



イオン源

SCIEX Triple Quad™、QTRAP®、および
TripleTOF® システム

テスト、仕様および、データログ



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を複製することは、SCIEXが書面で合意した場合を除いて固く禁止されています。

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

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

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

研究専用。診断手順には使用しないでください。

AB SciexはSCIEXブランドの下で事業を行っています。

ここに示されているすべての商標は、AB Sciex Pte. Ltd. またはそれぞれの権利保有者の財産です。

AB SCIEX™ はライセンスの下で使用されています。

© 2019年 AB Sciex



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

内容

1 IonDrive™ Turbo V イオン源テスト	6
テストの準備.....	7
TurbolonSpray® プローブのテスト.....	8
APCI プローブのテスト.....	10
2 Turbo V™ イオン源テスト	13
テストの準備.....	14
トリプル四重極システムおよび QTRAP®	
システムでのイオン源のテスト.....	16
TurbolonSpray® プローブのテスト.....	16
APCI プローブのテスト.....	18
TripleTOF® システムでのイオン源のテスト.....	20
テスト溶液の準備.....	20
TurbolonSpray® プローブのテスト.....	20
APCI プローブのテスト.....	22
3 DuoSpray™ イオン源テスト	25
テストの準備.....	26
TripleTOF® システム.....	28
テスト溶液の準備.....	28
TurbolonSpray® プローブのテスト.....	29
APCI プローブのテスト.....	31
トリプル四重極システムおよび QTRAP®	
システムでのイオン源のテスト.....	34
TurbolonSpray® プローブ.....	34
APCI プローブのテスト.....	37
4 OptiFlow™ Turbo V イオン源テスト	40
テストの準備.....	41
トリプル四重極システムおよび QTRAP®	
システムでのイオン源のテスト.....	42
SteadySpray プローブのテスト.....	42
TripleTOF® システムでのイオン源のテスト.....	43
SteadySpray プローブのテスト.....	44
5 NanoSpray® イオン源テスト	46
テストの準備.....	47
[グルコース ¹]フィブリノペプチドB希釈液の準備.....	49
TripleTOF® システムでのイオン源のテスト.....	50
TOF MS モードによるテストおよびキャリブレーション.....	52

プロダクトイオンモードによるテストおよびキャリブレーション (高感度) (5600/5600+ および 6600/6600+ システムのみ).....	59
プロダクトイオンモードによるテストおよびキャリブレーション.....	63
トリプル四重極システムおよび QTRAP® システムでのイオン源のテスト.....	66
Q1 モードによるテスト.....	67
Q3 モードでのテスト.....	73
EPI モードでのテストとキャリブレーション (QTRAP® または QTRAP® を有効にした Triple Quad 5500+ システムのみ).....	74
3200 シリーズシステムのイオン源テスト.....	82
レニン混合物 (濃度 500 fmol/μL) 2 mL の用意.....	82
Q1 および MS2 モードによるテスト.....	83
EPI モードでのテスト (3200 QTRAP® システムのみ).....	85
仕上げ.....	86
6 PhotoSpray® イオン源テスト.....	87
テストの準備.....	88
イオン源テスト.....	89
7 トラブルシューティングのヒント.....	92
A データログ: IonDrive™ Turbo V	
イオン源.....	96
システム情報.....	96
サインオフ.....	97
コメントおよび例外.....	98
B データログ: Turbo V™ イオン源.....	99
システム情報.....	99
サインオフ.....	101
コメントおよび例外.....	102
C データログ: DuoSpray™ イオン源.....	103
システム情報.....	103
サインオフ.....	104
コメントおよび例外.....	105
D データログ: OptiFlow™ Turbo V	
イオン源.....	106
システム情報.....	106
サインオフ.....	107
コメントおよび例外.....	108
E データログ: NanoSpray® イオン源.....	109
システム情報.....	109
サインオフ.....	114
コメントおよび例外.....	115
F データログ: PhotoSpray® イオン源.....	116

システム情報.....	116
サインオフ.....	117
コメントおよび例外.....	118
G TripleTOF® システムパラメータ.....	119
H 6500 および 6500+	
シリーズシステムパラメータ.....	123
I 5500 および 5500 +	
シリーズシステムパラメータ.....	129
J API 5000™ システムパラメータ.....	134
K 4500 シリーズシステムパラメータ.....	138
L 4000 シリーズシステムパラメータ.....	143
M SCIEX Triple Quad™ 3500	
システムパラメータ.....	149
N 3200 シリーズシステムパラメータ.....	153
O [グルコース¹]-フィブリノペプチド B の質量.....	160
P レセルピン希釈液 60:1 (10 pg/μL)	
の用意.....	162

IonDrive™ Turbo V イオン源テスト

1

これらのテストは、6500 または 6500+ シリーズシステムに取り付けられた IonDrive™ Turbo V イオン源に対して実施します。

次の条件のいずれかでテストを実行します。

- ・ 新しいイオン源をインストールした場合。
- ・ イオン源の大規模メンテナンス後。
- ・ プロジェクトの開始前や標準動作手順の一部としてイオン源の性能の評価が必要なとき。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。イオン源で使用する有害物質や障害性物質の適正使用、汚染、排気に関する知識や訓練を受けている場合に限り、イオン源を使用します。



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



警告！ 有害化学物質の危険性があります。白衣、手袋、保護メガネなどの身体保護具を着用して、皮膚や目を危険物質にさらさないようにします。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。化学物質の流出が発生した場合、特定の指示に関して製品安全性データシートを確認します。イオン源付近にこぼれたものを掃除する前に、システムが**Standby**モードであることを確認してください。適切な個人用防護具と吸着布を使用して、流出を食い止め、現地規制に従い処分してください。

必要な物

- ・ 移動相溶媒: アセトニトリル: 水 (70:30) 溶液
- ・ テスト溶液: 0.0167 pmol/μL (10 pg/μL 相当) レセルピン。SCIEX 標準化学物質キット (PN 4406127) 同梱の事前希釈 0.0167 pmol/μL レセルピン溶液。
- ・ TripleTOF® システムの場合、SCIEX TripleTOF® システム化学物質キット (PN 4456736) 同梱の 0.167 pmol/μL レセルピン溶液と標準希釈からテスト溶液を準備します。
- ・ HPLCポンプ (移動相用)
- ・ 5 μL ループ付マニュアルインジェクタ (8125 レオダインまたは相当) または 5 μL 注入仕様のオートサンプラー
- ・ 外径 (o.d.) 1/16-インチ、内径 (i.d.) 0.005-インチのPEEK チューブ
- ・ プローブがインストールされたイオン源
- ・ 250 μL ~ 1000 μL のシリンジ
- ・ パウダーフリーグローブ (ニトリルまたはネオプレンが推奨されます)
- ・ 安全メガネ
- ・ 白衣

注: すべてのテスト溶液は冷蔵保存しておかなければなりません。冷蔵庫から48時間以上外放置された場合、処分して新しい溶液を使用します。

テストの準備



警告! 感電の危険性。操作中、イオン源に印加された高電圧に触れないようにします。サンプルチューブやイオン源付近の他の装置を調整する前に、システムを**Standby**モードにします。

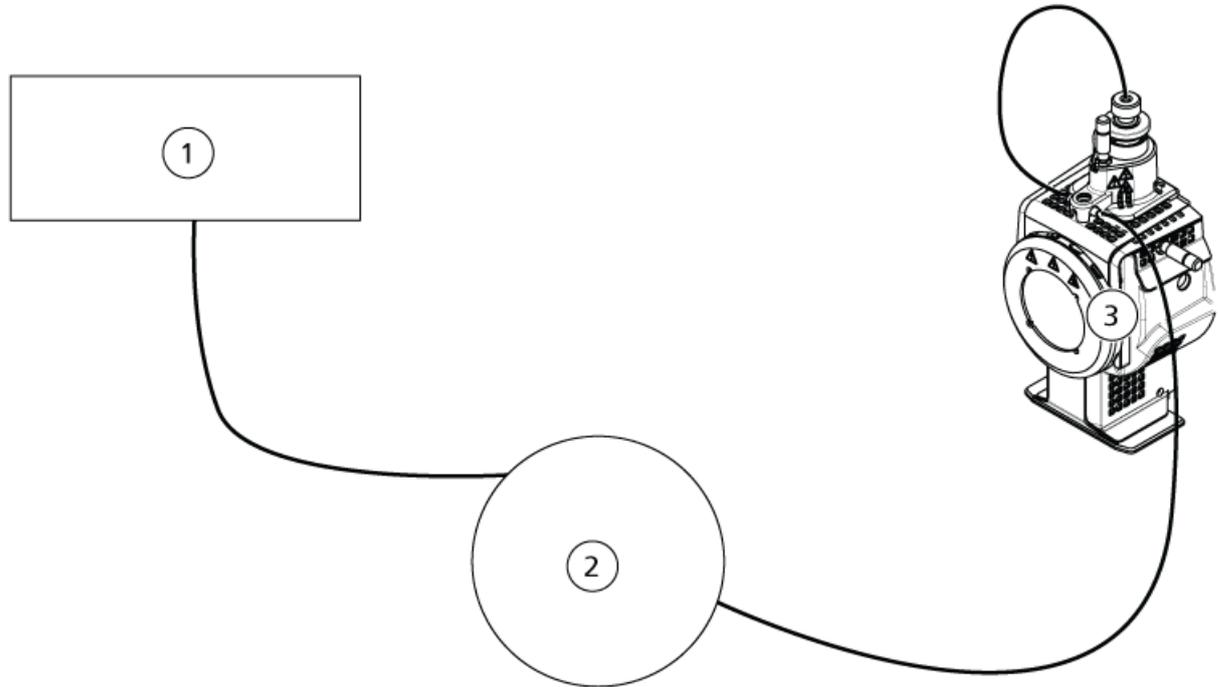
- ・ 新しいイオン源をインストールした場合、質量分析装置が既存のイオン源を使用したときの仕様で動作していることを確認します。
- ・ イオン源を質量分析装置にインストールします。
- ・ イオン源が完全に最適化されているかを確認します。イオン源については、『オペレータガイド』を参照してください。
- ・ 化学溶液または溶媒を取り扱う前に確認が必要な注意事項は、適用する安全性データシートをすべて参照してください。
- ・ 測定者が質量分析装置の操作と安全手順に関して十分なトレーニングを受けていることを確認します。

IonDrive™ Turbo V イオン源テスト

- ・ テストするプローブをインストールします。
- ・ 5 µL ループを装備したマニュアルインジェクタ経由で、イオン源の接地継手部をポンプに、あるいはオートサンプラーに接続します。

図 1-1 を参照してください。

図 1-1 LC ポンプ構成



項目	説明
1	流れの入口のポンプ
2	インジェクタまたはオートサンプラー
3	イオン源

TurbolonSpray® プローブのテスト



警告！ 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも90分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意：システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

イオン源のインストールまたは最適化に関する詳細は、イオン源『オペレータガイド』を参照してください。

1. 移動相流量 0.5 mL/分になるよう HPLC ポンプを構成します。
2. Analyst® ソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune** をダブルクリックします。
3. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 1-1 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan Mode	MRM
Q1	609.3
Q3	195.1
Scan Time (seconds)	0.200
Duration (minutes)	10
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas™ flow (CUR)	30 (または最適化されたとおり)
Temperature (TEM)	700 (または最適化されたとおり)
Ion Source Gas 1 (GS1)	60 (または最適化されたとおり)
Ion Source Gas 2 (GS2)	70 (または最適化されたとおり)
IonSpray Voltage (IS)	4500 (または最適化されたとおり)
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100 (または最適化されたとおり)
Collision Energy (CE)	45 (または最適化されたとおり)
Collision Exit Potential (CXP)	最適化されたとおり

4. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。



警告！イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。電極がプローブチップよりも先まで突出して、有害蒸気がイオン源から排出されないようにします。電極は、プローブ内部に配置してはなりません。

注意：システムに損傷を与える恐れ。Curtain Gas™流量にできる限り高値を使用します。

5. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
6. レセルピン溶液 5 μ L を 3 回注入します。

ヒント！ 5 μ L ループを、30 μ L~40 μ Lの溶液で満たすことを推奨しています。

7. 結果を印刷します。
8. イオンの3つの強度を平均化して、データログに結果を記録します。
9. 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: IonDrive™ Turbo V イオン源](#) を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

10. テスト完了度、LC ポンプを停止し、TEM を 0 に設定してプローブの熱を下げます。

APCI プローブのテスト



警告！高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも90分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意：システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

イオン源のインストールまたは最適化に関する詳細は、イオン源『オペレータガイド』を参照してください。

1. 移動相流量 1 mL/分になるよう HPLC ポンプを構成します。
2. Analyst® ソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune** をダブルクリックします。
3. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 1-2 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan Mode	MRM
Q1	609.3
Q3	195.1
Scan Time (seconds)	0.200
Duration (minutes)	10
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas™ flow (CUR)	30 (または最適化されたとおり)
CAD Gas	9 (または最適化されたとおり)
Nebulizer Current (NC)	3 (または最適化されたとおり)
Temperature (TEM)	425
Ion Source Gas 1 (GS1)	70 (または最適化されたとおり)
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100 (または最適化されたとおり)
Collision Energy (CE)	45 (または最適化されたとおり)
Collision Exit Potential (CXP)	最適化されたとおり

4. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。電極がプローブチップよりも先まで突出して、有害蒸気がイオン源から排出されないようにします。電極は、プローブ内部に配置してはなりません。

注意： システムに損傷を与える恐れ。**Curtain Gas™**流量にできる限り高値を使用します。

5. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
6. レセルピン溶液 5 μ L を 3 回注入します。

ヒント！ 5 µL ループを、30 µL～40 µLの溶液で満たすことを推奨しています。

7. 結果を印刷します。
8. イオンの3つの強度を平均化して、データログに結果を記録します。
9. 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: IonDrive™ Turbo V イオン源](#)を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

10. テスト完了度、LC ポンプを停止し、TEM を0に設定してプローブの熱を下げます。

次の条件のいずれかでテストを実行します。

- ・ 新しいイオン源をインストールした場合。
- ・ イオン源の大規模メンテナンス後。
- ・ プロジェクトの開始前や標準動作手順の一部としてイオン源の性能の評価が必要なとき。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。イオン源で使用する有害物質や障害性物質の適正使用、汚染、排気に関する知識や訓練を受けている場合に限り、イオン源を使用します。



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



警告！ 有害化学物質の危険性があります。白衣、手袋、保護メガネなどの身体保護具を着用して、皮膚や目を危険物質にさらさないようにします。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。化学物質の流出が発生した場合、特定の指示に関して製品安全性データシートを確認します。イオン源付近にこぼれたものを掃除する前に、システムが**Standby**モードであることを確認してください。適切な個人用防護具と吸着布を使用して、流出を食い止め、現地規制に従い処分してください。

必要な物

- ・ 移動相溶媒: アセトニトリル: 水 (70:30) 溶液
 - ・ テスト溶液:
 - ・ 4500、5500、5500+、6500、および 6500+ システムの場合、SCIEX標準化学物質キット (PN 4406127) 同梱の事前希釈 0.0167 pmol/μL レセルピン溶液を使用します。
 - ・ 3200 および 3500 システムの場合、SCIEX 標準化学物質キット (PN 4406127) 同梱の事前希釈 0.167 pmol/μL レセルピン溶液を使用します。
 - ・ TripleTOF® システムの場合、SCIEX TripleTOF® システム化学物質キット (PN 4456736) 同梱の0.167 pmol/μL レセルピン溶液と標準希釈からテスト溶液を準備します。
- ボルテックスミキサーが必要です。
- ・ HPLCポンプ (移動相用)
 - ・ 5 μL ループ付マニュアルインジェクタ (8125 レオダインまたは相当) または 5 μL 注入仕様のオートサンプラー
 - ・ 外径 (o.d.) 1/16-インチ、内径 (i.d.) 0.005-インチのPEEK チューブ
 - ・ プローブがインストールされたイオン源
 - ・ 250 μL ~ 1000 μL のシリンジ
 - ・ パウダーフリーグローブ (ニトリルまたはネオプレンが推奨されます)
 - ・ 安全メガネ
 - ・ 白衣

注：すべてのテスト溶液は冷蔵保存しておかなければなりません。冷蔵庫から48時間以上外放置された場合、処分して新しい溶液を使用します。

注意：誤った結果をもたらす可能性。有効期限切れの溶液を使用しないでください。

テストの準備



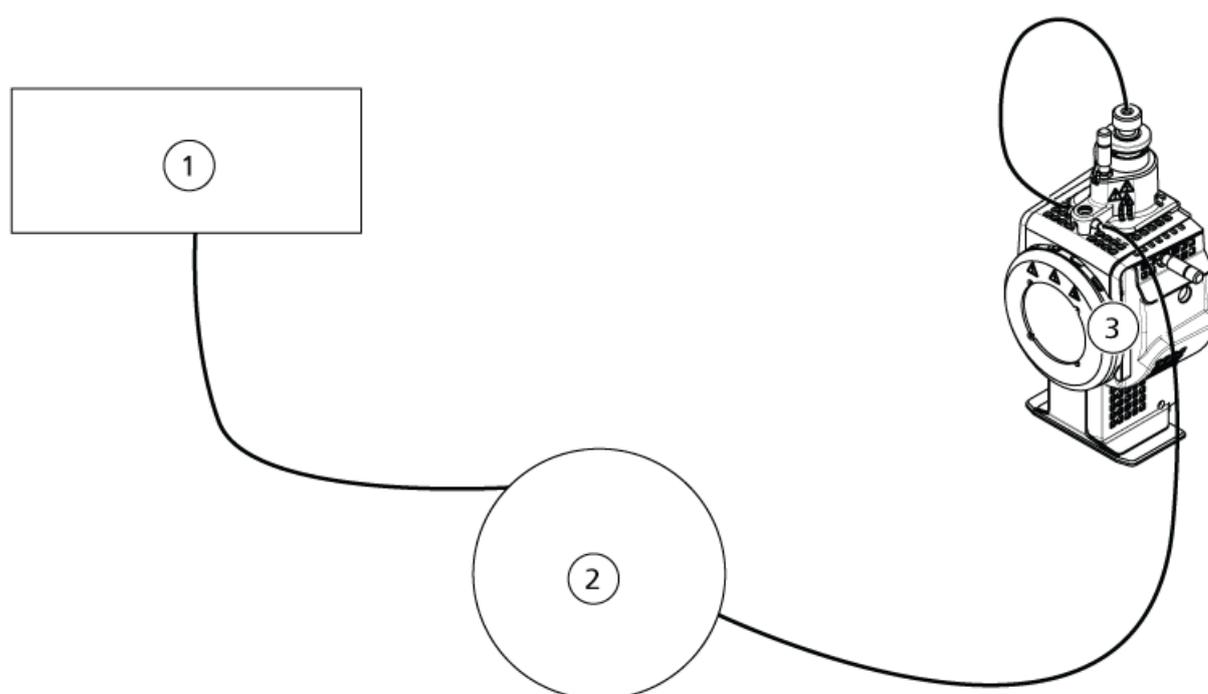
警告！感電の危険性。操作中、イオン源に印加された高電圧に触れないようにします。サンプルチューブやイオン源付近の他の装置を調整する前に、システムをStandbyモードにします。

- ・ 新しいイオン源をインストールした場合、質量分析装置が既存のイオン源を使用したときの仕様で動作していることを確認します。
- ・ イオン源を質量分析装置にインストールします。

- ・ イオン源が完全に最適化されているかを確認します。イオン源については、『オペレータガイド』を参照してください。
- ・ 化学溶液または溶媒を取り扱う前に確認が必要な注意事項は、適用する安全性データシートをすべて参照してください。
- ・ テストするプローブをインストールします。
- ・ 5 μ L ループを装備したマニュアルインジェクタ経由で、イオン源の接地継手部をポンプに、あるいはオートサンプラーに接続します。

図 2-1 を参照してください。

図 2-1 LC ポンプ構成



項目	説明
1	ポンプのために流量注入口
2	インジェクタまたはオートサンプラー
3	イオン源

トリプル四重極システムおよび QTRAP® システム でのイオン源のテスト

Turbolonspray® プローブのテスト



警告！ 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意： システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

イオン源のインストールまたは最適化に関する詳細は、イオン源『オペレータガイド』を参照してください。

1. 移動相流量 0.2 mL/分になるよう HPLC ポンプを構成します。
2. Analyst® ソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune** をダブルクリックします。
3. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 2-1 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan Mode	MRM
Q1	609.3 (または最適化されたとおり)
Q3	195.1 (または最適化されたとおり)
Scan Time (seconds)	0.200
Duration (minutes)	10
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas™ flow (CUR)	20 (または最適化されたとおり)
Temperature (TEM)	700 (または最適化されたとおり)
Ion Source Gas 1 (GS1)	60 (または最適化されたとおり)
Ion Source Gas 2 (GS2)	70 (または最適化されたとおり)
IonSpray™ Voltage (IS)	4500 (または最適化されたとおり)

表 2-1 メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100 (または最適化されたとおり)
Collision Energy (CE)	45 (または最適化されたとおり)
Collision Exit Potential (CXP)	最適化されたとおり

4. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。電極がプローブチップよりも先まで突出して、有害蒸気がイオン源から排出されないようにします。電極は、プローブ内部に配置してはなりません。

注意： システムに損傷を与える恐れ。**Curtain Gas™**流量にできる限り高値を使用します。

5. 最大シグナル強度と安定性を確保するよう次の項目を最適化している間に、レセルピン溶液 5 μ L を数回注入します。
- ・ プローブの垂直および水平ポジション
 - ・ エレクトロード先端拡張部
 - ・ CUR、TEM、GS1、GS2、および IS
6. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
7. レセルピン溶液 5 μ L を 3 回注入します。

ヒント！ 5 μ L ループを、30 μ L~40 μ Lの溶液で満たすことを推奨しています。

8. 結果を印刷します。
9. イオンの 3 つの強度を平均化して、データログに結果を記録します。
10. 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: Turbo V™ イオン源](#)を参照してください。
- 結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。
11. テスト完了度、LC ポンプを停止し、**TEM** を 0 に設定してプローブの熱を下げます。

APCI プローブのテスト



警告！高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意：システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

イオン源のインストールまたは最適化に関する詳細は、イオン源『オペレータガイド』を参照してください。

1. 移動相流量 1 mL/分になるよう HPLC ポンプを構成します。
2. Analyst® ソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune** をダブルクリックします。
3. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 2-2 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan Mode	MRM
Q1	609.3 (または最適化されたとおり)
Q3	195.1 (または最適化されたとおり)
Scan Time (seconds)	0.200
Duration (minutes)	10
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas™ flow (CUR)	20 (または最適化されたとおり)
CAD Gas	9 (または最適化されたとおり)
Nebulizer Current (NC)	3 (または最適化されたとおり)
Temperature (TEM)	425
Ion Source Gas 1 (GS1)	70 (または最適化されたとおり)
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100 (または最適化されたとおり)

表 2-2 メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Collision Energy (CE)	45 (または最適化されたとおり)
Collision Exit Potential (CXP)	最適化されたとおり

4. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。電極がプローブチップよりも先まで突出して、有害蒸気がイオン源から排出されないようにします。電極は、プローブ内部に配置してはなりません。

注意： システムに損傷を与える恐れ。Curtain Gas™流量にできる限り高値を使用します。

5. 最大シグナル強度と安定性を確保するよう次の項目を最適化している間に、レセルピン溶液 5 μ L を数回注入します。
- ・ プローブの垂直および水平ポジション
 - ・ エレクトロード先端拡張部
 - ・ CUR、GS1 および NC
6. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
7. レセルピン溶液 5 μ L を 3 回注入します。

ヒント！ 5 μ L ループを、30 μ L~40 μ Lの溶液で満たすことを推奨しています。

8. 結果を印刷します。
9. イオンの 3 つの強度を平均化して、データログに結果を記録します。
10. 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: Turbo V™ イオン源](#)を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

11. テスト完了度、LC ポンプを停止し、**TEM** を 0 に設定してプローブの熱を下げます。

TripleTOF® システムでのイオン源のテスト

注：仕様は、TripleTOF® 4600 システムに対応していません。TripleTOF® システムの推奨イオン源は、DuoSpray™ イオン源です。

テスト溶液の準備

1. 0.167 pmol/μL レセルピン溶液 100 μL と標準希釈液 900 μL を混ぜます。
2. ボルテックスミキサーで 30 秒間混ぜます。

このステップで、0.0167 pmol/μL レセルピン溶液が作られます。

TurbolonSpray® プローブのテスト



警告！高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意：システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

イオン源のインストールまたは最適化に関する詳細は、イオン源『オペレータガイド』を参照してください。

1. 移動相流量 0.2 mL/分になるよう HPLC ポンプを構成します。
2. Analyst® TFソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune** をダブルクリックします。
3. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 2-3 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan Mode	プロダクトイオン
High Sensitivity (5600/5600+ および 6600/6600+ システムのみ)	オン
Product Of	609.2807
TOF Masses (Da)	150~650

表 2-3 メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Accumulation time (seconds)	0.200
Duration (minutes)	10
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas™ flow (CUR)	20
Temperature (TEM)	700
Ion Source Gas 1 (GS1)	50
Ion Source Gas 2 (GS2)	50
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	5000
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100
Collision Energy (CE)	45
Resolution パラメータ	
Q1 Resolution	単位

4. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。電極がプローブチップよりも先まで突出して、有害蒸気がイオン源から排出されないようにします。電極は、プローブ内部に配置してはなりません。

注意： システムに損傷を与える恐れ。**Curtain Gas™**流量にできる限り高値を使用します。

5. 最大シグナル強度と安定性を確保するよう次の項目を最適化している間に、0.0167 pmol/μL レセルピン溶液 5 μL を数回注入します。
- ・ プローブの垂直および水平ポジション
 - ・ エレクトロード先端拡張部
 - ・ CUR、TEM、GS1、GS2 および ISVF
6. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
7. レセルピン溶液 5 μL を 3 回注入します。

ヒント！ 5 µL ループを、30 µL～40 µLの溶液で満たすことを推奨しています。

8. 結果を印刷します。
9. イオンの3つの強度を平均化して、データログに結果を記録します。
10. 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: Turbo V™ イオン源](#)を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

11. テスト完了度、LC ポンプを停止し、TEM を0に設定してプローブの熱を下げます。

APCI プローブのテスト



警告！ 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意： システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

イオン源のインストールまたは最適化に関する詳細は、イオン源『オペレータガイド』を参照してください。

1. 移動相流量 1 mL/分になるよう HPLC ポンプを構成します。
2. Analyst® TFソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune**をダブルクリックします。
3. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 2-4 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan Mode	プロダクトイオン
High Sensitivity (5600/5600+ および 6600/6600+ システムのみ)	オン
Product Of	609.2807
TOF Masses (Da)	150～650
Accumulation time (seconds)	0.200
Duration (minutes)	10

表 2-4 メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas™ flow (CUR)	20 (または最適化されたとおり)
Temperature (TEM)	425
Ion Source Gas 1 (GS1)	70 (または最適化されたとおり)
Nebulizer Current (NC)	3 (または最適化されたとおり)
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100
Collision Energy (CE)	45
Resolution パラメータ	
Q1 Resolution	単位

4. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。電極がプローブチップよりも先まで突出して、有害蒸気がイオン源から排出されないようにします。電極は、プローブ内部に配置してはなりません。

注意： システムに損傷を与える恐れ。**Curtain Gas™**流量にできる限り高値を使用します。

5. 最大シグナル強度と安定性を確保するよう次の項目を最適化している間に、レセルピン溶液 5 μ L を数回注入します。
- ・ プローブの垂直および水平ポジション
 - ・ エレクトロード先端拡張部
 - ・ CUR、GS1 および NC
6. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
7. レセルピン溶液 5 μ L を 3 回注入します。

ヒント！ 5 μ L ループを、30 μ L~40 μ Lの溶液で満たすことを推奨しています。

8. 結果を印刷します。

Turbo V™ イオン源テスト

9. イオンの3つの強度を平均化して、データログに結果を記録します。
10. 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: Turbo V™ イオン源](#)を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

11. テスト完了度、LC ポンプを停止し、TEM を0に設定してプローブの熱を下げます。

次の条件のいずれかでテストを実行します。

- ・ 新しいイオン源をインストールした場合。
- ・ イオン源の大規模メンテナンス後。
- ・ プロジェクトの開始前や標準動作手順の一部としてイオン源の性能の評価が必要なとき。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。イオン源で使用する有害物質や障害性物質の適正使用、汚染、排気に関する知識や訓練を受けている場合に限り、イオン源を使用します。



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



警告！ 有害化学物質の危険性があります。白衣、手袋、保護メガネなどの身体保護具を着用して、皮膚や目を危険物質にさらさないようにします。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。化学物質の流出が発生した場合、特定の指示に関して製品安全性データシートを確認します。イオン源付近にこぼれたものを掃除する前に、システムが**Standby**モードであることを確認してください。適切な個人用防護具と吸着布を使用して、流出を食い止め、現地規制に従い処分してください。

必要な物

- ・ 移動相溶媒: アセトニトリル: 水 (70:30) 溶液
 - ・ テスト溶液:
 - ・ 4500、5500、5500+、6500、および 6500+ システムの場合、SCIEX標準化学物質キット (PN 4406127) 同梱の事前希釈 0.0167 pmol/μL レセルピン溶液を使用します。
 - ・ 3200 および 3500 システムの場合、SCIEX 標準化学物質キット (PN 4406127) 同梱の事前希釈 0.167 pmol/μL レセルピン溶液を使用します。
 - ・ TripleTOF® システムの場合、SCIEX TripleTOF® システム化学物質キット (PN 4456736) 同梱の0.167 pmol/μL レセルピン溶液と標準希釈からテスト溶液を準備します。
- ボルテックスミキサーが必要です。
- ・ HPLCポンプ (移動相用)
 - ・ 5 μL ループ付マニュアルインジェクタ (8125 レオダインまたは相当) または 5 μL 注入仕様のオートサンプラー
 - ・ 外径 (o.d.) 1/16-インチ、内径 (i.d.) 0.005-インチのPEEK チューブ
 - ・ プローブがインストールされたイオン源
 - ・ 250 μL ~ 1000 μL のシリンジ
 - ・ パウダーフリーグローブ (ニトリルまたはネオプレンが推奨されます)
 - ・ 安全メガネ
 - ・ 白衣

注：すべてのテスト溶液は冷蔵保存しておかなければなりません。冷蔵庫から48時間以上外放置された場合、処分して新しい溶液を使用します。

注意：誤った結果をもたらす可能性。有効期限切れの溶液を使用しないでください。

テストの準備



警告！感電の危険性。操作中、イオン源に印加された高電圧に触れないようにします。サンプルチューブやイオン源付近の他の装置を調整する前に、システムをStandbyモードにします。

- ・ 新しいイオン源をインストールした場合、質量分析装置が既存のイオン源を使用したときの仕様で動作していることを確認します。
- ・ イオン源を質量分析装置にインストールします。

- ・ イオン源が完全に最適化されているかを確認します。イオン源については、『オペレータガイド』を参照してください。
- ・ 化学溶液または溶媒を取り扱う前に確認が必要な注意事項は、適用する安全性データシートをすべて参照してください。
- ・ 5 μ L ループを装備したマニュアルインジェクタ経由で、イオン源の接地継手部をポンプに、あるいはオートサンプラーに接続します。

図 3-1 および図 3-2 を参照してください。

図 3-1 LC ポンプ構成: TurbolonSpray® プローブ

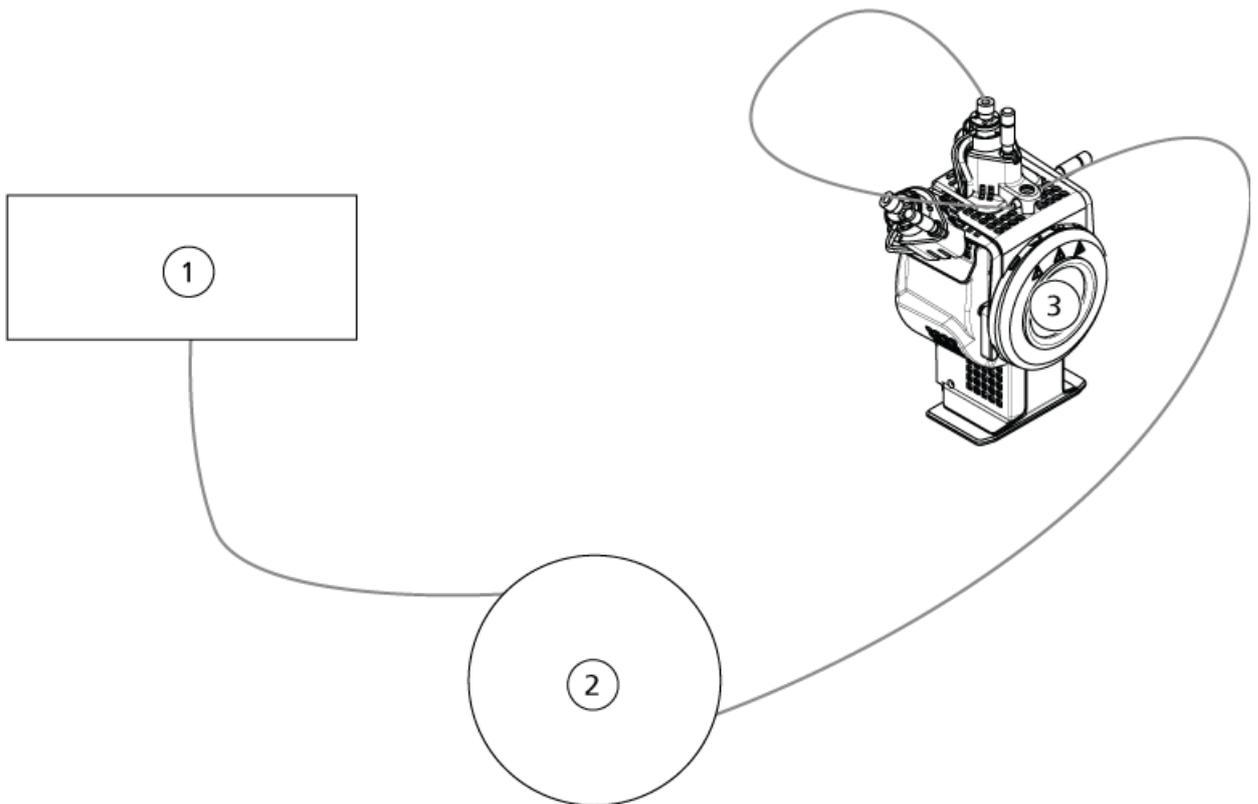
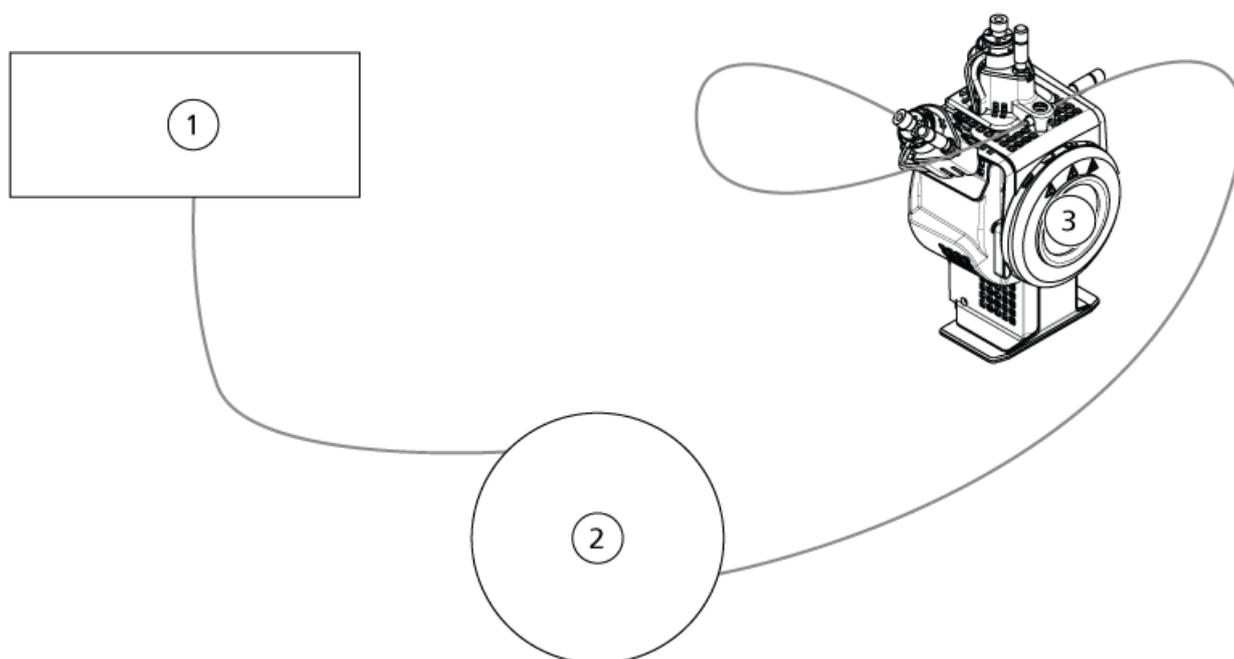


図 3-2 ポンプ構成: APCI プローブ



項目	説明
1	LC ポンプ
2	インジェクタまたはオートサンプラー
3	イオン源

TripleTOF[®] システム

テスト溶液の準備

1. 0.167 pmol/μL レセルピン溶液 100 μL と標準希釈液 900 μL を混ぜます。
2. ボルテックスミキサーで 30 秒間混ぜます。

このステップで、0.0167 pmol/μL レセルピン溶液が作られます。

TurbolonSpray® プローブのテスト



警告！高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意：システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

イオン源のインストールまたは最適化に関する詳細は、イオン源『オペレータガイド』を参照してください。

1. 移動相流量 0.2 mL/分になるよう HPLC ポンプを構成します。
2. Analyst® TFソフトウェアをTune and Calibrateモードにして、Manual Tuneをダブルクリックします。
3. 次の表に示すとおりプローブポジションを調整します。

表 3-1 プローブポジション

プローブ	垂直ポジション	水平ポジション	エレクトロード先端 拡張部
APCI	5	–	0.5 mm
TurbolonSpray	5	5	0.5 mm

4. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 3-2 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan Mode	プロダクトイオン
High Sensitivity (5600/5600+ および 6600/6600+ システムのみ)	オン
Product Of	609.2807
TOF Masses (Da)	150~650
Accumulation time (seconds)	0.200
Duration (minutes)	10

表 3-2 メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas™ flow (CUR)	20
Temperature (TEM)	650
Ion Source Gas 1 (GS1)	50
Ion Source Gas 2 (GS2)	70
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	5500
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100
Collision Energy (CE)	45
Resolution パラメータ	
Q1 Resolution	単位

5. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。電極がプローブチップよりも先まで突出して、有害蒸気がイオン源から排出されないようにします。電極は、プローブ内部に配置してはなりません。

注意： システムに損傷を与える恐れ。**Curtain Gas™**流量にできる限り高値を使用します。

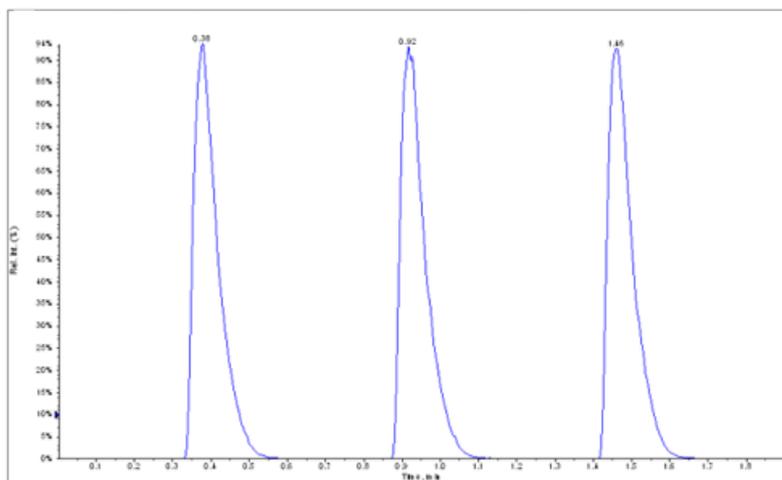
6. 最大シグナル強度と安定性を確保するよう次の項目を最適化している間に、0.0167 pmol/μL レセルピン溶液 5 μL を数回注入します。
- ・ プローブの垂直および水平ポジション
 - ・ エレクトロード先端拡張部
 - ・ CUR、TEM、GS1、GS2 および ISVF
7. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
8. レセルピン溶液 5 μL を 3 回注入します。

ヒント！ 5 μL ループを、30 μL~40 μLの溶液で満たすことを推奨しています。

- 測定後、それぞれの注入量に対して、 m/z 195.0652 (または、キャリブレーション時の観測質量) の中央に配置された 50 mDa ウィンドウの抽出イオンクロマトグラム (XIC) を生成します。それぞれの注入量の強度 (ピーク高さ) を記録します。
- 結果を印刷します。

結果は次の図のようになります。

図 3-3 セントロイド質量 m/z 195 周辺の 50 mDa ウィンドウ用 XIC



- イオンの 3 つの強度を平均化して、データログに結果を記録します。
- 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: DuoSpray™ イオン源](#) を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#) を参照してください。

- テスト完了度、LC ポンプを停止し、TEM を 0 に設定してプローブの熱を下げます。

APCI プローブのテスト



警告！ 高温面の危険。 メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意： システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

イオン源のインストールまたは最適化に関する詳細は、イオン源『オペレータガイド』を参照してください。

- 移動相流量 1 mL/分になるよう HPLC ポンプを構成します。

- Analyst® TFソフトウェアを**Tune and Calibrate**モードにして、**Manual Tune**をダブルクリックします。
- 次の表に示すとおりプローブポジションを調整します。

表 3-3 プローブポジション

プローブ	垂直ポジション	水平ポジション	エレクトロード先端 拡張部
APCI	5	–	0.5 mm
TurbolonSpray	5	5	0.5 mm

- 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 3-4 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan Mode	プロダクトイオン
High Sensitivity (5600/5600+ および 6600/6600+ システムのみ)	オン
Product Of	609.2807
TOF Masses (Da)	150~650
Accumulation time (seconds)	0.200
Duration (minutes)	10
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas™ flow (CUR)	20
Temperature (TEM)	650
Ion Source Gas 2 (GS2)	70
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	5500
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100
Collision Energy (CE)	45
Resolution パラメータ	
Q1 Resolution	単位

5. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。電極がプローブチップよりも先まで突出して、有害蒸気がイオン源から排出されないようにします。電極は、プローブ内部に配置してはなりません。

注意： システムに損傷を与える恐れ。 **Curtain Gas™** 流量にできる限り高値を使用します。

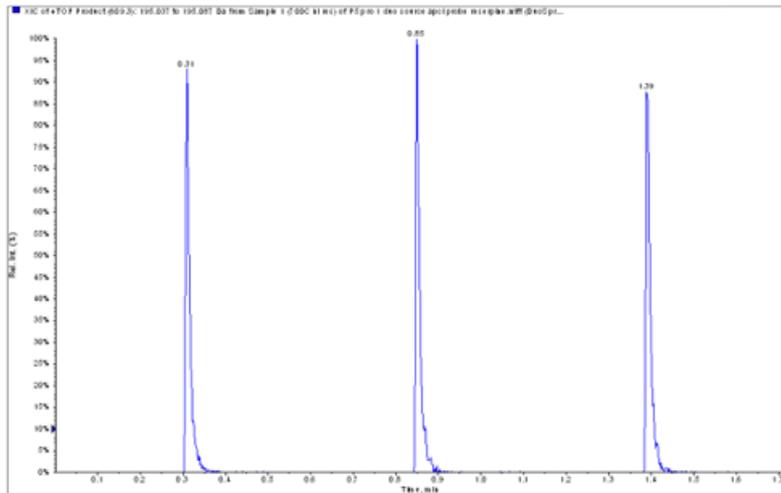
6. 最大シグナル強度と安定性を確保するよう次の項目を最適化している間に、0.0167 pmol/ μ L レセルピン溶液 5 μ L を数回注入します。
- ・ プローブの垂直ポジション
 - ・ エレクトロード先端拡張部
 - ・ CUR、TEM、GS2 および ISVF
7. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
8. レセルピン溶液 5 μ L を 3 回注入します。

ヒント！ 5 μ L ループを、30 μ L~40 μ L の溶液で満たすことを推奨しています。

9. 測定後、それぞれの注入量に対して、m/z 195.0652 (または、キャリブレーション時の観測質量) の中央に配置された 50 mDa ウィンドウの抽出イオンクロマトグラム (XIC) を生成します。それぞれの注入量の強度 (ピーク高さ) を記録します。
10. 結果を印刷します。

結果は次の図のようになります。

図 3-4 セントロイド質量 m/z 195 周辺の 50 mDa ウィンドウ用 XIC



11. 平均強度が許容範囲であるか確認します。データログ: DuoSpray™ イオン源を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、トラブルシューティングのヒントを参照してください。

12. テスト完了度、LC ポンプを停止し、TEM を 0 に設定してプローブの熱を下げます。

トリプル四重極システムおよび QTRAP® システム でのイオン源のテスト

TurbolonSpray® プローブ



警告！ 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意：システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

イオン源のインストールまたは最適化に関する詳細は、イオン源『オペレータガイド』を参照してください。

1. 移動相流量 0.2 mL/分になるよう HPLC ポンプを構成します。
2. Analyst®ソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune**をダブルクリックします。

3. **Source/Gas** タブで、リストから **TIS** を選択します。
4. 次の表に示すとおりにプローブポジションを調整します。

表 3-5 プローブポジション

プローブ	垂直ポジション	水平ポジション	エレクトロード先端 拡張部
APCI	5	–	0.5 mm
TurbolonSpray	5	5	0.5 mm

5. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 3-6 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	プロダクトイオン
Scan Mode	MRM
Q1	609.3
Q3	195.1
Scan Time (ms)	200
Duration (minutes)	10
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas™ flow (CUR)	20 (または最適化されたとおり)
IonSpray Voltage (IS)	4500 (または最適化されたとおり)
Temperature (TEM)	700 (または最適化されたとおり)
Ion Source Gas 1 (GS1)	60 (または最適化されたとおり)
Ion Source Gas 2 (GS2)	70 (または最適化されたとおり)
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100 (または最適化されたとおり)
Collision Energy (CE)	45 (または最適化されたとおり)
Collision Exit Potential (CXP)	最適化されたとおり

6. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。電極がプローブチップよりも先まで突出して、有害蒸気がイオン源から排出されないようにします。電極は、プローブ内部に配置してはなりません。

注意：システムに損傷を与える恐れ。**Curtain Gas™**流量にできる限り高値を使用します。

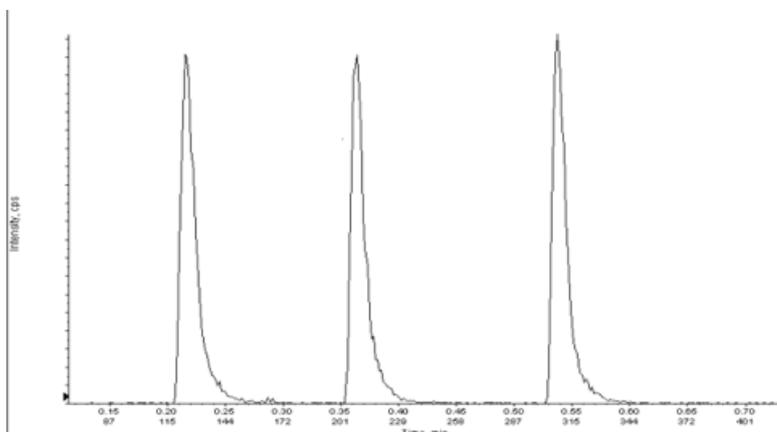
7. 最大シグナル強度と安定性を確保するよう次の項目を最適化している間に、レセルピン溶液 5 μ L を数回注入します。
 - ・ プローブの垂直および水平ポジション
 - ・ エレクトロード先端拡張部
 - ・ CUR、TEM、GS1、GS2、および IS
8. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
9. セントロイド質量 m/z 195 周辺の 50 mDa ウィンドウをモニターしている間に、10 pg/ μ L テスト溶液 5 μ L を回注入します。

ヒント！ 5 μ L ループを、30 μ L~40 μ L の溶液で満たすことを推奨しています。

10. 結果を印刷します。

結果は次の図のようになります。

図 3-5 レセルピン



11. イオンの 3 つの強度を平均化して、データログに結果を記録します。

12. 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: DuoSpray™ イオン源](#)を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

13. テスト完了度、LC ポンプを停止し、TEM を 0 に設定してプローブの熱を下げます。

APCI プローブのテスト



警告！ 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意： システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

イオン源のインストールまたは最適化に関する詳細は、イオン源『オペレータガイド』を参照してください。

1. 移動相流量 1 mL/分になるよう HPLC ポンプを構成します。
2. Analyst® ソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune** をダブルクリックします。
3. 次の表に示すとおりによりプローブポジションを調整します。

表 3-7 プローブポジション

プローブ	垂直ポジション	水平ポジション	エレクトロード先端 拡張部
APCI	5	–	0.5 mm
TurbolonSpray	5	5	0.5 mm

4. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 3-8 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan Mode	MRM
Q1	609.3
Q3	195.1

表 3-8 メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Scan Time (ms)	200
Duration (minutes)	10
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas™ flow (CUR)	20 (または最適化されたとおり)
Nebulizer Current (NC)	3 (または最適化されたとおり)
Temperature (TEM)	350 (または最適化されたとおり)
Ion Source Gas 2 (GS2)	70 (または最適化されたとおり)
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100 (または最適化されたとおり)
Collision Energy (CE)	45 (または最適化されたとおり)
Collision Exit Potential (CXP)	最適化されたとおり

5. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。電極がプローブチップよりも先まで突出して、有害蒸気がイオン源から排出されないようにします。電極は、プローブ内部に配置してはなりません。

注意： システムに損傷を与える恐れ。**Curtain Gas™**流量にできる限り高値を使用します。

6. 最大シグナル強度と安定性を確保するよう次の項目を最適化している間に、レセルピン溶液 5 μ L を数回注入します。
- ・ プローブの垂直および水平ポジション
 - ・ エレクトロード先端拡張部
 - ・ CUR、GS1 および NC
7. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
8. レセルピン溶液 5 μ L を 3 回注入します。

ヒント！ 5 μ L ループを、30 μ L~40 μ Lの溶液で満たすことを推奨しています。

9. 測定後、それぞれの注入量に対して、 m/z 195.0652 (または、キャリブレーション時の観測質量) の中央に配置された 50 mDa ウィンドウの抽出イオンクロマトグラム (XIC) を生成します。それぞれの注入量の強度 (ピーク高さ) を記録します。
10. 結果を印刷します。
11. 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: DuoSpray™ イオン源](#) を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、 [トラブルシューティングのヒント](#) を参照してください。
12. テスト完了度、LC ポンプを停止し、TEM を 0 に設定してプローブの熱を下げます。

OptiFlow™ Turbo V イオン源テスト

4

次の条件のいずれかでテストを実行します。

- ・ 新しいイオン源をインストールした場合。
- ・ イオン源の大規模メンテナンス後。
- ・ プロジェクトの開始前や標準動作手順の一部としてイオン源の性能の評価が必要なとき。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。イオン源で使用する有害物質や障害性物質の適正使用、汚染、排気に関する知識や訓練を受けている場合に限り、イオン源を使用します。



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



警告！ 有害化学物質の危険性があります。白衣、手袋、保護メガネなどの身体保護具を着用して、皮膚や目を危険物質にさらさないようにします。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。化学物質の流出が発生した場合、特定の指示に関して製品安全性データシートを確認します。イオン源付近にこぼれたものを掃除する前に、システムが**Standby**モードであることを確認してください。適切な個人用防護具と吸着布を使用して、流出を食い止め、現地規制に従い処分してください。

必要な物

- ・ 0.167 pmol/μL のレセルピン溶液、およびSCIEX TripleTOF® システム化学物質キット (PN 4456736) に付属の標準希釈から準備したテスト溶液

注：この溶液は、SCIEX Triple Quad™ および QTRAP® 質量分析装置上で OptiFlow™ Turbo V イオン源をテストする場合にも使用します。

- ・ 外径 (o.d.) 1/16-インチ、内径 (i.d.) 0.005-インチのPEEK チューブ
- ・ 低マイクロ流電極で MICRO プローブを取り付けたイオン源
- ・ 250 μL ~ 1000 μL のシリンジ
- ・ パウダーフリーグローブ（ニトリルまたはネオプレンが推奨されます）
- ・ 安全メガネ
- ・ 白衣

注：すべてのテスト溶液は冷蔵保存しておかなければなりません。冷蔵庫から48時間以上外放置された場合、処分して新しい溶液を使用します。

注意：誤った結果をもたらす可能性。有効期限切れの溶液を使用しないでください。

テストの準備



警告！感電の危険性。操作中、イオン源に印加された高電圧に触れないようにします。サンプルチューブやイオン源付近の他の装置を調整する前に、システムをStandbyモードにします。

- ・ 新しいイオン源をインストールした場合、質量分析装置が既存のイオン源を使用したときの仕様で動作していることを確認します。
- ・ イオン源を質量分析装置にインストールします。
- ・ イオン源が完全に最適化されているかを確認します。イオン源については、『オペレータガイド』を参照してください。
- ・ 化学溶液または溶媒を取り扱う前に確認が必要な注意事項は、適用する安全性データシートをすべて参照してください。
- ・ テストするプローブをインストールします。

トリプル四重極システムおよび QTRAP® システム でのイオン源のテスト

SteadySpray プローブのテスト



警告！ 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも60分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意： システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

注： OptiFlow™ Turbo V イオン源は、5500、5500+、6500、および 6500+ シリーズシステムのみで使用できます。

注： このテストは、MICRO プローブおよび低マイクロ流電極専用です。

イオン源のインストールまたは最適化に関する詳細は、イオン源『オペレータガイド』を参照してください。

1. レセルピン溶液を流量 5 μ l/分で注入します。
2. Analyst® ソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune** をダブルクリックします。
3. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 4-1 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan Mode	MRM
Q1	609.3 (または最適化されたとおり)
Q3	195.1 (または最適化されたとおり)
Scan Time (seconds)	0.200
Duration (minutes)	10
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas™ flow (CUR)	20 (または最適化されたとおり)

表 4-1 メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Temperature (TEM)	350 (最適化された状態、最高 350 °C)
Ion Source Gas 1 (GS1)	25 (または最適化されたとおり)
Ion Source Gas 2 (GS2)	65 (または最適化されたとおり)
IonSpray™	4500 (最大 4500)
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100 (または最適化されたとおり)
Collision Energy (CE)	45 (または最適化されたとおり)
Syringe Pump Method パラメータ	
Flow rate (μ L/min)	5
Syringe Size (μ L)	250 μ L~1000 μ L

4. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。

注意：システムに損傷を与える恐れ。**Curtain Gas™**流量にできる限り高値を使用します。

- CUR、TEM、GS1、GS2、および IS を最適化して最大の信号強度と安定性を達成しながら、レセルピン溶液を少なくとも 5 分間、流量 5 μ L/分で注入します。
- Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
- 結果を印刷します。
- データログに結果を記録します。
- イオンの 3 つの強度を平均化して、データログに結果を記録します。
- 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: OptiFlow™ Turbo V イオン源](#)を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

TripleTOF® システムでのイオン源のテスト

注：OptiFlow™ Turbo V イオン源は、TripleTOF® 6600+ システム、および OptiFlow™ Turbo V イオン源を使用するようにアップグレードされた TripleTOF® 6600 システムのみで使用できます。

SteadySpray プローブのテスト



警告！高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも60分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意：システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

イオン源のインストールまたは最適化に関する詳細は、イオン源『オペレータガイド』を参照してください。

注：このテストは、MICRO プローブおよび低マイクロ流電極専用です。

1. レセルピン溶液を流量 5 μ l/分で注入します。
2. Analyst® TFソフトウェアをTune and Calibrateモードにして、Manual Tuneをダブルクリックします。
3. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 4-2 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan Mode	プロダクトイオン
High Sensitivity	オン
Product Of	609.2807
TOF Masses (Da)	150~650
Accumulation time (seconds)	0.200
Duration (minutes)	10
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas™ flow (CUR)	20 (または最適化されたとおり)
Temperature (TEM)	350 (最適化された状態、最高 350 °C)
Ion Source Gas 1 (GS1)	25 (または最適化されたとおり)
Ion Source Gas 2 (GS2)	65 (または最適化されたとおり)
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	4500 (最大 4500)

表 4-2 メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100 (または最適化されたとおり)
Collision Energy (CE)	45 (または最適化されたとおり)
Resolution パラメータ	
Q1 Resolution	単位
Syringe Pump Method パラメータ	
Flow rate (μ L/min)	5
Syringe Size (μ L)	250 μ L~1000 μ L

4. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。

注意：システムに損傷を与える恐れ。**Curtain Gas™**流量にできる限り高値を使用します。

5. CUR、TEM、GS1、GS2、およびISVFを最適化して最大の信号強度と安定性を達成しながら、レセルピン溶液 0.167 pmol/ μ L を注入します。
6. **Acquire** をクリックして、少なくとも5分間、データの収集を始めます。
7. 結果を印刷します。
8. 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: Turbo V™ イオン源](#)を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

このセクションのテストは、NanoSpray III イオン源用ではありません。SCIEX 質量分析装置用 DPV-450 Digital PicoView[®] Nanospray イオン源のテストは、New Objective 社の『インストールマニュアル』を参照してください。

次の条件のいずれかでテストを実行します。

- ・ 新しいイオン源をインストールした場合。
- ・ イオン源の大規模メンテナンス後。
- ・ プロジェクトの開始前や標準動作手順の一部としてイオン源の性能の評価が必要なとき。



警告！イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。イオン源で使用する有害物質や障害性物質の適正使用、汚染、排気に関する知識や訓練を受けている場合に限り、イオン源を使用します。



警告！感電の危険性。NanoSpray[®]イオン源の操作は、照明器、カメラ、停止、カバーが適切に取り付けられていない場合は絶対に行わないでください。カーテンプレートには絶対に触れないでください。また、カーテンプレートにエミッターの先端が接触しないようにしてください。質量分析装置が使用可能で、イオン源がインストールされている場合は、X-Y-Z位置決めユニットをインターフェースから離れた場所に移動させても、カーテンプレートは高電圧になっています。



警告！有害化学物質の危険性があります。白衣、手袋、保護メガネなどの身体保護具を着用して、皮膚や目を危険物質にさらさないようにします。



警告！イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。化学物質の流出が発生した場合、特定の指示に関して製品安全性データシートを確認します。イオン源付近にこぼれたものを掃除する前に、システムがStandbyモードであることを確認してください。適切な個人用防護具と吸着布を使用して、流出を食い止め、現地規制に従い処分してください。

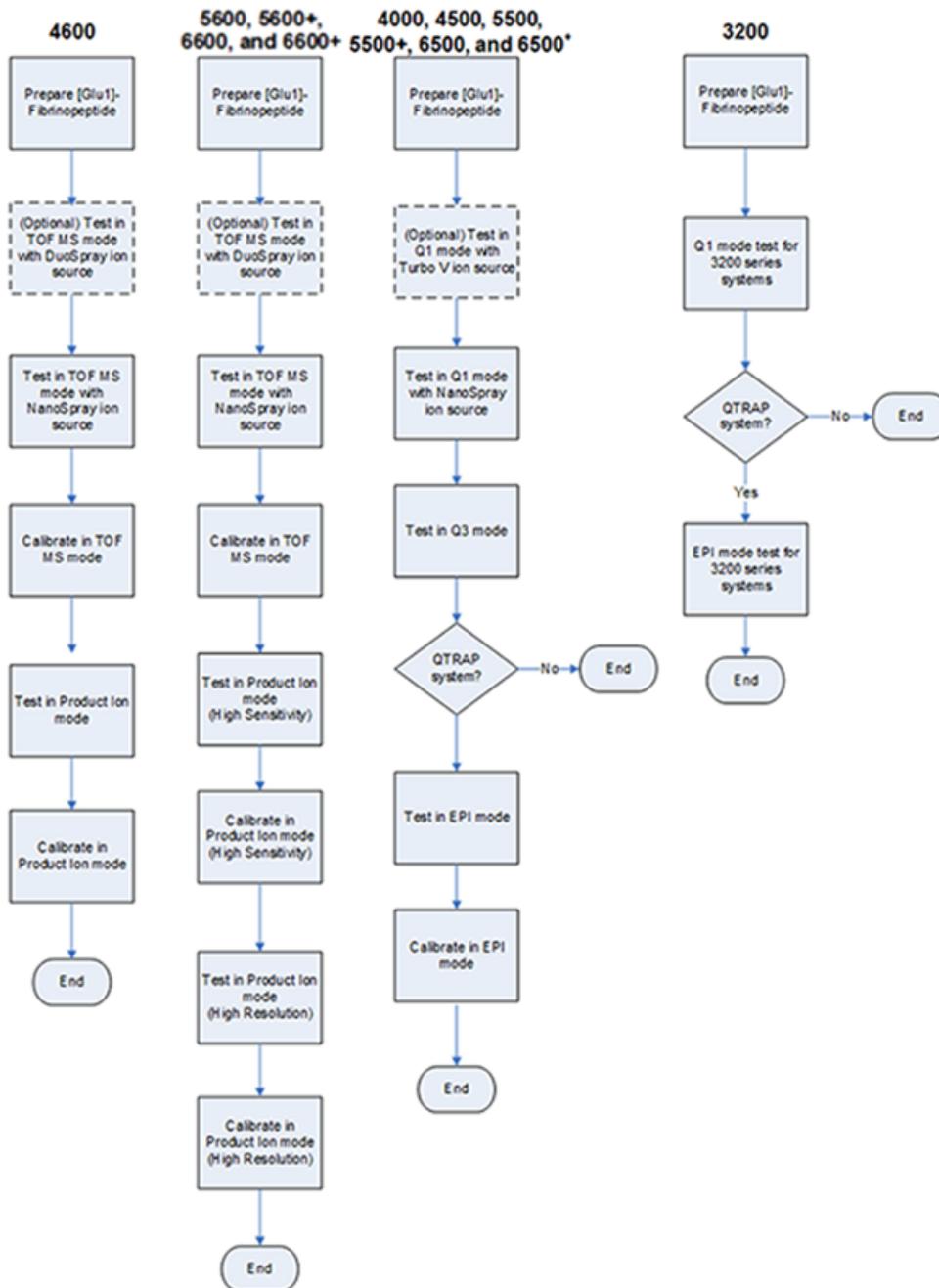
テストの準備



警告！感電の危険性。操作中、イオン源に印加された高電圧に触れないようにします。サンプルチューブやイオン源付近の他の装置を調整する前に、システムを**Standby**モードにします。

- ・ 新しいイオン源をインストールした場合、質量分析装置が既存のイオン源を使用したときの仕様で動作していることを確認します。
- ・ イオン源を質量分析装置にインストールします。
- ・ イオン源が完全に最適化されているかを確認します。イオン源については、『オペレータガイド』を参照してください。
- ・ 化学溶液または溶媒を取り扱う前に確認が必要な注意事項は、適用する安全性データシートをすべて参照してください。

図 5-1 テストワークフロー



[グルコース¹]フィブリノペプチドB希釈液の準備

必要な材料

- ・ [グルコース¹]-フィブリノペプチドB、LC/MS ペプチドキャリブレーションキット (PN 4465867) 同梱
- ・ LC/MSペプチドキャリブレーションキットに含まれる標準希釈物
- ・ パウダーフリーグローブ（ニトリルまたはネオプレンが推奨されます）
- ・ 安全メガネ
- ・ 白衣

[グルコース¹]フィブリノペプチドBの質量リストについては、[\[グルコース¹\]-フィブリノペプチドBの質量](#)を参照してください。

注：試験を開始する直前に、常に希釈物を準備してください。

注：[グルコース¹]フィブリノペプチドBは、バイアルのゴム隔膜に詰まることがあります。バイアルを開く前に、そっとトントンと叩くか揺らして落としてください。そして、スロットを露出させるためにゴム隔膜の一部を取り外してください。希釈溶媒をスロットから流し入れます。そして、ゴム隔膜を押して元の位置に戻し、分解するまでよく混ぜます。

注意：誤った結果をもたらす可能性。有効期限切れの溶液を使用しないでください。

1. 900 μL の標準希釈物（ギ酸0.1%、アセトニトリル10%）を、[グルコース¹]フィブリノペプチドBが入ったガラス製のアンバーバイアルに追加します。
2. バイアルにしっかりとふたをして振ります、少なくとも2分間攪拌し、ペプチドが完全に分解することを確認します。

注：ペプチド濃度は、標準希釈物の中の全体のペプチド含有量およびペプチド純度により異なります。ベンダーから提供される分析証明書を参照してください。100%純度においては、前述のように0.1ミリグラムの[グルコース¹]フィブリノペプチドBが分解され、約66.67ピコモル/ μL 濃度のストック溶液が作られます。

3. ストック溶液を50 μL 量の清潔なチューブに取り出します。使用しない分析物は将来のために -20°C で凍結します。
4. 50 μL のストック溶液を清潔なチューブに入れ、そして450 μL の標準希釈物を追加します。
5. チューブを30秒間攪拌します。

これは1 : 10の希釈であるため、6.7 pmol/ μL 溶液のうち500 μL を提供します。

6. 6.7 pmol/μL 溶液のうち50 μL を他の清潔なチューブに入れます。
7. 450 μL の標準希釈物を追加します。
8. チューブを30秒間攪拌します。

これは1 : 10の希釈であるため、667 fmol/μL 溶液のうち500 μL を提供します。

9. 667 fmol/μL 溶液のうち50 μL を他の清潔なチューブに入れます。
10. 450 μL の標準希釈物を追加します。
11. チューブを30秒間攪拌します。

これは1 : 10の希釈であるため、最後の66.7 fmol/μL 溶液のうち500 μL を注入試験に使用するために提供します。

TripleTOF[®] システムでのイオン源のテスト



警告！ 感電の危険性。 NanoSpray[®] イオン源の操作は、照明器、カメラ、停止、カバーが適切に取り付けられていない場合は絶対に行わないでください。カーテンプレートには絶対に触れないでください。また、カーテンプレートにエミッターの先端が接触しないようにしてください。質量分析装置が使用可能で、イオン源がインストールされている場合は、X-Y-Z位置決めユニットをインターフェースから離れた場所へ移動させても、カーテンプレートは高電圧になっています。



警告！ 高温面の危険。 高圧レールやエミッターの先端に触れないでください。

必要なタスクの概要は、[図 5-1](#)を参照してください。

TripleTOF[®] 4600 システムの場合、以下のタスクを実行します。

- ・ [\[グルコース¹\]フィブリノペプチドB希釈液の準備](#)
- ・ [TOF MS モードによるテストおよびキャリブレーション](#)
- ・ [プロダクトイオンモードによるテストおよびキャリブレーション](#)

TripleTOF[®] 5600/5600+ および 6600/6600+ システムの場合、以下のタスクを実行します。

- ・ [\[グルコース¹\]フィブリノペプチドB希釈液の準備](#)
- ・ [TOF MS モードによるテストおよびキャリブレーション](#)
- ・ [プロダクトイオンモードによるテストおよびキャリブレーション \(高感度\) \(5600/5600+ および 6600/6600+ システムのみ\)](#)

- ・ **プロダクトイオンモードによるテストおよびキャリブレーション**。このテストは高分解能モードで実施します。

必要な物

- ・ [グルコース¹]-フィブリノペプチドB希釈液。[グルコース¹]フィブリノペプチドB希釈液の準備を参照してください。
- ・ 100 µL シリンジ (内径 1.46 mm) または NanoSpray[®] イオン源を用いたそれ相当注入量
- ・ (オプション) 1 µL シリンジ (内径 4.61 mm) または DuoSpray[™] イオン源を用いたそれ相当注入量
- ・ パウダーフリーグローブ（ニトリルまたはネオプレンが推奨されます）
- ・ 安全メガネ
- ・ 白衣

TOF MS モードによるテストおよびキャリブレーション

(オプション) DuoSpray[™] イオン源を使用した TOF MS テストの実施

この手順で、希釈溶液の完全性を確認します。

注：[Glu¹]-フィブリノペプチドB溶液をシリンジに充填する前に、洗浄溶液でシリンジを3回洗浄します。次に、シリンジを適切なチューブに接続して、もう一度洗浄してから高圧レールの継手部に接続します。[グルコース¹]-フィブリノペプチドB溶液でチューブをフラッシュします。

1. DuoSpray[™] イオン源を質量分析装置にインストールします。DuoSpray[™] イオン源オペレータガイドを参照してください。
2. 1 µL シリンジを使用して、[グルコース¹]-フィブリノペプチドB溶液を流量 5 µL/分で注入します。
3. Analyst[®] TFソフトウェアをTune and Calibrateモードにして、Manual Tuneをダブルクリックします。
4. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 5-1 DuoSpray[™] イオン源での TOF MS テストパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan type	TOF MS
Accumulation time (sec)	
Polarity	ポジティブ

表 5-1 DuoSpray[™] イオン源での TOF MS テストパラメータ (続き)

パラメータ	値
TOF masses (Da)	400~1800
Duration (min)	0.5
Advanced MS パラメータ	
MCA	オフ
Auto Adjust with mass	オン
Q1 Transmission Window	デフォルト (自動調整有り)
Pulsar Frequency	デフォルト (自動調整有り)
Time bins to sum	4
Settling time	デフォルト
Pause between mass ranges	デフォルト
Source/Gas パラメータ	
Ion Source Gas 1 (GS1)	20
Curtain Gas [™] flow (CUR)	20
Temperature (TEM) (°C)	0
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	5500
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100
Syringe Pump Method パラメータ	
Flow rate (µL/min)	5
Syringe Size	1 mL (内径 4.61 mm)

5. 新規メソッドを保存します。

ヒント！ NanoSpray[®] イオン源テストに使用するメソッドを「NanoSpray Installation <date>」という名前の異なるフォルダで保存します。

6. **Acquire** をクリックして 30 秒間のデータを測定します。
7. 左下ペインの **TIC of +TOF MS** ウィンドウで、30 秒間ハイライトしてから、平均化されたスペクトルをダブルクリックして表示します。
8. 一番下のペインに表示される平均化されたスペクトルを右クリックして、**List Data** をクリックします。次に、セントロイド強度と分解能を記録します。

NanoSpray[®] イオン源テスト

9. セントロイド強度と分解能が許容範囲であるかを確認します。 [データログ: NanoSpray[®] イオン源](#)を参照してください。

ガイドライン: DuoSpray[™] イオン源で得たセントロイド強度と分解能は、NanoSpray[®] イオン源に規定された仕様を満たさなければなりません。そうではない場合、新規希釈溶液を用意してください。

NanoSpray[®] イオン源を使用した TOF MS テストの実施

注: [Glu¹]-フィブリノペプチドB溶液をシリンジに充填する前に、洗浄溶液でシリンジを3回洗浄します。次に、シリンジを適切なチューブに接続して、もう一度洗浄してから高圧レールの継手部に接続します。[グルコース¹]-フィブリノペプチドB溶液でチューブをフラッシュします。

1. NanoSpray[®] イオン源を質量分析装置にインストールします。 [NanoSpray[®] イオン源オペレータガイド](#)を参照してください。
2. NanoSpray III ヘッドを用意します。 [NanoSpray[®] イオン源オペレータガイド](#)を参照してください。
3. 100 µL シリンジを使用して、[グルコース¹]-フィブリノペプチドB溶液を流量 0.5 µL/分で注入します。
4. Analyst[®] TFソフトウェアを **Tune and Calibrate** モードにして、 **Manual Tune** をダブルクリックします。
5. オプションの手順、 [\(オプション\) DuoSpray[™] イオン源を使用した TOF MS テストの実施](#) を実施した場合、メソッドを開いて、以下の表に示すようにパラメータを設定します。この手順を実施しなかった場合、このパラメータで新規メソッドを作成します。

表 5-2 NanoSpray[®] イオン源を用いた TOF MS メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan type	TOF MS
Accumulation time (sec)	1.0
Polarity	ポジティブ
TOF masses (Da)	400~1800
Duration (min)	0.5
Advanced MS パラメータ	
MCA	オフ
Auto Adjust with mass	オン

表 5-2 NanoSpray[®]イオン源を用いた TOF MS メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Q1 Transmission Window	デフォルト (自動調整有り)
Pulsar Frequency	デフォルト (自動調整有り)
Time bins to sum	4
Settling time	デフォルト
Pause between mass ranges	デフォルト
Source/Gas パラメータ	
Ion Source Gas 1 (GS1)	3
Curtain Gas TM flow (CUR)	25
Interface Heater Temperature (IHT) (°C)	75
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	2100
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100
Syringe Pump Method パラメータ	
Flow rate (µL/min)	0.5
Syringe Size	100 Gastight (1.46 mm)

6. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。

注意：システムに損傷を与える恐れ。エミッタチップがカーテンプレートに触れないようにしてください。Z 軸微調整ノブを使用して、スプレーポジションを調整しエミッタチップを損傷から守ります。

注意：システム汚染の可能性。エミッタチップ終端部をカーテンプレートアパチャに挿入しないでください。エミッタチップが少なくとも 2 mm ~ 5 mm アパチャから離れた外側にあるかを確認します。アパチャに近すぎる位置でスプレー噴射すると、質量分析装置の汚染の原因となる恐れがあります。

7. カーテンプレートアパチャに対してスプレーヘッドのポジションを調整して、シグナル強度を最適化します。今後の使用のために、XYZ 値を記録します。
8. 100 V 単位で **ISVF** を調整して、最適なシグナルとシグナル対ノイズ比を確保します。

注： IonSprayTM電圧が高すぎると、コロナ放電が発生する可能性があります。これはプローブチップで青く光るため、目視確認できません。コロナ放電によって、シグナルの感度と安定性が下がります。

9. シグナルが下がり始めるまで **GS1** を増やし、シグナルが最大値に達するまで **GS1** を減らします。

GS1 は通常、3 ~ 10 で最適化されます。 **GS1** がこの範囲外の場合、チップ突出量が正しくないか (1 ~ 2 mm)、チップを交換する必要があります。

注： GS1パラメータはゼロで最適化することがあります。

10. シグナルが下がり始めるまで **CUR** を増やし、シグナルが最大値に達するまで **CUR** を減らします。

注： 汚染を防ぐために、感度を損なわずに可能な限り CUR最高値を使用します。CURを20以下に設定しないでください。これによって、ノイズの多いシグナルを生成する可能性のあるCurtain GasTM流量の浸透を防ぎ、アパチャを汚染から守り、全体のシグナル対ノイズ比を向上させます。

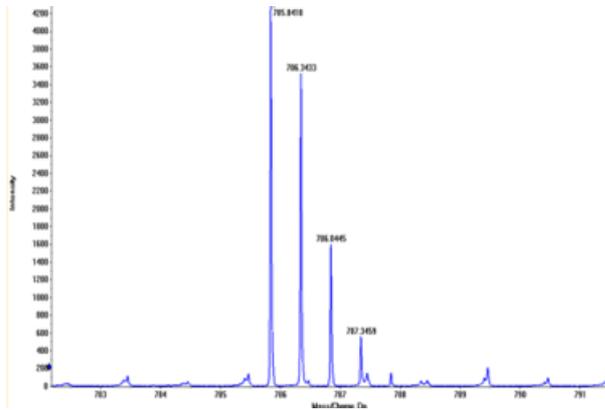
11. スプレーヘッドを移動してシグナル強度を最適化した場合、必要に応じて照明器のポジションを調整します。

12. 新規メソッドを保存します。
-

ヒント！ NanoSpray[®] イオン源テストに使用するメソッドを「NanoSpray Installation <date>」という名前の異なるフォルダで保存します。

13. メソッドを少なくとも20分間実行します。スプレー噴射安定性をモニターします。スプレー噴射が安定した状態の場合、TICにゆらぎが最小限しか見られません。
14. スプレー噴射が最適化され安定している状態の場合、**Acquire** をクリックして、30秒間のスキャンデータを測定します。
15. 左下ペインの**TIC of +TOF MS** ウィンドウで、30秒間ハイライトしてから、平均化されたスペクトルをダブルクリックして表示します。
16. 一番下のペインに表示される平均化されたスペクトルを右クリックして、**List Data** をクリックします。セントロイド強度と分解能を記録します。
17. セントロイド強度と分解能が許容範囲であるかを確認します。 [図 5-2](#) および [データログ: NanoSpray[®] イオン源](#) を参照してください。
-

図 5-2 サンプルスペクトラ: グルコースフィブリノペプチド B の TOF MS スキャン、TripleTOF 5600 システム



結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

18. 結果を一部印刷して、データログにセントロイド強度と分解能を記録します。

[グルコース¹]-フィブリノペプチド B の基準表を更新します。

1. Analyst[®] TF ソフトウェアを **Tune and Calibrate** モードにして、**Tools > Settings > Tuning Options**. をクリックします。
2. **Calibration** タブで **Reference** をクリックします。
3. **Reference Table Editor** の **Name** フィールドで **Glu-fibrinopeptide B**. を選択します。
4. **Reference Ions for TOF MS Calibration** の表 (左側) で、[図 5-3](#) に表示される質量を追加します。[グルコース¹]-フィブリノペプチド B の質量リストについては、[\[グルコース¹\]-フィブリノペプチド B の質量](#)を参照してください。

図 5-3 基準表エディタ: TOF MS キャリブレーション基準表

Reference Table Editor

Name: Glu-fibrinopeptide B New Copy Delete Positive Negative Calibration Valve Position: A

Reference Ions for TOF MS Calibration:

	Use	Compound Name	Precursor m/z (Da)	Use for MS/MS	CE for MS/MS	DP for MS/MS	Retention Time (min)
1	<input checked="" type="checkbox"/>	y4	480.25650	<input type="checkbox"/>	45,000	100,000	0.00
2	<input checked="" type="checkbox"/>	y6	684.34640	<input type="checkbox"/>	45,000	100,000	0.00
3	<input checked="" type="checkbox"/>	Glu-fibrinopeptide	785.84210	<input checked="" type="checkbox"/>	45,000	100,000	0.00
4	<input checked="" type="checkbox"/>	y7	813.38900	<input type="checkbox"/>	45,000	100,000	0.00
5	<input checked="" type="checkbox"/>	y8	942.43160	<input type="checkbox"/>	45,000	100,000	0.00
6	<input checked="" type="checkbox"/>	y9	1056.47450	<input type="checkbox"/>	45,000	100,000	0.00
7	<input checked="" type="checkbox"/>	y10	1171.50140	<input type="checkbox"/>	45,000	100,000	0.00
8	<input checked="" type="checkbox"/>	y11	1285.54440	<input type="checkbox"/>	45,000	100,000	0.00
9	<input type="checkbox"/>			<input type="checkbox"/>			
10	<input type="checkbox"/>			<input type="checkbox"/>			
11	<input type="checkbox"/>			<input type="checkbox"/>			
12	<input type="checkbox"/>			<input type="checkbox"/>			
13	<input type="checkbox"/>			<input type="checkbox"/>			
14	<input type="checkbox"/>			<input type="checkbox"/>			

Reference Ions for MS/MS Calibration:
(Product of 785.84210 Da)

	Use	Fragment Name	Fragment m/z (Da)
1	<input checked="" type="checkbox"/>	y1	175.11900
2	<input checked="" type="checkbox"/>	y3	333.18810
3	<input checked="" type="checkbox"/>	y4	480.25650
4	<input checked="" type="checkbox"/>	y6	684.34640
5	<input checked="" type="checkbox"/>	Parent	785.84210
6	<input checked="" type="checkbox"/>	y8	942.43160
7	<input checked="" type="checkbox"/>	y10	1171.50140
8	<input checked="" type="checkbox"/>	y11	1285.54440
9	<input type="checkbox"/>		
10	<input type="checkbox"/>		
11	<input type="checkbox"/>		
12	<input type="checkbox"/>		
13	<input type="checkbox"/>		
14	<input type="checkbox"/>		

Retention time is only used for non-CDS configuration. Retention Time Tolerance: +/- 0.000 sec

OK Cancel Help

5. OKをクリックします。
6. Tuning OptionsダイアログのOKをクリックします。

TOF MS モードでのキャリブレーション

1. Manual Tune モードで、パラメータがNanoSpray® イオン源を使用した TOF MS テストの実施で指定した値に設定されているかを確認します。表 5-2を参照してください。
2. Compound タブで Collision Energy (CE) を 35 V に設定します。
3. スプレー噴射が安定している状態の場合、Acquire をクリックして、30 秒間のスキャンデータを測定します。
4. TIC of +TOF MS ウィンドウ (左下) で、30 秒間の TIC シグナルをハイライトして平均化してから、ダブルクリックします。
5. 表示される新規ウィンドウ (Analyst® TF ソフトウェアウィンドウ下部) 内で右クリックして、Re-Calibrate TOF をクリックします。
6. TOF Calibration ダイアログの Reference Table リストで Glu-fibrinopeptide B を選択します。
7. 適正実験用質量が注入スペクトルで同定され、基準表の理論質量と一致しているかを確認します。
8. Average Error ボタンの右に表示される Calculate New Calibrations 値を確認します。
9. Calculate New Calibrations をクリックして、Average Error 値を 2 ppm 未満に減らします。

10. **Calibration Values** で **Calibrate Spectrum** をクリックします。
11. **Save Current Calibration** で **Set as Instrument Default** と **Overwrite Current File** を選択します。
12. **Entire File** をクリックします。
13. **Close** をクリックします。

プロダクトイオンモードによるテストおよびキャリブレーション (高感度) (5600/5600+ および 6600/6600+ システムのみ)

プロダクトイオンモード (高感度) テスト (5600/5600+ および 6600/6600+ システムのみ) の実施

1. Analyst[®] TFソフトウェアを**Tune and Calibrate**モードにして、**Manual Tune**をダブルクリックします。
2. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 5-3 プロダクトイオンメソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan type	プロダクトイオン
Product of	785.8
Accumulation time (sec)	1.0
Polarity	ポジティブ
TOF masses (Da)	100~1800
High sensitivity	オン
Duration (min)	0.5
Advanced MS パラメータ	
MCA	オフ
Auto Adjust with mass	オン
Q1 Transmission windows	デフォルト (自動調整有り)
Pulsar Frequency	デフォルト (自動調整有り)
Time Bins to Sum	4
Settling time	デフォルト

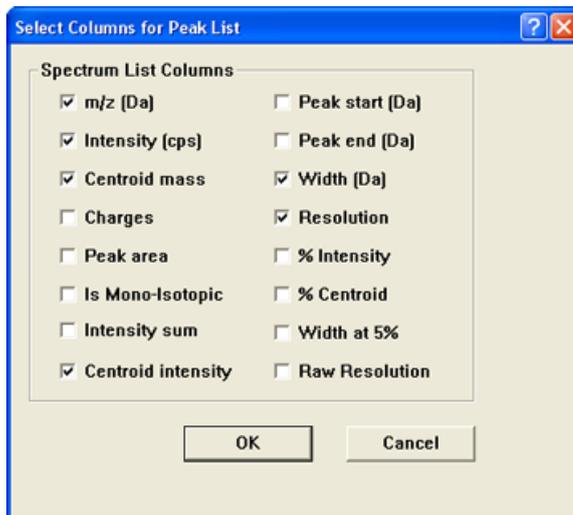
表 5-3 プロダクトイオンメソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Pause between mass	デフォルト
Source/Gas パラメータ	
Ion Source Gas 1 (GS1)	最適化されたとおり
Curtain Gas TM flow (CUR)	最適化されたとおり
Interface Heater Temperature (IHT) (°C)	75
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	最適化されたとおり
Compound パラメータ	
Collision Energy (CE) (V)	45 (または最適化されたとおり)
Resolution パラメータ	
Q1 resolution	単位

注：CEは通常、40 V～48 Vで最適化します。CEがこの範囲内がない場合、CADガス値が低すぎる値に設定されている可能性があります。M/z 785.9でのプレカーサーイオン強度が元の強度の10%以下の場合、CEとCADガスの相互作用が適切ではありません。詳細については、SCIEXテクニカルサポートにお問い合わせください。

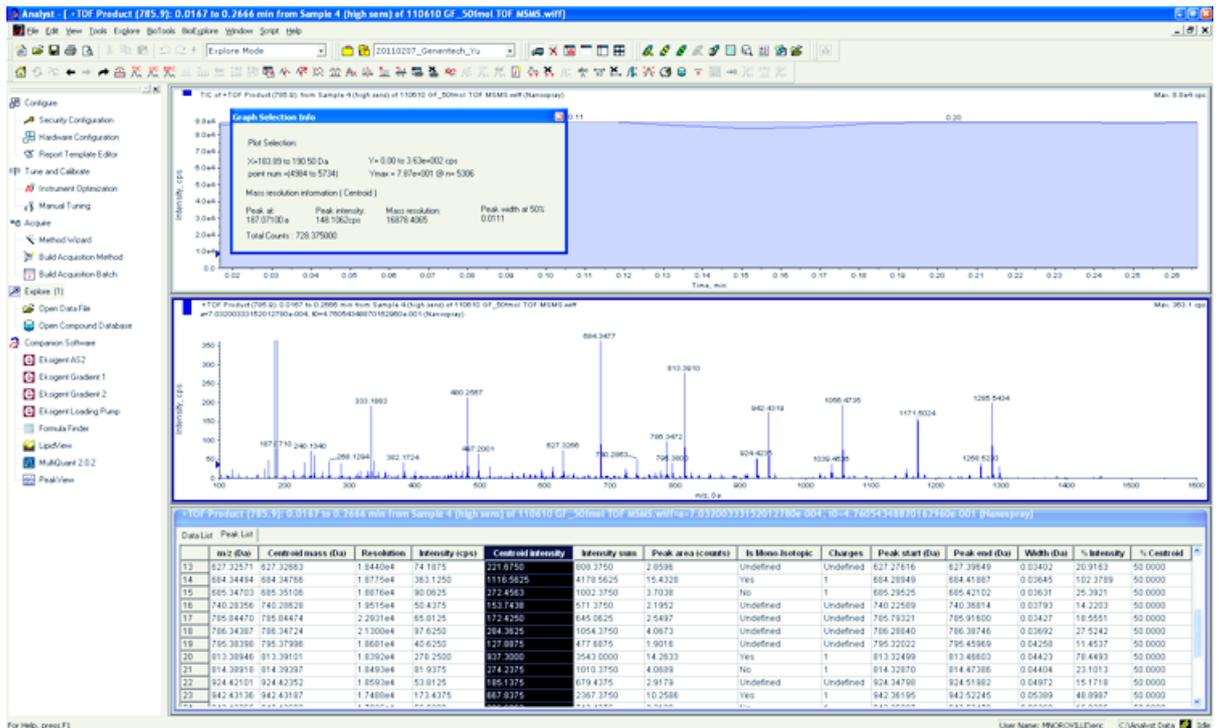
- 新規メソッドを保存します。
- スプレー噴射が安定している状態の場合、**Acquire** をクリックして、少なくとも 30 秒間のスキャンデータを測定します。
- 左下ペインの **TIC of +TOF Product** ウィンドウで、30 秒間ハイライトしてから、平均化されたスペクトルをダブルクリックして表示します。
- 一番下のペインに表示される平均化されたスペクトルを右クリックして、**List Data** をクリックします。
- Peak List** タブをクリックします。
- カラムヘッダの列を右クリックして、**Column Options** をクリックします。

図 5-4 Peak List ダイアログボックスのカラムを選択します。



9. **m/z (Da)**、**Intensity**、**Centroid mass**、**Centroid intensity**、**Width (Da)**、**Resolution** の各チェックボックスを選択します。
10. **OK**をクリックします。
11. セントロイド強度と分解能が許容範囲であるかを確認します。 [図 5-5](#) および [データログ: NanoSpray[®] イオン源](#)を参照してください。

図 5-5 サンプルスペクトラ: プロダクトイオン高感度テスト



結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

12. 結果を1部印刷して、データログにセントロイド強度と分解能を記録します。

プロダクトイオンモードでのキャリブレーション (高感度)

1. **Manual Tune** モードで、パラメータが**プロダクトイオンモード (高感度) テスト (5600/5600+ および 6600/6600+ システムのみ)** の実施で指定した値に設定されているかを確認します。[表 5-3](#)を参照してください。
2. スプレー噴射が安定している状態の場合、**Acquire** をクリックして、少なくとも 30 秒間のスキャンデータを測定します。
3. **TIC of +TOF Product** ウィンドウ (左下) で、30 秒間の TIC シグナルをハイライトして平均化してから、ダブルクリックします。
4. 表示される新規ウィンドウ (Analyst® TF ウィンドウ下部) 内で右クリックして、**Re-Calibrate TOF** をクリックします。
5. **TOF Calibration** ダイアログの **Reference Table** リストで **Glu-fibrinopeptide B** を選択します。
6. 適正実験用質量が注入スペクトルで同定され、基準表の理論質量と一致しているかを確認します。
7. **Average Error** ボタンの右に表示される **Calculate New Calibrations** 値を選択します。

8. **Calculate New Calibrations** をクリックして、**Average Error** 値を 2 ppm 未満に減らします。
9. **Calibration Values** で **Calibrate Spectrum** をクリックします。
10. **Save Current Calibration** で **Set as Instrument Default** と **Overwrite Current File** を選択します。
11. **Entire File** をクリックします。
12. **Close** をクリックします。

プロダクトイオンモードによるテストおよびキャリブレーション

SCIEX TripleTOF[®]

プロダクトイオンテストの実施

1. Analyst[®] TFソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune** をダブルクリックします。
2. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 5-4 プロダクトイオンメソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan type	プロダクトイオン
Product of	785.8
Accumulation time (sec)	1.0
Polarity	ポジティブ
TOF masses (Da)	100~1800
High resolution (5600/5600+ および 6600/6600+ システムのみ)	オン
Duration (min)	0.5
Advanced MS パラメータ	
MCA	オフ
Auto Adjust with mass	オン
Q1 Transmission windows	デフォルト (自動調整有り)

表 5-4 プロダクトイオンメソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Pulsar Frequency	デフォルト (自動調整有り)
Time Bins to Sum	4
Settling time	デフォルト
Pause between mass	デフォルト
Source/Gas パラメータ	
Ion Source Gas 1 (GS1)	最適化されたとおり
Curtain Gas TM flow (CUR)	最適化されたとおり
Interface Heater Temperature (IHT) (°C)	75
IonSpray Voltage Floating (ISVF)	最適化されたとおり
Compound パラメータ	
Collision Energy (CE) (V)	45 (または最適化されたとおり)
Resolution パラメータ	
Q1 resolution	単位

注：CEは通常、40 V～48 Vで最適化します。CEがこの範囲内がない場合、CADガス値が低すぎる値に設定されている可能性があります。M/z 785.9でのプレカーサーイオン強度が元の強度の10%以下の場合、CEとCADガスの相互作用が適切ではありません。詳細については、SCIEXテクニカルサポートにお問い合わせください。

- 新規メソッドを保存します。
- スプレー噴射が安定している状態の場合、**Acquire** をクリックして、少なくとも 30 秒間のスキャンデータを測定します。
- 左下ペインの **TIC of +TOF Product** ウィンドウで、30 秒間ハイライトしてから、平均化されたスペクトルをダブルクリックして表示します。
- 一番下のペインに表示される平均化されたスペクトルを右クリックして、**List Data** をクリックします。
- Peak List** タブをクリックします。
- セントロイド強度と分解能が許容範囲であるかを確認します。図 5-6 および [データログ: NanoSpray[®] イオン源](#) を参照してください。

図 5-6 サンプルスペクトラ: プロダクトイオンテスト、TripleTOF 5600 システム



結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

9. 結果を1部印刷して、データログにセントロイド強度と分解能を記録します。

プロダクトイオンモードでのキャリブレーション

SCIEX TripleTOF[®]

1. **Manual Tune** モードで、パラメータが**プロダクトイオンテストの実施**で指定した値に設定されているかを確認します。表 5-4を参照してください。
2. スプレー噴射が安定している状態の場合、**Acquire** をクリックして、少なくとも 30 秒間のスキャンデータを測定します。
3. **TIC of +TOF Product** ウィンドウ (左下) で、30 秒間の TIC シグナルをハイライトして平均化してから、ダブルクリックします。
4. 表示される新規ウィンドウ (Analyst[®] TF ウィンドウ下部) 内で右クリックして、**Re-Calibrate TOF** をクリックします。
5. **TOF Calibration** ダイアログの **Reference Table** リストで **Glu-fibrinopeptide B** を選択します。
6. 適正実験用質量が注入スペクトルで同定され、基準表の理論質量と一致しているかを確認します。
7. **Calculate New Calibrations** ボタンの右に表示される **Average Error** 値を確認します。

8. **Calculate New Calibrations** をクリックして、**Average Error** 値を 2 ppm 以下に減らします。
9. **Calibration Values** で **Calibrate Spectrum** をクリックします。
10. **Save Current Calibration** で **Entire File** をクリックします。
11. **Close** をクリックします。

仕上げ

注：SCIEXフィールドサービスエンジニア（FSE）は設置後、NanoSpray[®]受け入れ試験実施の結果をservicedata@sciex.comへEメールで報告する義務があります。

1. 先端と注入ラインをくまなくフラッシュします。
2. 完成したデータログとテスト結果を一部コピーして、顧客に原本を提出します。

トリプル四重極システムおよび QTRAP[®] システムでのイオン源のテスト



警告！ 高温面の危険。高圧レールやエミッターの先端に触れないでください。



警告！ 感電の危険性。NanoSpray[®]イオン源の操作は、照明器、カメラ、停止、カバーが適切に取り付けられていない場合は絶対に行わないでください。カーテンプレートには絶対に触れないでください。また、カーテンプレートにエミッターの先端が接触しないようにしてください。質量分析装置が使用可能で、イオン源がインストールされている場合は、X-Y-Z位置決めユニットをインターフェースから離れた場所に移動させても、カーテンプレートは高電圧になっています。

必要なタスクの概要は、[図 5-1](#)を参照してください。

Triple Quad[™]システムの場合、3200 シリーズシステムを除き、以下のタスクを実行します。

- ・ [\[グルコース¹\]フィブリノペプチドB希釈液の準備](#)
- ・ [Q1 モードによるテスト](#)
- ・ [Q3 モードでのテスト](#)

QTRAP[®] システムの場合、3200 QTRAP[®] システムを除き、以下のタスクを実行します。

- ・ [\[グルコース¹\]フィブリノペプチドB希釈液の準備](#)
- ・ [Q1 モードによるテスト](#)

- ・ Q3 モードでのテスト
- ・ EPI モードでのテストとキャリブレーション (QTRAP[®] または QTRAP[®] を有効にした Triple Quad 5500+ システムのみ)

API 3200[™] システムと 3200 QTRAP[®] システムについては、3200 シリーズシステムのイオン源テストを参照してください。

必要な物

- ・ [グルコース¹]-フィブリノペプチド B、LC/MS ペプチドキャリブレーションキット (PN 4465867) 同梱
- ・ 標準希釈液
- ・ 100 µL シリンジ (内径 1.46 mm) または NanoSpray[®] イオン源を用いたそれ相当注入量
- ・ (オプション) 1 µL シリンジ (内径 4.61 mm) または Turbo V[™] イオン源を用いたそれ相当注入量
- ・ パウダーフリーグローブ (ニトリルまたはネオプレンが推奨されます)
- ・ 安全メガネ
- ・ 白衣

Q1 モードによるテスト

(オプション) Turbo V[™] イオン源による Q1 テストの実施

この手順で、希釈溶液の完全性を確認します。

注：[Glu¹]-フィブリノペプチド B 溶液をシリンジに充填する前に、洗浄溶液でシリンジを3回洗浄します。次に、シリンジを適切なチューブに接続して、もう一度洗浄してから高圧レールの継手部に接続します。[グルコース¹]-フィブリノペプチド B 溶液でチューブをフラッシュします。

1. Turbo V[™] イオン源を質量分析装置に取り付けます。Turbo V[™] イオン源オペレータガイドを参照してください。
2. 1 µL シリンジを使用して、[グルコース¹]-フィブリノペプチド B 溶液を流量 5 µL/分で注入します。
3. Analyst[®] ソフトウェアの、Tune and Calibrate モードで、Manual Tune をダブルクリックします。
4. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 5-5 Turbo VTM イオン源による Q1 テストパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan type	Q1 スキャン
Mass mode (6500 および 6500+ シリーズのシステム)	低質量
Polarity	ポジティブ
Display masses (Da)	中央: 785.9 幅: 20
Scan Speed (Da/sec)	10
MCA	オン
Cycles	10
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas TM flow (CUR)	20
IonSpray Voltage (IS)	5500
Ion Source Gas 1 (GS1)	20
Interface Heater (IHT)	未使用
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100
Syringe Pump Method パラメータ	
Flow rate (μL/min)	5
Syringe Size	1 mL (内径 4.61 mm)

5. メソッドを保存します。

ヒント！ NanoSpray[®] イオン源テストに使用するメソッドを「NanoSpray Installation <date>」という名前の異なるフォルダで保存します。

6. **Acquire** をクリックして 30 秒間のデータを測定します。
7. m/z 785.8421 時のピーク強度を記録します。
8. ステップ 6 と 7 をあと 2 回繰り返します。
9. 3 つのスキャン結果を平均化します。

10. セントロイド強度と分解能をNanoSpray[®]イオン源仕様と比較します。データログ: NanoSpray[®]イオン源

ガイドライン: TurboVイオン源で得たセントロイド強度と分解能は、NanoSpray[®]イオン源に規定された仕様を満たさなければなりません。そうではない場合、新規希釈溶液を用意してください。

NanoSpray[®] イオン源での Q1 テストの実施

注：[Glu¹]-フィブリノペプチドB溶液をシリンジに充填する前に、洗浄溶液でシリンジを3回洗浄します。次に、シリンジを適切なチューブに接続して、もう一度洗浄してから高圧レールの継手部に接続します。[グルコース¹]-フィブリノペプチドB溶液でチューブをフラッシュします。

1. NanoSpray[®] イオン源を質量分析装置にインストールします。NanoSpray[®]イオン源オペレータガイドを参照してください。
2. NanoSpray[®] IIIヘッドを組み立てて取り付けるために必要なパーツを示します。NanoSpray[®]イオン源オペレータガイドを参照してください。
3. 100 µL シリンジを使用して、[グルコース¹]-フィブリノペプチドB溶液を流量 0.5 µL/分で注入します。
4. Analyst[®] ソフトウェアの、Tune and Calibrate モードで、Manual Tune をダブルクリックします。
5. オプションの手順を実施した場合(オプション) TurboV[™] イオン源による Q1 テストの実施、作成したメソッドを開けて、(オプション) TurboV[™] イオン源による Q1 テストの実施で指定したパラメータを設定します。表 5-5を参照してください。この手順を実施しなかった場合、このパラメータで新規メソッドを作成します。

表 5-6 NanoSpray[®] イオン源を用いたメソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan type	Q1 スキャン
Mass mode (6500 および 6500+ シリーズのシステム)	低質量
Polarity	ポジティブ
Mass Range	400~1000
Scan Speed (Da/sec) (4500、5500/5500+、および 6500/6500+ シリーズシステム)	2000

表 5-6 NanoSpray[®] イオン源を用いたメソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Scan Time (sec) (4000 シリーズシステム)	3
MCA	オフ
Cycles	注: 分析された特定の装置に固定されている場合のSサイクル数。上記のパラメータを参照してください。 500 (4000 シリーズシステム) 50 (4500、5500/5500+、および 6500/6500+ シリーズシステム)
Source/Gas パラメータ	
CAD Gas	低 (4000 シリーズシステム) 中 (または最適化されたとおり) (4500, 5500/5500 および6500/6500+ シリーズシステム)
IonSpray Voltage (IS)	2100
Ion Source Gas 1 (GS1)	10
Interface Heater Temperature (IHT) (°C)	75
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	70 (4000 シリーズシステム) 100 (4500、5500/5500 および 6500/6500+ シリーズシステム)
Syringe Pump Method パラメータ	
Flow rate (μL/min)	0.5
Syringe Size (μL)	100 Gastight (1.46 mm)

6. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。

注意：システムに損傷を与える恐れ。エミッタチップがカーテンプレートに触れないようにしてください。Z 軸微調整ノブを使用して、スプレーポジションを調整しエミッタチップを損傷から守ります。

注意：システム汚染の可能性。エミッタチップ終端部をカーテンプレートアパチャに挿入しないでください。エミッタチップが少なくとも 2 mm ~ 5 mm アパチャから離れた外側にあるかを確認します。アパチャに近すぎる位置でスプレー噴射すると、質量分析装置の汚染の原因となる恐れがあります。

7. カーテンプレートアパチャに対してスプレーヘッドのポジションを調整して、シグナル強度を最適化します。今後の使用のために、XYZ 値を記録します。
8. 100 V 単位で IS を調整して、最適なシグナルとシグナル対ノイズ比を確保します。

注：IonSprayTM電圧が高すぎると、コロナ放電が発生する可能性があります。これはプローブチップで青く光るため、目視確認できます。コロナ放電によって、シグナルの感度と安定性が下がります。

9. シグナルが下がり始めるまで GS1 を増やし、シグナルが最大値に達するまで GS1 を減らします。

注：GS1パラメータはゼロで最適化することがあります。

10. シグナルが下がり始めるまで CUR を増やし、シグナルが最大値に達するまで CUR を減らします。

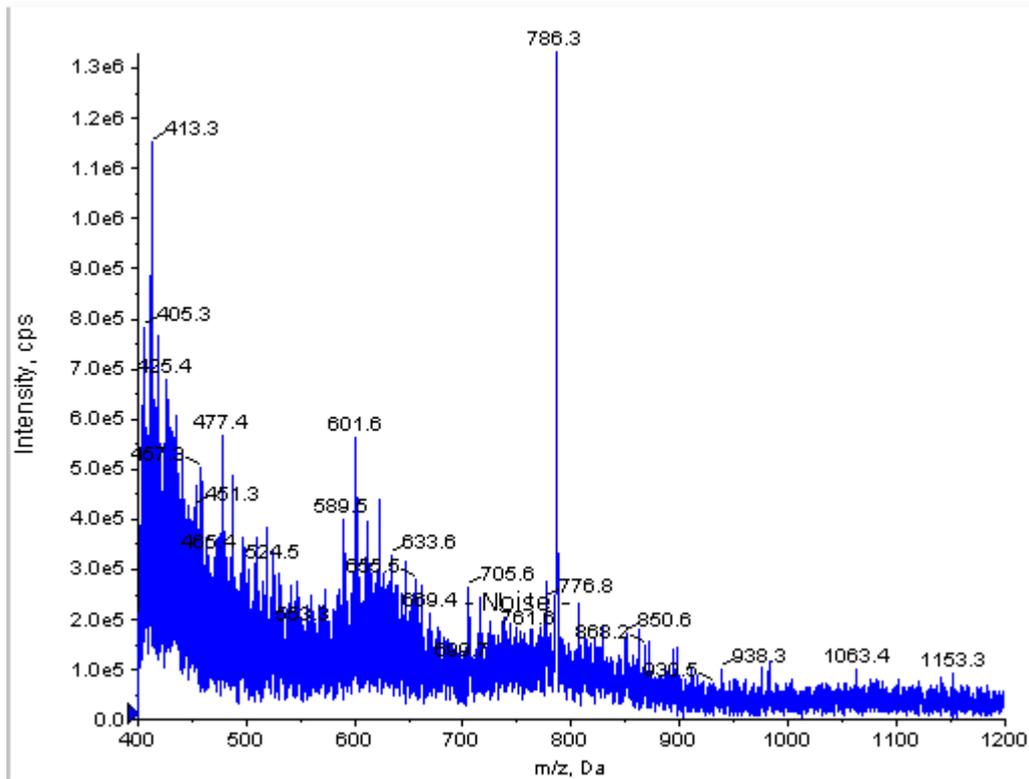
注：汚染を防ぐために、感度を損なわずに可能な限り CUR 最高値を使用します。CUR を 20 以下に設定しないでください。これによって、ノイズの多いシグナルを生成する可能性のある Curtain GasTM 流量の浸透を防ぎ、アパチャを汚染から守り、全体のシグナル対ノイズ比を向上させます。

11. スプレーヘッドを移動してシグナル強度を最適化した場合、必要に応じて照明器のポジションを調整します。
12. 新規メソッドを保存します。

ヒント！ NanoSpray[®] イオン源テストに使用するメソッドを「NanoSpray Installation <date>」という名前の異なるフォルダで保存します。

13. スプレー噴射を 5 分間モニターして安定性を確認します。スプレー噴射が安定した状態の場合、TIC にゆらぎが最小限しか見られません。

図 5-7 100 (4500、5500、6500 および 6500QTRAP® システム



14. スプレー噴射が安定したら、スキャン速度を 10 に変更します。
15. **Center/Width** を選択し、**Center** カラムに**785.9** を、**Width** カラムに**20** をそれぞれ入力します。
16. **MCA** を起動します。
17. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
18. m/z 785.9 時のピーク強度を記録します。
19. ステップ 17 と 18 をあと 2 回繰り返します。
20. 3 つの強度を平均化します。
21. 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: NanoSpray® イオン源](#) を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#) を参照してください。

22. 結果を 1 部印刷して、データログに強度を記録します。

Q3 モードでのテスト

注：[Glu¹]-フィブリノペプチドB溶液をシリンジに充填する前に、洗浄溶液でシリンジを3回洗浄します。次に、シリンジを適切なチューブに接続して、もう一度洗浄してから高圧レールの継手部に接続します。[グルコース¹]-フィブリノペプチドB溶液でチューブをフラッシュします。

1. Analyst[®] ソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune** をダブルクリックします。
2. Q1 テストに使用したメソッドを開きます。
3. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

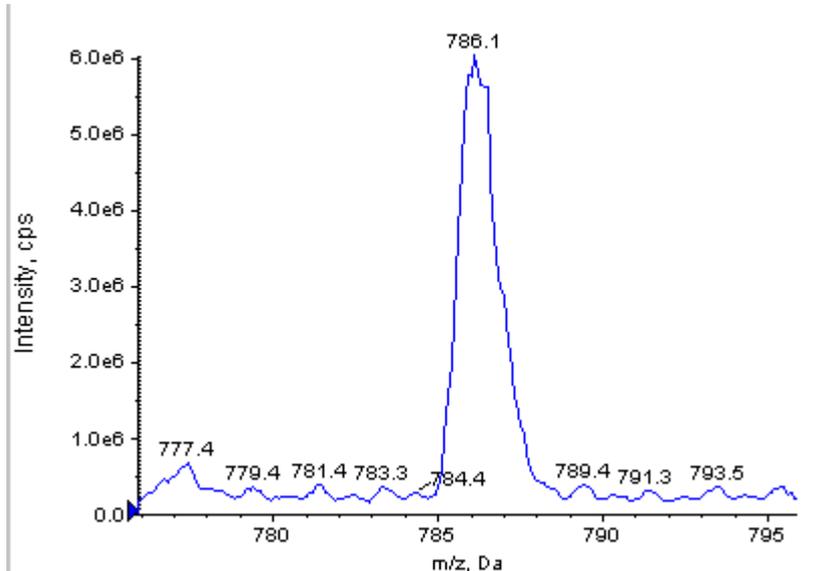
表 5-7 Q3 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan type	Q3 スキャン
Mass mode (6500/6500+ シリーズのシステム)	低質量
Display masses (Da)	中央: 785.9 幅: 20
Scan Speed (Da/sec)	10
MCA	オフ
Cycles	10
Compound パラメータ	
Collision Cell Exit Potential (CXP) (V)	15 (または最適化されたとおり) (4000 シリーズのシステム) 30 (または最適化されたとおり) (4500、5500/5500+、および 6500/6500+ シリーズシステム)

4. 新規メソッドを保存します。
5. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。
6. スプレー噴射が安定したら、MCA を起動します。
7. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
8. m/z 785.9 時のピーク強度を記録します。

9. ステップ7と8をあと2回繰り返します。

図 5-8 サンプルスペクトラ: QTRAP[®] 5500 システム



10. 結果を印刷します。

11. イオンの3つの強度を平均化して、データログに結果を記録します。

12. 平均強度が許容範囲であるか確認します。 [データログ: NanoSpray[®] イオン源](#)を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

EPI モードでのテストとキャリブレーション (QTRAP[®] または QTRAP[®] を有効にした Triple Quad 5500+ システムのみ)

EPI モードテストの実施

1. 100 μ L シリンジを使用して、[グルコース1]-フィブリノペプチド B 溶液を流量 0.5 μ L/分で注入します。
2. Analyst[®] ソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune** をダブルクリックします。
3. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 5-8 EPI メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan type	EPI スキャン
Mass mode (6500/6500+ シリーズのシステム)	低質量
Polarity	ポジティブ
Mass Range (Da)	100~1500 (4000 シリーズシステム) 100~1000 (4500、5500/5500+、および 6500/ 6500+ シリーズシステム)
Scan speed (Da/sec)	4000 (4000 シリーズシステム) 10000 (4500、5500/5500+、および 6500/6500+ シリーズシステム)
Precursors of	785.9
MCA	オン
Scans to sum	1
Cycles	10 (4000 シリーズシステム) 50 (4500、5500/5500+、および 6500/6500+ シ リーズシステム)
Advanced MS パラメータ	
Fixed LIT Fill Time (ms)	50 (4000 シリーズシステム) 10 (4500、5500/5500+、および 6500/6500+ シ リーズシステム)
Compound パラメータ	
Collision Energy (CE) (V)	45 (または最適化されたとおり)
Declustering Potential (DP)	70 (または最適化されたとおり)
Syringe Pump Method パラメータ	
Flow rate (μ L/min)	0.5
Syringe Size (μ L)	100 Gastight (1.46 mm)

注：CEは通常、40 V～48 Vで最適化します。CEがこの範囲内がない場合、CADガス値が低すぎる値に設定されている可能性があります。M/z 785.9でのプレカーサーイオン強度が元の強度の10%以下の場合、CEとCADガスの相互作用が適切ではありません。詳細については、SCIEXテクニカルサポートにお問い合わせください。

4. **Start** をクリックしてメソッドを実行します。
5. CE を最適化して、*m/z* 480.3、813.4、942.4、および 1171.7 時のフラグメント強度を最大化します。
6. 新規メソッドを保存します。
7. スプレー噴射が安定している状態の場合、**Acquire** をクリックして、データを測定します。
8. *m/z* 480.3、813.4、942.4、および 1171.7 時のフラグメント強度を記録します。
9. ステップ 7 と 8 をあと 2 回繰り返します。
10. 結果を印刷します。
11. イオンの 3 つの強度を平均化して、データログに結果を記録します。
12. 平均強度が許容範囲であるかを確認します。 [データログ: NanoSpray[®] イオン源](#) を参照してください。

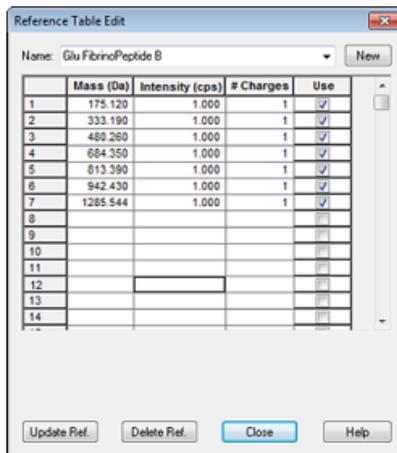
結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

キャリブレーション基準表の作成

データスペクトルをもとに質量分析装置をキャリブレーションする前に、使用するキャリブレーションの基準表を定義する必要があります。[グルコース¹]-フィブリノペプチドBの基準表が存在しない場合、次のステップに従って作成します。

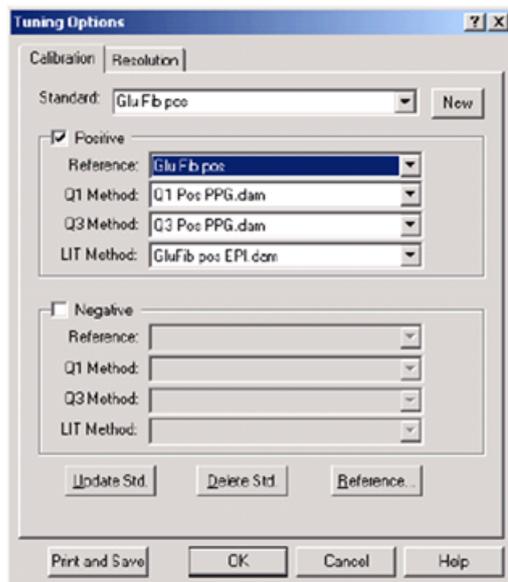
1. **Tools > Settings > Tuning Options.** をクリックします。
2. **Reference** をクリックします。

図 5-9 基準表エディタ



3. 前の図に示すエントリーを用いて、[グルコース1]-フィブリノペプチド B の基準表を作成します。 **Low Mass** と **High Mass** フィールドに、質量フラグメントの最小値および最大値を必ず入力してください。
4. **Update Ref** をクリックします。
5. **Close** をクリックします。
6. **New** をクリックします。

図 5-10 Tuning Options ダイアログボックス



7. **Standard** フィールドに **GluFib pos** と入力します。
8. **Positive** チェックボックスを選択します。

9. **Q1 Method** フィールドで、Q1 のキャリブレーションに使用するメソッドを選択します。
10. **Q3 Method** フィールドで、Q3 のキャリブレーションに使用するメソッドを選択します。
11. **LIT Method** フィールドで、**EPI モードテストの実施**で作成したメソッドを選択します。
12. **Update Std** をクリックします。
13. **OK** をクリックします。

EPI モードでのキャリブレーション

1. **Manual Tune** モードで、パラメータが**EPI モードテストの実施**で指定した値に設定されているかを確認します。表 5-8 を参照してください。
2. スプレー噴射が安定している状態の場合、**Acquire** をクリックして、少なくとも 30 秒間のスキャンデータを測定します。
3. EPI スペクトルペインをクリックします。
4. **Calibrate** ボタンをクリックします (↑)。

図 5-11 4000 シリーズシステムの LIT Mass Calibration ダイアログボックス

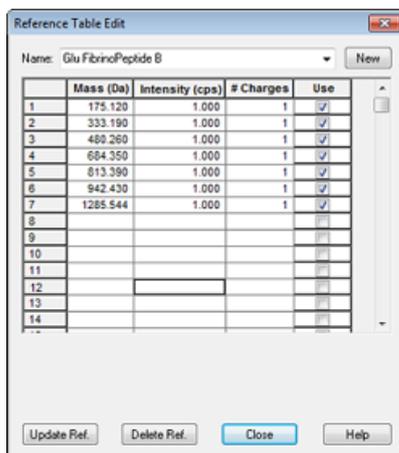
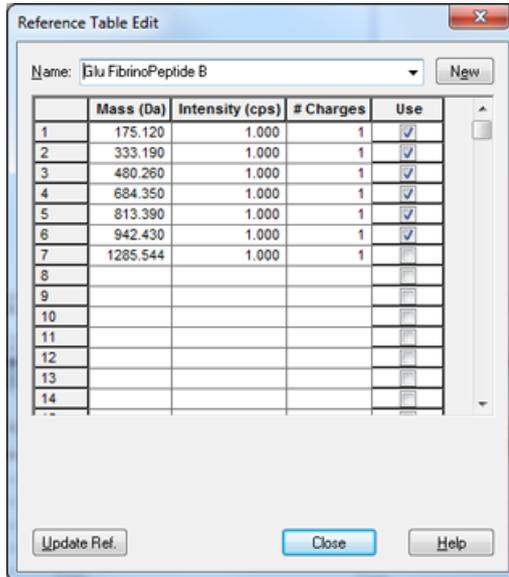


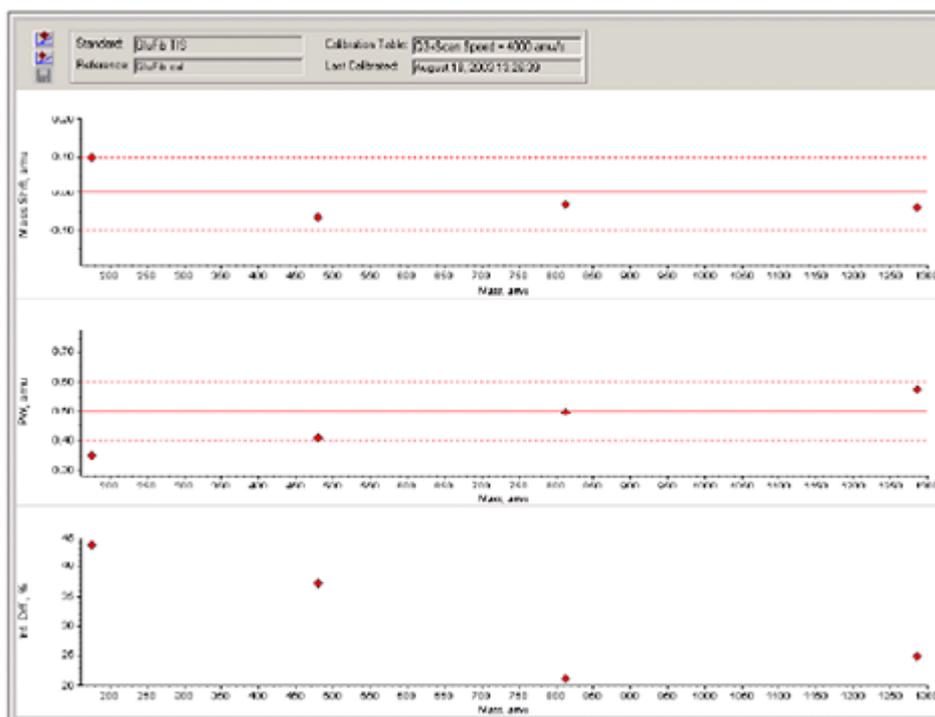
図 5-12 4500、5500、5500+、6500、および 6500+ シリーズシステムの LIT 質量校正ダイアログボックス



5. **Standard** フィールドで、ステップ7 **キャリブレーション基準表の作成 (GluFib pos)** で作成した標準を選択します。
6. **Start** をクリックします。

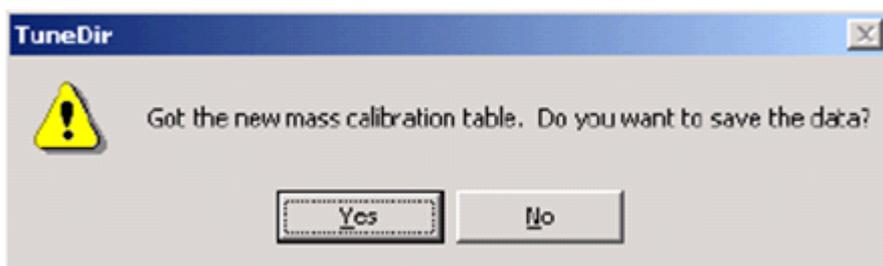
Mass Calibration Report ペインが表示されます。一番上のグラフに、最後のキャリブレーション以降のキャリブレーション用イオンの質量ソフトが表示されます。

図 5-13 質量校正レポート



7. データスペクトラに問題なしと判断し、質量シフトが指定した範囲内であれば、**Replace Calibration** () をクリックします。

図 5-14 TuneDir ダイアログボックス



8. **Yes** をクリックします。

新規キャリブレーション値がキャリブレーション概要レポートの一番下に表示されます。

注：フラグメントイオンのうち、質量や強度が劇的に変化するものが1つでもあれば、この変化がイオンのキャリブレーション前に起きたことかどうかを判断します。**No** を **TuneDir** ダイアログでクリックして、キャリブレーション概要レポートを確認します。**Found Mass** カラムで質量を探し出し、ローデータスペクトルのイオンの品質を観察します。正しくないイオンを選択した場合、**Search Range** ダイアログボックスのLIT Mass Calibrationを広げたり狭めたりします。ソフトウェアは、キャリブレーション検索範囲の最強ピークのセントロイドを使用します。

図 5-15 LIT 質量校正結果レポート

```

LIT Mass Calibration Results for Positive Ions at 4000 daltons per second
Generated On:      August 18, 2003 13:27:59
Last Calibration: August 18, 2003 13:26:39

Peak Search Parameters:
Search Range:      0.250
Threshold:         200.000
Peak Width At:    50.000

Config. table ver.: 03
Firmware ver.:    M401400 B4T0301 M311400 B1T0306
Instrument name:   Linear Ion Trap Quadrupole LC/MS/MS Mass Spectrometer
Instrument ID:     QTrap
Manufacturer:     AB Sciex Instruments
Serial number:    #1395304
Model Number:     027170c
Operator name:    setlinec
Workstation:      B10P904

Acq Method:       testTune.daa

Data Filename:    D:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Tuning Cache\NT20030818132659.viff
Standard name:    GluFib TIS
Reference table name: GluFib cal
Spectral information:

Expected Mass   Found Mass   Mass Shift   Peak Width   PW Shift   Intensity Change(%)
175.119         175.020      -0.099       0.350        0.350      43.65
480.257         480.323      -0.066       0.408        0.292      37.08
813.389         813.420      -0.031       0.496        0.204      21.18
1285.544        1285.584     -0.040       0.576        0.124      24.76
  
```

```

The Slope Variations for Active Calibration Table
Average Slope (DAG/amu): 37.326
  
```

Mass	DAG	Slope Variation	Slope
480.257	17908	n/a	n/a
813.389	30344	1.000	37.331
1285.544	47966	1.000	37.322

9. メソッドのスキャン速度を変更して残り2つのスキャン速度をキャリブレーションし、この手順を繰り返します。

仕上げ

注：SCIEXフィールドサービスエンジニア（FSE）は設置後、NanoSpray®受け入れ試験実施の結果をservicedata@sciex.comへEメールで報告する義務があります。

1. 先端と注入ラインをくまなくフラッシュします。
2. 完成したデータログとテスト結果を一部コピーして、顧客に原本を提出します。

3200 シリーズシステムのイオン源テスト



警告！ 高温面の危険。高圧レールやエミッターの先端に触れないでください。



警告！ 感電の危険性。NanoSpray[®] イオン源の操作は、照明器、カメラ、停止、カバーが適切に取り付けられていない場合は絶対に行わないでください。カーテンプレートには絶対に触れないでください。また、カーテンプレートにエミッターの先端が接触しないようにしてください。質量分析装置が使用可能で、イオン源がインストールされている場合は、X-Y-Z位置決めユニットをインターフェースから離れた場所に移動させても、カーテンプレートは高電圧になっています。

API 3200™

- ・ [Q1 および MS2 モードによるテスト](#)

3200 QTRAP[®] システムの場合、以下のタスクを実行します。

- ・ [Q1 および MS2 モードによるテスト](#)
- ・ [EPI モードでのテスト \(3200 QTRAP[®] システムのみ\)](#)

注： NanoSpray[®] イオン源は、どの 3200 シリーズ装置でもサポートされていません。詳細については、営業担当者にお問い合わせください。

必要な物

- ・ レニン 10 pmol/μL、MS 化学キット2 高濃度 PPGs キット (PN 5512399) に同梱
- ・ 希釈溶媒
- ・ 100 μL シリンジ (内径 1.46 mm) または相当注入量
- ・ パウダーフリーグローブ (ニトリルまたはネオプレンが推奨されます)
- ・ 安全メガネ
- ・ 白衣

レニン混合物 (濃度 500 fmol/μL) 2 mL の用意

1. 希釈溶媒 (キットに同梱) 2 ml を測定してバイアルに入れます。

2. 溶媒 100 μ L を除去し処分します。
3. 濃度 10 pmol/ μ L のレニン 100 μ L をバイアルに追加します。
4. 混ぜます。

Q1 および MS2 モードによるテスト

1. NanoSpray イオン源を質量分析装置にインストールします。『NanoSpray[®] イオン源オペレータガイド』を参照してください。
2. NanoSprayIII ヘッドを用意します。NanoSpray[®] イオン源オペレータガイド』を参照してください。
3. レニン混合物を流量 0.5 μ L/分で注入します。

注意：システム汚染の可能性。エミッタチップ終端部をカーテンプレートアパチャに挿入しないでください。エミッタチップが少なくとも 2 mm ~ 5 mm アパチャから離れた外側にあるかを確認します。アパチャに近すぎる位置でスプレー噴射すると、質量分析装置の汚染の原因となる恐れがあります。

4. スプレー噴射が安定するまで GS1 を調整します。ゼロ幅ノイズスパイクなしの状態ですプレー噴射が安定するまで、低い値 (2 または 3) から始めて、徐々に値を増やします。スプレー噴射が安定するまで数分かかることがあります。
5. Analyst[®] ソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune** をダブルクリックします。
6. 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 5-9 Q1 メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS Method パラメータ	
Scan type	Q1 MS (Q1)
Mass range	100~1200
Advanced MS パラメータ	
Step size (Da)	0.1
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas TM flow (CUR)	20
IonSpray Voltage (IS)	2100
Ion Source Gas 1 (GSI)	3

表 5-9 Q1 メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Interface Heater Temperature (IHT) (°C)	75
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	70 (または最適化されたとおり)

7. メソッドを実行します。

注意：システムに損傷を与える恐れ。エミッタチップがカーテンプレートに触れないようにしてください。Z 軸微調整ノブを使用して、スプレーポジションを調整しエミッタチップを損傷から守ります。

注意：システム汚染の可能性。エミッタチップ終端部をカーテンプレートアパチャに挿入しないでください。エミッタチップが少なくとも 2 mm ~ 5 mm アパチャから離れた外側にあるかを確認します。アパチャに近すぎる位置でスプレー噴射すると、質量分析装置の汚染の原因となる恐れがあります。

- カーテンプレートアパチャに対してスプレーヘッドのポジションを調整して、シグナル強度を最適化します。今後の使用のために、XYZ 値を記録します。
- 最適なシグナルとシグナル対ノイズ比を得るまで、100 V 単位で IS を調整します。

注：IonSprayTM電圧が高すぎると、コロナ放電が発生する可能性があります。これはプローブチップで青く光るため、目視確認できません。コロナ放電によって、シグナルの感度と安定性が下がります。

- シグナルが下がり始めるまで GS2 を増やし、シグナルが最大値に達するまで GS1 を減らします。

注：GS1パラメータはゼロで最適化することがあります。

- シグナルが下がり始めるまで CUR を増やし、シグナルが最大値に達するまで CUR を減らします。

注：汚染を防ぐために、感度を損なわずに可能な限り CUR最高値を使用します。CURを20以下に設定しないでください。これによって、ノイズの多いシグナルを生成する可能性のあるCurtain GasTM流量の浸透を防ぎ、アパチャを汚染から守り、全体のシグナル対ノイズ比を向上させます。

- 結果を一部印刷して、最適化された Q1 測定メソッドを保存します。

13. スキャンタイプを **Product Ion (MS2)** に設定し、**Product Of** を **587** に設定にします。
14. **CAD** を **Medium (6)** に設定します。
15. **CE** を調整して、フラグメントイオンの強度を *m/z* 136 および 784 で最適化します。
16. 結果を一部印刷して、最適化されたプロダクトイオンメソッドを保存します。
17. MS2 モードの強度が [データログ: NanoSpray[®] イオン源](#) の仕様を満たしているかを確認します。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

18. データログに結果を記録します。

EPI モードでのテスト (3200 QTRAP[®] システムのみ)

1. レニン混合物を流量 0.5 µL/分で注入します。

注意：システム汚染の可能性。エミッタチップ終端部をカーテンプレートアパチャに挿入しないでください。エミッタチップが少なくとも **2 mm ~ 5 mm** アパチャから離れた外側にあるかを確認します。アパチャに近すぎる位置でスプレー噴射すると、質量分析装置の汚染の原因となる恐れがあります。

2. Analyst[®] ソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune** をダブルクリックします。
3. ステップ12で保存した最適化された Q1 メソッドを開きます **Q1 および MS2 モードによるテスト**。
4. 次の表に示すとおりメソッドパラメータを設定します。

表 5-10 EPI メソッドパラメータ

パラメータ	値
MS パラメータ	
Scan type	EPI
Mass range (Da)	100~1200
Product Of (Da)	587.4
Duration (sec)	120
Advanced MS パラメータ	
Fixed LIT fill time (msec)	20
Q0 trapping	オフ

表 5-10 EPI メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Q3 entry barrier	8
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas TM flow (CUR)	最適化されたとおり
Collision Gas (CAD)	高
IonSpray Voltage (IS)	最適化されたとおり
Temperature (TEM) (°C)	150
Ion Source Gas 1 (GS1)	最適化されたとおり
Ion Source Gas 2 (GS2)	0
Interface Heater Temperature (IHT)	オン
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	80
Collision Energy (CE) (V)	45 (または最適化されたとおり)
Collision Energy Spread (CES)	0
Resolution パラメータ	
Q1 resolution	低

- メソッドを実行します。
- CE を調整して、ピーク強度を 136、647、784、および 1028 で最適化します。
- 結果を一部印刷して、最適化された EPI メソッドを保存します。
- 強度が [データログ: NanoSpray[®] イオン源](#) の仕様を満たしているかを確認します。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

- 結果を印刷したものを確認して、データログに強度を記録します。

仕上げ

注：SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) は設置後、NanoSpray[®] 受け入れ試験実施の結果を servicedata@sciex.com へ Eメールで報告する義務があります。

- 先端と注入ラインをくまなくフラッシュします。
- 完成したデータログとテスト結果を一部コピーして、顧客に原本を提出します。

次の条件のいずれかでテストを実行します。

- ・ 新しいイオン源をインストールした場合。
- ・ イオン源の大規模メンテナンス後。
- ・ プロジェクトの開始前や標準動作手順の一部としてイオン源の性能の評価が必要なとき。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。イオン源で使用する有害物質や障害性物質の適正使用、汚染、排気に関する知識や訓練を受けている場合に限り、イオン源を使用します。



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



警告！ 有害化学物質の危険性があります。白衣、手袋、保護メガネなどの身体保護具を着用して、皮膚や目を危険物質にさらさないようにします。



警告！ イオン化放射線障害の危険性、生物学的危険、および有害化学物質の危険性。化学物質の流出が発生した場合、特定の指示に関して製品安全性データシートを確認します。イオン源付近にこぼれたものを掃除する前に、システムが**Standby**モードであることを確認してください。適切な個人用防護具と吸着布を使用して、流出を食い止め、現地規制に従い処分してください。

必要な物

- ・ MSグレードメタノール
- ・ HPLCグレード脱イオン水
- ・ 移動相溶媒: アセトニトリル: 水 (70:30) 溶液
- ・ ドーパント: 100~150 µL/分で注入されるトルエン (HPLC グレード) ドーパントは、個別の HPLC ポンプで注入しなければなりません。
- ・ SCIEX 標準化学物質キット (PN 4406127) 同梱の事前希釈 0.0167 pmol/µL レセルピン溶液。
- ・ HPLCポンプ (移動相用)
- ・ ドーパント注入用 HPLC ポンプ。
- ・ 5 µL ループ付マニュアルインジェクタ (8125 レオダインまたは相当) または 5 µL 注入仕様のオートサンプラー
- ・ 外径 (o.d.) 1/16-インチ、内径 (i.d.) 0.005-インチのPEEK チューブ
- ・ 250 µL ~ 1000 µL のシリンジ
- ・ パウダーフリーグローブ (ニトリルまたはネオプレンが推奨されます)
- ・ 安全メガネ
- ・ 白衣

注：すべてのテスト溶液は冷蔵保存しておかなければなりません。冷蔵庫から48時間以上外放置された場合、処分して新しい溶液を使用します。

注意：誤った結果をもたらす可能性。有効期限切れの溶液を使用しないでください。

テストの準備



警告！感電の危険性。操作中、イオン源に印加された高電圧に触れないようにします。サンプルチューブやイオン源付近の他の装置を調整する前に、システムを**Standby**モードにします。

- ・ 新しいイオン源をインストールした場合、質量分析装置が既存のイオン源を使用したときの仕様で動作していることを確認します。
- ・ イオン源を質量分析装置にインストールします。
- ・ イオン源が完全に最適化されているかを確認します。イオン源については、『オペレータガイド』を参照してください。

- 化学溶液または溶媒を取り扱う前に確認が必要な注意事項は、適用する安全性データシートをすべて参照してください。

注：使用するポンプに関係なく、ドーパント流路にはかなりの背圧がかかっています。

イオン源テスト



警告！高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、イオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面が熱くなります。

注意：システムに損傷を与える恐れ。イオン源が適正温度に達したことを確認するまで、他の溶媒流量を導入しないでください。

注意：システムに損傷を与える恐れ。**Curtain GasTM**流量にできる限り高値を使用します。

注：最適なイオン移動電圧は、UVランプの高さに左右されます。設定した1つのUVランプの高さに、最適なイオン移動電圧は1つしかありません。同様に、特定のイオン移動電圧に最適なUVランプの高さは1つしかありません。ユーザーがUVランプの高さを変更する場合、高さの新設定値ごとにイオン移動電圧を最適化して、UVランプの高さとイオン移動電圧の最適な設定値を割り出します。

- Analyst[®]ソフトウェアの **Tune and Calibrate** モードで、**Manual Tune**をダブルクリックします。
- 前回最適化したメソッドを開くか、以下の表に示すメソッドパラメータを設定します。

表 6-1 メソッドパラメータ

パラメータ	値
Probe パラメータ	
Sample concentration	10 pg/μL
Mobile phase	70:30 ACN:H ₂ O
Flow rate (μL/min)	500
Flow rate (μL/min)	25 (ループの過充填)
Sample loop (μL)	5
Ionization mode	ポジティブ

表 6-1 メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	値
Probe vertical micrometer setting	2
Probe horizontal micrometer setting	5
UV Lamp vertical micrometer setting	5
Dopant	流量 100 μ L/分 ~ 150 μ L/分
MS パラメータ	
Scan mode	MRM
Q1 mass (Da)	609.3 (または計算精密質量)
Q3 mass (Da)	195.1 (または計算精密質量)
Source/Gas パラメータ	
Curtain Gas TM (CUR)	30 (または最適化されたとおり)
Collision Gas (CAD)	中
Ion Transfer Voltage (IS)	800 (または最適化されたとおり)
Temperature (TEM)	400 (または最適化されたとおり)
Ion Source Gas 1 (GS1)	60 (または最適化されたとおり)
Ion Source Gas 2 (GS2)	20 (または最適化されたとおり)
Compound パラメータ	
Declustering Potential (DP)	100 (または最適化されたとおり)
Collision Energy (CE)	45 (または最適化されたとおり)
Collision Exit Potential (CXP)	最適化されたとおり
Resolution パラメータ	
Resolution	単位/単位
装置検証時に取得した開始値がこの表の値と異なる場合があります。	

3. **Acquire** をクリックしてデータ収集を開始します。
4. アセトニトリル: 水 (70:30) 溶液をサンプルインレットから流量 500 μ L/分で導入します。
5. ドーパントをドーパントインレットから流量 75 μ L/分で導入します。
6. テスト溶液でサンプルループを満たします。
7. 多重反応モニタリング (MRM) 609/195 遷移をモニタリングしている間に、レセルピンテスト溶液 10 μ g/ μ L を注入します。

8. 化合物固有パラメータを最適化します。
9. プローブと UV ランプのポジションを最適化します。
10. イオン源パラメータを最適化します。
11. 結果を印刷します。
12. 結果を印刷したものを確認します。
13. 5 回の注入の平均強度が許容範囲か確認します。 [データログ: PhotoSpray[®] イオン源](#)を参照してください。

結果が許容範囲ではない場合、[トラブルシューティングのヒント](#)を参照してください。

トラブルシューティングのヒント

7

兆候	考えられる原因	対策
シグナルなし	<ol style="list-style-type: none"> 1. 噴霧されていません。 2. (NanoSpray[®] イオン源) イオン源のヘッドポジションが正しくありません。 	<ol style="list-style-type: none"> 1. 『イオン源オペレータガイド』を参照して、スプレー噴射問題を解決してください。 2. X-Y-Z 調整ノブを使用して、エミッタチップポジションを調整します。
予想外に幅のある LC ピークまたは後部	(NanoSpray [®] イオン源) 継手部にデッドボリュームがあります。	<ul style="list-style-type: none"> ・ すべてのポストカラムチューブに 25 ミクロン以下または相当の内部直径があることを確認します。 ・ すべての接続を点検して、適切に固定されているか点検します。 ・ すべての切断部をフラッシュします。 ・ エミッタチップを交換します。
低ピーク強度	<ol style="list-style-type: none"> 1. イオン源ポジション、チップ突出部、またはイオン源パラメータ値が正しくありません。 2. シリンジまたはサンプル通路に漏れがあります。 3. Q1 または Q3 がキャリブレーションされていません。 4. サンプルが劣化、またはサンプル濃度が低いです。 5. LC システムに問題があります。 	<ol style="list-style-type: none"> 1. イオン源を最適化します。 2. 漏れがないかどうかを点検します。 3. 装置最適化ウィザードを使用して、Q1 または Q3 をキャリブレーションします。 4. サンプル濃度を点検します。新規サンプルまたは凍結サンプルを使用します。 5. LC システムの問題を解決します。
貧弱な分解能	装置が最適化されていません。	装置を最適化してください。

兆候	考えられる原因	対策
貧弱な感度	<ol style="list-style-type: none"> 1. インターフェースコンポーネント(フロントエンド)が汚れています。 2. 溶媒蒸気または不明の化合物がアナライザ領域に存在します。 3. サンプルが正しく用意されなかったか、サンプルが劣化しています。 4. サンプルインレットに漏れがあります。 5. イオン源が故障しています。 	<ol style="list-style-type: none"> 1. インターフェースコンポーネントをクリーニングして、イオン源を再インストールします。 2. Curtain Gas™ 流量を最適化します。 3. サンプルが適切に用意されたことを確認します。 4. 継手が絞められているかを確認して、漏れが継続する場合は継手を交換します。継手を締め付けすぎないでください。 5. 代替イオン源をインストールして最適化します。それでも問題が解消されない場合は、FSE に連絡します。
低シグナル	<ol style="list-style-type: none"> 1. デクラスタリング電位(DP)が最適化されていません。 2. エレクトロードが汚れているか、塞がれています。 	<ol style="list-style-type: none"> 1. デクラスタリングを最適化して、最適なシグナルまたはシグナル対ノイズ比を達成します。最適値は、他のイオン源を使用した場合と異なることがあります。 2. エレクトロードをクリーニングします。
低いシグナル対ノイズ比	<ol style="list-style-type: none"> 1. イオン源ポジション、チップ突出部、またはイオン源パラメータ値が正しくありません。 2. シリンジまたはサンプル通路に漏れがあります。 3. 希釈剤が汚染されている。 	<ol style="list-style-type: none"> 1. イオン源を最適化します。 2. 漏れがないかどうかを点検します。 3. MS グレード試薬 (0.1% ギ酸、10% アセトニトリル)で作成した新しい希釈剤を使用します。

トラブルシューティングのヒント

兆候	考えられる原因	対策
高いバックグラウンドノイズ	<ol style="list-style-type: none"> 1. 希釈剤が汚染されています。 2. シリンジまたはサンプル通路が汚れています。 3. インターフェースに残留物があります。 4. 温度 (TEM) が高すぎます。 5. ヒーターガス流量 (GS2) が多すぎます。 6. イオン源が汚染されています。 	<ol style="list-style-type: none"> 1. MS グレード試薬 (0.1% ギ酸、10% アセトニトリル) で作成した新しい希釈剤を使用します。 2. シリンジまたはサンプル通路をクリーニングまたは交換します。 3. カーテンプレートとオリフィスプレートをクリーニングします (質量分析装置は、『有資格保守要員ガイド』を参照)。必要に応じて、インターフェースを焼付します。それでも問題が解消されない場合は、Q0 または QJet[®] イオンガイドをクリーニングします。 4. 温度を最適化します。 5. ヒーターガス流量を最適化します。 6. イオン源コンポーネントをクリーニングするか交換してから、イオン源とフロントエンドを以下のように調整します。 <ol style="list-style-type: none"> a. APCI プローブまたは TIS プローブをアパチャから最も離れた位置に移動します (垂直または水平に)。 b. ポンプ流量 1 mL/分でメタノール : 水 (50:50) を注入します。 c. Analyst[®]/Analyst[®] TF ソフトウェアで、TEM を 650 に、GS1 を 60 に、および GS2 を 60 に設定します。 d. Curtain Gas 流量を 45 または 50 に設定します。 e. 少なくとも 2 時間ないしできれば一晩中実行して、最良の結果を得るようにします。 7. エミッタチップ位置を調整します。

兆候	考えられる原因	対策
テスト時に、イオン源が仕様を満たさない	質量分析装置がインストールテストに合格していません。	デフォルトイオン源で質量分析装置のインストールテストを実施します。
目標温度に達していないか、または温度が高すぎるか不安定です	インターフェースヒーターが故障しています。	Mass Spectrometer Detailed Status ダイアログボックスを開きます。 Source Temperature フィールドに設定温度が入力されていて、 Interface Heater Status が Ready の状態である必要があります。 そうではない場合、インターフェースヒーターを交換します有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) に連絡してください。

データログ: IonDrive™ Turbo V イオン源

A

システム情報

表 A-1 質量分析装置の情報

質量分析装置のシリアル番号	
---------------	--

イオン源情報

コンポーネント	シリアル番号
イオン源	
TurboIonSpray® プローブ	
APCIプローブ	

IonDrive Turbo V イオン源テスト結果

注: IonDrive™ Turbo V イオン源は、装置の 6500 および 6500+ シリーズ、および と 6600/6600+ システムのみでサポートされています。

プローブ	強度 (cps)	強度 (cps)	結果 (cps)
	6500	6500+	
TurbolonSpray® プローブ	1.25×10^6	1.9×10^6	
APCIプローブ	5.0×10^5	7.5×10^5	

サインオフ

組織	
FSE名	日付 (年-月-日)
FSE署名	

コメントおよび例外

データログ: Turbo V™ イオン源

B

システム情報

表 B-1 質量分析装置の情報

質量分析装置のシリアル番号	
---------------	--

イオン源情報

コンポーネント	シリアル番号
イオン源	
TurboIonSpray® プローブ	
APCIプローブ	

Turbo V イオン源テスト結果

注：仕様は、TripleTOF® 4600 システムに対応していません。このシステムの推奨イオン源は、DuoSpray™ イオン源です。

注：6500および6500+シリーズシステムのテストは低質量モードで実行されます。

強度 (cps)								結果
3200	3500	4000	4500	5000 および 5500/5500+	5600/5600+ お よび 6600/ 6600+	6500	6500+	
TurbolonSpray® プローブ								
1.0×10^4	2.0×10^4	1.0×10^5	2.0×10^5	5.0×10^5	1.0×10^4	1.0×10^6	1.5×10^6	
APCI プローブ								
5.0×10^3	1.0×10^4	5.0×10^4	1.0×10^5	2.5×10^5	5.0×10^3	5.0×10^5	7.5×10^5	

サインオフ

組織	
FSE名	日付（年-月-日）
FSE署名	

コメントおよび例外

データログ: DuoSpray™ イオン源

C

システム情報

表 C-1 質量分析装置の情報

質量分析装置のシリアル番号	
---------------	--

イオン源情報

コンポーネント	シリアル番号
イオン源	
TurboIonSpray® プローブ	
APCIプローブ	

DuoSpray イオン源テスト結果

注：6500および6500+シリーズシステムのテストは低質量モードで実行されます。

強度 (cps)								結果
3200	4000	4500	4600	5000 および 5500/5500+	5600/5600+ およ び 6600/6600+	6500	6500+	
TurbolonSpray® プローブ								
5.0×10^3	5.0×10^4	1.0×10^5	2.0×10^3	2.5×10^5	5.0×10^3	5.0×10^5	7.5×10^5	
APCI プローブ								
2.5×10^3	2.5×10^4	5.0×10^4	1.0×10^3	1.25×10^5	2.5×10^3	2.5×10^5	3.8×10^5	

サインオフ

組織	
FSE名	日付 (年-月-日)
FSE署名	

コメントおよび例外

データログ: OptiFlow™ Turbo V イオン源

D

システム情報

表 D-1 質量分析装置の情報

質量分析装置のシリアル番号	
---------------	--

イオン源情報

コンポーネント	シリアル番号
イオン源	
SteadySpray プローブ	
電極バッチ番号	

OptiFlow Turbo V イオン源テスト結果

注：6500および6500+シリーズシステムのテストは低質量モードで実行されます。

強度 (cps)				結果
5500/5500+	6500	6500+	6600/6600+	
SteadySpray プローブ				
5.0×10^5	1.0×10^6	1.5×10^6	1.0×10^4	

サインオフ

組織	
FSE名	日付 (年-月-日)
FSE署名	

コメントおよび例外

データログ: NanoSpray[®] イオン源

E

システム情報

表 E-1 質量分析装置の情報

質量分析装置のシリアル番号	
---------------	--

イオン源情報

コンポーネント	シリアル番号
イオン源	
TurboIonSpray [®] プローブ	
APCIプローブ	

NanoSpray イオン源テスト結果 (TripleTOF システム)

注: SCIEXフィールドサービスエンジニア (FSE) は設置後、NanoSpray[®] 受け入れ試験実施の結果をservicedata@sciex.comへEメールで報告する義務があります。

表 E-2 TOF MS テスト結果

質量 786	仕様		結果
	4600	5600/5600+ および 6600/6600+	
セントロイド強度 (ピーク高さ、cps)	≥ 1500	≥ 4000	
分解能	≥ 25 000	≥ 30 000	
必要なプリントアウト: 785.8421			

表 E-3 プロダクトイオン高感度テスト結果 (5600/5600+ および 6600/6600 +システムのみ)

質量	セントロイド強度 (cps)		分解能	
	仕様	結果	仕様	結果
187.0713	≥ 60		該当なし	該当なし
480.2565	≥ 212		≥ 15 000	
813.3890	≥ 375		≥ 15 000	

表 E-3 プロダクトイオン高感度テスト結果 (5600/5600+ および 6600/6600 +システムのみ) (続き)

質量	セントロイド強度 (cps)		分解能	
	仕様	結果	仕様	結果
1056.4745	≥ 225		≥ 15 000	
必要なプリントアウト: 187.0713、480.2565、813.3890、および 1056.4745				

表 E-4 プロダクトイオンテスト結果

質量	セントロイド強度 (cps)			分解能		
	4600	5600/5600+ および 6600/6600+	結果	4600	5600/5600+ および 6600/6600+	結果
187.0713	≥ 8	≥ 20		該当なし	該当なし	該当なし
480.2565	≥ 25	≥ 65		≥ 24 000	≥ 25 000	
813.3890	≥ 35	≥ 125		≥ 25 000	≥ 25 000	
1056.4745	≥ 25	≥ 65		≥ 25 000	≥ 25 000	
注 : 5600/5600+ および 6600/6600+ システムの場合、このテストを高分解能モードで実施します。						
必要なプリントアウト: 187.0713、480.2565、813.3890、および 1056.4745						

NanoSpray イオン源テスト結果 (4000、4500、5500、5500+、6500、および 6500+ シリーズシステム)

このセクションの仕様は、NanoSpray® III イオン源用ではありません。SCIEX 質量分析装置用 DPV-450 Digital PicoView® Nanospray イオン源の仕様は、New Objective 社の『インストールマニュアル』を参照してください。

注：SCIEXフィールドサービスエンジニア（FSE）は設置後、NanoSpray® 受け入れ試験実施の結果を servicedata@sciex.com へEメールで報告する義務があります。

表 E-5 Q1 モードテスト結果

質量	強度 (cps)					結果
	4000	4500	5500/5500+	6500	6500+	
786	1.0×10^5	2.5×10^5	5.0×10^5	1.0×10^6	1.5×10^6	

表 E-6 Q3 モードテスト結果

質量	強度 (cps)					結果
	4000	4500	5500/5500+	6500	6500+	
786	1.0×10^5	2.5×10^5	5.0×10^5	1.0×10^6	1.5×10^6	

表 E-7 EPI モードテスト結果 (QTRAP® システムのみ)

質量	強度 (cps)					結果
	4000	4500	5500/5500+	6500	6500+	
	強度 (cps)					
480.3	1.0×10^5	5.0×10^5	1.0×10^6	5.0×10^6	7.5×10^6	
813.4	1.0×10^5	5.0×10^5	1.0×10^6	5.0×10^6	7.5×10^6	
942.4	5.0×10^4	2.5×10^5	5.0×10^5	2.5×10^6	3.8×10^6	
1171.7	4.0×10^4	2.0×10^5	該当なし	該当なし	該当なし	

NanoSpray イオン源テスト結果 (3200 シリーズシステム)

表 E-8 MS2 モードテスト結果

質量	強度 (cps)	結果 (cps)
136.1	$\geq 1.6 \times 10^5$	
784.4	≥ 5000	

表 E-9 EPI モードテスト結果

質量	強度 (cps)	結果 (cps)
136.1	1.0×10^5	
647.3	4.0×10^4	
784.4	8.0×10^4	
1028.5	1.0×10^4	

サインオフ

組織	
FSE名	日付 (年-月-日)
FSE署名	

コメントおよび例外

データログ: PhotoSpray[®] イオン源

F

システム情報

表 F-1 質量分析装置の情報

質量分析装置のシリアル番号	
---------------	--

イオン源情報

コンポーネント	シリアル番号
イオン源	
TurboIonSpray [®] プローブ	
APCIプローブ	

PhotoSpray イオン源テスト結果

注：6500および6500+シリーズシステムのテストは低質量モードで実行されます。

強度 (cps)						
3200	4000	4500	5000 および 5500	6500	6500+	結果
2.5×10^3	5.0×10^4	1.0×10^5	2.5×10^5	5.0×10^5	7.5×10^5	

サインオフ

組織	
FSE名	日付 (年-月-日)
FSE署名	

コメントおよび例外

TripleTOF[®] システムパラメータ

G

次の表に、TripleTOF[®] 4600、5600、5600+、6600、および 6600+ システムの一般的なパラメータを示します。
各スキャン種類の最初の数字はあらかじめ設定された値です。数字の範囲は、各パラメータの許容範囲です。

表 G-1 TripleTOF[®] システムパラメータ

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	TOF MS	MS/MS	Q1	TOF MS	MS/MS
GS1	GS1	20	20	20	20	20	20
		0~90	0~90	0~90	0~90	0~90	0~90
GS2	GS2	15	15	15	15	15	15
		0~90	0~90	0~90	0~90	0~90	0~90
CUR	CUR	25	25	25	25	25	25
		10~55	10~55	10~55	10~55	10~55	10~55

TripleTOF[®] システムパラメータ

表 G-1 TripleTOF[®] システムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	TOF MS	MS/MS	Q1	TOF MS	MS/MS
TEM ^{1,2,3,4,5,15}	TEM	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750
ISVF ^{1,4,15} (ISVF = IS - OR)	IS	5000 0~5500	5000 0~5500	5000 0~5500	-4000 -4500~0	-4000 -4500~0	-4000 -4500~0
ISVF ⁷ (ISVF = IS - OR)	IS	1000 0~4000	1000 0~4000	1000 0~4000	-1000 -4000~0	-1000 -4000~0	-1000 -4000~0
NC ⁵	NC	3 0~5	3 0~5	3 0~5	-3 -5~0	-3 -5~0	-3 -5~0
IHT ⁷	IHT	150 0~225	150 0~225	150 0~225	150 0~225	150 0~225	150 0~225

¹ DuoSpray[™]イオン源

² Turbo V[™]イオン源

³ IonDrive[™] Turbo V イオン源 (該当する場合)

⁴ TurbolonSpray[®] ブローブ

⁵ APCIブローブ

⁶ OptiFlow[™] Turbo V

⁷ NanoSpray[®]イオン源

表 G-1 TripleTOF® システムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	TOF MS	MS/MS	Q1	TOF MS	MS/MS
または (DP = OR - Q0)	DP	80 0~300	100 0~300	80 0~300	-80 -300~0	-80 -300~0	-80 -300~0
Q0	Q0	40 -300~300	該当なし	該当なし	-40 -300~300	該当なし	該当なし
Q0 (CE = Q0 - RO2)	CE	該当なし	10 5~150	30 0~150	該当なし	-10 -150 ~ -5	-30 -150~0
CES	CES	該当なし	該当なし	0 0~50	該当なし	該当なし	0 0~50
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	2 -300~300	2 -300~300	2 -300~300	-2 -300~300	-2 -300~300	-2 -300~300
IQ2	IQ2	0 -300~300	25 -300~300	0 -300~300	0 -300~300	-25 -300~300	0 -300~300
CAD	CAD	6 0~12	6 0~12	6 0~12	6 0~12	6 0~12	6 0~12
RO2	RO2	30 -57~57	30 -57~57	30 -57~57	-30 -57~57	-30 -57~57	-30 -57~57

TripleTOF® システムパラメータ

表 G-1 TripleTOF® システムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	TOF MS	MS/MS	Q1	TOF MS	MS/MS
IRD	IRD	30 6~1000	30 6~1000	30 6~1000	30 6~1000	30 6~1000	30 6~1000
IRW	IRW	15 5~1000	15 5~1000	15 5~1000	15 5~1000	15 5~1000	15 5~1000
LNR	LNR	-15000 -20000~20000	-15000 -20000~20000	-15000 -20000~20000	15000 -20000~20000	15000 -20000~20000	15000 -20000~20000
CEM	CEM	2300 0~3000	2200 0~3000	2200 0~3000	2200 0~3000	2200 0~3000	2200 0~3000
OFS	OFS	30 -100~100	30 -100~100	30 -100~100	-60 -100~100	-60 -100~100	-60 -100~100
MGV	MGV	-975 -2000~2000	-975 -2000~2000	-975 -2000~2000	975 -2000~2000	975 -2000~2000	975 -2000~2000
MPV	MPV	2600 -4000~4000	2600 -4000~4000	2600 -4000~4000	-2600 -4000~4000	-2600 -4000~4000	-2600 -4000~4000

6500 および 6500+ シリーズシステムパラメータ

H

各スキャン種類の最初の数字はあらかじめ設定された値です。数字の範囲は、各パラメータの許容範囲です。

表 H-1 6500 および 6500+ シリーズシステムパラメータ

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20 20~55	20 20~55	20 20~55	20 20~55	20 20~55	20 20~55
CAD ^{8,9}	CAD ^{8,9}	0 該当なし	6 該当なし	中 低、中、高	0 該当なし	6 該当なし	中 低、中、高
CAD ^{10,11}	CAD ^{10,11}	0 該当なし	6 該当なし	9 0~12	0 該当なし	6 該当なし	9 0~12

⁸ QTRAP® 6500 または 6500+ システム、低質量 (LM)

⁹ QTRAP® 6500 または 6500+ システム、高質量 (HM)

¹⁰ SCIEX Triple Quad™ 6500 または 6500+ システム、低質量 (LM)

¹¹ SCIEX Triple Quad™ 6500 または 6500+ システム、高質量 (HM)

6500 および 6500+ シリーズシステムパラメータ

表 H-1 6500 および 6500+ シリーズシステムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
IS ^{12,13,14,15}	IS ^{12,13,14}	5500 0~5500	5500 0~5500	5500 0~5500	-4500 -4500~0	-4500 -4500~0	-4500 -4500~0
IS ¹⁶	IS ¹⁶	1500 0~2500	1500 0~2500	1500 0~2500	-1500 -2500~0	-1500 -2500~0	-1500 -2500~0
IS ¹⁷	IS ¹⁷	1000 0~4000	1000 0~4000	1000 0~4000	-1000 -4000~0	-1000 -4000~0	-1000 -4000~0
NC ^{13,16,19,18}	NC ^{13,16,19,18}	3 0~5	3 0~5	3 0~5	-3 -5~0	-3 -5~0	-3 -5~0

¹²Turbo V™ イオン源

¹³IonDrive™ Turbo V イオン源

¹⁴TurboIonSpray® (TIS) プローブ

¹⁵OptiFlow™ Turbo V

¹⁶PhotoSpray®イオン源

¹⁷NanoSpray®イオン源

¹⁸APCI プローブ

¹⁹DuoSpray™イオン源

表 H-1 6500 および 6500+ シリーズシステムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
TEM ^{12,13,16,19,14,18,15}	TEM ^{12,13,16,19,14,18}	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750
または (DP = OR)	DP	100 0~300	100 0~300	100 0~300	-100 -300~0	-100 -300~0	-100 -300~0
Q0 (EP = -Q0)	EP	10 2~15	10 2~15	10 2~15	-10 -15~-2	-10 -15~-2	-10 -15~-2
IQ1 (IQ1 = Q0 + オフセット)	IQ1	Q0 + (-0.5) -0.1 ~ -2	Q0 + (-0.5) -0.1 ~ -2	Q0 + (-0.5) -0.1 ~ -2	Q0 + 0.5 0.1~2	Q0 + 0.5 0.1~2	Q0 + 0.5 0.1~2
ST (ST = Q0 + オフセット)	ST	Q0 + (-8) -12 ~ -5	Q0 + (-8) -12 ~ -5	Q0 + (-8) -12 ~ -5	Q0 + 8 5~12	Q0 + 8 5~12	Q0 + 8 5~12
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0~3	該当なし	1 0~3	-1 -3 ~ -0	該当なし	-1 -3 ~ -0
IQ2 (IQ2 = Q0 + オフセット)	IQ2	Q0+ (-10) -30 ~ -8	Q0+ (-10) -30 ~ -8	Q0+ (-10) -30 ~ -8	Q0 + 10 8~30	Q0 + 10 8~30	Q0 + 10 8~30
RO2	RO2	-20 該当なし	-20 該当なし	該当なし	20 該当なし	20 該当なし	該当なし

6500 および 6500+ シリーズシステムパラメータ

表 H-1 6500 および 6500+ シリーズシステムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
RO2 (CE = Q0 - RO2)	CE	該当なし	該当なし	30 5~180	該当なし	該当なし	-30 -180 ~ -5
ST3 (ST3 = RO2 + オフセット)	ST3	RO2 - 10 -30 ~ -5	該当なし	該当なし	RO2 + 10 5~30	該当なし	該当なし
ST3 (CXP = RO2 - ST3)	CXP	該当なし	15 0~55	15 0~55	該当なし	-15 -55~0	-15 -55~0
RO3	RO3	-50 該当なし	該当なし	該当なし	50 該当なし	該当なし	該当なし
RO3 (IE3 = RO2 - RO3)	IE3	該当なし	1 0~5	1 0~5	該当なし	-1 -5~0	-1 -5~0
CEM	CEM	1700 0~3300	1700 0~3300	1700 0~3300	1700 0~3300	1700 0~3300	1700 0~3300
GS1	GS1	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90

表 H-1 6500 および 6500+ シリーズシステムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
GS2	GS2	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90
IHT ¹⁷	IHT ¹⁷	150	150	150	150	150	150
sdp ¹⁹	sdp ¹⁹	1 1 または 2					

表 H-2 LIT スキャンタイプ専用の 6500 および 6500+ シリーズシステムパラメータ LIT スキャンシステム専用の

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード	負イオンモード
CAD	CAD	高い 低、中、高	高い 低、中、高
AF2 ²⁰	AF2	0.1 0~1	0.1 0~1
AF3	AF3	質量速度依存 0~10	質量速度依存 0~10

²⁰MS/MS/MSのみ

6500 および 6500+ シリーズシステムパラメータ

表 H-2 LIT スキャンタイプ専用の 6500 および 6500+ シリーズシステムパラメータ LIT スキャンシステム専用の (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード	負イオンモード
EXB	EXB	質量速度依存 -165~0	質量速度依存 0~165
CES	CES	0 0~50	0 0~50
ROS (Q0 - ROS)	CE	10 5~180	-10 -5 ~ -180

5500 および 5500 + シリーズシステムパラメータ

各スキャン種類の最初の数字はあらかじめ設定された値です。数字の範囲は、各パラメータの許容範囲です。

表 I-1 5500 および 5500 + シリーズシステムパラメータ

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20 10~55	20 10~55	20 10~55	20 10~55	20 10~55	20 10~55
CAD	CAD	0 該当なし	6 該当なし	中 (9) 0~12	0 該当なし	5 該当なし	中 (9) 0~12
IS ^{21,22}	IS ^{21,22}	5500 0~5500	5500 0~5500	5500 0~5500	-4500 -4500~0	-4500 -4500~0	-4500 -4500~0

²¹Turbo V™ イオン源

²²TurbolonSpray® プローブ

²³OptiFlow™ Turbo V

5500 および 5500 + シリーズシステムパラメータ

表 I-1 5500 および 5500 + シリーズシステムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
NC ²⁴	NC ²⁴	3 0~5	3 0~5	3 0~5	-3 -5~0	-3 -5~0	-3 -5~0
TEM ^{22,24,15}	TEM ^{22,24}	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750
または (DP = OR)	DP	100 0~300	100 0~300	100 0~300	-100 -300~0	-100 -300~0	-100 -300~0
Q0 (EP = -Q0)	EP	10 2~15	10 2~15	10 2~15	-10 -15~-2	-10 -15~-2	-10 -15~-2
IQ1 (IQ1 = Q0 + オフ セット)	IQ1	Q0 + (-0.5) -0.1 ~ -2	Q0 + (-0.5) -0.1 ~ -2	Q0 + (-0.5) -0.1 ~ -2	Q0 + 0.5 0.1~2	Q0 + 0.5 0.1~2	Q0 + 0.5 0.1~2
ST (ST = Q0 + オフセッ ト)	ST	Q0 + (-8) -12 ~ -5	Q0 + (-8) -12 ~ -5	Q0 + (-8) -12 ~ -5	Q0 + 8 12~5	Q0 + 8 12~5	Q0 + 8 12~5
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0~3	該当なし	1 0~3	-1 -3 ~ -0	該当なし	-1 -3 ~ -0

²⁴APCIプローブ

表 I-1 5500 および 5500 + シリーズシステムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
IQ2 (IQ2 = Q0 + オフ セット)	IQ2	Q0+ (-10) -30 ~ -8	Q0+ (-10) -30 ~ -8	Q0+ (-10) -30 ~ -8	Q0 + 10 8~30	Q0 + 10 8~30	Q0 + 10 8~30
RO2	RO2	-20 該当なし	-20 該当なし	該当なし	20 該当なし	20 該当なし	該当なし
RO2 (CE = Q0 - RO2)	CE	該当なし	該当なし	30 5~180	該当なし	該当なし	-30 -180 ~ -5
ST3 (ST3 = RO2 + オフ セット)	ST3	RO2 - 10 -30 ~ -5	該当なし	該当なし	RO2 + 10 5~30	該当なし	該当なし
ST3 (CXP = RO2 - ST3)	CXP	該当なし	15 0~55	15 0~55	該当なし	-15 -55~0	-15 -55~0
RO3	RO3	-50 該当なし	該当なし	該当なし	50 該当なし	該当なし	該当なし
RO3 (IE3 = RO2 - RO3)	IE3	該当なし	1 0~5	1 0~5	該当なし	-1 -5~0	-1 -5~0

5500 および 5500 + シリーズシステムパラメータ

表 I-1 5500 および 5500 + シリーズシステムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
DF ²⁵	DF	-200 -300~0	-200 -300~0	-200 -300~0	200 0~300	200 0~300	200 0~300
CEM ²⁵	CEM	1800 0~3300	1800 0~3300	1800 0~3300	1800 0~3300	1800 0~3300	1800 0~3300
CEM ²⁶	CEM	1700 0~3300	1700 0~3300	1700 0~3300	1700 0~3300	1700 0~3300	1700 0~3300
GS1	GS1	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90
GS2	GS2	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90
IHT	IHT	150 0~250	150 0~250	150 0~250	150 0~250	150 0~250	150 0~250
sdp ²⁷	sdp	1 1 または 2					

²⁵5500 シリーズシステムのみ

²⁶5500+ シリーズシステムのみ

²⁷DuoSpray™ イオン源 (1=TurbolonSpray プローブおよび 2=APCI プローブ)

表 I-2 LIT スキャンタイプ専用 QTRAP® 5500 および QTRAP® Enabled Triple Quad 5500+ システムパラメータ

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード	負イオンモード
CAD	CAD	高い 低-高	高い 低-高
AF2 ²⁸	AF2	0.100 0または1	0.100 0または1
AF3	AF3	質量速度依存 0~10	質量速度依存 0~10
EXB	EXB	質量速度依存 -165~0	質量速度依存 0~165
CES	CES	0 0~50	0 0~50
ROS (Q0 - ROS)	CE	10 5~180	-10 -5 ~ -180

²⁸MS/MS/MSのみ

API 5000™ システムパラメータ

各スキャン種類の最初の数字はあらかじめ設定された値です。数字の範囲は、各パラメータの許容範囲です。

表 J-1 API 5000™ システムパラメータ

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	10 10~50	10 10~50	10 10~50	10 10~50	10 10~50	10 10~50
CAD	CAD	0 該当なし	1 0~12	4 0~10	0 該当なし	1 0~12	4 0~12
IS ^{29,30}	IS ^{29,30}	5500 0~5500	5500 0~5500	5500 0~5500	-4500 -4500~0	-4500 -4500~0	-4500 -4500~0
NC ³¹	NC ³¹	3 0~5	3 0~5	3 0~5	-3 -5~0	-3 -5~0	-3 -5~0

²⁹Turbo V™ イオン源

³⁰TurbolonSpray® プローブ

³¹APCIプローブ

表 J-1 API 5000™ システムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
TEM ^{30,31}	TEM ^{30,31}	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750
または (DP = OR)	DP	120 0~400	120 0~400	120 0~400	-100 -400~0	-100 -400~0	-100 -400~0
Q0 (EP = -Q0)	EP	10 15~-2	10 15~-2	10 15~-2	-10 -15~-2	-10 -15~-2	-10 -15~-2
IQ1 (IQ1 = Q0 + オフ セット)	IQ1	Q0 + (-1) -0.5 ~ -2	Q0 + (-1) -0.5 ~ -2	Q0 + (-1) -0.5 ~ -2	Q0 + 1 0.5~2	Q0 + 1 0.5~2	Q0 + 1 0.5~2
ST (ST = Q0 + オフセッ ト)	ST	Q0 + (-7) -12 ~ -5	Q0 + (-7) -12 ~ -5	Q0 + (-7) -12 ~ -5	Q0 + 7 12~5	Q0 + 7 12~5	Q0 + 7 12~5
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0.5~2	該当なし	1 0.5~2	-1 -2 ~ -0.5	該当なし	-1 -2 ~ -0.5
RO1 (IE1 = Q0 + オフ セット)	RO1	該当なし	Q0+ (-2) -0.5 ~ -2	該当なし	該当なし	Q0 + 2 0.5~2	該当なし

API 5000™ システムパラメータ

表 J-1 API 5000™ システムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
IQ2 (IQ2 = Q0 + オフ セット)	IQ2	Q0+ (-20) -100 ~ -8	Q0+ (-20) 該当なし	Q0+ (-20) 該当なし	Q0 + 20 100 ~ 8	Q0 + 20 該当なし	Q0 + 20 該当なし
RO2	RO2	-100 -200~200	-20 -145 ~ -2	該当なし	100 -200~200	20 2~145	該当なし
RO2 (CE = Q0 - RO2)	CE	該当なし	該当なし	30 5~130	該当なし	該当なし	-30 -130 ~ -5
ST3	ST3	-120 -200~200	該当なし	該当なし	該当なし	該当なし	該当なし
ST3 (CXP = RO2 - ST3)	CXP	該当なし	20 0~55	15 0~55	該当なし	-20 -55~0	-15 -55~0
RO3	RO3	-150 -200~200	該当なし	該当なし	100 -200~200	該当なし	該当なし
RO3 (IE3 = RO2 - RO3)	IE3	該当なし	2 -0.5 ~5	2 -0.5 ~5	該当なし	-1.5 -5~0	-1.5 -5~0

表 J-1 API 5000™ システムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
DF	DF	-200 -400~0	-200 -400~0	-200 -400~0	200 0~400	200 0~400	200 0~400
CEM	CEM	2000 500~3297	2000 500~3297	2000 500~3297	2000 500~3297	2000 500~3297	2000 500~3297
GS1	GS1	20 0~90	20 0~90	20 0~90	15 0~90	15 0~90	20 0~90
GS2	GS2	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90
ihe ³²	ihe	1 0または1	1 0または1	1 0または1	1 0または1	1 0または1	1 0または1
IHT	IHT	40 0~250	40 0~250	40 0~250	40 0~250	40 0~250	40 0~250
svp ³³	svp	1 1または2	1 1または2	1 1または2	1 1または2	1 1または2	1 1または2

³²1=オン および 0=オフ

³³DuoSpray™ イオン源 (1=TurbolonSpray® および 2=APCI ブローブ)

4500 シリーズシステムパラメータ

各スキャン種類の最初の数字はあらかじめ設定された値です。数字の範囲は、各パラメータの許容範囲です。

表 K-1 4500 シリーズ装置パラメータ

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20 10~55	20 10~55	20 10~55	20 10~55	20 10~55	20 10~55
CAD	CAD	0 該当なし	6 該当なし	中 (9) 0~12	0 該当なし	6 該当なし	中 (9) 0~12
IS ^{34,35}	IS ^{34,35}	5500 0~5500	5500 0~5500	5500 0~5500	-4500 -4500~0	-4500 -4500~0	-4500 -4500~0
NC ³⁶	NC ³⁶	3 0~5	3 0~5	3 0~5	-3 -5~0	-3 -5~0	-3 -5~0

³⁴Turbo V™ イオン源

³⁵TurbolonSpray® プローブ

³⁶APCIプローブ

表 K-1 4500 シリーズ装置パラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
TEM ^{35,36}	TEM ^{35,36}	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750
または (DP = OR)	DP	100 0~300	100 0~300	100 0~300	-100 -300~0	-100 -300~0	-100 -300~0
Q0 (EP = -Q0)	EP	10 2~15	10 2~15	10 2~15	-10 -15~-2	-10 -15~-2	-10 -15~-2
IQ1 (IQ1 = Q0 + オフセット)	IQ1	Q0 + (-0.5) -0.1 ~ -2	Q0 + (-0.5) -0.1 ~ -2	Q0 + (-0.5) -0.1 ~ -2	Q0 + 0.5 0.1~2	Q0 + 0.5 0.1~2	Q0 + 0.5 0.1~2
ST (ST = Q0 + オフセット)	ST	Q0 + (-8) -12 ~ -5	Q0 + (-8) -12 ~ -5	Q0 + (-8) -12 ~ -5	Q0 + 8 12~5	Q0 + 8 12~5	Q0 + 8 12~5
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0~3	該当なし	1 0~3	-1 -3~0	該当なし	-1 -3~0
IQ2 (ST = Q0 + オフセット)	IQ2	Q0 + (-10) -30 ~ -8	Q0 + (-11) -30 ~ -8	Q0 + (-10) -30 ~ -8	Q0 + 10 8~30	Q0 + 10 8~30	Q0 + 10 8~30
RO2	RO2	-20 該当なし	-20 該当なし	該当なし	20 該当なし	20 該当なし	該当なし

4500 シリーズシステムパラメータ

表 K-1 4500 シリーズ装置パラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
R02 (CE = Q0 - R02)	CE	該当なし	該当なし	30 5~180	該当なし	該当なし	-30 -180~-5
ST3 (ST3 = R02 + オフセット)	ST3	R02 - 10 -30 ~ -5	該当なし	該当なし	R02 + 10 5~30	該当なし	該当なし
ST2 (CXP = R02 - ST3)	CXP	該当なし	15 0~55	15 0~55	該当なし	-15 -55~0	-15 -55~0
R03	R03	-50 固定	該当なし	該当なし	50 固定	該当なし	該当なし
R03 (IE3 = R02 - R03)	IE3	該当なし	1 0~5	1 0~5	該当なし	-1 -5~0	-1 -5~0
DF	DF	-200 -300~0	-200 -300~0	-200 -300~0	200 0~300	200 0~300	200 0~300
CEM	CEM	2000 0~3300	2000 0~3300	2000 0~3300	2000 0~3300	2000 0~3300	2000 0~3300
GS1	GS1	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90

表 K-1 4500 シリーズ装置パラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
GS2	GS2	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90
IHT	IHT	150 0~250	150 0~250	150 0~250	150 0~250	150 0~250	150 0~250
sdp ³⁷	sdp	1 1 または 2					

表 K-2 LIT スキャンタイプ専用 QTRAP[®] 4500 システムパラメータ

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード	負イオンモード
CAD	CAD	高い 低-高	高い 低-高
AF2 ³⁸	AF2	0.100 0 または 0.2	0.100 0 または 0.2

³⁷DuoSpray[™] イオン源 (1=TurbolonSpray プロローブおよび 2=APCI プロローブ)³⁸MS/MS/MSのみ

4500 シリーズシステムパラメータ

表 K-2 LIT スキャンタイプ専用 QTRAP[®] 4500 システムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード	負イオンモード
AF3	AF3	質量速度依存 0~10	質量速度依存 0~10
EXB	EXB	質量速度依存 -165~0	質量速度依存 0~165
CES	CES	0 0~50	0 0~50
ROS (Q0 - ROS)	CE	10 5~180	-10 -180 ~ -5

4000 シリーズシステムパラメータ

各スキャン種類の最初の数字はあらかじめ設定された値です。数字の範囲は、各パラメータの許容範囲です。

表 L-1 4000 シリーズ装置パラメータ

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20 10~50	20 10~50	20 10~50	20 10~50	20 10~50	20 10~50
CAD ³⁹	CAD	0 該当なし	1 0~12	4 0~10	0 該当なし	1 0~12	4 0~12
CAD ⁴⁰	CAD	0 該当なし	1 0~12	6 0~10	0 該当なし	1 0~12	6 0~12

³⁹API 4000™ システム

⁴⁰4000 QTRAP® システム

4000 シリーズシステムパラメータ

表 L-1 4000 シリーズ装置パラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
IS ^{41,42}	IS ^{41,42}	5500 0~5500	5500 0~5500	5500 0~5500	-4500 -4500~0	-4500 -4500~0	-4500 -4500~0
NC ⁴³	NC ⁴³	3 0~5	3 0~5	3 0~5	-3 -5~0	-3 -5~0	-3 -5~0
TEM ^{42,43}	TEM ^{42, 43}	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750
または (DP = OR)	DP	20 0~400	20 0~400	20 0~400	-20 -400~0	-20 -400~0	-20 -400~0
Q0 (EP = -Q0)	EP	10 2~15	10 2~15	10 2~15	-10 -15~-2	-10 -15~-2	-10 -15~-2
IQ1 (IQ1 = Q0 + オフ セット)	IQ1	Q0 + (-1) -0.5 ~ -2	Q0 + (-1) -0.5 ~ -2	Q0 + (-1) -0.5 ~ -2	Q0 + 1 0.5~2	Q0 + 1 0.5~2	Q0 + 1 0.5~2

⁴¹Turbo V™ イオン源

⁴²TurbolonSpray® プローブ

⁴³APCIプローブ

表 L-1 4000 シリーズ装置パラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
ST (ST = Q0 + オフセット)	ST	Q0 + (-5) -7 ~ -4	Q0 + (-5) -7 ~ -4	Q0 + (-5) -7 ~ -4	Q0 + 5 4~7	Q0 + 5 4~7	Q0 + 5 4~7
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0.5~2	該当なし	1 0.5~2	-1 -2 ~ -0.5	該当なし	-1 -2 ~ -0.5
RO1 (IE1 = Q0 + オフセット)	RO1	該当なし	Q0 + (-1) -0.5 ~ -2	該当なし	該当なし	Q0 + 1 0.5~2	該当なし
IQ2 (IQ2 = Q0 + オフセット)	IQ2	Q0+ (-8) 該当なし	Q0+ (-8) 該当なし	Q0+ (-8) 該当なし	Q0 + 8 該当なし	Q0 + 8 該当なし	Q0 + 8 該当なし
RO2	RO2	-60 -145 ~ 20	-20 -145 ~ -20	該当なし	60 60~100	20 20~145	該当なし
RO2 (CE = Q0 - RO2)	CE	該当なし	該当なし	30 5~130	該当なし	該当なし	-30 -130 ~ -5

4000 シリーズシステムパラメータ

表 L-1 4000 シリーズ装置パラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
ST3	ST3	-80 -80~200	該当なし	該当なし	80 80~200	該当なし	該当なし
ST3 (CXP = RO2 - ST3)	CXP	該当なし	15 0~55	15 0~55	該当なし	-15 -55~0	-15 -55~0
RO3	RO3	-62 -60~200	該当なし	該当なし	62 60~200	該当なし	該当なし
RO3 (IE3 = RO2 - RO3)	IE3	該当なし	2 -0.5 ~5	2 -0.5 ~5	該当なし	-1.5 -5~0	-1.5 -5~0
C2	C2	RO3 + 0 該当なし					
DF	DF	0 -400~0	0 -400~0	0 -400~0	0 0~400	0 0~400	0 0~400
CEM	CEM	1800 500~3297	1800 500~3297	1800 500~3297	1800 500~3297	1800 500~3297	1800 500~3297
GS1	GS1	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90

表 L-1 4000 シリーズ装置パラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
GS2	GS2	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90
ihe ⁴⁴	ihe	1 0または1	1 0または1	1 0または1	1 0または1	1 0または1	1 0または1
IHT	IHT	40 0~250	40 0~250	40 0~250	40 0~250	40 0~250	40 0~250
svp ⁴⁵	svp	1 1 または 2					

⁴⁴1=オン および 0=オフ

⁴⁵DuoSpray™ イオン源 (1=TurbolonSpray® プロープおよび 2=APCI プロープ)

4000 シリーズシステムパラメータ

表 L-2 LIT スキャンタイプ専用 4000 QTRAP[®] システムパラメータ

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード	負イオンモード
CAD	CAD	高い 低-高	高い 低-高
AF2 ⁴⁶	AF2	100 0~200	100 0~200
AF3	AF3	質量速度依存 0~5	質量速度依存 0~5
EXB	EXB	質量速度依存 -200~0	質量速度依存 0~200
CES	CES	0 -50~50	0 -50~50
ROS (Q0 - ROS)	CE	30 5~130	-30 -130 ~ -5

⁴⁶MS/MS/MSのみ

SCIEX Triple Quad™ 3500 システムパラメータ

M

各スキャン種類の最初の数字はあらかじめ設定された値です。数字の範囲は、各パラメータの許容範囲です。

表 M-1 SCIEX Triple Quad™ 3500 システムパラメータ

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20 10~55	20 10~55	20 10~55	20 10~55	20 10~55	20 10~55
CAD	CAD	0 該当なし	6 該当なし	中 (9) 0~12	0 該当なし	6 該当なし	中 (9) 0~12
IS ^{47,48}	IS ^{47,47,48}	5500 0~5500	5500 0~5500	5500 0~5500	-4500 -4500~0	-4500 -4500~0	-4500 -4500~0
NC ⁴⁹	NC ⁴⁹	3 0~5	3 0~5	3 0~5	-3 -5~0	-3 -5~0	-3 -5~0

⁴⁷Turbo V™ イオン源

⁴⁸TurbolonSpray® プローブ

⁴⁹APCIプローブ

SCIEX Triple Quad™ 3500 システムパラメータ

表 M-1 SCIEX Triple Quad™ 3500 システムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
TEM ^{48,49}	TEM ^{48,49}	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750
または (DP = OR)	DP	100 0~300	100 0~300	100 0~300	-100 -300~0	-100 -300~0	-100 -300~0
Q0 (EP = -Q0)	EP	10 2~15	10 2~15	10 2~15	-10 -15~-2	-10 -15~-2	-10 -15~-2
IQ1 (IQ1 = Q0 + オフセット)	IQ1	Q0 + (-0.5) -0.1 ~ -2	Q0 + (-0.5) -0.1 ~ -2	Q0 + (-0.5) -0.1 ~ -2	Q0 + 0.5 0.1~2	Q0 + 0.5 0.1~2	Q0 + 0.5 0.1~2
ST (ST = Q0 + オフセット)	ST	Q0 + (-8) -12 ~ -5	Q0 + (-8) -12 ~ -5	Q0 + (-8) -12 ~ -5	Q0 + 8 12~5	Q0 + 8 12~5	Q0 + 8 12~5
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0~3	該当なし	1 0~3	-1 -3~0	該当なし	-1 -3~0
IQ2 (ST = Q0 + オフセット)	IQ2	Q0 + (-10) -30 ~ -8	Q0 + (-11) -30 ~ -8	Q0 + (-10) -30 ~ -8	Q0 + 10 8~30	Q0 + 10 8~30	Q0 + 10 8~30
RO2	RO2	-20 該当なし	-20 該当なし	該当なし	20 該当なし	20 該当なし	該当なし

表 M-1 SCIEX Triple Quad™ 3500 システムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
R02 (CE = Q0 - R02)	CE	該当なし	該当なし	30 5~180	該当なし	該当なし	-30 -180~-5
ST3 (ST3 = R02 + オフセット)	ST3	R02 - 10 -30 ~ -5	該当なし	該当なし	R02 + 10 5~30	該当なし	該当なし
ST2 (CXP = R02 - ST3)	CXP	該当なし	15 0~55	15 0~55	該当なし	-15 -55~0	-15 -55~0
R03	R03	-50 固定	該当なし	該当なし	50 固定	該当なし	該当なし
R03 (IE3 = R02 - R03)	IE3	該当なし	1 0~5	1 0~5	該当なし	-1 -5~0	-1 -5~0
DF	DF	-200 -300~0	-200 -300~0	-200 -300~0	200 0~300	200 0~300	200 0~300
CEM	CEM	2000 0~3300	2000 0~3300	2000 0~3300	2000 0~3300	2000 0~3300	2000 0~3300
GS1	GS1	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90

SCIEX Triple Quad™ 3500 システムパラメータ

表 M-1 SCIEX Triple Quad™ 3500 システムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
GS2	GS2	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90
IHT	IHT	150 0~250	150 0~250	150 0~250	150 0~250	150 0~250	150 0~250

3200 シリーズシステムパラメータ

N

各スキャン種類の最初の数字はあらかじめ設定された値です。数字の範囲は、各パラメータの許容範囲です。

表 N-1 3200 シリーズシステムパラメータ

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR	CUR	20 10~50	20 10~50	20 10~50	20 10~50	20 10~50	20 10~50
CAD ⁵⁰	0 固定	2 固定	3 0~12	0 固定	2 固定	3 0~12	
CAD ⁵¹	0 固定	2 固定	中 低、中、高	0 固定	2 固定	中 低、中、高	
IS ⁵²	IS ⁵²	5500 0~5500	5500 0~5500	5500 0~5500	-4200 -4500~0	-4200 -4500~0	-4200 -4500~0

⁵⁰API 3200™ システム

⁵¹3200 QTRAP® システム

⁵²Turbo V™ イオン源

3200 シリーズシステムパラメータ

表 N-1 3200 シリーズシステムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
IS ⁵³	IS ⁵³	1000 0~5500	1000 0~5500	1000 0~5500	-1000 -4500~0	-1000 -4500~0	-1000 -4500~0
IS ⁵⁴	IS ⁽⁴⁾	1500 0~2500	1500 0~2500	1500 0~2500	-1500 -2500~0	-1500 -2500~0	-1500 -2500~0
NC ⁵⁵	NC ⁵⁵	1 0~5	1 0~5	1 0~5	-1 -5~0	-1 -5~0	-1 -5~0
NC ⁵⁶	NC ⁵⁶	1 0~5	3 0~5	3 0~5	-3 -5~0	-3 -5~0	-3 -5~0
TEM ^{52,55, 54}	TEM ^{53,55}	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750	0 0~750
または (DP = OR)	DP	20 0~400	20 0~400	20 0~400	-20 -400~0	-20 -400~0	-20 -400~0

⁵³NanoSpray[®] イオン源

⁵⁴PhotoSpray[®] イオン源

⁵⁵DuoSpray[™] イオン源 (1=TurbolonSpray[®] プロープおよび 2=APCI プロープ)

⁵⁶APCI プロープ

⁵⁷TurbolonSpray[®] プロープ

表 N-1 3200 シリーズシステムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
Q0 (EP = -Q0)	EP	10 1~12	10 1~12	10 1~12	-10 -12 ~ -1	-10 -12 ~ -1	-10 -12 ~ -1
IQ1 (IQ1 = Q0 + オフ セット)	IQ1	Q0 + (-1) -2 ~ -1	Q0 + (-1) -2 ~ -1	Q0 + (-1) -2 ~ -1	Q0 + 1 1~2	Q0 + 1 1~2	Q0 + 1 1~2
ST (ST = Q0 + オフセッ ト)	ST	Q0 + (-5) -8 ~ -2	Q0 + (-5) -8 ~ -2	Q0 + (-5) -8 ~ -2	Q0 + 5 2~8	Q0 + 5 2~8	Q0 + 5 2~8
RO1 (IE1 = Q0 - RO1)	IE1	1 0.5~2	該当なし	1 0.5~2	-1 -2 ~ -0.5	該当なし	-1 -2 ~ -0.5
RO1 (IE1 = Q0 + オフ セット)	RO1	該当なし	Q0+ (-2) -2 ~ -0.5	該当なし	該当なし	Q0 + 2 0.5~2	該当なし
IQ2 (CE = Q0 - IQ2)	CEP	質量依存 0~188	該当なし	質量依存 0~188	質量依存 -188~0	該当なし	質量依存 -188~0

3200 シリーズシステムパラメータ

表 N-1 3200 シリーズシステムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
IQ2 (IQ2 = R02 + オフ セット)	IQ2	該当なし	R02 + 0 0~2	該当なし	該当なし	R02 + 0 -2~0	該当なし
R02 (CE = Q0 - R02)	CE	該当なし	該当なし	30 5~130	該当なし	該当なし	-30 -130 ~ -5
R02	R02	-100 -150 ~ 20	-20 -130 ~ -5	該当なし	100 20~150	20 5~130	該当なし
IQ3 (CXP = R02 - IQ3)	CXP	該当なし	質量依存 0~58	5 0~58	該当なし	質量依存 -58~0	-5 -58~0
IQ3	IQ3	-125 -200 ~ -100	該当なし	該当なし	125 100~200	該当なし	該当なし
R03 (IE3 = R02 - R03)	IE3	該当なし	4 0.5~8	4 0.5~8	該当なし	-4 -8~0.5	-4 -8~0.5
R03	R03	-150 -200 ~ -100	該当なし	該当なし	150 150~200	該当なし	該当なし

表 N-1 3200 シリーズシステムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
EX	EX	-200 該当なし	-200 該当なし	-200 該当なし	200 該当なし	200 該当なし	200 該当なし
DF	DF	-100 -400~0	-100 -400~0	-100 -400~0	100 0~400	100 0~400	100 0~400
CEM	CEM	1800 500~3297	1800 500~3297	1800 500~3297	1800 500~3297	1800 500~3297	1800 500~3297
GS1	GS1	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90	20 0~90
GS2	GS2	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90	0 0~90
ihe ⁵⁸	ihe	1 0または1	1 0または1	1 0または1	1 0または1	1 0または1	1 0または1
C2	C2	0 該当なし	0 該当なし	0 該当なし	0 該当なし	0 該当なし	0 該当なし

⁵⁸1=オン および 0=オフ

3200 シリーズシステムパラメータ

表 N-1 3200 シリーズシステムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
		Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
XA3	XA3	0 該当なし	0 該当なし	0 該当なし	0 該当なし	0 該当なし	0 該当なし
XA2	XA2	0 該当なし	0 該当なし	0 該当なし	0 該当なし	0 該当なし	0 該当なし
IHT ⁵³	IHT	40 0~250	40 0~250	40 0~250	40 0~250	40 0~250	40 0~250
svp ⁵⁹	svp	1 1 または 2					

表 N-2 LIT スキャンタイプ専用の 3200 QTRAP[®] システムパラメータ

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード	負イオンモード
CAD	CAD	高い 低-中-高	高い 低-高
F12	CEP	質量速度依存 0~188	質量速度依存 -188~0

⁵⁹DuoSpray[™] イオン源 (1=TurbolonSpray[®] ブローブおよび 2=APCI ブローブ)

表 N-2 LIT スキャンタイプ専用の 3200 QTRAP[®] システムパラメータ (続き)

パラメータ ID	アクセス ID	正イオンモード	負イオンモード
ROS (Q0 - R02)	CE	30 5~130	-30 -5 ~ -130
AF2 ⁶⁰	AF2	100 0~200	100 0~200
AF3	AF3	質量速度依存 0~5	質量速度依存 0~5
EXB	EXB	質量速度依存 -200~0	質量速度依存 0~200
DF	DF	-400 該当なし	400 該当なし
C2B	C2B	質量速度依存 -500~500	質量速度依存 -500~500
CES	CES	0 -50~50	0 -50~50

⁶⁰MS/MS/MSのみ

[グルコース1¹]-フィブリノペプチド B の質量

O

表 O-1 [グルコース1]-フィブリノペプチド B (モノアイソトピック分子量、1569.6696 Da)

電荷	(M+nH) ⁿ⁺ モノアイソトピック m/z
+1	1570.6768
+2	785.8421*
+3	524.2305*
+4	393.4247
+5	—
+6	—

* より広く観察される電荷状態を示しています。

表 O-2 正イオンモードで計算された、[グルコース1]-フィブリノペプチド Bの理論上の開裂部の正確なモノアイソトピック質量が含まれています。

表 O-2 [グルコース1]-フィブリノペプチド B の理論的フラグメントイオン

b イオン		y イオン	
m/z	フラグメント	m/z	フラグメント
—	—	1570.6768	EGVNDNEEGFFSAR
130.0499	E	1441.6342	GVNDNEEGFFSAR
187.0713	EG	1384.6128	VNDNEEGFFSAR
286.1397	EGV	1285.5444	NDNEEGFFSAR
400.1827	EGVN	1171.5014	DNEEGFFSAR
515.2096	EGVND	1056.4745	NEEGFFSAR
629.2525	EGVNDN	942.4316	EEGFFSAR
758.2951	EGVNDNE	813.3890	EGFFSAR
887.3377	EGVNDNEE	684.3464	GFFSAR
944.3592	EGVNDNEEG	627.3249	FFSAR
1091.4276	EGVNDNEEGF	480.2565	FSAR

表 O-2 [グルコース1]-フィブリノペプチド B の理論的フラグメントイオン (続き)

b イオン		y イオン	
1238.4960	EGVNDNEEGFF	333.1881	SAR
1325.5281	EGVNDNEEGFFS	246.1561	AR
1396.5652	EGVNDNEEGFFSA	175.1190	R
1552.6663	EGVNDNEEGFFSAR	–	–

レセルピン希釈液 60:1 (10 pg/ μ L) の用意

P

この手順に従い、レセルピン1 pmol/ μ L (PN 4405236) からレセルピン希釈液を作ります。

1. 希釈溶媒 4.0 mL をバイアルに追加して、ストック溶液を作ります。
2. バイアルのキャップを締め、中身をそっと混ぜるか、バイアルを超音波で分解して材料を溶かします。

このステップによって、1 pmol/ μ L のレセルピン希釈液が作られます。

3. レセルピンストック溶液 1 mL を清潔なバイアルに入れて、希釈溶媒 5 mL を追加します。
4. 6:1 希釈液 1 mL と希釈溶媒 9 mL を混ぜます。

このステップによって、60:1 レセルピン希釈液が作られます。