

Analyst MD ソフトウェア

スクリプトユーザーガイド



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。

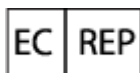
Rx only.

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 : はじめに.....	4
対象読者	4
テクニカルサポート	4
第 2 章 : スクリプト.....	5
スクリプトをインストールまたはアンインストールする	5
スクリプトをインストールする	5
スクリプトをアンインストールする	5
定量化メソッドとテキストファイルを作成する	6
Create Quan Methods From Text Files スクリプトを使用する	6
Create Text File from Quan Method スクリプトを使用	8
テキストファイル形式	9
DFT Tracker	12
MRM3 最適化スクリプト	13
MRM3 Optimization ウィンドウの概要	13
最適化の実行中	18
最適化の完了	20
スクリプトロジックの詳細: 初期化	22
分解能強調スキャン	22
Q1 多重イオンスキャン	22
プロダクトイオン強調モードスキャン	22
多重反応モニタリングスキャン	23
MS/MS/MS (MS3) スキャン	23
最終メソッドを作成する	23
MSServiceLog スクリプト	24
スクリプトをインストールする	24
スクリプトを使用する	24
sMRM Calculator	26
スクリプトをインストールする	26
スクリプトを使用する	26
お問い合わせ先.....	31
お客様のトレーニング	31
オンライン学習センター	31
SCIEX サポート	31
サイバーセキュリティ	31
ドキュメント	31

対象読者

本ガイドは、お客様およびフィールドサービスエンジニア (FSE) を対象としています。

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。

このドキュメントでは、Analyst MD ソフトウェアのスクリプトのインストール／使用方法について説明します。また、各スクリプトの使用に関する概要、ならびに必要なに応じてスクリプトをアンインストールする方法についても記されています。

スクリプトをインストールまたはアンインストールする

スクリプトの一部は、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。

他のスクリプトは、すべて Scripts フォルダで使用できます。

スクリプトを使用するには、スクリプトをインストールする必要があります。次のセクションを参照：[スクリプトをインストールする](#)。

スクリプトをインストールする

1. 次のいずれかの操作を行います。
 - コンピュータ上の<Drive>:\Program Files\Analyst\Scripts フォルダを参照します。
 - ソフトウェア DVD(利用可能な場合)または解凍されたソフトウェア Web ダウンロードパッケージの Extras\Scripts フォルダを参照します。
2. スクリプトフォルダを開きます。
3. 次のいずれかの操作を行います。
 - sMRM Calculator スクリプトについては、**sMRM Calculator Setup.exe** をダブルクリックします。
 - 他のすべてのスクリプトについては、**ScriptRunner.exe** をダブルクリックします。
4. 画面に表示される指示に従ってスクリプトをインストールします。
インストールされたスクリプトは、**Script** メニューから利用できます。

スクリプトをアンインストールする

注: DFTTracker スクリプトと MRM3 Optimization スクリプトはアンインストールしないでください。これらのスクリプトが削除された場合、再度アクセスする際に Analyst MD ソフトウェアを再びインストールする必要があります。

スクリプトをアンインストールするには、以下を実行します。

- Create Quan Methods From Text Files、Create Text File from Quant Method、および MSServiceLog スクリプトの場合は、
<drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Processing Scripts フォルダを参照してから、スクリプト dll を手動で削除します。

- sMRM Calculator スクリプトについては、以下を実行します。
 - Windows 7 オペレーティングシステムの場合: **Start > All Programs > Control Panel > Programs and Features** をクリックします。
 - Windows 10 オペレーティングシステムの場合: **Start > Control Panel > Programs and Features** をクリックします。
 - **sMRM Calculator** を右クリックして **Uninstall** をクリックします。
 - 画面上の指示に従ってください。

定量化メソッドとテキストファイルを作成する

Create Text File from Quan Method スクリプトでは、定量化メソッドがタブ区切りテキストファイルにエクスポートされます。Create Quan Method From Text Files スクリプトでは、タブ区切りテキストファイルに含まれている情報が定量化メソッドファイル(qmf)にインポートされます。現在、Analyst MD ソフトウェアの Build Quantitation Method コンポーネントはこの機能をサポートしていません。

Create Text File from Quan Method スクリプトによって、定量化メソッドファイルのテキストファイル表現が作成されます。各必須フィールドの列は、**Export all columns** チェックボックスが選択されている場合に、テキストファイル内に作成されます。このチェックボックスを選択しなかった場合、スクリプトによって生成されるテキストファイルには、フィールド値が全ピークにわたって同一ではないフィールド用の列しか含まれません。

Create Quan Method From Text Files スクリプトでは、テキストファイル内の必須フィールド以外（積分アルゴリズムや回帰パラメータなど）のデフォルト値が指定されます。詳細な情報については、次のセクションを参照: [テキストファイル形式](#)。

Create Quan Methods From Text Files スクリプトを使用する

1. **Script > Create Quan Methods From Text Files** をクリックします。

図 2-1 : Create Quantitation Methods from Text Files ダイアログ

2. Default Generic Parameters セクションのパラメータを使用して、定量メソッドを作成します。**Algorithm**、**Extraction Type**、**Period**、および **Experiment** フィールドは、Analyst MD ソフトウェアでは使用できません。必要に応じて以下のパラメータを設定します。

- **Algorithm** リストで、ピーク検出アルゴリズムを選択します。ウィンドウ累積アルゴリズムでは、保持閾値内の全強度が合計されるのみで、ピークは一切検出されません。
- **Extraction Type** リストで、積分するデータタイプを選択します。
- **Period** リストと **Experiment** リストで、期間番号と実験番号を選択します。

Default Analyst Classic Parameters、Default General IntelliQuan Parameters、Default IntelliQuan MQ III Parameters、Default Window Summation Parameters の各グループには、**Algorithm** フィールドで選択したアルゴリズムによって用いられるパラメータが記されます。

3. **Use Baseline Subtraction** チェックボックスを選択すると、Window Summation アルゴリズムによって、累積ウィンドウ内のデータポイント最小強度を示す水平線に向けて強度の合計値が算出されます（ゼロ強度に向けて累積されることはありません）。
4. Regression Parameters セクションで、回帰情報を選択します。

ここで指定した情報は、すべての分析試料ピークに適用されます。前述のパラメータとは異なり、この情報についてテキストファイルで示すことはできません。そのため、同一の回帰パラメータがすべての分析試料に適用されます。パラメータのすべての詳細については、次のドキュメントを参照：ヘルプ

5. 単一の定量化メソッドを作成するには **Create One Method** をクリックし、定量化メソッドの作成に用いられるテキストファイルを参照して、**Open** をクリックします。

テキストファイルが正しい形式であり、必要な列が含まれている場合、txt ファイルと同じファイル名の定量化メソッド qmf ファイルが作成されます。作成された定量化メソッドは、テキストファイルの場所に関係なく、Analyst MD ソフトウェアの現在の作業プロジェクトの下にある Quantitation Methods フォルダに保存されます。

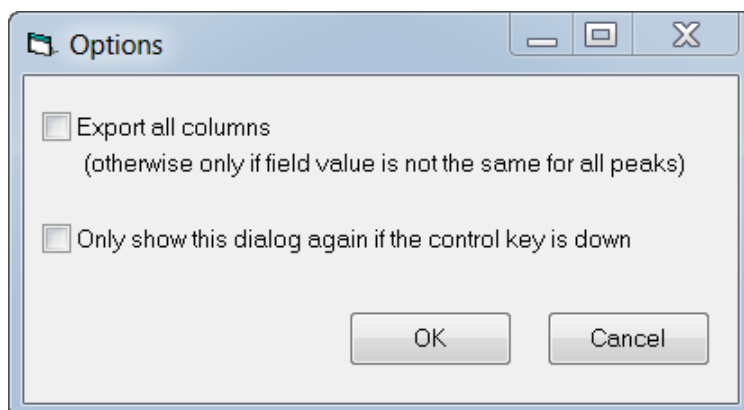
6. 複数のテキストファイルから複数のメソッドを作成するには、**Create Multiple Methods** をクリックし、テキストファイルが配置されているフォルダを参照して **OK** をクリックします。

テキストファイルと同じファイル名の定量化メソッド qmf ファイルは、正しい形式で必要な列が含まれている場合、そのフォルダ内の個々のテキストファイルごとに作成されます。作成された定量化メソッドは、テキストファイルの場所に関係なく、Analyst MD ソフトウェアの現在の作業プロジェクトの下にある Quantitation Methods フォルダに保存されます。

Create Text File from Quan Method スクリプトを使用

1. Analyst MD ソフトウェアで定量化メソッドを作成して保存します。
2. **Script > Create Text File from Quan Method.** をクリックします

図 2-2 : オプションダイアログ



3. **Export all columns** チェックボックスをオンにし、**OK** をクリックします。
4. 定量化メソッド(qmf)ファイルを参照して選択します。
5. テキストファイルの場所に**移動**して選択します。
スクリプトにより、すべての列が含まれたテキストファイルが生成されます。ステップ 3 で **Export all columns** チェックボックスが選択されていない場合、スクリプトは、フィールド値がすべてのピークで同じではないフィールドの列を含むテキストファイルのみを生成します。

テキストファイル形式

定量化メソッドを作成するために用いられるテキストファイル(Create Quan Methods from Text Files)、ならびにメソッドを用いて作成されたテキストファイル(Create Text File from Quan Method)の形式は以下のようになっています。

- 各フィールドはタブ文字で区切られる一方、各行の末端はキャリッジリターンまたは改行文字で区切られます。
- ファイルの最初の行には、列見出しが含まれている必要があります。以下の表に記された列のうち、「必須」と記されているものはいずれもファイルに含める必要があります。他の列にはついてはオプションです。列の実際の順序は重要ではありません。
- 後続の行には、単一の分析試料または内部標準ピークの情報を含めなければなりません(表を参照)。

表 2-1 : テキストファイル形式

列名	必須	説明
Peak Name	Yes	分析試料または内部標準ピークの名前。
First Mass	Yes	(MRM データの場合)ピークの Q1 質量。(フルスキャンデータの場合)統合される XIC の開始質量。(Q1 MI または Q3 MI データの場合)質量。
Second Mass	状況に応じる	このフィールドは、フルスキャンデータまたは MRM データを統合する場合には必須ですが、Q1 MI または Q3 MI データにおいては不要です。(MRM データの場合)ピークの Q3 質量。(フルスキャンデータの場合)統合される XIC の終了質量。
Extraction Type	No	統合されるデータのタイプ。これが含まれている場合は、以下のいずれかとなります。 0 - MRM データ 1 - Q1 MI または Q3 MI データ 2 - フルスキャンデータ
Is IS	No	現在のピークが内部標準または分析試料のいずれであるかを指定します。ピークが内部標準の場合は、TRUE。それ以外の場合は、FALSE。この列が含まれていない場合、定義されたピークはいずれも分析試料であると想定されます。 注記: テキストファイル内では、内部標準ピークは(この内部標準を使用する)分析試料ピークよりも前に定義しなくてはなりません。
IS Name	No	分析試料ピークについては、内部標準が存在する場合にはその名前を指定します。該当する分析試料で内部標準が用いられない場合は、このフィールドは空白のままにします。内部標準ピーク自体に対しては、このフィールドの値は無視されます。

表 2-1 : テキストファイル形式 (続き)

列名	必須	説明
Period	No	ピークの期間番号です(1 から始まり、データ内の期間番号まで続きます)。
Experiment	No	ピークの実験番号です(1 から始まり、期間内の最大実験番号まで続きます)。
相対 RT を使用する	No	内部標準を使用する分析試料ピークについては、予測保持時間が IS のものと相対しているかどうかを指定します。その場合は、TRUE。それ以外の場合は、FALSE。このフィールドの値は他のピークにおいては無視されますが、それでも TRUE または FALSE のいずれかを入力する必要があります。
Conc Units	No	濃度の単位
Calc Conc Units	No	算出濃度の単位。
Bkg Start	No	ピークバックグラウンドの開始時間(分)。このパラメータによってピーク積分が何らかの形で影響を受けることはありませんが、ノイズ、ひいては S/N の算出方法に影響を及ぼします。
Bkg End	No	ピークバックグラウンドの終了時間(分)。
Expected RT	No	予測保持時間(0~1666 分)。
RT Window	No	保持時間ウィンドウ(1~1000 秒)。
Algorithm	No	どのピーク検出アルゴリズムと積分アルゴリズムを使用すべきかを指定します。これが含まれている場合は、以下のいずれかとなります。 0 - Analyst Classic(TurboChrom) 1 - IntelliQuan - IQA II(自動) 2 - IntelliQuan - MQ III 3 - Window Summation
Bunching Factor	No	(TurboChrom アルゴリズム)ピークのバンチングファクター、1~100。
Num Smooths	No	(TurboChrom アルゴリズム)スムージング数、0~10。
Noise Threshold	No	(TurboChrom アルゴリズム)ノイズしきい値、1-6~19。
Area Threshold	No	(TurboChrom アルゴリズム)領域しきい値、-6~112。
Separation Width	No	(TurboChrom アルゴリズム)分離幅、0~5。
Separation Height	No	(TurboChrom アルゴリズム)分離高、0~1。
Exp Peak Ratio	No	(TurboChrom アルゴリズム)指数関数比、1~16。

表 2-1 : テキストファイル形式 (続き)

列名	必須	説明
Exp Adjusted Ratio	No	(TurboChrom アルゴリズム) 指数調整比、2～16。
Exp Valley Ratio	No	(TurboChrom アルゴリズム) 指数谷比、1～16。
Min Height	No	最小許容ピーク高さ、0～116、IntelliQuan アルゴリズム使用の場合。
Min Width	No	(IntelliQuan アルゴリズム) 最小許容ピーク幅、0～116 秒。
Smooth Width	No	(IntelliQuan アルゴリズム) Savitzky-Golay スムージングフィルターの半値幅、0～20。
MQ III ノイズ率	No	(IntelliQuan アルゴリズム) MQ III オプションを使用した場合のノイズ率。0～100 の整数でなければなりません。
MQ III Baseline Sub Window	No	(IntelliQuan アルゴリズム) ベースライン減算ウィンドウ、0～10 分、MQ III オプションが使用されている場合。
MQ III Peak Splitting Factor	No	(IntelliQuan アルゴリズム) ピーク分裂係数、0～10、MQ III オプションが使用されている場合。
MQ III Use Largest	No	(IntelliQuan アルゴリズム) MQ III オプションを使用した場合に、保持時間ウィンドウ内の最大ピークを報告するか、または保持時間が予想されるものに最も近いピークを報告するかを指定します。最大ピークを使用するには「TRUE」と、最も近いピークを使用するには「FALSE」と入力します。
Summation Baseline Sub	No	(特殊ウィンドウ積算アルゴリズム) 領域を強度=0 の線まで積算するか、ウィンドウ内で最も強度の低いデータポイントの強度値まで積算するかを指定します。領域を最小強度データポイントの強度値に向けて積分する場合は「TRUE」と、領域を強度=0 ラインに向けて積分する場合は「FALSE」と入力します。

フルスキャンデータのテキストファイルの例を以下の表に示します。テキストファイルでは列の間にタブが、各行の末端にはキャリッジリターンが配置されています。

表 2-2 : フルスキャンデータのテキストファイルの例

Peak Name	First Mass	Second Mass	Bunching Factor
Analyte Peak 1	500.1	500.7	1
Analyte Peak 2	812	813	2
Analyte Peak 3	400	401	3

スクリプト

MRM データの別の例を以下の表に示します。Analyte Peak 1 は指定した内部標準を使用するよう構成される一方、Analyte Peak 2 では内部標準が使用されません。

表 2-3 : MRM データのテキストファイルの例

Peak Name	Is IS	IS Name	First Mass	Second Mass
IS Peak 1	TRUE	—	500.1	413.2
Analyte Peak 1	FALSE	IS Peak 1	600.2	382.1
Analyte Peak 2	FALSE	IS Peak 1	400	312.1

以下の表には、各種実験におけるフルスキャンデータと MRM データの混合データが記されています。

表 2-4 : MRM データのテキストファイルの例

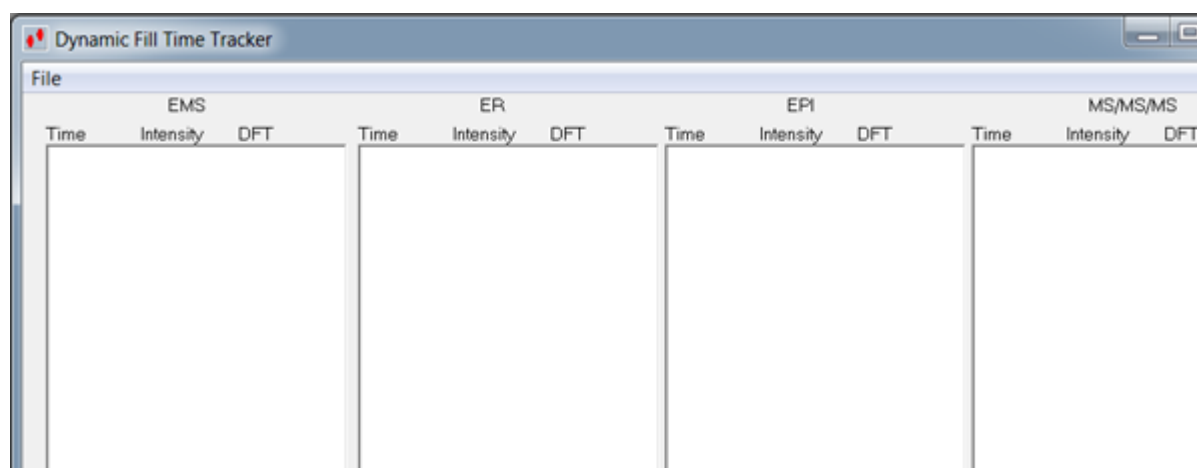
Peak Name	Extraction Type	Experiment	First Mass	Second Mass
Analyte Peak 1	0	1	500.1	413.2
Analyte Peak 2	0	1	600.2	382.1
Analyte Peak 3	2	2	812	813
Analyte Peak 4	2	2	400	401

DFT Tracker

動的充填時間 (DFT) トラッカー スクリプトは、QTRAP システム スキャン中に使用された DFT 設定を追跡します。このスクリプトを使用して、リニア イオントラップ (LIT) モードに最適な充填時間を特定することで、広いダイナミックレンジにわたって高いデータ品質が得られます。DFT Tracker では以下の LIT (リニア イオントラップ) スキャンタイプがモニターされます: MS 強調モード (EMS)、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)。

- **Script > DFTTracker** をクリックします。

図 2-3 : Dynamic Fill Time Tracker ダイアログ



DFTトラッカーは、リアルタイム実行中に発生する充填時間の動的な変化を監視します。

リニアイオントラップの充填に必要な時間が動的に算出されます。豊富に存在する化合物については、充填時間を短縮すると、イオントラップ内のイオン数が制限されることで空電電荷効果が軽減します。充填時間が長くなると、イオンが集積することで弱信号が強化されます。

- **File > Save** をクリックすると、追跡充填時間が保存されます。
- **File > Clear** をクリックすると、追跡充填時間が消去されます。
- **File > Always On Top** をクリックすると、Dynamic Fill Time Tracker ウィンドウが、現在開いている他のウィンドウ／アプリケーションの一番上に表示されます。
- **File > Exit** をクリックすると、DFT Tracker スクリプトが終了します。

MRM3 最適化スクリプト

このスクリプトを QTRAP システムでの定量分析に用いることで選択性が高まり、その結果、複雑なマトリクス内で分析試料を定量化する際の検出能力が改善します。このスクリプトは、インフュージョンごとに最適な MS3 測定メソッドが生成されるよう設計されています。スクリプトによって以下の最適化ステップが実行されます。

- プレカーサー質量の特定
- 衝突セルへの透過を最適化
- 大きなフラグメントイオンの特定
- フラグメントイオンごとに衝突エネルギー(CE)を特定
- 各フラグメントイオンに対して MS3 スキャンを実行
- すべての MS3 スキャンで励起エネルギー(AF2)を最適化
- レポートの生成
- すべてのデータと測定メソッドを保存

このスクリプトは定性に用いることで、化合物の MS/MS と MS3 スペクトルの集合体を半自動的(1回につき一つの化合物)に生成することも可能です。

MRM3 Optimization ウィンドウの概要

MRM3 Optimization ウィンドウではコントロールを使用して移動します。このウィンドウには、最適化結果が生成されるたびに表示されます。このウィンドウの各種セクションについて以下に大まかに示します。

表 2-5 : MRM3 Optimization ウィンドウ

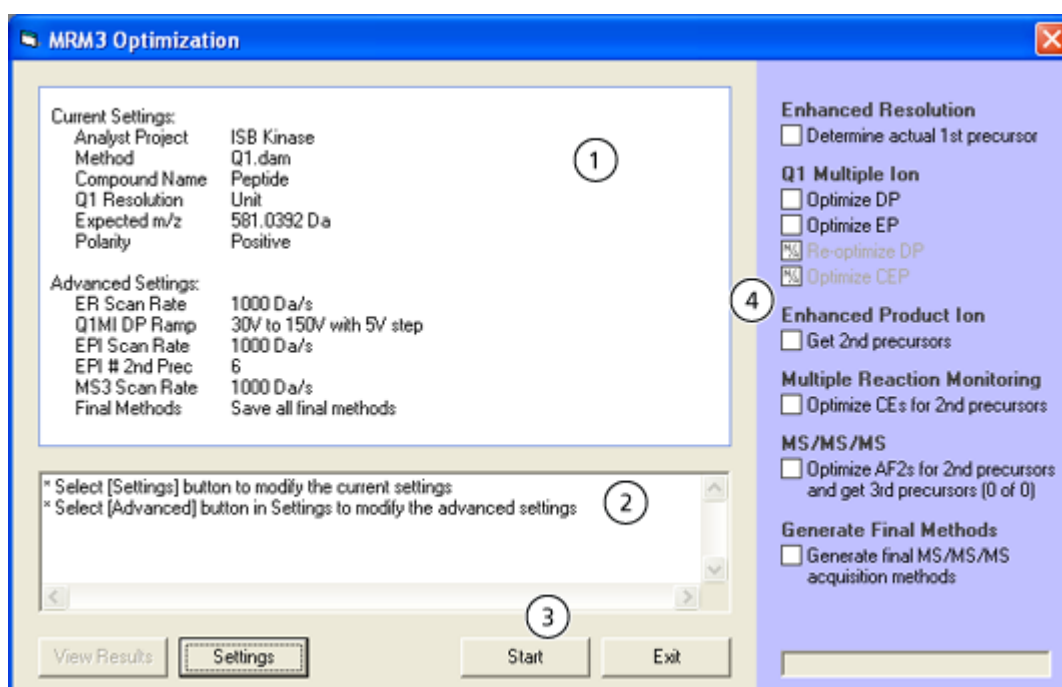
フィールド	説明
Status Window	スクリプトを初めて実行する際には、このウィンドウに、最適化に用いられる現在の最適化設定が表示されます。最適化が開始すると、このウィンドウにはスペクトル情報が表示されます。
Log File	最適化中に検出された結果がテキスト形式で表示されます。このセクションで検出されたエントリは、生成された Log.txt ファイルにも追加されます。

表 2-5 : MRM3 Optimization ウィンドウ (続き)

フィールド	説明
Overall Progress	全体的な最適化の進捗状況を表示します。
Main Controls	最適化プロセスの設定と実行に関連した主要機能がすべて表示されます。

- **View Results** をクリックして、Microsoft Notepad でファイルを開いてレビューします。最適化が完了すると、Results.txt ファイルが自動的に生成／保存されます。
- **Settings** をクリックしてウィンドウを開き、最適化プロセスに必要な化合物情報を入力します。
- **Start** をクリックして最適化プロセスを開始します。最適化の最中には、このボタンの名前が **Abort** に変化します。このボタンをクリックすると、最適化プロセスが停止します。

図 2-4 : MRM3 Optimization ウィンドウ



項目	説明
1	ステータスパネル
2	ログファイル
3	メインコントロール
4	全体進捗

環境設定を行う

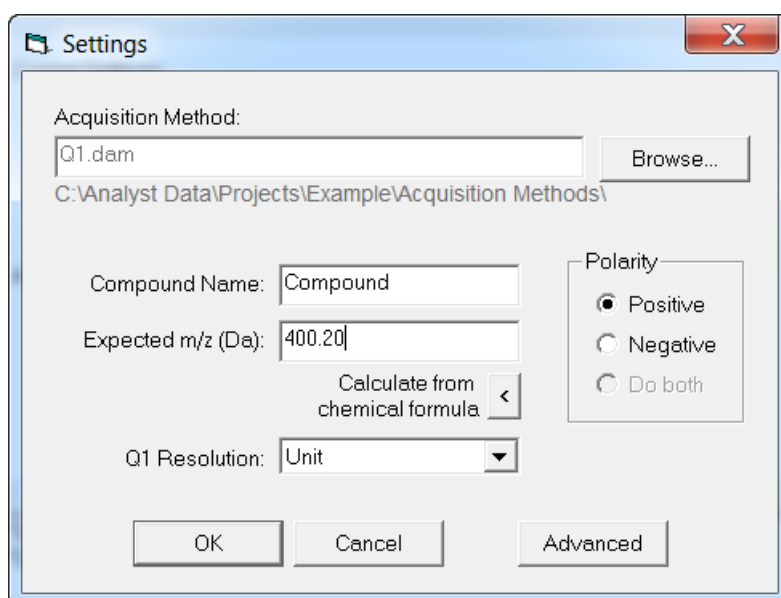
Settings ダイアログは、スクリプトが起動されるたびに自動的に開きます。

1. **Browse** をクリックして、スターター測定メソッドを参照します。このメソッドには、最適化に用いられるソース状態が含まれています。
2. **Compound Name** フィールドで、化合物名(説明的なもの)を入力します。この名前は、生成されるあらゆる測定メソッドファイルとデータファイルの接頭語として用いられます。
3. **Expected m/z (amu)** フィールドに、化合物の予測質量対電荷比(m/z)を入力します。化合物の m/z 値がわからない場合は、**Calculate from chemical formula** をクリックして、化合物の化学式から計算します。次のセクションを参照: [m/z を算出する](#)。
4. **Q1 Resolution** フィールドで、MS/MS および MS3 に用いられる Q1 分解能を選択します。
5. **Polarity** グループ内で極性をクリックします。これはスターターメソッドに応じて異なる場合があります。現時点では **Do both** オプションに対応していません。
6. 最適化プロセスで用いられる設定の一部を修正するには、**Advanced** をクリックします。次のセクションを参照: [Advanced Settings ダイアログを使用する](#)。
7. 更新した設定を検証して使用するには、**OK** をクリックします。

スクリプトを使用する

1. まだ存在しない場合は、スターター測定メソッドを作成します。このスターターメソッドは、手動チューニングで作成される Q1 測定メソッドとしなくてはならず、またチューニングプロセスに必要なソース状態を含めなくてはなりません。これらはスクリプトによって最適化されないことが理由です。
2. 生成されたすべてのファイルが保存される必要なプロジェクトの Acquisition Methods フォルダにメソッドを保存します。
3. **Script > MRM3 Optimization** をクリックします。

図 2-5 : Settings ダイアログ



4. 最適化プロセスに必要な複合情報を入力し、Settings ダイアログで **OK** をクリックします。

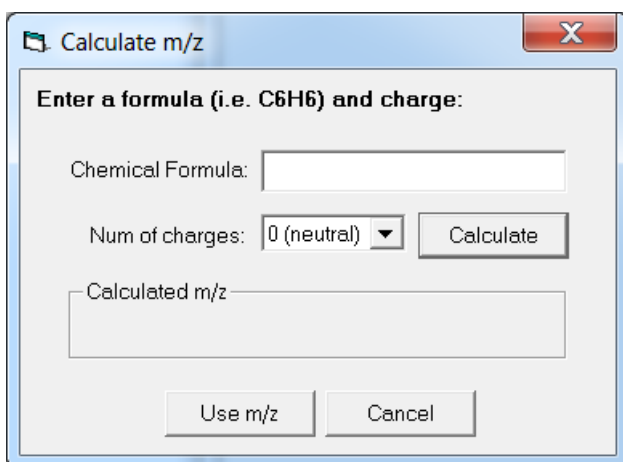
5. 最適化プロセスを開始するには、**StartMRM3 Optimization** ウィンドウでをクリックします。

***m/z* を算出する**

m/z 計算機には Settings ダイアログからアクセスできます。

1. MRM3 Optimization ウィンドウで **Settings** をクリックします。
Setting ダイアログが開きます。
2. **Calculate from chemical formula** をクリックします。

図 2-6 : Calculate *m/z* ダイアログ



3. **Chemical Formula** フィールドで、化合物の化学式を入力します。元素には大文字を使用します。このダイアログには、ペプチドの化学式も入力します。
4. **Num of charges** フィールドで電荷数をクリックします。
5. 入力した化学式と電荷の *m/z* を算出するには、**Calculate** をクリックします。
6. 計算機を閉じて、**Expected *m/z* (amu)** Settings ダイアログのフィールドを算出した *m/z* で更新するには、**Use *m/z*** をクリックします。

Advanced Settings ダイアログを使用する

このダイアログでは、それぞれの最適化ステップについての説明が表示されます。一部の設定は、最適化をカスタマイズするために変更できます。

1. MRM3 Optimization ウィンドウで **Settings** をクリックします。
Setting ダイアログが開きます。
2. **Advanced** をクリックします。

図 2-7 : Advanced Settings ダイアログ

Advanced Settings

Enhanced Resolution
Finds the most intense peak within a 2 Da window of expected 1st precursor molecular weight. Mass range window defaulted to 30 Da around expected mass to charge ratio.
Scan Rate: 1000 (Da/s)
Cycles: 20

Q1 Multiple Ion
Optimizes DP and EP. DP re-optimized if -10<EP<10. CEP is optimized only when applicable. Smooths TIC 2 times and finds voltage yielding greatest ion count.
DP Ramp: Start 30 Stop 150 Step 5 (0-200V)
Dwell Time: 100 (ms)

Enhanced Product Ion
Finds the most intense 2nd precursor peaks, excluding any peaks within a 5 Da window of 1st precursor.
Scan Rate: 1000 (Da/s)
2nd Precursors: 6 (1-10)
Mass range: 300 to 1000
CE: 30 CES: 10
Cycles: 3

Multiple Reaction Monitoring
Optimizes CE values for the most intense 2nd precursor peaks by cycling through each XIC overlay. XIC graph smoothed 2 times and voltage yielding greatest ion count is determined. (CE is ramped for its entire range with a 2V step size)
Dwell Time: 50 (ms)

MS/MS/MS
XIC graph smoothed 2 times. Finds 2 most intense 3rd precursors at 5% max intensity. Exclude peaks within 2 Da window of 2nd precursor (parent must be <10% total ion count). (AF2 is ramped for optimal sensitivity.)
Scan Rate: 1000 (Da/s)
☒ Use Q0 Trapping
Fixed Fill Time: 50 (ms)
Mass range: 100 to 1000

Generate Final Methods
Creates final MS/MS/MS methods with mass range of 50 Da to 2nd precursor + 0.8 Da for each top 2nd precursor. Creates optimal MS/MS/MS method with 20 Da mass range window around most intense 3rd precursor.
☒ Save All Final Methods
☐ Save Optimal Method Only

OK Cancel

3. 強化分解能、強化プロダクトイオン、MS/MS/MS の各グループの **Scan Rate** フィールドで、**ER**、**EPI**、**MS3** のスキャン速度を選択します。
4. **Q1 Multiple Ion** グループの **DP Ramp** フィールドに、最適化用のデクラスティング電位 (DP) 範囲を入力します。この範囲は絶対値として示されます。Settings ダイアログでの選択に応じて、該当する極性が自動的に適用されます。
5. **Enhanced Product Ion** グループで以下を実行します。
 - **2nd Precursors** フィールドに、MS3 最適化に用いられる二次プリカーサー (フラグメントイオン) の最大数を入力します。1~10 の数字を入力します。
 - **Mass range** フィールドに、MS3 最適化用に選択される二次プリカーサーの質量範囲を入力します。
 - **CE** フィールドに衝突エネルギー値を入力し、**CES** フィールドには、衝突エネルギーのスプレッド値 (良好な MS/MS スペクトルが得られ、そこからフラグメントイオンを選択できるような値) を入力します。
6. 二次プリカーサーごとにすべての最終 MS3 メソッドを作成し、定量分析用に最適 MS3 メソッドを作成するには、**Generate Final Methods** グループで **Save All Final Methods** をクリックします。最適 MS3 メソッド (定量において最も感度の高いもの) のみを保存するには **Save Optimal Method Only** をクリックします。
7. **OK** をクリックして、Advanced Settings の更新を承認します。

最適化の実行中

最適化が開始されると、Analyst MD ソフトウェアの Manual Tune は自動的に停止します。スクリプトの実行中でも、本ソフトウェアのすべての機能を引き続き使用できます。また、最適化手順の各パートが完了するたびに、Log.txt ファイルが更新されます。スクリプトをいつでも停止するには、**Abort** をクリックします。スクリプトの例については、次の図を参照してください。Overall Progress セクションでは、チェックリストの画像と各種テキストフォントによってさまざまな状態が示されます。これについては後述します。

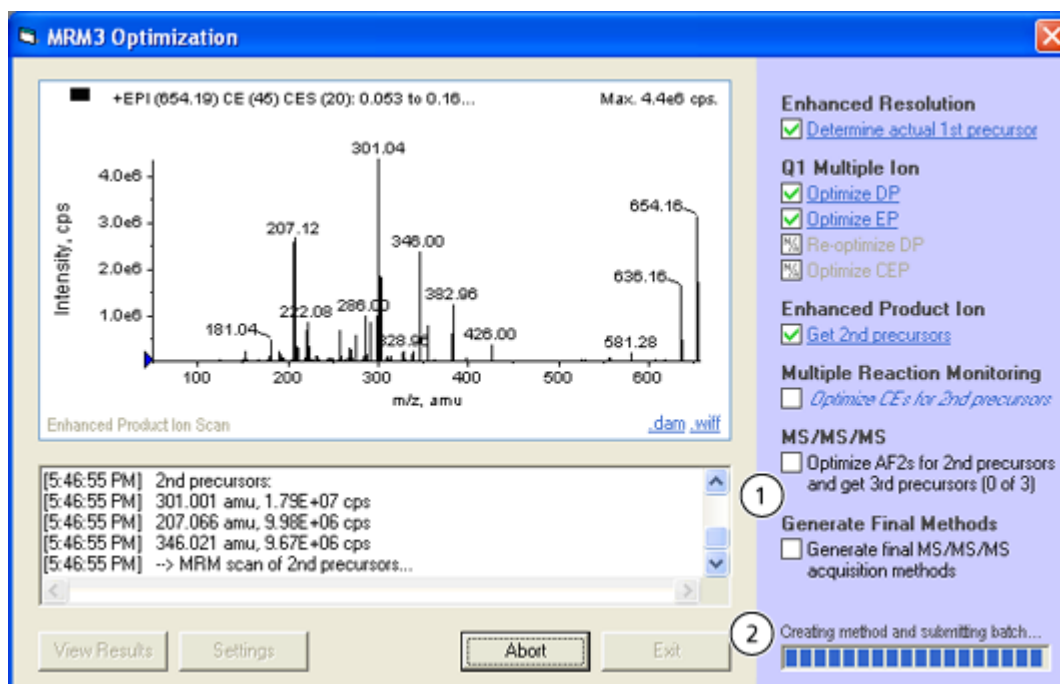
図 2-8 : ステータスの例

- ☐ ① Task not performed yet – text is black
- ☒ ② *Task in progress* – text is blue and italic
- ☐ ③ Task will not be performed – text is grey
- ☒ ④ Task completed (hyperlink) – text is blue and underlined
- ☒ ⑤ Task completed (no link) – text is blue
- ☒ ⑥ *Part of task completed (hyperlink)* – text is blue, underlined, and italic

項目	説明
1	タスクはまだ実行されていません - テキストは黒です
2	進行中のタスク - テキストは青と斜体で表示されます。
3	タスクは実行されません - テキストは青で下線が引かれています
4	タスクが完了しました(ハイパーリンク) - テキストは青で下線が引かれています
5	タスクが完了しました(リンクなし) - テキストは青です
6	完了したタスクの一部(ハイパーリンク) - テキストは青、下線付き、斜体

テキストに下線が付いている場合、これを web ページハイパーリンクのようにクリックすることで、該当するスペクトルまたはクロマトグラムが表示されます。MS/MS/MS の下に表示されるテキストは、実行中の MS3 スキャンの番号を表しています(本製品では 1~10 回のスキャンが可能です)。Overall Progress セクションには Message 領域も含まれています。この領域では、進捗バーに現在のステップの進捗が示されます。進捗バーの上には、現在の最適化ステップの時間や他の状態に関する各種メッセージが示されます。

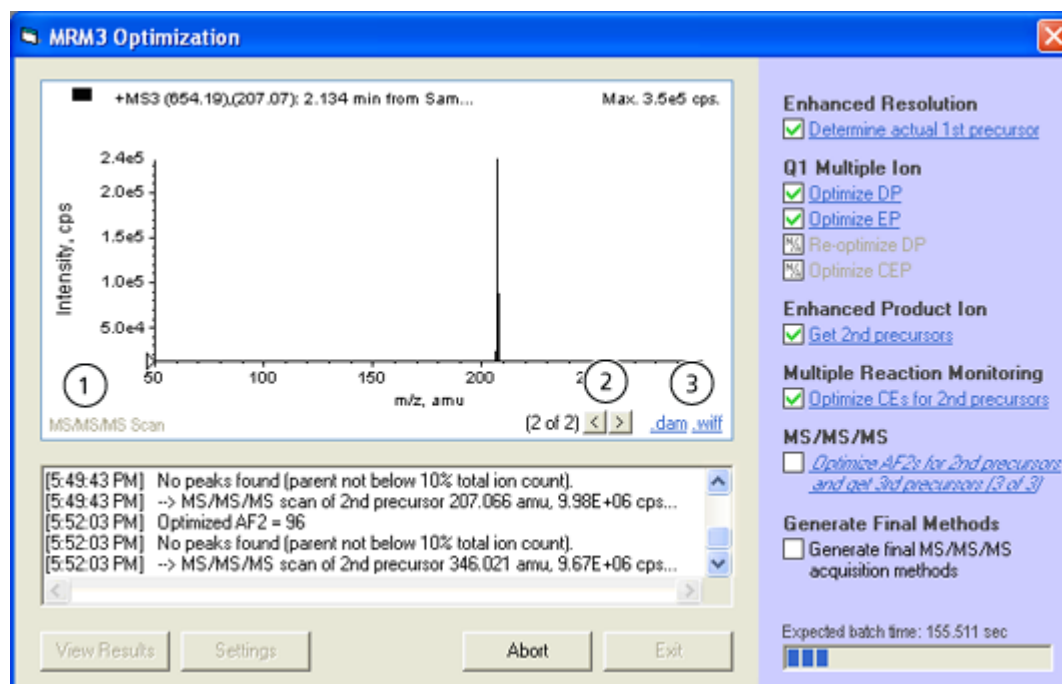
図 2-9 : EPI スキャン後の MRM3 Optimization ウィンドウ



項目	説明
1	チェックリスト
2	メッセージ

スペクトル状態ウィンドウには、以前生成されたスペクトルまたはクロマトグラムが表示されます。いずれかのチェックリスト項目を選択すると、該当するグラフが表示されます。スキャンタイプ名は、現在どのスキャンが表示されているかを表しています。各ステップが完了するたびに、表示中のグラフに関連した測定メソッド(dam)またはデータファイル(wiff)を開くことが可能です。MS/MS/MS スキャンが表示されている場合、ボタンを使用することでそれぞれの MS3 スキャン間を順次切り替えることができます。

図 2-10 : MS3 スキャン中の MRM3 Optimization ウィンドウ



項目	説明
1	スキャンタイプ
2	それぞれの MS3 スキャン間で切り替えるためのボタン
3	リンク

最適化の完了

MS3 の定量最適化が完了または停止すると、Results.txt ファイルが生成されます。このファイルは、自動的に Microsoft Notepad で開かれます。MRM3 Optimization ウィンドウから **View Results** をクリックして、ファイルを表示します。Results.txt ファイルの各部分について以下に説明します。

- **Time and Duration:** 最適化の日付と継続時間が表示されます。
- **User Starting Conditions:** 設定と Advanced Settings が表示されます。
- **Optimization Conditions Found:** ER/Q1MI スキャン時に検出された最適状態が表示されます。
- **MS3 Fragments Found and Associated Losses:** フラグメントと最適状態 (衝突エネルギーと励起エネルギー)、ならびに EPI スキャン/MS3 で検出された関連ロスが表示されます。

図 2-11 : 最適化レポート

```

Results.txt - Notepad
File Edit Format View Help
Quantitative Optimization for MS3
Thursday, July 15, 2004 (Start 10:12:49 AM, End 10:24:37 AM) ①

Starting Parameters
=====
Analyst Project: Opt MS3
Starting Method: Starter Method.dam
Compound Name: Reserpine
Resolution: Unit
Expected m/z: 609.281 amu ②
Polarity: Positive

ER Scan Rate: 250 amu/s
Q1MI DP Ramp: 0V to 200V with 5V step
EPI Scan Rate: 1000 amu/s
EPI # 2nd Prec: 5
MS3 Scan Rate: 1000 amu/s
Final Methods: Save all final methods

Optimization Results
===== ③
Actual m/z: 609.172 amu, 7.23E+07 cps
Optimized DP: 90 (30 initial value)
Optimized EP: 10 (10 initial value)
Optimized CEP: 24 (24.774 initial value)

[MS/MS Fragment 1] 195.117 amu (Loss of 414), 9.98E+06 cps ④
Optimized CE: 47 (10 initial value)
Optimized AF2: 70 (100 initial value)

MS3 Peak  Centroid Mass(amu)  2nd Loss  Centroid Intensity(cps)
-----
1          167.04             28      5.00E+04
2          152.82             42      1.67E+04

Final MS3 Method: Reserpine_FinalMS3_195.117.dam

[MS/MS Fragment 2] 174.149 amu (Loss of 435), 8.60E+06 cps
Optimized CE: 55 (10 initial value)
Optimized AF2: 70 (100 initial value)

MS3 Peak  Centroid Mass(amu)  2nd Loss  Centroid Intensity(cps)
-----
1          159.05             15      1.00E+05
2          142.209            32      5.00E+04

Final MS3 Method: Reserpine_FinalMS3_174.149.dam
  
```

項目	説明
1	時刻と継続時間
2	ユーザー指定の開始状態
3	検出された最適化状態
4	検出された MS3 フラグメントと関連ロス

生成されるいずれの測定メソッドにも、以下の形式で説明的なファイル名が付けられます:[入力した化合物名] + [スキャンタイプ] + [m/z] + dam。これらのメソッドは、スターター測定メソッドと同じフォルダに保存されます。

すべてのデータ、Log.txt、Results.txt ファイルは、スターター測定メソッドと同じプロジェクトで作成された、Data サブフォルダに保存されます。サブフォルダは以下の形式となっています:[入力した化合物名] + OptMS3 + ([日付]、[時刻])。データファイルは以下の形式となっています:[入力した化合物名] + [スキャンタイプ] + [m/z] + wiff。

スクリプトロジックの詳細: 初期化

本項では、最適化プロセスの各段階について説明します。いずれのスキャンも、スキャン番号を用いて実行されます(合計で 3 セットまで)。

最適化スキャンを実行する前に、MRM3 最適化スクリプトは次の初期化手順を実行します。これらのステップの最中にエラーが発生した場合は、スクリプトによって最適化プロセスが停止されます。

1. Analyst MD が実行されていることを確認してください。
2. スターター測定メソッドをロードして、これが有効であるかどうか特定するほか、装置タイプを確認します。
3. wiff ファイルを格納するために、新しい Datawv サブフォルダを作成します。
4. Log.txt ファイルを作成します。

分解能強調スキャン

このステップでは、最適化に用いられるイオンの質量が確認されます。ER スキャンは指定したスキャン速度で 20 サイクル実行されます。次に、予想される最初のプリカーサー m/z 値の ± 1 amu 以内の最も強いピークが選択されます。Analyst MD ソフトウェアと同様に、このスキャンは、指定した m/z 値を中心に 30 amu の質量範囲で実行されます。多価種については、このステップで C12 イオンが特定されます。

Q1 多重イオンスキャン

このステップでは関心のあるイオンの透過が、衝突セルに至るまで最適化されます。これは、Q1 MS スキャンを用いて実行されます。スクリプトによって指定した DP ランプでスキャンが実行されることで、まずは DP パラメータが最適化されます。EP パラメータは、1 V から 12 V まで(ネガティブモードでは -12 V から -1 V まで) 0.5 V 間隔で上げていくことで最適化します。最適 EP が 10 V 未満の場合(ネガティブモードでは -10 V を上回る場合)、DP が再度最適化されます。CEP パラメータも、0 V から 100 V まで(ネガティブモードでは -100 V から 0 V まで) 2 V 間隔で上げていくことで最適化されます。最適電圧の特定時にはグラフが 2 回スムージングされ、最大のイオンカウントを発生させる電圧が採用されます。各スキャンの滞留時間は 100 ms に設定されています。

プロダクトイオン強調モードスキャン

このステップでは、MS3 最適化に使用するフラグメントイオンを選択します。これは、EPI スキャンを指定したスキャン速度で 3 回のサイクルにわたって使用することで実行されます。分析したい化合物に対して、最適な CE を指定します。最適な CE について不明な場合は、CE 設定範囲が用いられるような CES 値を指定します。これによって最高強度の二次プリカーサーピークが検出されますが、一次プリカーサーの ± 2.5 amu ウィンドウ内のピークはすべて除外されます。使用する二次プリカーサーの数は、Advanced Settings で選択します。二次プリカーサーの選択対象となる質量範囲は、ユーザーが指定します。

多重反応モニタリングスキャン

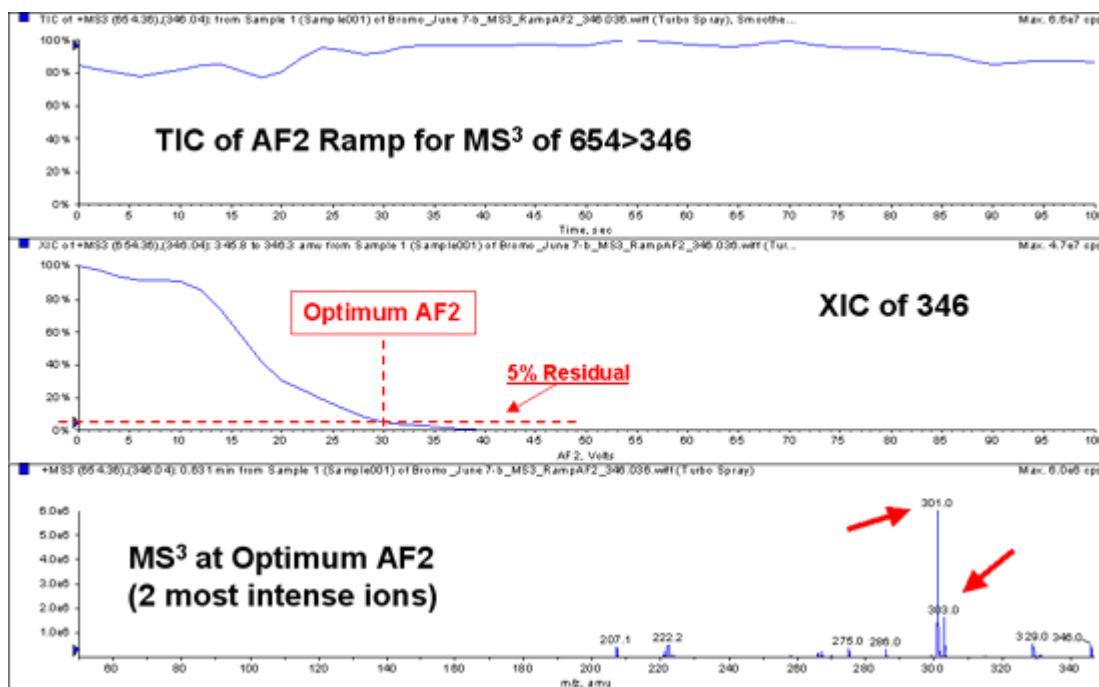
このステップでは、EPI スキャンによって選定されたフラグメントイオンごとに衝突エネルギーが最適化されます。これは、MRM スキャンを用いて実行されます。5 から 130 V まで(ネガティブモードでは-130 から-5 V まで)の CE ランプ(間隔は 2 V、滞留時間は 50 ms)を使用します。重ねられたグラフは 2 回スムージングされ、最大のイオンカウントを発生させる電圧が最適 CE 値として採用されます。

MS/MS/MS (MS3) スキャン

このスクリプトでは、選択した二次プリカーサーごとに MS/MS/MS (MS3) スキャンが指定のスキャン速度ならびに 0~100 V の AF2 ランプ(双方の極性において 2 mV のステップ)で実行されます。スキャンの充填時間を設定し、必要に応じて最大感度が得られるよう Q0 トラッピングをオンにすることもできます。MS/MS/MS (MS3) スキャンの質量範囲の下限を指定することも可能ですが、上限は「二次プリカーサー + 5 amu」となります。

生成されたグラフは 2 回スムージングされ、次の図に示すように、二次プリカーサーの残留強度(XIC に基づく)が最大強度の 5%になると、最適な AF2 が得られます。続いて、この AF2 値のスペクトルを用いて、最高強度の第二世代フラグメントイオンが 2 個検出されますが、二次プリカーサーの ± 1 amu 内にあるピークは除外されます。二次プリカーサーの m/z が総イオンカウントの 10% よりも大きい場合、そのスペクトルのフラグメントは使用されません。この状態は、二次プリカーサーの m/z 値が 10% よりも大きい場合には十分なフラグメンテーションが発生しないため起こります。

図 2-12 : AF2 はどのように特定されるか



最終メソッドを作成する

最適化スキャンの実行後に、スクリプトによって最終 MS/MS/MS メソッドが作成されます。Advanced Settings ダイアログで **Save Optimal Method Only** オプションがクリックされている場合、最大強度第二世代フラグメントイオンの ± 10 amu 周辺に位置する最適 MS/MS/MS メソッドの

スクリプト

みが作成されます。**Save All Final Methods** オプションをクリックすると、ユーザーが定義した下限から上限 (二次プリカーサー +5) amu までの質量範囲を使用して、上位二次プリカーサーのそれぞれに対する最適な方法および MS/MS/MS メソッドが作成されます。

MSServiceLog スクリプト

デフォルトでは、質量分析計からのリードバックは MS サービスログファイルに記録されます。MSServiceLog スクリプトを使用してリードバックの記録を停止するか、装置のリードバックの (MS Service ログファイルへの) 記録を開始します。MSServiceLog スクリプトは、4500MD および Citrine システムシステムにのみ適用できます。

MSServiceLog スクリプトはアクティブハードウェアプロファイルなしでも使用できますが、MS サービスログ設定に加えた変更は、ハードウェアプロファイルを再アクティブ化した後でしか反映されません。

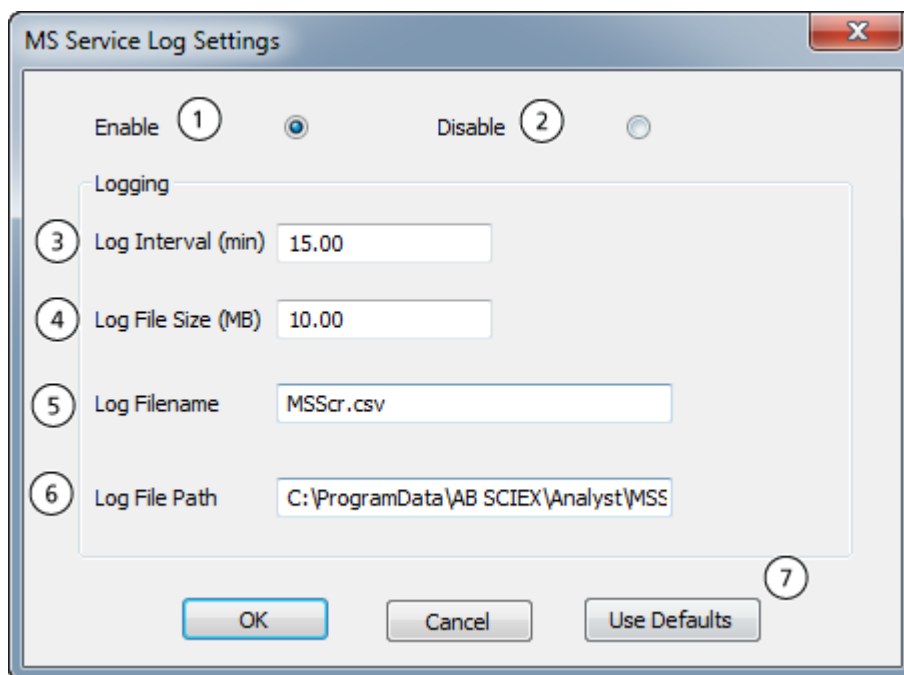
スクリプトをインストールする

[スクリプトをインストールする](#)を参照してください。

スクリプトを使用する

1. ハードウェアプロファイルを無効化します。
2. **Script > MSServiceLog** をクリックします。

図 2-13 : MS Service Log Settings ダイアログ



項目	名前	説明
1	Enable	MSServiceLog スクリプトを使用して、質量分析装置からのリードバックの (MS Service ログファイルへの) 記録を開始します。
2	Disable	MSServiceLog スクリプトを使用して、質量分析装置からのリードバックの (MS Service ログファイルへの) 記録をオフにします。
3	Log Interval (min)	質量分析装置からのリードバックが MS Service ログファイルに記録される頻度を分単位で指定します。デフォルト値は 15 分となっていますが、1~1440 分の範囲で選択できます。
4	Log File Size (MB)	<p>ログファイルのサイズを指定します。デフォルト値は 10 Mb となっていますが、1 となっているが、1 MB~1000 MB の範囲で選択できます。最大 2 つのログファイルが存在する可能性があります。</p> <ul style="list-style-type: none"> 装置からのリードバックが記録される現在のログファイル。 アーカイブされたログファイル。 <p>現在のログファイルが指定サイズに達すると、既定のアーカイブファイル名でアーカイブされ、リードバックを記録するための新しいログファイルが作成されます (MS Service Log Settings ダイアログで指定したログファイル名が付けられます)。</p>
5	Log Filename	ログファイルの名前を指定します。csv、txt、log の拡張子を使用できます。
6	Log File Path	ログファイルの保存場所を指定します。新しい場所は、必ずデフォルトの場所 (C:\ProgramData\AB SCIEX\Analyst\MSServiceLog) の中に作成してください。
7	Use Defaults	クリックすると、ダイアログ内の全フィールドをプリセット値に戻します。

3. **Disable** をクリックすると、MS Service ログファイルへのリードバックの記録がオフになります。
4. **Enable** をクリックすると、質量分析装置からのリードバックの MS Service ログファイルへの記録を開始します。
5. MS Service Log Settings ダイアログの他のフィールドの値を変更するには、次の図を参照：
[図 2-13](#)。
6. **OK** をクリックして変更内容を適用します。

sMRM Calculator

sMRM Calculator スクリプトは、*Scheduled* MRM アルゴリズム測定メソッドを選択しますこのスクリプトでは 4 種類のグラフを用いて、MRM 遷移、その同時実行性、予測されるサイクル時間、およびそれに適用される滞留時間の概要を示します。次の図を参照: [図 2-15](#)。実行時にトランジションを適切に配置するには、スクリプトダイアログで、**Maximum Dwell**、**Minimum Dwell**、**Target sMRM Cycle Time**、**Target sMRM Scan Time** または **Window Width**、**MRM Pause Time**、および **Settling Time** などのパラメータ値を変更します。4 つのグラフはそれに応じて更新されます。必要とされるトランジションの配置が得られるまでこのプロセスを繰り返します。

注: 元のメソッドで **Target Cycle Time** が選択されている場合、スクリプトダイアログで **Target Scan Time** に変更することはできません。元のメソッドで **Target Scan Time** が選択されている場合、スクリプトダイアログで **Target Cycle Time** に変更することはできません。

注: **Settling time** オプションは、sMRM Calculator スクリプトダイアログの Citrine システムに対してのみ変更できます。

スクリプトをインストールする

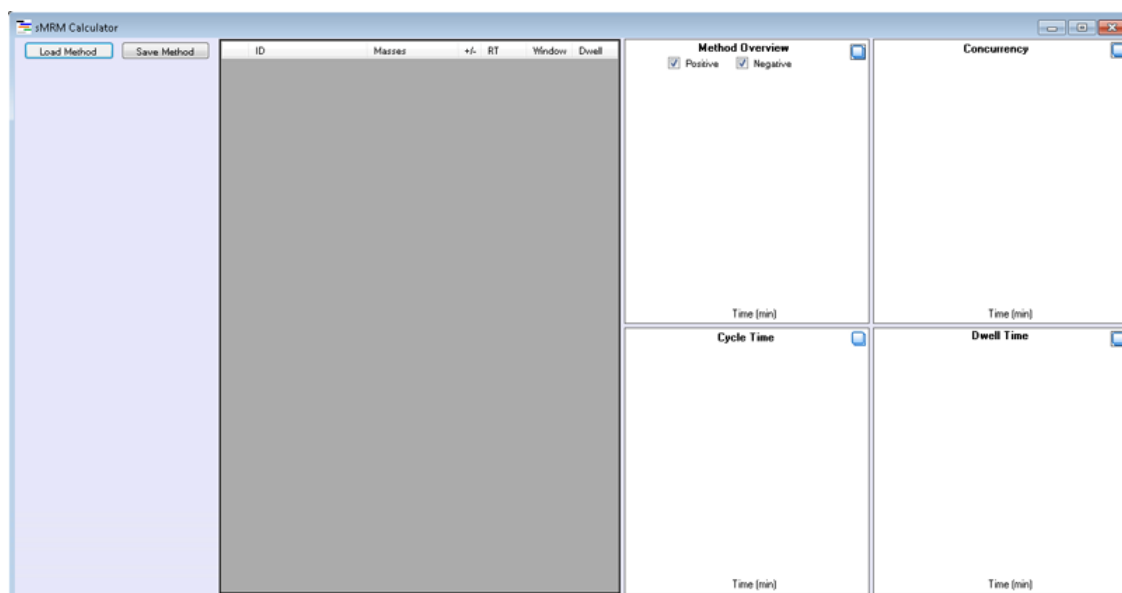
[スクリプトをインストールする](#)を参照してください。

スクリプトを使用する

前提条件
<ul style="list-style-type: none">Analyst MD ソフトウェアが開かれており、ハードウェアプロファイルがアクティブになっていることを確認します。<i>Scheduled</i> MRM アルゴリズム測定メソッドがすでに作成されていることを確認します。

1. **Script > sMRM Calculator** をクリックします。
sMRM Calculator ダイアログが開きます。

図 2-14 : sMRM Calculator ダイアログ



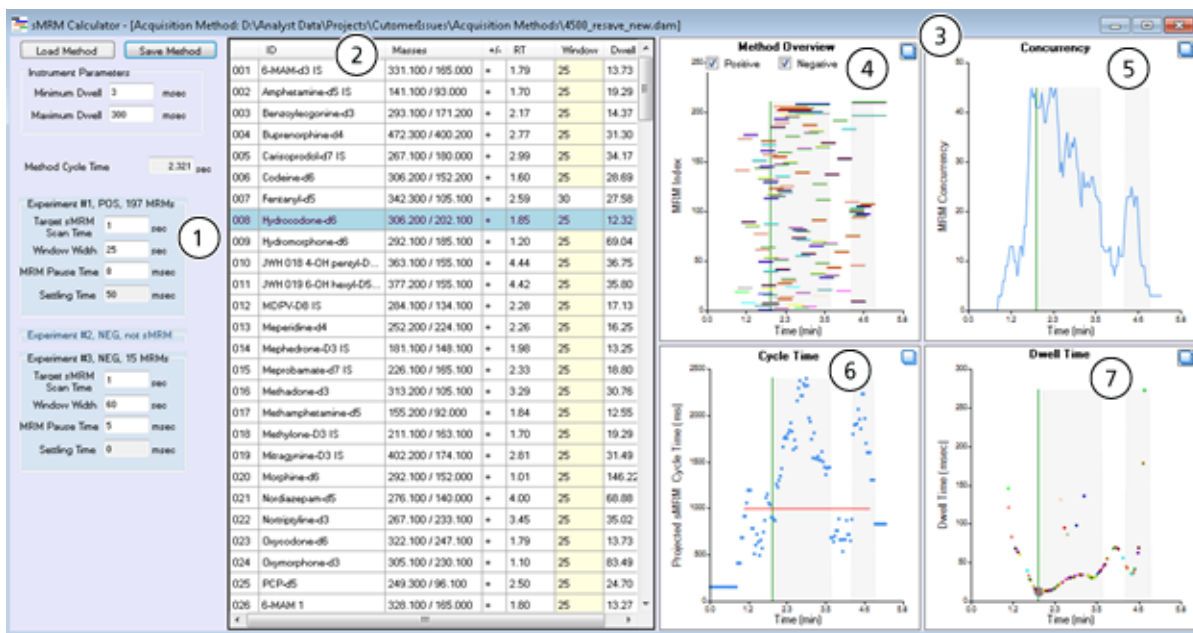
2. **Load Method** をクリックして、既存の *Scheduled* MRM アルゴリズム測定メソッドを選択します
Open ダイアログが開きます。

注: sMRM Calculator スクリプトにロードできるのは、*Scheduled* MRM アルゴリズムの実験と、現在選択されているプロジェクトのアクティブ質量分析装置については、sMRM Calculator スクリプトで開くことができます。*Scheduled* MRM アルゴリズム実験の詳細のみが示されています。非 *Scheduled* MRM アルゴリズムの実験は、スクリプトで非 *Scheduled* MRM としてラベル付けされます。

3. *Scheduled* MRM アルゴリズム測定メソッドを選択し、**Open** をクリックします。

選択した測定メソッドが **sMRM Calculator** ダイアログで開きます。開いている測定メソッドファイルのパスが、ダイアログのタイトルに表示されます。

図 2-15 : sMRM Calculator ダイアログで測定メソッドが開かれた状態



項目	説明
1	<p>左側のペインには、装置と <i>Scheduled</i> MRM アルゴリズムのパラメータが含まれています。このペインに表示されるパラメータは、開かれる測定メソッドに応じて変化します。</p> <p>右側のペインの 4 つのグラフにおいてトランジションが適切に配置されていない場合は、左側のペインで編集可能なパラメータと設定を変更します。これにより、テーブルとグラフ内の該当する列が適宜に更新されます。パラメータ値は、許容範囲内であればトランジションが適切に配置されるまで修正できます。</p> <p>たとえば、Target sMRM Scan Time フィールドの値を変更すると、テーブル内で滞留時間が再計算／更新され、グラフも適宜に更新されます。</p> <p>たとえば、Windows Width フィールドの値が変更された場合、この値は、このグローバル設定を使用するすべての遷移の Window 列で更新されます。すべてのトランジションの滞留時間がテーブル内で再計算／更新されます。右側のペインも適宜に更新されます。<i>Scheduled</i> MRM プロアルゴリズム測定メソッド内で独自の検出ウィンドウ設定が割り当てられたトランジションの場合、左側のペインでのグローバル設定 Window Width を変更しても、テーブル内でこれらのトランジションの Window 列が更新されることはありません。</p> <p>注: 左側のペインで灰色になっているフィールドは編集不可であるため、値を変更できません。</p>

項目	説明
2	<p>指数、化合物 ID、Q1/Q3 質量、極性、ウィンドウ幅、保持時間、滞留時間は、中央のペインに表示されます。デフォルトのビューは、インデックス番号順に編成されています。</p> <p>他の列の情報に基づいてビューを再配置するには、次の 7 列のいずれかのタイトルをクリックします: index、ID、Masses、+/-、RT、Window、および Dwell。中央のペインが更新され、選択した列の英数字順または数値順に並べられた情報が表示されます。</p> <p>SCIEX 4500MD および Citrine システムのメソッドの場合、その <i>Scheduled</i> MRM アルゴリズム実験のすべてのトランジションのウィンドウ幅も表で編集できます。表の滞留時間と右ペインのグラフは、それに応じて更新されます。テーブルのウィンドウ幅を編集すると、<i>Scheduled</i> MRM アルゴリズムの取得方法が <i>Scheduled</i> MRM プロアルゴリズムの取得方法に変換されます。</p> <p>注: グローバル設定が割り当てられたウィンドウ幅は、左側のペインで黄色い背景付きで表示されます。テーブル内でトランジションごとにウィンドウ幅を変更した場合、またはトランジションごとに特有となる「高度な」ウィンドウ幅がすでに用いられている場合、そのセルの背景色は白に変化します。</p>
3	<p>右側のペインには、すべての <i>Scheduled</i> MRM アルゴリズムトランジション（ロードされた <i>Scheduled</i> MRM アルゴリズム測定メソッドに含まれるもの）が、4 種類のグラフで表示されます。</p> <ul style="list-style-type: none"> • テーブル内で選択した MRM トランジションは、グラフで緑色の垂直線として示されます。 • グラフの灰色の領域は、（サイクルごとの極性切り替えを伴う）保持時間領域を表しています。 • 各グラフのツールヒントには、カーソルが置かれたトランジションの X 値と Y 値が表示されます。Method Overview グラフと Dwell Time のグラフについては、ツールヒントに化合物 ID も示されます。 • Method Overview グラフで MRM トランジションをクリックすると、他の 3 つのグラフとテーブル内でも、そのトランジションが選択されます。
4	<p>最初のグラフとなる Method Overview グラフには、すべてのトランジションに加え、各トランジションの検出ウィンドウが表示されます。X 軸は保持時間を表しています。Y 軸は、MRM インデックス番号を示します。これは、トランジションがメソッドに入力された順序です。</p>
5	<p>2 つめのグラフとなる MRM Concurrency グラフでは、保持時間が X 軸に、そして保持時間ごとの MRM トランジション並行性が Y 軸に示されます。</p>

項目	説明
6	<p>3 つめのグラフとなる Projected sMRM Cycle Time グラフでは、予測サイクル時間が保持時間に対してプロットされます。赤い線は Target Cycle Time (使用した場合)を表しています。Target Scan Time が使用されている場合、赤い線の値は、Target sMRM Scan 時間の合計です (メソッド内のすべての <i>Scheduled</i> MRM アルゴリズム実験)</p> <hr/> <p>注: Projected sMRM Cycle Time が Target Cycle Time や Target Scan Time の合計 (赤いバーがある場合) よりもはるかに低いトランジションでは、より多くのデータポイントが予想されます。Projected sMRM Cycle Time が Target Cycle Time や Target Scan Time の合計 (赤いバーがある場合) よりもはるかに高いトランジションでは、より少ないデータポイントが予想されます。</p>
7	<p>4 つめのグラフには、各トランジションの (保持時間時の) 滞留時間が示されます。X 軸は保持時間を表しています。Y 軸は、適用される滞留時間を示します。</p>

4. 必要に応じてパラメータ値を変更してメソッドを最適化し、**Projected sMRM Cycle Time** の分散を改善します。
5. **Save Method** をクリックします。
Save Method File ウィンドウが開きます。

メソッドへの変更は、元の取得メソッドで保存することも、新しい取得メソッドとして保存することもできます。変更内容が元の測定メソッドに保存された場合、元のパラメータ値は新しい値に上書きされます。
6. 新しいファイル名を入力するか、元のメソッド選択して、**Save** をクリックします。
7. **Acquisition Method Editor** で保存された取得メソッドを開き、新しい変更を表示します。
元のメソッドが **Acquisition Method Editor** で開かれていた場合、メソッドを閉じてから開き直す必要があります。
8. **X** ダイアログの右上の **sMRM Calculator** をクリックして、ダイアログを閉じます。

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。
