

# 2つのGC-MSデータの差分比較から不純物を同定する

フィルジェン株式会社 バイオインフォマティクス部  
(biosupport@filgen.jp)

GC-Analyzer V4.0.2 R17A

File Edit PreProcessing Settings Alignment Peak Picking Differential Analysis Analyze Identification RT Indexing Target Library Search Plots FID Processing Specials Options Help

Load Sample (+)  
Quick Settings Time Settings  
Load Target/Reference (-)  
Align Sample/Target  
Run Peak Picking  
Differential Analysis  
Clustering/Deconvolution  
Run Full Analysis  
Run Identification

Smooth S/N Threshold   
Table Sorting:  m/z  Time  Area/Height  Ratio  
Deconv. Plot Type:  MS + EIC  EIC Only  
 Normalize Ion Traces  
 Mask Differential Ions Only  
 Add Flow MS

Scan  TIC

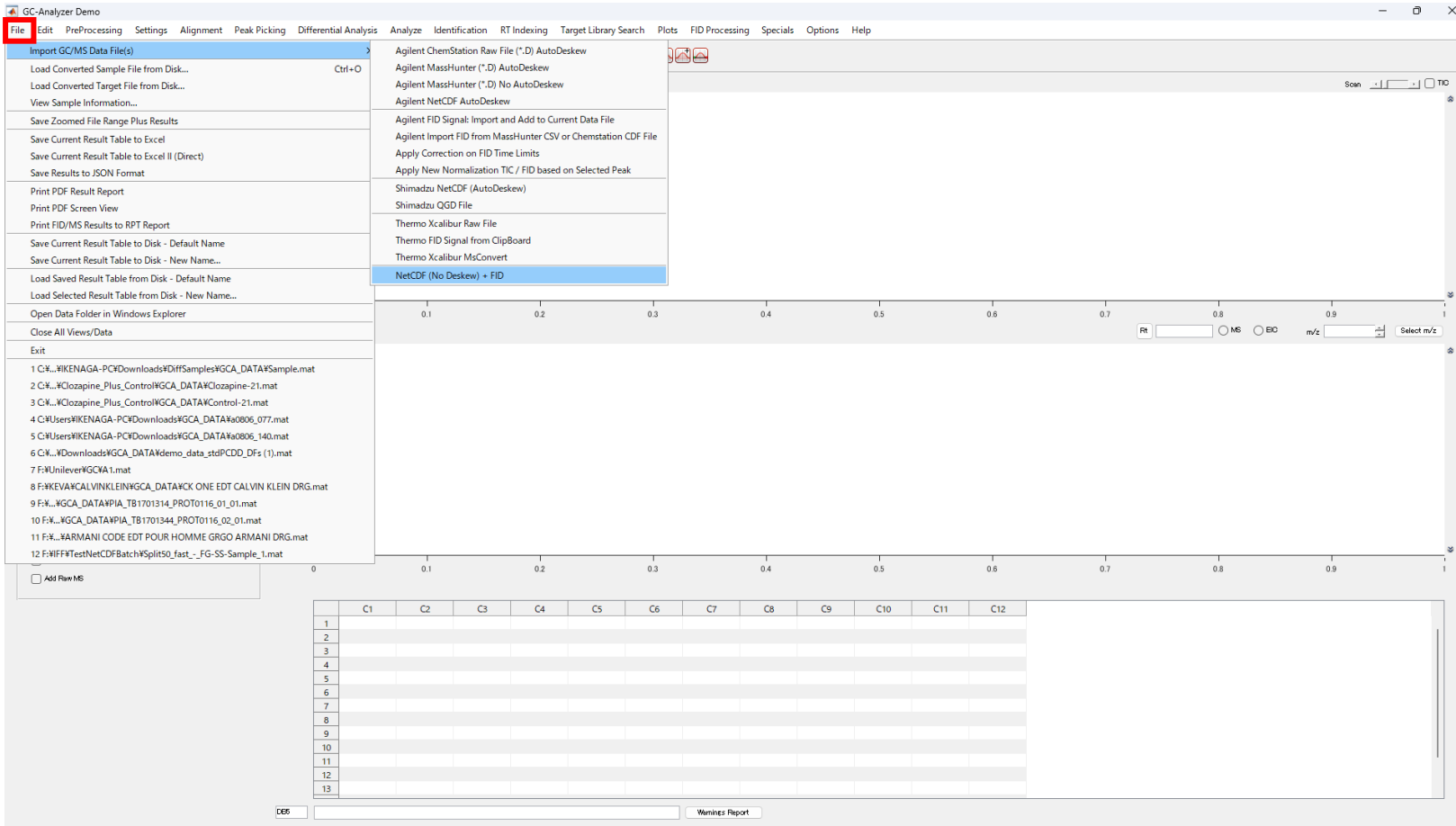
Rt   MS  EIC m/z  Select m/z

Time (min.)

1														
2														
3														
4														
5														
6														
7														
8														
9														
10														
11														
12														
13														

DE6 Warnings Report

**基本的なコマンドはすべて画面左側に並べられており、  
これらを順に実行することで2つのGC-MSデータの差分比較を実行することができます。**



## インポート可能なフォーマット

### Agilent

- \*.D (ChemStation, MassHunter)
- \*.cdf

### Shimadzu

- \*.qgd
- \*.cdf

### Thermo

- \*.raw

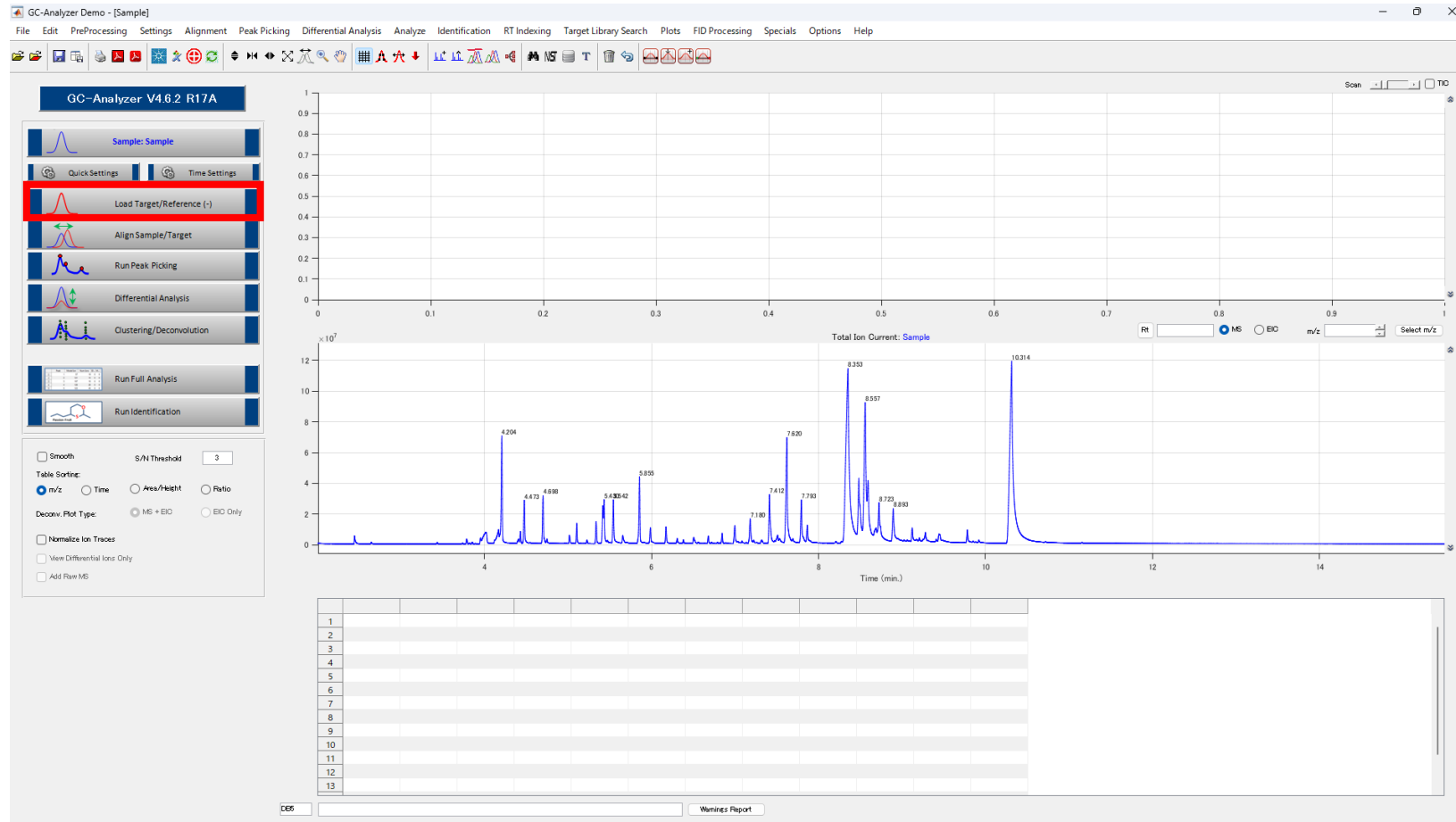
File > Import GC/MS Data File(s)からデータをインポートします。  
データが.matという形式に変換され、元のフォルダに保存されます。

# データのロード (サンプル)

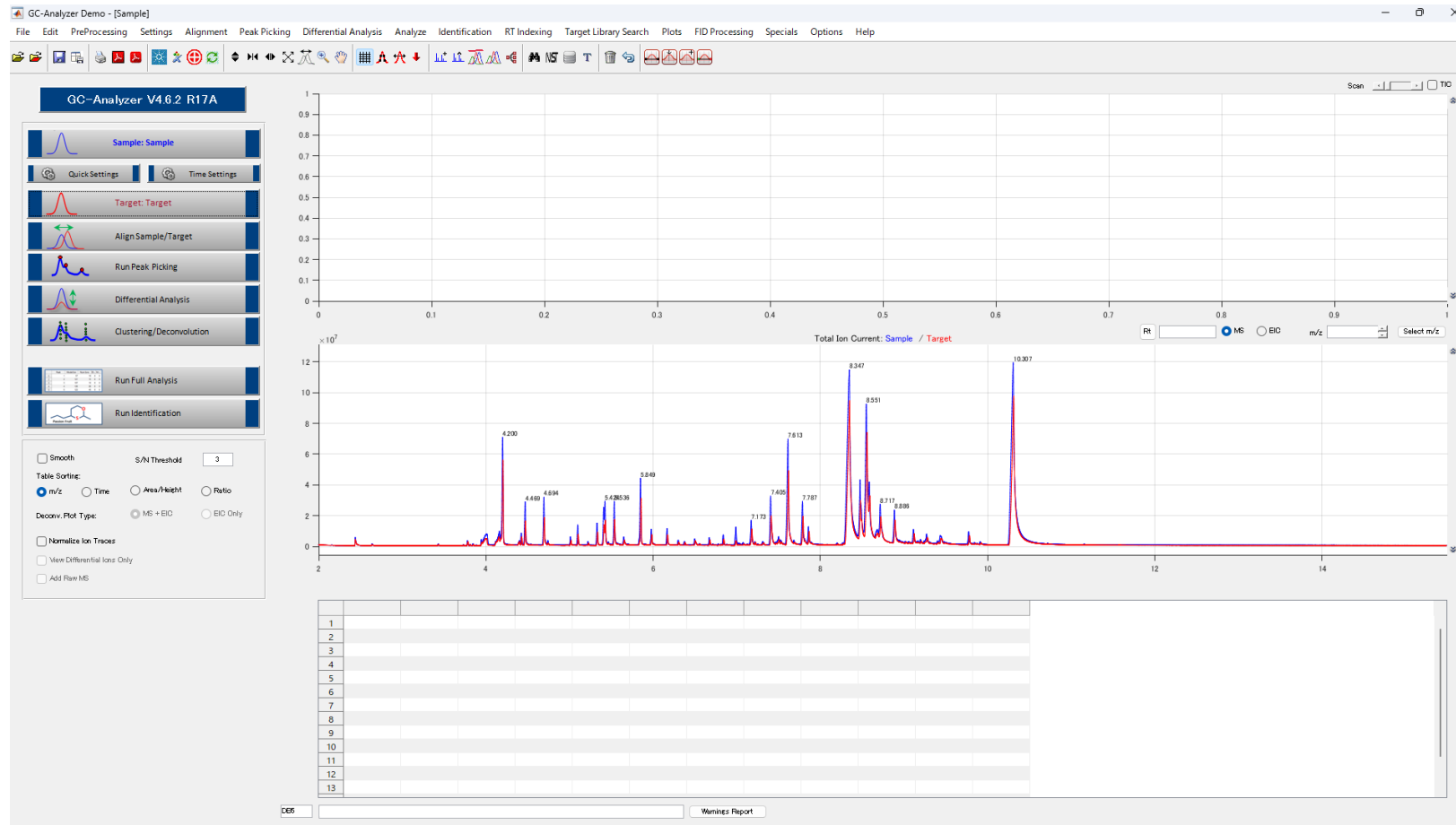
The screenshot shows the GC-Analyzer V4.0.2 R17A software interface. The 'Load Sample (+)' button in the left sidebar is highlighted with a red box. The interface includes a menu bar (File, Edit, PreProcessing, Settings, Alignment, Peak Picking, Differential Analysis, Analyze, Identification, RT Indexing, Target Library Search, Plots, FID Processing, Specials, Options, Help) and a toolbar. The main area contains two plots: a Chromatogram (top) and a Mass Spectrum (bottom). The Chromatogram plot shows a flat baseline with no peaks. The Mass Spectrum plot shows a flat baseline with no peaks. The x-axis for both plots is labeled 'Time (min.)' and ranges from 0 to 1. The y-axis for the Chromatogram ranges from 0 to 1. The y-axis for the Mass Spectrum ranges from 0 to 12, with a multiplier of  $\times 10^7$ . Below the plots is a data table with 13 rows and several columns. The table is currently empty. At the bottom of the interface, there is a 'Warnings Report' button.

“Load Sample”をクリックし、.mat形式のデータをロードします。

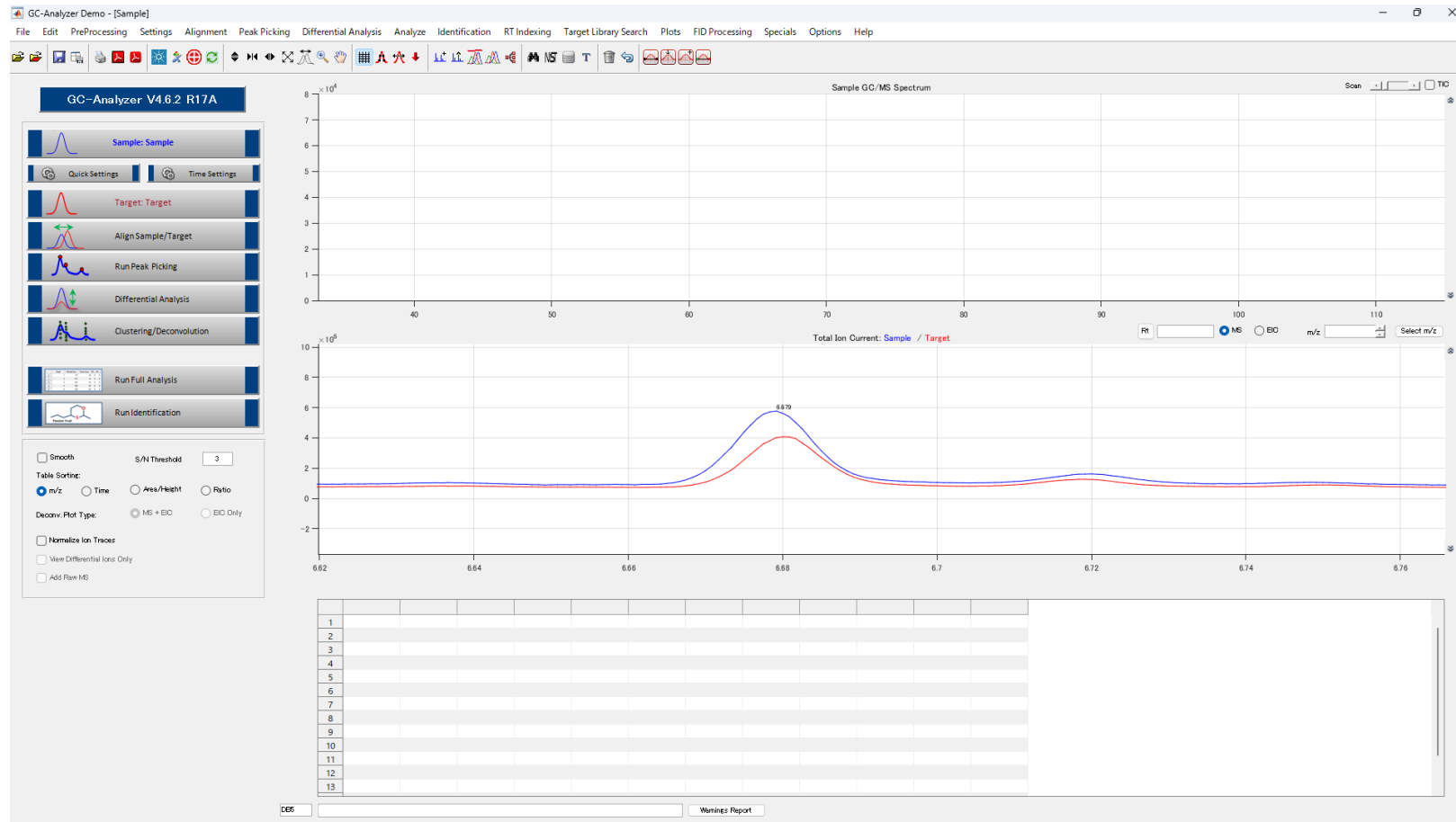
# データのロード (リファレンス)



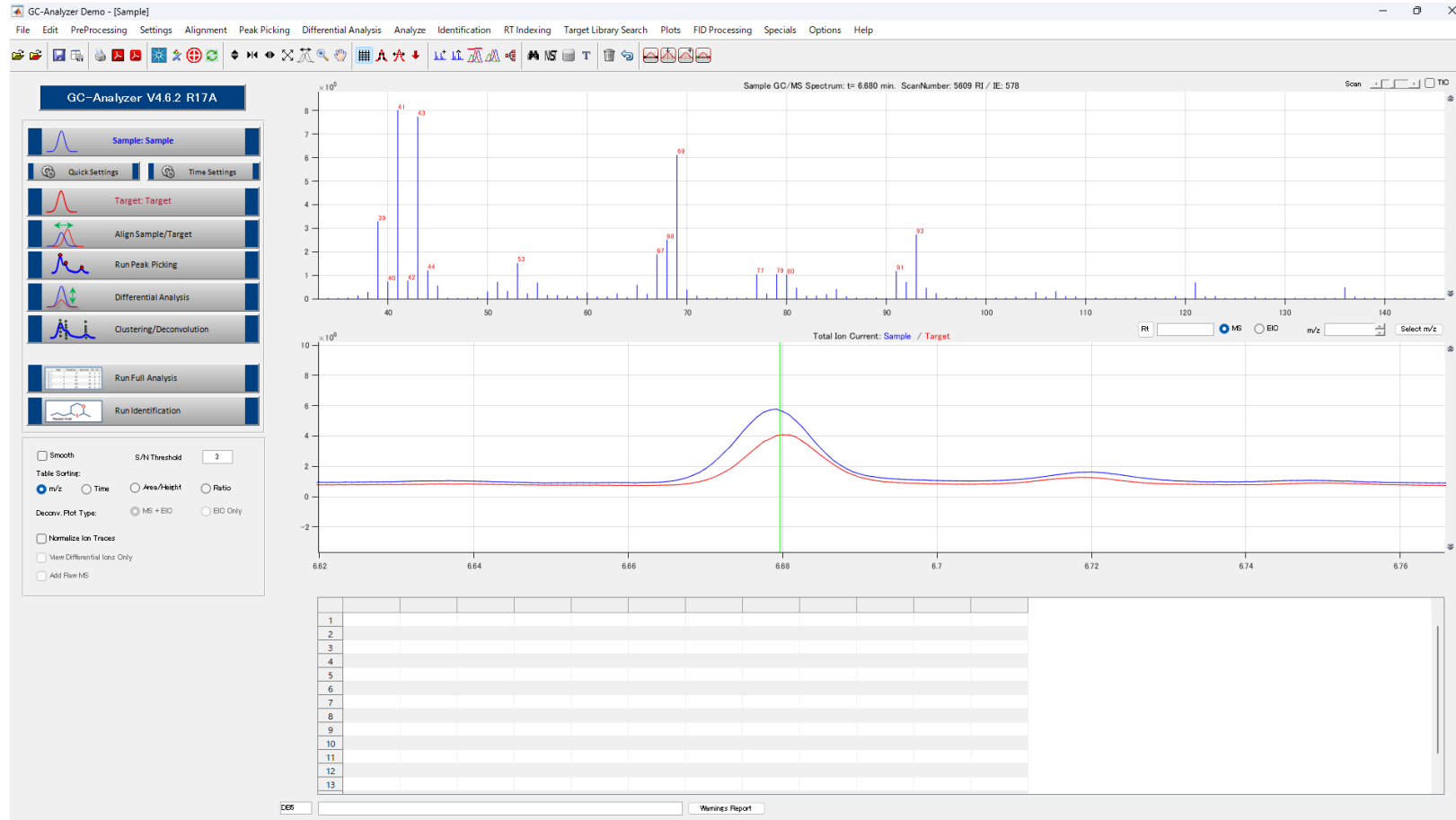
“Load Targer/Reference”をクリックし、  
.mat形式のコントロールデータをロードします。



下のプロットエリアにSample（青）およびReference（赤）のTICが表示されます。

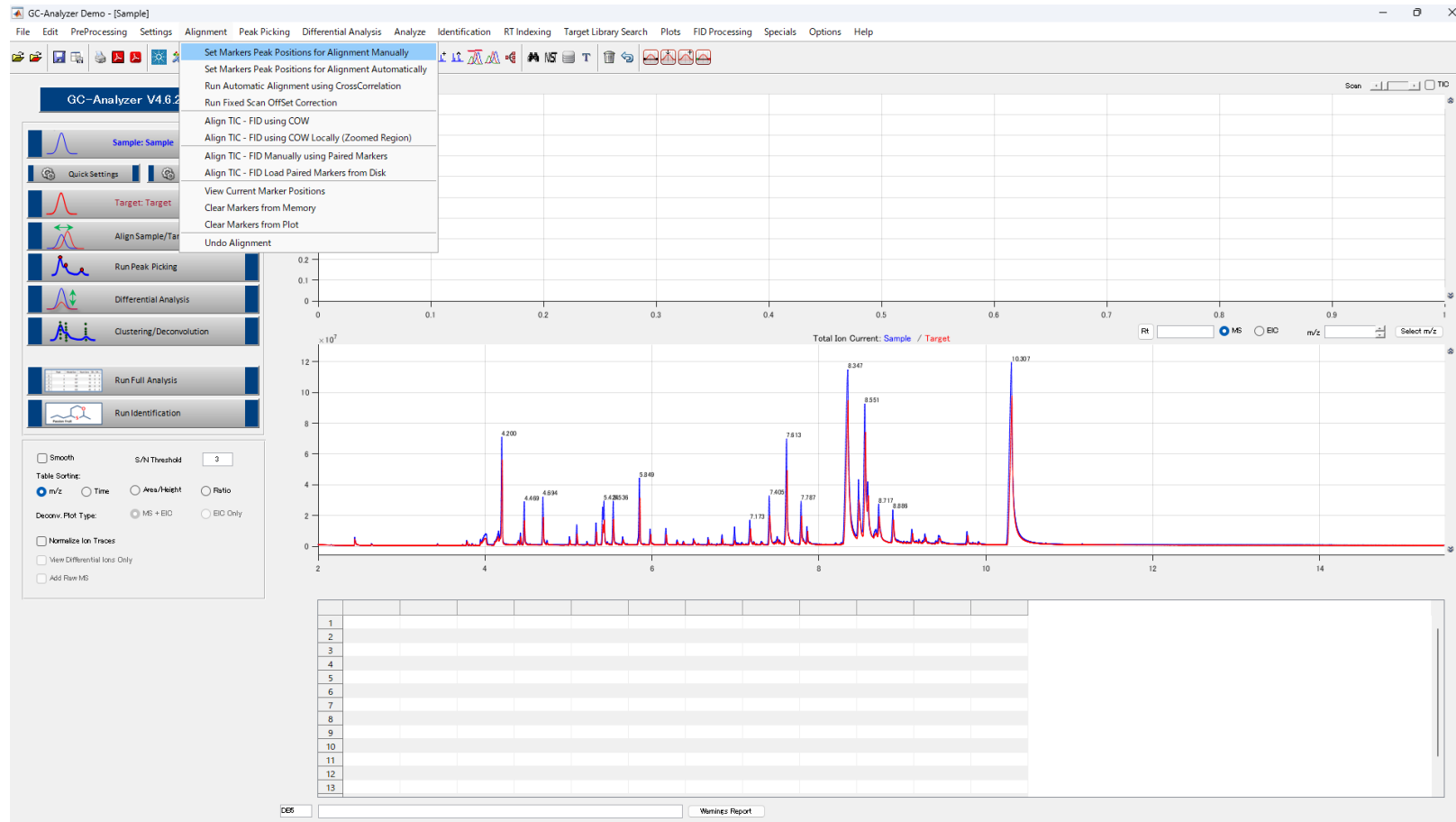


下のプロットエリアの一部をドラッグして領域を指定することで、その部分が拡大表示されます。



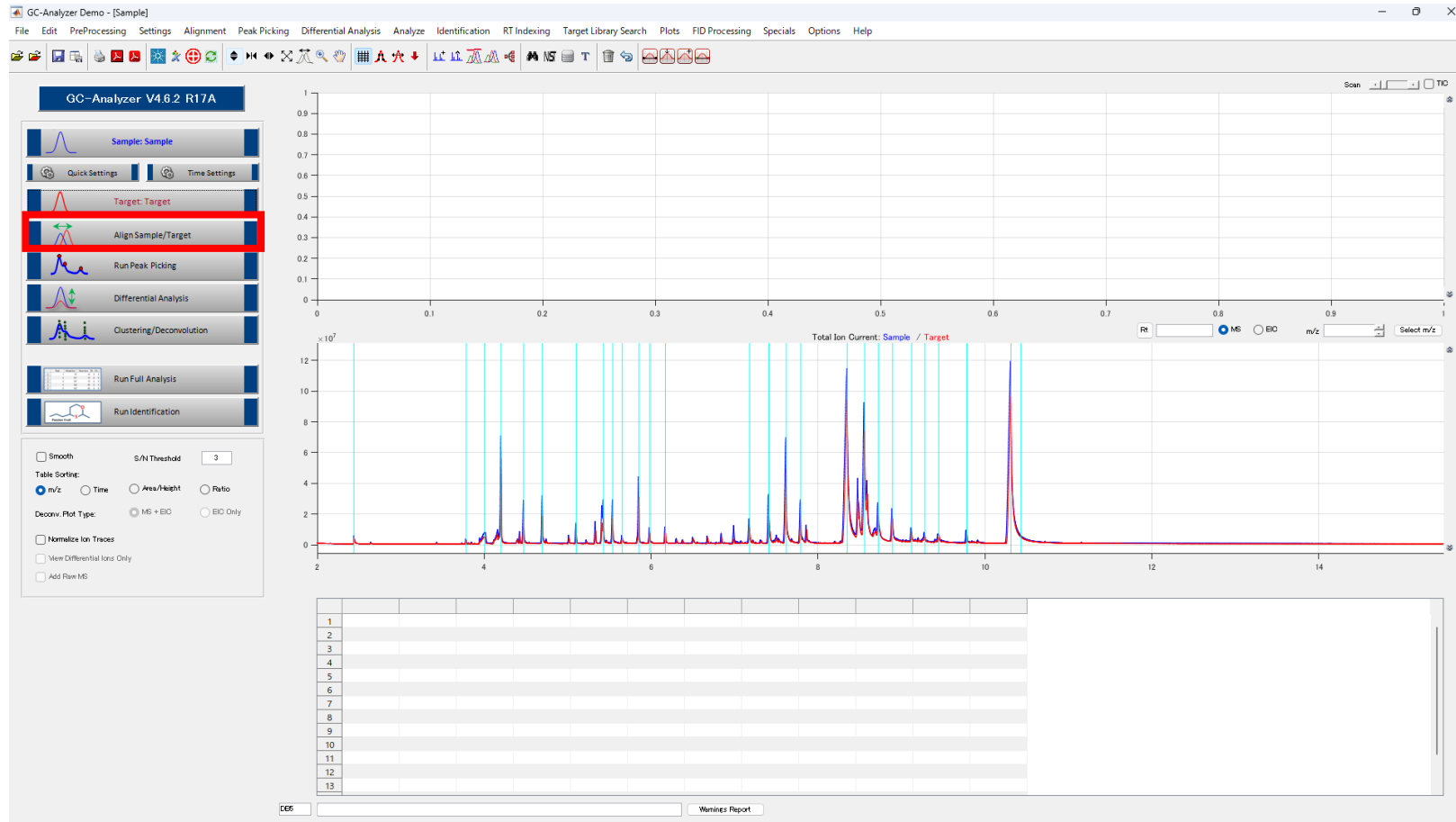
下のプロットエリアをクリックし、保持時間を指定（緑のライン）することで、その保持時間でのマススペクトルが上のプロットエリアに表示されます。



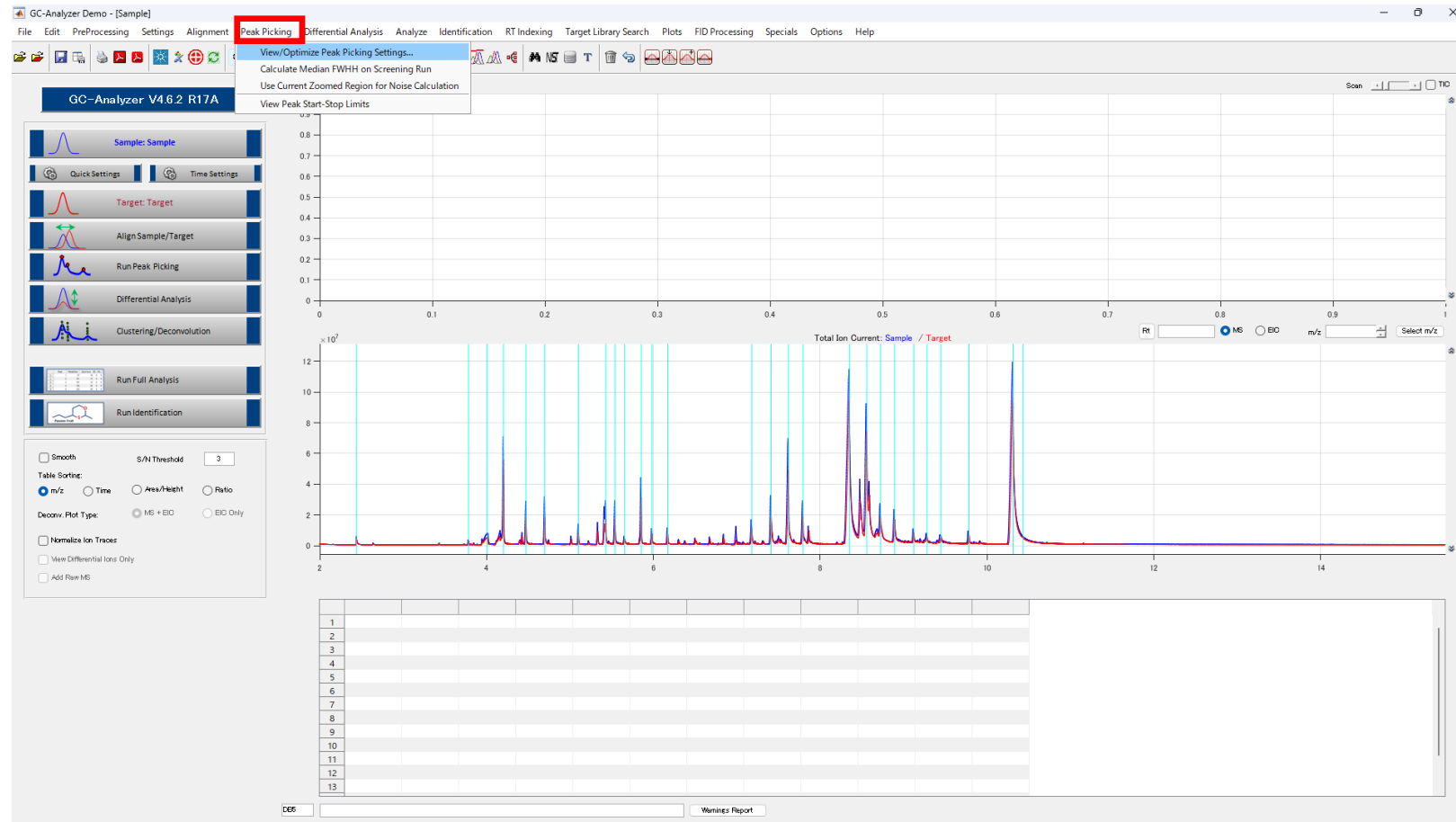


2つのデータのアライメントを行います。  
Alignment > Set Markers Peak Positions for Alignment Manually/Automatically  
でアライメントの基準となるピークを手動もしくは自動で指定します。

# クロマトグラムのアライメント



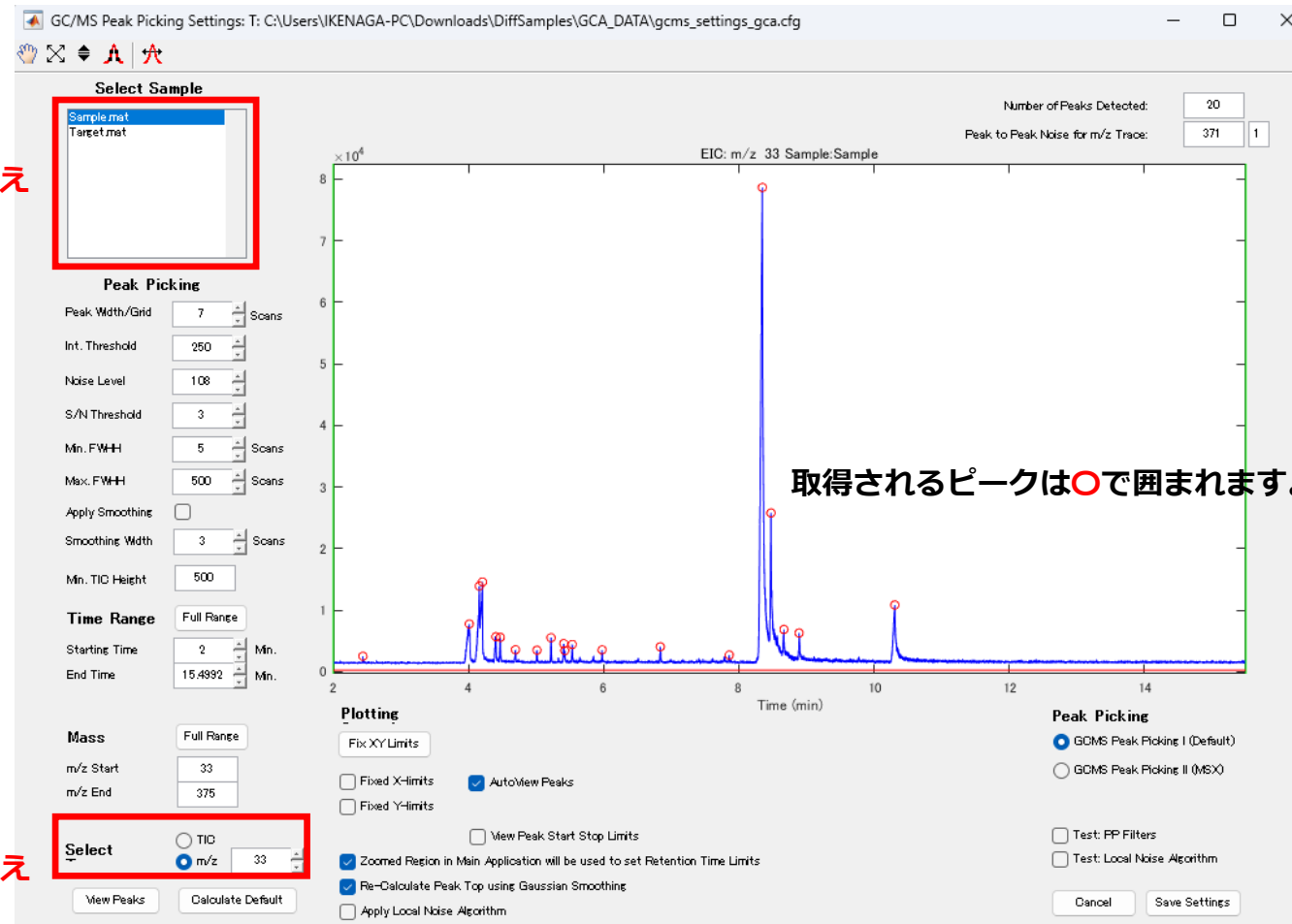
基準となるピークは、下のプロットエリアで水色のラインで示されます。  
Align Sample/Targetをクリックし、アライメントを実行します。



**Peak Picking > View/Optimize Peak Picking Settingsから、  
ピーク取得のアルゴリズムの最適化を行います。**

# ピーク取得アルゴリズムの最適化

Sample/Targetの切り替え

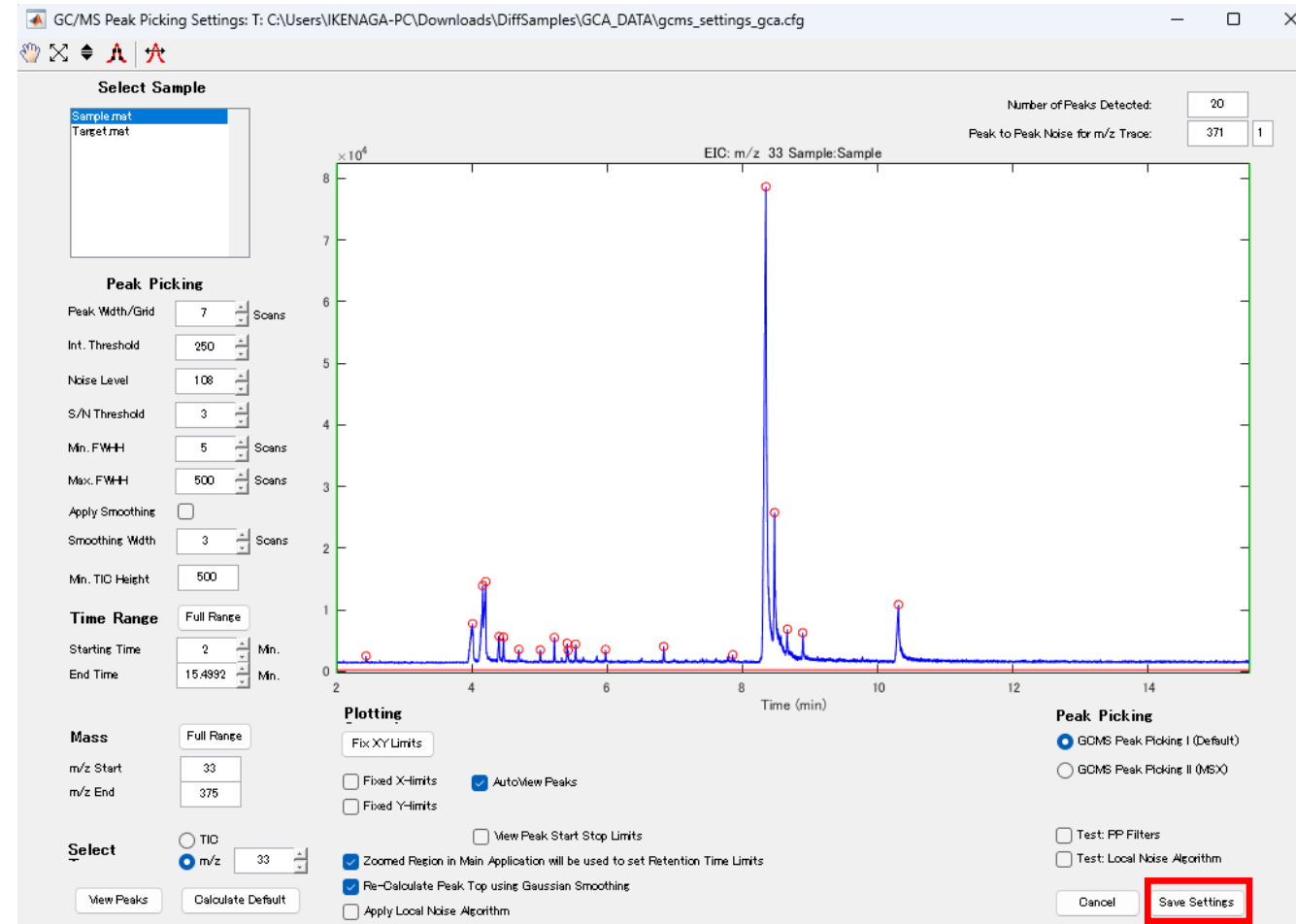


取得されるピークは○で囲まれます。

TICおよび各m/zの  
クロマトグラム間の切り替え

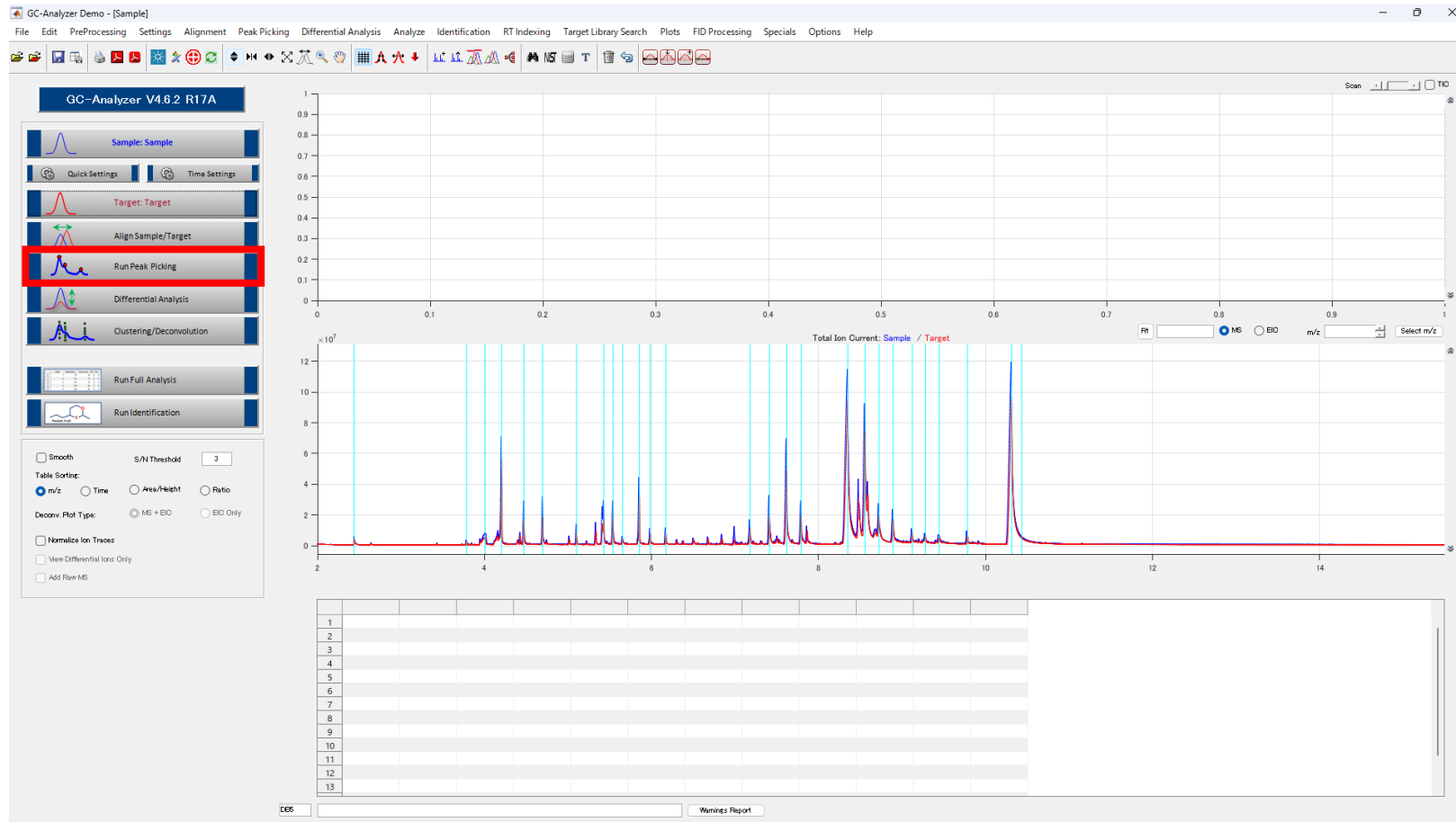
クロマトグラムを見ながら、パラメータを調整し、  
ピーク取得のアルゴリズムを最適化します。

# ピーク取得アルゴリズムの最適化



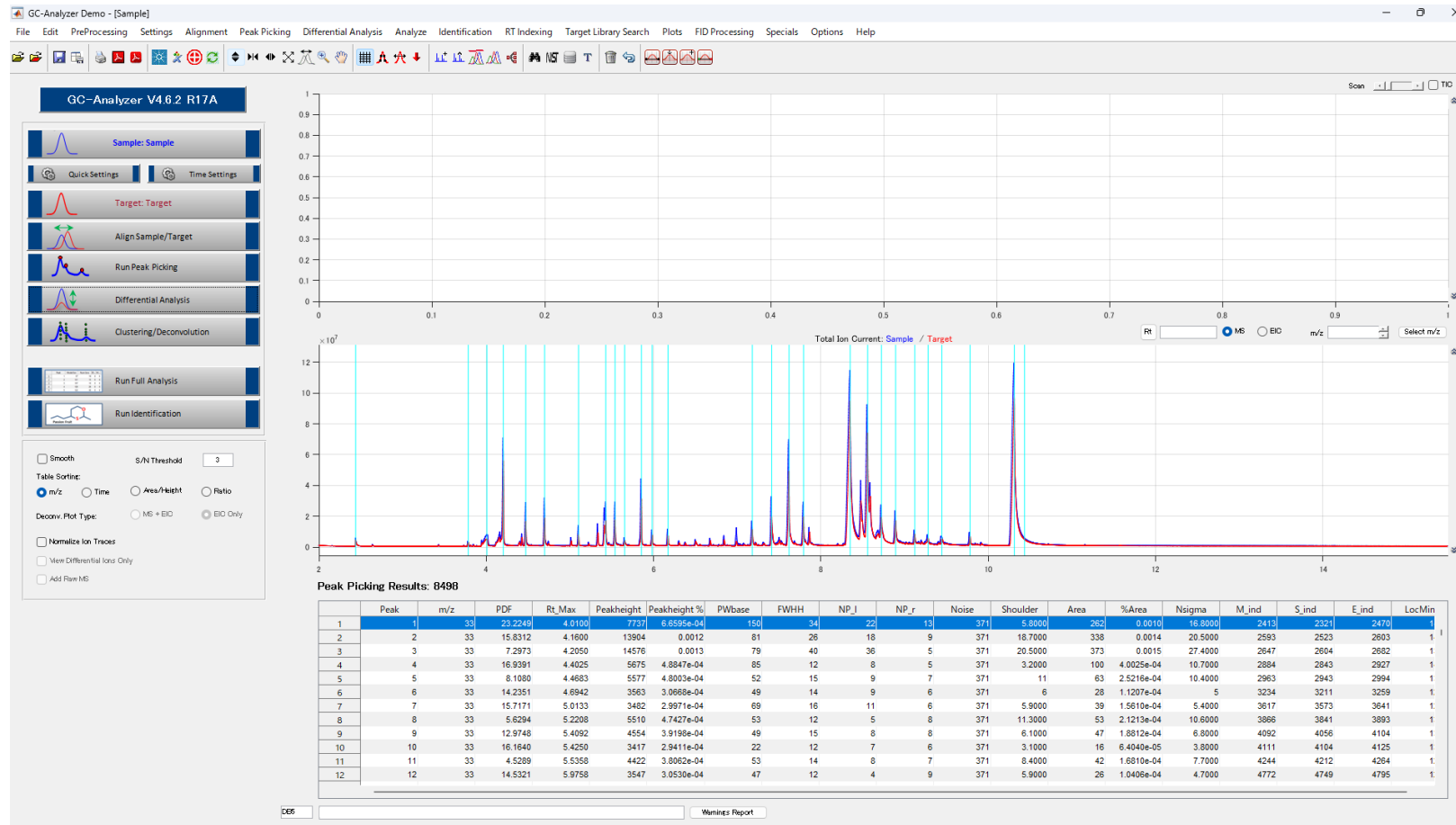
パラメータの調整が終了した後、“Save Settings”をクリックし、パラメータを保存します。

# ピーク取得の実行

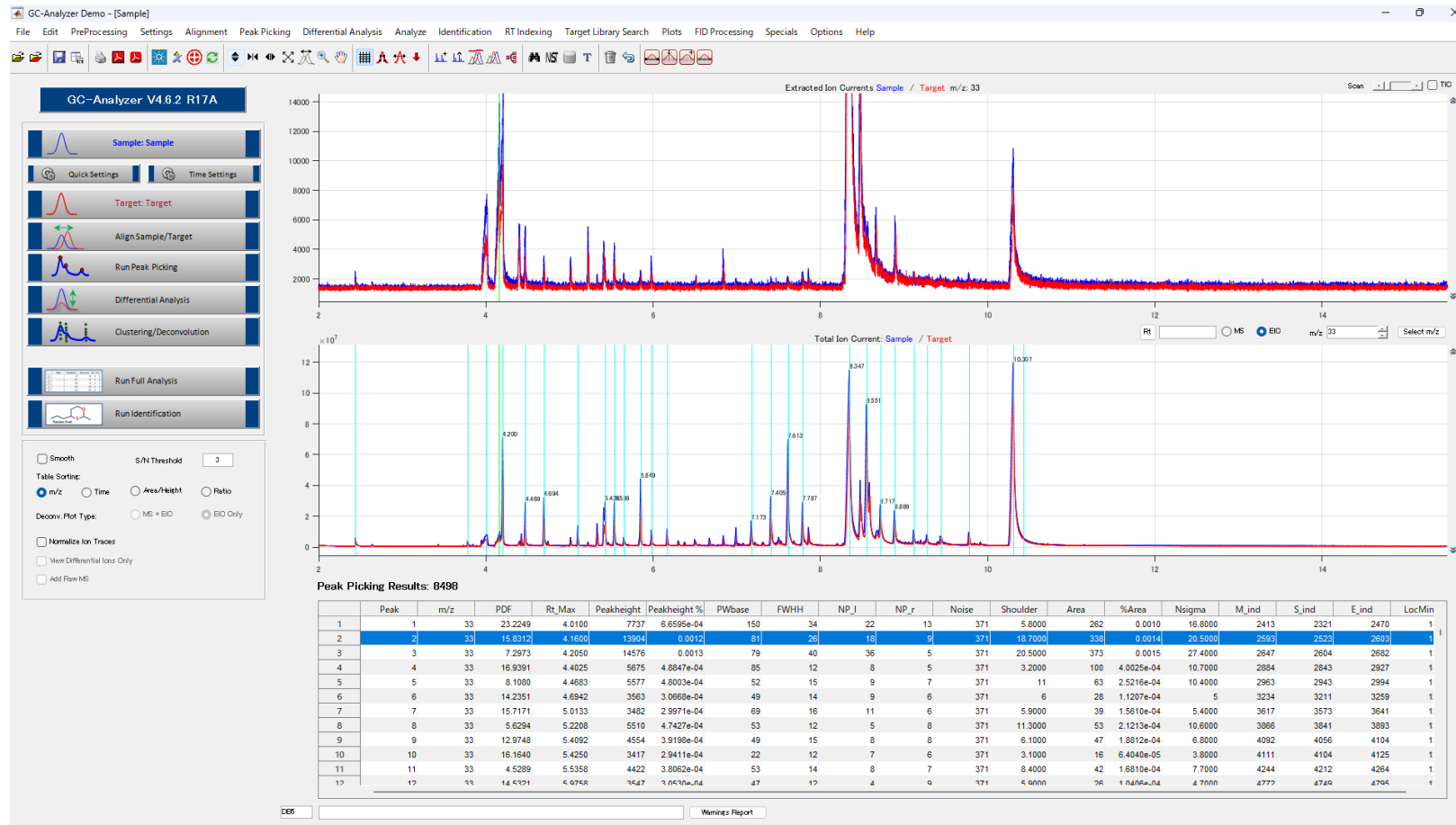


“Peak Picking”をクリックし、ピークの取得を実行します。

# ピーク取得結果



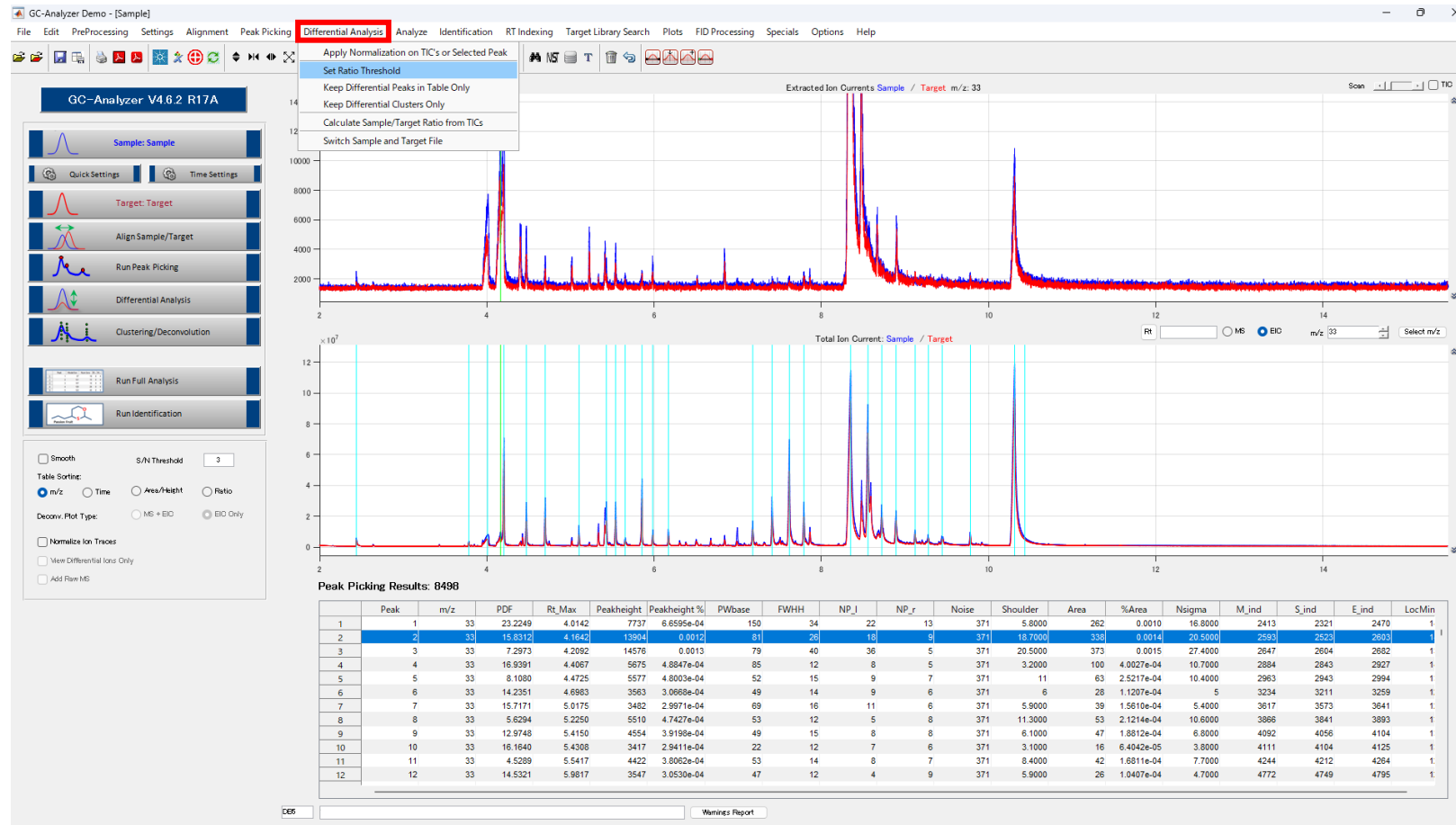
取得されたピークの一覧が下にテーブル形式で表示されます。



表中の任意の行をクリックすると、そのピークのm/zに関するクロマトグラムが上のプロットエリアに表示されます。また保持時間は緑色のラインとして、両方のプロットエリアに表示されます。

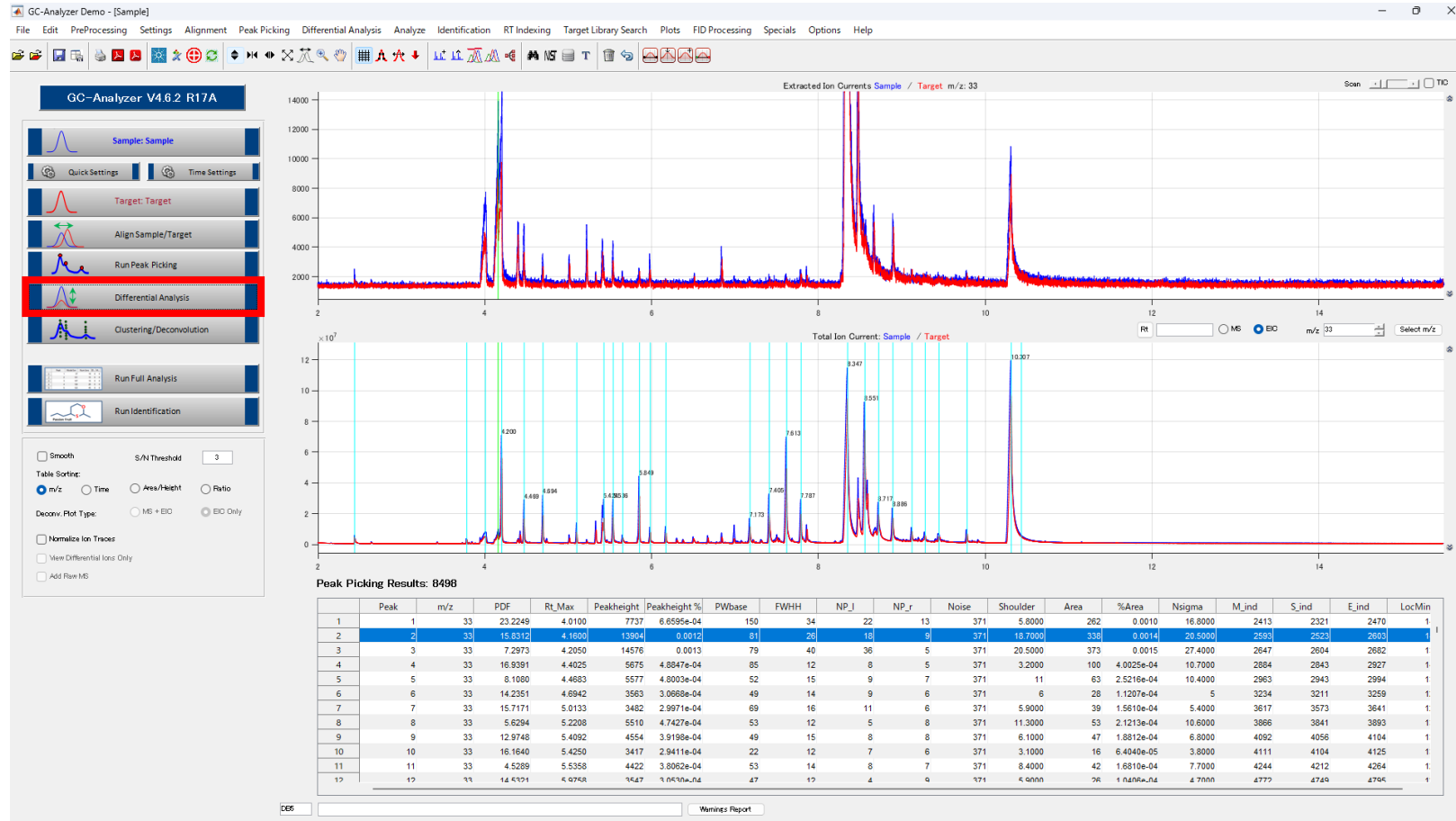


# 差分比較のしきい値の指定



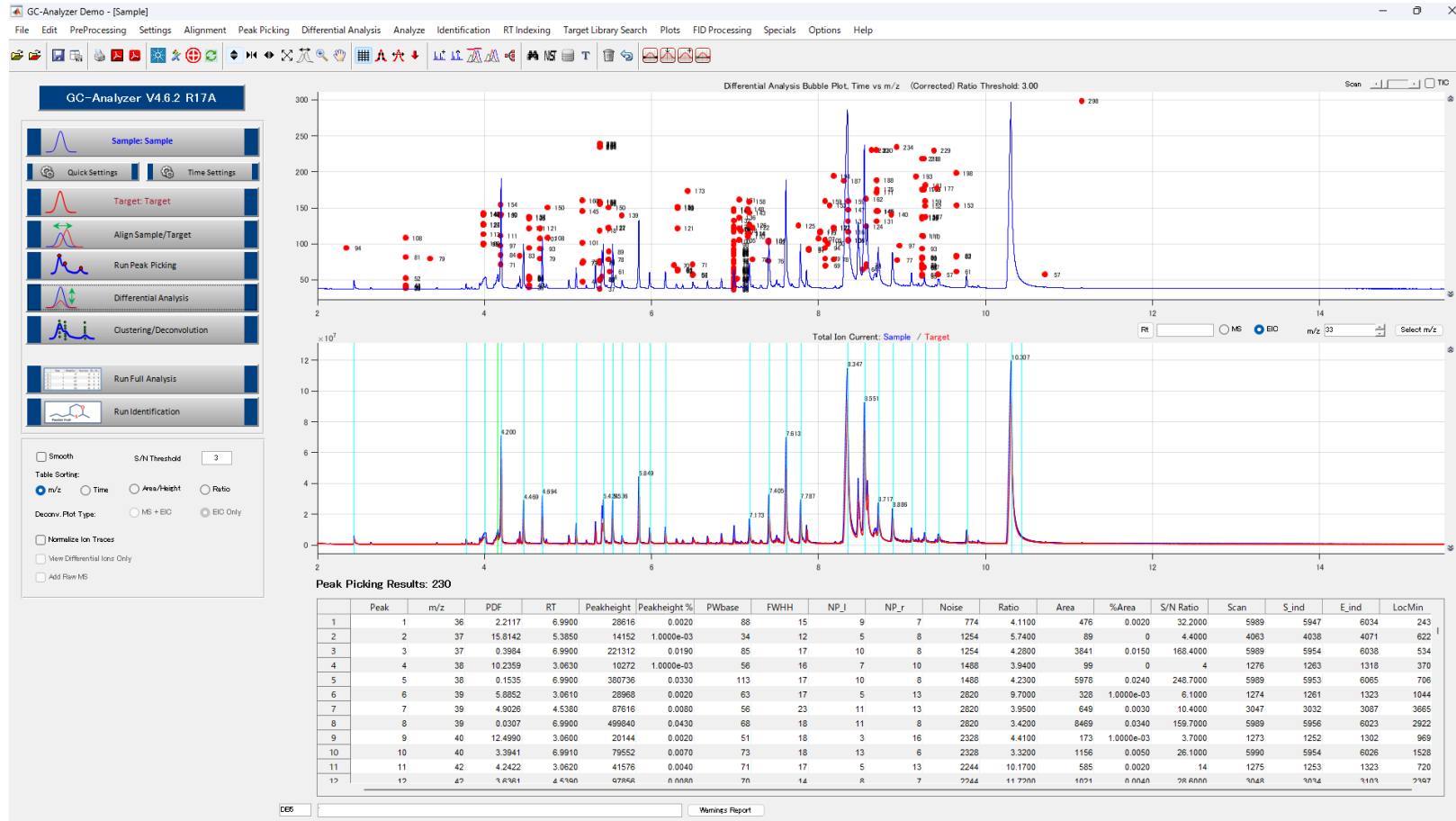
Differential Analysis > Set Ratio Thresholdから、差分比較のしきい値を指定します。  
サンプル間の強度比がしきい値以上のピークが検出されます。

# 差分比較の実行



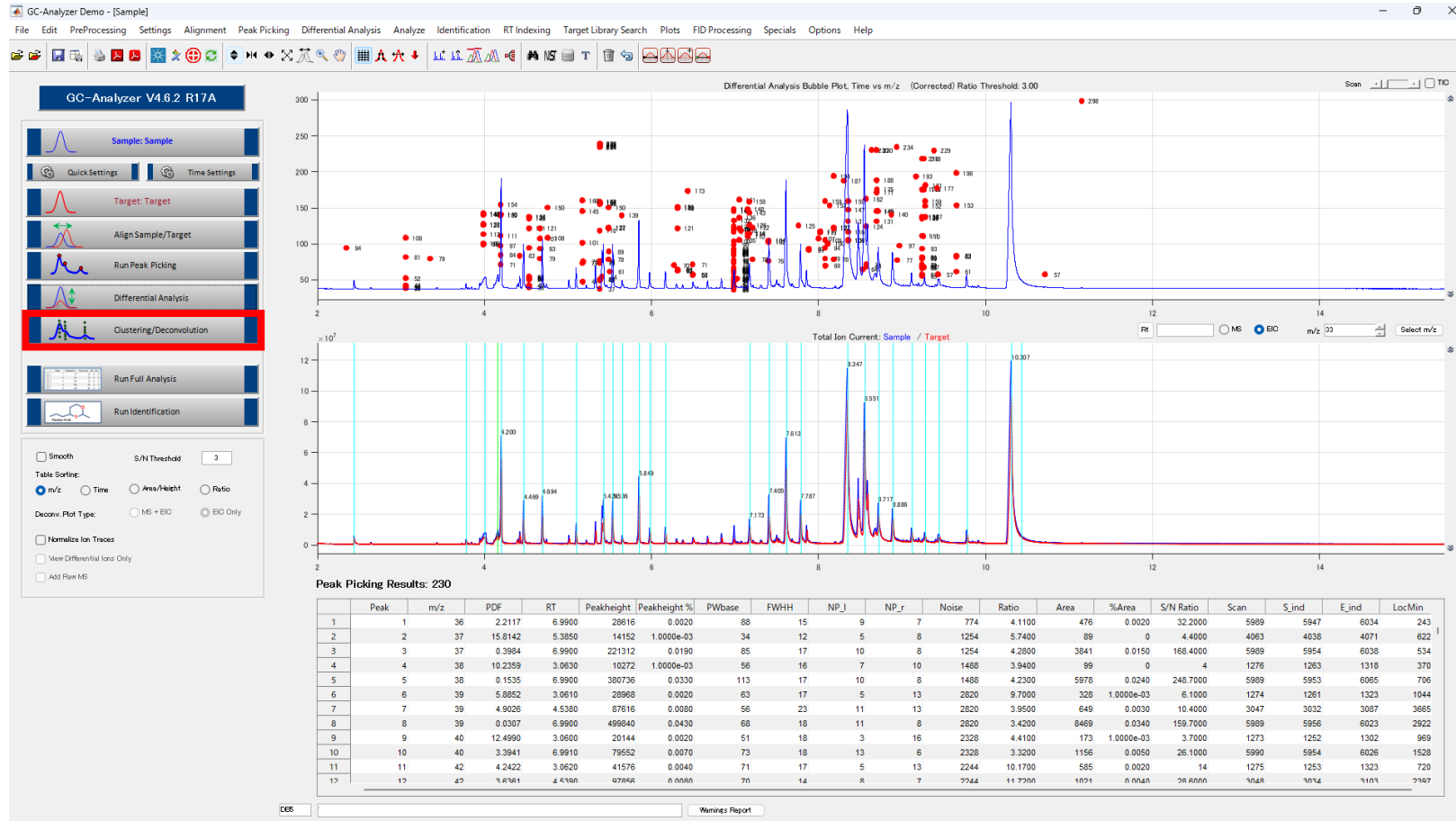
“Differential Analysis”をクリックし、差分比較を実行します。

# 差分比較結果



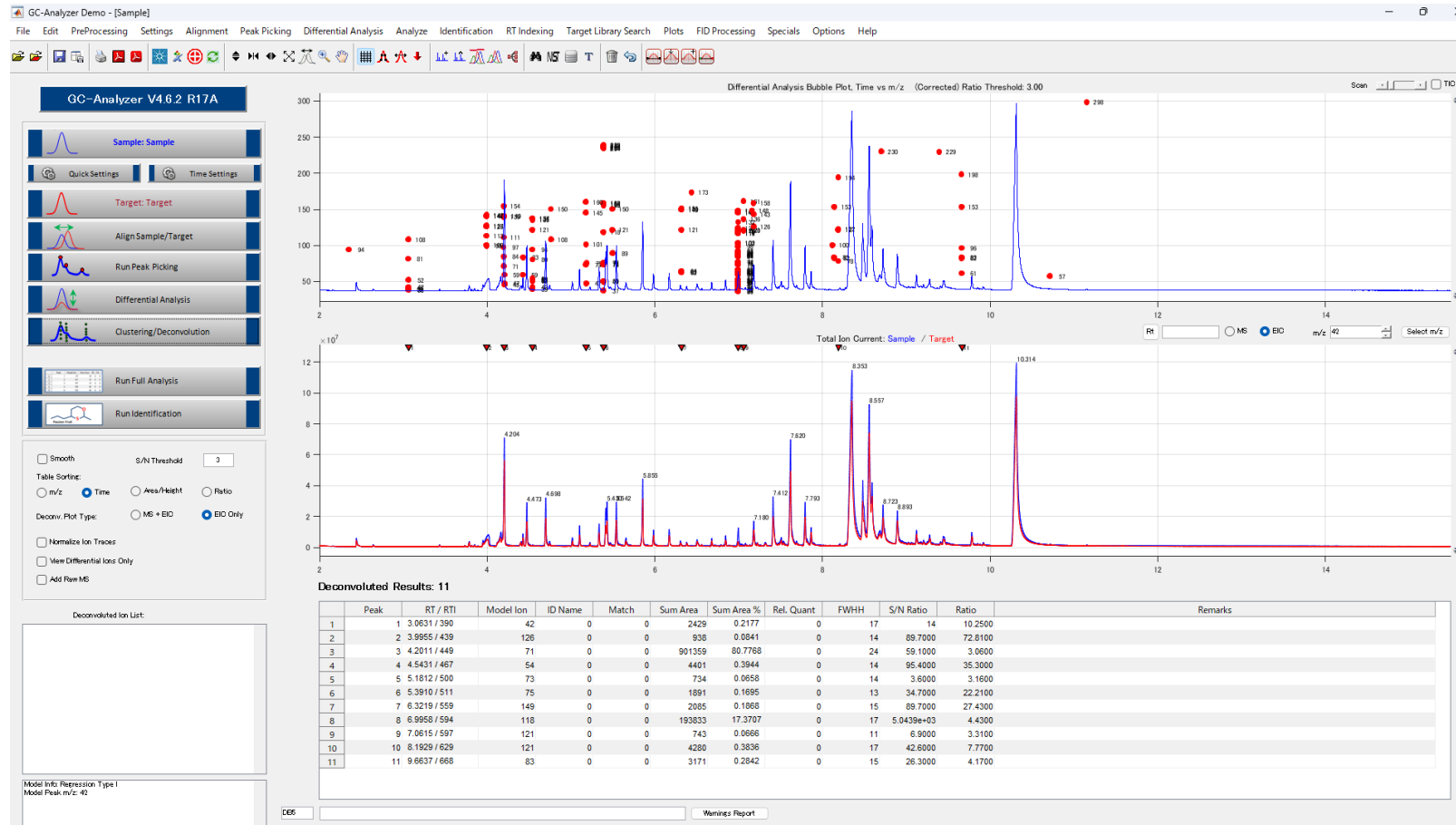
下の表が更新され、サンプル間で差のあるピークが抽出されます。  
また、抽出されたピークについては上のプロットエリアで赤いドットで表示されます。  
ドットの横軸方向の位置は保持時間に、縦軸方向の位置はm/zに対応しています。

# デコンボリューションの実行



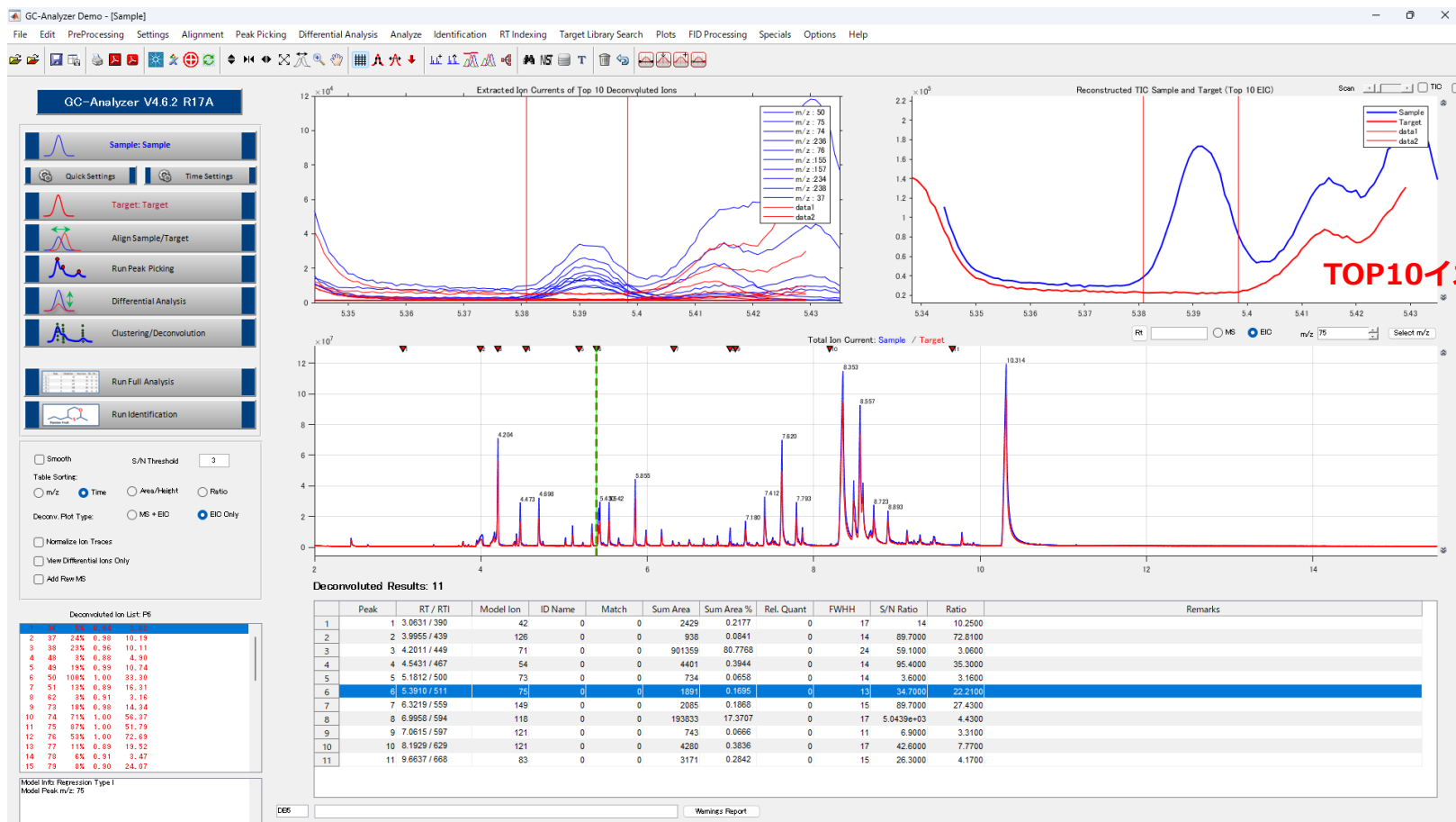
Clustering/Deconvolutionをクリックし、  
デコンボリューションおよびスペクトルの再構築を行います。

# デコンボリューション結果

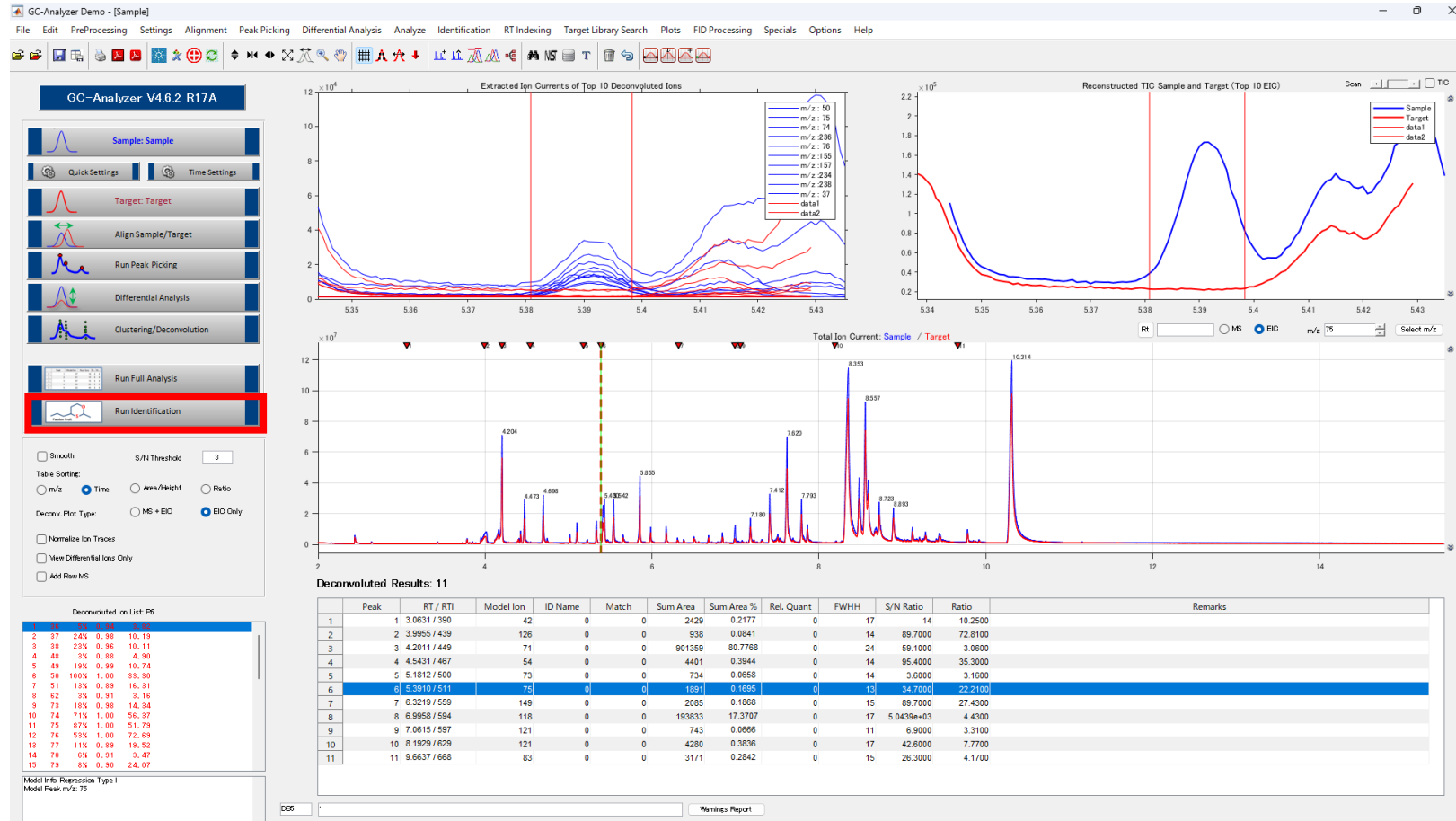


デコンボリューションの結果、同一のプリカーサーに由来すると推定されるピークはまとめられ、表中に記載されます。

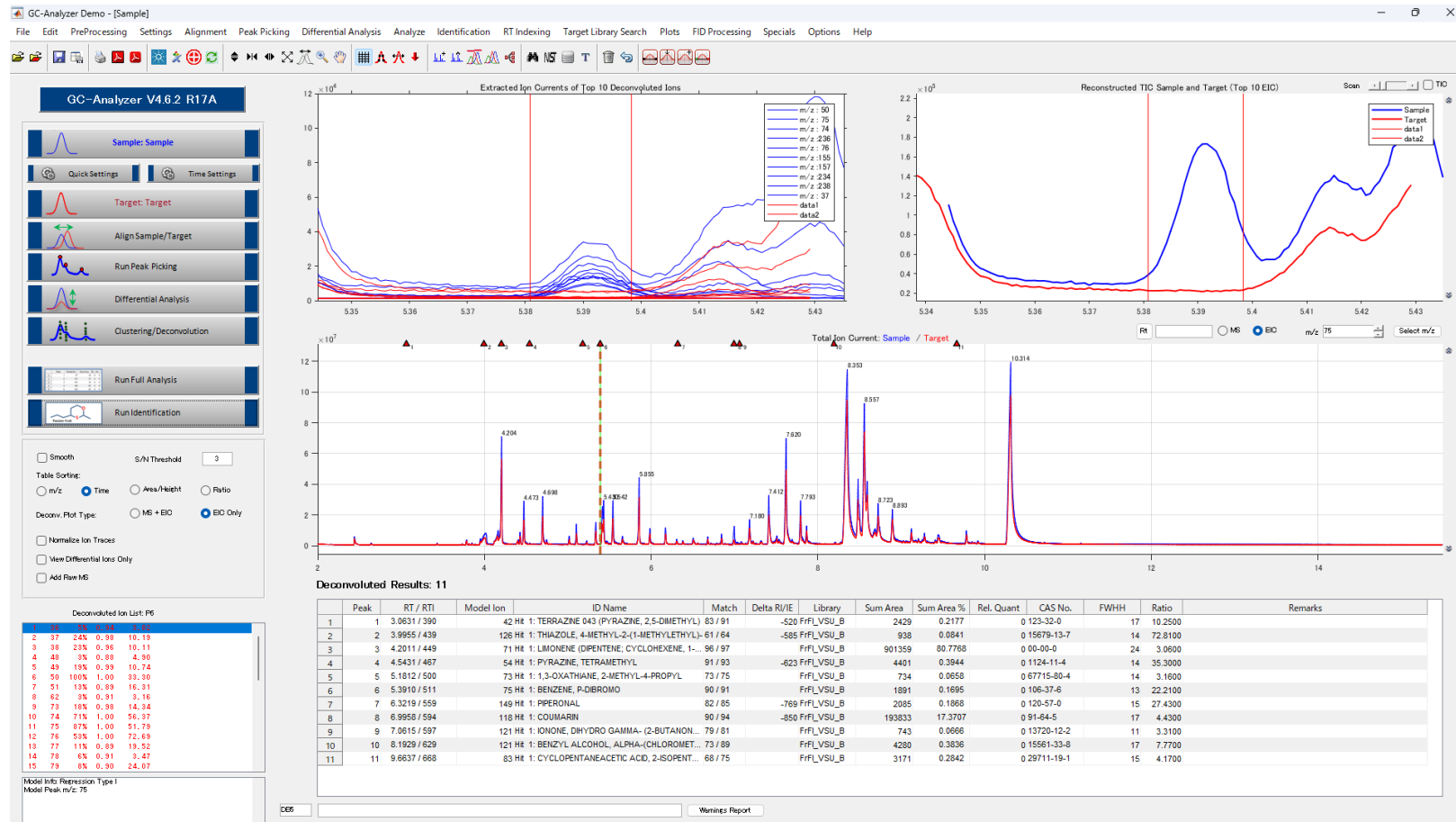
# デコンボリューション結果の確認



表中の任意の行をクリックし、キーボードの「d」を押すと、その保持時間において発現強度が高い順に10個のイオンのEICが、Sample (青) とTarget (赤) のそれぞれについて、上のプロットエリアに表示されます。



“Run Identification”をクリックし、  
デコンボリューションで得られたマススペクトルをライブラリと照合します。



表が更新され、照合結果が追加されます。



# 同定結果の確認

GC-Analyzer Demo - [Sample]

File Edit PreProcessing Settings Alignment Peak Picking Differential Analysis Analyze Identification RT Indexing Target Library Search Plots FID Processing Specials Options Help

GC-Analyzer V4.6.2 R17A

Sample: Sample

Quick Settings Time Settings

Target: Target

Align Sample/Target

Run Peak Picking

Differential Analysis

Clustering/Deconvolution

Run Full Analysis

Run Identification

Smooth S/N Threshold 3

Table Sort by: m/z Time Area/Height Ratio

Deconv. Plot Type: MS + EIC EIC Only

Normalize Ion Traces

View Differential Ions Only

Add Raw MS

Deconvoluted Ion List: P3

Scan	RT	Area	Height	Ratio
1	31	0%	0.36	1.53
2	34	0%	0.92	1.58
3	36	0%	0.94	1.20
4	37	2%	0.94	1.29
5	38	5%	0.94	1.31
6	39	68%	0.94	1.30
7	40	15%	0.94	1.28
8	41	46%	0.95	1.51
9	42	8%	0.98	1.51
10	43	8%	0.92	1.59
11	46	0%	0.76	1.66
12	49	0%	0.93	1.39
13	49	1%	0.94	1.42
14	50	7%	0.93	1.24
15	51	15%	0.93	1.25

Model Info: Regression Type 1  
Model Peak: m/z: 71

Extracted Ion Currents Sample / Target: m/z: 71

ID Overview

GCA ID Overview -- Peak Number: 3 Rt: 4.201 min. RI Measured: 449

To Substitute Current ID in Table for another Compound: Set CheckMark in first Column

Hit No.	Name	Formula	Match	RetInd	Delta R/IE	Spectrum	CAS No.	CID No.	MW	Librar
1	<input checked="" type="checkbox"/> HI 1: LIMONENE (PENTENE, CYCLOHEXENE, 1-MET...	C10H16	96 / 97				00-00-0		136	FILVLSUB
2	<input type="checkbox"/> HI 2: D-LIMONENE	C10H16	91 / 93				9889-27-5		136	FILVLSUB
3	<input type="checkbox"/> HI 3: DIPPENE	C10H16	90 / 92				13889-73-2		136	FILVLSUB
4	<input type="checkbox"/> HI 4: LIMONENE (PENTENE, CYCLOHEXENE, 1-MET...	C10H16	89 / 94				00-00-0		136	FILVLSUB
5	<input type="checkbox"/> HI 5: CYCLOHEXENE, 1-METHYL-6-O-METHYLENE...	C10H16	88 / 91	1029	-560		1461-97-4		136	FILVLSUB
6	<input type="checkbox"/> HI 6: LIMONENE	C10H16	87 / 94	1027	-578		138-86-3		136	FILVLSUB
7	<input type="checkbox"/> HI 7: CAMPHENE (BICYCLO[2.2.1]HEPTANE, 2,2-DIMET...	C10H16	85 / 87	952	-503		79-92-5		136	FILVLSUB
8	<input type="checkbox"/> HI 8: FENCHENE, ALPHA-INDROBORANE, 7,7-DIMETH...	C10H16	85 / 87	952	-503		471-84-1		136	FILVLSUB
9	<input type="checkbox"/> HI 9: 3-O-CYCLOHEXENE-1-CARBONITRILE, 1,4-DIMET...	C9H8N2	82 / 83				16695-92-4		150	FILVLSUB
10	<input type="checkbox"/> HI 10: 1-CYCLOHEXENE-1-CARBOXYALDEHYDE, 4-O...	C10H16O	82 / 83	1372	-623		2111-75-3		150	FILVLSUB
11	<input type="checkbox"/> HI 11: CAMPHENE	C10H16	82 / 86	953	-504		79-92-5		136	FILVLSUB

Set ID to Libzom Apply IE Filter New Structure: CAS Search: ChemSpider GoodScents PubChem

Set ID to Base Sort on Library Zoom On Zoom Off Copy Del

Set Name Manually Set to "Delete"

Viewing All Deconvoluted Ions

Apply Change

100  
50  
0  
-50  
-100

30 40 50 60 70 80 90 100 110 120 130 140

Scan: 2638 Rt: 4.201 Min. RI: 449 Mvwh Score: 96 IE: LIMONENE (PENTENE, CYCLOHEXENE, 1-METHYL-4-ISOPROPEN)

Side by Side Head to Tail Basched Difference Subtract

Scan	RT	Area	Height	Ratio	Remarks
7	6.3219 / 559	149	Hit 1: PIPERONAL	82 / 85	-769 FfLVSU_B 2085 0.1868 0.120-57.0 15 27.4300
8	6.9956 / 594	118	Hit 1: COUMARIN	90 / 94	-850 FfLVSU_B 193833 17.3707 0.91-64-5 17 4.4300
9	7.0615 / 597	121	Hit 1: IONONE, DIIYDRO GAMMA- (2-BUTANON...	79 / 81	FfLVSU_B 743 0.0968 0.13720-12-2 11 3.3100
10	8.1929 / 629	121	Hit 1: BENZYL ALCOHOL, ALPHA-(CHLOROMET...	73 / 89	FfLVSU_B 4280 0.3836 0.15561-33-8 17 7.7700
11	9.6637 / 668	83	Hit 1: CYCLOPENTANECETIC ACID, 2-ISOPENT...	68 / 75	FfLVSU_B 3171 0.2842 0.29711-19-1 15 4.1700

DE6

Winners Report

表中の任意の行をクリックすると、ライブラリのスペクトルとの比較ができます。

お問い合わせ先：フィルジエン株式会社

TEL: 052-624-4388 (9:00～17:00)

FAX: 052-624-4389

E-mail: [biosupport@filgen.jp](mailto:biosupport@filgen.jp)