

# SCIEX 4500MD システム

システムユーザーガイド



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

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

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

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

**In Vitro 診断用です。** 製品は一部の国では入手できません。詳細な情報については、最寄りの営業担当者にお問い合わせいただくか、または [sciex.com/diagnostics](http://sciex.com/diagnostics) を参照してください。

**Rx only.**

国によっては、製品を入手できない場合があります。詳細については、お近くの販売代理店にお問い合わせいただくか、[sciex.com](http://sciex.com) を参照してください。

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

AB Sciex™ はライセンスの下で使用されています。

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



Leica Microsystems CMS GmbH  
Ernst-Leitz-Strasse 17-37  
35578 Wetzlar  
Germany



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

IVD

CE

UK  
CA

# 目次

---

<b>第 1 章：操作上の予防措置および制限事項</b> .....	<b>10</b>
一般的な安全情報.....	10
文書内の記号と規約.....	10
監督法規の遵守.....	11
カナダ.....	11
欧州.....	11
米国.....	11
国際.....	12
電気システムに関する注意.....	12
装置主電源.....	12
保護接地線.....	13
化学物質に関する注意.....	13
システムに対して安全な液体.....	14
換気に関する注意事項.....	15
物理的な注意事項.....	16
環境に関する注意事項.....	16
電磁環境.....	17
停止および廃棄.....	18
<b>第 2 章：使用および機能</b> .....	<b>19</b>
使用目的.....	19
使用制限.....	19
説明.....	19
資格のある技術者.....	19
品質管理ガイドライン.....	19
ラボラトリープロセス.....	20
品質管理サンプル.....	20
内部標準物質.....	20
参考資料.....	21
機器の利用と変更.....	21
検査室条件.....	22
安全な環境条件.....	22
性能仕様.....	22
<b>第 3 章：インストール手順および特別要件</b> .....	<b>23</b>
内蔵シリンジポンプ位置の調節.....	23
ダイバーターバルブの配管.....	27
インジェクターモードでのダイバーターバルブ配管.....	28
ダイバーターモードでのダイバーターバルブ配列.....	29
イオン源の取り付け.....	31

## 目次

---

取り付けの準備	31
プローブの取り付け	32
イオン源チューブの接続	34
質量分析装置へのイオン源の取り付け	34
<b>第 4 章：動作原理</b>	<b>37</b>
システム概要	37
質量分析装置の概要	38
イオン源の概要	41
Analyst MD ソフトウェアの概要	47
動作原理	52
ESI モード	54
APCI モード	54
データの取り扱い	54
動作原理 - ソフトウェア	55
Analyst MD ソフトウェアウィンドウ	55
Analyst MD ソフトウェアモード	56
定量分析	57
解析	58
結果表	58
キャリブレーションカーブ	58
回帰の種類	59
<b>第 5 章：性能特性および仕様</b>	<b>60</b>
質量分析装置の仕様	60
<b>第 6 章：使用説明—サンプルワークフロー</b>	<b>63</b>
<b>第 7 章：使用説明 — 質量分析装置とイオン源</b>	<b>68</b>
システムの起動	68
イオン源の最適化	69
TurbolonSpray プローブの最適化	69
APCI プローブの最適化	74
最適化に関するヒント	79
質量分析装置のキャリブレーション手順	79
質量分析装置のリセット	80
システムのシャットダウンと大気開放	80
<b>第 8 章：取扱説明書 — ハードウェアプロファイルおよびプロジェクト</b>	<b>82</b>
ハードウェアプロファイル	82
ハードウェアプロファイルの作成	82
ハードウェアプロファイルにデバイスを追加	87
ハードウェアプロファイルのデバイスの編集	88
ハードウェアプロファイル有効化のトラブルシューティング	89
プロジェクトおよびサブプロジェクト	90
サブプロジェクトについて	90

プロジェクトおよびサブプロジェクトの作成.....	91
サブプロジェクトの作成.....	91
サブプロジェクトのコピー.....	92
プロジェクトとサブプロジェクトの切り替え.....	92
インストールされるプロジェクトフォルダ.....	93
<b>第 9 章：使用説明—チューニングとキャリブレーション.....</b>	<b>94</b>
チューニングとキャリブレーションについて.....	94
API 機器フォルダのバックアップ.....	95
装置パラメータのバックアップ.....	95
装置パラメータの復元.....	95
自動チューニングおよびキャリブレーション.....	95
装置のパフォーマンスの検証.....	96
Verifying or Adjusting Performance ダイアログ.....	98
結果概要.....	98
API 機器フォルダの回復.....	99
<b>第 10 章：使用説明—自動最適化.....</b>	<b>100</b>
自動最適化について.....	101
サンプル導入の種類.....	101
注入を使用した分析試料の自動最適化.....	102
化合物の存在を確認.....	102
既知のプレカーサーイオンおよび未知のプロダクトイオンの注入を使用して自動 MS および MS/MS 最適化を実行.....	104
最適化結果のレビュー.....	107
フローインジェクション分析を使用し、自動的に分析試料を最適化.....	108
<b>第 11 章：使用説明—測定メソッド.....</b>	<b>114</b>
測定メソッドエディタを用いて測定メソッドを作成.....	114
LC メソッドについて.....	115
質量分析法メソッドの作成.....	115
測定メソッドからのデバイスの追加と削除.....	122
測定メソッドの変更.....	127
スキヤンの技術.....	129
四重極モードスキヤン種類.....	130
LIT モードスキヤンタイプ.....	130
スペクトルデータ収集について.....	131
<b>第 12 章：使用説明—バッチ.....</b>	<b>132</b>
バッチの作成および提出.....	132
キューオプションの設定.....	132
バッチの作成および提出.....	133
サンプルまたはサンプルセットの提出.....	137
サンプル順序の変更.....	138
Locations タブを使用してバイアルの位置を選択する(オプション).....	138
バッチエディタで定量詳細を設定(オプション).....	141

## 目次

---

システムの平衡化 .....	141
データの取得 .....	141
バッチファイルのインポート .....	142
バッチおよび Acquisition Method Editor のヒント .....	144
バッチトラブルシューティングのヒント .....	144
サンプル測定 of 停止 .....	145
<b>第 13 章：使用説明—データの分析と探索 .....</b>	<b>146</b>
スペクトルデータおよびクロマトグラムデータの概要 .....	146
データの分析 .....	147
データファイルを開く .....	147
データファイル内のサンプル間ナビゲーション .....	147
実験条件の表示 .....	148
表内のデータを表示 .....	148
基本定量データの表示 .....	150
スペクトル .....	151
クロマトグラム .....	151
スペクトルから TIC を表示 .....	152
TIC からスペクトルを表示 .....	152
XIC .....	153
BPC .....	156
しきい値の調整 .....	157
TWC の生成 .....	157
XWC の生成 .....	158
Show DAD Data .....	158
ACD データの表示 .....	159
グラフィックデータ処理 .....	159
データの管理 .....	159
グラフのズームイン .....	161
グラフのラベリング .....	161
スペクトルまたはクロマトグラムの重ね表示および集約 .....	162
バックグラウンド減算の実行 .....	164
スペクトルに対するバックグラウンド減算の実行 .....	164
範囲のロック解除 .....	165
アルゴリズムのスモーキング .....	166
スムーズアルゴリズム .....	166
ガウシアンスムーズアルゴリズム .....	166
データのスムージング .....	167
スムーズアルゴリズムを用いたデータのスムージング .....	167
ガウシアンスムーズを用いたデータのスムージング .....	167
データのセントロイド .....	168
処理済みのデータファイルの保存およびオープン .....	170
処理済みのデータファイルを保存する .....	170
処理済みデータファイルを開く .....	170
等高線図での作業 .....	170
等高線図の表示 .....	171
等高線図の領域の選択 .....	171
等高線図内の強度および吸光度の設定 .....	171

等高線図の色の変更.....	172
フラグメント解釈.....	172
フラグメント解釈ツールでの作業.....	172
フラグメントの数式の差異の表示.....	174
ライブラリデータベース.....	174
既存のライブラリデータベース間での切り替え.....	175
ローカルライブラリデータベースとの接続.....	177
サーバーライブラリデータベースへの接続.....	178
ライブラリ記録での作業.....	180
類似したスペクトルの検索.....	181
ライブラリ検索に関するヒント.....	184
<b>第 14 章：使用説明—定量データの分析および処理.....</b>	<b>186</b>
定量分析.....	186
定量化メソッド.....	186
Build Quantitation Method.....	187
定量化ウィザード.....	187
Quick Quant.....	187
定量化メソッドと結果表.....	187
Results Table のレイアウトの指定.....	192
結果表のデータのソート.....	193
ピークレビューとピークの手動積分.....	196
ピークのレビュー.....	196
手動でピークを積分.....	200
キャリブレーションカーブ.....	201
キャリブレーションカーブの表示.....	202
キャリブレーションカーブのオーバーレイ.....	203
サンプル統計.....	204
標準溶液および QC に対する統計の表示.....	204
メトリックプロット.....	204
メトリックプロットの生成.....	205
<b>第 15 章：Reporter ソフトウェア.....</b>	<b>209</b>
Analyst Reporter ユーザーインターフェース.....	210
レポートの生成.....	212
<b>第 16 章：サービスおよびメンテナンス情報 — 質量分析装置.....</b>	<b>214</b>
推奨メンテナンススケジュール.....	214
表面のクリーニング.....	217
イオン源排気ドレインボトルを空にする.....	217
フロントエンドのクリーニング.....	219
汚染の兆候.....	219
必要な道具.....	220
クリーニングのベストプラクティス.....	220
質量分析装置の準備.....	222
カーテンプレートのクリーニング.....	223
オリフィスプレート前面のクリーニング.....	224

## 目次

---

質量分析装置の運転再開.....	224
保管と取り扱い.....	224
粗引きポンプのオイルレベルの点検.....	225
サービスおよびメンテナンス — イオン源.....	225
イオン源の取り扱い.....	227
イオン源の取り外し.....	228
表面のクリーニング.....	228
プローブのクリーニング.....	228
プローブの取り外し.....	229
電極の交換.....	229
コロナ放電ニードルの交換.....	231
サンプルチューブの交換.....	233
<b>第 17 章：質量分析装置のトラブルシューティング.....</b>	<b>234</b>
<b>付録 A：SCIEX 4500MD システムのパラメータ.....</b>	<b>240</b>
<b>付録 B：イオン源パラメータおよび電圧.....</b>	<b>244</b>
TurbolonSpray プローブのパラメータ.....	244
APCI プローブのパラメータ.....	245
プローブポジション.....	245
溶媒組成.....	245
<b>付録 C：キャリブレーションイオンと溶液.....</b>	<b>247</b>
<b>付録 D：ツールバーアイコン.....</b>	<b>249</b>
<b>付録 E：動作原理 — イオン源.....</b>	<b>259</b>
エレクトロスプレーイオン化モード.....	259
APCI モード.....	260
APCI イオン化領域.....	262
<b>付録 F：手動での化合物最適化.....</b>	<b>265</b>
手動での化合物最適化について.....	266
スキャン種類について.....	266
分析試料の手動最適化.....	266
化合物の存在を確認.....	266
MS 特異パラメータの最適化.....	268
最適化のためのプロダクトイオンを決定.....	270
各プロダクトイオンの衝突セル出口電位を最適化する.....	271
イオン源とガスパラメータの手動最適化.....	272
イオン源の準備.....	272
イオン源パラメータの最適化.....	272
拡張パラメータ.....	273



---

AF2 の最適化 .....	273
衝突エネルギーの広がり (CES) .....	273
<b>付録 G : 右クリックメニュー .....</b>	<b>275</b>
Batch Editor .....	275
キュー状態とデバイス状況 .....	276
キュー状態 .....	276
機器およびデバイスステータスアイコンを表示 .....	277
キュー .....	278
Contour Plot ペインの右クリックメニュー .....	279
Show File Information ペインの右クリックメニュー .....	280
スペクトルペイン .....	280
クロマトグラムペイン .....	281
Results Table .....	282
ピークレビュー .....	283
キャリブレーションカーブ .....	284
<b>付録 H : シンボルについての用語集 .....</b>	<b>285</b>
<b>付録 I : 警告についての用語集 .....</b>	<b>291</b>
<b>お問い合わせ先 .....</b>	<b>293</b>
お客様のトレーニング .....	293
オンライン学習センター .....	293
SCIEX サポート .....	293
サイバーセキュリティ .....	293
ドキュメント .....	293

# 操作上の予防措置および制限事項

# 1

---

注: システムを操作する前に、本ガイドのすべてのセクションを注意してお読みください。

---

本項には、一般の安全関連の情報が含まれており、規制対応の情報が提供されています。また、システムに関する潜在的な危険および関連する警告および危険を最小限にするために採るべき予防措置も説明されています。

ラボ環境、システムおよび本文書内で使用されている記号と約束事に関する情報については、本項に加えて、[シンボルについての用語集](#)を参照してください。装置主電源、イオン源排気、換気、圧縮空気、窒素、および粗引きポンプの要件などの施設要求事項については、[設置計画概要書](#)を参照してください。

## 一般的な安全情報

人身傷害またはシステムの損傷を防ぐために、本書、メーカーの化学薬品安全性データシート (SDS)、および製品ラベル情報に記載されているすべての安全に関する注意事項および警告を読み、理解し、それに従ってください。ラベルは、国際的に認められたシンボルで表示されています。これらの警告に従わない場合、重傷に至る可能性があります。

この安全情報は、連邦、州、地方、および地域環境、衛生および安全 (EHS) 規制を補足するものです。ここで提供される情報には、本システムの操作に適用されるシステム関連の安全情報が含まれています。実践すべき安全手順がすべて掲載されているわけではありません。最終的に、連邦、州、地方、そして地域の EHS 規則等の遵守、および安全なラボ環境の維持に対する責任は、ユーザーと組織にあります。

適切なラボの参考資料と標準作業手順書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。

---

## 監督法規の遵守

本システムは、本セクションに記載されている規制および標準に準拠しています。引用規格は、システムおよび個々のシステムコンポーネント同梱の**適合宣言書**を参照してください。適応ラベルはシステムに貼られています。

### カナダ

- **電磁妨害(EMI):** CAN/CSA CISPR11。この ISM 機器は、カナダ ICES-001 に適合しています。次のセクションを参照してください: [電磁妨害](#)。
- **安全性:**
  - CAN/CSA C22.2 No.61010-1
  - CAN/CSA C22.2 No 61010-2-061
  - CAN/CSA C22.2 No. 61010-2-101

### 欧州

- **インビトロ診断機器(IVD):** インビトロ診断規制 2017/746
- **電磁両立性 (EMC):** 以下の標準で実行されている電磁両立性指令 2014/30/EU:
  - EN 61326-1
  - EN 61326-2-6
  - EN 55011 (Class A)

[電磁両立性](#)を参照してください。

- **安全:** 以下の標準で実行されている低電圧指令 2014/35/EU:
  - EN 61010-1
  - EN 61010-2-061
  - EN 61010-2-101
- **廃棄物、電気および電子機器 (WEEE):** 廃電気電子機器指令 2012/96/EEC (EN 40519 で実施される通り)。[廃電気電子機器指令](#)を参照してください。
- **梱包および梱包廃棄物 (PPW):** 梱包および梱包廃棄物指令 94/62/EC
- **RoHS 有害物質制限指令:** RoHS 指令 2011/65/EU および 2015/863/EU

### 米国

- **無線送信妨害規制:** 47 CFR 15 (FCC Part15 で実施される通り(クラス A))

## 操作上の予防措置および制限事項

---

- **安全性:** 職業安全衛生法、29 CFR 1910(以下の標準で実施される通り):
  - UL 61010-1
  - IEC 61010-2-061
  - IEC 61010-2-101

## 国際

- **電磁両立性(EMC):**
  - IEC 61326-1
  - IEC CISPR 11(クラス A)
  - IEC 61000-3-2
  - IEC 61000-3-3

次のセクションを参照してください: [電磁両立性](#)。

- **安全性:**
  - IEC 61010-1
  - IEC 61010-2-061
  - IEC 61010-2-101

## 電気系統に関する注意



**警告! 感電の危険。カバーを取り外さないでください。カバーを取り外すと、傷害またはシステムの故障が発生する場合があります。定期的なメンテナンス、点検、または調整のためにカバーを取り外す必要はありません。カバーを取り外す必要がある修理については、SCIEX フィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。**

- 電気安全作業習慣に従ってください。
- ケーブルの管理慣行の実行により、ケーブルを管理してください。これにより、つまり危険が軽減します。

システムの電気仕様については、[性能特性および仕様](#)または[設置計画概要書](#)を参照してください。

## 装置主電源

本ガイドの指示の通り、システムを互換性のある主電源に接続します。



**警告! 感電の危険。すべての電気機器および接続器の設置は必ず有資格者が実施し、すべての設置が現地規制および安全規格に従うようにしてください。**



警告! 感電の危険。緊急時にはシステムを主電源コンセントから外せるようにしてください。主電源コンセントの周囲に物を置かないでください。



警告! 感電の危険。システムに同梱された主電源ケーブルのみを使用します。このシステムの操作にとって適切な定格ではない主電源ケーブルは使用しないでください。



外部線状変成器は質量分析装置、オプションベンチ、または粗引きポンプには不要です。

## 保護接地線

装置主電源には、保護接地(アース)が正常に組み込まれていなければいけません。システムを接続する前に、資格のある技師により必ず保護接地線(アース)を設置または点検してください。



警告! 感電の危険。保護接地線を意図的に妨害しないでください。保護接地線の妨害が生じると、感電の危険が発生します。



警告! 感電の危険。保護接地線(接地ケーブル)がサンプルループとイオン源の適切な接地点の間に接続されていることを確認します。この補足的な接地は、SCIEX によって指定された安全構成を強化するものです。



## 化学物質に関する注意



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。クリーニングやメンテナンス前に、汚染除去が必要かどうかを判断します。放射性物質、生物学的病原体、または有害化学物質が質量分析装置に使用された場合、お客様はクリーニングまたはメンテナンス前にシステムに対して汚染除去を行う必要があります。



警告! 環境の危険。システムコンポーネントを一般廃棄物として処分しないでください。コンポーネントを処分する際は、現地規制に従います。



警告! 生物学的危険、有害化学物質の危険。漏れを防ぐために、ドレインチューブを質量分析装置とイオン源排気ドレインボトルに正しく接続します。



- サービスや定期メンテナンスの前に、システムに使用された化学物質を特定してください。化学物質について従うべき安全衛生対策については、*Safety Data Sheet* を参照してください。保管

## 操作上の予防措置および制限事項

---

については、[分析証明書](#)を参照してください。SCIEX 安全性データシートまたは[分析証明書](#)を見つけるには、[sciex.com/tech-regulatory](https://sciex.com/tech-regulatory) にアクセスしてください。

- 割り当てられた個人用保護具を常に着用してください。これにはパウダーフリーの手袋、安全メガネ、および白衣が含まれます。

---

**注:** ニトリルまたはネオプレンの手袋をお勧めします。

---

- 通気性の良いエリアまたは換気フード内で作業を行ってください。
- イソプロパノール、メタノール、その他可燃性溶媒などの可燃性物質を用いて作業を行う際には、発火源を避けてください。
- 化学物質の使用および廃棄については十分注意してください。化学物質の取り扱いおよび廃棄について正しい手順が守られない場合には、人身傷害の危険があります。
- クリーニングの間、および使用後の手洗いの際には化学物質が肌に触れないようにしてください。
- すべての排気ホースがしっかりと接続され、すべての接続が設計通りに機能していることを確認します。
- 使用済み液体をすべて回収し、有害廃棄物として処分します。
- 生物学的危険のある物質、毒性物質、および放射性物質の保管、取り扱い、廃棄については、すべての現地規制を遵守してください。
- (推奨)粗引きポンプ、溶剤ボトル、および廃棄物コンテナの下に、化学物質がこぼれた場合に受け止めることができる、二次的な封じ込め用トレイを置いてください。

## システムに対して安全な液体

以下の液体は、本システムで安全に使用できます。安全な洗浄液については、[必要な道具](#)を参照してください。



**注意:** ダメージを与える恐れ。他の液体は、SCIEX によって危険がないことが確認されるまで、使用しないでください。これは完全なリストではありません。

---

**注:** LC 移動相には、新たに調製した LC-MS グレード以上の溶剤だけを使用してください。

---

- **有機溶剤**
  - LC-MS グレードアセトニトリル、最大 100%
  - LC-MS グレードメタノール、最大 100%
  - LC-MS グレードイソプロパノール、最大 100%
  - LC-MS グレード以上の水、最大 100%
- **バッファ**
  - 酢酸アンモニウム; 100mM 未満
  - ギ酸アンモニウム; 100mM 未満

• 酸と塩基

- ギ酸 1% 未満
- 酢酸 1% 未満
- トリフルオロ酢酸(TFA) 1% 未満
- ヘプタフルオロ酪酸(HFBA) 1% 未満
- アンモニア/水酸化アンモニウム 1% 未満

## 換気に関する注意事項

ガスの換気や廃棄物の処理は必ず連邦政府、州、区域、地域の保健規制や安全規制を遵守してください。地域の衛生法規や安全規制に準拠して空気の品質を維持することは、お客様の責任です。

イオン源排気システムおよび粗引きポンプは、必ず専用の検査室用ドラフトチャンバまたは外部排気システムに通気してください。



**警告!** 火災の危険。可燃性蒸気がイオン源に溜まるのを防ぐため、イオン源排気システムが接続され機能していることを確認してください。



**警告!** イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。排気ガスを専用のラボ用ガス換気フードまたは排気システムで通気するように注意して、換気チューブがクランプで固定されていることを確認します。ラボは実施される作業に適切な換気が行われるようにしなければなりません。



**警告!** イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。イオン源排気管や粗引きポンプ排気ホースがラボ換気システムに適切に接続されていない場合、質量分析装置を操作しないでください。定期的に排気チューブを点検し、漏れがないことを確認してください。適切なシステムの換気をせずに質量分析装置を使用すると、健康を害し、重度の傷害を引き起こす恐れがあります。



**警告!** イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。イオン源で使用する有害物質や障害性物質の適正使用、汚染、排気に関する知識や訓練なしに、イオン源を使用しないでください。





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

## 物理的な注意事項



**警告!** 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、Turbo V のイオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面の一部と真空インターフェースが熱くなります。



**警告!** 吊り上げ時の危険性。質量分析装置を持ち上げたり移動したりする際は機械式昇降装置を使用します。質量分析装置を手動で移動させなければならない場合、この装置を安全に動かすには少なくとも 6 人が必要です。認定を受けた安全吊り上げ手順に従います。専門の移動サービス業者に依頼することを推奨します。システムコンポーネントの重量については、*設置計画概要書*を参照してください。

## 環境に関する注意事項

送電線、加熱装置、換気装置、配管の供給および固定などのインストールについては資格のある担当者にお問い合わせください。すべての設置が地方条例および有害物質規制を遵守していることを確認してください。システムの環境条件への要求事項に関する情報は、*設置計画概要書*を参照してください。

システムのセットアップを行う際には、機器の周囲にアクセス空間を確保してください。



**危険!** 爆発の危険。爆発性ガスを含む環境でシステムを操作しないでください。システムは爆発の危険がある環境での操作を意図していません。



**警告!** 生物学的危険。生物学的危険のある物質を使用する場合、危険性評価、制御、および危険物取り扱いに関する現地規制を必ず遵守します。本システム、あるいはそのいかなる部分も、生物学的封じ込めとして機能することを意図していません。



**警告!** 環境の危険性。生物学的危険、有毒性、放射性がある廃棄物、および電子廃棄物の処分に関しては確立された手順に従ってください。化学物質、廃油および電子部品を含む危険物質の廃棄については、お客様が地域の法律および規制に従って行う責任があります。

**注意:** 質量シフトの可能性。周辺温度を安定した状態に保ってください。温度の変化が毎時 2°C を超えると、分解能と質量較正に影響する可能性があります。



**注意:** システム汚染の可能性。ガス発生装置をコンプレッサと一緒に使用する際の詳細については、ガス発生器に同梱されているメーカーのドキュメントを参照してください。たとえば、ガス発生装置とコンプレッサを併用した場合、炭化水素が環境に存在すると質量分析装置に入る可能性があります。

---

## 電磁環境 電磁両立性

**基本的電磁環境:** 公共メインネットワークからの低電圧で直接供給されているという特徴がある場所に存在する環境。

**性能基準 A (基準 A):** 機器は、テスト中またはテスト後に性能の低下なしおよび機能の損失なしに想定どおりに操作できるものとします。

**性能基準 B (基準 B):** 機器は、テスト中に機能を損失(1 つ以上)する可能性があるが、テスト後に性能がいくらか低下して機能が自己回復可能で想定どおりに操作できるものとします。

**性能基準 C (基準 C):** 機器は、テスト中に機能を損失(1 つ以上)する可能性があるが、テスト後に性能がいくらか低下して機能がオペレータによって回復可能で想定どおりに操作できるものとします。

機器は、基本的電磁環境での使用を前提としています。

電磁環境耐性条件における予想される性能損失は、総イオンカウント(TIC)の変化が 20%未満です。

**注意:** 結果が不正確になる可能性。電磁(EMC)放射線によって適切な操作が妨げられる可能性があるため、強 EMC 放射線源(シールドされていない意図的な RF 源など)のすぐ近くでこの装置を使用しないでください。

---

装置と互換性のある電磁環境が整備されており、装置が想定どおりに操作できることを確認してください。電源ラインの電氣的ノイズが大きい場合は、サージ保護装置を取り付けてください。

## 電磁妨害

**グループ 1 機器:** この機器は、内部動作に RF エネルギーを使用する可能性のある産業・科学・医療(ISM)用機器に分類されます。

**クラス A 機器:** 家庭用施設および住宅用に使用される建物に供給する低電圧電源供給ネットワークに直接接続する施設以外のすべての施設内での使用に適する機器。[CISPR 11:2009, 5.3 より派生] クラス A 機器はクラス A の制限を満たすものとします。

---

**注意:** 電波障害の恐れ。この機器は住宅環境での使用を意図したものではなく、そのような環境では無線受信に対する適切な保護が得られない恐れがあります。

---

この装置はクラス A デジタル機器の制限に準拠したテストを行っており、FCC (Federal Communications Commission: 連邦通信委員会) コンプライアンス規制パート 15 の基準を満たしています。

これらの制限は、装置が商業環境下で用いられた場合に、妨害行為から装置を適切に保護する必要性を考慮したものです。この装置は高周波エネルギーの生成、使用および放出を行います。オペ

## 操作上の予防措置および制限事項

---

レーターズマニュアルに従ってインストールおよび使用が行われなかった場合は、ラジオ通信に障害を発生させる恐れがあります。

住宅地域でのこの装置の操作は、発生した場合に自己負担で妨害を修正する必要がある有害な妨害を引き起こす恐れがあります。製造業者によって認可のない変更や調節を行った場合、装置を使用する権限が無効になる場合があります。

## 停止および廃棄



**警告! 環境の危険性。生物学的危険、有毒性、放射性がある廃棄物、および電子廃棄物の処分に関しては確立された手順に従ってください。化学物質、廃油および電子部品を含む危険物質の廃棄については、お客様が地域の法律および規制に従って行う責任があります。**

---

停止の前に、現地規制に従ってシステム全体に対して汚染除去を行います。

システムをサービスから外す際は、国または地域の換気用規制に従って、異なる素材を分別およびリサイクルしてください。[保管と取り扱い](#)を参照してください。

**注:** SCIEX は汚染除去フォームの記入のない場合、システムの引き取りはお受けしかねます。フォームのコピーが必要な場合は、フィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。

---

分別していない一般廃棄物としてコンピュータの部品を含むシステムのコンポーネントおよびサブアセンブリを廃棄しないでください。

## 廃電気電子機器指令

廃棄物、電気および電子機器(WEEE)の環境への影響を軽減するための適切な廃棄規定については、地域の一般廃棄物命令に従ってください。この機器を安全に廃棄するために、お近くのカスタマーサービスに連絡し、無料の機器引き取りおよびリサイクルをご利用ください。

## 使用目的

4500MD システムはヒトの標本から無機、有機化合物を識別するための液体クロマトグラフィー-タンデム質量分析 (LC-MS/MS) システムです。調査対象の化合物をイオン化し、結果として生じたイオンを質量に応じて電解分離にかけるという方法を用います。In Vitro 診断用。

## 使用制限

4500MD システムは、資格のある検査技師による、臨床検査室での専門的使用のみを前提としています。

## 説明

4500MD システムには、以下のコンポーネントが含まれています。

- TurbolonSpray プローブまたは大気圧化学イオン化 (APCI) プローブのいずれかを使用する Turbo V イオン源、粗引きポンプ、および圧縮空気と窒素の供給源を備えた SCIEX Triple Quad 4500MD 質量分析計または QTRAP 4500MD 質量分析計。
- SCIEX 供給のコンピュータとモニター、および装置の最適化、測定メソッドの開発、およびデータ収集用の Analyst MD ソフトウェア、および処理用の MultiQuant MD ソフトウェア。

注: 中国の場合、トリプル四重極質量分析装置のみが提供されます。これらのシステムは、リニアイオントラップ (LIT) のスキャン種類に対応していません。

## 資格のある技術者

資格のある SCIEX エンジニアのみが、装置の設置、検査、およびサービスを行うようにしてください。システムのインストール後、フィールドサービスエンジニア (FSE) はカスタマー習熟チェックリストを使用し、お客様にシステムの動作、クリーニング、基本のメンテナンスを説明します。SCIEX の承認を受けていない技術者が修理を行った場合、SCIEX による保証の対象外となることがあります。

装置のメンテナンスは、製造業者が認定した技術者のみが行うようにしてください。ラボで指定された者は、有資格保守要員 (QMP) とともに設置時の手順について習熟度を深めることもできます。QMP とは、ラボの機器へのサービスに関連する電気および化学物質のリスクに関して適切な意識のある担当者です。

## 品質管理ガイドライン

4500MD システムはオペレータの研修、分析開発および検証、検査室での分析パフォーマンスに関する外部監査などの目的で、臨床検査室において使用されることを前提としています。

## ラボラトリープロセス

レポート結果<sup>2,5</sup>を臨床用に実施する前にメソッドを検証してください。同様に、分析前、分析中、分析後プロセスにおいて意図した使用<sup>3</sup>と異なることがないように、分析方法のための標準作業手順(SOP)を確立してください。たとえば、少なくとも以下の内容についての SOP が必要です:<sup>3,4</sup>

- サンプル収集メソッド
- サンプル準備メソッド
- 液体クロマトグラフィー設定および初期条件
- 質量分析装置のセットアップおよびキャリブレーション初期条件
- 液体クロマトグラフィーおよび質量分析装置のメンテナンス
- 質量分析装置の測定メソッド
- サンプルバッチリスト準備メソッド
- データ分析メソッド
- データレビュー
- データ分析完了後のプロトコルリリース

生データの品質、および Analyst MD ソフトウェアによって実行されたピーク積分の正確性を確保するために、すべての積分結果を手動で確認することを推奨します。クロマトグラムのピークのレビューは、必ず訓練を受けた専門担当者が行ってください。Analyst MD ソフトウェアがクロマトグラムのピークを正しく積分できない場合、その原因は近くの溶出ピーク、ピーク分離、ノイズデータ、または高バックグラウンド信号の存在である可能性があります。分析手法についてのラボの標準作業手順書(SOP)に従って、ピーク積分を修正する必要があります。

## 品質管理サンプル

品質管理(QC)サンプルは分析手法のパフォーマンスに対するフィードバックを提供し、ラン中に分析される不明なサンプルの完全性および正当性を評価します<sup>2</sup>。QC サンプルデータは毎日監視します。分析ランに QC サンプルを含める場合は、適切なガイダンスに従ってください。

QC サンプルは適切な文書により商業的供給源により入手するか、特徴がはっきりした患者サンプルの備蓄から入手できます<sup>2</sup>。患者サンプルの分析ラン毎に、少なくとも 2 点の QC サンプルが含まれていることを推奨します<sup>1,2</sup>。QC サンプルが分析手法のための事前設定限度内であることを確認するために、データ見直しプロセスを使用します。分析ランにより取得された QC のデータが、事前設定限度外の場合は、無効の可能性があります<sup>2</sup>。検査室の SOP を参照してください。

## 内部標準物質

内部標準物質とは、構造的な類似物質である分析試料、または安定的で、同位体的に分類される分析試料であり、定量を容易にするために、設定された一定の濃度ですべてのサンプル種類(標準溶液、ブランク、品質管理、未知物質)に追加されます<sup>3</sup>。内部標準物質の信号強度は分析メソッドの統合性や個々のサンプルの妥当性を確認するため、分析ランを通してモニタリングされます。

SOP には内部標準物質の分析試料の評価および品質管理サンプルの判断基準が含まれていなければなりません。基準外のサンプルはメソッド、システム、またはサンプルのパフォーマンスで問

題を引き起こす可能性があります<sup>2,5</sup>。重要決定を伴う測定は、内部標準物質(同位体的に分類された分析試料)を用いて行ってください。早い段階でこれらの問題を特定することで、検査室での調査、修正、および再分析を必要に応じて行うことができます<sup>2,5</sup>。

## 参考資料

1. 業界向けガイダンス:生物分析法の検証; 米国食品医薬品局; 獣医用医薬品評価(CDER)センター(CVM)、2001年5月、BPセンター
2. CLSI 標準 C50-A-27 巻、No.24—臨床検査での質量分析:一般原則とガイダンス:承認されたガイドライン
3. ISO 17025:2005—試験および校正機関の能力に関する一般要求事項
4. ISO 15189:2012—臨床検査室-品質と能力に関する特定要求事項
5. CLSI 文書 C62-A:液体クロマトグラフィー、質量分析法、承認文書 34 巻、No.16、2014 年 10 月

## 機器の利用と変更



**警告! 人身傷害の危険。製品の設置、調整、または移設が必要な場合は、SCIEX の担当者にお問い合わせください。**



**警告! 感電の危険。カバーを取り外さないでください。カバーを取り外すと、傷害またはシステムの故障が発生する場合があります。定期的なメンテナンス、点検、または調整のためにカバーを取り外す必要はありません。カバーを取り外す必要がある修理については、SCIEX フィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。**



**警告! 人身傷害の危険。SCIEX が推奨する部品のみを使用してください。SCIEX が推奨しない部品を使用したり、用途以外の目的で部品を使用すると、測定者が危険にさらされたり、システムの性能に悪影響を及ぼしたりする可能性があります。**



**警告! 吊り上げ時の危険性。質量分析装置を持ち上げたり移動したりする際は機械式昇降装置を使用します。質量分析装置を手動で移動させなければならない場合、この装置を安全に動かすには少なくとも 6 人が必要です。認定を受けた安全吊り上げ手順に従います。専門の移動サービス業者に依頼することを推奨します。システムコンポーネントの重量については、*設置計画概要書*を参照してください。**



**警告! 挟み込みの危険性。重いものを動かす際は安全靴を履いてください。**

システムは、質量分析装置 *設置計画概要書* で推奨されている環境条件下にある屋内の検査室内で使用してください。

システムが製造業者の規定に反した環境および方法で使用された場合、機器に備わっている性能や保護機能が損なわれる可能性があります。

システム上で認定外の変更や動作を行ったために人身傷害や機器の破損が発生した場合は、保障が適用されない可能性があります。システムが推奨環境条件の範囲外で使用された場合、および認定外の変更を行った場合のどちらであっても、正常でないデータが生成されることがあります。システムサービスに関する情報は、FSE にお問い合わせください。

保証条件は、[sciex.com/warranty](https://sciex.com/warranty) ページから入手できます。4500MD システムの期待寿命は製造日から 7 年間です。スケジュールされたメンテナンス手順に従った場合、この耐用年数は延長される可能性があります。

## 検査室条件

### 安全な環境条件

システムは次の条件下で安全に動作するように設計されています。

- 室内
- 高度: 海拔 2,000 m (6,560 フィート) 以下
- 周辺温度: 5 °C (41 °F) ~ 40 °C (104 °F)
- 相対湿度: 20 % ~ 80 %、結露なし。
- 装置主電源電圧変動: 通常電圧の ± 10%
- 過渡過電圧: 過電圧カテゴリ II レベルまで
- 装置主電源の一時的過電圧
- 汚染度 2

### 性能仕様

システムは次の条件下で仕様に適合するように設計されています。

- 設置環境温度 15 °C ~ 30 °C (59 °F ~ 86 °F)

温度は常に、4 °C (7.2 °F) の範囲を維持し、毎時間 2 °C (3.6 °F) 以上の変化がないようにします。この制限を超えて環境温度が変化すると、スペクトルの質量シフトを引き起こす可能性があります。

- 相対湿度 20 ~ 80%、結露なし。

SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) がシステムをインストールおよび設定します。

このセクションでは、システムのハードウェアおよびソフトウェアの接続および設定の手順が示されています。システムの移動、再配管または再構成の必要がある場合は、このセクションの手順を参照してください。



**警告! 感電の危険。緊急時にはシステムを主電源コンセントから外せるようにしてください。主電源コンセントの周囲に物を置かないでください。**



Analyst MD ソフトウェアのインストールについては、ソフトウェアインストールガイドを参照してください。

## 内蔵シリンジポンプ位置の調節



**警告! 尖った部分により怪我をする危険。シリンジの取り扱いに注意してください。シリンジチップは非常に尖っています。**



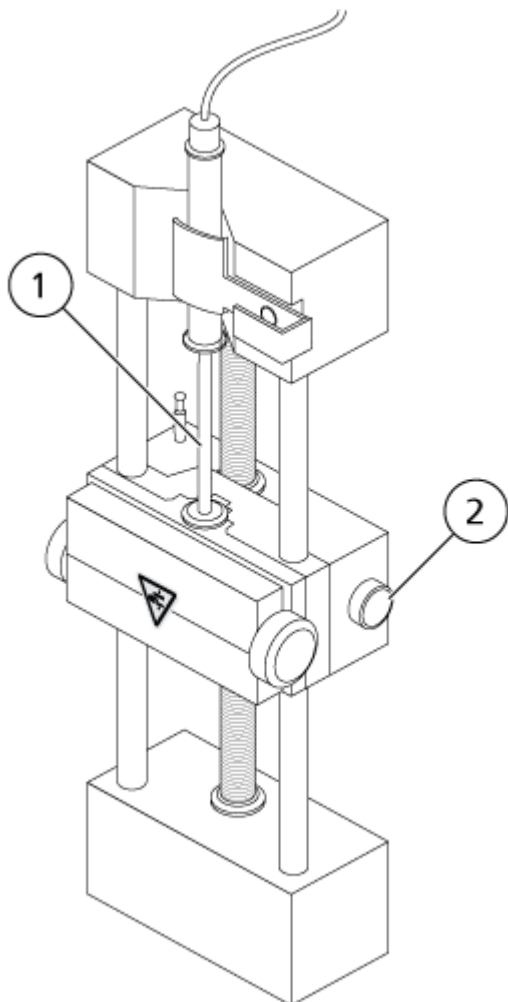
**警告! 尖った部分により怪我をする危険。シリンジがシリンジポンプに適切に固定され、自動シリンジポンプストップが適切に調整されて、ガラス製シリンジを損傷や破損から守っているかを確認します。シリンジが破損した場合、鋭利物の廃棄に関する認定を受けた安全手順に従います。**



質量分析装置のシリンジポンプの位置については、[質量分析装置の概要](#)を参照してください。

1. シリンジカバーを開きます。
2. ベースを下げるために、シリンジポンプ右面の Release ボタンを押してください。そして、シリンジを挿入してください。

図 3-1 : シリンジを下げる

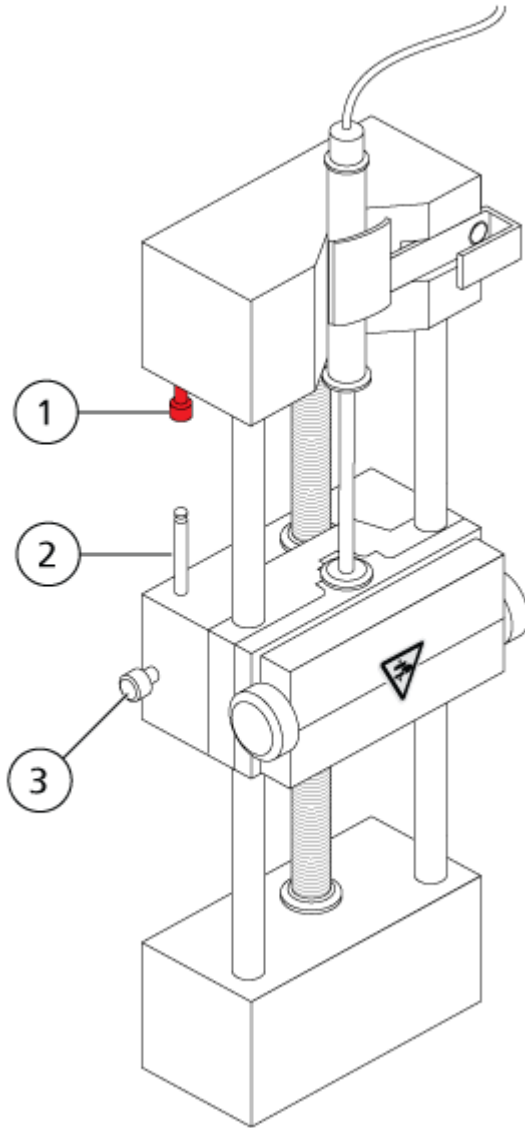


項目	説明
1	シリンジプランジャー
2	Release ボタン。ベースを上げ下げするために押してください。

3. シリンジの端がベースと同じ高さで、シリンジのシャフトがカットアウトで動かないことを確認してください。
4. シリンジプランジャーがガラスのシリンジの底に当たる前に自動シリンジ停止がかかるように、ポストを調節してください。



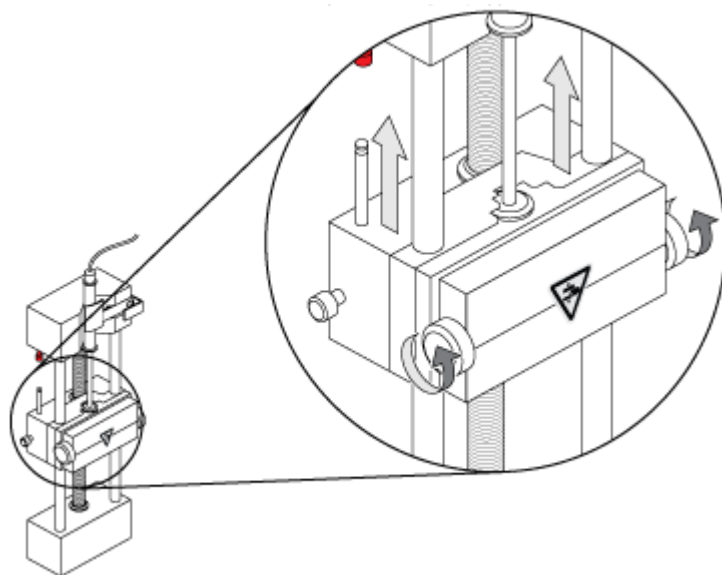
図 3-2 : 自動シリンジ停止



項目	説明
1	自動シリンジ停止。ポストが自動シリンジ停止に当たったあと、シリンジポンプは停止します。
2	ポスト。サンプル注入の間、シリンジプランジャーがシリンジを打つのを防ぐために高さを調整してください。
3	ロックネジを取り付けてください。ポストの高さを調節したあと、ネジを締めてください。

5. シリンジポンプのねじを回してシリンジを固定します。

図 3-3 : シリンジポンプネジ



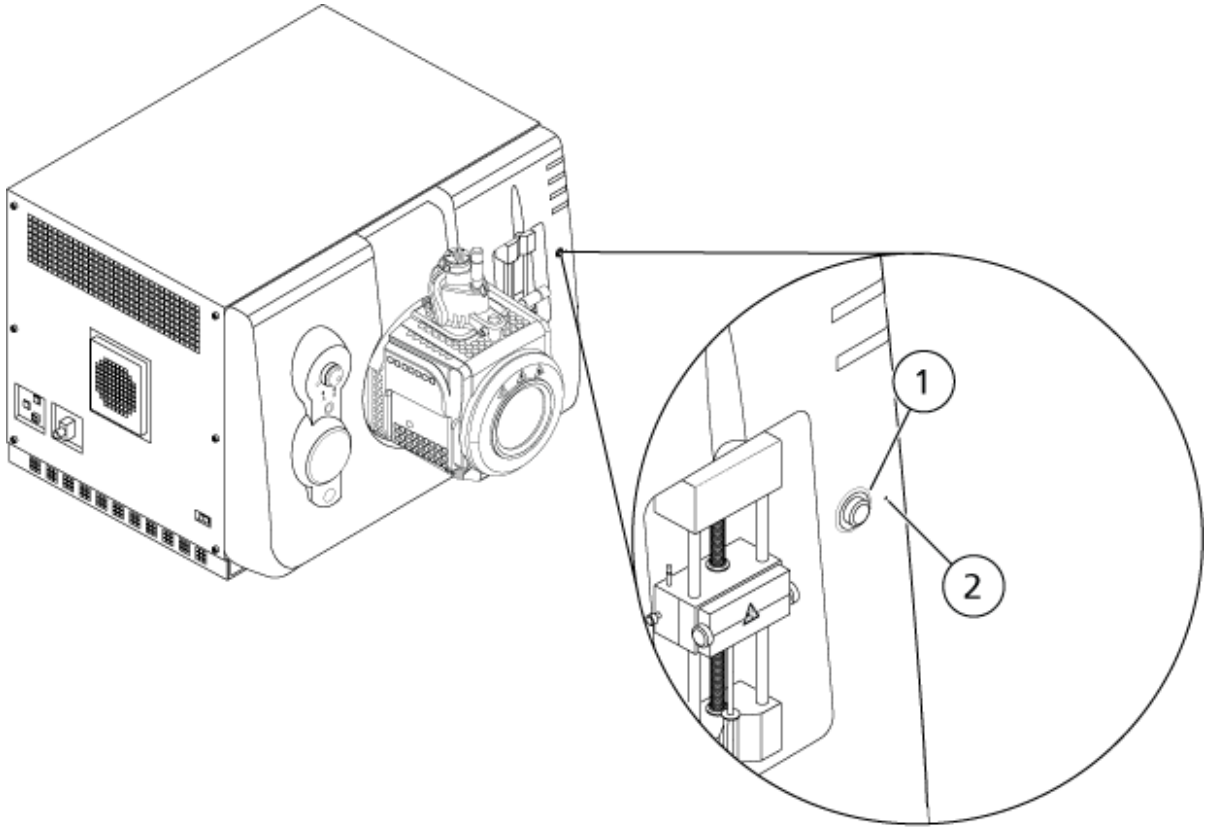
6. 質量分析装置と内蔵シリンジポンプをソフトウェアで確実に作動させます。

---

**注:** 以降の手動使用では、質量分析装置が Ready 状態になったら、シリンジの右側にある質量分析装置のボタンを押してフローを開始します。シリンジポンプの使用中には、ボタン横の LED が点灯します。シリンジポンプの流量は Analyst MD ソフトウェアで自動的に制御することもできます。

---

図 3-4 : シリンジポンプ LED



項目	説明
1	シリンジポンプ ON/OFF ボタン
2	シリンジポンプステータス LED

7. Analyst MD ソフトウェアの Navigation バーで **Manual Tuning** をクリックします。
8. **Start Syringe** をクリックします。
9. シリンジポンプを停止するには、**Stop Syringe** をクリックします。

## ダイバーターバルブの配管

イオン源の横にある内蔵ダイバーターバルブは、インジェクターモードまたはダイバーターモードで配列することができます。バルブを構成するには、Configuration タブを開き、**Use integrated injector/diverter valve** チェックボックスがオンになっていることを確認します。[ハードウェアプロファイルにデバイスを追加](#)を参照してください。

**注意:** 結果が不正確になる可能性。運転中、ダイバーターバルブボタンを押さないでください。データが不正確になる場合があります。

## インジェクターモードでのダイバーターバルブ配管

バルブが位置 A の場合、サンプルが外部ループを流れます。バルブが位置 B へ切り替わった場合、サンプルが注入されます。

インジェクターモードのバルブを配列します。

図 3-5 : ダイバーターバルブ:インジェクターモード位置 A

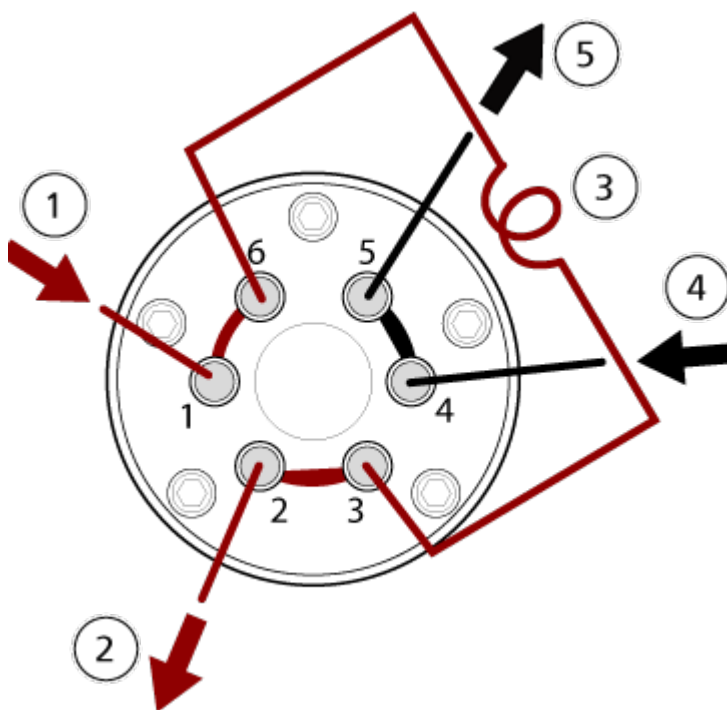
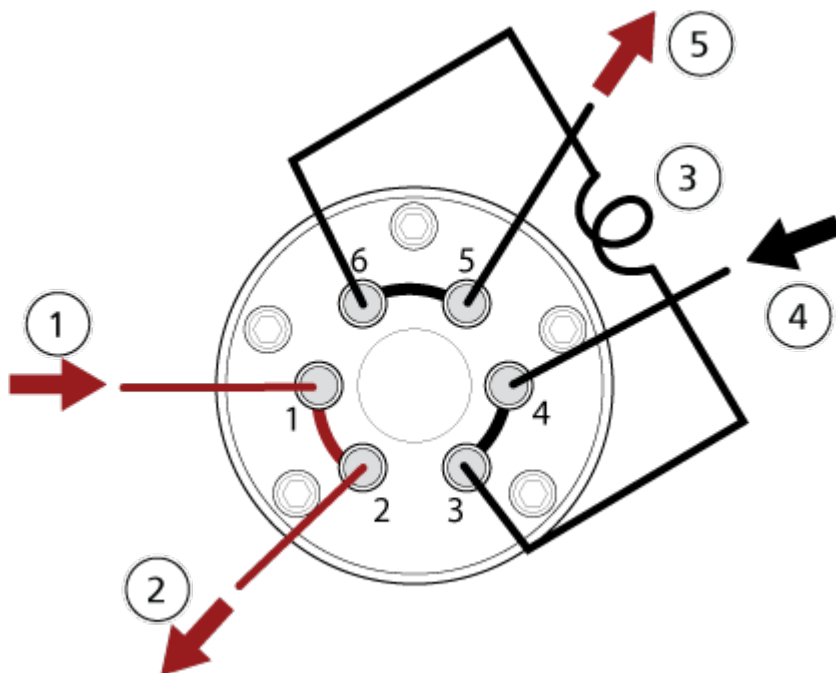


図 3-6 : ダイバーターバルブ:インジェクターモード位置 B



項目	説明
1	サンプルイン
2	排出
3	サンプルループ(ポート 3 および 6)
4	移動相イン
5	カラムへ、またはカラムが取り付けられていない場合は質量分析装置へ

### ダイバーターモードでのダイバーターバルブ配列

バルブが位置 A の場合、サンプルフローは質量分析装置側に流れます。バルブを位置 B に切り換えると、流量は無駄になります。

ダイバーターモードのバルブを配列します。

図 3-7 : ダイバーターバルブ:ダイバーターモード位置 A

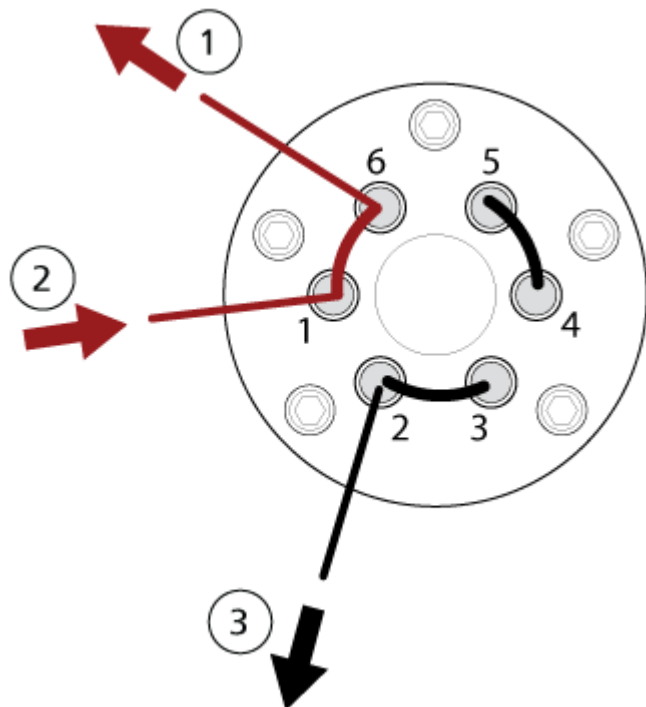
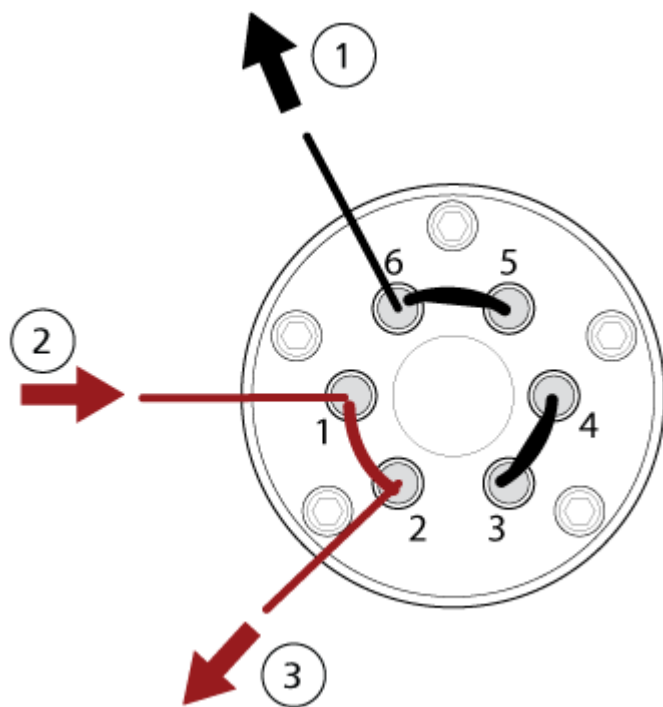


図 3-8 : ダイバーターバルブ:ダイバーターモード位置 B



項目	説明
1	質量分析装置へ

項目	説明
2	カラムから
3	排出

## イオン源の取り付け



**警告!** 感電の危険。この手順の最終手順として、イオン源を質量分析装置に取り付けます。イオン源を設置する際、高圧が発生しています。

**注意:** ダメージを与える恐れ。イオン源を片手で持ち上げたり、運んだりしないでください。イオン源は、両手(イオン源の各面に1つ)で持ち上げたり持ち運んだりできるように設計されています。

イオン源が真空インターフェースに接続され、2つのイオン源ラッチで保持されます。イオン源の内部は、イオン源の側面と前面のウィンドウから確認できます。

イオン源が取り付けられている場合、ソフトウェアがイオン源を認識して、イオン源同定を表示します。

このガイドでは、質量分析装置を制御するソフトウェアを制御ソフトウェアと呼びます。

### 必要な資材

- イオン源
- TurbolonSpray プローブまたは APCI プローブ
- 赤の PEEK チューブ (0.005 インチ口径)

## 取り付けの準備



**警告!** 尖った部分により怪我をする危険。電極を取り扱うときは注意してください。電極チップは非常に尖っています。

**ヒント!** 空のパッケージを捨てないでください。イオン源を使用していないときの保管用として使用します。

プローブ上の電極調整ナットを調整して、電極チップを電極チューブ内で移動します。図 4-4 および図 4-5 を参照してください。

最適な安定性と性能を確保するために、電極チップがプローブ終端よりも 0.5 mm ~ 1.0 mm 先に伸びていなくてはなりません。TurbolonSpray プローブポジションの最適化 または APCI プローブポジションの最適化を参照してください。

## プローブの取り付け



**警告!** 感電の危険。続行する前に、質量分析装置からイオン源が完全に取り外されているかを確認します。

---



**警告!** 尖った部分により怪我をする危険。電極を取り扱うときは注意してください。電極チップは非常に尖っています。

---

**注意:** ダメージを与える恐れ。電極チップ突出部またはコロナ放電ニードルがイオン源ハウジングに一切触れないようにして、プローブを損傷から守ります。

---

**注意:** ダメージを与える恐れ。TurbolonSpray プローブを使用している場合は、コロナ放電ニードルチップを必ずアパチャ(開口部)から離してください。

---

### 実施前提手順

- [イオン源の取り外し](#)。

プローブはイオン源に事前にインストールされていません。プローブを交換する前に、質量分析装置からイオン源を必ず取り外します。

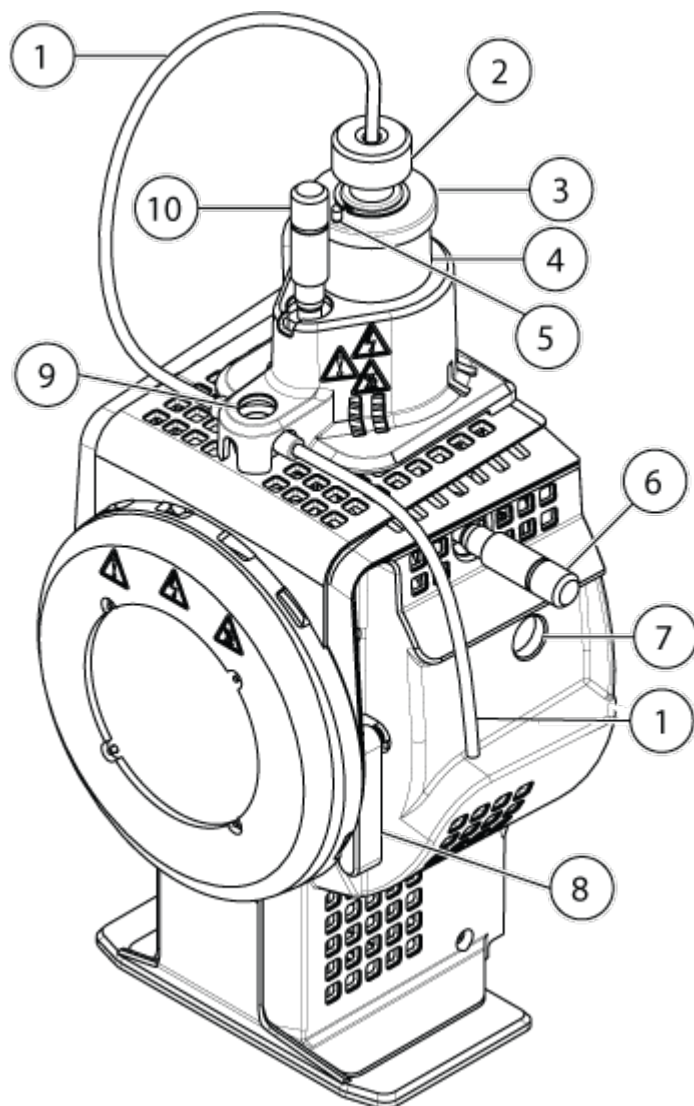
---

**注:** プローブがイオン源に適切に取り付けられていない場合、質量分析装置とイオン源排気システムの高電圧電源はオフになります。

---



図 3-9 : イオン源コンポーネント



項目	説明
1	サンプルチューブ
2	電極調整ナット
3	止めリング
4	プローブタワー
5	コロナ放電ニードル調整ネジ
6	プローブを水平軸上で移動して、イオン源感度調整を行うために使用するマイクロメータ
7	ウィンドウポート
8	イオン源を質量分析装置に固定する 2 つのイオン源ラッチのうちの 1 つ

項目	説明
9	接地継手部、イオン源カバーの下にあります
10	プローブを垂直軸上で移動して、イオン源感度調整を行うために使用するマイクロメータ

1. コロナ放電ニードルチップがカーテンプレートアパチャから離れていることを確認してください。[コロナ放電ニードルのポジションの調整](#)を参照してください。
2. プローブをタワーに挿入します。プローブの穴をイオン源の最上部にあるコロナ放電ニードル調整ネジに合わせます。[イオン源コンポーネント](#)を参照してください。
3. プローブをゆっくりと押し下げて、接点をタワーの接点と噛み合わせます。
4. プローブの止めリングを回して押し下げ、リングのネジとタワーのネジを噛み合わせてから、リングを手できつく締めます。
5. APCI プローブについてのみ、コロナ放電ニードルチップがカーテンプレートアパチャの方を指しているかを確認します。[コロナ放電ニードルのポジションの調整](#)を参照してください。

## イオン源チューブの接続



**警告! 感電の危険。接地継手部の接続を省略しないでください。接地継手部は、質量分析装置とサンプル導入装置の間を接地します。**



**警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。この装置を操作する前に、サンプルチューブナットが適切に締められているかを確認して、漏れを防ぎます。**



[イオン源コンポーネント](#)を参照してください。

1. 30 cm の赤い PEEK チューブをサンプルチューブナットに挿入します。
2. サンプルチューブナットをプローブ最上部のポートに取り付け、サンプルチューブナットを手できつく締めます。
3. チューブの反対の端部をイオン源の接地継手部に接続します。

## 質量分析装置へのイオン源の取り付け



**警告! 感電の危険。イオン源を質量分析装置に取り付ける前に、プローブをイオン源に取り付けます。**



**警告! 指挟みの危険性。イオン源を設置する際は、イオン源と真空インターフェースの間に指を挟まないように注意してください。**

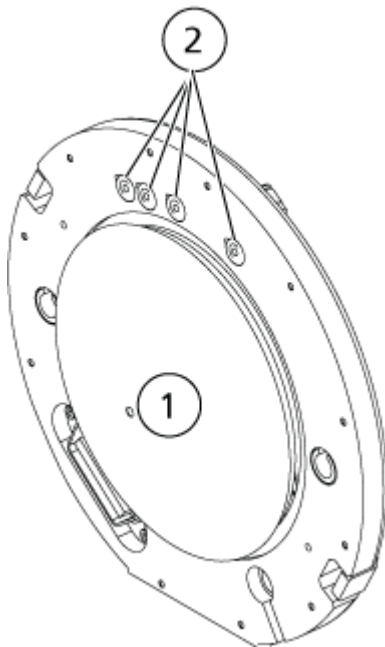
注意: ダメージを与える恐れ。電極チップ突出部またはコロナ放電ニードルがイオン源ハウジングに一切触れないようにして、プローブを損傷から守ります。

注: プローブがイオン源に適切に取り付けられていない場合、質量分析装置とイオン源排気システムの高電圧電源はオフになります。

前提条件

- 真空インターフェースにすべての O リングが取り付けられていることを確認します。

図 3-10 : 真空インターフェースの O リング



項目	説明
1	カーテンプレート
2	O リング

1. イオン源の両側面にあるイオン源ラッチが 12 時の位置にあることを確認します。[イオン源コンポーネント](#)を参照してください。
2. イオン源と真空インターフェースを位置合わせして、イオン源のガイドピンが真空インターフェースのソケットの位置に合っていることを確認します。
3. イオン源を真空インターフェースに軽く押し当て、イオン源ラッチを下向きに回してイオン源を所定の位置に固定します。  
質量分析装置がイオン源を認識し、イオン源の識別情報が制御ソフトウェアに表示されます。

4. サンプル供給デバイスの赤の PEEK チューブをイオン源の接地継手部の反対側に接続します。

システムは、ヒト標本内の無機物また有機物の化合物を確認することを意図しています。

このシステムは、生理学的サンプル内の小分子の分析を行うように設計されています。分析物の特性、または開始サンプルの複雑性に従い、溶液内の分析物抽出に先立って、サンプルの準備に様々な抽出、またはろ過を行う必要がある場合があります。サンプルは液体クロマトグラフで分離します。分離された画分は、質量分析装置に導入され、化合物の特定の分子量に基づいてさらに分離されます。

コンピュータおよびソフトウェアの詳細は、ソフトウェアのソフトウェアインストールガイドを参照してください。

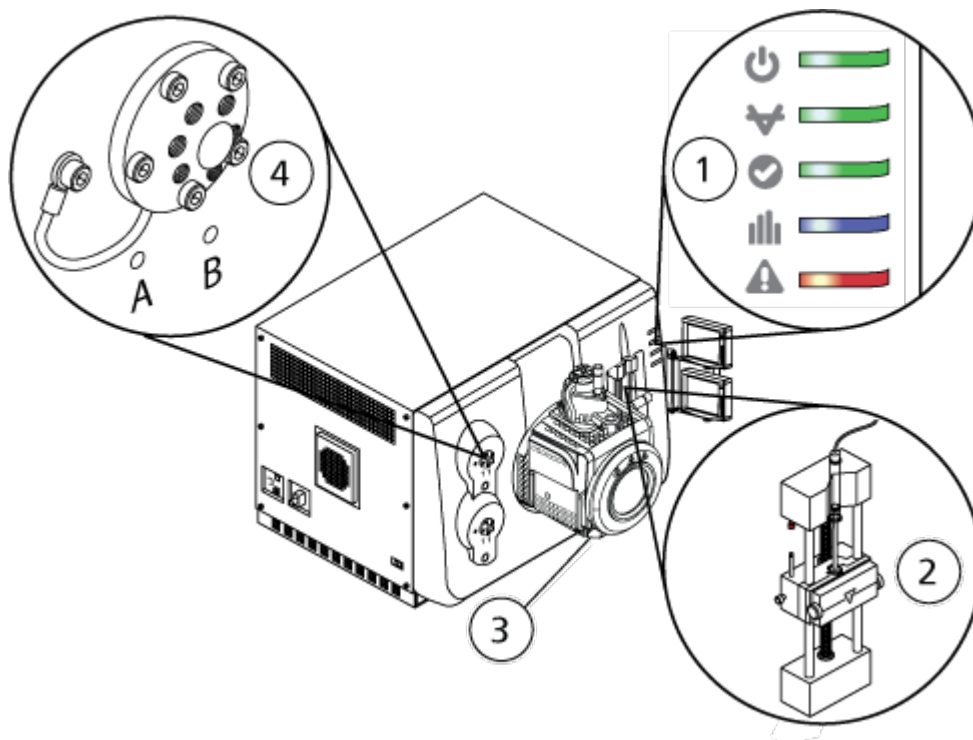
## システム概要

4500MD システムには、次のコンポーネントが含まれています：

- 粗引きポンプと圧縮空気および窒素源を装備した SCIEX Triple Quad 4500MD または 4500MD QTRAP 質量分析装置。
- Turbo V イオン源で、TurbolonSpray プローブまたは大気圧化学イオン化 (APCI) プローブを使用するもの。
- SCIEX 供給のコンピュータとモニター、および機器の最適化、測定メソッド開発、データ収集と処理のための Analyst MD ソフトウェア。コンピュータの仕様および要件については、Analyst MD ソフトウェアのソフトウェアインストールガイドを参照してください。

## 質量分析装置の概要

図 4-1 : 正面図



項目	説明	主要な材料	次を参照
1	パネルシンボル	プラスチック	<a href="#">パネルシンボル。</a>
2	シリンジポンプ	ペイント済みスチール(本体)、ステンレススチール(レール)、ブロンズ、Cu、Sn、Pb(ベアリング)	<a href="#">内蔵シリンジポンプ位置の調節</a>
3	イオン源	該当なし	<a href="#">イオン源の概要</a>
4	ダイバーターバルブ	ステンレススチール	<a href="#">ダイバーターバルブの配管。</a>





### パネルシンボル

次の表は、質量分析装置のステータス LED の意味を示しています。

表 4-1 : パネルシンボル

LED	色	名称	説明
	緑	Power	システムに電源が入ったときに点灯します。

表 4-1 : パネルシンボル (続き)

LED	色	名称	説明
	緑	真空	動作時の真空レベルに達したときに点灯します。動作時の真空レベルでない場合(ポンプダウンおよび通気中)には点滅しません。
	緑	準備完了	システムが準備完了状態にあるときに点灯します。システムは作動準備ができた状態である必要があります。
	青	スキャンング	システムがデータを取得しているときに点滅します。
	赤	障害	システムに障害が発生した場合に点灯します。

システムがオンにされた後、すべての LED が点灯します。電源 LED は点灯したままになります。他の LED は 2 秒間点滅してから消灯します。真空の LED が点滅します。動作時の真空レベルに到達すると、この LED は点灯したままになります。

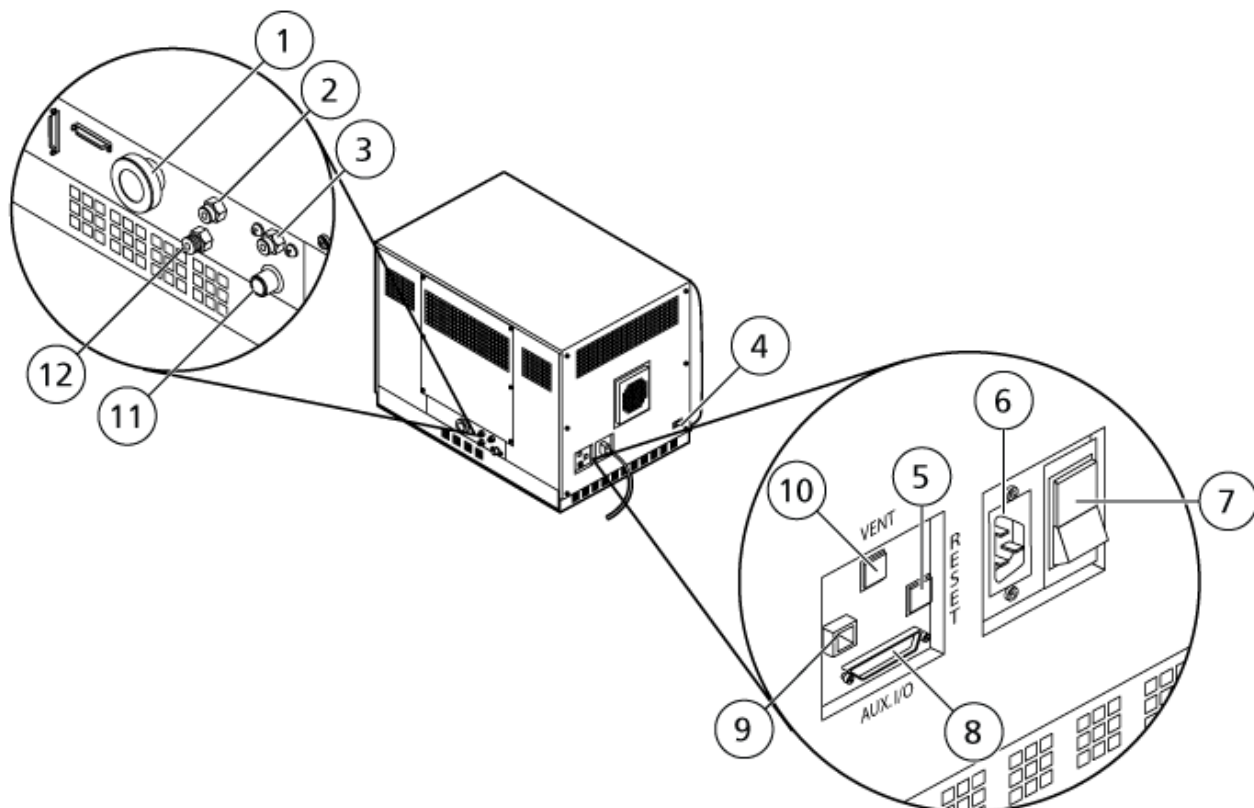
## 接続

次の図は、**RESET** ボタンと **VENT** ボタンの位置、質量分析装置のコンビニエンススイッチの位置など、質量分析装置の接続位置を示しています。



**警告! 人身傷害の危険: 圧縮ガスラインで作業中の注意を実行します。失敗した場合、個人レベルの傷害が生じる可能性があります。**

図 4-2 : 後面および側面の外観



項目	説明	主要な材料	詳細な情報については
1	粗引きポンプの真空接続	アルミニウム(ホース接続部)、亜鉛メッキスチール(ホースクランプ)	フィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。この接続はユーザー作業対象外です。
2	空気供給(ガス 1/ガス 2)	プラスチック	『設置計画概要書』を参照してください。
3	イオン源排気供給	プラスチック	<a href="#">イオン源排気システム</a> および <a href="#">設置計画概要書</a> を参照してください。
4	イオン源通信接続	アルミニウム	フィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。
5	RESET ボタン	プラスチック	<a href="#">質量分析装置のリセット</a> を参照してください。



項目	説明	主要な材料	詳細な情報については
6	主電源系の接続	アルミニウム/プラスチック	システムの起動またはシステムのシャットダウンと大気開放を参照してください。
7	質量分析装置のコンビニエンススイッチ <ul style="list-style-type: none"> <li>• 上 = ON</li> <li>• 下 = OFF</li> </ul>	プラスチック	システムの起動またはシステムのシャットダウンと大気開放を参照してください。
8	Aux 入出力接続	板金(亜鉛メッキ)	周辺装置セットアップガイドを参照してください。
9	イーサネット接続。質量分析装置とコンピュータを接続します	板金(亜鉛メッキ)	フィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。
10	VENT ボタン	プラスチック	システムの起動またはシステムのシャットダウンと大気開放を参照してください。
11	イオン源排気排出。イオン源排気ドレインボトルへ	ステンレススチール	設置計画概要書を参照してください。
12	窒素ガス供給(Curtain Gas™ 供給、CAD ガス)	ステンレススチール	設置計画概要書を参照してください。

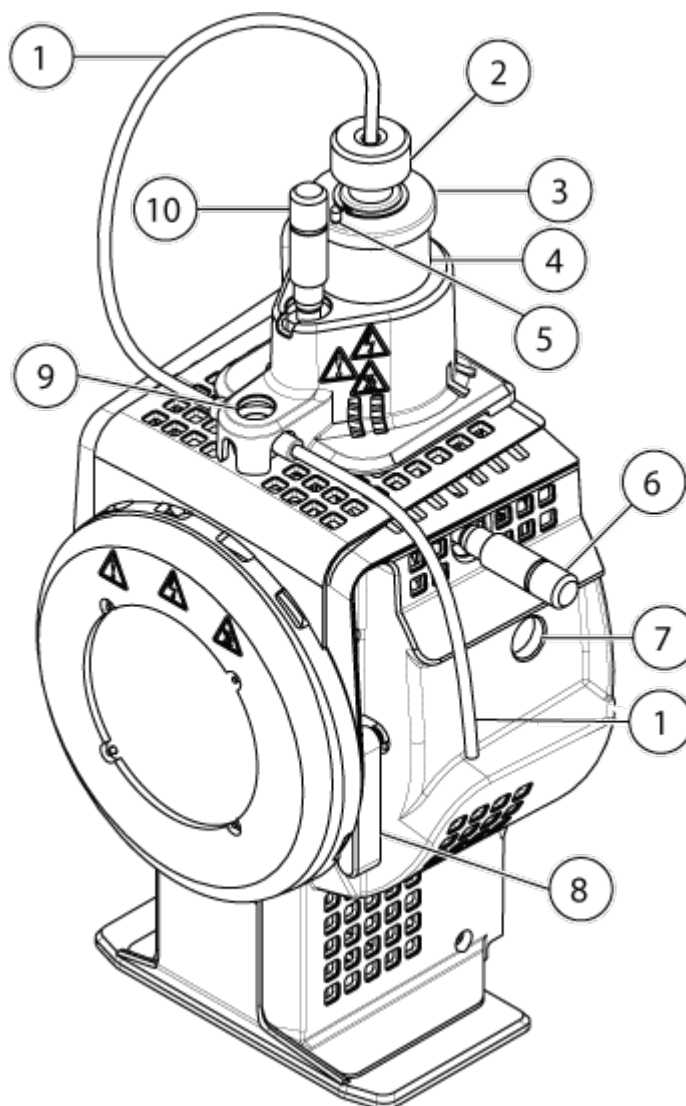
## イオン源の概要

Turbo V イオン源は、エレクトロスプレーイオン化(ESI)または大気圧化学イオン化(APCI)に使用できます。

TurbolonSpray プローブは、ESI モードで稼働する場合に使用します。APCI プローブは、APCI モードで稼働する場合に使用します。

## イオン源コンポーネント

図 4-3 : イオン源コンポーネント



項目	説明	主要な材料
1	サンプル供給デバイスからのサンプルチューブ	赤の PEEK
2	電極調整ナット	ポリオキシメチレン
3	止めリング	PEEK
4	プローブタワー	ステンレススチール
5	コロナ放電ニードル調整ネジ	PEEK
6	プローブを水平軸上で移動して、イオン源感度調整を行うために使用するマイクロメータ	ガラス

項目	説明	主要な材料
7	ウィンドウポート	ステンレススチール
8	イオン源を質量分析装置に固定する2つのイオン源ラッチのうちの1つ	ステンレススチール
9	接地継手部、イオン源カバーの下にあります	ステンレススチール
10	プローブを垂直軸上で移動して、イオン源感度調整を行うために使用するマイクロメータ	ポリオキシメチレン

## プローブ

TurbolonSpray および APCI プローブは、幅広いサンプルテスト機能を備えています。サンプル中の化合物に最も適したプローブとメソッドを選択します。

表 4-2 : イオン源仕様

仕様	TurbolonSpray プローブ	APCI プローブ
温度範囲	周囲温度から 750 °C まで(液体流量によって異なる)	周囲温度から 750 °C まで(液体流量によって異なる)
液体流量注入口	5 µL/min ~ 3,000 µL/min	200 µL/min ~ 3,000 µL/min
イオン源ガス 1 / イオン源ガス 2	質量分析装置の <i>設置計画概要書</i> を参照してください	

質量分析装置ソフトウェアはインストールされて取り付けられているプローブを認識し、対応するユーザーコントロールを使用可能にします。イオン源を使用して測定したデータはすべて、そのデータの測定に使用されたプローブの略称によって識別されます (TurbolonSpray プローブの場合は TIS、APCI プローブの場合は HN)。

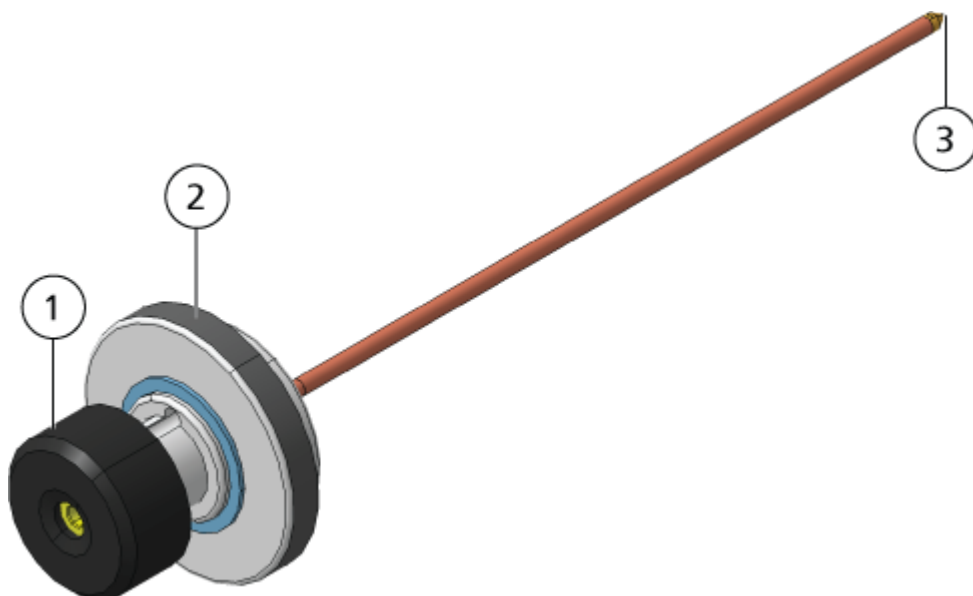
### TurbolonSpray プローブ

TurbolonSpray プローブは、外径 (o.d.) 300 µm (0.012 インチ) のステンレススチールチューブで構成されています。このプローブは中央に位置しており、2 つのターボヒーターが両側にそれぞれ 45 度の角度で配置されています。TurbolonSpray プローブから導入されたサンプルは、高電圧 (**IonSpray Voltage**) の印加により、チューブ内でイオン化されます。そして、ターボヒーターからの高温の乾燥したゼログレードエアのジェット噴射によって噴霧され、高い電荷を帯びた小さい液滴のミストになります。イオン源流出物とターボスプレーからの加熱ドライガスの混成物が、イオンパスに対して 90 度の角度で発射されます。[動作原理 — イオン源](#) を参照してください。



**警告!** 尖った部分により怪我をする危険。電極を取り扱うときは注意してください。電極チップは非常に尖っています。

図 4-4 : TurbolonSpray プローブの部品



項目	説明
1	電極チップの拡張量を調整する電極調整ナット(黒のカラー)
2	プローブをイオン源ハウジングのプローブタワーに固定する止めリング
3	イオン源のサンプルインレット領域にサンプルをスプレー噴射する電極チップ

### APCI プローブ

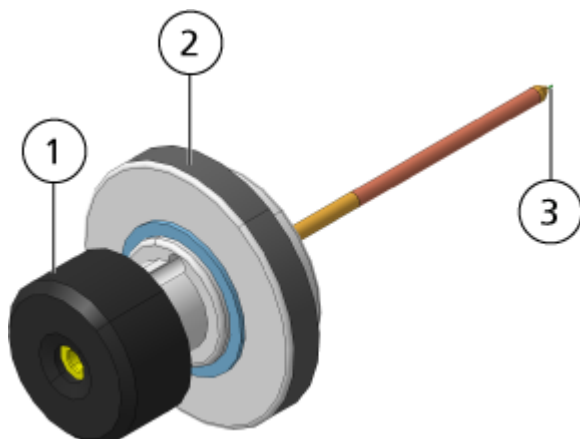
APCI プローブは、内径 100  $\mu\text{m}$  (0.004 インチ) のステンレススチールチューブであり、チューブの周囲をネブライザガス(ガス 1)が流れます。液体サンプルストリームがスプレーを通過して汲み上げられ、ヒーターを内蔵したセラミックチューブ内でネブライズ化されます。セラミックチューブの内壁は、温度範囲 100  $^{\circ}\text{C}$  ~ 750  $^{\circ}\text{C}$  に維持することができ、ヒーターに内蔵されたセンサーによってモニターされます。

高速ジェット噴射されたネブライザガスが電極チップの周囲を流れ、サンプルを微粒子のミストとして拡散します。サンプルはセラミック気化ヒーターを通過してイオン源の反応領域に移動し、コロナ放電ニードルを通過します。サンプル分子はここで、イオン源ハウジングを通過するときにイオン化されます。[動作原理 — イオン源](#)を参照してください。



**警告!** 尖った部分により怪我をする危険。電極を取り扱うときは注意してください。電極チップは非常に尖っています。

図 4-5 : APCI プローブの部品



項目	説明
1	電極チップの拡張量を調整する電極調整ナット(黒のカラー)
2	プローブタワー内のプローブを固定する止めリング
3	イオン源のサンプルインレット領域にサンプルをスプレー噴射する電極チップ

## ガスおよび電気の接続

ガス接続部と低電圧および高電圧の電気接続部は、真空インターフェースのフロントプレートに装備されており、イオン源ハウジングに内部接続されています。質量分析装置にイオン源を取り付けると、すべての電気およびガスの接続が完了します。

## イオン源検出回路

イオン源検出回路は、次の条件下で、質量分析装置とイオン源排気システムへの高圧電源供給を無効にします。

- ・ イオン源が取り付けられていないか、正しく取り付けられていない場合。
- ・ プローブがインストールされていない場合。
- ・ 質量分析装置がガス不良を検出する場合。
- ・ ターボヒーターが故障した場合。
- ・ イオン源が過熱している場合。

## イオン源排気システム



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。サンプル蒸気の排気をラボ環境から安全に除去するために、イオン源排気システムが接続され機能していることを確認してください。装置からの排気物は、一般の建物の排気口に排出され、ラボのワークスペースに排気されないようにする必要があります。イオン源排気システム要件については、**設置計画概要書**のドキュメントを参照してください。



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。有害蒸気がラボ環境に侵入するのを防ぐために、イオン源排気システムに専用のラボ用ドラフトチャンバまたは外部換気システムのいずれかの通気口を設けます。



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。LCシステムが質量分析装置と併用される場合、およびイオン源排気システムが機能していない場合は、イオン源排気システムの機能が回復するまで LC システムをシャットダウンします。



警告! 火災の危険。イオン源に可燃性の溶剤を 3 mL/分以上向けないでください。LC コンポーネントは最大 5 mL/分の流量を提供しますが、最大流量を上回ると、溶剤がイオン源に蓄積する可能性があります。イオン源とプローブが正しく設置されているときにイオン源排気システムが無効で機能していない場合は、イオン源を使用しないでください。

注: 装置の排気が室内に入ってくる可能性を低減させるために、すべての排気チューブがしっかりと接続されていることを確認します。

イオン源がサンプルと溶媒蒸気の両方を生成します。これらの蒸気は、ラボ環境に潜在的に有害です。イオン源排気システムは、安全に取り外せて、サンプルと溶媒蒸気を適切に取り扱うことができるよう設計されています。イオン源が取り付けられている場合、イオン源排気システムが作動していない限り質量分析装置は作動しません。

イオン源排気検出回路内に取り付けられた真空スイッチが、イオン源内の真空を測定します。プローブが取り付けられているときに、イオン源の真空がセットポイントを上回ると、システムは排気障害(準備中)状態になります。

作動中の排気システムは、化学ノイズを発生させることなく、ドレインポート経由でイオン源排気(ガス、溶媒、サンプル蒸気など)を除去します。ドレインポートはドレインチャンバとイオン源排気ポンプを経由してドレインボトルに接続し、ここから顧客供給の排気換気システムに接続されています。イオン源排気システムの換気要件に関する詳細は、**設置計画概要書**を参照してください。

注: イオン源排気システムは定期的に点検して、排気チューブに損傷がなく、排気が室内に漏れていないことを確認します。

## Analyst MD ソフトウェアの概要

Analyst MD ソフトウェアは、質量分析装置、液体クロマトグラフィー(LC)システム、および関連するファームウェアとともに作動し、システムをコントロールしデータ収集します。システムの動作中、取得されたデータは Analyst MD ソフトウェアへ送信されます。そこでデータは完全な質量分析スペクトル、単一または複数の対時間イオンまたは対時間の合計イオンカウントとして表示することができます。

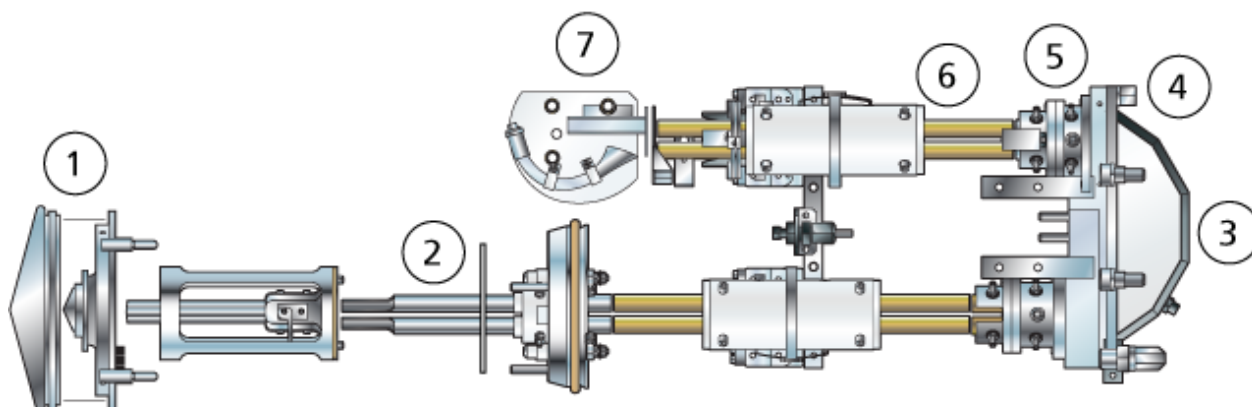
### さまざまなデータビュー MS パラメータ

加工パラメータとは、現在使用されている一連の質量分析装置(MS)パラメータです。

化合物パラメータおよびソースとガスパラメータはメソッドで保管されます。分解能および検出器パラメータは質量分析装置によって異なり、機器データとして保管されます。Tune and Calibrate モードがメソッドの作成で使われている場合は、機器の性能が最大化するように加工パラメータを最適化できます。あるいは、実験サイクル中に各パラメータを1つずつ上げます。

- ソースおよびガスパラメータ: これらのパラメータは使用するイオン源によって異なることがあります。
- 化合物パラメータ: これらのパラメータはイオンパスの電圧がほとんどを占めます。化合物依存性パラメータの最適値は分析する化合物によって異なります。
- 分解能パラメータ: これらのパラメータは分解能およびキャリブレーションに影響を及ぼします。
- 検出器のパラメータ: これらのパラメータは検出器に影響を及ぼします。

図 4-6 : イオン光学パスとパラメータ





## 動作原理

場所	パラメータ	パラメータ種類	使用	スキャンタイプ
1	IonSpray 電圧 (IS)	ソースとガス	IS パラメータは ESI プローブの電極に印加された電圧を調整し、イオン源のサンプルをイオン化します。このパラメータは極性に依存しており、スプレーの安定性および感度に影響します。このパラメータは化合物に依存している場合があります。化合物ごとに最適化する必要があります。	すべて
1	ネブライザ電流 (NC)	ソースとガス	NC パラメータは、APCI プローブ内のコロナ放電ニードルに印加される電流を制御します。放電により溶媒分子がイオン化され、それに次いでサンプル分子もイオン化されます。	すべて
1	イオン源ガス 1 (GS1)	ソースとガス	GS1 パラメータで、ESI プローブと APCI プローブ双方のネブライザガスを制御します。	すべて
1	イオン源ガス 2 (GS2)	ソースとガス	GS2 パラメータで、ESI プローブのヒーターガスを制御します。	すべて
1	温度 (TEM)	ソースとガス	TEM パラメータで、ESI プローブと APCI プローブのヒーターガスの温度を制御します。	すべて
1	カーテンガス (CUR)	ソースとガス	CUR パラメータは、Curtain Gas インターフェースのガスの流量を制御します。Curtain Gas インターフェースは、カーテンプレートとオリフィスの間に配置されています。これにより、イオン光学の汚染を防ぎます。	すべて



場所	パラメータ	パラメータ種類	使用	スキャンタイプ
1	デクラスタリング電位 (DP)	化合物	<p>DP パラメータにより、オリフィスと QJet イオンガイドの間のイオンをクラスター分離する能力を制御しているオリフィスの電圧を制御します。これは、真空チャンバに入った後にサンプルイオンに残る可能性がある溶媒クラスターを最小化し、必要に応じてフラグメント化させるために使用します。電圧が高くなるほど、イオンに加えられるエネルギーは高くなります。DP パラメータが高過ぎる場合、不要なフラグメンテーションが発生する場合があります。</p> <p>プリセット値を使用し、化合物を最適化します。</p>	すべて
2	エントランス電位 (EP)	化合物	<p>EP パラメータにより、Q0 と接地の間の電位差を制御します。エントランス電位は、Q0 領域ヘイオンを高圧で誘導し、集中させます。</p> <p>プリセット値を使用します。</p>	すべて
2	Q0トラップ	化合物	<p>Q0トラップパラメータにより、Q0 領域のイオンの保管状況を制御します。イオンがリアイオントラップから大量に選択されて排出される一方で、Q0 領域内でイオンをため込むことで、感度とデューティサイクルを上げるために使用します。このパラメータにより、固定の充填時間を使用します。</p> <p>実験での必要性から、特徴を選択または消去します。</p> <p>20 ms 以上の固定充填時間の使用を推奨します。</p>	EMS、EPI、ER、および MS/MS/MS

## 動作原理

場所	パラメータ	パラメータ種類	使用	スキャンタイプ
3	CAD ガス	ソースとガス	<p>CAD ガスパラメータにより、Q3、MS/MS、および LIT (リニアイオントラップ) スキャンの間、衝突セル内の CAD ガスの圧力を制御できます。Q3 スキャンの場合、衝突ガスは、イオンが Q2 衝突セルを通過するときにイオンを集中させるのに役立ちます。CAD ガス用のプリセット値は固定モードになっています。MS/MS スキャンタイプの場合、CAD ガスは、プレカーサーイオンを集めるのに役立ちます。前駆体イオンが衝突ガスと衝突すると、それぞれが分離してプロダクトイオンとなります。LIT (リニアイオントラップ) スキャンタイプの場合、衝突ガスはリニアイオントラップ内でイオンを集中させ、内部にためこむ働きをします。</p> <p>プリセット値を使用し、化合物を最適化します。</p>	Q3 MI、Q3 MS、MRM、Prec、NL、EMS、ER、EPI、および MS/MS/MS
3	衝突エネルギー (CE)	化合物	<p>CE パラメータにより、Q0 領域と Q2 衝突セルの間の電位差を制御します。これは MS/MS スキャンタイプでのみ使用します。このパラメータは、Q2 衝突セル内へと加速しているときにプレカーサーイオンが受け取ったエネルギーの総数です。このとき、ガス分子およびフラグメントと衝突しています。</p> <p>プリセット値を使用し、化合物を最適化します。</p>	EPI、MS/MS/MS、MRM、MS2、Prec、NL、および LIT
3	衝突エネルギー拡散 (CES)	化合物	<p>CES パラメータは CE パラメータと合わせて、CES を使用する場合に拡張製品イオン (EPI) または MS/MS/MS (MS3) スキャンで、どの 3 つの個別の衝突エネルギーをプレカーサー質量に適用するかを決定します。衝突エネルギー拡散値を入力するとき、CES は自動的に ON になります。</p> <p>プリセット値を使用し、化合物を最適化します。</p>	EPI および MS/MS/MS

場所	パラメータ	パラメータ種類	使用	スキャンタイプ
3	衝突セル出口電位 (CXP)	化合物	CXP パラメータを使用するのは Q3 と MS/MS スキャンタイプの場合のみです。このパラメータにより、イオンを Q3 四重極へ送ることができます。  プリセット値を使用し、化合物を最適化します。	Q3、MRM、MS2、Prec、NL
4	Q3 エントリーバリア	化合物	Q3 エントリーバリアパラメータを使用して、リニアイオントラップの Q2 衝突セルからイオンを移動します。  プリセット値を使用します。	EMS、EPI、ER、および MS/MS
5	MS/MS/MS フラグメンテーション励起時間	化合物	MS/MS/MS フラグメンテーション時間パラメータにより、励起エネルギーが適用される時間量を制御します。これは、励起エネルギーと結合して使用し、隔離された第 2 のプレカーサーイオンを分解します。  プリセット値を使用します。	MS/MS/MS
6	固定 LIT 充填時間	化合物	固定 LIT 充填時間パラメータにより、LIT がイオンで充填される時間量を制御します。  プリセット値を使用し、サンプル濃度に応じて望ましい信号応答が得られるように調整します。	EMS、EPI、ER、および MS/MS/MS

## 動作原理

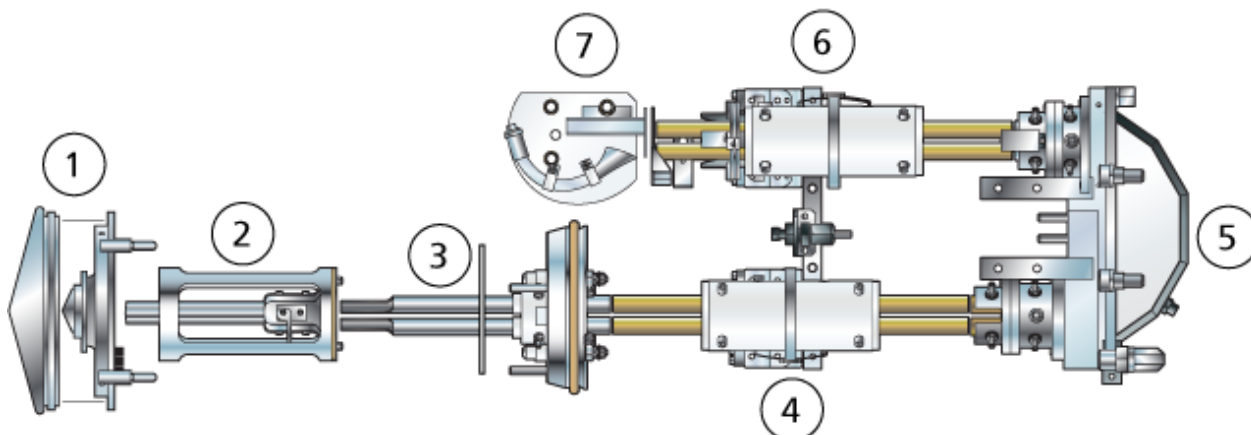
場所	パラメータ	パラメータ種類	使用	スキャンタイプ
6	動的充填時間(DFT)	化合物	DFT パラメータにより、受信するイオンシグナルに基づき、イオンがリニアイオントラップの中で収集される時間を動的に算出できます。DFT を ON にすると、シグナルは感度を上げるため、または空間電荷を最小化するために最適化されます。  実験に基づき、特徴を選択または削除します。  <b>Tools &gt; Settings &gt; Method Options</b> ダイアログボックスで、DFT 設定はデフォルトのスキャン速度用に最適化されます。これらの設定は、他の LIT (リニアイオントラップ) スキャン速度にも適しています。	EMS、EPI、ER、および MS/MS/MS
7	CEM	検出器	CEM パラメータにより、検出器に適用される電圧を制御します。この電圧は、検出器の反応を制御します。	すべて

## 動作原理

質量分析法は、イオンの質量電荷比を測定することにより、不明な成分を識別し、既知の成分を定量化し、分子の構造特性および化学的性質についての情報を提供します。

質量分析装置は、四重極フィルターのシリーズを持ち、質量電荷比 ( $m/z$ ) にしたがってイオンを伝達します。その中で最初の四重極となるのが QJet イオンガイドで、オリフィスプレートと Q0 領域の間に位置しています。QJet イオンガイドはイオンを濾過しませんが、Q0 領域に入る前にイオンにフォーカスします。QJet イオンガイドは、Q0 領域へのイオンのフォーカスを支援します。Q0 領域において、イオンは Q1 四重極に入る前に再度フォーカスされます。

図 4-7：イオンパス



項目	説明
1	カーテンプレートとオリフィスプレート
2	QJet イオンガイド
3	Q0 領域
4	Q1 四重極
5	Q2 衝突セル
6	Q3 四重極
7	検出器

Q1 四重極は Q2 衝突セルに入る前にイオンを選別する四重極フィルターです。Q2 衝突セルでは、ガス分子との衝突によってイオンの内部エネルギーが増加され、分子結合の破壊によるプロダクトイオンの生成に至ります。この技術によりユーザーがプロダクトイオンの  $m/z$  を測定し、親イオンの成分を決定する実験を設計できます。

Q2 衝突セルを通過後、イオンは追加のフィルターのために Q3 四重極に入り、その後検出器に入ります。検出器においては、イオンは電圧パルスに変換される電流を生成します。検出器から出る電圧パルスは、検出器に入ったイオン量に直接に比例します。システムはこれらの電圧パルスを監視し、情報をシグナルに変換します。シグナルは特定の  $m/z$  値についてのイオン強度を表し、システムは質量スペクトルとしてこの情報を表示します。

リニアイオントラップ (LIT) 機能性により、多数の強化モードでの操作が可能です。強化モードの共通要因は、イオンが Q3 四重極リージョン中に捕捉され、次いでスキャンアウトされて完全なスペクトルデータを生成する点です。多くのスペクトルが短時間に高速で収集され、比較可能な標準四重極モードの操作で収集されたスペクトルよりはるかに強力なものです。

収集段階ではイオンは CAD ガスがイオンを Q3 領域へ集中させる Q2 衝突セルを通過します。Q3 四重極はメイン RF 電圧だけを適用して操作されます。イオンは Q3 四重極を通過できず、また直流障壁電圧が適用される出口側レンズによって反射して戻されます。充填時間 (ユーザーによって定義されるか、ダイナミック充填時間機能によって決定される時間) が経過した後、直流障壁電圧

## 動作原理

---

は Q3 入口側レンズ (IQ3) に適用されます。この電圧により、収集されたイオンが Q3 領域に閉じ込められ、追加のイオンが侵入できなくなります。四重極ロッドに適用された入口側と出口側レンズの直流電圧障壁および RF 電圧が Q3 領域内にイオンを閉じ込めます。

スキャンアウト段階では、出口側レンズの電圧および補助 RF 電圧はメイン RF 電圧と同時に傾斜し、四重極スキャンタイプと比較して分解能および感度が増加します。補助交流周波数が Q3 四重極に適用されます。メイン RF 電圧振幅は低値から高値へ傾斜します、これにより連続して質量を補助交流周波数と共振させます。イオンが交流周波数との共振状態となる時、それらは出口側レンズバリアを乗り越えるのに十分な軸流速度を取得し、質量分析装置イオン検出器の方へ軸方向に放出されます。完全なスペクトルデータは高速でメイン RF 電圧をスキャンすることにより Q3 領域中に収集されたイオンから取得できます。

## ESI モード

ESI は、ニードル内を流れるサンプル流出物に高電圧を印加することによって、サンプルに含まれる分析試料の気相イオンを生成します。ESI は、加熱されたガスフローにより、単一イオンおよび多価イオンを比較的温和な条件下で生成するため、薬物や殺虫剤などの小分子や、ペプチド、タンパク質、その他の生体高分子などの大型分子を含む幅広い化合物に適しています。感度は、分析試料の化学的性質、ガス流量、温度、電圧、移動相組成によって異なります。

ESI 法は、ペプチド、タンパク質、熱的に不安定な医薬品などの不安定化合物に十分使用できる温和な手法です。ESI は 5  $\mu\text{L}/\text{min}$  ~ 3,000  $\mu\text{L}/\text{min}$  の流量で機能し、100% 水性溶媒から 100% 有機溶媒までを気化させます。

[エレクトロスプレーイオン化モード](#)を参照してください。

## APCI モード

APCI モードは以下に適しています。

- 溶液にすぐにイオンを形成しない化合物のイオン化。これらは通常、非極性化合物です。
- LC-MS/MS 実験の単純な APCI スペクトルの生成。
- 複雑で汚れているサンプルの高スループット分析。イオン抑制効果に対する感度は比較的低くなります。
- LC カラムありまたはなしの流量注入による急速なサンプル導入。

APCI 法は揮発性化合物や熱に不安定な化合物に使用でき、熱分解を最小限に抑えます。液滴および同伴分析試料の急速な脱溶媒と蒸発作用によって熱分解が最小限に抑えられ、コロナ放電ニードルによるイオン化の分子同定が保持されます。バッファは大きな汚染を受けずにイオン源にすぐに許容され、スプレー噴射された流出物が瞬時蒸発することで最大 100% の水を使用できます。APCI プロブは、流出物全体を分岐せずに、広口径カラムを介して流量 200  $\mu\text{L}/\text{min}$  ~ 3,000  $\mu\text{L}/\text{min}$  で受け入れることができます。

[APCI モード](#)を参照してください。

## データの取り扱い

### Reporter ソフトウェア

Analyst MD ソフトウェアは、データの取得および処理を行います。臨床決定を行うわけではありません。Reporter ソフトウェアにより、Analyst MD ソフトウェアで使用可能なレポート機能を拡張できます。Reporter ソフトウェアはカスタムレポート作成にもご使用いただけます。

### MultiQuant MD ソフトウェア

MultiQuant MD ソフトウェアは、定量データ処理ソフトウェアで、同時に複数の分析試料およびサンプルの処理を実行することができます。Analyst MD ソフトウェアと一緒にインストールされます。MultiQuant MD ソフトウェアは、臨床決定を行うものではありません。レポート機能は MultiQuant MD ソフトウェアで使用でき、カスタムレポートの作成に使用できます。

### Cliquid MD ソフトウェア

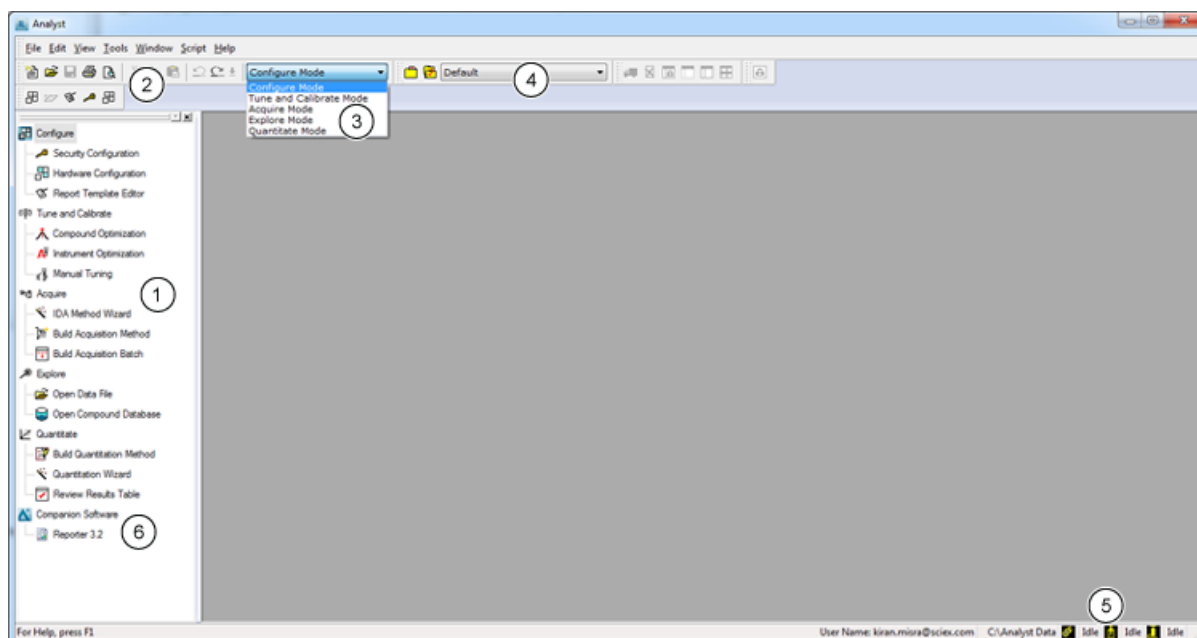
Cliquid MD ソフトウェアは、質量分析ワークフローを簡単に使用できるようにするもので、Analyst MD ソフトウェアと連動します。Cliquid MD ソフトウェアは、質量分析装置をコントロールするものでも、直接データを処理するものでもありません。むしろ、Analyst MD ソフトウェアと直接交信し、データ収集中に質量分析装置と交信し、測定データを処理するほか、ピークレビューを実行します。Cliquid MD ソフトウェアは、臨床決定を行うものではありません。

## 動作原理 - ソフトウェア

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。

### Analyst MD ソフトウェアウィンドウ

図 4-8 : Analyst MD ソフトウェアウィンドウ



項目	説明
1	<p>ナビゲーションバー: ナビゲーションバーにより、さまざまなソフトウェアモードにアクセスできます。ユーザーは Navigation バーの要素のいくつかを好みに合わせてカスタマイズすることができます。たとえば、ユーザーはサイズ変更、移動、または適所に固定することができます。Navigation バーを非表示にするには、右上隅の×をクリックします。Navigation バーを表示するには、<b>View &gt; Navigation Bar</b> をクリックします。</p> <p>ナビゲーションツリーの最上位レベルには、各ソフトウェアモードを表すアイコンが表示されます。特定のモードのアイコンをダブルクリックすると、ツリーを広げたり折りたたんだりできます。これにより、選択されたモード内での利用可能な機能のアイコンが表示または非表示されます。</p>
2	<p>メニューバー: モードごとに異なります。切り取り、コピー、貼り付けなどの一部のオプションはすべてのモードで同じです。その他のオプションはモードに固有なもので、他のモードでは利用できません。</p>
3	<p>モードリスト: クリックするとモードを変更できます。モードごとに異なるツールバーアイコンが用意されています。</p>
4	<p>プロジェクトリスト: クリックすると、データを保存するプロジェクトを変更できます。</p>
5	<p>装置および周辺装置の状態: この状態バーには現在の活動についての情報が表示されます。装置の状態が次の色別に表示されます。緑色(準備完了)、黄色(アイドル)、赤色(エラー)、白色(ローカル装置ワークステーションなし)。1つのアイコンはリモート装置の状態を示します。アイコンをダブルクリックすると、デバイスステータスウィンドウが開きます。</p>
6	<p>コンパニオンソフトウェア: 本ソフトウェアから開くことができる、インストール済みのコンパニオンソフトウェアが含まれます。</p>

## Analyst MD ソフトウェアモード

このソフトウェアはモードを切り替えることができます。モードは個別の機能領域であり、メインタスクに関連する一連の活動を行うことができます。ユーザーは Navigation バーあるいはツールバーの Mode リストからモードにアクセスでき、作業内容を失うことなくモード間を切り替えることができます。

表 4-3 : Analyst MD ソフトウェアのモード

名前	説明
<b>Configure</b>	(構成)このモードを用いると、機器およびシステム設定を構成することができます。ハードウェア構成とレポートテンプレートの設定を含む、ソフトウェアの種々のオプションやパラメータを設定します。



表 4-3 : Analyst MD ソフトウェアのモード (続き)

名前	説明
<b>Tune and Calibrate</b>	<p>(チューニングとキャリブレーション)このモードを使用して、最適な結果を保証するために装置を調整するためのオプションを設定します。このモードでは、ユーザーは次のことが可能です。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 装置最適化の実施</li> <li>• 手動チューニングの実施</li> <li>• グラフ型ビューの表示方法の変更、ファイル情報を開いたときに表示する情報の種類の選択、リンクオプションやその他の外観オプションの設定を行います。</li> <li>• 処理オプションの変更</li> </ul>
<b>Acquire</b>	<p>(取得)このモードを用いると、サンプルの収集方法を決定するためのオプションが設定できます。このモードでは、ユーザーは次のことが可能です。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• IDA Method Wizard を用いた IDA 測定メソッドの作成</li> <li>• Acquisition Method Editor による測定メソッドの作成</li> <li>• バッチエディタによるバッチの作成</li> <li>• Queue Manager によるキューの表示</li> <li>• 測定状態のモニタリング</li> </ul>
<b>Explore</b>	<p>(Explore)このモードを用いると、サンプルの定性分析ができます。このモードでは、ユーザーは次のことが可能です。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• グラフの表示</li> <li>• クロマトグラムの表示</li> <li>• スペクトルの表示</li> <li>• バッチ測定中にリアルタイムでのデータ表示</li> </ul>
<b>Quantitate</b>	<p>(定量)このモードを用いると、収集データの分析ができ、定量メソッドを構築して Results Table を生成することができます。Results Table を用いて、バッチ内の分析試料および内部標準それぞれのピークすべてを手動でレビューし、キャリブレーションカーブ、サンプル統計、およびメトリックプロットを表示します。</p>

## 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。

## 動作原理

---

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。

## 解析

LC-MS/MS データでは、解析とは、特定の化合物に関連したピークのカーブ下にあるエリアを取得することを意味します。トランジション、予期される保持時間、内部標準、積分、および回帰パラメータを指定するメソッドを使用して、ソフトウェアは所定のサンプルセットでのピークを自動的に積分できるようにしています。

## 結果表

結果表は、キャリブレーションカーブに基づき、各未知のサンプルの分析試料の算出濃度をまとめたものです。結果表には、キャリブレーションカーブと結果の統計も含まれます。ユーザーは、結果表をカスタマイズし、結果表をレイアウトで閲覧できます。

結果表のデータは 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、データを表形式またはカラムに記載の形でエクスポートすることもできます。

結果表が作成されたら、データファイル名は変更しないことを推奨します。

結果表の右クリックメニューの使い方については、[Results Table](#) を参照してください。

## 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との関係は、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定量化メソッドは、用途への許可を得る前に確認を行う必要があります。

---

## 回帰の種類

- 線形 ( $y = mx + b$ )
- ゼロ点を通る線形 ( $y = mx$ )
- 二次式 ( $y = a^2 + bx + c$ )

このセクションでは、SCIEX Triple Quad 4500MD LC-MS/MS システムおよび QTRAP 4500MD LC-MS/MS システムの特性や仕様について説明します。

## 質量分析装置の仕様

表 5-1 : 質量分析装置と粗引きポンプの仕様

感度 (MRM モード)	カラム上のレセルピン 200 fg	S/N、2000 超 CV 5% 未満
最大スキャンスピード	12,000 Da/ 秒	
最大リニアイオントラップスキャン速度 (QTRAP システムのみ)	20,000 Da/ 秒	
極性切り替え	Scheduled MRM モードで 50 msec および MRM モードで 50 msec 以上	
最小 MRM 滞留時間	1 msec	
質量範囲 ( $m/z$ )	5 Da ~ 2000 Da	
リニアイオントラップ質量範囲 ( $m/z$ ) (QTRAP システムのみ)	50 Da ~ 2000 Da	
レセルピン 609/195 のクロストーク	2 msec の滞留時間および 3 msec のインター MRM 休止時間で、0.5% 未満のクロストークを検出可能	
質量安定性 (スキャンスピード 10 Da/sec で、Q1 スキャンおよびプロダクトイオンスキャンを使用して評価した質量安定性)	24 時間にわたって 0.1 Da	
スキャン種類	Q1 と Q3 の両方でのフルスキャン MS および選択イオン MS、プロダクトイオンスキャン、プレカーサーイオンスキャン、ニュートラルロスまたはゲインスキャン、複数反応モニタリング (MRM) スキャン、および予定した MRM スキャンタイプ。QTRAP システムのみの場合は、強化 MS スキャン、強化プロダクトイオンスキャン、強化分解能スキャン、および MS <sup>3</sup> スキャン。	
動的範囲	4 桁	
<b>重量</b>		
積み重ね可能 – 質量分析装置上部の最大重量	77.5 kg (171 ポンド)	

表 5-1 : 質量分析装置と粗引きポンプの仕様 (続き)

重量 – 質量分析装置	130 kg (287 ポンド)
重量 – 粗引きポンプ	34 kg (75 ポンド)
<b>寸法</b>	
質量分析装置 (幅 × 奥行き × 高さ)	79 cm × 79cm × 59cm 32 インチ x 32 インチ x 24 インチ
粗引きポンプ (幅 × 奥行き × 高さ)	12 インチ x 17 インチ x 9 インチ
装置専用ベンチ (幅 × 奥行き × 高さ)	100 cm × 84 cm × 78 cm

表 5-2 : プローブの仕様

パラメータ	TurbolonSpray プローブ	APCI プローブ
イオン源温度範囲	周辺温度から 750 °C までのプローブ温度は、液体流量に左右されます。	周辺温度から 750 °C までのプローブ温度は、液体流量に左右されます。
流量適合性	5 µL/分 ~ 3 mL/分	200 µL/分 ~ 3 mL/分
	<b>注意: ダメージを与える恐れ。最大流量を超えないようにしてください。最大流量を超えると、システムのパフォーマンスの低下や損傷が発生する場合があります。</b>	
ガス 1 ガス 2	<ul style="list-style-type: none"> <li>ゼログレードエア、またはガス入力オプションについては、SCIEX にお問い合わせください。</li> <li>最大 22 リットル/分のフローで 100 psi (6.89 bar) ~ 105 psi (7.25 bar) の吐出圧力</li> </ul> 設置計画概要書を参照してください。	

表 5-3 : 電気系仕様

質量分析装置	
公称入力電圧	200~240VAC
入力電圧変動	± 10% (公称)
周波数	50Hz または 60Hz
最大入力電流	10 A

## 性能特性および仕様

---

表 5-3 : 電気系仕様 (続き)

最大入力電力	1,000 VA
<b>粗引きポンプ</b>	
公称入力電圧	200~240VAC
入力電圧変動	± 10% (公称)
周波数	50Hz または 60Hz
最大入力電流	4.2 A (50 Hz)、4.7 A (60 Hz)
最大入力電力	1420 VA (50 Hz)、1250 VA (60 Hz)
<b>コンピュータ</b>	
公称入力電圧	100~240VAC
入力電圧変動	± 10% (公称)
周波数	50Hz または 60Hz
最大入力電流	8 A (50 Hz)、6 A (60 Hz)
最大入力電力	460 W
<b>モニター</b>	
公称入力電圧	100~240VAC
周波数	50Hz または 60Hz
最大入力電流	2.5 A

# 使用説明—サンプルワークフロー

# 6

表 6-1 : 装置の設定ワークフロー

ステップ:	実行する作業	詳細情報	作業内容
1	ハードウェアプロファイルを作成します。	ハードウェアプロファイルの作成	各ハードウェアプロファイルには質量分析装置および LC システムなどのその他の機器が含まれる必要があります。有効なハードウェアプロファイルに含まれる機器のみが、測定メソッドを作成する際に使用できます。
2	プロジェクトを作成してデータを保存します。	プロジェクトおよびサブプロジェクトの作成	プロジェクトおよびサブプロジェクトを用いることで、データ管理が容易になり、結果を簡単に比較することができます。
3	質量分析装置を最適化します。	装置のパフォーマンスの検証	これは、分解能および質量分析装置のパラメータを最適化し、システムから最高の感度および性能を得るために質量分析装置のキャリブレーションを行うプロセスです。

表 6-2 : ルーチン分析ワークフローの例

ステップ:	実行する作業	詳細情報	作業内容
1	メソッドに適用可能なハードウェアプロファイルを有効化します。	ハードウェアプロファイルの作成	各ハードウェアプロファイルには質量分析装置および LC システムなどのその他の機器が含まれる必要があります。有効なハードウェアプロファイルに含まれる機器のみが、測定メソッドを作成する際に使用できます。
2	プロジェクトを作成してデータを保存します。	プロジェクトおよびサブプロジェクトの作成	プロジェクトおよびサブプロジェクトを用いることで、データ管理が容易になり、結果を簡単に比較することができます。
3	バッチを作成して提出します。	セットとサンプルをバッチに追加およびサンプルまたはサンプルセットの提出	測定メソッドの作成後、測定バッチを作成し、測定キューにそのバッチを書き込んでサンプルを実行します。
4	システムの平衡化を行います。	システムの平衡化	データ収集前のシステムの平衡化。平衡化されないシステムのデータは不良である可能性があります。

表 6-2 : ルーチン分析ワークフローの例 (続き)

ステップ:	実行する作業	詳細情報	作業内容
5	サンプルを実行してデータを取得します。	データの取得	サンプルの実行には、測定用キュー、モニタリング装置、および機器ステータスの管理が必要です。サンプルの提出およびデータ取得には、Queue Manager を用います。Queue Manager にはキュー、バッチ、およびサンプルステータスが表示され、キュー内のサンプルおよびバッチの管理を簡単に行うことができます。
6	Explore モードでデータを分析します(オプション)。	使用説明—データの分析と探索	Explore モードでは、多くのツールが提供されており、取得データの表示および処理が可能です。グラフはピークラベルやキャプションでカスタマイズすることができ、等高線図を表示し、スペクトルをライブラリに保存することができます。
<ul style="list-style-type: none"> <li>MultiQuant MD ソフトウェアを使った定量分析を行う場合は、ステップ 7 ~ 8 を実行します。より大きなデータセットには、MultiQuant MD ソフトウェアを推奨します。</li> <li>Analyst MD ソフトウェアを使った定量分析を行う場合は、ステップ 9 ~ 10a を実行します。</li> <li>Analyst MD ソフトウェアを使った定性分析を行う場合は、ステップ 9 ~ 10b を実行します。</li> </ul>			
7	MultiQuant MD ソフトウェアで定量データを分析します。	MultiQuant MD ソフトウェアリファレンスガイド: 第 7、8、10、11、12、13、14 章	結果表を生成および使用して、バッチ内の分析試料および内部標準それぞれのピークすべてを手動でレビューし、キャリブレーションカーブ、サンプル統計、およびメトリックプロットを表示します。
8	MultiQuant MD ソフトウェアでレポートを作成します。	MultiQuant MD ソフトウェアリファレンスガイド: 付録 C	生成およびレビューされた結果用に提供されたレポートテンプレートを用いてレポートを作成します。
9	Analyst MD ソフトウェアで定性(または定量)データを分析します。	使用説明—定量データの分析および処理	結果表を生成して、バッチ内の分析試料および内部標準それぞれのピークすべてを手動でレビューします。定量分析の場合、キャリブレーションカーブ、サンプル統計、およびメトリックプロットもレビューします。
10a	Reporter ソフトウェアでレポートを作成します。	レポートの生成	生成およびレビューされた結果用に提供されたレポートテンプレートを用いてレポートを作成します。定性分析のみのレポートについては、ライブラリ検索中のラベル付きのレポートテンプレートの一式を用いてください。



表 6-2 : ルーチン分析ワークフローの例 (続き)

ステップ:	実行する作業	詳細情報	作業内容
10b	ライブラリを選択し、Reporter ソフトウェアでレポートを作成します。	レポートの生成	結果に適切な MS/MS スペクトルライブラリを選択します。生成およびレビューされた結果用に提供された、ライブラリ検索のラベル付きのレポートテンプレートを用いてレポートを作成します。定性分析のみのレポートについては、ライブラリ検索のラベル付きのレポートテンプレート一式を用いてください。

表 6-3 : メソッドディベロッパーワークフローの例

ステップ:	実行する作業	詳細情報	作業内容
1	ハードウェアプロファイルを作成します。	ハードウェアプロファイルの作成	各ハードウェアプロファイルには質量分析装置および LC システムなどのその他の機器が含まれる必要があります。有効なハードウェアプロファイルに含まれる機器のみが、測定メソッドを作成する際に使用できます。
2	プロジェクトを作成してデータを保存します。	プロジェクトおよびサブプロジェクトの作成	プロジェクトおよびサブプロジェクトを用いることで、データ管理が容易になり、結果を簡単に比較することができます。
3	化合物の自動最適化  または  ステップ 4 - 化合物を手動で最適化します。	使用説明—自動最適化	ソフトウェアにより、化合物の最適化および対象化合物のための質量分析装置のパラメータが自動最適化されます。
4	化合物を手動で最適化します。	手動での化合物最適化	ユーザーは手動で、化合物を最適化し、対象化合物のための質量分析装置のパラメータを最適化します。手動での最適化では、経験を積んだユーザーが最適化プロセス中により大きな制御を行うことができます。
5	測定メソッドを作成します。	使用説明—測定メソッド	サンプルの分析のために、質量分析装置および任意の LC 機器用の測定メソッドを作成します。測定メソッドにより、使用する周辺装置、その機器でのデータ収集時期、および関連パラメータが示されます。

表 6-3 : メソッドディベロッパーワークフローの例 (続き)

ステップ:	実行する作業	詳細情報	作業内容
6	バッチを作成して提出します。	セットとサンプルをバッチに追加およびサンプルまたはサンプルセットの提出	測定メソッドの作成後、測定バッチを作成し、測定キューにそのバッチを書き込んでサンプルを実行します。
7	システムの平衡化を行います。	システムの平衡化	データ収集前のシステムの平衡化。平衡化されないシステムのデータは不良である可能性があります。
8	サンプルを実行してデータを取得します。	データの取得	サンプルの実行には、測定用キュー、モニタリング装置、および機器ステータスの管理が必要です。サンプルの提出およびデータ取得には、Queue Manager を用います。Queue Manager にはキュー、バッチ、およびサンプルステータスが表示され、キュー内のサンプルおよびバッチの管理を簡単に行うことができます。
9	Explore モードでデータを分析します(オプション)。	使用説明—データの分析と探索	Explore モードでは、多くのツールが提供されており、取得データの表示および処理が可能です。グラフはピークラベルやキャプションでカスタマイズすることができ、等高線図を表示し、スペクトルをライブラリに保存することができます。
<ul style="list-style-type: none"> <li>MultiQuant MD ソフトウェアを使った定量分析を行う場合は、ステップ 10 ~ 12 を実行します。より大きなデータセットには、MultiQuant MD ソフトウェアを推奨します。</li> <li>Analyst MD ソフトウェアを使った定量分析を行う場合は、ステップ 13 ~ 15 を実行します。</li> <li>定性分析の場合にはサポートにご連絡ください。</li> <li>Analyst MD ソフトウェアを使った定量分析を行う場合は、ステップ 14 ~ 15 を実行します。一般的なガイダンスが必要な場合は、サポートにお問い合わせください。</li> </ul>			
10	MultiQuant MD ソフトウェアで定量メソッドを作成します。	MultiQuant MD ソフトウェアリファレンスガイド: 定量化メソッドエディタ	ソフトウェアでさまざまな定量メソッド作成ツールを用いると、収集データの分析ができ、定量メソッドを構築して結果表を生成することができます。
11	MultiQuant MD ソフトウェアで定量データを分析します。	MultiQuant MD ソフトウェアリファレンスガイド: 第 7、8、10、11、12、13、14 章	結果表を生成および使用して、バッチ内の分析試料および内部標準それぞれのピークすべてを手動でレビューし、キャリブレーションカーブ、サンプル統計、およびメトリックプロットを表示します。

表 6-3 : メソッドディベロッパーワークフローの例 (続き)

ステップ:	実行する作業	詳細情報	作業内容
12	MultiQuant MD ソフトウェアでレポートを作成します。	MultiQuant MD ソフトウェアリファレンスガイド: 付録 C	生成およびレビューされた結果用に提供されたレポートテンプレートを用いてレポートを作成します。
13	Analyst MD ソフトウェアで定量メソッドを作成します。	MultiQuant MD ソフトウェアリファレンスガイド: 定量化メソッドエディタ	ソフトウェアでさまざまな定量メソッド作成ツールを用いると、収集データの分析ができ、定量メソッドを構築して結果表を生成することができます。
14	Analyst MD ソフトウェアで定性(または定量)データを分析します。	使用説明—定量データの分析および処理	結果表を生成して、バッチ内の分析試料および内部標準それぞれのピークすべてを手動でレビューします。定量分析の場合、キャリブレーションカーブ、サンプル統計、およびメトリックプロットもレビューします。
15	Analyst Reporter でレポートを作成します。	レポートの生成	生成およびレビューされた結果用に提供されたレポートテンプレートを用いてレポートを作成します。定性分析のみのレポートについては、ライブラリ検索中のラベル付きのレポートテンプレートの一式を用いてください。

# 使用説明 — 質量分析装置とイオン源 7



警告! 人身傷害の危険。システムを使用する際は、ドキュメントに記載された指示に従ってください。SCIEX が指定した方法で装置を使わない場合、装置による保護機能が損なわれることがあります。

## システムの起動



警告! 感電の危険。緊急時にはシステムを主電源コンセントから外せるようにしてください。主電源コンセントの周囲に物を置かないでください。



注: 装置を操作する前に、[操作上の予防措置および制限事項](#)に記載されている安全性に関する情報をお読みください。

### 前提条件

- 設置計画概要書に規定されている施設要求事項に適合していること。設置計画概要書には、主電源および接続、圧縮空気、窒素、粗引きポンプ、換気、排気、施設の清掃の各要件に関する情報が掲載されています。設置計画概要書のコピーが必要な場合は、SCIEX にお問い合わせください。お問い合わせ先については、[sciex.com/contact-us](https://sciex.com/contact-us) でご確認ください。
- イオン源排気ガス、圧縮空気、窒素ガスが質量分析装置に接続されていること。
- 4 L イオン源排気ドレインボトルが、質量分析装置の背面にある排気排出接続、およびラボ換気システムに接続されていること。
- イオン源排気ホースが質量分析装置、イオン源排気ドレインボトル、換気連結部にしっかりと固定されていること。
- 質量分析装置のコンビニエンススイッチがオフになっていて、主電源ケーブルが質量分析装置に接続されていること。
- 質量分析装置および粗引きポンプの主電源ケーブルが 200 VAC~240 VAC 主電源に接続されていること。
- イーサネットケーブルが質量分析装置およびコンピュータの両方に接続されていること。

1. 粗引きポンプの電源を入れます。
2. 5 分後に質量分析装置のコンビニエンススイッチの電源を入れます。図 4-2 を参照してください。
3. コンピュータの電源を入れます。
4. 制御ソフトウェアを開きます。

## イオン源の最適化



**警告!** イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。イオン源で使用する有害物質や障害性物質の適正使用、汚染、排気に関する知識や訓練なしに、イオン源を使用しないでください。



**警告!** 火災の危険。イオン源に可燃性の溶剤を 3 mL/分以上向けないでください。LC コンポーネントは最大 5 mL/分の流量を提供しますが、最大流量を上回ると、溶剤がイオン源に蓄積する可能性があります。イオン源とプローブが正しく設置されているときにイオン源排気システムが無効で機能していない場合は、イオン源を使用しないでください。



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

分析試料、流量または移動相組成に変化があるごとにイオン源を最適化します。

イオン源に依存するパラメータを最適化する際には、サンプル導入の方法としてフローインジェクション分析 (FIA) またはティー注入を用い、サンプル分析時に使用される流量でサンプルを導入します。イオン源に依存するパラメータを最適化する前に、イオン源の位置を最適化します。

複数のパラメータがイオン源の性能に影響を及ぼします。既知の化合物を注入中、および既知のイオンシグナルをモニタリング中に性能を最適化します。マイクロメータパラメータ、ガスパラメータ、電圧パラメータを調節して、シグナル対ノイズ比とシグナルの安定性を最大化します。

[TurbolonSpray プローブの最適化](#) または [APCI プローブの最適化](#) を参照してください。

## TurbolonSpray プローブの最適化



**警告!** イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。イオン源排気システムが接続され機能していること、およびラボ全体が良好に換気されていることを確認してください。ラボでの適切な換気は、溶剤やサンプル排気の制御と、システムを安全に操作する上で必要です。



**警告!** 火災の危険。イオン源に可燃性の溶剤を 3 mL/分以上向けないでください。LC コンポーネントは最大 5 mL/分の流量を提供しますが、最大流量を上回ると、溶剤がイオン源に蓄積する可能性があります。イオン源とプローブが正しく設置されているときにイオン源排気システムが無効で機能していない場合は、イオン源を使用しないでください。



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

**注意:** ダメージを与える恐れ。質量分析装置に接続されている LC システムがソフトウェアによって制御されていない場合は、操作中に質量分析装置から目を離さないでください。質量分析装置がスタンバイ状態に入ると、LC システムがイオン源をあふれさす可能性があります。

**注:** システムを清潔かつ最適な性能に保つために、流量を変更する際にプローブ位置を調整します。

**ヒント!** シグナルおよびシグナル対ノイズ比を最適化するときは、フローインジェクション分析を使用する方がオンカラム注入法を使用するよりも簡単です。

**注:** IonSpray Voltage が高過ぎる場合、コロナ放電が発生する可能性があります。コロナ放電はプローブの先端で青く光るため、目視で確認できます。コロナ放電によって、シグナルの感度と安定性が低下します。

## 流量およびイオン源温度

サンプル導入流量およびサンプル溶媒組成は、TurbolonSpray プローブ温度の最適化に影響を及ぼします。流量が多いほど、または水分含有量が多いほど、最適温度は高くなります。

TurbolonSpray プローブは、多くの場合、サンプル流量 5  $\mu\text{L}/\text{分}$  ~ 1000  $\mu\text{L}/\text{分}$  で使用されます。蒸発速度を速めるため、熱が利用されます。これにより、イオン化効率が向上し、感度が高まります。流量が極度に少ない高有機溶媒の場合は通常、温度を上げる必要はありません。イオン源パラメータおよび電圧を参照してください。

次の表に、さまざまな流量に対応した標準的なイオン源温度を示します。ユーザーは必ず、特定の用途用にイオン源温度を最適化する必要があります。

表 7-1 : 流量および通常温度

流量 ( $\mu\text{L}/\text{分}$ )	通常のイオン源温度 ( $^{\circ}\text{C}$ )
1 ~ 20	0 ~ 100
20 ~ 100	150 ~ 350
100 ~ 300	300 ~ 400
300 ~ 1000	400 ~ 500



## メソッド

液体サンプルストリームは、LC ポンプまたはシリンジポンプによってイオン源に運ばれます。LC ポンプでサンプルを送る場合、フローインジェクション分析 (FIA) またはティー注入を使用して移動相に直接注入するか、シリンジポンプを介して注入するか、またはループインジェクタもしくはオートサンプラーを使用して分離カラム経由で注入できます。シリンジポンプで導入する場合、サンプルはイオン源に直接注入されます。注入の最適化は、イオンパスの最適化と MS/MS フラグメント選定に使用することができます。

## システムの準備

特定の化合物のために最適化するためのメソッドを作成するには、[手動での化合物最適化](#)を参照してください。

1. Analyst MD ソフトウェアを起動します。
2. Navigation バーの **Tune and Calibrate** モードの下にある **Manual Tuning** をダブルクリックします。
3. 前回最適化したメソッドを開くか、化合物に合わせてメソッドを作成します。
4. イオン源の熱を冷まされている場合、次の操作を行います。
  - a. イオン源温度を 450 に設定します。
  - b. イオン源を 30 分そのままにして温めます。  
この 30 分間の温め行程で、溶媒蒸気が冷たいプローブ内で固体化するのを防ぎます。
5. 溶媒フローとサンプル注入を開始します。

## 開始条件の設定

1. Tune Method Editor で、正しい **Scan Type** と適切な化合物パラメータが選択されていることを確認してください。
2. **Ion Source Gas 1** の開始値を入力します。  
LC ポンプの場合、40 ~ 60 の値をガス 1 に使用します。
3. **Ion Source Gas 2 (GS2)** の開始値を入力します。  
LC ポンプの場合、30 ~ 50 の値をガス 2 に使用します。

---

注: ガス 2 は多めの流量で、通常 LC システムと使用され、温度の上昇と連動しています。

---

4. **IonSpray Voltage (IS)** フィールドに 4500 と入力します。
5. **Curtain Gas (CUR)** フィールドに 20 と入力します。
6. 測定を開始します。

## TurbolonSpray プローブポジションの最適化



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



**警告!** 尖った部分により怪我をする危険。電極を取り扱うときは注意してください。電極チップは非常に尖っています。

プローブを最適化したら、微調整だけで済みます。プローブを取り外した場合、または分析物、流量、溶媒組成が変更された場合は、最適化手順を繰り返します。

イオン源コンポーネントを参照してください。

1. イオン源のウィンドウ越しに、プローブポジションを確認します。
2. 前回の水平および垂直マイクロメータ設定を使用するか、これらの設定を 5 にして開始ポジションとして設定します。
3. 分析試料のシグナルまたはシグナル対ノイズ比を制御ソフトウェアでモニターします。
4. 水平マイクロメータを使用してプローブポジションを少しずつ調整して、最適なシグナルまたはシグナル対ノイズ比を達成します。  
プローブをアパチャのどちらかの側に若干寄せた方が最適となる可能性もあります。

**ヒント!** 水平マイクロメータ設定を調節して、TurbolonSpray プローブから出る液体噴射の方向をアパチャからそらして、アパチャの汚染、シグナルの不安定化をもたらす Curtain Gas インターフェースの流量の浸透、液体混入による電気ショートを防ぎます。

5. 垂直マイクロメータを使用してプローブポジションを少しずつ調整して、最適なシグナルまたはシグナル対ノイズ比を達成します。

**注:** プローブの垂直ポジションは流量に左右されます。流量が低くなると、プローブがアパチャ（開口部）に接近します。流量が高くなると、プローブがアパチャ（開口部）から遠ざかります。

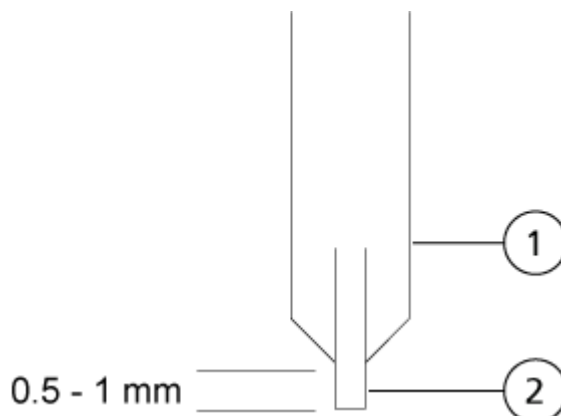
6. プローブ上の黒の電極調整ナットを調整して、電極チューブをプローブの内側または外側へと移動します（突起を調整します）。

**注:** 電極チップがプローブ終端よりも 0.5 mm ~ 1.0 mm 先に伸びていなくてはなりません。

電極チップの最適な設定値は化合物に左右されます。電極チップの突出距離がスプレーコーンの形状に影響を及ぼし、スプレーコーンの形状が質量分析装置の感度に影響を及ぼします。



図 7-1：電極チップ拡張部の調整



項目	説明
1	プローブ
2	電極

## イオン源/ガスパラメータおよび電圧の最適化

最適なシグナル安定性と感度が得られるよう、イオン源ガス 1(ネブライザガス)を最適化します。イオン源ガス 2(ヒーターガス)は溶媒の蒸発を助け、サンプルのイオン化を促進します。

温度が高すぎると、TurbolonSpray プローブで溶媒が早期に蒸発する可能性があります(これは特に、プローブの突出が大きすぎる場合によく起こります)。その結果シグナルが不安定になり、化学的バックグラウンドノイズが高くなります。同様に、ヒーターガス流量を多くすると、ノイズの多いシグナルまたは不安定なシグナルが生じる可能性があります。

**注:** IonSpray Voltage が高過ぎる場合、コロナ放電が発生する可能性があります。コロナ放電はプローブの先端で青く光るため、目視で確認できます。コロナ放電によって、シグナルの感度と安定性が低下します。

1. 最適なシグナルまたはシグナル対ノイズ比が得られるよう、イオン源ガス 1 とイオン源ガス 2 を 5 単位で調整します。
2. シグナルが減少し始めるまで、Curtain Gas インターフェースのガス流量を増やします。

注: 汚染を防ぐために、Curtain Gas インターフェースのガス流量は、感度を犠牲にしない範囲で、できるだけ大きな値を使用してください。流量を表の値未満に設定しないでください: 表 7-2。これにより、ノイズの多い信号を発生させる Curtain Gas インターフェースのガスの流れが浸透するのを防ぎ、アパチャ(開口部)の汚染を防ぎ、全体のシグナル対ノイズ比を高めることができます。

表 7-2 : CUR パラメータ値

質量分析装置	開始値
4500MD システム	20

3. IonSpray Voltage (IS) スプレー電圧の値を 500 V 単位で調整して、シグナル対ノイズ比を最大化します。

### ターボヒーター温度の最適化

最適なヒーター温度は、化合物、流量、および移動相の組成によって異なります。流量が多くなると、または水分組成が高くなると、最適温度も高くなります。

イオン源温度を最適化する際には、イオン源が新規設定温度で平衡状態に達しているかを確認します。

最適なシグナルまたはシグナル対ノイズ比が得られるよう、イオン源温度を 50 °C ~ 100 °C 単位で調整します。

### APCI プローブの最適化



警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。イオン源排気システムが接続され機能していること、およびラボ全体が良好に換気されていることを確認してください。ラボでの適切な換気は、溶剤やサンプル排気の制御と、システムを安全に操作する上で必要です。



警告! 火災の危険。イオン源に可燃性の溶剤を 3 mL/分以上向けないでください。LC コンポーネントは最大 5 mL/分の流量を提供しますが、最大流量を上回ると、溶剤がイオン源に蓄積する可能性があります。イオン源とプローブが正しく設置されているときにイオン源排気システムが無効で機能していない場合は、イオン源を使用しないでください。



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



**注意:** ダメージを与える恐れ。質量分析装置に接続されている LC システムがソフトウェアによって制御されていない場合は、操作中に質量分析装置から目を離さないでください。質量分析装置がスタンバイ状態に入ると、LC システムがイオン源をあふれさす可能性があります。

**注:** APCI プローブにサポートされる最小流量は、200  $\mu\text{L}/\text{min}$  です。APCI プローブのパラメータの完全なリストについては、[APCI プローブのパラメータ](#) を参照してください。

**ヒント!** シグナルおよびシグナル対ノイズ比を最適化するときは、フローインジェクション分析を使用する方がオンカラム注入法を使用するよりも簡単です。

**注:** APCI プローブを使用する際には、コロナ放電ニードルがアパチャ(開口部)の方を指しているかを確認します。

## システムの準備

特定の化合物のために最適化するためのメソッドを作成するには、[手動での化合物最適化](#)を参照してください。

1. Analyst MD ソフトウェアを起動します。
2. Navigation バーの **Tune and Calibrate** モードの下にある **Manual Tuning** をダブルクリックします。
3. 前回最適化したメソッドを開くか、化合物に合わせてメソッドを作成します。
4. イオン源の熱を冷まされている場合、次の操作を行います。
  - a. イオン源温度を 450 に設定します。
  - b. イオン源を 30 分そのままにして温めます。  
この 30 分間の温め行程で、溶媒蒸気が冷たいプローブ内で固体化するのを防ぎます。
5. 溶媒フローとサンプル注入を開始します。

## 開始条件の設定

1. Tune Method Editor で、正しい **Scan Type** と適切な化合物パラメータが選択されていることを確認してください。
2. **Ion Source Gas 1 (GS1)** フィールドに 30 と入力します。
3. **Curtain Gas (CUR)** フィールドに 20 と入力します。
4. **Nebulizer Current (NC)** フィールドに 1 と入力します。
5. Compound タブの **Declustering potential (DP)** フィールドで、100 を入力します。
6. 測定を開始します。

## イオン源 / ガスパラメータの最適化

1. 最適なシグナルまたはシグナル対ノイズ比が得られるよう、イオン源ガス 1 を 5 単位で調整します。

2. Curtain Gas インターフェースのガス流量を、シグナルが減少し始めるまで増やしていきます。

注: 汚染を防ぐために、Curtain Gas インターフェースのガス流量は、感度を犠牲にしない範囲で、できるだけ大きな値を使用してください。流量を表の値未満に設定しないでください: 表 7-3。これにより、ノイズの多い信号を発生させる Curtain Gas インターフェースのガスの流れが浸透するのを防ぎ、アパチャ(開口部)の汚染を防ぎ、全体のシグナル対ノイズ比を高めることができます。

表 7-3: CUR パラメータ値

質量分析装置	開始値
4500MD システム	20

## コロナ放電ニードルのポジションの調整



警告! 感電の危険。この手順に従い、コロナ放電ニードル、カーテンプレート、およびターボヒーターに印加された高電圧に触れないようにします。



### 必要な資材

- 絶縁マイナスイオンドライバー

APCI プローブを使用する際には、コロナ放電ニードルがアパチャ(開口部)の方を指しているかを確認します。TurboIonSpray プローブを使用する際には、コロナ放電ニードルがアパチャから離れた方を指しているかを確認します。

1. 絶縁マイナスイオンドライバーを使用して、ニードルの最上部にあるコロナ放電ニードル調整ネジを回します。
2. ガラスウィンドウ越しに、ニードルチップがアパチャの方を向いた形で配置されているかを確認します。

## APCI プローブポジションの最適化



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

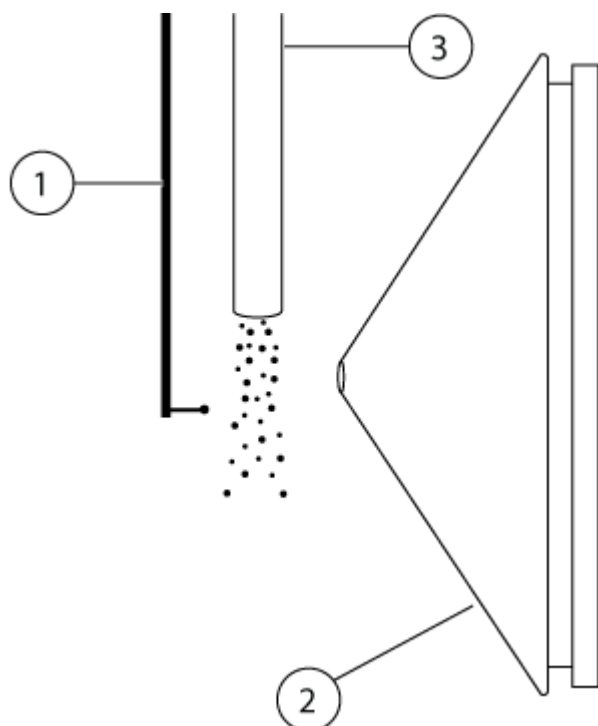


警告! 尖った部分により怪我をする危険。電極を取り扱うときは注意してください。電極チップは非常に尖っています。

カーテンプレートアパチャが、常に溶媒や溶媒液滴のない状態に保たれていることを確認します。

スプレーノズルのポジションが感度とシグナル安定性に影響を及ぼします。プローブポジションは必ず少しずつ調整してください。流量が少ない場合は、プローブをアパチャに近づけます。流量が多い場合は、プローブをアパチャから遠ざけます。プローブを最適化したら、微調整だけで済みます。プローブを取り外した場合、または分析物、流量、溶媒組成が変更された場合は、最適化手順を繰り返します。

図 7-2 : スプレーノズルポジション



項目	説明
1	コロナ放電ニードル
2	カーテンプレート
3	APCI プローブ

1. 前回の水平および垂直マイクロメータ設定を使用するか、これらの設定を 5 にして開始ポジションとして設定します。

**注:** 質量分析装置の性能低減を回避するために、アパチャ(開口部)内に直接スプレー噴射しないでください。

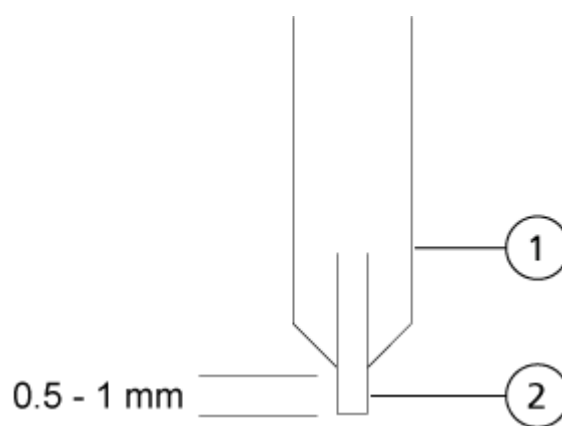
2. 制御ソフトウェアで、分析試料のシグナルまたはシグナル対ノイズ比をモニターします。
3. 水平マイクロメータを使用してプローブを少しずつ調整して、最適なシグナルまたはシグナル対ノイズ比を達成します。

4. 垂直マイクロメータを使用してプローブポジションを少しずつ調整して、最適なシグナルまたはシグナル対ノイズ比を達成します。
5. プローブ上の黒の電極調整ナットを調整して、電極チューブをプローブの内側または外側へと移動します(突起を調整します)。

注: 電極チップがプローブ終端よりも 0.5 mm ~ 1.0 mm 先に伸びていなくてはなりません。

電極チップの最適な設定値は化合物に左右されます。電極チップの突出距離がスプレーコーンの形状に影響を及ぼし、スプレーコーンの形状が質量分析装置の感度に影響を及ぼします。

図 7-3 : 電極チップ拡張部の調整



項目	説明
1	プローブ
2	電極

## ネブライザ電流の最適化

イオン源は電圧ではなく電流で制御されています。イオン源の選択位置に関係なく、測定メソッドに適した電流を選択します。

ネブライザの電流値の開始値を 3 として値を増減し、最適なシグナルまたはシグナル対ノイズ比が得られるよう調整します。

コロナ放電ニードルに印加されるネブライザ電流の最適値は、通常、どちらの極性でも 1  $\mu$ A ~ 5  $\mu$ A です。電流を上げてもシグナルに変化が見られない場合は、最高のシグナルまたはシグナル対ノイズ比が得られる最小値にしておきます。

## APCI プローブ温度の最適化

溶媒の容量と種類が、最適な APCI プローブ温度に影響を及ぼします。流量が多くなると、最適温度が高くなります。

最適なシグナルまたはシグナル対ノイズ比が得られるよう、イオン源温度を 50 °C ~ 100 °C 単位で調整します。

## 最適化に関するヒント

イオン源を最適化すると、イオン源および真空インターフェースコンポーネントのクリーニングの必要性が最小限に抑えられます。

- 化合物を最適化する際、可能な限り最も高い温度を使用します。多くの化合物にとって一般的な温度は 700 °C です。高温にすることによりイオン源を清潔に保ち、バックグラウンドノイズを削減します。
- Curtain Gas インターフェースのガス流量には、感度を損なわない範囲で可能な限り高い値を使用します。これにより、次のことが可能になります。
  - Curtain Gas インターフェースのガス流の貫通を防ぐ。これはノイズの多いシグナルを生成する可能性があります。
  - アパチャを汚染から守ります。
  - 全体のシグナル対ノイズ比を向上させます。
- 次の目的で、水平マイクロメータを調整して、プローブからの液体スプレーをアパチャから離れる方向に向けます。
  - アパチャを汚染から守ります。
  - Curtain Gas インターフェースのガス流の貫通を防ぐ。これは不安定なシグナルを生成する可能性があります。
  - 液体混入による電気ショートを回避します。

そのためには、垂直マイクロメータを用いて、プローブを上に向けます。

- シグナルを損なわない範囲で可能な限り低い IonSpray 電圧を使用します。シグナルだけではなく、シグナル対ノイズ比にも着目します。
- APCI モードで 2 mL/min を超える流量を用いる場合は、液体フローを開始する前に質量分析装置が平衡状態となるまで待ち、噴霧温度に達していることを確認します。

## 質量分析装置のキャリブレーション手順

質量較正は時間経過に伴い変化する可能性があります。質量較正は定期的に検証してください。設置時、質量分析装置の最高の感度と性能を得るためにシステムは質量較正を行い、単位および高分解能（ポジティブとネガティブの両方のモード）でスペクトルのピークの分解能が最適化されます。質量較正は、イオン化合物から発信されたシグナルが真の  $m/z$  値で記録されることを保証します。<sup>1</sup>  $m/z$  スケールは、既知の純度と質量の化合物を用いてキャリブレートされます。分解能の最適化には、ピーク幅とピーク形状の調整が伴います。質量スペクトル分解能は  $(m/z)/\text{Width}$  で表され、ここで、Width は既定の  $m/z$  値でのスペクトルピークのピーク幅です。<sup>1</sup> ピーク幅は、通常強度が半分のピーク高さの点で測定されます。

<sup>1</sup> CLSI 標準 C50-A-27 巻, No.24 — 臨床検査での質量分析: 一般原則とガイダンス: 承認されたガイドライン.



注: 分解能が高くなると、感度が下がります。感度と分解能の要件の均衡をとることが重要です。

---

Analyst MD ソフトウェアの Instrument Optimization モジュールは、質量較正と分解能の最適化に使用します。システムが正常に機能していることを確認するため、毎週、または機器をクリーニングした後に、質量較正と分解能を確認してください。一般に、トリプル四重極質量分析装置のキャリブレーションと分解能は、システムが真空を失わなければ 3~6 か月間安定しています。システムが真空を失う場合、システムを使用する前にキャリブレーションと分解能を確認します。[使用説明—チューニングとキャリブレーション](#) を参照してください。

---

注意: 結果が不正確になる可能性。システムがキャリブレーションされていることを確かめてください。システムが適切にキャリブレーションされていない場合、質量の同定や定量化が不正確になることがあります。

---

[操作上の予防措置および制限事項](#)および[キャリブレーションイオンと溶液](#)を参照してください。

## 質量分析装置のリセット

1. 質量分析装置で継続しているスキャンを中断した後、サンプルフローを停止します。
2. 制御ソフトウェアを閉じます。
3. **Reset** ボタンを 5 秒間押します。  
リレーが有効になるとクリック音が聞こえます。約 three 分後、質量分析装置が動作圧力に達します。

## システムのシャットダウンと大気開放

一部の手順では、システムをシャットダウンする必要があります。その他にも、大気開放が必要になる場合があります。以下の手順に従ってシステムをシャットダウンし、必要に応じて大気開放します。

注意: ダメージを与える恐れ。ターボポンプの回転が止まるまで、粗引きポンプを停止させないでください。

---

注: インพุットガス供給を外す必要がある場合、外す前にガスラインの圧力を開放します。

---

ヒント! 質量分析装置を延長期間使用しない場合は、イオン源をすぐ使用できる状態にしたまま Standby 状態にしておいてください。質量分析装置をシャットダウンさせるには、次の手順に従ってください。

---

1. 継続中のスキャンを完了させるか、停止してください。

注意: ダメージを与える恐れ。システムをシャットダウンする前に、サンプルフローを停止します。

---

2. システムのサンプルフローを停止します。
3. ソフトウェアを閉じます。



4. (必要に応じて)以下の手順に従ってシステムを大気開放します。

---

**注:** 真空インターフェースのフルクリーニング実行前、Q0 領域のクリーニング前、および粗引きポンプオイルの交換前にシステムを大気開放してください。詳細な情報については、有資格保守要員(QMP)またはフィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。

---

- a. **Vent** ボタンを 3 秒間押します。  
真空 LED が素早く(ポンプ停止時よりも速く)点滅し始めます。ターボポンプの回転速度が徐々に落ちます。
  - b. システムを 15 分間ベントしてから、粗引きポンプの電源を切ります。
5. 質量分析装置のコンビニエンススイッチを切ります。
  6. 質量分析装置の主電源ケーブルを、主電源コンセントから取り外します。
  7. (システムを大気開放する場合)粗引きポンプの電源供給ケーブルを、主電源コンセントから取り外します。

## ハードウェアプロファイル

ハードウェアプロファイルは、質量分析装置および機器がどのように構成され、コンピュータに接続されているかをソフトウェアに伝えます。複数のハードウェアプロファイルを設定することができますが、随時アクティブにできるのは 1 つのプロファイルだけです。

Hardware Configuration Editor でハードウェアプロファイルを作成する場合、周辺装置はソフトウェアと通信できるように構成する必要があります。周辺機器の設定には、次の 2 つの手順が必要です。

- 物理的な接続を行う手順。機器への物理的接続の設定については、*周辺装置セットアップガイド*を参照してください。
- 周辺機器と通信するためにソフトウェアを設定する手順。対応デバイスの一覧は、Analyst MD ソフトウェアの *ソフトウェアインストールガイド*を参照してください。

ソフトウェアをインストールするときに、各周辺装置に必要なドライバもインストールされます。周辺装置を物理的にコンピュータに接続した後、適切な構成情報を設定します。

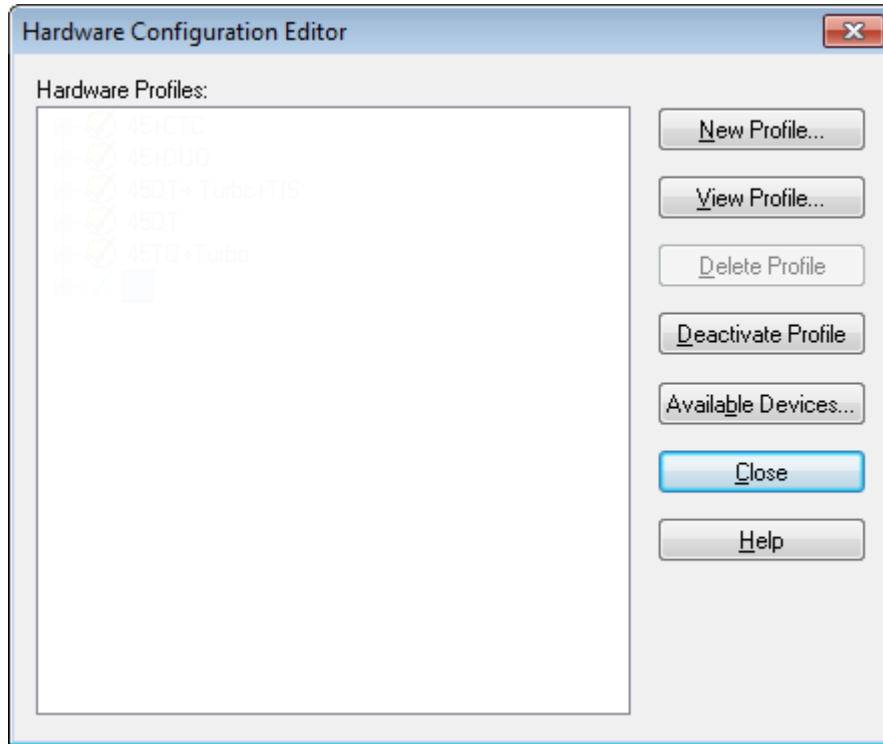
各ハードウェアプロファイルには質量分析装置が含まれている必要があります。測定メソッドを作成する前に、メソッドに使用する全機器がハードウェアプロファイルに含まれていることを確認します。有効なハードウェアプロファイルで構成し、Add/Remove Device Method ダイアログボックスで選択した機器は、Acquisition method ペインでアイコン表示されます。有効なハードウェアプロファイルに含まれる周辺装置のみが、測定メソッドの作成に使用できます。

## ハードウェアプロファイルの作成

ユーザーは複数のハードウェアプロファイルを作成することができますが、随時アクティブにできるのは 1 つのプロファイルだけです。

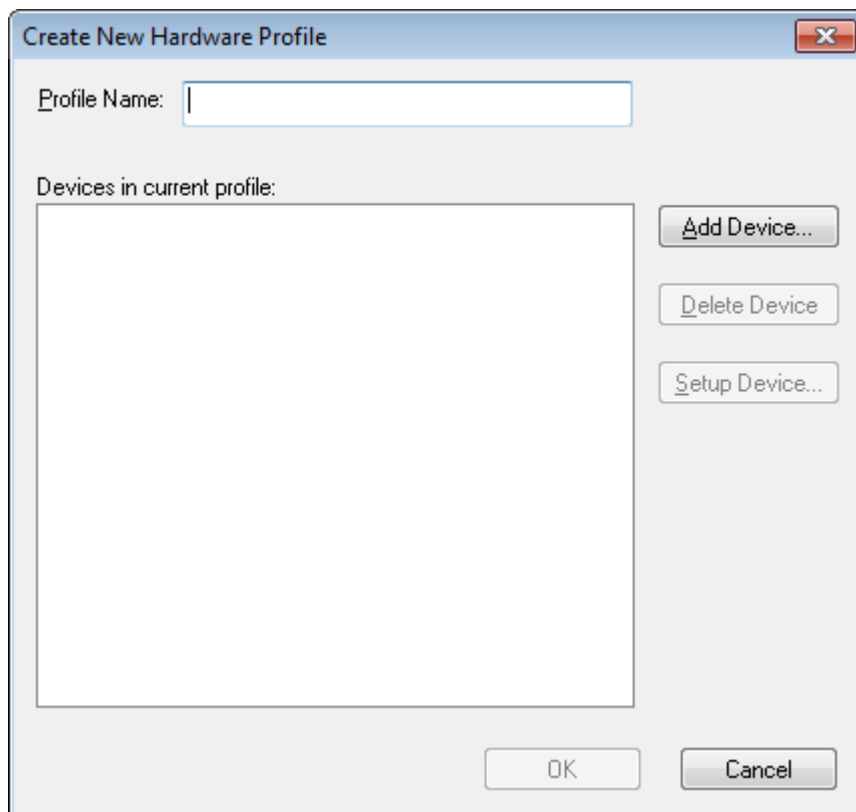
1. Navigation バーの **Configure** の下にある **Hardware Configuration** をダブルクリックします。

図 8-1 : Hardware Configuration Editor ダイアログ



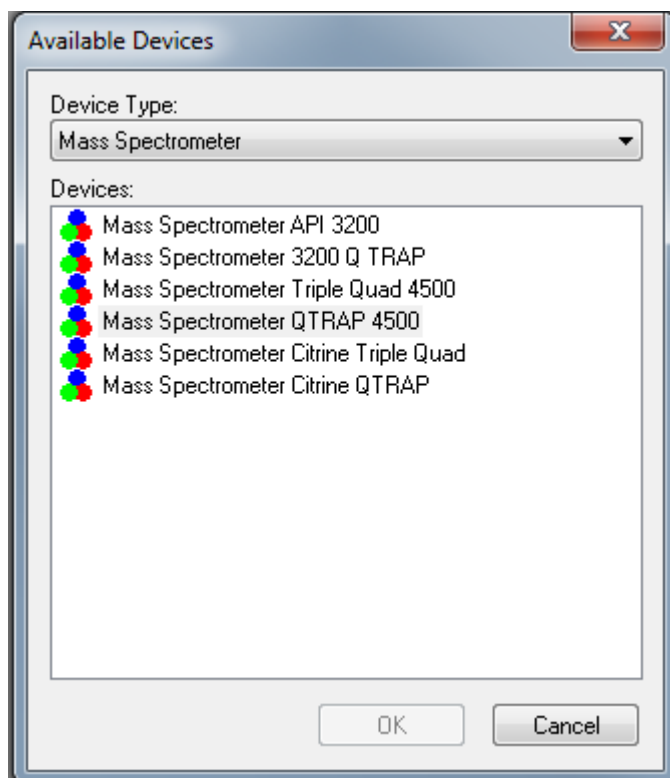
2. **New Profile** をクリックします。

図 8-2 : Create New Hardware Profile ダイアログ



3. **Profile Name** フィールドに名前を入力します。
4. **Add Device** をクリックします。

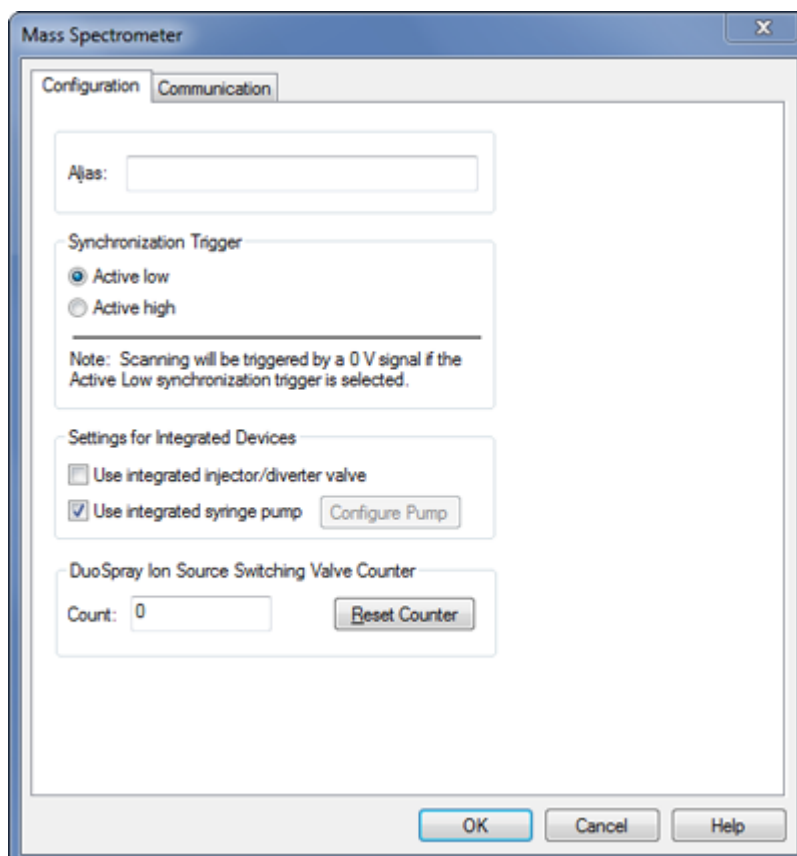
図 8-3 : Available Devices ダイアログ



Available Devices ダイアログの **Mass Spectrometer** フィールドでは、**Device Type** がプリセット値となっています。

5. **Devices** リストで適切な質量分析装置を選択し、**OK** をクリックします。
6. Create New Hardware Profile ダイアログで **Setup Device** をクリックします。
7. (オプション)内蔵シリンジポンプを使用する質量分析装置を構成するには、Configuration タブで **Use integrated syringe pump** チェックボックスをオンにします。

図 8-4 : シリンジポンプが構成された Configuration タブ



8. (オプション)ダイバーターバルブに対する質量分析装置を構成するには、Configuration タブで **Use integrated injector/diverter valve** を選択します。
9. (オプション)必要であれば Configuration および Communication タブでさらなる特性を選択します。
10. **OK** をクリックします。
11. Create New Hardware Profile ダイアログで **Add Device** をクリックし、質量分析装置で使用する各デバイスを追加して設定します。[ハードウェアプロファイルにデバイスを追加](#)を参照してください。
12. Create New Hardware Profile ダイアログで **OK** をクリックします。
13. Hardware Configuration Editor で有効化対象のハードウェアのプロファイルをクリックします。
14. **Activate Profile** をクリックします。  
チェックマークが緑色に変わります。赤い×印が現れる場合は、ハードウェアプロファイルの有効化に問題が生じています。

---

**ヒント!** ハードウェアプロファイルは、別のプロファイルが有効化されるまでは無効化する必要はありません。ハードウェアプロファイルをクリックし、次に **Activate Profile** をクリックします。有効なプロファイルは自動的に無効化されます。

---

15. **Close** をクリックします。

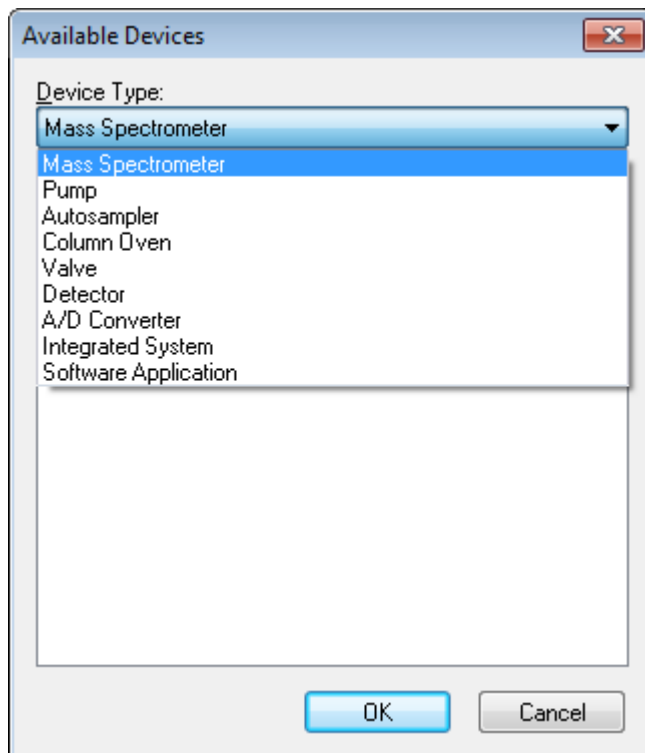
注: 有効なハードウェアプロファイルの現在の動作モードは、Analyst MD ソフトウェアウィンドウの右下のセクションで質量分析装置アイコンをダブルクリックすると、装置の Detailed Status ダイアログに表示されます。

## ハードウェアプロファイルにデバイスを追加

デバイスは、ソフトウェアが通信できるように構成する必要があります。ソフトウェアをインストールすると、各デバイスに必要なドライバもインストールされます。デバイスを設定する前に、デバイスをコンピュータに物理的に接続する必要があります。詳細な情報については、*周辺装置セットアップガイド*を参照してください。

1. Hardware Configuration Editor を開いてください。
2. **Hardware Profiles** リストで、ハードウェアプロファイルを無効にします。
3. **Edit Profile** をクリックします。
4. **Add Device** をクリックします。  
Available Devices ダイアログが開きます。
5. **Device Type** リストでデバイスを選択し、**OK** をクリックします。

図 8-5 : Available Devices ダイアログ



6. **OK** をクリックします。
7. **Devices** リストでデバイスを選択してから、**OK** をクリックします。

8. **Setup Device** をクリックします。  
デバイスの構成値を含むダイアログが開きます。
9. (オプション) Communication タブの **Alias** フィールドで、デバイスの名称または他の識別子を入力します。

---

注: シリアル通信を使用するデバイスでは、選択したシリアルポートが、デバイスが物理的に接続されているデバイスのシリアルポートと一致していることを確認してください。

---

注: **Alias** フィールドは **Name** ボックスとして参照されることもあり、**Alias** の下にある他のタブに位置しています。

---

- デバイスが **Serial Port** を通信インターフェースとして使用する場合は、**COM Port Number** リストでデバイスを接続している COM ポートを選択します。
- デバイスが **Ethernet** を通信インターフェースとして使用する場合は、管理者によりデバイスに割り当てられた **IP Address** を入力するか、対応するアドレスの **Host Name** を使用します。
- デバイスが **GPIB Board** を通信インターフェースとして使用する場合は、GPIB ボードの設定を変更しないでください。

デバイスの残りのプリセット値は、適切だと考えます。これらの値を変更しないでください。Configuration タブおよび Communication タブについての詳細は、ヘルプを参照してください。

10. デバイスのプリセット値を回復するには、Communication タブで、**Set Defaults** をクリックします。
11. 構成を保存するには、**OK** をクリックします。
12. ステップ 4 からステップ 11 を各デバイスについて繰り返します。
13. Create New Hardware Profile ダイアログで **OK** をクリックします。
14. ハードウェアプロファイルを有効にするには、以下の手順に従います。
  - a. Hardware Configuration Editor で、ハードウェアプロファイルをクリックします。
  - b. **Activate Profile** をクリックします。

チェックマークが緑色に変わります。赤い×印が現れる場合は、ハードウェアプロファイルの有効化に問題が生じています。詳細な情報については、[ハードウェアプロファイル有効化のトラブルシューティング](#)を参照してください。

---

**ヒント!** 他のハードウェアを有効にするために有効なハードウェアプロファイルを無効化する必要はありません。有効でないハードウェアプロファイルをクリックし、**Activate Profile** をクリックします。他のプロファイルは自動的に無効化されます。

---

15. **Close** をクリックします。

## ハードウェアプロファイルのデバイスの編集

1. Hardware Configuration Editor を開きます。



2. **Hardware Profiles** リストで、ハードウェアプロファイルを無効にします。
3. **Edit Profile** をクリックします。
4. 適切なデバイスを選択して **Setup Device** をクリックします。  
デバイス構成ダイアログが開きます。
5. 構成を編集して **OK** をクリックします。
6. **OK** をクリックします。
7. **Activate Profile** をクリックします。  
チェックマークが緑色に変わります。赤い×印が現れる場合、ハードウェアプロファイルの有効化に問題が生じています。詳細な情報については、[ハードウェアプロファイル有効化のトラブルシューティング](#)を参照してください。

---

**ヒント!** 他のハードウェアを有効にするために有効なハードウェアプロファイルは無効化する必要はありません。有効でないハードウェアプロファイルをクリックし、**Activate Profile** をクリックします。他のプロファイルは自動的に無効化されます。

---

8. **Close** をクリックします。

## ハードウェアプロファイル有効化のトラブルシューティング

ハードウェアプロファイルが有効にならない場合、プロファイルのどのデバイスが有効化に失敗したかを示すダイアログボックスが開きます。通信エラーでデバイスが有効にならないおそれがあります。

1. 生成されたエラーメッセージをお読みください。メッセージによって、機器自体、または通信のセットアップ方法に問題があるかどうか分かります。
2. デバイスが主電源に接続され、電源が入っていることを確認します。
3. デバイ스에割り当てられた COM ポートまたは IP アドレスが正しいことを確認します。

---

**ヒント!** コンピュータ上には 2 つのビルトインシリアルポートがあります。ケーブルに P1 と記されていても、シリアルポート拡張カードの最初のポートは通常 COM3 です。

---

4. デバイスとの通信設定（たとえば、デュアルインラインパッケージ (DIP) スイッチの設定）が正しく行われていて、Communication タブの設定と一致していることを確認します。
5. 機器の電源を切ってください。
6. 10 秒間待ってください。
7. 機器の電源を入れてください。  
すべての機器のパワーアップアクティビティが終了するまで待つてから、ハードウェアプロファイルをもう一度有効にします。いくつかの機器は、パワーアップアクティビティを終了するのに 30 秒以上かかる場合があります。
8. ハードウェアプロファイルを有効にします。
9. まだ問題が続くようであれば、失敗しているプロファイルを削除し、新たに作成してください。
10. それでも問題が解決しない場合は、[sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support) に進みます。

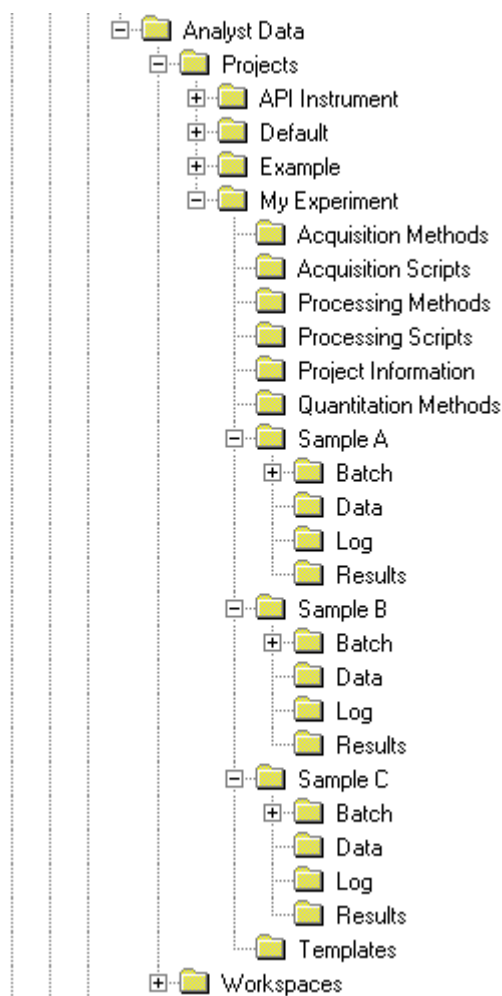
## プロジェクトおよびサブプロジェクト

実験開始前に、実験関連ファイルの保管場所を決めます。各実験にプロジェクトやサブプロジェクトを用いて、データを効果的に管理し結果を比較します。例えば、サブプロジェクトを用いて特定日の結果を保存します。

### サブプロジェクトについて

サブプロジェクトとは、プロジェクト内のフォルダのサブセットです。サブプロジェクトはすべて同じフォルダを含む必要があります。サブプロジェクトは、データの整理にきわめて有用です。例えば、異なるラボが同じ測定メソッドを用いて、さまざまな化合物のサンプルを実行する場合、ラボごとの結果の保存用にサブプロジェクトを用いつつ、測定メソッドフォルダはプロジェクトフォルダに保存することができます。こうすることで、測定メソッドはサブプロジェクトやラボで利用可能になります。その他、サンプルが数週間にわたって実行される場合には、日別の結果を別々のサブプロジェクトに保管することができます。

図 8-6 : プロジェクトとサブプロジェクトのフォルダ構造の例

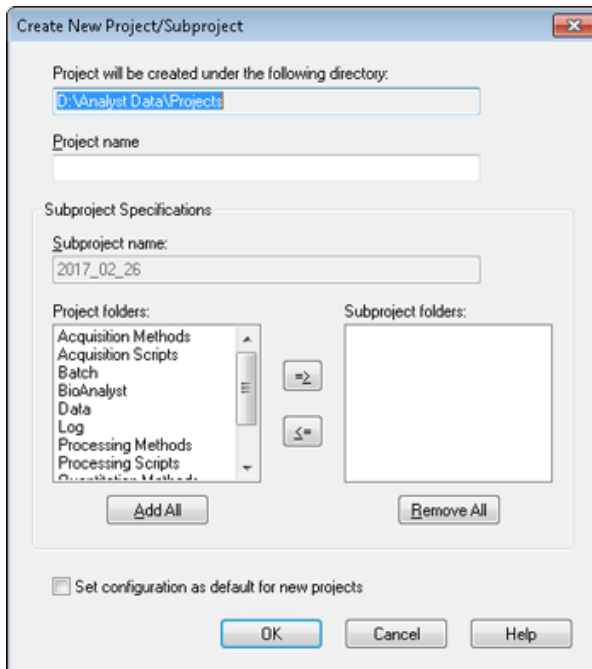


## プロジェクトおよびサブプロジェクトの作成

サブプロジェクト構造をプロジェクト内で使用するには、プロジェクト作成時にサブプロジェクト構造を作成します。

1. **Tools > Project > Create Project.** をクリックします。

図 8-7 : Create New Project/Subproject ダイアログ



**注:** 新規のサブプロジェクトは、最初にサブプロジェクト付きで作成されなかったプロジェクトには作成することができません。

2. **Project name** フィールドにプロジェクト名を入力します。
3. (オプション) サブプロジェクトを使用する場合は、以下の手順に従います。
  - a. 必要なフォルダを選択し、矢印ボタンを押して **Subproject folders** リストに移動します。
  - b. **Subproject name** フィールドに最初のサブプロジェクト名を入力するか、既存の日付を使用します。
4. (オプション) すべての新規プロジェクトに対して、このプロジェクトおよびサブプロジェクトのフォルダ組織を使用するには、**Set configuration as default for new projects** チェックボックスをオンにします。  
すべての新規プロジェクトはこのフォルダ構成で作成されます。
5. **OK** をクリックします。

## サブプロジェクトの作成

サブプロジェクトは、既存のサブプロジェクト構造を有するプロジェクトのみで作成されます。

1. **Project** ツールバー上で、**Project** リストからプロジェクトを選択します。
2. **Tools > Project > Create Subproject** をクリックします。
3. **Subproject name** ボックスで、サブプロジェクト名を入力するか既存の日付を使用します。
4. **OK** をクリックします。

### サブプロジェクトのコピー

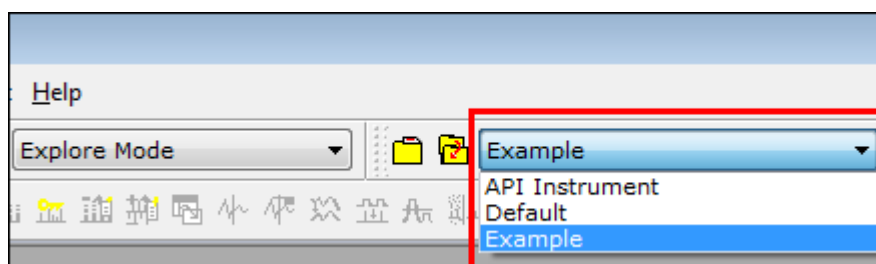
サブプロジェクトは、現存するサブプロジェクトを持つ別のプロジェクトからコピーが可能です。コピーするサブプロジェクトがコピー先のプロジェクトフォルダにも存在するフォルダを含む場合、ソフトウェアはプロジェクトレベルのフォルダを使用します。

1. **Tools > Project > Copy Subproject.** をクリックします。  
Copy Subproject ダイアログが開きます。
2. **Browse** をクリックして、サブプロジェクトのソースを参照します。
3. **OK** をクリックします。
4. **Source Subproject** リストからサブプロジェクトを選択します。
5. **Browse** をクリックして、サブプロジェクトのコピー先を参照します。
6. **Target Subproject** フィールドに名前を入力します。
7. **OK** をクリックします。
8. 次のいずれかの操作を行います。
  - **Subproject Source** から **Subproject Destination** にすべてのフォルダとファイルをコピーするには、**Copy Contents** チェックボックスをオンにします。
  - **Subproject Destination** に同じ構造でフォルダのみをコピーするには、**Copy Contents** チェックボックスがオフになっていることを確認します。
9. **Copy** をクリックします。

### プロジェクトとサブプロジェクトの切り替え

ソフトウェアツールバー上で、プロジェクトリストから必要なプロジェクトまたはサブプロジェクトをクリックします。

図 8-8 : プロジェクトリスト



この図のプロジェクトリストには、フォルダ **API Instrument**、**Default**、および **Example** が表示されます。

## インストールされるプロジェクトフォルダ

ソフトウェアをインストールすると、**Default**、**API Instrument**、**Example** という 3 つのプロジェクトフォルダがインストールされます。

### API 機器フォルダ

API Instrument フォルダは唯一、質量分析装置の機能を修正することができる重要なフォルダです。API Instrument フォルダには質量分析装置のチューニングおよびキャリブレーションに必要な情報が含まれています。この情報は、以下を含みます。

- パラメータ設定ファイル
- 参照ファイル
- キャリブレーションと分解能の情報を含む装置データファイル
- 自動チューニング中に使用する測定メソッド

API Instrument フォルダにはまた、**Start** ボタン (**Acquire** ボタンではありません) を使用して実行した手動チューニングのデータファイルも含まれています。これらのデータファイルは、作成された日時を名前にして、自動的に `API Instrument\Tuning Cache` フォルダに保存されます。Tuning Cache フォルダは定期的に自動削除されます。

### 初期設定フォルダ

Default フォルダには新規プロジェクトが含まれ、新規プロジェクトのテンプレートとしての役割を果たします。

### 実例フォルダ

Example フォルダには、サンプルのメソッドとデータファイルが含まれます。ユーザーは、サンプルデータファイルを使用して、Explore または Quantitate モードでの作業を練習することができます。実例ファイルは、質量分析装置の種類とアプリケーション領域によってサブフォルダにソートされます。

# 使用説明—チューニングとキャリブレーション

# 9

**Verify instrument performance** オプションを毎週または質量分析装置の洗浄後に実行し、システムが正常に作動しているかを確認してください。一般に、トリプル四重極システムでは、キャリブレーションおよび分解能調整は、システムが真空を失わない限り、3～6カ月間で十分です。QTRAPシステムでは、分解能調整は3～6カ月で十分ですが、システムはおおよそ毎月キャリブレーションが必要です。システムが真空を失う場合、システムを使用する前にキャリブレーションと分解能を確認します。調整とキャリブレーションに関する詳細は、[上級ユーザーガイド](#)および[手動チューニングチュートリアル](#)を参照してください。

**ヒント!** 定期的にメンテナンス作業を実行し、質量分析装置が最適に機能していることを確認してください。

## 前提条件

- スプレーは安定しており、正しいチューニング溶液が使用されています。
- プリンタが構成されています。

## 必要な資材

- システムとともに出荷された標準化学物質キットで供給されたチューニング溶液。必要に応じて、SCIEX から新しいキットをご注文いただけます。[キャリブレーションイオンと溶液](#)を参照してください。
- 5 mL、1 mL および 250  $\mu$ L シリアルガスタイトシリンジ
- 赤色の PEEK サンプルチューブ

## チューニングとキャリブレーションについて

装置のチューニングとは、分解能と装置パラメータを最適化することで、質量分析装置の感度と性能を最大限に高めるプロセスです。分解能の最適化では、ピーク幅とピーク形状の調整が必要です。装置のチューニングとキャリブレーションは自動または手動で実行できます。

**注意:** キャリブレーションエラーが発生する可能性があります。温度が 2 °C 以上変化すると、分解能と質量校正に影響する可能性があります。

**ヒント!** 四重極の帯電(対象イオンに対する感度が短期的に大幅に低下する可能性があります)を最小限に抑えるため、Q0 領域は定期的にクリーニングしてください。有資格保守要員(QMP)または FSE にお問い合わせください。

**自動チューニング:** ソフトウェアは、Instrument Optimization ウィザードを使って分解能の最適化と質量校正を行います。LIT 機器の場合、MS3 最適化もまた実行されます。

**手動チューニング:** 装置の分解能の最適化やキャリブレーションの多くは、ユーザーが手動で実行できます。

## API 機器フォルダのバックアップ

API Instrument フォルダを定期的に、および定期メンテナンス後にバックアップします。

API Instrument フォルダをコピーし、別の場所(別のコンピュータを推奨)に貼り付けます。その後フォルダ名を変更してください。複数の質量分析装置がある場合は、フォルダ名を付ける際に日付と質量分析装置のリファレンスを使用します。たとえば、API Instrument\_instrument\_model3\_010107 のように指定します。

## 装置パラメータのバックアップ

1. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Instrument Optimization** をダブルクリックします。
2. Instrument Optimization ダイアログの **File > Backup Instrument Settings Files** をクリックします。
3. ファイル名を入力し、**Save** をクリックします。
4. **Exit** をクリックします。

## 装置パラメータの復元

1. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Instrument Optimization** をダブルクリックします。
2. Instrument Optimization ダイアログの **File > Restore Instrument Settings Files** をクリックします。
3. 復元対象の装置設定に移動して、**Open** をクリックします。
4. **Exit** をクリックします。

## 自動チューニングおよびキャリブレーション

Instrument Optimization は、四重極モードと LIT モードの双方をチューニングし、質量較正を実行するための自動装置チューニングソフトウェアです。四重極モードでは、分解能オフセットが調整されます。LIT モードでは、AF3 と EXB が最適化されます。MS3 では、励起係数と分離係数が調整されます。次のいずれかの装置パフォーマンスオプションを選択します。

- **Verify instrument performance:** 装置のパフォーマンスをテストしますが、装置の設定は変更されません。テスト終了時にレポートが生成されます。このオプションは毎週実行し、装置の性能を確認します。

- **Adjust mass calibration only:** 質量較正を自動的に確認し、調整します。質量較正に変更が加えられた場合は、本ソフトウェアによって修正されます。このオプションは、必要に応じて質量較正を点検して調整するために LIT 機器に対して毎週または毎月使用できます。
- **Adjust instrument settings:** 装置の設定や質量較正を確認し、調整します。装置の設定が、現在の設定から最適な設定へと更新されます。このオプションは、装置の性能やピーク形状が良好でない場合に使用してください。装置の設定は、熟練したユーザー以外は調整しないでください。

注: 古い LIT メソッドは、新しい設定で更新する必要があります。Advanced MS タブで LIT 速度を切り替えた後、メソッドを保存します。

- **Reset selected scan modes to default values and adjust instrument settings:** 装置の値を工場出荷時のプリセット値にリセットします。このオプションは、装置の主要コンポーネントを交換した場合、または初回インストール後に選択してください。この機能は FSE のみが使用してください。

後日復元の必要が生じた場合に備え、現在の装置パラメータをバックアップします。装置パラメータのプリセットされた場所は、<drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Optimization\Instrument Settings Backups\User Created Backups です。

## 装置のパフォーマンスの検証

この手順は、質量分析装置のパフォーマンスを確認または調整するために使用します。他の機器のパフォーマンスオプションを使用する際の詳細については、ヘルプを参照してください。

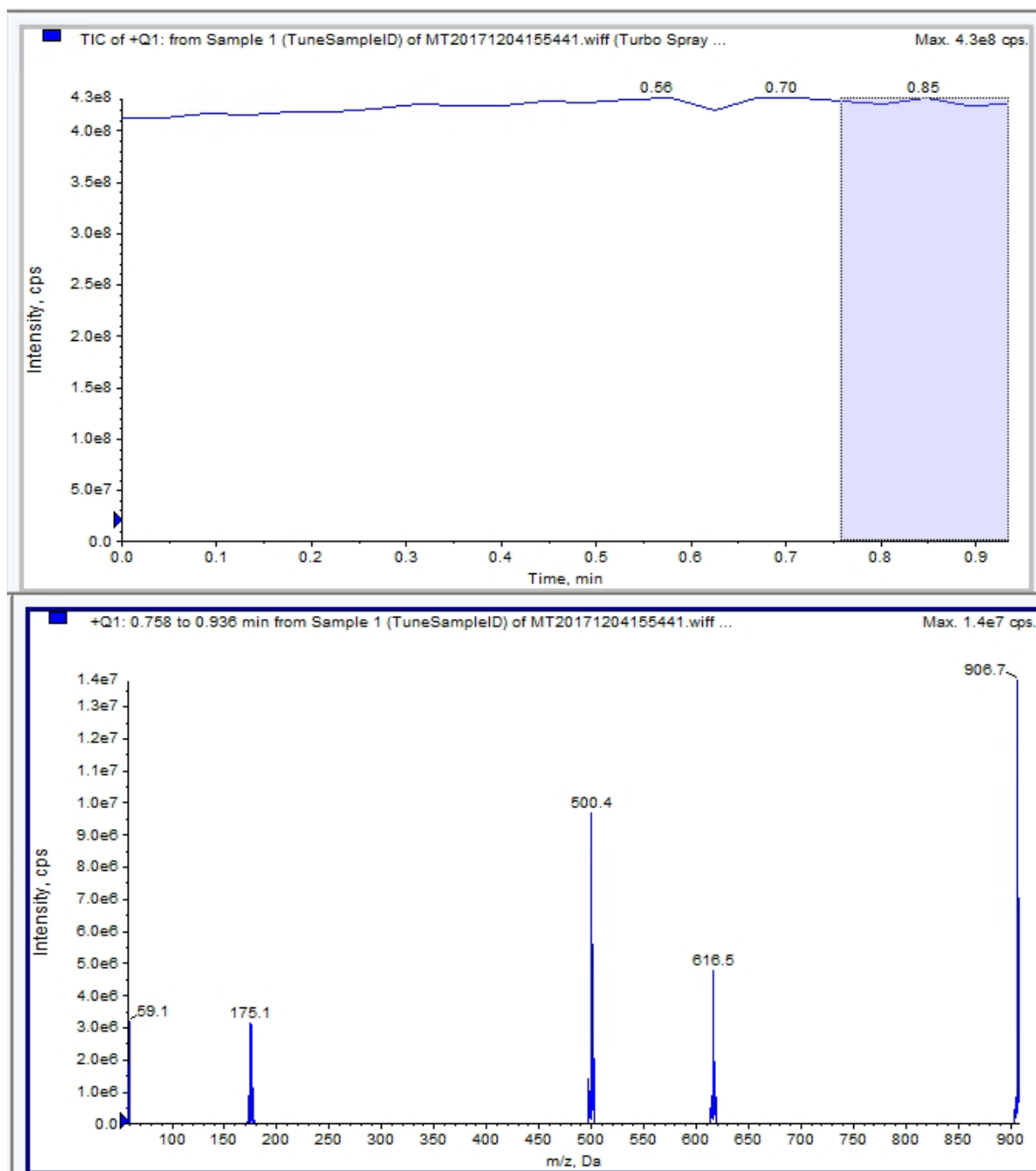
### 前提条件

- シリンジポンプがハードウェアプロファイルで有効である。シリンジポンプが有効でない場合は、ハードウェアプロファイルを編集します。[ハードウェアプロファイルにデバイスを追加](#)を参照してください。
- API Instrument フォルダが選択されている。

1. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Manual Tuning** をダブルクリックします。
2. シリンジポンプを起動し、**Duration** フィールドに **5** を入力してから、キャリブレーションメソッドを実行します。トータルイオンクロマトグラム (TIC) が安定しており、対象となるピークがスペクトルに存在することを確認します。



図 9-1 : 安定した TIC と対象となるピークの例



3. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Instrument Optimization** をダブルクリックします。  
Instrument Optimization ダイアログが開きます。
4. **Verify instrument performance** をクリックします。
5. **Next** をクリックします。

6. **Approved Tuning** をクリックします。
7. **Next** をクリックします。
8. リストから **Tuning Solution** を選択します。  
選択したソリューションに従って、異なるモードが利用可能となります。
  - a. 極性をクリックします。
  - b. (利用可能な場合)Quad セクションで **Q1** および **Q3** をクリックします。
  - c. (利用可能な場合)必要なスキャン速度をクリックします。
  - d. (利用可能な場合)LIT セクションでスキャン速度をクリックします。
  - e. (利用可能な場合)MS/MS/MS セクションで **Excitation** をクリックします。
9. **Next** をクリックします。
10. Select a mode ページが開いた場合は、**Automatic** を選択します。
11. **Next** をクリックします。
12. **GO** をクリックします。  
Verifying or Adjusting Performance ダイアログが開きます。プロセスが完了したら、Results Summary が開きます。詳細な情報については、ヘルプを参照してください。
13. (選択されたオプションにより該当する場合)プロンプトが表示されたら、異なるスキャンタイプや極性に溶液を変更します。

## Verifying or Adjusting Performance ダイアログ

左上隅に、調整されている装置の一部が表示されます。

ソフトウェアの結果がインタラクティブモードに表示されているとき、現在のスペクトルのグラフには、現在のスキャンのスペクトル、ソフトウェアによって選択された最適なスキャンまたは現在のパラメータ値のスキャンが表示されます。

グラフ右上にある装置の最適化決定プロットでは、現在最適化されているパラメータの強度 - 電圧の曲線が動的に表示されます。

## 結果概要

Results Summary は、Instrument Optimization ウィザードを用いて行われたすべての機器設定変更の記録です。

Results Summary には、データと機器設定のバックアップファイルの場所、最適化中の変更と結果のステップバイステップの記録が含まれています。

Results Summary にはまた、検証報告も含まれます。この報告は、適合する各質量に対する質量スペクトルをスキャンモードで検証したスナップショットを示したものです。スペクトルはターゲット質量、その質量の発見場所、質量シフト、ピーク幅、ピーク強度などで分類されています。このスペクトルはピークの形やスキャンモードのパフォーマンスを記した視覚的記録としても用いられます。スペクトルの状態に従って、結果要約表が作成されます。

Results Summary は、以下のパスに自動的に保存されます：

<drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Data\Instrument Optimization\yyyy-mm-dd\results.pdf。ここで yyyy-mm-dd は、レポートが作成された日付です。ユーザーは Results Summary の印刷、および以前に保存された Results Summary の閲覧が可能です。

## API 機器フォルダの回復

API Instrument フォルダを定期的に、および定期メンテナンス後にバックアップします。

1. 現在の API Instrument フォルダの名前を変更します。
2. バックアップフォルダを Projects フォルダにコピーします。
3. バックアップフォルダの名前を API Instrument に変更します。

特定の化合物のための機器パラメータを調整するには、次のステップに従うことを推奨します。4つの化合物の混合物は手順内の各ステップを説明するために使用されます。ユーザーは、対象となる分析に適切な化合物を使用する際、同じ手順を適用する必要があります。

このセクションは次の作業方法を説明しています。

- Compound Optimization ウィザードを使用して分析試料を自動で最適化します。
- 注入分析およびフローインジェクション分析 (FIA) のいずれかを選択します。
- パラメータの最適化:
  - 注入分析が選択された場合、注入メソッドを用いて化合物依存性パラメータを最適化します。
  - FIA 分析が選択された場合、FIA を用いて化合物依存性パラメータおよびイオン源依存性パラメータを最適化します。

この手順では、化合物の例として、ミノキシジル、トルブタミド、レセルピン、およびレシナミンを用います。その他の化合物も使用できますが、それに応じてメソッドを調整する必要があります。

ユーザーは手動で化合物を最適化することもできます。質量分析装置のシステムユーザーガイドを参照してください。

## 前提条件

- 質量分析装置のチューニング、キャリブレーションが完了していること。
- (FIA 分析の場合)測定メソッドテンプレートを入手できる。
- (FIA 分析の場合)LC ポンプとオートサンプラーが接続されており、ハードウェアプロファイル内で構成されている。
- 内蔵シリンジポンプがハードウェアプロファイル内で構成されている。
- すべての必須周辺装置(必要に応じて LC コンポーネントを含む)がハードウェアプロファイル内で構成されている。

**必要な資材**

- レセルピン、ミノキシジル、トルブタミド、レシナミンで構成された 4 化合物混合物 (10 ng/mL) です。溶液は注入および FIA に使用できます。濃度はシステムに依存します。50% 脱イオン水および 0.1% ギ酸を希釈剤としたアセトニトリル 49.9% の溶剤を使用します。

**注:** これはデモンストレーション用の混合物の一例となります。ユーザーはアプリケーション開発時に、適切な溶媒内に独自の化合物を作成することになります。ここでは単一化合物の溶液が推奨されます。化合物を混合する際には、化合物が互いに干渉しないよう、または分子量が同一にならないよう確認します。

- シリンジには 1.0 mL シリンジが推奨されます。
- (FIA 分析の場合) 移動相: アセトニトリルと水 (1:1) + 2 mM の酢酸アンモニウム + 0.1% のギ酸。

**注:** ユーザーは化合物の実験特性に基づき、さまざまな移動相を選択できます。

- LC ポンプとオートサンプラー。
- (FIA 分析の場合) オートサンプラーバイアル。

## 自動最適化について

自動最適化を行う際はまず化合物の有無について確認します。各種イオンパスパラメータの電圧が徐々に上昇あるいは低下し、各イオンの Q1 スキャンの最大信号強度が特定されます。最適化のプロセス中に、テキストファイルが作成、表示されます。本ファイルは実行された実験、および各パラメータの最適値を記録します。また、実施されたすべての実験を含むファイルフォルダも作成されます。これらは、Explore モードでデータファイルフォルダを開くことで閲覧できます。実施された各試験について測定メソッドが作成され、Acquisition Method フォルダに保存されます。

自動最適化プロセス中に、プレカーサーイオンおよび対応するプロダクトイオンの選択方法を選択します。

## サンプル導入の種類

### 注入

注入では、シリンジポンプを使用してサンプルをイオン源へ低流量で連続的に流します。注入最適化プロセス中に、ソフトウェアは、プレカーサーとプロダクトイオンを選択し、デクラスタリング電位、および衝突エネルギー、衝突セル出口電位に対して最適化することができます。イオンパスパラメータの電圧は、プレカーサーおよびプロダクトイオンのための最大信号強度を得るために徐々に増加または減少します。

LC-MS/MS 分析時に使用する流量よりもはるかに低い流量で、化合物依存性パラメータのみを最適化するために、注入最適化を使用します。

## FIA

FIA は、LC システムを使用してオートサンプラーで質量分析装置にサンプルを注入します。FIA 最適化プロセスの間、注入ごとに変更されるさまざまなイオン源依存性または化合物依存性パラメータのために、複数のサンプル注入が実行されます。FIA 化合物最適化は、連続したループ実験の実行により、パラメータを最適化します。ひとつの化合物依存性パラメータはまず最適化され、次の化合物依存性パラメータに続きます。FIA は各値に一度の注入を行うことで、イオン源依存性パラメータを最適化します。

化合物パラメータは、少なくともあと 2 回の FIA サイクルを使用して範囲を絞り込む必要があります。

LC システムを使用してより高い流量で化合物依存性およびイオン源依存性パラメータの両方を最適化するには、FIA 最適化を使用してください。

表 10-1 : サンプル導入メソッド間の差異

メソッド	必要な機器	パラメータ	一般流量範囲
注入	シリンジポンプ	化合物依存性	5 µL/分 ~ 25 µL/分
FIA	LC ポンプおよびオートサンプラー	イオン源および化合物依存性	25 µL/分 ~ 1000 µL/分

最適化の間、テキストファイルが作成され表示されます。本ファイルは実行された実験、および各パラメータの最適値を記録します。すべてのデータファイルを含むファイルフォルダも作成されます。また、実施された各試験について測定メソッドが作成され、Acquisition Methods フォルダに保存されます。

## 注入を使用した分析試料の自動最適化

この手順を使用して、既知のプレカーサーイオンおよび未知のプロダクトイオンの注入を使用した自動 MS/MS 最適化を実行します。

### 化合物の存在を確認

自動最適化を続行する前に、対象となる化合物の存在を確認します。

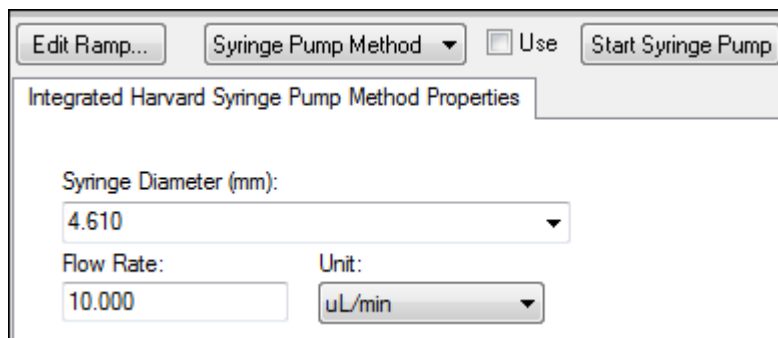
1. Analyst MD ソフトウェアで、プロジェクトを作成します。
2. ハードウェアプロファイルを有効にします。
3. サンプルを調製:
  - a. 化合物溶液をシリンジに吸引して、シリンジから空気を抜きます。
  - b. 特別な接続器の付いたチューブを用いて、質量分析装置にシリンジを接続します。
  - c. 内蔵のシリンジポンプにシリンジを取り付けます。
4. 5 µL/分から 10 µL/分の量で溶液に化合物を注入します。
5. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Manual Tuning** をダブルクリックします。

- メソッドリストフィールドで、**Syringe Pump Method** をクリックしてください。
- シリンジポンプメソッドのプロパティタブに、適切なパラメータ値を入力します。表 10-2 を参照してください。

表 10-2 : Syringe Pump Method Properties タブ

パラメータ	標準値
Syringe Diameter	シリンジ依存: 1.0 mL シリンジは 4.610 mm です
Flow Rate	5 ~ 10
Unit	μL/分

図 10-1 : Syringe Pump Method Properties タブ



- Start Syringe Pump** をクリックします。
- メソッドリストで **MS Method** をクリックします。
- MS タブで、表 10-3 に示されるパラメータを入力します。

表 10-3 : MS タブ

パラメータ	値
スキャンタイプ	Q1 MS (Q1)
開始 (Da)	200
停止 (Da)	700
スキャン速度 (Da/s) (可能な場合)	200
時間 (分)	3

- Start** をクリックします。
- 均等な TIC が左側に表示され、ピークが右側に表示されるまで待ってから、**Stop** をクリックします。
- MCA** チェックボックスをオンにします。

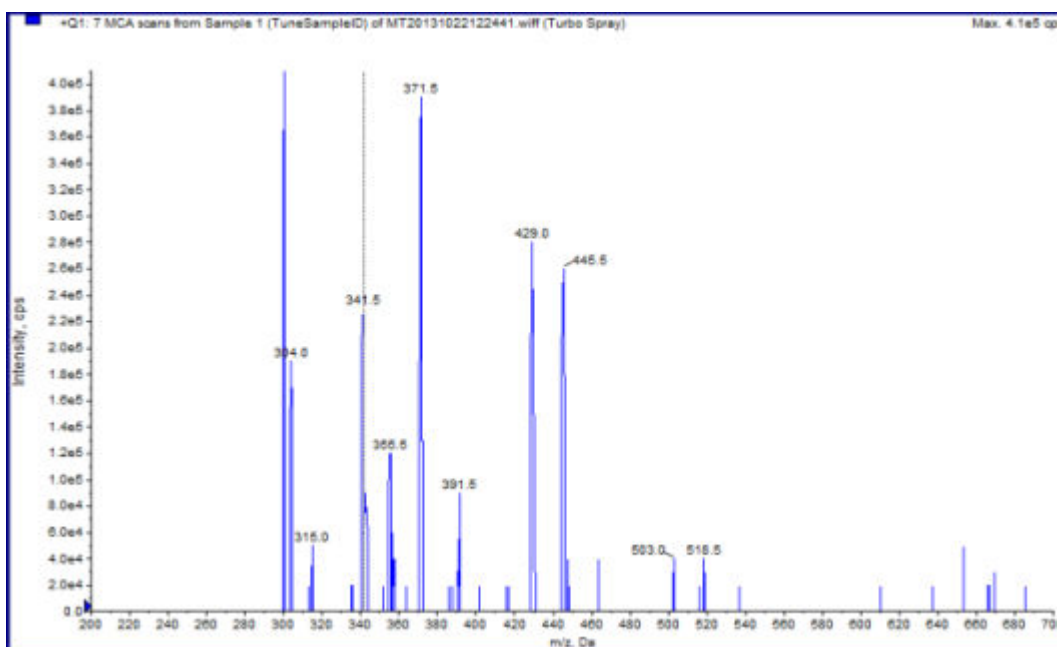
14. **Cycles** フィールドに 10 と入力します。

15. **Start** をクリックします。

10 スキャンが完了すると、グラフにイオンなど 4 つの化合物の質量が表示されます。

注: 化合物の強度は最小のノイズピークよりもはるかに高くなりますが、ノイズピークが全く見られないほどの高さではありません。最初のケースでは、ピークは本当の化合物ではない可能性があります。後者のケースでは、ソフトウェアを適切に最適化するには濃度が高すぎる可能性があります。

図 10-2 : 複イオン



## 既知のプレカーサーイオンおよび未知のプロダクトイオンの注入を使用して自動 MS および MS/MS 最適化を実行

MS/MS 分析の自動最適化により、1 つ以上の MRM 遷移に対するある種の化合物依存性パラメータが最適化されます。ソフトウェアが対象のイオンを見つけたら、化合物の最大感度を得るための化合物依存性パラメータを最適化します。ソフトウェアは、すべてのプロダクトイオン選択基準に適合するために、CE を傾斜させ、最も強いフラグメントを取り出します。

最初の Q1 スキャンシグナルが高すぎる場合、ソフトウェアは CEM を下げてイオンを検出器範囲に維持できるように試みます。CEM を下げてもシグナルが高すぎる場合、プロセスが停止し、エラーメッセージが表示されます。溶液を希釈し、最適化を再開してください。注入ラインは必ず洗浄してください。

最後の定量最適化のパラメータは保管されます。

1. シリンジポンプに正しい濃度の溶液が入れられ、そのシリンジポンプが始動されたことを確認します。



シリンジポンプは、化合物の最適化開始前に、Manual Tune ウィンドウで始動させる必要があります。

内蔵シリンジポンプが利用可能で、それが始動すると、シリンジポンプのステータス LED は点滅します。

2. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Compound Optimization** をダブルクリックします。  
Instrument Settings ページが開きます。
3. Inlet セクションで **Infusion** をクリックします。
4. Mass Spectrometer セクションで **MS/MS Analysis** をクリックします。
5. **Next** をクリックします。  
Ions to use in MS/MS Analysis ページが開きます。
6. 適切なパラメータ値を選択します。表 10-4 を参照してください。

表 10-4 : MS/MS Analysis ページで使用する Example Parameters

パラメータ	値
<b>MW Ion: Search Window</b>	2.500
<b>Resolution</b>	単位
<b>Polarity</b>	正または負(ターゲット化合物の特性に応じて)
<b>Product Ion</b>	自動選択
<b>Resolution</b>	単位

注: 最適化アルゴリズムが、指定された検索ウィンドウの最高強度ピークを検索します。そのウィンドウの最高強度ピークが対象となる質量でない場合、ソフトウェアは誤ったイオンを最適化します。

7. **Auto Select** オプションの横にある **Criteria** をクリックします。  
Product Ion Auto Selection Criteria ダイアログが開きます。
8. 適切なパラメータ値を入力します。表 10-5 を参照してください。

表 10-5 : Product Ion Auto Selection Criteria ダイアログパラメータの例

パラメータ	値	説明
<b>From the Most Intense (peaks)</b>	3	最適化するフラグメントピーク数。MCA モードで CE が傾斜している間、アルゴリズムはプロダクトイオンスペクトルを生成します。この例では、アルゴリズムによって、3 つの最も強いフラグメントイオンがスペクトルから取り出され、それらのフラグメントのみに対して MS/MS 最適化が継続されます。  未知の化合物の場合は、選択するピークを増やします。

表 10-5 : Product Ion Auto Selection Criteria ダイアログパラメータの例 (続き)

パラメータ	値	説明
Build final method using (most intense peaks)	2	自動的に測定メソッドに含まれる、プレカーサーイオン (標的化合物) 当たりのフラグメントイオン数です。指定した数値により、メソッドの各ターゲット化合物のために関与する MRM トランジションの数が定義されます。優先順位は、フラグメントイオンの強度に基づきます。  通常 2 つのプロダクトイオンが定量に必要であるため、1 より 2 の方が開始値として望ましいとされています。2 つの最良値の 1 つに問題がある場合は、3 から開始してください。戻ると第 3 が既に同定されています。  未知の化合物の場合は、干渉の際に使用するのために選択するピークを増やします。
Exclude Product Ions within $\pm$ (Da of Precursor Ion m/z)	20.000	プレカーサーイオン周囲の除外ウィンドウを定義する Da 値です。このウィンドウ内に収まるフラグメントイオンは、MRM 最適化の対象に選択されません。たとえば、m/z 値が 500 のプレカーサーイオンに $\pm 5$ Da と入力した場合、m/z 値が 495 ~ 505 の範囲内のフラグメントイオンがすべて除外されます。これにより、プレカーサーイオンがプロダクトイオンとして最適化されるのを防ぎます。
Min. Mass for Product Ion (Da)	60.000	最適化を考慮すべき最も低いフラグメント質量。このオプションは、プレカーサー質量から考慮するフラグメントイオンを含むウィンドウのサイズを増減するために使用します。
Threshold for Product Ion (cps)	100.000	プロダクトイオンの最小カウント数が考慮されます。

9. 選択基準への変更を保存するには、**OK** をクリックしてください。
10. **Next** をクリックします。  
Target Components ダイアログが開きます。
11. 適切なパラメータ値を入力します。表 10-6 を参照してください。

注: 化合物名は、各化合物またはトランジションに一意でなければなりません。

表 10-6 : Target Compounds ダイアログのパラメータ例

ターゲット化合物	フィールド	値
レセルピン	化合物名	レセルピン
	MW(Da) <sup>2</sup>	609.3

<sup>2</sup> 正確なイオン質量を入力してください。

表 10-6 : Target Compounds ダイアログのパラメータ例 (続き)

ターゲット化合物	フィールド	値
	電荷数	1
ミノキシジル	化合物名	ミノキシジル
	MW(Da) <sup>2</sup>	210.2
	電荷数	1
トルブタミド	化合物名	トルブタミド
	MW(Da) <sup>2</sup>	271.1
	電荷数	1
レシンナミン (IS)	化合物名	レシンナミン
	MW(Da) <sup>2</sup>	635.3
	電荷数	1

12. **Finish** をクリックして最適化プロセスを開始します。

テキストファイルウィンドウと測定ウィンドウという 2 つのウィンドウが表示されます。別のものを閲覧するには、どれかを最小化する必要が生じる場合もあります。実施されている実験が、測定ウィンドウの最上部に表示されます。X 軸は、各実験のために最適化されているパラメータを示します。結果が生成されると、テキストファイルウィンドウが更新されます。

最適化が完了すると、MRM 測定ファイルが作成され、`<compound>_QOpt_FinalMRM_Pos.dam` と名付けられます。<compound> は Target Components ページの最初の化合物です。

## 最適化結果のレビュー

最適化が完了すると、最適化されたパラメータが測定メソッドに保存されます。最適化過程で作成された dam および wiff ファイルはすべて、プロジェクトの Acquisition Methods フォルダおよび Data フォルダのサブフォルダにそれぞれ保存されます。サブフォルダの名前は化合物と日付を元に作成されます。

1. 最適化が完了したら、各化合物の最適化パラメータが含まれているテキストファイルを印刷します。
2. **File > Open** をクリックし、Reserpine\_QOpt\_FinalMRM.POS.dam ファイルを選択します。
3. テキストファイルと dam ファイルの値を比較します。
4. 次のフォルダの内容を確認します。
  - **Data:** 最適化中のすべての実施をレビューします。wiff ファイルをメソッドまたは印刷したパラメータの最適化した値と比較します。

- **Acquisition Method:** 最適化中に作成された Reserpine\_QOpt\_FinalMRM.POS.dam ファイルおよびその他の dam ファイル。
- **Log:** 最適化プロセスで表示されるレポートファイル (rtf) です。

## フローインジェクション分析を使用し、自動的に分析試料を最適化

### 前提条件

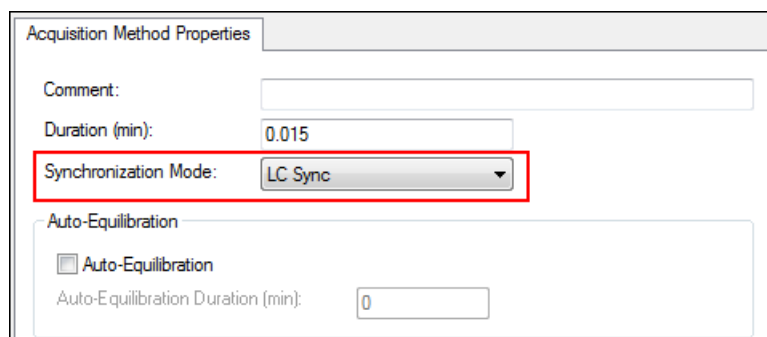
- 化合物に必要なイオンを特定し、基本となる測定メソッドを保存します。
- オートサンプラーと LC ポンプを基本の測定メソッドに追加します。最適化に FIA を用いるには、これらのデバイスがハードウェアプロファイル内で有効でなければなりません。
- 開始前に Reserpine\_QOpt\_FinalMRM.POS.dam ファイルに基づいて LC-MS/MS の測定メソッドを作成し、新しいメソッドをと名付けます。

**注:** フローインジェクション分析で化合物依存性パラメータの最適化を行うことができますが、最適なパラメータ値を取得するために必要なサイクル数が多いため、この方法は一般的には用いられません。

1. オートサンプラーに 4 つの化合物を混合した希釈液を注入します。各パラメータの各変数をレビューするために、十分な数のサンプルが必要です。サンプルは保管しておくようにしてください。たとえば、300 °C、400 °C、500 °C の温度で注入量 10 µL の場合の実行には、30 µL (3 × 10 µL 注入) の量が必要です。
2. メソッドで **LC Sync** が選択されていることを確認します。

**注:** LC Sync モードでは、データが適切に取得されるよう、質量分析装置は LC システムの動作と連動します。

図 10-3 : LC Sync が選択された測定メソッド



3. 最適化中に質量分析装置が汚染されない程度に、イオン源とガスパラメータが適度なレベルに設定されていることを確認します。[イオン源の最適化](#) を参照してください。
4. マイクロメータの水平目盛を 5 に設定します。

5. マイクロメータの垂直目盛をイオン源の流量に合わせて設定します。開始点として、次の表のパラメータを使用します。

表 10-7 : イオン源垂直パラメータ

流量	初期垂直パラメータ
1 $\mu\text{L}/\text{分}$ ~ 20 $\mu\text{L}/\text{分}$	10 mm
20 $\mu\text{L}/\text{分}$ ~ 250 $\mu\text{L}/\text{分}$	5 mm
250 $\mu\text{L}/\text{分}$ ~ 500 $\mu\text{L}/\text{分}$	2 mm
500 + $\mu\text{L}/\text{分}$	0 mm

6. LC システムに値を設定します。たとえば、オートサンプラーは注入量 10  $\mu\text{L}$  のものを使用します。注入実験には、同じ濃度か、より低い濃度で使用します。

LC ポンプはカラム無しのアイソクラティック実行に設定してください。正確なデータ取得のために、MS および LC 時間は同じにしてください。

流量、および移動相の割合はご使用の LC カラム、一般的なクロマトグラフィー、対象の化合物が溶出する概算の移動相濃度に依存します。

7. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Compound Optimization** をダブルクリックします。  
Instrument Settings ページが開きます。
8. 使用する LC システムに応じて、適切なパラメータ値を入力します。表 10-8 を参照してください。

表 10-8 : 機器設定パラメータの例

パラメータ	値
Inlet	FIA
Rack Code	オートサンプラーの詳細
Rack Position	オートサンプラーの詳細
Injection Volume	10 $\mu\text{L}$ (分量例)
Mass Spectrometer	MS/MS 分析

9. 適切なデフォルト測定メソッドを選択します。
10. **Next** をクリックします。
11. **Int. Std.** チェックボックスがオフになっていることを確認します。  
チェックボックスへのチェックは、MRM が内部標準と一致していることを表します。内部標準は最適化プロセスで最適化されません。
12. Resolution グループで、**Q1 Resolution** と **Q3 Resolution** の両方のフィールドに対して **Unit** を選択します。

図 10-4 : Q1 および Q3 分解能フィールド

FIA Target Compounds

These target compounds will be optimized. You may change the compound name. Please specify which one of them are used as internal standards.

	Compound Name	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Int. Std.	Vial Pos.
1	Compound 609.300-195.00	609.300	195.000	<input type="checkbox"/>	1
2	Compound 210.200-164.20	210.200	164.200	<input type="checkbox"/>	1
3	Compound 271.100-91.100	271.100	91.100	<input type="checkbox"/>	1
4	Compound 635.300-221.20	635.300	221.200	<input type="checkbox"/>	1

Note: All compounds identified as I.S. (internal standard) will not be used to determine optimum Source / Gas Parameter conditions.

Resolution

Q1 Resolution:

Q3 Resolution:

< Back   Next >   Cancel   Help

13. **Next** をクリックします。
14. FIA Source Parameters ページで、仕様の範囲で元の値よりも低いまたは高い数字を入力してください。

**注:** システムをクリーンな状態に保つために、数値が低くなりすぎないように注意します。開始点として使用できるパラメータについては、[表 10-9](#) を参照してください。

**ヒント!** 値を入力してから、チェックボックスをオンにします。

表 10-9 : FIA Source Parameters ページのパラメータ例

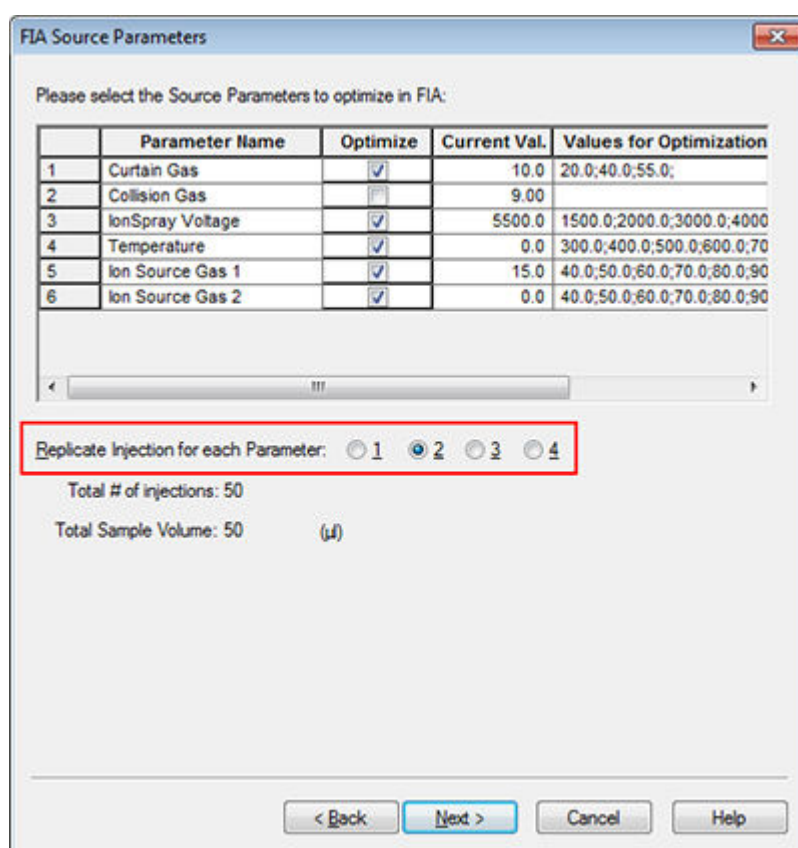
パラメータ	Optimize チェックボックスを選択?	最適化の仕様値
<b>Curtain Gas</b>	はい	20;40;55
<b>Collision Gas</b>	いいえ	—
<b>IonSpray Voltage</b>	はい	1500;2000;3000;4000;5000
<b>Temperature</b>	はい	300;400;500;600;700
<b>Ion Source Gas 1</b>	はい	40;50;60;70;80;90

表 10-9 : FIA Source Parameters ページのパラメータ例 (続き)

パラメータ	Optimize チェックボックスを選択?	最適化の仕様値
Ion Source Gas 2	はい	40;50;60;70;80;90

15. **Replicate Injection for each Parameter** の横にある **1** または **2** を選択します。注入の合計回数とサンプルの合計量は、このダイアログの仕様書に基づいて計算されます。必要なサンプルの合計量に注意してください。各変数は個別のメソッドであるため、最適化する各パラメータの変数の数とともにサンプル量が増加します。

図 10-5 : 各パラメータフィールドへの繰り返し注入例



16. **Next** をクリックします。
17. 各分析試料の FIA Compound Parameters ページで、開始点として提供されるパラメータ値の例を使用します。表 10-10 を参照してください。

注: 下表の値は推奨値です。詳細な情報については、ヘルプを参照してください。

表 10-10 : FIA Compound Parameters ページの例

パラメータ	Optimize チェックボックスを選択?	最適化の仕様値
Declustering Potential	はい	60;80;100;120;200
Entrance Potential	いいえ	—
Collision Energy	はい	20;30;40;50;70;80;100
Collision Cell Exit Potential	はい	2;4;6;8;10;12

注入の合計回数と依存するサンプル量は、自動的に更新されます。イオン源パラメータは値と繰り返しごとに注入が必要ですが、化合物依存性パラメータはパラメータ毎に 1 回の注入で済みます。各パラメータにはループ実験が行われます。値は 1 回の注入内でスキャンごとに変更されます。

注: 極端に多くの値を指定しないでください。値の数が多すぎると、パラメータの正確な評価ができなくなります。

18. Compound リストを使って、別の化合物に動かし、最適化されるパラメータを入力します。
19. すべての化合物のパラメータが入力されるまでステップ 18 を繰り返します。
20. **Mass Spec. Duration** フィールドに最適化の期間を入力します。

注: この値は少なくとも、各注入に必要な時間幅に見合っていなければなりません。



図 10-6 : Mass Spec.Duration フィールドの例

Please select the Compound Parameters to optimize by FIA:

Compound:  MRM: 609.300 - 195.000

	Parameter Name	Optimize	Current Val.	Values for Optimization
1	Decustering Potential	<input checked="" type="checkbox"/>	120.0	60.0;80.0;100.0;120.0;200.
2	Entrance Potential	<input type="checkbox"/>	10.0	
3	Collision Energy	<input checked="" type="checkbox"/>	30.0	20.0;30.0;40.0;50.0;70.0;80
4	Collision Cell Ext Potential	<input checked="" type="checkbox"/>	15.0	2.0;4.0;6.0;8.0;10.0;12.0;

Total # of Injections: 53  
 Total Sample Volume: 53 (μl)  
 Mass Spec. Duration: 1.5 (min)

< Back Finish Cancel Help

21. **Finish** をクリックして最適化プロセスを開始してください。

ソフトウェアは特定のイオン源および化合物依存性パラメータを最適化し、化合物の MRM トランジションにおける最高感度を取得します。ソフトウェアは最適化を実行している間に、**Compound Optimization** レポートを作成します。

22. 最適化したパラメータを取得するには、この手順を繰り返します。

**注:** 一般的に、イオン源とガスパラメータは FIA サイクルを繰り返し、絞り込む必要があります。

23. 最後に最適化された FIA メソッド「\*\_FIA\_sample\_1.」を開きます。

**注:** ソフトウェアによって数種の測定メソッドが生成されます。

24. このメソッドを分かりやすい名前でも保存します。

測定メソッドは、実験と期間で構成されています。Acquisition Method Editor を使用して、質量分析装置およびアクティブなハードウェアプロファイル内の任意のデバイスを対象とする期間および実験のシーケンスを作成します。

メソッドの作成に熟練したユーザーのみが、測定メソッド / 定量化メソッドを作成または修正することを推奨します。ロールとセキュリティの詳細な情報については、[ラボ管理者ガイド](#)を参照してください。

## 測定メソッドエディタを用いて測定メソッドを作成

**ヒント!** ユーザーが既存のファイルから新規の測定メソッドファイルを作成する場合、測定メソッドに含まれる周辺装置メソッドのいくつか、またはすべての使用が必要となる可能性があります。

有効なハードウェアプロファイルで設定したデバイスのみが Acquisition method ペインに表示されます。ハードウェアプロファイルに追加したすべてのデバイスは、既存の測定メソッドにも追加する必要があります。デバイスについての詳細は、[周辺装置セットアップガイド](#)を参照してください。

1. 質量分析装置と周辺装置を含むハードウェアプロファイルが有効になっていることを確認してください。
2. Navigation バーの **Acquire** の下にある **Build Acquisition Method** をダブルクリックします。
3. Acquisition Method Properties タブの **Synchronization Mode** を選択します。
4. (オプション) **Auto-Equilibration** チェックボックスをオンにして、必要な平衡時間を分単位で入力します。
5. Acquisition Method ペインで **Mass Spec** アイコンをクリックします。
6. MS タブで **Scan type** を選択します。
7. 必要に応じて、その他のフィールドに値を入力します。
8. Advanced MS タブで、必要なフィールドに値を入力します。
9. MS タブの **Edit Parameters** をクリックします。
10. Source/Gas タブで、必要なフィールドの値を決定してください。
11. Compound タブで、必要なフィールドの値を指定します。
12. **OK** をクリックします。
13. デバイスアイコンをクリックし、デバイスのパラメータを設定します。
14. 追加の期間や実験があれば追加します。[実験を追加](#)および[期間を追加](#)を参照してください。
15. **File > Save.** をクリックします。

## LC メソッドについて

LC システムなどの周辺装置を用いた測定メソッドの作成では、対象装置の操作パラメータを設定します。既存ファイルから新規の測定メソッドファイルを作成する場合、周辺装置メソッドのいくつか、またはすべてがその測定メソッドで使用することができます。

## 質量分析法メソッドの作成

Acquisition Method Editor を用いて、質量分析装置 (MS) 測定メソッドを作成します。構成される質量分析装置の種類および選択されるスキャン種類に応じて、さまざまなフィールドやオプションが利用可能になります。Acquisition Method Editor により、パラメータ入力時に設定内容が検証されます。

次のメソッドの 1 つを作成して、それを用いてデータを取得します。[バッチの作成および提出](#)

- [Q1 MS スキャン種類を用いた測定メソッドの作成](#)
- [Q1 MI スキャン種類を用いた測定メソッドの作成](#)
- [MRM スキャン種類を用いた測定メソッドの作成](#)

## Q1 MS スキャン種類を用いた測定メソッドの作成

以下に示す手順に従って、Q1 MS スキャンを用いてメソッドを作成します。イオン強度はスキャン範囲の中で必要な質量毎に戻されます。

### 前提条件

- 有効なハードウェアプロファイルに、質量分析装置とシリンジポンプが含まれていることを確認します。
- ソフトウェアツールバー上で、適切なプロジェクトが選択されるようにしてください。

1. Navigation バーの **Acquire** の下にある **Build Acquisition Method** をダブルクリックします。  
Acquisition Method Editor には有効なハードウェアプロファイルに基づくメソッドテンプレートが表示されます。
2. Acquisition Method ペインで **Acquisition Method** をクリックします。
3. Acquisition Method Properties タブの **Synchronization Mode** リストで、**No Sync** が選択されていることを確認します。同期モードの詳細については、ヘルプを参照してください。
4. Acquisition Method ペインで **Mass Spec** アイコンをクリックします。
5. MS タブの **Scan type** リストで、**Q1 MS (Q1)** を選択します。
6. Polarity セクションで **Positive** をクリックします。
7. **Center/Width** および **Parameter Range** を選択している場合はクリアします。
8. 質量範囲の表に、次の表に示す値を入力します。

図 11-1 : MS タブパラメータ値

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window. Key elements include:

- Experiment:** 1
- Scan type:** Q1 MS (Q1)
- Polarity:** Positive (selected)
- Center / Width:**
- Parameter Range:**
- Import List:** Button
- Period Summary:**
  - Duration: 0.000 (min)
  - Delay Time: 0 (sec)
  - Cycles: 1
  - Cycle: 0.0000 (sec)
- Scheduled Ionization:** 
  - Start Time: 0 (min)
  - Stop Time: 0 (min)
- MCA:**
- Total Scan Time (includes pauses):** 0.0000 (sec)
- Edit Parameters...** Button
- Table:**

	Start (Da)	Stop (Da)	Time (sec)
1			

表 11-1 : MS タブパラメータ値

フィールド	例
Start (Da)	200
Stop (Da)	700
Time (sec)	2.5
Scan rate (Da/s)	200
Duration (min)	3

- Advanced MS タブで、**Scan mode** が **Profile** に設定され、**Step size** が 0.1 になっていることを確認します。

図 11-2 : Advanced MS タブ

MS	Advanced MS
Scan mode:	Profile ▼
Step size:	0.1 (Da)
Resolution Q1:	Unit ▼
Intensity threshold (total count):	0
Settling time:	0 (ms)
Pause between mass ranges:	5.007 (ms)

この例では、四重極(Q1)が 500 Da の範囲を 0.1 Da ステップでスキャンしています。すなわち、質量範囲全体で 5000 ステップあります。スキャンに 2.5 秒かかるとすると、滞留時間は 1 ステップあたり 0.5 ms です。これは通常、標準的なキャリブレーション手順で Q1 または Q3 をスキャンする際の最速の時間です。Q1 または Q3 がこれより速くスキャンされる場合、質量較正を適切に検討する必要があります。

注: ステップサイズおよびスキャン時間によって、スキャンの 1 ステップあたりの滞留時間が決まります。滞留時間は、スキャンの各ステップでのシグナルの収集に費やされた時間の長さです。

- MS タブの **Edit Parameters** をクリックします。Parameter Table ダイアログが開きます。
- Source/Gas タブで次の値を入力します。

表 11-2 : Source/Gas タブパラメータ

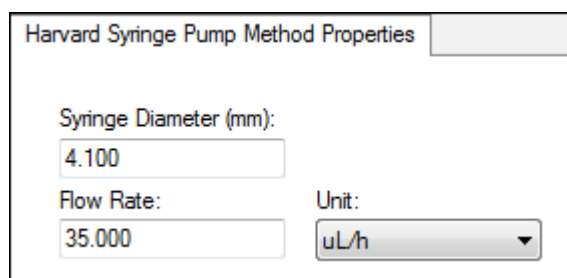
イオン源 / ガスパラメータ	標準値
Curtain Gas (CUR)	35
IonSpray Voltage (IS)	5000
Temperature (TEM)	0
Ion Source Gas 1 (GS1)	20
Ion Source Gas 2 (GS2)	0

- Compound タブをクリックし、**Declustering Potential (DP)** を 90 に設定し、**Entrance Potential (EP)** を 10 のままにします。

90 という値は質量分析装置には最適ではない場合がありますが、DP の開始としては適しています。

13. **OK** をクリックします。
14. Acquisition Method ペインで **Harvard Syringe Pump** アイコンまたは **Integrated Syringe Pump** アイコンをクリックします。

図 11-3 : Harvard Syringe Pump Method Properties タブ



15. シリンジポンプメソッドを編集して、**Syringe Diameter**、**Flow Rate**、**Unit** を含むようにします。
16. 測定メソッドを保存します。  
次のステップ: その測定メソッドを使用して、予備的分析用のデータを取得します。バッチの作成および提出については、[バッチの作成および提出](#)を参照してください。

### Q1 MI スキャン種類を用いた測定メソッドの作成

以下に示す手順に従って、Q1 MI スキャンを用いてメソッドを作成します。特定の質量についてのみイオン強度の増減をモニターすることができます。

#### 前提条件

- 有効なハードウェアプロファイルに、質量分析装置とシリンジポンプが含まれていることを確認します。
- ソフトウェアツールバー上で、適切なプロジェクトが選択されるようにしてください。

1. Navigation バーの **Acquire** の下にある **Build Acquisition Method** をダブルクリックします。  
Method Editor には有効なハードウェアプロファイルに基づくメソッドテンプレートが表示されます。
2. Acquisition method ペインで **Acquisition Method** をクリックします。
3. Acquisition Method Properties タブの **Synchronization Mode** リストで、**No Sync** が選択されていることを確認します。同期モードの詳細については、[ヘルプ](#)を参照してください。
4. Acquisition Method ペインで **Mass Spec** アイコンをクリックします。
5. MS タブの **Scan type** リストで、**Q1 Multiple Ions (Q1 MI)** を選択します。
6. Polarity セクションで **Positive** をクリックします。

7. 質量範囲の表に、次の表に示す値を入力します。

図 11-4 : MS タブパラメータ値

表 11-3 : MS タブパラメータ値

フィールド	値
Q1 Mass (Da)	609
Time (msec)	100

8. **Edit Parameters** をクリックします。  
Parameter table ダイアログが開きます。
9. Source/Gas タブで次の値を入力します。

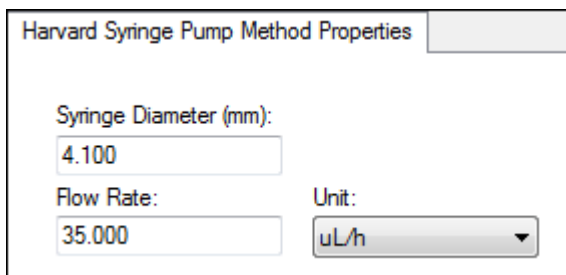
表 11-4 : Source/Gas タブパラメータ

イオン源 / ガスパラメータ	標準値
Curtain Gas (CUR)	35
IonSpray Voltage (IS)	5000
Temperature (TEM)	0
Ion Source Gas 1 (GS1)	20
Ion Source Gas 2 (GS2)	0

10. Compound タブをクリックし、**Declustering Potential (DP)** を 90 に設定し、**Entrance Potential (EP)** を 10 のままにします。  
90 という値は質量分析装置には最適ではない場合がありますが、DP の開始としては適しています。

11. **OK** をクリックします。
12. Acquisition Method ペインで **Harvard Syringe Pump** アイコンまたは **Integrated Syringe Pump** アイコンをクリックします。

図 11-5 : Harvard Syringe Pump Method Properties タブ



Harvard Syringe Pump Method Properties

Syringe Diameter (mm):  
4.100

Flow Rate: 35.000      Unit: uL/h

13. シリンジポンプメソッドを編集して、**Syringe Diameter**、**Flow Rate**、**Unit** を含むようにします。
14. 測定メソッドを **Save** します。  
次のステップ: この測定メソッドを含むバッチを作成し、提出します。バッチの作成および提出については、[バッチの作成および提出](#)を参照してください。

## MRM スキャン種類を用いた測定メソッドの作成

以下に示す手順に従って、MRM スキャンを用いてメソッドを作成します。このスキャンタイプは定量用途に用いられます。MRM スキャンを用いて、サンプル中の化合物の含有量を測定することができます。薬物動態解析に用いられており、市場での応用やスクリーニング目的での使用がますます増えています。

### 前提条件

- 有効なハードウェアプロファイルに、質量分析装置とシリンジポンプが含まれていることを確認します。
- ソフトウェアツールバー上で、適切なプロジェクトが選択されるようにしてください。

1. Navigation バーの **Acquire** の下にある **Build Acquisition Method** をダブルクリックします。  
Acquisition Method Editor には有効なハードウェアプロファイルに基づくメソッドテンプレートが表示されます。
2. Acquisition Method ペインで **Acquisition Method** をクリックします。
3. Acquisition Method Properties タブの **Synchronization Mode** リストで、**No Sync** が選択されていることを確認します。同期モードの詳細については、ヘルプを参照してください。
4. Acquisition Method ペインで **Mass Spec** アイコンをクリックします。
5. MS タブの **Scan type** リストで、**MRM (MRM)** を選択します。
6. Polarity セクションで **Positive** をクリックします。



7. 質量範囲の表に、次の表に示す値を入力します。

図 11-6 : MRM スキャン種類

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Dwell Time (msec)	ID
1				

表 11-5 : 質量範囲および滞留時間

Q1 質量 (Da)	Q3 質量 (Da)	Time (msec)
609	397.2	100

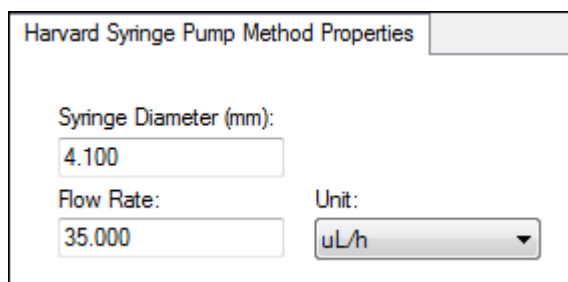
8. MS タブの **Edit Parameters** をクリックします。  
Parameter Table ダイアログが開きます。
9. Source/Gas タブで次の値を入力します。

表 11-6 : Source/Gas タブパラメータ

イオン源 / ガスパラメータ	標準値
Curtain Gas (CUR)	35
IonSpray Voltage (IS)	5000
Temperature (TEM)	0
Ion Source Gas 1 (GS1)	20
Ion Source Gas 2 (GS2)	0

10. Compound タブで **Declustering Potential (DP)** を 90 に設定し、**Entrance Potential (EP)** を 45 のままにします。
11. **OK** をクリックします。
12. Acquisition Method ペインで **Harvard Syringe Pump** アイコンをクリックします。

図 11-7 : Harvard Syringe Pump Method Properties タブ



13. Syringe Pump タブでシリンジポンプメソッドを編集して、**Syringe Diameter**、**Flow Rate**、**Unit** を含むようにします。
14. 測定メソッドを **Save** します。

次のステップ: この測定メソッドを含むバッチを作成し、提出します。バッチの作成および提出については、[バッチの作成および提出](#)を参照してください。

## 測定メソッドからのデバイスの追加と削除

Acquisition Method Editor を用いて、LC 周辺装置メソッドを追加 / 削除することで、測定メソッドをカスタマイズできます。必要な装置アイコンが Acquisition Method Browser ペインに表示されない場合は周辺装置を追加できますが、その装置がアクティブなハードウェアプロファイルに含まれている場合に限りです。

---

注: LC デバイスで使用可能なパラメータはメーカーごとに異なります。

---

### LC デバイスの追加または削除

1. Acquisition method ペインの Acquisition Method Editor でメソッドファイルを開いたまま、**Acquisition Method** を右クリックした後、**Add/Remove Device Method** をクリックします。
2. デバイスメソッドの横にあるチェックボックスを選択またはクリアして、デバイスメソッドを追加または削除します。
3. **OK** をクリックします。
4. LC デバイスを選択した場合、**Acquisition Method Properties** タブの **Synchronization** モードの **LC sync** を選択します。

### LC ポンプの特性の修正

各デバイスを対象のメソッドで正しく機能するように、メソッド内で修正します。

1. メソッドファイルが Acquisition Method Editor で開いた状態で、Acquisition Method ペインで LC デバイスアイコンをクリックします。  
Acquisition Method Editor ペインで LC Pump Gradient タブが開きます。

図 11-8 : SCIEX DX ポンプパラメータ

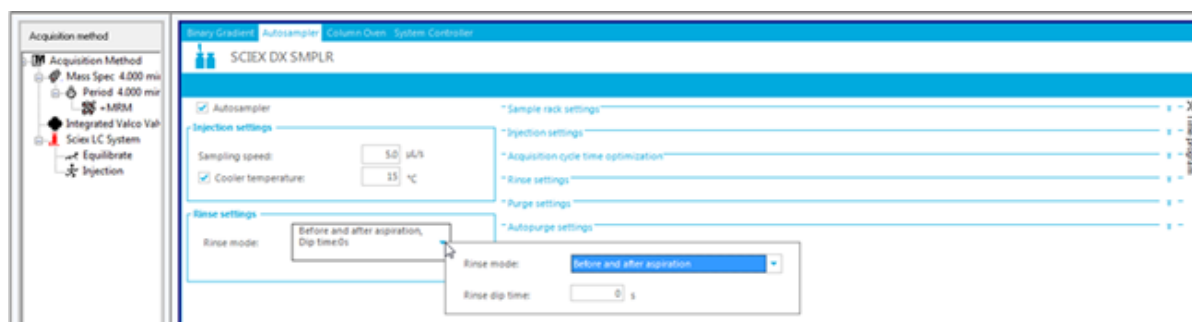


2. 実験の要件どおりに LC ポンプメソッドを編集します。
3. メソッドを保存します。

## オートサンプラーのプロパティの設定

1. メソッドファイルを Acquisition Method Editor で開いた状態で、Acquisition Method ペインで **Autosampler** デバイスをクリックします。  
Acquisition Method Editor ペインで Autosampler Properties タブが開きます。

図 11-9 : SCIEX DX Autosampler のパラメータ



2. 必要な場合は、注入や洗浄の詳細を編集します。
3. メソッドを保存します。

## Column Oven プロパティの設定

1. メソッドファイルを Acquisition Method Editor で開いた状態で、Acquisition Method ペインで **Column Oven** デバイスをクリックします。  
Acquisition Method Editor ペインで Column Oven Properties タブが開きます。

図 11-10 : SCIEX DX Column Oven パラメータ



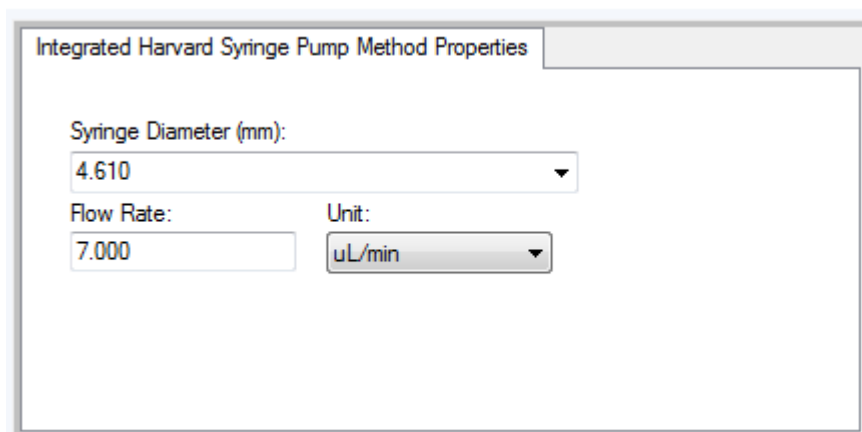
2. カラムオープンまたはカラムオープンのコンパートメントの温度を摂氏で入力します。
3. ファイルを保存します。

## 内蔵のシリンジポンプの構成

この手順は内蔵シリンジポンプのためのものです。

1. 内蔵シリンジポンプがハードウェアデバイスプロファイル内で選択されていることを確認します。
2. Acquisition method ペインで **Syringe Pump** アイコンをクリックします。  
Acquisition Method Editor の Syringe Pump Method Properties タブが開きます。

図 11-11 : Syringe Pump Properties タブ



3. **Syringe Diameter (mm)** フィールドにシリンジの直径を入力します。
4. **Flow Rate** フィールドに流量を入力します。
5. **Unit** リストから流量の単位を選択します。

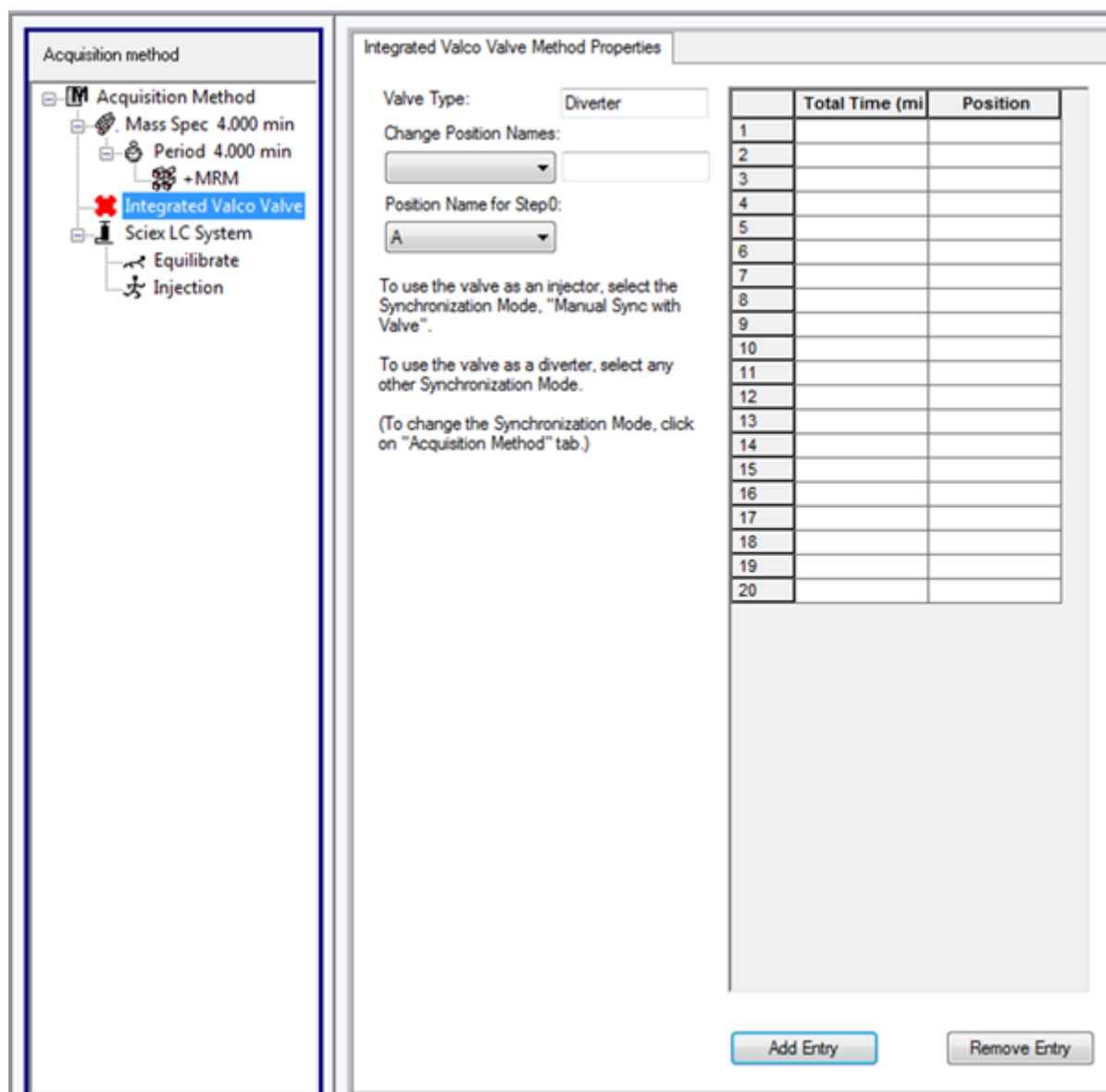
## ダイバーターバルブの特性の設定

スイッチングバルブは、ダイバーターバルブまたは注入バルブとして使用できます。

1. Acquisition Method Editor でメソッドファイルが開いた状態で、Acquisition method ペインにある **Valve** アイコンをクリックします。

Acquisition Method Editor ペインで Valve Properties タブが開きます。

図 11-12 : 内蔵 Falco バルブ



- 必要に応じて、ポジションの名前をプリセット名から変更します。

スイッチングバルブは時に、溶媒の流れを廃棄物容器、または別のカラムに切り替えるために用いられることもあります。位置名のプリセット値は A と B になっています。

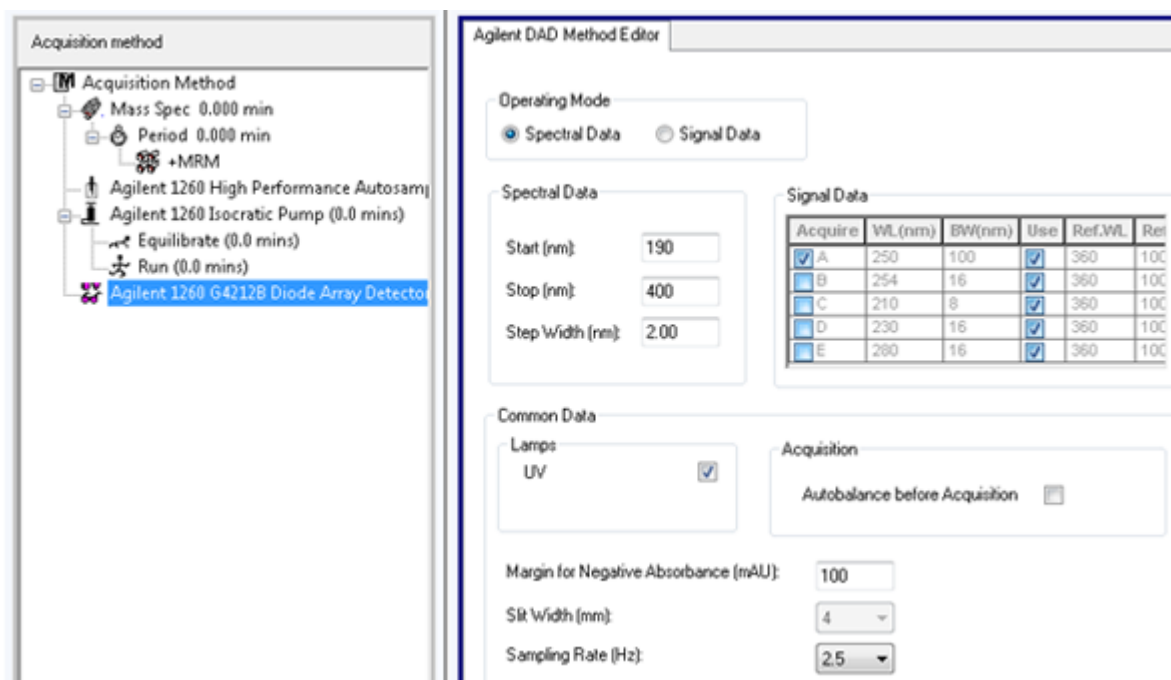
- **Change Position Names** リストで、ポジションを選択します。
- **Change Position Names** リストでプリセットされた位置名である A と B を、バルブがどのように配列されるかに応じて Inject と Divert、または Column と Waste に変更します。

3. **Total Time (min)** カラムでセルをクリックし、バルブがこの位置に維持される合計時間を入力します。
4. **Position** カラムでセルをクリックし、**Position** リストでバルブの位置を選択します。
5. 測定中に必要となるバルブのスイッチごとに上記のステップ 3 と 4 を繰り返します。
6. ファイルを保存します。

### ダイオードアレイ型検出器の特性の設定

1. メソッドファイルを Acquisition Method Editor で開いたままで、Acquisition Method ペインで **Diode Array Detector (DAD)** アイコンをクリックします。  
DAD Method Editor タブが Acquisition Method Editor ペインで開きます。

図 11-13 : DAD Method Editor タブ

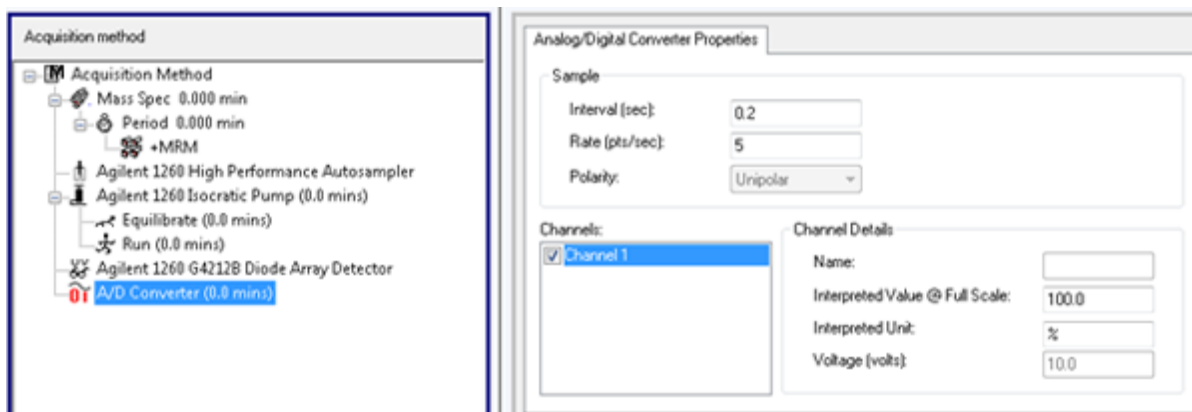


2. 次のいずれかの操作を行います。
  - 1~5 種の波長をスキャンするには、**Operating Mode** セクションで **Signal Data** をクリックし、データ要件を編集します。
  - 波長範囲全体をスキャンするには、**Operating Mode** セクションで **Spectral Data** をクリックし、データ要件を編集します。
3. ファイルを保存します。

### Analog to Digital Converter プロパティの設定

1. メソッドファイルが Acquisition Method Editor で開かれた状態で、Acquisition Method ペインで **Analog to Digital Converter (ADC)** アイコンをクリックします。  
Acquisition Method Editor ペインに Analog/Digital Converter Properties タブが開きます。

図 11-14 : Analog to Digital Converter Properties タブ



2. **Sample** セクションの **Rate (pts/sec)** フィールドに、速度を入力します。

**注:** 間隔と速度は互いに比例しています。速度が変更されると、間隔が自動的に再算出されます。

3. 次のことを実行してチャンネルの詳細を設定します。
  - **Channels** フィールドで、チャンネル名をクリックしてから、その横のチェックボックスを選択しメソッドに設定します。
  - **Interpreted Value @ Full Scale** フィールドに、適切な値を入力します。
  - **Interpreted Unit** フィールドに、適切な単位を入力します。

ハードウェアプロファイルの ADC をセットアップする場合、利用可能なチャンネルの番号が指定されます。

4. ファイルを保存します。

## 測定メソッドの変更

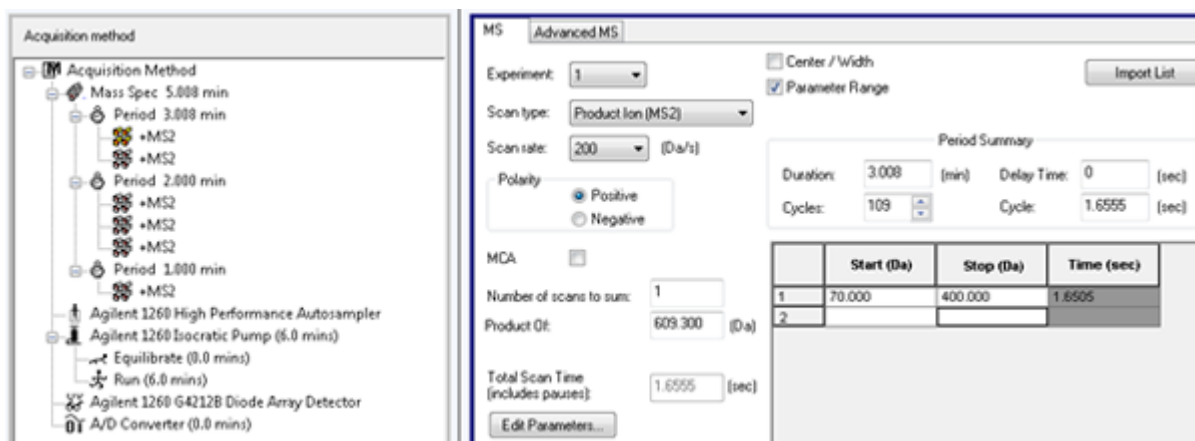
Acquire モードでは、期間や実験の既存の測定メソッドに対する追加または削除が可能です。

### 期間

期間には、1 つまたは複数のループ実験を含めることができます。複数期間の取得方法では、実験は指定された時間実行され、ソフトウェアは別の実験セットに切り替わります。期間は、LC ラン内の化合物の溶出時間が判明している場合に便利です。質量分析装置では、化合物の溶出のタイミングに合わせて、さまざまな実験を実施し、同一のランにおいて情報を最大限に取得することができます。

次の図は、3 期間の方法を示しています。

図 11-15 : 複数の期間にわたる実験の例



## 実験

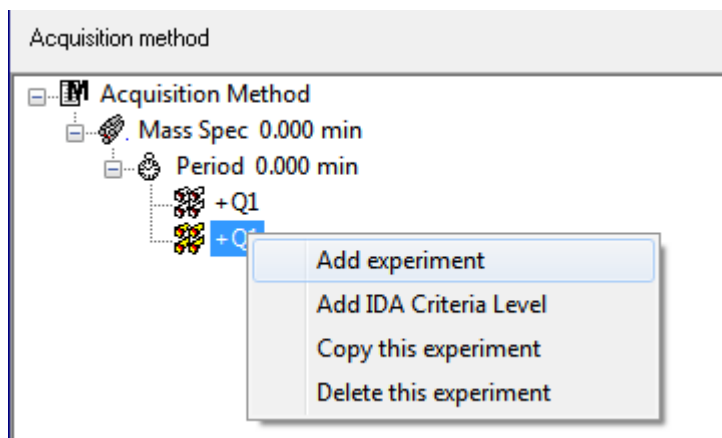
実験には MS スキャン中の質量分析装置設定およびスキャン種類が含まれます。特定の時間にわたって実行される MS スキャンのセットは「期間」と呼ばれます。全期間にわたって MS パラメータとアクションが変化しない測定メソッドは「単一期間/単一実験メソッド」と呼ばれます。

ループ実験においては、MS 設定はスキャンごとに变化します。たとえばサンプルに A と B の 2 種類の化合物が含まれている場合、化合物 A の MS/MS 実験を化合物 B の MS/MS 実験にループさせることで、同一のランにおいて双方の化合物の情報を取得したいような状況が考えられます。質量分析装置のメソッドは、2 つのスキャン種類間で交互に切り替わります。ループ実験の他の例として、同一のランにおいて正および負モードで交互に切り替える状況や、データ依存型取得 (IDA) メソッドなどが挙げられます。

## 実験を追加

1. Acquisition method ペインで、実験を追加する期間を右クリックしてから、**Add experiment** をクリックします。

図 11-16 : Add Experiment



実験は、期間の最後の実験の下に追加されます。



---

注: 実験、IDA Criteria、または期間の途中に実験を入れることはできません。期間の最後のみ、実験を追加できます。

---

2. MS タブで適切なパラメータを選択します。

### 実験を期間にコピー

1. 多重期間メソッドを開きます。
2. Acquisition method ペインで **Ctrl** を押し、実験を期間にドラッグします。実験は、期間の最後の実験の下にコピーされます。

### 期間内に実験をコピー

ほとんどの、またはすべてのパラメータが同じ場合には、この手順を使用して同一または類似の実験を期間に追加できます。

実験を右クリックして、**Copy this experiment** をクリックします。

実験のコピーは最後に作成された実験の下に追加されます。

### 期間を追加

Acquisition method ペインで、**Mass Spec** アイコンを右クリックし、**Add period** をクリックします。期間は、最後に作成された期間の下に追加されます。

---

注: ユーザーは、IDA の実験で複数の期間を使用することはできません。

---

## スキヤンの技術

**MS:** MS スキャン(単一 MS スキャンとも称される)では、イオンはそれらの質量対電荷比 ( $m/z$ ) に従って分離されます。単一 MS スキャンは化合物の分子量を決定するために使用される場合があります。単一 MS スキャンはサーベイスキャンと称される場合もあります。MS スキャンは質量以外にイオンの化学的組成に関して何の情報も提供しません。MS/MS または MS/MS/MS スキャンを実行すると、イオンに関してより多くの情報を取得します。

**MS/MS:** MS/MS スキャンは、構造情報を決定するために使用されます。

- トリプル四重極システムでの MS/MS スキャンの場合、選択されたイオンは Q2 衝突セルに入り、衝突して活性化されてフラグメント化し、特徴的なプロダクトイオンを生成します。
- QTRAP システムの MS/MS スキャンの場合、プレカーサーイオンのフラグメンテーションが、Q2 衝突セルまたはリニアイオントラップで発生する可能性があります。

十分なエネルギーが使用される場合、プレカーサーイオンは断片化して特有のプロダクトイオンを生成します。

**MS/MS/MS:** リニアイオントラップ (LIT) システムの MS/MS/MS スキャンは、MS/MS スキャンの 1 ステップ先に進みます。衝突セルで生成される断片は LIT でさらに断片化し、分子イオンに関するより多くの構造的情報を提供します。

## 四重極モードスキャン種類

トリプル四重極装置は、定量実験において要求される高感度の複数反応モニタリング (MRM) 能力を備えています。さらに、プレカーサーイオンや中性損失スキャンなど、特異性の高いスキャン種類を有しており、サンプルのコンポーネントにおけるより前進的な調査が可能になります。

**Q1 MS (Q1):** 一段目の四重極 (Q1) を使用したフルスキャン種類。イオン強度はスキャン範囲の中で質量ごとに戻されます。

**Q1 Multiple Ions (Q1 MI):** Q1 四重極を使用した選択スキャン種類。特定の質量についてイオン強度の増減をモニターできます。

**Q3 MS (Q3):** 三段目の四重極 (Q3) を使用したフルスキャン種類。イオン強度はスキャン範囲の中で質量ごとに戻されます。

**Q3 Multiple Ions (Q3 MI):** Q3 四重極を使用した選択スキャン種類。特定の質量についてイオン強度の増減をモニターできます。

**MRM (MRM):** ユーザー定義のイオンが Q1 四重極で分離され、Q2 衝突セル内でフラグメントとなる MS/MS スキャンです。次に、Q3 四重極を使用して、検出器によって記録されたユーザー定義のフラグメントイオンを分離します。このスキャン種類は定量分析のために主に使用されます。

**Product Ion (MS2):** Q1 四重極を使用して特定のプレカーサーイオンを分離および送信し、Q3 四重極スキャンが定義された質量範囲をスキャンする MS/MS フルスキャンです。このスキャンタイプは、特定のプリカーサーイオンのすべてのフラグメントイオンを識別するために使用されます。

**Precursor Ion (Prec):** Q3 四重極が特定の  $m/z$  値で固定されて特定のプロダクトイオンを透過し、Q1 四重極が質量範囲をスキャンする MS/MS スキャンです。このスキャン種類は、プレカーサーイオンの存在を確認したり、より一般的には、共通のプロダクトイオンを共有する化合物を特定するために使用されます。

**Neutral Loss (NL):** Q1 四重極および Q3 四重極スキャンの両方が、固定質量を除いて、質量範囲をスキャンする MS/MS スキャンです。特定された固定質量である中性損失を失うことにより、イオンが Q1 四重極フラグメントにより選ばれた場合は、反応が観察されます。このスキャン種類はプレカーサーイオンの有無の確認のため、またはより一般的に共通の中性損失を共有する成分の識別に使用されます。

## LIT モードスキャンタイプ

LIT モードスキャンは、Q3 四重極をリニアイオントラップとして使用します。イオンは、スキャンする前に Q3 四重極に捕捉・保存され、感度を向上させます。さらに、MS/MS/MS 分析はリニアイオントラップで実行することができ、サンプルについての詳細を提供します。LIT モードスキャン種類は、通常定性的な測定に使用されます。

---

**注:** 中国の場合、トリプル四重極質量分析装置のみが提供されます。これらのシステムは、リニアイオントラップ (LIT) のスキャン種類に対応していません。

---

**Enhanced MS (EMS):** Q1 四重極でイオンをスキャンし、線形イオントラップで収集します。これらのイオンは、MS 型シングルスペクトルを生成するために Q3 四重極からスキャンされます。

**Enhanced Product Ion (EPI):** 特定のイオンの高品質な MS/MS スペクトルを得るためのスキャンタイプです。フラグメンテーションは Q2 衝突セルで行われるため、衝突活性化分解の典型的情報が豊富な MS/MS スペクトルを提供します。このスキャンモードでは、フラグメント化するプレカーサーイオンを最初に Q1 四重極で 1 Da から 4 Da の幅の質量ウィンドウで選択し、他のすべてのイオンをフィルタリングします。プレカーサーイオンは、Q2 衝突セルの CAD ガスによってフラグメント化されます。生成されたフラグメントイオンは、リニアイオントラップで捕捉され、必要なフラグメントイオン分解能に応じて、3 つのスキャン速度のいずれかでスキャンされます。

IDA 実験に関しては、**Product Of** フィールドは既定で 30 Da に設定されています。この値は変更しないでください。

**Enhanced Resolution (ER):** このスキャンタイプは EMS スキャンと似ていますが、プレカーサー質量を中心に 30 Da の小さな質量ウィンドウを、最も遅いスキャンレートで線形イオントラップからスキャンして、最も分解能の高いスペクトルの狭いウィンドウを生成する点が異なります。

**MS/MS/MS (MS3):** プレカーサーイオンは、Q1 四重極で選択され、Q2 衝突セルの衝突活性化分解でフラグメント化しています。結果として得られるプロダクトイオンは、その後 1 つのプロダクトイオンが孤立するリニアイオントラップに、すべて送られます。孤立したイオンがリニアイオントラップでさらにフラグメント化され、結果として得られるプロダクトイオンは、3 つのスキャン速度のいずれかでトラップからスキャンされます。あらゆるトラップにおける衝突誘起解離 (CID) の技術と同様に、最小質量フラグメントとプレカーサーがトラップで同時に安定している必要があるため、2 番目の MS/MS ステップには低質量カットオフがあります。QTRAP システムでは、結果として MS3 実験中に前駆イオンの質量の 28% より低いイオンの損失が生じます。この現象は 3 分の 1 カットオフルールと呼ばれます。

## スペクトルデータ収集について

スペクトルデータを測定できるモードの説明については、[表 11-7](#) を参照してください。

表 11-7 : スペクトルデータ

モード	説明
Profile	プリセット値は 0.1 Da です。プロファイルデータは質量分析装置で生成され、一連の均等間隔の個別の質量値で記録された強度に対応します。たとえば、100 Da ~ 200 Da の質量範囲で、ステップサイズが 0.1 Da の場合、質量分析装置は 99.95 ~ 100.95 (値 100 として記録)、100.05 ~ 101.05 (値 101 として記録)...199.95 ~ 200.05 (値 200 として記録) をスキャンします。
Peak Hopping	プリセット値は 1.0 Da です。ピークホッピングは、大型ステップ (約 1 Da) を作成する質量分析装置の運用モードです。これには速度が速い (より少ないデータステップ) というメリットがありますが、ピークシェイプ情報が消失します。
Centroid	質量分析装置はプロファイルモードと同様のスキャンを行いますが、データのセントロイドを作成し、現在のピークに換えて各ピーク重力の強度中心点を取り込みます。セントロイドデータは、ファイルサイズを著しく小さくすることがメリットです。デメリットとしては、ピークシェイプ情報が消失し、データがセントロイドとして収集された場合、変更できません。プロファイルモードとデータの収集後にセントロイドを使用することを推奨しています。

---

**注意:** ダメージを与える恐れ。質量分析装置に接続されている LC システムがソフトウェアによって制御されていない場合は、操作中に質量分析装置から目を離さないでください。質量分析装置がスタンバイ状態に入ると、LC システムがイオン源をあふれさす可能性があります。

---

バッチとは、分析対象のサンプルに関する情報を収集したものです。サンプルは通常、提出を容易にするためにセットにグループ化されます。サンプルをセットとしてグループ化することで、手動入力が必要なデータの量も削減されます。セットは単一または複数のサンプルで構成されている場合があります。バッチ内のセットに対しては、いずれも同一のハードウェアプロファイルが用いられますが、他の測定メソッドを適用することも可能です。バッチは測定用コンピュータからのみ提出できます。

バッチには次の情報が含まれます。

- サンプル情報(名前、ID、コメントなど)
- オートサンプラーラック情報、バイアル位置、注入量
- 測定メソッド
- 処理メソッド(オプション)
- 定量情報(オプション)
- カスタムサンプルデータ(オプション)
- セット情報

## バッチの作成および提出

バッチは分析対象のサンプルに関する情報を収集したものです。バッチは、サンプルを分析する順序をソフトウェアに伝達します。バッチのインポートについての情報に関しては、『アドバンスドユーザーガイド』を参照してください。

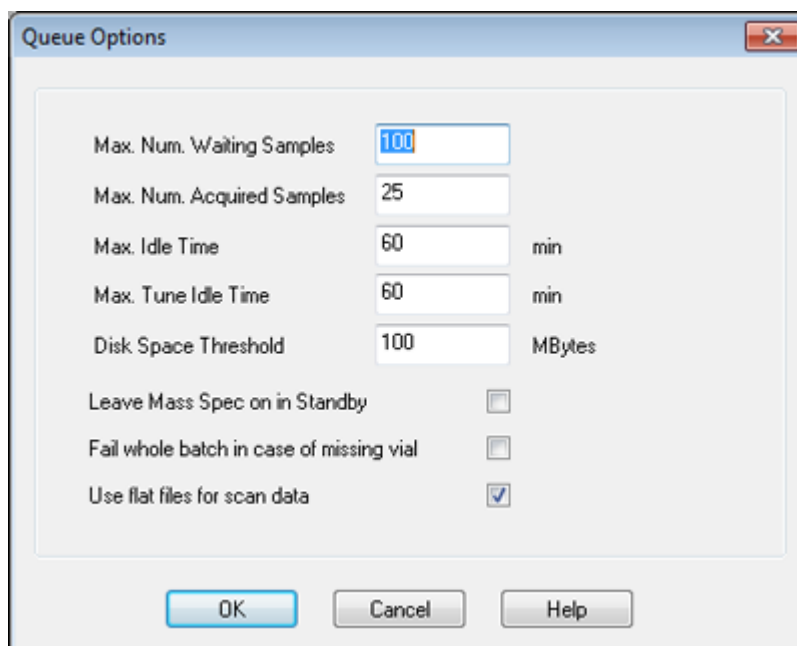
## キューオプションの設定

ソフトウェアは、キューにあるサンプルのリストを 1 つずつ調べ、選択した測定メソッドで各サンプルを測定します。全サンプルの測定が終了した後に、キューオプションで設定した **Max. Idle Time** が経過すると、測定が停止し、質量分析装置がスタンバイ状態になります。スタンバイ状態では、LC ポンプが停止し、いくつかの装置の電圧がオフになります。

ユーザーは、最後のサンプルを測定してからスタンバイ状態に移行するまでの時間を変更することができます。Queue Options ダイアログの他のフィールドの情報については、ヘルプを参照してください。

1. Navigation バーで **Configure** をクリックします。
2. **Tools > Settings > Queue Options.** をクリックします。

図 12-1 : Queue Options ダイアログ



3. **Max. Num. Waiting Samples** フィールドで、キューに提出するサンプルの数より大きい値にサンプルの最大数を設定します。
4. **Max. Idle Time** フィールドに、測定完了後にソフトウェアがスタンバイ状態に入るまでに待機する時間の長さを入力します。事前設定値は 60 分です。

高圧ガス容器を使用している場合、シリンダー内ガスが使い果たされていないことを確認するためにこの時間を調整します。

LC メソッドを使用する場合、実行を開始する前に、すべてのサンプルのリザーバーに十分な溶媒があり、初期流量、最大アイドル時間で作動していることを確認してください。

5. 分析が完了した後、質量分析装置の実行を維持するために **Leave Mass Spec on in Standby** チェックボックスを選択してください。  
この機能により、ヒーターおよびガスは、機器がアイドル状態となった後も作動し続け、イオン源と質量分析装置への入り口は、汚染物質のない状態で保たれます。
6. **Fail Whole Batch in Case of Missing Vial** チェックボックスをオンにすると、バイアルが欠損したときにバッチ全体が失敗するようになります。  
このオプションを選択していない場合は、現在のサンプルが失敗し、ソフトウェアは次のサンプルに進みます。

## バッチの作成および提出

このワークフローを用いてバッチを作成します。

Quick Quant 機能を使用してサンプル種類および濃度をデータファイルに保存する場合、自動的に生成された Quick Quant メソッドを使って定量化を実施しないでください。この定量化メソッドは、ピークの選択用に最適化されている化合物およびサンプル固有積分パラメータを使用しません。

## セットとサンプルをバッチに追加

セットは単一または複数のサンプルで構成されている場合があります。

**注:** 定量情報をバッチに追加する詳細は、*上級ユーザーガイド*を参照してください。

---

1. Navigation バーの **Acquire** の下にある **Build Acquisition Batch** をダブルクリックします。

図 12-2 : バッチエディタダイアログ

Sample Name	Rack Code	Rack Position	Plate Code	Plate Position	Vial Position	Data File	Inj. Volume (µl)
-------------	-----------	---------------	------------	----------------	---------------	-----------	------------------

2. Sample タブの **Set** リストで名前を入力します。
3. **Add Set** をクリックします。
4. **Add Samples** をクリックして、サンプルを新規セットに追加します。

図 12-3 : Add Sample ダイアログ

5. Sample name セクションの **Prefix** フィールドで、このセットのサンプル用の名前を入力します。
6. サンプル名の末尾に増分番号付けを追加するには、**Sample number** チェックボックスを選択してください。
7. **Sample number** チェックボックスが選択されている場合、**Number of digits** フィールドにサンプル名に含めるべき桁数を入力します。  
例えば、3 が入力された場合、サンプル名は samplename001、samplename002 および samplename003 になります。
8. Data file セクションの **Prefix** フィールドで、サンプル情報を格納するデータファイルの名前を入力します。
9. **Set name** チェックボックスを選択して、セット名をデータファイル名の一部として使用します。
10. **Auto Increment** チェックボックスを選択して、データファイル名を自動的に増分します。

質量分析装置が *in vitro* の診断デバイスとして使用される時は、データファイル毎に 1 つのサンプルだけを取得することが推奨されます。

**注:** 各サンプルのデータは同じか個別のデータファイルに格納することができます。データファイルの名前には、1 から始まる数値添え字があります。

11. **Sub Folder** フィールドに名前を入力します。  
フォルダは現在のプロジェクト用の Data フォルダに格納されます。**Sub Folder** フィールドがブランクのままである場合、データファイルは Data フォルダに格納され、またサブフォルダは作成されません。

12. New samples セクションの **Number** フィールドに、追加する新規サンプルの数を入力します。
13. **OK** をクリックします。  
サンプル表にはサンプル名およびデータファイル名が記入されます。

---

**ヒント!** 単一カラムの見出またはカラムの複数行が選択された後にメニューを右クリックすると **Fill Down** および **Auto Increment** オプションが利用できます。

---

14. Sample タブの Acquisition セクションで、リストからメソッドを選択します。  
システムのセットアップの仕方に応じて、オートサンプラー用の個別情報を入力する必要があります。注入量がメソッドで設定されている場合でも、ユーザーは注入量のカラムで値を変更することによって1つ以上のサンプルの注入量を変更することができます。

---

**注:** このセットでサンプル用にさまざまなメソッドを使用するには、**Use Multiple Methods** チェックボックスを選択してください。**Acquisition Method** カラムが Sample 表に表示されます。このカラムで各サンプル用に測定メソッドを選択してください。

---

15. **Sample** リストの **Set** タブでセットを選択してください。
16. セット内の各サンプルについて、必要に応じて次の手順を行ってください。
  - **Rack Code** カラムでラック種類を選択します。
  - **Rack Position** カラムで、オートサンプラーのラック位置を選択します。
  - **Plate Code** カラムでプレートタイプを選択します。
  - **Plate Position** カラムでラック上のプレート位置を選択します。
  - **Vial Position** カラムでプレートまたはトレイのバイアル位置を選択します。

---

**注:** Locations タブからサンプルに自動記入を行うには、**Shift** キーを押しながらセット内の最初と最後のバイアルをクリックします。これらのバイアルは赤い円で表示されます。Locations タブで、バイアルの場所をクリックしながら **Ctrl** キーを押すことにより同一のバイアルからの複数の注入を行うことができます。赤い円は緑に変わります。

---

17. または、Locations タブを使ってバイアル位置を選択する場合は、[Locations タブを使用してバイアルの位置を選択する\(オプション\)](#)を参照してください。
18. (オプション) 必要に応じて、[表 12-1](#) の手順を使用します。

**表 12-1 : バッチエディタの手引き**

目的の作業	実行する操作
カラムのすべての値を同時に変更するには	<p>カラム見出しをクリックした後、右クリックします。メニューから、<b>Auto Increment</b> および <b>Fill Down</b> コマンドを使用してカラムの値を変更します。</p> <p>この機能は同じカラムの複数のセルにも有効です。</p>



表 12-1 : バッチエディタの手引き (続き)

目的の作業	実行する操作
既存の測定メソッドを変更するには	メソッドを選択し、次いでリストから <b>Method Editor</b> をクリックしてください。新規の測定メソッドを作成するには、リストから <b>None</b> を選択し、次いで <b>Method Editor</b> をクリックします。この機能は熟練したユーザーだけが使用するようになっています。  <b>Use Multiple Methods</b> オプションが選択されている場合は、この機能を使用しないでください。
以前に作成した定量化メソッドを適用するには	<b>Quantitation</b> リストからメソッドを選択してください。
一度に 1 個以上のウェルまたはバイアルを選択するには	<b>Shift</b> キーを押しながら、その範囲にある最初と最後のウェルまたはバイアルをクリックします。

19. (オプション)バッチ提出前に定量詳細を定義するには、[バッチエディタで定量詳細を設定\(オプション\)](#)を参照してください。
20. Submit タブを開きます。

**注:** サンプルの順番は、サンプルをキューに送る前に編集できます。サンプルの順番を変更するには、Submit タブの表の左端にある数字のいずれかをダブルクリックし(小さなボックスが表示されます)、希望の位置にドラッグします。

21. Submit Status セクションの中にバッチのステータスに関するメッセージが入っている場合は、次のいずれかの操作を行います。
  - バッチの提出準備ができていることをメッセージが示している場合は、ステップ [22](#) に進みます。
  - バッチの提出準備ができていないことを示すメッセージであれば、メッセージが示す通りに変更を行ってください。
22. バッチに関する情報がすべて正しいことを確認した後、**Submit** をクリックします。対象のバッチがキューに提出され、Queue Manager に表示することができます。
23. ファイルを保存します。

## サンプルまたはサンプルセットの提出

**注:** サンプル測定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。

1. 1 つのサンプルまたはサンプルのセットを選択します。

2. Batch Editor の Submit タブを開きます。
3. Submit Status グループの中にバッチのステータスに関するメッセージが入っている場合は、次のいずれかの操作を行います。
  - バッチの提出準備ができていないことについてのメッセージであれば、次のステップに進みません。
  - バッチの提出準備ができていないことを示すメッセージであれば、メッセージが示す通りに変更を行ってください。
4. **Submit** をクリックします。

## サンプル順序の変更

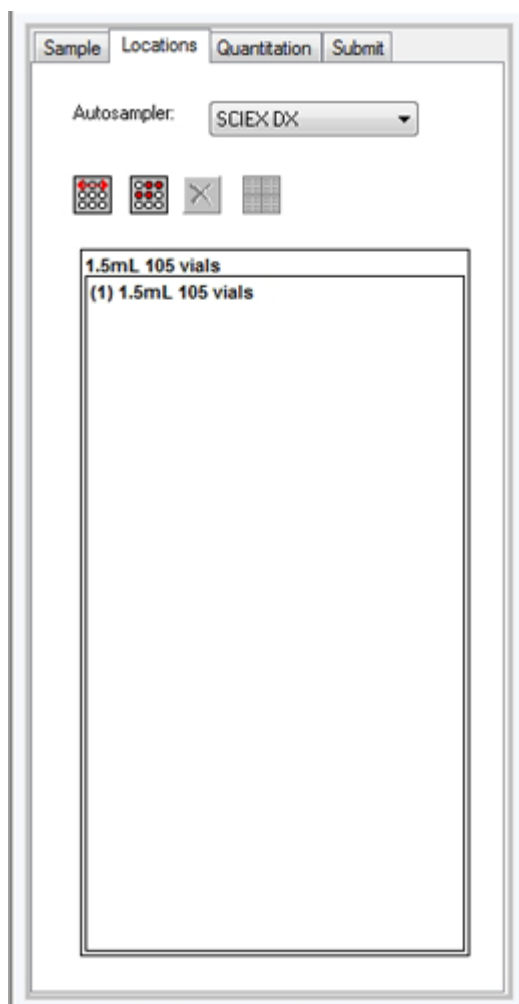
サンプルの順番は、サンプルを **Queue** に送る前に変更できます。

Submit タブでは、表(かすかに表示されている正方形のボックス)の左端の数字のいずれかをダブルクリックし、新しい場所にドラッグします。

## Locations タブを使用してバイアルの位置を選択する(オプション)

1. Batch Editor で、Locations タブを開きます。
2. **Set** リストで、セットを選択します。
3. **Autosampler** リストからオートサンプラーを選択します。
4. ラックに関連付けられているスペースで右クリックし、ラックの種類を選択します。プレートまたはトレイがラックに表示されます。
5. ラックタイプのラベルのついた白いスペースをダブルクリックします。サンプルラックが視覚的にレイアウト表示されます。オートサンプラーのラックスペースの適切な数が、グラフィックラックビューで表示されます。

図 12-4：視覚的なサンプルの場所



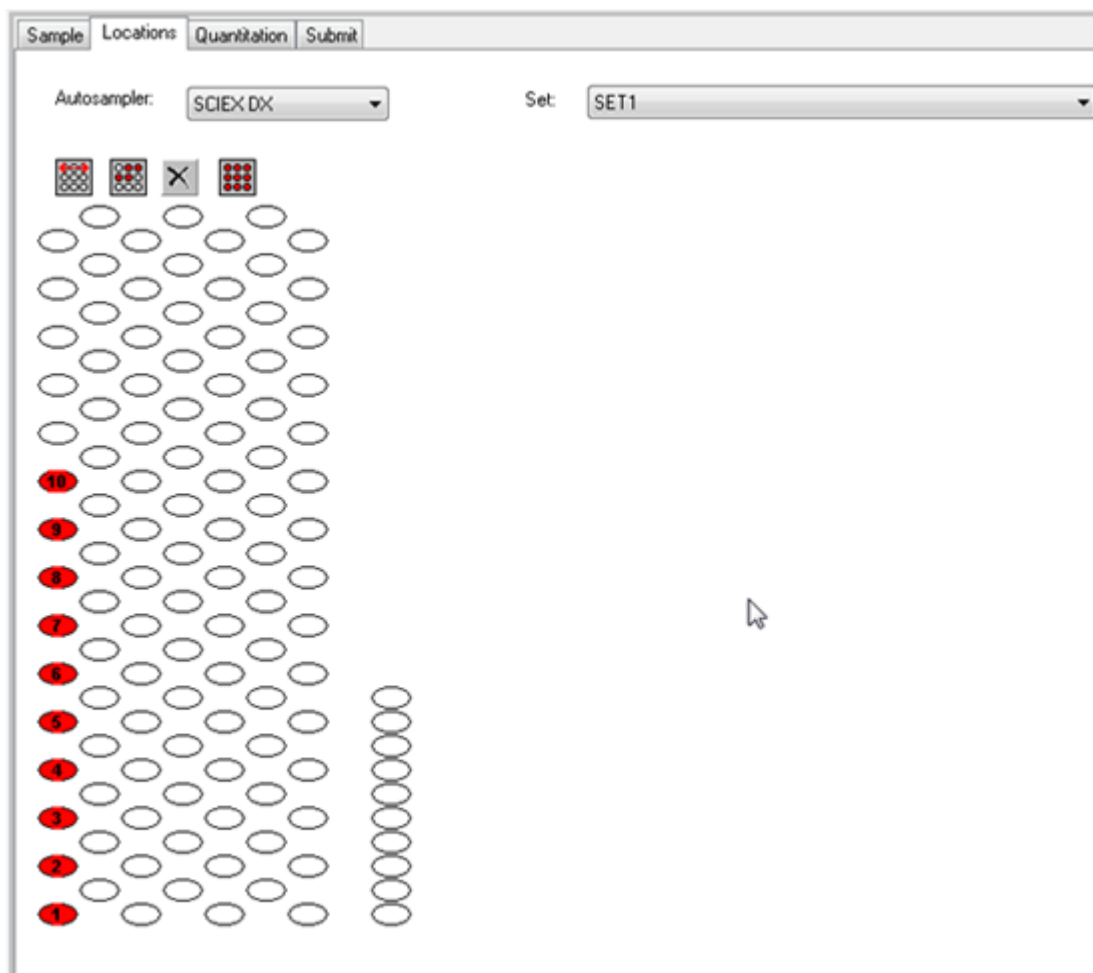
6. 四角形の 1 つをダブルクリックします。  
プレートまたはトレイのウェルまたはバイアルを描いた円が表示されます。

---

**ヒント!** グラフィック表示内で対応するバイアル番号を確認するには、サンプル位置にカーソルを合わせます。この情報を用いて、ソフトウェアでのバイアル位置がオートサンプラー内のバイアル位置と一致することを確認してください。

---

図 12-5 : Locations タブ



注: ご使用のオートサンプラーによっては、追加カラムへの情報入力は不要です。

7. サンプルを行またはカラムのどちらでマークするかどうかを選択するには、**Row/Column selection** セレクターボタンをクリックします。  
ボタンが赤色の横線を表示する場合、Batch Editor は行でサンプルを示します。ボタンが赤色の縦線を表示する場合、Batch Editor はカラムでサンプルを示します。
8. サンプルウェルまたはバイアルを分析する順番をクリックします。

ヒント! 選択したウェルまたはバイアルをクリアするには、もう一度クリックします。

ヒント! サンプルへの充填を自動的に行うには、セット内の最初と最後のバイアルをクリックしながら **Shift** を押します。同じバイアルから複数の注入を実行するには、キーを押して、バイアルの場所をクリックしながら **Ctrl** を押します。赤い円は、緑色の円に変わります。

## バッチエディタで定量詳細を設定(オプション)


バッチで定量化メソッドが使用されており、ユーザーが後に定量詳細を選択しない場合は、定量詳細(サンプルの種類、サンプルの濃度)をバッチ提出前に定義する必要があります。

適切な **Internal Standard** および **Standard** 列は、Sample タブで選択された定量化メソッドに応じて Quantitation タブに表示されます。

1. Batch Editor ウィンドウでバッチファイルを開き、Quantitation タブを開いてください。
2. サンプルを含むセットを選択してください。
3. セルのリストからすべてのサンプルの **Quant Type**、**Dilution Factor**、**Weight/Volume** を選択してください。
4. (必要に応じて)**Analyte** 列に、分析試料の濃度を入力します。
5. (必要に応じて)**Internal Standard** 列に、内部標準濃度を入力します。
6. バッチの各セットごとにこの手順を繰り返してください。

## システムの平衡化

システムの平衡化を行ってから、バッチの提出を行います。平衡化は、次のサンプルまたはバッチのために、質量分析装置をウォームアップさせ、準備を行います。

1. **Equilibrate** () をクリックします。  
Equilibrate ダイアログが開きます。
2. 提出されたバッチに用いられる測定メソッドを選択します。
3. **Time (min)** フィールドに、平衡時間を分単位で入力します。
4. **OK** をクリックします。システムの平衡化が始まります。  
平衡化が完了すると、システム状態は Ready に変わります。

**ヒント!** 平衡化が期待どおりに完了しない場合、または平衡化の完了後にシステムの状態が Ready に変化しない場合は、次の条件が満たされていることを確認してください。

- 有効化されたハードウェアプロファイルが測定メソッドに適していること
- LC システムの電源がオンであること
- LC システムとソフトウェアとの通信が正しく確立されていること

## データの取得

サンプル測定が開始した後で、ソフトウェアを Tune and Calibrate モードに切り替えしないでください。また、システムを当日その前に運転していて、スタンバイ状態に設定していない場合、サンプル測定は自動的に開始します。

1. カラムオープンの温度に到達していることを確認します。


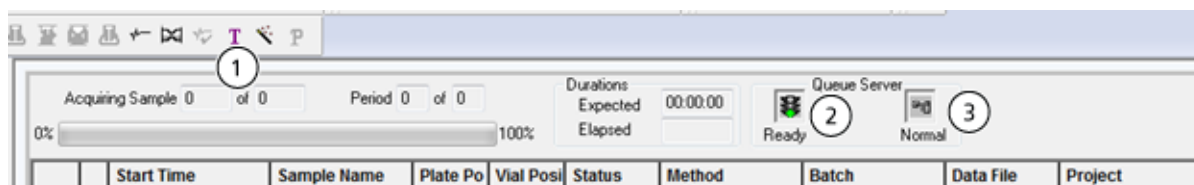
2. **Reserve Instrument for Tuning** (  ) アイコンが押されていないことを確認します。
3. Navigation バーで **Acquire** をクリックします。
4. **View > Sample Queue.** をクリックします。  
Queue Manager が開き、提出されたサンプルがすべて表示されます。

図 12-6 : Queue Manager



項目	説明
1	<b>Reserve Instrument for Tuning</b> アイコンは押し込まないでください。
2	キューの状態は準備完了である必要があります。
3	<b>Queue Server</b> の状態は Normal である必要があります。 <a href="#">キュー状態</a> を参照してください。

5. **Acquire > Start Sample.** をクリックします。

**注:** サンプル測定中に異常停止した場合は、サンプルをもう一度実行することを推奨します。

## バッチファイルのインポート

ユーザーはバッチ情報を含むテキストファイルをインポートできます。Batch Editor でバッチを作成する必要はありません。すべて/のサンプルの詳細がスプレッドシートにある場合、スプレッドシートにデータを再配置してインポートする方が、Batch Editor でデータを手動で入力するよりも高速です。

テキストファイルからバッチ情報をインポートする前に、ファイル内のデータが正しく整理、フォーマットされていることを確認してください。特に、スプレッドシートのカラム見出しは Batch Editor のカラム見出しと一致している必要があります。テキストファイルに適切な見出しが付いていることを確認するには、Batch Editor を用いてバッチ作成し、これをテキストファイルとしてエクスポートしてから、Spreadsheet Editor で適切な値を入力し、次にファイルを Batch Editor に再度インポートして戻します。

適切にフォーマットされたファイルの例については、Example プロジェクトの Batch フォルダを参照してください。

バッチファイル内の情報は、Microsoft Excel や Microsoft Access、ならびに一部のラボ情報管理システム(LIMS)ソフトウェアといった、他のアプリケーション用にエクスポートすることもできます。

## テキストファイルとしてバッチビルドを行う

### 前提条件

有効なハードウェアプロファイルが、サンプルを取得するために使用するすべての機器を含んでいることを確認します。

テキストファイルに適切な見出しが付いていることを確認するには、Batch Editor を用いてバッチ作成し、これをテキストファイルとしてエクスポートしてから、Spreadsheet Editor で適切な値を入力し、次にファイルを Batch Editor に再度インポートして戻します。ユーザーは少なくとも1つのサンプルについて1セットを含む時に限り、バッチをエクスポートすることができます。保存したテキストファイルはテンプレートとして再度使用することができます。

1. Batch Editor においては、シングルセット、シングルサンプルバッチを作成します。
2. **File > Export.**をクリックします。  
Save As ダイアログが開きます。
3. **File name** フィールドにテキストファイル名を入力し、**Save** をクリックします。
4. Excel のようなスプレッドシートプログラムでテキストファイルを開きます。
5. サンプルの詳細を入力するか、コピーおよび貼り付けを行います：一行につきサンプルは1つとし、適切な項目の下に詳細を入力してください。

**注:** いずれの列も削除しないでください。スプレッドシートのカラムはバッチエディタの列に一致させるようにしてください。

6. 修正したテキストファイルを txt または csv ファイルとして保存し、スプレッドシートプログラムを閉じます。  
これでテキストファイルを Batch Editor にインポートする準備が完了しました。

## テキストファイルからのバッチのインポート

1. Batch Editor の Sample タブを右クリックし、その後 **Import From > File.**をクリックします。  
Open ダイアログボックスが開きます。
2. 必要なテキストファイルをクリックして **Open** をクリックします。  
オートサンプラーを使用している場合は、Select Autosampler ダイアログが開きます。

**注:** 保存されたテキストファイルが **Files of type** リスト上にない場合は、**Microsoft Text Driver (\*.txt; \*.csv)** を選択します。フィールド上に拡張子.txt のファイルが表示されます。

3. オートサンプラーリスト上でオートサンプラーを選択し、**OK** をクリックします。  
サンプルテーブルに、テキストファイルから読み込まれた詳細が表示されます。
4. バッチを送信します。

## バッチおよび Acquisition Method Editor のヒント

実行する作業	実行する操作
表内の値を変更するには	(たとえば、サンプル名を変更するには)セルをクリックして新しい値を入力します。
カラムのすべての値を同時に変更するには	カラム見出しをクリックした後、右クリックします。表示されたメニューから、 <b>Auto Increment</b> および <b>Fill Down</b> コマンドを選択してカラムの値を変更します。  この機能は同じカラムの複数のセルにも有効です。
既存の測定メソッドを変更するには	リストからメソッドを選択した後、 <b>Method Editor</b> をクリックします。新規の測定メソッドを作成するには、リストから <b>None</b> を選択し、次いで <b>Method Editor</b> をクリックします。この機能は熟練したユーザーだけが使用するようになっています。  Use <b>Multiple Methods</b> オプションをお使いの場合は、この機能を使用しないでください。
以前に作成した定量化メソッドを適用するには	<b>Quantitation</b> メニューからメソッドを選択します。
一度に 1 個以上のウェルまたはバイアルを選択するには	<b>Shift</b> キーを押して、選択対象範囲内の最初と最後のウェルまたはバイアルをクリックします。

Batch Editor の右クリックメニューの使い方については、[Batch Editor](#) を参照してください。

## バッチトラブルシューティングのヒント

症状	考えられる原因	修正アクション
Analyst MD ソフトウェアのバッチエディタで、注入量(uL)カラムに -1 が表示される。	バッチの測定メソッドが選択されていません。	バッチ用の正しい測定メソッドを選択します。
	選択した測定メソッドの LC デバイスが、ハードウェアプロファイルの LC デバイスと一致しません。	意図する測定メソッドを開きレビューします。LC デバイスの情報を正しく修正してから、メソッドを保存します。



症状	考えられる原因	修正アクション
	有効化されたハードウェアプロファイルには LC デバイスが含まれていないか、別の LC デバイスが含まれています。	Hardware Configuration Editor を開いた後、ハードウェアプロファイルを無効化します。ハードウェアプロファイルを編集し、LC デバイスの情報を正しく修正してから、ハードウェアプロファイルを有効化します。

## サンプル測定 of 停止

サンプル測定を停止する場合、ソフトウェアは測定を停止する前に現在のスキャンを完了させます。

1. Queue Manager で、測定を停止した地点の後に来るキュー上のサンプルをクリックしてください。
2. Navigation バーで **Acquire** をクリックします。
3. **Acquire > Stop Sample.** をクリックします。  
選択したサンプルの現在のスキャンの測定後、測定が停止します。**Queue Manager (Local)** ウィンドウのサンプル状態が **Terminated** に変化し、キューに続くその他のサンプルは、**Waiting** となります。
4. バッチ処理を継続するには、**Acquire > Start Sample.** をクリックします。

一般的な分析および処理ツールを使用してデータの閲覧および分析を行う方法については、Example フォルダにインストールされたサンプルファイルを活用してください。以下のトピックに関する詳細は、[上級ユーザーガイド](#)を参照してください。

- グラフのラベリング
- スペクトルまたはクロマトグラムの重ね表示および合計
- バックグラウンドサブトラクションの実行
- アルゴリズムのスムージング
- スムージングされたデータでの作業
- セントロイドされたデータでの作業
- 等高線図での作業
- フラグメント解釈ツールでの作業
- ライブラリデータベースおよびライブラリ記録での作業

## スペクトルデータおよびクロマトグラムデータの概要

スペクトルデータからは化合物の質量固有の情報が得られます。クロマトグラムはデータの全体像を把握するためのものですが(LC カラムの使用時にはたいいてい時間に依存したものとなります)、ピークのコンポーネントに関する情報は何ら得られません。しかし、スペクトルは特定のピークに注目したものであり、対応する化合物の分子量が示されます。これは、より具体的な情報を得るために使用できます。例えば、クロマトグラムにピークが 1 つしか表示されていない場合でも、そのピークが複数の化合物(つまり質量が異なること)を表す場合があります。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。

特定のサンプルでクロマトグラフィーの状態が変化した場合、クロマトグラフィーのデータは時間と強度の両面で変化する場合があります。スペクトル強度は変化する場合がありますが、化合物の質量は変化しないため、質量は一定です。

スペクトルデータを生成する方法は、次の 2 通りがあります。

- スキャンが 1 つしか取得されていない場合、そのデータはデフォルトで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。

一般的なスペクトルは分子量とともに表示され、質量電荷比( $m/z$ )のラベルが付けられて X 軸に示されます。強度は Y 軸に示されます。

## データの分析

データファイルが開かれると、実施する実験の種類に応じて異なるペインが表示されます。ソフトウェアによって、データは wiff 拡張子付きでファイルに保管されます。wiff ファイルは、複数サンプルのデータを収納できます。wiff ファイルだけでなく、txt ファイルも開くことができます。しかし、txt ファイルの場合は、収納できるデータは 1 サンプルのみです。

データファイルに含まれる情報は、表形式またはグラフ形式で参照することができます。グラフ形式のデータはクロマトグラムまたはスペクトルとして示されます。これらのうちいずれかのデータをデータポイントの表として表示でき、データにさまざまなソート操作を行うことができます。

ユーザーは既存のデータや現在収集されているデータを含むファイルを開くことができます。さらに実験関連データすべてを表形式で参照することができます。表ペインは、2 つのタブ、すなわち Data List タブおよび Peak List タブからなります。Data List タブには、実験関連情報、例えば、収集時間およびスキャン強度などが含まれます。Peak List タブでは、ピーク関連情報、例えば、ピーク高、ピーク領域およびベースラインの種類などが表示されます。

データに複数の実験の結果が含まれている場合、ユーザーは各実験に個別の TIC (トータルイオンクロマトグラム) を作成し、さらに全実験の合計を表す TIC を作成することができます。

全実験の合計を表すプリセットされた TIC は、X 軸の中心の下のスプリッターツールで表示されます。

## データファイルを開く

**ヒント!** 質量スペクトルの自動更新を停止するには、質量スペクトルを右クリックし、**Show Last Scan** をクリックします。**Show Last Scan** にチェックが付いている場合、スペクトルはリアルタイムで更新されます。



1. Navigation バーの **Explore** 下にある **Open Data File** をダブルクリックします。  
Select Sample ダイアログが表示されます。
2. **Data Files** リストで開きたいデータファイルを特定し、サンプルを選択して **OK** をクリックします。  
サンプルから取得されたデータが表示されます。データ取得中は、質量スペクトル、DAD/UV トレース、TIC の自動更新は継続されます。


## データファイル内のサンプル間ナビゲーション

**注:** サンプルがそれぞれ別のデータファイルに保存されている場合は、各ファイルを個別に開いてください。

この手順で使用するナビゲーションアイコンの説明については、[表 D-4](#) を参照してください。

複数のサンプルを含むデータファイルを開き、次のいずれかの操作を行います。

- データファイルの次のサンプルに移動するには、**Show Next Sample** アイコン () をクリックします。
- 連続しないサンプルにスキップするには、**Go to Sample** アイコン () をクリックします。

- Select Sample ダイアログの **Sample** リストからサンプルを選択して表示します。
- データファイルの前のサンプルに移動するには、**Show Previous Sample** アイコン () をクリックします。

## 実験条件の表示

データを収集するために使用される実験条件は、その結果と共にデータファイルに格納されます。情報には、使用した測定メソッドの詳細が含まれます: MS 測定メソッド、すなわち装置パラメータを含む期間数、実験数、サイクル数、および LC デバイスメソッド (LC ポンプ流量を含む)。さらに、サンプルの測定に使用される MS 分解能および質量較正表も含まれています。ユーザーがファイル情報を閲覧する際に利用できるソフトウェアの機能については、[Show File Information ペインの右クリックメニュー](#)を参照してください。

---

**注:** 複数サンプルから同一 wiff ファイルにデータが取得された場合、ファイル情報ペインはサンプルのスクロール中に自動リフレッシュされません。ファイル情報ペインを閉じた後、再度開いて、wiff ファイル中の次のサンプルの詳細を参照します。

---

**Explore > Show > Show File Information.** をクリックします。  
グラフの下で File Information ペインが開きます。

---

**ヒント!** File Information ペインから測定メソッドを作成するには、File Information ペインを右クリックし、その後 **Save Acquisition Method** をクリックします。

---

## 表内のデータを表示

1. データファイルを開きます。
2. **Explore > Show > Show List Data.** をクリックします。  
データはグラフの下のペイン内に表示されます。

図 13-1 : Peak List タブ(QTRAP システム)

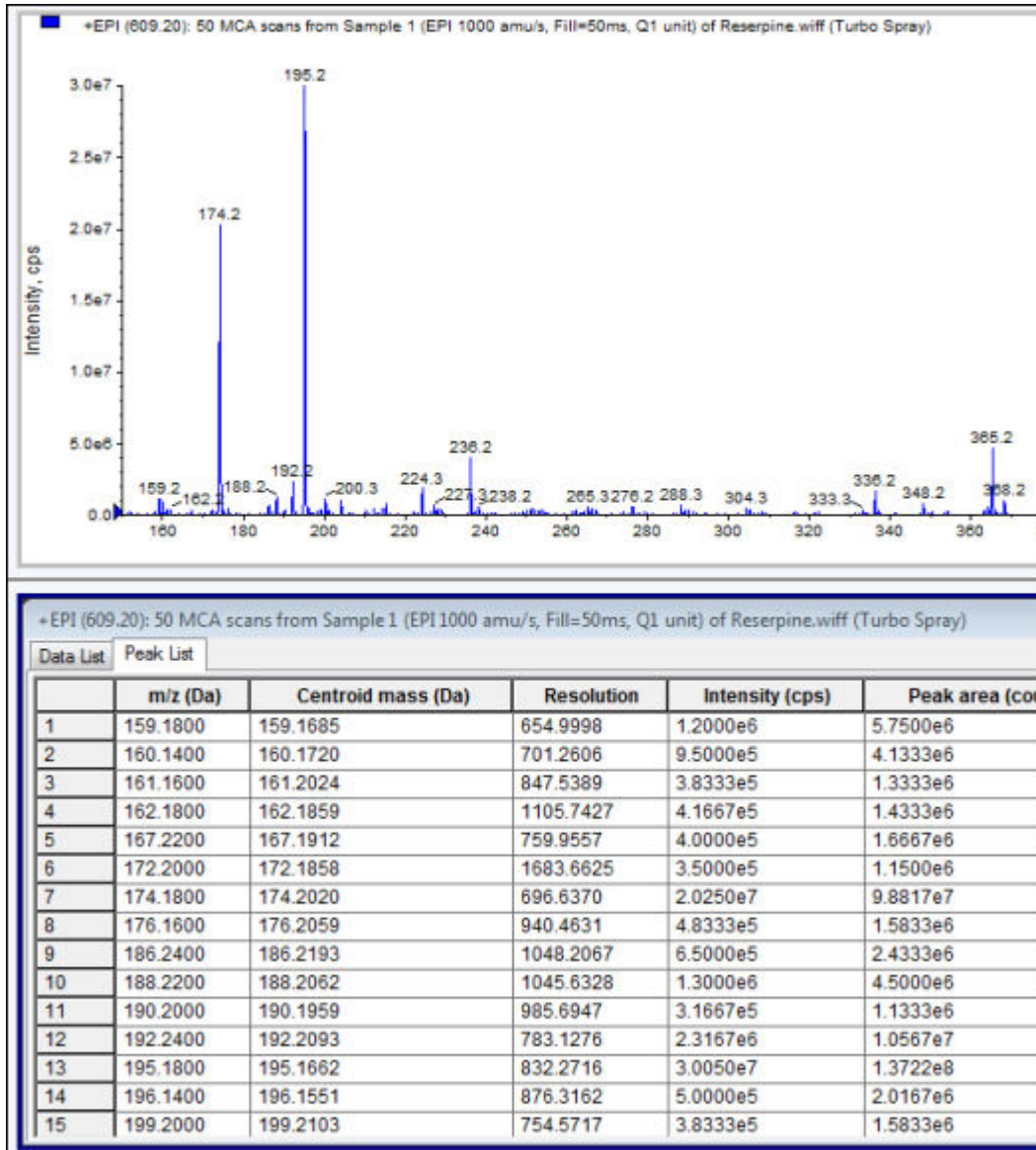


表 13-1 : Spectral Peak List タブの右クリックメニュー

メニュー	機能
Column Options	(カラムオプション) <b>Select Columns for Peak List</b> ダイアログを開きます。
Save As Text	(テキストとして保存) データを .txt ファイルとして保存します。
Delete Pane	(ペインの削除) 選択したペインを削除します。

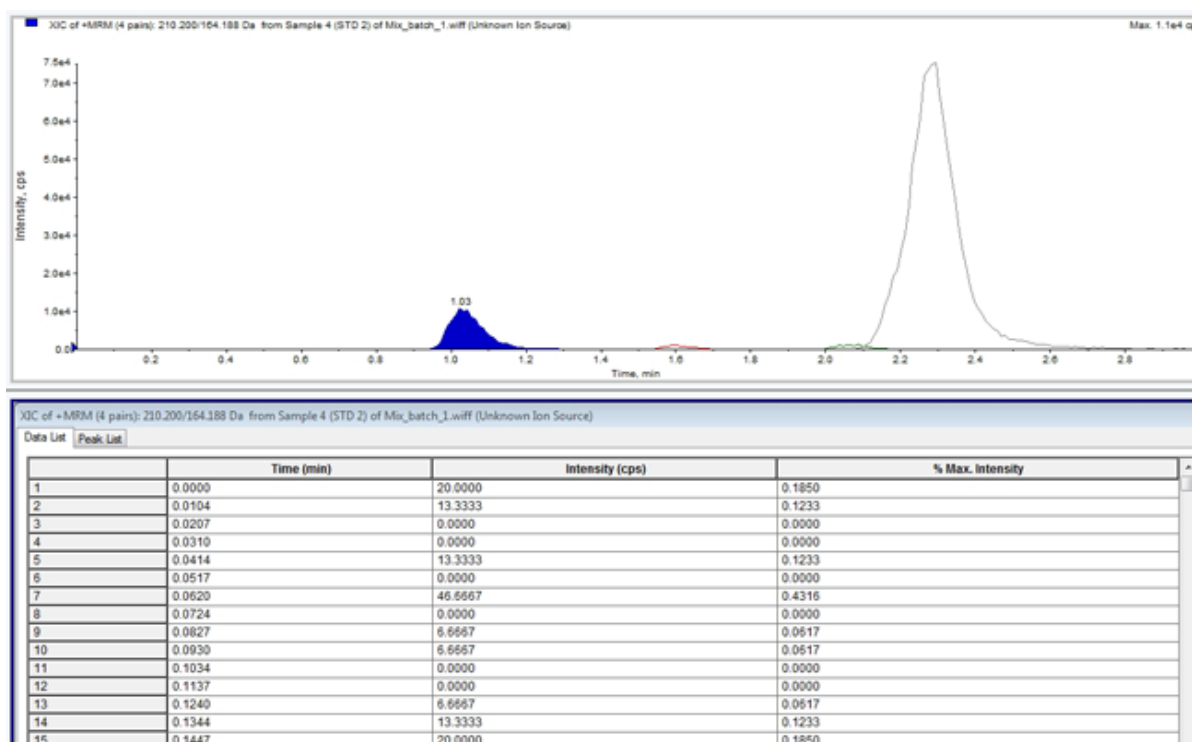
表 13-2 : Chromatographic Peak List タブの右クリックメニュー

メニュー	機能
Show Peaks in Graph	(ピークをグラフに表示)ピークを 2 色でグラフに表示します。
IntelliQuan Parameters	(IntelliQuan パラメータ)IntelliQuan ダイアログを開きます。
Save As Text	(テキストとして保存)データを .txt ファイルとして保存します。
Delete Pane	(ペインの削除)選択したペインを削除します。

## 基本定量データの表示

1. データファイルを開きます。
2. **Explore > Show > Show List Data** をクリックします。

図 13-2 : List Data



3. Peak List タブで右クリックし、**Show Peaks in Graph** を選択します。ピークが 2 色で表示されます。
4. ピーク検出アルゴリズム設定を変更するには、右クリックして **Analyst Classic Parameters** または **IntelliQuan Parameters** のうち、有効になっているものを選択します。
5. (オプション)色つきピークを削除するには、Peak List タブで右クリックし、**Show Peaks in Graph** をクリアします。

## 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。スペクトルの取り扱い方法については、[表 G-4](#) を参照してください。

MS/MS データの場合、強度は 2 種類の質量、つまりプレカーサーイオン質量 (Q1) とプロダクトイオン質量 (Q3) に関連付けられています。

## クロマトグラム

クロマトグラムはサンプル分析から得られるデータをグラフ表示したものです。シグナル強度が時間またはスキャン番号を示す軸に沿ってプロットされます。クロマトグラムで使用できるソフトウェアの機能、およびクロマトグラムペインの右クリックメニューの使用方法の詳細については、[クロマトグラムペイン](#)を参照してください。

1 秒当たりのカウント (cps) で表した強度が Y 軸に、時間が X 軸に表示されます。設定されたしきい値を上回るピークは、自動的にラベル付けされます。LC-MS の場合、多くの場合クロマトグラムは時間の関数として表示されます。クロマトグラムの種類については、[表 13-3](#) を参照してください。

使用可能なアイコンの使い方については、[表 13-5](#) を参照してください。

表 13-3 : クロマトグラムの種類

クロマトグラムの種類	目的
トータルイオンクロマトグラム (TIC)	時間またはスキャン数に対するスキャン内のすべてのアイコンの強度のプロットングにより生成されたクロマトグラムです。  データファイルが開いている場合、TIC として開くよう事前設定されています。実験にスキャンが 1 回のみ使用される場合、スペクトルとして表示されます。  データファイルの取得中に <b>MCA</b> チェックボックスを選択した場合、データファイルは質量スペクトルに対して開きます。 <b>MCA</b> チェックボックスを選択していない場合、データファイルは TIC として開きます。
Extracted Ion Chromatogram (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。
ベースピーククロマトグラム (BPC)	スキャン対時間またはスキャン数内で最も強いイオンを示すクロマトグラムです。
トータル波長クロマトグラム (TWC)	取得した波長範囲の吸光度すべての合計および時間に対する値のプロットングによって作成されるクロマトグラムです。クロマトグラムペインで、時間に対してプロットされたスキャンに含まれる全イオンの吸光度の合計値で構成されています。
抽出波長クロマトグラム (XWC)	TWC のサブセット。XWC は、単一の波長の吸光度または一定の範囲の波長の吸光度の合計を示します。



表 13-3 : クロマトグラムの種類 (続き)

クロマトグラムの種類	目的
Diode Array Detector (DAD)	1 つ以上の波長で溶出する化合物の吸収スペクトルを示すクロマトグラムです。

## スペクトルから TIC を表示

実例データファイルを開覧する際は、Example プロジェクトが選択されていることを確認してください。

LIT スペクトルを表示するには、LIT フォルダを開き、Reserpine.wiff ファイルを開きます。

**Explore > Show > Show TIC.** をクリックします。  
TIC が新しいペインを開きます。

---

ヒント! スペクトルを含むペイン内で右クリックし、**Show TIC** をクリックします。

---

**Spectra Panes** の右クリックメニューの使い方については、[スペクトルペイン](#)を参照してください。  
**TIC からスペクトルを表示**

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ず。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。データに複数の実験結果が含まれている場合、すべての実験の合計を表す TIC の下に、各実験の TIC を作成することができます。

データファイルが開いている場合は TIC として表示されるように事前設定されています。ただし、実験に 1 スキャンしか含まれていない場合は、スペクトルとして表示されます。データファイルの取得前に **MCA** チェックボックスをオンにした場合、データファイルは質量スペクトルとして開きます。**MCA** チェックボックスがオフの場合、データファイルは TIC として開きます。

**Spectra Panes** の右クリックメニューの使い方については、[スペクトルペイン](#)を参照してください。

1. TIC を含んでいるペインで、範囲を選択してください。
2. **Explore > Show > Show Spectrum.** をクリックします。  
スペクトルは新しいペインで開きます。

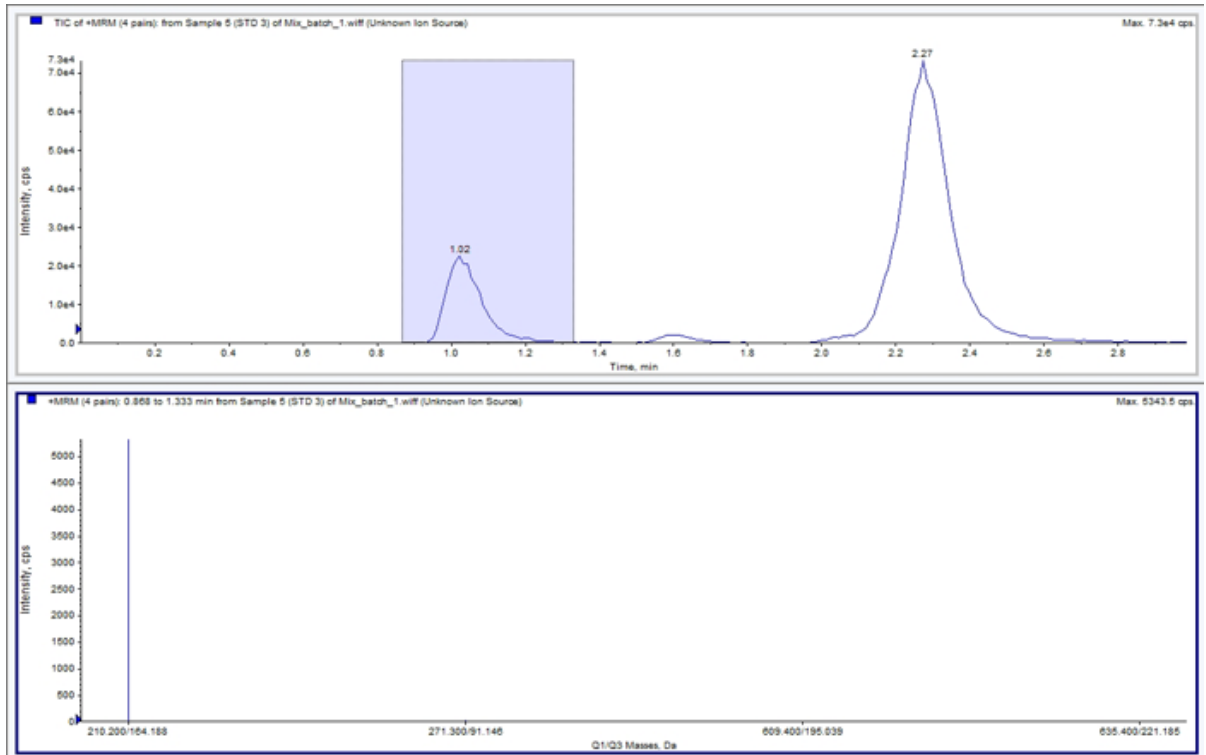
---

ヒント! スペクトルを示すため特定の時間に、TIC ペイン内でダブルクリックしてください。

---



図 13-3 : TIC の例



## XIC

XIC は、単一かつ離散した質量の値、あるいは一連の質量スペクトルスキャンにおけるとりの質量範囲をもとに作成された抽出イオンクロマトグラムです。これは、特定の質量(または質量範囲)の作用を時間関数で示したものです。クロマトグラフペインに、イオン強度(または特定の範囲内に存在する全イオンの合計強度)がプロットされます。

### XIC の生成

XIC は単一期間、単一試験クロマトグラム、あるいはスペクトルからのみ生成できます。複数期間または複数実験データから XIC を作成する場合、X 軸の下に△をクリックしてデータを別のペインに分けます。使用可能なアイコンの使い方については、表 13-5 を参照してください。

イオンを抽出して XIC を生成するには、クロマトグラムかスペクトルを使用するかによっていくつかの方法があります。クロマトグラムとスペクトルで使用できる方法の概要については、次の表を参照してください。

表 13-4 : XIC 生成方法の概要

方法	クロマトグラムで使用	スペクトルで使用	抽出
選択範囲	×	○	イオンをスペクトルで選択した範囲から抽出します。

表 13-4 : XIC 生成メソッドの概要 (続き)

メソッド	クロマトグラムで使用	スペクトルで使用	抽出
最大	×	○	イオンを、選択した範囲内の最大ピークを用いて、スペクトルで選択した範囲から抽出します。このオプションにより、選択したスペクトルの範囲からの最大質量を用いて XIC が生成されます。
ベースピーク質量	○	○	ベースピーククロマトグラム (BPC) のみ使用できます。 <b>Use Base Peak Masses</b> コマンドを用いて、質量ごとに異なる色が付いたトレースで表示される XIC 内のイオンの結果を抽出します。選択に複数のピークが含まれる場合、結果として生じる XIC は各質量に 1 種の色が付いたトレースと同じ数になります。
特定の質量	○	○	スペクトルまたはクロマトグラムのいずれかの種類からイオンを抽出します。スタートおよびストップ質量を 10 まで選択し、それに対する XIC を生成します。

## 選択範囲を使用して XIC を生成

1. スペクトルを含むデータファイルを開きます。
2. 範囲の開始位置でマウスの左ボタンを押し、カーソルを範囲の終了位置までドラッグして、マウスの左ボタンを放して、範囲を選択します。  
選択範囲は青色で表示されます。
3. **Explore > Extract Ions > Use Range.** をクリックします。  
選択した XIC がスペクトルペイン下のペインで開きます。ペイン上部の実験情報には、秒毎にカウントされた質量範囲と質量強度が示されます。

## 最大ピークを使用して XIC を生成

1. スペクトルを含むデータファイルを開きます。
2. スペクトル内範囲を選択します。  
選択範囲は青色で表示されます。
3. **Explore > Extract Ions > Use Maximum.** をクリックします。  
選択した最大ピークの XIC が、スペクトルペインの下に開きます。ペイン上部の実験情報には、秒毎にカウントされた質量範囲と質量強度が示されます。

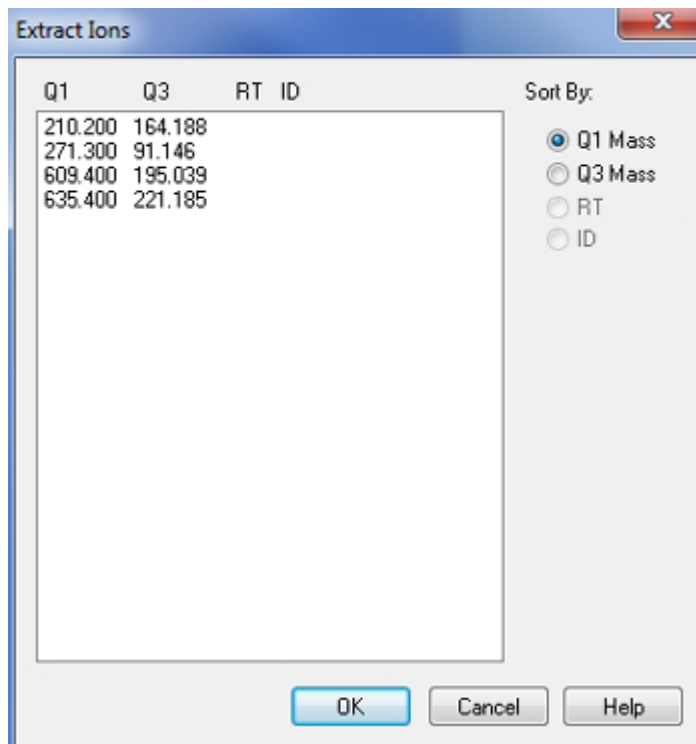
## ベースピークの質量を使用して XIC を生成

1. スペクトルを含むデータファイルを開きます。
2. BPC で、イオンを抽出するためのピークを選択します。  
選択範囲は青色で表示されます。
3. **Explore > Extract Ions > Use Base Peak Masses.** をクリックします。  
指定した選択範囲の XIC が、スペクトルペインの下に開きます。ペイン上部の実験情報は、毎秒カウント数で質量範囲と最大強度を示します。

## 質量を選択してイオンを抽出

1. スペクトルまたはクロマトグラムを開きます。
2. **Explore > Extract Ions > Use Dialog.**

図 13-4 : Extract Ions ダイアログ



3. 作成する各 XIC の値を入力します。
  - **Start** フィールドで、質量範囲の開始値(低い方の値)を入力します。
  - **Stop** フィールドで、質量範囲の停止値(高い方の値)を入力します。

**注:** 停止値が入力されていない場合は、開始値で範囲を規定します。

4. **OK** をクリックします。

選択した XIC がクロマトグラムペインの下に開きます。ペイン上部の実験情報は、質量および秒あたりカウントで示される最大強度が含まれます。

## BPC

BPC は、各スキャンにおける最高強度イオンの強度がスキャン数または保持時間として示されます。これは、TIC のノイズの量があまりに多いために大きなオフセットが存在し、クロマトグラムのピークを区別するのが困難な場合に便利です。また、共溶出成分を区別するのにも役立ちます。BPC は単一期間の単一実験データのみから生成されます。

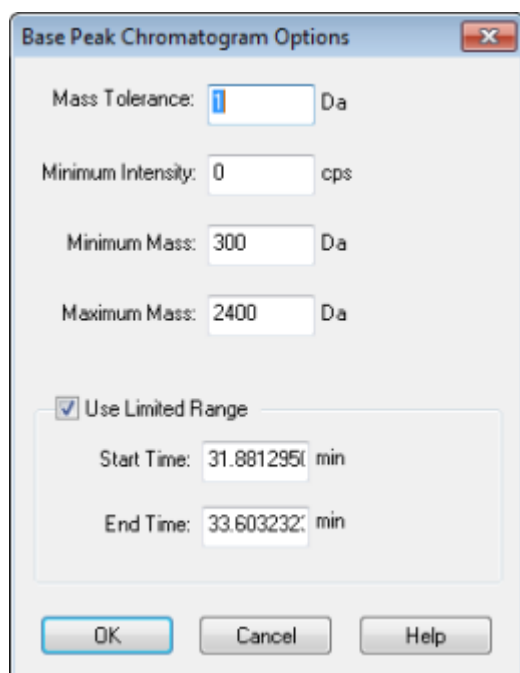
グラフでは 2 色が用いられ、ベースピークの質量の変化が変化するたびに色が切り替わります。色の変化は、データに対してスクロールまたはズーム操作を実行した際にも維持されます。グラフで使用する色を選択する方法については、ヘルプを参照してください。

## BPC の生成

BPC は単一期間および単一実験のデータのみから生成されます。

1. データファイルを開きます。
2. TIC 内の領域を選択します。  
選択範囲は青色で表示されます。
3. **Explore > Show > Show Base Peak Chromatogram.** をクリックします。  
選択範囲は **Start Time** および **End Time** フィールドに表示されます。

図 13-5 : Base Peak Chromatogram オプション



4. **Mass Tolerance** フィールドに、ピーク取得に必要な質量範囲を示す値を入力します。  
ソフトウェアは入力値の 2 倍値を使用してピークを求めます (±質量値)。

5. **Minimum Intensity** フィールドに、アルゴリズムが無視するピークの強度を入力します。
6. **Minimum Mass** フィールドに、スキャン範囲の先頭の質量を入力します。
7. **Maximum Mass** フィールドに、スキャン範囲の終端の質量を入力します。
8. 開始および終了時間を設定するには、**Use Limited Range** チェックボックスをオンにし、次の操作を行います。
  - **Start Time** フィールドに、実験の対象範囲を開始する時刻を入力します。
  - **End Time** フィールドに、実験の対象範囲を終了する時刻を入力します。
9. **OK** をクリックします。  
BPC が新しいペインに生成されます。

## しきい値の調整

しきい値は、グラフ上の X 軸に平行にひかれた目視不可の線で、ソフトウェアがスペクトルにピークを含まない下限です。この線には、Y 軸の左に青の△で示されたハンドルがあります。青の△をクリックしてしきい値を示す点線を表示します。しきい値は上げたり下げたりできますが、しきい値を変更してもデータは変更されません。しきい値より下の領域にあるピークについては、ソフトウェア上に表示されません。

1. データファイルを開きます。
2. 次のいずれかの操作を行います。
  - しきい値を上げるには、Y 軸で青の△を上にもドラッグします。
  - しきい値を下げるには、青の△を下にもドラッグします。
  - **Explore > Set Threshold.** をクリックします。Threshold Options ダイアログが開いたら、しきい値を入力して **OK** をクリックします。
  - **Explore > Threshold.** をクリックします。

グラフが更新され、新しく設定したしきい値が表示されます。ピークラベルおよびピークリストも更新されます。

---

**ヒント!** 現在のしきい値を表示するには、しきい値ハンドル上にポインタを移動させます。

---

## TWC の生成

TWC は使用頻度の低いクロマトグラムです。このクロマトグラムでは合計吸光度 (mAU) が時間の関数として示されます。TWC により、データセット全体を単一ペインに表示することができます。クロマトグラムで、時間に対してプロットされたスキャンに含まれる全イオンの吸光度の合計値で構成されています。データに複数の実験結果が含まれている場合、すべての実験の合計を表す TWC の下に、各実験の TWC を作成することができます。

TWC は X 軸の時間に対してプロットされた Y 軸上の全吸光度 (mAU) を示します。使用可能なアイコンの使い方については、[表 13-5](#) を参照してください。

1. DAD スペクトルを含むデータファイルを開きます。

2. **Explore > Show > Show DAD TWC.** をクリックします。  
TWC は DAD スペクトル下部のペインに表示されます。

---

**ヒント!** DAD スペクトルを含むペイン内で右クリックし、**Show DAD TWC** をクリックします。

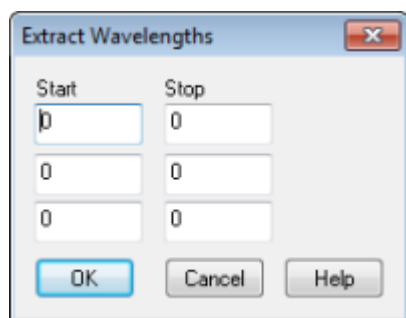
---

## XWC の生成

XWC は単一の波長の強度値を採用することで、あるいは(複数の波長が含まれる)範囲を持つ吸光度を合計することで作成される波長クロマトグラムです。最大 3 範囲を、DAD スペクトルから抽出して XWC を生成できます。使用可能なアイコンの使い方については、[表 13-5](#) を参照してください。

1. DAD スペクトルを含むデータファイルを開きます。
2. ペインの任意の場所を右クリックし、**Extract Wavelengths** をクリックします。

**図 13-6 : Extract Wavelengths ダイアログ**



3. **Start** と **Stop** の値を入力します。
4. **OK** をクリックします。  
XWC は DAD スペクトル下部のペインに表示されます。

## Show DAD Data

DAD データは質量分析装置のデータのように、クロマトグラムまたはスペクトル形式で見ることができます。DAD スペクトルは単一の時点にて、あるいはトータル波長クロマトグラム(TWC)として一定の時間範囲にわたって表示できます。

1. DAD で取得されたデータを含むデータファイルを開きます。  
TIC に相似の TWC は、TIC 下部のペインで開きます。
2. TWC ペインでは、ポイントをクリックしてある時間のシングルポイントを選ぶか、スペクトルのエリアをハイライトして時間範囲を選ぶことができます。
3. **Explore > Show > Show DAD Spectrum.**  
DAD スペクトルは TWC 下部のペインで開きます。Y 軸は吸光度を示し、X 軸は波長を示します。

---

**ヒント!** TWC のペインが閉じた場合には、TWC の任意のポイントをクリックして再度開いてください。**Explore > Show > Show DAD TWC.**

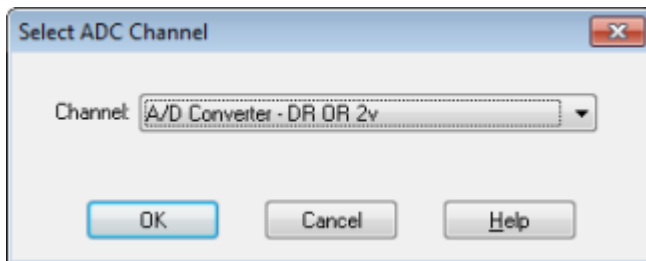
---

## ACD データの表示

アナログからデジタルへのコンバータ(ADC)は、セカンダリ検知器(たとえば、ADC カードを通した UV 検知器)から取得され、質量分析装置データの比較に有益です。ADC データを利用するためには、ADC データと質量分析装置のデータを同時に取得する必要があります。そして、両方のデータが同じファイルに保存されます。

1. ADC データが保存されているプロジェクトフォルダを選択していることを確認します。たとえば、Example フォルダをクリックします。
2. Navigation バーの **Explore** の下にある **Open Data File** をダブルクリックします。Select Sample ダイアログが開きます。
3. **Data Files** フィールドで、サブデータフォルダをダブルクリックし(該当する場合)、開くデータファイルをクリックします。たとえば、Example フォルダで **Devices** をダブルクリックし、**Adc16chan.wiff** をクリックします。
4. **Samples** リストでサンプルを選択してから、**OK** をクリックします。
5. **Explore > Show > Show ADC Data** をクリックします。

図 13-7 : Select ADC Channel ダイアログ



6. **Channel** リストからチャネルを選択した後、**OK** をクリックします。アクティブなペインの下に、ADC データが新たなペインに表示されます。

## グラフィックデータ処理

グラフィックデータはさまざまな方法で処理が可能です。このセクションには、最も一般的に使用されるツールの幾つかの使用法についての情報と手順が示されています。

ユーザーはグラフの一部を拡大して特定のピークまたはスペクトルとクロマトグラムの両方においてより詳細な領域を閲覧できます。ユーザーはさらに小さいピークを表示するために繰り返し拡大することもできます。

## データの管理

次のメニューオプションまたはアイコンを使用してグラフ内のデータを管理します。

表 13-5 : グラフのオプション











実行する作業	このメニューオプションを使用します	あるいはこのアイコンをクリックします
グラフを新しいウィンドウにコピーします	コピーするグラフを選択します。 <b>Explore &gt; Duplicate Data &gt; In New Window.</b> をクリックします。	
グラフの元のサイズへの調整	グラフを選択します。 <b>Explore &gt; Home Graph.</b> をクリックします。	
ペインの移動	<ul style="list-style-type: none"> <li>グラフを選択します。<b>Window &gt; Move Pane.</b> をクリックします。</li> <li>ペインまたはウィンドウを選択し、新しい位置へドラッグします。この位置は同じウィンドウ内か別のウィンドウ内となります。</li> </ul> <p>カーソルがアクティブなウィンドウまたはペインの境界上にある場合、4 方向を示す矢印が表示されます。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>ペインが目標ペインの上部あるいは下部にある場合、ペインはその各ペインの上あるいは下へ移動します。</li> <li>ペインが目標ペインの左あるいは右にある場合、目標ペインはそれぞれペインの左あるいは右へ移動します。</li> <li>ペインが他の位置にある場合、ペインは目標行へ移動します。ペインが移動する際、ペインのドロップシャドウが新しい位置を示します。</li> </ul>	
ペインのリンク	<p>a. 2 つのグラフが開いている場合、1 つをクリックしてペインを有効にします。</p> <p>b. <b>Explore &gt; Link</b> をクリックしてもう 1 つのペインをクリックします。</p>	
リンクを解除	ペインの 1 つを閉じます。 <b>Explore &gt; Remove Link.</b> をクリックします。	
ペインの削除	グラフを選択します。 <b>Window &gt; Delete Pane.</b> をクリックします。	
ペインの固定	グラフを選択します。 <b>Window &gt; Lock Panes.</b> をクリックします。	
ペインの非表示	グラフを選択します。 <b>Window &gt; Hide Pane.</b> をクリックします。	



表 13-5 : グラフのオプション (続き)

実行する作業	このメニューオプションを使用します	あるいはこのアイコンをクリックします
ペインの最大化	グラフを選択します。 <b>Window &gt; Maximize Pane.</b> をクリックします。	
Tile panes	グラフを選択します。 <b>Window &gt; Tile all Panes.</b> をクリックします。	

## グラフのズームイン

グラフの一部を拡大して特定のピークや、スペクトルおよびクロマトグラム双方の特定の領域を詳細に閲覧できます。小さなピークを表示するには、拡大を繰り返します。

### Y 軸をズームイン

1. Y 軸の左側のポイントを拡大させる領域のいずれかの側に動かします。その後、マウスの左ボタンを押した状態で開始点から垂直方向にドラッグします。Y 軸に沿って、新しいスケールを表すボックスが表示されます。

**注:** ベースラインをズームする場合は注意してください。ズームの可能領域を超えてしまうと、ズームインボックスが閉じられます。

2. 新しいスケール上でグラフを描く場合は、マウスボタンを放してください。

**ヒント!** グラフの Y 軸を元の縮尺に戻すには、どちらかの軸をダブルクリックします。グラフ全体を標準のスケールに戻すには、**Explore > Home Graph.** をクリックしてください。

### X 軸をズームイン

1. X 軸の下部においたポイントを拡大させる領域のいずれかの側へ動かします。その後、マウスの左ボタンを押した状態で開始点から水平方向にドラッグします。
2. 新しいスケール上でグラフを描く場合は、マウスボタンを放してください。

**ヒント!** グラフの X 軸を元の縮尺に戻すには、X 軸をダブルクリックします。グラフ全体を標準のスケールに戻すには、**Explore > Home Graph.** をクリックしてください。

## グラフのラベリング

グラフとクロマトグラムのラベル用に事前設定されたスタイルはカスタマイズすることができます。ピークと軸のラベルに使用するフォントおよびトレースに使用する色を選択します。軸ラベル、ラベルの種類、およびピークの精度を追加します。

### グラフへのキャプションの追加

キャプションを用いて、グラフ上の目的のピークや重要なポイントにラベルを付けることができます。ピークのそばに配置したキャプションは、ピークがズームイン、ズームアウトされた場合にもピークの

もとに留まります。ユーザーがデータファイル内のサンプル間を移動する場合でも、キャプションは元のサンプルのもとにあります。キャプションはテキスト 1 行で最大 128 文字使用できます。

1. スペクトル上で右クリックし、**Add Caption** をクリックします。  
Add Caption ダイアログが開きます。
2. **Caption** ボックス内に、テキストを入力します。
3. キャプションのサイズとスタイルを変更するには、**Font** をクリックします。
4. キャプションを配置するには **OK** をクリックします。

---

**ヒント!** キャプションの位置を変更する場合は、キャプションを別の位置にドラッグします。グラフがズームイン/ズームアウトされても、キャプションは X 軸と Y 軸に対して同じ位置に維持されます。キャプションを編集または削除するには、キャプションを右クリックし、該当するコマンドをクリックします。

---

### グラフへのテキストの追加

テキストを用いて、複数行にわたる情報をグラフに追加します。特定のピークに付けられたキャプションはグラフのズームに併せて移動しますが、テキストラベルはグラフがユーザーによってズームされても元の位置に維持されます。テキストラベルは、データファイル内のサンプル間を移動した場合、元のサンプルから離れます。

1. グラフ上で右クリックし、**Add User Text** をクリックします。  
Add User Text ダイアログが開きます。
2. **User Text** フィールドにテキストを入力します。
3. テキストを中央ぞろえにするには、**Center Text** チェックボックスを選択します。
4. キャプションのサイズとスタイルを変更するには、**Font** をクリックします。
5. テキストを挿入するには **OK** をクリックします。

---

**ヒント!** テキストの位置を変更する場合は、テキストを別の位置にドラッグします。テキストを編集または削除するには、テキストを右クリックし、該当するコマンドを選択します。

---

### スペクトルまたはクロマトグラムの重ね表示および集約

2 セット以上のデータを視覚的に比較するには、同様の方法を用いて作成済みのグラフを重ね表示します。スペクトルはそれぞれ、そのトレースの色によって識別されます。フルスキャンデータの場合、ユーザーは数種のサンプルスペクトル間の差異を視覚化することができます。

2 つ以上のグラフが重ね表示されたら、グラフを集約して新しいトレースを取得します。新たなトレース上の各ポイントはグラフのポイントの合計です。類似するデータの種類のいくつかの重ね表示を集約することで、後に続く処理操作を容易かつ迅速に実施することができます。例えば、XIC 数種の重ね表示および集約を行ってから、集約された重ね表示をスムーズにしてノイズを取り除きます。

重ね表示を集約することは、TIC の生成に類似しており、重ね表示対象のグラフを選択できる利点があります。例えば、ユーザーが 10 種の実験を検討している場合、TIC では 10 種の実験をすべて合算することになります。重ね表示を集約する場合、ユーザーは 10 種の重ね表示されたグラフ

のうちの 9 種のみを合算する選択ができます。これは、実験のうちの 1 回で収集されたデータがノイズのみであった場合に有用です。

## グラフを重ねて表示する

類似した方法で作成されたグラフを重ねて表示(オーバーレイ)することで、2 セット以上のデータを視覚的に比較できます。スペクトルはそれぞれ、そのトレースの色によって識別されます。フルスキャンデータの場合、これによって複数のサンプルスペクトル間の差異を視覚化することができます。

複数のペインが選択された場合、それぞれの XIC が個々に開きます。

**ヒント!** 同一ペインに 3 つ以下のグラフを重ね表示するには、ペインで **Ctrl** を右クリックしてから、**Appearance Options** をクリックします。Appearance Options ダイアログの複数のグラフオプションタブで、**Spectrum** および **Chromatogram** の **Overlay Multiple Panes** フィールドで **Yes** を選択します。

1. 重ねて表示する最初のペインを選択します。
2. **Explore > Overlay** をクリックします。
3. 2 つ目のペインをクリックします。

グラフが重ねられ、2 つのトレースが異なる色で表示されます。

**ヒント!** 重ね表示されたグラフの色分けリストを表示するには、ペインのタイトルバーを右クリックします。

## 重ね表示されたグラフ間の表示の切り替え

1. 重ね表示されたグラフを含むペインを選択します。
2. **Explore > Cycle Overlays** をクリックします。  
表示が変わり、次の順番のグラフが最前面に表示されます。

## Sum Overlays

1. 合算するグラフを重ね表示します。
2. **Explore > Sum Overlays** をクリックします。  
重ね表示されたグラフは合算されます。

表 13-6 : Explore ツールバーのクイックリファレンス: グラフの重ね表示





アイコン	名称	機能
	Home Graph (規定グラフ)	クリックすると、グラフが標準のスケールに戻ります。
	Overlay	クリックするとグラフが重ね表示されます。
	Cycle Overlays	クリックすると、重ね表示されたグラフ間で表示が切り替わります。

表 13-6 : Explore ツールバーのクイックリファレンス:グラフの重ね表示 (続き)

アイコン	名称	機能
	Sum Overlays	クリックすると、グラフがひとつに統合されます。

## バックグラウンド減算の実行

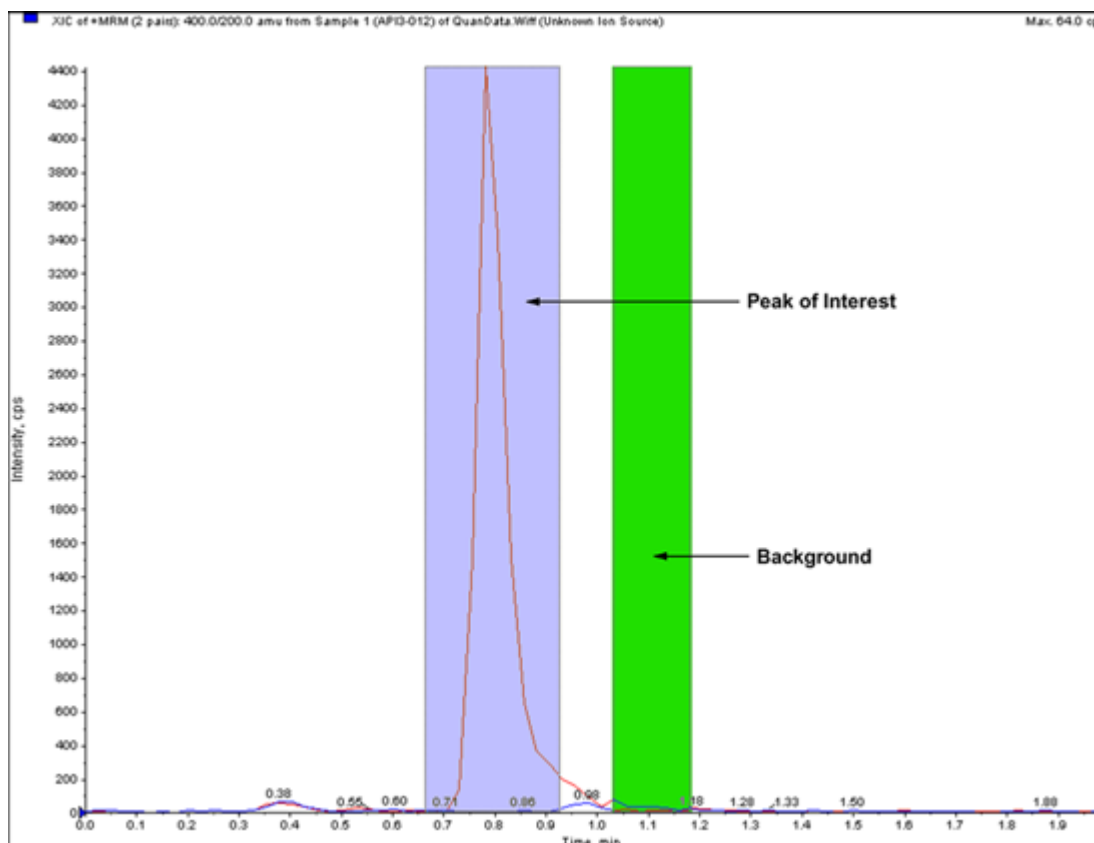
バックグラウンド減算はスペクトル中のノイズ量を減らすためのもので、ピークを含む範囲のノイズが含まれる 2 つの範囲のうちいずれか 1 つを減算します。対象の範囲を個別に移動するか、ロックしてグラフ内の 1 つのエントリティとして移動します。デフォルトでは Locked Background Subtraction に設定されています。

**Background Subtract:** バックグラウンド減算を用いて目的のピークを分離します。ピークからの最大 2 つの選択範囲を強調表示してから減算します。対象範囲をロックした後、グラフ内で移動させて、ピークの分離を最適化するか、別のピークを分離します。

## スペクトルに対するバックグラウンド減算の実行

1. データファイルを開きます。
2. バックグラウンド範囲を選択します。

図 13-8 : バックグラウンド範囲の選択



3. **Shift** キーを押しながら、もう一方のバックグラウンド範囲を選択します。
4. 減算範囲を設定するには、**Explore > Background Subtract > Set Subtract Range** をクリックします。
5. 関心のあるピークを選択します。
6. **Explore > Background Subtract > Perform Background Subtract** をクリックします。  
バックグラウンドがピークから除去され、新しいスペクトルが生成されます。
7. 別のピークを分離するには、クロマトグラム内でロック範囲をドラッグし、バックグラウンド減算を繰り返します。

---

注: バックグラウンド減算範囲を選択解除するには、**Explore > Background Subtract > Clear Subtract Range** をクリックします。

---

8. バックグラウンドが減算されたスペクトルを処理済みデータファイルとして保存するには、**File > Save** をクリックします。



## 範囲のロック解除

選択した減算範囲はロック済みに設定されます。

- **Explore > Background Subtract > Subtract Range Locked** をクリックします。

範囲はロック解除され、それぞれを別々に移動することができます。

表 13-7 : Explore ツールバーのクイックリファレンス:バックグラウンド減算

アイコン	名称	機能
	Perform Background Subtract	クリックすると、バックグラウンド範囲が選択された後、バックグラウンド減算が実行されます。
	Subtract Range Locked	クリックすると、選択されたバックグラウンド範囲がロックされます。各範囲を個別に移動するには、バックグラウンド範囲をロック解除します。

## アルゴリズムのスムージング

データセットをスムージングすると、ノイズにより引き起こされる可能性の高い局所的変化を取り除くことができます。いくつかのスムージングサイクルをデータに適用することができますが、ユーザーは直近のスムーズのみを取り消すことができます。スムージングは MI/MRM スペクトルでは利用できません。デフォルトのスムージングとして、スムーズアルゴリズムあるいはガウシアンスムーズアルゴリズムを選択します。

### スムーズアルゴリズム

このアルゴリズムをデータのスムージングに使用すると、「現在のポイント」、「前のポイント」、「次のポイント」の3つのデータポイントのポイント加重値が設定されます。スムーズアルゴリズムでは、割り当てられた加重値によってデータポイントが乗算され、これらの値が合計された後、合計値がポイント加重値の合計で除算されます。ガウシアンスムーズよりも穏やかなスムージングですが、ノイズが非常に多いデータの場合は処理に時間がかかります。

### ガウシアンスムーズアルゴリズム

ガウシアンスムーズでは、各データポイントが、その両側に存在する複数のデータポイントの加重平均に置き換えれます。新しいデータポイントごとの加重は、ガウス曲線にもとづいて算出されます。スムーズアルゴリズムよりも荒いスムージングですが、ノイズが非常に多いデータに対して有効です。

ガウシアンスムーズメソッドの使用時には次の2つの値を設定します。

**Gaussian filter width (ポイント間の最小距離の%)**: この値は、隣接ポイントの加重を算出する際に用いる値を示しています。この幅は、スキャンにおける2つのポイント間の距離の割合として述べられます。プリセット幅である100%であれば、データポイント間の距離が可能な限り広く用いられた分布が示されます。

**Limit of Gaussian filter (ポイント間の最小距離の数)**: この値はガウス曲線の限界に相当しており、ポイント間の距離の倍数として示されます。例えばプリセット値である10を用いて生成されたガウス曲線では、中央の両側のデータポイント幅の数が10を超えた時点で切り取られます。

## データのスムージング

Analyst MD ソフトウェアスムーズ法またはガウシアンスムーズ法が選択できます。

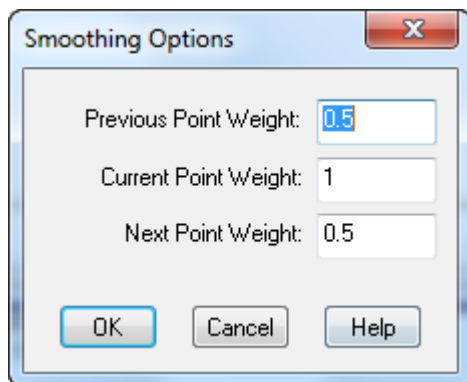
ヒント! スムージングを取り消すには、**Edit > Undo** をクリックします。本ソフトウェアでは 1 レベルの取り消しに対応しています。

## スムーズアルゴリズムを用いたデータのスムージング

ヒント! スムージングを取り消すには、**Edit > Undo** をクリックします。本ソフトウェアでは 1 レベルの取り消しに対応しています。

1. クロマトグラムまたはスペクトルを含むペインを選択します。
2. **Explore > Smooth** をクリックします。  
Smoothing Options ダイアログが開きます。

図 13-9 : Smoothing Options ダイアログ

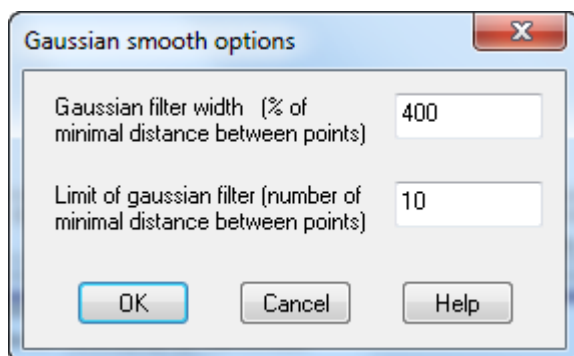


3. **Previous Point Weight** フィールドには、過去のデータポイントに適用させるための加重ファクターを入力します。
4. **Current Point Weight** フィールドには、中央データポイントに適用させるための加重ファクターを入力します。
5. **Next Point Weight** フィールドには、次のデータポイントに適用させるための加重ファクターを入力します。
6. **OK** をクリックします。  
データセットはスムージングされ、ペインの中の最新データが置き換えられます。

## ガウシアンスムーズを用いたデータのスムージング



1. クロマトグラムまたはスペクトルを含むペインを選択します。
2. **Explore > Gaussian Smooth** をクリックします。  
Gaussian smooth options ダイアログが表示されます。

図 13-10 : Gaussian Smooth Options ダイアログ



3. **Gaussian filter width** フィールドに、隣接ポイントの加重を検出するために用いる幅を、2つのポイント間の距離の割合として入力します。
4. **Limit of gaussian filter** フィールドに、ガウス曲線の限界を入力します。ポイント間の距離の倍数として示されます。
5. データをスムージングするには、**OK** をクリックします。  
データセットはスムージングされ、ペインの中の最新データが置き換えられます。

表 13-8 : Explore ツールバーのクイックリファレンス:データのスムージング

アイコン	名称	機能
	Smooth	クリックすると、スムーズアルゴリズムを用いてデータをスムージングできます。
	Gaussian smooth	クリックすると、ガウシアンスムーズを用いてデータをスムージングできます。

## データのセントロイド

セントロイドは、ピークの分布値を、そのピークを表す  $m/z$  と強度の単一の値に変換します。プロファイルモードで収集したデータをセントロイドすることで、データが簡素化され、ファイルサイズが縮小します。またピークの割り当てがより正確になり、データ量も減少しますが、ピークの形状に関する情報は取り除かれます。

セントロイドアルゴリズムでは、強度を加重した平均値を用いてピークが単一の値に変換され、ピークの重心が算出されます。アルゴリズムの出力は、表 13-9 に示すようなパラメータを持つピークのリストです。

表 13-9 : ピークパラメータ

パラメータ	定義
セントロイド値	セントロイドデータの値です(質量単位または時間単位)。
強度	各ピークの強度(cps)です。



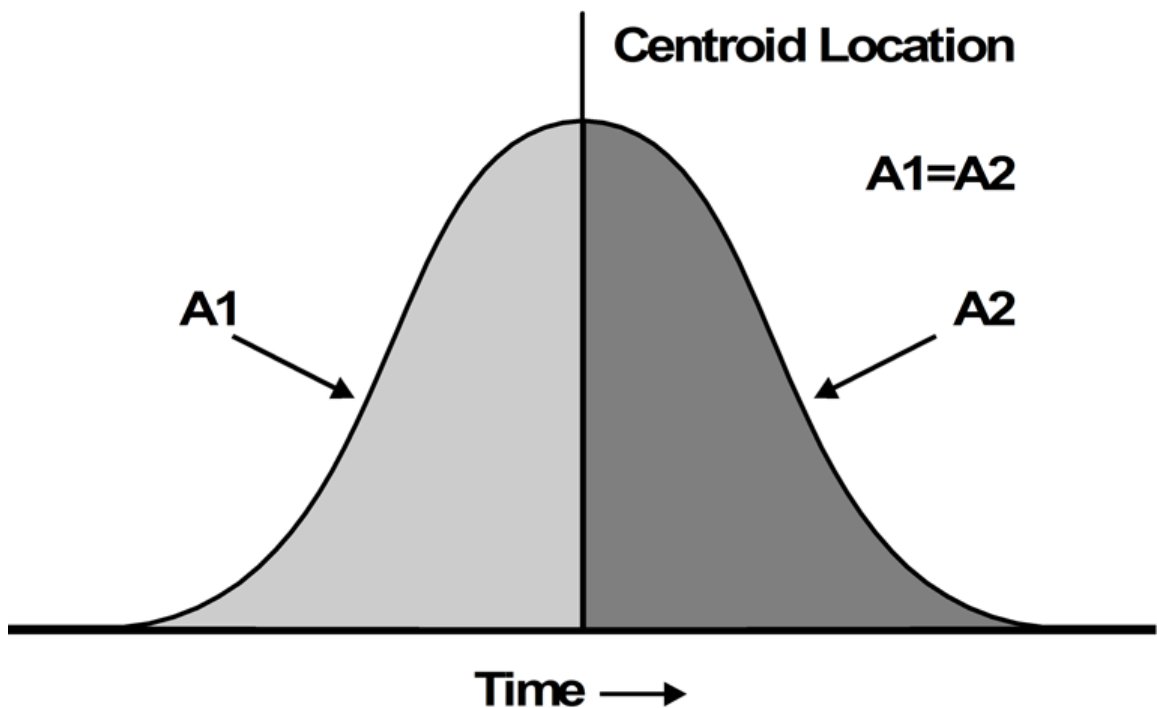
表 13-9 : ピークパラメータ (続き)


パラメータ	定義
幅	セントロイドピークの幅 (amu) です。

データはライブラリに追加された時点または検索が実行された時点で、自動的にセントロイドされます。

1. スペクトルが含まれるペインを選択します。  
データをセントロイドすると、既存のグラフの外観が変化します。結果を元のデータと比較するには、セントロイドする前にグラフをコピーしておいてください。
2. **Explore > Centroid** をクリックします。  
データはセントロイドされています。

図 13-11 : 分析試料のセントロイド位置



アイコン	名称	機能
	Centroid	クリックすると、データがセントロイドされます。

## 処理済みのデータファイルの保存およびオープン

ユーザーは特定のレイアウトやキャプションなどの Explore モードでのみ再オープンできる処理データを保管することができます。これらのファイルには履歴情報も含まれており、Explore の有効ペインのデータのみを含む点を除けば、データファイルと同じです。このようなファイルには pdt 拡張子がついており、現在のプロジェクト用の Data フォルダに格納されます。

### 処理済みのデータファイルを保存する

1. 保存したいデータのペインを選択します。
2. **File > Save Processed Data File** をクリックします。
3. **File name** フィールドに名前を入力します。
4. **Save** をクリックします。

### 処理済みデータファイルを開く

1. Explore モードで、**File > Open Processed Data File** をクリックします。  
Load Processed Data File ダイアログが開きます。
2. ファイルを選択した後、**Open** をクリックします。

## 等高線図での作業

等高線図とは、完全データセットとなる色分けプロットであり、プロットの第三次元が色で示されています。TIC の等高線図では、X 軸は保持時間またはスキャン番号を、Y 軸は質量を、そして色はその時点でのデータの強度を表します。DAD データ用の TWC の等高線図では、X 軸は保持時間またはスキャン番号を、Y 軸は波長を、そして色は吸光度を表します。等高線図は測定後ツールであるため、リアルタイムでのスキャン測定では機能しません。

---

**注:** 等高線図は MI または MRM スキャンには対応していませんが、DAD スキャンには対応しています。

---

色は等高線図の第三軸に付けられており、強度または吸光度を表します。等高線図の上のカラーバーにあるコントロール用三角形を使用して、等高線図の強度または吸光度を高値/低値に変更します。Contour Plot ペインの上部にあるパーセンテージパラメータは、低/高スライダーの値を示しています。実際の値は、選択した領域内の最大強度または最大吸光度の割合(パーセンテージ)にもとづいたものとなります。この値は、Contour Plot ペインの右上に表示されます。


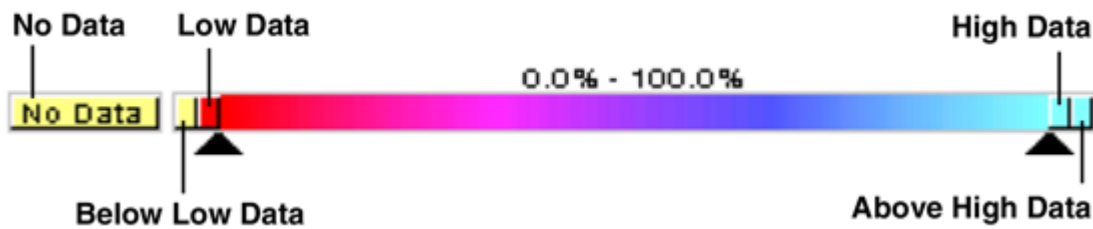
 **図 13-12** に示されているコントロールにより、等高線図の色が変化します。

図 13-12 : 等高線図の色をコントロールするボタン



等高線図グラフの色は、コントラストを際立たせ、データ仕様が要件に合わせて表示されるよう指定します。例えば、強度/波長を設定し、Below Low Data および Above High Data の値に色を付けることで、等高線図のバックグラウンドノイズを除去できます。

スライダーコントロールを動かすと、Below Low Data ボタンと Above High Data ボタンがカラーバー上で拡大/縮小します。等高線図の色を変更すると、以降の全グラフにおいて新しい色がプリセット値となります。

## 等高線図の表示

ユーザーは測定後にのみ、等高線図を TIC、XIC、TWC、または XWC グラフで表示することができます。TIC と XIC は wiff データファイルすべてで利用可能です。TWC と XWC は DAD によって収集されたデータに対してのみ利用可能です。

1. **Explore** モードでは、データファイルを TIC、XIC、TWC、または XWC グラフとして開くことができます。
2. 範囲を強調表示して等高線図内に表示します。選択しない場合、全範囲が表示されます。
3. **Explore > Show > Show Contour Plot** をクリックします。  
選択された領域の等高線図は別のペインに表示されます。

## 等高線図の領域の選択

特定の選択領域にズームインするか、またはその選択領域の該当質量スペクトルを表示することができます。

次のいずれかの操作を行います。

- ボックス内で標準領域を選択するには、等高線図内でポインタをドラッグし、領域の周辺にボックスを作成します。
- 垂直に選択するには、Ctrl キーを押しながらポインタを垂直にドラッグします。
- 水平に選択するには、スペースバーを押しながらポインタを水平にドラッグします。

## 等高線図内の強度および吸光度の設定

次のいずれかの操作を行います。

- 等高線図内の低強度/低吸光度の値を設定するには、等高線図の上にある色付きのバーの左向きの三角形スライダーを必要な位置にドラッグします。

等高線図は設定値より下の値の色に自動調節し、範囲を逸脱していることを示します。

- 等高線図内の高強度/高吸光度の値を設定するには、等高線図の上にある色付きのバーの右向きの三角形スライダーを必要な位置にドラッグします。

等高線図は設定値より上の値の色に自動調節し、範囲を逸脱していることを示します。

## 等高線図の色の変更

1. Contour Plot ペインで、色ボタンのうちの 1 つをクリックします。  
Color ダイアログが開きます。

2. 色をクリックしてから **OK** をクリックします。

グラフの色が変わり、変更が反映されます。

---

**ヒント!** Define Custom Colors パレットを用いて、等高線図内の色をカスタマイズします。

---

## フラグメント解釈

フラグメント解釈ツールは、ユーザーによる MS/MS データの解釈に役立ちます。フラグメント解釈ツールでは、分子構造に含まれる単結合/非環状結合の開裂をもとに、理論的フラグメント質量のリストが生成されます。分子構造は他社製の描画プログラムで作成した後、mol ファイルとして保存することができます。これにより、理論的リストを現在の質量スペクトルのピークと一致させることができます。フラグメント解釈ツールでは、論理的フラグメントが Fragment リストに表示され、フラグメント質量が質量スペクトルのピークと比較されます。強度しきい値を上回り、かつユーザーが定義したフラグメント質量の質量許容値(最大 2 Da)以内のピークのみが一致していると判断され、Fragment リスト上で太字で表示されます。

---

**注:** フラグメント解釈ツールは、次のスキャン種類とは併用できません。

- プリカーサーイオン
- ニュートラルロス
- Q1 多重イオン
- Q3 多重イオン
- 複数反応モニタリング(MRM)

---

## フラグメント解釈ツールでの作業

スペクトルペインが複数表示されている場合、フラグメント解釈ツールは有効なスペクトルに接続します。データファイルにサンプルが複数ある場合、フラグメント解釈ツールは有効なスペクトルに接続します。

このツールにより、単結合および非環状結合の開裂フラグメントが、mol ファイルをもとに自動的に算出されます。フラグメント解釈ツールがスペクトルに接続されると、太字の理論的フラグメントで、指定された質量許容値および強度閾値内のスペクトル中で一致するピークが示されます。

分子構造内の単結合および非環状結合が選択されている場合、フラグメント解釈ツールは結合が開裂される際に作成される2つのフラグメントを強調表示した後、接続されたスペクトル内で一致するピークを示します。

## フラグメント解釈ツールのスペクトルへの接続

フラグメント解釈ツールの起動時にスペクトルが開いている場合、アクティブパネルは開いているスペクトルに自動的にリンクされます。

1. **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool** をクリックします。

2. Fragment Interpretation ペインの右下にある接続ボタンをクリックします。  
ポインタが接続ツールに変化します。

3. フラグメント解釈ツールの接続先となるスペクトルグラフをクリックします。

左下の接続済みグラフィックデータには、Fragment Interpretation ペインに接続されたグラフの名前が示されます。グラフまたはフラグメント解釈ツールのいずれかが閉じられると、接続は解除されます。接続中の wiff ファイルに複数のサンプルが含まれている場合、ユーザーがサンプル間をスクロールするのに併せて、Fragment Interpretation ペインが自動的に更新されます。

## ピークとのフラグメントの一致

1. **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool** をクリックします。

2. Fragment Interpretation ペイン内の mol ファイルで、**Fragment List** 内で太字表示されるセルを選択します。

スペクトルには、ソフトウェアにより、**Options** タブ下で選択された色のスペクトルの一致するピークが強調表示されます。分子構造では、結合が強調表示されます。

複数一致するフラグメントがあるカラムがクリックされた場合、そのモノアイソトピック質量に近いスペクトルのピークが、**Options** タブで指定した色の質量スペクトル内で強調表示されます。

## 分子構造内の結合の選択

1. **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool** をクリックします。

2. Fragment Interpretation ペインで mol ファイルを開いたまま、分子構造内の単結合および非環状結合をクリックします。

結果として生じる2つのフラグメントは、フラグメントリストに強調表示されます。2つのフラグメントの質量が結合の片側に示されます。

スペクトルが接続される場合、Fragment Interpretation ツールはグラフ内の一致するピークをすべて表示します。リスト内のフラグメントが選択されており、フラグメントがピークと一致する場合、Fragment Interpretation ウィンドウで該当するピークがズームインされます。

## アイソトープの表示

フラグメント解釈ツールでは、フラグメントリスト内のフラグメントピークマッチングの理論的アイソトープ分布を表示できます。

1. **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool** をクリックします。

2. Fragment Interpretation ペインで **Options** タブをクリックします。
3. **Show Isotopes** チェックボックスをクリックします。
4. **Apply** をクリックします。
5. **Fragment List** で、ピークと一致するフラグメントを選択します。  
一致ピークのアイトープ分布がスペクトル内に表示されます。

### フラグメントの数式の差異の表示

2つの関連する仮説のフラグメント間の数式とモノアイソトピック質量の差異を、ソフトウェアで表示することができます。ピークを2つ選択すると、その数式の差異が示されます。数式およびモノアイソトピック質量の差異が表示されるのは、2つのフラグメントが選択されている場合、あるいは2つの単結合、非環状結合が選択されている場合です。

### スペクトル内の数式の相違の表示

1. フラグメントピークをクリックします。
2. **Shift** を押してから、別のフラグメントピークをクリックします。  
数式の違いがフラグメントリストのフラグメントと同一の場合、フラグメントがリスト内で強調表示されます。そうでない場合、ピークにおける一致フラグメント間の化学式の差異がメッセージボックスに示されます。

### フラグメントリスト内の数式の相違の表示

1. 1つのフラグメントの行番号をクリックします。
2. **Shift** を押してから、別のフラグメントピークをクリックします。  
フラグメントが関連する場合、数式およびモノアイソトピック質量差異がメッセージボックスに表示されます。

### 分子構造内の化学式の差異の表示

1. 単結合および非環状結合をクリックします。(2つの強調表示されたフラグメントの)デフォルトのフラグメントが選択されます。開裂結合の他方のフラグメントを選択するには、**Ctrl** キーを押しながら結合をクリックします。
2. 2つめの非環状結合を選択します。デフォルトのフラグメントを選択するには、**Shift** キーを押しながら結合をクリックします。開裂結合の他方のフラグメントを選択するには、**Ctrl+Shift** キーを押しながら結合をクリックします。  
フラグメント解釈では、ステップ 1 で選択したフラグメントとステップ 2 で選択したフラグメントが関連している場合、これらの化学式/モノアイソトピック質量の差異が算出されます。化学式/モノアイソトピック質量の差異がメッセージボックスに表示されます。

## ライブラリデータベース

ライブラリ検索機能では、未知のスペクトルが(ライブラリデータベースに含まれる)既知の MS スペクトルと比較され、一致している可能性のある物質のリストが生成されます。

Library Search を用いて次の操作を行います。

- ライブラリのコンテンツを未知のスペクトルと比較します。
- 記録をライブラリに追加します。
- 既存の記録を編集します。

ライブラリデータは次の場所に保存できます。

- ローカルデータベース上の MS Access
- MS SQL Server

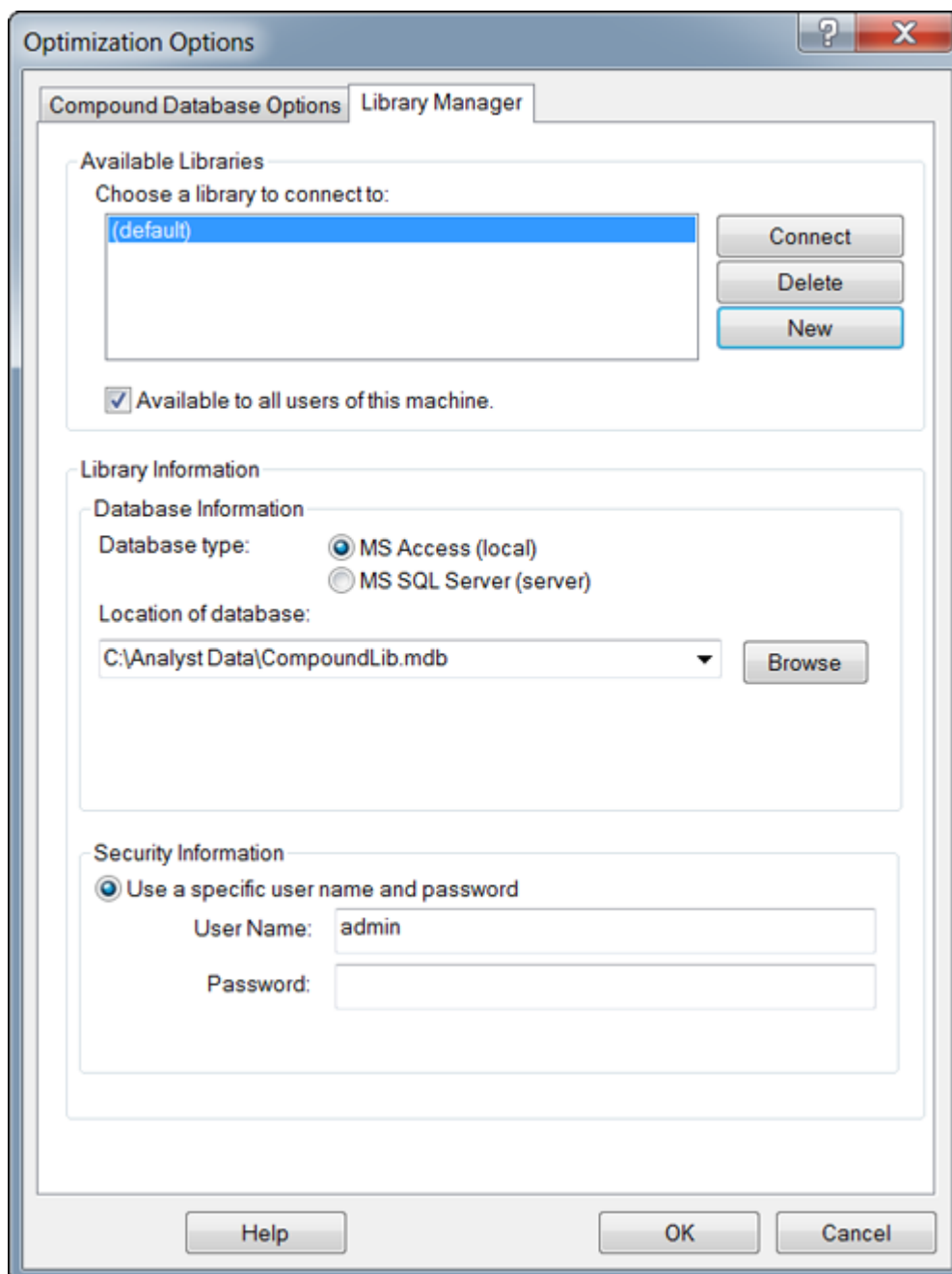
ライブラリ検索機能を使用する前に、ライブラリデータが保存されている場所を確認し、コンピュータをその場所に接続します。ライブラリデータベースはコンピュータでローカルに、またはネットワークを介してネットワーク上に保存できます。

## 既存のライブラリデータベース間での切り替え

ユーザーは、設定済みのエイリアスが割り当てられたあらゆるデータベースに接続できます。

1. **Tools > Settings > Optimization Options** をクリックします。  
Optimization Options ダイアログが開きます。
2. Library Manager タブをクリックします。

図 13-13 : Library Manager タブ



3. **Available Libraries** セクションで接続したいデータベースのエイリアスをクリックし、**Connect** をクリックします。
4. 他のユーザーがデータベースにアクセスできるようにするには、**Available to all users of this machine** チェックボックスを選択します。
5. **OK** をクリックします。



## ローカルライブラリデータベースとの接続

1. **Tools > Settings > Optimization Options** をクリックします。  
Optimization Options ダイアログが開きます。
2. Library Manager タブをクリックします。
3. **Available Libraries** セクションの **New** をクリックします。

図 13-14 : Add Library ダイアログ

4. ライブラリ名を入力します。
5. **Database Information** セクションで **MS Access (local)** を選択します。
6. データベースの場所を入力します。

7. **Security Information** セクションで、このデータベースにアクセスする際にユーザー名とパスワードが必要な場合は、ユーザー名とパスワードを入力します。
8. **Save** をクリックします。

### サーバーライブラリデータベースへの接続

1. **Tools > Settings > Optimization Options** をクリックします。  
Optimization Options ダイアログが開きます。
2. Library Manager タブをクリックします。
3. **Available Libraries** セクションの **New** をクリックします。
4. ライブラリ名を入力します。
5. **Database Information** セクションで **MS SQL Server (server)**を選択します。

図 13-15 : Add Library ダイアログ

6. データベースサーバーの名前を入力します。
7. データベースの名前を入力します。
8. **Security Information** セクションの次のいずれかの操作を行います。
  - このデータベースにアクセスする際に特定のユーザー名とパスワードが必要な場合は、ユーザー名とパスワードを入力します。
  - Windows セキュリティが用いられている場合は、**Use Windows integrated security** オプションを選択します。
9. **Save** をクリックします。

## ライブラリ記録での作業

ライブラリのコンテンツが制約なしで検索される場合、全記録がリストされます。ライブラリのコンテンツが制約付きで検索される場合、指定された制約と一致する記録のみがリストされます。表示される記録の数は、選択された制約数に依存します。選択された制約が多ければ、リストされる記録はほとんどなくなります。

### 全ライブラリレコードの表示

Explore > Library Search > List をクリックします。  
Librarian ダイアログが開き、データベース内のレコードがすべて表示されます。

### 制約のあるライブラリ記録の検索

1. Explore > Library Search > List With Constraints をクリックします。

図 13-16 : List Constraints ダイアログ

The screenshot shows the 'List Constraints' dialog box. It features a 'Conditions' section with three input fields: 'Field Name' (set to 'Formula'), 'Relation' (set to 'Contains'), and 'Value' (empty). To the right of these fields are buttons for 'Add', 'Modify', 'Remove', 'Group', 'Ungroup', and 'Or'. Below the conditions section are two tables: 'Elements Included' and 'Excluded'. The 'Elements Included' table has columns for 'Element', 'Min.', and 'Max.', with rows 1, 2, and 3. The 'Excluded' table has a column for 'Element' with rows 1, 2, and 3. At the bottom right of the dialog are buttons for 'Help', 'Cancel', and 'List'.

2. **Field Name** リストで、制約にしたいフィールドを選択します。
3. **Relation** リストで、フィールド名に適用する関係(オペレータ)を選択します。
4. **Value** フィールドに、関係に基づくフィールド名の値を入力します。

5. **Conditions** リストに選択した制約を追加するには、**Add** をクリックします。
6. 必要に応じて、**Conditions** リストに制約を追加し続けます。
7. **Conditions** リスト内の個別の制約を組み合わせることで、検索を効果的にする、より具体的な条件を設定することができます。
  - 制約をグループ化するには、制約を選択してから、**Group** をクリックします。
  - グループ化された制約を分離するには、該当するグループをクリックし、**Ungroup** をクリックします。
8. 制約間の関係を変更するには、関係をクリックしてから、**And** または **Or** をクリックします。
9. 特定の元素の一定の原子数を含む化合物を除外するには、**Elements Included** 表にある元素を選択または入力した後、その元素の最小および最大数を入力します。

---

注: 元素記号は大文字と小文字を区別します。例えば、水素は H であり、h ではありません。ナトリウムは Na であり、NA でも na でもありません。

---

10. ある元素を含む化合物を除外するには、**Excluded** 表に元素を選択および入力します。
11. 基準に適合する化合物を検索するには、**List** をクリックします。  
制約すべてと一致する記録は **Records** 表に示されます。リストにある制約は保存されます。

## ライブラリへの記録の追加

1. アクティブスペクトルを右クリックし、**Add a Record** をクリックします。  
スペクトルは、セントロイドされていない場合には、自動的にセントロイドされます。  
Add a Record ダイアログが開き、スペクトルのデータが表示されます。
2. **Mass Spectral Information** タブの **Compound Name** フィールドに名前を入力します。化合物名の入力は必須です。化合物を識別するため、ライブラリ内で固有の名前を付ける必要があります。
3. 他のフィールドを任意で編集します。これらのフィールドの多くは、スペクトルに関連したデータをもとに自動的に入力されます。
4. **General Information** タブで必要なフィールドの値を編集し、**OK** をクリックしてください。

## 類似したスペクトルの検索

ユーザーは有効なスペクトルと一致する(あるいは類似した)スペクトル(およびその関連化合物の情報)をライブラリから検索することができます。検索は制約の有無にかかわらず実行できます。検索が制約付きで行われる場合、基準すべてに一致する記録だけがリストされます。検索結果はランク分けされてリスト表示されます。最初にリストされるのは有効なスペクトルに最も適合するものです。リスト内のより低順位のエントリは適合性が低くなります。

選択される制約が多いほど、リストはより精度が高く、絞り込まれ、関連性の高いものがリスト表示されます。制約がひと通り定義されると、編集されることがなければ、後続の検索すべてに適用されます。

しきい値を超えるピークのみが検索に用いられます。制約付き検索を選択する場合、ピークを有効なスペクトルに追加または有効なスペクトルから削除することができます。例えば、ピークがバック

グラウンドまたはノイズスパイクと考えられる場合、結果が正しくなくなるおそれがあるため、検索には使用されません。

制約なしの検索を実行する場合、対象のスペクトルデータに具体的に一致させるものが少なくすむため、ライブラリからの推奨スペクトルは大量にリストされます。

### 類似したスペクトルの検索

1. アクティブスペクトルを右クリックし、**Search With Constraints** をクリックします。  
必要な場合、スペクトルは自動的にセントロイドされます。

図 13-17 : Search Constraints ダイアログ

2. **Maximum Number of Match** フィールドに、検索結果として表示する化合物の最大数を入力します。
3. **Preselect Constraints** セクションで、適用したい制約のチェックボックスを選択します。
4. 選択した制約ごとに、**Preset Tolerance** セクションで許容値を入力します。
5. 必要に応じて、**Result Sorted by** リストで記録のソートメソッドを選択します。
6. 必要に応じて、**Comment Contains** フィールドにテキストを入力します。

7. 必要に応じて、**Keyword Contains** フィールドにテキストを入力します。
8. ピークの追加/削除によってピーク制約を適用するには、**Peak Constraints** をクリックします。**Peaks Included** 表が開きます。
9. 検索対象としたいピークをリストに追加するには、**Add** をクリックし、空のセルに *m/z* と該当する強度を入力します。
10. 検索に含まれないようピークを削除するには、検索の対象外になるようにピークを選択して **Remove** をクリックします。
11. **Search** をクリックして制約を保存し、検索を開始します。

## Search Results への化合物の表示

複数のスペクトルが未知のスペクトルと一致した場合、その他のスペクトルを表示し、未知のスペクトルと比較することもできます。

1. Search Results ダイアログの化合物リストで、表示したい化合物の行番号を選択します。
2. 既知の化合物のいずれかのスペクトルペインをクリックします。  
選択した化合物のスペクトルが開きます。

## ライブラリ検索に関するヒント

実行する作業	実行する操作
ライブラリ検索: 条件のグループ化の方法	グループ化条件を選択し、 <b>Group</b> をクリックします。この機能は、数式の括弧のように機能します。
ライブラリ検索: 制約を使用しない検索方法	アクティブスペクトルを右クリックし、 <b>Search Library</b> をクリックします。Search Results ダイアログが開きます。
テーブル特有クエリ: テーブル全体を再表示するには	Results Table の任意の場所を右クリックして、 <b>Query &gt; Show All</b> をクリックします。これでクエリを再適用または編集できます。  結果表データの分析に用いられたクエリはすべて検証することを推奨します。
ピーク積分: ピークのレビュー方法	すべてのピークをレビューするには、すべてのサンプルが Results Table にリストされていることを確認します。  Peak Review ウィンドウには、結果表にリストされているピークしか表示されません。一部のサンプルが表に表示されない状態 (クエリが適用されている場合など) では、これらはピークレビューでも非表示となります。  結果表データの分析に用いられたクエリはすべて検証することを推奨します。
ピーク積分: バッチ内の最初のピークの移動方法	Peak Review ペインの任意の場所を右クリックし、 <b>Show First Page</b> をクリックします。バッチ内の最後のピークに移動するには、Peak Review ペインのいずれかの場所を右クリックし、 <b>Show Last Page</b> をクリックします。



実行する作業	実行する操作
キャリブレーションカーブを調べる方法	カーブのいずれかの場所を右クリックし、 <b>Active Plot</b> をクリックして、最上部にプロットしたいカーブを選択します。
サンプルの統計レビュー: 個々のピークのレビュー方法	<b>Display the Data Set(s)</b> チェックボックスをオンにして、 <b>Data Point</b> カラムで、ピークを表すデータポイントをダブルクリックします。選択されたピークの Peak Review ウィンドウが開きます。
Results Table: Results Table を元の順序に戻すには	Results Table を右クリックして、 <b>Sort &gt; Sort By Index</b> をクリックします。
測定メソッド: file information ペインから測定メソッドを作成する方法	File information ペインを右クリックし、 <b>Save Acquisition Method</b> をクリックします。

# 使用説明—定量データの分析および処理

# 14

本項では、Analyst MD ソフトウェアを用いて、定量データを分析および処理する方法を説明します。MultiQuant MD ソフトウェアを使用してデータを処理することもできます。MultiQuant MD ソフトウェアを使用してデータを定量化することをお勧めします。MultiQuant MD ソフトウェアに付属のドキュメントを参照してください。

**Example** フォルダにあるサンプルファイルを使用して、定量サンプルの選択法、事前に設定されたクエリの選択および表特定のクエリの作成法、取得データの分析法を学んでください。以下のトピックに関する詳細は、*上級ユーザーガイド*を参照してください。

Results Table のデータの分析に用いたクエリはすべて検証することを推奨します。

- メトリックプロット
- Results Table のレイアウト

## 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。

## 定量化メソッド

定量化メソッドとは、サンプル内でピークを生成するために使用する一連のパラメータのことです。定量化メソッドにはピークの位置設定および統合、標準カーブの生成、未知濃度の計算などを行うパラメータが含まれています。以前に保存された定量化メソッドは、バッチの **Quantitation** メニューから選択できます。

定量化メソッドの作成には Quantitation ウィザード、Build Quantitation Method、Quick Quant の 3 つのツールが使用できます。

## Build Quantitation Method

Build Quantitation Method は、定量の結果表を生成しませんが、そのメソッドは次に定量化ウィザードで使用して、結果表を作成することができます。Build Quantitation Method は、既存の定量化メソッドの変更にも使用できます。これは、定量化メソッドを作成する最も柔軟な方法といえます。[定量化メソッドエディタを使用したメソッドの作成](#)を参照してください。

## 定量化ウィザード

定量化ウィザードを用いると、結果表が定量化メソッドと同時に生成されます。代わりに、既存の定量化メソッドが異なるデータセットの定量化に使用されます。

## Quick Quant

Quick Quant を結果の定量に用いることはお勧めしません。

Quick Quant は、Batch Editor の一部です。Quick Quant を使用して、データ取得前に化合物濃度を追加します。サンプルを取得していないので、それぞれのサンプルの選択、およびピークのレビューはできません。この機能では、メソッドのコンポーネントのみを定義します。

Quick Quant 機能を使用してサンプル種類および濃度をデータファイルに保存する場合、自動的に生成された Quick Quant メソッドを使って定量化を実施しないでください。この定量化メソッドは、ピークの選択用に最適化されている化合物およびサンプル固有積分パラメータを使用しません。

以前に保存された定量化メソッドを使用するには、バッチの **Quantitation** メニューから選択します。バッチ作成の手順については、[バッチの作成および提出](#)を参照してください。

## 定量化メソッドと結果表

次の手順を行うにあたっては、Example/Triple Quad フォルダにインストールされたサンプルデータを使用してください。フォルダには、データファイル、Mix\_Batch\_1 および Mix\_Batch\_2 が含まれます。これらのサンプルファイルは、問題のあるサンプルを分離するメトリックプロットの有益性を示すために用いられます。スキャン対象のイオンはレセルピン (609.3/195.0)、ミノキシジル (210.2/164.2)、トルブタミド (271.1/91.1)、また内部標準でもあるレシンナミン (635.3/221.2) です。Mix\_Batch\_1 にはエラーはありませんが、Mix\_Batch\_2 には内部標準物質を 2 回添加した QC サンプル (サンプル QC2) が含まれています。

## 定量化メソッドエディタを使用したメソッドの作成

注: 結果表のデータの分析に用いたクエリはすべて検証することを推奨します。

### 前提条件

- 定量対象のデータを含むプロジェクトまたはサブプロジェクトを選択します。[プロジェクトとサブプロジェクトの切り替え](#)

- Example プロジェクトが選択されていることを確認します。

- Navigation バーの **Quantitate** の下にある **Build Quantitation Method** をダブルクリックします。  
Select Sample ダイアログが開きます。
- Data Files** リストの **Triple Quad** フォルダをダブルクリックします。
- Mix\_Batch\_2. wiff** を選択します。  
選択したデータファイル内のサンプルは、**Samples** リストに表示されます。

---

**注:** 測定メソッドのサンプルと内部標準で **Compound ID** フィールドを入力した場合、**Q1/Q3** フィールドで値を選択すると、Internal Standards 表の **Name** フィールドが自動的に入力されます。


---

- バッチ全体に合う積分パラメータを選択するための検出可能なシグナルを出すサンプルを選択してから、**OK** をクリックします。
- Internal Standards 表の **Name** カラムで、**rescinamine** を選択します。**Q1/Q3** カラムで **635.3/221.2** を選択します。
- Analytes 表で、次の操作を行います。
  - Name** カラムで、**210.2/164.188** の **Q1/Q3** カラム質量には **minoxidol** を、**271.3/91.146** には **tolbutamide** を、**609.4/195.039** には **reserpine** を選択します。
  - Internal Standard** カラムで、リストから各分析試料に関連付ける内部標準として **rescinamine** を選択します。
  - Analytes 表の **Q1/Q3** カラムから、**635.4/221.185** を削除します。

---

**注:** 測定メソッドのサンプルと内部標準で **Compound ID** フィールドに入力した場合には、Analytes 表の **Name** フィールドと **Q1/Q3** フィールドが入力されます。

---

- Integration タブを開きます。  
プリセット積分パラメータはほとんどのピークに適しています。
- 積分が適しない場合には、アルゴリズムを変更してください。 **手動でピークを積分** を参照してください。
- 追加の積分アルゴリズムを表示するには、**Show or Hide Parameters** () をクリックします。
- Calibration タブを開きます。  
プリセットパラメータはこれらのサンプルに適しています。ユーザーはアプリケーションごとに、フィッティング、重み付け、および特回帰パラメータを変更することができます。
- 定量化メソッドを保存します。  
Batch Editor でバッチが作成されたとき、または Quantitation Wizard が Results Table の作成に使用された時に新しいメソッドが使用されます。

---

**ヒント!** 定量化メソッドは、他のプロジェクトにコピーしない限り、現在のプロジェクトにのみ使用できます。そのためには、**Tools > Project > Copy Data** をクリックします。これを使用するためには、新規プロジェクトを作成および選択する必要があります。

---

## 定量化ウィザードを用いて結果表を作成

注: 結果表のデータの分析に用いたクエリはすべて検証することを推奨します。

### 前提条件

- 定量対象のデータを含むプロジェクトまたはサブプロジェクトを選択します。[プロジェクトとサブプロジェクトの切り替え](#)

1. Navigation バーの **Quantitate** の下にある **Quantitation Wizard** をダブルクリックします。  
Create Quantitation Set - Select Samples ページが開きます。
2. **Available Data Files** リストで **Triple Quad** フォルダをダブルクリックします。
3. **Mix\_batch\_2. wiff** を選択します。
4. **Add All** をクリックします。

注: 測定時に異常が生じたり、予期せずに中断したサンプルの結果については、処理やレポートの作成を行わないことを推奨します。

5. **Next** をクリックします。  
Create Quantitation Set - Select Settings & Query ページが開きます。
6. **Default Query** セクションの **Select Existing: Query** をクリックします。
7. **Query** リストから **Accuracy 15%** を選択します。

注: 同時にクエリを作成するには、[標準クエリの作成\(オプション\)](#)を参照してください。

注: 特定のアプリケーションに使用するクエリの評価と検証は、ユーザーの責任において行ってください。

8. **Next** をクリックします。  
Create Quantitation Set - Select Method ページが開きます。
9. **Choose Existing Method** をクリックします。
10. **Method** リストから **PK Data\_Mix.qmf** を選択します。
11. **Finish** をクリックします。  
Results Table が開きます。

ヒント! Results Table にサンプルを追加する、またはサンプルを削除するには、**Tools > Results Table > Add/Remove Samples.** をクリックします。

12. サンプル種類、実際の濃度、ピーク積分、キャリブレーションカーブ、統計ペイン、内部標準のためのメトリックプロット、およびその他のデータ定量と関係する情報をレビューします。
13. 結果表を保存します。

**注:** 結果表にデータファイル(wiff)からのサンプルが含まれる場合は、データファイルの名前を変更しないことを推奨します。

**ヒント!** Reporter ソフトウェアを用いると、結果表から正確にフォーマットされたレポートが作成されます。Reporter のテンプレートにクエリが使用されている場合は、結果を検証することを推奨します。[Reporter ソフトウェア](#)を参照してください。

### 標準クエリの作成(オプション)

アドバンスドユーザーはクエリおよび標準クエリをさまざまな方法で作成することができます。以下に一例を示します。クエリ作成の詳細な情報については、ヘルプを参照してください。

**Results Table** のデータ分析に使用するクエリはすべて検証することを推奨します。

1. Navigation バーの **Quantitate** の下にある **Quantitation Wizard** をダブルクリックします。Create Quantitation Set - Select Samples ページが開きます。
2. 定量セットの一部として使用するサンプルを選択します。
3. **Next** をクリックします。Select Settings & Query ページが開きます。
4. **Default Query** セクションで、**Create New Standard Query** を選択します。
5. クエリ名を入力します。

図 14-1 : Create Quantitation Set — Select Settings & Query ページ

Create Quantitation Set - Select Settings & Query

Please select the settings for the new results table and the default query (if any). Integration Algorithm: IntelliQuan

Settings to Use: Default

Default Query

None

Select Existing:

Query: Accuracy 15%  Execute Query as Standard Query

Create New Standard Query

Name:

< Back Next > Finish Cancel Help

6. **Next** をクリックします。

図 14-2 : Create Quantitation Set — Create Default Query ページ

Please specify the concentrations/sample names and the corresponding allowed accuracy variations (in percent). You can leave any of the "variation" fields empty as desired.

Maximum Allowed Accuracy Variation for QCs (%)

Concentration	Max. Variation
4.000000	
40.000000	
400.000000	
4000.000000	
12000.000000	

Maximum Allowed Accuracy Variation for Standards (%)

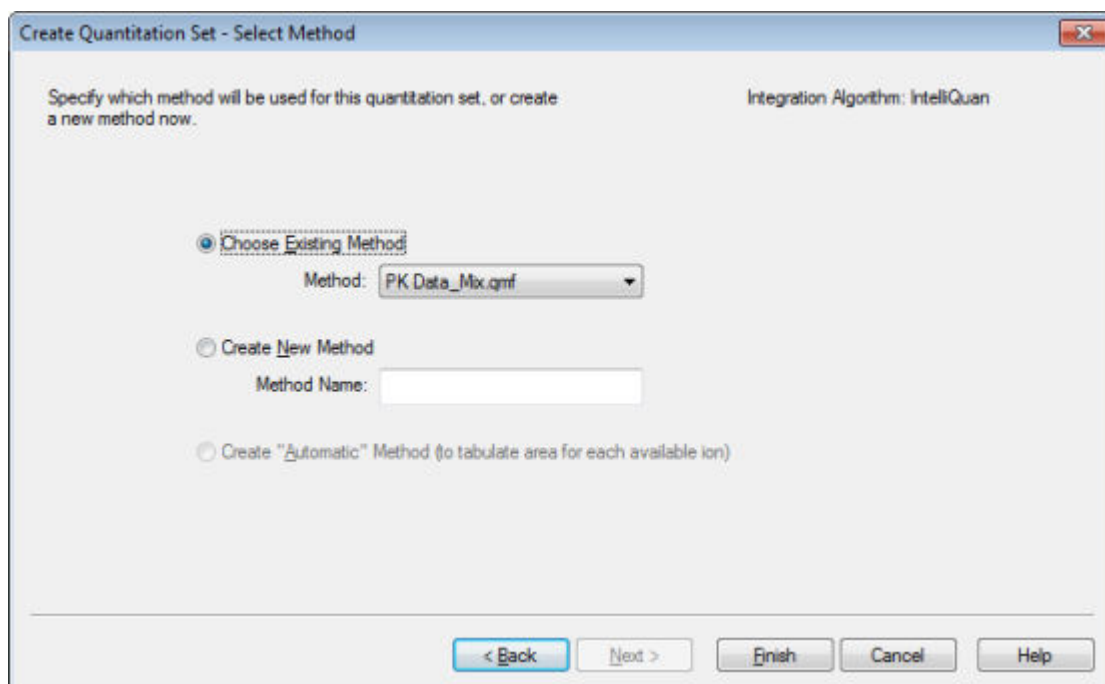
Concentration	Max. Variation
0.120000	
0.240000	
0.490000	
0.980000	
1.950000	
3.910000	
7.810000	
15.630000	
31.250000	
62.500000	
125.000000	

Query By Name

< Back   Next >   Finish   Cancel   Help

7. **Maximum Allowed Accuracy Variation for QCs (%)** 表の **Max. Variation** カラムで、対応する濃度と同じ行に、各 QC の最大許容精度変動率(例:5 は± 5%)を入力します。測定時に濃度を指定しなかった場合は、表示されません。その場合は、**Concentration** カラムに入力します。
8. **Maximum Allowed Accuracy Variation for Standards (%)** 表の **Max. Variation** カラムで、対応する濃度と同じ行に、各標準溶液に対する最大許容変動率(例:10 は± 10%)を入力します。測定時に濃度を指定しなかった場合は、表示されません。**Concentration** カラムに濃度を入力します。
9. **Next** をクリックします。

図 14-3 : Create Quantitation Set — Select Method ページ



10. メソッドを選択または作成します。

11. **Finish** をクリックします。

クエリは標準クエリとして適用されます。クエリの結果は、Pass または Fail のエントリとして結果表の **Standard Query Status** カラムに表示されます。

**ヒント!** 全体表示に戻るには、右クリックして **Full** をクリックします。

## Results Table のレイアウトの指定

結果表には既定ビューが用意されています。

結果表を右クリックし、次のいずれかをクリックします。

- フルレイアウトを表示するには、**Full** をクリックします。  
すべての分析試料が表示されます。
- 概要レイアウトを表示するには **Summary** をクリックし、フィールド名をクリックします。
- 分析試料レイアウトを表示するには **Analyte** をクリックし、(複数の分析試料が存在する場合は)対象の分析試料をクリックします。
- 分析試料グループレイアウトを表示するには **Analyte Group** をクリックし、対象の分析試料をクリックします。

**ヒント!** 新しい分析試料グループは最初に作成する必要があります。これを行うには結果表を右クリックし、**Analyte Group > New** をクリックします。



ヒント! 全体表示に戻るには、右クリックして **Full** をクリックします。

---

表が選択したレイアウトで表示されます。

## 結果表のデータのソート

結果表のデータは次の方法でソートすることができます。

- いずれかの Sort ボタンを使用して、カラム 1~3 にもとづいて表をすばやくソート:このソート基準は保存できません。
- 表に特有のソート基準を作成し、その時点の表のソート基準を保存:表特有のソート基準を用いることで、その時点の表をカラム 1~3 に基づいてソートし、その表に再び使用できるよう基準を保存できます。
- 以前に作成したプリセットのソート基準を使用:ソート基準を作成および保存し、後で結果表に適用することができます。

---

ヒント! ソート基準または他の表設定を保存するには、表を右クリックして、**Table Settings > Export To New Table Settings** をクリックします。これらのソート基準や他のパラメータは、その時点のプロジェクトで使用できます。表設定を別のプロジェクトで使用するには、対象のプロジェクトにコピーします。**Tools > Project > Copy Data** をクリックします。これを使用するためには、新規プロジェクトが作成および選択されている必要があります。

---

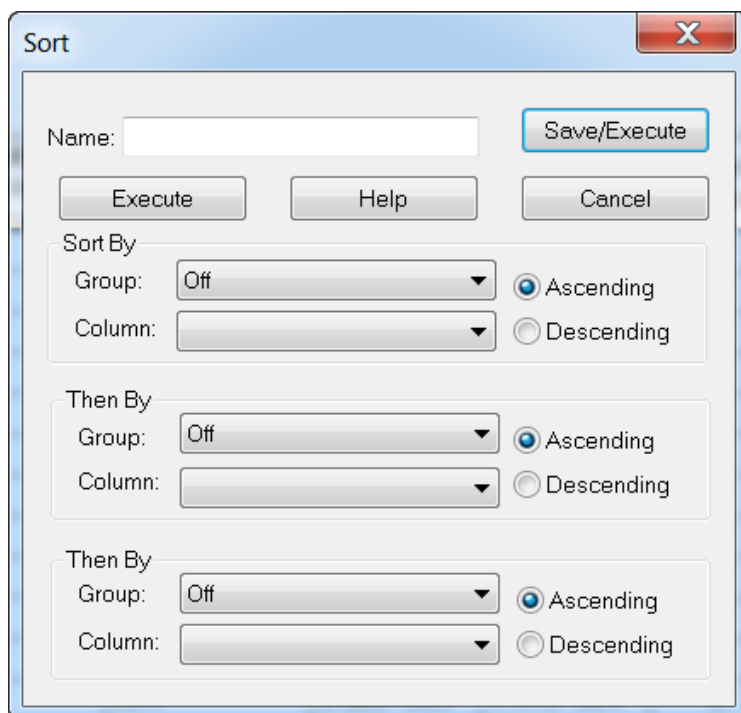
## 結果表のソート

1. ソートする順に結果表のカラムから 3 つまで選択します。
2. 次のいずれかの操作を行います。
  - 昇順にソートするには **A-Z** をクリックします。
  - 降順にソートするには **Z-A** をクリックします。

## 結果表のソートおよびソート基準の保存

1. 結果表を右クリックしてから、**Sort > New** をクリックします。

図 14-4 : Sort ダイアログ

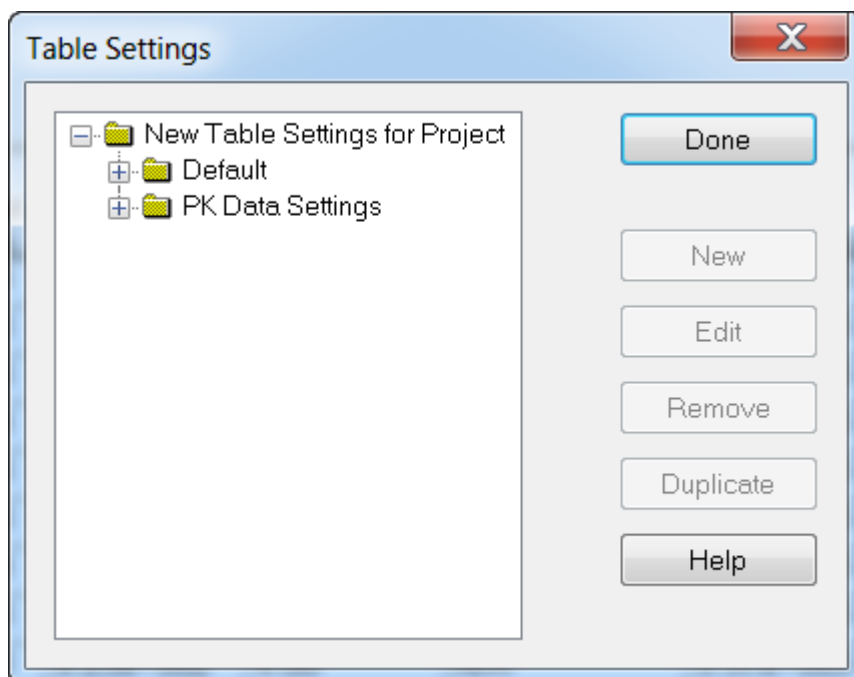


2. **Name** フィールドに、新しいソートの名前を入力します。
3. ソートルールごとに、**Sort By** と **Then By** セクションで次の操作を行います。
  - **Group** リストで、ソートの基準とするカラムの種類を選択します。
  - **Column** リストで、ソートの基準とするカラムを選択します。
  - ソート順 (**Ascending** または **Descending**) を選択します。
4. 次のいずれかの操作を行います。
  - ソートを実行するには、ソート基準を保存し、**Sort** ダイアログを閉じて、**Save/Execute** をクリックします。
  - ソート基準を保存せずに、**Sort** ダイアログを閉じソートを実行するには、**Execute** をクリックします。

### 今後の結果表用のデフォルトのソート基準の保存

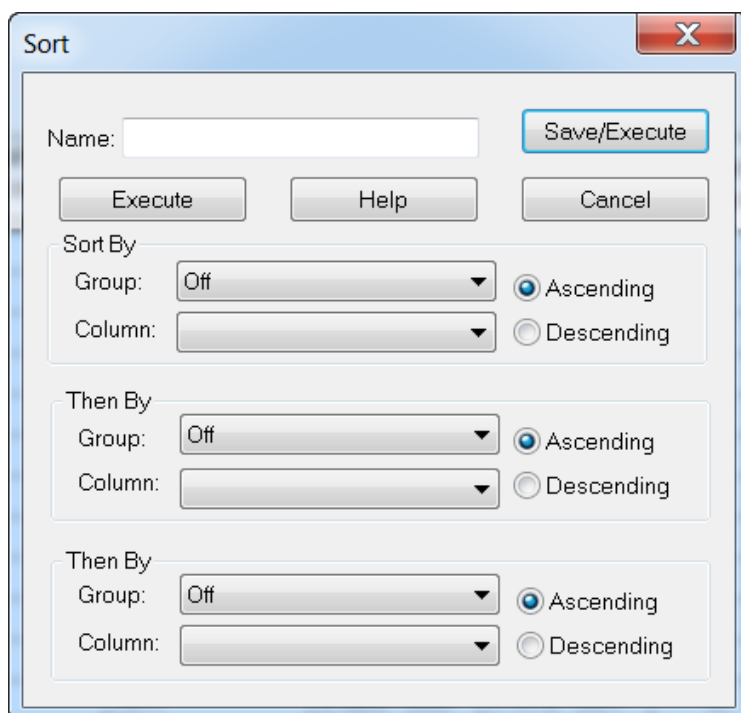
1. **Tools > Settings > New Quantitation Results Table Settings** をクリックします。

図 14-5 : Table Settings ダイアログ



2. **Table Settings** フォルダを展開した後、**Default** フォルダをダブルクリックします。
3. 展開された **Default** フォルダから、**Sorts** フォルダを選択した後、**New** をクリックします。

図 14-6 : Sort ダイアログ



4. **Name** フィールドに、新しいソートの名前を入力します。
5. ソートルールごとに、**Sort By** と **Then By** セクションで次の操作を行います。
  - **Group** リストで、ソートの基準とするカラムの種類を選択します。
  - **Column** リストで、ソートの基準とするカラムを選択します。
  - ソート順 (**Ascending** または **Descending**) を選択します。
6. 基準を保存し、**Sort** ダイアログを閉じるには、**OK** をクリックします。
7. **Table Settings** ダイアログを閉じるには、**Done** をクリックします。

### 事前設定の基準を用いた結果表のソート

- 結果表を右クリックし、**Sort** をクリックしてから、ソートの名称を選択します。

## ピークレビューとピークの手動積分

ピークレビューを使用し、ソフトウェアが見極めたピークを分析し、その後、必要に応じて、ピークまたは開始点および終了点を再定義します。

分析試料およびソフトウェアで見つけなければならない内部標準を確認した後、ソフトウェアはサンプル内のピークを検索します。ソフトウェアがピークを確認すると、各分析試料と内部標準のクロマトグラムが Standard Wizard ページの Create Quantitation Method: Define Integration または Full Method Editor の Integration タブに表示されます。ユーザーは、発見されたピークを確認し、ピークをよりうまく定義するために定量化メソッドを変更できます。ユーザーが手動ですべての解析結果を閲覧することを推奨します。

Peak Review の右クリックメニューの使い方については、[ピークレビュー](#)を参照してください。

### ピークのレビュー

ピークレビューでは、ピークの全体像の閲覧およびベースラインの検証を行い、ソフトウェアがピークの開始・終了点を正確に捉えているかを判定します。自動ズーム機能もお使いいただけます。

ソフトウェアがピークを発見しやすいように、ピークの正確な開始点と終了点、およびバックグラウンドを手動で定義してください。これらの変更はグローバルメソッドが更新されない限り、個々のピークに対してのみ適用されます。

---

**注:** 手動解析結果を検証することを推奨します。

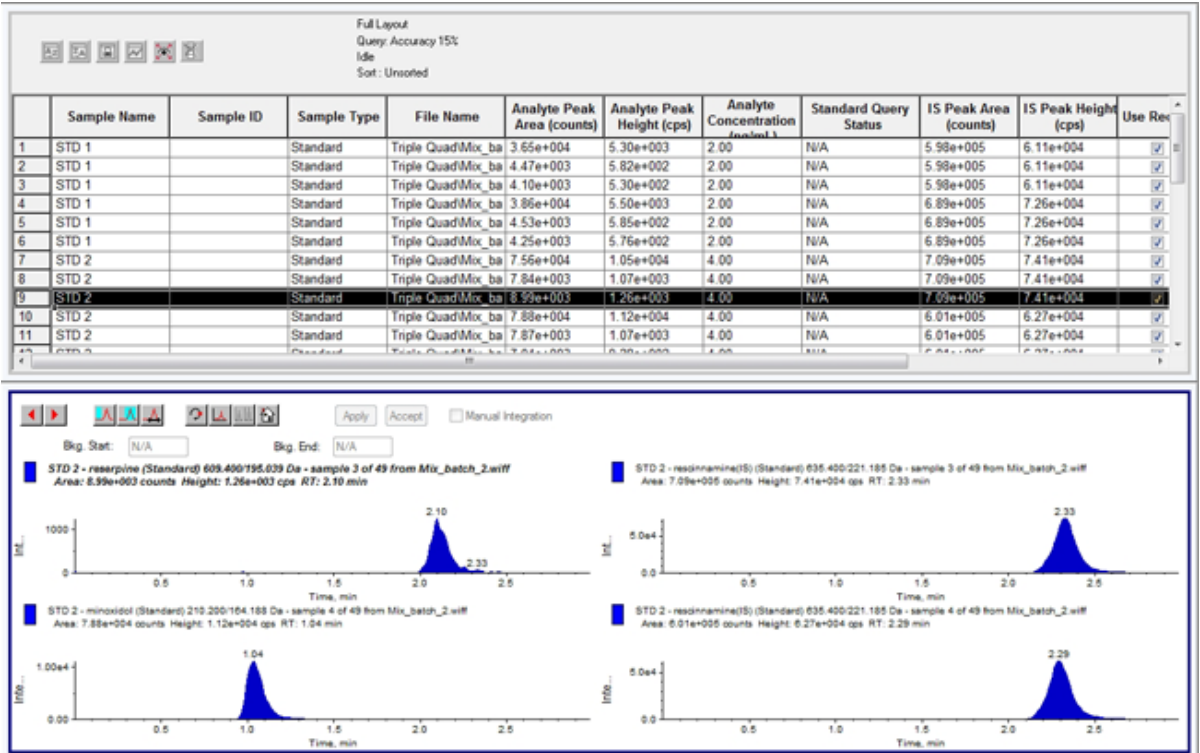
---

**ヒント!** 個々のピークをレビューするには、カーブ地点を右クリックし、**Show Peak** をクリックします。ソフトウェアが選択されたピークの Peak Review ウィンドウを開きます。

---

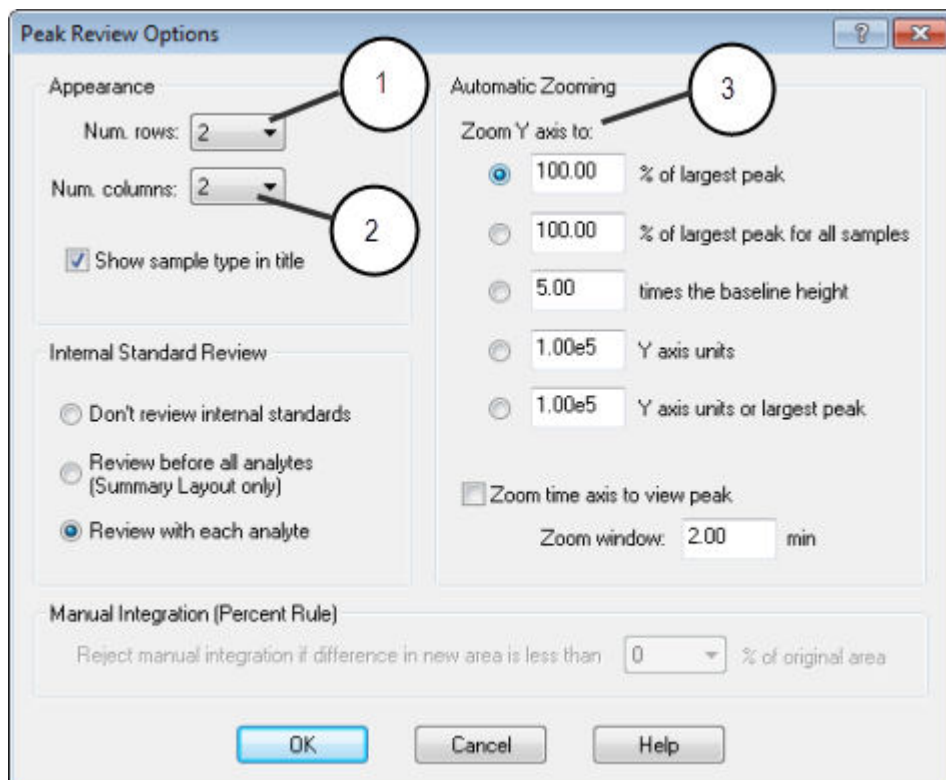
1. 結果表の場所を右クリックして、**Analyte** をクリックします。
2. 分析試料を選択します。
3. **Tools > Peak Review > Pane.** をクリックします。  
ピークは結果表の下部に表示されます。Results Table に記載のあるピークのみが対象となります。

図 14-7 : ピークレビュー



4. ペインを右クリックし、**Options** をクリックします。  
Peak Review Options ダイアログが開きます。
5. **Appearance** セクションで、**Num. rows** を 1 に、**Num. columns** を 2 に変更します。
6. **Automatic Zooming** セクションで、**Zoom Y axis to: 100% of largest peak** をクリックしてピーク全体を表示します。

図 14-8 : Peak Review Options ダイアログ

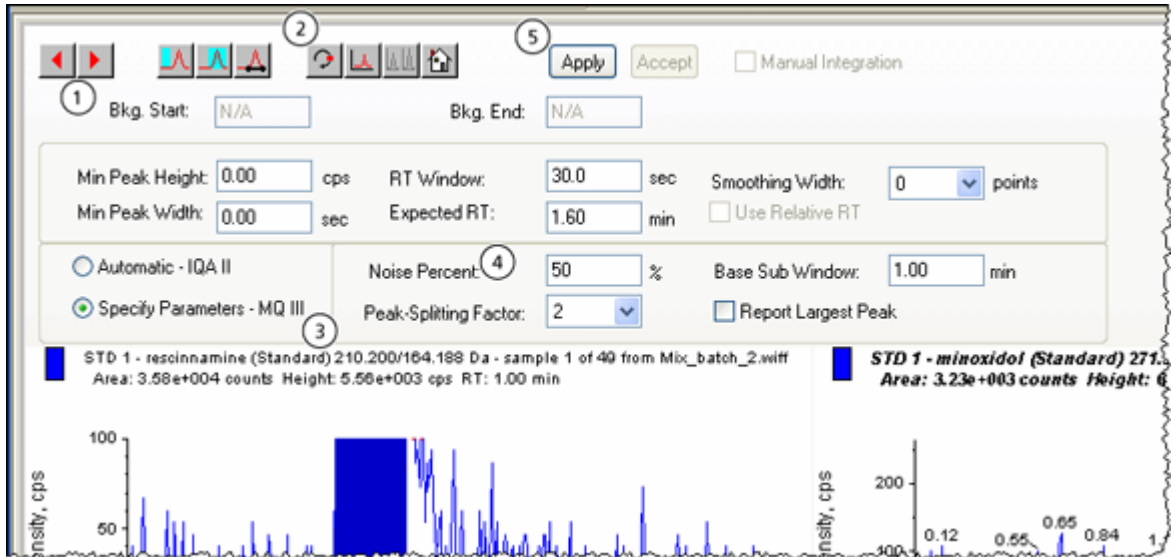


項目	定義
1	行数
2	カラム(列)数
3	ピーク全体を表示するには、 <b>Zoom Y-axis to 100% of largest peak</b>

7. **OK** をクリックします。
8. ピークを移動させるには、右矢印をクリックしてください。図 14-9 を参照してください。
9. 標準溶液 3 の第 2 注入を開始してください。  
この例では **Specify Parameters** オプションを選択することで、ピークがベースラインにより近い位置に統合されます。

**ヒント!** Peak Review ペインで特定のピークに移動するには、Results Table の対応する行を選択してください。

図 14-9 : Peak Review ペイン



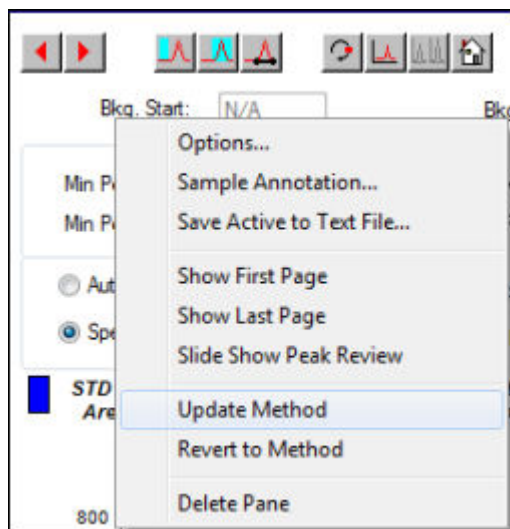
項目	定義
1	矢印: クリックしてピークを移動
2	<b>Show or Hide Parameters</b> : クリックして積分パラメータを表示
3	積分パラメータ: クリックしてパラメータを変更
4	<b>Noise Percentage</b> : ノイズパーセンテージを入力
5	<b>Apply</b> : クリックしてパラメータを積分

10. **Show or Hide Parameters** を 2 回クリックします。
11. **Specify Parameters - MQ III** をクリックします。
12. **Noise Percent** の値を変更します。
13. **Apply** をクリックします。  
ピークがベースラインにより近い位置に統合されます。
14. この変更を行ってもピーク解析が改善されない場合は、**Noise Percent** パラメータを最適値に調整してください。

**注: Update Method** オプションは特定の分析試料(または内部標準)に対するアルゴリズム値のみを更新するもので、すべての分析試料には適用されません。

15. すべてのピークに対してアルゴリズムを更新する場合は、ペインを右クリックして **Update Method** をクリックしてください。

図 14-10 : Update Method



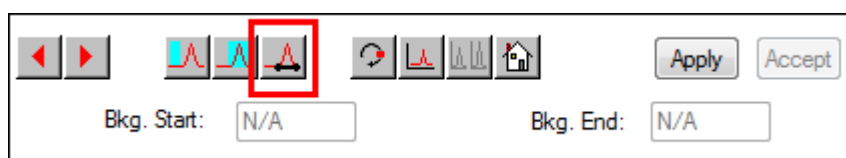
## 手動でピークを積分

手動によるピーク積分は、個人間のばらつきを抑えるために、最後に行ってください。手動ピーク積分は、アルゴリズムパラメータの調整および更新が完了した後にすべてのピークが発見できなかった場合にのみ行います。特定のアプリケーションで手動積分が許容されるかどうかを判断するために、ユーザーが結果を検証することを推奨します。

**注:** 手動で解析されたピーク、またはアルゴリズムがそのピークのために変更された箇所は、結果表の **Record Modified** カラムで識別することができます。分析試料グループ全体に適用されないサンプルに対して、アルゴリズムのパラメータ変更が行われたピークも同様です。

1. **Peak Review** ペインの **Manual Integration Mode** をクリックします。

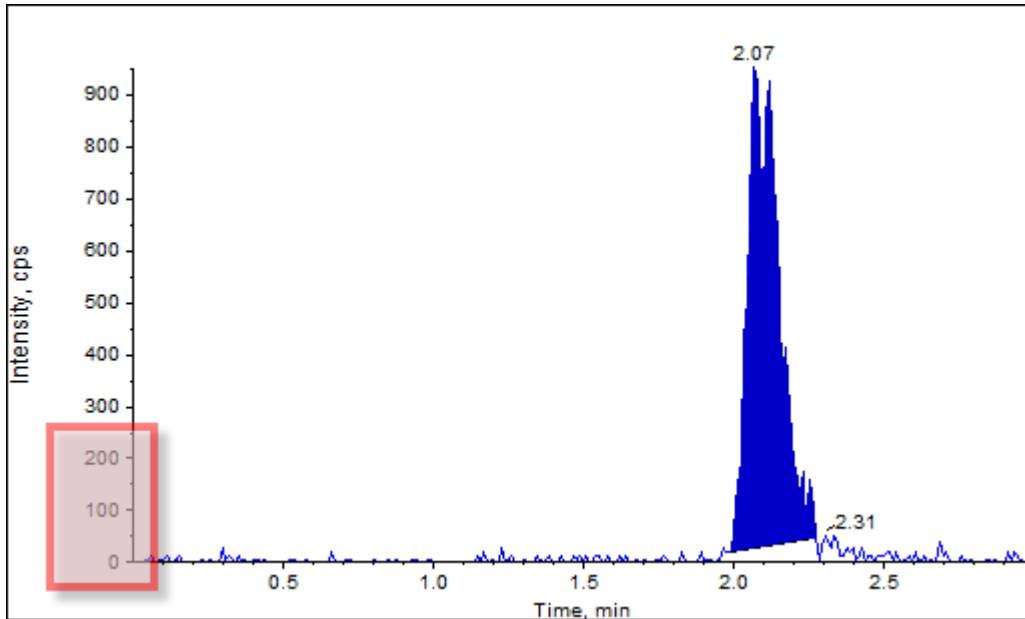
図 14-11 : ピークレビューペイン:手動背積分モード



2. ピークより 10% 低い値部分をズームインします。



図 14-12 : ピークレビューペイン: ピークへの照準設定



3. 照準線をピークの開始点に合わせ、その後ピークの終了点にドラッグします。ソフトウェアが、ピークの基準点と側面により決定されたエリアに陰をつけます。ピークパラメータが灰色なのは、適用されなくなったためです。これは、ピークが手動で描かれたためです。
4. 次のいずれかの操作を行います。
  - この変更を恒久的にするには、**Accept** をクリックします。
  - 変更を破棄するには、**Manual Integration** チェックボックスをクリアします。

**ヒント!** ピークが正しく選択されていた場合は、ピークを右クリックし、**Revert to Method** をクリックします。

## 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、品質管理(QC)サンプルなど、サンプルの算出濃度を求めるために使用します。品質管理サンプルはバッチ内標準溶液のデータ品質と精度を測るため、バッチに追加されます。品質管理サンプルは検証済の分析試料濃度を保持していますが、測定濃度と実際の値を比較するため、未知物質として扱われます。

キャリブレーションカーブは、標準溶液の濃度をその領域および高さを基準にプロットすることで生成されます。内部標準を使用している場合は、標準溶液濃度または内部標準の割合を、内部標準のピーク高または領域に対する標準溶液のピーク高または領域の割合を基準にプロットします。サンプルの領域および高さの割合はカーブに適用され、求められたサンプル濃度が結果表に表示されます。指定された回帰に応じて、このキャリブレーションカーブから回帰方程式が生成されます。回帰方程式は未知サンプルの濃度を計算するために使用されます。

キャリブレーションカーブには線形回帰が推奨されます。

キャリブレーションカーブがカバーする濃度範囲外となった定量値について、ユーザーは報告する必要はありません。

Calibration Curve の右クリックメニューの使い方については、[キャリブレーションカーブ](#)を参照してください。

### キャリブレーションカーブの表示

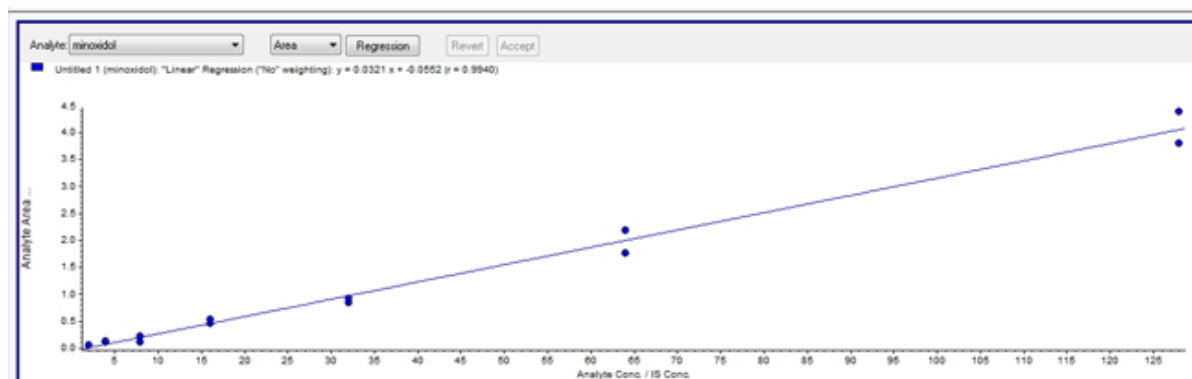
ユーザーはキャリブレーションカーブを表示し、開いている結果表で回帰オプションを変更することができます。2 つ以上の結果表が開いている場合、キャリブレーションカーブは重ねて表示されます。重ねて表示されたキャリブレーションカーブについては、表作成メソッドが同じであることを確認してください。

キャリブレーションカーブをプロットして回帰に使用された曲線を閲覧します。Results Table 内の **Calculated Concentration** カラムは、曲線を標準点に合わせた結果の変更を反映しています。

**注:** Results Table が開いているときにのみオプションが選択可能です。

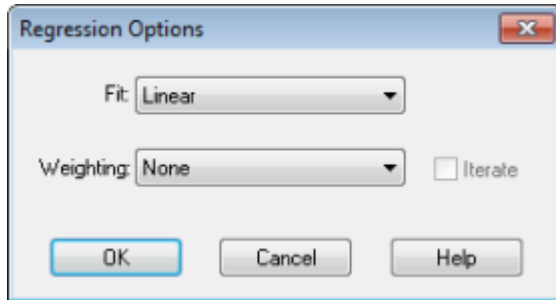
1. Results Table を開きます。
2. **Tools > Calibration > Pane.** をクリックします。  
キャリブレーションカーブを含む Calibration Curve ペインが開きます。

図 14-13 : キャリブレーションカーブ



3. 複数の分析試料がある場合は、次のステップを用いて他の分析試料のキャリブレーションカーブを表示します。
  - a. **Analyte** リストから分析試料を選択します。
  - b. 必要に応じて次のリストから **Area** あるいは **Height** を選択します。
4. キャリブレーションカーブの回帰オプションを変更するには、次の操作を行います。
  - a. **Regression** をクリックします。

図 14-14 : 回帰オプションダイアログ



- b. **Fit** リストから **Linear** を選択します。
- c. **Weighting** リストから **1 / x** を選択します。
- d. **OK** をクリックします。

キャリブレーションカーブが開きます。ユーザーは曲線上にそれぞれのピークを表示したり、曲線から点を削除することでより良い曲線が作成できます。

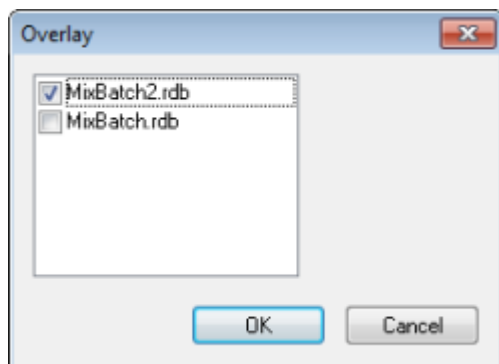
5. 必要に応じてこれらのステップを繰り返してより適切な曲線を作成します。
6. 変更を保存するには、**Accept** をクリックします。

## キャリブレーションカーブのオーバーレイ

**ヒント!** 1 つの表に対するカーブをより詳細に調べるには、カーブを右クリックして **Active Plot** をクリックします。上部にプロットするカーブを選択します。

1. Results Tables が 2 つ以上開いている場合は、いずれか 1 つの表に対するキャリブレーションカーブを表示します。
2. キャリブレーションカーブを右クリックし、**Overlay** をクリックします。

図 14-15 : Overlay ダイアログ



3. 現在のキャリブレーションカーブに重ねて表示する表を選択します。
4. **OK** をクリックします。  
ソフトウェアは、同じグラフ上に表のカーブをプロットします。

## サンプル統計

Statistics ウィンドウを使用して、内部標準および品質管理(QC)など、サンプルの統計を閲覧します。Results Table 内の各利用可能バッチからのデータが、グリッドとデータ列の表形式で開き、各標準用または QC 濃度用に表示されます。

バッチ統計をレポートに含め、結果の妥当性を確認することを推奨します。

## 標準溶液および QC に対する統計の表示

複数の Results Table が表示されている場合、追加のバッチの標準と QC に関する統計情報を Statistics ウィンドウに表示できます。これにより、標準または QC 内のバッチと傾向の特定間の結果の比較が容易になります。

1. Results Table を開きます。
2. **Tools > Statistics.**をクリックします
3. **Statistics Metric** リストから **Concentration** を選択します。
4. **Analyte Name** フィールドから分析試料を選択します。
5. **Sample Type** フィールドの **Standard** を選択します。  
結果が表示されます。
6. **%CV** カラムと **Accuracy** カラムを調べます。  
**%CV** は、単一パラメータ間の変動係数(例:領域)を示します。**Accuracy** は、プロットした点が補間値にどれくらい近いを示します。
7. 必要に応じて、**Display Low/High values** チェックボックスを選択し、グリッドの各行の **Low**、**High** 値、および **Mean** を調べます。それぞれの行は、濃度レベルが同じ標準物質を表しています。
8. 他の分析試料を選択します。  
結果は基本として分析試料ごとに表示されます。
9. 同じ濃度レベルの品質管理(QC)変動をチェックするには、**Sample Type** フィールドの **QC** を選択します。

## メトリックプロット

メトリックプロットとは、1つの結果表カラムに含まれるデータを X 軸または Y 軸にプロットしたグラフ、あるいは2つのカラムに含まれるデータを互いにプロットしたグラフを指します。このセクションではメトリックプロットを生成して使用方法について説明します。

既定のメトリックプロットもいくつか用意されています。

- Int\_Std\_Response(問題のサンプルの場所を特定)
- Analyte\_Area versus Height(クロマトグラフィーの動作を検証)
- PK プロファイル(「濃度」対「時間」のプロット、サンプルクエリ後に実行)

## メトリックプロットの生成

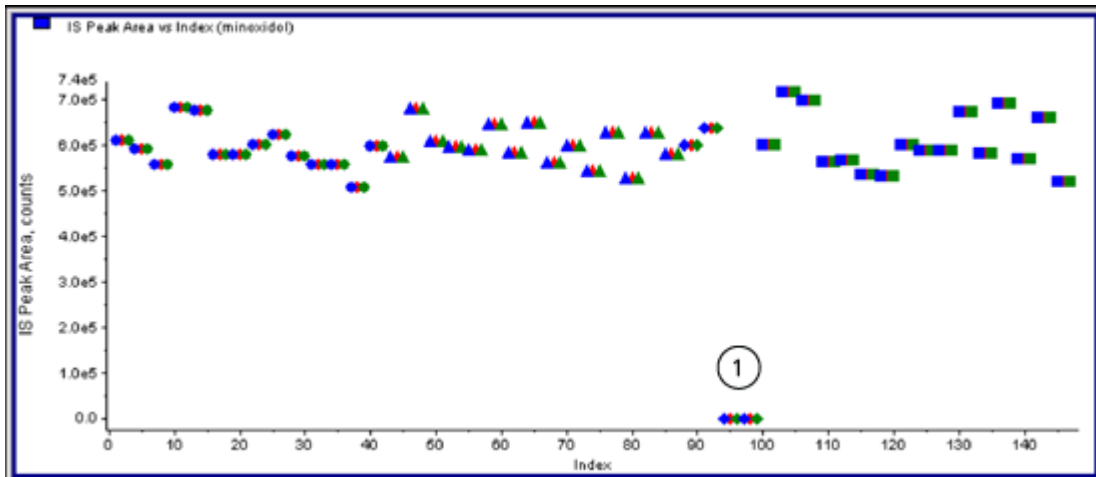
メトリックプロットを用いて、与えられたカラム、例えば、Analyte Peak Area、Accuracy、Calculated Concentrationなどを結果表からプロットします。2種の結果表フィールドを互いにプロットすることができ、そのプロットは正常範囲を逸脱するポイントの調査に使用されます。メトリックプロットはたいていくエリと併用されます。クエリの詳細な情報については、次のドキュメントを参照: *Help*。

メトリックプロットは次の方法で生成します。

- Plot ボタンを用いて、現在の結果表の1つまたは複数のカラムをプロットすることができますが、プロット基準を保存することはできません。
- 現在の表とプロット基準を保存するには、表固有のプロットを作成します。
- 今後の結果表でも使用するプロット基準を保存するには、グローバルなプロットを作成します。

QC、未知物質、ブランク、ダブルブランク、または溶媒はキャリブレーションカーブには現れませんが、それらのメトリックプロットは生成することができます。

図 14-16 : メトリックプロットの例



項目	説明
1	ダブルブランク

## メトリック一時プロットの作成

1. 結果表が開いた状態で、次のいずれかの操作を行います。
  - データを Y 軸にプロットするには (X 軸はインデックスとして使用)、プロットしたいデータが含まれるカラムの見出しをクリックします。
  - 最初に選択したカラムのデータを X 軸に、次に選択したカラムのデータを Y 軸にプロットするには、**Ctrl** キーを押しながら 2 つのカラムを選択してから、カラムの見出しをクリックします。

2. 結果表の上にある **Metric Plot by Selection** アイコンをクリックします。表 D-9 を参照してください。  
メトリックプロットが開きます。
3. プロットペインを右クリックし、**Data Legend** をクリックすると、プロットで用いられている色についての説明が表示されます。
4. プロットペインを右クリックし、**Point Legend** をクリックすると、プロットで用いられているシンボルについての説明が表示されます。

## メトリックプロットの生成およびプロット基準の保存

1. 適切な Results Table を開きます。
2. Results Table を右クリックしてから、**Metric Plot > New** をクリックします。

図 14-17 : Metric Plot ダイアログ

Metric Plot

Name:

Save/Execute

Cancel

Execute

Help

X Axis

Group: Index

Column:

Y Axis

Group: Index

Column:

Show

Regression: None Weighting: None

None

Percent Deviation Percent: 50

Standard Deviation Multiplier: 2

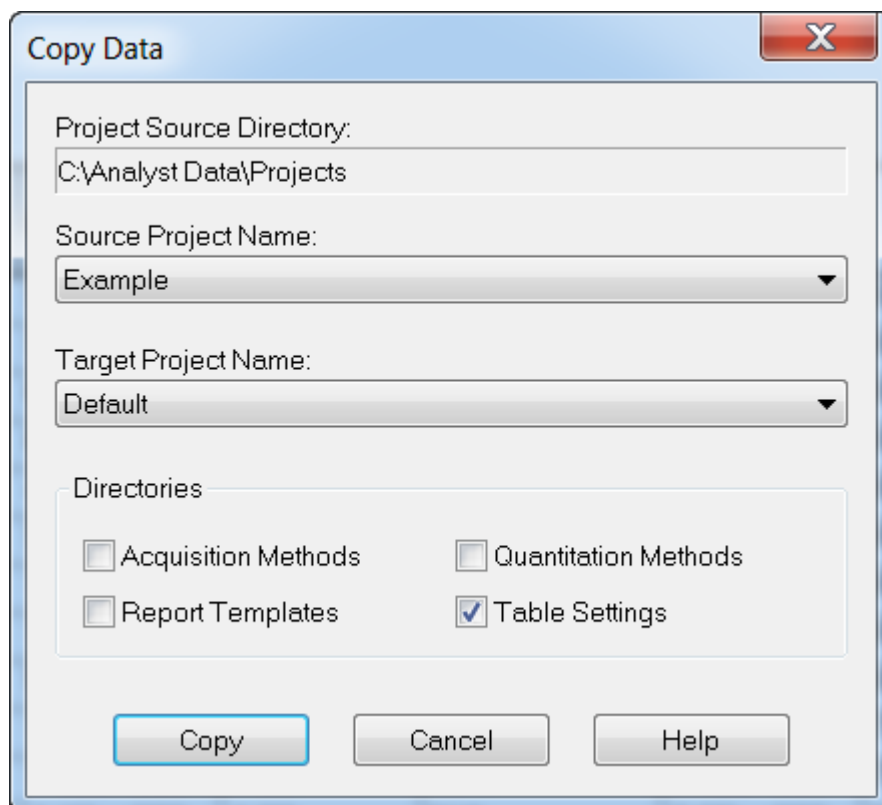
3. **Name** フィールドに、新しいプロット基準の名称を入力します。
4. X 軸をインデックスとして用いて Y 軸のフィールドをプロットするには、**X-Axis** セクションの **Group** リストで、**Index** を選択して **Column** リストを空白のままにします。

5. 相互に2つのカラムをプロットするには、**Y-axis** セクションの **Group** リストで、**Internal Standard** を選択してから、**Column** リストで **IS Peak Area** を選択します。
6. 必要な場合、**Regression** リストで使用する回帰の種類を選択した後、適切な回帰設定を選択します。
7. プロットを生成してプロット基準を保存するには、**Save/Execute** をクリックします。  
メトリックプロットが開きます。詳細は、[図 14-16](#) を参照してください。
8. プロットペインを右クリックし、**Data Legend** をクリックすると、プロットで用いられている色についての説明が表示されます。
9. プロットペインを右クリックし、**Point Legend** をクリックすると、プロットで用いられているシンボルについての説明が表示されます。  
これで Results Table の右クリックメニュー内の Results Table のプロットを今後作成する際に、この基準セットを使用できるようになります。プロット基準はユーザーが編集することも可能です。
10. 問題のサンプルを参照するには、時間に対して未知物質の濃度をプロットするか、インデックスに対して内部標準の面積をプロットしてみてください。

### 今後の結果表用のデフォルトのプロット基準の保存

1. 結果表を右クリックし、**Table Settings > Export To New Table Settings** をクリックします。  
これにより、rdb から表設定がエクスポートされるため、プロジェクト内の他の定量ランで再利用することが可能です。
2. 表設定を他のプロジェクトにエクスポートするには、**Tools > Project > Copy Data** をクリックします。

図 14-18 : Copy Data ダイアログ





Reporter ソフトウェアを使うことで、Analyst MD ソフトウェアで提供されているレポート機能を拡張できます。

**注意: 潜在的に正しくない結果。不正確な結果を避けるために:**

- 使用する前に、すべての Reporter クエリを検証してください。
- 変更された Reporter テンプレートまたはクエリを含むテンプレートが使用されている場合は、結果を検証します。
- Reporter で検証が完了していることを確認してください

Reporter ソフトウェアでは、Microsoft Word および Excel (2013、2016、または Office 365) を使用してカスタムレポートを作成できます。Reporter ソフトウェアには次の特徴があります。

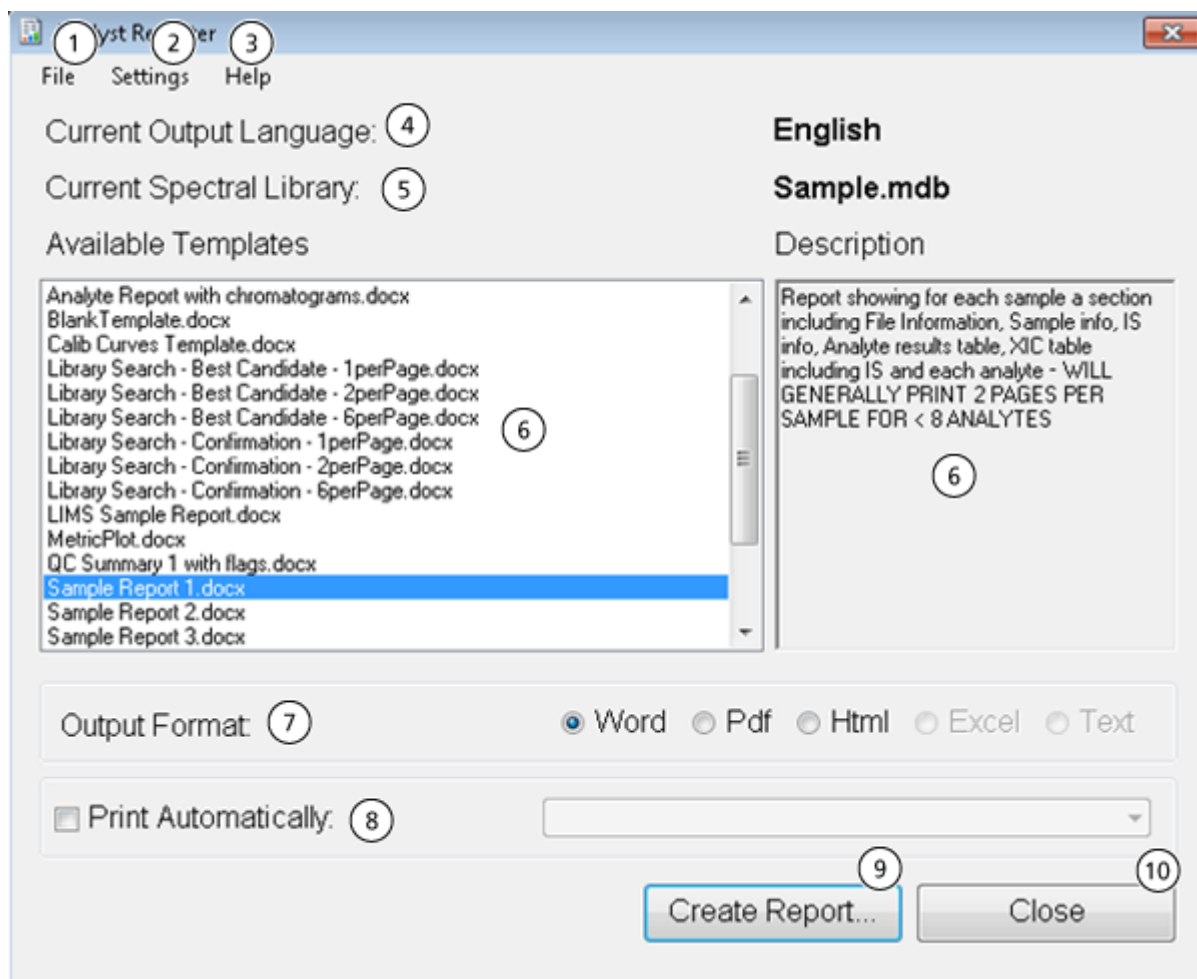
- 結果表、ファイル情報、定量ピークレビューウィンドウからのデータを使用してさまざまな種類のレポートを作成できます。
- MS/MS ライブラリ検索の結果を表示する様々なレポートを作成することができます。ユーザーは、Analyst MD ソフトウェア (mdb) のフォーマットを使用する任意の MS/MS スペクトルライブラリに対して検索を行うように Reporter ソフトウェアを設定することができます。
- レポート生成時に必要なフォーマット情報を設定する際は、Microsoft Word テンプレートを使用してください。これらのテンプレートを作成、修正することで、レポートフォーマットをカスタマイズすることができます。Report Template Editor の作成または編集については、ヘルプを参照してください。
- ブランクの初期テンプレートはほぼ全てのレポート要件に対応しており、Reporter ソフトウェアの編集環境でレポートテンプレートをデザインする際に活用できます。
- レポートの自動印刷、Adobe Portable Document Format (pdf) へのエクスポート、e メールでの結果送信を行います。
- 入手可能な Analyst MD ソフトウェアプログラミングライブラリを使用して、カスタムソフトウェアアプリケーションからレポートを生成します。

Reporter ソフトウェアは次の形でもご使用いただけます。

- Analyst MD ソフトウェア上で、単一および複数のレポートを手動で生成します。
- Analyst MD ソフトウェアを使用しないアプリケーションによります。

## Analyst Reporter ユーザーインターフェース

図 15-1 : Analyst Reporter



項目	オプション	説明
1	File > Exit	プログラムを閉じてすべてのリソースを開放します。

項目	オプション	説明
2	<b>Settings &gt; Select Output Language</b>	レポートテンプレート内で言語タグの置換えに使用する言語辞書を設定します。言語タグを含むテンプレートを使って、任意の言語でレポートを作成することができます。言語タグは、選択した言語の辞書ファイルの中でマッチングしたタグからテキストに置き換えられます。これらの辞書ファイルは次のフォルダに入っています： C:\Program Files\AB SCIEX\AnalystReporter\Resources\Languages (Windows 7、32 ビットオペレーティングシステム)または C:\Program Files (x86)\AB SCIEX\AnalystReporter\Resources\Languages (Windows 7、64 ビットオペレーティングシステムまたは Windows 10、64 ビットオペレーティングシステム)。
2	<b>Settings &gt; Select Library</b>	スペクトルライブラリを閲覧します。このライブラリは、MS/MS スキャン種類を誘発するデータ依存型取得 (IDA) からのデータを含む結果表からの MS/MS データのマッチングおよびスコアリングのために使用されます。
2	<b>Settings &gt; Select Template Folder</b>	利用可能なテンプレートから読み出されるフォルダを設定します。既定のテンプレートフォルダに戻るには、 <b>Default</b> オプションを選択します。
3	<b>Help &gt; About</b>	現在インストールされている Reporter ソフトウェアのバージョン情報を表示します。
4	<b>Current Output Language</b>	現在選択されている、レポートテンプレート内で置き換える言語タグに使用する言語辞書を表示します。言語辞書を選択するには、 <b>Settings &gt; Select Output Language.</b> をクリックします。
5	<b>Current Spectral Library</b>	現在選択されている、スペクトルライブラリを表示します。スペクトルライブラリを選択するには、 <b>Settings &gt; Select Library.</b> をクリックします。
6	<b>Available Templates および Description</b>	利用可能なレポートテンプレートを表示します。テンプレートを選択すると、テンプレートの説明が表示されます。利用可能なテンプレートを読み込むフォルダを変更するには、 <b>Settings &gt; Select Template Folder &gt; Browse.</b> を選択します。

項目	オプション	説明
7	<b>Output Format</b>	Reporter ソフトウェアにサポートされる出力フォーマットを示します。選択されたレポートテンプレートと互換性がある形式のみ利用可能です。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Word</b>: Microsoft Word 文書 (docx) が作成されます。この文書は Microsoft Word 2010 またはそれ以上のバージョンで読むことができます。</li> <li>• <b>PDF</b>: レポートが PDF フォーマットで直接作成されます。</li> <li>• <b>HTML</b>: HTML ファイルの作成には Microsoft Word が使用されます。関連画像ファイルは HTML ファイルと同じ名前のフォルダに保存されます。</li> <li>• <b>Excel</b>: 標準テキストファイル (csv) が作成されます。コマンドで区切られた数値を含むレポートテンプレートは、各数値が異なるセルに表示されるよう、Microsoft Excel で開くことができます。テキスト互換性有りと特別に記されたテンプレートのみ、出力形式として使用することができます。</li> <li>• <b>Text</b>: プレーンテキスト文書 (txt) が作成されます。テキスト互換性有りと特別に記されたテンプレートのみ、出力形式として使用することができます。</li> </ul>
8	<b>Print Automatically</b>	レポートが作成されると、選択されたプリンタで印刷されます。利用可能なプリンタを選択してください。
9	<b>Create Report</b>	選択されたレポートテンプレートを用いて、選択された出力フォーマットでレポートを作成します。
10	<b>Close</b>	プログラムを閉じてすべてのリソースを開放します。

## レポートの生成

Reporter ソフトウェアは数値データを結果表から抽出し、wiff ファイルからサンプルおよび図形情報を抽出します。

1. **Results Table** を開きます。
2. **Companion Software** の下で **Reporter** をダブルクリックします。**Analyst Reporter** が開きます。
3. **Available Templates** フィールドで、該当するレポートテンプレートを選択します。
4. **PDF** 出力用フォーマットをクリックします。  
Word オプションがあらかじめ選択されていて、レポートは現在のプロジェクトの Results フォルダに自動的に保存されます。PDF 出力フォーマットを選択しなかった場合、レポートは Word で作成されて開くか、または選択したオプションで印刷されます。ただし、この場合レポートは保存されません。そのため、元のレポートを保存する前にユーザーは Word でレポートを編集する必要があります。

5. MS/MS スキャンタイプのトリガーとなるデータ依存型取得 (IDA) からのデータを含む結果表が用いられる場合のライブラリ検索 (定性的) ワークフローのオプション: **Settings > Select Library** をクリックして、該当の MS/MS ライブラリデータベース (mdb フォーマット) に進んだ後、**Open** をクリックします。
6. (オプション) **Print Automatically** チェックボックスをオンにすると、事前選択したプリンタでレポートを自動印刷することができます。  
他のプリンタを選択しない限り、Windows で設定された初期設定プリンタが使用されます。Reporter ソフトウェアでは、操作を終えてもプリンタの選択が維持されます。プリンタが PDF プリンタドライバに設定されている場合、Reporter ソフトウェアは作成されたレポートの PDF ファイル版を自動的に生成します。
7. **Create Report** をクリックします。  
ソフトウェアがテンプレートを開き、結果表からテンプレートにデータを追加する際、画面にさまざまな進捗インジケータが表示されます。数秒で生成されるレポートもありますが、通常はもう少し長い時間を要します。多くの MRM トランジションや多量の図を含む大きなデータは、数百枚ものレポートとなり、作成に何時間も要することがあります。

パフォーマンスを最適化するために、システムの定期クリーニングおよびメンテナンスを行ってください。



**警告! 感電の危険。カバーを取り外さないでください。カバーを取り外すと、傷害またはシステムの故障が発生する場合があります。定期的なメンテナンス、点検、または調整のためにカバーを取り外す必要はありません。カバーを取り外す必要がある修理については、SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。**



**警告! イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。クリーニングやメンテナンス前に、汚染除去が必要かどうかを判断します。放射性物質、生物学的病原体、または有害化学物質が質量分析装置に使用された場合、お客様はクリーニングまたはメンテナンス前にシステムに対して汚染除去を行う必要があります。**

## 推奨メンテナンススケジュール

次の表に、システムのクリーニングとメンテナンスの推奨スケジュールを示します。

**ヒント!** 定期的にメンテナンス作業を実行し、システムが最適に機能していることを確認してください。

- 定期的なガス漏れ点検と一般的なメンテナンス点検を実施して、安全なシステム操作を心がけます。
- システムを定期的にクリーニングして、良好な動作状態に保ちます。
- システムメンテナンス時は、装置に接続されたチューブを含む外部ガス供給システムの部品を注意深く検査して、満足のいく状態であることを確認してください。ひびが入ったり、損傷していたり、つぶれていたりするチューブは交換してください。

質量分析装置とイオン源のクリーニングまたはメンテナンスの実施頻度を決定する際には、次の要素を考慮してください。これらの要素によって、質量分析装置の性能に変化が見られる可能性があります。メンテナンスの必要性を示唆します。

- テスト対象の化合物
- サンプルの清浄度と準備メソッド
- プローブがサンプルにさらされている時間
- システム総稼働時間

チューニング頻度については、[キャリブレーションイオンと溶液](#)を参照してください。

消耗部品の注文や基本サービス、メンテナンス要件については、QMP にお問い合わせいただくか、または [部品および機器ガイド](#)をご覧ください。その他のすべてのサービスおよびメンテナンス要件については、SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。

表 16-1 : 質量分析装置のメンテナンス作業

コンポーネント	頻度	タスク	詳細な情報については
システム	毎日	漏れがないかどうかを点検します。	<a href="#">化学物質に関する注意</a> を参照してください。
カーテンプレート	毎日	クリーニング	<a href="#">カーテンプレートのクリーニング</a> を参照してください。
粗引きポンプオイル	毎週	レベルを点検	<a href="#">粗引きポンプのオイルレベルの点検</a> を参照してください。必要に応じて、現地の有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせになりオイルを追加します。
粗引きポンプオイル	3 年ごと、または必要に応じて。	交換	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
粗引きポンプオイル	必要に応じて	再充填	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
オリフイスプレート (フロント)	必要に応じて	クリーニング	<a href="#">オリフイスプレート前面のクリーニング</a> を参照してください。
オリフイスプレート (前面および背面)	必要に応じて	クリーニング	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
質量分析装置エアフィルター	必要に応じて	交換	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
QJet イオンガイドおよび IQ0 レンズ	必要に応じて	クリーニング	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。

表 16-1 : 質量分析装置のメンテナンス作業 (続き)

コンポーネント	頻度	タスク	詳細な情報については
Q0 ロッドセットおよび IQ1 レンズ	必要に応じて	クリーニング	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
機器の表面	必要に応じて	クリーニング	<a href="#">表面のクリーニング</a> を参照してください。
イオン源排気ドレインボトル	必要に応じて	空にする	<a href="#">イオン源排気ドレインボトルを空にする</a> を参照してください。
インターフェースヒーター	必要に応じて	交換	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。

表 16-2 : イオン源のメンテナンス作業

コンポーネント	頻度	タスク	詳細な情報については
TurbolonSpray および APCI プローブ	必要に応じて	点検および交換	<a href="#">プローブの取り外し</a> および <a href="#">プローブの取り付け</a> を参照してください。
TurbolonSpray および APCI プローブ用電極	必要に応じて	点検および交換	<a href="#">電極の交換</a> を参照してください。
コロナ放電ニードル	必要に応じて	交換	<a href="#">コロナ放電ニードルの交換</a> を参照してください。
ターボヒーター	必要に応じて	交換	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
サンプルチューブ	必要に応じて	交換	<a href="#">イオン源チューブの接続</a> を参照してください。

「必要に応じて」の作業については、次のガイドラインに従ってください。

- こぼれた後、または汚れた際に、質量分析装置の表面を清掃してください。
- イオン源排気ドレインボトルが満杯になる前に空にします。
- システムの感度が低下した場合は、オリフィスプレート、QJet イオンガイド、Q0 領域をクリーニングします。



**ヒント!** 四重極とレンズへの充電の影響(短時間で対象イオン感度が大幅に損失)を最小限に抑えるために、定期的に Q0 領域のクリーニングを行ってください。有資格保守要員(QMP)またはフィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。

- オイルシール式の粗引きポンプを使用しているシステムでは、オイルが最小オイルレベルを下回ったらオイルを補充してください。
- すべての排気接続箇所を定期的に点検して、しっかり接続されていること、および排気がお客様の研究室に入り込んでいないことを確認してください。

## 表面のクリーニング

溶液がこぼれたり、または汚れた場合には、質量分析装置の外表面をクリーニングします。

**注意:** ダメージを与える恐れ。推奨されているクリーニング方法および材料のみを使用して、装置を損傷から守ります。

1. 温かい石鹼水で湿らせた柔らかい布で外表面を拭きます。
2. 水で湿らせた柔らかい布で外部表面を拭いて、石鹼の残留物を取り除きます。

## イオン源排気ドレインボトルを空にする



**警告!** 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、Turbo V のイオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面の一部と真空インターフェースが熱くなります。



**警告!** イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。有害物質は、適切にラベルを貼った廃棄物容器に入れて処分し、その際は現地規制に従い処分してください。



**警告!** イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。排気ガスを専用のラボ用ガス換気フードまたは排気システムで通気するように注意して、換気チューブがクランプで固定されていることを確認します。ラボは実施される作業に適切な換気が行われるようにしなければなりません。

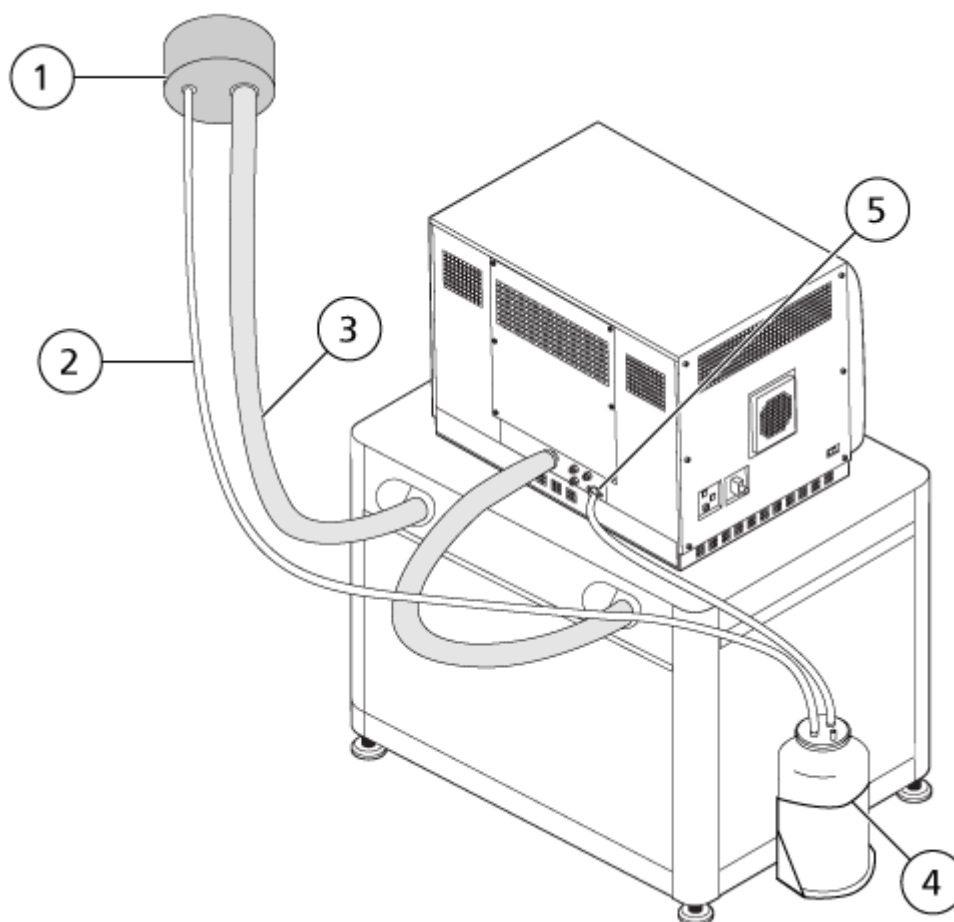


**注:** イオン源廃棄物ラインにねじれ、たるみ、ねじれがないことを確認してください。

イオン源排気ドレインボトルは定期的を確認し、満杯になる前に空にします。また、ボトルとその継手に漏れがないか点検し、必要に応じて接続部を締め付けるかコンポーネントを交換します。ボトルを空にするには、この手順のステップに従います。

1. イオン源を除去します。
2. ホースをイオン源排気ドレインボトルのキャップに取り付けているクランプをゆるめます。

図 16-1：イオン源排気ドレインボトル



項目	説明
1	換気口への接続
2	イオン源排気ドレインチューブ: 内径 2.5 cm (1.0 インチ)
3	粗引きポンプ排気ホース: 内径 (i.d.) 3.2 cm (1.25 インチ)
4	イオン源排気ドレインボトル こぼれないようにボトルがしっかりと取り付けられていることを確認します。
5	質量分析装置へのイオン源排気接続: 内径 1.6 cm (0.625 インチ)

注: ドレインボトル、質量分析装置、検査室通気口のイオン源排気ホースの接続部は、ホースクランプで固定されています。

3. ドレインボトルをホルダーから取り出します。

4. キャップからホースを外します。
5. ドレインボトルからキャップを取り外します。
6. ドレインボトルを空にし、ラボの手順と現地の廃棄規制に従って不用品を廃棄します。
7. ボトルにキャップを取り付け、ホルダーにボトルを取り付けます。
8. ホースをキャップにクランプでしっかりと取り付けます。

## フロントエンドのクリーニング

次の警告は、本項の手順すべてに適用されます。



**警告! 高温面の危険。**メンテナンス手順を開始する前に、Turbo V のイオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面の一部と真空インターフェースが熱くなります。



定期クリーニングメソッドを使用し、質量分析装置のフロントエンドをクリーニングします。

- システムの予期せぬ故障を最小限に抑えることができます。
- 最適な感度が維持できます。
- サービス人員の訪問が必要となるような大規模クリーニングを回避できます。

汚染が発生した場合は、初期の定期クリーニングを行ってください。オリフィスプレートの前面も忘れずにクリーニングしてください。定期クリーニングを行っても感度の問題が解決しない場合は、フルクリーニングが必要です。お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。

本項では、大気開放を要さない定期クリーニングを解説します。

---

**注:** 適用される現地規制に従ってください。健康と安全のガイドラインについては、[化学物質に関する注意](#)を参照してください。

---

## 汚染の兆候

次のいずれかが観察された場合、システムが汚染しているおそれがあります。

- 感度の著しい低下
- バックグラウンドノイズの増加
- フルスキャンまたはサーベイスキャン方式のサンプルの一部ではない追加のピーク

こうした問題が観察された場合、質量分析装置のフロントエンド部をクリーニングしてください。

## 必要な道具

---

注: 消耗品の注文情報および問い合わせについては、『MD 装置ファミリーの部品および機器ガイド』を参照してください。詳細な情報については、お近くのフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせいただくか [sciex.com](http://sciex.com) をご覧ください。

---

- パウダーフリーグローブ (ニトリルまたはネオプレンを推奨)
- 安全メガネ
- 実験用白衣
- 新鮮な LC-MS グレード水。古い水には不純物が含まれており、質量分析装置の汚染を進行させる可能性があります。
- LC-MS グレードメタノール、イソプロパノール (2-プロパノール)、アセトニトリル
- 洗浄液は、次のうちひとつを使用してください。
  - 100%メタノール
  - 100%イソプロパノール
  - 1:1 比のアセトニトリル:水の溶液 (新規調製すること)
  - 1:1 比のアセトニトリル:水に 0.1%酢酸を加えた溶液 (新規調製すること)
- 洗浄液を準備するために、1 L または 500 mL のガラス製ビーカーを洗浄します。
- 使用済の溶剤を入れるための 1 L ビーカー
- 有機廃棄物容器
- 糸くずの出ない布。メーカーから入手可能なツールとサプライを参照してください。
- (オプション) ポリエステル綿棒

## メーカーから入手可能なツールとサプライ

---

注: 部品番号は *部品および機器ガイド* のドキュメントを参照してください。

---

- 小型ポリスワブ (熱接着)。クリーニングキットにも同梱されています。
- 糸くずの出ない布 (11 cm x 21 cm、4.3 インチ x 8.3 インチ)。クリーニングキットにも同梱されています。
- クリーニングキット。小さなポリスワブ、糸くずの出ない布、Q0 クリーニングツール、ストレート型の QJet イオンガイドクリーニングブラシ、および Alconox が含まれています。

## クリーニングのベストプラクティス



**警告!** 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、Turbo V のイオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面の一部と真空インターフェースが熱くなります。

---



**警告!** 有害化学物質の危険があります。化学製品の安全性データシートを参照し、化学物質の取り扱い、保管、処理についての推奨安全手順に従ってください。



**警告!** イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。クリーニングやメンテナンス前に、汚染除去が必要かどうかを判断します。放射性物質、生物学的病原体、または有害化学物質が質量分析装置に使用された場合、お客様はクリーニングまたはメンテナンス前にシステムに対して汚染除去を行う必要があります。



**警告!** 環境の危険。システムコンポーネントを一般廃棄物として処分しないでください。コンポーネントを処分する際は、現地規制に従います。

- イオン源は、取り外す前にそのままにして熱を下げます。
- クリーニングを行う際は、常に清潔なパウダーフリーグローブ（ニトリル、あるいはネオプレンを推奨）を着用してください。
- 質量分析装置コンポーネントのクリーニング後、再組立前に新しいグローブを着用してください。
- 本手順書で指定されるもの以外のクリーニング用品を使用しないでください。
- 可能な場合は、クリーニングの直前に洗浄液を準備してください。
- すべての有機溶液および有機含有溶液は、非常に清潔なガラス製品にのみ、準備保管してください。プラスチックボトルは決して使用しないでください。汚染物質がこれらのボトルから浸出し、質量分析装置を汚染します。
- 洗浄液の汚染を避けるため、溶液は布またはスワブに浸して使用してください。
- 布の中心部分のみが質量分析装置の表面に触れるようにしてください。切れ端は、繊維を残す可能性があります。

**ヒント!** 熱結合されたポリスワブの周りに布を巻きつけてください。

図 16-2 : 例: 布の折り方



- クロスコンタミネーションを避けるために、布やスワブは表面に一度でも触れたものは、廃棄してください。
- 必要に応じて、カーテンプレートなど、真空インターフェースの大部分に複数のワイプを使用して、複数のクリーニングを実行します。

- 水または洗浄液を塗布する場合は、布またはスワブをわずかに湿らせる程度にしてください。有機溶剤より頻繁に使用される水は、質量分析装置の残留物が残り、布を劣化させる可能性があります。
- アパチャを布でこすらないでください。アパチャから拭き取り布の繊維が質量分析装置に入らないようにアパチャの周辺を拭いてください。
- カーテンプレートまたはオリフィスプレートのアパチャにブラシを挿入しないでください。

## 質量分析装置の準備



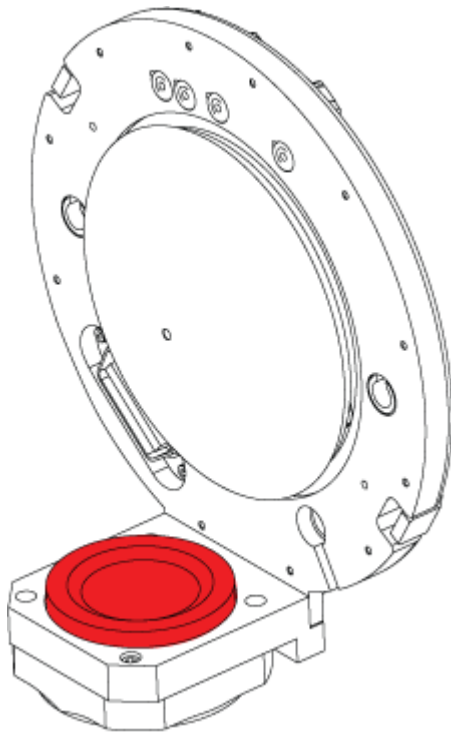
**警告!** 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、Turbo V のイオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面の一部と真空インターフェースが熱くなります。

---



**注意:** ダメージを与える恐れ。イオン源を取り外す際、イオン源ドレインに何も落とさないでください。

図 16-3 : 真空インターフェースのイオン源ドレイン



1. ハードウェアプロファイルを無効化します。ソフトウェアユーザーガイドを参照してください。
2. イオン源を除去します。[イオン源の取り外し](#)を参照してください。  
イオン源を使用しないときは、正確な動作を維持するために保護された場所に保管し、破損のないようにしてください。



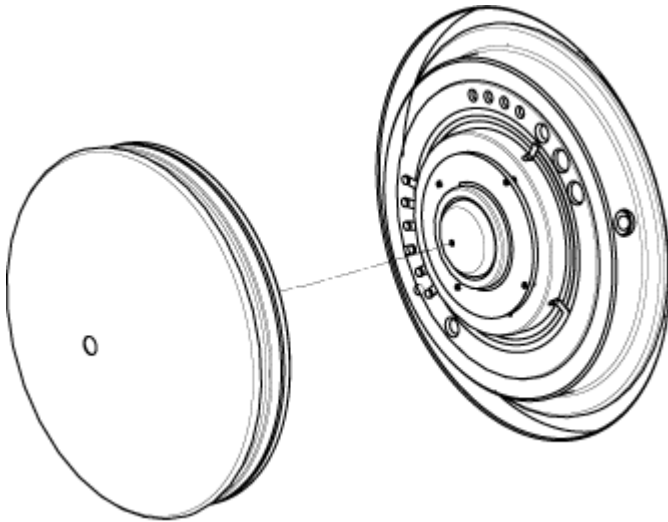
## カーテンプレートのクリーニング

**注意:** ダメージを与える恐れ。カーテンプレートやオリフィスプレートのアパチャ(開口部)先端部を下側にして置かないようにしてください。カーテンプレートの円錐側が上になっているかを確認します。

**注意:** ダメージを与える恐れ。アパチャ(開口部)の損傷を防ぐため、カーテンプレート、オリフィスプレート、またはインターフェースヒーターのアパチャ(開口部)にワイヤーや金属製のブラシを挿入しないでください。

1. 真空インターフェース部からカーテンプレートを取り外し、円錐面を上側にして、清潔かつ安定した面に置きます。

図 16-4 : カーテンプレート取外し



カーテンプレートはオリフィスプレートに配置された 3 つの球状キャッチで保持されています。

**ヒント!** オリフィスプレートからカーテンプレートをすぐに取り外せないときには、少し回転させながら(90 度以下)取り外し、球状バネラッチを開放してみてください。

2. 糸くずの出ない布を LC-MS グレード水に浸し、カーテンプレートの両側を拭いてきれいにします。

**注:** 必要なだけワイプを使います。

3. 洗浄液を使用して、手順 2 を繰り返します。
4. クリーニング液に浸したワイプまたは小型ポリスワブを使ってアパチャをクリーニングします。
5. カーテンプレートが乾くのを待ちます。
6. カーテンプレートに溶媒や糸くずの付着がないかを確認し、残留物がある場合、清潔で軽く濡らした糸くずの出ない布で拭いてください。

**注:** しつこい染みやほこりや水などの薄い膜が、溶媒が汚染されているサインとなります。

## オリフィスプレート前面のクリーニング

**注意:** ダメージを与える恐れ。オリフィスプレートの表面をクリーニングするときに、インターフェースヒーターを取り外さないでください。インターフェースヒーターを頻繁に取り外すと、損傷の原因となる可能性があります。定期クリーニングの際に、インターフェースヒーター表面を清掃してください。

**注意:** ダメージを与える恐れ。アパチャ(開口部)の損傷を防ぐため、カーテンプレート、オリフィスプレート、またはインターフェースヒーターのアパチャ(開口部)にワイヤーや金属製のブラシを挿入しないでください。

1. 糸くずの出ない布を LC-MS グレード水に浸し、インターフェースヒーターを含むオリフィスプレートの前面を拭きます。
2. 洗浄液を使用して、手順 1 を繰り返します。
3. オリフィスプレートが乾燥するまでお待ちください。
4. オリフィスプレートに溶媒や糸くずの付着がないかを確認し、残留物がある場合、清潔で軽く濡らした糸くずの出ない布で拭いてください。

**注:** しつこい染みやほこりや水などの薄い膜が、溶媒が汚染されているサインとなります。

## 質量分析装置の運転再開

1. カーテンプレートを取り付けます。カーテンプレートのドットが 12 時の位置にあることを確認し、オリフィスプレートの穴にアライメントピンを差し込みます。
2. イオン源を質量分析装置にインストールします。[質量分析装置へのイオン源の取り付け](#)を参照してください。  
イオン源ラッチをロッキングポジションまでねじこみ、イオン源をしっかり閉めます。
3. 質量分析装置が LC システムに接続されたら、LC システムとの接続すべてを復元します。
4. ハードウェアプロファイルを有効にします。ソフトウェアユーザーガイドを参照してください。

## 保管と取り扱い



**警告! 環境の危険。** システムコンポーネントを一般廃棄物として処分しないでください。コンポーネントを処分する際は、現地規制に従います。

質量分析装置を長期保管するか、出荷の準備をする必要がある場合は、SCIEX FSE に使用停止情報についてお問い合わせください。質量分析装置から電源を外す際は、AC 主電源から主電源コネクタを取り外してください。

**注:** イオン源と質量分析装置は、 $-30\text{ }^{\circ}\text{C}\sim+60\text{ }^{\circ}\text{C}$  ( $-22\text{ }^{\circ}\text{F}\sim140\text{ }^{\circ}\text{F}$ ) の温度および 99% を超えない相対湿度 (結露なし) で輸送および保管する必要があります。システムは、海拔 2,000 m (6,562 フィート) を超えない場所で保管します。

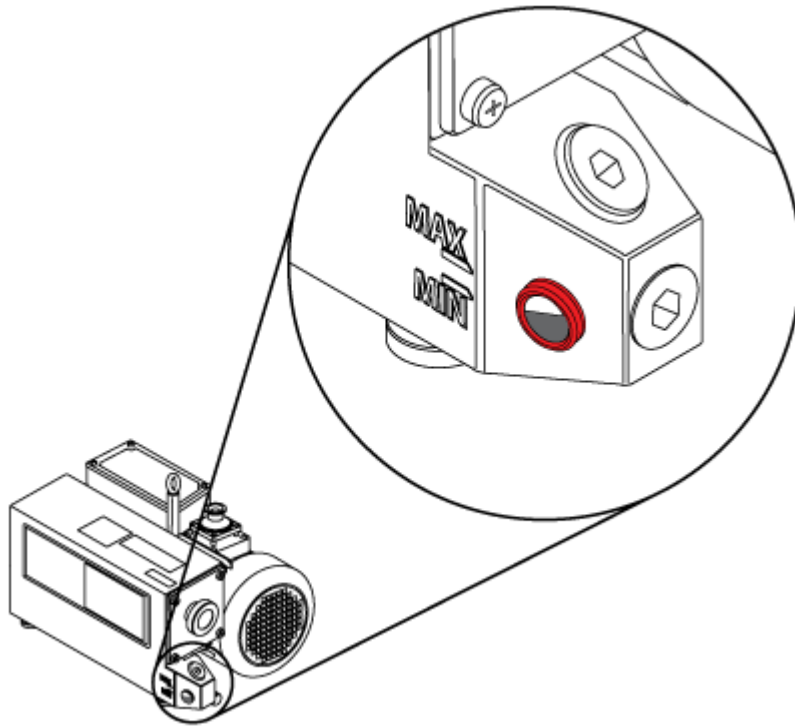


## 粗引きポンプのオイルレベルの点検

粗引きポンプのオイルレベル確認窓を点検して、オイルが最低レベルを上回っていることを確認します。

オイルが最低レベルを下回っている場合は、有資格保守要員 (QMP) または SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) に連絡してください。

図 16-5 : オイルレベル確認窓



## サービスおよびメンテナンス — イオン源

このセクションに示すすべてのメンテナンス手順には、次の警告が適用されます。



**警告!** 高温面の危険。メンテナンス手順を開始する前に、Turbo V のイオン源を少なくとも 30 分そのままにして熱を下げます。操作中、イオン源の表面の一部と真空インターフェースが熱くなります。



**警告!** 火災および有害化学物質の危険。引火性液体を炎や火花に近づけないでください。また、通気口付化学ガス換気フードまたは安全キャビネットの中のみで使用してください。





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



**警告!** イオン化放射線障害の危険、生物学的危険、または有害化学物質の危険。化学物質の流出が発生した場合は、製品安全性データシートを参照し、詳細な指示を確認してください。イオン源付近にこぼれたものを掃除する前に、システムがスタンバイ状態であることを確認してください。適切な個人用防護具と吸着布を使用して、流出を食い止め、現地規制に従い処分してください。



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



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

**注意:** ダメージを与える恐れ。イオン源を片手で持ち上げたり、運んだりしないでください。イオン源は、両手(イオン源の各面に1つ)で持ち上げたり持ち運んだりできるように設計されています。

このセクションには、一般的なイオン源のメンテナンス手順が記載されています。イオン源のクリーニングまたはメンテナンスを実施する頻度を決定するには、次のことを考慮してください。

- テスト対象の化合物
- サンプルの清浄度とサンプル調製方法
- 待機中プローブがサンプルを含有する時間量
- システム総稼働時間

これらの要素によって、イオン源の性能に変化が見られる可能性があり、メンテナンスの必要性を示唆します。

取り付けたイオン源が質量分析装置に対して完全に密閉されており、ガス漏れの形跡がないことを確認します。定期的に、イオン源とその接続部に漏れがないか点検します。イオン源コンポーネントを定期的にクリーニングして、イオン源を良好な動作状態に保ちます。

**注意:** ダメージを与える恐れ。推奨されているクリーニング方法および材料のみを使用して、装置を損傷から守ります。

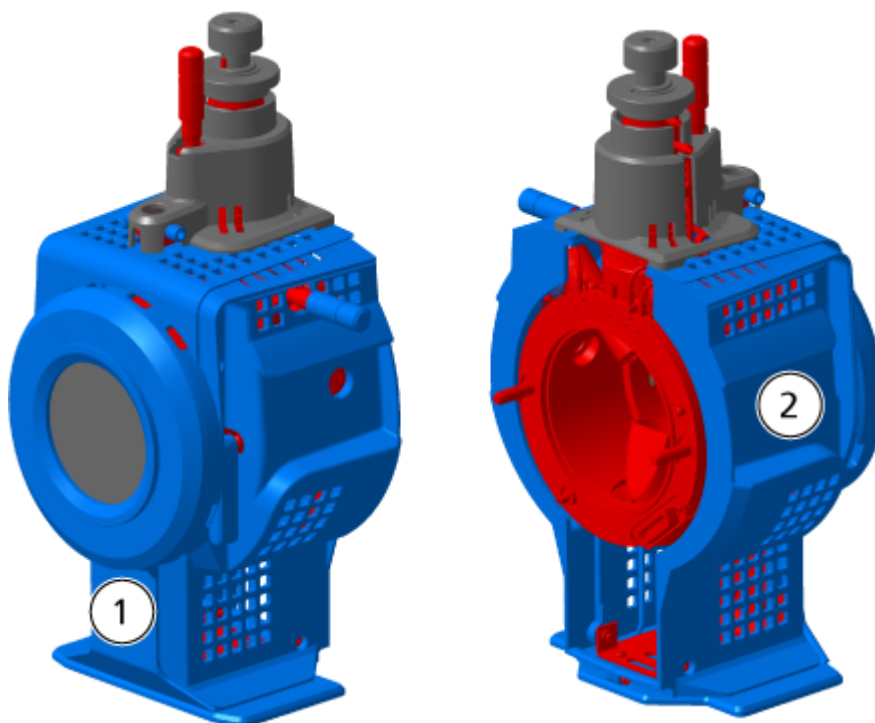
**必要な資材**

- 1/4 インチオープンエンドレンチ
- マイナスドライバー
- LC-MS グレードのメタノール
- LC-MS グレードの脱イオン水
- 安全メガネ
- 呼吸マスクおよびフィルター
- パウダーフリーグローブ(ニトリルまたはネオプレンを推奨)
- 白衣

**イオン源の取り扱い**

操作中はイオン源の表面が高温になります。次の図は、比較的温度の低い面(青)と、高温の状態が長時間続く面(赤)を示しています。イオン源の使用途中や取り外し中は、赤で表示されている面に触れないでください。

図 16-6 : イオン源の熱い表面(赤=熱い、灰色=温かい、青=取り扱いに注意)



項目	説明
1	前

項目	説明
2	背面

## イオン源の取り外し

**注:** 質量分析装置がオフであるか、またはイオン源がシステムから取り外された場合には、5.3 L/min の窒素が流れ続けます。質量分析装置を使用していない間、窒素ガスの消費を最小限に抑え、装置を清潔に保つには、質量分析装置に取り付けられたイオン源をそのままにし、システムの電源をオンのままにしておきます。

イオン源はツールなしで素早く簡単に取り外しできます。イオン源のメンテナンスやプローブの交換を実施する前に、質量分析装置からイオン源を必ず取り外します。

1. 実行中のスキャンを停止します。
2. サンプルストリームをオフにします。
3. ヒーターを使用している場合は、イオン源 **Temperature** を 0 に設定します。
4. イオン源が冷えるまで、少なくとも 30 分待ちます。
5. 接地継手部のサンプルチューブを外します。
6. 2 つのイオン源ラッチを 12 時の位置まで回して、イオン源を取り外します。
7. イオン源を真空インターフェースからそっと引き抜きます。

**注:** 真空インターフェースに取り付けられた O リングを紛失しないように注意します。

8. イオン源を清潔で安全な表面に置きます。

## 表面のクリーニング



**警告!** 感電の危険。続行する前に、質量分析装置からイオン源が完全に取り外されているかを確認します。

サンプルをこぼしたり、汚れた場合、イオン源の表面をクリーニングします。

### 実施前提手順

- [イオン源の取り外し](#)

水を湿らせた柔らかい布でイオン源の表面を拭きます。

## プローブのクリーニング

サンプルに使用した化合物の種類に関係なく、イオン源を定期的にフラッシュします。フラッシュ操作専用の制御ソフトウェアでメソッドを設定して行います。

1. 1:1 の水:アセトニトリルまたは 1:1 の水:メタノールの移動相に切り替えます。

2. プローブポジションを調整して、オリフィスからできるかぎり遠ざけます。
3. 制御ソフトウェアで次のことを実行します。
  - a. MS メソッドを作成します。
  - b. イオン源の温度を 500 °C と 600 °C の間に設定します。
  - c. イオン源ガス 1 とイオン源ガス 2 を 40 以上に設定します。
  - d. Curtain Gas インターフェースの流量をできるだけ大きな値に設定します。
4. 設定した温度に達するまで待機します。
5. プローブとサンプルチューブがくまなくフラッシュされているかを確認します。

## プローブの取り外し



**警告! 感電の危険。**この手順を開始する前に、質量分析装置からイオン源を取り外します。すべての電気安全作業規範を遵守します。

**注意:** ダメージを与える恐れ。電極チップ突出部またはコロナ放電ニードルがイオン源ハウジングに一切触れないようにして、プローブを損傷から守ります。

### 実施前提手順

- [イオン源の取り外し](#)。

プローブはツールを使わずに素早く簡単に取り外せます。プローブを交換またはプローブのメンテナンスを実施する前に、質量分析装置からイオン源を必ず取り外します。

1. サンプルチューブナットを緩めて、サンプルチューブをプローブから外します。
2. プローブをイオン源ハウジングに固定している止めリングを緩めます。
3. タワーからプローブをまっすぐ上にそっと引き上げます。
4. プローブを安全で清潔な表面に置きます。

## 電極の交換



**警告! 感電の危険。**この手順を開始する前に、質量分析装置からイオン源を取り外します。すべての電気安全作業規範を遵守します。



**警告! 尖った部分により怪我をする危険。**電極を取り扱うときは注意してください。電極チップは非常に尖っています。

**実施前提手順**

- [イオン源の取り外し](#)。
- [プローブの取り外し](#)。

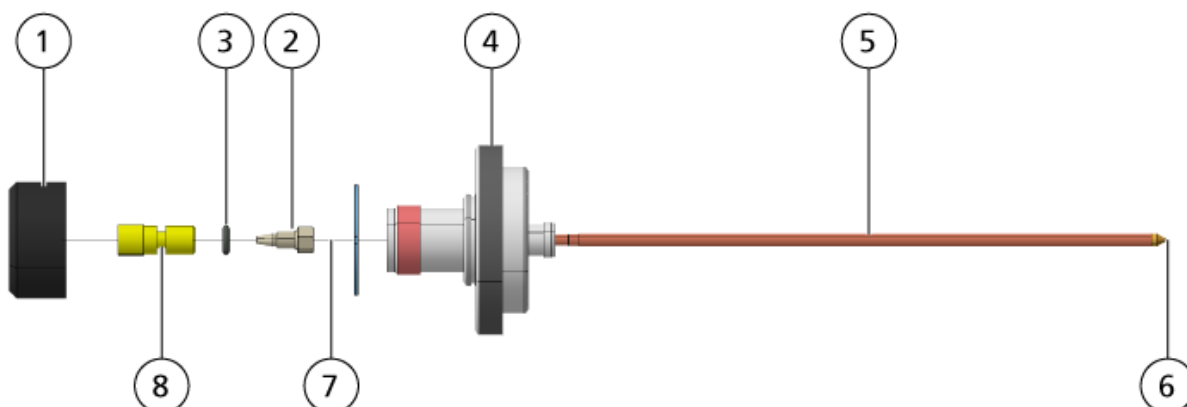
プローブには電極が含まれています。性能の低下が見られるときは電極を交換します。

**注:** 電極交換後には、システム性能に対する影響を評価します。

この手順は、両方のプローブに適用されます。

1. 電極調整ナットを取り外してから、電極を取り外します。
2. ばねがプローブ内に留まるように先端を下に向けてプローブを持ち、サンプルフィッティングを PEEK 継手部に取り付けて、手できつく締めます。

**図 16-7 : プローブ、拡大表示**



項目	説明
1	電極調整ナット
2	1/4 インチ止めナット
3	ばね
4	止めリング
5	スプレーチューブ
6	電極チップ
7	電極チューブ
8	PEEK 継手部

3. プローブから PEEK 継手部と接続された電極チューブを引っ張ります。

4. PEEK 継手部からサンプル継手を外します。
5. 1/4 インチオープンエンドレンチを使用して、PEEK 継手部内に電極チューブを固定している止めナットを取り外します。
6. 電極チューブを止めナットから取り外します。
7. 新しい電極チューブを止めナットに挿入してから、PEEK 継手部に挿入します。  
電極チューブが PEEK 継手部に可能な限り奥まで挿入されていることを確認してください。電極チューブと継手部内部の接触箇所の間に隙間があると、デッドボリュームが生じることがあります。
8. 止めナットを締めてください。  
止めナットを斜めにねじ込んで途中でとまった状態にしたり、締めすぎないでください。チューブに漏れが生じることがあります。
9. ばねがプローブ内部にまだあることを確認して、電極調整ナットを締めます。
10. 電極チューブとスプレーチューブの狭い開口部の位置を合わせ、PEEK 継手部と接続した電極チューブをプローブに挿入します。電極チューブを折り曲げないように注意します。
11. 電極調整ナットを取り付けて締め付けます。
12. プローブを取り付けます。[プローブの取り付け](#)を参照してください。
13. イオン源を質量分析装置にインストールします。[イオン源の取り付け](#)を参照してください。
14. サンプルチューブを接続します。[イオン源チューブの接続](#)を参照してください。
15. 電極チップ拡張部を調整します。[TurbolonSpray プローブポジションの最適化](#)または [APCI プローブポジションの最適化](#)を参照してください。

## コロナ放電ニードルの交換



**警告! 感電の危険。**この手順を開始する前に、質量分析装置からイオン源を取り外します。すべての電気安全作業規範を遵守します。



**警告! 尖った部分により怪我をする危険。**ニードルの取り扱いは慎重に行います。ニードルチップは非常に尖っています。

### 実施前提手順

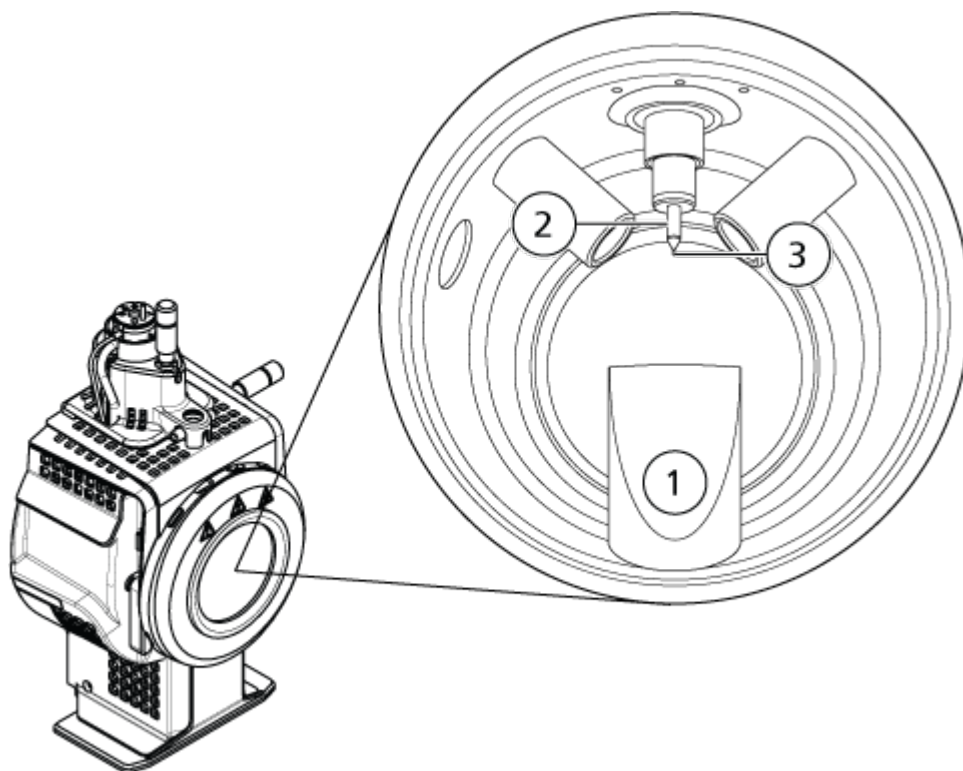
- [イオン源の取り外し](#).
- [プローブの取り外し](#).

コロナ放電ニードルチップが腐食すると、手で取り外せなくなることがあります。取り外せない場合は、ニードルチップを切断して取り除き、コロナ放電ニードル全体を交換します。

1. イオン源を回転して、開口部にアクセスしやすいようにします。



図 16-8 : コロナ放電ニードル



項目	説明
1	排気チムニー
2	セラミックスリーブ
3	コロナ放電ニードルチップ

2. 片手の親指と人差し指でコロナ放電ニードル調整ネジをつまみ、もう一方の手でコロナ放電ニードルを持って、コロナ放電ニードルチップを反時計回りに回して緩め、ゆっくりと取り外します。イオン源コンポーネントを参照してください。
3. コロナ放電ニードルをゆっくりと下ろし、排気チムニーを通して取り除きます。
4. 排気チムニーから新しいニードルを入れ、セラミックスリーブに可能な限り奥まで挿入します。
5. 新しいチップを片方の手の親指と人差し指でつまみ、もう一方の手でコロナ放電ニードル調整ネジを持って、コロナ放電ニードルチップを時計回りに回し、チップを取り付けます。
6. プローブを挿入して、イオン源を質量分析装置にインストールします。イオン源の取り付けを参照してください。



## サンプルチューブの交換



警告! 感電の危険。この手順を開始する前に、質量分析装置からイオン源を取り外します。すべての電気安全作業規範を遵守します。

### 実施前提手順

- サンプルフローを停止し、残留ガスがイオン源排気システムから除去されたことを確認します。
- イオン源を除去します。[イオン源の取り外し](#)を参照してください。

サンプルチューブに詰まりがある場合、次の手順で交換します。

1. プロブと接地継手部からサンプルチューブを取り外します。
2. サンプルチューブを適切な長さのチューブと交換し、適切なチューブカッターで切断します。[イオン源チューブの接続](#)を参照してください。
3. イオン源を取り付けます。[イオン源の取り付け](#)を参照してください。
4. サンプルフローを開始します。

# 質量分析装置のトラブルシューティング 17

本項には、システム問題のトラブルシューティングのための情報が含まれています。特定の作業は、ラボで SCIEX のトレーニングを受講した、有資格保守要員 (QMP) のみが行うことができます。高度なトラブルシューティングについては、SCIEX フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。

表 17-1 : システムの問題

症状	考えられる原因	修正アクション
QJet イオンガイドが極度に汚れているか、頻繁に汚れます。	Curtain Gas インターフェースのガス流量が少なすぎます。	Curtain Gas インターフェースのガスの設定を点検し、必要に応じて増加します。
真空圧力が高すぎるために、システムエラーが発生しました。	<ol style="list-style-type: none"><li>1. オイルレベルが低すぎます。</li><li>2. 液漏れがあります。</li><li>3. 誤ったオリフィスプレートが設置されています。</li></ol>	<ol style="list-style-type: none"><li>1. 粗引きポンプのオイルレベルを点検し、現地の QMP または FSE に連絡してオイルを追加してください。<a href="#">粗引きポンプのオイルレベルの点検</a>を参照してください。</li><li>2. 点検して液漏れを修理してください。</li><li>3. 正しいオリフィスプレートを設置してください。</li></ol>
QPS エキサイタモジュールの温度が高すぎるために、システムエラーが発生しました。	<ol style="list-style-type: none"><li>1. 質量分析装置のエアフィルタが詰まっています。</li><li>2. コイルボックスが調整されていません。</li><li>3. 室温が高すぎます。</li></ol>	<ol style="list-style-type: none"><li>1. お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。</li><li>2. 周囲温度の仕様については、システムの <a href="#">設置計画概要書</a> を参照してください。</li></ol>

表 17-1 : システムの問題 (続き)

症状	考えられる原因	修正アクション
制御ソフトウェアによって、イオン源が原因で質量分析装置が故障状態にあると報告されます。	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. プローブが取り付けられていません。</li> <li>2. プローブがしっかりと接続されていません。</li> </ol>	<p>デバイス詳細ページの状態パネルで故障を確認してください。</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. プローブを取り付けます。<a href="#">プローブの取り付け</a>を参照してください。</li> <li>2. プローブを取り外してから取り付けます。止めリングをしっかりと締めます。<a href="#">プローブの取り外し</a> および <a href="#">プローブの取り付け</a> を参照してください。</li> </ol>
制御ソフトウェアは、APCI プローブが使用中でも、TurbolonSpray プローブが取り付けられていることを示しています。	F3 ヒューズが飛びました。	フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
スプレー噴射が均一ではありません。	電極が詰まっています。	電極をクリーニングまたは交換します。 <a href="#">電極の交換</a> を参照してください。
インターフェースヒーターの準備ができていません。	インターフェースヒーターが故障しています。	お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
質量分析装置の分解能が低いです。	質量分析装置が調整されていません。	Instrument Optimization ウィザードを使用して、質量分析装置を最適化します。ソフトウェアユーザーガイドまたはヘルプを参照してください。

## 質量分析装置のトラブルシューティング

表 17-1 : システムの問題 (続き)

症状	考えられる原因	修正アクション
質量分析装置の性能が低下しています。	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. イオン源状態が最適化されていません。</li> <li>2. サンプルが正しく用意されなかったか、サンプルが劣化しています。</li> <li>3. サンプルインレット継手に漏れがあります。</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. イオン源状態を最適化します。<a href="#">TurbolonSpray プローブポジションの最適化</a> または <a href="#">APCI プローブポジションの最適化</a> を参照してください。</li> <li>2. サンプルが適切に用意されたことを確認します。</li> <li>3. 継手が正しいサイズとタイプであることを確認し、それらがしっかりと締められていることを確認します。継手を締め付けすぎないでください。漏れが続く場合、継手を交換します。</li> <li>4. 代替イオン源をインストールして最適化します。</li> <li>5. 問題が解決しない場合は、フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。</li> </ol>
アーク放電またはスパーク放電が発生します。	コロナ放電ニードルのポジションが正しくありません。	TurbolonSpray プローブが使用中の場合は、コロナ放電ニードルをカーテンプレートの方に向けて、ヒーターガスの蒸気から遠ざけます。 <a href="#">コロナ放電ニードルのポジションの調整</a> を参照してください。

表 17-2 : 感度の問題

考えられる原因	修正アクション
<b>感度が低下</b>	
イオン源パラメータが最適化されていません。	イオン源パラメータを最適化します。
質量分析装置が最適化されていません。	Instrument Optimization ウィザードを使用して、質量分析装置を最適化します。
カーテンプレートが汚れています。	カーテンプレートのクリーニングを行います。 <a href="#">カーテンプレートのクリーニング</a> を参照してください。

表 17-2 : 感度の問題 (続き)

考えられる原因	修正アクション
オリフィスプレートが汚れています。	<a href="#">オリフィスプレート前面のクリーニング</a> を参照するか、または現地の QMP か FSE に連絡してください。
QJet イオンガイドまたは IQ0 レンズが汚れています。	QJet イオンガイドと IQ0 レンズのクリーニングを行います。お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
Q0 領域が汚れています。	Q0 領域の汚染についてテストします。お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
シリンジまたはサンプル通路に漏れがあります。	漏れがないかシリンジまたはサンプルラインを点検し漏れが見つかった場合はそれを修理します。すべての継手が正しいタイプとサイズであることを確認します。
サンプルが劣化、またはサンプル濃度が低い。	サンプル濃度を確認します。新しいサンプルを使用します。
プローブが正しく取り付けられていません。	プローブを取り外して取り付けます。
イオン源が正しく取り付けられていないか故障しています。	ラッチが正しく固定されていることを確認しながら、イオン源を取り外して取り付けます。これで問題が解決されない場合、代替イオン源を取り付けて最適化します。
真空インターフェースの 1 つ以上の O リングがありません。	イオン源に O リングがある場合、それらを真空インターフェースに取り付けます。それらを紛失した場合、交換します。
LC システムまたは接続に問題があります。	LC システムの問題を解決します。
デクラスタリング電位 (DP) が最適化されていません。	DP を最適化します。
電極が汚れているか、塞がれています。	電極を交換します。 <a href="#">電極の交換</a> を参照してください。
<b>信号がないか、信号が不安定です。</b>	
チューブが詰まっています。	サンプルチューブを交換します。 <a href="#">イオン源チューブの接続</a> を参照してください。

表 17-3 : バックグラウンドノイズの問題

考えられる原因	修正アクション
Temperature (TEM)、IonSpray 電圧 (IS)、またはヒーターガス流量 (GS2) が高すぎます。	イオン源パラメータを最適化します。 <a href="#">TurbolonSpray プローブの最適化</a> または <a href="#">APCI プローブの最適化</a> を参照してください。
シリンジまたはサンプル通路が汚れています。	シリンジまたはサンプル通路をクリーニングまたは交換します。
カーテンプレートが汚れています。	カーテンプレートのクリーニングを行います。 <a href="#">カーテンプレートのクリーニング</a> を参照してください。
オリフィスプレートが汚れています。	オリフィスプレートの前面のクリーニングを行います。 <a href="#">オリフィスプレート前面のクリーニング</a> を参照してください。
QJet イオンガイドまたは IQ0 レンズが汚れています。	質量分析装置のフロントエンドコンポーネントのフルクリーニングを行います。お近くの有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
Q0 領域が汚れています。	Q0 領域のクリーニングを行います。有資格保守要員 (QMP) またはフィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせください。
移動相が汚染されています。	移動相を交換します。
イオン源が汚染されています。	イオン源コンポーネントをクリーニングするか交換してからイオン源とフロントエンドを次のように調整します。 <ol style="list-style-type: none"> <li>1. プローブを開口部から垂直および水平方向に最も離れた位置に移動します。</li> <li>2. (Analyst MD ソフトウェア) インターフェースヒーターの電源が入っていることを確認します。</li> <li>3. ポンプ流量 1 mL/分でメタノール:水 (50:50) を注入します。</li> <li>4. 制御ソフトウェアで、温度を 650、イオン源ガス 1 ~ 60、イオン源ガス 2 ~ 60 に設定します。</li> <li>5. Curtain Gas インターフェースのガス流量を 45 または 50 に設定します。</li> <li>6. 最良の結果を得るには、最低 2 時間、できれば一晩中実行してください。</li> </ol>

販売、技術サポートまたはサービスについては、フィールドサービスエンジニア (FSE) にお問い合わせいただくか、SCIEX のウェブサイト ([sciex.com](https://www.sciex.com)) のお問い合わせ情報をご覧ください。

# SCIEX 4500MD システムのパラメータ **A**

次の表には、SCIEX 4500MD システムの一般的なパラメータが含まれています。各スキャンタイプの最初の数字はあらかじめ設定された値です。数字の範囲は、各パラメータの許容範囲です。

表 A-1 : Triple Quadrupole スキャンタイプのシステムパラメータ

アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
	Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR <sup>3 4</sup>	20 10 ~ 55	20 10 ~ 55	20 10 ~ 55	20 10 ~ 55	20 10 ~ 55	20 10 ~ 55
CAD <sup>5</sup>	0 固定	6 固定	中 低、中、高	0 固定	6 固定	中 低、中、高
CAD <sup>6</sup>	0 固定	5 固定	9 0 ~ 12	0 固定	5 固定	9 0 ~ 12
IS <sup>3 4</sup>	5500 0 ~ 5500	5500 0 ~ 5500	5500 0 ~ 5500	-4500 -4500 ~ 0	-4500 -4500 ~ 0	-4500 -4500 ~ 0
NC <sup>7</sup>	3 0 ~ 5	3 0 ~ 5	3 0 ~ 5	-3 -5 ~ 0	-3 -5 ~ 0	-3 -5 ~ 0
TEM <sup>4 7</sup>	0 0 ~ 750	0 0 ~ 750	0 0 ~ 750	0 0 ~ 750	0 0 ~ 750	0 0 ~ 750
DP <sup>5</sup>	200 0 ~ 300	100 0 ~ 300	100 0 ~ 300	-100 -300 ~ 0	-100 -300 ~ 0	-100 -300 ~ 0
DP <sup>6</sup>	130 0 ~ 300	130 0 ~ 300	120 0 ~ 300	-60 -300 ~ 0	-60 -300 ~ 0	-150 -300 ~ 0

<sup>3</sup> Turbo V イオン源

<sup>4</sup> TurbolonSpray プローブ

<sup>5</sup> QTRAP 4500MD システム

<sup>6</sup> SCIEX Triple Quad 4500MD システム

<sup>7</sup> APCI プローブ



表 A-1 : Triple Quadrupole スキャンタイプのシステムパラメータ (続き)

アクセス ID	正イオンモード			負イオンモード		
EP	10 2 ~ 15	10 2 ~ 15	10 2 ~ 15	-10 -15 ~ -2	-10 -15 ~ -2	-10 -15 ~ -2
CEM <sup>5</sup>	1800 0 ~ 3300	1800 0 ~ 3300	1800 0 ~ 3300	1800 0 ~ 3300	1800 0 ~ 3300	1800 0 ~ 3300
CEM <sup>6</sup>	2000 0 ~ 3300	2000 0 ~ 3300	2000 0 ~ 3300	2000 0 ~ 3300	2000 0 ~ 3300	2000 0 ~ 3300
GS1 <sup>5</sup>	20 0 ~ 90	20 0 ~ 90	20 0 ~ 90	20 0 ~ 90	20 0 ~ 90	20 0 ~ 90
GS1 <sup>6</sup>	15 0 ~ 90	15 0 ~ 90	15 0 ~ 90	15 0 ~ 90	15 0 ~ 90	15 0 ~ 90
GS2	0 0 ~ 90	0 0 ~ 90	0 0 ~ 90	0 0 ~ 90	0 0 ~ 90	0 0 ~ 90
CE <sup>5</sup>	該当なし	該当なし	30 5 ~ 180	該当なし	該当なし	-30 -180 ~ -5
CE <sup>6</sup>	該当なし	該当なし	53 5 ~ 180	該当なし	該当なし	-40 -180 ~ -5
CXP <sup>5</sup>	該当なし	15 0 ~ 55	15 0 ~ 55	該当なし	-15 -55 ~ 0	-15 -55 ~ 0
CXP <sup>6</sup>	該当なし	9 0 ~ 55	27 0 ~ 55	該当なし	-17 -55 ~ 0	-12 -55 ~ 0

表 A-2 : LIT スキャンタイプのシステムパラメータ(QTRAP 専用)

アクセス ID	正イオンモード	負イオンモード
CUR <sup>3 4 7</sup>	20 10 ~ 55	20 10 ~ 55

表 A-2 : LIT スキャンタイプのシステムパラメータ(QTRAP 専用) (続き)

アクセス ID	正イオンモード	負イオンモード
CAD	高 低、中、高	高 低、中、高
IS <sup>3</sup>	5500 0 ~ 5500	-4500 -4500 ~ 0
NC <sup>7</sup>	3 0 ~ 5	-3 -5 ~ 0
TEM <sup>4 7</sup>	0 0 ~ 750	0 0 ~ 750
DP	100 0 ~ 300	-100 -300 ~ 0
EP	10 2 ~ 15	-10 -15 ~ -2
AF2	0.100 0 または 1	0.100 0 または 1
AF3	質量速度依存 0 ~ 10	質量速度依存 0 ~ 10
EXB	質量速度依存 -165 ~ 0	質量速度依存 0 ~ 165
CEM	1800 0 ~ 3300	1800 0 ~ 3300
GS1	20 0 ~ 90	20 0 ~ 90
GS2	0 0 ~ 90	0 0 ~ 90

表 A-2 : LIT スキャンタイプのシステムパラメータ(QTRAP 専用) (続き)

アクセス ID	正イオンモード	負イオンモード
CES	0 0 ~ 50	0 0 ~ 50
CE	10 5 ~ 180	-30 -180~-10

## TurbolonSpray プローブのパラメータ

次の表に、TurbolonSpray プローブの推奨される操作条件を 3 通りの流量別に示します。各流量に対して、Curtain Gas インターフェースのガス流量ができる限り多くなるようにします。最適化に使用された溶媒組成は、水: アセトニトリル (1:1) です。これらの条件は、プローブの最適化の開始地点を示しています。反復プロセスを使用して、フローインジェクション分析を使用するパラメータを最適化して、対象の化合物の最良のシグナル対ノイズ比を達成します。

表 B-1 : TurbolonSpray プローブのパラメータの最適化

パラメータ	標準値			動作範囲
	低	中	高	
LC 流量	5 µL/分 ~ 50 µL/分	200 mL/分	1,000 µL/分	5 µL/分 ~ 3,000 µL/分
イオン源ガス 1 (ネブライザガス)	20 psi ~ 40 psi	40 psi ~ 60 psi	40 psi ~ 60 psi	0 psi ~ 90 psi
イオン源ガス 2 (ヒーターガス)	0 psi	50 psi	50 psi	0 psi ~ 90 psi
IonSpray Voltage	5500 V	5500 V	5500 V	5500 V
Curtain Gas インターフェースのガス	20 psi	20 psi	20 psi	20 psi ~ 50 psi
イオン源温度 <sup>8</sup>	周囲温度 ~ 200 °C	200 °C ~ 650 °C	400 °C ~ 750 °C	最大 750 °C
デクラスタリング電位 (DP) <sup>9</sup>	正: 70 V 負: -70 V	正: 70 V 負: -70 V	正: 100 V 負: -100 V	正: 0 V ~ 400 V 負: -400 V ~ 0 V
プローブ垂直型マイクロメータ設定	7 ~ 10	2 ~ 5	0 ~ 2	0 ~ 13
プローブ水平マイクロメータ設定	4 ~ 6	4 ~ 6	4 ~ 6	0 ~ 10

<sup>8</sup> 最適な温度値は化合物と移動相の組成によって異なります。水分含有量が多いほど、温度を高くする必要があります。ゼロ(0)は、加熱されていないことを意味します。

<sup>9</sup> DP 値は化合物によって異なります。

## APCI プローブのパラメータ

表 B-2 : APCI プローブのパラメータ最適化

パラメータ	標準値	動作範囲
LC 流量	1,000 $\mu$ L/min	200 $\mu$ L/min ~ 3,000 $\mu$ L/min
イオン源 ガス 1 (ネブライザガス)	30 psi	0 psi ~ 90 psi
Curtain Gas インターフェースのガス	20 psi	20 psi ~ 50 psi
イオン源温度 <sup>10</sup>	400 $^{\circ}$ C	100 $^{\circ}$ C ~ 750 $^{\circ}$ C
ネブライザ電流	正: 3 $\mu$ A 負: -3 $\mu$ A	正: 0 mA ~ 5 $\mu$ A 負: -5 mA ~ 0 $\mu$ A
デクラスタリング電位 (DP)	正: 60 V 負: -60 V	正: 0 V ~ 300 V 負: -300 V ~ 0 V
プローブ垂直型マイクロメータ設定	4	目盛 0 ~ 13

## プローブポジション

プローブポジションは分析感度に影響を及ぼします。プローブポジションを最適化する方法に関する詳細は、[イオン源の最適化](#)を参照してください。

## 溶媒組成

ギ酸アンモニウムまたは酢酸アンモニウムの標準濃度は、正イオンで 2 mmol/L ~ 10 mmol/L で、負イオンで 2 mmol/L ~ 50 mmol/L です。有機酸の濃度は、体積で 0.1% ~ 0.5% (TurbolonSpray プローブの場合)、または体積で 0.1% ~ 1.0% (APCI プローブの場合) です。

広く使われている溶媒は、次のとおりです。

- アセトニトリル
- メタノール
- プロパノール
- 水

広く使われているモディファイヤーは、次のとおりです。

- 酢酸

<sup>10</sup> 温度値は化合物によって異なります。

## イオン源パラメータおよび電圧

---

- ギ酸
- ギ酸アンモニウム
- 酢酸アンモニウム

次のモディファイヤーは、そのイオン混合物とクラスタの組み合わせで、スペクトルを複雑化させるため、あまり使用されません。また、ターゲット化合物のイオンシグナル強度を抑制する場合があります。

- トリエチルアミン (TEA)
- リン酸ナトリウム
- トリフルオロ酢酸 (TFA)
- ドデシル硫酸ナトリウム

# キャリブレーションイオンと溶液

# C

注意: 結果が不正確になる可能性。期限切れの溶液や、指定された保管温度で保管されていない溶液は使用しないでください。

表 C-1 : チューニング頻度

キャリブレーション			分解能の最適化	
スキャンタイプ	頻度	手動/自動	頻度	手動/自動
Q1 および Q3	3~6 か月	両方	3~6 か月	両方
LIT	2 週間ごと、必要に応じて	両方	3~6 か月	自動のみ

表 C-2 : 4500MD 装置シリーズ用の推奨チューニング溶液

システム	Q1 および Q3		LIT
	正	負	正および負
SCIEX Triple Quad 4500MD LC-MS/MS system	POS PPG, 2e-6 M	NEG PPG, 3e-4 M	該当なし
QTRAP 4500MD LC-MS/MS system	POS PPG, 2e-6 M	NEG PPG, 3e-4 M	ES Tuning Solution (1:100 dilution)

キャリブレーションイオンと溶液

表 C-3 : Q1 および Q3 での PPG 正イオンスキャン

MS 装置	質量							
SCIEX Triple Quad 4500MD LC-MS/MS システム	59.0	175.1	500.3	616.5	906.7	1254.9	1545.1	1952.4
QTRAP 4500MD LC-MS/MS システム	59.0	175.1	500.3	616.5	906.7	1254.9	1545.1	1952.4

表 C-4 : Q1 および Q3 での PPG 負イオンスキャン

MS 装置	質量							
SCIEX Triple Quad 4500MD LC-MS/MS システム	45.0	411.2	585.4	933.6	1223.8	1572.1	1863.3	1979.3
QTRAP 4500MD LC-MS/MS システム	45.0	411.2	585.4	933.6	1223.8	1572.1	1863.3	1979.3

表 C-5 : QTRAP 4500MD LC-MS/MS システム (Agilent)

装置/極性	質量				
LIT 正	118.087	322.049	622.030	922.010	1521.972
LIT 負	112.985	431.982	601.978	1033.988	1633.949



# ツールバーアイコン

# D

ツールバーアイコンを追加するには、[上級ユーザーガイド](#)を参照してください。

表 D-1 : ツールバーアイコン











アイコン	名称	説明
	<b>New Subproject</b>	サブプロジェクトを作成します。Subprojects は、元々のプロジェクトがサブプロジェクトを伴って作成されていた場合にのみ、以後のプロセスにおいて作成されます。
	<b>Copy Subproject</b>	サブプロジェクトフォルダをコピーします。 サブプロジェクトは、現存するサブプロジェクトを持つ別のプロジェクトからのみコピーが可能です。プロジェクトおよびサブプロジェクトレベルで同じフォルダが存在した場合、ソフトウェアはプロジェクトレベルのフォルダを使用します。

表 D-2 : 測定メソッドエディタアイコン

アイコン	名称	説明
	<b>Mass Spec</b>	MS タブが Acquisition Method エディタに表示されます。
	<b>Period</b>	実験、 <b>IDA Criteria Level</b> を追加したり、期間を削除したりします。
	<b>Autosampler</b>	Autosampler Properties タブを開きます。
	<b>Syringe Pump</b>	Syringe Pump Properties タブを開きます。
	<b>Column Oven</b>	Column Oven Properties タブを開きます。
	<b>Valve</b>	Valve Properties タブを開きます。
	<b>DAD</b>	DAD Method Editor を開きます。 <a href="#">Show DAD Data</a> を参照してください。
	<b>ADC</b>	ADC Properties タブを開きます。 <a href="#">ACD データの表示</a> を参照してください。

## ツールバーアイコン

表 D-3 : 測定モードアイコン

アイコン	名称	説明
	<b>View Queue</b>	サンプルキューを表示します。
	<b>Instrument Queue</b>	リモート機器ステーションを表示します。
	<b>Status for Remote Instrument</b>	リモート機器のステータスを表示します。
	<b>Start Sample</b>	キュー内のサンプルを開始します。
	<b>Stop Sample</b>	キュー内のサンプルを停止します。
	<b>Abort Sample</b>	サンプル処理の途中で、そのサンプル測定を中断します。
	<b>Stop Queue</b>	すべてのサンプル処理を完了する前にキューを停止します。
	<b>Equilibrate</b>	デバイスの平衡化に使用するメソッドを選択します。このメソッドはキューの最初のサンプルで使用されたものと同じでなければなりません。
	<b>Standby</b>	装置を <b>Standby</b> 状態にします。
	<b>Ready</b>	装置を <b>Ready</b> 状態にします。
	<b>Reserve Instrument for Tuning</b>	質量分析装置のチューニングおよびキャリブレーションの準備を行います。
	<b>IDA Method Wizard</b>	<b>IDA Method Wizard</b> を開始します。

アイコン	名称	説明
	<b>Calibrate from spectrum</b>	Mass Calibration Option ダイアログを開き、使用可能なスペクトルを使用して質量分析装置のキャリブレーションを行います。
	<b>Manual Tune</b>	Manual Tune Editor を開きます。
	<b>Compound Optimization</b>	FIA による注入を用いて化合物を最適化します。

















アイコン	名称	説明
	<b>Instrument Optimization</b>	機器のパフォーマンス確認、質量較正の調整、質量分析装置の設定調整を行います。
	<b>View Queue</b>	サンプルキューを表示します。
	<b>Instrument Queue</b>	リモート機器を表示します。
	<b>Status for Remote Instrument</b>	リモート機器のステータスを表示します。
	<b>Reserve Instrument for Tuning</b>	装置のチューニングおよびキャリブレーションの準備を行います。
	<b>IDA Method Wizard</b>	IDA Method Wizard を開始します。

表 D-4 : Explore クイックリファレンス:クロマトグラムとスペクトル

アイコン	名称	説明
	<b>Open Data File</b>	ファイルを開きます。
	<b>Show Next Sample</b>	次のサンプルに移動します。
	<b>Show Previous Sample</b>	前のサンプルに移動します。
	<b>Go To Sample</b>	Select Sample ダイアログを開きます。
	<b>List Data</b>	データを表形式で表示します。
	<b>Show TIC</b>	スペクトルから TIC を生成します。
	<b>Extract Using Dialog</b>	質量を選択してイオンを抽出します。
	<b>Show Base Peak Chromatogram</b>	ベースピーククロマトグラフィー (BPC) を生成します。
	<b>Show Spectrum</b>	TIC からスペクトルを生成します。
	<b>Copy Graph to new Window</b>	有効なグラフを新規ウィンドウにコピーします。

## ツールバーアイコン

表 D-4 : Explore クイックリファレンス:クロマトグラムとスペクトル (続き)

アイコン	名称	説明
	<b>Baseline Subtract</b>	Baseline Subtract ダイアログを開きます。
	<b>Threshold</b>	しきい値を調整します。
	<b>Noise Filter</b>	Noise Filter Options ダイアログを表示し、ピークの最小幅を定義できます。この最小幅以下のシグナルが、ノイズとして認識されます。
	<b>Show ADC</b>	ADC データを表示します。
	<b>Show Auxiliary Traces</b>	Select Auxiliary Trace Channel ダイアログを開きます
	<b>Show File Info</b>	データ収集に用いる実験条件を表示します。
	<b>Add arrows</b>	有効なグラフの X 軸に矢印を追加します。
	<b>Remove all arrows</b>	有効なグラフの X 軸から矢印を消去します。
	<b>Offset Graph</b>	ADC データと質量分析装置データが記録された時間のわずかな差異を相殺します。複数のグラフを重ねて比較する際に便利です。
	<b>Force Peak Labels</b>	すべてのピークをラベル化します。
	<b>Expand Selection By</b>	グラフの一部をより詳細に閲覧するための拡大率を設定します。
	<b>Clear ranges</b>	拡大選択をクリアし、通常の倍率に戻します。
	<b>Set Selection</b>	選択した部分の開始および停止ポイントを定義します。カーソルで領域選択を行うことで、より正確に選択部分を定義することができます。
	<b>Normalize To Max</b>	グラフを最大サイズに設定し、最も強力なピークを最大スケールに視覚化します。
	<b>Show History</b>	スムージング、減算、キャリブレーション、ノイズフィルタリングなど、特定のファイルで実行されたデータ処理の概要を表示します。
	<b>Open Compound Database</b>	化合物データベースを開きます。
	<b>Set Threshold</b>	しきい値を調整します。

表 D-4 : Explore クイックリファレンス:クロマトグラムとスペクトル (続き)





アイコン	名称	説明
	Show Contour Plot	スペクトルグラフまたは XIC の形で、選択されたデータを表示します。また、DAD で取得されたデータの場合、等高線図上のデータは DAD スペクトルまたは XWC の形で表示されます。
	Show DAD TWC	DAD スペクトルの TWC を生成します。
	Show DAD Spectrum	DAD スペクトルを生成します。
	Extract Wavelength	DAD スペクトルから、XWC を閲覧するための波長範囲を 3 つまで抽出します。

表 D-5 : Explore ツールバーのクイックリファレンス:グラフの重ね表示








アイコン	名称	説明
	Home Graph	グラフを元のスケールに戻します。
	Overlay	グラフを重ねて表示します。
	Cycle Overlays	重ねられたグラフ間で表示が切り替わります。
	Sum Overlays	グラフが 1 つに統合されます。

表 D-6 : Explore ツールバーのクイックリファレンス:フラグメント解釈ツール

アイコン	名称	説明
	Show Fragment Interpretation Tool	Fragment Interpretation ツールが開きます。このツールでは .mol ファイルをもとに、単結合 / 非環状結合の開裂フラグメントが算出されます。

表 D-7 : Explore ツールバーのナビゲーションアイコン

アイコン	名称	機能
	Open File	ファイルを開きます。
	Show Next Sample	次のサンプルに移動します。
	Show Previous Sample	前のサンプルに移動します。

## ツールバーアイコン


表 D-7 : Explore ツールバーのナビゲーションアイコン (続き)

アイコン	名称	機能
	<b>GoTo Sample</b>	Select Sample ダイアログを開きます。
	<b>List Data</b>	データを表形式で表示します。
	<b>Show TIC</b>	スペクトルから TIC を生成します。
	<b>Extract Using Dialog</b>	クリックすると、質量を選択することでイオンを抽出できます。
	<b>Show Base Peak Chromatogram</b>	ベースピーククロマトグラフィー (BPC) を生成します。
	<b>Show Spectrum</b>	TIC からスペクトルを生成します。
	<b>Copy Graph to new Window</b>	有効なグラフを新規ウィンドウにコピーします。
	<b>Baseline Subtract</b>	Baseline Subtract ダイアログを開きます。
	<b>Threshold</b>	しきい値を調整します。
	<b>Noise Filter</b>	ピークの最小幅を定義する Noise Filter Options ダイアログを開きます。この最小幅以下のシグナルが、ノイズとして認識されます。
	<b>Show ADC</b>	ADC データを表示します。
	<b>Show Auxiliary Traces</b>	Select Auxiliary Trace Channel ダイアログを開きます
	<b>Show File Info</b>	データ収集に用いる実験条件を表示します。
	<b>Add arrows</b>	有効なグラフの X 軸に矢印を追加します。
	<b>Remove all arrows</b>	有効なグラフの X 軸から矢印を消去します。
	<b>Offset Graph</b>	ADC データと質量分析装置データが記録された時間のわずかな差異を相殺します。複数のグラフを重ねて比較する際に便利です。
	<b>Force Peak Labels</b>	すべてのピークをラベル化します。

表 D-7 : Explore ツールバーのナビゲーションアイコン (続き)

アイコン	名称	機能
	<b>Expand Selection By</b>	グラフの一部をより詳細に閲覧するための拡大率を設定します。
	<b>Clear ranges</b>	拡大選択をクリアし、通常の倍率に戻します。
	<b>Set Selection</b>	選択した部分の開始および停止ポイントを設定します。カーソルを用いて領域を強調表示することで、より正確に選択部分を指定できます。
	<b>Normalize to Max</b>	グラフのスケールを最大化します。これにより、(表示されているかどうかに関係なく)最も強いピークがフルスケールで表示されます。
	<b>Show History</b>	スムージング、減算、キャリブレーション、ノイズフィルタリングなど、特定のファイルで実行されたデータ処理の概要を表示します。
	<b>Open Compound Database</b>	化合物データベースを開きます。
	<b>Set Threshold</b>	しきい値を調整します。
	<b>Show Contour Plot</b>	スペクトルグラフまたは XIC の形で、選択されたデータを表示します。また、DAD で取得したデータについては、選択したデータを等高線図に DAD スペクトルまたは XWC 形式で表示することも可能です。
	<b>Show DAD TWC</b>	DAD の TWC を生成します。
	<b>Show DAD Spectrum</b>	DAD スペクトルを生成します。
	<b>Extract Wavelength</b>	DAD スペクトルから、XWC を閲覧するための波長範囲を 3 つまで抽出します。

表 D-8 : 解析タブと定量化ウィザードアイコン

アイコン	名称	説明
	<b>Set parameters from Background Region</b>	選択されたピークを使用します。

## ツールバーアイコン

表 D-8 : 解析タブと定量化ウィザードアイコン (続き)







アイコン	名称	説明
	Select Peak	選択されたバックグラウンドを使用します。
	Manual Integration Mode	ピークを手動で解析します。
	Show or Hide Parameters	ピーク検出パラメータの表示 / 非表示を切り替えます。
	Show Active Graph	分析試料のクロマトグラムのみを表示します。
	Show Both Analyte and IS	分析試料とそれに関連するクロマトグラムを表示します。この機能は、関連する内部標準が存在する場合にのみ使用できます。
	Use Default View for Graph	プリセットビュー(すべてのデータを表示)に戻します。ユーザーがクロマトグラムを拡大していた場合などに使用します。

表 D-9 : 結果表アイコン








アイコン	名称	説明
	Sort Ascending by Selection	選択したカラムを昇順にソートします。
	Sort Descending by Selection	選択したカラムを降順にソートします。
	Lock Or Unlock Column	選択した列をロックまたはロックを解除します。ロックされた列は移動できません。
	Metric Plot By Selection	選択したカラムからメトリックプロットを作成します。
	Show all Samples	Results Table のすべてのサンプルを表示します。
	Delete Formula Column	数式列を削除します。
	Report Generator	Reporter ソフトウェアを開きます。



表 D-10 : アイコンのクイックリファレンス: 定量化モード

アイコン	名称	説明
	<b>Add/Remove Samples</b>	Results Table からサンプルを追加および削除します。
	<b>Export as Text</b>	Results Table をテキストファイルで保存します。
	<b>Modify Method</b>	wiff ファイルを開きます。
	<b>Peak Review - Pane</b>	ピークをペインで開きます。
	<b>Peak Review - Window</b>	ピークをウィンドウで開きます。
	<b>Calibration - Pane</b>	キャリブレーションカーブをペインで開きます。
	<b>Calibration - Window</b>	キャリブレーションカーブをウィンドウで開きます。
	<b>Show First Peak</b>	最初のピークをペインまたはウィンドウに表示します。
	<b>Show Last Peak</b>	最後のピークをペインまたはウィンドウに表示します。
	<b>Show Audit Trail</b>	Results Table の監査証跡を表示します。
	<b>Clear Audit Trail</b>	Results Table の監査証跡を消去します。この機能は使用できません。
	<b>Statistics</b>	Statistics ウィンドウを開きます。
	<b>Report Generator</b>	Reporter ソフトウェアを開きます。

表 D-11 : 測定モードアイコン




アイコン	名称	機能
	<b>Start Sample</b>	クリックして、キュー内のサンプルの処理を開始します。
	<b>Stop Sample</b>	クリックして、キュー内のサンプルの処理を停止します。

表 D-11 : 測定モードアイコン (続き)

アイコン	名称	機能
	<b>Equilibrate</b>	クリックして、質量分析装置の平衡化に用いるメソッドを選択します、選択対象として、イオン源、LC カラム(使用している場合)、すべての周辺装置が表示されます。このメソッドはキューの最初のサンプルで使用されたものと同じでなければなりません。

## エレクトロスプレーイオン化モード

プローブの両側にそれぞれ 45 度の角度で配置されている 2 つのターボヒーターがあり、その中央部にプローブはあります。ターボヒーターからの加熱ドライガスとスプレーの混成物が、カーテンプレートのアパチャに対して 90 度の角度で発射されます。

液体溶媒でイオン化する化合物のみを、イオン源の気相イオンとして生成することができます。イオン生成の効率性および割合は、特定のイオンの溶媒和エネルギーに左右されます。溶媒和エネルギーの低いイオンは、溶媒和エネルギーの高いイオンよりも蒸発する可能性が高くなります。

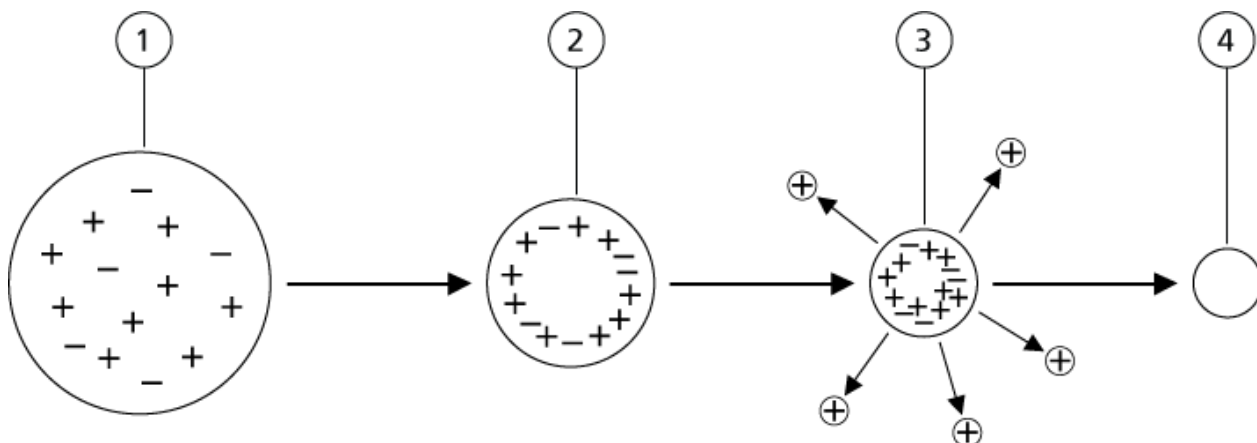
**IonSpray Voltage** とターボヒーターの相互作用により、ストリームが収束され、液滴の蒸発速度が速くなるため、結果としてイオンシグナルが増加します。加熱されたガスによりイオン蒸発効率が高まるため、感度が向上し、処理できる液体サンプル流量が増加します。

ネブライザガス的高速流量で、**IonSpray Voltage** 注入口の液体サンプルストリームの液滴がせん断されます。スプレーに印加された可変高圧を使用して、イオン源が各液滴に正味荷電を加えます。この電荷が液滴の拡散を助けます。単極イオンは、液体ストリームから分離されているため、高電圧によって優先的に液滴内に引き込まれます。ただし、この分離は完全なものではないため、各液滴に両極イオンが数多く含まれます。単極イオンが各液滴で支配的ですが、陽イオンと陰イオンの数の差が正味電荷を引き起こします。支配的な極性の過剰イオンのみがイオン蒸発に使用され、これらのうち、実際に蒸発するのはごくわずかです。

プローブは、ペプチド類やオリゴヌクレオチドなど、複数の帯電箇所のある化合物から多価イオンを生成できます。これは、複数の電荷により質量分析装置の質量範囲内で質量対電荷比 ( $m/z$ ) のイオンが生成される、高分子量種の分析において役立ちます。これによって、化合物の分子量を決まった手順によりキロダルトン (kDa) 単位で求めることができます。

帯電した各液滴には、溶媒と正イオンおよび負イオンが含まれていますが、一方のイオンが支配的な極性となります。図 E-1 を参照してください。導電媒体として、余剰電荷が液滴の表面に存在します。溶媒が蒸発すると、液滴の半径が小さくなるため、液滴の表面の電界が広がります。

図 E-1 : イオン蒸発



項目	説明
1	液滴には両極性のイオンが含まれますが、一方の極性が支配的になります。
2	溶媒が蒸発すると、液滴の表面の電界が強まり、イオンが表面に移動します。
3	臨界電界値に達すると、イオンは液滴から放出されます。
4	不揮発性残留物が、乾燥した粒子となって残ります。

液滴に余剰イオンが含まれ、十分な溶媒が液滴から蒸発する場合、イオンが表面から排出される臨界電界に達します。最終的に、溶媒のすべてが液滴から蒸発して、サンプル溶液の不揮発性要素で構成される乾いた粒子が後に残ります。

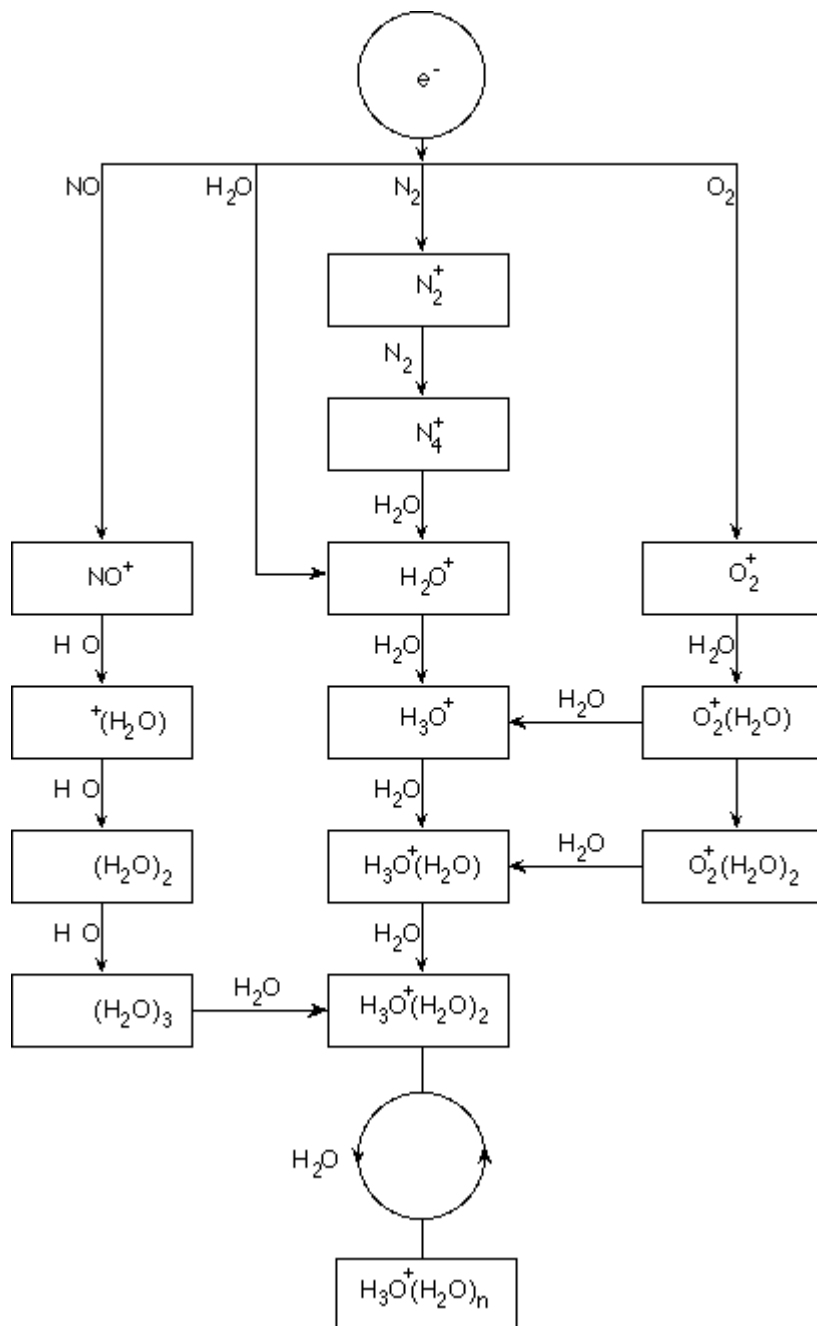
ほとんどの有機分子の溶媒和エネルギーが知られていないため、イオン蒸発に対する特定の有機イオンの感度を予測することは難しいです。液体の表面に堆積する界面活性剤を非常に高感度に検出することができるため、溶媒和エネルギーが重要なことは明らかです。

## APCI モード

これまで液体クロマトグラフィーと質量分析の連携がうまくいかなかったのは、溶液中の比較的不揮発性の分子を過度に分解せずに分子ガスに変換するのが困難だったためです。APCI プロンププロセスでは、穏やかに噴霧されたサンプルが、加熱されたセラミックチューブ内で微細に分散された小さな液滴となるため、サンプルが急速に蒸発し、サンプル分子の分解が抑えられます。

次の図に、反応物正イオン、プロトンハイドレート、 $\text{H}_3\text{O}^+[\text{H}_2\text{O}]_n$  に対する APCI プロセスの反応フローを示します。

図 E-2 : APCI 反応フロー図



主要な一次イオン、 $N_2^+$ 、 $O_2^+$ 、 $H_2O^+$ 、および  $NO^+$  は、空気中の主要な中性成分に対するコロナ生成電子の電子衝撃によって形成されます。 $NO^+$  は通常、清浄な空中の主な構成要素ではないものの、コロナ放電で引き起こされる自然反応により、イオン源内にこの種の堆積する割合が多くなります。

APCI プロブを通して導入されたサンプルは、ネブライザガスを使用して、加熱されたセラミックチューブ内にスプレー噴射されます。チューブ内で、きめ細かく拡散したサンプルおよび溶媒の液滴

## 動作原理 — イオン源

が、熱分解を最小限に抑えながら急速に蒸発します。穏やかな蒸発により、サンプルの分子同定が保持されます。

ガスサンプルと溶媒分子はイオン源ハウジングに送られ、そこで、セラミックチューブの端に接続されたコロナ放電ニードルによって、APCIによるイオン化が誘発されます。サンプル分子は、移動相の溶媒分子のイオン化によって生成された試薬イオンと衝突することによりイオン化されます。気化した溶媒分子はイオン化し、正極性の試薬イオン  $[X+H]^+$  と負極性の試薬イオン  $[X-H]^-$  が生成されます。図 E-3 を参照してください。サンプル分子と衝突時に安定したサンプルイオンを生成するのはこれらの試薬イオンです。

図 E-3 : 大気圧化学イオン化法

項目	説明
1	サンプル
2	一次イオンがコロナ放電ニードル周辺で生成されます。
3	イオン化によって、主に溶媒イオンが生成されます。
4	試薬イオンがサンプル分子と反応し、クラスタを形成します。
5	カーテンプレート
6	インターフェース

x = 溶媒分子、M=サンプル分子

サンプル分子は、正極性ではプロトン移動プロセスを通じて、また、負極性では電子移動またはプロトン移動のいずれかによってイオン化されます。イオン源の大気圧は比較的高いため、APCI イオン化プロセスのエネルギーは衝突が支配的になります。

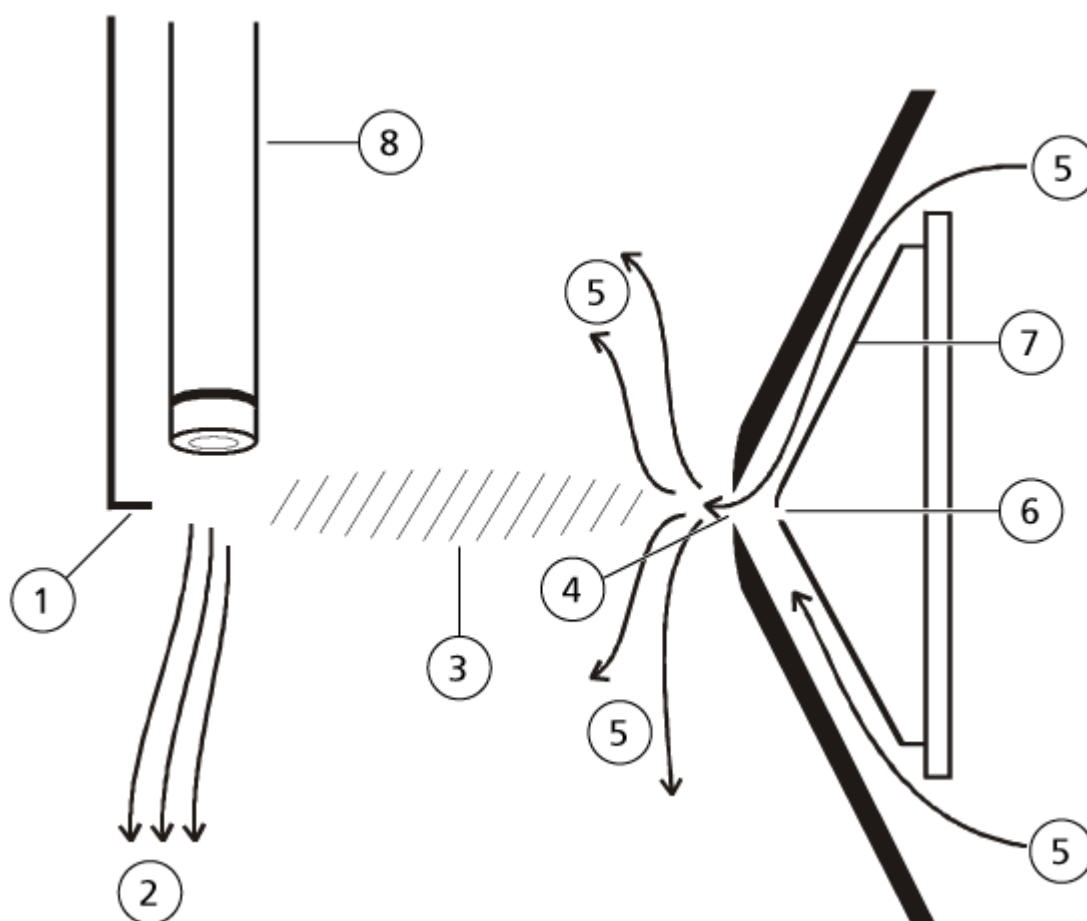
逆相アプリケーションの場合の試薬イオンは、正極性ではプロトン化された溶媒分子、負極性では溶媒和酸素イオンで構成されます。優性熱力学を用いて、モディファイヤーを追加すると試薬イオン組成が変化します。例えば、酢酸塩緩衝液またはモディファイヤーを追加すると、酢酸イオン  $[CH_3COO]^-$  を負極性の主な試薬とすることができます。アンモニウムモディファイヤーを追加すると、プロトン化したアンモニア  $[NH_4]^+$  を正極性の主要な試薬とすることができます。

衝突によって、プロトン化した水クラスタイオンなど、特定のイオンが継続的に均一に拡散されま  
す。試薬イオンに対する溶媒クラスタ緩和効果とイオン源内の比較的高いガス圧により、イオン源内のサンプルイオンの早期フラグメンテーションが抑制されます。その結果、イオン化プロセスにより、質量分析装置での質量分析用として主に分子プロダクトイオンが産出されます。

## APCI イオン化領域

次の図に、APCI プローブのイオン分子反応器の一般的な位置を示します。斜線は無壁反応器を示しています。放電ニードルとカーテンプレート間の電界により、マイクロアンペア範囲で自己放電するコロナ放電イオン電流が生じます。放電ニードルチップ周辺のプラズマで発生する電子の放出により、一次イオン ( $N_2^+$  や  $O_2^+$  など) が生成されます。これらの電子のエネルギーは、効果的なイオン化断面積によって中立分子が効率的にイオン化する前に、ガス分子と何回も衝突することで適度な状態になります。

図 E-4 : APCI イオン化領域



項目	説明
1	放電ニードルチップ
2	サンプルフロー
3	無壁反応器
4	カーテンプレートアパチャ
5	Curtain Gas インターフェース用ガス
6	オリフィス
7	オリフィスプレート
8	セラミックチューブ

次に、一次イオンがサンプルイオンを形成する中間イオンを生成します。選択した極性のイオンが電界の影響を受けてカーテンプレートの方向にドリフトし、ガスカーテンを通して質量分析装置内に流れ込みます。APCI プロブの大気圧は比較的高いため、イオン形成プロセス全体は衝突が支

## 動作原理 — イオン源

---

配的になります。電界強度が最も大きい放電ニードルチップのすぐ近くを除き、電界によってイオンに与えられるエネルギーは、イオンの熱エネルギーと比較すると少ない量になります。

衝突によって、特定のイオン (例: プロトン化した水クラスタイオン) が継続的に均一に拡散されま  
す。イオン分子反応プロセスでイオンが得る可能性のある過剰エネルギーは、すべて熱化されま  
す。衝突の安定化によって、多くの後発衝突が発生するにもかかわらず、プロダクトイオンの多くが  
固定化します。プロダクトイオンと反応イオンの形成は、760 torr (大気) の作動圧時の平衡条件に  
左右されます。

APCI プローブは無壁反応器として機能します。これは、イオン源から真空チャンバを通過して最終  
的に検出器に達するイオンが一度も壁と衝突せず、他の分子とのみ衝突するためです。イオンは指  
定イオン源の外側でも形成されますが、それらのイオンは検出されず、壁の表面と相互作用して最  
最終的に中和されます。

プローブの温度は、APCI プローブの操作にとって重要な要素です。分子同定を温存するには、温  
度を十分に高く設定して急速な蒸発を可能にします。十分に高い操作温度で、液滴は急速に蒸発  
するため、有機分子が液滴から熱劣化を最小限に抑えた状態で離脱します。しかし、設定温度が低  
すぎると、蒸発プロセスが遅くなり、蒸発が完了する前に熱分解または分解が生じる可能性があ  
ります。最適温度を超える温度で APCI プローブを操作すると、サンプルの熱分解が生じる可能性が  
あります。



# 手動での化合物最適化

# F

これらのデバイスは Tune and Calibrate モードではシステムを介して制御できないため、ユーザーはオートサンプラーと注入バルブを手動で制御する必要があります。

## 前提条件

- 質量分析装置のチューニング、キャリブレーションが完了していること。
- LC 分離のための条件がわかっていること。
- ハードウェアプロファイルにシリンジポンプが含まれていること。
- 必要な周辺装置(該当する場合はシリンジポンプを含む)すべてと LC コンポーネントが、ハードウェアプロファイルに含まれていること。

## 必要な資材

特定の化合物用に装置パラメータをチューニングするには、次のソリューションに従うことが推奨されます。4 つの化合物の混合物は手順内の各ステップを説明するために使用されます。ユーザーは、対象となる分析に適切な化合物を使用する際、同じ手順を適用する必要があります。

- 移動相: アセトニトリルと水(1:1) + 2 mM の酢酸アンモニウム + 0.1%のギ酸
- LC ポンプとオートサンプラー。
- オートサンプラーバイアル
- レセルピン、ミノキシジル、トルブタミド、レシンナミンで構成された 4 化合物混合物(10 ng/mL)です。溶液は注入および FIA に使用できます。濃度はシステムに依存します。50% 脱イオン水および 0.1% ギ酸を希釈剤としたアセトニトリル 49.9% の溶剤を使用します。他の化合物で代用する場合は、分子量が判明済みで、Turbo V イオン源によるイオン化の対象となる場合に限ります。

表 F-1 : 化合物と  $m/z$  値

化合物	$m/z$ 値
ミノキシジル	210.2
トルブタミド	271.1
レセルピン	609.3
レシンナミン	635.3

## 手動での化合物最適化について

手動での化合物最適化は、分析試料のための化合物およびイオン源依存パラメータを最適化するために使用します。ユーザーが手動で分析試料のために最適化するとき、MS 測定メソッドは Tune and Calibrate モードで作成されます。注入または LC を使用できるように、選択されたサンプル導入方法に応じて、測定メソッドに LC メソッドを追加します。

最も高いシグナルを与えるために最適化を行っても、常に最高のシグナル対ノイズ比が得られるとは限りません。ノイズは、いくつかのパラメータのためのシグナルに対応することができるため、目標がシグナル対ノイズ比の最大化である場合、最適化中に検証する必要があります。

イオン源に依存するパラメータを最適化する際には、サンプル導入の方法としてフローインジェクション分析 (FIA) またはティー注入を用い、サンプル分析時に使用される流量でサンプルを導入します。CAD ガスパラメータは、Source/Gas タブに示されている唯一の化合物依存性パラメータであり、分析試料を注入しながら、容易に最適化することができます。

イオン源に依存するパラメータを最適化する前に、イオン源の位置を最適化します。[イオン源の最適化](#)。

## スキャン種類について

この例では、Q1 MS、Q1 MI、プロダクトイオン、MRM スキャン種類を使用します。Q1 MS スキャン種類は、対象化合物の存在を確認するために使用されます。Q1 MI スキャンは MS またはプレ衝突セルの電圧を最適化するために使用されます。プロダクトイオンスキャン種類は、各化合物のプロダクトイオンの決定に使用されます。MRM スキャン種類は、各プロダクトイオンまたはフラグメントの衝突エネルギー (CE) および衝突セル出口電位 (CXP) を最適化するために使用されます。定量的もしくは定性的な解析のためのこのセクションで作成したメソッドを使用します。

## 分析試料の手動最適化

測定メソッド作成後、**Edit Ramp** 機能を用いるか Tune Method Editor で手動でパラメータを編集し、化合物依存性パラメータを最適化します。イオン源ごとに異なるパラメータは、Tune Method Editor で手動で調整できます。使用するスキャン種類によって最適化できるパラメータが異なります。

下記に挙げる順に手順に従ってください：

1. [化合物の存在を確認](#)
2. [MS 特異パラメータの最適化](#)
3. [最適化のためのプロダクトイオンを決定](#)
4. [各プロダクトイオンの衝突セル出口電位を最適化する](#)

## 化合物の存在を確認

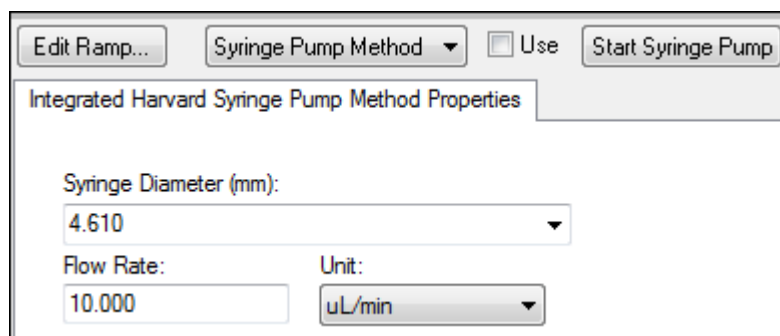
1. プロジェクトを作成します。
2. ハードウェアプロファイルを有効にします。
3. サンプルを調製：

- a. 化合物溶液をシリンジに吸引して、シリンジから空気を抜きます。
  - b. 特別な接続器の付いたチューブを用いて、質量分析装置にシリンジを接続します。
  - c. 内蔵のシリンジポンプにシリンジを取り付けます。
4. 5  $\mu$ L/分から 10  $\mu$ L/分の量で溶液に化合物を注入します。
  5. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Manual Tuning** をダブルクリックします。
  6. メソッドリストフィールドで、**Syringe Pump Method** をクリックしてください。
  7. Syringe Pump Method Properties タブで、次の表に示すパラメータ値を入力します。

表 F-2 : Syringe Pump Method Properties タブ

パラメータ	値
Syringe Diameter	シリンジ依存: 1.0 mL シリンジを用いる場合は 4.610 mm
Flow Rate	10
Unit	$\mu$ L/分

図 F-1 : Syringe Pump Method Properties タブ



8. **Start Syringe Pump** をクリックします。
9. メソッドリストから **MS Method** を選択します。
10. MS タブで、次の表に示すパラメータ値を入力します。

表 F-3 : MS タブ

パラメータ	値
Scan type	Q1 MS (Q1)
Start (Da)	200
Stop (Da)	700
Scan rate (Da/s)	200

表 F-3 : MS タブ (続き)

パラメータ	値
Duration (min)	3

11. **Start** をクリックします。
12. 均等な TIC が左側に表示され、ピークが右側に表示されるまで待ってから、**Stop** をクリックしてください。
13. **MCA** チェックボックスをオンにします。
14. **Cycles** フィールドに 10 と入力します。
15. **Start** をクリックします。  
スキャンが 10 回終了すると、4 つの化合物の質量がイオンとして表示されます。

---

**ヒント!** 過去のまたは想定したイオンクロマトグラムペインが非表示の場合、**Window** メニューから対象のウィンドウを選択します。

---

**注:** 化合物のイオン強度には大きなばらつきがみられます。最適化時に必要に応じて高または低濃度の溶液へ移動を容易にするために、最適化前にいくつかの濃度レベルを用意しておいてください。

---

16. 右下のスペクトルペインを右クリックして、**Open File** をクリックします。
17. 目的の化合物を見つけ、最高ピークの  $m/z$  値を記録します。これらの値は、予想される  $m/z$  値の 0.1 Da ~ 0.2 Da の範囲内になっている必要があります。次の手順で、 $m/z$  値を使用します。

## MS 特異パラメータの最適化

DP はオリフィスと地面では異なります。電位差が大きいほどデクラスタリングの量が大きくなります。

DP のパラメータは分析試料信号に重大な影響を与えます。一般的な DP 値の範囲は 20 V ~ 150 V です。DP 値が低すぎると、イオン強度が低くクラスターによる干渉が生じる場合があります。DP 値が高すぎると、ソースでの分析試料のフラグメンテーションの原因となります。通常、DP は最大強度を生じる値に設定されます。

EP のパラメータは、高圧 Q0 領域全体でイオンをガイドしフォーカスするエントランス電位をコントロールします。正イオンには 10 V、負イオンには -10 V が一般的に設定されています。EP は化合物の最適化には影響をほとんど及ぼさないため、分析試料の検出限界に影響を与えることなく通常はデフォルトのままです。

1. Tune Method Editor へ戻り、メソッドを **Q1 Multiple Ions (Q1 MI)** スキャン種類に変更します。
2. 質量表に、適切なパラメータ値を入力します。次の表を参照してください。

表 F-4 : 質量表パラメータ – Q1 多重イオン (Q1 MI)

化合物	Q1 質量	時間
レセルピン	609.3	1
ミノキシジル	210.2	1
トルブタミド	271.1	1
レシンナミン	635.3	1

単純例の場合はレセルピンで開始します。残りの化合物に対して、手動最適化プロセスを繰り返します。

3. **Edit Ramp** をクリックします。
4. Ramp Parameter Settings ダイアログで **Declustering Potential (DP)** を選択します。

注: DP パラメータで開始し、ダイアログに表示される順番に他のパラメータを最適化します。順番が異なると、パラメータが適切に最適化されないことがあります。

5. 必要な **Start**、**Stop**、および **Step** の値を入力します。

ヒント! 既存の値は良好な出発点となります。**Edit Ramp** 機能を用いて、これらの値をより効率的になるように変更します。

6. **OK** をクリックします。
7. **Start** をクリックします。
8. XIC ウィンドウ枠の右下を右クリックして **Open File** をクリックし、XIC 表示を最大にします。
9. XIC をモニタリングします。

注: 対象のイオンに対して最良の信号/秒が得られる値が最適値です。

10. 対象となるイオンの最適値を記録します。
11. カーソルを質量表に移動させ、右クリックして最適化したパラメータを追加します。表に列が追加されます。
12. 最適化した値を適切な行に加えます。
13. 全質量について最適化リストが得られるまで、測定メソッドで、各質量に対してこれらのステップを繰り返します。
14. これらのステップを繰り返して他の MS 特異パラメータを最適化します。

表 F-5 : MS 特異パラメータ

パラメータ	コメント
DP	DP を最大強度が得られる値に設定します。
EP	影響が少ないため、このパラメータを最適化することは稀です。

表 F-5 : MS 特異パラメータ (続き)

パラメータ	コメント
CEP	最強強度の CEP 値を選択します。

## 最適化のためのプロダクトイオンを決定

衝突エネルギー (CE) は衝突セルへと加速しているときにプレカーサーイオンが受け取ったエネルギーの総数を制御します。

以前に取得されていた MS 固有の最適値を使用して、一度に 1 つの化合物についてこの手順を実行してください。プロダクトイオンは、MRM 遷移の Q3 質量を提供します。

この例では、化合物のレセルピンが使用されます。

1. Tune Method Editor で、XIC ペインを閉じます。
2. **Scan type** フィールドの **Product Ion (MS2)** をクリックします。
3. Compound タブで、**MS 特異パラメータの最適化**に記載されている最適値を入力します。
4. MS タブの **Product Of** フィールドに 609.4 を入力します。  
この値は**化合物の存在を確認**に記載されているレセルピンの質量割り当てです。
5. **Center / Width** チェックボックスがオフであることを確認します。
6. 質量表に、適切な **Start**、**Stop**、**Time** の値を入力します。表 F-6 を参照してください。

表 F-6 : 質量テーブルパラメータ (プロダクトイオンスキャン)

フィールド	値
<b>Start (Da)</b>	100
<b>Stop (Da)</b>	650
<b>Time (sec)</b>	2

7. **Edit Ramp** をクリックします。  
Ramp Parameter Settings ダイアログが開きます。
8. **Collision Energy** を選択し、求められた **Start**、**Stop**、**Step** の値を入力します。

**注:** 既存の値は良好な出発点となります。**Edit Ramp** 機能を用いて、これらの値をより効率的になるように変更します。

9. **OK** をクリックします。
10. **MCA** チェックボックスをオンにします。
11. **Start** をクリックします。
12. XIC 右下のペインを右クリックして **Open File** をクリックします。

13. 強度が最大の製品イオンを選択し、その製品イオンの  $m/z$  値を最初の小数点まで記録します (例: 195.1)。  
各化合物のために 2、3 のプロダクトイオンを最適化することを推奨します。追加的遷移を使用して確認すること、または干渉が発見された時のために化合物を再最適化する必要を回避することができます。

---

**注:** 最適化に選ばれた最高のピークが水または二酸化炭素などのプレカーサーイオンによる通常の損失を表わさないことを確認してください。プロダクトイオンの質量が低すぎないこと、またカラム解析中に実際のサンプルやクラスターで移動相からの遷移妨害が生じる場合があることを確認してください。

---

14. 残りの化合物にもこの手順を繰り返します。

## 各プロダクトイオンの衝突セル出口電位を最適化する

1. Tune Method Editor で、XIC ペインを閉じます。
2. 前回保存したメソッドを開きます。
3. 質量表で、化合物の Q1 および Q3  $m/z$  値を検証します。
4. **Compound** タブをクリックし、**MS 特異パラメータの最適化**で記録した最適な DP 値および CE 値を入力します。
5. **Edit Ramp** をクリックします。
6. Ramp Parameter Settings ダイアログで **Collision Cell Exit Potential (CXP)** を選択します。
7. 必要な **Start**、**Stop**、および **Step** の値を入力します。

---

**ヒント!** 既存の値は良好な出発点となります。**Edit Ramp** 機能を用いて、これらの値をより効率的になるように変更します。

---

8. **OK** をクリックします。
9. **Start** をクリックします。
10. XIC 右下のペインを右クリックして **Open File** をクリックします。
11. 対象となるイオンの最適値を記録します。  
最良の信号が得られる値が最適値です。
12. 質量表を右クリックし、最適化したパラメータを選択します。  
これにより表にカラムが追加されます。
13. 他のプロダクトイオンをモニタリングした場合は手順を繰り返します。
14. 適切な行に最適値を追加してください。
15. メソッドを保存します。
16. これまでに最適化された他の化合物について、この手順を実行します。

## イオン源とガスパラメータの手動最適化

イオン源とガスの設定を正しく行って、質量分析装置を汚染から防止し、対象の混合物がイオンとして最適な状態でガス相に変化するようにします。

注: 最適なイオン源およびガス設定は溶媒組成と流量に関連します。

LC の状態が著しく変化するとき、イオン源とガス設定を調整しなければいけません。

イオン源とガスパラメータを最適化するために、対象の混合物に関してシリンジポンプを設定し、サンプルチューブを T 字管で LC デバイスと接続します。LC ポンプの制御は、手動またはソフトウェアによって行うことができます。

イオン源とガス設定を手動で最適化する際、手動チューニングによりパラメータを手動で変更する間にオートサンプラーを使用して、対象となる混合物を手動で注入することもできます。

### イオン源の準備

1. マイクロメータの水平目盛を 5 に設定します。
2. マイクロメータの垂直目盛をイオン源の流量に合わせて設定します。  
次の表のパラメータを使用します。

表 F-7 : Turbo VV イオン源垂直パラメータ

流量	初期垂直パラメータ
1 $\mu$ L/ 分~20 $\mu$ L/ 分	10
20 $\mu$ L/ 分~ 250 $\mu$ L/ 分	5
250 $\mu$ L/ 分~ 500 $\mu$ L/ 分	2
500 + $\mu$ L/ 分	0

最適化実行の方法によって、LC ポンプ付ハードウェアプロファイルを設定する必要がある場合があります。

[イオン源の最適化](#)を参照してください。

### イオン源パラメータの最適化

イオン源パラメータは、目的の化合物の最高のシグナル対ノイズ比のために最適化されます。Curtain Gas インターフェース用ガスの流量は、感度を失うことなく最高値で最適化されます。[イオン源の最適化](#)を参照してください。

次の手順に従って、**Curtain Gas (CUR)** パラメータを最適化します。このパラメータの主な機能は、イオン光学の汚染を防止することです。CUR パラメータは、感度を失うことなく、常に、可能な限り高い数値で維持される必要があります。数値は、質量分析装置のタイプおよびイオン源により異なります。

開始値よりも低くパラメータを設定しないでください。



1. Navigation バーの **Tune and Calibrate** の下にある **Manual Tuning** をダブルクリックします。
2. **File > Open.** をクリックします。
3. **Files** リストで化合物パラメータの最適化に使用する測定メソッドをクリックし、**OK** をクリックします。  
Tune Method Editor でメソッドが開きます。
4. Source/Gas タブを開きます。
5. イオン源およびガス流ガイドを使用して、流量に適切になるよう、すべてのイオン源およびガスパラメータを設定します。
6. 稼働時間を十分長く設定して、多くのパラメータが調整されるようにします。推奨開始時間は 15 分間です。
7. **Start** をクリックします。  
Tune Method Editor 下のペインにデータが表示されます。
8. 目的のピーク信号を記述します。
9. **Curtain Gas (CUR)** フィールドで、値を 5 増やします。
10. **Curtain Gas (CUR)** 値を、感度が失われずに最高値となるところまで上げ続けます。  
ほとんどの Source/Gas パラメータと同様、2 つの値が同じ結果を示す場合には、より高い方を使用してください。
11. 他のソース/ガスパラメータにもこの手順を繰り返してください。  
これらのパラメータを最適化する際には、最高のシグナル対ノイズ比値を出す値を探してください。

## 拡張パラメータ

次のパラメータは必ず経験のあるオペレータが最適化を行ってください。

### AF2 の最適化

AF2 パラメータは MS3 スキャンにおいて 2 番目のプレカーサーイオンのフラグメンテーションを管理します。使用される励起エネルギーの量は、化合物およびフラグメンテーションの目標量によって決定されます。

1. 正負イオンモードの双方において、**AF2** を次のように徐々に上げます：**Step** 値 10 mV で 70 mV ~ 300 mV。許容範囲は 0 mV ~ 1000 mV です。
2. フラグメンテーションの理想量が得られる AF2 値を選択します。

### 衝突エネルギーの広がり (CES)

QTRAP 質量分析装置のユニークな機能として、オートフラグ実験を実行する機能があります。複合スペクトルは、衝突エネルギーを最適化する必要を除去し、3 つの異なる衝突エネルギーからイオンでリニアイオントラップを満たすことにより入手できます。

化合物依存性パラメータでの EPI (プロダクトイオン強調モード) および MS3 実験においては、衝突エネルギー拡散 (CES) フィールドを用いて、実験で印加されるさまざまな衝突エネルギーを指定す

## 手動での化合物最適化

---

ることができます。例えば、CE 値が 30 で CES 値が 15 で使用する場合、衝突エネルギーは 15、30、45 が使用されます。

## Batch Editor

Batch Editor 表を右クリックしてオプションにアクセスします。

図 G-1 : バッチの右クリックメニュー

Plate Position	Vial Position	Data File	Inj. Volume (µl)
1	0	DataSET1	-1.000
1	0	DataSET1	-1.000
1	0		
1	0		
1	0		
1	0		
1	0		
1	0		
1	0		


メニュー	機能
Open	(開く)バッチファイルを開きます。
Import From	(インポート元)ファイルからバッチをインポートします。
Save As Batch	(バッチとして保存)バッチを別の名前で保存します。
Save As a Template	(テンプレートとして保存)バッチをテンプレートとして保存します。
Hide/Show Column	(カラムの表示 / 非表示)カラムを表示 / 非表示にします。
Save Column Settings	(カラム設定を保存)バッチカラムの設定を保存します。

## 右クリックメニュー

メニュー	機能
Add Custom Column	(カスタムカラムの追加)カスタムカラムを追加します。
Delete Custom Column	(カスタムカラムの削除)カスタムカラムを削除します。
Fill Down	(下方向へコピー)選択したセルに同一データをコピーします。
AutoIncrement	(AutoIncrement)選択したセルのデータを自動的に増やします。
Delete Samples	(サンプルを削除)選択した行を削除します。
Select Autosampler	(オートサンプラーを選択)オートサンプラーを選択します。

## キュー状態とデバイス状況

Queue Manager はキュー、バッチ、サンプルのステータスを表示します。キュー内の特定のサンプルについての詳細情報も閲覧することができます。

ヒント! View Queue (  ) をクリックして、キューを表示します。

Queue の右クリックメニューの使い方については、[キュー](#)を参照してください。

### キュー状態

キューの現在の状態は、Queue Server グループに示されています。

図 G-2 : Normal モードを示すキューサーバーインジケータ

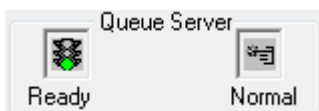


図 G-3 : チューニングモードを示すキューサーバーインジケータ



最初のアイコンは、キューの状態を示しています。2 番目のアイコンは、キューが Tune モード(チューニング)と(サンプルを実行するための)Normal モードのどちらであることを示します。アイコンとキューの状態の説明は、[表 G-1](#) を参照してください。

表 G-1 : キュー状態

アイコン	状態	定義
 Queue Server Not Ready Normal	<b>Not Ready</b>	ハードウェアプロファイルが無効化され、キューはサンプルの提出を受け付けていない状態です。
 Queue Server Stand By Normal	<b>Stand By</b>	ハードウェアプロファイルは有効ですが、すべてのデバイスがアイドル状態になっています。ポンプが動作しておらず、ガスがオフになっています。
 Queue Server Warming Up Normal	<b>Warming Up</b>	質量分析装置およびデバイスの平衡化、カラムの調整、オートサンプラーの針の洗浄が完了し、また、カラムオープンが規定温度に達している状態です。オペレータは平衡化の持続時間を選択できます。この状態から、システムは <b>Ready</b> 状態に移ることができます。
 Queue Server Ready Normal	<b>Ready</b>	このシステムはサンプルの実行を開始する準備が完了しており、デバイスも平衡化が完了して準備が整っています。この状態では、キューは、サンプルを受け取ることができ、サンプルが提出された後に実行されます。
 Queue Server Waiting Normal	<b>Waiting</b>	次のサンプルが提出されたときにシステムが自動的に測定を開始します。
 Queue Server PreRun Normal	<b>PreRun</b>	このメソッドは各デバイスにダウンロードされ、デバイスの平衡化が起こります。この状態は、バッチ内の各サンプルの測定前に行われます。
 Queue Server Acquiring Normal	<b>Acquiring</b>	メソッドが実行され、データ収集が行われています。
 Queue Server Paused Normal	<b>Paused</b>	システムは、測定中に一時停止されています。

## 機器およびデバイスステータスアイコンを表示

質量分析装置および有効なハードウェア構成での各デバイスを表すアイコンは、ウィンドウの右下隅にあるステータスバーに表示されます。ユーザーは、LC ポンプの圧力が適切であることを確認するために LC ポンプの詳細な状態を表示したり、イオン源の温度を監視するために質量分析装置の詳細な状態を表示したりすることができます。

## 右クリックメニュー

注: 各ステータスについて、背景色が赤色になることがあります。赤色の背景は、そのステータスにある間、デバイスがエラーを検出したことを示しています。

ステータスバーで、デバイスまたは質量分析装置のアイコンをダブルクリックします。Instrument Status ダイアログが表示されます。

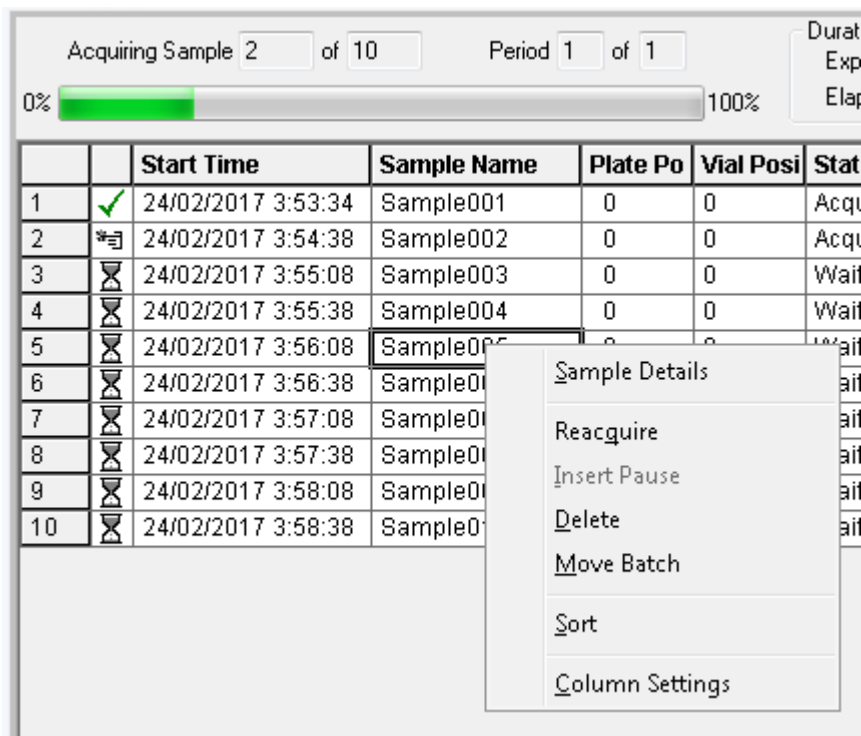
表 G-2 : 機器およびデバイスステータスアイコン

状態	アイコン	背景色	説明
アイドル状態		緑または黄色	デバイスが作動していません。背景色が黄色の場合、デバイスは作動可能な状態になる前に、平衡化する必要があります。背景色が緑の場合、デバイスは作動準備ができています。
平衡化		緑または黄色	デバイスが平衡化中です。
待機中		緑	デバイスは、ソフトウェアまたは他のデバイスからのコマンド、またはオペレータによる何らかのアクションを待っています。
実行中		緑	デバイスは、バッチを実行しています。
中止しています		緑	デバイスは、バッチを停止しています。
ダウンロード		緑	メソッドがデバイスに転送されています。
準備完了		緑	デバイスは作動していませんが、作動する準備ができています。
エラー		赤	デバイスに調査が必要なエラーが発生しました。

## キュー

キューの表を右クリックし、オプションを表示します。

図 G-4 : Queue Manager の右クリックメニュー



メニュー	機能
Sample Details	(サンプル詳細) Sample Details ダイアログを開きます。
Reacquire	(再測定) サンプルを再度測定します。
Insert Pause	(一時停止を挿入) 2つのサンプルの間に秒単位で一時停止を挿入します。この機能は本ソフトウェアのこのバージョンでは使用できません。
Delete	(削除) バッチまたは選択されたサンプルを削除します。
Move Batch	(バッチ移動) バッチをキュー内で移動させます。
Sort	(ソート) 事前に選択されたカラムでソートします。
Column Settings	(カラム設定) カラムの設定を変更します。

## Contour Plot ペインの右クリックメニュー

メニュー	機能
Show DAD Spectrum	新しいペインが DAD スペクトルとともに開きます。
Extract Wavelengths (Use Range)	DAD スペクトルから、XWC を表示するための波長範囲を 3 つまで抽出します。

## 右クリックメニュー

メニュー	機能
Extract Wavelengths (Use Maximum)	最大波長を用いて波長範囲を抽出します。
Zoom to selection	選択した領域にズームインします。
Add User Text	カーソルの位置にテキストボックスを追加します。
Undo Zoom	グラフが元のスケールに戻ります。
Delete Pane	選択したペインが削除されます。
Show Cross-Hair	照準が表示されます (nm/分)。

## Show File Information ペインの右クリックメニュー

表 G-3 : Show File Information ペインの右クリックメニュー

メニュー	機能
Copy	(コピー) 選択したデータをコピーします。
Paste	(貼り付け) データを貼り付けます。
Select All	(全選択) ペイン内の全データを選択します。
Save To File	(ファイルに保存) データを rtf ファイルとして保存します。
Font	(フォント) フォントを変更します。
Save Acquisition Method	(測定メソッドを保存) 測定メソッドを dam ファイルとして保存します。
Save Acquisition Method to CompoundDB	(測定メソッドを CompoundDB に保存) Specify Compound Information ダイアログを開きます。化合物データベースに保存する ID とその分子量を選択します。
Delete Pane	(ペインの削除) 選択したペインを削除します。

## スペクトルペイン

表 G-4 : スペクトルペインの右クリックメニュー

メニュー	機能
List Data	データポイントをリストし、クロマトグラムを統合します。
Show TIC	TIC を含む新しいペインを生成します。



表 G-4 : スペクトルペインの右クリックメニュー (続き)

メニュー	機能
Extract Ions (Use Range)	選択されたペインから特定のイオンまたはイオンの集合を抽出し、特定のイオンに対するクロマトグラムを含む新しいペインを生成します。
Extract Ions (Use Maximum)	選択したエリア内の最も強力なピークを使用してイオンを抽出します。
Save to Text File	Microsoft Excel またはその他のプログラムで開くことができる、ペインのテキストファイルを作成します。
Save Explore History	処理オプションとも呼ばれる処理パラメータに関する変更情報を保存します。これは、wiff ファイルが Explore モードで処理されたときに作成されたものです。処理履歴は、eph (Explore Processing History) の拡張子で保存されます。
Add Caption	ペインのカーソル位置にキャプションを追加します。
Add User Text	ペインのカーソル位置にテキストボックスを追加します。
Show Last Scan	選択前のスキャンを表示します。
Select Peaks For Label	このダイアログでは、ピークのラベリングを減少するパラメータを選択します。
Delete Pane	選択したペインを削除します。
Add a Record	スペクトルを含む記録および化合物関連データをライブラリに追加します。このタスクを実行するには、有効なスペクトルが必要です。
Search Library	制限なしまたは前回保存した制限でライブラリを検索します。
Set Search Constraints	Search Constraints ダイアログボックスに入力された基準を使用してライブラリを検索します。

## クロマトグラムペイン

表 G-5 : クロマトグラムペインの右クリックメニュー

メニュー	機能
List Data	データポイントをリスト化し、クロマトグラムで検出されたピークを積分します。
Show Spectrum	スペクトルを含む新規ペインを作成します。
Show Contour Plot	データセットがその点におけるデータの強度を色で表すように色分けされた図を表示します。一部の MS モードのみがサポートされています。

## 右クリックメニュー

表 G-5 : クロマトグラムペインの右クリックメニュー (続き)

メニュー	機能
Extract Ions	選択されたペインから特定のイオンまたはイオンの集合を抽出し、特定のイオンに対するクロマトグラムを含む新しいペインを生成します。
Show Base Peak Chromatogram	ベースピーククロマトグラムを含む新規ペインを作成します。
Show ADC Data	取得できた場合には、ADC データ追跡を含む新規ペインを作成します。
Show Auxiliary Traces	Select Auxiliary Trace Channel ダイアログを開きます。
Show UV Detector Data	取得できた場合には、UV データ追跡を含む新規ペインを作成します。
Save to Text File	Microsoft Excel またはその他のプログラムで開くことができるテキストファイル(データを含む)をペインに作成します。
Save Explore History	処理オプションとも呼ばれる処理パラメータに関する変更情報を保存します。これは、wiff ファイルが Explore モードで処理されたときに作成されたものです。処理履歴は、eph (Explore Processing History) の拡張子で保存されます。
Add Caption	ペインのカーソル位置にキャプションを追加します。
Add User Text	ペインのカーソル位置にテキストボックスを追加します。
Set Subtract Range	ペインの減算範囲を設定します。
Clear Subtract Range	ペインの減算範囲をクリアします。
Subtract Range Locked	減算範囲をロックまたはアンロックします。減算範囲がロックされていない場合には、各減算範囲は独自に移動します。減算範囲はロックにプリセットされています。
Delete Pane	選択したペインを削除します。

## Results Table

Results Table を右クリックし、次の表に示すオプションにアクセスします。

表 G-6 : 結果表の右クリックメニュー

メニュー	機能
Full	(フル)すべてのカラムを表示します。
Summary	(概要)特定のカラムを表示します。
Analyte	(分析試料)特定の分析試料を表示します。

表 G-6 : 結果表の右クリックメニュー (続き)

メニュー	機能
Analyte Group	(分析試料グループ)分析試料グループを作成します。
Sample Type	(サンプルタイプ)特定タイプのサンプルまたはすべてのサンプルを表示します。
Add Formula Column	(Formula カラムの追加)Formula カラムを追加します。Formula カラムを使用している場合は、ユーザーが結果を検証することを推奨します。
Table Settings	(表設定)表設定を編集または選択します。
Query	(クエリ)クエリを作成または選択します。 結果表のデータの分析に用いたクエリはすべて検証することを推奨します。
Sort	(ソート)ソートを作成するか、またはインデックスでソートします。
Metric Plot	(メトリックプロット)メトリックプロットを作成します。
Delete Pane	(ペインの削除)アクティブなペインを削除します。
Fill Down	(下方向へコピー)選択したセルに同一データをコピーします。
Add Custom Column	(カスタムカラムの追加)カスタムカラムを追加します。
Delete Custom Column	(カスタムカラムの削除)選択したカスタムカラムを削除します。

## ピークレビュー

Peak Review ウィンドウまたはペインを右クリックして、表 G-7 に表示されているオプションにアクセスします。

表 G-7 : ピークレビューの右クリックメニュー

メニュー	機能
Options	(オプション)Peak Review Options ダイアログボックスを開きます。
Sample Annotation	(サンプル注釈)Sample Annotation ダイアログを開きます。
Save Active to Text File	(アクティブなものをテキストファイルに保存)選択したピークをテキストファイルとして保存します。
Show First Page	(最初のページを表示)最初のサンプルに移動します。

## 右クリックメニュー

表 G-7 : ピークレビューの右クリックメニュー (続き)

メニュー	機能
Show Last Page	(最後のページを表示)最後のサンプルに移動します。
Slide Show Peak Review	(ピークレビューのスライドショー)スライドショーを開きます。
Update Method	(更新メソッド)すべてのピークのアルゴリズムを更新します。
Revert to Method	(メソッドに戻る)現在の定量化メソッドに基づいて再定義されたピークを選択します。
Delete Pane	(ペインの削除)アクティブなペインを削除します。

## キャリブレーションカーブ

Calibration ウィンドウまたはペインの表を右クリックし、次の表に示すオプションにアクセスします。

表 G-8 : キャリブレーションカーブの右クリックメニュー

メニュー	機能
Exclude (Include)	(除外する(含める))カーブからポイントを除外するには、ポイントを右クリックし、 <b>Exclude</b> をクリックします。ポイントを含めるには、ポイントを右クリックし、 <b>Include</b> をクリックします。
Exclude All Analytes (Include All Analytes)	(すべての分析試料を除外する(すべての分析試料を含める))カーブからすべての分析試料を除外するには、ポイントを右クリックし、 <b>Exclude All Analytes</b> をクリックします。ポイントを含めるには、ポイントを右クリックし、 <b>Include All Analytes</b> をクリックします。
Show Peak	(ピークを表示)個々のピークをレビューします。
Overlay	(オーバーレイ)2つのグラフを重ねます。
Active Plot	(アクティブプロット)どのプロットがアクティブかを判定します。
Legend	(凡例)グラフの凡例を表示します。
Log Scale X Axis*	(対数スケール X 軸)X 軸に対数スケールを使用します。
Log Scale Y Axis*	(対数スケール Y 軸)Y 軸に対数スケールを使用します。
Delete Pane	(ペインの削除)アクティブなペインを削除します。
Home Graph	(ホームグラフ)グラフを元のサイズに調整します。

\*対数スケールはデータポイントをより操作しやすい形で表示することができるため、すべてのポイントの効果を同時にモニタリングするのに便利です。この表示の際は、一方の軸の対数ではなく **Log Scale Y Axis** を **Log Scale X** に対して選択します。


# シンボルについての用語集

# H

注: 以下の表のすべてのシンボルが、すべての機器に適用されるものではありません。





シンボル	説明
	オーストラリアの監督法規の遵守マーク。本製品が、Australian Communications Media Authority (ACMA) の EMC 要件を満たしていることを表します。
	交流
A	アンペア(電流)
	窒息の危険
	ヨーロッパ共同体の公認代表者
	生物学的危険
	CE 適合マーキング
	cCSAus マーク。カナダおよび米国での電気安全認証を示します。
	カタログ番号
	注意。起こりうる危険についての情報は、説明書を参照してください。 注: SCIEX マニュアルでは、このシンボルは人身傷害の危険を示します。

## シンボルについての用語集

シンボル	説明
	<p>中国 RoHS 注意ラベル。電子情報製品は特定の毒性または有害物質を含んでいます。中央に書かれている数字は、環境保護使用期限 (EFUP) の日付であり、製品の操作可能暦年を数字で示すものです。EFUP の期限が切れた際は、製品は速やかにリサイクルされなければなりません。回転矢印は、製品がリサイクル可能であることを示します。ラベルまたは製品にある日付コードは、製造年月日を示します。</p>
	<p>中国 RoHS ロゴ。装置は最大濃度値を超える毒性および有害物質または元素を含んでおらず、リサイクルおよびリユース可能な環境に優しい製品です。</p>
	<p>使用説明書を参照してください。</p>
	<p>圧碎の危険</p>
	<p>TÜV Rheinland of North America 用の cTUVus マーク</p>
	<p>ユニークデバイス識別子 (UDI) を取得するためにバーコードリーダーでスキャンできる Data Matrix シンボル</p>
	<p>環境の危険</p>
	<p>イーサネット接続</p>
	<p>爆発の危険</p>

シンボル	説明
	眼球傷害の危険
	火災の危険
	可燃性化学物質の危険
	壊れ物
	ヒューズ
Hz	ヘルツ
	内部安全シンボル「注意－感電の危険あり」(ISO 3864)、別名高電圧シンボル メインカバーを取り外す必要がある場合は、感電を避けるために SCIEX の代理店に連絡してください。
	高温面の危険
	実験室用診断機器
	イオン化放射の危険
	濡らさないでください。 雨にさらさないでください。 相対湿度は 99%以下でなければなりません。

## シンボルについての用語集



シンボル	説明
	上部を上になしてください。
	引き裂き/重篤な危険
	レーザー放射線障害の危険
	吊り上げ時の危険
	磁気の危険
	メーカー
	可動部品の危険
	ペースメーカーの危険。ペースメーカーを使用している人はアクセスできません。
	挟み込みの危険
	加圧ガスの危険
	保護接地(アース)
	穿刺災害の危険



シンボル	説明
	反応性化学物質の危険
	シリアル番号
	有害化学物質の危険
	システムの輸送および保管は 66 kPa～103 kPa 以内で行ってください。
	システムの輸送および保管は 75 kPa～101 kPa 以内で行ってください。
	システムの輸送および保管は指定された相対湿度の最小(min)および最大(max)レベルの間で、結露が発生しない状態で行ってください。
	システムの輸送および保管は-30 °C～+45 °C 以内で行ってください。
	システムの輸送および保管は-30 °C～+60 °C 以内で行ってください。
	USB 2.0 接続
	USB 3.0 接続
	紫外線放射の危険
	英国適合性評価マーク
VA	ボルトアンペア(皮相電力)

## シンボルについての用語集

---

シンボル	説明
V	ボルト(電圧)
	WEEE.分別されていない一般廃棄物として機器を廃棄しないでください。環境の危険
W	ワット
	yyyy-mm-dd 製造年月日

# 警告についての用語集



注: コンポーネントの識別に使用されるラベルのいずれかが剥がれた場合は、フィールドサービスエンジニア(FSE)にお問い合わせください。

ラベル	翻訳(該当する場合)
EN61326—1, EN61326—2-6, CLASS A, GROUP 1, ISM-IVD EQUIPMENT	EN61326—1, EN61326—2-6, クラス A、グループ 1, ISM-IVD 機器
IMPACT INDICATOR SENSITIVE PRODUCT WARNING	インパクトインジケータ 高感度の製品についての警告  注: インジケータがトリップしている場合、このコンテナは落下したか、乱暴に取り扱われています。船荷証券に注意書きを行い、損傷を確認してください。衝撃による損傷に関するあらゆる苦情には通知が必要です。
IMPORTANT!  RECORD ANY VISIBLE CRATE DAMAGE INCLUDING TRIPPED “IMPACT INDICATOR” OR “TILT INDICATOR” ON THE WAYBILL BEFORE ACCEPTING SHIPMENT AND NOTIFY YOUR LOCAL AB SCIEX CUSTOMER SUPPORT ENGINEER IMMEDIATELY.  DO NOT UNCRATE. CONTACT YOUR LOCAL CUSTOMER SUPPORT ENGINEER FOR UNCRATING AND INSTALLATION.	重要！  荷物を受け取る前に、トリップした「インパクトインジケータ」または「チルトインジケータ」を含む目に見える損傷を貨物運送状に記録し、お近くの AB SCIEX カスタマーサポートエンジニアにすぐに通知してください。  開梱しないでください。開梱および設置については、お近くのカスタマーサポートエンジニアにお問い合わせください。
MINIMUM OF SIX PERSONS REQUIRED TO SAFELY LIFT THIS EQUIPMENT	本機器を安全に持ち上げるには最低 6 人必要です。  注: 使用説明書を参照してください。
TIP & TELL	チルトインジケータ  注: コンテナが傾斜または誤った取り扱いをされていないかを示します。船荷証券に記載し、損傷がないか点検してください。傾斜に関するあらゆる苦情には、通知が必要です。

## 警告についての用語集

ラベル	翻訳(該当する場合)
<p>TiltWatch PLUS</p> <p>ShockWatch</p>	<p>チルトインジケータ</p> <hr/> <p><b>注:</b> コンテナが傾斜または誤った取り扱いをされていないかを示します。船荷証券に記載し、損傷がないか点検してください。傾斜に関するあらゆる苦情には、通知が必要です。</p>
<p>WARNING: DO NOT OPERATE WITHOUT FIRST ENSURING BOTTLE CAP IS SECURED.</p>	<p><b>警告:</b> 最初にボトルキャップが確実に固定されていることを確認せずに、操作しないこと。</p> <hr/> <p><b>注:</b> この警告は、イオン源排気排出ボトルに添付されています。</p>
<p>WARNING: NO USER SERVICEABLE PARTS INSIDE. REFER SERVICING TO QUALIFIED PERSONNEL.</p>	<p><b>警告:</b> ユーザーは内部部品の修理を行わないでください。修理が必要な場合は、資格のあるサービス担当者にお問い合わせください。</p> <hr/> <p><b>注:</b> 使用説明書を参照してください。</p>

# お問い合わせ先

---

## お客様のトレーニング

- 北米: [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- ヨーロッパ: [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- ヨーロッパおよび北米以外: [sciex.com/education](http://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](http://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](http://sciex.com/contact-us)
- [sciex.com/request-support](http://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](http://sciex.com/productsecurity) を参照してください。

## ドキュメント

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

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

ソフトウェア製品のドキュメントについては、ソフトウェアに付属のリリースノートまたはソフトウェアインストールガイドを参照してください。

ハードウェア製品のドキュメントを検索するには、システムまたはコンポーネントに付属の *カスタマーリファレンス DVD* を参照してください。

---

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

---