

# Molecule Profiler ソフトウェア

ソフトウェアユーザーガイド



---

本書は SCIEX 機器をご購入され、実際に使用されるお客様にむけてのものです。本書の著作権は保護されています。本書および本書の一部分を複製することは、SCIEX が書面で合意した場合を除いて固く禁止されています。

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

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

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

研究専用。診断手順には使用しないでください。

ここに記載されている商標および / または登録商標は、関連するロゴを含め、米国および / またはその他の特定の国における AB Sciex Pte. Ltd.、またはその該当する所有者の所有物です([sciex.com/trademarks](http://sciex.com/trademarks) をご覧ください)。

AB Sciex™ はライセンスの下で使用されています。

© 2021 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



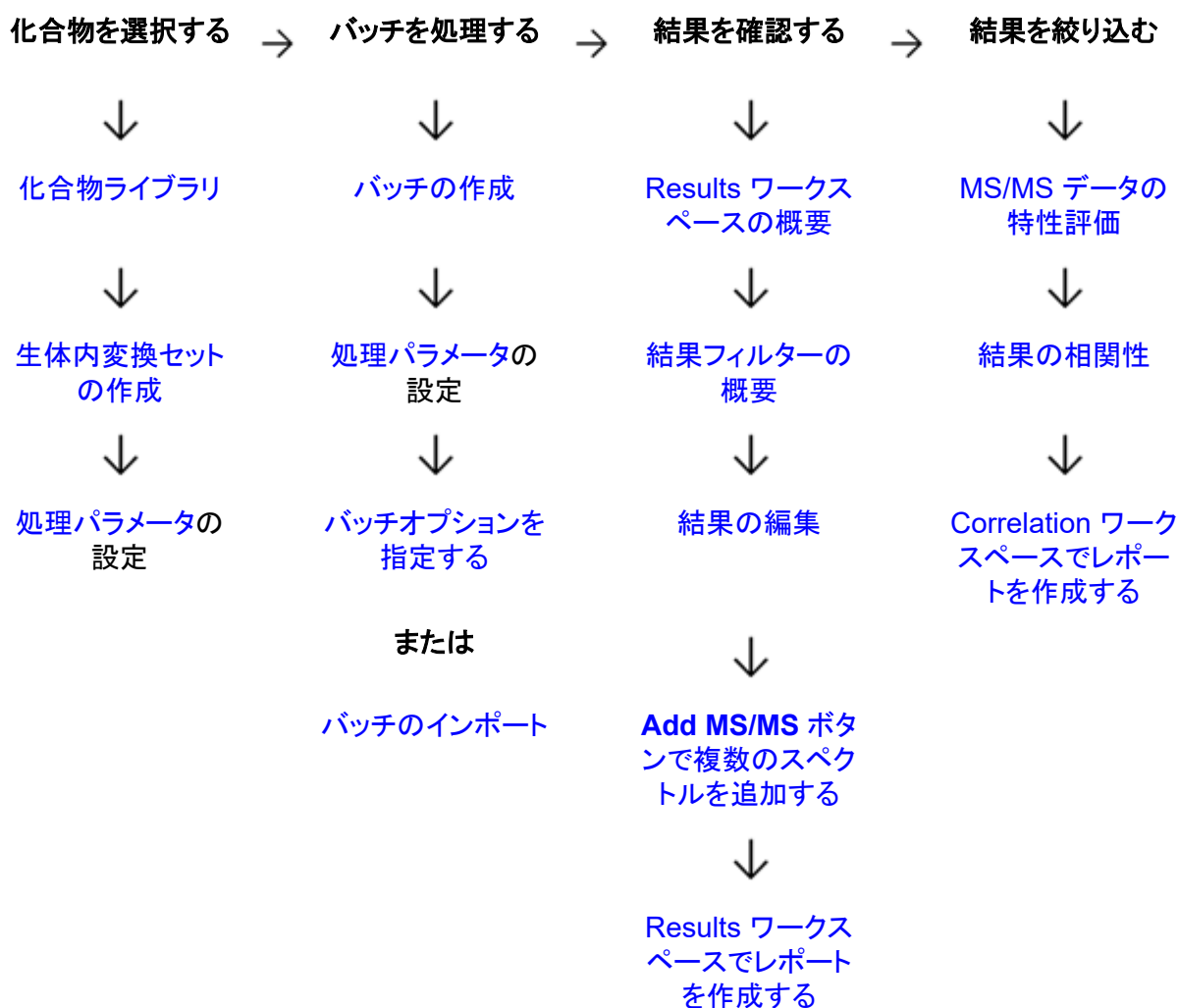
AB Sciex Pte. Ltd.

Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

Molecule Profiler ソフトウェアを使用して、Analyst TF ソフトウェアおよび SCIEX OS で取得したデータ内の分子およびその誘導体(不純物や代謝物の可能性を含む)を探索し、レポートを作成します。

Molecule Profiler ソフトウェアは、10 kDa 未満の低分子、ペプチド、抗体薬物複合体、オリゴヌクレオチドの同定をサポートします。



## 分子の候補とその誘導体の見つけ方

このソフトウェアには、目的のサンプルに含まれている可能性のある分子を見つけるために使用する、一連のピーク検出戦略またはアルゴリズムが備わっています。[ピーク検出戦略の概要](#)を参照してください。

見つかったピークが予測される分子である場合、ソフトウェアは前駆体または 1 つ以上の変換の組み合わせから得た特定の名前を割り当てます。ワークフローに基づいて、選択した生体内変換セッ

## はじめに

---

ト、開裂代謝物の候補または加水分解開裂の候補、または抗体からの配列フラグメントの候補を変換に含めることができます。

低分子データ分析の場合は、選択した生体内変換セットと開裂代謝物の候補を変換に含めます。

ペプチドデータ分析の場合は、選択した生体内変換セットと加水分解開裂の候補を変換に含めません。

抗体薬物複合体(ADC)データ分析の場合は、選択した生体内変換セット、開裂代謝物の候補、消化された抗体タンパク質からの配列フラグメントの候補を変換に含めます。

オリゴヌクレオチド分析では、代謝物と不純物の両方に適した生体内変換セットの選択、さらに開裂代謝物の候補、内部 n-1 および末端 n+1 配列を変換に含めます。

一般的なピーク検出戦略を使用した場合、ピークが想定外の分子であれば、一般的な Loss of または Gain of の名前と、分子イオン電荷でのプロトン付加体が割り当てられます。

サンプルと一緒に対照ファイルを選択した場合は、ソフトウェアがサンプルと対照データの比較を行います。サンプルと一緒にアナログファイルを選択した場合は、ソフトウェアが MS データとアナログデータの比較を行います。

各アルゴリズムを制御するパラメータは、ユーザーが変更できます。[パラメータ値の選択](#)を参照してください。

## Molecule Profiler ワークスペースを開く

SCIEX OS ソフトウェアバージョン 2.1.5 以降がインストールされ、有効な Molecule Profiler ソフトウェアライセンスが有効化されている必要があります。

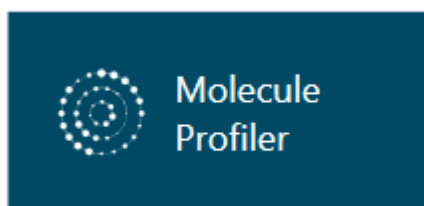
1. Start メニューからソフトウェアを選択します: **Start > SCIEX OS > SCIEX OS**

ソフトウェアが Integrated モード用に構成されている場合は、ホームページが開きます。

ソフトウェアが Mixed モード用に構成されている場合は、Logon ダイアログが開きます。次の手順に進みます。

2. Logon ダイアログが開いたら、ソフトウェアの使用を許可されているユーザーのユーザー名とパスワードを入力し、**OK** をクリックします。  
ホームページが開きます。
3. Molecule Profiler タイルをクリックします。

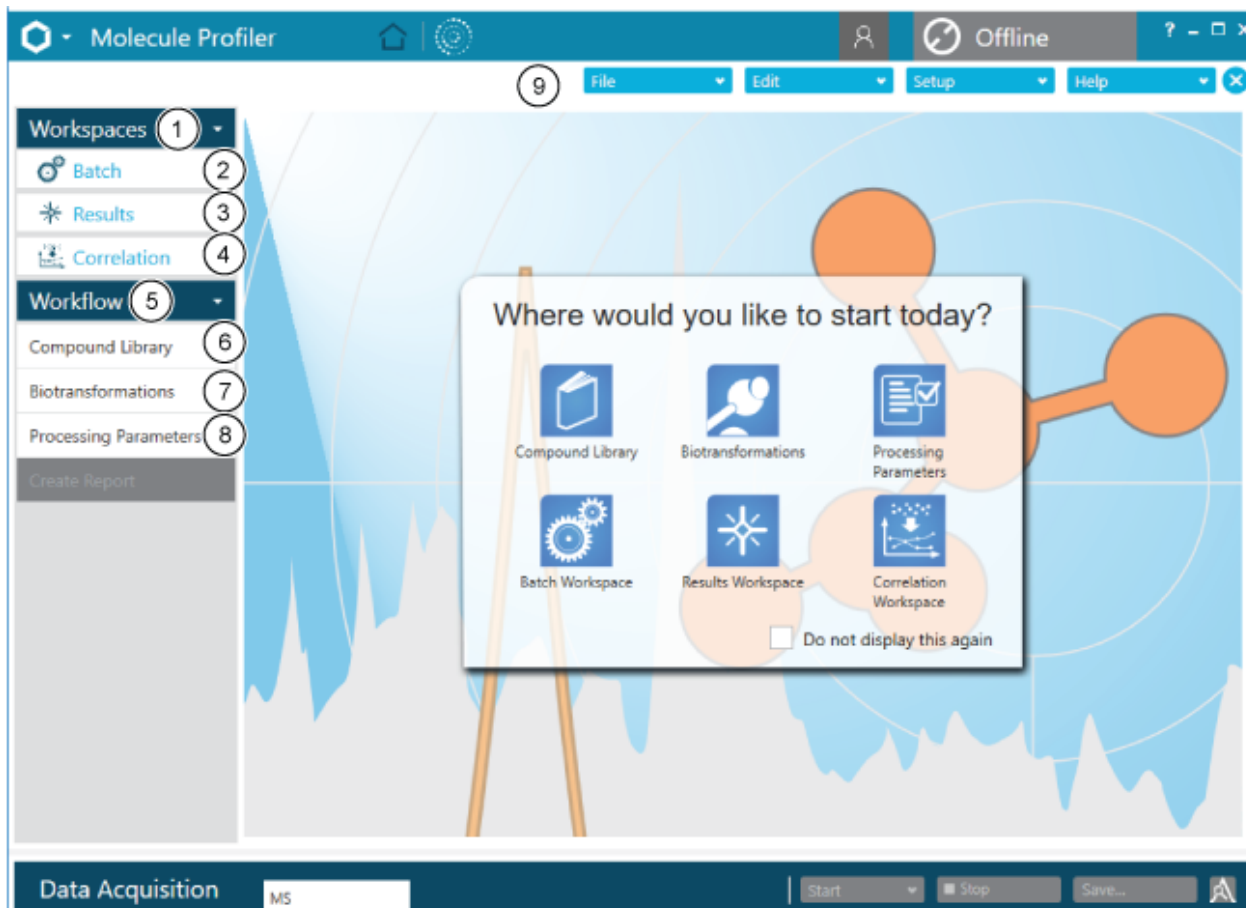
図 1-1 : Molecule Profiler タイル



Molecular Profiler ワークスペースが開きます。

## Molecule Profiler ウィンドウ

図 1-2 : Molecule Profiler ウィンドウ



項目	説明
1	ワークスペースのリスト
2	Batch ワークスペース。このワークスペースを使用して、代謝物の候補を探索できます。 <a href="#">Batch ワークスペースの概要</a> を参照してください。
3	Results ワークスペース。このワークスペースは、処理後の代謝物候補を表示するために使用します。 <a href="#">Results ワークスペースの概要</a> を参照してください。
4	Correlation ワークスペース。このワークスペースは、異なる Results ファイルで検出された代謝物を比較するために使用します。 <a href="#">Correlation ワークスペースの概要</a> を参照してください。
5	ワークフローリスト
6	化合物ライブラリ。化合物ライブラリを作成し、管理します。 <a href="#">化合物ライブラリ</a> を参照してください。

## はじめに

項目	説明
7	生体内変換。一般的な変換のリストを作成し、管理します。 <a href="#">生体内変換セット</a> を参照してください。
8	パラメータの処理。Batch ワークスペースで使用できる処理メソッドを作成し、管理します。 <a href="#">処理メソッドの作成</a> を参照してください。
9	メニューバー。 <a href="#">表 1-1</a> を参照してください。

表 1-1 : メニューコマンド

項目	説明
File メニュー	
New	<ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Batch</b>: 新しいバッチを作成します。<a href="#">バッチの作成</a>を参照してください。</li><li>• <b>Correlation</b>: 新しい相関を作成します。<a href="#">相関の準備</a>を参照してください。</li></ul>
Open	<ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Batch</b>: バッチを開きます。</li><li>• <b>Correlation</b>: 相関ファイルを開きます。</li><li>• <b>Results</b>: Results ファイルを開きます。</li></ul>
Save Batch	Batch ワークスペースにバッチを保存します。
Save Batch As	Batch ワークスペースにバッチを別名で保存します。
Create Report	レポートを作成します。 <a href="#">レポート</a> を参照してください。
Recent reports	最近のレポートを開きます。
Edit メニュー	
Edit Name	化合物の名前と式を編集します。
Copy Selected Table	選択した表をコピーします。
Copy Selected Graph	選択したグラフをコピーします。
Copy Batch Row	選択したバッチ行をコピーします。
Paste Batch Row	コピーしたバッチ行を、選択した場所に貼り付けます。
Clear Batch Row	選択したバッチ行の内容を削除します。
Delete Selected Row	選択した行を Results 表から削除します。ソフトウェアが結果を再計算します。
Undo Delete	最後に削除された行を復元します。ソフトウェアが結果を再計算します。

表 1-1 : メニューコマンド (続き)

項目	説明
Hide Unchecked Rows	選択されていない行を非表示にします。
Show Hidden Rows	選択されていない行を表示します。
Custom Elements	Custom Elements ダイアログを開きます。このダイアログを使用して、アミノ酸やオリゴヌクレオチド残基を定義します。 <a href="#">Custom Elements</a> を参照してください。
<b>Setup</b> メニュー	
Compound Library	化合物ライブラリを開きます。 <a href="#">化合物ライブラリ</a> を参照してください。
Biotransformations	生体内変換セットのリストを開きます。 <a href="#">生体内変換セット</a> を参照してください。
Processing Parameters	処理メソッドウィンドウを開きます。 <a href="#">処理メソッドの作成</a> を参照してください。
Filters	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Results:</b> Results ワークスペースのフィルターを設定します。<a href="#">結果フィルターの概要</a>を参照してください。</li> <li>• <b>Correlation:</b> Correlation ワークスペースのフィルターを設定します。<a href="#">相関フィルターの概要</a>を参照してください。</li> <li>• <b>Interpretation:</b> Interpretation ワークスペースのフィルターを設定します。</li> </ul>
Create New Folder	フォルダーを作成します。 <a href="#">フォルダーの作成</a> を参照してください。

## フォルダーの作成

フォルダーには、目的のサンプルに含まれる分子の候補を見つけるためにソフトウェアが必要とするファイルや、Results ファイルが格納されます。

カスタムフォルダーを作成して結果を整理することも可能です。

1. **Setup > Create New Folder** をクリックします。  
Create New Folder ダイアログが開きます。
2. フォルダーの **Name** を入力します。  
**Location** フィールドには、Data ディレクトリ  
(C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler\Data)のインストール先が表示されます。作成されたすべてのフォルダーは、このディレクトリに格納されます。
3. **OK** をクリックします。

## はじめに

---

フォルダーを作成すると、Processing Parameters フォルダおよび Results フォルダという 2 つのサブフォルダが自動的に作成されます。



Custom Elements ダイアログには、以下のタブが含まれています。

- AA List タブには、標準アミノ酸のリストに関する情報が含まれています。この情報は編集や削除ができません。ユーザーはこのリストにカスタムアミノ酸を追加でき、必要に応じて追加した項目を修正・削除できます。追加したアミノ酸は、自動的にリストの一番下に追加されます。ただし、列のヘッダーをクリックすることで並べ替えが可能です。
- AA Modifications タブには、ペプチドの末端基やアミノ酸残基の側鎖に適用できるさまざまな修飾の質量シフト情報が含まれています。この情報は編集や削除ができません。ユーザーはリストにカスタムアミノ酸修飾を追加でき、必要に応じて追加した項目を修正・削除できます。追加したアミノ酸修飾は、自動的にリストの一番下に追加されます。ただし、列見出しをクリックすることで並べ替えが可能です。
- Oligo List タブには、事前に定義されたオリゴヌクレオチド残基と末端基がすべて含まれています。この情報は編集や削除ができません。ユーザーはこのリストに新しいオリゴヌクレオチド残基と末端基を追加でき、必要に応じて追加した項目を修正・削除できます。追加した残基は、自動的にリストの一番下に追加されます。ただし、列のヘッダーをクリックすることで並べ替えが可能です。

## カスタムアミノ酸

### カスタムアミノ酸の作成

1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。  
Custom Elements ダイアログが開きます。
2. AA List タブが選択されていることを確認します。
3. **New** をクリックします。  
New Custom Amino Acid Residue ダイアログが開きます。
4. 次の表に説明しているフィールドに入力し、**OK** をクリックします。

表 2-1 : New Custom Amino Acid Residue ダイアログのフィールド

フィールド	説明	使用可能な値
Name	アミノ酸の名前	英数字
Symbol	アミノ酸の記号	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 英数字</li> <li>• 最初の文字は大文字に</li> </ul>
Residue Formula	アミノ酸の式	周期元素を用いた実験式。濃縮同位体を式の一部分として使用することも可能です。たとえば、 <sup>13</sup> C は炭素数 13 の同位体を示します。

カスタムアミノ酸はアミノ酸表の一番下に追加され、名前、記号、質量が表示されます。

## カスタムアミノ酸の編集

1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。  
Custom Elements ダイアログが開きます。
2. AA List タブが選択されていることを確認します。
3. 編集するアミノ酸を選択します。

---

注: 編集できるのは、ユーザーが追加したカスタムアミノ酸のみです。ソフトウェアに付属しているアミノ酸は編集できません。

---

4. **Edit** をクリックします。  
Edit Custom Amino Acid Residue ダイアログが開きます。
5. 次の表に説明しているフィールドを編集します。

表 2-2 : Edit Custom Amino Acid Residue ダイアログのフィールド

フィールド	説明	使用可能な値
Name	アミノ酸の名前	英数字
Symbol	アミノ酸の記号	• 英数字 • 最初の文字は大文字に
Residue Formula	アミノ酸の式	周期元素を用いた実験式

6. **OK** をクリックします。  
選択したカスタムアミノ酸の名前、記号、質量が、該当する場合、アミノ酸表で更新されます。

## カスタムアミノ酸の削除

---

注: 処理メソッドや結果で使用しているカスタムアミノ酸を削除すると、予期せぬ動作が発生することがあります。

---

1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。  
Custom Elements ダイアログが開きます。
2. AA List タブが選択されていることを確認します。
3. 削除するアミノ酸を選択します。

---

注: 削除できるのは、ユーザーが追加したカスタムアミノ酸のみです。ソフトウェアに付属しているアミノ酸は削除できません。

---

4. **Delete** をクリックします。  
カスタムアミノ酸がアミノ酸表から削除されます。

## カスタムアミノ酸修飾

### カスタムアミノ酸修飾の作成

注: カスタムアミノ酸修飾は、標準アミノ酸にのみ適用可能です。

1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。  
Custom Elements ダイアログが開きます。
2. AA Modifications タブが選択されていることを確認します。
3. **New** をクリックします。  
New Custom Amino Acid ダイアログが開きます。
4. 次の表に説明しているフィールドに入力し、**OK** をクリックします。

表 2-3 : New Custom Modification ダイアログのフィールド

フィールド	説明	使用可能な値
<b>Name</b>	残基の名前	英数字
<b>Symbol</b>	残基の記号	<ul style="list-style-type: none"> <li>必ず <code>_</code> で始まること</li> <li>英数字</li> <li>最初の文字は大文字に</li> </ul>
<b>Formula Gain</b>	残基で得られる式	周期元素を用いた実験式
<b>Formula Lost</b>	残基で失われる式	周期元素を用いた実験式
<b>Mod Type</b>	修飾の位置	アミノ酸、N 末端、C 末端、タンパク質 N 末端、タンパク質 C 末端
<b>Applies to AA</b>	関連するアミノ酸の名前	カスタム修飾を適用する標準アミノ酸を 1 文字で表したもの。たとえば、P はプロリンを表します。すべての標準アミノ酸にカスタム修飾を適用する場合は、このフィールドを空欄にします。

カスタムアミノ酸はアミノ酸修飾表の一番下に追加され、記号、質量シフト、名前が表示されます。

### カスタムアミノ酸修飾の編集

1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。  
Custom Elements ダイアログが開きます。
2. AA Modifications タブが選択されていることを確認します。
3. 編集する修飾を選択します。

注: 編集できるのは、ユーザーが追加した修飾のみです。ソフトウェアに付属している修飾は編集できません。

## Custom Elements

---

4. **Edit** をクリックします。  
Edit Custom Modification ダイアログが開きます。
5. 次の表に説明している適切なフィールドを編集します。

表 2-4 : Edit Custom Modification ダイアログのフィールド

フィールド	説明	使用可能な値
<b>Name</b>	残基の名前	英数字
<b>Symbol</b>	残基の記号	<ul style="list-style-type: none"><li>• 必ず <b>_</b> で始まること</li><li>• 英数字</li><li>• 最初の文字は大文字に</li></ul>
<b>Formula Gain</b>	残基で得られる式	周期元素を用いた実験式
<b>Formula Lost</b>	残基で失われる式	周期元素を用いた実験式
<b>Mod Type</b>	修飾の位置	アミノ酸、N 末端、C 末端、タンパク質 N 末端、タンパク質 C 末端
<b>Applies to AA</b>	関連するアミノ酸の名前	カスタム修飾を適用する標準アミノ酸を 1 文字で表したものの。たとえば、P はプロリンを表します。すべての標準アミノ酸にカスタム修飾を適用する場合は、このフィールドを空欄にします。

6. **OK** をクリックします。  
選択したカスタム修飾の名前、記号、質量シフトが、該当する場合、修飾表で更新されます。

## カスタムアミノ酸修飾の削除

---

注: 処理メソッドや結果で使用しているカスタムアミノ酸修飾を削除すると、予期せぬ動作が発生することがあります。

---

1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。  
Custom Elements ダイアログが開きます。
2. AA Modifications タブが選択されていることを確認します。
3. 削除する修飾を選択します。

---

注: 削除できるのは、ユーザーが追加したカスタム修飾のみです。ソフトウェアに付属している修飾は削除できません。

---

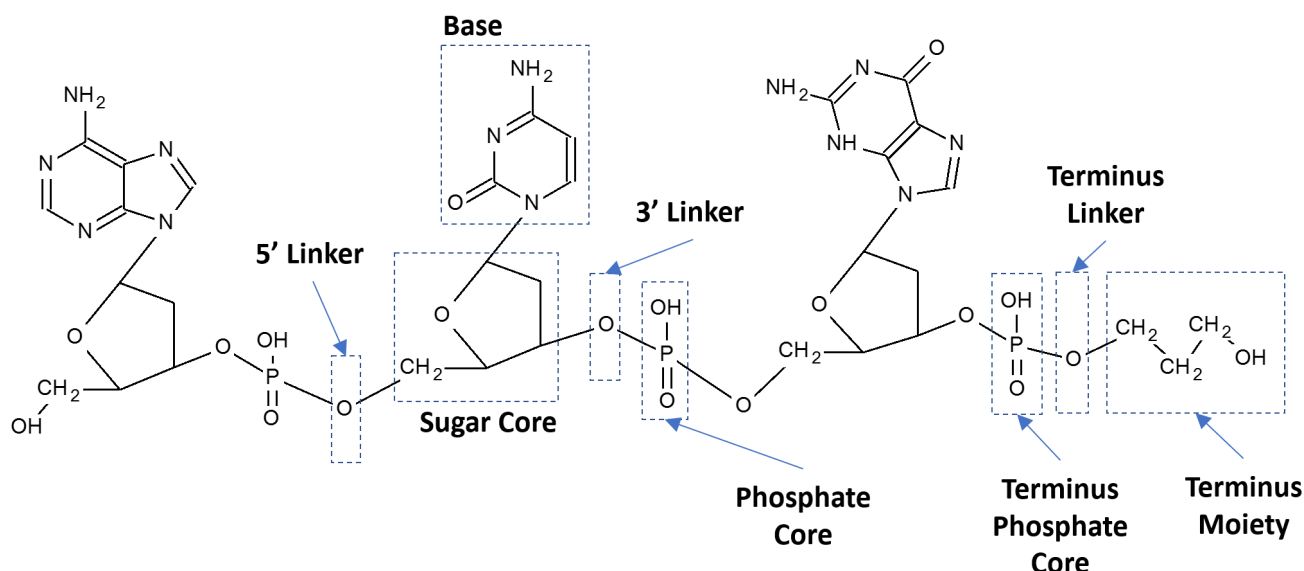
4. **Delete** をクリックします。  
カスタム修飾が修飾表から削除されます。

## カスタムのオリゴヌクレオチド残基または末端基

カスタム要素を使用して、オリゴヌクレオチドのコア構造に追加できるカスタム官能基を含む配列を作成します。これらの修飾を配列に入力し、Molecule Profiler ソフトウェアで探索・識別できます。

オリゴヌクレオチドは、いくつかの部分構造に分解できます。

図 2-1 : オリゴヌクレオチドの部分構造



オリゴヌクレオチドのコア部分構造を変更したり、コア、末端、リン酸骨格を新規に定義したりできます。カスタム修飾配列を作成する場合は、この一般的な構造を使用します：

5'-(Terminus Moiety)-(Terminus Linker)-(Terminus Phosphate Core)-(Residue Type)<sub>1</sub>-...-(Residue Type)<sub>n</sub>-(Terminus Phosphate Core)-(Terminus Linker)-(Terminus Moiety)-3'

New Oligo Residue or Terminus ダイアログの **Type** フィールドには、事前に定義されたいくつかのタイプの残基または末端があります。これらの事前に定義されたタイプは、オリゴヌクレオチドの特定の部分構造に編集を制限し、タイプ自体に特化した修飾の作成を簡素化するものです。各タイプが上記の一般的な構造にどのように当てはまるかを理解するために、次の表を参照してください。

表 2-5 : 種類

種類	カテゴリ	編集可能な部分構造
DNA	残基のタイプ	塩基
DNA*	残基のタイプ	塩基
RNA	残基のタイプ	塩基
RNA*	残基のタイプ	塩基
2'-O-Methyl RNA	残基のタイプ	塩基
2'-O-Methyl RNA*	残基のタイプ	塩基

表 2-5 : 種類 (続き)

種類	カテゴリ	編集可能な部分構造
ロック(LNA)	残基のタイプ	塩基
ロック(LNA)*	残基のタイプ	塩基
その他の残基	残基のタイプ	塩基 5'リンカー 糖コア 3'リンカー リン酸コア
リン酸化末端*	末端部分	末端部分
リン酸化末端	末端部分	末端部分
もう 1 つの末端	末端部分 末端リンカー 末端リン酸コア	末端部分 末端リンカー リン酸コア

\* ホスホロチオエート骨格

化学式を追加・編集するための最も柔軟なタイプは「その他の残基」です。複数の異なるカスタム部分構造に対応するように変更することも可能であり、ユーザーは高度にカスタマイズされたオリゴヌクレオチドを定義できます。同様に、「もう 1 つの末端」タイプでは、カスタムの 5' または 3'-末端、リンカー、コアを定義することができます。

たとえば、[カスタムオリゴヌクレオチドの例](#)を参照してください。

## オリゴヌクレオチド残基または末端基をカスタムで作成する

ヒント! 既存のものをコピーしてオリゴヌクレオチド残基や末端基を作成するには、Oligo List タブで既存のものを選択し、**New From** をクリックします。

1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。  
Custom Elements ダイアログが開きます。
2. Oligo List タブが選択されていることを確認します。  
このリストには、事前に定義されたオリゴヌクレオチド残基と末端基がすべて含まれています。
3. **New** をクリックします。  
New Oligo Residue or Terminus ダイアログが開きます。
4. ダイアログのフィールドに入力します。たとえば、[カスタムオリゴヌクレオチドの例](#)を参照してください。
5. **OK** をクリックします。

---

カスタム残基または末端基は、表の一番下に追加されます。

## カスタムのオリゴヌクレオチド残基または末端基を編集する

1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。  
Custom Elements ダイアログが開きます。
2. Oligo List タブが選択されていることを確認します。
3. 編集する残基または末端基を選択します。

---

注: 編集できるのは、ユーザーが追加した残基と末端基のみです。ソフトウェアに付属している残基と末端基は編集できません。

---

4. **Edit** をクリックします。  
Edit Custom Amino Acid Residue ダイアログが開きます。
5. 残基または末端基のプロパティを編集します。
6. **OK** をクリックします。

## カスタムのオリゴヌクレオチド残基または末端基を削除する

---

注: 処理メソッドや結果で使用しているカスタムのオリゴヌクレオチド残基または末端基を削除すると、予期せぬ動作が発生することがあります。

---

1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。  
Custom Elements ダイアログが開きます。
2. Oligo List タブが選択されていることを確認します。
3. 削除する残基または末端基を選択します。

---

注: 削除できるのは、ユーザーが追加した残基と末端基のみです。ソフトウェアに付属している残基と末端基は削除できません。

---

4. **Delete** をクリックします。  
カスタム残基または末端基は、表から削除されます。

## オリゴヌクレオチド残基と末端基のインポート

オリゴヌクレオチド残基と末端基はテキストファイルからインポートできます。

1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。  
Custom Elements ダイアログが開きます。
2. Oligo List タブが選択されていることを確認します。  
このリストには、事前に定義されたオリゴヌクレオチド残基と末端基がすべて含まれています。
3. **Import** をクリックします。  
Import Text File ダイアログが開きます。
4. テキストファイルに移動して右クリックし、**Open** をクリックします。

### オリゴヌクレオチド残基と末端基のエクスポート

オリゴヌクレオチド残基と末端基はテキストファイルに出力できます。

1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。  
Custom Elements ダイアログが開きます。
2. Oligo List タブが選択されていることを確認します。  
このリストには、事前に定義されたオリゴヌクレオチド残基と末端基がすべて含まれています。
3. エクスポートするオリゴヌクレオチド残基と末端基を選択します。

---

**ヒント! Ctrl+A** を押して、リスト内のすべての残基と末端基を選択します。

---

4. **Export** をクリックします。  
Save As ダイアログが開きます。
5. エクスポートしたオリゴヌクレオチド残基と末端基を保存するテキストファイルの名前を入力します。



化合物ライブラリは、化合物の化学式、構造または配列、同位体パターン、MS/MS スペクトルなどの情報を格納しています。また、化合物ごとに基準スペクトルを指定することも可能です。ライブラリの各エントリを使用して、処理パラメータを作成できます。

ソフトウェアには基本的な化合物ライブラリがインストールされていますが、ユーザーはエントリを追加、編集、削除してライブラリをカスタマイズできます。

---

注: 各エントリには、化学式と少なくとも 1 つの MS/MS スペクトルが必要です。

---

## 化合物ライブラリのオプション



## 構造と配列の使い方

化学構造、ペプチド、オリゴヌクレオチドの配列は、開裂代謝物の候補など、化合物固有のパラメータ値を生成するためにソフトウェアが使用します。

---

注: ソフトウェアは、構造または配列から化学式を自動生成します。

---

ソフトウェアは、マルクーシュ構造や多重構造を含む v2000 と v3000 の両方の mol ファイルを受け入れます。

## 構造の追加

wiff ファイルや txt ファイルを使用して、化合物ライブラリの個々のエントリに基準スペクトルを追加します。

1. Workflow パネルで **Compound Library** をクリックします。  
Compound Library ダイアログが開きます。
2. 次のいずれかの操作を行います。
  - 新しい化合物を作成します。
    - a. **New** をクリックし、オプションリストから **Structure** を選択します。  
New Entry ダイアログが開きます。
    - b. 化合物に **Name** を入力し、**OK** をクリックします。  
Compound Library ダイアログの **Compound name** フィールドに、指定した名前が自動的に入力されます。
  - **Compound name** フィールドに表示されるリストから化合物を選択します。

Compound Library ダイアログが、選択した化合物に対応する情報で更新されます。

3. **Open Structure** をクリックします。  
Open Structure File ダイアログが開きます。
4. 有効な mol ファイルに移動し、選択します。
5. **Open** をクリックします。

Compound Library ダイアログの以下のフィールドが自動入力されます。

- 構造
- 化学式
- 極性
- 同位体パターン

デフォルトでは、**Adduct** フィールドには一価のプロトン付加体  $[M+H]^+$  または  $[M-H]^-$  が入力されます。ソフトウェアはまた、**m/z** フィールドを適切な情報に更新します。

6. 測定の **Polarity** を選択します。  
選択した極性に基づいて、Compound Details タブの **Isotope Pattern**、**m/z**、**Adduct** の値が更新されます。
7. 以下のフィールドに適切な情報を入力してください。
  - 化合物クラス
  - CAS 番号
  - コメント(たとえば、代謝物クラスに関する情報をこのフィールドに追加できます。)
8. Experimental Data タブを開きます。
9. 次のいずれかの操作を行います。
  - wiff ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加するには、[wiff ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加する](#)に進んでください。
  - txt ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加するには、[txt ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加する](#)に進んでください。

## ペプチド配列の追加

wiff ファイルや txt ファイルを使用して、化合物ライブラリの個々のエントリに基準スペクトルを追加します。

1. Workflow パネルで **Compound Library** をクリックします。  
Compound Library ダイアログが開きます。
2. **New** をクリックし、オプションリストから **Sequence** を選択します。  
New Entry ダイアログが開きます。
3. 化合物に **Name** を入力し、**OK** をクリックします。  
Compound Library ダイアログの **Compound name** フィールドに、指定した名前が自動的に入力されます。

4. **Sequence** フィールドに適切なペプチド配列を入力します。

注: 配列にはカスタム要素を含めることができます。[Custom Elements](#) を参照してください。

5. **Chemical formula** フィールドをクリックします。

Compound Library ダイアログの以下のフィールドが自動入力されます。

- 化学式
- 極性
- 同位体パターン

デフォルトでは、**Adduct** フィールドには二重電荷のプロトン付加体  $[M+2H]^{2+}$  または  $[M-2H]^{2-}$  が入力されます。ソフトウェアはまた、**m/z** フィールドを適切な情報に更新します。

6. 測定の **Polarity** を選択します。  
選択した極性に基づいて、Compound Details タブの **Isotope Pattern**、**m/z**、**Adduct** の値が更新されます。
7. Experimental Data タブをクリックします。
8. 次のいずれかの操作を行います。
- wiff ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加するには、[wiff ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加する](#)に進んでください。
  - txt ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加するには、[txt ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加する](#)に進んでください。

## ペプチド配列の命名規則

表 3-1 : ペプチド配列

特性	入力規則	例
複数チェーン	/	LIGHTCHAIN / HEAVYCHAIN
アミノ酸の修飾: 側鎖	[記号]	M[Oxi]
アミノ酸の修飾: C 末端	-[記号]	Y-[Ami]
アミノ酸の修飾: N 末端	[記号]-	[1Me]-Y
結合	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 結合された各残基に [#] を付ける</li> <li>• リンクしている各残基の番号</li> </ul>	S-S Bridge: MYC[*1]PEPC[*1]TIDE

表 3-2 : 結合

結合の種類	規則	例
S-S ブリッジ	ブリッジの両残基に [*#] を追加する	シングルチェーン: MYC[*1]PEPC[*1]TIDE マルチチェーン: LIGHTC[*1]HAIN / MC[*2]HEAVYC[*1]HAINC[*2] ]AD
エステル / アミドブリッジ	結合残基の 1 つに '[O-1]' を追加する	MYR[*1]PEPD[*1][O-1]TIDE
環状	C タームに '[H]' を追加する	M[*1]YCPEPCTIDE[*1]-[H]
ループ: 最初または最後のインデックスでリンクしている残基と、末端基が架橋結合の一部でないもの	末端基を明示的に追加する	[H]-C[*1]YCPEPCTIDC[*1]- [OH]

## オリゴヌクレオチド配列の追加

オプションで、化合物ライブラリにオリゴヌクレオチド化合物情報を追加します。ライブラリ内の化合物には MS/MS スペクトルがあり、処理時に使用されます。

注: 化合物がライブラリにない場合は、ユーザーが手動で処理メソッドに追加できます。

配列はテキスト形式で追加されます。治療用オリゴヌクレオチドの多様な修飾やカスタム要素を取り込むには、配列入力のルールを守ってください。オリゴヌクレオチド配列の命名規則を参照してください。修飾やカスタム要素の詳細なリストについては、[Custom Elements](#) を参照してください。

1. Workflow パネルで **Compound Library** をクリックします。
2. **New > Oligonucleotide Sequence** をクリックします。  
New Entry ダイアログが開きます。
3. オリゴヌクレオチド配列の **Name** を入力し、**OK** をクリックします。
4. **Sequence** 表に配列を入力します。

注: 配列にはカスタム要素を含めることができます。[Custom Elements](#) を参照してください。

5. **Chemical formula** フィールドをクリックすると化学式が自動的に更新されます。
6. (オプション) Compound Details タブのフィールドに情報を入力します。
7. Experimental Data タブをクリックします。
8. 次のいずれかの操作を行います。

- wiff ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加するには、[wiff ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加する](#)に進んでください。
- txt ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加するには、[txt ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加する](#)に進んでください。

## オリゴヌクレオチド配列の命名規則

オリゴヌクレオチド配列は、塩基に特徴的な 1 文字の識別子で指定できます。

- アデニン(A)
- シトシン(C)
- チミン(T)
- グアニン(G)
- ウラシル(U)

デオキシリボ核酸(DNA、d)、リボ核酸(RNA、r)などのオリゴヌクレオチド型は、配列の先頭に 1 文字、または混合オリゴヌクレオチド型は塩基間に 1 文字の識別子を追加して識別することができます。

ロック核酸(LNA)のように合成ヌクレオチドを含むオリゴヌクレオチドでは、配列を定義する際に各残基の完全な記号を使用します。たとえば、LNA-A は IA、2'-メトキシメチル-A は moA となります。

各塩基の末端にはホスホロチオエート(HPSO、\*)などの骨格修飾が加えられています。

特定のオリゴヌクレオチド残基の後に炭素 13(/13Cn/)などの重原子が付加されます。*n* は重原子の数を表します。

**注:** 上記の例では、"/13Cn/" という表記で、既存の式に重原子を追加しています。核酸塩基の原子を重い標識に置き換えるわけではありません。同位体で標識された核酸塩基を定義するには、カスタム修飾が必要です。

ユーザー定義のカスタム修飾を識別するために、最初と最後の文字としてスラッシュ(/)を使用します。カスタム修飾の追加、および修飾の追加使用例と関連する命名規則については、[Custom Elements](#) を参照してください。

表 3-3 : オリゴヌクレオチドの表記方法

特性	入力規則	例
DNA	d	dACG T
RNA	r	rACG U
DNA と LNA の混合	d, l	dACG lT
ホスホロチオエート骨格	*	dA*C*G* T*
2' メトキシメチル(2'MOE)糖修飾	mo	moAmoCmoG moT
炭素 13	/13Cn/	dACG T/13C2/

表 3-3 : オリゴヌクレオチドの表記方法 (続き)

特性	入力規則	例
カスタム残基	//	dACG / その他の残基 /

## wiff ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加する

1. **Open wiff File** をクリックします。  
Select Data ダイアログが開きます。
2. 適切な場所に移動し、追加する化合物のスペクトルを含む wiff ファイルを選択し、**OK** をクリックします。

注: wiff ファイルには、プレカーサーイオンとして化合物が含まれている必要があります。

表 3-4 : 基準スペクトルの追加

ファイルに複数の前駆体が含まれている	ファイルに 1 つの前駆体が含まれている
<p>選択した wiff ファイルに複数の前駆体がある場合は、Select a Spectrum ダイアログが開き、利用可能な前駆体ごとに Precursors 表に以下の情報が表示されます。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• m/z</li> <li>• 時間(分)</li> <li>• 品質</li> <li>• 電荷</li> </ul>	<p>wiff ファイルに前駆体が 1 つしか含まれていない場合、MS/MS Spectrum ウィンドウはそのスペクトルで更新されます。</p>
<p>適用するフィルターのチェックボックスをオンにします。</p> <p>必要に応じて、1 つまたは両方のフィルターオプションを選択します。<b>Precursors</b> 表が更新され、指定された条件を満たす行のみが表示されます。</p>	<p>ソフトウェアは、選択した前駆体の <b>m/z</b> と <b>Charge</b>、および実験の衝突エネルギーを使用して、Compound Library ダイアログの <b>Spectra</b> フィールドに一意の情報行を作成します。たとえば、Prec(m/z), CE(collision energy from experiment), Charge(Charge) がフィールドに表示されます。</p> <p>スペクトルのタイトルには、Compound Information グループの <b>Polarity</b> と <b>Compound name</b> に続き、<b>Spectra</b> フィールドの情報が表示されます。</p> <p><b>Spectrum Details</b> には、選択した MS/MS スペクトルに対応する機器タイプ、保持時間、電荷、衝突エネルギーが表示されます。この情報は読み取り専用です。</p>

表 3-4 : 基準スペクトルの追加 (続き)

ファイルに複数の前駆体が含まれている	ファイルに 1 つの前駆体が含まれている
<p>Precursors 表の行を選択します。</p> <p>MS/MS Spectrum ウィンドウが、選択した前駆体のスペクトルで更新されます。</p> <hr/> <p><b>ヒント!</b> 複数行を選択するには <b>Ctrl+</b> クリックを使用します。複数行を選択した場合は、最初に選択した前駆体の <b>MS/MS Spectrum</b> が表示されます。</p>	—
<p><b>Charge state from</b> チェックボックスをオンにした場合は、<b>from</b> と <b>to</b> の値をオプションから選択します。<b>from</b> 値は Precursors 表の使用可能な最小電荷状態と同等です。<b>to</b> 値は Precursors 表に表示される使用可能な最大電荷状態と同等です。</p>	—
<p><b>Quality above</b> チェックボックスがオンの場合は、表示されるフィールドに適切な値を入力します。</p>	—
<p><b>OK</b> をクリックします。</p>	—
<p>Precursors 表で選択した各行について、ソフトウェアは選択した前駆体の <b>m/z</b> と <b>Charge</b>、および実験の衝突エネルギーを使用して、Compound Library ダイアログの <b>Spectra</b> フィールドに一意的な情報行を作成します。たとえば、Prec(m/z), CE(collision energy from experiment), Charge(Charge) がフィールドに表示されます。</p> <p><b>Spectra</b> フィールドに表示される情報と <b>MS/MS Spectrum</b> フィールドに表示されるスペクトルは、Precursors 表で選択した最初の行に対応します。</p> <p>スペクトルのタイトルには、Compound Information グループの <b>Polarity</b> と <b>Compound name</b> に続き、<b>Spectra</b> フィールドの情報が表示されます。</p> <p><b>Spectrum Details</b> には、選択した MS/MS スペクトルに対応する機器タイプ、保持時間、電荷、衝突エネルギーが表示されます。この情報は読み取り専用です。</p>	—

3. (オプション)表示されたリストから別の **Spectra** を選択します。

**MS/MS Spectrum** と **Spectrum Details** が更新され、選択内容に関連する情報が表示されます。

4. スペクトルを化合物の事前に定義されたスペクトルとして保存するには、表示されるリストから適切な **Spectra** を選択し、**Set as Reference** をクリックします。  
**Spectra** フィールドに表示される情報に **- Reference** が追加されます。たとえば、Prec (xx.xx), CE(xx), Charge(xx) - Reference がフィールドに表示されます。
5. **Save** をクリックします。
6. **OK** をクリックします。  
新しい化合物がライブラリに保存され、Compound Library ダイアログが閉じます。

## txt ファイルから基準 MS/MS スペクトルを追加する

1. **Open txt File** をクリックします。  
Open txt File ダイアログが開きます。
2. 適切な場所へ移動し、MS/MS txt ファイルを選択して、**OK** をクリックします。  
Spectrum Details ダイアログが開きます。
3. 選択したスペクトルの適切な情報を入力し、**OK** をクリックします。

ソフトウェアは、**Precursor mass (m/z)**、**Collision energy**、**Charge** フィールドの情報を使用して、Compound Library ダイアログの **Spectra** フィールドの情報を生成します。フィールドにはたとえば、Prec(前駆体質量(m/z))、CE(衝突エネルギー)、Charge(電荷)が表示されます。

**Spectra** フィールドに表示される情報と **MS/MS Spectrum** フィールドに表示されるスペクトルは、選択した txt ファイルに対応します。

スペクトルのタイトルには、Compound Information グループの **Polarity** と **Compound name** に続き、**Spectra** フィールドの情報が表示されます。

**Spectrum Details** には、選択した MS/MS スペクトルに対応する機器タイプ、保持時間、電荷、衝突エネルギーが表示されます。この情報は読み取り専用です。

4. (オプション)表示されたリストから別の **Spectra** を選択します。  
**MS/MS Spectrum** と **Spectrum Details** が更新され、選択内容に関連する情報が表示されます。
5. スペクトルを化合物の事前に定義されたスペクトルとして保存するには、表示されるリストから適切な **Spectra** を選択し、**Set as Reference** をクリックします。  
**Spectra** フィールドに表示される情報に **- Reference** が追加されます。たとえば、Prec (xx.xx), CE(xx), Charge(xx) - Reference がフィールドに表示されます。
6. **Save** をクリックします。
7. **OK** をクリックします。  
新しい化合物がライブラリに保存され、Compound Library ダイアログが閉じます。



---

## Results Table から化合物ライブラリに情報を追加する

---

注: この機能は、低分子およびペプチドの Results ファイルにのみ利用可能です。抗体薬物複合体およびオリゴヌクレオチドの Results ファイルでは、この機能は利用できません。

---

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
5. Potential Metabolites 表の行を選択し、右クリックして **Add to Compound Library** を選択します。

---

注: 選択した行に MS/MS スペクトルが含まれていない場合、**Add to Compound Library** オプションは利用できません。

---

6. 確認メッセージへの応答として **OK** をクリックします。
7. Workflow パネルで **Compound Library** をクリックします。  
Compound Library ダイアログが開きます。追加した代謝物が **Compound name** リストに追加されます。

生体内変換セットは、一般的な変換のリストです。

## 生体内変換の概要

ユーザーは、ソフトウェアにインストールされている事前に定義された生体内変換セットを使用して予測される代謝物を探索したり、新しい生体内変換セットを作成したりできます。たとえば、分析する化合物ごとに異なるセットを作成することもできます。インストールされた生体内変換には、配列や構造の自動提案の際に使用する埋め込み情報が含まれています。

メソッド固有の生体内変換セットは、各メソッドタイプのデフォルトとして使用されます。たとえば、ペプチドメソッドでは、バイオ医薬品生体内変換セットをデフォルトとして使用します。この生体内変換セットは、ペプチドの生体内代謝反応に最も関連性の高い生体内変換を含んでいます。

オリゴヌクレオチドの場合は、事前に定義された3つの変換セットから1つを選択します。

- **Oligonucleotide Basic:** 修飾点の簡潔なリストを提供し、塩基または骨格に影響を与えるものだけに限定されます。
- **Oligonucleotide Comprehensive:** 合成、代謝、保存の過程で起こりうるすべての転換を広範囲にカバー。
- **Oligonucleotide Metabolites:** 包括的なセットのうち、転換のみに焦点を当てたサブセットを含んでいます。

サンプルの由来を考慮し、最も代表的なセットを選択してください。デフォルトのエントリから、または新たなエントリを追加して、ユーザー独自の生体内変換セットを構築することができます。[生体内変換セットの作成](#)および[生体内変換セットの編集](#)を参照してください。

化学式の変化を特定したり、既存の2つの生体内変換を組み合わせたりして、カスタム生体内変換を作成します。

新規に作成する生体内変換セットには、カスタム生体内変換や既存セットの生体内変換を含めることができます。

---

**ヒント!** 生物製剤データを評価する場合は、可能性の高い生体内変換を選択して小規模なセットを作成し、データの解析を迅速に行うことができます。

---

## 生体内変換セットの作成

1. Workflow パネルで **Biotransformations** をクリックします。  
Biotransformations ダイアログが開きます。
2. **New** をクリックします。  
New Biotransformation Set ダイアログが開きます。
3. **Working biotransformation set** フィールドにセットの名前を入力します。
4. **New Biotransformation** をクリックします。

New Biotransformation ダイアログが開きます。

5. **Name** フィールドに生体内変換の名前を入力します。
6. (オプション)**Description** フィールドと **Comments** フィールドに、生体内変換に関連する適切な詳細を入力します。
7. 次のいずれかの操作を行います。

表 4-1：生体内変換セットの作成

単一の生体内変換を作成する	複合的な生体内変換を作成する
<b>Single biotransformation</b> をクリックします。	<b>Combined biotransformation</b> をクリックします。
<b>Formula from</b> フィールドで失われる構造の部分を同定します。	<b>Biotransformation 1</b> フィールドと <b>Biotransformation 2</b> フィールドのそれぞれから生体内変換を選択します。
<b>Formula to</b> フィールドに生体内変換の式を入力します。	—

注: 利用可能な生体内変換は、ワーキングセット内に存在するものです。

注: ソフトウェアは、生体内変換による変化を自動的に計算し、**Mass shift** フィールドにこの値を入力します。

8. **OK** をクリックします。  
新しい生体組織変換は、生体組織変換のワーキングセットと生体組織変換のソースセットの両方の表に表示されます。
9. **OK** をクリックして、新しい生体内変換セットを保存します。  
New Biotransformation Set ダイアログが閉じます。
10. **OK** をクリックします。  
Biotransformations ダイアログが閉じます。

## 生体内変換セットの編集

1. Workflow パネルで **Biotransformations** をクリックします。  
Biotransformations ダイアログが開きます。
2. 表示されたリストから適切な **Set** を選択します。
3. **Edit** をクリックします。  
Edit Biotransformation Set ダイアログが開き、選択したセットの名前が **Working biotransformation set** フィールドに表示されます。
4. **Working biotransformation set** フィールドに適切なセットの名前を入力します。
5. 生体内変換のワーキングセット表で行を選択します。
6. **Edit Biotransformation** をクリックします。  
Edit Biotransformation ダイアログが開きます。

## 生体内変換セット

---

- (オプション) **Name**、**Description**、**Comments** の各フィールドに必要な変更を加えます。
- (オプション) 次のいずれかの操作を行います。

表 4-2 : 生体内変換セットの編集

単一の生体内変換を作成する	複合的な生体内変換を作成する
<b>Single biotransformation</b> をクリックします。	<b>Combined biotransformation</b> をクリックします。
<b>Formula from</b> フィールドで失われる構造の部分を同定します。	<b>Biotransformation 1</b> フィールドと <b>Biotransformation 2</b> フィールドのそれぞれから生体内変換を選択します。
<b>Formula to</b> フィールドに生体内変換の式を入力します。	—

---

注: 利用可能な生体内変換は、ワーキングセット内に存在するものです。

---

- OK** をクリックします。  
更新された生体組織変換は、生体組織変換のワーキングセットと生体組織変換のソースセットの両方に表示されます。
- OK** をクリックすると、変更を保存できます。  
Edit Biotransformation Set ダイアログが閉じます。
- OK** をクリックします。  
Biotransformations ダイアログが閉じます。

## 生体内変換セットの削除

- Workflow パネルで **Biotransformations** をクリックします。  
Biotransformations ダイアログが開きます。
- 表示されたリストから適切な **Set** を選択します。
- Delete** をクリックします。  
確認メッセージが開きます。
- Yes** をクリックします。
- OK** をクリックします。  
Biotransformations ダイアログが閉じます。

ソフトウェアは、低分子、ペプチド、オリゴヌクレオチド、抗体薬物複合体という4つのワークフローをサポートしています。

目的のサンプルに含まれる代謝物の候補を見つけるには、調査対象のサンプルファイルに固有の処理パラメータを含むメソッドを作成する必要があります。

## メソッドタイプの選択



## パラメータ値の選択



## 一般的な処理パラメータの設定



## 化合物固有の処理パラメータの設定

## 処理パラメータ

Molecule Profiler ソフトウェアの処理パラメータには、wiff ファイルを処理するための属性と値がすべて含まれています。処理機能は、代謝物の探索と特性解析に使用します。処理機能には、代謝物に対する信頼度スコアの割り当ても含まれています。

以下の処理パラメータテンプレートを使用します。

- 低分子
- ペプチド
- オリゴヌクレオチド
- 抗体薬物複合体

テンプレートは、さまざまな種類の分析で考慮される化合物やワークフローの種類を表しています。

注: 化合物の配列を追加する場合は、配列名が正しくフォーマットされていることを確認してください。[ペプチド配列の命名規則](#)または[オリゴヌクレオチド配列の命名規則](#)を参照してください。

## メソッドタイプの選択

1. Workflow パネルで **Processing Parameters** をクリックします。  
Processing Parameters ワークスペースが開きます。
2. **New** をクリックし、表示されたリストからメソッドのタイプを選択します。

3. [パラメータ値の選択](#)のステップ 2 に進みます。

## パラメータ値の選択

1. Workflow パネルで **Processing Parameters** をクリックします。  
Processing Parameters ワークスペースが開きます。
2. Processing Parameters ワークスペースに化合物情報を入力します。
  - 低分子ワークフローと抗体薬物複合体ワークフローでは、Structure グループの **Open Structure** をクリックし、対象となる mol ファイルを選択した後、構造をインポートします。
  - ペプチドワークフローとオリゴヌクレオチドワークフローでは、Sequence グループに適切な配列を入力します。

---

**ヒント!** または、**Select From Library** をクリックして化合物ライブラリからエントリを選択し、構造または配列を入力することもできます。ワークフローに一致するエントリのみがリストで利用できます。[ライブラリから化合物を選択する](#)を参照してください。

---

3. **Polarity**、**Charge state**、および **Adduct** または **Ion type** がデータセットに適していることを確認します。  
オリゴヌクレオチドは、通常、負極性または負イオンモードで取得されます。質量が 10,000 Da 以下のオリゴヌクレオチドの推奨電荷範囲は、-2 ~ -20 です。10,000 Da を超えるオリゴヌクレオチドの処理は推奨しません。
4. 代謝物の候補を見つける際に使用するピーク検出戦略を選択します。[ピーク検出戦略の概要](#)を参照してください。
5. 処理中の化合物に依存しないパラメータを設定します。[一般的な処理パラメータ](#)を参照してください。
6. 化合物に依存するパラメータを設定します。[化合物固有の処理パラメータ](#)を参照してください。
7. **Save and Close** をクリックします。
8. Save Processing Parameters As ダイアログの **Folder** フィールドで、メソッドの保存場所を選択します。
9. **Name** フィールドにメソッドの名前を入力し、**OK** をクリックします。  
メソッドが保存され、Processing Parameters ワークスペースが閉じます。

## ライブラリから化合物を選択する

1. Workflow パネルで **Processing Parameters** をクリックします。  
Processing Parameters ワークスペースが開きます。
2. **Select From Library** をクリックします。  
Select From Library ダイアログが開きます。
3. **Compound name** フィールドのリストから化合物を選択します。

---

**注:** 低分子および抗体薬物複合体の処理パラメータでは、化合物ライブラリ内で構造として同定されたエントリのみがリストに表示されます。ペプチドおよびオリゴヌクレオチドの処理パラメータでは、化合物ライブラリ内で配列として同定されたエントリのみがリストに表示されます。

---

4. **OK** をクリックします。  
選択した化合物の情報で、処理パラメータのワークスペースが更新されます。
5. 基準 MS/MS スペクトルを確認または編集するには、**Compound-Specific Parameters > Product Ions and Neutral Losses** をクリックします。

注: Reference MS/MS Spectrum ペインには、選択した化合物の MS/MS スペクトルが入力されます。

6. (オプション) 複数の基準スペクトルが利用できる場合は、必要に応じて、リスト内を移動して別のスペクトルを選択します。

注: 異なる基準スペクトルを選択した場合は、Reference MS/MS Spectrum ペインが更新され、プロダクトイオンとニュートラルロスの表から情報がクリアされます。

7. フラグメント表を設定するには、**Assign Fragments** をクリックします。
8. [パラメータ値の選択](#)のステップ 5 に進みます。

## ピーク検出戦略の概要

ピーク検出戦略とは、対象サンプル中の代謝物候補を見つけるためにソフトウェアが使用するアルゴリズムのことです。ユーザーは、Peak Finding Strategy グループで特定のアルゴリズムを選択してデータを処理することができます。

アルゴリズム	説明
<b>TOF MS</b>	
<b>Predicted metabolites</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Small molecule:</b> このアルゴリズムでは、選択した生体内変換セット、予測される開裂代謝物、およびその組み合わせに基づいて代謝物を探索できます。</li> <li>• <b>Peptides:</b> このアルゴリズムでは、生体内変換セット、予測される異性体、およびその組み合わせに基づいて代謝物を探索できます。</li> <li>• <b>Oligonucleotides:</b> このアルゴリズムでは、生体内変換セット、予測される異性体(加水分解開裂、末端 n+1、内部 n-1 生成物を含む)、およびその組み合わせに基づいて代謝物を探索できます。</li> <li>• <b>ADC:</b> このアルゴリズムでは、生体内変換、開裂、抗体フラグメント、およびその 3 つの組み合わせに基づいて代謝物を探索できます。</li> </ul> <p><a href="#">一般的な処理パラメータ</a>を参照してください。どのメソッドでも、MS Parameters タブで選択した <b>Available Adducts</b> は、組み合わせを使用する際にも含まれます。</p> <p>注: オリゴヌクレオチドデータの処理には、<b>Predicted metabolites</b> オプションを推奨します。</p>

## 処理メソッドの作成

アルゴリズム	説明
<b>Generic peak finding</b>	<p>このアルゴリズムでは、想定外の代謝物を探索できます。<b>Apply mass defect filter</b> または <b>Apply charge state filter</b> を選択すれば、さらに絞り込むことができます。</p> <p>このアルゴリズムを制御するパラメータは、<b>Chromatographic Data</b> と <b>MS Parameters</b> のタブにあります。<a href="#">一般的な処理パラメータ</a>を参照してください。</p> <hr/> <p><b>注:</b> このオプションは、<b>Predicted metabolites</b> オプションと併せて、オリゴヌクレオチドデータの処理に推奨されます。</p>
<b>Apply mass defect filter</b>	<p>Compound-Specific Parameters で指定した <b>Mass Defect</b> の範囲で選択したフィルターを示すピークに探索を限定するフィルターです。このフィルターを選択すると、一般的なピークファインダーで検出された代謝物のうち、指定した条件を満たすものだけが結果に含まれます。</p>
<b>Apply charge state filter</b>	<p>Compound Information グループの Charge state タブに含まれる電荷を持つピークに探索を限定するフィルターです。このフィルターを選択すると、一般的なピークファインダーで検出された代謝物のうち、指定した条件を満たすものだけが結果に含まれます。</p> <hr/> <p><b>注:</b> このオプションは、オリゴヌクレオチドデータの処理には推奨されません。</p>
<b>Mass defect</b>	<p>このアルゴリズムは、低分子メソッドにのみ適用可能です。</p> <p>このアルゴリズムでは、分数質量を用いてデータをフィルタリングします。化合物、選択した生体内変換、および開裂される可能性のある代謝物のすべてが、質量範囲内で特定の代謝物を探索できる利用可能なフィルターに寄与します。</p> <p>このアルゴリズムを制御するパラメータは、Mass Defect タブにあります。<a href="#">化合物固有の処理パラメータ</a>を参照してください。</p>
<b>Isotope pattern</b>	<p>このアルゴリズムでは、親化合物と類似した同位体パターンを持つ代謝物を探索します。</p> <hr/> <p><b>ヒント!</b> 化合物が放射標識されている場合は、Processing Parameters ダイアログで <b>Compound-Specific Parameters &gt; Isotope Pattern</b> を選択して、同位体濃縮度を定義できます。</p> <hr/> <p>このアルゴリズムを制御するパラメータは、Isotope Pattern タブにあります。<a href="#">化合物固有の処理パラメータ</a>を参照してください。</p>



アルゴリズム	説明
<b>TOF MSMS</b>	
<p>注: このアルゴリズムは、パラメータの処理メソッドが基準 MS/MS スペクトルを含んでいる場合にのみ機能します。基準 MS/MS スペクトルは、化合物ライブラリのエントリから、または Product Ions and Neutral Losses タブで手動で追加できます。<a href="#">化合物固有の処理パラメータ</a>を参照してください。</p>	
<b>Find characteristic product ions</b>	<p>ソフトウェアはこのアルゴリズムを用いて、親化合物内に特徴的なプロダクトイオンを持つ代謝物を IDA データおよび SWATH 測定データから探索します。</p> <p>このアルゴリズムでは、特定されたイオンのすべて、または限られた数のイオンを探索できます。</p> <p>このアルゴリズムを制御するパラメータは、Product Ions and Neutral Losses タブにあります。<a href="#">化合物固有の処理パラメータ</a>を参照してください。</p>
<b>All specified ions</b>	<p>このオプションを選択すると、特定されたすべてのイオンが探索されます。たとえば、4 つのプロダクトイオンを特定し、これらのイオンをすべて持つピークの探索を行った場合、完全に一致するものだけが代謝物の候補として特定されます。</p>
<b>At least __ ions</b>	<p>このオプションを選択すると、Product Ions and Neutral Losses タブで選択したイオンのみが探索されます。たとえば、少なくとも 2 つのイオンを持つピークを探索する場合、選択したイオンのうち少なくとも 2 つが代謝物の MS/MS スペクトルに存在しなければ、ピークを代謝物と見なすことはできません。</p>
<b>Find characteristic neutral losses</b>	<p>ソフトウェアはこのアルゴリズムを用いて、親化合物にニュートラルロスを持つ代謝物を IDA データおよび SWATH 測定データから探索します。このアルゴリズムは、ペプチドやオリゴヌクレオチドのワークフローには適用されません。</p> <p>このアルゴリズムでは、すべて、または限られた数の損失を探索できます。たとえば、4 つのニュートラルロスを特定し、これらの損失がすべてあるピークの探索を行った場合、完全に一致するものだけが代謝物の候補として特定されます。少なくとも 2 つの損失があるピークを探索する場合、選択した損失のうち少なくとも 2 つが代謝物の MS/MS スペクトルに存在しなければ、ピークを代謝物と見なすことはできません。</p> <p>このアルゴリズムを制御するパラメータは、Product Ions and Neutral Losses タブにあります。<a href="#">化合物固有の処理パラメータ</a>を参照してください。</p>
<b>All specified losses</b>	<p>このオプションを選択した場合、すべての代謝物が探索され、すべてのニュートラルロスが報告されます。</p>

## 処理メソッドの作成

アルゴリズム	説明
<b>At least __ losses</b>	このオプションを選択すると、Product Ions and Neutral Losses タブで選択した損失のみが探索されます。たとえば、4 つのニュートラルロスを特定し、これらの損失がすべてあるピークの探索を行った場合、完全に一致するものだけが代謝物の候補として特定されます。少なくとも 2 つの損失があるピークを探索する場合、選択した損失のうち少なくとも 2 つが代謝物の MS/MS スペクトルに存在しなければ、ピークを代謝物と見なすことはできません。
<b>Consider internal neutral losses</b>	このアルゴリズムは SWATH の測定データに特化したものです。 この戦略は、少なくとも 2 つのニュートラルロスを選択している場合にのみ機能します。内部のニュートラルロスは、2 つのニュートラルロス式の差分です。なお、"Find by Internal Neutral Loss" を有効にするには、一方のニュートラルロス式が他方のニュートラルロス式のサブセットである必要があります。
<b>Isotope pattern (SWATH Only)</b>	このアルゴリズムは SWATH の測定データに特化したものです。 Compound-Specific Parameters の Product Ions and Neutral Losses タブの表で選択したフラグメント同位体パターンと一致するフラグメント同位体パターンを持つプレカーサーには、代謝物としてのフラグが付きます。ユーザーは、 <b>Isotope Pattern</b> 列のフラグメント同位体式のチェックボックスを 1 つ以上オンにする必要があります。ピークを代謝物とみなすには、MS/MS Parameters タブで指定した MS/MS $m/z$ 許容値と強度許容度の範囲内で、実験的フラグメント同位体パターンが理論的フラグメント同位体パターンに一致している必要があります。

## 一般的な処理パラメータ

一般的なパラメータは、処理する化合物に依存しない設定です。一般的なパラメータは以下の各タブで管理します。

### 一般的なパラメータ

←	←	↘	↘
低分子	ペプチド	オリゴヌクレオチド	抗体薬物複合体
<a href="#">Biotransformations タブ</a>	<a href="#">Biotransformations タブ</a>	<a href="#">Biotransformations タブ</a>	<a href="#">Biotransformations タブ</a>
<a href="#">Chromatographic Data タブ</a>	<a href="#">Chromatographic Data タブ</a>	<a href="#">Chromatographic Data タブ</a>	<a href="#">Chromatographic Data タブ</a>
<a href="#">MS Parameters タブ</a>	<a href="#">MS Parameters タブ</a>	<a href="#">MS Parameters タブ</a>	<a href="#">MS Parameters タブ</a>
<a href="#">MS/MS Parameters タブ</a>	<a href="#">MS/MS Parameters タブ</a>	<a href="#">MS/MS Parameters タブ</a>	<a href="#">MS/MS Parameters タブ</a>

Formula Prediction タブ (低分子メソッドと抗体薬物複合体メソッド)    Confirmation Scoring タブ    Confirmation Scoring タブ    Formula Prediction タブ (低分子メソッドと抗体薬物複合体メソッド)  
 Confirmation Scoring タブ    Confirmation Scoring タブ

## Biotransformations タブ

予想される生体内変換を含む生体内変換セットを同定します。このソフトウェアには、事前に定義された生体内変換セットが含まれています。カスタム生体内変換セットを作成する場合は、[生体内変換セットの作成](#)を参照してください。

パラメータ	説明
Select Set	<p>処理に使用する別の生体内変換セットをデータベースから選択します。</p> <p>このオプションを選択すると、次のような警告が表示される場合があります:                  "The selected biotransformation set might no longer exist in the biotransformations database." これは、選択された生体内変換セットが処理パラメータファイルに保存されているためです。Biotransformations ワークスペース内の生体内変換に後から変更を加えても、処理パラメータファイルには保存されません。</p> <p>保存した生体組織変換セットを用いて再処理を行うには、Biotransformations ダイアログで <b>OK</b> をクリックし、<b>Cancel</b> をクリックします。新しい生体内変換セットで処理パラメータファイルを更新するには、次のようにします。</p> <ol style="list-style-type: none"> <li><b>OK</b> をクリックします。</li> <li>生物変換セットを選択します。</li> </ol> <p>メッセージが表示されます: "If you select this new biotransformation set, you might not be able to re-select the existing set. Do you want to continue?"</p> <ol style="list-style-type: none"> <li><b>OK</b> をクリックします。</li> </ol>

## Chromatographic Data タブ

パラメータ	説明
Chromatographic Peak	

## 処理メソッドの作成

パラメータ	説明
<b>Retention time window</b>	<p>代謝物の候補を探索する保持時間の範囲を指定します。保持時間(RT)ウィンドウの大きさは、処理時間に正比例します。</p> <p>カラムのボイドボリュームを除くため、0.00 分より大きい値を指定します。</p> <p><b>to</b> 値は <b>from</b> 値より大きい値にする必要があります。</p> <p>RT の範囲が広いと処理時間が非常に長くなるため、すべてのワークフローで RT ウィンドウを設定することをお勧めします。範囲は、分析する実験に大きく依存します。各実験の RT ウィンドウを調べてください。開始時間は 0.00 分より少し大きい値に、終了時間は目的のピークの少し後、またはメソッドが勾配(グラジエント)の高溶出段階または洗浄段階に入ったときとすることをお勧めします。</p>
<b>MS data</b>	<p>XIC の幅の設定方法を指定します。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>XIC width</b>: 抽出イオンクロマトグラムのうち、処理の対象として考慮する幅を指定します。</li> <li>• <b>Automatic</b>: ソフトウェアは、選択したデータをもとに最適な幅を算出します。</li> </ul> <p>オリゴヌクレオチドワークフローでは、<b>Automatic</b> 設定を推奨します。</p> <hr/> <p><b>注</b>: SWATH 測定データの処理中にこのオプションを選択していた場合は、<b>XIC width</b> オプションが適用されます。</p>
<b>LC peak separation</b>	<p>溶出ピークの積分精度を判定します。このパラメータは、テーリングが顕著なクロマトグラムのピークにも対応します。</p> <p>溶出ピークが近い場合は、このパラメータを低く設定します。低く設定すると、ピークを 1 つのピークとしてではなく、別々に考慮することができます。</p>
<b>TOF MS</b>	
<b>Minimum peak width</b>	<p>この値を下回る幅を持つクロマトグラムのピークを除外します。</p> <p>狭いピークを含める場合は、値を低く設定します。</p>

パラメータ	説明
<b>Minimum peak intensity</b>	<p>指定した TOF MS 強度レベルを下回るクロマトグラムのピークを考慮から除外します。</p> <p>クロマトグラムのデータにノイズがある場合に使用します。ノイズレベルギリギリのしきい値を設定することで、ノイズの影響と思われるピークを排除できます。</p> <p>Molecule Profiler ソフトウェアまたは SCIEX OS の Explorer ワークスペースなどのビューアソフトウェアでデータを処理する前に、ピーク幅を調べます。調べたすべてのピークの一般的な平均を使用して、最小ピーク幅を計算します。</p> <p>TOF MS または IDA 実験を含むオリゴヌクレオチドメソッドでは、50 cps の設定を推奨します。</p>
<b>Use smoothing</b>	<p>ノイズの中の強度のばらつきをなくし、ピークをノイズから区別します。</p> <p>クロマトグラムのデータにノイズがある場合に選択します。</p> <p>オリゴヌクレオチドワークフローでは、このオプションを推奨します。</p>
<b>Sample-control offset</b>	MS サンプルと対照クロマトグラムをアライメントします。処理中、ソフトウェアはすべての対照をシフトしてから、サンプルと比較します。
<b>Sample/control ratio</b>	代謝物とみなすには対照と比較してサンプルのピークが何倍大きい必要があるかを指定します。
<b>TOF MS/MS</b>	
<b>Minimum peak intensity</b>	<p>このパラメータは、MS/MS ピーク検出アルゴリズムで SWATH 測定データを処理するときのみ使用されます。IDA データを処理する場合、このパラメータは使用しません。</p> <p>指定した TOF MS/MS 強度レベルを下回るクロマトグラムのピークを考慮から除外します。</p> <p>クロマトグラムのデータにノイズがある場合に使用します。ノイズレベルギリギリのしきい値を設定することで、ノイズの影響と思われるピークを排除できます。</p>
<b>Analog data</b>	
<b>Wavelength (UV only)</b>	代謝物の候補を確認する際に使用する波長を選択します。
<b>Time offset from MS</b>	<p>MS とアナログのクロマトグラムデータをアライメントします。処理中、ソフトウェアはアナログデータをシフトしてから MS データと比較します。</p> <hr/> <p>注: また、MS とアナログのクロマトグラムデータは、後処理として Analog Interpretation ワークスペースでアライメントできます。<a href="#">R.T. Offset の変更</a>を参照してください。</p> <hr/>

## 処理メソッドの作成

パラメータ	説明
<b>LC peak separation</b>	溶出ピークの積分精度を判定します。このパラメータは、テーリングが顕著なクロマトグラムのピークにも対応します。  溶出ピークが近い場合は、このパラメータを低く設定します。低く設定すると、ピークを1つのピークとしてではなく、別々に考慮することができます。
<b>Minimum peak width</b>	この値を下回る幅を持つクロマトグラムのピークを除外します。  狭いピークを含める場合は、値を低く設定します。
<b>Minimum peak intensity</b>	指定した強度レベルを下回るクロマトグラムのピークを考慮から除外します。  クロマトグラムのデータにノイズがある場合に使用します。ノイズレベルギリギリのしきい値を設定することで、ノイズの影響と思われるピークを排除できます。
<b>Use smoothing</b>	ノイズの中の強度のばらつきをなくし、ピークをノイズから区別します。  クロマトグラムのデータにノイズがある場合に選択します。
<b>Sample-control offset</b>	MS サンプルと対照クロマトグラムをアライメントします。処理中、ソフトウェアはすべての対照をシフトしてから、サンプルと比較します。

## MS Parameters タブ

パラメータ	説明
<b>m/z Tolerance</b>	
<b>MS m/z tolerance</b>	MS スペクトルのピークを判定する範囲を指定します。この範囲内の質量はすべて、1つの一意なピークとみなされます。実験式が割り当てられたピークを代謝物の候補とみなすには、そのピークの質量精度が指定した許容範囲内である必要があります。  このパラメータは、機器のキャリブレーション状態に大きく依存します。3 ppm 以内にキャリブレーションされた機器の場合、TOF MS または IDA 実験を含むオリゴヌクレオチドメソッドでは 10 ppm の値を推奨します。
<b>Minimum MS peak intensity</b>	MS ピーク強度の最小スペクトルしきい値を指定します。指定したスペクトルしきい値を下回る強度の MS ピークを考慮から除外します。  スペクトルに含まれるノイズのレベルに応じて値を設定します。
<b>Isotope Pattern Tolerances</b>	
<b>MS m/z tolerance</b>	代謝物の同位体パターンに適用する許容範囲を指定します。同位体 $m/z$ のオフセット値がこの許容範囲内にあるピークのみが一致とみなされます。  TOF MS または IDA 実験を含むオリゴヌクレオチドメソッドでは、10 mDa の値を推奨します。

パラメータ	説明
<b>Intensity tolerance</b>	Compound-Specific Parameters の Isotope Pattern タブで定義された同位体強度の相対許容範囲を指定します。一致と見なされるには、2つのピークの強度比が、この許容値内で予測比と等しくなければなりません。  TOF MS 実験を含むオリゴヌクレオチドメソッドでは、20% の値を推奨します。
<b>Minimum Score</b>	(オリゴヌクレオチドメソッド) 代謝物の同位体パターンを予測同位体パターンと比較して、観測同位体パターンの最小一致許容値 (%) を指定します。確認済みの偽陽性の検出を除去するために、まずは 0% から始め、必要に応じて値を増やすことをお勧めします。
<b>Limits</b>	
<b>Maximum number of unexpected metabolites</b>	代謝物の候補として同定できる想定外のピークの最大数を選択します。  この設定は、一般的なピークファインダーで識別可能なピークの最大数に影響します。一般的なピークファインダーは、予測代謝物ピークファインダーと交信します。たとえば、複雑なサンプルに対してより小さい生体内変換セットを選択した場合、想定外の代謝物の最大数が多くなるため、この設定を大きくする必要があります。通常、プロセス不純物のオリゴヌクレオチドサンプルには、100 の設定が推奨されます。より複雑なサンプルでは、この数を増やす必要があります。
<b>Mass range window (m/z)</b>	代謝物の候補を見つけるための質量範囲を制限します。
<b>Generic LC/MS Peak Finding</b>	
<b>Perform background subtraction</b>	背景減算を行うかどうかを指定します。LC/MS クロマトグラムのバックグラウンドレベルが高い場合は、このオプションを選択してバックグラウンドイオンを除去します。  TOF MS および TOF MS/MS 実験を含むオリゴヌクレオチドメソッドでは、このオプションは推奨されません。
<b>Available Adducts (低分子メソッド)</b>  Compound Information グループで定義された電荷範囲に基づいてサポートされているすべての付加体のリストです。	
<b>Use</b>	付加体を探索対象に含めるか否かを示します。
<b>__ adduct(s) selected</b>	(読み取り専用) Available Adducts 表の <b>Use</b> 列で選択した付加体の数を示します。
<b>Advanced Ion Types (抗体薬物複合体メソッド、ペプチドメソッド、オリゴヌクレオチドメソッド)</b>	
<b>Use</b>	イオンを探索対象に含めるか否かを示します。

## 処理メソッドの作成

パラメータ	説明
__ adduct(s) selected	(読み取り専用)Advanced Ion Types 表の <b>Use</b> 列で選択したイオンの数を示します。

## MS/MS Parameters タブ

パラメータ	説明
<b>MS/MS Finding</b>	
<b>MS/MS m/z tolerance</b>	<p>MS/MS スペクトルのピークを判定する範囲を指定します。MS/MS <i>m/z</i> 許容値は、対応する前駆体のピークを代謝物の候補と見なされるために、MS/MS スペクトルで見つかったフラグメントピークが Compound-Specific Parameters の Product Ions and Neutral Losses タブで選択したフラグメントまたはニュートラルロスの値と一致していると判定されるための許容範囲を指します。</p> <p>TOF MS/MS または IDA 実験を含むオリゴヌクレオチドメソッドでは、10 mDa の値を推奨します。</p>
<b>Minimum MS/MS peak intensity</b>	<p>指定したスペクトルしきい値を下回る強度の MS/MS ピークを考慮から除外します。</p> <p>スペクトルに含まれるノイズのレベルに応じて値を設定します。</p>
<b>MS/MS Isotope Finding</b>	
<b>MS/MS m/z tolerance</b>	<p>MS/MS スペクトルのピークを判定する範囲を指定します。MS/MS スペクトルのピークが一致したと見なされるには、2 つの同位体ピークの質量差がこの許容範囲内で予測される差に等しい必要があります。</p> <p>MS/MS <i>m/z</i> 許容値は、同位体パターン (SWATH のみ) ピーク検出戦略を選択した状態で SWATH 測定データを処理する際に使用されます。</p> <p>TOF MS/MS または IDA 実験を含むオリゴヌクレオチドメソッドでは、10 mDa の値を推奨します。</p>



パラメータ	説明
<b>Intensity tolerance</b>	<p>Compound-Specific Parameters の Product Ions and Neutral Losses タブの選択した IP セルで定義されている、選択したフラグメント式の同位体強度に関する相対許容範囲を指定します。一致と見なされるには、2つのピークの強度比が、この許容値内で予測比と等しくなければなりません。このパラメータは、パターンの一部と見なされる最小の同位体を定義するものでもあります。たとえば、強度の許容範囲が 10% であれば、質量パターンに寄与できる最小の同位体は、100% 定義されたピークの 10% 以上である必要があります。</p> <p><b>Intensity tolerance</b> は、同位体パターン (SWATH のみ) ピーク検出戦略を選択した状態で SWATH 測定データを処理する際に使用されます。</p> <p>TOF MS/MS または IDA 実験を含むオリゴヌクレオチドメソッドでは、20% の値を推奨します。</p>
<b>Source of Reference MS/MS Spectrum</b>	
<b>Control</b>	対象となる化合物の基準スペクトルを選択します。スペクトルはさまざまな場所から選択できます。
<b>Sample</b>	
<b>Selected reference spectrum</b>	
選択した基準スペクトルがデフォルトで選択されます。	
構造または配列の自動生成機能を使用する場合は、 <b>Selected reference spectrum</b> オプションの選択をお勧めします。	
<b>MS/MS Spectrum</b>	
<b>Use advanced MS/MS filter</b>	このフィルターは、SWATH 測定データ専用です。このフィルターで使用されるアルゴリズムには、SWATH 測定データの MS/MS スペクトルから特定の前駆体にフラグメントを割り当てるために使用される PCVG があります。スライダー ( <b>Comprehensive</b> または <b>Confident</b> ) の位置に応じて、前駆体に確実に割り当てられるフラグメントのみが MS/MS スペクトルに表示されます。
<b>Similarity and Fragment Interpretation</b>	
<b>MS/MS m/z tolerance</b>	<p>基準 MS/MS スペクトルと代謝物の MS/MS スペクトルを比較するための質量精度の許容値を選択します。このパラメータは、Interpretation 表でフラグメントを割り当てる際にも使用されます。割り当てるフラグメントの質量精度は、指定した MS/MS m/z 許容値内である必要があります。</p> <p>TOF MS/MS または IDA 実験を含むオリゴヌクレオチドメソッドでは、10 ppm の値を推奨します。</p>
<b>Minimum signal-to-noise ratio</b>	基準 MS/MS スペクトルと代謝物の MS/MS スペクトルを比較するために、最小の S/N 比 (シグナルと不要なノイズの比率) を選択します。このパラメータは、Interpretation 表でフラグメントを割り当てる際にも使用されます。割り当てるフラグメントの S/N 比は、規定された S/N 比の最小値を上回っている必要があります。
<b>Fragment Interpretation Options (低分子メソッドとペプチドメソッド)</b>	

## 処理メソッドの作成

パラメータ	説明
Number of fragment peaks selected for assignment	(低分子メソッド)割り当てのために選択される MS/MS フラグメントの数を指定します。ピークはその強度に基づいて選択されます(強度の高いピークが最初に選択されます)。
Break aromatic rings	(低分子メソッド)芳香環の一部を構成する結合を切断します。
Maximum number of bonds to break	(低分子メソッド)MS/MS フラグメントを解釈のために割り当てる際に、切断する結合の最大数を指定します。
Maximum number of C-C bonds to break	(低分子メソッド)MS/MS フラグメントを解釈のために割り当てる際に、切断する C-C 結合の最大数を指定します。
Fragment Types	(ペプチドメソッド)フラグメントの種類を同定します。複数の種類を選択できます。
Maximum bonds to break	(ペプチドメソッド)切断する結合の最大数を指定します。
Break linkages	(ペプチドメソッド)ペプチドまたはオリゴヌクレオチド配列の結合を切断します。

## Formula Prediction タブ(低分子メソッドと抗体薬物複合体メソッド)

パラメータ	説明
<b>Search Constraints</b>	
Elements from Elements to	代謝物の候補となる式を提案するためにソフトウェアが使用する開始要素を指定します。
<b>Isotope Pattern Tolerances</b>	
MS m/z tolerance	提案された処方 of 理論的な予測同位体パターンをソフトウェアが同定した後、このパラメータは、代謝物の同位体パターンと比較したときの同位体間の許容質量差を制限します。
Intensity tolerance	提案された処方 of 理論的な予測同位体パターンをソフトウェアが同定した後、この値は、代謝物の同位体パターンと比較したときの同位体ピーク強度の許容差を制限します。
<b>Ranking</b>	
Contribution	MS スペクトルに基づく式と MS/MS スペクトルに基づく式のどちらを結果に表示するかを指定します。
Automatically weight MS/MS	MS/MS の重み付けに対数目盛を適用する場合に選択します。

パラメータ	説明
<b>Rings and Double Bonds</b>	
<b>RDB from</b>	代謝物候補の提案式に含まれる環や二重結合の範囲を同定します。
<b>RDB to</b>	提案式の環や二重結合の数が指定された範囲に入らない場合、その式は代謝物の対象とはなりません。  最小値は最大値より小さくする必要があります。
<b>Element Ratios</b>	
<b>Oxygen/ phosphorus count</b>	提案式に存在しなければならない酸素とリンの分子の範囲を指定します。  このパラメータは、MS と MS/MS の両方の数式に適用されます。
<b>Oxygen/sulphur count</b>	提案式に存在しなければならない酸素と硫黄の分子の範囲を指定します。  このパラメータは、MS と MS/MS の両方の数式に適用されます。

## Confirmation Scoring タブ

目的のサンプルに代謝物の候補が見つかった場合、ソフトウェアは見つかったピークが代謝物である可能性を示す確認スコアを割り当てます。このスコアは、代謝物を見つけるためのアルゴリズムに依存せず、さまざまなプロパティに基づいて決定されます。

**注:** オリゴヌクレオチドメソッドでは、**Isotope pattern** は 100、その他のパラメータは 0 を推奨します。

パラメータ	説明
<b>Mass defect</b>	(低分子メソッド) 代謝物の質量不一致・誤差が、親化合物、開裂代謝物の候補、または第 II 相代謝物の質量不一致・誤差にどれだけ近いかを示します。  <b>注:</b> この属性は、抗体薬物複合体、ペプチド、オリゴヌクレオチドデータの合計確認スコアの計算には使用されません。
<b>Isotope pattern</b>	(低分子メソッドと抗体薬物複合体メソッド) 代謝物が親化合物と類似の同位体パターンを持つか否かを示します。このプロパティは 0 から 100 のスコアで評価されます。  (オリゴヌクレオチドメソッド) 代謝物が予想される同位体パターンと類似した同位体パターンを持つかどうかを示します。このパラメータは、偽陽性のフィルタリングに非常に有用です。値は 100 を推奨します。

## 処理メソッドの作成

パラメータ	説明
<b>MS/MS</b>	<p>MS/MS スペクトルが基準スペクトルにどれだけ近いかを示します。このプロパティは、基準スペクトルが利用可能な場合にのみ適用されます。</p> <p>MS/MS スコアには次の 2 つの要素があります。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>品質: スペクトルピークをバックグラウンドノイズから識別する能力を示す指標。</li> <li>類似性: ソフトウェアは、既知の生体内変換に基づいてシフトしたプロダクトイオンを含め、MS/MS スペクトルが基準スペクトルにどれだけ近いかを計算します。</li> </ul> <p><b>注:</b> TOF MS データのみを処理する場合は、このパラメータを 0 に設定します。</p>
<b>Mass accuracy</b>	<p>検出された <math>m/z</math> 値が予想される <math>m/z</math> 値にどの程度近いかを示します。このプロパティは、予測される代謝物のみに適用されます。</p>
<b>Total confirmation score</b>	<p>(読み取り専用)4 つのプロパティ値の合計。</p>

ヒント! Scoring 表に 0 を入力すると、スコアリング時に特定のプロパティを無視できます。

## 化合物固有の処理パラメータ

化合物固有の処理パラメータは、処理する化合物に依存する設定です。化合物固有のパラメータは以下の各タブで管理します。

### 化合物固有のパラメータ

低分子	ペプチド	オリゴヌクレオチド	抗体薬物複合体
<a href="#">Cleavage Metabolites タブ (低分子メソッドと抗体薬物複合体メソッド)</a>	<a href="#">Catabolites タブ (ペプチドメソッド)</a>	<a href="#">Catabolites タブ (オリゴヌクレオチドメソッド)</a>	<a href="#">Cleavage Metabolites タブ (低分子メソッドと抗体薬物複合体メソッド)</a>
<a href="#">Mass Defect タブ (低分子メソッド)</a>	<a href="#">Isotope Pattern タブ</a>	<a href="#">Isotope Pattern タブ</a>	<a href="#">Isotope Pattern タブ</a>
<a href="#">Isotope Pattern タブ</a>	<a href="#">Product Ions and Neutral Losses タブ</a>	<a href="#">Product Ions and Neutral Losses タブ</a>	<a href="#">Product Ions and Neutral Losses タブ</a>
<a href="#">Product Ions and Neutral Losses タブ</a>			<a href="#">抗体の詳細</a>

## Cleavage Metabolites タブ (低分子メソッドと抗体薬物複合体メソッド)

親化合物の開裂代謝物候補を同定します。このメソッドは、ソフトウェアが開裂代謝物候補のリストを生成する前に、構造を含んでいる必要があります。

パラメータ	説明
<b>Potential Compound Cleavages</b>	
<b>Maximum bonds to break</b>	切断する結合の最大数を指定します。
<b>Break ring bonds</b>	環の一部を構成する結合を切断します。
<b>Only break C-N bonds</b>	C-N 結合のみを切断します。
<b>Cleavages selected</b>	化合物開裂の候補表で選択した開裂の数を示します。ソフトウェアによって自動的に生成されます。

## Catabolites タブ (ペプチドメソッド)

親化合物の加水分解開裂候補を同定します。このメソッドは、ソフトウェアが加水分解性異性体の候補リストを生成する前に、ペプチド配列を含んでいる必要があります。

パラメータ	説明
<b>Potential Hydrolytic Cleavages</b>	
<b>Max. peptide bonds to break</b>	切断するペプチド結合の最大数を指定します。
<b>Max. cross-links to break</b>	切断する架橋の最大数を指定します。
<b>Min. AA count</b>	異化産物のアミノ酸の最小数を指定します。
<b>Catabolites selected</b>	(読み取り専用)加水分解開裂の候補表で選択した異性体の数を示します。

## Catabolites タブ (オリゴヌクレオチドメソッド)

親化合物の加水分解開裂候補を同定します。このメソッドは、ソフトウェアが加水分解性異性体の候補リストを生成する前に、ペプチド配列を含んでいる必要があります。

パラメータ	説明
<b>Potential Hydrolytic Cleavages</b>	
<b>Max. bonds to break</b>	オリゴヌクレオチド骨格に沿ってのみ切断可能な結合の最大数を指定します (H <sub>2</sub> PO <sub>3</sub> の損失を含む)。核酸塩基と糖の損失については、 <a href="#">Biotransformations タブ</a> を参照してください。

## 処理メソッドの作成

パラメータ	説明
Min. Nucleotides	異性体および加水分解開裂の候補を生成するために使用する最小のヌクレオチド数を指定します。
Include terminus n+1 sequences	末端 n+1 個の不純物を探索するかどうかを指定します。
Include internal n-1 sequences	内部の n-1 個の不純物を探索するかどうかを指定します。
Catabolites selected	(読み取り専用)加水分解開裂の候補表で選択した異性体の数を示します。

## Mass Defect タブ (低分子メソッド)

複雑な生体試料を分析する場合は、このフィルターを使用することでバックグラウンドの干渉を除去できます。

パラメータ	説明
<b>Mass Defect Filters</b>	
Filters selected	質量不一致・誤差フィルター表で選択した質量不一致・誤差フィルターの数を示します。ソフトウェアによって自動的に生成されます。
<b>Filters</b>	
Parent	デフォルトで選択されています。
Glucuronidation	デフォルトで選択されています。
Bis-Glucuronidation	デフォルトで選択されています。
Glutathione	デフォルトで選択されています。
Sulphate	デフォルトで選択されています。

## Isotope Pattern タブ

パラメータ	説明
Isotope Pattern	Isotopes 表に記載されている情報をグラフで表示します。  (オリゴヌクレオチドメソッド)オリゴヌクレオチドの指定電荷状態における同位体分布のグラフを表示します。電荷状態を変更するには、Compound Information で別の <b>Ion type</b> を選択します。

パラメータ	説明
Isotopic Enrichment	<p>親化合物の式に使用される原子の同位体濃縮度を指定します。</p> <hr/> <p>注: 抗体薬物複合体や低分子メソッドに同位体元素を追加するには、同位体を含む mol ファイルをインポートします。</p> <hr/> <p>注: 原子が濃縮されたペプチドやオリゴヌクレオチド式の同位体濃縮度を変更するには、<b>ペプチドおよびオリゴヌクレオチド式の同位体濃縮度を編集する</b>を参照してください。</p>
Isotopes	親化合物の式と同位体濃縮度(該当する場合)に基づいて、最大強度の同位体を表示します。
Isotope Pattern Intensity Cutoff for Metabolite XICs (%)	(オリゴヌクレオチドメソッド)XIC 抽出の対象となる個々の同位体に対して、ピーク領域計算時に適用されるカットオフ値をパーセント強度で指定します。強度がカットオフ値を下回る同位体は、表中、赤色で表示されます。

## Product Ions and Neutral Losses タブ

パラメータ	説明
Reference MS/MS Spectrum	<p>代謝物候補の MS/MS と照合するプロダクトイオンとニュートラルロスを選択する際に使用するスペクトルを特定します。対象サンプルと同様の条件で取得したサンプルのデータファイルが最適です。</p> <p>スペクトルは次の 2 箇所のいずれかから選択できます。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• wiff ファイル</li> <li>• 化合物ライブラリ</li> </ul>
<b>Filters</b>	
m/z From __ to __	プロダクトイオンとニュートラルロスの表に入力する際に考慮する質量範囲を定義します。選択した範囲内のフラグメントのみが、プロダクトイオンとニュートラルロスの表に表示されます。
Charge state From __ to __	プロダクトイオンとニュートラルロスの表に入力する際に考慮する電荷状態の範囲を定義します。選択した範囲内の電荷を持つフラグメントのみが、プロダクトイオンとニュートラルロスの表に表示されます。
Only show product ions above (%)	プロダクトイオンとニュートラルロスの表に含めるプロダクトイオンの最小しきい値を定義します。指定した強度を下回るプロダクトイオンを考慮から除外します。
Mass accuracy within (mDa)	プロダクトイオンとニュートラルロスの表には、質量精度が指定値内にあるフラグメントのみが表示されます。

## 処理メソッドの作成

パラメータ	説明
Add product ions, neutral losses from Phase II metabolites	(低分子メソッドと抗体薬物複合体メソッド)第 II 相代謝物からのプロダクトイオンとニュートラルロスプロダクトイオンとニュートラルロスをプロダクトイオンとニュートラルロスの表に含めます。

注: フィルターに必要な変更をすべて行った後、**Assign Fragments** をクリックして、プロダクトイオンとニュートラルロスの表を更新します。

## 抗体の詳細

注: これらの化合物固有のパラメータは、抗体薬物複合体メソッドのみに適用されます。

パラメータ	説明
Protein Sequence	抗体のタンパク質配列。
Enzyme	タンパク質の消化に使用する酵素。
Break disulfide bonds	このチェックボックスをオンにすると、ジスルフィド結合が切断されます。
Site of conjugation	薬物分子が結合できる抗体中のアミノ酸。
Type of conjugation	薬物分子と抗体との結合に関わる化学反応。
Max. AA count	消化後、フラグメントの候補とみなされるアミノ酸の最大数。
Selected fragments	ソフトウェアによって自動的に生成されます。表で選択されているフラグメントの数を示します。

## ペプチドおよびオリゴヌクレオチド式の同位体濃縮度を編集する

### 前提条件

カスタムアミノ酸(修飾の有無は問わない)を作成する必要があります。[カスタムアミノ酸の作成](#)および[カスタムアミノ酸修飾の作成](#)を参照してください。カスタムアミノ酸またはカスタムアミノ酸修飾は、少なくとも 1 つの濃縮同位体を含んでいる必要があります。

1. Workflow パネルで **Processing Parameters**. をクリックします。  
Processing Parameters ワークスペースが開きます。
2. **New > Peptides** または **New > Oligonucleotide** をクリックします。



---

注: または、化合物ライブラリからエントリを選択し、配列を埋めます。

---

3. カスタムアミノ酸またはオリゴヌクレオチドの **Compound name** をフィールドに入力します。
4. カスタムアミノ酸またはオリゴヌクレオチドの **Sequence** 情報を入力します。配列は少なくとも 1 つの濃縮同位体を含んでいる必要があります。
5. **Chemical formula** フィールドをクリックします。

**Chemical formula** フィールドと **m/z** 値には、カスタムアミノ酸に関連する情報が入力されません。

---

ヒント! 配列の上に ⓘ アイコンが表示されます。アイコンにカーソルを合わせると、使用しているカスタムアミノ酸の **Symbol** と **Residue Formula** が表示されます。

---

6. **Compound-Specific Parameters > Isotope Pattern** をクリックします。Isotopic Enrichment 表では、**Element** 列にカスタムアミノ酸の残基式、**Enrichment %** 列に **100** が表示されます。
7. 必要に応じて **Enrichment %** 値を変更します。
8. **Save and Close** をクリックします。

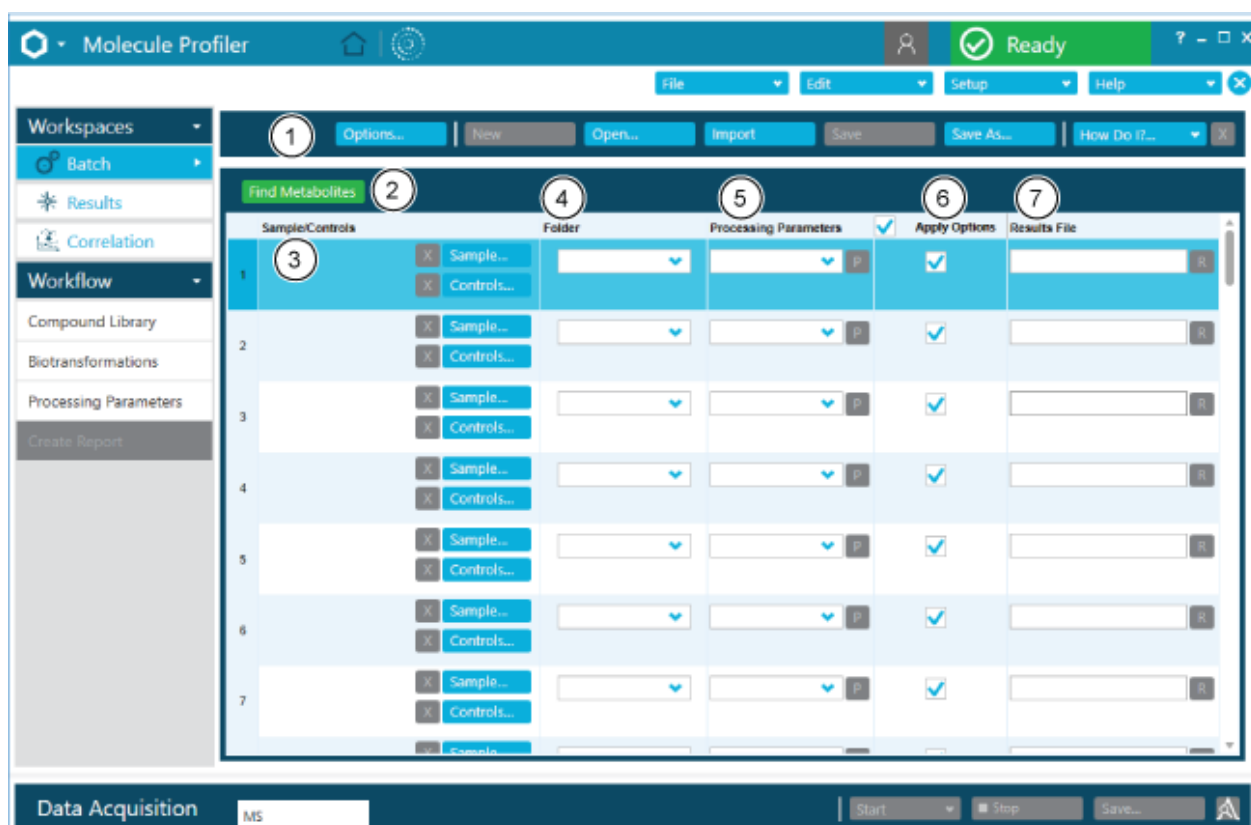
Batch ワークスペースは、複数のサンプルファイルを同時に処理するために使用します。バッチ表は、手動で入力することも、既存のバッチをインポートして表に入力することもできます。

1. 手動でバッチを調製するには、[バッチの作成](#)に進みます。
2. 既存のバッチを開くには、[バッチを開く](#)に進みます。
3. 既存のバッチをインポートするには、[バッチのインポート](#)に進みます。

## Batch ワークスペースの概要

Batch ワークスペースは、処理するサンプルのバッチを作成するために使用します。

図 6-1 : Batch ワークスペース



項目	説明
1	<p>メニューバー。以下のボタンがあります。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Options:</b> Batch Processing Options ダイアログを開き、バッチに関連するオプションを指定することができます。<a href="#">バッチ処理オプション</a>を参照してください。</li> <li>• <b>New:</b> クリックすると、バッチを保存できます。<b>Sample/Controls</b> フィールドにサンプルを追加した後にのみ利用可能です。</li> <li>• <b>Open:</b> Open Processing Batch ダイアログを開き、既存のバッチを選択して開くことができます。<a href="#">バッチを開く</a>を参照してください。</li> <li>• <b>Import:</b> Batch Importer ダイアログを開き、インポートする Excel ファイルを選択することができます。<a href="#">バッチのインポート</a>を参照してください。</li> <li>• <b>Save:</b> 現在開いているバッチファイルを保存します。自動的に既存のバージョンを置き換えます。バッチ情報を変更した後にのみ利用可能です。</li> <li>• <b>Save As:</b> 現在開いているバッチファイルを保存します。バッチファイルには新しい名前を割り当てることができます。</li> </ul>
2	<b>Find Metabolites</b> ボタン。バッチの処理を開始します。
3	<b>Sample/Controls</b> 列。 <b>Sample</b> ボタンを押すと Select Data ダイアログが開き、目的のサンプルを選択できます。 <b>Controls</b> ボタンを押すと Select Data ダイアログが開き、対応する対照サンプルを選択できます。1 サンプルにつき最大 5 つの対照サンプルが選択可能です。
4	<b>Folder</b> 列。処理パラメータや処理結果を保存するフォルダーの場所のリストを示します。
5	<b>Processing Parameters</b> 列。目的のサンプルを処理するために使用できる処理パラメータのリストを示します。選択した <b>Folder</b> に保存されている処理パラメータのみ選択可能です。
6	<p><b>Apply Options</b> 列。デフォルトで選択されています。選択すると、Batch Processing Options ダイアログで選択した Auto Assign と Report オプションのすべてが、バッチ内のサンプルと対照サンプルに適用されます。オプションは次のとおりです。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Apply Options</b> チェックボックスをオフにすると、選択したすべてのチェックボックスがオフになります。</li> <li>• 特定のサンプルのチェックボックスをオフにします。</li> <li>• 特定のサンプルのチェックボックスをオンにします。</li> </ul> <p><a href="#">バッチ処理オプション</a>を参照してください。</p> <hr/> <p>注: Auto Assign のオプションは、オリゴヌクレオチドワークフローには適用されません。</p>
7	<b>Results File</b> 列。Results ファイルのユーザー指定名。

## バッチオプションを指定する

バッチ処理オプションを参照してください。

- Workspace パネルで **Batch** をクリックします。  
Batch ワークスペースが開きます。
- Options** をクリックします。  
Batch Processing Options ダイアログが開きます。
- (低分子、ペプチド、抗体薬物複合体のワークフロー) Auto Assign タブで次の手順を実行します。
  - 該当するオプションのチェックボックスをオンにします。
  - 選択した各オプションに適切な値を入力します。
- Report タブで次の手順を実行します。
  - 該当するオプションのチェックボックスをオンにします。
  - 選択した各オプションに適切な値を入力します。
- OK** をクリックします。  
バッチオプションはバッチと一緒に保存されます。

### バッチ処理オプション

オプション	説明
<b>Auto Assign</b>	
注: 自動割り当てオプションは、互いに独立しています。これらは OR 条件とみなされます。選択したオプションのうち 1 つ以上が、指定した条件を満たしている必要があります。	
注: 自動割り当てオプションは、オリゴヌクレオチドサンプルには適用されません。	
<b>Assign Structures or Sequences</b>	<p>選択したオプションの条件を満たす代謝物の構造または配列の候補を提案します。使用するデータの種別および処理パラメータに依存します(すなわち、低分子かペプチドか)。</p> <p>注: 複数のオプションを選択できます。</p>
<b>Metabolites with peak areas above (%)</b>	XIC ピーク領域が指定値を上回る代謝物について、構造または配列の候補を提案します。
<b>Metabolites with analog peak areas above (%)</b>	アナログピーク領域が指定値を上回る代謝物について、構造または配列の候補を提案します。
<b>Metabolites with MS/MS quality above</b>	<p>MS/MS 品質が指定値を超える代謝物について、構造または配列の候補を提案します。</p> <p>このオプションは、オリゴヌクレオチドワークフローには適用されません。</p>

オプション	説明
<b>Report</b>	
注: レポートオプションは互いに依存しています。これらは AND 条件とみなされます。選択したオプションのすべてが、指定した条件を満たしている必要があります。	
<b>Report metabolites with assigned structures or sequences</b>	Potential Metabolites 表の <b>Report</b> 列で、構造または配列が割り当てられている代謝物にチェックマークを表示します。
<b>Report metabolites with peak areas above (%)</b>	Potential Metabolites 表の <b>Report</b> 列で、構造または配列が割り当てられている代謝物にチェックマークを表示します。
<b>Report metabolites with analog peak areas above (%)</b>	Potential Metabolites 表の <b>Report</b> 列で、指定値を上回るアナログピーク領域を持つ代謝物にチェックマークを表示します。
<b>Report metabolites with scores above (%)</b>	Potential Metabolites 表の <b>Report</b> 列で、指定値を上回るスコアを持つ代謝物にチェックマークを表示します。

## バッチの作成

注: 各行 1 サンプルずつのみ処理可能で、各サンプルにつき最大 5 つの対照サンプルが選択可能です。ただし、処理に対照サンプルは不要です。

1. Workspace パネルで **Batch** をクリックします。  
Batch ワークスペースが開きます。

**ヒント! Open** オプションを選択すると、以前に保存したバッチファイルを取り出すことができます。[バッチを開く](#)を参照してください。

2. 次のようにして MS サンプルを追加します。
  - a. バッチ表の最初の利用可能な行で、**Sample** をクリックします。  
Select Data ダイアログが開きます。
  - b. **Browse** をクリックし、適切なソースフォルダーに移動します。
  - c. **Available** フィールドで wiff ファイルと、目的のサンプルを含む注入を選択した後、>> をクリックします。  
**Selected** フィールドにサンプル情報が表示されます。
3. (オプション) 次のようにして、アナログサンプルを追加します。

**ヒント! アナログデータ**を取得した場合、**Use analog data** チェックボックスをオンにすると、MS サンプルの追加時にアナログデータが自動的に追加されます。

- a. バッチ表の最初の利用可能な行で、**Use analog data** をクリックします。
- b. Analog Sample タブを開きます。

## 分子候補の探索

---

- c. **Browse** をクリックし、適切なソースフォルダーに移動します。
  - d. **Available** フィールドでアナログサンプルを選択した後、>> をクリックします。  
**Selected** フィールドにサンプル情報が表示されます。
4. **OK** をクリックします。  
バッチ表の選択した行の **Sample/Controls** フィールドにサンプル情報が入力されます。
5. (オプション) 次のようにして MS 対照を追加します。
  - a. バッチ表の最初の利用可能な行で、**Control** をクリックします。  
Select Data ダイアログが開きます。
  - b. **Browse** をクリックし、適切なソースフォルダーに移動します。
  - c. **Available** フィールドで wiff ファイルと、対照を含む 注入を選択した後、>> をクリックします。  
**Selected** フィールドにサンプル情報が表示されます。
  - d. 次のステップに進んでアナログ対照を追加するか、**OK** をクリックしてこのダイアログを閉じます。
6. (オプション) 次のようにしてアナログ対照を追加します。
  - a. バッチ表の最初の利用可能な行で、**Use analog data** をクリックします。
  - b. Analog Sample タブを開きます。
  - c. **Browse** をクリックし、適切なソースフォルダーに移動します。
  - d. **Available** フィールドでアナログサンプルを選択した後、>> をクリックします。  
**Selected** フィールドにサンプル情報が表示されます。
  - e. **OK** をクリックします。  
バッチ表の選択した行の **Sample/Controls** フィールドにサンプル情報が入力されます。
7. **Folder** 列で、処理パラメータと Results ファイルを保存するフォルダーを選択します。
8. **Processing Parameters** 列で、処理パラメータファイルを選択します。

---

**ヒント!** 処理パラメータファイルを表示するには、**P** をクリックします。必要に応じてパラメータを変更し、**Save and Close** をクリックして保存します。

---

9. **Results File** 列には、結果を保存するファイル名を入力します。
10. バッチ内の各行に対して、ステップ 2 からステップ 9 を繰り返します。

---

**注:** 1 バッチで処理できる最大行数は 200 です。

---

**ヒント!** バッチを簡単に作成するために、行のコピー & ペーストや削除が可能になっています。  
[バッチ行のコピー & ペースト](#) または [バッチ行のクリア](#) を参照してください。

---

## バッチ行のコピー & ペースト

バッチを編集するには、コピー & ペーストのオプションを使用します。

1. バッチ表で、コピーする行を選択します。

2. 右クリックして、次に **Copy Batch Row** を選択します。
3. 貼り付け先の行を選択します。
4. 右クリックして、次に **Paste Batch Row** を選択します。

---

注: 貼り付け先の行にある既存の情報はずべて上書きされます。

---

## バッチ行のクリア

バッチ作成時に、サンプル情報の行をクリアできます。

1. バッチ表で、クリアする行を選択します。
2. 右クリックして、次に **Clear Batch Row** を選択します。  
選択した行のデータがすべて削除されます。

## バッチを開く

1. Workspace パネルで **Batch** をクリックします。  
Batch ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Processing Batch ダイアログが開きます。
3. バッチファイルを選択し、**OK** をクリックします。
4. 次のいずれかの操作を行います。
  - バッチが完成している場合は、[バッチの送信](#)に進みます。
  - バッチが未完成の場合は、[バッチの作成](#)に進みます。

## バッチのインポート

1. Workspace パネルで **Batch** をクリックします。
2. **Import** をクリックします。  
Batch Importer ダイアログが開きます。
3. **Browse** をクリックします。  
Open excel file ダイアログが開きます。
4. 適切な Excel ファイルに移動し、選択します。

---

注: Excel ファイルは、ソフトウェアに付属のテンプレート (BatchImportTemplate.xlsx) を用いて作成してください。インストール時、テンプレートは  
C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler\Batch Import Templates にインストールされます。

---

5. **Open** をクリックします。  
**Target batch file** フィールドには、インポートした Excel ファイルの名前が入力されます。この情報は、必要に応じて変更できます。
6. 次のいずれかの操作を行います。

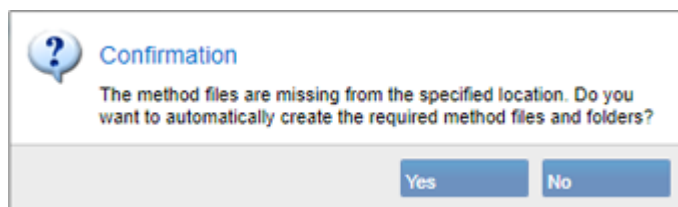


## 分子候補の探索

---

- 選択した Excel ファイルを Molecule Profiler ソフトウェアのバッチに変換し、Batch ワークスペースでバッチを開くには、**Convert and Open** をクリックし、ステップ 7 に進みます。
  - 選択した Excel ファイルを Molecule Profiler ソフトウェアのバッチに変換し、後で Batch ワークスペースで開くことができるようにするには、**Convert** をクリックしてステップ 7 に進みます。
  - インポートをキャンセルする場合は、**Close** をクリックします。
7. 次のいずれかの操作を行います。
- **Convert and Open** オプションを選択し、Excel ファイルで参照されている処理パラメータ (メソッドファイル) およびフォルダーがすべて正しい場所に格納されている場合は、**バッチの送信**に進みます。
  - **Convert** オプションを選択し、Excel ファイルで参照されている処理パラメータ (メソッドファイル) およびフォルダーがすべて正しい場所に格納されている場合は、**バッチの保存**に進みます。
  - **Convert and Open** オプションまたは **Convert** オプションが選択され、確認ダイアログが表示された場合は、手順 8 に進みます。

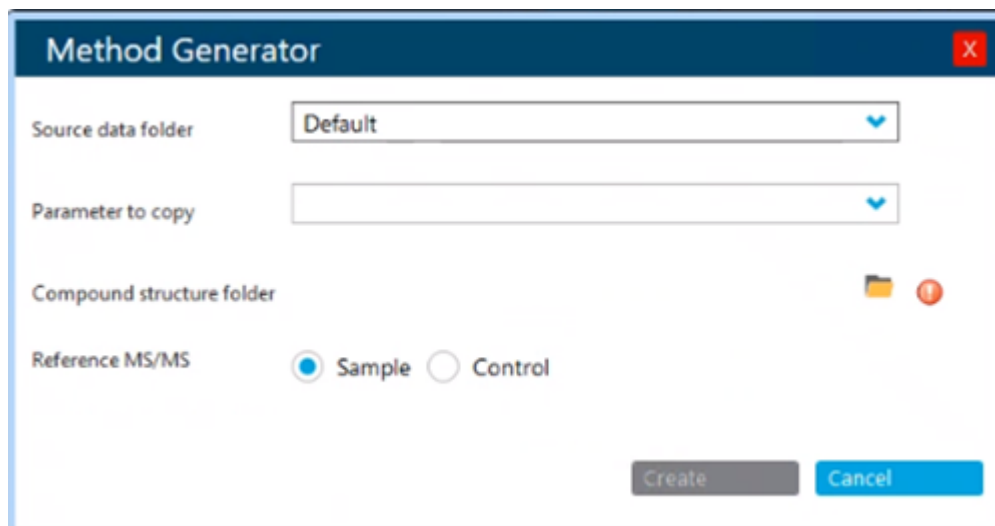
図 6-2 : 確認ダイアログ



8. 次のいずれかの操作を行います。
- (低分子ワークフロー) 必要なメソッドファイルを自動的に作成する場合は、ステップ 9 に進みます。
- 
- 注:** Method Generator は、ペプチド、オリゴヌクレオチド、抗体薬物複合体のワークフローでは使用できません。
- 
- 必要なメソッドファイルを手動で作成する場合は、**No** をクリックしてからインポートをキャンセルします。**処理メソッドの作成**に進みます。
9. **Yes** をクリックします。



図 6-3 : Method Generator ダイアログ



10. **Source data folder** リストから適切なフォルダーを選択します。
11. **Parameters to copy** リストから適切なメソッドファイルを選択します。
12. **Compound structure folder** フィールドの右側にあるフォルダーアイコンをクリックし、処理パラメータの前駆体構造を含むフォルダーに移動して選択します。
13. 次のいずれかの操作を行います。
  - サンプル wiff ファイルに基準 MS/MS が含まれている場合は **Sample** をクリックします。
  - 対照 wiff ファイルに基準 MS/MS が含まれている場合は **Control** をクリックします。
14. **Create** をクリックします。  
処理パラメータと不足しているフォルダーが作成され、Excel スプレッドシートで指定した場所に格納されます。
15. 次のいずれかの操作を行います。
  - **Convert and Open** オプションを選択した場合は、**バッチの送信**に進みます。
  - **Convert** オプションを選択した場合は、**バッチの保存**に進みます。

## バッチの保存

バッチワークスペースの表に追加された情報は、後で使用するために保存できます。

1. バッチを同じファイル名で保存する場合は、**Save** をクリックします。
2. バッチを別の名前で作成する場合は、**Save As** をクリックします。  
Save Processing Batch As ダイアログが開きます。
3. 一意の **Name** を入力し、**OK** をクリックします。

## バッチの送信

バッチを調製し、バッチオプションを指定した後、バッチをデータ処理のために送信します。

## 分子候補の探索

---

注: 必要に応じて、バッチを送信する前に、対象サンプルの処理パラメータを変更することができます。

---

1. (オプション) サンプルの処理パラメータを表示するには、次のようにします。
  - a. 対象のサンプルを含む行を選択し、**Processing Parameters** フィールドの右側にある **P** をクリックします。  
選択したサンプルに関連する処理パラメータが表示されます。
  - b. 必要な変更を加えた後、**Save and Close** をクリックします。  
Batch ワークスペースが表示されます。
2. **Save As** をクリックします。  
Save Processing Batch As ダイアログが開きます。
3. 一意の **Name** を入力し、**OK** をクリックします。
4. **Find Metabolites** をクリックします。  
バッチ処理が開始します。処理の状況が進行状況バーに表示されます。処理中は **P** が無効になり、パラメータの変更を防止します。行の処理が完了すると、**Processing Parameters** フィールドの右側にある **P** と **Results File** フィールドの右側にある **R** が利用可能になります。
5. **R** をクリックすると、Results ワークスペースに Results ファイルが開きます。

注: Batch Processing Options ダイアログで選択した Auto Assign オプションと Report オプションは、ソフトウェアによって完了します。

---

6. (オプション) ステップ 1 を完了すると、更新された処理パラメータが保存されます。
7. **Save** をクリックします。

ヒント! **Save As** をクリックすると、バッチを別名で保存できます。

---

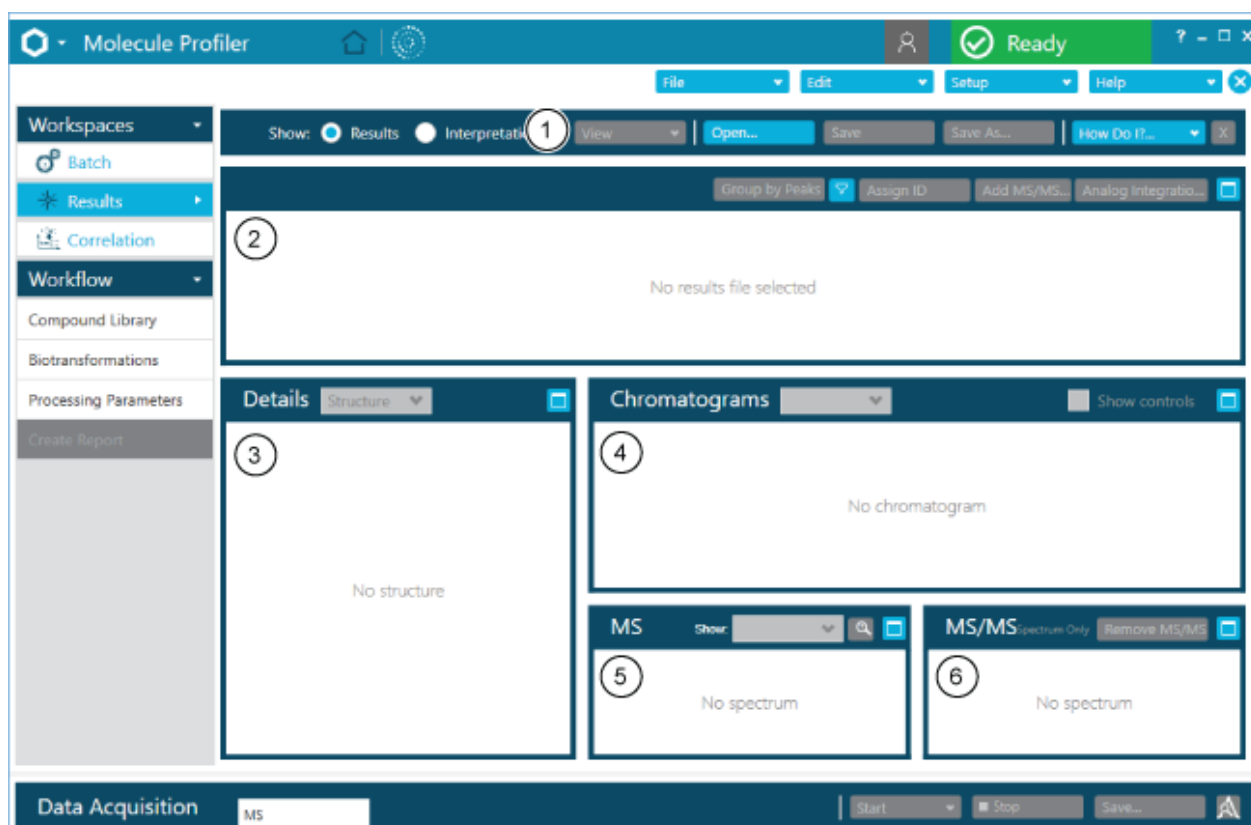
Results ワークスペースを使用して、対象サンプルに含まれる代謝物の候補を探索した結果を表示します。

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。

## Results ワークスペースの概要

ソフトウェアがデータを処理した後、Results ワークスペースを使用して、代謝物の候補のリストを表示します。

図 7-1 : Results ワークスペース



## 結果の閲覧

項目	説明
1	<p>メニューバー。以下のボタンがあります。</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>View</b><ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Processing Parameters:</b> 結果の処理パラメータを表示します。</li><li>• <b>Batch Options:</b> 結果のバッチ処理オプションを表示します。</li><li>• <b>Sample Details:</b> サンプルの詳細情報を表示します。</li></ul></li><li>• <b>Open:</b> Open Results ダイアログを開き、適切な Results ファイルに移動できます。</li><li>• <b>Save:</b> 現在開いている Results ファイルを保存します。自動的に既存のバージョンを置き換えます。</li><li>• <b>Save As:</b> 現在開いている Results ファイルを保存します。ユーザーは、保存先フォルダーを選択し、Results ファイルに新しい名前を割り当てることができます。</li></ul>
2	<p>Potential Metabolites ペイン。選択したアルゴリズムで検出された目的のサンプルのピークをすべてリストアップします。<a href="#">ピーク検出戦略の概要</a>を参照してください。</p> <p>代謝物の候補を含まない行の削除、名称や式の変更、MS/MS スペクトルの追加、ピーク ID の割り当てなど、結果の編集を行います。<a href="#">結果の編集</a>を参照してください。</p> <p>Potential Metabolites 表の列の説明については、<a href="#">表 7-1</a> を参照してください。</p> <hr/> <p><b>注:</b> 事前に定義されたフィルターが、リストに表示される代謝物の候補に影響を与える場合があります。<a href="#">結果フィルターの概要</a>を参照してください。</p>

項目	説明
3	<p>Details ペイン。代謝物の候補がどのようにスコア化されたかについての情報を提供します。処理メソッドのプロパティごとに、個々の代謝物のスコアと、全代謝物のスコアの合計が <b>Scoring</b> リストに表示されます。<a href="#">Confirmation Scoring タブ</a>を参照してください。スコアは、<b>Mass Defect</b>(オリゴヌクレオチドでは無効)、<b>Isotope Pattern</b>、<b>MS/MS</b>、<b>Mass Accuracy</b>、および <b>Total confirmation score</b> について表示されます。</p> <p>低分子の結果については、<b>Structure</b> リストには利用可能な構造が表示されます。</p> <p>抗体薬物複合体の結果については、<b>Structure</b> リストには、利用可能な構造と利用可能な配列の両方が表示されます。</p> <p>ペプチドの結果については、<b>Sequence</b> リストには利用可能な配列が表示されます。</p> <p>オリゴヌクレオチドの結果については、<b>Sequence</b> リストには、Interpretation ビューで MS/MS の割り当てによって決定された、選択した代謝物のオリゴヌクレオチド配列が表示されます。割り当てを行わなかった場合、このフィールドは空白になります。</p>

項目	説明
4	<p>Chromatograms ペイン。検出された代謝物の候補について、異なるクロマトグラムを表示することが可能です。</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Metabolites:</b> 現在検出されているすべての代謝物ピークの合計を表示します。すべての主要なクロマトグラムのピークが、その RT とピーク ID とともに表示されます。選択した代謝物ピークおよび同じ保持時間に溶出するピークは黄色で表示されます。</li><li>• <b>XIC:</b> 選択した代謝物の抽出イオンクロマトグラム (XIC) を表示します。XIC 抽出のために選択した同位体は、グラフの上部にラベルが付けられています。</li><li>• <b>Mass Defect:</b> 選択した代謝物の同定に使用した質量不一致・誤差クロマトグラムを表示します。これは低分子データのみの特化したものです。</li><li>• <b>Isotope Pattern:</b> 同位体パターンが親化合物と一致するすべてのピークのクロマトグラムを表示します。</li><li>• <b>Product Ions:</b> Product Ion and Neutral Losses タブで選択したフラグメントと一致するフラグメントイオンを持つすべてのピークのクロマトグラムを表示します。</li><li>• <b>Neutral Losses:</b> Product Ion and Neutral Losses タブで選択したニュートラルロスと一致するニュートラルロスを持つすべてのピークのクロマトグラムを表示します。</li><li>• <b>Isotope Pattern (SWATH 測定データ):</b> Product Ion and Neutral Losses タブで選択したフラグメント同位体パターンと一致するすべてのピークのクロマトグラムを表示します。</li><li>• <b>Analog Data:</b> すべてのピークのアナログクロマトグラムを表示します。ピークラベルは、アナログピークと対応する MS ピークの両方の一致するピーク ID を示します。</li></ul> <hr/> <p><b>注:</b> Mass Defect、Isotope Pattern、Product Ions、Neutral Losses、および Isotope Pattern (SWATH 測定データ) クロマトグラムは、これらのアルゴリズムを処理用に選択していた場合にのみ利用可能です。また、処理メソッドの定義に従ってアナログデータの処理が行われた場合、Chromatograms のリストで Analog Data のクロマトグラムが利用可能です。</p> <hr/> <p><b>注:</b> オリゴヌクレオチドワークフローでは、Metabolites、XIC、および Analog Data のビューのみ利用可能です。</p> <hr/> <p><b>注:</b> Show Controls チェックボックスがオンの場合、XIC と Analog Data の両方のクロマトグラム (該当する場合) に対照トレースが表示されます。</p>

項目	説明
5	<p>MS ペイン。MS スペクトルを表示します。<b>Show</b> リストのオプションでは、強調表示するピークを選択します。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Default:</b> 選択した代謝物の <math>m/z</math> 値を中心とするサンプル MS の一部を表示します。</li> <li>• <b>Mass Defect:</b> 処理メソッドで選択したいずれかの質量不一致・誤差フィルターに一致する <math>m/z</math> 値をすべて強調表示します。これは低分子データのみの特化したものです。</li> <li>• <b>Isotope Pattern:</b> 親化合物と同じ同位体パターンを持つ <math>m/z</math> 値をすべて強調表示します。</li> </ul> <p>オリゴヌクレオチドワークフローの場合、デフォルトで <b>Predicted Isotope Pattern</b> と <b>Charge Series</b> のトレースがオーバーレイ表示されます。デフォルトのビューでは、選択した代謝物の重心 TOF MS スペクトルが表示されます。モノアイソトピックピークは予測電荷でラベル付けされ、青い矢印がその位置を示します。<math>m/z</math> 軸の赤い矢印は、XIC 抽出と領域決定のために選択した個々の同位体を示します。理論的な同位体エンベロープは重心のピークに重なり、観測データに対する適合度評価を示します。スペクトルをフルレンジに設定するには、<math>m/z</math> 軸の下をダブルクリックします。選択した代謝物の追加電荷状態の予測位置を表示するには、<math>m/z</math> 軸上で左クリックしてドラッグし、パンとズームを行います。</p>
6	<p>MS/MS ペイン。選択した代謝物の MS/MS スペクトルを表示します。このデータのソースは、以下のいずれかです。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• サンプル IDA wiff ファイル。</li> <li>• サンプル SWATH 測定 wiff ファイル。</li> <li>• Results ファイルに追加した専用の MS/MS wiff ファイル。<b>Add MS/MS ボタンで複数のスペクトルを追加する</b>を参照してください。</li> </ul> <p>オリゴヌクレオチドについては、処理パラメータで選択した基準 MS/MS スペクトルと一致した共通のプロダクトイオンピークは黄色で表示されます。一致しなかったプロダクトイオンピークは青色で表示されます。</p>

表 7-1 : Potential Metabolites 表の列

列	説明
Report	選択すると、最終レポートにその代謝物が含まれます。
Peak ID	<p>代謝物のピーク ID を表示します。ID は、保持時間と代謝物の質量に基づいて決まります。どの Parent 代謝物でも、<b>Peak ID</b> は空白です。</p> <p>質量と保持時間が同じで電荷が異なるピークには、-# が付きます。たとえば、M1-1、M1-2、M1-3 のようになります。</p>

表 7-1 : Potential Metabolites 表の列 (続き)

列	説明
Name	代謝物の名前を表示します。  抗体薬物複合体の結果については、名前の前に Parent という単語が付きます。Parent は、低分子薬剤(ペイロード)成分とリンカー成分が結合していることを示します。  オリゴヌクレオチドの結果については、主成分名を Parent および Ion charge という語句で表しています。予測ピークファインダーで同定された生体内変換・開裂生成物には、特徴的な 5' または 3' (n-#) の表記があります。一般的なピークファインダーの結果は、Gain または Loss のいずれかの接頭辞で示されます。
Formula	代謝物のニュートラルフォーミュラを表示します。
Assigned	選択すると、Interpretation ワークスペースに情報が存在することを示します。たとえば、構造または配列が存在する場合や、Fragments 表にデータが入力されている場合があります。
Neutral Mass	代謝物のニュートラルマスを表示します。
m/z	代謝物のモノアイソトピック質量電荷比を表示します。  オリゴヌクレオチドの結果では、モノアイソトープが観測されない場合、ソフトウェアがその位置を計算し、m/z 値に (n) のフラグを付けます (n は最初に観測されたピークからモノアイソトープが離れているピークの数です)。
Charge	代謝物の電荷を表示します。
Peak Index	代謝物について示される XIC ピーク領域の同位体を反映します。  <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Blank cell:</b> モノアイソトープ</li> <li>• <b>1:</b> モノアイソトピックピーク後の最初の同位体</li> <li>• <b>2:</b> モノアイソトピックピーク後の 2 番目のアイソトープ、以下同様</li> </ul> 表に列が含まれていない場合、XIC ピーク領域は代謝物のモノアイソトープに関連付けられます。予測代謝物検出戦略によって同定された代謝物については、推定による仮想ベースピークインデックスを表示します。他のピーク検出戦略で同定された代謝物については、実験的アイソトピックピークを表示します。通常は、実験的アイソトピックピークをベースピークとします。ただし、IDA データの場合、実験的アイソトピックピークはプレカースーイオンのインデックスである可能性があります。
ppm	代謝物の質量真度 (ppm) を表示します。
R.T. (min)	代謝物の保持時間を表示します。
Peak Area	<b>Peak Index</b> 列にピークインデックスを示す同位体の XIC ピーク領域を表示します。



表 7-1 : Potential Metabolites 表の列 (続き)

列	説明
% Area	表中の代謝物の総数を基準とする XIC の % 領域を表示します。
% Score	代謝物の % スコアを表示します。
Analog - Peak Area	アナログピークのピーク領域を表示します。アナログデータ処理時のみ利用可能です。
Analog - % Area	アナログピークの % 領域を表示します。アナログデータ処理時のみ利用可能です。
Analog - R.T. (min)	アナログピークの保持時間を表示します。アナログデータ処理時のみ利用可能です。

## フィルタリングされたスペクトルのみを表示

注: この機能は、オリゴヌクレオチドワークフローには適用されません。

Processing Parameters ワークスペース内にある Generic Parameters グループの MS/MS Parameters タブで SWATH 測定データファイルの処理に **Use advanced MS/MS filter** パラメータを選択した場合、このチェックボックスをオンにすると、高度なフィルターでフィルタリングした MS/MS スペクトルだけが表示されます。チェックボックスをオフにすると、背景差分スペクトルが表示されます。

注: **Use advanced MS/MS filter** パラメータを選択したにもかかわらず、MS/MS スペクトルに背景差分スペクトルしか表示されない場合は、以下の可能性があります。

- フィルタリングされたスペクトルが空白だった。
- 約 10 倍以上の強度を持つ共溶出ピークによる干渉のため、高度なフィルターが有効でなかった。
- 前駆体ピークのデータポイントが 5 点未満のため、高度なフィルターが有効でなかった。

## 結果フィルターの概要

フィルターを適用して、Potential Metabolites 表に表示される結果を絞り込むことができます。


ヒント! フィルターアイコン  をクリックすると Results Filters ダイアログが開きます。

表 7-2 : フィルター

選択するフィルター	表示される内容
<b>Metabolites</b>	
<b>Top __ metabolites by peak area</b>	ピーク領域の % に基づいて最多となる指定ピーク数のみ。

## 結果の閲覧

表 7-2 : フィルター (続き)

選択するフィルター	表示される内容
Reported metabolites	Report 列で選択済みの代謝物のみ。
Metabolites by adduct	一次付加体によって検出された代謝物のみ。一次付加体とは、 <b>Generic Parameters &gt; MS Parameters</b> タブの <b>Advanced Ion Types</b> 表で最初に表示される付加体のことです。オプションは次のとおりです。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• 一次</li> <li>• 最大強度</li> </ul>
<b>Assigned Metabolites</b>	
Metabolites with structures or sequences assigned	Potential Metabolites 表の <b>Assigned</b> 列にチェックマークが表示されている、構造(低分子)または配列(ペプチドおよびオリゴヌクレオチド)が割り当てられた代謝物のみ。
<b>Retention Time Window</b>	
Retention time from __ to __	指定した範囲内のピークのみ。
<b>Peak Area</b>	
Peak area from __ % to __ %	指定したパーセンテージの範囲内にある % Area を持つピークのみ。
Analog peak area from __ % to __ %	指定したパーセンテージの範囲内にある % Analog Area を持つピークのみ。処理用にアナログファイルが提供されていない場合、このフィルターには何の効果もありません。
<b>Charge</b>	
Charge from __ to __	電荷値が指定範囲内にある代謝物のみ。
<b>Score</b>	
Overall score above __ %	総合スコアが指定値を上回るピークのみ。 <a href="#">Confirmation Scoring タブ</a> を参照してください。  オリゴヌクレオチドワークフローでは、同位体エンベロープを確認スコアリングの唯一のパラメータとして使用することをお勧めします。また、理論的な同位体重複スコアが低い代謝物を除去するために、 <b>Overall Score</b> を 20% よりも上に設定することを推奨しています。
<b>Mass Accuracy</b>	
Accuracy within __ ppm	質量真度が指定範囲内にあるピークのみ。
<b>Mass Range</b>	
m/z from __ to __	指定範囲内の m/z 値のみ。

表 7-2 : フィルター (続き)

選択するフィルター	表示される内容
<b>Product Ions and Neutral Losses</b>	
<b>MS/MS similarity above</b> —	MS/MS の類似性スコアが指定値を上回るピークのみ。基準スペクトルが提供されていない場合、このフィルターには何の効果もありません。
<b>Minimum number of common product ions</b> —	親化合物と指定数以上のプロダクトイオンを共通に持つピークのみ。基準スペクトルが提供されていない場合、このフィルターには何の効果もありません。
<b>Minimum number of common neutral losses</b> —	親化合物と指定数以上のニュートラルロスを共通に持つピークのみ。基準スペクトルが提供されていない場合、このフィルターには何の効果もありません。

注: 表の行を削除したり追加したりすると、各代謝物の % Area と % Analog Area が自動的に更新され、残りの行に対するピーク領域、アナログピーク領域、ピーク領域による上位代謝物のフィルターの適用方法に影響を与えます。

## 結果の編集

Potential Metabolites 表のエントリは、編集または削除して、結果をさらに絞り込むことができます。

以下のことができます。

- [行の削除](#)
- [代謝物候補の名前と式を編集](#)
- [ピーク ID の割り当て](#)

## 行の削除

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
5. Potential Metabolites 表の行を選択します。

**ヒント!** クリックしたまま **Ctrl** または **Shift** キーを押して、複数の行を選択します。

6. **Edit > Delete Selected Rows.** をクリックします。

ヒント! 直近の削除を元に戻すには、**Edit > Undo Delete** をクリックします。

---

7. **Save** をクリックします。

## 代謝物候補の名前と式を編集

ソフトウェアによる代謝物の命名方法を参照してください。

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
5. Potential Metabolites 表の行を右クリックし、**Edit Name and Formula** を選択します。  
Edit Name and Formula ダイアログが開きます。
6. **Name** を変更するには、次のいずれかを行います。
  - 該当する場合は、表示されるオプションのリストから名前を選択します。
  - 新しい名前を入力します。
7. 該当する場合は、表示されるオプションのリストから付加体を選択します。

注: 付加体に変更された場合、代謝物の **Mass accuracy** は自動的に更新されます。

---

8. **Formula** を変更するには、次のいずれかを行います。
  - 式を決定するのに十分な情報がない場合は、**Unknown** を選択します。
  - 代謝物の候補に式を手動で追加するには、**Use** を選択した後、表示されるフィールドに式を入力します。
  - 式の候補がソフトウェアによって予測された場合は、**Automatic** を選択し、リストからエントリを選択します。

注: 式の候補がソフトウェアによって予測されなかった場合、**Automatic** は選択できません。

---

注: **Mass accuracy** フィールドと **RDB** フィールドの値は、新しい式を追加すると自動的に更新されます。

---

9. 選択した行の代謝物を親化合物として同定するには、**Assign as Parent** をクリックします。
10. **OK** をクリックします。
11. **Save** をクリックします。

---

**注:** ペプチドの場合は、提案された名前の質量精度と、たとえば結合を切断するなどの必要な操作の数に基づいて、名前の順番を決定します。つまり、質量精度が高く、操作の少ないペプチドの提案名がリストの一番上に表示されます。

---

## ピーク別にグループ化

**Group by Peaks** ボタンを使用して、たとえば分子の複数の電荷状態のように、中性質量が等しいピークをグループ化し、同定されたすべての電荷状態を集計した **Peak Area**、**%Area** などのサマリー表を表示することができます。ピークは中性質量と保持時間の許容範囲に基づいてグループ化されます。

---

**注:** グループ機能は、オリゴヌクレオチドワークフローにのみ適用されます。

---

## ピーク ID の割り当て

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
5. Potential Metabolites 表で現在の **ピーク ID** を確認します。
6. 行の削除や代謝物の名前の変更など、表の変更を行います。
7. **Assign ID** をクリックします。

同じニュートラルフォーミュラと保持時間に関連する行はグループ化されています。グループ内の 1 つの行に一次ピーク ID が割り当てられ、残りの行には一次ピーク ID の 1 つ下のレベルの配列 ID が割り当てられます。たとえば、割り当てられた一次ピーク ID が M2 の場合、残りの各行には M2 から始まる配列 ID が割り当てられます。たとえば、M2-1、M2-2 のようになります。

非一次ピーク ID は、非一次付加体を持つピークに割り当てられます。非一次付加体とは、Advanced Ion Types 表で選択されているものの、イオンタイプリストには表示されていない付加体のことです。イオンタイプリストには、一次ピーク ID のみが表示されます。

## MS/MS スペクトル

MS/MS スペクトルは、任意の代謝物について追加、削除、置換ができます。MS/MS スペクトルは、手動の場合は Explorer ワークスペースで重心を設定した単一の MS/MS スペクトルをコピーし、Results ワークスペースに貼り付けることで、自動の場合は Results ワークスペースの **Add MS/MS** ボタンで追加できます。

## 貼り付けによるスペクトルの追加

---

**注:** この機能はベータ版です。

---

## 結果の閲覧

---

**注:** この機能は、オリゴヌクレオチドワークフローにおいて、TOF-MS/MS および IDA データに対してのみ利用可能です。IDA Explorer からの MS/MS スペクトルの貼り付けは、現在非対応です。データファイルは、標準的な TIC として開き、Explorer ワークスペースで重心を設定してから Molecule Profiler にペーストする必要があります。

---

**注:** Results ファイル内の既存の MS/MS スペクトルは、Results ファイルが保存されるまで上書きされません。Results ファイルに保存されている選択した代謝物質の元のスペクトルに戻すには、Results ファイルを保存する前に **Remove MS/MS** をクリックします。

---

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動して選択し、**OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
4. Potential Metabolites 表の行を選択します。
5. SCIEX OS ホームページから Explorer ワークスペースを開きます。
6. **File > Open Sample** を選択します。  
Select Sample ダイアログが開きます。
7. サンプルを含むデータファイルに移動し、+ をクリックして展開し、開くサンプルを選択して **OK** をクリックします。  
データファイルは、TOF-MS/MS または IDA のデータを含む wiff または wiff2 データファイルである必要があります。
8. データファイルに IDA データが含まれている場合は、Open IDA Sample ダイアログで **As a standard TIC** を選択し、**OK** をクリックします。
9. MS および MS/MS スペクトルを開きます。

---

**ヒント!** スペクトルを開くには、選択ウィンドウを設定するか、TIC ペインで保持時間をダブルクリックします。

---

10. MS/MS スペクトルのヘッダーを右クリックし、**Remove All Traces Except Active** を選択します。
11. **Process > Centroid Spectrum** を選択します。  
Centroid ダイアログが開きます。
12. **Intensity、Height、Area、Intensity sum above 50%** のいずれかに重心を置くかを選択します。
13. **Edit > Copy** を選択します。
14. Molecule Profiler ワークスペースに移動します。
15. **Paste MS/MS** をクリックします。  
MS/MS スペクトルが追加されます。
16. **Save** をクリックします。


---

## Add MS/MS ボタンで複数のスペクトルを追加する

---

注: Results ファイル内の既存の MS/MS スペクトルは、Results ファイルが保存されるまで上書きされません。Results ファイルに保存されている選択した代謝物質の元のスペクトルに戻すには、Results ファイルを保存する前に **Remove MS/MS** をクリックします。

---

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動して選択し、**OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
4. Potential Metabolites 表の行を選択します。
5. **Add MS/MS** をクリックします。  
Add MS/MS ダイアログが開きます。
6. **Select MS/MS** をクリックします。  
Select Data ダイアログが開きます。
7. 適切な **Source** フォルダーに移動し、選択します。
8. **OK** をクリックします。
9. Select Data ダイアログの Available ペインで、MS/MS スペクトルを含む wiff ファイルと注入を選択し、アイコン(  )をクリックして Selected ペインにファイルを移動します。

---

**ヒント!** 最大 10 本の注入が選択できます。

---

10. Add MS/MS ダイアログに必要なファイルがすべて表示されたら、**OK** をクリックします。  
ソフトウェアは、各代謝物の一致するスペクトルを見つけようとします。
11. 各代謝物のスコアを確認します。  
MS/MS のスペクトルが変更された場合、ソフトウェアが **% Score** を再計算する可能性があります。
12. **Save** をクリックします。  
1 つの MS/MS スペクトル内で特定のフラグメントの種類を編集するには、[オリゴヌクレオチドワークフロー](#)を参照してください。

## スペクトルの削除

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。

## 結果の閲覧

---

5. Potential Metabolites 表の行を選択します。
6. MS/MS ペインで **Remove MS/MS** をクリックします。

---

注: 代謝物候補の IDA スペクトルが存在する場合は、MS/MS ペインに表示されます。

---

7. **Save** をクリックします。

## MS/MS スペクトルファイルの削除

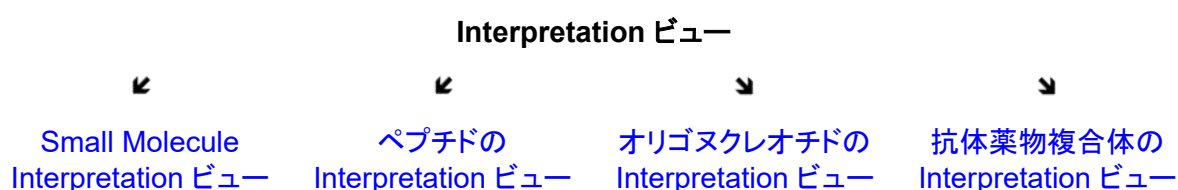
1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
5. **Add MS/MS** をクリックします。
6. **MS/MS Samples** フィールドで適切な wiff ファイルを選択します。
7. **Remove** をクリックし、**OK** をクリックします。  
wiff ファイル内の専用 MS/MS スペクトルはすべて結果から削除されます。
8. **Save** をクリックします。



対象サンプルのピークを特定した後、フラグメント解釈を使用すると、各代謝物候補の構造を特定するのに役立ちます。

## Interpretation ビューの概要

Results ワークスペースの Interpretation ビューには、Results ファイルに含まれる各代謝物質の構造候補を明らかにするために必要なデータとツールが表示されます。



## Small Molecule Interpretation ビュー

図 8-1 : Small Molecule Interpretation ビュー

The screenshot displays the 'Interpretation' view for a selected neutral formula: C<sub>32</sub>H<sub>40</sub>BrN<sub>5</sub>O<sub>5</sub>. The top panel shows a mass spectrum plot (1) with peaks at m/z 207.0690, 275.0187, 301.0362, 346.0572, 426.0836, and 664.2321. Below the plot, it states 'Assigned: 29 of 30 peaks, score for 29 proposed assignments: 654.5'. The middle panel (2) shows a table of 'Fragments: 29 of 127 Proposed Formulae' with columns for Use, Mass (m/z), Ion Formula, Error (mDa), Intensity (cps), RDB, and Proposed Structures. The bottom right panel (2a) shows 'Structure Details for C1...' with 'Use Broken E Delt' and 'Contained Neutral Losses' options. The bottom right panel (3) shows 'Structure Candidates' with 'No additional proposed structures'. The top right panel (4) shows the chemical structure and a periodic table.

Use	Mass (m/z)	Ion Formula	Error (mDa)	Intensity (cps)	RDB	Proposed Structures
<input checked="" type="checkbox"/>	176.0652	C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> N	0.1	207.3	11.6	0
<input checked="" type="checkbox"/>	181.1342	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O	0.7	804.1	4.0	1
<input checked="" type="checkbox"/>	191.0730	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> N	0.0	338.0	11.5	0
<input checked="" type="checkbox"/>	206.0690	C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	0.0	1141.1	12.0	0
<input checked="" type="checkbox"/>	207.0690	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	2.5	2740.1	12.0	0

## MS/MS データの特性評価

項目	インターフェース コンポーネント	説明
1	MS/MS ペイン	<p>選択した代謝物の MS/MS スペクトルを表示します。また、基準 MS/MS スペクトルがある場合は、その鏡像も表示されます。アスタリスクは、割り当てのために選択したピークを示します。このスペクトルのソースは、サンプルの IDA wiff ファイル、サンプルの SWATH 測定 wiff ファイル、または Results ファイルに追加した専用の MS/MS wiff ファイルです。ボタンを押して実行する機能の説明については、<a href="#">表 8-1</a> を参照してください。</p>
2	Fragments 表	<p>選択した代謝物に割り当てられたフラグメントの <math>m/z</math> 値、提案された構造の数、スコアをすべて表示します。特定の <math>m/z</math> 値に異なる式が割り当てられる可能性がある場合、表には各式の行が含まれます。デフォルトでは、各式と <math>m/z</math> 値の組み合わせで最も高いスコアを持つ行は、<b>Use</b> チェックボックスがオンになっています。</p> <hr/> <p><b>ヒント!</b> <b>Use</b> チェックボックスをオンにしていない行は、非表示になります。すべての行を表示するには、表を右クリックし、<b>Show Hidden Rows</b> をクリックします。</p> <hr/> <p>アイコンを押して実行する機能の説明については、<a href="#">表 8-3</a> を参照してください。</p>
2a	Structure Details 表	<p>選択したフラグメントを生成する可能性のある構造部分を、結合の切断数、デルタ H の値、およびスコアとともにリストアップします。この表で行を選択すると、構造の関連部分が強調表示されます。</p> <p>デフォルトでは、スコアが最も高いフラグメント構造で <b>Use</b> チェックボックスがオンになっています。</p>
2b	Contained Neutral Losses 表	<p>2 つのフラグメント質量からのニュートラルロスを含みます。</p>
3	Structure charts ペイン	<p>以下の 2 つタブが含まれています。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Parent Structure タブ。選択した代謝物の親構造を示します。</li> <li>Structure Candidates タブ。提案された構造の全リストをスコアの降順に並べた表を含むインタラクティブなヒストグラムです。この表の行を選択すると、Structure ペイン(項目 2)に表示される構造が変化します。特定の構造を結果に含めるには、その構造の <b>Apply to Results</b> チェックボックスをクリックします。<a href="#">Structure Candidates タブの概要</a>を参照してください。</li> </ul>

項目	インターフェース コンポーネント	説明
4	Structure ペイン	代謝物候補の構造候補を読み込み、基本的な描画ツールで構造を編集できます。ボタンを押して実行する機能の説明については、表 8-2 を参照してください。

表 8-1 : MS/MS ペインのボタン

ボタン	説明
Deisotope	MS/MS ペインのすべての同位体を非表示にします。もう一度クリックすると同位体が表示されます。
Prepare	Interpret Data ダイアログを開き、選択した代謝物を解釈するために必要な詳細(式、アクティブなピーク、MS/MS スペクトルの再キャリブレーション)を編集できます。
Options	MS/MS フラグメントを割り当てるための Options ダイアログを開きます。 <a href="#">オプションの設定</a> で表 8-15 を参照してください。
Generate	選択した代謝物の構造候補を自動生成し、Structure Candidate タブに入力します。 <a href="#">Structure Candidates タブの概要</a> を参照してください。
Apply	選択したピークに解釈の変更を適用します。
Remove	選択したピークから、割り当てられたフラグメントと代謝物構造を削除します。

表 8-2 : Structure ペインのボタン

ボタン	説明
Load	<ul style="list-style-type: none"> <li>親を読み込む: 選択した代謝物の親構造を開きます。</li> <li>構造を読み込む: 選択したピークの構造ファイルを開きます。</li> </ul>
Delete	表示されている構造を Structure ペインから削除します。
Save As	表示されている構造を別のファイル名で保存できるようにします。
Assign	構造候補のフラグメントとニュートラルロスを計算し、MS/MS スペクトルにイオンを割り当てます。

表 8-3 : Fragments 表のアイコン




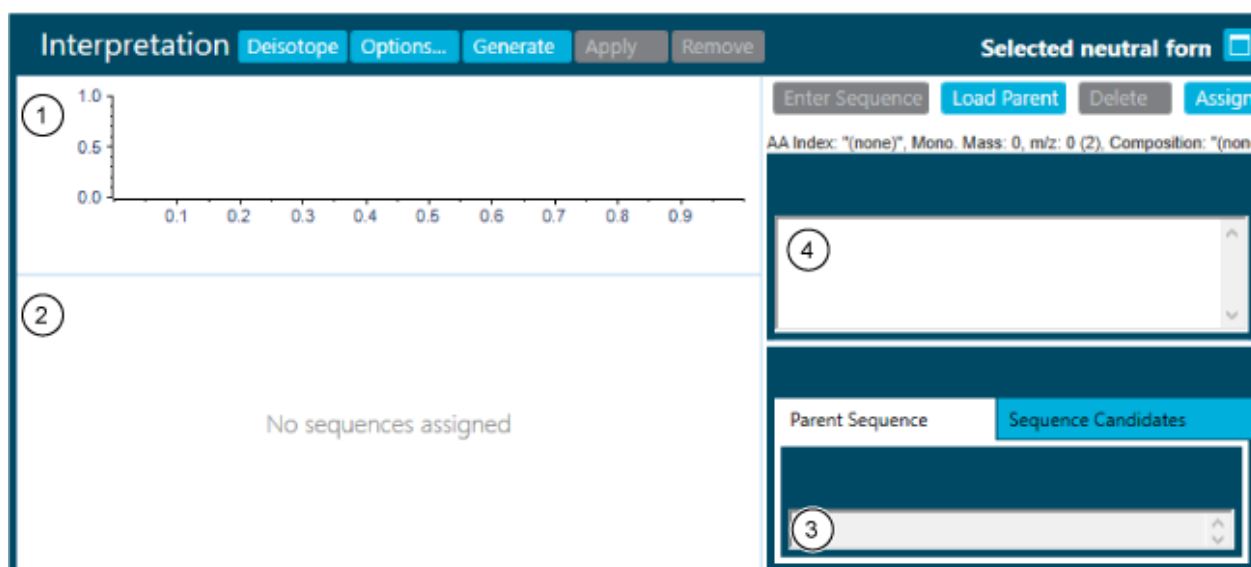
アイコン	説明
	選択したフラグメントのラベルを追加します。
	MS/MS スペクトルからすべてのラベルを削除します。

表 8-3 : Fragments 表のアイコン (続き)

アイコン	説明
	Interpretation Filters ダイアログを開きます。低分子用 Interpretation Filters の概要を参照してください。

## ペプチドの Interpretation ビュー

図 8-2 : ペプチドの Interpretation ビュー



項目	インターフェース コンポーネント	説明
1	MS/MS ペイン	選択した代謝物の MS/MS スペクトルを表示します。また、基準 MS/MS スペクトルがある場合は、その鏡像も表示されます。このスペクトルのソースは、サンプルの IDA wiff ファイル、サンプルの SWATH 測定 wiff ファイル、または Results ファイルに追加した専用の MS/MS wiff ファイルです。ボタンを押して実行する機能の説明については、表 8-4 を参照してください。
2	Sequence ペイン	配列の入力を可能にします。ボタンを押して実行する機能の説明については、表 8-5 を参照してください。
3	Fragments 表	選択した代謝物候補の提案式のリストが含まれています。リストには、 $m/z$ 値、配列、フラグメントイオンの種類 (たとえば y や b)、電荷、エラー、強度が含まれます。アイコンを押して実行する機能の説明については、表 8-6 を参照してください。

項目	インターフェース コンポーネント	説明
4	Sequence charts ペイン	以下の 2 つタブが含まれています。 <ul style="list-style-type: none"> <li>親薬品の配列が含まれている Parent Sequence タブ。</li> <li>Sequence Candidates タブは、ソフトウェアが提案する配列のリストを示す表を含むインタラクティブなヒストグラムです。各配列案には、ピーク領域の割合に基づいたスコアが割り当てられます。特定の配列を結果に適用するには、その配列の <b>Apply to Results</b> チェックボックスをオンにします。適用された配列は、Results ファイルを閉じてから再び開くと、デフォルトの配列として表示されます。<a href="#">Sequence Candidates タブの概要</a>を参照してください。</li> </ul>





表 8-4 : MS/MS ペインのボタン

ボタン	説明
Deisotope	MS/MS スペクトルからすべての同位体を削除します。
Options	Options ダイアログを開きます。 <a href="#">オプションの設定</a> で表 8-16 を参照してください。
Generate	選択した代謝物の構造候補を自動生成し、Structure Candidate タブに入力します。 <a href="#">Structure Candidates タブの概要</a> を参照してください。
Apply	選択したピークに解釈の変更を適用します。
Remove	選択したピークから、割り当てられたフラグメントと代謝物構造を削除します。

表 8-5 : Sequence ペインのボタン

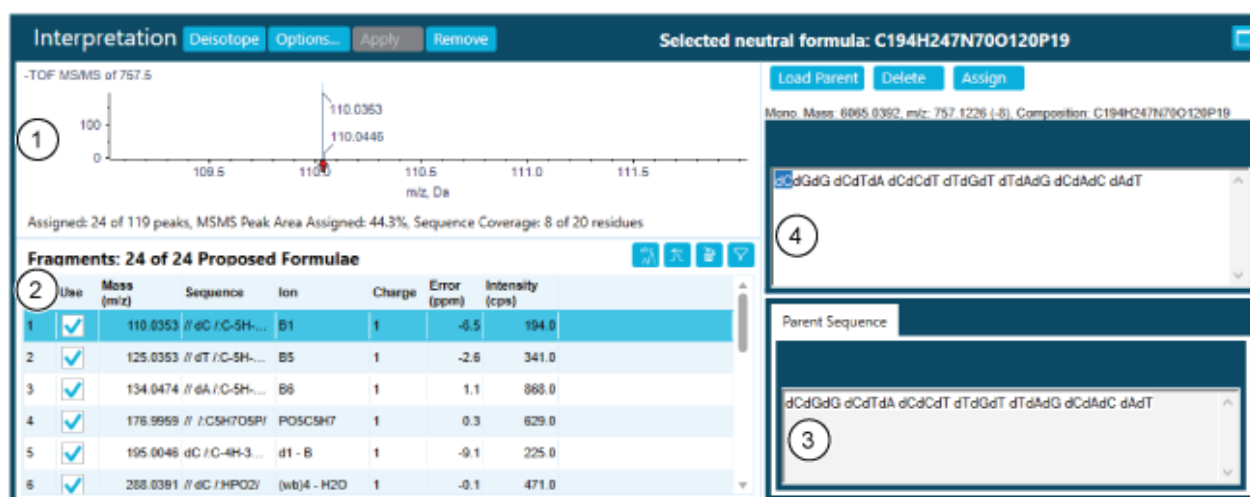
ボタン	説明
Enter Sequence	Sequence ペインに新しい配列を入力できるようになります。 <a href="#">ペプチド配列の命名規則</a> を参照してください。
Load Parent	選択した代謝物の親配列を開きます。
Delete	表示されている配列を Sequence ペインから削除します。
Assign	構造候補のフラグメントとニュートラルロスを計算し、MS/MS スペクトルにイオンを割り当てます。

表 8-6 : Fragments 表のアイコン

アイコン	説明
	すべてのピークにラベルを追加します。
	選択したフラグメントのラベルを追加します。
	MS/MS スペクトルからすべてのラベルを削除します。
	Interpretation Filters ダイアログを開きます。 <a href="#">ペプチド用の Interpretation フィルターの概要</a> を参照してください。

## オリゴヌクレオチドの Interpretation ビュー

図 8-3 : オリゴヌクレオチドの Interpretation ビュー



項目	インターフェース コンポーネント	説明
1	MS/MS ペイン	選択した代謝物の MS/MS スペクトルを表示します。また、基準 MS/MS スペクトルがある場合は、その鏡像も表示されます。このスペクトルのソースは、サンプルの IDA wiff ファイル、サンプルの SWATH 測定 wiff ファイル、または Results ファイルに追加した専用の MS/MS wiff ファイルです。ボタンを押して実行する機能の説明については、 <a href="#">表 8-7</a> を参照してください。
2	Fragments 表	選択した代謝物候補の提案式のリストが含まれています。リストには、 <i>m/z</i> 値、配列、フラグメントイオンの種類（たとえば <i>y</i> や <i>b</i> ）、電荷、エラー、強度が含まれます。アイコンを押して実行する機能の説明については、 <a href="#">表 8-6</a> を参照してください。

項目	インターフェース コンポーネント	説明
3	Sequence charts ペイン	親薬品の配列を含みます。
4	Sequence ペイン	配列の入力を可能にします。ボタンを押して実行する機能の説明については、 <a href="#">表 8-5</a> を参照してください。





表 8-7 : MS/MS ペインのボタン

ボタン	説明
Deisotope	MS/MS スペクトルからすべての同位体を削除します。
Options	Options ダイアログを開きます。 <a href="#">オプションの設定</a> で <a href="#">表 8-18</a> を参照してください。
Apply	選択したピークに解釈の変更を適用します。
Remove	選択したピークから、割り当てられたフラグメントと代謝物構造を削除します。

表 8-8 : Sequence ペインのボタン

ボタン	説明
Load Parent	選択した代謝物の親配列を開きます。
Delete	表示されている配列を Sequence ペインから削除します。
Assign	構造候補のフラグメントとニュートラルロスを計算し、MS/MS スペクトルにイオンを割り当てます。

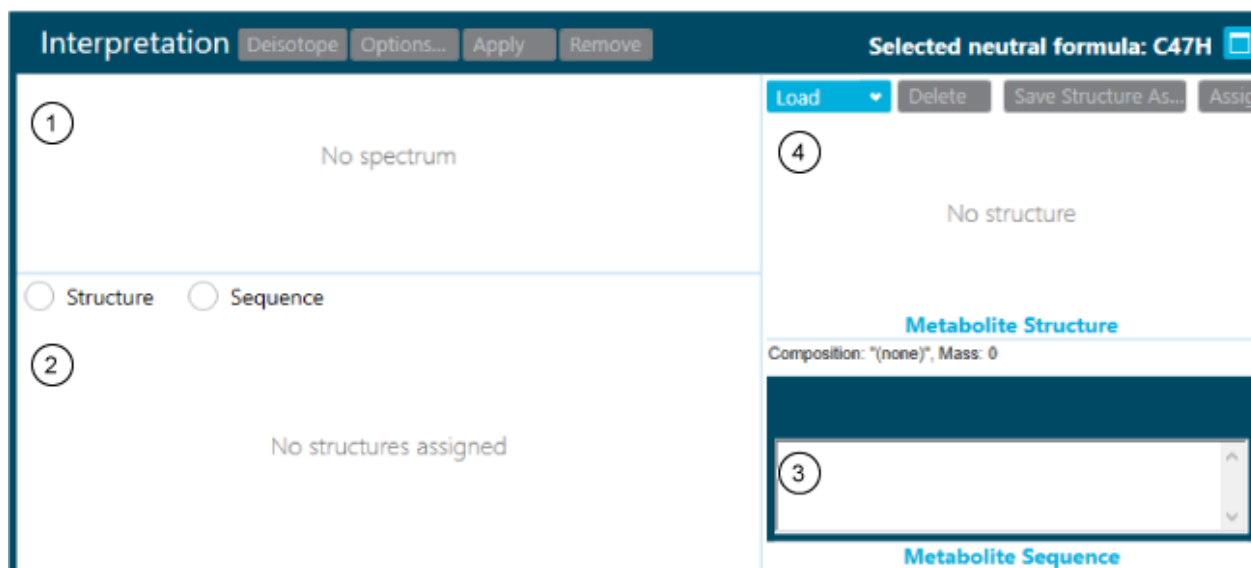
表 8-9 : Fragments 表のアイコン

アイコン	説明
	すべてのピークにラベルを追加します。
	選択したフラグメントのラベルを追加します。
	MS/MS スペクトルからすべてのラベルを削除します。
	Interpretation Filters ダイアログを開きます。 <a href="#">オリゴヌクレオチド用の Interpretation フィルターの概要</a> を参照してください。



## 抗体薬物複合体の Interpretation ビュー

図 8-4 : 抗体薬物複合体の Interpretation ビュー



項目	インターフェース コンポーネント	説明
1	MS/MS ペイン	<p>選択した代謝物の MS/MS スペクトルを表示します。また、基準 MS/MS スペクトルがある場合は、その鏡像も表示されます。このスペクトルのソースは、サンプルの IDA wiff ファイル、サンプルの SWATH 測定 wiff ファイル、または Results ファイルに追加した専用の MS/MS wiff ファイルです。ボタンを押して実行する機能の説明については、<a href="#">表 8-10</a> を参照してください。</p>
2	Fragments 表	<p>以下のタブが含まれています。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Structure タブ。選択した代謝物に割り当てられたフラグメントの <math>m/z</math> 値、提案された構造の数、スコアをすべて表示します。特定の <math>m/z</math> 値に異なる式が割り当てられる可能性がある場合、表には各式の行が含まれません。デフォルトでは、各式と <math>m/z</math> 値の組み合わせで最も高いスコアを持つ行は、<b>Use</b> チェックボックスがオンになっています。</li> <li>• Sequence タブ。選択した代謝物候補の提案式をすべてリストアップします。リストには、<math>m/z</math> 値、配列、フラグメントイオンの種類(たとえば y や b)、電荷、エラー、強度が含まれます。</li> </ul> <p>アイコンを押して実行する機能の説明については、<a href="#">表 8-13</a> を参照してください。</p>



項目	インターフェース コンポーネント	説明
3	Sequence ペイン	ペイロードまたはリンカー部分と結合している配列の部分を表示します。ペイロードやリンカー部分と結合している残基を示すには、残基を選択して右クリックし、 <b>Mark Residue to Conjugate</b> を選択します。
4	Structure ペイン	代謝物候補の構造候補を読み込み、基本的な描画ツールで構造を編集できます。ボタンを押して実行する機能の説明については、表 8-11 を参照してください。

表 8-10 : MS/MS ペインのボタン

ボタン	説明
Deisotope	MS/MS スペクトルからすべての同位体を削除します。
Options	Options ダイアログを開きます。オプションの設定で表 8-21 を参照してください。
Apply	選択したピークに解釈の変更を適用します。
Remove	選択したピークから、割り当てられたフラグメントと代謝物構造を削除します。

表 8-11 : Structure ペインのボタン

ボタン	説明
Load	<ul style="list-style-type: none"> <li><b>Load Parent Structure:</b> 選択した代謝物の親構造を開きます。</li> <li><b>Load Sequence:</b> 選択した代謝物の配列を開きます。</li> </ul>
Delete	Structure ペインから読み込んだ構造、Sequence ペインから読み込んだ配列情報、Fragments 表から割り当てた構造と配列情報を削除します。
Save Structure As	構造を別のファイル名で保存できるようにします。
Assign	構造候補のフラグメントとニュートラルロスを計算し、MS/MS スペクトルにイオンを割り当てます。

表 8-12 : Fragments 表のボタン

ボタン	説明
Structure	選択した代謝物に割り当てられたフラグメントの $m/z$ 値、提案された構造の数、スコアをすべて表示します。特定の $m/z$ 値に異なる式が割り当てられる可能性がある場合、表には各式の行が含まれます。デフォルトでは、各式と $m/z$ 値の組み合わせで最も高いスコアを持つ行は、 <b>Use</b> チェックボックスがオンになっています。



マルクーシュ構造の装着

ピークラベルの概要



MS/MS スペクトルにピークラベルを追加する

低分子用 Interpretation Filters の概要

## 構造の読み込み

代謝物の構造解析を開始する前に、ソフトウェアがフラグメント構造の候補を決定するための構造ファイルを読み込んでください。

**注:** 構造が読み込まれていない場合でも、式の候補をフラグメントに割り当てることができます。

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. Results ファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。
5. **Show** フィールドで **Interpretation** を選択します。
6. Potential Metabolites 表の行を選択します。
7. Structure ペインで **Load** をクリックし、**Load Structure** オプションを選択します。  
Open Structure File ダイアログが開きます。
8. 構造ファイルに移動し、選択します。

**注:** ソフトウェアは、sdf または mol フォーマットの構造ファイルを受け入れます。

9. 細かい変更が必要な場合は、構造を編集します。[構造の編集](#)を参照してください。

## 構造の編集

特定の代謝物の構造を読み込んだ後、編集ツールで細かい変更を加えます。

**ヒント!** 編集ツールを使って代謝変換の付着点を変えるなど、構造に細かい変更を加えることができます。編集ツールは、新しい構造を作成したり、既存の構造に大きな変更を加えたりするために使用しないでください。

表 8-14 : 構造の編集

目的の作業	実行する操作
構造に原子を追加する	パレット上の特定の記号を新しい位置にドラッグします。追加した原子は、最も近い既存の原子と単結合を形成します。

表 8-14 : 構造の編集 (続き)

目的の作業	実行する操作
パレット上に新しい原子を作成する	空白の四角をクリックし、Specify Symbol ダイアログに記号を入力し、 <b>OK</b> をクリックします。  <b>ヒント!</b> 追加した四角をクリックし、新しい記号を入力すると、異なる原子を作成できます。
構造の一部を強調表示する	必要な原子と結合の周りをドラッグして円を描きます。
1 つ以上の原子を移動する	構造のハイライト部分を新しい位置までドラッグします。その部分が他の 1 つの原子に結合していれば、結合は新しい位置に移動します。その部分が 2 つ以上の原子に結合している場合、その部分は移動しますが、既存の結合は変わりません。
既存の構造に構造を挿入する	構造を右クリックし、次のいずれかをクリックします。 <ul style="list-style-type: none"> <li>別の構造を追加するには <b>Insert .mol File</b> をクリックします。</li> <li>特定の結合構造を追加するには <b>Insert Conjugate</b> をクリックします。</li> </ul>
1 つ以上の原子を削除する	構造のハイライト部分を右クリックし、 <b>Remove Selected Atoms</b> をクリックします。
結合の作成	結合していない 2 つの原子を選択し、選択したものを右クリックして <b>New Bond</b> をクリックし、結合の種類を選択します。
結合の編集	結合を右クリックし、 <b>Set Bond Type</b> をクリックして、結合の種類を選択します。
結合の削除	結合を右クリックし、 <b>Remove Bond</b> をクリックします。
既存の原子の電荷状態を変更する	原子を右クリックし、 <b>Atom Charge State</b> をクリックして、状態を選択します。

**ヒント!** 編集した構造を別ファイルとして保存する場合は、**Save As** をクリックします。

**ヒント!** 構造は mol ファイルまたは sdf ファイルとして保存できます。Save As ダイアログに適切な拡張子を入力します。

## 構造割り当てを準備する

ユーザーが構造割り当てを準備する際に、4 つのタスクがあります。

- 代謝物候補の名前または式を編集する。
- MS/MS スペクトルを再キャリブレーションする。

- 
- MS/MS スペクトルの特定のピークを選択する。
  - 解釈するフラグメントピークを選択する。
- 

注: これらの作業が不要な場合は、上記の手順を無視して、すぐにフラグメント構造を割り当てることができます。

---

### 代謝物候補の名前と式を編集

ソフトウェアによる代謝物の命名方法を参照してください。

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
  2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
  3. 適切なファイルに移動し、選択します。
  4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
  5. Potential Metabolites 表の行を右クリックし、**Edit Name and Formula** を選択します。  
Edit Name and Formula ダイアログが開きます。
  6. **Name** を変更するには、次のいずれかを行います。
    - 該当する場合は、表示されるオプションのリストから名前を選択します。
    - 新しい名前を入力します。
  7. 該当する場合は、表示されるオプションのリストから付加体を選択します。
- 

注: 付加体に変更された場合、代謝物の **Mass accuracy** は自動的に更新されます。

---

8. **Formula** を変更するには、次のいずれかを行います。
    - 式を決定するのに十分な情報がない場合は、**Unknown** を選択します。
    - 代謝物の候補に式を手動で追加するには、**Use** を選択した後、表示されるフィールドに式を入力します。
    - 式の候補がソフトウェアによって予測された場合は、**Automatic** を選択し、リストからエントリを選択します。
- 

注: 式の候補がソフトウェアによって予測されなかった場合、**Automatic** は選択できません。

---

注: **Mass accuracy** フィールドと **RDB** フィールドの値は、新しい式を追加すると自動的に更新されます。

---

9. 選択した行の代謝物を親化合物として同定するには、**Assign as Parent** をクリックします。
  10. **OK** をクリックします。
  11. **Save** をクリックします。
-

## MS/MS データの特性評価

---

**注:** ペプチドの場合は、提案された名前の質量精度と、たとえば結合を切断するなどの必要な操作の数に基づいて、名前の順番を決定します。つまり、質量精度が高く、操作の少ないペプチドの提案名がリストの一番上に表示されます。

---

### MS/MS スペクトルの再キャリブレーション

1. Interpretation ビューで **Prepare** をクリックします。  
Interpret Data ダイアログが開きます。
2. MS/MS Details タブをクリックします。
3. キャリブレーションポイントとして使用するフラグメントを選択します。
4. 選択したフラグメントを右クリックし、**Set calibration points** をクリックします。  
フラグメントサークルの色が青に変わります。
5. ステップ 3 と 4 を繰り返して、キャリブレーションポイントをさらに選択します。
6. 設定したキャリブレーションポイントを削除するには、該当するキャリブレーションポイントを選択した後、右クリックして **Clear calibration points** を選択します。  
フラグメントサークルの色が緑に戻ります。
7. フラグメントの詳細を表示するには、キャリブレーションポイントを選択した後、右クリックして **Composition details** を選択します。  
Fragment ダイアログが開き、 $m/z$  値、質量エラー (ppm と mDa の両方)、提案式が偶数電子を指すかどうか、および提案式の RDB 値 (環と二重結合) が表示されます。
8. キャリブレーションポイントをフラグメントの組成またはキャリブレーションポイント候補として選択するには、キャリブレーションポイントを選択した後、右クリックして **Select composition** を選択します。
9. MS/MS スペクトルを右クリックして、**Recalibrate** をクリックします。

**注:** 再キャリブレーションしたスペクトルを破棄するには、スペクトルを右クリックして **Revert Calibration** をクリックします。

---

### MS/MS スペクトルの脱同位体化

Interpretation ビューで、Deisotope をクリックすると、MS/MS スペクトルからすべての同位体が削除されます。これにより、モノアイソトピックピークを素早く表示でき、SWATH 測定データを閲覧する際に便利です。

**注:** このオプションを選択したかどうかにかかわらず、モノアイソトープのみが Results Table に表示されます。

---

### アクティブピークを選択

アクティブピークは、MS/MS スペクトルの中で、フラグメント解釈に利用できる唯一のピークです。

1. Interpretation ビューで **Prepare** をクリックします。  
Interpret Data ダイアログが開きます。
2. MS/MS スペクトルをレビューします。  
青い矢印は、現在アクティブなピークを示します。

3. ピークを選択するには、ピークを横切るように四角形をドラッグします。
4. 選択したピークをダブルクリックします。  
選択したピークの下に青い矢印が表示されます。
5. 単一ピークを削除するには、Interpret Data ダイアログの境界線の下にある青い矢印をドラッグします。  
選択したピークの下から青い矢印が削除されます。

---

**ヒント!** アクティブなピークをすべてクリアするには、スペクトルを右クリックし、**Clear All Markers** をクリックします。

---

6. アクティブなピークをすべて選択した後、**Find** をクリックします。
7. MS および MS/MS スペクトルに最も良く一致する式の行を選択します。
8. **Select** をクリックします。

### 割り当てるフラグメントピークを選択する

複数のピークがアクティブとして同定される可能性があります。ユーザーは最も強度の高いピークのみを選択して作業することができます。

1. Interpretation ビューで **Options** をクリックします。  
Options ダイアログが開きます。
2. **Number of fragment peaks selected for assignment** フィールドに適切な数を入力します。
3. **OK** をクリックします。  
MS/MS スペクトル内のアスタリスクは、割り当てのために選択したピークを示します。

### オプションの設定

1. Interpretation ビューで **Options** をクリックします。  
Options ダイアログが開きます。
2. フラグメンテーションとラベリングのパラメータを表 8-15 のように変更します。

表 8-15 : Options ダイアログ

オプション	説明
<b>Number of fragment peaks selected for assignment</b>	このフィールドを使用して、割り当てるフラグメントピークの数を選択します。この数には、Prepare ダイアログで選択したピークの総数のサブセットが使用できます。全ピーク数のサブセットであれば、ピークは強度の高い順に選択されます。
<b>Minimum signal-to-noise ratio</b>	このフィールドを使用して、フラグメントピークを割り当てるために使用するしきい値を指定します。このしきい値未満のピークは割り当てられません。ノイズは、MS/MS スペクトルにおいて最も強度の小さいピークと定義されます。
<b>MS/MS m/z tolerance (ppm or mDa)</b>	フラグメントピークに式や構造を割り当てるには、その質量精度が指定した MS/MS m/z 許容値内である必要があります。

表 8-15 : Options ダイアログ (続き)

オプション	説明
<b>Fragmentation Settings</b>	
<b>Break aromatic rings</b>	芳香環を切断する場合は、このチェックボックスをオンにします。
<b>Maximum number of bonds to break</b>	このフィールドを使用して、切断する結合の最大数を指定します。オプションは次のとおりです。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• 1</li> <li>• 2</li> <li>• 3</li> <li>• 4</li> </ul>
<b>Maximum number of C-C bonds to break</b>	このフィールドを使用して、切断する C-C 結合の最大数を指定します。オプションは次のとおりです。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• 0</li> <li>• 1</li> <li>• 2</li> <li>• 3</li> <li>• 4</li> </ul>
<b>Label Settings</b>	
<b>Label peaks with</b>	このフィールドを使用して、ピークラベルに表示する情報を指定します。オプションは次のとおりです。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ion</li> <li>• Ion with ppm Error</li> <li>• Ion with mDa Error</li> </ul>
<b>Apply options to all potential metabolites</b>	このチェックボックスをオンにすると、現在のオプションが未割り当てのすべての代謝物に適用されます。

## フラグメント構造の割り当て

構造を割り当てるために、ソフトウェアは MS/MS スペクトル中のフラグメントピークを構造候補の可能性のある部分にリンクさせます。ユーザーは、各フラグメントの  $m/z$  値に最も良く一致する式と構造を選択できます。割り当ての実行後、割り当てのために選択したピークを示すアスタリスクは、割り当てが行われた場合はチェックマークに、割り当てができなかった場合は x に置き換えられます。

**注:** フラグメンテーションルールはソフトウェアに組み込まれており、編集できません。



---

## 提案式と構造の割り当て

各代謝物には、フラグメント構造を割り当てる前に MS/MS スペクトルが必要です。スペクトルを追加するには、[Add MS/MS ボタンで複数のスペクトルを追加する](#)を参照してください。

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
5. **Show** フィールドで **Interpretation** を選択します。
6. 構造候補を読み込んで編集します。[構造の読み込み](#)および[構造の編集](#)を参照してください。
7. 必要に応じて、構造を割り当てる準備をします。[構造割り当てを準備する](#)を参照してください。
8. Interpretation ビューの Structure ペインで、**Assign** をクリックします。  
MS/MS ペインの下には、同定されたフラグメントを示す Fragments 表、構造候補を示す Structure Details 表、含有されるニュートラルロスを示す Contained Neutral Losses 表という 3 つの表が表示されます。

---

**注:** 構造が読み込まれていない場合、ソフトウェアはフラグメントに候補式のみを割り当てません。

---

## 各フラグメントに対応する式構造を選択する

1. 必要に応じて、Interpretation ビューで Fragments、Structure Details、Contained Neutral Losses の各表を右クリックし、**Show Hidden Rows** をクリックします。

---

**注:** Fragments 表では、 $m/z$  値のスコアが最も高い行の **Use** チェックボックスがオンになっています。Structure Details 表では、スコアが最も高い行の **Use** チェックボックスがオンになっています。Contained Neutral Losses 表では、すべての行で **Use** チェックボックスがオンになっています。

---

2. Fragments 表で、**Use** チェックボックスをオンにすると、各  $m/z$  値に対して最も正確な式を含む行を特定できます。

---

**ヒント!** Fragments 表で複数行の **Use** チェックボックスをオンにすると、各フラグメントに対して複数の候補式を選択できます。

---

3. Structure Details 表で **Use** チェックボックスをオンにすると、選択した式に最も正確に一致する部分を特定できます。
4. Contained Neutral Losses 表で **Use** チェックボックスをオンにすると、含まれているニュートラルロスを最も正確に反映する行を特定できます。

---

**ヒント!** Structure Details 表と Contained Neutral Losses 表で、特定のフラグメントに対して複数の行で **Use** チェックボックスをオンにします。

---

5. **Apply** をクリックします。  
選択した代謝物の解釈データが保存されます。
6. すべての変更が完了したら、**Save** をクリックします。

**ヒント!** 特定の代謝物の解釈データをすべて削除する場合は、**Remove** をクリックします。

## Structure Candidates タブの概要

構造の自動生成機能を使用すると、Structure charts ペインの Structure Candidates タブに、Options ダイアログで設定した条件を満たす、選択した代謝物の構造リストが表示されます。[バッチ処理オプション](#)を参照してください。ソフトウェアは、以下の種類の代謝物の構造を生成します。

- 1 つまたは 2 つの開裂がある代謝物
- 単一の生体内変換代謝物
- 1 つの開裂と 1 回の生体内変換がある代謝物

より複雑な代謝の場合は、カスタム代謝物構造を提供または編集し、その構造案を評価することができます。

構造のリスト(ヒストグラムと呼ばれる)には、次のような列の情報が含まれています。

列	説明
Rank	構造の位置やランキングを示します。
Relative Evidence	親構造の MS/MS スペクトルと代謝物の MS/MS スペクトルの比較により、順位付けまたはスコアリングを行います。その後、代謝物のフラグメントを親のフラグメントと比較し、シフトしたフラグメントとそうでないフラグメントを同定します。さらに、フラグメント強度や提案の独自性といった他の属性も、全体的なランキング戦略において考慮されます。最終的なランキングは、特定の原子番号で生体内変換や開裂が起こる確率を示します。  また、この欄で構造の切り替えが可能です。 <a href="#">構造の切り換え</a> を参照してください。
Apply to Results	チェックボックスがオンの場合、対応する構造が Results ファイルに保存されます。

ヒストグラム表の上、**Apply to Results** 列の真上に候補の総数が表示されます。

自動生成された構造は編集できません。構造を読み込み、必要な修飾を加えた後、**Apply to Results** チェックボックスをオンにすると、その構造が Results ファイルに含まれます。[構造の読み込み](#)および[構造の編集](#)のステップ 7 および 8 を参照してください。

### 構造の切り換え

ヒストグラムの青いバーをクリックします。  
対応する構造が Structure ペインに表示されます。

## 空のペインを選択する

ヒストグラムの 1 行目をクリックします。

ヒストグラムの 1 行目には、No structure の語句が含まれています。Structure ペインが更新され、No structure の語句が表示されます。

## 構造の追加

注: 自動生成される構造のリストに追加できる配列は 1 つだけです。構造を追加した場合、ユーザーが追加した前の構造は上書きされます。

1. Structure ペインで **Load** をクリックし、**Load Structure** オプションを選択します。Open Structure File ダイアログが開きます。
2. 有効な mol または sdf ファイルに移動し、選択します。
3. **Open** をクリックします。

選択した構造が Structure ペインに表示され、ヒストグラム表には、最初に自動生成された構造のすぐ上に行が追加されます。読み込まれた構造の行の青の濃淡は、自動生成された構造を含む行の青とは僅かに異なります。ランキングは 0 となります。

ユーザーが追加した構造は編集が可能です。構造に加えられた変更は、ユーザーが Structure ペインからタブアウトしたときにメモリに保持されます。

## 表示する構造を選択する

1. ヒストグラムの青いバーをクリックします。対応する構造が Structure ペインに表示されます。デフォルトでは、ヒストグラムの最初の構造だけが Fragments 表に割り当てられています。
2. 異なる構造の Fragments 表を割り当てるには、ヒストグラムの青いバーをクリックし、**Assign** をクリックします。

## 構造の削除

1. ヒストグラムの青いバーをクリックします。対応する構造が Structure ペインに表示されます。
2. Structure ペインで **Delete** をクリックします。Structure ペインから構造が削除され、選択した青い線がヒストグラムから削除され、Fragments 表が削除されます。ヒストグラムの次の行の構造は、Structure ペインに表示されます。

## マルクーシュ構造の装着

フラグメント構造を割り当てた後、化学修飾の概位を示すためにマルクーシュ構造を使用します。

注: マルクーシュ構造を含む代謝物にはフラグメント構造を割り当てることができません。

1. 構造の一部を強調表示します。
2. 構造の上または下を右クリックして、**Attach Markush** をクリックします。
3. **Single Bond** または **Double Bond** のいずれかを選択します。

## MS/MS データの特性評価

4. Select Symbol ダイアログで、必要な記号または式を入力します。
5. **OK** をクリックします。

マルクーシュ構造は、構造の選択した部分と破線で結んで表示しています。


**注:** マルクーシュ構造が添付されている場合は、解釈データを割り当てた後に構造を変更することができます。マルクーシュ構造を削除すると、いかなる変更を行っても、代謝物の解釈データがすべて削除されます。

## ピークラベルの概要

ピークには次のようなラベルを付けることができます。


- イオン式またはイオンタイプ(ペプチドの場合)
- イオン式またはイオンタイプ(ペプチドの場合)と ppm の誤差
- イオン式またはイオンタイプ(ペプチドの場合)と mDa の誤差

### MS/MS スペクトルにピークラベルを追加する

1. Interpretation ビューで **Options** をクリックします。  
Options ダイアログが開きます。
2. **Label peaks with** フィールドでラベルの種類を選択します。
3. **OK** をクリックします。
4. Fragments 表で、ラベル付けするピークを含む行を選択します。
5.  をクリックします。

**ヒント!** MS/MS スペクトルからすべてのラベルを削除するには、 をクリックします。

## 低分子用 Interpretation Filters の概要

フィルターを適用して、Fragments 表に表示されるデータを絞り込みます。Interpretation Filters ダイアログを開くには、Fragments 表の  アイコンをクリックします。

フィルター	説明
<b>Rings and Double Bonds</b>	
<b>RDB</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Integer value (even-electron):</b> 環と二重結合の値が整数であるフラグメントのみを表示します。</li><li>• <b>Non-integer value (odd-electron):</b> 環と二重結合の値が非整数であるフラグメントのみを表示します。</li></ul>
<b>Mass Range</b>	
m/z from ___ to ___	m/z 値が指定範囲内にあるフラグメントのみを表示します。
<b>Mass Accuracy</b>	

フィルター	説明
Accuracy within	質量真度が指定範囲内にあるフラグメントのみを表示します。 注: 質量真度を mDa と ppm のどちらで測定するかは、Options ダイアログで選択したものに依存します。
Intensity	
Intensity above __ cps	指定した値を超える強度値があるフラグメントのみを表示します。
Score	
Score above	指定した値を超えるスコアのフラグメントのみを表示します。
Structures	
Fragments with assigned structures	構造に関連付けられているフラグメントのみを表示します。

## ペプチドワークフロー

[配列の読み込み](#)

[配列の編集](#)

[オプションの設定](#)

[フラグメント配列の割り当て](#)

[ピークラベルの概要](#)



[MS/MS スペクトルにピークラベルを追加する](#)

[ペプチド用の Interpretation フィルターの概要](#)

## 配列の読み込み

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. Results ファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。
5. **Show** フィールドで **Interpretation** を選択します。
6. Potential Metabolites 表の行を選択します。
7. 次のいずれかの操作を行います。
  - Sequence ペインが空白の場合は、**Load Parent** をクリックします。
  - Sequence ペインに既に配列が存在し、新たに配列を追加する必要がある場合は、**Enter Sequence** をクリックしてペインをクリアし、**Load Parent** をクリックします。

親配列が Sequence ペインに表示されます。ペインの上に **AA Index: [ ], Mono. Mass: [ ], m/z: [ ], Composition: [ ]** というラベルが追加されます。ここで

- **AA Index:** (アミノ酸インデックス)アミノ酸インデックスは、親配列におけるその配列の最初と最後の残基の位置を示します。異性体配列が親配列のサブセットでない場合、AA Index は表示されません。
- **Mono. Mass:** 中性成分のモノアイソトピック質量。
- **m/z:** 質量電荷比の値。電荷は括弧内に表示されます。
- **Composition:** 配列の非荷電元素組成。

8. 変更が必要な場合は、配列を編集します。[配列の編集](#)を参照してください。

### 配列の編集

特定の代謝物の配列を作成した後、または読み込んだ後、その配列を編集できます。

1. 変更が必要な配列をクリックします。
2. 必要な変更を加えます。[ペプチド配列の命名規則](#)を参照してください。

### オプションの設定

1. Interpretation ビューで **Options** をクリックします。  
Options ダイアログが開きます。
2. フラグメンテーションとラベリングのパラメータを変更します。[表 8-16](#) を参照してください。

表 8-16 : Options ダイアログ

オプション	説明
<b>Minimum signal-to-noise ratio</b>	このフィールドを使用して、フラグメントピークを割り当てるために使用するしきい値を指定します。このしきい値未満のピークは割り当てられません。ノイズは、MS/MS スペクトルにおいて最も強度の小さいピークと定義されます。
<b>MS/MS m/z tolerance (ppm or mDa)</b>	このフィールドを使用して、MS/MS m/z 許容値を指定します。フラグメントピークにイオンタイプや配列を割り当てるには、質量精度が指定した MS/MS m/z 許容値内である必要があります。
<b>Fragmentation Settings</b>	
<b>Fragment Types</b>	適切なフラグメントの種類を選択します。複数の種類を選択できます。オプションは次のとおりです。 <ul style="list-style-type: none"><li>• a</li><li>• b</li><li>• y</li></ul>

表 8-16 : Options ダイアログ (続き)

オプション	説明
<b>Maximum number of bonds to break</b>	このフィールドを使用して、切断する結合の最大数を指定します。オプションは次のとおりです。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• 1</li> <li>• 2</li> <li>• 3</li> </ul> <hr/> <b>ヒント!</b> より複雑なペプチドの場合、切断する結合の最大数に 3 を選択した場合、必要な処理時間が増加します。
<b>Break linkages</b>	ペプチド配列に結合がある場合、このチェックボックスをオンにすると、個々のアミノ酸間の結合を切断できます。
<b>Label Settings</b>	
<b>Label peaks with</b>	このフィールドを使用して、ピークラベルに表示する情報を指定します。オプションは次のとおりです。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ion</li> <li>• Ion with ppm Error</li> <li>• Ion with mDa Error</li> <li>• Ion with Charge</li> </ul>
<b>Apply options to all potential metabolites</b>	このチェックボックスをオンにすると、現在のオプションが未割り当てのすべての代謝物に適用されます。

## フラグメント配列の割り当て

注: フラグメンテーションルールはソフトウェアに組み込まれており、編集できません。

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
5. **Show** フィールドで **Interpretation** を選択します。
6. 配列を読み込みます。[配列の読み込み](#)を参照してください。
7. Sequence ペインで **Assign** をクリックします。



## MS/MS データの特性評価

Fragments 表には、選択したオプションを使用して、読み込んだ配列の解釈結果が入力されます。[オプションの設定](#)を参照してください。Fragments 表で一致したイオンを示す緑色の縦線が、MS/MS ペインに追加されます。表の上のラベルは、更新されて以下のことを示します。

- **Assigned: x of y peaks.** 割り当てられているピークの数を示します。
- **MSMS Peak Area Assigned: x%.** MS/MS ピーク領域のうち、割り当てられている割合を示します。
- **Sequence Coverage: x of y consecutive amino acids.** 配列がカバーする連続したアミノ酸の数を示します。

## Sequence Candidates タブの概要

配列の自動生成機能を使用すると、Sequence charts ペインの Sequence Candidates タブに、Options ダイアログで設定した条件を満たす、選択した異性体または代謝物の配列リストが表示されます。[バッチ処理オプション](#)を参照してください。ソフトウェアは、以下の種類の代謝物または異性体の配列を生成します。

- $n$  箇所の開裂: 開裂に最大 4 つの修飾が可能
- 親: ここで  $n$  は任意の数の開裂を指します

配列のリスト(ヒストグラムと呼ばれる)には、次のような列の情報が含まれています。

列	説明
Rank	指定した代謝物について見つかったすべての異性体配列の相対的ランキングを示します。ランクは、割り当てられた MS/MS ピーク領域に基づいています。
View sequence fragments	パーセンテージの値は、提案された配列のスコアリングを示します。 また、この欄で配列の切り替えが可能です。 <a href="#">配列の切り換え</a> を参照してください。
AA Index	アミノ酸配列の始点と終点を示します。
Apply to Results	チェックボックスがオンの場合、対応する配列が Results ファイルに保存されます。

ヒストグラム表の上、**Apply to Results** 列の真上に候補の総数が表示されます。

自動生成された配列は編集できません。配列を読み込み、必要な修飾を加えた後、**Apply to Results** チェックボックスをオンにすると、その配列が Results ファイルに含まれます。[配列の読み込み](#)および[配列の編集](#)のステップ 7 を参照してください。

## ピークラベルの概要

ピークには次のようなラベルを付けることができます。

- イオン式またはイオンタイプ(ペプチドの場合)
- イオン式またはイオンタイプ(ペプチドの場合)と ppm の誤差





- イオン式またはイオンタイプ(ペプチドの場合)と mDa の誤差
- イオン式またはイオンタイプ(ペプチドの場合)と電荷

### MS/MS スペクトルにピークラベルを追加する


1. Interpretation ビューで **Options** をクリックします。  
Options ダイアログが開きます。
2. **Label peaks with** フィールドでラベルの種類を選択します。
3. **OK** をクリックします。
4. 次のいずれかの操作を行います。

表 8-17 : ピークラベルの追加

1つのピークにラベルを付ける場合	すべてのピークにラベルを付ける場合
Fragments 表で、ラベル付けするピークを含む行を選択します。	 をクリックします。
 をクリックします。	—

ヒント! MS/MS スペクトルからすべてのラベルを削除するには、 をクリックします。

### ペプチド用の Interpretation フィルターの概要

フィルターを適用して、Fragments 表に表示されるデータを絞り込みます。Interpretation Filters ダイアログを開くには、Fragments 表の  アイコンをクリックします。

フィルター	説明
<b>Mass Range</b>	
m/z from ___ to ___	m/z 値が指定範囲内にあるフラグメントのみを表示します。
<b>Charge Range</b>	
Charge from ___ to ___	<p>選択した範囲内に電荷があるフラグメントのみを表示します。オプションは次のとおりです。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>From range:</b> 1 ~ 10(10 を含む)</li> <li>• <b>To range:</b> 1 ~ 10(10 を含む)</li> </ul> <p>注: 範囲の上限値は下限値以上である必要があります。</p>
<b>Ion Type</b>	

フィルター	説明
<b>Fragment type</b>	適切なフラグメントの種類を選択します。複数の種類を選択できます。これらのオプションが利用できます。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• a</li> <li>• b</li> <li>• y</li> </ul>
<b>Mass Accuracy</b>	
<b>Accuracy within</b>	質量真度が指定範囲内にあるフラグメントのみを表示します。 注: 質量真度を mDa と ppm のどちらで測定するかは、Options ダイアログで選択したものに依存します。
<b>Intensity</b>	
<b>Intensity above __ cps</b>	指定した値を超える強度値があるフラグメントのみを表示します。

## オリゴヌクレオチドワークフロー

[配列の読み込み](#)

[配列の編集](#)

[オプションの設定](#)

[フラグメント配列の割り当て](#)

[ピークラベルの概要](#)



[MS/MS スペクトルにピークラベルを追加する](#)

[オリゴヌクレオチド用の Interpretation フィルターの概要](#)

## 配列の読み込み

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. Results ファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。
5. **Show** フィールドで **Interpretation** を選択します。
6. Potential Metabolites 表の行を選択します。
7. Sequence ペインが空白の場合は、次のいずれかを行います。
  - **Load Parent** をクリックします。
  - 配列をペインに入力または貼り付けます。

ペインの上に **Mono. Mass: [ ]**, **m/z: [ ]**, **Composition: [ ]** というラベルが追加されます。ここで

- **Mono. Mass:** 中性成分のモノアイソトピック質量。
- **m/z:** 質量電荷比の値。電荷は括弧内に表示されます。
- **Composition:** 配列の非荷電元素組成。

8. 変更が必要な場合は、配列を編集します。[配列の編集](#)を参照してください。

## 配列の編集

特定の代謝物の配列を作成した後、または読み込んだ後、その配列を編集できます。

1. 変更が必要な配列をクリックします。
2. 必要な変更を加えます。[オリゴヌクレオチド配列の命名規則](#)を参照してください。

## オプションの設定

1. Interpretation ビューで **Options** をクリックします。  
Options ダイアログが開きます。
2. フラグメンテーションとラベリングのパラメータを変更します。[表 8-18](#) を参照してください。

表 8-18 : Options ダイアログ

オプション	説明
<b>Minimum signal-to-noise ratio</b>	このフィールドを使用して、フラグメントピークを割り当てるために使用するしきい値を指定します。このしきい値未満のピークは割り当てられません。ノイズは、MS/MS スペクトルにおいて最も強度の小さいピークと定義されます。
<b>MS/MS m/z tolerance (ppm or mDa)</b>	このフィールドを使用して、MS/MS m/z 許容値を指定します。フラグメントピークにイオンタイプや配列を割り当てるには、質量精度が指定した MS/MS m/z 許容値内である必要があります。
<b>Fragmentation Settings</b>	

表 8-18 : Options ダイアログ (続き)

オプション	説明
<b>Fragment Types</b>	<p>適切なフラグメントの種類を選択します。複数の種類を選択できます。オプションは次のとおりです。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• a</li> <li>• b</li> <li>• c</li> <li>• d</li> <li>• y</li> <li>• Other</li> <li>• wb-H20</li> <li>• x</li> <li>• y</li> </ul> <p><a href="#">カスタムオリゴヌクレオチドの例</a>を参照してください。</p>
<b>Maximum number of bonds to break</b>	<p>このフィールドを使用して、切断する結合の最大数を指定します。オプションは次のとおりです。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 1</li> <li>• 2</li> </ul> <p>値は 2 を推奨します。</p> <hr/> <p><b>ヒント!</b> より複雑なオリゴヌクレオチドの場合、切断する結合の最大数に 3 を選択した場合、必要な処理時間が増加します。</p>
<b>Maximum water and Base losses</b>	<p>フラグメンテーション時に発生しうる最大の水分損失を指定します。値は 1 を推奨します。</p>
<b>Label Settings</b>	
<b>Label peaks with</b>	<p>このフィールドを使用して、ピークラベルに表示する情報を指定します。オプションは次のとおりです。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ion</li> <li>• Ion with ppm Error</li> <li>• Ion with mDa Error</li> <li>• Ion with Charge</li> </ul>
<b>Apply options to all potential metabolites</b>	<p>このチェックボックスをオンにすると、現在のオプションが未割り当てのすべての代謝物に適用されます。</p>

---

## フラグメント配列の割り当て

---

注: フラグメンテーションルールはソフトウェアに組み込まれており、編集できません。

---

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
5. **Show** フィールドで **Interpretation** を選択します。
6. 配列を読み込みます。配列の読み込みを参照してください。
7. Sequence ペインで **Assign** をクリックします。  
Fragments 表には、選択したオプションを使用して、読み込んだ配列の解釈結果が入力されます。オプションの設定を参照してください。Fragments 表で一致したイオンを示すシアン縦線が、MS/MS ペインに追加されます。表の上のラベルは、更新されて以下のことを示します。
  - **Assigned: x of y peaks.** 割り当てられているピークの数を示します。
  - **MSMS Peak Area Assigned: x%.** MS/MS ピーク領域のうち、割り当てられている割合を示します。
  - **Sequence Coverage: x of y consecutive nucleotides.** 配列がカバーする連続したヌクレオチドの数を示します。

## ピークラベルの概要



ピークには次のようなラベルを付けることができます。

- イオン式またはイオンタイプ(オリゴヌクレオチドの場合)
- イオン式またはイオンタイプ(オリゴヌクレオチド場合)と ppm の誤差
- イオン式またはイオンタイプ(オリゴヌクレオチド場合)と mDa の誤差
- イオン式またはイオンタイプ(オリゴヌクレオチドの場合)と電荷

## MS/MS スペクトルにピークラベルを追加する


1. Interpretation ビューで **Options** をクリックします。  
Options ダイアログが開きます。
2. **Label peaks with** フィールドでラベルの種類を選択します。
3. **OK** をクリックします。
4. 次のいずれかの操作を行います。

表 8-19 : ピークラベルの追加

1つのピークにラベルを付ける場合	すべてのピークにラベルを付ける場合
Fragments 表で、ラベル付けするピークを含む行を選択します。	 をクリックします。
 をクリックします。	—

ヒント! MS/MS スペクトルからすべてのラベルを削除するには、 をクリックします。

## オリゴヌクレオチド用の Interpretation フィルターの概要

フィルターを適用して、Fragments 表に表示されるデータを絞り込みます。Interpretation Filters ダイアログを開くには、Fragments 表の  アイコンをクリックします。

フィルター	説明
<b>Mass Range</b>	
m/z from ___ to ___	m/z 値が指定範囲内にあるフラグメントのみを表示します。
<b>Charge Range</b>	
Charge from ___ to ___	選択した値を超える電荷があるフラグメントのみを表示します。有効な値は 1 から 10 までです。
<b>Ion Type</b>	
Fragment type	適切なフラグメントの種類を選択します。複数の種類を選択できます。これらのオプションが利用できます。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• a</li> <li>• b</li> <li>• c</li> <li>• d</li> <li>• w</li> <li>• wb-H2O</li> <li>• x</li> <li>• y</li> <li>• Other</li> <li>• Base loss</li> <li>• Water loss</li> <li>• Internals</li> </ul>

フィルター	説明
<b>Mass Accuracy</b>	
<b>Accuracy within</b>	質量真度が指定範囲内にあるフラグメントのみを表示します。 注: 質量真度を mDa と ppm のどちらで測定するかは、Options ダイアログで選択したものに依存します。
<b>Intensity</b>	
<b>Intensity above __ cps</b>	指定した値を超える強度値があるフラグメントのみを表示します。

## 抗体薬物複合体ワークフロー

[構造の読み込み](#)

[構造の編集](#)

[配列の読み込み](#)

[配列の編集](#)

[オプションの設定](#)

[構造と配列の両方に対応したフラグメントイオンの割り当て](#)

[ピークラベルの概要](#)



[MS/MS スペクトルにピークラベルを追加する](#)

[抗体薬物複合体用の Interpretation フィルターの概要](#)

## 構造の読み込み

代謝物の構造解析を開始する前に、構造を読み込むことで、ソフトウェアはフラグメント構造の候補を決定できます。

注: 構造が読み込まれていない場合でも、式の候補をフラグメントに割り当てることができます。

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. Results ファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。
5. **Show** フィールドで **Interpretation** を選択します。
6. Potential Metabolites 表の行を選択します。
7. Structure ペインで **Load** をクリックし、**Load Parent Structure** オプションを選択します。  
選択した代謝物の親配列がペインに表示されます。添付ファイルのマークされた部位(埋め込み処理パラメータファイルで見た場合)または原子が紫色で表示されます。

8. 細かい変更が必要な場合は、構造を編集します。[構造の編集](#)を参照してください。

## 構造の編集

特定の代謝物の構造を読み込んだ後、編集ツールで細かい変更を加えます。

**ヒント!** 編集ツールを使って代謝変換の付着点を変えるなど、構造に細かい変更を加えることができます。編集ツールは、新しい構造を作成したり、既存の構造に大きな変更を加えたりするために使用しないでください。

表 8-20 : 構造の編集

目的の作業	実行する操作
構造に原子を追加する	パレット上の特定の記号を新しい位置にドラッグします。追加した原子は、最も近い既存の原子と単結合を形成します。
パレット上に新しい原子を作成する	空白の四角をクリックし、Specify Symbol ダイアログに記号を入力し、 <b>OK</b> をクリックします。  <b>ヒント!</b> 追加した四角をクリックし、新しい記号を入力すると、異なる原子を作成できます。
構造の一部を強調表示する	必要な原子と結合の周りをドラッグして円を描きます。
1 つ以上の原子を移動する	構造のハイライト部分を新しい位置までドラッグします。その部分が他の 1 つの原子に結合していれば、結合は新しい位置に移動します。その部分が 2 つ以上の原子に結合している場合、その部分は移動しますが、既存の結合は変わりません。
既存の構造に構造を挿入する	構造を右クリックし、次のいずれかをクリックします。 <ul style="list-style-type: none"> <li>別の構造を追加するには <b>Insert .mol File</b> をクリックします。</li> <li>特定の結合構造を追加するには <b>Insert Conjugate</b> をクリックします。</li> </ul>
1 つ以上の原子を削除する	構造のハイライト部分を右クリックし、 <b>Remove Selected Atoms</b> をクリックします。
結合の作成	結合していない 2 つの原子を選択し、選択したものを右クリックして <b>New Bond</b> をクリックし、結合の種類を選択します。
結合の編集	結合を右クリックし、 <b>Set Bond Type</b> をクリックして、結合の種類を選択します。
結合の削除	結合を右クリックし、 <b>Remove Bond</b> をクリックします。



表 8-20 : 構造の編集 (続き)

目的の作業	実行する操作
既存の原子の電荷状態を変更する	原子を右クリックし、 <b>Atom Charge State</b> をクリックして、状態を選択します。

ヒント! 編集した構造を別ファイルとして保存する場合は、**Save As** をクリックします。

ヒント! 構造は mol ファイルまたは sdf ファイルとして保存できます。Save As ダイアログに適切な拡張子を入力します。

## 配列の読み込み

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. ペプチドの Results ファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。
5. **Show** フィールドで **Interpretation** を選択します。
6. Potential Metabolites 表の行を選択します。
7. Structure ペインで **Load** をクリックし、**Load Sequence** オプションを選択します。  
選択した代謝物の親配列が Sequence ペインに表示されます。
8. 結合する残基を選択し、右クリックし、**Mark Residue to Conjugate** を選択します。  
選択した残基は紫色で表示されます。
9. 変更が必要な場合は、配列を編集します。[配列の編集](#)を参照してください。

## 配列の編集

特定の代謝物の配列を作成した後、または読み込んだ後、その配列を編集できます。

1. 変更が必要な配列をクリックします。
2. 必要な変更を加えます。[ペプチド配列の命名規則](#)を参照してください。

## オプションの設定

1. Interpretation ビューで **Options** をクリックします。  
Options ダイアログが開きます。
2. フラグメンテーションとラベリングのパラメータを [表 8-21](#) のように変更します。

表 8-21 : Options ダイアログ

オプション	説明
<b>Number of fragment peaks selected for structure assignment</b>	このフィールドを使用して、抗体薬物複合体の構造部分に割り当てるフラグメントピークの数を選択します。全ピーク数のサブセットであれば、ピークは強度の高い順に選択されます。
<b>Minimum signal-to-noise ratio</b>	このフィールドを使用して、フラグメントピークを割り当てるために使用するしきい値を指定します。このしきい値未満のピークは割り当てられません。
<b>MS/MS m/z tolerance (ppm or mDa)</b>	このフィールドを使用して、MS/MS <i>m/z</i> 許容値を ppm または mDa で指定します。フラグメントピークに式や構造を割り当てるには、その質量精度が指定した MS/MS <i>m/z</i> 許容値内である必要があります。
<b>Structure Fragmentation Settings</b>	
<b>Break aromatic rings</b>	芳香環を切断する場合は、このチェックボックスをオンにします。
<b>Maximum number of bonds to break</b>	このフィールドを使用して、切断する結合の最大数を指定します。オプションは次のとおりです。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• 1</li> <li>• 2</li> <li>• 3</li> <li>• 4</li> </ul>
<b>Maximum number of C-C bonds to break</b>	このフィールドを使用して、切断する C-C 結合の最大数を指定します。オプションは次のとおりです。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• 0</li> <li>• 1</li> <li>• 2</li> <li>• 3</li> <li>• 4</li> </ul>
<b>Sequence Fragmentation Settings</b>	
<b>Fragment Types</b>	適切なフラグメントの種類を選択します。複数の種類を選択できます。オプションは次のとおりです。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• a</li> <li>• b</li> <li>• y</li> </ul>

表 8-21 : Options ダイアログ (続き)

オプション	説明
Maximum number of bonds to break	このフィールドを使用して、切断する結合の最大数を指定します。オプションは次のとおりです。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• 1</li> <li>• 2</li> <li>• 3</li> </ul> <p>注: より複雑なペプチドの場合、切断する結合の最大数に 3 を選択した場合、必要な処理時間が増加します。</p>
Break linkages	ペプチド配列に結合がある場合、このチェックボックスをオンにすると、個々のアミノ酸間の結合を切断できます。
<b>Label Settings</b>	
Label peaks with	このフィールドを使用して、ピークラベルに表示する情報を指定します。オプションは次のとおりです。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ion</li> <li>• Ion with ppm Error</li> <li>• Ion with mDa Error</li> <li>• Ion with Charge</li> </ul>
Apply options to all potential metabolites	このチェックボックスをオンにすると、現在のオプションが未割り当てのすべての代謝物に適用されます。

## 構造と配列の両方に対応したフラグメントイオンの割り当て

注: フラグメンテーションルールはソフトウェアに組み込まれており、編集できません。

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
5. **Show** フィールドで **Interpretation** を選択します。
6. 構造、配列を読み込みます。構造の読み込みおよび配列の読み込みを参照してください。

## MS/MS データの特性評価

---

**注:** 構造または配列のどちらか一方のみを読み込む必要があります。この手順は、両方を読み込み済みであることを前提に書かれています。

---

7. Structure ペインで **Assign** をクリックします。

TOF MS/MS スペクトルの下の Structure ビューと Sequence ビューの両方が入力され、デフォルトで Structure ビューが表示されます。

**注:** 親構造のみが読み込まれた場合は、Fragments 表の Structures ビューが表示されます。親配列のみが読み込まれた場合は、Fragments 表の Sequences ビューが表示されます。

---

Structure ビューでは、Fragments 表には識別されたフラグメントが、Structure Details 表には構造候補が、Contained Neutral Losses 表には含有ニュートラル損失が入力されます。結果は、選択したオプションに基づいています。[オプションの設定](#)を参照してください。Fragments 表で一致したイオンを示す水色の縦線が、MS/MS ペインに追加されます。

**注:** 構造に解釈結果がない場合は、Fragments 表に No structures assigned と表示されます。

---

Fragments 表の上のラベルは、以下のことを示します。

- **b** ピークの **Assigned: a** (Structure:  $x$ , Sequence:  $y$ )。ここで  $a$  は  $x$  と  $y$  の和で、割り当てられたピークの数、 $b$  はピークの総数、 $x$  は Structures ビューの行数、 $y$  は Sequences ビューの行数を示します。
- **MSMS Peak Area Assigned: w%**。ここで  $w$  は、スペクトルデータから割り当てられたピーク領域のパーセンテージを示します。

Fragments 表には **Use as Conjugate** 列があります。この列には、表の各行に対応するチェックマークが含まれます。チェックボックスをオンにできる場合は、フラグメントの提案された構造上に付着部位が存在します。チェックボックスをオンにできない場合は、付着部位が存在しません。チェックボックスをオンにした場合、そのフラグメントは配列との結合に使用されます。チェックボックスをオンにしている場合、そのフラグメントは使用されません。デフォルトでは、真度と量に基づいて、付着部位を含むフラグメントが最大 3 つまで選択されるようにしました。デフォルトでは、表の最初の行が選択されます。

8. Structures ビューが選択されていることを確認します。
9. 必要に応じて、Fragments、Structure Details、Contained Neutral Losses の各表を右クリックし、**Show Hidden Rows** をクリックします。

**注:** Fragments 表では、 $m/z$  値のスコアが最も高い行の **Use** チェックボックスがオンになっています。Structure Details 表では、スコアが最も高い行の **Use** チェックボックスがオンになっています。Contained Neutral Losses 表では、すべての行で **Use** チェックボックスがオンになっています。

---

10. Fragments 表で、**Use** チェックボックスをオンにすると、各  $m/z$  値に対して最も正確な式を含む行を特定できます。

**ヒント!** 複数の行で **Use** チェックボックスをオンにすると、各フラグメントに対して複数の候補式を選択できます。

---

---

割り当てられた  $m/z$  値は、太字の斜体で表示されます。

11. Structure Details 表で **Use** チェックボックスをオンにすると、選択した式に最も正確に一致する部分を特定できます。
12. Contained Neutral Losses 表で **Use** チェックボックスをオンにすると、含まれているニュートラルロスをもっと正確に反映する行を特定できます。

---

**ヒント!** Structure Details 表と Contained Neutral Losses 表で、特定のフラグメントに対して複数の行で **Use** チェックボックスをオンにします。

---

13. Sequences ビューを選択します。

Sequence ビューでは、選択したオプション([オプションの設定](#)を参照)、Structures ビューで選択した結合、Compound-Specific Parameters の Product Ions and Neutral Losses タブ ([Product Ions and Neutral Losses タブ](#)を参照)で選択した内容、および配列に基づいて、解釈の結果が Fragments 表に入力されます。Fragments 表で一致したイオンを示す緑色の縦線が、MS/MS ペインに追加されます。

---

**注:** 配列に解釈結果がない場合は、Fragments 表に No sequences assigned と表示されます。

---

表の上のラベルは、以下のことを示します。

- Assigned:  $b$  ピークの  $a$  (Structure:  $x$ , Sequence:  $y$ )。ここで  $a$  は  $x$  と  $y$  の和で、割り当てられたピークの数、 $b$  はピークの総数、 $x$  は **Structures** タブの行数、 $y$  は **Sequences** タブの行数を示します。
- **MSMS Peak Area Assigned:  $w\%$** 。ここで  $w$  は、スペクトルデータから割り当てられたピーク領域のパーセンテージを示します。

14. 必要に応じて、Fragments 表を右クリックし、**Show Hidden Rows** をクリックします。

---

**注:** Fragments 表では、 $m/z$  値のスコアが最も高い行の **Use** チェックボックスがオンになっています。

---

15. Fragments 表で、**Use** チェックボックスをオンにすると、各  $m/z$  値に対して最も正確な式を含む行を特定できます。

---

**ヒント!** 複数の行で **Use** チェックボックスをオンにすると、各フラグメントに対して複数の候補式を選択できます。

---

割り当てられた  $m/z$  値は、太字の斜体で表示されます。

16. すべての変更が完了したら、**Apply** をクリックします。  
選択した代謝物の解釈データが保存されます。
17. **Save** をクリックします。

---

**ヒント!** 特定の代謝物の解釈データをすべて削除する場合は、**Remove** をクリックします。

---

## ピークラベルの概要

ピークには次のようなラベルを付けることができます。



## MS/MS データの特性評価

- イオン式またはイオンタイプ(ペプチドの場合)
- イオン式またはイオンタイプ(ペプチドの場合)と ppm の誤差
- イオン式またはイオンタイプ(ペプチドの場合)と mDa の誤差
- イオン式またはイオンタイプ(ペプチドの場合)と電荷

### MS/MS スペクトルにピークラベルを追加する


1. Interpretation ビューで **Options** をクリックします。  
Options ダイアログが開きます。
2. **Label peaks with** フィールドでラベルの種類を選択します。
3. **OK** をクリックします。
4. 次のいずれかの操作を行います。

表 8-22 : ピークラベルの追加

1 つのピークにラベルを付ける場合	すべてのピークにラベルを付ける場合
Fragments 表で、ラベル付けするピークを含む行を選択します。	 をクリックします。
 をクリックします。	—

ヒント! MS/MS スペクトルからすべてのラベルを削除するには、 をクリックします。

## 抗体薬物複合体用の Interpretation フィルターの概要

フィルターを適用して、Fragments 表に表示されるデータを絞り込みます。Interpretation Filters ダイアログを開くには、Fragments 表の  アイコンをクリックします。

フィルター	説明
<b>Rings and Double Bonds</b>	
<b>RDB</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Integer value (even-electron):</b> 環と二重結合の値が整数であるフラグメントのみを表示します。</li><li>• <b>Non-integer value (odd-electron):</b> 環と二重結合の値が非整数であるフラグメントのみを表示します。</li></ul>
<b>Mass Range</b>	
m/z from ___ to ___	m/z 値が指定範囲内にあるフラグメントのみを表示します。
<b>Charge Range</b>	

フィルター	説明
Charge from __ to __	<p>選択した範囲内に電荷があるフラグメントのみを表示します。オプションは次のとおりです。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>From range:</b> 1 ~ 10(10 を含む)</li> <li>• <b>To range:</b> 1 ~ 10(10 を含む)</li> </ul> <p>注: 範囲の上限値は下限値以上である必要があります。</p>
<b>Ion Type</b>	
Fragment type	<p>適切なフラグメントの種類を選択します。複数の種類を選択できます。オプションは次のとおりです。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• a</li> <li>• b</li> <li>• y</li> </ul>
<b>Mass Accuracy</b>	
Accuracy within	<p>質量真度が指定範囲内にあるフラグメントのみを表示します。</p> <p>注: 質量真度を mDa と ppm のどちらで測定するかは、Options ダイアログで選択したものに依存します。</p>
<b>Intensity</b>	
Intensity above __ cps	指定した値を超える強度値があるフラグメントのみを表示します。
<b>Score</b>	
Score above	指定した値を超えるスコアのフラグメントのみを表示します。
<b>Structures</b>	
Fragments with assigned structures	構造に関連付けられているフラグメントのみを表示します。

## 自動解釈

### 自動解釈



[低分子ワークフロー](#)



[ペプチドワークフロー](#)

## 低分子ワークフロー

構造の自動生成は、以下の方法で開始できます。



## MS/MS データの特性評価

---

- Batch ワークスペースで **Apply Options** チェックボックスをオンにすると、Batch Processing Options ダイアログで選択した Auto Assign オプションがすべてバッチ内のサンプルと対照サンプルに適用されます。最低でも、Assign Structures または Sequences オプションを選択する必要があります。[バッチ処理オプション](#)を参照してください。
- Results ワークスペースの Interpretation ビューで、MS/MS ペインの **Generate** をクリックします。

## ペプチドワークフロー

配列の自動生成は、以下の方法で開始できます。

- Batch ワークスペースで **Options** チェックボックスをオンにすると、Batch Processing Options ダイアログで選択した **Auto Assign** オプションがすべてバッチ内のサンプルと対照サンプルに適用されます。最低でも、**Assign Structures or Sequences** オプションを選択する必要があります。[バッチ処理オプション](#)を参照してください。
- Results ワークスペースの Interpretation ビューで、MS/MS ペインの **Generate** をクリックします。

## 配列の切り換え

ヒストグラムの青いバーをクリックします。

対応する配列が Sequence ペインに表示され、Fragments 表が、選択した配列に関連する情報で更新されます。Sequence ペインの上にあるラベルが更新され、配列番号と割り当てランクが表示されます。例: y の配列 x、ランク = z。

## 空のペインを選択する

ヒストグラムの 1 行目をクリックします。

ヒストグラムの 1 行目には、No sequence の語句が含まれています。Sequence ペインがクリアされ、Fragments 表が更新されて、No sequences assigned の語句が表示されます。

## 配列の追加

---

**注:** 自動生成される配列のリストに追加できる配列は 1 つだけです。配列を追加した場合、ユーザーが追加した前の配列は上書きされます。

---

1. Sequence ペインで **Enter Sequence** をクリックします。  
Sequence ペインがクリアされ、Fragments 表が更新されて、No sequence assigned の語句が表示されます。
2. **Load Parent** をクリックします。  
親配列は、Sequence ペインに、および Sequence charts ペインの **Parent Sequence** タブに表示されます。
3. **Tab** を押して親配列を検証します。

配列には有効であることを示すアンダーラインが追加されます。Sequence Candidates タブに新しいヒストグラムが作成され、最初に自動生成された配列のすぐ上の行に、ユーザーが追加した配列が表示されます。ユーザーが追加した配列のランキングは 0 となります。青いバーが表の幅全体に広がります。ただし、バーにパーセンテージは表示されません。読み込まれた配



---

列の行の青の濃淡は、自動生成された配列を含む行の青とは僅かに異なります。提案される配列の数が 1 つ増えます。

ユーザーが追加した配列は編集が可能です。配列に加えられた変更は、ユーザーが Sequence ペインからタブアウトしたときにメモリに保持されます。

## 表示する配列を選択する

ヒストグラムの青いバーをクリックします。

対応する配列が Sequence ペインに表示されます。選択した配列に関連する情報で Fragments 表が更新されます。Sequence ペインの上にあるラベルが更新され、配列番号と割り当てランクが表示されます。例: y の配列 x、ランク = z。

## 配列の削除

1. ヒストグラムの青いバーをクリックします。  
対応する配列が Sequence ペインに表示されます。
2. Sequence ペインで **Delete** をクリックします。  
配列が Sequence ペインから、行がヒストグラムから削除されます。ヒストグラムの次の行の配列が Sequence ペインに表示され、Fragments 表が、選択した配列に関連する情報で更新されます。

対象となる複数のサンプルから代謝物の候補が検出されると、各サンプルの結果を比較できます。これにより、複数の Results ファイルから生成された代謝物候補の相違点や類似点を確認できます。異なる Results ファイルからの代謝物は、Correlate Results ダイアログで設定した質量電荷比と保持時間の許容値に一致すれば、同一であるとみなされます。

オリゴヌクレオチドワークフローでは、同じ中性質量で保持時間の許容範囲内にある多価の代謝物を、Correlation ワークスペースの 1 つのエントリでグループ化することができます。この機能を「グループ化」と言います。この機能を有効にするには、結果の相関をとる際に **Group results by analyte** を選択します。この機能を有効にすると、多価荷電種がマージされ、Results ファイル間の比較が容易になります。

**注:** Results ファイルを関連付ける前に、グループ機能を有効にします。

## 相関の準備

1. **File > New > Correlation** をクリックします。  
Correlate Results ダイアログが開きます。
2. **Add Results** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。

**注:** 選択したファイルには、異なる化合物が含まれている場合があります。相関をとるためにアナログデータは必要ありません。

4. **X-axis title** と **X-axis units** のフィールドを完成させます。  
これにより、Correlation ワークスペースのグラフの X 軸にラベルが割り当てられます。
5. X 軸のラベルに対応するフィールドで、各 Results ファイルの横に一意的な値を入力します。  
たとえば、ステップ 4 で割り当てたラベルが **Time** の場合は、**Time** フィールドに各 Result ファイルの時間を入力します。
6. 必要に応じて、**Include RRF in % area determination** を選択します。

**注:** **Include RRF in % area determination** と **Group results by analyte** の両方を選択しないでください。

このオプションを選択した場合、MS 領域に **相対感度係数** が乗算されます。領域の変化は、Correlations Details ペインの折れ線グラフ、棒グラフ、表に表示されます。この変化は、Potential Metabolites 表には表示されません。

7. (オリゴヌクレオチドワークフロー) 必要に応じて、中性質量に基づいてピークをグループ化する **Group results by analyte** を選択します。
8. 相関をカスタマイズします。[相関のカスタマイズ](#)を参照してください。
9. **Correlation file name** フィールドにファイル名を入力します。

---

注: ファイル名にはスペースを含めないでください。

---

10. 相関ファイルを保存する場所を選択するには、**Browse** をクリックし、適切なフォルダーを選択します。
11. **OK** をクリックします。  
ソフトウェアは、選択したファイルに見つかった代謝物を比較し、Correlation ワークスペースに結果を表示します。

---

ヒント! 同じ相関に異なる設定を使用して処理することも可能です。Correlation ワークスペースで、**Correlate Results** をクリックします。

---

## 相関のカスタマイズ

相関させるファイルを選択した後、Correlation Results ダイアログでパラメータの値を編集して、結果を改善することができます。

### ピークアライメントの改善

個々の Result ファイルの保持時間をシフトすることで、選択したファイルの相関を改善できます。

1. 結果の相関をとる前に、次のようにします。
  - a. Results ワークスペースで該当する各 Results ファイルを開きます。
  - b. すべてのファイルに表示されている特定の代謝物の保持時間を確認します。
2. Results ファイルに表示されているシフトに基づいて、Correlate Results ダイアログで、特定のファイルの横の **R.T. Shift (min)** フィールドに値を入力します。

---

注: **R.T. Shift (min)** フィールドには、-2.00 分から 2.00 分までの値を指定できます。

---

### ピークマーキングの定義

特定の許容値を設定すれば、近い値を持つピークを同じピークとみなすことができます。

1. Results ワークスペースの各 Results ファイルを開きます。
2. すべてのファイルに表示されている特定の代謝物の保持時間と質量公差を同定します。
3. Correlate Results ダイアログの Tolerances グループで、**Retention time** フィールドに値を入力します。

---

注: **Retention time** フィールドには、0.01 分から 0.25 分までの値を指定できます。

---

4. **MS m/z** フィールドに値を入力し、単位は **ppm** または **mDa** のいずれかを選択します。

---

注: オリゴヌクレオチドワークフローでは、**Group results by analyte** オプションを選択した場合、**ppm** のみ利用可能です。

---

---

注: **MS m/z** フィールドには、0.1 から 250.0 までの値を指定できます。

---


## Correlation ワークスペースの概要

Correlation ワークスペースには、選択した Results ファイルで検出された代謝物候補の比較が表示されます。

図 9-1 : Correlation ワークスペース



項目	説明
1	<p>メニューバー。メニューバーには以下のボタンがあります。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Correlate Results:</b> Correlate Results ダイアログを開きます。<a href="#">相関の準備</a>を参照してください。</li> <li>• <b>Open:</b> Open Correlation ダイアログを開き、適切な相関ファイルに移動できます。</li> <li>• <b>Save:</b> 現在開いている相関ファイルを保存します。自動的に既存のバージョンを置き換えます。</li> <li>• <b>Save As:</b> 現在開いている相関ファイルを保存します。オプションで、保存先フォルダーを選択し、相関ファイルに新しい名前を割り当てることができます。</li> </ul>

項目	説明
2	<p>Potential Metabolites ペイン。設定済みの許容値に基づき、相関のあるすべてのピークをリストアップします。各行には、Results ファイルから相関のある代謝物の候補、<b>MS Area</b> および <b>Analog Area</b> (該当する場合) をリストアップしています。空の <b>MS Area</b> セルは、特定の Results ファイルにその代謝物が見つからなかったことを示します。空の <b>Analog Area</b> セルは、Results ファイルで代謝物が見つからなかったか、アナログ応答がゼロであったことを示します。</p> <p>このペインには以下のボタンがあります。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Select values to filter peaks from the results.</b> (  ): Correlation Filters ダイアログを開き、条件に合わない情報を結果から除外するための値を設定できます。<a href="#">相関フィルターの概要</a>を参照してください。</li> <li>• <b>Assign ID:</b> Potential Metabolites 表の各ピークに、保持時間と <math>m/z</math> 値に基づいて一意の識別子を割り当てます。</li> </ul>
3	<p>Correlation Details ペイン。相関代謝物を比較できます。<a href="#">相関代謝物の比較</a>を参照してください。異なる代謝物や Results ファイルを選択できます。MS およびアナログデータは、以下のフォーマットで表示できます。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Linear Graph</b> または <b>Bar Graph</b>: 各代謝物が検出された各 Results ファイルで強度を比較します。</li> <li>• <b>Table</b>: 各代謝物が検出された Results ファイルを特定します。また、表中にオカレンス、ピーク ID、ピーク領域を表示するかどうかをユーザーが選択できます。</li> </ul> <p>注: 相関を準備する際に相対感度係数を適用した場合、定量 MS データは折れ線グラフと棒グラフに表示されます。</p>
4	<p>Chromatograms ペイン: 選択した代謝物の抽出イオンクロマトグラム (XIC) またはアナログクロマトグラムが表示されます。クロマトグラムには、代謝物を含む 1 つまたはすべての Results ファイルからのデータを含めることができます。</p>
5	<p>MS ペイン: 選択した代謝物を含む 1 つまたはすべての Results ファイルから、目的のサンプルの MS スペクトルを表示します。</p>
6	<p>MS/MS ペイン: 選択した代謝物の MS/MS スペクトルを、その代謝物を含む 1 つまたはすべての Results ファイルから表示します。</p>

注: 相関結果がグループ化されている場合、クロマトグラム、MS、および MS/MS のスペクトルは表示されません。

## 相関代謝物の名前を編集する

1. Workspace パネルで **Correlation** をクリックします。

## 結果の相関性

---

- Correlation ワークスペースが開きます。
- Open** をクリックします。  
Open Correlation ダイアログが開きます。
- 適切な相関ファイルに移動し、選択します。
- Potential Metabolites 表の行を選択します。
- Edit > Edit Name** をクリックします。  
Edit Name ダイアログが開きます。
- 新しい代謝物の名前を入力します。
- OK** をクリックします。  
代謝物の名前が新しい値に変わります。

## 相関代謝物の比較

複数の Results ファイルに含まれる代謝物を相関させた後、選択した特定の代謝物をより詳細に比較することができます。


- Workspace パネルで **Correlation** をクリックします。  
Correlation ワークスペースが開きます。
- Open** をクリックします。  
Open Correlation ダイアログが開きます。
- 適切なファイルに移動し、選択します。
- Potential Metabolites 表で、比較する代謝物候補の横にある **Plot** チェックボックスをオンにします。  
代謝物は Correlation Details ペインに表示されます。
- 特定の代謝物の相対感度係数を変更するには、**RRF** フィールドに値を入力します。

折れ線グラフと棒グラフでは、MS 領域とアナログ領域(該当する場合)に RRF 値が乗算されます。

---

**注:** このフィールドは、相関を準備する際に相対感度係数を使用した場合のみ表示されます。

---

- Correlation Details ペインにアナログデータを表示するには、**Analog data** をクリックします。
- 選択した代謝物を含むファイルを特定するには、Correlation Details ペインで **Table** を選択します。
- 正規化されたデータを表示する場合は、 をクリックします。

---

**ヒント!** 正規化したデータは、折れ線グラフ、棒グラフ、XIC、アナログクロマトグラム、MS スペクトル、MS/MS スペクトルで表示することが可能です。

---

- 相関ファイル中の Potential Metabolites のピーク ID をリテンションタイムと  $m/z$  値に基づいて再割り当てする場合は、**Assign ID** をクリックします。

## 相関フィルターの概要

フィルターを適用して、相関表に表示されるデータをさらに絞り込みます。 アイコンをクリックして Correlation Filters ダイアログを表示するか、**Setup > Filters > Correlation** をクリックします。

フィルター	説明
<b>Mass Range</b>	
m/z from __ to __	m/z 値が指定範囲内にあるピークのみを表示します。
<b>Retention Time</b>	
R.T. from __ to __	保持時間が指定範囲内にあるピークのみを表示します。
<b>Occurrence</b>	
Peaks in __ or more results files	指定した数の Results ファイルに表示されているピークのみを表示します。  注: 最大値は、相関をとるために選択したファイル数に依存します。たとえば、5 つの Results ファイルを選択して相関をとる場合、最大 5 つのピークを選択できます。

ソフトウェアでレポートを作成するには、Microsoft Word 2010 以降がコンピュータにインストールされている必要があります。

Adobe PDF、Microsoft Word、HTML でのレポート作成が可能です。また、レポートを直接プリンターに送ることも可能です。

以下のレポートテンプレートが、ソフトウェアと一緒に C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler\Report Templates フォルダにインストールされています。

- Correlation フォルダ
  - Correlation Detailed Report
  - Correlation Summary Report
  - Correlation Group Report
- ResultsAndInterpret フォルダ
  - Interpretation Detailed Report
  - Interpretation Summary Report
  - Results Detailed Report
  - Results Summary Report
- ResultsAndInterpret\_ADC フォルダ
  - Interpretation Detailed Report
  - Interpretation Summary Report
  - Results Detailed Report
  - Results Summary Report
- ResultsAndInterpret\_Peptides フォルダ
  - Interpretation Detailed Report
  - Interpretation Summary Report
  - Results Detailed Report
  - Results Summary Report
- ResultsAndInterpret\_Oligo フォルダ
  - Interpretation Detailed Report
  - Interpretation Summary Report
  - Results Detailed Report
  - Results Summary Report



各レポートには多くの情報を含めることができますが、レポートには、レポートが生成された時点で報告されている Results ファイルの内容のみが表示されます。Results ファイルに特定の情報（たとえば同位体濃縮度）が含まれていない場合、生成されるレポートにはその内容が含まれず、ほとんどの場合、その内容のフィールドラベルや見出しも含まれません。Potential Metabolites 表または Fragments 表に適用されたフィルターは、レポートに反映されます。たとえば、Potential Metabolites 表をフィルタリングして 23 ピークのうち上位 5 ピークのみを表示するようにした場合、その 5 ピークのみがレポートに含まれます。

レポートに含まれるすべてのグラフまたはスペクトルは、ユーザーインターフェースで選択したズームレベルに関係なく、デフォルトのズームレベルで表示されます。すべての関連グラフは非正規化データでレポートされています。

**注:** グループ化されたデータで使用するためのカスタム関連レポートのテンプレートを作成する場合は、ファイル名に "grouped" を必ず含めてください。

## Results ワークスペースでレポートを作成する

低分子、ペプチド、抗体薬物複合体の各結果についてレポートを作成できます。

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。
5. **Report** 列で、レポートに含める各代謝物に対応したチェックボックスをオンにします。  
選択しなかった代謝物は、生成されるレポートに含まれません。
6. Workflow パネルで **Create Report** をクリックします。  
Create Report ダイアログが開きます。
7. **Available templates** フィールドからレポートのテンプレートを選択します。

テンプレートのリストについては、[レポート](#)を参照してください。

8. 必要なバージョンのレポートファイルを作成したり、レポートを印刷したりするには、該当する **Formats** チェックボックスをオンにします。

**注:** 複数のフォーマットを選択できます。

9. 選択した各フォーマットバージョンについて、**Browse** をクリックし、Browse For Folder ダイアログで、レポートファイルの特定の保存場所に移動し、選択します。
10. **OK** をクリックします。  
Browse For Folder ダイアログが閉じます。
11. 選択した各フォーマットバージョンについて、表示されるフィールドにレポートの名前を入力します。

12. (オリゴヌクレオチドワークフロー) 必要に応じて、**Report grouping table for Results** チェックボックスをオンまたはオフにします。
13. **Generate Report** をクリックします。
14. **Print report** オプションを選択していた場合は、Print ダイアログで必要な印刷オプションを選択し、**OK** をクリックします。  
ソフトウェアがレポートを生成します。

## Correlation ワークスペースでレポートを作成する

低分子、ペプチド、抗体薬物複合体の各結果について関連レポートを作成できます。

1. Workspace パネルで **Correlation** をクリックします。  
Correlation ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Correlation ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。
4. **Open** をクリックします。  
Correlation Results ビューが表示されます。
5. 目的とする代謝物の関連の詳細をレポートに含めるには、**Plot** チェックボックスをオンにします。
6. Workflow パネルで **Create Report** をクリックします。  
Create Report ダイアログが開きます。
7. **Available templates** フィールドからレポートのテンプレートを選択します。  
テンプレートのリストについては、[レポート](#)を参照してください。

---

**注:** 関連ファイルにグループ化されたデータが含まれていない場合、グループ化されていないレポートテンプレートのみが利用可能です。関連ファイルにグループ化されたデータが含まれている場合、ファイル名に "grouped" を含むレポートテンプレートのみが表示されます。

---

8. 必要なバージョンのレポートファイルを作成したり、レポートを印刷したりするには、該当する **Formats** チェックボックスをオンにします。

---

**注:** 複数のフォーマットを選択できます。

---

9. 選択した各フォーマットバージョンについて、**Browse** をクリックし、Browse For Folder ダイアログで、レポートファイルの特定の保存場所に移動し、選択します。
10. **OK** をクリックします。  
Browse For Folder ダイアログが閉じます。
11. 選択した各フォーマットバージョンについて、表示されるフィールドにレポートの名前を入力します。
12. **Generate Report** をクリックします。
13. **Print report** オプションを選択している場合は、Print ダイアログで必要な印刷オプションを選択し、**OK** をクリックします。

---

ソフトウェアがレポートを生成します。

## グラフのコピー & ペースト

グラフは、Results ワークスペースだけでなく、Compound Library ダイアログや Processing Parameters ダイアログからもコピーできます。

1. コピーするグラフを右クリックし、**Copy Selected Graph** をクリックします。  
グラフがクリップボードにコピーされます。
2. グラフを Microsoft Word などの他のアプリケーションに貼り付けます。

## 代謝物候補の表をコピー & ペーストする

1. 表を右クリックし、Results ワークスペースの **Copy Table** をクリックします。  
表がクリップボードにコピーされます。
2. 表を Excel に貼り付けます。

アナログデータは、質量分析装置で検出された代謝物が偽陽性ではなく、実際の代謝物であることを確認するために使用されます。質量分析装置でアナログインラインを使用するユーザーは、この機能を使用して、アナログ領域の積分を最適化し、MS ピークとアナログピークの関連性をより良く可視化することができます。

アナログデータを含む Results ファイルを開くと、Potential Metabolites 表の **Analog Integration** ボタンが有効になります。

**Analog Integration** をクリックすると、Analog Integration ダイアログが開きます。

Results ワークスペースの元の Potential Metabolites 表が表示されます。ただし、以下の例外があります。

- 質量ピークを持たないアナログピークはすべて表示されますが、MS 関連の列は空です。
- アナログ対照データが存在する場合は、**Analog - R.T. (min)** 列の直後に **Analog Signal in Control** 列が追加表示されます。アナログ対照データがない場合、この列は表示されません。

**Analog Signal in Control** 列には、以下の情報が表示されます。

- アナログピークのサンプル / 対照比が処理パラメータで指定された値より大きい場合、その列に x が表示されます。
- アナログピークのサンプル / 対照比が処理パラメータで指定された値より小さい場合、その列にチェックマークが表示されます。

## アナログデータを手動で積分する

### 前提条件:

- 結果がアナログデータで処理されていること。

1. Workspace パネルで **Results** をクリックします。  
Results ワークスペースが開きます。
2. **Open** をクリックします。  
Open Results ダイアログが開きます。
3. 適切なファイルに移動し、選択します。

**注:** Results ファイルには、アナログクロマトグラムが含まれている必要があります。

4. **OK** をクリックします。  
Results ビューが表示されます。Results ファイルにアナログデータが含まれている場合、Potential Metabolites 表の **Analog Integration** ボタンが有効になります。Results ファイルにアナログデータが含まれていない場合、このボタンは使用できません。
5. **Analog Integration** をクリックします。

Analog Integration ダイアログが開きます。

Potential Metabolites 表に加え、2つのクロマトグラムが表示されます。最初のクロマトグラムである Analog Sample クロマトグラムは、一般的な処理パラメータの Chromatographic Data タブで指定した保持時間範囲内のすべてのアナログピークを表示します。[Chromatographic Data タブ](#)を参照してください。2つ目のクロマトグラム、MS Sample の抽出イオンクロマトグラム(XIC)には、選択した行のすべてのピークが表示されます。XIC は、Potential Metabolites 表で異なる行を選択するたびに更新されます。

6. Analog Sample クロマトグラムを選択した後、必要に応じて以下の作業を行い、データを統合します。

- ピークを手動で統合する
- 既存のピークの統合を変更する
- ピークを削除する

変更を加えると、ソフトウェアは自動的にアナログサンプルクロマトグラムを更新します。

7. (オプション) **Show Controls** チェックボックスをオンにします。  
Analog Sample クロマトグラムのタイトルの下に、最大 5 つの対照サンプルが表示されます。[Show Controls](#) を参照してください。
8. (オプション) **Baseline Subtract** をクリックします。  
ベースライン減算が、アナログサンプルと任意の対照サンプルの両方に適用されます。Analog Sample クロマトグラムのタイトルと対照サンプルに "baseline subtracted" のフレーズが付加されます。[ベースライン減算の実行](#)を参照してください。
9. (オプション) **R.T. Offset** を変更します。[R.T. Offset の変更](#)を参照してください。  
R.T. Offset は、アナログサンプルと対照トレースの両方に適用されます。
10. (オプション) アナログ積分 **Options** を適用します。[アナログ積分オプションの設定](#)を参照してください。
11. 次のいずれかの操作を行います。
  - **Update Table** をクリックします。[表を更新](#)を参照してください。
  - **Update Results and Close** をクリックします。[結果を更新して閉じる](#)を参照してください。
12. 次のいずれかの操作を行います。
  - 現在開いている Results ファイルを保存し、既存のバージョンを上書きするには、**Save** をクリックします。
  - 現在開いている Results ファイルを新しい名前で保存するには、**Save As** をクリックします。既存の Results ファイルは更新されません。

## Show Controls

1. Analog Integration ダイアログの Chromatograms ペインで、**Show controls** チェックボックスをオンにします。  
該当する場合は、Chromatograms ペインの Analog Sample タイトルの下に最大 5 つの対照サンプルが表示されます。該当する場合は、XIC ペインの MS Sample タイトルの下に最大 5 つの対照サンプルが表示されます。

## アナログ積分

---

2.  アイコンをクリックするとリストが展開され、Analog Sample とアナログ対照の両方、または MS Sample と MS 対照の両方が表示されます。
3.  アイコンをクリックすると、リストが折りたたまれ、Analog Sample または MS Sample のみが表示されます。
4. **Show controls** チェックボックスを再度オンにすると、ビューから対照が削除されます。

## ベースライン減算の実行

1. Analog Integration ダイアログの Chromatograms ペインで、**Baseline Subtract** をクリックします。  
Analog Sample クロマトグラムがベースライン減算されます。ベースライン減算が、アナログサンプルと対照トレースの両方に適用されます。Analog Sample クロマトグラムの名前に "baseline subtracted" のフレーズが付加されます。
2. **Baseline Subtract** をもう一度クリックすると、ベースライン減算が解除されます。  
Analog Sample クロマトグラムの名前から "baseline subtracted" のフレーズが削除されます。

## R.T. Offset の変更

Analog Integration ダイアログの Chromatograms ペインで、**R.T. Offset** フィールドの上下の矢印を使用して保持時間オフセットを変更します。

Analog Sample クロマトグラムのピークが、指定した保持時間のオフセット分、シフトします。

Potential Metabolites 表が更新されたとき、または結果が更新されたとき、**Analog R.T. (min)** 列の値は指定した保持時間オフセットのシフトを反映するように更新されます。オフセットは、アナログサンプルと対照サンプルの両方に適用されます。

## アナログ積分オプションの設定

1. Analog Integration ダイアログの Chromatograms ペインで、**Options** をクリックします。  
Analog Integration Options ダイアログが開きます。
2. 適用する各オプションのチェックボックスをオンにします。

オプション	説明
<b>Overlay XIC for peaks at the same analog retention time</b>	アナログ保持時間が同一のこれらのトレースの MS サンプル XIC を重ね合わせます。
<b>Link x-axis</b>	Analog Sample クロマトグラムと XIC クロマトグラムの X 軸をリンクさせます。

3. **OK** をクリックします。

## 表を更新

Analog Integration ダイアログで変更を行うと、**Update Table** オプションが有効になります。

---

**Update Table** をクリックします。

Potential Metabolites 表の以下の列の情報は、アナログピーク積分、アナログ保持時間、およびベースライン減算に加えられた変更を反映して更新されます。

- **Analog Sample** クロマトグラムに割り当てた **Peak ID** は、手動による積分を反映するために更新される場合があります。アナログピークの保持時間と MS ピークの保持時間が指定した許容値内で一致した場合は、MS ピークと一致したと判断します。
- **Analog - Peak Area** は、新たに積分された領域があれば、それを反映して更新されます。
- **Analog - % Area** は、アルゴリズムに変更があれば、それを反映して更新されます。**Analog - % Area** は、処理パラメータで指定した時間範囲内で、MS ピークに関連するものと関連しないものの両方を含め、すべてのアナログピークに基づいて計算されます。アナログピークが複数の MS ピークと関連している場合、特定の M# にリストアップされているアナログピーク領域は、その M# の XIC MS 領域に基づいて比例的に計算されます(関連するすべての MS ピークのピーク領域を合計として使用)。
- **Analog - R.T. (min)** は保持時間オフセットに加えられた変更を反映して更新されます。

---

注: これらの変更は Results ファイルには保存されず、**Cancel** をクリックして元に戻すことができません。

---

## 結果を更新して閉じる

Analog Integration ダイアログで変更を行うと、**Update Results and Close** オプションが有効になります。

1. **Update Results and Close** をクリックします。  
変更した内容に基づくアナログ情報の更新が必要なことを確認するメッセージが表示されます。
2. **Yes** をクリックします。  
Analog Integration ダイアログが閉じます。Potential Metabolites 表の以下の列の情報は、アナログピーク積分、アナログ保持時間、およびベースライン減算に加えられた変更を反映して更新されます。
  - **Analog Sample** クロマトグラムに割り当てた **Peak ID** は、手動による積分を反映するために更新される場合があります。アナログピークの保持時間と MS ピークの保持時間が指定した許容値内で一致した場合は、MS ピークと一致したと判断します。
  - **Analog - Peak Area** は、新たに積分された領域があれば、それを反映して更新されます。
  - **Analog - % Area** は、アルゴリズムに変更があれば、それを反映して更新されます。**Analog - % Area** は、処理パラメータで指定した時間範囲内で、MS ピークに関連するものと関連しないものの両方を含め、すべてのアナログピークに基づいて計算されます。アナログピークが複数の MS ピークと関連している場合、特定の M# にリストアップされているアナログピーク領域は、その M# の XIC MS 領域に基づいて比例的に計算されます(関連するすべての MS ピークのピーク領域を合計として使用)。
  - **Analog - R.T. (min)** は保持時間オフセットに加えられた変更を反映して更新されます。

特定の問題についてのヘルプは、該当するリンクを選択してください。

- [構造ファイルが開かない](#)
- [ユーザー権限の変更](#)
- [代謝物の候補が見つからない](#)
- [見つかった代謝物の候補が多すぎる](#)
- [長い処理時間](#)
- [ProgramData フォルダを表示する](#)
- [既知の問題と制限事項](#)

## 構造ファイルが開かない

構造ファイルが、これらの規則に従っていることを確認してください。

- フォーマット: mol
- バージョン: v2000 または v3000
- 内容: テキストを含まない

## ユーザー権限の変更

Molecule Profiler ソフトウェアをインストールすると、インストールしたユーザーデータフォルダー内のファイルの読み取り、書き込み、削除の権限がすべてのユーザーに付与されます。権限を変更すると、ソフトウェアが正常に動作しなくなる可能性があります。

---

注: インストールされたユーザーフォルダーのデフォルトの場所は  
C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler Data です。

---

## 代謝物の候補が見つからない

目的のサンプルに含まれている代謝物をより多く見つけるには、次の手順を実行します。

- 別のピーク検出戦略を選択する。[ピーク検出戦略の概要](#)を参照してください。
- Chromatographic Data タブでクロマトグラム強度の最小値を小さくする。[Chromatographic Data タブ](#)を参照してください。
- MS Parameters タブで m/z Tolerance グループの **MS m/z tolerance** を大きくする。[MS Parameters タブ](#)を参照してください。
- MS Parameters タブで m/z Tolerance グループの **Minimum MS peak intensity** を小さくする。[MS Parameters タブ](#)を参照してください。



- (オリゴヌクレオチドワークフロー)MS Parameters タブで Isotope Pattern Tolerances グループの **Intensity tolerance** を大きくする。

## 見つかった代謝物の候補が多すぎる

代謝物候補の検出数を減らすには、次の手順を実行します。

- 別のピーク検出戦略を選択する。[ピーク検出戦略の概要](#)を参照してください。
- Chromatographic Data タブでクロマトグラム強度の最小値を大きくする。[Chromatographic Data](#) タブを参照してください。
- Chromatographic Data タブで保持時間ウィンドウを縮小する。[Chromatographic Data](#) タブを参照してください。
- MS Parameters タブの質量範囲ウィンドウを縮小する。[MS Parameters](#) タブを参照してください。
- MS Parameters タブで Isotope Pattern Tolerances グループの **Minimum MS peak intensity** を大きくする。[MS Parameters](#) タブを参照してください。

## 長い処理時間

処理時間は、データの複雑さ、処理パラメータ、ワークステーション、オペレーティングシステムなど、多くの要因に左右されます。

処理に必要な時間を短縮するには、次の操作を行います。

1. ワークステーションで起動している他のアプリケーションをすべて終了します。
2. 処理パラメータの値を変更します。例：
  - 選択したアルゴリズムの数を減らす。
  - Chromatographic Data タブでクロマトグラム強度の最小値を大きくする。
  - Chromatographic Data タブで保持時間ウィンドウを縮小する。
  - MS Parameters タブで MS ピーク強度の最小値を大きくする。
  - MS Parameters タブの質量範囲ウィンドウを縮小する。
  - 選択した質量不一致・誤差フィルターの数を減らす(低分子のみ)。
  - 生体内変換の数を減らす。
  - (ペプチド、オリゴヌクレオチド、抗体薬物複合体ワークフロー)化合物固有のパラメータを調整することで、生成される異性体の数を減らす。

## ProgramData フォルダーを表示する

Microsoft Windows オペレーティングシステムが C:\ProgramData フォルダーを非表示にする場合があります。Molecule Profiler ソフトウェアのインストール後、すべてのユーザーが C:\ProgramData\SCIEX\Molecule Profiler Data フォルダーを表示できることを確認してください。フォルダーが表示されていない場合は、以下の手順を実行します。

## トラブルシューティング

---

1. File Explorer で **View > Options** をクリックします。  
Folder Options ダイアログが開きます。
2. View タブを選択します。
3. **Hidden files and folder > Show hidden files, folders, or drives** をクリックします。
4. **Apply** をクリックします。
5. **OK** をクリックします。

## 既知の問題と制限事項

### 結果データ

- MS ピーク領域を判定する際、時間換算係数 60 を適用して計算するようにしました。

### 解釈

- 構造割り当ての準備をするときは、Interpret Data ダイアログで変更を行った後に必ず **Find** をクリックしてください。ソフトウェアは、選択した設定に基づいて、利用可能な式のリストを再計算します。

### 相関

- 特定の代謝物の相対感度係数 (RRF) が変化した場合は、MS 領域に RRF の値を乗じること  
で、その代謝物が計算されます。選択した代謝物の更新された MS 領域は、Correlation  
Details ペインの折れ線グラフ、棒グラフ、表のそれぞれに表示されます。

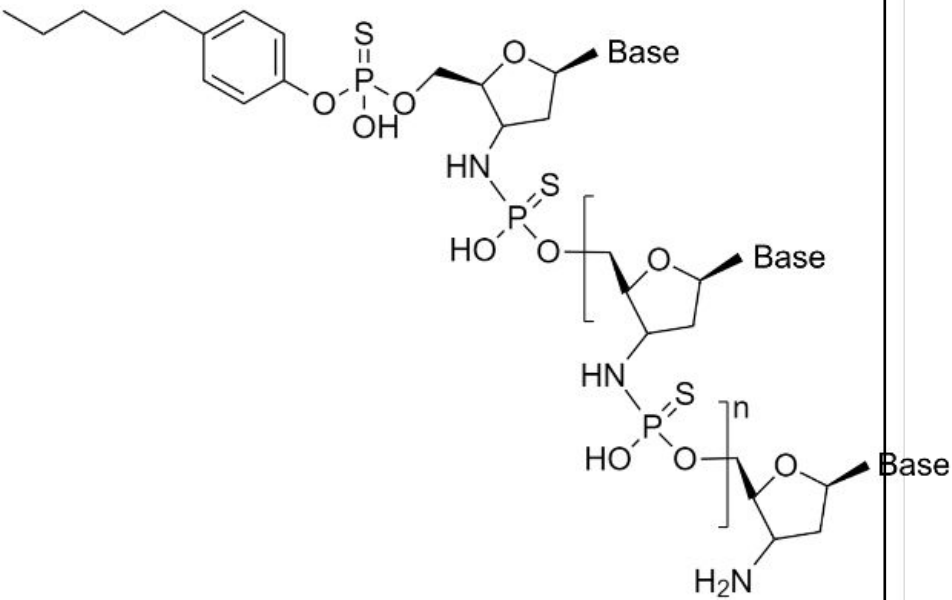
### レポート作成

- レポート作成時に Microsoft Word のレポートテンプレートとの間に競合が発生する場合は、  
すべての Microsoft Office アプリケーションを終了したことを確認してから、再度お試しください。

# カスタムオリゴヌクレオチドの例

# A

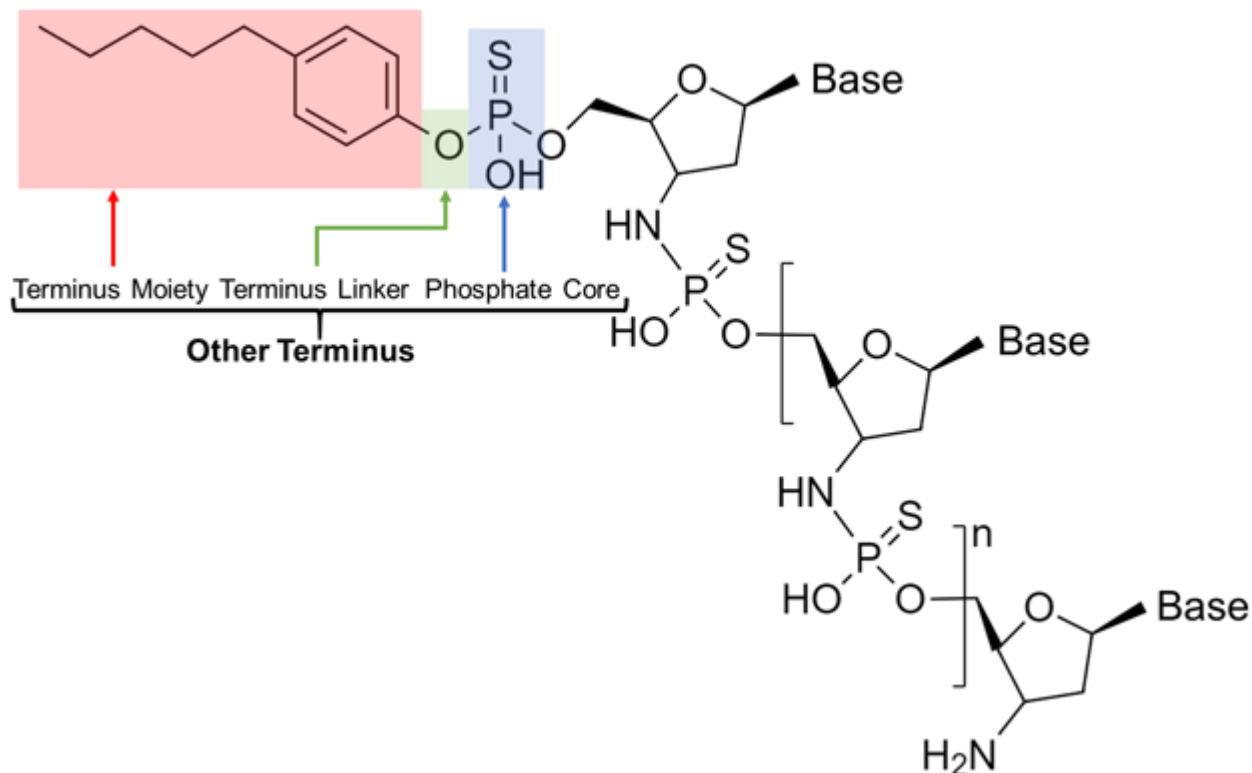
5' 末端チオリン酸にベンジルペンタンリンカーを結合したチオホスホルアミド酸オリゴヌクレオチド。

配列	化学構造、化学式、モノアイソピック質量
5'- ATCGATCGTTTAAA- 3'	<p>図 A-1 : <math>C_{149}H_{203}N_{65}O_{57}P_{14}S_{14}</math> (4695.7400)</p> 

## もう 1 つの末端を作成する

5' リンカー部分を構成する部分構造を同定するための一般的なスキームに従ってください。

図 A-2 : もう 1 つの末端



1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。
2. Oligo List タブで、**New** をクリックします。  
New Oligo Residue or Terminus ダイアログが開きます。
3. **Name** フィールドに、たとえば 5' benzyl-pentane terminus のような名前を入力します。
4. **Symbol** フィールドに、たとえば /CustomBP/ のような記号を入力します。
5. **Composition Type** フィールドで **Other Terminus** を選択します。
6. もう 1 つの末端のフィールドに入力します。

表 A-1 : もう 1 つの末端フィールド

フィールド	値
<b>Terminus Moiety</b>	C11H15
<b>Terminus Linker</b>	O
<b>Phosphate Core</b>	HOPS

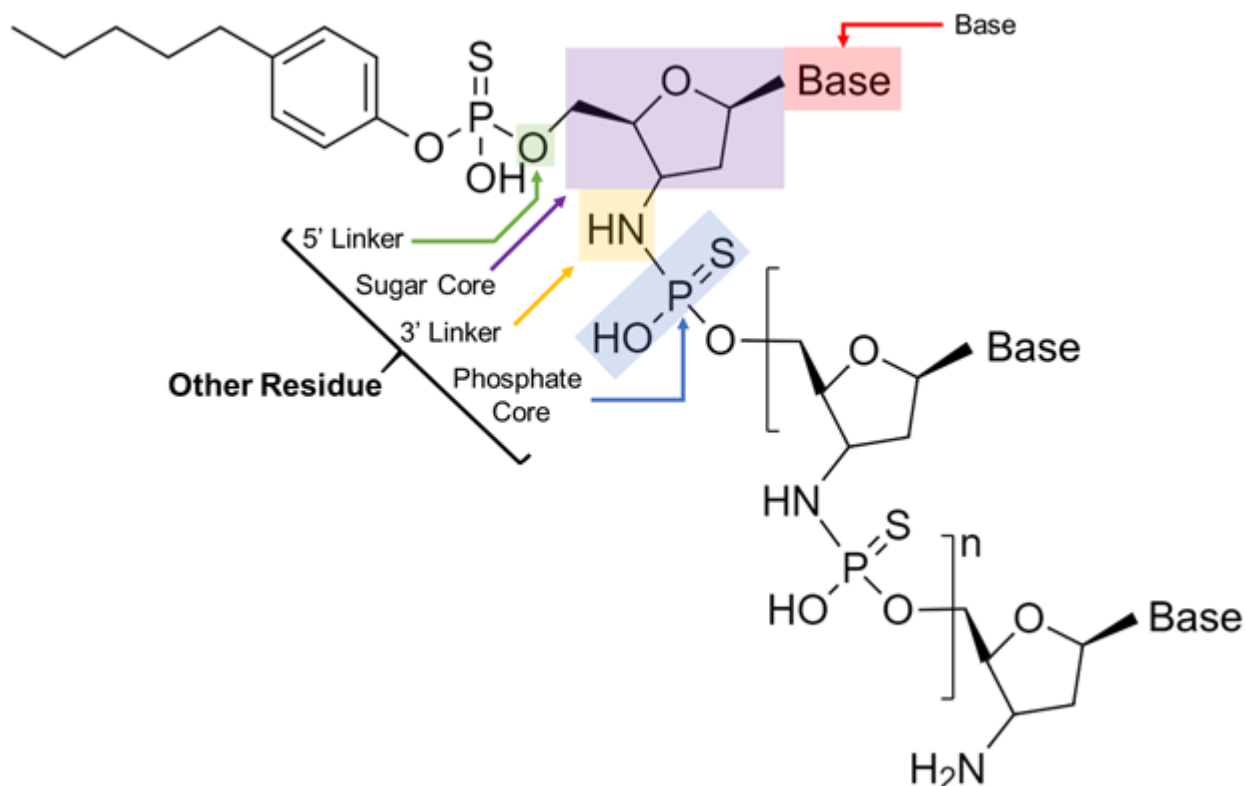
7. **OK** をクリックします。  
次のメッセージとともに、Warning ダイアログが表示されます: The "Terminus Moiety" field is usually odd electron.Do you want to continue?

8. OK をクリックします。

## 内部残基をその他の残基として作成する

カスタム塩基を構成するサブストラクチャを同定するための一般的なスキームに従ってください。

図 A-3 : その他の残基



1. **Edit > Custom Elements** をクリックします。
2. Oligo List タブで、**New** をクリックします。

**ヒント!** カスタム残基を作成する場合は、4 つのヌクレオチドをすべて定義します。1 つのヌクレオチドを作成した後に **New From** をクリックして、残りの 3 つのヌクレオチドを作成することをお勧めします。

New Oligo Residue or Terminus ダイアログが開きます。

3. アデニンヌクレオチドについては、次の手順を実行します。
  - a. **Name** フィールドに Custom dA と入力します。
  - b. **Symbol** フィールドに /CustomdA/ と入力します。
  - c. **Composition Type** フィールドで **Other Residue** を選択します。
  - d. その他の残基のフィールドに入力します。

表 A-2 : その他の残基のフィールド

フィールド	値
Base	C5H4N5
5' Linker	O
Sugar Core	C5H7O
3' Linker	NH
Phosphate Core	HPOS

- e. **OK** をクリックします。  
次のメッセージとともに、Warning ダイアログが表示されます: The "Sugar Core" field is usually odd electron. Do you want to continue?
  - f. **OK** をクリックします。
4. 残りの 3 つのヌクレオチドそれぞれについて、次のようにします。
- a. **/CustomdA/** を選択し、**New From** をクリックします。  
New Oligo Residue or Terminus ダイアログが開きます。
  - b. **NameSymbolBase** を入力します。基本式については、次の表を参照してください。

表 A-3 : 基本式

ヌクレオチド	名前	シンボル	塩基
チミン	Custom dT	/CustomdT/	C5H5N2O2
グアニン	Custom dG	/CustomdG/	C5H4N5O
シトシン	Custom dC	/CustomdC/	C4H4N3O

- c. **OK** をクリックします。

## カスタム配列を書く

1. **New > Oligonucleotide** をクリックします。
2. Sequence ペインで以下を入力します。  
/CustomBP/ /CustomdA//CustomdT//CustomdC/ /CustomdG//CustomdA//CustomdT/ /  
CustomdC//CustomdG//CustomdT/ /CustomdT//CustomdT//CustomdA/ /CustomdA//  
CustomdA/
3. **Chemical formula** フィールドをクリックします。  
C149H203N65O57P14S14 がフィールドに表示されます。

## ソフトウェアによる代謝物の命名方法

代謝物候補の命名方法は2つあります。ピークが予測される代謝物の場合は、一致する生体内変換、開裂代謝物、またはその2つの組み合わせに基づいて名前が付けられます。ピークが想定外の代謝物である場合は、Loss of または Gain of と命名されます。

また、このソフトウェアは、各代謝物に式の候補を割り当てます。ユーザーは、ソフトウェアによる提案式のリストから別の式を選択するか、式を手入力することで式を変更できます。

## IDA

IDA メソッドは、測定中にフルスキャンスペクトルでイオンを検出し、その後に MS/MS で分析するイオンをリアルタイムで決定するメソッドです。

## ピーク ID

ソフトウェアは、保持時間と  $m/z$  値に基づいて、代謝物の候補を M1、M2、M3 ... のようにラベル付けします。

## 相対感度係数

相対感度係数 (RRF) は、ピーク領域に乗じることでピーク領域を人為的に増加または減少させる値です。これにより、相関詳細グラフにおける当該ピーク領域のプロットングを変更できます。

## 基準スペクトル

代謝物の候補を特定する際に用いられる、特定の化合物の MS/MS スペクトルです。

# お問い合わせ先

---

## お客様のトレーニング

- 北米: [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- ヨーロッパ: [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- ヨーロッパおよび北米以外: [sciex.com/education](https://sciex.com/education)

## オンライン学習センター

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

## SCIEX サポート

SCIEX およびその代理店は、十分に訓練を受けた保守／技術専門要員を世界中に有しています。システムまたは起こり得る技術的問題に関するご質問にお答えします。詳細な情報については、SCIEX ウェブサイト ([sciex.com](https://sciex.com)) を参照するか、以下の連絡先までお問い合わせください。

- [sciex.com/contact-us](https://sciex.com/contact-us)
- [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support)

## サイバーセキュリティ

SCIEX 製品のサイバーセキュリティに関する最新のガイダンスについては、[sciex.com/productsecurity](https://sciex.com/productsecurity) を参照してください。

## ドキュメント

このバージョンのドキュメントは、以前のすべてのバージョンのドキュメントに優先します。

このドキュメントを電子的に閲覧するには Adobe Acrobat Reader が必要です。最新バージョンをダウンロードするには、<https://get.adobe.com/reader> にアクセスします。

ドキュメントの最新版は SCIEX の web サイト ([sciex.com/customer-documents](https://sciex.com/customer-documents)) で入手できます。

---

注: このドキュメントの無料の印刷版を請求するには、[sciex.com/contact-us](https://sciex.com/contact-us) までお問い合わせください。

---