

TripleTOF 6600+ システム

システムユーザーガイド



本書は SCIEX 機器をご購入され、実際に使用されるお客様にむけてのものです。本書の著作権は保護されています。本書および本書の一部分を複製することは、SCIEX が書面で合意した場合を除いて固く禁止されています。

本書に記載されているソフトウェアは、使用許諾契約書に基づいて提供されています。使用許諾契約書で特に許可されている場合を除き、いかなる媒体でもソフトウェアを複製、変更、または配布することは法律で禁止されています。さらに、使用許諾契約書では、ソフトウェアを逆アセンブル、リバースエンジニアリング、または逆コンパイルすることをいかなる目的でも禁止することがあります。正当とする根拠は文書中に規定されているとおりです。

本書の一部は、他の製造業者および/またはその製品を参照することがあります。これらには、その名称を商標として登録しているおよび/またはそれぞれの所有者の商標として機能している部分を含む場合があります。そのような使用は、機器への組み込みのため SCIEX により供給された製造業者の製品を指定することのみを目的としており、その権利および/またはライセンスの使用を含む、または第三者に対しこれらの製造業者名および/または製品名の商標利用を許可するものではありません。

SCIEX の保証は販売またはライセンス供与の時点で提供される明示的保証に限定されており、また SCIEX の唯一かつ独占的な表明、保証および義務とされています。SCIEX は、明示的・黙示的を問わず、制定法若しくは別の法律、または取引の過程または商慣習から生じるかどうかに関わらず、特定の目的のための市場性または適合性の保証を含むがこれらに限定されない、他のいかなる種類の保証も行いません。これらのすべては明示的に放棄されており、購買者による使用またはそれから生じる不測の事態に起因する間接的・派生的損害を含め、一切の責任または偶発債務を負わないものとします。

研究専用。診断手順には使用しないでください。

ここに記載されている商標および / または登録商標は、関連するロゴを含め、米国および / またはその他の特定の国における AB Sciex Pte. Ltd.、またはその該当する所有者の所有物です(sciex.com/trademarks をご覧ください)。

AB Sciex™ はライセンスの下で使用されています。

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.

Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

目次

第 1 章：操作上の予防措置および制限事項	7
一般的な安全情報.....	7
文書内の記号と規約.....	7
監督法規の遵守.....	8
オーストラリアおよびニュージーランド.....	8
カナダ.....	8
欧州.....	8
米国.....	9
国際.....	9
電気システムに関する注意.....	9
装置主電源.....	9
保護接地線.....	10
化学物質に関する注意.....	10
システムに対して安全な液体.....	11
換気に関する注意事項.....	12
物理的な注意事項.....	13
環境に関する注意事項.....	13
電磁環境.....	14
停止および廃棄.....	15
資格のある技術者.....	15
検査室条件.....	16
安全な環境条件.....	16
性能仕様.....	16
機器の利用と変更.....	16
第 2 章：動作原理	18
システム概要.....	18
ハードウェアの概観.....	18
パネルシンボル.....	22
動作原理.....	23
データの取り扱い.....	24
第 3 章：使用説明	25
システムの起動.....	25
システムのシャットダウン.....	26
内蔵シリンジポンプ位置の調節.....	27
シリンジポンプのリセット.....	29
第 4 章：使用説明—サンプルワークフロー	31

第 5 章：取扱説明書 — ハードウェアプロファイルおよびプロジェクト	34
ハードウェアプロファイル.....	34
ハードウェアプロファイルの作成.....	34
ハードウェアプロファイルにデバイスを追加.....	39
ハードウェアプロファイル有効化のトラブルシューティング.....	41
プロジェクトおよびサブプロジェクト.....	41
プロジェクトおよびサブプロジェクトの作成.....	41
サブプロジェクトの作成.....	43
サブプロジェクトのコピー.....	43
プロジェクトとサブプロジェクトの切り替え.....	43
インストールされるプロジェクトフォルダ.....	44
API 機器フォルダのバックアップ.....	44
API 機器フォルダの回復.....	45
第 6 章：使用説明—チューニングとキャリブレーション	46
質量分析装置の最適化.....	47
Verifying or Adjusting Performance ダイアログ.....	47
結果概要.....	47
第 7 章：使用説明—測定メソッド	49
測定メソッドエディタを用いて測定メソッドを作成.....	49
実験を追加.....	50
期間を追加.....	50
実験を期間にコピー.....	50
期間内に実験をコピー.....	51
メソッドウィザードを使用して測定メソッドを作成.....	51
スキヤンの技術.....	52
単一質量分析.....	52
四重極に基づく単一質量分析装置.....	52
飛行時間単一質量分析装置.....	52
タンデム型質量分析装置.....	52
プロダクトイオン質量分析.....	52
プレカーサーイオンの質量分析.....	53
スペクトルデータ収集について.....	53
MS パラメータ.....	53
第 8 章：使用説明—バッチ	58
キューオプションの設定.....	58
セットとサンプルをバッチに追加.....	60
サンプルまたはサンプルセットの提出.....	62
サンプルキャリブレーションの設定.....	63
サンプル順序の変更.....	63
データの取得.....	64
バッチエディタのサンプル位置を設定.....	64
Locations タブを使用してバイアルの位置を選択する(オプション).....	65

サンプル測定 of 停止	66
キュー状態とデバイス状況	66
キュー状態	66
機器およびデバイスステータスアイコンを表示	67
第 9 章：使用説明—データの分析と探索	69
データファイルを開く	69
データファイル内のサンプル間ナビゲーション	69
実験条件の表示	70
表内のデータを表示	70
ACD データの表示	72
基本定量データの表示	72
クロマトグラム	73
スペクトルから TIC を表示	74
TIC からスペクトルを表示	74
XIC の生成	75
選択範囲を使用して XIC を生成	76
最大ピークを使用して XIC を生成	76
ベースピークの質量を使用して XIC を生成	77
質量を選択してイオンを抽出	77
BPC の生成	78
XWC の生成	79
Show DAD Data	79
TWC の生成	80
しきい値の調整	80
グラフィックデータ処理	80
グラフ	81
データの管理	81
Y 軸をズームイン	83
X 軸をズームイン	83
第 10 章：サービスおよびメンテナンス情報	84
推奨メンテナンススケジュール	84
表面のクリーニング	87
フロントエンドのクリーニング	87
汚染の兆候	88
必要な道具	88
クリーニングのベストプラクティス	89
質量分析装置の準備	90
カーテンプレートのクリーニング	91
オリフィスプレート前面のクリーニング	92
質量分析装置の運転再開	93
イオン源排気ドレインボトルを空にする	93
粗引きポンプのオイルレベルの点検	95
質量分析装置冷却ファンフィルターの交換	96
保管と取り扱い	98

目次

第 11 章：質量分析装置のトラブルシューティング	100
付録 A：推奨キャリブレーションイオン	105
付録 B：計算精密質量および化学式	108
付録 C：ツールバーアイコン	112
付録 D：右クリックメニュー	122
Batch Editor	122
キュー	123
Show File Information ペインの右クリックメニュー	124
クロマトグラムペイン	124
スペクトルペイン	125
Results Table	126
ピークレビュー	127
キャリブレーションカーブ	127
付録 E：シンボルについての用語集	129
付録 F：警告についての用語集	135
お問い合わせ先	137
お客様のトレーニング	137
オンライン学習センター	137
SCIEX サポート	137
サイバーセキュリティ	137
ドキュメント	137

操作上の予防措置および制限事項

1

注: システムを操作する前に、本ガイドのすべてのセクションを注意してお読みください。

本項には、一般の安全関連の情報が含まれており、規制対応の情報が提供されています。また、システムに関する潜在的な危険および関連する警告および危険を最小限にするために採るべき予防措置も説明されています。

ラボ環境、システムおよび本文書内で使用されている記号と約束事に関する情報については、本項に加えて、[シンボルについての用語集](#)を参照してください。装置主電源、イオン源排気、換気、圧縮空気、窒素、および粗引きポンプの要件などの施設要求事項については、[設置計画概要書](#)を参照してください。

一般的な安全情報

人身傷害またはシステムの損傷を防ぐために、本書、製造業者の化学薬品安全性データシート (SDS)、および製品ラベル情報に記載されているすべての安全に関する注意事項および警告を読み、理解し、それに従ってください。ラベルは、国際的に認められたシンボルで表示されています。これらの警告に従わない場合、重傷に至る可能性があります。

この安全情報は、連邦、州、地方、および地域環境、衛生および安全 (EHS) 規制を補足するものです。ここで提供される情報には、本システムの操作に適用されるシステム関連の安全情報が含まれています。実践すべき安全手順がすべて掲載されているわけではありません。最終的に、連邦、州、地方、そして地域の EHS 規則等の遵守、および安全なラボ環境の維持に対する責任は、ユーザーと組織にあります。

適切なラボの参考資料と標準作業手順書を参照してください。

文書内の記号と規約

このガイド内では以下のシンボルと規約が適用されます。



危険!「危険」は致命傷や死を引き起こす行動を指します。



警告!「警告」は、注意点を守らなかった場合に人身傷害を引き起こす可能性のある行動を指します。

注意:「注意」は注意点を守らなかった場合にシステム損傷やデータ損失を引き起こす可能性のある行動を指します。

注:「注」は手順および説明内の重要な情報を指します。

ヒント!「ヒント」は本文記載の技術および手順の応用に役立つ情報です。特別なニーズがある場合、手順を短縮する場合の補足事項として使用ください。手順を完了するために必須のものではありません。

監督法規の遵守

本システムは、本セクションに記載されている規制および標準に準拠しています。引用規格は、システムおよび個々のシステムコンポーネント同梱の**適合宣言書**を参照してください。適応ラベルはシステムに貼られています。

オーストラリアおよびニュージーランド

- **電磁両立性 (EMC)**: 1992 年無線通信法に以下の標準として制定:
 - 電波障害 —AS/NZS CISPR 11/ EN 55011/ CISPR 11 (Class A)。電磁妨害を参照してください。
- **安全性**: AS/NZ 61010-1、および IEC 61010-2-061

カナダ

- **電磁妨害 (EMI)**: CAN/CSA CISPR11。この ISM 機器は、カナダ ICES-001 に適合しています。次のセクションを参照してください: [電磁妨害](#)。
- **安全性**:
 - CAN/CSA C22.2 No.61010-1
 - CAN/CSA C22.2 No 61010-2-061

欧州

- **電磁両立性 (EMC)**: 以下の標準で実行されている電磁両立性指令 2014/30/EU:
 - EN 61326-1
 - EN 55011 (Class A)[電磁両立性](#)を参照してください。
- **安全**: 以下の標準で実行されている低電圧指令 2014/35/EU:
 - EN 61010-1
 - EN 61010-2-061
- **廃棄物、電気および電子機器 (WEEE)**: 廃電気電子機器指令 2012/96/EEC (EN 40519 で実施される通り)。廃電気電子機器指令を参照してください。
- **梱包および梱包廃棄物 (PPW)**: 梱包および梱包廃棄物指令 94/62/EC
- **RoHS 有害物質制限指令**: RoHS 指令 2011/65/EU

米国

- 無線送信妨害規制: 47 CFR 15 (FCC Part15 で実施される通り(クラス A))
- 安全性: 職業安全衛生法、29 CFR 1910(以下の標準で実施される通り):
 - UL 61010-1
 - IEC 61010-2-061

国際

- 電磁両立性(EMC):
 - IEC 61326-1
 - IEC CISPR 11(クラス A)
 - IEC 61000-3-2
 - IEC 61000-3-3

次のセクションを参照してください: [電磁両立性](#)。

- 安全性:
 - IEC 61010-1
 - IEC 61010-2-061

電気系統に関する注意



警告! 感電の危険。カバーを取り外さないでください。カバーを取り外すと、傷害またはシステムの故障が発生する場合があります。定期的なメンテナンス、点検、または調整のためにカバーを取り外す必要はありません。カバーを取り外す必要がある修理については、SCIEX フィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。

- 電気安全作業習慣に従ってください。
- ケーブルの管理慣行の実行により、ケーブルを管理してください。これにより、つまり危険が軽減します。

システムの電気仕様については、[設置計画概要書](#)を参照してください。

装置主電源

本ガイドの指示の通り、システムを互換性のある主電源に接続します。



警告! 感電の危険。すべての電気機器および接続器の設置は必ず有資格者が実施し、すべての設置が現地規制および安全規格に従うようにしてください。



警告! 感電の危険。緊急時にはシステムを主電源コンセントから外せるようにしてください。主電源コンセントの周囲に物を置かないでください。



警告! 感電の危険。システムに同梱された主電源ケーブルのみを使用します。このシステムの操作にとって適切な定格ではない主電源ケーブルは使用しないでください。



外部ライン変圧器は質量分析装置や粗引きポンプには不要です。

保護接地線

装置主電源には、保護接地(アース)が正常に組み込まれていなければいけません。システムを接続する前に、資格のある技師により必ず保護接地線(アース)を設置または点検してください。



警告! 感電の危険。保護接地線を意図的に妨害しないでください。保護接地線の妨害が生じると、感電の危険が発生します。



警告! 感電の危険。保護接地線(接地ケーブル)がサンプルループとイオン源の適切な接地点の間に接続されていることを確認します。この補足的な接地は、SCIEX によって指定された安全構成を強化するものです。



化学物質に関する注意



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。クリーニングやメンテナンス前に、汚染除去が必要かどうかを判断します。放射性物質、生物学的病原体、または有害化学物質が質量分析装置に使用された場合、お客様はクリーニングまたはメンテナンス前にシステムに対して汚染除去を行う必要があります。



警告! 尖った部分により怪我をする危険、イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。イオン源のウィンドウがひび割れたり破損したりした場合、イオン源の使用を中止して、SCIEX フィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。装置に入り込んだ有害物質や障害性物質は、イオン源排気出力に混入します。装置からの排気は室外に換気してください。認定を受けたラボ安全手順に従い、鋭利物を処分します。



警告! 環境の危険。システムコンポーネントを一般廃棄物として処分しないでください。コンポーネントを処分する際は、現地規制に従います。



警告! 生物学的危険、有害化学物質の危険。漏れを防ぐために、ドレインチューブを質量分析装置とイオン源排気ドレインボトルに正しく接続します。



- サービスや定期メンテナンスの前に、システムに使用された化学物質を特定してください。化学物質について従うべき安全衛生対策については、*Safety Data Sheet* を参照してください。保管については、*分析証明書*を参照してください。SCIEX 安全性データシートまたは*分析証明書*を見つけるには、sciex.com/tech-regulatory にアクセスしてください。
- 割り当てられた個人用保護具を常に着用してください。これにはパウダーフリーの手袋、安全メガネ、および白衣が含まれます。

注: ニトリルまたはネオプレンの手袋をお勧めします。

- 通気性の良いエリアまたは換気フード内で作業を行ってください。
- イソプロパノール、メタノール、その他可燃性溶媒などの可燃性物質を用いて作業を行う際には、発火源を避けてください。
- 化学物質の使用および廃棄については十分注意してください。化学物質の取り扱いおよび廃棄について正しい手順が守られない場合には、人身傷害の危険があります。
- クリーニングの間、および使用後の手洗いの際には化学物質が肌に触れないようにしてください。
- すべての排気ホースがしっかりと接続され、すべての接続が設計通りに機能していることを確認します。
- 使用済み液体をすべて回収し、有害廃棄物として処分します。
- 生物学的危険のある物質、毒性物質、および放射性物質の保管、取り扱い、廃棄については、すべての現地規制を遵守してください。
- (推奨)粗引きポンプ、溶剤ボトル、および廃棄物コンテナの下に、化学物質がこぼれた場合に受け止めることができる、二次的な封じ込め用トレイを置いてください。

システムに対して安全な液体

以下の液体は、本システムで安全に使用できます。安全な洗浄液については、[必要な道具](#)を参照してください。



注意: ダメージを与える恐れ。他の液体は、SCIEX によって危険がないことが確認されるまで、使用しないでください。これは完全なリストではありません。

注: LC 移動相には、新たに調製した LC-MS グレード以上の溶剤だけを使用してください。

- **有機溶剤**
 - LC-MS グレードアセトニトリル、最大 100%
 - LC-MS グレードメタノール、最大 100%

操作上の予防措置および制限事項

- LC-MS グレードイソプロパノール、最大 100%
- LC-MS グレード以上の水、最大 100%
- アセトニトリル、最大 100%
- メタノール、最大 100%
- イソプロパノール 最大 100%
- DDI 水、最大 100%
- テトラヒドロフラン 最大 100%
- トルエンおよびその他芳香族溶剤、最大 100 %
- ヘキサン 最大 100%
- **バッファ**
 - 酢酸アンモニウム; 100mM 未満
 - ギ酸アンモニウム; 100mM 未満
 - リン酸塩 1% 未満
- **酸と塩基**
 - ギ酸 1% 未満
 - 酢酸 1% 未満
 - トリフルオロ酢酸(TFA) 1% 未満
 - ヘプタフルオロ酪酸(HFBA) 1% 未満
 - アンモニア/水酸化アンモニウム 1% 未満
 - リン酸 1% 未満
 - トリメチルアミン 1% 未満
 - トリエチルアミン 1% 未満

換気に関する注意事項

ガスの換気や廃棄物の処理は必ず連邦政府、州、区域、地域の保健規制や安全規制を遵守してください。地域の衛生法規や安全規制に準拠して空気の品質を維持することは、お客様の責任です。

イオン源排気システムおよび粗引きポンプは、必ず専用の検査室用ドラフトチャンバまたは外部排気システムに通気してください。



警告! 火災の危険。可燃性蒸気がイオン源に溜まるのを防ぐため、イオン源排気システムが接続され機能していることを確認してください。



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。排気ガスを専用のラボ用ガス換気フードまたは排気システムで通気するように注意して、換気チューブがクランプで固定されていることを確認します。ラボは実施される作業に適切な換気が行われるようにしなければなりません。



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。イオン源排気管や粗引きポンプ排気ホースがラボ換気システムに適切に接続されていない場合、質量分析装置を操作しないでください。定期的に排気チューブを点検し、漏れがないことを確認してください。適切なシステムの換気をせずに質量分析装置を使用すると、健康を害し、重度の傷害を引き起こす恐れがあります。



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。イオン源で使用する有害物質や障害性物質の適正使用、汚染、排気に関する知識や訓練なしに、イオン源を使用しないでください。



警告! 尖った部分により怪我をする危険、イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。イオン源のウィンドウがひび割れたり破損したりした場合、イオン源の使用を中止して、SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。装置に入り込んだ有害物質や障害性物質は、イオン源排気出力に混入します。装置からの排気は室外に換気してください。認定を受けたラボ安全手順に従い、鋭利物を処分します。



物理的な注意事項



警告! 吊り上げ時の危険性。質量分析装置を持ち上げたり移動したりする際は機械式昇降装置を使用します。認定を受けた安全吊り上げ手順に従います。専門の移動サービス業者に依頼することを推奨します。システムコンポーネントの重量については、**設置計画概要書**を参照してください。

環境に関する注意事項

送電線、加熱装置、換気装置、配管の供給および固定などのインストールについては資格のある担当者にお問い合わせください。すべての設置が地方条例および有害物質規制を遵守していることを確認してください。システムの環境条件への要求事項に関する情報は、**設置計画概要書**を参照してください。

システムのセットアップを行う際には、機器の周囲にアクセス空間を確保してください。



危険! 爆発の危険。爆発性ガスを含む環境でシステムを操作しないでください。システムは爆発の危険がある環境での操作を意図していません。



警告! 生物学的危険。生物学的危険のある物質を使用する場合、危険性評価、制御、および危険物取り扱いに関する現地規制を必ず遵守します。本システム、あるいはそのいかなる部分も、生物学的封じ込めとして機能することを意図していません。



警告! 環境の危険性。生物学的危険、有毒性、放射性がある廃棄物、および電子廃棄物の処分に関しては確立された手順に従ってください。化学物質、廃油および電子部品を含む危険物質の廃棄については、お客様が地域の法律および規制に従って行う責任があります。

注意: 質量シフトの可能性。周辺温度を安定した状態に保ってください。温度の変化が毎時 2°C を超えると、分解能と質量キャリブレーションに影響する可能性があります。

電磁環境

電磁両立性

基本的電磁環境: 公共メインネットワークからの低電圧で直接供給されているという特徴がある場所に存在する環境。

性能基準 A (基準 A): 機器は、テスト中またはテスト後に性能の低下なしおよび機能の損失なしに想定どおりに操作できるものとします。

性能基準 B (基準 B): 機器は、テスト中に機能を損失 (1 つ以上) する可能性があるが、テスト後に性能がいくらか低下して機能が自己回復可能で想定どおりに操作できるものとします。

性能基準 C (基準 C): 機器は、テスト中に機能を損失 (1 つ以上) する可能性があるが、テスト後に性能がいくらか低下して機能がオペレータによって回復可能で想定どおりに操作できるものとします。

機器は、基本的電磁環境での使用を前提としています。

電磁環境耐性条件における予想される性能損失は、総イオンカウント (TIC) の変化が 20% 未満です。

装置と互換性のある電磁環境が整備されており、装置が想定どおりに操作できることを確認してください。電源ラインの電氣的ノイズが大きい場合は、サージ保護装置を取り付けてください。

電磁妨害

グループ 1 機器: この機器は、内部動作に RF エネルギーを使用する可能性のある産業・科学・医療 (ISM) 用機器に分類されます。

クラス A 機器: 家庭用施設および住宅用に使用される建物に供給する低電圧電源供給ネットワークに直接接続する施設以外のすべての施設内での使用に適する機器。[CISPR 11:2009, 5.3 より派生] クラス A 機器はクラス A の制限を満たすものとします。

注意: 電波障害の恐れ。この機器は住宅環境での使用を意図したものではなく、そのような環境では無線受信に対する適切な保護が得られない恐れがあります。

この装置はクラス A デジタル機器の制限に準拠したテストを行っており、FCC (Federal Communications Commission: 連邦通信委員会) コンプライアンス規制パート 15 の基準を満たしています。

これらの制限は、装置が商業環境下で用いられた場合に、妨害行為から装置を適切に保護する必要性を考慮したものです。この装置は高周波エネルギーの生成、使用および放出を行います。オペレーターズマニュアルに従ってインストールおよび使用が行われなかった場合は、ラジオ通信に障害を発生させる恐れがあります。

住宅地域でのこの装置の操作は、発生した場合に自己負担で妨害を修正する必要がある有害な妨害を引き起こす恐れがあります。製造業者によって認可のない変更や調節を行った場合、装置を使用する権限が無効になる場合があります。

停止および廃棄



警告! 環境の危険性。生物学的危険、有毒性、放射性がある廃棄物、および電子廃棄物の処分に関しては確立された手順に従ってください。化学物質、廃油および電子部品を含む危険物質の廃棄については、お客様が地域の法律および規制に従って行う責任があります。

停止の前に、現地規制に従ってシステム全体に対して汚染除去を行います。

システムをサービスから外す際は、国または地域の換気用規制に従って、異なる素材を分別およびリサイクルしてください。保管と取り扱いを参照してください。

注: SCIEX は汚染除去フォームの記入のない場合、システムの引き取りはお受けしかねます。フォームのコピーが必要な場合は、フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。

分別していない一般廃棄物としてコンピュータの部品を含むシステムのコンポーネントおよびサブアセンブリを廃棄しないでください。

廃電気電子機器指令

廃棄物、電気および電子機器 (WEEE) の環境への影響を軽減するための適切な廃棄規定については、地域の一般廃棄物命令に従ってください。この機器を安全に廃棄するために、お近くのカスタマーサービスに連絡し、無料の機器引き取りおよびリサイクルをご利用ください。

資格のある技術者

資格のある SCIEX エンジニアのみが、装置の設置、検査、およびサービスを行うようにしてください。システムのインストール後、フィールドサービスエンジニア (FSE) はカスタマー習熟チェックリストを使用し、お客様にシステムの動作、クリーニング、基本のメンテナンスを説明します。SCIEX の承認を受けていない技術者が修理を行った場合、SCIEX による保証の対象外となることがあります。

装置のメンテナンスは、製造業者が認定した技術者のみが行うようにしてください。ラボで指定された者は、有資格保守要員 (QMP) とともに設置時の手順について習熟度を深めることもできます。QMP とは、ラボの機器へのサービスに関連する電気および化学物質のリスクに関して適切な意識のある担当者です。

検査室条件

安全な環境条件

システムは次の条件下で安全に動作するように設計されています。

- 室内
- 高度: 海拔 2,000 m (6,560 フィート) 以下
- 周辺温度: 5 °C (41 °F) ~ 40 °C (104 °F)
- 相対湿度: 20 % ~ 80 %、結露なし。
- 装置主電源電圧変動: 通常電圧の ± 10%
- 過渡過電圧: 過電圧カテゴリ II レベルまで
- 装置主電源の一時的過電圧
- 汚染度 2

性能仕様

システムは次の条件下で仕様に適合するように設計されています。

- 設置環境温度 15 °C ~ 26 °C (59 °F ~ 78.8 °F)

温度は常に、4 °C (7.2 °F) の範囲を維持し、毎時間 2 °C (3.6 °F) 以上の変化がないようにします。この制限を超えて環境温度が変化すると、スペクトルの質量シフトを引き起こす可能性があります。

- 相対湿度 20 ~ 80%、結露なし。

機器の利用と変更



警告! 人身傷害の危険。製品の設置、調整、または移設が必要な場合は、SCIEX の担当者にお問い合わせください。



警告! 感電の危険。カバーを取り外さないでください。カバーを取り外すと、傷害またはシステムの故障が発生する場合があります。定期的なメンテナンス、点検、または調整のためにカバーを取り外す必要はありません。カバーを取り外す必要がある修理については、SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。



警告! 人身傷害の危険。SCIEX が推奨する部品のみを使用してください。SCIEX が推奨しない部品を使用したり、用途以外の目的で部品を使用すると、測定者が危険にさらされたり、システムの性能に悪影響を及ぼしたりする可能性があります。



警告! 吊り上げ時の危険性。質量分析装置を持ち上げたり移動したりする際は機械式昇降装置を使用します。認定を受けた安全吊り上げ手順に従います。専門の移動サービス業者に依頼することを推奨します。システムコンポーネントの重量については、**設置計画概要書**を参照してください。



警告! 挟み込みの危険性。重いものを動かす際は安全靴を履いてください。

システムは、質量分析装置 **設置計画概要書**で推奨されている環境条件下にある屋内の検査室内で使用してください。

システムが製造業者の規定に反した環境および方法で使用された場合、機器に備わっている性能や保護機能が損なわれる可能性があります。

システム上で認定外の変更や動作を行ったために人身傷害や機器の破損が発生した場合は、保障が適用されない可能性があります。システムが推奨環境条件の範囲外で使用された場合、および認定外の変更を行った場合のどちらであっても、正常でないデータが生成されることがあります。システムサービスに関する情報は、FSE にお問い合わせください。

システムは、化学種の定性分析および定量分析用に設計されています。

このセクションでは、質量分析装置について説明します。イオン源の概要については、*DuoSpray イオン源オペレータガイド*を参照してください。

コンピュータおよびソフトウェアの詳細は、ソフトウェアのソフトウェアインストールガイドを参照してください。

システム概要

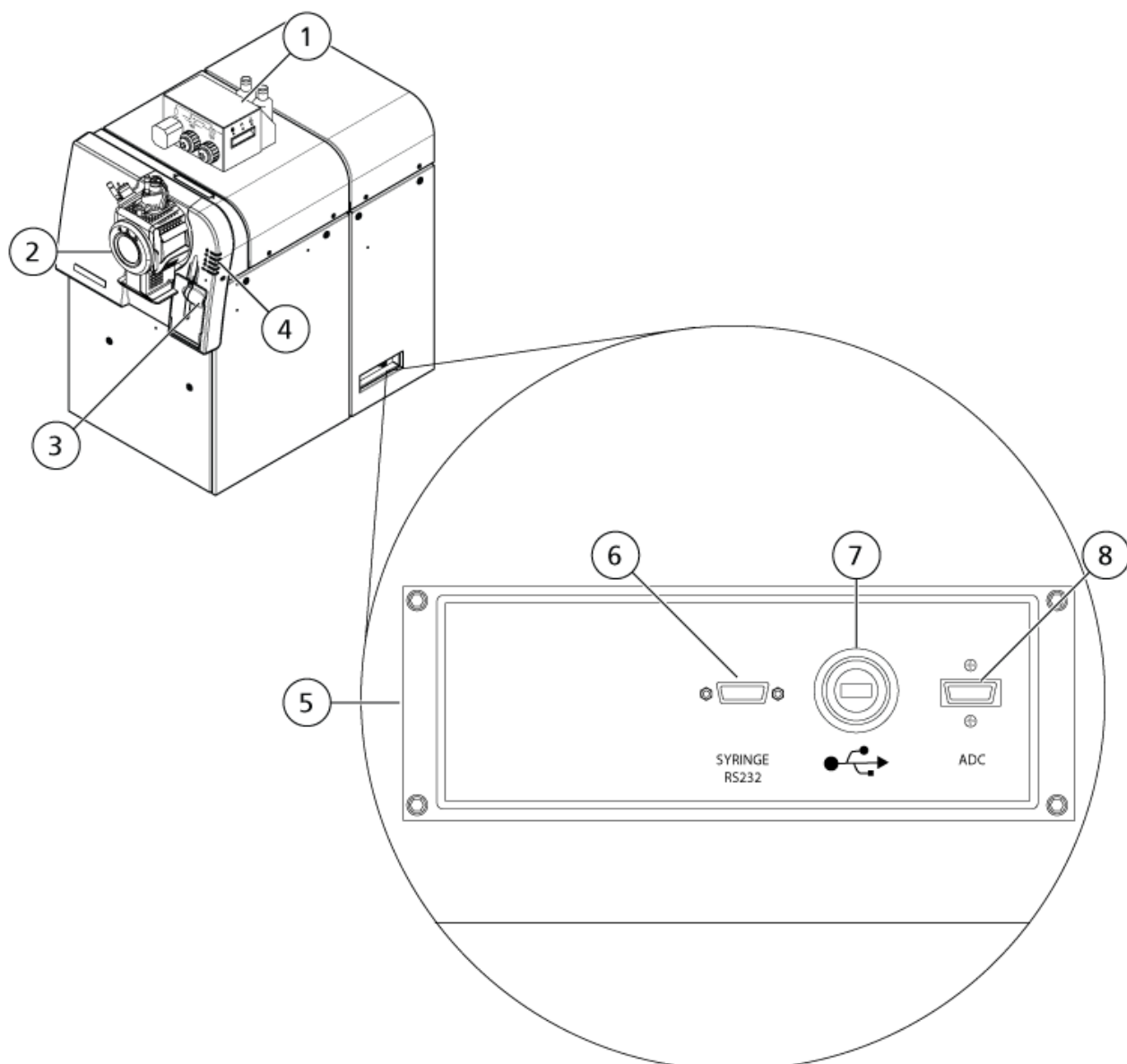
TripleTOF 6600+ システムには、次のコンポーネントが含まれています：

- TripleTOF 6600+ 質量分析装置、粗引きポンプを装備。
- DuoSpray イオン源。*DuoSpray イオン源オペレータガイド*を参照してください。
- 機器の最適化、測定メソッド開発、およびデータ測定のための Analyst TF ソフトウェアを搭載した SCIEX 供給のコンピュータおよびモニター。コンピュータの仕様および要件については、Analyst TF ソフトウェアのソフトウェアインストールガイドを参照してください。
- オプションのキャリブラント供給システム (CDS)

ハードウェアの概観

図 2-1 およびは質量分析装置のコンポーネントとの接続を表示します。

図 2-1 : 正面および右側のビュー

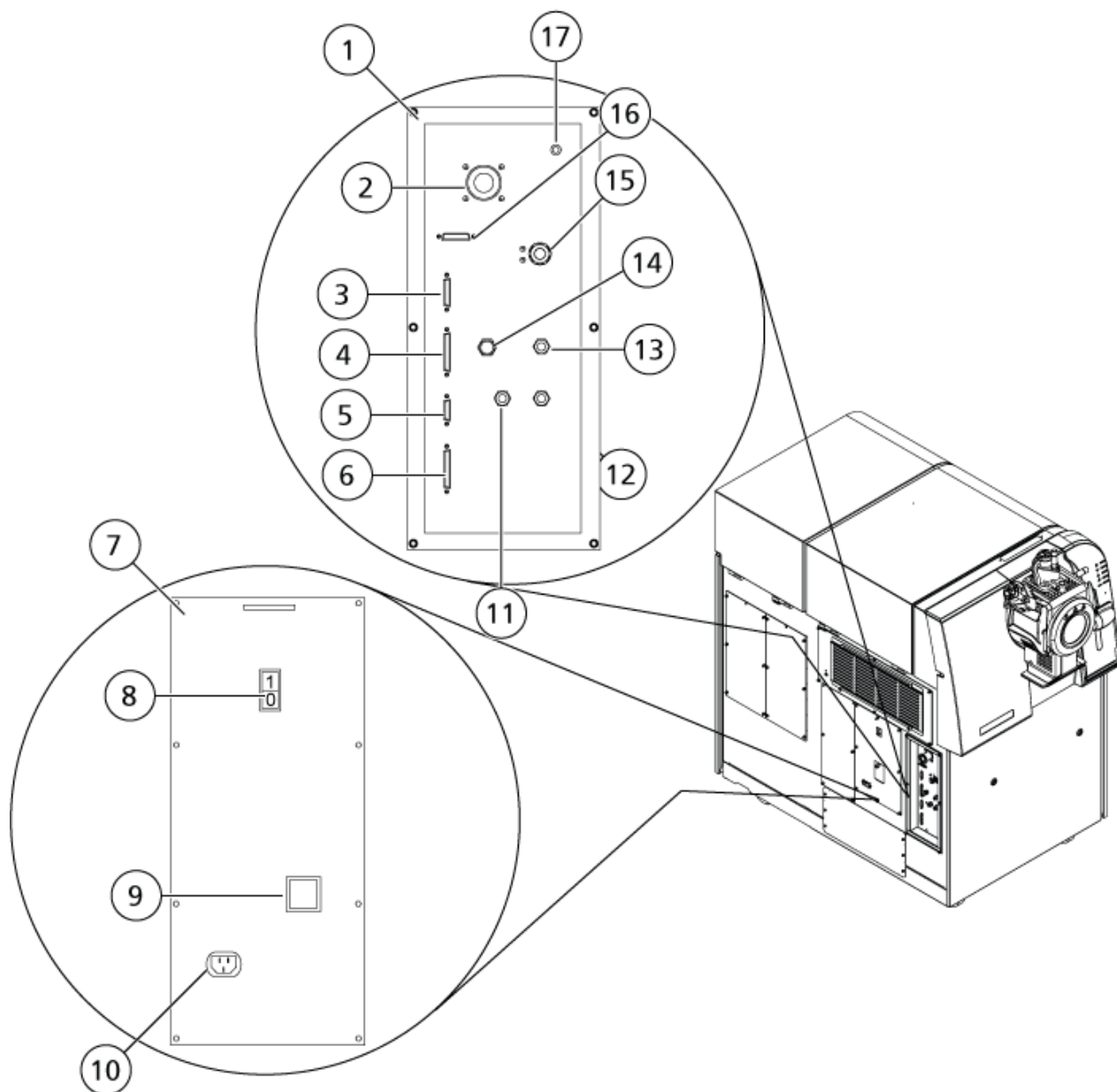


項目	説明	詳細については...
1	オプションの CDS	CDS オペレータガイドを参照してください。
2	DuoSpray イオン源	『DuoSpray Ion Source for TripleTOF Systems Operator Guide』を参照してください。
3	シリンジポンプ	内蔵シリンジポンプ位置の調節 を参照してください。
4	質量分析装置のステータス LED	パネルシンボル を参照してください。

動作原理

項目	説明	詳細については...
5	通信の隔壁	SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
6	シリンジポンプ用シリアル (RS-232) ケーブル接続	FSE にお問い合わせください。
7	USB-GPIB カード用 USB ケーブル接続	FSE にお問い合わせください。
8	ADC カード用 InfiniBand ケーブル接続	FSE にお問い合わせください。

図 2-2 : 左側ビュー



項目	説明	詳細については...
1	ガスと真空隔壁	FSE にお問い合わせください。
2	粗引きポンプの真空接続	FSE にお問い合わせください。
3	検量体制御接続	『CDS Operator Guide』を参照してください。
4	AUX 入出力接続。オプションの LC システム開始信号は、このポートに接続します。	FSE にお問い合わせください。

動作原理

項目	説明	詳細については...
5	外部制御接続。このポートは、将来の使用を意図されたものです。	FSE にお問い合わせください。
6	イオン源の接続。一部のイオン源は、このポートに接続します。	FSE にお問い合わせください。
7	AC 分電盤	FSE にお問い合わせください。
8	機器の電源スイッチ	システムの起動を参照してください。
9	回路ブレーカ上のカバー	システムの起動を参照してください。システムを停止するには、回路ブレーカではなく、電源スイッチを使用してください。
10	主電源系の接続	システムの起動を参照してください。
11	Curtain Gas (窒素) 電源接続	FSE にお問い合わせください。
12	ガス 1 およびガス 2 (ゼロ) 電源接続	FSE にお問い合わせください。
13	イオン源排気ガス(ゼロ空気または窒素)供給接続	FSE にお問い合わせください。
14	CAD ガス(窒素)電源接続	FSE にお問い合わせください。
15	イオン源排気排出接続	FSE にお問い合わせください。
16	未使用	N/A』を参照してください。
17	未使用	N/A』を参照してください。

パネルシンボル

次の表は、質量分析装置のステータス LED の意味を示しています。

表 2-1 : パネルシンボル







LED	色	名称	説明
	緑	電源	システムに電源が入ったときに点灯します。
	緑	真空	動作時の真空レベルに達したときに点灯します。動作時の真空レベルでない場合(ポンプダウンおよび通気中)には点滅します。
	緑	準備完了	システムが準備完了状態にあるときに点灯します。システムは作動準備ができた状態である必要があります。

表 2-1 : パネルシンボル (続き)

LED	色	名称	説明
	青	スキャンング	システムがデータを取得しているときに点滅します。
	赤	障害	システムに障害が発生した場合に点灯します。
	緑	シリンジポンプの状態	シリンジポンプが動作しているときに点灯します。

システムがオンにされた後、すべての LED が点灯します。電源 LED は点灯したままになります。他の LED は 2 秒間点滅してから消灯します。真空の LED が点滅します。動作時の真空レベルに到達すると、この LED は点灯したままになります。

動作原理

質量分析法は、イオンの質量電荷比を測定することにより、不明な成分を識別し、既知の成分を定量化し、分子の構造特性および化学的性質についての情報を提供します。

TripleTOF 6600+ システムには、質量電荷比 (m/z) に従ってイオンを選択または送信する一連の四重極フィルターがあります。その中で最初の四重極となるのが QJet イオンガイドであり、オリフィスプレートと Q0 領域の間に配置されています。QJet イオンガイドはイオンを濾過しませんが、Q0 領域に入る前にイオンにフォーカスします。より幅の広いオリフィスプレートにより作られたより大きなイオン流量に事前にフォーカスされることにより、QJet イオンガイドはシステム感度を増加させ、SN 比を向上させます。Q0 領域において、イオンは Q1 四重極に通過していく前にさらにフォーカスされます。

Q1 四重極は Q2 衝突セルに入る前にイオンを選別します。Q1 四重極は、以下の 2 種類のモードで動作します。

- 指定された m/z 範囲内のすべてのイオンを Q2 衝突セルに通過させる。これは TOF MS スキャンです。すべてのイオンがシステムによって分析されます。
- 指定された m/z 比を持つ 1 つのイオンを Q2 衝突セルに通過させる。これは TOF MS/MS スキャンです。選択されたイオンだけが分析されます。

Q2 衝突セルでは、ガス分子との衝突によってイオンの内部エネルギーが増加され、分子結合の破壊によるプロダクトイオンの生成に至ります。この手法によってプロダクトイオンの m/z

Q2 衝突セルの通過後、イオンは TOF 領域に入り、さらに質量分析が行われます。検出器への到達にかかる時間は、それぞれの m/z 検知器においては、イオンは電圧パルスに変換される電流を生成します。このような電圧パルスはカウントされ、パルス数は検出器に入ったイオン量に直接的に比例します。質量分析装置は電圧パルスを信号に変換し、その信号を各イオンが検出器に到達するまでにかかった時間と相関させます。信号はイオンの強度を表し、検出器への到達にかかった時間は具体的な m/z 質量分析装置は、このデータを質量スペクトルとして表示します。

データの取り扱い

Analyst TF ソフトウェアを使用するには、Windows 7、64 ビットまたは Windows 10、64 ビット OS 搭載のコンピュータがソフトウェアが必要です。コンピュータおよび関連するシステムは、システムおよびデータ収集を制御するシステムコントローラおよび関連するファームウェアによって作動します。システム動作中に、取得したデータは Analyst TF ソフトウェアに送信され、完全な質量分析スペクトル、イオンクロマトグラムまたはイオンスペクトル、または時間経過に伴う全イオン電流として表示できます。



警告! 人身傷害の危険。システムを使用する際は、ドキュメントに記載された指示に従ってください。SCIEX が指定した方法で装置を使わない場合、装置による保護機能が損なわれることがあります。

システムの起動



警告! 感電の危険。緊急時にはシステムを主電源コンセントから外せるようにしてください。主電源コンセントの周囲に物を置かないでください。



警告! 吊り上げ時の危険性。フィールドサービスエンジニア(FSE)に相談することなくシステムを動かさないでください。人身傷害やシステム損傷のリスク。システムを動かす必要がある場合、FSE に連絡してください。



注: 装置を操作する前に、[操作上の予防措置および制限事項](#)に記載されている安全性に関する情報をお読みください。

前提条件

- ・ 設置計画概要書に規定されている施設要求事項に適合していること。設置計画概要書には、主電源および接続、圧縮空気、窒素、粗引きポンプ、換気、排気、施設の清掃の各要件に関する情報が掲載されています。設置計画概要書のコピーが必要な場合は、SCIEX にお問い合わせください。お問い合わせ先については、sciex.com/contact-us でご確認ください。
- ・ イオン源排気ガス、圧縮空気、窒素ガスが質量分析装置に接続されていること。
- ・ 4 L イオン源排気ドレインボトルが、質量分析装置の背面にある排気排出接続、およびラボ換気システムに接続されていること。
- ・ イオン源排気ホースが質量分析装置、イオン源排気ドレインボトル、換気連結部にしっかりと固定されていること。
- ・ 装置の電源スイッチがオフになっていて、主電源ケーブルが質量分析装置に差し込まれていること。
- ・ 質量分析装置および粗引きポンプの主電源ケーブルが 200 VAC~240 VAC 主電源に接続されていること。
- ・ イーサネットケーブルが質量分析装置およびコンピュータの両方に接続されていること。

1. 粗引きポンプの電源を入れます。

使用説明

2. 前面から見て質量分析装置の左側にある回路ブレーカスイッチのカバーを外し、回路ブレーカをオンにします。図 2-2 を参照してください。
3. 回路ブレーカのカバーを閉じ、カバーを持ちながら手でネジを締め付けます。
4. 装置の電源スイッチをオンにします。図 2-2 を参照してください。
5. コンピュータの電源を入れます。
6. 制御ソフトウェアを開きます。

システムのシャットダウン

一部の手順では、システムをシャットダウンする必要があります。その他にも、大気開放が必要になる場合があります。以下の手順に従ってシステムをシャットダウンし、必要に応じて大気開放します。

注: ガス用チューブを取り外す必要がある場合は、ガス管路の圧力を下げてから取り外します。

ヒント! 質量分析装置を延長期間使用しない場合は、イオン源をすぐ使用できる状態にしたまま Standby 状態にしておいてください。質量分析装置をシャットダウンさせるには、次の手順に従ってください。

1. 継続中のスキャンを完了させるか、停止してください。

注意: ダメージを与える恐れ。システムをシャットダウンする前に、サンプルフローを停止します。

2. システムのサンプルフローを停止します。
3. Analyst TF ソフトウェアで、ハードウェアプロファイルが有効になっている場合は無効にします。
4. ソフトウェアを閉じます。
5. 装置左側にある電源スイッチを切ります。ハードウェアの概観を参照してください。
6. (必要に応じて)以下の手順に従ってシステムを大気開放します。

注: イオン源は適切な排気のために取り付けたまにしておいてください。

- a. 粗引きポンプの電源を切ってください。
 - b. システムがベントするのを待ちます。所要時間は 15 分から 25 分です。
7. 質量分析装置の左側にある回路ブレーカスイッチのカバーを外し、回路ブレーカを切ります。図 2-2 を参照してください。
 8. 回路ブレーカスイッチのカバーを取り付け、カバーを固定するネジを手で締め付けます。
 9. (システムを大気開放する場合)粗引きポンプの電源供給ケーブルを、主電源コンセントから取り外します。

内蔵シリンジポンプ位置の調節



警告! 尖った部分により怪我をする危険。シリンジの取り扱いに注意してください。シリンジチップは非常に尖っています。



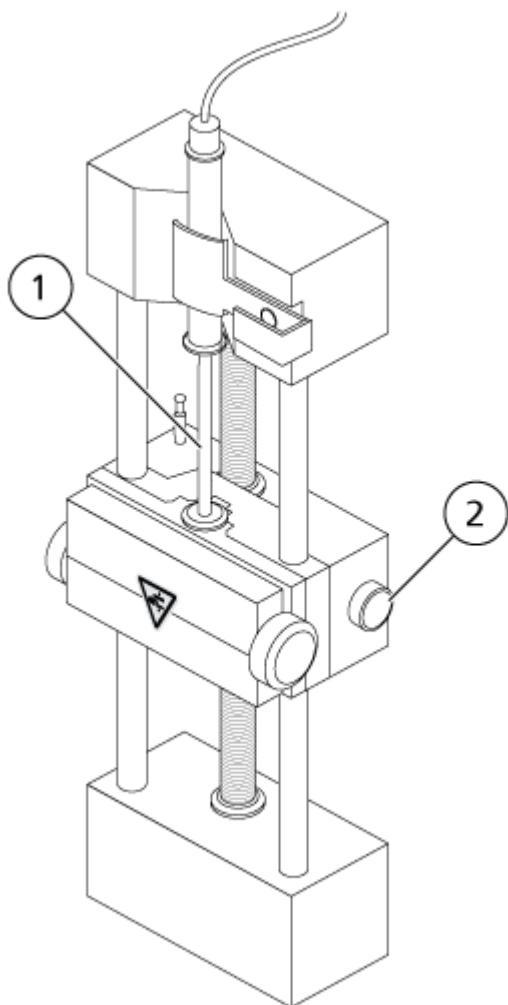
警告! 尖った部分により怪我をする危険。シリンジがシリンジポンプに適切に固定され、自動シリンジポンプストップが適切に調整されて、ガラス製シリンジを損傷や破損から守っているかを確認します。シリンジが破損した場合、鋭利物の廃棄に関する認定を受けた安全手順に従います。



質量分析装置のシリンジポンプの位置については、[図 2-1](#) を参照してください。

1. ベースを下げるために、シリンジポンプ右面の Release ボタンを押してください。そして、シリンジを挿入してください。

図 3-1 : シリンジを下げる

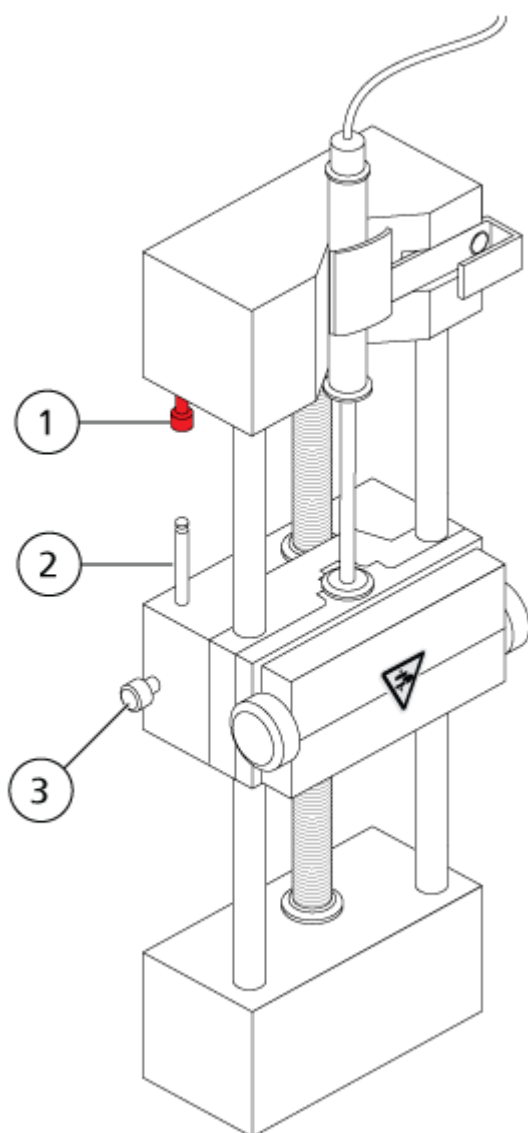


使用説明

項目	説明
1	シリンジプランジャー
2	Release ボタン。ベースを上げ下げするために押してください。

2. シリンジの端がベースと同じ高さで、シリンジのシャフトがカットアウトで動かないことを確認してください。
3. シリンジプランジャーがガラスのシリンジの底に当たる前に自動シリンジ停止がかかるように、ポストを調節してください。

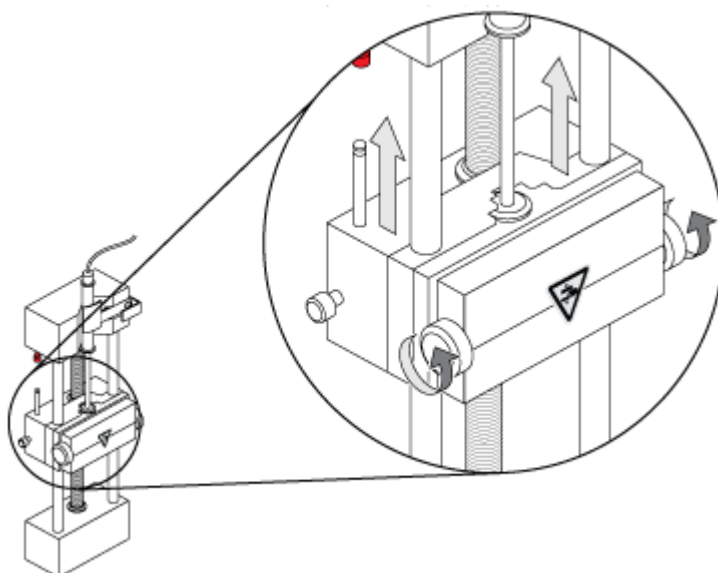
図 3-2 : 自動シリンジ停止



項目	説明
1	自動シリンジ停止。ポストが自動シリンジ停止に当たったあと、シリンジポンプは停止します。
2	ポスト。サンプル注入の間、シリンジプランジャーがシリンジを打つのを防ぐために高さを調整してください。
3	ロックネジを取り付けてください。ポストの高さを調節したあと、ネジを締めてください。

- シリンジポンプのねじを回してシリンジを固定します。

図 3-3 : シリンジポンプネジ



- 質量分析装置と内蔵シリンジポンプをソフトウェアで確実に作動させます。
- Analyst TF ソフトウェアの Navigation バーで **Manual Tuning** をクリックします。
- Start Syringe** をクリックします。
- シリンジポンプを停止するには、**Stop Syringe** をクリックします。

シリンジポンプのリセット

Analyst TF ソフトウェアがシリンジポンプとの通信を停止した場合には、シリンジポンプをリセットしてください。

クリップや類似のツールを使用して、[図 3-4](#) に示すリセットボタンを押してください。

図 3-4 : リセットボタン

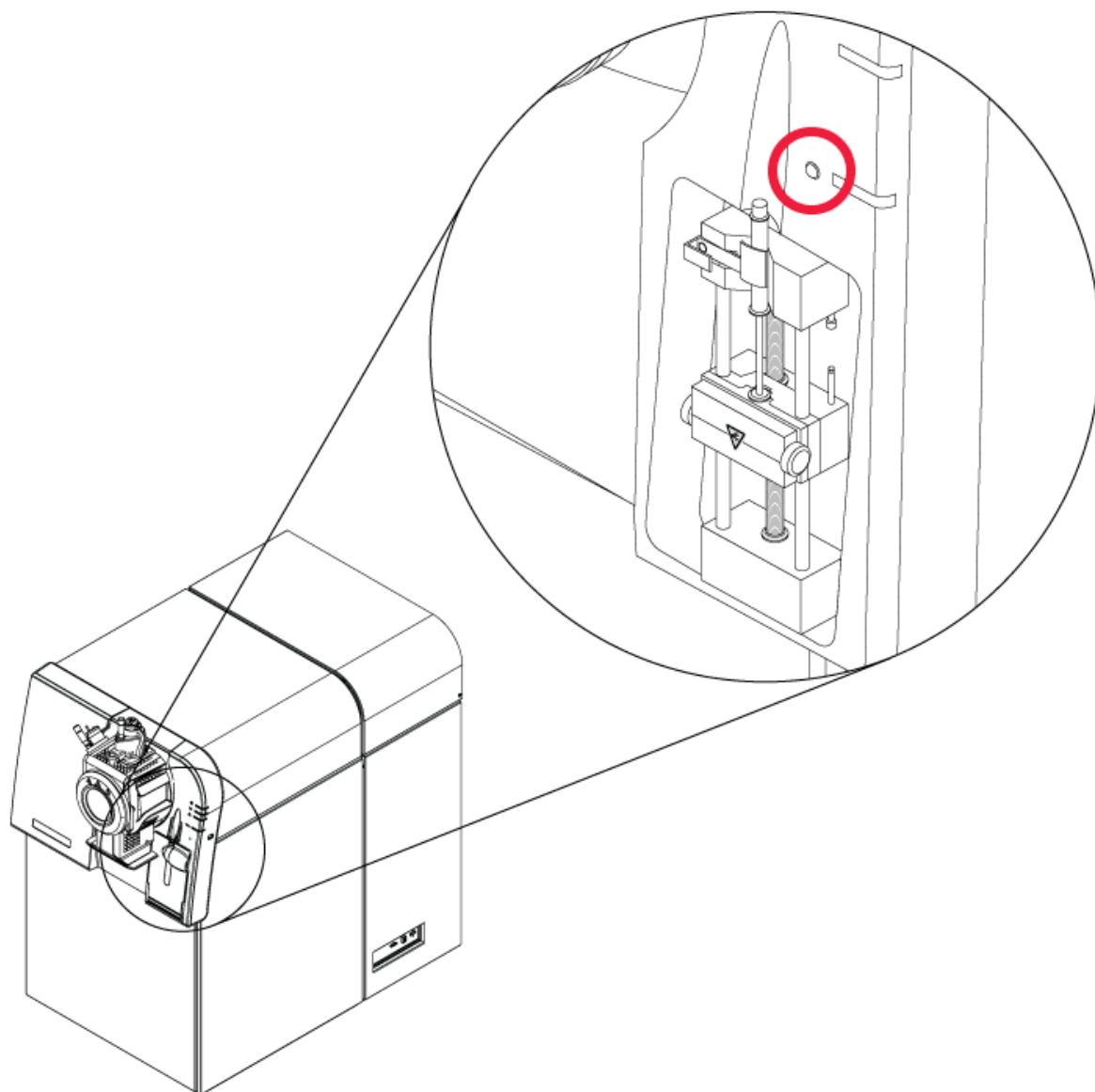


表 4-1 : 装置の設定

ステップ:	目的の作業	詳細情報	作業内容
1	ハードウェアプロファイルを作成します。	ハードウェアプロファイルの作成	各ハードウェアプロファイルには質量分析装置および LC システムなどのその他の機器が含まれる必要があります。有効なハードウェアプロファイルに含まれる機器のみが、測定メソッドを作成する際に使用できます。
2	プロジェクトを作成してデータを保存します。	プロジェクトおよびサブプロジェクトの作成	プロジェクトおよびサブプロジェクトを用いることで、データ管理が容易になり、結果を簡単に比較することができます。
3	質量分析装置を最適化します。	質量分析装置の最適化	これは、分解能および質量分析装置のパラメータを最適化し、システムから最良の感度および性能を得るために質量分析装置のキャリブレーションを行うプロセスです。

表 4-2 : サンプル測定ワークフロー

ステップ:	目的の作業	詳細情報	作業内容
1	プロジェクトを作成してデータを保存します。	プロジェクトおよびサブプロジェクトの作成	実験開始前に、実験関連ファイルの保管場所を決めます。プロジェクトとサブプロジェクトを利用すれば、簡単にデータ管理ができ、結果も簡単に比較できます。

表 4-2 : サンプル測定ワークフロー (続き)

ステップ:	目的の作業	詳細情報	作業内容
2	測定メソッドを作成します。	使用説明—測定メソッド	サンプルの分析のために、質量分析装置および任意の LC 機器用の測定メソッドを作成します。測定メソッドにより、使用する周辺装置、その機器でのデータ収集時期、および関連パラメータが示されます。
3	バッチを作成して提出します。	セットとサンプルをバッチに追加 およびサンプルまたはサンプル セットの提出	測定メソッドの作成後、測定バッチを作成し、測定キューにそのバッチを書き込んでサンプルを実行します。
4	サンプルを実行してデータを取得します。	データの取得	サンプルの実行には、測定用キュー、モニタリング装置、および機器ステータスの管理が必要です。サンプルの提出およびデータ取得には、Queue Manager を用います。Queue Manager にはキュー、バッチ、およびサンプルステータスが表示され、キュー内のサンプルおよびバッチの管理を簡単に行うことができます。
5	Explore モードでデータを分析します。 —または—	使用説明—データの分析と探索	Explore モードでは、多くのツールが提供されており、取得データの表示および処理が可能です。グラフはピークラベルやキャプションでカスタマイズすることができます。等高線図を表示し、スペクトルをライブラリに保存することができます。

表 4-2 : サンプル測定ワークフロー (続き)

ステップ:	目的の作業	詳細情報	作業内容
6	データを分析し、比較ソフトウェアでレポートを印刷します。	MultiQuant ソフトウェア/ PeakView ソフトウェア	MultiQuant ソフトウェアまたは PeakView ソフトウェアを使ってデータを分析してください。詳細については、ソフトウェアに付属している資料等を参照してください。

表 4-3 : 熟練ユーザーのワークフロー

ステップ:	目的の作業	詳細情報
1	装置を質量較正します。	次の場所に格納された質量較正チュートリアル <ul style="list-style-type: none"> Windows 7 オペレーティングシステム: Start > All Program > SCIEX > Analyst TF > Software Guides.をクリックします。 Windows 10 オペレーティングシステム: Start > SCIEX Analyst TF > Analyst TF Documentation, をクリックし、Software Guides フォルダをダブルクリックします。
2	質量分析装置を最適化します。	に格納された Manual Optimization Tutorial <ul style="list-style-type: none"> Windows 7 オペレーティングシステム: Start > All Program > SCIEX > Analyst TF > Software Guides.をクリックします。 Windows 10 オペレーティングシステム: Start > SCIEX Analyst TF > Analyst TF Documentation, をクリックし、Software Guides フォルダをダブルクリックします。

ハードウェアプロファイル

ハードウェアプロファイルは、質量分析装置および機器がどのように構成され、コンピュータに接続されているかをソフトウェアに伝えます。複数のハードウェアプロファイルを設定することができますが、随時アクティブにできるのは 1 つのプロファイルだけです。

Hardware Configuration Editor でハードウェアプロファイルを作成する場合、周辺装置はソフトウェアと通信できるように構成する必要があります。周辺機器の設定には、次の 2 つの手順が必要です。

- 物理的な接続を行う手順。機器への物理的接続の設定については、*周辺装置セットアップガイド*を参照してください。
- 周辺機器と通信するためにソフトウェアを設定する手順。Analyst TF ソフトウェアに対応する機器のリストについては、*ソフトウェアインストールガイド*を参照してください。

ソフトウェアをインストールするときに、各周辺装置に必要なドライバもインストールされます。周辺装置を物理的にコンピュータに接続した後、適切な構成情報を設定します。

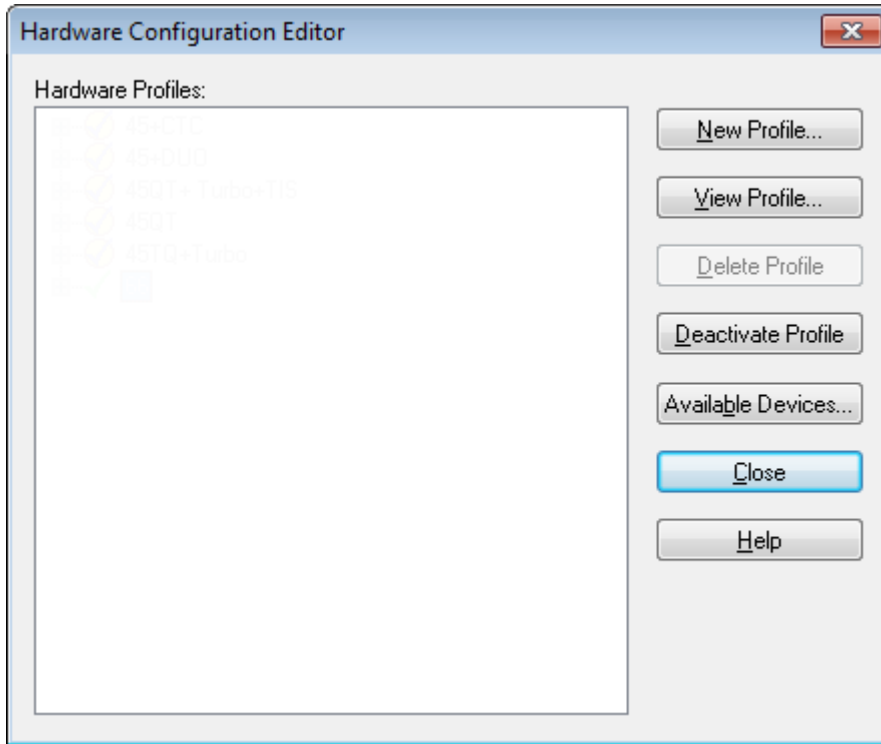
各ハードウェアプロファイルには質量分析装置が含まれている必要があります。測定メソッドを作成する前に、メソッドに使用する全機器（シリンジポンプを含む）がハードウェアプロファイルに含まれていることを確認します。有効なハードウェアプロファイルで構成し、Add/Remove Device Method ダイアログボックスで選択した機器は、Acquisition method ペインでアイコン表示されます。有効なハードウェアプロファイルに含まれる周辺装置のみが、測定メソッドで使用できます。

ハードウェアプロファイルの作成

ユーザーは複数のハードウェアプロファイルを作成することができますが、随時アクティブにできるのは 1 つのプロファイルだけです。

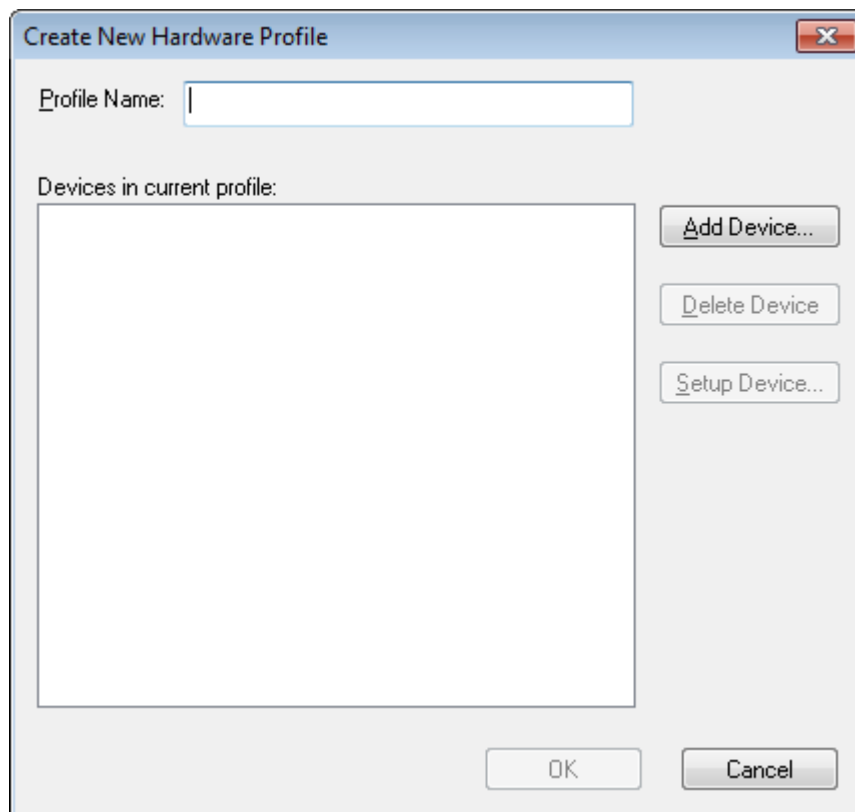
1. Navigation バーの **Configure** の下にある **Hardware Configuration** をダブルクリックします。

図 5-1 : Hardware Configuration Editor ダイアログ



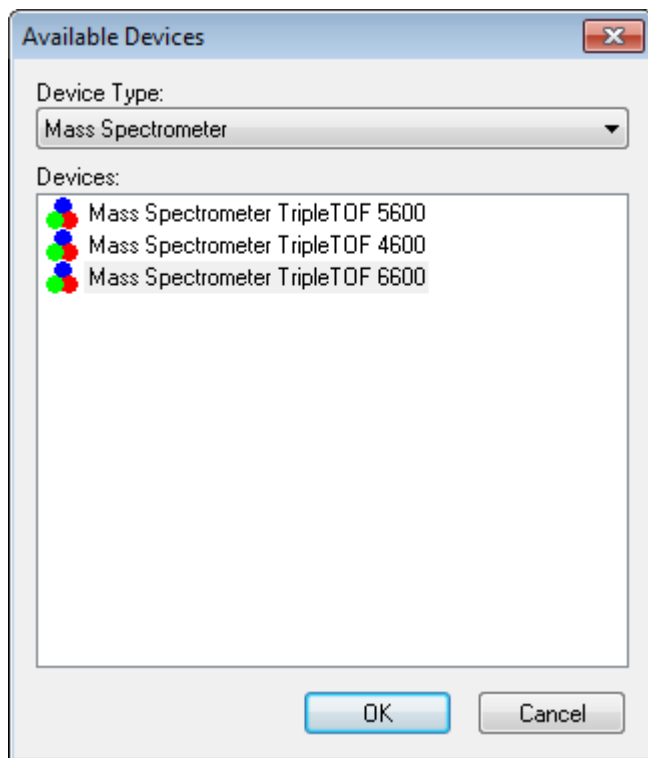
2. **New Profile** をクリックします。

図 5-2 : Create New Hardware Profile ダイアログ



3. **Profile Name** フィールドに名前を入力します。
4. **Add Device** をクリックします。

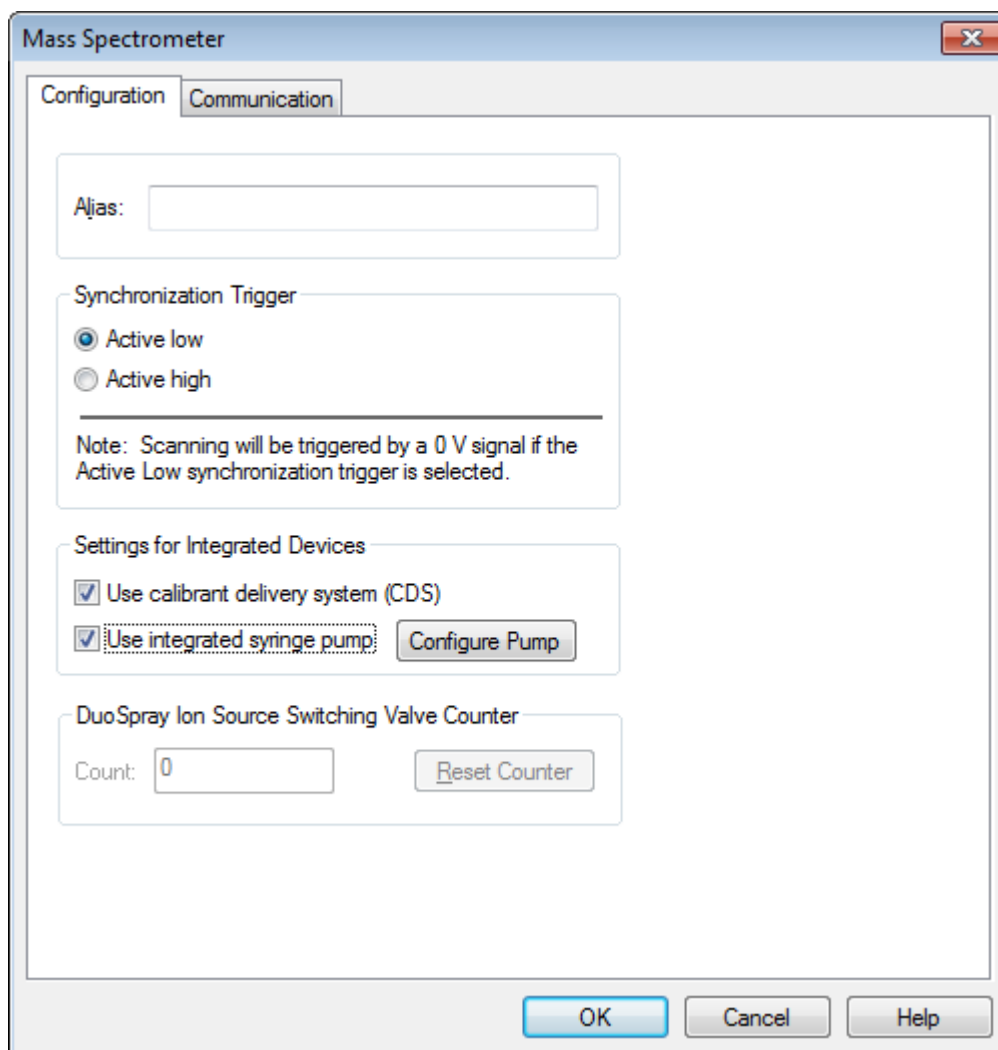
図 5-3 : Available Devices ダイアログ



Available Devices ダイアログの **Mass Spectrometer** フィールドでは、**Device Type** がプリセット値となっています。

5. **Devices** リストで適切な質量分析装置を選択し、**OK** をクリックします。
6. Create New Hardware Profile ダイアログで **Setup Device** をクリックします。
7. (オプション)内蔵シリンジポンプを使用する質量分析装置を構成するには、Configuration タブで **Use integrated syringe pump** チェックボックスをオンにします。

図 5-4 : CDS の Configuration タブと構成されたシリンジポンプ



8. (オプション)CDS に対する質量分析装置を構成するには、Configuration タブで **Use calibrant delivery system (CDS)** を選択します。
9. (オプション)必要であれば Configuration および Communication タブでさらなる特性を選択します。
10. **OK** をクリックします。
11. Create New Hardware Profile ダイアログで **Add Device** をクリックし、質量分析装置で使用する各デバイスを追加して設定します。ハードウェアプロファイルにデバイスを追加を参照してください。
12. Create New Hardware Profile ダイアログで **OK** をクリックします。
13. Hardware Configuration Editor で有効化対象のハードウェアのプロファイルをクリックします。
14. **Activate Profile** をクリックします。
チェックマークが緑色に変わります。赤い×印が現れる場合は、ハードウェアプロファイルの有効化に問題が生じています。

ヒント! ハードウェアプロファイルは、別のプロファイルが有効化されるまでは無効化する必要はありません。ハードウェアプロファイルをクリックし、次に **Activate Profile** をクリックします。有効なプロファイルは自動的に無効化されます。

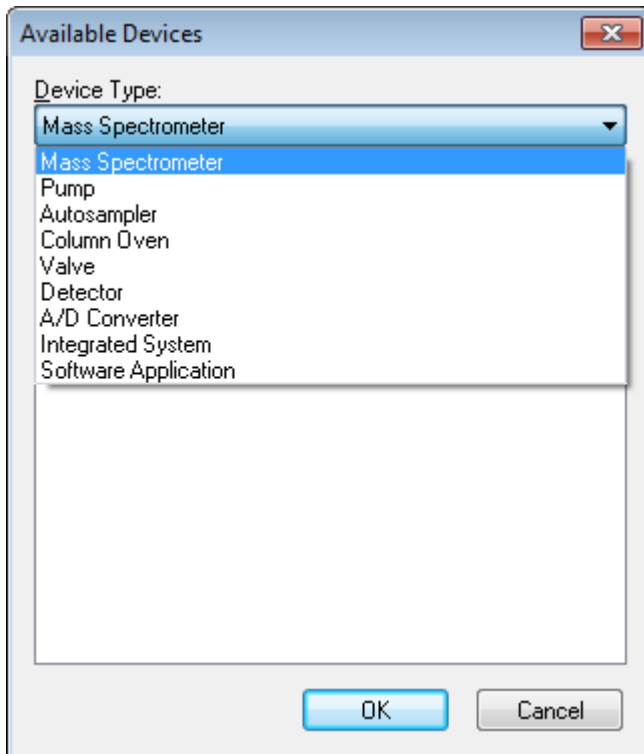
15. **Close** をクリックします。

ハードウェアプロファイルにデバイスを追加

デバイスは、ソフトウェアが通信できるように構成する必要があります。ソフトウェアをインストールすると、各デバイスに必要なドライバもインストールされます。デバイスを設定する前に、デバイスをコンピュータに物理的に接続する必要があります。詳細な情報については、*周辺装置セットアップガイド*を参照してください。

1. Hardware Configuration Editor を開いてください。
2. **Hardware Profiles** リストで、ハードウェアプロファイルを無効にします。
3. **Edit Profile** をクリックします。
4. **Add Device** をクリックします。
Available Devices ダイアログが開きます。
5. **Device Type** リストでデバイスを選択し、**OK** をクリックします。

図 5-5 : Available Devices ダイアログ



6. **OK** をクリックします。
7. **Devices** リストでデバイスを選択してから、**OK** をクリックします。

8. **Setup Device** をクリックします。
デバイスの構成値を含むダイアログが開きます。
9. (オプション) Communication タブの **Alias** フィールドで、デバイスの名称または他の識別子を入力します。

注: シリアル通信を使用するデバイスでは、選択したシリアルポートが、デバイスが物理的に接続されているデバイスのシリアルポートと一致していることを確認してください。

注: **Alias** フィールドは **Name** ボックスとして参照されることもあり、**Alias** の下にある他のタブに位置しています。

- デバイスが **Serial Port** を通信インターフェースとして使用する場合は、**COM Port Number** リストでデバイスを接続している COM ポートを選択します。
- デバイスが **Ethernet** を通信インターフェースとして使用する場合は、管理者によりデバイスに割り当てられた **IP Address** を入力するか、対応するアドレスの **Host Name** を使用します。
- デバイスが **GPIB Board** を通信インターフェースとして使用する場合は、GPIB ボードの設定を変更しないでください。

デバイスの残りのプリセット値は、適切だと考えます。これらの値を変更しないでください。Configuration タブおよび Communication タブについての詳細は、ヘルプを参照してください。

10. デバイスのプリセット値を回復するには、Communication タブで、**Set Defaults** をクリックします。
11. 構成を保存するには、**OK** をクリックします。
12. ステップ 4 からステップ 11 を各デバイスについて繰り返します。
13. Create New Hardware Profile ダイアログで **OK** をクリックします。
14. ハードウェアプロファイルを有効にするには、以下の手順に従います。
 - a. Hardware Configuration Editor で、ハードウェアプロファイルをクリックします。
 - b. **Activate Profile** をクリックします。

チェックマークが緑色に変わります。赤い×印が現れる場合は、ハードウェアプロファイルの有効化に問題が生じています。詳細な情報については、[ハードウェアプロファイル有効化のトラブルシューティング](#)を参照してください。

ヒント! 他のハードウェアを有効にするために有効なハードウェアプロファイルを無効化する必要はありません。有効でないハードウェアプロファイルをクリックし、**Activate Profile** をクリックします。他のプロファイルは自動的に無効化されます。

15. **Close** をクリックします。

ハードウェアプロファイル有効化のトラブルシューティング

ハードウェアプロファイルが有効にならない場合、プロファイルのどのデバイスが有効化に失敗したかを示すダイアログボックスが開きます。通信エラーでデバイスが有効にならないおそれがあります。

1. 生成されたエラーメッセージをお読みください。メッセージによって、機器自体、または通信のセットアップ方法に問題があるかどうか分かります。
2. デバイスが主電源に接続され、電源が入っていることを確認します。
3. デバイスに割り当てられた COM ポートが正しいことを確認します。
4. デバイスとの通信設定（たとえば、デュアルインラインパッケージ (DIP) スイッチの設定）が正しく行われていて、Communication タブの設定と一致していることを確認します。
5. 機器の電源を切ってください。
6. 10 秒間待ってください。
7. 機器の電源を入れてください。
すべての機器のパワーアップアクティビティが終了するまで待つてから、ハードウェアプロファイルをもう一度有効にします。いくつかの機器は、パワーアップアクティビティを終了するのに 30 秒以上かかる場合があります。
8. ハードウェアプロファイルを有効にします。
9. まだ問題が続くようであれば、失敗しているプロファイルを削除し、新たに作成してください。
10. それでも問題が解決しない場合は、sciex.com/request-support に進みます。

プロジェクトおよびサブプロジェクト

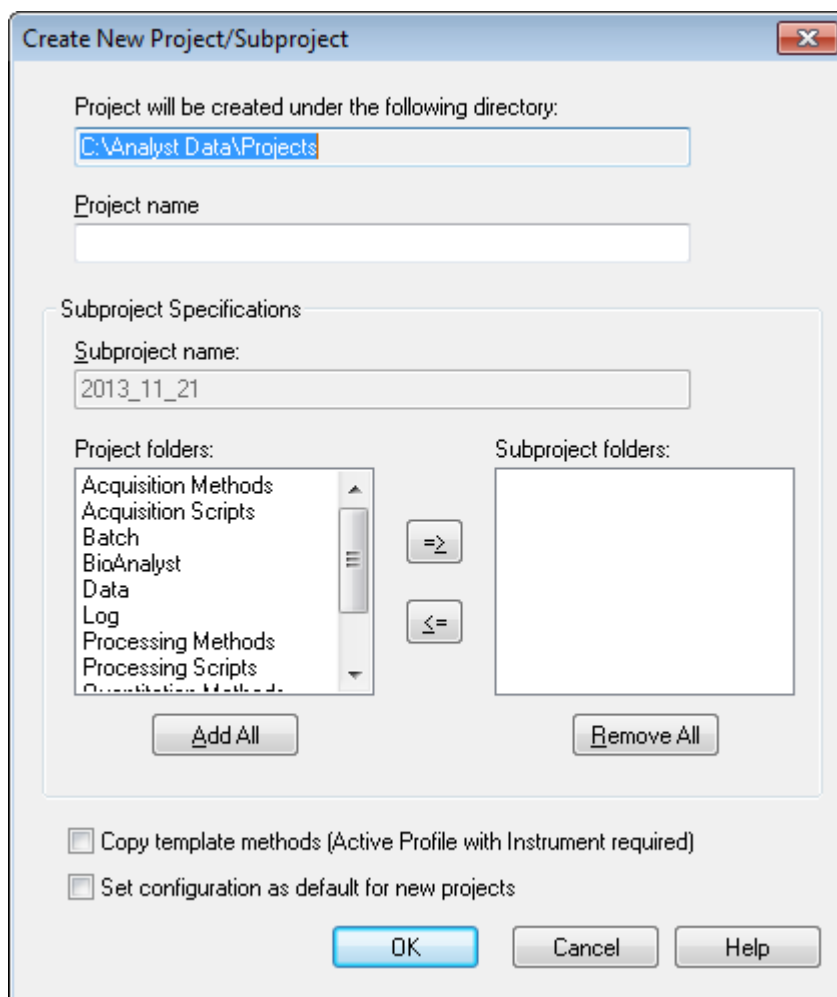
実験開始前に、実験関連ファイルの保管場所を決めます。各実験にプロジェクトやサブプロジェクトを用いて、データを効果的に管理し結果を比較します。例えば、サブプロジェクトを用いて特定日の結果を保存します。

プロジェクトおよびサブプロジェクトの作成

サブプロジェクト構造をプロジェクト内で使用するには、プロジェクト作成時にサブプロジェクト構造を作成します。

1. **Tools > Project > Create Project.** をクリックします。

図 5-6 : Create New Project/Subproject ダイアログ



注: 新規のサブプロジェクトは、最初にサブプロジェクト付きで作成されなかったプロジェクトには作成することができません。

2. **Project name** フィールドにプロジェクト名を入力します。
3. (オプション) サブプロジェクトを使用する場合は、以下の手順に従います。
 - a. 必要なフォルダを選択し、矢印ボタンを押して **Subproject folders** リストに移動します。
 - b. **Subproject name** フィールドに最初のサブプロジェクト名を入力するか、既存の日付を使用します。
4. (オプション) すべての新規プロジェクトに対して、このプロジェクトおよびサブプロジェクトのフォルダ組織を使用するには、**Set configuration as default for new projects** チェックボックスをオンにします。
すべての新規プロジェクトはこのフォルダ構成で作成されます。
5. **OK** をクリックします。

サブプロジェクトの作成

サブプロジェクトは、既存のサブプロジェクト構造を有するプロジェクトのみで作成されます。

1. **Project** ツールバー上で、**Project** リストからプロジェクトを選択します。
2. **Tools > Project > Create Subproject** をクリックします。
3. **Subproject name** ボックスで、サブプロジェクト名を入力するか既存の日付を使用します。
4. **OK** をクリックします。

サブプロジェクトのコピー

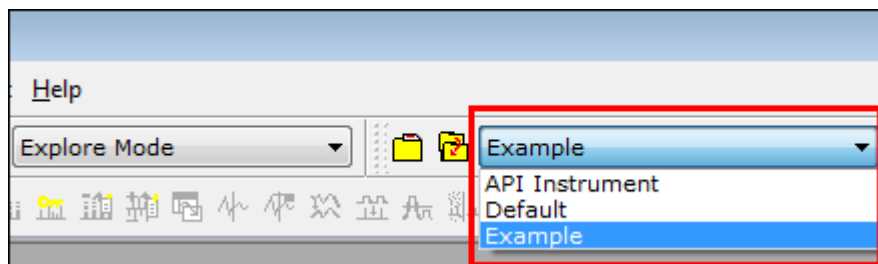
サブプロジェクトは、現存するサブプロジェクトを持つ別のプロジェクトからコピーが可能です。コピーするサブプロジェクトがコピー先のプロジェクトフォルダにも存在するフォルダを含む場合、ソフトウェアはプロジェクトレベルのフォルダを使用します。

1. **Tools > Project > Copy Subproject.** をクリックします。
Copy Subproject ダイアログが開きます。
2. **Browse** をクリックして、サブプロジェクトのソースを参照します。
3. **OK** をクリックします。
4. **Source Subproject** リストからサブプロジェクトを選択します。
5. **Browse** をクリックして、サブプロジェクトのコピー先を参照します。
6. **Target Subproject** フィールドに名前を入力します。
7. **OK** をクリックします。
8. 次のいずれかの操作を行います。
 - **Subproject Source** から **Subproject Destination** にすべてのフォルダとファイルをコピーするには、**Copy Contents** チェックボックスをオンにします。
 - **Subproject Destination** に同じ構造でフォルダのみをコピーするには、**Copy Contents** チェックボックスがオフになっていることを確認します。
9. **Copy** をクリックします。

プロジェクトとサブプロジェクトの切り替え

ソフトウェアツールバー上で、プロジェクトリストから必要なプロジェクトまたはサブプロジェクトをクリックします。

図 5-7 : プロジェクトリスト



この図のプロジェクトリストには、フォルダ **API Instrument**、**Default**、および **Example** が表示されます。

インストールされるプロジェクトフォルダ

ソフトウェアをインストールすると、**Default**、**API Instrument**、**Example** という 3 つのプロジェクトフォルダがインストールされます。

API 機器フォルダ

API Instrument フォルダは唯一、質量分析装置の機能を修正することができる重要なフォルダです。API Instrument フォルダには質量分析装置のチューニングおよびキャリブレーションに必要な情報が含まれています。この情報は、以下を含みます。

- パラメータ設定ファイル
- 参照ファイル
- キャリブレーションと分解能の情報を含む装置データファイル
- 自動チューニング中に使用する測定メソッド

API Instrument フォルダにはまた、**Start** ボタン (**Acquire** ボタンではありません) を使用して実行した手動チューニングのデータファイルも含まれています。これらのデータファイルは、作成された日時を名前にして、自動的に **API Instrument\Tuning Cache** フォルダに保存されます。Tuning Cache フォルダは定期的に自動削除されます。

初期設定フォルダ

Default フォルダには新規プロジェクトが含まれ、新規プロジェクトのテンプレートとしての役割を果たします。

実例フォルダ

Example フォルダには、サンプルのメソッドとデータファイルが含まれます。ユーザーは、サンプルデータファイルを使用して、Explore モードでの作業を練習することができます。

API 機器フォルダのバックアップ

API Instrument フォルダを定期的に、および定期メンテナンス後にバックアップします。

API Instrument フォルダをコピーし、別の場所(別のコンピュータを推奨)に貼り付けます。その後フォルダ名を変更してください。複数の質量分析装置がある場合は、フォルダ名を付ける際に日付と質量分析装置のリファレンスを使用します。たとえば、API Instrument_QT6500plus3_010121 です

API 機器フォルダの回復

API Instrument フォルダを定期的に、および定期メンテナンス後にバックアップします。

1. 現在の API Instrument フォルダの名前を変更します。
2. バックアップフォルダを Projects フォルダにコピーします。
3. バックアップフォルダの名前を API Instrument に変更します。

使用説明—チューニングとキャリブレーション

6

Verify Performance Only オプションはいつでも実行できますが、装置のチューニングは感度の喪失または分解能が検知された場合のみ行ってください。チューニングとキャリブレーションの詳細な情報については、**アドバンスユーザーガイド**を参照してください。

システムのチューニングには、設置キットについている以下の溶媒を使用してください。

正モードでは:

- TOF MS - Product IonHigh Resolution または Product Ion High Sensitivity の最適化には、チューニング溶液を使用してください。
- Q1 キャリブレーションには、PPG POS 溶媒を使用してください。

負モード:

- TOF MS - Product IonHigh Resolution または Product Ion High Sensitivity の最適化には、タウロコール酸を使用してください。

注: 当社は、タウロコール酸使用後には、PPG POS 溶媒を使用したチャンネルアラインメントを繰り返すことを推奨しています。

- Q1 キャリブレーションには、PPG POS 溶媒を使用してください。

ヒント! 定期的にメンテナンス作業を実行し、質量分析装置が最適に機能していることを確認してください。

前提条件

- スプレーは安定しており、正しいチューニング溶液が使用されています。
- プリンタが構成されています。

必要な資材

- システムとともに出荷された標準化学物質キットで供給されたチューニング溶液。必要に応じて、SCIEX から新しいキットをご注文いただけます。
- ガスタイトシリンジ(推奨 1 mL)
- 赤色の PEEK サンプルチューブ
- (オプション)シリンジポンプ(シリンジポンプを内蔵していないシステムを使用する場合)。

質量分析装置の最適化

以下の手順で、質量分析装置のパフォーマンスを検証するための方法を説明します。他の機器のパフォーマンスオプションを使用する際の詳細は、ヘルプを参照してください。

1. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Manual Tuning** をダブルクリックします。
2. TOF MS またはプロダクトイオンスキャンタイプを実行し、TIC が安定していて、目的物のピークがスペクトルに存在することを確認します。
3. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Instrument Optimization** をダブルクリックします。
Instrument Optimization ダイアログが開きます。
4. チューニング溶液を選択します。チューニング溶液が基準テーブルと一致することを確認してください。
5. **Verify Performance Only** チェックボックスは選択済みです。**Next** をクリックします。
この例では、このオプションは選択したままにしておきます。装置チューニングの必要性がレポートに表示された場合は、Instrument Optimization を再び実行し、1 つ以上のスキャンモードを選択して最適化します。
6. イオン源パラメータとシリンジパラメータが適切であることを確認してください。

注: CDS で溶液を注入することもできます。チューニング溶液が基準テーブルの構成と一致することを確認してください。適切な流量を設定し、CDS Inject をクリックします。

注: Reference Table Editor で、選択した基準テーブルに対して正しい Calibrant Valve Position が選択されていることを確認してください。CDS には、最高で 4 つの異なる位置、A から D を選択できます。

7. **GO** をクリックします。
Verifying or Adjusting Performance 画面が開きます。プロセスが完了したら、**Results Summary** が開きます。詳細については、ヘルプを参照してください。

Verifying or Adjusting Performance ダイアログ

左上隅に、調整されている装置の一部が表示されます。

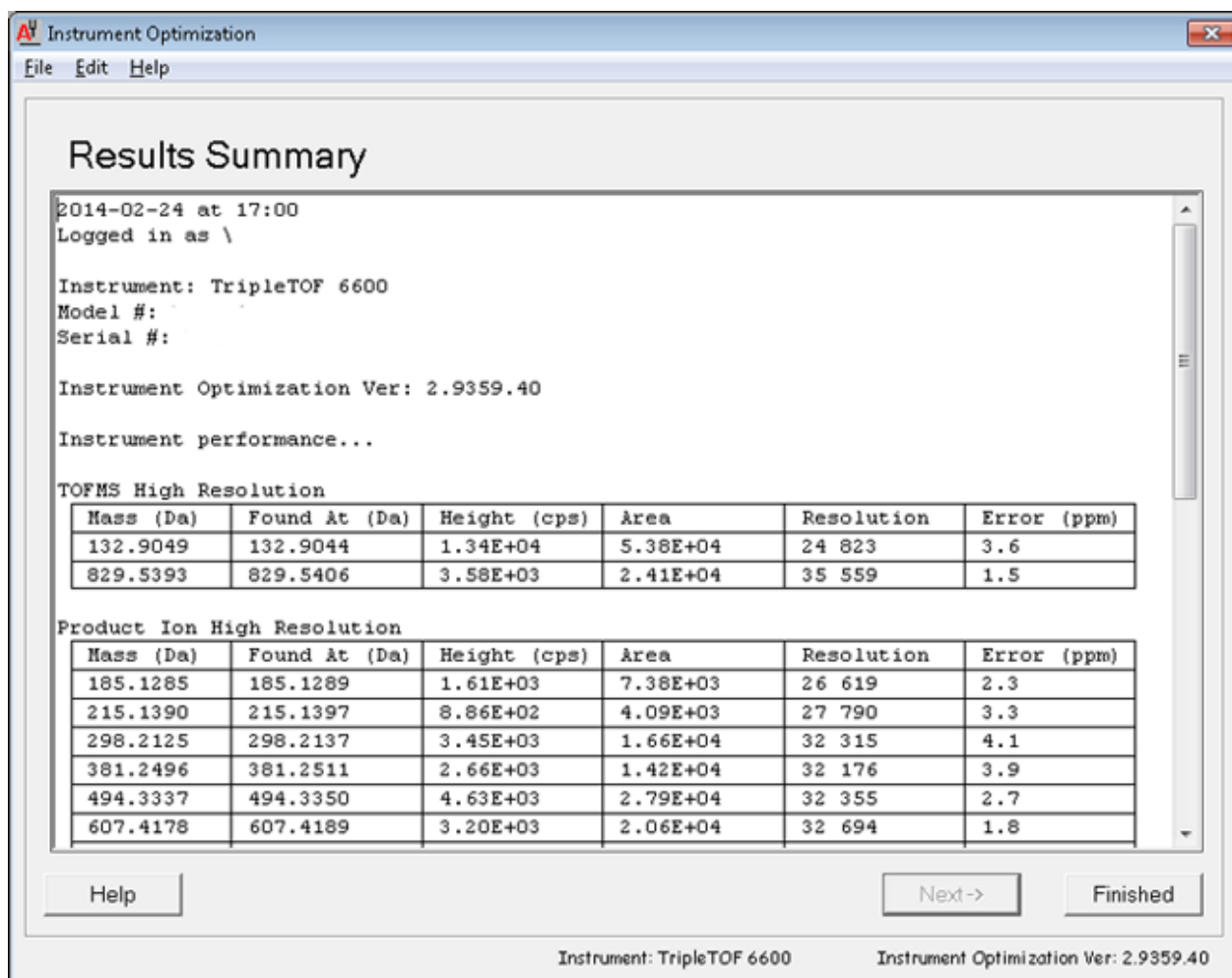
ソフトウェアの結果がインタラクティブモードに表示されているとき、現在のスペクトルのグラフには、現在のスキャンのスペクトル、ソフトウェアによって選択された最適なスキャンまたは現在のパラメータ値のスキャンが表示されます。

グラフ右上にある装置の最適化決定プロットでは、現在最適化されているパラメータの強度 - 電圧の曲線が動的に表示されます。

結果概要

Results Summary は、Instrument Optimization ウィザードを用いて行われたすべての機器設定変更の記録です。

図 6-1 : Results Summary: TripleTOF 6600 システム



Results Summary は、以下のパスに自動的に保存されます：

<drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Data\Instrument Optimization\yyyy-mm-dd\results.pdf。ここで yyyy-mm-dd は、レポートが作成された日付です。ユーザーは Results Summary の印刷、および以前に保存された Results Summary の閲覧が可能です。

測定メソッドは、実験と期間で構成されています。Acquisition Method Editor を使用して、質量分析装置およびアクティブなハードウェアプロファイル内の任意のデバイスを対象とする期間および実験のシーケンスを作成します。

測定メソッドは、質量分析装置および液体クロマトグラフィー(LC)機器のための方法により構成されています。ユーザーは、Method Wizard を使用して簡単に測定メソッドを作成することができます。

Acquisition Method Editor は、測定メソッドの作成および一連の期間および装置とデバイスの実験を追加するためにも使用されます。

SWATH 測定機能は Method Wizard と Acquisition Method Editor の両方で利用可能で、SWATH 測定メソッドの作成に利用できます。また、SWATH 変数幅ウィンドウメソッドは、Method Wizard または Acquisition Method Editor で作成することができます。詳細は、*上級ユーザーガイド*、Analyst TF ヘルプ、および Method Wizard のヘルプを参照してください。

メソッドの作成に熟練したユーザーのみが、測定メソッド / 定量化メソッドを作成または修正することを推奨します。ロールとセキュリティの詳細な情報については、*ラボ管理者ガイド*を参照してください。

測定メソッドエディタを用いて測定メソッドを作成

ヒント! ユーザーが既存のファイルから新規の測定メソッドファイルを作成する場合、測定メソッドに含まれる周辺装置メソッドのいくつか、またはすべての使用が必要となる可能性があります。

有効なハードウェアプロファイルで設定したデバイスのみが Acquisition method ペインに表示されます。ハードウェアプロファイルに追加したすべてのデバイスは、既存の測定メソッドにも追加する必要があります。デバイスについての詳細は、*周辺装置セットアップガイド*を参照してください。

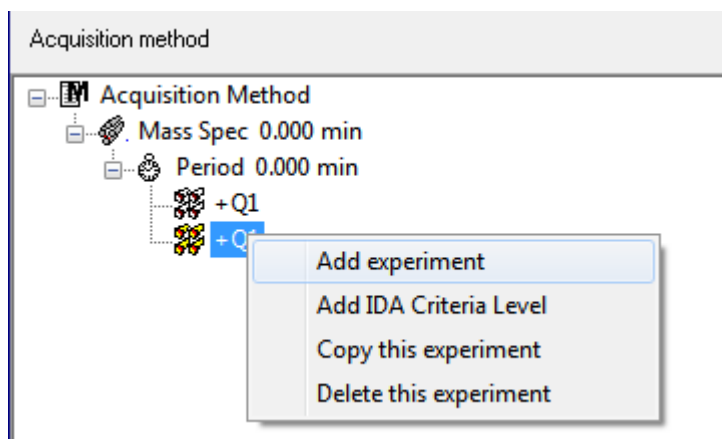
1. 質量分析装置と周辺装置を含むハードウェアプロファイルが有効になっていることを確認してください。
2. Navigation バーの **Acquire** の下にある **Build Acquisition Method** をダブルクリックします。
3. Acquisition Method Properties タブの **Synchronization Mode** を選択します。
4. (オプション) **Auto-Equilibration** チェックボックスをオンにして、必要な平衡時間を分単位で入力します。
5. Acquisition Method ペインで **Mass Spec** アイコンをクリックします。
6. MS タブで **Scan type** を選択します。
7. 必要に応じて、その他のフィールドに値を入力します。
8. Advanced MS タブで、必要なフィールドに値を入力します。

9. MS タブの **Edit Parameters** をクリックします。
10. Source/Gas タブで、必要なフィールドの値を決定してください。
11. Compound タブで、必要なフィールドの値を指定します。
12. **OK** をクリックします。
13. デバイスアイコンをクリックし、デバイスのパラメータを設定します。
14. 追加の期間や実験があれば追加します。[実験を追加](#)および[期間を追加](#)を参照してください。
15. **File > Save.** をクリックします。

実験を追加

1. Acquisition method ペインで、実験を追加する期間を右クリックしてから、**Add experiment** をクリックします。

図 7-1 : Add Experiment



実験は、期間の最後の実験の下に追加されます。

注: 実験、IDA Criteria、または期間の途中に実験を入れることはできません。期間の最後にのみ、実験を追加できます。

2. MS タブで適切なパラメータを選択します。

期間を追加

Acquisition method ペインで、**Mass Spec** アイコンを右クリックし、**Add period** をクリックします。期間は、最後に作成された期間の下に追加されます。

注: ユーザーは、IDA の実験で複数の期間を使用することはできません。

実験を期間にコピー

1. 多重期間メソッドを開きます。

2. Acquisition method ペインで **Ctrl** を押し、実験を期間にドラッグします。
実験は、期間の最後の実験の下にコピーされます。

期間内に実験をコピー

ほとんどの、またはすべてのパラメータが同じ場合には、この手順を使用して同一または類似の実験を期間に追加できます。

実験を右クリックして、**Copy this experiment** をクリックします。

実験のコピーは最後に作成された実験の下に追加されます。

メソッドウィザードを使用して測定メソッドを作成

測定メソッドは、既存のプロジェクトに保存できます。

ヒント! Method Wizard テンプレートメソッドをプロジェクトフォルダ内の **Acquisition Methods** フォルダにコピーするために、**Create New Project or Subproject** ダイアログ内の **Copy method templates** チェックボックスを選択してください。このダイアログを開くには、**Tools > Project > Create Project or Create Subproject** をクリックしてください。

1. 質量分析装置と周辺機器を含むハードウェアプロファイルが有効になっていることを確認してください。
2. ソフトウェアツールバー上で、適切なプロジェクトが選択されるようにしてください。
3. **Acquire** モードで、ナビゲーションバーの **Method Wizard** をダブルクリックします。**Method Wizard** が開きます。

ヒント! カーソルをインタフェースの上へ移動し、ツールの手引きと手順を閲覧します。

4. **Choose MS Method** リストから **TOF MS (+)** を選択してください。
5. **Choose LC Method** リストから、ハードウェアプロファイル用に作成した LC メソッドを選択します。
6. メソッドの名前を入力し、**Enter** を押します。
7. **Next** をクリックします。
8. **Ion Source Parameters** タブで値を確認後、必要に応じて編集し、**Next** をクリックします。
9. **TOF MS** タブで値を確認し、必要に応じて編集した後 **Finish** をクリックします。

ヒント! 必要に応じて、ユーザーは**測定メソッドエディタ**を使用して測定メソッドを編集できます。**Acquire** モードで、**File > Open** をクリックし、**Method Wizard** で作成した方法を開きます。

次のステップ: 新しく作成した測定メソッドを使用して、予備的分析用のデータを取得することができます。

スキヤンの技術

本装置は、液体サンプルストリームの液体クロマトグラフィー質量分析を実施して、化合物の同定、定量、検査ができる多目的で信頼できるシステムです。

本装置は次の質量分析技術を用いてサンプルの分析を行います。

- 単一質量分析 (MS) の 2 モード:
 - 四重極形単一質量分析 (Q1 キャリブレーションのみ)
 - 飛行時間型単一質量分析
- タンデム質量分析装置 (MS/MS) の 2 モード:
 - プロダクトイオン質量分析
 - プレカーサーイオン質量分析

単一質量分析

単一質量分析 (MS) は、電荷処理後の分子を分析し、分子の重量および欠損イオンの量を判定します。MS で検出された個別のイオンは、ターゲット分析物の存在を示しています。

四重極に基づく単一質量分析装置

四重極に基づく単一質量分析装置 (Q1 MS) スキヤンで、システムは従来の四重極型の質量分析装置として機能します。このモードでは、システムは機器の第 1 四重極型セクションを使用して単一質量分析情報を作成します。

飛行時間単一質量分析装置

飛行時間単一質量分析装置 (TOF MS) のスキヤンでは、システムはイオンをパルスで飛行管に誘導し、その到着時間を検知器で厳密に記録することで質量分析情報を生成します。質量/電荷数の大きいイオンの場合、飛行管に到着するまでの時間が長くなります。

タンデム型質量分析装置

特徴的なプロダクトイオンスペクトラムが、プロダクトイオンが特異の m/z 比を持つと推定して他のコンポーネントからの干渉を受けずにミクスチャの各コンポーネントを得ることができるため、MS/MS 技術は、混合分析技術に非常に適しています。

サンプルを溶出する間、特定のプレカーサー/プロダクトイオンをモニタリングすることにより、ターゲット分析用 MS/MS を使用します。この種の分析は単一 MS より特異性が高く、質量/電荷数に基づいて差別化のみを行います。

プロダクトイオン質量分析

プロダクトイオンスキヤン (プロダクトイオン) では、Q1 でプレカーサーイオンウィンドウを選択し、Q2 (衝突セル) で分解し、イオンをパルスとして (イオン分解) 飛行管内に取り出し、検知器でこれらの

正確な到着時刻を記録することにより、システムは質量分析情報を生成します。プロダクトイオンは、もとの(プレカーサー)イオンの分子構造に関する情報を提供できます。

プレカーサーイオンの質量分析

プレカーサーイオンのスキャンに際して、システムは特定のプロダクトイオンを生成するプレカーサーイオンを検知します。機器は対象の質量領域をスキャンするために、Q1を質量分解モードで使用します。その間、TOFセクションが各プレカーサーイオンのプロダクトイオンスペクトルを記録します。Q1のマススペクトルは、対象のプロダクトイオンを生成するすべてのプレカーサーイオンを表示します。

スペクトルデータ収集について

スペクトルデータを測定できるモードの説明については、[表 7-1](#) を参照してください。

スペクトルデータは、Q1 およびプレカーサーイオンスキャン種類からのみ取得することができます。

表 7-1 : スペクトルデータ

モード	説明
Profile	プリセット値は 0.1 Da です。プロファイルデータは質量分析装置で生成され、一連の均等間隔の個別の質量値で記録された強度に対応します。例えば、100 Da~200 Da の質量範囲で、ステップサイズが 0.1 の場合、0.1 Da の増大で機器は 100 Da~200 Da からスキャンします(例: 100.0、100.1、100.2、100.3...最大 200.0 まで)。
Peak Hopping	プリセット値は 1.0 Da です。ピークホッピングは、大型ステップ(約 1 Da)を作成する質量分析装置の運用モードです。これには速度が速い(より少ないデータステップ)というメリットがありますが、ピークシェイプ情報が消失します。

MS パラメータ

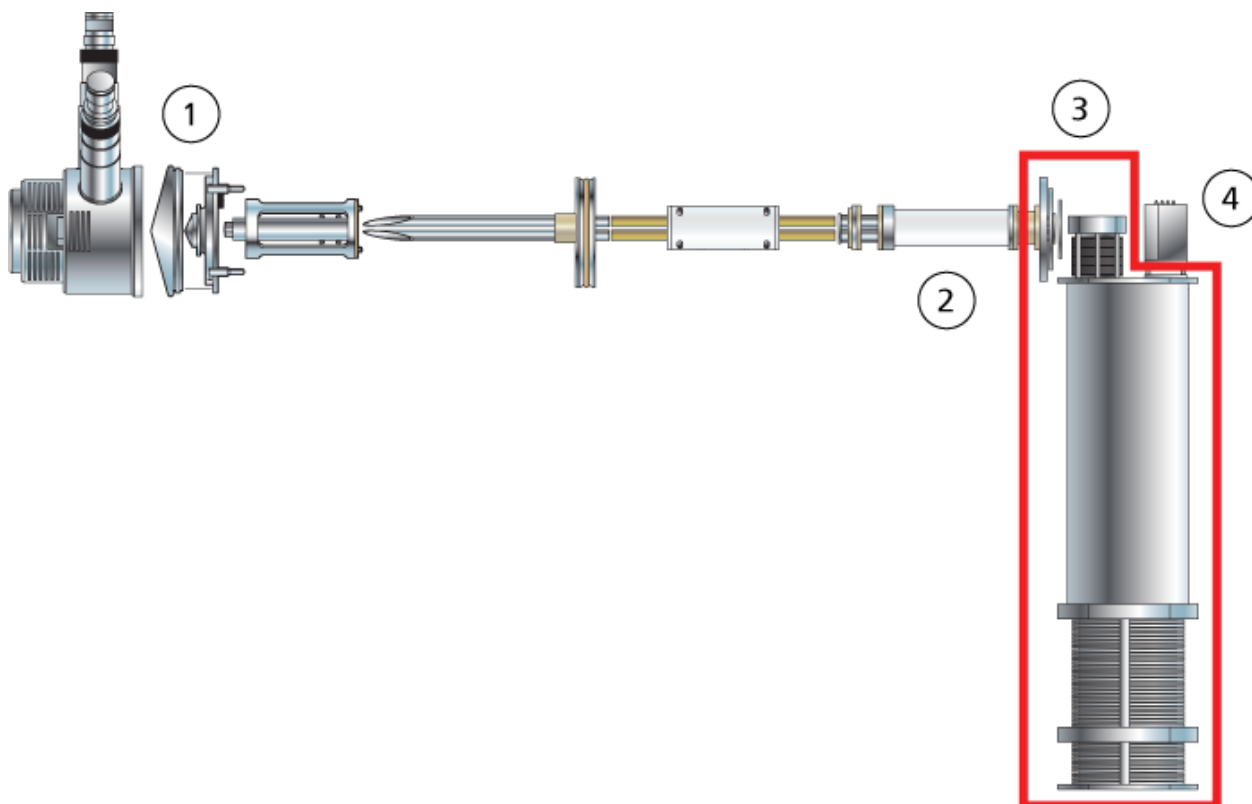
加工パラメータとは、現在使用されている一連の質量分析装置(MS)パラメータです。

化合物パラメータおよびソースとガスパラメータはメソッドで保管されます。分解能および検出器パラメータは質量分析装置によって異なり、機器データとして保管されます。Tune and Calibrate モードがメソッドの作成で使われている場合は、機器の性能が最大化するように加工パラメータを最適化できます。あるいは、実験サイクル中に各パラメータを 1 つずつ上げます。

- ソースおよびガスパラメータ: これらのパラメータは使用するイオン源によって異なることがあります。
- 化合物パラメータ: これらのパラメータはイオンパスの電圧がほとんどを占めます。化合物依存性パラメータの最適値は分析する化合物によって異なります。
- 分解能パラメータ: これらのパラメータは分解能およびキャリブレーションに影響を及ぼします。
- 検出器のパラメータ: これらのパラメータは検出器に影響を及ぼします。マルチチャンネルプレートは TOF 機器内の検出器で、イオン検出用の 4 チャンネルがあります。チャンネル総数がイオン強度と同等です。このパラメータは装置最適化を使って最適化できます。

表のパラメータは、システムに付属のイオン源に適用されます。他のイオン源の詳細については、イオン源に付属の『オペレータガイド』を参照してください。以下に、イオン光学パスのパラメータ位置を示しています。

図 7-2 : イオン光学パスとパラメータ



場所	パラメータ	パラメータ種類	使用	スキャンタイプ
1	イオンスプレーフローティング電圧 (ISVF)	ソースとガス	ISVF パラメータはスプレーの安定性と、それに伴い信号の感度に影響を与えます。これは、サンプルにスプレーを吹きかける針に適用される電圧です。	すべて
1	イオン源ガス 1 (GS1)	ソースとガス	GS1 パラメータで、ESI プローブ用のネブライザガスを制御します。	すべて
1	イオン源ガス 2 (GS2)	ソースとガス	GS2 パラメータで、ESI プローブ用のヒーターガスと APCI プローブ用のネブライザガスを制御します。	すべて
1	温度 (TEM)	ソースとガス	TEM パラメータにより、TurbolonSpray プローブ用のヒーターガスの温度または APCI プローブの温度を制御できます。	すべて

場所	パラメータ	パラメータ種類	使用	スキャンタイプ
1	カーテンガス (CUR)	ソースとガス	CUR パラメータは、Curtain Gas インターフェースのガスの流量を制御します。Curtain Gas インターフェースは、カーテンプレートとオリフィスの間に配置されています。これにより、イオン光学の汚染を防ぎます。	すべて
1	デクラスタリング電位 (DP)	化合物	DP パラメータにより、オリフィスと QJet イオンガイドの間のイオンをクラスター分離する能力を制御しているオリフィスの電圧を制御します。これは、真空チャンバに入った後にサンプルイオンに残る可能性がある溶媒クラスターを最小化し、必要に応じてフラグメント化させるために使用します。電圧が高くなるほど、イオンに加えられるエネルギーは高くなります。DP パラメータが高過ぎる場合、不要なフラグメンテーションが発生する場合があります。 プリセット値を使用し、化合物を最適化します。	すべて
2	CAD ガス	ソースとガス	CAD パラメータにより、衝突セル内の CAD ガスの圧力を制御します。衝突ガスは、衝突セルを通過しているものとして、イオンに焦点を当てるのに役立ちます。CAD パラメータのプリセット値は、固定モードです。MS/MS スキャンタイプの場合、CAD ガスは、プレカーサーイオンを集めるのに役立ちます。前駆体イオンが衝突ガスと衝突すると、それぞれが分離してプロダクトイオンとなります。 プリセット値を使用し、化合物を最適化します。	すべて

場所	パラメータ	パラメータ種類	使用	スキャンタイプ
2	衝突エネルギー (CE)	化合物	<p>CE パラメータにより、Q0 領域と Q2 衝突セルの間の電位差を制御します。これは MS/MS スキャンタイプでのみ使用します。このパラメータは、Q2 衝突セル内へと加速しているときにプレカーサーイオンが受け取ったエネルギーの総数です。このとき、ガス分子およびフラグメントと衝突しています。</p> <p>プリセット値を使用し、化合物を最適化します。</p>	TOF MS、 TOF MS/MS
2	衝突エネルギー拡散 (CES)	化合物	<p>CES パラメータは CE パラメータと合わせて、CES を使用する場合に製品イオンスキャンで、どの 3 つの個別の衝突エネルギーをプレカーサー質量に適用するかを決定します。衝突エネルギーのランプが低から高になります。例えば、ポジティブモードの場合、衝突エネルギーのランプは CE - CES から CE + CES になります。CES 値を入力することにより、衝突エネルギー拡散は自動的に ON になります。</p> <p>プリセット値を使用し、化合物を最適化します。</p>	TOF MS/MS
3	イオン放出遅延 (IRD)	化合物	<p>イオンパルス前のミリ秒単位の時間総数です。初期値 (11 msec) は、TOF 質量に基づいて見積もられており、オペレータにより調整が可能です。範囲は一般的に 6 msec から 333 msec です。</p> <p>このパラメータは、Instrument Optimization オプションが Enhanced Ion オプションで選択された場合に、Advanced ウィザードを使用して最適化します。一般的に、規定値は変更する必要がありません。</p>	MS/MS のみ、強化

場所	パラメータ	パラメータ種類	使用	スキャンタイプ
3	イオン放出幅 (IRW)	化合物	<p>これは、イオンパルスミリ秒単位で表した幅または期間です。IRD を基に計算します。範囲は一般的に 5~328 msec で、初期値は 10 msec です。</p> <p>このパラメータは、Instrument Optimization オプションが Enhanced Ion オプションで選択された場合に、Advanced ウィザードを使用して最適化します。一般的に、規定値は変更する必要がありません。</p>	MS/MS のみ、強化
4	MCP (CEM)	検出器	CEM パラメータにより、検出器に適用される電圧を制御します。この電圧は、検出器の反応に影響します。	すべて

注意: ダメージを与える恐れ。質量分析装置に接続されている LC システムがソフトウェアによって制御されていない場合は、操作中に質量分析装置から目を離さないでください。質量分析装置がスタンバイ状態に入ると、LC システムがイオン源をあふれさす可能性があります。

バッチとは、分析対象のサンプルに関する情報を収集したものです。サンプルは通常、提出を容易にするためにセットにグループ化されます。サンプルをセットとしてグループ化することで、手動入力が必要なデータの量も削減されます。セットは単一または複数のサンプルで構成されています。バッチ内のセットに対しては、いずれも同一のハードウェアプロファイルが用いられますが、他の測定メソッドを適用することも可能です。バッチは測定用コンピュータからのみ提出できます。

バッチには次の情報が含まれます。

- サンプル情報(名前、ID、コメントなど)
- オートサンプラーラック情報、バイアル位置、注入量
- 測定メソッド
- 処理メソッドまたはスクリプト(オプション)
- 定量情報(オプション)
- カスタムサンプルデータ(オプション)
- セット情報

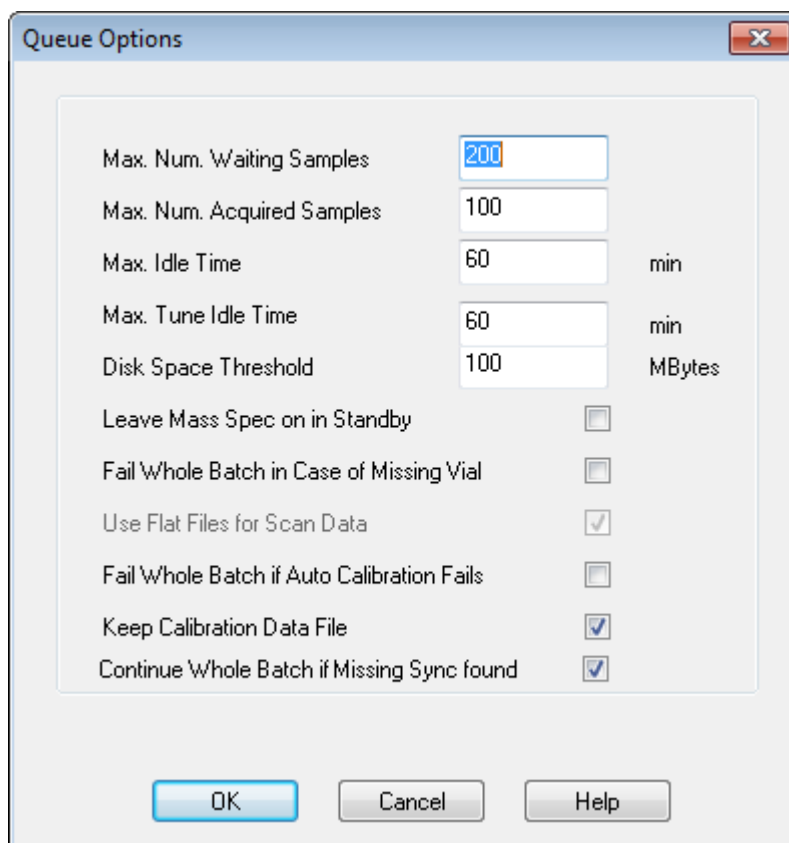
キューオプションの設定

ソフトウェアは、キューにあるサンプルのリストを 1 つずつ調べ、選択した測定メソッドで各サンプルを測定します。全サンプルの測定が終了した後に、キューオプションで設定した **Max. Idle Time** が経過すると、測定が停止し、質量分析装置がスタンバイ状態になります。スタンバイ状態では、LC ポンプが停止し、いくつかの装置の電圧がオフになります。

ユーザーは、最後のサンプルを測定してからスタンバイ状態に移行するまでの時間を変更することができます。Queue Options ダイアログの他のフィールドの情報については、ヘルプを参照してください。

1. Navigation バーで **Configure** をクリックします。
2. **Tools > Settings > Queue Options.** をクリックします。

図 8-1 : Queue Options ダイアログ



3. **Max. Num. Waiting Samples** フィールドで、キューに提出するサンプルの数より大きい値にサンプルの最大数を設定します。
4. **Max. Idle Time** フィールドに、測定完了後にソフトウェアがスタンバイ状態に入るまでに待機する時間の長さを入力します。事前設定値は 60 分です。

高圧ガス容器を使用している場合、シリンダー内ガスが使い果たされていないことを確認するためにこの時間を調整します。

LC メソッドを使用する場合、実行を開始する前に、すべてのサンプルのリザーバーに十分な溶媒があり、初期流量、最大アイドル時間で作動していることを確認してください。

5. 分析が完了した後、質量分析装置の実行を維持するために **Leave Mass Spec on in Standby** チェックボックスを選択してください。
この機能により、ヒーターおよびガスは、機器がアイドル状態となった後も作動し続け、イオン源と質量分析装置への入り口は、汚染物質のない状態で保たれます。
6. **Fail Whole Batch in Case of Missing Vial** チェックボックスをオンにすると、バイアルが欠損したときにバッチ全体が失敗するようになります。
このオプションを選択していない場合は、現在のサンプルが失敗し、ソフトウェアは次のサンプルに進みます。
7. オートキャリブレーションが失敗した場合、バッチを停止するために、**Fail Whole Batch if Auto Calibration Fails** チェックボックスをオンにします。

8. サンプルが提出されているプロジェクトのデータフォルダ内のサブフォルダにキャリブレーションデータファイルを保持するには、**Keep Calibration Data File** チェックボックスをオンにします。
9. 同期信号が不足しているときにバッチ全体の取得を継続するために **Continue Whole Batch if Missing Sync found** チェックボックスをオンにします。このチェックボックスが選択されていない場合は、現在のサンプルは失敗します。この信号が検出されたとき、キューは次のサンプルに進みません。

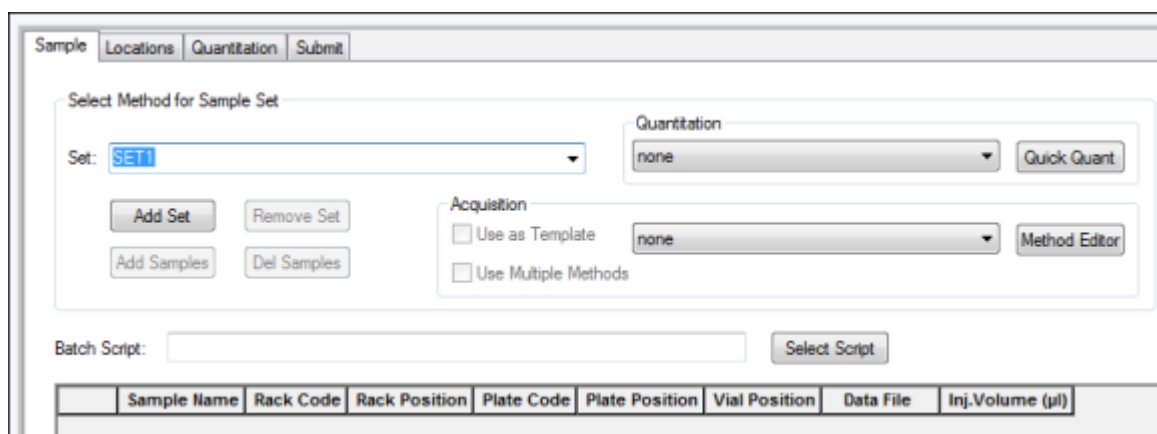
セットとサンプルをバッチに追加

セットは単一または複数のサンプルで構成されている場合があります。

注: 定量情報をバッチに追加する詳細は、*上級ユーザーガイド*を参照してください。

1. Navigation バーの **Acquire** の下にある **Build Acquisition Batch** をダブルクリックします。

図 8-2 : バッチエディタダイアログ



2. Sample タブの **Set** リストで名前を入力します。
3. **Add Set** をクリックします。
4. **Add Samples** をクリックして、サンプルを新規セットに追加します。

図 8-3 : Add Sample ダイアログ

The screenshot shows the 'Add Sample' dialog box with the following fields and options:

- Sample name section:**
 - Prefix: Sample
 - Sample number:
 - Number of digits: 3
- Data file section:**
 - Prefix: Data
 - Set name:
 - Auto Increment:
 - Sub Folder: (empty field) with a Browse button
- New samples section:**
 - Number: 1

Buttons at the bottom: OK, Cancel, Help.

5. Sample name セクションの **Prefix** フィールドで、このセットのサンプル用の名前を入力します。
6. サンプル名の末尾に増分番号付けを追加するには、**Sample number** チェックボックスを選択してください。
7. **Sample number** チェックボックスが選択されている場合、**Number of digits** フィールドにサンプル名に含めるべき桁数を入力します。
例えば、3 が入力された場合、サンプル名は samplename001、samplename002 および samplename003 になります。
8. Data file セクションの **Prefix** フィールドで、サンプル情報を格納するデータファイルの名前を入力します。
9. **Set name** チェックボックスを選択して、セット名をデータファイル名の一部として使用します。
10. **Auto Increment** チェックボックスを選択して、データファイル名を自動的に増分します。

注: 各サンプルのデータは同じか個別のデータファイルに格納することができます。データファイルの名前には、1 から始まる数値添え字があります。

11. **Sub Folder** フィールドに名前を入力します。
フォルダは現在のプロジェクト用の Data フォルダに格納されます。**Sub Folder** フィールドがブランクのままである場合、データファイルは Data フォルダに格納され、またサブフォルダは作成されません。
12. New samples セクションの **Number** フィールドに、追加する新規サンプルの数を入力します。
13. **OK** をクリックします。

サンプル表にはサンプル名およびデータファイル名が記入されます。

ヒント! 単一カラムの見出しまたはカラムの複数行が選択された後にメニューを右クリックすると **Fill Down** および **Auto Increment** オプションが利用できます。

14. Sample タブの Acquisition セクションで、リストからメソッドを選択します。システムのセットアップの仕方に応じて、オートサンプラー用の個別情報を入力する必要があります。注入量がメソッドで設定されている場合でも、ユーザーは注入量のカラムで値を変更することによって1つ以上のサンプルの注入量を変更することができます。

注: このセットでサンプル用にさまざまなメソッドを使用するには、**Use Multiple Methods** チェックボックスを選択してください。**Acquisition Method** カラムが Sample 表に表示されます。このカラムで各サンプル用に測定メソッドを選択してください。

15. メソッドに一覧表示されている量の注入量を変更するには、各サンプルの注入量を **Inj. Volume (µL)** カラムに入力します。
16. サンプルの配置を設定するには、下記のうちの1つを行います。
 - [バッチエディタのサンプル位置を設定](#)
 - [Locations タブを使用してバイアルの位置を選択する\(オプション\)](#)
17. Submit タブを開きます。

注: サンプルの順番は、サンプルをキューに送る前に編集できます。サンプルの順番を変更するには、Submit タブの表の左端にある数字のいずれかをダブルクリックし(小さなボックスが表示されます)、希望の位置にドラッグします。

18. Submit Status セクションの中にバッチのステータスに関するメッセージが入っている場合は、次のいずれかの操作を行います。
 - バッチの提出準備ができていることをメッセージが示している場合は、[ステップ 19](#)に進みます。
 - バッチの提出準備ができていないことを示すメッセージであれば、メッセージが示す通りに変更を行ってください。
19. バッチに関する情報がすべて正しいことを確認した後、**Submit** をクリックします。対象のバッチがキューに提出され、Queue Manager に表示することができます。
20. ファイルを保存します。

サンプルまたはサンプルセットの提出

注: サンプル測定中に異常な終わり方をした場合は、サンプルをもう一度実行してください。停電によって異常な終わり方をした場合、オートサンプラーのトレイの温度が持続されず、サンプルの完全性が損なわれる恐れがあります。

1. 1つのサンプルまたはサンプルのセットを選択します。
2. Batch Editor の Submit タブを開きます。

3. Submit Status グループの中にバッチのステータスに関するメッセージが入っている場合は、次のいずれかの操作を行います。
 - バッチの提出準備ができていないことについてのメッセージであれば、次のステップに進みません。
 - バッチの提出準備ができていないことを示すメッセージであれば、メッセージが示す通りに変更を行ってください。
4. **Submit** をクリックします。

サンプルキャリブレーションの設定

サンプルがバッチモードで取得されている間、ソフトウェアは外部の自動キャリブレーションを自動的に計画し、実行できます。これにより、取得中、良質の質量精度が確実に保持されます。

CDS を設定していない場合、キャリブレーションはオートサンプラーを使用して行い、ユーザーはキャリブラントサンプルのキャリブレーション方法 (*.dam) とバイアル位置を提供する必要があります。

1. **Batch Editor** で、**Calibrate** タブをクリックしてください。
2. **Calibrate Every _ Samples** フィールドに、キャリブレーションサンプルの中で取得する試料の数を入力してください。
3. **Calibrant Reference Table** で、現在の極性で使用できるキャリブレーション参照テーブルすべてのリストからテーブルを選択してください。選択した参照テーブルが正しい **Calibrant Valve Position** にあるか確認してください。
4. **CDS Inject Flow Rate** を設定してください。

バッチが提出されると、キャリブレーションサンプルがキューに挿入されます。各セットはキャリブレーションサンプルから開始します。このキャリブレーション方法は AnalystCal_ に取得法の名前をつける形で命名します (例: AnalystCal_TOF.dam)。CDS が設定されている場合、ソフトウェアはそのキュー内にある次のサンプル用に使用する測定メソッドに合致したキャリブレーション方法を自動的に作成します。キャリブレーションデータは各キャリブレーションサンプル毎に別々のデータファイルに保存されます。Keep Calibration Data File を Queue Options ダイアログボックス内で選択した場合、データファイルはレポートとともにサブフォルダの Cal Data に保存され、Cal の後ろにタイムスタンプおよびキャリブレーションサンプルのインデックスを付与した名前がつけられます (例: Cal200906261038341.wiff)。キャリブレーションレポートは、Cal の後ろにタイムスタンプ、キャリブレーションサンプルのインデックスおよび report という単語を加えて命名します (例: Cal20130822154447030_report.txt)。レポートには、ピーク発見基準、パラメータおよびキャリブレーションに使用する質量が表示されます。これによりユーザーは、キャリブレーションの成否を確認することができます。レポートには、キャリブレーションに使用されたパラメータの要約も記載されています。

サンプル順序の変更

サンプルの順番は、サンプルを **Queue** に送る前に変更できます。

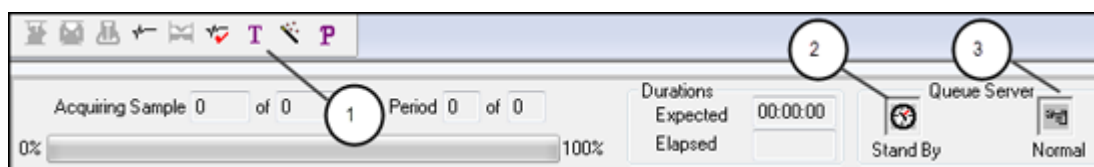
Submit タブでは、表 (かすかに表示されている正方形のボックス) の左端の数字のいずれかをダブルクリックし、新しい場所にドラッグします。

データの取得

サンプル測定が開始した後で、ソフトウェアを Tune and Calibrate モードに切り替えないでください。また、システムを当日その前に運転していて、スタンバイ状態に設定していない場合、サンプル測定は自動的に開始します。

1. カラムオープンの温度に到達していることを確認します。
2. **Reserve Instrument for Tuning** (T) アイコンが押されていないことを確認します。
3. Navigation バーで **Acquire** をクリックします。
4. **View > Sample Queue.** をクリックします。
Queue Manager が開き、提出されたサンプルがすべて表示されます。

図 8-4 : Queue Manager



項目	説明
1	Reserve Instrument for Tuning アイコンは押し込まないでください。
2	キューの状態は準備完了である必要があります。
3	Queue Server の状態は Normal である必要があります。 キュー状態 を参照してください。

5. **Acquire > Start Sample.** をクリックします。

バッチエディタのサンプル位置を設定

測定メソッドにオートサンプラーが使用されている場合、サンプルのバイアル位置を測定バッチで定義する必要があります。Sample タブまたは Locations タブで位置を定義します。バッチの作成については、[セットとサンプルをバッチに追加](#)を参照してください。

1. Sample タブの **Set** リストでセットを選択します。
2. セット内の各サンプルについて、必要に応じて次の手順を行ってください。
 - **Rack Code** カラムでラック種類を選択します。
 - **Rack Position** カラムで、オートサンプラーのラック位置を選択します。
 - **Plate Code** カラムでプレートタイプを選択します。
 - **Plate Position** カラムでラック上のプレート位置を選択します。
 - **Vial Position** カラムでプレートまたはトレイのバイアル位置を選択します。

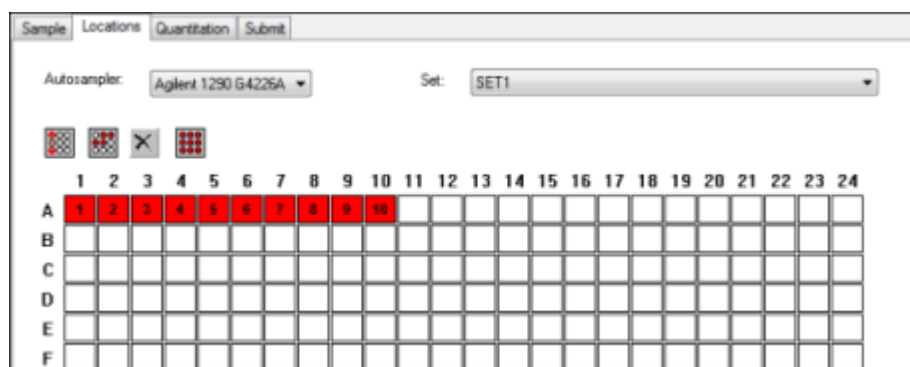
3. ファイルを保存します。

Locations タブを使用してバイアルの位置を選択する (オプション)

1. Batch Editor で、Locations タブを開きます。
2. **Set** リストで、セットを選択します。
3. **Autosampler** リストからオートサンプラーを選択します。
4. ラックに関連付けられているスペースで右クリックし、ラックの種類を選択します。プレートまたはトレイがラックに表示されます。
5. ラックタイプのラベルのついた白いスペースをダブルクリックします。サンプルラックが視覚的にレイアウト表示されます。オートサンプラーのラックスペースの適切な数が、グラフィックラックビューで表示されます。
6. 四角形の 1 つをダブルクリックします。プレートまたはトレイのウェルまたはバイアルを描いた円が表示されます。

ヒント! グラフィック表示内で対応するバイアル番号を確認するには、サンプル位置にカーソルを合わせます。この情報を用いて、ソフトウェアでのバイアル位置がオートサンプラー内のバイアル位置と一致することを確認してください。

図 8-5 : Locations タブ



注: ご使用のオートサンプラーによっては、追加カラムへの情報入力は不要です。

7. サンプルを行またはカラムのどちらかでマークするかどうかを選択するには、**Row/Column selection** セレクターボタンをクリックします。ボタンが赤色の横線を表示する場合、Batch Editor は行でサンプルを示します。ボタンが赤色の縦線を表示する場合、Batch Editor はカラムでサンプルを示します。
8. サンプルウェルまたはバイアルを分析する順番をクリックします。

ヒント! 選択したウェルまたはバイアルをクリアするには、もう一度クリックします。

ヒント! サンプルへの充填を自動的に行うには、セット内の最初と最後のバイアルをクリックしながら **Shift** を押します。同じバイアルから複数の注入を実行するには、キーを押して、バイアルの場所をクリックしながら **Ctrl** を押します。赤い円は、緑色の円に変わります。


サンプル測定 of 停止

サンプル測定を停止する場合、ソフトウェアは測定を停止する前に現在のスキャンを完了させます。

1. Queue Manager で、測定を停止した地点の後に来るキュー上のサンプルをクリックしてください。
2. Navigation バーで **Acquire** をクリックします。
3. **Acquire > Stop Sample.** をクリックします。
選択したサンプルの現在のスキャンの測定後、測定が停止します。**Queue Manager (Local)** ウィンドウのサンプル状態が **Terminated** に変化し、キューに続くその他のサンプルは、**Waiting** となります。
4. バッチ処理を継続するには、**Acquire > Start Sample.** をクリックします。

キュー状態とデバイス状況

Queue Manager はキュー、バッチ、サンプルのステータスを表示します。キュー内の特定のサンプルについての詳細情報も閲覧することができます。

ヒント! **View Queue** () をクリックして、キューを表示します。

Queue の右クリックメニューの使い方については、[キュー](#)を参照してください。

キュー状態

キューの現在の状態は、Queue Server グループに示されています。

図 8-6 : Normal モードを示すキューサーバーインジケーター

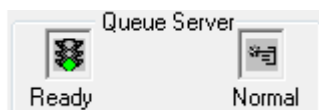
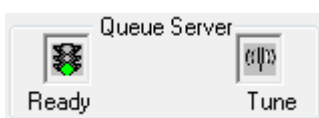


図 8-7 : チューニングモードを示すキューサーバーインジケーター



最初のアイコンは、キューの状態を示しています。2 番目のアイコンは、キューが Tune モード(チューニング)と(サンプルを実行するための)Normal モードのどちらであるかを示します。アイコンとキューの状態の説明は、[表 8-1](#) を参照してください。

表 8-1 : キュー状態

アイコン	状態	定義
	Not Ready	ハードウェアプロファイルが無効化され、キューはサンプルの提出を受け付けていない状態です。
	Stand By	ハードウェアプロファイルは有効ですが、すべてのデバイスがアイドル状態になっています。ポンプが動作しておらず、ガスがオフになっています。
	Warming Up	質量分析装置およびデバイスの平衡化、カラムの調整、オートサンプラーの針の洗浄が完了し、また、カラムオープンが規定温度に達している状態です。オペレータは平衡化の持続時間を選択できます。この状態から、システムは Ready 状態に移ることができます。
	Ready	このシステムはサンプルの実行を開始する準備が完了しており、デバイスも平衡化が完了して準備が整っています。この状態では、キューは、サンプルを受け取ることができ、サンプルが提出された後に実行されます。
	Waiting	次のサンプルが提出されたときにシステムが自動的に測定を開始します。
	PreRun	このメソッドは各デバイスにダウンロードされ、デバイスの平衡化が起こります。この状態は、バッチ内の各サンプルの測定前に行われます。
	Acquiring	メソッドが実行され、データ収集が行われています。
	Paused	システムは、測定中に一時停止されています。

機器およびデバイスステータスアイコンを表示

質量分析装置および有効なハードウェア構成での各デバイスを表すアイコンは、ウィンドウの右下隅にあるステータスバーに表示されます。ユーザーは、LC ポンプの圧力が適切であることを確認するために LC ポンプの詳細な状態を表示したり、イオン源の温度を監視するために質量分析装置の詳細な状態を表示したりすることができます。

注: 各ステータスについて、背景色が赤色になることがあります。赤色の背景は、そのステータスにある間、デバイスがエラーを検出したことを示しています。

ステータスバーで、デバイスまたは質量分析装置のアイコンをダブルクリックします。Instrument Status ダイアログが表示されます。

表 8-2 : 機器およびデバイスステータスアイコン

状態	アイコン	背景色	説明
アイドル状態		緑または黄色	デバイスが作動していません。背景色が黄色の場合、デバイスは作動可能な状態になる前に、平衡化する必要があります。背景色が緑の場合、デバイスは作動準備ができています。
平衡化		緑または黄色	デバイスが平衡化中です。
待機中		緑	デバイスは、ソフトウェアまたは他のデバイスからのコマンド、またはオペレータによる何らかのアクションを待っています。
実行中		緑	デバイスは、バッチを実行しています。
中止しています		緑	デバイスは、バッチを停止しています。
ダウンロード		緑	メソッドがデバイスに転送されています。
準備完了		緑	デバイスは作動していませんが、作動する準備ができています。
エラー		赤	デバイスに調査が必要なエラーが発生しました。

一般的な分析および処理ツールを使用してデータの閲覧および分析を行う方法については、Example フォルダにインストールされたサンプルファイルを活用してください。以下のトピックに関する詳細は、[上級ユーザーガイド](#)を参照してください。

- グラフのラベリング
- スペクトルまたはクロマトグラムの重ね表示および合計
- バックグラウンドサブトラクションの実行
- アルゴリズムのスムージング
- スムージングされたデータでの作業
- セントロイドされたデータでの作業
- 等高線図での作業
- フラグメント解釈ツールでの作業
- ライブラリデータベースおよびライブラリ記録での作業

データファイルを開く

ヒント! 質量スペクトルの自動更新を停止するには、質量スペクトルを右クリックし、**Show Last Scan** をクリックします。**Show Last Scan** にチェックが付いている場合、スペクトルはリアルタイムで更新されます。

1. Navigation バーの **Explore** 下にある **Open Data File** をダブルクリックします。
Select Sample ダイアログが表示されます。
2. **Data Files** リストで開きたいデータファイルを特定し、サンプルを選択して **OK** をクリックします。
サンプルから取得されたデータが表示されます。データ取得中は、質量スペクトル、DAD/UV トレース、TIC の自動更新は継続されます。




ヒント! 実例データファイルを閲覧する際は、**Example** プロジェクトが選択されていることを確認してください。TOF フォルダを開き、続いて **TOFMS PPGs3000.wiff** ファイルを開きます。サンプルリストで **TOFMS** を選択してください。

データファイル内のサンプル間ナビゲーション

注: サンプルがそれぞれ別のデータファイルに保存されている場合は、各ファイルを個別に開いてください。

この手順で使用するナビゲーションアイコンの説明については、[表 C-4](#) を参照してください。

複数のサンプルを含むデータファイルを開き、次のいずれかの操作を行います。

- データファイルの次のサンプルに移動するには、**Show Next Sample** アイコン () をクリックします。
- 連続しないサンプルにスキップするには、**Go to Sample** アイコン () をクリックします。
- Select Sample ダイアログの **Sample** リストからサンプルを選択して表示します。
- データファイルの前のサンプルに移動するには、**Show Previous Sample** アイコン () をクリックします。

実験条件の表示

データを収集するために使用される実験条件は、その結果と共にデータファイルに格納されます。情報には、使用した測定メソッドの詳細が含まれます: MS 測定メソッド、すなわち装置パラメータを含む期間数、実験数、サイクル数、および LC デバイスメソッド (LC ポンプ流量を含む)。さらに、サンプルの測定に使用される MS 分解能および質量較正表も含まれています。ユーザーがファイル情報を閲覧する際に利用できるソフトウェアの機能については、[Show File Information ペインの右クリックメニュー](#)を参照してください。

注: 複数サンプルから同一 wiff ファイルにデータが取得された場合、ファイル情報ペインはサンプルのスクロール中に自動リフレッシュされません。ファイル情報ペインを閉じた後、再度開いて、wiff ファイル中の次のサンプルの詳細を参照します。

Explore > Show > Show File Information. をクリックします。
グラフの下で File Information ペインが開きます。

ヒント! File Information ペインから測定メソッドを作成するには、File Information ペインを右クリックし、その後 **Save Acquisition Method** をクリックします。

表内のデータを表示

1. データファイルを開きます。
2. **Explore > Show > Show List Data.** をクリックします。
データはグラフの下のペイン内に表示されます。

図 9-1 : Peak List タブ (TripleTOF システム)

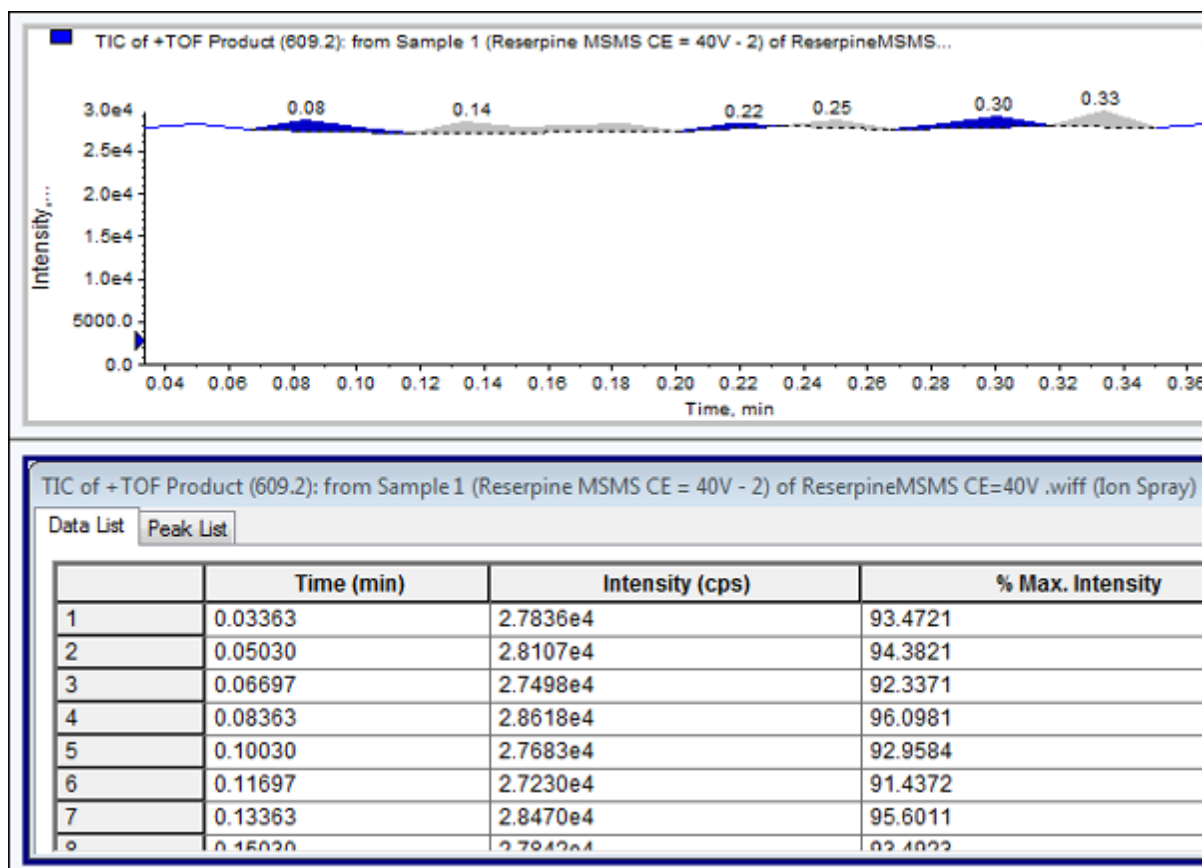


表 9-1 : Spectral Peak List タブの右クリックメニュー

メニュー	機能
Column Options	(カラムオプション) Select Columns for Peak List ダイアログを開きます。
Save As Text	(テキストとして保存) データを .txt ファイルとして保存します。
Delete Pane	(ペインの削除) 選択したペインを削除します。

表 9-2 : Chromatographic Peak List タブの右クリックメニュー

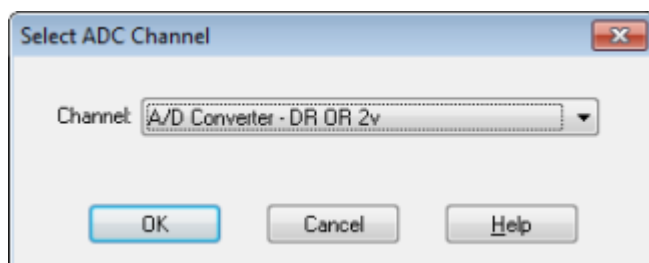
メニュー	機能
Show Peaks in Graph	(ピークをグラフに表示) ピークを 2 色でグラフに表示します。
IntelliQuan Parameters	(IntelliQuan パラメータ) IntelliQuan ダイアログを開きます。
Save As Text	(テキストとして保存) データを .txt ファイルとして保存します。
Delete Pane	(ペインの削除) 選択したペインを削除します。

ACD データの表示

アナログからデジタルへのコンバータ(ADC)は、セカンダリ検知器(たとえば、ADC カードを通した UV 検知器)から取得され、質量分析装置データの比較に有益です。ADC データを利用するためには、ADC データと質量分析装置のデータを同時に取得する必要があります。そして、両方のデータが同じファイルに保存されます。

1. ADC データが保存されているプロジェクトフォルダを選択していることを確認します。たとえば、Example フォルダをクリックします。
2. Navigation バーの **Explore** の下にある **Open Data File** をダブルクリックします。
Select Sample ダイアログが開きます。
3. **Data Files** フィールドで、サブデータフォルダをダブルクリックし(該当する場合)、開くデータファイルをクリックします。たとえば、Example フォルダで **Devices** をダブルクリックし、**Adc16chan.wiff** をクリックします。
4. **Samples** リストでサンプルを選択してから、**OK** をクリックします。
5. **Explore > Show > Show ADC Data** をクリックします。

図 9-2 : Select ADC Channel ダイアログ

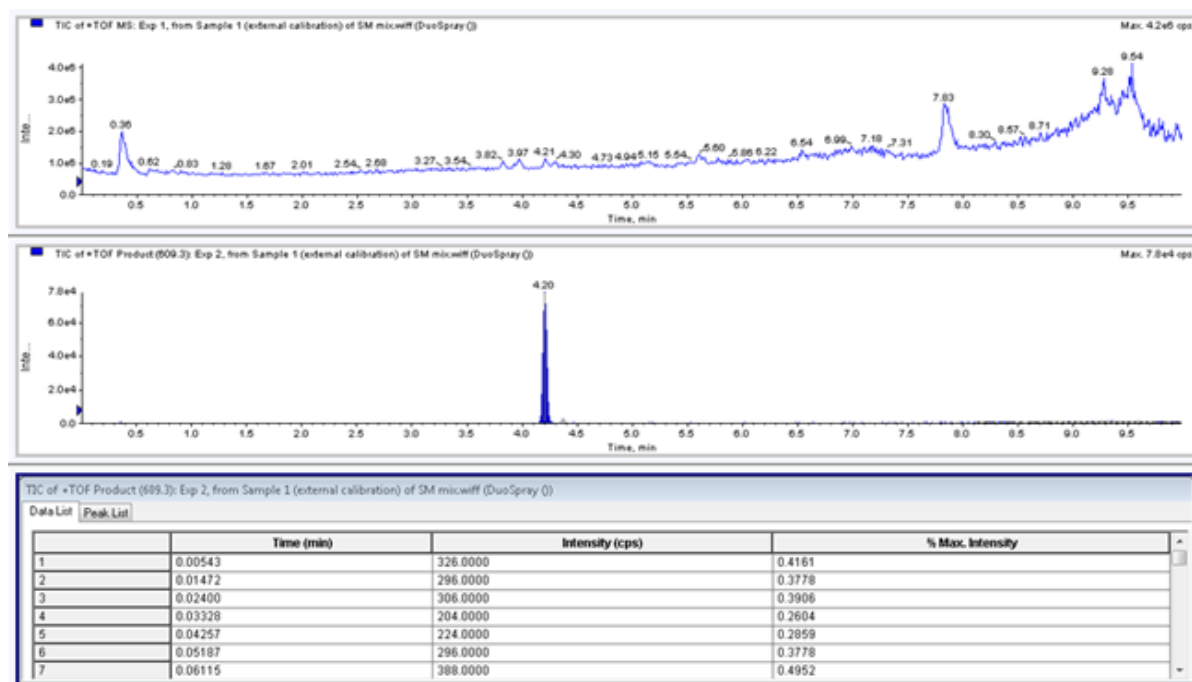


6. **Channel** リストからチャンネルを選択した後、**OK** をクリックします。
アクティブなペインの下に、ADC データが新たなペインに表示されます。

基本定量データの表示

1. データファイルを開きます。
2. **Explore > Show > Show List Data** をクリックします。

図 9-3 : List Data



3. Peak List タブで右クリックし、**Show Peaks in Graph** を選択します。ピークが 2 色で表示されます。
4. ピーク検出アルゴリズム設定を変更するには、右クリックして **Analyst Classic Parameters** または **IntelliQuan Parameters** のうち、有効になっているものを選択します。
5. (オプション) 色つきピークを削除するには、Peak List タブで右クリックし、**Show Peaks in Graph** をクリアします。

クロマトグラム

クロマトグラムはサンプル分析から得られるデータをグラフ表示したものです。シグナル強度が時間またはスキャン番号を示す軸に沿ってプロットされます。クロマトグラムで利用できるソフトウェアの機能、およびクロマトグラムペインの右クリックメニューの使用の詳細については、[クロマトグラムペイン](#)を参照してください。

1 秒当たりのカウント (cps) で表した強度が Y 軸に、時間が X 軸に表示されます。設定されたしきい値を上回るピークは、自動的にラベル付けされます。LC-MS の場合、多くの場合クロマトグラムは時間の関数として表示されます。クロマトグラムの種類については、[表 9-3](#) を参照してください。

使用可能なアイコンの使い方については、[表 9-5](#) を参照してください。

表 9-3 : クロマトグラムの種類

クロマトグラムの種類	目的
トータルイオンクロマトグラム (TIC)	時間またはスキャン数に対するスキャン内のすべてのアイコンの強度のプロットングにより生成されたクロマトグラムです。 データファイルが開いている場合、TIC として開くよう事前設定されています。実験にスキャンが 1 回のみ使用される場合、スペクトルとして表示されます。 データファイルの取得中に MCA チェックボックスを選択した場合、データファイルは質量スペクトルに対して開きます。 MCA チェックボックスを選択していない場合、データファイルは TIC として開きます。
Extracted Ion Chromatogram (XIC)	一連の質量スペクトルスキャンにおいて、単一または複数の質量値あるいは質量範囲の強度値によって作成されたクロマトグラムです。これは、該当する質量または質量範囲の振る舞いを時間の関数として示したものです。
ベースピーククロマトグラム (BPC)	スキャン対時間またはスキャン数内で最も強いイオンを示すクロマトグラムです。
トータル波長クロマトグラム (TWC)	取得した波長範囲の吸光度すべての合計および時間に対する値のプロットングによって作成されるクロマトグラムです。クロマトグラムペインで、時間に対してプロットされたスキャンに含まれる全イオンの吸光度の合計値で構成されています。
抽出波長クロマトグラム (XWC)	TWC のサブセット。XWC は、単一の波長の吸光度または一定の範囲の波長の吸光度の合計を示します。
Diode Array Detector (DAD)	1 つ以上の波長で溶出する化合物の吸収スペクトルを示すクロマトグラムです。

スペクトルから TIC を表示

Explore > Show > Show TIC. をクリックします。
TIC が新しいペインを開きます。

ヒント! スペクトルを含むペイン内で右クリックし、**Show TIC** をクリックします。

Spectra Panes の右クリックメニューの使い方については、[スペクトルペイン](#)を参照してください。

TIC からスペクトルを表示

TIC は、一連の質量スキャンから得られたすべてのイオンの強度寄与を合計することで作成されます。TIC を使用して、データセット全体を単一のペインで表示します。TIC は、クロマトグラムのペインの時間に対してプロットされたスキャンのすべてのイオンの強度の合計で構成されています。データに複数の実験結果が含まれている場合、すべての実験の合計を表す TIC の下に、各実験の TIC を作成することができます。

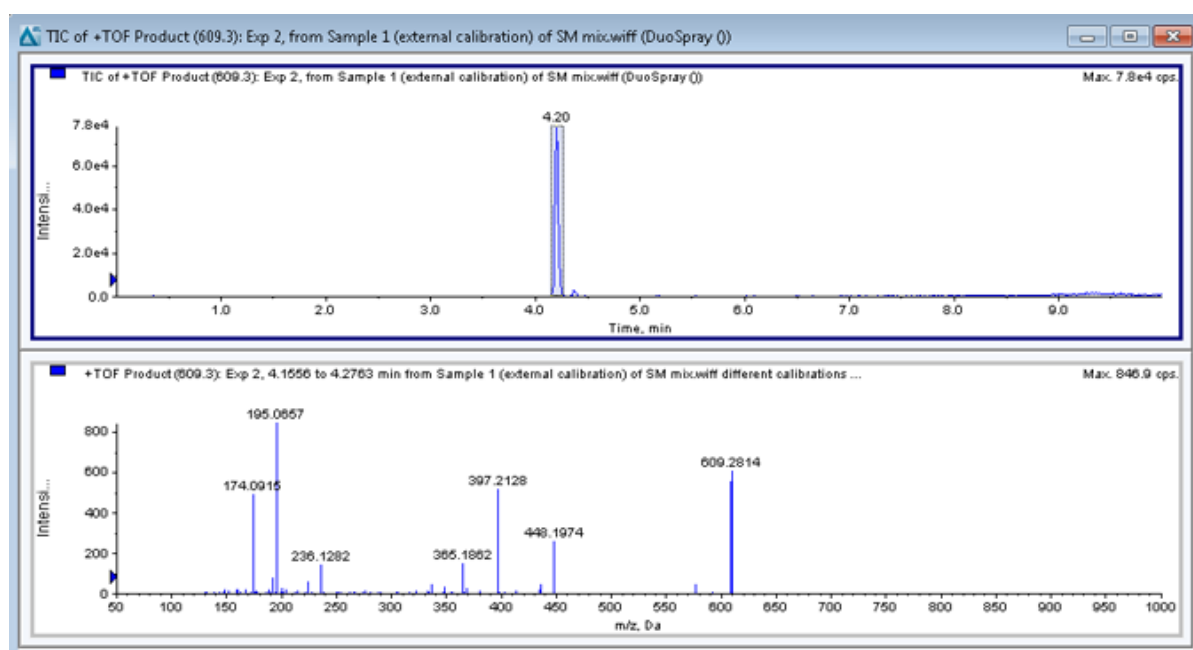
データファイルが開いている場合は TIC として表示されるように事前設定されています。ただし、実験に 1 スキャンしか含まれていない場合は、スペクトルとして表示されます。データファイルの取得前に **MCA** チェックボックスをオンにした場合、データファイルは質量スペクトルとして開きます。**MCA** チェックボックスがオフの場合、データファイルは TIC として開きます。

Spectra Panes の右クリックメニューの使い方については、[スペクトルペイン](#)を参照してください。

1. TIC を含んでいるペインで、範囲を選択してください。
2. **Explore > Show > Show Spectrum.** をクリックします。
スペクトルは新しいペインで開きます。

ヒント! スペクトルを示すため特定の時間に、TIC ペイン内でダブルクリックしてください。

図 9-4 : TIC の例



XIC の生成

XIC は単一期間、単一試験クロマトグラム、あるいはスペクトルからのみ生成できます。複数期間または複数実験データから XIC を作成する場合、X 軸の下側の△をクリックしてデータを別のペインに分けます。使用可能なアイコンの使い方については、[表 9-5](#)を参照してください。

イオンを抽出して XIC を生成するには、クロマトグラムかスペクトルを使用するかによっていくつかのメソッドがあります。クロマトグラムとスペクトルで使用できるメソッドの概要については、次の表を参照してください。

表 9-4 : XIC 生成メソッドの概要

メソッド	クロマトグラムで使用	スペクトルで使用	抽出
選択範囲	×	○	イオンをスペクトルで選択した範囲から抽出します。
最大	×	○	イオンを、選択した範囲内の最大ピークを用いて、スペクトルで選択した範囲から抽出します。このオプションにより、選択したスペクトルの範囲からの最大質量を用いて XIC が生成されます。
ベースピーク質量	○	○	ベースピーククロマトグラム (BPC) のみ使用できます。 Use Base Peak Masses コマンドを用いて、質量ごとに異なる色が付いたトレースで表示される XIC 内のイオンの結果を抽出します。選択に複数のピークが含まれる場合、結果として生じる XIC は各質量に 1 種の色が付いたトレースと同じ数になります。
特定の質量	○	○	スペクトルまたはクロマトグラムのいずれかの種類からイオンを抽出します。スタートおよびストップ質量を 10 まで選択し、それに対する XIC を生成します。

選択範囲を使用して XIC を生成

1. スペクトルを含むデータファイルを開きます。
2. 範囲の開始位置でマウスの左ボタンを押し、カーソルを範囲の終了位置までドラッグして、マウスの左ボタンを放して、範囲を選択します。
選択範囲は青色で表示されます。
3. **Explore > Extract Ions > Use Range.** をクリックします。
選択した XIC がスペクトルペイン下のペインで開きます。ペイン上部の実験情報には、秒毎にカウントされた質量範囲と質量強度が示されます。

最大ピークを使用して XIC を生成

1. スペクトルを含むデータファイルを開きます。
2. スペクトル内範囲を選択します。
選択範囲は青色で表示されます。
3. **Explore > Extract Ions > Use Maximum.** をクリックします。

選択した最大ピークの XIC が、スペクトルペインの下に開きます。ペイン上部の実験情報には、秒毎にカウントされた質量範囲と質量強度が示されます。

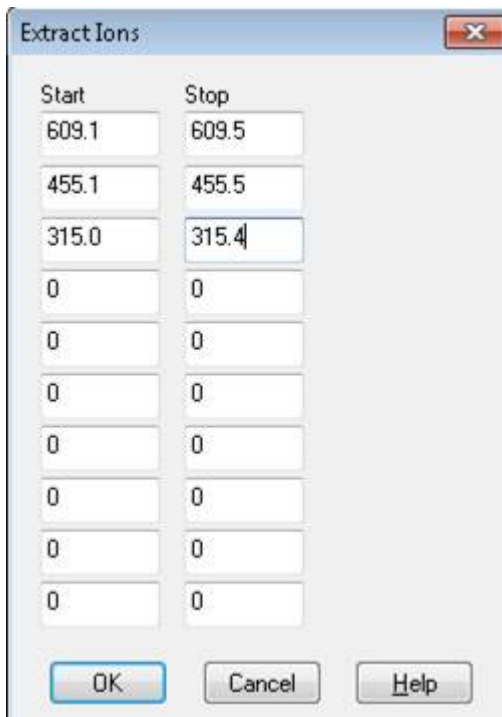
ベースピークの質量を使用して XIC を生成

1. スペクトルを含むデータファイルを開きます。
2. BPC で、イオンを抽出するためのピークを選択します。
選択範囲は青色で表示されます。
3. **Explore > Extract Ions > Use Base Peak Masses.** をクリックします。
指定した選択範囲の XIC が、スペクトルペインの下に開きます。ペイン上部の実験情報は、毎秒カウント数で質量範囲と最大強度を示します。

質量を選択してイオンを抽出

1. スペクトルまたはクロマトグラムを開きます。
2. **Explore > Extract Ions > Use Dialog.**

図 9-5 : Extract Ions ダイアログ



3. 作成する各 XIC の値を入力します。
 - **Start** フィールドで、質量範囲の開始値(低い方の値)を入力します。
 - **Stop** フィールドで、質量範囲の停止値(高い方の値)を入力します。

注: 停止値が入力されていない場合は、開始値で範囲を規定します。

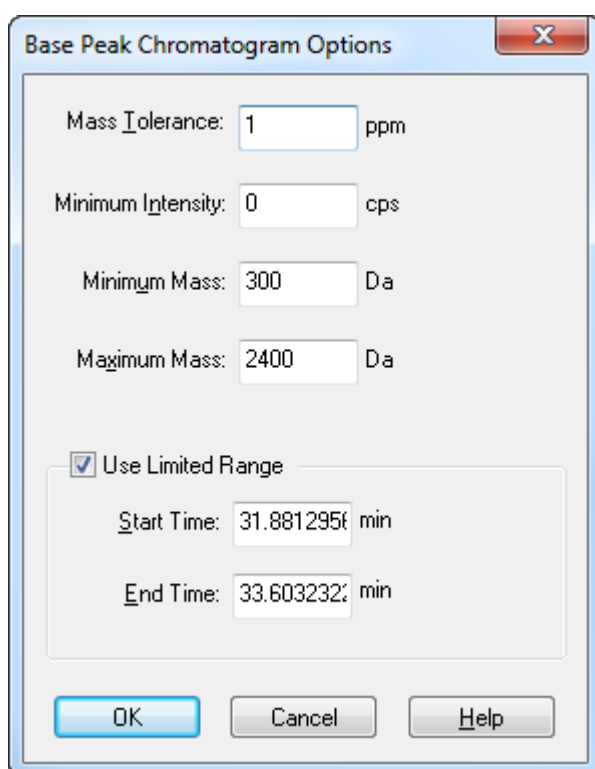
4. **OK** をクリックします。
選択した XIC がクロマトグラムペインの下に開きます。ペイン上部の実験情報は、質量および秒あたりカウントで示される最大強度が含まれます。

BPC の生成

BPC は単一期間および単一実験のデータのみから生成されます。

1. データファイルを開きます。
2. TIC 内の領域を選択します。
選択範囲は青色で表示されます。
3. **Explore > Show > Show Base Peak Chromatogram.** をクリックします。
選択範囲は **Start Time** および **End Time** フィールドに表示されます。

図 9-6 : Base Peak Chromatogram オプション



4. **Mass Tolerance** フィールドに、ピーク取得に必要な質量範囲を示す値を入力します。
ソフトウェアは入力値の 2 倍値を使用してピークを求めます (±質量値)。
5. **Minimum Intensity** フィールドに、アルゴリズムが無視するピークの強度を入力します。
6. **Minimum Mass** フィールドに、スキャン範囲の先頭の質量を入力します。
7. **Maximum Mass** フィールドに、スキャン範囲の終端の質量を入力します。
8. 開始および終了時間を設定するには、**Use Limited Range** チェックボックスをオンにし、次の操作を行います。

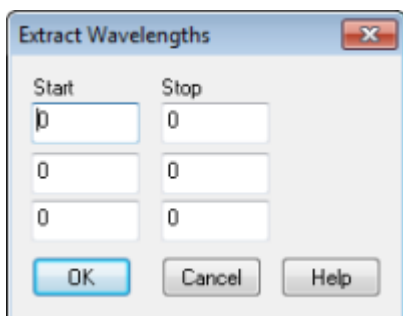
- **Start Time** フィールドに、実験の対象範囲を開始する時刻を入力します。
 - **End Time** フィールドに、実験の対象範囲を終了する時刻を入力します。
9. **OK** をクリックします。
BPC が新しいペインに生成されます。

XWC の生成

XWC は単一の波長の強度値を採用することで、あるいは(複数の波長が含まれる)範囲を持つ吸光度を合計することで作成される波長クロマトグラムです。最大 3 範囲を、DAD スペクトルから抽出して XWC を生成できます。使用可能なアイコンの使い方については、表 9-5 を参照してください。

1. DAD スペクトルを含むデータファイルを開きます。
2. ペインの任意の場所を右クリックし、**Extract Wavelengths** をクリックします。

図 9-7 : Extract Wavelengths ダイアログ



3. **Start** と **Stop** の値を入力します。
4. **OK** をクリックします。
XWC は DAD スペクトル下部のペインに表示されます。

Show DAD Data

DAD データは質量分析装置のデータのように、クロマトグラムまたはスペクトル形式で見ることができます。DAD スペクトルは単一の時点にて、あるいはトータル波長クロマトグラム (TWC) として一定の時間範囲にわたって表示できます。

1. DAD で取得されたデータを含むデータファイルを開きます。
TIC に相似の TWC は、TIC 下部のペインで開きます。
2. TWC ペインでは、ポイントをクリックしてある時間のシングルポイントを選ぶか、スペクトルのエリアをハイライトして時間範囲を選ぶことができます。
3. **Explore > Show > Show DAD Spectrum.**
DAD スペクトルは TWC 下部のペインで開きます。Y 軸は吸光度を示し、X 軸は波長を示します。

ヒント! TWC のペインが閉じた場合には、TWC の任意のポイントをクリックして再度開いてください。Explore > Show > Show DAD TWC.

TWC の生成

TWC は使用頻度の低いクロマトグラムです。このクロマトグラムでは合計吸光度 (mAU) が時間の関数として示されます。TWC により、データセット全体を単一ペインに表示することができます。クロマトグラムで、時間に対してプロットされたスキャンに含まれる全イオンの吸光度の合計値で構成されています。データに複数の実験結果が含まれている場合、すべての実験の合計を表す TWC の下に、各実験の TWC を作成することができます。

TWC は X 軸の時間に対してプロットされた Y 軸上の全吸光度 (mAU) を示します。使用可能なアイコンの使い方については、表 9-5 を参照してください。

1. DAD スペクトルを含むデータファイルを開きます。
2. **Explore > Show > Show DAD TWC.** をクリックします。
TWC は DAD スペクトル下部のペインに表示されます。

ヒント! DAD スペクトルを含むペイン内で右クリックし、**Show DAD TWC** をクリックします。

しきい値の調整

しきい値は、グラフ上の X 軸に平行にひかれた目視不可の線で、ソフトウェアがスペクトルにピークを含まない下限です。この線には、Y 軸の左に青の△で示されたハンドルがあります。青の△をクリックしてしきい値を示す点線を表示します。しきい値は上げたり下げたりできますが、しきい値を変更してもデータは変更されません。しきい値より下の領域にあるピークについては、ソフトウェア上に表示されません。

1. データファイルを開きます。
2. 次のいずれかの操作を行います。
 - しきい値を上げるには、青の△を Y 軸で上にドラッグします。
 - しきい値を下げるには、青の△を下にドラッグします。
 - **Explore > Set Threshold.** をクリックします。Threshold Options ダイアログが開いたら、しきい値を入力して **OK** をクリックします。
 - **Explore > Threshold.** をクリックします。

グラフが更新され、新しく設定したしきい値が表示されます。ピークラベルおよびピークリストも更新されます。

ヒント! 現在のしきい値を表示するには、しきい値ハンドル上にポインタを移動させます。

グラフィックデータ処理

グラフィックデータはさまざまな方法で処理が可能です。このセクションには、最も一般的に使用されるツールの幾つかの使用法についての情報と手順が示されています。

グラフ

グラフデータを、異なる方法で検査することができます。このセクションには、最も一般的に使用される機能の幾つかの使用法についての情報と手順が示されています。

スムージングや減算といった処理操作を行う前に、比較のためにデータを保持することもできます。

ウィンドウには 1 つまたそれ以上のペインが表示され、すべてのペインの全体が見えて重ならないように配置されます。

ペインのサイズは変動可能と固定タイプに分かれます。ペインは、ウィンドウ内で自動的にタイル化され、列(カラム)および行の形式に配置されます。ウィンドウのサイズが変更された場合、ウィンドウ内のペインのサイズもそれに伴い変化します。ウィンドウのサイズは、表示されているペインの最小サイズ以下に変更することはできません。

同様のデータを含む 2 つ以上のウィンドウまたはペインは、リンクさせることができます(例: 同様の質量範囲を持つスペクトルなど)。1 つのペインまたはウィンドウがズームインされると、もう 1 つのペインも同時にズームインします。たとえば、ユーザーは XCI の抽出から XIC を BPC にリンクすることができます。BPC へのズームインは、XIC へのズームでもあり、両方のクロマトグラムが同一の倍率を示します。

データの管理

次のメニューオプションまたはアイコンを使用してグラフ内のデータを管理します。

表 9-5 : グラフのオプション











目的の作業	このメニューオプションを使用します	あるいはこのアイコンをクリックします
グラフを新しいウィンドウにコピーします	コピーするグラフを選択します。 Explore > Duplicate Data > In New Window. をクリックします。	
グラフの元のサイズへの調整	グラフを選択します。 Explore > Home Graph. をクリックします。	

表 9-5 : グラフのオプション (続き)

目的の作業	このメニューオプションを使用します	あるいはこのアイコンをクリックします
ペインの移動	<ul style="list-style-type: none"> グラフを選択します。Window > Move Pane. をクリックします。 ペインまたはウィンドウを選択し、新しい位置へドラッグします。この位置は同じウィンドウ内か別のウィンドウ内となります。 <p>カーソルがアクティブなウィンドウまたはペインの境界上にある場合、4 方向を示す矢印が表示されます。</p> <ul style="list-style-type: none"> ペインが目標ペインの上部あるいは下部にある場合、ペインはその各ペインの上あるいは下へ移動します。 ペインが目標ペインの左あるいは右にある場合、目標ペインはそれぞれペインの左あるいは右へ移動します。 ペインが他の位置にある場合、ペインは目標行へ移動します。ペインが移動する際、ペインのドロップシャドウが新しい位置を示します。 	
ペインのリンク	<ol style="list-style-type: none"> 2 つのグラフが開いている場合、1 つをクリックしてペインを有効にします。 Explore > Link をクリックしてもう 1 つのペインをクリックします。 	
リンクを解除	ペインの 1 つを閉じます。 Explore > Remove Link. をクリックします。	
ペインの削除	グラフを選択します。 Window > Delete Pane. をクリックします。	
ペインの固定	グラフを選択します。 Window > Lock Panes. をクリックします。	
ペインの非表示	グラフを選択します。 Window > Hide Pane. をクリックします。	
ペインの最大化	グラフを選択します。 Window > Maximize Pane. をクリックします。	
Tile panes	グラフを選択します。 Window > Tile all Panes. をクリックします。	

Y 軸をズームイン

1. Y 軸の左側のポインタを拡大させる領域のいずれかの側に動かします。その後、マウスの左ボタンを押した状態で開始点から垂直方向にドラッグします。
Y 軸に沿って、新しいスケールを表すボックスが表示されます。

注: ベースラインをズームする場合は注意してください。ズームの可能領域を超えてしまうと、ズームインボックスが閉じられます。

2. 新しいスケール上でグラフを描く場合は、マウスボタンを放してください。

ヒント! グラフの Y 軸を元の縮尺に戻すには、どちらかの軸をダブルクリックします。グラフ全体を標準のスケールに戻すには、**Explore > Home Graph.** をクリックしてください。

X 軸をズームイン

1. X 軸の下部においたポインタを拡大させる領域のいずれかの側へ動かします。その後、マウスの左ボタンを押した状態で開始点から水平方向にドラッグします。
2. 新しいスケール上でグラフを描く場合は、マウスボタンを放してください。

ヒント! グラフの X 軸を元の縮尺に戻すには、X 軸をダブルクリックします。グラフ全体を標準のスケールに戻すには、**Explore > Home Graph.** をクリックしてください。

パフォーマンスを最適化するために、システムの定期クリーニングおよびメンテナンスを行ってください。



警告! 感電の危険。カバーを取り外さないでください。カバーを取り外すと、傷害またはシステムの故障が発生する場合があります。定期的なメンテナンス、点検、または調整のためにカバーを取り外す必要はありません。カバーを取り外す必要がある修理については、SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。クリーニングやメンテナンス前に、汚染除去が必要かどうかを判断します。放射性物質、生物学的病原体、または有害化学物質が質量分析装置に使用された場合、お客様はクリーニングまたはメンテナンス前にシステムに対して汚染除去を行う必要があります。



推奨メンテナンススケジュール

次の表に、システムのクリーニングとメンテナンスの推奨スケジュールを示します。

ヒント! 定期的にメンテナンス作業を実行し、システムが最適に機能していることを確認してください。

- 定期的なガス漏れ点検と一般的なメンテナンス点検を実施して、安全なシステム操作を心がけます。
- システムを定期的にクリーニングして、良好な動作状態に保ちます。
- システムメンテナンス時には、外部ガス供給システムの部品（装置に接続されたチューブを含む）を注意深く検査して、良好な状態であることを確認してください。ひびが入ったり、損傷していたり、つぶれていたりするチューブは交換してください。

イオン源のメンテナンス方法については、*DuoSpray イオン源オペレータガイド*を参照してください。

質量分析装置とイオン源のクリーニングまたはメンテナンスの実施頻度を決定する際には、次の要素を考慮してください。これらの要素によって、質量分析装置の性能に変化が見られる可能性があります。メンテナンスの必要性を示唆します。

- テストされた化合物
- サンプルの清浄度と準備メソッド
- プローブがサンプルにさらされている時間
- システム総稼働時間

消耗部品の注文や基本サービス、メンテナンス要件については、QMP にお問い合わせいただくか、または **部品および機器ガイド** をご覧ください。その他のすべてのサービスおよびメンテナンス要件については、SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。

表 10-1 : 質量分析装置のメンテナンス作業

コンポーネント	頻度	タスク	詳細な情報については
システム	毎日	漏れがないかどうかを点検します。	化学物質に関する注意 を参照してください。
カーテンプレート	毎日	クリーニング	カーテンプレートのクリーニング を参照してください。
粗引きポンプオイル	毎週	レベルを点検	粗引きポンプのオイルレベルの点検 を参照してください。必要に応じて、現地の有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせになりオイルを追加します。
粗引きポンプオイル	3 年ごと、または必要に応じて。	交換	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
粗引きポンプオイル	必要に応じて	再充填	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
オリフィスプレート (フロント)	必要に応じて	クリーニング	オリフィスプレート前面のクリーニング を参照してください。
オリフィスプレート (前面および背面)	必要に応じて	クリーニング	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
QJet イオンガイド	必要に応じて	クリーニング	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
Q0 ロッドセットおよび IQ1 レンズ	必要に応じて	クリーニング	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
機器の表面	必要に応じて	クリーニング	表面のクリーニング を参照してください。

表 10-1 : 質量分析装置のメンテナンス作業 (続き)

コンポーネント	頻度	タスク	詳細な情報については
イオン源排気ドレインボトル	必要に応じて	空にする	イオン源排気ドレインボトルを空にする を参照してください。
インターフェースヒーター	必要に応じて	交換	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。

表 10-2 : イオン源のメンテナンス作業

コンポーネント	頻度	タスク	詳細な情報については
TurbolonSpray および APCI プローブ	必要に応じて	点検および交換	DuoSpray イオン源オペレータガイド を参照してください。
MICRO 1 ~ 50 μ L、MICRO 50 ~ 200 μ L、および NANO プローブ (OptiFlow Turbo V イオン源)	必要に応じて	点検および交換	OptiFlow Turbo V イオン源オペレータガイド を参照してください。
TurbolonSpray および APCI プローブ用電極	必要に応じて	点検および交換	DuoSpray イオン源オペレータガイド を参照してください。
OptiFlow Turbo V イオン源のプローブ用電極	必要に応じて	点検および交換	OptiFlow Turbo V イオン源オペレータガイド を参照してください。
コロナ放電ニードル	必要に応じて	交換	DuoSpray イオン源オペレータガイド を参照してください。
ターボヒーター	必要に応じて	交換	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
ターボヒーター	必要に応じて	交換	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
サンプルチューブ	必要に応じて	交換	DuoSpray イオン源オペレータガイド を参照してください。

「必要に応じて」の作業については、次のガイドラインに従ってください。

- こぼれた後、または汚れた際に、質量分析装置の表面を清掃してください。
- イオン源排気ドレインボトルが満杯になる前に空にします。

- システムの感度が低下した場合は、オリフィスプレート、QJet イオンガイド、Q0 領域をクリーニングします。

ヒント! 四重極とレンズへの充電の影響(短時間で対象イオン感度が大幅に損失)を最小限に抑えるために、定期的に Q0 領域のクリーニングを行ってください。有資格保守要員(QMP)またはフィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。

- オイルが最小オイルレベルを下回るときは、粗引きポンプオイルを追加します。
- すべての排気接続箇所を定期的に点検して、しっかり接続されていること、および排気がお客様の研究室に入り込んでいないことを確認してください。

表面のクリーニング

溶液がこぼれたり、または汚れた場合には、質量分析装置の外表面をクリーニングします。

注意: ダメージを与える恐れ。推奨されているクリーニング方法および材料のみを使用して、装置を損傷から守ります。

1. 温かい石鹼水で湿らせた柔らかい布で外表面を拭きます。
2. 水で湿らせた柔らかい布で外部表面を拭いて、石鹼の残留物を取り除きます。

フロントエンドのクリーニング

次の警告は、本項の手順すべてに適用されます。



警告! 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、DuoSpray のイオン源を少なくとも 20 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面の一部と真空インターフェースが熱くなります。



定期クリーニングメソッドを使用し、質量分析装置のフロントエンドをクリーニングします。

- システムの予期せぬ故障を最小限に抑えることができます。
- 最適な感度が維持できます。
- サービス人員の訪問が必要となるような大規模クリーニングを回避できます。

汚染が発生した場合は、初期の定期クリーニングを行ってください。オリフィスプレートの前面も忘れずにクリーニングしてください。定期クリーニングを行っても感度の問題が解決しない場合は、フルクリーニングが必要です。

本項では、大気開放を要さない定期クリーニングを解説します。

注: 適用される現地規制に従ってください。健康と安全のガイドラインについては、[化学物質に関する注意](#)を参照してください。

汚染の兆候

次のいずれかが観察された場合、システムが汚染しているおそれがあります。

- 感度の著しい低下
- バックグラウンドノイズの増加
- フルスキャンまたはサーベイスキャン方式のサンプルの一部ではない追加のピーク

こうした問題が観察された場合、質量分析装置のフロントエンド部をクリーニングしてください。

必要な道具

注: 米国のお客様は、877-740-2129 までお電話での資料請求およびお問い合わせが可能です。米国以外のお客様は sciex.com/contact-us をご覧ください。

- パウダーフリーグローブ(ニトリルまたはネオプレンを推奨)
- 安全メガネ
- 実験用白衣
- 新鮮な LC-MS グレード水。古い水には不純物が含まれており、質量分析装置の汚染を進行させる可能性があります。
- LC-MS グレードメタノール、イソプロパノール(2-プロパノール)、アセトニトリル
- 洗浄液は、次のうちひとつを使用してください。
 - 100%メタノール
 - 100%イソプロパノール
 - 1:1 比のアセトニトリル:水の溶液(新規調製すること)
 - 1:1 比のアセトニトリル:水に 0.1%酢酸を加えた溶液(新規調製すること)
- 洗浄液を準備するために、1 L または 500 mL のガラス製ビーカーを洗浄します。
- 使用済の溶剤を入れるための 1 L ビーカー
- 有機廃棄物容器
- 糸くずの出ない布。[メーカーから入手可能なツールとサプライ](#)を参照してください。
- (オプション)ポリエステル綿棒

メーカーから入手可能なツールとサプライ

表 10-3 :

説明	部品番号
小型ポリスワブ(熱接着)。クリーニングキットにも同梱されています。	1017396
糸くずの出ない布(11 cm x 21 cm、4.3 インチ x 8.3 インチ)。クリーニングキットにも同梱されています。	018027

表 10-3 : (続き)

説明	部品番号
クリーニングキット。小さなポリスワブ、糸くずの出ない布、Q0 クリーニングツール、先細の QJet イオンガイドクリーニングブラシ、および Alconox が含まれています。	5020763

クリーニングのベストプラクティス



警告! 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、DuoSpray のイオン源を少なくとも 20 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面の一部と真空インターフェースが熱くなります。



警告! 有害化学物質の危険があります。化学製品の安全性データシートを参照し、化学物質の取り扱い、保管、処理についての推奨安全手順に従ってください。



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。クリーニングやメンテナンス前に、汚染除去が必要かどうかを判断します。放射性物質、生物学的病原体、または有害化学物質が質量分析装置に使用された場合、お客様はクリーニングまたはメンテナンス前にシステムに対して汚染除去を行う必要があります。



警告! 環境の危険。システムコンポーネントを一般廃棄物として処分しないでください。コンポーネントを処分する際は、現地規制に従います。

- ・ イオン源は、取り外す前にそのままにして熱を下げます。
- ・ クリーニングを行う際は、常に清潔なパウダーフリーグローブ(ニトリル、あるいはネオプレンを推奨)を着用してください。
- ・ 質量分析装置コンポーネントのクリーニング後、再組立前に新しいグローブを着用してください。
- ・ 本手順書で指定されるもの以外のクリーニング用品を使用しないでください。
- ・ 可能な場合は、クリーニングの直前に洗浄液を準備してください。
- ・ すべての有機溶液および有機含有溶液は、非常に清潔なガラス製品にのみ、準備保管してください。プラスチックボトルは決して使用しないでください。汚染物質がこれらのボトルから浸出し、質量分析装置を汚染します。
- ・ 洗浄液の汚染を避けるため、溶液は布またはスワブに浸して使用してください。
- ・ 布の中心部分のみが質量分析装置の表面に触れるようにしてください。切れ端は、繊維を残す可能性があります。

ヒント! 熱結合されたポリスワブの周りに布を巻きつけてください。

図 10-1 : 例: 布の折り方



- クロスコンタミネーションを避けるために、布やスワブは表面に一度でも触れたものは、廃棄してください。
- 必要に応じて、カーテンプレートなど、真空インターフェースの大部分に複数のワイプを使用し、複数のクリーニングを実行します。
- 水または洗浄液を塗布する場合は、布またはスワブをわずかに湿らせる程度にしてください。有機溶剤より頻繁に使用される水は、質量分析装置の残留物が残り、布を劣化させる可能性があります。
- アパチャを布でこすらないでください。アパチャから拭き取り布の繊維が質量分析装置に入らないようにアパチャの周辺を拭いてください。
- カーテンプレートまたはオリフィスプレートのアパチャにブラシを挿入しないでください。

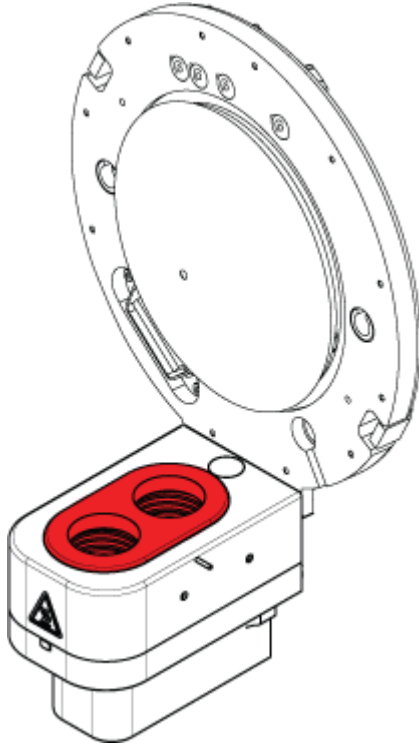
質量分析装置の準備



警告! 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、DuoSpray のイオン源を少なくとも 20 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面の一部と真空インターフェースが熱くなります。

注意: ダメージを与える恐れ。イオン源を取り外す際、イオン源ドレインに何も落とさないでください。

図 10-2 : 真空インターフェースのイオン源ドレイン



注: NanoSpray イオン源が付属の質量分析装置は、最適な結果を得るためにフルクリーニングが必要です。お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。

1. ハードウェアプロファイルを無効化します。ソフトウェアユーザーガイドを参照してください。
2. イオン源を除去します。イオン源のオペレータガイドを参照してください。
イオン源を使用しないときは、正確な動作を維持するために保護された場所に保管し、破損のないようにしてください。

カーテンプレートのクリーニング

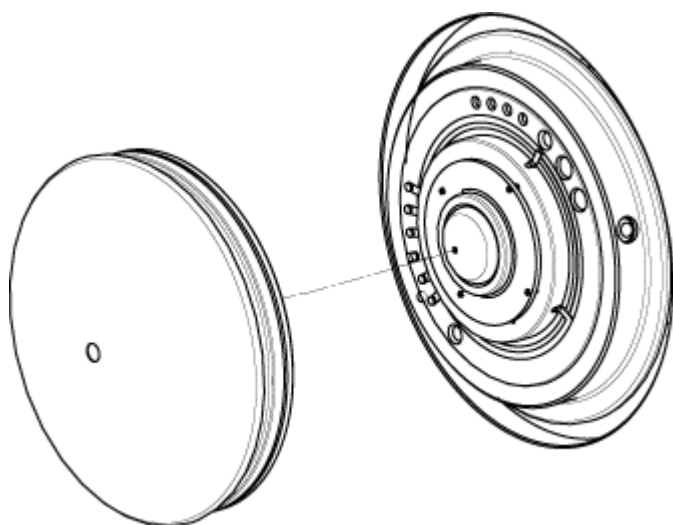
注意: ダメージを与える恐れ。カーテンプレートやオリフィスプレートのアパチャ(開口部)先端部を下側にして置かないようにしてください。カーテンプレートの円錐側が上になっているかを確認します。

注意: ダメージを与える恐れ。アパチャ(開口部)の損傷を防ぐため、カーテンプレート、オリフィスプレート、またはインターフェースヒーターのアパチャ(開口部)にワイヤーや金属製のブラシを挿入しないでください。

1. 真空インターフェース部からカーテンプレートを取り外し、円錐面を上側にして、清潔かつ安定した面に置きます。

注: ナノセルヒーターアセンブリーが設置されている場合は、イオン源の『オペレータガイド』の手順に従って、ヒーターアセンブリーを外してクリーニングしてください。

図 10-3 : カーテンプレート取外し



カーテンプレートはオリフィスプレートに配置された 3 つの球状キャッチで保持されています。

ヒント! オリフィスプレートからカーテンプレートをすぐに取り外せないときには、少し回転させながら(90 度以下)取り外し、球状バネラッチを開放してみてください。

2. 糸くずの出ない布を LC-MS グレード水に浸し、カーテンプレートの両側を拭いてきれいにします。

注: 必要なだけワイプを使います。

3. 洗浄液を使用して、手順 2 を繰り返します。
4. クリーニング液に浸したワイプまたは小型ポリスワブを使ってアパチャをクリーニングします。
5. カーテンプレートが乾くのを待ちます。
6. カーテンプレートに溶媒や糸くずの付着がないかを確認し、残留物がある場合、清潔で軽く濡らした糸くずの出ない布で拭いてください。

注: しつこい染みやほこりや水などの薄い膜が、溶媒が汚染されているサインとなります。

オリフィスプレート前面のクリーニング

注意: ダメージを与える恐れ。オリフィスプレートの表面をクリーニングするときに、インターフェースヒーターを取り外さないでください。インターフェースヒーターを頻繁に取り外すと、損傷の原因となる可能性があります。定期クリーニングの際に、インターフェースヒーター表面を清掃してください。

注意: ダメージを与える恐れ。アパチャ(開口部)の損傷を防ぐため、カーテンプレート、オリフィスプレート、またはインターフェースヒーターのアパチャ(開口部)にワイヤーや金属製のブラシを挿入しないでください。

1. 糸くずの出ない布を LC-MS グレード水に浸し、インターフェースヒーターを含むオリフィスプレートの前面を拭きます。
2. 洗浄液を使用して、手順 1 を繰り返します。
3. オリフィスプレートが乾燥するまでお待ちください。
4. オリフィスプレートに溶媒や糸くずの付着がないかを確認し、残留物がある場合、清潔で軽く濡らした糸くずの出ない布で拭いてください。

注: しつこい染みやほこりや水などの薄い膜が、溶媒が汚染されているサインとなります。

質量分析装置の運転再開

1. カーテンプレートを取り付けます。カーテンプレートのドットが 12 時の位置にあることを確認し、オリフィスプレートの穴にアライメントピンを差し込みます。
2. イオン源を質量分析装置にインストールします。イオン源のオペレータガイドを参照してください。
イオン源ラッチをロックポジションまでねじこみ、イオン源をしっかり閉めます。
3. ハードウェアプロファイルを有効にします。ソフトウェアユーザーガイドを参照してください。

イオン源排気ドレインボトルを空にする



警告! 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、DuoSpray のイオン源を少なくとも 20 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面の一部と真空インターフェースが熱くなります。



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。有害物質は、適切にラベルを貼った廃棄物容器に入れて処分し、その際は現地規制に従い処分してください。



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。排気ガスを専用のラボ用ガス換気フードまたは排気システムで通気するように注意して、換気チューブがクランプで固定されていることを確認します。ラボは実施される作業に適切な換気が行われるようにしなければなりません。

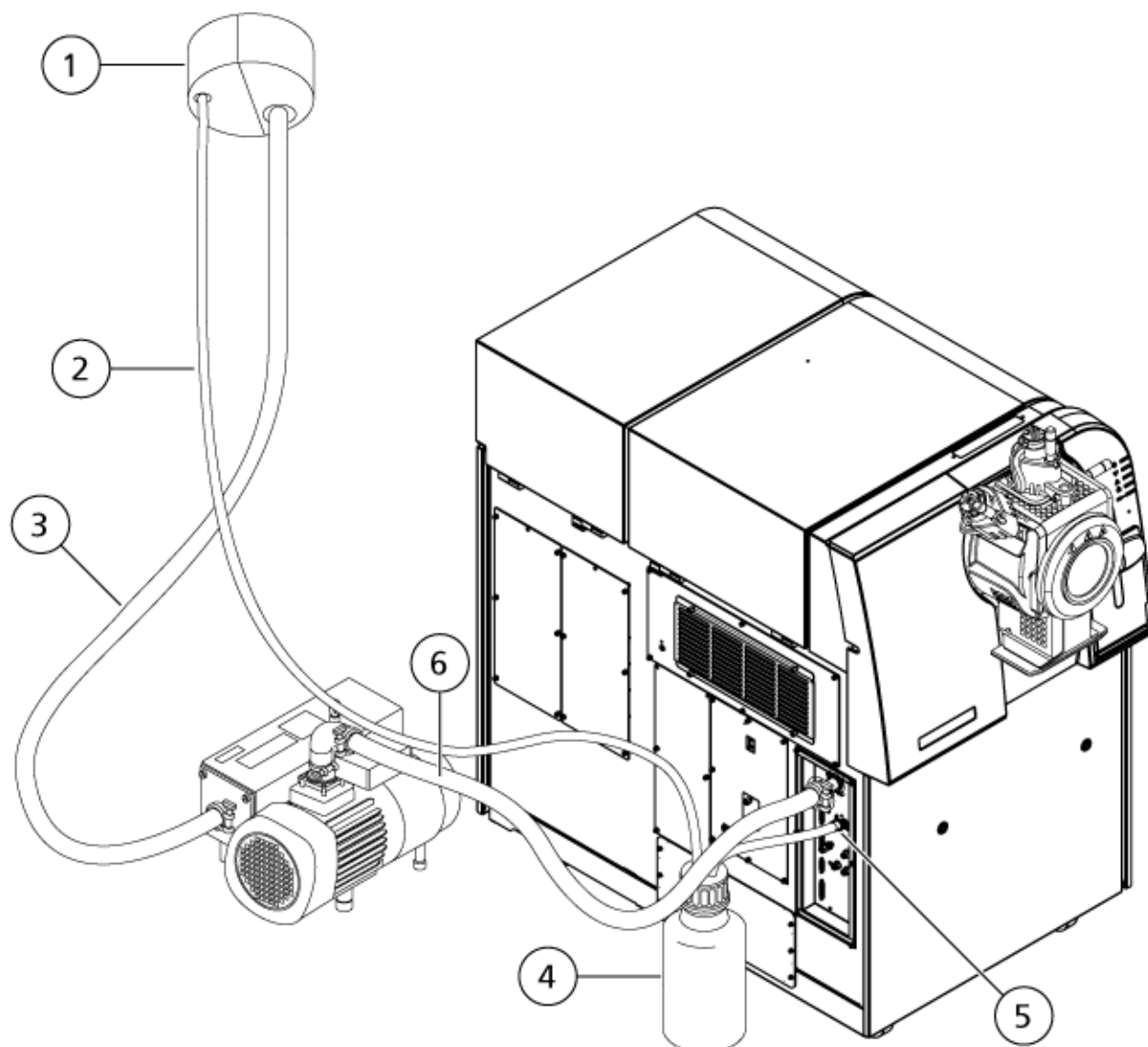


注: イオン源廃棄物ラインにねじれ、たるみ、ねじれがないことを確認してください。

イオン源排気ドレインボトルは定期的を確認し、満杯になる前に空にします。また、ボトルとその継手に漏れがないか点検し、必要に応じて接続部を締め付けるかコンポーネントを交換します。ボトルを空にするには、この手順のステップに従います。

1. イオン源を除去します。DuoSpray イオン源オペレータガイドを参照してください。
2. ホースをイオン源排気ドレインボトルのキャップに取り付けているクランプをゆるめます。

図 10-4 : イオン源排気ドレインボトル



項目	説明
1	換気口への接続
2	イオン源排気ドレインチューブ: 内径 2.5 cm (1.0 インチ)
3	粗引きポンプ排気ホース: 内径 (i.d.) 3.2 cm (1.25 インチ)

項目	説明
4	イオン源排気ドレインボトル 本図では、接続点が見えるように質量分析装置の背面のキャップを取り付けたドレインボトルを表示しています。ドレインボトルは、質量分析装置の側面のドレインボトルホルダーに取り付けられている場合もあります。こぼれないようにボトルがしっかりと取り付けられていることを確認します。
5	質量分析装置へのイオン源排気接続: 内径 1.6 cm (0.625 インチ)
6	粗引きポンプ真空インレットホース.

注: ドレインボトル、質量分析装置、検査室通気口のイオン源排気ホースの接続部は、ホースクランプで固定されています。

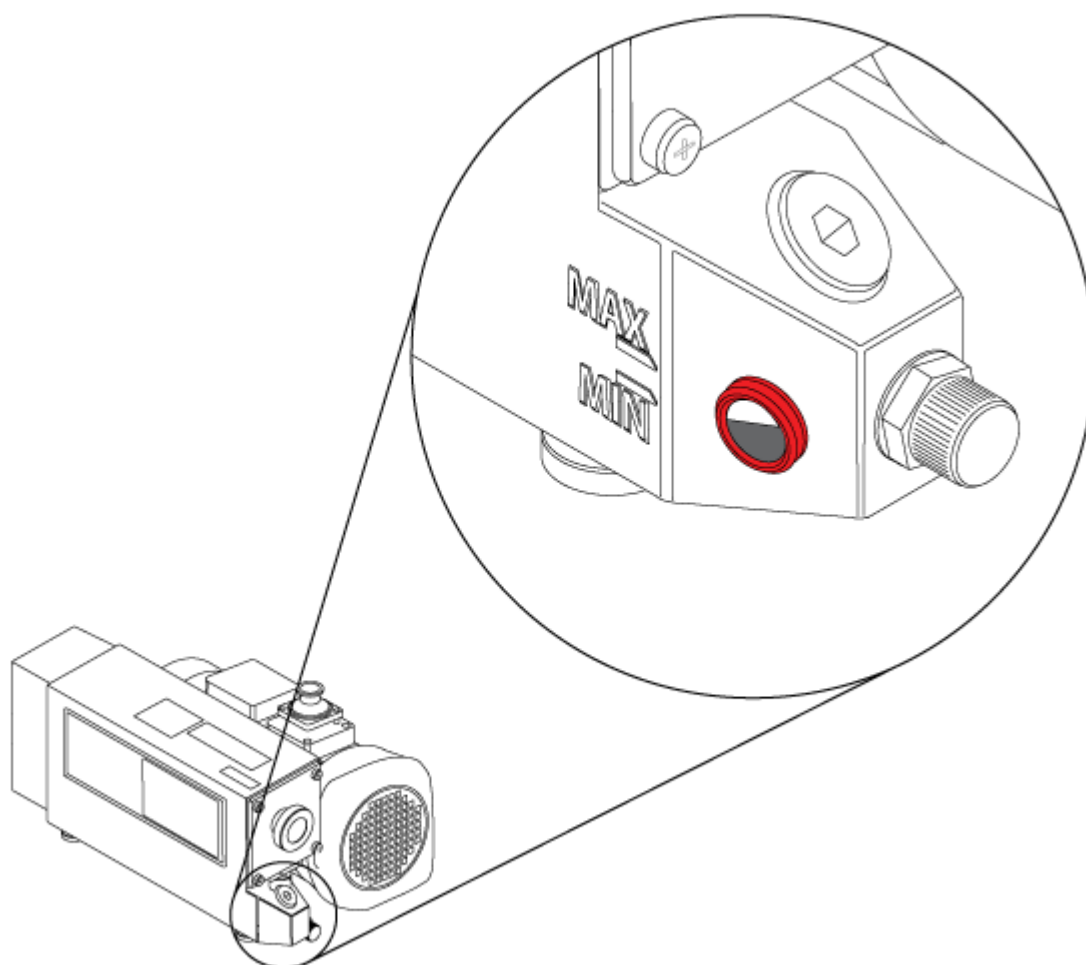
- 必要に応じてドレインボトルをホルダーから取り出します。
- キャップからホースを外します。
- ドレインボトルからキャップを取り外します。
- ドレインボトルを空にし、ラボの手順と現地の廃棄規制に従って不用品を廃棄します。
- ボトルにキャップを取り付け、ホルダーにボトルを取り付けます。
- ホースをキャップにクランプでしっかりと取り付けます。

粗引きポンプのオイルレベルの点検

粗引きポンプのオイルレベル確認窓を点検して、オイルが最低レベルを上回っていることを確認します。

オイルが最低レベルを下回っている場合は、有資格保守要員 (QMP) または SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) に連絡してください。

図 10-5 : オイルレベル確認窓



質量分析装置冷却ファンフィルターの交換

質量分析装置冷却ファンは、質量分析装置の左側にあります。

実施前提手順

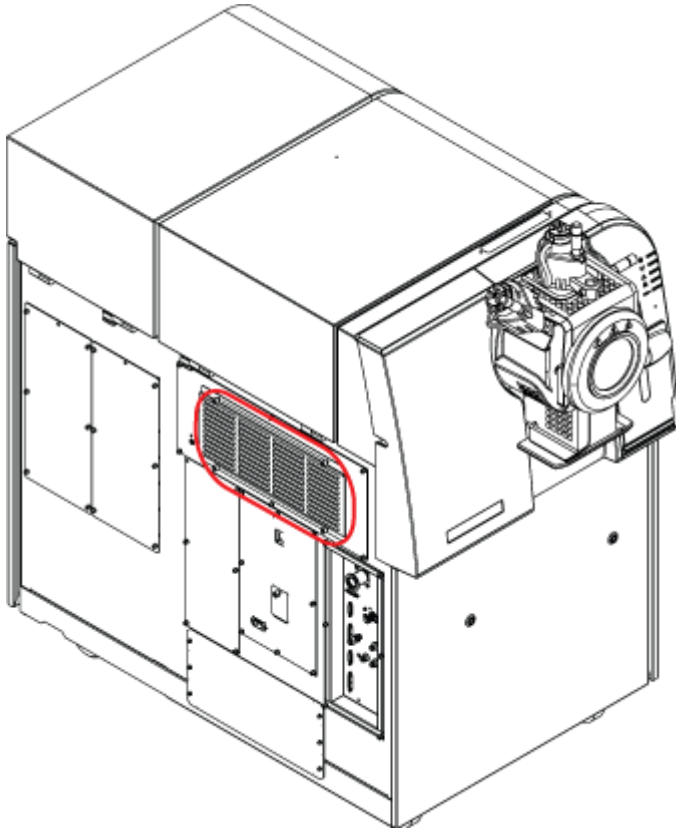
- システムをシャットダウンするには、『システムユーザーガイド』の手順に従ってください。



警告! 環境の危険。システムコンポーネントを一般廃棄物として処分しないでください。コンポーネントを処分する際は、現地規制に従います。

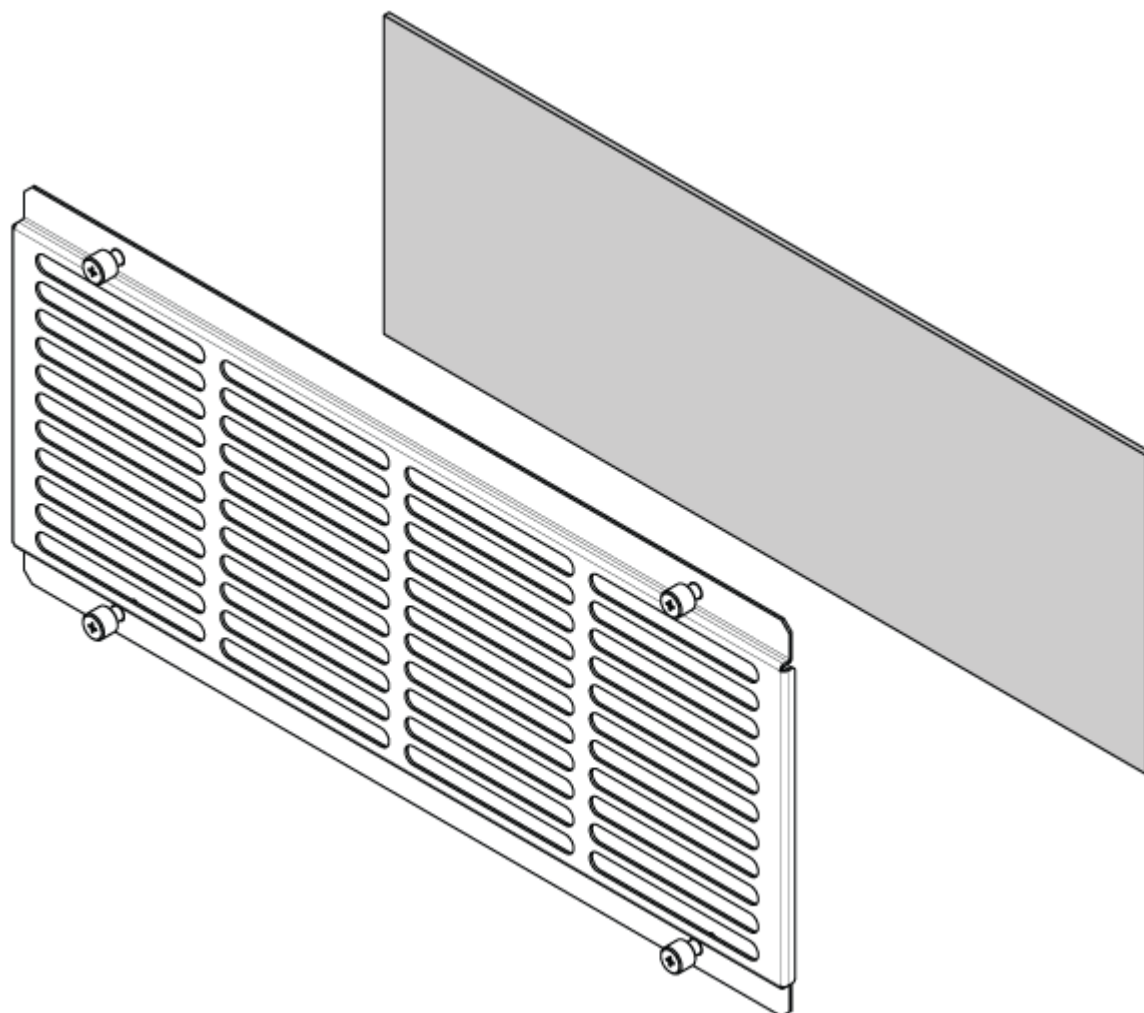
1. 冷却ファンカバーの 4 本のかみねじを外します。

図 10-6 : 冷却ファンフィルター



2. フィルターを取り外し、新しいフィルターに交換します。

図 10-7 : 冷却ファンフィルター



項目	説明
1	冷却ファンカバー
2	フィルタ

3. フィルターカバーを取り付けます。

保管と取り扱い



警告! 環境の危険。システムコンポーネントを一般廃棄物として処分しないでください。コンポーネントを処分する際は、現地規制に従います。

質量分析装置を長期保管するか、出荷の準備をする必要がある場合は、SCIEX FSE に使用停止情報についてお問い合わせください。質量分析装置から電源を外す際は、AC 主電源から主電源コネクタを取り外してください。

注: イオン源と質量分析装置は、 $-30\text{ }^{\circ}\text{C}\sim+60\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($-22^{\circ}\text{F}\sim140\text{ }^{\circ}\text{F}$)の温度および99%を超えない相対湿度(結露なし)で輸送および保管する必要があります。システムは、海拔2,000 m(6,562フィート)を超えない場所で保管します。

質量分析装置のトラブルシューティング 11

本項には、システム問題のトラブルシューティングのための情報が含まれています。特定の作業は、ラボで SCIEX のトレーニングを受講した、有資格保守要員 (QMP) のみが行うことができます。高度なトラブルシューティングについては、SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。

表 11-1 : システムの問題

症状	考えられる原因	修正アクション
QJet イオンガイドが極度に汚れているか、頻繁に汚れます。	Curtain Gas インターフェースのガス流量が少なすぎます。	Curtain Gas インターフェースのガスの設定を点検し、必要に応じて増加します。
真空圧力が高すぎるために、システムエラーが発生しました。	<ol style="list-style-type: none">1. オイルレベルが低すぎます。2. 液漏れがあります。3. 誤ったオリフィスプレートが設置されています。	<ol style="list-style-type: none">1. 粗引きポンプのオイルレベルを点検し、現地の QMP または FSE に連絡してオイルを追加してください。粗引きポンプのオイルレベルの点検を参照してください。2. 点検して液漏れを修理してください。3. 正しいオリフィスプレートを設置してください。
QPS エキサイタモジュールの温度が高すぎるために、システムエラーが発生しました。	<ol style="list-style-type: none">1. 室温が高すぎます。	<ol style="list-style-type: none">1. お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。2. 周囲温度の仕様については、システムの 設置計画概要書 を参照してください。

表 11-1 : システムの問題 (続き)

症状	考えられる原因	修正アクション
制御ソフトウェアによって、イオン源が原因で質量分析装置が故障状態にあると報告されま す。	<ol style="list-style-type: none"> 1. プローブが取り付けられて いません。 2. プローブがしっかりと接続 されていません。 	<p>デバイス詳細ページの状態パ ネルで故障を確認してくださ い。</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. プローブを取り付けます。 <i>DuoSpray</i> イオン源オペ レータガイドを参照してくださ い。 2. プローブを取り外してから 取り付けます。止めリング をしっかりと締めます。 <i>DuoSpray</i> イオン源オペ レータガイドを参照してくださ い。
制御ソフトウェアは、APCI プロ ーブが使用中でも、 TurbolonSpray プローブが取 り付けられていることを示して います。	F3 ヒューズが飛びました。	フィールドサービスエンジニア (FSE)にお問い合わせくださ い。
スプレー噴射が均一ではありま せん。	電極が詰まっています。	電極をクリーニングまたは交換 します。 <i>DuoSpray</i> イオン源オ ペレータガイドを参照してくださ い。
インターフェースヒーターの準 備ができていません。	インターフェースヒーターが故 障しています。	お近くの有資格保守要員 (QMP)またはフィールドサービ スエンジニア(FSE)にお問い 合わせください。
質量分析装置の分解能が低い です。	質量分析装置が調整されてい ません。	Instrument Optimization ウィ ザードを使用して、質量分析装 置を最適化します。ソフトウェ アユーザーガイドまたはヘルプ システムを参照してください。

質量分析装置のトラブルシューティング

表 11-1 : システムの問題 (続き)

症状	考えられる原因	修正アクション
質量分析装置の性能が低下しています。	<ol style="list-style-type: none"> 1. イオン源状態が最適化されていません。 2. サンプルが正しく用意されなかったか、サンプルが劣化しています。 3. サンプルインレット継手に漏れがあります。 	<ol style="list-style-type: none"> 1. イオン源状態を最適化します。<i>DuoSpray</i> イオン源オペレータガイドを参照してください。 2. サンプルが適切に用意されたことを確認します。 3. 継手が正しいサイズとタイプであることを確認し、それらがしっかりと締められていることを確認します。継手を締め付けすぎないでください。漏れが続く場合、継手を交換します。 4. 代替イオン源をインストールして最適化します。 5. 問題が解決しない場合は、フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
アーク放電またはスパーク放電が発生します。	コロナ放電ニードルのポジションが正しくありません。	TurbolonSpray プローブが使用中の場合は、コロナ放電ニードルをカーテンプレートの方に向けて、ヒーターガスの蒸気から遠ざけます。 <i>DuoSpray</i> イオン源オペレータガイドを参照してください。

表 11-2 : 感度の問題

考えられる原因	修正アクション
感度が低下	
イオン源パラメータが最適化されていません。	イオン源パラメータを最適化します。
質量分析装置が最適化されていません。	Instrument Optimization ウィザードを使用して、質量分析装置を最適化します。
カーテンプレートが汚れています。	カーテンプレートのクリーニングを行います。 カーテンプレートのクリーニング を参照してください。

表 11-2 : 感度の問題 (続き)

考えられる原因	修正アクション
オリフィスプレートが汚れています。	オリフィスプレート前面のクリーニングを参照するか、または現地の QMP か FSE に連絡してください。
QJet イオンガイドまたは IQ0 レンズが汚れています。	QJet イオンガイドと IQ0 レンズのクリーニングを行います。お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
Q0 領域が汚れています。	Q0 領域の汚染についてテストします。お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
サンプルが劣化、またはサンプル濃度が低い。	サンプル濃度を確認します。新しいサンプルを使用します。
プローブが正しく取り付けられていません。	プローブを取り外して取り付けます。
イオン源が正しく取り付けられていないか故障しています。	ラッチが正しく固定されていることを確認しながら、イオン源を取り外して取り付けます。これで問題が解決されない場合、代替イオン源を取り付けて最適化します。
真空インターフェースの 1 つ以上の O リングがありません。	イオン源に O リングがある場合、それらを真空インターフェースに取り付けます。それらを紛失した場合、交換します。
LC システムまたは接続に問題があります。	LC システムの問題を解決します。
デクラスタリング電位 (DP) が最適化されていません。	DP を最適化します。
電極が汚れているか、塞がれています。	電極を交換します。DuoSpray イオン源オペレータガイドを参照してください。
信号がないか、信号が不安定です。	
チューブが詰まっています。	サンプルチューブを交換します。

表 11-3 : バックグラウンドノイズの問題

考えられる原因	修正アクション
Temperature (TEM)、IonSpray 電圧 (IS)、またはヒーターガス流量 (GS2) が高すぎます。	イオン源パラメータを最適化します。DuoSpray イオン源オペレータガイドを参照してください。
カーテンプレートが汚れています。	カーテンプレートのクリーニングを行います。カーテンプレートのクリーニングを参照してください。

表 11-3 : バックグラウンドノイズの問題 (続き)

考えられる原因	修正アクション
オリフィスプレートが汚れています。	オリフィスプレートの前面のクリーニングを行います。 オリフィスプレート前面のクリーニング を参照してください。
QJet イオンガイドまたは IQ0 レンズが汚れています。	質量分析装置のフロントエンドコンポーネントのフルクリーニングを行います。お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
Q0 領域が汚れています。	Q0 領域のクリーニングを行います。有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
移動相が汚染されています。	移動相を交換します。
イオン源が汚染されています。	イオン源コンポーネントをクリーニングするか交換してからイオン源とフロントエンドを次のように調整します。 <ol style="list-style-type: none"> 1. プローブを開口部から垂直および水平方向に最も離れた位置に移動します。 2. (Analyst TF ソフトウェア) インターフェースヒーターの電源が入っていることを確認します。 3. ポンプ流量 1 mL/分でメタノール:水 (50:50) を注入します。 4. 制御ソフトウェアで、温度を 650、イオン源ガス 1 ~ 60、イオン源ガス 2 ~ 60 に設定します。 5. Curtain Gas インターフェースのガス流量を 45 または 50 に設定します。 6. 最良の結果を得るには、最低 2 時間、できれば一晩中実行してください。

販売、技術サポートまたはサービスについては、フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせいただくか、SCIEX のウェブサイト (sciex.com) のお問い合わせ情報をご覧ください。

推奨キャリブレーションイオン

A

注意: 結果が不正確になる可能性。期限切れの溶液や、指定された保管温度で保管されていない溶液は使用しないでください。

次の表に、SCIEX が推奨する TripleTOF 6600+ システムのキャリブレーションの標準を示します。チューニング溶液については、[使用説明—チューニングとキャリブレーション](#)を参照してください。

表 A-1 : Q1 PPG ポジティブキャリブレーションイオン

質量								
59.0491 4	233.174 72	442.337 40	674.504 84	906.672 28	1196.88 158	1545.13 274	1952.42 576	2242.63 506

表 A-2 : Q1 PPG ネガティブキャリブレーションイオン

質量								
44.9981 9	411.259 91	585.385 49	933.636 65	1165.80 409	1572.09 711	1863.30 641	1979.39 013	2211.55 757

表 A-3 : APCI ポジティブキャリブレーション溶媒および ESI ポジティブキャリブレーション溶媒:
TOF MS

TOF MS	質量
アミノヘプタン酸	146.11756
アミノ -dPEG 4 酸	266.15981
クロミプラミン	315.16225
アミノ -dPEG 6 酸	354.21224
アミノ -dPEG 8 酸	442.26467
レセルピン	609.28066
アミノ -dPEG 12 酸	618.36953
ヘキサキス(2,2,3,3-テトラフルオロプロピル)ホスファシン	922.0098
ヘキサキス(1H,1H,5H-オクタフルオロペンチン)ホスファシン	1521.97148

推奨キャリブレーションイオン

表 A-4 : APCI ポジティブキャリブレーション溶媒および ESI ポジティブキャリブレーション溶媒:
MSMS(クロミプラミン)

MSMS(クロミプラミン)	質量
C ₃ H ₈ N	58.0651
C ₅ H ₁₂ N	86.0964
C ₁₆ H ₁₄ N	220.1121
C ₁₄ H ₁₀ NCl	227.0496
C ₁₇ H ₁₇ N	235.1356
C ₁₅ H ₁₃ NCl	242.0731
C ₁₇ H ₁₇ ClN	270.1044
C ₁₉ H ₂₃ ClN ₂	315.16225

表 A-5 : APCI ネガティブキャリブレーション溶媒および ESI ネガティブキャリブレーション溶媒:
TOF MS

TOF MS	質量
7-アミノヘプタン酸	144.103
アミノ -dPEG 4 酸	264.14526
スルフィンピラゾンフラグメント	277.09825
アミノ -dPEG 6 酸	352.19769
スルフィンピラゾン	403.11219
アミノ -dPEG 8 酸	440.25012
アミノ -dPEG 12 酸	616.35498
アミノ-dPEG16 酸	792.45984

表 A-6 : APCI ネガティブキャリブレーション溶媒および ESI ネガティブキャリブレーション溶媒:
MSMS(スルフィンピラゾン)

MSMS(スルフィンピラゾン)	質量
C ₆ H ₅ O	93.0344
C ₆ H ₅ OS	125.0067
C ₁₀ H ₈ NO	158.06114
C ₁₇ H ₁₃ N ₂ O ₂	277.0983
C ₂₃ H ₂ ON ₂ OS ₃	403.11219

表 A-7 : APCI ネガティブキャリブレーション溶媒および ESI ネガティブキャリブレーション溶媒:
MSMS (スルフィンピラゾンフラグメント)

MSMS (スルフィンピラゾンフラグメント)	質量
C ₆ H ₅	77.03967
C ₈ H ₆ N	116.0506
C ₉ H ₈ N	130.0662
C ₁₀ H ₈ NO	158.0611
C ₁₁ H ₈ N ₂ O ₂	200.0591
C ₁₅ H ₉ N ₂	217.0771
C ₁₆ H ₁₃ N ₂ O	249.1033
C ₁₇ H ₁₃ N ₂ O ₂	277.09825

計算精密質量および化学式

B

PPG

表 B-1 には、PPG (ポリプロピレングリコール) キャリブレーション溶媒によって観察される正確なモノアイソトピック質量および荷電種 (正および負) が含まれます。質量とイオンは、式 $M = H [OC_3H_6]_n OH$ を使用して計算されます。陽イオン MSMS フラグメントは、式 $[OC_3H_6]_n (H^+)$ を使用して計算されます。いずれの計算においても、 $H = 1.007825$ 、 $O = 15.99491$ 、 $C = 12.00000$ 、 $N = 14.00307$ となります。

注: PPG 溶媒を使ってキャリブレーションを行う際は、正しいアイソトピークを使用してください。

表 B-1 : PPG 計算精密質量

n	計算精密質量 (M)	(M + NH ₄) ⁺	MSMS フラグメント	(M + NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
1	76.05242	94.08624	59.04914	56.06003	121.05061
2	134.09428	152.12810	117.09100	85.08096	179.09247
3	192.13614	210.16996	175.13286	114.10189	237.13433
4	250.17800	268.21182	233.17472	143.12282	295.17619
5	308.21986	326.25368	291.21658	172.14375	353.21805
6	366.26172	384.29554	349.25844	201.16468	411.25991
7	424.30358	442.33740	407.30030	230.18561	469.30177
8	482.34544	500.37926	465.34216	259.20654	527.34363
9	540.38730	558.42112	523.38402	288.22747	585.38549
10	598.42916	616.46298	581.42588	317.24840	643.42735
11	656.47102	674.50484	639.46774	346.26933	701.46921
12	714.51288	732.54670	697.50960	375.29026	759.51107
13	772.55474	790.58856	755.55146	404.31119	817.55293
14	830.59660	848.63042	813.59332	433.33212	875.59479
15	888.63846	906.67228	871.63518	462.35305	933.63665
16	946.68032	964.71414	929.67704	491.37398	991.67851
17	1004.72218	1022.75600	987.71890	520.39491	1049.72037
18	1062.76404	1080.79786	1045.76076	549.41584	1107.76223
19	1120.80590	1138.83972	1103.80262	578.43677	1165.80409

表 B-1 : PPG 計算精密質量 (続き)

n	計算精密質量 (M)	(M + NH ₄) ⁺	MSMS フラグメント	(M + NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
20	1178.84776	1196.88158	1161.84448	607.45770	1223.84595
21	1236.88962	1254.92344	1219.88634	636.47863	1281.88781
22	1294.93148	1312.96530	1277.92820	665.49956	1339.92967
23	1352.9733	1371.0072	1335.9701	694.5205	1397.9715
24	1411.0152	1429.0490	1394.0119	723.5414	1456.0134
25	1469.0571	1487.0909	1452.0538	752.5624	1514.0553
26	1527.0989	1545.1327	1510.0956	781.5833	1572.0971
27	1585.1408	1603.1746	1568.1375	810.6042	1630.1390
28	1643.1826	1661.2165	1626.1794	839.6251	1688.1808
29	1701.2245	1719.2583	1684.2212	868.6461	1746.2227
30	1759.2664	1777.3002	1742.2631	897.6670	1804.2646
31	1817.3082	1835.3420	1800.3049	926.6879	1862.3064
32	1875.3501	1893.3839	1858.3468	955.7089	1920.3483
33	1933.3919	1951.4258	1916.3887	984.7298	1978.3901
34	1991.4338	2009.4676	1974.4305	1013.7507	2036.4320
35	2049.4757	2067.5095	2032.4724	1042.7717	2094.4739
36	2107.5175	2125.5513	2090.5142	1071.7926	2152.5157
37	2165.5594	2183.5932	2148.5561	1100.8135	2210.5576
38	2223.6012	2241.6351	2206.5980	1129.8344	2268.5994

レセルピン

表 B-2 : レセルピンの計算精密質量 (C₃₃H₄₀N₂O₉)

説明	質量
分子イオン C ₃₃ H ₄₁ N ₂ O ₉	609.28066
フラグメント C ₂₃ H ₃₀ NO ₈	448.19659
フラグメント C ₂₃ H ₂₉ N ₂ O ₄	397.21218
フラグメント C ₂₂ H ₂₅ N ₂ O ₃	365.18597
フラグメント C ₁₃ H ₁₈ NO ₃	236.12812

計算精密質量および化学式

表 B-2 : レセルピンの計算精密質量 (C₃₃H₄₀N₂O₉) (続き)

説明	質量
フラグメント C ₁₀ H ₁₁ O ₄	195.06519
フラグメント C ₁₁ H ₁₂ NO	174.09134

タウロコール酸

表 B-3 : タウロコール酸の計算精密質量 (C₂₆H₄₅ なし 7S)

説明	質量
分子イオン C ₂₆ H ₄₄ なし 7S	514.28440
フラグメント C ₂ H ₃ O ₃ S	106.98084
フラグメント C ₂ H ₆ なし 3S	124.00739
フラグメント SO ₃	79.95736

TOF キャリブレーション溶媒

表 B-4 : TOF キャリブレーション溶媒の計算精密質量

説明	質量
分子イオン Cs ⁺	132.90488
分子イオンペプチド ALILTLVS	829.53933

ペプチド ALILTLVS

表 B-5 : ペプチド ALILTLVS 正確な質量

名称	シーケンス	質量	電荷状態
プレカーサーイオン	ALILTLVS	829.5393	1+
b8	ALILTLVS	811.5288	1+
b7	ALILTLV	724.4967	1+
b7-18	ALILTLV	706.4862	1+
b6-18	ALILTLV	607.4178	1+
y5	LTLVS	532.3341	1+
b5	ALILT	512.3443	1+
b5-18	ALILT	494.3337	1+

表 B-5 : ペプチド ALILTLVS 正確な質量 (続き)

名称	シーケンス	質量	電荷状態
b4	ALIL	411.2966	1+
b3	ALI	298.2125	1+
内部フラグメント y b	IL または LI	227.1754	1+
内部フラグメント y b	LT または TL	215.139	1+
b2	AL	185.1285	1+
a2	AL	157.1335	1+
イモニウムイオン	I または L	86.09643	1+

ツールバーアイコン

C

ツールバーアイコンを追加するには、次のドキュメントを参照: [アドバンスユーザーガイド](#)。

表 C-1 : ツールバーアイコン



アイコン	名前	説明
	New Subproject	サブプロジェクトを作成します。Subprojects は、元々のプロジェクトがサブプロジェクトを伴って作成されていた場合にのみ、以後のプロセスにおいて作成されます。
	Copy Subproject	サブプロジェクトフォルダをコピーします。 サブプロジェクトは、現存するサブプロジェクトを持つ別のプロジェクトからのみコピーが可能です。プロジェクトおよびサブプロジェクトレベルで同じフォルダが存在した場合、ソフトウェアはプロジェクトレベルのフォルダを使用します。

表 C-2 : 測定メソッドエディタアイコン












アイコン	名前	説明
	Mass Spec	「MS」タブが測定メソッドエディタに表示されます。
	Period	実験 IDA Criteria Level を追加、または期間を削除します。
	Autosampler	Autosampler Properties タブを開きます。
	Syringe Pump	Autosampler Properties タブを開きます。
	Column Oven	Column Oven Properties タブを開きます。
	Valve	Valve Properties タブを開きます。
	DAD	DAD Method Editor を開きます。次のセクションを参照: Show DAD Data 。
	ADC	ADC Properties タブを開きます。次のセクションを参照: ACD データの表示 。

表 C-3 : 測定モードアイコン

アイコン	名前	説明
	View Queue	サンプルキューを表示します。
	Instrument Queue	リモート装置ステーションを表示します。
	Status for Remote Instrument	リモート装置のステータスを表示します。
	Start Sample	キュー内のサンプルを開始します。
	Stop Sample	キュー内のサンプルを停止します。
	Abort Sample	サンプル処理の途中で、そのサンプル測定を中断します。
	Stop Queue	すべてのサンプル処理を完了する前にキューを停止します。
	Pause Sample Now	キュー内に一時停止命令を送信します。
	Insert Pause before Selected Sample(s)	特定のサンプルの前で一時停止命令を送信します。
	Continue Sample	サンプルの取得を継続します。
	Next Period	新しい期間を開始します。
	Extend Period	現在の期間を延長します。
	Next Sample	現在のサンプル取得を停止し、次のサンプル取得を開始します。
	Equilibrate	デバイスの平衡化に使用するメソッドを選択します。このメソッドは、キューの最初のサンプルで使用されたものと同一でなければなりません。
	Standby	装置を Standby 状態にします。
	Ready	装置を Ready 状態にします。

ツールバーアイコン

表 C-3 : 測定モードアイコン (続き)

アイコン	名前	説明
	Reserve Instrument for Tuning	質量分析装置のチューニングおよびキャリブレーションの準備を行います。
	Method Wizard	Method Wizard を開始します。
	Purge Modifier	モディファイヤーポンプから浄化を開始します。









アイコン	名前	説明
	Calibrate from spectrum	Mass Calibration Option ダイアログを開き、使用可能なスペクトルを使用して質量分析装置のキャリブレーションを行います。
	Manual Tune	Manual Tune Editor を開きます。
	Instrument Optimization	装置のパフォーマンス確認、質量校正の調整、質量分析装置の設定調整を行います。
	View Queue	サンプルキューを表示します。
	Instrument Queue	リモート装置を表示します。
	Status for Remote Instrument	リモート装置のステータスを表示します。
	Reserve Instrument for Tuning	装置のチューニングおよびキャリブレーションの準備を行います。
	Purge Modifier	モディファイヤーポンプからの浄化および洗浄を行うにはクリックしてください。

表 C-4 : Explore クイックリファレンス:クロマトグラムとスペクトル



アイコン	名前	説明
	Open Data File	ファイルを開きます。
	Show Next Sample	次のサンプルに移動します。

表 C-4 : Explore クイックリファレンス:クロマトグラムとスペクトル (続き)

アイコン	名前	説明
	Show Previous Sample	前のサンプルに移動します。
	Go To Sample	Select Sample ダイアログを開きます。
	List Data	データを表形式で表示します。
	Show TIC	スペクトルから TIC を生成します。
	Extract Using Dialog	質量を選択してイオンを抽出します。
	Show Base Peak Chromatogram	ベースピーククロマトグラフィー(BPC)を生成します。
	Show Spectrum	TIC からスペクトルを生成します。
	Copy Graph to new Window	有効なグラフを新規ウィンドウにコピーします。
	Baseline Subtract	Baseline Subtract ダイアログを開きます。
	Threshold	しきい値を調整します。
	Noise Filter	Noise Filter Options ダイアログを表示し、ピークの最小幅を定義できます。この最小幅以下のシグナルが、ノイズとして認識されません。
	Show ADC	ADC データを表示します。
	Show File Info	データ収集に用いる実験条件を表示します。
	Add arrows	有効なグラフの X 軸に矢印を追加します。
	Remove all arrows	有効なグラフの X 軸から矢印を消去します。
	Offset Graph	ADC データと質量分析装置データが記録された時間のわずかな差異を相殺します。複数のグラフを重ねて比較する際に便利です。
	Force Peak Labels	すべてのピークをラベル化します。

ツールバーアイコン

表 C-4 : Explore クイックリファレンス:クロマトグラムとスペクトル (続き)







アイコン	名前	説明
	Expand Selection By	グラフの一部をより詳細に閲覧するための拡大率を設定します。
	Clear ranges	拡大選択をクリアし、通常の倍率に戻します。
	Set Selection	選択した部分の開始および停止ポイントを定義します。カーソルで領域選択を行うことで、より正確に選択部分を定義することができます。
	Normalize To Max	グラフを最大サイズに設定し、最も強力なピークを最大スケールに視覚化します。
	Show History	スムージング、減算、キャリブレーション、ノイズフィルタリングなど、特定のファイルで実行されたデータ処理の概要を表示します。
	Open Compound Database	化合物データベースを開きます。
	Set Threshold	しきい値を調整します。
	Show Contour Plot	スペクトルグラフまたは XIC の形で、選択されたデータを表示します。また、DAD で取得されたデータの場合、等高線図上のデータは DAD スペクトルまたは XWC の形で表示されます。
	Show DAD TWC	DAD スペクトルの TWC を生成します。
	Show DAD Spectrum	DAD スペクトルを生成します。
	Extract Wavelength	DAD スペクトルから、XWC を閲覧するための波長範囲を 3 つまで抽出します。

表 C-5 : Explore ツールバーのクイックリファレンス:グラフの重ね表示





アイコン	名前	説明
	Home Graph	グラフが元のスケールに戻ります。
	Overlay	グラフが重ねて表示されます。
	Cycle Overlays	重ねられたグラフ間で表示が切り替わります。
	Sum Overlays	グラフが 1 つに統合されます。

表 C-6 : Explore ツールバーのクイックリファレンス:フラグメント解釈ツール


アイコン	名前	説明
	Show Fragment Interpretation Tool	Fragment Interpretation ツールが開きます。このツールでは.mol ファイルをもとに、単結合/非環状結合の開裂フラグメントが算出されます。

表 C-7 : Explore ツールバーのナビゲーションアイコン

アイコン	名前	機能
	Open File	ファイルを開きます。
	Show Next Sample	次のサンプルに移動します。
	Show Previous Sample	前のサンプルに移動します。
	GoTo Sample	Select Sample ダイアログを開きます。
	List Data	データを表形式で表示します。
	Show TIC	スペクトルから TIC を生成します。
	Extract Using Dialog	クリックすると、質量を選択することでイオンを抽出できます。
	Show Base Peak Chromatogram	ベースピーククロマトグラフィー(BPC)を生成します。
	Show Spectrum	TIC からスペクトルを生成します。
	Copy Graph to new Window	有効なグラフを新規ウィンドウにコピーします。
	Baseline Subtract	Baseline Subtract ダイアログを開きます。
	Threshold	しきい値を調整します。
	Noise Filter	Noise Filter Options ダイアログを開き、ピークの最小幅を指定できます。この最小幅以下のシグナルが、ノイズとして認識されます。
	Show ADC	ADC データを表示します。

ツールバーアイコン

表 C-7 : Explore ツールバーのナビゲーションアイコン (続き)

アイコン	名前	機能
	Show File Info	データ収集に用いる実験条件を表示します。
	Add arrows	有効なグラフの X 軸に矢印を追加します。
	Remove all arrows	有効なグラフの X 軸から矢印を消去します。
	Offset Graph	ADC データと質量分析装置データが記録された時間のわずかな差異を相殺します。複数のグラフを重ねて比較する際に便利です。
	Force Peak Labels	すべてのピークをラベル化します。
	Expand Selection By	グラフの一部をより詳細に閲覧するための拡大率を設定します。
	Clear ranges	拡大選択をクリアし、通常の倍率に戻します。
	Set Selection	選択した部分の開始および停止ポイントを設定します。カーソルを用いて領域を強調表示することで、より正確に選択部分を指定できます。
	Normalize to Max	グラフのスケールを最大化します。これにより、(表示されているかどうかに関係なく)最も強いピークがフルスケールで表示されます。
	Show History	スムージング、減算、キャリブレーション、ノイズフィルタリングなど、特定のファイルで実行されたデータ処理の概要を表示します。
	Open Compound Database	化合物データベースを開きます。
	Set Threshold	しきい値を調整します。
	Show Contour Plot	スペクトルグラフまたは XIC の形で、選択されたデータを表示します。また、DAD で取得したデータについては、選択したデータを等高線図に DAD スペクトルまたは XWC 形式で表示することも可能です。
	Show DAD TWC	DAD の TWC を生成します。
	Show DAD Spectrum	DAD スペクトルを生成します。

表 C-7 : Explore ツールバーのナビゲーションアイコン (続き)


アイコン	名前	機能
	Extract Wavelength	DAD スペクトルから、XWC を閲覧するための波長範囲を 3 つまで抽出します。

表 C-8 : 解析タブと定量化ウィザードアイコン











アイコン	名前	説明
	Set parameters from Background Region	選択されたピークを使用します。
	Select Peak	選択されたバックグラウンドを使用します。
	Manual Integration Mode	ピークを手動で解析します。
	Show or Hide Parameters	ピーク検出パラメータを表示または非表示にします。
	Show Active Graph	分析試料のクロマトグラムのみを表示します。
	Show Both Analyte and IS	分析試料とそれに関連するクロマトグラム (関連する内部標準が存在する場合にのみ有効) を表示します。
	Use Default View for Graph	プリセットに戻り、すべてのデータを表示し、たとえば、ユーザーがクロマトグラムを拡大したかどうかを表示します。

表 C-9 : Results Table アイコン

アイコン	名前	説明
	Sort Ascending by Selection	選択した列を昇順で並べ替えます。
	Sort Descending by Selection	選択した列を降順で並び替えます。
	Lock Or Unlock Column	選択した列をロックまたはロックを解除します。ロックされた列は移動できません。

ツールバーアイコン

表 C-9 : Results Table アイコン (続き)





アイコン	名前	説明
	Metric Plot By Selection	選択した列からメトリックプロットを作成します。
	Show all Samples	Results Table のすべてのサンプルを表示します。
	Delete Formula Column	数式列を削除します。
	Report Generator	Reporter ソフトウェアを開きます。

表 C-10 : アイコンのクイックリファレンス: 定量化モード

アイコン	名前	説明
	Add/Remove Samples	Results Table からサンプルを追加および削除します。
	Export as Text	Results Table をテキストファイルで保存します。
	Modify Method	wiff ファイルを開きます。
	Peak Review - Pane	ピークをペインで開きます。
	Peak Review - Window	ピークをウィンドウで開きます。
	Calibration - Pane	キャリブレーションカーブをペインで開きます。
	Calibration - Window	キャリブレーションカーブをウィンドウで開きます。
	Show First Peak	最初のピークをペインまたはウィンドウに表示します。
	Show Last Peak	最後のピークをペインまたはウィンドウに表示します。
	Show Audit Trail	Results Table の監査証跡を表示します。
	Clear Audit Trail	Results Table の監査証跡を消去します。この機能は使用できません。
	Statistics	Statistics ウィンドウを開きます。

表 C-10 : アイコンのクイックリファレンス: 定量化モード (続き)





アイコン	名前	説明
	Report Generator	Reporter ソフトウェアを開きます。

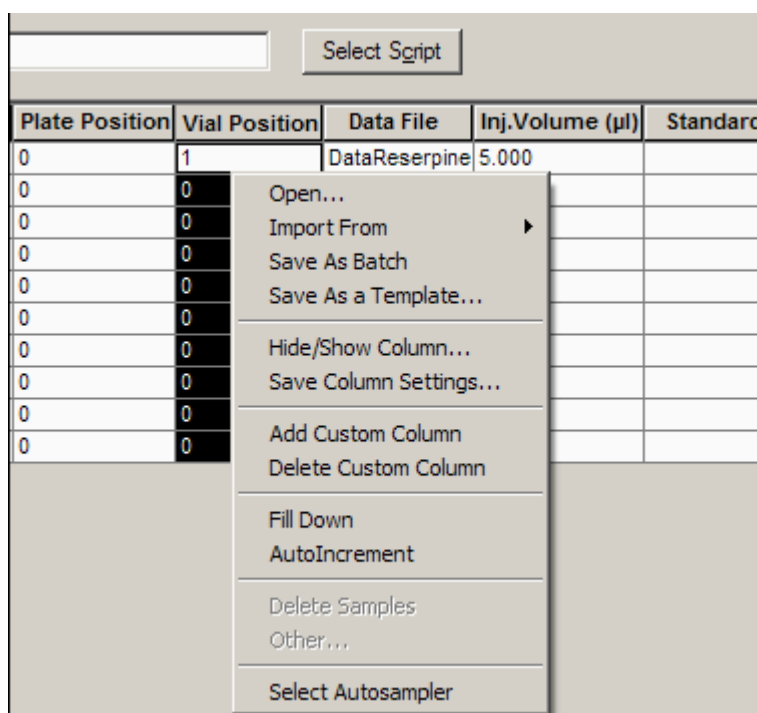
表 C-11 : 測定モードアイコン

アイコン	名前	機能
	Start Sample	クリックして、キュー内のサンプルの処理を開始します。
	Stop Sample	クリックして、キュー内のサンプルの処理を停止します。
	Equilibrate	クリックして、質量分析装置の平衡化に用いるメソッドを選択します、選択対象として、イオン源、LC カラム (使用している場合)、すべての周辺装置が表示されます。このメソッドはキューの最初のサンプルで使用されたものと同じでなければなりません。

Batch Editor

Batch Editor 表を右クリックしてオプションにアクセスします。

図 D-1 : バッチの右クリックメニュー



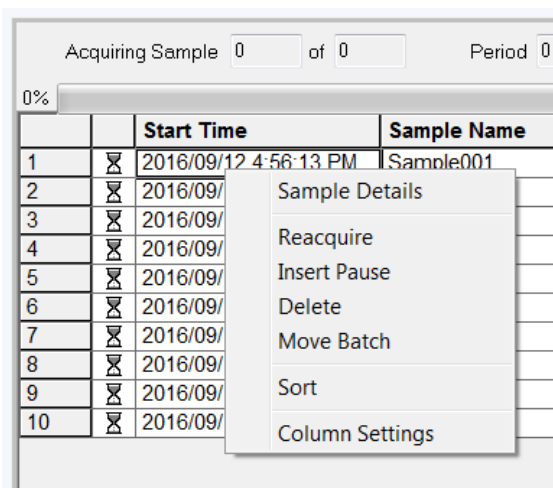
メニュー	機能
Open	(開く)バッチファイルを開きます。
Import From	(インポート元)ファイルからバッチをインポートします。
Save As Batch	(バッチとして保存)バッチを別の名前で保存します。
Save As a Template	(テンプレートとして保存)バッチをテンプレートとして保存します。
Hide/Show Column	(カラムの表示 / 非表示)カラムを表示 / 非表示にします。
Save Column Settings	(カラム設定を保存)バッチカラムの設定を保存します。
Add Custom Column	(カスタムカラムの追加)カスタムカラムを追加します。

メニュー	機能
Delete Custom Column	(カスタムカラムの削除)カスタムカラムを削除します。
Fill Down	(下方向へコピー)選択したセルに同一データをコピーします。
AutoIncrement	(AutoIncrement)選択したセルのデータを自動的に増やします。
Delete Samples	(サンプルを削除)選択した行を削除します。
Select Autosampler	(オートサンプラーを選択)オートサンプラーを選択します。

キュー

キューの表を右クリックし、オプションを表示します。

図 D-2 : Queue Manager の右クリックメニュー



メニュー	機能
Sample Details	(サンプル詳細) Sample Details ダイアログを開きます。
Reacquire	(再測定) サンプルを再度測定します。
Insert Pause	(一時停止を挿入) 2つのサンプルの間に秒単位で一時停止を挿入します。
Delete	(削除) バッチまたは選択されたサンプルを削除します。
Move Batch	(バッチ移動) バッチをキュー内で移動させます。
Sort	(ソート) 事前に選択されたカラムでソートします。
Column Settings	(カラム設定) カラムの設定を変更します。

Show File Information ペインの右クリックメニュー

表 D-1 : Show File Information ペインの右クリックメニュー

メニュー	機能
Copy	(コピー) 選択したデータをコピーします。
Paste	(貼り付け) データを貼り付けます。
Select All	(全選択) ペイン内の全データを選択します。
Save To File	(ファイルに保存) データを rtf ファイルとして保存します。
Font	(フォント) フォントを変更します。
Save Acquisition Method	(測定メソッドを保存) 測定メソッドを dam ファイルとして保存します。
Save Acquisition Method to CompoundDB	(測定メソッドを CompoundDB に保存) Specify Compound Information ダイアログを開きます。化合物データベースに保存する ID とその分子量を選択します。
Delete Pane	(ペインの削除) 選択したペインを削除します。

クロマトグラムペイン

表 D-2 : クロマトグラムペインの右クリックメニュー

メニュー	機能
List Data	データポイントをリスト化し、クロマトグラムで検出されたピークを積分します。
Show Spectrum	スペクトルを含む新規ペインを作成します。
Show Contour Plot	データセットがその点におけるデータの強度を色で表すように色分けされた図を表示します。一部の MS モードのみがサポートされています。
Extract Ions	選択されたペインから特定のイオンまたはイオンの集合を抽出し、特定のイオンに対するクロマトグラムを含む新しいペインを生成します。
Show Base Peak Chromatogram	ベースピーククロマトグラムを含む新規ペインを作成します。
Show ADC Data	取得できた場合には、ADC データ追跡を含む新規ペインを作成します。
Show UV Detector Data	取得できた場合には、UV データ追跡を含む新規ペインを作成します。
Spectral Arithmetic Wizard	スペクトル演算ウィザードを開きます。
Save to Text File	Microsoft Excel またはその他のプログラムで開くことができるテキストファイル(データを含む)をペインに作成します。

表 D-2 : クロマトグラムペインの右クリックメニュー (続き)

メニュー	機能
Save Explore History	処理オプションとも呼ばれる処理パラメータに関する変更情報を保存します。これは、wiff ファイルが Explore モードで処理されたときに作成されたものです。処理履歴は、eph (Explore Processing History) の拡張子で保存されます。
Add Caption	ペインのカーソル位置にキャプションを追加します。
Add User Text	ペインのカーソル位置にテキストボックスを追加します。
Set Subtract Range	ペインの減算範囲を設定します。
Clear Subtract Range	ペインの減算範囲をクリアします。
Subtract Range Locked	減算範囲をロックまたはアンロックします。減算範囲がロックされていない場合には、各減算範囲は独自に移動します。減算範囲はロックにプリセットされています。
Delete Pane	選択したペインを削除します。

スペクトルペイン

表 D-3 : スペクトルペインの右クリックメニュー

メニュー	機能
List Data	データポイントをリストし、クロマトグラムを統合します。
Show TIC	TIC を含む新しいペインを生成します。
Extract Ions (Use Range)	選択されたペインから特定のイオンまたはイオンの集合を抽出し、特定のイオンに対するクロマトグラムを含む新しいペインを生成します。
Extract Ions (Use Maximum)	選択したエリア内の最も強力なピークを使用してイオンを抽出します。
Save to Text File	Microsoft Excel またはその他のプログラムで開くことができる、ペインのテキストファイルを作成します。
Save Explore History	処理オプションとも呼ばれる処理パラメータに関する変更情報を保存します。これは、wiff ファイルが Explore モードで処理されたときに作成されたものです。処理履歴は、eph (Explore Processing History) の拡張子で保存されます。
Add Caption	ペインのカーソル位置にキャプションを追加します。
Add User Text	ペインのカーソル位置にテキストボックスを追加します。
Show Last Scan	選択前のスキャンを表示します。

表 D-3 : スペクトルペインの右クリックメニュー (続き)

メニュー	機能
Select Peaks For Label	このダイアログでは、ピークのラベリングを減少するパラメータを選択します。
Re-Calibrate TOF	TOF Calibration ダイアログを開きます。
Abscissa (Time)	X 軸上の TOF 値を表示するビューを変更します。
Delete Pane	選択したペインを削除します。
Add a Record	スペクトルを含む記録および化合物関連データをライブラリに追加します。このタスクを実行するには、有効なスペクトルが必要です。
Search Library	制限なしまたは前回保存した制限でライブラリを検索します。
Set Search Constraints	Search Constraints ダイアログボックスに入力された基準を使用してライブラリを検索します。

Results Table

Results Table を右クリックし、次の表に示すオプションにアクセスします。

表 D-4 : 結果表の右クリックメニュー

メニュー	機能
Full	(フル)すべてのカラムを表示します。
Summary	(概要)特定のカラムを表示します。
Analyte	(分析試料)特定の分析試料を表示します。
Analyte Group	(分析試料グループ)分析試料グループを作成します。
Sample Type	(サンプルタイプ)特定タイプのサンプルまたはすべてのサンプルを表示します。
Add Formula Column	(Formula カラムの追加)Formula カラムを追加します。Formula カラムを使用している場合は、ユーザーが結果を検証することを推奨します。
Table Settings	(表設定)表設定を編集または選択します。
Query	(クエリ)クエリを作成または選択します。
Sort	(ソート)ソートを作成するか、またはインデックスでソートします。
Metric Plot	(メトリックプロット)メトリックプロットを作成します。
Delete Pane	(ペインの削除)アクティブなペインを削除します。
Fill Down	(下方向へコピー)選択したセルに同一データをコピーします。

表 D-4 : 結果表の右クリックメニュー (続き)

メニュー	機能
Add Custom Column	(カスタムカラムの追加)カスタムカラムを追加します。
Delete Custom Column	(カスタムカラムの削除)選択したカスタムカラムを削除します。

ピークレビュー

Peak Review ウィンドウまたはペインを右クリックして、表 D-5 に表示されているオプションにアクセスします。

表 D-5 : ピークレビューの右クリックメニュー

メニュー	機能
Options	(オプション)Peak Review Options ダイアログボックスを開きます。
Sample Annotation	(サンプル注釈)Sample Annotation ダイアログを開きます。
Save Active to Text File	(アクティブなものをテキストファイルに保存)選択したピークをテキストファイルとして保存します。
Show First Page	(最初のページを表示)最初のサンプルに移動します。
Show Last Page	(最後のページを表示)最後のサンプルに移動します。
Slide Show Peak Review	(ピークレビューのスライドショー)スライドショーを開きます。
Update Method	(更新メソッド)すべてのピークのアルゴリズムを更新します。
Revert to Method	(メソッドに戻る)現在の定量化メソッドに基づいて再定義されたピークを選択します。
Delete Pane	(ペインの削除)アクティブなペインを削除します。

キャリブレーションカーブ

Calibration ウィンドウまたはペインの表を右クリックし、次の表に示すオプションにアクセスします。

右クリックメニュー

表 D-6 : キャリブレーションカーブの右クリックメニュー

メニュー	機能
Exclude (Include)	(除外する(含める))カーブからポイントを除外するには、ポイントを右クリックし、 Exclude をクリックします。ポイントを含めるには、ポイントを右クリックし、 Include をクリックします。
Exclude All Analytes (Include All Analytes)	(すべての分析試料を除外する(すべての分析試料を含める))カーブからすべての分析試料を除外するには、ポイントを右クリックし、 Exclude All Analytes をクリックします。ポイントを含めるには、ポイントを右クリックし、 Include All Analytes をクリックします。
Show Peak	(ピークを表示)個々のピークをレビューします。
Overlay	(オーバーレイ)2つのグラフを重ねます。
Active Plot	(アクティブプロット)どのプロットがアクティブかを判定します。
Legend	(凡例)グラフの凡例を表示します。
Log Scale X Axis*	(対数スケール X 軸)X 軸に対数スケールを使用します。
Log Scale Y Axis*	(対数スケール Y 軸)Y 軸に対数スケールを使用します。
Delete Pane	(ペインの削除)アクティブなペインを削除します。
Home Graph	(ホームグラフ)グラフを元のサイズに調整します。
*対数スケールはデータポイントをより操作しやすい形で表示することができるため、すべてのポイントの効果を同時にモニタリングするのに便利です。この表示の際は、一方の軸の対数ではなく Log Scale Y Axis を Log Scale X に対して選択します。	



シンボルについての用語集

E

注: 以下の表のすべてのシンボルが、すべての機器に適用されるものではありません。





シンボル	説明
	オーストラリアの監督法規の遵守マーク。本製品が、Australian Communications Media Authority (ACMA) の EMC 要件を満たしていることを表します。
	交流
A	アンペア(電流)
	窒息の危険
	ヨーロッパ共同体の公認代表者
	生物学的危険
	CE 適合マーキング
	cCSAus マーク。カナダおよび米国での電気安全認証を示します。
	カタログ番号
	注意。起こりうる危険についての情報は、説明書を参照してください。 注: SCIEX マニュアルでは、このシンボルは人身傷害の危険を示します。

シンボルについての用語集

シンボル	説明
	<p>中国 RoHS 注意ラベル。電子情報製品は特定の毒性または有害物質を含んでいます。中央に書かれている数字は、環境保護使用期限 (EFUP) の日付であり、製品の操作可能暦年を数字で示すものです。EFUP の期限が切れた際は、製品は速やかにリサイクルされなければなりません。回転矢印は、製品がリサイクル可能であることを示します。ラベルまたは製品にある日付コードは、製造年月日を示します。</p>
	<p>中国 RoHS ロゴ。装置は最大濃度値を超える毒性および有害物質または元素を含んでおらず、リサイクルおよびリユース可能な環境に優しい製品です。</p>
	<p>使用説明書を参照してください。</p>
	<p>圧碎の危険</p>
	<p>TÜV Rheinland of North America 用の cTUVus マーク</p>
	<p>ユニークデバイス識別子 (UDI) を取得するためにバーコードリーダーでスキャンできる Data Matrix シンボル</p>
	<p>環境の危険</p>
	<p>イーサネット接続</p>
	<p>爆発の危険</p>



シンボル	説明
	眼球傷害の危険
	火災の危険
	可燃性化学物質の危険
	壊れ物
	ヒューズ
Hz	ヘルツ
	内部安全シンボル「注意－感電の危険あり」(ISO 3864)、別名高電圧シンボル メインカバーを取り外す必要がある場合は、感電を避けるために SCIEX の代理店に連絡してください。
	高温面の危険
	実験室用診断機器
	イオン化放射の危険
	濡らさないでください。 雨にさらさないでください。 相対湿度は 99%以下でなければなりません。

シンボルについての用語集

シンボル	説明
	上部を上になしてください。
	引き裂き/重篤な危険
	レーザー放射線障害の危険
	吊り上げ時の危険
	磁気の危険
	メーカー
	可動部品の危険
	ペースメーカーの危険。ペースメーカーを使用している人はアクセスできません。
	挟み込みの危険
	加圧ガスの危険
	保護接地(アース)
	穿刺災害の危険

シンボル	説明
	反応性化学物質の危険
	シリアル番号
	有害化学物質の危険
	システムの輸送および保管は 66 kPa～103 kPa 以内で行ってください。
	システムの輸送および保管は 75 kPa～101 kPa 以内で行ってください。
	システムの輸送および保管は指定された相対湿度の最小(min)および最大(max)レベルの間で、結露が発生しない状態で行ってください。
	システムの輸送および保管は-30 °C～+45 °C 以内で行ってください。
	システムの輸送および保管は-30 °C～+60 °C 以内で行ってください。
	USB 2.0 接続
	USB 3.0 接続
	紫外線放射の危険
	英国適合性評価マーク
VA	ボルトアンペア(皮相電力)

シンボルについての用語集

シンボル	説明
V	ボルト(電圧)
	WEEE.分別されていない一般廃棄物として機器を廃棄しないでください。環境の危険
W	ワット
	yyyy-mm-dd 製造年月日

警告についての用語集

F

注: コンポーネントの識別に使用されるラベルのいずれかが剥がれた場合は、フィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。

ラベル	翻訳(該当する場合)
FOR RESEARCH USE ONLY. NOT FOR USE IN DIAGNOSTIC PROCEDURES.	研究専用。診断手段としての使用は想定されていません。
IMPACT INDICATOR SENSITIVE PRODUCT WARNING	インパクトインジケータ 高感度の製品についての警告 注: インジケータがトリップしている場合、このコンテナは落下したか、乱暴に取り扱われています。船荷証券に注意書きを行い、損傷を確認してください。衝撃による損傷に関するあらゆる苦情には通知が必要です。
IMPORTANT! RECORD ANY VISIBLE CRATE DAMAGE INCLUDING TRIPPED "IMPACT INDICATOR" OR "TILT INDICATOR" ON THE WAYBILL BEFORE ACCEPTING SHIPMENT AND NOTIFY YOUR LOCAL AB SCIEX CUSTOMER SUPPORT ENGINEER IMMEDIATELY. DO NOT UNCRATE. CONTACT YOUR LOCAL CUSTOMER SUPPORT ENGINEER FOR UNCRATING AND INSTALLATION.	重要！ 荷物を受け取る前に、トリップした「インパクトインジケータ」または「チルトインジケータ」を含む目に見える損傷を貨物運送状に記録し、お近くの AB SCIEX カスタマーサポートエンジニアにすぐに通知してください。 開梱しないでください。開梱および設置については、お近くのカスタマーサポートエンジニアにお問い合わせください。
TIP & TELL	チルトインジケータ 注: コンテナが傾斜または誤った取り扱いをされていないかを示します。船荷証券に記載し、損傷がないか点検してください。傾斜に関するあらゆる苦情には、通知が必要です。

警告についての用語集

ラベル	翻訳(該当する場合)
<p>TiltWatch PLUS</p> <p>ShockWatch</p>	<p>チルトインジケータ</p> <hr/> <p>注: コンテナが傾斜または誤った取り扱いをされていないかを示します。船荷証券に記載し、損傷がないか点検してください。傾斜に関するあらゆる苦情には、通知が必要です。</p>
<p>WARNING: DO NOT OPERATE WITHOUT FIRST ENSURING BOTTLE CAP IS SECURED.</p>	<p>警告:最初にボトルキャップが確実に固定されていることを確認せずに、操作しないこと。</p> <hr/> <p>注: この警告は、イオン源排気排出ボトルに添付されています。</p>
<p>WARNING: NO USER SERVICEABLE PARTS INSIDE. REFER SERVICING TO QUALIFIED PERSONNEL.</p>	<p>警告:ユーザーは内部部品の修理を行わないでください。修理が必要な場合は、資格のあるサービス担当者にお問い合わせください。</p> <hr/> <p>注: 使用説明書を参照してください。</p>

お問い合わせ先

お客様のトレーニング

- 北米: NA.CustomerTraining@sciex.com
- ヨーロッパ: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- ヨーロッパおよび北米以外: sciex.com/education

オンライン学習センター

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

SCIEX サポート

SCIEX およびその代理店は、十分に訓練を受けた保守/技術専門要員を世界中に配置しています。システムまたは起こり得る技術的問題に関するご質問にお答えします。詳細な情報については、SCIEX web サイト (sciex.com) を参照するか、以下の連絡先までお問い合わせください。

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

サイバーセキュリティ

SCIEX 製品のサイバーセキュリティに関する最新のガイダンスについては、sciex.com/productsecurity を参照してください。

ドキュメント

このバージョンのドキュメントは、以前のすべてのバージョンのドキュメントに優先します。

このドキュメントを電子的に閲覧するには Adobe Acrobat Reader が必要です。最新バージョンをダウンロードするには、<https://get.adobe.com/reader> にアクセスします。

ソフトウェア製品のドキュメントについては、ソフトウェアに付属のリリースノートまたはソフトウェアインストールガイドを参照してください。

ハードウェア製品のドキュメントを検索するには、システムまたはコンポーネントに付属の *カスタマーリファレンス DVD* を参照してください。

ドキュメントの最新版は SCIEX の web サイト (sciex.com/customer-documents) で入手できます。

注: このドキュメントの無料の印刷版を請求するには、sciex.com/contact-us までお問い合わせください。
