

## ピークにラベルを付ける

スペクトル上のピークにマニュアル操作でラベルを付けることができます。

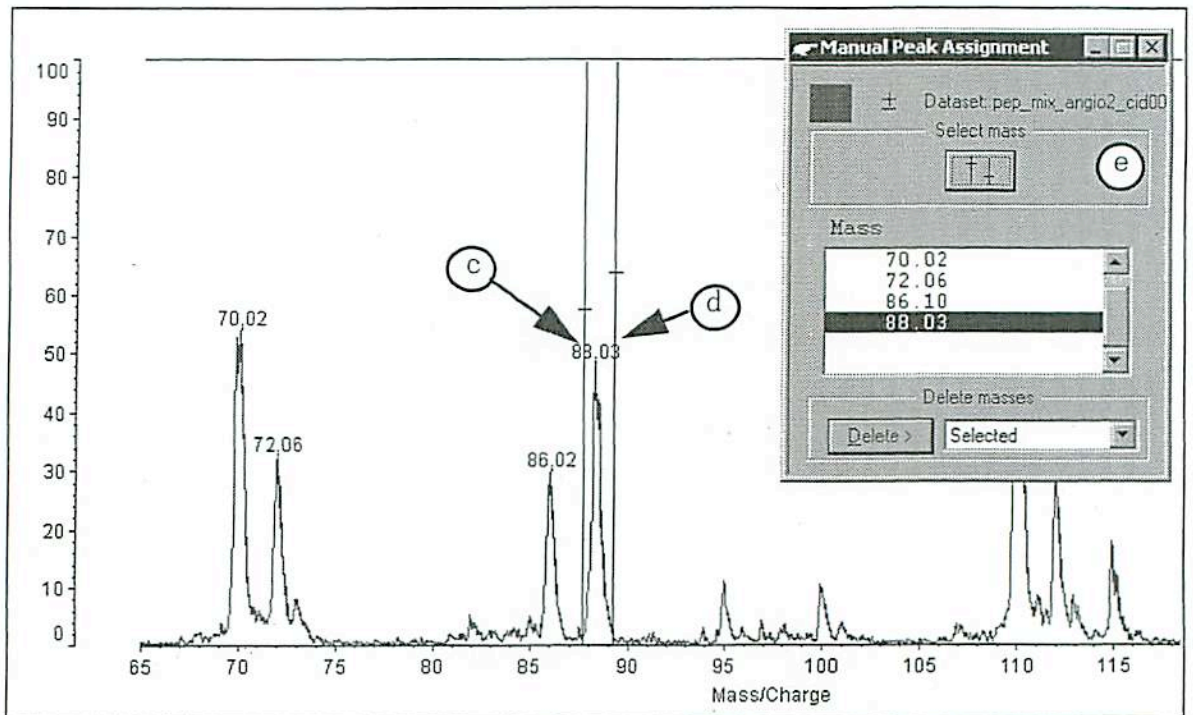
### ピークにラベルを付ける

1. スペクトルを表示します。
2. ピークが自動的にラベル付けされている場合は、ラベルをオフにします。
  - a. [Peak Processing - Peak Cleanup] ウィンドウを開きます。  
( [Processing] => [Peak Processing...] => [Peak Cleanup] タブ。)
  - a. [Threshold Offset] ボックスを非常に高い値 (3000 mV など) に設定します。(ベースラインは、最大ピークよりも高く設定されるので、ソフトウェアはラベル付けするピークを識別しません。)
3. ピークにラベルを付けます (下図を参照してください)。
  - a. [MALDI-MS] ウィンドウで、[Processing] => [Manual Peak Assignment...] をクリックします。[Manual Peak Assignment] ウィンドウが表示されます。






以降の操作中に [Manual Peak Assignment] ウィンドウが [MALDI-MS] ウィンドウで隠されないようにするため、[Manual Peak Assignment] ウィンドウを端に寄せておきます。

b. ピークを識別できるように、スペクトルを拡大表示します。



- c. マウスのホイールボタンを押し、目的とするピークの左側にカーソルをドラッグします。ホイールボタンを放します。
- d. マウスのホイールボタンを再度押し、目的とするピークの右側にカーソルをドラッグします。ホイールボタンを放します。

ピークへのラベル付けの手引きとして、次ページの表を参照してください。

- e. [Manual Peak Assignment] ウィンドウで  ボタンをクリックすると、ピークの質量がリストに表示されます。
- f.  ボタン (右側のツールバー) をクリックし、カーソルをクリアします。
- g. 次のピークに移動し、ピークの両側にカーソルを配置します。
- h.  ボタンをクリックします。リストにピークの質量が表示されます。
- i. 上の手順を繰り返し、すべてのピークにラベルを付けます。

ピークの質量は画面に表示されないこともありますが、[Manual Peak Assignment] ウィンドウのリストには追加されます。

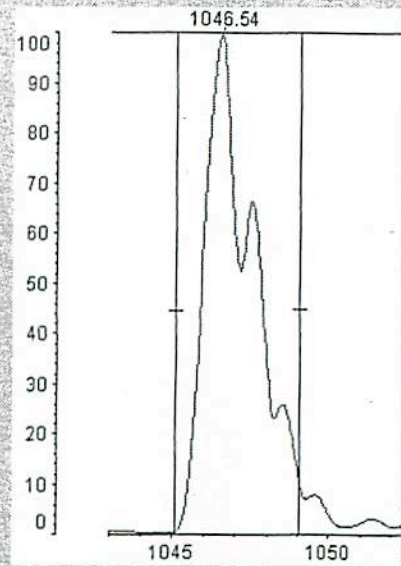
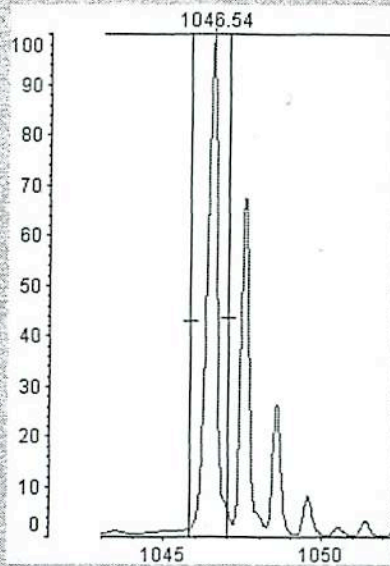
ピークの割り当て

高分解能ピーク

MS/MS 分析でのフラグメントイオンの分解能は低くなりますが、それでも  $^{13}\text{C}$  同位体ピークから  $^{12}\text{C}$  モノアイソトピックピークを分離することはできません。そのときは、フラグメントのモノアイソトピックピークのみにラベル付けするようにしてください。

低分解能ピーク

モノアイソトピックピークを分離することができない場合は、ピークカーソルをフラグメントイオンピーク全体の両側に置き、全ピークの頂点にラベルを付けます。



スペクトルを取得する