

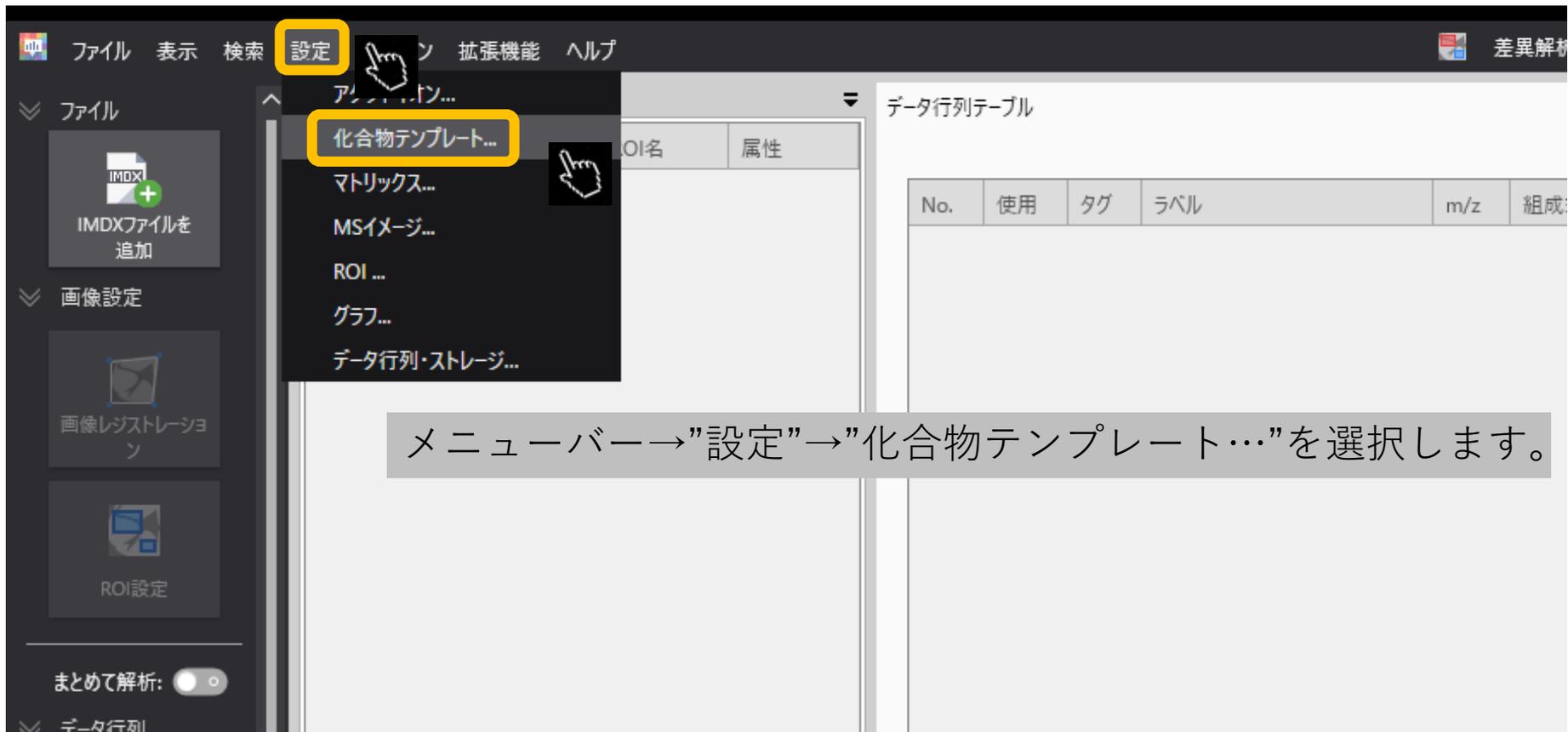
化合物テンプレート編集法

対象化合物が決まっている場合

化合物テンプレートとは

- IMAGEREVEAL MSでは“データ行列”を計算します。
- 対象化合物(ターゲット)が決まっている場合は”化合物テンプレート”にそのm/zや名前を記述しておき、“データ行列”計算の設定に使用します。
- “化合物テンプレート”はcsv (“,”で区切られたテキスト) です

化合物テンプレートの設定



The screenshot shows a software interface with a dark theme. The top menu bar includes 'ファイル', '表示', '検索', '設定', '拡張機能', and 'ヘルプ'. The '設定' menu is open, showing options like '化合物テンプレート...', 'マトリックス...', 'MSイメージ...', 'ROI ...', 'グラフ...', and 'データ行列・ストレージ...'. The '化合物テンプレート...' option is highlighted with a yellow box. A hand cursor is visible over the '設定' menu item and the '化合物テンプレート...' option. In the background, there is a table titled 'データ行列テーブル' with columns for 'No.', '使用', 'タグ', 'ラベル', 'm/z', and '組成'.

メニューバー→”設定”→”化合物テンプレート…”を選択します。

化合物テンプレートのエクスポート

化合物テンプレート設定

テンプレート名:

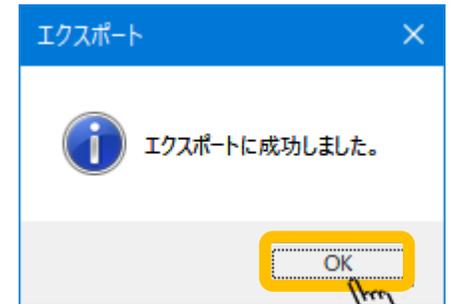
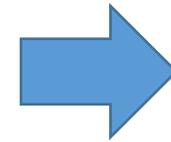
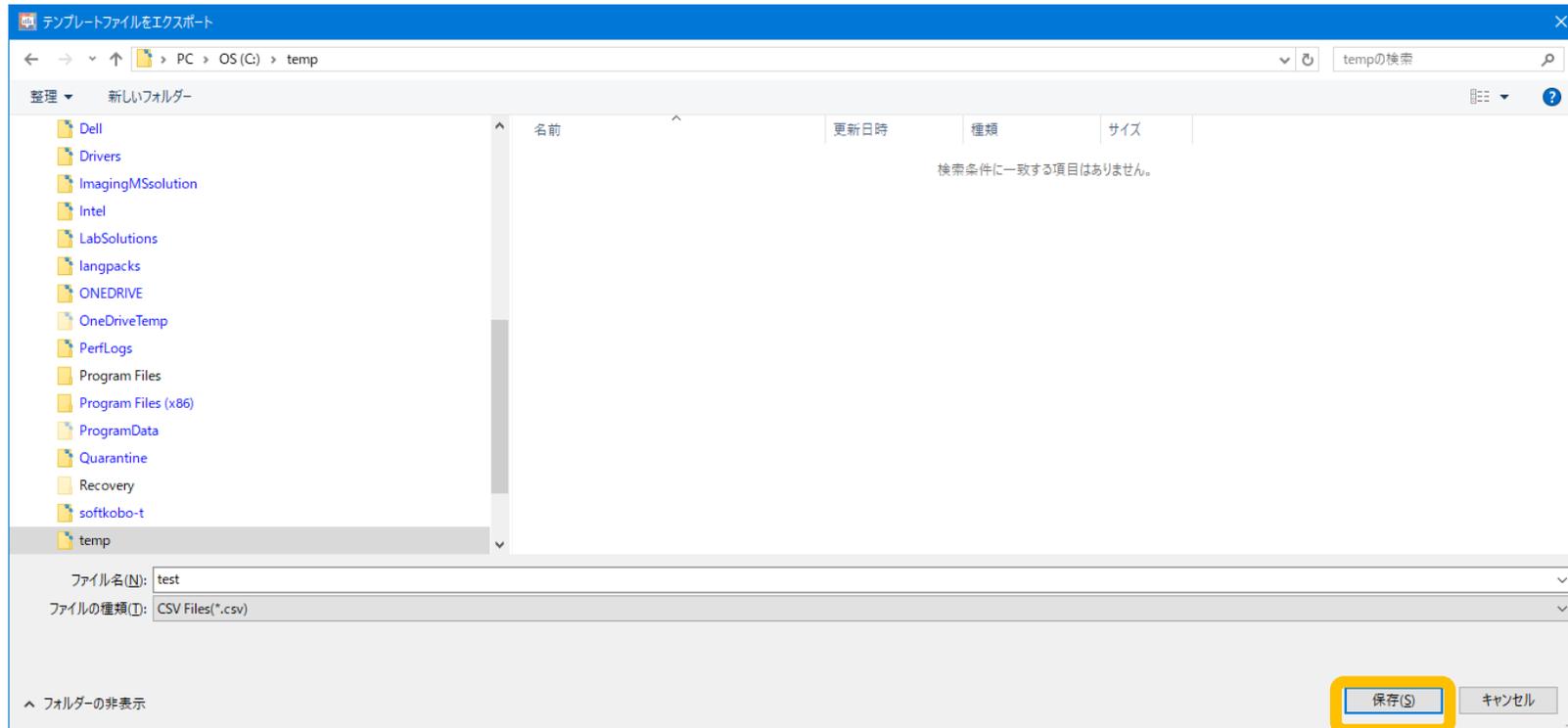
化合物

No.	m/z	化合物名	組成式	アダクト...	マトリックス	極性	マトリックス由来	ニュートラルロス質量	ニュートラルロス組成	多量体
1	194.084398300	9-AA (9-aminoacridine)	C13H10N2	<input checked="" type="checkbox"/>	9-AA	ネガティブ	1			
2	194.084398300	9-AA (9-aminoacridine)	C13H10N2	<input checked="" type="checkbox"/>	9-AA	ネガティブ	1	17.02654910	NH3	
3	194.084398300	9-AA (9-aminoacridine)	C13H10N2	<input checked="" type="checkbox"/>	9-AA	ネガティブ	1			2
4	194.084398300	9-AA (9-aminoacridine)	C13H10N2	<input checked="" type="checkbox"/>	9-AA	ネガティブ	1	17.02654910	NH3	2
5	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1			
6	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	18.01056468	H2O	
7	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	43.98982924	CO2	
8	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1			2
9	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1			2
10	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1			2
11	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	62.00039392	CO2-H2O	2
12	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	62.00039392	CO2-H2O	2
13	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1			3
14	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	18.01056468	H2O	3
15	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	43.98982924	CO2	3
16	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	26.00307400	CN	3
17	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	87.97965848	2(CO2)	3
18	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	62.00039392	CO2-H2O	3
19	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1			4
20	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	43.98982924	CO2	4
21	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	87.97965848	2(CO2)	4
22	154.026608700	DHB (2,5-Dihydroxy-benzoic acid)	C7H6O4	<input checked="" type="checkbox"/>	DHB	ポジティブ	1			
23	154.026608700	DHB (2,5-Dihydroxy-benzoic acid)	C7H6O4	<input checked="" type="checkbox"/>	DHB	ポジティブ	1	18.01056468	H2O	
24	154.026608700	DHB (2,5-Dihydroxy-benzoic acid)	C7H6O4	<input checked="" type="checkbox"/>	DHB	ポジティブ	1			2
25	154.026608700	DHB (2,5-Dihydroxy-benzoic acid)	C7H6O4	<input checked="" type="checkbox"/>	DHB	ポジティブ	1	18.01056468	H2O	2
26	154.026608700	DHB (2,5-Dihydroxy-benzoic acid)	C7H6O4	<input checked="" type="checkbox"/>	DHB	ポジティブ	1	36.02112937	2(H2O)	2
27	154.026608700	DHB (2,5-Dihydroxy-benzoic acid)	C7H6O4	<input checked="" type="checkbox"/>	DHB	ポジティブ	1	18.01056468	H2O	3

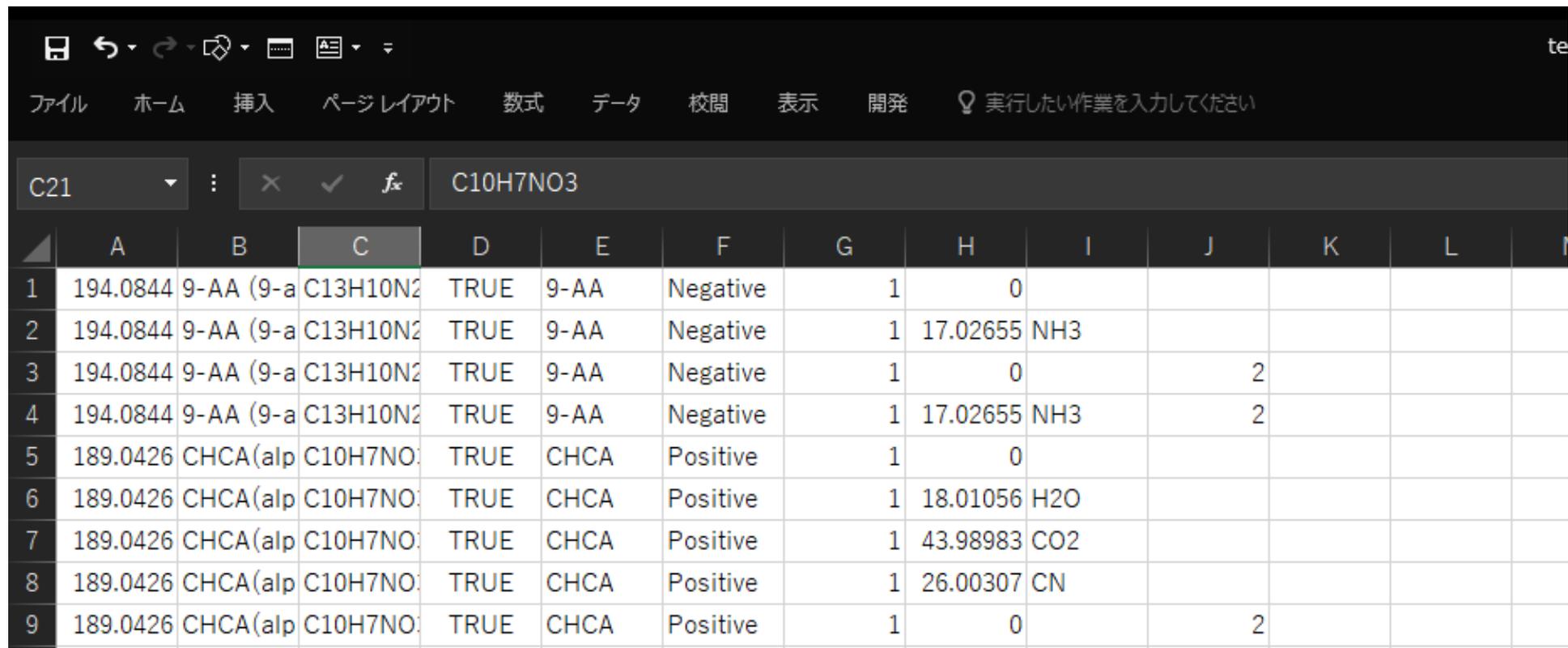
すでに存在するテンプレートが表示されます。
エクスポートしてみます。

OK キャンセル

適当な名前で保存します



エクセルで開く



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	194.0844	9-AA (9-a	C13H10N2	TRUE	9-AA	Negative	1	0					
2	194.0844	9-AA (9-a	C13H10N2	TRUE	9-AA	Negative	1	17.02655	NH3				
3	194.0844	9-AA (9-a	C13H10N2	TRUE	9-AA	Negative	1	0		2			
4	194.0844	9-AA (9-a	C13H10N2	TRUE	9-AA	Negative	1	17.02655	NH3	2			
5	189.0426	CHCA(alp	C10H7NO	TRUE	CHCA	Positive	1	0					
6	189.0426	CHCA(alp	C10H7NO	TRUE	CHCA	Positive	1	18.01056	H2O				
7	189.0426	CHCA(alp	C10H7NO	TRUE	CHCA	Positive	1	43.98983	CO2				
8	189.0426	CHCA(alp	C10H7NO	TRUE	CHCA	Positive	1	26.00307	CN				
9	189.0426	CHCA(alp	C10H7NO	TRUE	CHCA	Positive	1	0		2			

左から、
m/z, 化合物名, 組成式, アダクトイオンを計算するか, マトリックス, 極性, マトリックス由来, ニュートラルロス質量, ニュートラルロス組成式, 多量体
です。詳しい内容についてはマニュアルかヘルプをご覧ください。

任意の化合物の情報を入力して保存

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	100	test1	H2O	TRUE	AAA	Negative	1	0				
2	111.111	test2	CO2	TRUE	BBB	Positive	1	17.02655	NH3			
3	222.222	test3	C6H12O6	TRUE	CCC	Negative	1	0		2		
4												
5												
6												
7												
8												
9												

この上から任意の化合物の情報を入力します。
これを"csv"形式で保存します。

化合物テンプレートのインポート

化合物テンプレート設定

テンプレート名  インポート  エクスポート   

化合物

No.	m/z	化合物名	組成式	アダクト...	マトリックス	極性	マトリックス由来	ニュートラルロス質量	ニュートラルロス組成	多量体
1	194.084398300	9-AA (9-aminoacridine)	C13H10N2	<input checked="" type="checkbox"/>	9-AA	ネガティブ	1			
2	194.084398300	9-AA (9-aminoacridine)	C13H10N2	<input checked="" type="checkbox"/>	9-AA	ネガティブ	1	17.02654910	NH3	
3	194.084398300	9-AA (9-aminoacridine)	C13H10N2	<input checked="" type="checkbox"/>	9-AA	ネガティブ	1			2
4	194.084398300	9-AA (9-aminoacridine)	C13H10N2	<input checked="" type="checkbox"/>	9-AA	ネガティブ	1	17.02654910	NH3	2
5	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1			
6	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	18.01056468	H2O	
7	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	43.98982924	CO2	
8	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	26.00307400	CN	
12	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	62.00039392	CO2-H2O	2
13	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1			3
14	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	18.01056468	H2O	3
15	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	43.98982924	CO2	3
16	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	26.00307400	CN	3
17	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	87.97965848	2(CO2)	3
18	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	62.00039392	CO2-H2O	3
19	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1			4
20	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	43.98982924	CO2	4
21	189.042593100	CHCA(alpha-Cyano-4-hydroxycinnamic acid)	C10H7NO3	<input checked="" type="checkbox"/>	CHCA	ポジティブ	1	87.97965848	2(CO2)	4
22	154.026608700	DHB (2,5-Dihydroxy-benzoic acid)	C7H6O4	<input checked="" type="checkbox"/>	DHB	ポジティブ	1			
23	154.026608700	DHB (2,5-Dihydroxy-benzoic acid)	C7H6O4	<input checked="" type="checkbox"/>	DHB	ポジティブ	1	18.01056468	H2O	
24	154.026608700	DHB (2,5-Dihydroxy-benzoic acid)	C7H6O4	<input checked="" type="checkbox"/>	DHB	ポジティブ	1			2
25	154.026608700	DHB (2,5-Dihydroxy-benzoic acid)	C7H6O4	<input checked="" type="checkbox"/>	DHB	ポジティブ	1	18.01056468	H2O	2
26	154.026608700	DHB (2,5-Dihydroxy-benzoic acid)	C7H6O4	<input checked="" type="checkbox"/>	DHB	ポジティブ	1	36.02112937	2(H2O)	2
27	154.026608700	DHB (2,5-Dihydroxy-benzoic acid)	C7H6O4	<input checked="" type="checkbox"/>	DHB	ポジティブ	1	18.01056468	H2O	3

OK キャンセル

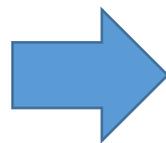
化合物テンプレートの設定画面から，“インポート”を選択して編集したcsvファイルを指定します。

化合物テンプレートの名前をつけます

テンプレート名 ×

入力が必要です。

OK キャンセル



テンプレート名 ×

OK キャンセル

インポート後

化合物テンプレート設定

テンプレート名

化合物

No.	m/z	化合物名	組成式	アダクト...	マトリックス	極性	マトリックス由来	ニュートラルロス質量	ニュートラルロス組成	多量体
1	100.00000000	test1	H2O	<input checked="" type="checkbox"/>	AAA	ネガティブ	1			
2	111.11100000	test2	CO2	<input checked="" type="checkbox"/>	BBB	ポジティブ	1	17.02654910	NH3	
3	222.22200000	test3	C6H12O6	<input checked="" type="checkbox"/>	CCC	ネガティブ	1			2

Matrix Clusters
Lipids
Lipid Mediators
Endogenous Metabolites
test001

インポートに成功するとメッセージとインポートされたテンプレートが表示されます。

インポート

📘 インポートに成功しました。

OK

OK キャンセル

インポートに失敗する場合は

- “,”の数が合わないのが原因であることが多いです。
- エクセルでは”,”が見えないので、メモ帳などでご確認されることをおすすめします