

使用するアダクトイオンの 変更法

メニューバーの[設定]-[アダクトイオン]

ターゲットの化合物リストの作成

データ行列の設定

解析方法 **ターゲット** ノンターゲット しきい値 0.000 %

リストの作成

化合物テンプレート ? 除外する化合物テンプレート ?

Matrix Clusters
Lipids
Lipid Mediators
Endogenous Metabolites
test001

Matrix Clusters
Lipids
Lipid Mediators
Endogenous Metabolites
test001

許容幅 0.0010 Da

使用するアダクトイオン ?

+H, +Na, +K
-H

マトリックス 9-AA

極性 ネガティブ

選択された化合物テンプレートと使用するアダクトイオンに表示されているアダクトイオンを組み合わせることで化合物リストを作成します。
化合物テンプレートに含まれる化合物のうち、アダクトイオンを計算するにチェックされているものだけアダクトイオンとの組み合わせが化合物リストに追加されます。

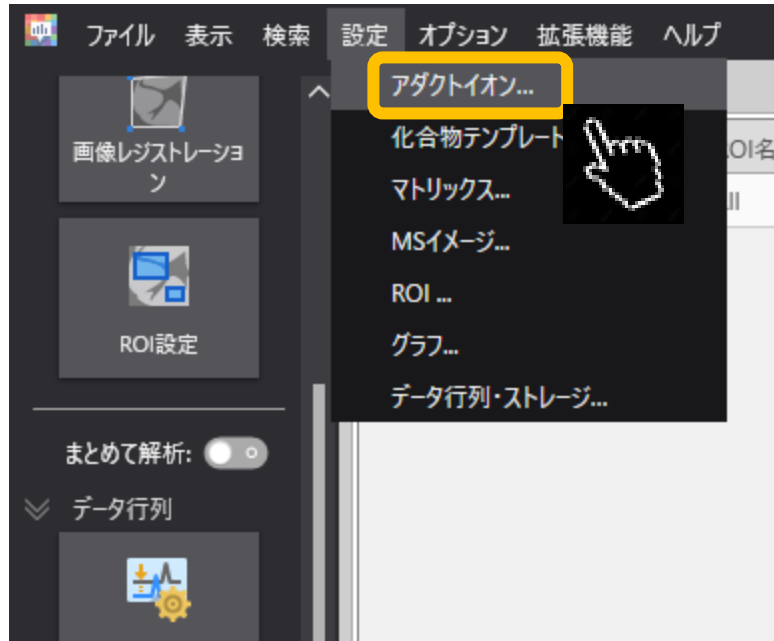
作成 キャンセル

許容幅 0.0010 Da

OK キャンセル

- [化合物テンプレート]と[使用するアダクトイオン]の組合せで化合物リストが生成されます。(手順は“データ行列の作成”参照)

アダクトイオンの種類の変更手順



- メニューバーの[設定]-[アダクトイオン]を選択します。

アダクトイオン設定画面

アダクトイオン設定

ポジティブアダクトイオン

アダクトイオン	モノアイソトピック質量	使用	マトリックス	マトリックスクラスタへの付加
+H	1.00727600	<input checked="" type="checkbox"/>	▼	▼
+Na	22.98922000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
+K	38.96371000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
-e	-0.00054858	<input type="checkbox"/>	▼	▼
-H+2Na	44.97116000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
-H+2K	76.91904000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
-H+K+Na	60.94510000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
-2H+3Na	66.95311000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
-2H+3K	114.87490000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
+DHB-H ₂ O+H	137.02330000	<input type="checkbox"/>	DHB ▼	0 ▼
+DHB-H ₂ O+Na	159.00530000	<input type="checkbox"/>	DHB ▼	0 ▼
+DHB-H ₂ O+K	174.97920000	<input type="checkbox"/>	DHB ▼	0 ▼
+2DHB-2(H ₂ O)+H	273.03940000	<input type="checkbox"/>	DHB ▼	0 ▼
+2DHB-2(H ₂ O)+Na	295.02130000	<input type="checkbox"/>	DHB ▼	0 ▼
+2DHB-2(H ₂ O)+K	310.99520000	<input type="checkbox"/>	DHB ▼	0 ▼
+3DHB-3(H ₂ O)+H	409.05540000	<input type="checkbox"/>	DHB ▼	0 ▼

ネガティブアダクトイオン

アダクトイオン	モノアイソトピック質量	使用	マトリックス	マトリックスクラスタへの付加
-H	-1.00727600	<input checked="" type="checkbox"/>	▼	▼
+Cl	34.96940000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
+e	0.00054858	<input type="checkbox"/>	▼	▼
-2H+Na	20.97467000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
-3H+2Na	42.95661000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
-2H+K	36.94860000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
-3H+2K	74.90449000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
-3H+Na+K	58.93055000	<input type="checkbox"/>	▼	▼
-3H-2e	-3.02402400	<input type="checkbox"/>	9-AA ▼	1 ▼
+9-AA-H	193.07710000	<input type="checkbox"/>	9-AA ▼	0 ▼

必要なアダクトイオンを選択して[OK]ボタンを押します。

OK キャンセル

[使用するアダクトイオン]が変更されます

リストの作成

化合物テンプレート ?

除外する化合物テンプレート ?

Matrix Clusters
Lipids
Lipid Mediators
Endogenous Metabolites
test001

Matrix Clusters
Lipids
Lipid Mediators
Endogenous Metabolites
test001

許容幅 0.0010 Da

使用するアダクトイオン ?

+H
-H

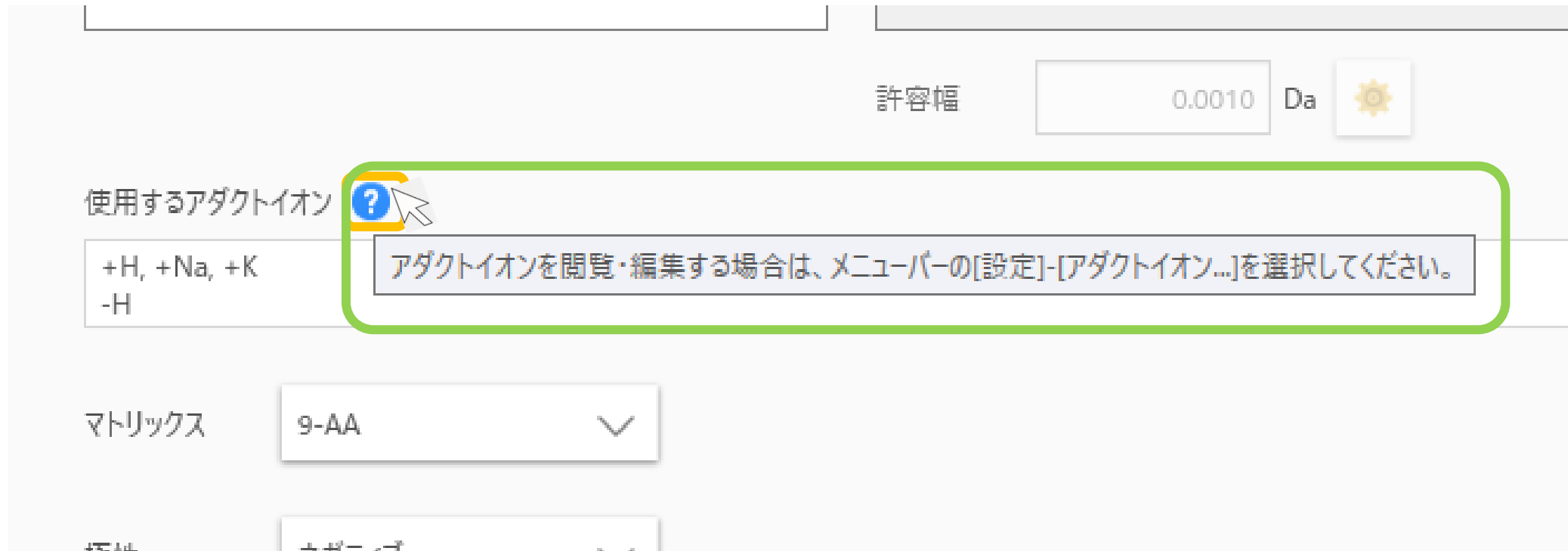
マトリックス 9-AA

極性 ネガティブ

選択された化合物テンプレートと使用するアダクトイオンに表示されているアダクトイオンを組み合わせることで化合物リストを作成します。
化合物テンプレートに含まれる化合物のうち、アダクトイオンを計算するにチェックされているものだけアダクトイオンとの組み合わせが化合物リストに追加されます。

作成 キャンセル

ちなみに青い？にマウスカーソルを合わせるとヒントが表示されます。



The screenshot shows a software interface with several settings. At the top right, there is a '許容幅' (Tolerance) field set to '0.0010 Da' with a gear icon. Below this, the '使用するアダクトイオン' (Used Adducts) section is highlighted with a green rounded rectangle. It contains a list of adducts: '+H, +Na, +K' and '-H'. A blue question mark icon with a mouse cursor is positioned over the list. A tooltip box is open, containing the text: 'アダクトイオンを閲覧・編集する場合は、メニューバーの[設定]-[アダクトイオン...]を選択してください。' (To view or edit adducts, please select [Settings]-[Adducts...] in the menu bar.) Below the adduct list, there is a 'マトリックス' (Matrix) dropdown menu set to '9-AA' and a partially visible 'モジュール' (Module) dropdown menu set to 'モジュール'.

許容幅 0.0010 Da

使用するアダクトイオン ?

+H, +Na, +K
-H

アダクトイオンを閲覧・編集する場合は、メニューバーの[設定]-[アダクトイオン...]を選択してください。

マトリックス 9-AA

モジュール モジュール