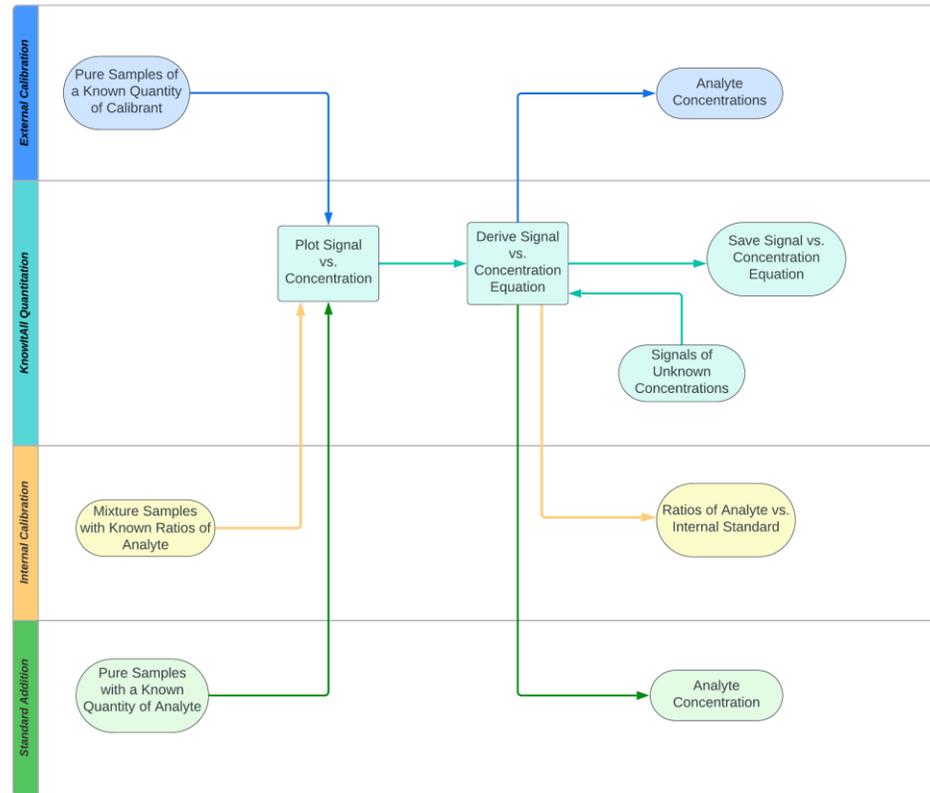


KnowItAll ソフトウェアのトレーニング

定量

定量ワークフロー



外部キャリブレーション定量

外部キャリブレーション定量の実行

目的

これらの演習では、KnowItAll 定量ソフトウェアを使用して外部キャリブレーション定量を実行する方法を示します。

目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- ▶ 外部キャリブレーションの作成方法
- ▶ 定量分析の実行方法

背景

Wiley の KnowItAll 定量アプリケーションは、さまざまな種類の分析データに対して正確な定量を行うことができます。

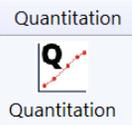
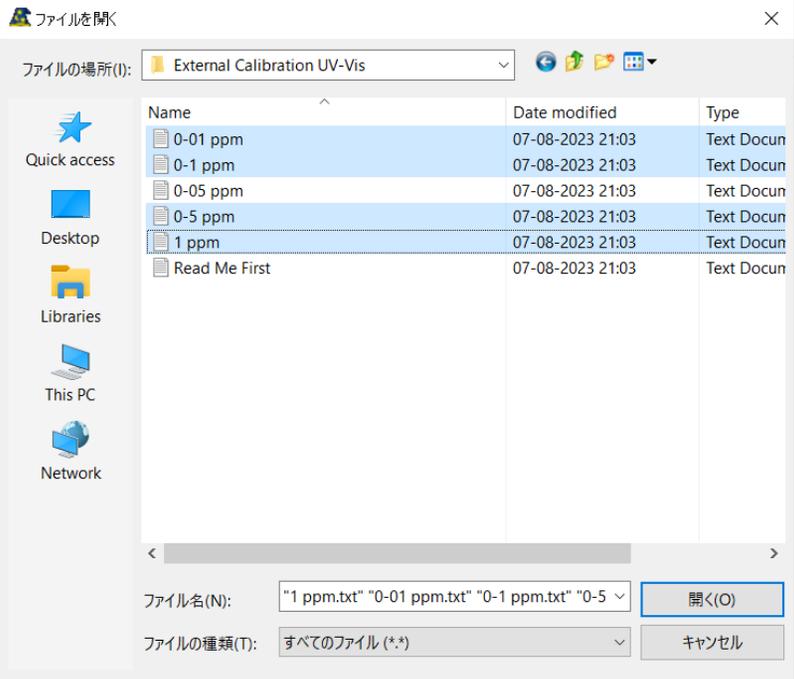
このレッスンで使用されるトレーニングファイルは、以下の場所に保存されています

C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Quantitation folder

- 外部キャリブレーション UV-Vis
- 外部キャリブレーション IR

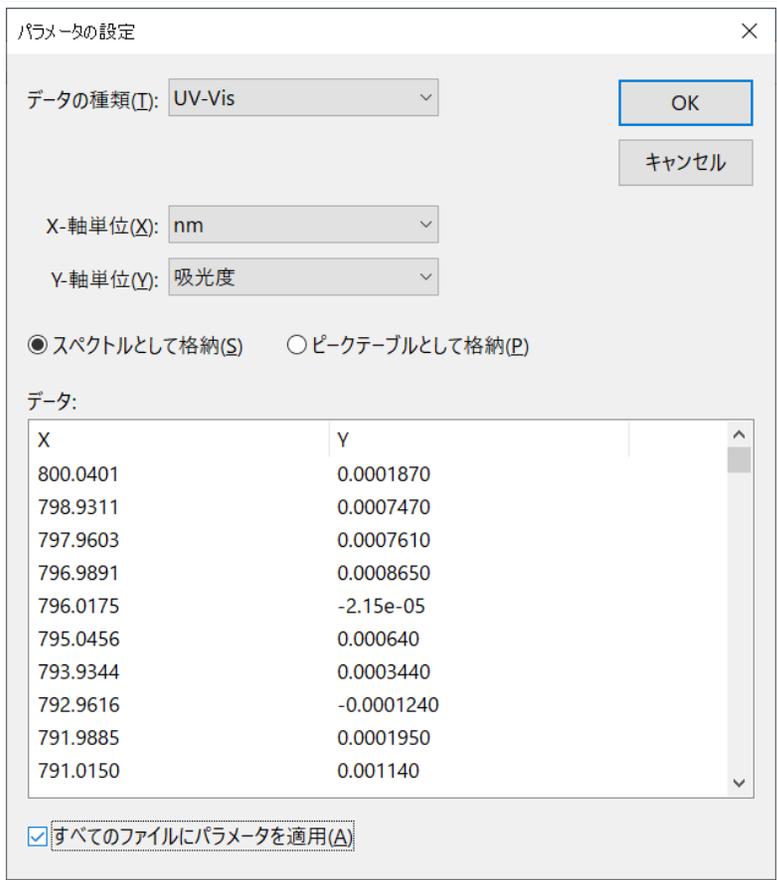
KnowItAll 使用アプリケーション

UV-Vis

	アクション	結果																					
1	<p>Quantitation (定量) アプリケーションを開くには、通常は Quantitation (定量) グループにあるアイコンをクリックします。</p>	 <p>Quantitation</p>																					
2	<p>新しい外部キャリブレーションボタンをクリックします。</p>	<p>KnowItAll は、キャリブレーション用のファイルを開くようにユーザーに促します。</p>																					
3	<p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Quantitation\External Calibration UV-Vis フォルダに移動します。</p> <p>サンプルファイルを選択し、1つだけ未知のファイルとして残します。</p> <p>「Open」をクリックします。</p>	 <p>ファイルを開く</p> <p>ファイルの場所(I): External Calibration UV-Vis</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Name</th> <th>Date modified</th> <th>Type</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>0-01 ppm</td> <td>07-08-2023 21:03</td> <td>Text Docun</td> </tr> <tr> <td>0-1 ppm</td> <td>07-08-2023 21:03</td> <td>Text Docun</td> </tr> <tr> <td>0-05 ppm</td> <td>07-08-2023 21:03</td> <td>Text Docun</td> </tr> <tr> <td>0-5 ppm</td> <td>07-08-2023 21:03</td> <td>Text Docun</td> </tr> <tr> <td>1 ppm</td> <td>07-08-2023 21:03</td> <td>Text Docun</td> </tr> <tr> <td>Read Me First</td> <td>07-08-2023 21:03</td> <td>Text Docun</td> </tr> </tbody> </table> <p>ファイル名(N): "1 ppm.txt" "0-01 ppm.txt" "0-1 ppm.txt" "0-5" <input type="button" value="開く(O)"/></p> <p>ファイルの種類(T): すべてのファイル (*.*) <input type="button" value="キャンセル"/></p>	Name	Date modified	Type	0-01 ppm	07-08-2023 21:03	Text Docun	0-1 ppm	07-08-2023 21:03	Text Docun	0-05 ppm	07-08-2023 21:03	Text Docun	0-5 ppm	07-08-2023 21:03	Text Docun	1 ppm	07-08-2023 21:03	Text Docun	Read Me First	07-08-2023 21:03	Text Docun
Name	Date modified	Type																					
0-01 ppm	07-08-2023 21:03	Text Docun																					
0-1 ppm	07-08-2023 21:03	Text Docun																					
0-05 ppm	07-08-2023 21:03	Text Docun																					
0-5 ppm	07-08-2023 21:03	Text Docun																					
1 ppm	07-08-2023 21:03	Text Docun																					
Read Me First	07-08-2023 21:03	Text Docun																					

4 「技術パラメーター」のプロンプトウィンドウで：

- ファイルタイプを **UV-Vis** に設定します
- 「すべてのファイルにパラメータを適用する」にチェックを入れます。
- **OK** をクリックします。



パラメータの設定

データの種類(I): UV-Vis

X-軸単位(X): nm

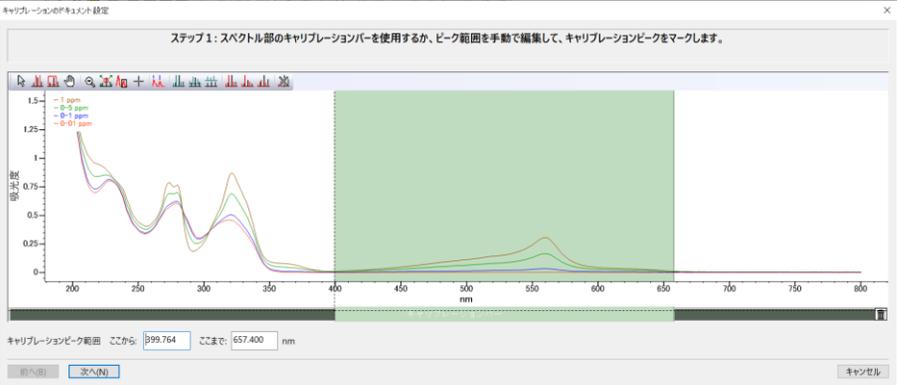
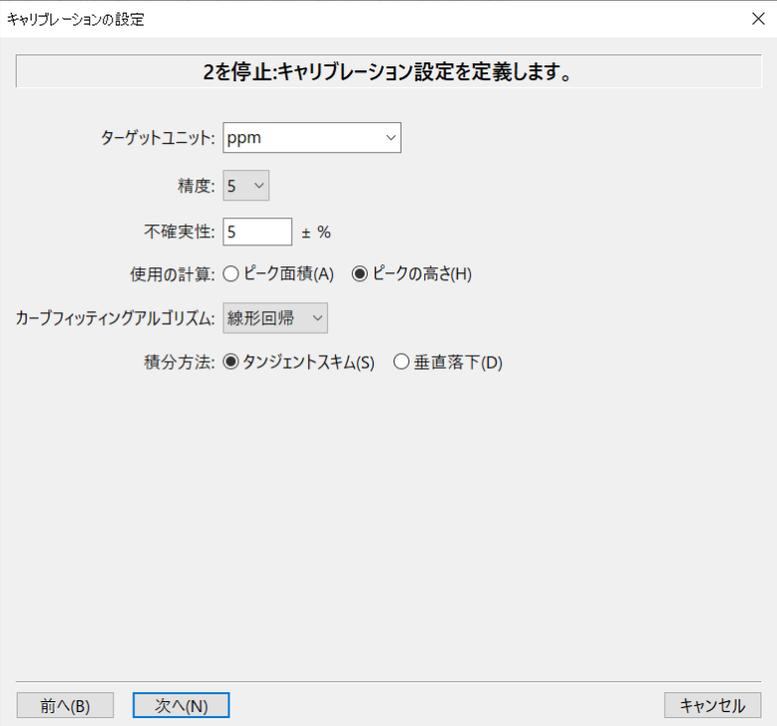
Y-軸単位(Y): 吸光度

スペクトルとして格納(S) ピークテーブルとして格納(P)

データ:

X	Y
800.0401	0.0001870
798.9311	0.0007470
797.9603	0.0007610
796.9891	0.0008650
796.0175	-2.15e-05
795.0456	0.000640
793.9344	0.0003440
792.9616	-0.0001240
791.9885	0.0001950
791.0150	0.001140

すべてのファイルにパラメータを適用(A)

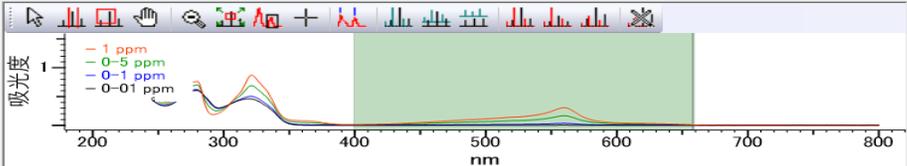
<p>5 CALIBRATION BAR (キャリブレーションバー) をクリックして、560 nm 周辺のピーク領域を選択します (ドラッグアンドドロップ)。</p> <p>「次へ」 ボタンをクリックします。</p>	
<p>6 次のウィンドウで、画像の右側に示されているようにキャリブレーション設定を定義します。</p> <p>目標単位 : ppm 計算方法 : ピークの高さを使用</p> <p>「次へ>」 ボタンをクリックします。</p>	

- 7 ファイル名に基づいて、右の列に濃度を入力します。
(サンプルファイルでは、サンプル名には小数点の代わりにハイフンが使用されています。したがって、「0-01 ppm」というファイルの濃度は実際には0.01 ppmです。)

Finish (完了) ボタンをクリックします。

キャリブレーションの設定

ステップ3:すべてのスペクトルの濃度値を入力します。セルをダブルクリックして編集を開始するか数値を選択して入力します。

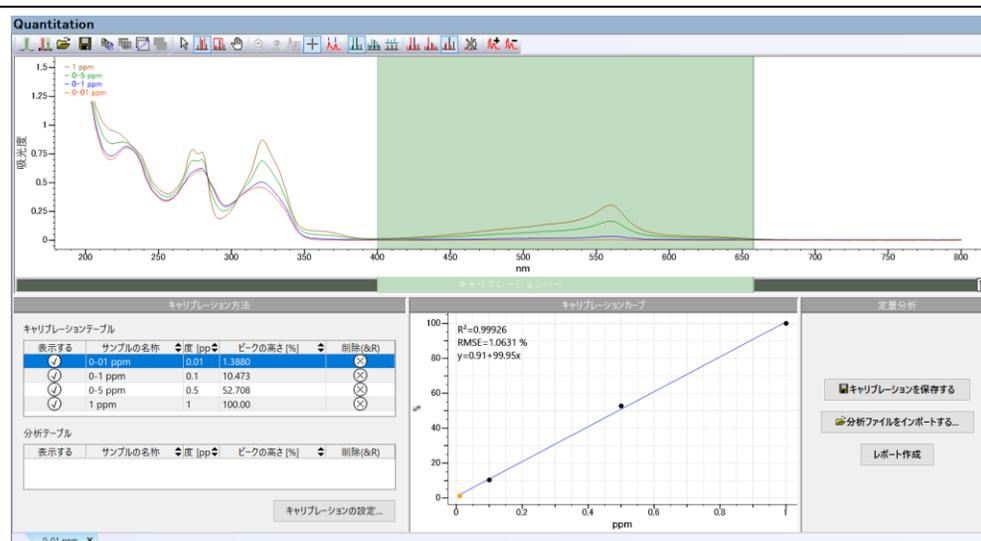


キャリブレーションバー

サンプルの名称	濃度 [ppm]
0-01 ppm	0.01
0-1 ppm	0.1
0-5 ppm	0.5
1 ppm	1

前へ(B) 完了(F) キャンセル

8



キャリブレーション曲線の統計データが報告されます。**RMSE (平均二乗誤差)** が低ければ低いほど、曲線の適合度が高いです。**R² (決定係数)** が 1 に近ければ近いほど、曲線の適合度が高いです。

キャリブレーション設定 ボタンをクリックすると、パラメータをリセットすることができます。また、**キャリブレーションの保存** ボタンをクリックすることで、このキャリブレーションを将来の使用や共有のために保存することができます。

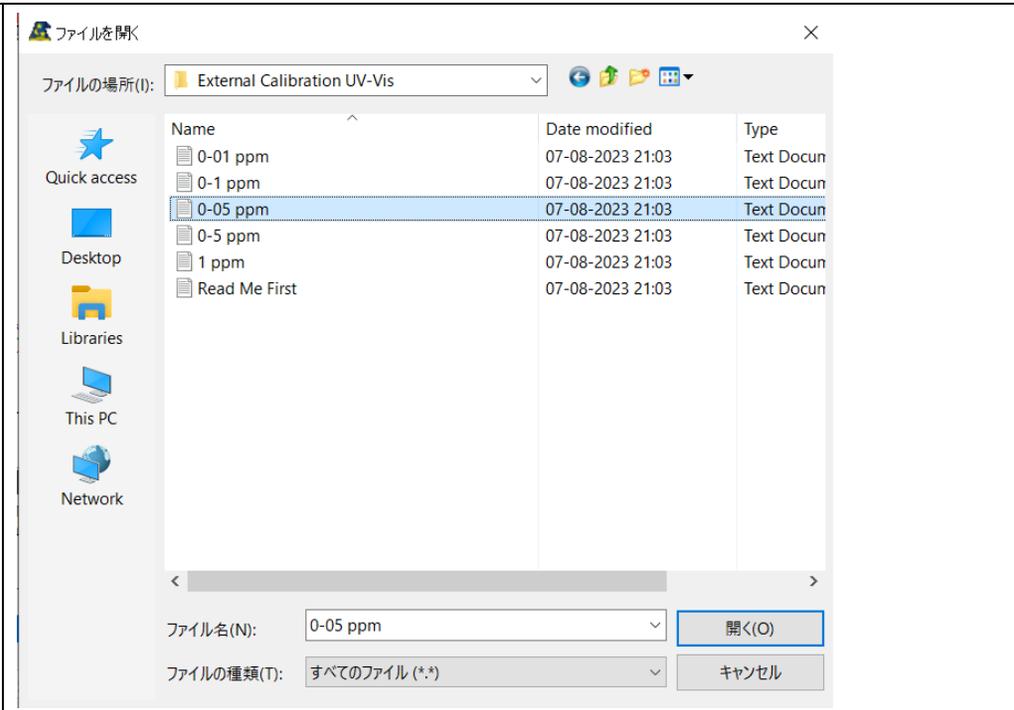
9 分析ファイルのインポートボタンをクリックします。

除外されたファイル (0-05 ppm) を選択します。

「Open」をクリックします。

プロンプトでファイルタイプを **UV-Vis** に設定します。

OK をクリックします。



10

未知の濃度が計算されてマークされます。

キャリブレーション方法

キャリブレーションテーブル

表示する	サンプルの名称	度 [ppm]	ピークの高さ [%]	削除(&R)
<input checked="" type="checkbox"/>	0-01 ppm	0.01	1.3880	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	0-1 ppm	0.1	10.473	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	0-5 ppm	0.5	52.708	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	1 ppm	1	100.00	<input type="checkbox"/>

分析テーブル

表示する	サンプルの名称	度 [ppm]	ピークの高さ [%]	削除(&R)
<input checked="" type="checkbox"/>	0-05 ppm	[0.04206]	5.1167	<input type="checkbox"/>

キャリブレーションの設定...

キャリブレーションカーブ

11 **Create Report** (レポートを作成) ボタンをクリックするか、**Transfer to:** (に転送する) を使用します。**ReportIt** を使用すると、オブジェクトを他のデスクトップツールにコピー/貼り付けできるレポートを生成することができます。

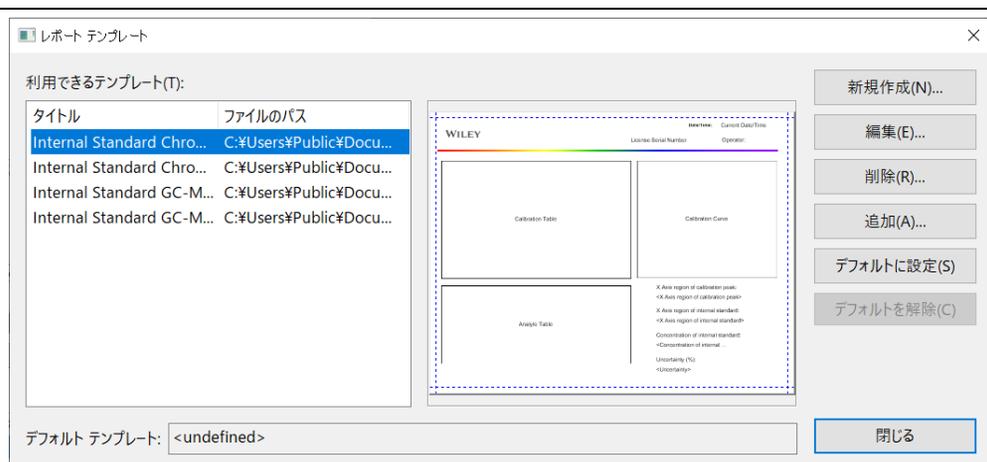
注記： テンプレートを初めて使用する場合、**ReportIt** アプリケーションにデータを転送する前に以下の手順を行う必要があります：

[ファイル] > [レポートテンプレートの編集]

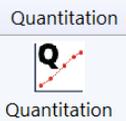
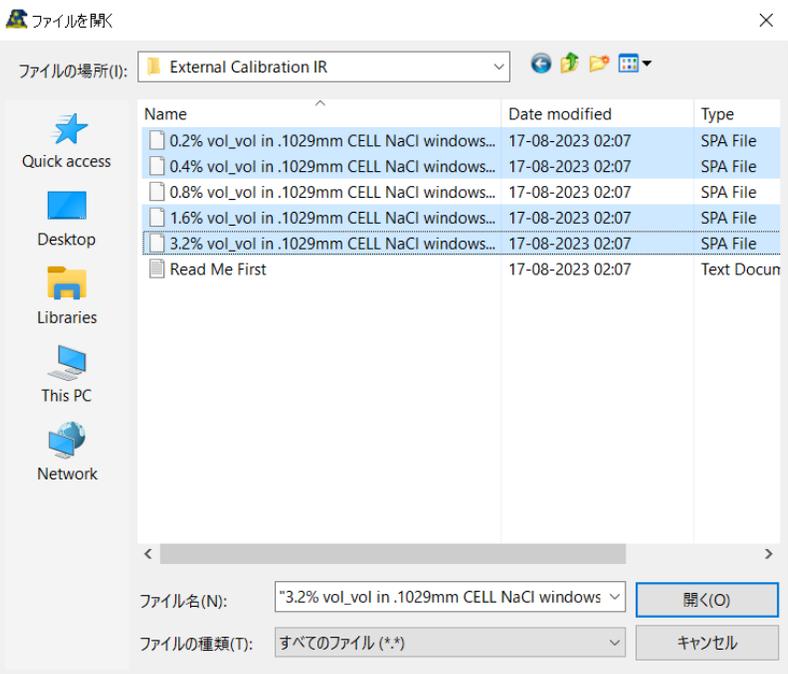
[追加] ボタンをクリックします

テンプレートファイルの場所に移動します

Open (開きます)

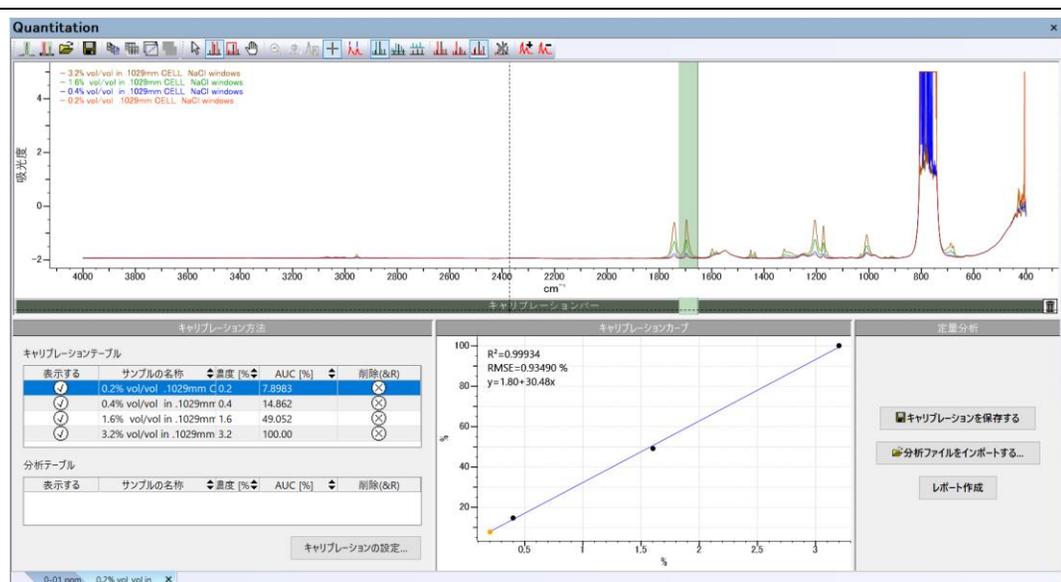


IR

	アクション	結果																					
1	<p>Quantitation (定量) アプリケーションを開くには、通常は Quantitation (定量) グループにあるアイコンをクリックします。</p>	 <p>Quantitation</p>																					
2	<p>新しい外部キャリブレーションボタンをクリックします。。</p>	<p>KnowItAll は、キャリブレーション用のファイルを開くようにユーザーに促します。</p>																					
3	<p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Quantitation\External Calibration IR フォルダに移動します。</p> <p>サンプルファイルを選択し、その中から 1 つだけ未知のファイル (0.8%) を除外します。</p> <p>「Open」をクリックします。</p>	 <p>ファイルを開く</p> <p>ファイルの場所 (I): External Calibration IR</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Name</th> <th>Date modified</th> <th>Type</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td><input type="checkbox"/> 0.2% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...</td> <td>17-08-2023 02:07</td> <td>SPA File</td> </tr> <tr> <td><input type="checkbox"/> 0.4% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...</td> <td>17-08-2023 02:07</td> <td>SPA File</td> </tr> <tr> <td><input type="checkbox"/> 0.8% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...</td> <td>17-08-2023 02:07</td> <td>SPA File</td> </tr> <tr> <td><input type="checkbox"/> 1.6% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...</td> <td>17-08-2023 02:07</td> <td>SPA File</td> </tr> <tr> <td><input checked="" type="checkbox"/> 3.2% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...</td> <td>17-08-2023 02:07</td> <td>SPA File</td> </tr> <tr> <td><input type="checkbox"/> Read Me First</td> <td>17-08-2023 02:07</td> <td>Text Docun</td> </tr> </tbody> </table> <p>ファイル名 (N): "3.2% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows..." <input type="button" value="開く(O)"/></p> <p>ファイルの種類 (T): すべてのファイル (*.*) <input type="button" value="キャンセル"/></p>	Name	Date modified	Type	<input type="checkbox"/> 0.2% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...	17-08-2023 02:07	SPA File	<input type="checkbox"/> 0.4% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...	17-08-2023 02:07	SPA File	<input type="checkbox"/> 0.8% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...	17-08-2023 02:07	SPA File	<input type="checkbox"/> 1.6% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...	17-08-2023 02:07	SPA File	<input checked="" type="checkbox"/> 3.2% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...	17-08-2023 02:07	SPA File	<input type="checkbox"/> Read Me First	17-08-2023 02:07	Text Docun
Name	Date modified	Type																					
<input type="checkbox"/> 0.2% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...	17-08-2023 02:07	SPA File																					
<input type="checkbox"/> 0.4% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...	17-08-2023 02:07	SPA File																					
<input type="checkbox"/> 0.8% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...	17-08-2023 02:07	SPA File																					
<input type="checkbox"/> 1.6% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...	17-08-2023 02:07	SPA File																					
<input checked="" type="checkbox"/> 3.2% vol_vol in .1029mm CELL NaCl windows...	17-08-2023 02:07	SPA File																					
<input type="checkbox"/> Read Me First	17-08-2023 02:07	Text Docun																					

<p>4 キャリブレーションバーをクリックして、1696 cm⁻¹周辺のピーク領域を選択します（ドラッグアンドドロップ）。</p> <p>注記： IR 定量では、最も強いピークの使用は避けるべきです。</p> <p>「次へ」ボタンをクリックします。</p>											
<p>6 次のウィンドウで、キャリブレーション設定を定義します：</p> <p>（目標単位：% 計算方法：ピーク面積）</p> <p>「次へ」ボタンをクリックします。</p>											
<p>7 サンプル名の数字に基づいて、ポップアップウィンドウに濃度を入力します。</p> <p>Finish (完了) ボタンをクリックします。</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>サンプルの名称</th> <th>濃度 [%]</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>0.2% vol/vol .1029mm CELL NaCl windows</td> <td>0.2</td> </tr> <tr> <td>0.4% vol/vol in .1029mm CELL NaCl windows</td> <td>0.4</td> </tr> <tr> <td>1.6% vol/vol in .1029mm CELL NaCl windows</td> <td>1.6</td> </tr> <tr> <td>3.2% vol/vol in .1029mm CELL NaCl windows</td> <td>3.2</td> </tr> </tbody> </table>	サンプルの名称	濃度 [%]	0.2% vol/vol .1029mm CELL NaCl windows	0.2	0.4% vol/vol in .1029mm CELL NaCl windows	0.4	1.6% vol/vol in .1029mm CELL NaCl windows	1.6	3.2% vol/vol in .1029mm CELL NaCl windows	3.2
サンプルの名称	濃度 [%]										
0.2% vol/vol .1029mm CELL NaCl windows	0.2										
0.4% vol/vol in .1029mm CELL NaCl windows	0.4										
1.6% vol/vol in .1029mm CELL NaCl windows	1.6										
3.2% vol/vol in .1029mm CELL NaCl windows	3.2										

8



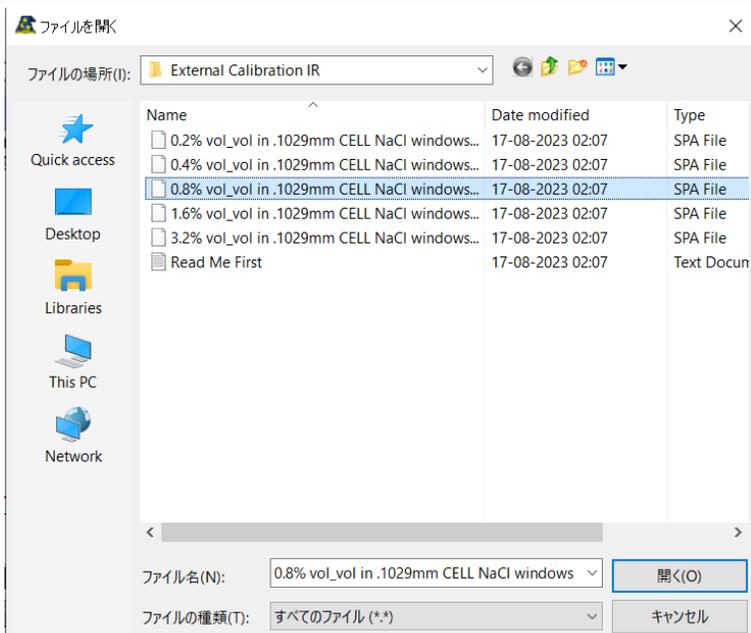
キャリブレーション曲線の統計データが報告されます。**RMSE (平均二乗誤差)** が低ければ低いほど、曲線の適合度が高いです。**R² (決定係数)** が 1 に近ければ近いほど、曲線の適合度が高いです。

キャリブレーション設定 ボタンをクリックすると、パラメータをリセットすることができます。また、**キャリブレーションの保存** ボタンをクリックすることで、このキャリブレーションを将来の使用や共有のために保存することができます。

9 分析ファイルのインポートボタンをクリック
します。

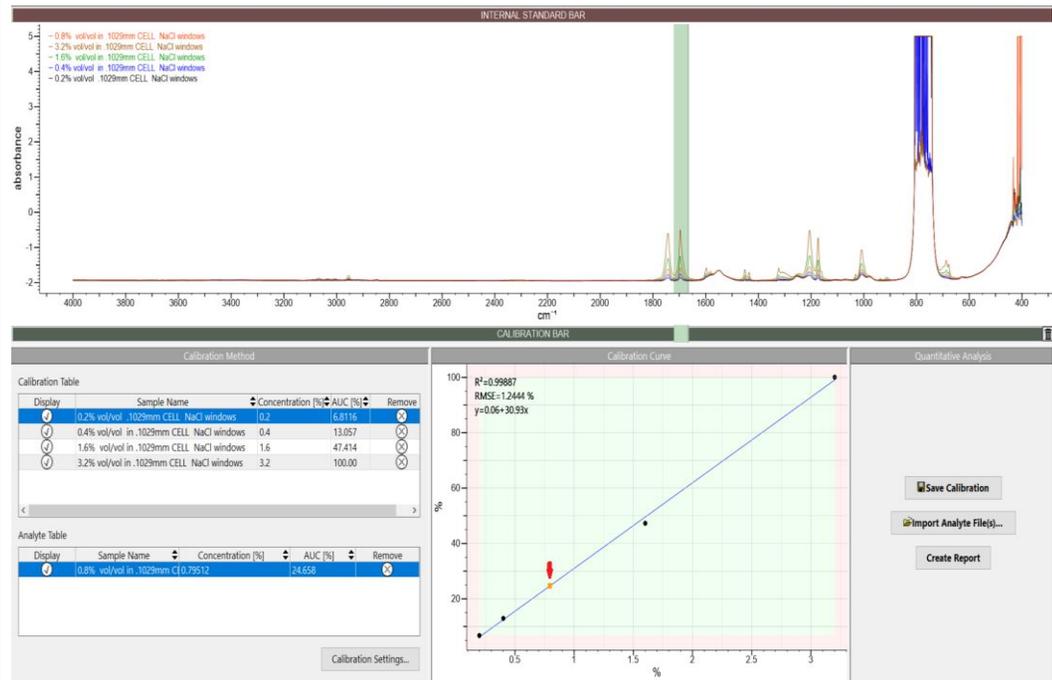
除外されたファイル (**0.8%**) を選択します。

「**Open**」をクリックします。



10

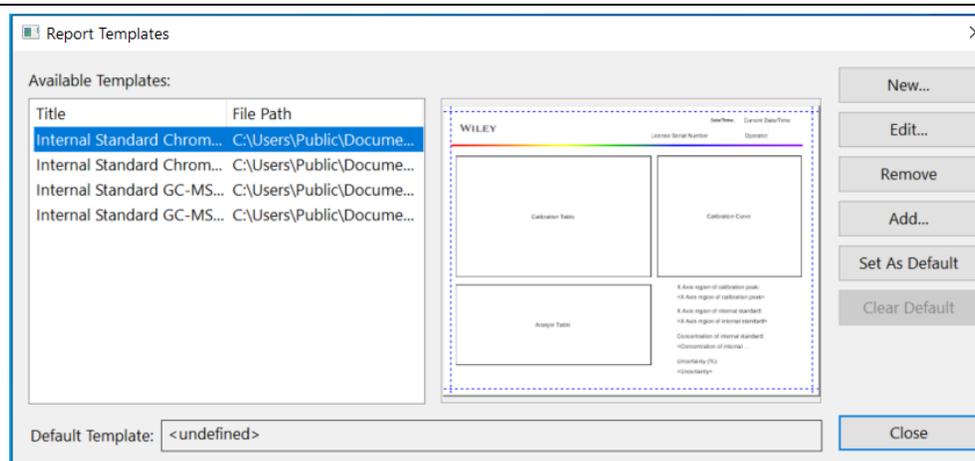
未知の濃度が計算されてマークされます。



11 **Create Report** (レポートを作成) ボタンをクリックするか、**Transfer to: (に転送する)** を使用します。これにより、オブジェクトを他のデスクトップツールにコピー/貼り付けできるレポートが生成されます。

注記： テンプレートを初めて使用する場合、ReportIt アプリケーションにデータを転送する前に以下の手順を行う必要があります：

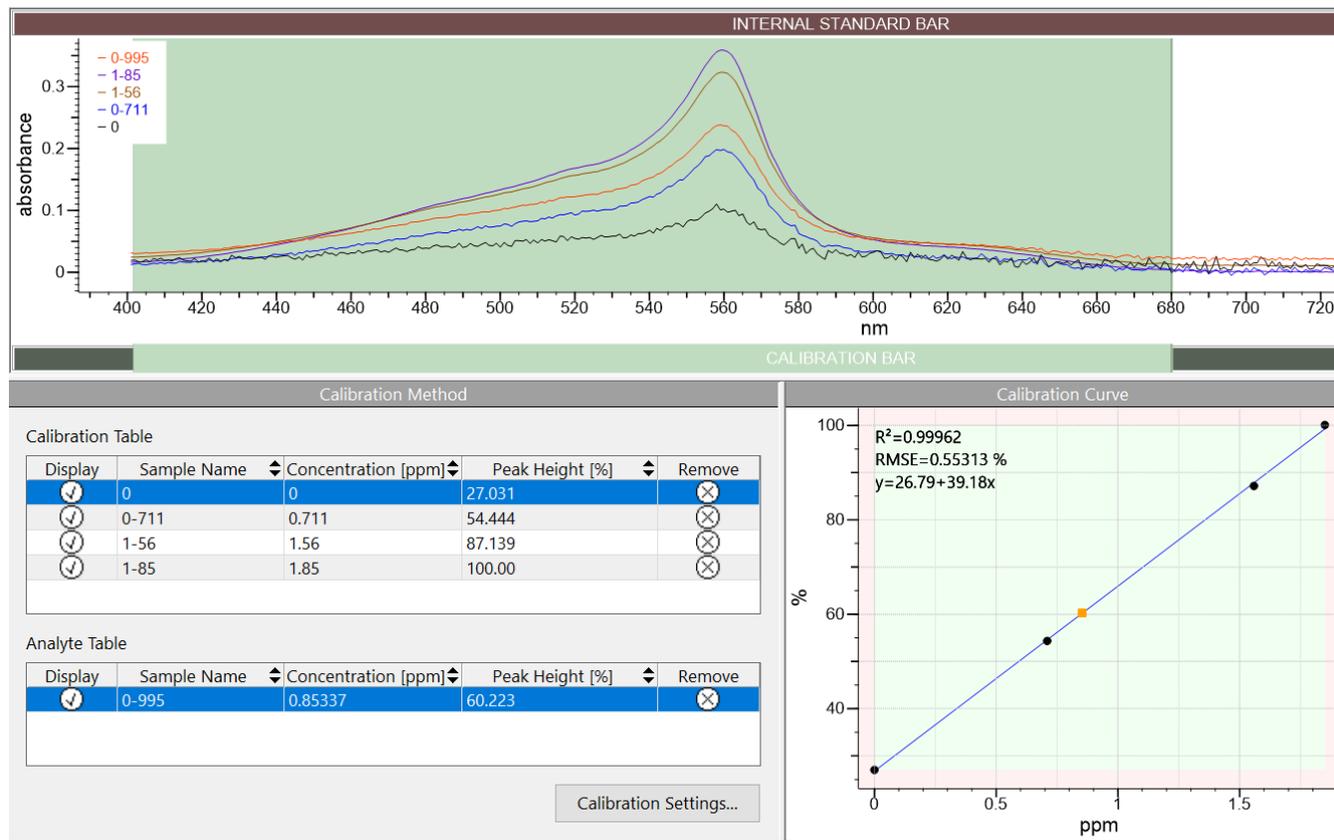
[ファイル] > [レポートテンプレートの編集]
[追加] ボタンをクリックします
テンプレートファイルの場所に移動します
Open (開きます)



標準添加定量

標準添加定量を実行

このスクリーンショットは、標準添加法の結果を示しています。追加濃度が 0 の場合、Y 軸の値 26.79 は元の未知のサンプル中のシグナル（この場合は鉄）を表しています：



内部標準校正定量

内部標準校正定量を実行

目的

これらの演習では、KnowItAll Quantitation ソフトウェアを使用して内部標準校正定量を行う方法を示しています。

目標

この演習では、以下の内容を学ぶことができます:

- 内部標準校正の作成方法
- 定量分析の実行方法

背景

Wiley の KnowItAll 定量アプリケーションは、さまざまな種類の分析データに対して正確な定量を行うことができます。

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\Quantitation folder

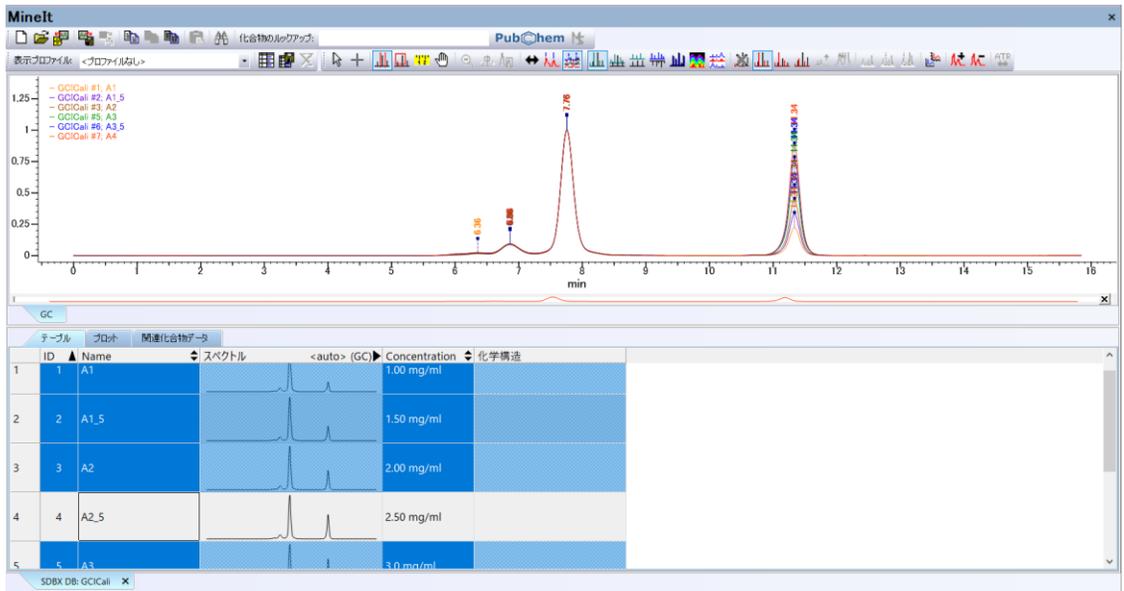
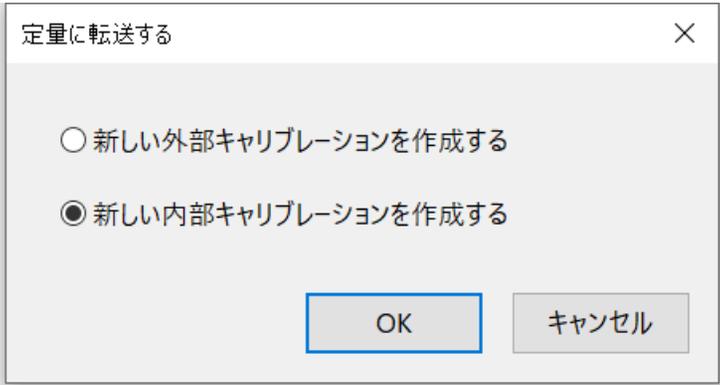
- 内部標準校正クロマトグラム

KnowItAll 使用アプリケーション

- 定量

クロマトグラム

	アクション	結果
1	<p>データグループに通常含まれるアイコンをクリックして、Minelt アプリケーションを開きます。</p> <p>データベース > 開く を選択します。</p> <p>[閲覧で開く] ボタンをクリックします。</p>	 <p>The screenshot shows a vertical menu with the following items from top to bottom: 'Data' (with a lightbulb icon), 'ID Expert' (with a lightbulb icon), 'SearchIt' (with a magnifying glass icon), 'Minelt/Create Database' (with a document and pencil icon, highlighted by a red rectangular box), and 'QC Expert' (with a green checkmark icon).</p>

2	<p>C:\Users\Public\Documents\Wiley\KnowItAll\Samples\Quantitation\Internal Calibration Chromatogram フォルダに移動します。</p> <p>Chromatograms For Internal Calibration Demo 「内部校正デモ用のクロマトグラム」 を選択します。</p> <p>「Open」をクリックします。</p> <p>レコードのセットを選択します（未知のものを1つ残して選択）、そして、Transfer to: Quantitation（定量に転送する）を選択します。</p>	 <p>The screenshot shows the Minelt software interface. The top part displays a chromatogram with several peaks. The x-axis is labeled 'min' and ranges from 0 to 16. The y-axis ranges from 0 to 1.25. There are peaks at approximately 6.35, 6.75, 7.75, and 11.5 minutes. Below the chromatogram is a table with the following data:</p> <table border="1"><thead><tr><th>ID</th><th>Name</th><th>スペクトル</th><th>Concentration</th><th>化学構造</th></tr></thead><tbody><tr><td>1</td><td>A1</td><td>[Spectrum]</td><td>1.00 mg/ml</td><td></td></tr><tr><td>2</td><td>A1_5</td><td>[Spectrum]</td><td>1.50 mg/ml</td><td></td></tr><tr><td>3</td><td>A2</td><td>[Spectrum]</td><td>2.00 mg/ml</td><td></td></tr><tr><td>4</td><td>A2_5</td><td>[Spectrum]</td><td>2.50 mg/ml</td><td></td></tr><tr><td>5</td><td>A3</td><td>[Spectrum]</td><td>3.00 mg/ml</td><td></td></tr></tbody></table>	ID	Name	スペクトル	Concentration	化学構造	1	A1	[Spectrum]	1.00 mg/ml		2	A1_5	[Spectrum]	1.50 mg/ml		3	A2	[Spectrum]	2.00 mg/ml		4	A2_5	[Spectrum]	2.50 mg/ml		5	A3	[Spectrum]	3.00 mg/ml	
ID	Name	スペクトル	Concentration	化学構造																												
1	A1	[Spectrum]	1.00 mg/ml																													
2	A1_5	[Spectrum]	1.50 mg/ml																													
3	A2	[Spectrum]	2.00 mg/ml																													
4	A2_5	[Spectrum]	2.50 mg/ml																													
5	A3	[Spectrum]	3.00 mg/ml																													
3	<p>プロンプトウィンドウで[新しい内部校正を作成]を選択します。</p> <p>OK をクリックします。</p>	 <p>The screenshot shows a dialog box titled "定量に転送する" (Transfer to Quantitation). It contains two radio button options:</p> <ul style="list-style-type: none"><input type="radio"/> 新しい外部キャリブレーションを作成する (Create new external calibration)<input checked="" type="radio"/> 新しい内部キャリブレーションを作成する (Create new internal calibration) <p>At the bottom of the dialog box are two buttons: "OK" and "キャンセル" (Cancel).</p>																														

<p>4 キャリブレーションバーをクリックして、11.3 周辺のピーク領域を校正ピークとして選択します（ドラッグアンドドロップ）。</p> <p>「次へ」ボタンをクリックします。</p>	<p>キャリブレーションのコメント設定</p> <p>ステップ1: スペクトル部のキャリブレーションバーを使用するか、ピーク範囲を手動で編集して、キャリブレーションピークをマークします。</p> <p>intensity</p> <p>min</p> <p>キャリブレーションピーク範囲 ここから: 10.7377 ここまで: 11.9770 min</p> <p>前へ(B) 次へ(N) キャンセル</p>
<p>5 キャリブレーションバーをクリックして、7.8 周辺のピーク領域を内部標準ピークとして選択します（ドラッグアンドドロップ）。</p> <p>「次へ」ボタンをクリックします。</p>	<p>キャリブレーションのコメント設定</p> <p>ステップ2: スペクトルパインの範囲バーを使用するか、ピーク範囲を手動で編集して、内部標準ピークをマークします。</p> <p>intensity</p> <p>min</p> <p>内部標準ピーク</p> <p>キャリブレーションピーク範囲 ここから: 7.26995 ここまで: 8.41546 min</p> <p>前へ(B) 次へ(N) キャンセル</p>

<p>6 次のウィンドウでは、以下のように校正設定を定義します： (目標単位：%)</p> <p>「次へ」ボタンをクリックします。</p>	 <p>キャリブレーションの設定</p> <p>3を停止:キャリブレーション設定を定義します。</p> <p>ターゲットユニット: %</p> <p>精度: 5</p> <p>不確実性: 5 ± %</p> <p>使用の計算: <input checked="" type="radio"/> ピーク面積(A) <input type="radio"/> ピークの高さ(H)</p> <p>カーブフィッティングアルゴリズム: 線形回帰</p> <p>積分方法: <input checked="" type="radio"/> タンジェントスキム(S) <input type="radio"/> 垂直落下(D)</p>
---	--

7 ポップアップウィンドウに濃度比を入力します。

(なお、サンプル名は濃度に基づいていますが、小数点はアンダースコアに置き換えられています。「GCICali #6; A3_5」というサンプル名は、サンプルの濃度が3.5%であることを示しています。)

完了ボタンをクリックします。

キャリブレーションの設定

ステップ4:すべてのスペクトルの濃度値を入力します。セルをダブルクリックして編集を開始するか数値を選択して入力します。

内部標準バー

intensity

min

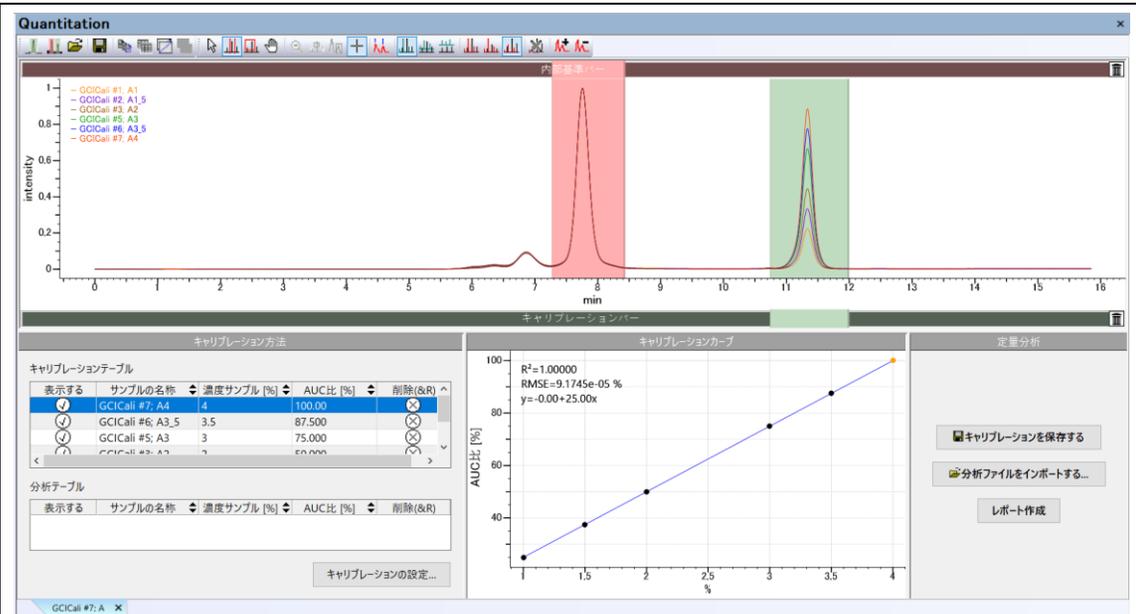
キャリブレーションバー

内部標準濃度は一定です。 濃度 %

サンプルの名称	濃度サンプル [%]
GCICali #7; A4	4
GCICali #6; A3_5	3.5
GCICali #5; A3	3
GCICali #3; A2	2
GCICali #2; A1_5	1.5
GCICali #1; A1	1

前へ(B) 完了(F) キャンセル

8



キャリブレーション曲線の統計データが報告されます。**RMSE (平均二乗誤差)** が低ければ低いほど、曲線の適合度が高いです。 **R^2 (決定係数)** が 1 に近ければ近いほど、曲線の適合度が高いです。

キャリブレーション設定 ボタンをクリックすると、パラメータをリセットすることができます。また、**キャリブレーションの保存** ボタンをクリックすることで、このキャリブレーションを将来の使用や共有のために保存することができます。

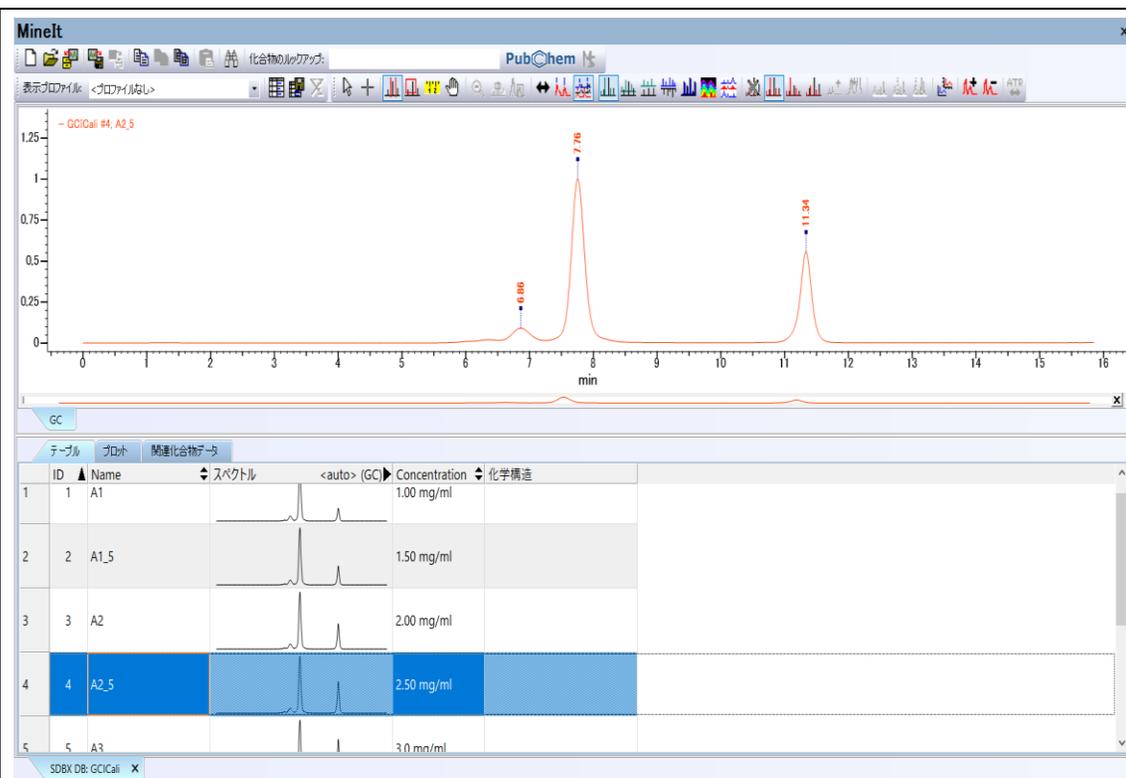
9 **Minelt** のデータベースに戻ります。

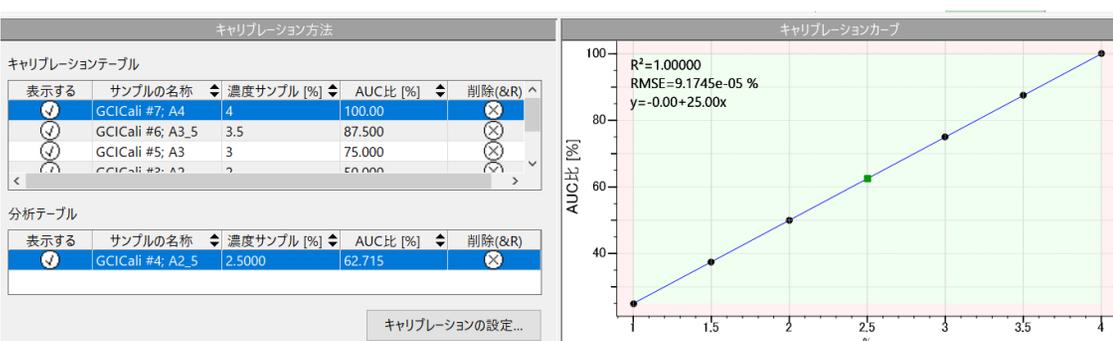
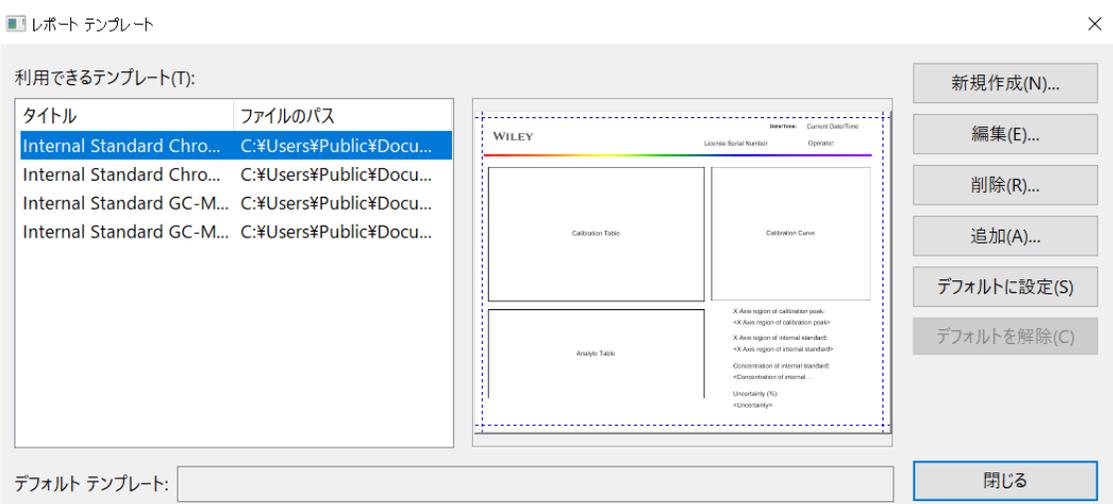
残しておいたファイル（未知のファイル）である **A2_5** を選択してください。

Transfer to: Quantitation（定量に転送する）を選択します。

プロンプトで、**Calculate concentration**（濃度の計算）を選択します。

OK をクリックします。



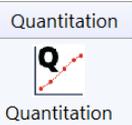
<p>10</p>		<p>未知のサンプルの濃度が計算され、マークされます。</p> 
<p>11</p>	<p>Create Report (レポートを作成) ボタンをクリックするか、Transfer to: (に転送する) を使用します。ReportIt を使用すると、オブジェクトを他のデスクトップツールにコピー/貼り付けできるレポートを生成することができます。</p> <p>注記: テンプレートを初めて使用する場合、ReportIt アプリケーションにデータを転送する前に以下の手順を行う必要があります:</p> <p>[ファイル] > [レポートテンプレートの編集]</p> <p>[追加] ボタンをクリックします テンプレートファイルの場所に移動します Open (開きます)</p>	

GC-MS

この演習では、https://arts-sciences.und.edu/academics/chemistry/kubatova-research-group/chrom_ms02.html からサンプルのデータセットをダウンロードする必要があります。ファイル名には分析物 (Guaiacol) の濃度が反映されるように、ファイル名を変更することが役立ちます。

内部標準物は: *o*-Terphenyl (IS) で、保持時間 11.5192 分、濃度は 62.0 ug/ml です。

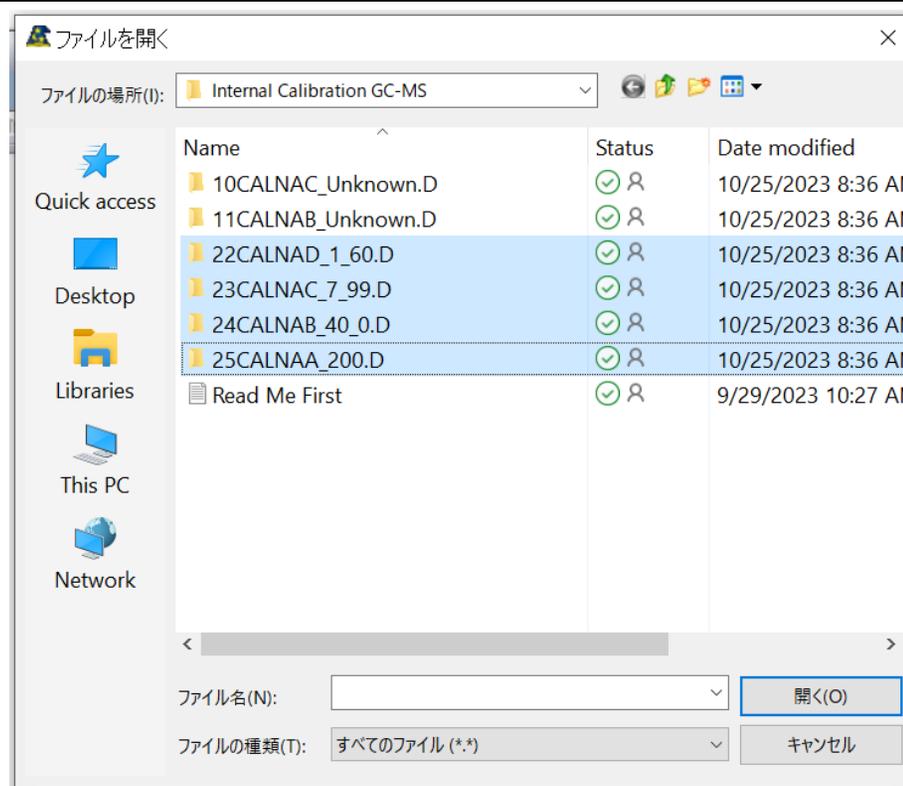
分析物は: Guaiacol で、保持時間は 6.3368 分です。

	アクション	結果
1	Quantitation (定量) アプリケーションを開くには、通常は Quantitation (定量) グループにあるアイコンをクリックします。	 Quantitation
2	New Internal Calibration (新しい内部キャリブレーション) ボタンをクリックしてください。	KnowItAll は、キャリブレーション用のファイルを開くようにユーザーに促します。

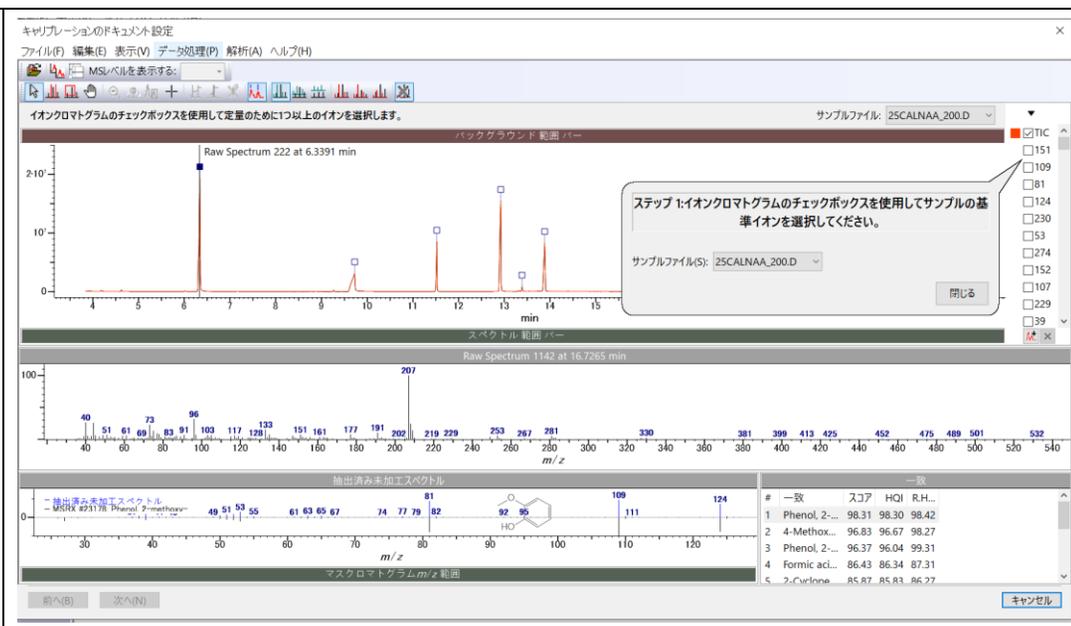
3 ダウンロードした GC-MS ファイルのフォルダに移動します。

右側のスクリーンショットに示されているフォルダを選択してください。

「Open」をクリックします。



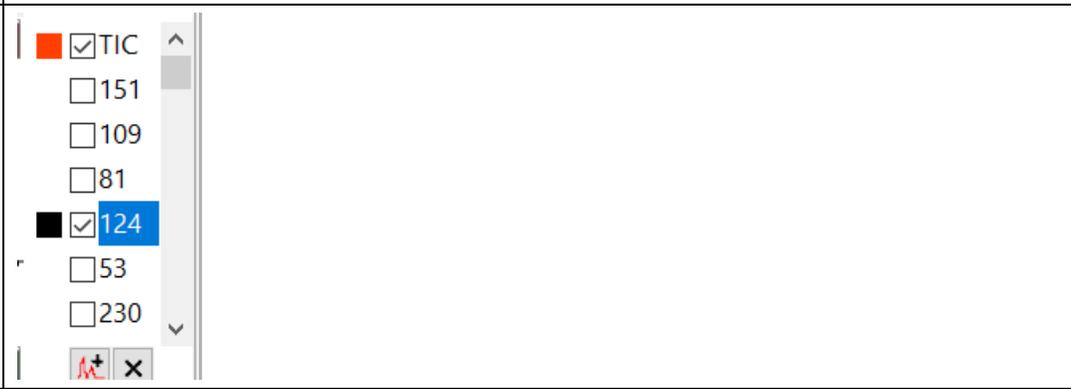
4 ドロップダウンリストから、分析物の濃度が最も大きいキャリブレーションとなるファイルを選んでください。この例では、**25CALNAA_200.D** となります。



5 **Raw Spectrum (生スペクトル)** パネルから、興味のある成分を選択します。この例では、関心のある成分は保持時間 **6.45** 分に TIC ピークが観察されます。

イオンを選択します。この場合、分子の **m/z 124** を選択します。

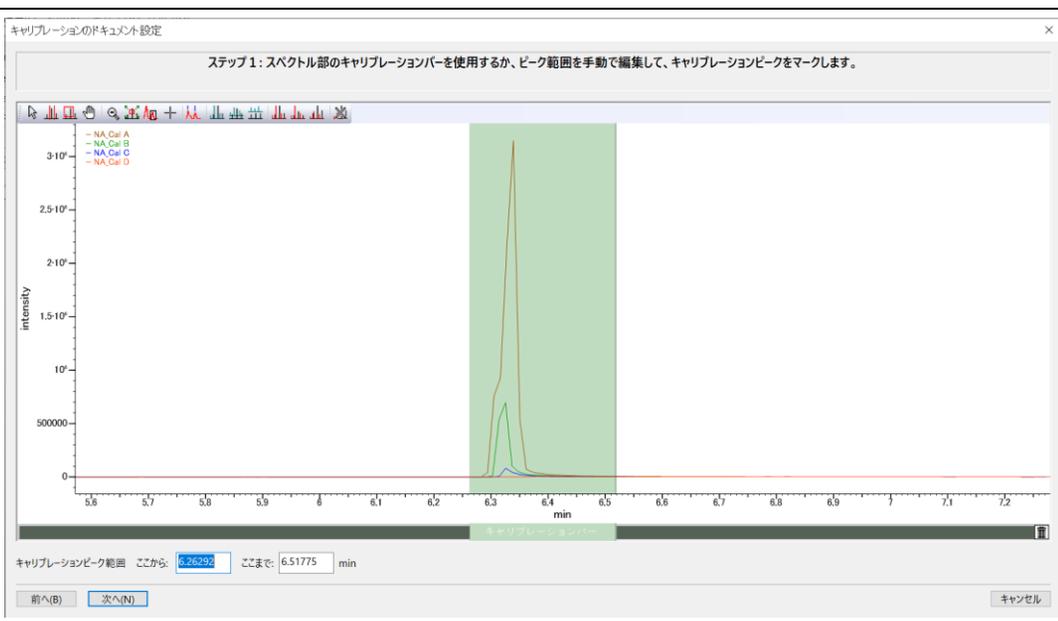
「次へ>」 (左下の角) をクリックしてください。



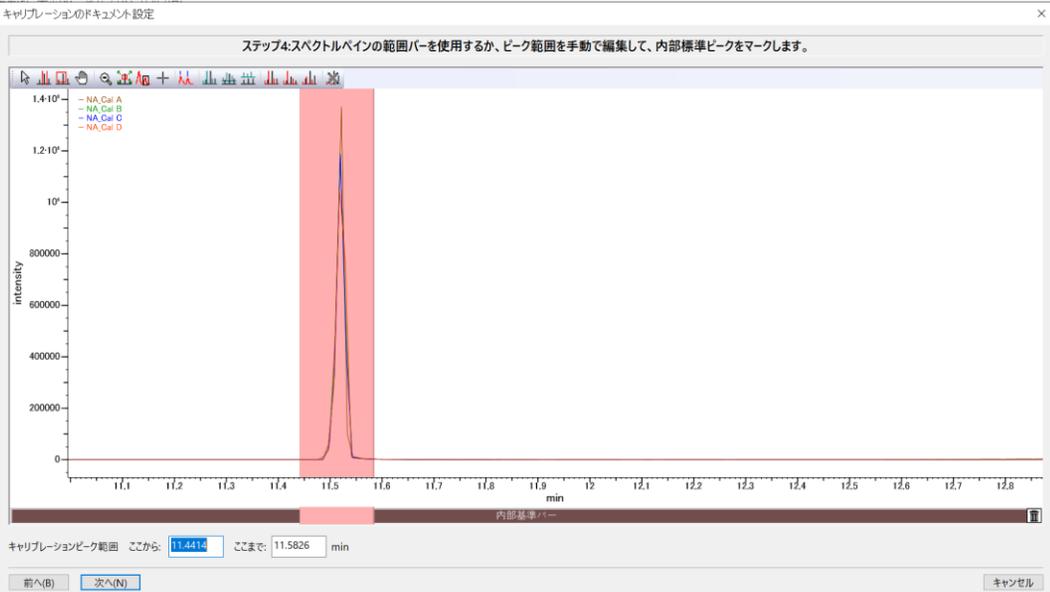
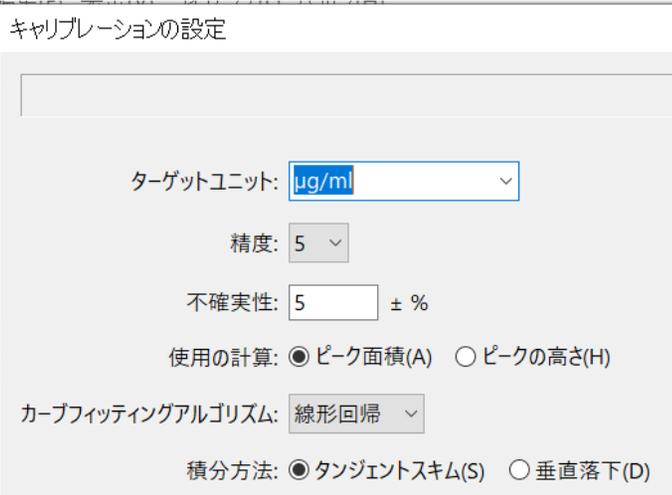
6 スペクトルパネルをクリックし、マウスでドラッグして、6分から6.5分の領域にズームインします。

キャリブレーションバーをクリックしてピーク領域を選択します（ドラッグ&ドロップ）。

「次へ」ボタンをクリックします。



7	<p>Raw Spectrum (生スペクトル) パネルから、興味のある成分を選択します。この例では、関心のある成分は保持時間 11.5分 に TIC ピークが観察されます。</p> <p>イオンを選択します。この場合、分子の m/z 230 を選択します。</p> <p>「次へ」 > (左下の角) をクリックしてください。</p>	 <table border="1" data-bbox="1564 738 1881 852"> <thead> <tr> <th>#</th> <th>一致</th> <th>スコア</th> <th>HQI</th> <th>R.H.</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>o-Terphenyl</td> <td>96.70</td> <td>96.66</td> <td>97.06</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>6,6-Diphenylfulvene</td> <td>91.82</td> <td>91.73</td> <td>92.56</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>Naphthalene, 2-styryl-</td> <td>91.56</td> <td>91.43</td> <td>92.74</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td></td> <td>91.28</td> <td>91.27</td> <td>91.32</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>6,6-Diphenylfulvene</td> <td>88.00</td> <td>87.30</td> <td>94.37</td> </tr> </tbody> </table>	#	一致	スコア	HQI	R.H.	1	o-Terphenyl	96.70	96.66	97.06	2	6,6-Diphenylfulvene	91.82	91.73	92.56	3	Naphthalene, 2-styryl-	91.56	91.43	92.74	4		91.28	91.27	91.32	5	6,6-Diphenylfulvene	88.00	87.30	94.37
#	一致	スコア	HQI	R.H.																												
1	o-Terphenyl	96.70	96.66	97.06																												
2	6,6-Diphenylfulvene	91.82	91.73	92.56																												
3	Naphthalene, 2-styryl-	91.56	91.43	92.74																												
4		91.28	91.27	91.32																												
5	6,6-Diphenylfulvene	88.00	87.30	94.37																												
8	<p>スペクトルパネルを右クリックします。</p> <p>「ズームアウト」を選択してください。</p>	 <ul style="list-style-type: none"> ズームを戻す(Z) 規定値で表示する Ctrl+1 全範囲を表示する(W) Ctrl+0 選択モード(S) Ctrl+L X-軸ズームモード(H) Ctrl+R ボックスズームモード(B) • スペクトル移動モード(P) Ctrl+M コピー(C) 表示設定(E)... 																														

<p>10 スペクトルパネルをクリックし、マウスでドラッグして、10.5分から12分の領域にズームインします。</p> <p>内部標準バーをクリックしてピーク領域を選択します（ドラッグ&ドロップ）。</p> <p>「次へ>」ボタンをクリックします。</p>	
<p>9 次のウィンドウで、キャリブレーションの設定を行います。</p> <p>目標単位：ug/ml（手動で入力してください）</p> <p>計算方法：ピーク面積</p> <p>「次へ>」ボタンをクリックします。</p>	

10 ポップアップウィンドウに、濃度と比率の値を入力します。

内部基準物の濃度 : 62 ug/ml

キャリブレーションファイルの濃度 [ug/ml]

NA_Cal D 1.60

NA_Cal C 7.99

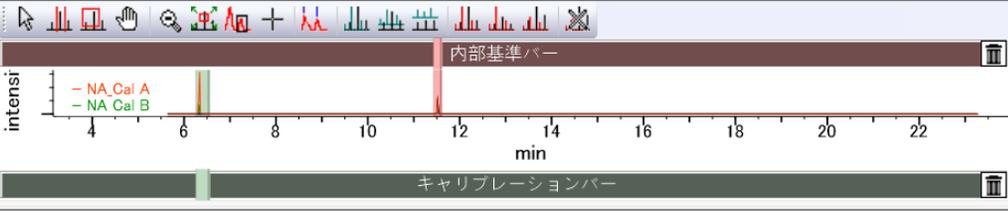
NA_Cal B 40.0

NA_Cal A 200

Finish (完了) ボタンをクリックします。

キャリブレーションの設定

ステップ6:すべてのスペクトルの濃度値を入力します。セルをダブルクリックして編集を開始するか数値を選択して入力します。

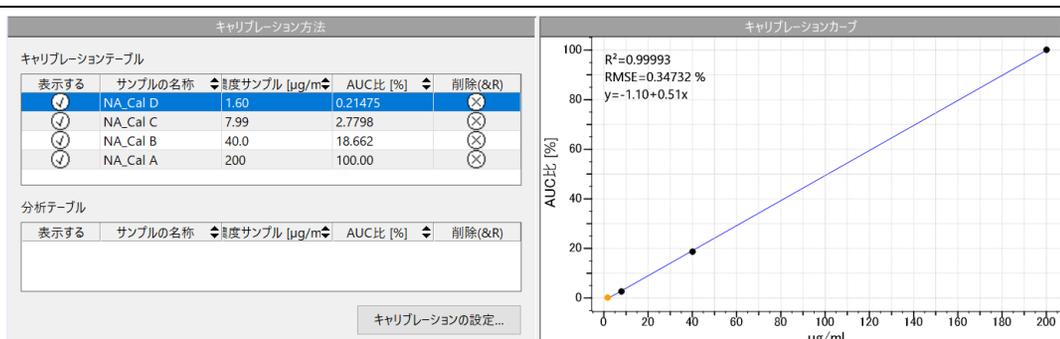


内部標準濃度は一定です。 濃度 ug/ml

サンプルの名称	濃度サンプル [ug/ml]
NA_Cal D	1.60
NA_Cal C	7.99
NA_Cal B	40.0
NA_Cal A	200

前へ(B) キャンセル

11



キャリブレーション曲線の統計データが報告されます。**RMSE (平均二乗誤差)** が低ければ低いほど、曲線の適合度が高いです。**R² (決定係数)** が1に近ければ近いほど、曲線の適合度が高いです。

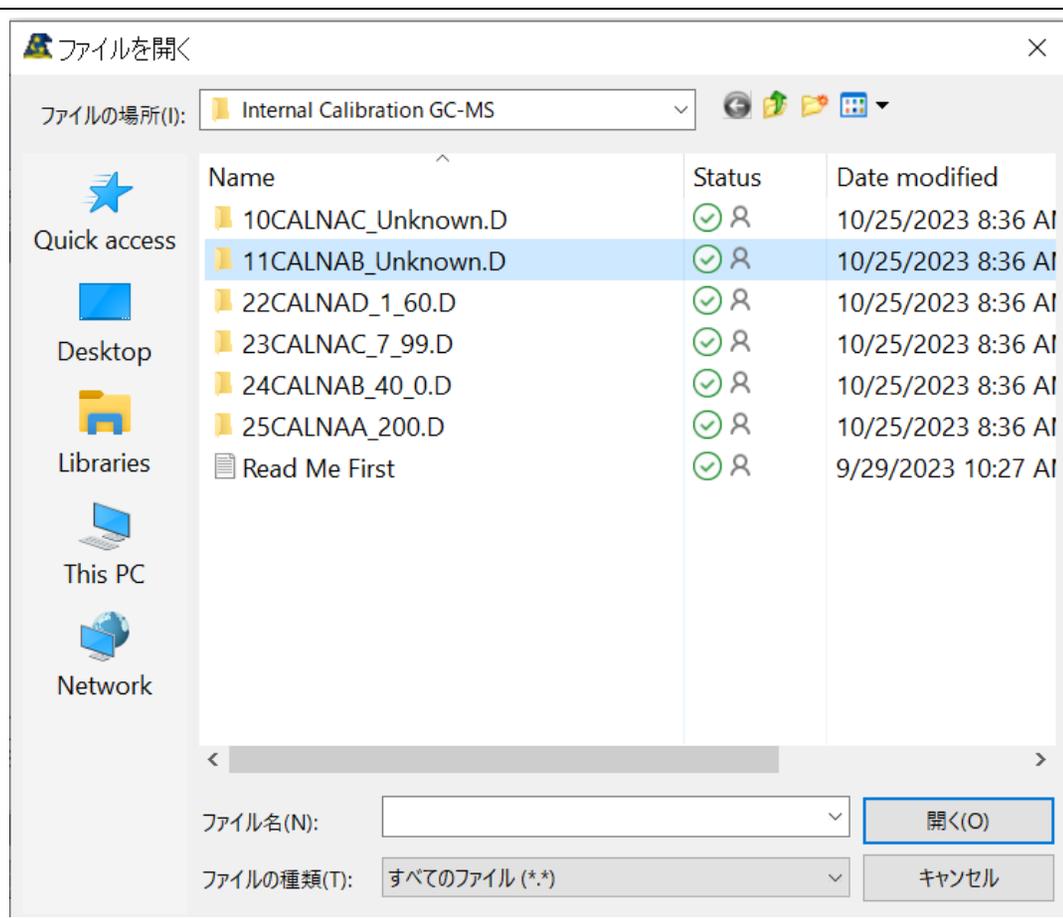
「**Remove (削除)**」セルを使用することで、キャリブレーションからサンプルを除外することができます。また、「**Add Spectrum (スペクトルを追加)**」を使用して新しいキャリブレーションを追加することもできます。

キャリブレーション設定ボタンをクリックすると、パラメータをリセットすることができます。また、**キャリブレーションの保存**ボタンをクリックすることで、このキャリブレーションを将来の使用や共有のために保存することができます。

12 分析ファイルのインポートボタンをクリックします。

未知のファイルフォルダーである
11_CLANAB_Unknown.Dを選択して、濃度を計算します。

「Open」をクリックします。



13

キャリブレーション方法

キャリブレーションテーブル

表示する	サンプルの名称	濃度サンプル [µg/ml]	AUC比 [%]	削除(&R)
<input checked="" type="checkbox"/>	NA_Cal D	1.60	0.21475	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	NA_Cal C	7.99	2.7798	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	NA_Cal B	40.0	18.662	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	NA_Cal A	200	100.00	<input type="checkbox"/>

分析テーブル

表示する	サンプルの名称	濃度サンプル [µg/ml]	AUC比 [%]	削除(&R)
<input checked="" type="checkbox"/>	NA_Cal B	35.160	20.031	<input type="checkbox"/>

キャリブレーションの設定...

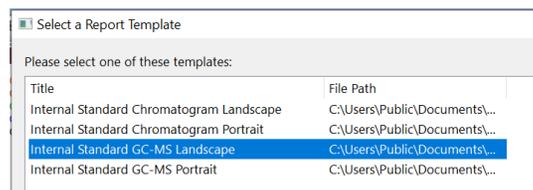
キャリブレーションカーブ

$R^2=0.99993$
 $RMSE=0.34732\%$
 $y=-1.10+0.51x$

分析物と内部基準物の濃度比は、分析物テーブルとキャリブレーション曲線上の四角形のスポットとして表示されます。

14 「**Transfer to: Report** (レポートに転送する)」をクリックします。

The **Internal Standard GC-MS Landscape** (内部基準 GC-MS ランドスケープ) テンプレートを選択してください。



OK をクリックします。

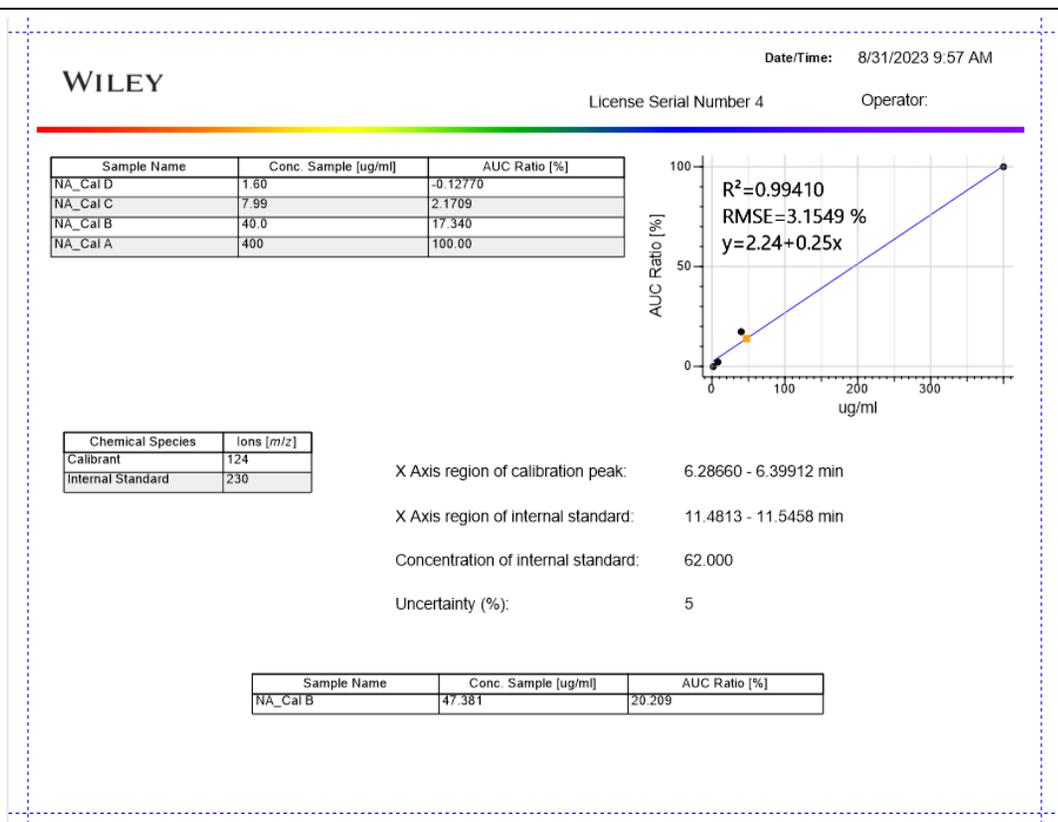
注記: テンプレートを初めて使用する場合、ReportIt アプリケーションにデータを転送する前に以下の手順を行う必要があります:

[ファイル] > [レポートテンプレートの編集] をクリックします。

[追加] ボタンをクリックします

テンプレートファイルの場所に移動します

Open (開きます)



これは基本的なレポートであり、これらのオブジェクトを選択して他のアプリケーションにコピー&ペーストすることができます。