

# 操作マニュアル

---

第 2.8 版 2012 年 2 月 7 日

## 目 次

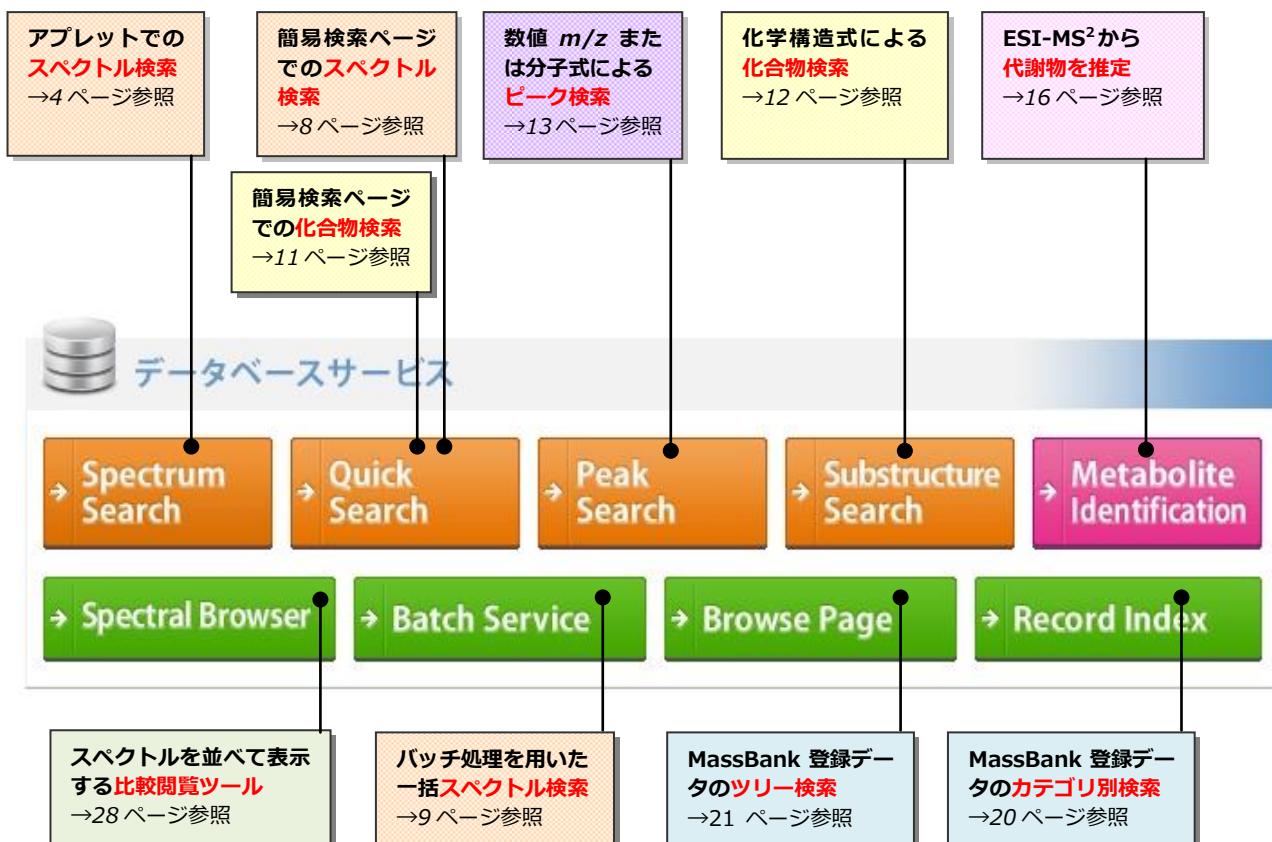
<b>1. はじめに .....</b>	<b>3</b>
1.1 データベースサービスの概要 .....	3
1.2 動作環境 .....	3
<b>2. 類似スペクトルの検索 .....</b>	<b>4</b>
2.1 アプレットでのスペクトル検索 .....	4
2.2 簡易検索ページでのスペクトル検索 .....	8
2.3 バッチ処理を用いた一括スペクトル検索 .....	9
<b>3. 化合物の検索 .....</b>	<b>11</b>
3.1 簡易検索ページでの化合物検索 .....	11
3.2 化学構造式による化合物検索 .....	12
<b>4. ピーク検索 .....</b>	<b>13</b>
4.1 数値 $m/z$ によるピーク検索 .....	13
4.2 分子式によるピーク検索 .....	14
<b>5. ESI-MS<sup>2</sup> から代謝物を推定 .....</b>	<b>16</b>
5.1 ピークと化学部分構造の関係を用いた推定 .....	16
5.2 中性脱離分子を利用した推定 .....	19
<b>6. データー覧からの検索 .....</b>	<b>21</b>
6.1 カテゴリ検索 .....	21
6.2 ツリー検索 .....	22
<b>7. その他 .....</b>	<b>23</b>
7.1 検索結果画面 .....	23
7.2 MassBank レコード詳細画面 .....	27
7.3 簡易質量計算ツール .....	28
7.4 スペクトル閲覧ツール .....	29

# 1. はじめに

本マニュアルでは、MassBank データベースサービスの操作について解説します。

## 1.1 データベースサービスの概要

MassBank では、以下のデータベースサービスを提供しています。



## 1.2 動作環境

MassBank のデータベースサービスを利用するには以下の環境が必要です。

### (1) Web ブラウザ

Internet Explorer 6 以上 または、Firefox 2 以上のブラウザの使用を推奨します。

### (2) Web ブラウザの設定

Web ブラウザで以下の設定が行われていることを確認してください。

① JavaScript の実行を許可

② ポップアップを許可する

- 設定方法は以下のページを参照してください。【許可する Web サイトのアドレス：<http://www.massbank.jp>】  
[http://www.microsoft.com/japan/windowsxp/using/web/sp2\\_popupblocker.mspx](http://www.microsoft.com/japan/windowsxp/using/web/sp2_popupblocker.mspx)

### (3) Java 実行環境のインストール

Java Runtime Environment (JRE) Version 5 以上がインストールされている必要があります。

- 以下のページでインストール状況の確認や Java のダウンロードができます。

<http://www.java.com/ja/download/>

## 2. 類似スペクトルの検索

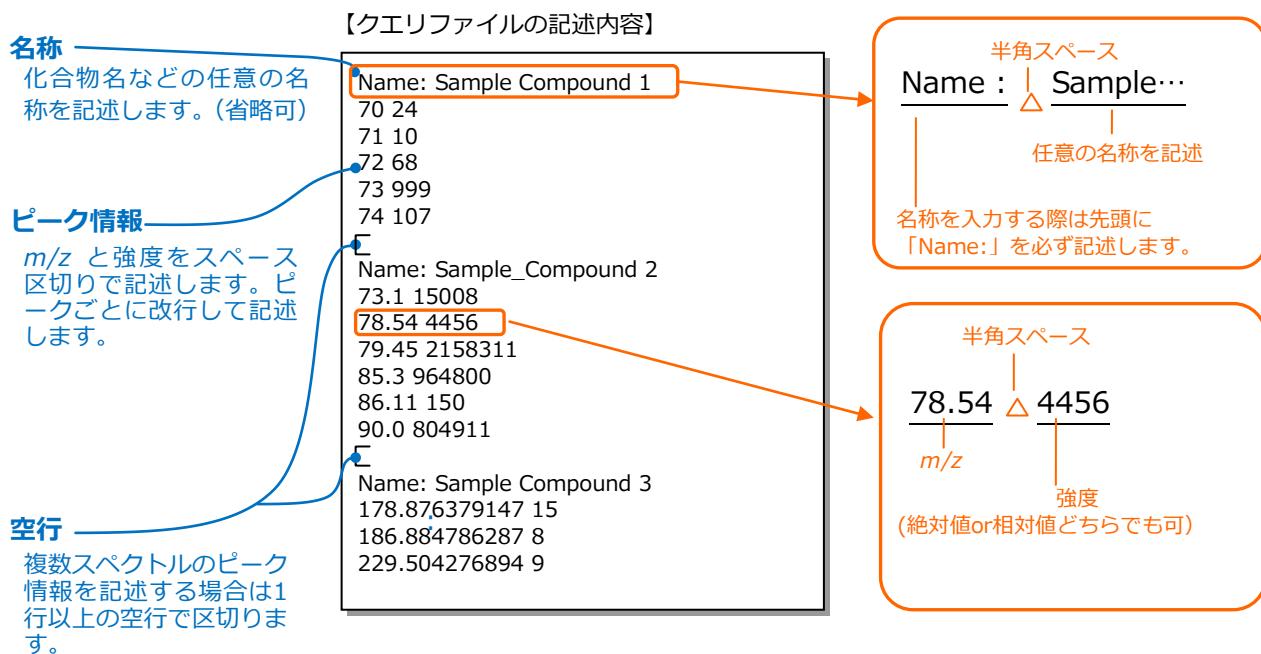
### 2.1 アプレットでのスペクトル検索

Spectrum Search は、Web ブラウザ上で GUI ベースのスペクトル検索ができます。ユーザのスペクトルをクエリとして MassBank から類似スペクトルを検索して検索結果を表示します。また、クエリスペクトルと検索結果のスペクトルをグラフィカルに比較することができます。

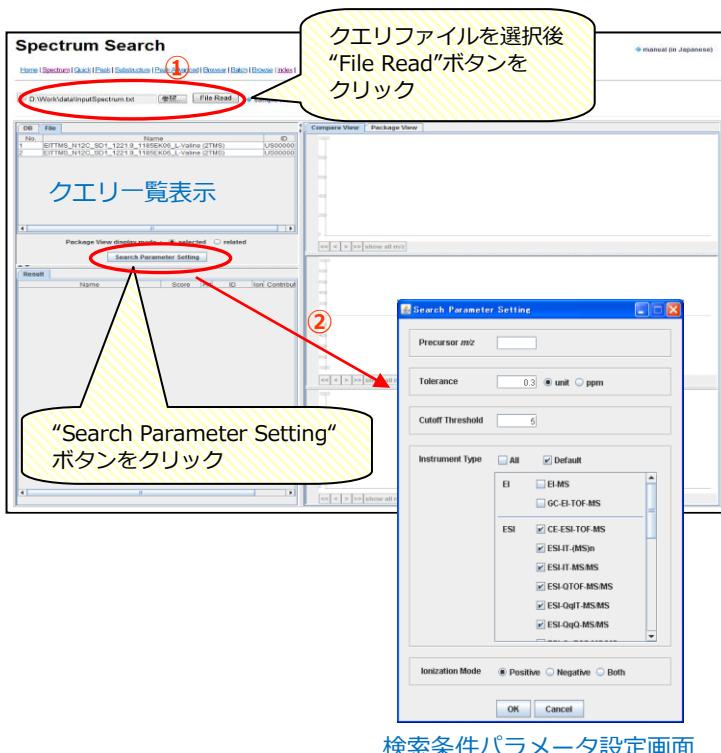
#### (1) クエリファイル準備

アプレットでのスペクトル検索をおこなうためには、以下のいずれかの形式でユーザのマススペクトルを記述したクエリファイルを作成しておきます。

サンプルは <http://www.massbank.jp/sample/sample.zip> からダウンロードできます。



#### (2) クエリの読み込みと検索パラメータの設定



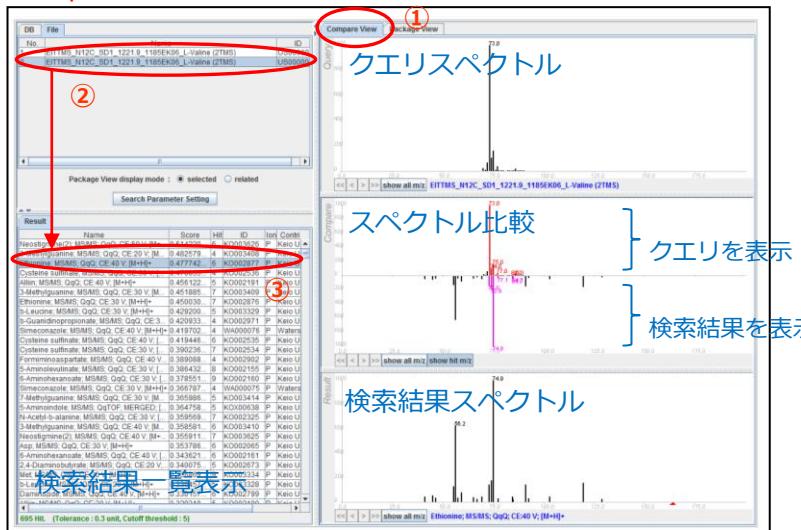
**① クエリファイルの読み込み**  
参照ボタンを押して、準備したクエリファイルを選択します。“File Read”ボタンをクリックするとファイルが読み込まれます。ファイルの読み込みが完了するとクエリ一覧が表示されます。

**② 検索条件パラメータの設定**  
“Search Parameter Setting”ボタンをクリックすると設定画面が開きます。

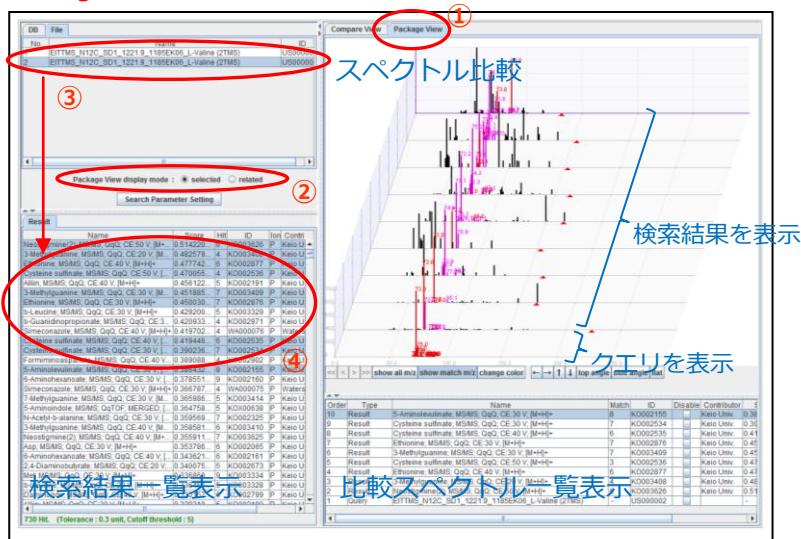
- 設定内容 -
  - Precursor *m/z* : 前駆イオンを指定した絞込み
  - Tolerance : *m/z* の誤差範囲
  - Cutoff Threshold : 相対強度のしきい値
  - Instrument Type : 装置種別
  - Ionization Mode : イオン化モード

### (3) 検索実行

Compare View での表示：クエリと検索結果のスペクトルが 1 対 1 で比較できます。



Package View での表示：クエリと検索結果のスペクトルが 1 対多で比較できます。



#### - Package View 表示モードの違い -

Package View では表示モードが 2 つあります。

##### **[selected] の場合**

検索結果一覧から複数スペクトルが選択可能です。

選択スペクトルとクエリスペクトルを並べて表示します。

##### **[related] の場合**

検索結果一覧から 1 スペクトルだけ選択可能です。

選択スペクトル、選択スペクトルと衝突エネルギーが異なるスペクトル（自動検出）、クエリスペクトルを並べて表示します。

#### - スペクトル比較エリアのピークの色 -

Compare View 及び Package View でのスペクトル比較エリアでは、一致するピークを色で判別できます。

ピーカー	クエリのピークに対する $m/z$ の一致	完全に一致	誤差範囲内で一致
クエリのスペクトル		赤色	赤色
検索結果のスペクトル		赤色	ピンク色

#### ① Compare View 選択

クリックして選択します。  
初期状態では選択済みです。

#### ② クエリスペクトル選択

クエリにするスペクトルの行をクリックして選択します。  
選択と同時に類似スペクトルの検索を行います。

#### ③ 検索結果スペクトル選択

検索結果一覧から任意のスペクトルの行をクリックして選択します。

#### ① Package View 選択

クリックして選択します。

#### ② Package View 表示モード選択

"selected" または "related" をクリックします。

#### ③ クエリスペクトル選択

クエリにするスペクトルの行をクリックして選択します。  
選択と同時に類似スペクトルの検索を行います。

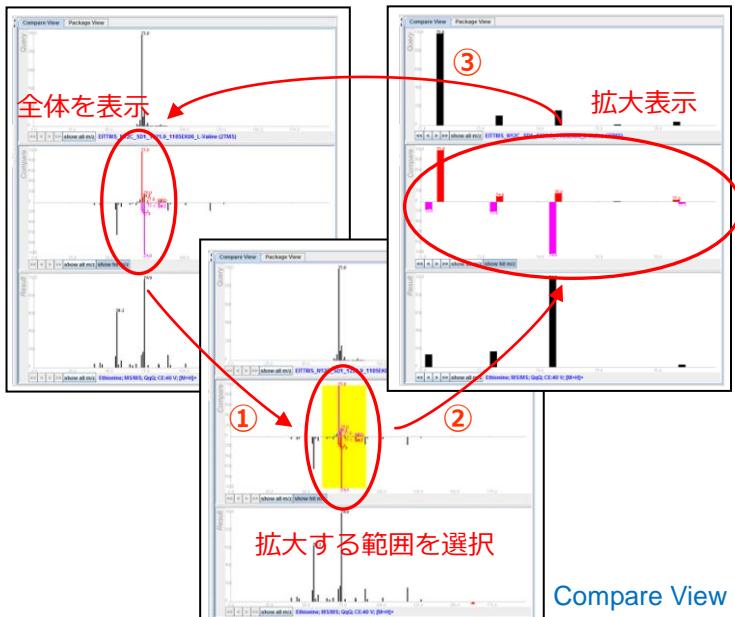
#### ④ 検索結果スペクトル選択

検索結果一覧から任意のスペクトルの行をクリックして選択します。

②で "selected" を選択した場合は、CtrlキーやShiftキーを使用して複数行の選択ができます。

②で "related" を選択した場合は 1 行のみ選択できます。

## «便利な機能 1 – スペクトル拡大表示»



### ① 拡大位置の選択

スペクトルの拡大を開始したい場所からドラッグします。

### ② 拡大位置の確定

スペクトルの拡大を確定したい場所でドロップします。

### ③ 拡大解除

スペクトルの上でダブルクリックします。

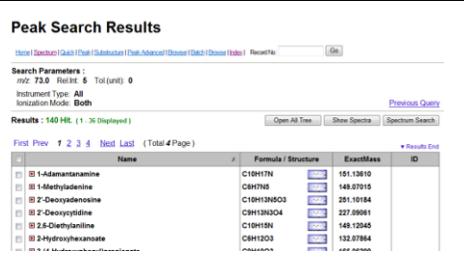
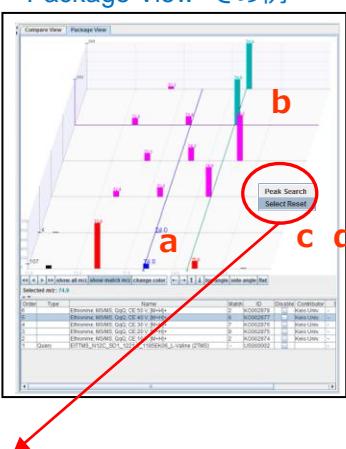
※ スペクトルの拡大表示は Package View でも行うことができます。

## «便利な機能 2 – ピーク操作»

Compare View での例



Package View での例



Peak Search 検索結果画面

### a ピークハイライト

ピークにマウスカーソルを乗せると、青色で描画され、 $m/z$  とIntensity の値が表示されます。

### b ピーク選択

任意のピーク上でクリックすると、水色で描画され、選択状態になります。  
最大6ピークまで選択できます。

### c ピーク検索

1つ以上のピークが選択されている状態で右クリックすると、メニューが表示され“Peak Search”が選択できるようになります。選択後は直ちにピーク検索が行われれます。

### d ピーク選択の解除

スペクトル上で右クリックするとメニューが表示されますので、“Select Reset”を選択します。

#### - ピークの描画色 -

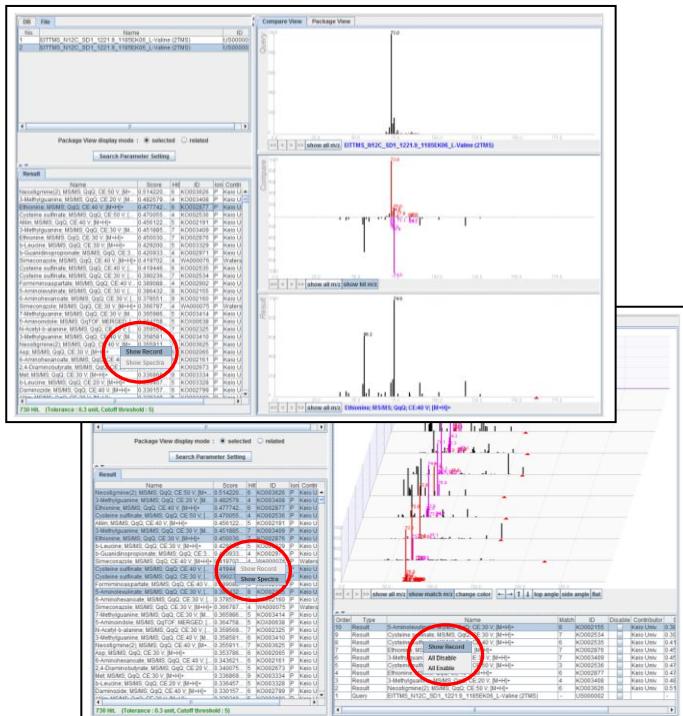
- ハイライト状態 → 青色
- 選択状態 → 水色

### - Package View でのピークハイライトと選択 -

Package View では、スペクトルが複数表示され、そのいずれかのスペクトルに存在するピークをハイライトもしくは選択することができます。このとき他のスペクトルでも  $m/z$  が完全一致するピークがあれば、そのピークもハイライトもしくは選択されます。

## «便利な機能 3 – レコード表示»

Compare View での例

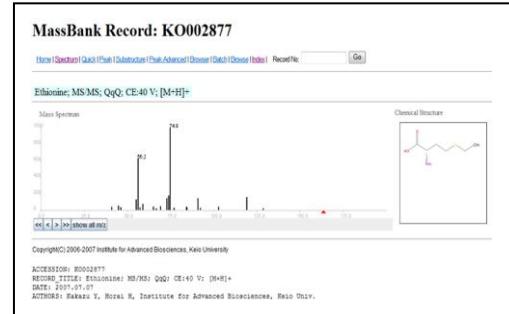


Package View での例



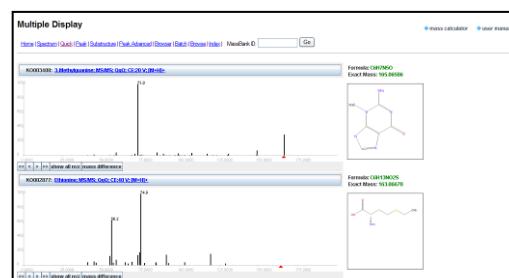
### a レコード表示

1つのスペクトルを選択している状態で右クリックメニューから“Show Record”を選択すると、スペクトル詳細が表示されます。

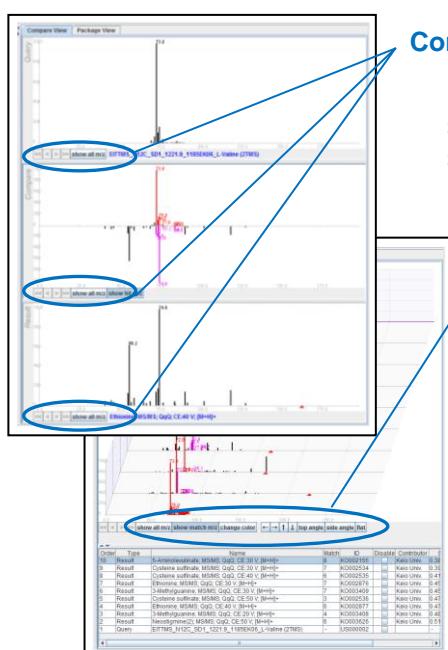


### b 複数スペクトル表示

2つ以上のスペクトルを選択している状態で右クリックメニューから“Multiple Display”をクリックすると、複数のスペクトルを並べて表示することができます。



## «便利な機能 4 – スペクトル操作»



### Compare View でのスペクトル操作用ボタン

- <<, <, >, >> … 表示位置移動（スペクトル拡大時のみ）
- show all m/z … 全ピークの  $m/z$  値表示
- show hit m/z … 一致ピークの  $m/z$  値表示

### Package View でのスペクトル操作用ボタン

- <<, <, >, >> … 表示位置移動（スペクトル拡大時のみ）
- show all m/z … 全ピークの  $m/z$  値表示
- show match m/z … 一致ピークの  $m/z$  値表示
- change color … スペクトルごとの色づけ
- $\leftarrow$ ,  $\rightarrow$ ,  $\uparrow$ ,  $\downarrow$  … アングル変更（マニュアル操作）
- top angle … アングル変更（最上視点）
- side angle … アングル変更（最横視点）
- flat … アングル変更（全スペクトル重ね合わせ）

## 2.2 簡易検索ページでのスペクトル検索

Quick Search では、簡単な入力で類似スペクトルの検索を行うことができます。

### ■検索条件の入力

**Quick Search**

Instrument type, Ionization Mode を選択すると、絞込み検索ができます。

Search by Keyword     **Search by Peak**

**Peak Data**  
273.096 22  
289.086 107  
290.118 14  
291.096 999  
292.113 162  
293.054 34  
579.169 37  
580.179 15

ピークデータを入力する

m/z and relative intensities(0-999), delimited by a space.  
Example1 Example2

① Cutoff threshold of relative intensities 5

② Number of Results 20

Instrument Type  
 EI     EI-MS     GC-EI-TOF-MS  
 ESI     CE-ESI-TOF-MS  
 ESI-IT-(MS)n  
 ESI-IT-MS/MS  
 ESI-QqQ-MS/MS  
 ESI-QqTOF-MS/MS  
 LC-ESI-IT-TOF-MS  
 LC-ESI-Q-MS  
 LC-ESI-TOF-MS/MS

Ionization Mode  
 Positive     Negative     Both

Search

①Cutoff threshold of relative intensities  
相対強度のしきい値 (1~999 の範囲で指定)  
ここで指定された強度以下のピ�クは無視します。

②Number of Results  
検索結果表示件数

半角スペース  
273.096 △ 22  
m/z                      強度  
(絶対値or相対値どちらでも可)

### ■検索結果の表示



## 2.3 バッチ処理を用いた一括スペクトル検索

Batch Service は、スペクトル検索を一括で行い、検索結果をメールで受け取るサービスです。

ユーザのクエリスペクトルが大量にある場合等に使用します。

**Batch Service**

Home | Spectrum | Quick | Peak | Substructure | Peak Advanced | Browser | Batch | Browse | Index

This service will appear as a part of Quick Search Page.

① Query File: C:\Users\... Desktop\Neg

② Mail Address: ttck.keio.ac.jp

Copyright © since 2006-2009 JST-BIRD MassBank

### ① クエリファイルの読み込み

クエリファイルは、「1.1 アプレットでのスペクトル検索」で説明した形式と同様のものを準備します。参照ボタンを押して、準備したクエリファイルを選択します。

### ② メールアドレス

検索結果を受け取るメールアドレスを入力します。

“submit”ボタンをクリックするとバッチ処理がエントリされ、処理受付メッセージが表示されます。

**Batch Service**

Home | Spectrum | Quick | Peak | Substructure | Peak Advanced | Browser

[2009/09/25 18:41:51]  
Your batch search is accepted.  
The results will be sent to ynihei@ttck.keio.ac.jp later.

検索結果は指定したメールアドレスに送信され、メールには、  
(1) 検索結果詳細と、(2) 検索結果サマリ の2種類のファイルが添付されます。

### (1) 検索結果詳細(テキストファイル)

***** MassBank Batch Service Results *****						
Request Date: 2010/10/15 14:07:51 JST						
# Instrument Type: CE-ESI-TOF-MS,ESI-IT-(MS)n,ESI-IT-MS/MS,ESI-QTOF-MS/MS,ESI-QqIT-MS/MS,ESI-QqQ-MS/MS,ESI-QqTOF-MS/MS,LC-ESI-FT-MS,LC-ESI-IT-MS/MS,LC-ESI-IT-TOF-MS,LC-ESI-Q-MS,LC-ESI-QTOF-MS/MS,LC-ESI-QqQ-MS/MS,LC-ESI-TOF-MS						
# Ion Mode: Negative						
<b>### Query 1 ###</b>						
# Name: Scan530 <b>クエリの名称</b>						
# Hit: 37						
<b>ヒットしたスペクトル一覧(スコア上位 20 まで表示)</b>						
Accession	Title	Formula	Mass	Score	Hit	
KNA00756	L-Aspartate; LC-ESI-FT-MS; NEG	C4H7NO4	133.03751	0.3545	2	
KNA00487	L-Aspartate; LC-ESI-FT-MS; NEG	C4H7NO4	133.03751	0.3104	2	
KNA00752	L-Serine; LC-ESI-FT-MS; NEG	C3H7NO3	105.04259	0.3041	2	
KNA00542	cis-Aconitate; LC-ESI-FT-MS; NEG	C6H6O6	174.01644	0.2955	2	
KNA00475	L-Serine; LC-ESI-FT-MS; NEG	C3H7NO3	105.04259	0.2942	2	
KNA00628	L-Glutamine; LC-ESI-FT-MS; NEG	C5H10N2O3	146.06914	0.2911	2	
KNA00728	L-Homoserine; LC-ESI-FT-MS; NEG	C4H9NO3	119.05824	0.2904	2	
KNA00812	Citrate; LC-ESI-FT-MS; NEG	C6H8O7	192.027	0.2885	2	
KNA00820	3-Phospho-D-glycerate; LC-ESI-FT-MS; NEG	C3H7O7P	185.99294	0.2844	2	
KNA00554	L-Homoserine; LC-ESI-FT-MS; NEG	C4H9NO3	119.05824	0.2823	2	
KNA00538	sn-Glycerol 3-phosphate; LC-ESI-FT-MS; NEG	C3H9O6P	172.01367	0.2756	2	
KNA00527	(S)-Malate; LC-ESI-FT-MS; NEG	C4H6O5	134.02152	0.2746	2	
KNA00648	L-Threonine; LC-ESI-FT-MS; NEG	C4H9NO3	119.05824	0.2716	2	
KNA00736	L-Asparagine; LC-ESI-FT-MS; NEG	C4H8N2O3	132.05349	0.2713	2	
KNA00808	cis-Aconitate; LC-ESI-FT-MS; NEG	C6H6O6	174.01644	0.2673	2	
KNA00491	L-Glutamine; LC-ESI-FT-MS; NEG	C5H10N2O3	146.06914	0.2663	2	
KNA00483	L-Asparagine; LC-ESI-FT-MS; NEG	C4H8N2O3	132.05349	0.2650	2	
KNA00696	4-Hydroxy-L-proline; LC-ESI-FT-MS; NEGC5H9NO3	C131.05824	0.2646	2		
KNA00546	D-Gluconic acid; LC-ESI-FT-MS; NEG	C6H12O7	196.0583	0.2616	2	
KNA00530	2-Oxoglutarate; LC-ESI-FT-MS; NEG	C5H6O5	146.02152	0.2587	2	

## (2) 検索結果サマリ (HTMLファイル)

## Summary Of Batch Service Results

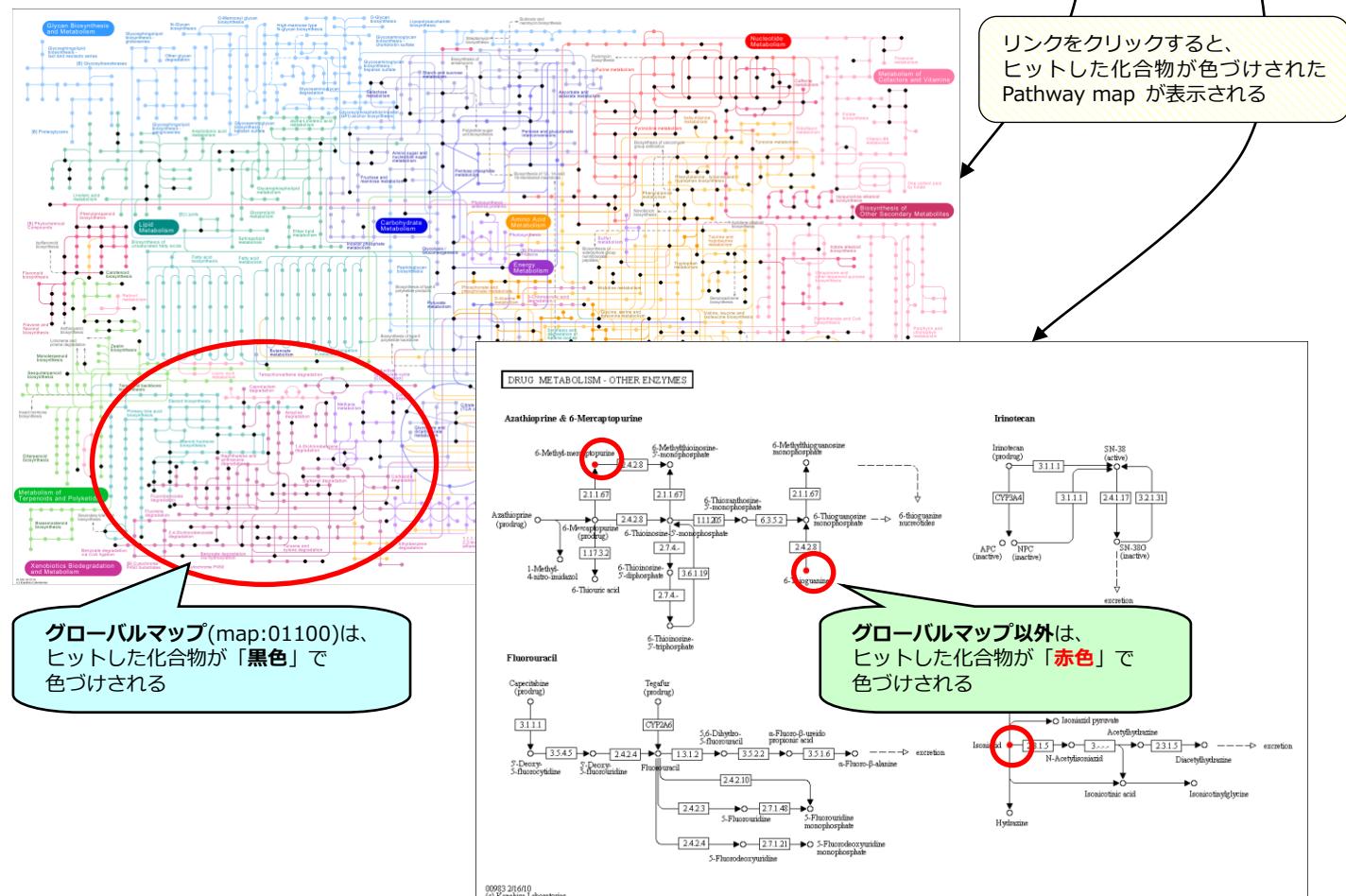
Request Date : 2010/10/15 14:07:51 JST

Instrument Type : CE-ESI-TOF-MS,ESI-IT-(MS)<sub>n</sub>,ESI-IT-MS/MS,ESI-QTOF-MS/MS,ESI-QqIT-MS/MS,ESI-QqO-MS/MS,ESI-QqTOF-MS/MS,LC-ESI-FT-MS,LC-ESI-IT-MS/MS,LC-ESI-IT-TOF-MS,LC-ESI-Q-MS,LC-ESI-QTOF-MS/MS,LC-ESI-Qq-MS/MS,LC-ESI-TOF-MS

Ion Mode : Negative

各クエリに対するヒットしたスペクトル (スコア最上位のみ) の一覧

No.	Query Name	Score	MassBank ID	Record Title	Formula	KEGG ID	Colored Pathway Maps			
							MAP1	MAP2	MAP3	MAP4
1	Scan530	0.3545	KNA00756	L-Aspartate; LC-ESI-FT-MS; NEG	C4H7NO4	C00049	map01100(28)	-	-	-
2	Scan531	0.9899	K0001625	Propionate, MS/MS; QqQ; CE10 V, [M-H]-	C3H2O2	C00804	-	-	map00640(1)	-
3	Scan532	0.2593	KNA00475	L-Serine; LC-ESI-FT-MS; NEG	C3H7NO3	C00065	map01100(28)	-	-	-
4	Scan534	0.3524	KNA00756	L-Aspartate; LC-ESI-FT-MS; NEG	C4H7NO4	C00049	map01100(28)	-	-	-
5	Scan535	0.9899	K0001625	Propionate, MS/MS; QqQ; CE10 V, [M-H]-	C3H2O2	C00804	-	-	map00640(1)	-
6	Scan536	No Hit Record								
7	Scan539	0.0751	UT002896	Phosphatidylethanolamine alkanyl 18:0-24:5; LC-MS/MS; Orbitrap; m/z: 804.59, [M-H]-, RT: 37.85; Exp: 3	C47H84N07P	-	-	-	-	-
8	Scan540	0.4198	TY000102	Cinobufotalin; LC-ESI-IT-TOF-MS, [(M+CH3COOH)-H]-	C26H34O7	-	-	-	-	-
9	Scan542	No Hit Record								
10	Scan543	0.1230	UT002896	Phosphatidylethanolamine alkanyl 18:0-24:5; LC-MS/MS; Orbitrap; m/z: 804.59, [M-H]-, RT: 37.85; Exp: 3	C47H84N07P	-	-	-	-	-
11	Scan544	0.4294	TY000102	Cinobufotalin; LC-ESI-IT-TOF-MS, [(M+CH3COOH)-H]-	C26H34O7	-	-	-	-	-
12	Scan546	0.0876	UT00244	Phosphatidylserine 18:1-22:0 / 20:0-20:1; LC-MS/MS; Orbitrap; m/z: 844.61, [M-H]-, RT: 51.49; Exp: 2	C47H80N09P	-	-	-	-	-
13	Scan547	0.5831	PR050557	Acetylsalicylic acid; ESI-OTOF-MS/MS; MERGED; [M-H]-	C9H8O4	-	-	-	-	-
14	Scan548	0.1290	TY000102	Cinobufotalin; LC-ESI-IT-TOF-MS, [(M+CH3COOH)-H]-	C26H34O7	-	-	-	-	-
15	Scan550	0.3157	TY000102	Cinobufotalin; LC-ESI-IT-TOF-MS, [(M+CH3COOH)-H]-	C26H34O7	-	-	-	-	-
16	Scan551	0.4388	WA0000541	Pentobarbital sodium salt; ZQ-MS; NEG; 30 V	C11H17N2NaO3	-	-	-	-	-
17	Scan552	0.1168	TY000116	Baicalein; LC-ESI-IT-MS/MS; [M-H]-	C21H18O11	-	-	-	-	-
18	Scan554	0.2840	TY000102	Cinobufotalin; LC-ESI-IT-TOF-MS, [(M+CH3COOH)-H]-	C26H34O7	-	-	-	-	-
19	Scan555	0.1109	UT002896	Phosphatidylethanolamine alkanyl 18:0-24:5; LC-MS/MS; Orbitrap; m/z: 804.59, [M-H]-, RT: 37.85; Exp: 3	C47H84N07P	-	-	-	-	-
20	Scan556	0.5834	PR050557	Acetylsalicylic acid; ESI-OTOF-MS/MS; MERGED; [M-H]-	C9H8O4	-	-	-	-	-
21	Scan558	No Hit Record								
22	Scan559	0.1074	UT002896	Phosphatidylethanolamine alkanyl 18:0-24:5; LC-MS/MS; Orbitrap; m/z: 804.59, [M-H]-, RT: 37.85; Exp: 3	C47H84N07P	-	-	-	-	-
23	Scan560	0.1288	PB004142	Kaempferol; MS/MS; QqQ; CE35 eV, [M-H]-	C15H10O6	C05903	map01100(28)	-	-	-
24	Scan562	No Hit Record								
25	Scan563	0.2191	UT002452	Phosphatidylserine 18:0-20:1 / 18:1-20:0; LC-(MS)3; Orbitrap; m/z: 816.57/729.15, [M-H]-/[M-Ser]-, RT: 43.92; Exp: 2	C45H86N09P	-	-	-	-	-
26	Scan564	0.4068	TY000102	Cinobufotalin; LC-ESI-IT-TOF-MS, [(M+CH3COOH)-H]-	C26H34O7	-	-	-	-	-
27	Scan566	No Hit Record								
28	Scan567	0.0201	MTD00095	taurochenodeoxycholate; MS/MS; IT; m/z: 498.3; [M-H]-	C26H45NO6S	C05465	-	-	-	map0121(1)
29	Scan568	0.4064	TY000102	Cinobufotalin; LC-ESI-IT-TOF-MS, [(M+CH3COOH)-H]-	C26H34O7	-	-	-	-	map0121(1)



### 3. 化合物の検索

#### 3.1 簡易検索ページでの化合物検索

Quick Search では、化合物名、分子式等を指定して化合物検索を行うことができます。

##### ■検索条件の入力

##### Quick Search

Search by Keyword を選択

Search by Keyword     Search by Peak

① Compound Name acetate

AND ② Exact Mass      Tolerance 0.3

AND ③ Formula  
(e.g. C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>N<sub>5</sub>, C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>N<sub>5</sub>, C<sub>5</sub>\*

[Browse](#) | [Index](#) | Record No:

Instrument type、Ionization Mode を選択すると、絞込み検索ができます。

##### Instrument Type

EI     EI-MS     GC-EI-TOF-MS

ESI     CE-ESI-TOF-MS  
 ESI-(MS)n     ESI-IT-MS/MS  
 ESI-QqT-MS/MS     ESI-QqQ-MS/MS  
 ESI-QqTOF-MS/MS     LC-ESI-T-TOF-MS  
 LC-ESI-Q-MS     LC-ESI-TOF-MS/MS

##### Ionization Mode

Positive     Negative     Both

##### ①Compound Name

化合物名を入力します。入力した値と部分一致するものを検索します。

##### ②Exact Mass , Tolerance

化合物の質量とその誤差範囲を入力します。

##### ③Formula

化合物の分子式を入力します。Formula は最初に"C"、続いて"H"、それ以降はアルファベット順で入力します。部分一致させたい場合は、ワイルドカード「\*」を付けます。(例) C<sub>5</sub>H\*N<sub>5</sub>

##### ■検索結果の表示



##### Quick Search Results

[Home](#) | [Spectrum](#) | [Quick](#) | [Peak](#) | [Substructure](#) | [Peak Advanced](#) | [Browser](#) | [Batch](#) | [Browse](#) | [Index](#) | MassBank ID:  Go

[mass calculator](#) [user manual](#)

##### Search Parameters :

Compound Name: acetate

Instrument Type: GC-EI-TOF-MS

Ionization Mode: Positive

[Edit / Resubmit Query](#)

Results : 4 Hit. (1 - 4 Displayed)

別名も含め一致しているものが表示される

[Multiple Display](#) [Spectrum Search](#)

First Prev 1 Next Last (Total 1 Page)

▼ Results End

	Name	Formula / Structure	ExactMass	ID
<input type="checkbox"/>	3,4-dihydroxyphenylacetic acid	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub> 	168.04226	
<input type="checkbox"/>	4-Hydroxyphenylacetic acid	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub> 	152.04734	
<input type="checkbox"/>	Indole-3-acetic acid	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub> 	175.06333	

First Prev 1 Next Last (Total 1 Page)

▲ Results Top

### 3.2 化学構造式による化合物検索

Substructure Search では、入力した化学構造式を含む化合物を検索することができます。

#### ■検索条件の入力

**Substructure**

Query1: 

Query2: 

AND

Edit Molfile Clear

**① π電子数の比較**  
Comparison of pi-electron for each atom number in query = number in target  
\* Double and triple bound is translated to pi-electrons of the bonded atoms.

Copyright 2008 by K. Tanaka and S. Kanaya, NIST, Japan

**Peak Search (Option)**  
m/z:  ,  ,   
Tolerance of m/z: 0.3  
Search

**② Peak Search オプション**

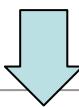
#### ① π電子数の比較

- クエリ化学構造式 = ターゲット化学構造式(デフォルト)
- クエリ化学構造式 ≠ ターゲット化学構造式
- 比較しない

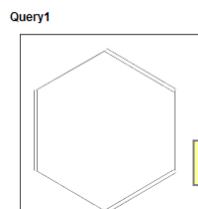
#### ② Peak Search オプション

ピーク検索と組合せて検索する場合は、m/zを指定します。

Instrument type や Ionization Mode を選択すると、絞込み検索ができます。



#### ■検索結果の表示



Edit / Resubmit Query

Results : 48 Hit. (1 - 42 Displayed)

Open All Tree Multiple Display Spectrum Search

First Prev 1 2 Next Last (Total 2 Page)

▼ Results End

	Name	Formula / Structure	ExactMass	ID
<input type="checkbox"/>	(R)-(-)-Phenylephrine	C9H13NO2 	167.09463	
<input type="checkbox"/>	1,10-Phenanthroline	C12H8N2 	180.06875	

#### クエリ化学構造式の入力

##### 1. エディタで書く

Query1

JME Molecular Editor, Novartis Pharma AG

OK CANCEL JME Editor courtesy of Peter Ertl, Novartis



または、

##### 2. Molfileを読み込む

Read Molfile

参照

①参照ボタンをクリック

ファイルのアップロード

OK CANCEL

②ファイルを選択

お気に入りリンク: SamplePlugin, Visual Studio 2008, services, Apache2, バックアップ, api, classes, 詳細

名前: K0000001.mol, K0000002.mol, K0000003.mol, K0000004.mol, K0000005.mol, K0000006.mol, K0000007.mol, K0000008.mol, K0000009.mol, K0000010.mol, K0000011.mol

更新日時: 2008-01-01 2008-01-01 2008-01-01 2008-01-01 2008-01-01 2008-01-01 2008-01-01 2008-01-01 2008-01-01 2008-01-01

種類: mol, mol, mol, mol, mol, mol, mol, mol, mol, mol

サイズ: 23.000034, 35.000035, 36.000036, 37.000037, 38.000038, 39.000039, 40.000040, 41.000041, 42.000042, 43.000043

フォルダ: 新しいフォルダ

ファイル名(1): K0000002.mol

## 4. ピーク検索

### 4.1 数値 $m/z$ によるピーク検索

Peak Search では、 $m/z$  または  $m/z$  の差を数値で指定し、ピークを検索することができます。

#### ■検索条件の入力

- ①  Search of "Peaks"  Peak Differences  
 ②  Search by "m/z-Value"  Molecular Formula

③	<b><math>m/z</math></b>	<b>Formula</b>
AND	79.05477	C6H7
AND		
④	<b>Rel.Intensity</b> 100	<b>Tolerance</b> 0.3
<input type="button" value="Reset"/>		
<input type="button" value="Search"/>		

#### ■検索結果の表示

Results : 313 Hit. ( 1 - 46 Displayed )

First Prev 1 2 3 4 5 6 7 8 9 Next Last ( Total 9 Page )

	Name	Formula
1-Adamantanamine	C10H17N	
MS/MS: QqQ; CE:40 V; [M+H]+		
MS/MS: QqQ; CE:50 V; [M+H]+		
MS/MS: QqTOF; MERGED: [M+H]+		
1-Methyladenine	C6H7N5	
MS/MS: QqQ; CE:40 V; [M+H]+		
MS/MS: QqQ; CE:50 V; [M+H]+		

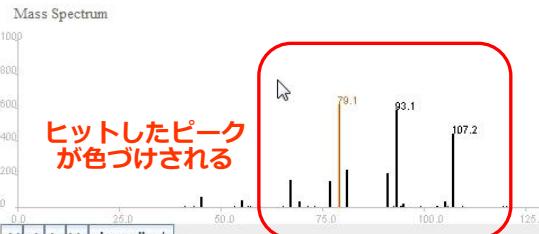
#### ■スペクトルの表示

Peak Search の場合

**MassBank Record: KO002186**

[Home](#) | [Spectrum](#) | [Quick](#) | [Peak](#) | [Substructure](#) | [Peak Advanced](#) | [Browser](#) | [Batch](#) | [Browse](#) | [Index](#)

1-Adamantanamine; MS/MS; QqQ; CE:40 V; [M+H]+



ACCESSION: KO002186  
 RECORD\_TITLE: 1-Adamantanamine; MS/MS; QqQ; CE:40 V; [M+H]+  
 DATE: 2007.07.07  
 AUTHORS: Kakazu Y, Horai H, Institute for Advanced Bioscience  
 COPYRIGHT: Copyright(C) 2006-2008 Institute for Advanced Bios

#### ①Search of "Peaks" または "Peak Differences"

$m/z$  で検索する場合は"Peaks"を、 $m/z$  の差で検索する場合は"Peak Differences"を選択します。

#### ②Search by "m/z-Value" または "Molecular Formula"

$m/z$  の数値を元に検索したいため、"m/z-Value"を選択して下さい。

#### ③m/z

ピークの  $m/z$  値を指定します。6つまで指定でき、"AND"または"OR"条件で検索が可能です。

#### ④Rel. Intensity

ここで指定された強度以下のピークは無視します。値は1~999の範囲で相対強度を指定します。

#### ⑤Tolerance

$m/z$  の誤差範囲を指定します。

#### 分子式から $m/z$ への変換

分子式を入力すると、自動的に計算した精密質量値（小数点以下第六位切り捨て）が  $m/z$  入力ボックスに入れます。

Instrument type, Ionization Mode を選択すると、絞込み検索ができます。

Peak Difference Searchの場合

**MassBank Record: KO002304**

[Home](#) | [Spectrum](#) | [Quick](#) | [Peak](#) | [Substructure](#) | [Peak Advanced](#) | [Browser](#) | [Batch](#) | [Browse](#)

5-Aminoimidazole-4-carboxamide-1-ribofuranosyl 5'-monophosphate



ACCESSION: KO002304  
 RECORD\_TITLE: 5-Aminoimidazole-4-carboxamide-1-ribofuranosyl 5'-monophosphate  
 DATE: 2007.07.07

## 4.2 分子式によるピーク検索

Peak Search では、数値  $m/z$  の代わりにイオンやニュートラルロス（中性脱離分子）の分子式を指定してピークを検索することもできます。

### ■検索条件の入力

#### イオンによる検索を行う場合

Search of  Peaks  Peak Differences  
 Search by  m/z-Value  Molecular Formula

Ion 1 Formula <b>C5H6N5</b>	Ion 2 Formula <b>C3H6N</b>	Ion 3 Formula	Ion 4 Formula
AND		AND	AND
<input checked="" type="radio"/> AND	<input type="radio"/> OR		

\* The targets of Peak Search Advanced are only Keio and Riken data.

**分子式を入力する補助機能については次ページを参照**

**Search**

CH<sub>3</sub>COOHを入力した場合は、C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>に変換して検索します。

#### ニュートラルロスによる検索を行う場合

Search of  Peaks  Peak Differences  
 Search by  m/z-Value  Molecular Formula

Neutral Loss 1 Formula <b>C4H7NO2</b>	Neutral Loss 2 Formula <b>CH4S</b>	Neutral Loss 3 Formula	Neutral Loss Formula
AND		<input checked="" type="radio"/> SEQUENCE	AND

\* The targets of Peak Search Advanced are only Keio and Riken data.

"SEQUENCE"を選択した場合、 $m/z$  の差がNeutral Lossで指定した分子式と一致するピーク対が、Neutral Loss 1, 2, 3 の順番でマススペクトルの高質量側から出現しているマススペクトルを検索します。  
(上記の場合、CH<sub>4</sub>H<sub>7</sub>NO<sub>2</sub>→CH<sub>4</sub>Sの順)

### ■検索結果の表示

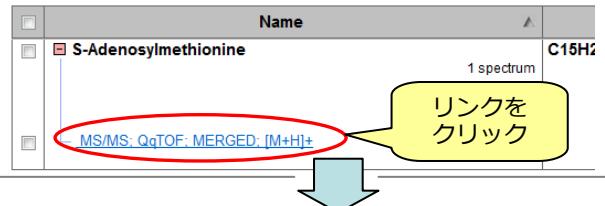
Query :

Ion 1 C5H6N5	AND	Ion 2 C3H6N
-----------------	-----	----------------

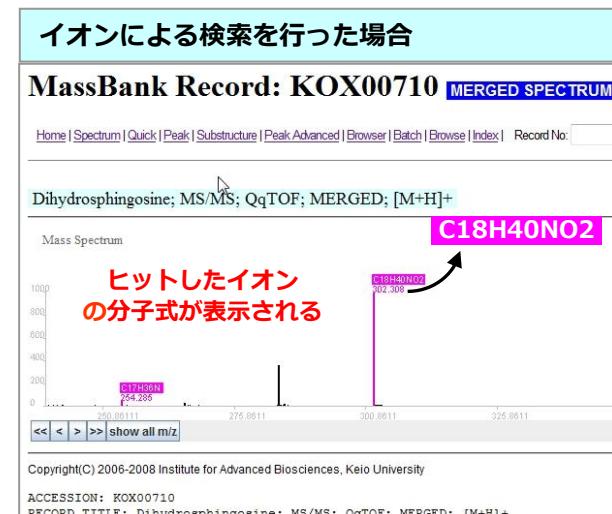
[Edit / Resubmit Query](#)

Results : 1 Hit. (1 - 1 Displayed)

First Prev 1 Next Last (Total 1 Page)



### ■スペクトルの表示



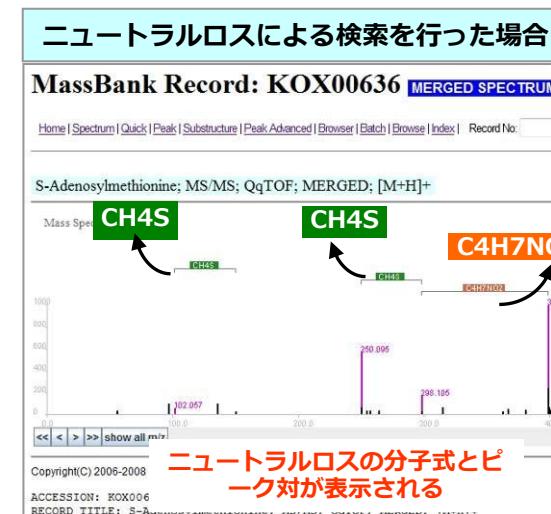
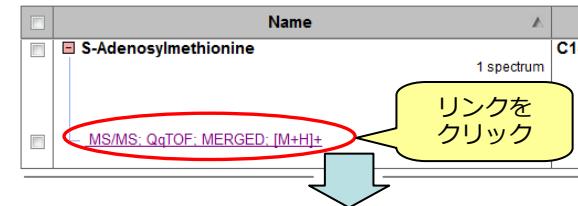
Query :

Neutral Loss 1 C4H7NO2	Neutral Loss 2 CH4S
---------------------------	------------------------

[Edit / Resubmit Query](#)

Results : 1 Hit. (1 - 1 Displayed)

First Prev 1 Next Last (Total 1 Page)



\* 分子式入力の補助機能について

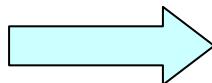
*m/z* 値 (数値) を入力すると、その値と Exact mass が一致する分子式 (注を参照) の候補を表示します。

例、Search of "Peaks" かつ、Search by "Molecular Formula" モードで、入力欄に "141" と入力した場合

Search of <input checked="" type="radio"/> Peaks <input type="radio"/> Peak Differences		
Search by <input type="radio"/> m/z-Value <input checked="" type="radio"/> Molecular Formula		
Ion 1 Formula 141	Ion 2 Formula AND	Ion 3 Formula AND
C6H5O2S (141.00103) <input type="checkbox"/> C7H6ClO (141.01072) <b>C6H5O4 (141.01878)</b> <input checked="" type="checkbox"/> C9H5N2 (141.04527) C6H9N2O2 (141.0664) C11H9 (141.07043) C6H13N4 (141.11402) C9H17O (141.12794) C8H17N2 (141.13917)		
* The targets of Peak Search Advanced are only Keio and Riken data.		
<input type="button" value="Search"/>		

Copyright © since 2006-2010 JST-BIRD MassBank

"C6H5O4"をクリック



Search of <input checked="" type="radio"/> Peaks <input type="radio"/> Peak Differences		
Search by <input type="radio"/> m/z-Value <input checked="" type="radio"/> Molecular Formula		
Ion 1 Formula <b>C6H5O4</b>	Ion 2 Formula AND	Ion 3 Formula AND
<input checked="" type="radio"/> AND <input type="radio"/> OR		
* The targets of Peak Search Advanced are only Keio and Riken data		
<input type="button" value="Search"/>		

Copyright © since 2006-2010 JST-BIRD MassBank

- Exact massが "141" で始まる分子式の候補が表示される  
(注、Exact massが140.9などの四捨五入によって141と扱える分子式の場合、  
文字列検索を用いているため、この例ではこの分子式は表示されない)
- Search for "Neutral loss"モードでも使用可能

## 5. ESI-MS<sup>2</sup> から代謝物を推定

### 5.1 ピークと化学部分構造の関係を用いた推定

MassBank はこれまで一次代謝物について分析した ESI-MS<sup>2</sup> データの化学的注釈をおこなって、「プロダクトイオン（ピーク）と部分化学構造との関係」を解析、蓄積してきました。このツールはこの関係を利用してクエリとして入力した ESI-MS<sup>2</sup> データから一次代謝物やその誘導体を推定します。

クエリ ESI-MS<sup>2</sup> データで観察されたピークから、未知代謝物の化学構造にふくまれる部分化学構造を推定します。さらに分子イオン（前駆イオン）から分子式を推定します。これら 2 つの化学的条件を満たす代謝物を KNApSack データベース ([http://kanaya.naist.jp/knapsack\\_jsp/top.html](http://kanaya.naist.jp/knapsack_jsp/top.html)) から探し出して、未知代謝物候補として出力します。

このツールの利用にあたっての注意点は以下のとおりです。①マススペクトルは高分解能装置で測定されたデータであること(少なくとも  $m/z$  の小数第二位までは精度良く測定されていること)、②分子イオン（前駆イオン）が“M±H”であること、③適度にフラグメンテーションが観察されていること(相対強度 5%以上のプロダクトイオンが 10 個以上観察されること)。④未知代謝物を異なる CID 条件で測定した二つ以上の ESI-MS<sup>2</sup> データを入力することを推奨します。このツールは入力されたデータを自動的に重ね合わせて人工的な ESI-MS<sup>2</sup> データを作り、これをクエリデータとします。

次に示す例は、1 つの未知代謝物を異なる CID 条件で分析した 3 つの ESI-MS<sup>2</sup> データを入力し、重ね合わせて、1 つのクエリデータを人工的に作成して推定したものです。

## Metabolite Identification

[Home](#) | [Spectrum](#) | [Quick](#) | [Peak](#) | [Substructure](#) | [Identification](#) | [Browser](#) | [Batch](#) | [Browse](#) | [Index](#) | MassBank ID:  Go

[1]

by Peak-Substructure Relationships

by Annotated Neutral Losses

[2]

Query File

[参照...](#)

[File Read](#)

[sample file](#) [sample archive](#)



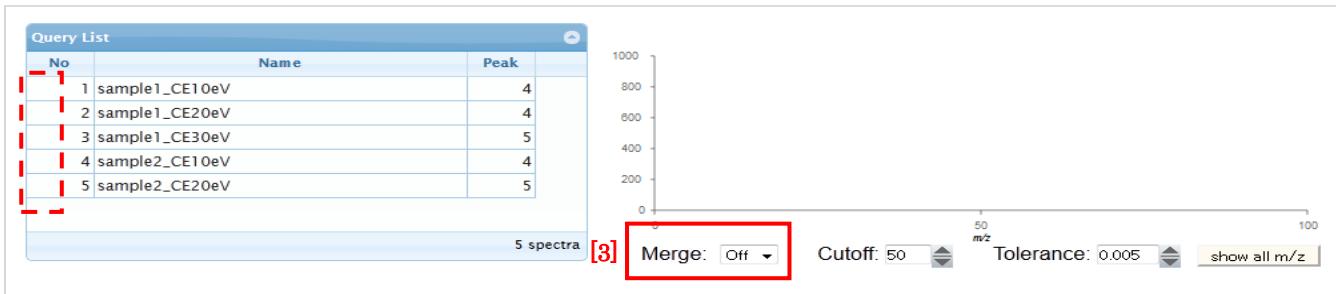
読み込んだ ESI-MS<sup>2</sup> データ  
の一覧が表示される

[1] “by Peak-Substructure Relationships”を選択

[2] クエリファイル\*の読み込み

- クエリファイルを選ぶ
- “File Read”をクリック

\*クエリファイルの作成法は「2.1 (1) クエリファイル準備」を参照  
してください。



Precursor  $m/z$ :  Ion Mode: [Positive](#)

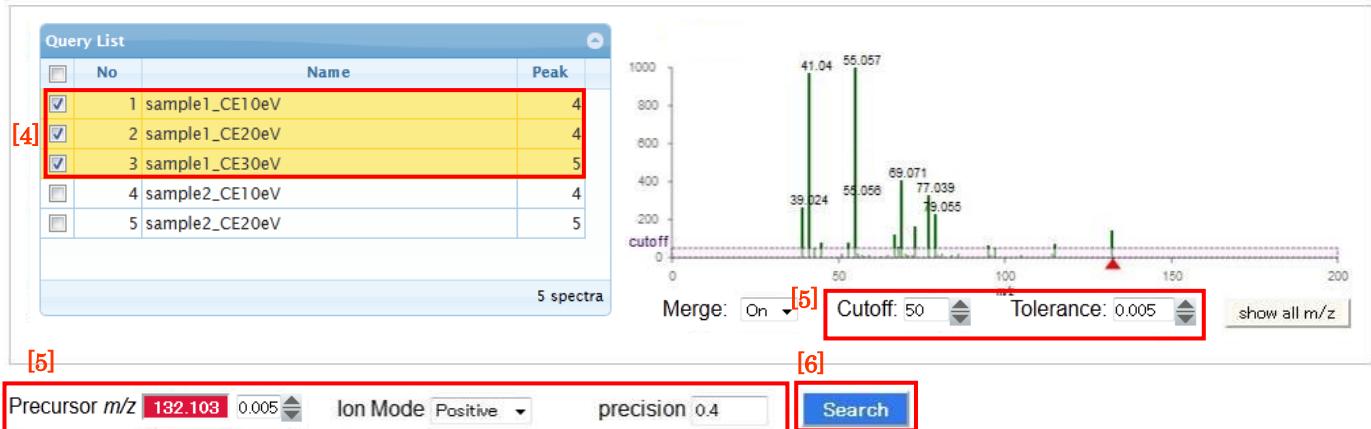
Ion Mode: [Positive](#)

precision: 0.4

[Search](#)



[3] “Merge On”に設定すると、チェックボックスが表示されます。



#### [4] チェックボックスにチェックを付け、同定する未知代謝物のピークデータを選択

- データを選ぶとクエリに追加され、自動的に重ね合わせされます。
- データを選ぶごとに、重ね合わせされたマススペクトルがウィンドウの右側に表示されます。

#### [5] 各パラメータに値を入力 (パラメータの説明は下表を参照)

- 全てのパラメータが正しい値になっていることを確認する。
- "Precursor m/z" の値を入力

#### [6] "Search" ボタンをクリックして検索を開始

##### - 検索パラメータ -

###### ・ Merge :

複数のマススペクトルを重ね合わせ、それをクエリとして検索することができます。“On”にすると、画面左側のクエリ一覧にチェックボタンが現れますので、重ね合わせたいスペクトルを選択してください。

###### ・ Cut off :

相対強度が入力した値未満のピークは検索対象から除外されます。  
\*例外的にPrecursor m/zは相対強度に関係なく検索対象に含まれます。

###### ・ Tolerance :

ピークのm/zから分子式へ変換する際の質量確度の許容範囲です。

###### ・ Precursor m/z (左枠) :

前駆イオンの m/z の数値が自動的に入力されます。スペクトルの最右端にあるピーク（ピークの相対強度が50以上）の m/z が自動的に入力されますが、**値が適切でない場合には手動で正しい値に修正して下さい。**

###### ・ Precursor m/z (右枠) :

Precursor m/z から化合物の質量で絞り込む際の許容範囲です。

###### ・ Ion Mode :

測定モードを “Positive”, “Negative” から選択します。

###### ・ precision :

値を大きくするほどFalse Positiveが減少しますが、False Negativeは増加する可能性があります。  
値は0.1～1.0の範囲で入力してください。 \* 詳細については次ページを参照してください

## ■検索結果

Matched Formulae : 4

m/z	78.0355	80.0508	96.0458	123.0560
Formula	C5H4N	C5H6N	C5H6NO	C6H7N2O
No.	ion-pos-0013	ion-pos-0013	ion-pos-0013	ion-pos-0013

Hit Relationships : 2

ion-pos-0013 Substructure



Formula, Precision & Recall, TP

C5H4N	0.66	0.68	27
C6H7N2O	0.67	0.1	4
C5H6N	0.71	0.38	15

ion-pos-0028 Substructure



Formula, Precision & Recall, TP

C5H6NO	0.55	0.55	11
--------	------	------	----

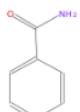
検索対象となったクエリのピークのm/z  
ピークのm/z±Toleranceに該当する分子式  
推定された部分構造(A欄)のID

\* マウスカーソルを乗せることで、対応するA欄の  
部分構造が強調表示される

**A**

Results : 3 Hit.

Isonicotineamide

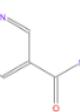


Formula : C6H6N2O  
Exact Mass : 122.048

DB Links  
KEGG : [C02421](#)

Hit Relationship-No.  
ion-pos-0013

Nicotinamide

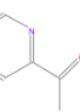


Formula : C6H6N2O  
Exact Mass : 122.04801

DB Links  
KNAPSAck : [C00000209](#)  
KEGG : [C00153](#)

Hit Relationship-No.  
ion-pos-0013

Picolinamide



Formula : C6H6N2O  
Exact Mass : 122.048

DB Links  
KEGG : [C01950](#)

Hit Relationship-No.  
ion-pos-0013

**B**

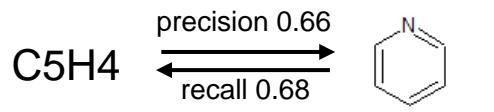
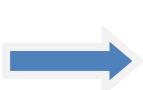
A : クエリのピークから推定された部分構造式。未知代謝物の化学構造にこれらの部分構造が含まれていると推定される。  
\* その部分構造をふくむ化合物が B 欄に表示されなかった場合には、グレー地で表示されます。

B : KNApSAcK と KEGG に収集されている代謝物のうち、Precursor m/z と A 欄の部分構造を満たす化合物を表示。

[A 欄の表、パラメータの見方]

Formula, Precision & Recall, TP

C5H4N	0.66	0.68	27
-------	------	------	----



約 1000 の ESI-MS<sup>2</sup> データを解析した「ピーク(分子式)と部分化学構造との関係」をまとめた統計情報を表示している。

### Precision (例では"0.66")

・・・ピーク(m/z=78.0355)「C5H4N」が観察された全てのマススペクトルのうち、

分析した化合物の化学構造が「ピリジン環」を含んでいたマススペクトルの割合が 0.66(66%)であることをあらわす。

### Recall (例では"0.68")

・・・構造式に「ピリジン環」が含む化合物のマススペクトルのうち、

ピーク「C5H4N」が観察されたマススペクトルの割合が 0.68(68%)であることをあらわす。

### TP (True Positive, 例では"27")

・・・ピーク「C5H4N」が観察され、かつ化学構造に「ピリジン環」を含む化合物のマススペクトルの総数が 27 であることをあらわす。

\* TP の値から、C5H4N のピークが観察されたマススペクトル数、およびピリジン環が含まれていたその数を算出できる

(例えは前者の数は、0.66 = 27/x , x ≈ 41)。これらの数が極端に少ない場合には統計情報の信頼性も低くなるため注意

## 5.2 中性脱離分子を利用した推定

細胞内では1つの代謝物を化学修飾することによってさまざまな誘導体化合物が合成されます。誘導体のマススペクトルはもとの代謝物のマススペクトルと似ていますが、対応するピークが化学修飾によってズレ ( $\Delta u$ ) を生じます。このような類似性は通常の類似性検索（「2. 類似性スペクトルの検索」）によって見つけることもできません。また「5.1 ピークと化学部分構造の関係」を利用して未知代謝物を推定することができません。本ツールは対応するピークにズレがある場合に未知代謝物を推定しようとするものです。

しかしどれだけズれている ( $\Delta u$ ) のか、あらかじめ知ることはできません。そこで本ツールでは「2つのピークの差」を利用することによってズレを回避しています。本タイトルの「中性脱離分子」はピークの差をとることをあらわしています。

ピークの差を利用したマススペクトルの類似性検索は難しい点があります。すなわち、任意に2つのピーク（ピークのペア）を選ぶ組み合わせの数が極めて多いことです。さらに  $m/z$  の測定誤差を考慮すると、クエリとターゲットのマススペクトルの間で同じ差を与えるピークのペアを見つけることはとても複雑なアルゴリズムになるうえに、計算時間が大きくなるために実用的ではありません。

本ツールが検索対象とするMassBank ESI-MS<sup>2</sup>データはいずれもピークが分子式であらわされている化学注釈データです。クエリ ESI-MS<sup>2</sup>データについても、ピークに分子式を推定することができる高い質量確度で測定されたデータであることが望まれます。測定誤差を含む数値 ( $m/z$ ) の代わりに分子式によってピークを表現することができます。そうすることによってピークの差をとる組み合わせを少なくするとともに、測定誤差を考慮する必要がなくなりました。

さらに低質量のピーク ( $50 < m/z < 99$ ) については、一致するピークを考慮しています。MassBank にクエリと同じ化合物のマススペクトルが無い場合には、表示された化合物の化学構造の傾向を探ることによって未知代謝物のヒントを得ることができます。

### ■検索条件の入力

## Metabolite Identification

[Home](#) | [Spectrum](#) | [Quick](#) | [Peak](#) | [Substructure](#) | [Identification](#) | [Browser](#) | [Batch](#) | [Browse](#) | [Index](#) | MassBank ID:

by Peak-Substructure Relationships     by Annotated Neutral Losses [1]



Query File

参照...

File Read

sample file

sample archive

Search similar spectra on a neutral loss-to-neutral loss basis

Retrieves spectra similar to user's spectrum in terms of molecular formulae.

This search is helpful to predict the chemical structure of unknown metabolites.

[1] “by Annotated Neutral Losses”を選択。

[2] - [6] は「5.1 ピークと化学部分構造の関係」と同一

## ■検索結果

hide ボタン

Matched neutral losses : 6  
H3N(17.027), CH2N2(42.022), C4H6(54.047), CH5N3(59.048), C3H7O(59.05), C4H9N(71.074)

Results : In descending order of number of matched neutral loss.  
hide

No. ① PR100307	No. 2 KOX00653	No. 3 KOX00672
Agmatine; LC-ESI-QTOF-MS/MS; CE:Ramp 5-6 ...  Neutral Loss Hits : 5 H3N(17.027) CH2N2(42.022) C4H6(54.047) CH5N3(59.048) C4H9N(71.074)  Formula : C5H14N4 Exact Mass : 130.12185	Agmatine; MS/MS; QqTOF; MERGED; [M+H]+  Neutral Loss Hits : 5 H3N(17.027) CH2N2(42.022) C4H6(54.047) CH5N3(59.048) C4H9N(71.074)  Formula : C5H14N4 Exact Mass : 130.12185	Buformin; MS/MS; QqTOF; MERGED; [M+H]+  Neutral Loss Hits : 4 H3N(17.027) CH2N2(42.022) CH5N3(59.048) C4H9N(71.074)  Formula : C6H15N5 Exact Mass : 157.13275
<b>No. 4 KOX00641</b> N-Acetylputrescine; MS/MS; QqTOF; MERGED ...  Neutral Loss Hits : 3 H3N(17.027) C4H6(54.047) C4H9N(71.074)  Ion C4H10N(72.08132)  Formula : C6H14N2O Exact Mass : 130.11061	<b>No. 5 KOX00781</b> Metformin; MS/MS; QqTOF; MERGED; [M+H]+  Neutral Loss Hits : 3 H3N(17.027) CH2N2(42.022) CH5N3(59.048)  Ion CH6N3(60.05617)  Formula : C4H11N5 Exact Mass : 129.10145	<b>No. 6 KOX00737</b> β-Guanidinopropionate; MS/MS; QqTOF; MERGED ...  Neutral Loss Hits : 3 H3N(17.027) CH2N2(42.022) CH5N3(59.048)  Ion CH6N3(60.05617)  Formula : C4H9N3O2 Exact Mass : 131.06948

\*ヒットしたMassBankレコードが最大で30件表示されます

① **Neutral Loss** : クエリの中性脱離分子の分子式と一致した「分子式」と「一致数」を表示  
Neutral Loss の一致数が多いほど、順位が上位に位置づけられます。

② **Ion** : クエリで観察されたピークの分子式（整数  $m/z$  50~99 の範囲内のピークのみが対象）と一致した分子式を表示

A. 表示された 30 件のレコード中、Ion の一致数が最大のレコードに対しては、②の表示範囲が赤字点線で囲まれる  
(例では、この一致数が最大の"2"である 1,2,3,6 位のレコードが該当)。

B. Ion の一致数がゼロであるレコードに対しては、レコード全体が灰色に塗りつぶされます。  
hide ボタン (1 位のレコードの上部) をクリックすると、これに該当するレコードの非表示が可能です。

C. クエリのスペクトルにおいて、整数  $m/z$  50~99 の範囲内にピークが 1 つも存在しない場合、  
"NO peaks within  $m/z$  50-99 in query." のメッセージが表示されます。

D. クエリのスペクトルにおいて、整数  $m/z$  50~99 の範囲内にピークが存在するものの、そこから分子式が全く検出されなかった場合、"NO matched ions to peaks within  $m/z$  50-99 in query." のメッセージが表示されます。

③ **Exact Mass**

分子量の整数値に"positive"の場合+1 を、"negative"の場合-1 にした値が、 検索パラメータの"Precursor  $m/z$ "の値と一致した場合には赤地の白抜き文字 (例では  $130+1=131$  で一致)、"Precursor  $m/z$ "の値から 50 以上離れている場合には灰地の白抜き文字で表示されます。

④ **順位**

① 分子式の一致数 (例では1位のレコードでは5つ一致) が多いほど上位に表示されます。  
もし一致数が同数ならば、③の整数値に"positive"の場合+1 を、"negative"の場合-1 にした値が"Precursor  $m/z$ " の値に近いレコードほど上位に表示されます。

### クエリと同一、もしくは類似の化学構造であることの条件

- ・順位が上位であること (上記②のAに該当していると尚良し)
- ・上記②のBに該当しないこと
- ・上記③が赤字の白抜き文字で表示されること (同一の化学構造である場合にはこの表示が必須)

## 6. データ一覧からの検索

### 6.1 カテゴリ検索

Record Index では、登録されている全てのデータをデータ提供機関、分析装置種別、MS 種別、Merged スペクトル、イオン化モード、アルファベットごとに分類分けしてあり、各リンクをクリックするとあらかじめ分類分けされたスペクトルを検索結果として表示します。

**Record Index**

mass calculator user manual

Home | Spectrum | Quick | Peak | Substructure | Advanced | Browser | Batch | Browse | Index | MassBank ID:  Go

<b>Contributor</b>	: <a href="#">Chubu Univ.</a> (2,628) <a href="#">IMM, CAMS &amp; PUMC, China</a> (67) <a href="#">Kyoto Univ.</a> (185) <a href="#">NAIST</a> (817) <a href="#">Osaka Univ.</a> (502) <a href="#">Tottori Univ.</a> (16) <a href="#">Univ. Toyama</a> (253)	<a href="#">Fac. Eng. Univ. Tokyo</a> (12,379) <a href="#">Kazusa</a> (273) <a href="#">Leibniz IPB</a> (528) <a href="#">Nihon Univ.</a> (75) <a href="#">PFOS research group</a> (277) <a href="#">UOEH</a> (35) <a href="#">Waters</a> (2,994)	<a href="#">Fukuyama Univ.</a> (340) <a href="#">Keio Univ.</a> (5,629) <a href="#">Metabolon</a> (149) <a href="#">Osaka MCHRI</a> (20) <a href="#">RIKEN</a> (1,722) <a href="#">Univ. Connecticut</a> (510)	
<b>Instrument Type</b>	: <a href="#">CE-ESI-TOF</a> (20) <a href="#">EI-FEBEB</a> (12) <a href="#">ESI-QqQ-MS/MS</a> (52) <a href="#">FAB-EB</a> (5) <a href="#">FI-B</a> (1) <a href="#">LC-ESI-IT</a> (515) <a href="#">LC-ESI-Q</a> (2,721) <a href="#">LC-ESI-QTOF</a> (2,742)	<a href="#">CI-B</a> (796) <a href="#">ESI-IT-MS/MS</a> (149) <a href="#">ESI-QqTOF-MS/MS</a> (510) <a href="#">FAB-EB</a> (173) <a href="#">GC-EI-TOF</a> (1,016) <a href="#">LC-ESI-ITFT</a> (3,006) <a href="#">LC-ESI-QIT</a> (378) <a href="#">MALDI-TOF</a> (17)	<a href="#">EI-B</a> (11,636) <a href="#">ESI-QqIT-MS/MS</a> (15) <a href="#">FAB-B</a> (26) <a href="#">FD-B</a> (41) <a href="#">LC-APPI-QQ</a> (277) <a href="#">LC-ESI-ITTOF</a> (253) <a href="#">LC-ESI-QQ</a> (5,038)	
<b>MS Type</b>	: <a href="#">MS</a> (16,898)	<a href="#">MS2</a> (11,505)	<a href="#">MS3</a> (926)	<a href="#">MS4</a> (70)
<b>Merged Type</b>	: <a href="#">Normal</a> (28,560)	<a href="#">Merged</a> (839)		
<b>Ion Mode</b>	: <a href="#">Positive</a> (22,721)	<a href="#">Negative</a> (6,678)		
<b>Compound Name</b>	: <a href="#">A</a> (1,273) <a href="#">G</a> (747) <a href="#">M</a> (1,552) <a href="#">S</a> (948) <a href="#">Y</a> (8)	<a href="#">B</a> (1,117) <a href="#">H</a> (565) <a href="#">L</a> (1,389) <a href="#">I</a> (1,491) <a href="#">Z</a> (75)	<a href="#">C</a> (1,478) <a href="#">I</a> (777) <a href="#">Q</a> (471) <a href="#">U</a> (118) <a href="#">J</a> (3) <a href="#">P</a> (3,762) <a href="#">V</a> (137) <a href="#">D</a> (1,887) <a href="#">R</a> (137) <a href="#">W</a> (3) <a href="#">X</a> (50)	<a href="#">E</a> (760) <a href="#">K</a> (216) <a href="#">Q</a> (140) <a href="#">Others</a> (623) <a href="#">F</a> (395) <a href="#">L</a> (1,371) <a href="#">B</a> (262) <a href="#">X</a> (50)

#### ① Contributor

データ提供機関ごとの分類分けです。

各リンクの右側に表示されている数値は、  
登録されているスペクトル数です。

#### ② Instrument Type

分析装置種別ごとの分類分けです。

#### ③ MS Type

MS 種別ごとの分類分けです。

#### ④ Merged Type

通常のスペクトルとマージ（人工的に作成）されたスペクトルの分類分けです。

#### ⑤ Ionization Mode

イオン化モードごとの分類分けです。

#### ⑥ Compound Name

化合物名インデックスごとの分類分けです。

## 6.2 ツリー検索

Browse Page では、登録されている全てのデータをデータ提供期間ごとにツリー表示してあり、階層をたどることによって目的のスペクトルを検索することができます。

**Browse Page**

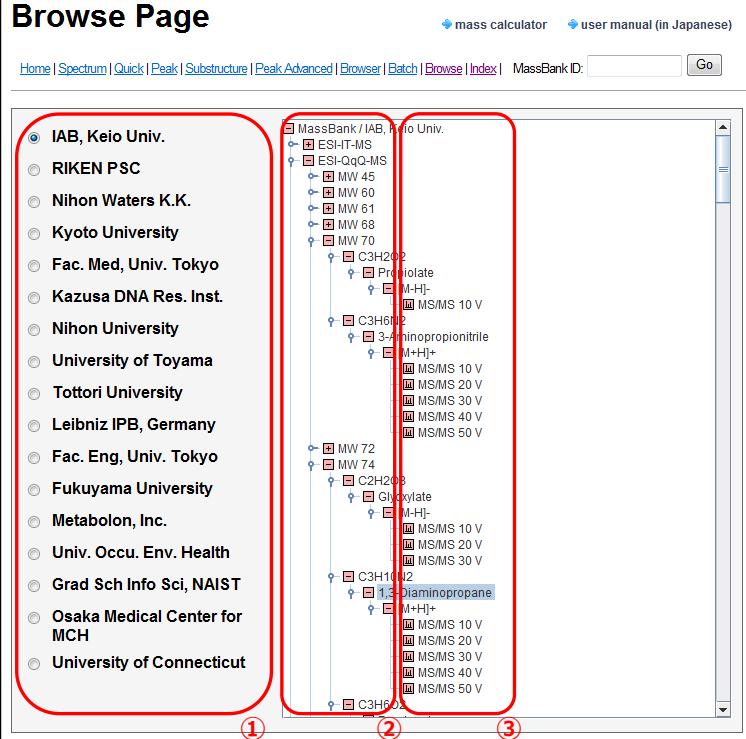
mass calculator user manual (in Japanese)

Home | Spectrum | Quick | Peak | Substructure | Peak Advanced | Browser | Batch | Browse | Index | MassBank ID:  Go

① 提供機関選択  
ラジオボタンをクリックして提供機関を選択します。

② スペクトル検索  
[+]をクリックすると下位の階層が表示されます。  
[-]をクリックすると下位の階層が非表示になります。

③ スペクトル表示  
[+]をダブルクリック、もしくは 1 つ選択した状態で“右クリック”→“Show Record”をクリックするとレコード詳細画面が表示されます。  
[+]を複数選択した状態で“右クリック”→“Multiple Display”をクリックすると Multiple Display 画面が表示されます。



[+] を1つ選択して、Ctrl キーまたは Shift キーを押しながら、他の [+] をクリックすると複数選択できます。

選択した状態で右クリックすると、以下のポップアップ画面が表示されます。

### 【1つ選択の場合】

Show Record  
Multiple Display

“Show Record”をクリックするとレコード詳細画面が表示されます。

### 【複数選択の場合】

Show Record  
Multiple Display

“Multiple Display”をクリックすると Multiple Display 画面が表示されます。

## 7. その他

### 7.1 検索結果画面

“Quick Search”、“Substructure Search”、“Peak Search”、“Peak Search Advanced”、“Record Index”で検索を行った場合、検索結果はほぼ共通の形式で表示されます。

#### «操作1»

##### 検索結果の一覧表示

**化合物一覧**

Results : 25 Hit. ( 1 - 25 Displayed )

Name	Formula / Structure	ExactMass	ID
2,4-Dimethylaniline	C8H11N	121.08910	
2,6-Diethylaniline	C10H15N	149.12045	
2,6-Dimethylaniline	C8H11N	121.08915	

すべてのツリーを展開

Open All Tree Multiple Display Spectrum Search

+アイコンをクリックすると、個別のツリーを展開

見出し部分をクリックすることによりソート(名前、分子式、精密質量順)が可能です。

**スペクトル一覧**

Results : 25 Hit. ( 1 - 25 Displayed )

Name	Formula / Structure	ExactMass	ID
2,4-Dimethylaniline	C8H11N	121.08915	
2,6-Diethylaniline	C10H15N	149.12045	
2,6-Dimethylaniline	C8H11N	121.08915	

Close All Tree Multiple Display Spectrum Search

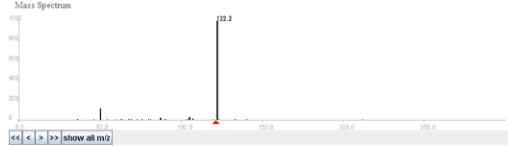
リンクをクリック

MassBank Record: K0002806

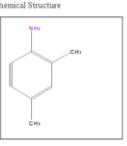
Home | Spectrum | Quick | Peak | Substructure | Peak Advanced | Browser | Batch | Browse Index | Record No. [ ] Go

2,4-Dimethylaniline; MS/MS; QqQ; CE:10 V; [M+H]+

Mass Spectrum



Chemical Structure



Copyright(C) 2006-2008 Institute for Advanced Biosciences, Keio University

ACCESSION: K0002806  
RECORD TITLE: 2,4-Dimethylaniline; MS/MS; QqQ; CE:10 V; [M+H]+  
DATE: 2007.07.07  
AUTHORS: Kakazu Y, Morai M, Institute for Advanced Biosciences, Keio Univ.  
COPYRIGHT: Copyright(C) 2006-2008 Institute for Advanced Biosciences, Keio University

個々のスペクトルのMassBankレコードが表示されます。

## «操作2»

“Multiple Display”および“Spectrum Search”との連携

Results : 25 Hit. ( 1 - 25 Displayed )

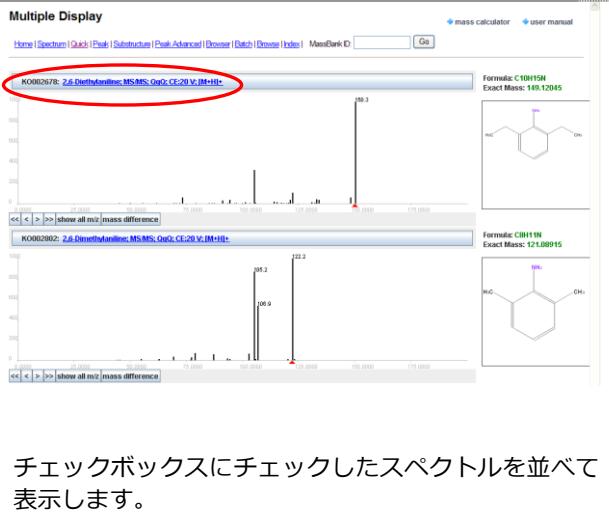
Close All Tree **Multiple Display** **Spectrum Search**

First Prev 1 Next Last (Total 1 Page)

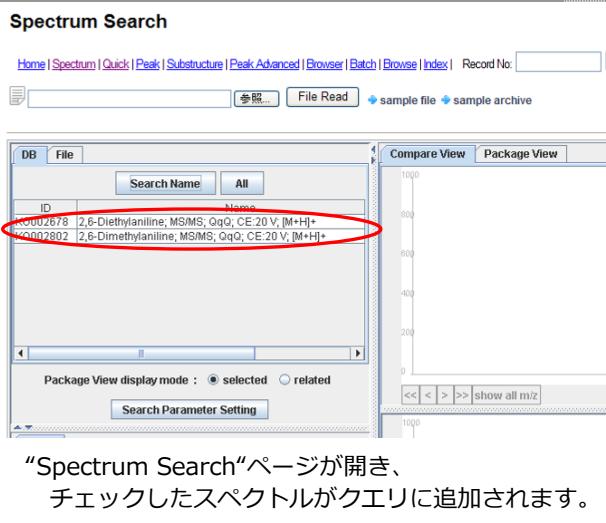
Name	Formula / Structure	②いづれかのボタンをクリック
2,4-Dimethylaniline	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N 	KO002806 KO002807 KO002808 KO002809 KO002810
2,6-Diethylaniline	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N 	149.12045 KO002677 KO002678 KO002679 KO002680 KO002681
2,6-Dimethyl-	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N 	121.08915 KO002801 KO002802 KO002803

①チェックを入れ、スペクトルを選択する

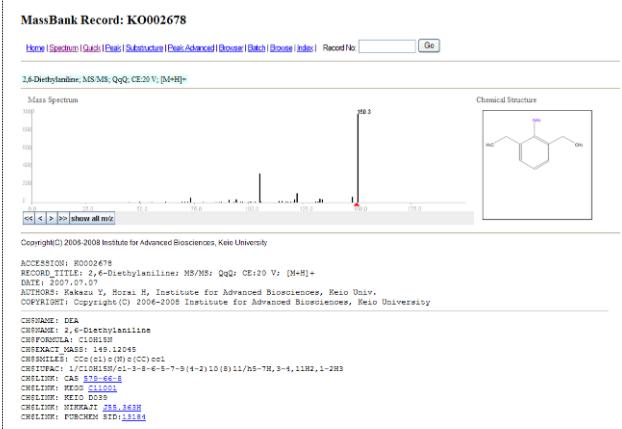
### “Multiple Display”ボタンをクリックした場合



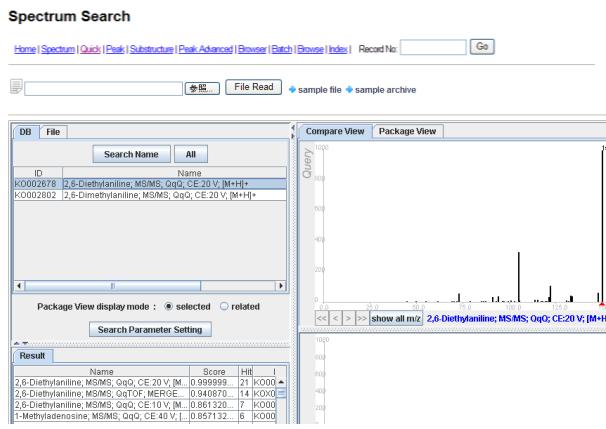
### “Spectrum Search”ボタンをクリックした場合



レコードタイトルが表示されたボタンをクリックすると、MassBankレコードが表示されます。



選択したスペクトルをクエリとして検索できます。



### «操作3»

#### 化学構造式の簡易表示

Results : 5,704 Hit. ( 1 - 182 Displayed )

First Prev 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 Next Last ( Total 28 Page ) ▾ Results End

	Name	Formula / Structure	ExactMass	ID
<input type="checkbox"/>	(9Z, 12Z)-Octadecadienoate	C18H32O2 6 spectra	280.24023	
<input type="checkbox"/>	(Aminomethyl)phosphonate	CH6NO3P 12 spectra		
<input type="checkbox"/>	(Methylthio)acetate	C3H6O2S 6 spectra		
<input type="checkbox"/>	(R)-Mandelate	C8H8O3 5 spectra	152.04734	
<input type="checkbox"/>	(S)-2-Aminobutyrate	T	103.06333	

① 化学構造式の画像の上にマウスポインターを移動する

② 拡大画像（中）が表示される  
※表示されるのはマウスポインターを化学構造式の画像の上にあるときだけです

Results : 5,704 Hit. ( 1 - 182 Displayed )

Total 28 Page ) ▾ Results End

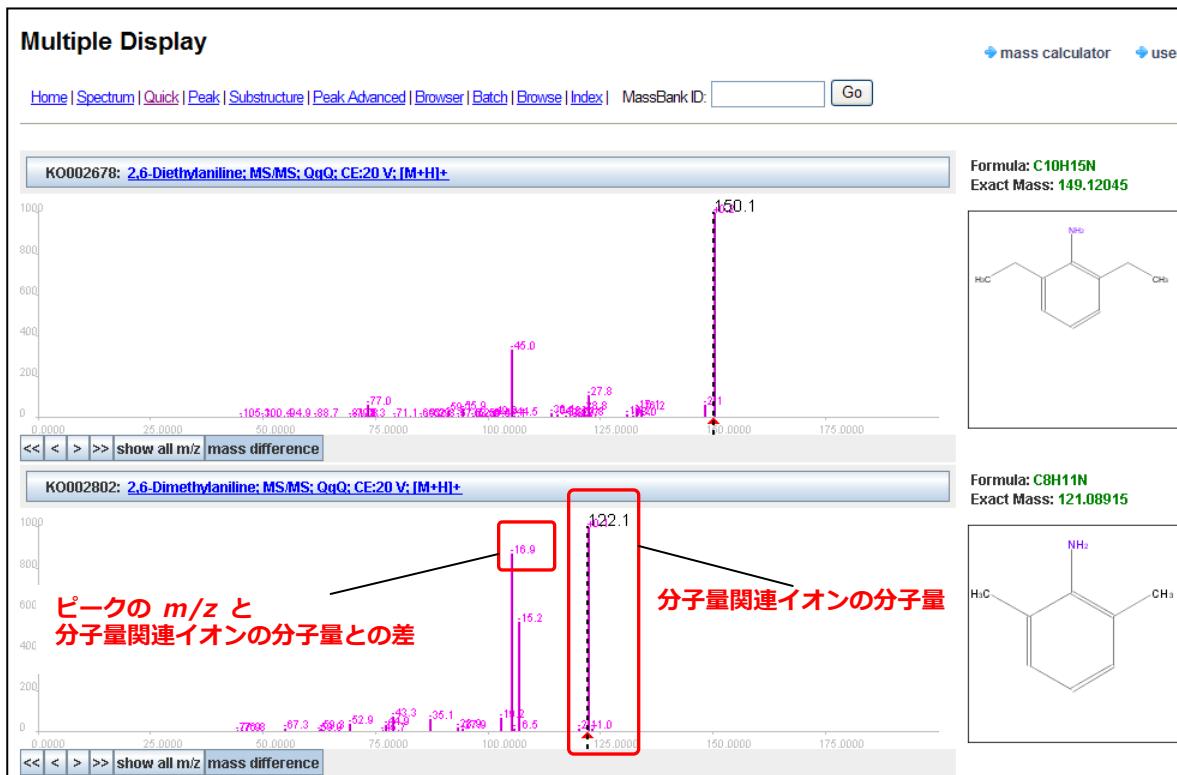
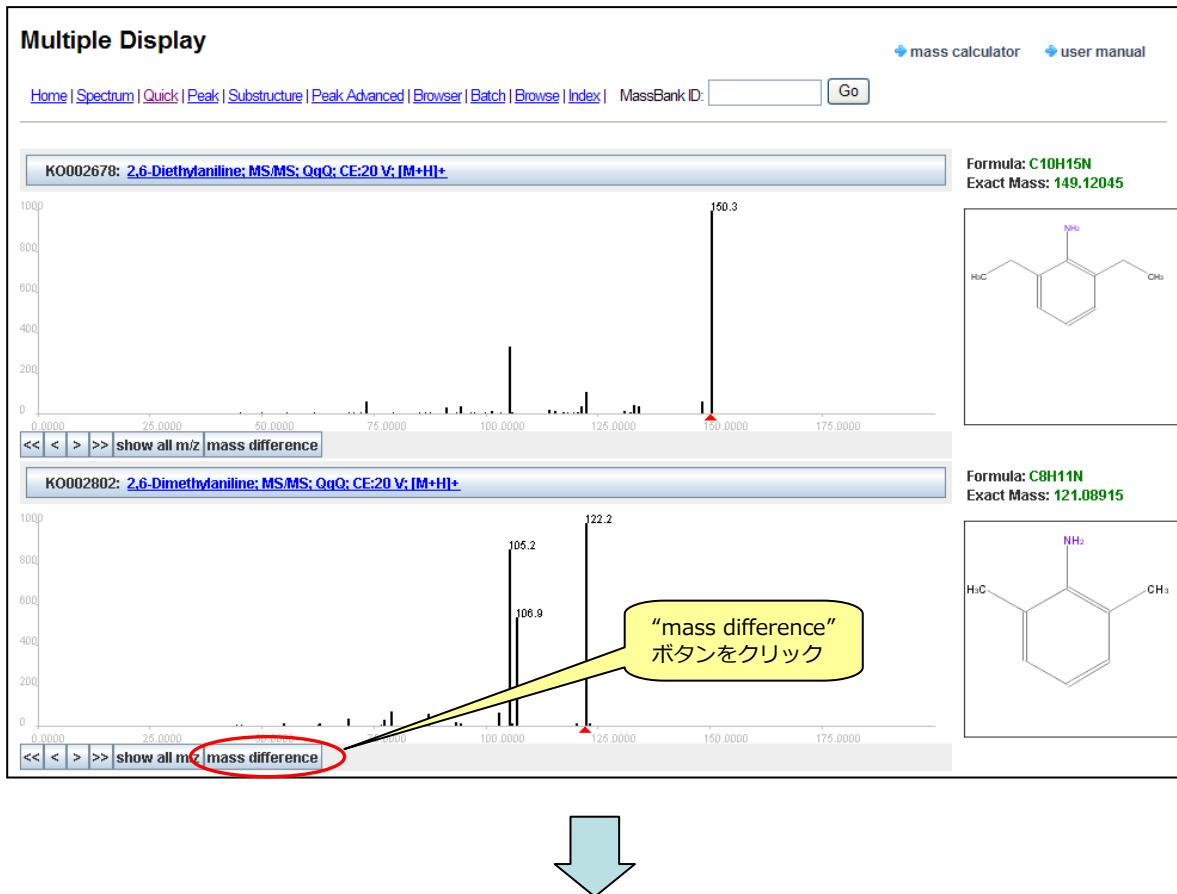
	Name	Formula / Structure	ExactMass	ID
<input type="checkbox"/>	(9Z, 12Z)-Octadecadienoate	C18H32O2 6 spectra	280.24023	
<input type="checkbox"/>	(Aminomethyl)phosphonate	CH6NO3P 12 spectra		
<input type="checkbox"/>	(Methylthio)acetate	C3H6O2S 6 spectra		
<input type="checkbox"/>	(R)-Mandelate	C8H8O3 5 spectra	152.04734	
<input type="checkbox"/>	(S)-2-Aminobutyrate	T 11 sp	103.06333	

① 化学構造式の画像をクリックする

② 拡大画像（大）が別ウインドウで表示される  
※表示されるウインドウは1つだけで、自分で閉じる必要があります

## ■ mass difference 機能

“Multiple Display” ページでは、分子量関連イオンの分子量を基準とした時に、各フラグメントピークの  $m/z$  との差を一覧表示することができます。



## 7.2 MassBank レコード詳細画面

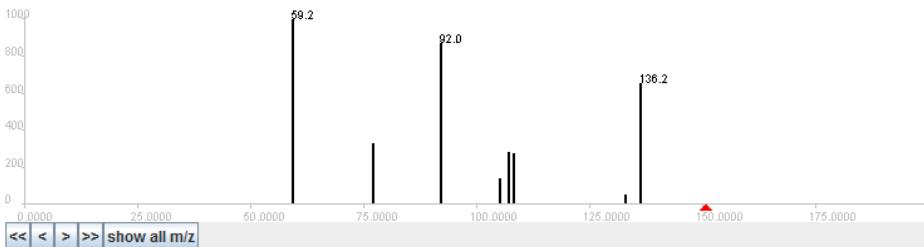
MassBank レコードは、マススペクトルと 1 対 1 に対応しています。  
ピークデータのほかに、化合物情報 (CH\$)、実験条件 (AC\$) 等が記載されています。

### MassBank Record: KO001419

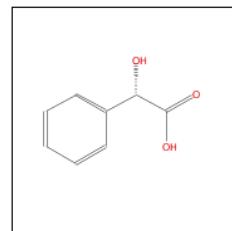
[Home](#) | [Spectrum](#) | [Quick](#) | [Peak](#) | [Substructure](#) | [Identification](#) | [Browser](#) | [Batch](#) | [Browse](#) | [Index](#) | MassBank ID:  [Go](#)

(S)-Mandelic acid; LC-ESI-QQ; MS2; CE:30 V; [M-H]-

Mass Spectrum



Chemical Structure



ACCESSION: KO001419  
RECORD\_TITLE: (S)-Mandelic acid; LC-ESI-QQ; MS2; CE:30 V; [M-H]-  
DATE: 2011.05.10 (Created 2007.07.07)  
AUTHORS: Kakazu Y, Horai H, Institute for Advanced Biosciences, Keio University  
LICENSE: CC BY-NC-SA  
COMMENT: KEIO\_ID M057

CH\$NAME: (S)-Mandelate  
CH\$NAME: (S)-Mandelic acid  
CH\$NAME: (S)-2-Hydroxy-2-phenylacetic acid  
CH\$NAME: (S)-2-Hydroxy-2-phenylacetate  
CH\$COMPOUND\_CLASS: Non-Natural Product  
CH\$FORMULA: C8H8O3  
CH\$EXACT\_MASS: 152.04734  
CH\$SMILES: OC(=O)[C@H](O)c1ccccc1  
CH\$IUPAC: InChI=1S/C8H8O3/c9-7(8(10)11)6-4-2-1-3-5-6/h1-5,7,9H, (H, 10)H2  
CH\$LINK: CAS [90-64-2](#) [611-72-3](#)  
CH\$LINK: CHEBI [32800](#)  
CH\$LINK: CHEMPDB [SMN](#)  
CH\$LINK: KEGG [C01984](#)  
CH\$LINK: PUBCHEM SID:[5081](#)

AC\$INSTRUMENT: API3000, Applied Biosystems  
AC\$INSTRUMENT\_TYPE: LC-ESI-QQ  
AC\$MASS\_SPECTROMETRY: MS\_TYPE MS2  
AC\$MASS\_SPECTROMETRY: ION\_MODE NEGATIVE  
AC\$MASS\_SPECTROMETRY: COLLISION\_ENERGY 30 V

MS\$FOCUSSED\_ION: PRECURSOR\_M/Z 151  
MS\$FOCUSSED\_ION: PRECURSOR\_TYPE [M-H]-

PK\$NUM\_PEAK: 8  
PK\$PEAK: m/z int. rel.int.  
59.200 707921.5 999  
77.200 232673.5 328  
92.000 613862.0 866  
105.100 99010.0 140  
107.200 198020.0 279  
108.300 193069.5 272  
133.000 34653.5 49  
136.200 460396.5 650  
//

基本情報

ACCESSION : "レコードID"  
RECORD\_TITLE : "タイトル (化合物名、手法など)"  
DATE : "最終更新日 (作成日)"  
AUTHORS : "レコード作成者"  
LICENSE : "CreativeCommons または Copyright"

化合物情報

CH\$NAME : "名称 (別名を含め複数記載可能)"  
CH\$FORMULA : "分子式"  
CH\$EXACT\_MASS : "精密質量 (小数点以下5桁)"  
CH\$SMILES : "SMILESコード"  
CH\$IUPAC : "InChIコード"

実験条件

AC\$INSTRUMENT : "分析装置名"  
AC\$INSTRUMENT\_TYPE : "分析装置種別"  
AC\$MASS\_SPECTROMETRY: MS\_TYPE "MS種別"  
AC\$MASS\_SPECTROMETRY: ION\_MODE "イオン種別"

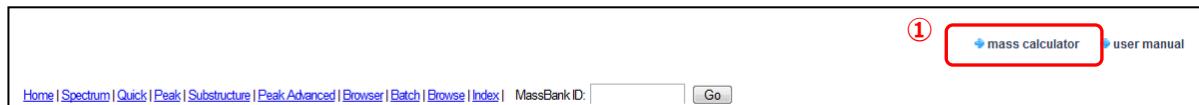
ピークデータ

PK\$NUM\_PEAK : "ピーク数"  
PK\$PEAK : "各ピークのm/z、実測強度、相対強度を列挙"

※ レコードの各データの詳細については「レコード編集ツールマニュアル」を参照してください。

### 7.3 簡易質量計算ツール

Mass Calculator は、各検索ページの右上部に表示される簡易質量計算ツールです。入力した Formula に対する  $m/z$  の計算または、 $m/z$  に対する Formula の候補を表示することができます。

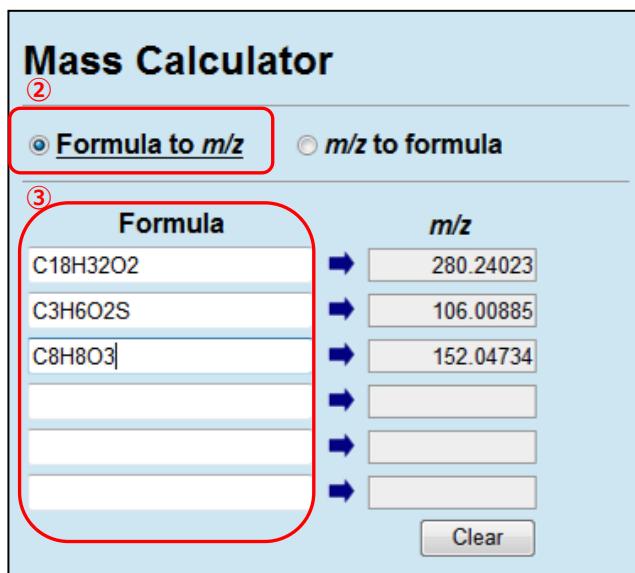


① “mass calculator” をクリック

別ウィンドウで Mass Calculator が表示されます。



$m/z$  から Formula を計算する場合



Formula	$m/z$
C18H32O2	280.24023
C3H6O2S	106.00885
C8H8O3	152.04734

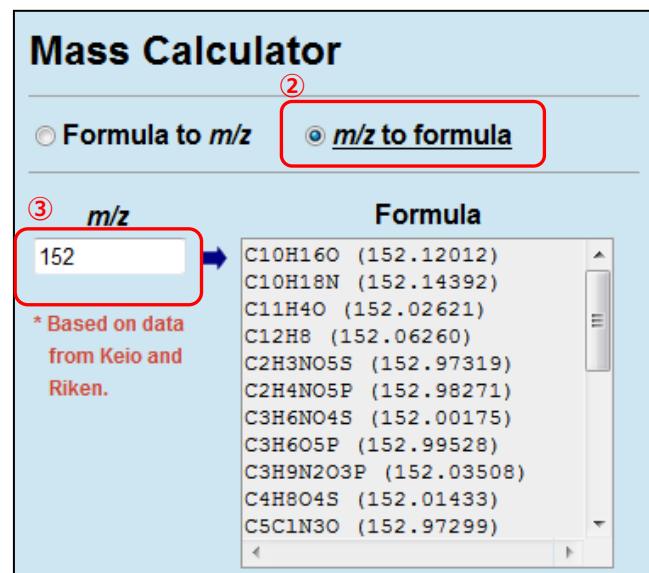
② “Formula to  $m/z$ ” を選択

③ Formula の入力

入力欄に Formula を入力すると  $m/z$  が自動的に計算されます。

分子式を入力すると、自動的に計算した精密質量値（小数点以下第六位切り捨て）が  $m/z$  入力ボックスに入ります。

Formula から  $m/z$  の候補を表示する場合



$m/z$	Formula
152	C10H16O (152.12012) C10H18N (152.14392) C11H4O (152.02621) C12H8 (152.06260) C2H3NO5S (152.97319) C2H4NO5P (152.98271) C3H6NO4S (152.00175) C3H6O5P (152.99528) C3H9N2O3P (152.03508) C4H8O4S (152.01433) C5C1N3O (152.97299)

② “ $m/z$  to formula” を選択

③  $m/z$  の入力

入力欄に  $m/z$  を入力すると Formula の候補一覧が自動的に表示されます。

Mass Calculator ウィンドウは ESC キーで閉じることができます。

## 7.4 スペクトル閲覧ツール

Spectral Browser は、ユーザが用意したスペクトル情報を記述したファイルを読み込み、最大 20 スペクトルまで並べて表示できるスペクトル閲覧ツールです。また、読み込んだスペクトル同士をグラフィカルに比較することもできます。

### (1) スペクトル情報ファイル準備

以下のいずれかの形式でユーザのマススペクトルを記述したスペクトル情報ファイルを作成します。サンプルは <http://www.massbank.jp/sample/sample.zip> からダウンロードできます。また、スペクトル情報ファイルは Spectrum Search で利用するクエリファイルと全く同じ記述になるため、Spectrum Search、Spectral Browser のどちらでも利用可能です。

**【スペクトル情報ファイルの記述内容】**

**名称**  
化合物名などの任意の名  
称を記述します。(省略可)

**ピーク情報**  
 $m/z$  と強度をスペース  
区切りで記述します。ピ  
ークごとに改行して記述  
します。

**空行**  
複数スペクトルのピーク  
情報を記述する場合は1  
行以上の空行で区切りま  
す。

```
Name: Sample Compound 1
70 24
71 10
72 68
73 999
74 107

Name: Sample_Compound 2
73.1 15008
78.54 4456
79.45 2158311
85.3 964800
86.11 150
90.0 804911

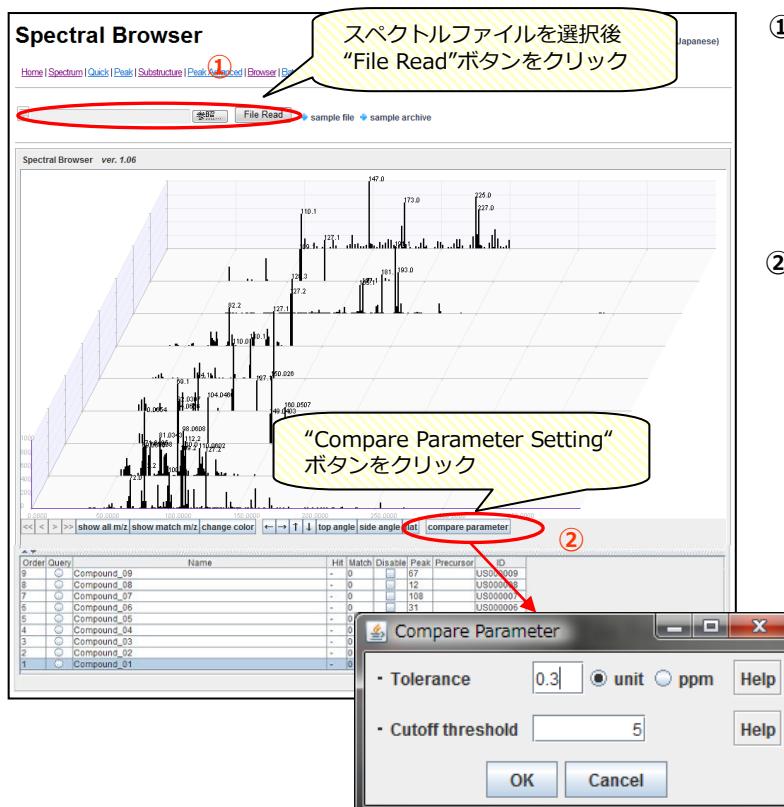
Name: Sample Compound 3
178.876379147 15
186.884786287 8
229.504276894 9
```

半角スペース  
Name : Sample…  
任意の名称を記述

名称を入力する際は先頭に  
「Name:」を必ず記述します。

半角スペース  
78.54 △ 4456  
 $m/z$  強度  
(絶対値or相対値どちらでも可)

### (2) スペクトル情報の読み込みと比較パラメータの設定



**① スペクトル情報ファイルの読み込み**  
参照ボタンを押して、準備したスペクトル情報ファイルを選択します。“File Read”ボタンをクリックするとファイルが読み込まれます。ファイルの読み込みが完了するとスペクトル情報が表示されます。

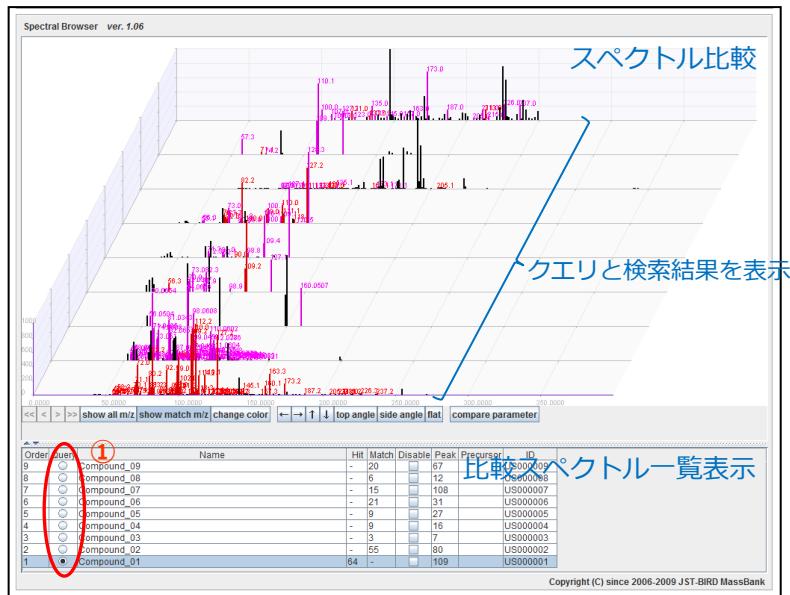
**② 比較条件パラメータの設定**  
“Compare Parameter Setting”ボタンをクリックすると設定画面が開きます。

- 設定内容 -
  - Tolerance :  $m/z$  の誤差範囲
  - Cutoff Threshold : 相対強度のしきい値

比較条件パラメータ設定画面

### (3) 比較実行

読み込んだスペクトルの中からクエリにしたい任意のスペクトルを選択すると、スペクトルを1対多で比較できます。

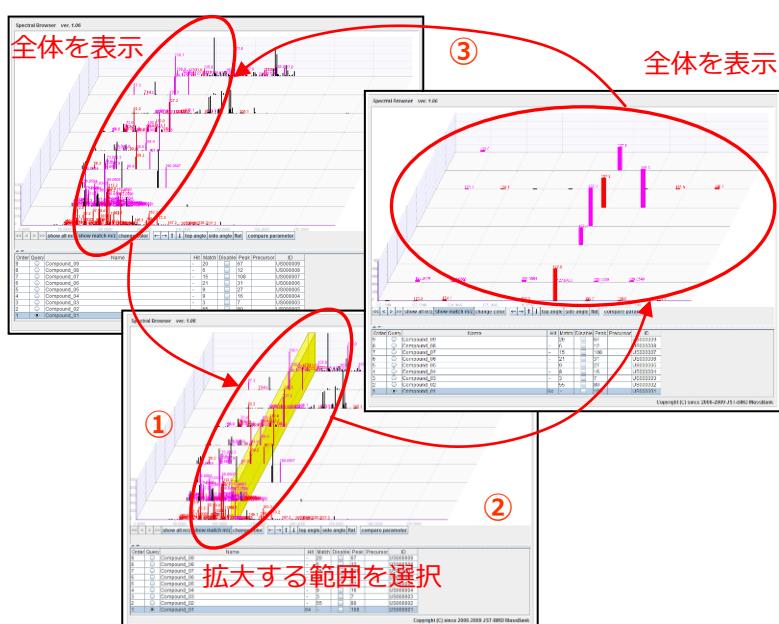


#### ① クエリスペクトル選択

クエリにしたい任意のスペクトルのラジオボタンを、クリックして選択します。選択と同時に比較結果がスペクトル比較画面に反映されます。

- スペクトル比較画面のピークの色 -		
スペクトル比較画面では、一致するピークを色で判別できます。		
ピーク	完全に一致	誤差範囲内で一致
クエリのスペクトル	赤色	赤色
検索結果のスペクトル	赤色	ピンク色

### «便利な機能1 – スペクトル拡大表示»



#### ① 拡大位置の選択

スペクトルの拡大を開始したい場所からドラッグします。

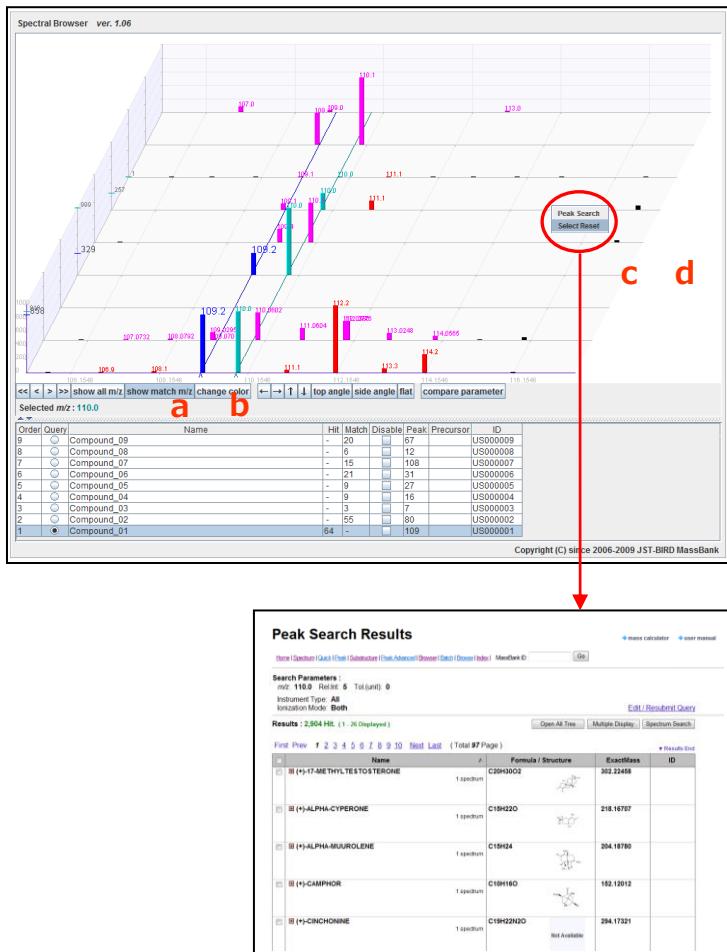
#### ② 拡大位置の確定

スペクトルの拡大を確定した居場所でドロップします。

#### ③ 拡大解除

スペクトル比較エリア内でダブルクリックします。

## «便利な機能 2 – ピーク操作»



Peak Search 検索結果画面

### - Spectral Browser でのピークハイライトと選択 -

Spectral Browser では、スペクトルが複数表示され、そのいずれかのスペクトルに存在するピークをハイライトもしくは選択することができます。このとき他のスペクトルでも  $m/z$  が完全一致するピークがあれば、そのピークもハイライトもしくは選択されます。

### a ピークハイライト

ピークにマウスカーソルを乗せると、青色で描画され、 $m/z$  と Intensity の値が表示されます。

### b ピーク選択

任意のピーク上でクリックすると、水色で描画され、選択状態になります。  
最大6ピークまで選択できます。

#### - ピークの描画色 -

ハイライト状態 → 青色  
選択状態 → 水色

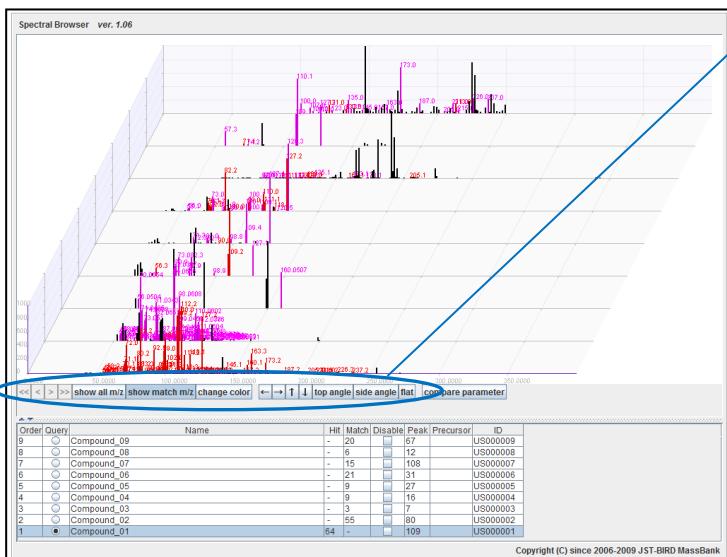
### c ピーク検索

1つ以上のピークが選択されている状態で右クリックすると、メニューが表示され“Peak Search”が選択できるようになります。選択後は直ちにピーク検索が行われます。

### d ピーク選択の解除

スペクトル上で右クリックするとメニューが表示されますので、“Select Reset”を選択します。

## «便利な機 3 – スペクトル操作»



### スペクトル操作用ボタン

<<, <, >, >>  
… 表示位置移動（スペクトル拡大時のみ）

### show all m/z

… 全ピークの  $m/z$  値表示

### show match m/z

… 一致ピークの  $m/z$  値表示

### change color

… スペクトルごとの色づけ

### ←, →, ↑, ↓

… アングル変更（マニュアル操作）

### top angle

… アングル変更（最上視点）

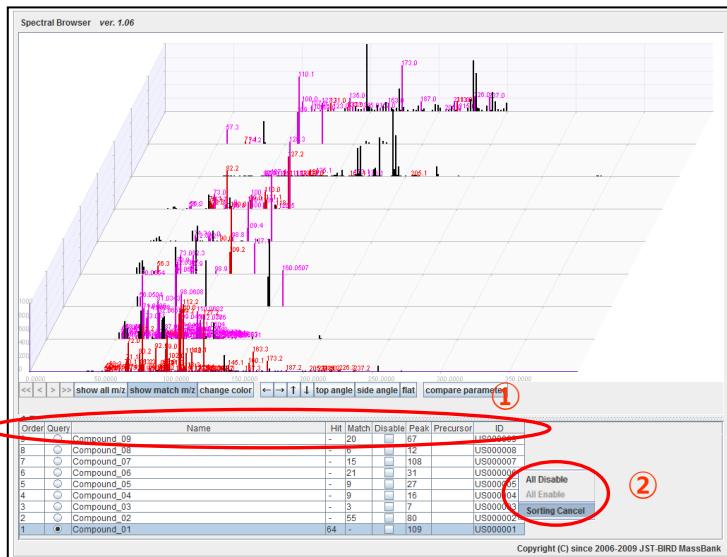
### side angle

… アングル変更（最横視点）

### flat

… アングル変更（全スペクトル重ね合わせ）

## «便利な機能4 – ソート機能»



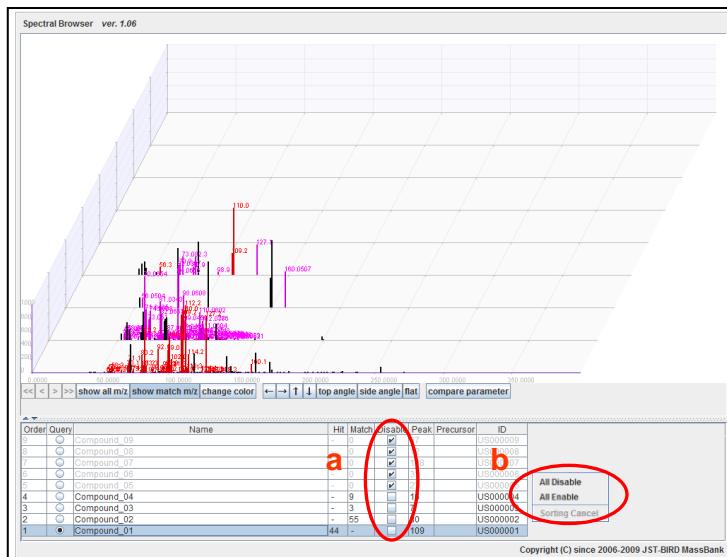
### ① スペクトルの並び替え

比較スペクトル一覧ヘッダーの “Order”、“Query”、“Name”、“Hit”、“Match”、“Disable”、“Peak”、“Precursor”、“ID” をクリックするたびに、昇順→降順→末ソートの順でスペクトルの並び替えを行うことができます。

### ② スペクトルの並び替え解除

比較スペクトル一覧で右クリックし、“Sorting Cancel” を選択します。

## «便利な機能5 – スペクトル非表示機能»



### a スペクトルの表示非表示を選択

比較スペクトル一覧で非表示にしたいスペクトルの場合はチェックボックスにチェックします。表示したいスペクトルの場合はチェックボックスのチェックをはずします。

### b スペクトルの一括表示非表示

比較スペクトル一覧で右クリックし、一括で非表示にしたい場合は “All Disable” を選択します。一括で表示したい場合は“All Enable” を選択します。

#### - スペクトル比較エリアと比較スペクトル一覧表示エリアについて -

スペクトル比較エリア（上部）に表示されているスペクトルと、比較スペクトル一覧表示エリア（下部）に表示されているスペクトル情報は連動しています。比較スペクトル一覧表示エリアで並び替えを行った場合はスペクトル比較エリアに即時反映されます。

## お問い合わせ

不具合やご不明な点がございましたら、MassBank グループまでご連絡ください。

[massbank@iab.keio.ac.jp](mailto:massbank@iab.keio.ac.jp)

0235-29-0825 (直通)