スペクトルの重ね書き方法

[スペクトルビュー]について

[PDA データ解析]画面の[スペクトルビュ ー]には、<u>クロマトグラム上でダブルクリックし</u> <u>た時間位置のスペクトル(以下切出しスペク</u> <u>トルと呼ぶ)</u>が表示されます。[スペクトルビュ ー]はスペクトルの切出しの他、スペクトルの 重ね書きやスペクトルファイルを保存する機 能も備えています。



[スペクトルビュー]には、下記のような(切出し)モードと(登録)モ ードがあります。[スペクトルビュー]の右クリックメニューの[登録ス ペクトル表示]でモードを切り替えることができます。([登録スペクト ル表示]にチェックをつけると(登録)モードになります。)





[登録スペクトル表示]



スペクトルの重ね書き

スペクトルを重ね書きする方法は、下記の2通りあります。

[1] スペクトルテーブルへ登録

切出しスペクトル、UV スペクトル、ライブラリをスペクトルテーブルに登録します。スペクトルテーブルに登録されたスペクトルを重ね書き表示できます。

[2] 参照スペクトルを設定(但し、重ね書きは2スペクトルまで)

切出しスペクトル、UV スペクトル、ライブラリのいずれか一つを参照スペクトルとして設定しておきます。 更に、 切出しスペクトルを重ね書きできます。

[1] スペクトルテーブルへ登録

トルを登録できます。

をご参照ください。

[スペクトルビュー]を(切出し)モードにします。
 重ね書きしたい切出しスペクトルを表示します。右クリックメニュー[切出しスペクトルをスペクトルテーブ

ルヘ登録]、またはツールバーの 🚈 をクリックすると

スペクトルテーブルへ登録できます。

登録スペクトル表示(M)
データ処理パラメータ(<u>E</u>)
切出しスペクトルをスペクトルテーブルへ登録(B)
スペクトルテーブルの表示()」の
ライブラリ検索(<u>C</u>)

この操作を繰り返すことにより、複数の必要なスペク [スペクトルビュー]の右クリックメニュー

参考 1:(登録)モードでは、クロマトグラム上でピーク時間位置をダブルクリックすることで、切出しスペク トルをスペクトルテーブルに直接登録できます。 参考 2:クロマトグラムの検出ピークのスペクトルをまとめてスペクトルテーブルに登録したい場合は別紙

- 2) 右クリックメニュー[登録スペクトルを表示]を選択すると 登録スペクトルが重ね書き表示されます。
- 重ね書きされているスペクトルの詳細な情報は、右クリックメニュー[スペクトルテーブルの表示]で確認できます。
 予めファイル保存されているスペクトルファイル(ライブラリも含む)を重ね書きしたい場合は、[スペクトルテーブル]の[対象]を[スペク



を重ね書きしたい場合は、[スペクトルテーブル]の[対象]を[スペクトル](または[ライブラリ])にし[対象パラメータ]で必要なファイルを 設定します。

参考 1:[UV スペクトル]ファイルの作成方法

ファイル保存したいスペクトルを切出し、 [スペクトルビュー]上の右クリックメニュー

[スペクトルのエクスポート]を選びます。

7	クトルテ ∽ ヘ⁰ウトルテ	- ブル ーブル	菞	するかし	んいかを	設定できる	3			
	ID#	表示	対象	対象 パラメータ	スケール	表示倍率	λmax			
	1		時間 💌	3.92	設定	1.00	256/227			
	2 3 4		時間 スヘットル ライフ・ラリ	3.07 3.86 3.07	設定 設定 設定	スケール	-ル調節できる			
	-		a + 00	0.01	L (_>					

[スペクトルテーブル]

[名前を付けて保存]画面が表示されるので、名前を付けて保存すると[UV スペクトル]ファイルを作成できます。

参考2:スペクトルテーブルでスペクトル間の類似度を比較することができます。詳細は別紙をご覧ください。

[2] 参照スペクトルを設定

1) スペクトル比較に使いたいスペクトルを参照スペクトルとして登録します。[スペクトルビュー]を

(切出し)モードにします。 現在の切出しスペクトルを参照スペクトルに使う場合は、[スペクトルビュー] の右クリックメニューの[参照スペクトル の設定]から[切出しスペクトル]を選ぶ
 切出しスペクトルの設定(F)

 UVスペクトルファイル(U)...

 ライブラリファイル(U)...

 参照スペクトルのカリア(F)

 コピー(Y)

 描画プロパティ(P)...

[スペクトルビュー]の右クリックメニュ



と、前述スペクトルが参照スペクトルとして設定されます。 参照スペクトルの設定で切出しスペクトルとした場 合右図のようにスペクトルラベルにピンク色の字で、上記 切出しスペクトルの保持時間が表示されます。(参照スペ クトルとして[UV スペクトル]を選んだ場合はファイル名、 [ライブラリ]を選んだ場合はライブラリファイル名と登録 No. が表示されます。)注)[UV スペクトル]ファイルの作成方法 は[1]の(2)参考1をご参照ください。

 クロマトグラム上で、スペクトルを重ねたいピーク時間位 置をダブルクリックして下さい。右図のようにスペクトルが 重ね書きされます。

スペクトルラベルの一番右に、参照スペクトルとの類似度 が表示されます。(類似度の表示が無い場合、右クリックメ ニュー[描画プロパティ]で表示するよう設定します。)

右クリックメニューの[コピー]でレポートや Word などに スペクトルの重ね書きを貼り付け可能です。



<別紙>

クロマトグラムの検出ピークのスペクトルをまとめてスペクトルテーブルへ登録

1) [スペクトルビュー]を(登録)モードにし ます。[クロマトビュー]上の右クリックメニ ュー[データ処理パラメータ] - [波形処 理]タブを開きます。

2) チャンネルを指定し、[検出ピークのスペクトルをスペクトルテーブルに登録する]チェックボックスをオンにして[適用]を クリックします。

3) [OK]で画面を終了します。

	データ処理パラメータ(デ	「一タ内メソット")						
,	波形処理 同定処理	定量処理 カラムノ	パフォーマンス マルチ	クロマトグラム	<u>ાપટ^%ોત્ર ક્રિટ</u> ્ટ	∋月検索↓	(°בו/דר	
	Channel:	Ch1 270nm		•	チャンネル	指 定		
	Width:	5	sec	≣¥				
	Slope:	1000	uV/min					
	Drift:	0	uV∕min		m			
7	T. DBL:	1000	min	Pr	ógrám			
`	最小面積/高さ(<u>M</u>):	10000	カウント	全てのチャン	ノネルにコピー(©)			
	使用データ(B):	● 面積 ○	高さ					
	☑ 検出ビークのスへや	トルをスペウトルテーフ゛ル	に登録する					
			•			~~		
	検	ピークの人	VINEX	~~751	テー ノルご	违 球9 る	ծ	
			OK		キャンセル	適用(A)		ヘルプ

スペクトルテーブル内の比較

1) 基準にするスペクトルの行左端の[ID#]をクリックして行を反転表示します。右クリックメニュー[類 似度用参照スペクトルに設定]を選択します。[類似度]に[Ref]と入力されます。

2) [適用]をクリックすると max、 min、類似度が表示されます。

ID#	表示	対象	対象	77-1	表示倍率	λmax	λmin	類似度	Ch#	Ū I
0	V	時間	4.08	設定	1.00	285/195/654/645	246/440/650	0.8321	1	
1	V	時間	4.42	設定	1.00	196/322/654	262/401/485	0.9547	1	
2	V	時間	4.68	設定	1.00	198/271/669	245/401/485	0.7233	1	
3	V.	時間	4.97	設定	1.00	324/217/234/657/480	205/229/262/433/485	0.9992	1	
4	V	時間	5.54	設定	1.00	215/278/480	246/440/485/655	0.5528	1	
5	V	時間	5.84	設定	1.00	195/285/647/480	250/401/655/485	0.7681	1	
6	V	時間	6.16	設定	1.00	195/264/647/480	228/396/656/485	0.7118	1	
7	V	時間	6.59	設定	1.00	252/195/322/293/644	226/286/401/667/485	0.8695	1	
8	V	時間	7.17	設定	1.00	195/322	262/401/656/485	0.9555	1	
9	V	時間	7.80	設定	1.00	197/290/654/481	256/390/485	0.8606	1	
0	V	時間	8.41	設定	1.00	325/217/234/668/643	206/230/262/401/580	0.9971	1	
1	V	時間	8.82	設定	1.00	205/272/486/665/647	244/412/580/656	0.5368	1	
2	V	時間	9.30	設定	1.00	325/217/234/679/672	206/230/263/675/433	0.9991	1	
3	V I	時間	10.48	設定	1.00	322/644/479/728	261/426/485/760/656	0.9112	1	
4	V	時間	11.53	設定	1.00	292/657/554/479	255/420/580/485/769	0.7967	1	
5		時間	11.72	設定	1.00	289/657/728	250/580/485/769	0.7680	1	
6	V	時間	12.39	設定	1.00	325/293/520/632/476	307/265/391/580/485	0.7670	1	
7	V	時間	12.59	設定	1.00	325/217/233/669/431	210/229/262/420/580	0.9738	1	
8	V	時間	12.93	設定	1.00	326/294/628/424	263/419/580/485/655	0.7559	1	
9	V	時間	13.46	設定	1.00	290/657/727	264/402/580/485/767	0.6523	1	
0	V	時間	14.21	設定	1.00	289/632/727	264/580/485/655/769	0.6128	1	
1		時間	15.13	設定	1.00	290/322/627/727	312/267/718/485/655	0.6248	1	
2	V	時間	15.44	設定	1.00	322/297/469/628/727	263/456/580/485/655	0.8089	1	
3	V	時間	15.85	設定	1.00	326/450/628/679/727	264/440/718/485/655	0.7500	1	
4	F	時間	16.45	設定	1.00	325/431/631/669/727	265/419/684/580/718	0.7625	1	4 I
5	V	ライブラリ	af.Ilb	ノーマライズ	2.03	325/217/235/638/490	205/229/263/486/635	Ref		参昭スペクトル
û		0 ,	0.01	ノーマライズ	1.00	0				

同様にスペクトルの行左端の[ID#]をクリックして行を反転表示にし、[ライブラリ検索]や[スペクトルをライブラリへ登録]が可能です。