

SCIEX OS ソフトウェア

X500 QTOF および ZenoTOF 7600 システム用
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 をご覧ください)。

AB Sciex™ はライセンスの下で使用されています。

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.

Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3

Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

目次

第 1 章：はじめに	9
ソフトウェアの概要.....	9
ソフトウェアを開く.....	9
ホームページについて.....	9
リボンとランチャーについて.....	12
ステータスパネルについて.....	14
データ取得パネル.....	18
画面をロック.....	19
ソフトウェアのロック解除.....	19
電子ラボノートのサポート.....	20
文書内の記号と規約.....	20
第 2 章：操作説明書—デバイスの設定	21
デバイスの追加.....	21
デバイスの削除.....	21
デバイスの設定を編集する.....	22
第 3 章：操作上の使用説明-ソフトウェアの構成	23
プロジェクトとルートディレクトリについて.....	23
ルートディレクトリの追加.....	23
ルートディレクトリの削除.....	24
安全なネットアカウントの指定.....	24
プロジェクトの追加.....	24
サブフォルダの追加.....	25
キューオプションの選択.....	25
ラボ情報管理システム (LIMS) の設定の選択.....	25
全画面モードの有効化.....	26
地域設定の選択.....	26
化合物ライブラリの管理.....	26
LibraryView ソフトウェアパッケージのインポート.....	26
化合物データベースのインポート.....	27
Cliquid ソフトウェアパッケージのインポート.....	28
Excel ファイルのインポート.....	29
ライブラリデータベースのスナップショットのインポート.....	30
サードパーティーのライブラリパッケージのインポート.....	30
ライセンス済みの LibraryView ソフトウェアパッケージをインストール.....	31
化合物の不一致.....	32
化合物の追加.....	34
化合物への質量スペクトルの追加.....	34
第 4 章：操作上の使用説明—ユーザーワークフロー	36

目次

アナリスト.....	36
メソッドディベロッパー.....	36
管理者.....	37
レビューア.....	37
第 5 章：取扱説明書—取得.....	38
MS Method ワークスペース.....	38
MS メソッドの作成.....	38
Guided MRM HR を使用した MRM HR メソッドの作成.....	40
MS メソッドの実験.....	41
MS メソッドについて.....	42
MS メソッドの動的衝突エネルギーを計算する.....	43
MS メソッドを開く.....	44
MS メソッドを手動で実行.....	44
LC Method ワークスペース.....	46
LC メソッドの作成.....	46
Batch ワークスペース.....	47
バッチを管理.....	51
ファイルからのバッチのインポート.....	53
LIMS からのバッチのインポート.....	54
バッチを手動で作成.....	55
プレートレイアウト機能を使用してバッチを作成する.....	57
イオン参照表の作成.....	59
CDS を使用したシステムのキャリブレーション.....	59
LC メソッドを使用したシステムのキャリブレーション.....	60
コンポーネント濃度管理.....	60
決定ルールを管理.....	61
システムの平衡化.....	63
バッチを送信.....	63
単一のサンプルを Batch ワークスペースからキューに送信.....	64
複数のサンプルを Batch ワークスペースからキューに送信.....	64
Queue ワークスペース.....	65
キューの管理.....	67
列の表示または非表示.....	69
キューアイコン.....	70
MS Tune ワークスペース.....	72
クイック状態チェックの実行.....	72
検出器の最適化.....	73
Q1 Unit チューニング.....	74
TOF のチューニング.....	74
Q1 High のチューニング.....	75
Zeno のキャリブレーション (ZenoTOF システム).....	76
EAD 最適化の実行(ZenoTOF システム).....	76
EAD EI バックグラウンド削減の実行(ZenoTOF システム).....	77
EAD 診断化の実行(ZenoTOF システム).....	77
ADC の初期化の実行(ZenoTOF システム).....	77
高度なトラブルシューティングの実行.....	78
装置データの復元.....	78

第 6 章：操作上の使用説明—処理	80
Explorer ワークスペース.....	80
サンプルを開く.....	80
分析試料の存在の確認.....	80
イオンの抽出.....	81
トータルイオンクロマトグラムを開く.....	82
ベースピーククロマトグラムを開く.....	84
データおよびピーク表の表示.....	86
サンプル情報の表示.....	87
グラフ選択情報の表示.....	88
グラフの設定の編集.....	90
グラフのデータの操作.....	91
ダブルペインの操作ツールの使用.....	95
ペインまたはウィンドウの移動.....	96
ガウシアンスムーズの実行.....	97
データのしきい値.....	98
グラフ選択を使用したサブセットデータ.....	99
ベースライン補正クロマトグラム.....	100
クロマトグラムのオフセット.....	100
スペクトルのセントロイド作成.....	101
テキストとしてデータをエクスポートする.....	102
テキストとしてピークリストをエクスポートする.....	103
データの印刷.....	104
オプションのリセット.....	104
オプションの設定.....	104
Analytics ワークスペース.....	105
プロジェクトのデフォルト処理パラメータの定義.....	106
ワークスペースレイアウトの操作.....	106
プロジェクトの安全エクスポート設定の設定.....	109
Project Modified Peak Warning の有効化.....	110
処理メソッドの作成.....	110
データを処理.....	112
Results Tables の操作.....	119
ピークのレビュー.....	147
統計を使用したデータの分析.....	158
キャリブレーションカーブの表示.....	161
メトリックプロットを使用してデータを分析する.....	161
レポートテンプレートの編集.....	162
Reporter テンプレート.....	164
第 7 章：イベント	177
イベントログ.....	177
ログの表示.....	178
ログのアーカイブ.....	178
アーカイブされたログを表示.....	179
ログの印刷.....	179
Event Log アーカイブ.....	179

目次

第 8 章：監査	181
監査証跡の記録の表示.....	181
キーワード検索を使用した監査済みイベントのフィルタリング.....	181
指定された基準を使用する監査済みのイベントのフィルタリング.....	181
監査証跡の印刷.....	183
付録 A：動作原理 - ソフトウェア	184
データの取り扱い.....	184
スキヤンの技術.....	184
さまざまなデータビュー.....	184
@クロマトグラム.....	184
スペクトル.....	186
再構成スペクトル.....	186
決定ルール.....	187
Dynamic Background Subtraction.....	187
定量分析.....	187
標準添加.....	188
Mass Reconstruction.....	189
定性分析.....	190
質量精度.....	190
保持時間.....	190
アイソトープパターン.....	190
ライブラリ検索.....	191
式の検出.....	192
解析.....	192
AutoPeak 積分アルゴリズムのパラメータ.....	193
MQ4 積分アルゴリズムのパラメータ.....	197
回帰.....	200
回帰方程式.....	200
重み付けの種類.....	200
相関係数.....	201
回帰の種類.....	201
外れ値の自動除外.....	204
Results Table.....	205
キャリブレーションカーブ.....	205
シグナル対ノイズ比.....	206
相対ノイズと S/N の計算.....	206
ピーク間を用いた S/N.....	209
標準偏差を使用した S/N 比.....	209
ノイズ領域を定義.....	210
計算列.....	210
計算列インターフェースのナビゲート.....	210
デフォルト以外の情報の簡単な抽出.....	212
単純な算術.....	212
より複雑な機能.....	213
IF ステートメント.....	214
結果のテキスト値として扱う.....	215

付録 B : 接点閉が設定されているシステムのキャリブレーション	217
バッチモードでのシステムのキャリブレーション.....	217
CDS を使用したシステムのキャリブレーション.....	217
LC システムを使用したシステムのキャリブレーション.....	220
手動モードでのキャリブレーション.....	223
CDS によるシステムのキャリブレーション.....	223
LC メソッドを使用したシステムのキャリブレーション.....	223
付録 C : 計算精密質量および化学式	224
付録 D : Explorer チュートリアル	226
序論.....	226
構成.....	226
オプション.....	227
ペイン.....	227
グラフ.....	232
オーバーレイ.....	238
ファイルを開く.....	239
クロマトグラムとスペクトル.....	242
等高線図とヒート マップ.....	245
クロマトグラムとスペクトルを使用する.....	247
データ ファイルを開く.....	247
1 つの実験について TIC を表示する.....	249
既知の分子式に対して XIC を表示する.....	251
スペクトルを生成し、処理する.....	255
等高線図を使用する.....	261
概要.....	264
IDA Explorer を使用する.....	265
スペクトルの表示と結合.....	265
IDA データにフィルタを適用する.....	269
基準スペクトルを使用する.....	271
概要.....	272
構造ツールで作業する.....	272
MS/MS スペクトルに構造をリンクさせる.....	272
フラグメントの処理.....	276
スペクトルに下部構造を追加する.....	281
関連 MS/MS スペクトルで作業する.....	282
概要.....	285
複数のサンプルを分析する.....	286
2 つのサンプルを分析する.....	286
複数のサンプルを処理する.....	292
概要.....	299
バイオ ツール キットの機能を使用する.....	300
手動配列.....	300
手動再構築ハイライトの追加と削除.....	310
消化プロテイン.....	313
LCMS ペプチド再構築.....	320

目次

タンパク質の再構築.....	327
概要.....	332
お問い合わせ先.....	334
お客様のトレーニング.....	334
オンライン学習センター.....	334
SCIEX サポート.....	334
サイバーセキュリティ.....	334
ドキュメント.....	334

ソフトウェアの概要

SCIEX OS ソフトウェアには、装置コントロール、データ収集、データ処理、およびレポート機能がすべて1つのパッケージに含まれます。

ソフトウェアを開く

1. スタートメニューからソフトウェアを選択します。
 - Windows 7: **Start > All Programs > SCIEX > SCIEX OS > SCIEX OS**
 - Windows 10: **Start > SCIEX OS > SCIEX OS**

注: **LibraryViewServiceHost** サービスの実行中以外は、User Account Control ダイアログが表示されます。**Yes** をクリックしてサービスを開始します。

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

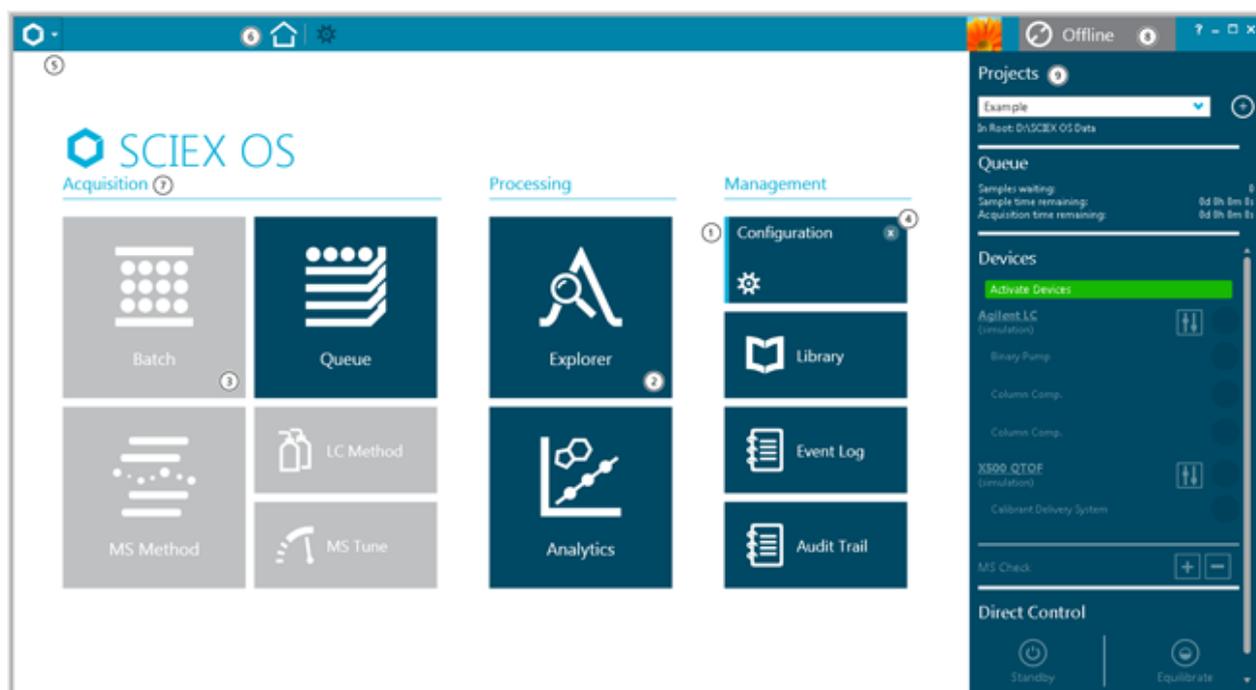
ソフトウェアが Mixed Mode 用に構成されている場合は、Logon ダイアログが開きます。次の手順に進みます。

2. Central Administrator Console (CAC)ソフトウェアを使用していて、SCIEX OS が中央管理用に設定されている場合は、ログオン先のワークグループを選択します。
3. 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。

ホームページについて

ホームページは、機能、ステータスパネル、リボン、ランチャーでグループ化されたワークスペーススタイルで構成されています。ワークスペースへのアクセスは、ユーザーに割り当てられている役割とライセンスによって決められます。

図 1-1 : ホームページ



項目	説明
1	ダークブルーのタイルの左側にあるライトブルーの垂直な線は、ワークスペースが開かれ、ワークが進行中であり、機能へのアクセスができることを示します。開いているワークスペースの状態は、タイルに表示されます。
2	ダークブルーのタイルは、ワークスペースが閉じられていることを示します。
3	灰色のタイルは、ワークスペースが有効でないことを示します。
4	ワークスペースが開いているときは、閉じるのアイコン(×)が右上隅に表示されます。
5	ランチャーへのアクセス。ランチャーには、すべてのワークスペースのリストが含まれています。アイコンの右側の▼をクリックして、ランチャーを開きます。
6	リボン。次のセクションを参照: リボンとランチャーについて 。別のワークスペースに移動するには、リスト内のワークスペースをクリックします。現在開いているワークスペースは有効のまま、ワークスペースアイコンがリボンに表示されます。有効なワークスペースを閉じるには、 をクリックします。ホームページに戻るには、 をクリックします。
7	機能: 取得、処理、および管理。アクセスは、ユーザーに割り当てられた役割とライセンスに依存します。
8	システムの状態。タイトルバーをクリックして、ステータスパネルを表示、または非表示にします。

項目	説明
9	ステータスパネル。次のセクションを参照: ステータスパネルについて 。

表 1-1 : 機能

ラベル	説明
Acquisition	(取得) 取得グループにある機能を使用して、メソッド、バッチを作成し、取得用のサンプルを送信します。ユーザーは、MS チューンを使用して質量分析装置をチューニングすることもできます。
Processing	(処理中) 処理グループにある機能を使用して、定量的または定性的にデータを処理します。
Management	(管理) 管理グループにある機能を使用して、デバイスの設定、ソフトウェアへのアクセスの設定、イベントログの表示を行います。

表 1-2 : タイル

ラベル	説明
Batch	(バッチ) Batch ワークスペースを使用してバッチを作成し、それらをキューに送信します。次のセクションを参照: Batch ワークスペース 。
Queue	(キュー) Queue ワークスペースを使用して、取得と処理状態を監視し、キュー内のサンプルを管理します。次のセクションを参照: Queue ワークスペース 。
MS Method	(MS メソッド) MS Method ワークスペースを使用して、MS メソッドを作成および編集します。次のセクションを参照: MS Method ワークスペース 。
LC Method	(LC メソッド) LC Method ワークスペースを使用して、LC メソッドを作成および編集します。次のセクションを参照: LC Method ワークスペース 。
MS Tune	(MS チューン) MS Tune ワークスペースを使用して、質量分析装置を最適化します。次のセクションを参照: MS Tune ワークスペース 。
Explorer	(エクスプローラ) 取得したデータを検査するには、Explorer ワークスペースを使用します。次のセクションを参照: Explorer ワークスペース 。
Analytics	(分析) Analytics ワークスペースを使用して、取得したデータを処理および確認します。次のセクションを参照: Analytics ワークスペース 。

表 1-2 : タイル (続き)

ラベル	説明
Configuration	(構成) Configuration ワークスペースを使用して、ソフトウェアの構成、デバイスの追加と有効化、ユーザーロールの割り当て、監査マップの作成と割り当てを行います。次のドキュメントを参照: 『ヘルプシステム』。
Library	(ライブラリ) Library ワークスペースを使用して、化合物ライブラリを管理します。
Event Log	(イベントログ) Event Log ワークスペースを使用して、エラーや警告などのシステムイベントを表示します。次のドキュメントを参照: 『ラボ管理者ガイド』。
Audit Trail	(監査証跡) 構成変更やデータ処理などのソフトウェアイベントの記録を表示するには、Audit Trail ワークスペースを使用します。次のドキュメントを参照: 『ラボ管理者ガイド』。

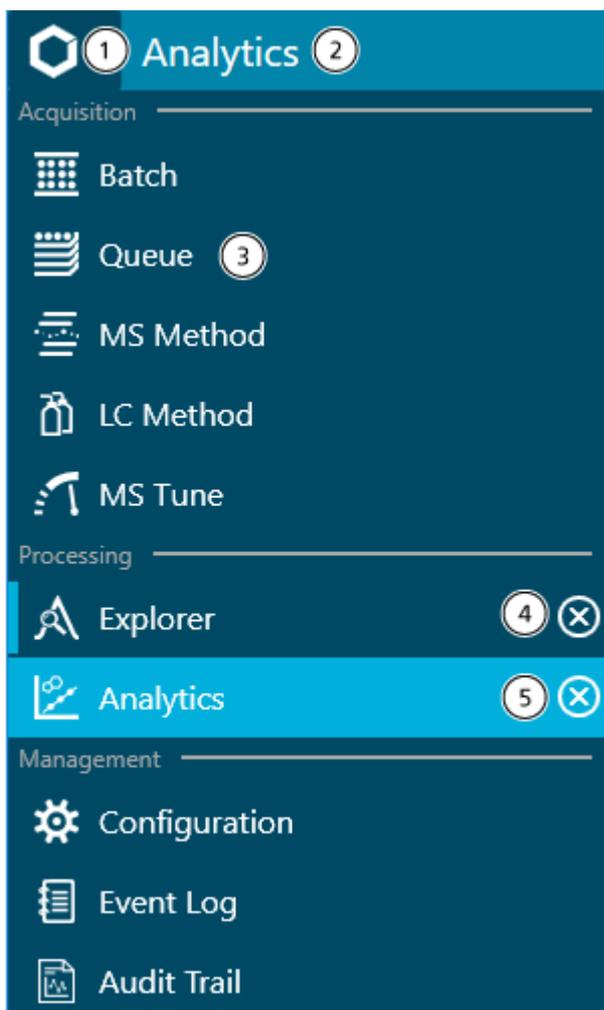
リボンとランチャーについて

図 1-2 : リボン



項目	説明
1	ユーザーがリストから選択することにより、別のワークスペースを開くことができます。このワークスペースがアクティブなワークスペースになります。以前アクティブだったワークスペースは開いたままです。図 1-3 を参照してください。
2	有効なワークスペースの名前を表示します。
3	ホームページを開きます。
4	開いているワークスペースを表示します。アクティブなワークスペースは白で表示されます。開いているワークスペースをアクティブにするには、ワークスペースアイコンをクリックします。
5	現在ログインしているユーザーを表示します。
6	システム状態を表示します。次のセクションを参照: ステータスパネルについて 。
7	ヘルプシステムを開きます。? をクリックします。

図 1-3 : ランチャー



項目	説明
1	ワークスペースのリストを表示します。▼をクリックします。
2	有効なワークスペースの名前を表示します。
3	ワークスペースの状態を表示します。ダークブルーの背景は、ワークスペースが閉じられていることを示します。左側にあるライトブルーの縦棒は、ワークスペースが開いていることを示します。ライトブルーの背景は、ワークスペースがアクティブであることを示します。
4	開いているワークスペースを閉じます。ⓧをクリックします。
5	アクティブなワークスペースを閉じます。ⓧをクリックします。

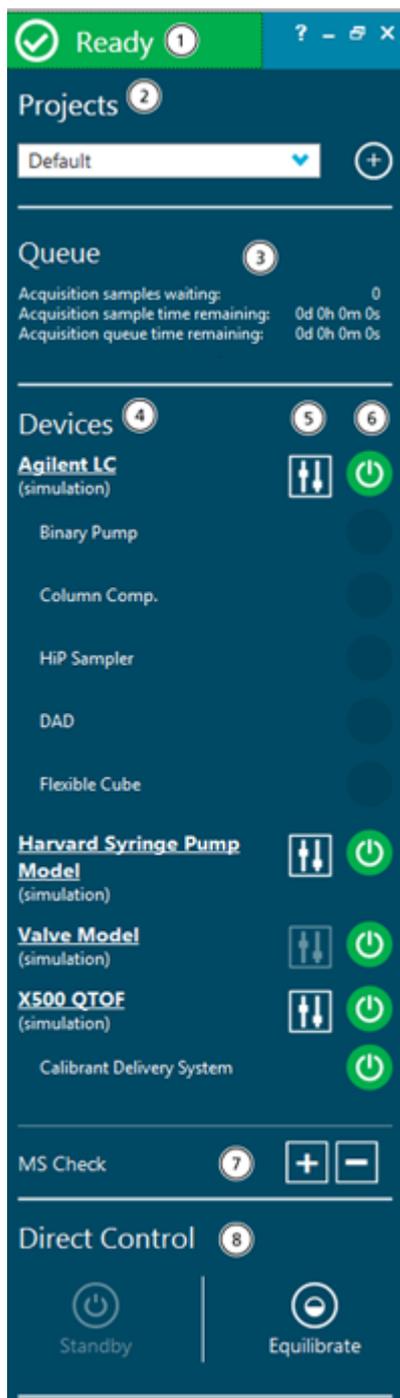
ステータスパネルについて

このパネルを開くには、ステータスパネルのタイトルバーをクリックします。図 1-2 を参照してください。

状態タイトルバーのアイコン、テキスト、色が変化して、システムの状態を示します。ステータスパネルを使用して、以下を行います。

- プロジェクトを追加または選択します。
- キューに残っているサンプルおよびバッチを測定するために残っている予想時間を表示します。
- キューに残っているサンプルの数およびキューを完了するために残っている予想時間を表示します。
- Configuration ワークスペースのデバイスリストで有効にされた個々のデバイスのシステム状態、または状態を表示します。
- デバイスの直接制御にアクセスして、デバイスを起動または停止します。
- デバイスの詳細を表示します。
- 質量分析装置、または LC システムをスタンバイ状態にします。
- TOF MS および TOF MS/MS モードの確認およびキャリブレーションを実行します。
- システムの平衡化を行います。

図 1-4 : SCIEX OS ステータスパネル



はじめに

項目	説明
1	<p>システムの状態を表示します。タイトルバーをクリックして、ステータスパネルを表示、または非表示にします。</p> <ul style="list-style-type: none"> 準備完了の場合は緑になります。 オフラインの場合は灰色になります。 平衡化、実行中、および読み込み中の場合は青になります。 停止済み、または停止中の場合は黄色になります。 故障の場合は赤になります。
2	<p>現在のプロジェクトを表示します。既存のプロジェクトに変更するには、リストからプロジェクトを選択します。プロジェクトを追加するには、Create Project () をクリックし、プロジェクト名を入力して、OK をクリックします。</p>
3	キューにあるサンプルの状態を表示します。
4	デバイスの状態を表示します。デバイスのタイトルをクリックすると、Device Details ダイアログが開き、詳細が表示されます。デバイスが非アクティブの場合、 Activate Devices ボタンがステータスパネルのこのセクションに表示されます。このボタンをクリックして、デバイスを有効にします。
5	Direct Device Control アイコンをクリックすると、デバイスのコントロールにアクセスできます。オプションのシリンジは、Device Control ダイアログで開始、または停止できます。
6	デバイスの状態を表示します。アイコンはデバイスの状態を表示するのみのインジケータです。
7	クリックして MS チューンの手順にアクセスします。
8	該当するボタンをクリックして、システムを平衡化するか、またはスタンバイ状態にします。次のセクションを参照: システムの平衡化 。

表 1-3 : ステータスパネルセクション

ラベル	説明
Projects	<p>(プロジェクト) 現在のプロジェクトを表示します。 Create Project () をクリックしてプロジェクトを作成します。次のセクションを参照: プロジェクトの追加。</p>

表 1-3 : ステータスパネルセクション (続き)

ラベル	説明
Queue	<p>(キュー)キューにあるサンプルの状態を表示します。次の情報が提供されます。</p> <ul style="list-style-type: none"> • Samples waiting (サンプル待機) • Sample time remaining (残りのサンプル時間) • Acquisition time remaining (残りの取得時間) <p>次のセクションを参照: キューの管理。</p>
Devices	<p>(デバイス)有効な構成のデバイスを一覧表示します。このリストから、デバイスは次の方法で管理できます。</p> <ul style="list-style-type: none"> • デバイス名をクリックして、Device Details ダイアログを開いて、表示します。 • アイコンの状態を見るか、状態アイコンの上でカーソルを移動させて、デバイスの状態を表示させます。 • Direct device control () をクリックして、Device Control ダイアログを開きます。
MS Check	<p>(MS チェック) 正 (+) または 負 (-) モードで MS チューニング手順を実行します。</p>
Direct Control	<p>(直接制御) デバイスを手動で制御できるようにします。 Standby をクリックして、スタンバイ状態にします。 Equilibrate をクリックして、Equilibrate ダイアログを開きます。次のセクションを参照: システムの平衡化。</p>

表 1-4 : ステータスパネル機能

実行する操作	実行する作業
ステータスパネルの表示	<p>最小化されたステータスパネルの上部にあるステータスパネルのタイトルバーをクリックします。 図 1-2 を参照してください。</p>
ステータスパネルの非表示	<p>ステータスパネルが表示されているときに、そのタイトルバーをクリックします。</p>
有効なプロジェクトを変更	<p>ステータスパネルの Projects リストからプロジェクトを選択します。</p> <hr/> <p>ヒント! Create Project () をクリックしてプロジェクトを作成します。プロジェクト名を入力して OK をクリックします</p> <hr/>

表 1-4 : ステータスパネル機能 (続き)

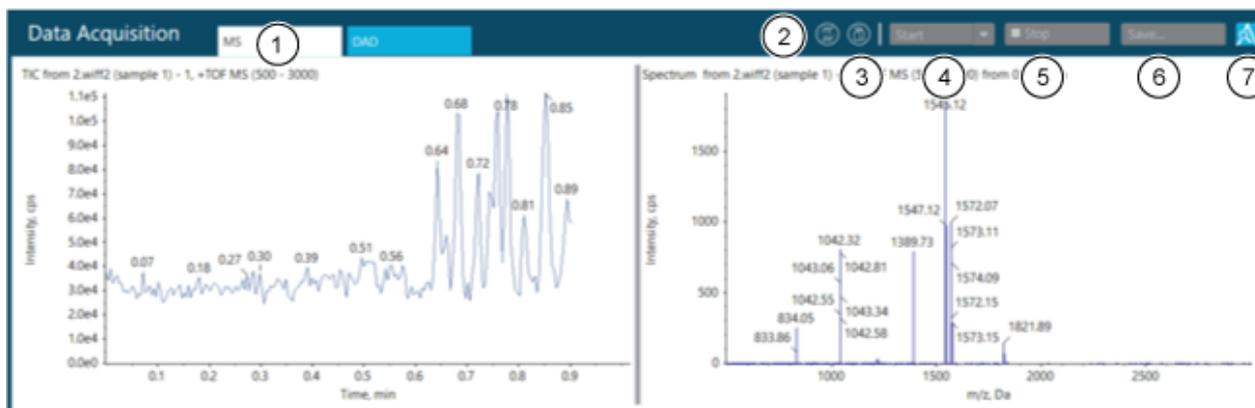
実行する操作	実行する作業
デバイス状態の制御	<ol style="list-style-type: none"> 状態パネルで、デバイスタイトルの右側にある Direct device control () をクリックします。 Device Control ダイアログが表示されます。 必要に応じて、デバイスを開始、停止、または更新します。 OK をクリックします。 <p>この手順を使用して、デバイスの状態の詳細なフィードバックを取得します。たとえば、温度、圧力、電圧などです。デバイス状態を監視するには、デバイスのタイトルの一番右側にあるアイコンをクリックします。</p>

データ取得パネル

Data Acquisition パネルを使用して、リアルタイムのデータ取得を開始して監視します。リアルタイムのデータ取得中に取得メソッドパラメータを編集することもでき、また Explorer ワークスペースでデータを保存、またはデータを開くこともできます。

ヒント! Data Acquisition パネルの一番上を上下にクリックしてドラッグすると、内容のサイズを変更できます。

図 1-5 : データ取得パネル



項目	説明
1	TIC とスペクトルまたは XIC を表示します。検出器が有効な場合、DAD または UV データも表示されます。
2	MS メソッド。カーソルを合わせると、実行中の MS メソッドの名前が表示されます。
3	LC メソッド。カーソルを合わせると、実行中の LC メソッドの名前が表示されます。

項目	説明
4	Start をクリックすると、手動取得が開始します。 Start > Start with LC をクリックして Start with LC ダイアログを開きます。次のセクションを参照:
5	クリックすると、手動取得を停止します。
6	クリックすると、データを保存できます。
7	クリックすると、リアルタイムでデータを探索できます。

画面をロック

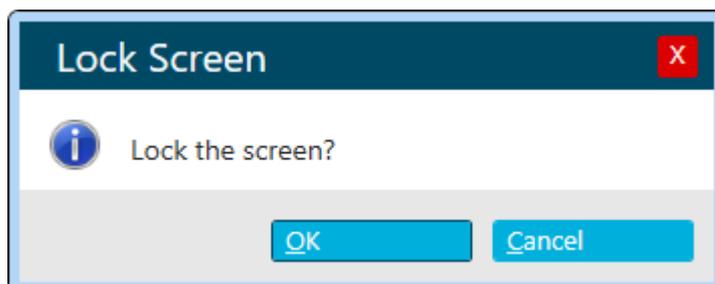
ワークステーションが不在のときにソフトウェアへの不正アクセスを防ぐには、ソフトウェアをロックします。ソフトウェアがロックされている間、進行中の取得または処理が続行されます。

自動ログオフ時間が経過すると、ユーザーはログオフされます。取得が続行します。

注: 処理が進行中の場合、または Results Table が保存されていない場合、ログオフは行われません。

1. **Ctrl+Q** を押します。

図 1-6 : Lock Screen ダイアログ



2. **OK** をクリックします。
SCIEX OS is Locked ダイアログが開きます。

ソフトウェアのロック解除

ソフトウェアがロックされている場合、現在ログオンしているユーザーはロックを解除できます。

注: 他のユーザーはソフトウェアのロックを解除できませんが、**Force User Logoff** 権限を持つユーザーは現在のユーザーをログオフできます。

SCIEX OS is Locked ダイアログで、現在のユーザーのパスワードを入力し、**Unlock** をクリックします。

はじめに

電子ラボノートのサポート

SCIEX は特定の電子ラボノートブック(ELN)ソリューションをサポートしていませんが、SCIEX は ELN システムとの統合のためのデータのインポートとエクスポートを容易にする製品、ツール、およびサービスを提供しています。

- **バッチの作成:** SCIEX OS は、csv および txt 形式のバッチファイルをインポートできます。[Batch ワークスペース](#)を参照してください。
- **結果のアップロード:** SCIEX OS は、LIMS システムで使用するためにデータを txt ファイルにエクスポートできます。[Analytics ワークスペース](#)を参照してください。

文書内の記号と規約

このガイド内では以下のシンボルと規約が適用されます。



危険!「危険」は致命傷や死を引き起こす行動を指します。



警告!「警告」は、注意点を守らなかった場合に人身傷害を引き起こす可能性のある行動を指します。

注意:「注意」は注意点を守らなかった場合にシステム損傷やデータ損失を引き起こす可能性のある行動を指します。

注:「注」は手順および説明内の重要な情報を指します。

ヒント!「ヒント」は本文記載の技術および手順の応用に役立つ情報です。特別なニーズがある場合、手順を短縮する場合の補足事項として使用ください。手順を完了するために必須のものではありません。

以下のために Configuration ワークスペースを使用します。

- デバイスを有効または無効にする
- デバイスを追加または削除する
- デバイスの設定を編集する
- デバイスをテストする

デバイスの追加

注: 有効化の問題を回避するには、他のデバイスを追加する前に、必ず質量分析装置を追加してください。

1. Configuration ワークスペースを開きます。
2. **Devices** をクリックします。
3. デバイスがアクティブな場合は、**Deactivate** をクリックします。
4. **Add** をクリックします。
Device ダイアログが開きます。
5. **Type** リストで、必要な種類を選択します。
6. **Model** リストで、必要なモデルを選択します。
7. **Settings** をクリックして、設定の編集またはデフォルト値の復元を行います。
8. **Test Device** をクリックして、デバイスが正しく設定されていて使用可能であることを確認します。
9. **Save** をクリックします。
10. 必要に応じて、手順 4 から手順 9 を繰り返します。
11. アクティブにする各デバイスの横にある **Activate** チェックボックスを選択して、**Activate Devices** をクリックします。
選択したすべてのデバイスがアクティブ化されます。
12. デバイスを編集または削除するには、『ヘルプシステム』を参照してください。

デバイスの削除

注: 削除するデバイスが統合システムの一部である場合、統合システムのすべてのデバイスが削除されます。ユーザーは、統合システムの中の 1 つのデバイスを削除することはできません。

1. Configuration ワークスペースを開きます。
2. **Devices** をクリックします。

3. **Deactivate** をクリックします。
4. デバイスを選択します。
5. **Delete** をクリックします。
6. アクティブにする各デバイスの横にある **Activate** チェックボックスを選択して、**Activate Devices** をクリックします。
選択したすべてのデバイスがアクティブ化されます。

デバイスの設定を編集する

1. Configuration ワークスペースを開きます。
2. **Devices** をクリックします。
3. 装置がアクティブな場合は、**Deactivate** をクリックします。
4. 編集するデバイスを選択します。
5. **Edit** をクリックします。
Device ダイアログが開きます。
6. (オプション)**Device Display Names** セクションでデバイスのプロパティを編集します。プロパティの詳細については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
7. (オプション)**Settings** をクリックして、追加のデバイス情報を表示および変更します。これらのタスクを実行するには、Settings ダイアログを使用します。
 - **Restore Defaults** をクリックして、デバイスのデフォルト設定を復元します。
 - **Test Device** をクリックして、デバイスが正しく設定されていて使用可能であることを確認します。テストが成功すると、Settings ダイアログが閉じます。
8. **Test Device** をクリックして、デバイスが正しく設定されていて使用可能であることを確認します。
テストに成功した場合、緑色のメッセージが表示されます。そうでない場合は、メッセージは構成が無効であり、更新が必要であることを示します。
9. **Save** をクリックします。
10. アクティブにする各デバイスの横にある **Activate** チェックボックスを選択して、**Activate Devices** をクリックします。
選択したすべてのデバイスがアクティブ化されます。

操作上の使用説明-ソフトウェアの構成 3

ユーザーおよび権限の設定に関する詳細は、『ラボ管理者ガイド』のドキュメントを参照してください。

プロジェクトとルートディレクトリについて

ルートディレクトリは 1 つ以上のプロジェクトを含むフォルダです。これは、ソフトウェアがプロジェクトデータを検索するフォルダです。事前定義されたルートディレクトリは C:\SCIEX OS Data です。

プロジェクト情報が安全に保存されていることを確認するには、SCIEX OS を使用してプロジェクトを作成します。次のセクションを参照: [プロジェクトの追加](#)。

プロジェクトデータはサブフォルダに整理できます。SCIEX OS でサブフォルダを作成します。次のセクションを参照: [サブフォルダの追加](#)。

注: Central Administrator Console (CAC) ソフトウェアで管理するワークグループの場合、SCIEX OS でプロジェクトを管理する機能は CAC ソフトウェアの設定で制御します。CAC ソフトウェアで **Use central settings for projects** オプションを選択している場合、Projects ページは読み取り専用になります。

ルートディレクトリの追加

ルートディレクトリは 1 つ以上のプロジェクトが保管されているフォルダです。

注: 最大 10 個のルートディレクトリを保存できます。

1. Configuration ワークスペースを開きます。
2. **Projects** をクリックします。
3. **Advanced** セクションで、**Current root directory** フィールドの横にある **Create Root** () をクリックします。
4. ルートディレクトリフォルダへのフルパスを入力します。フォルダが作成されます。

ヒント! パスを入力する代わりに、**Browse** をクリックして、ルートディレクトリを作成するフォルダを選択します。「\」とパスの末尾にあるルートディレクトリフォルダの名前を入力します。

ヒント! あるいは、File Explorer にフォルダを作成して、そのフォルダを参照し選択します。

注: 処理ライセンスのある SCIEX OS インストールの場合、ルートディレクトリは Analyst ソフトウェア Analyst Data\Projects フォルダにすることができます。

5. **OK** をクリックします。

新しいルートディレクトリは、現在のプロジェクトのルートディレクトリになります。

ルートディレクトリの削除

ソフトウェアは、使用された最後の 10 個のルートディレクトリのリストを保持します。ユーザーは、このリストからルートディレクトリを削除できます。

注: この **Current root directory** は削除できません。

1. Configuration ワークスペースを開きます。
2. **Projects** をクリックします。
3. **Advanced** セクションで、**Current root directory** フィールドの横にある  をクリックします。
Clear Root Directory ダイアログが開きます。
4. ルートディレクトリのリストから削除するフォルダーを選択し、**OK** をクリックします。

安全なネットアカウントの指定

プロジェクトがネットワークリソースに保存されている場合、ワークステーションのすべてのユーザーがネットワークリソースに必要なアクセス権を持つようにするために、SNA を指定できます。

1. Configuration ワークスペースを開きます。
2. **Projects** をクリックします。
3. **Advanced** セクションの **Credentials for Secure Network Account** をクリックします。
4. ネットワークリソースで定義されている安全ネットワークアカウントのユーザー名、パスワード、ドメインを入力します。
5. **OK** をクリックします。

プロジェクトの追加

プロジェクトには、測定メソッド、データ、バッチ、処理メソッド、処理結果などが保存されます。各プロジェクトに対して別々のプロジェクトフォルダを使用することを推奨します。

ヒント! プロジェクトは、状態パネルの **Create Project** () をクリックして作成することもできます。

SCIEX OS の外部にプロジェクトを作成したり、ファイルをコピーまたは貼り付けしたりしないでください。

1. Configuration ワークスペースを開きます。
2. **Projects** をクリックします。
3. **Current Project** フィールドの横にある **Create Project** () をクリックします。

New Project ダイアログが開きます。

4. プロジェクト名を入力します。
5. **OK** をクリックします。

サブフォルダの追加

プロジェクト内では、データをサブフォルダにさらに編成できます。

1. Configuration ワークスペースを開きます。
2. **Projects** をクリックします。
3. **Add Data Sub-Folders to any Project** をクリックします。
Add Data Subfolders ダイアログが開きます。
4. **SCIEX OS Project** フィールドで、サブフォルダが追加されるプロジェクトを選択します。
5. **Project Data Sub-Folders** セクションのボックスの上にある **Add a new data sub-folder**



() をクリックします。
Data Sub-Folder Name ダイアログが開きます。

6. サブフォルダの名前を入力します。
7. **Save** をクリックします。
8. Add Data Sub-Folders ダイアログを閉じます。

キューオプションの選択

ソフトウェアは、リスト内の送信されたサンプルを順次処理し、選択された測定メソッドで各サンプルを実行します。すべてのサンプルの測定が完了するとキューが停止し、システムは準備完了状態になります。また、「Instrument Idle Time (装置のアイドル時間)」フィールドに設定されている時間が経過すると、システムはスタンバイ状態になります。スタンバイ状態では、LC ポンプとカラムオーブン、さらには質量分析装置の一部のコンポーネントの電源がオフになります。ただし、サンプルの劣化を防ぐため、オートサンプラーの温度制御はオンの状態が保たれます。

キューを管理する権限を割り当てられたユーザーのみが、最後の取得が完了してから、装置がスタンバイ状態になるまでのキューの実行時間を変更できます。

1. Configuration ワークスペースを開きます。
2. **Queue** をクリックします。
3. 必要に応じてキューオプションを選択します。オプションの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
4. **Save** をクリックします。

ラボ情報管理システム(LIMS)の設定の選択

この機能を使用して、LIMS サーバーに接続します。ユーザーは、バッチ情報を LIMS からインポートでき、またそこに結果をエクスポートすることもできます。

操作上の使用説明-ソフトウェアの構成

注: この手順は、Watson LIMS への接続には必要ありません。

1. Configuration ワークスペースを開きます。
2. **LIMS Communication** をクリックします。
3. LIMS と通信するには、LIMS サーバーの URL を **LIMS Server** フィールドに入力し、**Enable import from the specified LIMS server** を選択します。

注: お客様の IT 部門またはミドルウェアプロバイダーは、LIMS サーバーの構成を担当します。サーバーの URL または場所については、お客様にお問い合わせください。

4. **Save** をクリックします。

全画面モードの有効化

この機能を選択して、SCIEX OS を主要アプリケーションとして使用します。ユーザーは、ソフトウェアを閉じたり、その他のソフトウェアプログラムにアクセスしたりすることはできません。

1. Configuration ワークスペースを開きます。
2. **General** をクリックします。
3. **General** で、**Enabled** チェックボックスを選択して **Full Screen Mode** を有効にします。
4. **Save** をクリックします。

地域設定の選択

この機能は、コントロールパネルで選択された地域設定と言語設定を適用します。ピリオド「.」またはコンマ「,」のみが小数点の記号として使用できます。桁区切りには対応していません。

1. Configuration ワークスペースを開きます。
2. **General** をクリックします。
3. **Regional Settings** で **Apply** をクリックします。
Windows オペレーティングシステムで設定されている地域設定は、コンピュータを再起動した後にソフトウェアに適用されます。
4. **Save** をクリックします。
5. コンピュータを再起動します。

化合物ライブラリの管理

LibraryView ソフトウェアパッケージのインポート

1. Manage ペインで **Compounds** リストを展開します。
2. **All Compounds** をクリックします。
3. **Import** アイコンをクリックします。
4. **LibraryView Package (*.lbp) Library Importer** ダイアログにあるをクリックします。

5. Open ダイアログで、目的のファイルまで移動します。
6. ファイルを選択して **Open** をクリックします。
7. Library Importer ダイアログで以下のいずれかを行います。
 - すべての化合物をインポートするには、**All** 列の上にある **Compound** をクリックします。
 - 個別の化合物をインポートするには、該当する行内をクリックします。

ヒント! Search フィールドを使用すると、目的の化合物を簡単に探すことができます。検索条件を入力すると、表示されている列が検索され、指定した条件と一致する情報だけを表示するように更新されます。

8. 次のいずれかを実行して、ライブラリに化合物を追加します。
 - **Add to Compound Library** リストから適切なライブラリを選択します。
 - ライブラリの名前を **Add to Compound Library** リストフィールドに入力します。
9. **Next** をクリックします。

注: データベースにすべての化合物がコピーされる前にインポートをキャンセルした場合でも、すでにインポート済みの化合物はそのままデータベースに保持されます。インポート前の状態に戻されることはありません。

10. 必要に応じて、競合を解決します。
11. **Finish** をクリックします。

化合物データベースのインポート

1. Manage ペインで **Compounds** リストを展開します。
2. **All Compounds** をクリックします。
3. **Import** アイコンをクリックします。
4. Library Importer ダイアログで以下のいずれかを行います。
 - **DiscoveryQuant Compound Database (*.mdb)**をクリックします。
 - **Analyst Compound Database (*.mdb)**をクリックします。
5. Open ダイアログで、目的のファイルまで移動します。
6. ファイルを選択して **Open** をクリックします。
7. Library Importer ダイアログで以下のいずれかを行います。
 - すべての化合物をインポートするには、**All** 列の上にある **Compound** をクリックします。
 - 個別の化合物をインポートするには、該当する行内をクリックします。

ヒント! Search フィールドを使用すると、目的の化合物を簡単に探すことができます。検索条件を入力すると、表示されている列が検索され、指定した条件と一致する情報だけを表示するように更新されます。

- 次のいずれかを実行して、ライブラリに化合物を追加します。
 - Add to Compound Library** リストから適切なライブラリを選択します。
 - ライブラリの名前を **Add to Compound Library** リストフィールドに入力します。
- Next** をクリックします。

注: データベースにすべての化合物がコピーされる前にインポートをキャンセルした場合でも、すでにインポート済みの化合物はそのままデータベースに保持されます。インポート前の状態に戻されることはありません。

- 必要に応じて、競合を解決します。
- Finish** をクリックします。

Cliiquid ソフトウェアパッケージのインポート

- Manage ペインで **Compounds** リストを展開します。
- All Compounds** をクリックします。
- Import** アイコンをクリックします。
- Library Importer ダイアログにある **Cliiquid Package (*.clq)** をクリックします。
- Open ダイアログで、目的のファイルまで移動します。
- ファイルを選択して **Open** をクリックします。
- Library Importer ダイアログで以下のいずれかを行います。
 - すべての化合物をインポートするには、**All** 列の上にある **Compound** をクリックします。
 - 個別の化合物をインポートするには、該当する行内をクリックします。

ヒント! Search フィールドを使用すると、目的の化合物を簡単に探すことができます。検索条件を入力すると、表示されている列が検索され、指定した条件と一致する情報だけを表示するように更新されます。

- 次のいずれかを実行して、ライブラリに化合物を追加します。
 - Add to Compound Library** リストから適切なライブラリを選択します。
 - ライブラリの名前を **Add to Compound Library** リストフィールドに入力します。
- Next** をクリックします。
- 必要に応じて、Instrument Name ダイアログの **Instrument Name** フィールドに質量分析装置の名前を入力します。
- OK** をクリックします。

注: データベースにすべての化合物がコピーされる前にインポートをキャンセルした場合でも、すでにインポート済みの化合物はそのままデータベースに保持されます。インポート前の状態に戻されることはありません。

- 必要に応じて、競合を解決します。

13. **Finish** をクリックします。

Excel ファイルのインポート

1. Manage ペインで **Compounds** リストを展開します。
2. **All Compounds** をクリックします。
3. **Import** アイコンをクリックします。
4. **Excel file (*.xls)** Library Importer ダイアログにあるをクリックします。
5. Open ダイアログで、目的のファイルまで移動します。
6. ファイルを選択して **Open** をクリックします。
7. **Excel worksheet to import** Library Importer ダイアログにある適切なを選択します。
8. ワークシートに列ヘッダーが含まれている場合は、**Selected Excel Worksheet has headers** の横のチェックボックスを選択します。
9. 必要に応じて、Instrument Name ダイアログの **Instrument Name** フィールドに質量分析装置の名前を入力します。
10. 情報の各列に対して適切な見出しを選択します。

ヒント! **Compound:CompoundId** および **Compound:Name** は必須の選択肢です。必要のない情報については、---[not used]---を選択します。

11. **Next** をクリックします。
12. Library Importer ダイアログで以下のいずれかを行います。
 - すべての化合物をインポートするには、**All** 列の上にある **Compound** をクリックします。
 - 個別の化合物をインポートするには、該当する行内をクリックします。

ヒント! **Search** フィールドを使用すると、目的の化合物を簡単に探すことができます。検索条件を入力すると、表示されている列が検索され、指定した条件と一致する情報だけを表示するように更新されます。

13. 次のいずれかを実行して、ライブラリに化合物を追加します。
 - **Add to Compound Library** リストから適切なライブラリを選択します。
 - ライブラリの名前を **Add to Compound Library** リストフィールドに入力します。
14. **Next** をクリックします。

注: データベースにすべての化合物がコピーされる前にインポートをキャンセルした場合でも、すでにインポート済みの化合物はそのままデータベースに保持されます。インポート前の状態に戻されることはありません。

15. 必要に応じて、競合を解決します。
16. **Finish** をクリックします。

ライブラリデータベースのスナップショットのインポート

注意: データ損失の可能性。この手順を実行する前に、現在の LibraryView ソフトウェアデータベースをバックアップしてください。このパッケージの情報は、LibraryView ソフトウェアデータベースのすべての既存のデータを上書きします。インポートの開始後は、操作をキャンセルすることはできません。

1. Manage ペインで **Compounds** リストを展開します。
2. **All Compounds** をクリックします。
3. **Import** アイコンをクリックします。
4. **Overwrite Database with Library Snapshot (*.lbp)** Library Importer ダイアログにあるをクリックします。
5. Warning ダイアログで **Yes** をクリックします。
6. Open ダイアログで、目的のファイルまで移動します。
7. ファイルを選択して **Open** をクリックします。
8. **Finish** をクリックします。

サードパーティーのライブラリパッケージのインポート

1. Manage ペインで **Compounds** リストを展開します。
2. **All Compounds** をクリックします。
3. **Import** アイコンをクリックします。
4. Library Importer ダイアログにある **Third Party Library Package (*.tulp)** をクリックします。
5. Open ダイアログで、目的のファイルまで移動します。
6. ファイルを選択して **Open** をクリックします。
7. Library Importer ダイアログで以下のいずれかを行います。
 - すべての化合物をインポートするには、**All** 列の上にある **Compound** をクリックします。
 - 個別の化合物をインポートするには、該当する行内をクリックします。

ヒント! Search フィールドを使用すると、目的の化合物を簡単に探すことができます。検索条件を入力すると、表示されている列が検索され、指定した条件と一致する情報だけを表示するように更新されます。

8. 次のいずれかを実行して、ライブラリに化合物を追加します。
 - **Add to Compound Library** リストから適切なライブラリを選択します。
 - ライブラリの名前を **Add to Compound Library** リストフィールドに入力します。
9. **Next** をクリックします。

注: データベースにすべての化合物がコピーされる前にインポートをキャンセルした場合でも、すでにインポート済みの化合物はそのままデータベースに保持されます。インポート前の状態に戻されることはありません。

10. 必要に応じて、競合を解決します。
11. **Finish** をクリックします。

ライセンス済みの LibraryView ソフトウェアパッケージをインストール

注: LibraryView ソフトウェアがインストールされている必要があります。

注: LibraryView ソフトウェアライセンス。コンピュータがインターネットに接続されていない場合は、生成されたコンピュータ ID をメモしておきます。インターネットに接続されているコンピュータで、SCIEX web サイトのライセンスページにアクセスし、指示に従ってライセンスを取得します。

ライセンスのあるライブラリは、DVD から、または SCIEX の Web サイトからダウンロードした zip アプリケーションファイルからインストールできます。アプリケーションファイルには化合物名、化合物移行情報、および化合物ライブラリスペクトルなどが含まれます。

1. 管理者権限を持つ Windows ユーザーとしてコンピュータにログオンします。
2. 次のいずれかの操作を行います。
 - ライブラリを DVD からインストールする場合は、DVD ドライブに DVD を挿入してステップ 5 に進みます。
 - ライブラリをダウンロードしたファイルからインストールする場合は、ステップ 3 に進みます。
3. 必要な.zip ファイルを SCIEX の web サイトからダウンロードします。

ヒント! インストール時の問題を避けるため、ファイルはコンピュータのデスクトップ以外の場所に保存してください。

4. ダウンロードが完了したら、ダウンロードしたファイルを右クリックして **Extract All** をクリックします。
5. 展開されたファイルまたは DVD の場所を参照して、**Library.exe** をダブルクリックします。

ヒント! User Account Control ダイアログが開いた場合は、**Yes** をクリックします。

ヒント! LibraryView Setup (Not Responding) メッセージダイアログが開いた場合は、メッセージダイアログを閉じ、**Library.exe** ファイルを右クリックして **Run as administrator** オプションを選択し、インストールを再度開始します。

6. LibraryViewPackages Feature Unavailable ダイアログで **Software Activation** をクリックします。
LibraryViewPackages Activation ダイアログが開きます。
7. 表示されるフィールドにライセンスキーを正確に入力します。
ライセンスキーを入手できない場合は、sciex.com/request-support にお問い合わせください。

8. **Generate Computer ID** をクリックします。
ワークステーションに対して一意の識別子が作成されます。
9. **Copy ID to Clipboard** をクリックします。
10. 指示に従ってライセンスを取得します。
必要な情報を送信すると、指定したすべてのメールアドレスにライセンスファイルが配信されます。
11. ブラウザウィンドウを閉じます。
12. ライセンスファイルが添付されたメールを受信したら、ライセンスファイルをワークステーションのデスクトップにコピーします。
13. LibraryViewPackages Activation ダイアログで **Install License File** をクリックします。
14. Select the new license file to be installed (インストールする新しいライセンスファイルの選択) ダイアログで、ライセンスファイルにブラウズして選択します。
15. **Open** をクリックします。
Select the new license file to be installed (インストールする新しいライセンスファイルの選択) ダイアログおよび LibraryViewPackage Activation (LibraryView パッケージの有効化) ダイアログが両方とも閉じます。
16. 次のいずれかの操作を行います。
 - すべての化合物をインポートするには、**AllLibrary ImporterCompound** ダイアログの列の上にあるをクリックします。
 - Library Importer ダイアログにある適切な行の内側をクリックして各化合物をインポートします。

ヒント! Search フィールドを使用すると、目的の化合物を簡単に探すことができます。検索条件を入力すると、表示されている列が検索され、指定した条件と一致する情報だけを表示するように更新されます。

17. **Next** をクリックします。

注: データベースにすべての化合物がコピーされる前にインポートをキャンセルした場合でも、すでにインポート済みの化合物はそのままデータベースに保持されます。インポート前の状態に戻されることはありません。

18. 必要に応じて、競合を解決します。
19. **Finish** をクリックします。

化合物の不一致

化合物のグループを含むライブラリのインストールまたは個別の化合物のインストールを行う際は、ソフトウェアはパッケージにある化合物と同じ名前または式を持つ化合物がないかデータベースを検索します。そのような化合物が見つかったら、ソフトウェアはパッケージにある対応する化合物にフラグを立て、ユーザー入力の継続を待ちます。

ユーザーには以下の選択肢があります。

- 化合物情報を統合する。パッケージにある化合物の新しいスペクトル、トランジション、および保持時間が、データベースに保存されている化合物情報に追加されます。
- 化合物情報を上書きする。パッケージの化合物情報は、データベースに保存されている化合物情報に置き換えられます。
- 化合物情報を維持する。データベースにある化合物情報は保持され、パッケージの化合物情報は破棄されます。

不一致の情報は、ユーザーが正しい選択をするのに役立ちます。

化合物の不一致の表示

1. Library Importer ダイアログので、化合物の隣にある **Resolve** をクリックして、不一致の詳細を表示します。
2. 次のいずれかの操作を行います。
 - 既存の化合物情報を保持し、新しい情報を破棄するには、**Keep Original** をクリックします。
 - 既存の化合物情報を新しい情報で置き換えるには、**Use New** をクリックします。
3. 化合物ごとに手順 1 と 2 を繰り返します。
4. すべての不一致が解消されたら、**Finish** をクリックします。

化合物の統合

1. Library Importer ダイアログで、次のいずれかを実行します。
 - **Merge** をクリックして、インポートパッケージにある個々の化合物の新しいスペクトル、トランジション、および保持時間を、データベースに保存されている化合物情報に統合します。
 - **Merge All** をクリックして、インポートパッケージにある化合物すべての新しいスペクトル、トランジション、および保持時間を、データベースに保存されているすべての化合物情報に統合します。
2. すべての不一致が解消されたら、**Finish** をクリックします。

化合物の上書き

1. Library Importer ダイアログで以下のいずれかを行います。
 - **Overwrite All** をクリックして、インポートパッケージからの該当する化合物情報を含むデータベースに保存されているすべての化合物情報を上書きします。
 - 目的の化合物の横にある **Resolve** をクリックしてから **Use New** をクリックしてインポートパッケージからの該当する化合物情報を含むデータベースに保存されているすべての化合物情報を上書きします。
2. すべての不一致が解消されたら、**Finish** をクリックします。

元の化合物の維持

1. Library Importer ダイアログで以下のいずれかを行います。

- **Keep All Original** をクリックしてデータベースに保存されているすべての化合物情報を維持し、インポートパッケージからの化合物情報を破棄します。
 - 目的の化合物の横にある **Keep Original** をクリックしてデータベースに保存されている個々の化合物情報を維持し、インポートパッケージからの化合物情報を破棄します。
2. すべての不一致が解消されたら、**Finish** をクリックします。

化合物の追加

注: 化合物は、**Edit Library** オプションを使用してライブラリに追加することもできます。

1. Manage ペインで **Compounds** リストを展開します。
2. **All Compounds** をクリックします。
3. **Add** アイコンをクリックします。

注: 化合物名は必須です。その他の情報は、すべてオプションです。

4. Details タブの各フィールドに、必要な情報を入力します。
5. **Save** をクリックします。

化合物への質量スペクトルの追加

1. Manage ペインで **Compounds** リストを展開します。
2. **All Compounds** をクリックします。
3. 目的の化合物をダブルクリックします。
4. **MS Spectra** タブをクリックします。
5. **Edit Mode** アイコンをクリックします。
6. **Add Spectra** アイコンをクリックします。
7. **Open *.wiff file** Add Mass Spectrum from *.wiff file to Compound ダイアログで、をクリックします。
8. Open ダイアログにある適切な.wiff または.wiff2 ファイルを閲覧してから選択します。
9. **Open** をクリックします。
10. 次のいずれかを実行して、ライブラリに化合物を追加します。
 - IDA データの場合はサンプルを展開し、左側のナビゲーションペインで目的の化合物を選択します。
 - EMS、MRM、ループデータの場合は、目的のサンプルを選択します。
11. 次のいずれかを実行して、化合物にスペクトルを追加します。
 - IDA データの場合は、Acquired Spectrum ペインで **Add Spectrum** をクリックします。
 - EMS、MRM、ループデータの場合は、TIC をダブルクリックし、Acquired Spectrum ペインで **Add Spectrum** をクリックします。

12. 追加するスペクトルごとにステップ 7～11 を繰り返します。
13. **Save** をクリックします。
14. MS Spectra タブで **Save** をクリックします。

操作上の使用説明—ユーザーワークフロー

4

アナリスト

タスク	次を参照
メイン画面およびステータスパネルを表示して、システムの状態を確認します。	ホームページについて および ステータスパネルについて 。
Microsoft Excel スプレッドシート、LIMS、または手動のいずれかを使用してバッチを作成して送信します。LC および MS メソッドは、Analysts によってバッチを作成して送信する前に、メソッドディベロッパーがロックする必要があります。	Batch ワークスペース 。
キュー内のサンプルの確認および管理。	Queue ワークスペース 。
Results Table のデータを処理とレビューをします。	Analytics ワークスペース 。
データの探索。	Explorer ワークスペース 。

メソッドディベロッパー

タスク	次を参照
システムの構成。	<ul style="list-style-type: none">• 操作説明書—デバイスの設定。• プロジェクトのデフォルト処理パラメータの定義。• Results Table のレビュー。
質量分析装置のチューニング。	MS Tune ワークスペース 。
液体クロマトグラフィ(LC)デバイスの構成。	LC デバイスのドキュメント 。
LC メソッドの作成。	LC メソッドの作成 。
質量分析装置(MS)メソッドの作成。	MS Method ワークスペース 。
処理メソッドの開発。	処理メソッドの作成 。

管理者

タスク	次を参照
Windows のファイルアクセス権の設定。	ラボ管理者ガイド 。
LIMS の構成。	ラボ情報管理システム (LIMS) の設定の選択 。
ソフトウェアへのユーザーの追加および役割の割り当て。	ラボ管理者ガイド 。
ログをアーカイブ。	ログのアーカイブ 。

レビューア

タスク	次を参照
処理された結果の確認。	Analytics ワークスペース 。
データの探索。	Explorer ワークスペース 。
ログの確認。	ログの表示 。

次のワークスペースを使用して、取得タスクを実行します。

- [MS Method ワークスペース](#): MS メソッドの作成と管理
- [LC Method ワークスペース](#): LC メソッドを作成および管理
- [Batch ワークスペース](#): バッチを作成してキューに送信する
- [Queue ワークスペース](#): キュー内のサンプルを管理する

注: パフォーマンスの問題やデータの破損を回避するために、サンプルの取得中は、最適化やディスククリーンアップ、ウイルススキャン、Windows Update などのコンピューターのメンテナンス手順を実行しないでください。

MS Method ワークスペース

このワークスペースを使用して、質量分析装置 (MS) メソッドを作成および管理。

MS Method のワークスペースでは、複数のメソッドを開くことができます。**Views** メニューを使用すると、ユーザーはメソッド ウィンドウの配置を、タブ付きビュー、垂直タイル ビュー、水平タイル ビュー、またはフローティング ビューに変更できます。フローティング ビューでは、ウィンドウのサイズ変更、最大化、最小化、SCIEX OS ウィンドウの外への移動、別のモニターへの移動が可能です。

メソッドウィンドウのタイトルバーには、メソッド名とプロジェクト名が含まれています。タイルおよびフローティング表示では、アクティブなメソッドのタイトルバーは青色で、他のメソッドのタイトルバーは灰色です。タブ付き表示では、有効なメソッドのタブは白く、他のメソッドのタブは青く表示されます。

このワークスペースにある機能へのアクセスは、割り当てられた役割ごとに管理されています。次のドキュメントを参照: 『[ラボ管理者ガイド](#)』。

MS メソッドの作成

必要に応じて、次を参照してください。

- [MS メソッドの実験](#)
 - [MS メソッドについて](#)
 - [MS メソッドの動的衝突エネルギーを計算する](#)
1. **MS Methods** ワークスペースを開きます。
 2. **New** をクリックし、メソッドをクリックします。
 3. (オプション)**Options** をクリックし、必要に応じて以下の項目を選択します。

表 5-1 : オプションメニュー

パラメータ	説明
Apply experiment scheduling	(実験スケジューリングの適用) 実験の実行時に保持時間ウィンドウを適用する場合に選択します。ループ実験の場合、いずれかの実行開始時間が 0 で、いずれかの実行停止時間がメソッドの持続時間と等しくなければなりません。
Apply ionization scheduling	(イオン化スケジューリングの適用) Ionization start time と Ionization stop time を表示する場合に選択します。
Show EAD parameters	(EAD パラメータの表示) (ZenoTOF 7600 システム) EAD パラメータを表示する場合に選択します。EAD フラグメンテーションモードが使用されており、このオプションが選択されている場合、次のフィールドが有効になります。 <ul style="list-style-type: none"> • Fragmentation mode: EAD • Electron KE • ETC • Electron beam current • Load time • EAD RF • Reaction time
Apply intact protein mode	(インタクトプロテインモードを適用) (X500 QTOF システム) インタクトプロテインモードフィールドを表示する場合に選択します。
Ramp	(ランプ)パラメータをランプする場合に選択します。Ramp Compound Parameters ダイアログが開きます。 <p>ランプは、イオンに対してパラメータを最適化する目的で使用できます。</p> <p>パラメータのランプでは、パラメータの値を増減させながら実験が自動的に実行されます。ランプできるパラメータは 1 回に 1 つだけで、ステップは同じ向きでなければなりません(開始値または停止値の範囲内で増加または減少)。ユーザーは、開始および停止電圧、およびその間のステップのサイズを設定できます</p> <p>TOF MS メソッドでは、DP パラメータをランプできます。TOF MSMS メソッドでは、DP または CE のいずれかのパラメータをランプできます。ランプは、Apply ramping to the compound parameter を選択することで有効にできます。</p>

表 5-1 : オプションメニュー (続き)

パラメータ	説明
Calibrate	(キャリブレーション) 取得中にスペクトルと質量分析装置をキャリブレーションする場合に選択します。Calibrate ダイアログが開きます。このダイアログにより、キャリブレーション用の適切なイオン参照表を選択できます。 キャリブレーション機能は通常、キャリブレーション供給システム (CDS) で使用されます。キャリブレーション結果を表示するには、Queue ワークスペースに移動して、キャリブレーション実行の取得状態アイコンをダブルクリックします。キャリブレーションには 1.25 分かかります。
Dynamic collision energy	(動的衝突エネルギー) クリックして、Dynamic Collision Energy ダイアログを開きます。
Dynamic ETC	(ZenoTOF 7600 システム) (動的 ETC) クリックして Dynamic ETC ダイアログを開きます。

4. 必要に応じて、フィールドに値を入力します。パラメータの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
5. (オプション) **Add Experiment** をクリックします。

ヒント! Experiment フィールドの隣にあるリストを使用して、実験を変更または削除します。

6. 次のいずれかの操作を行います。
 - **Save > Lock Method** をクリックして、MS メソッドを保存およびロックします。
 - **Save > Save** をクリックします。
 - **Save > Save as** をクリックします。

Guided MRM HR を使用した MRM HR メソッドの作成

開始および停止電圧を詳細に制御する必要がある場合は、**Guided** オプションを使用します。

1. MS Method ワークスペースを開きます。
2. **New > Guided MRM HR** をクリックします。Preparation ページが開きます。
3. モードを選択します:
 - **Guided:** 開始および停止電圧を詳細に制御する場合。
 - **Automatic:** 電圧の開始値と停止値をソフトウェアによる自動選択にする場合。
4. **Polarity** を選択します。
5. 既知のトランジションを使用するには、以下の手順に従います。
 - a. **Use known transitions** をクリックします。
 - b. **Compound IDPrecursor Ion (Da)Fragment to Use (Da)**を入力します。

6. 未知のトランジションを使用するには、以下の手順に従います。
 - a. **Find transitions automatically** をクリックします。
 - b. 各化合物について、表内の **Compound Name**、**Charge**、**Precursor Ion** および **Number of Fragments to Use** を指定します。
7. **Continue** をクリックします。
Initial Conditions ページが開きます。
8. 必要に応じて、**Source and Gas Parameters** を調整します。
9. 処理が自動的に開始しない場合には、**Start** をクリックします。
10. Optimize DP ページで、**Ramp** をクリックします。
(ソフトウェアは DP パラメータを傾斜させ、各トランジションで最も強い DP 値を見つけます。)
11. (自動モード)各プロダクトイオンに対して最適な DP と最適な CE が特定され、Review Report ページが表示されるまで待ちます。次に、ステップ 13 に進んでください。
12. Optimize DP ページで、**Ramp** をクリックします。
(ソフトウェアは DP パラメータを傾斜させ、各トランジションで最も強い DP 値を見つけます。)
13. (オプション)下記の手順でレポートを保存します。
 - a. Report(レポート)ページで、**Save report as** をクリックします。
 - b. レポートを保存するフォルダに移動し、**File name** を入力してから **Save** をクリックします。
14. **Continue** をクリックし、MS Method ワークスペースで最適化されたメソッドを開きます。
15. 必要となるメソッドの持続時間を **Method Duration** フィールドに入力します。
16. 以下のいずれかを行って、MS メソッドを保存します。
 - **Save > Save** をクリックすると、同じプロジェクトに同じ名前でもソッドが保存されます。
 - 新しい名前で、または別のプロジェクトにメソッドを保存する場合は、**Save > Save As** をクリックします。
 - ルーチン分析の準備ができている場合は、**Save > Lock Method** をクリックしてメソッドをロックします。

注: メソッドのロックは、許可されていないユーザーによる編集を防ぐために使います。ロックされたメソッドを編集できるのは、**Lock/Unlock methods** 権限のあるユーザーだけです。他のユーザーは、送信だけを行えます。

Save As MS Method ダイアログが開きます。

17. **File Name** フィールドに名前を入力します。
18. **Save** をクリックします。

MS メソッドの実験

MS Method ワークスペースを使用して、MS メソッドを作成または編集します。MS メソッドには、1 つまたは複数の実験を含めることができます。デフォルトでは、新規 TOF MS メソッドには 1 つの実験が含まれています。

取扱説明書—取得

使用できる MS 実験の種類は、以下のとおりです。

- 3 種類の基本的なメソッドの実験: TOF MS、TOF MSMS、Q1
- 3 種類の複合的なメソッドの実験: IDA、SWATH、MRM^{HR}

さらに、ステップごとの手順を使用して、MRM^{HR} 実験を容易に作成できます。手順が完了したら、パラメータを使用して MRM^{HR} メソッドに入力します。

表 5-2 : 基本的なメソッドの実験

種類	定義
TOF MS	TOF 領域を使用した質量分析。イオンの m/z 値は、TOF 領域の飛行時間に基づいて保持されます。
TOF MSMS	四重極質量フィルターを使用して、プレカーサーイオンが選択されます。フラグメントイオンの m/z 値は、TOF MS 領域の飛行時間に基づいて返されます。この実験は、化合物の構造を特定する目的で使用します。
Q1	四重極質量フィルターを使用したデータ収集。イオン強度はスキャン範囲での質量に対して返されます。

表 5-3 : 複合的なメソッドの実験

種類	定義
IDA	IDA(情報依存採取)実験では、データを取得しながら分析を行い、分析結果に応じて実験条件を変更します。依存スキャンの実行対象となる質量は、結果の分析によって決定されます。ユーザーは、IDA 実験がアクティブになる条件と、アクティブになった IDA 実験のパラメータを全体的に制御できます。
SWATH	SWATH 測定では、LC タイムテーブル上の広範な質量範囲にわたるすべてのプレカーサーイオンの MS/MS 分析が可能です。Q1 四重極は、従来のプロダクトイオン測定で使用されていたウィンドウよりも幅の広い選択ウィンドウ(一般的には 10 Da~50 Da)に設定されています。複数の連続した選択ウィンドウをステップごとに実行することで、広範な質量範囲を迅速にカバーします。結果として生成される質量スペクトルは、対応する Q1 選択ウィンドウを通過したすべてのプレカーサーイオンのフラグメントの複合体です。この手法では、サンプル中のすべての種の非ターゲット MS/MS 分析が可能です。
MRM HR	MRM ^{HR} 実験は、既知の質量と保持時間を持つ化合物の高品質の MS/MS データの測定に役立ちます。この測定は、TOF MSMS スペクトルから狭い幅(0.02 Da)のフラグメントの質量を抽出するために使用することもできます。狭い幅の抽出により、選択性が高まります。
Guided MRM HR	MRM ^{HR} メソッドを容易に作成できるステップごとの手順。手順の各ステップが完了したら、パラメータを使用して MRM ^{HR} メソッドの種類に入力します。

MS メソッドについて

MS メソッドは、以下の各要素で構成されています。

- **Source and Gas** のパラメータなど、メソッド全体に関連するパラメータ。

- 1 つまたは複数の実験。
 - 各メソッドには少なくとも 1 つの実験が含まれていなければなりません。
 - どのメソッドにも、複数の実験を含めることができます。これはループ実験と呼ばれます。
 - TOF MS 実験および TOF MSMS 実験は、メソッド内でループさせることができます (最大 10 件の実験)。Q1 実験はループできません。
 - IDA、SWATH、MRM^{HR} の各実験は、メソッド内でループさせることができます (最大 2 件の実験)。

注: 実験の特定の組み合わせのみを使用できます。たとえば、IDA + IDA、IDA + MRM^{HR}、IDA + SWATH、SWATH + MRM^{HR} などです。

- 実験ごとに固有の高度な設定が用意されています。
- 各実験内の個別のスキャン

表 5-4 : MS Methods ワークスペースの機能

実行する操作	実行する作業
複数の実験を持つメソッド、つまりループ実験を作成する。	Add Experiment をクリックし、実験の種類をクリックします。
既存の MS メソッド内で実験を切り替える。	Experiment の隣にあるリストをクリックし、実験の種類をクリックします。
TOF MSMS 実験を IDA 実験に切り替える。	Experiment の隣にあるリストをクリックし、 Add IDA criteria をクリックします。
MRM ^{HR} 実験で、メソッドから TOF MS を削除する。	Experiment の隣にあるリストをクリックし、 Delete TOF MS (of MRM HR) をクリックします。。
	注: ループ実験だけに適用されます。
メソッド内に複数の実験が存在する場合に実験を削除する。	Experiment の隣にあるリストをクリックし、 Delete experiment. をクリックします。
以下のメソッドの構造を表示する: <ul style="list-style-type: none"> • メソッドの内の実験数。 • メソッドの内の各実験のスケジュール期間。 • 複数の実験に対する TOF MSMS スキャンの回数。 	ワークスペースの左側にある Method Overview パネルを展開したり折り畳んだりします。

MS メソッドの動的衝突エネルギーを計算する

1. MS Method ワークスペースを開きます。
2. IDA 基準または SWATH 取得基準。

3. **Options > Dynamic collision energy** をクリックします。
4. 必要に応じてフィールドの情報を修正します。
5. 次のいずれかの操作を行います。
 - 以前に保存したデフォルト値を使用して動的衝突エネルギーを計算するには、**Load Default Settings** をクリックします。
 - 新しいメソッドで動的衝突エネルギーを計算する場合に使用するデフォルト値として現在の値を保存するには、**Save as Default Settings** をクリックします。
 - 現在の値を現在のメソッドに適用して動的衝突エネルギーを計算するには、**Apply** をクリックします。
 - ダイアログを閉じて変更内容を破棄するには、**Cancel** をクリックします。

MS メソッドを開く

この手順を使用して、SCIEX OS で作成された MS メソッドを開きます。

1. MS Method ワークスペースを開きます。
2. **Open** をクリックします。
Open MS Method ダイアログが開きます。現在のプロジェクトの MS メソッドのリストが含まれています。
3. (オプション)開くメソッドが現在のプロジェクトにない場合は、開くメソッドを含むプロジェクトを選択します。
4. MS メソッドを選択して開き、**Open** をクリックします。

ヒント! 複数の方法を選択するには、**Shift** または **Ctrl** キーを使用します。

MS メソッドを手動で実行

実施前提手順

- MS Method ワークスペースで、MS メソッドを作成するか、既存のメソッドを開きます。次のセクションを参照: [MS Method ワークスペース](#) または [MS メソッドを開く](#)。

この手順を使用して、MS Method ワークスペースで有効なメソッドを実行します。

1. Data Acquisition パネルの **Start** ボタンの下矢印をクリックし、次のいずれかをクリックします。
 - **Start:** このオプションは、LC なしで MS メソッドを実行します。
 - **Start with LC**次のセクションを参照: [データ取得パネル](#)。

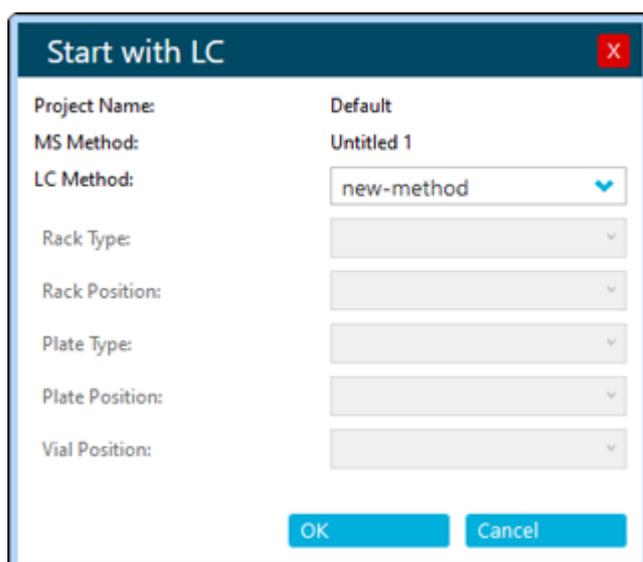


警告! 火災の危険。イオン源に 3 mL/分以上の溶剤を誘導しないでください。LC コンポーネントは最大流量 5 mL/分を供給できますが、3 mL/分以上の溶剤を誘導すると、溶剤がイオン源に蓄積する可能性があります。ティーで流量を分岐して、イオン源に供給される最大流量が 3 mL/分を上回らないようにできます。

ユーザーが **Start with LC** をクリックすると、Start with LC ダイアログが開きます。このダイアログのフィールドについては、次のドキュメントを参照: 『ヘルプシステム』。

注: LC システムを有効にし、LC メソッドを作成して保存しておく必要があります。

図 5-1 : Start with LC ダイアログ

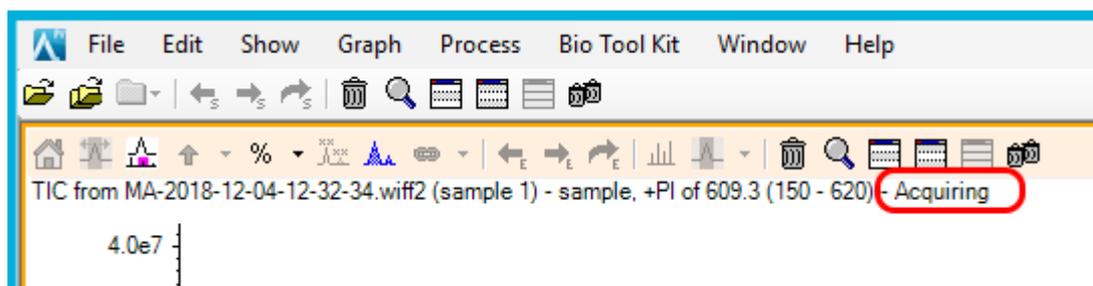


- (オプション) Explorer ワークスペースにデータを表示するには、Data Acquisition パネルの

Open data exploration to view real-time data () をクリックします。

リアルタイムの取得は、サンプルタイトルの **Acquiring**、**Finished**、または **Aborted** という単語で Explore パネルに示されます。

図 5-2 : リアルタイム取得—取得



- (オプション) 必要に応じて、MS パラメータを最適化します。パラメータの説明については、次のドキュメントを参照: 『ヘルプシステム』。

4. **StopData Acquisition** パネルで をクリックします。
5. (オプション)データを保存するには、次の手順に従います。
 - a. **Save** をクリックすると、データを保存できます。
Save Data ダイアログが開きます。
 - b. (オプション)必要に応じて、データを保存するプロジェクトとサブフォルダを選択します。
 - c. **File Name** フィールドに名前を入力します。
 - d. **Save** をクリックします。
6. 以下のいずれかを行って、MS メソッドを保存します。
 - **Save > Save** をクリックすると、同じプロジェクトに同じ名前でメソッドが保存されます。
 - 新しい名前で、または別のプロジェクトにメソッドを保存する場合は、**Save > Save As** をクリックします。
 - ルーチン分析の準備ができている場合は、**Save > Lock Method** をクリックしてメソッドをロックします。

注: メソッドのロックは、許可されていないユーザーによる編集を防ぐために使います。ロックされたメソッドを編集できるのは、**Lock/Unlock methods** 権限のあるユーザーだけです。他のユーザーは、送信だけを行えます。

Save As MS Method ダイアログが開きます。

7. **File Name** フィールドに名前を入力します。
8. **Save** をクリックします。

LC Method ワークスペース

このワークスペースを使用して、LC メソッドを作成および管理。

LC Method のワークスペースでは、複数のメソッドを開くことができます。**Views** メニューを使用すると、ユーザーはメソッド ウィンドウの配置を、タブ付きビュー、垂直タイルビュー、水平タイルビュー、またはフローティングビューに変更できます。フローティングビューでは、ウィンドウのサイズ変更、最大化、最小化、SCIEX OS ウィンドウの外への移動、別のモニターへの移動が可能です。

メソッドウィンドウのタイトルバーには、メソッド名とプロジェクト名が含まれています。タイルおよびフローティング表示では、アクティブなメソッドのタイトルバーは青色で、他のメソッドのタイトルバーは灰色です。タブ付き表示では、有効なメソッドのタブは白く、他のメソッドのタブは青く表示されます。

このワークスペースにある機能へのアクセスは、割り当てられた役割ごとに管理されています。次のドキュメントを参照: 『ラボ管理者ガイド』。

LC メソッドの作成

LC デバイスに付属している資料等を参照してください。

1. LC Method ワークスペースを開きます。
2. **New** をクリックします。

3. 必要に応じて、左側のパネルにあるデバイスをクリックし、次にフィールドを編集します。
4. 次のうちいずれかのコマンドをクリックして、LC メソッドを保存して、必要に応じてロックします。
 - **Save**: LC メソッドを保存します。
 - **Save > Lock Method**: LC メソッドを保存してロックします。

Save As LC Method ダイアログが開きます。
5. **File Name** フィールドに LC メソッドの名前を入力し、**Save** をクリックします。

Batch ワークスペース

Batch ワークスペースには、取得して(オプションで)処理するサンプルのセットに関する情報が含まれています。バッチは、サンプルを取得して処理する順序をソフトウェアに指示します。

次のドキュメントを参照: このワークスペースにある機能へのアクセスは、割り当てられた役割ごとに管理されています。『ラボ管理者ガイド』。

注: 選択したオートサンプラーについて、ラックタイプ、ラック位置、プレートタイプ、プレート位置、およびバイアル位置はすべて相互に依存しており、特定の値だけが有効になります。

表 5-5 : Batch ワークスペース列

列名	定義	フィールドの値の要件
Sample and method information (サンプルメソッド情報) 		
Sample Name	(サンプル名): サンプルの名前。	252 文字未満。
Sample ID	(サンプル ID) サンプルのカスタム番号などの識別子。	252 文字未満。 Sample ID フィールドに次の無効な文字を含めることはできません: \ / : ; * ? " < > =
Barcode ID	(バーコード ID) サンプル固有の ID。	250 文字未満。
MS Method	(MS メソッド) メソッドの名前。	MS メソッドは、現在のプロジェクトに存在している必要があります。このフィールドでは、大文字と小文字が区別されません。
LC Method	(LC メソッド) 液体クロマトグラフィメソッドの名前。	LC メソッドは、現在のプロジェクトに存在している必要があります。このフィールドでは、大文字と小文字が区別されません。
Rack Type	(ラックの種類) オートサンプラーのラックの種類。	LC メソッドで指定したオートサンプラーに対して有効な選択肢でなければなりません。
Rack Position	(ラック位置) トレイでのラックの位置。	数値。

表 5-5 : Batch ワークスペース列 (続き)

列名	定義	フィールドの値の要件
Plate Type	<p>(プレート種類)オートサンプラーのウェルプレートの種類。</p> <hr/> <p>注: Rack Type がバイアルを表す場合、この列は使用できません。</p>	LC メソッドで指定したオートサンプラーに対して有効な選択肢でなければなりません。
Plate Position	(プレート位置)ラックでのプレートの位置。	事前定義されたオートサンプラーのプレート位置のいずれかと一致する必要があります。
Vial Position	(バイアル位置) (LC メソッド)ラック内またはプレート上のバイアルの位置。	数値。最大値がラックのバイアル数以下でなければなりません。
Injection Volume (μL)	<p>((注入量(μL))注入するサンプルの量。</p> <hr/> <p>注:</p> <p>LC メソッドの場合のみ、注入量は LC メソッドから取得されます。Batch ワークスペースまたはインポート済みバッチファイルにこの注入量を上書きできます。バッチを送信する場合、注入量が LC デバイスの適合範囲内にあるか検証します。</p> <p>LC メソッドで指定されていた注入量に戻すには、このフィールドの内容を削除してから LC Method フィールドで再度 LC メソッドを選択します。</p>	数値。
Sample Type	(サンプルの種類)サンプルの種類。	サンプルの種類が、事前定義されているいずれかのサンプルの種類と一致していることを確認してください。一致していない種類は、自動的に Unknown に置き換えられます。

表 5-5 : Batch ワークスペース列 (続き)

列名	定義	フィールドの値の要件
Dilution Factor	(希釈係数)個別のサンプルの希釈係数。	SCIEX が開発したメソッドの場合、値は 1.000000 でなければなりません。 ゼロより大きく、小数点以下 6 桁の値でなければなりません。フィールドの値は 1.000000 です。フィールドを空白にしないでください。
Data File	(データファイル)取得されたデータの保存先となるファイル名。ファイルが保存されるサブフォルダへのフルパスを含めます。	252 文字未満でなければなりません。合計文字数には、データサブフォルダパスの文字数も含まれません。データファイルに次の無効な文字を含めることはできません: \ / : ; * ? " < > = ヒント! 矢印をクリックして、リストからサブフォルダを選択するか、新しいサブフォルダの名前を入力します。サブフォルダとファイル名の間にはバックスラッシュ(\)を必ず含めてください。サブフォルダが存在しない場合は、バッチの実行時に作成されます。
Processing Method	(処理メソッド)メソッドの名前。既存の Results File を使用する場合は、このフィールドを空白のままにします。既存の Results File を選択すると、値 *Embedded Method* がこのフィールドに自動的に表示されます。 注: 処理メソッドは、サンプルに指定された MS メソッドと互換性がある必要があります。	プロジェクトの処理メソッドのリストから処理メソッドを選択します。

表 5-5 : Batch ワークスペース列 (続き)

列名	定義	フィールドの値の要件
Results File	<p>(結果ファイル) 処理結果が保存されるファイルの名前。有効な Results File が指定されている場合、サンプルデータは取得が完了後に自動的に処理されます。ファイル名が無効な場合、バッチ送信プロセスを完了できません。</p> <p>注: 既存の Results File が選択されている場合、選択された結果ファイルの埋め込みメソッドが処理に使用され、Processing Method セルのテキストが *Embedded Method* に置き換えられます。</p>	<p>ファイル名に次の無効な文字を含めることはできません: \ / ; * ? " < > =</p> <p>ファイル名とサブフォルダを含むファイルパスは、252 文字未満にする必要があります。</p> <p>ヒント! 矢印をクリックして、リストから既存の結果ファイルを選択します。ファイルを作成するには、ファイル名を入力します。提出されたバッチの最初のサンプルが処理されると、ファイルが作成されます。</p>
Comment	(コメント) テキスト	50 文字未満でなければなりません。 Comment フィールドに次の無効な文字を含めることはできません: \ / ; * ? " < > =
Custom columns	(カスタム列) (オプション) テキスト、整数、または実数形式のユーザー定義列。	要件はフォーマットによって異なります。
Component Concentrations (コンポーネント濃度) 		
Component	<p>(コンポーネント名) MS メソッド、処理メソッド、または Results Table で定義されたコンポーネント名。</p> <p>バッチには最大で 4,000 個のコンポーネント列を含めることができます。</p>	<p>コンポーネント名は、MS メソッド、MRM スキャンの場合は処理メソッド、または Results Table から取得されます。名前はメソッドの作成の間に検証されます。</p> <p>コンポーネントは、手動でテーブルに追加することもできます。次のセクションを参照: コンポーネント濃度を追加。</p> <p>注: インポートファイルにバッチグリッドの列のどれにも一致しないデータ列が含まれている場合、その列は化合物またはコンポーネント名列として扱われます。濃度列が追加され、データ列の値が入力されます。</p>

表 5-5 : Batch ワークスペース列 (続き)

列名	定義	フィールドの値の要件
Component concentration	標準および QC サンプルの種類に対する分析試料または内部標準の濃度。表には、各サンプルのカラムが含まれています。列名にはサンプル名を使用しています。	ゼロ以上の数値。

バッチを管理

注: 状態パネルで正しいプロジェクト名が選択されていることを確認してください。

Batch ワークスペースで、次の機能を使用してバッチを管理します。

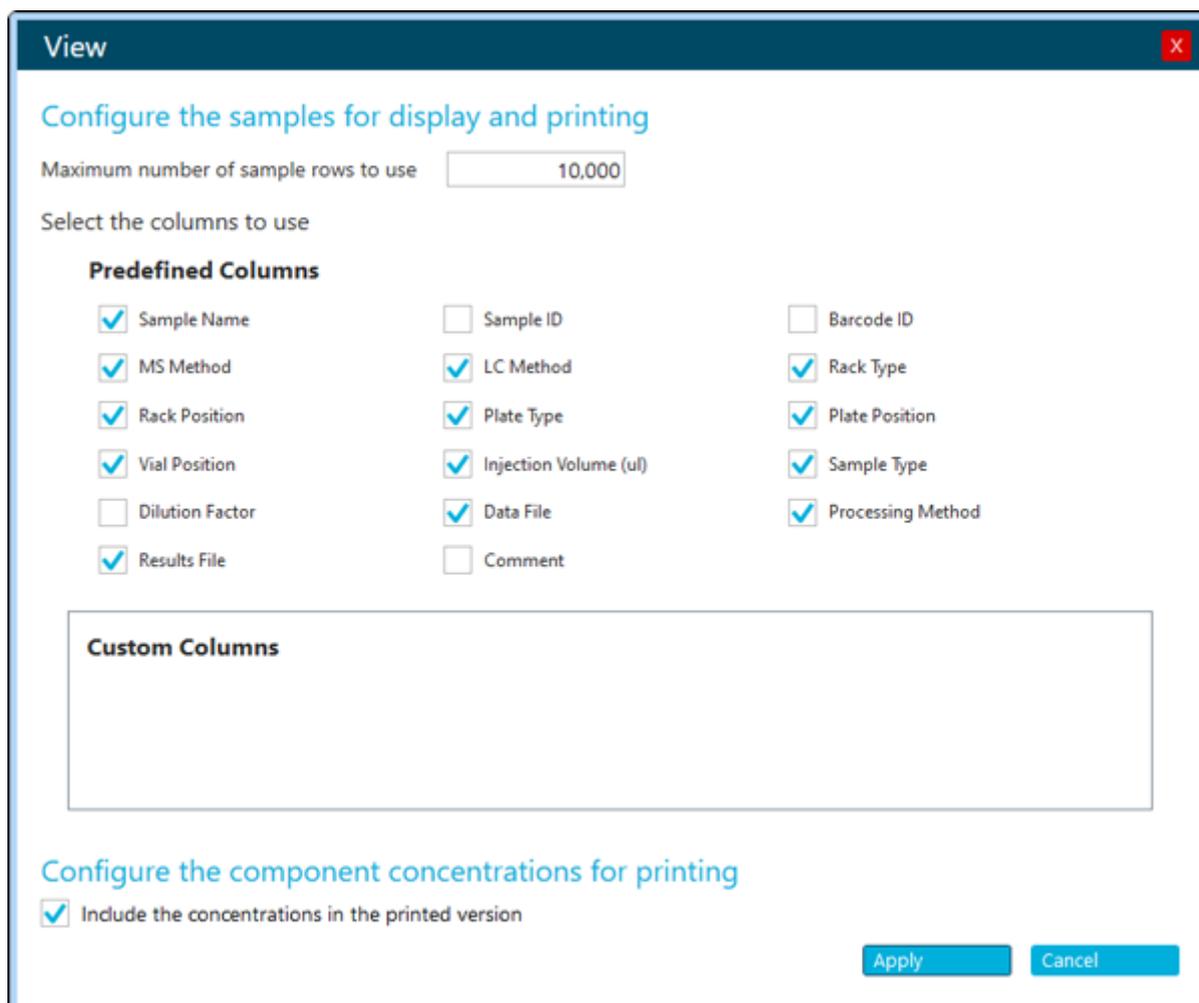
表 5-6 : Batch ワークスペースの機能

実行する操作	実行する作業
列の表示または非表示	View をクリックします。次のセクションを参照: 列の表示または非表示 。
行を切り取る	Manage Samples > Cut をクリックします。
行をコピーする	Manage Samples > Copy をクリックします。
行を貼り付ける	Manage Samples > Paste をクリックします。
行を挿入する	Manage Samples > Insert sample をクリックします。
行を削除する	Manage Samples > Delete sample をクリックします。
列を選択	View をクリックします。次のセクションを参照: 列の表示または非表示 。
プロジェクトにサブフォルダを追加	Manage Samples > Add data sub-folders をクリックします。 『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
バッチを印刷	Print をクリックします。
バッチを現在のプロジェクトに保存	Save > Save または Save > Save As をクリックします。
バッチを txt または csv ファイルにエクスポート	Save > Export をクリックします。

列の表示または非表示

1. Batch ワークスペースを開きます。
2. **View** をクリックします。
3. 必要に応じて、View ダイアログの列チェックボックスを選択またはクリアします。列の説明については、次を参照: [表 5-5](#)。

図 5-3 : View ダイアログ



4. **OK** をクリックします。

カスタム列の追加

この手順を使用して、バッチに列を追加し、乾燥重量などのサンプルに関する追加情報を保存して、数式や計算列などの処理で使用できるようにします。

1. Batch ワークスペースを開きます。
2. バッチグリッドを右クリックして、**Add Custom Column** をクリックします。
Add Custom Column ダイアログが開きます。
3. **Column name** フィールドに、列の名前を入力します。
名前は一意でなければなりません。事前定義された列の名前と同じにすることはできません。
4. **Column type** フィールドでは、以下のいずれかのタイプを選択します。
 - **Integer**: 列には整数が含まれています。小数点以下の数値は四捨五入されます。
 - **Real**: 列には、小数点以下 6 桁までの実数が入ります。

- **Text**: 列には、最大 128 文字のテキストが含まれます。
5. **Add** をクリックします。
Batch ワークスペースの右側に新しい列が追加されます。

カスタム列の名前を変更

注: **Column type** は変更できません。

1. Batch ワークスペースを開きます。
2. 変更する列を右クリックし、**Edit Custom Column** をクリックします。
Edit Custom Column ダイアログが開きます。
3. **Name** フィールドに、列の名前を入力新規ます。
名前は一意でなければなりません。事前定義された列の名前と同じにすることはできません。
4. **Apply** をクリックします。

カスタム列を削除

1. Batch ワークスペースを開きます。
2. バッチグリッドを右クリックして、**Delete Custom Column** をクリックします。
Delete Custom Column ダイアログが開きます。
3. 削除する列の名前の横にあるチェックボックスを選択します。
4. **Delete** をクリックします。

ファイルからのバッチのインポート

実施前提手順

- バッチファイルを作成します。ファイルに含まれるフィールドの説明については、次を参照: [表 5-5](#)。

注: インポートする Microsoft Excel ファイルでは、事前定義された列が最初で、次にカスタム列が続く必要があります。事前定義された列の列ヘッダーは、SCIEX OS の列名と一致する必要があります。事前定義された列の列ヘッダーが正しくない場合、情報はインポートされません。csv や xsl ファイルでは、ピリオドのみが小数点以下の区切り文字としてサポートされています。

注: バッチファイルを閉じてからインポートしてください。バッチファイルを Microsoft Excel で開いている場合は、インポートできません。

- (Watson LIMS からのインポートのオプション) **LC Method** フィールドに自動的にデータを入力するには、LC メソッドの名前が MS メソッドの名前と同じであることを確認してください。

注: Watson LIMS には LC メソッドフィールドがありません。LC メソッドの名前と MS メソッドの名前が異なる場合は、LC メソッドのカラムを手動で入力する必要があります。

取扱説明書—取得

バッチの内容は、サンプルを提出する前に必ずレビューしてください。

ヒント! 切り取り、コピー、貼り付け、行の追加、および行の削除の各機能にアクセスするには、**Manage Samples** をクリックします。

1. Batch ワークスペースを開きます。
2. (オプション)**View** をクリックして、Batch ワークスペースに表示される列を選択します。
3. **Open > Import from file** をクリックします。
Batch Import ダイアログが開きます。
4. **Browse** をクリックします。
5. 必要なファイルに移動します。
6. **Open** をクリックします。
7. (オプション)必要に応じて、**Append to current batch** チェックボックスを選択またはクリアします。

注: **Append to current batch** オプションを選択していない場合、グリッド内の既存のデータはすべて上書きされます。

8. **Import** をクリックします。
9. (オプション)サンプル位置を選択または確認する基準としてプレートレイアウトを使用するには、**Plate Layout** をクリックします。
プレートレイアウトにより、未割り当てサンプルのウェルおよびバイアルの位置が自動的に提供されます。
10. バッチを提出する前に、カラムオープンの温度に到達していることを確認してください。
11. バッチを保存:
 - a. **Save As** をクリックします。
Save As Batch ダイアログが開きます。
 - b. **File Name** を入力して、**Save** をクリックします。
12. バッチを送信します。次のセクションを参照:[バッチを送信](#)。

LIMS からのバッチのインポート

実施前提手順

- Configuration ワークスペースで LIMS を構成します。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

注: Watson LIMS からバッチをインポートするには、次のセクションを参照:[ファイルからのバッチのインポート](#)。

1. Batch ワークスペースを開きます。
2. (オプション)**View** をクリックして、Batch ワークスペースに表示される列を選択します。

-
3. **Open > Import from LIMS** をクリックします。
Import a Batch File ダイアログが開きます。
 4. ファイルの場所、またはファイル名を入力します。
 5. **Batch Identifier** フィールドにバッチ識別子を入力します。
 6. (オプション)必要に応じて、**Append to current batch** チェックボックスを選択またはクリアします。

注: **Append to current batch** オプションを選択していない場合、グリッド内の既存のデータはすべて上書きされます。

7. **Import** をクリックします。
8. (オプション)サンプル位置を選択または確認する基準としてプレートレイアウトを使用するには、**Plate Layout** をクリックします。
プレートレイアウトにより、未割り当てサンプルのウェルおよびバイアルの位置が自動的に提供されます。
9. (オプション)キャリブレーションサンプルをバッチに含めるには、以下の操作を実行します。
 - a. Batch-Automatic Calibration Editor ダイアログを開くには、**Auto-Calibrate** をクリックします。
 - b. 指定した頻度で自動的に適用するイオン参照およびキャリブレーション供給設定を選択します。
 - c. **OK** をクリックします。
 - d. **Auto-Calibrate** ボタンの左側にあるチェックボックスを選択します。
10. バッチを提出する前に、カラムオープンの温度に到達していることを確認してください。
11. バッチを保存：
 - a. **Save As** をクリックします。
Save As Batch ダイアログが開きます。
 - b. **File Name** を入力して、**Save** をクリックします。
12. バッチを送信します。次のセクションを参照：[バッチを送信](#)。

バッチを手動で作成

バッチの内容は、サンプルを提出する前に必ずレビューしてください。

注: 質量分析装置で外部デバイスとの通信に接点閉を使用している場合、これらのガイドラインに従います。

- バッチで定義したサンプルシーケンスが外部デバイスで定義した列と一致することを確認します。
 - 外部デバイスで定義したように、メソッドの期間が注入間隔の時間以内になるようにします。
-

取扱説明書—取得

ヒント! 切り取り、コピー、貼り付け、行の追加、および行の削除の各機能にアクセスするには、**Manage Samples** をクリックします。

1. Batch ワークスペースを開きます。
2. (オプション)**View** をクリックして、Batch ワークスペースに表示される列を選択します。

ヒント! 既存のバッチを使用するには、**Open > Open** をクリックします。

3. **New** をクリックします。
4. (オプション) サンプル位置を選択または確認する基準としてプレートレイアウトを使用するには、**Plate Layout** をクリックします。
プレートレイアウトにより、未割り当てサンプルのウェルおよびバイアルの位置が自動的に提供されます。
5. バッチの情報をグリッドに入力します。
グリッドの列の説明については、次を参照: [表 5-5](#)。

ヒント! Batch ワークスペースには、バッチの作成を容易にする次の機能があります。

- **Sample Type** セルなどの一部のセルのコンテンツは、セル内のリストから選択できます。セルの右側をクリックして、リストを表示します。
- バッチに追加された 2 番目以降の行には、前の行の値が自動的に入力されます。
- セルを選択し、セルの右下隅をクリックして、セルの内容をコピーする最後の行にドラッグすることにより、単一のセルをコピーできます。
- セルを選択し、セルの右下隅をクリックして、セルの内容をコピーする最後の行にドラッグすることにより、同じ行のセルのグループをコピーできます。
- 2 つの行に連続する値を入力し、両方のセルを選択し、下部のセルの右下隅をクリックして、一連の最後の行にドラッグすることにより、一連の値をコピーできます。
- コピー (**Ctrl+C**) コマンドと貼り付け (**Ctrl+V**) コマンドを使用して、セルまたはセルのグループのコンテンツをコピーし、新しい場所に貼り付けることができます。

注: LC カラムは、LC メソッドが選択されるまで使用できません。

ヒント! 取得後にサンプルを自動的に処理するようにバッチを構成するには、次のいずれかのメソッドを使用します。

- 埋め込み処理メソッドを使用するには、既存の **Results File** を選択します。サンプルは、対応する結果ファイルの埋め込みメソッドで処理されます。
- 新しい処理メソッドを使用するには、**Results File** フィールドをクリアします。**Results File** フィールドがクリアされると、**Processing Method** フィールドが使用可能になります。**Processing Method** を選択し、新しい **Results File** 名を入力します。選択した処理メソッドでサンプルが処理されます。

非ターゲットスクリーニングワークフローで処理する場合、自動処理する比較サンプルを選択できません。AutoPeak アルゴリズムを使用する処理メソッドの場合、ソフトウェアは常に、メソッドの作成に使用されたサンプルを使用して解析モデルを構築します。

-
6. (オプション)コンポーネント濃度を定義します。次のセクションを参照:[コンポーネント濃度を追加](#)
 7. (オプション)バッチに決定ルールを適用するには、次の手順に従います。
 - a. **Decision Rules** チェックボックスを選択します。
 - b. **Decision Rules** をクリックして、バッチに適用する各決定ルールの **Apply** を選択します。決定ルールを追加するには、次のセクションを参照:[決定ルールを追加](#)。
 - c. **Save** をクリックします。

注: **Decision Rules** オプションが選択され、バッチに対して少なくとも 1 つの決定ルールがアクティブな場合、Queue(キュー)ワークスペースのバッチ名の横に **Decision Rules: Active** が表示されます。アクティブなプロジェクトがネットワーク上にあり、ネットワークが利用できない場合、**Decision Rules: Disabled** というテキストが表示されます。

-
8. バッチを保存:
 - a. **Save As** をクリックします。
Save As Batch ダイアログが開きます。
 - b. **File Name** を入力して、**Save** をクリックします。
 9. バッチを提出する前に、カラムオープンの温度に到達していることを確認してください。
 10. システムが、バッチで使用されている MS および LC メソッドで平衡化されていることを確認します。
 11. バッチを送信します。次のセクションを参照:[バッチを送信](#)。

プレートレイアウト機能を使用してバッチを作成する

プレートレイアウト機能ではラックとプレートの構造がグラフィック表示され、「Batch(バッチ)」ワークスペースのグリッドに入力する目的で使用できます。

1. Batch ワークスペースを開きます。
2. **MS Method** を選択します。
3. **LC Method** を選択します。

取扱説明書—取得

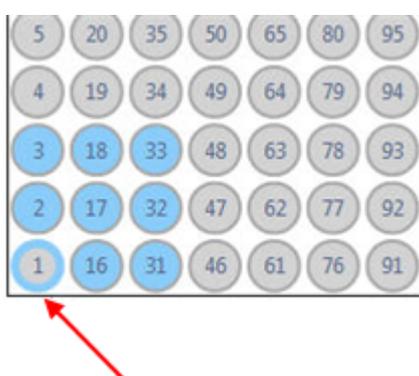
LC システムは有効である必要があります。

4. 取得したデータを保存する **Data File** の名前を入力します。
5. 取得後のデータの処理に使用する **Processing Method** を選択します。
6. 処理されたデータが保存される **Results File** の名前を入力します。
7. **Plate Layout** をクリックします。
Plate Layout ウィンドウが開き、デフォルトでは、プレートのグラフィックが表示されます。
8. プレートのプロパティを設定します。
ウィンドウが更新され、選択したプレートタイプのグラフィックが表示されます。
9. グラフィック表示で、サンプルの位置をクリックします。
選択したサンプルの位置は、グラフィックは完全に強調表示されて表示されます。Batch ワークスペースは、サンプル位置が完全に定義されていない最初の行、つまり、**Rack Type**、**Plate Type** (ウェルが使用されている場合)、および **Vial Position** 値を含まない行から更新されません。グリッドには、この情報に従ってサンプル位置が表示されます。
10. 必要に応じてグラフィック表示でサンプル位置のクリックを続行し、Batch ワークスペースでグリッドに入力します。
Batch ワークスペースのグリッドにサンプル位置を入力すると、それによってグラフィック表示が更新されます。

ヒント! 指定したラックの種類に関連付けられたすべてのデータを削除するには、**Clear All** をクリックします。選択したラックの種類がプレートを識別する場合、**Clear All** の下のメニューには **Clear Front** と **Clear Back** が含まれます。

11. 選択された繰り返し注入のサンプルの位置は、グラフィック表示でサンプル位置をクリックします。
プレートレイアウトのグラフィック表示には、繰り返し注入のサンプルの位置が色付きの輪郭で表示され、Batch ワークスペースのグリッドには、それに対応するデータが表示されます。

図 5-4 : プレートレイアウト-繰り返し注入のサンプルの位置(位置 1)



注: 選択されていない位置は灰色で表示され、一度選択された位置は灰色で縁取りされた青色で表示されます。

12. グラフィック表示でサンプルインデックスを表示するには、強調表示されたサンプル位置にカーソルを合わせます。

サンプルインデックスがツールチップで表示されます。

- すべての位置を割り当てて確認したら、Plate Layout ウィンドウで **Close** をクリックし、**BatchSave** ワークスペースでをクリックします。

イオン参照表の作成

- Batch ワークスペースを開きます。
- Auto-Calibrate** をクリックします。
Batch - Automatic Calibration Editor ダイアログが開きます。
- Edit** をクリックします。
Ion Reference Table Editor ダイアログが開きます。
- New** をクリックします。

ヒント! Tab キーを使用してセルを移動し、Enter を押して行を追加します。

- Reference Ions for TOF MS Calibration** グリッドで、プレカーサー質量を入力します。
Compound Name フィールドはオプションです。
- 必要に応じて行を追加します。
- Use** 列で、使用するイオンを選択します。
- MS/MS で使用するプレカーサー質量について、**Use for MS/MS** ラジオボタンを選択します。
- ステップ 8 で選択したプレカーサー質量の **CE for MS/MS** および **DP for MS/MS** フィールドに値を入力します。
- Reference Ions for MS/MS Calibration** グリッドで、2 つ以上のフラグメント質量を追加して選択します。
Fragment Name フィールドはオプションです。
- OK** をクリックします。
- Save Reference Table ダイアログで名前を入力して **OK** をクリックします。

注: キャリブレーション供給メソッドとして LC Method を選択した場合は、Reference Ions 表で Retention Time と Retention Time Tolerance を指定する必要があります。

CDS を使用したシステムのキャリブレーション

注: 質量分析装置が接点閉オプションで設定されている場合は、次のセクションを参照: [接点閉が設定されているシステムのキャリブレーション](#)。

- Batch** ワークスペースを開きます。
- Auto-Calibrate** をクリックします。
「Batch - Automatic Calibration Editor (バッチ - 自動キャリブレーションエディタ)」が開きます。
- イオン参照表を選択します。

取扱説明書－取得

注: TOF MSMS メソッドでは、参照テーブルで選択したプリカーサー質量がメソッド内の最小プリカーサー質量よりも大きいことを確認してください。

4. キャリブレーション間に取得するサンプルの数を入力します。
5. キャリブレーション供給メソッドとして、**CDS** を選択します。
デフォルトでは、CDS チャンネル 1 が選択されています。チャンネル 1 は正の溶液に使用し、チャンネル 2 は負の溶液に使用します。
6. **OK** をクリックしてダイアログを閉じます。
7. **Auto-Calibrate** ボタンの左側のチェックボックスが選択されていることを確認してください。
8. バッチを作成して送信します。

LC メソッドを使用したシステムのキャリブレーション

注: 質量分析装置が接点閉オプションで設定されている場合は、次のセクションを参照: [接点閉が設定されているシステムのキャリブレーション](#)。

1. **Batch** ワークスペースを開きます。
2. **Auto-Calibrate** をクリックします。
「Batch - Automatic Calibration Editor (バッチ - 自動キャリブレーションエディタ)」が開きます。
3. イオン参照表を選択します。
4. キャリブレーション間に取得するサンプルの数を入力します。
5. キャリブレーション供給メソッドとして「LC Method (LC メソッド)」を選択します。
ダイアログの右側に、オートサンプラーのラック、プレート、バイアルのフィールド、および MS メソッドフィールドが表示されます。
6. MS メソッドを選択して、適切なラック、プレート、およびバイアル情報を選択します。
7. **OK** をクリックしてダイアログを閉じます。
8. **Auto-Calibrate** ボタンの左側のチェックボックスが選択されていることを確認してください。
9. バッチを作成して送信します。

コンポーネント濃度管理

コンポーネント濃度を追加

バッチには、MS メソッド、処理メソッド、または Results Table で定義されたコンポーネント濃度が含まれています。この手順を使用して追加のコンポーネント濃度を追加します。

注: この手順を使用して追加されたコンポーネント濃度は、品質管理および標準タイプのサンプルで編集できます。コンポーネントを含む処理メソッドがサンプルで定義されている場合、コンポーネント濃度はバッチにも追加されます。処理メソッドによって追加されたコンポーネント濃度は、そのコンポーネントを含む処理メソッドを持つサンプルに対してのみ編集可能です。

1. バッチワークスペースで、**Component Concentrations** () をクリックします。

2. **Manage Components > Add Component** をクリックします。
3. **Component** の名前を入力します。
4. **OK** をクリックします。
新しいコンポーネント濃度が現在のバッチに追加されます。

コンポーネント濃度を削除

この手順を使用してコンポーネント濃度をバッチから削除します。

1. バッチワークスペースで、**Component Concentrations** () をクリックします。
2. **Manage Components > Remove Component** をクリックします。
コンポーネントのリストが表示されます。それには、**Add Component Concentration** コマンドで追加された、または MRM メソッドまたは処理メソッドがバッチに追加された際に追加されたすべてのコンポーネントが含まれています。
3. リストからコンポーネントを選択します。
4. **OK** をクリックします。

決定ルールを管理

決定ルールを追加

この手順を使用して決定ルールを追加します。

1. Batch ワークスペースで、**Decision Rules** をクリックします。
Decision Rules ダイアログが開きます。
2. **Add Rule** をクリックします。
Decision Rule Configuration ダイアログが開きます。
3. 決定ルールの名前を入力します。
4. フラグ設定ルール、決定ルールが評価されるタイミング、レスポンスなど、決定ルールのプロパティを定義します。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
5. **Save** をクリックして決定ルールを保存します。
6. **Save** をクリックしてダイアログを閉じます。

注: Decision Rules ダイアログで、**Save** をクリックしない場合は、新しい決定ルールは保存されません。

決定ルールの変更

1. Batch ワークスペースで、**Decision Rules** をクリックします。
Decision Rules ダイアログが開きます。
2. 変更する決定ルールの **Decision Rule Name** をクリックします。
Decision Rule Configuration ダイアログが開きます。
3. フラグ設定ルールなど決定ルールが評価されるタイミング、レスポンスを含む、**Decision rule name** や決定ルールの設定を変更します。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

4. **Save** をクリックして決定ルールを保存します。
5. **Save** をクリックしてダイアログを閉じます。

注: Decision Rules ダイアログで、**Save** をクリックしない場合は、新しい決定ルールは保存されません。

決定ルールを削除

この手順を使用して、決定ルールを削除します。

1. Batch ワークスペースで、**Decision Rules** をクリックします。
決定ルールダイアログが開きます。
2. **Flagging Rule Used** をクリックします。
3. **Delete Rule** をクリックして決定ルールを削除します。
4. **Save** をクリックします。

複製ルールを作成

この手順を使用して、複製ルールを作成します。

1. Batch ワークスペースで、**Decision Rules** をクリックします。
決定ルールダイアログが開きます。
2. 複製する決定ルールをクリックします。
3. **Duplicate Rule** をクリックします。
4. **Save** をクリックします。

決定ルールをインポート

この手順を使用して、決定ルールをインポートします。

1. Batch ワークスペースで、**Decision Rules** をクリックします。
決定ルールダイアログが開きます。
2. **Import List** をクリックします。
3. インポートするテキストファイルに移動して選択し、**Open** をクリックします。
4. **Save** をクリックします。

決定ルールをエクスポート

1. Batch ワークスペースで、**Decision Rules** をクリックします。
決定ルールダイアログが開きます。
2. **Export List** をクリックします。
3. レポートを保存するフォルダに移動し、ファイル名を入力してから **Save** をクリックします。
4. **Cancel** をクリックします。

システムの平衡化

1日の最初にシステムの平衡化を行った後に、新しいメソッドの実行、またはバッチの Submit を行います。平衡化は、次のサンプルまたはバッチのために、質量分析装置や LC システムをウォームアップさせ、準備を行います。

1. Status Panel で **Equilibrate** をクリックします。
Equilibrate ダイアログが開きます。
2. **MS Method** リストから MS メソッドを選択します。
3. **LC Method** リストから LC メソッドを選択します。
4. **Time (min)** フィールドに、平衡時間を分単位で入力します。
5. **OK** をクリックします。
平衡化が完了すると、Status Panel のシステム状態は準備完了になります。

ヒント! Queue ワークスペースを開いて、平衡化の進行を監視します。Queue ワークスペースは、平衡化が完了するのにどれだけの時間が必要かを示します。平衡化が完了する前に停止するには、Queue ワークスペースで **Stop** をクリックします。

バッチを送信

実施前提手順

- システムの平衡化。
- バッチワークスペースで Batch を開きます。

1. **Submit** をクリックします。
Submit Samples ダイアログが開きます。
2. **OK** をクリックして続行します。

注: **Auto-Calibrate** オプションが選択されていて、質量分析装置が接点閉オプションで設定されている場合、最初のキャリブレーションは自動的に実行されます。その後、外部デバイスで注入が開始されるまでシステムは Loading 状態になります。

画面の一番上にエラーが表示された場合は、それを解決して、次に **Submit** を再度クリックします。すべてのエラーが解決されるまで、バッチはキューに追加されません。

ヒント! キューが開始していない場合は、Queue ワークスペースに移動して、メニューバーの **Start** をクリックします。

単一のサンプルを Batch ワークスペースからキューに送信

実施前提手順

- システムの平衡化。
- バッチワークスペースで Batch を開きます。

1. 各サンプルの行インデックス番号を選択します。
2. **Submit** をクリックします。
Submit Samples ダイアログが開きます。
3. **OK** をクリックして続行します。

注: Auto-Calibrate オプションが選択されていて、質量分析装置が接点閉オプションで設定されている場合、最初のキャリブレーションは自動的に実行されます。その後、外部デバイスで注入が開始されるまでシステムは Loading 状態になります。

画面の一番上にエラーが表示された場合は、それを解決して、次に **Submit** を再度クリックします。すべてのエラーが解決されるまで、バッチはキューに追加されません。

ヒント! キューが開始していない場合は、Queue ワークスペースに移動して、メニューバーの **Start** をクリックします。

複数のサンプルを Batch ワークスペースからキューに送信

実施前提手順

- システムの平衡化。
- バッチワークスペースで Batch を開きます。

1. 次のいずれかの操作を行います。
 - 各サンプルのサンプル行インデックス番号をクリックしながら、**Ctrl** を押します。
 - インデックス番号のリストを上下にドラッグします。

注: サンプルは、選択されるために提出され、バッチで表示されるためではありません。

2. **Submit** をクリックします。
Submit Samples ダイアログが開きます。
3. **OK** をクリックして続行します。

注: Auto-Calibrate オプションが選択されていて、質量分析装置が接点閉オプションで設定されている場合、最初のキャリブレーションは自動的に実行されます。その後、外部デバイスで注入が開始されるまでシステムは Loading 状態になります。

画面の一番上にエラーが表示された場合は、それを解決して、次に **Submit** を再度クリックします。すべてのエラーが解決されるまで、バッチはキューに追加されません。

ヒント! キューが開始していない場合は、Queue ワークスペースに移動して、メニューバーの **Start** をクリックします。

Queue ワークスペース

Queue ワークスペースには、以下が表示されます。

- キューの状態
- バッチの状態
- サンプル取得と処理状態

このワークスペースでは、キュー内のバッチとサンプルを管理できます。

デフォルトでは、サンプルはキューに表示されません。サンプル情報は、バッチ名の下で折り畳まれています。バッチの状態、バッチ名、バッチ内のサンプルの数、および現在のバッチを測定するための残り時間が表示されます。バッチに含まれるキャリブレーションサンプルは、Sample Name 列のキューで Cal と表示されます。

このワークスペースにある機能へのアクセスは、割り当てられた役割ごとに管理されています。次のドキュメントを参照: 『ラボ管理者ガイド』。

注: サンプル取得中に、内蔵ダイバーターバルブの位置を手動で変更しないでください。

図 5-5 : Queue ワークスペース

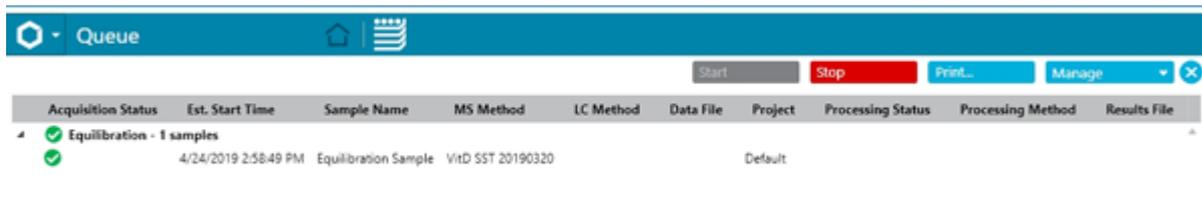


表 5-7 : Queue ワークスペース列

ラベル	説明
バッチ名	<p>キューに送信されたバッチの名前、バッチ内のサンプル数、および決定ルール処理の状況。</p> <p>キューには、各バッチの行が含まれています。デフォルトでは、バッチは折りたたまれていますが、展開するとバッチ内のすべてのサンプルを表示できます。各サンプルについて、以下のカラムに情報が表示されます。</p> <p>注: 決定ルール処理を伴うバッチの場合、ソフトウェアは次のサンプルの取得を遅らせて、現在のサンプルの処理を終了させます。許容時間内に処理が完了しない場合、決定ルールは無効になります。遅延時間は、取得時間の 1.5 倍です。</p>

表 5-7 : Queue ワークスペース列 (続き)

ラベル	説明
Acquisition Status	(取得状態)データ取得の状況。状態アイコンの詳細については、次のセクションを参照: キューアイコン 。
Est. Start Time	(予測開始時間)このサンプルの取得が開始された時間。
Acquisition Time	(取得時間)このサンプルの取得にかかった時間。
Sample Name	(サンプル名)バッチで指定されたサンプルの名前。
Sample ID	(サンプル ID)バッチで指定されたサンプルの識別子。
Barcode	(バーコード)バッチで指定されたサンプルバイアルのバーコード番号。
Rack Code	(ラックコード)バッチで指定された LC ラックの識別子。
Rack Position	(ラック位置)バッチで指定された LC ラックの設置場所。
Plate Code	(プレートコード)バッチで指定された LC プレートの識別子。
Plate Position	(プレート位置)バッチで指定された LC プレートの設置場所。
Vial Position	(バイアル位置)LC プレートまたはラック内のサンプルの位置。
MS Method	(MS メソッド)バッチで指定された MS メソッド。
LC Method	(LC メソッド)バッチで指定された LC メソッド。
Injection Volume	(注入量)注入するサンプルの量。
Data File	(データファイル)データを取得するデータファイルの名前
Scanned Barcode	(スキャンされたバーコード)バイアルの識別子。
User	(ユーザー)バッチを送信したユーザーの名前。
Project	(プロジェクト)データファイルが保存されるプロジェクト。
Data File Status	(データファイルの状態)データファイルの状態。
Auto Processing Status	(自動処理の状態)データ処理の状態。状態アイコンの詳細については、次のセクションを参照: キューアイコン 。
Processing Method	(処理メソッド)取得したデータの処理に使用する処理メソッド。既存の結果ファイルが使用されている場合、この列にはテキスト* Embedded Method *が含まれます。
Results File	(結果ファイル)処理されたデータが書き込まれるファイル。
Decision Rule Status	(決定ルールの状態)サンプルのフラグ設定状態と決定ルールによるアクション。
Decision Rule Summary	(決定ルールの概要)トリガーとなる決定ルールの名前。

キューの管理

測定は、サンプルが Batch ワークスペースから提出された後に始まります。バッチの提出前に、システムが平衡になっていることを確認してください。次のセクションを参照：[システムの平衡化](#)。

注: サンプル取得中に異常な終わり方をした場合は、サンプルをもう一度実行してください。停電によって異常な終わり方をした場合、オートサンプラーのトレイの温度が持続されず、サンプルの完全性が損なわれる恐れがあります。

次の表の機能を使用して、キュー内のサンプルとバッチを管理します。

表 5-8 : Queue ワークスペース機能

実行する操作	実行する作業
列の表示または非表示	Manage > Display Columns をクリックします。次のセクションを参照： 列の表示または非表示 。
バッチにあるすべてのサンプルを見る	▶ をクリックします。
バッチにあるすべてのサンプルを折り畳む	▲ をクリックします。
測定を開始する	Start をクリックします。サンプルのランを行う前にシステムの平衡化を行います。
提出したサンプルの状態を見る	バッチのヘッダーをダブルクリックします。
選択したサンプルを再測定する	1. サンプルをクリックします。 2. Manage > Reacquire samples をクリックします。
選択したサンプルを削除する	1. サンプルをクリックします。 2. Manage > Delete samples をクリックします。
選択したサンプルの下のすべてのサンプルを削除する	1. サンプルをクリックします。 2. Manage > Delete samples below row selection をクリックします。
すべての測定したバッチまたはサンプルのキューをクリアする	Manage > Clear queue をクリックします。
選択した行からフォーカスを削除する	Manage > Clear all selections をクリックします。
選択したバッチまたはサンプルをキューの一番上に移動する	1. バッチのヘッダーをクリックします。 2. Manage > Move row to top をクリックします。 注: 測定されていない単一のバッチまたはサンプルのみが移動できます。

表 5-8 : Queue ワークスペース機能 (続き)

実行する操作	実行する作業
キュー内の選択したサンプルを上に移動する	<ol style="list-style-type: none"> 1. サンプルをクリックします。 2. Manage > Move row up をクリックします。 <p>注: 測定されていない単一のサンプルのみを移動できます。</p>
キュー内の選択したサンプルを下に移動する	<ol style="list-style-type: none"> 1. サンプルをクリックします。 2. Manage > Move row down をクリックします。 <p>注: 測定されていない単一のサンプルのみを移動できます。</p>
すべてのサンプルとバッチを折り畳む	Manage > Collapse all rows をクリックします。
すべてのサンプルとバッチを表示する	Manage > Expand all rows をクリックします。
取得中のサンプルのデータを表示する	<p>次のいずれかの操作を行います。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 測定が進行中のサンプルをダブルクリックします。 <p>注: Processing Status 列の左側にある列の 1 つをダブルクリックします。</p> <ul style="list-style-type: none"> • Data Acquisition パネルで Open data exploration to view real time data () をクリックします。
測定されたサンプルのデータを見る	Acquisition Status 列の緑色のチェックマーク()をダブルクリックします。
作成された Results file を表示する	Processing Status 列の緑色のチェックマーク()をダブルクリックします。
スキャンされているバーコードバイアルを表示する	<ol style="list-style-type: none"> 1. Manage > Display Columns をクリックします。 2. Select Columns ダイアログで Barcode または Scanned Barcode チェックボックス、あるいはその両方を選択します。次のセクションを参照: 列の表示または非表示。 3. OK をクリックします。
キューを停止する	<ol style="list-style-type: none"> 1. Stop をクリックします。 2. Stop now または Stop after the current tasks are completed を選択します。 3. OK をクリックします。

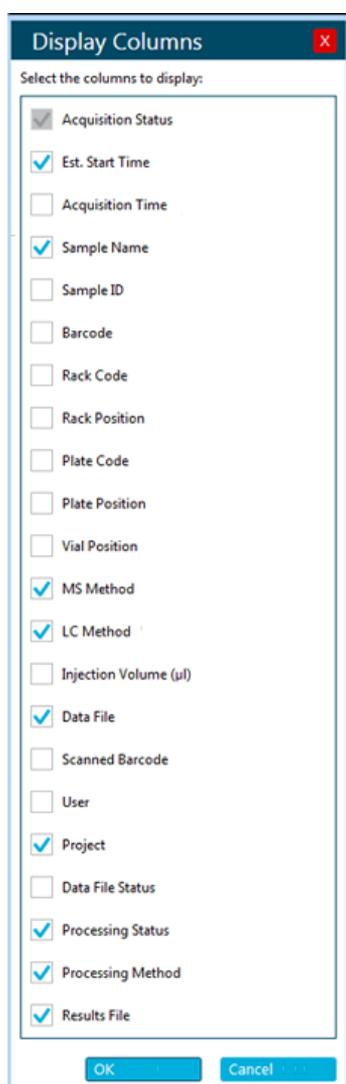
表 5-8 : Queue ワークスペース機能 (続き)

実行する操作	実行する作業
キューに入っている残りのサンプルすべての処理を停止する	<ol style="list-style-type: none"> 1. Cancel remaining processing をクリックします。 2. Yes をクリックします。
キューを印刷する	ワークスペースメニューから Print をクリックします。

列の表示または非表示

1. Queue ワークスペースで、**Manage > Display Columns.**をクリックします。
2. 必要に応じて、Display Columns ダイアログの列チェックボックスを選択またはクリアします。列の説明については、次を参照: [表 5-7](#)。

図 5-6 : 列の表示ダイアログ



3. OK をクリックします。

キューアイコン

表 5-9 : キューアイコン

アイコン	名称	説明
	展開矢印	バッチにあるサンプルを表示します。
	折り畳み矢印	バッチにあるサンプルを非表示にします。

表 5-10 : 測定状態アイコン

アイコン ¹	名称	説明
	Completed	サンプルまたはバッチ全体が正常に取得されました。このアイコンをダブルクリックして、Explorer ワークスペースでサンプルを開きます。
	Warning	サンプルは測定されましたが、ユーザーが測定を停止または延長しました。
	Failed	サンプルまたはバッチ内のサンプルが正常に取得されませんでした。
	Failed	キャリブレーションサンプルが許容基準を満たしていませんでした。アイコンをダブルクリックして、状態レポートを確認してください。
	In Progress	サンプルまたはバッチは測定中です。
	Waiting	サンプルまたはバッチはまだ測定されていないか、測定が進行中です。
	Barcode Warning	バーコードの読み取りエラーまたはバーコードスキャンおよびサンプルの不一致がありました。

表 5-11 : 処理状態アイコン

アイコン ²	名称	説明
	Completed	サンプルが正常に処理されました。このアイコンをダブルクリックして、Analytics ワークスペースで結果ファイルを開きます。

¹ 決定ルールが使用されている場合、取得の状態は決定ルールの影響を受ける可能性があります。たとえば、決定ルールはサンプルを中止したり、キューを停止したりします。決定ルールでは、バッチ内のすべてのサンプルが考慮され、サンプルが異なる結果ファイルに処理されている場合は、関連する結果ファイルが考慮されます。キューに表示されなくなったサンプルも考慮されます。

² **Processing Status** 列が空の場合、サンプルに対して処理メソッドまたは結果ファイルが選択されていません。

表 5-11 : 処理状態アイコン (続き)

アイコン	名称	説明
	Warning	ユーザーによって処理が停止されました。
	Failed	サンプルは正常に処理されませんでした。
	In Progress	サンプルは処理中です。
	Waiting	サンプルは正常に処理されませんでした。

表 5-12 : 決定ルールの状態アイコン

アイコン ³ 4	名称	説明
	Flagging rule passed	サンプルは、決定ルールで構成されたフラグ設定ルールの合格基準を満たしています。
	Flagging rule marginal	サンプルは、決定ルールで構成されたフラグ設定ルールの限界基準を満たしています。
	Flagging rule failed	サンプルは、決定ルールで構成されたフラグ設定ルールの失敗基準を満たしています。
	Queue stopped	キューは、決定ルールに基づいて停止されます。このアイコンは、キューが停止して次のバッチが取得されるときにも表示されます。
	Sample injected	決定ルールに基づいてサンプルが再注入されるか、決定ルールで設定されたバイアルからサンプルが注入されます。

表 5-13 : データファイルの状態アイコン

アイコン	名称	説明
	Transfer Complete	サンプルはネットワークプロジェクトに正常に転送されました。
	Transfer in Process	サンプルはネットワークプロジェクトに転送中です。
	Transfer Failed	サンプル転送が失敗しました。SCIEX OS は、サンプルの転送を再度試みます。

³ フラグ設定状態のアイコンとそのツールチップは、ユーザーが決定ルール名、フラグ設定ルール名、および実行されたアクションにカーソルを合わせると表示されます。

⁴ ユーザーがすべての標準が取得された後にルールを評価することを選択した場合、フラグが設定されたサンプルの状態は遡って更新されます。

MS Tune ワークスペース

.dat ファイルは、装置データが保存される際にソフトウェアによって作成されます。このファイルを使用して、以前のパラメータ状態を復元します。dat バックアップファイルは、ファイルがバックアップされた時刻ではなく、ファイルが作成された時刻を使用して名前が付けられます。

注: APCI プローブを使用している場合、Quick Status Check 機能と Advanced Troubleshooting 機能のみを使用できます。他のチューニング手順を実施するには、ESI プローブを取り付けます。

MS チューン手順をロードするたびに、質量分析装置のパラメータがバックアップされます。

このワークスペースにある機能へのアクセスは、割り当てられた役割ごとに管理されています。『ラボ管理者ガイド』のドキュメントを参照してください。

クイック状態チェックの実行

実施前提手順

- 正しいプローブが取り付けられていることを確認します。

この手順を使用して、システムのキャリブレーションを行い、TOF MS および MS/MS モードの分解能を素早く確認します。チャンネルアラインメント質量精度が仕様を満たさない場合、ステップを繰り返してシステムのキャリブレーションを行うことができます。分解能が仕様を満たしていない場合は、TOF チューニング手順を実行してシステムを最適化できます。

ヒント! この手順は、ステータスパネルで **MS Check** をクリックして評価できます。

注: 質量分析装置が CDS で構成されている場合、「Achieve Stable Spray」手順の開始時に、自動的に CDS が起動します。[MS チューン]ワークスペースを閉じると、CDS が停止します。

- MS Tune ワークスペースを開きます。
- Tuning Procedures** リストから **Positive Quick Status Check** または **Negative Quick Status Check** を選択します。
- Next** をクリックします。
- 各ステップについて、画面上の指示に従います。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
- (オプション)レポートをレビューして、各ステップの結果を確認します。
- (オプション)レポートを保存します。
- 結果に問題がなければ、**Save Tuning Settings** をクリックします。結果に問題がある場合は、以下のいずれかの操作を行います。
 - 各ステップを繰り返します。
 - TOF MS のチューニング手順を実行します。次のセクションを参照:[TOF のチューニング](#)。
 - MS Tune** ワークスペースを閉じて結果を破棄します。

- **Restore Instrument Data** メニューから該当するバックアップファイルを選択して、以前の設定を復元します。

検出器の最適化

システム感度が低い場合は、この手順に従って検出器の電圧が最適化されていることを確認します。手順の実行中はソフトウェアが検出器の電圧を調整し、最適な感度を提供します。最適化が完了したら、最適化された値を保存したり変更を破棄したりできます。

注: この手順は、高質量と低質量の両方のモードで実行してください。

1 か月に 1 回検出器を最適化することを推奨します。感度が著しく低下した場合と装置の大気開放およびクリーニング後にも検出器を最適化する必要があります。

注: 検出器のエージングはイオン曝露の作用であるため、高濃度を使用する場合にはより高頻度の最適化が必要となる場合があります。

注: 質量分析装置が CDS で構成されている場合、「Achieve Stable Spray」手順の開始時に、自動的に CDS が起動します。[MS チューン]ワークスペースを閉じると、CDS が停止します。

1. MS Tune ワークスペースを開きます。
2. **Tuning Procedures** リストから、次のいずれかの操作を行います。
 - (ZenoTOF システム) **Positive Detector Optimization** または **Negative Detector Optimization** を選択します。
 - (X500 QTOF システム) **Detector Optimization** を選択します。Introduction (はじめに) ページが表示されます。最適化プロセスの目的、前提条件、手順を説明します。
3. シリンジポンプが適切に構成されていることを確認します。システムユーザーガイドのドキュメントを参照してください。次に **Next** をクリックします。
4. スプレーが安定していることを確認してから、**Next** をクリックします。
5. 画面上の指示に従ってください。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。最適化レポートが表示されます。
6. (オプション) 下記の手順でレポートを保存します。
 - a. Report(レポート) ページで、**Save report as** をクリックします。
 - b. レポートを保存するフォルダに移動し、**File name** を入力してから **Save** をクリックします。
7. **Next** をクリックします。
8. **Save Settings** をクリックします。

注: 検出器が 2650 V 以上で最適化される場合は、sciex.com/request-support に問い合わせ、検出器を交換してください。

「チューニング設定が保存されました」というメッセージが表示されます。

Q1 Unit チューニング

MS/MS 実験では、フラグメンテーション用のプレカーサーイオンを選択する目的で Q1 領域が使用されます。Q1 Unit のチューニングによりピーク幅が最適化され、Q1 質量がキャリブレーションされます。Q1 Unit は、ユニット分解能でのプレカーサーイオン選択ウィンドウの幅を表します。Q1 Low または Open は、低分解能(広いウィンドウ)またはオープン分解能(オープンウィンドウ)でのプレカーサーイオン選択ウィンドウの幅を表します。Q1 Unit をチューニングすると、Q1 Unit の値に基づいて Q1 Low および Open の設定が計算されます。

注: 質量分析装置が CDS で構成されている場合、「Achieve Stable Spray」手順の開始時に、自動的に CDS が起動します。[MS チューン]ワークスペースを閉じると、CDS が停止します。

1. MS Tune ワークスペースを開きます。
2. **Tuning Procedures** リストから **Positive Q1 Unit Tuning** または **Negative Q1 Unit Tuning** を選択します。
3. **Next** をクリックします。
4. 各ステップについて、画面上の指示に従います。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
5. (オプション)**Edit Method** をクリックして、パラメータを調整します。
6. キャリブレーションを実行した場合は、**Confirm** をクリックして確認測定を実行します。
7. **Next** をクリックします。
8. (オプション)レポートを保存します。
9. **Next** をクリックします。
10. **Save Settings** をクリックします。

TOF のチューニング

TOF MS チューニング手順では、TOF MS および MS/MS モードでの分解能と感度に対応するパラメータを最適化します。最適化はチューニング前のシステム性能の確認から始まり、強度と分解能を最大限に高めるための各種パラメータのランピングへと続きます。チャンネルのアライメントが完了するとシステムがキャリブレーションされ、システムの性能が特定されます。性能が十分な場合は、システムにチューニング設定を保存することができます。また、設定を破棄することもできます。

TOF MS のチューニングは、自動または手動モードで実行できます。手動モードでは、最適化されたパラメータ値を選択したり、チューニングステップの最後で一時停止したりできます。

注: 質量分析装置が CDS で構成されている場合、「Achieve Stable Spray」手順の開始時に、自動的に CDS が起動します。[MS チューン]ワークスペースを閉じると、CDS が停止します。

1. MS Tune ワークスペースを開きます。
2. **Tuning Procedures** リストから、次のいずれかの操作を行います。
 - (X500 QTOF システム)**Positive TOF MS Tuning** または **Negative TOF MS Tuning** を選択

-
- (ZenoTOF システム) **Positive TOF Tuning** または **Negative TOF Tuning** を選択します。
3. 噴射が安定していることを確認します。
 4. **Next** をクリックします。
 5. 各ステップについて、画面上の指示に従います。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
 6. **Next** をクリックします。
 7. (オプション)レポートを保存します。
 8. 結果に問題がなければ、**Save Settings** をクリックします。結果に問題がある場合は、以下のいずれかの操作を行います。
 - 各ステップを繰り返します。
 - **MS Tune** ワークスペースを閉じて結果を破棄します。
 - **Restore Instrument Data** メニューから該当するバックアップファイルを選択して、以前の設定を復元します。
 - sciex.com/request-support に問い合わせます。

Q1 High のチューニング

MS/MS 実験では、フラグメンテーション用のプレカーサーイオンを選択する目的で Q1 領域が使用されます。Q1 高度チューニングによりピーク幅が最適化され、Q1 質量がキャリブレーションされます。Q1 High はより狭いプレカーサーイオン選択ウィンドウを示します。

注: 質量分析装置が CDS で構成されている場合、「Achieve Stable Spray」手順の開始時に、自動的に CDS が起動します。[MS チューン]ワークスペースを閉じると、CDS が停止します。

1. MS Tune ワークスペースを開きます。
2. **Tuning Procedures** リストから **Positive Q1 High Tuning** または **Negative Q1 High Tuning** を選択します。

注: ポジティブ Q1 High の手順が一定時間実行されていない場合は **Copy** をクリックし、ポジティブ Q1 Unit の設定を出発点として使用します。

3. 噴射が安定していることを確認します。
4. **Next** をクリックします。
5. 各ステップについて、画面上の指示に従います。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
6. (オプション)**Edit Method** をクリックして、パラメータを調整します。
7. キャリブレーションを実行した場合は、**Confirm** をクリックして確認測定を実行します。
8. **Next** をクリックします。
9. (オプション)レポートを保存します。
10. **Next** をクリックします。

11. **Save Settings** をクリックします。

Zeno のキャリブレーション (ZenoTOF システム)

1. MS Tune ワークスペースを開きます。
2. **Tuning Procedures** リストから **Positive Zeno Calibration** または **Negative Zeno Calibration** を選択します。
Introduction (はじめに) ページが表示されます。キャリブレーションプロセスの目的と前提条件について説明します。
3. スプレーが安定していることを確認してから、**Next** をクリックします。

注: Achieve Stable Spray/Modify ページで **Source and Gas Parameters** を手動で調整できます。

4. 各ステップについて、画面上の指示に従います。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
5. **Next** をクリックします。
6. (オプション) 下記の手順でレポートを保存します。
 - a. Report (レポート) ページで、**Save report as** をクリックします。
 - b. レポートを保存するフォルダに移動し、**File name** を入力してから **Save** をクリックします。
7. **Next** をクリックします。
8. 結果に問題がなければ、**Save Tuning Settings** をクリックします。結果に問題がある場合は、以下のいずれかの操作を行います。
 - 各ステップを繰り返します。
 - **MS Tune** ワークスペースを閉じて結果を破棄します。
 - **Restore Instrument Data** メニューから該当するバックアップファイルを選択して、以前の設定を復元します。

EAD 最適化の実行 (ZenoTOF システム)

1. MS Tune ワークスペースを開きます。
2. **Tuning Procedures** リストから **EAD Optimization** を選択します。
Introduction (はじめに) ページが表示されます。最適化プロセスの目的と前提条件について説明します。
3. **Tuning process** を選択し、**Next** をクリックします。
4. Filament Calibration Verification ページで、**Filament** を選択して、**Calibrate Filament** をクリックします。

ヒント! 選択したフィラメントを変更するには、**Filament** フィールド内のリストをクリックし、必要なフィラメントを選択します。

5. **Next** をクリックします。

-
6. スプレーが安定していることを確認してから、**Next** をクリックします。

注: Achieve Stable Spray/Modify ページで **Source and Gas Parameters** を手動で調整できます。

7. 各ステップについて、画面上の指示に従います。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
8. **Next** をクリックします。
9. (オプション) 下記の手順でレポートを保存します。
 - a. Report(レポート) ページで、**Save report as** をクリックします。
 - b. レポートを保存するフォルダに移動し、**File name** を入力してから **Save** をクリックします。
10. **Next** をクリックします。
11. **Save Settings** をクリックします。

EAD EI バックグラウンド削減の実行(ZenoTOF システム)

1. MS Tune ワークスペースを開きます。
2. **Tuning Procedures** リストから **EAD EI Background Reduction** を選択します。Introduction(はじめに) ページが表示されます。チューニング手順の目的と前提条件/説明します。
3. **Next** をクリックします。
4. 各ステップについて、画面上の指示に従います。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
5. **Next** をクリックします。
6. (オプション) 下記の手順でレポートを保存します。
 - a. Report(レポート) ページで、**Save report as** をクリックします。
 - b. レポートを保存するフォルダに移動し、**File name** を入力してから **Save** をクリックします。

EAD 診断化の実行(ZenoTOF システム)

1. MS Tune ワークスペースを開きます。
2. **Tuning Procedures** リストから **EAD Diagnostics** を選択します。Introduction(はじめに) ページが表示されます。EAD 診断の目的と前提条件について説明します。
3. **Next** をクリックします。
4. 各ステップについて、画面上の指示に従います。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

ADC の初期化の実行(ZenoTOF システム)

1. MS Tune ワークスペースを開きます。
2. **Tuning Procedures > ADC Initialization** を選択します。

Introduction (はじめに) ページが表示されます。初期化の目的について説明します。

3. **Next** をクリックします。
ADC Initialization ページが表示されます。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

高度なトラブルシューティングの実行

実施前提手順
<ul style="list-style-type: none">• 正しいプローブが取り付けられていることを確認します。

チューニング手順の結果に問題がある場合は、ここで説明する高度なトラブルシューティング手順を使用して、質量分析装置に関連するパラメータを最適化します。また、測定中に TDC チャンネルの統計情報とスペクトルを表示することもできます。

ヒント! 「Live Method (ライブメソッド)」ウィンドウを使用して、チューニング実行後の最適化されたパラメータを表示することもできます。

1. MS Tune ワークスペースを開きます。
2. **Tuning Procedures** リストから **Advanced Troubleshooting** を選択します。
3. スキャンの種類を選択します。
4. 必要に応じて **Edit Method** をクリックし、Live Method ウィンドウでパラメータを編集します。
5. **Start/Restart Method** をクリックします。
6. データを確認し、必要に応じてパラメータを調整します。
7. **Stop** をクリックし、必要に応じて検出器のパラメータまたは TOF MS のパラメータを保存します。

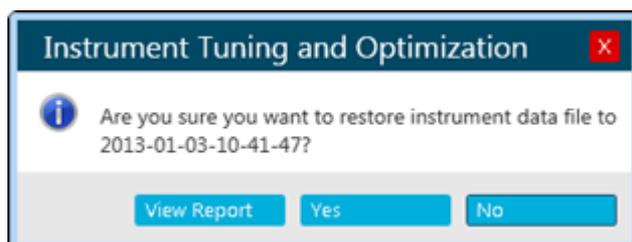
装置データの復元

各チューニング手順の最後にユーザーがチューニング設定を保存すると、ソフトウェアにより装置データファイル (dat) のコピーが生成され、現在の dat ファイルが更新されます。以前に保存した設定は、**Restore Instrument Data** 機能を使用して復元できます。

各チューニング手順を実行すると、最適化された結果を追跡するためにレポートとデータファイルが生成されます。デフォルトでは、wiff2 データファイルおよびレポートは、D:\SCIEX OS Data\Optimization にあります。

1. MS Tune ワークスペースを開きます。
2. **Restore Instrument Data** メニューから、復元するタイムスタンプが以前の dat ファイルを選択します。

図 5-7 : 装置チューニングおよび最適化ダイアログ



3. (オプション) 次の手順に従って、復元する dat ファイルのレポートを表示します。
 - a. **View Report** をクリックします。
 - b. 選択した装置データファイルのレポートが生成された場合は、レポートファイルに移動してダブルクリックして開きます。
4. **Yes** をクリックします。

Explorer ワークスペース

このワークスペースにある機能へのアクセスは、割り当てられた役割ごとに管理されています。『ラボ管理者ガイド』のドキュメントを参照してください。

サンプルを開く

Explorer ワークスペースでデータレビュータスクを実行する前に、レビューするサンプルを開きます。

1. Explorer ワークスペースを開きます。
2. 単一のサンプルを開くには、次の手順に従います。
 - a. **File > Open Sample** をクリックします。
Select Sample ダイアログが開きます。
 - b. 開くサンプルを参照して選択します。
 - c. **OK** をクリックします。
3. 複数のサンプルを開くには、次の手順に従います。
 - a. **File > Open Multiple Samples** をクリックします。
 - b. Select Samples ダイアログで、**Available** リストからサンプルを選択して矢印をクリックし、ファイルを **Selected** リストに移動します。

ヒント! サンプルを 1 つ選択するには、ファイルを展開してサンプルをクリックし、矢印をクリックします。

- c. **OK** をクリックします。

分析試料の存在の確認

実施前提手順

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• サンプルを開く。 |
|--|

1. イオンを抽出します。次のセクションを参照：[イオンの抽出](#)。
2. (オプション) データとピークのテーブルを表示します。参照してください：[データおよびピーク表示](#)。
3. 化合物のピーク領域、強度、質量、および電荷状態を確認します。ピーク領域、強度、質量、フルスキャンデータタイプの場合は、化合物の電荷状態を確認します。
SCIEX Triple Quad システムの場合、電荷状態はフルスキャンデータタイプでのみ利用可能です。

イオンの抽出

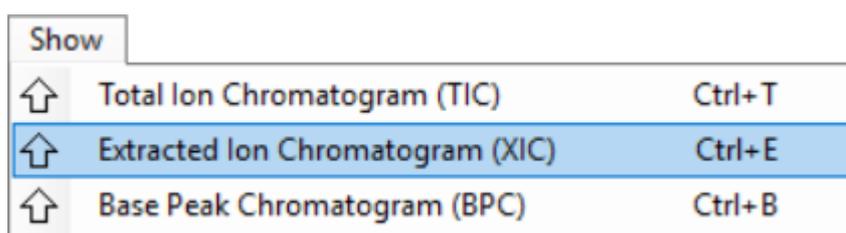
実施前提手順

- サンプルを開く。

重なっている 1 つ以上の抽出イオンクロマトグラム (XIC) を計算する目的で使用します。これは、保持時間を関数とした一定の質量範囲にわたる強度和のプロットです。

1. **Show > Extract Ion Chromatogram (XIC)** をクリックします。

図 6-1 : メニューを表示: 抽出したイオンのクロマトグラム (XIC)



2. Specify XIC Ranges ダイアログが開いたら、次の手順を実行します。

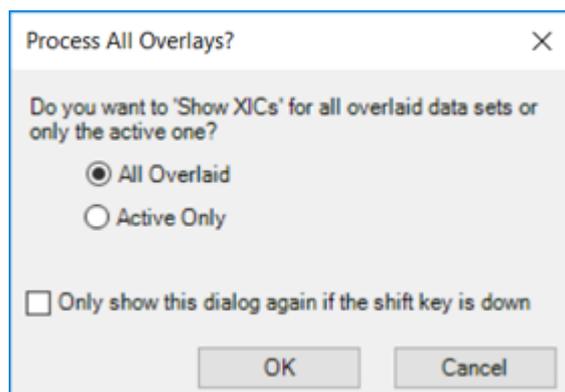
- a. **Center**、**Width**、**Compound** の値を入力するか、値をインポートします。

注: XIC のデフォルトのタイトルは、特定の行のセルに表示されている化合物名で構成されています。

ヒント! **Center/Width** モードを使用している場合、**Center** 値として質量ではなく化学式を指定できます。H のような中性の組成物 $_2O$ を使用すると、陽イオンは、正モードの場合は自動的に追加され、負モードの場合は差し引かれます。たとえば、H の m/z 比 $_3O^+$ は正モードに使用されます。組成の末尾に $+n$ または $-n$ を付けて、明示的に電荷状態を指定します。 n は電荷状態を表し、 n を省略した場合は 1 とみなされます。たとえば、 H_2ONa^+ が指定されている場合、 m/z 比 (H_2ONa^+) がそのまま使用されます。

- b. (オプション) 右クリックメニューの機能を使用して、イオン抽出のオプションをカスタマイズします。詳細な情報については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
- c. **OK** をクリックします。
アクティブなグラフに、別のサンプルとオーバーレイしている系列が含まれている場合は、Process All Overlays? ダイアログが開きます。

図 6-2 : すべてのオーバーレイを処理しますか？ダイアログ



3. Select MRMs ダイアログが開いたら、XIC に含める MRM を選択して、**OK** をクリックします。
4. Process All Overlays? ダイアログが開いたら、次の手順に従います。
 - a. 次のいずれかの操作を行います。
 - 使用可能なすべてのサンプルについて XIC のオーバーレイを生成するには、**All Overlaid** を選択します。
 - 現在アクティブなサンプルだけで XIC を生成するには、**Active Only** を選択します。
 - b. **OK** をクリックします。

Only show this dialog again if the shift key is down チェックボックスが選択されている場合は、ユーザーが **Shift** キーを押してオプションを変更するまで、選択されているアクションが使用されます。

トータルイオンクロマトグラムを開く

実施前提手順

- サンプルを開く。

トータルイオンクロマトグラム (TIC) は、一連の質量スキャンから得られたすべてのイオンの強度寄与を合計することで作成されます。TIC を使用して、データセット全体を単一のペインで表示します。TIC は、クロマトグラムのペインの時間に対してプロットされたスキャンのすべてのイオンの強度の合計で構成されています。

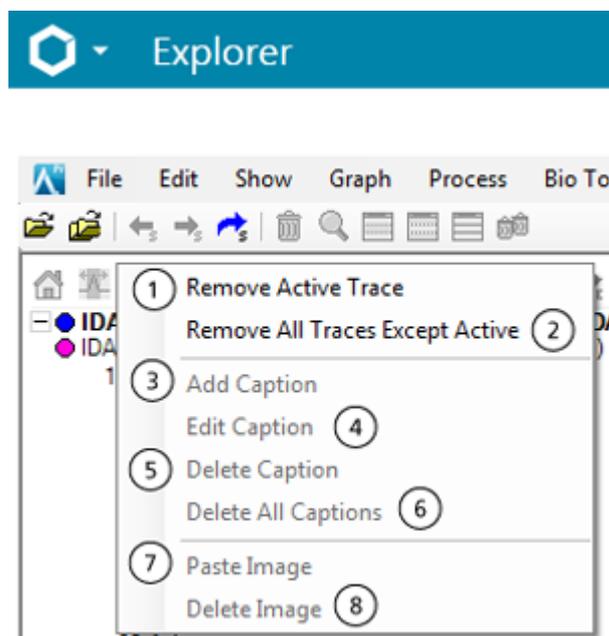
1. **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)** をクリックします。
アクティブなグラフに、別のサンプルとオーバーレイしている系列が含まれている場合は、すべてのオーバーレイを処理しますか？ダイアログが開きます。
2. すべてのオーバーレイを処理しますか？ダイアログが開いたら、次の手順に従います。
 - a. 次のいずれかの操作を行います。
 - 使用可能なすべてのサンプルについて TIC のオーバーレイを生成するには、**All Overlaid** を選択します。

- 現在アクティブなサンプルだけで TIC を生成するには、**Active Only** を選択します。
- b. **OK** をクリックします。

Only show this dialog again if the shift key is down チェックボックスが選択されている場合は、ユーザーが **Shift** キーを押してオプションを変更するまで、選択されているアクションが使用されます。

3. TIC を右クリックして、右クリックメニューの機能を使用します。

図 6-3 : トータルイオンクロマトグラムの右クリックメニュー



項目	説明
1	重なっているトレースが複数存在する場合に使用できます。現在アクティブなトレースがグラフから削除されます。現在アクティブではないトレースを削除するには、目的のトレースをアクティブにしてからこの機能を選択します。
2	重なっているトレースが複数存在する場合に使用できます。現在アクティブなトレースを除き、すべてのトレースが削除されます。保持するトレースが現在アクティブではない場合は、目的のトレースをアクティブにしてからこの機能を選択します。

項目	説明
3	<p>グラフにテキストを追加します。</p> <p>必要に応じて Font をクリックし、フォントのプロパティを調整してから OK をクリックします。キャプションは、ユーザーが右クリックしてメニューを開いた (x, y) 位置に追加されます。</p> <p>キャプションの追加後は、ドラッグして別の場所に移動できます。X 軸または Y 軸にドラッグすると、ドラッグ操作が取り消されます。</p> <p>\d および \u という文字列は、特別に扱われます。前者の場合、その直後に続く 1 文字が下付き文字として描画され、後者の場合は上付き文字として描画されます。どちらの場合も、特殊文字は表示されません。これは、化学式を表現する場合に特に便利です。たとえば、「H\d3O\u+」は H と表示されます ${}_3\text{O}^+$。</p>
4	<p>選択したキャプションを編集します。このダイアログは、キャプションをダブルクリックして開くこともできます。</p>
5	<p>選択したキャプションを削除します。また、キャプションをグラフの外までドラッグすると削除されます。</p>
6	<p>グラフに 1 つ以上のキャプションが存在する場合に使用できます。1 回の操作ですべてのキャプションが削除されます。</p>
7	<p>グラフに画像を貼り付けます。</p>
8	<p>選択した画像をグラフから削除します。</p>

ベースピーククロマトグラムを開く

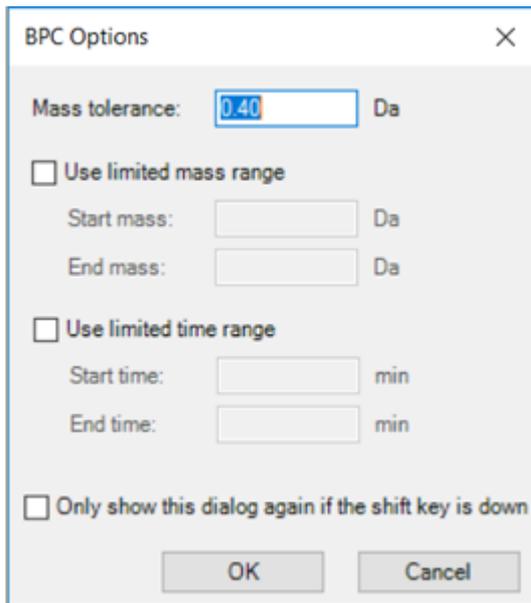
実施前提手順

- [サンプルを開く](#)。

各スペクトルにおける最大ピークの強度を時間の関数としてプロットします。

1. **Show > Base Peak Chromatogram (BPC)** をクリックします。

図 6-4 : BPC オプションダイアログ

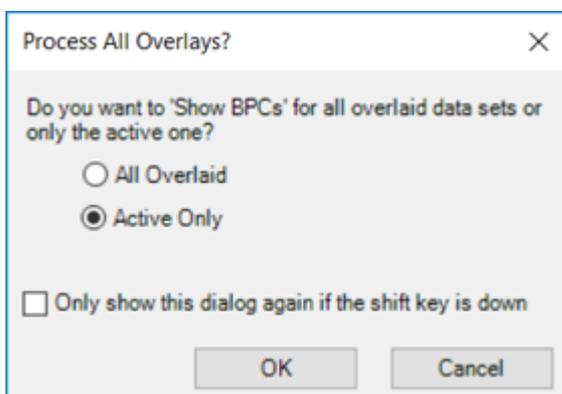


2. BPC Options ダイアログのフィールドに入力します。フィールドの詳細については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

注: ベースピーククロマトグラムの生成中に、単一の選択範囲が 1.0 分を超えて広がっているクロマトグラムがアクティブになっている場合、時間範囲は、デフォルトでその選択範囲の時間範囲になります。それ以外の場合は、最後の時間範囲が使用されます。時間範囲を制限することで、ユーザーが手動で範囲を入力する手間を省けます。

アクティブなグラフに、別のサンプルとオーバーレイしている系列が含まれている場合は、Process All Overlays? ダイアログが開きます。

図 6-5 : すべてのオーバーレイを処理しますか？ダイアログ



3. Process All Overlays? ダイアログが開いたら、次の手順に従います。
 - a. 次のいずれかの操作を行います。

操作上の使用説明—処理

- 使用可能なすべてのサンプルについて BPC のオーバーレイを生成するには、**All Overlaid** を選択します。
- 現在アクティブなサンプルだけで BPC を生成するには、**Active Only** を選択します。

b. **OK** をクリックします。

Only show this dialog again if the shift key is down チェックボックスが選択されている場合は、ユーザーが **Shift** キーを押してオプションを変更するまで、選択されているアクションが使用されます。

データおよびピーク表の表示

実施前提手順

- [サンプルを開く](#)。

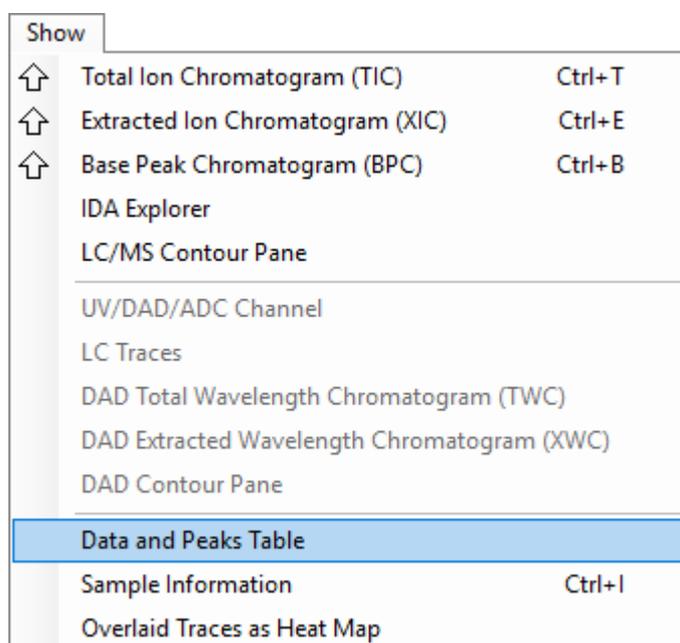
データおよびピーク表は、2 種類の表で構成されています。データ表にはデータセットを構成する生データの (X、Y) 値が表示され、ピーク表にはピーク自体の情報が表示されます。この表は、グラフがアクティブの場合に生成されます。

注: 表示されるのは、グラフの Y 軸に対して青い矢印を使用して設定した現在のしきい値を超えているピークだけです。次のセクションを参照: [グラフのデータの操作](#)。

この機能は、現在アクティブなデータに対して 2 種類の表で構成されたペインを表示する目的で使用します。2 種類の表とは、生データの (X、Y) 値が表示される表とピークのリストが表示される表です。

1. **Show > Data and Peaks Table** をクリックします。

図 6-6 : メニューを表示: データとピークの表



2. 次の表の手順を使用します。

表 6-1: データおよびピークテーブルの機能

実行する操作	実行する作業
そのフィールドを基準として表を並べ替える	列見出しをクリックします。
現在選択されているセルをコピーする	表内で右クリックして、 Copy をクリックします。Data タブがアクティブの場合は、選択されている Y 値および Y 値がコピーされます。Peaks タブがアクティブの場合は、選択されているピーク情報がコピーされます。
選択した行だけをコピーする	まず行選択列でドラッグして行を選択してから、 Shift または Ctrl キーを使用して複数の行を選択します。次に、表内で右クリックして、 Copy をクリックします。
複数の列を選択する	Ctrl キーを押しながら列見出しをクリックします。単に列見出しをクリックした場合は、列が並べ替えられます。
表全体をコピーする	Edit > Select All をクリックし、 Edit > Copy をクリックします。
テキストとしてデータをエクスポートする	ペイン内で右クリックし、 Export Data as Text をクリックします。 指定したファイルにデータリスト全体を保存します。x 値と y 値はタブで区切られており、各 (x, y) ペアの後にはハードリターンが続きます。
テキストとしてピークリストをエクスポートする。	ペイン内で右クリックし、 Export Peak List as Text をクリックします。 指定したファイルにピークリスト全体を保存します。これには、関連付けられたグラフの Y 軸で設定されている現在のしきい値を下回っているピークは含まれません。ピークメトリックはタブで区切られ、各ピークの後にはハードリターンがあります。

3. 化合物のピーク領域、強度、質量、および電荷状態を確認します。ピーク領域、強度、質量、フルスキャンデータタイプの場合のみは、化合物の電荷状態を確認します。

サンプル情報の表示

実施前提手順

- サンプルを開く。

Sample Information ペインには、アクティブデータの取得に使用されている実験の説明がテキスト情報として表示されます。この情報には、サンプル名やデータ収集に関する情報(実験の回数やタイプなど)といった、サンプルに固有の情報が含まれています。

同一のデータファイルの異なるサンプルに関連付けられた複数の Sample Information ペインが表示されている場合は、いずれかのペインのツリービューで項目をクリックすると、他のすべてのペインでは対応するセクションまでスクロールします。これは、すべてのペインに同じ名前を持つセクションが存在することを前提とした機能です。この機能は、2つの類似した(ただし同一ではない) Sample Information ペインを比較する場合に便利です。

Show > Sample Information をクリックします。

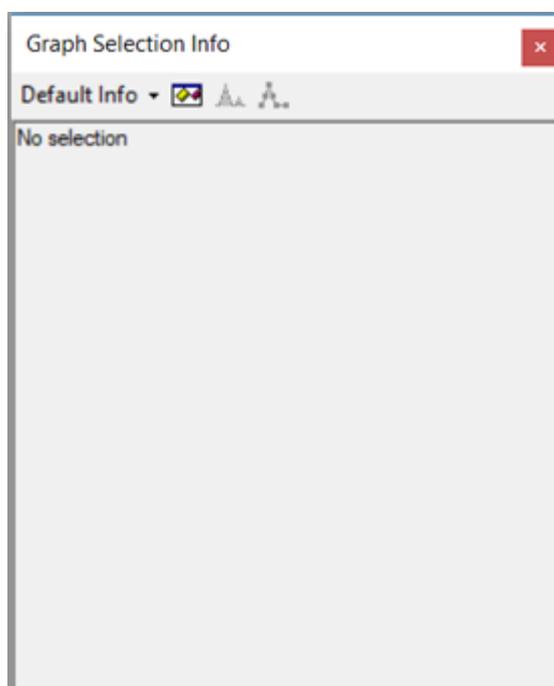
グラフ選択情報の表示

実施前提手順
<ul style="list-style-type: none">• サンプルを開く。

Graph Selection Information ダイアログは、クロマトグラムまたはスペクトルで選択されている領域の情報が表示され、このようなペインのいずれかがアクティブの場合に生成されます。

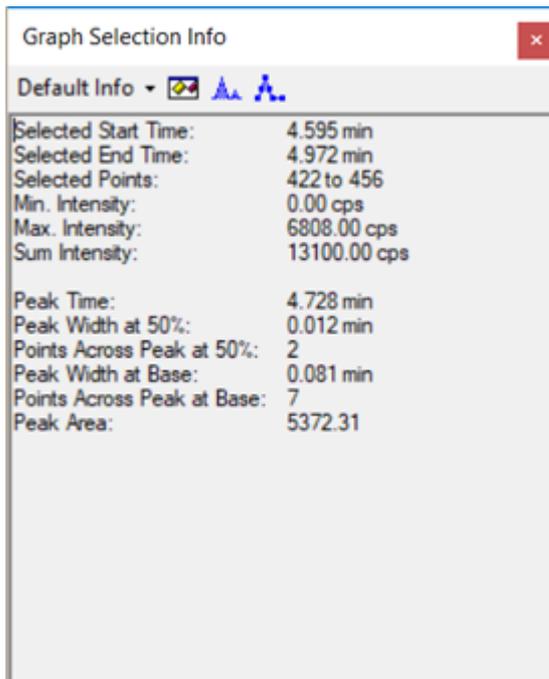
1. **Window > Graph Selection Window** をクリックします。

図 6-7 : Graph Selection Info ダイアログ



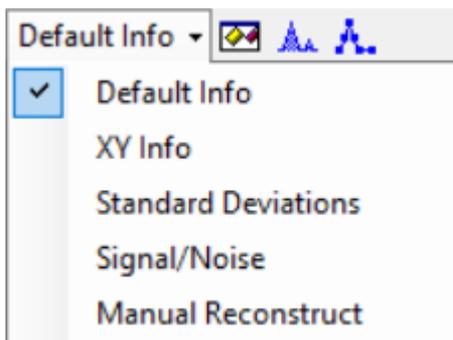
2. クロマトグラムまたはスペクトルグラフで 1 つ以上の選択を行います。

図 6-8 : Graph Selection Info ダイアログ



3. リストからオプションを選択します。**Default Info**、**XY Info**、**Standard Deviations**、**Signal/Noise**、または **Manual Reconstruct** (該当する場合)。

図 6-9 : 選択情報オプション



ダイアログのフィールドの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

4. (オプション) S/N 比を手動で計算します。
 - a. クロマトグラフを選択するか、Mass Reconstruction ワークフローで再構成グラフを選択します。
 - b. ノイズ領域とターゲットピークの両方を、**Shift** キーを使って複数選択します。
 - c. **Default Info > Signal/Noise** を選択します。
5. (オプション) **Options** (🔍) をクリックし、グラフ情報オプションを設定してから、**OK** をクリックします。オプションの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

操作上の使用説明—処理

たとえば、ノイズ乗数として3シグマを使用するには、**Noise multiplier for S/N** を3に設定します。

6. (オプション)**Fill Peaks** () をクリックします。
アクティブなグラフは、暗い塗りと明るい塗りを交互に使用してピークを塗りつぶすモードと、塗りつぶさないモードを切り替えます。この機能は、**Peak Width at Base** に対応するピークの範囲を確認する場合に便利です。
7. (オプション)**Show Point Symbols** () をクリックします。
アクティブペインのすべてのスペクトルは、データポイントをポイント記号で示すモードと、そのようにしないモードを切り替えます。この機能は、メインウィンドウに表示されるテキスト情報を使用するだけでなく、ピークを細かく調べ、どのくらいのデータポイント数で構成されているのかを確認する場合に便利です。

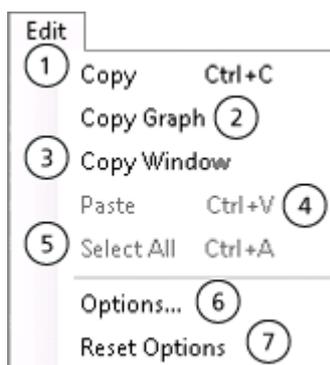
グラフの設定の編集

実施前提手順

- サンプルを開く。

Edit をクリックし、**Edit** メニューの機能を使用します。

図 6-10 : 編集メニュー:オプション



項目	説明
1	現在のデータをクリップボードにコピーします。スペクトルまたはクロマトグラムがアクティブの場合、そのアクティブなグラフの画像がコピーされます。
2	スペクトルまたはクロマトグラムがアクティブな場合、現在のグラフを画像としてクリップボードにコピーします。
3	アクティブなウィンドウ全体の画像をクリップボードにコピーします。ウィンドウのタイトルバーおよび各種ペインのツールバーは含まれません。
4	現在のビューのクリップボードからデータを貼り付けます。
5	表がアクティブの場合は、表内のすべての行を選択します。テキストペインがアクティブの場合は、すべてのテキストを選択します。

項目	説明
6	グラフの外観、ピークのラベル付けと検出、自動処理、XIC 範囲の計算に関するオプションを設定できます。次のセクションを参照： オプションの設定 。
7	デフォルトのエクスプローラオプションを復元します。次のセクションを参照： オプションのリセット 。

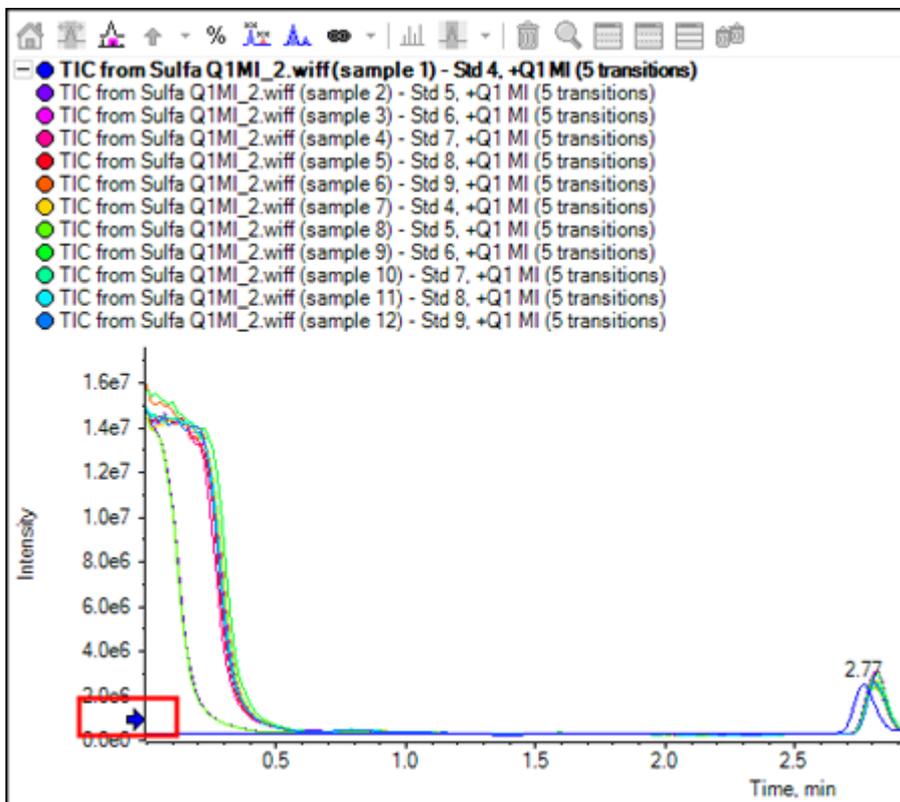
グラフのデータの操作

実施前提手順

- [サンプルを開く](#)。

1. ピークのラベル付けや、それに伴う **Data and Peaks** 表などの機能に対するしきい値を設定するには、グラフの Y 軸に表示される青い矢印をドラッグします。

図 6-11 : Y 軸の青い矢印



2. **Graph** メニューの機能を使用します。

図 6-12 : グラフメニュー:オプション



項目	説明
1	<p>後続の操作で処理されるグラフの部分を選択します。たとえば、クロマトグラムの領域を選択してダブルクリックし、平均スペクトルを取得します。Set Selection 機能を使用して具体的な X の範囲を入力すると、カーソルを使用した場合よりも正確に選択部分を設定できます。</p> <p>a. Graph > Set Selection をクリックします。 Expand Selection ダイアログが開きます。</p> <p>b. Center と Width の値を入力します。</p> <p>c. OK をクリックします。</p> <hr/> <p>ヒント! グラフ内での選択部分を手動で設定するには、プロット領域でカーソルをドラッグして選択を行います。Shift キーを押すと、現在の選択部分が保持されます。</p>

項目	説明
2	<p>プロットを目的として、指定した係数の範囲内で Y 値を拡大します。</p> <ol style="list-style-type: none"> a. 1 つまたは複数のサンプルを開きます。 b. グラフの部分を選択します。 c. Graph > Expand Selected Y-Values by をクリックします。 Expand Selection ダイアログが開きます。 d. 拡大係数を入力します。 e. OK をクリックします。
3	<p>すべての拡大範囲を解除します。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 拡大された範囲が存在するグラフで、Graph > Clear Expansion Ranges をクリックします。
4	<p>現在アクティブなトレースがグラフから削除されます。この機能は、重なっているトレースが複数存在する場合に使用できます。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 重なっているトレースが複数存在するグラフで、Graph > Remove Active Trace をクリックします。
5	<p>現在アクティブなトレースを除き、すべてのトレースが削除されます。この機能は、重なっているトレースが複数存在する場合に使用できます。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 重なっているトレースが複数存在するグラフで、Graph > Remove All Traces Except Active をクリックします。
6	<p>現在のしきい値設定を下回るすべてのデータポイントについて、重なっているトレースがグラフから削除されます。</p> <p>X 範囲の一部だけが表示されるようにグラフが現在ズームされている場合は、ダイアログが開きます。このダイアログでは、範囲全体を使用してしきい値を下回るトレースを削除するのか、現在表示されている部分だけを使用するのか選択できます。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 重なっているトレースが複数存在するグラフで、Graph > Remove Traces Below Threshold をクリックします。
7	<p>アクティブなグラフに重なっているトレースが複数存在する場合は、現在アクティブなトレースを除き、通常よりも薄い色合いで表示します。この機能は、アクティブなトレースを注視する場合に使用します。アクティブではないトレースは、目立たなくなります。元のスタイルに戻すには、もう一度この機能を選択します。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 重なっているトレースが複数存在するグラフで、Graph > Fade Inactive Trace をクリックします。
8	<p>アクティブなグラフに複数のオーバーレイされたトレースが含まれている場合、2 番目のトレースを反転します。これにより、類似する 2 つのトレースを視覚的に比較しやすくなります。元の表示に戻すには、Invert Second Overlay を再度選択します。</p>

項目	説明
9	<p>グラフを、個別のトレースをすべて合計した単一のトレースに置き換えます。</p> <ul style="list-style-type: none"> 重なっているトレースが複数存在するアクティブなグラフで、Graph > Sum Graph Traces をクリックします。
10	<p>個別のオーバーレイごとにグラフを作成します。たとえば、3つのトレースが重なったグラフでこの機能を選択すると、最終的には4つのペインで構成されることとなります。1つはオーバーレイが表示された元のグラフで、残りにはそれぞれ個別のデータセットが表示されます。</p> <ol style="list-style-type: none"> 重なっているトレースが複数存在するアクティブなグラフで、Graph > Split Traces into Separate Panes をクリックします。 列数ダイアログが開きます。 出力の列数を選択します。 必要な行数は、行数と重なっているトレースの数に基づいて決定します。 チェックボックスを選択して、新しいウィンドウでペインを開きます。チェックボックスが選択されていない場合、ペインは同じウィンドウ内に配置されます。
11	<p>Set Titles ダイアログが開きます。このオプションを使用して、トレースのタイトルを手動で変更します。</p>
12	<p>Color ダイアログが開きます。このオプションを使用して、現在アクティブなグラフトレースのカラーを設定します。</p>
13	<p>Set Trace Colors Using Titles ダイアログが開きます。複数のグラフトレースが重なっている場合、各オーバーレイにはデフォルトのカラーが使用されません。タイトルに特定のテキストが含まれているトレースに対して特定のカラーを使用する場合は、このオプションを使用します。</p>
14	<p>現在アクティブなグラフデータのコピーを作成し、グラフに追加します。この機能は、特定のデータ処理操作による影響を確認する目的で使用します。たとえば、この機能を使用してデータを複製し、2つのトレースのいずれかをスムージング処理すると、グラフには処理前と処理後のデータが重なって表示されることとなります。</p> <ul style="list-style-type: none"> アクティブなグラフで、Graph > Duplicate Active Data をクリックします。
15	<p>現在アクティブなグラフのコピーを作成します。この機能は、特定のデータ処理操作による影響を確認する目的で使用します。たとえば、この機能を使用してデータを複製し、2つのトレースのいずれかをスムージング処理すると、2つの独立したグラフに処理前と処理後のデータが表示されることとなります。一方のグラフをズームすると他方も自動的にズームされるように、X軸をリンクしておきます。</p> <ul style="list-style-type: none"> アクティブなグラフで、Graph > Duplicate Graph をクリックします。

項目	説明
16	Offset Traces ダイアログが開きます。このオプションは、重なっている一連のグラフトレースから 3 次元の積層グラフを作成する場合に使用します。
17	生成されたオフセットを TIC から削除します。

ダブルペインの操作ツールの使用

実施前提手順

- Explorer ワークスペースを開きます。

ペインの右端に並んでいるアイコンを使用して、2 つのペイン (ソースペインとターゲットペイン) で操作を実行します。次のセクションを参照: 表 6-2。どのような場合でも、ソースペインでアイコンをクリックして、ターゲットペインにドラッグします。

表 6-2 : ダブルペインのツール

アイコン	名称	説明
	Move Pane (ペインの移動)	<p>ペインの相対的な位置を変更します。各ペインの右上に表示されます。1 つのペインのアイコンをクリックして、第 2 のペインの上、下、左、または右側部分にドラッグします。カーソルが解放された場所に応じて、最初のペインは、第 2 のペインに関連して位置が変更されます。ペインをドラッグすると、第 2 のペインの 1 辺が赤で強調表示され、最初のペインが配置される場所が示されます。</p> <p>注: また、一方のウィンドウから他方のウィンドウにペインをドラッグすることもできます。</p>
	Add Data (データの加算)	<p>ポイントごとに 2 つのデータセットを合計します。最初にクリックしたソースペインのデータが、アイコンをリリースしたターゲットペインのデータに加算されます。変更したペインのタイトルが更新され、データが変更されたことを示します。</p> <p>注: 同じ種類の 2 つのデータセットのみを加算できます。たとえば、クロマトグラムにスペクトルを加算することはできません。</p> <p>ヒント! ターゲットグラフに複数の重なっているトレースが含まれている場合、デフォルトでは、ソースデータはアクティブなターゲットデータだけに加算されます。ソースをターゲットペインのすべてのデータセットに加算するには、Ctrl キーを押しながら操作します。</p>

表 6-2 : ダブルペインのツール (続き)

アイコン	名称	説明
	Subtract Data (データの減算)	<p>質量スペクトルからバックグラウンドを差し引きます。Add Data アイコンに似ていますが、ソースデータがターゲットデータから減算されます。</p> <hr/> <p>ヒント! ターゲットグラフに複数の重なっているトレースが含まれている場合、デフォルトでは、ソースデータはアクティブなターゲットデータからのみ減算されます。ソースをターゲットのすべてのデータセットに加算するには、Ctrl キーを押しながら操作します。</p> <hr/> <p>ヒント! 通常、ソースの強度がターゲットよりも高いデータポイントは保持されません。つまり、負の Y 値は破棄されます。負の強度を持つポイントを保持するには、Shift キーを押しながら操作します。</p>
	Overlay Data (データの重ね合わせ)	<p>ソースグラフのアクティブなデータをターゲットグラフにオーバーレイします。操作が完了すると、ターゲット グラフは、ターゲット データのコピーを含む新しい系列を含んだ状態になります。</p> <hr/> <p>ヒント! ソースグラフに複数の重なっているトレースが含まれている場合、デフォルトでは、アクティブなデータのコピーだけがターゲットグラフに移動されます。ソースグラフのすべてのデータセットのコピーをターゲットグラフ上でオーバーレイするには、Ctrl キーを押しながら操作します。</p>

ペインまたはウィンドウの移動

実施前提手順

- サンプルを開く。

Window をクリックし、**Window** メニューの機能を使用します。

図 6-13 : Window メニュー: オプション



項目	説明
1	アクティブなグラフで選択した領域の情報を表示するウィンドウが開きます。たとえば、選択した領域の X 範囲や選択したポイントの強度範囲などです。このウィンドウがすでに表示されている場合、このメニュー項目を選択するとウィンドウが閉じます。次のセクションを参照： グラフ選択情報の表示 。
2	ウィンドウ内の情報のレイアウトを行形式から列形式に変更します。
3	現在アクティブなペインをウィンドウから削除し、そのペイン単独で新規ウィンドウに配置します。
4	最小化されていない開いているウィンドウをすべて 1 行に並べて配置します。
5	最小化されていない開いているウィンドウをすべて 1 つの列で上下に並べます。

ガウシアンスムーズの実行

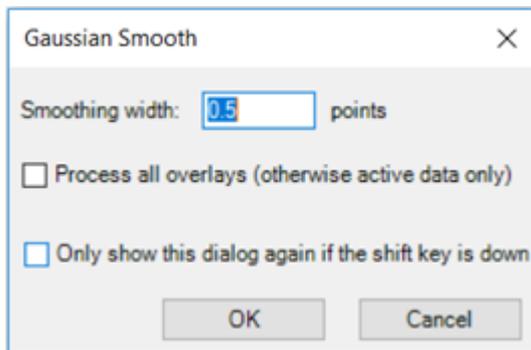
実施前提手順

- [サンプルを開く](#)。

ガウシアンスムーズアルゴリズムを適用します。指定された幅のフィルターであり、重み付け係数はガウシアン関数または「正規」関数に従います。

1. **Process > Gaussian Smooth** をクリックします。

図 6-14 : Gaussian Smooth ダイアログ



2. **Smoothing width** フィールドに値を入力します。
これは実際には、最大高の半分の位置におけるガウシアン関数の幅となります。計算はガウシアン関数の両翼に向かって実行されるため、全幅はさらに大きくなります。ガウシアン関数の半分の幅が 1 ポイント未満の場合は、小数値を使用できます。
3. アクティブなグラフに複数のトレースが存在する場合は、**Process all overlays (otherwise active data only)** を選択して、すべてのトレースに操作を適用します。

Only show this dialog again if the shift key is down チェックボックスが選択されている場合は、ユーザーが **Shift** キーを押してオプションを変更するまで、選択されているアクションが使用されます。

4. **OK** をクリックします。

データのしきい値

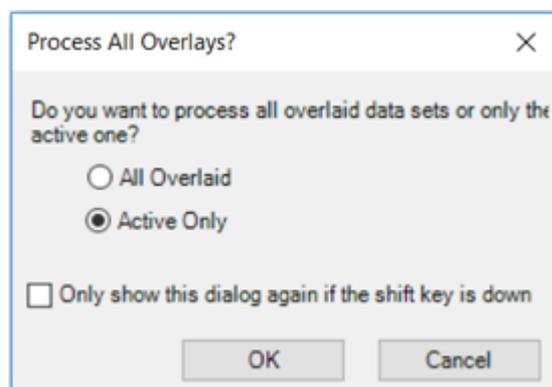
実施前提手順

- サンプルを開く。

現在のしきい値設定を下回る強度のデータポイントをすべて削除します。しきい値は、グラフの Y 軸に示されている青い矢印をドラッグして設定します。

1. **Process > Threshold Data** をクリックします。
アクティブなグラフに、別のサンプルとオーバーレイしている系列が含まれている場合は、すべてのオーバーレイを処理しますか？ダイアログが開きます。

図 6-15 : すべてのオーバーレイを処理しますか？ダイアログ



2. すべてのオーバーレイを処理しますか？ダイアログが開いたら、次の手順に従います。
 - a. 次のいずれかの操作を行います。
 - 使用可能なすべてのサンプルについて TIC のオーバーレイを生成するには、**All Overlaid** を選択します。
 - 現在アクティブなサンプルだけで TIC を生成するには、**Active Only** を選択します。
 - b. **OK** をクリックします。

Only show this dialog again if the shift key is down チェックボックスが選択されている場合は、ユーザーが **Shift** キーを押してオプションを変更するまで、選択されているアクションが使用されます。

グラフ選択を使用したサブセットデータ

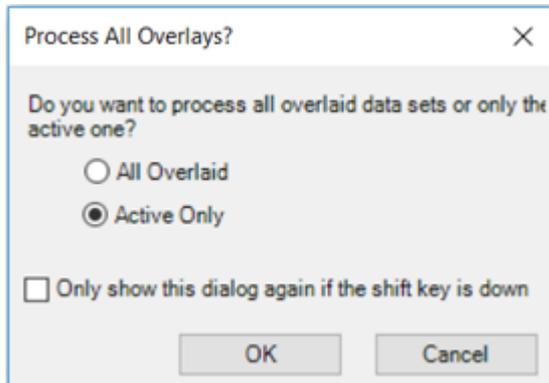
実施前提手順

- サンプルを開く。

この機能は、領域が1つだけ選択されているグラフがアクティブの場合のみ使用できます。選択されている領域外のデータポイントが削除されます。この機能は、データ全体のサブセットにデータ処理を集中させる場合に使用します。

1. グラフで選択を行います。
2. **Process > Subset Data (using graph selection)**をクリックします。
アクティブなグラフに、別のサンプルとオーバーレイしている系列が含まれている場合は、すべてのオーバーレイを処理しますか？ダイアログが開きます。

図 6-16 : すべてのオーバーレイを処理しますか？ダイアログ



3. すべてのオーバーレイを処理しますか？ダイアログが開いたら、次の手順に従います。
 - a. 次のいずれかの操作を行います。
 - 使用可能なすべてのサンプルについて XIC または TIC のオーバーレイを生成するには、**All Overlaid** を選択します。
 - 現在アクティブなサンプルだけで XIC または TIC を生成するには、**Active Only** を選択します。
 - b. **OK** をクリックします。

Only show this dialog again if the shift key is down チェックボックスが選択されている場合は、ユーザーが **Shift** キーを押してオプションを変更するまで、選択されているアクションが使用されます。

ベースライン補正クロマトグラム

実施前提手順

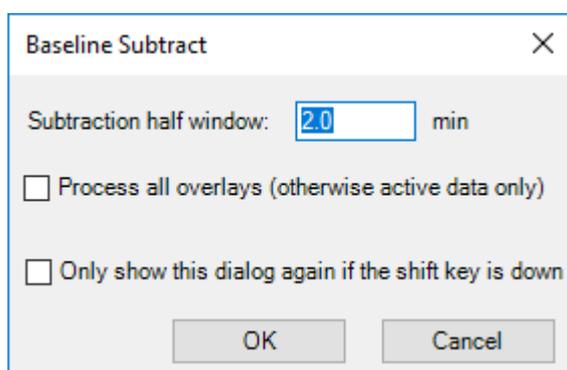
- サンプルを開く。

比較的ゆっくりと変化するバックグラウンドをクロマトグラムから削除します。

クロマトグラムの各データポイントについて、ウィンドウは対応する X 値の中央に配置され、ウィンドウの範囲内で最小の強度を持つポイントの左右両側にあるデータポイントが検出されます。また、これら 2 つのポイント間で直線が接続され、ウィンドウの中心で Y 値が計算されます。これは、そのポイントでデータから削除されたベースラインとなります。

1. **Process > Baseline Subtract Chromatogram** をクリックします。

図 6-17 : ベースライン補正ダイアログ



2. **Subtraction half window** フィールドに分単位の値を入力します。
3. アクティブなグラフに複数のトレースが存在する場合は、**Process all overlays (otherwise active data only)** を選択して、すべてのトレースに操作を適用します。
Only show this dialog again if the shift key is down チェックボックスが選択されている場合は、ユーザーが **Shift** キーを押してオプションを変更するまで、選択されているアクションが使用されます。
4. **OK** をクリックします。

クロマトグラムのオフセット

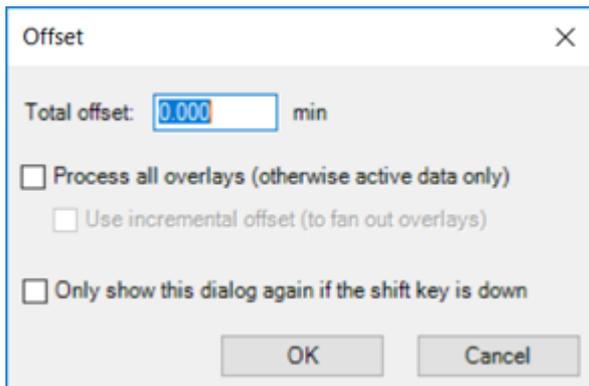
実施前提手順

- サンプルを開く。

クロマトグラムの時間値をオフセットする目的で使用します。

1. **Process > Offset Chromatogram** をクリックします。

図 6-18 : Offset ダイアログ



2. **Total offset** フィールドに分単位の値を入力します。
3. アクティブなグラフに複数のトレースが存在する場合は、**Process all overlays (otherwise active data only)** を選択して、すべてのトレースに操作を適用します。
Only show this dialog again if the shift key is down チェックボックスが選択されている場合は、ユーザーが **Shift** キーを押してオプションを変更するまで、選択されているアクションが使用されます。
4. 時間方向にオーバーレイを広げるには、**Use incremental offset (to fan out overlays)** を選択します。
5. **OK** をクリックします。

スペクトルのセントロイド作成

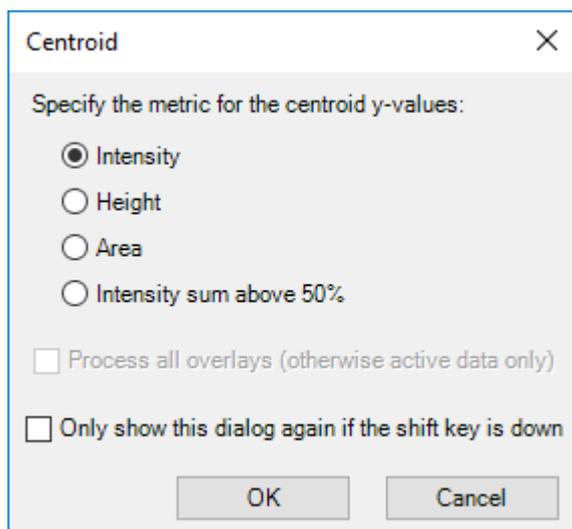
実施前提手順

- サンプルを開く。

質量スペクトルのセントロイドを作成します。つまり、プロファイルのスペクトルを検出されたピークだけの質量と強度ポイントで置き換えます。

1. **Process > Centroid Spectrum** をクリックします。

図 6-19 : Centroid ダイアログ



2. セントロイドプロセスに使用するメトリックを選択します。
 - **Intensity**: 各ピークについて、セントロイドの Y 値はピークを構成する最大データポイントの強度を表します。
 - **Height**: このメトリックは、ベースラインオフセットがある場合にベースライン強度によって強度が減算されることを除いて、強度メトリックと同様です。
 - **Area**: 各ピークについて、セントロイドの Y 値はピークの合計面積を表します。これは、報告される値が強度プロファイルとピーク幅の両方に依存するため真の積分といえます。
 - **Intensity sum above 50%**: 各ピークについて、Y 値はピーク頂点強度の 50%を超えるピークで構成された強度の合計を表します。この値は、Intensity および Height メトリックのように単一のデータポイントの強度だけに依存せず、ノイズの多いピークや干渉のあるエッジの影響を受けないので便利です。
3. アクティブなグラフに複数のトレースが存在する場合は、**Process all overlays (otherwise active data only)** を選択して、すべてのトレースに操作を適用します。
Only show this dialog again if the shift key is down チェックボックスが選択されている場合は、ユーザーが **Shift** キーを押してオプションを変更するまで、選択されているアクションが使用されます。
4. **OK** をクリックします。

テキストとしてデータをエクスポートする

実施前提手順

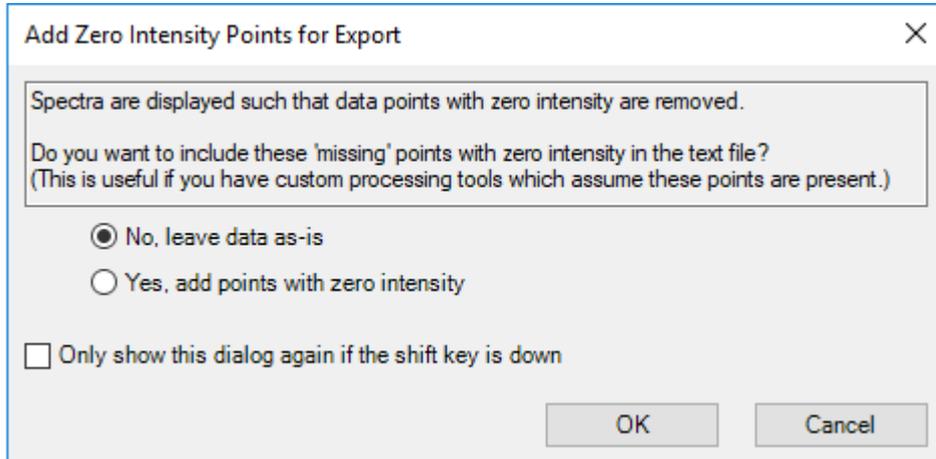
- サンプルを開く。

現在アクティブなスペクトルまたはクロマトグラムが、タブ区切りのテキストファイルに保存されます。

1. **File > Export > Data as Text** をクリックします。

スペクトルデータをエクスポートする場合は、Add Zero Intensity Points for Export ダイアログが開きます。

図 6-20 : Add Zero Intensity Points for Export ダイアログ



2. Add Zero Intensity Points for Export ダイアログが開いている場合は、次のいずれかを実行します。
 - **No, leave data as-is** をクリックして、強度がゼロのポイントをエクスポートファイルから除外します。
 - **Yes, add points with zero intensity** をクリックして、強度がゼロのポイントがエクスポートファイルに含まれます。

次に **OK** をクリックします。

3. エクスポートされたファイルのファイル名を入力します。
4. **Save** をクリックします。

テキストとしてピークリストをエクスポートする

実施前提手順

- サンプルを開く。

現在アクティブなスペクトルまたはクロマトグラムのピークリストは、タブ区切りのテキストファイルとして保存できます。このファイルには、セントロイドの X 値 (質量または時間)、ピーク領域、高さなどの情報が記録されています。

1. **File > Export > Peak List as Text** をクリックします。
2. エクスポートされたファイルのファイル名を入力します。
3. **Save** をクリックします。

データの印刷

実施前提手順

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• サンプルを開く。 |
|--|

1. **File > Print** をクリックして、必要なオプションを選択します。
Print ダイアログが開きます。
2. プリンタを選択して **Print** をクリックします。

オプションのリセット

実施前提手順

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• Explorer ワークスペースを開きます。 |
|--|

Explorer ワークスペースのすべてのオプションは、デフォルト値にリセットできます。これには、処理オプションだけでなく、前のセクションで説明したオプションも含まれます。オプションのリセットによる影響を受けるのは現在ログインしている Windows ユーザーだけで、同じコンピュータの他のユーザーは影響を受けません。

1. **Edit > Reset Options** をクリックします。
確認ダイアログが表示されます。
2. **OK** をクリックします。

オプションの設定

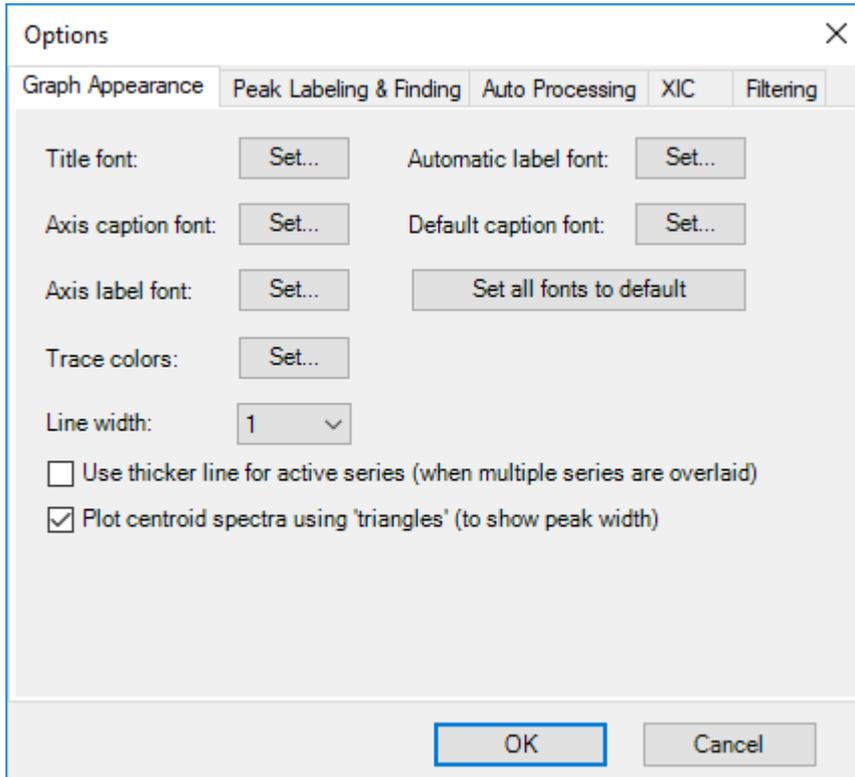
実施前提手順

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">• Explorer ワークスペースを開きます。 |
|--|

必要に応じて、各タブの機能を使用します。

1. **Edit > Options** をクリックします。

図 6-21 : Options (オプション)ダイアログ:Graph Appearance(グラフの外観)タブ



2. 必要に応じて、各タブでオプションを設定します。オプションの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
3. **OK** をクリックします。

Analytics ワークスペース

このワークスペースにある機能へのアクセスは、割り当てられた役割ごとに管理されています。次のドキュメントを参照: 『ラボ管理者ガイド』。

注: Analytics ワークスペースからのデータ出力制御方法は、Results Tables のエクスポート、LIMS へのデータ転送、およびレポートです。Results Tables からのコピーおよび貼り付けなどのその他の出力データソースは制御されていません。規制上、制御されていない出力メソッドを使用しないでください。

数値の桁区切りは Analytics ワークスペースではサポートされていません。数値を、積分パラメータなどのテキストボックスや、Results Table などのグリッドにグループ化しないでください。

処理メソッドには、積分用に選択したピークを定量するために使用される基準が含まれています。

レビューは、標準操作手順書(SOP)にあるピーク積分およびデータ合否基準に従ってデータを確認する必要があります。

SCIEX OS は、SCIEX OS または Analyst ソフトウェアによって取得されているデータを処理できません。取得したサンプルは、Results Table に追加できます。取得中のサンプルを追加するには、取得が完了するまで待ってから Results Table に追加します。

プロジェクトのデフォルト処理パラメータの定義

このオプションでは、処理メソッドを作成する際に使用されるデフォルトのピーク検出パラメータを設定します。コンポーネントが 2、3 個以上ある場合、クロマトグラフィに基づいてデフォルト値を設定し、それらをすべてのコンポーネントで個別に調整する必要がないようにします。しかし、すべてのコンポーネントに対して理想的なパラメータが 1 つもない可能性があり、そのためにいくつかのコンポーネントに対するパラメータのいくつかを調整する必要がある場合があります。

1. Analytics ワークスペースで、**Projects > Project default settings** をクリックします。

注: 状態パネルで正しいプロジェクト名が選択されていることを確認してください。

Project Default Settings (プロジェクトのデフォルト設定) ダイアログが開きます。

2. Quantitative Processing のページで、次の手順を実行します。
 - a. **Signal to Noise Algorithm** リストから S/N アルゴリズムを選択します。
 - b. **Integration Algorithm** リストから統合アルゴリズムを選択し、定量処理のデフォルトパラメータを設定します。

パラメータの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

3. Qualitative Processing のページで、**Library Search Algorithm** リストからライブラリ検索アルゴリズムを選択し、定性処理のデフォルトパラメータを設定します。

アルゴリズムの詳細な情報については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
4. Mass Reconstruction Processing (大量再構成処理) ページで、**Integration Algorithm** リストから統合アルゴリズムを選択し、Mass Reconstruction のデフォルトの統合パラメータを設定します。

パラメータの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

注: MQ4 および Summation アルゴリズムのみが使用可能です。

5. **Save** をクリックします。
6. **Close** をクリックします。

ワークスペースレイアウトの操作

ワークスペースレイアウト機能を使用して、カスタマイズされたワークスペースレイアウトを Analytics ワークスペースに保存します。カスタマイズされたレイアウトは結果ファイルとともに保存され、ファイルを開くと自動的に適用されます。これにより、ユーザーが結果を分析する際の時間を節約できます。保存されたワークスペースのレイアウトは、他の結果ファイルにも適用できます。また、プロジェクトのデフォルトのワークスペースレイアウトとして設定することもでき、そのプロジェクトの結果ファイルを開いたときに適用されます。ワークスペースのレイアウトは、ローカルネットワーク上を含め、どこにでも保存できます。

ユーザーは、保存されたさまざまなレイアウトを変更して、結果ファイルでさまざまなタイプのデータ分析を実行できます。

注: すべてのワークスペースレイアウトは、ファイル名の拡張子が `qlayout` で保存されます。

注: データを直接変更するような設定は、ワークスペースレイアウトには保存されません。

次の表は、ワークスペースのレイアウトで保存される UI 要素の一覧です。

表 6-3 : ワークスペースレイアウトで保存された UI 要素

ペイン	保存された UI 要素
Results Table	<ul style="list-style-type: none"> • Qualify for Rules Filters チェックボックス。 • 認定行フィルター。 • テーブルソートの選択。 • ハイライトされた行と列。 • Table display settings。 • 列フィルター。 <hr/> <p>注: ワークスペースレイアウトが別の Results Table に適用される場合、可能であれば、列フィルター設定が適用されます。フィルター処理された列が Results Table に存在しない場合、またはフィルター オプションが適用されない場合、設定は適用されません。</p>
Views メニュー	<ul style="list-style-type: none"> • Show hidden pane 設定。 • Tabbed view オプションが選択されているかどうか。
Samples またはコンポーネントとグループ	<ul style="list-style-type: none"> • Samples または Components and Groups のリストが開いているかどうか。 • 特定のサンプルまたはコンポーネントを選択して Results Table に表示するかどうか。 • Samples リストで、Options > Synchronize Sample Selection の設定。 • Components and Groups のリストで、All Internal Standards、All Analytes、All Components、および Groups (where applicable) オプションを選択。 • Components and Groups リストで、Options > Show IS の設定。
Peak Review	<ul style="list-style-type: none"> • Peak Review ペインが開いているかどうか、およびドッキングされているかどうか。 • 現在の View。 • 選択された任意の Options、Peak review display settings オプションおよび XIC Graph Title オプションを含む。

表 6-3 : ワークスペースレイアウトで保存された UI 要素 (続き)

ペイン	保存された UI 要素
Calibration Curve (キャリブレーションカーブ)	<ul style="list-style-type: none"> Calibration Curve ペインが開いているかどうか。 Options メニューの Show excluded standards、Show quality controls、Show legend、Use percent Y-axis、および Log-log plot 設定。
Metric Plot (メトリックプロット)	<ul style="list-style-type: none"> Metric Plot ペインが開いているかどうか。 Link メニュー設定 Regression (回帰) ダイアログの設定。 Options メニューの Display "N/A" as 0.0、Show sample names、Show legend、Use percent Y-axis、Start Y-axis at 0 および Connect with lines 設定。
統計ペイン	<ul style="list-style-type: none"> Statistics (統計) ペインが開いているかどうか。 アクティブな Sample grouping の選択。 アクティブな Metric の選択。

現在のワークスペースレイアウトを保存

1. Analytics ワークスペースを開きます。
2. Results Table を開きます。
3. 必要に応じて、ワークスペースのレイアウトをカスタマイズします。
4. **Views > Save current layout** をクリックします。
[ワークスペースレイアウトに名前を付けて保存]ダイアログが開きます。
5. ワークスペース レイアウトの名前を入力し、**Save** をクリックします。

現在のプロジェクトに別のワークスペース レイアウトを適用する

さまざまなワークスペース レイアウトを現在の結果ファイルに適用すると、ユーザーは同じデータに対してさまざまなタイプの結果分析をすばやく実行できます。

1. Analytics ワークスペースを開きます。
2. Results ファイルを開きます。
3. **Views > Apply different layout to current results** をクリックします。
[ワークスペース レイアウトの適用]ダイアログが開きます。
4. **Browse** をクリックし、レイアウトを選択して、**Open** をクリックします。
[ワークスペースレイアウトの適用]ダイアログには、選択したワークスペースレイアウトのプレビューが表示されます。
5. **OK** をクリックします。

ヒント! Views > Recent layouts をクリックしてレイアウトを選択することにより、最近使用したワークスペース レイアウトを適用します。

現在のワークスペース レイアウトをプロジェクトのデフォルトとして設定

プロジェクトのデフォルトのワークスペース レイアウトを設定すると、複数のセッションまたはユーザー間でレイアウトが保持されます。また、プロジェクト内で作成された新しい結果ファイルは、プロジェクトのデフォルトのワークスペース レイアウトで開かれます。

1. Analytics ワークスペースを開きます。
2. Results ファイルを開きます。
3. プロジェクトに合わせてワークスペースのレイアウトをカスタマイズします。
4. **Views > Set current layout as project default** をクリックします。
[Default Workspace Layout for the Project]ダイアログが開きます。
5. **Default layout name** フィールドにレイアウトの名前を入力し、**OK** をクリックします。
6. **Results > Save** をクリックします。

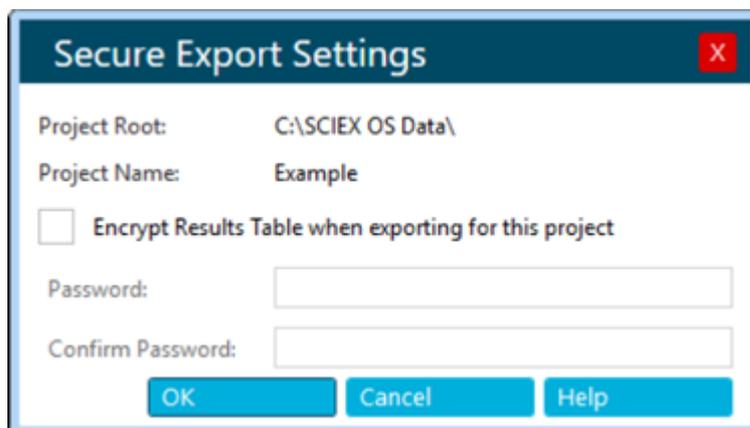
プロジェクトの安全エクスポート設定の設定

このタスクを実行できるのは、管理者の役割が割り当てられているユーザーだけです。

このオプションが選択された場合、テキストファイルにあるデータはエクスポートの間に暗号化されます。パスワードを設定して、暗号化を有効にします。

1. Analytics ワークスペースで、**Projects > Project secure export settings** をクリックします。

図 6-22 : Secure Export Settings ダイアログ



2. **Encrypt Results Table when exporting for this project** チェックボックスを選択します。
3. **Password** フィールドに、パスワードを入力します。
4. **Confirm Password** フィールドに、パスワードを再度入力します。
5. **OK** をクリックします。

Project Modified Peak Warning の有効化

デフォルトでは、このオプションは選択されていません。選択すると、ユーザーが Results Table のクロマトグラムを変更してから変更を保存すると、変更が行われたことを示す警告メッセージが表示されます。ユーザーは、保存を続行するか、Results Table に戻るかを選択できます。

Analytics ワークスペースで、**Projects > Enable project modified peak warning** をクリックします。

処理メソッドの作成

処理メソッドには、データ処理のための定量および定性設定が含まれます。非ターゲットワークフローは、未知のコンポーネントのために使用されます。

ヒント! 既存の処理メソッドを編集するには、**Process Method > Open** をクリックします。

1. Analytics ワークスペースを開きます。
2. **Process Method > New** をクリックします。

ヒント! 現在の Results Table の処理メソッドを編集するには、**Process Method > Edit embedded method** をクリックしてから、ステップ 3 に進みます。

3. Workflow ページを選択し、少なくとも 1 つのワークフローと参照サンプルを選択します。このページのフィールドの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

ヒント! Mass Reconstruction ワークフローを使用する場合は、**Quantitation** のみを選択します。

4. Components ページを選択し、次の手順を実行します。
 - a. 該当する場合は、**Options > Mass Reconstruction** をクリックして Mass Reconstruction ワークフローを選択し、確認ダイアログで **Yes** をクリックします。
 - b. コンポーネント表の完成この表のフィールドの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

注: Mass Reconstruction ワークフローは、統合アルゴリズムが **MQ4** または **Summation** に設定されている場合にのみ使用できます。

ヒント! Components の表でグループが定義されている場合、プレカーサーイオンと実験的指標がトランジションについて異なっている場合でも、ユーザーはグループ内のイオンを合計できます。合計イオンは表には表示されませんが、Integration ページと Results Table には **group name > Sum** という形式で表示されます。この機能は、タンパク質とペプチドの定量化に便利です。

ヒント! コンポーネントの保持時間が未知の場合、質量または化学式の **Retention Time Mode** を **Find n peaks** に設定します(ここでは、 n は 1、2、5、10、または all)。ソフトウェアは、最大ピーク領域を持つ機能の指定された数を特定し、適切な保持時間を割り当て、次にターゲットのピーク処理ワークフローを実行します。処理が完了したならば、Results Table の埋め込みメソッドは対象メソッドとして保存できます。

ヒント! テキストファイルからコンポーネントをインポートするか、コンポーネントと積分パラメータをインポートするには、**Import** メニューの適切なコマンドを使用します。コンポーネント情報に濃度単位が含まれていない場合は、Project Default Settings ダイアログで定義された **Concentration units** が使用されます。

注: AutoPeak 積分アルゴリズムを使用する処理メソッドから積分パラメータをインポートすることはできません。

注: 積分パラメータは、Analyst ソフトウェアの定量化メソッドからインポートできます。Analyst ソフトウェアのパラメータは、対応する SCIEX OS のパラメータにマッピングされ、マッピングできないパラメータにはプロジェクトのデフォルト設定が使用されます。

注: 積分パラメータは、SignalFinder アルゴリズムを使用しない MultiQuant ソフトウェア定量化メソッドからインポートできます。MQ4 メソッドの場合、**S/N Integration Threshold** は MultiQuant ソフトウェアのデフォルトの 0 からプロジェクトのデフォルトに変更されます。MultiQuant ソフトウェアのパラメータは、SCIEX OS の対応するパラメータにマッピングされています。

5. Integration ページを選択し、次の手順を実行します。
 - a. 各コンポーネントの統合パラメータを選択します。このページのフィールドの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

ヒント! Options > Remove Outliers Automatically をクリックして自動外れ値除外のルールを定義します。次のドキュメントを参照: 『ヘルプシステム』。

- b. (オプション)ノイズ領域を表示するには、**Options > Show Noise Regions** をクリックします。次のセクションを参照: [ノイズ領域の操作](#)。

注: **Show Noise Regions** は、S/N アルゴリズムが **Standard Deviation** または **Peak to Peak** に設定されている場合のみ表示されます。

6. (該当する場合)Library Search ページを選択し、次にライブラリ検索パラメータを定義します。このページのフィールドの説明については、『ヘルプシステム』を参照してください。
7. Calculated Columns ページを選択して、カスタム計算列に使用するカスタム式を定義します。このページのフィールドの説明については、『ヘルプシステム』を参照してください。

注: 計算列の詳細な情報については、次のセクションを参照: [計算列](#)。

8. Flagging Rules ページを選択して、Results Table で結果にフラグを立てるのに使用するルールを選択します。このページのフィールドの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
必要に応じて、フラグ設定ルールを作成するか、事前定義済みルールに対して以下の値をカスタマイズします。

- 以下の合格基準:
 - 標準および品質管理の精度
 - 未知のサンプルに対する算出濃度範囲

操作上の使用説明—処理

- ピーク積分
- 質量の精度のための信号設定、保持時間の信頼度、アイソトープの一致、ライブラリのスコア、および Formula Finder のスコア
- イオン比合否のための信号設定
イオン比とは、ピークレスポンスの比率です(クオリファイアおよびクオンティファイアの面積または高さ)。

ヒント! フラグ設定ルールをテキストファイルからインポートするには、**Import** をクリックします。

9. Formula Finder ページを選択し、次にフォーミュラファインダー設定を選択します。このページのフィールドの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
10. Non-targeted Peaks ページ(非ターゲットワークフローが選択されている場合)を選択し、非ターゲット検索パラメータを定義します。このページのフィールドの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
11. **Save** をクリックします。

ヒント! 非ターゲットメソッドを作成する場合、ピーク積分には現在のプロジェクトのデフォルトパラメータが使用され、それらのパラメータが処理メソッドファイルに保存されます。処理メソッドにターゲット分析試料が含まれている場合、ターゲット化合物に対してカスタマイズされた積分パラメータが非ターゲットピーク解析に影響を与えることはありません。後でプロジェクトのデフォルトパラメータに変更を加えても、変更されたパラメータが既存の非ターゲットメソッドに影響を与えることはなく、メソッドの作成時点のパラメータが引き続き含まれることになります。変更したパラメータが使用されるのは、新たに作成した非ターゲットメソッドだけです。

データを処理

1. Analytics ワークスペースを開きます。
2. **Results > New** をクリックします。
3. Process New Results ダイアログで、矢印( および )を使用して、処理するサンプルを選択します。
4. 次のいずれかの方法で処理メソッドを選択します。
 - **Browse** をクリックしてから処理メソッドを選択し、**Open** をクリックします。
 - **New** をクリックします。新しい処理メソッドを作成します。次のセクションを参照: [処理メソッドの作成](#)。
5. (オプション)**Edit** をクリックして処理メソッドを編集します。次のセクションを参照: [処理メソッドの作成](#)。
6. 非ターゲットワークフローのための比較サンプルを選択します。
7. **Process** をクリックします。

注: 非ターゲット分析では、付加物別のグループ化が自動で行われます。このグループ化アルゴリズムでは、保持時間が同じ化合物について、それらの質量差が一般的な付加物に関連するものである場合、付加物変更子が割り当てられます。この機能により、電荷付加が異なる、重複する化合物を調査しなくて済みます。

データに、事前定義された結果テーブル列または既存の式と同じ名前のカスタムバッチ列が含まれている場合、警告メッセージが表示されます。**OK** をクリックして続行します。これらの列名の先頭にアンダースコア(_)が追加されます。

8. サンプルタイプを表示または非表示にするには、**Sample Type** 列のフィルターアイコン(▼)をクリックし、必要なチェックボックスを選択またはオフにします。
9. 合否フィルターを設定するには、いずれかの合否列でフィルターアイコン(▼)をクリックし、**Filter by Flag** を選択してから、**Pass** または **Fail** を選択します。

注: 合否列には、**Accuracy**、**Accuracy Acceptance**、**Asymmetry Factor**、**Calculated Concentration**、**Concentration Acceptance**、**Integration Acceptance**、**Quality Retention Time Delta (min)**、**Retention Time Error (%)**、**Total Width** が含まれます。

10. 定量化信頼フィルターを選択するには、**Confidence** 信号灯をクリックし、次に必要なチェックボックスを選択またはオフにします。

注: AutoPeak アルゴリズムを使用して Results Table を生成した場合、ユーザーが XIC 幅と予測される RT を変更しても、新しい XIC 幅と Expected RT の値を使用してモデルを更新していない限り、以前のアルゴリズムモデルを使用してデータが処理されます。

11. Results Table 列の個々の値に基づいてフィルタリングするには、列ヘッダーのフィルターアイコン(▼)をクリックし、Results Table に表示する値のチェックボックスを選択します。

ヒント! 追加のカスタムフィルターを適用するには、**Text Filters** を選択します。

ヒント! Results Table の面積カウントなどを変更した後にフィルターを再適用するには、**Reapply Filter**()をクリックします。

12. 次のいずれかの方法で結果ファイルを保存します。
 - **Results > Save** をクリックします。
 - Results Table が変更されないようにするには、**Results > Lock results file and save** をクリックします。

サンプルを追加

前提条件

- Analytics ワークスペースで、Results Table が開きます。

このオプションで、追加的なサンプルを現在有効な Results Table に追加します。

1. **More > Add samples** をクリックします。

操作上の使用説明—処理

2. Select Samples ダイアログで、必要なサンプルを選択します。
 - Available ペインは、サブフォルダ、.wiff2 ファイル、および現在のプロジェクトのための **Data** フォルダで利用可能なサンプルを示します。
 - 個別のフォルダを、サブフォルダや.wiff2 ファイルを見るために拡張します。.wiff2 ファイルを展開すると、それが開いて利用可能なサンプルを表示します。
 - 矢印を使用して、サンプルの追加()や削除()を行います。
 - 次の方法でサンプルを選択します。
 - 個々のサンプルをダブルクリックします。
 - サンプルまたはデータファイルを選択し、 をクリックします。
 - 左ペインから右ペインにサンプルまたはデータファイルをドラッグします。

複数のファイルまたはサンプルを移動するには、**Shift** または **Ctrl** を押しながら移動したいファイルを選択します。
3. **OK** をクリックします。

新しいサンプルが積分され、既存の表に追加される間は、進行バーが表示されます。

Results Table のレビュー

前提条件
<ul style="list-style-type: none">• Analytics ワークスペースで、Results Table が開きます。

数値フォーマットと Results Table で表示される列を選択します。列設定は、プロジェクトにある Results Table のすべてに適用できます。

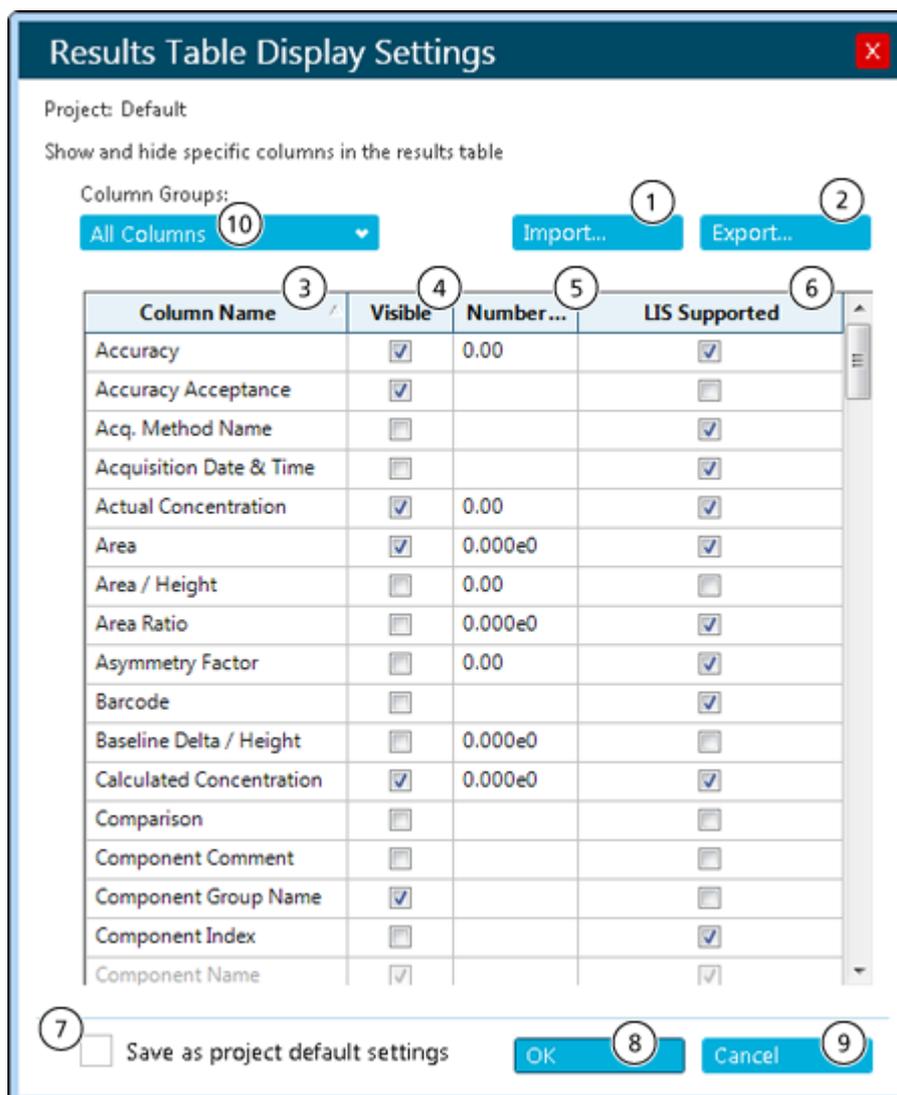
注: **Sample Name**、**Sample ID**、**Barcode** などの重要な列は、Results Table の列設定をカスタマイズしたときに非表示にならないようにしてください。

ヒント! 列名が切り詰められている場合、そのフィールドの上にカーソルを移動すると、列名がツールチップとして表示されます。

1. **More > Table display settings** をクリックします。

Results Table Display Settings ダイアログが開きます。Results Table の列の説明については、次のセクションを参照: [Results Table の列](#)。

図 6-23 : 「Results Table の表示設定」ダイアログ



項目	説明
1	クリックすると、Export ボタンを使用して以前に保存した列設定ファイルを選択できます。ダイアログの各フィールドは、選択したファイルの情報を使用するために更新されます。
2	クリックすると、現在の列設定をファイルに保存できます。このような設定は、Import ボタンを使用してインポートおよび使用します。このオプションを使用することで、異なる列レイアウトを切り替えられます。
3	列の名前がアルファベット順に表示されます。 注: このリストには、Results Table を作成するのに使用された処理メソッドで定義されている計算列も含まれています。
4	チェックマークは、列が表示されることを示します。

項目	説明
5	数値フィールドでは、科学的ではない通知にはフォーマット 0.00 を使用し、科学的な通知にはフォーマット 0.00e0 を使用します。小数点を変更して、表示される数字の精度を示します。インポートされる.csv または.xsl ファイルでは、小数点の記号としてピリオド「.」小数点の記号として使用できます。 注: 桁区切りには、対応していません。
6	LIS Supported 行の選択は LIMS によって事前定義されており、列選択は変更できません。
7	クリックすると、列設定を今後の Results Table で使用できます。
8	クリックすると、変更を適用して、ダイアログを閉じます。
9	クリックすると、変更を破棄して、ダイアログを閉じます。
10	Results Table の列のカテゴリを選択します。Results Table に表示される列は、選択内容に基づいてフィルタリングできます。カテゴリを選択しておくことで、Results Table の列を容易に見つけることができます。

- 必要に応じて、**Visible** 列のチェックボックスを選択またはオフにします。

注: セクション [Results Table の列](#) で説明されている列に加えて、Results Table には、カスタム計算列とテキスト列を含めることができます。計算列はアスタリスクで識別されます。

- (オプション) **Number Format** 列で、フォーマットを整数または科学的通知に変更します。
- (オプション) **Number Format** 列で、表示する小数点以下の桁数を変更します。
- OK** をクリックします。
新しい設定が、Results Table に適用されます。このような設定は、新しい Results Table を作成する場合だけでなく、以前に保存した Results Table を再度開いた場合にも適用されます。

ヒント! 列幅と列の順序を調整するには、Results Table のヘッダー行を使用します。幅を変更するには、ヘッダーの境界線をドラッグします。列の順序を変更するには、列のヘッダーを Results Table の別の位置にドラッグします。列のヘッダーにあるフィルターアイコン(▼)をクリックして列にフィルターを適用します。**Export** ボタンを使用して Results Table をエクスポートする場合、列の幅、順序、フィルター設定がエクスポートしたファイルに保存されます。

レポートの作成

前提条件

- Analytics ワークスペースで、Results Table が開きます。

ヒント! 報告書に含む分析試料を選択するには、Results Table の **Reportable** 列を使用します。次のセクションを参照: [Results Table の列](#)。

- Reporting > Create Report and Save Results Table** をクリックします。

Create Report(レポートの作成)ダイアログが開きます。

2. **Template name** リストからテンプレートを選択します。
3. レポートフォーマットを選択します。
4. ファイル名と場所を変更するには、**Browse** をクリックして別の場所に移動し、**File name** と入力してから **Save** をクリックします。

注: デフォルトでは、レポートは
ProgramData\SCIEX\Analytics\Reporter\Reports に保存されます。

5. 必要に応じて、**Create an individual report for each sample** チェックボックスをクリックします。
6. (オプション)レポートに別のロゴを選択します。
 - a. **Replace Logo** をクリックします。
 - b. 必要に応じて、Replace Logo ダイアログにあるオプションを使用して、ロゴを修正します。
 - c. **Save** をクリックします。
 - d. **Cancel** をクリックします。
7. **View Pages** をクリックして、レポートのレイアウトを表示します。
8. **Create** をクリックします。

ヒント! Per Sample Quant、Per Sample Qual、Per Sample Visible Rows Using Visible Analytes、または Positive Hits Qual などのテンプレートを使用して選択した結果を報告するには、フィルターを使用するか、Results Table の不要な行を非表示にします。

ヒント! Create Report ダイアログの **Template View** の例をクリックして、レポートテンプレートのレイアウトを表示します。特定のテンプレートを表示するには、サフィックス[Snapshot_X]に加えて、テンプレートと同じ名前の jpg ファイルが必要です。X はシーケンスのスナップショット番号です。ファイル名とサフィックスの間にはスペースを入れないでください。

たとえば、All Peaks Qual.docx テンプレートの場合、ファイル名は All Peaks Qual[Snapshot_1].jpg All Peaks Qual[Snapshot_2].jpg All Peaks Qual[Snapshot_3].jpg のようになります。

Results Table をエクスポートして保存

前提条件

- Analytics ワークスペースで、Results Table が開きます。

ヒント! エクスポートする分析試料を選択するには、Results Table の **Reportable** 列を使用します。次のセクションを参照: [Results Table の列](#)。

1. **Reporting > Export results > Export and save Results Table** をクリックします。

操作上の使用説明—処理

Export ダイアログが開きます。

2. 必要に応じてオプションを選択します。
オプションの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
3. **OK** をクリックします。

Results Table のエクスポート – メトリック

前提条件

- | |
|---|
| <ul style="list-style-type: none">• Analytics ワークスペースで、Results Table が開きます。 |
|---|

注: メーカーは、データが Analytics ワークスペースからエクスポートされた後の間接的または派生的な損害を含む偶発賠償責任に対して一切の責任を負いません。

Exporting Results Tables は、Analytics ワークスペースでのデータ出力用に制御されたメソッドの 1 つです。

この機能は、有効な Results Table の情報を含むタブ区切りのテキストファイルを作成するために使用されます。情報は、すべてのサンプルおよびすべてのコンポーネントまたは 1 つの選択したメトリックやフィールド用の見ることができるコンポーネントだけのいずれかのためにエクスポートされません。

1. **Reporting > Export results > Results Table - Metric** をクリックします。
Export Metric ダイアログが開きます。
2. **Metric** フィールドでエクスポートする列を選択し、オプションを設定します。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
3. **OK** をクリックします。

結果を Watson LIMS に転送

前提条件

- | |
|---|
| <ul style="list-style-type: none">• Results Table が開いてロックされています。• Watson LIMS ソフトウェアが開いています。 |
|---|

注: 結果テーブルの列のサブセットが転送されます。これには、非表示の列と **Reportable** として指定されていない列が含まれます。

1. **Reporting > Initiate Transfer to Watson LIMS** をクリックします。
転送ダイアログが開きます。
2. Watson LIMS ソフトウェアでデータをインポートします。
3. SCIEX OS の転送ダイアログで、次のいずれかを実行します。
 - 転送が正常に完了した場合は、**Confirm** をクリックします。

- 転送が正常に完了しなかった場合は、**Decline** をクリックします。

結果を別の LIMS に転送

実施前提手順

- Configuration ワークスペースで LIMS を構成します。次のセクションを参照：[ラボ情報管理システム \(LIMS\) の設定の選択](#)。
- ロックされた Results Table を開きます。

ヒント! エクスポートする分析試料を選択するには、Results Table の **Reportable** 列を使用します。次のセクションを参照：[Results Table の列](#)。

1. **Reporting > Transfer Results to LIMS** をクリックします。
LIMS Transfer ダイアログが開きます。
2. **Template** リストからテンプレートを選択します。
3. **Transfer** をクリックします。

Results Tables の操作

Results Table では、キャリブレーションカーブに基づいて、未知の各サンプル内の分析試料の算出濃度、およびライブラリヒットや Formula Finder 結果などの定量分析結果などが要約されます。Results Table には、キャリブレーションカーブと結果の統計も含まれます。Results Tables をカスタマイズし、Results Tables をレイアウトで閲覧できます。

注: アスタリスク(*)の付いた Results Table の列は、カスタムテキスト列または計算列です。

Results Table のデータは txt ファイルにエクスポートし、Microsoft Excel などの他のアプリケーションで使用できます。ユーザーは、Results Table 内のデータすべて、または表示した列のデータのみをエクスポートできます。

ヒント! Results Table の複数のセッションが垂直または水平にタイル化されている場合、**Views > Reset layout** をクリックすると、Results Table が元のレイアウトに戻ります。

右クリックメニューを使用して、Results Table の行を編集します。このメニューを表示するには、Results Table の任意の場所でマウスの右ボタンをクリックします。

図 6-24 : 右クリック メニュー

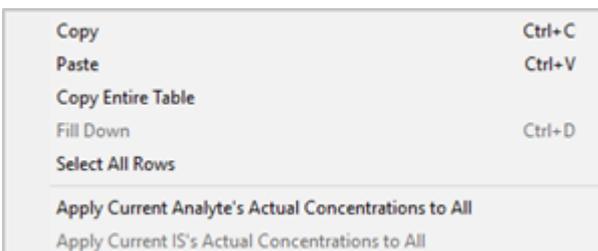


表 6-4 : 右クリック メニューコマンド

ラベル	説明
Copy	(コピー)Copy このオプションを使用して、現在のデータをクリップボードにコピーします。
Paste	(貼り付け)このオプションを使用して、データをクリップボードから現在のビューに貼り付けます。
Copy Entire Table	(表全体をコピー)このオプションを使用して、表全体をクリップボードにコピーします。
Fill Down	(下方向にコピー)(コンポーネント)このオプションをコンポーネントを使用して、最初を選択した行の情報を続いて選択したすべての行に複製を作ります。
Select All Rows	(すべての行を選択)このオプションは、現在アクティブの Results Table の行をすべて選択する際に使用します。選択した行で操作を行う Copy などのコマンドを後で適用したい場合に便利です。
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All	<p>(現在の分析試料の実際の濃度をすべてに適用)(分析試料)分析試料が 1 つ以上ある場合、および分析試料すべてが同じ濃度のこれらのサンプルに存在する場合、このオプションを使うと標準サンプルの分析試料すべてに対する実際の濃度フィールドを設定するショートカットが使用できます。この機能を使用するには:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Components and Groups List を使うと、表の中の特定の 1 つの分析試料のみが表示されます。次のセクションを参照:コンポーネントとグループのリスト。 2. (オプション)Sample Type 列をフィルタリングすると、標準サンプルのみが表示されます。 3. セルに入力するか、列を選択してテキストを貼り付けることにより、分析試料の実際の濃度を指定します。 4. Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All を選択します。 <p>必要に応じて、すべてのコンポーネントとサンプルタイプの表示に戻ります。</p>

表 6-4 : 右クリック メニューコマンド (続き)

ラベル	説明
Apply Current IS's Actual Concentrations to All	<p>(現在の IS の実際の濃度をすべてに適用) (内部標準) 内部標準が 1 つ以上ある場合、および内部標準すべてが同じ濃度のこれらのサンプルに存在する場合、このオプションを使うと標準サンプルの内部標準すべてに対する実際の濃度フィールドを設定するショートカットが使用できます。この機能を使用するには:</p> <ol style="list-style-type: none"> Components and Groups List を使うと、表の中の特定の 1 つの分内部標準のみが表示されます。次のセクションを参照: コンポーネントとグループのリスト。 (オプション) Sample Type 列をフィルタリングすると、標準サンプルのみが表示されます。 セルに直接入力するか、または列を選択してテキストを貼り付けるかして、内部標準の実際の濃度を指定します。 Apply Current IS's Actual Concentrations to All を選択します。 <p>必要に応じて、すべてのコンポーネントとサンプルタイプの表示に戻ります。</p>

Results Table フィルター

Results Table の上部にある各フィールドにより、結果の確認とフィルタリングを行うことができます。

図 6-25 : フィルター管理



表 6-5 : Results Table フィルター

ラベル	説明
x of y rows	(x/ y 行) 全行数 (y) のうち表示されている行数 (x) が表示されます。
Filters	(フィルター) フィルターが適用されている列数が表示されます。
Qualify for Rules Filters	(ルールフィルターの認定) Results Table のビューを、合否基準フィルターまたは信頼信号フィルターに一致する行と一致しない行の間で切り替えます。合否基準および信頼性信号は、処理メソッドで適用します。

表 6-5 : Results Table フィルター (続き)

ラベル	説明
Reapply Filter	(フィルターを再適用) Results Table で面積カウントなどを変更した後に、フィルターを再適用します。 注: フィルターを追加または変更すると、すべてのフィルターが自動で再適用されます。
Clear	(クリア)すべてのフィルターをクリアします。

Results Table の列

注:

- アスタリスク(*)の付いた列は、カスタムテキスト列、計算列、または結合されたフラグ設定ルールの結果として作成された列です。
- アンダースコア(_)で始まる名前の列は、事前定義された Results Table の列または式と同じ名前のカスタムバッチ列です。
- **Format** 列は、フィールドが数式で検証される方法を示します。
- 数値を含む列では、数値の書式と有効桁数を変更できます。**Number Format** 列で **Decimal**、**Significant Digits**、または **Scientific Notation** から選択し、Results Table Display Settings ダイアログの **Number Format Precision** 列に有効桁数を入力します。

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Accuracy	(精度)標準および品質管理(QC)サンプルの精度を示します。その他のサンプルタイプでは、この値を N/A に設定します。 既知の濃度の標準については、標準サンプルおよび QC サンプルの精度は $100\% \times (\text{Calculated Concentration}) / (\text{Actual Concentration})$ という式で導かれます。	数値	Y
Accuracy Acceptance	(精度承認)精度の合否状態を表示します。	Text	N
Acq. Method Name	(取得メソッド)サンプルの取得に使用した取得メソッド名を表示します。	Text	Y
Acquisition Date & Time	(取得の日時)サンプルを取得した日時を表示します。	Text	Y
Actual Concentration	(実際の濃度)標準および QC サンプルの場合、予測される既知の濃度を示します。	数値	Y

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Adduct/ Charge	(アダクト/チャージ)化合物の付加または電荷状態を表示します。ターゲットワークフローでは、この値をユーザーが設定します。非ターゲットワークフローでは、付加ごとのグループ化が有効になっている場合、この値はソフトウェアによって自動的に設定されます。	Text	N
Area	(領域)検出されたピーク領域を表示します。ピークが検出されていない場合、この値は N/AN/A に設定されます。	数値	Y
Area / Height	(面積/高さ)検出されたピーク領域を高さで割った値を表示します。ピークが検出されていない場合、この値は N/A(N/A)に設定されます。	数値	N
Area Ratio	(面積比)内部標準を使用する分析試料の場合、分析試料 Area と IS Area の比率を示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A(N/A)に設定されます。	数値	Y
Area Ratio of comparison	(比較面積比)サンプル/コントロールサンプルの面積比を表示します。 <ul style="list-style-type: none"> コントロールでピークが検出されない場合、値は N/AN/A となります。 サンプルでピークが検出されない場合、値は 0 となります。 サンプルのすべてのピークが Area Ratio Threshold 未満の場合、値は N/A(N/A)となります。 比較サンプルが含まない使用されていない場合、値は No control sample(コントロールサンプルなし)となります。 コントロールサンプルについて、検出されたピークでの面積比は常に 1 となります。 <p>定性分析のワークフローだけに適用されます。</p>	数値	N

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Asymmetry Factor	(非対称係数)ピークの中心線からバックスロープまでの距離をピークの中心線からフロントスロープまでの距離で割った値で示します。すべての測定は、最大ピーク高さの10%で行われています。	数値	Y
AutoPeak Asymmetry	(AutoPeak 非対称)解析したピークのアシメトリー対モデルに基づいて予測したシメトリーの比率を表示します。比率 1 は良好な一致を示します。値が 1 でない場合、イオン源が飽和しているか、解析が正しくない可能性があります。 AutoPeak 積分アルゴリズムを使用する処理メソッドにのみ適用されます。	数値	N
AutoPeak Candidate Model Quality	(AutoPeak 候補モデルの品質)ピークモデルの作成に用いるためのピークの適格性を表示します。値が 1 よりも著しく大きい場合、定量化メソッドの作成に使用するサンプルとして不適格です。反応が大きいピークを使用してモデルを作成し、そのピークをすべてのサンプルに適用します。 AutoPeak 積分アルゴリズムを使用する処理メソッドにのみ適用されます。	数値	N
AutoPeak Group Confidence	AutoPeak グループの信頼性実際のピークのグループが解析され、解析は偽陽性のノイズピークを含まない可能性を示します。 AutoPeak 積分アルゴリズムを使用する処理メソッドにのみ適用されます。	数値	N
AutoPeak Integration Quality	(AutoPeak 積分品質)データの品質を示します。品質は 0~1 の値として示されます。品質が 0.6 未満の場合は、積分についてさらに調査します。 AutoPeak 積分アルゴリズムを使用する処理メソッドにのみ適用されます。	数値	N

ラベル	説明	形式	LIS 対応
AutoPeak Model Source	<p>(AutoPeak モデルソース)ピークのモデリングに使用されたサンプル名とコンポーネント名を表示します。モデリングに使用されるコンポーネント名が、解析されるコンポーネント名と同じでない場合、モデルをレビューして適切かどうか決定します。</p> <p>AutoPeak 積分アルゴリズムを使用する処理メソッドにのみ適用されます。</p>	数値	N
AutoPeak Num Peaks	<p>(AutoPeak のピーク数)アルゴリズムで検出された隣接する入り組んだピークの数を表示します。</p> <p>AutoPeak 積分アルゴリズムを使用する処理メソッドにのみ適用されます。</p>	数値	N
AutoPeak Peak Width Confidence	<p>(AutoPeak のピーク幅の信頼性)ピーク幅での信頼性のレベルを表示します。値が 1 の場合、実際のピーク幅と予測されるピーク幅が等しいことを示します。値が 1 よりも大きい場合、実際のピーク幅が予測されるピーク幅よりも大きいことを示します。値が 1 よりも小さい場合、実際のピーク幅が予測されるピーク幅よりも小さいこと、またはクロマトグラフィ条件の変化によりピークがブロードになっていることを示します。</p> <p>AutoPeak 積分アルゴリズムを使用する処理メソッドにのみ適用されます。</p>	数値	N
AutoPeak Saturated acc	<p>(AutoPeak 飽和) Saturation correction オプションが使用され、対応するピークが飽和していて、フィットされたモデルがピークより上にある場合、このフィールドには Yes (はい) が表示されます。そうでないと、列がブランクになります。高濃度でのサンプルの精度と%CV が条件に合う領域内でない場合、Saturation correction を調整します。</p> <p>AutoPeak 積分アルゴリズムを使用する処理メソッドにのみ適用されます。</p>	Text	N

操作上の使用説明—処理

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Barcode	<p>(バーコード) サンプル固有の ID を表示します。固有の ID は、データを取得するために使用されたバッチで元々指定されている値から初期化されたものです。</p> <p>Barcode には最大 20 文字を含めることができます。Barcode に次の無効な文字を含めることはできません: \ / : * ? ASCII の表にある " < > = または 0 から 31 の文字。</p>	Text	Y
Baseline Delta/ Height	<p>(ベースラインデルタ/高さ) ピークの開始時とピークの終了時のベースラインの高さの差の絶対値と実際のピークの高さを示します。値が 0.1 を超える場合は、ベースラインが正しく解析されていない可能性があるため、ピークをレビューする必要があります。</p>	数値	N
Calculated Concentration	<p>(算出濃度) 既知の濃度の標準については、キャリブレーションカーブから逆算された濃度の値を表示します。回帰方程式は、さまざまな回帰の種類と重み付けについて回帰がどのように行われるかを表します。</p>	数値	Y
Combined Score	<p>(複合スコア) (オプション) 相対的な比較を目的として使用できる単精度浮動小数点数のスコアを表示します。</p> <p>定性分析のワークフローだけに適用されます。</p>	数値	N
Comparison	<p>(比較) 比較サンプルのコンポーネントを表示します。</p>	数値	N
Component Comment	<p>(コンポーネントコメント) 分析試料または内部標準に対する任意のコメントを表示します。このコメントは、すべてのサンプルに適用されます。</p>	Text	N
Component Group Name	<p>(コンポーネントグループ名) 分析試料または内部標準に関連付けられたグループ名を表示します。</p>	Text	N
Component Index	<p>(コンポーネントインデックス) 分析試料のインデックスまたは元の処理メソッドの内部標準を表示します。</p>	数値	Y

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Component Name	<p>(コンポーネントグループ名)分析試料または内部標準の名前を表示します。</p> <p>この列は、常に Results Table に表示されます。そのため、Column Settings ダイアログでは、チェックボックスが用意されていません。</p> <p>Component Name には最大 50 文字を含めることができます。</p> <hr/> <p>注:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Component Name は処理メソッドでのみ変更でき、Results Table では変更できません。 • この列は、ラボ情報管理システム (LIMS) の転送には必須です。 	Text	Y
Component Type	(コンポーネントタイプ)分析試料のタイプ: Quantifier 、 Qualifier 、または Internal Standard を表示します。	Text	N
Conc. Units	(濃度単位)濃度単位を表示します。	Text	Y
Concentration Acceptance	(濃度合否)算出濃度の合否状態を表示します。	数値	N
Concentration Ratio	(濃度比)内部標準を使用する分析試料の場合、分析試料 Actual Concentration と IS Actual Concentration の比率を示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	数値	N
Difference from Average Sample Time	(平均サンプル時間との差)このサンプルの分析時間と、すべてのサンプルの平均分析時間との差を示します。	数値	N
Dilution Factor	(希釈係数)サンプルを希釈した係数を表示します。この係数はキャリブレーションカーブの計算に使用されます。	数値	Y
End Time	(終了時間)検出されたピークの分単位の終了保持時間を表示します。	数値	Y
End Time at 10%	(10%での終了時間)強度がピーク高さの10%のところでピークの裏側に沿った分単位の時間を表示します。	数値	N

操作上の使用説明—処理

ラベル	説明	形式	LIS 対応
End Time at 5%	(5%での終了時間)強度がピーク高さの5%のところでピークの裏側に沿った分単位の時間を表示します。	数値	N
Expected Ion Ratio	(予測イオン比)未知、QC、および標準サンプルの予測イオン比を示します。 グループ内の各コンポーネントでは、 Expected Ion Ratio はその標準のイオン比の平均です。これらの条件が当てはまる場合、標準はコンポーネントの Expected Ion Ratio の計算に含まれません。 1. ピーク面積は N/A です。 2. 使用列が選択されていません。	数値	Y
Expected RT	(予測 RT)処理メソッドからの元の予測される保持時間を分単位で表示します。	数値	Y
Expected MW	(予想分子量)処理メソッドからの元の予想分子量を Da で示します。 Mass Reconstruction ワークフローのみに適用できます。	数値	Y
Formula	(式)(オプション)有効な化学式を表示します。化学式が無効な場合、その式はソフトウェアによって保持されません。化学式が有効な場合、 Mass (Da) 列と Isotope 列は自動的に入力されます。	Text	Y
Formula Confidence	(式の信頼度) Formula Finder Score の信頼度をパーセンテージで示します。以下に基づいて計算されます: <ul style="list-style-type: none"> 質量に基づいて、現在の MS スペクトルが化合物の理論スペクトルにどの程度適合しているか。 取得した MS/MS スペクトルが、LibraryView ソフトウェア データベースで見つかった MS/MS スペクトルにどの程度適合しているか。 MS スペクトルスコアには、MS/MS スペクトルスコアの 2 倍の重みがあります。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	Text	N

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Formula Finder	(式ファインダー)相対的な比較を目的として使用できる単精度浮動小数点数のスコアを表示します。この値は、Peak Review の Formula Finder の Results Table のデータを使用して更新できます。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	数値	N
Formula Finder Results	(式ファインダー結果)(オプション)一致する可能性が最も高い Formula Finder の結果を表示します。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	Text	N
Formula Finder Score	(式ファインダースコア)(オプション)相対的な比較を目的として使用できる単一の数値スコアを表示します。	数値	Y
Found at Fragment	(フラグメントで検出)(オプション)一致したスペクトルが検出された最も要求されたフラグメント質量(Da)を表示します。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	数値	Y
Found at Mass	(質量で検出)(オプション)一致したスペクトルが検出された最も要求された抽出質量(Da)を表示します。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	数値	Y
Fragment Mass	(フラグメント質量)(オプション)メソッドで指定されたように、フラグメントの質量を表示します。 Extraction Mass (Da) フラグメントのプレカーサーは、列の MS/MS から抽出されます。入力する場合、この値は数値でなければなりません。	数値	Y
Fragment Mass Error (ppm)	(フラグメント質量誤差(ppm))(オプション)フラグメントで検出とフラグメント質量の間の差を ppm で表示します。	数値	Y
Fragment Mass Error (mDa)	(フラグメント質量誤差(mDa))(オプション)フラグメントで検出とフラグメント質量の間の差を mDa で表示します。	数値	Y

操作上の使用説明—処理

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Fragment Mass Error Confidence	(フラグメントの質量誤差の信頼性)(オプション)フラグメントの質量誤差の信頼性のレベルを表示します。	Text	Y
Height	(高さ)検出されたピークのを表示します。ピークが検出されていない場合、この値は N/A (N/A)に設定されます。	数値	Y
Height Ratio	(高さの比)内部標準を使用する分析試料の場合、分析試料 Height と IS Height の比率を示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A)に設定されます。	数値	Y
Index	(インデックス)元のソートされていない順序で行のインデックスを表示します。表が別の列に基づいて並べ替えられている場合、表はこの列を並べ替えて元の順序に戻すことができます。	数値	N
Injection Volume	(注入量)注入量メソッドに保存され、オートサンプラーにより注入されたサンプルの量を表示します。	数値	Y
Integration Acceptance	(積分合否)ピーク積分が合格基準をどれだけ満たしているかを示します。フラグルールで設定されている次の要因に基づいて計算されます。 <ul style="list-style-type: none"> • 積分品質 • 非対称係数 • ピーク幅の合計(分) • 保持時間誤差(パーセントまたは分単位で測定) 	数値	N
Integration Type	(積分の種類)積分の種類を選択します。 <ul style="list-style-type: none"> • Baseline: 通常の方法で積分された単独のピーク。 • Valley: 2つの隣接したピークがあり、シグナルがそれらにあるベースラインに戻らなかったことを示します。 • N/A(N/A): ピークが検出されなかったことを示します。 • Manual: ピークが手動で積分されたことを示します。 	Text	Y

ラベル	説明	形式	LIS 対応
<p>Ion Ratio</p>	<p>(イオン比)イオン比を表示します。イオン比は、1つの分析試料から少なくとも2つのMRMトランジションが1つのグループで収集されたときに特定されます。</p> <p>グループのすべての分析試料は、分析試料サブグループを構成します。グループのすべての内部標準が、ISサブグループを構成します。サブグループにある最初のコンポーネントは、クオンティファイアイオンとして使用されます。残りのコンポーネントは、クオリファイアイオンとして使用されます。</p> <p><i>イオン比 = (クオリファイアのピーク面積または高さ) / (クオンティファイアのピーク領域または高さ)</i></p> <p>イオン比は、ピーク領域またはピーク高さのどちらかについて計算できます。処理メソッドで Results Table の最初のコンポーネント、つまりコンポーネントインデックスが1のコンポーネントの回帰に面積を使用する場合、ピーク領域を使用して Results Table 全体のイオン比を計算します。Height が最初のコンポーネントの回帰に使用される場合、ピーク高さが計算のために使用されます。</p> <ul style="list-style-type: none"> コンポーネントがグループのメンバーでない場合、Ion Ratio 値は N/A (N/A) に設定されます。 ピークが検出されていない場合、Ion Ratio 値は N/A (N/A) に設定されます。 イオン比は、分析試料サブグループと IS サブグループの両方にあるすべてのコンポーネントに適用される場合、クオリファイアがクオンティファイアになります。 クオンティファイアまたはクオリファイアのピークのどちらかで積分値が変化すると、イオン比は再度計算されます。 <p>注: ユーザーは、処理メソッドで、イオン比のフラグ設定ルールを定義できます。</p>	<p>数値</p>	<p>Y</p>
<p>Ion Ratio Acceptance</p>	<p>(イオン比合否)算出濃度の合否状態を表示します。</p>	<p>数値</p>	<p>N</p>

操作上の使用説明—処理

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Ion Ratio Confidence	(イオン比信頼度)イオン比の信頼度を示します。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	Text	N
IS	(内部標準)その行が内部標準かどうかを示します。チェックボックスが選択されている場合は、行のコンポーネントが分析試料ではなく内部標準であることを示します。 注: .heavy または -cis を含むサンプル名では、これらのサンプルがプロテオミクス ワークフローで内部標準として定義されているため、IS チェック ボックスが自動的に選択されます。その他のワークフローの場合は、内部標準ではないため、IS チェック ボックスをオフにする必要があります。	数値	N
IS Actual Concentration	(IS の実際の濃度)現在の分析試料と関連する内部標準の実際の濃度を表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	数値	N
IS Area	(IS 面積)現在の分析試料と関連する内部標準の面積を表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	数値	N
IS Area / Height	(IS 面積/高さ)現在の分析試料に関連付けられた内部標準の IS Area と IS Height の比率を示します内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	数値	N
IS Baseline Delta / Height	(IS ベースラインデルタ/高さ)ピークの開始時とピークの終了時のベースラインと、内部標準の実際のピーク高さの間の高さの差の絶対値を示します。値が 0.1 を超える場合は、ベースラインが正しく解析されていない可能性があるため、ピークをレビューする必要があります。	数値	N
IS Comment	(IS コメント)現在の分析試料と関連する内部標準の任意のコメントを表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	Text	N

ラベル	説明	形式	LIS 対応
IS End Time	(IS 終了時間)現在の分析試料と関連する内部標準の取得が終了する時間を表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	数値	N
IS Expected MW	(IS 予想分子量)現在の分析対象物に関連する内部標準の予想分子量を Da で示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。 mass reconstruction ワークフローのみに適用できます。	数値	Y
IS Expected RT	(IS 予測保持時間)現在の分析試料と関連する内部標準の予測される保持時間を表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	数値	N
IS Height	(IS 高さ)現在の分析試料と関連する内部標準のを表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	数値	N
IS Integration Type	(IS 積分の種類)現在の分析試料と関連する内部標準の積分の種類を表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	Text	N
IS Mass Info	(IS 質量情報)現在の分析試料と関連する内部標準の質量情報を表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	Text	N
IS MW	(IS 分子量)現在の分析対象物に関連する内部標準の予想分子量を Da で示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。 mass reconstruction ワークフローのみに適用できます。	数値	N

操作上の使用説明—処理

ラベル	説明	形式	LIS 対応
IS MW Delta (Da)	(IS MW デルタ(Da))内部標準の予想分子量と検出分子量の差を Da で示します。 Mass Reconstruction ワークフローのみに適用できます。	数値	Y
IS MW Delta (ppm)	(IS MW デルタ(ppm))内部標準の予想分子量と検出分子量の差を ppm で示します。 Mass Reconstruction ワークフローのみに適用できます。	数値	Y
IS Name	(IS 名)現在の分析試料と関連する内部標準の名前を表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A)に設定されます。	Text	N
IS Peak Comment	(IS ピークコメント)現在の分析試料と関連する内部標準のピークコメントを表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A)に設定されます。	Text	N
IS Quality	(IS 品質)現在の分析試料と関連する内部標準の品質を表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A)に設定されます。	数値	N
IS Region Height	(IS 領域高さ)内部標準領域の高さを示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A)に設定されます。	数値	N
IS Retention Time	(IS 保持時間)現在の分析試料と関連する内部標準の予測される保持時間を表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A)に設定されます。	数値	N
IS Signal / Noise	(IS シグナル/ノイズ)現在の分析試料と関連する内部標準のシグナル対ノイズ比を表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A)に設定されます。	数値	N
IS Start Time	(IS 開始時)現在の分析試料に関連付けられた内部標準の開始時間を示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A)に設定されます。	数値	N

ラベル	説明	形式	LIS 対応
IS Total Width	(IS 全幅) 現在の分析試料と関連する内部標準の全幅を表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	数値	N
IS Width at 50%	(IS の 50%での幅) 現在の分析試料と関連する内部標準の 50%での幅を表示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	数値	N
Isotope Confidence	(アイソトープ信頼度) アイソトープ比での信頼性のレベルを表示します。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	Text	N
Isotope Ratio Difference	(アイソトープ比) 理論的なアイソトープパターン(式に基づく)と取得したスペクトルのアイソトープパターンとの差を示します。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	数値	N
LC Method	(LC メソッド) データを取得するために使用される LC メソッドの名前を表示します。	Text	N
Library Confidence	(ライブラリ信頼度) ヒットの Library Score に基づいて Library Hit の信頼度を示します。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	Text	N
Library Hit	(ライブラリヒット) 最も高いライブラリー一致の化合物名、つまり最も高い純度スコアと要求された式と一致する式を持つ化合物の名前を表示します。 この値は、Peak Review のライブラリ検索の結果グリッドのデータを使用して更新できます。定性分析のワークフローだけに適用されます。	Text	N

操作上の使用説明—処理

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Library Score	(ライブラリのスコア)ライブラリの一致が検出された質量にどれだけ適合するかを示します。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	数値	N
Mass Error (ppm)	(質量誤差(ppm))検出された質量と抽出質量の差を、百万分率で表示します。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	数値	N
Mass Error (mDa)	(質量誤差(mDa))検出された質量と抽出質量の差を、ミリダルトンで表示します。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	数値	N
Mass Error Confidence	(質量誤差の信頼性)質量誤差の信頼度を示します。 定性分析のワークフローだけに適用されます。	Text	N
Mass Info	(質量情報)コンポーネントに関連付けられている質量情報を表示します。 <ul style="list-style-type: none"> • MRM 実験では Q1/Q3、プロファイル(フルスキャン)実験では開始-停止を示します。 • UV、ADC、DAD の各実験では、波長(DAD)またはチャンネル情報(UV/ADC)です。 フラグメント質量が存在する場合は、XIC 抽出で使用されます。 フラグメント質量が存在しない場合は、プレカーサー質量を XIC 抽出で使用する必要があります。	Text	Y
Modified	(修正)ピーク検出パラメータが修正されているかどうかを示します。選択されたチェックボックスは、Peak Review ペインを使用して、処理メソッドのピーク検出パラメータが変更されたことを示します。	数値	Y

ラベル	説明	形式	LIS 対応
MS Method	(MS メソッド)データを取得するために使用される MS メソッドの名前を表示します。	Text	N
MW	(MW)再構成されたグラフから検出された分析試料の分子量を Da 単位で表示します。 Mass Reconstruction ワークフローのみに適用できます。	数値	Y
MW Delta (Da)	(MW Delta (Da)) 予想分子量と検出分子量の差を Da で示します。 Mass Reconstruction ワークフローのみに適用できます。	数値	Y
MW Delta (ppm)	(MW Delta (ppm)) 予想される分子量と検出された分子量の差を ppm で示します。 Mass Reconstruction ワークフローのみに適用できます。	数値	Y
Non-Targeted Peak	(非ターゲットメソッド)チェックマークは、強化ピークファインダーによってピークが検出されていることを示します。 定性分析のワークフローだけに適用されません。	数値	N
Operator Name	(オペレータ名)サンプルを測定した装置のオペレータの名前を表示します。	Text	Y
Original Filename	(元のファイル名)ファイルの名前を表示します。	Text	Y

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Outlier Reasons	<p>(外れ値の理由) 定量化メソッドで外れ値の自動削除が有効になっている場合に、コンポーネントの所定の制限の外にあることが判明した基準を示します。</p> <p>Outlier Reasons 列は、定量化メソッドでの外れ値の自動削除のルールにリンクされています。Results Table の事前設定された列です。</p> <p>外れ値にフラグが立てられる理由:</p> <ul style="list-style-type: none"> • 精度 • 濃度 • イオン比 <p>クオンティファイアまたはクオリファイアのどちらか一方にのみピークがある場合、両方のコンポーネントのイオン比にフラグが立てられます。これらのコンポーネントのどちらにもピークがない場合、どちらのコンポーネントのイオン比にもフラグが立てられません。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 予測イオン比を計算できません • ユーザーが作成したカスタムのフラグ設定ルールが失敗しました 	Text	N
Peak Comment	(ピークコメント) 行に対する任意のコメントを表示します。	Text	N
Plate Number	(プレート番号) データの取得に使用されたオートサンプラーのプレート番号をプレート番号表示します。これは、バッチエディタで示されている番号です。	Text	Y
Points Across Baseline	(ベースラインを横切るポイント) ピーク全体のスキャン数を示します。	数値	N
Points Across Half Height	(高さの半分を横切るポイント) 高さの約 50% でピークを横切るスキャンの数を表示します。	数値	N
Polarity	(極性) サンプルを取得するために使用された実験の極性を示します。	Text	N

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Precursor Mass	(プレカーサー質量)処理メソッドから取得された処理入力パラメータを表示します。 この列は、常に Results Table に表示されます。そのため、Column Settings ダイアログでは、チェックボックスが用意されていません。	数値	N
Proc. Method Name	(処理メソッド名)Results Table を作成した処理メソッドの名前を示します。	Text	Y
Quality	(品質)解析ピークのを表示します。解析ピークの面積とより大きな RT ウィンドウの面積を比較します。値が 0 に近い場合、ピーク解析されていない、またはピークが存在しないことを示します。値が 1.0 に近い場合、見直す必要のない良好に解析されたピークであることを示します。	数値	N
Rack Number	(ラック番号)バッチエディタで指定された、データの取得に使用されるオートサンプラーのラック番号を表示します。	Text	Y
Region Height	(領域高さ)検出したピーク付近で最大のピークを示すピーク高さを示します。 Quality フィールドとの接合に便利です。妥当な Region Height を示す低品質のピークは確認する必要があります。 Region Height が小さい場合、有意なピークはありません。	数値	N
Relative RT	(相対 RT)内部標準を使用している分析試料の場合、 Retention Time と IS Retention Time の比率を示します。内部標準、または内部標準を持たない分析試料については、値が N/A (N/A) に設定されます。	数値	Y
Reportable	(レポート可能)Reports 結果が報告、エクスポート、および LIMS 転送に含まれるかどうかを表示します。	数値	Y
Retention Time	(保持時間)検出されたピークの分単位の終了保持時間を表示します。	数値	Y
Retention Time Delta (min)	(保持時間デルタ)保持時間質量で定義した保持時間と実際の保持時間が異なることを示します。	数値	N

操作上の使用説明—処理

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Retention Time Error (%)	<p>(保持時間エラー(%))「RT で検出」と「予測 RT」の間に検出されたエラーの割合を示します。</p> <p>定性分析のワークフローだけに適用されます。</p>	数値	N
RT Confidence	<p>(RT 信頼性)保持時間での信頼性を表示します。</p> <p>定性分析のワークフローだけに適用されます。</p>	Text	N
Sample Comment	(サンプルコメント)サンプルに対してユーザーが指定したコメントを表示します。	Text	Y
Sample ID	<p>(サンプル ID)サンプルに対してユーザーが指定した識別子を表示します。Sample ID は、取得のためのサンプル提出の前にバッチエディタで指定されます。</p> <p>標準添加ワークフローが処理メソッドで有効な場合、Sample ID を標準添加グループごとのグループ識別子として使用できます。SCIEX OS は、分析試料濃度が未知の各サンプルと同じ分析試料で濃度がわかりその濃度を変えて添加しているサンプルにリンクしています。</p> <p>Sample ID には最大 252 文字を含めることができます。Sample ID に次の無効な文字を含めることはできません:\ / : * ? ASCII の表にある" < > = または 0 から 31 の文字。</p>	Text	Y
Sample Index	<p>(サンプルインデックス)現在のサンプルのインデックスを表示します。</p> <hr/> <p>注: この列はロックされており、常に Results Table の左側に表示されます。</p> <hr/>	数値	Y

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Sample Name	<p>(サンプル名) サンプルに対してユーザーが指定した名前を表示します。 Sample Name は、取得のためのサンプル提出の前にバッチエディタで指定されます。</p> <p>Sample Name には、1~252 文字を含める必要があります。 Sample Name に次の無効な文字を含めることはできません: \ / : * ? ASCII の表にある " < > = または 0 から 31 の文字。</p> <hr/> <p>注: この列はロックされており、常に Results Table の左側に表示されます。</p>	Text	Y
Sample Type	(サンプルの種類) サンプルの種類を選択します。	Text	Y
Scanned Barcode	(スキャンしたバーコード) 注入の前にスキャンしたバーコードを表示します。	Text	Y
Signal / Noise	<p>(シグナル/ノイズ) 検出されたピークのピーク高さ対クロマトグラムに存在するノイズの推定される比率を表示します。</p> <p>AutoPeak 積分アルゴリズムを使用する場合、ノイズは計算による相対ノイズおよびピークの頂点位置でのベースラインを使用して推定されます。 MQ4 アルゴリズムでも同様のアプローチが使用されますが、ベースラインはクロマトグラム全体を使用して推定されることは除きます。</p>	数値	Y
Slope of Baseline	<p>(分析試料の傾き) 解析ピークのベースラインからの傾きを表示します。</p> <p>$((\text{ピーク終点での強度}) - (\text{ピーク開始点での強度})) \div \text{ピーク幅}$</p>	数値	N
Start Time	(開始時間) 検出されたピークの分単位の開始保持時間を表示します。	数値	Y
Start Time at 10%	(10%での開始) 強度がピーク高さの 10% のところでピークの裏側に沿った分単位の時間を表示します。	数値	N
Start Time at 5%	(5%での開始) 強度がピーク高さの 5% のところでピークの裏側に沿った分単位の時間を表示します。	数値	N

操作上の使用説明—処理

ラベル	説明	形式	LIS 対応
Std Addition Accuracy	<p>(標準添加の精度)さまざまな濃度の標準物質を添加して定量した既知濃度サンプルの精度を表示します。標準添加ワークフローが処理メソッドで有効になっている場合、全サンプルの Sample Type は Standard に設定されます。Sample Type が他の種類に変更された場合や、標準添加ワークフローが有効化されていない場合、この値は N/AN/A に設定されます。バッチ内の品質管理サンプルなど濃度が既知であるサンプルの場合、Std Addition Accuracy は下記のように定義されます。</p> <p>$100\% \times (\text{標準追加の算出濃度}) / (\text{標準追加の実際の濃度})$。</p>	数値	N
Std Addition Actual Concentration	<p>(標準添加の実際の濃度)標準添加によって定量化されたサンプルのユーザー指定の予測される既知の濃度を示します。たとえば、バッチ内の品質管理サンプル。Sample Type が Standard でない場合、この値は N/AN/A に設定されます。</p>	数値	N
Std Addition Calculated Concentration	<p>(標準追加の算出濃度)線形回帰を使用して重み付けをしない状態で、X 切片に標準添加カーブを外挿して得た逆算濃度の値を表示します。標準添加で定量したサンプルの場合、Std Addition Calculated Concentration を次のように定義します。</p> <p>切片/傾き</p> <p>Sample Type が Standard でない場合、標準添加ワークフローが処理メソッドで有効でない場合、または標準添加グループの非スパイクサンプルでピークが認められない場合、この値は N/AN/A に設定されます。</p>	数値	N
Tailing Factor	<p>(テーリング係数)ピークのフロントスロープからバックスロープまでの距離をピークを中心線からフロントスロープまでの距離の 2 倍で割った値で示します。すべての測定は、最大ピーク高さの 5% で行われます。</p>	数値	N
Time Since First Sample (min)	<p>(最初のサンプルからの時間(分))最初のサンプルの取得が開始されてからの経過時間を分単位で示します。</p>	数値	N

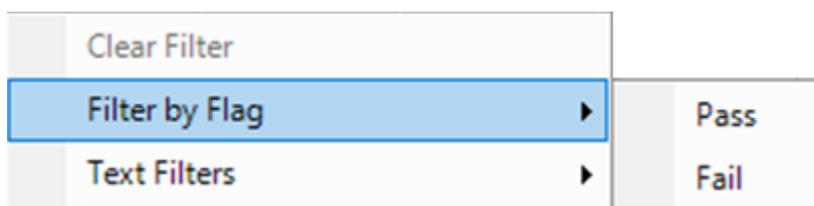
ラベル	説明	形式	LIS 対応
Time Since Last Sample (sec)	(最後のサンプルからの時間(秒))最後のサンプルの取得が開始されてからの経過時間を秒単位で示します。	数値	N
Total Width	(全幅)ベースラインで分単位でクロマトグラムのピーク幅を表示します。	数値	Y
Used	(使用)結果が使用されるかどうかを示します。 <ul style="list-style-type: none"> すべてのサンプルでは、チェックボックスが選択されている場合は、結果が参照値の計算とフラグ設定ルールの実行に使用されていることを示します。 標準サンプルでは、チェックボックスが選択されている場合は、結果がキャリブレーションカーブの構築、回帰および統計計算に使用されていることを示します。 QC サンプルでは、チェックボックスが選択されている場合は、結果が品質管理統計の計算に使用されていることを示します。 他のサンプルの種類では、チェックボックスが選択されている場合は、結果が計算に使用されていることを示します。 	数値	Y
Vial Number	(バイアル番号)データの取得に使用されたオートサンプラーのバイアル番号を表示します。これは、バッチで指定されている番号です。	Text	Y
Width at 10%	(10%での幅)ピーク高さの 10%で測定されたピークの幅を表示します。	数値	N
Width at 5%	(5%での幅)ピーク高さの 5%で測定されたピークの幅を表示します。	数値	N
Width at 50%	(50%での幅)頂点の強度の半分で測定された検出ピークの分単位のクロマトグラムのピーク幅を表示します。	数値	Y
XIC Width (Da)	(XIC 幅(Da))抽出イオンクロマトグラムの幅をダルトンで表示します。	数値	Y
XIC Width (ppm)	(XIC 幅(ppm))Width 抽出イオンクロマトグラムの幅を ppm(百万分率)で表示します。	数値	Y

合否フィルター

Results Table 列にフィルターメニューの **Filter by Flag** オプションを使用して、合否基準に基づき列にフィルターをかけるかどうかを決めます。Results Table は、以下のように合否基準でフィルタリングできます。

- **Pass:** 処理メソッドで定義された基準を満たす列を表示します。
- **Fail:** 処理メソッドで定義された基準を満たさない列を表示します。

図 6-26 : Filter By Flag



フラグ設定ルールが適用された列および次の合否基準には、合否フィルターが選択できます。

- 精度
- 精度合否
- 非対称係数
- 算出濃度
- 濃度合否
- 積分合否
- 品質
- 保持時間デルタ(min)
- 保持時間エラー(%)
- 全幅

信頼信号灯

合否基準を使用して認定行を定義します。認定行とは、合否基準が処理メソッドで定義された基準と一致する行です。

図 6-27 : 認定行

Define a qualifying row:

Ion ratio	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Mass error	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Frag. mass error	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
RT	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
¹⁴ C Isotope	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Library	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
C _n H _n Formula	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

信号灯は、定性ルールまたはイオン比合否ルールが適用されている各行の信頼状態を表示します。フラグ設定ルールの詳細については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

ヒント! 信頼信号を使用して、Results Table をフィルタリングできます。**Qualify for Rules Filters** チェックボックスを選択し、信頼フィルターに一致する行と一致しない行の Results Table の表示を切り替えます。信頼フィルターは Pass、Marginal、Fail、N/A です。

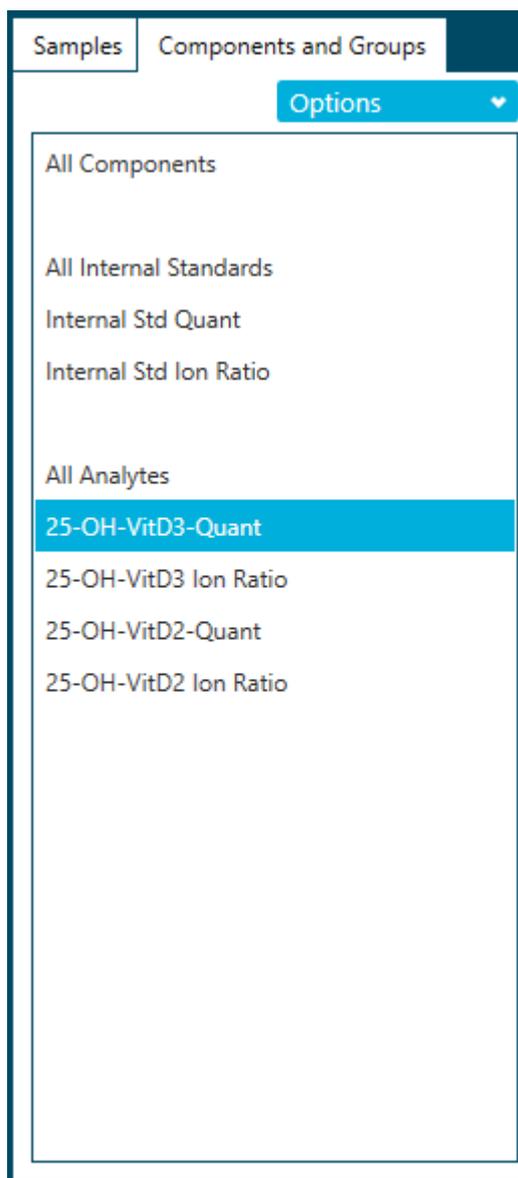
表 6-6 : 信頼信号灯

信号灯アイコン	説明
	どのコンポーネントが、処理メソッドで定義されている信頼レベルを満たすかを表示します。
	どのコンポーネントが、処理メソッドで定義されている限界的パーセント差レベルを満たすかを表示します。
	どのコンポーネントが、処理メソッドで定義されている許容できないパーセント差レベルを表示します。
	どの信頼パラメータが、コンポーネントに適用できないかを表示します。

コンポーネントとグループのリスト

Results Table が開くと、現在のコンポーネントとグループのリストがメインウィンドウの左側に表示されます。このリストを使用して、結果およびリンクされた Peak Review またはキャリブレーションカーブペインに表示されるコンポーネントの変更を行います。すべての情報が、処理メソッドで定義されたとおりに表示されます。

図 6-28 : コンポーネントとグループ



リストにある個別の項目をクリックして、その項目のためのコンポーネントのみを表示されます。
Shift+クリックまたは**Ctrl+クリック**で、たとえば、2つの特定の分析試料などの複数の項目を選択
できます。

ヒント! ペインの右端を左右にドラッグして、リストの幅を変更します。

Results Table の列の順序は、フィルタリングには影響されません。テーブルは、処理メソッドに示さ
れている順序で、最初にサンプル、次にコンポーネントの順に並べられるように事前設定されていま
す。

表 6-7 : オプション

ラベル	説明
Show IS	(IS を表示) クリックすると、現在選択されている分析試料と対応する内部標準物質の両方について、Results Table にある行を示します。これは Ctrl を押しながら分析試料をクリックし、内部標準物質をクリックする動作と同じです。この方法でも両方を選択できます。
Find	(検索) クリックすると、指定されたテキストと一致するリストにある項目を見つけます。

ピークのレビュー

実施前提手順

- Results Table を開きます。

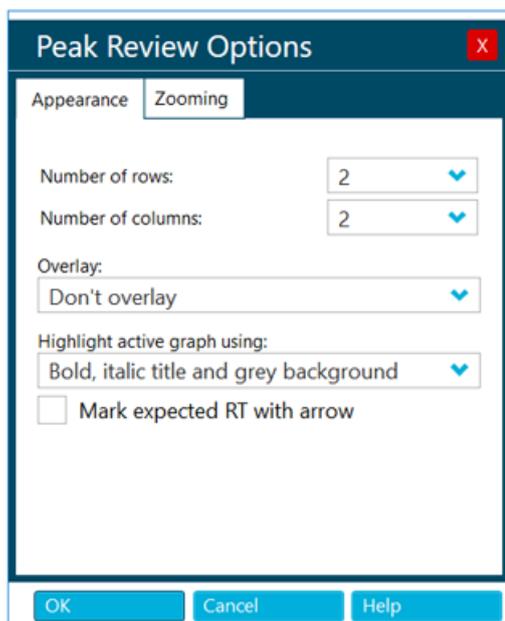
Peak Review ペインを使用して、以下を行います。

- ピーク検出プロセスの品質を決定できるように、生のクロマトグラムを目視で検査します。
- ピーク検出パラメータを調整するか、積分の開始ポイントと終了ポイントを手動で選択するかのいずれかにより、正しく積分されていないクロマトグラムを訂正します。クロマトグラムが再積分された後、Results Table が新しいピーク領域とその他のパラメータを用いて自動的に更新されます。
- 積分した XIC について、MS および MS/MS スペクトルを目視で検査します。
- 式検出の結果およびライブラリ検索の結果をレビューし、必要に応じて Results Table の結果を手動で更新します。
- (Mass Reconstruction ワークフロー) 平均スペクトル、Reconstruction スペクトルを目視で確認します。
- (Mass Reconstruction ワークフロー) ピーク検出パラメータを調整するか、XIC 領域を手動で選択することにより、XIC 領域が適切に選択されなかったクロマトグラムを修正します。新しい XIC 領域が選択された後、平均スペクトルと再構成スペクトルが再度生成されます。
- (Mass Reconstruction ワークフロー) 質量ピーク選択パラメータを調整するか、または手動で質量ピークを選択することで、正しく選択されなかった質量ピークを修正します。質量ピークが変更されると、Results Table は自動的に新しいピークとその他のパラメータで更新されます。

1. **Displays the peak review** () をクリックします。
2. 左側のペインの **Components and Group** リストで、コンポーネントを選択します。
3. (オプション) **View** メニューを使用して、ピークレビューペインのレイアウトをカスタマイズします。**View** オプションの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
4. (オプション) **Options > Peak review display settings** をクリックして、Peak Review ペインの外観を変更します。たとえば、一度に表示するクロマトグラムの数を選択します。オプション

の説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。オプションの説明については、-dnu-および-dnu-。

図 6-29 : Peak Review Options ダイアログ



- (オプション)ピークを拡大するには、次のいずれかのメソッドを使用します。
 - **Options > Peak review display settings** をクリックし、次に **Zooming** をクリックして、ピークのズームパラメータを変更します。
 - カーソルを X 軸または Y 軸でズームする領域にドラッグします。
- (オプション)ピークを展開して[ピークレビュー]ペイン全体に表示するには、ピークを選択して **Peak magnifier** () をクリックします。

ヒント! ピークレビューペインのアイコンが黒の場合、対応する機能が有効になっています。無効にするには、アイコンをもう一度クリックします。

- (オプション)グラフのノイズ領域を表示および調整するには、**Options > Show Noise Regions** をクリックしてから、該当する場合はノイズ領域を調整します。次のセクションを参照：[ノイズ領域の操作](#)。

注: ノイズ領域は、**Peak to Peak** または **Standard Deviation** の S/N アルゴリズムが使用されている場合にのみ調整できます。

- クロマトグラムまたは再構成グラフに複数のピークが含まれ、不適切なピークが積分された場合は、正しいピークの上をドラッグして、新しい予測される保持時間または分子量を設定します。必要に応じて、ピーク検出パラメータと積分パラメータを調整します。
- (オプション) サンプルコンポーネントまたはグループのすべてのサンプルに新しいパラメータを適用するには、右クリックメニューオプションを使用します。詳細な情報については、次のセクションを参照：[ピークレビューペインでピークを操作](#)。

ヒント! 積分されたピークを表示するには、**Displays the peak review** () をクリックします。Peak Review ペインで、**Options > Show navigation controls** を選択します。次に、ナビゲーションアイコンをクリックします。アイコンの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

ヒント! **Set peak to "not found"** () をクリックして、積分をクリアします。ユーザーは、ピークを手動で積分する前に生データを見ることができます。積分パラメータは編集できません。

10. Peak Review (ピークレビュー) ペインで **Enable manual integration mode** () をクリックして、手動積分モードを使用します。
11. 対象ピークの一方のベースからもう一方のベースまでカーソルをドラッグします。これでピークが手動で積分され、前回使用した積分パラメータは利用できなくなります。

ヒント! ピークが修正されたばかりの場合は、右クリックして **Revert Peak to Original Method** をクリックすると、ピークを元のメソッドに戻すことができます。

ヒント! 手動積分をクリアして積分パラメータフィールドを有効にするには、**Manual Integration** チェックボックスをクリアしてから、もう一度 **Enable manual integration mode** () をクリックします。

12. (オプション) Explorer ワークスペースで現在のピークを表示するには、**Open data exploration** () をクリックします。
現在の拡大レベルは維持されます。

注: ピークの手動統合は、ユーザーが Peak Review ペインでそのピークの統合を変更するか、埋め込みメソッドを編集してコンポーネントを変更するまで継続されます。

注: Mass Reconstruction ワークフローでは、再構成された質量ピークが手動で統合されている場合、対応する XIC 領域と平均スペクトルは、ユーザーが Peak Review ペインでそのピークの統合を変更するか、コンポーネントを変更するために埋め込まれたメソッドを編集するまで保持されます。

ピークレビューペインでピークを操作

表 6-8 : ピークレビュー機能

実行する操作	実行する作業
積分パラメータのコピー	<p>このコマンドを Paste Integration Parameters と併せて使用し、1つのクロマトグラムから別のクロマトグラムにピーク検出パラメータをコピーします。このコマンドは、複数のクロマトグラムに同じパラメータの調整を行う必要がある場合に使用できます。</p> <ol style="list-style-type: none"> 有効なクロマトグラムが開いたグラフを右クリックし、次に Copy Integration Parameters をクリックします。 コンポーネントのすべてのクロマトグラムに変更を適用するには、Update Processing Method for Component コマンドを使用します。 グループのすべてのクロマトグラムに変更を適用するには、Update Processing Method for Group コマンドを使用します。
積分パラメータを貼り付け	<p>このコマンドを Copy Integration Parameters と併せて使用し、1つのクロマトグラムから別のクロマトグラムにピーク検出パラメータをコピーします。</p> <ol style="list-style-type: none"> 有効なクロマトグラムが開いたグラフを右クリックし、次に Copy Integration Parameters をクリックします。 別のクロマトグラムを右クリックし、次に Paste Integration Parameters をクリックします。
コンポーネントに対する処理メソッドを更新	<p>特定のクロマトグラムのピーク検出パラメータを調整した後、このコマンドを使用して、Results Table で保存された処理メソッドのコピーを変更して、コンポーネントのパラメータを使用します。</p> <ul style="list-style-type: none"> ピーク検出パラメータを調整し、右クリックして、Update Processing Method for Component を選択します。 <p>特定のコンポーネントについては、すべてのサンプルが新しいパラメータを使用するように自動的に積分され、Peak Review ペインと Results Table が更新されます。手動で積分したピークが存在する場合は、再積分をすべてのピークに適用するか、手動で積分されていないピークだけに適用するかを選択します。</p>

表 6-8 : ピークレビュー機能 (続き)

実行する操作	実行する作業
グループに対する処理メソッドを更新	<p>(Mass Reconstruction ワークフローには適用されません) 積分が現在アクティブなクロマトグラムのコンポーネントと同じグループに属するすべてのコンポーネントに適用されることを除いて、Update Processing Method for Component オプションに似ています。ユーザーが各種コンポーネントをグループに割り当てていて、特定のグループに割り当てられたコンポーネントが同じ保持時間を持つことが望まれる場合は、このコマンドが有用です。これは、予測保持時間などのパラメータを、すべてのグループのすべてのコンポーネントについて一度にリセットできるためです。グループのコンポーネントの保持時間が異なる場合は、有用とはいえません。</p> <ul style="list-style-type: none"> • ピーク検出パラメータを調整し、右クリックして、Update Processing Method for Group を選択します。
Expected MW を除くグループの処理メソッドを更新します	<p>(Mass Reconstruction ワークフローのみ) 積分が現在アクティブなクロマトグラムのコンポーネントと同じグループに属するすべてのコンポーネントに適用されることを除いて、Update Processing Method for Component オプションに似ています。ユーザーが各種コンポーネントをグループに割り当てていて、特定のグループに割り当てられたコンポーネントが同じ保持時間と積分パラメータを持つことが望まれる場合は、このコマンドが有用です。これは、予測保持時間などのパラメータを、すべてのグループのすべてのコンポーネントについて一度にリセットできるためです。グループのコンポーネントの保持時間が異なる場合は、有用とはいえません。このコマンドは Expected MW には適用されません。</p> <ul style="list-style-type: none"> • ピーク検出積分パラメータを調整し、右クリックして、Update Processing Method for Group, Excluding Expected MW を選択します。
積分パラメータを A グループ内の A サンプルに適用	<p>(Mass Reconstruction ワークフローには適用されません) 特定のクロマトグラムのピーク検出パラメータを調整した後、このコマンドを使用して、変更された化合物と同じグループに属するサンプル内のすべての化合物にパラメータを適用します。</p> <ul style="list-style-type: none"> • クロマトグラムのピーク検出パラメータを調整し、右クリックして Apply integration parameters to sample within a group を選択します。

表 6-8 : ピークレビュー機能 (続き)

実行する操作	実行する作業
Expected MW を除いて、積分パラメータを A グループ内の A サンプルに適用します。	<p>(Mass Reconstruction ワークフローのみ) 特定のクロマトグラムのピーク検出パラメータと再構成グラフの積分パラメータを調整した後、このコマンドを使用して、変更された化合物と同じグループに属するサンプル内のすべての化合物にパラメータを適用します。このコマンドは Expected MW には適用されません。</p> <ul style="list-style-type: none"> クロマトグラムのピーク検出とデコンボリューションされた質量ピークの積分パラメータを調整し、右クリックして、Apply integration parameters to sample within a group, excluding Expected MW を選択します。
ピークを元のメソッドに戻す	<p>特定のクロマトグラムのためにピーク検出パラメータを調整した後、このコマンドを使用して、Results Table で保存した処理メソッドのコピーから元のパラメータをそのクロマトグラムに適用します。</p> <ul style="list-style-type: none"> アクティブなクロマトグラムが開かれているグラフで右クリックし、Revert Peak to Original Method を選択します。
コンポーネントに対するすべてのピークを元に戻す	<p>特定のクロマトグラムに合わせてピーク検出パラメータを調整した後、このコマンドを使用すると、Results Table で保存した処理メソッドのコピーから、有効なクロマトグラムと同じコンポーネントをすべてのクロマトグラムに対して元のパラメータを適用できます。手動で積分したピークが存在する場合は、再積分をすべてのピークに適用するか、手動で積分されていないピークだけに適用するかを選択します。</p> <ul style="list-style-type: none"> アクティブなクロマトグラムが開かれているグラフで右クリックし、Revert All Peaks for Component を選択します。

ノイズ領域の操作

Peak to Peak または **Standard Deviation** の S/N アルゴリズムが使用されている場合、ノイズ領域は、処理メソッドの積分ページとピークレビューペインでインタラクティブに調整できます。

1. グラフ上のノイズ領域をクリックして、必要な位置に移動します。
2. 両端矢印が表示されるまで、ノイズ領域の左端または右端にカーソルを移動します。次に、エッジを必要な位置にドラッグして、ノイズ領域のサイズを調整します。

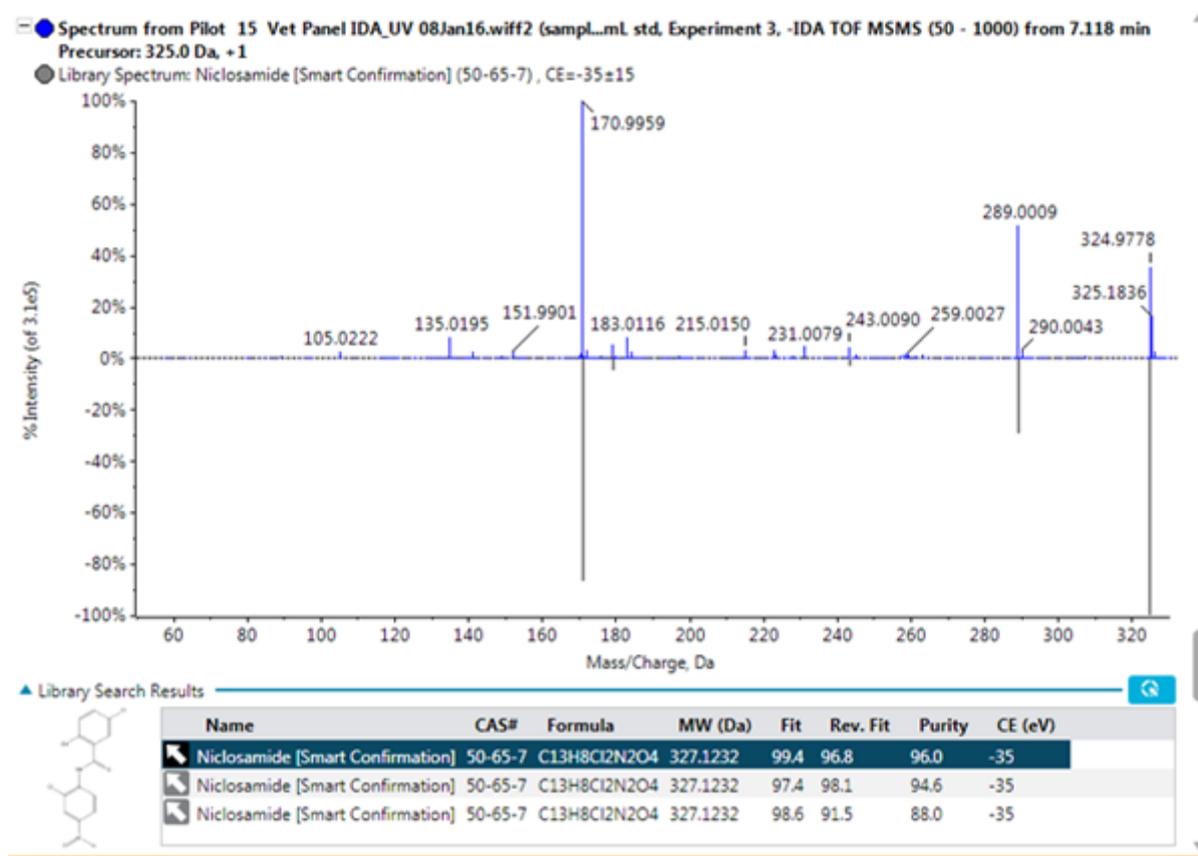
ライブラリ検索または Formula Finder の結果を使用したピークの分析

ヒント! **Options > Peak review display settings** をクリックして、ペインに表示される行数を変更します。ペインの上部を上ドラッグして、Peak Review ペインのサイズを大きくすることもできます。

1. Peak Review ペインで **View** をクリックして、**XIC + MS**、**XIC + MS/MS**、**XIC + MS + MS/MS** のいずれかをクリックします。

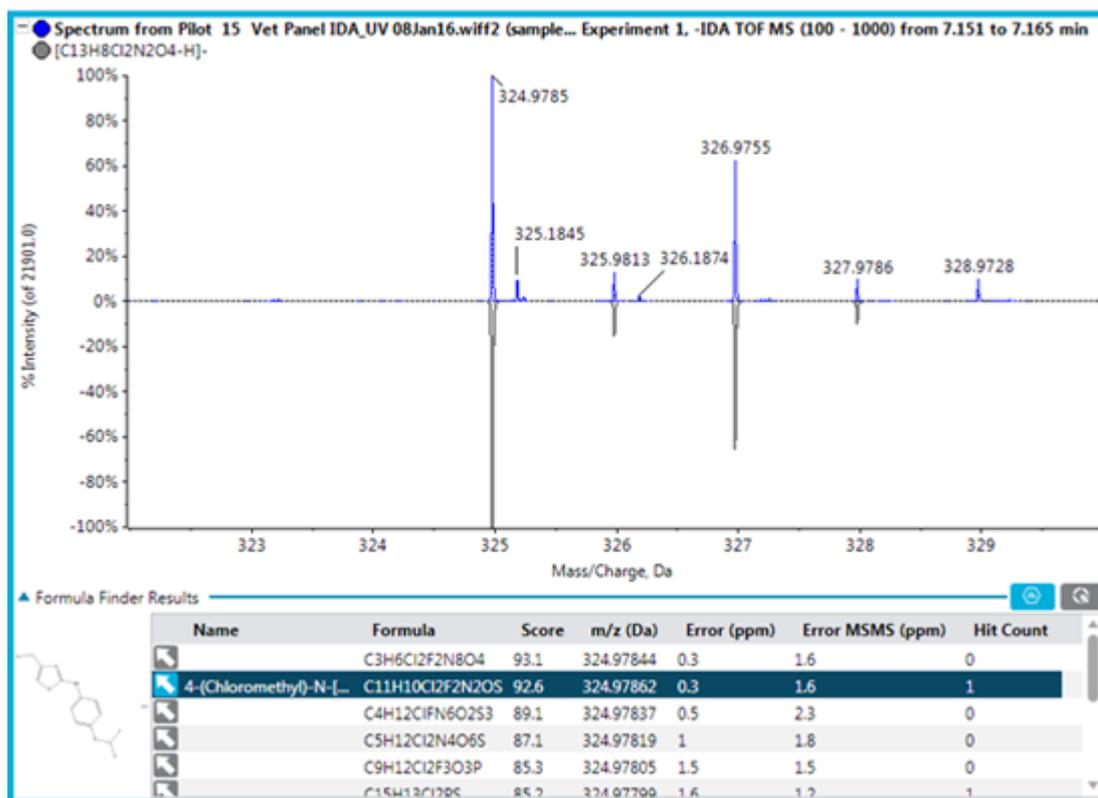
グラフの下に検索結果が表示されます。

図 6-30 : ライブラリ検索の結果



2. 青い矢印をクリックして **Library Search Results** を展開すると、より多くのライブラリヒットが表示されます。
この表には、選択したライブラリヒットの化学構造も表示されます。
3. 矢印をもう一度クリックすると、表が折り畳まれます。
折り畳まれた表の結果は、Results Table にも表示されます。
4. (オプション) 表で行を選択し、 をクリックして Results Table の結果を更新してから、そのライブラリヒットを分析で使用します。
5. (オプション)  をクリックし、選択した化合物の情報で処理メソッドを更新します。
6. ライブラリデータベースにスペクトルを追加するには、次の手順に従います。
 - a. スペクトルを右クリックして、**Add spectrum to library** をクリックします。
Add spectrum to library ダイアログが開きます。
 - b. **Compound Name**、**Library**、および **Precursor m/z** フィールドを更新します。
 - c. **OK** をクリックします。
7. 青い矢印をクリックして **Formula Finder Results** を展開すると、より多くの可能な結果が表示されます。

図 6-31 : Formula Finder の結果



ChemSpider から化合物を更新している場合は、選択した Formula Finder の結果の化学構造が表にも表示されます。

8. 矢印をもう一度クリックすると、表が折り畳まれます。折り畳まれた表の結果は、Results Table にも表示されます。
9.  をクリックし、選択した化合物で Results Table の **Formula Finder Results** 列を更新します。
10.  をクリックし、選択した化合物の情報で処理メソッドを更新します。

ヒント! Options > Get Chemspider hit count をクリックして、グラフの下の表に ChemSpider Hit Count 列を表示します。

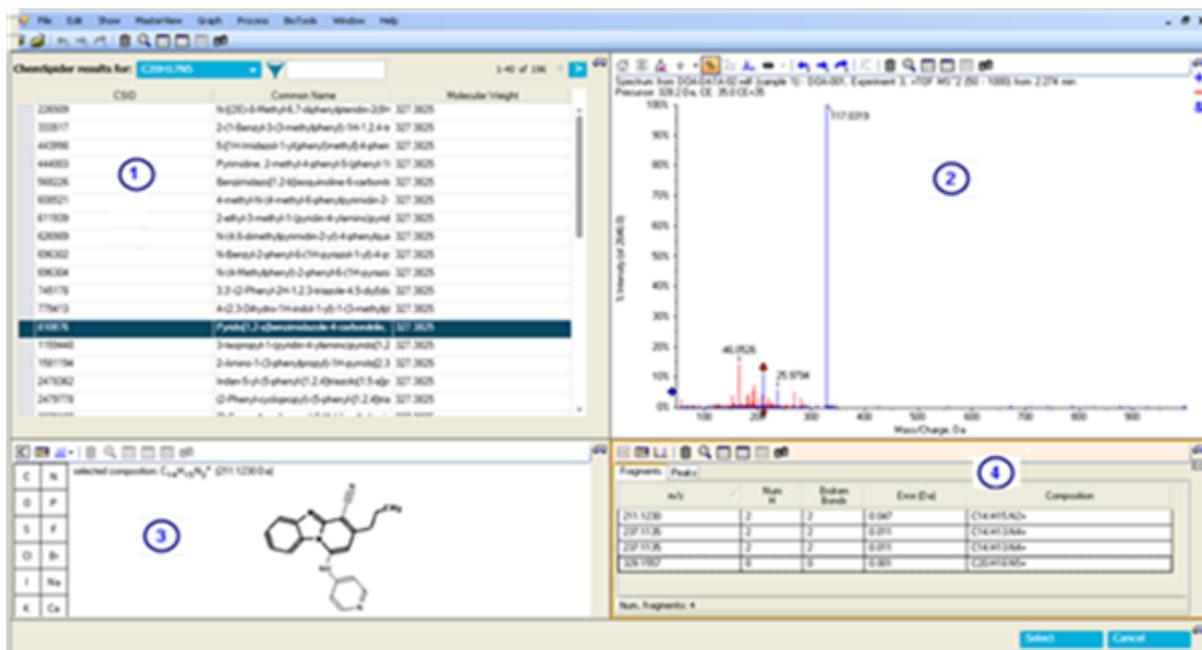
11.  をクリックして、ChemSpider アプリケーションを開きます。次のセクションを参照: [ChemSpider](#)。

ChemSpider

注: ChemSpider データベースにアクセスするには、有効なライセンスファイルがワークステーションに登録されている必要があります。

注: 下図の情報は、例示のみを目的として提供されています。

図 6-32 : ChemSpider セッション



項目	説明
1	結果ペイン: 選択した式に一致する推奨される化合物のリストが表示されます。結果は、40 種類の化合物をグループとして表示されます。リスト内の次のグループに進むには、右矢印印を使用します。リスト内の前のグループに戻るには、左矢印印を使用します。
2	スペクトルペイン: 取得したスペクトル(赤)および一致するフラグメント(青)が表示されます。青いフラグメントが多いほど良好な一致を示します。
3	構造ペイン: 結果ペインで選択された化合物の化学構造が表示されます。
4	フラグメント表ペイン、Fragments タブ: 選択した化合物に対して一致するフラグメントの合計数が表示されます。
4	フラグメント表ペイン、Peaks タブ: 選択した化合物について、ピークの合計数、一致するピーク数、合計強度の割合が表示されます。一致するピークは、 Assigned 列のチェックボックスが自動的に選択されます。

表 6-9 : ChemSpider の機能

実行する操作	発生する動作
Filter XIC List アイコンの横にあるフィールドに情報を入力する	結果ペインが更新され、入力した基準に一致する結果だけが表示されます。
結果ペインの各エントリをクリックする	残りのペインが更新され、選択内容に関連付けられた情報が表示されます。

表 6-9 : ChemSpider の機能 (続き)

実行する操作	発生する動作
フラグメント表ペインの Fragments タブで、各エントリをクリックする	残りのペインが更新されます。スペクトルペインでは、一致するフラグメント(青)の上下に赤い矢印が表示されます。構造ペインでは、フラグメントに一致する化学構造のコンポーネントが強調表示されます(太字)。
フラグメントテーブルペインの Peaks タブで Assigned エントリをクリックする	残りのペインが更新されます。スペクトルペインでは、一致するフラグメント(青)の上下に赤い矢印が表示されます。構造ペインでは、フラグメントに一致する化学構造のコンポーネントが強調表示されます(太字)。
ChemSpider results for フィールドの右側にある下矢印をクリックして、 ChemSpider web site オプションを選択する	ChemSpider のウェブサイト (www.chemspider.com) がブラウザウィンドウで開きます。情報へのアクセス方法については、ChemSpider のヘルプを参照してください。
ChemSpider results for フィールドの右側にある下矢印をクリックして、 Refresh オプションを選択する	すべての変更が破棄され、セッションが元の検索結果に戻ります。
Select をクリックする	ChemSpider セッションで選択した情報が、ソフトウェアセッションの Formula Finder Results ペインにコピーされます。また、ChemSpider セッションが終了します。

ピークレビューペインヒント

- 特定の列で Results Table を並べ替え、表の一番上または下に並ぶクロマトグラムのみを確認します。
- ピークレビューペインは対応する表と常に同期し、Results Table にあるような、同じピークのクロマトグラムを同じ順番で表示します。Results Table を作成するためのどのような変更(行の並び方、サンプルタイプのフィルタリング、またはコンポーネントの選択など)も Peak Review ペインに自動的に反映されます。
- 利用できるクロマトグラムをスクロールするには、ペインの右側にあるスクロールバーを使用します。Peak Review ペインが有効な場合、キーボードの上下キーを使用するか、マウスのスクロールウィールを使ってクロマトグラムを動かします。
- 初めの列の左側にあるライトブルー領域をクリックして Results Table の行を選択すると、Peak Review ペインにある対応するピークを示します。Peak Review ペインの特定のクロマトグラムにスクロールすると、Results Table で対応する行が強調表示され、表示されます。
- 数値の桁区切りは Analytics ワークスペースではサポートされていません。積分パラメータなどのテキストボックスや、Results Tables などのグリッドで番号をグループ化しないでください。
- どの場合でも、1つのクロマトグラムは有効であることを考慮し、太字でタイトルが表示されます。クロマトグラムの中の任意の場所をクリックして、特定のクロマトグラムを有効にします。

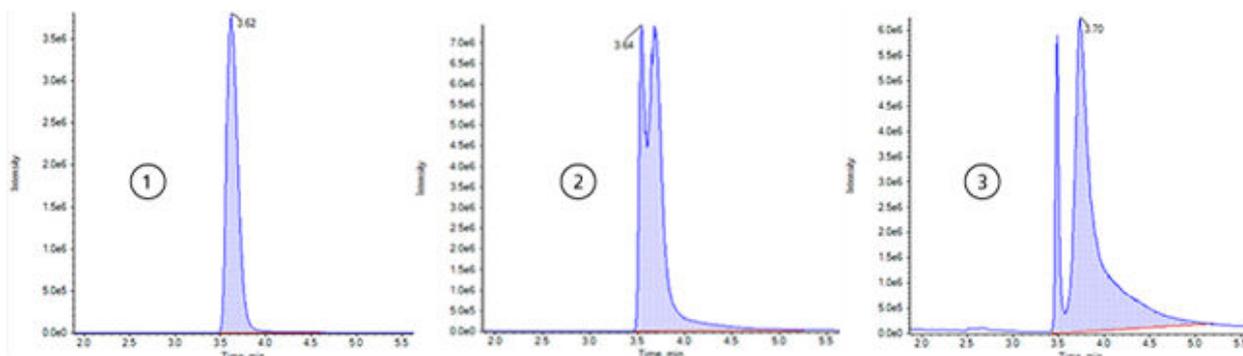
注意: データ損失の可能性。クロマトグラム内でカーソルをドラッグしないでください。この操作を行うと、予測保持時間が調整され、積分が変更される可能性があります。

- クロマトグラムの特定のピーク上をドラッグすると、**Expected RT** 積分パラメータが実際のピークの保持時間とともに更新されます。その後、新しい保持時間が自動的に適用され、ソフトウェアは再びピークを統合し、それに応じて結果テーブルを更新します。
- (Mass Reconstruction ワークフロー)再構成グラフの特定のピークをドラッグすると、**Expected MW** パラメータがピークの実際の分子量で更新されます。その後、新しい分子量が自動的に適用され、ソフトウェアがピークを再び統合し、それに応じて Results Table を更新します。
- (Mass Reconstruction ワークフロー)**Recentered on the largest XIC Peak** が選択されていない場合、ユーザーは目的の XIC 領域を手動で選択できます。XIC 領域の中心の時間が予測 RT になり、XIC 領域内の最大ピークの RT が検出 RT になります。
- 手動積分モードでピークを確認している場合、ピーク上でカーソルをドラッグすると、選択したピークが手動で積分されます。ドラッグ中に **Shift** を押し続けると、線をまっすぐに保つことができます。
- クロマトグラムが有効になると、ペインの左側に表示される積分パラメータが更新され、新しい有効なクロマトグラムが反映されます。ピーク積分パラメータを調整してから **Apply** をクリックすると、現在アクティブなクロマトグラムが影響を受けます。
- ピークレビュー中にピーク形状を検査して、潜在的な飽和ピークを特定し、部分的または不正確な統合が誤って濃度を不正確に報告しないことを確認する必要があります。
- システムの問題を示す可能性のある過度のノイズスパイクがないか、ピークレビュー中にクロマトグラムを検査しなければなりません。
- Y 軸をダブルクリックし、全体のデータセット内の最も強度の強いピークに軸のスケールを合わせます。軸内をドラッグしてズームインし、強度範囲を選択します。
- X 軸内でダブルクリックすると、すべてのデータが表示される初期表示にグラフを戻します。軸内をドラッグしてズームすると、時間範囲を選択します。
- 結果テーブルでサンプルごとにナビゲートする場合は、**Results > Cache all chromatograms for faster peak review** をクリックしてパフォーマンスを向上させます。

非常に高濃度のサンプルは、定量の上限、または ULOQ をはるかに超えており、歪んだまたは分割された形状の飽和ピークがますます広くなる可能性があります。

次の図は、線形回帰を使用して定量化できる最大濃度を示しています。

図 6-33 : 非飽和および飽和ピークの例



項目	説明
1	定量に使用できる許容可能なピークを示します。
2	飽和したピークを示します。このピークを生成したサンプルの濃度は ULOQ をはるかに上回っています。ピークが飽和すると、ピークが広くなり、ピークの上部がゲイン抑制により反転します。部分的な積分は誤って報告された濃度をもたらす可能性があるため、このようなピークは定量から除外する必要があります。
3	LC ピークが 2 つのピークに分かれる極度の飽和を示します。部分的な積分は誤って報告された濃度をもたらす可能性があるため、このようなピークは定量から除外する必要があります。

統計を使用したデータの分析

実施前提手順

- Results Table を開きます。

Statistics ペインを使用すると、分析物の再現性に関連する情報を表示できます。表内の各行には、関連するピークグループの平均と標準偏差などの情報(同じ反応を持つものと予測される同じ分析試料からの情報)がまとめられています。

反復プロセスを使用して、ピーク積分、キャリブレーションカーブ、サンプル統計を確認します。Results Table の **Actual Concentration** フィールドで設定された精度は、統計表でも使用されます。

注: %CV や精度など、統計で許容される値の情報については、ラボの標準業務手順書を参照してください。

Results Table を開き、**Views > Statistics pane** をクリックします。。

統計ペインの列

ラベル	説明
Row	(行)行番号を表示します。
Component Name	(コンポーネント名)分析試料の名前を表示します。
Sample Name/ Actual Concentration	(サンプル名/実際の濃度)サンプルを実際の濃度でグループ化すると、濃度が表示されます。サンプルをサンプル名でグループ化すると、サンプル名が表示されます。
Num. Values	数値 m/n の形式で表示され、 n は特定の実際の濃度を持つサンプルの合計数(または同じサンプル名を持つサンプルの合計数)を表します。 m は、そのようなサンプルの中で計算に使用されているサンプルの数を表します。対応するピークを積分できなかった場合、または Used フィールドが手動でクリアされている場合、サンプルは使用されません。
Mean	(平均)使用したサンプルの平均を示します。
Standard Deviation	(標準偏差)表示使用されているサンプルの標準偏差。
Percent CV	(パーセント CV)変動係数をパーセントで表示します。 $100 * Standard Deviation / Mean$ 。
Accuracy	(精度)平均値を実際の濃度で除算し、パーセントで表した値で表示します。 $100 * Mean / Actual Concentration$ 。このフィールドは、実際の濃度を基準としてグループ化している場合のみ表示され、サンプル名を基準としてグループ化している場合は表示されません。
Values	(値)追加列にサンプルの個々の値を表示します。対応するサンプルを積分できなかった場合は、 N/A と表示されます。 Used フィールドが手動でクリアされている場合、値は取り消し線付きで表示されます。
Group by	(グループ化)統計の計算のために、特定の分析試料のサンプルをグループ化する方法を指定します。以下のオプションを使用できます。 <ul style="list-style-type: none"> • Group by Concentration for Standards(標準の濃度でグループ化): 標準サンプルは実際の濃度でグループ化されます。 • Group by Concentration for QCs(QC の濃度でグループ化): 品質管理サンプルは実際の濃度でグループ化されます。 • Group by Sample Name for Standards(標準のサンプル名でグループ化): 複製標準サンプルは Sample Name フィールドでグループ化されます。 • Group by Sample Name for QCs(QC のサンプル名でグループ化): 複製品質管理サンプルは Sample Name フィールドでグループ化されます。 • Group by Sample Name for All Samples(すべてのサンプルのサンプル名でグループ化): すべての複製サンプルは Sample Name フィールドでグループ化されます。

ラベル	説明
メトリック	<p>統計の計算に使用される実際のメトリックを指定します。以下のオプションを使用できます。</p> <ul style="list-style-type: none"> • Calculated Concentration(算出濃度): Results Table の Calculated Concentration フィールドが使用されます。 • Area(面積): Results Table の Area フィールドが使用されます。 • Height(高さ): Results Table の Height フィールドが使用されます。 • Calibration Y-Value(キャリブレーション Y 値): 分析試料に対して指定されている回帰パラメータが使用されます。これは、対応する内部標準がない分析試料の Area または Height、あるいは内部標準を使用する分析試料の Area Ratio または Height Ratio のいずれかです。
Save Results and Export	(結果の保存とエクスポート)結果を保存し、統計テーブルをエクスポートする場合にクリックします。Export Statistics ダイアログが開きます。

Statistics Pane ヒント

- **Components and Groups** リストで、**All Components** を選択して、統計テーブルのすべての分析試料のエントリを表示します。個々のコンポーネントを選択して、その分析試料のみのエントリを表示します。ユーザーがリストから個々の内部標準を選択すると、統計表は空になります。次のセクションを参照:[コンポーネントとグループのリスト](#)。
- Statistics pane に表示されている行の **Value** セルの 1 つをクリックして、分析試料とサンプルの Results Table で対応する行を選択します。Peak Review ペインが表示されている場合、そのペインは Results Table にリンクしており、対応するセルをクリックすると更新されます。
- 列ヘッダーの 1 つをクリックして、統計情報を並べ替えます。
- 行を選択して **Ctrl+C** を押すことにより、統計表全体または対象の行のみをコピーします。
- **Group by** リストを使用して、統計の計算のために、特定の分析試料のサンプルをグループ化する方法を指定します。
- **Metric** リストを使用して、統計、算出濃度、面積などの計算に使用されるメトリックを指定します。
- 列幅を調整して表示を最適化します。これらの幅は、次に Statistics pane が表示されたときに保持されます。
- 統計テーブルの形式と精度を変更するには、Results Table でそれらを変更します。次のセクションを参照:[Results Table のレビュー](#)。
- 個々の値の **Use Peak** オプションを変更するには、Statistics pane のセルを右クリックして、**Use Peak** を選択します。Results Table の **Use Peak** 列が更新されます。

キャリブレーションカーブの表示

実施前提手順

- Results Table を開きます。

キャリブレーションカーブを使用して、未知のサンプルと濃度が分かっている一連の標準サンプルを比較することにより、未知のサンプル中の物質濃度を定量します。次のセクションを参照：[キャリブレーションカーブ](#)。

1. **Displays the Calibration Curve** () をクリックします。
2. 回帰オプションを設定するには、**Regression** をクリックします。『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

キャリブレーションのエクスポート

キャリブレーションのエクスポートを使用して、有効な Results Table に関連付けられているすべての分析試料のキャリブレーション方程式のコピーを、外部ファイル (*.mqcal) に保存します。これによりユーザーは、1 セットの標準サンプルでのキャリブレーションを、同じ Results Table の一部ではないその他のサンプルに適用できるようになります。

典型的なワークフロー：

1. 標準のみを含む Results Table を作成します。
2. Peak Review ペインを使用して、積分が成功したことを確認します。
3. キャリブレーションカーブペインで **Options > Export calibration (and save results)** をクリックして、キャリブレーションのコピーを保存します。
4. 未知の濃度のサンプルを含む新しい Results Table を作成します。
5. キャリブレーションカーブペインで、**Options > Assign external calibration** をクリックして、エクスポートされたキャリブレーション方程式を新しい Results Table に適用します。

注： ユーザーは、キャリブレーションファイル (mqcal) を指定して、新しい Results Table に適用することもできます。

元の Results Table (標準サンプル付き) 変更が行われた場合、更新したキャリブレーション方程式を保存するために、Results Table を再度エクスポートしなければなりません。前回エクスポートした Results Table は自動的に更新されません。

メトリックプロットを使用してデータを分析する

実施前提手順

- Results Table を開きます。

Metric Plot を使用して、行番号または別の列のいずれかに対する Results Table の列に値をプロットします。これらのプロットは、視覚的なデータレビューに非常に役立ちます。

操作上の使用説明—処理

1つの列が選択されている場合は、結果のプロットは表の行番号の関数として列の値を表示します。2つの列が選択された場合、それらの列の値は互いにプロットされます。選択される2つの列の最初は X 値を含み、2列目は Y 値を含みます。

1. Results Table の 1 つまたは 2 つの列を選択します。

ヒント! 2 番目の列を選択するには、列ヘッダーをクリックしながら **Ctrl** を押します。

2. **More > Create Metric Plot with new settings** をクリックします。
3. メトリックプロットで **Link** をクリックして、**Link to results table columns** または **Link to results table rows** をクリックし、Results Table でのスクロールをメトリックプロットにリンクします。
Link メニューの詳細な情報については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。
4. メトリックプロットを更新するには、Results Table で目的の行を選択し、メトリックプロットペインで **Link > Plot selected rows only** をクリックします。

ヒント! 複数の行を選択するには、行を選択しながら **Ctrl** を押します。

5. (オプション) **Options** メニューからオプションを選択して、メトリックプロットオプションをカスタマイズします。オプションの説明については、『ヘルプシステム』のドキュメントを参照してください。

メトリックプロットのヒント

- データポイントを左クリックすると、Results Table の対応する行が自動的に選択され、ビューまでスクロールします。また、Peak Review ペインが開いている場合は、対応するクロマトグラムを表示するように更新されます。これは、外れ値のピークレビューを実行する便利なメソッドを提供します。
- タイトル領域には、常にアクティブなトレースの名前が表示されます。複数のコンポーネントのトレースがオーバーレイされている場合は、タイトルの左側にあるプラス記号(+)をクリックして、すべてのトレースの情報を表示するか、アクティブなトレースのみを表示するかを切り替えます。特定のトレースをアクティブにするには、対応するタイトルの左側にあるタイトルまたはカラースポットをクリックするか、メトリックプロットでデータポイントを選択します。
- メトリックプロットを使用して内部標準や QC サンプルのピーク領域をプロットし、偏差や傾向の可能性を監視できます。

レポートテンプレートの編集

注意: データ損失の可能性。ユーザーによるテンプレートの変更を防ぐため、Reporter テンプレートは、システム管理者が書き込みのためだけにアクセスできる、安全な読み取り専用フォルダーに必ず保管してください。

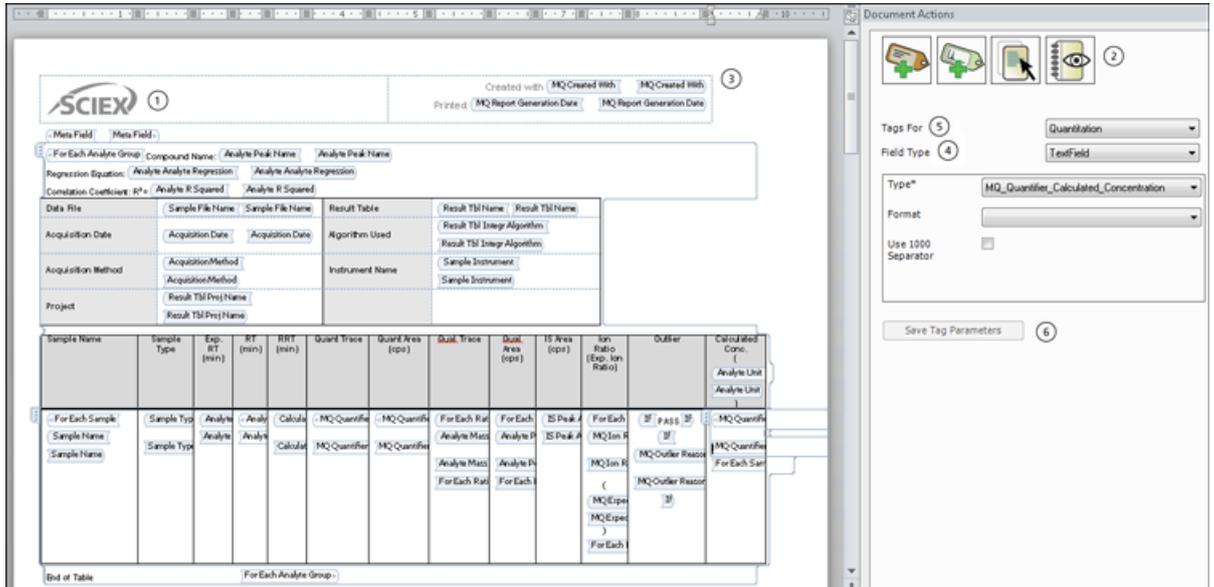
ユーザーはカスタムテンプレートの検証を行う必要があります。

1. .docx テンプレートを開きます。

ヒント! テンプレートは C:\ProgramData\SCIEX\Analytics\Reporter にあります。

領域を選択すると、右側に Reporter テンプレートエディタが開きます。テンプレートエディタには、自動的にタグ情報が入力されています。

図 6-34 : レポーターテンプレートエディタ



項目	説明
1	現在のタグが表示されているレポートテンプレートです。
2	アイコン: <ul style="list-style-type: none"> 新しいタグを追加します。 画像タグを追加します。 内容エリアを表示します。 文書変更ログを表示します。
3	Created with: タグ情報を提供しているソフトウェア名が表示されます。
4	Field Type: ソフトウェアに適用されるフィールドタイプが表示されます。
5	選択されたフィールドタイプに基づく利用可能な属性リストが表示されます。たとえば、タグ名や数値のフォーマットです。
6	Save Tag Parameters: クリックして、変更を保存します。変更が保存されていない場合、変更の保存を促すメッセージが表示されます。

2. 次の表の手順を使用します。

表 6-10 : Reporter の機能

実行する操作	実行する作業
フィールドタイプを変更	タグ内をクリックし、新しいフィールドタイプを選択して、属性を選択します。
フィールドタイプの属性を変更	タブ内部をクリックして、必要に応じて属性を変更します。
タグを追加する	Add new tag アイコンをクリックし、Field Type フィールドを選択してから、属性を選択します。
画像を追加	Add picture tag アイコンをクリックし、属性を選択します。
タグの開始・終了を表示する	Show content area アイコンをクリックします。
文書変更ログを表示	View document change log アイコンをクリックします。
タグをコピーして貼り付け	選択したタグをコピーし、新しい場所に貼り付け、フィールドタイプ属性を更新します。 属性はコピーされないため、選択しなければなりません。
タグ間で移動	左右の矢印キーを使用して、タグ間を移動します。
タグを消去	次のいずれかの操作を行います。 <ul style="list-style-type: none"> カーソルがタグの左側にある場合、Delete を押します。 カーソルがタグの右側にある場合、Backspace を押します。

3. 何らかの変更を加えたら、**Save Tag Parameters** をクリックします。

ヒント! 必須情報は、フィールド左側の点滅している赤いエクスクラメーションマークで示されます。

Reporter テンプレート

カスタムのレポートテンプレートは、ユーザーの責任において検証してください。

レポートテンプレートにはクエリを使用するものもあります。レポートの Results Table のデータを評価、操作、および提示するために、Microsoft Excel の式を使用してクエリを作成できます。レポートテンプレートの Metafield タグは、使用すべきクエリファイルの名前をレポートに示します。クエリを使用するには、クエリファイルの名前がレポートテンプレートの Metafield タグで指定される必要があります。クエリには、クエリとして認識されるために query の拡張子が付いている必要があります。クエリは、レポートテンプレートが保存されている Reporter フォルダに保存される必要があります。

Reporter テンプレートが使用された際、特にクエリがテンプレートで使用された際に、生成された結果をユーザーが検証することを推奨します。検証後にレポートテンプレートに修正が行われた場合、レポートテンプレートを再検証する必要があります。レポートテンプレートへの変更には、レポータータグまたはクエリへの修正も含まれます。

表 6-11 : デフォルトのテンプレート

テンプレート	テンプレートの説明(Create Report ダイアログに表示)	その他の注意事項
All Peaks Qual (すべてのピーク品質)	各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、分析試料 Results Table、および全分析試料と内部標準が重なったクロマトグラムで構成されたセクションが表示されます。分析試料 Results Table は、Results Table で表示されているように印刷されます。定性分析の信頼信号灯は、すべて表の先頭に示されます。	該当なし
Analyte 20 percent Report (20 パーセントのレポートを分析)	各分析試料について、ファイル情報、および各ブランク、標準、QC とすべての不明サンプルの 20%に関する XIC 表のあるセクションを示すレポート。	これは、クエリ (Analyte20percent.Query) が添付されたレポートテンプレートの例です。
Analyte Summary (分析試料概要)	特定の分析対象物および関連する内部標準のバッチ内のすべてのサンプルのサンプル名、算出濃度、および外れ値を示す結果の表。	該当なし
キャリブレーションカーブ	分析試料のファイル情報、統計表(標準)、分析試料のキャリブレーションカーブを 1 ページずつ表示したレポート。	<ul style="list-style-type: none"> • [報告可能]チェックボックスがオフになっている標準は、データテーブルに報告されません。統計は、報告可能ステータスの影響を受けません。 • レポートには、Used 列のステータスに基づいて、Analytics ワークスペースの[キャリブレーションカーブ]ペインに表示および計算された回帰方程式とグラフが表示されます。
インタクト定量すべてのピークとグラフ	各サンプルの Results Table エントリを示すレポート。Results Table に表示されているすべてのカラムがレポートに表示されています。レポートには、各サンプルと分析試料についての XIC クロマトグラフ、平均スペクトル、再構成スペクトルも含まれています。	このレポートは、Mass Reconstruction ワークフローに固有のものであります。

表 6-11 : デフォルトのテンプレート (続き)

テンプレート	テンプレートの説明(Create Report ダイアログに表示)	その他の注意事項
インタクト定量分析試料の概要とキャリブレーションカーブ	各分析試料の Results Table 項目、キャリブレーションカーブ、統計データを表示したレポートです。Results Table には、サンプル名、サンプルタイプ、分析対象物名、実際の濃度、面積、高さ、予測 MW、MW、MW デルタ、算出濃度、および精度が含まれます。	このレポートは、Mass Reconstruction ワークフローに固有のものであります。
インタクト定量サンプルの概要	すべてのサンプルの Results Table エントリを示すレポート。Results Table には、サンプル名、サンプルタイプ、分析対象物名、実際の濃度、面積、高さ、予測 MW、MW、MW デルタ、算出濃度、精度、および精度判断が含まれます。	このレポートは、Mass Reconstruction ワークフローに固有のものであります。
Metric Plot(メトリックプロット)	各分析試料について、ファイル情報と分析試料のピーク面積のメトリックプロットで構成されたセクションが表示される安定したレポートです。	Reportable チェックボックスの状態は、レポートの内容には影響しません。チェックボックスがオフの場合でも、すべてのデータポイントが含まれます。
MQ Analyte Report 1(MQ 分析試料レポート 1)	各分析試料について、ファイル情報、サンプル Results Table、および各サンプルの XIC 表を含むセクションを表示するレポートは、8 サンプル未満の分析試料については、通常、1 分析試料につき 2 ページを印刷します。	該当なし
MQ Analyte Report 2(MQ 分析試料レポート 1)	各分析試料について、ファイル情報、および各サンプルの XIC 表を含むセクションを表示するレポートは、8 サンプル未満の分析試料については、通常、1 分析試料につき 2 ページを印刷します。	不明なものだけが報告されます。
MQ Analyte Report 3(MQ 分析試料レポート 1)	各分析試料について、ファイル情報および不明のサンプル概要表のあるセクションを示すレポート。	不明なものだけが報告されます。

表 6-11 : デフォルトのテンプレート (続き)

テンプレート	テンプレートの説明(Create Report ダイアログに表示)	その他の注意事項
MQ_Analyte Report condensed table (MQ 分析試料レポート要約表)	不明の各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、および結果概要表のあるセクションを示すレポート。この表は、ページあたりのサンプル数を増やすために 2 列で示されています。	不明なものだけが報告されます。
MQ Analyte Report with chromatograms (クロマトグラムの MQ 分析試料レポート)	各分析試料について、各サンプルのファイル情報、サンプル Results Table、および小さいクロマトグラムのあるセクションを示すレポート。	不明なものだけが報告されます。
MQ Blank Template (MQ ブランクテンプレート)	該当なし	レポートには、ヘッダー情報、ロゴ、およびページ番号のみが表示されます
MQ Pep Quant	該当なし	Peptide Quantitation データセットで使用します。MultiQuant ソフトウェアのユーザーガイドの 2 番目の例である絶対定量の例を参照してください。
MQ QC Summary 1 with flags (フラグ付きの MQ QC サマリー 1)	ファイル情報、分析試料あたりの QC 概要表 (20% よりも高い CV のある値がハイライトされます)、および QC 詳細 Results Table (80~120% 精度を外れる値がハイライトされます) を示すレポート。	Reportable チェックボックスをオフにされている品質管理は、レポートには含まれず、計算にも使用されません。
MQ Sample Report 1 (MQ サンプルレポート 1)	各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、IS 情報、分析試料 Results Table、IS および各分析試料を含む XIC 表のあるセクションを示すレポート。通常、8 サンプル未満の場合はサンプルごとに 2 ページを印刷します。	該当なし
MQ Sample Report 2 (MQ サンプルレポート 2)	不明なサンプルごとに、ファイル情報、TIC、サンプルの詳細、分析試料 XIC、および結果を表形式で含むセクションを示すレポート。8 サンプル未満のサンプルでは、1 サンプルにつき通常 2 ページの印刷となります。	不明なものだけが報告されます。

表 6-11 : デフォルトのテンプレート (続き)

テンプレート	テンプレートの説明(Create Report ダイアログに表示)	その他の注意事項
MQ Sample Report 3 (MQ サンプルレポート 3)	不明の各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、および結果概要表のあるセクションを示すレポート。	不明なものだけが報告されます。
MQ Sample Report condensed table (MQ サンプルレポート要約表)	不明の各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、および結果概要表のあるセクションを示すレポート。この表は、ページあたりの分析試料を増やすために 2 列で示されています。	不明なものだけが報告されます。
MQ Sample Report with chromatograms (クロマトグラムの MQ サンプルレポート)	各サンプルについて、各分析試料のファイル情報、サンプル情報、分析試料 Results Table、および小さいクロマトグラムのあるセクションを示すレポート。	不明なものだけが報告されます。

表 6-11 : デフォルトのテンプレート (続き)

テンプレート	テンプレートの説明(Create Report ダイアログに表示)	その他の注意事項
MQ Sample Report with Concentration Threshold (濃度しきい値付き MQ サンプルレポート)	不明の各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、および結果の合計のあるセクションを示すレポート。	<ul style="list-style-type: none"> • 関連するクエリファイルは、Sample Report with Concentration Threshold.query です。 • コンポーネントには「Cmpd X #」という名前を付ける必要があります。ここで、X は A から F までの任意の文字で、# は任意の数値です。 例: レポートでは、「Cmpd A 1」という名前のコンポーネントが見出し Compound Group A の下に表示されます。「Cmpd B 1」という名前のコンポーネントは、Compound Group B の下に表示されます。 • コンポーネントが同じグループにある場合、グループ内のアルファベット順の最初のコンポーネントのみがレポートに含まれます。 例 1: 「Cmpd B 25」と「Cmpd C 1」の両方がグループ「Grp」に属している場合、「Cmpd C 1」はレポートに含まれません。 例 2: 「Cmpd A 1」、「Cmpd A 2」、および「Cmpd A 3」がグループに割り当てられていない場合、「Cmpd A 2」および「Cmpd A 3」はレポートに含まれません。 例 3: 「Cmpd A 1」、「Cmpd A 2」、および「Cmpd A 3」がそれぞれグループ 1、2、および 3 に割り当てられている場合、3 つのコンポーネントすべてがレポートの見出し Compound Group A の下に表示されます。

表 6-11 : デフォルトのテンプレート (続き)

テンプレート	テンプレートの説明(Create Report ダイアログに表示)	その他の注意事項
MQ Sample Report with MRM ratios 2 (MRM 比率の MQ サンプルレポート 2)	不明の各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、結果概要表を含むセクション、およびすべての XIC のオーバーレイを示すレポート。予測イオン比は、利用可能なすべての標準を使って自動的に算出されます。比率の値は Results Table 内のカスタム列に置かれています。予測の 20% を外れる値はいずれもフラグが立てられます。クオンティファイアの分析試料名は、空白スペースの後に数字の 1 で終わる必要があります。比率を表すイオン分析試料名は、空白スペースの後に数字の 2~9 で終わる必要があります。	該当なし
MQ Sample Report with MRM ratios EU (MRM 比率付き MQ サンプルレポート EU)	不明の各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、および結果概要表のあるセクションを示すレポート。予測イオン比は、利用可能なすべての標準を使って自動的に算出されます。比率の値は Results Table 内のカスタム列に置かれています。予測を外れる値はいずれもフラグが立てられません(比率許容範囲に関する EU ガイドラインを使用)。クオンティファイアの分析試料名は、空白スペースの後に数字の 1 で終わる必要があります。比率を表すイオン分析試料名は、空白スペースの後に数字の 2~9 で終わる必要があります。	関連するクエリファイルは、MRM ratios EU.query です。

表 6-11 : デフォルトのテンプレート (続き)

テンプレート	テンプレートの説明(Create Report ダイアログに表示)	その他の注意事項
MQ Sample Report with MRM ratios (MRM 比率付き サンプルレポート) MQ EFAB 03	不明の各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、および結果概要表のあるセクションを示すレポート。予測イオン比は、利用可能なすべての標準を使って自動的に算出されます。比率の値は Results Table 内のカスタム列に置かれています。予測の 20%を外れる値はいずれもフラグが立てられます。クオンティファイアの分析試料名は、空白スペースの後に数字の 1 で終わる必要があります。比率を表すイオン分析試料名は、空白スペースの後に数字の 2~9 で終わる必要があります。	該当なし
MQ Sample Report with MRM ratios (MRM 比率付き MQ サンプルレポート)	不明の各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、および結果概要表のあるセクションを示すレポート。予測イオン比は、利用可能なすべての標準を使って自動的に算出されます。比率の値は Results Table 内のカスタム列に置かれています。予測の 20%を外れる値はいずれもフラグが立てられます。クオンティファイアの分析試料名は、空白スペースの後に数字の 1 で終わる必要があります。比率を表すイオン分析試料名は、空白スペースの後に数字の 2~9 で終わる必要があります。	関連するクエリファイルは、MRM ratios.query です。
MQ Sample Report with standards, QC, and blanks (標準、QC、およびブランクを含む MQ サンプルレポート)	サンプルごとに、ファイル情報、標準サマリーテーブル、QC サマリーテーブル、ブランク Results Table を含むセクションを示すレポート。次に、不明のサンプルごとに、ファイル情報、サンプル情報、IS 情報、分析試料 Results Table、IS および各分析試料を含む XIC テーブルを含むセクション。通常、8 サンプル未満の場合はサンプルごとに 2 ページを印刷します。	Reportable チェックボックスがオフになっている標準および品質管理は、レポートのそれぞれの要約表に表示されず、統計計算にも使用されません。

表 6-11 : デフォルトのテンプレート (続き)

テンプレート	テンプレートの説明(Create Report ダイアログに表示)	その他の注意事項
MQ Tutorial Dataset Heavy Light(MQ チューリアルデータセットヘビーライト)	該当なし	このレポートは、Tutorial Dataset Heavy Light データセットでの使用を目的としています。MultiQuant ソフトウェアのユーザーガイドの 2 番目の例である相対定量の例を参照してください。
Per Sample Quant-Qual	選択した各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、および選択した分析試料の分析試料 Results Table で構成されたセクションを表示するレポートです。分析試料 Results Table は、Results Table で表示されているように印刷されます。定性分析の信頼信号灯は、すべて表の先頭に示されます。	該当なし
Per Sample Quant-Qual Visible Rows Using Visible Analyte	選択した各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、および選択した分析試料の分析試料 Results Table で構成されたセクションを表示するレポートです。分析試料 Results Table は、Results Table で表示されているように印刷されます。定性分析の信頼信号灯は、すべて表の先頭に示されます。	行の非表示状態は、 Reportable チェックボックスの状態よりも優先されません。 Reportable チェックボックスが選択されているが、行が非表示になっている場合、その行は報告されません。

表 6-11 : デフォルトのテンプレート (続き)

テンプレート	テンプレートの説明(Create Report ダイアログに表示)	その他の注意事項
Per sample Quant-Qual with statistics(サンプルごとの統計量を持つ Quant-Qual)	WYSIWYG テーブルを使用して各サンプルのコンポーネントを示すレポート。XIC、MS、および MS/MS が表示されます。エリアの統計要約表は、レポートの最後に表示されます。	<ul style="list-style-type: none"> • コンポーネントテーブルに UV コンポーネントがある場合、UV トレースはレポートの XIC グラフの下に報告されます。 <hr/> <p>注: UV コンポーネントの名前が [compound_nameuv] または [uv] の形式である場合、UV サフィックスは UV MS Qual レポートに関連付けられているため、UV トレースはレポートされません。</p> <hr/> <ul style="list-style-type: none"> • サンプルに QC のラベルが付いていて、サンプルが 2 つ以上ある場合、平均、STDEV、および %CV が計算され、レポートの最後にある QC 要約表に含まれます。 • QC 行の Reportable チェックボックスがオフになっている場合、その行は QC サマリーテーブルの計算に使用されません。
Per Analyte Quant-Qual	各分析試料について、ファイル情報、Results Table、キャリブレーションカーブ、および内部標準と各分析試料のクロマトグラムで構成されたセクションが表示されます。このテンプレートは、グループが定義された Results Table に適しています。	該当なし
Positive Hits Qual	選択した各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、選択した分析試料の分析試料 Results Table、すべての分析試料、内部標準、XIC が重なったクロマトグラム、取得/理論的 MS スペクトル、選択した各分析試料の取得/ライブラリ MS/MS スペクトルで構成されたセクションが表示されます。分析試料 Results Table は、Results Table で表示されているように印刷されます。定性分析の信頼信号灯は、すべて表の先頭に示されます。	該当なし

表 6-11 : デフォルトのテンプレート (続き)

テンプレート	テンプレートの説明 (Create Report ダイアログに表示)	その他の注意事項
Qual CSV Report	各サンプルについて、ファイル情報、サンプル情報、および分析試料 Results Table で構成されたセクションを表示する.acsv フォーマットのレポートです。	レポート形式には CSV オプションを使用することをお勧めします。
サンプルの概要	各サンプルについて、分析試料の要約表のセクションを示すレポート。このレポートテンプレートは、グループが定義された Results Table に適しています。	該当なし

表 6-11 : デフォルトのテンプレート (続き)

テンプレート	テンプレートの説明(Create Report ダイアログに表示)	その他の注意事項
UV MS Qual report (UV MS Qual レポート)	各サンプルについて、そのサンプルのコンポーネントとそれに対応する UV コンポーネントを WYSIWYG テーブルで示すレポート XIC、MS、および MS/MS が UV データとともに表示されますエリアの統計要約表は、レポートの最後に表示されます。	<ul style="list-style-type: none"> • UVMS データは、質量分析計 (MS) コンポーネントの命名規則 <i>compound 1</i> (任意の文字列) および対応する UV コンポーネントの <i>compound 1uv</i> (任意の文字列と uv) で処理する必要があります。 • 質量誤差、フラグメント質量誤差、RT 信頼度、アイソトープ信頼度、およびライブラリ信頼度の信号のみが表示されます。 • グラフテーブルが作成され、XIC、MS1 トレース、MS/MS トレース、化合物 1 のヘッダー情報、および化合物 1uv の UV トレースなど、Results Table の個々のコンポーネントが表示されます。図 6-35 を参照してください。 • 分析試料のグラフは、MS 実験に対してのみ繰り返され、UV 実験では繰り返されません。 • サンプルに QC のラベルが付いていて、サンプルが 2 つ以上ある場合、平均、STDEV、および %CV が計算され、レポートの最後にある QC 要約表に含まれます。図 6-36 を参照してください。 • QC 行の Reportable チェックボックスがオフになっている場合、その行は QC 要約表の計算に使用されません。

操作上の使用説明—処理

図 6-35 : グラフテーブル

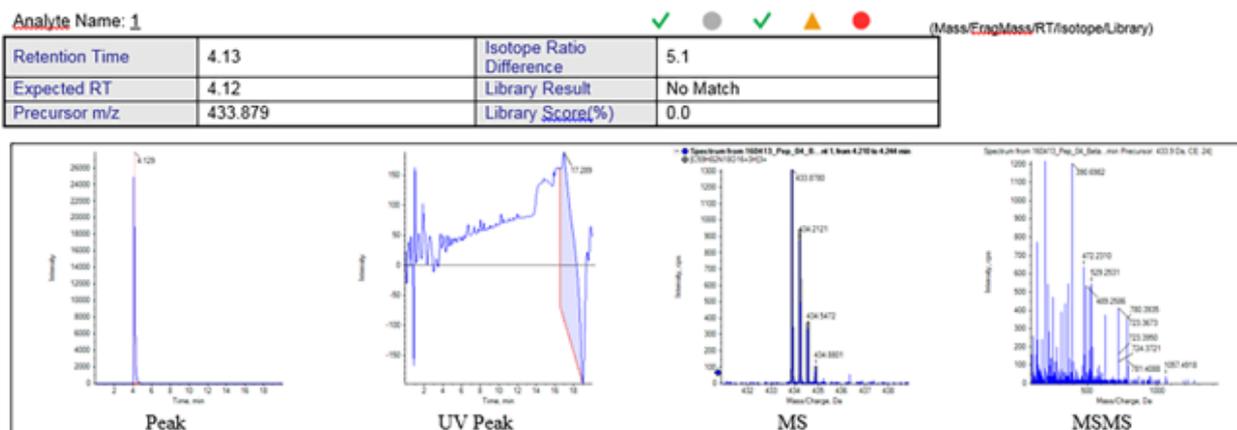


図 6-36 : 統計表

Statistics (Grouped by Concentration for QCs - Area)

Analyte Peak Name (MRM Transition)	Mean	Std. Deviation	% CV	Number of Values Used
1 (723.3573 - 723.3773)	1.062e4	7.367e2	6.93	2 of 2
2 (753.3091 - 753.3291)	2.215e4	6.858e2	3.10	2 of 2
3 (760.3353 - 760.3553)	9.332e3	1.955e1	0.21	2 of 2
4 (631.3450 - 631.3650)	3.244e4	1.110e3	3.42	2 of 2
5 (636.3373 - 636.3573)	1.144e5	3.962e2	0.35	2 of 2
6 (871.4354 - 871.4554)	6.479e4	1.198e3	1.85	2 of 2
7 (932.4493 - 932.4693)	2.183e4	7.301e2	3.34	2 of 2
8 (1000.5743 - 1000.5943)	2.553e4	5.007e2	1.96	2 of 2
9 (755.4352 - 755.4552)	1.127e5	8.422e3	7.48	2 of 2
10 (1184.5929 - 1184.6129)	3.576e4	7.231e2	2.02	2 of 2
11 (884.4871 - 884.5071)	5.183e4	1.512e3	2.92	2 of 2
12 (1176.5468 - 1176.5668)	1.670e4	1.848e2	1.11	2 of 2
13 (871.9418 - 871.9618)	1.597e5	5.501e2	0.34	2 of 2
14 (879.4236 - 879.4436)	1.868e5	5.182e3	2.77	2 of 2

問題が発生すると、Central Administrator Console (CAC)ソフトウェアは画面に表示されるエラーレポートと警告をログに記録します。Event Log ワークスペースには、エラー、警告、メッセージなどのシステムイベントのログが含まれています。

このワークスペースを開くには、ホームページの Event Log タイルをクリックします。

表 7-1 : Event Log ワークスペース列

ラベル	説明
Current	(現在)各サブシステムのための現在のイベントのリストを表示します。
Severity	(重要度)イベントの種類: 情報、エラー、警告
Time	(時間)イベントが発生した時間。
Subsystem	(サブシステム)イベントが発生したサブシステム。
Event	(イベント)イベントの説明。この情報は、システムのトラブルシューティングに使用できます。
User	(ユーザー)ユーザーの名前とイベントが発生したシステムを表示します。 注: 決定ルールによってトリガーされたイベントの場合は、これはバッチを送信したユーザーです。

イベントログ

次のログを使用できます。

- **All**(すべて)
- **Device**(デバイス)
 - **LC**(LC)
 - **Mass Spectrometer**(質量分析装置)
- **Workspace**(ワークスペース)
 - **Batch**(バッチ)
 - **Explorer**(エクスプローラ)
 - **Devices**(デバイス)
 - **General**(全般)
 - **LC Method**(LC メソッド)
 - **MS Method**(MS メソッド)

イベント

- **MS Tune**(MS チューン)
- **Analytics**(分析)
- **Queue**(キュー)
- **Users**(ユーザー)
- **Configuration**(構成)

イベントログのコードが 20,000 件に達すると、SCIEX OS は自動的に記録をアーカイブし、新しいイベントログを開始します。詳細な情報については、次のセクションを参照: [Event Log アーカイブ](#)。

ログの表示

1. Event Log ワークスペースを開きます。
2. 左側のパネルから項目をクリックして、ログを表示します。

ログのアーカイブ

1. Event Log ワークスペースを開きます。
2. **Archive > Archive Log** をクリックします。

図 7-1 : アーカイブメニュー:アーカイブログ

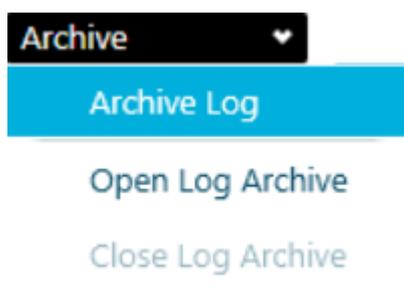
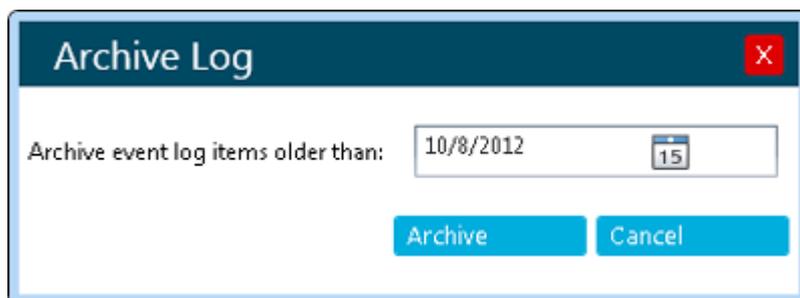


図 7-2 : ログをアーカイブダイアログ

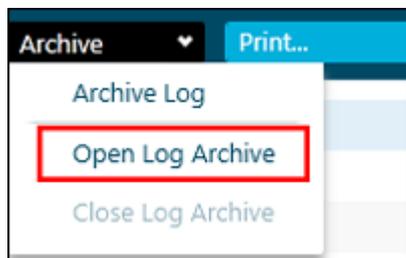


3. **Archive event log items older than** フィールドで、日付アイコンをクリックして日付を選択します。
4. **Archive** をクリックします。

アーカイブされたログを表示

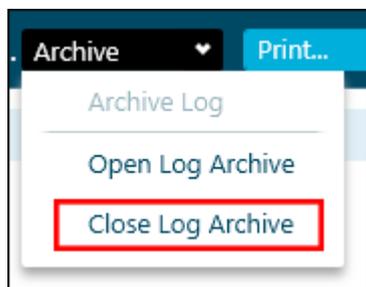
1. Event Log ワークスペースを開きます。
2. **Archive > Open Log Archive** をクリックします。

図 7-3 : アーカイブメニュー:ログアーカイブを開く



3. 必要なファイルを開きます。
4. **Archive > Close Log Archive** をクリックします。

図 7-4 : アーカイブメニュー:ログアーカイブを閉じる



ログの印刷

1. Event Log ワークスペースを開きます。
2. (オプション)アーカイブされたログを開きます。次のセクションを参照:[アーカイブされたログを表示](#)。
3. **Print** をクリックします。
Print ダイアログが開きます。
4. プリンタを選択して **Print** をクリックします。

Event Log アーカイブ

イベント レコードはイベント ログに蓄積され、移動や管理が困難な大きなファイルが作成される可能性があります。

イベントログのコードが 20,000 件に達すると、アーカイブされます。最後のイベントレコードがイベントログに追加され、イベントログは、イベントログの種類と日時を示すファイル名で保存されます。新

イベント

しいイベント ログが作成されます。新しいイベントログの最初のレコードは、イベントログがアーカイブされたことを示します。

イベントログがアーカイブは、C:\ProgramData\SCIEX\Clearcore2.Acquisition フォルダに保存されます。ファイル名は、<logfile>Archive_<YYYYMMDD>_<HHMMSS>.data の形式です。たとえば、CustomerLogArchive_20220427_172915.data です。

このセクションでは、監査機能の使用方法について説明します。

監査証跡の記録の表示

1. Audit Trail ワークスペースを開きます。
2. ワークステーションの監査証跡を表示するには、左側のペインで **Workstation** をクリックします。
3. プロジェクトの監査証跡を表示するには、左側のペインでプロジェクトを選択します。次にいずれかを選択します。
 - 一般的なイベント: 監査マップの変更やサンプル測定など、プロジェクト全体に適用される監査レコードを表示します。
 - 分析: Results Table の監査レコードを表示。
 - すべてのプロジェクトイベント: 一般的なイベントと処理イベントの両方の監査レコードを表示。

キーワード検索を使用した監査済みイベントのフィルタリング

ユーザーは、キーワード検索を使用して、監査証跡で監査されたイベントをフィルタリングできます。検索により、テキストのすべての出現箇所が強調表示されます。

1. Audit Trail ワークスペースを開きます。
2. 検索する監査証跡を選択します。次のセクションを参照: [監査証跡の記録の表示](#)。監査証跡の記録が表示されます。
3. 検索対象の単語を **Find in Page** フィールドに入力します。ページ上の一致する単語がすべて強調表示されます。
4. 次へ(▼)および前へ(▲)ボタンを使用して、一致を移動します。

指定された基準を使用する監査済みのイベントのフィルタリング

ユーザーは、一連の指定された基準を使用して、監査証跡にある監査済みのイベントをフィルタリングできます。

1. Audit Trail ワークスペースを開きます。
2. フィルタリングする監査証跡を選択します。次のセクションを参照: [監査証跡の記録の表示](#)。監査証跡の記録が表示されます。

3. **Filter**()をクリックします。
Filter Audit Trail ダイアログが開きます。
4. リストを使用して、必要なフィルター基準を定義します。

図 8-1 : 監査証跡のフィルターダイアログ

項目	説明
1	<p><No Filter>リストで、フィルタリングするフィールドを選択します。次のフィールドをフィルタリングに使用できます。</p> <ul style="list-style-type: none"> • Description • Sample Name • Full User Name • E-Signature • Reason
2	選択すると、完全に一致する単語またはフレーズでフィルタリングされます。
3	部分的な単語または語句でフィルタリングする場合に選択します。
4	<p>フィルタリングするテキストを次のように指定します。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 完全なテキスト文字列を入力します。Is(項目 2)を選択します。 • 部分的なテキスト文字列を入力します。Contains(項目 3)を選択します。 • Yes または No を選択します。
5	特定の日に発生したイベントをフィルタリングするために使用します。

-
5. フィルターをクリアするには、次の手順に従います。
 - a. **Filter** () をクリックします。
 - b. **Clear** をクリックして、すべてのフィルター基準を **No Filter** にリセットします。
 - c. **OK** をクリックします。

監査証跡の印刷

1. Audit Trail ワークスペースを開きます。
2. 印刷する監査証跡を選択します。次のセクションを参照: [監査証跡の記録の表示](#)。
3. **Print** をクリックします。
Print ダイアログが開きます。
4. プリンタを選択して **Print** をクリックします。

このセクションでは、ソフトウェアで使用される概念について説明します。

データの取り扱い

SCIEX OS ソフトウェアを使用するには、Windows 7、64 ビットまたは Windows 10、64 ビット OS 搭載のコンピュータがソフトウェアが必要です。コンピュータおよび関連するシステムは、システムおよびデータ収集を制御するシステムコントローラおよび関連するファームウェアによって作動します。システムの操作中、取得されたデータは SCIEX OS ソフトウェアに送信されます。このソフトウェアでデータは完全な質量分析スペクトル、時間経過に伴う単一または複数イオンの強度、または時間経過に伴う合計イオン電流として表示することができます。

スキヤンの技術

本装置は、液体サンプルストリームの液体クロマトグラフィー質量分析を実施して、化合物の同定、定量、検査ができる多目的で信頼できるシステムです。

本装置は次の質量分析技術を用いてサンプルの分析を行います。

- 単一質量分析 (MS) の 2 モード：
 - 四重極形単一質量分析 (Q1 キャリブレーションのみ)
 - 飛行時間型単一質量分析
- タンデム質量分析装置 (MS/MS) の 1 モード：
 - プロダクトイオン質量分析

さまざまなデータビュー

@クロマトグラム

たとえば、ある一連の質量スペクトルスキヤンを複数回繰り返し実行するように装置がプログラムされている場合、クロマトグラムには、繰り返しの実験における時間を基準とした一定量の変動が表示されます。クロマトログラムのデータは、データの強度がゼロの場合でも連続したデータになります。クロマトログラムは装置によって直接生成されるわけではなく、質量スペクトルから生成されます。

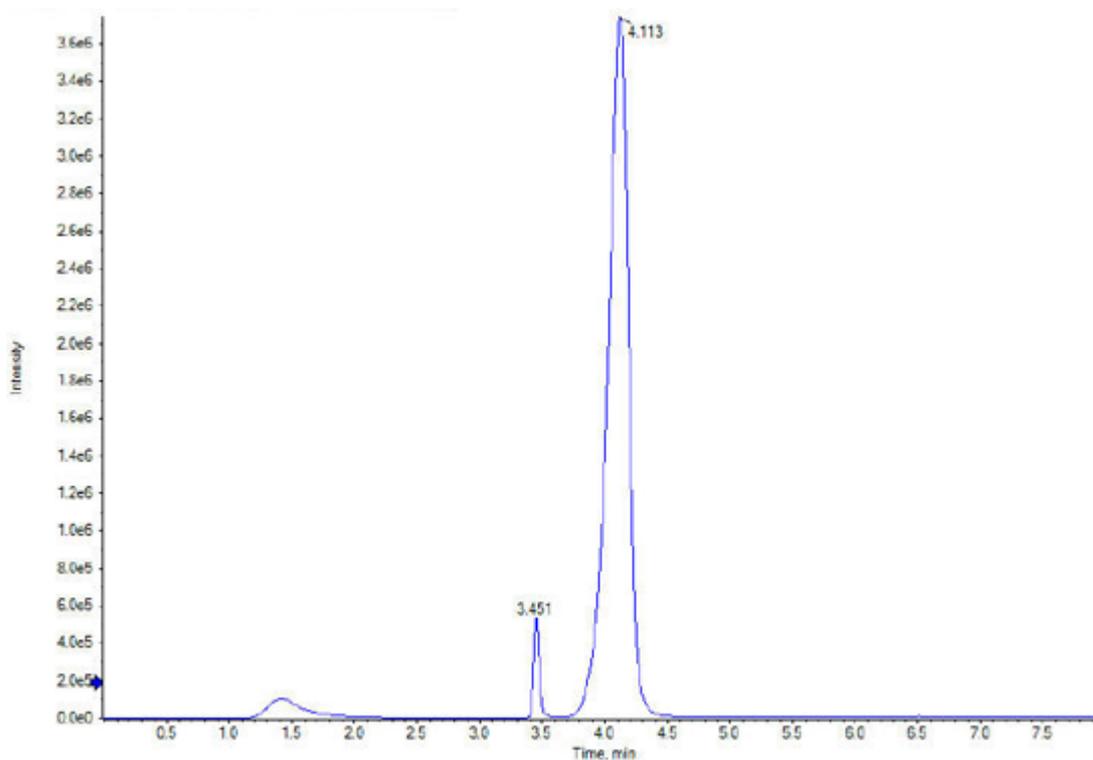
クロマトグラムのグラフでは、1 秒当たりのカウント (cps) で表した強度が Y 軸として表示され、時間が X 軸として表示されます。ピークには自動的にラベルが付けられます。

クロマトグラムのピークは、所定のサンプルのクロマトグラム条件の変化に基づいて、保持時間と強度が変化する可能性があります。

ソフトウェアは、次のタイプのクロマトグラムを表示します。

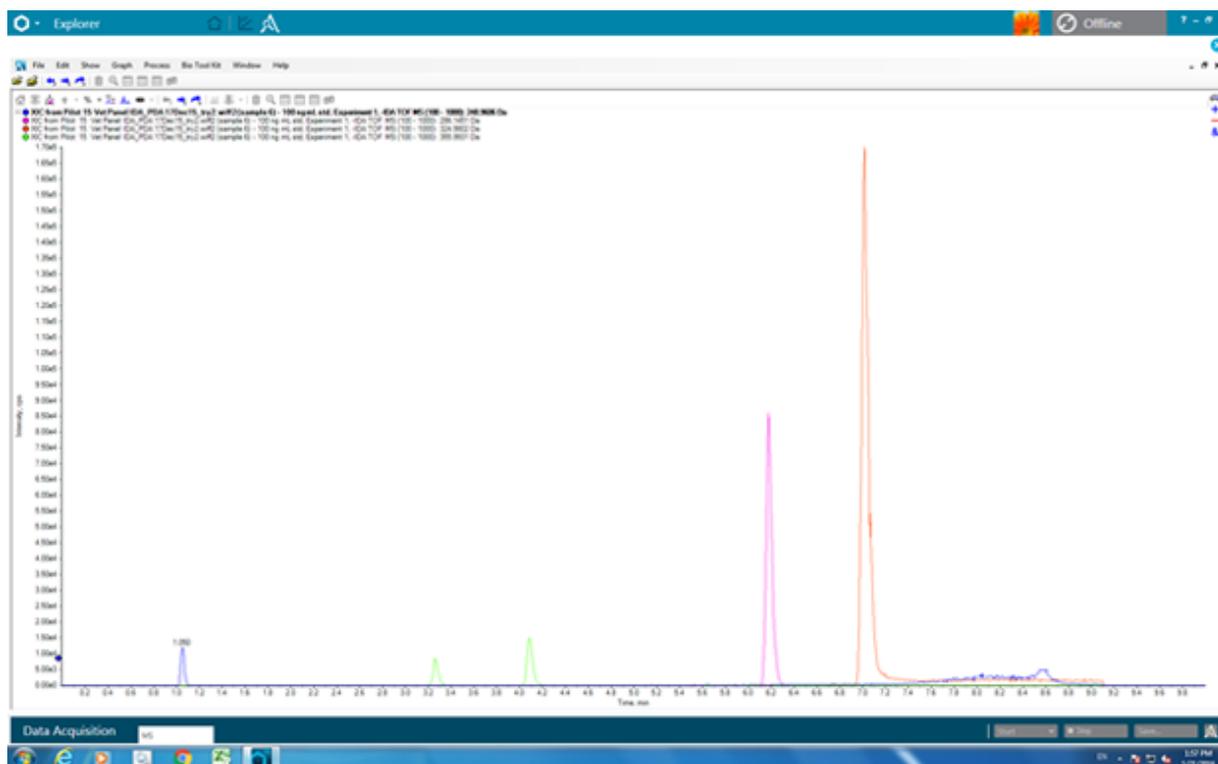
- **TIC**: 全イオン電流の強度を時間の関数としてプロットしたものです。

図 A-1 : TIC の例



- **XIC**: 一連の質量スペクトルスキャンにおいて、単一または複数の質量値あるいは質量範囲の強度値によって作成されたイオンクロマトグラムです。これは、該当する質量または質量範囲の振る舞いを時間の関数として示したものです。

図 A-2 : XIC の例



スペクトル

スペクトルとは質量分析装置から直接取得されたデータであり、通常は特定の質量電荷比 (m/z) で検出されたイオンの数を表しています。スペクトルは、 m/z 値を示す X 軸と強度 (cps) を示す Y 軸のグラフとして表示されます。

データをスペクトルとして表示すると、化合物に関する質量特有の情報が取得されます。スペクトルは、特定のクロマトグラムのピークに対応するイオンの m/z 値を提供します。これらのイオンは、より具体的な情報を見つけるために使用できます。たとえばスペクトルには、各質量の強度など、ピークを構成するすべての質量が示されます。

スペクトル強度は変化する可能性があります、化合物の質量は変化しないため、 m/z 値は一定です。

スペクトルデータを生成する方法は、以下の 2 通りです。

- スキャンが 1 つしか取得されていない場合、そのデータはスペクトルとして表示されます。
- クロマトグラムから生成されます。

再構成スペクトル

処理されたスペクトルは、MS または MS / MS スペクトルにデコンボリューションアルゴリズムを適用することによって生成されます。再構成スペクトルは、対応する強度を持つゼロ電荷または中性質量で構成されています。スペクトルは通常、化合物の分子量情報を提供します。スペクトル強度は変化する可能性があります、分子量情報は変化しません。

典型的な再構成スペクトルは、X 軸に質量 (Da)、Y 軸に強度とともに表示されます。

決定ルール

Queue (キュー) ワークスペースでバッチが処理されている間、ソフトウェアは指定された分析結果に応じて選択した修正アクションを実行できます。たとえば、サンプルが処理メソッド (分析結果) で定義された合否基準を満たさない場合、ソフトウェアはサンプルを再注入するように指示できます (修正アクション)。

この機能は、決定ルールを使用して実装されます。決定ルールは 2 つの主要な部分で構成されています。

- 分析結果を定義するフラグ設定ルール
フラグ設定ルールは処理メソッドで定義されます。
- 処理結果が分析結果の基準を満たさない場合に適用される修正アクション
是正措置には次のものがあります。
 - キューを停止
 - バッチを中止
 - 別のサンプルを注入
 - フラグが立てられたサンプルの再注入

バッチを作成する際には、バッチの決定ルールを有効にしてから、使用する決定ルールを選択することができます。

Dynamic Background Subtraction

Dynamic Background Subtraction アルゴリズムは、情報依存取得 (IDA) 実験でのプレカーサーイオンの検出を改善します。このアルゴリズムがアクティブ化されると、IDA において (プレカーサーがサーベイスpekトルから直接選択される代わりに) バックグラウンド減算済みのpekトルを用いて、関心のある候補プレカーサーイオンが MS/MS 分析向けに選択されるようになります。このプロセスは LC 分析中に行われるため、このアルゴリズムはシグナルの強度の増加に応じて種の検出を可能にします。そのため、このアルゴリズムでは、LC ピークの立ち上がり部分のプレカーサーイオンを、LC ピークの上まで、あるいは少し上まで検出して分析することに焦点を当てています。

定量分析

定量分析はサンプル中の特定の物質の濃度を発見するために使用されます。未知のサンプルを分析して標準サンプル、つまり既知の濃度の同じ物質を含むサンプルと比較することにより、ソフトウェアは未知のサンプルの濃度を計算できます。このプロセスでは、標準のシグナル応答または応答比を使用してキャリブレーションカーブを作成し、未知のサンプルの濃度を計算します。すべてのサンプルの算出濃度が結果テーブルに追加されます。

定量分析は、最も一般的には、複数反応モニタリング (MRM) スキャンを使用して実行されます。MRM スキャンでは、プレカーサーイオンと特徴的なプロダクトイオンを使用して、分析試料に非常に特異的な MRM トランジションを定義します。液体クロマトグラフィー内の分析試料の保持時間と関連する MRM トランジションによって、定量に必要な特異性がもたらされます。

定量化は、検証済みの MRM LC-MS/MS 測定メソッドを使用し、標準キャリブレーションカーブを取得し、目的の化合物に関連するピークを後に統合することによって達成されます。シグナル応答と濃度とのキャリブレーションカーブの関連性を用いて、未知のサンプル中の特定の分析試料の量を測定します。

標準添加

標準添加は、既知のマトリックス効果が従来のキャリブレーションカーブの使用を妨げるサンプル中の化合物の濃度を決定するために使用できます。

この機能により、ソフトウェアで直接標準追加を計算できます。標準添加機能が定量ワークフローで有効になっている場合、解析中に標準追加計算が実施され、Results Table に結果が表示されます。

この機能が有効になっている場合、これらの回帰パラメータは無効です。

- 回帰の種類
- 重み付けの種類
- 自動外れ値削除を適用

標準追加機能の有効化

1. Analytics ワークスペースを開きます。
2. **Process Method > New** をクリックします。

ヒント! 既存の処理メソッドを編集するには、**Process Method > Edit embedded method** をクリックし、次に以下のステップを行います。

3. Workflow ページを選択し、次に参照サンプルと少なくとも 1 つのワークフローを選択します。
4. Components ページを選択し、次にコンポーネント名、質量、内部標準、グループなどを定義します。

ヒント! コンポーネントの表でグループが定義されている場合、プレカーサーイオンと実験的指標がトランジションについて異なっている場合でも、グループ内のイオンを合計できます。合計されたイオンは表には表示されませんが、Integration ページと Results Table には <group name>_Sum という形式で表示されます。この機能は、タンパク質とペプチドの定量化に便利です。

ヒント! コンポーネントの保持時間が未知の場合、質量または化学式の **Retention Time Mode** を **Find n peaks** に設定します (ここで n は 1、2、5、10、または all)。ソフトウェアは、最大ピーク領域を持つ機能の指定された数を特定し、適切な保持時間を割り当て、次にターゲットのピーク処理ワークフローを実行します。処理が完了したならば、Results Table の埋め込みメソッドは通常のターゲットのメソッドとして保存できます。

5. Integration ページを選択し、次に各コンポーネントのための積分パラメータを選択します。
6. **Options > Quantitate by standard addition** をクリックします。

この機能は、次のバッチフィールドに対して特定の要件があります。

- **Sample ID:**同じ標準添加グループにあるサンプルはすべて、同じサンプル ID を持つ必要があります。
- **Sample Type:**標準添加により定量化するサンプルはすべて、サンプルの種類が **Standard** である必要があります。
- **Actual Concentration:**このフィールドには、標準添加グループのサンプルで付加された既知の標準濃度が含まれています。たとえば、標準添加のないサンプルの場合は **0** となります。この列からのデータはキャリブレーションカーブ上の X 軸としてプロットされます。

この機能がオンになっている場合、Results Table にはサンプルを対象として **Standard Addition Accuracy** と **Standard Addition Calculated Concentration** を比較する新しい **Standard Addition Actual Concentration** フィールドが含まれます。

特定のサンプルのキャリブレーションカーブの動的ビューは、キャリブレーションカーブダイアログに表示されます。

Mass Reconstruction

大きな分子の場合、電荷状態の広がり通常、MS フルスキャンスペクトルで観察されます。Mass Reconstruction 機能を使用すると、ソフトウェアでスペクトルのデコンボリューションを直接実行し、次に、デコンボリューションされた、またはゼロ電荷質量ピークに基づいて定量を実行できます。定量ワークフローで Mass Reconstruction 機能が有効になっている場合、処理中にピーク検出、スペクトルデコンボリューション、質量ピーク検出、および積分が実行され、結果が Results Table に表示されます。

Mass Reconstruction 機能を有効

注: Mass Reconstruction は、定量ワークフローでのみサポートされています。

注: Mass Reconstruction は、MQ4 および累積積分アルゴリズムでのみサポートされています。

注: Mass Reconstruction が有効な場合、**Options > Sum Multiple Ion** は無効になります。

1. Analytics ワークスペースを開きます。
2. **Process Method > New.**をクリックします。

ヒント! 既存の処理メソッドを編集するには、**Process Method > Edit embedded method** をクリックし、次に以下のステップを行います。

3. Workflow ページを選択し、**Quantitation** ワークフローと参照サンプルを選択します。
4. Components ページを選択します。
5. **Options > Mass Reconstruction** をクリックします。
6. コンポーネントを追加し、必須フィールドに情報を入力します。

注: **Expected MW** フィールドはオプションです。

7. **Integration** をクリックして統合ページを表示し、XIC クロマトグラフ、平均スペクトル、再構成スペクトルを確認して、ターゲット質量を選択します。

8. メソッドを保存します。

この機能が有効になっている場合、結果テーブルには次の新しい列が含まれます。**Expected MW、MW、MW Delta (Da)、MW Delta (ppm)、IS Expected MW、IS MW、IS MW Delta (Da)、および IS MW Delta (ppm)。**

定性分析

定性分析とは、ターゲット化合物または未知の化合物を同定することです。質量分析では、質量精度、保持時間、同位体パターン、ライブラリ検索、式の検出を使用して、どの化合物が存在するのかを特定します。このようなツールをすべて組み合わせて使用することで、未知のサンプルに含まれるターゲット化合物および非ターゲット化合物の両方の同定において信頼性を高めることができます。

質量精度

サンプル中の既知のターゲット化合物を同定する場合は、化合物の質量精度に注目し、その化合物に対して可能性のあるヒットの質量精度が、一定の許容範囲内に収まっているかどうかを確認すると便利です。たとえば、イマザリルの化学式は $C_{14}H_{14}Cl_2N_2O$ 、これは 296.0483 のモノアイソトピック質量を小数点以下 4 桁で示します。プロトン化された付加物は正電荷を持つイオンであり、通常は質量分析装置を使用して検出されます。イマザリルのプロトン化された付加物は、297.0556 の質量電荷比 (m/z) を持っています。イマザリルがサンプルに含まれている疑いがある場合は、見つかった化合物の m/z をプロトン化されたイマザリルの m/z を比較し、それらがどの程度一致しているかを判断します。ppm または Da での差が小さいほど、見つかった化合物が一致する可能性が高くなります。

保持時間

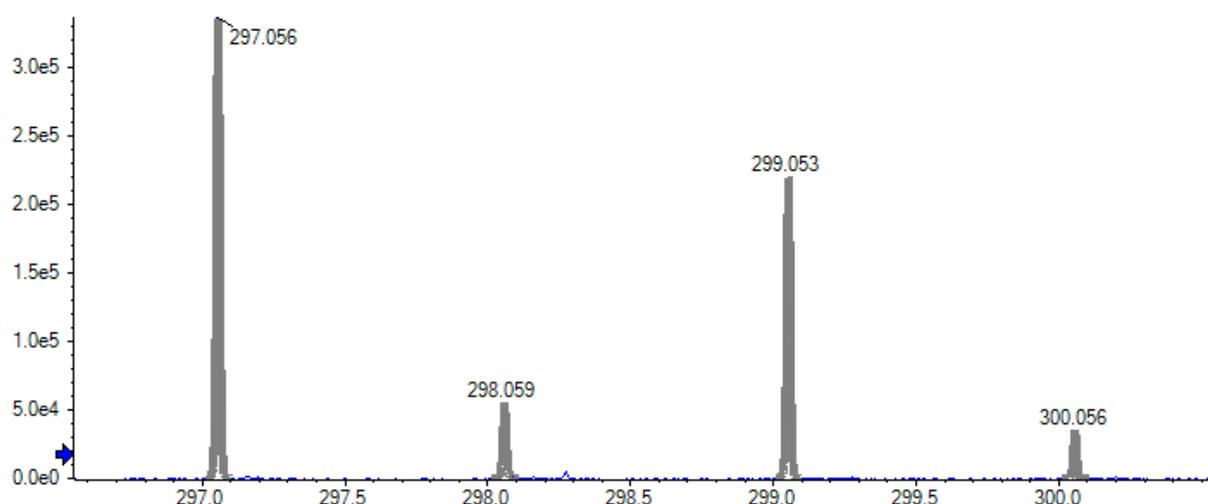
ほとんどの質量分析装置は、何らかの種類のクロマトグラフィーを使用しています。化合物の保持時間は、既知の標準化合物の注入によって決定されます。保持時間は、サンプル中のターゲット化合物の特定に役立ちます。未知のサンプルに特定の化合物が含まれると思われる場合、その保持時間と標準の保持時間が近いほど、未知の化合物を同定できる可能性が高くなります。保持時間は変わる可能性があり、既知の標準を使用して定期的に確認する必要があります。

アイソトープパターン

質量分析装置の化合物のフルスキャン質量スペクトルには、分子式に基づいた明確なアイソトープパターンがあります。

イマザリルのアイソトープパターンについては、次の図を参照してください。

図 A-3 : アイソトープパターン(イマザリル)

● C₁₄H₁₄Cl₂N₂O +H

これはイマザリルのアイソトープパターンであり、元素ごとにさまざまな質量のアイソトープで構成されています。アイソトープパターンは理論的に計算され、未知の物質中の化合物について実際に得られたものと比較されます。理論的なアイソトープパターンと実際のアイソトープパターンが類似しているほど、その化合物を同定できている可能性が高くなります。

ライブラリ検索

未知のサンプルから取得した MS/MS スペクトルを、基準スペクトルを持つ化合物のデータベースと比較するという手法は、定性分析における最も強力なツールの 1 つです。この手法ではライブラリ検索アルゴリズムを使用し、サンプルの未知のスペクトルを比較してから、そのスペクトルと既知のスペクトルおよびデータベースのスペクトルとの一致を試みます。一致の結果が類似していて、報告されるスコアが高いほど、その化合物を同定できている可能性が高くなります。

純度、適合性、逆適合性は、以下のように計算されます。

- (補正された)ライブラリスペクトルと(補正された)未知のスペクトルの両方で、特定の質量にピークが存在する場合で、その強度比がユーザー指定の制限内である場合、ライブラリスペクトルでのピークの強度は未知のスペクトルの強度と同じ値に設定されます。

- 純度は以下のように計算されます。

$100.0 (U_{L_{total}})^2 / (U_{total} \cdot L_{total})$ ここで:

$$U_{total} = \sum U_m \cdot U_m$$

$$L_{total} = \sum L_m \cdot L_m$$

$$UL_{total} = \sum U_m \cdot L_m$$

合計には、次の強度のすべての質量が含まれます。U_m および L_m は質量加重の平方根。減少、不明、およびライブラリのエントリです。純度は常に 0 から 100 の範囲に収まり、ライブラリスペクトルと未知のスペクトルの類似性を示す尺度となります。

- 適合性は純度とまったく同じ方法で計算されますが、合計に含まれるのがライブラリスペクトルに出現する質量だけである点が異なります。これらの合計から削除される用語がないため、これは

L_{total} または UL_{total} に影響を与えません。適合性は、ライブラリスペクトルが未知のスペクトルに含まれる程度を示す尺度となります。適合性が高く純度が低い場合、その未知のスペクトルは純度が低いものの、ライブラリの化合物を含む可能性が高いことを示します。

- 逆適合性も純度と同じ方法で計算されますが、合計に含まれるのが未知のスペクトルに出現する質量だけである点が異なります。逆適合性は、未知のスペクトルがライブラリスペクトルに含まれる程度を示す尺度となります。

式の検出

質量数を使用して、式検索アルゴリズムは、質量分析装置によって生成された MS および MS / MS スペクトルに基づいて、化合物の化学式を予測しようとします。そのため、式の検出のスコアが高いからといって、サンプル中の化合物が必ずしも Formula Finder アルゴリズムで特定されたものであるとは限りません。多くの場合は質量誤差の範囲内で複数の式が一致します。注意を払い、他の確認テストを実行してから、式の検出を使用して化合物を同定する必要があります。

注: 公称質量システムで式の検索を実行することはお勧めしません。

式の検出アルゴリズムでは、信号設定を使用して質量を正確にします。赤い ppm 誤差は 0 のスコアを獲得し、完全一致は 100 のスコアを獲得します。

MS スペクトルは最終的な式の検出スコアに 67% 寄与し、MS / MS スペクトルは 33% 寄与します。その結果、MS の質量を予測する式的能力がスコアに大きく影響します。ただし、MS/MS フラグメントの一致もスコアに影響します。

アイソトープのパターンは、見つかった式のリストの生成に使用されますが、最終スコアの生成には使用されません。したがって、誤ったアイソトープパターンを含む式は、おそらくリストに含まれません。

可能性のある式のリストは、プレカーサー質量の精度、アイソトープパターン、および MS/MS フラグメンテーションを使用して特定します。提示される式には、プレカーサー質量の精度と一致するフラグメントの平均 MS/MS 質量精度に基づいてスコアが付けられます。

解析

定量分析または定性分析では、解析とは対象化合物のクロマトグラムのピーク領域または高さの生成を指します。処理メソッドには、データの処理に必要なすべての情報が含まれています。

特定のサンプルセットの定量または定性情報をまとめたものが Results Table です。[Results Table](#) を参照してください。

ソフトウェアには、次の使用可能な 3 つの積分アルゴリズムがあります。

- MQ4: 分析ランの代表サンプルとして、低濃度を選択するが、デフォルトでは最低濃度、標準、品質管理サンプルは選択しません。
- AutoPeak: アルゴリズムは、高い濃度 (飽和ではない) の標準、または分析ランの代表サンプルとしてデフォルトで設定された品質管理サンプルを選択します。
- 累積: 通常のピーク検索は実行しませんが、ピークが予測される保持時間の近くに存在すると想定します。

アルゴリズムが取得できなかったピークを手動で解析することも可能です。

AutoPeak 積分アルゴリズムのパラメータ

以下の各パラメータは、目的のピークを同定および報告するために使用します。

使用可能なパラメータの完全なリストについては、ヘルプシステムを参照してください。

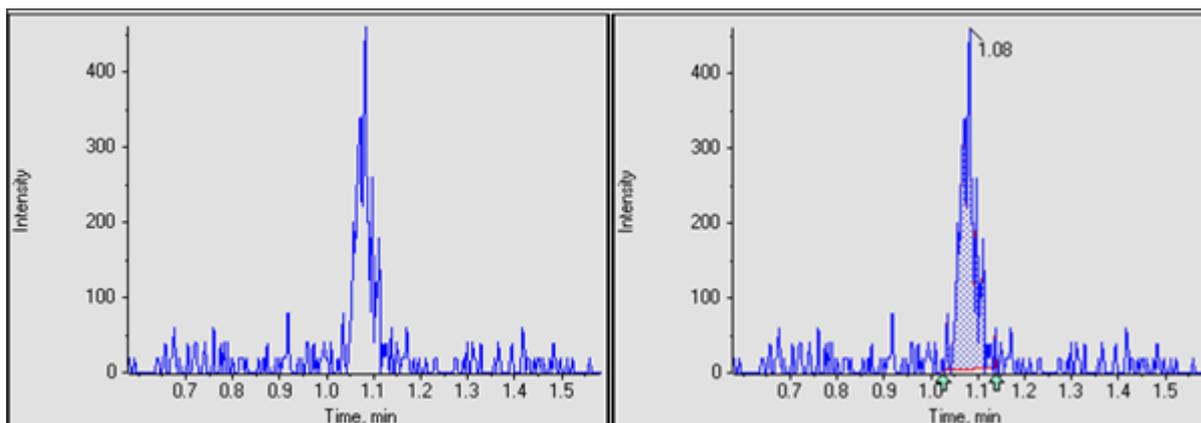
- **Local peak baseline**: クロマトグラム全体を基準としたベースラインを計算するのではなく、ピークを中心とした局所的なベースラインに対する変化が評価されます。
- **線形ピークベースライン**: ピークの特定のグループの始点と終点にあるポイント間にラインを適合させ、ベースラインがピークを下回り、非線形となる可能性を排除します。

Saturation correction: アルゴリズムによってピークの飽和が検出されると、検出器が飽和しなかった場合はピークがどのようにしていたのかを予測するモデルを使用します。これによりプロファイルがピークの最上部を超えて拡大され、およその反応が見積もられます。また、キャリブレーションカーブの線形動的範囲が拡大される場合があります。このオプションを使用できるのは、全体的なアルゴリズムのデフォルト値を設定している場合で、処理メソッドの作成時または個別のピークレビュー時ではない場合だけです。これは、一部のピークだけに対応した設定では、この設定は有用ではないためです。

Minimum Signal/Noise

次の図の左側のグラフに示すように、最小シグナル対ノイズ比が 7 に設定されている場合、ピークは報告されません。右のグラフに示すように、最小シグナル対ノイズ比を 2 に設定すると、ピークが報告されます。このパラメータは解析に影響しません。

図 A-4 : S/N しきい値



Confidence Threshold

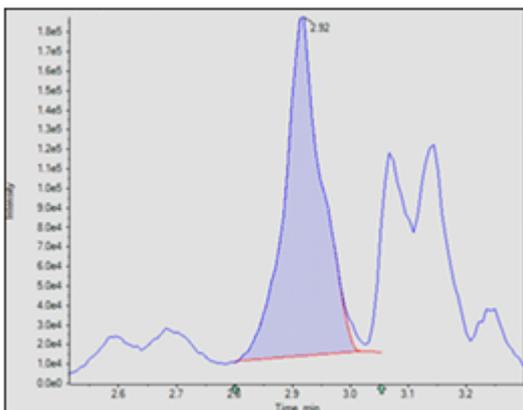
このパラメータは、偽陽性の電位ピークを除去するために使用されます。デフォルト値は 50% であり、ほとんどの場合適合します。値を大きくすることで、非常にノイズが大きいデータ、またはピーク幅がサンプルごとにより変動したデータに使用できます。

次の 2 つの図は、**Confidence Threshold** が識別されたピークの数にどのように影響するかを示しています。**Confidence Threshold** を 50% に設定する場合、小さな肩ピークは 1 つのピークとして同定されます。**Confidence Threshold** を 16% に下げると、SignalFinder アルゴリズムは 2 つのピークを検出します。2 つのピーク領域上でドラッグし、2 つのピークを表示します。

動作原理 - ソフトウェア

この単一のピークに潜在的に存在する他のピークを特定するために、正確な **Confidence Threshold** がわからなければ、**Ctrl** を押し目的のピーク領域上でドラッグしてください。これにより、**Confidence Threshold** が自動的に下がり目的の 2 番目のピークが現れます。これは、**Confidence Threshold** が 50% に設定されている場合、現れないピークです。

図 A-5 : 50%信頼度



16%の信頼度では、2つのピークが検出されます。ピーク領域上でドラッグし、2つのピークを特定します。

図 A-6 : 16%信頼度

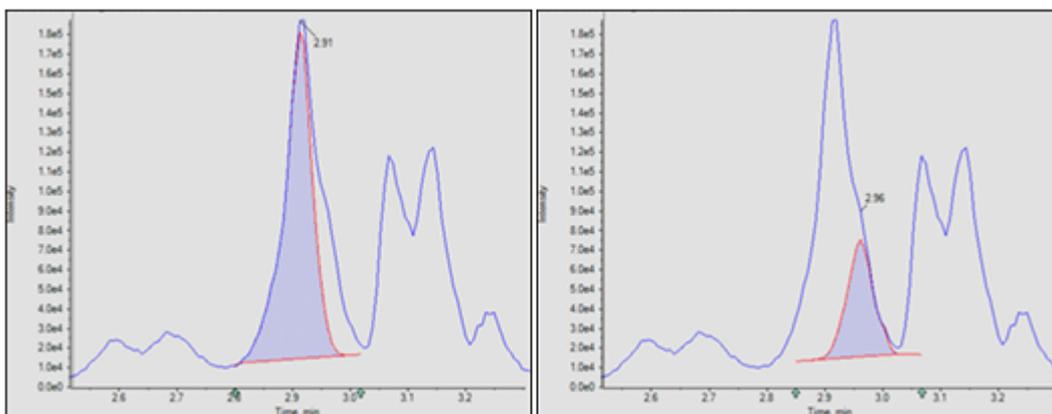
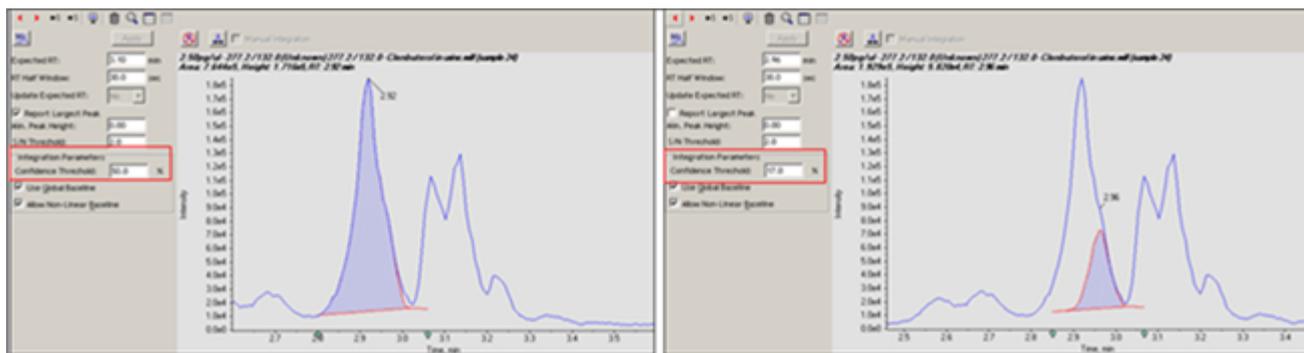


図 A-7 : Confidence Threshold パラメータ

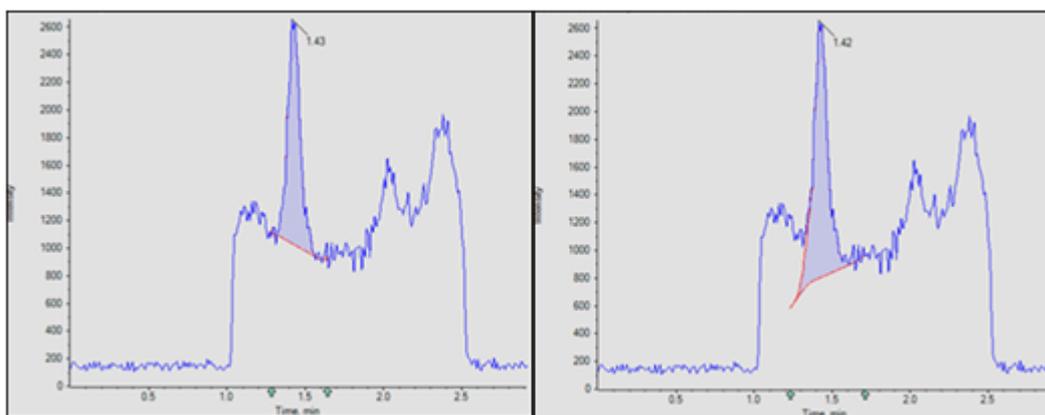


ローカル対グローバルピークベースライン

ピークベースラインはローカルまたはグローバルです。ローカルオプションが選択されている場合、定量ソフトウェアはベースラインへの変更をローカルで評価します。グローバルオプションでは、クロマトグラム全体をベースラインとして使用します。

ローカルベースラインをいつ使用するかを示す例については、次の図を参照してください。左側のグラフは局所ベースラインを使って適切に積分されたクロマトグラムを表示しています。右側のグラフは全体のベースラインを使って不適切に積分された同じクロマトグラムを表示しています。

図 A-8 : 全体のベースラインを使用する



線形対非線形ピークベースライン

ピークベースラインは、線形または非線形に設定できます。非線形オプションは各ピークの下でのベースラインを推測します。線形オプションはピークの特定のグループの始点と終点にあるポイント間にラインを適合させます。共溶出ピークの線形および非線形ベースラインの例については、[図 A-9](#) および [図 A-10](#) を参照してください。項目 1 から 4 はピークを畳み込み積分したものです。項目 5 は、さまざまなオプションで導出されたベースラインを示しています。

非線形ベースラインは複数ピークに対して推奨されています。単一ピークの場合、線形ベースラインと非線形ベースラインの差は重要ではありません。

図 A-9 : 線形ベースラインの例

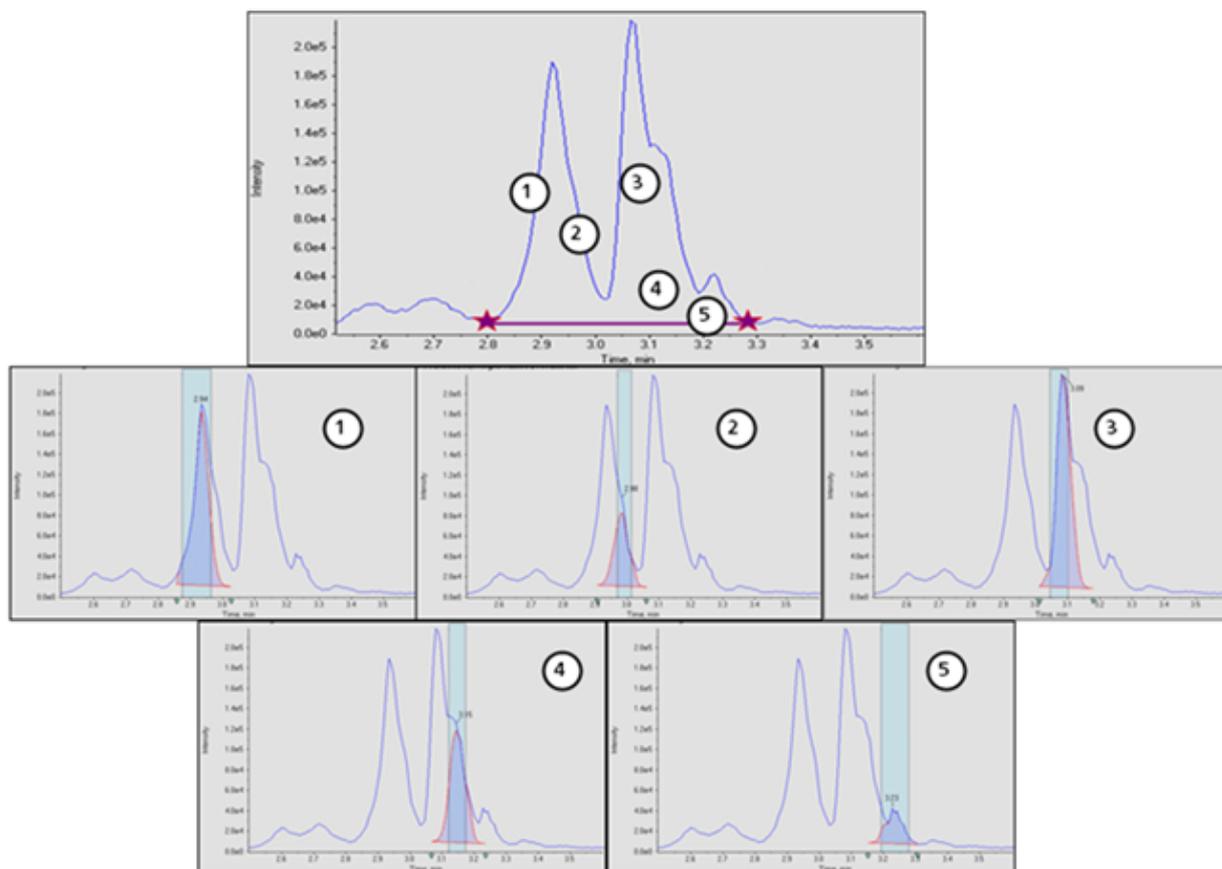
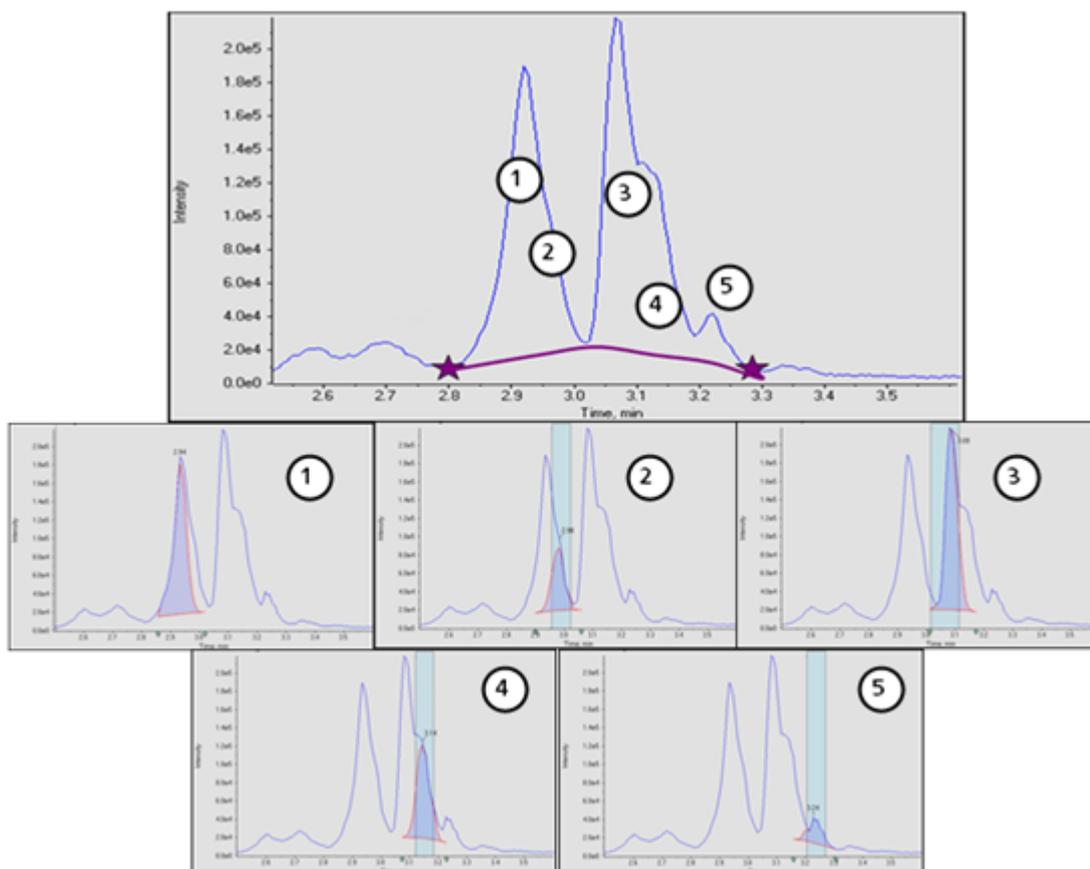


図 A-10 : 非線形ベースラインの例



MQ4 積分アルゴリズムのパラメータ

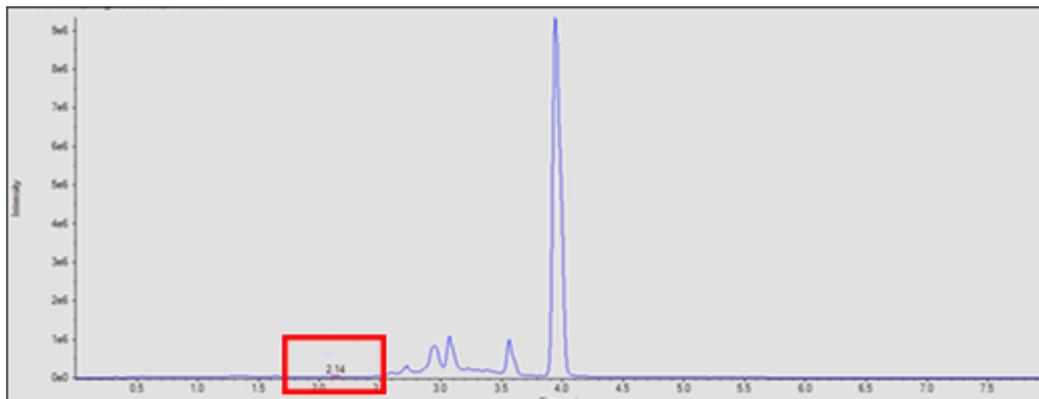
以下の各パラメータは、目的のピークを同定および報告するために使用します。使用可能なパラメータの完全なリストについては、ヘルプシステムを参照してください。

ノイズ率

このパラメータは、クロマトグラムのノイズレベルを推定する目的で使用します。最小の強度を持つ指定した割合のデータポイントがノイズとみなされます。

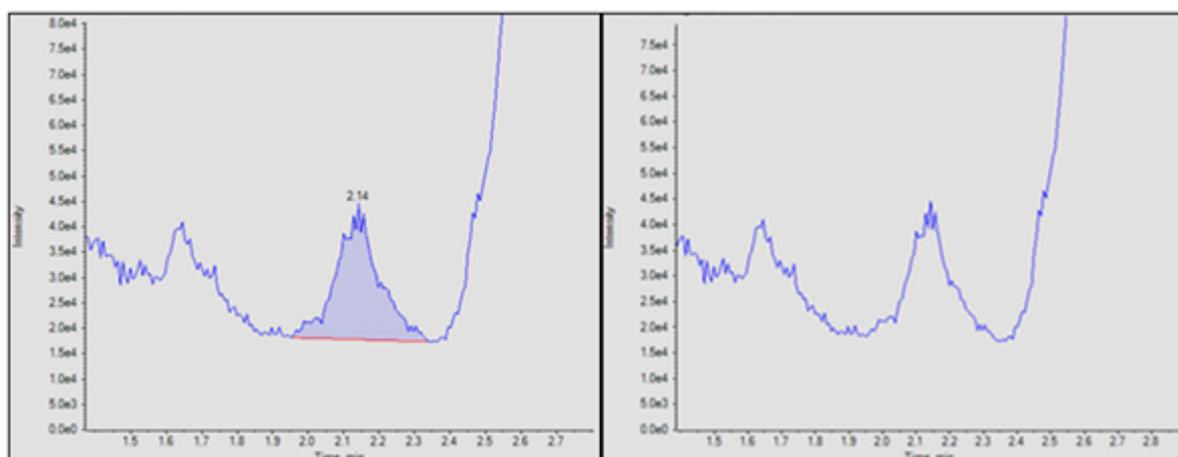
通常は、20%~60%の値を指定します。大きなピークが存在する状況で小さなピークが検出されていない場合は、ノイズ率を下げる必要があります。次の図は、極端に大きなピークが存在する状況における小さなピークの例を示したものです。ノイズ率を 90% に設定している場合、このピークは検出されませんが、ノイズ率を 40% に設定すると検出されます。

図 A-11 : 目的のピーク



次の図の左側のグラフは、ノイズ率が 40% に設定されていることを示しています。また、右側は 90% に設定した場合です。

図 A-12 : Noise Levels



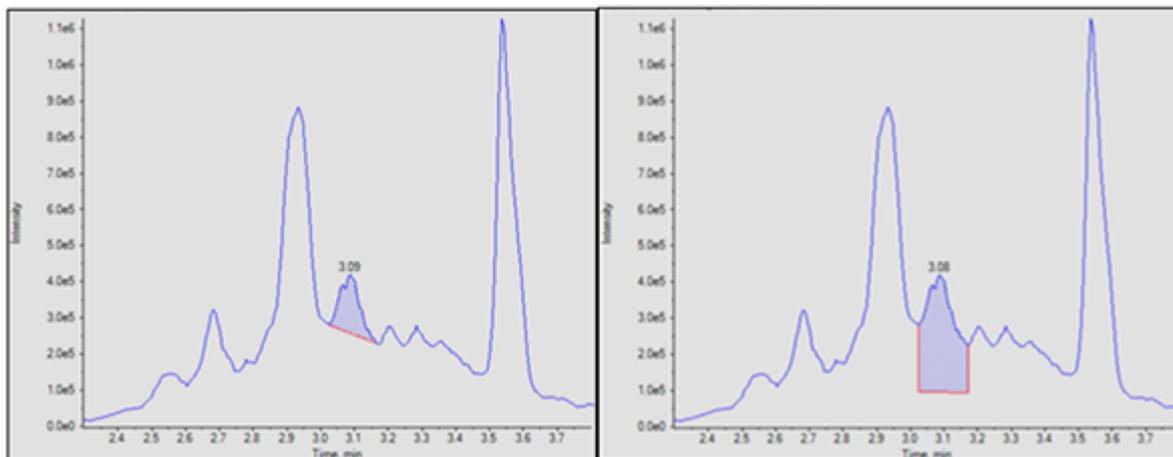
Baseline Subtract Window

スムージング後であっても、その他の処理の実行前は、突出データを排除するためにクロマトグラムがベースライン補正されます。各データポイントについて、ベースラインは、最小の強度 (補正ウィンドウの範囲内) を持つ現在のポイントの左右両側にあるデータポイントを使用して計算されます。

予測されるピーク幅より少なくとも数倍大きく設定されている場合、このパラメータの正確な値は重要ではありません。

次の図では、左側のグラフは 0.1 分に設定されたベースライン補正ウィンドウを示し、右側のグラフは 1 分に設定されたベースライン補正ウィンドウを示しています

図 A-13 : ベースライン補正ウィンドウ



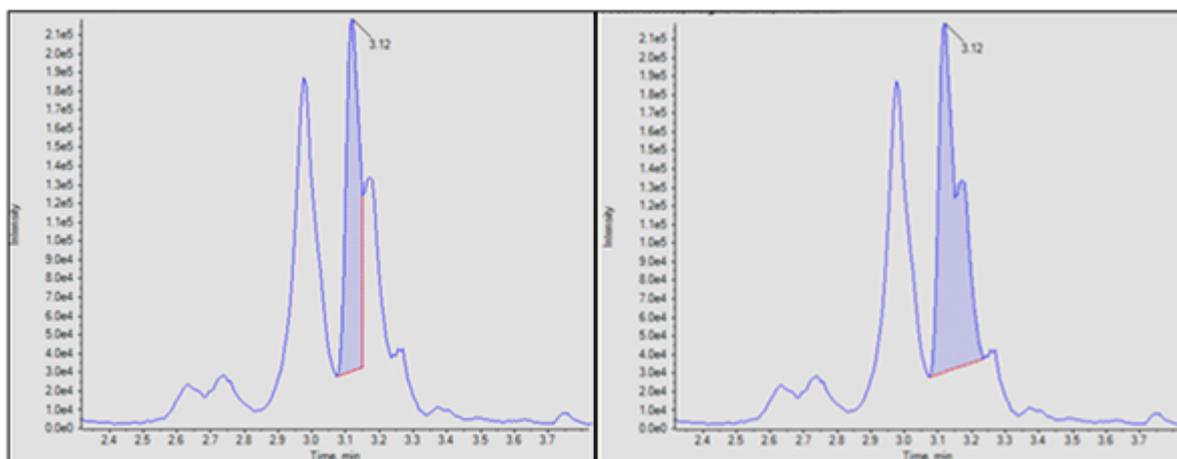
ピークスプリット

このパラメータでは、ノイズが発生する可能性のあるピークを単一のピークとして検出するか、2つ以上の個別のピークとして検出するのを制御します。2つの電位ピーク間の下落が指定した値未満の場合は、単一のピークとして検出されます。そうでない場合は2つのピークとして検出されます。

このパラメータを大きな値に設定すると、ノイズの多いピークがスプリットされず、2つの独立したピークとして検出されなくなります。ただし、2つの溶出する(重複する)明確なピークが近接して存在する場合は、小さい方の値を使用する必要があります。

次の図の左側のグラフは、ピークスプリットが2つのポイントに設定されていることを示しています。また右側のグラフでは、3つのポイントに設定されたピークスプリットを示しています。

図 A-14 : ピークスプリット



回帰

分析試料ピークの面積または高さは、キャリブレーションカーブとメトリックプロットで既知の濃度に対してプロットされます。それに続き、線がポイントにフィッティングされます。この回帰線は未知のサンプルの濃度を計算するために使用されます。

回帰方程式

このセクションでは、回帰曲線の計算に使用する式について説明します。 x 以下の各式では、 x は標準サンプルにおける分析試料濃度を表し、 y は対応するピーク領域または高さを表します。回帰に使用する正確な変数は、次の表に示すように、内部標準が使用されているかどうか、およびピーク領域とピーク高さのどちらが使用されているかによって異なります。

表 A-1 : 回帰変数

内部標準濃度の使用	面積の使用	x	y
はい	はい	$C_a / C_{\text{である}} / DF$	$A_a / A_{\text{である}}$
はい	いいえ	$C_a / C_{\text{である}} / DF$	$H_a / H_{\text{である}}$
いいえ	はい	C_a / DF	A_a
いいえ	いいえ	C_a / DF	H_a

ここで:

- C_a = 実際の分析試料濃度
- $C_{\text{である}}$ = 内部標準濃度
- DF = 希釈係数
- A_a = 分析試料のピーク領域
- $A_{\text{である}}$ = 内部標準のピーク領域
- H_a = 分析試料のピーク高
- $H_{\text{である}}$ = 内部標準のピーク高さ

重み付けの種類

以下の表には、7種類ある各加重ファクター (w) がそれぞれどのように算出されるかが示されています。

表 A-2 : 重み付けの種類

重み付けの種類	Weight (w)
なし	常に 1.0。
$1/x$	$ x < 10^{-5}$ の場合、 $w = 10^5$ 。そうでない場合、 $w = 1/ x $
$1/x^2$	$ x < 10^{-5}$ の場合、 $w = 10^{10}$ 。そうでない場合、 $w = 1/x^2$

表 A-2 : 重み付けの種類 (続き)

重み付けの種類	Weight(w)
1 / y	y < 10 ⁻⁸ の場合、w = 10 ⁸ 。そうでない場合、w = 1 / y
1 / y ²	y < 10 ⁻⁸ の場合、w = 10 ¹⁶ 。そうでない場合、w = 1 / y ²
ln(x)	x < 0 の場合、エラーが生成される。 < 10 ⁻⁵ の場合は w = ln 10 ⁵ に、それ以外の場合は w = ln x になります。
ln(y)	y < 0 の場合、エラーが生成される。 < 10 ⁻⁸ の場合は w = ln 10 ⁸ に、それ以外の場合は w = ln y になります。

相関係数

回帰式では、x、y、および w は前述に定義したとおりです。総合計は、非使用とマークした標準サンプル以外の標準サンプルすべてを算出します。

相関係数は次のように計算します。

ここで:

$$D_y = \sum w \sum wy^2 - (\sum wy)^2$$

- y_C = 回帰の種類適切な方程式を使用して計算された Y 値

$$D_{yc} = \sum w \sum wy_c^2 - (\sum wy_c)^2$$

回帰の種類

Analytics ワークスペースで、次の種類の回帰を使用できます。

- 平均 (メトリックプロットペインのみ)
- 中央値 (メトリックプロットペインのみ)
- 線形 (y = mx + b)
- ゼロ点を通る線形 (y = mx)
- 平均応答係数
- 二次式 (y = a² + bx + c)
- Power
- ワグナー
- ヒル

注: キャリブレーションカーブペインの Regression Options ダイアログの **Remove outliers automatically from the calibration curve** オプションは、選択した対象のコンポーネントに自動外れ値削除ルールを自動的に適用します。ヘルプを参照してください。

線型

線形キャリブレーション方程式:

$$y = mx + b$$

傾きと切片は以下のように計算されます。

$$m = (\sum w \sum wxy - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

ここで:

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

ゼロ点通過線型

ゼロ点を通る線形キャリブレーション方程式:

$$y = mx$$

傾きは以下のように計算されます。

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

平均応答係数

平均応答係数キャリブレーション:

$$y = mx$$

これは、ゼロ点を通る線形キャリブレーション方程式と同じものです。しかし、傾きは以下のように異なる形で算出されます。

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

応答係数の標準偏差:

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1)) / \sum w}$$

ここで:

$$D = \sum w \sum wy^2/x^2 - (\sum wy/x)^2$$

注: x の値が 0 であるポイントは、合計から除外されます。

ポイントの線に直線性および湾曲が見られる場合、それらの間で線を作成する際に線形回帰または二次回帰の代わりに指数回帰を使用してください。

二次

二次キャリブレーション方程式：

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

多項式係数は以下のように計算されます。

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum wx y - a_1 \sum wx - a_2 \sum wx^2) / \sum w$$

ここで：

$$b_0 = \sum wx / \sum w - \sum wx^2 / \sum wx$$

$$b_1 = \sum wx^2 / \sum w - \sum wx^3 / \sum wx$$

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$

$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2 y / \sum wx^2$$

指数

指数関数キャリブレーション方程式：

$$y = ax^p$$

線形キャリブレーション用の方程式が上記の説明に従って使用され、傾き(m)および切片(b)の計算が行われます。ただし、この方程式中の x は $\ln x$ に、y は $\ln y$ に置き換えられます。この場合、a および p は以下のように計算されます。

$$a = e^b$$

$$p = m$$

x または y の値のいずれかが負の数、またはゼロである場合、エラーが報告されます。

ワグナー

ワグナーキャリブレーション方程式：

$$\ln y = a_2 (\ln x)^2 + a_1 (\ln x) + a_0$$

二次キャリブレーションの方程式は、前述のように使用され、 a_0 、 a_1 、および a_2 、これらの方程式の x は $\ln x$ に、 y は $\ln y$ に置き換えられていることを除いて、計算されます。

x または y の値のいずれかが負の数、またはゼロである場合、エラーが報告されます。

ヒル

ヒルキャリブレーション方程式：

$$y = (a + bx^n) / (c + x^n)$$

a 、 b 、 c 、および n について解くための解析関数を提供することはできません。その代わりに、レーベンバーグ・マーカート反復法を使って係数が決定されます。

外れ値の自動除外

オプション機能により、ソフトウェア上で外れ値をキャリブレーションカーブから自動的に除外できます。この機能により時間を節約できるため、直線範囲や感度が異なる多数の化合物が含まれるアプリケーションに役立ちます。

この機能を有効にすると、ソフトウェアで全データポイントを繰り返し調査し、最良の線形回帰が得られ、さらに外れ値の除外に関しユーザーが指定したルールに一致する 4 連続ポイントの開始範囲を特定します。アルゴリズムにより、開始ポイントの全順列に関する重回帰が算出されます。アルゴリズムでは、ユーザーが指定したルールに一致するすべての有効な回帰を検討し、すべてを拡張列にかけます。有効な開始範囲のすべてで、各拡張が得られるかは使用したポイントの総数、使用した濃度範囲、拡張前後の回帰内にある最悪の絶対精度誤差を有する点に左右されます。最大範囲に及ぶものでこのルールを満たす回帰が「獲得」回帰です。

注： 4 点のデータポイントが得られない場合、ソフトウェアでは 3 点が用いられます。利用できるデータポイントが 3 点に満たない場合、このアルゴリズムは適用されません。

外れ値の自動除外ルールは処理メソッドで定義し、以下を含められます。

- 最小相関係数 (r)

注： このオプションで使用するのは相関係数であり、決定係数 (r^2) ではありません。

- 低濃度の定量 (LLOQ) での標準繰り返し測定値の最大許容精度誤差
- LLOQ より上での標準物質の最大許容精度誤差
- LLOQ での標準複数回繰り返し測定値の変動係数 (CV) 最大パーセント

注： %CV が指定された値より大きい場合、残りの複製の %CV がこの値より小さくなるまで、アルゴリズムは精度誤差の降順で複製を削除します。

- LLOQ より上での標準複数回繰り返し測定値の CV 最大パーセント

注： %CV が指定された値より大きい場合、残りの複製の %CV がこの値より小さくなるまで、アルゴリズムは精度誤差の降順で複製を削除します。

- 指定された外れ値の総数が、LLOQ 未満で定量上限 (ULOQ) を超える外れ値を除外するかどうか

- 濃度レベルで除外できる外れ値の最大数
- キャリブレーションカーから除外できる外れ値の合計数

注: このアルゴリズムは、手動で除外されたものを含むすべての標準に適用されます。

注: 回帰の作成に使用する繰り返し測定値数が標準濃度ごとに異なる場合、自動外れ値除外機能は正常に機能せず、開始ポイントとして使用できるのみです。各キャリブレーションカーブを手動でレビューします。

ヒント! 処理メソッドの合格基準で標準物質精度の許容しきい値が Rules for Automatically Removing Outliers for Calibration Standards (キャリブレーション標準の外れ値を自動的に削除するためのルール) ダイアログのものと一致することを確認します。

Results Table

Results Table は、サンプルセットに関連した定量情報および定性情報をまとめたものです。これには、標準キャリブレーションカーブを補間した結果によって決定される濃度および精度の計算が含まれます。Results Table には、ライブラリ検索の結果、式検出の結果、およびその他の定性分析の結果も表示されます。面積、高さ、および他の数値特性が表示されます。Results Table 内の列の番号および種類を編集して、簡素化した表示できます。

キャリブレーションカーブ

キャリブレーションカーブは、標準濃度カーブとも呼ばれ、不明のサンプルと濃度が分かっている標準サンプルを比較することにより、未知のサンプル内の物質濃度を決定する方法です。キャリブレーションカーブは、装置が分析試料(測定が行われる物質)の濃度の変化にどう反応するか(分析信号)に関するプロットです。オペレータは、未知のサンプル内の分析試料の予想濃度に近い濃度範囲の一連の標準液を準備します。

キャリブレーション標準は、キャリブレーションカーブの形成に使用されます。キャリブレーションサンプルの正確でない読み取り、または読み取りの欠如は、分析ランに問題があることを示唆している場合があります。文書に記載されている許容される方法、および規制当局のガイダンスに従ってキャリブレーションカーブを作成してください。キャリブレーションカーブの準備におけるグッドプラクティスの例には、以下が含まれます。

- 分析試料の測定を行うブランクのマトリクスにキャリブレーション標準を準備します。
- 測定する各分析試料に対し、キャリブレーションカーブを生成します。
- 代表的標本、および非定型標本を含め、分析試料の推定濃度範囲を網羅するようにします。
- カーブの生成に、6~8 の標準を使用します。

これは包括的なリストではありません。ラボにおけるキャリブレーションカーブの作成に関するベストプラクティスを決定する際には、他のガイダンスも参照する必要があります。

注: 分析ランにおいて、1 点キャリブレーション標準が使用される場合もあります。1 点キャリブレーションは、マトリクスブランクサンプル、および 1 つの標準濃度を使用して実行します。装置の反応および分析試料濃度の間の関係は、これら 2 つの点で作成される線によって決定されます。収集メソッドおよび処理メソッドは、用途への許可を得る前に確認を行う必要があります。

シグナル対ノイズ比

定量的な質量分析データ処理を実行する際、特定のピークが重要かどうかを特定しておくことは重要であり、ここでの **重要**とは一般的に、バックグラウンドノイズを超えることを意味します。

相対ノイズと S/N の計算

通常、ピークの高さは、ピークのない領域で測定したバックグラウンドノイズと比較しており、このノイズは一般的に、ピークのない領域のデータポイントの標準偏差の 1 または 3 倍として見積もられています。このアプローチは次のような理由で理想的とは言えません。

- ノイズ領域の選択は手動で行うため、主観的である。
- ピークのないバックグラウンド領域は存在しない、またはその領域がノイズの正確な見積もりのためにはあまりにも狭い可能性がある。
- ピーク位置のノイズは、選択したノイズ領域におけるものとまったく異なっている可能性がある。
- 「1 または 3」ということも主観的であり、さまざまな権威のある人たちが異なる推奨を行っている。
- ノイズの出現は、データが前処理されていた場合、変わる可能性がある。たとえば、スムージングやしきい値があげられる。

Relative Noise (Rn) (相対ノイズ) コンセプトにより、データのどのポイントでも予測されるノイズを算出し、測定したシグナルと比較するための単純なメソッドを開発することは簡単です。これは優れた客観的なメトリックで、シグナル対ノイズ (S/N) を算出し、機器とアッセイの性能を評価し比較するために使うことができます。相対ノイズコンセプトを応用したものが多くあり、そのうちの一つは S/N の算出です。

基本的なアルゴリズムは次のように機能します。

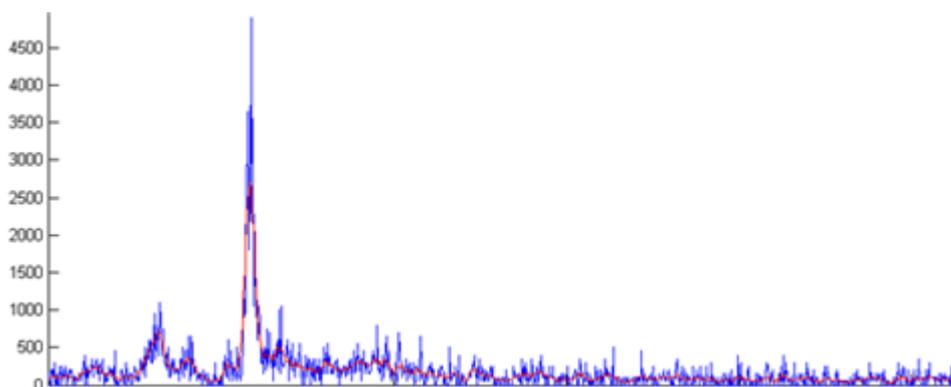
1. あるポイントの根底にあるシグナルのレベルを前提として、データ記録のすべてのポイントの予測ノイズを算出できるノイズモデルを考案。

このノイズモデルは、論理的考察から決定することもできますし、特定のシステムの実測値からモデル化できます。パルスカウンタ検出器では、シグナルの標準偏差、そこから予測されるノイズは、シグナルの平方根に比例するため、シグナルと共に変動します。他のシステムでは、一定の「ホワイトノイズ」コンポーネントがあり、強度依存的なコンポーネントと組み合わさっている可能性があります。

2. 測定したシグナルから根底のシグナルを推測。

このタスクは多くの方法で実現できますが、最も簡単なものは、データをスムーズ化したバージョンを作成することです。 [図 A-15](#) を参照してください。

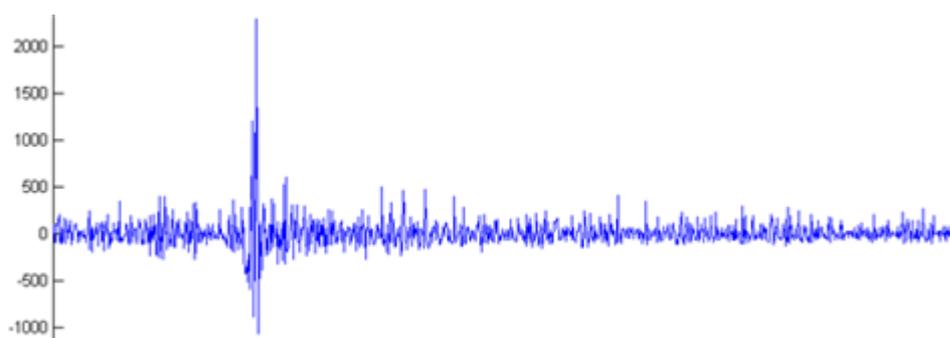
図 A-15 : 生データおよびスムーズ化したデータのオーバーレイ



3. 全ポイント(ピークおよびバックグラウンドの両方)を使ってデータ内の実際のノイズを測定します。

これは、元のシグナルからスムーズ化したシグナルを引き算したデータの各ポイントで、推測したシグナルから根底にあるシグナルの推定値を引き算して得られます。結果はデルタノイズとして知られています。デルタノイズの領域は、ほぼ一定ですが、大きなピークは当てはまりません。というのも、ノイズはシグナルに依存するため、シグナルが大きくなればノイズも大きくなるためです。図 A-16 を参照してください。

図 A-16 : 各データポイントのデルタノイズ値のプロット



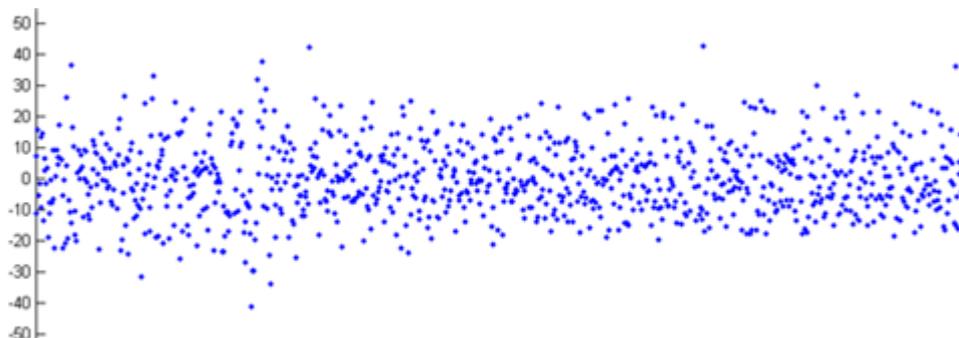
4. 各データポイントで、予測ノイズに対する測定ノイズの割合を算出します。

つまり、すべてのデータポイントで、ステップで測定されたノイズを、ノイズモデルが予測する値(この場合は強度の平方根)で割ります。ノイズモデルが良好であれば、ソフトウェアは、大部分がいくつかの限界に縛られたままの一連の値を生成します。次の図を参照してください。この図は、次の式のプロットも示しています。

$$\Delta noise / \sqrt{intensity}$$

注: このステップでは、デルタノイズの大きなばらつきが減少し、結果的に拘束された値のセットが得られます。

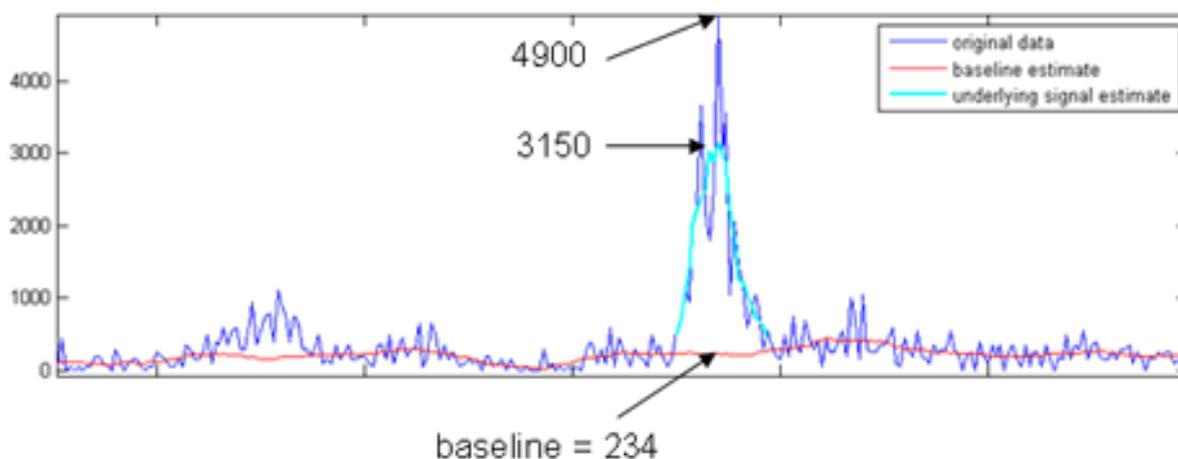
図 A-17 : ノイズモデル



- 割合値の標準偏差を算出します。これが R_n であり、実際のデルタノイズとモデルから予測したノイズの間の最も可能性の高い関係を推定した値になります。上図では、これは 9.5 の値になります

次の図は、相対ノイズを使用してどのように S/N を算出できるか例を示しています。

図 A-18 : 生データ、根底にある推測シグナル、推測ベースラインのオーバーレイ



前述のようにノイズは以下のように求められます。

$$\text{noise} = R_n \times \sqrt{(\text{baseline})}$$

この例では、次のようになります。

$$\text{noise} = 9.5 \times \sqrt{234} = 145$$

ピークの頂点をシグナルとして使用する場合、34 (4900/145) の S/N となり、スムーズ化したシグナルの高さを使用した場合、22 (3150/145) の S/N となります。

S/N をレポートする際、MQ4 積分アルゴリズムはここで説明した方法を使用し、ピークの頂点をシグナルとして使用しています。AutoPeak 積分アルゴリズムはモデルをピークに適合させるため、適合したプロファイルの高さを使用します。これは、小さな S/N 値をレポートすることになります。しか

し、潜在的なノイズスパイクによって影響を受けることがほとんどないので、これはより精度の高い値なのです。AutoPeak 積分アルゴリズムはベースライン予測に洗練されたアプローチでもあり、これら 2 つの理由から 2 つのアルゴリズムによって報告される S/N 値は同一ではありませんが、たいていの場合よく似たものになります。

まとめると、バックグラウンド領域の標準偏差としてノイズを推測する通常の方法と比較して、S/N を算出する相対ノイズ法は次のような利点があります。

- バックグラウンド領域は手動で選択する必要がないため、主観性がはるかに少ない。
- クロマトグラムのピークのない領域が存在しない場合でも正確な S/N が予測できる。
- AutoPeak および Summation 積分アルゴリズムの場合、ベースライン、つまりノイズは、対象となるピークの近くで推定されます。MQ4 積分アルゴリズムの場合、ベースラインはユーザー指定のノイズ率でのデータポイントの強度です。たとえば、ユーザーが指定したノイズ率が 40% で、100 個のデータポイントがある場合、MQ4 積分アルゴリズムは、データポイントを強度の小さいものから大きいものへと並べ替え、40 番目に小さい強度を持つデータポイントの強度を使用します。

これは報告された S/N 値とかなり異なる場合があります。というのも、通常の方法に対して選択したバックグラウンド領域は、ピーク近くのバックグラウンドよりもはるかに緩やかなためです。すでに説明したように、Relative Noise 法によって算出した S/N 値は通常の方法よりも小さい値になる場合があります。しかし、ここで述べた方法はより正確で有用性の高い値となります。[図 A-18](#) を参照してください。

Results Table で **Signal / Noise** 列を表示させたい場合は、[Results Table のレビュー](#)を参照してください。

AutoPeak 積分アルゴリズムを使用する場合のシグナル対ノイズに関する注意

AutoPeak 積分アルゴリズムはシグナルノイズを高精度に算出するため(そのため、予測 CV の精度がさらに高まる)、1 シグマのシグナルノイズ法を使用する場合、ラボの実験的なデータに基づいて、シグナルノイズ値を最小の許容範囲に低下させる標準操作手順書(SOP)を検討してください。

ピーク間を用いた S/N

この S/N アルゴリズムを使用する場合、指定されたバックグラウンドの開始時刻と終了時刻の間のすべてのクロマトグラフィ データポイントの標準偏差を取得することで、S/N 比を計算します。ソフトウェアは、アクティブなクロマトグラムの S/N 比を計算し、選択したピークから平均バックグラウンド信号を減算し、減算した信号をピーク間ノイズレベルで除算します。次に、各領域の最大強度に基づいて、ノイズ領域とピーク領域を区別します。完了すると、アクティブなクロマトグラムに S/N 比のラベルが付けられます。

標準偏差を使用した S/N 比

この S/N アルゴリズムを使用すると、ソフトウェアはクロマトグラフィピークの S/N 比を計算し、ラベルを付けます。このアルゴリズムでは、クロマトグラムで 2 つの領域を選択する必要があります。

- ノイズ領域
- 対象ピーク

次に、ソフトウェアは、各選択の最大強度に基づいて、ピークを含む領域とノイズを含む領域を決定します。ピーク信号強度から平均バックグラウンド信号強度を減算し、減算した信号をノイズ領域の標準偏差を乗じたユーザー指定の係数で除算します。

ノイズ領域を定義

標準偏差またはピークツーピークアルゴリズムが使用されている場合は、この手順を使用してノイズ領域を定義します。

注: 結果テーブルに使用できる S/N アルゴリズムは 1 つだけです。別の S/N アルゴリズムをデータに適用するには、プロジェクトのデフォルトを変更してから、新しい Results Table を作成します。

1. プロジェクトのデフォルト設定で、**Standard Deviation** または **Peak-to-Peak** の S/N アルゴリズムを選択します。

ヒント! プロジェクトのデフォルト設定を開くには、**Projects > Project default settings** をクリックします。

2. 処理メソッドを作成
3. Integration (統合) ページで、**Options > Show Noise Regions** をクリックします
4. (必要に応じて) マウスを使ってノイズ領域を調整します。

注: ノイズ領域はトランジションごとに設定する必要があります。

5. データを処理します。
6. Peak Review ペインで、**Options > Show Noise Regions** をクリックします。
7. (必要に応じて) マウスを使ってノイズ領域を調整します。

計算列

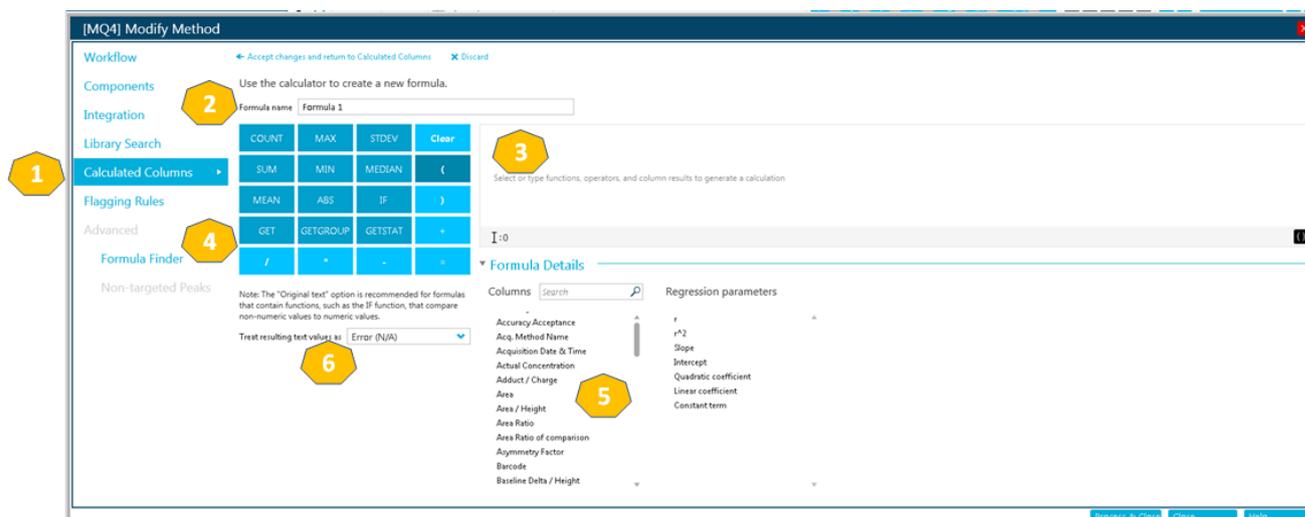
計算列は、新しいカスタム列が Results Table に追加される式です。式を作成してデータを処理(または再処理)すると、式の結果が新しいカスタム列に表示されます。

計算列インターフェースのナビゲート

計算列は処理メソッドで作成されます。これらのファイルは `f_rml` ファイルとしてインポート、エクスポートでき、後で使用したり、共有することができます。

次の図は、数式エディタのインターフェースを示しています。

図 A-19 : 計算列 UI



項目	説明
1	処理方法のワークフローにおける Calculated Columns ステップ。クリックして、[計算された列]ページを開きます。次に、 Add Formula をクリックします (表示されていません)。
2	Formula name フィールド。式名を入力します。 注: 式名には、計算機の関数名、角括弧、または丸括弧を含めることはできません。
3	Formula フィールド。
4	一般的に使用される関数と演算子を含む計算機。式フィールドには、次の追加の演算子を入力できます。 <ul style="list-style-type: none"> • > (~ 超過) • >= (~ 以上) • < (~ 未満) • <= (~ 以下) • != (~ に等しくない) これらの演算子と関数の詳細については、ヘルプシステムを参照してください。
5	利用可能な回帰パラメータと Results Table の列。 注: このリストは <code>qsession</code> テーブルでは利用できません。

項目	説明
6	<p>Treat resulting text values as メニューを使用すると、ユーザーはテキストエントリの処理方法を構成できます。このオプションは、数値出力とテキスト出力の両方を含む可能性のある Results Table の列で重要です。</p> <p>たとえば、計算された濃度列には、N/A、縮退、無限などの数値以外の値とともに数値を含めることができます。</p>

注: サンプルの配列を使用する式の入力を開始すると、サンプルの選択項目が使用可能になります。

デフォルト以外の情報の簡単な抽出

計算列機能を使用すると、デフォルトでは Results Table に表示されない情報を表示できます。

たとえば、 R^2 を Results Table の列として表示するには、 R^2 に等しい式を作成できます。

図 A-20 : 計算列を含むカスタム列の作成

← Accept changes and return to Calculated Columns ✕ Discard

Use the calculator to create a new formula.

Formula name

COUNT	MAX	STDEV	Clear
SUM	MIN	MEDIAN	(
MEAN	ABS	IF)
GET	GETGROUP	GETSTAT	+
/	*	-	=

I:5

▼ Formula Details

Columns	Search	Regression parameters
Accuracy		r
Accuracy Acceptance		r^2
Acq. Method Name		Slope
Acquisition Date & Time		Intercept
Actual Concentration		Quadratic coefficient

Note: The "Original text" option is recommended for formulas that contain functions, such as the IF function, that compare non-numeric values to numeric values.

Treat resulting text values as

単純な算術

単純な数式を作成して、基本的な数学演算を実行できます。

例: R²

```
[r] * [r]
```

この例では、乗算演算子(*)を使用して R 値をそれ自体で乗算することにより、R² 値が再生されません。

例: 1 秒あたりのポイントの収集

```
[Points Across Baseline]/(((End Time)-[Start Time])*60)
```

この例では、ベースライン全体のポイントは、積分されたクロマトグラフピークの最初から最後まで秒数で除算されます。この数式は、除算 (/)、乗算 (*), および減算 (-) 演算子を使用します。

より複雑な機能

他にも多くの機能と制御構造が存在します。一般的なものとしては、**MEAN()**、**MAX()**、**MIN()**などがあり、計算機の数式バーの下に表示されます。

構文の詳細、演算子、関数の完全なリストについては、ヘルプシステムを参照してください。

例: 標準の平均([面積])

すべての値を操作する関数を使用する場合、計算に含めるサンプルを選択できます。

図 A-21 : 標準サンプルのみのピーク面積の平均値の取得

← Accept changes and return to Calculated Columns ✕ Discard

Use the calculator to create a new formula.

Formula name:

COUNT	MAX	STDEV	Clear
SUM	MIN	MEDIAN	(
MEAN	ABS	IF)
GET	GETGROUP	GETSTAT	+
/	*	-	=

MEAN([Area])

I:12

▼ Formula Details

Columns 🔍

Regression parameters

- Accuracy
- Accuracy Acceptance
- Acq. Method Name
- Acquisition Date & Time
- Actual Concentration
- Adduct / Charge
- Area
- Area / Height
- Area Ratio
- Area Ratio of comparison
- Asymmetry Factor
- Barcode
- ...

r
 r²
 Slope
 Intercept
 Quadratic coefficient
 Linear coefficient
 Constant term

MEAN value will be calculated using the following sample types:

- Unknowns
 - Only if the sample name contains...
- Standards
 - Only if the sample name contains...
- QCs
 - Only if the sample name contains...
- Blanks
 - Solvent
 - Blank
 - Double blank
 - Only if the sample name contains...

Note: The "Original text" option is recommended for formulas that contain functions, such as the IF function, that compare non-numeric values to numeric values.

Treat resulting text values as:

例: 関数の組み合わせ

単純な算術とより複雑な関数を組み合わせることができます。たとえば、取得された 1 秒あたりの平均ポイントを計算するには、次の式を使用します。

```
MEAN([Points Across Baseline]/(([End Time]-[Start Time])*60))
```

IF ステートメント

IF 関数は論理テストを実行し、真の結果に対して 1 つの値を返し、偽の結果に対して別の値を返します。ネストされた IF 関数を使用して、複数の条件をテストできます。IF 関数は、**and** や **or** などの他の論理関数と組み合わせて、論理テストを拡張できます。

注:「&&」と「||」はそれぞれ **and** と **or** に使用できます。演算子 **and** および **or** は前後にスペースが必要ですが、演算子&&および||には不要です。

基本的な IF ステートメントの構文は次のとおりです。

```
if(<condition>;<value if true>;<value if false>)
```

- **<condition>** は、true または false として評価できる値または論理式です。
- **<value if true>** は返される値であり、対応する Results Table の列に表示されます。**<condition>** が true と評価されたときに実行されます。
- **<value if false>** は返される値であり、対応する Results Table の列に表示されます。**<condition>** が false と評価されたときに実行されます。

注: IF 関数記号は、計算機から選択または入力します。または別のソースからコピーすることができます。**if** または **IF** 構文で使用できます

IF 関数では、**MEAN**、**STDEV** などの他の数値関数を使用できます。**<condition>**、**<value if true>**、または **<value if false>** 式も、式内で使用されます。

例: **<condition>**

たとえば、**<condition>** の例を次に示します。

```
[Peak Area]>5000
```

```
[Component Name]='Analyte 1'
```

```
[Retention Time]> 1 and [Retention Time]<2
```

例: <value if true> および <value if false>

<value if true> および <value if false> は、数値またはテキストのいずれかです。

```
if([Retention Time]> 1 and [Retention Time]<2; '1-2 min RT window'; 'not applicable')
```

例: 内部標準面積の平均値

この例では、必要なサンプル全体で内部標準 (IS) 面積の平均値が計算され、1e6 の値と比較されます。**MEAN ([IS Area])**が 1e6 より大きい場合、平均 IS 面積値が対応する Results Table の列に表示されます。<condition> が真の場合に適用されます。**MEAN ([IS Area])**が 1e6 未満の場合、つまり <condition> が false の場合、Results Table の列には **Review IS performance**、<value if false>が含まれます。

```
IF (MEAN([IS Area])>=1e6; 'MEAN([IS Area]'); 'Review IS performance')
```

注: IF 関数のみ複数の計算を含めることができます。

結果のテキスト値として扱う

Treat resulting text values as オプションは、テキストまたは数値とテキストの組み合わせを含むカスタム Results Table 列で、テキストをどのように解釈するかを決定します。たとえば、**Sample Type** 列にはテキストのみ、**Precursor Mass** 列には数値のみ、**Calculated Concentration** 列には数値とテキストの両方が含まれる場合があります。

式で使用されている関数に応じて、**Treat resulting text values as** オプションは、計算のベースとなる列のテキスト値を特定の方法で解釈することができます。使用可能なオプションは次のとおりです。

- **Zero**
- **Ignore (blank)**
- **Error (N/A)**
- **Original text**

注: これらのオプションの詳細については、ヘルプシステムを参照してください。

計算が **COUNT**、**MAX**、**STDEV**、**SUM**、**MIN**、**MEDIAN**、**GET**、**GETGROUP**、**SLOPE**、**INTERCEPT**、**MAD** または **GETSTAT** 関数に基づいている場合、推奨されるオプションは **Zero**、**Ignore (blank)** または **Error (N/A)** です。これらのオプションは、数式に数値が必要な列が含まれている場合、**IF** ステートメントでも推奨されます。

Original text は、コンポーネントが、次の **IF** ステートメントで推奨されるオプションであり <condition>、<value if true>、および <value if false> の式は、特に追加の関数を使用している場合、数値とテキストの両方になることがあります。

注: **IF** ステートメントでは、複数の <condition> を含んでいる場合は、1 つの <condition> も評価に失敗するとカスタム結果テーブルの列に <value if false> が出力されます。

例

この例では、数式で使用される列にテキストと数値の両方が含まれている可能性があります。したがって、**Original text** オプションが推奨されます。

```
IF([Sample Type]='Unknown'&&(GET([Calculated Concentration];  
'Analyte 1')+GET([Calculated Concentration];'Analyte 2'))<=15;  
'Low Range';IF([Sample Type]='Unknown'&&(GET([Calculated  
Concentration]  
; 'Analyte 1')+GET([Calculated Concentration];'Analyte 2'))  
<=65;'Normal Range';'Over normal range'))
```

この IF 式には、**Sample Type** 列と **Calculated Concentration** 列の両方が含まれています。**Sample Type** 列の値は、**Original text** として扱う必要があります。**Calculated Concentration** 列の場合、<0 や **Degenerate** などの数値以外の値を **Zero** として扱う必要がある場合があります。

数値以外の値は別の扱いをする必要があるため、数式を複数の小さな数式に分割して、数値以外の値をより細かく制御することをお勧めします。

接点閉が設定されているシステムのキャリブレーション

B

システムに接点閉が設定されている場合、バッチモードと手動モードで共に接点閉をシステムのキャリブレーションに使用できます。

- バッチモード: CDS または LC メソッドのいずれかでシステムのキャリブレーションができます。
[バッチモードでのシステムのキャリブレーション](#)を参照してください。
- 手動モード: CDS または LC メソッドのいずれかでシステムのキャリブレーションができます。
StartMS Method ワークスペースの **Start with LC** またはをクリックしてメソッドを開始します。
ステータスが **Load** に変わってから LC デバイスで注入を開始します。

注: MS Tune ワークスペースは接点閉機能に対応していません。MS Tune では接点閉信号を待つことはありません。

バッチモードでのシステムのキャリブレーション

CDS または LC メソッドのいずれかを使用してシステムをキャリブレーションします。

CDS を使用したシステムのキャリブレーション

システムが接点閉を使用して外部デバイスと通信している場合、これらのガイドラインに従って CDS を使用しているシステムをキャリブレーションします。

- キャリブレーション間のサンプル数などの Auto-Calibration プロパティを設定します。
- サンプルの間でキャリブレーション時間がとれるように LC システムのメソッドと質量分析装置を同期させます。以下のセクションで、同期させるための 2 種類のオプションについて説明します。
- バッチの送信後、最初のキャリブレーションが終了するまで待ち、システムが Loading 状態になったら外部デバイスで注入を開始します。

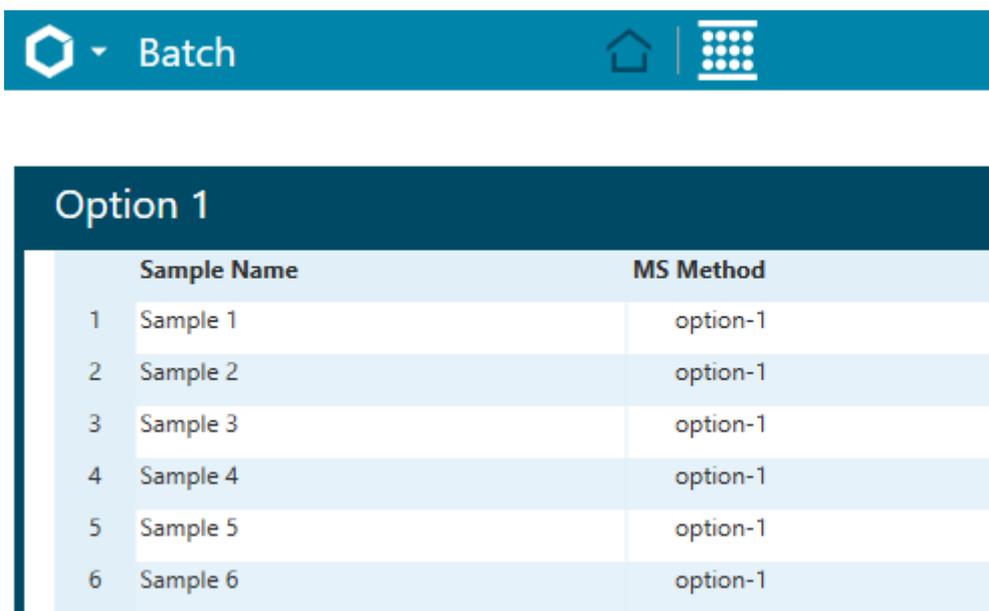
オプション 1

LC システムと質量分析装置を同期させるには、LC メソッドが質量分析装置メソッドよりも 2 分以上長くなるようにします。

以下の例で、SCIEX OS のバッチおよびキュー、さらに 3 番目のサンプルが終わるごとにキャリブレーションを実施するバッチの外部デバイスの対応するスケジュールを示します。

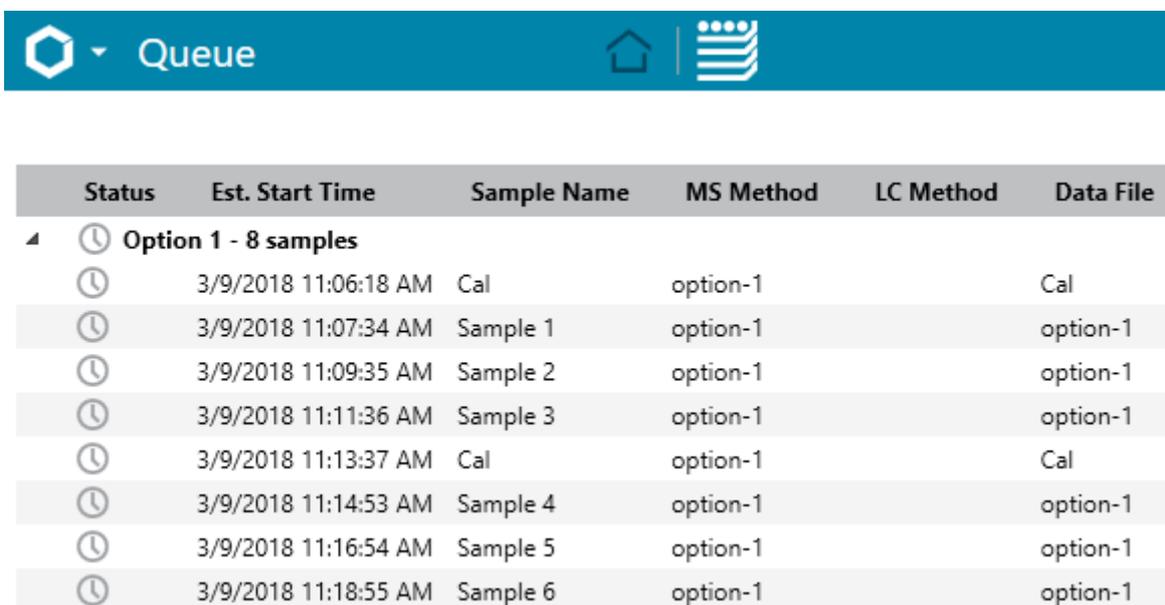
接点閉が設定されているシステムのキャリブレーション

図 B-1 : CDS キャリブレーション:バッチの例



	Sample Name	MS Method
1	Sample 1	option-1
2	Sample 2	option-1
3	Sample 3	option-1
4	Sample 4	option-1
5	Sample 5	option-1
6	Sample 6	option-1

図 B-2 : CDS キャリブレーション:キューの例



Status	Est. Start Time	Sample Name	MS Method	LC Method	Data File
⌚		Option 1 - 8 samples			
⌚	3/9/2018 11:06:18 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:07:34 AM	Sample 1	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:09:35 AM	Sample 2	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:11:36 AM	Sample 3	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:13:37 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:14:53 AM	Sample 4	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:16:54 AM	Sample 5	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:18:55 AM	Sample 6	option-1		option-1

表 B-1 : 外部デバイスのサンプル列

時間(分:秒)	Injection(注入)
00:00	サンプル 1
12:00	サンプル 2
24:00	サンプル 3

表 B-1 : 外部デバイスのサンプル列 (続き)

時間(分:秒)	Injection(注入)
36:00	サンプル 4
48:00	サンプル 5
60:00	サンプル 6

オプション 2

このオプションはショート LC メソッドによるワークフローに適しています。

これらのガイドラインに従って LC システムと質量分析装置を同期させます。

- バッチの最初のものを除く全キャリブレーションで、キャリブレーションを行う予定の時は常にブランクサンプルを注入するよう外部デバイスを設定します。例として、キャリブレーションの間に 3 サンプルを測定する場合、4 番目の注入がすべてブランクサンプルになるようにします。
- 外部デバイスでのブランクサンプルのランタイムは 2 分以上になるようにします。(CDS キャリブレーションには 2 分かかります) Method Duration が注入間隔の時間以内になるようにします。

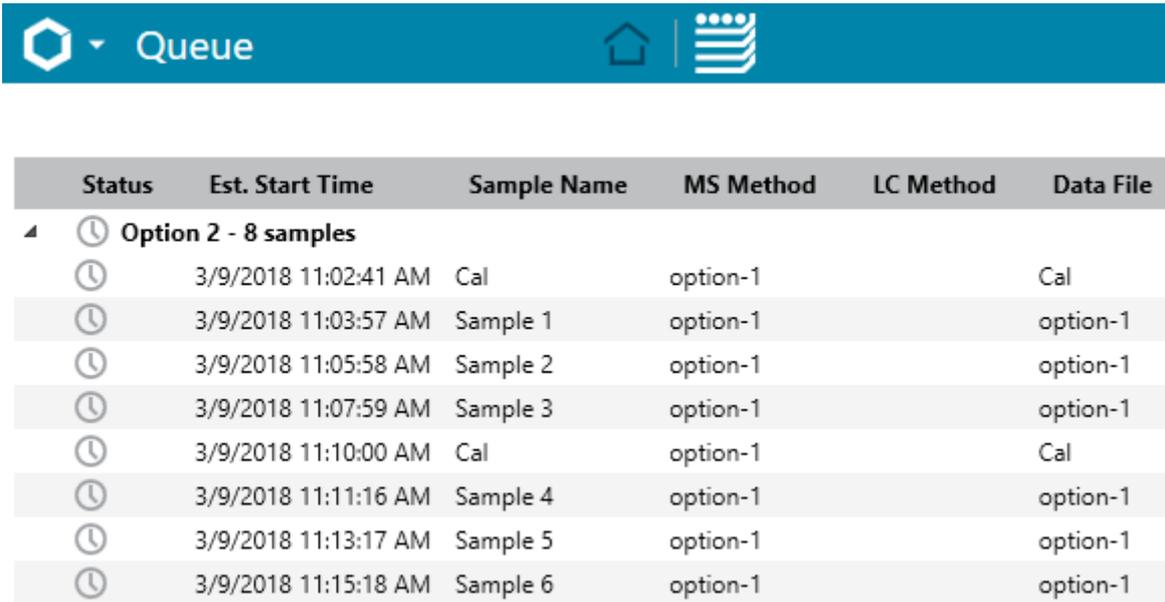
以下の例で、SCIEX OS のバッチおよびキュー、さらに 3 番目のサンプルが終わるごとにキャリブレーションを実施するバッチの外部デバイスの対応するスケジュールを示します。

図 B-3 : CDS キャリブレーション: バッチの例

	Sample Name	MS Method
1	Sample 1	option-2
2	Sample 2	option-2
3	Sample 3	option-2
4	Sample 4	option-2
5	Sample 5	option-2
6	Sample 6	option-2

接点閉が設定されているシステムのキャリブレーション

図 B-4 : CDS キャリブレーション:キューの例



Status	Est. Start Time	Sample Name	MS Method	LC Method	Data File
⌚	Option 2 - 8 samples				
⌚	3/9/2018 11:02:41 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:03:57 AM	Sample 1	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:05:58 AM	Sample 2	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:07:59 AM	Sample 3	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:10:00 AM	Cal	option-1		Cal
⌚	3/9/2018 11:11:16 AM	Sample 4	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:13:17 AM	Sample 5	option-1		option-1
⌚	3/9/2018 11:15:18 AM	Sample 6	option-1		option-1

表 B-2 : 外部デバイスのサンプル列

時間(分:秒)	Injection(注入)
00:00	サンプル 1
02:00	サンプル 2
04:00	サンプル 3
06:00	空白
08:00	サンプル 4
10:00	サンプル 5
12:00	サンプル 6

LC システムを使用したシステムのキャリブレーション

システムが接点閉を使用して外部デバイスと通信している場合、これらのガイドラインに従って外部デバイスを使用しているシステムをキャリブレートします。

- 質量分析装置のプロパティで、外部デバイスをシミュレートするようにバルブを設定します。
- バルブの LC メソッドを作成します。
- 外部デバイスで、メソッドの期間が注入間隔の時間以内になるようにします。
- バッチの Auto-Calibration プロパティの設定: イオン参照表を選択してキャリブレーション頻度を設定します。**Calibrant delivery** ではバルブの LC メソッドを選択し、**MS method** では使用している MS メソッドを選択します。

図 B-5 : LC キャリブレーション: Automatic Calibration Editor

注: 参照表で必ずペプチドごとに保持時間を入力します。

- バッチを送信してキューを開始します。キューの入力内容が外部デバイスのスケジュールの入力内容と一致することを確認します。
- 外部デバイスで注入を開始します。

以下の例で、SCIEX OS のバッチおよびキュー、さらに 3 番目のサンプルが終わるごとにキャリブレーションを実施するバッチの外部デバイスの対応するスケジュールを示します。MS メソッドの期間は 1 分です。キャリブレーションメソッドの期間も 1 分です。

接点閉が設定されているシステムのキャリブレーション

図 B-6 : LC キャリブレーション:Batch

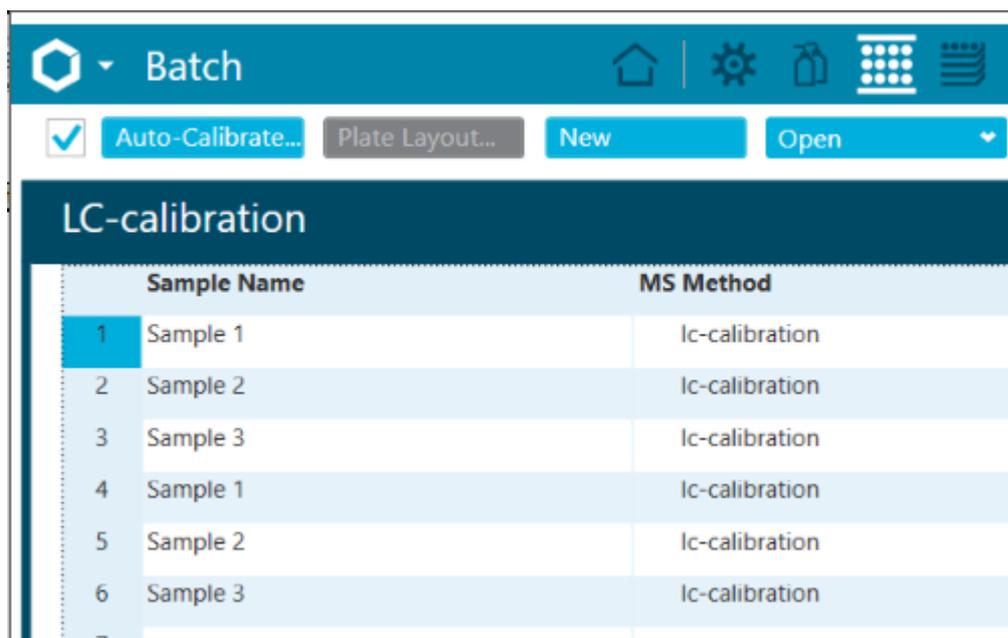


図 B-7 : LC キャリブレーション:Queue

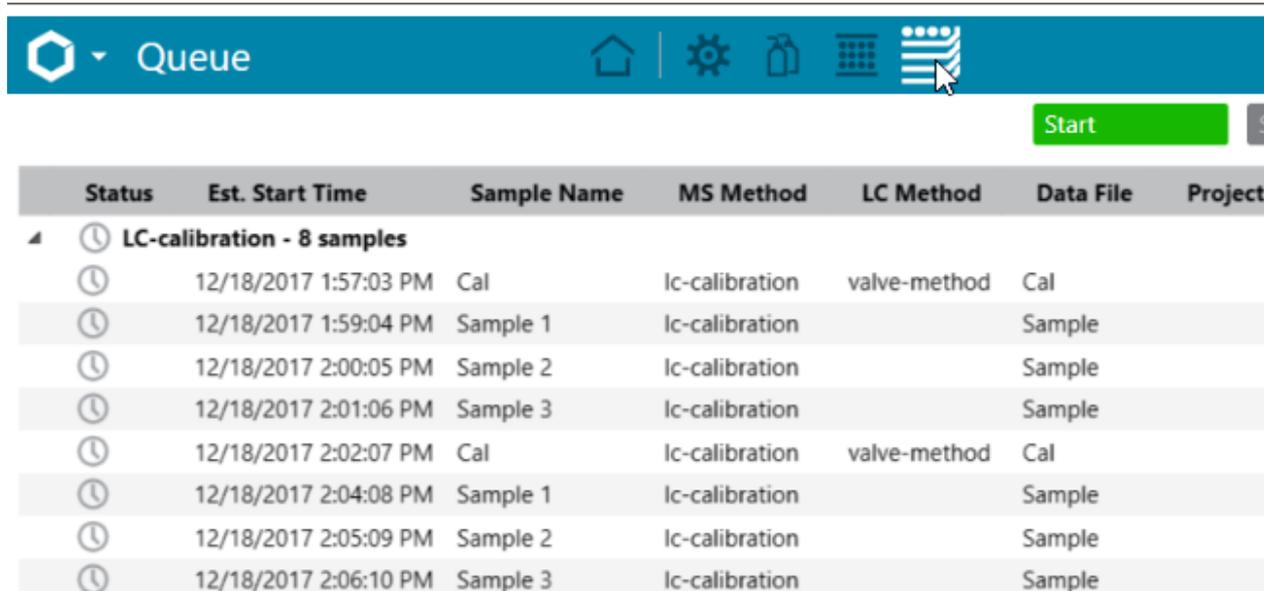


表 B-3 : 外部デバイスのサンプル列

時間(分:秒)	Injection(注入)
00:00	キャリブラント
01:00	サンプル 1
02:00	サンプル 2

表 B-3 : 外部デバイスのサンプル列 (続き)

時間(分:秒)	Injection(注入)
03:00	サンプル 3
04:00	キャリブラント
05:00	サンプル 1
06:00	サンプル 2
07:00	サンプル 3

手動モードでのキャリブレーション

このセクションでは、MS Method ワークスペースのメソッドを手動で実行している時に接点閉を使用してキャリブレーションする方法について説明します。

CDS によるシステムのキャリブレーション

1. MS Method ワークスペースで実行中のメソッドを開きます。
2. **Advanced > Calibrate** をクリックします。
3. **Ion Reference Table** フィールドで、メソッドの極性に従って **X500 Positive Calibration Solution** または **X500 Negative Calibration Solution** を選択します。
4. **Apply Calibration** を選択します。
5. **OK** をクリックします。
6. **Start** をクリックします。

LC メソッドを使用したシステムのキャリブレーション

システムが接点閉を使用して外部デバイスと通信している場合、これらのガイドラインに従って外部デバイスを使用しているシステムをキャリブレートします。

- 質量分析装置のプロパティで、外部デバイスをシミュレートするようにバルブを設定します。
 - バルブを含み、MS メソッドの期間以上に長い期間を有する LC メソッドを作成します。
1. MS Method ワークスペースで実行中の MS メソッドを開きます。
 2. **Start with LC** をクリックして LC メソッドを選択します。
 3. システムステータスが **Loading** に変わってから LC デバイスで注入を開始します。

計算精密質量および化学式

C

レセルピン

表 C-1 : レセルピンの計算精密質量(C₃₃H₄₀N₂O₉)

説明	質量
分子イオン C ₃₃ H ₄₁ N ₂ O ₉	609.28066
フラグメント C ₂₃ H ₃₀ NO ₈	448.19659
フラグメント C ₂₃ H ₂₉ N ₂ O ₄	397.21218
フラグメント C ₂₂ H ₂₅ N ₂ O ₃	365.18597
フラグメント C ₁₃ H ₁₈ NO ₃	236.12812
フラグメント C ₁₀ H ₁₁ O ₄	195.06519
フラグメント C ₁₁ H ₁₂ NO	174.09134

ペプチド ALILTLVS

表 C-2 : ペプチド ALILTLVS 正確な質量

名称	シーケンス	質量	電荷状態
プレカーサーイオン	ALILTLVS	829.5393	1+
b8	ALILTLVS	811.5288	1+
b7	ALILTLV	724.4967	1+
b7-18	ALILTLV	706.4862	1+
b6-18	ALILTLV	607.4178	1+
y5	LTLVS	532.3341	1+
b5	ALILT	512.3443	1+
b5-18	ALILT	494.3337	1+
b4	ALIL	411.2966	1+
b3	ALI	298.2125	1+
内部フラグメント y b	IL または LI	227.1754	1+
内部フラグメント y b	LT または TL	215.139	1+
b2	AL	185.1285	1+
a2	AL	157.1335	1+

表 C-2 : ペプチド ALILTLVS 正確な質量 (続き)

名称	シーケンス	質量	電荷状態
イモニウムイオン	I または L	86.09643	1+

序論

本書では、ソフトウェアで利用できるツールや機能に関する、いくつかのチュートリアル概要を説明します。ここでは、使用可能なすべての操作を詳細に説明するのではなく、ソフトウェアが実行できる一般的なワークフローの一部を説明しています。

構成

一部の機能や操作は、特定のアプリケーションやワークフローに固有のものですが、大部分は汎用のものです。それらは、質的データを分析する際に頻繁に使用されます。このセクションでは、ソフトウェアの概念に加え、最も一般的で本質的な操作について一部を簡単に紹介します。続くセクションでは、特定のワークフローへのアプローチを説明します。そこでは、ソフトウェアに付属のサンプルデータファイルを使用します。

サンプルファイルは、**SCIEX OS resources** 下の sciex.com/software-support/software-downloads にあります。全プロジェクトをコンピュータの D:\SCIEX OS DATA フォルダにコピーします。このチュートリアルの例では、以下のサンプルファイルが使用されます：

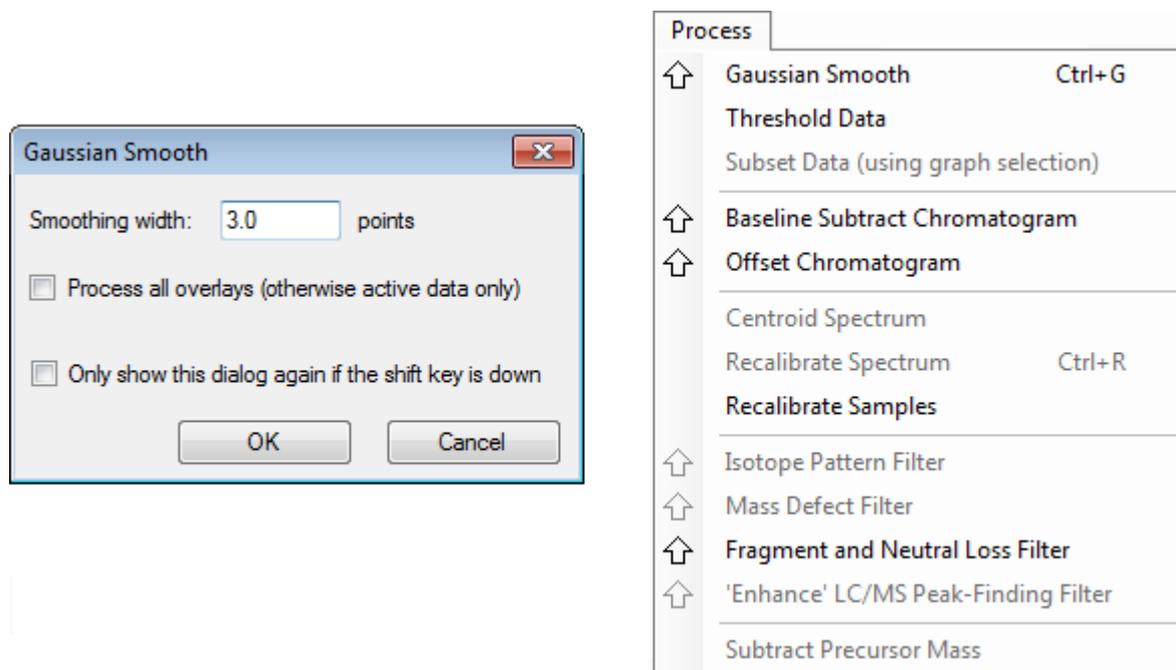
- Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff
- Bromocrip_IDA-DBS in plasma_T=0.wiff
- Bromocrip_IDA-DBS in plasma_T=1.wiff
- DataSET61.wiff
- DataSET62.wiff
- DataSET63.wiff
- DataSET64.wiff
- DataSET65.wiff
- DataSET66.wiff
- RP_digests.wiff
- RP_Intact.wiff
- Bromocriptine.mol

Bromocriptine ファイルは、ラットの肝臓マイクロソームを用いたインキュベーションにおける、ネガティブモードの IDA 分析を基にしています。Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff は 1 時間の時点で収集されたものです。他の 2 つのファイルは、0 時間と 1 時間の時点で収集し、血漿に調製したものです。Bromocriptine.mol ファイルには、ブロモクリプチンの分子構造が含まれています。DataSET61 ~ DataSET66 までのファイルは、ロラタジンとその不純物を基にしています。異なるデータセットは、異なる濃度レベルを表します。RP_Intact.wiff ファイルは、インタクト ミオグロビンの分析からのものです。RP_Intact.wiff ファイルは、トリプシン消化したミオグロビンの分析からのものです。

オプション

ソフトウェアでは、コマンドの実行結果を微調整するための、多くのオプションが用意されています。図 D-1 に示すように、一部の機能では、**Shift** キーを押した場合にのみダイアログが表示されるようにするチェックボックスも設けられています。これにより、パラメータの変更が不要な場合は、ダイアログに対応する必要がなくなります。これらのコマンドのメニューには、上向きの矢印が含まれています。

図 D-1 : オプション



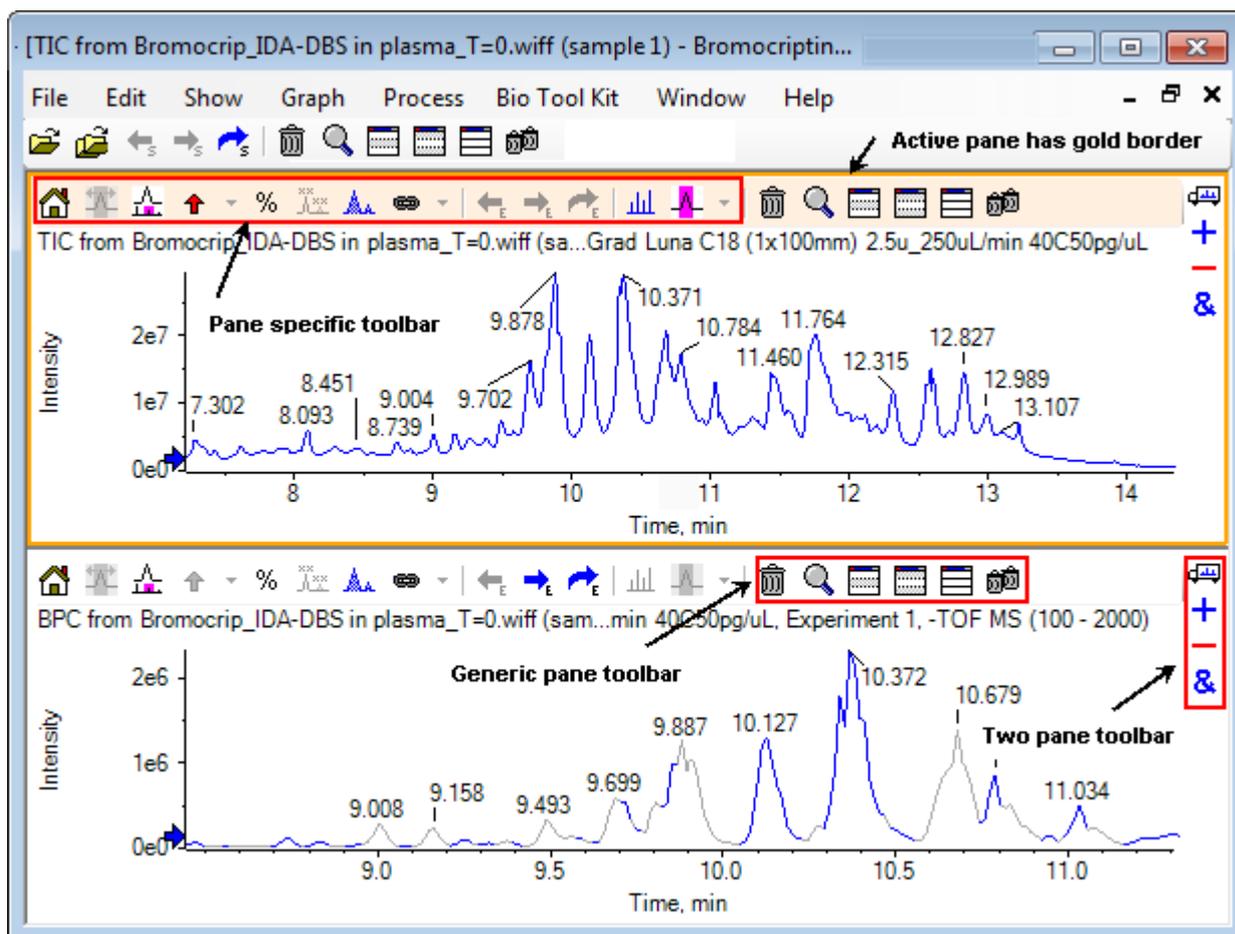
ペイン

ソフトウェアでは情報の受け渡しにウィンドウを使用していますが、基本的なユーザー インターフェース コンポーネントはペインです。ウィンドウには、1 つ以上のペインを表示することもできますが、同時にアクティブにできるのは 1 個のペインのみです。ペインは、メニューやツールバーからのコマンドを受け取ります。メニューとツールバーからは、ペインやペインに含まれるデータを操作することができます。

ペインには、スペクトルおよびクロマトグラムなどのグラフ、ヒートマップや表に加え、より専門的なビューも含めることができます。一般的な処理作業では、情報を表示するペインを作成したり、ペイン内に表示されるデータで作業を進めたりすることになります。すべてのペインには、汎用のシングル ペイン ツールとダブル ペイン ツールが含まれています。ほとんどのペインでは、各種のペインに固有のツールも追加されています。追加されたツールは、より使用頻度の高いコマンド用のものです。

一般的なウィンドウの一例は、図 D-2 に示されています。ウィンドウには、2 つのペインが含まれています。アクティブなペイン(クロマトグラム)は、色付きの境界線とツールバーで識別されています。

図 D-2 : ウィンドウ内に表示されたペインの例



一般的なペイン操作は、汎用ペインのツールバー および ダブルペインのツールバー に要約されています。ペインに固有の操作は、グラフに要約されています。

汎用ペインのツールバー

汎用のシングルペイン機能を使用するには、アイコンをクリックします。

表 D-1 : 汎用ペインのツールバーに表示されるアイコン

アイコン	名称(ツールヒント)
	このペインを削除する
	アクティブなペインをウィンドウ全体に表示する
	このペインを非表示にする
	他のペインをすべて非表示にする
	現在非表示のペインをすべて表示する

表 D-1 : 汎用ペインのツールバーに表示されるアイコン (続き)

アイコン	名称(ツールヒント)
	他のペインをすべて削除する (Ctrl キーを押しながらクリックすると、このペインより後に開いたペインのみが削除される)

注: 同様のアイコンは、メニューバーのすぐ下に位置するマスター ツールバーからも利用できます。マスター ツールバーのアイコンのいずれかをクリックしても、アクティブなペインに対して (アクティブ ウィンドウ内のアイコンをクリックするのと) 同じ効果があります。このツールバーは、アクティブペインのサイズが変更されていて一部のアイコンが見えない場合に便利です。

このペインを削除する

複数のペインが開いている場合、このアイコンをクリックすると対応するペインが削除されます。ペインが 1 つだけしか開いていない場合、このアイコンは使用できません。

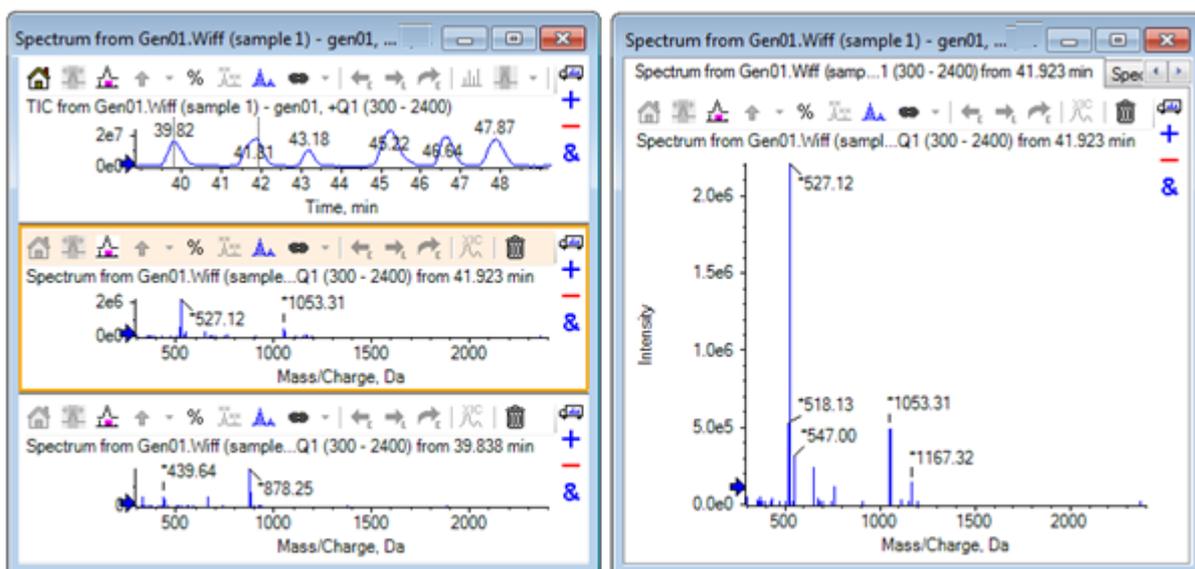
アクティブなペインをウィンドウ全体に表示する

このアイコンを使用することで、ペインの全画面表示と、元の表示サイズの間を切り替えることができます。ウィンドウに複数のペインがある場合、このアイコンをクリックすることで、一時的にいずれか 1 つのペインに注意を向けることができます。

ウィンドウの上部には、ペインごとに別のタブが表示されます。ペインを切り替えるには、目的のタブをクリックします。

注: ペインのタイトルが長い場合、すべてのタブは表示されない場合もあります。それらをスクロールするには、タブの右側にある矢印ボタンを使用します。ペインをすべて表示し、元の表示に戻るには、もう一度アイコンをクリックします。

図 D-3 : ペインを全画面表示した例



このペインを非表示にする

このアイコンを使用すると、対応するペインが非表示になり、ウィンドウ内で利用可能なスペースを他のペインで埋めることができます。このアイコンは、ペインのサブセットを表示する場合に、他のペインを恒久的に削除したくないときに便利です。

他のペインをすべて非表示にする

(対応ペインを除く)ペインをすべて非表示にするには、このアイコンを使用します。このアイコンをクリックした結果は、**Expands active pane to fill window**(アクティブなペインをウィンドウ全体に表示する)アイコンをクリックしたときと似ています。どちらの場合も、対応するペインのみが残り、利用可能な領域全体に表示されます。効果の違いは、別のウィンドウが後に作成された場合に出ます。拡大ウィンドウの場合は、新しいウィンドウがアクティブになり、利用可能な表示領域を埋めます。非表示ペインの場合は、2つのウィンドウ(元のアクティブ ウィンドウと新しいウィンドウ)の両方が表示されます。

現在非表示のペインをすべて表示する

非表示のペインをすべて表示するには、このアイコンを使用します。

他のペインをすべて削除する

Ctrl キーを同時に押さずにこのアイコンをクリックすると、対応するペインを除くウィンドウ内のすべてのペインが削除されます。このオプションは、画面を整理してサンプルを再処理する場合に便利です。また、非表示になっているペインもすべて削除されます。

Ctrl キーを押しながらこのアイコンをクリックすると、対応するペインの後に開いたペインのみが削除されます。このオプションは、多くのペインが開いており、最初に開いたいくつかのペインのみが必要な場合に便利です。この場合、非表示のペインは削除されません。

ダブル ペインのツールバー

ダブル ペインの機能を利用する(可用性はペインの種類に依存)には、アイコンをドラッグします。アイコンを選択した方のペインがソースペインになり、もう一方のペインがターゲットペインになります。

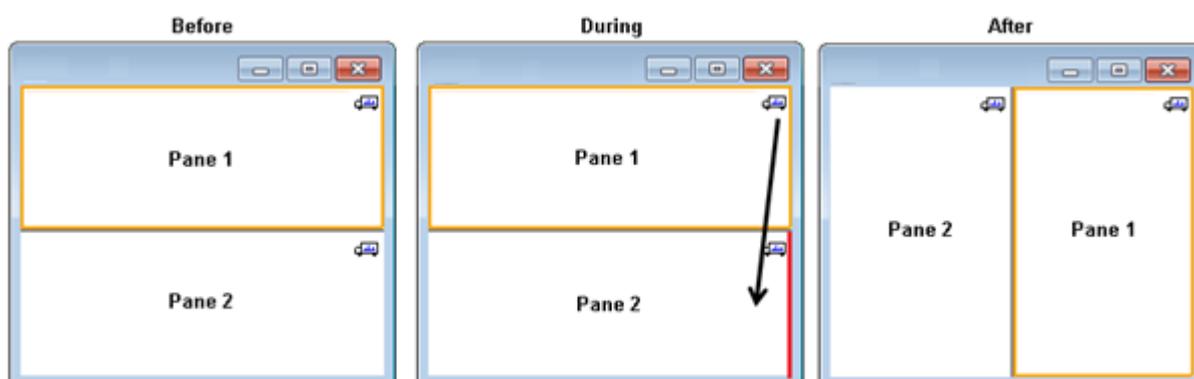
表 D-2 : ダブル ペインのツールバーに表示されるアイコン

アイコン	名称(ツールヒント)
	ドラッグ アンド ドロップによりペインを再配置します。
	このアイコンを別のグラフにドラッグすると、アクティブデータが他方のグラフのアクティブデータに加算されます。(Ctrl キーを押しながらドラッグすると、アクティブデータが他方のグラフのすべてのデータセットに加算されます。)
	このアイコンを別のグラフにドラッグすると、アクティブデータが他方のグラフのアクティブデータから減算されます。(Ctrl キーを押しながらドラッグすると、ターゲットのすべてのデータセットから減算されます。負の値を維持するには、Shift キーを押し続けます。)
	ターゲットのグラフにアクティブ データを重ね合わせるには、別のグラフへドラッグします。(Ctrl キーを押しながらドラッグすると、アクティブなデータセットだけでなくすべてのデータセットが重ね合わされます。)

ドラッグアンドドロップによりペインを再配置する

このアイコンは各ペインの右上に表示されており、ペインの相対位置を変更するために使用されます。1つのペインのアイコンをクリックして、第2のペインの上、下、左、または右側部分にドラッグします。マウスを離れた場所に応じて、最初のペインが第2のペインに対して相対的な位置に変更されます。カーソルをドラッグすると、第2のペインのいずれかの辺が赤で強調表示されます。これは、最初のペインがどこに配置されるかを示します。図 D-4 は、上部のペインから、下部のペインの右側部分にこのアイコンをドラッグした結果です。

図 D-4 : 上部のペインから、下部のペインの右側部分にこのアイコンをドラッグした結果



注: ウィンドウ間でペインをドラッグすることもできます。

別のグラフにドラッグしてアクティブデータを他のグラフのアクティブデータに加算する

2つのデータセットを合計するには、ポイントごとにこのアイコンを使用します。(最初にクリックされたペインの)ソース データは、(アイコンがリリースされたペインの)ターゲット データに追加されます。変更対象データのタイトルが更新され、データが変更されたことを示します。

注: 同じ種類の2つのデータセットのみを加算できます。たとえば、スペクトルをクロマトグラムに加算することはできません。

注: オーバーレイされたトレースがターゲット グラフに複数含まれている場合、デフォルトでは、ソース データはアクティブなターゲット データに追加されます。Ctrl キーを押すと、ターゲット内のデータセットすべてにソース データが追加されます。

別のグラフにドラッグしてアクティブデータをターゲットのアクティブデータから減算する

ターゲット データから元のデータを減算するには、このアイコンを使用します。このアイコンは、質量スペクトルのバックグラウンド減算を行う場合に最も便利です。

注: オーバーレイされたトレースがターゲット グラフに複数含まれている場合、デフォルトでは、ソース データはアクティブなターゲット データからのみ減算されます。Ctrl キーを押すと、ターゲット内のデータセットすべてからソース データが減算されます。

Explorer チュートリアル

ヒント! 通常、ソースの強度がターゲットよりも高いデータポイントは保持されません。これは、負の Y 値が破棄されることを意味します。Shift キーを押すと、負の強度を示すデータポイントが保持されます。

別のグラフにドラッグしてアクティブデータをターゲットグラフに重ね合わせる

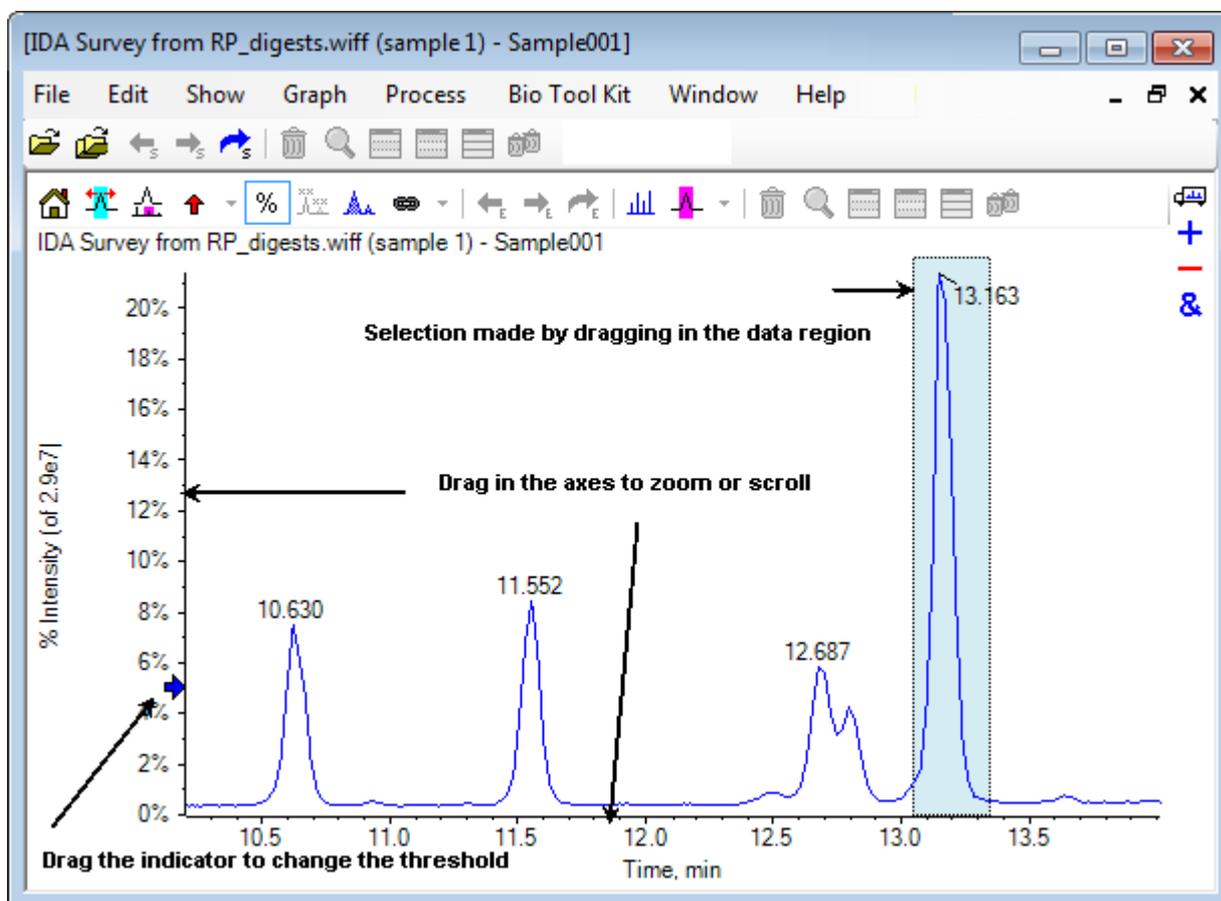
このアイコンを使用することで、ターゲット グラフ上にソースグラフ内のアクティブ データを重ね合わせることができます。操作が完了すると、ターゲット グラフは、ターゲット データのコピーを含む新しい系列を含んだ状態になります。

注: ソース グラフに複数の重ねトレースが含まれている場合、デフォルトでは、そのアクティブ データのコピーのみがターゲット グラフに移動されます。Ctrl キーを押した場合、ソースグラフ中のデータセットすべてのコピーが、ターゲット グラフ上に重ねて表示されます。

グラフ

[Graphs] ペインでは、データの可視化と相互作用を行います。いくつかの操作はすべてのグラフに共通ですが、表示データの種類に応じて変わる操作もあります。

図 D-5 : グラフ



一般的なコマンドを要約すると、以下のようになります。

- ズームやスクロールするには、グラフの X 軸または Y 軸のいずれかの方向にカーソルをドラッグします。ダブルクリックすると、軸の表示範囲が元の状態に戻ります。また、**Shift** キーを押しながら軸をクリックすると、グラフを前の表示状態に戻します(ズームやスクロールするには、この操作を取り消します)。
- しきい値インジケータは、ドラッグして配置することができます。しきい値は通常、どのピークが標識されているかを判別します。また、どのピークが処理されているかを判断するために使用される場合もあります。
- 選択するには、データ領域内をドラッグします。選択範囲は、使用または処理されるデータの一部を定義するために使用されます。複数の領域を選択するには、**Shift** キーを押しながらドラッグします。X 軸と Y 軸の両方で同時に選択するには、**Ctrl** キーを押します。

グラフ固有のツールバー

表 D-3 : グラフ固有のツールバーのアイコン

アイコン	名称(ツールヒント)
	拡大表示したグラフを初期表示に戻す
	選択範囲を拡大して全体に表示する
	(現在のズーム状態を表示するため)グラフの「拡大表示」を表示します。図 D-6 を参照してください。
	選択したピークに矢印マーカーを追加する
%	Y 軸(パーセント)を使用します。
	オーバーレイされたすべてのトレースにラベルを付ける
	ピークを塗りつぶす
	グラフの X 軸を、ウィンドウ内の他のグラフ(単位が同じ)にリンクさせます。現在のグラフすべてに適用するには、Control キーを併用します。
	前の実験のデータに切り替える
	次の実験のデータに切り替える
	選択した実験のデータに切り替える
	選択範囲のスペクトルを表示する
	バックグラウンド減算範囲を設定する

注: [Deletes this pane] のアイコンで始まる、ツールバーの最後尾にあるアイコン 6 個については、[汎用ペインのツールバー](#) に記載されています。

拡大表示したグラフを初期表示に戻す

図が拡大表示されている場合、このアイコンを使用して初期表示に戻します。初期表示では、X 軸と Y 軸の両方についてデフォルトの範囲が表示され、利用可能なデータがすべて表示されます。X 軸をダブルクリックすると、グラフが初期表示に戻ります。Y 軸をダブルクリックすると、Y 軸についてのみ全範囲を表示します。

選択範囲を拡大して全体に表示する

このアイコンを使用すると、プロットを拡大表示し、利用可能なスペース全体を選択領域で埋めることができます。このアイコンを選択する前に、プロットの内側をドラッグして特定範囲を選択します。また、プロットの X 軸(または Y 軸)で直接ドラッグして拡大表示することもできます。

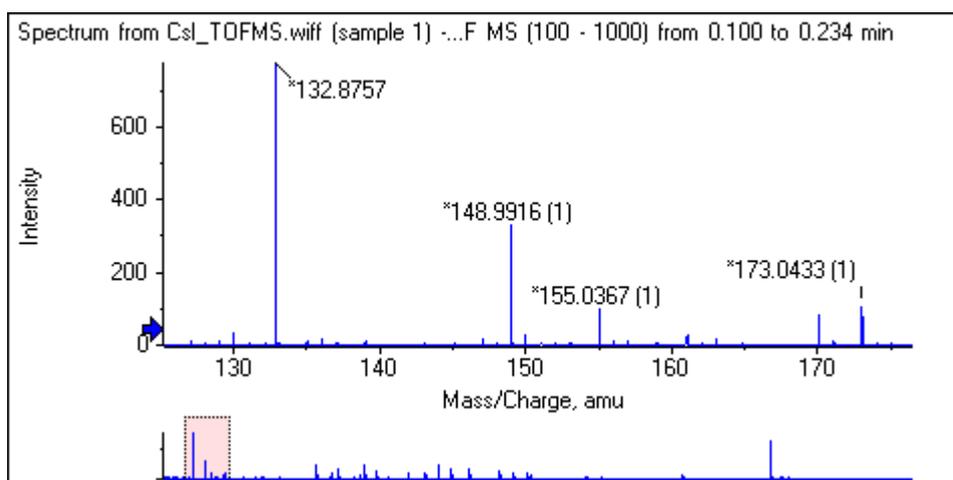
「ズーム」グラフを表示する(現在のズーム位置を示すため)

このアイコンを使用すると、メイングラフの下にグラフのコピーを小さく表示することができます(図 D-6 参照)。この概要グラフには、利用可能な全範囲が常に表示されます。また、メイングラフの拡大表示領域はピンクで表示されます。メイングラフをズームすると、それに従ってこの選択範囲も更新されます。

ピークを選択範囲を新しい場所にドラッグすると、必要に応じてメイングラフもスクロールされます。選択範囲の左端または右端付近をドラッグすると、選択範囲の幅が調整されます。この場合は、メイングラフも必要に応じて拡大表示されます。

必要な詳細レベルに達するまでかなり拡大することも多くあるため、この機能は、高分解能で質量スペクトルを表示する際に便利です。どれだけ拡大しても、概要グラフを見れば質量範囲全体に対してどの領域を拡大しているかがわかります。

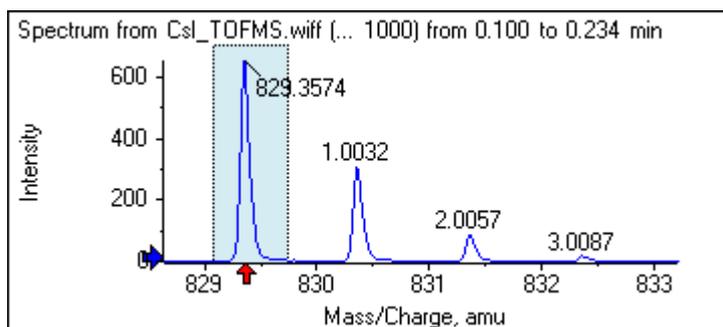
図 D-6 : 概要グラフを表示する



選択したピークに矢印マーカーを追加する

このアイコンを使用すると、グラフ内で現在選択されている領域内で、最大ピークに矢印マーカーを追加することができます。図 D-7 は、このアイコンをクリックした後の画面です。ここでは、図示されるように、829 ピーク(近似)が選択されています。

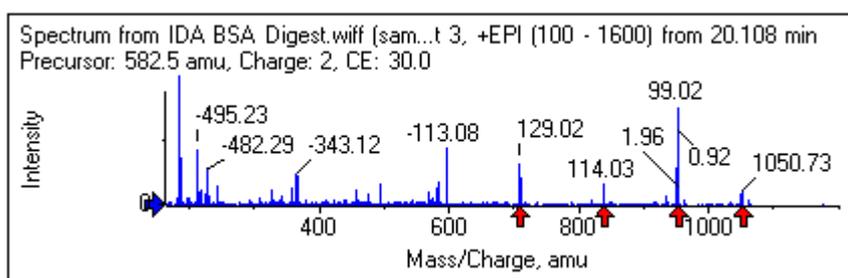
図 D-7 : 単一の矢印マーカを追加する



矢印には、データの参照点としての役目があります。デフォルトでは、矢印に近くないピークは、最寄りの矢印からの距離がラベル表示されます。最大の X 値を持つ矢印付近のピークは、実際の X 値がラベル表示されます。矢印の近くにあるピーク(最後のピークを除く)は、矢印の X 値の高さに応じてラベル付けされます。図 D-7 では、ピークは、829 Da 前後のピークは、実際の m/z 値を用いて判別されています。アイソトープピークは、このピークからの距離で標識されます。矢印の左側のピーク(図示せず)は、負の値が表記されていた可能性もあります。

矢印は、スペクトルに対して最も一般的に使用されています。アイソトープや、MS/MS スペクトルのニュートラルロスといった、予想質量の差異を決める際に便利です。図 D-8 では、ペプチドの MS/MS スペクトルが表示されています。矢印は、アミノ酸残基のニュートラルロスに相応する各値に追加されています。たとえば、99.02 と表記されたピークは 1050.73 Da ピークからのバリン損失の可能性があり、隣の 114.03 と表記されたピークはアスパラギンの追加損失の可能性があると、いった具合です。また -113.08 と表記されたピークは、129.02 と表記されたピーク(実際の m/z 比は 709 Da に近い)からのロイシン損失またはイソロイシン損失の可能性もあります。

図 D-8 : 複数の矢印マーカを追加する



この相対ピーク標識を使用しない場合は、**Use Arrows for Relative Peak Labeling** メニュー項目をオフにします。(図 D-9 を参照。) この場合、矢印は、特に関心のあるピークをマークするために使用されます。

図 D-9 : [Add Arrow Marker] メニュー



矢印を別の位置にドラッグできます。矢印をプロットエリアにドラッグすると、ドラッグ操作が取り消されます。矢印をグラフの外にドラッグすると、矢印が削除されます。また、に示すメニューから **Remove All Arrows** を選択して矢印を削除することもできます。  D-9

パーセント Y 軸を使用する

このアイコンは、Y 軸のスケールリングを決定します。選択すると、各トレースの最大値が 100 % になるようにオーバーレイトレースの縮小・拡大が調整されます。オーバーレイトレースの絶対的な大きさが非常に異なる場合、パーセントの Y 軸を使用すると便利です。

オーバーレイされたすべてのトレースにラベルを付ける

デフォルトでは、複数のトレースがオーバーレイされている場合、アクティブなトレースのみラベルが表示されます。トレースのすべてにラベルを付けるには、このアイコンをクリックしてください。このアイコンをもう一度クリックすると、すべてのラベルが除去されて元の表示に戻ります。

ピークを塗りつぶす

このアイコンをクリックすると、暗部と明部が交互に変化するように、アクティブ データのピークを表示することができます。この機能は、ピークの正確な開始位置と終了位置を確認する場合に便利です。すべてのラベルを削除し、元の表示に戻すには、もう一度アイコンをクリックします。

グラフの X 軸をウィンドウ内の他のグラフ(単位が同じもの)にリンクさせる

2 つ以上のグラフの軸をリンクすることで、1 つのグラフで軸を拡大表示したときに、他のグラフでも自動調整により同じ範囲を表示させることができます。この機能は、軸をリンクしたグラフ間でデータを比較する場合に便利です。これに代わる比較手段は、同じグラフ内のデータセットをオーバーレイすることです。ただし、これは常に望ましい手段となるわけではありません。

各グラフの **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** アイコンをクリックしてリンクします。Ctrl キーを押しながらこのアイコンをクリックすると、アクティブなグラフと同じウィンドウにあり、なおかつ X 軸の単位が同じであるすべての可視グラフがリンクされます。たとえば、3 つのスペクトルが表示されていて、そのうち 1 つのスペクトルで Ctrl キーを押しながら **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** (グラフの X 軸をウィンドウ内の他のグラフ(単位が同じもの)にリンクさせる) アイコンをクリックした場合、3 つのスペクトルすべてが相互にリンクされます。

注: この例では、新しいスペクトルがその後生成された場合、他のグラフにはリンクされません。新しいスペクトルをリンクするには、関連する **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** アイコンをクリックします。

デフォルトでは、グラフの x 軸のみがリンクされます。この例では、1 つのグラフが手動で拡大表示されたときに他方のグラフは Y 軸について自動拡大し、表示画面内で利用可能なスペースをピークで埋めるように設定されています。

リンク済みグラフをリンク解除するには、対象のグラフ上で **Links graph's x-axis to others (with same units) in the window** [(グラフの X 軸を、ウィンドウ内の他のグラフ(単位が同じ)にリンクさせる)] のアイコンをクリックします。この際に Ctrl キーを同時に押すと、同じウィンドウ内にある、X 軸の単位が共通するグラフすべてのリンクを解除できます。

次の実験のデータに切り替える

グラフのアクティブなデータが(最後以外の)特定の実験に関連している場合、このアイコンをクリックすると、このデータを同じタイプのデータ(次の実験データを除く)に置き換えることができます。

たとえば、実験 2 用の TIC がアクティブである場合、このアイコンをクリックすることで、実験 3 用の TIC に切り替えることができます。指定時間からのスペクトルが実験 2 に対してアクティブの場合、このアイコンをクリックすることで、実験 3 の同じ時間からのスペクトルに切り替えることができます。

前の実験のデータに切り替える

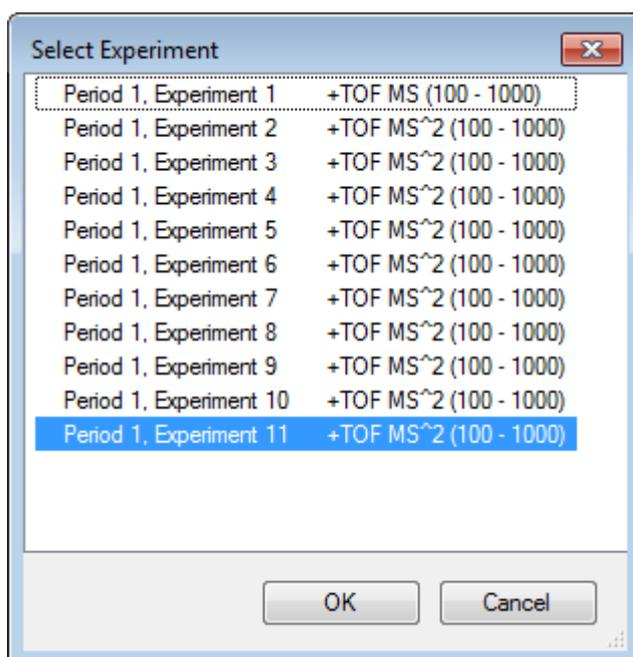
グラフのアクティブなデータが(最初以外の)特定の実験に関連している場合、このアイコンをクリックすると、このデータを同じタイプのデータ(以前の実験データを除く)に置き換えることができます。

たとえば、実験 3 用の TIC がアクティブである場合、このアイコンをクリックすることで、実験 2 用の TIC に切り替えることができます。指定時間からのスペクトルが実験 3 に対してアクティブの場合、このアイコンをクリックすることで、実験 2 の同じ時間からのスペクトルに切り替えることができます。

選択した実験のデータに切り替える

このアイコンを使用すると、実験を 1 つずつスクロールする代わりに、特定の実験を選択できます。このアイコンをクリックすると、使用可能なすべての実験のリストを示すダイアログが開きます。アクティブなサンプルが強調表示されます。リスト内の実験をクリックして選択し、**OK** をクリックします。図 D-10 を参照してください。

図 D-10 : 実験サンプル ダイアログの選択



選択範囲のスペクトルを表示する

このアイコンを使用すると、グラフ内で選択中の時間範囲にわたって平均かされた質量スペクトルを生成できます。同様の結果は、選択範囲内でダブルクリックすることによっても得ることができます。

バックグラウンド減算範囲を設定する

クロマトグラムから生成されたスペクトルについて自動バックグラウンド減算を実行するには、このアイコンを使用します。

スペクトル固有のツールバー

表 D-4 : スペクトル固有のツールバーのアイコン

アイコン	名称 (ツールヒント)
	選択範囲の XIC を表示する

注: [Returns zoomed graph to home view (拡大表示したグラフを初期表示に戻す)] のアイコンで始まる、ツールバーの最初にある 11 個のアイコンについては、[グラフ固有のツールバー](#) に記載されています。

注: [Deletes this pane (このペインを削除する)] のアイコンで始まる、ツールバーの最後尾にあるアイコン 6 個については、[汎用ペインのツールバー](#) に記載されています。

選択範囲の XIC を表示する

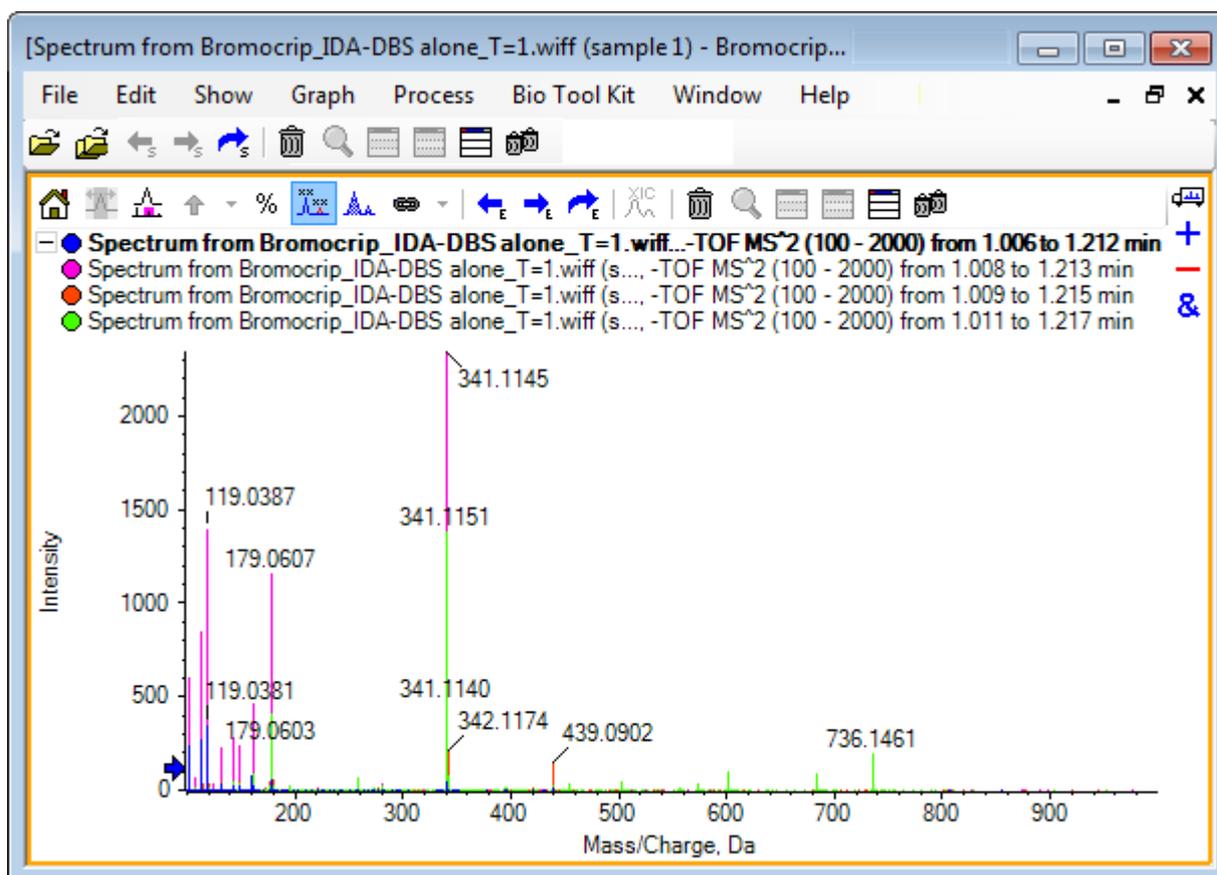
このアイコンから、グラフ内で選択中の質量範囲にわたって抽出イオン クロマトグラム (XIC) を生成します。

オーバーレイ

グラフには、別のトレース (オーバーレイと呼ばれる) を含めることができます。これらは軸を共有しているため、容易に比較することができます。これらは、適切なダブル ペインのアイコン (**Drag to another graph to overlay the active data in the target graph (別のグラフにドラッグしてアクティブデータをターゲットグラフに重ね合わせる)** アイコン) をドラッグすることによって生成できます。また、いくつかのペイン作成コマンドによって自動的に生成されます。[クロマトグラムとスペクトル](#) を参照してください。

図 D-11 では、**Label all overlaid traces (すべての重ねトレースにラベルを表示する)** アイコンが選択された状態で、グラフには 4 つのスペクトルが含まれています。グラフのヘッダ領域には、2 つのスペクトルと、トレースの色を示す塗りつぶされた丸のタイトルが表示されます。アクティブなトレースは太字で表示されます。このトレースはすべての処理 (しきい値データや平滑化) における対象となるため、通常はトレースにのみラベル付けが行われます。タイトルの左にあるアイコンをクリックすると、アイコンが変更され、アクティブトレースのタイトルだけが描画されるようになります。この機能は、多数のオーバーレイがあるときに便利です。プロセスを元に戻すには、もう一度アイコンをクリックします。トレースが多く存在している場合にカーソルをタイトルの上に移動させると、カーソルが両方向の矢印に変わり、ドラッグする際はスクロールバーのような役割を果たします。これにより、タイトルのすべてにアクセスできます。

図 D-11 : [Label all overlaid traces (すべての重ねたトレースにラベルを表示する)] アイコンが選択された状態で、4 つのスペクトルを含むグラフ



アクティブなトレースを切り替えるには、次のようないくつかの方法があります。

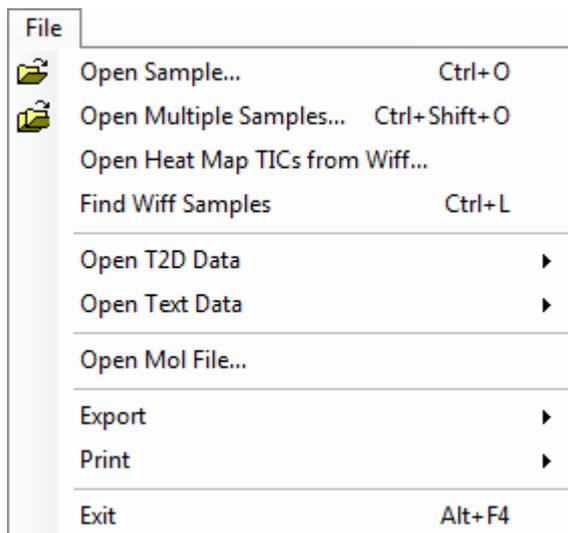
- タイトルの横にある、色付きの円をクリックする
- タイトル自体をクリックする
- トレース内で(トレース自体ではなく)データポイントをクリックする

オーバーレイが表示されているグラフで右クリックすると、コマンドを含むコンテキストメニューが表示されます。これは、表示されたトレースを視覚的に編集する際に使用します。**Remove Active Trace** および **Remove All Traces Except Active** のオプションは、予想通りに機能しています。

ファイルを開く

図 D-12 に示すように、ソフトウェアでは異なる種類のデータファイルを開くことができます。また、単一または複数のサンプルを開くコマンドにも対応しています。

図 D-12 : File メニュー

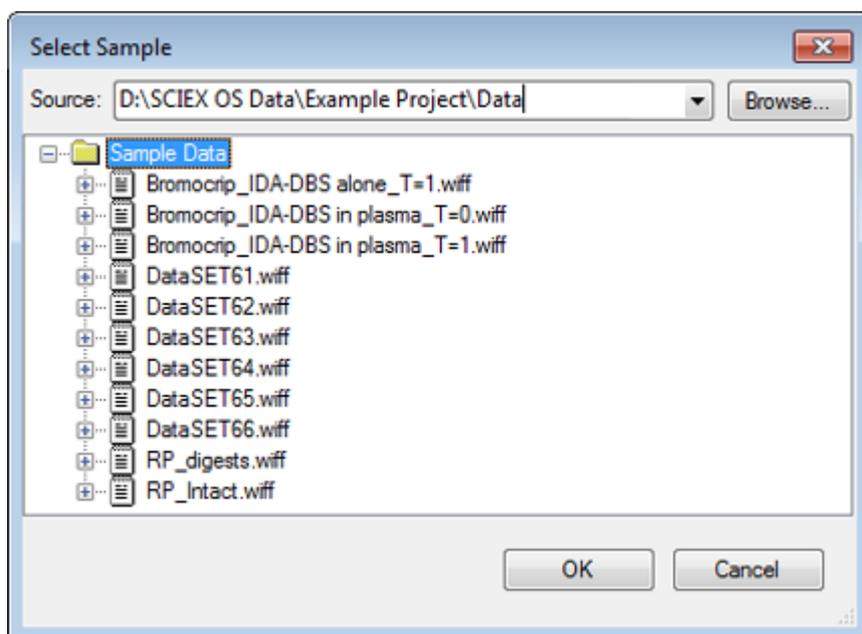


単一のサンプル ファイルを開く

Open Sample オプションにより、**Select Sample** ダイアログが表示されます。図 D-13 を参照してください。

このダイアログでは、単一のファイルを選択することができます。結果ビューは、選択したコマンドに応じて変化します。単一の .scan ファイルではスペクトルやトータルイオンクロマトグラム (TIC) を、および複数のスキャン.wiff ファイルでは TIC (1 つ以上ある場合は、全実験の合計) が表示されます。

図 D-13 : Select Sample ダイアログ



.wiff ファイルの左にあるアイコンをクリックし、ファイル内のすべてのサンプルを表示させ、必要なファイル名を選択します。ファイルに 1 つのサンプルだけが含まれる場合、ファイル名を選択して **OK** をクリックします。

複数のサンプルファイルを開く

Open Multiple Samples と **Open Heat Map TICs from Wiff** のオプションから、**Select Samples** ダイアログを開きます。図 D-14 を参照してください。

左側のパネルは、フォルダを参照しファイルを指定するための **Open** ダイアログに対応しています。右側のパネルには、**OK** をクリックすると開かれるファイルが表示されます。サンプルは、次のようにして左から右へ転送することができます。

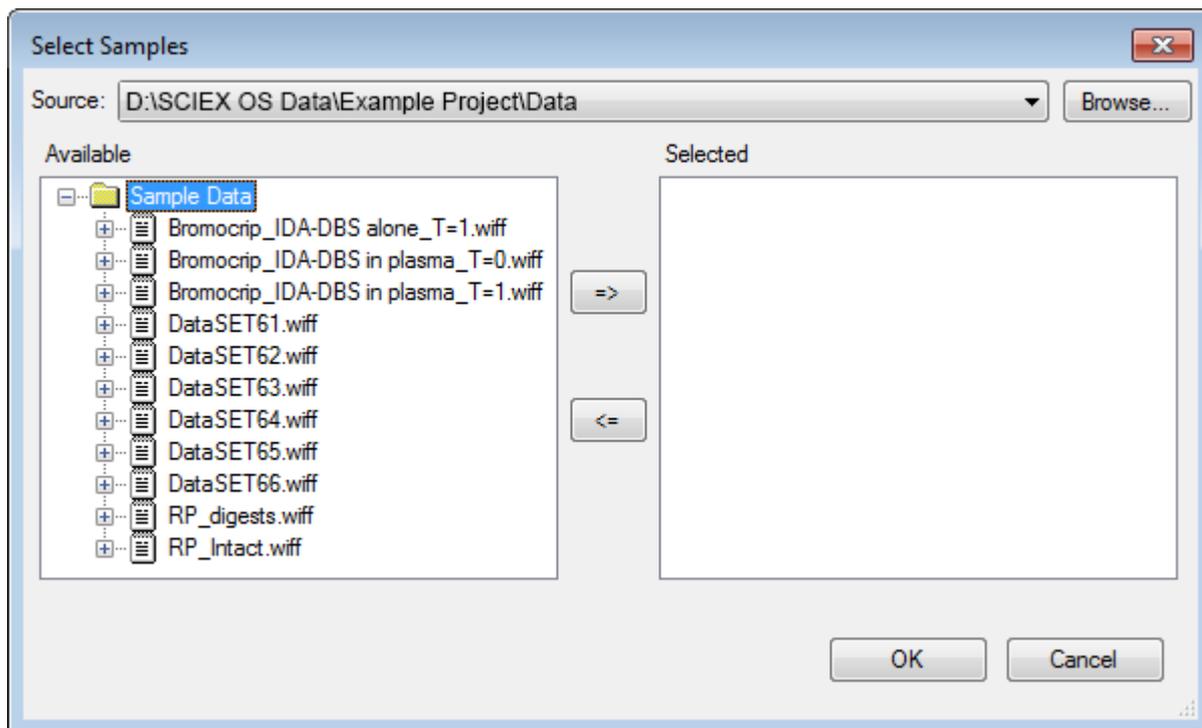
- wiff ファイルを展開し、サンプルを選択し、右矢印をクリックします。
- wiff ファイルを展開し、サンプルを選択し、右のパネルヘドラッグします。
- wiff ファイルを展開し、サンプルをダブルクリックします。

ファイルに複数のサンプルが含まれている場合は、wiff ファイルを選択して右矢印をクリックする、または .wiff ファイルを選択して右側のパネルにドラッグすることにより、それらをすべて転送することができます。

サンプルは、次のようにして右から左へ転送することができます。

- wiff ファイルを展開し、サンプルを選択し、左矢印をクリックします。
- wiff ファイルを展開し、サンプルを選択し、左のパネルヘドラッグします。
- サンプルをダブルクリックします。

図 D-14 : Select Sample ダイアログ



クロマトグラムとスペクトル

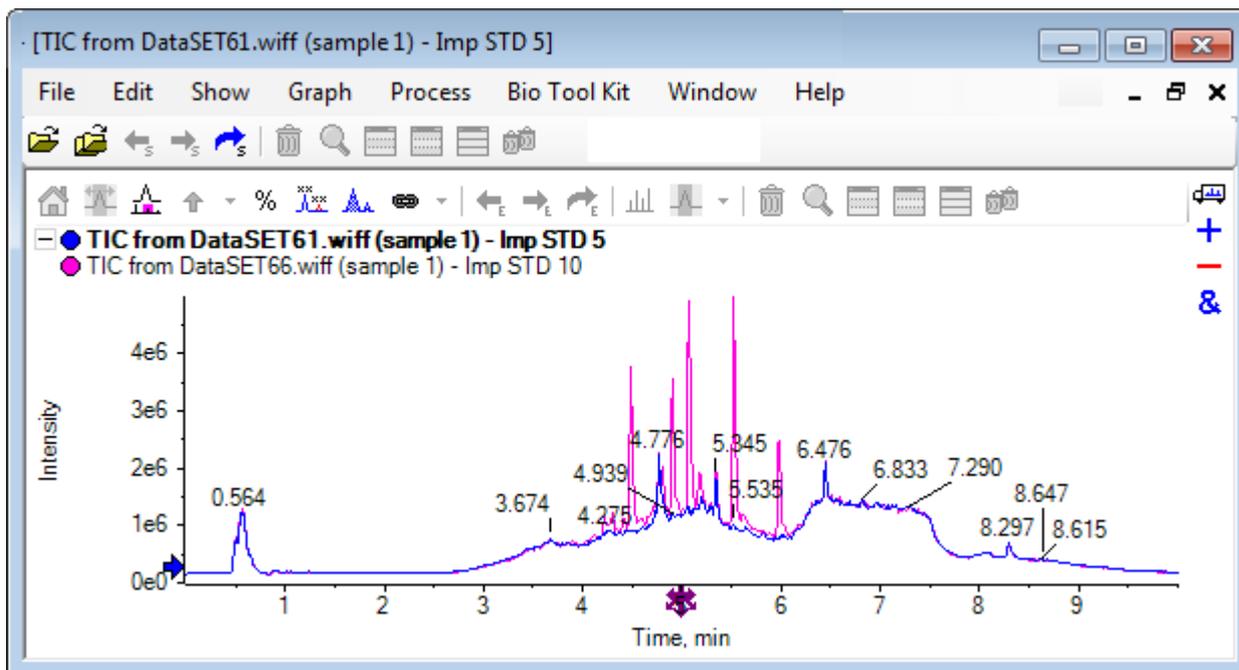
トータルイオンクロマトグラム (TIC: Total Ion Chromatogram)、スペクトル、および抽出イオンクロマトグラム (XIC: Extracted Ion Chromatogram) は、データの分析や確認に最も広く使用されているデータの表示形式です。各データビューの間では、ソフトウェアによってリンクが提供されます。これにより、スペクトルを迅速に生成し、その上で XIC を生成できるようになり、スペクトル内のピークが 1 つ以上のクロマトグラムのピークからのものであるかどうかを判断することができます。

トータルイオンクロマトグラム (TIC)

これは、スキャンまたはマルチスキャン wiff ファイルを開いたときに表示されるデフォルトの表示画面です。表示されている TIC は、各スペクトル中のイオンについてすべての強度を加算した後、保持時間の関数としての合計をプロットすることによって生成されたクロマトグラムに相当します。

サンプルがグループ実験を用いて取得された場合、表示されている TIC は、両方の実験における強度の和に相当します。これを示すために、X 軸には特別な矢印が描かれています。図 D-15 を参照してください。インジケータをダブルクリックすると、新しいペインが表示されます。ここには、実験ごとに、個別の重ね TIC が表示されます。

図 D-15 : TIC



サンプルに IDA データが含まれている場合は、IDA Explorer か、または従来の TIC のいずれかを選択します。IDA エクスプローラでは、選択したプレカーサー質量と保持時間を視覚的に表示することができます。従来の TIC オプションを選択した場合は、IDA 調査の TIC と IDA 依存和の TIC が別々に表示されます。

Show > Total Ion Chromatogram (TIC) をクリックすると、いつでも TIC を表示することができます。これにより、どの実験でも選択できるダイアログが開きます。期間 1 を選択すると、全実験について TIC を表示します。他のエントリは、個々の TIC に対応します。複数選択するには、**Shift** キーまたは **Ctrl** キーを押しながらクリックします。

スペクトル

ファイルに単一のスペクトルのみが含まれている場合は、ファイルを開いた際にそのスペクトルが表示されます。

複数のスキャンを含むデータの場合は、クロマトグラムで範囲を選択してその内側をダブルクリックするか、「**Displays a spectrum for selection (選択範囲のスペクトルを表示する)**」アイコンをクリックすることにより、クロマトグラムからスペクトルを導出できます。スペクトルを更新して新しい領域を表示するには、クロマトグラム内で選択矩形をドラッグします。

複数の領域を選択するには、最初の選択を完了した後、**Shift** キーを押しながらドラッグします。これらの選択のいずれかをダブルクリックするか、**[Displays a spectrum for selection (選択範囲のスペクトルを表示する)]** アイコンをクリックして、スペクトルが重ねあわされたスペクトル ペインを新しく開きます。

IDA の場合は選択画面が表示され、依存スペクトルすべてを重ね合わせる(オーバーレイ)か、または単に最初のスペクトルを表示するかを選択します。後者の場合、他のスペクトルを表示するには左右の矢印キーを押します。

注: このダイアログには、[Only show again if the shift key is down (Shift キーを押した場合のみ再び表示する)] チェック ボックスがあります。

バックグラウンドを減算したスペクトルを生成するには、2 つの方法があります。

- ピーク領域とバックグラウンド領域に別々のスペクトルを生成し、[subtract two-pane (ダブルペインを減算する)] のアイコンをバックグラウンド スペクトルからピーク スペクトルまでドラッグします。
 - クロマトグラム内で 1 つないし 2 つ選択してバックグラウンド領域を定義し、**[Set background subtraction range (バックグラウンド減算範囲を設定する)]** アイコンをクリックします。バックグラウンド領域が定義されているときに生成されたスペクトルは、自動的にバックグラウンド減算されます。バックグラウンド領域は、薄い赤色の選択矩形としてクロマトグラム上に表示されます。選択矩形やスペクトルの選択範囲は、どちらもデータ表示を変更するために移動させることができます。定義されているバックグラウンド領域を消去するには、アイコンの横の矢印をクリックし、**[Clear Subtraction Range (減算範囲を消去する)]** を選択します。
-

注: スペクトル上で矢印マーカを使用すると、ピーク ラベルを (矢印が付いた) 最寄りのピークに対して配置し、損失質量や追加質量を簡単に決定できるため便利です。複数のオーバーレイ (重ね表示) が存在しており、かつ [Label all overlaid traces (すべての重ねトレースにラベルを表示する)] アイコンが選択されている場合、各オーバーレイのラベルは矢印に対して配置されます。

抽出したイオンのクロマトグラム (XIC)

XIC は、次の 2 つの方法で生成することができます。

- **[Show] > [Extracted Ion Chromatogram (XIC)]** をクリックします。

この操作により、開始質量と停止質量 (モードによっては、中央値と幅値) を入力できるダイアログが開きます。これは、コンテキストメニューから変更することができます。コンテキストメニューを開くには、ダイアログ内を右クリックします。コンテキストメニューでは、デフォルト幅の設定や、質量リストのインポート/エクスポートなどの便利なコマンドにもアクセスできます。また、質量値を記憶させておき、(削除するまで) 自動的に入力することもできます。

- スペクトルを 1 つ以上選択し、それらをダブルクリックするか、または 1 つをクリックして **[Displays an XIC for selection (選択範囲の XIC を表示する)]** アイコンをクリックします。

これらの操作では、それぞれの選択に相応する XIC を生成します。デフォルトでは、プログラムは各選択範囲の最大ピークを決定し、ピークについて半分の高さと同質量に相応する値に XIC を自動的に設定します。Ctrl キーを押すと、全選択幅が使用できます。

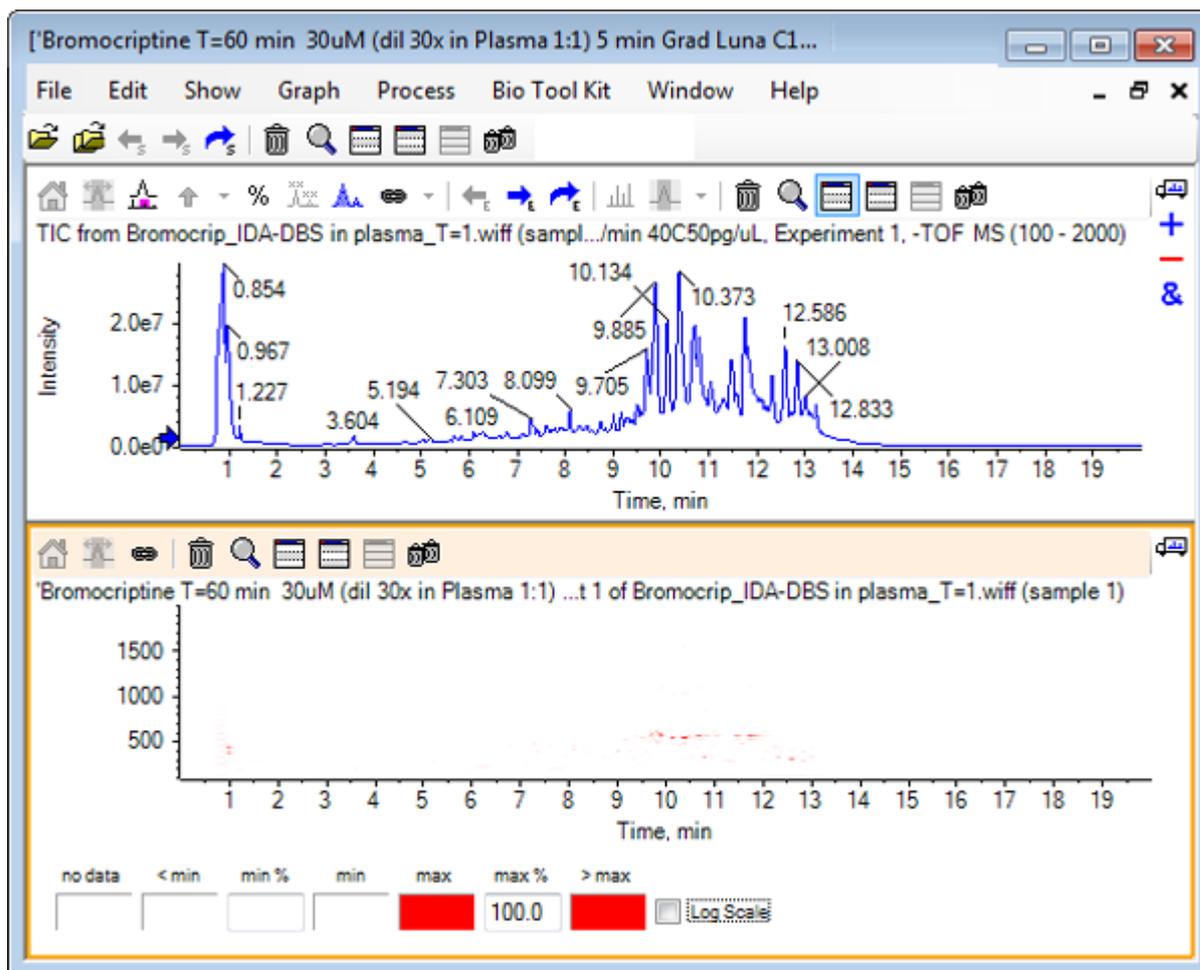
いずれの場合でも、各選択につき 1 つのオーバーレイを含むグラフが表示されます。選択はリンクに変換されます。リンクをドラッグすると、XIC が更新されます。

注: XIC は通常、全クロマトグラフ範囲に対して計算され、表示されます。この処理は、複数の範囲が選択されており、データが高解像度の機器から生成されたもので、スキャンを多く含むような場合には時に遅くなることがあります。この場合、XIC の範囲を制限し、スペクトル生成時に使用する保持時間の前後の値に設定すると便利です。これは、**[Edit] > [Options] > [XIC]** タブをクリックし、表示されたダイアログの XIC タブから設定することができます

等高線図とヒート マップ

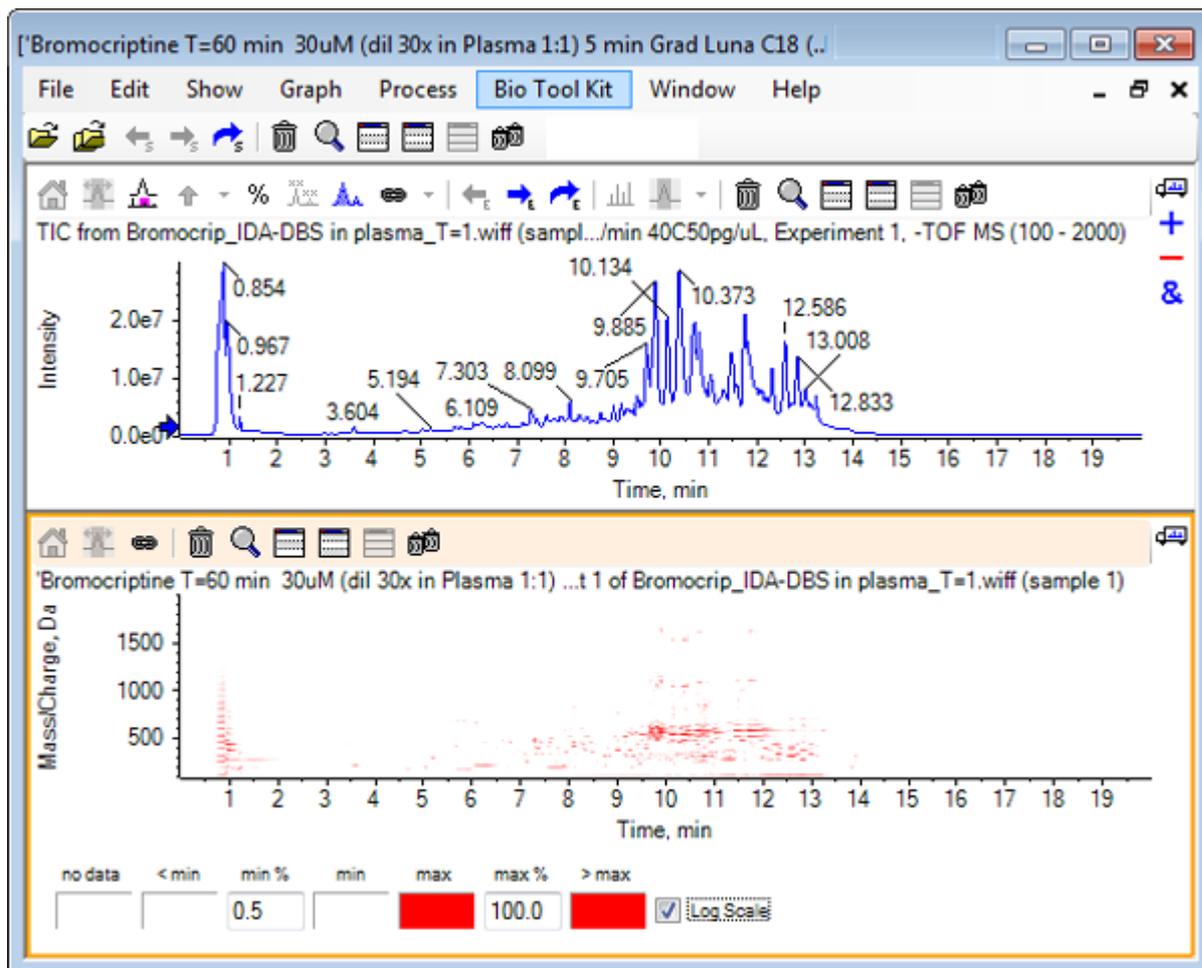
LC/MS 等高線図(Show > LC/MS Contour Pane)では、単一画面で LC/MS サンプルのデータすべてが表示されます。図 D-16 の例では、TIC と、それに相応する等高線図が表示されています。ここでは、データが m/z 比のマップとして表示されており、強度の色分けがなされた保持時間が対比されています。ここでは色の管理メニューも表示されています。それらを非表示にするには、ビュー内で右クリックして **Show Appearance Controls** オプションをクリアします。等高線図とクロマトグラムの X 軸は共通しているため、それらをリンクさせることで、比較する際にズームやスクロールを一度に行うことができます。

図 D-16 : TIC と、それに相応する等高線マップ



色の管理メニューでは 256 色のパレットを使用しており、**min %** および **max %** によって定義された範囲について強度が色分けされます。**min %** より低い強度は **< min** を、**max %** より高い強度は **> max** を使用して描画されます。**< min** で使用する色と、それらに相応するデータが一致しない場合(この例も同様)、**min %** より低いデータポイントは表示されません。これは視覚的しきい値の一種で、Figure 1-11 に示すようにプロットを簡素化することができます。ここでは、**min %** の値が 0.5 % に増加されています。色の管理メニューに関する詳細な情報については、システムユーザーガイドを参照してください。

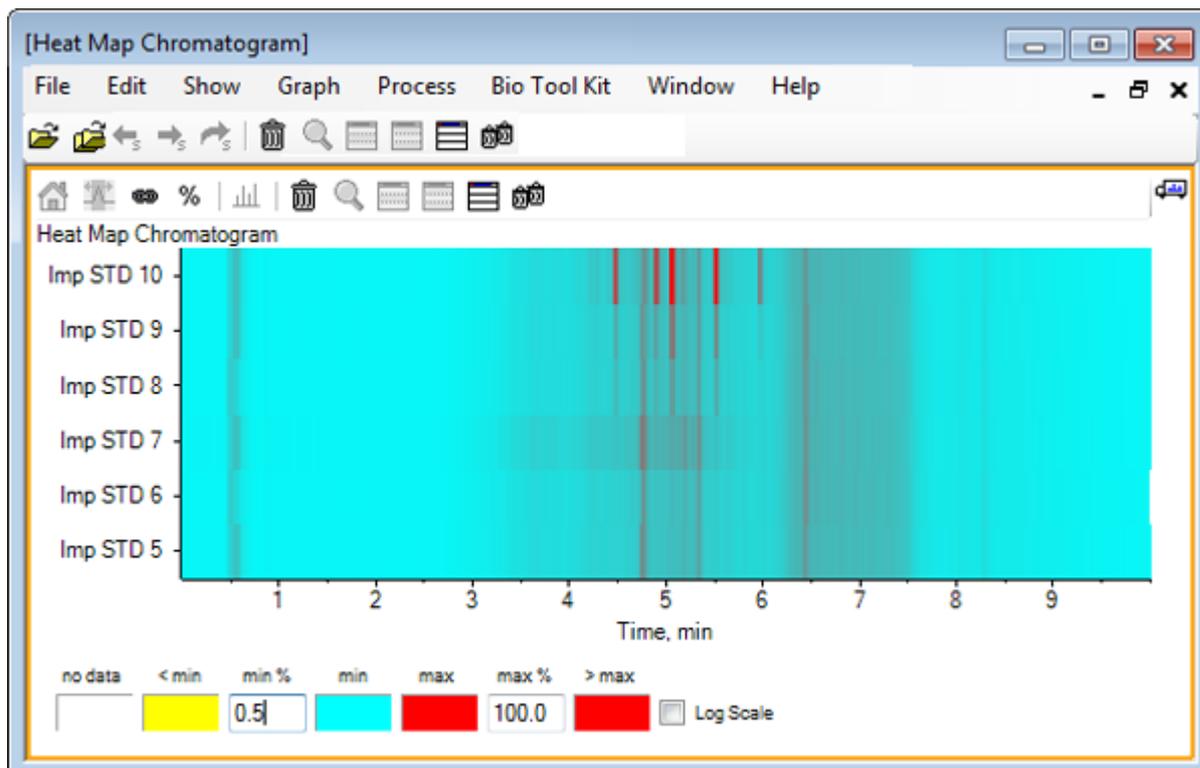
図 D-17 : min% の値を 0.5 % まで増やした等高線図



低強度ピークは、**max %** の値を低減することによって強調できます。これによりカラーパレットにはより強度が低い範囲も含まれるようになりますが、この値よりも大きいピークはすべて同じ色で表示されます。また **Log Scale** チェックボックスをオンにすることも強調できます。**Log Scale** を有効にするには、**min %** にゼロ以外の値(1 や 0.1 など)を指定し、続けてパーセント強度の対数に色を割り当てる必要があります。

ソフトウェアのマルチサンプル可視化ツールには、TIC や XIC に加え、複数のサンプルのスペクトルを一連の(個々の)ヒートマップとして表示する機能が含まれています。これは、サンプルを比較する際に役立ちます。図 D-18 は 6 個の分析試料から生成された一連の TOF クロマトグラムです。[複数のサンプルを分析する](#) を参照してください。

図 D-18 : ヒート マップ クロマトグラム



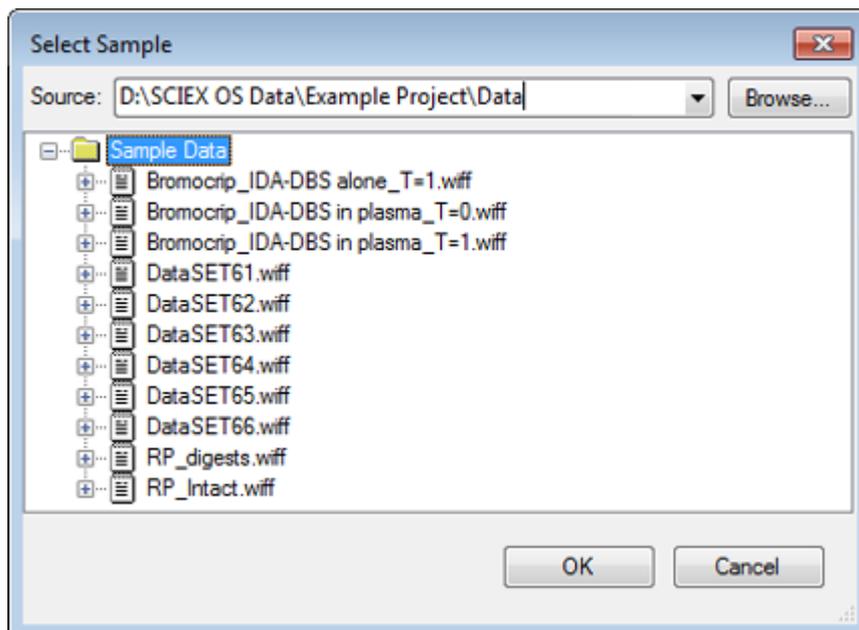
クロマトグラムとスペクトルを使用する

このセクションでは、最も一般的な処理オプションの一部を紹介します。ここで使用されるファイルは、多くのループ実験を伴う IDA ファイルですが、この例では、簡単な LC/MS 分析をシミュレートした最初の調査実験を使用しています。次のセクションでは、IDA の機能を説明します。

データ ファイルを開く

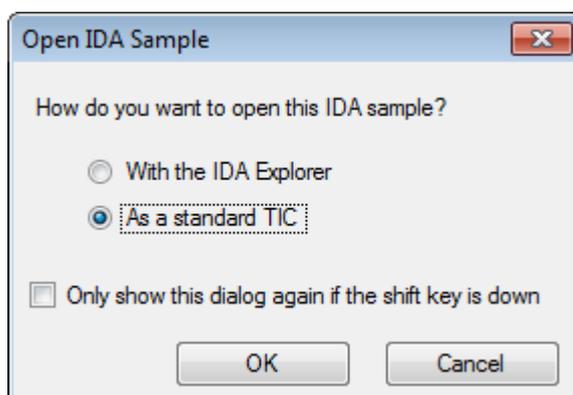
1. メイン ツールバーから、**Open Sample** のアイコンをクリックします。
Select Sample ダイアログが開きます。

図 D-19 : Select Sample ダイアログ



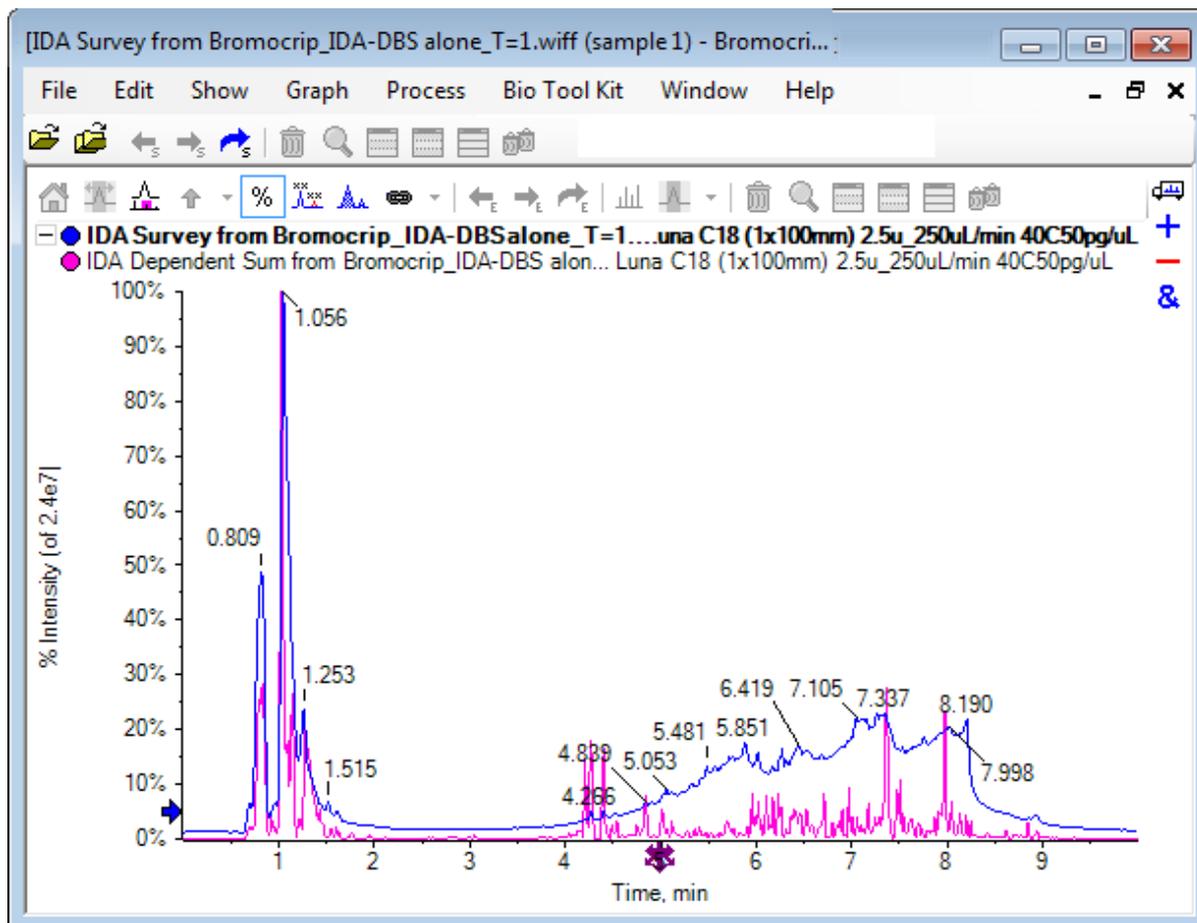
2. **Sample Data** フォルダがすでに選択されていない場合は、**Browse** をクリックして **Sample Data** フォルダに移動します。インストールされたデータ ファイルの場所については、[構成](#) を参照してください。
3. ファイル内のすべてのサンプルを表示するには、Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff ファイルの左にあるアイコンをクリックします。
Bromocrip_IDA-DBS alone_T = 1.wiff ファイルには、1 つのサンプルだけ含まれています。
4. サンプル名を選択し、**OK** をクリックします。
これは IDA ファイルであるため、ソフトウェア上では、選択したサンプルを開く方法を指定するように求められます。

図 D-20 : IDA サンプルを開く



5. まだ選択されていない場合は **As a standard TIC** をクリックし、**OK** をクリックして示されるように、TIC [図 D-21](#) を生成します。

図 D-21 : TIC

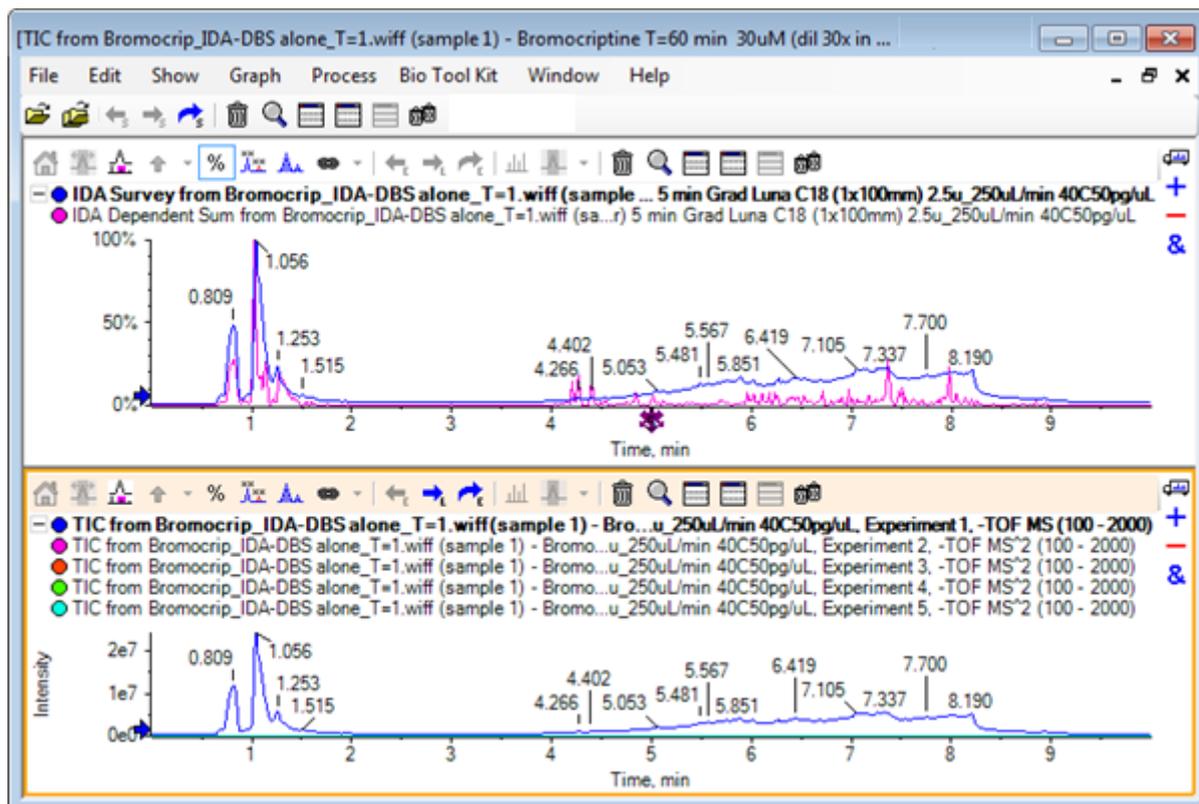


ペインでは、サーベイスキャン TIC(青)向けに1つのオーバーレイを、および加算された依存型スキャン(プロダクトイオンスキャン)向けにもう1つのオーバーレイを備えています。この例では、調査 TIC のみを示すよう調査データを処理したいと考えています。

1つの実験について TIC を表示する

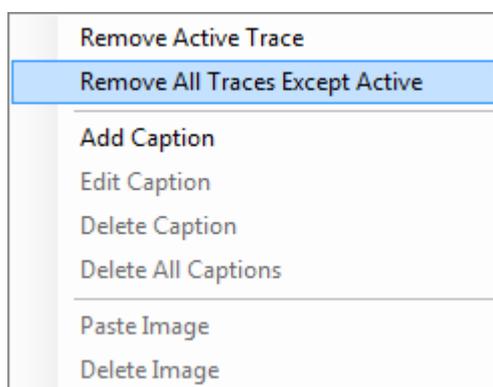
1. X 軸の中央にある **Double-click to overlay individual TICs for all experiments (全実験について個々の TIC を重ね合わせるには、ここをダブルクリック)** アイコンをダブルクリックし、全実験の TIC を重ね合わせます。
アクティブなペインは、新しいクロマトグラムです。また、最初の実験は調査であるため、アクティブトレースはヘッダ内で太字のタイトルとして表示されます。

図 D-22 : 重ね合わせ表示した XIC



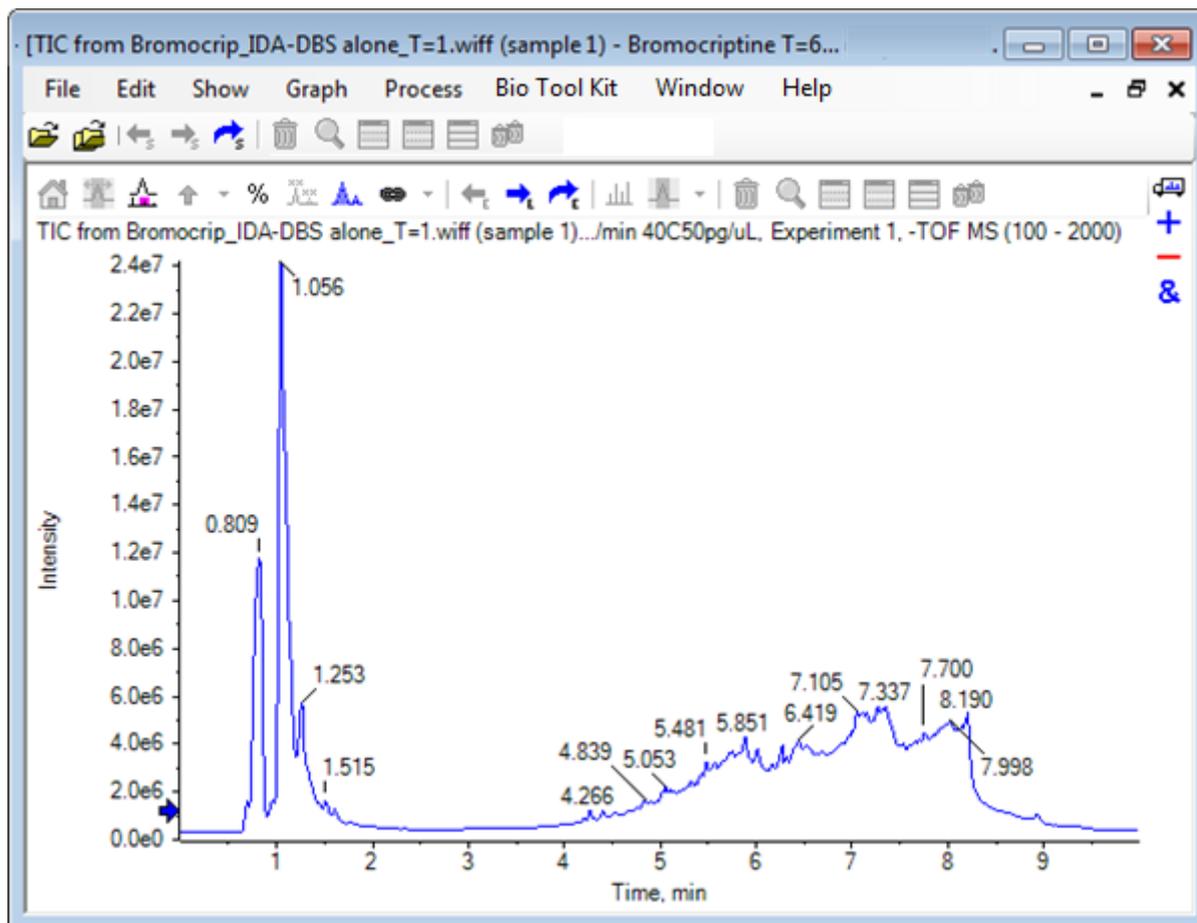
2. アクティブのクロマトグラム ウィンドウ内で右クリックし、**Remove All Traces Except Active** をクリックします。調査 TIC のみ表示されます。

図 D-23 : 右クリック メニュー



3. 同じペインで、**[Deletes all other panes(他のペインをすべて削除する)]** アイコンをクリックすると、調査 TIC 以外も表示されます。

図 D-24 : 調査 TIC



既知の分子式に対して XIC を表示する

4分～7分の範囲に外見上小さいピークがいくつかありますが、その多くはこのデータに存在するかなり強いバックグラウンド信号によって不明瞭になっている可能性があります。このサンプルは、ブロモクリプチンのマイクロソーム インキュベーションに対応しているため、期待される分子イオンの m/z 比をピーク位置への最初のガイドとして使用します。ブロモクリプチンの分子式は $C_{32}H_{40}N_5O_5Br$ であり、これはネガティブモードのデータであるため、 $(M - H)^-$ イオンの出現が期待されます。

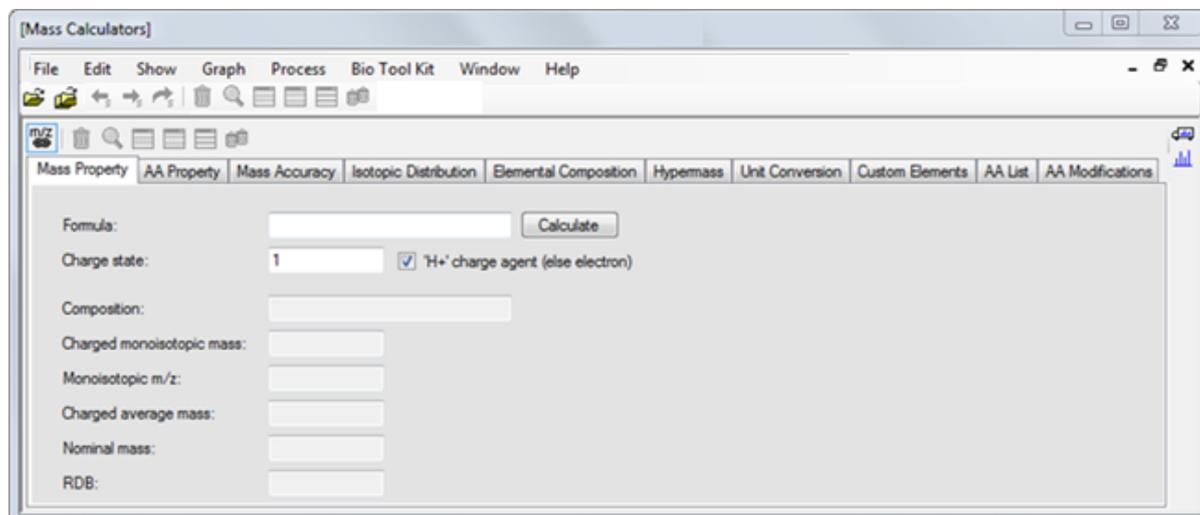
1. **Show > Mass Calculators** をクリックします。
2. **[Mass Calculators]** ペイン内の **[Mass Property]** タブをクリックします。
3. **[Formula]** フィールドに分子式を入力します。
4. 「**Charge state**」フィールドに **-1** と入力します。
5. 「**H+** charge agent (else electron)」を選択します。
6. **[Calculate]** をクリックします。

Explorer チュートリアル

注: また、分子式から手動で 1 個の水素を除去し、「H +」の電荷エージェント(他の電子)のチェックボックスをオンにしないことも可能です。

ダイアログが更新され、モノアイソトピックや平均といった、多くの質量値を表示します。

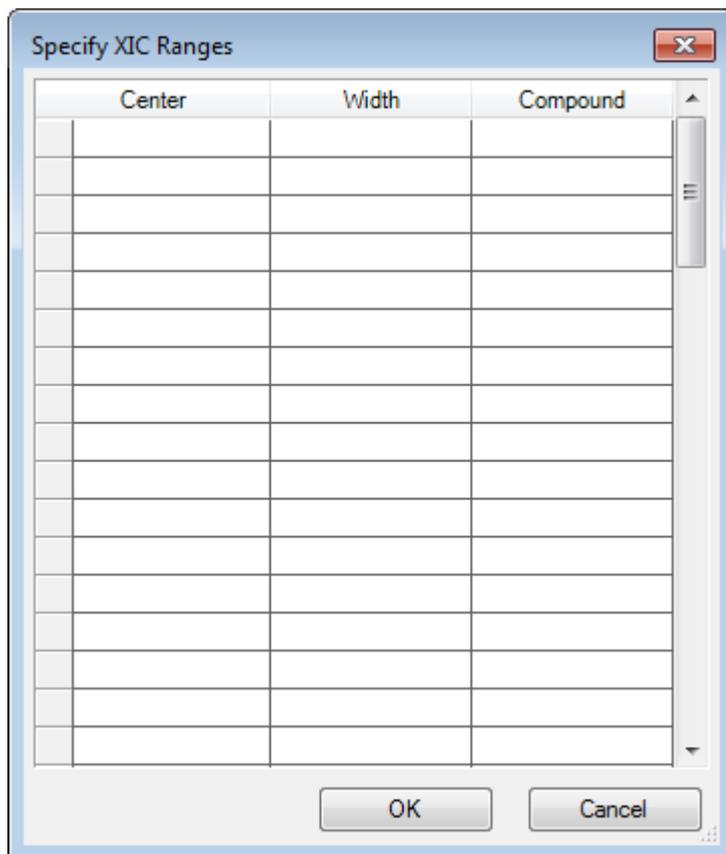
図 D-25 : [Mass Calculators] ペイン



注: これらの質量値で、アイソトープは容易に解析できます。したがって、モノアイソトピック m/z 値が最も適切な値となります。

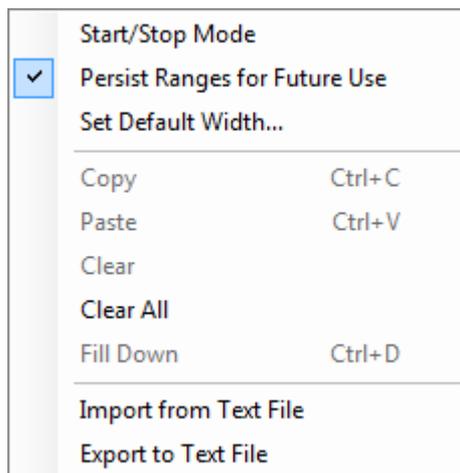
7. **モノアイソトピック m/z 値**を選択し、**Ctrl + C** キーを押してクリップボードに値をコピーします。
8. 「**Deletes this pane(このペインを削除する)**」アイコンをクリックして **Mass Calculators** ペインを削除するか、「**Hides this pane(このペインを非表示にする)**」アイコンをクリックしてペインを非表示にします。
9. **[Show] > [Extracted Ion Chromatogram (XIC)]** をクリックし、**[Specify XIC Ranges]** ダイアログを開きます。

図 D-26 : Specify XIC Ranges ダイアログ



10. **Specify XIC Ranges** ダイアログを右クリックし、コンテキストメニューを開きます。
11. コンテキストメニューから、以下の操作を行います。
 - a. **Start/Stop Mode** オプションが選択されていないことを確認します。これにより、XIC 値が中心値および幅として入力されます。
 - b. **Set Default Width** をクリックし、**0.05** と入力して **OK** をクリックします。
 - c. **Persist Ranges for Future Use** をクリックします。これにより、次回にダイアログを開いた際は値が記憶されています。

図 D-27 : コンテキスト メニュー

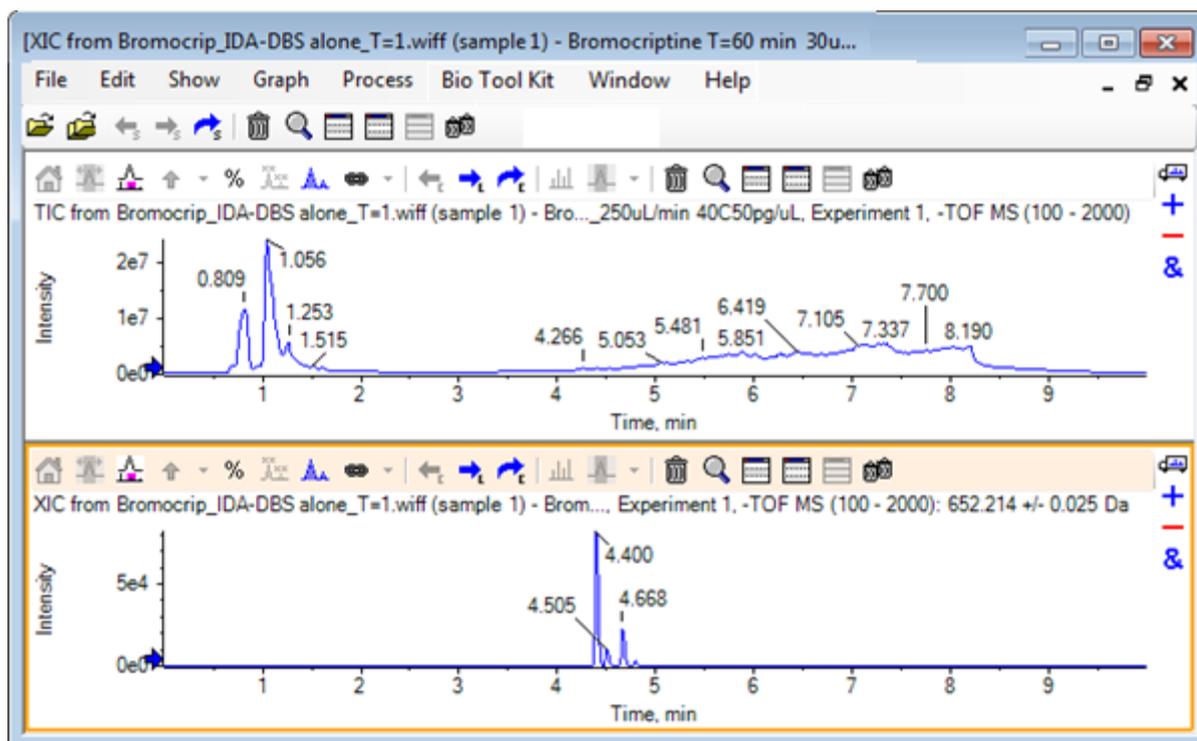


12. **Specify XIC Ranges** ダイアログに戻ります。
これでダイアログが設定され、対象の XIC ごとに入力する必要があるのは 1 つの質量値のみとなります。また、デフォルトの幅が使用されます。
13. **Center** の下から最初のセルを選択し、**Ctrl + V** キーを押して、ステップ 7 でコピーした質量値を貼り付けます。
14. **OK** をクリックします。

注: デフォルト幅が設定されているため、個々の値を入力する必要はありません。

ペインには、プロモクリプチンの予想分子イオンについて、TIC と XIC が表示されます。ここでは、いくつかのピークも表示されます。

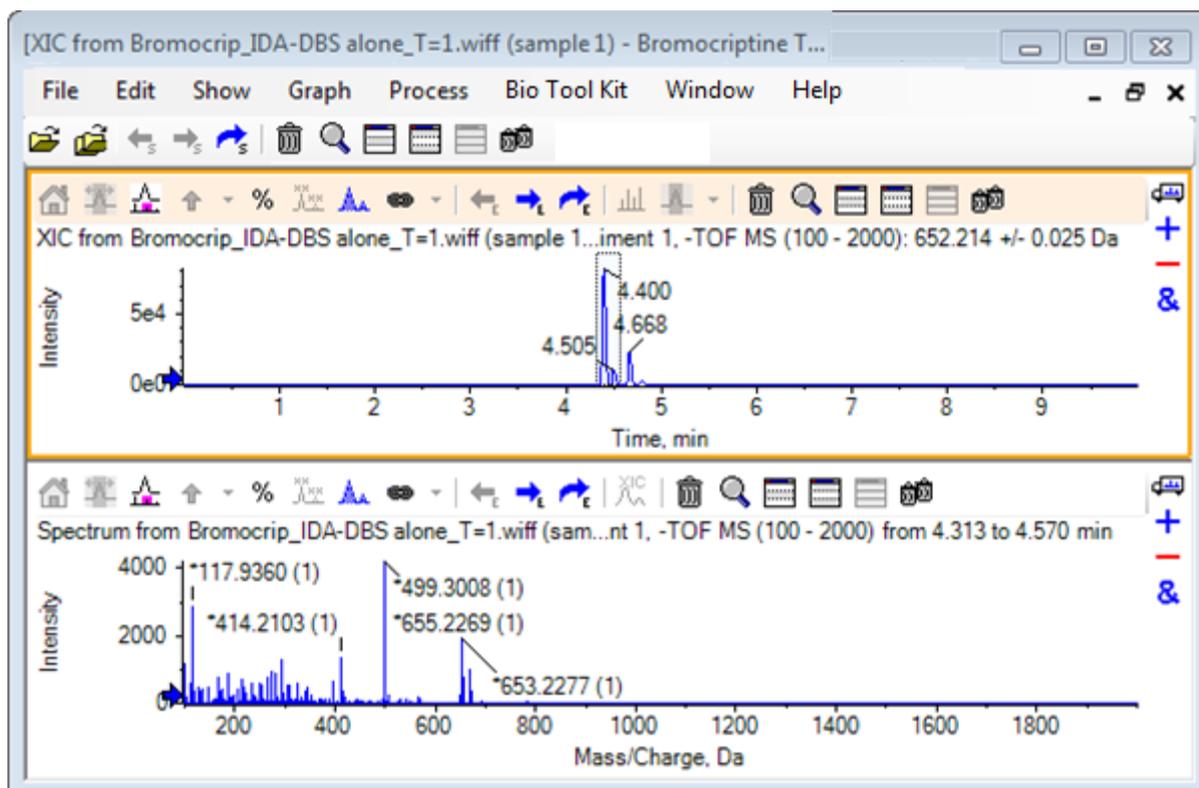
図 D-28 : プロモクリプチンの予想分子イオンにおける TIC と XIC



スペクトルを生成し、処理する

1. TIC ペインを非表示にし、XIC 最大のピーク付近を選択し、**Displays a spectrum for selection (選択範囲のスペクトルを表示)** のアイコンをクリックします。選択範囲の平均スペクトルが生成されます。

図 D-29 : XIC 最大のピークからのスペクトル



注: 図 D-29 では、**Options** ダイアログ (**Edit > Options**) で使用可能)の **Peak Labeling & Finding** タブにある **Label** フィールドは、**Mass (Charge)** に設定されています。

2. X 軸の 630 Da~700 Da あたりをドラッグして、この領域のスペクトルを拡大表示します。

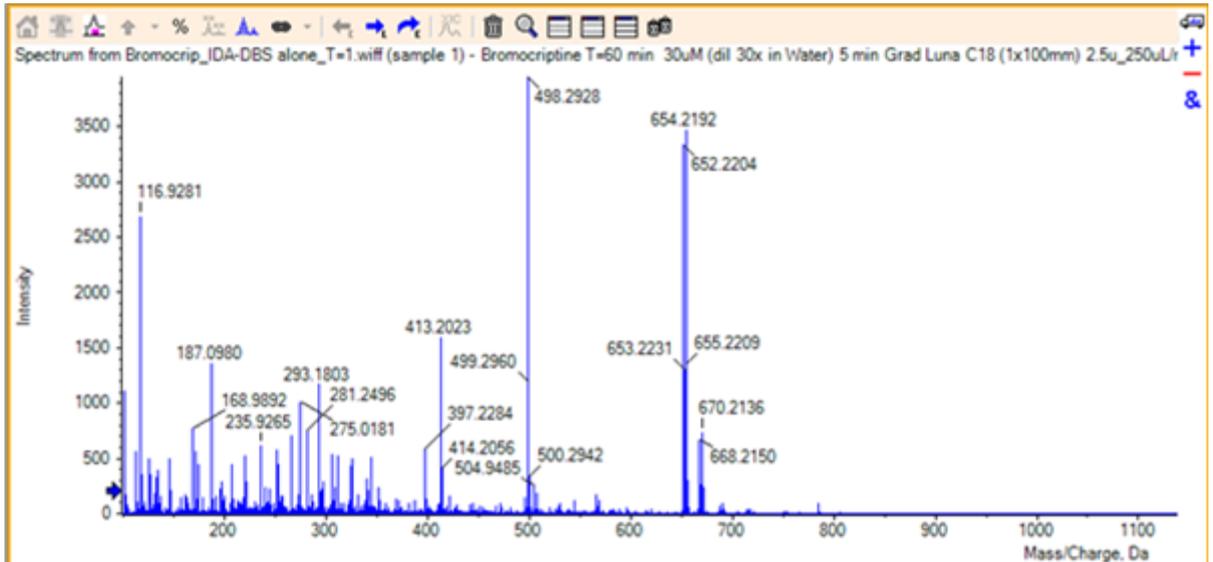
注: この操作には、2 つのステップが必要になる場合があります。

臭素アイソトープパターンも併せ持つ 652.2140 の期待値に非常に近い場所では、652.2199 にピークがありますが、第二の臭素アイソトープクラスターが 668.2158 以降見受けられます。正確な m/z 比の値は、XIC で選択された正確な保持時間ウィンドウによって異なります。

注: ここで用いられる表記スタイルでは、 m/z 比に加え、括弧内の荷電状態の推定値(ピーク間の間隔に基づく)を表示します。また、モノアイソトピックのように見えるピークにもアスタリスクが付いています。表記アルゴリズムは 13C 以外のアイソトープを認識しないので、単一荷電としての 81Br アイソトープを誤ってモノアイソトピックとして表記してしまいます。

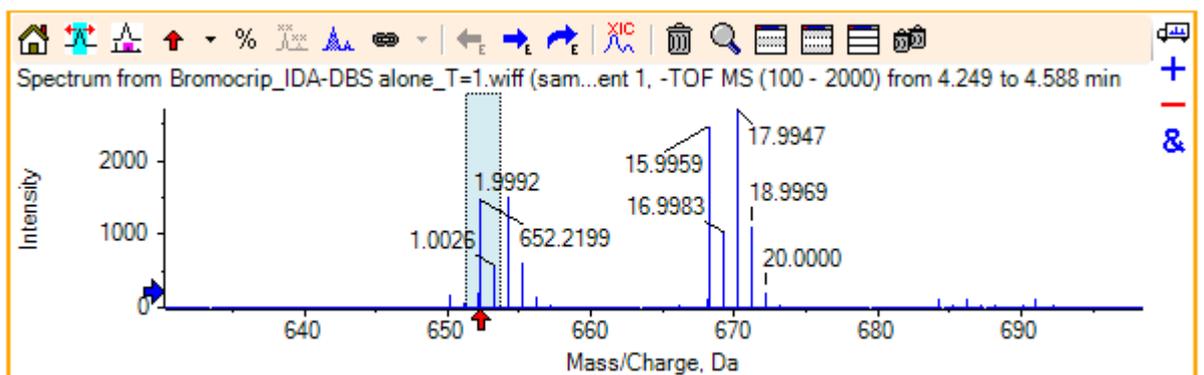
3. 表記スタイルをデフォルトに戻すには、**Edit > Options** をクリックし **Peak Labeling & Finding** タブを開き、**Label** フィールドの設定を **Mass / Charge** に変更します。
4. **OK** をクリックします。

図 D-30 : 異なる表記スタイルを適用したスペクトル



5. スペクトルを拡大表示した状態で、652.2199 ピーク付近を選択し、**Adds arrow markers for selected peaks** (選択したピークに矢印マーカを追加する) アイコンをクリックします。

図 D-31 : 選択したピークに ↑ を表示するスペクトル



質量標識は選択したピークを基準にしているため、質量ピークの差異が表示されています。668.2158 にあるピークのラベルは「15.9959」になります。これは酸素の質量に対応しており、このピークはヒドロキシプロモクリプチン代謝物であることを示唆しています。

ヒント! 矢印は、別のピークにドラッグして移動することができます。また、矢印を消去するには、矢印アイコンの横にあるリストから **Remove All Arrows** を選択します。

6. 「15.9959」ラベルのピーク付近を選択し、**Displays an XIC for selection** (選択範囲の XIC を表示する) アイコンをクリックします。
7. **XIC Selection Ranges** ダイアログで **OK** をクリックします。

図 D-32 : XIC Selection Ranges のダイアログ

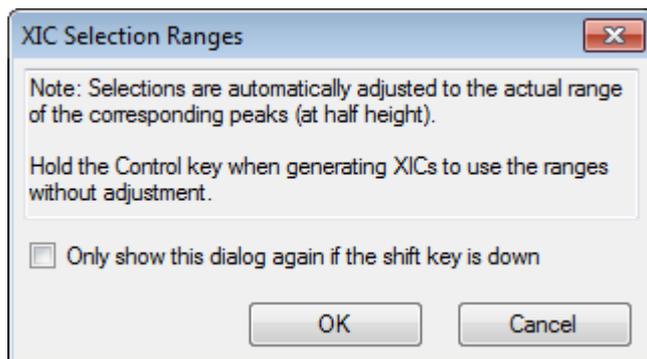
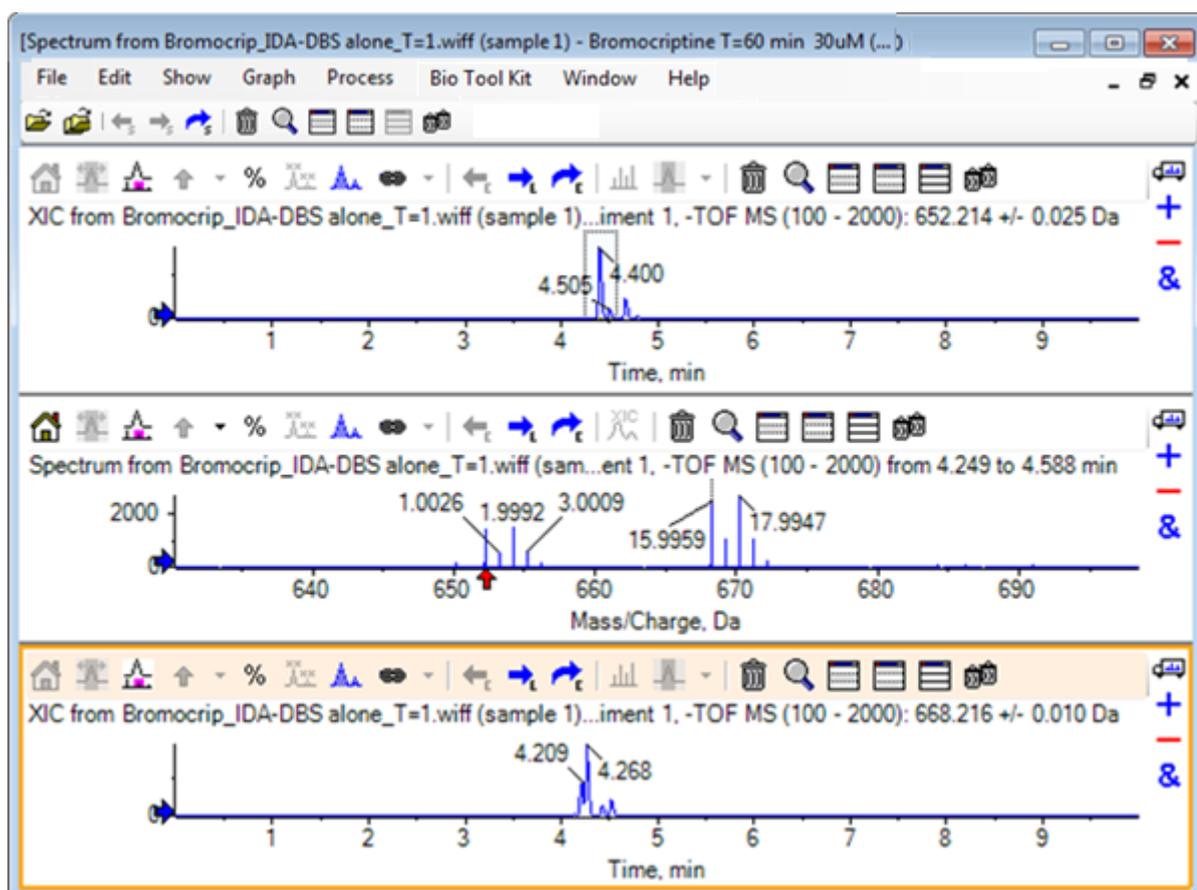


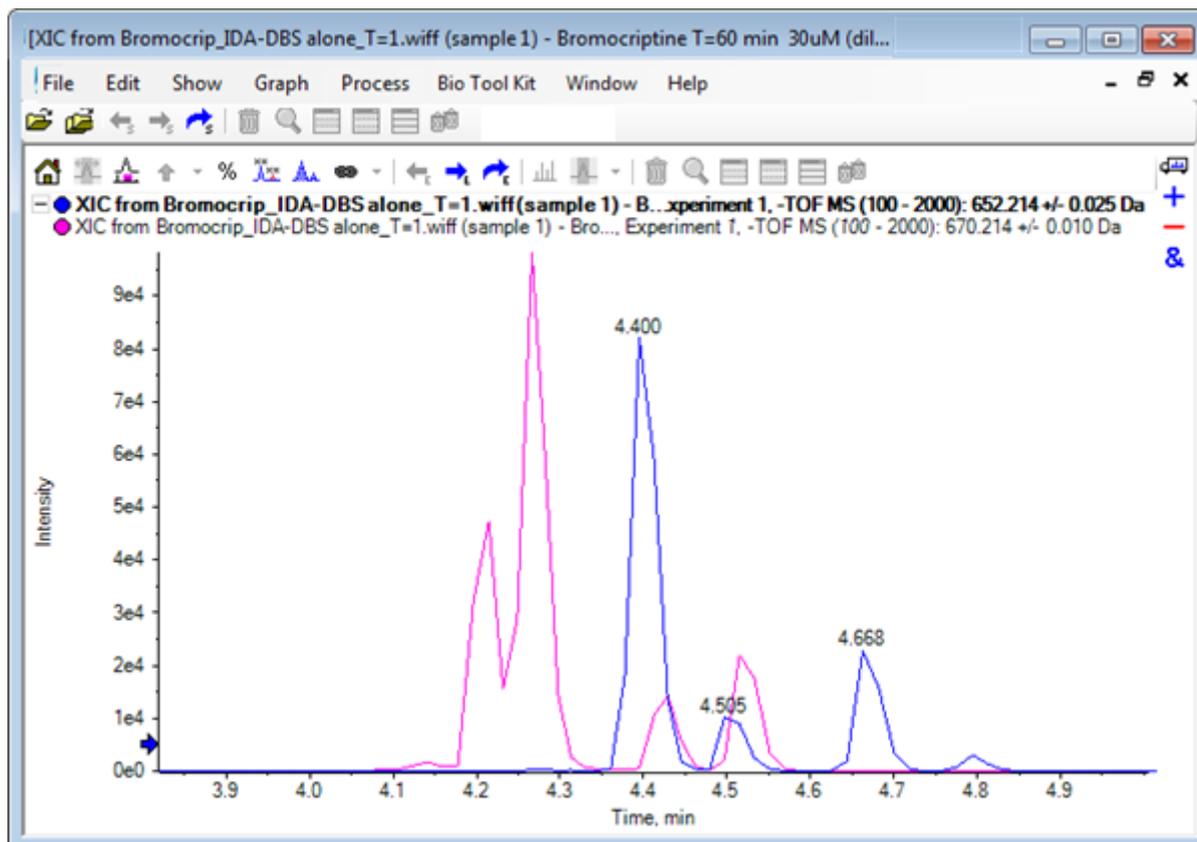
図 D-33 : XIC



これは、インタラクティブな XIC を生成できる便利な方法です。デフォルトでは、XIC に使用する幅の半分の高さが質量ピークの幅であり、選択リンクはスペクトルに示されています。

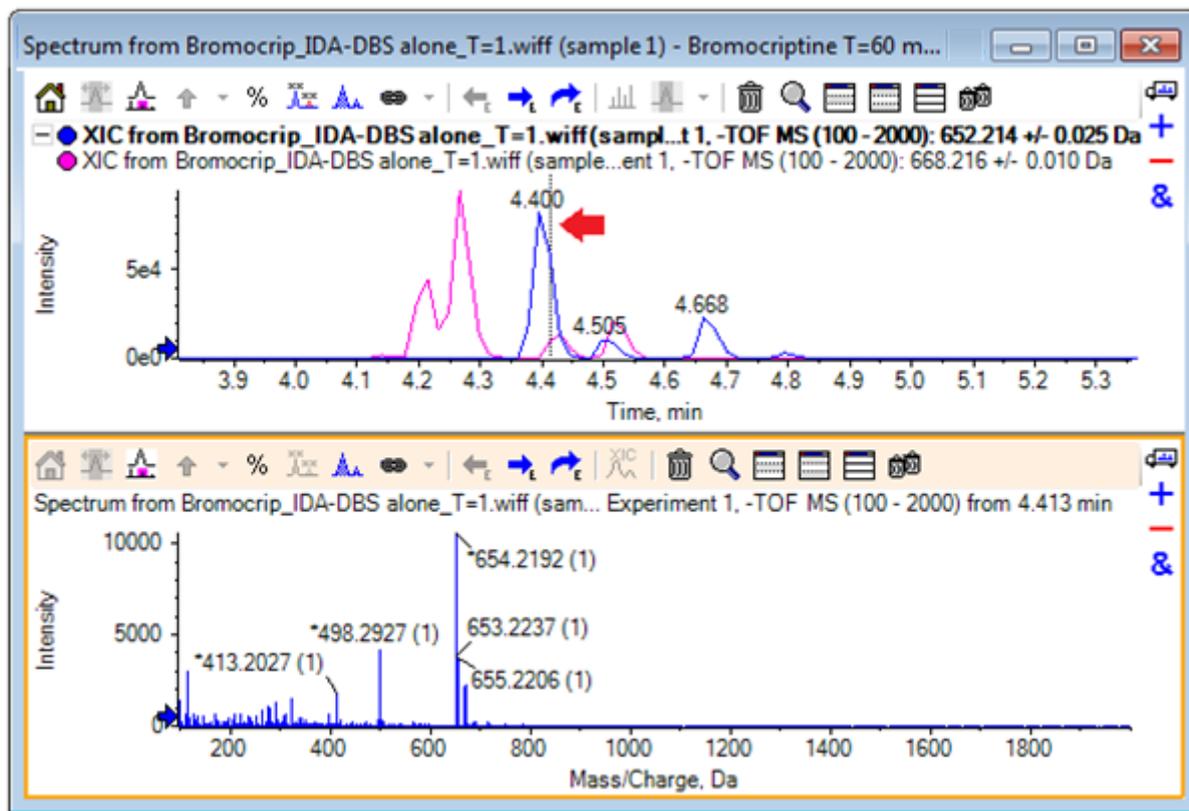
8. 選択リンクをドラッグして表示されている XIC を更新し、上記のステップを繰り返して XIC を追加します。
9. それらを重ね合わせるには、新しいクロマトグラムの **Drag to another graph to overlay the active data in the target graph** (別のグラフにドラッグしてアクティブデータをターゲットグラフに重ね合わせる) アイコンをクリックし、元の XIC ペインにクロマトグラムをドラッグします。

図 D-34 : XIC のオーバーレイ(重ね合わせ)



- 2番目のクロマトグラムペインとスペクトルを非表示にするか削除してから、重ね合わせたクロマトグラムをズームして4分～5分の領域を表示します。
4.4分の付近に、同時期に溶出したが保持時間は完全には同じでない2つのピーク(各XICから1つずつ)があります。また、668.216クロマトグラムにも多くのピークがあります。おそらく他のヒドロキシン代謝物の存在を示していると考えられます。
- クロマトグラムペインの4.40分の位置をダブルクリックし、単一スキャンからスペクトルを生成します。

図 D-35 : 単一スキャンに基づくスペクトル



XIC の破線は表示スキャンを表します (図 D-35 では矢印で表されます)。この線をドラッグするとスペクトルが更新されるので、4.40 分前後の領域を詳しく調べることができます。(一度に 1 スキャン) 移動するには前方と後方の矢印キーを使用します。668.215 イオンの信号が無い領域 (ただし、背景の値はここでも高い) にラインを移動させることにより、652.214 の m/z 比のピークからノイズの無いスペクトルを得ることが可能です。ただし、668.215 の領域については、同様の方法でノイズの無いスペクトルを得ることはできません。

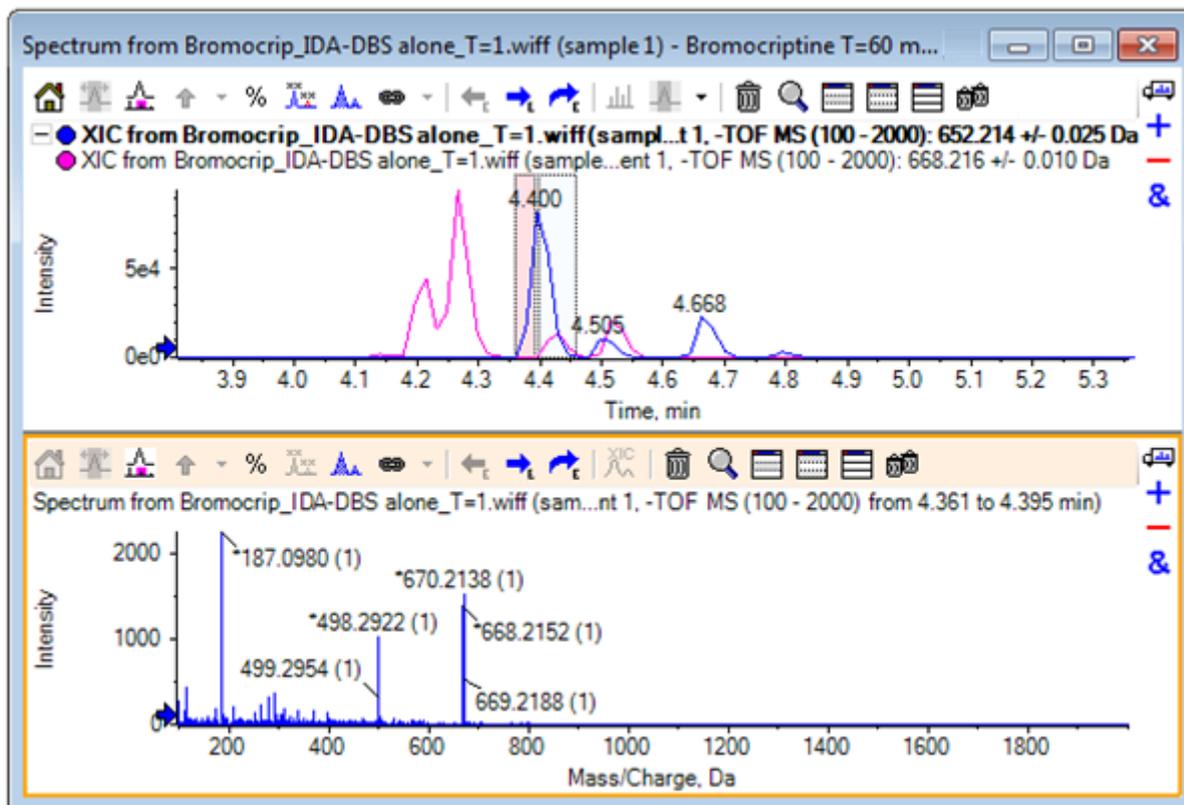
12. スペクトル ペインを削除します。
13. クロマトグラムペインで、652 ピークの左側を含むが 668 ピークを含まない狭い領域を選択し、**Set background subtraction range** (バックグラウンド減算範囲を設定する) アイコンをクリックします。

選択範囲がピンク色になります。

減算範囲が定義されているときは、続いて生成されたスペクトルから自動的に減算されます。減算範囲を消去するには、**Set Subtraction Range** アイコンの右にある小さい矢印をクリックし、リストから **Clear Subtraction Range** を選択します。

14. 668 ピークの頂点を含むようクロマトグラムで別の選択を行います。その際、652 ピークが含まれる量を可能な限り少なくします。その後、**Displays a spectrum for selection** (選択範囲のスペクトルを表示する) アイコンをクリックします。

図 D-36 : バックグラウンドを差し引いた、668 ピークのスペクトル



その結果、652 ピークをほとんど含まない、668 ピークのバックグラウンドを差し引いたスペクトルが表示されます。バックグラウンドが表示されておらず、クロマトグラム他の部分に移動させることもできますが、クロマトグラム中の両選択範囲は双方のスペクトルにリンクされた状態が維持されます。スペクトル選択を移動すると、表示されているスペクトルも自動的に更新されます。ただし、バックグラウンド領域を変更した場合は、その後に生成されたスペクトルのみ更新されます。

15. **Hides all other panes (他のすべてのペインを非表示にする)** アイコンをクリックします。単一スペクトル TIC 内をクリックし、**Deletes all other panes (他のペインをすべて削除する)** アイコンをクリックすると、TIC のみ表示されるようになります。
16. TIC ペインを削除した場合は、**Show > Total Ion Chromatogram (TIC)** をクリックし、**Period 1, Experiment 1** を選択して **OK** をクリックします。

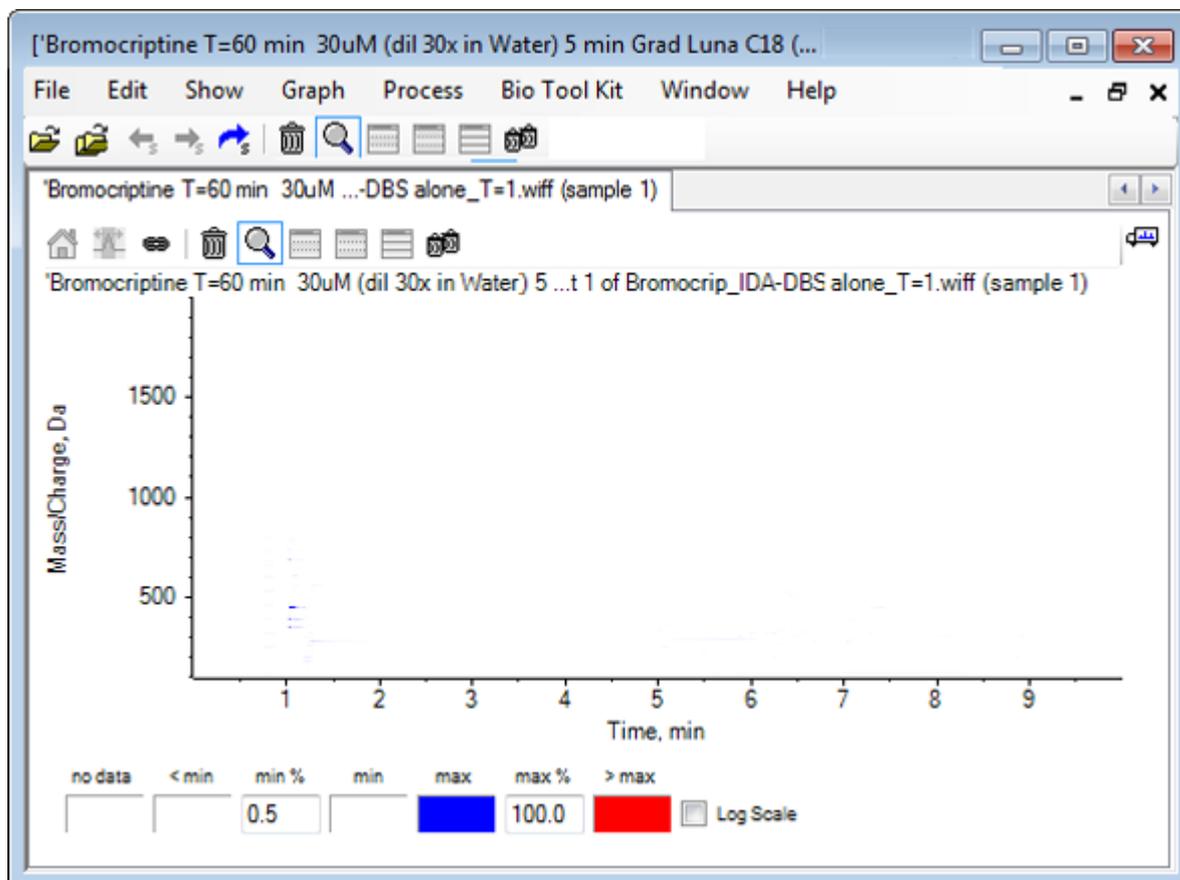
等高線図を使用する

データセット(クロマトグラムまたはスペクトル)の一部を表示するもう1つの方法は、等高線図を使用して1つの実験に関する完全な概要を取得することです。等高線図は非常に多くの情報を含むこともありますが、最良の結果を得る上では通常、表示パラメータを調整することが必要となります。この場合、プレカーサー化合物は臭素化されており、等高線図により、臭素のアイソトープパターンを有するピークを探索することができます。

1. 単一の実験 TIC がアクティブの状態です。 **Show > LC/MS Contour Pane** をクリックします。表示された等高線図内のツールバーから **Expands active pane to fill window** アイコンをクリックすると、このペインのみ表示されるようになります。

2. 外観管理メニュー(左下隅にあるカラー ボックス)が表示されていない場合は、ペインを右クリックし、**Show Appearance Control** を選択します。等高線図とヒート マップ および *Reference Guide* を参照してください。

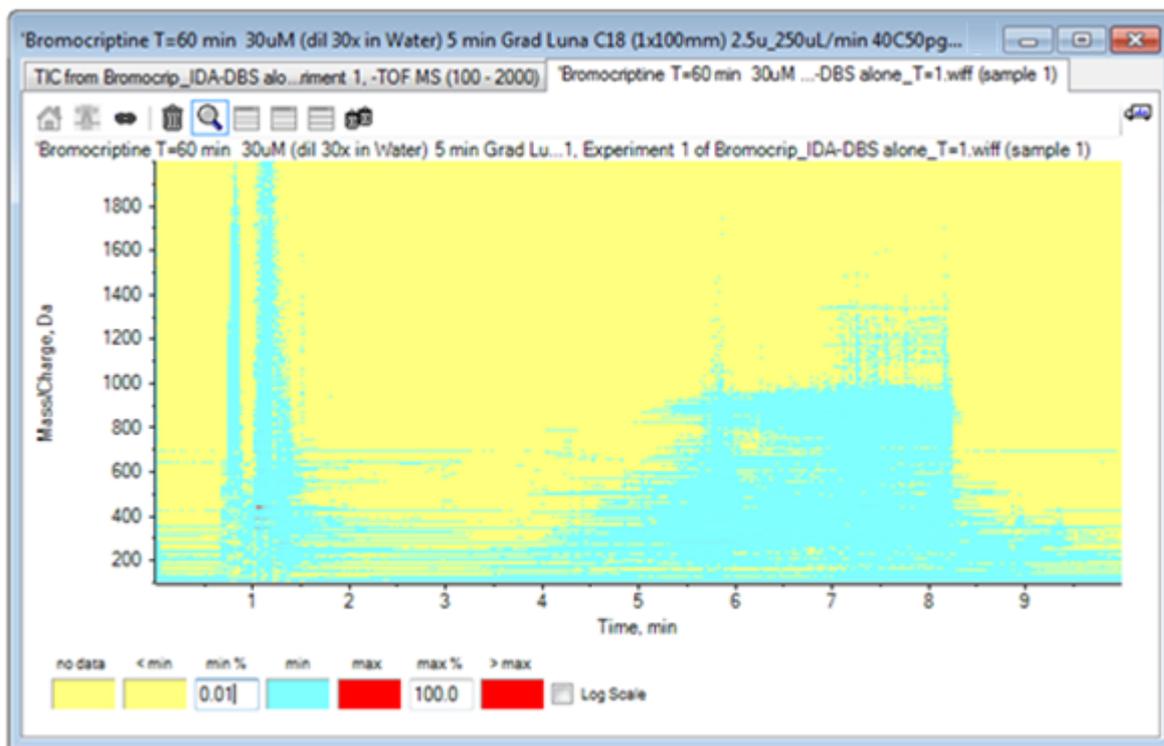
図 D-37 : 等高線図



ヒント! デフォルトのパラメータを使用した場合、低強度のピークとノイズが過半数を占めるため、本当のピークが不明瞭になるため、ビューはあまり役立ちません。以下の操作によって、より良いビューを生成することができます。

- 表示する最小強度を変化させる: この強度以下のデータポイントはすべて(データが存在しない場合と)同じ色で描画されるようになるため、結果的に表示されなくなります。
 - カラーマッピングを変更すると、利用可能な色が割り当てられる強度範囲が狭まり、小さなピークの視認性が向上します。
3. **min %** 値を **0.01** に変更します。強度がベースピークの 0.01% に満たないデータポイントがすべて表示されなくなります。

図 D-38 : 等高線図

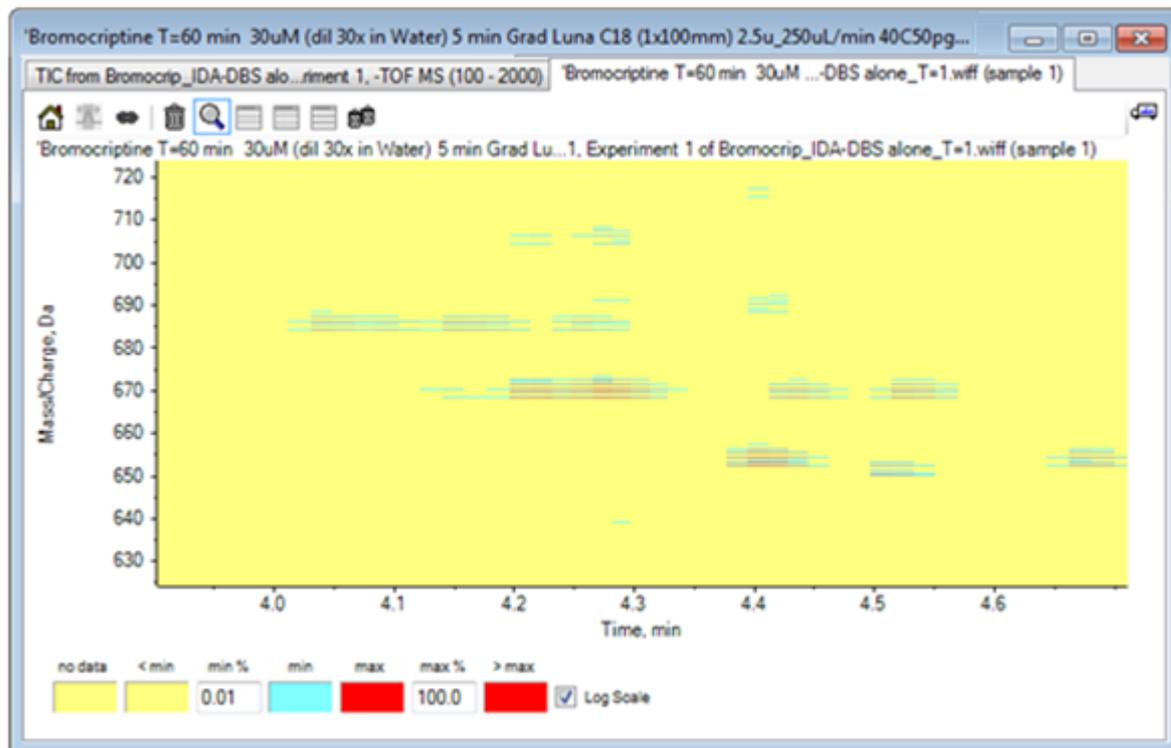


データ内の構造体を詳細に表示します。空隙容量とカラム洗浄領域が明確に表示され、保持時間すべてに存在し水平線として表示されるバックグラウンドピークが多く見受けられます。

4. **Log scale** チェック ボックスを選択します。
選択した色が(ベースピーク強度の割合としての)強度の対数にマッピングされ、強度が低いピークを強調する効果があります。たとえば、4分～4.5分のあたりにある600～700の質量範囲を持つクラスタが強調されます。
5. この領域を選択し、**Zooms selection to full view** アイコンをクリックします。

ヒント! また、通常の方法とは別に X 軸と Y 軸を拡大表示することも可能です。

図 D-39 : 等高線図



表示画面からは、この領域に多くの臭素化ピークが存在することが判別できるようになります。これらのピークは、 ^{79}Br および ^{81}Br アイソトープと、それらの ^{13}C アイソトープに対応する、各組 4 本の平行線によって区別することができます。

6. 色の管理設定を変えながら、ビューへの影響を試します。
7. 終了したら、ウィンドウを閉じます。
これにより、データファイルも同時に閉じられます。

概要

このセクションでは、以下のタスクについて説明されました。

- データ ファイルを参照して開き、TIC を表示する。
- ビューを変更し、1 つの実験のみ表示されるようにする。
- 質量電卓を使用して元素組成からイオンの質量を決定し、その質量を使用して XIC を生成する。
- インタラクティブなスペクトルとクロマトグラムを生成し、スペクトルに矢印マーカーを使用してピーク間の質量差を示す。
- バックグラウンド減算されたスペクトルを生成する。
- 等高線図を使用し、データ セットの概要を生成する。

これらの操作は、どのような種類のデータを表示するかに関わらず、インタラクティブなデータ処理の基礎となります。

IDA Explorer を使用する

IDA 実験では、1 つ以上の調査スペクトルのデータが一定の基準を満たすときに、MS/MS スペクトル(おそらく MS3 も含む)のデータが自動的に収集されます。パラメータでは、一定時間にかけてプレカーサー質量(トリガーとして作用させない)を排除することで、同じ LC ピークから複数のスペクトルを収集しないよう設定するのが一般的です。ただし、冗長なスペクトルを収集することも時にはあります。また、ピークが基準を満たすと同時に IDA のトリガーが起こるため、通常は LC ピークの初期部分でスペクトルが生成されます。このため、最高品質の結果を得られない可能性もあります。

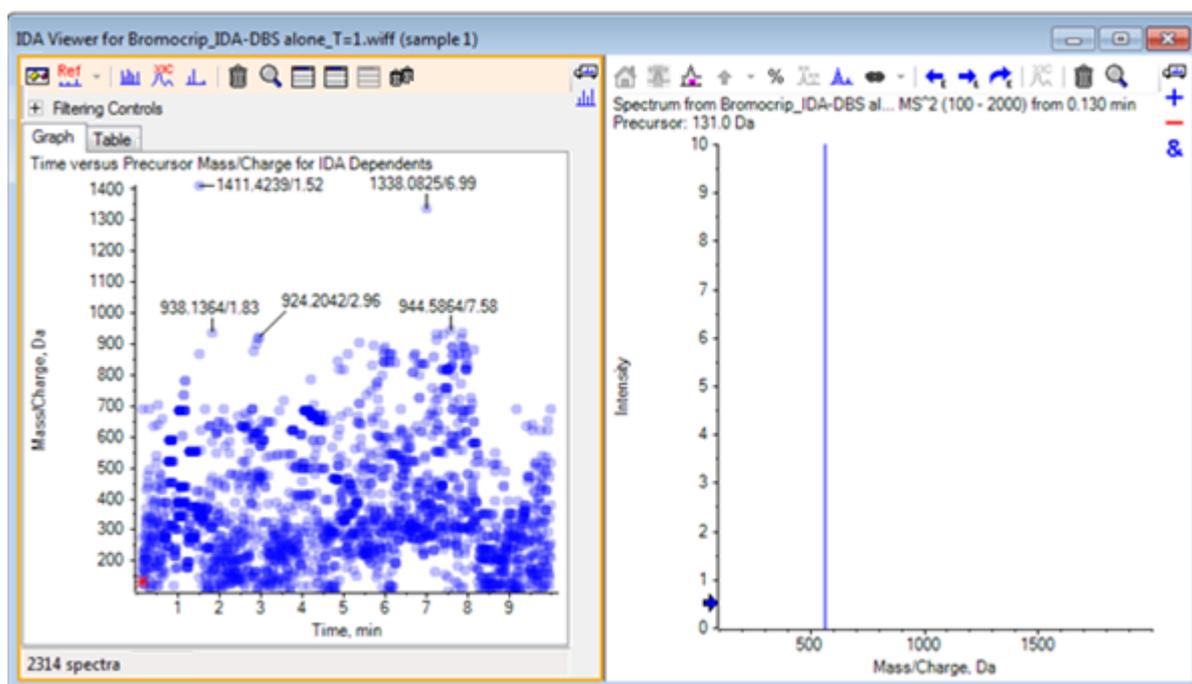
ソフトウェアには、IDA データを表示し、フィルタを適用し、処理するためのツールが含まれています。これらのツールについて、一部はこのセクションで説明されます。

開始する前に、開いているウィンドウをすべて閉じます。

スペクトルの表示と結合

1. メイン ツールバーから、**Open Sample** のアイコンをクリックします。
Select Sample ダイアログが開きます。
2. **Sample Data** フォルダがすでに選択されていない場合は、**Browse** をクリックして **Sample Data** フォルダに移動します。
3. **Bromocrip_IDA-DBS alone_T=1.wiff** ファイルを選択し、**OK** をクリックします。
4. **Open IDA Sample** ダイアログで **With the IDA Explorer** をクリックし、**OK** をクリックします。
ソフトウェアでは、データファイル内のスペクトルをすべて検査し、以下のグラフを生成します。

図 D-40 : IDA ビューア



Explorer チュートリアル

左側のパネルには、**Graph** タブと **Table** タブが含まれています。**Graph** タブは、仮想等高線図を表示します。この中で、すべてのデータポイントは、保持時間と、プレカーサーイオンとして選択されていたイオンの m/z 比を表します。**Table** タブは、仮想等高線図上のデータポイントを表形式で表示します。右側のパネルは、選択したデータポイントのスペクトルを表示します。最初は、第一の MS/MS スペクトルが表示されます。

等高線図では、ピーク強度に応じた色分けが使用されます。暗い色は、より強いピークを示しています。ラベルは、それらがデータポイントや相互に重ならないよう、可能な場合に描画されます。より詳細に領域を調べ、複数のラベルを表示するには、等高線図を拡大表示します。

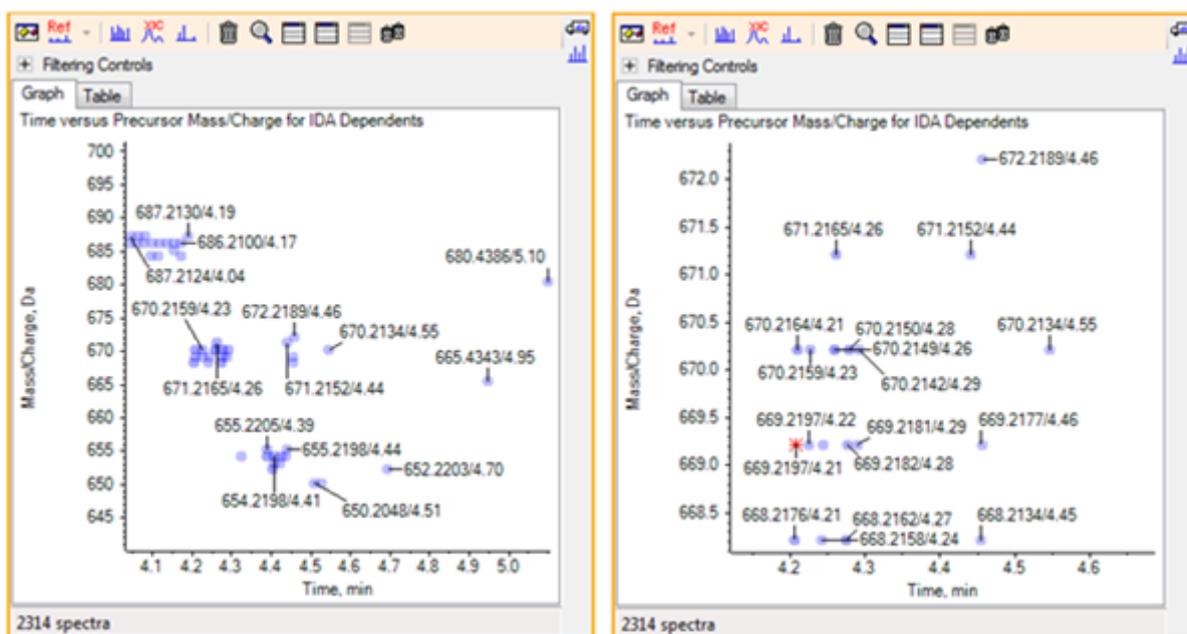
5. 左側のパネルで、4 分～5 分および 640 Da～700 Da の領域を拡大表示します。この領域では、プロモクリブチンに関連するピークがすでに見つかっています。

左図(図 D-41)は、左側のパネルだけを示しています。現在のビューが異なる場合は、**Show Options**(オプションを表示) アイコンをクリックし、**Options** ダイアログの **General** タブで **Merge spectra with similar precursor masses** のチェックボックスを外します。

多くの MS/MS スペクトルはこの領域で収集されており、クロマトグラムのピークが非常に狭いにも関わらず、これらのいくつかはおそらく同じピークから収集されたものです。さらに、アイソトープクラスタ内のピークごとに MS/MS スペクトルが収集されています。

6. さらにグラフをズームして、ピーク(m/z 比が 668 Da 対 672 Da)のクラスタを拡大表示します。図 D-41 の右側のパネルを参照してください。

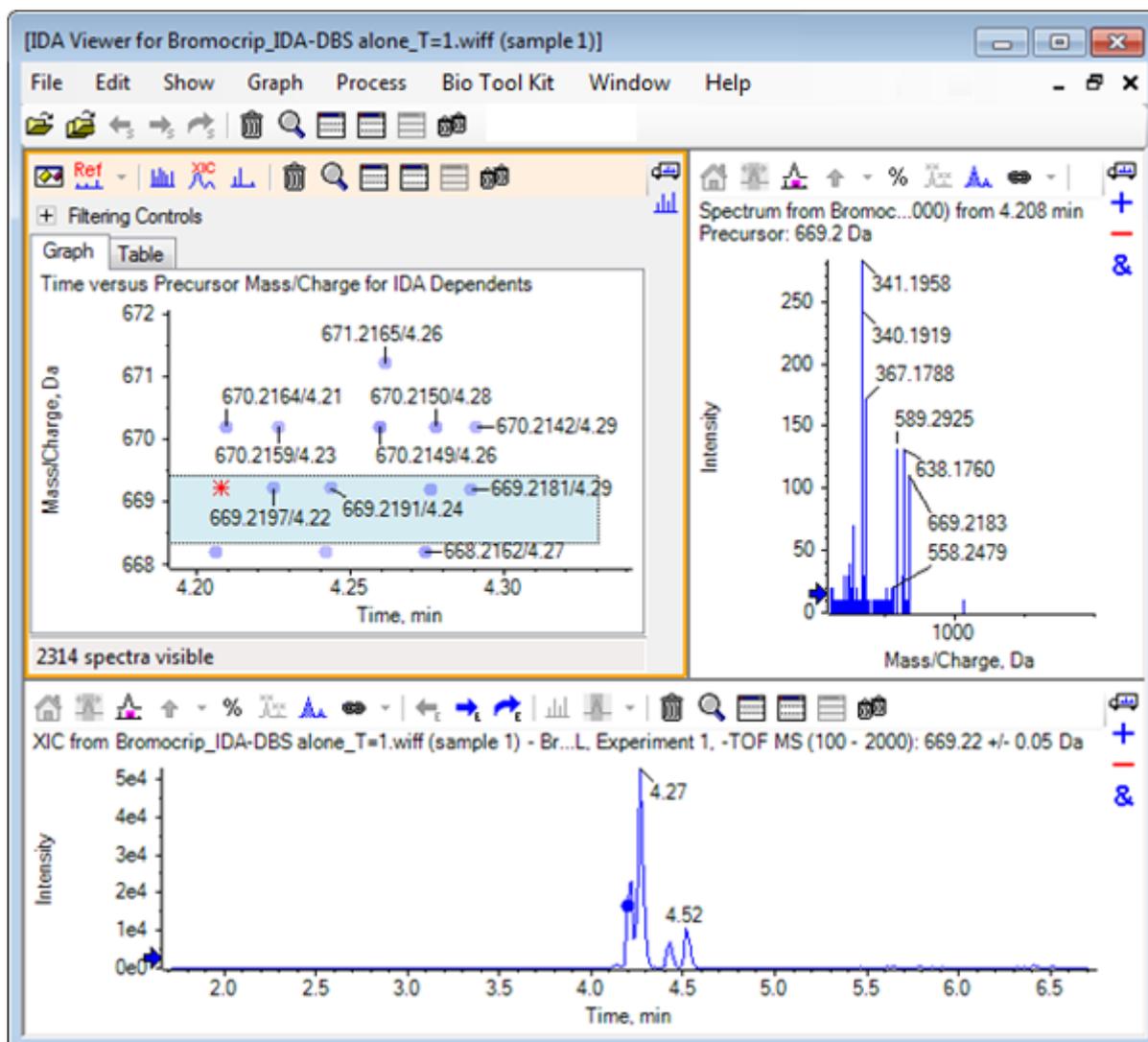
図 D-41 : IDA ビューア



7. 669.2197 のピーク(上記の右パネルにアスタリスクとして表示されている)から最初のものを選択し、**Displays an XIC for selection**(選択範囲の XIC を表示する) アイコンをクリックし、サーベイスキャンでプレカーサー質量の XIC を表示します。

当初は、ピークを選択すると、対応する MS/MS スペクトルが表示されます。

図 D-42 : サーベイスキャンにおける、プレカーサー質量向けの XIC



等高線図内のデータポイントにラベルが表示されていない場合は、その上にカーソルを移動して m/z 比と保持時間のラベルを表示させます。プロダクトイオンスキャンの時間が、調査クロマトグラムに連動するようになります。

669.2 のピークについて、最初の 3 回のスキャンは 4.21 分にある最初の XIC ピークに関連しています。ここでは 668.2 のスキャンが生成された位置でもあります。2 番目の 2 回のスキャンは 4.27 分のピークに関連しており、最後のスキャンは 4.42 分のピーク (669.2177/4.46) からのもので、4.52 分の 669.2 ピークについてはスキャンが実施されませんでした。670.2 ピークについてはスキャンが得られました。

注: スキャンは連続して実施されるため、同じサーベイスキャンで実施された場合でも、各スキャン時間はわずかに異なります。小さいアイソトープピークは、大きなピークよりも先には検出されない場合があります。

- 最初の 5 回の 669.2 スキャンの周囲に選択四角形を描画します。右クリックし、**Select Points in Graph Selection** を選択します。

これにより、MS/MS スペクトルすべてに対してスペクトル ペインがオーバーレイで表示されます。

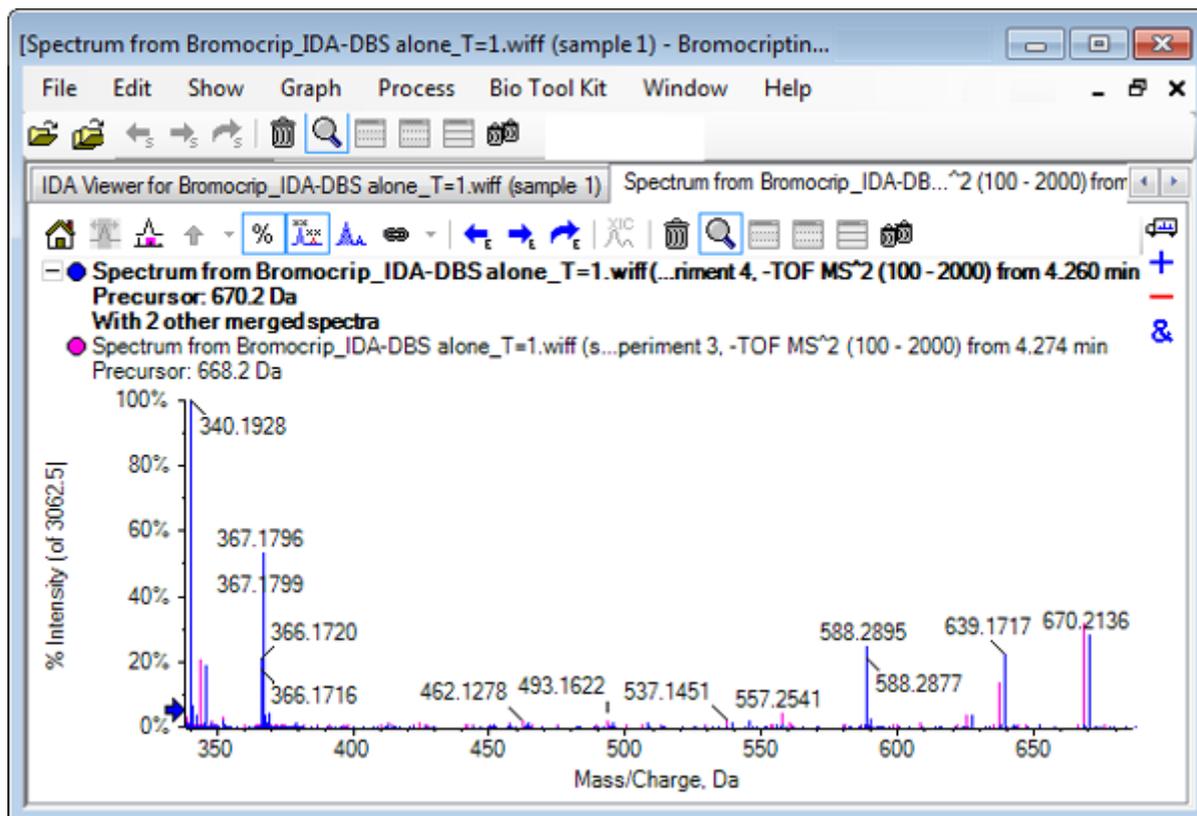
システムでは、必要以上のスキャンを実施しています。処理するスペクトルの数を減らし、異なる化合物まで僅かに達しないスペクトルを統合することにより、結果の質を向上させることができます。結合する際は、質量と保持時間の両方を基にこれらのスキャンを決定します。

9. **Show Options (オプションを表示)** アイコンをクリックし、**Merge spectra with similar precursor masses** チェックボックスをオンにしてから **Mass tolerance** を **10 ppm** に、および **RT gap tolerance** を **0.03** 分に設定します (この分析のピークは、幅約 2 秒です)。
10. **OK** をクリックします。

注: ダイアログのこの部分では、XIC の抽出方法を定義することもできます。質量幅は、計器の分解能やピーク幅と一致している必要があります。使用する時間範囲を制限すると、処理を高速化できて便利です。

データをこのように統合すると、669.2 に対する 3 つのピーク (4.21 分、4.28 分、4.46 分) が生成されます。IDA ビューア ペインの最下部にあるステータス バーには、データ統合の進行状況が表示されます。完了後は、依存スペクトルの合計数が表示されます。

11. 670.2149/4.26 でのデータポイントをクリックし、**Ctrl** キーを押して 668.2162/4.27 のポイントをクリックします。
12. MS/MS スペクトルのペインで、**Expands active pane to fill window (アクティブなペインを拡大しウィンドウ全体に表示する)** アイコン、**Use percent y-axis (Y 軸 (パーセント) を使用)** アイコン、および **Label all overlaid traces (すべての重ねトレースにラベルを表示)** アイコンをクリックし、X 軸を拡大表示させて 340 から 680 の領域を表示します。

図 D-43 : スペクトル: m/z 340 ~ 680 の領域を拡大表示

これら 2 つのプレカーサーが Br のアイソトープに対応しているため、2 つの Da によって区切られた 2 個一組のピークとして表示され、Br 原子を保持するイオン以外はスペクトルが同一になります。この例では、344.0441、625.1765、および 637.1712 におけるフラグメント(668.2 トレース)は Br 原子を保持しており、340.1925、367.1796、および 588.2877 では Br 原子を保持していません。

588.2877 のピークに矢印を置き、668 と 670 のピークに Br アイソトープの質量 + 1 のラベルが表示されることを確認します。これは、588.2877 において HBr が損失したことを示します。

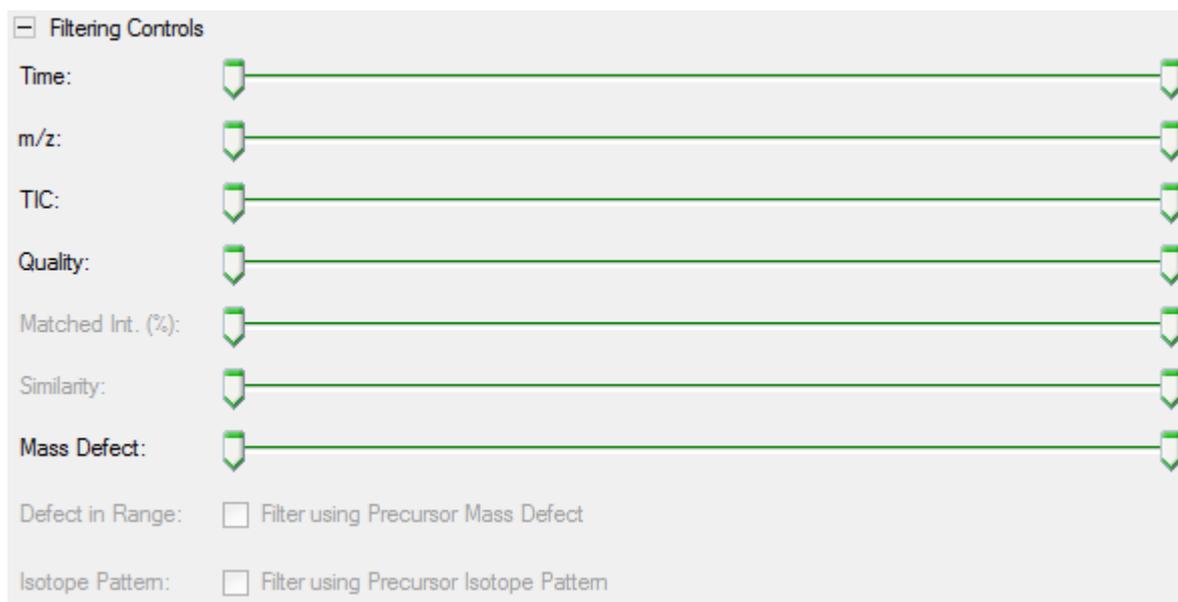
13. スペクトルから矢印を削除し、**Expands active pane to fill window(アクティブなペインを拡大しウィンドウ全体に表示する)** アイコンをクリックします。その後、等高線図をズームアウトしデータポイント全体を表示します。

IDA データにフィルタを適用する

IDA Explorer では、可視化データや処理データの量を減らすのに役立つ多数のフィルタが用意されています。これらは、このセクションで説明されています。

1. 等高線図にて、**Expands active pane to fill window(アクティブなペインを全画面表示にする)** アイコンをクリックした後、ツールバーのすぐ下にある **Filtering Controls(フィルタ管理)** アイコンをクリックします

図 D-44 : IDA データにフィルタを適用する



このウィンドウにあるスライダとチェックボックスはそれぞれ異なるフィルタ条件に対応しており、これらを使用して表示するデータの量を調整できます。保持時間(**Time**)および m/z 比(**m/z**)は、ここで選択するか、あるいは表示を拡大することで選択できます。

他のフィルタは、次のとおりです。

- **TIC**: MS/MS スペクトル内で、ピーク合計強度の制限幅を設定します。これは通常、ノイズの多い小さなスキャンを除去するために使用されます。
- **Quality**: この値は、カウント 1 より大きい加算強度の端数です。すなわち、スペクトル品質の推定値として、ノイズに起因する可能性が低いことを表します。
- **Int 型と一致しています。(%)**: **Fragment Matching** の使用時に既知のフラグメントとニュートラルロスによって説明される加算強度の割合を評価します。
- **Similarity**: 基準スペクトルが設定されているときに利用できます。この機能は、基準スペクトル内の共通フラグメントおよびニュートラルロスに対応する加算強度の割合を測定します。[基準スペクトルを使用する](#) を参照してください。
- **Mass Defect**: 質量の小数部分について単一範囲を設定します。この機能は、代謝物を見つけるのに便利です。一般的な代謝変換(O、O2 など)ではプレカーサー分子からの欠損が大きく変わることはないため、その欠損に近い範囲を指定することで、存在し得る代謝物を特定できる場合があります。
- **Defect in Range**: ソフトウェアでは、単一の質量不一致・誤差の範囲だけでなく、異なる質量範囲に適用される不一致もいくつか定義することができます。このような範囲が定義されている場合は、このチェックボックスにより、フィルターを適用するかどうかを決めることができます。範囲は、**Options** ダイアログの **Mass Defect** タブで設定されています。
- **Isotope pattern**: このチェックボックスを使用すると、1 つ以上のアイソトープパターンのフィルタを MS 調査データに適用できます。すなわち、選択したプレカーサーイオンが目的のパターンを持つ場合にのみデータポイントが表示されます。これらのパターンは、**Options** ダイアログの **Isotope Pattern** タブに定義されています。

簡易フィルタにはそれぞれ 2 つのスライダが設けられており、範囲を定義することができます。いずれかのスライダをダブルクリックしてから、値を直接入力します。

2. スライダーの設定を様々な値で試すと体験できるのですが、**TIC** (例えば 1e3) や **Quality** (1) の各値は、最低値に設定した場合でも劇的な効果があります。下位の **TIC** フィルタを 2e3 に、および他のフィルタをすべて 0 に設定します。

プロモクリプチンの質量不一致・誤差は約 0.22 であるため、単純な代謝物の値がこれよりも高くなったり、あるいは相当地に低くなったりする可能性はほとんどありません。

3. **Mass Defect** フィルタを 0.18~0.23 に設定すると、残存ピークの中に 4.5 分かつ 650 Da の付近に存在するものがあり、この領域には m/z 比が 652.2211 である 1 つのデータポイントのみが存在することがわかります (4.40 分)。
4. **Filtering Controls** の隣にあるアイコンをクリックして、フィルタ管理ツールを隠します。

ヒント! 表示されるフィルタを変更するには、フィルタ領域で右クリックして **Filters** を選択してから、適切なものを選択します。

基準スペクトルを使用する

1. 等高線図で、652.2211/4.40 (プロモクリプチン自体) のデータポイントをクリックし、**Set Reference Spectrum (for Similarity Scoring)** (基準スペクトルの設定 (類似性スコアリング向け)) アイコンをクリックします。

注: この際は、最初のグラフを拡大表示する必要がある場合もあります。

2. **Set Reference Spectrum (for Similarity Scoring)** (基準スペクトルの設定 (類似性スコアリング向け)) アイコンの横にある矢印をクリックし、**Overlay Reference Spectrum** が選択されていることを確認します。
3. 654.2185/4.39 のデータポイントをクリックします。

基準スペクトルが定義され、かつ **Overlay Reference Spectrum** が選択された状態では、スペクトルと同時に基準スペクトルも表示されるため、それらを簡単に比較することができます。この方法では、遷移したピークとそうでないものを簡単に見分けることができるため、代謝物を扱うときに便利です。

ここまでの手順で、質量が低い臭素アイソトープのプレカーサーイオンの MS/MS スペクトルを基準スペクトルに設定し、質量が高い同位体のスペクトルを重ね合わせたため、画面の表示は前述の 668.2 ピークと同じようになっています。すなわち、2 Da 離れたピークの存在によって、臭素を含むイオンを同定できます。

4. **Expands active pane to fill window** (アクティブなペインを全画面表示にする) アイコンをクリックし、[Contour Plot] から **Table** (**Filtering Controls** のすぐ下) をクリックします。

注: すべての列を表示する必要がある場合、スペクトル ペインを表の下に移動させます (ドラッグ アンド ドロップを使用してペインのアイコンを再配置させます)。

表にはグラフィカル エクスプローラと同じ情報が表示されていますが、追加の詳細情報も含まれています。また、フィルタ管理の操作も反映されるため、2 つのビューに同じスペクトルが含まれています。表はスペクトルビューにリンクされており、行を選択するとスペクトルが更新され、列ヘッダーをクリックすると行が並び替えられます。

基準スペクトルが定義されている場合は、次の 2 つの列が追加表示されます。**Delta m/z** は、基準スペクトルのプレカーサー質量と、行に相応するスペクトルのプレカーサー質量の差異を表示します。**Similarity** は、両スペクトルの類似性を示します。

5. **Delta m/z** をクリックして表を並び替えると、約 15.995 (酸素の質量) 離れたいくつかのピークと、31.990 (O₂) にある 1 つのピークの存在に気付きます。これらは、ヒドロキシブロモクリプチン代謝産物であると考えられます。
6. 関連するスペクトルを表示するには、表の行をクリックします。

注: これらのスペクトルは高い類似性値を有しており(プレカーサー質量が 2 Da 高いスキャンでも同様の類似性が認められる)、これらは ⁸¹Br を含むイオンを基に得られています。

概要

このセクションでは、以下のタスクについて説明されました。

- IDA エクスプローラのグラフィカルなビューと表形式のビューを使用して IDA ファイルを調べる。
- 必要性を判断した後、関連するスペクトルを結合する。
- TIC フィルタと質量不一致・誤差フィルタを使用して、表示されるスペクトルの数を絞り込む。
- それらを比較できるように、スペクトルを重ね合わせる。
- 基準スペクトルを定義し、表を基に可能性の高い代謝物を発見する。

これらの操作は、IDA データ処理の基本です。

次のセクションでは、ブロモクリプチンの MS/MS スペクトルを用いた構造ツールの使用方法について説明します。

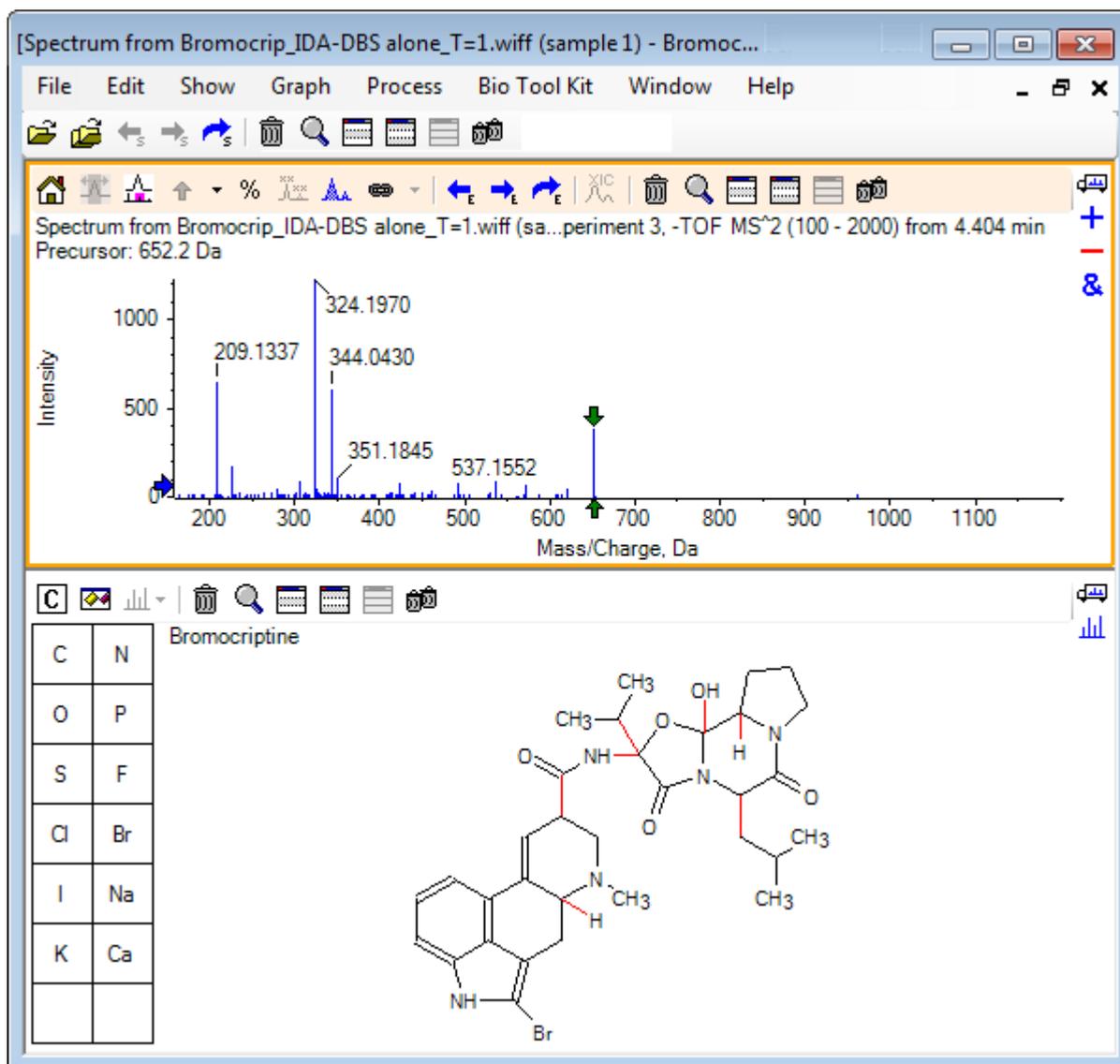
構造ツールで作業する

ソフトウェアには、イオンの質量を構造体 (.mol ファイルとして保存) にリンクし、生物変換が起こり得るサイトを探索するためのツールが含まれています。

MS/MS スペクトルに構造をリンクさせる

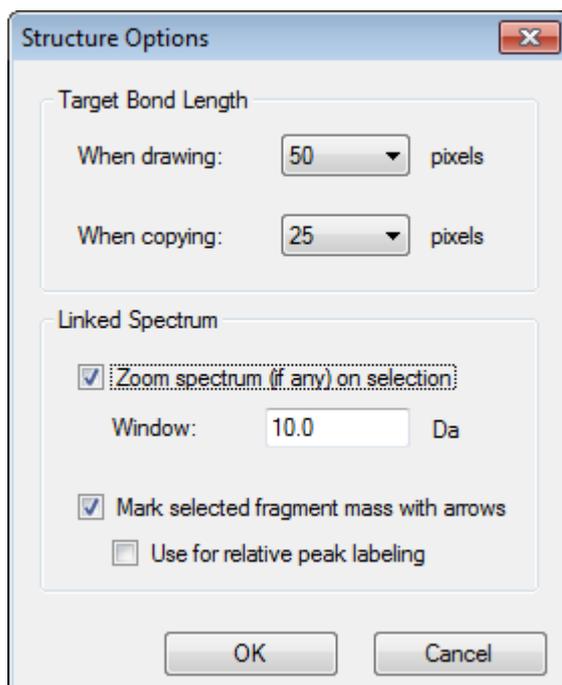
1. ブロモクリプチンの MS/MS スペクトル (652.2211/4.40) の位置を確認します。[IDA Explorer を使用する](#) を参照してください。
2. 等高線図で **Hides all other panes** (他のペインをすべて削除する) アイコンをクリックし、スペクトルのみが表示されるようにします。
3. **File > Open Mol File** をクリックします。
4. **Select Mol File** ダイアログで **Bromocriptine.mol** ファイルを選択し、**Open** をクリックします。インストールされたデータファイルの場所については、[構成](#) を参照してください。スペクトルの下に新しいウィンドウが表示され、構造とツールを表示します。

図 D-45 : プロモクリプチンの構造



5. 構造ペインで **Show options dialog** をクリックします。 **Zoom spectrum (if any) on selection** と **Mark selected fragment mass with arrows** の各チェック ボックスがオンになっていることを確認し、**OK** をクリックします。他のパラメータを変更する必要はありません。

図 D-46 : [Structure Options ダイアログ



構造ペインを作成したときにスペクトルがアクティブ状態にあったため、スペクトルと構造は自動的にリンクされます。**Displays a spectrum for selection** アイコンを適切なスペクトルにドラッグすることで、スペクトルを手動で構造にリンクさせることができます。

構造ペイン内でマウスをドラッグすると、線(投げ縄)がカーソルに追従します。これにより、構造の全体または一部を選択できます。選択した構造は太字で描画されます。リンクされたスペクトルがあるため、選択された下部構造の質量の周囲領域を表示するようにズームやスクロールすることができます。

6. 分子全体を投げ縄で囲みます。そうすると、表示が変わって m/z 比 652.2177 のピークが示されます。これは $(M - H)^-$ イオンに対応します。

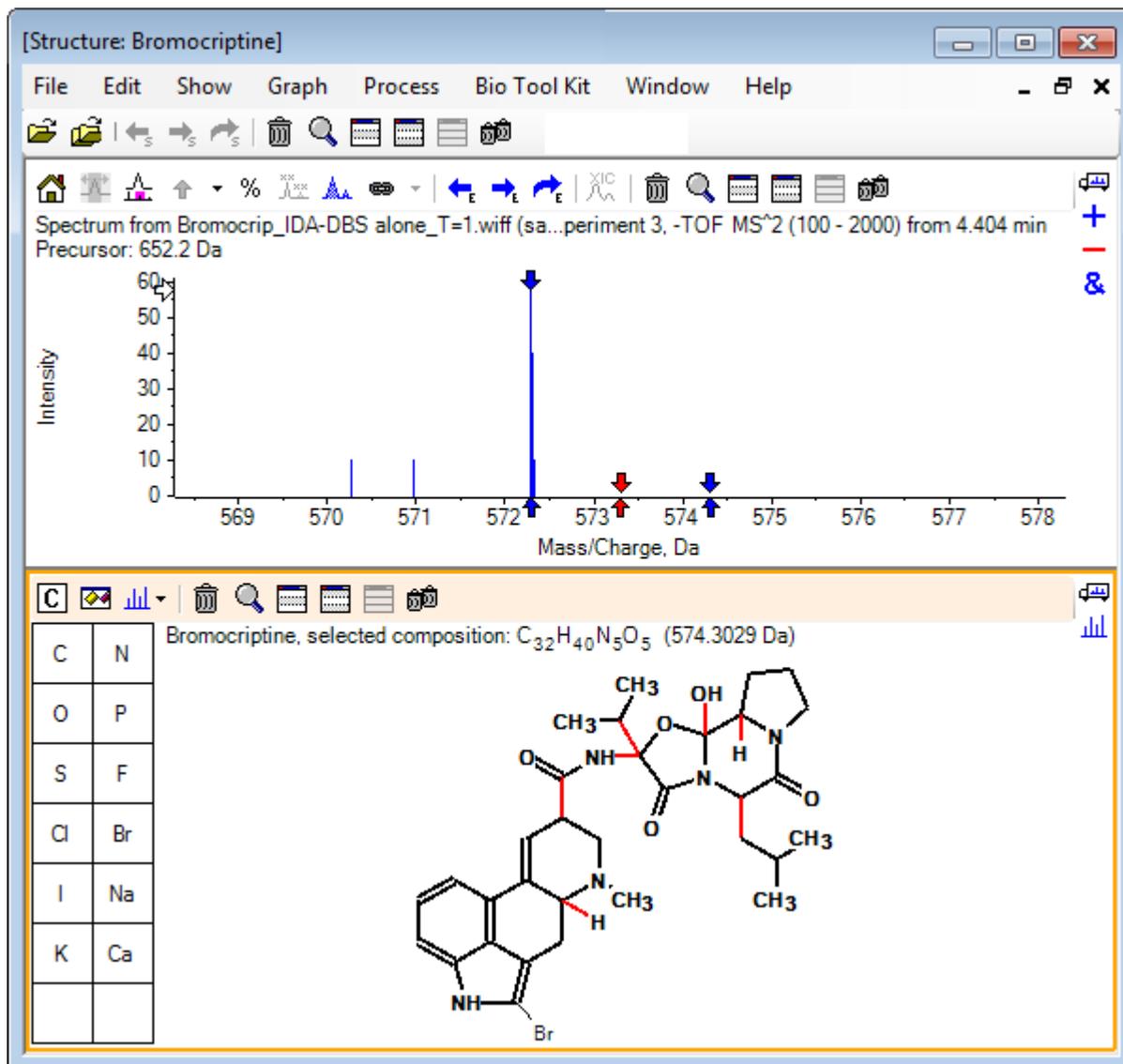
Mark selected fragment mass with arrows チェック ボックスがオンになっていたため、ピークの上下に赤い矢印が描かれます。この矢印は、選択された領域に相応するイオンの予想質量(データが負の領域にあるため $(M - H)^-$ になる)を示します。

注: 構造ペインのタイトルは、選択範囲に相応する元素組成と中性化合物の質量(つまり、653.2213 Da の質量を持つ $C_{32}H_{40}N_5O_5Br$)を示します。

Mark selected fragment mass with arrows が選択されており、かつ構造ペインで何も選択されていない場合は、652.2177 のピーク上に緑色の矢印が描画されます。この背景には、緑の矢印は現在の選択の補数を表しており、選択されていない状態では補数が全体の分子となることがあります。

7. 分子全体(臭素原子を除く)を選択します。図 D-47 を参照してください。

図 D-47 : プロモクリプチンの構造



注: 臭素原子のみが通常のフォントで表示され、構造ペインのタイトルが組成 $C_{32}H_{40}N_5O_5$ と質量 574.3029 Da に変わります。スペクトルでは、赤の矢印は選択した構造の予想質量(すなわち、 $(M - H)^-$ 分子イオンの質量から臭素の質量を除いた質量)を示します。また、左右に 1 Da 離れた位置にも矢印が表示されます。フラグメンテーション中は、追加の水素原子の増減が一般的に発生します。ソフトウェアでは、そうした可能性がある壊れた各結合に対して、「+1」と「-1」の青い矢印を 2 個一組で描画します。この例では壊れた結合が 1 つのみ存在しているため、ちょうど 2 つの矢印が追加されています。

スペクトル内の実際のピークは、これらの矢印のいずれかに対応します。これは、余分な水素原子(すなわち、HBr)が失われたことを示します。そのため、イオンの質量は $(M - H - HBr)^-$ に対応します。

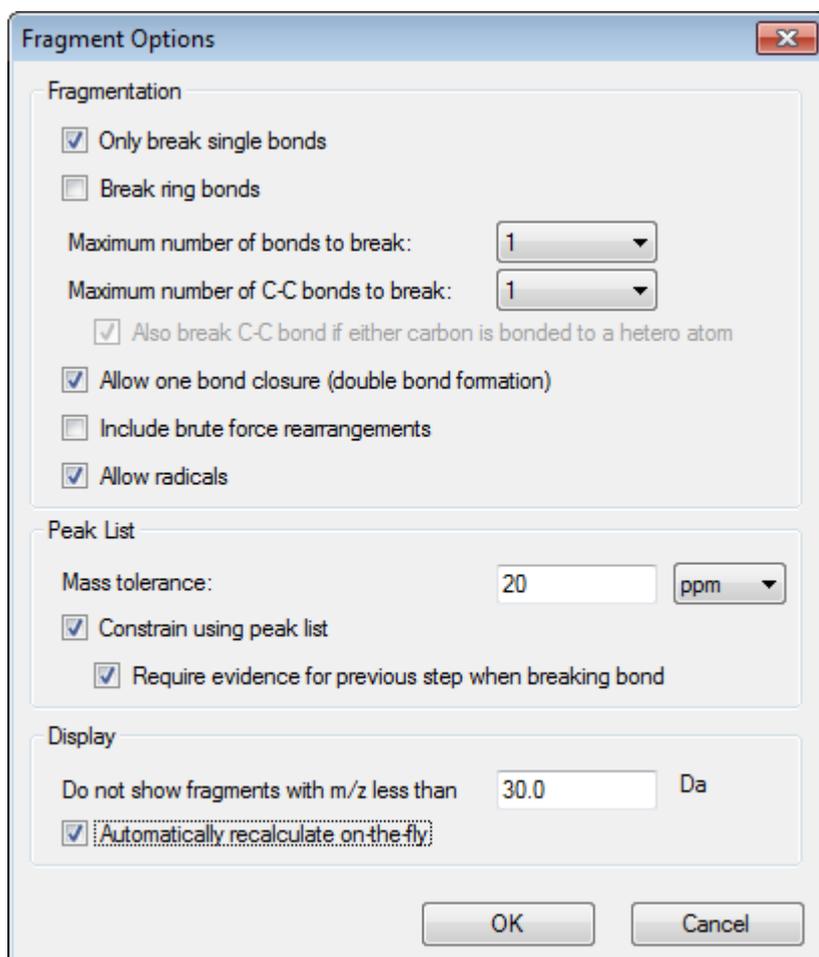
フラグメントの処理

ソフトウェアは断片イオンの予測機能を含んでおり、この機能では、結合を破壊し水素原子を追加または除去することにより、種の集団を生成することができます。

注: この予測は算術のみに基づくものであり、化学的論理は使用されていません。生成される断片が過大評価される傾向はありますが、断片を分析する上で便利なツールです。

1. 構造ペインがアクティブの状態では、**Show > Fragments Pane** をクリックします。**Fragment Options** ダイアログの設定次第では、プログレスバーが表示されます。図 D-48 を参照してください。
2. **Show options dialog** アイコンをクリックし、図 D-48 に従ってパラメータを設定し、**OK** をクリックします。

図 D-48 : Fragment Options ダイアログ



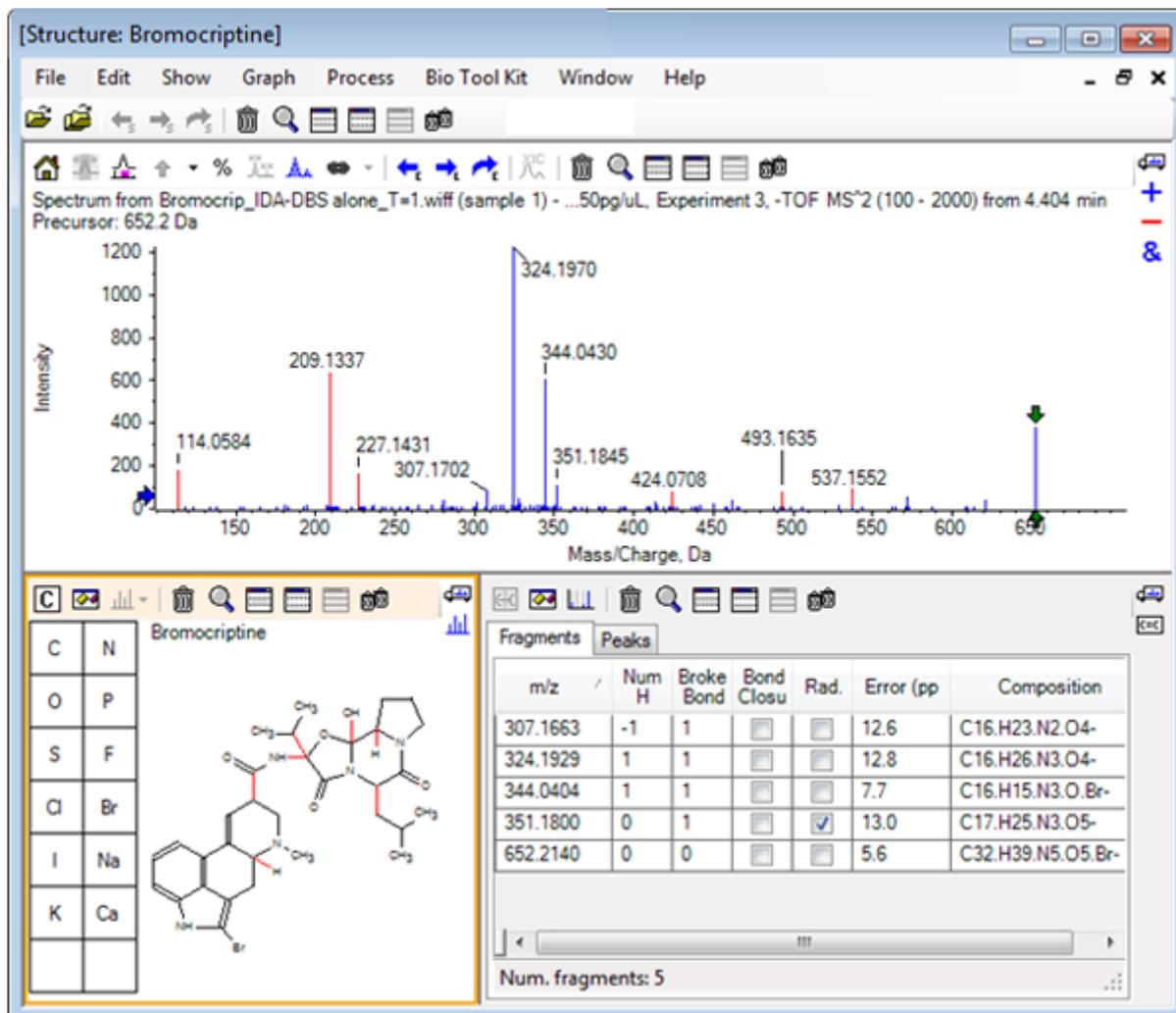
一連のシンプルな断片が生成されるようにオプションを設定します。その後、観測されたイオンを説明する必要に応じて、壊れた結合の数と種類を増やします。破壊される結合数を増やすと、プログラムの動作が遅くなり、意味の無いおそれのあるフラグメントが大量に生成されます。

Fragment Options ダイアログのパラメータの大部分は *Reference Guide* に説明されていますが、以下の点に注意してください。

- **Automatically recalculate on-the-fly** チェックボックスにチェックを入れた場合、スペクトルに何らかの変更(別のものへ切り替える、パラメータを調製する、など)を加えたり、選択を変更したりした場合はフラグメントが再計算されます。これは通常は望ましい動作ですが、多くのフラグメントを生成するようにオプションを設定した場合は、分析速度に影響を与える可能性もあります。このオプションを使用しない場合は、**Fragment** アイコンをクリックします。
- **Constrain using peak list** では、適切な公差でスペクトルのピークと一致した断片のみソフトウェアに表示されます。
- **Require evidence for previous step when breaking bond** のオプションは、複数の結合が切断されたときにのみ有効です。プログラムでは、最初の結合をまず切断した後に、生成された断片の結合を破壊するかどうかを決定します。このオプションを選択した場合、断片をさらに破壊する前に、各断片に相当するイオンが存在している必要があります。

これらのパラメータを使用した場合、表示画面は [図 D-49](#) のようになります。ただし、設定された(ラベル付けもされた)しきい値を超えるピークのみが考慮されているため、画面は若干異なる場合があります。

図 D-49 : プロモクリプチンの構造

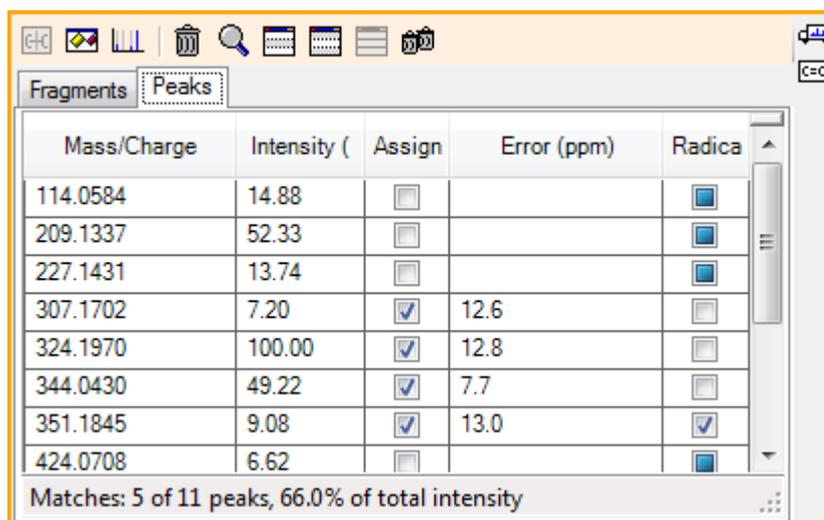


注: スペクトルのピークは着色されており、[Fragments] タブに表示されたピークに一致する、割り当て済み(青色)と未割り当て(赤色)の各スペクトルが判別できるようになっています。

フラグメントのペインには、2 つのタブがあります。

- **Fragments:** この例では、リストの長さが短くなっています。その理由は、指定された条件下で生成されるフラグメントがそれほど多くないことに加えて、**Constrain using peak list** チェックボックスが選択されていることから、その中でもスペクトルでピークが一致するものがわずかしかないためです。
- **Peaks:** スペクトル中のしきい値を超えているピークを一覧表示します。ピークの強度と、フラグメントに割り当てられているのかも示されます。割り当てられたピークについては、質量誤差も表示されます。

図 D-50 : [Fragments] ペイン

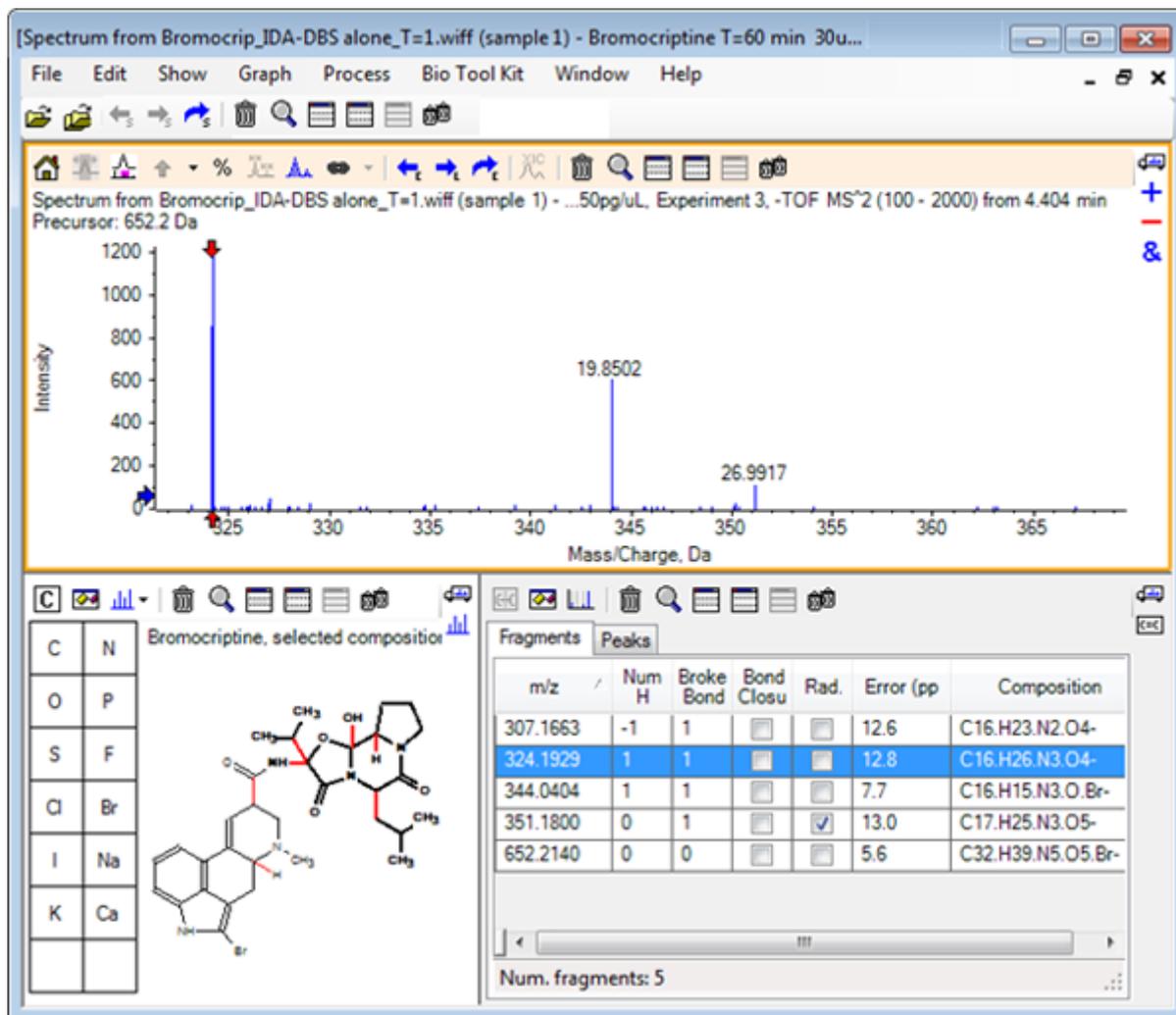


Mass/Charge	Intensity (%)	Assign	Error (ppm)	Radica
114.0584	14.88	<input type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
209.1337	52.33	<input type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
227.1431	13.74	<input type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
307.1702	7.20	<input checked="" type="checkbox"/>	12.6	<input type="checkbox"/>
324.1970	100.00	<input checked="" type="checkbox"/>	12.8	<input type="checkbox"/>
344.0430	49.22	<input checked="" type="checkbox"/>	7.7	<input type="checkbox"/>
351.1845	9.08	<input checked="" type="checkbox"/>	13.0	<input checked="" type="checkbox"/>
424.0708	6.62	<input type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>

Matches: 5 of 11 peaks, 66.0% of total intensity

3. **Fragments** タブで、 m/z 比が 324.1929 の行を選択します。ピークは赤い矢印でマークされ、予想質量であることを示しています。相当する下部構造は、構造ペインに太字で描かれます。

図 D-51 : Fragmentation ダイアログ



注: 構造ペインのタイトルに含まれる組成物と質量は、ニュートラルの質量ではなく、イオンの質量を反映するようになります。

- 他のフラグメントに割り当てられた構造を調べます。

これらはすべて中央のアミド結合に関連しており、可能性があるように見えます。このアミド結合は、分子の2つの周期的な部分を分離します。

注: 割り当てられた元素組成は、[基準スペクトルを使用する](#) で生成されたオーバーレイスペクトルと一致しています。そこでは、⁷⁹Br および ⁸¹Br を含む分子イオンのスペクトルを比較することによって、断片中の Br の存在が推定されています。

- 全質量範囲が表示されるように、スペクトルを拡大します。
分子の両側に対応する2つの主要ピーク(324.1970の m/z と 344.0430の m/z) が割り当てられており、青で描画されています。ただし、多くのピークがまだ割り当てられていません。
- Options** のダイアログを開き、**Maximum number of bonds to break** を 2 に変更します。

注: しきい値設定によっては、このオプションを変更することでいくつかの小さなピークが割り当てられることもあります。より大きなピーク(たとえば、 m/z 比が 114.0584、209.1337、227.1431 のものなど)は割り当てられません。スペクトルが赤の矢印に対してラベル付けされている場合は、構造ペインをクリックすることで、すべての選択を消去し、絶対質量値を表示することができます。

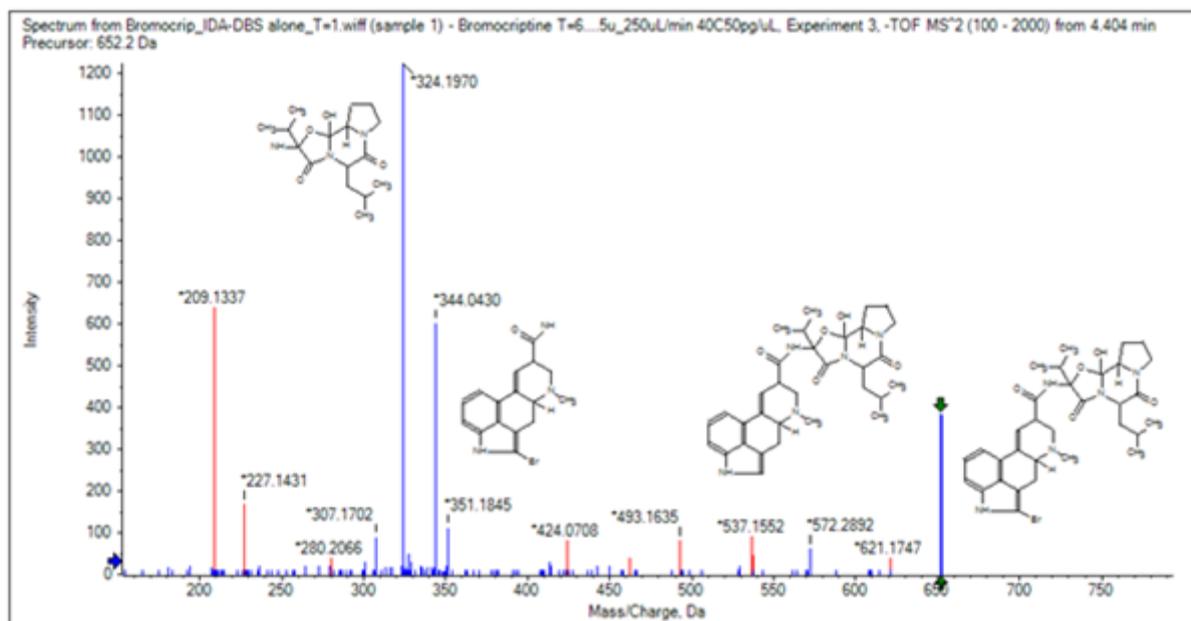
7. **Break ring bonds** チェックボックスをオンにし、**OK** をクリックします。
これにより、多くの付加的なイオンが一致します (m/z 比が 209.1337 および 227.1431 のものを含む)。**Fragments** ペインで新しい質量を選択して下部構造を強調表示すると、それらが分子の環状ペプチド部分にある環開裂に関連していることがわかります。これらのイオンは、この領域における代謝変換部位を決定するのに有用となることが予想されます。

スペクトルに下部構造を追加する

構造の一部を選択し、それらを使用してスペクトルに参考用の注釈を付けることができます。スペクトル ペインの大きさ次第では、構造ペインの **Options** ダイアログから、コピー時の **Target Bond Length** を調整します。

1. **Fragment Options** ダイアログの中で **Break ring bonds** のチェックボックスを外し、フラグメント数を減らします。
2. フラグメント ペインで、より豊富なイオンの 1 つに対応する行を選択し、対応する下部構造を強調させます。
3. 構造ペイン内をクリックします。
4. **Edit > Copy** をクリックします。
5. アクティブなスペクトル ペイン内を右クリックし、**Paste Image** をクリックします。
これにより、下部構造の画像がスペクトル ペインにペーストされます。
6. 画像を移動させるには、目的の場所までドラッグします。画像を完全に削除するには、画像を右クリックし、**Delete Image** を選択します。
画像はスペクトル(つまり、質量強度位置)にリンクされているため、スクロールやズームによって動かすことができます。
7. 他のフラグメント イオンについても、ステップ 2 ~ 6 を繰り返し、[図 D-52](#) に似た最終画像を生成します。

図 D-52 : 追加下部構造を持つスペクトル



8. **File > Print > Print Preview Window** をクリックし、下部構造の位置を確認します。一致したイオンは青色で描かれているため、対応する構造に簡単に関連付けできます。
9. 線などを追加するには、画像をコピーして描画プログラムに貼り付けます。

関連 MS/MS スペクトルで作業する

いくつかの用途では、変更された化合物(代謝産物など)のスペクトルを、プレカーサー化合物のスペクトルや構造と比較できると便利です。

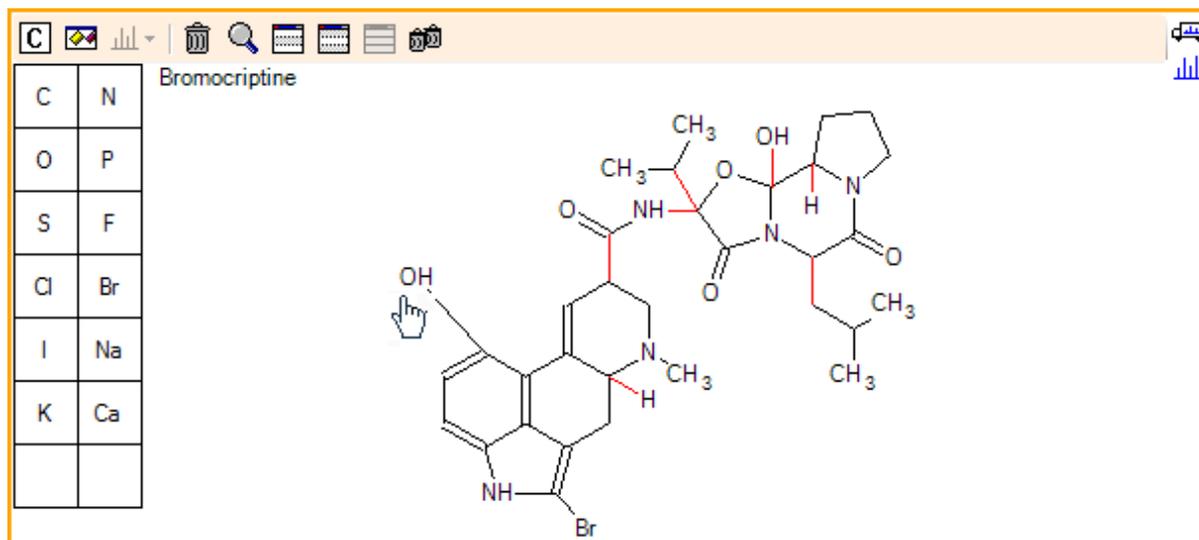
1. 再び等高線図を表示するには、IDA Explorer を使用します。668.2176 / 4.21 のピークを選択し、等高線図を非表示にします。

構造ペインとフラグメント ペインはスペクトルにリンクされているため、新しいスペクトルを反映するよう更新されています。ただし、構造体は依然としてプレカーサー化合物からのものであり、スペクトルは追加の酸素原子を有する化合物(質量は 16 Da 高い)から取得されています。多くの場合、一致するケースは依然として残っており、変化していない分子の部分を示します。ただし、この例では、重要なイオンはすべて一致しておらず、それらは赤で描画されています。

構造ペインには、くつかの簡単な描画ツールが含まれています。これらを使用すると、構造を変更し、一致を探することができます。

2. 構造ペインの左側には、要素記号と共にグリッドが表示されます。○ をクリックし、中心構造体に向けてドラッグします。原子が構造体に近い場合は、結合により接合されています。この結合は、構造体の近くでマウスをドラッグすると、カーソルの後を追いかけます。
3. 結合が構造(エルゴリン)の下部に描画されるように ○ シンボルをドラッグしてから、マウスのボタンを離します(たとえば、新しい原子をフェニル環上に配置します)。図 D-53 には、プロセスを示しています。

図 D-53 : 構造ペイン

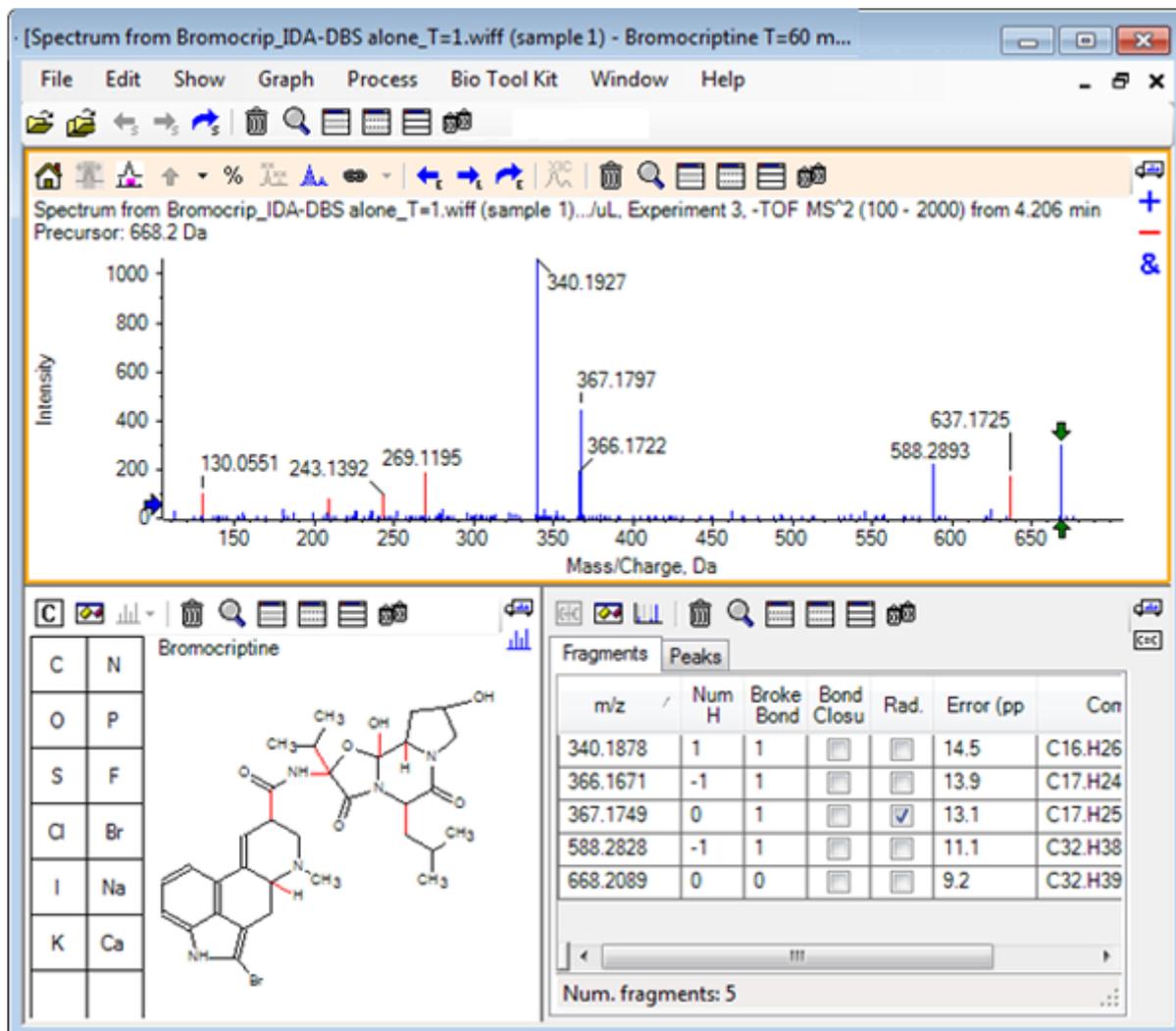


スペクトルが再び更新され、2つの一致が見つかったことを示します。1つは 668.2089 の分子イオンで、もう1つは HBr の損失に対応する 588.2828 のイオンです。これは、全体的な元素組成は正しくなったことを示唆しています。ただし、主要なフラグメントが一致しないという事実は、原子が分子の適切な部分に追加されなかったことを示唆しています。

- ここで追加した OH 基をクリックし、構造体の上部にあるピロリジン環にドラッグします。移動中の原子のみが太字で描かれていることを確認します。そうでない場合は、強調表示された下部構造全体を移動させます。

図 D-54 に示すように、これにより 340.1927、366.1722、および 367.1797 でイオンが整合されます。対応する下部構造は、プレカーサー化合物のスペクトルに一致する、ヒドロキシル化されたイオンであることが判明します。

図 D-54 : プロモクリプチンからのスペクトル



整合できない低質量ピークの多くは、プレカーサーのスペクトルに存在していたか、またはアルゴリズムによる共有結合の破壊を許可した際に整合されたヒドロキシル当量となります。ただし、637.1725 に高質量イオンがあり、これはフラグメンテーションのステップの簡素さに起因する可能性が高く、まだ整合もされていません。

5. **Fragments** タブでは、668.2089 の行を選択します。これにより、この行がラベル付けされ、他のイオンはそれを基準にラベル付けされます。
これにより、637.1725 のピークはプレカーサー分子 (CH_3NH_2 または CH_3O の可能性がある) からの 31.0364 の損失に対応することがわかります。このイオンはプレカーサー分子のスペクトルで観察されていなかったため、構造の環状ペプチド部分にあるメチル基のいずれかで発生した水酸化に由来している可能性が最も高いと思われます。
6. 構造ペイン内を 2 度クリックして構造の選択を解除し、新しい OH 基を、構造の右側にあるいずれかのメチル基までドラッグします。
7. **Fragment Options** ダイアログを開き、**Mass tolerance** を 30 ppm に設定し、**OK** をクリックします。

これにより、637 イオンが整合されます。フラグメント ペインからこの行を選択すると、イオンはメキシ部分の損失に相当する可能性があることが表示されます。

8. **[Fragment Options]** ダイアログを開き、**[Break ring bonds]** のチェックボックスを入れ、**[OK]** をクリックします。
これにより、フラグメントの大部分は整合されます。ただし、209 のイオンは、3 個の結合 (2 個はプレカーサー分子に必要で、1 個は追加の酸素原子の損失のために必要) を破壊することが許可されている場合にのみ整合できます。

注: [Fragments] ペインで、一部の質量 (637.1905 など) について複数の行が表示されます。各行は、一致する可能性がある別々のフラグメントに対応しています (3 個の結合を破壊することを許可した場合はさらにフラグメントの数が増えます)。[Fragments] ペインの [Peak] タブには、質量精度、破壊結合の数、フラグメントがラジカルかどうかなどの組み合わせに基づいて、最もよく一致していると判断されたものだけが表示されます。この例では、整合する可能性が最も高い組み合わせは、プレカーサー化合物から生成される可能性もあった (実際には観察されなかった) 断片に対応しています。そのため、[Fragments] タブに表示される追加オプションには、一見判別しにくい整合可能性が表示されるため役立ちます。

概要

このセクションでは、以下のタスクについて説明されました。

- 構造を .mol ファイルにより入力した後、スペクトルにリンクする。
- 構造の一部を選択し、それに対応する質量ピークがあるかどうかを判断する。
- 断片ペインを生成し、シンプルな断片を観察するためのパラメータを設定する。
- **Fragments** および **Peaks** の各タブを操作し、一致する組成物、下部構造、および質量ピークを表示する。
- **Fragment Options** では、設定を変更することで、より複雑なフラグメンテーション経路を可能にする。
- スペクトル ペインに下部構造を追加する。
- 構造を変更し、代謝産物のような関連分子のフラグメンテーションを検討する。

一般的には、シンプルな断片化プロセスから開始し、観測されたイオンを説明する必要がある場合は追加のフラグメンテーションのオプション (結合の追加、共有結合) を使用することをお勧めします。これは、断片化イオンは一般的に一連のステップで断片化するという事実と一致します。複数の結合を一度のステップで集中して破壊するのではなく、シンプルなフラグメントが最初に形成されます。もちろん、シンプルなフラグメントは不安定になり直後に細分化することもあるため、それを観察できない場合もあります。また、多くのフラグメンテーションのステップを実行すると処理時間もそれに比して長くなり、完了までに時間がかかります。

関連分子を比較する際は、基準スペクトル (プレカーサー分子) に変更形態を重ね合わせた後、構造ペインまたはフラグメント ペインにビューをリンクさせると便利です。ビューは、アクティブ スペクトルを切り替える際に更新されます。ただし、オーバーレイの表示では、色分け次第では一致したイオンとそうでないイオンを区別するのが難しい場合もあります。そのため、ソフトウェアやビューの操作に慣れるまでは、単一のスペクトルで作業することをお勧めします。

複数のサンプルを分析する

分析を進める際は単一のサンプルを使用するのが一般的ですが、複数のサンプルを比較するか可視化することで追加の情報が得られる場合もあります。このセクションでは、2つのサンプルについてソフトウェアで利用可能なツールの一部について説明し、その後は複数のサンプルの場合についても取りあげます。

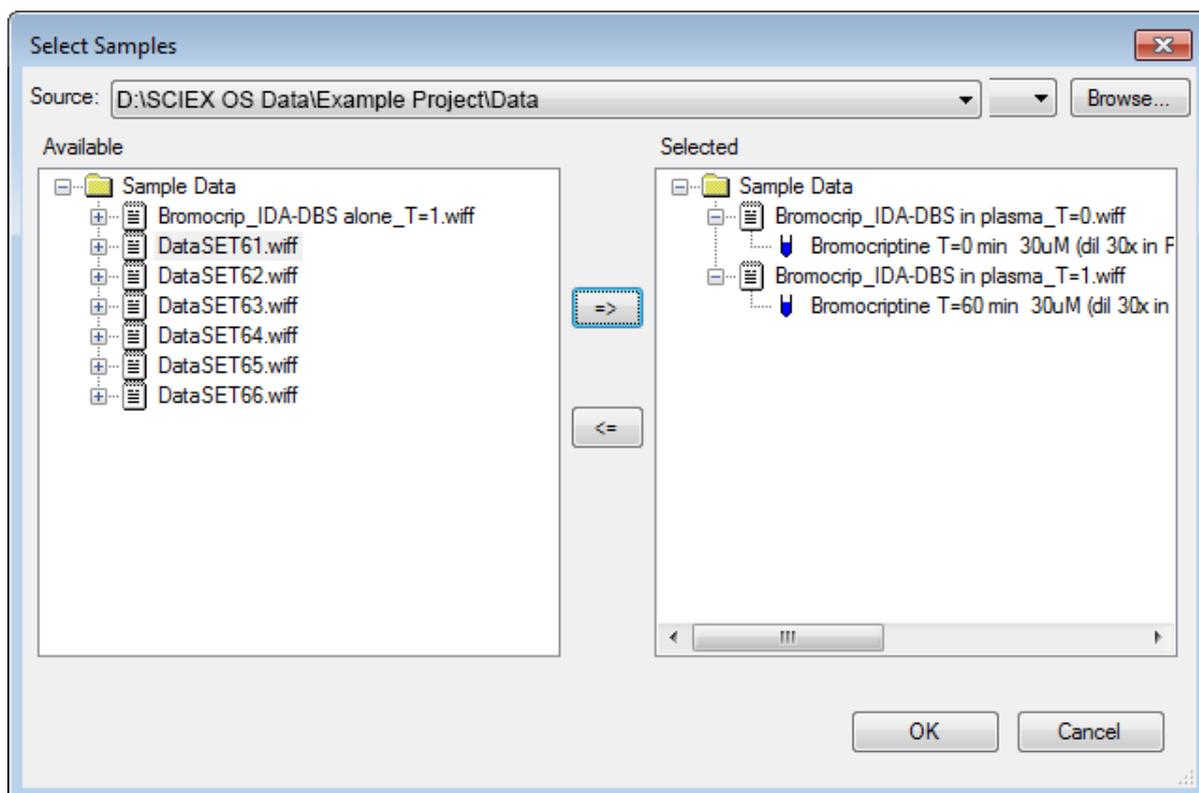
2つのサンプルを分析する

一般的なワークフローでは、異なる条件で得られた2つのサンプルを比較し、変更を特定します。例えば、医薬品の投与後には、2つの異なる時点からのサンプルを比較します。この例(T = 0 時間、T = 1 時間)で比較するデータは、血漿に調製したラットの肝臓マイクロソームを用いたブロモクリプチンのインキュベーションからのものです。

開始する前に、開いているウィンドウをすべて閉じます。

1. **File > Open Multiple Samples** をクリックし、サンプルデータを含むフォルダを参照します。
2. **Bromocrip_IDA-DBS in plasma_T=0.wiff** および **Bromocrip_IDA-DBS in plasma_T=1.wiff** の各ファイルを選択し、ファイルをウィンドウの右側にドラッグします。
3. **OK** をクリックします。

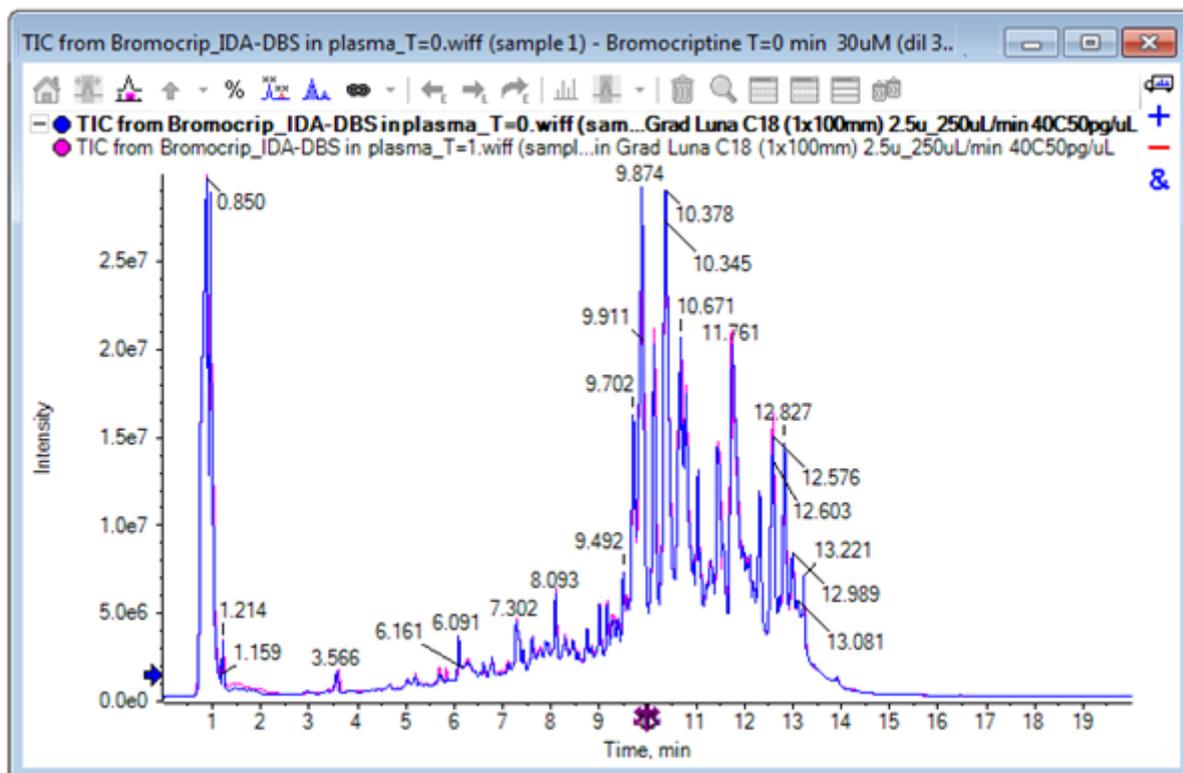
図 D-55 : 複数のサンプルを選択する



単一の IDA ファイルを開くと、調査スキャンとディペンデントスキャンが別々の TIC として表示されます。それとは対照的に、複数の IDA ファイルを使用すると、すべてのサンプルについて

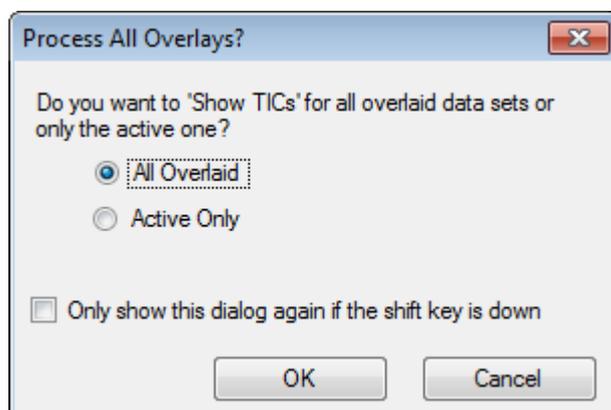
全データが単一の TIC に表示されます。この場合、[図 D-56](#) に示すように、2 つの TIC が存在します。

図 D-56 : TIC



4. **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)** をクリックし、**Select Experiment** ダイアログを開きます。
5. **Period 1, Experiment 1 - TOF MS (100 - 2000)** を選択し、**OK** をクリックします。

図 D-57 : [Process All Overlays] ダイアログ



重ねたトレースが処理されるたびに表示される **Process All Overlays** ダイアログでは、すべてのトレースを処理するか、またはアクティブのトレースのみを処理するかを選択できます。以降

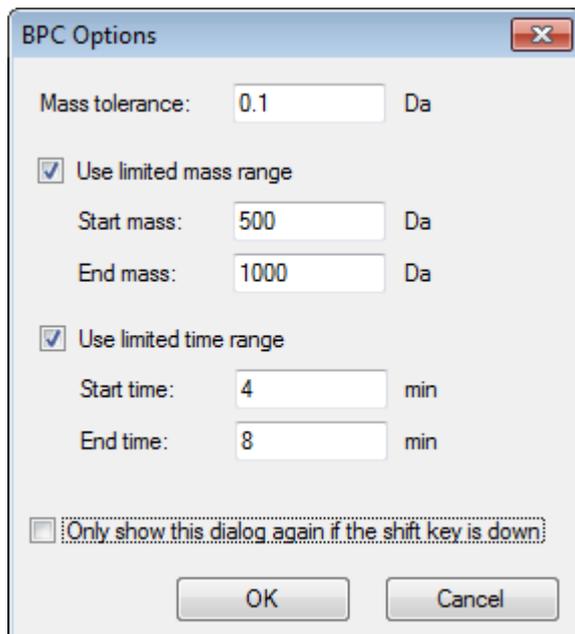
の操作はすべてのトレース(サンプル)に影響を与えるため、すべてのトレースを処理すると便利です。

6. **All Overlaid** を選択します。
7. **Only show the dialog again if the shift key is down** を選択し、この選択をデフォルトのアクションに設定します。
8. **OK** をクリックします。
調査 TIC のオーバーレイを含むペインが生成されます。このクロマトグラフィーは非常に再現性が高く、代謝物のピークが強いため、いくつかはクロマトグラムの拡大表示や比較によって見つけることができます(6分前後の領域を調べてください)。ただし、通常は追加の作業が必要になります。より容易に比較できるビューを生成するには、いくつかの方法があります。この例では、ベースピーククロマトグラムを使用します。

注: **File > Open Heat Map TICs from Wiff** をクリックすると、最初に重ねクロマトグラムを表示することなく、ストリップビューを直接生成することができます。

9. 最初の TIC ペインを非表示にし、**Show > Base Peak Chromatogram(BPC)** をクリックします。
10. **BPC Options** ダイアログの中で、必要に応じて  **D-58** の値と一致するように設定を変更し、**OK** をクリックします。

D-58 : [BPC Options] ダイアログ



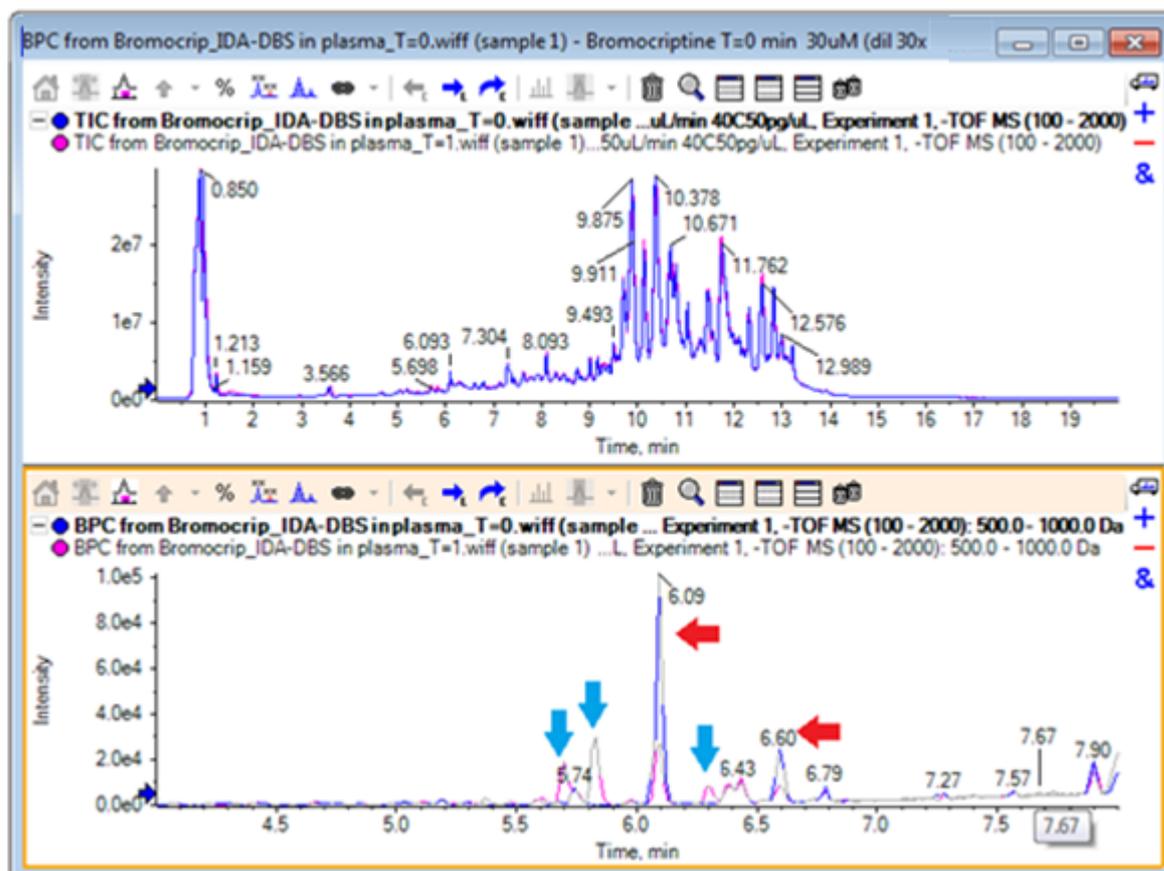
ベースピーククロマトグラムは、各スキャンにおける最大ピークの強度を保持時間の関数としてプロットすることで構築されます。追加情報を提供するため、このダイアログで指定した質量許容範囲を超えてベースピーク質量が変化した場合に、各トレース スイッチは通常色と灰色の間で切り替えを行います。

必要に応じて、対象となる質量範囲を制限することができます。これにより、ノイズの多いバックグラウンド ピークに起因するアーチファクトを回避し、保持時間範囲を設定して処理を高速化

することができます。プロモクリプチンの質量は約 652 であることが判明しているため、単純な代謝物は 500 の m/z 比を超えることはありません。

11. **Process All Overlays** ダイアログで **All Overlaid** オプションが選択されていることを確認し、**OK** をクリックします。
新しいペインに BPC が表示されます。これは、元の TIC と比べ、はるかに簡単かつ手軽に比較することができます。

図 D-59 : BPC



T = 0 のサンプル(青)と比較して、1時間のサンプル(ピンク)で減少したように見えるピーク(赤い矢印)が2つ存在しています。これらは、プロモクリプチン(6.09分)および異性体に相応します。また、T = 1のサンプルには存在する一方で、T = 0のサンプルには存在しないピーク(青の矢印)も3つ存在しています。これらは潜在的な代謝産物です。

注: BPC は非常に便利な場面もありますが、(選択した質量範囲で)最も強いイオンの挙動のみが反映されます。ベースピークにならない質量ピークは絶対に表示されないため、サンプル間の違いを特定する際は他のツールを使用する必要があります。

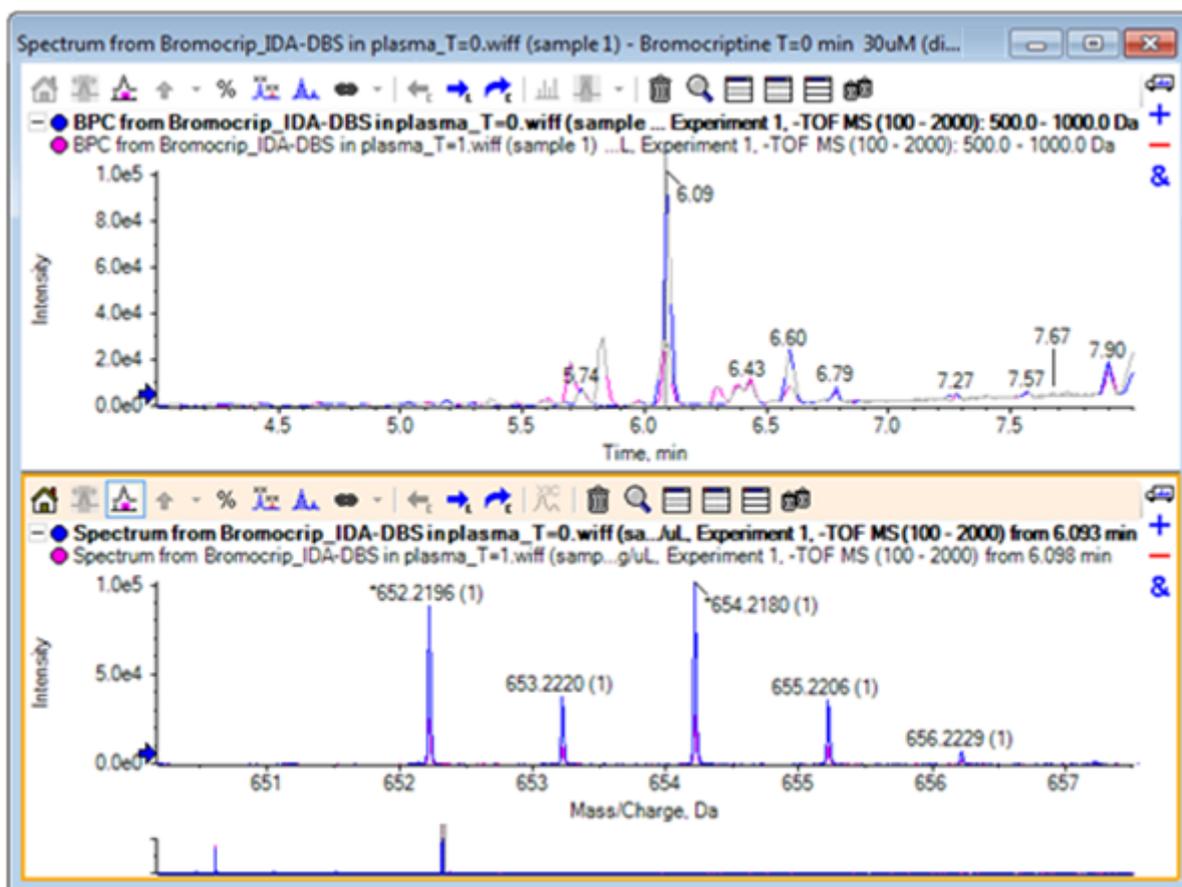
12. TIC ペインを非表示にします。
13. BPC ペインで 6.09 分の部分をダブルクリックします。
14. **Process All Overlays** ダイアログ内の **All Overlaid** を選択し、**OK** をクリックします。
これにより、2つの重ねスペクトルが生成されます。

15. スペクトル ペイン内をクリックして拡大表示し、652 の m/z 比の周辺にあるアイソトープクラスターを表示させます。図 D-60 を参照してください。

スペクトルペインに2つのサンプルのスペクトルが重ね合わせて表示されるため、両者を簡単に比較できます。この例では、T = 1 時間のサンプル(ピンク)における強度は、T = 0 時間のサンプルよりも明らかに小さくなっています。

このような分解能の高いデータを表示する場合、概要グラフは非常に有用です。この方法では、スペクトル全体を表示しつつ、詳細を確認することができます。

図 D-60 : 652 の m/z 比付近のアイソトープクラスター



16. [Chromatogram]ペインで、スペクトルの時間を示す行にカーソルを移動します(以前はダブルクリック)。
 17. カーソルが両端矢印に変わったら、約 5.8 分のピークにドラッグします。

スペクトルは、拡大表示質量範囲を引き続き示します。この範囲では、ノイズと小さなピークのみが含まれています。メイン ウィンドウに大きなピンクのピークを表示するには、以下の黒い矢印で示した概要グラフでピンクの長方形をドラッグします。マウスを離すと、ビューは再び初期値に戻ります。

図 D-62 では、Label all overlaid traces(すべての重ねトレースにラベルを表示する)アイコンが選択されていました。

図 D-61 : BPC とスペクトル

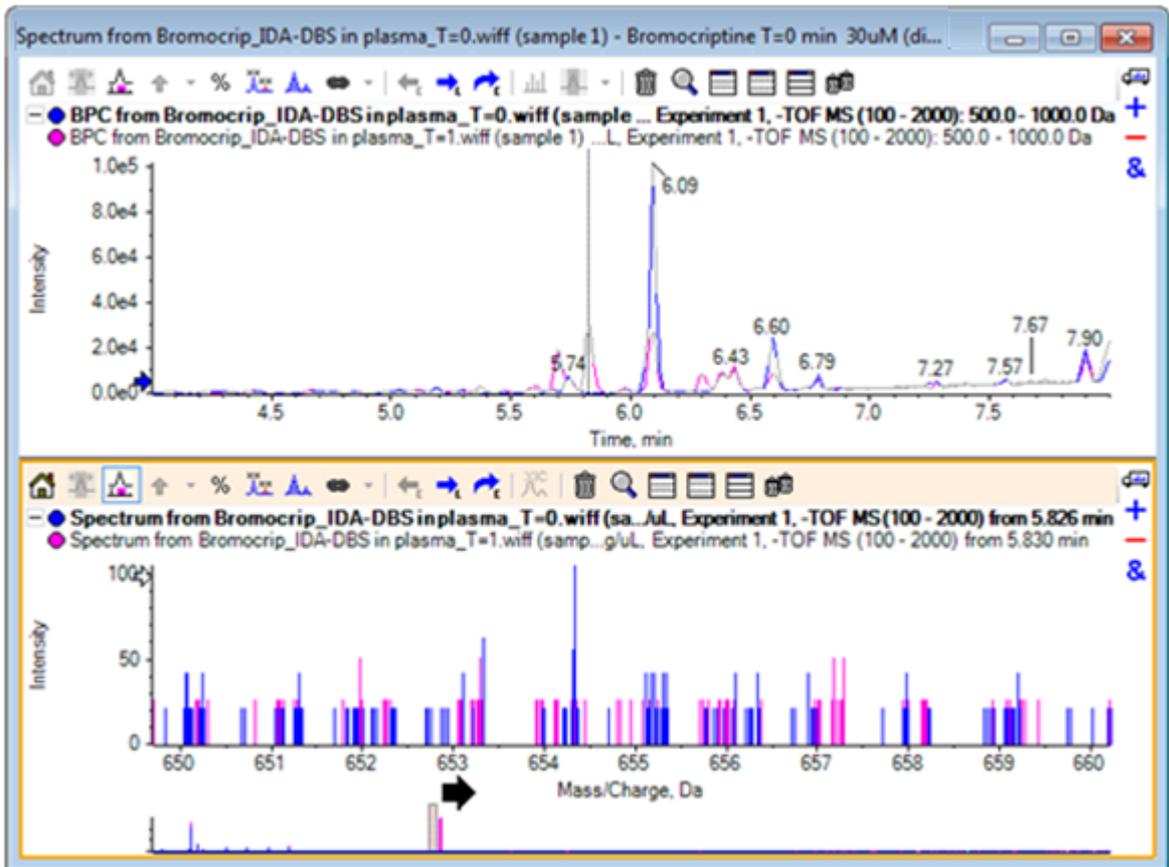
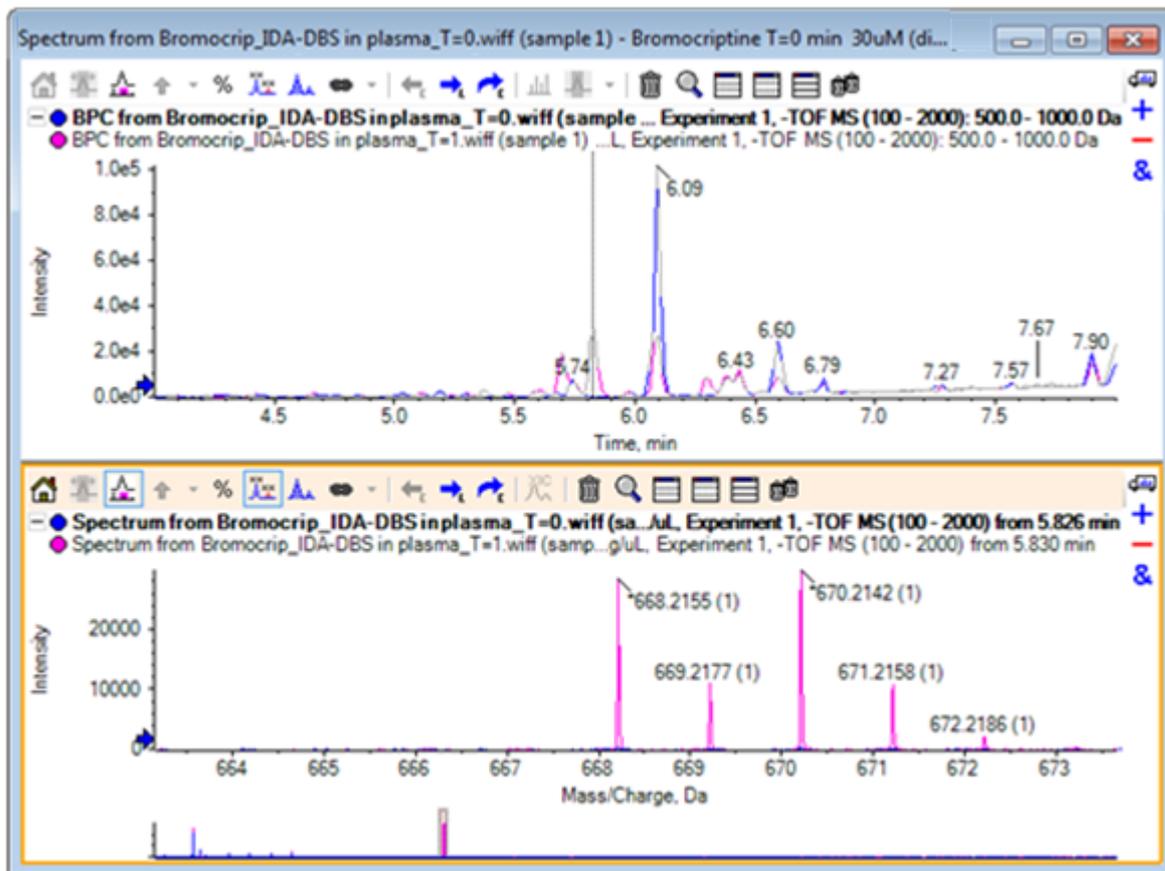


図 D-62 : [Label all overlaid traces] のオプションを適用した BPC とスペクトル



これらのピークは、T = 0 のサンプルには存在しません。

18. 続行する前に、開いているウィンドウをすべて閉じます。

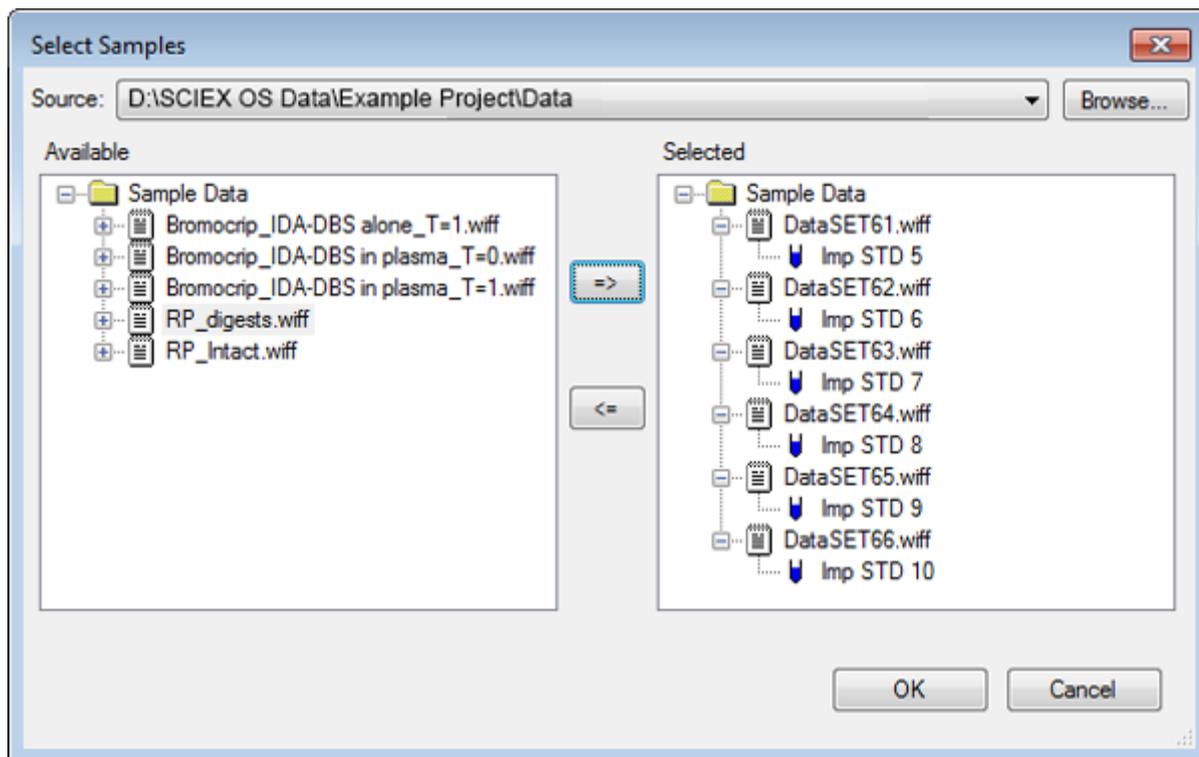
複数のサンプルを処理する

2 つ以上のサンプルを重ね合わせた場合、ウィンドウが煩雑になり、差異を基に正しいサンプルと結合する作業が困難になることもあります。ソフトウェアには他のツールも含まれており、それらは多くのサンプルからのデータを表示する際に役立ちます。

この例で使用するデータセットは、6 つの異なるデータセットに対する不純物プロファイル分析を基にしています。

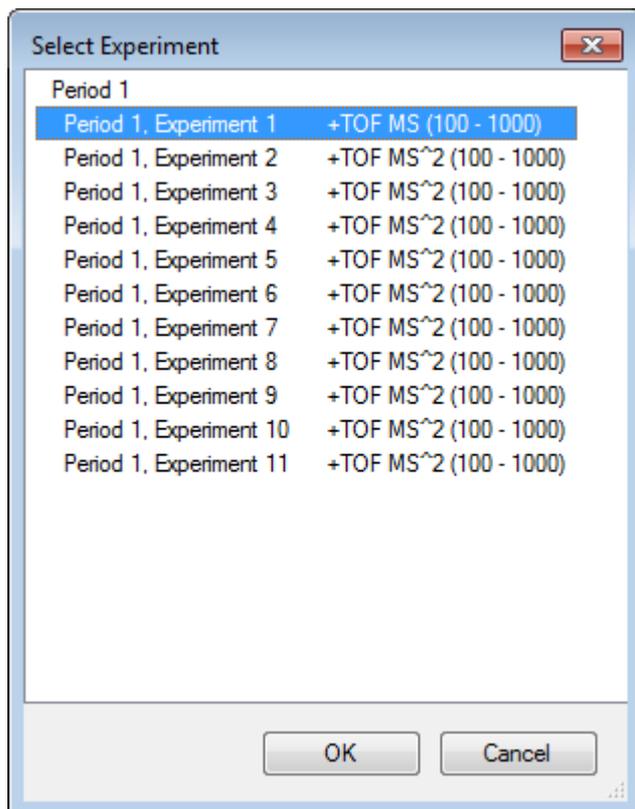
1. **File > Open Multiple Samples** をクリックします。
2. **DataSet61.wiff ~ DataSet66.wiff** までの各ファイルを選択し、**Selected** パネルに移動させます。

図 D-63 : 複数のサンプルを選択した状態



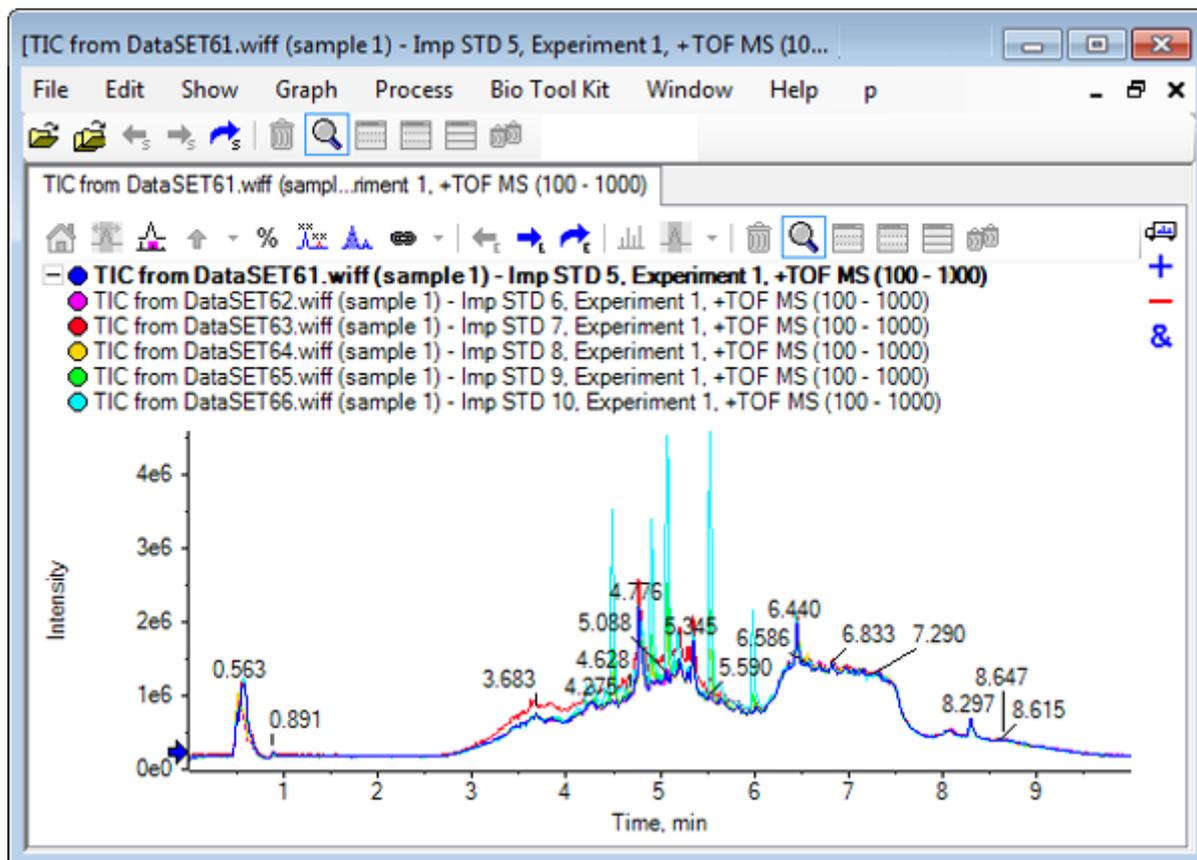
3. **OK** をクリックします。
4. **Show > Total Ion Chromatogram (TIC)** をクリックします。
5. **Select Experiment** ダイアログから、**Period 1, Experiment 1** を選択します。

図 D-64 : 実験サンプル ダイアログの選択



6. **OK** をクリックします。
7. **Process All Overlays** ダイアログで **All Overlaid** を選択し **OK** をクリックします。グラフは、ファイル内の各サンプルについて、TIC クロマトグラムオーバーレイを示します。

図 D-65 : DataSet61.wiff から DataSet66.wiff までの実験 1 に基づく、重ね合わせた TIC



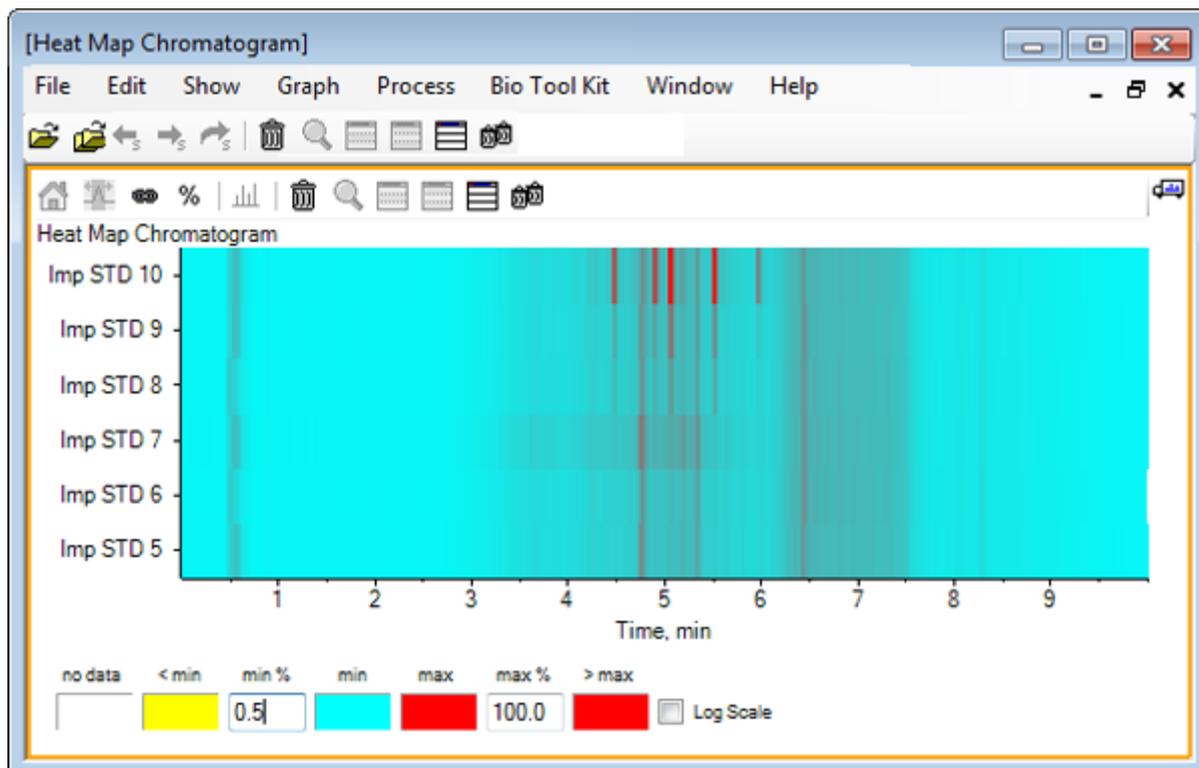
アクティブトレースのタイトルは太字で表示されます。このタイトルの左にあるアイコンをクリックすると、ヘッダを単一の行に折りたたみます。これにより、情報の表示領域を増やすことができます。

8. **Show > Overlaid Traces as Heat Map** をクリックします。表示されたペインでは、色の管理メニューから、**min %** が **0.5** に、および **max %** が **100** になるように設定します。

ヒント! 色の管理メニューが表示されていない場合は、右クリックから **Show Appearance Control** を選択します。

9. クロマトグラム ペインの内側をクリックし、**Hides all other panes** (他のペインをすべて削除する) アイコンをクリックします。

図 D-66 : ヒート マップ クロマトグラム



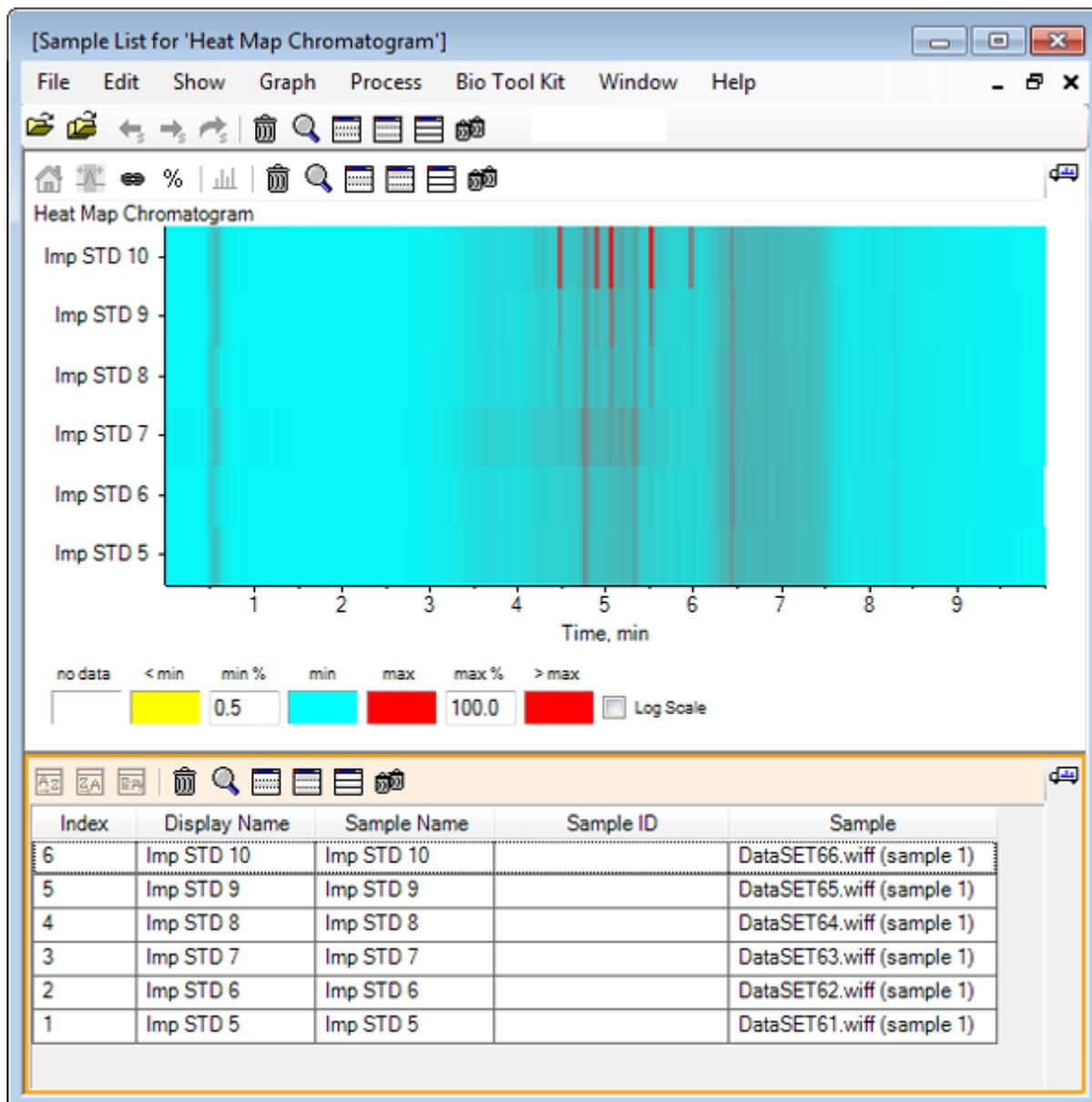
各サンプルは、単一の水平ストリップで表されます。これは、強度に応じて色分けされた TIC を示します。上記のカラースキームを使用した場合、黄色は、データが取得されなかった点か、または全サンプル中の最大値に対して強度が 0.5 % 未満の場所を表します。青色は 0.5% を、および赤色は最も強い信号を表します。

ウィンドウには 6~7 個のピーク(4.5 分から 6.5 分の間)が表示され、その反応は 6.5 分のピークを除いて異なります。

ピークの順序は、サンプルが取得された順序と同じです。そのため、これらは理想的ではない場合もあります。この例では、順序に問題はありません。

10. ペイン内で右クリックし、**Show Samples Table** をクリックします。最初は、サンプル表がヒートマップの右側に表示されます。ペインの右上にある **Drag and drop to rearrange the panes** (ドラッグアンドドロップ操作でペインの位置を変える) アイコンは、ペインをヒートマップの最後にドラッグし、表を元のペインの下まで移動させるときに使用します。

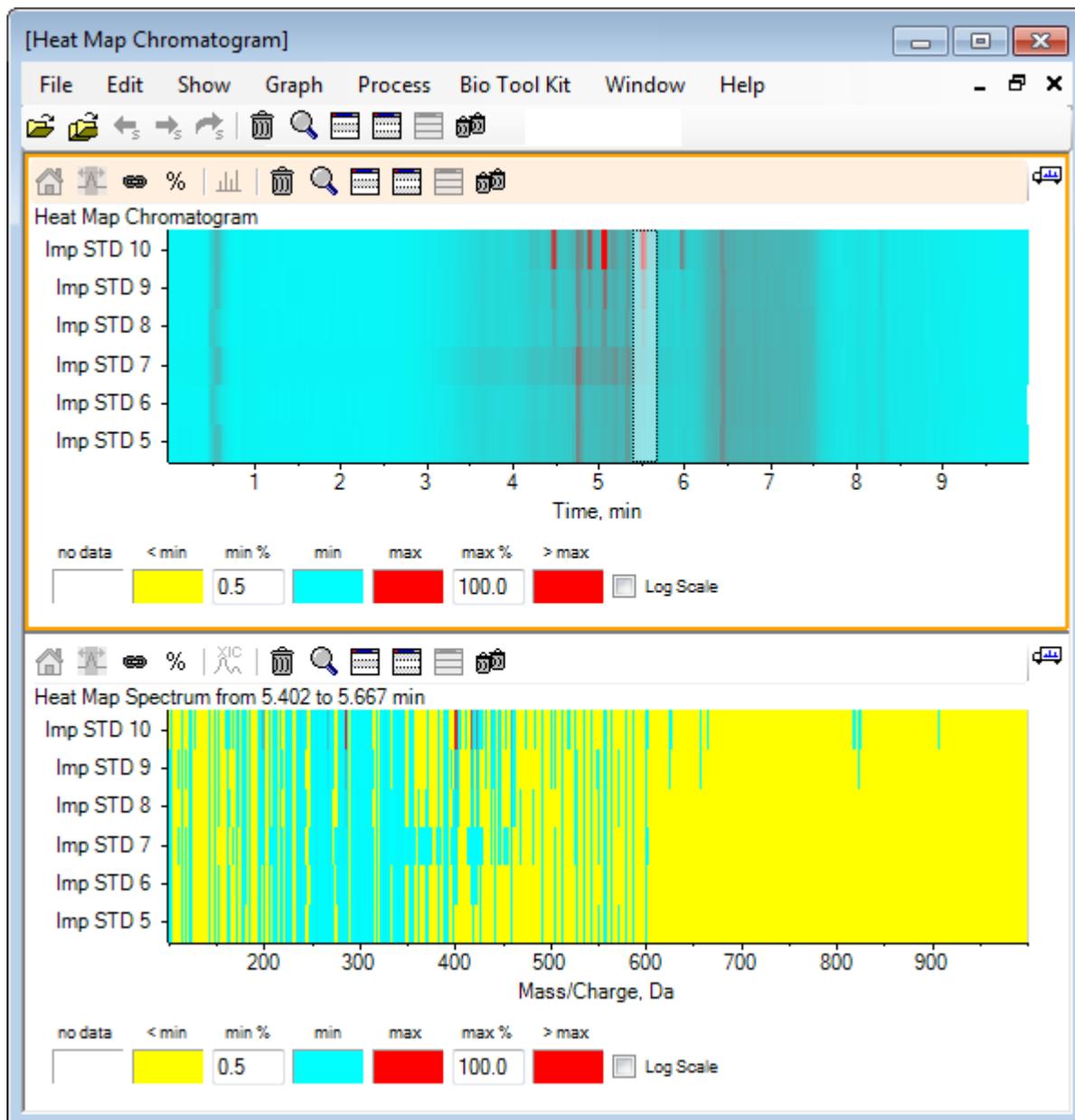
図 D-67 : ヒートマップ クロマトグラムのサンプル一覧



表には、各サンプルに関連する様々なテキストフィールドの列が含まれています。**Display Name** の列は編集可能ですが、他の列は読み取り専用です。すべての列は、表およびビューのサンプルを分類するために使用することができます。

- Imp STD 10 の 5.5 分の部分を囲むように選択し、その内側でダブルクリックします。新しいヒートマップスペクトルのペインが生成され、完全な質量範囲が X 軸上に示されています。

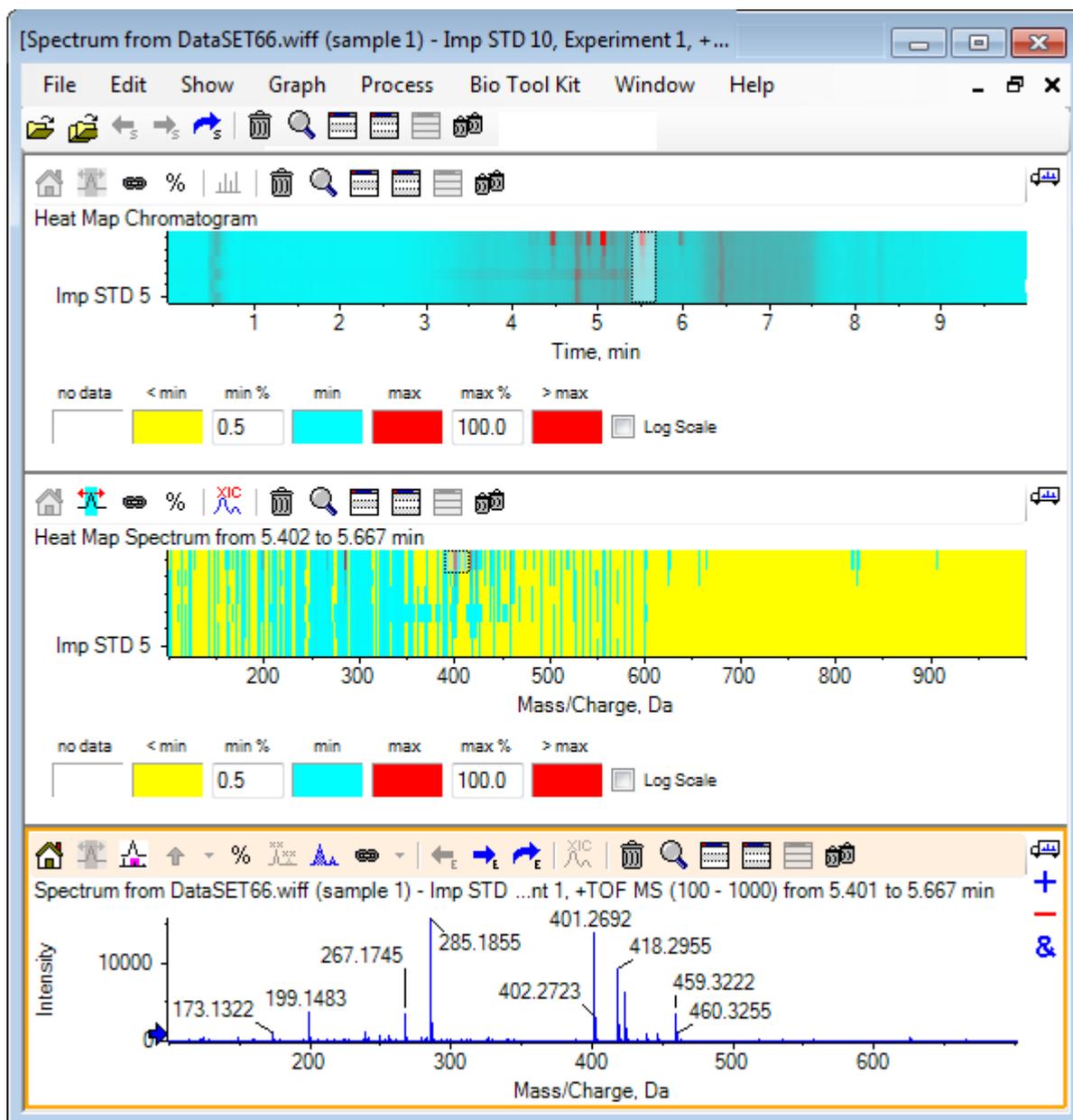
図 D-68 : ヒート マップ スペクトル



このスペクトルから、選択した時間領域において、いくつかの質量(400 の m/z から 460 の m/z の間)が強度増加の一因になっていることがわかります。

12. Imp STD 10 サンプルについて質量/電荷 Da 401 周辺の部分を選択し、右クリックして **Show Spectra for Selected Samples** を選択します。
これにより、選択したサンプルについてスペクトルが生成されます。その時点におけるスペクトルが表示されます。図 D-69 を参照してください。
13. ヒート マップ スペクトル内で質量/電荷 Da 401 周辺の質量をダブルクリックし、ヒートマップ XIC を生成します。

図 D-69 : スペクトル



概要

このセクションでは、以下のタスクについて説明されました。

- ソフトウェアで利用可能な、複数のサンプル ツールを使って作業する。
- 重ねクロマトグラムと、インタラクティブなスペクトルを持つ 2 つのサンプルを比較する。
- ヒートマップ ビューを用いて、複数のサンプルを比較する。

バイオ ツール キットの機能を使用する

このセクションでは、ソフトウェアの **Bio Tool Kit** メニュー項目から利用できるオプションの一部を説明します。

注: この機能にアクセスするには、バイオ ツール キット MicroApp 機能を有効にする必要があります。アクティベーションが完了するまでは、利用できるオプションが [Peptide Fragments (ペプチド断片)], [Add Manual Reconstruct Highlights (手動再構築マーカの追加)], および [Remove Manual Reconstruct Highlights (手動再構築マーカの削除)] に限られます。リリース ノート 文書の「Activate the Bio Tool Kit MicroApp Feature (バイオ ツールキットの MicroApp 機能を有効化する)」を参照してください。

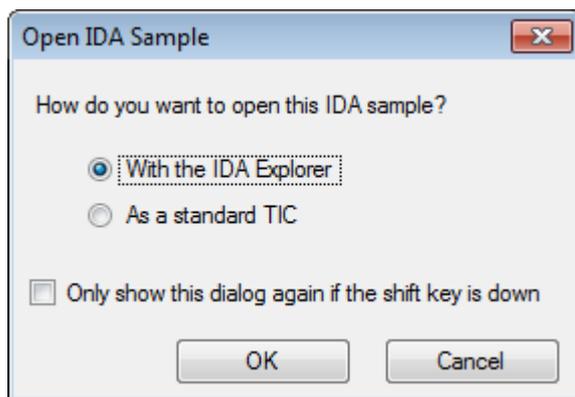
手動配列

消化タンパク質サンプルからの MS/MS スペクトル データを手動配列する場合は、このオプションを使用します。

1. メイン ツールバーから、**Open Sample** のアイコンをクリックします。
Select Sample ダイアログが開きます。
2. **Sample Data** フォルダがすでに選択されていない場合は、**Browse** をクリックして **Sample Data** フォルダに移動します。
3. **RP_digests.wiff** ファイルを選択し、**OK** をクリックします。

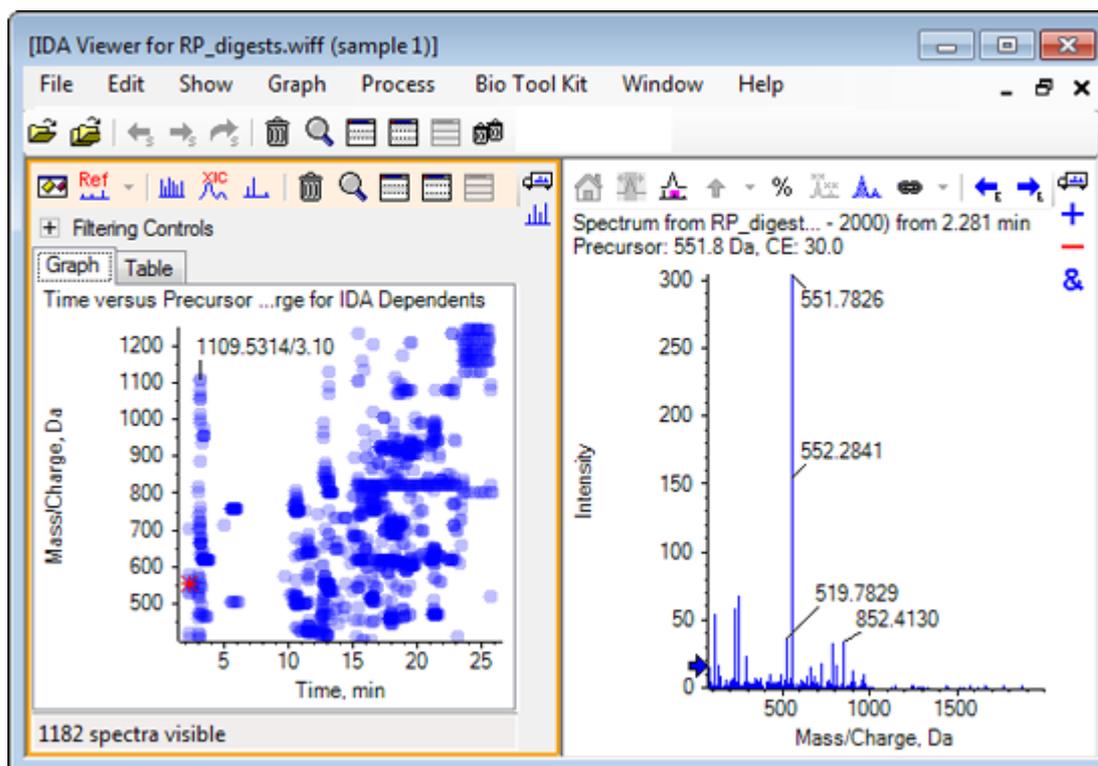
Open IDA Sample ダイアログが開きます。

図 D-70 : IDA サンプル ダイアログを開く



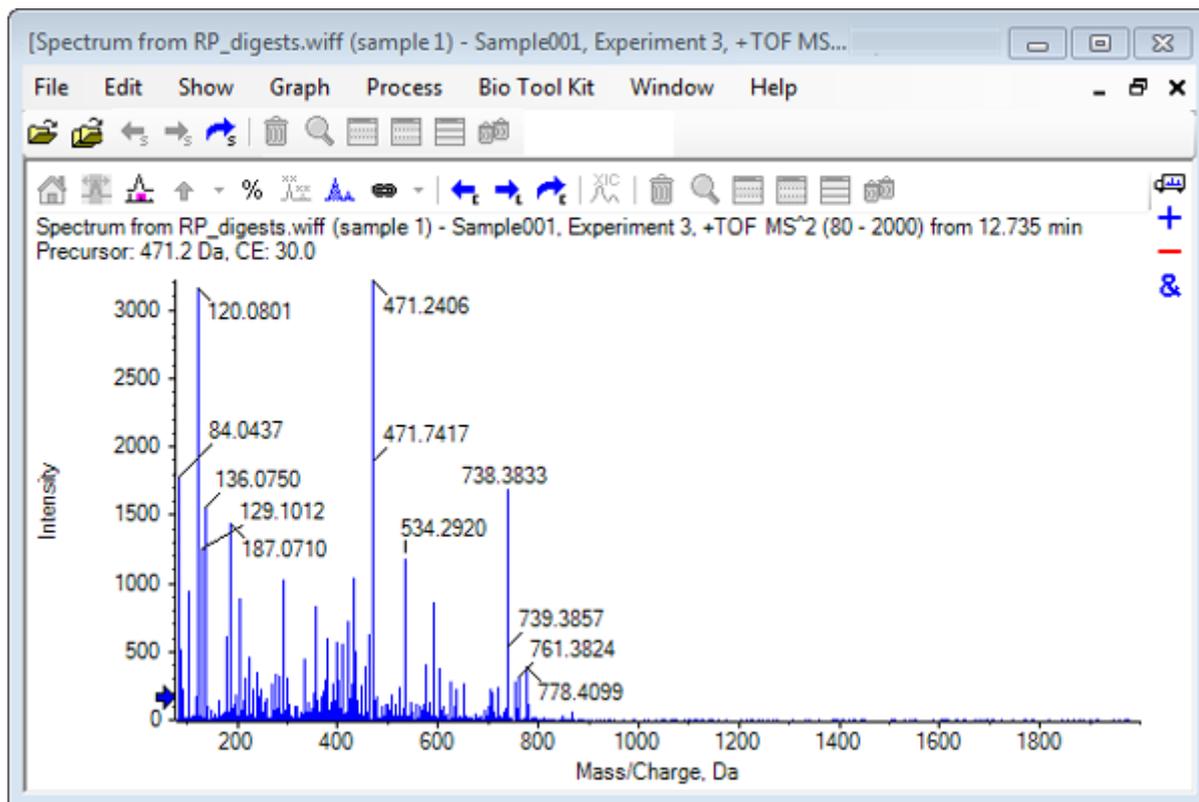
4. **With the IDA Explorer** オプションが選択されていることを確認し、**OK** をクリックします。

図 D-71 : RP_digests.wiff からのスペクトル



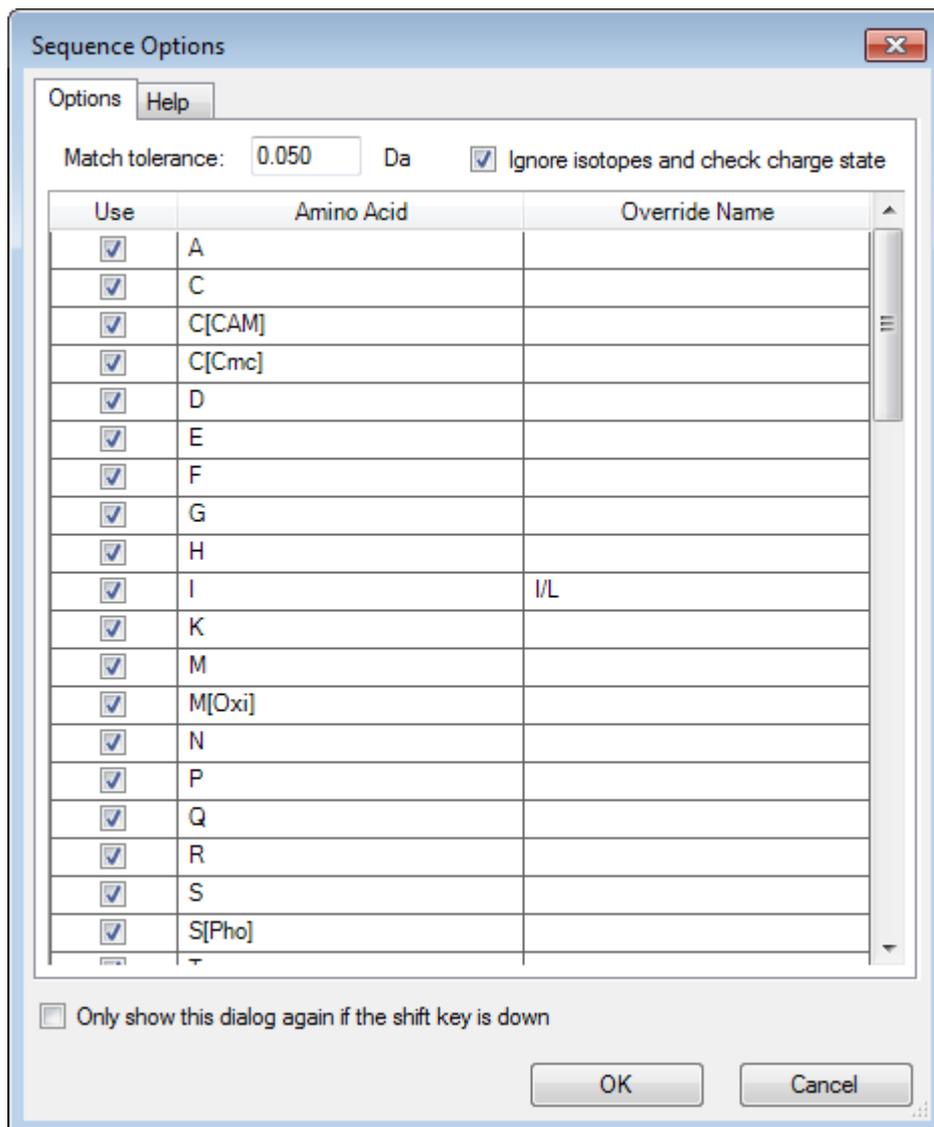
5. **Table** タブをクリックします。
6. m/z 471.2398 を **Time** 12.73 で選択します。
7. 構造ペインがアクティブの状態では、**Graph > Duplicate Graph** をクリックします。選択されたプレカーサー(471.2)について、新しい [Spectrum] ペインが開きます。[IDA Explorer] ペインと、それに関連する [Spectrum] ペインは削除して構いません。

図 D-72 : 保持時間(12.73)におけるプレカーサー(471.2398)のスペクトル



8. ラベルが **738.3833** のピークを選択します。
9. **Bio Tool Kit > Manual Sequence** をクリックします。
Sequence Options ダイアログが開きます。

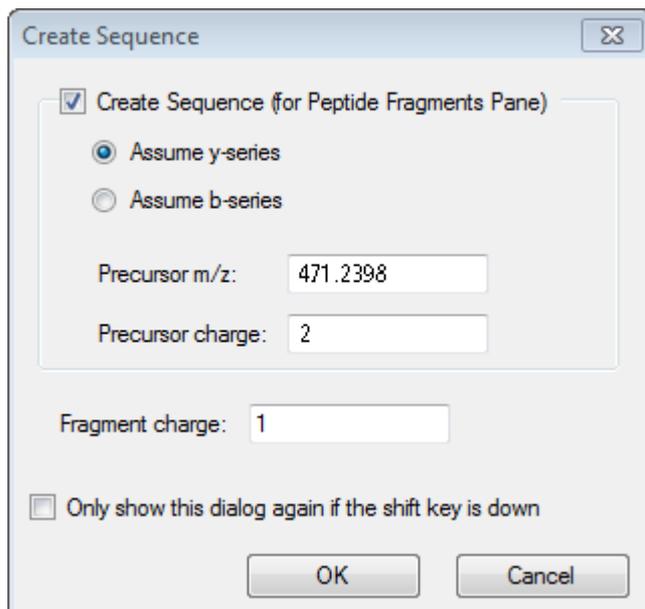
図 D-73 : [Sequence Options] ダイアログ



注: [Ignore isotopes and check charge state] のチェックボックスが選択されている場合、ソフトウェアで後続のアミノ酸を提案した際に、アイソトープおよび誤った電荷状態にあるピークはすべて無視されます。

10. **OK** をクリックします。
Create Sequence のダイアログが開きます。

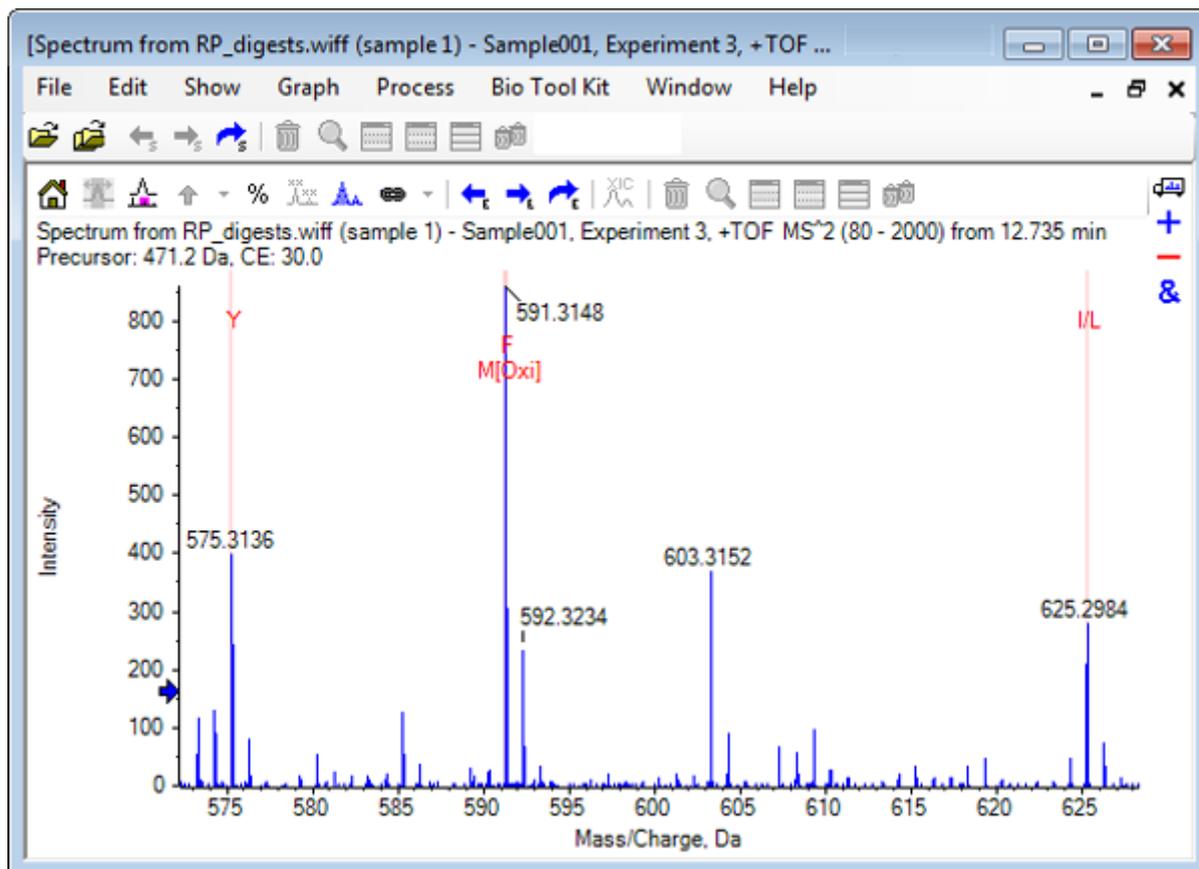
図 D-74 : [Create Sequence] ダイアログ



注: このダイアログでは、ファイルに対して手動配列を行った後、Y 系列と B 系列のイオンと電荷状態に関する仮定を変更し、データに対して最も整合性の高い仮定を選ぶことができます。

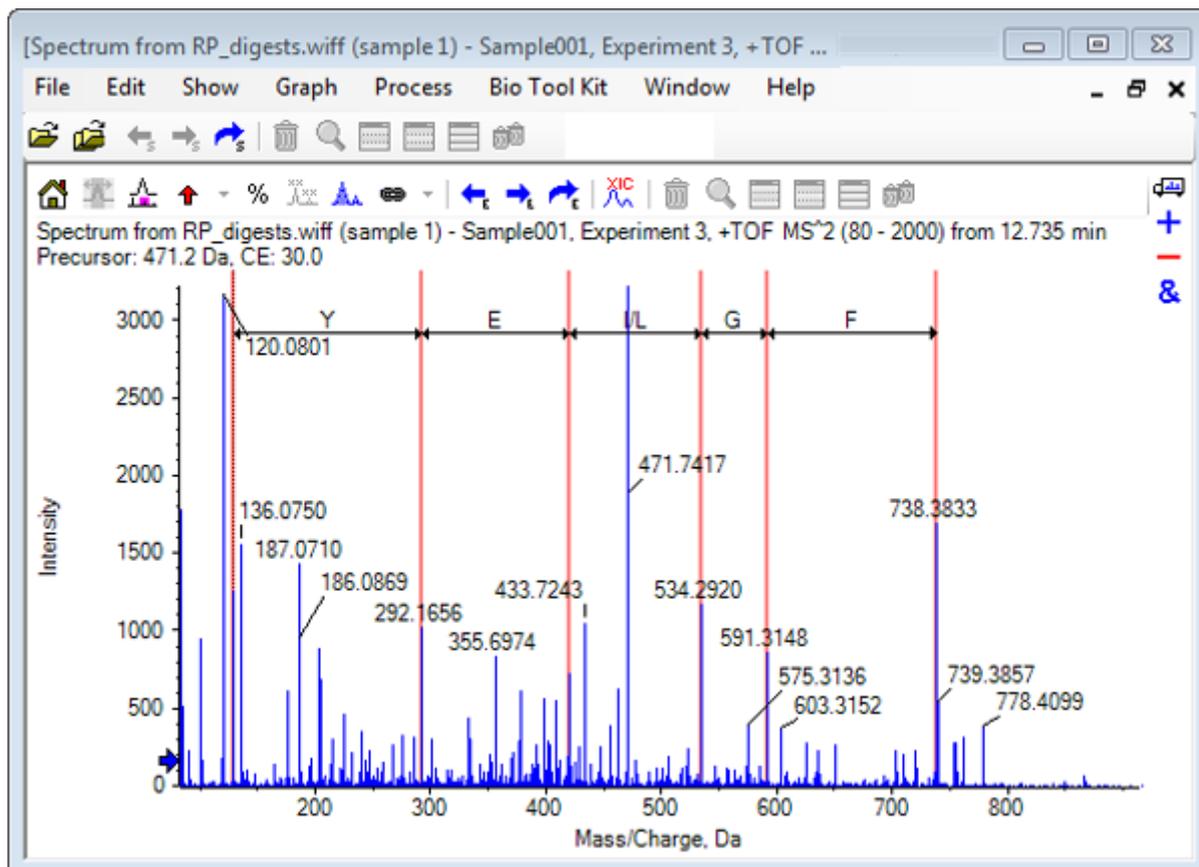
11. **Create Sequence (for Peptide Fragments Pane)** のチェックボックスが選択されていることを確認します。
12. **Precursor charge** フィールドに **2** と入力します。
13. 手動配列ツリーに従って、**Fragment charge** フィールドに、選択されたピークの電荷値を入力します。
14. **OK** をクリックします。
ソフトウェアが更新され、更新された[Spectrum] ペインが表示されます。この中では、スペクトル データ上で追加ないし喪失した(関連性があると考えられる)アミノ酸の最初の 1 組が、赤の縦線が表示されます。

図 D-75 : 手動配列のスペクトル: 当初の可能性



- さらに配列決定する部分について、赤い縦線のキャプションをダブルクリックします。
ソフトウェアが更新され、スペクトル データにおけるアミノ酸の次の 1 組が表示されます。
- 関連性があると考えられるアミノ酸がすべて提示されるまで、ステップ 15 を繰り返します。

図 D-76 : 手動配列スペクトル



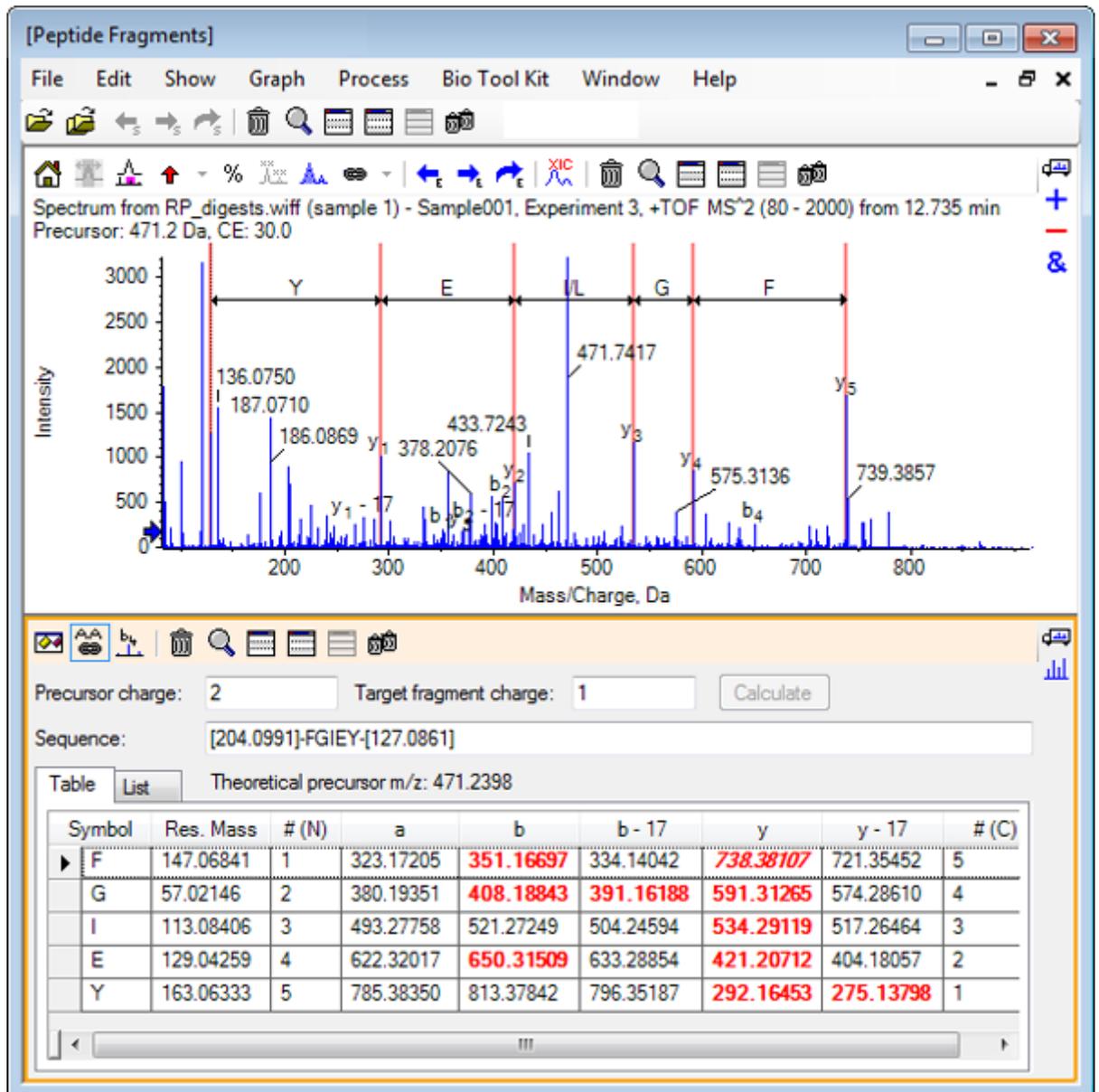
注: 図 D-76 では、キャプションをクリックした順序は F > G > I/L > E > Y です。

ヒント! ソフトウェアに複数の可能性が提示されている場合で、かつ最初に提案されたものとは異なる分岐に従う場合は、グラフを初期表示に戻し、この手順(別の相応アミノ酸のラベルを選択する)を繰り返します。

ペプチドフラグメントと連動させた手動配列決定

1. **Bio Tool Kit > Peptide Fragments** をクリックします。
[ペプチドフラグメント] のペインが開きます。このペインは、手動で配列決定されたスペクトルにリンクされています。

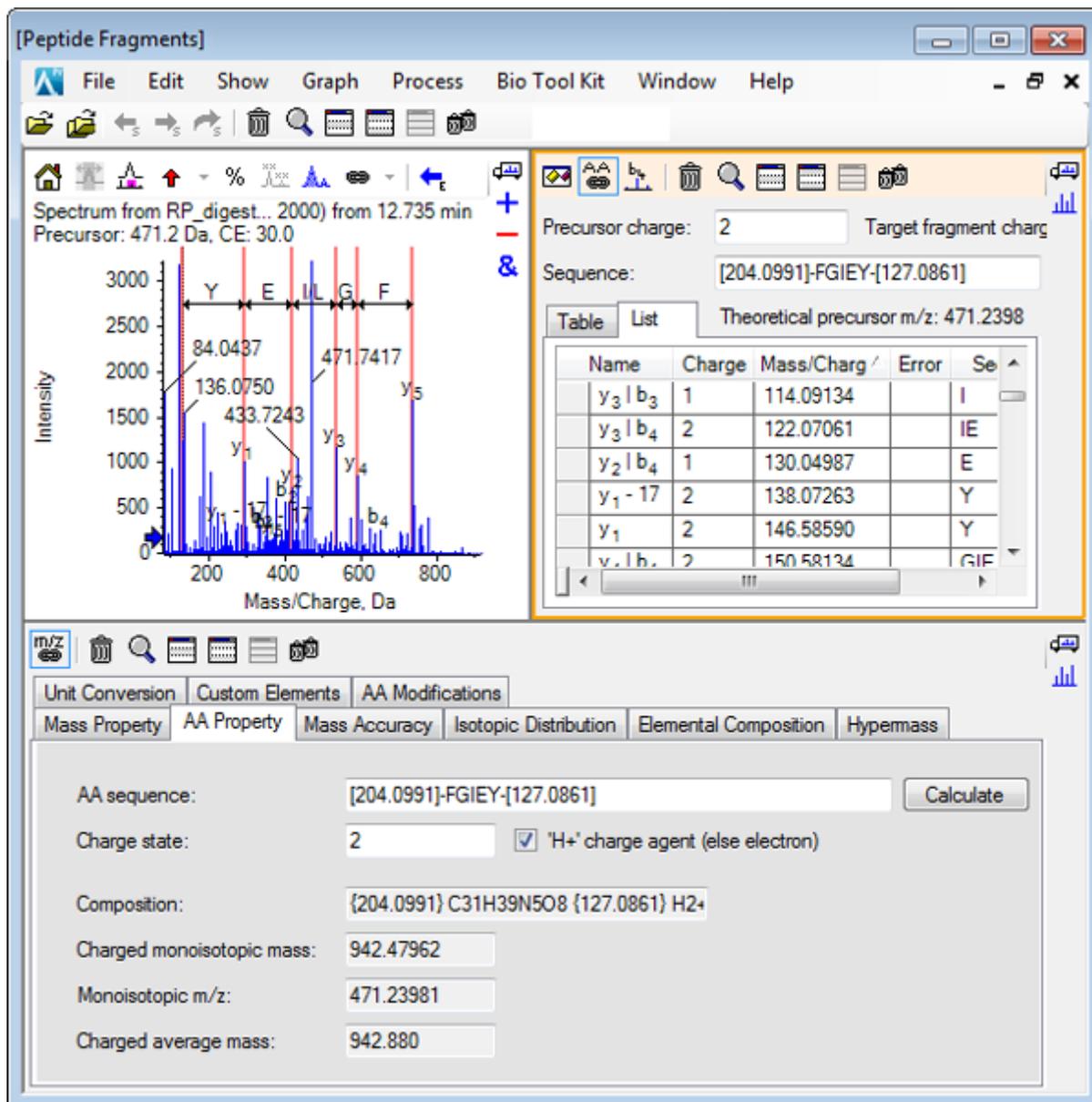
図 D-77 : 手動で配列決定されたスペクトルにリンクされた [Peptide Fragments] のペイン



注: 実験データと一致しているアミノ酸は、[Table] タブの列に赤色の太字で表示されます。実験データと一致しており、かつ異なる対象フラグメントの電荷を持つアミノ酸は、[Table] タブの列に赤色の斜体で表示されます。

2. **List** タブをクリックします。
3. **Show > Mass Calculators** をクリックします。
4. **AA Property** タブをクリックします。

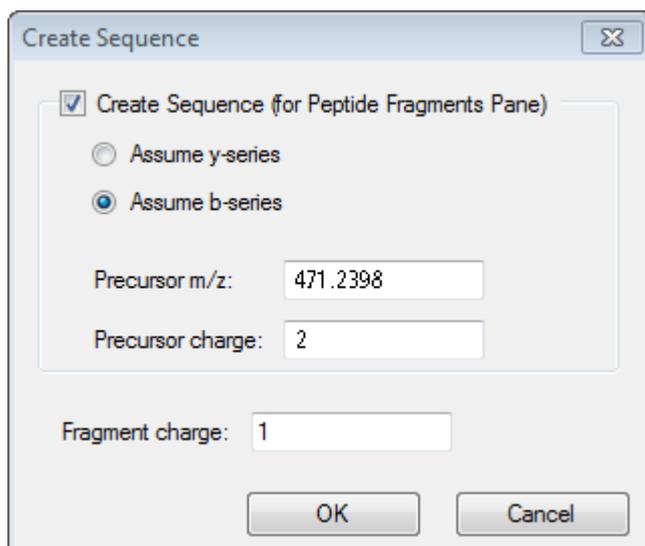
図 D-78 : 質量電卓:[AA Property] タブ



注: デフォルトでは、質量電卓は、手動で配列決定されたスペクトルに自動的にリンクされません。スペクトルからのアミノ酸配列は、**AA sequence** フィールドに表示されます。

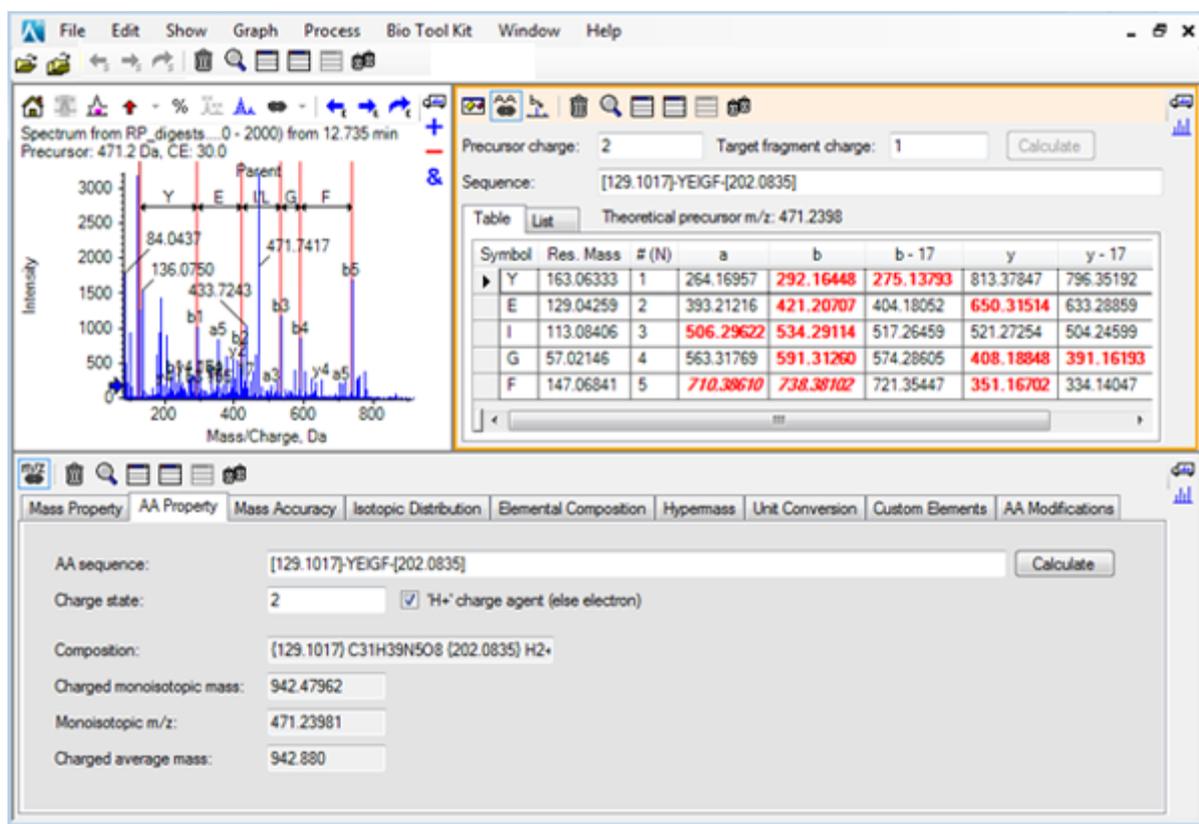
5. スペクトル ペインがアクティブな状態で、**Bio Tool Kit > Set Sequence Creation Parameters** をクリックします。
Create Sequence のダイアログが開きます。

図 D-79 : Create Sequence ダイアログ



6. **Create Sequence** ダイアログを以下のように入力します。
 - **Create Sequence (for Peptide Fragments Pane)** のチェック ボックスが選択されていることを確認します。
 - **Assume b-series** オプションを選択します。
 - **Precursor m/z** フィールドに **471.2398** と入力します。
 - **Precursor charge** フィールドに **2** と入力します。
 - **Fragment charge** フィールドに **1** と入力します。
7. **OK** をクリックします。
[Peptide Fragments] と [Mass Calculators] の各ペインに、更新後の配列データが反映されます。
8. **Peptide Fragments** ペイン内の **Table** タブをクリックします。

図 D-80 : 手動で配列決定されたスペクトルにリンクされた [Peptide Fragments] のペイン (更新後)



9. スペクトル ペインがアクティブな状態で、**Bio Tool Kit > Clear Manual Sequencing** をクリックします。
手動配列のマーキングがすべて消去されます。

手動再構築ハイライトの追加と削除

Add Manual Reconstruct Highlights オプションを使用して、特定の質量の理論的な m/z 位置をスペクトルに示すマーカーを追加することができます。この機能は、スペクトルに多価成分が含まれているときにスペクトルの特定のピークが同じ成分に対応するかどうかを確認するのに便利です。マーカーを削除するには、**Remove Manual Reconstruct Highlights** オプションを使用します。

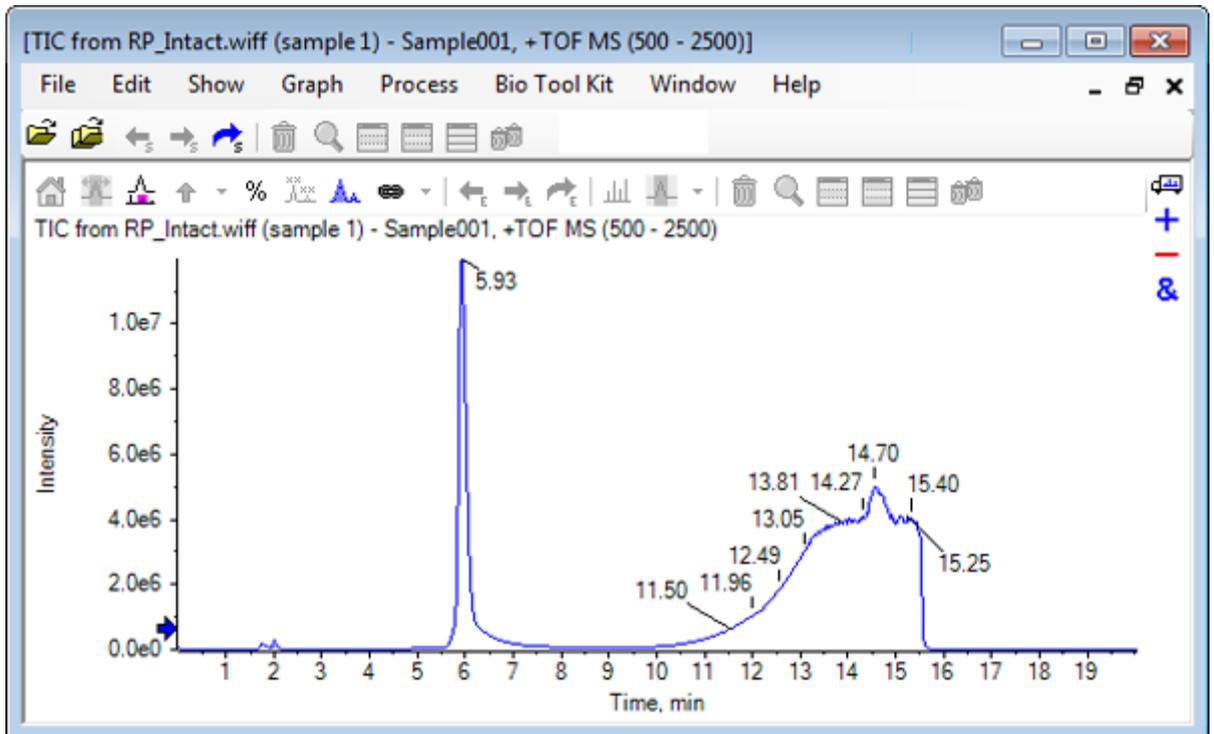
ヒント! マーカを別の位置に移動するには、マーカーの垂直線を新しい m/z 値にドラッグします。

ヒント! マーカをアクティブにするには、マーカーの垂直線をクリックするか、対応する荷電状態ラベルをクリックします。アクティブなマーカーには m/z 位置が表示されます。

1. メイン ツールバーから、**Open Sample** のアイコンをクリックします。
Select Sample ダイアログが開きます。
2. **Sample Data** フォルダがすでに選択されていない場合は、**Browse** をクリックして **Sample Data** フォルダに移動します。

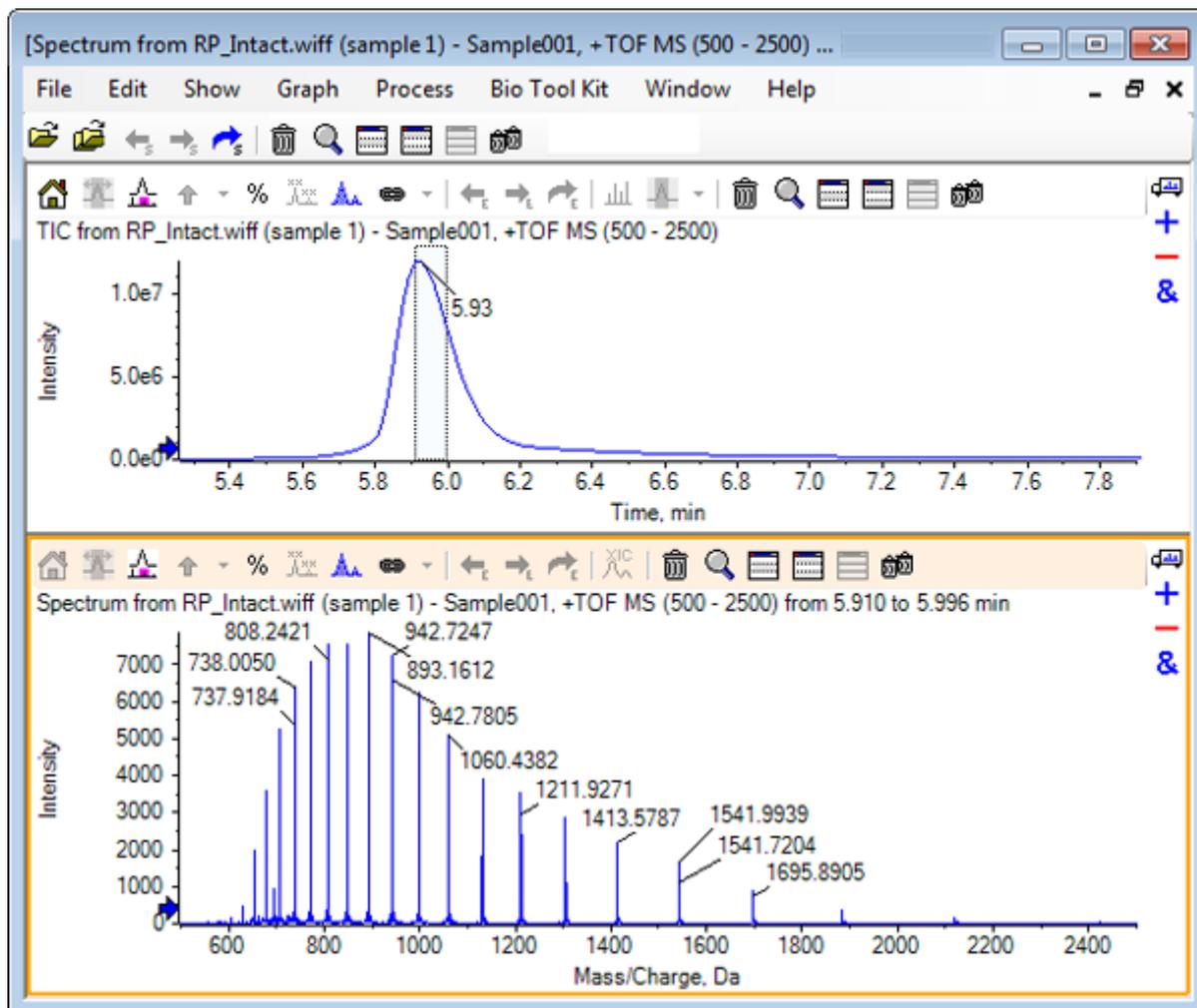
3. RP_Intact.wiff ファイルを選択し、OK をクリックします。

図 D-81 : RP_Intact.wiff ファイルからの TIC



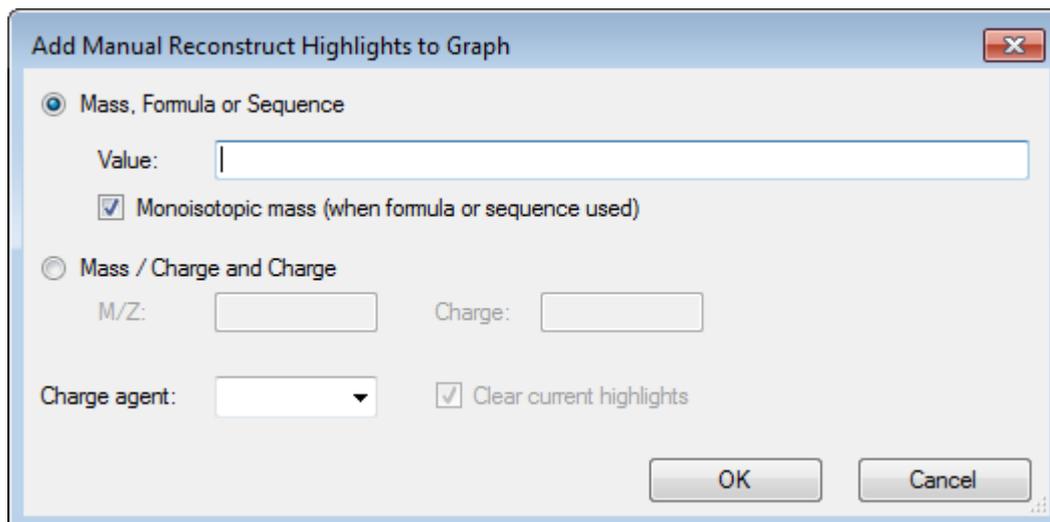
4. ミオグロビンについて、ピークの上領域 (5.91 分 ~ 6.00 分) を用いて平均スペクトルを作成します。

図 D-82 : 平均化スペクトル



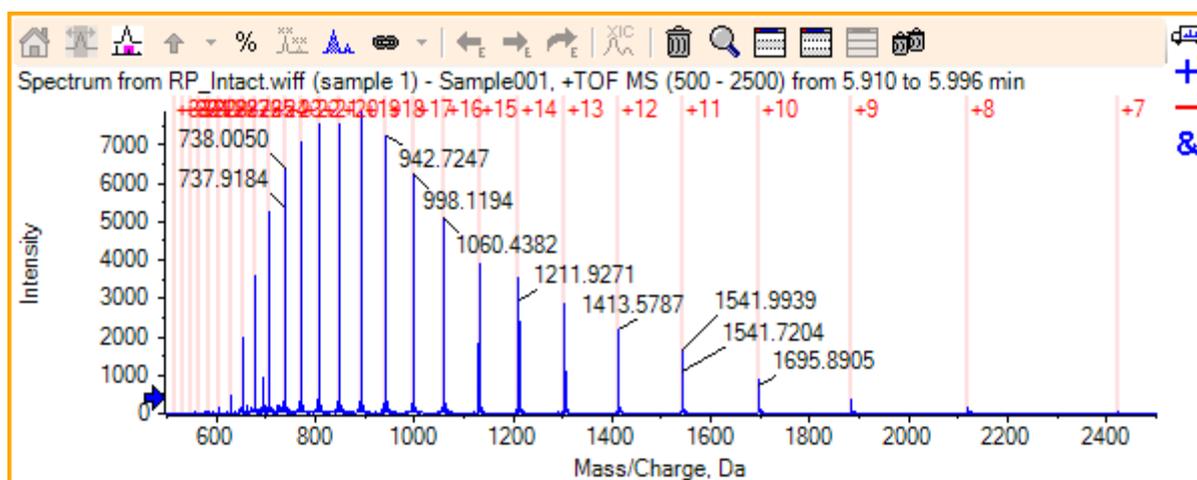
5. スペクトル ペインがアクティブな状態で、**Bio Tool Kit > Add Manual Reconstruct Highlights** をクリックします。
Add Manual Reconstruct Highlights to Graph ダイアログが開きます。

図 D-83 : 手動再構築ハイライトをグラフへ追加する



6. **Value** フィールドに **16950** と入力します。
7. **Charge agent** に **H+** を選択し、**OK** をクリックします。
ハイライトを含むグラフが更新されます。

図 D-84 : 追加されたハイライトを含むスペクトル



8. マーカーを削除するには、**Bio Tool Kit > Remove Manual Reconstruct Highlights** をクリックします。
グラフが更新され、ハイライトが削除されます。

消化プロテイン

理論的なペプチド配列の情報を取得するには、このオプションを使用します。この情報は、指定したタンパク質の、ユーザが定義した酵素的切断から生じます。

ツールバー

ツールバーのアイコンを使用することで、必要に応じて視野を調整することができます。

表 D-5 : ツールバーアイコン

アイコン	名称 (ツールヒント)
	配列内の検索と置換
	選択した文字を大文字に変換する
	配列の検索

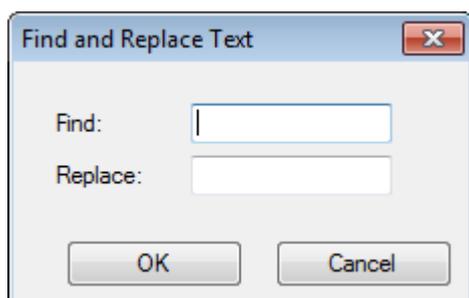
注: [Deletes this pane] のアイコンで始まる、ツールバーの最後尾にあるアイコン 6 個については、[汎用ペインのツールバー](#) に記載されています。

配列内の検索と置換

このオプションでは、**Sequence** フィールドに入力されたテキストを検索し、新しいテキストに置き換えることができます。

1. **Find and replace in sequence (配列内を検索して置換する)** アイコンをクリックします。**Find and Replace Text** ダイアログが開きます。

図 D-85 : [Find and Replace Text] ダイアログ



2. **Find** フィールドに置き換えられることになる情報を入力します。
3. **Replace** フィールドに、必要な情報を入力します。
4. **OK** をクリックします。
ソフトウェアは、ユーザが指定した既存のテキストを置換テキストに置き換えます。

選択された文字を大文字に変換する

このオプションでは、**Sequence** フィールドに入力したテキストを変換 (大文字 > 小文字) することができます。

1. 必要な文字を選択します。
2. **Convert selection to uppercase (選択された文字を大文字に変換する)** アイコンをクリックします。

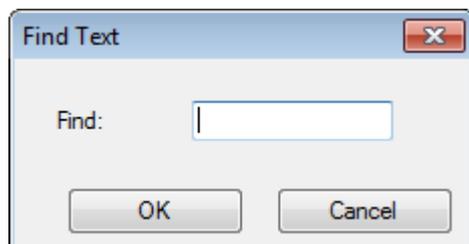
ソフトウェアは、テキスト内の小文字を大文字に置き換えます。

配列の検索

このオプションでは、**Sequence** フィールド内のテキストを検索できます。

1. **Find sequence (配列を検索)** アイコンをクリックします。
Find Text ダイアログが開きます。

図 D-86 : Find Text ダイアログ

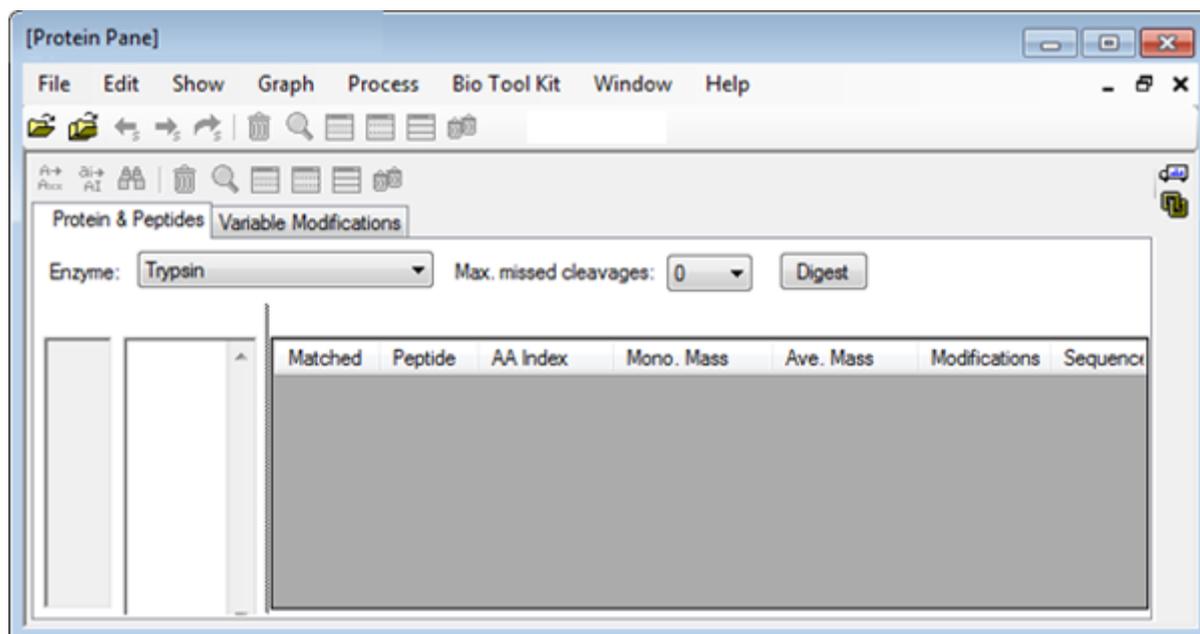


2. **Find** フィールドに必要な情報を入力します。
3. **OK** をクリックします。
一致するテキストは、ソフトウェアによって強調表示されます。

理論的タンパク質消化

1. **Bio Tool Kit > Digest Protein** をクリックします。
Protein ペインが表示されます。

図 D-87 : Protein ペイン: Protein & Peptides タブ



2. 表示されたフィールドに、タンパク質またはペプチド配列を入力します。

Explorer チュートリアル

注: このチュートリアルでは、GLSDGEWQQV LNVWGKVEAD IAGHGQEVLI
RLFTGHPETL EKFDKFKHLK TEAEMKASED LKKHGTVVLV ALGGILKKKG
HHEAELKPLA QSHATKHKIP IKYLEFISDA IIVLHSHKHP GDFGADAQGA
MTKALELFRN DIAAKYKELG FQG(ミオグロビンの配列)を使用しました。

3. **Enzyme(酵素)** を選択します。

注: このチュートリアルでは、トリプシンを選択しました。

4. **Max. missed cleavages** を選択します。

注: このチュートリアルでは、0 を選択しました。

5. **Digest** をクリックします。
ソフトウェアは、消化されたペプチドとその配列の理論的な情報を表に入力します。

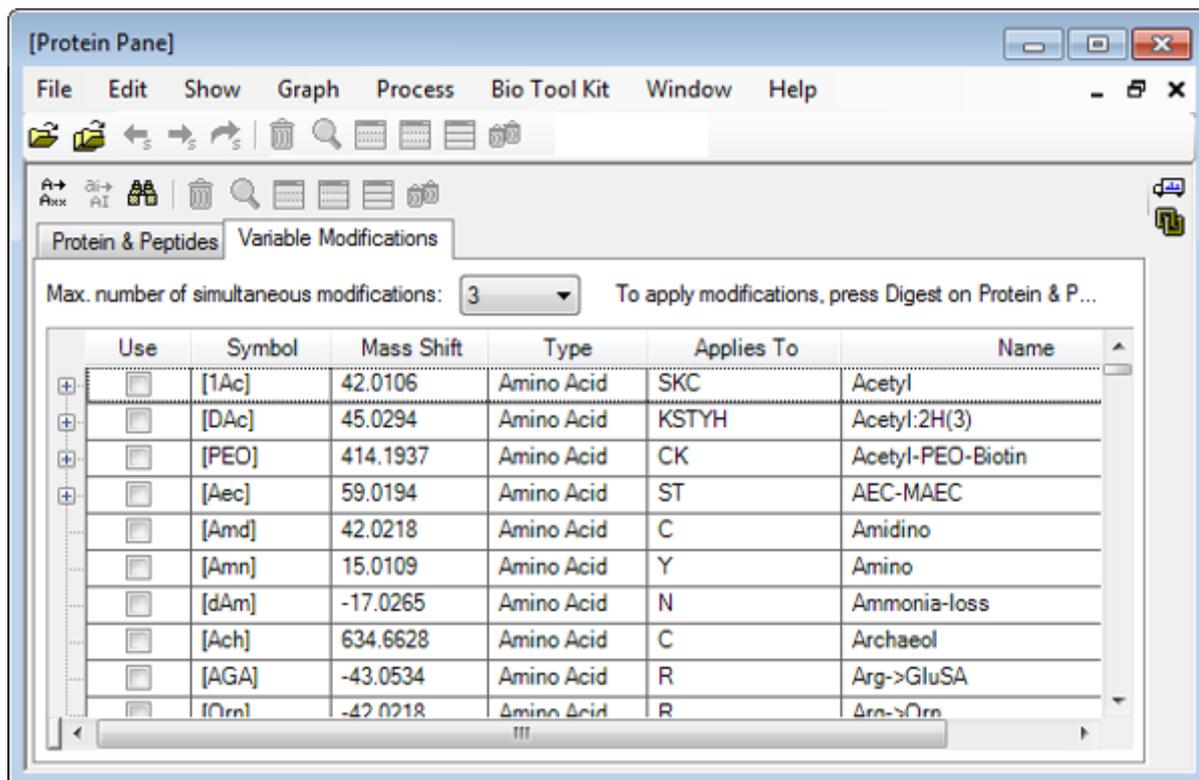
図 D-88 : 理論的情報が入力された Protein ペイン

The screenshot shows the 'Protein Pane' window with the 'Variable Modifications' tab selected. The 'Enzyme' dropdown is set to 'Trypsin' and 'Max. missed cleavages' is set to 0. The 'AA selection' is '(None)'. On the left, a list of peptides is shown with their corresponding amino acid sequences. On the right, a table lists the matched peptides with their respective indices, masses, and sequences.

Matched	Peptide	AA Index	Mono. Mass	Ave. Mass	Modifications	Sequence
<input checked="" type="checkbox"/>	T1	1 - 16	1814.89515	1816.004		GLSDGEWQ...
<input checked="" type="checkbox"/>	T2	17 - 31	1605.84747	1606.799		VEADIAGHG...
<input checked="" type="checkbox"/>	T3	32 - 42	1270.65575	1271.436		LFTGHPETLEK
<input checked="" type="checkbox"/>	T4	43 - 45	408.20088	408.455		FDK
<input checked="" type="checkbox"/>	T5	46 - 47	293.17394	293.366		FK
<input checked="" type="checkbox"/>	T6	48 - 50	396.24850	396.490		HLK
<input checked="" type="checkbox"/>	T7	51 - 56	707.31599	707.801		TEAEMK
<input checked="" type="checkbox"/>	T8	57 - 62	661.32827	661.710		ASEDLK
<input checked="" type="checkbox"/>	T9	63	146.10553	146.189		K
<input checked="" type="checkbox"/>	T10	64 - 77	1377.83439	1378.679		HGTVLTLA...
<input checked="" type="checkbox"/>	T11	78	146.10553	146.189		K
<input checked="" type="checkbox"/>	T12	79	146.10553	146.189		K
<input checked="" type="checkbox"/>	T13	80 - 96	1852.95440	1854.056		GHHEAELKP...
<input checked="" type="checkbox"/>	T14	97 - 98	283.16444	283.331		HK
<input checked="" type="checkbox"/>	T15	99 - 102	469.32642	469.625		IPIK
<input checked="" type="checkbox"/>	T16	103 - 118	1884.01454	1885.194		YLEFISDAIHK...
<input checked="" type="checkbox"/>	T17	119 - 133	1501.66198	1502.626		HPGDFGADA...
<input checked="" type="checkbox"/>	T18	134 - 139	747.42793	747.893		ALELFR
<input checked="" type="checkbox"/>	T19	140 - 145	630.33369	630.699		NDIAAK
<input checked="" type="checkbox"/>	T20	146 - 147	309.16886	309.365		YK
<input checked="" type="checkbox"/>	T21	148 - 153	649.30714	649.701		ELGFQG

6. **Variable Modifications** タブをクリックします。

図 D-89 : Protein ペイン: Variable Modifications タブ



7. **Max. number of simultaneous modifications** を選択します。

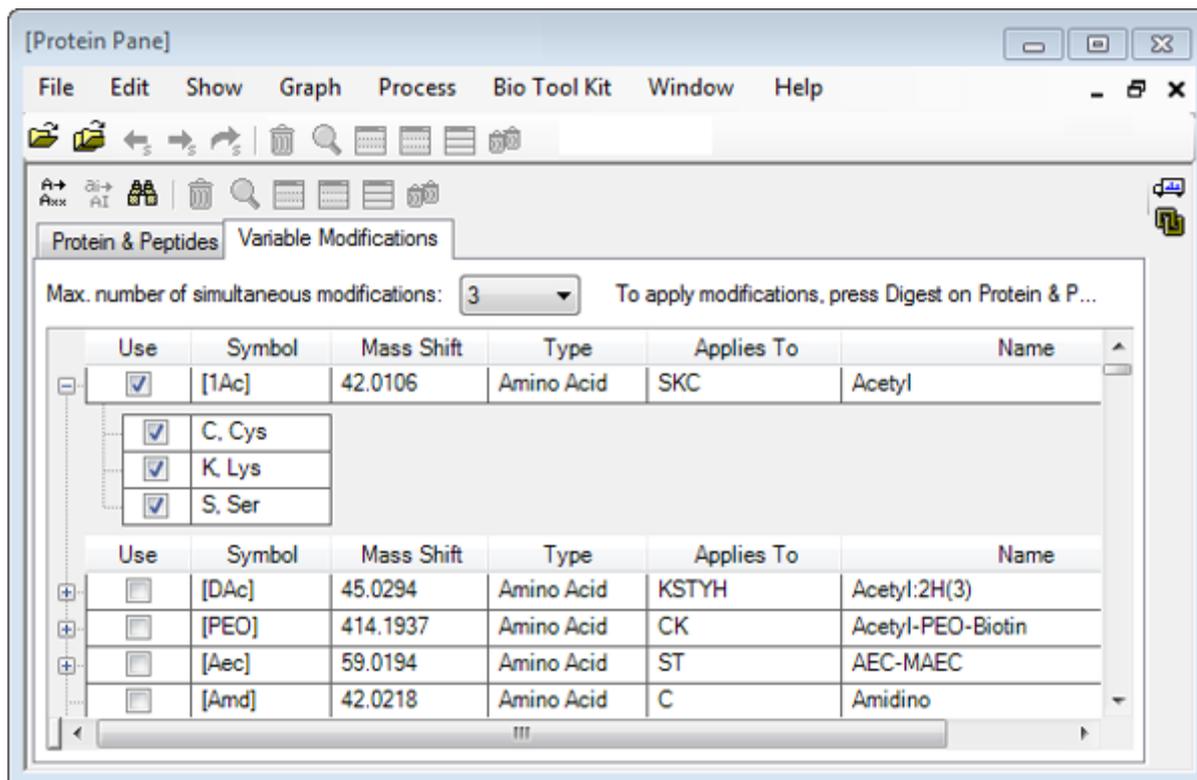
注: このチュートリアルでは、3 を選択しました。

8. 適切な変更を反映させるには、**Use** 列のチェックボックスを入れます。

ヒント! チェックボックスの左側にアイコンが表示されている場合は、アミノ酸のリスト全体を選択するか、または必要なものだけを選択することができます。

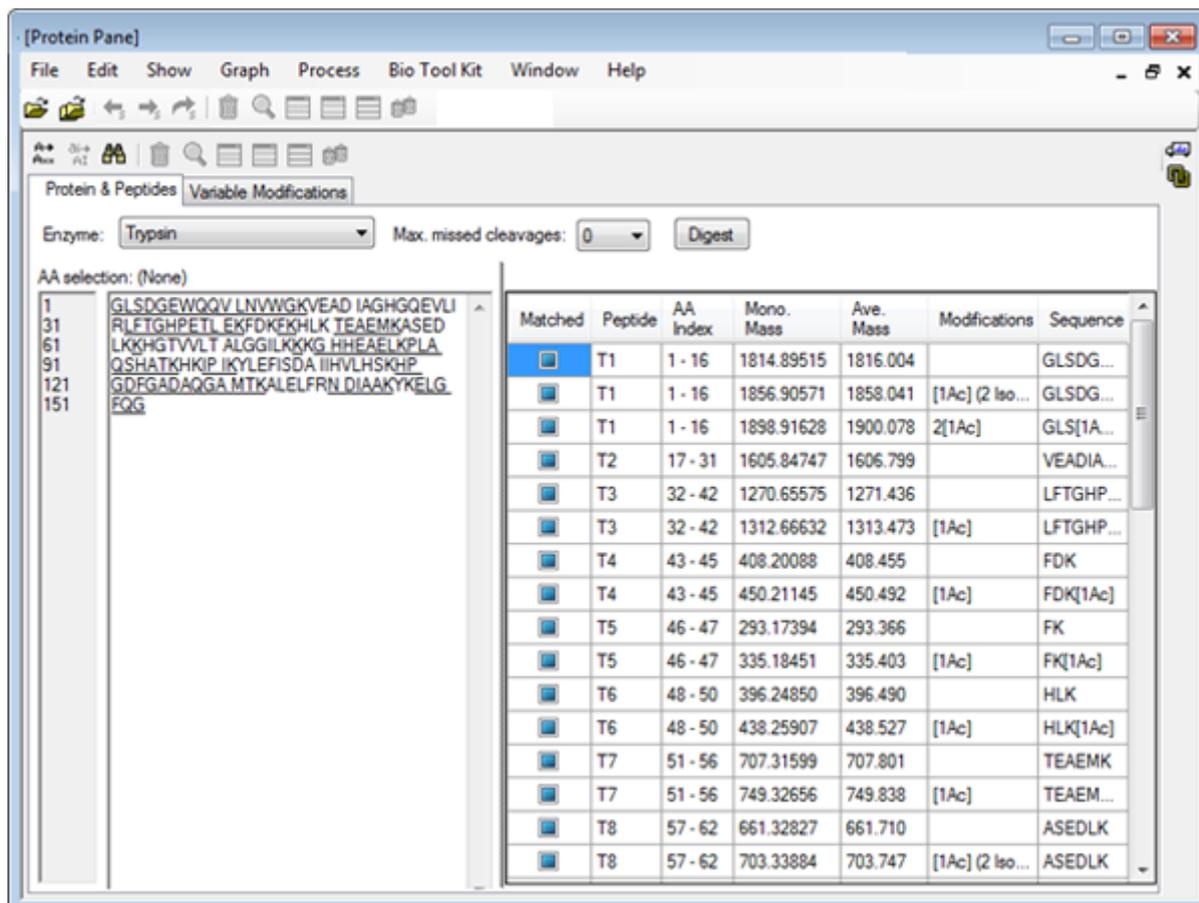
注: このチュートリアルでは、[1AC] のチェックボックスを選択しました。

図 D-90 : 変更の選択例



9. **Protein & Peptides** タブをクリックします。
10. **Digest** をクリックします。
表の表示が変更され、ユーザによる選択内容が反映されます。

図 D-91 : 変更後の情報が入力された Protein ペイン



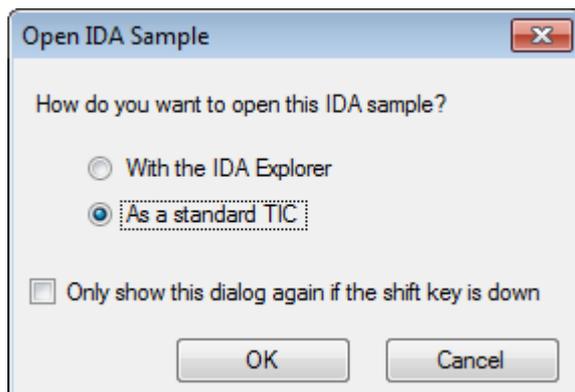
LCMS ペプチド再構築

LCMS ペプチド再構築では、スペクトルのピークを識別し、識別されたスペクトルピークからデコンボリューションを行います。LCMS ペプチド再構築ツールでは、2つのステップが実行されます。まず、ピークは「強化」ピーク発見アルゴリズムにより発見されます。次に、アイトープ系と電荷系を構成する一群のピークを検索し、発見されたコンポーネントすべての中性質量を表示します。

1. メイン ツールバーから、**Open Sample** のアイコンをクリックします。
Select Sample ダイアログが開きます。
2. [Sample Data] フォルダがすでに選択されていない場合は、**Browse** をクリックして **Sample Data** フォルダに移動します。
3. **RP_digests.wiff** ファイルを選択し、**OK** をクリックします。

Open IDA Sample ダイアログが開きます。

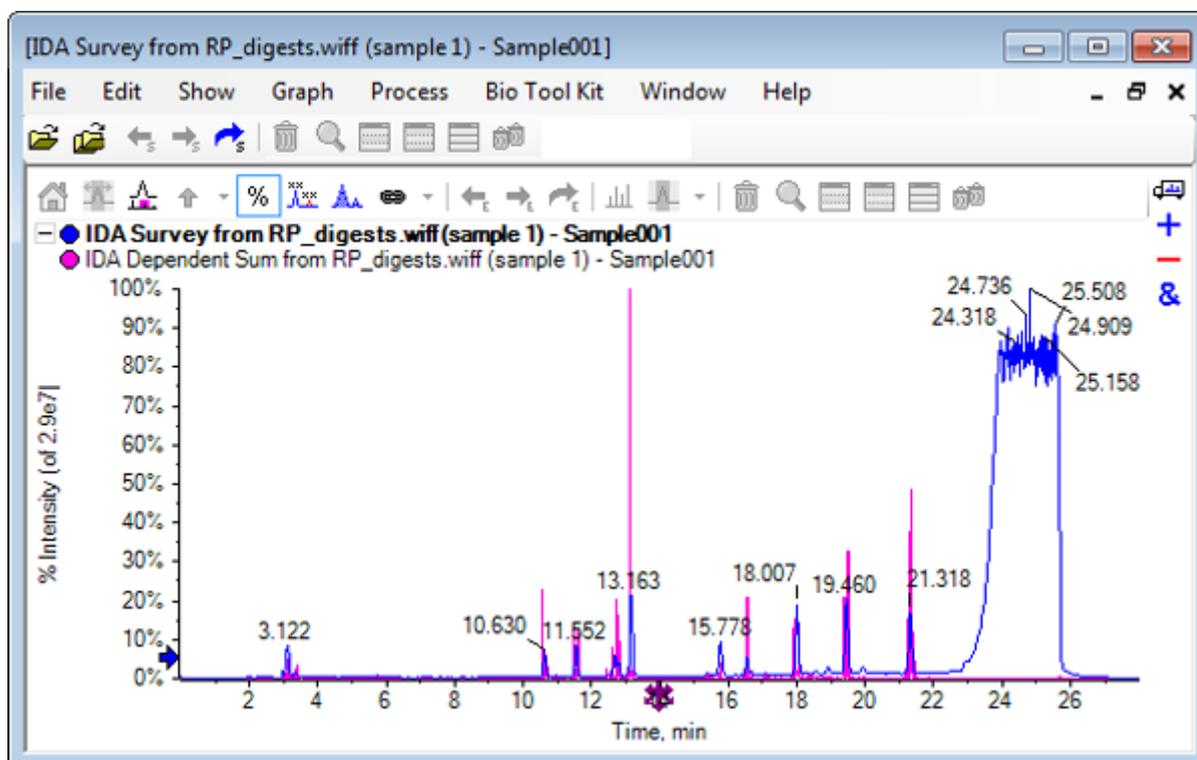
図 D-92 : IDA サンプル ダイアログを開く



4. 標準 TIC として オプションが選択されていることを確認し、OK をクリックします。

最初のトレースとして「IDA Survey from RP_digests.wiff (sample 1) - Sample001」が太字で表示されていることを確認します。必要に応じて、このトレースを選択します。

図 D-93 : RP_digests.wiff を基にした IDA 調査



5. **Bio Tool Kit > LCMS Peptide Reconstruct (with peak finding)** をクリックします。
LCMS Peptide Reconstruct Options ダイアログが開きます。

図 D-94 : LCMS Peptide Reconstruct Options ダイアログ

6. 表示されたフィールドに次の値を入力します。

- **Minimum retention time (最小保持時間)** フィールド: **9.00** 分
- **Maximum retention time (最大保持時間)** チェックボックスをオンにし、フィールドに **16.00** と入力
- **Approximate LC peak width (おおよその LC ピーク幅)** フィールド: **6.0** 秒

注: バックグラウンド減算の間は、おおよそのピーク幅を基にオフセットが決定されます。

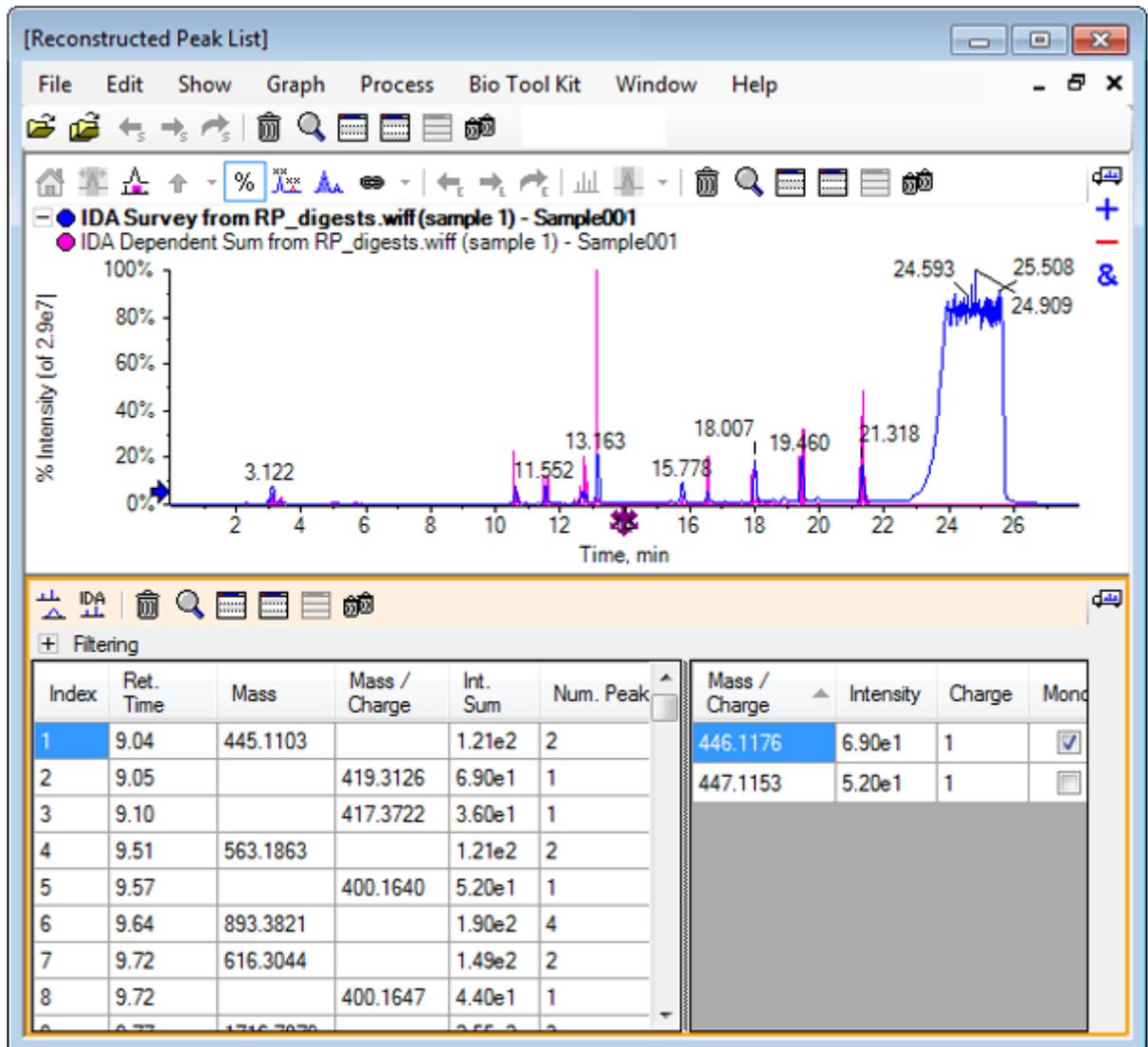
- **Minimum intensity in counts (最小強度(カウント))** フィールド: **5**
- **Chemical noise intensity multiplier (化学ノイズ強度乗数)** フィールド: **1.5**
- **Mass tolerance (質量公差)** フィールド: **0.100** Da
- **Maximum charge (最大電荷)** フィールド: **5**

注: [Charge Deconvolution (電荷デコンボリューション)] セクションの質量許容差では、理論的に消化されたタンパク質と再構成されたピークが一致していることを確認し、同じペプチドに属する m/z 各値を一緒にグループ化します。

7. **OK** をクリックします。

ソフトウェアは、保持時間ごとのペプチドを表に示します。表示されたペプチドについては、それぞれ次の情報が提供されます。**Index (指数)**、**Ret. Time (保持時間)**、**Mass (質量)**、**Mass / Charge (質量/電荷)**、**Int. Sum (初期合計)**、および **Num. Peaks (ピーク数)**。

図 D-95 : 再構成されたピークの一覧



8. **Filtering** を展開し、使用可能なフィルタを表示します。

利用可能なフィルタリング オプションは、次のとおりです。 **Intensity threshold** (強度閾値)、 **Min. Num. Peaks** (最小ピーク数)、および **Show matched peaks only** (一致したピークのみ表示する)。

図 D-96 : フィルタリング オプション

Intensity threshold:

Min. Num. Peaks: Show matched peaks only

Index	Ret. Time	Mass	Mass / Charge	Int. Sum	Num. Peak
1	9.04	445.1103		1.21e2	2
2	9.05		419.3126	6.90e1	1
3	9.10		417.3722	3.60e1	1
4	9.51	563.1863		1.21e2	2
5	9.57		400.1640	5.20e1	1
6	9.64	893.3821		1.90e2	4

9. 表示内容を調製する必要がある場合は、1つ以上のフィルタを選択します。

注: このチュートリアルでは、強度閾値は 2.39e4 に、および 最小ピーク数は 4 に設定されています。

図 D-97 : 再構成されたピークの一覧(フィルタ適用後)

Intensity threshold:

Min. Num. Peaks: Show matched peaks only

Index	Ret. Time	Mass	Mass / Charge	Int. Sum	Num. Peaks
1	10.62	1501.6620		2.39e5	17
2	11.55	1270.6542		2.98e5	16
3	12.68	940.4651		1.93e5	9
4	13.15	1605.8489		8.62e5	18
5	15.76	563.3048		1.53e5	4
6	15.78	747.4268		1.96e5	4

ツールバー

ツールバーのアイコンを使用することで、必要に応じて視野を調整することができます。

表 D-6 : ツールバーアイコン

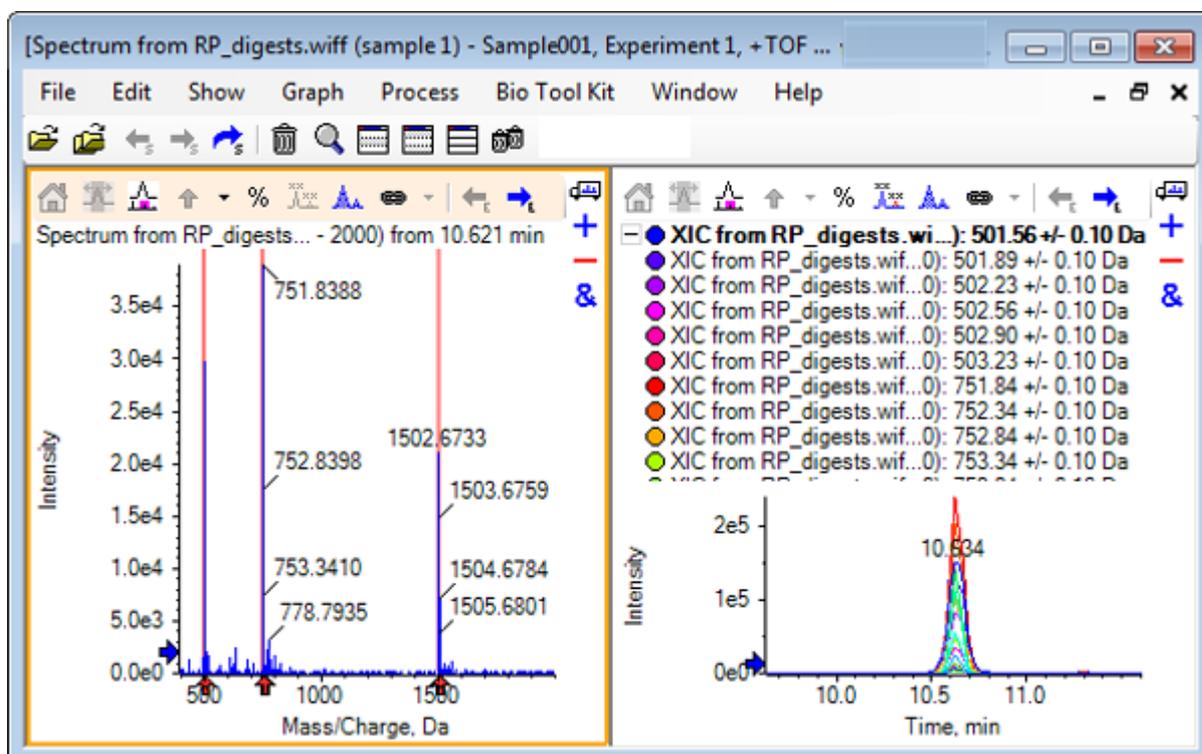
アイコン	名称 (ツールヒント)
	スペクトルと XIC を表示
	IDA MS/MS スペクトルを表示

注: [Deletes this pane] のアイコンで始まる、ツールバーの最後尾にあるアイコン 6 個については、[汎用ペインのツールバー](#)に記載されています。

スペクトルと XIC を表示

Show spectrum and XIC(スペクトルと XIC を表示) アイコンが選択されている場合、以下のスペクトル ペインと XIC ペインが開きます。

図 D-98 : スペクトルと XIC の各結果を表示



生成された MS スペクトルについては、ペプチドの質量決定の一因となった各ピークの下に矢印が表示されます。ペプチドの質量決定の一因となった各 m/z ピークの XIC は、右側のペインにオーバーレイとして表示されます。

IDA MS/MS スペクトルを表示

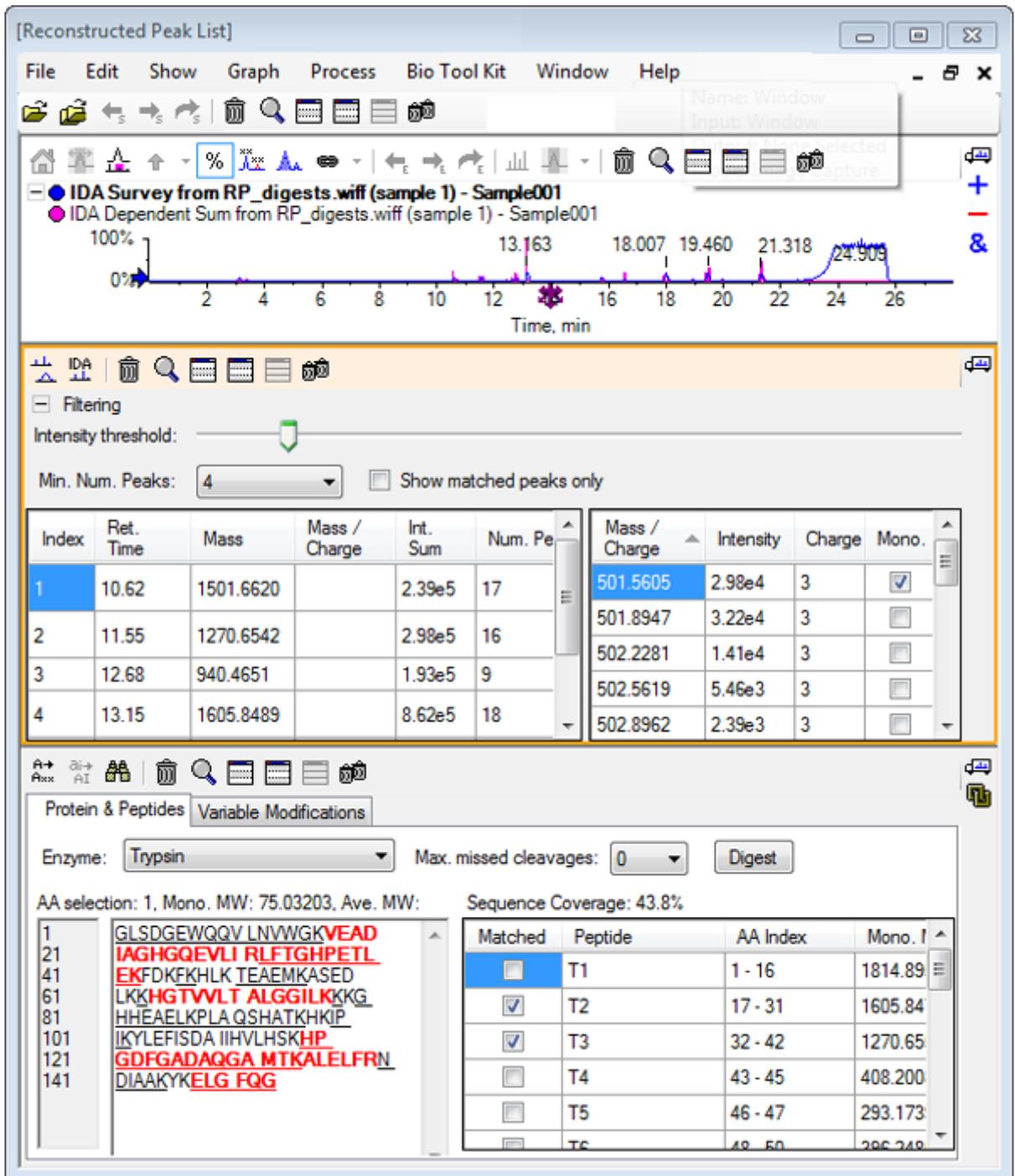
Show IDA MS/MS Spectra(IDA MS/MS を表示) アイコンが選択されている場合、以下のスペクトル ペインが開きます。

消化タンパク質と LCMS ペプチド再構築

1. **Bio Tool Kit > Digest Protein** をクリックします。
Protein ペインが表示されます。
2. **Protein** ペインの **Drag to a protein pane to set its peak list** ([タンパク質]ペインにドラッグしてピークリストを設定する) アイコンを、**Reconstructed Peak List** ペインにドラッグします。

Protein ペインが更新され、[Reconstructed Peak List (再構成されたピークリスト)] のものと一致するペプチド配列が表示されます。**Protein** ペインに赤い太字で表示されるフラグメントは、**Reconstructed Peak List** のペインにあるものと正確に一致しています。赤い通常のフォントで表示されるフラグメントは、**Reconstructed Peak List** ペインの **Match** 列で括弧内に示された荷電状態が割り当てられていた場合に、**Reconstructed Peak List** ペインにあるものと一致したと考えられるフラグメントを指します。黒のフォントで示したフラグメントは、**Reconstructed Peak List** ペインのフラグメントといずれも一致しないものを指します。

図 D-99 : [Reconstructed Peak List] にリンクされた、[Protein] ペイン上の理論上の情報



タンパク質の再構築

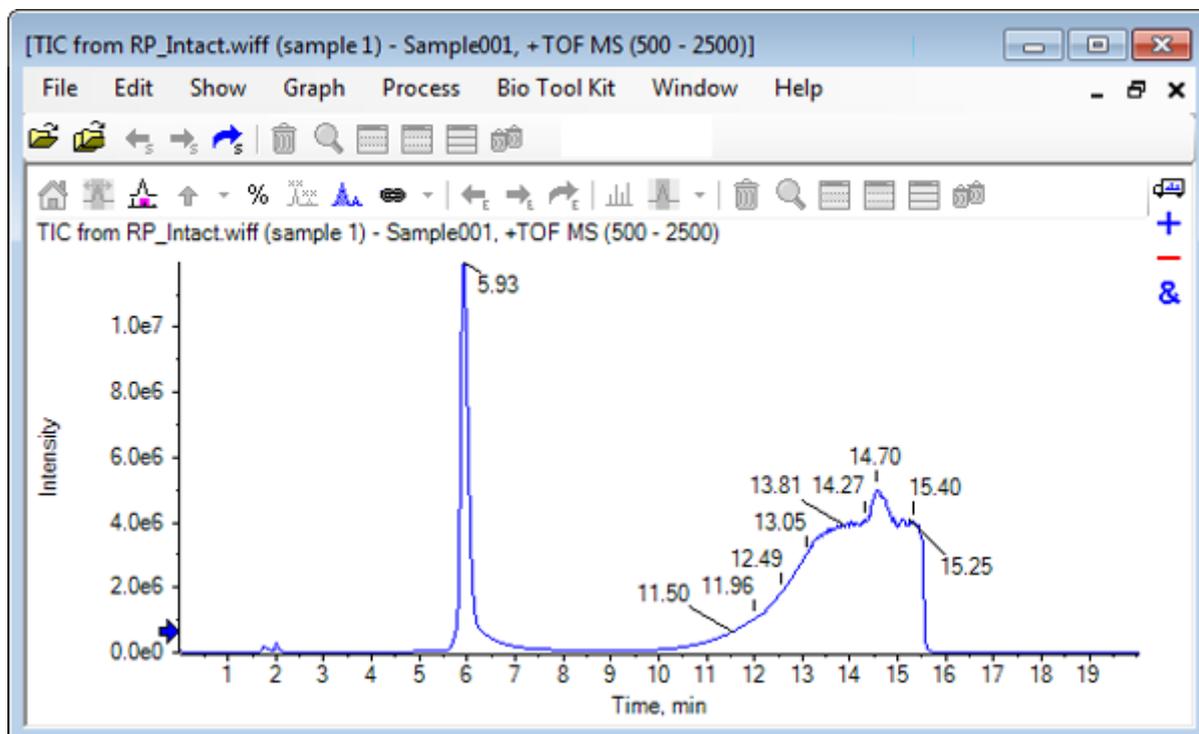
蛋白質タンパク質の平均質量(分子量)を取得する場合は、このオプションを使用します。

1. メイン ツールバーから、**Open Sample** のアイコンをクリックします。
Select Sample ダイアログが開きます。

Explorer チュートリアル

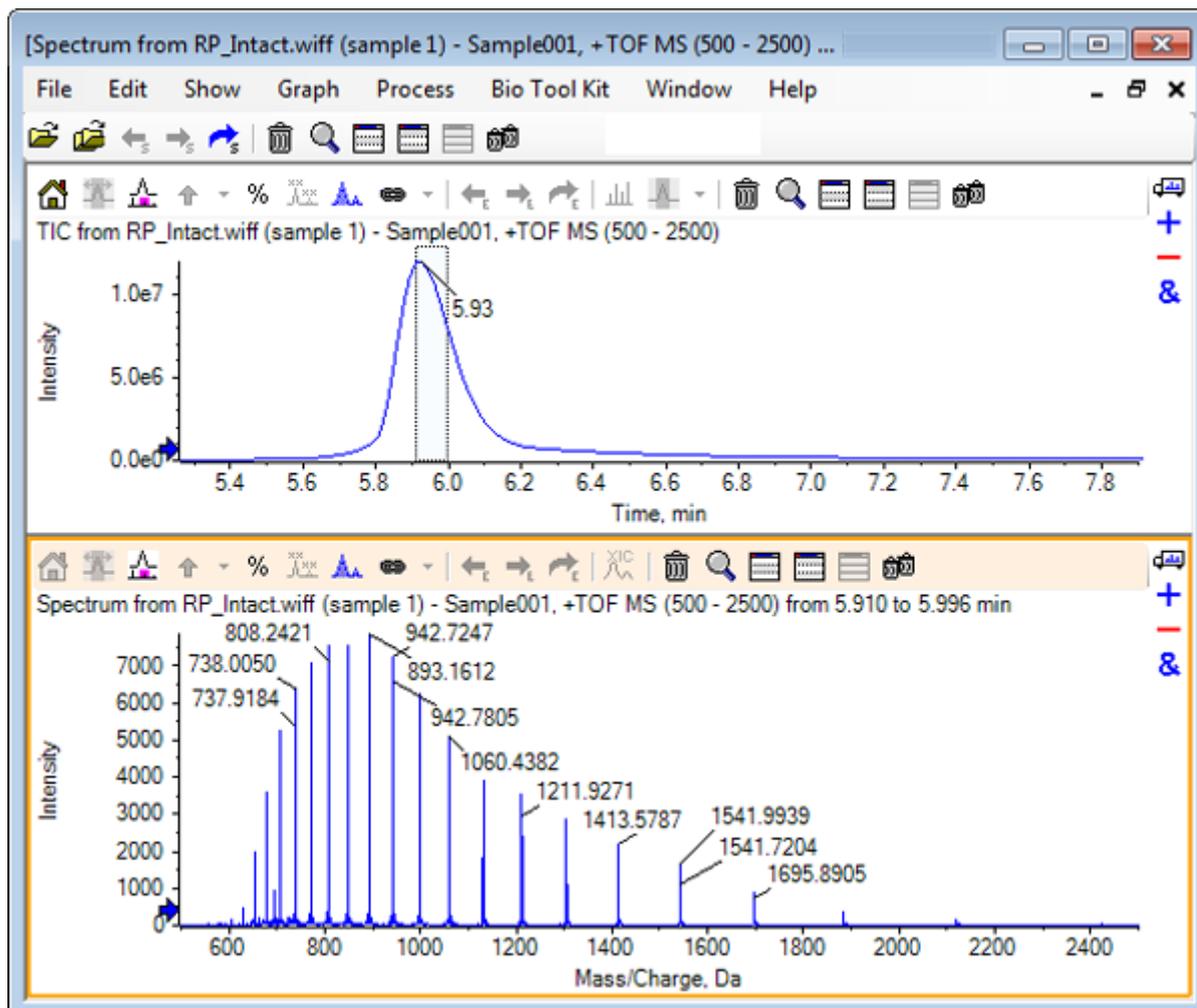
2. **Sample Data** フォルダがすでに選択されていない場合は、**Browse** をクリックして **Sample Data** フォルダに移動します。
3. **RP_Intact.wiff** ファイルを選択し、**OK** をクリックします。

図 D-100 : RP_Intact.wiff ファイルからの TIC



4. 5.93 分のピーク領域を基に平均スペクトルを作成します。図 D-101 を参照してください。

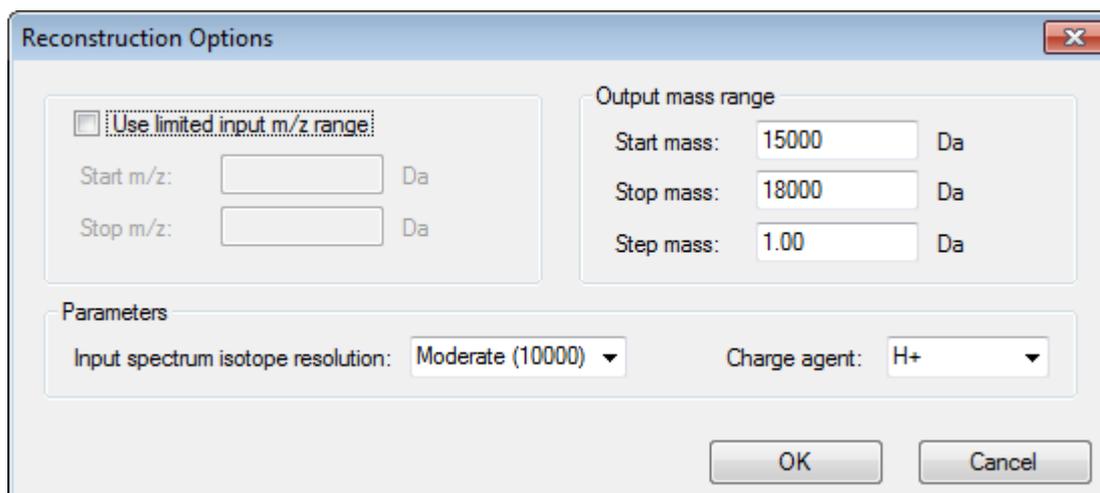
図 D-101 : 平均化スペクトル



5. スペクトル ペインがアクティブな状態で、**Bio Tool Kit > Reconstruct Protein** をクリックします。

Reconstruction Options ダイアログが開きます。

図 D-102 : 再構築オプション

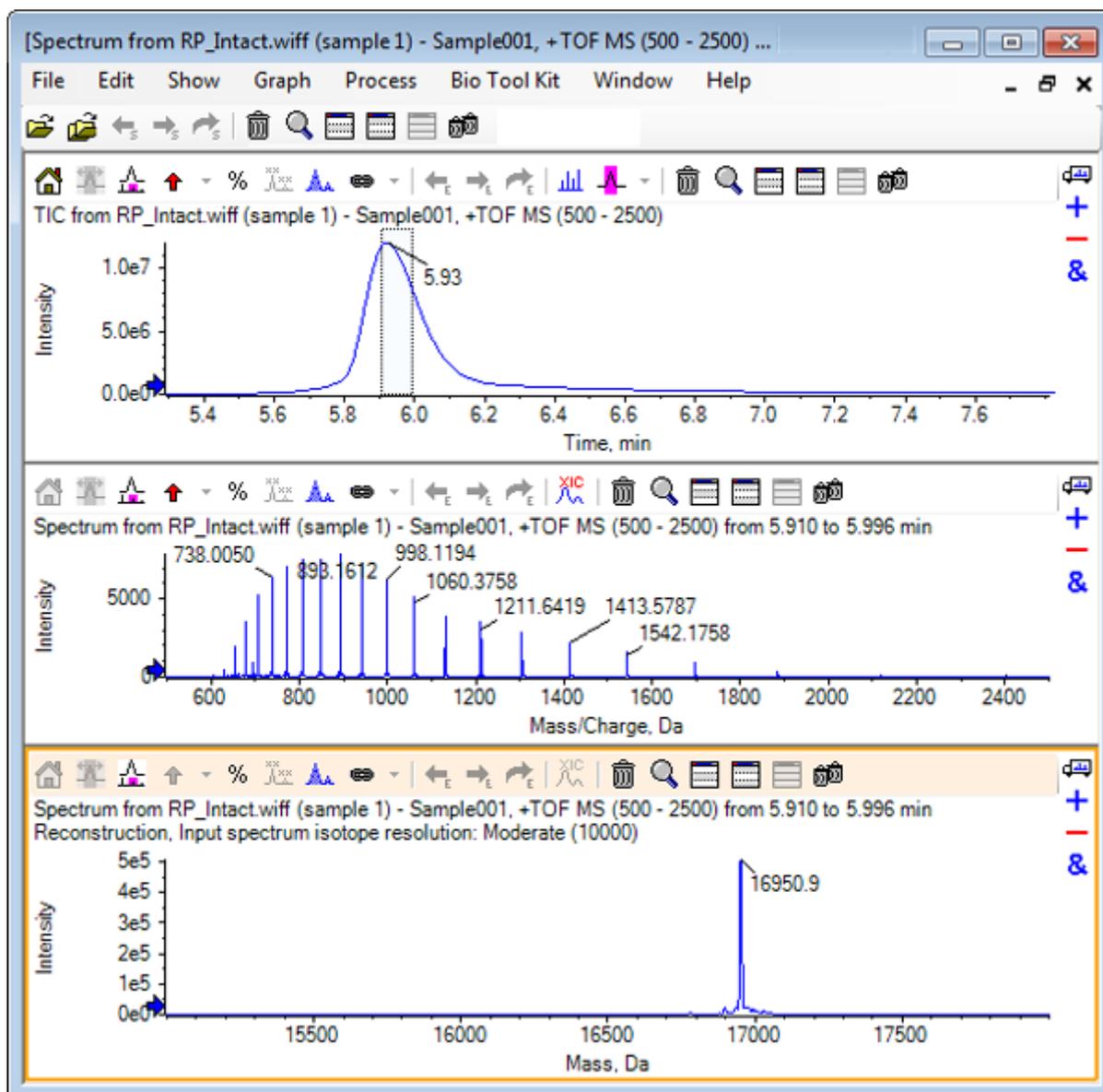


6. 次の各オプションに、適切な値を入力します。
 - **Start mass (開始質量)**: 15000 Da
 - **Stop mass (停止質量)**: 18000 Da
 - **Step mass (質量間隔)**: 1.0 Da
7. 適切な **入力スペクトル アイソトープ分解能** (中等度: 10000) を選択します。

注: 四重極システムを用いて取得されたデータについては、入力スペクトル アイソトープ分解能パラメータの代わりに、ピーク幅パラメータが表示されます。

8. 適切な **電荷剤 (H⁺)** を選択します。
9. **OK** をクリックします。
ソフトウェアは、再構築されたタンパク質のスペクトルを生成し、「再構築、入力スペクトルのアイソトープ分解能 [ユーザーが選択]」のタイトルが付いた別のペインに表示します。

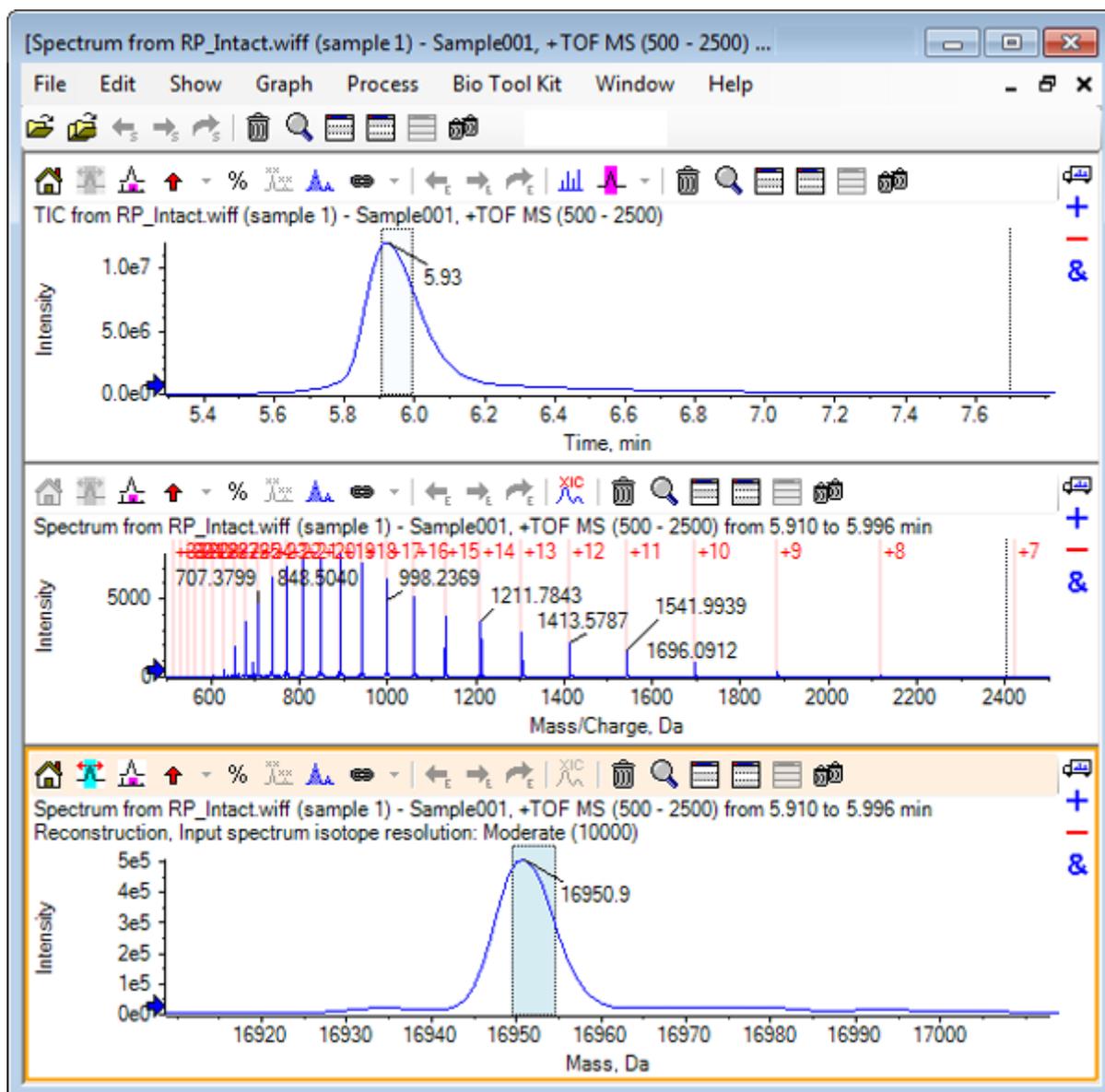
図 D-103 : 再構築ペイン



注: 四重極システムを使用して取得したデータについては、ペイン内でのタイトルは「再構築、ピーク幅 [値]」のようになります。

10. 再構築されたタンパク質のピークを選択します。
再構成タンパク質を生成するために選択したスペクトルには、手動再構築の垂直マーカが追加されます。

図 D-104 : 手動再構築マーカ付きスペクトル



概要

このセクションでは、以下のタスクについて説明されました。

- 消化タンパク質サンプルからの MS/MS スペクトル データを手動配列する。
- ペプチドフラグメントを使用して、手動で配列決定されたスペクトルをリンクする。
- マーカー(手動再構築マーカ)を追加し、スペクトルに対して、所定の質量における理論 m/z 比の位置を注記する。
- スペクトルからマーカを削除します。
- 理論的なペプチド配列の情報を取得する。この情報は、指定したタンパク質の、ユーザが定義した酵素的切断から生じます。

- LCMS ペプチド再構築により、スペクトルのピークを識別し、識別されたスペクトルピークからデコンボリューションを行う。
- [Protein(タンパク質)] ペイン上の理論上の情報を、再構成されたピークリストにリンクする。
- 蛋白質タンパク質の平均質量(分子量)を取得する。

お問い合わせ先

お客様のトレーニング

- 北米: NA.CustomerTraining@sciex.com
- ヨーロッパ: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- ヨーロッパおよび北米以外: sciex.com/education

オンライン学習センター

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

SCIEX サポート

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

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

サイバーセキュリティ

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

ドキュメント

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

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

ソフトウェア製品のドキュメントについては、ソフトウェアに付属のリリースノートまたはソフトウェアインストールガイドを参照してください。

ハードウェア製品のドキュメントを検索するには、システムまたはコンポーネントのドキュメント DVD を参照してください。

ドキュメントの最新版は SCIEX の web サイト (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 までお問い合わせください。
