

Analyst MD ソフトウェア

アドバンスユーザーガイド



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。

In Vitro 診断用です。製品は一部の国では入手できません。詳細な情報については、最寄りの営業担当者にお問い合わせいただくか、または sciex.com/diagnostics を参照してください。

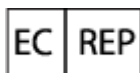
Rx only.

国によっては、製品を入手できない場合があります。詳細については、お近くの販売代理店にお問い合わせいただくか、sciex.com を参照してください。

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 年 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



Leica Microsystems CMS GmbH
Ernst-Leitz-Strasse 17-37
35578 Wetzlar
Germany



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

IVD

CE

UK
CA

目次

第 1 章：一般情報	7
Analyst MD ソフトウェアのイベント	7
Analyst MD ソフトウェアに関連する情報のシステムログをフィルタリングします。	7
Analyst MD ソフトウェアウィンドウ	8
Analyst MD ソフトウェアモード	9
AnalystService	10
AnalystService の開始	10
AnalystService を停止する	10
API Instrument プロジェクトフォルダ	10
プログラムファイル	11
プロジェクトとサブプロジェクト	12
サブプロジェクト	12
プロジェクトの整理	13
アクセスとセキュリティ	14
ワークスペース	15
第 2 章：チューニングおよびキャリブレーションモード	17
チューニング	18
キャリブレーション	18
自動チューニング／キャリブレーション	18
(オプション) 装置パラメータを手動でバックアップする	19
(オプション) 装置パラメータを復元する	19
Compound Optimization	19
フロー注入分析	19
インフュージョン	20
T 注入	20
第 3 章：測定メソッド	21
測定メソッド内の装置	21
周辺装置を追加または削除する	21
LC ポンプのプロパティを設定する	22
オートサンプラーのプロパティを設定する	22
内蔵シリンジポンプのプロパティを設定する	23
カラムオープンのプロパティを設定する	23
スイッチングバルブのプロパティを設定する	23
ダイオードアレイ型検出器のパラメータを設定する (Agilent)	24
アナログ/デジタルコンバータのプロパティ	24
動的充填時間	25
実験と期間	25
実験	25
期間	25

目次

データ依存型取得メソッド.....	26
スケジュールされたイオン化.....	27
溶媒圧縮率.....	28
「シリンジサイズ」対「流量」.....	28
第 4 章：バッチ.....	31
Batch Editor.....	31
バッチファイルのインポート.....	32
バッチエディタで定量詳細を設定(オプション).....	32
第 5 章：定性データ分析.....	34
@クロマトグラム.....	34
スペクトル.....	34
バックグラウンド除去.....	35
クロマトグラムに対してバックグラウンド減算を実行する.....	35
範囲のロック解除.....	37
Baseline Subtract.....	37
計算機.....	37
Elemental Composition 計算機.....	38
Hypermass 計算機.....	38
Elemental Targeting 計算機.....	38
Mass Property 計算機.....	38
Isotopic Distribution 計算機.....	38
計算機にアクセス.....	38
セントロイドピーク.....	39
ピークのセントロイドを算出する.....	39
データ分析.....	40
トータルイオンクロマトグラム.....	40
抽出イオンクロマトグラム.....	40
ベースピーククロマトグラム.....	41
抽出波長クロマトグラム.....	41
ダイオードアレイ型検出器.....	41
トータル波長クロマトグラム.....	41
グラフを重ねて表示する.....	41
重ね表示されたグラフ間の表示の切り替え.....	42
Sum Overlays.....	42
グラフをカスタマイズ.....	42
グラフへのキャプションの追加.....	42
グラフにテキストを追加する.....	43
化合物データベース.....	43
等高線図.....	43
等高線図を表示する.....	45
等高線図の領域の選択.....	45
等高線図内の強度および吸光度の設定.....	45
等高線図の色を変更する.....	46
Dynamic Background Subtraction.....	46
フラグメント解釈.....	46
フラグメント解釈ツールをスペクトルと連動させる.....	47

フラグメントをピークと一致させる.....	47
分子構造内の結合を選択する.....	47
アイソトープを表示する.....	48
スペクトル内の化学式の違いを表示する.....	48
フラグメントリスト内の数式の相違の表示.....	48
分子構造内の化学式の差異の表示.....	48
IDA Explorer.....	48
ライブラリデータベース.....	50
既存のライブラリデータベース間で切り替える.....	50
ローカルライブラリデータベースを作成する.....	51
サーバーライブラリデータベースに接続する.....	53
すべてのライブラリレコードを表示する.....	55
ライブラリへの記録の追加.....	55
ライブラリレコードを制約付きで検索する.....	56
ライブラリ検索に関するヒント.....	57
類似したスペクトルを検索する.....	57
検索結果の化合物を表示する.....	59
処理済みのデータファイル.....	59
処理済みのデータファイルを保存する.....	59
処理済みデータファイルを開く.....	59
定性データ.....	59
シグナル対ノイズ比.....	60
スムーズアルゴリズム.....	60
スムーズアルゴリズムを用いたデータのスムージング.....	61
ガウシアンスムーズを用いたデータのスムージング.....	61
システムログ.....	62
システムログを保存してサポートに転送.....	62
Analyst MD ソフトウェアに関連する情報のシステムログをフィルタリングします。.....	63
第 6 章：定量データ分析.....	64
キャリブレーションオプション.....	64
キャリブレーションカーブについて.....	64
最良回帰タイプを選択する.....	64
最良加重ファクターを選択する.....	65
積分アルゴリズム.....	66
Analyst Classic/IntelliQuan 積分アルゴリズム.....	66
定量メソッド作成ツール.....	68
ウィザード.....	68
Quantitation Method Editor.....	69
Semi-Automatic Method Editor.....	69
メトリックプロット.....	70
メトリックプロットを作成する.....	71
メトリックプロットを生成してプロット基準を保存する.....	71
今後の結果表用のデフォルトのプロット基準の保存.....	73
ノイズ/領域しきい値パラメータ.....	73
ノイズ/領域しきい値を再計算する.....	74
ピーク積分.....	74
Peak Review.....	74
ピークレビューに関するヒント.....	75

目次

ピークを検出する.....	75
潜在的ピーク開始地点を検出する.....	75
ピーク開始地点を確認する.....	76
ピーク頂点を検出する.....	78
ピーク終点を検出する.....	80
ピークを分離する.....	82
クエリー.....	83
サンプルタイプに対するクエリー.....	83
デフォルトクエリとテーブル特有クエリ.....	83
正確度の変動が結果にもたらす影響.....	84
回帰方程式.....	84
適合オプション.....	84
重み付け係数.....	86
Report Templates.....	87
レポートをカスタマイズする.....	89
レポートをプレビュー、印刷、エクスポートする.....	89
Results Table.....	90
Results Table の特定のレイアウトの表示.....	91
結果テーブルのデータを並び替える.....	91
結果表のソートおよびソート基準の保存.....	91
今後用いられる結果テーブル向けにデフォルトの並び替え基準を保存する.....	92
プリセット並び替え基準を使って結果テーブルを並び替える.....	94
Results Table でのクエリの使用について.....	94
結果をバッチ間で比較する.....	94
濃度レベルが結果に及ぼす影響.....	94
Results Table のレイアウト.....	94
Results Table フィールド.....	97
Results Table に関するヒント.....	104
 付録 A : ツールバーアイコン.....	 105
 付録 B : PPG 計算精密質量テーブル.....	 106
 お問い合わせ先.....	 112
お客様のトレーニング.....	112
オンライン学習センター.....	112
SCIEX サポート.....	112
サイバーセキュリティ.....	112
ドキュメント.....	112

アドバンスユーザーガイドでは、Analyst MD ソフトウェアの機能。

Analyst MD ソフトウェアのイベント

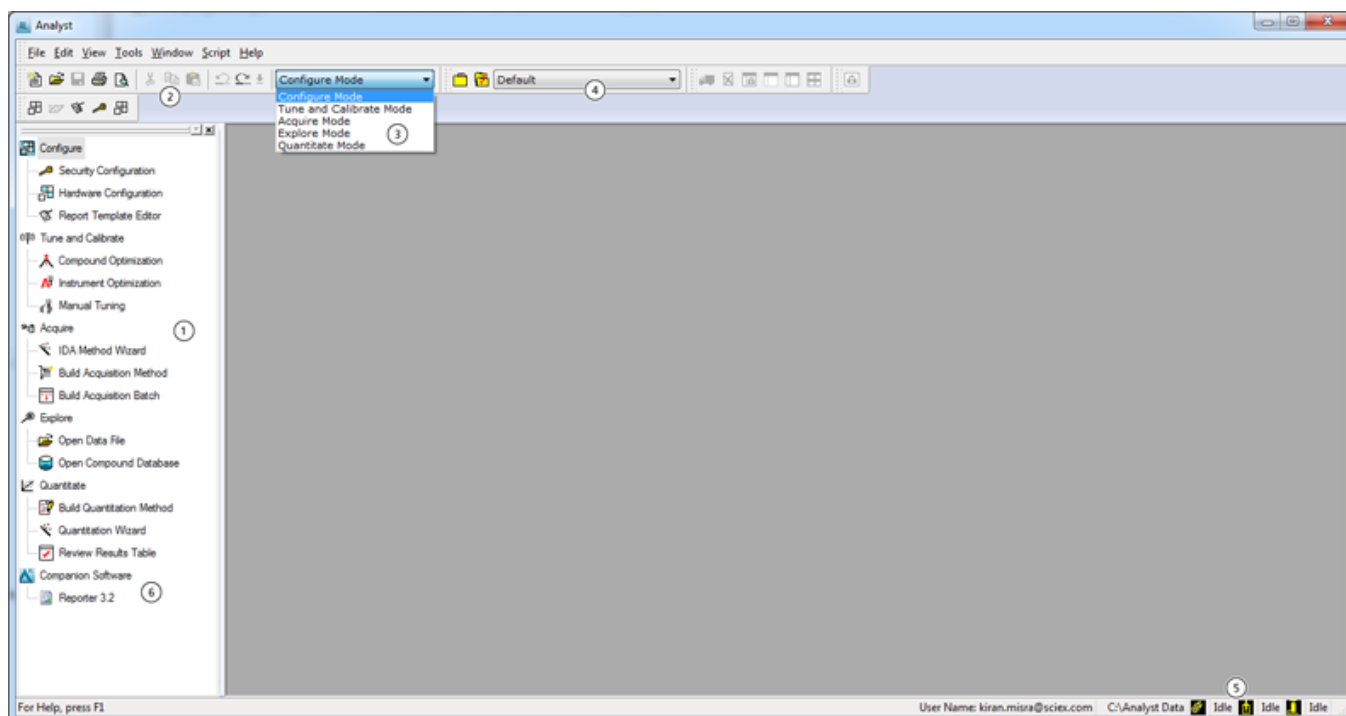
システムログには、エラー、警告、メッセージなどのシステムイベントを記録したレポートが含まれています。この情報を Windows Event Viewer で表示すれば、トラブルシューティングやシステム診断の実行に役立ちます。システムログの情報を活用するには、ソフトウェアに関連した項目のみが表示されるよう、これらの情報にフィルターをかけます。

Analyst MD ソフトウェアに関連する情報のシステムログをフィルタリングします。

1. **View > Event Log** をクリックします。
Event Viewer ダイアログが開きます。
2. **Windows Logs** フォルダをダブルクリックします。
3. **Application** をクリックします。
4. **Action > Filter Current Log** をクリックします。
Filter Current Log ダイアログが開きます。
5. **Event Sources** フィールドの **Analyst** を選択します。
6. **OK** をクリックします。
Event Viewer ダイアログに、フィルタリングされた Analyst MD ソフトウェアイベントのみが表示されるようになりました。

Analyst MD ソフトウェアウィンドウ

図 1-1 : Analyst MD ソフトウェアウィンドウ



項目	説明
1	<p>ナビゲーションバー: ナビゲーションバーにより、さまざまなソフトウェアモードにアクセスできます。ユーザーは Navigation バーの要素のいくつかを好みに合わせてカスタマイズすることができます。たとえば、ユーザーはサイズ変更、移動、または適所に固定することができます。Navigation バーを非表示にするには、右上隅の×をクリックします。Navigation バーを表示するには、View > Navigation Bar をクリックします。</p> <p>ナビゲーションツリーの最上位レベルには、各ソフトウェアモードを表すアイコンが表示されます。特定のモードのアイコンをダブルクリックすると、ツリーを広げたり折りたたんだりできます。これにより、選択されたモード内での利用可能な機能のアイコンが表示または非表示されます。</p>
2	<p>メニューバー: モードごとに異なります。切り取り、コピー、貼り付けなどの一部のオプションはすべてのモードで同じです。その他のオプションはモードに固有なもので、他のモードでは利用できません。</p>
3	<p>モードリスト: クリックするとモードを変更できます。モードごとに異なるツールバーアイコンが用意されています。</p>
4	<p>プロジェクトリスト: クリックすると、データを保存するプロジェクトを変更できます。</p>

項目	説明
5	装置および周辺装置の状態:この状態バーには現在の活動についての情報が表示されます。装置の状態が次の色別に表示されます。緑色(準備完了)、黄色(アイドル)、赤色(エラー)、白色(ローカル装置ワークステーションなし)。1つのアイコンはリモート装置の状態を示します。アイコンをダブルクリックすると、デバイスステータスウィンドウが開きます。
6	コンパニオンソフトウェア:本ソフトウェアから開くことができる、インストール済みのコンパニオンソフトウェアが含まれます。

Analyst MD ソフトウェアモード

このソフトウェアはモードを切り替えることができます。モードは個別の機能領域であり、メインタスクに関連する一連の活動を行うことができます。ユーザーは Navigation バーあるいはツールバーの Mode リストからモードにアクセスでき、作業内容を失うことなくモード間を切り替えることができます。

表 1-1 : Analyst MD ソフトウェアのモード

名前	説明
Configure	(構成)このモードを用いると、機器およびシステム設定を構成することができます。ハードウェア構成とレポートテンプレートの設定を含む、ソフトウェアの種々のオプションやパラメータを設定します。
Tune and Calibrate	(チューニングとキャリブレーション)このモードを使用して、最適な結果を保証するために装置を調整するためのオプションを設定します。このモードでは、ユーザーは次のことが可能です。 <ul style="list-style-type: none">• 装置最適化の実施• 手動チューニングの実施• グラフ型ビューの表示方法の変更、ファイル情報を開いたときに表示する情報の種類の選択、リンクオプションやその他の外観オプションの設定を行います。• 処理オプションの変更
Acquire	(取得)このモードを用いると、サンプルの収集方法を決定するためのオプションが設定できます。このモードでは、ユーザーは次のことが可能です。 <ul style="list-style-type: none">• IDA Method Wizard を用いた IDA 測定メソッドの作成• Acquisition Method Editor による測定メソッドの作成• バッチエディタによるバッチの作成• Queue Manager によるキューの表示• 測定状態のモニタリング

表 1-1 : Analyst MD ソフトウェアのモード (続き)

名前	説明
Explore	(Explore)このモードを用いると、サンプルの定性分析ができます。このモードでは、ユーザーは次のことが可能です。 <ul style="list-style-type: none"> • グラフの表示 • クロマトグラムの表示 • スペクトルの表示 • バッチ測定中にリアルタイムでのデータ表示
Quantitate	(定量)このモードを用いると、収集データの分析ができ、定量メソッドを構築して Results Table を生成することができます。Results Table を用いて、バッチ内の分析試料および内部標準それぞれのピークすべてを手動でレビューし、キャリブレーションカーブ、サンプル統計、およびメトリックプロットを表示します。

AnalystService

AnalystService は、質量分析装置と付属装置を結ぶ通信パスです。AnalystService は、Analyst MD ソフトウェアが起動するときに起動します。AnalystService、ユーザーが Windows にログオンする際に自動的に起動します。Analyst MD ソフトウェアの起動時に AnalystService がサービスが実行されていない場合、同サービスは自動的に起動します。

AnalystService の開始

AnalystService の起動の種類が **Manual** に設定されている場合は、Analyst MD ソフトウェアを起動する前に、手動で AnalystService を起動してください。**Startup Type** を変更しないでください。

1. Administrative Tools を開きます。
2. **Services** をダブルクリックして、**AnalystService** をクリックします。
3. **Start** をクリックします。

AnalystService を停止する

装置との通信、あるいは装置と周辺装置間の通信に問題が発生した場合は、AnalystService を停止します。

1. Administrative Tools を開きます。
2. **Services** をダブルクリックして、**AnalystService** をクリックします。
3. **Stop** をクリックします。

API Instrument プロジェクトフォルダ

API Instrument プロジェクトに含まれているフォルダの一部を以下に示します。

- **Bundler**: データファイル (wiff ファイル) のあらゆる側面を管理するプログラムが含まれています。これらはサンプルが完了した時点で自動的に組み合わせられます。
- **Configuration**: あらゆるハードウェアプロファイル (hwpf ファイル) が保存されています。
- **Instrument Data**: `InstrumentData.ins` と呼ばれるファイルが保存されています。これらのファイルには、重要なキャリブレーション情報などがすべて含まれています。
- **Method Tables**: スキャン強調機能について定義するための、あらゆる装置パラメータが保存されています。このフォルダは変更しないでください。このフォルダのコンテンツを変更すると、スキャン強調モードのパフォーマンスに影響が及びます。
- **Parameter Settings**: あらゆる装置パラメータとリンクが保存されています。装置パラメータは、`ParamSettingsdef.psf` ファイルとして保存されます。
- **Preferences**: `Tunedata.tun` ファイルが保存されています。すべての設定コンポーネントを含む、チューニング、装置、処理、外観、キュー) は、このフォルダに `Tunedata.tun` として保存されます。
- **Processing Scripts**: Explore モードでデータを処理するためのスクリプトが保存されています。スクリプトは **Script** メニューで表示できます。
- **Queue Data**: キューの情報が保存されます。
- **Tuning Cache**: 手動チューニング (**Acquire** ではなく **Start** をクリックすることで実行) で作成されるすべてのデータが保存されています。ファイルは、名前に日時スタンプが付いて保存されます。Tuning Cache フォルダで維持されるファイル数には上限があるため、必要に応じてファイルが上書きされます。これらのファイルを保存する必要がある場合は、ただちに新しい名前を付けて移動してください。

プログラムファイル

以下のフォルダは、`Program Files\Analyst` フォルダ (Windows 7、32 ビットオペレーティングシステム) または `Program Files (x86)\Analyst` フォルダ (Windows 7、64 ビットまたは Windows 10、64 ビットオペレーティングシステム) に含まれています。

- **bin**: Analyst MD ソフトウェアのプログラムファイルが含まれています。このフォルダのコンテンツは変更しないでください。ソフトウェアの機能に影響が生じます。
- **binEx2**: ExionLC 2.0 デバイスのコントロールに必要なコンポーネントが含まれています。
- **binEx**: コントロールに必要な次のコンポーネントが含まれています: ExionLC、Jasper、統合システム Shimadzu LC-20/30 コントローラを使用して制御される Shimadzu LC-20/30 デバイス、および Shimadzu LC40 デバイス
- **Firmware**: 装置システムファームウェア構成テーブルファイルと装置ファームウェアファイルが含まれています。詳細な情報については、ソフトウェアに付属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。
- **Help**: ヘルプファイル、ガイド、チュートリアル、リリースノート、ソフトウェアインストールガイドが格納されています。
- **Scripts**: ユーザーが必要に応じてインストールできるスクリプトが格納されています。これらのスクリプトは、Analyst MD ソフトウェアがインストールされていれば、どのワークステーションからも開くことができます。詳細な情報については、次のドキュメントを参照: スクリプトユーザーガイド。

- **Simulation:** ソフトウェアをシミュレーションモードで実行するために必要な装置データファイルが格納されています。

プロジェクトとサブプロジェクト

実験の開始に先立ち、実験に関連したファイルの保存場所を決めます。それぞれの実験にプロジェクトとサブプロジェクトを用いれば、データを効果的に管理できるほか、結果を比較することも可能です。たとえば、サブプロジェクトには特定の日付の結果を保存できます。

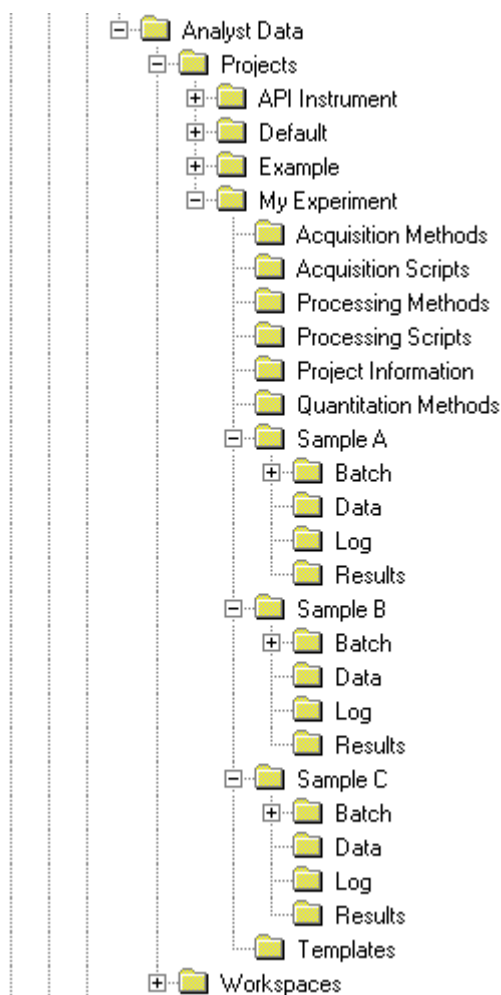
注: プロジェクト内でサブプロジェクト構造を使用するには、プロジェクトを最初に作成する際に、少なくともひとつのサブプロジェクトを作成します。サブプロジェクト構造が含まれていない既存のプロジェクトには、サブプロジェクトを作成することができません。

サブプロジェクト

サブプロジェクトとは、プロジェクト内のフォルダのサブセットです。すべてのサブプロジェクトに、同じフォルダが含まれている必要があります。サブプロジェクトはデータを整理する際に便利です。

たとえば、さまざまなラボにおいて同一の測定メソッドで各種化合物が含まれるサンプルが測定される場合、結果を保存するためのサブプロジェクトをラボごとに作成しつつも、測定メソッドフォルダはプロジェクトに残したままの状態にすることができます。こうすることで、測定メソッドをサブプロジェクトまたはラボ内で使用できるようになります。また、サンプルが数週間にわたって分析されるような状況では、日別の結果を別々のサブプロジェクトに保管することができます。次の図を参照してください。

図 1-2 : プロジェクトとサブプロジェクトのフォルダ構造の例



プロジェクトの整理

プロジェクトとは、サンプル情報、データ、定量情報など整理/保存するためのフォルダ構造です。それぞれのプロジェクトには、各種ファイルタイプを保存できるフォルダがあります。たとえば、Data フォルダには測定データファイルが保存されます。さまざまなフォルダの内容の説明については、次の表を参照してください。

本ソフトウェアでは、ルートフォルダに保存されているプロジェクトにしかアクセスできません。ルートフォルダと定義されていないフォルダ内では、プロジェクトを作成できません。

ソフトウェアがインストールされたドライブでは、Analyst Data がルートフォルダとしてプリセットされています。他のプロジェクトを他の場所に保存するには、新しいルートフォルダを作成します。ルートフォルダの詳細な情報については、次のドキュメントを参照: *Help*。

表 1-2 : プロジェクトフォルダ

フォルダ	コンテンツ
\Acquisition Methods	利用可能なすべての測定メソッドが含まれています。測定メソッドファイルには dam の拡張子が付いています。

表 1-2 : プロジェクトフォルダ (続き)

フォルダ	コンテンツ
\Acquisition Scripts	測定スクリプトは、Analyst MD ソフトウェアでは使用できません。このフォルダは空です。 Analyst MD ソフトウェアのスクリプト記述を用いればカスタムスクリプト (Analyst のカスタム操作シーケンス) を作成できますが、これを <i>in vitro</i> 診断装置の一部として使用することは避けてください。 Analyst MD ソフトウェアの使用時に実行される固有のソフトウェアチェックは、カスタムスクリプトに対して実行さないため、結果がサンプル ID に誤ってリンクされる可能性があります。
\Batch	使用可能なすべての取得バッチファイルが含まれています。測定バッチファイルには dab の拡張子が付いています。このフォルダには、取得バッチ テンプレートが含まれるサブフォルダ Templates も含まれています。バッチテンプレートファイルには dat の拡張子が付いています。
\Data	wiff の拡張子が付いた測定データファイルが保存されています。
\Log	定量と Compound Optimization の結果が保存されています。
\Processing Methods	使用した定性データ処理メソッドがすべて保存されています。
\Processing Scripts	データ処理スクリプトが保存されています。API 装置プロジェクトに保存されている処理スクリプトは、 Scripts メニューに表示されます。
\Project Information	プロジェクトの情報と設定が保存されています。このフォルダはサブプロジェクトに保存することはできません。
\Quantitation Methods	使用した定量化メソッド (qmf の拡張子) がすべて保存されています。
\Results	定量 Results Table ファイル (rdb の拡張子) がすべて保存されています。
\Templates	レポートテンプレートファイル (rpt の拡張子) が保存されています。

アクセスとセキュリティ

Analyst MD ソフトウェアは、Windows 管理ツールのセキュリティ、アプリケーション、システムイベント監査コンポーネントと併せて機能します。

また、本ソフトウェアには、セキュリティを構成/管理するための機能がいくつか搭載されています。ソフトウェア管理者は、以下の操作を実行できます。

- ・ 稼働環境のニーズに最も適したセキュリティモードを選択する。
- ・ ユーザーと役割を追加/削除する。
- ・ 必要に応じて、ユーザーと役割のアクセス権限を設定する。

- ・ リモート質量分析装置へのアクセスを制御する。
- ・ プロジェクトファイルへのアクセスを制御する

ソフトウェアのセキュリティの詳細な情報については、ドキュメント「ラボ管理者ガイド」を参照してください。

注: ソフトウェアのセキュリティ構成への変更は、ソフトウェアの再起動後に有効になります。


ワークスペース

ワークスペースとは、ウィンドウとペインの特有の配置であり、関連するファイルが 1 つまたは複数表示されます。たとえば、特定のデータセットで作業しているときに、ユーザーはさまざまなウィンドウを開いてサイズを変更し、分析に役立てることができます。この配置（ワークスペース）は保存できるため、次回データを調べる際にも同じウィンドウ配置が維持されます。

ユーザーはワークスペースに表示したいウィンドウとペインを選択することで、ワークスペースをカスタマイズできます。ユーザーは、ウィンドウとペインのサイズと位置を変更したり、ペインを一緒にロックしたり、特定のペインとウィンドウを表示または非表示にしたりできます。ユーザーはこれらの操作を用いて、作業中のタスクに合うようワークスペースをカスタマイズできます。

Quantitate モードと Explore モードでは、ユーザーはセッションごとに複数のワークスペースを持つことができます。ユーザーは、関連データも含むワークスペースを保存できます。これらの 2 つのモードのいずれかを使用すると、そのモードを終了せずに特定のワークスペースを開くことができます。ウィンドウとペインの特定の配置を他のデータセットに再利用するために、ユーザーはワークスペースをテンプレートとして保存できます。チューニングおよびキャリブレーションまたは取得モードでは、ソフトウェアはワークスペースを自動的に保存します。

実行する作業	実行する操作
ワークスペースを作成	<ol style="list-style-type: none">1. ナビゲーションバーで、ワークスペースが作成されるモードをクリックします。2. ワークスペースに含めるウィンドウやペインを開き、必要に応じてウィンドウ同士をロックしたり、ウィンドウやペインのサイズを変更したりして、画面上に配置します。3. File > Save Workspace をクリックします。4. File name フィールドに、ワークスペースのファイル名を入力します。 <p>注: ワークスペース名とパスを合わせて 255 文字を超えることはできません。ワークスペース名の後にピリオドをつけ、拡張子を wws とすることで、ワークステーションのファイルであることを表しています。</p> <ol style="list-style-type: none">5. Save をクリックします。 <p>ワークスペース情報は、指定されたディレクトリに拡張子 wws のファイルで保存されます。</p>

実行する作業	実行する操作
ワークスペースを開く	<p>Quantitate モードと Explore モードでは、現在のモードを終了せずにさまざまなワークスペースを開くことができます。</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. File > Open Workspace をクリックします。 2. リストから適切なワークスペースファイルを選択し、OK をクリックします。
ワークスペースの保存	<ol style="list-style-type: none"> 1. Quantitate または Explore モードで、ワークスペースがアクティブになっていることを確認します。 2. File > Save Workspace As をクリックします。 <hr/> <p>ヒント! ワークスペースの保存をクリックして、ワークスペース情報を現在のファイル名と場所で保存します。</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none"> 3. ワークスペースファイルの名前を入力し、保存をクリックします。 <p>現在のモードに関連付けられたワークスペースの一部として、ウィンドウとペインの情報は自動的に保存されます。構成、チューニングおよびキャリブレーション、取得モードでは、ユーザーが現在のモードを閉じたときにワークスペースが自動的に保存されます。</p>
ソフトウェアのロック	<ol style="list-style-type: none"> 1. ツールバーで、をクリックします Lock Application .

チューニングおよびキャリブレーションモード

2

質量分析装置のチューニングとキャリブレーションにより、分解能と強度のパフォーマンスが最大化されます。

チューニング中に次のタスクを実行できます。

- 分解能のオフセット値を調整することで、キャリブラント質量の強度と分解能を調整します(四重極モード専用)。
- キャリブレーション対象の質量を選択します。必要に応じて、質量をキャリブレーションリストに追加/削除できます。
- 固有のキャリブレーション標準セットを 1 つまたは複数作成します。キャリブレーション標準セットには、少なくとも 2 つのコンポーネント(関心のある質量範囲の低値用と高値用)が必要となります。

チューニングおよびキャリブレーションされた装置は、サンプルの指定されたピーク分解能と質量割り当てを検出できます。これは、PPG(ポリプロピレングリコール)などの既知のキャリブレーション標準を使用して実現されます。キャリブレーション標準を使用して質量スケールをキャリブレーションし、許容可能な質量シフト内で、ターゲットイオンを正確な質量電荷比に可能な限り近づけて検出します。ピークを正確に特定するだけでなく、最適なピークの幅や形状を得るために分解能を調整することも可能です。

適切に調整およびキャリブレーションされた質量分析装置は、質量分析装置で分析されたサンプルまたは化合物に対して最良の結果を提供します。チューニングとキャリブレーションは、最適化とは関係なく、組み合わせて実行されます。チューニングとキャリブレーションは、分解能と質量キャリブレーションに重点を置いています。最適化では感度を重視します。

チューニングやキャリブレーション中の質量分析装置構成の変更は、API 装置フォルダのデータファイルに保存されます。API 装置メソッドフォルダのプリセットパラメータは、SCIEX フィールドサービス従業員(FSE)によって最適化されているため、使用する必要があります。

チューニングとキャリブレーションを行った後、システムパフォーマンスを最大化し、指定されたパラメータはすべての実験のデフォルトパラメータとなる。最適化されたソースおよび化合物依存のパラメータで実験を行い、分析試料に対する応答を最大化することができます。

ヒント! 四重極の帯電(関心イオンに対する感度が短期的に大幅に低下する可能性があります)を最小限に抑えるため、Q0 領域は定期的にクリーニングしてください。次のドキュメントを参照: [有資格保守要員ガイド](#)を参照してください。

装置のチューニングとキャリブレーションは、自動または手動で実行できます。

自動チューニング : Instrument Optimization ウィザードを用いて、分解能の最適化と質量キャリブレーションが自動的に実行されます。リニアイオントラップ(LIT)装置については、MS³ 最適化も実行されます。

手動チューニング: 装置分解能の最適化/キャリブレーションの多くは、ユーザーが手動で実行できます。

チューニング

質量分析装置のチューニングとは、分解能と装置パラメータを最適化することで、質量分析装置の感度とパフォーマンスを最大限に高めるプロセスです。定期的に、またはシステムのパフォーマンスが低下した場合に、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を行ってください。質量分析装置を最適化して、新しいサンプルまたは化合物からの応答を最大化します。分解能の最適化には、ピーク幅とピーク形状を調整が伴います。

キャリブレーション

質量キャリブレーションとは、適切な質量電荷比 (m/z) を質量ピークに割り当てるためのプロセスです。ポリプロピレングリコール (PPG) などのキャリブレーション用標準物質を用いて質量キャリブレーションを行った場合、過去の校正結果と比較し、観測されたピークの m/z 値が理論値にどれだけ近いかを判断できます。以前のキャリブレーションを更新するか、より一般的には新しいキャリブレーションに置き換えることができます。

極性ごとに Q1、Q3、全 LIT (リニアイオントラップ) スキャンをキャリブレーションする際には、複数の質量を選択します。結果はキャリブレーション表に保存されます。質量キャリブレーションが実行されると、キャリブレーション表は、新しいキャリブレーションからの新しいデジタル-アナログコンバータ (DAC) 値、またはすでにキャリブレーション表にある質量で更新されます。現在のキャリブレーションでキャリブレーションされていない質量のすべてのデータが保持されます。質量キャリブレーションが置き換えられると、すべての質量の以前のすべてのキャリブレーション値が置き換えられます。新たに取得したスペクトルを使用するか、保存したデータファイルのスペクトルを用いて質量キャリブレーションを実行します。

自動チューニング／キャリブレーション

Instrument Optimization は、四重極モードと LIT モードの双方をチューニングし、質量校正を実行するための自動装置チューニングソフトウェアです。四重極モードでは、分解能オフセットが調整されます。LIT モードでは、AF3 と EXB が最適化されます。MS³ では、励起係数と分離係数が調整されます。以下のいずれかの装置パフォーマンスオプションを選択します。

- **装置パフォーマンスの検証:** 装置パフォーマンスがテストされますが、装置の設定に変更は加えられません。テスト終了時にレポートが生成されます。このオプションは毎週実行し、装置のパフォーマンスを確認してください。
- **質量校正のみ調整:** 質量校正が自動的に検査／調整されます。質量校正に変更が加えられた場合は、本ソフトウェアによって修正されます。このオプションは LIT 装置に毎週または毎月実行し、必要に応じて質量校正を点検／調整してください。
- **装置設定の調整:** 装置設定と質量校正が検査／調整されます。装置の設定が、現在の設定から最適な設定へと更新されます。このオプションは、装置のパフォーマンスやピーク形状が良好でない場合に使用してください。装置の設定は、熟練したユーザー以外は調整しないでください。

注: 古い LIT メソッドは、新しい設定で更新する必要があります。Advanced MS タブで LIT 速度を切り替えた後、メソッドを保存します。

- 選択したスキャンモードをデフォルト値にリセットして装置の設定を調整: 装置の値が工場出荷時のプリセット値にリセットされます。このオプションは、装置の主要コンポーネントを交換した場合、または初回インストール後に選択してください。この機能は FSE でのみ使用してください。

(オプション) 装置パラメータを手動でバックアップする

現在の装置パラメータは、後日復元する必要がある場合に備え、バックアップすることができます。手動でバックアップされた装置パラメータのプリセットの位置は

<drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Optimization\Instrument Settings Backups\User Created Backups です。

1. 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。
2. **File > Backup Instrument Settings** をクリックします。
3. ファイル名を入力します。
4. **Save** をクリックします。

(オプション) 装置パラメータを復元する

1. 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。
2. **File > Restore Instrument Settings File** をクリックします。
3. 復元したい装置設定に移動します。
4. **Open** をクリックします。

Compound Optimization

Compound Optimization ソフトウェアウィザードを使うと、分析試料が自動的に最適化されます。サンプルはインフュージョンまたは FIA (フロー注入分析) を用いて注入できます。本ソフトウェアでは、まず化合物の存在が確認されます。各種イオンパスパラメータの電圧が徐々に上昇あるいは低下し、各イオンの最大信号強度 (Q1 スキャン) が特定されます。最適化プロセス中にテキストファイルが作成され、それが表示されます。このファイルには、実施されたさまざまな実験と、各イオン光学パラメータの最適値が記録されます。また、実施されたすべての実験を含むファイルフォルダも作成されます。これらは、Explore モードでデータファイルフォルダを開くことで閲覧できます。さらに、実験を実施するたびに測定メソッドが生成され、測定メソッドフォルダに保存されます。

フロー注入分析

フロー注入分析 (FIA) では、オートサンプラーから LC ストリームに少量のサンプルが注入されます。FIA 最適化プロセスの間、各種イオン源パラメータタイプまたは化合物依存性パラメータタイプ、あるいはその双方に対して、複数のサンプル注入が実行されます (タイプは注入ごとに変更されます)。FIA ではループ実験が連続して実施される (つまり、特定の化合物依存性パラメータの後に、次の化合物依存性パラメータへと続きます) ことで、デクラスタリング電位、衝突エネルギー、衝突セル退出電位が最適化されます。パラメータごとに注入を実施することで、イオン源依存性パラメータが最適化されます。

FIA 最適化は、LC を高流量で用いて化合物依存性パラメータとイオン源依存性パラメータの双方を最適化したい場合に使用します。

インフュージョン

インフュージョンでは、シリンジポンプを使用してサンプルをイオンソースへ低流量で連続的に流します。本ソフトウェアではインフュージョン最適化プロセスの最中に、プレカーサーとプロダクトイオンを選択し、双方のデクラスタリング電位、衝突エネルギー、衝突セル退出電位を最適化できます。これらのイオンパスパラメーターの電圧は徐々に上昇または低下し、プレカーサーとプロダクトイオンの最大信号強度が特定されます。

インフュージョン最適化を用いれば、LC/MS 分析で用いたものよりも低い流量で化合物依存性パラメーターを最適化できます。

T 注入

T 注入(または分割注入)は、イオン源の 3 方向接地ユニオンを介してイオン源に低速でサンプルを連続的に流す方法です。3 方向接地ユニオンは、赤い PEEK チューブと LC ポンプを備えたシリンジポンプに接続されています。

既存のファイルから測定メソッドファイルを作成する場合、ユーザーは測定メソッドに含まれる装置メソッドを一部または全部使用することができます。Acquisition Method Editor では、装置メソッドを追加/削除して、測定メソッドをカスタマイズします。必要な装置アイコンが Acquisition Method Browser ペインに表示されない場合は装置を追加できますが、この装置がアクティブハードウェアプロファイルに含まれている場合に限りです。

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。役割とセキュリティの詳細については、ドキュメントの *ラボ管理者ガイド* の人員および役割のセクションを参照してください。

測定メソッド内の装置

周辺装置用の測定メソッドは、その装置の稼働パラメータを選択することで作成します。測定メソッドは、アクティブハードウェアプロファイルで構成されている場合に限り、以下のあらゆる装置に対して作成できます。

- ポンプ
- オートサンプラー
- シリンジポンプ
- Column oven
- スイッチングバルブ
- ダイオードアレイ型検出器
- アナログ/デジタルコンバータ
- 統合システム

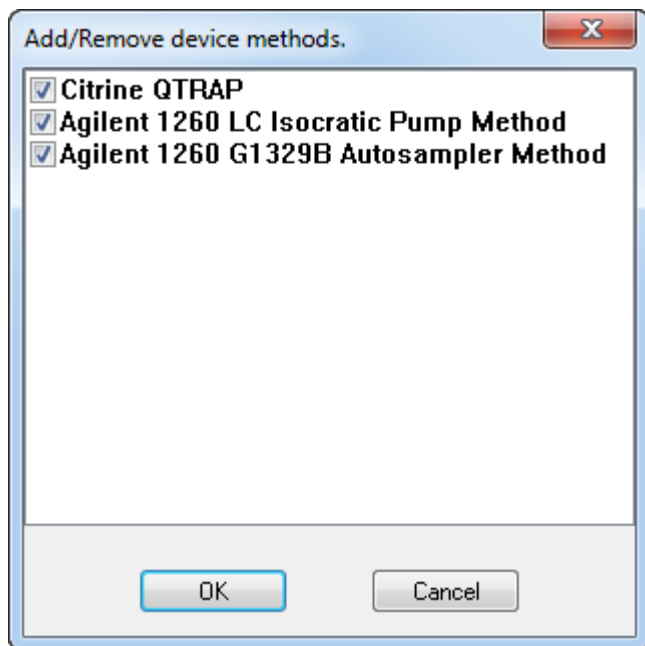
装置のプロパティの設定については、次のドキュメントを参照: *周辺装置セットアップガイド*

注: LC デバイスで使用可能なパラメータはメーカーごとに異なります。

周辺装置を追加または削除する

1. メソッドファイルが Acquisition Method Editor で開いた状態で、Acquisition method ペインで **Acquisition Method** を右クリックし、**Add/Remove Device Method** をクリックします。Add/Remove Device Method ダイアログが開き、アクティブハードウェアプロファイル内で構成されている装置が表示されます。

図 3-1 : Add/Remove Device Method ダイアログ



2. 装置メソッドを追加または削除するには、装置メソッドの横にあるチェックボックスを選択または選択解除します。
3. **OK** をクリックします。

LC ポンプのプロパティを設定する

1. Acquisition Method Editor で測定メソッドファイルが開いた状態で、Acquisition method ペインで以下のいずれかを実行します。
 - Agilent ポンプについては、**Pump** アイコンをクリックします。
 - 統合システム Shimadzu LC コントローラを使用してアクティブ化された Shimadzu LC 20/30 装置の場合は、**Shimadzu LC System** をクリックします。
 - 統合システム Shimadzu LC-20/30 コントローラを使用してアクティブ化された Shimadzu LC-20/30 デバイスの場合、Shimadzu LC 40 デバイス、ExionLC 装置、ExionLC 2.0 装置、JasperLC 装置を使用してアクティブ化された Shimadzu LC 20/30 デバイスの場合は、**LC System** をクリックします。
2. まだ選択されていない場合は右側のペインで LC ポンプ用のタブを選択し、必要に応じてプロパティまたは設定を編集します。
3. ファイルを保存します。

オートサンプラーのプロパティを設定する

1. Acquisition Properties タブの **Synchronization Mode** フィールドが **LC Sync** に設定されていることを確認します。デバイスの起動、サンプルの注入、装置の取得が同時に開始します。
2. メソッドファイルが Acquisition Method Editor で開いた状態で、Acquisition Method ペインで以下のいずれかを実行します。

- Agilent オートサンプラーについては、Agilent Autosampler アイコンをクリックします。
 - CTC Pal オートサンプラーについては、CTC PAL Autosampler アイコンをクリックします。
 - 統合システム Shimadzu LC コントローラを使用してアクティブ化された Shimadzu LC 20/30 装置の場合は、**Shimadzu LC System** をクリックします。
 - 統合システム Shimadzu LC-20/30 コントローラを使用してアクティブ化された Shimadzu LC-20/30 デバイスの場合、Shimadzu LC 40 デバイス、ExionLC 装置、ExionLC 2.0 装置、JasperLC 装置を使用してアクティブ化された Shimadzu LC 20/30 デバイスの場合は、**LC System** をクリックします。
3. 右側のペインの Autosampler タブを選択し、必要に応じてプロパティまたは設定を編集します。
 4. ファイルを保存します。

内蔵シリンジポンプのプロパティを設定する

この手順は、シリンジポンプが内蔵されたシステム向けです。

1. Acquisition Method Editor で測定メソッドファイルが開いた状態で、Acquisition Method Browser ペインの Syringe Pump アイコンをクリックします。
Acquisition Method Editor ペインで Syringe Pump Method Properties タブが開きます。
2. 必要に応じてフィールドを編集します。
3. ファイルを保存します。

カラムオーブンのプロパティを設定する

1. Acquisition Method Editor で測定メソッドファイルが開いた状態で、Acquisition Method ペインで以下のいずれかを実行します。
 - Agilent カラムオープンについては、**Agilent Column Compartment** のアイコンをクリックします。
 - 統合システム Shimadzu LC コントローラを使用してアクティブ化された Shimadzu LC 20/30 装置の場合は、**Shimadzu LC System** をクリックします。
 - 統合システム Shimadzu LC-20/30 コントローラを使用してアクティブ化された Shimadzu LC-20/30 デバイスの場合、Shimadzu LC 40 デバイス、ExionLC 装置、ExionLC 2.0 装置、JasperLC 装置を使用してアクティブ化された Shimadzu LC 20/30 デバイスの場合は、**LC System** をクリックします。
2. まだ選択されていない場合は、右側のペインの Column Oven タブを選択し、必要に応じてプロパティまたは設定を編集します。
3. ファイルを保存します。

スイッチングバルブのプロパティを設定する

スイッチングバルブは、ダイバータバルブまたは注入バルブとして使用できます。バルブがインジェクタとして使用されている場合は、**Manual Sync with Valve** 同期モードを選択します。バルブをダイバータとして使用する場合は、それ以外のモードを選択します。

測定メソッド

1. Acquisition Method Editor **Valve** でメソッドファイルが開いた状態で、Acquisition method ペインにあるアイコンをクリックします。
Acquisition Method Editor ペインで Valve Properties タブが開きます。
2. 必要に応じて、ポジションの名前をプリセット名から変更します。
スイッチングバルブは時に、溶媒の流れを廃棄物容器、または別のカラムに切り替えるために用いられることもあります。位置名のプリセット値は A と B になっています。
 - **Change Position Names** リストで、ポジションを選択します。
 - **Change Position Names** リストで、バルブの配管方法に応じて、プリセット位置名の名前を変更します。バルブがインジェクタとして使用されている場合は、A と B の名前を Inject と Divert または Column と Waste に変更します。バルブがダイバータとして使用されている場合は、A と B の名前を Divert と Inject または Waste と Column に変更します。
3. **Total Time (min)**カラムでセルをクリックし、バルブがこの位置に維持される合計時間を入力します。
4. **Position** カラムでセルをクリックし、**Position** リストでバルブの位置を選択します。
5. 取得中に必要なバルブのスイッチごとに、手順 3 と 4 を繰り返します。
6. ファイルを保存します。

ダイオードアレイ型検出器のパラメータを設定する (Agilent)

1. Acquisition Method Editor で測定メソッドファイルが開いた状態で、Acquisition method ペインの Agilent ダイオードアレイ型検出器アイコンをクリックします。
Agilent DAD Method Editor タブが Acquisition Method Editor ペインで開きます。
2. 必要に応じてパラメータを編集します。
3. ファイルを保存します。

アナログ/デジタルコンバータのプロパティ

1. メソッドファイルが Acquisition Method Editor 開かれた状態で、Acquisition Method ペインの Analog to Digital Converter (ADC)アイコンをクリックします。
Acquisition Method Editor ペインに Analog/Digital Converter Properties タブが開きます。
2. Sample セクションの **Rate (pts/sec)**フィールドに、速度を入力します。

注: 間隔と速度は互いに比例しています。速度が変更されると、間隔が自動的に再算出されます。

3. 以下を実行してチャンネルの詳細を設定します。
 - a. **Channels** フィールドで、チャンネル名をクリックしてから、その横のチェックボックスを選択しメソッドに設定します。
 - b. **Interpreted Value @ Full Scale** フィールドに、適切な値を入力します。
 - c. **Interpreted Unit** フィールドに、適切な単位を入力します。

ハードウェアプロファイルの ADC をセットアップする場合、利用可能なチャンネルの番号が指定されます。

4. ファイルを保存します。

動的充填時間

DFT(動的充填時間)は、各スペクトルで取得したデータをリニアイオントラップスキャン機能向けに最適化するための機能です。DFT では、イオン源から放出されるイオン流量に基づいて、イオントラップの充填に用いられる時間が自動的に調整されます。高強度のイオンにおいては、トラップがイオンによって過剰充填されないよう、充填時間が自動的に短縮されます。

低強度のイオンについては、スペクトル内で良好なイオン統計が得られるよう、充填時間が自動的に延長されます。DFT は以下のスキャンタイプに適用されます。

- EMS(MS 強調モード)
- 分解能強調モード(ER)
- プロダクトイオン強調モード(EPI)
- MS/MS/MS(MS³)

ソフトウェアで **Tools > Settings > Method Options** を選択して、DFT 設定を調整します。

実験と期間

質量分析装置の測定メソッドは、実験と期間で構成されています。Acquisition Method Browser ペインで、質量分析装置の測定期間と実験のシーケンスを作成します。または、Tune Method Editor で以前作成したメソッドを開きます。

実験

実験には MS スキャン中の質量分析装置設定およびスキャン種類が含まれます。特定の時間にわたって実行される MS スキャンのセットは「期間」と呼ばれます。全期間にわたって MS パラメータとアクションが変化しない測定メソッドは「単一期間/単一実験メソッド」と呼ばれます。

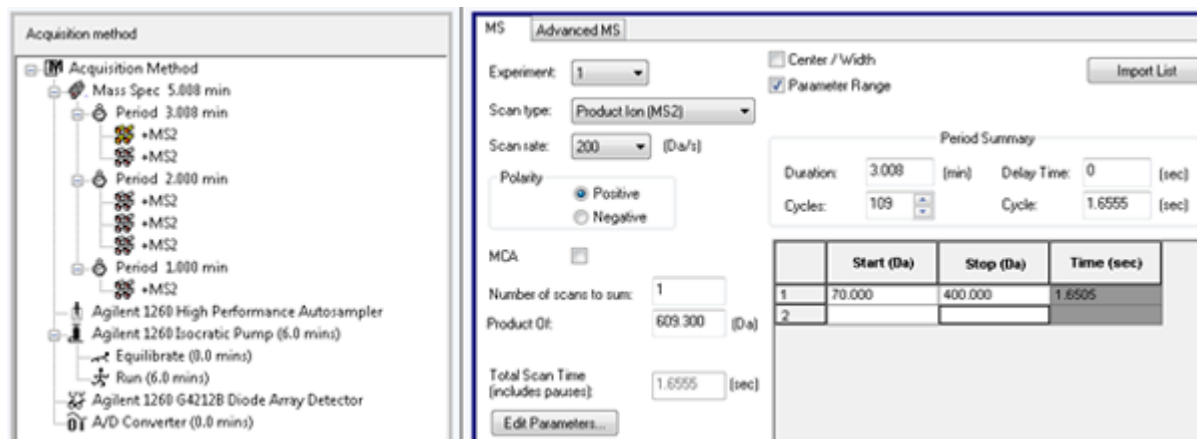
ループ実験においては、MS 設定はスキャンごとに変化します。たとえばサンプルに A と B の 2 種類の化合物が含まれている場合、化合物 A の MS/MS 実験を化合物 B の MS/MS 実験にループさせることで、同一のランにおいて双方の化合物の情報を取得したいような状況が考えられます。質量分析装置のメソッドは、2 つのスキャン種類間で交互に切り替わります。ループ実験の他の例として、同一のランにおいて正および負 モードで交互に切り替える状況や、データ依存型取得(IDA)メソッドなどが挙げられます。

期間

期間には、1 つまたは複数のループ実験を含めることができます。複数期間の取得方法では、実験は指定された時間実行され、ソフトウェアは別の実験セットに切り替わります。期間は、LC ラン内の化合物の溶出時間が判明している場合に便利です。質量分析装置では、化合物の溶出のタイミングに合わせて、さまざまな実験を実施し、同一のランにおいて情報を最大限に取得することができます。

次の図は、3 期間の方法を示しています。

図 3-2 : 複数の期間にわたる実験の例



データ依存型取得メソッド

IDA メソッドでは、前回のサイクルで取得した結果をもとに、実験が自動的に実施されます。IDA 基準を用いてデータの収集と併せてデータ収集設定を最適化することで、シングル注入におけるサンプルの収集時間が短縮します。IDA により、必要なサンプル量と貴重な作業時間の両方を節約できます。

最大で 2 つのサーベイスキャン、および最大で 8 つのディペンデントスキャンが単一の期間に含まれる IDA メソッドを作成します。IDA では、サーベイスキャンが追加実験のトリガーとして使用されます。以下のスキャンタイプは、サーベイスキャンとして使用できます。

- プロダクトイオン強調モード (EPI) (二次サーベイスキャン)
- EMS (MS 強調モード)
- MRM (複数反応モニタリング) または *Scheduled* MRM アルゴリズム
- ニュートラルロス (NL)
- プリカーサーイオン (Prec)
- Q3 MS

以下のスキャンタイプは、ディペンデントスキャンとして使用できます。

- EPI
- MS/MS

IDA メソッド収集時の質量分析装置の操作内容は、前回のスキャンで取得したデータに応じて、スキャンごとに変化します。本ソフトウェアではデータが取得時に分析され、ディペンデントスキャン対象となる質量が特定されます。ユーザーは IDA 実験のアクティブ化基準と、使用するメソッドパラメータを設定できます。

IDA メソッド収集では、以下のユーザー定義の基準に基づいてディペンデントスキャンが実行されることで、結果が改善されます。

- イオン強度と電荷状態
- 組み入れ/除外リスト

- ・ アイソトープパターン
- ・ 動的除外
- ・ イオン強度の変化率(次のセクションを参照:[Dynamic Background Subtraction](#) のセクションを参照してください)

スケジュールされたイオン化

スケジュールされたイオン化機能を使用すると、汚染のリスクを低減することにより、質量分析装置のダウンタイムを短縮できます。Acquisition Method Editor で利用可能で、単周期取得方式による一括取得に使用することができます。次の図を参照してください。

図 3-3 : 取得メソッドエディタのスケジュールイオン化機能

MS Advanced MS

Experiment: 1

Scan type: MRM (MRM)

Polarity: ☒ Positive ☐ Negative

Total Scan Time (includes pauses): 0.0000 (sec)

Edit Parameters...

☒ DMS Off

☒ Ramp COV

Start: -30.000 Stop: 30.000 Step: 0.100

Scheduled MRM

☐ Enabled ☒ Basic ☐ Advanced

Import List

Period Summary

Duration: 0.000 (min) Delay Time: 0 (sec)

Cycles: 600 Cycle: 0.0000 (sec)

☒ Scheduled Ionization

Start Time: 0 (min) Stop Time: 0 (min)

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Dwell Time (msec)	ID
1				

Scheduled Ionization が選択され、**Scheduled Ionization** の **Start Time** と **Stop Time** が設定されている日時、**IonSpray Voltage (ISV)** は、対象のピークが溶出する **Start Time** と **Stop Time** の間でのみ取得メソッドで指定された **ISV** 値に設定されます。**ISV** は、**Start time** 時間の前と **Stop time** の後に 0 に設定されます。LC メソッドは通常どおりに設定する必要があります。たとえば、LC の継続時間を 5 分とし、**Scheduled Ionization** を 1.5 分で開始、3.5 分で停止とした場合、LC は 0 分で開始し 5 分で停止、質量分析装置のデータ収集は 1.5 分で開始し、3.5 分で停止することになります。**Scheduled Ionization** は、次の場合でも **Nebulizer Current (NC)** にも使用できます: Turbo V または IonDrive Turbo V イオン源が APCI モードで使用されている場合。

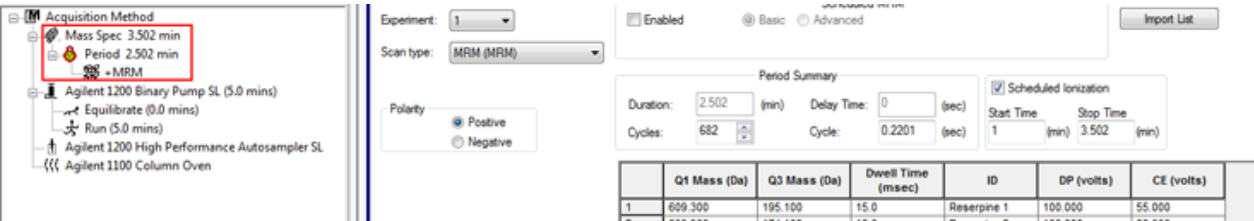
Scheduled Ionization 機能が選択された取得方法の **Start Time** と **Stop Time** は、同じ取得方法で **Scheduled Ionization** 機能が選択されていない場合のデータをもとに作成する必要があります。

注: **Stop Time** は **Start Time** より大きい値にする必要があります。

測定メソッド

注: **Scheduled Ionization** チェックボックスが選択されている場合、**Mass Spec** 時間は **Stop Time** です。これは、イオン化の停止がスケジュールされている時間です。Acquisition Method Editor の **Period** の横に表示される時間は、**Duration** フィールドに表示される値と同じです。次の図を参照してください。

図 3-4 : スケジュールされたイオン化が選択されたときの質量分析装置の時間



溶媒圧縮率

表 3-1 : 溶媒圧縮率

溶剤	圧縮率(10 ⁻⁶ /bar)
アセトン	126
アセトニトリル	115
ベンゼン	95
四塩化炭素	110
クロロフォルム	100
シクロヘキサン	118
エタノール	114
酢酸エチル	104
ヘプタン	120
ヘキサン	150
イソブタノール	100
イソプロパノール	100
メタノール	120
1-プロパノール	100
トルエン	87
水	46

「シリンジサイズ」対「流量」

シリンジポンプの流量は、ポンプにどのようなシリンジが取り付けられたかに応じて変化します。流量とシリンジサイズの関係を表に示します。

表 3-2 : シリンジサイズと流量 (L/時)

シリンジサイズ (μ L)	最小値 (L/時)	最大値 (L/時)
0.5	0.002	23.8
1.0	0.003	47.8
2.0	0.006	95.2
5.0	0.015	238.0
10.0	0.029	474.0
25.0	0.073	1193.0

表 3-3 : シリンジサイズと流量 (μ L/分)

シリンジサイズ (μ L)	最小値 (μ L/分)	最大値 (μ L/分)
50	0.002	39.7
100	0.005	79.7
250	0.012	197.8
500	0.024	397.0
1000	0.048	795.0
1.0	0.049	805.0

表 3-4 : シリンジサイズと流量 (mL/時)

シリンジサイズ (mL)	最小値 (mL/時)	最大値 (mL/時)
2.0	0.011	186.8
2.5	0.010	168.2
3.0	0.011	181.4
5.0	0.019	317.0
10.0	0.028	461.0
20.0	0.050	821.0
30.0	0.074	1208.0

表 3-5 : シリンジサイズと流量 (mL/分)

シリンジサイズ (mL)	最小値 (mL/分)	最大値 (mL/分)
50.0	0.002	28.40
100.0	0.003	47.60
140.0	0.004	55.10

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。セットには、単一のサンプルあるいは複数のサンプルを含めることができます。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。バッチは測定用ステーションからしか提出できません。

バッチには次の情報が含まれます。

- サンプル情報（名前、ID、データファイル名、コメントなど）
- オートサンプラーの場所（ラック情報）。バイアル位置
- 取得方法と注入量
- 定量化メソッド（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。

Batch Editor

Batch Editor ではバッチの作成または修正、ならびにバッチテンプレートの作成が可能です。それぞれ異なる測定メソッドを使用してサンプルを実行するには、同一セット内で複数の測定メソッドを選択します。

測定メソッドはテンプレートとしても使用できます。この場合、すべてのサンプルに同じメソッドが使用されますが、サンプルごとに異なる質量または質量範囲を選択できます。Batch Editor は、Microsoft Excel などの外部プログラムで作成したサンプルリストのインポートにも使用できます。

処理用にバッチを提出する前に、バッチのあらゆる詳細を修正できます。バッチを分析用に提出する際には、バッチ全体、バッチの内の特定のセット、またはセットの内の特定のサンプルを提出できます。

たとえば 10 個のサンプルの分析において、5 個のサンプルでは 1 つの測定メソッドが、そして他の 5 個のサンプルでは別の測定メソッドが使用されている場合、2 つのバッチセット（使用したメソッドごとに 1 つ）を作成します。

注: バッチを提出する前にすべてのバッチパラメータをレビューして、ラック、プレート、バイアルのポジションがオートサンプラーのハードウェア設定と一致していること、ならびにラック設定オプション「Specify rack」が測定メソッドで使用可能となっており、これが使用中のオートサンプラーで選択されていることを確認するよう推奨されています。

注: バッチを送信する前に、正しいサンプル位置の正しいラックとプレートがオートサンプラーにロードされていることを確認することをお勧めします。

表 4-1 : Batch Editor タブ

タブ	説明
サンプル	サンプルリストを作成し、サンプルの詳細(サンプル測定時に用いられるサンプル名や測定メソッドなど)を選択する際に使用します。
Locations	オートサンプラーでのサンプルの位置を選択する際に使用します。サンプルの位置は、Sample タブでも数値を用いて指定できますが、Locations タブでは、サンプル位置の選択にグラフィカルインターフェースを使用できます。
定量化	定量バッチのサンプルタイプと濃度を選択する際に使用します。定量情報は測定後も定量 Results Table で指定できるため、Batch Editor の Quantitation タブを使用する必要はありません。代わりに定量ウィザードを使用できます。
Submit	サンプル情報を検証し、サンプルを測定キューに提出する際に使用します。Queue Manager にはキュー、バッチ、サンプルの状態が表示されるほか、キューに入れられたサンプルを管理することもできます。

バッチファイルのインポート

ユーザーはバッチ情報を含むテキストファイルをインポートできます。Batch Editor でバッチを作成する必要はありません。すべて/のサンプルの詳細がスプレッドシートにある場合、スプレッドシートにデータを再配置してインポートする方が、Batch Editor でデータを手動で入力するよりも高速です。

テキストファイルからバッチ情報をインポートする前に、ファイル内のデータが正しく整理、フォーマットされていることを確認してください。特に、スプレッドシートのカラム見出しは Batch Editor のカラム見出しと一致している必要があります。テキストファイルに適切な見出しが付いていることを確認するには、Batch Editor を用いてバッチ作成し、これをテキストファイルとしてエクスポートしてから、Spreadsheet Editor で適切な値を入力し、次にファイルを Batch Editor に再度インポートして戻します。

適切にフォーマットされたファイルの例については、Example プロジェクトの Batch フォルダを参照してください。

バッチファイル内の情報は、Microsoft Excel や Microsoft Access、ならびに一部のラボ情報管理システム(LIMS)ソフトウェアといった、他のアプリケーション用にエクスポートすることもできます。

バッチエディタで定量詳細を設定(オプション)

バッチで定量化メソッドが使用されており、ユーザーが後に定量詳細を選択しない場合は、定量詳細(サンプルの種類、サンプルの濃度)をバッチ提出前に定義する必要があります。

適切な **Internal Standard** および **Standard** 列は、Sample タブで選択された定量化メソッドに応じて Quantitation タブに表示されます。

1. Batch Editor ウィンドウでバッチファイルを開き、Quantitation タブを開いてください。
2. サンプルを含むセットを選択してください。

3. セルのリストからすべてのサンプルの **Quant Type**、**Dilution Factor**、**Weight/Volume** を選択してください。
4. (必要に応じて) **Analyte** 列に、分析試料の濃度を入力します。
5. (必要に応じて) **Internal Standard** 列に、内部標準濃度を入力します。
6. バッチの各セットごとにこの手順を繰り返してください。

データファイルに含まれている情報は、テーブルまたはグラフ形式で表示できます。グラフ形式のデータは、クロマトグラムまたはスペクトルとして示されます。これらのいずれかの形式のデータをデータポイントテーブルとして表示し、データに対してさまざまな並び替え操作を行うことができます。

本ソフトウェアでは、TIC とメソッドデータは wiff ファイルに、スペクトルデータは wiff.scan ファイルに保存されます。本ソフトウェアでデータファイルを開くには、wiff と wiff.scan の両方のファイルが必要となります。さらに、1 つのサンプルのみのデータを含む txt ファイルを開くことができます。ソフトウェア内でデータファイルが開くと、実施された実験タイプに応じて異なるペインが表示されます。

Tune Method Editor で MCA チェックボックスが選択された場合、データファイルは質量スペクトルとして開かれます。MCA チェックボックスが選択されない場合、データファイルはトータルイオンクロマトグラム (TIC) を開きます。範囲を選択し、特定の時間を表す TIC ペインをダブルクリックすることで、この範囲のスペクトルを表示できます。

@クロマトグラム

反復実験においては、クロマトグラムに経時的な数量差異が示されます。たとえば、質量分析装置で一連のスペクトルスキャンを複数回繰り返して実行するようプログラムされる場合などが挙げられます。クロマトグラムのデータは、たとえデータの強度がゼロとなった場合でも、連続したものとなっています。クロマトグラムは質量分析装置によって直接生成されるわけではありません。クロマトグラムはスペクトルから生成されます。

クロマトグラムビューでは、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。ピークには自動的にラベルが付けられます。

LC/MS については、クロマトグラムは時間の観点で示されることが多々あります。これは特定のスキャンが取得された時間であり、スキャン番号から参照できます。

クロマトグラムはデータの全体像を示すもので、LC カラムを使用している場合、通常は時間に依存しますが、ピークのコンポーネントに関する情報を得ることができます。たとえば、クロマトグラムにピークが 1 つしか表示されていない場合でも、そのピークが複数の化合物 (つまり質量が異なること) を表す場合があります。

特定のサンプルでクロマトグラフィーの状態が変化した場合、クロマトグラフィーのデータは時間と強度の両面で変化する場合があります。

スペクトル

スペクトルとは質量分析装置から直接取得されたデータであり、通常は特定の質量電荷比 (m/z) で検出されたイオンの数を表しています。スペクトルは、 m/z 値を示す X 軸と強度 (cps) を示す Y 軸のグラフとして表示されます。

MRM スペクトルでは、強度は 2 種類の質量 (プレカーサーイオン質量 (Q1) とプロダクトイオン質量 (Q3)) に関連付けられています。

データをスペクトルとして表示すると、化合物に関する質量特有の情報が取得されます。スペクトルは、特定のクロマトグラムのピークに対応するイオンの m/z 値を提供します。これらのイオンは、よ

り具体的な情報を見つけるために使用できます。たとえばスペクトルには、各質量の強度など、ピークを構成するすべての質量が示されます。

スペクトル強度は変化する可能性があります、化合物の質量は変化しないため、 m/z 値は一定です。

スペクトルデータを生成する方法は、以下の 2 通りです。

- スキャンが 1 つしか測定されていない場合、あるいは測定に MCA が用いられている場合、そのデータはスペクトルとして表示されます。
- クロマトグラムから生成されます。

バックグラウンド除去

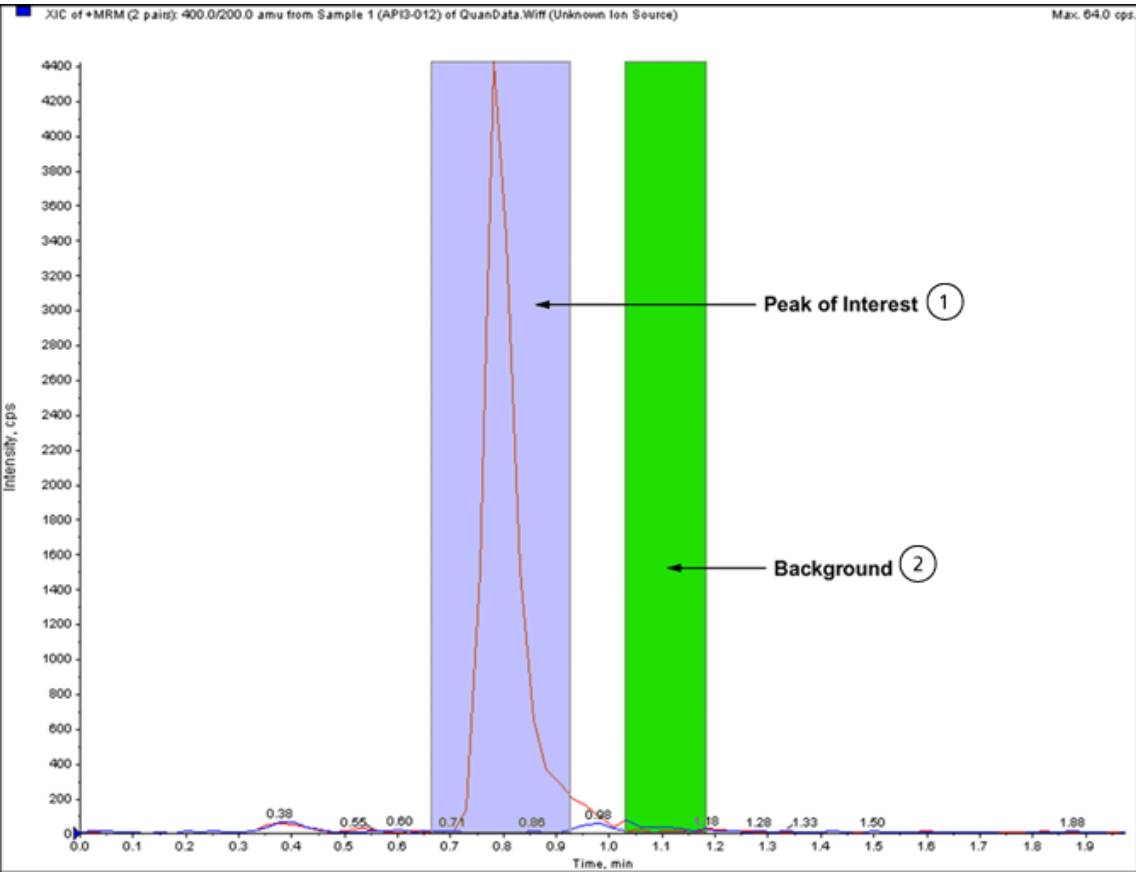
バックグラウンド除去はスペクトル内のノイズ量を減らすための機能であり、ノイズが含まれる範囲から、ピークが含まれる範囲を 1 つまたは 2 つ取り除きます。ユーザーは対象の範囲を個別に移動するか、ひとつのエントリティとしてロックしてグラフ内で移動することでピーク分離を最適化するか、あるいは別のピークを分離することができます。Locked Background Subtraction がプリセット設定となっています。本ソフトウェアには、さまざまなバックグラウンド除去メソッドが用意されています。

Background Subtract: バックグラウンド除去を用いて関心のあるピークを分離します。最大で 2 つの選択範囲を強調表示し、ピークから取り除くことができます。また、選択範囲をロックしてグラフ内で移動させることで、ピーク分離を最適化するか、別のピークを分離することも可能です。

クロマトグラムに対してバックグラウンド減算を実行する

1. データファイルを開きます。
2. クロマトグラムで一方のバックグラウンド範囲を選択します。
3. **Shift** を押して、別のバックグラウンド範囲を選択します。

図 5-1 : XIC



項目	説明
1	対象のピーク
2	バックグラウンド

- 4. 減算範囲を設定するには、**Explore > Background Subtract > Set Subtract range** をクリックします。
- 5. 関心のあるピークを選択します。
- 6. **Explore > Background Subtract > Perform Background Subtract** をクリックします。
バックグラウンドがピークから除去され、新しいスペクトルが生成されます。
- 7. 別のピークを分離するには、クロマトグラム内でロック範囲をドラッグし、バックグラウンド減算を繰り返します。

ヒント! バックグラウンド減算領域をクリアするには、**Explore > Background Subtract > Clear Subtract Range** をクリックします。

- 8. バックグラウンドが減算されたスペクトルを処理済みデータファイルとして保存するには、**File > Save Processed Data File** をクリックします。

範囲のロック解除

前提条件
<ul style="list-style-type: none">選択した減算範囲は「ロック」に設定されています。

Explore > Background Subtract > Subtract Range Locked.をクリックします

これで範囲のロックが解除され、個別に移動することができるようになります。

Baseline Subtract

ベースライン除去を実行すると、データセットから一定のオフセットまたは緩やかに変化しているオフセットが取り除かれます。この機能は、ノイズによって隠されている小さなピークを検出する場合に便利です。本ソフトウェアでは、ベースライン除去の実行において以下のアルゴリズム日時用いられます。

- データセットのいずれのデータポイントも、ユーザー定義の幅 (amu または分) を持った、ウィンドウ (質量または時間) の中心とみなされます。
- ウィンドウ内の現在のデータポイントのいずれかの側に最小値 (ミニマ) が特定されます。
- 直線は 2 つのミニマの間で適合され、その線の上に位置する現在のデータポイントの高さ (強度) が算出されます。データの端点はミニマとみなされます。
- データポイントは新たな算出値に置き換えられます。

計算機

計算機を用いて、収集したデータに基づいて計算を行います。計算機は独立したウィンドウとなっていますが、本ソフトウェアのアクティブグラフと連動しています。

以下の計算機を使用できます。

- [Elemental Composition 計算機](#)
- [Hypermass 計算機](#)
- [Elemental Targeting 計算機](#)
- [Mass Property 計算機](#)
- [Isotopic Distribution 計算機](#)

計算機ウィンドウのテキストボックスの値を切り取り、別の計算機のテキストボックスに貼り付けることができます。いずれの計算機のデータも、ウィンドウの左上にある **Print** アイコンをクリックすることで印刷できます。計算機の使用についての詳細な情報については、ヘルプを参照してください。

Elemental Composition 計算機、Mass Property 計算機、Isotopic Distribution 計算機は、個別のファイルにエクスポートできます。アクティブグラフ内のデータを修正するには、Elemental Targeting 計算機を使用します。超重量とアイソトープ分布計算機は、アクティブスペクトルに重ねることができます。

ヒント! 計算機データの精度は、Appearance Options ダイアログの Calculators タブで設定します。ダイアログを開くには、**Tools > Settings > Appearance Options** をクリックします。

Elemental Composition 計算機

Elemental Composition 計算機では、ターゲットの質量対電荷比をもとに潜在的な分子組成またはアミノ酸構成が特定されます。この比率は手動で入力するか、アクティブスペクトルから選択します。この計算機により、関心のある質量を成している可能性のある元素またはアミノ酸の組み合わせと、それぞれの特性が記されたテーブルが作成されます。

許容値、電子状態、電荷数などのパラメーター値を入力または選択します。潜在的な元素のリストを入力し、それぞれの値に制限を設けることも可能です。

Hypermass 計算機

Hypermass 計算機では、非電荷質量をもとに多価エンベロープの分布が特定されます。ユーザーは非電荷質量（付加物と極性を含む）を選択できます。

この計算機では Hypermass 級数がグラフ表示されます。このグラフはアクティブスペクトルに重ねることができます。Hypermass データのリストも入手できます。

Elemental Targeting 計算機

Elemental Targeting 計算機では特定のパターン（主にアイソトープパターンに該当するもの）にもとづいて、データスペクトルが縮小されます。また、MS データスペクトルに特定のピークパターンがないかも検索され、検出されれば数式またはアイソトープ分布として入力されます。

一致項目が見つかった場合は、特定のパターンに関連したデータのみが含まれる縮小プロットが作成されます。スペクトルにおいては、一致しなかったデータはすべて削除されます。クロマトグラムにおいては、基礎スペクトルごとの元素ターゲットが算出され、これらの新しいスペクトルにもとづいてクロマトグラムで各ポイントが再生成されます。

Mass Property 計算機

Mass Property 計算機により、関心のある質量の計算精密質量、平均質量、質量精度、質量欠損、質量不一致・誤差といった、さまざまな特性が特定されます。この計算機によってどのような結果が生成されるかは、値を入力したインプットフィールドの数によって変化します。

Isotopic Distribution 計算機

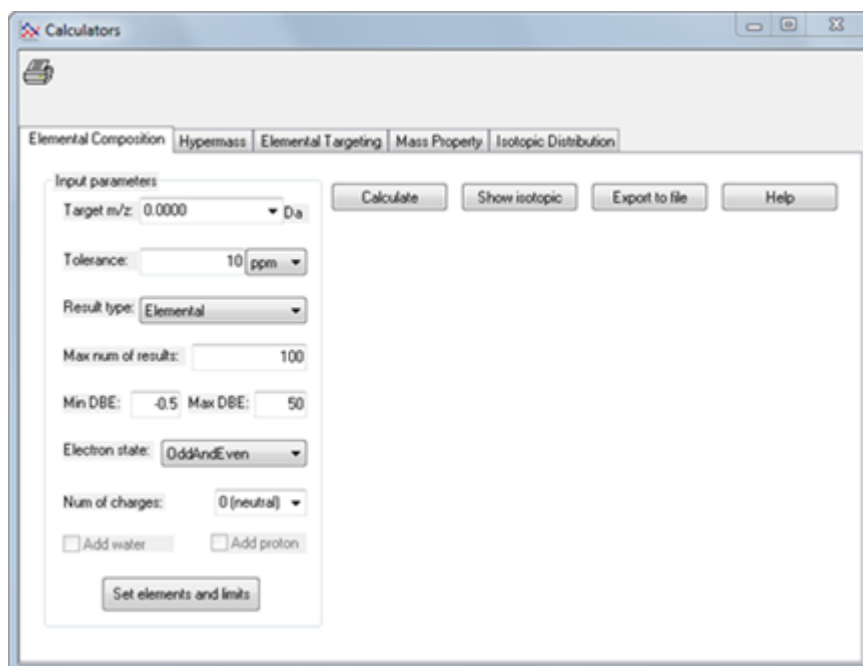
Isotopic Distribution 計算機は、入力した数式をもとにアイソトープ分布を特定するための機能です。アイソトープの相対強度を用いることで、同じ質量を持つ化合物を区別できるようになります。

算出したアイソトープ分布は、Isotopic Distribution ペインでグラフまたはテキスト形式で表示し、アクティブスペクトルと重ね合わせ、さらには個別のファイルにエクスポートすることができます。

計算機にアクセス

Tools > Calculators をクリックします。

図 5-2 : 計算機ダイアログ



Calculators ダイアログが開きます。

セントロイドピーク

ピークのセントロイドを算出することで、ピーク分布値が m/z の単一の値に、そしてピークを表す強度へと変換されます。プロファイルモードで収集されたセントロイドデータによってデータが簡素化され、ファイルサイズが縮小します。またピークの割り当てがより正確になり、データ量も減少しますが、ピークの形状に関する情報は取り除かれます。

セントロイドアルゴリズムでは、強度を加重した平均値を用いてピークが単一の値に変換され、ピークの重心が算出されます。アルゴリズムの出力は、次の表に示すようなパラメータを持つピークのリストです。

表 5-1 : ピークパラメータ

パラメータ	定義
セントロイド値	セントロイドデータの値です(質量単位または時間単位)。
強度	各ピークの強度(cps)です。
幅	セントロイドピークの幅(Da)です。

データは、ライブラリに追加された時点または検索が実行された時点で、セントロイドとして自動的に算出されます。

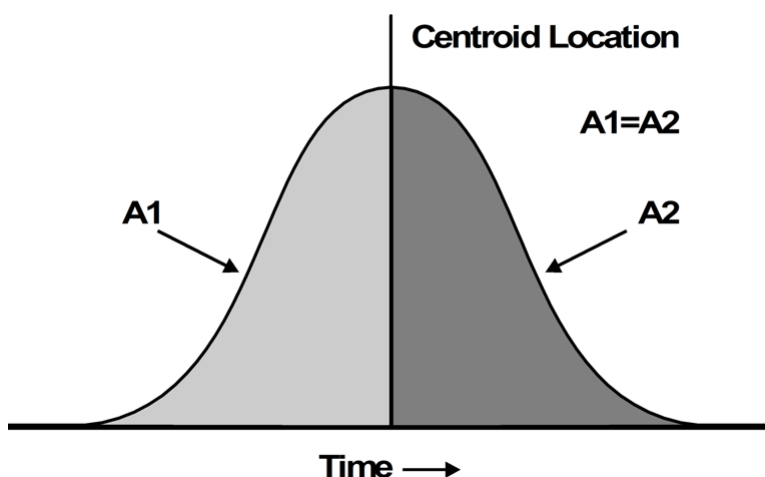
ピークのセントロイドを算出する

1. スペクトルが含まれるペインを選択します。

ピークのセントロイドを算出すると、既存のグラフの外観が変化します。結果を元のデータと比較できるよう、セントロイドを算出する前にグラフをコピーしておいてください。

2. **Explore > Centroid** をクリックします。
データはセントロイド化されています。

図 5-3：分析試料のセントロイド位置



データ分析

ユーザーは、既存のデータまたは現在収集中のデータが含まれるファイルを開くことができます。また実験関連データはすべて、テーブル形式で表示することも可能です。テーブルペインは、Data List タブと Peak List タブの 2 つのタブで構成されています。Data List タブには、実験に関する情報（収集時間やスキャン強度など）が表示されます。Peak List タブには、ピークに関する情報（ピーク高、ピーク領域ベースラインタイプなど）が表示されます。

トータルイオンクロマトグラム

トータルイオンクロマトグラム (TIC) は、一連の質量スキャンで得られた全イオンが持つ強度を合計することで作成されます。ユーザーは TIC を使用して、データセット全体を単一のペインで表示することができます。TIC は、クロマトグラムペインの時間に対してプロットされたスキャンに含まれる、すべてのイオンの強度を合計した値で構成されています。データに複数の実験からの結果が含まれている場合、ユーザーは各実験に個別の TIC を作成し、さらに全実験の合計を表す TIC を作成することができます。すべての実験の合計値を表すプリセット TIC は、スプリッターツールと併せて X 軸の中央下に表示されます。

抽出イオンクロマトグラム

抽出されたイオンクロマトグラム (XIC) は、単一の個別の質量値、または一連の質量分析スペクトルスキャンの質量範囲で強度値を取得することによって作成されます。これは、特定の質量（または質量範囲）の作用を時間関数で示したものです。クロマトグラフペインに、イオン強度（または特定の範囲内に存在する全イオンの合計強度）がプロットされます。

ベースピーククロマトグラム

ベースピーククロマトグラム (BPC) は、各スキャンにおける最高強度イオンの強度がスキャン数または保持時間として示されます。TIC がノイズに支配されているためにオフセットが大きく、クロマトグラフィーのピークを区別するのが難しい場合に役立ちます。また、共溶出成分を区別するのにも役立ちます。BPC は、単一の期間にわたる単一の実験データからしか生成できません。

グラフでは 2 色が用いられ、ベースピークの質量が変化するたびに色が切り替わります。色の変化は、データに対してスクロールまたはズーム操作を実行した際にも維持されます。グラフで使用する色の選択方法については、ヘルプを参照してください。

抽出波長クロマトグラム

抽出波長クロマトグラム (XWC) は、単一の波長の強度値を採用すること、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。

ダイオードアレイ型検出器

ダイオードアレイ型検出器 (DAD) スペクトルは、単一の時点、あるいはトータル波長クロマトグラムとして一定の時間範囲にわたって表示できます。

トータル波長クロマトグラム

トータル波長クロマトグラム (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。データに複数の実験からの結果が含まれている場合、ユーザーは各実験に個別の TWC を作成し、さらに全実験の合計を表す TWC を作成することができます。

グラフを重ねて表示する

類似した方法で作成されたグラフを重ねて表示 (オーバーレイ) することで、2 セット以上のデータを視覚的に比較できます。スペクトルはそれぞれ、そのトレースの色によって識別されます。フルスキャンデータの場合、これによって複数のサンプルスペクトル間の差異を視覚化することができます。

複数のペインが選択された場合、それぞれの XIC が個々で開きます。

ヒント! 同一ペインに 3 つ以下のグラフを重ね表示するには、ペインで **Ctrl** を右クリックしてから、**Appearance Options** をクリックします。Appearance Options ダイアログの複数のグラフオプションタブで、**Spectrum** および **Chromatogram** の **Overlay Multiple Panes** フィールドで **Yes** を選択します。

1. 重ねて表示する最初のペインを選択します。
2. **Explore > Overlay** をクリックします。
3. 2 つ目のペインをクリックします。

グラフが重ねられ、2 つのトレースが異なる色で表示されます。

ヒント! 重ね表示されたグラフの色分けリストを表示するには、ペインのタイトルバーを右クリックします。

重ね表示されたグラフ間の表示の切り替え

1. 重ね表示されたグラフを含むペインを選択します。
2. **Explore > Cycle Overlays** をクリックします。
表示が変わり、次の順番に位置するグラフが最前面に表示されます。

Sum Overlays

2 つ以上のグラフを重ねれば、グラフを集約して新しいトレースを取得できます。新しいトレースの各ポイントは、グラフのポイントの集約を表しています。データタイプが類似したいくつかのオーバーレイを集約することで、後続の処理操作を容易かつ迅速に実施することができます。たとえば、複数の XIC を重ね合わせてから集約し、集約オーバーレイをスムージングしてノイズを取り除くことができます。

オーバーレイの集約は TIC の生成と似ており、重ね合わせるグラフを選択できるという利点もあります。たとえば 10 件の実験を表示すると、TIC は 10 件すべての実験をまとめて追加します。一方でオーバーレイを集約すれば、重ね合わせられた 10 件のグラフのうち 9 件のみを追加するというオプションも可能です。この手順は、その 1 件の実験で収集されたデータがノイズのみであった場合に使用できます。

1. 集約したいグラフを重ね合わせます。
2. **Explore > Sum Overlays** をクリックします。
重ね表示されたグラフは合算されます。

グラフをカスタマイズ

グラフは、グラフやクロマトグラムラベル、キャプション、またはテキストのプリセットスタイルを使用してカスタマイズできます。ユーザーはピークと軸のラベルに使用するフォント、およびトレースに使用する色を選択できます。また、軸ラベルを追加したり、ピーク用のラベル/精度タイプを追加したりもできます。

グラフへのキャプションの追加

キャプションを用いて、グラフ上の目的のピークや重要なポイントにラベルを付けることができます。キャプションがピークの横に配置されると、グラフがズームイン/ズームアウトされてもキャプションはピークのもとに留まります。データファイル内のサンプル間を移動しても、キャプションは元のサンプルのもとに留まります。キャプションにはテキスト一行 (最大で 128 文字) を含めることができます。

1. スペクトル内で右クリックし、**Add Caption** をクリックします。
Add Caption ダイアログが開きます。
2. **Caption** ボックス内に、テキストを入力します。
3. キャプションのサイズとスタイルを変更するには、**Font** をクリックします。
4. キャプションを配置するには **OK** をクリックします。

ヒント! キャプションの位置を変更したい場合は、キャプションを別の位置にドラッグします。グラフがズームイン/ズームアウトされても、キャプションは x 軸と y 軸に対して同じ位置に維持されます。キャプションを編集または削除するには、キャプションを右クリックし、該当するコマンドをクリックします。

グラフにテキストを追加する

テキストを使用して、複数行の情報をグラフに追加します。特定のピークに付けられたキャプションはグラフのズームに併せて移動しますが、テキストラベルはたとえグラフがズームされても元の位置に維持されます。データファイル内のサンプル間を移動した場合、元のサンプルから離れます。

1. グラフを右クリックし、**Add User Text** をクリックします。
Add User Text ダイアログが開きます。
2. **User Text** フィールドにテキストを入力します。
3. テキストを中央揃えにするには、**Center Text** チェックボックスを選択します。
4. キャプションのサイズとスタイルを変更するには、**Font** をクリックします。
5. テキストを挿入するには **OK** をクリックします。

ヒント! テキストの位置を変更したい場合は、テキストを別の位置にドラッグします。テキストを編集または削除するには、テキストを右クリックし、該当するコマンドを選択します。

化合物データベース

化合物データベースには、最適化仕様を含む、化合物に関する情報が保存されています。化合物データベースは、多数のサンプルが存在し、かつ多数の化合物をすばやく最適化する必要がある場合に使用します。Compound Database ウィンドウには、サンプル実行のために検出可能な化合物の最適化状態も表示されます。詳細な情報については、次のドキュメントを参照: ヘルプ。

等高線図

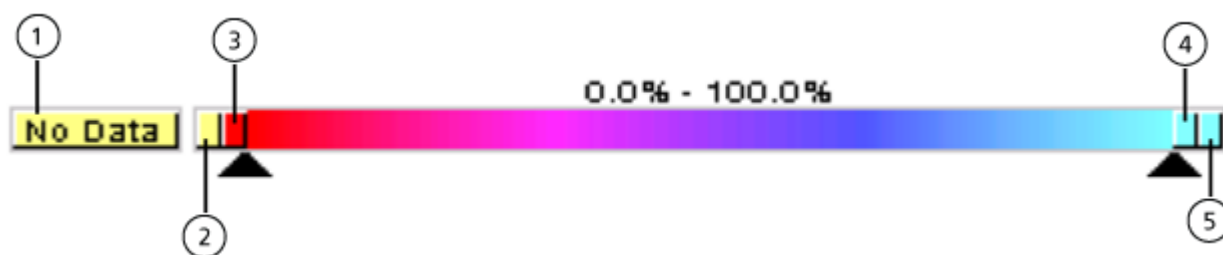
等高線図とは、完全データセットとなる色分けプロットであり、プロットの第三次元が色で示されています。TIC の等高線図では、X 軸は保持時間またはスキャン番号を、Y 軸は質量を、そして色はその時点でのデータの強度を表します。DAD データ用の TWC の等高線図では、X 軸は保持時間またはスキャン番号を、Y 軸は波長を、そして色は吸光度を表します。等高線図は測定後ツールであるため、リアルタイムでのスキャン測定では機能しません。

注: 等高線図は MI または MRM スキャンには対応していませんが、DAD スキャンには対応しています。

色は等高線図の第三軸に付けられており、強度または吸光度を表します。ユーザーは等高線図の上のカラーバーにあるコントロール用三角形を使用して、等高線図の強度または吸光度を高値/低値に変更できます。Contour Plot ペインの上部にあるパーセンテージパラメータは、低/高スライダーの値を示しています。実際の値は、選択した領域内の最大強度または最大吸光度の割合(パーセンテージ)にもとづいたものとなります。この値は、Contour Plot ペインの右上に表示されます。

次の図に示すコントロールは、等高線図の色を変更します。

図 5-4 : 等高線図の色をコントロールするボタン



項目	説明
1	データなし
2	Below low data
3	Low data
4	High data
5	Above high data

等高線図グラフの色は、コントラストを際立たせ、データ仕様がユーザーのニーズに合わせて表示されるよう指定できます。たとえば、強度/波長を設定し、**Below Low Data** と **Above High Data** の値の色を変更すると、等高線図のバックグラウンドノイズを排除できます。

スライダーコントロールを動かすと、**Below Low Data** ボタンと **Above High Data** ボタンがカラーバー上で縮小および拡大します。等高線図の色を変更すると、以降の全グラフにおいて新しい色がプリセット値となります。

表 5-2 : Contour Plot ペインの右クリックメニュー

コマンド	機能
Show DAD Spectrum	(DAD スペクトルの表示)DAD スペクトルの表示で新しいペインを開きます。
Extract Wavelengths (Use Range)	(波長の抽出(使用範囲))DAD スペクトルから、XWC を表示するための波長範囲を 3 つまで抽出します。
Extract Wavelengths (Use Maximum)	(波長抽出(最大値使用))最大波長を使用して波長範囲を抽出します。
Zoom to selection	(選択領域にズーム)選択した領域にズームインします。
Add User Text	(ユーザーテキストを追加)カーソルの位置にテキストボックスを追加します。
Undo Zoom	(ズームの取り消し)グラフを元の縮尺に戻します。
Delete Pane	(ズームの取り消し)選択したペインを削除します。

表 5-2 : Contour Plot ペインの右クリックメニュー (続き)

コマンド	機能
Show Cross-Hair	(照準の表示)照準が表示されます (nm/分)。

等高線図を表示する

等高線図はデータ収集後にのみ表示できます。ユーザーは TIC、XIC、TWC、XWC グラフのいずれかの等高線図を表示できます。TIC と XIC は、あらゆる wiff データファイルで使用できます。TWC と XWC は、DAD または PDA によって収集されたデータに対してのみ利用可能です。

1. Explore モードでは、データファイルを TIC、XIC、TWC、XWC のいずれかのグラフとして開くことができます。
2. 等高線図に表示したい範囲を強調表示します。選択を行わない場合は、全範囲が表示されます。
3. **Explore > Show > Show Contour Plot** をクリックします。
選択した領域の等高線図が別のペインに表示されます。

ヒント! 等高線図ペインを閉じるには、Contour Plot ペインを右クリックして、**Delete Pane** をクリックします。

等高線図の領域の選択

特定の選択領域にズームインするか、またはその選択領域の該当質量スペクトルを宛先表示するには、以下のいずれかを実行します。

- ボックス内で標準領域を選択するには、等高線図内でポインタをドラッグし、領域の周辺にボックスを作成します。
- 垂直方向に選択するには、**Ctrl** を押して、ポインタを垂直方向にドラッグします。
- 水平に選択するには、スペースバーを押しながらポインタを水平にドラッグします。

等高線図内の強度および吸光度の設定

次のいずれかの操作を行います。

- 低強度/低吸光度の値を等高線図に表示するには、等高線図の上にあるカラーバーから、左向きの三角形スライダーを必要な位置にドラッグします。

等高線図では、設定を下っている値の色が自動的に調整されることで、範囲の逸脱が示されません。

- 高強度/高吸光度の値を等高線図に表示するには、等高線図の上にあるカラーバーから、右向きの三角形スライダーを必要な位置にドラッグします。

等高線図では、設定を上回っている値の色が自動的に調整されることで、範囲の逸脱が示されません。

等高線図の色を変更する

ヒント! Define Custom Colors パレットでは、等高線図で使用するカスタム色を作成できます。

1. Contour Plot ペインで、色ボタンのいずれかをクリックします。
Color ダイアログが開きます。

注: 等高線図には、色をコントロールする 5 つのボタンがあります。カーソルがボタンの上にある場合、それぞれに名前が表示されます。これにより、正しい機能を確実に変更できます。さらに、ユーザーがスライダーコントロールを動かすと、Below Low Data ボタンと Above High Data ボタンがカラーバー上で縮小および拡大します。等高線図の色を変更すると、それ以降のすべてのグラフのデフォルトの色になります。

2. 色をクリックします。
3. **OK** をクリックします。
グラフの色が変わり、変更が反映されます。

Dynamic Background Subtraction

Dynamic Background Subtraction アルゴリズムは、情報依存取得 (IDA) 実験でのプリカーサーイオンの検出を改善します。このアルゴリズムがアクティブ化されると、IDA において (プレカーサーがサーベイスpekトルから直接選択される代わりに) バックグラウンド減算済みのpekトルを用いて、関心のある候補プレカーサーイオンが MS/MS 分析向けに選択されるようになります。このプロセスは LC 分析中に行われるため、このアルゴリズムはシグナルの強度の増加に応じて種の検出を可能にします。そのため、このアルゴリズムでは、LC ピークの立ち上がり部分のプレカーサーイオンを、LC ピークの上まで、あるいは少し上まで検出して分析することに焦点を当てています。

フラグメント解釈

フラグメント解釈ツールは、ユーザーによる MS/MS データの解釈に役立ちます。フラグメント解釈ツールでは、分子構造に含まれる単結合/非環状結合の開裂をもとに、理論的フラグメント質量のリストが生成されます。分子構造は他社製の描画プログラムで作成した後、mol ファイルとして保存することができます。これにより、理論的リストを現在の質量pekトルのピークと一致させることができます。フラグメント解釈ツールでは、論理的フラグメントが Fragment リストに表示され、フラグメント質量が質量pekトルのピークと比較されます。強度しきい値を上回り、かつユーザーが定義したフラグメント質量の質量許容値 (最大 2 Da) 以内のピークのみが一致していると判断され、Fragment リスト上で太字で表示されます。

注: フラグメント解釈ツールは、次のスキャン種類とは併用できません。

- プリカーサーイオン
 - ニュートラルロス
 - Q1 多重イオン
 - Q3 多重イオン
 - 複数反応モニタリング (MRM)
-

フラグメント解釈ツールをスペクトルと連動させる

分子構造内の単結合/非環状結合が選択されている場合、フラグメント解釈ツールによって、結合開裂時に生成された 2 つのフラグメントが強調表示され、一致するピークが連動スペクトル内に示されます。

スペクトルペインが複数表示されている場合、データファイルに複数のサンプルが含まれている場合、フラグメント解釈ツールはアクティブスペクトルと連動します。

あるいはフラグメント解釈ツールの起動時にスペクトルが開いている場合、アクティブパネルは開いているスペクトルに自動的にリンクされます。

1. **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool** をクリックします。

2. Fragment Interpretation ペインの右下にある接続ボタンをクリックします。
ポインタが連動ツールに変化します。

3. フラグメント解釈ツールの連動先となるスペクトルグラフをクリックします。

左下の連動済みグラフィックキーターには、Fragment Interpretation ペインと連動しているグラフの名前が示されます。グラフまたはフラグメント解釈ツールのいずれかが閉じられると、連動は解除されます。連動中の wiff ファイルに複数のサンプルが含まれている場合、ユーザーがサンプル間をスクロールするのに併せて、Fragment Interpretation ペインが自動的に更新されます。

フラグメントをピークと一致させる

1. **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool** をクリックします。

2. Fragment Interpretation ペインの mol ファイルで、Fragment List に太字表示されたセルを選択します。
スペクトルでは、一致するスペクトルが (Options タブで選択した色で) 強調表示されます。分子構造では、結合が強調表示されます。

3. 複数の一致フラグメントが存在する行がクリックされた場合、モノアイソトピック質量に最も近いスペクトルのピークが、質量スペクトル内で (Options タブで指定した色で) 強調表示されます。

分子構造内の結合を選択する

1. **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool** をクリックします。

2. mol ファイルが開いた状態の Fragment Interpretation ペインで、分子構造内の単結合／非環状結合をクリックします。

生成された 2 つのフラグメントが、Fragment リストで強調表示されます。これら 2 つのフラグメントの質量は、結合のいずれかの側に表示されます。

スペクトルと連動している場合、フラグメント解釈ツールにはグラフ内の一致するピークがすべて表示されます。リスト内のフラグメントが選択されており、フラグメントがピークと一致する場合、Fragment Interpretation ウィンドウで該当するピークがズームインされます。

アイソトープを表示する

フラグメント解釈ツールでは、フラグメントリスト内のフラグメントと一致する、理論的アイソトープ分布を表示できます。

1. **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool** をクリックします。
2. Fragment Interpretation ペインで **Options** タブをクリックします。
3. **Show Isotopes** チェックボックスをクリックします。
4. **Apply** をクリックします。
5. フラグメントリストで、ピークと一致するフラグメントを選択します。
一致ピークのアイソトープ分布がスペクトル内に表示されます。

スペクトル内の化学式の違いを表示する

関連した 2 種類の仮定フラグメント間に存在する、化学式とモノアイソトピック質量の差異を示すことができます。化学式の差異は、2 つのピークを選択すると表示されます。化学式およびモノアイソトピック質量の差異は、2 種類のフラグメントまたは 2 つの単結合/非環状結合を選択すると表示されます。

1. フラグメントピークをクリックします。
2. **Shift** を押してから、別のフラグメントピークをクリックします。
化学式の差異が Fragment リストのフラグメントと同一の場合、そのフラグメントがリスト内で強調表示されます。そうでない場合、ピークにおける一致フラグメント間の化学式の差異がメッセージボックスに示されます。

フラグメントリスト内の数式の相違の表示

1. 1 つのフラグメントの行番号をクリックします。
2. **Ctrl** を押してから、別のフラグメントをクリックします。
フラグメントが関連する場合、数式およびモノアイソトピック質量差異がメッセージボックスに表示されます。

分子構造内の化学式の差異の表示

1. 単結合および非環状結合をクリックします。(2 つの強調表示されたフラグメントの)プリセットフラグメントが選択されます。開裂結合の他方のフラグメントを選択するには、**Ctrl** キーを押しながら結合をクリックします。
2. 2 つ目の非環状結合を選択します。プリセットフラグメントを選択するには、**Shift** を押した後、結合をクリックします。開裂結合の他方のフラグメントを選択するには、**Ctrl + Shift** を押してから結合をクリックします。
フラグメント解釈では、ステップ 1 で選択したフラグメントとステップ 2 で選択したフラグメントが関連している場合、これらの化学式/モノアイソトピック質量の差異が算出されます。化学式/モノアイソトピック質量の差異がメッセージボックスに表示されます。

IDA Explorer

データ依存型取得 (IDA) メソッドで取得したデータを表示するには、IDA Explorer が用いられます。

IDA Explorer は、Appearance Options ダイアログの IDA Explorer タブでオン/オフにできます。このタブでは、リストビューにどの列を表示するかも指定できます。

下図に示すビューアの左側には、プロダクトイオンスキャンを実行した質量が表示されます。この領域では、プロダクトイオンスキャンが実行されたイオンの質量、強度、時間、および衝突エネルギーを、リストビューまたはツリービューで確認することができます。リストビューでは、いずれかの列の見出しをダブルクリックしてリストを並べ替えることができます。リストビューの列をカスタマイズするには、Appearance Options を使用します。

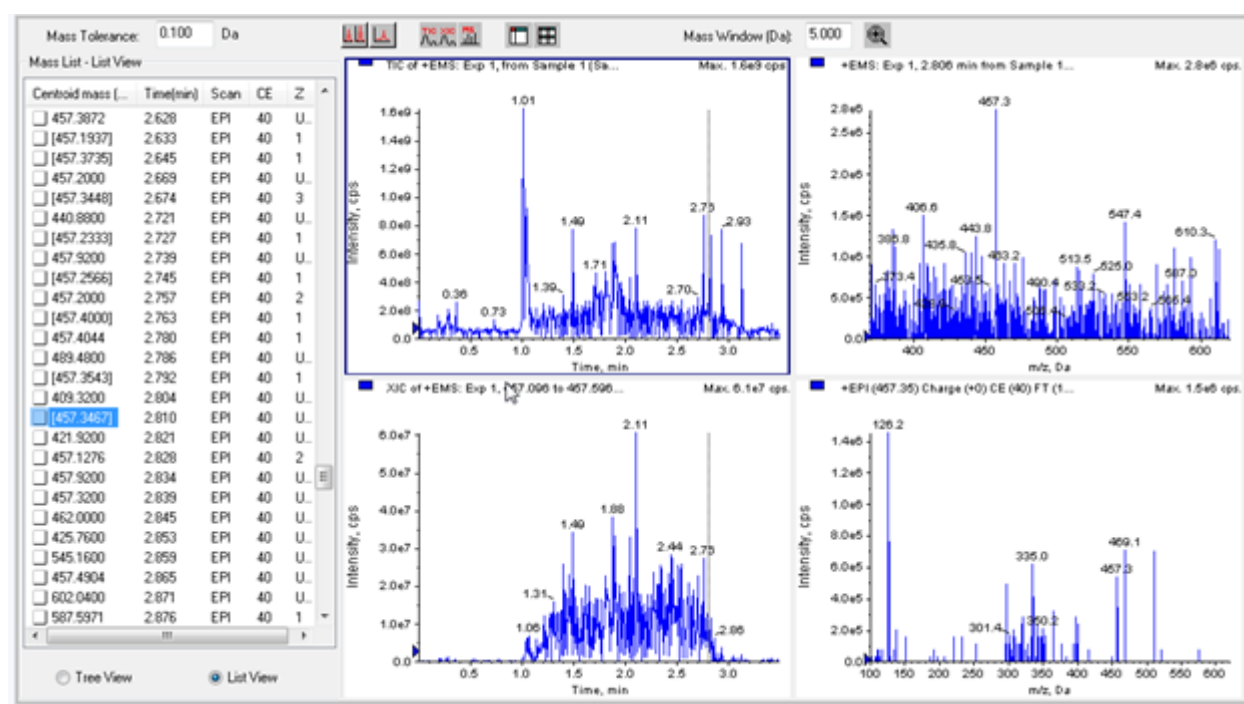
ビューアの右側は 4 つのペインに分割されています。左上のペインには、サーベイ TIC データが表示されます。左下のペインには、質量の XIC が表示されます。右上のペインにはサーベイが、あるいはサーベイと分解能強調モード (ER) が交互に表示されます。右下のペインにはプロダクトスキャンが表示されます。

IDA ビューアには、プロダクトイオン強調モード (EPI) スキャンで実行された質量または ER スキャンタイプがすべてリストされます。ユーザーは IDA ビューアで以下を実行できます。

- リストビューまたはツリービューで質量を選択し、この質量に関連するプロットを表示する。
- 質量が特定されたサーベイスpekトルと、その質量のプロダクトpekトルを表示する。
- サーベイスキャンの TIC と、それぞれの質量の XIC を表示する。

注: 括弧が付いた質量は、その質量が結合されていることを表しています。結合された質量は、いくつかのサイクルにわたって連続しています。結合質量が表示されている場合、(すべての連続pekトルの平均値が含まれる) 平均pekトルを表しています。

図 5-5 : IDA Viewer



ライブラリデータベース

ライブラリ検索機能では、未知のスペクトルが(ライブラリデータベースに含まれる)既知の MS スペクトルと比較され、一致している可能性のある物質のリストが生成されます。未知のスペクトルを検索し、データベースに保管されている質量分析スペクトルと一致するものがないかを調べるための質量分析スペクトルデータベースを、ライブラリ検索機能を用いて作成/管理します。

ライブラリ検索によって以下が可能です。

- ライブラリのコンテンツを未知のスペクトルと比較する。
- 記録をライブラリに追加します。
- 既存のレコードを編集する。

ライブラリデータは以下の場所に保存できます。

- ローカルデータベース上の MS Access。
- MS SQL Server。

ライブラリ検索機能を使用する前に、ライブラリデータベースが保存されており、コンピュータがその場所に接続されていることを確認してください。ライブラリデータベースはコンピュータでローカルに、またはネットワークを介してサーバーに保存できます。

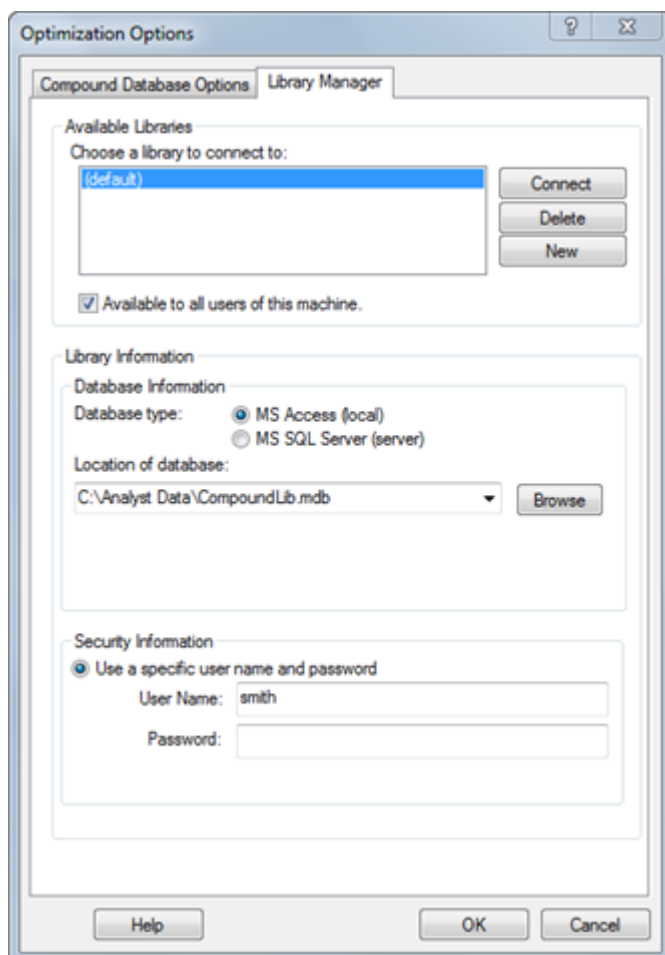
エイリアスを使用してデータベースに接続します。この場合、エイリアスによって特定のデータベースへの接続が指定されるほか、データベースへのアクセスに必要なユーザー名とパスワードを含めることもできます。たとえば、個人のユーザーが識別済みの化合物から成る小さなライブラリデータベースを維持することがある一方、組織は(ユーザーが使用することもある)中央データベースを所有しているという状況が考えられます。それぞれのデータベースエイリアス作成することで、ユーザーはデータベースをすばやく切り替えることが可能です。エイリアスを作成してデータベースに接続する方法については、ヘルプを参照してください。

既存のライブラリデータベース間で切り替える

ユーザーは、設定済みのエイリアスが割り当てられたあらゆるデータベースに接続できます。

1. **Tools > Settings > Optimization Options** をクリックします。
Optimization Options ダイアログが開きます。
2. **Library Manager** タブをクリックします。

図 5-6 : Optimization Options ダイアログ - Library Manager タブ

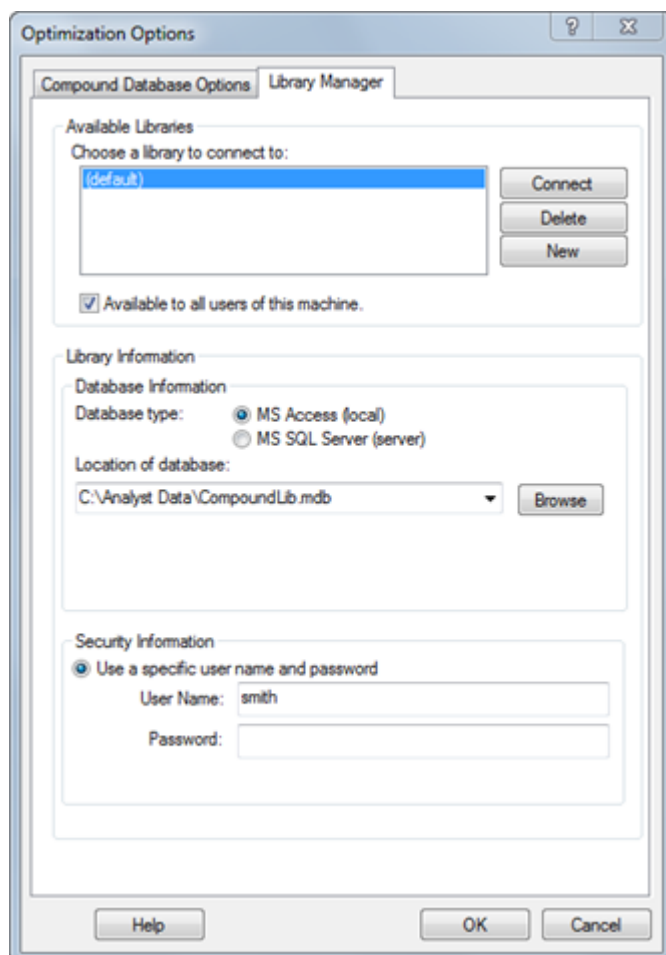


3. **Available Libraries** セクションで接続したいデータベースのエイリアスをクリックし、**Connect** をクリックします。
4. (オプション)他のユーザーがデータベースにアクセスできるようにするには、**Available to all users of this machine** チェックボックスを選択します。
5. **OK** をクリックします。

ローカルライブラリデータベースを作成する

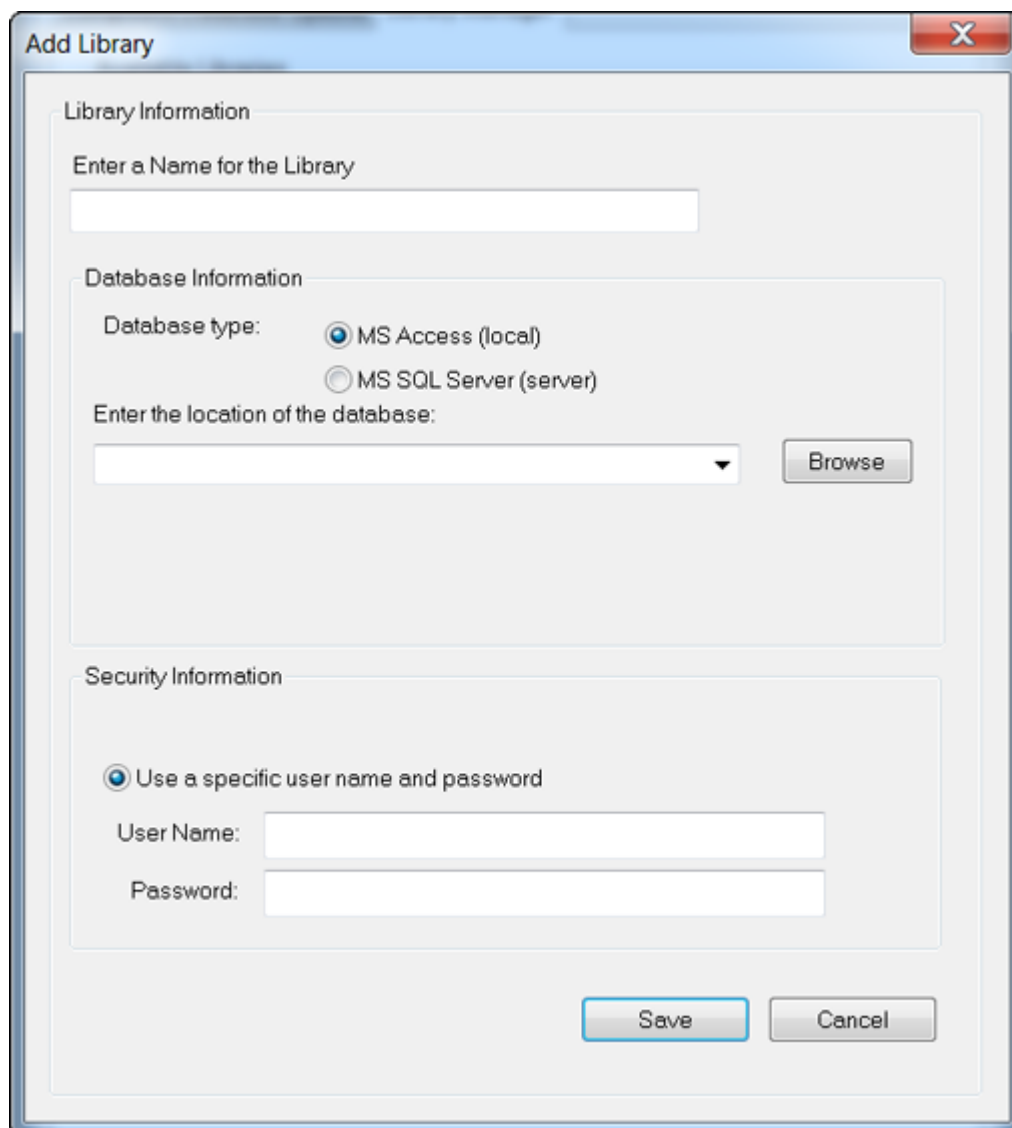
1. **Tools > Settings > Optimization Options** をクリックします。
Optimization Options ダイアログが開きます。
2. **Library Manager** タブをクリックします。

図 5-7 : Optimization Options ダイアログ - Library Manager タブ



3. **Available Libraries** セクションの **New** をクリックします。
Add Library ダイアログが開きます。

図 5-8 : Add Library ダイアログ

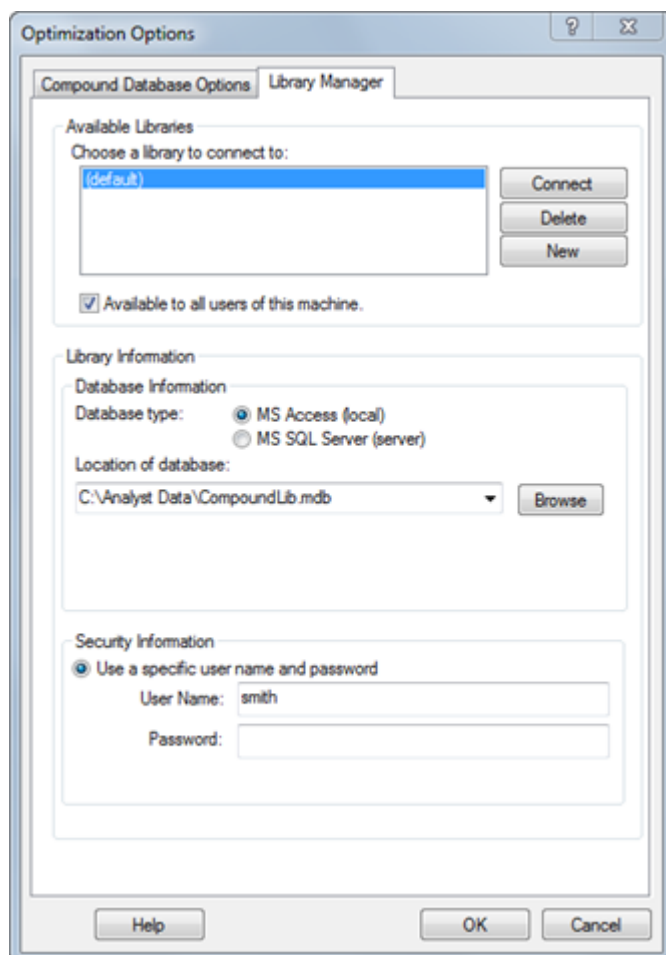
The image shows a Windows-style dialog box titled "Add Library". It has a standard title bar with a close button (X). The dialog is divided into three main sections: "Library Information", "Database Information", and "Security Information". In the "Library Information" section, there is a text input field labeled "Enter a Name for the Library". The "Database Information" section contains two radio buttons for "Database type": "MS Access (local)" (which is selected) and "MS SQL Server (server)". Below these is a text input field labeled "Enter the location of the database:" and a "Browse" button. The "Security Information" section has a radio button labeled "Use a specific user name and password" (which is selected), followed by "User Name:" and "Password:" text input fields. At the bottom right of the dialog are "Save" and "Cancel" buttons.

4. **Enter a Name for the Library** フィールドに、ライブラリの名前を入力します。
5. **Database Information** セクションで、**MS Access (local)**を選択します。
6. データベースの場所を入力します。
7. **Security Information** セクションで、必要に応じてデータベースにアクセスするためのユーザー名とパスワードを入力します。
8. **Save** をクリックします。

サーバーライブラリーデータベースに接続する

1. **Tools > Settings > Optimization Options** をクリックします。
Optimization Options ダイアログが開きます。
2. **Library Manager** タブをクリックします。

図 5-9 : Optimization Options ダイアログ - Library Manager タブ



3. **Available Libraries** セクションで **New** をクリックします。
Add Library ダイアログが開きます。
4. **Enter a Name for the Library** フィールドにライブラリーの名前を入力します。
5. **Database Information** セクションで **MS SQL Server (server)**を選択します。

図 5-10 : Add Library ダイアログ

6. データベースサーバーの名前を入力します。
7. データベースの名前を入力します。
8. 以下のいずれかを実行します。
 - このデータベースにアクセスする際に特定のユーザー名とパスワードが必要な場合は、ユーザー名とパスワードを入力します。
 - Windows セキュリティが用いられている場合は、Security Information セクションで **Use Windows integrated security** オプションを選択します。
9. **Save** をクリックします。

すべてのライブラリレコードを表示する

Explore > Library Search > List をクリックします。

Librarian ダイアログが開き、データベース内のレコードがすべて表示されます。

ライブラリへの記録の追加

1. アクティブスペクトルを右クリックし、**Add a Record** をクリックします。
スペクトルがセントロイドとして自動的に算出されます。Add a Record ダイアログが開き、スペクトルのデータが表示されます。
2. Mass Spectral Information タブの **Compound Name** フィールドに名前を入力します。

化合物名の入力必須です。化合物を識別するため、ライブラリ内で固有の名前を付ける必要があります。

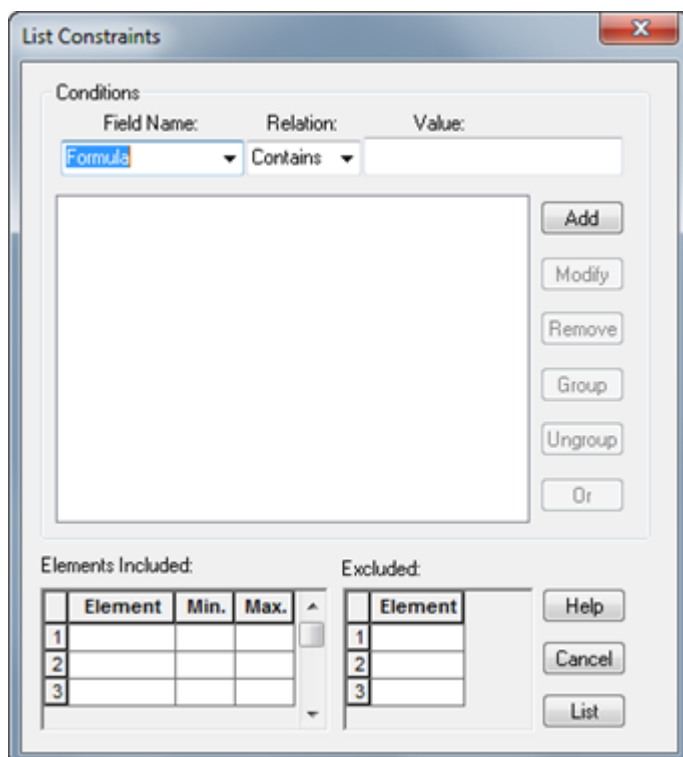
3. 他のフィールドを任意で編集します。これらのフィールドの多くは、スペクトルに関連したデータをもとに自動的に入力されます。
4. **General Information** タブをクリックします。
5. 必要に応じてフィールドを編集します。
6. **OK** をクリックします。

ライブラリレコードを制約付きで検索する

制約の付いたリストを使用することで結果を絞ります。設定した制約は、以後すべての検索に使用されます。

1. **Explore > Library Search > List With Constraints** をクリックします。

図 5-11 : List Constraints ダイアログ



List Constraints ダイアログが開きます。

2. **Field Name** リストで、制約のベースとなるフィールドを選択します。
3. **Relation** リストで、フィールド名に適用する関係(オペレータ)を選択します。
4. **Value** フィールドに、関係に基づくフィールド名の値を入力します。
5. **Conditions** リストに選択した制約を追加するには、**Add** をクリックします。
6. 必要に応じて、Conditions リストに制約を追加します。

7. **Conditions** リスト内の個別の制約を組み合わせることで、検索を効果的にする、より具体的な条件を設定することができます。制約をグループ化するには、制約を選択してから、**Group** をクリックします。グループ化された制約を分離するには、該当するグループをクリックし、**Ungroup** をクリックします。
8. 制約間の関係を変更するには、関係をクリックしてから、**And** または **Or** をクリックします。
9. 特定の元素の指定原子数が含まれる化合物を組み込むには、**Elements Included** テーブル内で元素を選択または入力し、その元素の原子の最小数と最大数を入力します。

注: 元素記号では大文字と小文字が区別されます。たとえば、水素は H であり、h ではありません。ナトリウムは Na であり、NA でも na でもありません。

10. ある元素を含む化合物を除外するには、**Excluded** 表に元素を選択および入力します。
11. 基準と一致する化合物を検索するには、**List** をクリックします。
すべての制約と一致するレコードが **Records** テーブルに表示されます。リストにある制約は保存されます。

ライブラリ検索に関するヒント

実行する作業	実行する操作
条件のグループ化	グループ化条件を選択し、 Group をクリックします。この機能は、数式における括弧と同様に機能します。
制約を使用せずに検索	アクティブスペクトルを右クリックし、 Search Library をクリックします。 Search Results ダイアログが開きます。

類似したスペクトルを検索する

ユーザーはアクティブスペクトルと一致する(あるいは類似した)スペクトルとその関連化合物情報を、ライブラリから検索することができます。検索は制約の有無にかかわらず実行できます。検索が制約付きで行われる場合、すべての基準と一致するレコードのみがリストされます。検索結果はランク付けリストに表示されます。最初にリストされるのは有効なスペクトルに最も適合するものです。リスト内のより低順位のエントリは適合性が低くなります。

選択される制約が多いほどリストの精度が高まり、より絞り込まれた関連性の高い項目が表示されます。制約のセットが定義されれば、(編集されない限り)以後のすべての検索に適用されます。制約なしで検索を実行すると、スペクトルデータとの細かい照合作業が減るため、推奨スペクトルのリストは大幅に長くなります。

検索には、しきい値を超えるピークのみが使用されます。制約付き検索を選択した場合、アクティブスペクトルにピークを追加または削除できます。

たとえば、ピークがバックグラウンドまたはノイズスパイクであると考えられる場合、不正確な結果が生じる可能性があるため、検索に使用することはできません。

1. アクティブスペクトルを右クリックし、**Search With Constraints** をクリックします。
スペクトルのセントロイドが自動的に算出されます。

2. **Maximum Number of Match** フィールドに、検索結果として表示する化合物の最大数を入力します。

図 5-12 : Search Constraints ダイアログ

Search Constraints

Maximum Number of Match:

Preselect Constraints:

- ☒ Mass Tolerance
- ☐ Intensity Factor
- ☐ 1st Precursor m/z
- ☐ Collision Energy
- ☐ 2nd Precursor m/z
- ☐ Excitation Energy
- ☐ Retention Time
- ☐ Record Contains UV Spectrum
- ☐ Record Contains Molecular Structure

Preset Tolerance:

+/-	0.2	Da
+/-	2	
+/-	0.25	Da
+/-	5	
+/-	0.25	Da
+/-	5	
+/-	0.1	min

Result Sorted by:

Comment Contains:

Keyword Contains:

Compound Name:

Formula:

Compound Class:

CAS Number:

Default Search Cancel Apply Peak Constraints >> Help

3. **Preselect Constraints** セクションで、適用したい制約のチェックボックスを選択します。
4. 選択した制約ごとに、**Preset Tolerance** セクションで許容値を入力します。
5. 必要に応じて、**Result Sorted by** リストからレコードを並べ替える方法を選択します。
6. 必要に応じて、**Comment Contains** フィールドにテキストを入力します。
7. 必要に応じて、**Keyword Contains** フィールドにテキストを入力します。
8. ピークの追加/削除によってピーク制約を適用するには、**Peak Constraints** をクリックします。Peaks Included テーブルが開きます。
9. 検索対象リストにピークを追加するには、**Add** をクリックし、空のセルに m/z 値と対応する強度を入力します。
10. 検索に含まれないようピークを削除するには、ピークを選択して **Remove** をクリックします。
11. **Search** をクリックして制約を保存し、検索を開始します。

検索結果の化合物を表示する

複数のスペクトルが未知のスペクトルと一致した場合、既知のスペクトルを表示し、これらを未知のスペクトルと比較することが求められる状況も考えられます。

1. Search Results ダイアログの化合物リストで、表示したい化合物の行番号を選択します。
2. いずれかの既知の化合物のスペクトルペインをクリックします。
選択した化合物のスペクトルが表示されます。

処理済みのデータファイル

ユーザーは(特定のレイアウトやキャプションなどの)処理済みのデータを保存できます。これらは Explore モードでのみ開くことができます。これらのファイルには履歴情報も含まれており、Explore のアクティブペインのデータのみが含まれるという点以外は、データファイルと類似しています。このようなファイルには pdt 拡張子がついており、現在のプロジェクト用の Data フォルダに格納されます。

処理済みのデータファイルを保存する

1. 保存したいデータのペインを選択します。
2. **File > Save Processed Data File** をクリックします。
3. **File name** フィールドに名前を入力します。
4. **Save** をクリックします。

処理済みデータファイルを開く

1. Explore モードで、**File > Open Processed Data File** をクリックします。
Load Processed Data File ダイアログが開きます。
2. ファイルを選択した後、**Open** をクリックします。

定性データ

データファイルに含まれている情報は、テーブルまたはグラフ形式で表示できます。グラフ形式のデータは、クロマトグラムまたはスペクトルとして示されます。またテーブルでは、データポイントとして示されます。データはさまざまな方法で並び替えることができます。

データファイルを開いた際にどのペインが表示されるかは、実施する実験のタイプ種類に応じて変化します。

MCA でチェックボックスが選択されていない場合は、データファイルは質量スペクトル (MS) として開かれます。**MCA** チェックボックスが選択されていない場合、データファイルは TIC として開きます。範囲を選択し、特定の時間を表す TIC ペインをダブルクリックして、この範囲の MS を表示します。

データは、wiff および wif.scan の拡張子が付いたファイルとして保存されます。データファイルには、複数のサンプルのデータを保存できます。本ソフトウェアでデータファイルを開くには、wiff と wif.scan の双方のファイルが必要となります。本ソフトウェアではデータファイルに加え、txt ファイルも開くことができます。ただし txt ファイルに保存できるデータは 1 つのサンプルのもののみです。

シグナル対ノイズ比

シグナル対ノイズ比は、ピーク高をノイズで除算した値です。

本ソフトウェアでは、ノイズを算出するため、クロマトグラムの **Background Start** 時間から **Background End** 時間(いずれも Quantitation Method Editor と Peak Review ウィンドウの高度なパラメータに表示されます)までの全データポイントの標準偏差(ゼロ平均を使用)が用いられます。これらの時間は、バックグラウンド範囲を新たに定めた時点で設定されます。

ユーザーが新しいバックグラウンド範囲を定義せずにメソッドを作成した場合(これは、プリセット積分が変更なしで受け入れられた場合に可能です)、**Background Start** と **Background End** の両方の値は **N/A** として表示されます。その結果、シグナル対ノイズ比は計算されず、Results Table の該当フィールドは **N/A** と表示されます。

スムーズアルゴリズム

ユーザーはスムーズメソッドとして、スムーズアルゴリズムかガウシアンスムージンズアルゴリズムのいずれかを選択できます。スムージング操作では、各データポイントが、その前後のデータポイントの平均に置き換えられます。以前のデータセットは、スムージングされたデータセットに置き換えられます。

データのスムージングは複数回可能ですが、本ソフトウェアで取り消せるのは最後の 1 回のみです。

スムージングは複数イオン(MI)または MRM スペクトルでは利用できません。

スムーズアルゴリズム

データのスムージング時には、ユーザーが「現在のポイント」、「前のポイント」、「次のポイント」の 3 つのデータポイントのポイント加重値を設定することになります。スムーズアルゴリズムでは、割り当てられた加重値によってデータポイントが乗算され、これらの値が合計された後、合計値がポイント加重値の合計で除算されます。ガウシアンスムーズよりも穏やかなスムージングですが、ノイズが非常に多いデータの場合は処理に時間がかかります。

ガウシアンスムーズアルゴリズム

ガウシアンスムーズでは、各データポイントが、その両側に存在する複数のデータポイントの加重平均に置き換えられます。新しいデータポイントごとの加重は、ガウス曲線に基づいて算出されます。スムーズアルゴリズムよりも荒いスムージングですが、ノイズが非常に多いデータに対して有効です。

ガウシアンスムーズメソッドの使用時には、以下の 2 つの値を設定します。

Gaussian filter width (ポイント間の最小距離の%): 隣接するポイントの加重を計算するために使用される幅この幅は、スキャンにおける 2 つのポイント間の距離の割合として述べられます。プリセット幅である 100%であれば、データポイント間の距離が可能な限り広く用いられた分布が示されます。

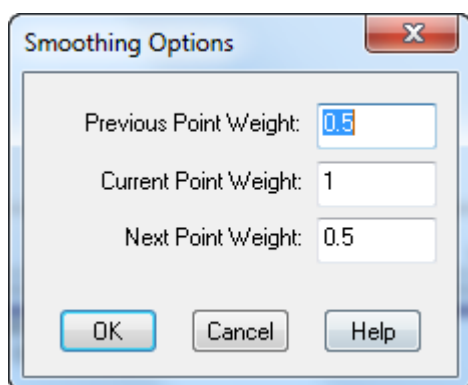
Limit of Gaussian filter (ポイント間の最小距離の数): ポイント間の距離の倍数で示されるガウス曲線の限界。たとえばプリセット値である 10 を用いて生成されたガウス曲線では、中央の両側のデータポイント幅の数が 10 を超えた時点で切り取られます。

スムーズアルゴリズムを用いたデータのスムージング

ヒント! スムージングを取り消すには、**Edit > Undo** をクリックします。本ソフトウェアでは 1 レベルの取り消しに対応しています。

1. クロマトグラムまたはスペクトルを含むペインを選択します。
2. **Explore > Smooth** をクリックします。
Smoothing Options ダイアログが開きます。

図 5-13 : Smoothing Options ダイアログ



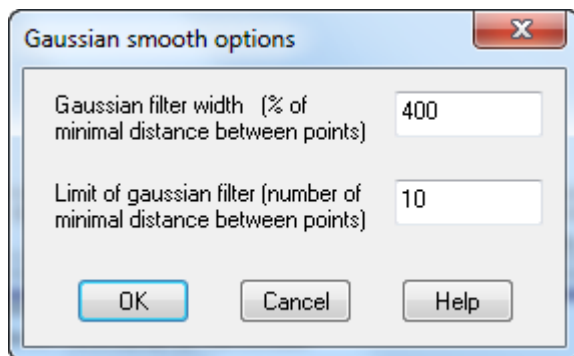
3. **Previous Point Weight** フィールドには、過去のデータポイントに適用させるための加重ファクターを入力します。
4. **Current Point Weight** フィールドには、中央データポイントに適用させるための加重ファクターを入力します。
5. **Next Point Weight** フィールドには、次のデータポイントに適用させるための加重ファクターを入力します。
6. **OK** をクリックします。
データセットはスムージングされ、ペインの中の最新データが置き換えられます。

ガウシアンスムーズを用いたデータのスムージング

ヒント! スムージングを取り消すには、**Edit > Undo** をクリックします。本ソフトウェアでは 1 レベルの取り消しに対応しています。

1. クロマトグラムまたはスペクトルが含まれるペインを選択します。
2. **Explore > Gaussian Smooth** をクリックします。
Gaussian smooth options ダイアログが開きます。

図 5-14 : Gaussian Smooth Options ダイアログ



3. **Gaussian filter width** フィールドに、隣接ポイントの加重を検出するために用いる幅を、2つのポイント間の距離の割合として入力します。
4. **Limit of gaussian filter** フィールドに、ガウス曲線の限界を入力します。ポイント間の距離の倍数として示されます。
5. **OK** をクリックします。
データセットはスムージングされ、ペインの中の最新データが置き換えられます。

システムログ

システムログには、エラー、警告、メッセージなどのシステムイベントを記録したレポートが含まれています。この情報を Windows Event Viewer で表示すれば、トラブルシューティングやシステム診断の実行に役立ちます。システムログの情報を活用するには、ソフトウェアに関連した項目のみが表示されるよう、これらの情報にフィルターをかけます。

システムログの情報を理解し、エラーのトラブルシューティングを行うには、Windows アプリケーションイベントログを参照してください。このログには、関連するトラブルシューティング情報が含まれています。

システムログを保存してサポートに転送

1. **View > Event Log** をクリックします。
2. **Windows Logs** フォルダの右側にあるプラス記号をクリックします。
3. **Application** を右クリックします。
4. **Save All Events As** をクリックします。
Save As ダイアログが開きます。
5. ファイル名を入力し、**Save** をクリックします。
Display Information ダイアログが開きます。
6. **Display information for these languages** をクリックします。
7. **English (United States)**が選択されていることを確認します。
8. **OK** をクリックします。
9. ファイルをメールに添付して、SCIEX に送信します。

注: 問題のトラブルシューティングのための追加のログイン機能については、sciex.com/request-support にお問い合わせください。

Analyst MD ソフトウェアに関連する情報のシステムログをフィルタリングします。

1. **View > Event Log** をクリックします。
Event Viewer ダイアログが開きます。
2. **Windows Logs** フォルダをダブルクリックします。
3. **Application** をクリックします。
4. **Action > Filter Current Log** をクリックします。
Filter Current Log ダイアログが開きます。
5. **Event Sources** フィールドの **Analyst** を選択します。
6. **OK** をクリックします。
Event Viewer ダイアログに、フィルタリングされた Analyst MD ソフトウェアイベントのみが表示されるようになりました。

キャリブレーションオプション

キャリブレーションオプションでは、キャリブレーションカーブ（サンプルの算出濃度の特定に使用）に用いられるパラメーターを定義します。内部標準が用いられなかった場合、このカーブでは標準の濃度が、標準の面積または高さに対してプロットされます。内部標準が用いられた場合、濃度比が面積または高さに対してプロットされたカーブとなります。このカーブを未知物質の面積（または高さ）と併せて使用することで、算出濃度が内挿されます。

最適な回帰タイプまたは適合を選択することでカーブをポイントに適合させ、プロジェクトに最適な加重ファクターを適用します。

キャリブレーションカーブについて

キャリブレーションカーブは、サンプル（QC サンプルを含む）の算出濃度を特定するために用いられます。キャリブレーションカーブは、標準の濃度がそのピーク領域または高さ（あるいは内部標準が用いられている場合は「比率」）に対してプロットされたものです。サンプルの領域および高さの割合はカーブに適用され、サンプル濃度が特定されます（結果テーブルに表示されます）。このキャリブレーションカーブによって生成される回帰方程式は、未知サンプルの濃度を算出するために使用されます。

本ソフトウェアでは、既知の濃度（または比率）が x 軸、算出された面積または高さ（または比率）が y 軸に示されます。続いて、バッチ内の全標準に対してポイントがプロットされます。選択した回帰と加重タイプにもとづき、これらの点の最良適合カーブが生成されます。このカーブを未知物質の面積（または高さ）と併せて使用することで、濃度が内挿されます。

最良回帰タイプを選択する

回帰タイプ（適合）を選択した後は、ウィザードで作成したキャリブレーションカーブを表示できなくなります。代わりに、プリセット値、実験、会社ポリシーを用いて回帰タイプを選択します。

適合を変更した後は、Results Table の **Accuracy** 列で変更を確認します。適合が改善するほど、定量分析の正確度も高まります。

キャリブレーションカーブは、標準の濃度がそのピーク領域または高さ（あるいは内部標準が用いられている場合は「比率」）に対してプロットされたものです。標準のポイントがプロットされる際には、これらのポイントに対するカーブの最良適合が特定され、その値がウィザードの Specify Calibration ダイアログに示されます。適合は linear にプリセットされています。つまり、すべての標準は直線状に並ぶものと想定されます。次の表の適合タイプから選択します。

表 6-1 : 適合タイプ

適合	説明
リニア	線形回帰です。標準ポイントが直線状に並んでいると仮定されます。

表 6-1 : 適合タイプ (続き)

適合	説明
ゼロ点を通る線形	ゼロ点を通る線形回帰です。標準ポイントが直線状に並び、かつポイントが x 軸と y 軸のゼロ点とそろうものと仮定されます。この設定を用いることで、線がゼロ点を通るよう強制できます。
二次	標準ポイントが直線状に並ばない場合は、この二次回帰を用いて、データポイントに対する二次適合を作成します。
平均応答係数	標準ポイントが直線状に並ぶ場合は、ポイントを平均化するため、この平均レスポンスファクター回帰を用いて、カーブの全ポイントに対する傾きの平均値を作成します。
指数	ポイントを結んだ線に幾分の直線性および湾曲が見られる場合は、(線形回帰または二次回帰ではなく) 指数回帰を使用して、これらの適合間のいずれかに線を引いてください。

最良加重ファクターを選択する

キャリブレーションカーブは、標準の濃度がそのピーク領域または高さに対してプロットされたものです。標準のポイントがプロットされる際には、これらのポイントの最良加重ファクターが特定され、その値が Specify Calibration ダイアログに示されます。適合は **None** にプリセットされています。つまり、カーブに沿ったポイントの重要性はすべて同じであると想定されます。次の表の加重タイプから選択します。詳細な情報については、次のセクションを参照: [重み付け係数](#)。

表 6-2 : 加重タイプ

加重	説明
1/x	1/x の加重ファクターを使用して、値の低いポイントにさらに重点を置きます。
1 / x ²	低値ポイントを大きく強調するには、1/x ² で加重します。
1 / y	濃度(X 軸)ではなく面積(Y 軸)をもとにキャリブレーションを実行する場合、あるいは低値ポイントを幾分強調させる必要がある場合には、1/y の加重ファクターを使用します。1/y の加重は 1/x の異形となります。ここでは、y と x は互いに比例していません。
1 / y ²	濃度(X 軸)ではなく面積(Y 軸)をもとにキャリブレーションを実行する場合、あるいは低値ポイントを大きく強調させる必要がある場合には、1/y ² の加重ファクターを使用します。1/y 二乗の加重は 1/x 二乗の異形となります。ここでは、y と x は互いに比例していません。
ln x	高値ポイントをさらに強調したい場合は、x の対数を使用します。
ln y	高値ポイントをさらに加重したい場合は、y の対数を使用します。濃度(X 軸)ではなく面積(Y 軸)をもとにキャリブレーションを実行する際に使用します。

積分アルゴリズム

Analyst MD ソフトウェアには、Analyst Classic 積分アルゴリズム（従来のもの）と IntelliQuan 積分アルゴリズムの、2 種類のアルゴリズムが搭載されています。IntelliQuan アルゴリズムでは、より一貫性のあるピーク検出/積分機能が可能であり、必要なパラメータ数も少なく済みます。

Analyst Classic/IntelliQuan 積分アルゴリズム

IntelliQuan アルゴリズムでは、Automatic IQA II（パラメータを伴わない設定）と Specify Parameters MQ III の、2 種類のピーク検出パラメータのいずれかが用いられます。IntelliQuan アルゴリズムを用いてピークを積分した後、どのピーク検出パラメータがデータセットに最も適合するかを特定します。これは、Peak Review ペイン/ウィンドウに表示されているピーク積分パラメータで実行します。

次の表には、Analyst Classic アルゴリズムで利用できるパラメータが記されています。

表 6-3 : Analyst Classic アルゴリズム

パラメータ	定義
Default Bunching Factor	一緒に平均化されるポイントの数。ピーク検出においては単一のポイントとみなされます。
Default Number of Smooths	クロマトグラムがスムージングされる回数。
Default Void Volume Retention Time	この時間よりも前に発生したピークはすべて無視されます。
Default Concentration Units	サンプルの濃度を示すために用いられる濃度の単位（例：pg/ μ L）。
Default Calculated Concentration Units	サンプルの算出濃度を示すために用いられる濃度の単位（例：pg/ μ L）。
Default RT Window	ピーク検出の予測保持時間を中心として設けられた時間ウィンドウ。たとえば保持時間を 30 秒に設定した場合、予測保持時間の前後に 15 秒が追加されます。

次の表には、MQ III アルゴリズムで利用できるパラメータが記されています（IQA II アルゴリズムのものではありません）。

表 6-4 : MQ III アルゴリズム

パラメータ	定義
Default Noise Percentage	ピーク検出で用いられるしきい値です。この指定パーセンテージを上回るピークのみが検出されます。

表 6-4 : MQ III アルゴリズム (続き)

パラメータ	定義
Default Baseline Subtraction Window	データポイント周辺の時間ウィンドウです。このポイントに適用されるベースライン補正の高さを特定するために用いられます。この時間ウィンドウにより、クロマトグラフから過剰なノイズを取り除きやすくなります。ベースラインは、指定のウィンドウにおいて「特定のデータポイントの左側にある最小強度ポイントと、右側にある最低強度ポイントを結ぶ線」と定義されています。
Default Peak-Splitting Factor	特定のピーククラスターの構成に、複数の隣接ピークまたは 1 つの (ノイズが多い可能性のある) ピークのいずれを含めるかをコントロールします。強度ディップが指定した値よりも低かった場合は、単一のピークとして報告されます。それ以外の場合は、ディップ内の最小強度ポイントにて、クラスターが個別のピークに 2 分割されます。ファクターを高めに設定することで、クラスターが複数のピークに分割するのを防ぐことができます。
Default Void Volume Retention Time	この時間よりも前に発生したピークはすべて無視されます。
Report Largest Peak	このパラメータを選択すると、保持時間ウィンドウ内の最大ピークが返されます。このパラメータを選択しなかった場合、予測保持時間に最も近いピークが検出されます。予測保持時間は Quantitation Wizard によって自動的に算出されます。

次の表には、双方の IntelliQuan アルゴリズムで使用できるパラメータが記されています。

表 6-5 : IQA II と MQ III 双方向の IntelliQuan アルゴリズム

パラメータ	定義
Default Minimum Peak Height	ピーク積分に必要な最小ピーク高です。
Default Minimum Peak Width	ピーク積分に必要な最小ピーク幅です。
Default RT Window	(ピーク検出の予測保持時間の中心に設けられる) 時間ウィンドウを指定します。たとえば保持時間を 30 秒に設定した場合、予測保持時間の前後に 15 秒が追加されます。
Default Smoothing Width	データスムージングに用いられるポイントの数です。
Default Concentration Units	サンプルの濃度を示すために用いられる濃度の単位 (例: pg/μL)。

表 6-5 : IQA II と MQ III 双方向けの IntelliQuan アルゴリズム (続き)

パラメータ	定義
Default Calculated Concentration Units	サンプルの算出濃度を示すために用いられる濃度の単位 (例: pg/ μ L)。

定量メソッド作成ツール

本ソフトウェアには 4 種類の定量化メソッド作成ツールが備わっています。いずれのツールを使用しても完全に機能するメソッドを作成できます。どのツールが最適かは、どのようなタスクを実行したいかによって異なります。

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。

役割とセキュリティの詳細な情報については、次のセクションを参照:ドキュメントの *人員および役割* について: *ラボ管理者ガイド*。

ウィザード

使用可能なメソッド作成ウィザードは、標準定量ウィザードと自動定量ウィザードです。いずれのウィザードでも、定量化したいバッチを 1 つまたは複数選択し、定量化メソッドを作成または選択して、サンプルデータを統合することができます。

違いは作成されるメソッドのタイプにあります。標準定量化ウィザードでは標準メソッドが作成される一方、自動定量化ウィザードではメソッドが作成された後、Results Table が自動的に生成されます。自動定量ウィザードでは、メソッド作成の一部としてピークが検証されません。ただし、統合後もピークをレビューすることは可能です。

一般的にピークの検証が不要となるのは、定量化の目的が統合のみであり、濃度が不要な場合です。この作業は、すべてのサンプルに異なる化合物が含まれている場合や、質量がサンプルごとに異なる場合などに必要となることがあります。このような場合は、自動ウィザードを使用します。それ以外の場合は、標準定量化ウィザードで定量化を実行します。

サンプル測定後に標準定量ウィザードを用いて以下を実行します。

- 代表サンプルを選択する。
- 分析試料ピークと内部標準ピークを選択する
- ピーク検出パラメータと積分パラメータを調整する。
- メソッド作成中にピークをレビューする。
- キャリブレーションを選択する。

自動定量ウィザードではバッチが選択され、メソッドが作成(ピークの確認作業はなし)された後、サンプルデータが統合されます。このウィザードは標準定量化ウィザードよりもスピーディに進行し、また全サンプルに対してスキャン済み質量を同一にする必要もありません。ただし内部標準を選択することはできません。いずれのイオンも分析試料として処理されます。

自動定量ウィザードは以下のような状況で、サンプル測定後に使用します。

- キャリブレーションの選択が必要。
- ピーク検出パラメータと積分パラメータの調整が不要。
- 分析試料ピーク名の選択が不要。
- 内部標準が一切不要。
- メソッド作成時のピークレビューが不要、または化合物がサンプルごとに異なる。

ピークのみが統合される場合は、濃度計算が不要なため、ピークを検証する必要はありません。この場合、自動定量化ウィザードを使用すると、統合後にピークを確認できます。

自動メソッドを用いてピークを検出する。

本ソフトウェアでは標準ピーク検出プロセスが用いられますが、以下の例外が存在します。

- バンチングファクターと(ウィザードによって特定された)スムージングの数が用いられる。
- 予測保持時間とノイズノ領域閾値がピークごとに個別に算出される。

Quantitation Method Editor

このオプションは、サンプル測定後に以下を実行する場合に使用します。

- ピーク検出パラメーターと積分パラメーターを調整する。
- 分析試料ピークと内部標準ピークを選択する。
- キャリブレーションを選択する。

Quantitation Method Editor を使用して、以下の 3 つの追加タスクを実行します。

- 積分に向けてイオンを合計する。
- 他の期間または実験に属する内部標準を使用する(分析試料とは異なる期間または実験から内部標準を入手した場合)。
- 既存のメソッドを編集する。

Semi-Automatic Method Editor

Semi-Automatic Quantitation Method Editor は、Batch Editor の一機能です。Semi-Automatic Quantitation Method Editor は、データ収集に先立ち、サンプルタイプやサンプル濃度などの定量情報を選択する際に使用します。この準備作業により、以後定量分析を容易に実行できるようになります。また、Batch Editor でフルメソッドを選択すれば、バッチランの終了時にこのメソッドが自動的に実行され、定量結果テーブルが生成されます。

Quick Quant 機能を使用してサンプルタイプや濃度をデータファイルに保存する場合、自動生成された Quick Quant メソッドを用いて定量化を実施することは避けてください。この定量メソッドは、ピークの選択用に最適化されている混合物およびサンプル特有の統合パラメーターを使用しません。

このオプションは以下のような状況で使用します。

- 同測定メソッドを用いて測定したサンプルがまだない。

- 分析試料／内部標準ピークの名前と質量を選択する必要がある。
- Batch Editor の Quantitation タブで濃度とサンプルタイプを選択する必要があるが、他の定量化メソッドが一切存在しない。
- 後で必要に応じて定量化メソッドを編集する必要がある。

半自動メソッドを用いてピークを検出する

本ソフトウェアでは標準ピーク検出プロセスが用いられますが、以下の例外が存在します。

- (Quantitation Method Options ダイアログで指定した)バンチングファクターと(Create Semi-Automatic Quantitation Method ダイアログで指定した)スムージングの数がそのまま使用されます。
- 最も濃度の高い標準が代表サンプルとして用いられます。保持時間を確立するため、同クロマトグラム内で最大のピークが用いられます。
- ノイズと領域閾値を設定するため、生成されるベースラインノイズが用いられます。(このプロセスは、通常のメソッドでピークに対してプリセット値を設定する手順と同一です。)これらの積分パラメーターは、他のすべてのサンプルに適用されます。
- 調査しているバッチに定量情報(サンプルタイプと濃度)が含まれていない場合は、完全自動メソッドと同様、保持時間と閾値がピークごとに個別に算出されます

メトリックプロット

メトリックプロットとは、1 つの Results Table カラムに含まれるデータを X 軸または Y 軸にプロットしたグラフ、あるいは 2 つのカラムに含まれるデータを互いにプロットしたグラフを指します。このセクションではメトリックプロットを生成して使用方法について説明します。

既定のメトリックプロットもいくつか用意されています。

- Int_Std_Response(問題のサンプルの場所を特定)
- Analyte_Area versus Height(クロマトグラフィーの動作を検証)
- PK プロファイル(「濃度」対「時間」のプロット、サンプルクエリ後に実行)

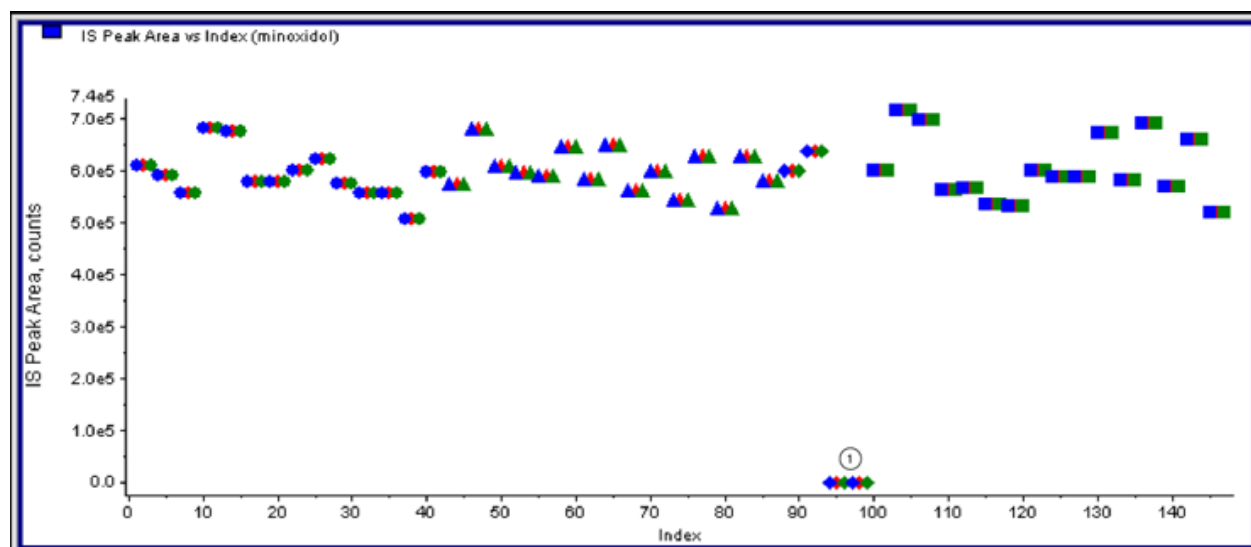
メトリックプロットを用いて、与えられたカラム、たとえば **Analyte Peak Area**、**Accuracy**、**Calculated Concentration** などを Results Table からプロットします。Results Table の 2 つのフィールドを互いにプロットすることも可能です。これにより、正常範囲外に表示されているポイントを調査することができます。メトリックプロットはたいいていクエリと併用されます。クエリの詳細な情報については、次のドキュメントを参照: *Help*。

メトリックプロットは次の方法で生成します。

- **Plot** ボタンを用いて、現在の Results Table の 1 つまたは複数のカラムをプロットすることができますが、プロット基準を保存することはできません。
- 現在の表とプロット基準を保存するには、表固有のプロットを作成します。
- 今後の Results Table でも使用するプロット基準を保存するには、グローバルなプロットを作成します。

QC、未知物質、ブランク、ダブルブランク、溶媒はキャリブレーションカーブには表示されませんが、これらのメトリックプロットは生成できます。

図 6-1 : 「内部標準のピーク領域」対「サンプル指数」のメトリックプロットの例



項目	説明
1	ダブルブランク

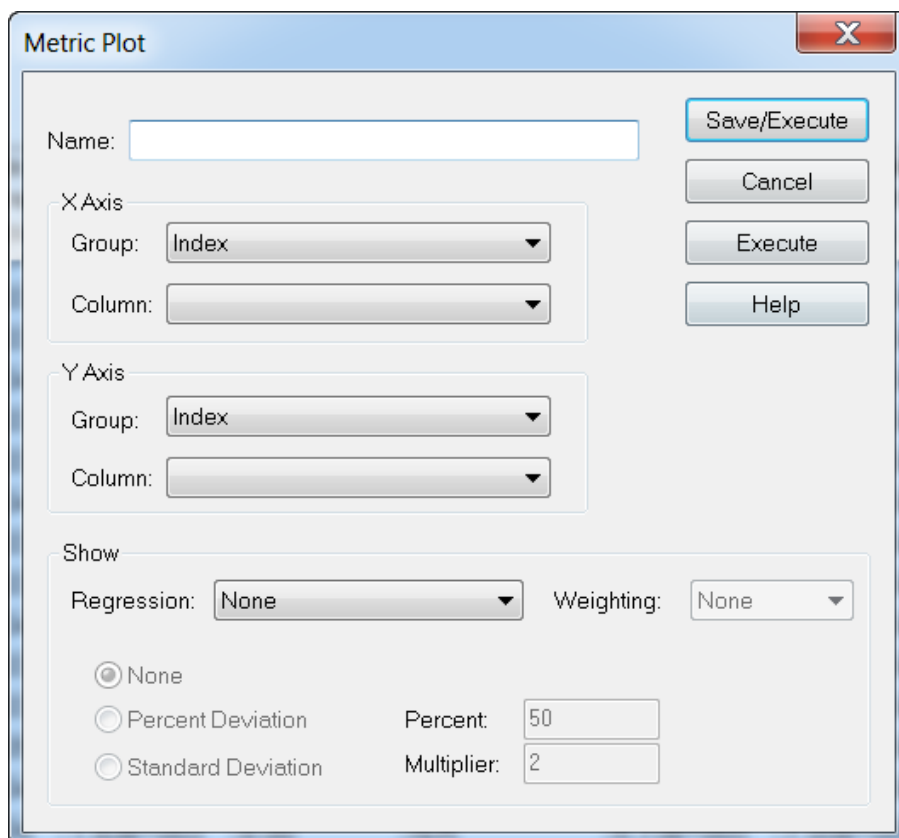
メトリックプロットを作成する

- 結果テーブルが開いた状態で、以下のいずれかを実行します。
 - データを y 軸にプロットするには(x 軸はインデックスとして使用)、プロットするデータが含まれる列の見出しをクリックします。
 - 最初を選択した列のデータを x 軸に、次に選択した列のデータを y 軸に表示するには、Ctrl キーを押しながら 2 つの列を選択してから、列の見出しをクリックします。
- 結果テーブルの上にある **Metric Plot by Selection** アイコンをクリックします。メトリックプロットが開きます。
- プロットペインを右クリックしてから Data Legend をクリックすると、プロットで用いられている色についての説明が表示されます。
- プロットペインを右クリックしてから Point Legend をクリックすると、プロットで用いられているシンボルについての説明が表示されます。

メトリックプロットを生成してプロット基準を保存する

- 該当する Results Table を開きます。
- Results Table の場所を右クリックして、**Metric Plot > New** をクリックします。

図 6-2 : Metric Plot ダイアログ

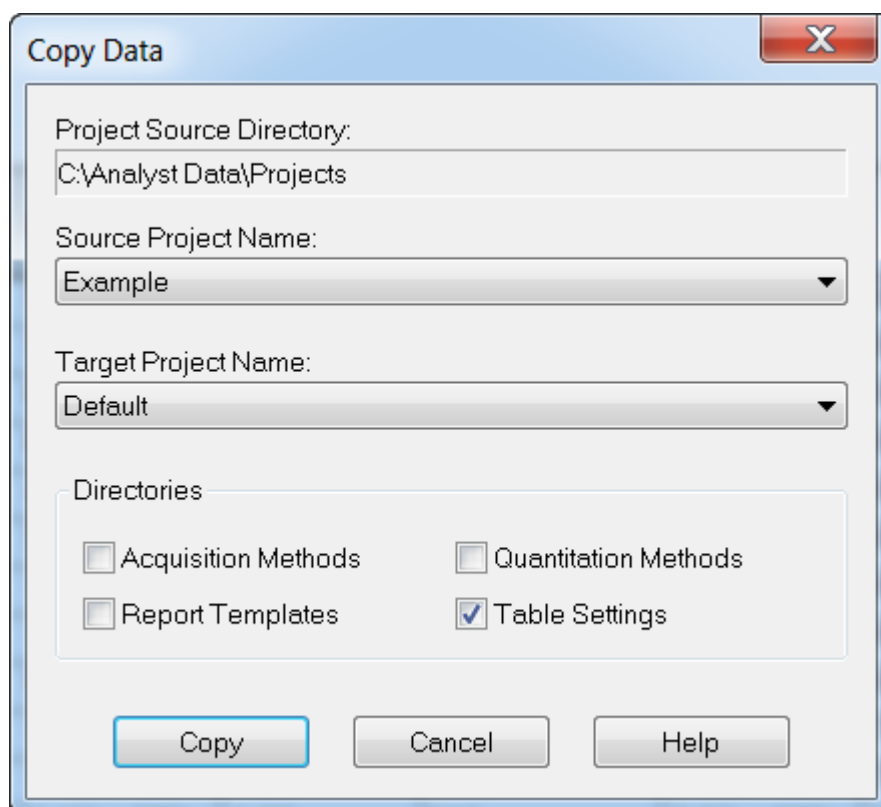


3. **Name** フィールドに、新しいプロット基準の名前を入力します。
4. X-Axis グループの **Group** リストで、**Index** を選択し、**Column** リストを空白にすると、X 軸をインデックスとして使用して Y 軸にフィールドをプロットします。
5. 必要に応じて、Y-axis グループの **Group** リストで **Internal Standard** を選択し、次に **Column** リストで **IS Peak Area** を選択して、2 つの列を相互にプロットします。
6. 必要に応じて、**Regression** リストで使用する回帰タイプを選択してから、回帰設定を適宜に選択します。
7. プロットを生成してプロット基準を保存するには、**Save/Execute** をクリックします。
メトリックプロットが開きます。詳細な情報については、次の図を参照: 図 6-1。
8. プロットペインを右クリックし、**Data Legend** をクリックすると、プロットで用いられている色についての説明が表示されます。
9. プロットペインを右クリックし、**Point Legend** をクリックすると、プロットで用いられているシンボルについての説明が表示されます。
これで、この Results Table で今後プロットを作成する際に、この基準セットを使用できるようになります。Results Table を右クリックすると、基準にアクセスできます。プロット基準は編集も可能です。
10. 問題のサンプルを表示するには、未知物質の濃度を時間に対してプロットするか、内部標準の領域をインデックスに対してプロットしてみてください。

今後の結果表用のデフォルトのプロット基準の保存

1. 結果表を右クリックし、**Table Settings > Export To New Table Settings** をクリックします。これにより、rdb から表設定がエクスポートされるため、プロジェクト内の他の定量ランで再利用することが可能です。
2. 表設定を他のプロジェクトにエクスポートするには、**Tools > Project > Copy Data** をクリックします。

図 6-3 : Copy Data ダイアログ



ノイズ/領域しきい値パラメータ

本ソフトウェアでピークを特定するには、ノイズ/領域しきい値パラメータのセットが必要です。これらのパラメータはソフトウェア内部で設定されますが、後でユーザーが変更することも可能です。ソフトウェアはパラメータを次のように設定します。

1. いずれかの 2 つの連続データポイント間の最大強度差が算出されます。この数値は、2 つの強度の間の差を表しています(実際の強度ではありません)。
2. 強度差がステップ 1 で算出した値の 5%未満の連続ペアごとに、強度差の標準偏差(ゼロ平均を使用)が算出されます。強度差が最大値の 5%を超えるポイントのペアは使用されません。
 - ノイズしきい値は、ステップ 2 で計算された標準偏差に等しくなります。
 - 領域しきい値は、ノイズしきい値の 5 倍の値と等しくなります。

注: ノイズ/領域しきい値の最小値は 0.000001 です。前の計算によってこの最小値よりも小さな値が算出された場合、このしきい値が 0.000001 でリセットされます。

ノイズ/領域しきい値を再計算する

新たなバックグラウンド領域が定義されると、ノイズ/領域しきい値パラメータが以下のように再計算されます。

データポイントの連続ペアごとに、ゼロ平均を用いて強度差の標準偏差が算出されます。Analyst MD ソフトウェアでは、選択した領域がバックグラウンドノイズであると明確に指示されているため、選択範囲内のあらゆるポイントが用いられます。

- ノイズしきい値は、選択した範囲から計算された標準偏差に等しくなります。
- 領域しきい値は、ノイズしきい値の 5 倍の値と等しくなります。

注: ノイズ/領域しきい値の最小値は 0.000001 です。前の計算によってこの最小値よりも小さな値が算出された場合、このしきい値が 0.000001 でリセットされます。

ピーク積分

ピーク検出時には、以下の積分タイプを用いてベースラインが検出／積分されます。

- **Manual**: ピークがユーザーによって手動で積分されたことを示します。
- **Automatic**: ピークが以下のように自動的に積分されたことを示します。
 - **Baseline-to-baseline**: ピーク領域の定義に、ベースラインに伸びたピークの開始／終了地点にある垂直ドロップラインが用いられます。この積分タイプは、その直前または直後に他のピークが存在しないピークにおいてのみ可能です。
 - **Valley**: baseline-to-baseline と同様ですが、直前または直後に他のピークが存在するピークに対してのみ適用されます。
 - **Exponential Skim**: ピーク領域が、指数スキムの主要ピークまたは親ピークとなっています。
 - **Exponential Child**: ピーク領域が子ピークとなっていることから、指数スキムが生じます。

Peak Review

ピークレビューの最中には、ソフトウェアによって選択されたピークのサーベイを実行し、必要に応じてピークまたは開始/終了ポイントを再定義できます。

一般的に、本ソフトウェアは分析試料ピークと内部標準ピークを正確に特定することに長けています。ただし、サンプル取得や定量化メソッドの定義などに起因するさまざまな理由により、適切なピークを逃す、誤ったピークが選択される、あるいはピークをまったく特定できないような状況も発生します。また、ソフトウェアによってピークが適切に特定されているにもかかわらず、その開始/終了ポイントについてユーザーが納得できないような場合も考えられます。

ピークレビューに関するヒント

実行する作業	実行する操作
ピーク積分:ピークのレビュー方法	すべてのピークをレビューするには、すべてのサンプルが Results Table にリストされていることを確認します。 Peak Review ウィンドウには、Results Table にリストされているピークしか表示されません。一部のサンプルがテーブルに表示されない状態(クエリが適用されている場合など)では、これらはピークレビューでも非表示となります。
ピーク積分:バッチ内の最初のピークを移動するには	Peak Review ペインの任意の場所を右クリックし、 Show First Page をクリックします。バッチ内の最後のピークに移動するには、Peak Review ペインのいずれかの場所を右クリックし、 Show Last Page をクリックします。

ピークを検出する

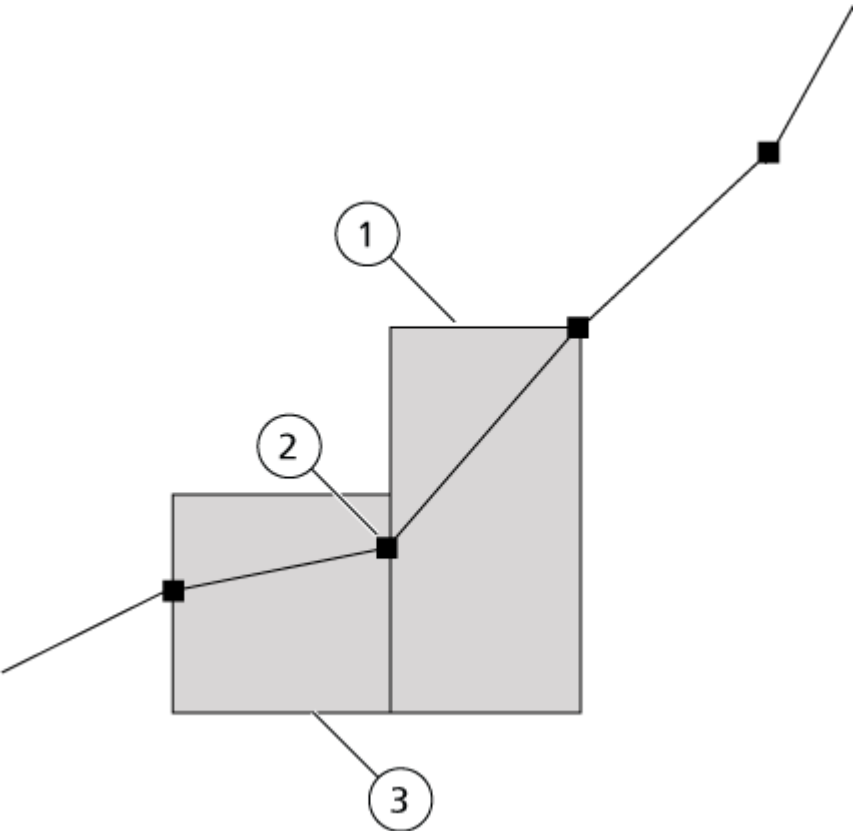
本ソフトウェアで、ピークは4つの段階を経て検出されます。

1. それぞれのバンチドポイントと前のバンチドポイントとの距離を調べることで、潜在的ピーク開始地点が検出されます。距離が現在のノイズしきい値を上回った時点で、潜在的ピーク開始地点が検出されます。
2. 領域しきい値を超えるのに十分なポイントが連続して存在していることを確認することで、ピーク開始地点が確定されます。
3. 前のポイントよりも低いポイントを検索することで、ピーク頂点が検出されます。
4. 特定のバンチドポイントと次のバンチドポイントとの距離がノイズしきい値を下回る場所を特定することで、ピークの終端が検出されます。必要に応じて、ピークが分離されます。

潜在的ピーク開始地点を検出する

本ソフトウェアでは潜在的ピーク開始地点を検出するため、バンチドポイントの連続ペア間の強度差が測定されます(測定は最初のポイントから開始します)。現在のノイズしきい値を上回る強度差が検出されると、そこが潜在的ピーク開始地点であると判断されます。

図 6-4 : 潜在的ピーク開始地点を検出する



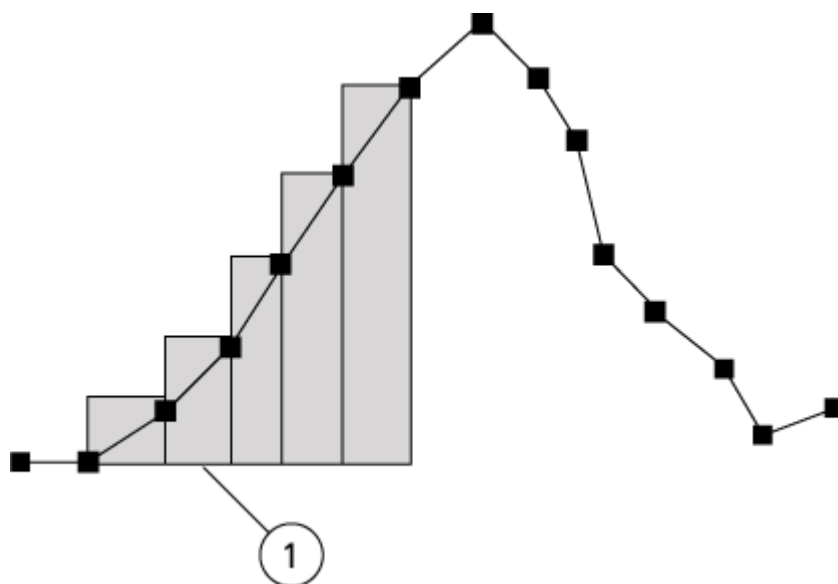
項目	説明
1	ノイズしきい値を超過している
2	潜在的ピーク開始地点
3	ノイズしきい値を超過していない

ピーク開始地点を確認する

実際のピークを確実に検出するために、ソフトウェアは曲線に沿って移動し、各バンチデータポイントの強度と潜在的なピークの強度の差を加算して、合計を計算します。このプロセスは連続ポイント間の強度差が、ノイズしきい値を下回った時点で終了します。この合計値は、ピーク前縁のおおよその領域を表します。この合計値が領域しきい値を超えた場合には、ソフトウェアによってピークの開始地点であると確定されます。

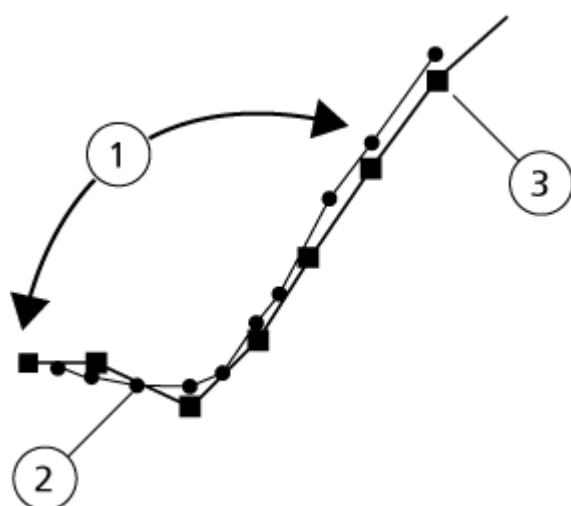
続いて潜在的ピーク開始地点から、ピークの最低ポイントが検出されるまで後方に移動することで、ピークの実際の開始地点が特定されます。この際、5 つの生データバンチを通して逆行します。このポイントが、実際のピーク開始地点となります。

図 6-5 : ピーク開始地点を確認する



項目	説明
1	領域スライスの合計が、領域のしきい値を超える

図 6-6 : 実際のピーク開始地点を確認する



項目	説明
1	この領域内のデータポイントが調べられます。
2	最小データポイント
3	潜在的ピーク開始地点

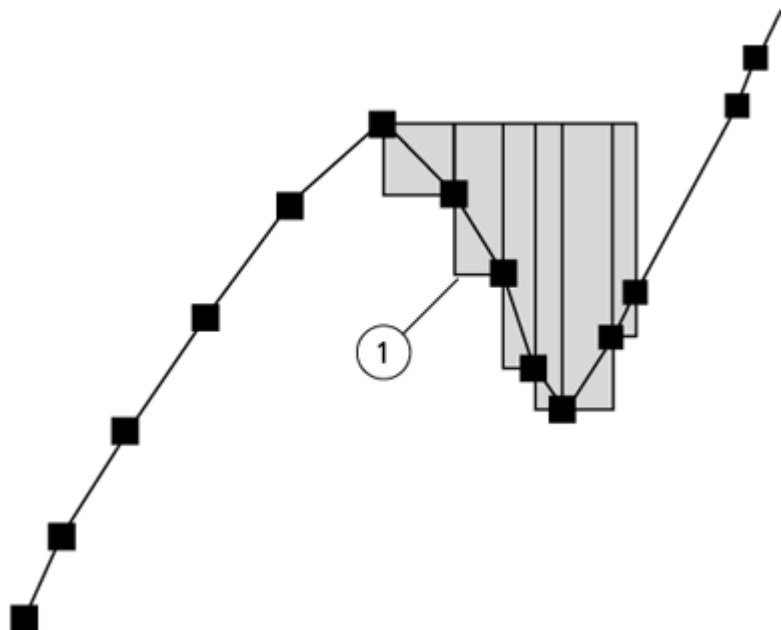
ピーク頂点を検出する

本ソフトウェアではピーク頂点を検出するため、前回のポイントよりも低いポイントが検索されます。続いて、頂点が適切に検出されたことを確認するため、潜在的な頂点と後続のバンチドポイントとの間の強度差が合計されます。この作業はピークの終端に到達するまで繰り返されます。ポイント間の合計距離が領域しきい値の $\frac{2}{3}$ を超えれば、ピーク頂点が確定します。つまり、本ソフトウェアではピークが存在するかどうかを最初に確認され、そこからピークの頂点を検出する作業へと逆行します。

ただし、領域テストに合格する前に高めのバンチドポイントが検出された場合、新たな頂点が特定され、領域テストがやり直されます。

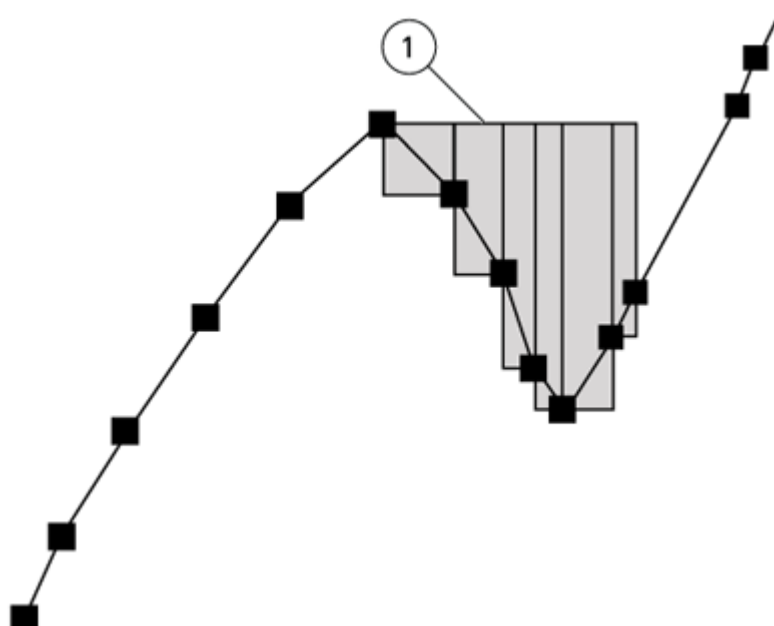
注: ピークの実際の保持時間は、単純に前述のポイントを表しているというわけではありません。これは、3 つの最高位データポイントにもとづいた二次方程式適合をもとに特定されます。

図 6-7 : ピーク頂点を検出する



項目	説明
1	領域スライスの合計が、領域しきい値の $\frac{2}{3}$ を超えています。

図 6-8 : 新しいピーク頂点を特定する



項目	説明
1	肩に最大値が含まれていますが、累積頂点領域の合計は領域しきい値の 2/3 を超えていません。

ピーク終点を検出する

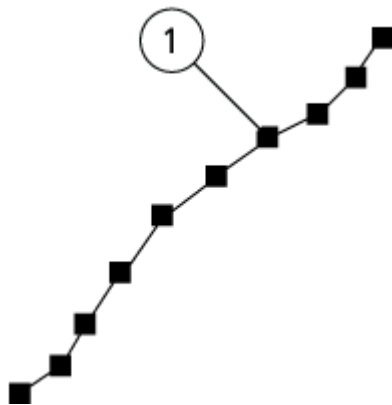
本ソフトウェアでは、以下のいずれかの状況が発生した場所がピーク終点であると判断されます。

- 2つの連続ポイント間の差異が、ノイズしきい値テストの基準を満たさない。
- ソフトウェアによって新たなピークの開始位置が検出された。

いずれの場合においても、最後の5つのバッチの最低バッチドポイントが、ピークの実際の終点であると判断されます。

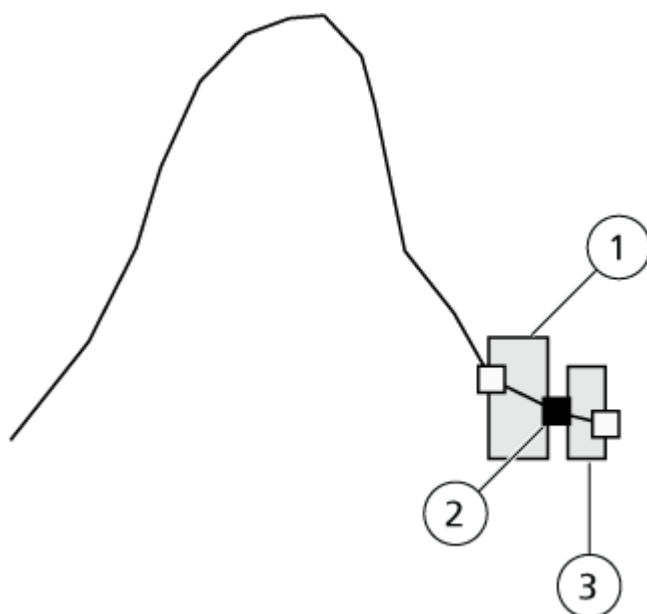
ソフトウェアは通常、各クロマトグラムについて複数のピークを検出します。ソフトウェアによって選択されたピークは、メソッドで指定した予測保持時間に最も近い保持時間を持つピークです。いずれのピークにも指定された保持時間が存在しない場合、これらのピークは「未検出」と記録されます。

図 6-9 : ピークを検出する



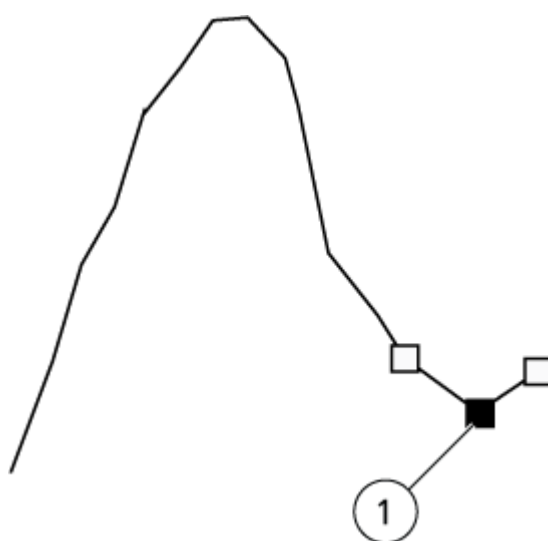
項目	説明
1	肩に個別の最大点が見られない

図 6-10 : ピーク終点を検出する:事例 1



項目	説明
1	ノイズしきい値を超過している
2	ピーク終点
3	ノイズしきい値を超過していない

図 6-11 : ピーク終点を検出する:事例 2



項目	説明
1	ピーク終点

ピークを分離する

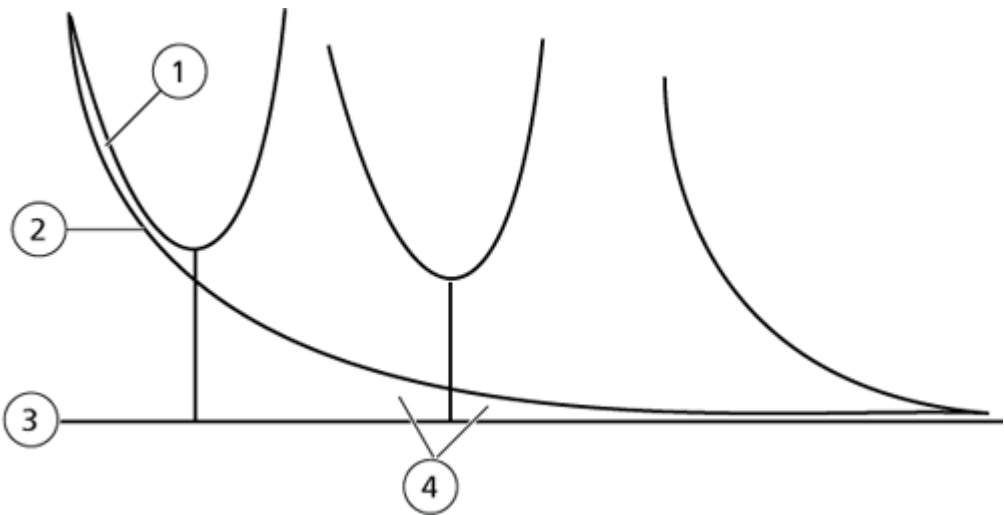
現在のピークがベースラインに達する前に新しいピークが開始した場合、本ソフトウェアでは以下の基準に基づいて、指数スキムを用いてベースラインを分解すべきかどうか特定されます。スキムは、プリカーサーの後に発生する 1 つまたは複数のピークの下を通ります。これらのピークはプロダクトピークと呼ばれています。

指数スキムの実行時には、スキム下の領域がプロダクトピークから取り除かれ、プリカーサーに与えられます。続いて、スキム上の小さな領域がプリカーサーピークから取り除かれ、最初のプロダクトピークに与えられます。

本ソフトウェアでは以下の基準に基づいて、指数スキムを実行すべきかどうか判断されます。

- Exponential Peak Ratio
- Exponential Adjusted Ratio
- Exponential Valley Ratio

図 6-12 : ピークの分離: 指数スキム



項目	説明
1	この領域がプリカーサーピークから除去され、最初のプロダクトピークに追加されます。
2	指数スキム
3	クラスターベースライン
4	これらの領域がプロダクトピークから除去され、プリカーサーピークに追加されます。

クエリー

クエリーとは、特定の基準を満たすレコードを選択するための手段です。クエリーを使用すれば、テキストまたは数式を用いて、結果テーブルに記されたデータの関心部分を表示することができます。プロジェクトに保存されたクエリーは、そのプロジェクト内のあらゆる結果テーブルに対して使用できます。

クエリーを使用すると、選択した基準と一致するデータ行のみがテーブルに表示されます。列はすべて表示されます。最初のクエリーの結果に対して 2 つ目のクエリーを実行することで、選択をさらに絞り込むことができます。

既定オプションに追加の要素を加えたクエリーを作成すれば、これを実行、保存、修正することが可能です。クエリーの各ラインはブール検索のように機能し、結果テーブルの列が検索され、どのレコードを表示すべきかが特定されます。クエリーの各ラインをもとに、基準と一致するレコードのみが表示対象として選択されます。プリセットクエリーまたはテーブル特有クエリーも作成できます。

結果テーブルのデータの分析に用いられたクエリーはすべて検証することが推奨されます。

サンプルタイプに対するクエリー

標準サンプルタイプのみを選択するよう設計されたクエリーを実行した場合、Sample Type 列に Standard と記されたデータ行しか結果テーブルに表示されません。

デフォルトクエリとテーブル特有クエリ

デフォルトクエリは通常、特定の基準を満たしていないサンプルを識別するために用いられます。テーブル特有クエリは通常、特定の基準と一致するレコードを識別するために用いられます。

デフォルトクエリは通常、品質管理 (QC) または標準に伴う問題を検出するために用いられます。Quantitation Method Wizard で QC/標準の濃度と最大変動が選択されている場合、Results Table にはこの範囲に収まらないサンプルのみが表示されます。Results Table に何も表示されなければ、サンプルはすべて正常です。Execute Query as Standard Query チェックボックスを選択した場合、Results Table にすべてのサンプルが表示されますが、サンプルがクエリを満たしているかどうかに応じて、Standard Query Status 列に Fail または Pass のいずれかが示されます。

テーブル特有クエリが表示中の Results Table に対して実行され、特定の基準を満たすレコードが選択されます。これらのクエリは、テーブルを右クリックすることで表示されるメニューを介して設計します。以後の Results Table でも使用できるよう、クエリを保存してエクスポートします。

テーブル特有設定またはグローバル設定

テーブル設定オプションでの作業時には、手順をテーブル特定とグローバルのいずれかにできます。

- **テーブル特有設定:** テーブル設定がそのテーブル自体で修正された場合、設定への変更はそのテーブルにしか使用できません。ただし、グローバル設定にエクスポートすることは可能です。
- **グローバル設定:** グローバル設定の修正では設定のグループに変更が加えられることから、以後の Results Table にも適用できます。作成中の Results Table をカスタマイズするには、Create Quantitation Set: Select Settings & Query ページで設定のグループを選択します。設定のグループが選択されなかった場合、プリセット設定が自動的に用いられます。

正確度の変動が結果にもたらす影響

プリセットクエリでは、正確度はパーセンテージとして示され、その値のプラスまたはマイナス記号として適用されます。たとえば、Create Default Query ダイアログで **Maximum Variation for standards** に「10」と入力した場合、Results Table には精度が 90%～110%の範囲外である標準を含む全レコードが表示されます。また「5」と入力すると、Results Table には正確度が 95%未満か 105%を上回る標準のみが表示されます。次のセクションを参照：[Results Table](#)。

回帰方程式

このセクションでは、回帰曲線の計算に使用する式について説明します。 x 以下の各式では、 x は標準サンプルにおける分析試料濃度を表し、 y は対応するピーク領域または高さを表します。回帰に使用する正確な変数は、次の表に示すように、内部標準が使用されているかどうか、およびピーク領域とピーク高さのどちらが使用されているかによって異なります。

表 6-6：回帰変数

内部標準濃度の使用	面積の使用	x	y
はい	はい	$C_a / C_{\text{である}} / DF$	$A_a / A_{\text{である}}$
はい	いいえ	$C_a / C_{\text{である}} / DF$	$H_a / H_{\text{である}}$
いいえ	はい	C_a / DF	A_a
いいえ	いいえ	C_a / DF	H_a

ここで：

- C_a = 実際の分析試料濃度
- $C_{\text{である}}$ = 内部標準濃度
- DF = 希釈係数
- A_a = 分析試料のピーク領域
- $A_{\text{である}}$ = 内部標準のピーク領域
- H_a = 分析試料のピーク高
- $H_{\text{である}}$ = 内部標準のピーク高さ

適合オプション

適合とは、データに適用される回帰分析のタイプを表します。適合オプションには、線形、ゼロ点通過線形、平均レスポンスファクター、指数、二次があります。

線型回帰

線形回帰では、標準ポイントが直線状に並んでいると仮定されます。

線形キャリブレーション方程式：

$$y = mx + b$$

傾きと切片は以下のように計算されます。

$$m = (\sum w \sum wx y - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

ここで:

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

ゼロ点通過線型

ゼロ通過線形回帰では、標準ポイントが直線状に並び、かつポイントが x 軸と y 軸のゼロ点と一致するものと仮定されます。この設定を用いることで、線がゼロ点を通るよう強制できます。

ゼロ点を通る線形キャリブレーション方程式:

$$y = mx$$

傾きは以下のように計算されます。

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

平均応答係数

平均応答係数キャリブレーション:

$$y = mx$$

これは、ゼロ点を通る線形キャリブレーション方程式と同じものです。しかし、傾きは以下のように異なる形で算出されます。

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

応答係数の標準偏差:

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1)) / \sum w}$$

ここで:

$$D = \sum w \sum wy^2 / x^2 - (\sum wy / x)^2$$

注: x の値が 0 であるポイントは、合計から除外されます。

ポイントの線に直線性および湾曲が見られる場合、それらの間で線を作成する際に線形回帰または二次回帰の代わりに指数回帰を使用してください。

指数

指数関数キャリブレーション方程式:

$$y = ax^p$$

線形キャリブレーション用の方程式が上記の説明に従って使用され、傾き(m)および切片(b)の計算が行われます。ただし、この方程式中の x は $\ln x$ に、y は $\ln y$ に置き換えられます。この場合、a および p は以下のように計算されます。

$$a = e^b$$

$$p = m$$

x または y の値のいずれかが負の数、またはゼロである場合、エラーが報告されます。

二次

二次キャリブレーション方程式:

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

多項式係数は以下のように計算されます。

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum wy - a_1 \sum wx - a_2 \sum wx^2) / \sum w$$

ここで:

$$b_0 = \sum wx / \sum w - \sum wx^2 / \sum wx$$

$$b_1 = \sum wx^2 / \sum w - \sum wx^3 / \sum wx$$

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$

$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2 y / \sum wx^2$$

重み付け係数

以下の表には、7 種類ある各加重ファクター(w)がそれぞれどのように算出されるかが示されています。

表 6-7 : 重み付け係数

重み付けの種類	Weight(w)
なし	常に 1.0。
$1/x$	$ x < 10^{-5}$ の場合、 $w = 10^5$ 。そうでない場合、 $w = 1/ x $
$1/x^2$	$ x < 10^{-5}$ の場合、 $w = 10^{10}$ 。そうでない場合、 $w = 1/x^2$
$1/y$	$ y < 10^{-8}$ の場合、 $w = 10^8$ 。そうでない場合、 $w = 1/ y $
$1/y^2$	$ y < 10^{-8}$ の場合、 $w = 10^{16}$ 。そうでない場合、 $w = 1/y^2$
$\ln(x)$	$x < 0$ の場合、エラーが生成される。 $< 10^{-5}$ の場合は $w = \ln 10^5$ に、それ以外の場合は $w = \ln x $ になります。
$\ln(y)$	$y < 0$ の場合、エラーが生成される。 $< 10^{-8}$ の場合は $w = \ln 10^8$ に、それ以外の場合は $w = \ln y $ になります。

Report Templates

このセクションでは、レポートテンプレートに使用できる各種エレメントについて説明します(テンプレートは、ナビゲーションバーの **Configure** セクションにある **Report Template Editor** を使用 (Analyst MD ソフトウェア))。

レポートのヘッダーとフッターには、以下の情報を追加できます。

注: これらを編集する前に、既存のレポートテンプレートのバックアップを作成してください。

表 6-8 : 基本デザインエレメント

エレメント	定義
Printing Date	(印刷日) ドキュメントが印刷された日付。
Printing Time	(印刷時間) ドキュメントが印刷された時間。
Operator	(オペレータ) ドキュメントを印刷したオペレータ。
Workstation	(ワークステーション) ドキュメントの印刷元のワークステーション。
Page n of N	(n/N ページ) 総ページ数のページ番号。
Custom Field	(カスタムフィールド) カスタマイズされたテキストをここで作成します。
Analyst Version	(Analyst のバージョン) Analyst MD ソフトウェアのバージョン。
User Type	(ユーザータイプ) ユーザータイプ(セキュリティ)。
Electronic Signature	電子署名電子署名機能(セキュリティ)が有効か無効かを示します。

表 6-9 : 測定エレメント

エレメント	定義
Acquisition File	サンプル測定情報が含まれたデータファイルの名前。
Acquisition Date	サンプルが測定された日付。
Acquisition Time	サンプルが測定された時刻。
Operator	サンプルバッチを実行したオペレータの名前。
Batch Name	バッチの名前。
Sample Number	サンプルに関連した番号。
Sample Name	サンプルの名前。
Sample Comment	Acquisition Method Editor を介して入力されたサンプルに関するコメントです。
Sample ID	サンプルの識別番号。
Scan Mode	スキャン/フル質量範囲スキャンに向けて質量ポイントを算出するために用いられたメソッド。
Scan Type and Polarity	測定スキャンタイプ (Q1、Q3、MRM、プロダクトイオン、プリカーサーイオン、ニュートラルロス/ゲイン) と測定メソッドの極性 (正または負)。
Scan Mass(es)	スキャン対象のイオンまたはイオンフラグメント。
Dwell Time	システムによって特定の質量がスキャンされるまでに要する時間。
Pause Time	質量範囲のスキャン間、または実験間の一時停止時間。
Ion Energy	イオンエネルギーは取得方法から得られ、IonSpray イオン源電圧または衝突エネルギーに関連しています。
Collision Energy	衝突エネルギーは取得方法から発生し、IonSpray イオン源電圧に関連しています。
Period and Experiment	期間には一群の実験が含まれます。実験には、数多くのプロパティ (Scan Type 、 Scan Mode 、 Resolution 、 Ion Source Parameters 、質量範囲または質量の集合体など) が含まれています。
State Table Parameters	実験で用いられる質量分析装置のパラメータ。
ポンプ	実験に用いられるポンプの名前。
オートサンプラー	実験に用いられるオートサンプラーの名前。
カスタム注釈	Batch Editor で追加されるカスタムテキスト。
収集者	データを収集した人物の名前。

表 6-10 : 定量エレメント

エレメント	定義
Results Table Name	Results Table の名前。
Results Table Path	Results Table の場所。
Method Name	定量化メソッドの名前。
Method Path	メソッドファイルの場所。
Project Name	プロジェクトの名前。

レポートをカスタマイズする

Report Template Editor では、ヘッダー、フッター、ページレイアウトを設定することでレポートをカスタマイズできます。レポートテンプレートを用いれば出力を印刷したり、データを他のアプリケーションにエクスポートしたりできます。

印刷された出力には、いくつかのタイプのエレメントが含まれています。

- **ウィンドウ**: ソフトウェアウィンドウの作業領域 (ツールバーの下、ならびにナビゲーションバーの右側) でウィンドウが開きます。ウィンドウを印刷すると、その領域に表示されているすべての内容が印刷されます。
- **ペイン**: ペインとは、互いに重ならないよう配置されたウィンドウの一部分であり、常にフル表示されます。たとえば、Method Editor ウィンドウには、Browser ペインと Method Editor ペインの 2 つのペインがあります。ユーザーは、ウィンドウ内の各ペインに含まれる情報を印刷できます。
- **レポート**: ソフトウェア内で作成／構造化されたレポートと情報のセットです。一部のレポート (キャリブレーションレポートなど) は直接印刷できます。他の情報 (バッチ／定量結果テーブルなど) は先にエクスポートする必要があります。

レポートをプレビュー、印刷、エクスポートする

測定メソッド、バッチ、定量 Results Table、グラフ Results Table は、レポートとしてエクスポートできます。他の種類の情報 (計算機のデータなど) もエクスポートできますが、レポートテンプレートを使ってカスタマイズすることはできません。

画面に表示される領域の大半は印刷できます。印刷プレビュー機能を使用すれば、グラフをプレビュー、スケーリング、またはコピーすることができます。

エクスポートされたレポートは、Notepad、Microsoft Word、Excel などのプログラム、または LIMS (ラボ情報管理システム) ソフトウェアに適した形式で保存されます。

レポートは以下の形式でエクスポートします。

- csv
- doc
- pdf
- txt

定量データ分析

どの形式を使用できるかは、エクスポートする情報に応じて異なります。たとえば、グラフは pdf としてエクスポートできます。データテーブルは txt ファイルとしてエクスポートできます。

追加情報をレポートのヘッダーとフッターに含めるには、適切なレポートテンプレートを使用してレポートを印刷します。

表 6-11 : レポートをプレビュー、印刷、エクスポートする

実行する作業	実行する操作
グラフのプレビューを表示する	File > Print Preview > Pane. をクリックします
レポートをテンプレートなしで印刷する	File > Print をクリックし、印刷するレポートをクリックします。
レポートをテンプレート付きで印刷する	<ol style="list-style-type: none">1. File > Print & Report Setup.をクリックします2. Report Template セクションで、使用するテンプレートを選択し、OK.をクリックします。
レポートをエクスポートする	<ol style="list-style-type: none">1. File > Export.をクリックします2. File フィールドにファイルの名前を入力します。3. Save as type リストで、ファイルの種類を選択します。4. 定量モードでレポートをエクスポートする場合は、Export セクションから All Columns または Visible Columns のいずれかを選択し、Save をクリックします。

Results Table

Results Table には、それぞれの未知のサンプルに含まれる分析試料の (キャリブレーションカーブにもとづいた) 算出濃度が要約されます。また、キャリブレーションカーブと結果の統計も表示されます。

Results Table のデータは txt ファイルにエクスポートすることで、Microsoft Excel などの他のアプリケーションで使用できます。テーブルに含まれるすべての対象データ、または表示中の列のデータのみをエクスポートできます。

注: Analyst MD ソフトウェアからデータを出力するには、Results Tables のエクスポートやレポートなどの管理された方法のみを使用することをお勧めします。他の方法でのデータの出力 (Results Table からコピーして貼り付けるなど) は制御されていないため、使用しないでください。

Results Table のデータは以下の 3 種類の方法で並び替えることができます。

- いずれかの **Sort** ボタンを使用して、列 1~3 に基づいて表をすばやくソート: このソート基準は保存できません。
- テーブルに特有の並び替え基準を作成し、現在テーブル用の並び替え基準を保存する: テーブル特有の並び替え基準を用いることで、現在のテーブルを 1~3 列に基づいて並び替え、そのテーブルに再び使用できるよう基準を保存できます。

- 以前に作成したプリセット並び替え基準を使用する: 並び替え基準を作成/保存し、後の段階で Results Table に適用します。

ヒント! 並び替えまたはその他のテーブル設定を保存するには、テーブルを右クリックしてから **Table Settings > Export To New Table Settings** をクリックします。並び替えおよびその他のパラメータは、現在のプロジェクトで使用できます。別のプロジェクトでテーブル設定を使用するには、**Tools > Project > Copy Data** をクリックして別のプロジェクトにテーブル設定をコピーします。**Source Project Name** と **Target Project Name** を選択し、Directories 下の **Table Settings** のチェックボックスを選択して、**Copy** をクリックします。**Table Settings** を新しいプロジェクトで使用する場合は、**Table Settings** をコピーする前に、まず新しいプロジェクトを作成する必要があります。

Results Table の特定のレイアウトの表示

Results Table のデフォルトのビューは、フルレイアウトまたはサマリーレイアウトです。サンプルごとに複数の分析試料がある場合は、各分析試料を分析試料レイアウトで表示できます。

Results Table を開いてアクティブにした状態で、右クリックして次のフィールドの 1 つをクリックします。

表 6-12 : Results Table のレイアウト

フィールド	説明
Full	クリックして、完全レイアウトを表示します。
Summary	フィールド名をクリックします。
Analyte	単一の分析試料をクリックして、分析試料レイアウトを表示します。MRM または <i>Scheduled MRM</i> アルゴリズムの結果を表示する場合、ユーザーは Analyte をクリックして化合物 ID のリストを表示できます。
Analyte Group	分析試料グループをクリックして、分析試料グループのレイアウトを表示します。 ヒント! 新しい分析試料グループは最初に作成する必要があります。これを行うには、Results Table を右クリックして、 Analyte Group > New をクリックします。
Sample Type	クリックして特定のサンプルタイプを表示します。

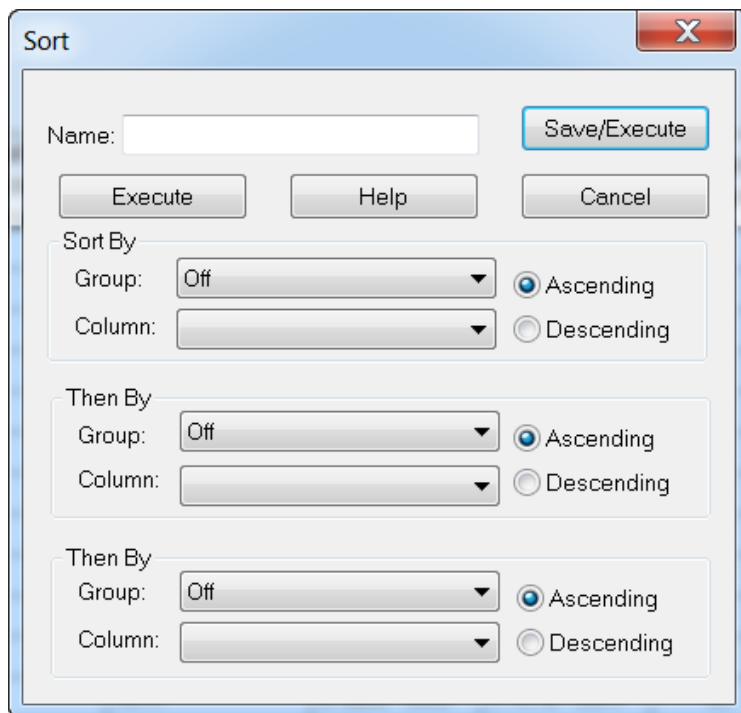
結果テーブルのデータを並び替える

1. 結果テーブルで、並び替える列を 3 つまで選択します。
2. 次のいずれかを実行します。
 - 昇順に並び替えるには **A-Z** をクリックします。
 - 降順に並び替えるには **Z-A** をクリックします。

結果表のソートおよびソート基準の保存

1. 結果表を右クリックしてから、**Sort > New** をクリックします。

図 6-13 : Sort ダイアログ

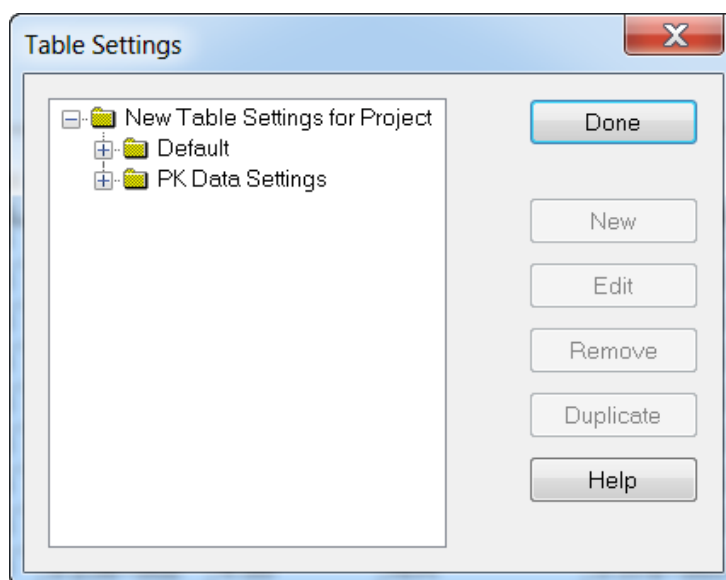


2. **Name** フィールドに、新しいソートの名前を入力します。
3. ソートルールごとに、**Sort By** と **Then By** セクションで次の操作を行います。
 - **Group** リストで、ソートの基準とするカラムの種類を選択します。
 - **Column** リストで、ソートの基準とするカラムを選択します。
 - ソート順(**Ascending** または **Descending**)を選択します。
4. 次のいずれかの操作を行います。
 - ソートを実行するには、ソート基準を保存し、**Sort** ダイアログを閉じて、**Save/Execute** をクリックします。
 - ソート基準を保存せずに、**Sort** ダイアログを閉じソートを実行するには、**Execute** をクリックします。

今後用いられる結果テーブル向けにデフォルトの並び替え基準を保存する

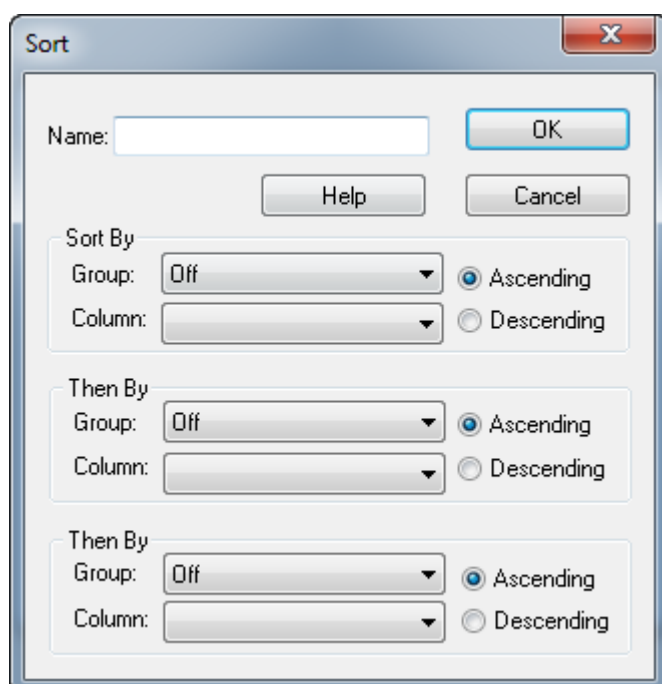
1. **Tools > Settings > New Quantitation Results Table Settings** をクリックします。

図 6-14 : Table Settings ダイアログ



2. **Table Settings** フォルダを展開し、**Default** フォルダをダブルクリックします。
3. 展開した **Default** フォルダで **Sorts** フォルダを選択します。
4. **New** をクリックします。

図 6-15 : Sort ダイアログ



5. **Name** フィールドに名前を入力します。
6. 設定する並び替えルールごとに、それぞれの Sort By セクションで以下を実行します。

- a. **Group** リストで列のタイプを選択します。
 - b. **Column** リストで列を選択します。
 - c. 並び替え順 (**Ascending** または **Descending**) を選択します。
7. 基準を保存して Sort ダイアログを閉じるには、**OK** をクリックします。
 8. **Done** をクリックします。

プリセット並び替え基準を使って結果テーブルを並び替える

結果テーブルを右クリックし、**Sort** をクリックして並び替え基準の名前を選択します。

Results Table でのクエリの使用について

クエリとは、Results Table 内のレコードに対して、テキストまたは数学的な選択基準を用いて特定の条件を設定するための要求です。クエリは Results Table の作成プロセス中、または Results Table の作成後に適用します。これら 2 種類のクエリは、デフォルトクエリおよびテーブル特有クエリと呼ばれています。次のセクションを参照: [デフォルトクエリとテーブル特有クエリ](#)。

Results Table のデータの分析に用いられたクエリはすべて検証することが推奨されます。

結果をバッチ間で比較する

Statistics ウィンドウで統合する分析試料の数および名前は一致している必要があります。

1. Results Table を開きます。
2. **Tools > Statistics.** をクリックします
3. 次のいずれかの操作を行います。
 - 結果を **Results Table** で整理するには、**Conc. as Rows** リストで **Group By Batch** を選択します。
 - 濃度順に結果を並び替えるには、**Conc. as Rows** リストで **Group By Concentration** を選択します。
 - 各グループまたはバッチの統計情報を示す行を表示せずに、結果を濃度順に並べるには、**Conc. as Rows** リストで **Group By Concentration (no All)** を選択します。

ソフトウェアが結果をソートします。各バッチまたはグループの最後に、1 つまたは 2 つの列が追加で表示されます: **All** (該当するグループの全 Results Table の統計) および **Average** (該当するバッチまたはグループの統計)。

濃度レベルが結果に及ぼす影響

濃度はすべての QC/標準に対して定義されます。濃度レベルの精度が、Create Default Query ダイアログの Max. Variation フィールドで指定した値を超えて変化した場合、この情報が結果テーブルに表示されます。

Results Table のレイアウト

本ソフトウェアでは、Results Table に以下の定義済みビューがあります。

- フルレイアウトビュー
- 概要レイアウトビュー
- 分析試料レイアウトビュー
- 分析試料のグループレイアウトビュー
- サンプルのタイプレイアウトビュー

分析試料レイアウトビューでは、複数の分析試料サンプルに含まれる分析試料を個別に表示できます。フルレイアウトがプリセットビューとなっています。

フルレイアウトビュー

プリセットされたフルレイアウトビューには、定量バッチに含まれる分析試料がすべて表示されます。どの列が表示されるかは、Results Table Columns ダイアログで選択した列、ならびに Quantitation Method Wizard の 2 ページ目で選択した設定に応じて変化します。

図 6-16 : サンプルのフルレイアウトビュー

	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name	Analyte Peak Area	Analyte Peak Height	Analyte Concentration
1	B series 0 blank	Blank	QuanData.Wiff	Peak 1	2.45e+002	6.02e+001	0.00
2	B series 0 blank	Blank	QuanData.Wiff	Peak 2	1.25e+004	4.53e+003	0.00
3	B series 0.1 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.80e+002	2.53e+002	0.00
4	B series 0.1 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.39e+004	4.93e+003	0.00
5	B series 0.2 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	1.55e+003	5.08e+002	0.00
6	B series 0.2 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.28e+004	4.27e+003	0.00
7	B series 0.5 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	3.32e+003	1.04e+003	0.00
8	B series 0.5 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.14e+004	4.20e+003	0.00
9	B series 1.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.12e+003	2.33e+003	0.00
10	B series 1.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.23e+004	4.35e+003	0.00
11	B series 2.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	1.50e+004	4.77e+003	0.00
12	B series 2.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.34e+004	4.83e+003	0.00
13	B series 5.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	3.70e+004	1.20e+004	0.00
14	B series 5.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.51e+004	5.29e+003	0.00
15	B series 10.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.73e+004	2.49e+004	0.00
16	B series 10.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	1.50e+004	5.41e+003	0.00
17	B series 20.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 1	7.61e+004	2.44e+004	0.00
18	B series 20.0 ng/mL	Standard	QuanData.Wiff	Peak 2	8.04e+003	3.13e+003	0.00

概要レイアウトビュー

概要レイアウトビューでは、それぞれの分析試料を対象とした「ロック済みの列」と「選択済みのフィールド」が残りの列に用意されています。たとえば、メニューで 2 種類の分析試料に対して Analyte Peak Area が選択された場合、Sample Name 列と Analyte Peak Area 列にこれらの分析試料の名前が表示されます。概要レイアウトビューには、Formula 列と Custom 列も示されます（これらが存在する場合）。

定量データ分析

図 6-17 : サンプル概要レイアウトビュー

	Sample Name	Peak 1	Peak 2
1	B series 0 blank	2.45e+002	1.25e+004
3	B series 0.1 ng/mL	7.80e+002	1.39e+004
5	B series 0.2 ng/mL	1.55e+003	1.28e+004
7	B series 0.5 ng/mL	3.32e+003	1.14e+004
9	B series 1.0 ng/mL	7.12e+003	1.23e+004
11	B series 2.0 ng/mL	1.50e+004	1.34e+004
13	B series 5.0 ng/mL	3.70e+004	1.51e+004
15	B series 10.0 ng/mL	7.73e+004	1.50e+004
17	B series 20.0 ng/mL	7.61e+004	8.04e+003
19	Unknown concentra	1.23e+004	8.39e+003
21	Unknown concentra	8.71e+003	5.71e+003
23	Unknown concentra	1.12e+004	7.18e+003
25	Unknown concentra	1.32e+004	7.36e+003
27	Unknown concentra	1.25e+004	7.14e+003
29	Unknown concentra	1.10e+004	6.50e+003
31	Unknown concentra	1.36e+004	7.94e+003

分析試料レイアウトビュー

分析試料レイアウトビューには、特定の分析試料のデータが表示されます。他の分析試料はすべて非表示になります。たとえば分析試料 A が選択されると、分析試料 A の全データが表示されます。どの列が表示されるかは、Results Table Columns ダイアログで選択した列、ならびに Quantitation Method Wizard の 2 ページ目で選択した設定に応じて変化します。

ピーク 1 が選択された分析試料レイアウトビューは、次の図のようになります。このビューでは、フルレイアウトビューに表示されている他のすべての行が除外されます。

図 6-18 : サンプル分析試料のレイアウトビュー

	Sample Name	File Name	Analyte Peak Area	Analyte Peak Height	Analyte Concentration	Use Record	Record Modified
1	B series 0 blank	QuanData.Wiff	2.45e+002	6.02e+001	0.00		<input type="checkbox"/>
3	B series 0.1 ng/mL	QuanData.Wiff	7.80e+002	2.53e+002	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
5	B series 0.2 ng/mL	QuanData.Wiff	1.55e+003	5.08e+002	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
7	B series 0.5 ng/mL	QuanData.Wiff	3.32e+003	1.04e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
9	B series 1.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.12e+003	2.33e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
11	B series 2.0 ng/mL	QuanData.Wiff	1.50e+004	4.77e+003	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
13	B series 5.0 ng/mL	QuanData.Wiff	3.70e+004	1.20e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
15	B series 10.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.73e+004	2.49e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
17	B series 20.0 ng/mL	QuanData.Wiff	7.61e+004	2.44e+004	0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
19	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.23e+004	4.30e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
21	Unknown concentra	QuanData.Wiff	8.71e+003	2.53e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
23	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.12e+004	3.40e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
25	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.32e+004	4.24e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
27	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.25e+004	4.04e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
29	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.10e+004	3.96e+003	N/A		<input type="checkbox"/>
31	Unknown concentra	QuanData.Wiff	1.36e+004	5.16e+003	N/A		<input type="checkbox"/>

分析試料のグループレイアウトビュー

分析試料グループレイアウトビューには、特定のグループに属している分析試料のデータが表示されます。Results Table Columns ダイアログに表示されているように、選択された列は、Results

Table に表示されます。次のグラフィックスを参照してください。Results Table に **Analyte Peak Name** 列を表示すると、グループに属している分析試料の名前を表示します。

図 6-19 : サンプル分析試料のグループレイアウトビュー

Formula:		Analyte Group: Minoxidols Only			
		Query: None			
		Idle			
		Sort : Unsorted			
	Sample Name	Sample ID	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name
1	STD 1		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
2	STD 1		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
3	STD 2		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
4	STD 2		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol
5	STD 3		Standard	Mix_batch_1.wiff	minoxidol

サンプルのタイプレイアウトビュー

サンプルタイプレイアウトを使用すると、ユーザーはサンプルタイプで Results Table をフィルタリングできます。

図 6-20 : サンプルのタイプレイアウトビュー

		Sample Type: Standard		
		Query: None		
		Idle		
		Sort : Unsorted		
	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Area (counts)
1	STD 1	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.63e+005
2	STD 1	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.68e+005
3	STD 2	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.31e+005
4	STD 2	Standard	Triple Quad\Mix_ba	6.11e+005
5	STD 3	Standard	Triple Quad\Mix_ba	6.58e+005
6	STD 3	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.76e+005
7	STD 4	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.72e+005
8	STD 4	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.94e+005
9	STD 5	Standard	Triple Quad\Mix_ba	5.61e+005

Results Table フィールド

標準結果テーブルに列を追加し、Analyte/Internal Standard/Record フィールド用に DAD (ダイオードアレイ検出器) データを表示します。

Formula フィールド

Formula フィールドには、ユーザーが定義したスプレッドシート式の数式結果が表示されます。Formula フィールドは、結果テーブルに Formula 列が少なくともひとつ存在する場合に限り、結果テーブルの上部に表示されます。Formula フィールドは、Formula 列のセルが選択されるとアクティブになります。Formula 列が選択されると、Formula フィールドの下にある Delete Formula Column ボタンも使用できるようになります。

Formula 列の使用した場合、ユーザーは結果を検証することが推奨されます。

カスタムフィールド

カスタムフィールドには、測定プロセス中に定義した情報が記されます。ユーザーはサンプルの測定時にカスタム列を作成し、これらに入力するデータタイプを定義できます。カスタム列が結果テーブルに配置されれば、他の列と同じように処理できます（移動する、非表示にする、数式のベースとするなど）

内部標準列フィールド

Results Table の内部標準の列には、分析後の内部標準に関する情報が表示されます。以下の表は、使用可能なフィールドを示しています。

表 6-13 : 内部標準列

列	説明
IS Peak Name	内部標準ピークの名前。
IS Units	内部標準に割り当てられた単位。
IS Peak Area	内部標準のピークが占める領域。
IS Peak Height	内部標準のピークの高さ。
IS Concentration	内部標準の既知の濃度。これは、「標準および品質管理」サンプルタイプに適用されます。「溶媒/ブランク/ダブルブランク」サンプルタイプに対してはゼロと表示されます。不明な場合は N/A が表示されます。
IS Retention Time	ソフトウェアによって特定されたクロマトグラフの保持時間。
IS Expected Retention Time	代表サンプルの保持時間。定量化メソッドをもとに特定されます。
IS Retention Time Window	定量化メソッドで指定した保持時間ウィンドウ。
IS Centroid Location	分析試料の（強度が加重された）平均保持時間。この時間までとこの時間以降のピーク領域が特定されます。
IS Start Scan	期間または実験の組み合わせに関連したサイクル番号であり、ピークの開始地点となります。
IS Start Time	期間または実験の組み合わせに関連した時間であり、ピークの開始地点となります。

表 6-13 : 内部標準列 (続き)

列	説明
IS Stop Scan	期間または実験の組み合わせに関連したサイクル番号であり、ピークの終了地点となります。
IS Stop Time	期間または実験の組み合わせに関連した時間であり、ピークの終了地点となります。
IS Integration Type	ピーク検出時にベースラインを検出/積分するために用いられたメソッド。タイプは手動と自動 (Baseline-to-Baseline 、 Valley 、 Exponential Skim 、および Exponential Child) です。
IS Signal to Noise	ピークのシグナル対ノイズ比。
IS Peak Width	ピーク高のピーク幅に対する比率。
IS UV Range	内部標準の UV 範囲。
IS UV Channel	内部標準の UV チャンネル。
IS Peak Width at 50 Percent (min.)	(読み取り専用) ピーク高が 50% の時点でのピーク幅。
IS Baseline Slope (%/min.)	(読み取り専用) ベースラインの傾きが示されます。
IS Peak Asymmetry	(読み取り専用) ピーク非対称性が示されます。非対称性は以下の数式を用いて算出されます。 $\frac{[(\text{ピーク終了時間}) - (\text{保持時間})]}{[(\text{保持時間}) - (\text{ピーク開始時間})]}$ <p>1.0 に近い値はピークが対称であることを示し、値が 1.0 を上回るとテーリングピークに、値が 1.0 を下回るとフロンティングピークになることを示します。</p>
IS Processing Alg	(読み取り専用) 使用された処理アルゴリズムが示されます。
IS Integration Quality	Integration Quality 指数は、ピークがどれだけ良好に積分されているかを示しています。値が 1 に近いほどピーク統合の質が高いことを、値が 0 に近いほど積分ピークの質が低いことを表しています。

Record フィールド

Results Table の **Record** 列には、各サンプルレコードの追加情報が示されます (この情報は分析試料のものです。内部標準の情報ではありません)。以下の表は、使用可能なフィールドを示しています。

定量データ分析

表 6-14 : 記録列

列	説明
Use Record	レコードをキャリブレーションに含めるべきかどうかを表します。標準と QC に適用されます。チェックボックスが選択解除されている場合は、Results Table で未使用の標準/QC に取り消し線が引かれます。
Record Modified	レコードに使用した定量化メソッドが、何らかの形で元の状態から修正されたかどうかを示されます。
Calculated Concentration	キャリブレーションカーブを用いて算出された分析試料の濃度です。
Relative Retention Time	内部標準と分析試料の保持時間の比率。
Accuracy	算出濃度を既知の濃度で割った値（パーセンテージとして表示）。
Response Factor	（回帰オプションに応じて）ピーク領域またはピーク高のいずれかを分析試料の濃度で割った値です。

分析試料列

Results Table の分析試料列には、分析を終えたそれぞれの分析試料と内部標準（使用された場合）に関する情報が表示されます。以下の表は、使用可能なフィールドを示しています。

表 6-15 : Results Tables : 分析試料列

列	説明
Analyte Peak Name	分析試料の名前。
Analyte Units	分析試料の濃度の単位。
Analyte Peak Area	分析試料が占める領域。
Analyte Peak Height	分析試料のピークの高さ。
Analyte Concentration	分析試料の実際の（既知の）の濃度。これは、「標準および品質管理」サンプルタイプに適用されます。「溶媒/ブランク/ダブルブランク」サンプルタイプに対してはゼロと表示されます。未知の物質には「N/A」と表示されます。
Analyte Retention Time	ソフトウェアによって特定されたクロマトグラフの保持時間。
Analyte Expected Retention Time	定量化メソッドによって特定された代表サンプルの保持時間。
Analyte Retention Time Window	定量化メソッドで指定した保持時間ウィンドウ。

表 6-15 : Results Tables: 分析試料列 (続き)

列	説明
Analyte Centroid Location	分析試料の(強度が加重された)平均保持時間。この時間までとこの時間以降のピーク領域が特定されます。
Analyte Start Scan	期間または実験の組み合わせに関連したサイクル番号であり、ピークの開始地点となります。
Analyte Start Time	期間または実験の組み合わせに関連した時間であり、ピークの開始地点となります。
Analyte Stop Scan	期間または実験の組み合わせに関連したサイクル番号であり、ピークの終了地点となります。
Analyte Stop Time	期間または実験の組み合わせに関連した時間であり、ピークの終了地点となります。
Analyte Integration Type	ピーク検出時にベースラインを検出/積分するために用いられたメソッド。タイプには手動と自動(Baseline-to-Baseline、Valley、Exponential Skim、Exponential Child)があります。
Analyte Signal to Noise	ベースラインと比較した、ピークのシグナル対ノイズ比。
Analyte Peak Width	ピーク高のピーク幅に対する比率。
Analyte UV Range	分析試料の UV 範囲。
Analyte UV Channel	分析試料の UV チャンネル。
Analyte Peak Width at 50 Percent (min.)	(読み取り専用)ピーク高が 50%の時点でのピーク幅が示されます。
Analyte Baseline Slope (%/min.)	(読み取り専用)ベースラインの傾きが示されます。
Analyte Peak Asymmetry	<p>(読み取り専用)ピーク非対称性が示されます。非対称性は以下の数式を用いて算出されます。</p> $[(\text{ピーク終了時間}) - (\text{保持時間})] / [(\text{保持時間}) - (\text{ピーク開始時間})]$ <p>1.0 に近い値はピークが対称であることを示し、値が 1.0 を上回るとテーリングピークに、値が 1.0 を下回るとフロンティングピークになることを示します。</p>
Analyte Processing Alg	(読み取り専用列)使用された処理アルゴリズムが示されます。

表 6-15 : Results Tables: 分析試料列 (続き)

列	説明
Analyte Integration Quality	Integration Quality 指数は、ピークがどれだけ良好に積分されているかを示しています。値が 1 に近いほどピーク統合の質が高いことを、値が 0 に近いほど積分ピークの質が低いことを表しています。ユーザーは手動レビューにおいて分析試料の Integration Quality 値の低いピークを把握できることから、ピークレビュー作業が円滑に進みます。また、分析試料の Integration Quality 値が許容レベルよりも低いデータに対してクエリを実施することで、データのサブセットを表示し、これに対して手動レビューを行うことも可能です。

サンプル列

Results Table のサンプル列には、すべての分析試料に共通しているサンプルに関する情報が表示されます。空白とダブル空白は、ラボごとに設定を変えることができます。以下の表は、使用可能なフィールドを示しています。

表 6-16 : サンプル列

列	説明
Sample Name	サンプルの測定時に、ユーザーがサンプルに付けた名前。
Sample ID	サンプルを特定するためにユーザーが指定した ID。
Sample Type	<p>サンプル内の分析試料は、すべて同じサンプルタイプに属している必要があります。以下のいずれかのサンプルタイプが示されます。</p> <p>Unknown: 濃度がまだ特定されていない分析試料を指します。</p> <p>Standard: 分析試料の濃度が判明しているサンプル。キャリブレーション目的で用いられます。</p> <p>Quality Control: 分析試料の濃度が判明しているサンプル。標準カーブの正確度を確認するために用いられます。</p> <p>Solvent: 質量分析装置が清潔であることを確認するために用いられる溶媒。溶媒はサンプル調製プロセスにおいて装置にかけられることはありません。</p> <p>Blank: ゼロ濃度のサンプル。回帰に用いられることはありません。</p> <p>Double Blank: 内部標準またはサンプル分析試料なしに調製されるサンプル。抽出プロセスで何も追加されていないことを確認するために用いられます。</p>
Sample Comment	サンプルについて説明するためのコメント。
Set Number	バッチ全体のサブセットを識別するための番号。
Acquisition Method	サンプルを測定するために使用されるメソッドの名前。

表 6-16 : サンプル列 (続き)

列	説明
Acquisition Date	測定が実行された日時。
Rack Type	使用されたオートサンプラーラックの種類を表す識別子(ラックが用いられた場合)。
Rack Number	測定時にサンプルが配置されたラックのポジション。(シングルラックオートサンプラーにおいては、この値は常に「1」となります。)
Vial Position	バイアルが配置されたオートサンプラープレートのポジション。
Plate Type	使用されたプレートの種類を表す識別子(複数のラックのみ)。
Plate Number	ラックのプレートポジション(複数のラックのみ)。
File Name	生データファイルの名前。1 つのデータファイルに数々のサンプルのデータが含まれることもあるため、この名前は固有ではありません。
Dilution Factor	サンプルの希釈量。算出濃度を特定するために用いられます。
Sample Annotation	サンプルについて説明するための追加コメント。
Weight-to-Volume Ratio	サンプルの比重量。

表 6-17 : DAD 列

列	説明
Analyte Peak Area for DAD	分析試料が占める領域(mAU/分)。
Analyte Peak Height for DAD	分析試料のピーク高さ(mAU)。
Analyte Wavelength Ranges	波形の範囲(nm)。
IS Peak Area for DAD	内部標準ピークが占める領域(mAU/分)。
IS Wavelength Ranges	波形の範囲(nm)。
IS Peak Height for DAD	内部標準のピーク高さ(mAU)。DAD 向けの算出濃度です。

以下の表には、ADC(アナログ/デジタルコンバータ)測定データの Results Table に追加できるフィールドが記されています。

表 6-18 : ADC 列











列	説明
Analyte Channel	分析試料が測定された ADC チャンネル。
Analyte Wavelength Ranges	波形の範囲 (nm)。
IS Channel	内部標準が測定された ADC チャンネル。
IS Wavelength Ranges	波形の範囲 (nm)。

Results Table に関するヒント

実行する作業	... 実行する操作
テーブル特有クエリ: テーブル全体を再表示するには	Results Table の任意の場所を右クリックして、 Query > Show All をクリックします。これでクエリを再適用または編集できます。
キャリブレーションカーブを調べるには	カーブのいずれかの場所を右クリックし、 Active Plot をクリックして、最上部にプロットしたいカーブを選択します。
サンプルの統計レビュー: 個々のピークのレビュー方法	Display the Data Set(s) チェックボックスを選択し、続いて Data Point 列で、ピークを表すデータポイントをダブルクリックします。Peak Review ウィンドウを開き、ユーザーが選択したピークが表示されます。
Results Table: Results Table を元の順序に戻すには	Results Table を右クリックして、 Sort > Sort By Index をクリックします。

ツールバーアイコン

A

アイコン	名前	機能
	バックグラウンド減算	バックグラウンド範囲が選択された後に、バックグラウンド減算が実行されます。
	除去範囲のロック	選択したバックグラウンド範囲がロックされます。バックグラウンドのロックが解除されると、それぞれの範囲を個別に移動させることができます。
	Centroid	データのセントロイドが算出されます。
	Home Graph (規定グラフ)	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。
	オーバーレイのサイクル表示	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。
	フラグメント解釈ツールの表示	フラグメント解釈ツールが開きます。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。
	スムージング	スムーズアルゴリズムを用いてデータがスムージングされます。
	ガウシアンスムージング	ガウシアンスムーズを用いてデータがスムージングされます。

PPG 計算精密質量テーブル

B

以下の表には、PPG (ポリプロピレングリコール) キャリブレーション溶媒を用いることで生じる、モノアイソトピック計算精密質量と荷電種 (正および負) が記されています。質量およびイオンは $M = H[OC_3H_6]_nOH$ の化学式を用いて算出される一方、正イオン MS/MS フラグメントは $[OC_3H_6]_n(H^+)$ の化学式を用いて算出されます。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 溶媒を用いてキャリブレーションを実行する際は、正しいアイソトープピークが使用されていることを確認してください。

表 B-1 : PPG 計算精密質量

n	計算精密質量 (M)	$(M + NH_4)^+$	MS/MS フラグメント	$(M + 2NH_4)^{2+}$	$(M + COOH)^-$
1	76.052	94.087	59.0	56.061	121.050
2	134.094	152.129	117.1	85.082	179.092
3	192.136	210.171	175.1	114.102	237.134
4	250.178	268.212	233.2	143.123	295.176
5	308.220	326.254	291.2	172.144	353.218
6	366.262	384.296	349.2	201.165	411.259
7	424.304	442.338	407.3	230.186	469.301
8	482.346	500.380	465.3	259.207	527.343
9	540.388	558.422	523.4	288.228	585.385
10	598.430	616.464	581.4	317.249	643.427
11	656.471	674.506	639.4	346.270	701.469

表 B-1 : PPG 計算精密質量 (続き)

n	計算精密質量 (M)	(M + NH ₄) ⁺	MS/MS フラグメント	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
12	714.513	732.548	697.5	375.291	759.511
13	772.555	790.590	755.5	404.312	817.552
14	830.597	848.631	813.6	433.333	875.594
15	888.639	906.673	871.6	462.354	933.636
16	946.681	964.715	929.7	491.373	991.678
17	1004.723	1022.757	987.7	520.396	1049.720
18	1062.765	1080.799	1045.7	549.417	1107.762
19	1120.807	1138.841	1103.8	578.438	1165.804
20	1178.849	1196.883	1161.8	607.459	1223.845
21	1236.890	1254.925	1219.9	636.480	1281.887
22	1294.932	1312.967	1277.9	665.501	1339.929
23	1352.974	1371.009	1335.9	694.521	1397.971
24	1411.016	1429.050	1394.0	723.542	1456.013
25	1469.058	1487.092	1452.0	752.563	1514.055
26	1527.100	1545.134	1510.1	781.584	1572.097
27	1585.142	1603.176	1568.1	810.605	1630.138
28	1643.184	1661.218	1626.2	839.626	1688.180

PPG 計算精密質量テーブル

表 B-1 : PPG 計算精密質量 (続き)

n	計算精密質量 (M)	(M + NH ₄) ⁺	MS/MS フラグメント	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
29	1701.226	1719.260	1684.2	868.647	1746.222
30	1759.268	1777.302	1742.2	897.668	1804.264
31	1817.309	1835.344	1800.3	926.689	1862.306
32	1875.351	1893.386	1858.3	955.710	1920.348
33	1933.393	1951.428	1916.4	984.731	1978.390
34	1991.435	2009.469	1974.4	1013.752	2036.431
35	2049.477	2067.511	2032.5	1042.773	2094.473
36	2107.519	2125.553	2090.5	1071.794	2152.515
37	2165.561	2183.595	2148.5	1100.815	2210.557
38	2223.603	2241.637	2206.6	1129.836	2268.599
39	2281.645	2299.679	2264.6	1158.857	2326.641
40	2339.687	2357.721	2322.7	1187.878	2384.683
41	2397.728	2415.783	2380.7	1216.899	2442.724
42	2455.770	2473.805	2438.7	1245.920	2500.766
43	2513.812	2531.847	2496.8	1274.940	2558.808
44	2571.854	2589.888	2554.8	1303.961	2616.850
45	2629.896	2647.930	2612.9	1332.982	2674.892

表 B-1 : PPG 計算精密質量 (続き)

n	計算精密質量 (M)	(M + NH ₄) ⁺	MS/MS フラグメント	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
46	2687.938	2705.972	2670.9	1362.003	2732.934
47	2745.980	2764.014	2729.0	1391.024	2790.976
48	2804.022	2822.056	2787.0	1420.045	2849.017
49	2862.064	2880.098	2845.0	1449.066	2907.059
50	2920.106	2938.140	2903.1	1478.087	2965.101
51	2978.147	2996.182	2961.1	1507.108	3023.143
52	3036.189	3054.224	3019.2	1536.129	3081.185
53	3094.231	3112.266	3077.2	1565.150	3139.227
54	3152.273	3170.307	3135.2	1594.171	3197.269
55	3210.315	3228.349	3193.3	1623.192	3255.311
56	3268.357	3286.391	3251.3	1652.213	3313.352
57	3326.399	3344.433	3309.4	1681.234	3371.394
58	3384.441	3402.475	3367.4	1710.255	3429.436
59	3442.483	3460.517	3425.5	1739.276	3487.478
60	3500.525	3518.559	3483.5	1768.297	3545.5202
61	3558.566	3576.601	3541.5	1797.318	3603.562
62	3616.608	3634.643	3599.6	1826.339	3661.604

PPG 計算精密質量テーブル

表 B-1 : PPG 計算精密質量 (続き)

n	計算精密質量 (M)	(M + NH ₄) ⁺	MS/MS フラグメント	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
63	3674.650	3692.685	3657.6	1855.359	3719.645
64	3732.692	3750.726	3715.7	1884.380	3777.687
65	3790.734	3808.768	3773.7	1913.401	3835.729
66	3848.776	3866.810	3831.7	1942.422	3893.771
67	3906.818	3924.852	3889.8	1971.443	3951.813
68	3964.860	3982.894	3947.8	2000.464	4009.855
69	4022.902	4040.936	4005.9	2029.485	4067.897
70	4080.944	4098.978	4063.9	2058.506	4125.938
71	4138.985	4157.020	4122.0	2087.527	4183.980
72	4197.027	4215.062	4180.0	2116.548	4242.022
73	4255.069	4273.104	4238.0	2145.569	4300.064
74	4313.111	4331.145	4296.1	2174.590	4358.106
75	4371.153	4389.187	4354.1	2203.611	4416.148
76	4429.195	4447.229	4412.2	2232.632	4474.190
77	4487.237	4505.271	4470.2	2261.653	4532.231
78	4545.279	4563.313	4528.3	2290.674	4590.273
79	4603.321	4621.355	4586.3	2319.695	4648.315

表 B-1 : PPG 計算精密質量 (続き)

n	計算精密質量 (M)	(M + NH ₄) ⁺	MS/MS フラグメント	(M + 2NH ₄) ²⁺	(M + COOH) ⁻
80	4661.363	4679.397	4644.3	2348.716	4706.357
81	4719.404	4737.439	4702.4	2377.737	4764.399
82	4777.446	4795.481	4760.4	2406.758	4822.441

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。

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。
