

Analyst MD ソフトウェア

手動チューニングチュートリアル



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。

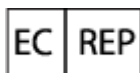
Rx only.

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

手動チューニングチュートリアル	4
チューニングについて	4
分解能と感度	5
分解能の手動調整	5
LIT 装置の分解能の調整	5
質量校正	5
手動質量キャリブレーション	6
テクニカルサポート	7
手動チューニングとキャリブレーションを四重極モードで実行する	7
測定メソッドを選択する	7
分解能を調整する	8
質量校正を四重極モードで実行する	9
質量分析装置の手動キャリブレーションを LIT モードで実行する	11
測定メソッドを選択して、手動キャリブレーションを LIT モードで実行する	11
質量校正を LIT モードで実行する	12
チューニングおよびキャリブレーションモードアイコン	14
 お問い合わせ先	 16
お客様のトレーニング	16
オンライン学習センター	16
SCIEX サポート	16
サイバーセキュリティ	16
ドキュメント	16

手動チューニングチュートリアル

四重極モードおよびリニアイオントラップ(LIT)モードでの質量分析装置の手動チューニングとキャリブレーションの方法を学習します。

前提条件
ユーザーは以下ができなくてはなりません。 <ul style="list-style-type: none">測定メソッドを作成する。バッチを送信する。 以下の周辺装置と装置の使用が推奨されます。 <ul style="list-style-type: none">質量分析装置とシリンジポンプが含まれるアクティブなハードウェアプロファイル。PPG または適切なチューニング溶液。

チューニングについて

チューニングを施すことで、質量分析装置の分解能と強度パフォーマンスが最大限に高まります。質量分析装置のチューニング時には以下を実行します。

- 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。

質量分析装置のチューニングとキャリブレーションが完了すると、変更内容が API Instrument フォルダの InstrumentData ファイルに保存されます。API Instrument メソッドフォルダのプリセットパラメータは、設置時にフィールドサービスエンジニア(FSE)によって最適化されたものであるため、こちらを必ず使用してください。

表 1 : 同調周波数

スキャンタイプ	キャリブレーション		分解能の最適化	
	周波数	手動／自動	周波数	手動／自動
Q1 および Q3	3～6 ヶ月	両方	3～6 ヶ月	両方
LIT	2 週間ごと(必要に応じて)	両方	3～6 ヶ月	自動のみ

分解能と感度

本ソフトウェアの四重極モードでは、分解能に対して定義済みのユニット値／高値／低値／オープン値が用いられます。四重極スキャンでは、分解能と感度の間でバランスが取られます。ピークの幅が広いほど、そのピークの強度が高まります。狭いピークについてはその逆となります。LIT の機能の観点から、LIT (リニアイオントラップ) の分解能と感度の間には関係性がありません。

通常は低分解能とオープン分解能に対して以下のオフセットが適用されますが、標準操作手順によっては変更が加えられることもあります。

- 低分解能 (ユニット分解能よりも電圧が低下) : 0.03
- オープン分解能 (ユニット分解能よりも電圧が低下) : 0.30

ヒント! 分解能設定は、Tuning Options ダイアログの Resolution タブで確認または編集できます。このダイアログを開くには、**Tune and Calibrate** モード内で、**Tools > Settings > Tuning Options** の順にクリックします。

分解能の手動調整

本ソフトウェアの四重極には、ユニット、高、低、オープンの 4 種類の分解能パラメータが設けられています。ピーク幅は、ユニット分解能に対して $0.7 (\pm 0.1 \text{ Da FWHH})$ (半分の高さで全幅に到達)、または高分解能に対して $0.5 (\pm 0.1)$ に設定されています。これは、分解能オフセットを調整することで行います。本ソフトウェアでは、ユニット分解能パラメータをもとに、低およびオープン分解能パラメータが算出されます。分解能オフセットの調整は、Tune Method Editor の Resolution タブから行います。

LIT (リニアイオントラップ) スキャンでは、Q1 分解能は使用したスキャンに応じて変化します。ER および EMS スキャンについては、Q1 分解能は一定です。ER スキャンの Q1 分解能はオープンにリセットされているため、LIT に対して質量の幅を適宜に設定できます。

EPI および MS3 スキャンについては、Q1 分解能を選択したいいずれかの分解能パラメータに設定します。一般的には単位分解能に設定されますが、衝突セルの質量ウィンドウを大きくしてより多くのアイソトープを表示するため、あるいは低分解能で MRM スキャンを実行するのと同じ方法で感度を上げるために、分解能を低く設定することができます。

LIT (リニアイオントラップ) スキャンモードでは、分解能はスキャン速度に左右されます。一般的に、スキャン速度が遅いほど分解能が高まります。

LIT 装置の分解能の調整

ピークの分解能は、そのピークの質量とピーク幅によって決まります。LIT モードでは、分解能はイオンがどれだけ速く LIT から質量選択的に放出されるかに左右されます。LIT (リニアイオントラップ) スキャンタイプの感度と分解能を変更するには、装置の最適化機能を使用します。次のドキュメントを参照: システムユーザーガイドまたは *Analyst MD* ソフトウェアヘルプ。

質量校正

質量校正とは、適切な質量電荷比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標準溶液を用いて質量校正を実行することで、結果を前

回のキャリブレーションと比較し、観測されたピークの質量電荷比が理論値にどれだけ近いかを特定します。前回のキャリブレーションは更新されることもありますが、通常は新たなキャリブレーション結果に置き換えられます。

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。質量校正が実行されると、キャリブレーション表は新規キャリブレーションで取得した新しいデジタル/アナログコンバーター (DAC) の値によって更新されます。すでにキャリブレーション表に存在する質量の DAC 値は更新されませんが、使用されることはありません。質量校正が置き換えられた場合、使用対象として選択したすべての質量において、前回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校正を実行します。

質量校正の実行時には、ソフトウェアによって以下が行われます。

1. 選択したそれぞれの質量の検索範囲内で最大ピークが検出される。
2. 質量、強度、ピーク幅の値が特定される。
3. 質量が予測質量と比較されることで (存在する場合は) 質量シフトが計算される。
4. ピーク幅がターゲットピーク幅と比較される。
5. 強度が前回のキャリブレーションと比較される。
6. 結果がグラフまたはテキスト形式で表示される。
7. キャリブレーション表が、
 <Drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Data フォルダの装置データファイルに保存される。

手動質量キャリブレーション

Q1 および Q3 四重極分解能の手動調整が完了したら、キャリブレーションを確認します。分解能の最適化中にパラメータに変更を加えると、前回の質量校正に影響が及ぶ可能性があります。

キャリブレーションレポートには、質量シフト、ピーク幅、強度差の 3 種類のグラフが表示されます。

- 質量シフトグラフには、現行のキャリブレーションをもとに測定された質量と、参照表をもとに取得された実際の質量の差が示されます。
- ピーク幅グラフには、それぞれのピーク幅の質量が、測定メソッドで選択したターゲット幅と比較して示されます。
- 強度差グラフには、前回のキャリブレーションと現行のキャリブレーションとの強度の差が示されます。

チューニングとキャリブレーションは必ず熟練したオペレーターが実行してください。またパラメータのチューニングは、必ず FSE のみが実行してください。

テクニカルサポート

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備しています。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。詳しくは、ウェブサイト (sciex.com) をご覧ください。

手動チューニングとキャリブレーションを四重極モードで実行する

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適切に実行するには、分解能を調整してから質量校正を実行します。

特有のキャリブレーション溶液が用いられるスキャンタイプごとに、異なる測定メソッドが必要となります。ポジティブモードとネガティブモードでのキャリブレーションには、異なるキャリブレーション溶液が用いられます。解析に双方のスキャンタイプのサブセットが含まれている場合は、1 つの四重極、1 つの極性、あるいは 1 つの分解能タイプのみをチューニングすることも可能です。四重極、極性、分解能タイプのあらゆる組み合わせに対してキャリブレーションプロセスを完全にチューニングする必要はありません。

下記の手順を指定された順に実行してください。

1. [測定メソッドを選択する](#)
2. [分解能を調整する](#)
3. [質量校正を四重極モードで実行する](#)

測定メソッドを選択する

1. プロジェクトを作成し、キャリブレーションメソッドと結果を保存します。
これはチューニングに固有のものとするか、あるいは作業プロジェクトの一部とすることができ
ます。
2. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Manual Tuning** をダブルクリックしま
す。
3. 手動チューニングで適切な測定メソッドを作成するか、3200MD シリーズ装置を使用する場合
には **API Instrument** フォルダを参照して、キャリブレーション用の測定メソッドを開きます。

ヒント! (3200MD シリーズ装置にのみ適用) 本ソフトウェアには、高分解能で最適化するための
デフォルト測定メソッドはインストールされていません。ただし、これらのメソッドとユニット分
解能メソッド (Q1PosPPG.dam, Q1NegPPG.dam, Q3PosPPG.dam, Q3NegPPG.dam) にお
ける唯一の違いは、分解能のタイプです。質量分析装置を初めてチューニングする際に高分
解能メソッドが必要となる場合は、ユニット分解能メソッドを開き、分解能タイプを High に変更
してから、別の名前 (Q1PosPPG_high.dam など) を付けて保存します。

4. Q1 および Q3 を正モードでチューニングする際には PPG 溶液を、または Q1 および Q3 を負
モードでチューニングする際には PPG 3000 を 5~10 µL/min の流量で注入します。

ヒント! 元のメソッドを FSE 向けに維持できるよう、このメソッドをコピーしておきます。

5. プロジェクトリストで新しいプロジェクトを選択し、メソッドを同じ名前で保存します。

分解能を調整する

噴射が安定していることを確認します。

1. Tune Method Editor の MS タブで、**MCA** チェックボックスが選択されていることを確認します。
2. **Period Summary** セクションの **Cycles** フィールドに 10 と入力します。
3. **Start** をクリックします。
Manual Tune ウィンドウの下部に質量スペクトルペインが表示されます。
4. 質量分析装置がアイドル状態になったら、質量スペクトルペインを右クリックし、**Open File** をクリックします。
新しく開いたウィンドウで、メソッド内の質量ごとに質量スペクトルデータペインが 1 つ開きます。
5. いずれかのデータペインを右クリックし、**List Data** をクリックします。
スペクトル用のデータが記された新規ペインが開きます。このペインには、Data List タブ、Calibration Peak List タブ、Peak List タブがあります。
6. Calibration Peak List タブを開きます。

ヒント! このタブは、タブを表示するオプションが選択されている場合にのみ表示されます。Calibration Peak List タブを表示するには、**Tools > Settings > Appearance Options** をクリックします。Miscellaneous タブで、**Show Mass Calibration Peak List** チェックボックスをオンにして、**OK** をクリックします。

7. のターゲット質量が表示中の質量と一致していない場合、**Calibration Peak List** Calibration Peak List を右クリックし、該当する **Reference** リストをクリックしてから、**Use as Reference** をクリックします。
8. **Calibration Peak List** のデータを確認します。

注: **Width (Da)** 列の値が、ユニット分解能に対してすべて 0.7 ± 0.1 Da の範囲内、または高分解能に対してすべて 0.5 ± 0.1 Da の範囲内であれば、分解能は許容範囲内です。

- 分解能が許容できる場合は、ステップ 14 に進みます。
 - 値が必要な許容範囲内にない場合は、ステップ 9 に進みます。
9. ペインを閉じ、Tune Method Editor 内で Resolution タブを開きます。
 10. **Advanced** をクリックします。

Resolution Table ダイアログが開きます。このダイアログには、キャリブレーションピーク質量と、そのスキャンの分解能オフセット値がリストされます。

11. 0.7 ± 0.1 Da (ユニット分解能) または 0.5 ± 0.1 Da (高分解能) というピーク幅基準を満たしていない質量に対して、それぞれ以下のようにオフセットを調整します。
 - ピークが広すぎる場合は、オフセットを最大で 0.05 増加します。
 - ピークが狭すぎる場合は、オフセットを最大で 0.05 減少させます。

12. **Apply** をクリックします。
変更は InstrumentData ファイルに保存されます。
13. **Close** をクリックします。
14. キャリブレーションリスト内のすべてのピークが 0.7 ± 0.1 Da (ユニット分解能) または 0.5 ± 0.1 Da (高分解能) というピーク幅基準を満たすまで、すべての質量ピークに対してステップ 1 から 8 を繰り返します。
15. **Close** をクリックします。

質量校正を四重極モードで実行する

1. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Manual Tuning** をダブルクリックします。
2. Tune Method Editor の MS タブで、**MCA** チェックボックスが選択されていることを確認します。
3. **Period Summary** セクションの **Cycles** フィールドに 10 と入力します。
4. **Start** をクリックします。
Manual Tune ウィンドウの下部に質量スペクトルペインが表示されます。
5. 質量分析装置がアイドル状態になったら、質量スペクトルペインを右クリックし、**Open File** をクリックします。
新しく開いたウィンドウで、メソッド内の質量ごとに質量スペクトルデータペインが 1 つ開きます。
6. いずれかのデータペインを右クリックし、**List Data** をクリックします。
スペクトル用のデータが記された新規ペインが開きます。このペインには、Data List タブ、Calibration Peak List タブ、Peak List タブがあります。
7. Calibration Peak List タブを開きます。

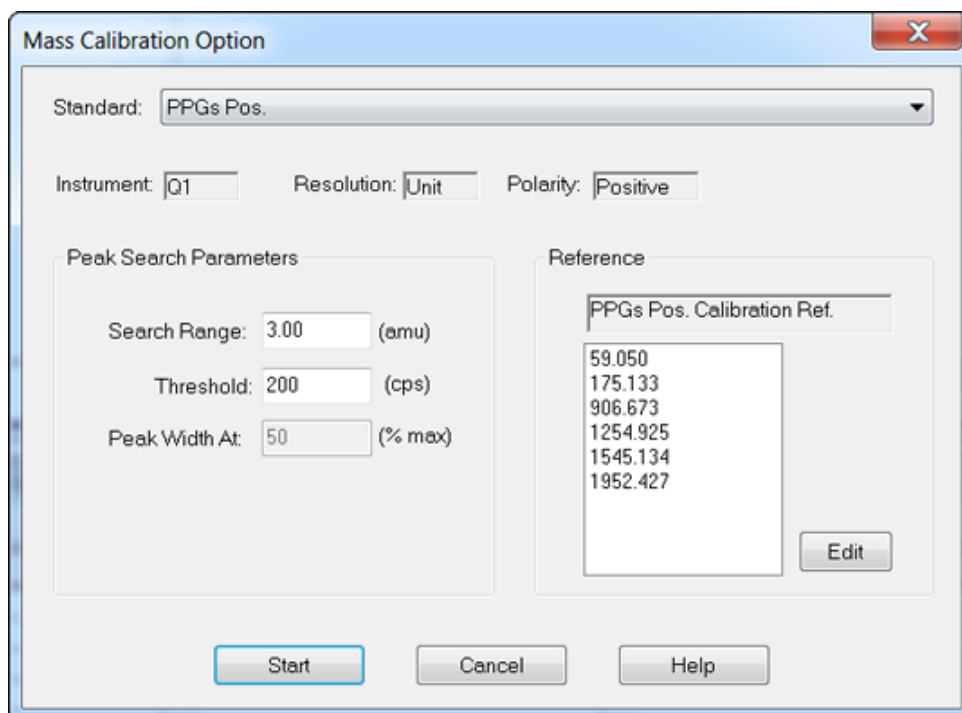
ヒント! このタブは、タブを表示するオプションが選択されている場合にのみ表示されます。Calibration Peak List タブを表示するには、**Tools > Settings > Appearance Options** をクリックします。Miscellaneous タブで、**Show Mass Calibration Peak List** チェックボックスをオンにして、**OK** をクリックします。

8. Calibration Peak List タブでデータを確認します。タブ **Mass Shift (Da)** カラムの値が、すべての質量に対して 0.1 Da よりも大きい場合は、次の手順に進みます。それ以外の場合は、これで質量キャリブレーションは完了です。

注: グラフのピークラベルは最高値を表していますが、**Found At** Calibration Peak List タブの列に記されたピーク値はセントロイド値となっています。ピークが完全に対称でない場合は、同じピークでも最高値とセントロイド値が若干異なる可能性があります。キャリブレーションには、より正確なセントロイド値が用いられます。

9. いずれかの質量スペクトルペインの任意の場所をクリックします。
10. **Tools > Calibrate from Spectrum** をクリックします
Mass Calibration Option ダイアログが開きます。

図 1 : Mass Calibration Option ダイアログ



11. **Standard** リストで、使用した取得方法で示された極性に応じて、**PPGs Pos** または **PPGs Neg** をクリックします。
12. プリセット値である Peak Search Parameters は、たいていの状況に適しています。これらを変更する場合は該当するフィールドをクリックし、新しい値を入力します。

注: 質量範囲が広めの質量分析装置では 2,000 前後の PPG ピークが発生しますが、これらのピークでは最も強いアイソトープが必ずしも最初のアイソトープを表しておらず、これによってキャリブレーション上の問題を引き起こす場合があります。このような状況が生じた場合、検索範囲を 0.8 に狭めます。

13. Reference リストに記された質量が、データ測定時の質量と一致していることを確認します。質量が一致していれば、次の手順に進みます。質量が一致しない場合は、次の手順を実行します。
 - a. **Edit** をクリックします。
Reference Table ダイアログが開きます。
 - b. **Reference** 列のチェックボックスを選択またはクリアすることで、**Use** リストの質量を、データ収集時に用いた質量と一致させます。
 - c. **Update Ref.** をクリックすると、変更を保存できます。
 - d. **Close** をクリックします。
14. **Start** をクリックして質量キャリブレーションを開始します。
 - 本ソフトウェアでは、それぞれの質量の検索範囲内に存在する最大ピークが検出され、これをもとに質量、強度、ピーク幅の値が特定されます。

- また、質量が予測質量と比較されることで(存在する場合は)質量シフトが特定されるほか、ピーク幅がターゲットピーク幅と比較され、強度が前回のキャリブレーションと比較されます。
 - 質量校正の結果は、グラフおよびレポート形式で示されます。
15. ソフトウェアによって、適切なピークがターゲット質量として選択されていない場合は、キャリブレーションからポイントを除外してください。
-
- ヒント!** 除外したいポイントを右クリックし、**Exclude** をクリックします。
-
16. **Window** をクリックし、キャリブレーション結果をクリックします。
キャリブレーションレポートのテキスト版が表示されます。
17. Calibration report ウィンドウで、次のいずれかの操作を行います。
- 変更を加えた質量の値を更新し、新しい質量の値を既存の質量キャリブレーションに追加するには、**Update Mass Calibration** をクリックします。キャリブレーションされた質量の、既存のキャリブレーション値のみが上書きされます。
 - 既存の質量と値を新しい質量と値に完全に置き換えるには、**Replace Mass Calibration** をクリックします。既存のキャリブレーション値がすべて上書きされます。キャリブレーションされなかった質量はキャリブレーションから削除されます。
18. 質量キャリブレーションの変更内容を反映させるには、**Save** をクリックします。
19. **Close** をクリックします。
20. 10 スキャン MCA を実行してキャリブレーションをチェックします。

注: 必要に応じてキャリブレーション手順を繰り返します。

質量分析装置の手動キャリブレーションを LIT モードで実行する

質量分析装置の手動キャリブレーションを LIT モードで実行するには、ポジティブモードとネガティブモードの双方でスキャン速度を質量校正します。

下記の手順を指定された順に実行してください。

1. [質量分析装置の手動キャリブレーションを LIT モードで実行する](#)
2. [質量校正を LIT モードで実行する](#)

測定メソッドを選択して、手動キャリブレーションを LIT モードで実行する

1. Agilent Mix または PPG 3000 を 5~10 µL/min で注入します。
2. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Manual Tuning** をダブルクリックします。
3. (3200MD QTRAP システム)。選択したスキャンレートで適切な拡張解像度取得方法を作成するか、**File > Open** をクリックします。

4. **Files** リストで、メソッドを **API Instrument > Acquisition Methods > QTRAP3200** から選択します。
5. **OK** をクリックします。
Tune Method Editor には、選択したメソッドの詳細が表示されます。
6. プロジェクトリストで新しいプロジェクトを選択し、メソッドデータを保存します。

質量校正を LIT モードで実行する

1. Tune Method Editor の MS タブで、**MCA** チェックボックスが選択されていることを確認します。
2. MS タブで極性とスキャン速度を選択します。
3. MS タブの **Period Summary** セクションの **Cycles** フィールドに「50」と入力します。
4. **Start** をクリックします。
Manual Tune ウィンドウの下部に質量スペクトルペインが表示されます。
5. MS アイコンに Idle と表示されたら、質量スペクトルペイン内を右クリックし、**Open File** をクリックします。
新規ウィンドウが開き、関心のあるイオンがそれぞれ個別のペインに表示されます。
6. いずれかのデータペインを右クリックし、**List Data** をクリックします。
スペクトル用のデータが記された新規ペインが開きます。このペインには、Data List タブ、Calibration Peak List タブ、Peak List タブがあります。
7. Calibration Peak List タブを開きます。

ヒント! このタブは、タブを表示するオプションが選択されている場合にのみ表示されます。Calibration Peak List タブを表示するには、**Tools > Settings > Appearance Options** をクリックします。Miscellaneous タブで、**Show Mass Calibration Peak List** チェックボックスをオンにして、**OK** をクリックします。

8. Calibration Peak List 表を右クリックし、メニューを右クリックして、適切な参照表が選択されていることを確認します。
正しい参照表が選択されていない場合は、正しい参照表を選択し、**Use as Reference** をクリックします。

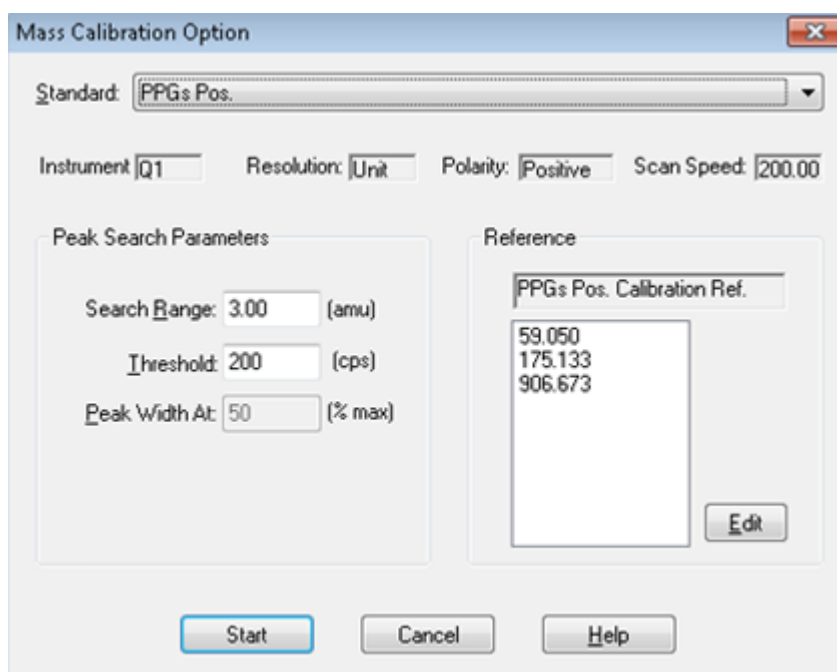
注: すべての質量が **Calibration Peak List** タブに表示されていない場合は、Calibration Peak List テーブルを右クリックします。右クリックメニューで、使用中の参照表にカーソルを置き、サブメニューで **Edit Reference Table** をクリックします。Reference Table Edit ダイアログで、Calibration Peak List タブに表示される質量の **Use** ボックスを選択し、**Update Ref** をクリックします。

9. Calibration Peak List タブでデータを確認しますタブ。**Mass Shift (Da)** カラムの値が、すべての質量に対して 0.1 Da よりも大きい場合は、次の手順に進みます。それ以外の場合は、これで質量キャリブレーションは完了です。

注: グラフのピークラベルは最高値を表していますが、**Found At** Calibration Peak List タブの列に記されたピーク値はセントロイド値となっています。ピークが完全に対称でない場合は、同じピークでも最高値とセントロイド値が若干異なる可能性があります。キャリブレーションには、より正確なセントロイド値が用いられます。

10. いずれかの質量スペクトルペインの任意の場所をクリックします。
11. **Tools > Calibrate from Spectrum.**をクリックします
Mass Calibration Option ダイアログが開きます。

図 2 : Mass Calibration Option ダイアログ



12. **Standard** リストで、PPG を標準液として使用した場合は、使用した取得方法で示された極性に
応じて、**PPGs Pos. LIT Ref.**または **PPGs Neg. LIT Ref.**をクリックします。
13. Peak Search Parameters を変更する場合は該当するフィールドをクリックし、新しい値を入力
します。
プリセット値である Peak Search Parameters は、たいていの状況に適しています。
14. **Reference** リストに記された質量が、データ測定時の質量と一致していることを確認します。
質量が一致していれば、次の手順に進みます。質量が一致しない場合は、次の手順に従いま
す。
 - a. **Edit** をクリックします。
Reference Table ダイアログが開きます。
 - b. **Reference** 列のチェックボックスを選択またはクリアすることで、**Use** リストの質量を、デ
ータ収集時に用いた質量と一致させます。
 - c. **Update Ref.**をクリックすると、変更を保存できます。
15. **Start** を押して質量キャリブレーションを開始します。




- 本ソフトウェアでは、それぞれの質量の検索範囲内に存在する最大ピークが検出され、これをもとに質量、強度、ピーク幅の値が特定されます。
- また、質量が予測質量と比較されることで(存在する場合は)質量シフトが特定されるほか、ピーク幅がターゲットピーク幅と比較され、強度が前回のキャリブレーションと比較されます。
- 質量校正の結果は、グラフおよびレポート形式で示されます。







注: 中央のピーク幅グラフィンジケーター(点線)は使用しないでください。これらは四重極スキャン用に作成されたものであり、LIT(リニアイオントラップ)スキャンには適用されません。

16. **Window** をクリックし、キャリブレーション結果をクリックします。
キャリブレーションレポートのテキスト版が表示されます。
17. 勾配変動値を確認します。これらは 1.000 ± 0.002 でなければなりません。最低データポイントには勾配を持たせることができないため **N/A** と表示されます。
18. 差が 0.002 よりも大きい場合は、質量分析装置をキャリブレーションしないでください。SCIEX サポート (sciex.com/request-support) までお問い合わせください。
19. 勾配変動値が良好であれば、Calibration report ウィンドウに進みます。
20. Calibration report ウィンドウで、次のいずれかの操作を行います。
 - 変更を加えた質量の値を更新し、新しい質量の値を既存の質量キャリブレーションに追加するには、**Update Mass Calibration** をクリックします。キャリブレーションされた質量の、既存のキャリブレーション値のみが上書きされます。
 - 既存の質量と値を新しい質量と値に完全に置き換えるには、**Replace Mass Calibration** をクリックします。既存のキャリブレーション値がすべて上書きされます。キャリブレーションされなかった質量はキャリブレーションから削除されます。
21. 質量キャリブレーションの変更内容を反映させるには、**Save** をクリックします。
22. **Close** をクリックします。
23. 10 スキャン MCA を実行してキャリブレーションをチェックします。

注: 必要に応じてキャリブレーション手順を繰り返します。

チューニングおよびキャリブレーションモードアイコン

アイコン	名前	説明
	Calibrate from spectrum	Mass Calibration Option ダイアログを開き、使用可能なスペクトルを使用して質量分析装置のキャリブレーションを行います。
	Manual Tune	Manual Tune Editor を開きます。
	Compound Optimization	FIA による注入を用いて化合物を最適化します。

アイコン	名前	説明
	Instrument Optimization	装置のパフォーマンス確認、質量校正の調整、質量分析装置の設定調整を行います。
	View Queue	サンプルキューを表示します。
	Instrument Queue	リモート装置を表示します。
	Status for Remote Instrument	リモート装置のステータスを表示します。
	Reserve Instrument for Tuning	装置のチューニングおよびキャリブレーションの準備を行います。
	IDA Method Wizard	IDA Method Wizard を開始します。

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。
