

Analyst MD ソフトウェア

Scheduled MRM アルゴリズムチュートリアル



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。

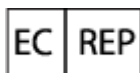
Rx only.

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

Scheduled MRM アルゴリズムチュートリアル	4
目標	4
Scheduled MRM Scheduled MRM Algorithm について	4
関連マニュアル	5
前提条件	6
csv または txt ファイルを作成する	6
Scheduled MRM アルゴリズム測定メソッドを作成	6
2 つの Scheduled MRM アルゴリズム実験を使用して取得メソッドを作成	13
抽出イオンクロマトグラムの作成	13
MRM トランジションの表示	15
定量化メソッドの作成	16
Results Table のレビュー	17
Scheduled MRM Pro Algorithm について	20
Scheduled MRM プロアルゴリズム測定メソッドを作成	21
IDA において Scheduled MRM プロアルゴリズムがもたらす影響	24
IDA Scheduled MRM プロアルゴリズム測定メソッドを作成する。	25
ファイル情報で Scheduled MRMPRO アルゴリズムパラメータを表示	25
Scheduled Ionization を使用して Scheduled MRM ベーシックまたはプロアルゴリズム測定メソッドを作成する	27
 お問い合わせ先	 28
お客様のトレーニング	28
オンライン学習センター	28
SCIEX サポート	28
サイバーセキュリティ	28
ドキュメント	28

Scheduled MRM アルゴリズムチュートリアル

目標

本書では、次の方法を学習します。

- Scheduled MRM アルゴリズムトランジションをモニタリングするためのメソッドを作成する。
- 抽出イオンクロマトグラム内の Scheduled MRM アルゴリズムトランジションを表示する。
- 定量化メソッドを作成し、Results Table をレビューすることで、定量的データを分析する。
- Scheduled MRM プロアルゴリズム測定メソッドを作成する。
- IDA Scheduled MRM プロアルゴリズム測定メソッドを作成する。

Scheduled MRM Scheduled MRM Algorithm について

Scheduled MRM アルゴリズムは、取得メソッドの作成時に提供される複数反応モニタリング (MRM) トランジション、保持時間、および化合物 ID のリストに基づいて、数百種類の化合物の取得を支援します。Scheduled MRM アルゴリズム機能により、多期間にわたる実験に課せられる要件が軽減されます。また、IDA (データ依存型取得) メソッドのサーベイスキャンとしても使用できます。

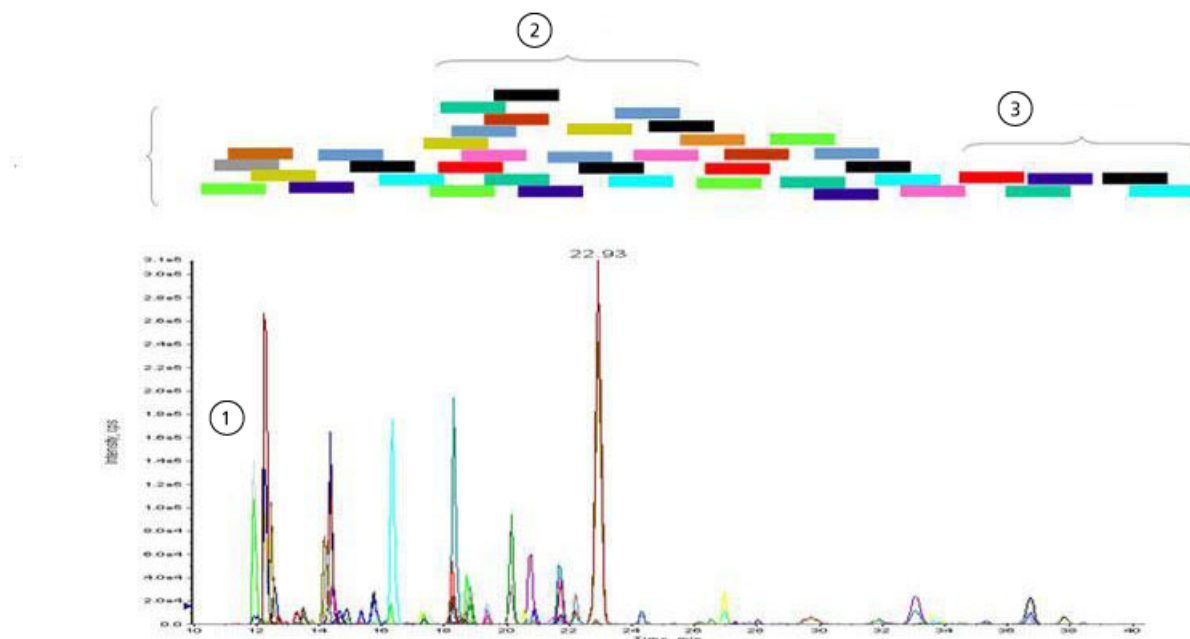
このアルゴリズムによってクロマトグラムのピーク全体のポイント数が最大化することで、ピークの検出が改善し、再現性が向上します。この機能を活用すれば、化合物 ID、分析試料 Integration Quality 指数、IS (内部標準) Integration Quality 指数の列を表示することで、多数の MRM トランジションを伴うデータファイルを閲覧することも可能です。SCIEX 3200MD システムの場合、最大 1000 のトランジションが Scheduled MRM アルゴリズムによってサポートされます。SCIEX 4500MD および Citrine システムの場合、最大 4000 のトランジションが Scheduled MRM アルゴリズムによってサポートされます。

注: Analyte Integration Quality Index 列と IS Integration Quality Index 列は、Results Table で MRM データ向けに確認することも可能です。

次の図は、Scheduled MRM アルゴリズムの LC 実行の例を示しています。同時にモニタリングされる MRM トランジションの数は LC 分析中に変化しますが、注入間では一定となります。

図 1 : Scheduled MRM アルゴリズム LC 実行の典型的な例

Scheduled MRM Algorithm



項目	説明
1	モニタリングされている MRM トランジション。
2	多数の MRM トランジションモニタリングされています。
3	少数の MRM トランジションモニタリングされています。

多数のトランジションを Scheduled MRM アルゴリズムで処理する場合は、データ処理用の MultiQuant MD ソフトを使用します。詳しくは、SCIEX 営業担当者までお問い合わせください。

関連マニュアル

- 質量分析装置のシステムユーザーガイド
- アドバンスドユーザーガイド
- スクリプトユーザーガイド(Create Quan Methods From Text Files スクリプトおよび Create Text File from Quan Method スクリプトに関する詳細が記載)
- データ依存型取得チュートリアル(IDA を用いたメソッドの作成に関する詳細が記載)
- Analyst ヘルプ

前提条件

前提条件

ユーザーは以下ができなくてはなりません。

- 測定メソッドを作成する
- バッチを送信する
- 定量化メソッドを作成し、結果表を作成およびレビューする

ハードウェアプロファイルには以下の周辺装置を含める必要があります。

- LC ポンプ
- オートサンプラー

csv または txt ファイルを作成する

オプションとして、Scheduled MRM メソッドのトランジション情報を作成して csv または txt ファイルに保存し、Scheduled MRM アルゴリズムメソッドの質量範囲テーブルにインポートできます。csv または txt ファイルを作成するには以下の基準に従います。

- ファイルには見出し、列のタイトル、行のタイトルを含めることはできません。
- ファイル内の列の順序および数は、質量範囲表の列の順序および数と一致していなくてはなりません。
- MRM および Scheduled MRM アルゴリズムメソッドでは、空のセルを入力できません。Scheduled MRM プロアルゴリズムメソッドでは、デフォルト値を使用できるよう、**Window** 列および **Threshold** 列を空白のままにすることが可能です。**Group** 列も空白のままにできます。

ファイルが csv または txt 拡張子のいずれかで保存されていることを確認してください。

Scheduled MRM アルゴリズム測定メソッドを作成

注: の場合、SCIEX 4500MD および Citrine システムでは、最大 1,250 のスケジュールされていない MRM トランジションと、Scheduled MRM アルゴリズムによる 4,000 の MRM トランジションを取得できます。SCIEX 3200MD システムの装置の場合、Scheduled MRM アルゴリズムを使用して最大 300 のスケジュールされていない MRM トランジションと 1,000 の MRM トランジションを取得できます。

1. Navigation バーの **Acquire** 下にある **Build Acquisition Method** をダブルクリックし、Acquisition Method ペインの **Mass Spec** アイコンを選択します。
2. **Scan Type** として **MRM** が選択されていることを確認した後、**Enabled** グループ内で **Scheduled MRM** を選択します。SCIEX 4500MD および Citrine システムのメソッドを作成するには、図の機能を参照してください。図 2。SCIEX 3200MD システムのメソッドを作成するには、図の機能を参照してください。図 3。

図 2 : Scheduled MRMSCIEX4500MD および Citrine システム

項目	説明
1	Enabled グループの Scheduled MRM チェックボックス:これを選択すると、Basic および Advanced Scheduled MRM MRM アルゴリズム機能が有効になります。
2	Basic オプション: Scheduled MRM アルゴリズム機能を有効にする場合に選択します。デフォルトではベーシックに設定されています。
3	Q1/Q3 Resolution チェックボックス: 各トランジションに異なる Q1 および Q3 分解能設定を適用する場合に選択します。このオプションであるを使用するときは、質量範囲表に Q1 Resolution 列と Q3 Resolution 列を追加します。
4	Import List : クリックすると、MRM トランジション、時間、ID、化合物依存性パラメータが txt または csv ファイルからインポートされます。
5	Retention Time (min) 列: 該当する MRM トランジションの予測保持時間を分単位で入力します。このカラムには、MRM メソッドの滞留時間が msec で表示されます。
6	ID カラム: (オプション) 関心のあるトランジションの化合物 ID を入力します。
7	MRM detection window (sec) フィールド: 検出時間を入力します (各トランジションの保持時間が収まる範囲にします)。

項目	説明
8	Target Cycle Time (across sMRM experiments) オプション: 期間またはメソッド全体の Scheduled MRM アルゴリズム実験のすべてについて、目標サイクルタイムを指定し、使用する場合に選択します。1 つの Scheduled MRM アルゴリズム実験でオプションを選択またはクリアすると、メソッド内に 2 つの Scheduled MRM アルゴリズム実験がある場合は、もう一方の Scheduled MRM アルゴリズム実験に同じ設定が自動的に適用されます。1 つの期間または方法で最大 2 つの Scheduled MRM アルゴリズム実験が許可されます。ターゲットサイクル時間は、全サイクルにわたって特定のサイクル時間がターゲットとされるよう調整できます。これにより、サイクル内での並行トランジション間の極性切り替えに関係なく、より均等に分布したデータポイントが得られるようになります。 Target Cycle Time はプリセット設定です。
9	Target Scan Time (per sMRM experiment) (sec) フィールド: 各サイクルで実験に使用する目標時間を指定する場合に選択します。本ソフトウェアでは、一部の並行トランジションに対して最小滞留時間または最大滞留時間が設定されない限り、当該実験の合計スキャン時間が、各サイクルにおいてターゲット時間の周辺で維持されます。ターゲットスキャン時間は、LC ピーク全体の特定ポイント数を目標にできるように調整が可能です。

図 3 : Scheduled MRMSCIEX3200MD システムのアルゴリズムソフトウェア機能

項目	説明
1	Enabled グループの Scheduled MRM チェックボックス: これを選択すると、Scheduled MRM MRM アルゴリズム機能が有効になります。

項目	説明
2	Q1/Q3 Resolution チェックボックス: 各トランジションに異なる Q1 および Q3 分解能設定を適用する場合に選択します。このオプションであるを使用するときは、質量範囲表に Q1 Resolution 列と Q3 Resolution 列を追加します。
3	Import List : クリックすると、MRM トランジション、時間、ID、化合物依存性パラメータが txt または csv ファイルからインポートされます。
4	Retention Time (min) 列: 該当する MRM トランジションの予測保持時間を分単位で入力します。このカラムには、MRM メソッドの滞留時間が msec で表示されます。
5	ID カラム: (オプション) 関心のあるトランジションの化合物 ID を入力します。
6	MRM detection window (sec) フィールド: 検出時間を入力します (各トランジションの保持時間が収まる範囲にします)。
7	Target Cycle Time (across sMRM experiments) オプション: 期間またはメソッド全体の Scheduled MRM アルゴリズム実験のすべてについて、目標サイクルタイムを指定し、使用する場合に選択します。1 つの Scheduled MRM アルゴリズム実験でオプションを選択またはクリアすると、メソッド内に 2 つの Scheduled MRM アルゴリズム実験がある場合は、もう一方の Scheduled MRM アルゴリズム実験に同じ設定が自動的に適用されます。1 つの期間または方法で最大 2 つの Scheduled MRM アルゴリズム実験が許可されます。ターゲットサイクル時間は、全サイクルにわたって特定のサイクル時間がターゲットとされるよう調整できます。これにより、サイクル内での並行トランジション間の極性切り替えに関係なく、より均等に分布したデータポイントが得られるようになります。 Target Cycle Time はプリセット設定です。
8	Target Scan Time (per sMRM experiment) (sec) フィールド: 各サイクルで実験に使用する目標時間を指定する場合に選択します。本ソフトウェアでは、一部の並行トランジションに対して最小滞留時間または最大滞留時間が設定されない限り、当該実験の合計スキャン時間が、各サイクルにおいてターゲット時間の周辺で維持されます。ターゲットスキャン時間は、LC ピーク全体の特定ポイント数を目標にできるように調整が可能です。

3. トランジションごとに異なる Q1 および Q3 解像度設定を使用するには、Scheduled RM グループの **Q1/Q3 Resolution** をクリックします。

質量範囲テーブルに 2 つの列が追加されます: Q1 Resolution と Q3 Resolution。

図 4 : SCIEX 4500MD および Citrine システム用に選択された Q1/Q3 分解能オプション

項目	説明
1	Q1 Resolution 列: Q1 スキャンによって近接したコンポーネントが分離されるモードです。これは、最初の四重極の分解能を指します。オプションには、高、ユニット、低、オープンがあります。
2	Q3 Resolution 列: Q3 スキャンによって近接したコンポーネントが分離されるモードです。これは、3 番目の四重極の分解能を指します。オプションには、高、ユニット、低、オープンがあります。

Resolution Q1 Advanced MS **Resolution Q3** タブのオプションとオプションは使用できません。

Tune Method Editor で **Q1/Q3 Resolution** チェックボックスが選択されている場合、Resolution タブの **Q1 Resolution** および **Q3 Resolution** オプションは使用できません。

- 以下のいずれかの方法を用いて、関心のある各 MRM トランジションの質量範囲表に記入します。
 - MRM トランジションを手動で入力: 関心のあるトランジションごとに Q1 質量、Q3 質量、保持時間、化合物 ID を入力します。トランジションごとに、**Q1 Resolution** 列と **Q3 Resolution** 列の値を選択します。必要に応じて、右クリックして化合物依存性パラメータを追加します。質量範囲表には最大で 4 つの化合物依存性パラメータを追加できます。
 - MRM トランジションのインポート: **Import List** をクリックし、Open ダイアログで、MRM トランジション情報を含むコンマ区切り値 (csv) またはタブ区切り値 (txt) ファイルのいずれかを選択します。ファイルを選択したら、**Open** をクリックします。ファイルの内容が質量範囲表に表示されます。ファイルの作成の詳細については、次のセクションを参照: [csv または txt ファイルを作成する](#)。
 - MRM トランジションのコピーと貼り付け: 必要な情報が含まれるセルを csv または txt ファイルから選択し、**Ctrl+C** キーを押します。情報の列を貼り付けるには、まずは質量範囲表で **Q1 Mass (Da)** セルを選択し、**Ctrl+V** キーを押します。

注: インポートまたはコピー／貼り付け操作を実施する前に、csv または txt ファイルに含まれるデータの列が、本ソフトウェアの質量範囲表のものと一致していることを確認します。ソースファイルと対象となる表において、列の数と列の順序が一致してはなりません。必要に応じて、ソース ファイルの列を追加、削除、並び替えます。質量範囲表に列を追加するには、質量範囲表を右クリックし、化合物依存性パラメータを選択します。化合物依存性パラメータの値は、選択した極性の許容範囲内でなくてはなりません。

5. **MRM detection window (sec)** フィールドで、検出時間を入力します (各トランジションの保持時間が収まる範囲にします)。このウィンドウは、予測されるクロマトグラムのピークの幅と、クロマトグラムにおける分析試料の保持時間の変動性を表したものでなければなりません (MRM ピーク全体が常にウィンドウ内に収まる必要があります)。

LC クロマトグラフィーをガイドとして使用することで、最良の Scheduled MRM アルゴリズムのパラメータを選択します。ベースでの一般的なピークの幅を決定し、推奨設定については次の表を参照してください。MRM 検出ウィンドウを定義する際には、保持時間の安定性を必ず考慮してください。

表 1: Scheduled MRM アルゴリズムパラメータの推奨設定

ベース時のピーク幅	MRM 検出ウィンドウ	ターゲットスキャン時間またはターゲットサイクル時間
30 秒	90 秒	2 秒
15 秒	60 秒	1 秒
10 秒	30 秒	0.5 秒

Scheduled MRM アルゴリズムでは、サイクルごとにモニターされる分析試料の数は、分析試料の保持時間ウィンドウをもとに調整されます。各分析試料に用いられる滞留時間とシグナル対ノイズ比を最大限に高めるため、関心のあるピークがキャプチャされるよう、保持時間ウィンドウを小さくも妥当な範囲に設定するよう推奨します。最初は 60 秒の値を使用するのがお勧めです。この値は、15 秒のピーク幅に加え、ピークの左右双方に 20 秒間の潜在的保持時間を発生させるクロマトグラフィーであれば、この値で十分です。

たとえば予測保持時間が 4.5 分の場合、60 秒と入力することで、検出ウィンドウが 4 分～5 分に設定されます。

注: **Retention Time** を「0」に設定した場合、実行時間中は常に当該トランジションがモニターされます。

6. 必要に応じて次のいずれかの操作を行います。
 - 次の図に示すように、必要に応じて、**Target Cycle Time (across sMRM expts)** オプションを選択したままにして、目標サイクル時間を秒単位で入力します。**Target Cycle Time** オプションが選択されている場合、ソフトウェアはすべてのサイクルに同じサイクル時間を適用しようとします。しかし、各サイクルで実際に使用されるサイクル時間は、主にサイクル内のすべてのトランジションの滞留時間の合計によって変化します。

ソフトウェアは、ターゲットサイクル時間、極性切替時間 (ある場合)、およびすべての一時停止時間を使用して、サイクル内の各トランジションの滞留時間を計算します。トランジションに割り当てられる滞留時間は、検出ウィンドウ内の各サイクルについて計算された滞留時

間に依存します。計算された滞留時間がいくつかのサイクルについての最小滞留時間より短いまたは最大滞留時間より長い、および検出ウィンドウ上の他のトランジションのそれぞれとの程度オーバーラップするかに依存します。同時実行性が高いために計算された滞留時間が最小滞留時間より短い場合、または同時実行性が低いために計算された滞留時間が最大滞留時間より長い場合、計算の次のステップでは、最小滞留時間または最大滞留時間がそのサイクルのトランジションに使用されます。このトランジションの全サイクルの滞留時間の平均が、このトランジションに割り当てられた最終的な滞留時間となります。

図 5 : ターゲットサイクル時間(sMRM expts で)

The screenshot shows the 'MS Advanced MS' window. In the 'Target for sMRM' section, the radio button for 'Target Cycle Time (across sMRM expts)' is selected and highlighted with a red box. The input field next to it shows '1 (sec)'. Other parameters like 'Duration: 5.000 (min)', 'Cycles: 300', and 'Cycle: 1.0000 (sec)' are visible in the 'Period Summary' section.

- 必要に応じて、**Target Scan Time (per sMRM expt)**をクリックし、次の図に示すように、各サイクルの実験の目標時間を秒単位で入力します。このパラメータは、クロマトグラムのピーク全体に存在するポイント数を特定するのに役立ちます。

図 6 : Target Scan Time (per sMRM expt)

This screenshot is identical to Figure 5, but in the 'Target for sMRM' section, the radio button for 'Target Scan Time (per sMRM expt)' is selected and highlighted with a red box. The input field next to it shows '1 (sec)'.

この値を設定する際には、クロマトグラムのピーク幅をガイドとして使用します。最初は、15 秒のピーク幅を生成するクロマトグラフィーに対して、1 秒の値を使用するのがお勧めです。この場合、この検出ウィンドウ内の同時トランジションのいずれにも最小滞留時間また

は最大滞留時間が適用されていない場合、1 秒のターゲットスキャン時間は 15 秒間のピークで約 15 個のデータポイントを生成します。

7. 測定メソッドの残りの必須フィールドに値を入力します。
8. 測定が実施されるプロジェクトに測定メソッドを保存します。

注: *Scheduled MRM* アルゴリズムフィールドは、Tune Method Editor でも使用できます。

2 つの *Scheduled MRM* アルゴリズム実験を使用して取得メソッドを作成

この手順を用いて、極性切り替えをサポートするメソッドを作成します。

1. 次のセクションの手順を使用して、*Scheduled MRM* アルゴリズム取得メソッドを作成します：
[Scheduled MRM アルゴリズム測定メソッドを作成](#)。
2. Acquisition method ペインで、**Period** を右クリックし、**Add experiment** をクリックします。
2 つめの MRM スキャン実験が作成されます。
3. MS タブで、使用中の質量分析装置に応じて以下のいずれかのオプションを選択します。
 - SCIEX 4500MD および Citrine システムの場合、**Scheduled MRM** グループの **Enabled** チェックボックスを選択します。標準的な *Scheduled MRM* アルゴリズム測定メソッドを作成するには、**Basic** グループ内で **Scheduled MRM** オプションが選択されていることを確認します。メソッドを作成するには、図の機能を参照：[図 2](#)。Scheduled MRM プロアルゴリズムメソッドを作成するには、**Advanced** オプションが選択されていることを確認します。このメソッドを作成するには、次のセクションを参照：[Scheduled MRM プロアルゴリズム測定メソッドを作成](#)。
 - SCIEX 3200MD システムの場合、**Scheduled MRM** グループの **Enabled** チェックボックスを選択します。メソッドを作成するには、図の機能を参照：[図 3](#)。
4. 次のセクションの説明に従って、取得メソッドを完了します。[Scheduled MRM アルゴリズム測定メソッドを作成](#)。
5. 測定が実施されるプロジェクトに測定メソッドを保存します。

注: SCIEX 3200MD および SCIEX 4500MD システムについては、同サイクル内で極性切り替えが発生した際にデフォルトの定着時間が適用されます。Citrine 一連の装置については、同サイクル内で極性切り替えが発生した際ユーザー設定の定着時間が適用されます。

抽出イオンクロマトグラムの作成

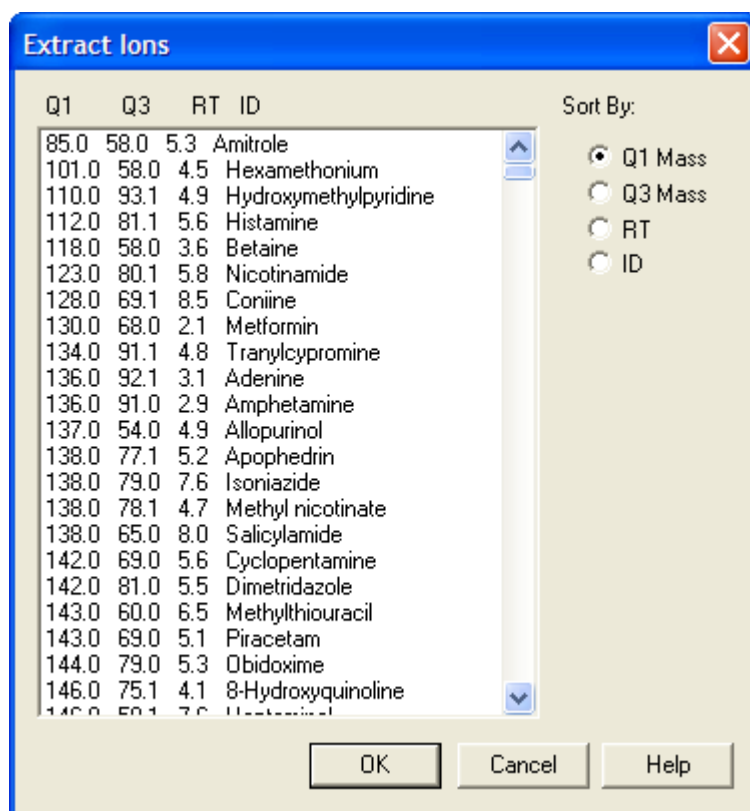
注: 2500 以上のトランジションを含む *Scheduled MRM* アルゴリズム wiff ファイルを開くと、XIC の代わりに TIC が表示されます。

1. 前の手順で作成した取得方法を使用して *Scheduled MRM* アルゴリズムデータを生成した後、ナビゲーションバーの **Explore** で、**Open Data File** をダブルクリックし、データファイルとサンプルを選択します。

MRM および *Scheduled MRM* アルゴリズムデータは、オーバーレイされた XIC として表示されるように事前設定されています。

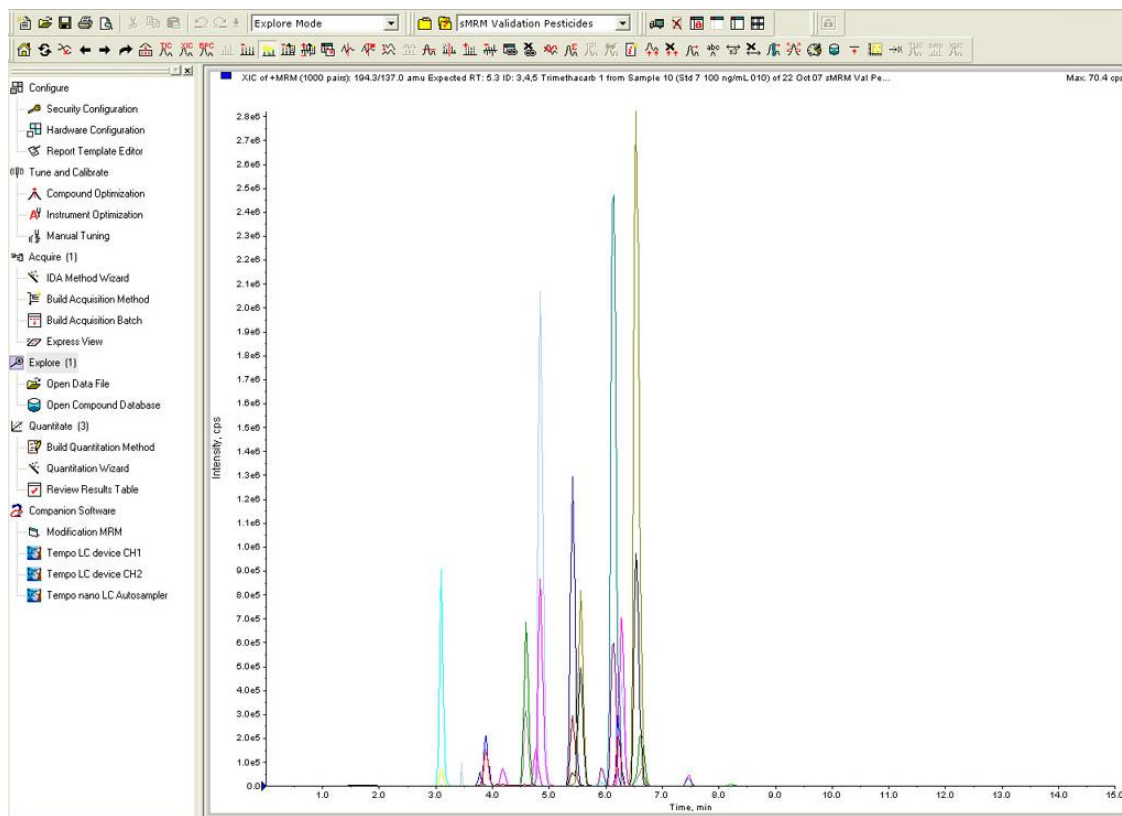
2. **Explore > Extract Ions > Use Dialog** をクリックします。
Extract Ions ダイアログが開き、選択したデータファイルの各 MRM トランジションが、対応する予想保持時間と化合物 ID (入力されている場合) とともに表示されます。

図 7 : Extract Ions ダイアログ



3. Q1 質量、Q3 質量、RT (保持時間)、化合物 ID 別に並び替える場合に選択します。
4. 1 つまたは複数のトランジションを選択します。
5. **OK** をクリックします。
XIC がクロマトグラムの下に、そして最初に選択したトランジションの化合物 ID がタイトルに表示されます。

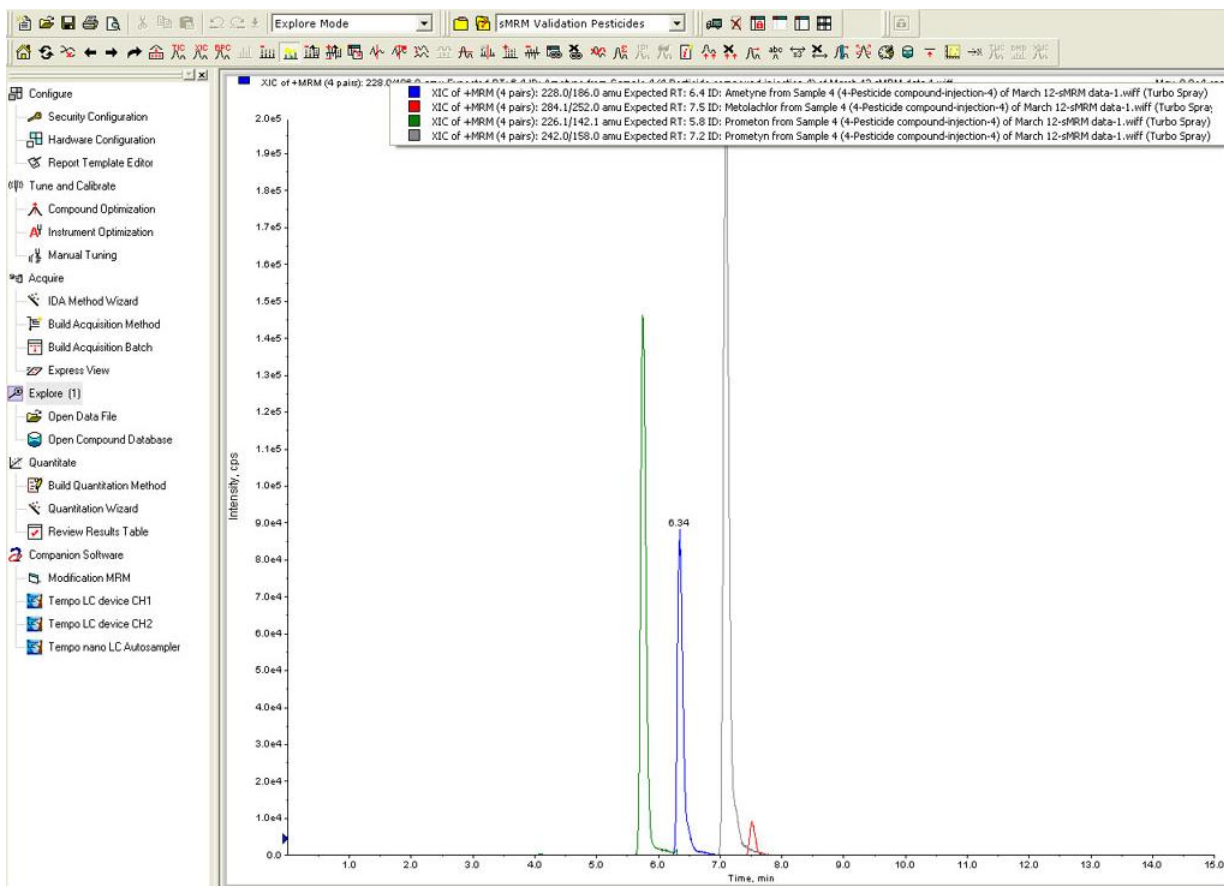
図 8：複数のイオンが抽出された際に開かれるオーバーレイ XIC の例



MRM トランジションの表示

1. XIC を生成します。
2. XIC のタイトルを右クリックし、領域内でアクティブになっている MRM トランジションを表示します。関心のある MRM トランジションを選択し、保持時間のラベルをクロマトグラムに表示します。

図 9 : アクティブ状態の MRM トランジション



3. 特定の時間領域にズームインするには、カーソルを X 軸に沿ってドラッグします。
XIC が表示中のデータの最大ピークに再スケーリングされます。
4. XIC のタイトルを再度右クリックし、特定の時間領域内でアクティブになっている MRM トランジションを表示します。
しきい値を上回っており、かつ領域内にズームインされているすべてのトランジションが表示されます。タイトルは、ズーム中のセクションのトランジション数に合わせて縮小されます。

定量化メソッドの作成

注: Analyst MD ソフトウェアでは、Build Quantitation Method を使用して、94 を超えるトランジションを含むデータファイルの定量化メソッドを作成する必要があります。Quantitation Wizard は、トランジション数が 94 以下のデータファイルに対してのみ定量化メソッドを作成することができます。

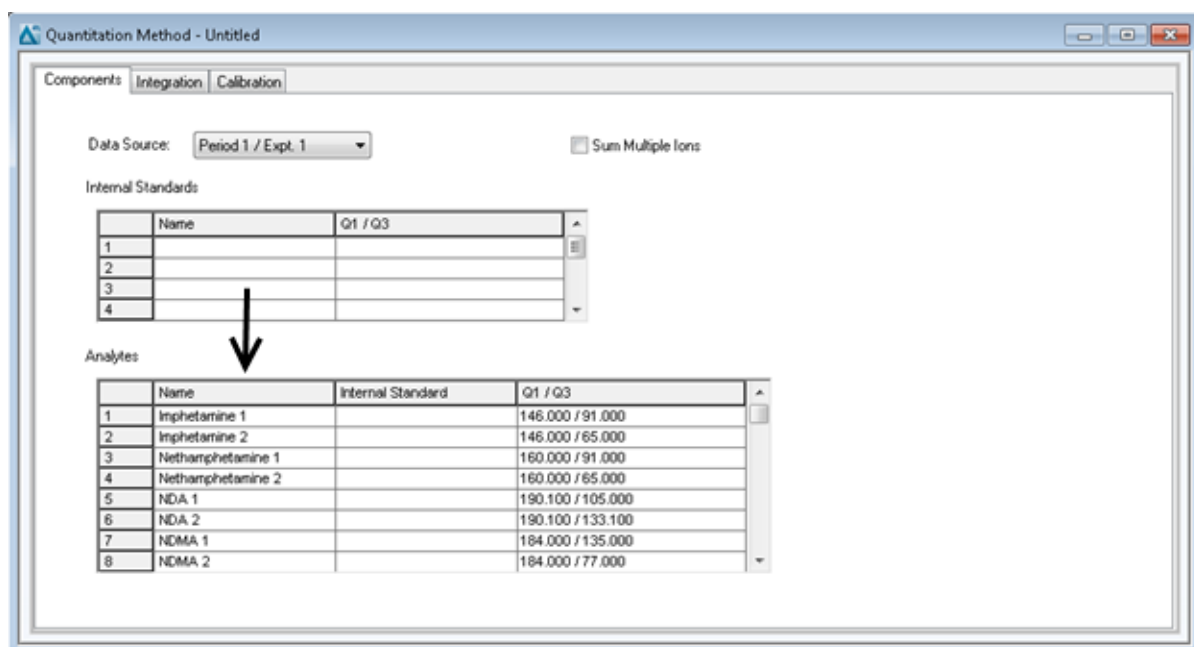
開始する前に、推奨される IntelliQuan-MQ III アルゴリズムが使用されていることを確認してください。アルゴリズムの選択に関する詳細な情報については、次のドキュメントを参照: [Help](#)。

1. **Navigation** バーの **Quantitate** の下にある **Build Quantitation Method** をダブルクリックします。

注: 定量化ウィザードを使用して、94 未満のトランジションを含むデータを解析するための定量化メソッドを作成できます。

2. 取得したばかりのデータファイルとサンプルを選択し、**OK** をクリックします。
Name 列が Analytes テーブルに表示されます。トランジションは測定時に選択されたものであるため、この列は測定メソッドの化合物 ID を用いて作成されます。

図 10 : 定量化メソッド: Components タブ



注: メソッドに複数の実験が含まれる場合、実験で使用された分析試料を定量化メソッドで使用するには、各実験を **Data Source** リストから選択してレビューします。分析試料が多数存在する場合、**Data Source** リストが生成されるまで若干時間がかかる場合があります。

3. 測定メソッドの残りの必須フィールドに値を入力し、定量化メソッドを保存します。
4. Quantitation wizard を使用して Results Table を作成します。今しがた作成した定量化メソッドが選択されていることを確認してください。

ヒント! データファイルに多数の MRM トランジションが含まれている場合は、Create Quan Methods From Text Files スクリプトおよび Create Text File from Quan Method スクリプトを使用することで、定量化メソッドを作成または修正できます。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。

Results Table のレビュー

1. 特定のトランジションの Results Table を表示するには、**Analyte** を選択し、化合物 ID リストで希望のトランジションを選択します。

図 11 : Results Table: 分析試料の選択

	Sample Name	Sample ID	Sample Status
1	SYS suit001		Un
2	SYS suit001		Un
3	SYS suit001		Un
4	SYS suit001		Un
5	SYS suit001		Un
6	SYS suit001		Un
7	SYS suit001		Un
8	SYS suit001		Un
9	SYS suit001		Un
10	SYS suit001		Un
11	SYS suit001		Un
12	SYS suit001		Un
13	SYS suit001		Un
14	SYS suit001		Un
15	SYS suit001		Un
16	SYS suit001		Un
17	SYS suit001		Un
18	SYS suit001		Un
19	SYS suit001		Un
20	SYS suit001		Un
21	SYS suit001		Un
22	SYS suit001		Un
23	SYS suit001		Un
24	SYS suit001		Un

- Results Table を右クリックし、**Table Settings > Edit** をクリックして Table Settings ダイアログを開きます。
- Columns** をダブルクリックし、リストから **Analyte** を選択します。
- Analyte Peak Name** の横にある **Shown** チェックボックスを選択します。
- OK** をクリックし、**Done** をクリックします。
Analyte Peak Name 列が Results Table に追加され、この列に各トランジションの化合物 ID が示されます。

図 12 : Results Table: Analyte Peak Name 列

	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name
1	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	3,4-Methylenedioxymphetamine
2	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	3,4-Methylenedioxyethylamphetamine
3	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	3,4-Methylenedioxymethamphetamine
4	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	6-O-Monoacetylmorphine
5	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	7-Aminoclonazepam
6	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	7-Aminoflunitrazepam
7	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	9-Hydroxynisperidone
8	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Aceclidine
9	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Aceprometazine
10	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Aciclovir
11	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Ajmaline
12	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	alpha-Hydroxyalprazolam
13	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	alpha-Hydroxytriazolam
14	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Alprazolam
15	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Alprenolol
16	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Amantadine
17	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Amiloride

- Results Table を右クリックし、続いて **Table Settings > Edit** をクリックして、表に **Analyte Integration Quality** 列と **IS Integration Quality** 列を表示します。
- Columns** をダブルクリックし、リストから **Analyte** を選択します。
- Analyte Integration Quality** の横にある **Shown** チェックボックスを選択し、**OK** をクリックします。
- リストから **Internal Standard** を選択します。
- IS Integration Quality** の横にある **Shown** チェックボックスを選択します。
- OK** をクリックし、**Done** をクリックします。

2 つの列が Results Table に追加されます。Integration Quality は、ピークがどれだけ良好に統合できているかを示します。値が 1 に近いほどピーク統合の質が高いことを表します。値が小さい場合、ピークの統合が良好ではないこと、大きなバックグラウンドが存在すること、あるいはこの領域に別のピークが存在する可能性があることを示している場合があります。

この列を使用すると、分析試料 **Integration Quality** 指数値が低いピークを簡単に確認できるため、手動でのピークレビューが容易になります。また、分析試料 **Integration Quality** 指数値が許容レベルよりも低いデータに対してクエリーを実施することで、データのサブセットを表示し、手動レビューを行うことも可能です。

図 13 : Results Table の列

	Sample Name	Record Modified	Calculated Concentration (ng/mL)	Accuracy (%)	Analyte Integration Quality	IS Integration Quality	Time
1	STD 1	<input type="checkbox"/>	3.22	161.	1.00 ①	1.00 ②	0.000000
2	STD 1	<input type="checkbox"/>	3.29	165.	0.874	1.00	N/A
3	STD 1	<input type="checkbox"/>	2.74	137.	1.00	1.00	N/A
4	STD 1	<input type="checkbox"/>	3.20	160.	1.00	1.00	0.000000
5	STD 1	<input type="checkbox"/>	2.86	143.	0.731	1.00	N/A
6	STD 1	<input type="checkbox"/>	2.54	127.	1.00	1.00	N/A
7	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.92	123.	1.00	1.00	0.000000
8	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.79	120.	0.852	1.00	N/A
9	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.37	109.	1.00	1.00	N/A
10	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.24	106.	1.00	1.00	0.000000
11	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.50	112.	0.942	1.00	N/A
12	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.50	9	1.00	1.00	N/A

項目	説明
1	「分析試料 Integration Quality 指数」列
2	「IS Integration Quality 指数」列

Scheduled MRM Pro Algorithm について

Scheduled MRM プロアルゴリズム機能は、SCIEX 4500MD および Citrine システム。

Scheduled MRM プロアルゴリズムは、Scheduled MRM アルゴリズムに高度な機能を追加します。測定メソッドのトランジションごとに測定ウィンドウを設定できることから、実験における保持時間のロバスト性が改善しています。ユーザーは幅広い LC ピークを持つ化合物、あるいは保持時間が大きく変動する化合物において個々のウィンドウを調整できます。

さらに、Scheduled MRM プロアルゴリズムには、次の機能が含まれています：

- Scheduled MRM プロアルゴリズムは、測定中の自動ウィンドウ拡張にも対応しています。ユーザーは、動的ウィンドウ拡張 (DWE) をオンまたはオフに切り替えるオプションを利用できます。ユーザーは、個々のトランジションごとに異なるトリガーしきい値と DWE しきい値を設定することもできます。たとえば、低いトリガーしきい値と高い DWE しきい値は、2 次トランジションをトリガーする可能性が高くなりますが、不要な動的ウィンドウ拡張は回避されます。DWE が有効になっている際に、化合物の保持時間が後の段階にずれ込んだことで、保持時間を過ぎても強度が拡張しきい値を下回らない場合、Scheduled MRM プロアルゴリズムによって、強度がしきい値を下回るまで検出ウィンドウが自動的に拡張されます。トランジションは、メソッドで指定した検出ウィンドウの残り半分にわたってモニタリングされます。拡張後の測定ウィンドウは、指定した検出ウィンドウの継続時間の最大 2 倍の長さになります。この機能により小さなウィンドウを使用しつつも、すべてのピークを完全にキャプチャできるようになります。またこの機能により、保持時間のほとんどの変化に対するメソッドの堅牢性も向上します。
- ユーザーは、分析試料の複数のトランジションを一次または二次としてラベル付けすることができます。一次トランジションは測定ウィンドウ全体を通してモニタリングされる一方、二次トランジションは、関連する一次トランジションがトリガーしきい値に達した後にのみモニタリングされます。これによって MRM トランジションのモニタリング数が減少することで、サイクル時間が最小

限に抑えられます。取得時間は、サンプルに存在する分析試料のデータ収集に焦点が当てられています。サンプルに含まれていない分析試料は注視されません。

- アルゴリズムは滞留加重の使用にも対応しています。滞留加重を用いることで、滞留時間を相対的に表すことができます。豊富に存在する化合物には低い滞留加重を、あまり豊富でない化合物には高い滞留加重を割り当てることができます。この加重に基づいて、実行中に利用可能な滞留時間が割り当てられます。
- このアルゴリズムは、二次トランジションをトリガーするための動的バックグラウンド減算 (DBS) をサポートしています。DBS オプションは、Scheduled MRM アルゴリズムに高度な機能を追加します。これらのメソッドまたは実験では、DBS が有効になっている場合、DBS が一次トランジションに適用され、その実験で二次トランジションがトリガーされます。

サーベイスキャンに Scheduled MRM アルゴリズムを使用する IDA メソッドの場合、IDA 基準で DBS が有効になっていると、それが一次トランジションに適用され、二次トランジションとディペンデントスキャンの両方がトリガーされます。

Scheduled MRMDWE トリガーは、一次トランジションの DBS なしの未処理データに依存します。

Scheduled MRM セカンダリトランジションは、トリガーされると、プライマリトランジションの取得が停止するまで取得を継続します。

Scheduled MRM プロアルゴリズム測定メソッドを作成

Scheduled MRM プロアルゴリズム機能は、SCIEX 4500MD および Citrine システム。

この手順に従って、Method Editor ウィンドウ内で Scheduled MRM プロアルゴリズムメソッドを作成します。この種類のメソッドは Manual Tune ウィンドウでも作成できます。

1. 対応している質量分析装置向けのハードウェアプロファイルをアクティブ化します。Citrine システムについては、必要に応じてハードウェアプロファイル内で別の質量モードを選択してから、ハードウェアプロファイルをアクティブ化します。
2. 既存の Scheduled MRM アルゴリズム測定メソッドを開くか、次のセクション手順を使用してメソッドを作成: [Scheduled MRM アルゴリズム測定メソッドを作成](#)。
3. Acquisition Method Editor の MS タブの **Scheduled MRM** セクションで **Advanced** オプションを選択します。これにより、Scheduled MRM プロアルゴリズム機能が有効になります。

質量範囲表に新たに 5 列が追加され、Scheduled MRM の部分に **Dynamic Window Extension** と **Dynamic Background Subtraction** の 2 つのチェックボックスが表示されています。

図 14 : Scheduled MRM プロアルゴリズムパラメータ

The screenshot displays the 'Advanced MS' configuration window for Scheduled MRM. Key sections include:

- Experiment:** Set to 1.
- Scan type:** MRM (MRM).
- Polarity:** Positive (selected).
- MRM detection window:** 60 (sec).
- Target for sMRM:** Target Cycle Time (across sMRM expts) (selected).
- Scheduled MRM Settings:**
 - Enabled:** Checked.
 - Basic/Advanced:** Advanced (selected).
 - Q1/Q3 Resolution:** Checked.
 - Dynamic Window Extension:** Checked.
 - Dynamic Background Subtraction:** Checked.
- Period Summary:**
 - Duration:** 5.000 (min).
 - Delay Time:** 0 (sec).
 - Cycles:** 300.
 - Cycle:** 1.0000 (sec).
- MRM Transition Table:**

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Retention Time(min)	ID	Group	MRM Window (sec)	Primary / Secondary	Trigger Threshold	Dwell Weight
1					①	②	③	④	⑤

項目	説明
1	Group column: このカラムは、化合物のトランジションをグループ化する場合に使用します。単一のグループに属するトランジションすべてに同じ名前を付けます。
2	MRM Window (sec) フィールド: トランジションをモニターする時間を指定します (保持時間の中央周辺に設定されます)。このフィールドのトランジションの値は、 MRM detection window フィールドのメソッドのデフォルトウィンドウの値に優先します。 MRM Window カラムは MRM detection window フィールドと似ていますが、入力した値は該当するトランジションにしか適用されません。空白にした場合、値は MRM detection window フィールドから取得されます。
3	Primary/Secondary: このカラムは、トランジションが一次または二次のいずれであるかを指定するために使用します。プライマリトランジションは、測定ウィンドウ全体にわたってモニターされます。二次トランジションは、すべての一次トランジションがその個々のしきい値を上回っている場合に限り、測定ウィンドウ内でモニターされます。 グループ内の一次トランジションに数字の 1 を、二次トランジションに 2 を割り当てます。1 つのグループ内に一次トランジションおよび二次トランジションが複数存在していても構いません。
4	Trigger Threshold: 二次トランジションがトリガーされる強度を指定します。IDA メソッドでは、 Trigger Threshold はディペンデントスキャンのトリガーとして用いられます。 この値には 0 以上の値が使用可能です。

項目	説明
5	<p>Dwell Weight: 特定のトランジションで、他のトランジションと比較して長いスキャン時間(滞留時間)が必要かどうかを指定するためにこの列を使用します。デフォルト値は 1 です。</p> <p>滞留加重を用いることで、滞留時間を相対的に表すことができます。豊富に存在する化合物には低い滞留加重(<1)を、あまり豊富でない化合物には高い滞留加重(>1)を割り当てることができます。滞留加重範囲は 0.1~10 です。この加重に基づいて、実行中に利用可能な滞留時間が割り当てられます。</p> <hr/> <p>注: 総滞留加重は、そのサイクル内のすべての一次トランジションの滞留加重の合計と、すべての二次トランジションの滞留加重の合計に 1/2 を乗じた数の和で表されます。ただしその場合も、滞留時間の割り付けには、個々の滞留加重を総滞留加重で除いたものを使用します。たとえば、保持時間が同じ 2 件のトランジションが含まれるメソッドにおいて、一次トランジションと二次トランジション双方の滞留加重が 1 であったと仮定します。総滞留加重は $1 + 0.5 = 1.5$ です。両トランジションの滞留時間は、同時に発生するすべてのトランジションに割り当てられる総滞留時間に $1/1.5$ を乗じた数となります。割り当てられる総滞留時間は、必要であれば一時停止時間と極性スイッチ時間を差し引いてから、係数 1.2 で修正されます。滞留加重を空白とする場合は、デフォルト値の 1 を使用します。</p> <hr/> <p>注: 算出された滞留時間が、トランジションの全サイクルで(そのトランジションの保持時間ウィンドウにわたって)同一でない場合、全サイクルの平均滞留時間が測定に用いられます。</p>
6	<p>Dynamic Window Extension: Scheduled MRM プロ測定メソッドで動的ウィンドウ拡張を有効にする場合に選択します。ダイナミックウィンドウエクステンション(DWE)を使用しない場合は、Dynamic Window Extension チェックボックスをオフにします。DWE を選択すると、新しい Extension Threshold 列が質量範囲テーブルに追加されます。DWE が選択され、トランジションのピーク強度が保持時間経過後も拡張しきい値を超えている場合、Scheduled MRM プロアルゴリズムは、強度が拡張しきい値を下回るまで自動的に検出ウィンドウを延長し、トランジションがメソッドで指定された残り半分の検出ウィンドウがモニターされます。拡張後の測定ウィンドウでは、メソッドで特定した検出ウィンドウの持続時間が 2 倍になることがあります。</p>
7	<p>Dynamic Background Subtraction: Scheduled MRM プロ測定メソッドで動的バックグラウンド減算を使用する場合に選択します。Scheduled MRM Pro アルゴリズムによってトリガーされる IDA メソッドでは、チェックボックスが IDA 基準で有効になっている場合、Scheduled MRMPRO アルゴリズムの実験では Dynamic Background Subtraction チェックボックスを使用できません。IDA 基準の Dynamic Background Subtraction チェックボックスは、選択されている場合、2 次トランジションと依存スキャンの両方をトリガーするために使用されます。</p>

項目	説明
8	Extension Threshold: <i>Scheduled</i> MRM プロ測定メソッドの動的ウィンドウ拡張のしきい値を指定しますこの値はゼロ以上に設定できます。次の図を参照: 図 15。

図 15 : Extension Threshold 列で Dynamic Window Extension を選択

The screenshot shows the 'MS Advanced MS' configuration window. On the left, 'Experiment' is set to 1, 'Scan type' is MRM (MRM), and 'Polarity' is Positive. The 'MRM detection window' is 60 seconds. Under 'Target for sMRM', 'Target Cycle Time (across sMRM expts)' is selected with a value of 1 second. On the right, 'Scheduled MRM' is enabled, and 'Dynamic Window Extension' is checked. Below these settings is a 'Period Summary' table showing Duration: 5.000 (min), Delay Time: 0 (sec), Cycles: 300, and Cycle: 1.0000 (sec). At the bottom is a table with columns: Q1 Mass (Da), Q3 Mass (Da), Retention Time(min), ID, Group, MRM Window (sec), Primary / Secondary, Trigger Threshold, Extension Threshold, and Dwell Weight. The first row shows an Extension Threshold of 8.

4. *Scheduled* MRM プロアルゴリズムの 5 つの列に適切な値を入力することで、各 MRM トランジションの質量範囲表に記入します。次のルールと図の情報を使用: 図 14。
 - 同じグループ内のすべてのトランジションは、質量範囲表に連続してリストされている必要があります。
 - 同じグループに属しているトランジションは、いずれも **Retention Time (min)** 列に同じ保持時間が示されていなければならない。
 - 同じグループに属しているトランジションは、いずれも **MRM Window (sec)** 列に同じ時間が示されていなければならない。
 - 同じグループのすべての一次トランジションは、グループの二次トランジションの前に入力する必要があります。グループにトランジションが 1 つしか存在しない場合、そのトランジションを一次トランジションにする必要があります。
5. 測定メソッドを保存します。
Scheduled MRM プロアルゴリズム測定メソッドには、1 つの期間に加え、最大で 2 つの *Scheduled* MRM アルゴリズム実験のみを含めることができます。

IDA において *Scheduled* MRM プロアルゴリズムがもたらす影響

Scheduled MRM プロアルゴリズムを用いて データ依存型取得 (IDA) サーベイスキャンを実施する際には、IDA メソッドのディペンデントスキャンは、グループ内のすべての MRM トランジションの強度がそのトリガーしきい値を上回った場合にのみトリガーされます。これによってディペンデントスキャンの誤トリガーを抑えられることで、サイクル時間が改善します。

IDA Scheduled MRM プロアルゴリズム測定メソッドを作成する。

1. 次のセクションの手順を使用して、Scheduled MRM プロアルゴリズムを作成します：
[Scheduled MRM プロアルゴリズム測定メソッドを作成。](#)
2. 必要に応じて、IDA を追加する前に ER スキャンタイプの実験を追加します。
3. **Period** アイコンを右クリックし、**Add IDA Criteria Level** をクリックします。
4. IDA Criteria パラメータを指定します。次のドキュメントを参照：データ依存型取得チュートリアル。
5. **Period** アイコンを右クリックし、**Add experiment** をクリックします。
6. MS タブの **Scan type** リストで、ディペンデントスキャンの種類を選択します。この例では、**Product Ion (MS2)**または **Enhanced Product Ion (EPI)**を選択します。

注: すべてのディペンデントスキャンタイプで、**Product Of** は 30 Da である必要があります。

7. 必要に応じて、他のディペンデント実験をコピーまたは追加します。
これは IDA Criteria (X から Y に向けた最も強力なイオン)によって左右されます。
8. 実験パラメータを指定します。
9. 測定が実施されるプロジェクトに測定メソッドを保存します。

注: IDA Scheduled MRMPPro アルゴリズムメソッドを使用したデータ取得中に、メソッド内の各 MRM トランジションのトリガーしきい値が、IDA しきい値の代わりに依存スキャンをトリガーするために使用されます。

注: 滞留時間の割り当て、同時実行性、および予測されるサイクル時間に対して Scheduled MRM アルゴリズム方式を最適化するには、sMRM Calculator スクリプトをインストールして使用します。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。

ファイル情報で Scheduled MRMPPro アルゴリズムパラメータを表示

サンプルの取得が完了すると、Scheduled MRM Pro アルゴリズムメソッドで取得されたデータファイルのファイル情報に、各トランジションのすべてのユーザー定義パラメータが表示されます。これには以下のパラメータが含まれます：

- **MRM** (予定されているかどうか)
- **Q1**
- **Q3**
- **Retention Time**
- **ID**

- Group
- MRM Window (sec)
- Primary/Secondary
- Trigger Threshold
- Extension Threshold (Dynamic Window Extension チェックボックスが選択されている場合)
- Dwell Weight
- Q1 Resolution
- Q3 Resolution (Q1/Q3 Resolution チェックボックスが選択されている場合)

Dynamic Background Subtraction、Dynamic Window Extension、Dwell Time、Target Scan Time または Target Cycle Time パラメータも表示されます。


1. Navigation バーの **Explore** の下にある **Open Data File** をダブルクリックします。
Select Sample ダイアログが開きます。
2. Data Files ペインで wiff ファイルを選択します。
3. Samples ペインでサンプルを選択します。
4. **OK** をクリックします。
サンプルから測定されたデータが表示されます。
5. ファイル情報を表示するには、ツールバーの  **Show File Info** をクリックします。
File Information ペインは、グラフの下に開かれます。
6. File Information ペインの左ペインで必要期間を拡張します。
7. 必要期間実験リンクをクリックします。
各トランジションの *Scheduled MRM* プロアルゴリズムパラメータの値が、右ペインで選択した Period Experiment セクションに記録されます。

図 16 : ファイル情報に記された *Scheduled MRM* プロアルゴリズムパラメータ

File Info

Log Info

Acquisition Info

Quant Info

Periods

Period 1 Experiment 1

Parameter Table

Resolution tables

Calibration tables

Instrument Parameters

Keyword Text

Period 1:

Scans in Period: 120

Min. Dwell Time: 3 ms

Max. Dwell Time: 250 ms

Relative Start Time: 0.00 msec

Experiments in Period: 1

Use target Cycle Time: No

Target Cycle Time: N/A

Period 1 Experiment 1:

Scan Type: MRM (MRM)

Scheduled MRM: Yes

Polarity: Positive

Scan Mode: N/A

Ion Source: Turbo Spray

Dynamic Window Extension: Yes

Dynamic Background Subtraction: Yes

sMRM Q1/Q3 Resolution: Yes

MRM detection window: 60 sec

Target Scan Time: 1.0000 sec

Resolution Q1: N/A

Resolution Q3: N/A

Intensity Thres.: 0.00 cps

Settling Time: 0.0000 msec

MR Pause: 5.0070 msec

MCA: No

Step Size: 0.00 Da

Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Time (min)	sMRM Dwell (msec)	Param	Start	Stop	ID
609.200	195.000	1.00	250.000				
Window (sec)	Primary / Secondary	Trigger Threshold	Extension Threshold	Dwell Weight	Group	Q1 Resolution	Q3 Resolution
0.5	1	1	10000000	1.0	A	High	Unit

Scheduled Ionization を使用して Scheduled MRM ベーシックまたはプロアルゴリズム 測定メソッドを作成する

1. Scheduled MRM ベーシックまたはプロアルゴリズム測定メソッドを作成します。
2. メソッドのいずれかの実験を選択し、**Scheduled Ionization** チェックボックスをオンにします。
3. **Scheduled Ionization** グループで、適切な **Start Time** と **Stop Time** を入力します。対象となるピークが **Start Time** と **Stop Time** の間で溶出することを確認してください。**Dynamic Window Extension** も選択している場合は、**Stop Time** が質量表の最新の保持時間にこのトランジションの検出ウィンドウの 1.5 を加えた後であることを確認します。また、測定メソッド **Synchronization Mode** と LC メソッドが **Scheduled Ionization** を使用しない場合と同じ設定になっていることを確認してください。

注: Scheduled Ionization は、単一期間の測定メソッドでのみ使用できます。

次の図は、**LC Synchronization Mode** が使用され、LC メソッドの長さが 7 分であることを示しています。対象となるすべてのピークは、0.5 分後および 5.0 分前に溶出します。最終溶出ピークの測定ウィンドウがフル検出ウィンドウ分伸びる可能性があるため、**Stop Time** に 5.5 分を使っています。**Scheduled Ionization** を使用する場合は、**Start Time** の前と **Stop Time** の後に **IonSpray** 電圧 0 が印加されます。MS メソッドで設定した **IonSpray** 電圧は、**Start Time** と **Stop Time** の間にのみ印加されます。**Scheduled Ionization** 機能は、装置の汚染のリスクを減らし、質量分析装置のダウンタイムを減らすことができます。**Scheduled Ionization** に関する詳細は、**上級ユーザーガイド**を参照してください。

図 17 : Scheduled Ionization を使用した Scheduled MRM プロアルゴリズム

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Retention Time (min)	ID	Group	MRM Window (sec)
1	301.100	165.000	1.79	6-MAM-d3 IS		
2	141.100	93.000	1.70	Amphetamine-d5		
3	293.100	171.200	2.17	Benzoylcegonine		
4	472.300	400.200	2.77	Buprenorphine-d		
5	267.100	180.000	2.99	Carisoprodol-d7 I		
6	306.200	152.200	1.60	Codaine-d6		
7	342.300	105.100	2.59	Fentanyl-d5		
8	306.200	202.100	1.65	Hydrocodone-d6		
9	292.100	185.100	1.20	Hydromorphone-		
10	363.100	155.100	4.44	JMH Q18 4-OH p		
11	377.200	155.100	4.42	JMH Q19 6-OH h		
12	284.100	134.100	2.28	MEPV-d6 IS		
13	252.200	224.100	2.26	Meprobamate-d4		
14	161.100	148.100	1.98	Mephedrone-Q3 I		
15	226.100	165.100	2.33	Meprobamate-d7		

4. 測定メソッドを保存します。

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。
