

# **KnowItAll** ソフトウェアのトレーニング

---

## KnowItAll MS Expert、ProcessIt、SearchIt を使用した GC-MS 分析

# 自動的な GC-MS 分析

## KnowItAll MS Expert を使用して自動的な GC-MS 分析を行う方法

### 目的

これらの演習は、KnowItAll MS Expert を使用して GC-MS データを自動的に分析する方法を示しています。

### 目標

これらのエクササイズを通じて、以下の内容を学ぶことができます：

- KnowItAll MS Expert を使用して、GC-MS データを自動的に化学成分の MS スペクトルに分解し、それらを数百万のリファレンスと自動的に照合する方法
- レポートの生成方法

### 背景

GC-MS データは情報が豊富であり、特に複雑な分析物を調べる場合には時間がかかることがあります。そこで、私たちは高速かつ柔軟な自動分離と、既知および未知の化合物を同定するための自動データベース検索を組み合わせたコンピュータシステムを提案します。新規の化合物は同定することができ、MS アダプティブ検索を適用することで、断片化データや構造データを利用して未知の化合物の構造特性を推定することができます。

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\MS Expert folder files

#### KnowItAll 使用アプリケーション

- KnowItAll MS Expert

## GC-MS デコンボリューションアルゴリズム

当システムでは、複数のスペクトル上で個々の  $m/z$  値を追跡し、重なる  $m/z$  値ピークを持つ成分を分離するため、各成分ごとにデータから純粋なスペクトルを抽出します。正確な  $m/z$  値データが利用可能であり、ユーザーが単位  $m/z$  値の代わりにそれを使用することを選択した場合、選択された計器の精度（自動、ppm、または固定値）に基づいて、GC-MS 分析全体に存在する正確な  $m/z$  値を特定します。生データ中の  $m/z$  値は、計器の分解能を考慮して最も近い値を見つけ、それを修正して正確な値に変換します。修正された  $m/z$  値は、次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、個々の  $m/z$  値を複数の生データスペクトルで追跡し、重なる  $m/z$  値ピークを持つ成分を分離しながら、各成分のスペクトルをデータから抽出します。このアルゴリズムの詳細は、以下の論文[1-4]によって大部分がまとめられています。

低い強度の再構築された全イオンカレント（RTIC）クロマトグラムピークを持つ成分でも、周囲の成分と十分に分離できる場合には、自動的に検出するための追加の手順が行われます。

アルゴリズムの詳細は、以下の論文によって一部はまとめられていますが、それに加えて私たちはさらに改良を加えています。

1. S. E. Stein. 「ガスクロマトグラフィー/質量分析計データからのスペクトル抽出と化合物同定のための統合的手法」 *J Am Soc Mass Spectrom* 1999, **10**, 770-781.
2. R. G. Dromey, Mark J. Stefik, Thomas C. Rindfleisch, Alan M. Duffield. 「ガスクロマトグラフィー/質量分析計データからの背景と隣接成分の影響を受けない質量スペクトルの抽出」 *ANALYTICAL CHEMISTRY*, 1976, VOL. **48**, NO. 9, 1368-1375.
3. J. E. Biller, K. Biemann. 「再構築質量スペクトル、ガスクロマトグラフィー-質量分析計データの新しいアプローチ」 *Analytical Letters* 1974, **7**, 515-528.
4. Bruce N. Colby. 「重なり合う GC/MS 成分のためのスペクトルデコンボリューション」 *J Am Soc 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

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

Spectrum search type – identity (normal)

Presearch – default

Included Libs – MainLib

Apply limits – unchecked

Use constraints – unchecked

Dot-product algorithm

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

Spectrum search type – similarity (simple)

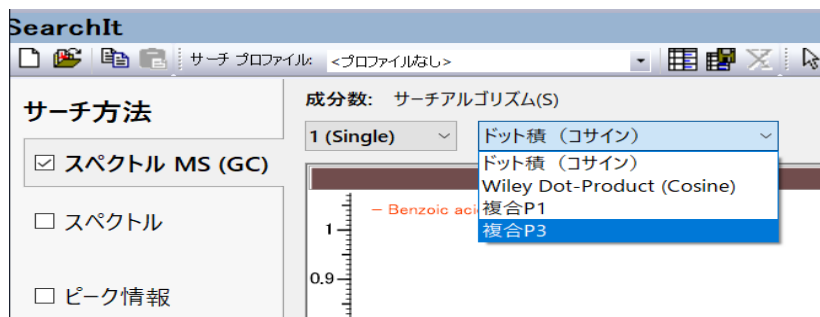
Presearch – default

Included Libs – MainLib

Apply limits – unchecked

Use constraints – unchecked

Samokhin, K. Sotnezova, V. Lashin, I. Revelsky. 「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」 J. Mass Spectrom. 2015, **50**, 820-825.



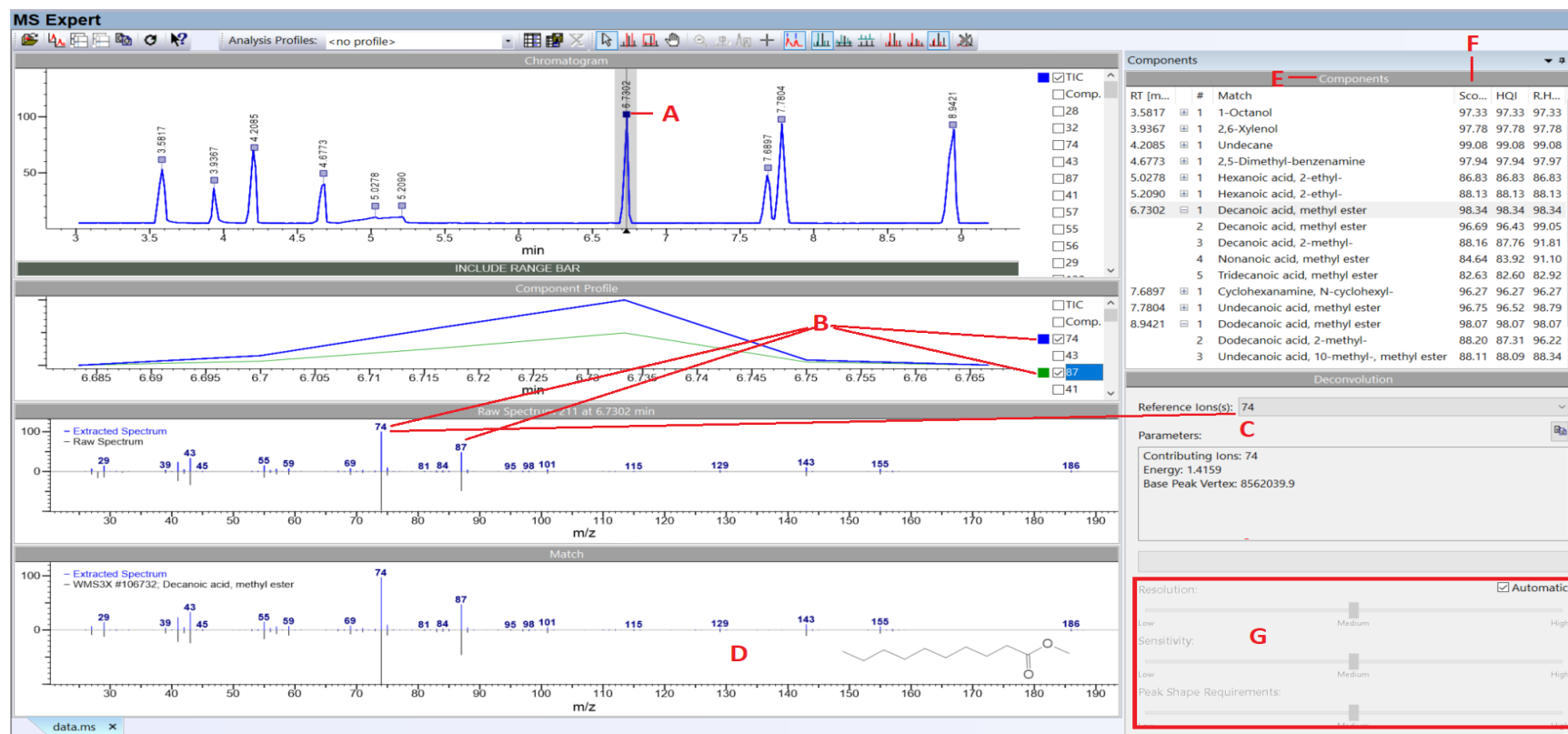
#### 場所

- ドット積 (Dot-Product) - 上記のグラフの 2 番目の式
  - また、古い Finnigan アルゴリズムである「Wiley ドット積 (旧 KnowItAll アルゴリズム)」は、ドット積の計算を行う前に、最大 16 つのピークのうち少なくとも 12 つのピークと基準ピーク的一致が確認される必要があります。
  - Composite P1 - 上記のグラフの 1 番目の式
  - Composite P3 - 上記のグラフの 1 番目の式
- 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。

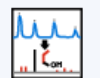
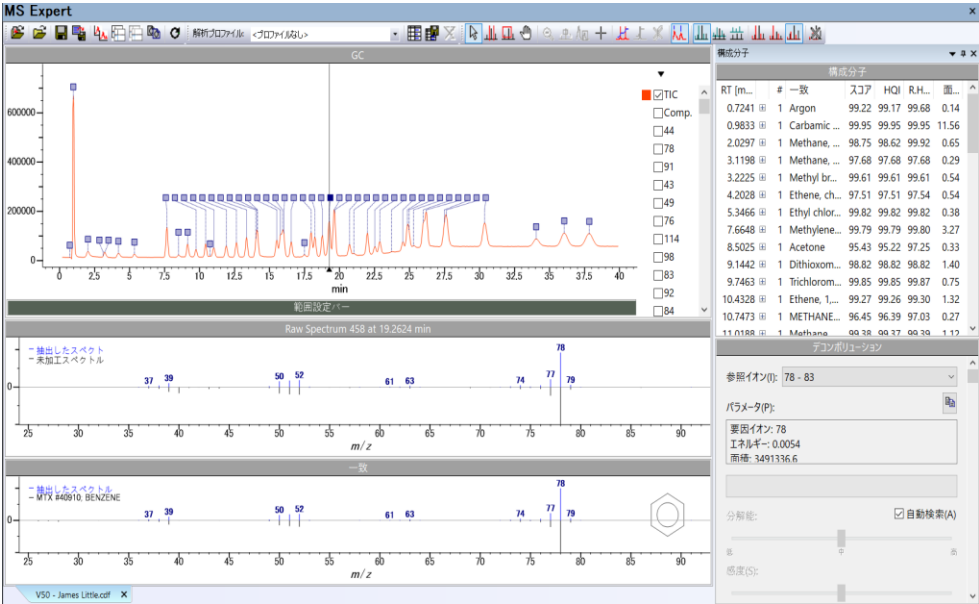
## 例 1：単位 m/z 値による GC-MS のデータ

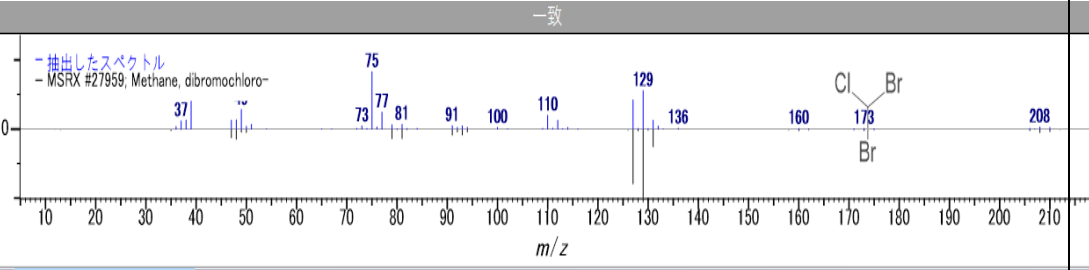
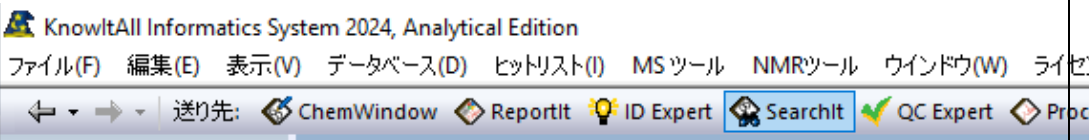
### GUI の説明

この図は、単位 m/z 値による GC-MS データの解析結果と、各成分に対する Wiley MS データベースの検索結果を示しています。

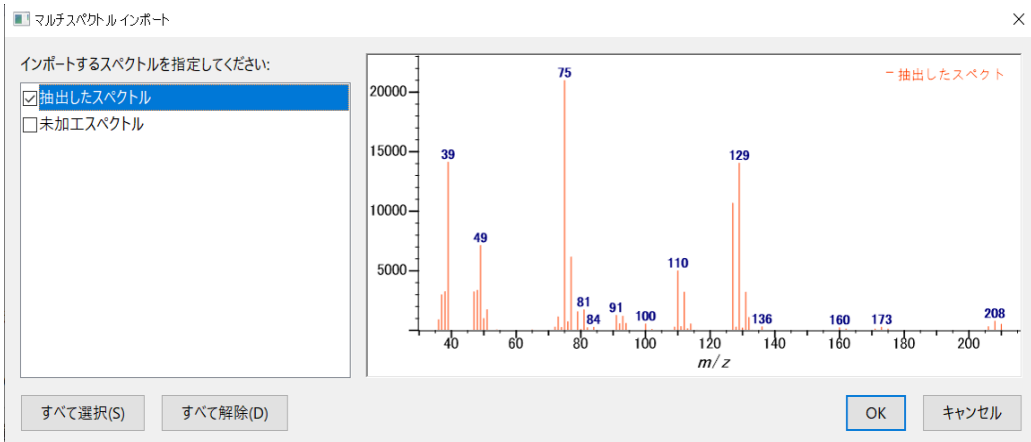
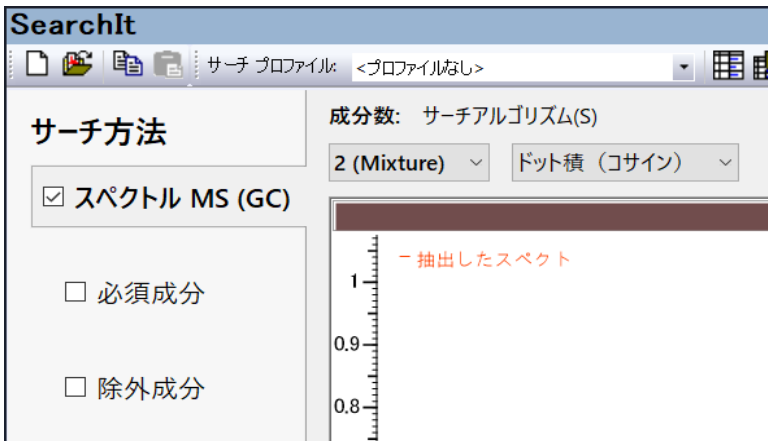


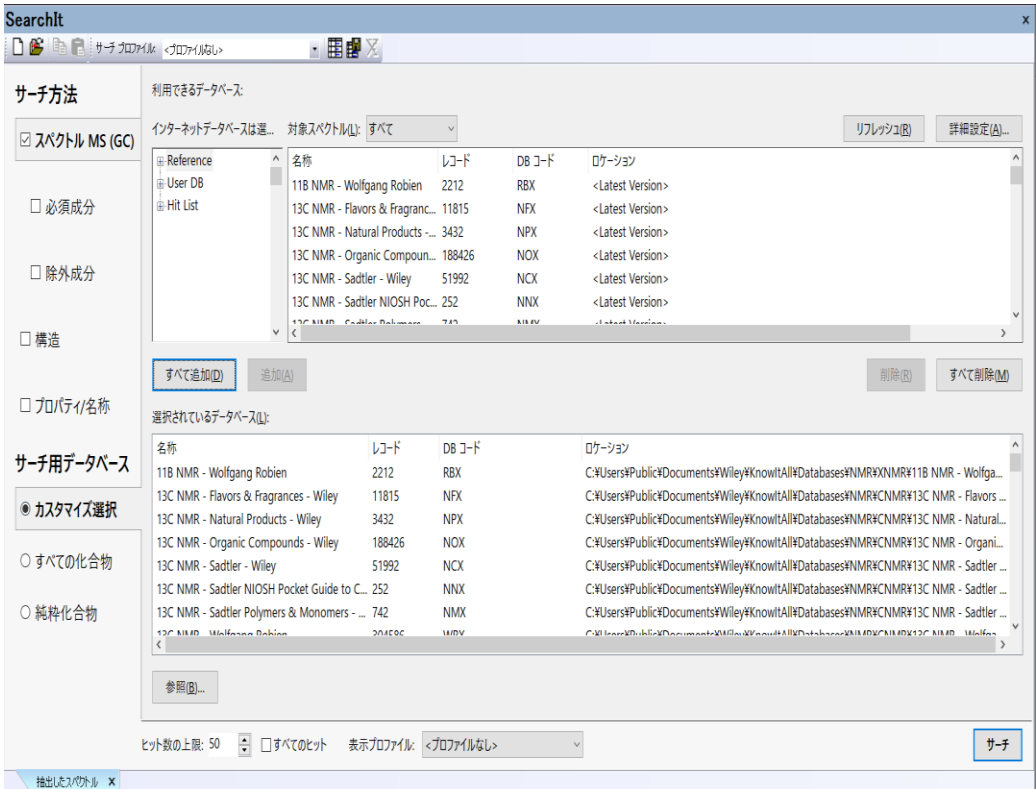
A - 解析された GC ピークで、参照 MS データベースとの一致が見つかりました; B - 各成分内の選択されたイオン; C - 成分をモデル化するために使用された参照イオン; D - 抽出されたスペクトル (上) と参照スペクトル (下) の比較; E - 成分のテーブル; F - スペクトルの検索と逆検索の結果を示すヒット品質指数 (HQI)。また、上記のスクリーンショットには表示されていませんが、各成分の GC 曲線下面積 (AUC) の値も表示されます; G - アルゴリズムの調整可能なパラメータ。

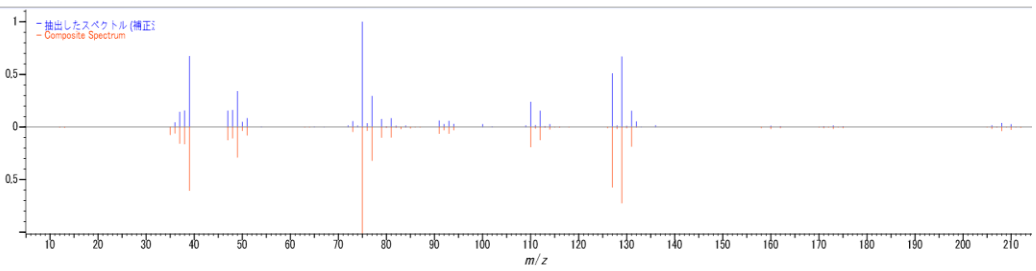
	アクション	結果
1	<p><b>Spectral Process</b> ツールバーの下にある <b>MS Expert</b> アプリケーションに移動してください。</p>  <p>MS Expert</p> <p>「<b>Open Data File</b> (データファイルを開く)」ボタンをクリックしてください</p> <p>フォルダ C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\MS Expert に移動してください</p> <p>V50 - James Little.CDF ファイル</p> <p><b>注記</b> : 2024 年のリリースでは、外部で保存された解析ファイルを開くためには、「<b>Open Analysis</b> (解析を開く)」ボタンを使用できます。</p>	<p><b>MS Expert</b> は以下の処理を自動的に実行します</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>GC デコンボリューションにより、抽出された成分の MS を生成します。</li> <li>抽出された MS を再度、参照データベースで検索します</li> <li>トップヒットをレポートします</li> </ol>  <p><b>注記</b> : 2024 年のリリースでは、「成分」テーブルに「面積%」という列が追加されます。これにより、クロマトグラムピーク強度の成分割合をおおよそ把握することができます。</p>

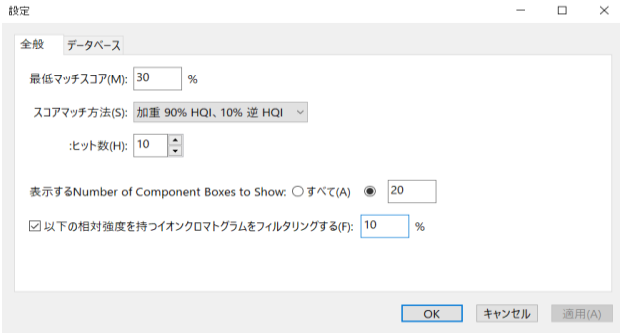
アクション	結果
<p>2 「成分」テーブルの各成分のヒットリストを確認します</p> <p><b>RT (MIN) 19.6127</b> に移動し、このヒットのスコアが非常に低いことに気づきます。スコアは <b>56.74</b> です。</p>	<p>一致</p>  <p>抽出したスペクトル - MSRX #27959, Methane, dibromochloro-</p> <p>上部ペインの抽出スペクトルと下部ペインのメタン、ジブロモクロローの参照スペクトルを比較すると、抽出スペクトルにはメタン、ジブロモクロローを含む他の成分も含まれていることがわかります。</p>
<p>3 抽出スペクトルを「SearchIt」に転送します</p>	 <p>KnowItAll Informatics System 2024, Analytical Edition</p> <p>ファイル(F) 編集(E) 表示(V) データベース(D) ヒットリスト(I) MSツール NMRツール ウインドウ(W) ライセン</p> <p>送り先: ChemWindow ReportIt ID Expert SearchIt QC Expert Proce</p>

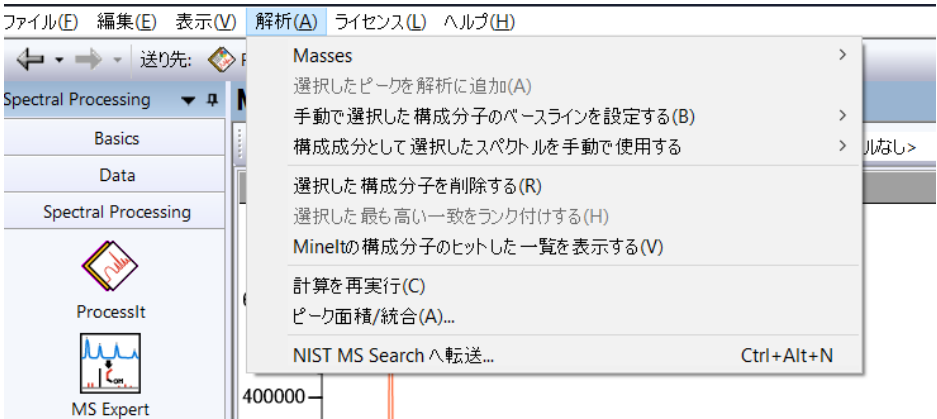


アクション	結果
<p>4 プロンプトで<b>抽出スペクトル</b>のみをチェックします</p> <p>OK</p>	
<p>5 「<b>SearchIt</b>」で、<b>2 (混合物)</b> を検索するように設定します</p>	

アクション	結果																																																																								
<p>6 ユーザー選択タブをクリックして、全てのライセンス付き MS データベースを追加します</p> <p>検索</p>	 <p>The screenshot shows the SearchIt application window. On the left, there are search method options: 'インターネット MS (GC)' (checked), '必須成分', '除外成分', '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 table of available databases with columns for name, record ID, DB code, and location. A table below shows the selected databases.</p> <table border="1" data-bbox="1010 467 1879 657"> <thead> <tr> <th>Reference</th> <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>11B NMR - Wolfgang Robien</td> <td>2212</td> <td>RBX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragranc...</td> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragranc...</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Natural Products ...</td> <td>13C NMR - Natural Products ...</td> <td>3432</td> <td>NPX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Organic Compoun...</td> <td>13C NMR - Organic Compoun...</td> <td>188426</td> <td>NOX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>13C NMR - Sadtler - Wiley</td> <td>51992</td> <td>NCX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...</td> <td>13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...</td> <td>252</td> <td>NNX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler Polymers &amp; Monomers ...</td> <td>13C NMR - Sadtler Polymers &amp; Monomers ...</td> <td>742</td> <td>NMX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> </tbody> </table> <table border="1" data-bbox="1010 722 1879 974"> <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>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\11B NMR - Wolfga...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Flavors &amp; Fragrances - Wiley</td> <td>11815</td> <td>NFX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\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\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\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\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\13C NMR - Sadtler ...</td> </tr> <tr> <td>13C NMR - Sadtler Polymers &amp; Monomers - ...</td> <td>742</td> <td>NMX</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...</td> </tr> </tbody> </table> <p>At the bottom, there are controls for 'ヒット数の上限: 50', 'すべてのヒット', '表示プロファイル: &lt;プロファイルなし&gt;', and a 'サーチ' button.</p>	Reference	名称	レコード	DB コード	ロケーション	11B NMR - Wolfgang Robien	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>	13C NMR - Flavors & Fragranc...	13C NMR - Flavors & Fragranc...	11815	NFX	<Latest Version>	13C NMR - Natural Products ...	13C NMR - Natural Products ...	3432	NPX	<Latest Version>	13C NMR - Organic Compoun...	13C NMR - Organic Compoun...	188426	NOX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler - Wiley	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...	13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...	252	NNX	<Latest Version>	13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers ...	13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers ...	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	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\11B NMR - Wolfga...	13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Flavors ...	13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Natural...	13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Organi...	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...	13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to C...	252	NNX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...	13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers - ...	742	NMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...
Reference	名称	レコード	DB コード	ロケーション																																																																					
11B NMR - Wolfgang Robien	11B NMR - Wolfgang Robien	2212	RBX	<Latest Version>																																																																					
13C NMR - Flavors & Fragranc...	13C NMR - Flavors & Fragranc...	11815	NFX	<Latest Version>																																																																					
13C NMR - Natural Products ...	13C NMR - Natural Products ...	3432	NPX	<Latest Version>																																																																					
13C NMR - Organic Compoun...	13C NMR - Organic Compoun...	188426	NOX	<Latest Version>																																																																					
13C NMR - Sadtler - Wiley	13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	<Latest Version>																																																																					
13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...	13C NMR - Sadtler NIOSH Poc...	252	NNX	<Latest Version>																																																																					
13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers ...	13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers ...	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	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\11B NMR - Wolfga...																																																																						
13C NMR - Flavors & Fragrances - Wiley	11815	NFX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Flavors ...																																																																						
13C NMR - Natural Products - Wiley	3432	NPX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Natural...																																																																						
13C NMR - Organic Compounds - Wiley	188426	NOX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Organi...																																																																						
13C NMR - Sadtler - Wiley	51992	NCX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...																																																																						
13C NMR - Sadtler NIOSH Pocket Guide to C...	252	NNX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...																																																																						
13C NMR - Sadtler Polymers & Monomers - ...	742	NMX	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\NMR\13C NMR - Sadtler ...																																																																						


	アクション	結果																																																					
7		<p>混合物の解析結果として、ヒットリストのトップに非常に良い複合スペクトルの一致が返されます：</p>  <p>Raman MS (GC) NMR</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>テーブル</th> <th>プロパ</th> <th>関連化合物デー</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>化学構造</th> <th>スペクトル</th> <th>&lt;auto&gt; (Raman)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>94.09</td> <td>N.A.</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>Composite Spectrum</td> <td><chem>ClC=CClC(Br)Cl</chem></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>0.59</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>MSR: 4571 1-Propene, 1,3-dichloro-, (Z)-</td> <td><chem>ClC=CCl</chem></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>0.41</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>MSR: 27959 Methane, dibromochloro-</td> <td><chem>ClC(Br)Br</chem></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td></td> <td>N.A.</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>Residual Spectrum</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <p>最初の行の複合スペクトルは、1-プロペン、1,3-ジクロロ（新しい成分）とメタン、ジブロモクロロから成る2つの成分の混合物です。最後の行の残留スペクトルは、抽出スペクトルと複合スペクトルの差であり、差はほとんどないため、未検出の成分は残っていないことを示しています。</p>	テーブル	プロパ	関連化合物デー	HQI	構成比	除く	Co	DI	ID	Name	化学構造	スペクトル	<auto> (Raman)	1	94.09	N.A.				Composite Spectrum	<chem>ClC=CClC(Br)Cl</chem>				0.59					MSR: 4571 1-Propene, 1,3-dichloro-, (Z)-	<chem>ClC=CCl</chem>				0.41					MSR: 27959 Methane, dibromochloro-	<chem>ClC(Br)Br</chem>				N.A.					Residual Spectrum			
テーブル	プロパ	関連化合物デー																																																					
HQI	構成比	除く	Co	DI	ID	Name	化学構造	スペクトル	<auto> (Raman)																																														
1	94.09	N.A.				Composite Spectrum	<chem>ClC=CClC(Br)Cl</chem>																																																
	0.59					MSR: 4571 1-Propene, 1,3-dichloro-, (Z)-	<chem>ClC=CCl</chem>																																																
	0.41					MSR: 27959 Methane, dibromochloro-	<chem>ClC(Br)Br</chem>																																																
	N.A.					Residual Spectrum																																																	


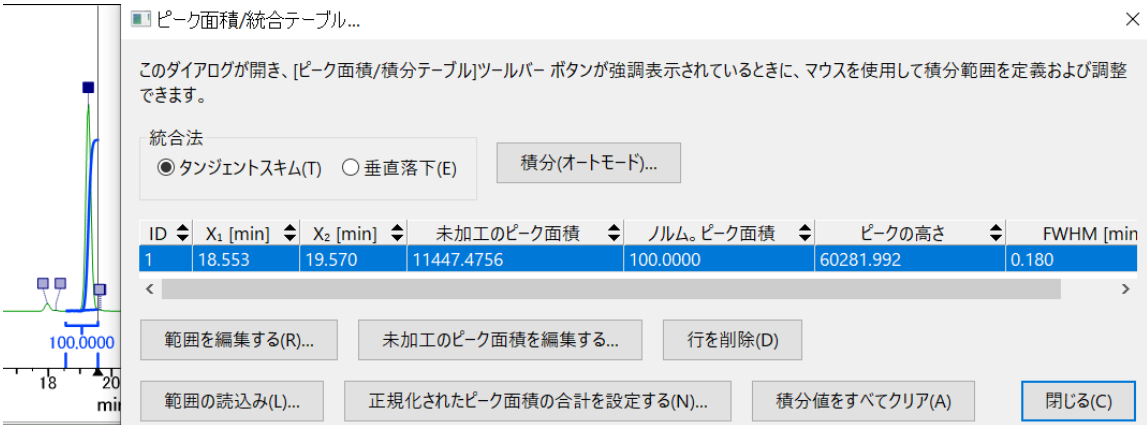

	アクション	結果																																				
8	<p><b>MS Expert</b> に戻ります、</p> <p>「<b>File (ファイル)</b>」 &gt; 「<b>Settings (設定)</b>」メニューに移動して、成分のヒットリストのパラメータを調整することができます</p>	<p>ヒットの評価パラメータ :</p>  <p>設定</p> <p>全般 データベース</p> <p>最低マッチスコア(M): 30 %</p> <p>スコアマッチ方法(S): 加重 90% HQI, 10% 逆 HQI</p> <p>:セット数(H): 10</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</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:</p> <p>インターネットデータベースは選... 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>ロケーション</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>User DB</td> <td>MS - Wiley Mass Spectral Library of Lipids</td> <td>430</td> <td>WMLX</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...</td> <td>2959</td> <td>WMSD3X</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...</td> <td>236376</td> <td>WMSL3X</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...</td> <td>601041</td> <td>WMS3X</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</td> </tr> <tr> <td></td> <td>MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...</td> <td>32986</td> <td>WMSR3X</td> <td>&lt;Latest Version&gt;</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 Dat...</td> <td>WMS3X</td> <td>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\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	ロケーション	User DB	MS - Wiley Mass Spectral Library of Lipids	430	WMLX	<Latest Version>		MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...	2959	WMSD3X	<Latest Version>		MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...	236376	WMSL3X	<Latest Version>		MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...	601041	WMS3X	<Latest Version>		MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...	32986	WMSR3X	<Latest Version>	名称	DB コード	ロケーション	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...	WMS3X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\MS...
Reference	名称	レコード	DB コード	ロケーション																																		
User DB	MS - Wiley Mass Spectral Library of Lipids	430	WMLX	<Latest Version>																																		
	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...	2959	WMSD3X	<Latest Version>																																		
	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...	236376	WMSL3X	<Latest Version>																																		
	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...	601041	WMS3X	<Latest Version>																																		
	MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...	32986	WMSR3X	<Latest Version>																																		
名称	DB コード	ロケーション																																				
MS - Wiley Registry of Mass Spectral Dat...	WMS3X	C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Databases\MS...																																				

	アクション	結果
9	<p>TIC ペインの「<b>INCLUDE RANGE BAR</b>」をクリックして、手でピークを追加することができます。その後、「<b>Re-run Calculations</b> (再計算)」を選択して新たな解析を行います。</p> <p>「Minelt」で「<b>View Component Hit List in Minelt</b> (成分ヒット List in Minelt) を表示」を選択すると、<b>Minelt</b> での成分テーブルの内容を確認することができます</p>	

## 例 2 : クロマトグラムの曲線下面積 (AUC) の評価

これは KnowItAll 2024 の新機能です。この機能を使用すると、各成分ごとにクロマトグラムの AUC 値を取得することができます。

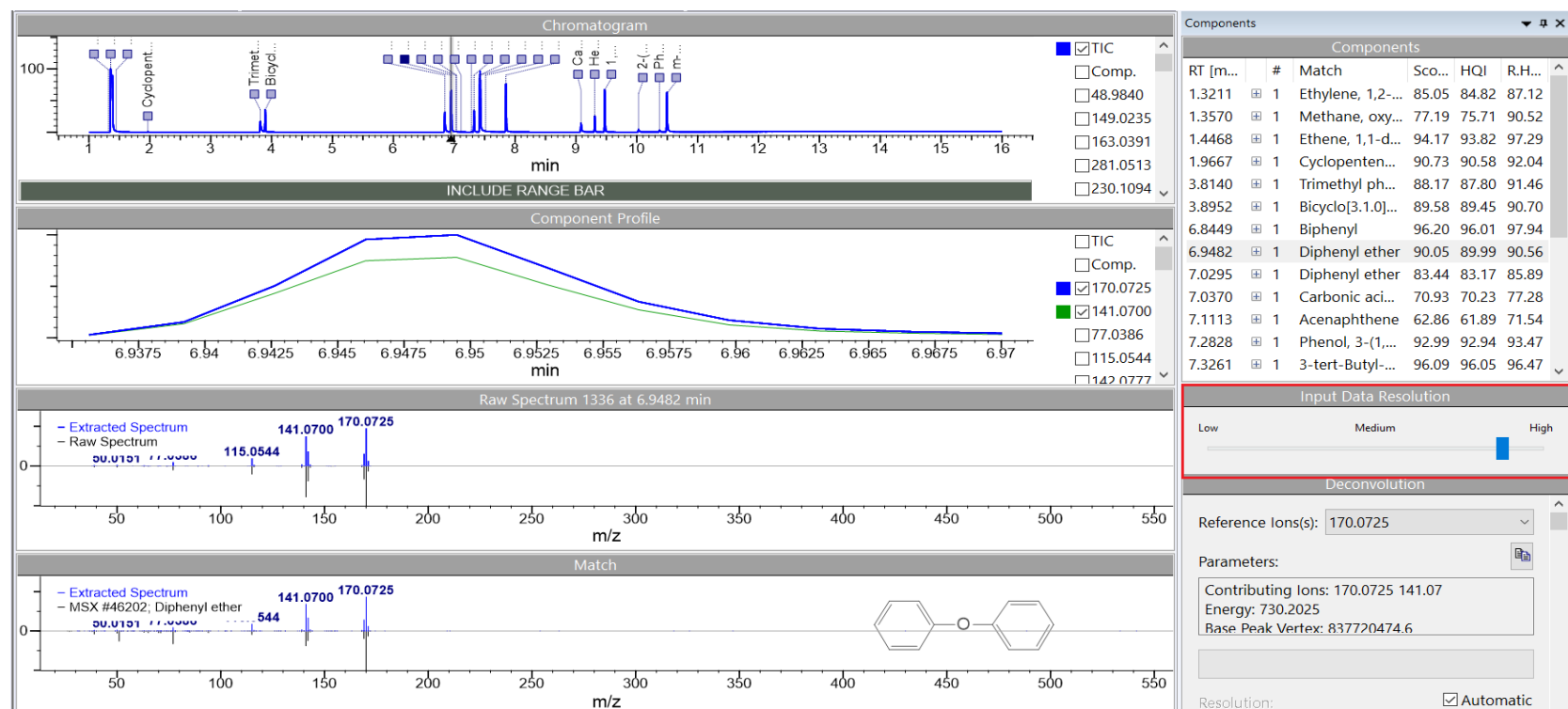
アクション	結果
<p>1 前の例を引き続き進めましょう。</p> <p>TIC のチェックをオフにし、イオンの m/z 値を 78 に設定します</p> <p><input type="checkbox"/> TIC <input type="checkbox"/> Comp. <input type="checkbox"/> 44 <input checked="" type="checkbox"/> 78</p> <p>「Analysis (解析)」 &gt; 「Peak Area/Integration (ピーク面積/積分)」のメニューアイテムを選択します</p>	 <p>The screenshot shows the 'Analysis' menu open in the software. The menu items are: Masses, 選択したピークを解析に追加(A), 手で選択した構成分子のベースラインを設定する(B), 構成成分として選択したスペクトルを手動で使用する, 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), 計算を再実行(C), <b>ピーク面積/統合(A)...</b> (highlighted), and NIST MS Searchへ転送... (Ctrl+Alt+N). The background shows the 'Spectral Processing' panel with 'ProcessIt' and a chromatogram icon.</p>

アクション	結果
<p>2 クロマトグラムパネル上でマウスを重ねると、積分のマーク  が表示され、マウスをドラッグして AUC の計算領域を定義できます。</p>	 <p>または、ポップアップウィンドウを使って AUC テーブルを自動的に作成することもできます。接線スキム (tangential skim) は、傾斜したベースラインの AUC とピークの高さを計算するための方法です。</p>
<p>3 TIC ペインの「<b>INCLUDE RANGE BAR</b>」をクリックして、手動でピークを追加することができます。その後、「<b>Re-run Calculations</b> (再計算)」を選択して新たな解析を行います。</p> <p>「Minelt」で「<b>View Component Hit ListinMinelt</b> (成分ヒット ListinMinelt) を表示」を選択すると、<b>Minelt</b> での成分テーブルの内容を確認することができます</p>	

### 例 3 : 高分解能 GC-MS

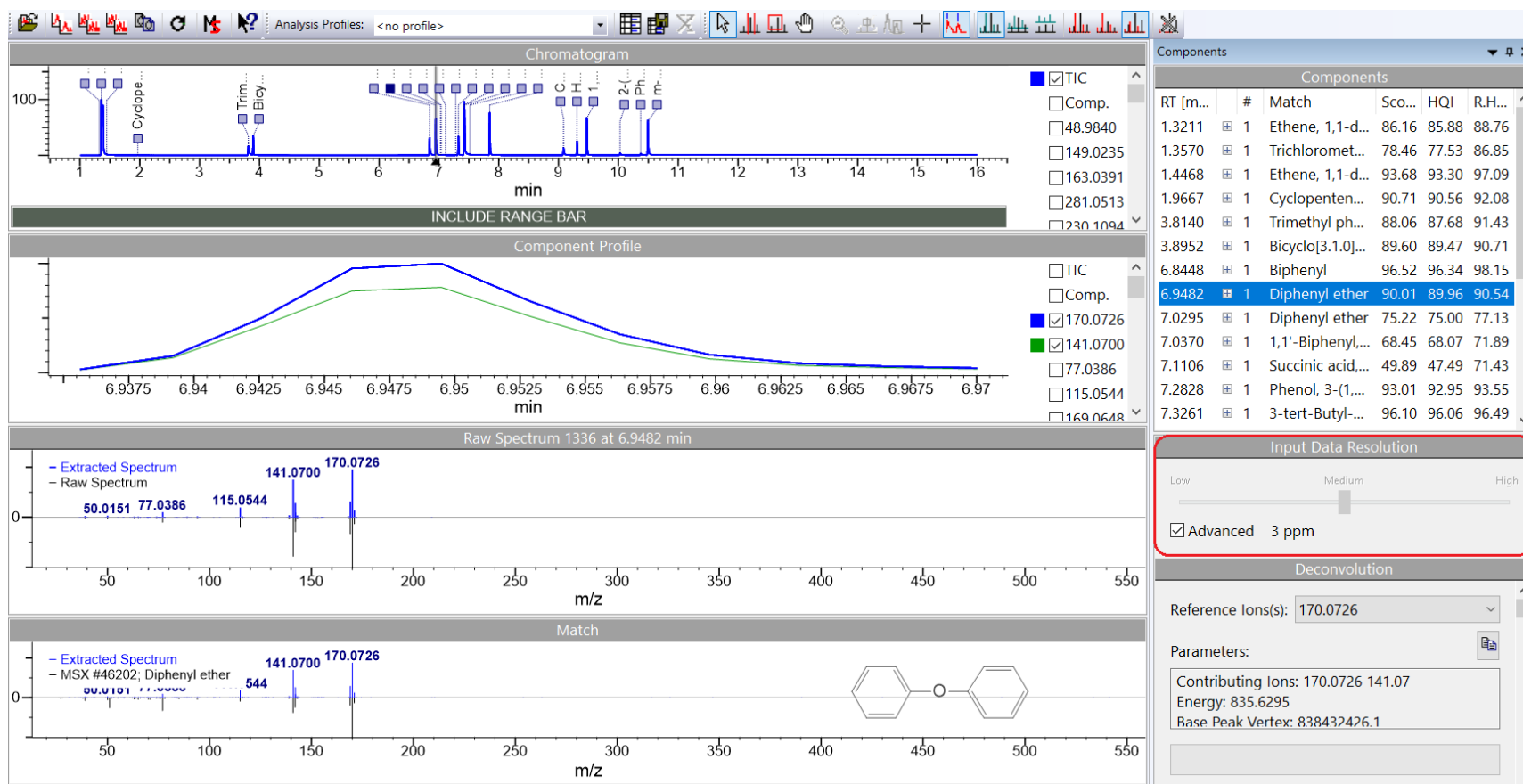
#### GUI の説明

正確な  $m/z$  値データを得るためには、計器の分解能を把握していない場合、この値を自動的に計算する安全なアルゴリズムは存在しません。そのため、通常は研究上合理的と考えられるデフォルト値を使用します。この値は定数成分と、質量 (ppm) に依存する可変成分からなります。経験的に、これはほとんどの場合に適用されます。 $m/z$  値の精度を過剰に高めると、個別の質量スペクトルピークを複数のピークに分割してしまう危険性があります。これらは実際には単一のピークとして考える必要があります。一方、 $m/z$  値の精度を過剰に低くすると、個々の質量スペクトルピークが統合され、正確な  $m/z$  値が不正確に報告される可能性があります。



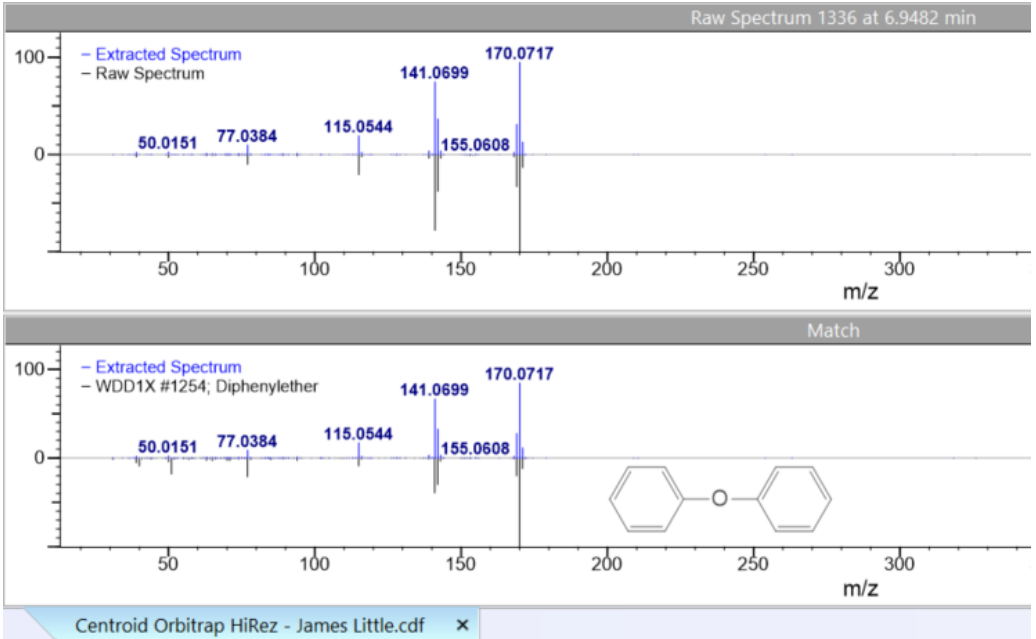
もしユーザーが計器の分解能を知っている場合は、それを上記の図に示されたダイアログの該当箇所に入力することができます：



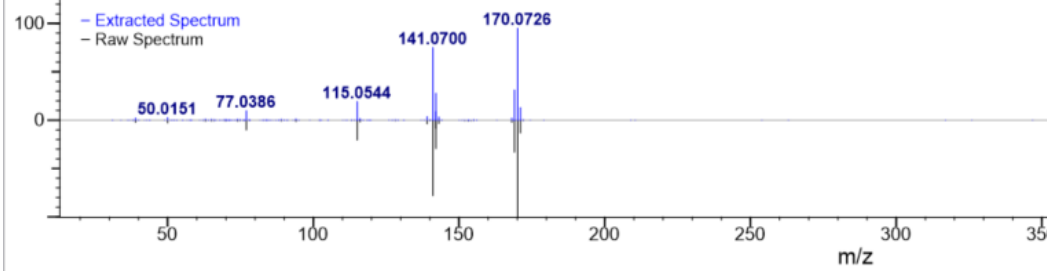
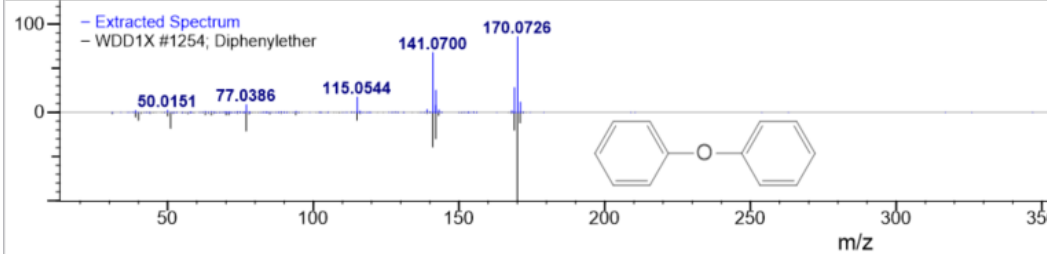


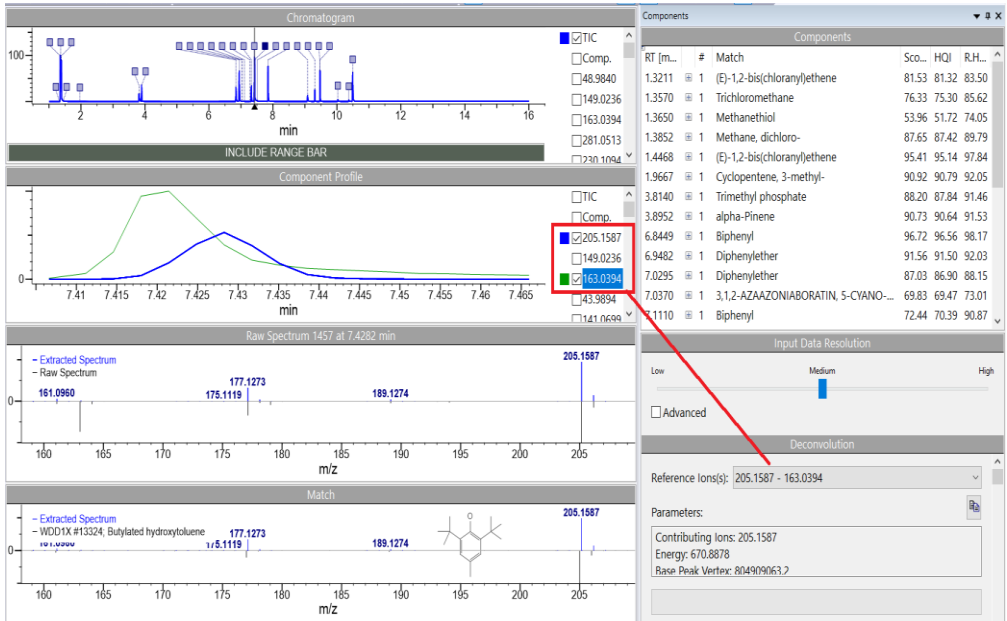
また、それをプロファイルの一部として保存することも可能です。保存したプロファイルは、計器の種類に応じて選択することができます。ユーザーは、異なる種類のデータ（および計器）に対して異なる分解能設定を持つ複数のプロファイルを作成することができます。

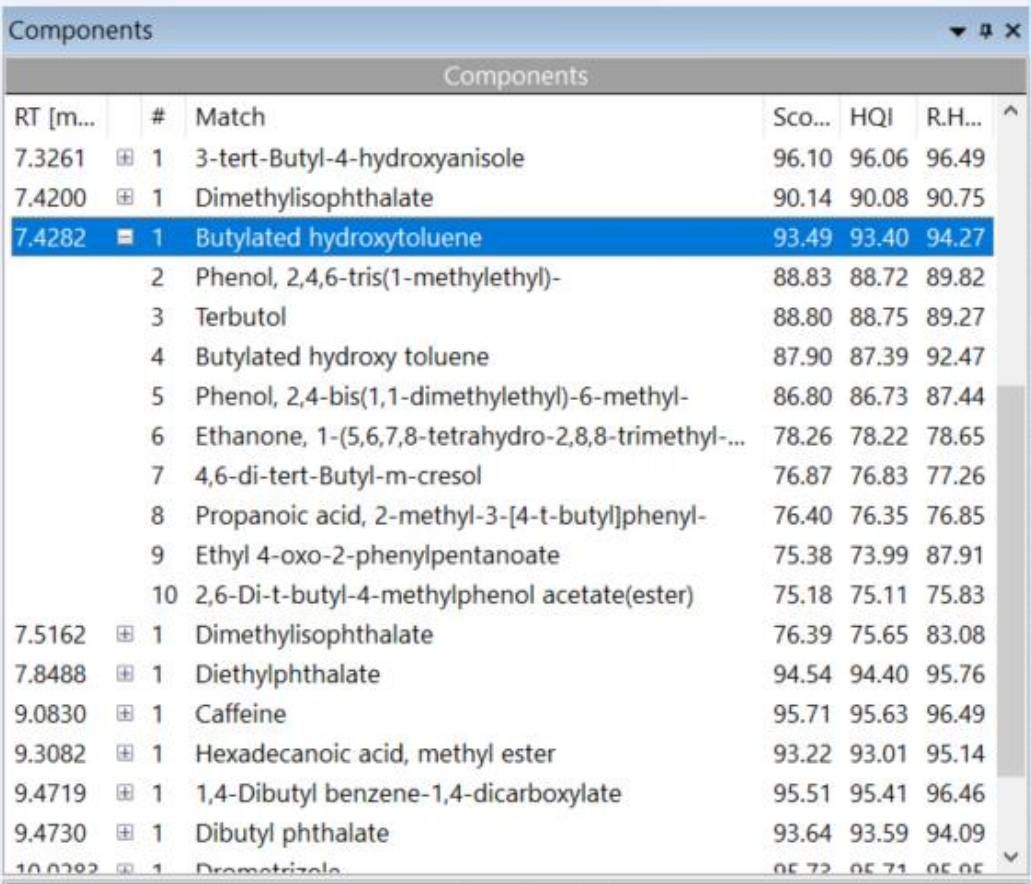
## 例 1

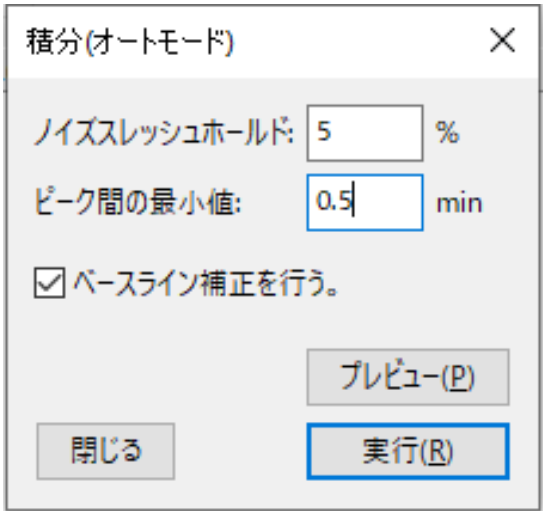
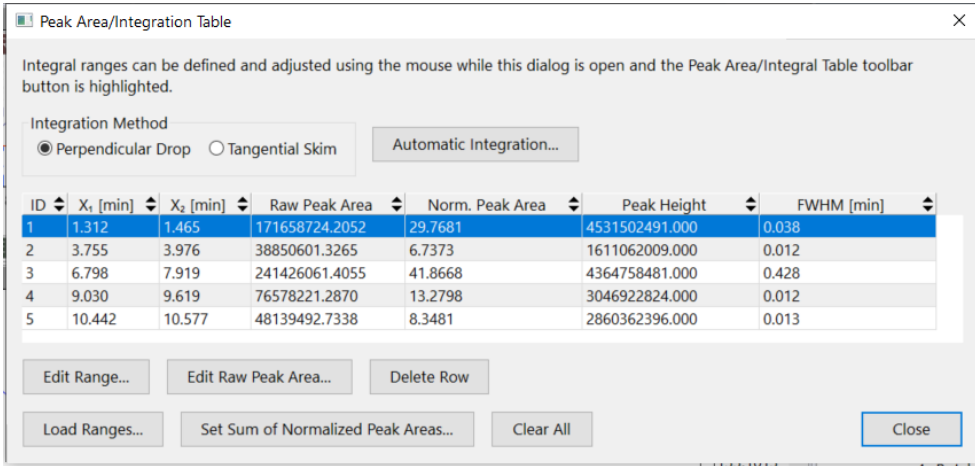
	アクション	結果
1	同じフォルダ内にある高分解能 GC-MS ファイルを開きます Centroid Orbitrap HiRez - James Little ヒットリストの RT (MIN) 6.9482 に移動します	 <p>この化合物において、m/z 値が 170.0717 と若干ずれています。</p>

	アクション	結果
2	「 <b>Advanced</b> (詳細設定)」を確認します 計器の分解能を <b>3 ppm</b> に設定し、 <b>OK</b> をクリックします	<p><b>MS Expert</b> は、この高分解能データファイルを認識し、ユーザーが分解能情報を入力したり、分解能を調整したりすることができるように特別に設計されています：</p>  <p>The screenshot shows a dialog box titled "Input Data Resolution". It features a horizontal slider with three positions: "Low", "Medium", and "High". The slider is currently positioned at "Medium". Below the slider, there is a checkbox labeled "Advanced" which is currently unchecked.</p>

	アクション	結果
3		<p data-bbox="850 332 1890 365">Raw Spectrum 1336 at 6.9482 min</p>  <p data-bbox="850 641 1890 673">Match</p>  <p data-bbox="850 933 1890 966">Centroid Orbitrap HiRez - James Little.cdf ×</p> <p data-bbox="850 982 1890 1015">正しい m/z 値は 170.0726 です。この計器の分解能設定は継続的に適用されます。</p>

	アクション	結果																																																																																				
4	コンポーネント TIC 7.4282 に移動します	<p><b>MS Expert</b> では、微妙に異なる TIC 値を持つピークによって特徴付けられる 2 つの成分が分離されています。それぞれの成分の m/z 値は 205.1587 と 163.0394 です。この場合、成分 205.1587 は抽出スペクトルに含まれています。</p>  <p>The screenshot displays the MS Expert interface with the following sections:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><b>Chromatogram:</b> Shows a Total Ion Chromatogram (TIC) with a peak at 7.4282 minutes. The x-axis is labeled 'min' and ranges from 0 to 16.</li> <li><b>Component Profile:</b> Shows two overlapping peaks at 7.4282 minutes. The x-axis is labeled 'min' and ranges from 7.41 to 7.465. The legend indicates two components: 205.1587 (blue) and 163.0394 (green).</li> <li><b>Raw Spectrum 1457 at 7.4282 min:</b> Shows the mass spectrum of the extracted peak. The x-axis is labeled 'm/z' and ranges from 160 to 205. The y-axis is labeled 'Intensity'. Peaks are labeled at m/z 161.0960, 177.1273, 189.1274, and 205.1587.</li> <li><b>Match:</b> Shows the reference mass spectrum for WDD1X #13324, Butylated hydroxytoluene. The x-axis is labeled 'm/z' and ranges from 160 to 205. The y-axis is labeled 'Intensity'. Peaks are labeled at m/z 177.1273, 189.1274, and 205.1587. A chemical structure of Butylated hydroxytoluene is shown.</li> <li><b>Components Table:</b> A table listing various components with their retention times (RT), match scores, and quality indices (HQI, R.H.). The table includes columns for RT [m...], #, Match, Sco..., HQI, and R.H... The following table represents the data from the screenshot:</li> </ul> <table border="1" data-bbox="1480 430 1837 747"> <thead> <tr> <th>RT [m...]</th> <th>#</th> <th>Match</th> <th>Sco...</th> <th>HQI</th> <th>R.H...</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>1.3211</td><td>1</td><td>(E)-1,2-bis(chloranyl)ethene</td><td>81.53</td><td>81.32</td><td>83.50</td></tr> <tr><td>1.3570</td><td>1</td><td>Trichloromethane</td><td>76.33</td><td>75.30</td><td>85.62</td></tr> <tr><td>1.3650</td><td>1</td><td>Methanethiol</td><td>53.96</td><td>51.72</td><td>74.05</td></tr> <tr><td>1.3852</td><td>1</td><td>Methane, dichloro-</td><td>87.65</td><td>87.42</td><td>89.79</td></tr> <tr><td>1.4468</td><td>1</td><td>(E)-1,2-bis(chloranyl)ethene</td><td>95.41</td><td>95.14</td><td>97.84</td></tr> <tr><td>1.9667</td><td>1</td><td>Cyclopentene, 3-methyl-</td><td>90.92</td><td>90.79</td><td>92.05</td></tr> <tr><td>3.8140</td><td>1</td><td>Trimethyl phosphate</td><td>88.20</td><td>87.84</td><td>91.46</td></tr> <tr><td>3.8952</td><td>1</td><td>alpha-Pinene</td><td>90.73</td><td>90.64</td><td>91.53</td></tr> <tr><td>6.8449</td><td>1</td><td>Biphenyl</td><td>96.72</td><td>96.56</td><td>98.17</td></tr> <tr><td>6.9482</td><td>1</td><td>Diphenylether</td><td>91.56</td><td>91.50</td><td>92.03</td></tr> <tr><td>7.0295</td><td>1</td><td>Diphenylether</td><td>87.03</td><td>86.90</td><td>88.15</td></tr> <tr><td>7.0370</td><td>1</td><td>3,1,2-AZAAZONIABORATIN, 5-CYANO...</td><td>69.83</td><td>69.47</td><td>73.01</td></tr> <tr><td>7.1110</td><td>1</td><td>Biphenyl</td><td>72.44</td><td>70.39</td><td>90.87</td></tr> </tbody> </table>	RT [m...]	#	Match	Sco...	HQI	R.H...	1.3211	1	(E)-1,2-bis(chloranyl)ethene	81.53	81.32	83.50	1.3570	1	Trichloromethane	76.33	75.30	85.62	1.3650	1	Methanethiol	53.96	51.72	74.05	1.3852	1	Methane, dichloro-	87.65	87.42	89.79	1.4468	1	(E)-1,2-bis(chloranyl)ethene	95.41	95.14	97.84	1.9667	1	Cyclopentene, 3-methyl-	90.92	90.79	92.05	3.8140	1	Trimethyl phosphate	88.20	87.84	91.46	3.8952	1	alpha-Pinene	90.73	90.64	91.53	6.8449	1	Biphenyl	96.72	96.56	98.17	6.9482	1	Diphenylether	91.56	91.50	92.03	7.0295	1	Diphenylether	87.03	86.90	88.15	7.0370	1	3,1,2-AZAAZONIABORATIN, 5-CYANO...	69.83	69.47	73.01	7.1110	1	Biphenyl	72.44	70.39	90.87
RT [m...]	#	Match	Sco...	HQI	R.H...																																																																																	
1.3211	1	(E)-1,2-bis(chloranyl)ethene	81.53	81.32	83.50																																																																																	
1.3570	1	Trichloromethane	76.33	75.30	85.62																																																																																	
1.3650	1	Methanethiol	53.96	51.72	74.05																																																																																	
1.3852	1	Methane, dichloro-	87.65	87.42	89.79																																																																																	
1.4468	1	(E)-1,2-bis(chloranyl)ethene	95.41	95.14	97.84																																																																																	
1.9667	1	Cyclopentene, 3-methyl-	90.92	90.79	92.05																																																																																	
3.8140	1	Trimethyl phosphate	88.20	87.84	91.46																																																																																	
3.8952	1	alpha-Pinene	90.73	90.64	91.53																																																																																	
6.8449	1	Biphenyl	96.72	96.56	98.17																																																																																	
6.9482	1	Diphenylether	91.56	91.50	92.03																																																																																	
7.0295	1	Diphenylether	87.03	86.90	88.15																																																																																	
7.0370	1	3,1,2-AZAAZONIABORATIN, 5-CYANO...	69.83	69.47	73.01																																																																																	
7.1110	1	Biphenyl	72.44	70.39	90.87																																																																																	

	アクション	結果																																																																																																																								
5	成分の詳細をいくつか展開します。例えば、RT 7.4 を選択します	 <table border="1"> <thead> <tr> <th>RT [m...]</th> <th>#</th> <th>Match</th> <th>Sco...</th> <th>HQI</th> <th>R.H...</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>7.3261</td> <td>1</td> <td>3-tert-Butyl-4-hydroxyanisole</td> <td>96.10</td> <td>96.06</td> <td>96.49</td> </tr> <tr> <td>7.4200</td> <td>1</td> <td>Dimethylisophthalate</td> <td>90.14</td> <td>90.08</td> <td>90.75</td> </tr> <tr style="background-color: #e6f2ff;"> <td>7.4282</td> <td>1</td> <td>Butylated hydroxytoluene</td> <td>93.49</td> <td>93.40</td> <td>94.27</td> </tr> <tr> <td></td> <td>2</td> <td>Phenol, 2,4,6-tris(1-methylethyl)-</td> <td>88.83</td> <td>88.72</td> <td>89.82</td> </tr> <tr> <td></td> <td>3</td> <td>Terbutol</td> <td>88.80</td> <td>88.75</td> <td>89.27</td> </tr> <tr> <td></td> <td>4</td> <td>Butylated hydroxy toluene</td> <td>87.90</td> <td>87.39</td> <td>92.47</td> </tr> <tr> <td></td> <td>5</td> <td>Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl)-6-methyl-</td> <td>86.80</td> <td>86.73</td> <td>87.44</td> </tr> <tr> <td></td> <td>6</td> <td>Ethanone, 1-(5,6,7,8-tetrahydro-2,8,8-trimethyl-...</td> <td>78.26</td> <td>78.22</td> <td>78.65</td> </tr> <tr> <td></td> <td>7</td> <td>4,6-di-tert-Butyl-m-cresol</td> <td>76.87</td> <td>76.83</td> <td>77.26</td> </tr> <tr> <td></td> <td>8</td> <td>Propanoic acid, 2-methyl-3-[4-t-butyl]phenyl-</td> <td>76.40</td> <td>76.35</td> <td>76.85</td> </tr> <tr> <td></td> <td>9</td> <td>Ethyl 4-oxo-2-phenylpentanoate</td> <td>75.38</td> <td>73.99</td> <td>87.91</td> </tr> <tr> <td></td> <td>10</td> <td>2,6-Di-t-butyl-4-methylphenol acetate(ester)</td> <td>75.18</td> <td>75.11</td> <td>75.83</td> </tr> <tr> <td>7.5162</td> <td>1</td> <td>Dimethylisophthalate</td> <td>76.39</td> <td>75.65</td> <td>83.08</td> </tr> <tr> <td>7.8488</td> <td>1</td> <td>Diethylphthalate</td> <td>94.54</td> <td>94.40</td> <td>95.76</td> </tr> <tr> <td>9.0830</td> <td>1</td> <td>Caffeine</td> <td>95.71</td> <td>95.63</td> <td>96.49</td> </tr> <tr> <td>9.3082</td> <td>1</td> <td>Hexadecanoic acid, methyl ester</td> <td>93.22</td> <td>93.01</td> <td>95.14</td> </tr> <tr> <td>9.4719</td> <td>1</td> <td>1,4-Dibutyl benzene-1,4-dicarboxylate</td> <td>95.51</td> <td>95.41</td> <td>96.46</td> </tr> <tr> <td>9.4730</td> <td>1</td> <td>Dibutyl phthalate</td> <td>93.64</td> <td>93.59</td> <td>94.09</td> </tr> <tr> <td>10.0282</td> <td>1</td> <td>Drometrizole</td> <td>95.72</td> <td>95.71</td> <td>95.95</td> </tr> </tbody> </table>	RT [m...]	#	Match	Sco...	HQI	R.H...	7.3261	1	3-tert-Butyl-4-hydroxyanisole	96.10	96.06	96.49	7.4200	1	Dimethylisophthalate	90.14	90.08	90.75	7.4282	1	Butylated hydroxytoluene	93.49	93.40	94.27		2	Phenol, 2,4,6-tris(1-methylethyl)-	88.83	88.72	89.82		3	Terbutol	88.80	88.75	89.27		4	Butylated hydroxy toluene	87.90	87.39	92.47		5	Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl)-6-methyl-	86.80	86.73	87.44		6	Ethanone, 1-(5,6,7,8-tetrahydro-2,8,8-trimethyl-...	78.26	78.22	78.65		7	4,6-di-tert-Butyl-m-cresol	76.87	76.83	77.26		8	Propanoic acid, 2-methyl-3-[4-t-butyl]phenyl-	76.40	76.35	76.85		9	Ethyl 4-oxo-2-phenylpentanoate	75.38	73.99	87.91		10	2,6-Di-t-butyl-4-methylphenol acetate(ester)	75.18	75.11	75.83	7.5162	1	Dimethylisophthalate	76.39	75.65	83.08	7.8488	1	Diethylphthalate	94.54	94.40	95.76	9.0830	1	Caffeine	95.71	95.63	96.49	9.3082	1	Hexadecanoic acid, methyl ester	93.22	93.01	95.14	9.4719	1	1,4-Dibutyl benzene-1,4-dicarboxylate	95.51	95.41	96.46	9.4730	1	Dibutyl phthalate	93.64	93.59	94.09	10.0282	1	Drometrizole	95.72	95.71	95.95
RT [m...]	#	Match	Sco...	HQI	R.H...																																																																																																																					
7.3261	1	3-tert-Butyl-4-hydroxyanisole	96.10	96.06	96.49																																																																																																																					
7.4200	1	Dimethylisophthalate	90.14	90.08	90.75																																																																																																																					
7.4282	1	Butylated hydroxytoluene	93.49	93.40	94.27																																																																																																																					
	2	Phenol, 2,4,6-tris(1-methylethyl)-	88.83	88.72	89.82																																																																																																																					
	3	Terbutol	88.80	88.75	89.27																																																																																																																					
	4	Butylated hydroxy toluene	87.90	87.39	92.47																																																																																																																					
	5	Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl)-6-methyl-	86.80	86.73	87.44																																																																																																																					
	6	Ethanone, 1-(5,6,7,8-tetrahydro-2,8,8-trimethyl-...	78.26	78.22	78.65																																																																																																																					
	7	4,6-di-tert-Butyl-m-cresol	76.87	76.83	77.26																																																																																																																					
	8	Propanoic acid, 2-methyl-3-[4-t-butyl]phenyl-	76.40	76.35	76.85																																																																																																																					
	9	Ethyl 4-oxo-2-phenylpentanoate	75.38	73.99	87.91																																																																																																																					
	10	2,6-Di-t-butyl-4-methylphenol acetate(ester)	75.18	75.11	75.83																																																																																																																					
7.5162	1	Dimethylisophthalate	76.39	75.65	83.08																																																																																																																					
7.8488	1	Diethylphthalate	94.54	94.40	95.76																																																																																																																					
9.0830	1	Caffeine	95.71	95.63	96.49																																																																																																																					
9.3082	1	Hexadecanoic acid, methyl ester	93.22	93.01	95.14																																																																																																																					
9.4719	1	1,4-Dibutyl benzene-1,4-dicarboxylate	95.51	95.41	96.46																																																																																																																					
9.4730	1	Dibutyl phthalate	93.64	93.59	94.09																																																																																																																					
10.0282	1	Drometrizole	95.72	95.71	95.95																																																																																																																					

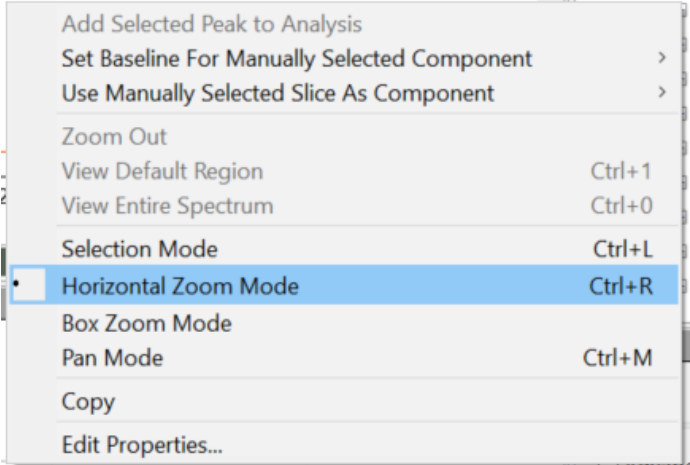
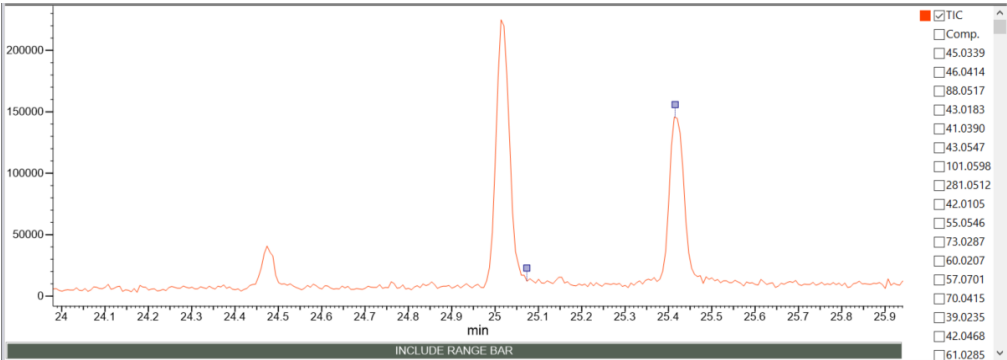
	アクション	結果																																										
6	<p>「<b>Analysis</b> (解析)」 → 「<b>Peak Area/Integration</b> (ピーク面積/積分)」 を選択します</p> <p>「<b>Automatic Integration</b> (自動積分)」 を選択します</p> <p><b>Automatic Integration pop-up window</b> (自動積分のポップアップウィンドウ) でパラメータを設定します</p>																																											
7	<p>「<b>Replace</b> (置換)」 をクリックします</p> <p>「<b>Close</b> (閉じる)」 ボタンをクリックします</p>	<p>この機能を示すために、わずかなピークのみを使用しています。</p>  <table border="1" data-bbox="863 1089 1785 1230"> <thead> <tr> <th>ID</th> <th>X<sub>1</sub> [min]</th> <th>X<sub>2</sub> [min]</th> <th>Raw Peak Area</th> <th>Norm. Peak Area</th> <th>Peak Height</th> <th>FWHM [min]</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>1.312</td> <td>1.465</td> <td>171658724.2052</td> <td>29.7681</td> <td>4531502491.000</td> <td>0.038</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>3.755</td> <td>3.976</td> <td>38850601.3265</td> <td>6.7373</td> <td>1611062009.000</td> <td>0.012</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>6.798</td> <td>7.919</td> <td>241426061.4055</td> <td>41.8668</td> <td>4364758481.000</td> <td>0.428</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>9.030</td> <td>9.619</td> <td>76578221.2870</td> <td>13.2798</td> <td>3046922824.000</td> <td>0.012</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>10.442</td> <td>10.577</td> <td>48139492.7338</td> <td>8.3481</td> <td>2860362396.000</td> <td>0.013</td> </tr> </tbody> </table>	ID	X <sub>1</sub> [min]	X <sub>2</sub> [min]	Raw Peak Area	Norm. Peak Area	Peak Height	FWHM [min]	1	1.312	1.465	171658724.2052	29.7681	4531502491.000	0.038	2	3.755	3.976	38850601.3265	6.7373	1611062009.000	0.012	3	6.798	7.919	241426061.4055	41.8668	4364758481.000	0.428	4	9.030	9.619	76578221.2870	13.2798	3046922824.000	0.012	5	10.442	10.577	48139492.7338	8.3481	2860362396.000	0.013
ID	X <sub>1</sub> [min]	X <sub>2</sub> [min]	Raw Peak Area	Norm. Peak Area	Peak Height	FWHM [min]																																						
1	1.312	1.465	171658724.2052	29.7681	4531502491.000	0.038																																						
2	3.755	3.976	38850601.3265	6.7373	1611062009.000	0.012																																						
3	6.798	7.919	241426061.4055	41.8668	4364758481.000	0.428																																						
4	9.030	9.619	76578221.2870	13.2798	3046922824.000	0.012																																						
5	10.442	10.577	48139492.7338	8.3481	2860362396.000	0.013																																						

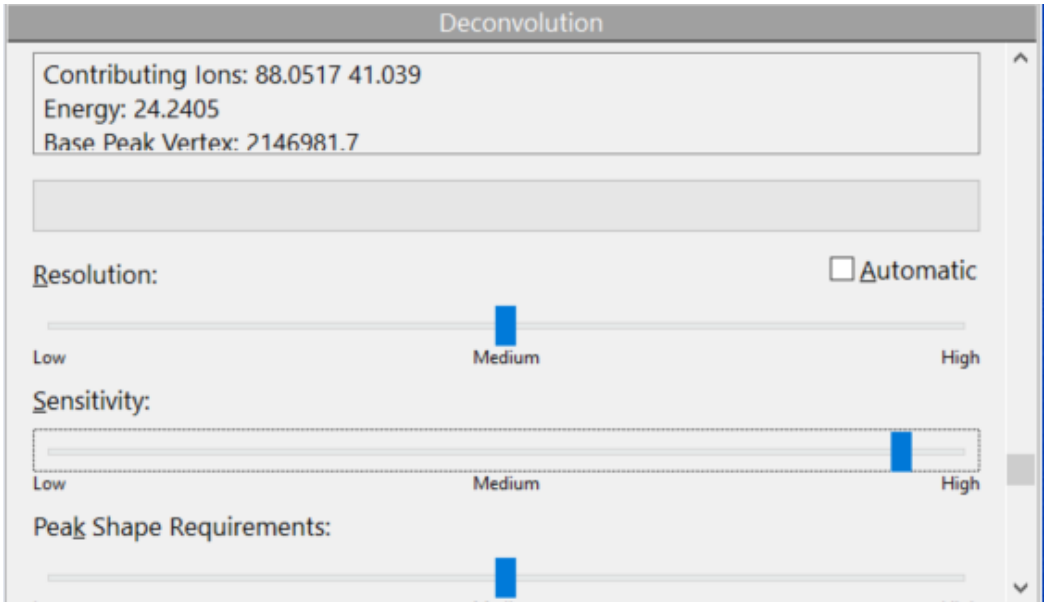
	アクション	結果																																																																																																																																																																	
8	GC ペインにはピークの積分値が表示されます																																																																																																																																																																		
9	「Transfer to: ReportIt (ReportIt に転送)」をクリックします  	<table border="1"> <thead> <tr> <th>ID</th> <th>RT (min)</th> <th>ID</th> <th>Name</th> <th>Class</th> <th>MW</th> <th>Area</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>1.3570</td> <td>13001</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>1.3640</td> <td>13002</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>1.3852</td> <td>13003</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>1.7428</td> <td>13004</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>29.7681</td> <td>13005</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>3.8140</td> <td>13006</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>6.7373</td> <td>13007</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>3.8852</td> <td>13008</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>6.8449</td> <td>13009</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>10</td> <td>6.8452</td> <td>13010</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>11</td> <td>7.2251</td> <td>13011</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>12</td> <td>7.2104</td> <td>13012</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>13</td> <td>7.4193</td> <td>13013</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>14</td> <td>7.4262</td> <td>13014</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>15</td> <td>7.5408</td> <td>13015</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>16</td> <td>9.0830</td> <td>13016</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>17</td> <td>9.3082</td> <td>13017</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>18</td> <td>13.2798</td> <td>13018</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>19</td> <td>8.3481</td> <td>13019</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>20</td> <td>10.0283</td> <td>13020</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>1,4-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>21</td> <td>10.3718</td> <td>13021</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>1,2-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> <tr> <td>22</td> <td>10.4934</td> <td>13022</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>1,3-Dioxane</td> <td>98.12</td> <td>10000</td> </tr> </tbody> </table>	ID	RT (min)	ID	Name	Class	MW	Area	1	1.3570	13001	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000	2	1.3640	13002	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000	3	1.3852	13003	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000	4	1.7428	13004	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000	5	29.7681	13005	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000	6	3.8140	13006	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000	7	6.7373	13007	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000	8	3.8852	13008	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000	9	6.8449	13009	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000	10	6.8452	13010	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000	11	7.2251	13011	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000	12	7.2104	13012	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000	13	7.4193	13013	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000	14	7.4262	13014	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000	15	7.5408	13015	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000	16	9.0830	13016	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000	17	9.3082	13017	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000	18	13.2798	13018	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000	19	8.3481	13019	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000	20	10.0283	13020	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000	21	10.3718	13021	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000	22	10.4934	13022	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000
ID	RT (min)	ID	Name	Class	MW	Area																																																																																																																																																													
1	1.3570	13001	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
2	1.3640	13002	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
3	1.3852	13003	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
4	1.7428	13004	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
5	29.7681	13005	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
6	3.8140	13006	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
7	6.7373	13007	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
8	3.8852	13008	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
9	6.8449	13009	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
10	6.8452	13010	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
11	7.2251	13011	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
12	7.2104	13012	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
13	7.4193	13013	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
14	7.4262	13014	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
15	7.5408	13015	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
16	9.0830	13016	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
17	9.3082	13017	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
18	13.2798	13018	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
19	8.3481	13019	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
20	10.0283	13020	1,4-Dioxane	1,4-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
21	10.3718	13021	1,2-Dioxane	1,2-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													
22	10.4934	13022	1,3-Dioxane	1,3-Dioxane	98.12	10000																																																																																																																																																													

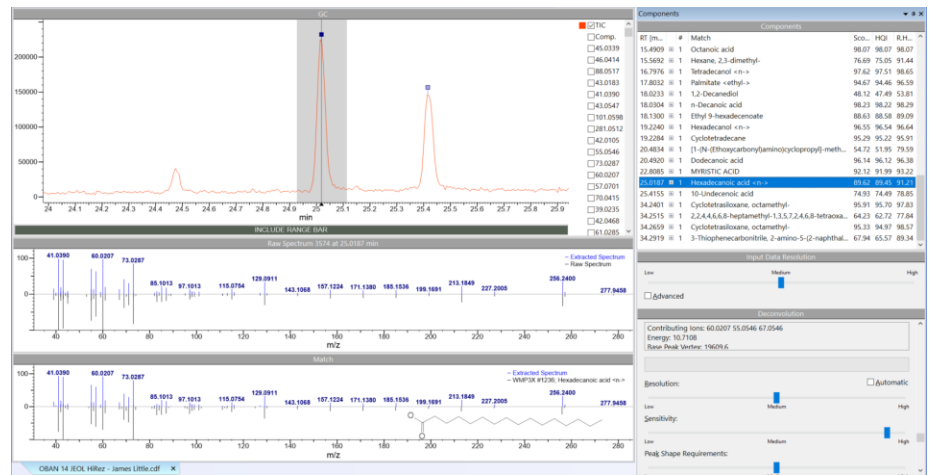


アクション		結果									
10	<p>MS Expert に戻ります</p> <p>成分テーブルを右クリックし、「<b>Copy All ComponentInformation</b> (全成分情報をコピー)」を選択します。情報を Excel や Word などに貼り付けることができます。</p>	RT [min]	#	Match	Score	HQI	R.HQI	DB	ID		
		1.3211	1	(E)-1,2-bis(chloranyl)ethene	88.34	88.04	90.99	WMS3X	4144		
			2	Ethene, 1,1-dichloro-	86.55	86.26	89.15	MSX	3048		
			3	Ethene, 1,1-dichloro-	84.14	82.84	95.9	WMSR3X	1983		
			4	2,2,3-Trichloropropionaldehyde	78.8	78.56	80.92	WMS3X	56863		
			5	2,2,3-Trichloropropane-1,1-diol	75.53	75.3	77.6	WMS3X	88275		
			6	Dihydro-4,5-dichloro-2(3H)furanone	72.69	71.59	82.61	MSX	30922		
			7	Propanoic acid, 2,2,3-trichloro-	68.81	68.59	70.83	WMS3X	84684		
			8	Propanoic acid, 2,2,3-trichloro-	59.81	57.45	80.97	WMS3X	84685		
			9	Chloromethylmethyl sulfide	57.41	57.23	59.07	MSX	3054		
			10	Methyl 2,3,3-trichloropropanoate	53.98	53.77	55.85	MSX	64271		
			1.357	1	Trichloromethane	78.5	77.57	86.84	MSX	9775	
				2	Methane, oxybis[dichloro-	78.48	77	91.75	MSX	56380	
				3	Methane, trichloro-	78.05	76.69	90.33	WMS3X	13436	
				4	Ethane, 2-bromo-1,1-dichloro-	69.34	68	81.41	WMSD3X	330	
				5	Ethane, 1,1,2,2-tetrachloro-	68.51	68.31	70.3	WMSR3X	13033	
				6	1,1',3-trimethyl-3,3'-biindolin-2-one	67.98	65.35	91.65	WMSD3X	1193	
				7	Methane, dichloronitro-	67.11	65.71	79.7	MSX	14617	
				8	N,N-Dimethyl-2H-pyran-2-iminium chloride	64.16	62.24	81.49	WMSD3X	219	
				9	Ethane, 1,2,2-trichloro-1,1-difluoro-	63.71	62.79	71.95	MSX	42934	
				10	N-(Phenyl MIDA boronate-4-yl)-S-methyl-S-ph	63.11	59.87	92.28	WMS3X	576845	
				1.4468	1	(E)-1,2-bis(chloranyl)ethene	93.9	93.52	97.26	WMS3X	4143
					2	Ethene, 1,1-dichloro-	93.88	93.5	97.28	MSX	3048
					3	(E)-1,2-bis(chloranyl)ethene	93.86	93.48	97.32	WMS3X	4144
					4	Ethene, 1,1-dichloro-	92.61	91.89	99.11	WMSR3X	1983
					5	2,2,3-Trichloropropionaldehyde	81.63	81.34	84.21	WMS3X	56863
					6	Dihydro-4,5-dichloro-2(3H)furanone	81.56	81.04	86.23	MSX	30922
					7	2,2,3-Trichloropropane-1,1-diol	77.78	77.5	80.3	WMS3X	88275
					8	Propanoic acid, 2,2,3-trichloro-	76.16	75.88	78.67	WMS3X	84684
					9	Propanoic acid, 2,2,3-trichloro-	68.17	66.78	80.63	WMS3X	84685
					10	Chloromethylmethyl sulfide	65.61	65.46	66.99	MSX	3054
				1.9667	1	Cyclopentene, 3-methyl-	90.7	90.55	92.08	MSX	1382
					2	Cyclopentene, 1-methyl-	90.19	90.07	91.25	MSX	1367
					3	Cyclopentene, 4-methyl-	89.11	88.84	91.55	WMS3X	1919
					4	Cyclopentene, 4-methyl-	89.05	88.94	90.1	MSX	1389
					5	(Z),(Z)-2,4-Hexadiene	87.84	87.69	89.17	MSX	1356
		<p><b>注記：成分の面積%の列はエクスポートされますが、上記の Excel 表示からは削除されています。</b></p>									

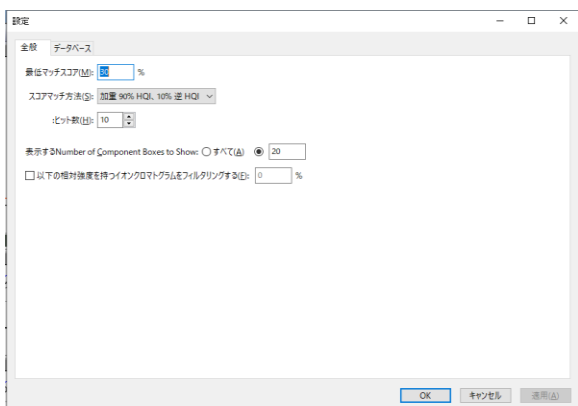
## 例 2

	アクション	結果
1	<p>同じフォルダにある別の高分解能 GC-MS ファイルを開きます</p> <p>OBAN 14 JEOL HiRez - James Little</p> <p>TIC ペインを右クリックします</p> <p>「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>	
2	<p>24 分から 26 分の領域にズームインします (3 つの小さなピークがあります) :</p>	 <p>ここで 2 つの問題があります。まず、分析対象として小さなピークが検出されませんでした。次に、成分がベースラインに割り当てられています。</p>

	アクション	結果
3	<p>第二の問題を解決するために、アルゴリズムの感度を上げることができます。</p> <p>「<b>Automatic under Deconvolution</b>」のチェックを外して、<b>感度</b>バーを「高」に調整します。</p>	 <p>The screenshot shows the 'Deconvolution' window with the following settings:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>Contributing Ions: 88.0517 41.039</li><li>Energy: 24.2405</li><li>Base Peak Vertex: 2146981.7</li><li>Resolution: <input type="checkbox"/> Automatic, slider set to Medium</li><li>Sensitivity: slider set to High</li><li>Peak Shape Requirements: slider set to Medium</li></ul>

アクション	結果
4	<p>すると、第二の成分が正しくミスされたヘキサデカン酸として識別されます。</p>  <p>The screenshot displays the GC-MS software interface. At the top, a chromatogram shows two peaks. The first peak is at approximately 24.5 minutes and the second, larger peak is at approximately 25.4 minutes. Below the chromatogram are mass spectra for both peaks. The mass spectrum for the second peak shows a base peak at m/z 41.0300 and other significant peaks at 60.0307, 73.0307, 85.1013, 97.1013, 110.0754, 129.0911, 143.1068, 157.1224, 171.1380, 185.1536, 199.1691, 213.1849, 227.2005, 256.2400, and 277.2458. A chemical structure of hexadecanoic acid is shown below the mass spectrum.</p>

ヒント：時には、GC ペインが多すぎる GC ピークで混雑してしまうことがあります。設定を変更することで表示方法を制御できます。**File > Settings** (ファイル > 設定) を選択して好みに設定してください。



# マニュアル GC-MS 分析の方法

## KnowItAllProcessIt を使用したマニュアルの GC-MS 分析の方法

### 目的

これらの演習は、KnowItAllProcessIt を使用して GC-MS をマニュアルで分析する方法を示しています。

### 目標

これらのエクササイズを通じて、以下の内容を学ぶことができます：

- KnowItAllProcessIt の使用方法。

### 背景

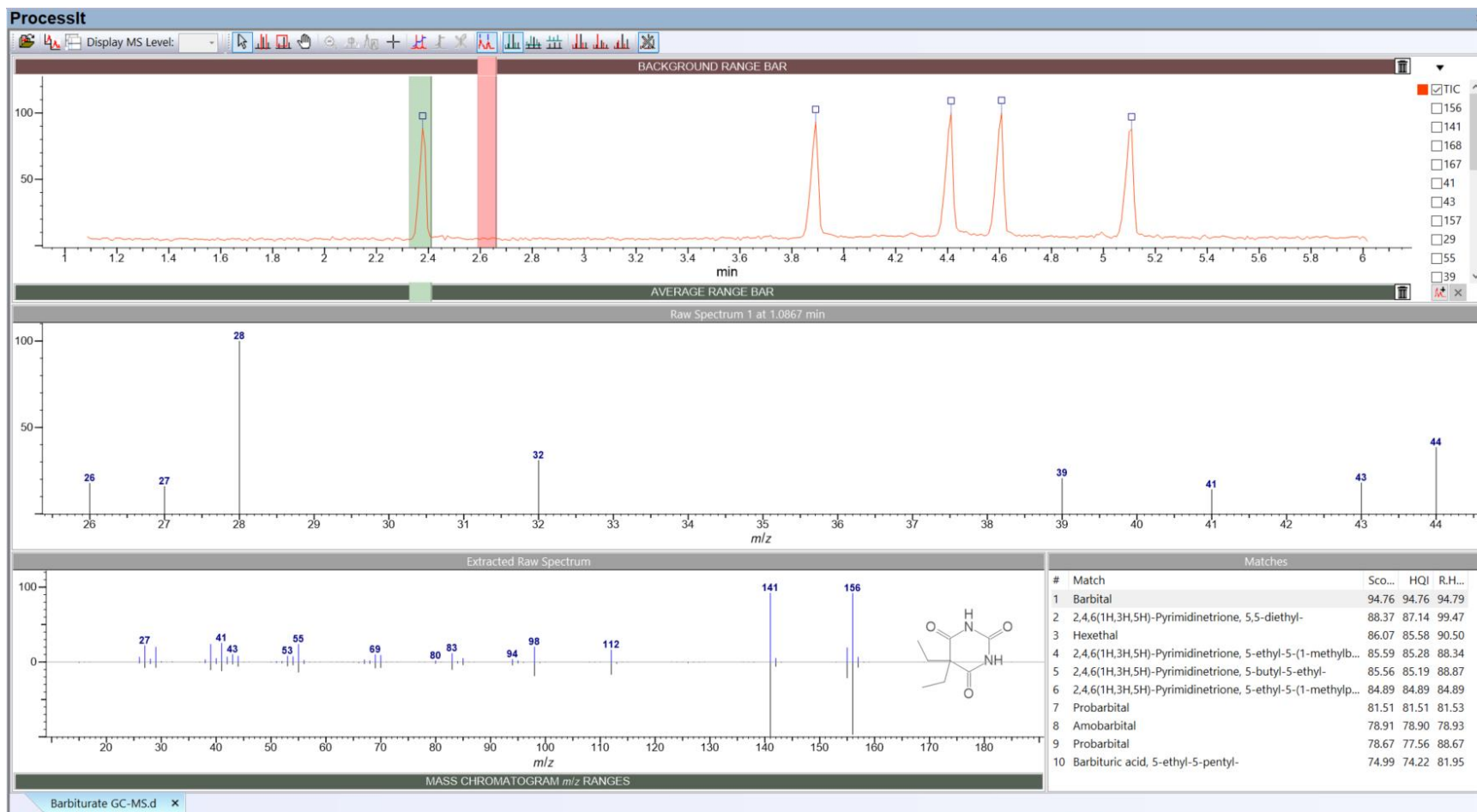
KnowItAll ProcessIt ソフトウェアは、GC-MS データを確認し、スペクトルの減算を制御することができます。減算されたスペクトルは、参照データとの一致を検索します。

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

- サンプルファイルを開くために、以下のパスに移動します。  
C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\GC-MS\Barbiturate GC-MS.d

**KnowItAll 使用アプリケーション**

### GUI の説明



下部のスペクトルペインには、以下の情報が表示されます：

- 左クリックで選択された MS (質量スペクトル) または
- バックグラウンドとして定義された選択された MS (GC ペインの赤いバーをクリックしてドラッグ&ドロップ)
- 平均 MS (GC ペインの緑のバーをクリックしてドラッグ&ドロップ)
- 平均 MS (緑のバー) とバックグラウンド (赤いバー)

マッチテーブルには、選択された MS のデータベース検索結果が表示されます。

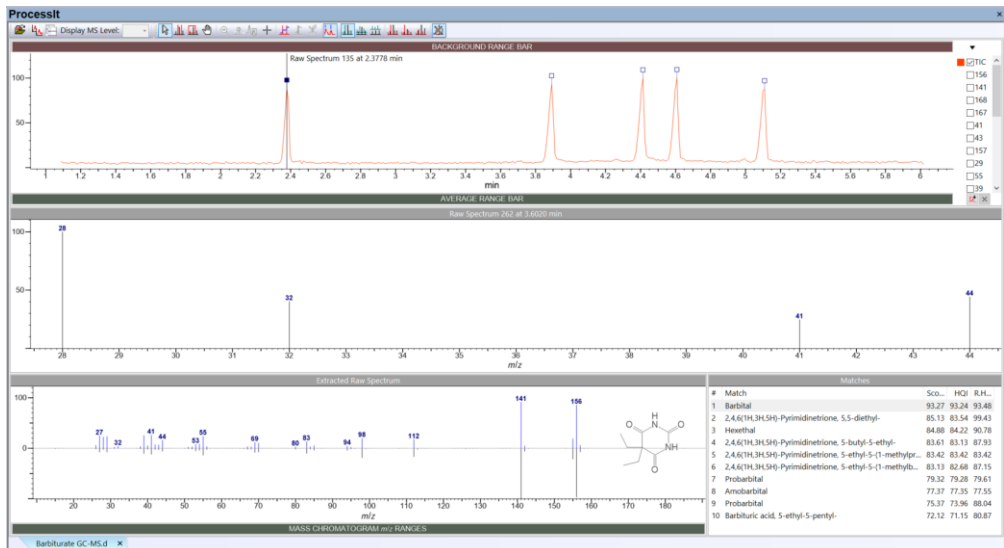
選択された MS は、スペクトル検索のために **SearchIt** アプリケーションに転送することができます。

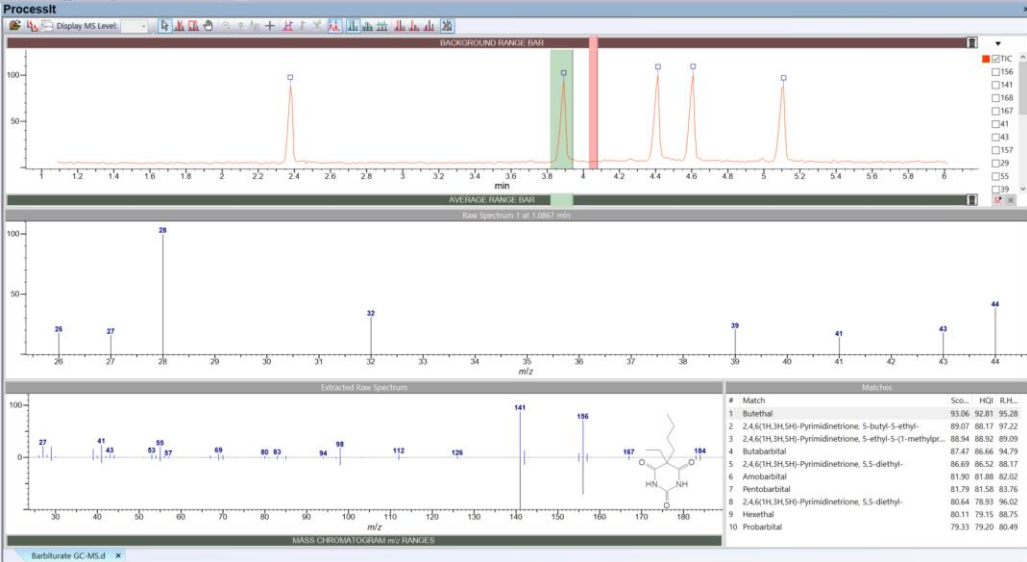
イオンクロマトグラムの曲線下面積 (AUC) やピークの高さ値は、**Analysis > Peak Area/Integration** メニューアイテムを使用して計算することができます。

## 例 : ProcessIt MS

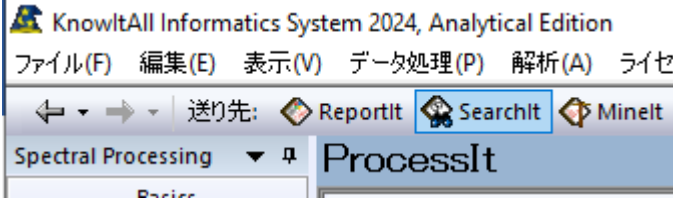
	アクション	結果
1	<p>ProcessIt で、<b>Open Data File</b> (データファイルを開く) ボタンをクリックします</p> <p>「C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\GC-MS」に移動します</p> <p>Barbiturate GC-MS.d を選択します</p> <p><b>Open</b> (開きます)</p>	

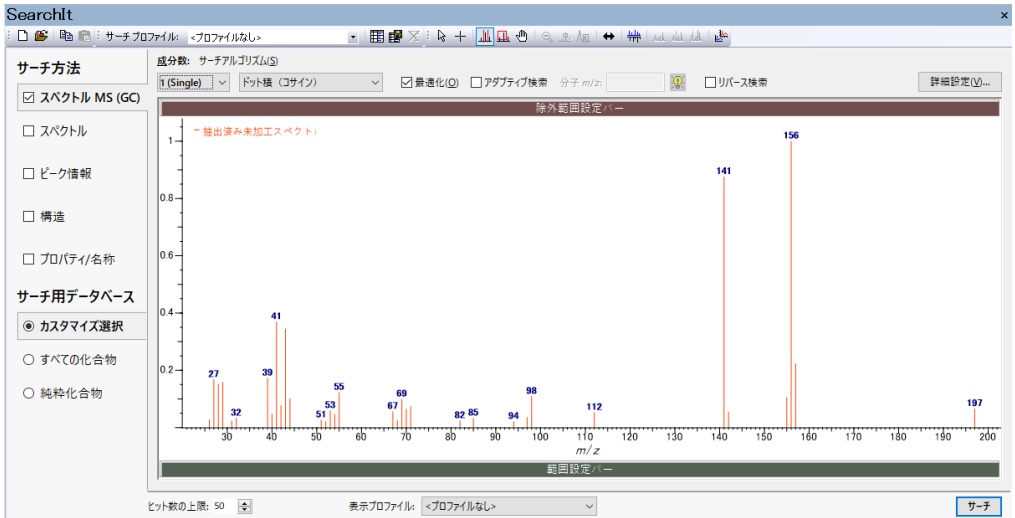



アクション	結果																																																							
<p>2 クロマトグラムペイン (上のペイン) でピークをクリックします</p>	<p>すると、対応する MS スペクトルとヒットデータベースの検索結果が下のペインに表示されます：</p>  <p>The screenshot displays the ProcessIt software interface. At the top, a chromatogram shows a peak at 2.3778 min. Below it, the 'AVERAGE RANGE BAR' shows a mass spectrum with major peaks at m/z 28, 32, 41, and 44. The 'Extracted Raw Spectrum' shows a detailed view of the mass spectrum with peaks at m/z 27, 32, 41, 44, 50, 69, 83, 98, 112, 141, and 156. A chemical structure of a barbiturate is shown next to the spectrum. On the right, a 'Matches' table lists search results:</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>#</th> <th>Match</th> <th>Score</th> <th>HCJ</th> <th>RtL</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>Barbital</td> <td>93.27</td> <td>93.24</td> <td>93.48</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5,5-diethyl-</td> <td>85.13</td> <td>83.54</td> <td>99.43</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>Hexethyl</td> <td>84.88</td> <td>84.22</td> <td>90.78</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-butyl-5-ethyl-</td> <td>83.63</td> <td>83.13</td> <td>87.93</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-ethyl-5-(1-methylb...</td> <td>83.42</td> <td>83.42</td> <td>83.42</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-ethyl-5-(1-methylb...</td> <td>83.13</td> <td>82.68</td> <td>87.15</td> </tr> <tr> <td>7</td> <td>Probarbital</td> <td>79.32</td> <td>79.28</td> <td>79.61</td> </tr> <tr> <td>8</td> <td>Amobarbital</td> <td>77.37</td> <td>77.35</td> <td>77.55</td> </tr> <tr> <td>9</td> <td>Probarbital</td> <td>75.37</td> <td>73.96</td> <td>88.04</td> </tr> <tr> <td>10</td> <td>Barbituric acid, 5-ethyl-5-pentyl-</td> <td>72.12</td> <td>71.15</td> <td>80.87</td> </tr> </tbody> </table>	#	Match	Score	HCJ	RtL	1	Barbital	93.27	93.24	93.48	2	2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5,5-diethyl-	85.13	83.54	99.43	3	Hexethyl	84.88	84.22	90.78	4	2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-butyl-5-ethyl-	83.63	83.13	87.93	5	2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-ethyl-5-(1-methylb...	83.42	83.42	83.42	6	2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-ethyl-5-(1-methylb...	83.13	82.68	87.15	7	Probarbital	79.32	79.28	79.61	8	Amobarbital	77.37	77.35	77.55	9	Probarbital	75.37	73.96	88.04	10	Barbituric acid, 5-ethyl-5-pentyl-	72.12	71.15	80.87
#	Match	Score	HCJ	RtL																																																				
1	Barbital	93.27	93.24	93.48																																																				
2	2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5,5-diethyl-	85.13	83.54	99.43																																																				
3	Hexethyl	84.88	84.22	90.78																																																				
4	2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-butyl-5-ethyl-	83.63	83.13	87.93																																																				
5	2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-ethyl-5-(1-methylb...	83.42	83.42	83.42																																																				
6	2,4,6-(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5-ethyl-5-(1-methylb...	83.13	82.68	87.15																																																				
7	Probarbital	79.32	79.28	79.61																																																				
8	Amobarbital	77.37	77.35	77.55																																																				
9	Probarbital	75.37	73.96	88.04																																																				
10	Barbituric acid, 5-ethyl-5-pentyl-	72.12	71.15	80.87																																																				

	結果
<p>3 平均スペクトル範囲を定義します</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 上部のバー（緑色）をクリックして</li> <li>• ドラッグ&amp;</li> <li>• ドロップします。</li> </ul> <p>背景スペクトル範囲を定義します</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 上部のバー（赤色）をクリックします</li> <li>• ドラッグ&amp;</li> </ul> <p>ドロップします。</p>	 <p>データベースの検索結果はデフォルトで表示されますが、「<b>Process &gt; Search Extracted MS Spectrum for Database Matches</b> menu-item」を選択することで、表示をオフにすることもできます。</p>

## 例：SearchIt に転送

	アクション	結果
1	Transfer to をクリックします：SearchIt	 <p>KnowItAll Informatics System 2024, Analytical Edition ファイル(F) 編集(E) 表示(V) データ処理(P) 解析(A) ライセ 送り先: ReportIt SearchIt MineIt Spectral Processing ProcessIt</p>

アクション	結果
<p>2 <b>SearchIt</b> では、さまざまな MS スペクトル検索が可能です。</p> <p><b>Adaptive Search</b> のチェックを外します</p> <p><b>User-Select</b> でライセンス付きのすべてのデータベースが選択されていることを確認します。</p> <p><b>検索</b></p>	
<p>3</p>	 <p>上記の手順を実行すると、期待される検索結果が得られます。</p>

