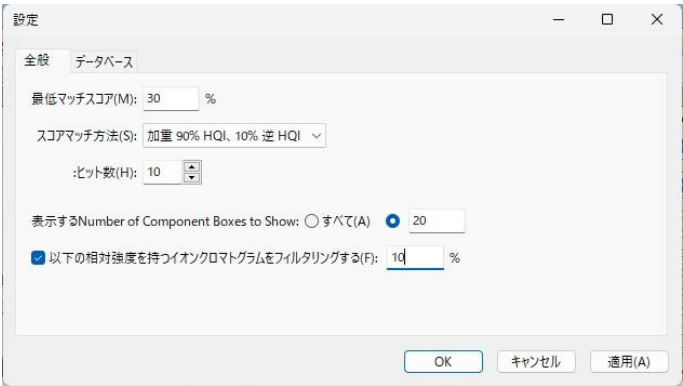
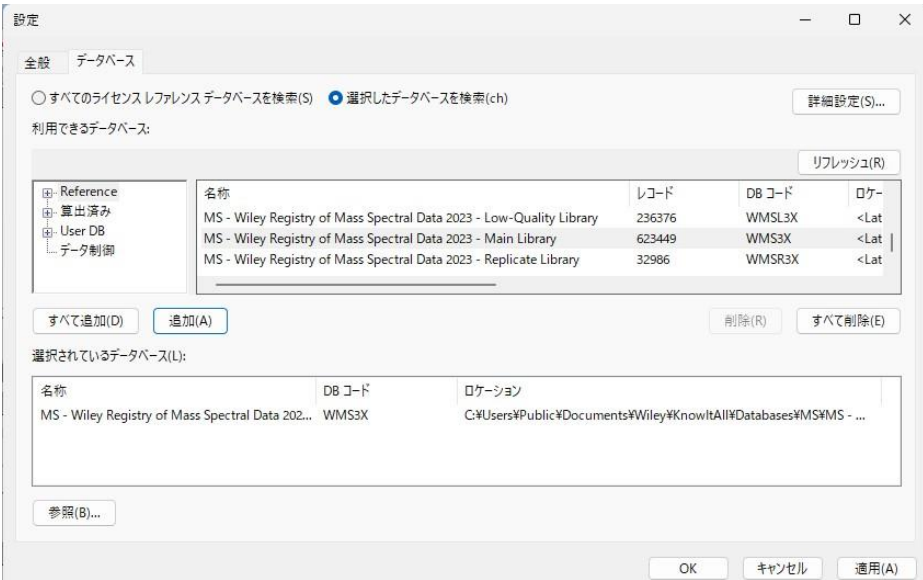
アクション	結果																																																												
<p>1 <b>Spectral Process</b> ツールバーの下にある <b>MS Expert</b> アプリケーションに移動します。</p>  <p>MS Expert</p> <p><b>Open Raw GC-MS Data File</b> ボタンをクリック</p> <p>フォルダ  <b>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\MS Expert\</b> に移動し、  <b>V50 - James Little.cdf</b> ファイルを選択します。</p> <p>19.6533 分に対応する成分が表示されます。</p>	<p><b>MS Expert</b> は自動的に以下を実行します</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. GC デコンボリューションを行い、成分ごとの MS スペクトルを抽出します。</li> <li>2. 抽出された MS スペクトルを再度参照データベースと照合します。</li> <li>3. 上位の一致結果 (トップヒット) をレポートとして表示します。</li> </ol>  <p>The screenshot shows the MS Expert interface with the following components:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><b>Chromatogram (TIC):</b> Shows a peak at 19.6533 min. The y-axis is intensity (up to 500,000) and the x-axis is time in minutes (0 to 40).</li> <li><b>Mass Spectra:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li><b>未加工スペクトル (Raw Spectrum):</b> Shows the extracted spectrum with peaks at m/z 83, 97, and 132.</li> <li><b>データベースの一致 (Reference Spectrum):</b> Shows the reference spectrum for Ethane, 1,1,2-trichloro- with peaks at m/z 37, 49, 61, 83, 97, and 132.</li> </ul> </li> <li><b>Component List Table:</b> <table border="1"> <thead> <tr> <th>RT [m...]</th> <th>#</th> <th>一致</th> <th>スコア</th> <th>HQI</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>18.7663</td><td>1</td><td>Trichloroethy...</td><td>99.66</td><td>99.66</td></tr> <tr><td>19.2624</td><td>1</td><td>BENZENE</td><td>99.46</td><td>99.45</td></tr> <tr><td>19.5835</td><td>1</td><td>Methane, di...</td><td>71.85</td><td>70.45</td></tr> <tr><td>19.6127</td><td>1</td><td>Methane, di...</td><td>56.74</td><td>53.99</td></tr> <tr><td>19.6533</td><td>1</td><td>Ethane, 1,1,2...</td><td>95.53</td><td>95.53</td></tr> <tr><td>20.7145</td><td>1</td><td>Ethene, (2-c...</td><td>97.23</td><td>97.21</td></tr> <tr><td>21.0187</td><td>1</td><td>Butanoic aci...</td><td>92.22</td><td>92.16</td></tr> <tr><td>21.9853</td><td>1</td><td>Benzene, 1,4...</td><td>98.26</td><td>98.23</td></tr> <tr><td>22.5330</td><td>1</td><td>Methane, tri...</td><td>95.45</td><td>95.34</td></tr> <tr><td>22.8777</td><td>1</td><td>Methyl Isobu...</td><td>97.01</td><td>97.01</td></tr> <tr><td>23.7254</td><td>1</td><td>Methyl 2-me...</td><td>88.90</td><td>88.57</td></tr> </tbody> </table> </li> </ul>	RT [m...]	#	一致	スコア	HQI	18.7663	1	Trichloroethy...	99.66	99.66	19.2624	1	BENZENE	99.46	99.45	19.5835	1	Methane, di...	71.85	70.45	19.6127	1	Methane, di...	56.74	53.99	19.6533	1	Ethane, 1,1,2...	95.53	95.53	20.7145	1	Ethene, (2-c...	97.23	97.21	21.0187	1	Butanoic aci...	92.22	92.16	21.9853	1	Benzene, 1,4...	98.26	98.23	22.5330	1	Methane, tri...	95.45	95.34	22.8777	1	Methyl Isobu...	97.01	97.01	23.7254	1	Methyl 2-me...	88.90	88.57
RT [m...]	#	一致	スコア	HQI																																																									
18.7663	1	Trichloroethy...	99.66	99.66																																																									
19.2624	1	BENZENE	99.46	99.45																																																									
19.5835	1	Methane, di...	71.85	70.45																																																									
19.6127	1	Methane, di...	56.74	53.99																																																									
19.6533	1	Ethane, 1,1,2...	95.53	95.53																																																									
20.7145	1	Ethene, (2-c...	97.23	97.21																																																									
21.0187	1	Butanoic aci...	92.22	92.16																																																									
21.9853	1	Benzene, 1,4...	98.26	98.23																																																									
22.5330	1	Methane, tri...	95.45	95.34																																																									
22.8777	1	Methyl Isobu...	97.01	97.01																																																									
23.7254	1	Methyl 2-me...	88.90	88.57																																																									

アクション	結果
<p>2</p> <ul style="list-style-type: none"><li>● <b>Components</b> テーブルで、デコンボリューションされた各成分のヒットリストを確認します。</li><li>● <b>RT (MIN)</b> が <b>19.6127</b> の行に移動し、このヒットのスコアが <b>56.74</b> と非常に低いことを確認します。</li></ul>	 <p>抽出スペクトル（上段）とメタン、ジブロモクロロの参照スペクトル（下段）の比較から、抽出スペクトルにはメタン、ジブロモクロロ、および他の成分が含まれていることがわかります。</p>
<p>3</p> <p>抽出されたスペクトルを <b>SearchIt</b> に転送します。</p>	

アクション	結果
<p>4 抽出スペクトルのみを確認してください。</p> <p>OK をクリックします。</p>	
<p>5 SearchIt で 2 (混合物) 」を検索対象に設定します。</p>	

アクション	結果
<p>6 <b>User-Select</b> タブをクリックし、すべてのライセンスされた MS データベースを追加します。</p> <p><b>Search</b></p>	 <p>The screenshot shows the SearchIt application window. On the left, the 'Search Method' (サーチ方法) section has 'Spectra MS (GC)' (スペクトル MS (GC)) selected. Under 'Search Databases' (サーチ用データベース), 'Custom Selection' (カスタマイズ選択) is chosen. The main area displays two tables of available databases. The top table, 'Available Databases' (利用できるデータベース), lists databases like '11B NMR - Wolfgang Robien' and '13C NMR - AIST SDBS'. The bottom table, 'Selected Databases' (選択されているデータベース(L)), shows the same databases with their full file paths. At the bottom, there are controls for 'Hits per page' (ヒット数の上限) set to 50 and a 'Search' button.</p>

	アクション	結果																																																
7		<p>混合物分析の結果、ヒットリストのトップに非常に良好な<b>合成スペクトル</b>の一致が得られました。</p>  <p>MS (GC)</p> <table border="1" data-bbox="913 673 1921 974"> <thead> <tr> <th>テーブル</th> <th>プロット</th> <th colspan="2">関連化合物データ</th> <th>ID</th> <th>Name</th> <th>化学構造</th> <th>スペクトル</th> </tr> <tr> <th>HQI</th> <th>標成比</th> <th>除く</th> <th>Cor</th> <th>DE</th> <th></th> <th></th> <th>&lt;auto&gt; (MS (GC))</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>94.09</td> <td>N.A.</td> <td></td> <td></td> <td>Composite Spectrum</td> <td><chem>ClC=CCl</chem></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>0.59</td> <td><input type="radio"/></td> <td><input type="checkbox"/></td> <td>MSRX: 4571</td> <td>1-Propene, 1,3-dichloro-, (Z)-</td> <td><chem>ClC=CCl</chem></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>0.41</td> <td><input type="radio"/></td> <td><input type="checkbox"/></td> <td>MSRX: 27959</td> <td>Methane, dibromochloro-</td> <td><chem>ClCBr</chem></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>N.A.</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>Residual Spectrum</td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <p>最初の行の<b>合成スペクトル</b>は、2つの成分の混合物です：1-プロペン、1,3-ジクロロ（新しい成分）およびメタン、ジブロモクロロ。最後の行の<b>残差スペクトル</b>は、<b>抽出スペクトル</b>と<b>合成スペクトル</b>の差であり、その差は無視できるほど小さく、他に未検出の成分がないことを示しています。</p>	テーブル	プロット	関連化合物データ		ID	Name	化学構造	スペクトル	HQI	標成比	除く	Cor	DE			<auto> (MS (GC))	1	94.09	N.A.			Composite Spectrum	<chem>ClC=CCl</chem>			0.59	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	MSRX: 4571	1-Propene, 1,3-dichloro-, (Z)-	<chem>ClC=CCl</chem>			0.41	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	MSRX: 27959	Methane, dibromochloro-	<chem>ClCBr</chem>			N.A.				Residual Spectrum		
テーブル	プロット	関連化合物データ		ID	Name	化学構造	スペクトル																																											
HQI	標成比	除く	Cor	DE			<auto> (MS (GC))																																											
1	94.09	N.A.			Composite Spectrum	<chem>ClC=CCl</chem>																																												
	0.59	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	MSRX: 4571	1-Propene, 1,3-dichloro-, (Z)-	<chem>ClC=CCl</chem>																																												
	0.41	<input type="radio"/>	<input type="checkbox"/>	MSRX: 27959	Methane, dibromochloro-	<chem>ClCBr</chem>																																												
	N.A.				Residual Spectrum																																													

アクション	結果																										
8 <b>MS Expert</b> に戻り、 <b>File &gt; Settings</b> メニューに進んで、コンポーネントのヒットリストパラメータを調整できます。	<p>ヒット評価パラメータ:</p>  <p>設定</p> <p>全般 データベース</p> <p>最低マッチスコア(M): 30 %</p> <p>スコアマッチ方法(S): 加重 90% HQL、10% 逆 HQL</p> <p>ヒット数(H): 10</p> <p>表示するNumber of Component Boxes to Show: <input type="radio"/> すべて(A) <input checked="" type="radio"/> 20</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> 以下の相対強度を持つイオンクロマトグラムをフィルタリングする(F): 10 %</p> <p>OK キャンセル 適用(A)</p> <p>参照データベースの選択肢</p>  <p>設定</p> <p>全般 データベース</p> <p><input type="radio"/> すべてのライセンス レファレンス データベースを検索(S) <input checked="" type="radio"/> 選択したデータベースを検索(ch) 詳細設定(S)...</p> <p>利用できるデータベース: リフレッシュ(R)</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>ロケ</th></tr></thead><tbody><tr><td><input checked="" type="checkbox"/></td><td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Low-Quality Library</td><td>236376</td><td>WMSL3X</td><td>&lt;Lat</td></tr><tr><td><input checked="" type="checkbox"/></td><td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Main Library</td><td>623449</td><td>WMS3X</td><td>&lt;Lat</td></tr><tr><td><input type="checkbox"/></td><td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Replicate Library</td><td>32986</td><td>WMSR3X</td><td>&lt;Lat</td></tr></tbody></table> <p>すべて追加(D) 追加(A) 削除(R) すべて削除(E)</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>DB コード</th><th>ロケーション</th></tr></thead><tbody><tr><td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 202...</td><td>WMS3X</td><td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WMS\MS - ...</td></tr></tbody></table> <p>参照(B)...</p> <p>OK キャンセル 適用(A)</p>	Reference	名称	レコード	DB コード	ロケ	<input checked="" type="checkbox"/>	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Low-Quality Library	236376	WMSL3X	<Lat	<input checked="" type="checkbox"/>	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Main Library	623449	WMS3X	<Lat	<input type="checkbox"/>	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Replicate Library	32986	WMSR3X	<Lat	名称	DB コード	ロケーション	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 202...	WMS3X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WMS\MS - ...
Reference	名称	レコード	DB コード	ロケ																							
<input checked="" type="checkbox"/>	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Low-Quality Library	236376	WMSL3X	<Lat																							
<input checked="" type="checkbox"/>	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Main Library	623449	WMS3X	<Lat																							
<input type="checkbox"/>	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 - Replicate Library	32986	WMSR3X	<Lat																							
名称	DB コード	ロケーション																									
MS - Wiley Registry of Mass Spectral Data 202...	WMS3X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\WMS\MS - ...																									



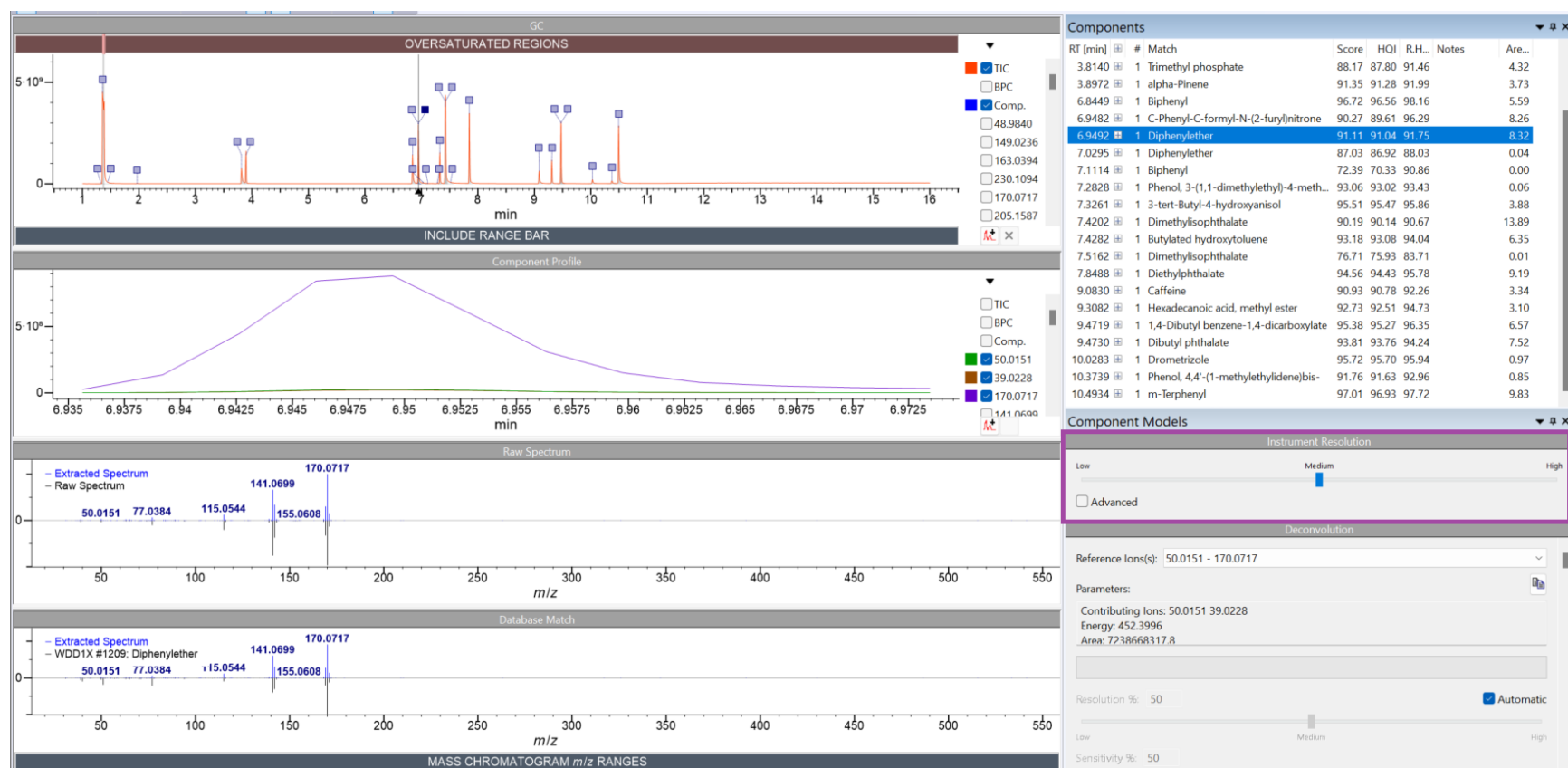
	アクション	結果
9	<p>TIC パネルをクリックしてピークを手動で追加し、次に「分析」&gt;「選択したピークを分析に追加」を選択して新しい分析を実行できます。</p> <p><b>Minelt</b> で「コンポーネントヒットリストを表示」を選択すると、<b>Minelt</b> のコンポーネントテーブルの内容を確認できます。</p>	 <p>ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 解析(A) ライセンス(L) ヘルプ(H)</p> <p>送り先: R</p> <p>Spectral Proces... ▼</p> <p>Basics</p> <p>Data</p> <p>Spectral Processing</p> <p>Processit</p> <p>MS Expert</p> <p>5000</p> <p>質量(M) &gt;</p> <p>分析方法(L) &gt;</p> <p>マスクロマトグラムを選択する(S)...</p> <p>選択したマスクロマトグラムを削除する</p> <p>選択したピークを分析に追加(A)</p> <p>手動で選択した構成分子のベースラインを設定する(B) &gt;</p> <p>構成成分として選択したスペクトルを手動で使用する &gt;</p> <p>選択した構成分子を削除する(R)</p> <p>選択した最も高い一致をランク付けする(H)</p>



## 例 2: 高解像度 GC-MS

### GUI の説明


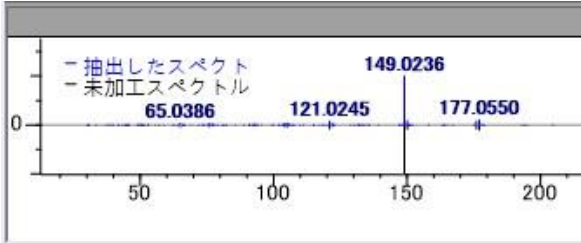
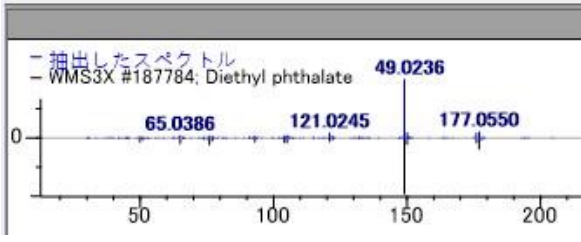
アルゴリズムがデータの正確な  $m/z$  値を自動的に計算するためには、機器の分解能が必要です。そのため、私たちの研究で合理的だと考えるデフォルト値を使用します。この値は、質量に依存する定数値と変動する値 (ppm) を持っています。経験的に、これはほとんどの場合に機能します。 $m/z$  値の精度を過度に高くすると、個々の  $m/z$  値が個別の質量スペクトルピークに分割され、1つとして考慮すべきものが分割されてしまう危険があります。 $m/z$  値の精度を過度に低くすると、個々の質量スペクトルピークが統合され、誤った正確な  $m/z$  値が報告される可能性があります。



もしユーザーが機器の分解能を知っている場合、その値は上の図の紫色のボックスで強調表示された **Instrument Resolution**」パネルに、'Advanced' をクリックして手動で入力する必要があります。


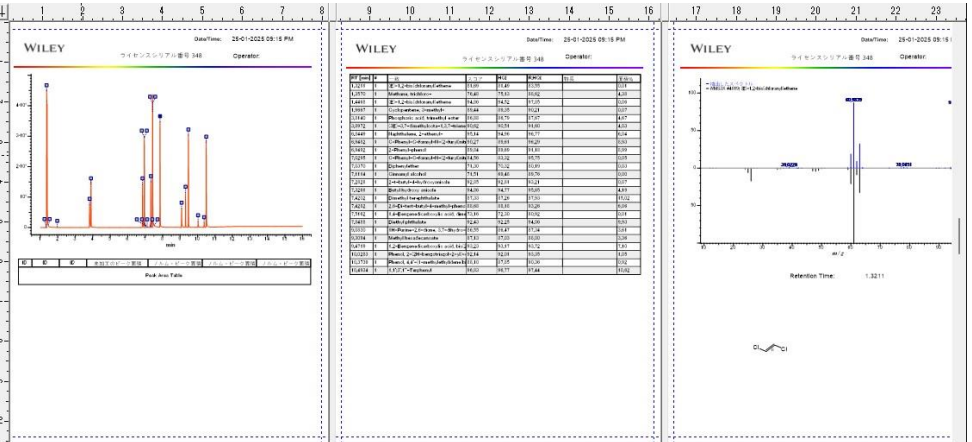
機器の分解能をプロファイルの一部として保存することが可能で、これにより機器の種類に応じて選択することができます。ユーザーは、異なる解像度設定を持つ複数のプロファイルを作成し、異なるタイプのデータ（および機器）に合わせて使用することができます。

## MS Expert を使用した高解像度 GC-MS 分析 - 演習 1

	アクション	結果
<p>1 注意: 前回の演習で <b>File &gt; Settings</b> を変更した場合は、この演習のために <b>File &gt; Settings</b> に戻ってリセットしてください。</p> <p>新しい分析を開始するには、「生の GC-MS データファイルを開く」ボタンをクリックします。</p>  <p>フォルダに移動します: C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\MS Expert</p> <p>ファイルを選択します: <b>Centroid Orbitrap HiRez - James Little.cdf</b></p> <p>注意: ポップアップウィンドウが表示されます。警告を無視するために「OK」をクリックしてください。</p> <p>コンポーネント」パネルを使用して、<b>RT (MIN) 6.9482</b> を見つけ、そのコンポーネントをクリックします。</p>	  <p>この化合物の m/z 値 170.0717 はわずかにずれています。</p>	

	アクション	結果
2	<p><b>Instrument Resolution</b>」パネルで <b>Advanced</b>」をチェックします。 機器の解像度を 3 ppm に設定し、<b>OK</b>」をクリックします。</p>	<p><b>MS Expert</b> は、これが高解像度のデータファイルであることを認識し、ユーザーが解像度情報を入力したり、解像度を調整したりできるように特別に許可します。</p> 
3		<p>m/z 値は 170.0726 に修正されました。これが正しい値です。この機器の解像度設定は永続的に保存されます。</p> 

	アクション	結果
4	<p>選択した一致のコンポーネントヒットを展開するには、コンポーネント名の左側にある (田) をクリックします。</p> <p>例えば、RT 7.4282 のコンポーネントを見つけて、(田) アイコンをクリックします。</p>	

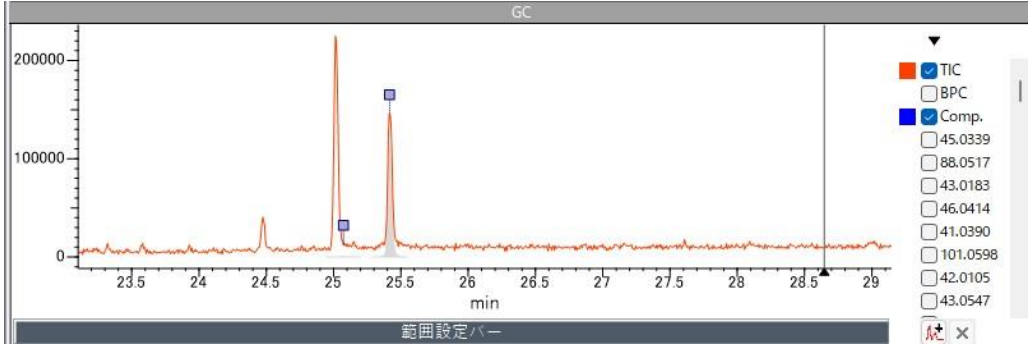
アクション	結果
<p>5 結果を <b>ReportIt</b> にエクスポートするには、<b>Transfer to:</b> ツールバーを使用します。<b>ReportIt</b> をクリックします。</p> <p>ポップアップウィンドウが表示されますので、希望するレポートテンプレートを選択します。</p> <p>OK」をクリックします。</p>  <p><b>MS_Expert_Portrait</b> テンプレートを選択してください</p>	<p>結果</p>  <p>注意: もしこれが初めて MS Expert のレポート機能を使用する場合、テンプレートをこのステップの前に追加する必要があります。次の手順を <b>MS Expert</b> を使って実行します。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● ファイル &gt; レポートテンプレートの編集」を選択</li> <li>● ポップアップウィンドウで「追加」ボタンを選択</li> <li>● ファイル MS_Expert Landscape」と MS_Expert Portrait」を選択</li> <li>● 「開く」をクリック</li> <li>● 「レポートテンプレート」ポップアップウィンドウで「閉じる」をクリック</li> </ul>

アクション		結果								
6	<b>MS Expert</b> に戻ります。									
	いくつかのコンポーネントの参照ヒットを展開し、コメントを追加します。									
	コンポーネントテーブルを右クリックして「すべてのコンポーネント情報をコピー」を選択します。その後、この情報を Excel や Word などに貼り付けることができます。									
		1	RT [min]	#	Match	Score	HQI	R.HQI	Notes	Area %
		2	1.3211		1 (E)-1,2-bis	81.69	81.49	83.55		0.01
		3	1.357		1 Trichlorom	76.85	75.94	85.11		4.05
		4	1.4468		1 (E)-1,2-bis	94.86	94.52	97.85		0.05
		5	1.9667		1 Cyclopent	90.92	90.8	92.06		0.07
		6	3.814		1 Trimethyl p	88.17	87.8	91.46		4.32
		7	3.8972		1 alpha-Pine	91.35	91.28	91.99		3.73
		8	6.8449		1 Biphenyl	96.72	96.56	98.16		5.59
		9	6.9482		1 C-Phenyl-C	90.27	89.61	96.29		8.26
		10	6.9492		1 Diphenylet	91.11	91.04	91.75		8.32
		11	7.0295		1 Diphenylet	87.03	86.92	88.03	This is righ	0.04
		12			2 DIPHENYL	85.7	84.87	93.22		
		13			3 C-Phenyl-C	84.56	83.32	95.75		
		14			4 2-Phenyl-p	84.5	84.18	87.39		
		15			5 Biphenylol	82.6	82.52	83.33		
		16			6 8-Methyl-1	81.62	80.31	93.42		
		17			7 5-Methyl-1	81.57	80.26	93.36		
		18			8 1,2-Dihydr	80.56	79.27	92.21		
		19			9 1H,3H-Naj	80.43	80.31	81.46		
		20			10 1-Naphtha	80.15	78.86	91.74		
		21	7.1114		1 Biphenyl	72.39	70.33	90.86		0
		22	7.2828		1 Phenol, 3-i	93.06	93.02	93.43		0.06
		23	7.3261		1 3-tert-Buty	95.51	95.47	95.86		3.88
		24	7.4202		1 Dimethylis	90.19	90.14	90.67		13.89
		25	7.4282		1 Butylated l	93.18	93.08	94.04		6.35
		26	7.5162		1 Dimethylis	76.71	75.93	83.71		0.01
		27	7.8488		1 Diethylpht	94.56	94.43	95.78		9.19
		28	9.083		1 Caffeine	90.93	90.78	92.26		3.34
		29	9.3082		1 Hexadecar	92.73	92.51	94.73		3.1
		30	9.4719		1 1,4-Dibuty	95.38	95.27	96.35		6.57
		31	9.473		1 Dibutyl pht	93.81	93.76	94.24		7.52
		32	10.0283		1 Drometrizc	95.72	95.7	95.94		0.97
	33	10.3739		1 Phenol, 4,4	91.76	91.63	92.96		0.85	
	34	10.4934		1 m-Terpher	97.01	96.93	97.72		9.83	

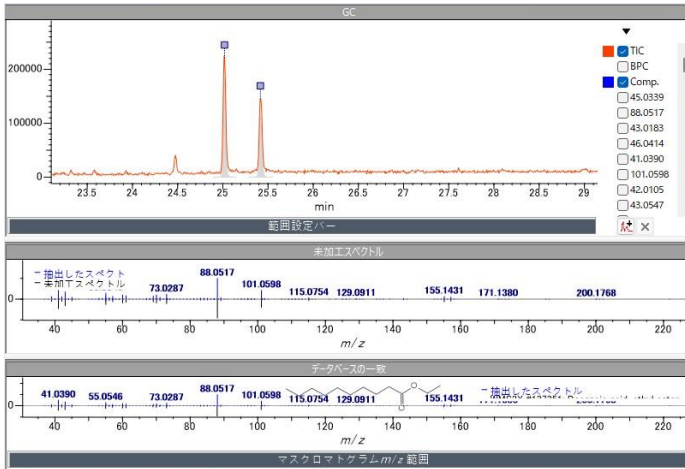
## 「MS Expert を使用した高解像度 GC-MS 分析 - 演習 2」

	Action	Result
1	<p>別の高解像度 GC-MS ファイルを同じフォルダから開きます。</p> <p>フォルダに移動します:</p> <p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\MS Expert</p> <p>ファイルを選択します:</p> <p>OBAN 14 JEOL HiRez - James Little.cdf</p> <p>GC パネルを右クリックし、 「水平ズーム」または「ボックスズーム」モードを選択します。</p>	<p>選択したピークを分析に追加(A)</p> <p>手動で選択した構成分子のベースラインを設定する(B) &gt;</p> <p>構成成分として選択したスペクトルを手動で使用する &gt;</p> <hr/> <p>ズームを戻す(Z)</p> <p>規定値で表示する Ctrl+1</p> <p>全範囲を表示する(W) Ctrl+0</p> <hr/> <p>選択モード(S) Ctrl+L</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• X-軸ズームモード(H) Ctrl+R</li> </ul> <p>ボックスズームモード(B)</p> <p>スペクトル移動モード(P) Ctrl+M</p> <hr/> <p>コピー(C)</p> <hr/> <p>表示設定(E)...</p>



	Action	Result
2	<p>24分から26分の領域（3つの小さなピーク）にズームインします。</p> <p>水平ズームを使用する場合:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>マウスマウスカーソルを使用して24分の領域をクリックし、カーソルを26分の領域までドラッグします。</li></ul> <p>ボックスズームモードを使用する場合:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>マウスマウスカーソルを使用してGCパネルの上部付近の24分の領域をクリックします。カーソルを右方向と下方向にドラッグして26分の領域を含めます。</li><li>これにより、関心のある領域にボックスが作成されます。</li></ul>	 <p>The screenshot displays a Total Ion Chromatogram (TIC) for a GC-MS analysis. The x-axis represents time in minutes, ranging from 23.5 to 29. The y-axis represents intensity, ranging from 0 to 200,000. A zoomed-in view is shown for the 24 to 26 minute range, indicated by a blue box. The chromatogram shows several peaks, with the most prominent ones between 24 and 26 minutes. A legend on the right side of the plot area shows the following options: TIC (checked), BPC (unchecked), and Comp. (checked). Below these, a list of retention times is shown with checkboxes: 45.0339, 88.0517, 43.0183, 46.0414, 41.0390, 101.0598, 42.0105, and 43.0547. At the bottom of the plot area, there is a label '範囲設定バー' (Range Setting Bar).</p>

	Action	Result
3	<p>アルゴリズムの感度を高くして、2 番目の問題を解決できます。</p> <p>「Deconvolution」パネルで、自動 deconvolution のチェックボックスを外し、Sensitivity バーを「High」に移動します</p>	 <p>Deconvolution</p> <p>参照イオン(I): 80.0619 - 139.1116</p> <p>パラメータ(P):</p> <p>要因イオン: 80.0619 エネルギー: 20.0387 面積: 83663732.4</p> <p>分解能(R)%: 50 <input type="checkbox"/> 自動検索(A)</p> <p>感度(S)%: 96</p> <p>ピーク形状要件(K)%: 52</p>

Action	Result																														
<p>4</p>	<p>Now the second component is correctly identified as the missing hexadecanoic acid.</p>  <p>構成分子</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>RT [m.]</th> <th>#</th> <th>一致</th> <th>スコア</th> <th>HI</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>12.6939</td> <td>1</td> <td>Acetic acid, 2-phenylethyl es...</td> <td>94.07</td> <td>94.0</td> </tr> <tr> <td>12.9991</td> <td>1</td> <td>4-(1-Piperidinyl)-1(2H)-phth...</td> <td>32.29</td> <td>25.0</td> </tr> <tr> <td>13.0046</td> <td>1</td> <td>2-(4-Bromophenyl)-2-oxoet...</td> <td>47.11</td> <td>46.0</td> </tr> <tr> <td>13.0135</td> <td>1</td> <td>Dodecanoic acid, ethyl ester</td> <td>97.63</td> <td>97.0</td> </tr> <tr> <td>13.1823</td> <td>1</td> <td>3-Methylbutyl decanoate</td> <td>92.66</td> <td>92.0</td> </tr> </tbody> </table> <p>構成分子モデル</p> <p>機器の解像度</p> <p>高度な検索</p> <p>デコンボリューション</p> <p>パラメータ(P):</p> <p>質量イオン: 80.0619 エネルギー: 20.0387 高圧: 82662722.4</p> <p>分解能(R): 50 <input type="checkbox"/> 自動検索(A)</p> <p>感度(S): 96</p> <p>ピーク形状要件(K): 52</p>	RT [m.]	#	一致	スコア	HI	12.6939	1	Acetic acid, 2-phenylethyl es...	94.07	94.0	12.9991	1	4-(1-Piperidinyl)-1(2H)-phth...	32.29	25.0	13.0046	1	2-(4-Bromophenyl)-2-oxoet...	47.11	46.0	13.0135	1	Dodecanoic acid, ethyl ester	97.63	97.0	13.1823	1	3-Methylbutyl decanoate	92.66	92.0
RT [m.]	#	一致	スコア	HI																											
12.6939	1	Acetic acid, 2-phenylethyl es...	94.07	94.0																											
12.9991	1	4-(1-Piperidinyl)-1(2H)-phth...	32.29	25.0																											
13.0046	1	2-(4-Bromophenyl)-2-oxoet...	47.11	46.0																											
13.0135	1	Dodecanoic acid, ethyl ester	97.63	97.0																											
13.1823	1	3-Methylbutyl decanoate	92.66	92.0																											
<p>5</p> <p>時々、GC パネルに GC ピークが多すぎて密集して表示されることがあります。表示を調整して密集を減らすには、以下の手順で設定を行います「ファイル &gt; 設定」をクリックして、設定を調整します:</p>	<p>設定</p> <p>全般 データベース</p> <p>最低マッチスコア(M): <input type="text" value="30"/> %</p> <p>スコアマッチ方法(S): <input type="text" value="加重 90% HQI, 10% 逆 HQI"/></p> <p>ヒット数(H): <input type="text" value="10"/></p> <p>表示するNumber of Component Boxes to Show: <input type="radio"/> すべて(A) <input checked="" type="radio"/> 20</p> <p><input type="checkbox"/> 以下の相対強度を持つイオンクロマトグラムをフィルタリングする(F): <input type="text" value="0"/> %</p> <p>OK キャンセル 適用(A)</p>																														

## GC-MS 分析のピークピッキングによる実施方法

### 目的

これらの演習では、KnowItAll MS Expert を使用して GC-MS データをピークピッキングで分析する方法を示します。

### 目標

これらの演習を通じて、以下のことを学びます：

- KnowItAll MS Expert を使用して GC-MS をピークピッキングで分析する方法。
- レポートを作成する方法。

### 背景

GC-MS データは、デコンボリューションを通さずにピークピッキングによって分析できます。新規化合物の同定や、MS Adaptive 検索を使用して断片化と構造データから未知の化合物の構造的特徴を提案し、推定することができます。

このレッスンで使用するトレーニングファイル

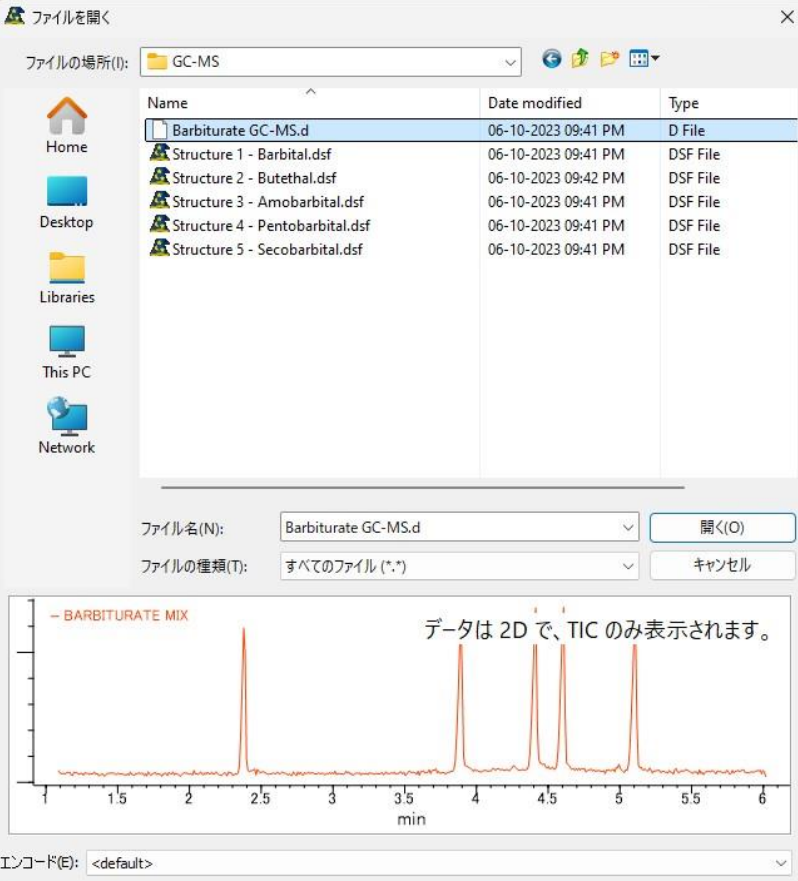
- C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\GC-MS\Barbiturate GC-MS.d

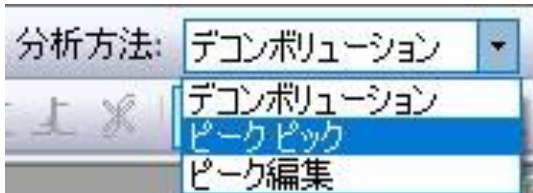
使用する KnowItAll アプリケーション

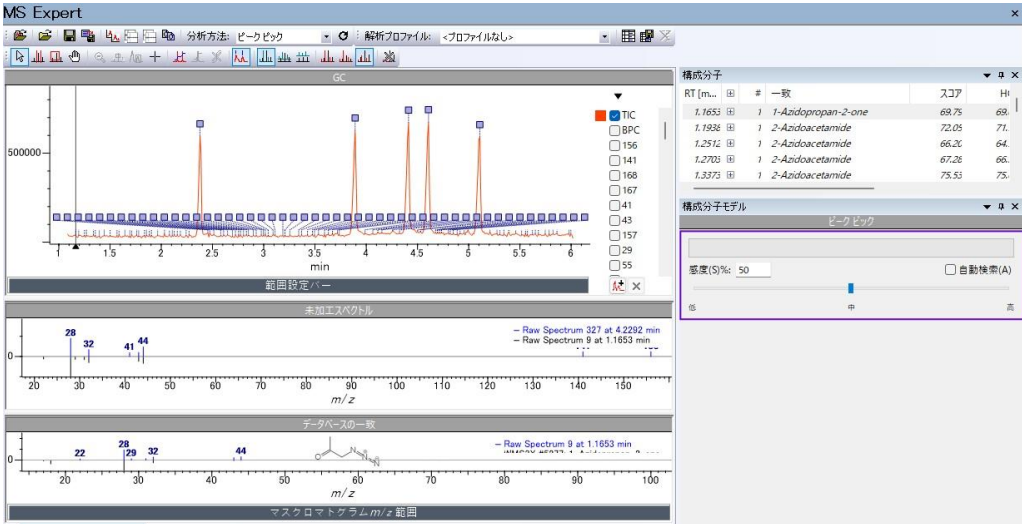
- KnowItAll MS Expert

KnowItAll MS Expert はデフォルトでデコンボリューションを実行しますが、GC がコンポーネントを十分に分離できている場合、ピークピッキングオプションを使用して GC-MS データを分析することもできます。

### 例: ピークピッキング

アクション	結果																					
<p>1 「生の GC-MS データファイルを開く」 ボタンをクリックします。</p> <p>「<b>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\GC-MS</b>」に移動します。</p> <p>ファイルを選択します。</p> <p><b>Barbiturate GC-MS.d</b></p>	 <p>ファイルを開く</p> <p>ファイルの場所(l): 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>06-10-2023 09:41 PM</td><td>D File</td></tr><tr><td>Structure 1 - Barbitral.dsf</td><td>06-10-2023 09:41 PM</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 2 - Butethal.dsf</td><td>06-10-2023 09:42 PM</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 3 - Amobarbital.dsf</td><td>06-10-2023 09:41 PM</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 4 - Pentobarbital.dsf</td><td>06-10-2023 09:41 PM</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 5 - Secobarbital.dsf</td><td>06-10-2023 09:41 PM</td><td>DSF File</td></tr></tbody></table> <p>ファイル名(N): Barbiturate GC-MS.d 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>BARBITURATE MIX</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): &lt;default&gt;</p>	Name	Date modified	Type	Barbiturate GC-MS.d	06-10-2023 09:41 PM	D File	Structure 1 - Barbitral.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File	Structure 2 - Butethal.dsf	06-10-2023 09:42 PM	DSF File	Structure 3 - Amobarbital.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File	Structure 4 - Pentobarbital.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File	Structure 5 - Secobarbital.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File
Name	Date modified	Type																				
Barbiturate GC-MS.d	06-10-2023 09:41 PM	D File																				
Structure 1 - Barbitral.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File																				
Structure 2 - Butethal.dsf	06-10-2023 09:42 PM	DSF File																				
Structure 3 - Amobarbital.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File																				
Structure 4 - Pentobarbital.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File																				
Structure 5 - Secobarbital.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File																				

	アクション	結果
2	分析方法を「ピークピッキング」に切り替えます。	

	アクション	結果																														
3	<p>感度を「低」に設定して、主要なピークのみがピックされるようにします (A)。 3.8917 分のピークを選択します。 選択したピークを GC パネルの固い四角で示された位置にマウスカーソルを置きます。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● <b>B Raw Spectrum</b>」パネルに、選択したピークの MS スペクトルが表示されます。</li> <li>● <b>C GC</b>」および <b>Database Match</b>」パネルの両方に、選択したピークの MS スペクトルが表示されます。</li> <li>● <b>D Database Match</b>」パネルで、<b>C</b> で示された選択したスペクトルに一致する参照スペクトルが表示されます。</li> </ul>	 <p>The screenshot displays the MS Expert software interface. The top panel shows a Total Ion Chromatogram (TIC) with several peaks. Below it, two raw mass spectra are shown: one for a peak at 4.2292 min and another for a peak at 1.1653 min. The bottom panel shows a database match for the 1.1653 min peak, identifying it as 2-Azidoacetamide with a score of 75.53. The right-hand panel shows a list of identified components with their retention times and scores.</p> <table border="1" data-bbox="1585 397 1927 527"> <thead> <tr> <th>RT (min)</th> <th>#</th> <th>名称</th> <th>スコア</th> <th>Hi</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1.1653</td> <td>1</td> <td>1-Azidoopropan-2-one</td> <td>69.75</td> <td>69.</td> </tr> <tr> <td>1.1936</td> <td>1</td> <td>2-Azidoacetamide</td> <td>72.05</td> <td>71.</td> </tr> <tr> <td>1.2512</td> <td>1</td> <td>2-Azidoacetamide</td> <td>66.02</td> <td>64.</td> </tr> <tr> <td>1.2703</td> <td>1</td> <td>2-Azidoacetamide</td> <td>67.26</td> <td>66.</td> </tr> <tr> <td>1.3373</td> <td>1</td> <td>2-Azidoacetamide</td> <td>75.53</td> <td>75.</td> </tr> </tbody> </table>	RT (min)	#	名称	スコア	Hi	1.1653	1	1-Azidoopropan-2-one	69.75	69.	1.1936	1	2-Azidoacetamide	72.05	71.	1.2512	1	2-Azidoacetamide	66.02	64.	1.2703	1	2-Azidoacetamide	67.26	66.	1.3373	1	2-Azidoacetamide	75.53	75.
RT (min)	#	名称	スコア	Hi																												
1.1653	1	1-Azidoopropan-2-one	69.75	69.																												
1.1936	1	2-Azidoacetamide	72.05	71.																												
1.2512	1	2-Azidoacetamide	66.02	64.																												
1.2703	1	2-Azidoacetamide	67.26	66.																												
1.3373	1	2-Azidoacetamide	75.53	75.																												

## GC-MS を手動で分析する

### GC-MS を手動で分析する方法

#### 目的

これらの演習は、KnowItAll MS Expert を使用して GC-MS を手動で分析する方法を示しています。

#### 目標

これらの演習を通じて、以下のことを学びます：

- ▶ KnowItAll MS Expert を使用して GC-MS を手動で分析する方法。

#### 背景

KnowItAll MS Expert は、GC-MS データを調べ、スペクトルの引き算を実行することができます。引き算されたスペクトルに対するマッチは、参照データと照合して検索されます。」

##### このレッスンで使用したトレーニングファイル

・ C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\GC-MS\Barbiturate GC-MS.d

使用した KnowItAll アプリケーション

・ KnowItAll MS Expert」



平均 MS (GC ペインの緑色のバー) は、バーをクリックし、ドラッグ&ドロップすることで定義されます。

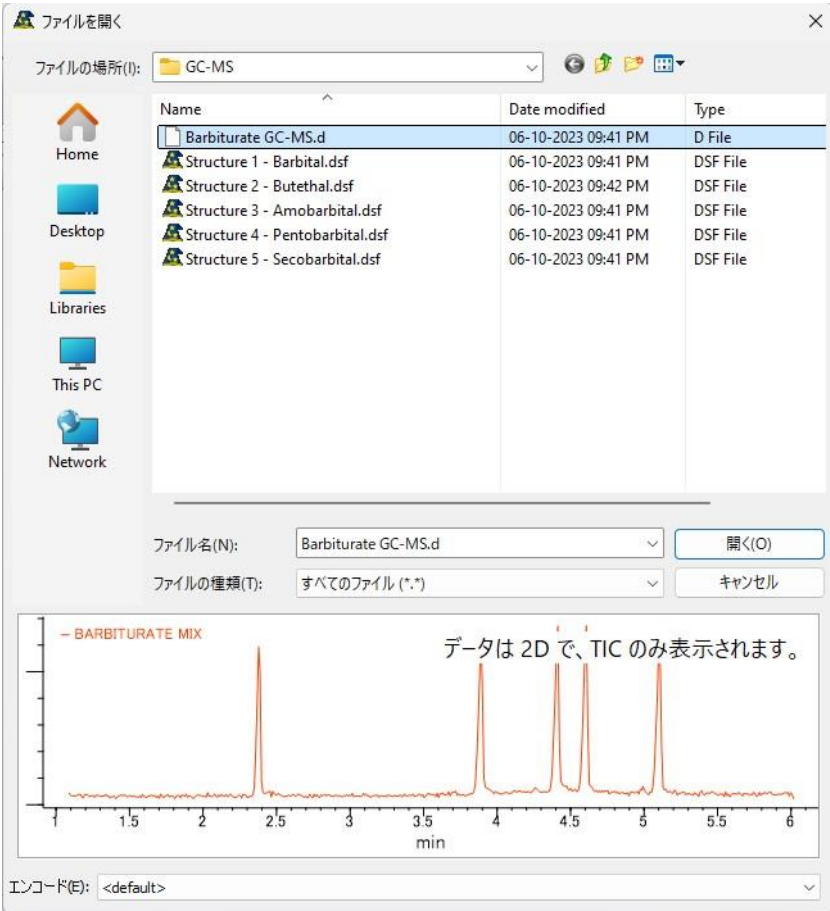
- 平均 MS (緑色のバー) - 背景 (赤色のバー)

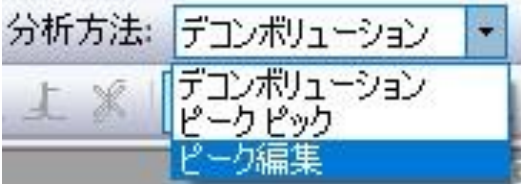
**Match** テーブルは、選択した MS に対するデータベース検索のヒットリストです。

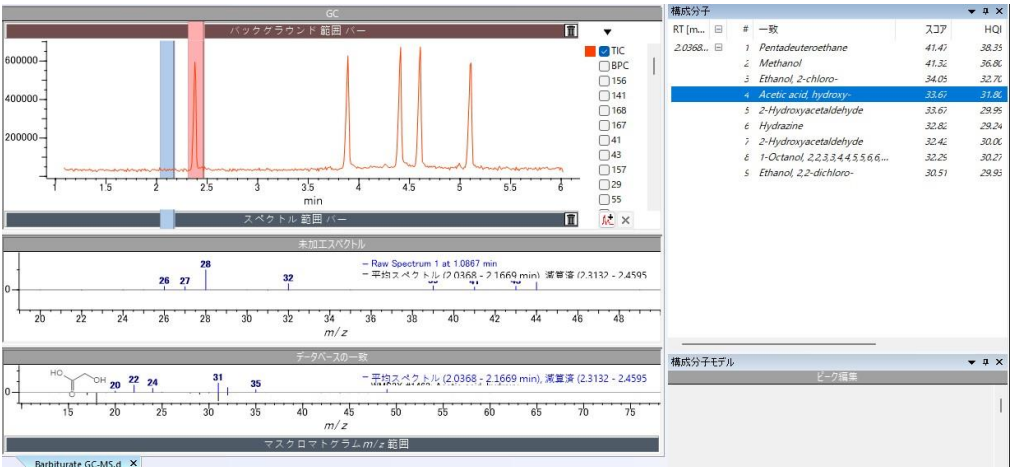
選択した MS は、スペクトル検索のために **SearchIt** アプリケーションに転送できます。

イオンクロマトグラムの曲線下面積 (AUC) とピーク高さの値は、[分析] > [ピーク面積/積分] メニュー項目を使用して計算できます。]

## 例：手動分析

	アクション	結果																					
1	<p>MS Expert で「生の GC-MS データファイルを開く」ボタンをクリックします。</p> <p>次の場所に移動します： C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\GC-MS」</p> <p>に移動します： ファイル「Barbiturate GC-MS.d」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>06-10-2023 09:41 PM</td><td>D File</td></tr><tr><td>Structure 1 - Barbitol.dsf</td><td>06-10-2023 09:41 PM</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 2 - Butethal.dsf</td><td>06-10-2023 09:42 PM</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 3 - Amobarbital.dsf</td><td>06-10-2023 09:41 PM</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 4 - Pentobarbital.dsf</td><td>06-10-2023 09:41 PM</td><td>DSF File</td></tr><tr><td>Structure 5 - Secobarbital.dsf</td><td>06-10-2023 09:41 PM</td><td>DSF File</td></tr></tbody></table> <p>ファイル名(N): Barbiturate GC-MS.d 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>エンコード(E): &lt;default&gt;</p>	Name	Date modified	Type	Barbiturate GC-MS.d	06-10-2023 09:41 PM	D File	Structure 1 - Barbitol.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File	Structure 2 - Butethal.dsf	06-10-2023 09:42 PM	DSF File	Structure 3 - Amobarbital.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File	Structure 4 - Pentobarbital.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File	Structure 5 - Secobarbital.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File
Name	Date modified	Type																					
Barbiturate GC-MS.d	06-10-2023 09:41 PM	D File																					
Structure 1 - Barbitol.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File																					
Structure 2 - Butethal.dsf	06-10-2023 09:42 PM	DSF File																					
Structure 3 - Amobarbital.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File																					
Structure 4 - Pentobarbital.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File																					
Structure 5 - Secobarbital.dsf	06-10-2023 09:41 PM	DSF File																					

	アクション	結果
2	分析方法を「手動」に切り替えます。	

	アクション	結果																																																		
3	<p>平均範囲バー (A) を使用して MS クロマトグラムの選択した領域を定義します。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>マウスマウスカーソルをクリックしてドラッグし、平均範囲バーに沿って範囲を選択します。</li> <li>複数の範囲を選択することができます。</li> </ul> <p>背景範囲バー (B) を使用して、クロマトグラムの選択した背景領域を定義します。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>マウスマウスカーソルをクリックしてドラッグし、背景範囲バーに沿って範囲を選択します。</li> <li>こちらも複数の範囲を選択できます。</li> </ul>	<p>背景が差し引かれた MS スペクトル (C) と、対応する一致した参照 MS スペクトル (D) が下部パネルに表示されます。</p>  <p>The screenshot displays the following components:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><b>Chromatogram:</b> Shows a Total Ion Chromatogram (TIC) with a peak at approximately 2.1669 minutes. A red vertical bar (A) indicates the selected peak, and a blue vertical bar (B) indicates the background region.</li> <li><b>Mass Spectra:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li><b>Raw Spectrum 1 at 1.6887 min:</b> Shows the initial mass spectrum.</li> <li><b>平均スペクトル (2.1669 min):</b> Shows the background-subtracted mass spectrum of the selected peak.</li> <li><b>データベースの一覧:</b> Shows a reference mass spectrum for Acetic acid, hydroxy- (m/z 20, 22, 24, 31, 35).</li> </ul> </li> <li><b>分子リスト (右側):</b> A table listing identified compounds with their retention times and quality scores. <table border="1" data-bbox="1554 422 1900 600"> <thead> <tr> <th>RT [min]</th> <th>#</th> <th>一致</th> <th>スコア</th> <th>HQI</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>2.0368</td> <td>1</td> <td>Pentadeuteroethane</td> <td>41.47</td> <td>38.35</td> </tr> <tr> <td></td> <td>2</td> <td>Methanol</td> <td>41.32</td> <td>36.88</td> </tr> <tr> <td></td> <td>3</td> <td>Ethanol, 2-chloro-</td> <td>34.05</td> <td>32.76</td> </tr> <tr> <td></td> <td>4</td> <td>Acetic acid, hydroxy-</td> <td>33.67</td> <td>31.86</td> </tr> <tr> <td></td> <td>5</td> <td>2-Hydroxyacetaldehyde</td> <td>33.67</td> <td>29.95</td> </tr> <tr> <td></td> <td>6</td> <td>Hydrazine</td> <td>32.82</td> <td>29.24</td> </tr> <tr> <td></td> <td>7</td> <td>2-Hydroxyacetaldehyde</td> <td>32.42</td> <td>30.02</td> </tr> <tr> <td></td> <td>8</td> <td>1-Octanol, 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6...</td> <td>32.25</td> <td>30.27</td> </tr> <tr> <td></td> <td>9</td> <td>Ethanol, 2,2-dichloro-</td> <td>30.51</td> <td>29.95</td> </tr> </tbody> </table> </li> </ul>	RT [min]	#	一致	スコア	HQI	2.0368	1	Pentadeuteroethane	41.47	38.35		2	Methanol	41.32	36.88		3	Ethanol, 2-chloro-	34.05	32.76		4	Acetic acid, hydroxy-	33.67	31.86		5	2-Hydroxyacetaldehyde	33.67	29.95		6	Hydrazine	32.82	29.24		7	2-Hydroxyacetaldehyde	32.42	30.02		8	1-Octanol, 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6...	32.25	30.27		9	Ethanol, 2,2-dichloro-	30.51	29.95
RT [min]	#	一致	スコア	HQI																																																
2.0368	1	Pentadeuteroethane	41.47	38.35																																																
	2	Methanol	41.32	36.88																																																
	3	Ethanol, 2-chloro-	34.05	32.76																																																
	4	Acetic acid, hydroxy-	33.67	31.86																																																
	5	2-Hydroxyacetaldehyde	33.67	29.95																																																
	6	Hydrazine	32.82	29.24																																																
	7	2-Hydroxyacetaldehyde	32.42	30.02																																																
	8	1-Octanol, 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6...	32.25	30.27																																																
	9	Ethanol, 2,2-dichloro-	30.51	29.95																																																