SCIEX OS ソフトウェア

(Version 1.7)

操作マニュアル

X500
QTOF System

株式会社 エービー・サイエックス
アプリケーションサポート

2020 年 6 月版

SCIEX
The Power of Precision

SCIEX OSソフトウェアについて

研究用にのみ使用できます。診断目的およびその手続き上での使用は出来ません。

本文書は、AB SCIEX 製装置を購入した顧客が、本 AB SCIEX 製装置を操作するときに活用するものとして提供されています。本文書は著作権で保護されており、本文書の一部または全部を複製することは、AB SCIEX が書面で許可する場合を除き、厳しく禁止されています。
本文書に記載の装置は、米国、カナダおよびその他の国で申請された単数または複数の特許のもとに保護されています。さらなる特許が出願中です。
本文書に記載のソフトウェアは、ライセンス契約のもとに提供されます。ライセンス契約で特別に許可される場合を除き、ソフトウェアの複製、変更または配布は、いかなる媒体においても法律に違反します。さらに、ライセンス契約では、ソフトウェアの逆アセンブル、リバースエンジニアリング、逆コンパイルを、いかなる目的においても禁止します。

目次

1 SCIEX OS Software について 5

1.1 SCIEX OS Software の起動と各モードについて 5

2 測定の準備 6

2.1 装置の Configuration 6

2.2 キャリブレーション溶液の準備 6

2.3 装置の Status 6

2.4 分析のワークフロー 7

2.5 各種パラメーター（参考値） 7

2.6 プロジェクトの作成 8

2.7 MS Check の実施 8

3 分析メソッドの作成と測定 12

3.1 MS Method の作成 12

3.2 LC Method の作成 14

3.3 Valve の設定 15

3.4 平衡化 16

3.5 Batch の作成 16

3.6 Batch を使用した測定 18

3.7 Queue の確認 18

4 Explore によるデータ解析 20

4.1 解析 21

4.2 IDA Explorer からの解析 21

4.3 クロマトグラムからの解析 29

4.4 組成分析（Formula Finder） 36

4.5 フラグメントの帰属（Fragments Pane） 41

4.6 Mass Calculators について 44

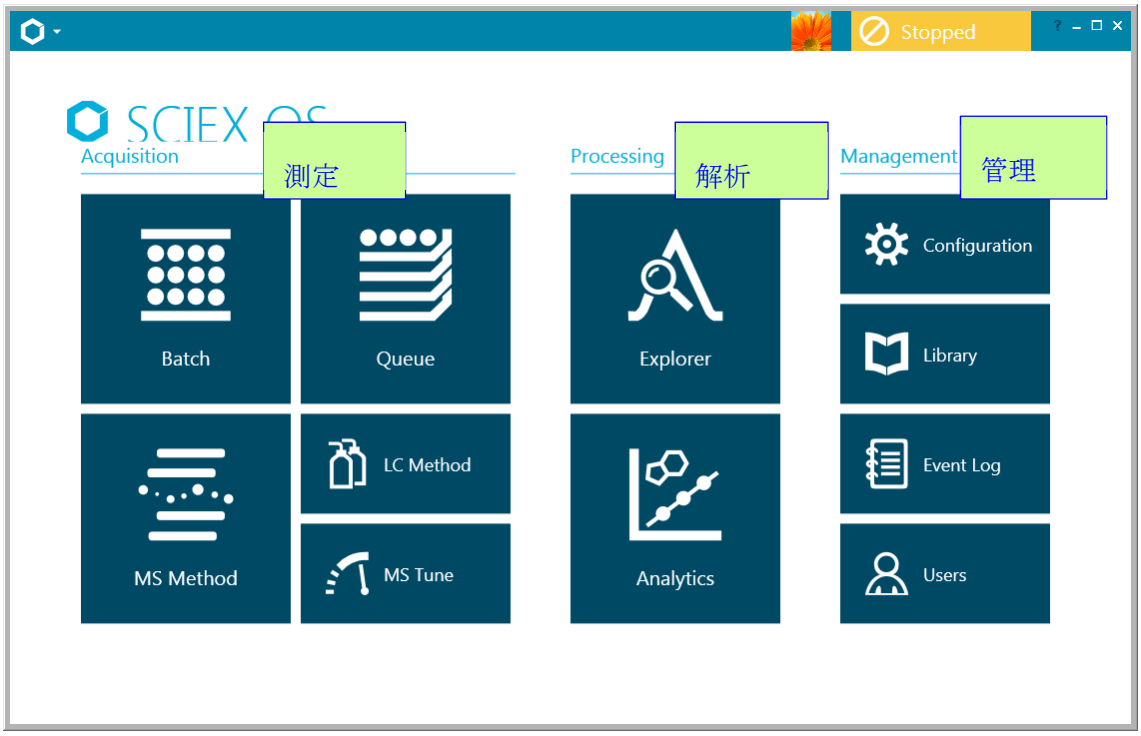
5 Analytics によるデータ解析 45
5.1 検索に使用する Library の準備 45
5.2 はじめに 45
5.3 定量解析とターゲットスクリーニング 46
5.4 ノンターゲットスクリーニング 61
5.5 ライブラリー追加方法 67
6 定量測定 MRM^{HR} Method の作成と解析 69
6.1 MS Method の作成 69
6.2 Quantitation Method の作成 74
7 その他 77
7.1 MS Tune の実施 77
7.2 精度や質量分解能の最適化 77
7.3 検出器の最適化 80

※ 操作方法の詳細は、SCIEX OS Software の Help メニューからご覧いただけます。

1　SCIEX OS Software について

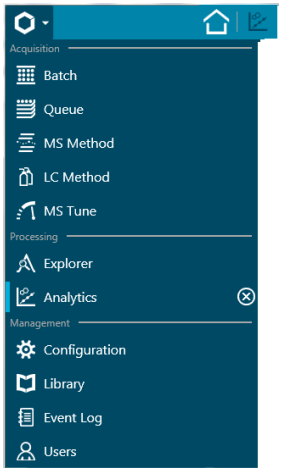
1.1　SCIEX OS Software の起動と各モードについて

SCIEX OS Software ホーム画面



① Desktop の右図アイコンをダブルクリックし、software を起動します。

- Acquisition：装置のチューニングや測定用のメソッドおよびバッチを作成し、データを取り込みます。
- Processing：データの閲覧や組成解析等の定性解析、定量解析、ライブラリー検索等を行います。
- Management：機器の認識やライブラリーのインポート、ユーザー登録等を行います。
- 複数の Window を表示した際、最初の画面に戻る際は Home アイコンをクリックするか、別の設定に移る際は アイコンをクリックします。

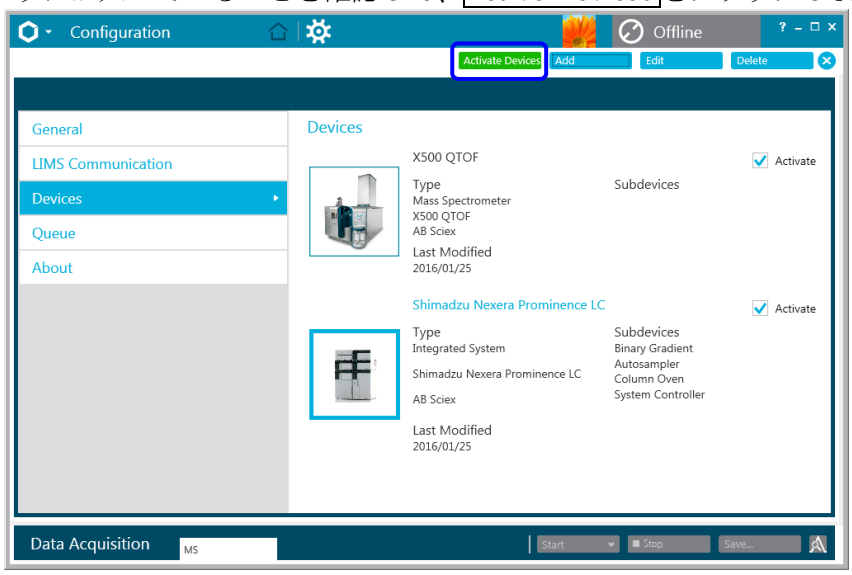


2　測定の準備

2.1　　装置の Configuration

① Configuration をクリックし画面を開きます。

② Devices をクリックし、X500 QTOF と LC（ここでは Shimadzu）の Active にチェックが入っていることを確認して、Active Devices をクリックします。



③ 画面上部の⊗をクリックして画面を閉じます。

2.2　　キャリブレーション溶液の準備

① キャリブレーション溶液の残量を確認します。

② ボトルを外すには時計回りに回し、ボトルごと交換または溶液を補充します。

※　1：Positive、2：Negative

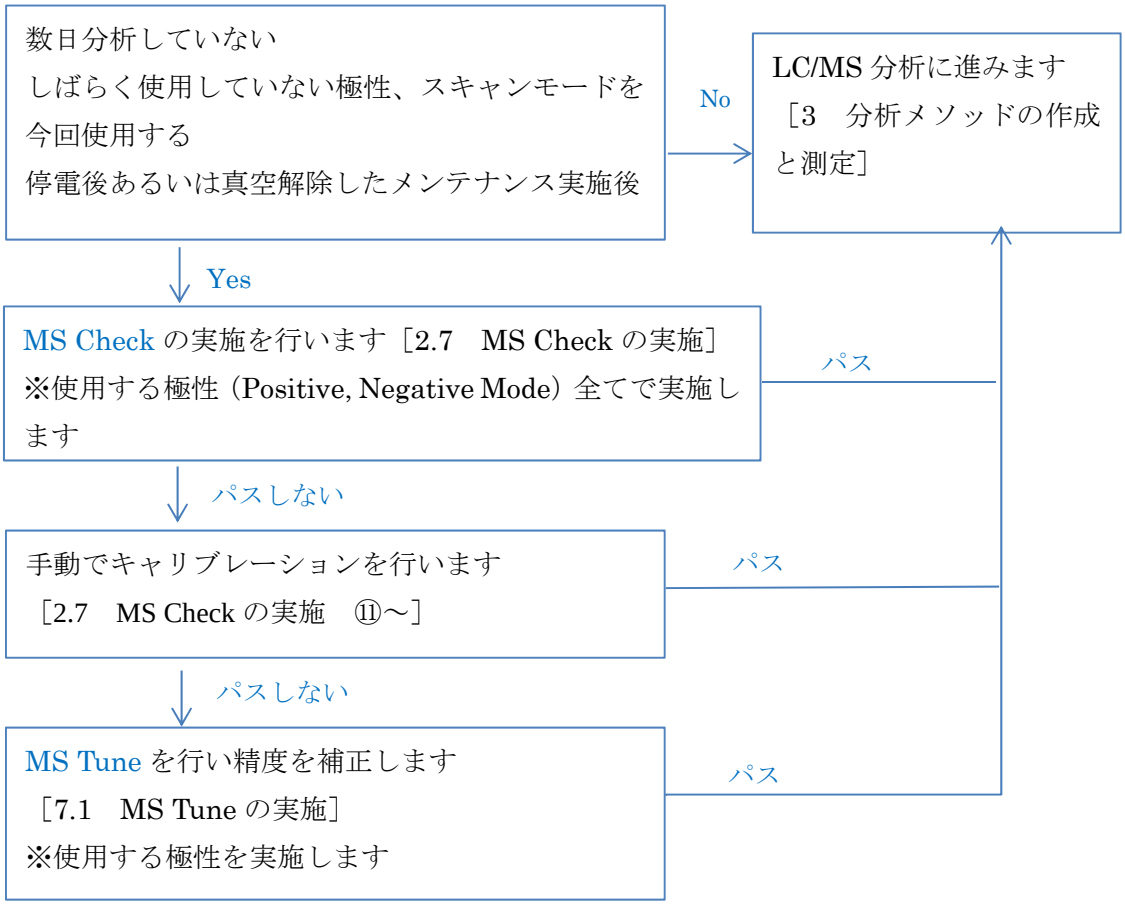
※　残量は、ボトルの 1/3 程度以上が望ましいです。

2.3　　装置の Status

① 本体から Status を確認できます。

LED					
名称	電源	真空度	Ready	測定中	Fault

2.4　　分析のワークフロー



※　感度は、導入時の MS Check や MS Tune の結果、あるいはお客様の標品などで確認を行い指標にすることをお勧めします。

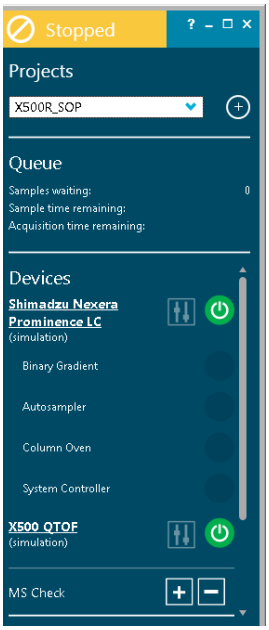
※　スプレーのポジションは Infusion および LC/MS 分析時で変更します。

- Infusion：縦 5mm、横 5mm
- LC/MS：縦 3mm、横 7mm（実際の分析時は適宜変更することも可能です）

2.5　　各種パラメーター（参考値）

	パラメータ	説明	Ingusion	LC/MS
Compound	Declustering Potential	オリフィスプレートにかかる電圧 (V)	80 (-80)	80 (-80)
	Collision Energy	コリジョンエネルギー (V)：MS	10 (-15)	10 (-15)
		コリジョンエネルギー (V)：MS/MS	35 (-35)	35 (-35)
Source/Gas	Ion Source gas 1	ネブライザーガス (psi)	20	60
	Ion Source gas 2	ターボガス (psi)	0	60
	Curtain gas	カーテンガス (psi)	25	30
	CAD gas	Q2に入るガス	7	7
	Temperature	ヒーター温度 (°C)	0	350
	Spray voltage	プローブにかかる電圧 (V)	5500 (-4500)	5500 (-4500)

2.6　プロジェクトの作成



① 画面上部右上の Status Panel（例：

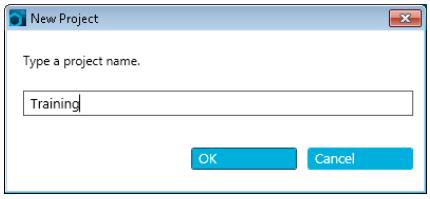
）をクリックします。

※　クリックを繰り返すことで表示/非表示になります。

② Projects の⊕をクリックし、新規プロジェクトを作成します。

※　既存のプロジェクトを選ぶ場合はプルダウンから選択します。

③ 名称を入力し OK をクリックします。



※　プロジェクトの保存先：D:¥SCIEX OS Data

2.7　MS Check の実施

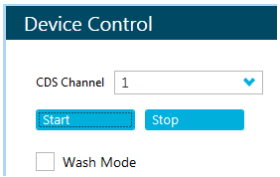
※　装置の状態を確認します。

※　分析に使用する極性（Positive および Negative Mode）を実施します。

<u>例：Positve Mode の場合</u>

① X500 QTOF 横の Direct CDS Control アイコン
をクリックします。

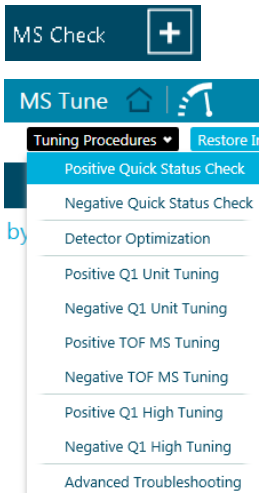
② CDS Channel は 1 を選び、Start をクリックして☒を選び閉じます。



※　1：Positive、2：Negative

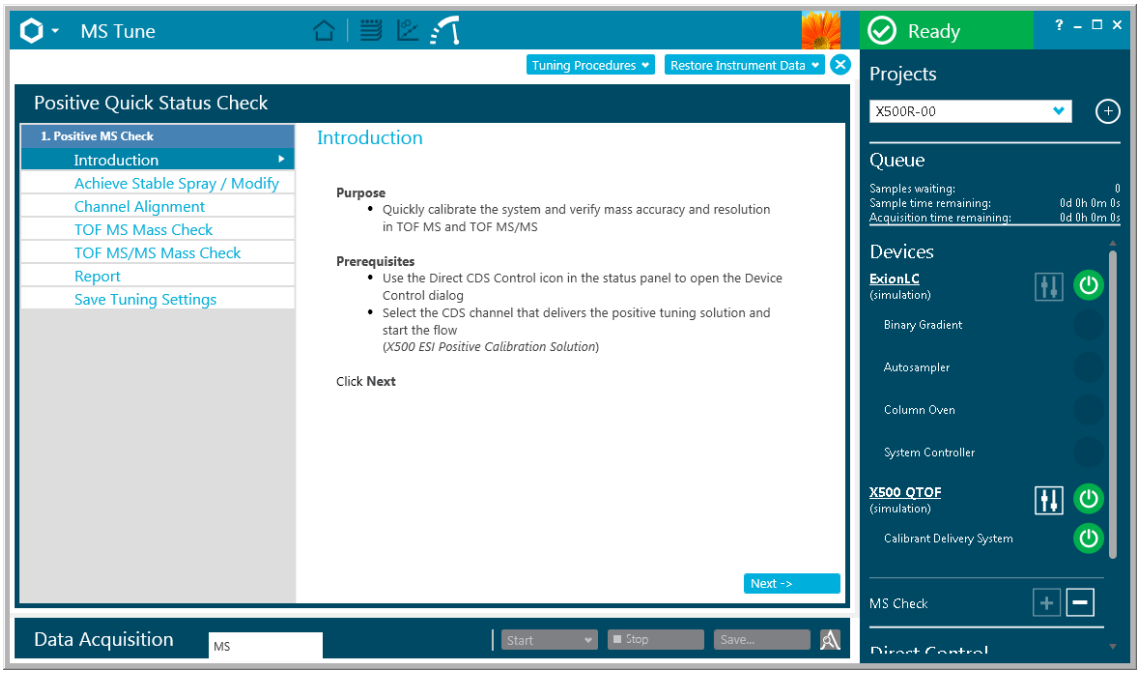
※　パージする場合は Wash Mode にチェックを入れ、数分経過しましたらチェックを外します。

③ Status Panel の MS Check の
アイコンをクリックします。



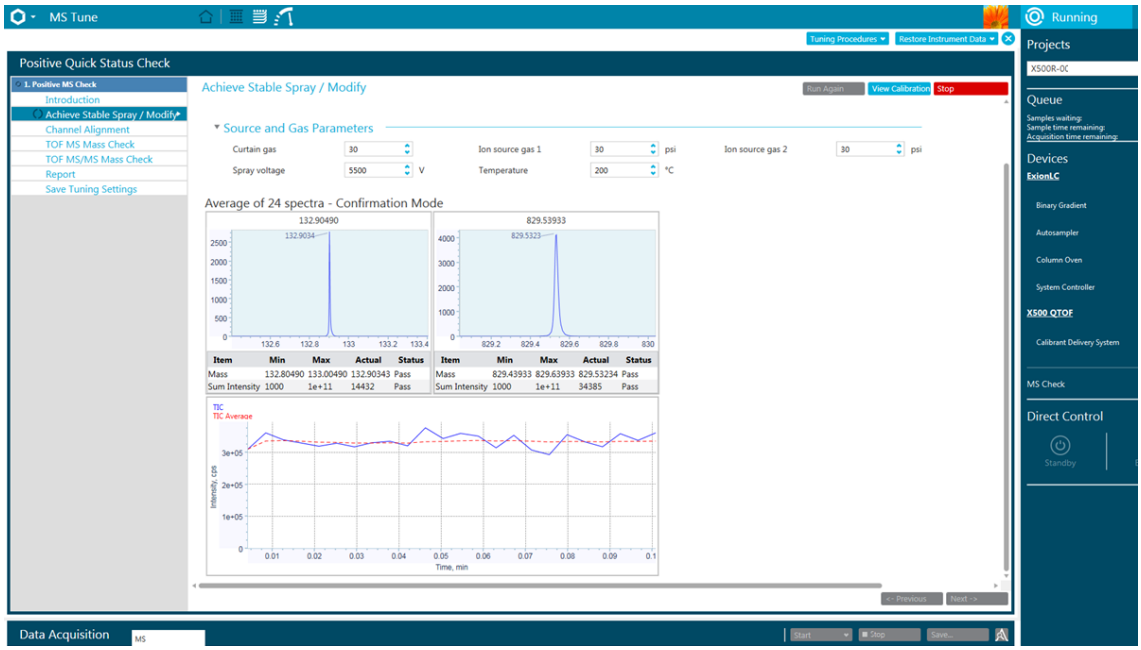
同様の操作は、MS Tune の Tuning Procedures > Positive Quick Status Check でも行えます。

④ 画面が開いたら右下の Next -> をクリックします。



⑤ 自動的にサンプルが導入されますので、TIC が安定するまで数分待ちます。

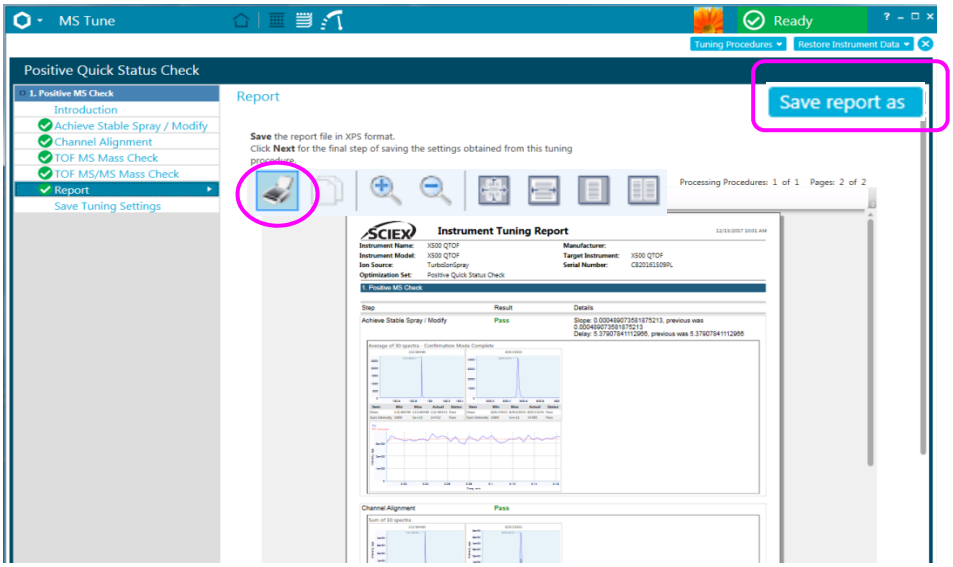
⑥ 安定すると、自動的に Channel Alignment、 TOF MS Mass Check、 TOF MS/MS Mass Check の順で進みます。



⑦ 数分後、下図 Report 画面で Pass が表示されたら Save Report as をクリックし、必要に応じて結果を xps ファイルとして保存します（拡張子.xps）。

※　Window10 は XPS Viewer が標準でインストールされていないため、上記⑦で保存しても開くことができません。開かない場合は Print を選び、PDF として保存します。

※　保存先はお使いのプロジェクト内あるいは Desktop 等適宜フォルダを作成して保存します)。



<u>補足）XPS Viewer のインストール方法</u>

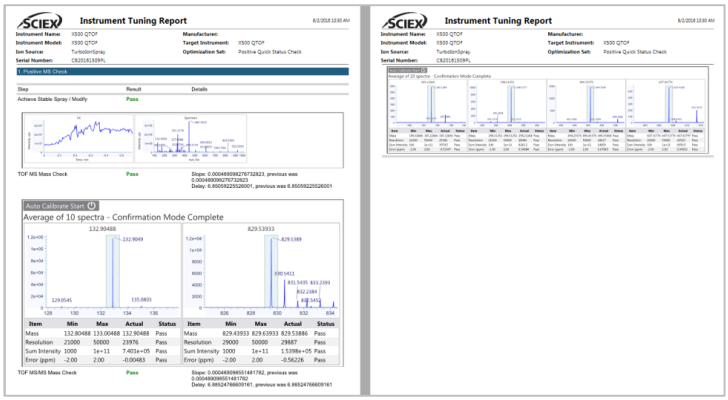
1）Start を開き、[Settings] を選択し、[Settings] が開いたら、Apps > Apps & features> Mange optional features の順に進みます

2）[+ Add a feature] をクリック、またはタップし、追加する機能の一覧から [XPS Viewer] を選択し、[install] をクリック、またはタップします

※　インストール方法の詳細は Window10 関連のウェブサイトをご覧いただくか、下記サイトをご参照ください。

https://answers.microsoft.com/ja-jp/windows/forum/all/windows-10/76d80c1a-63a3-42f8-ae55-a9db6ae9c72f

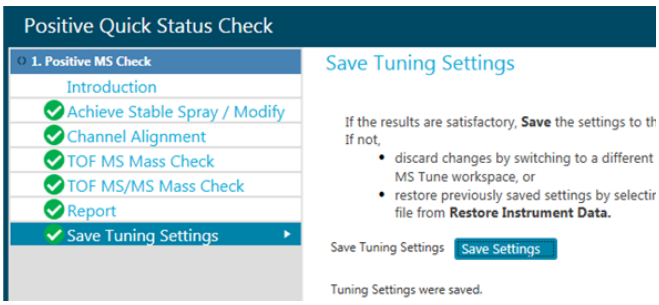
※　ファイル例：Positive Mode



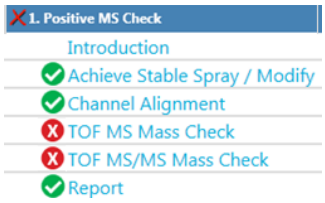
⑧ 下図のように全ての項目で Pass しており、この設定を保存する場合は Next -> をクリックし、Save Settings をクリックします。

⑨ 画面上部の をクリックして画面を閉じます。

※ この画面を閉じたタイミングで CDS ポンプの送液も止まります。



⑩ Report 上で Fail、あるいは Navigation で右図のように と表示された場合は手動でキャリブレーションを行います。



⑪ TOF MS Mass Check をクリックし、Auto Calibrate Start をクリックします。TOF MS/MS Mass は自動で進みます。

※ いずれも Pass が表示されたらキャリブレーションは成功です。

※ Fail と表示された場合は、MS Tune を行い精度を補正します(［7.1 MS Tune の実施］を参照してください。)

⑫ 終了したら画面上部の をクリックし、メッセージが表示された後 Yes を選んで画面を閉じます。

例：Negative Mode の場合

① X500R QTOF 横の Direct CDS Control アイコン をクリックします。

② CDS Channel は 2 を選び、Start をクリックして×を選び閉じます。

※ Positive Mode から連続して操作する場合はパージが必要です。Wash Mode にチェックを入れパージを実施し、数分経過した後チェックを外します。

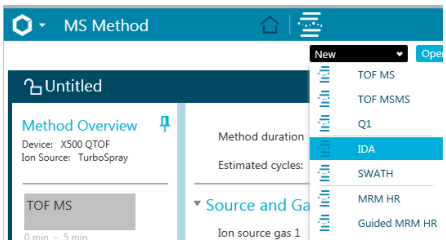
③ Status Panel の MS Check の アイコンをクリックします。

④ 全頁④～⑫を参考に、Positive Mode と同様に操作します。

3　分析メソッドの作成と測定

3.1　MS Method の作成

IDA メソッドの作成

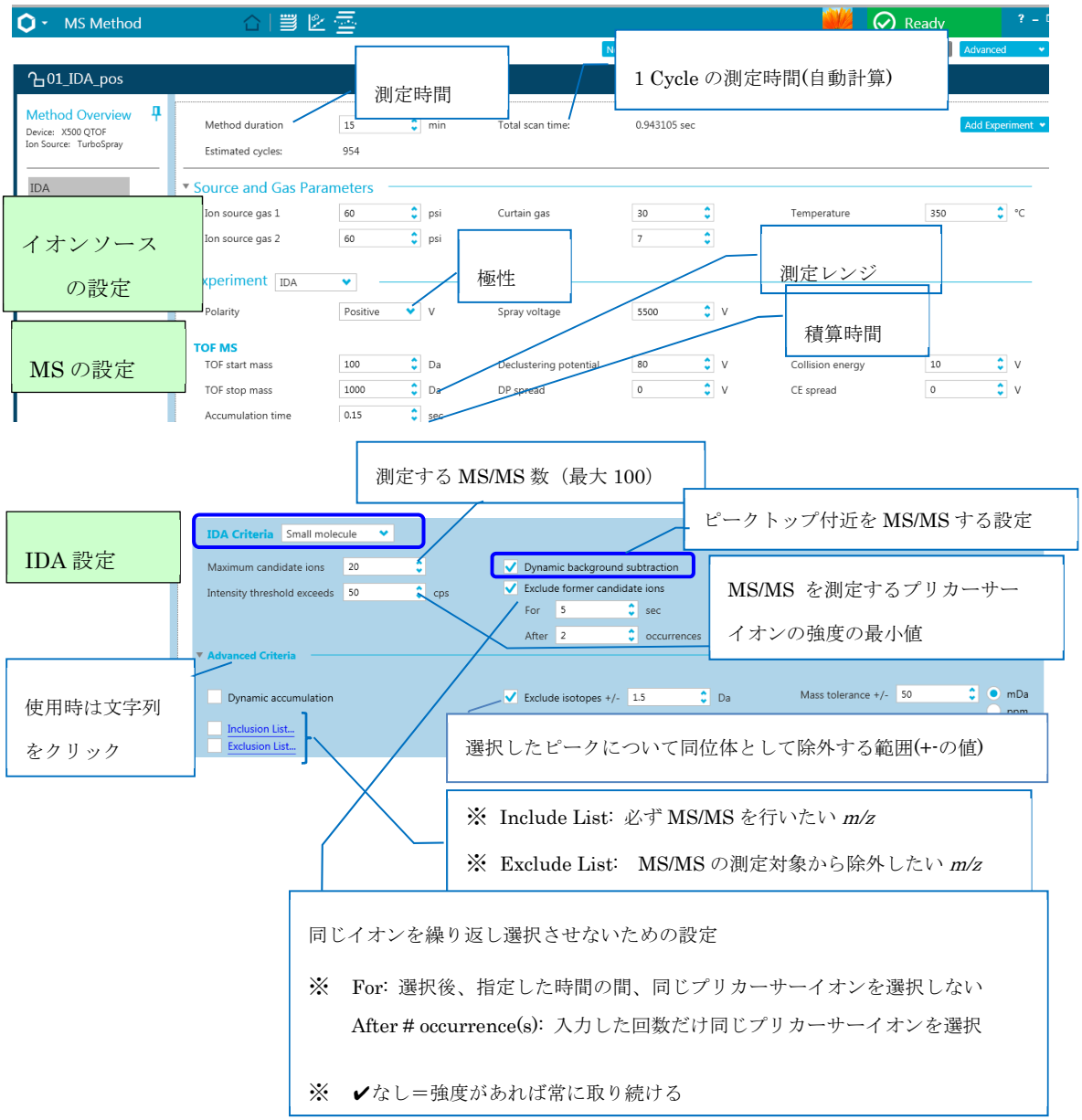


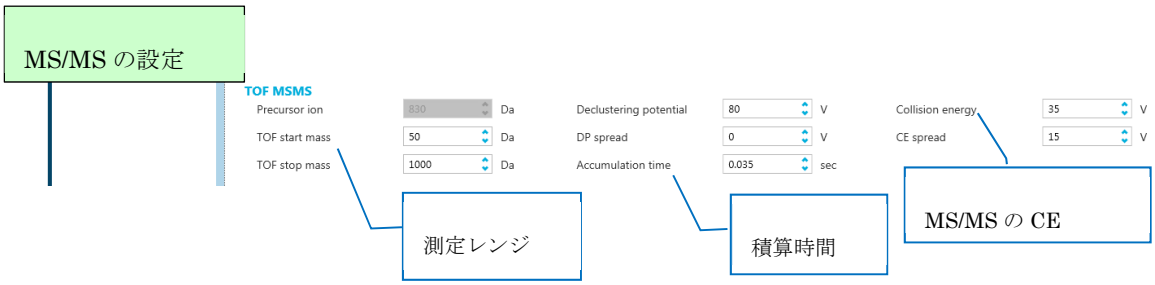
① Home 上の MS Method をクリックします。

② New から IDA を選択します。下図を参考に設定します。

※ IDA Criteria：Small molecule、Dynamic background subtract にチェックを入っていることを確認します。

※ Temperature および DP は、熱に不安定な化合物やインソース CID が起きる化合物を分析される際には、低い値に設定してください。（例　TEM：300、DP：30 程度）





CE Spread (CES) について

数値を入力することで、CE-CES から CE+CES の値で CE を掃引しながらスペクトルを取得します。

例）CE 45, CES 15 の場合：CE 30-60V で測定を行い、全 CE の平均のスペクトルが表示されます。

IDA や SWATH など、低分子から高分子、開裂しやすい化合物から開裂しにくい化合物など、網羅的な成分の自動測定を行う場合に有効です。

定量時など、化合物ごとに最適な CE がある場合は、通常 CES 0 を使用します。

得られるスペクトルは平均のスペクトルになります。得られた結果から各 CE のスペクトルの閲覧はできません。

Inclusion List, Exclusion List について

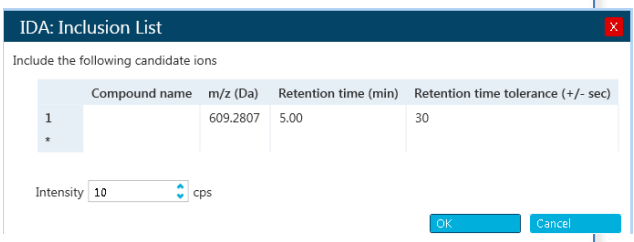
必ず MS/MS を行いたい *m/z*、MS/MS の測定対象から除外したい *m/z* がある場合に使用します。

チェックをいれ、Include List…をクリックします。

起動した右の画面で、目的の Mass, RT や Tolerance を入力します。

Excel からのコピー&ペーストもできます。

Intensity には強度の閾値を入力し OK します。



③ Save をクリックし Save As を選択して、名前を付けて保存します。

3.2　LC Method の作成

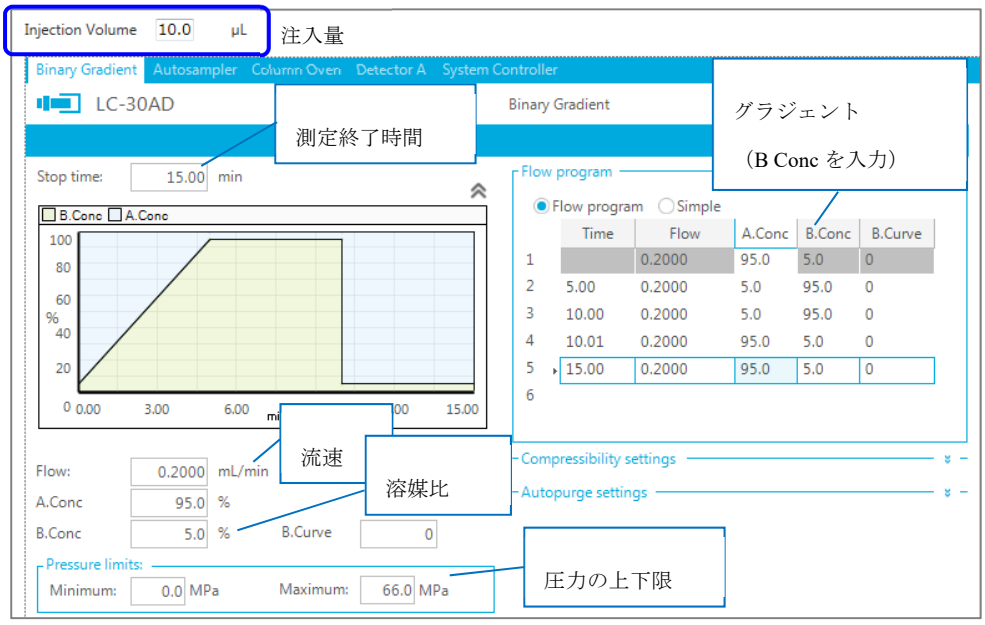
① Home 上の LC Method をクリックします。

② New をクリックします。

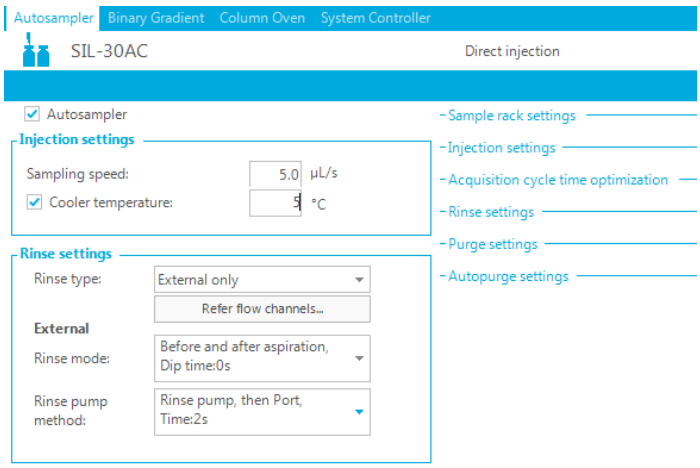
③ Binary Gradient タブは下図を参考に、Binary Gradient では注入量、分析時間、タイムプログラム等を設定します。

※　溶媒比の設定は、B. Conc に値を入力します。

④ Flow program の Table を表示するには、Flow program 上をクリックします。

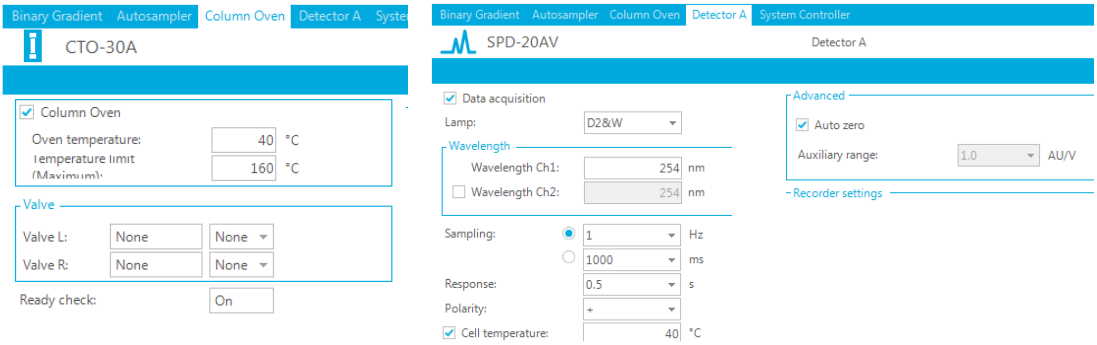


⑤ Autosampler タブは下図を参考に設定を行います。



※　Rinse Settings の各項目のプルダウンをクリックすると設定が変更できます。

※　右側の Sample Rack Settings 等をクリックすると各種設定が表示できます。



⑥ カラムオーブンタブや Detector A タブではカラムオーブンや UV 等を設定します。

⑦ Save をクリックし Save As を選択して、名前を付けて保存します。

3.3 Valve の設定

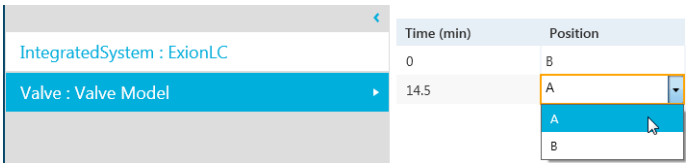
① 必要に応じて Valco Valve の設定を行います。

② 下記は A ポジション（Waste）、B ポジション（MS online）の設定です。

※ Valve の切り替え時の開始と終了時間は分析時間よりやや短めに設定します。

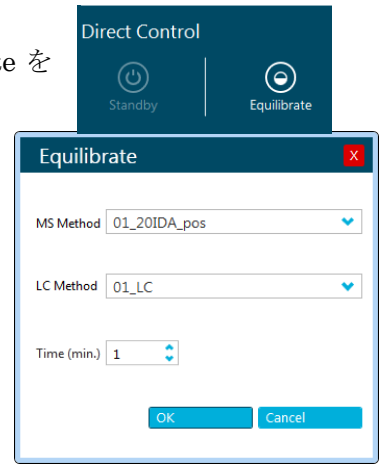
※ 例：測定時間が 15 分の場合は、0.5-14.5 分の間で設定します。

※ Position は A および B が交互になるよう設定します。



③ Save をクリックし Save します。

3.4　平衡化



① 装置を平衡化します。Status Panel の Equilibrate をクリックします。

② 使用する MS Method および LC Method を選び、平衡化時間（Time：1）を選択し OK をクリックします。

③ LC の溶媒が流れ、ガスやターボガスの加熱が始まります。1 分後に画面右上の Status Panel が Ready に変わります。

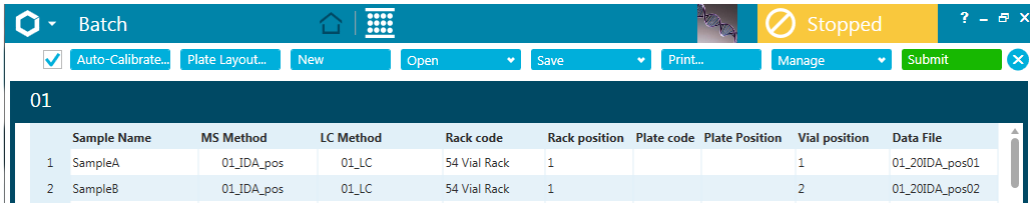
※ Status Panel の表示を消すには Status Panel

※ （例：Ready ）をクリックします。

3.5　Batch の作成

① Home 上の Batch をクリックします。

② Sample Name、Data File にサンプル情報やファイル名等を入力します。Data File は同一名は使用せず別名になるよう設定してください。



【Tips!】特殊文字（スペース+ - * . ,@ # % /& ^()など)の使用は推奨していません。Software によって Data が開かないなど、不具合が起きる場合がありますので、使用されないことを強く推奨します。以下にも類似の例がありますのでご参照ください。

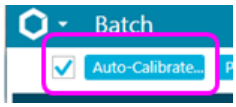
https://support.microsoft.com/ja-jp/kb/826763

③ MS Method および LC Method は、先ほど作成したファイルをプルダウンから選択します。

④ Rack Code 等を選択し、Vial position を入力あるいはプルダウンから選択します。

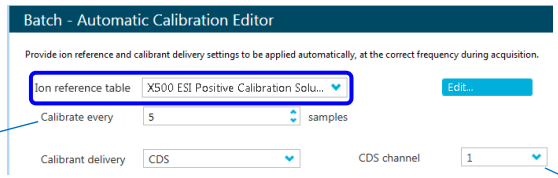
※ Vial position は Plate Layout…でも設定できます。

⑤ Auto Calibrate…にチェックをかけ、クリックして下図を参考に Ion reference tabel から極性に合わせて条件を選びます。



⑥ Calibration every と CDS channel を入力、設定します。

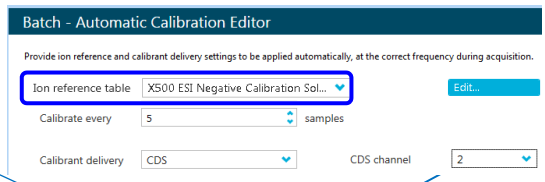
Positive Mode



何サンプル毎に 1 回 Calibration を行うかの設定

* 連続分析の際は、数時間おきに入るよう設定

Negative Mode



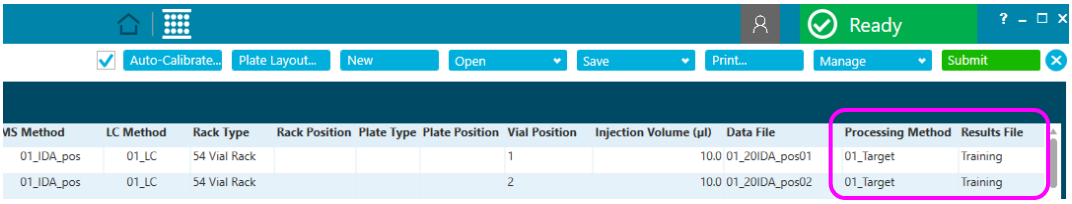
Positive：1

Negative：2

※ 開いた画面の Edit…では、使用するキャリブレーションイオンを変更できます。

⑦ Save をクリックして Batch を保存します。

【※Tips!】自動トリガー解析（SCIEX OS 1.6 以降）



1) Batch 上に、Processing Method と Results File のカラムが表示されます。

2) 既存の Results Table にデータを追加する場合は、Results File をプルダウンから選択します。既存の Results Table で使用した Processing Method が自動で表示されます。

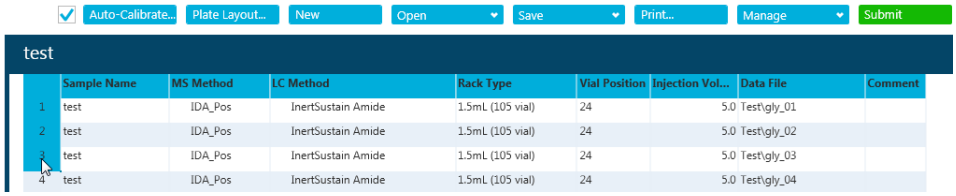
3) 新規で Results Table を作成する場合は、Results File に File 名を入力し、使用する既存の Processing Method をプルダウンから選択します。（Processing Method については、5 Analytics によるデータ解析の章を参照して下さい。）

4) データ取得が終わると、自動的に解析が始まります。Queue 画面の Processing Status で解析の進行具合を確認できます。

※ Training では設定しません。

3.6　Batch を使用した測定

① サンプルを Vial Position で入力したポジションにセットします。

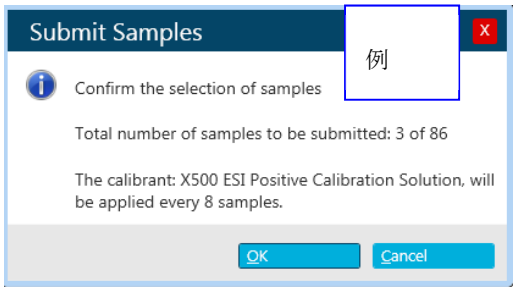


② 入力したサンプルのうち、限定したサンプルを分析する場合はその行を選択します。

③ Submit をクリックします。

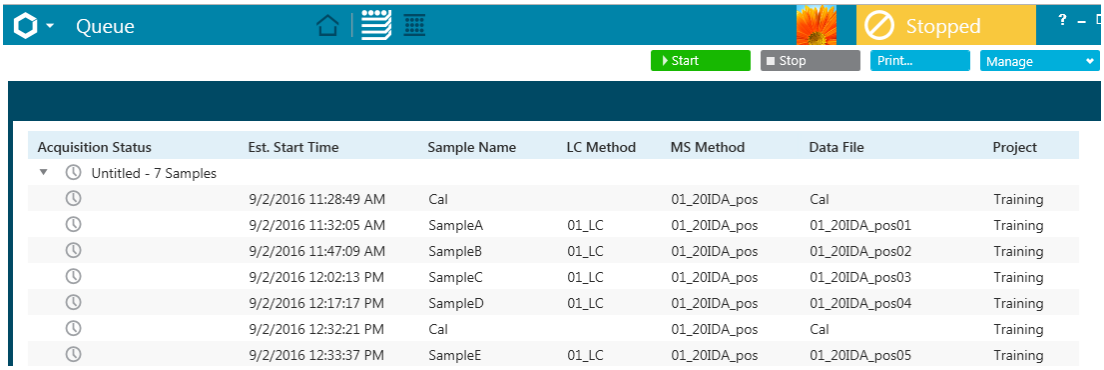
④ メッセージが出たら内容を確認して OK を選びます。

※　分析する本数や実施する Calibration を確認します。



3.7　Queue の確認

① Home 上の Queue をクリックします。



② 左側の Acquisition Status 上の▼をクリックすると、Auto Calibration を含めたサンプルが Waiting の状態で待機しているのを確認します。

※　平衡化が終わると、自動で分析が開始します。

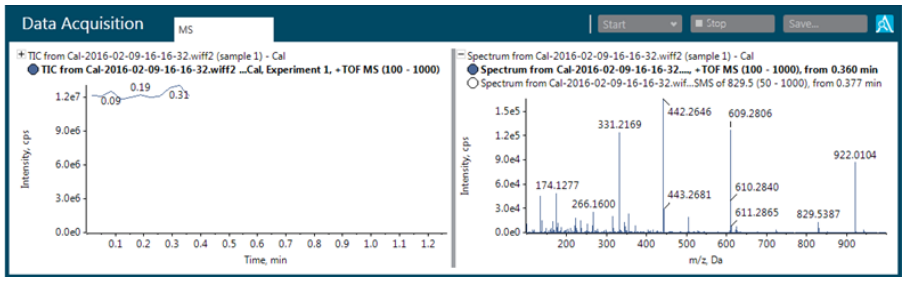
※　Submit したサンプルの MS Method が異なる場合は、それぞれについて Auto Calibration が挿入されます。

※　途中で中止する場合は、Stop をクリックしてください。

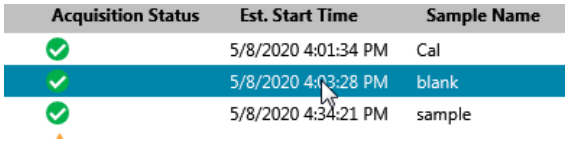
※　進行中は が表示され、分析が終了すると が入ります。

③ 測定中の Data を確認するには、画面下部の Data Acquisition をクリックすると、リアルタイムの TIC およびスペクトルが表示されます。

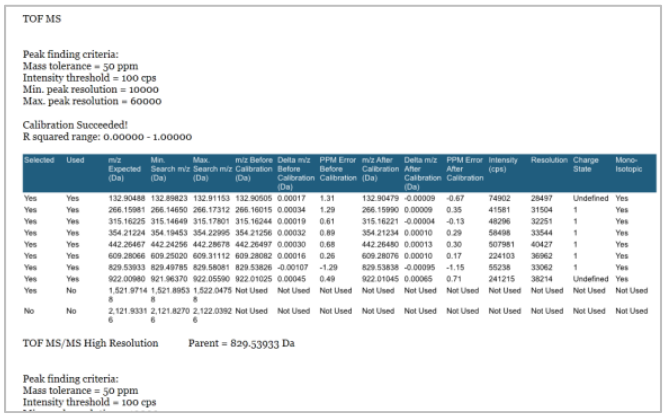
※　Data Acquisition を隠すには再度クリックします。



④ 分析中あるいは分析終了後のデータを確認するには、該当する Queue をダブルクリックすると Explore 上でデータが開きます。



⑤ Auto Calibration の結果を確認するには、Queue の cal 左側 をダブルクリックします。


TOF MS

Peak finding criteria:
Mass tolerance = 50 ppm
Intensity threshold = 100 cps
Min. peak resolution = 10000
Max. peak resolution = 60000

Calibration Succeeded!
R squared range: 0.00000 - 1.00000

Selected	Used	m/z Expected (Da)	Min. Search m/z (Da)	Max. Search m/z (Da)	m/z Before Calibration (Da)	Delta m/z Before Calibration (Da)	PPM Error Before Calibration	m/z After Calibration (Da)	Delta m/z After Calibration (Da)	PPM Error After Calibration	Intensity (cps)	Resolution	Charge State	Mono-Isotopic
Yes	Yes	132.90488	132.89823	132.91153	132.90505	0.00017	1.31	132.90479	-0.00009	-0.67	74902	28497	Undefined	Yes
Yes	Yes	266.15981	266.14650	266.17312	266.16015	0.00034	1.29	266.15990	0.00009	0.35	41581	31504	1	Yes
Yes	Yes	315.16225	315.14649	315.17801	315.16244	0.00019	0.61	315.16221	-0.00004	-0.13	48296	32251	1	Yes
Yes	Yes	354.21224	354.19453	354.22995	354.21256	0.00032	0.89	354.21234	0.00010	0.29	58498	33544	1	Yes
Yes	Yes	442.26467	442.24256	442.28678	442.26497	0.00030	0.68	442.26480	0.00013	0.30	507981	40427	1	Yes
Yes	Yes	609.28066	609.25020	609.31112	609.28082	0.00016	0.26	609.28076	0.00010	0.17	224103	36962	1	Yes
Yes	Yes	829.53933	829.49785	829.58081	829.53826	-0.00107	-1.29	829.53838	-0.00095	-1.15	55238	33062	1	Yes
Yes	Yes	922.00980	921.96370	922.05590	922.01025	0.00045	0.49	922.01045	0.00065	0.71	241215	38214	Undefined	Yes
Yes	No	1,521.9714 8	1,521.8953 8	1,522.0475 8	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used
No	No	2,121.9331 6	2,121.8270 6	2,122.0392 6	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used	Not Used

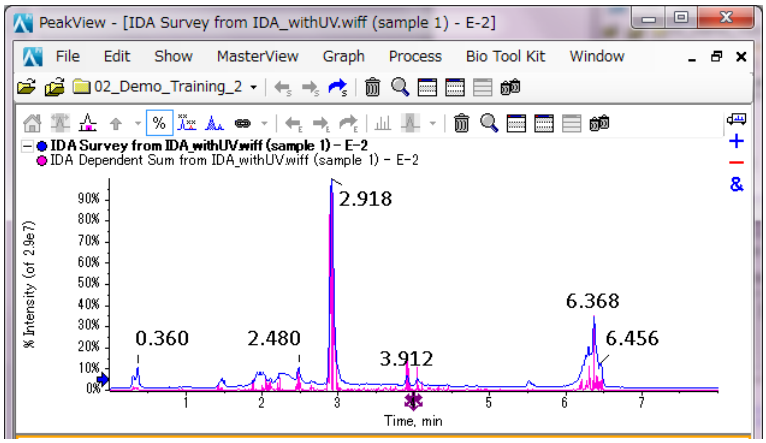
TOF MS/MS High Resolution　　Parent = 829.53933 Da

Peak finding criteria:
Mass tolerance = 50 ppm
Intensity threshold = 100 cps

4　Explore によるデータ解析

データの表示方法について

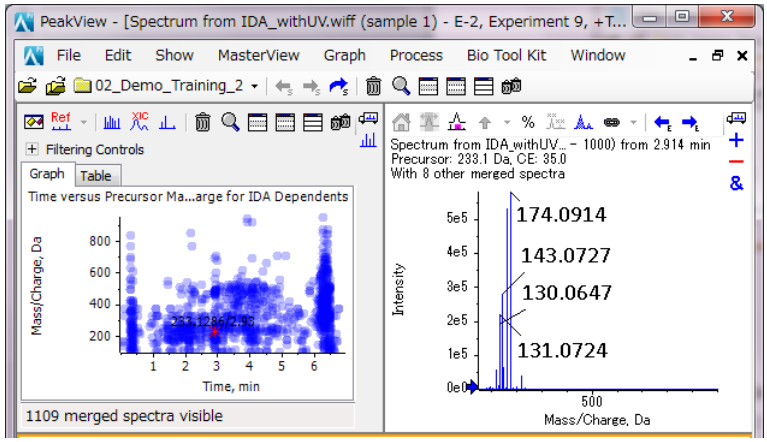
- TIC から、IDA Explore からの 2 種類の Data の開き方があります。
- IDA Explorer は IDA で取得した Data 用の解析手法になります。SWATH など、他の測定方法については、対応していません。
- どちらの方法からも他の解析画面を開くことができます。
- A.　TIC からの解析の初期画面



＊ すべての測定方法に対応しています。

＊ 初期画面は使用した全測定 Method の TIC の重ね書きになります。

- B.　IDA Explore からの解析の初期画面



＊ IDA で取得した Data 用の解析手法になります。

＊ スペクトルの確認から構造解析、類縁体検索など、様々な解析を容易に行うことができます。

- 複数の Data を同時に解析する(Open Multiple Samples...)、File 名や File 内の Sample Name や Sample Info.から目的のデータファイルを検索する（Find Wiff Samples)ことも可能です。
- 詳細な説明につきましては、PeakView® Software ユーザーマニュアル（日本文、英文)、PeakView® Software　Reference Guide (英文) を参考ください。
- 英文の資料につきましては、Explore の Help から参照することが可能です。

4.1　　解析

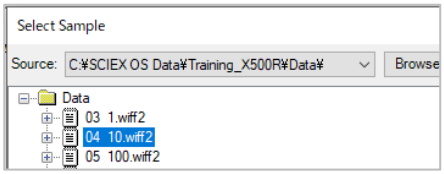
① Home 上の Explore をクリックします。

4.2　　IDA Explorer からの解析

※　IDA で取得した Data について、スペクトルの確認から構造解析、類縁体検索など、様々な解析を容易に行うことができます。

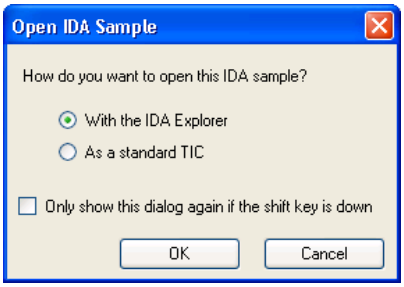
① Open Sample… あるいは File Menu の Open Sample…から目的の File を選択します。

※　Training では以下のファイルを選択します。



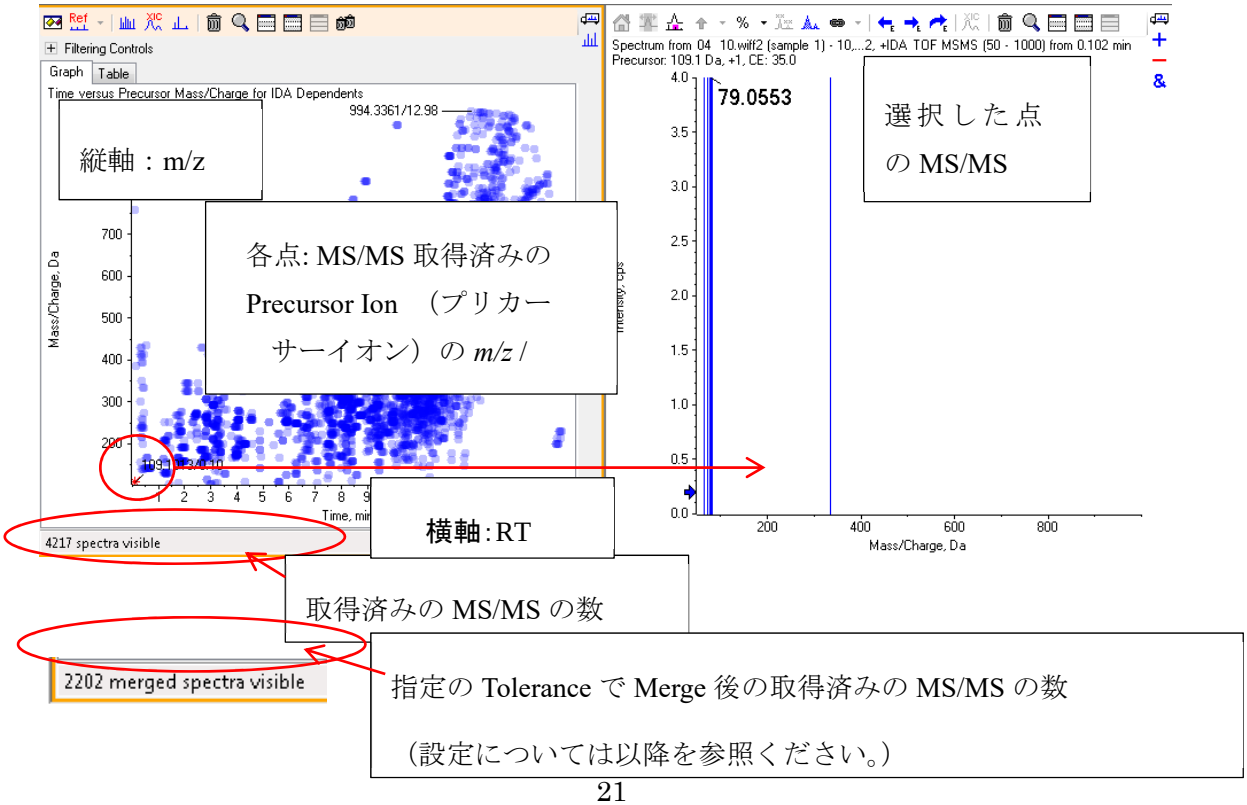
D:¥SCIEX OS Data¥Training_X500R¥Data 中の 04 10.wiff2

② With the IDA Explorer（IDA Explorer から開く）、As a standard TIC（TIC から開く）のどちらかをを選び、OK をクリックします。



※　Training では With the IDA Explorer を選択してください。

※　以下の形式の初期画面が開きます。



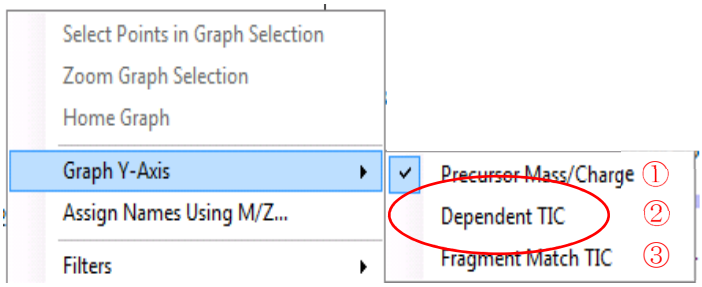
4.2.1　縦軸の切り替え、リスト表示

目的に応じ、Graph の縦軸の切り替えやリスト表示にすることが可能です。

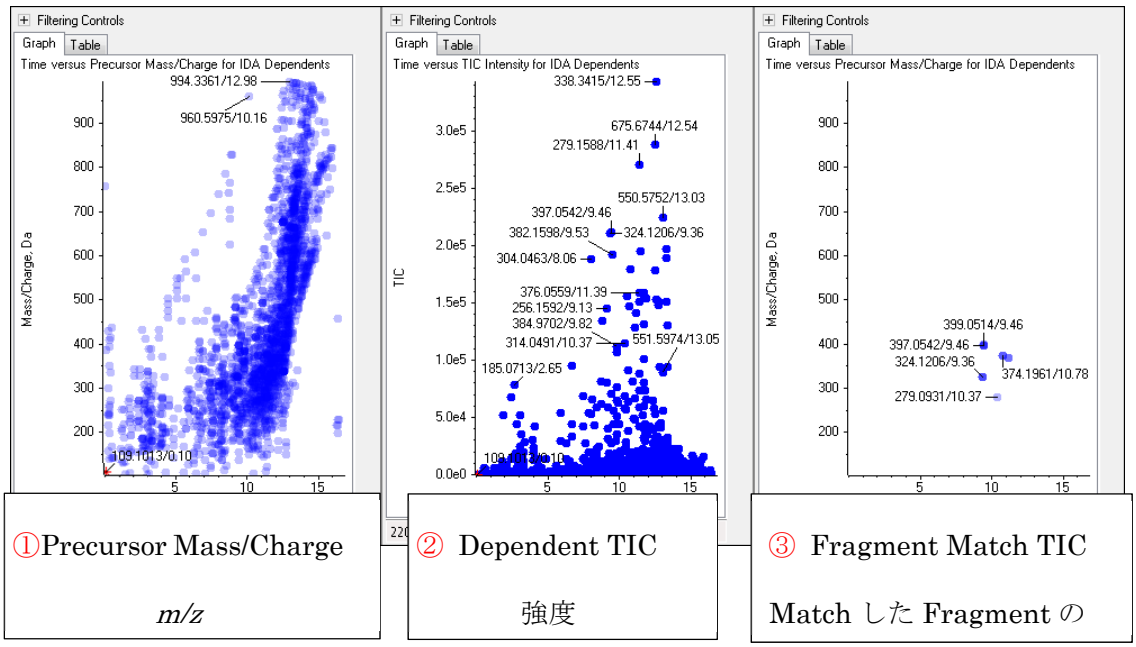
縦軸の切り替え

① 画面上を右クリックし、Graph Y-Axis から目的の縦軸を選択します。

※ Fragment Match TIC は後述の Fragment Matching 使用時に使用できます。



※ Training では②Dependent TIC（強度）に変更してください。



①Precursor Mass/Charge *m/z*

② Dependent TIC 強度

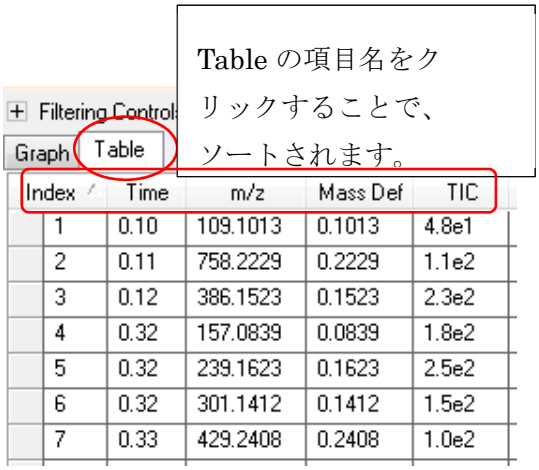
③ Fragment Match TIC Match した Fragment の

4.2.2　Table 表示

① 画面上部の Table タブを選択することで表示されます。

※ Training では Graph のタブをクリックし、上述②Dependent TIC（強度）にしてください。

※ Table の各項目をクリックすることでソートすることができます。



4.2.3　スペクトルの統合（Merge）

※ 指定の *m/z*、RT の Tolerance 内の Peak について、積算して表示します。

※ 解析が容易になり、より質のよい MS/MS が得られる可能性があります。

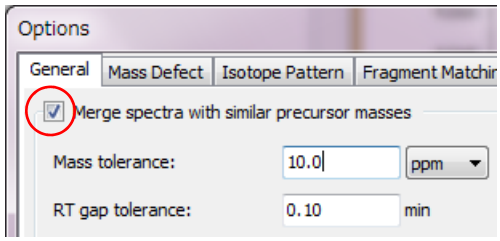
※ 前の解析時の設定が保存されます。LC 条件の変更後など、必要に応じて確認してください。

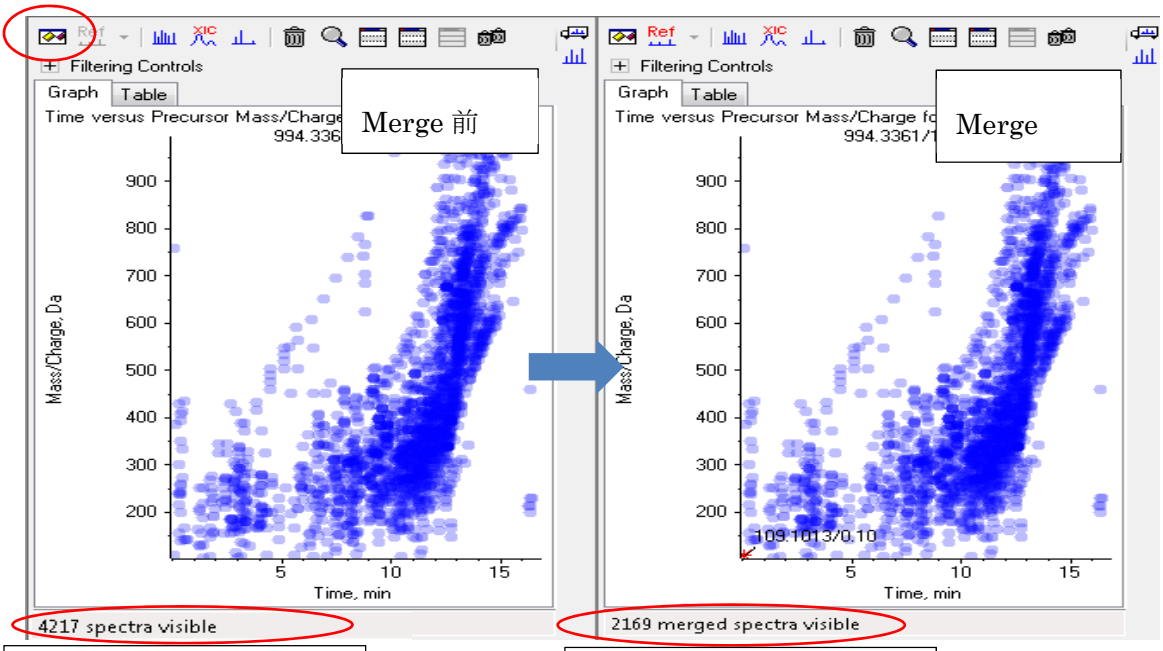
① 画面左上の アイコンで Options（右下）を開きます。

② Merge…にチェックをかけ、Mass, RT gap Tolerance に適当な値を入力します。

※ RT の Tolerance は LC の Peak 幅に依存します。

Training ではそれぞれ 10、 0.1 を入力してください。





4.2.4　Filtering

※　MS/MS 取得された Precursor Ion に Filter をかけ、目的のイオンを抽出し、解析を容易にすることが可能です。

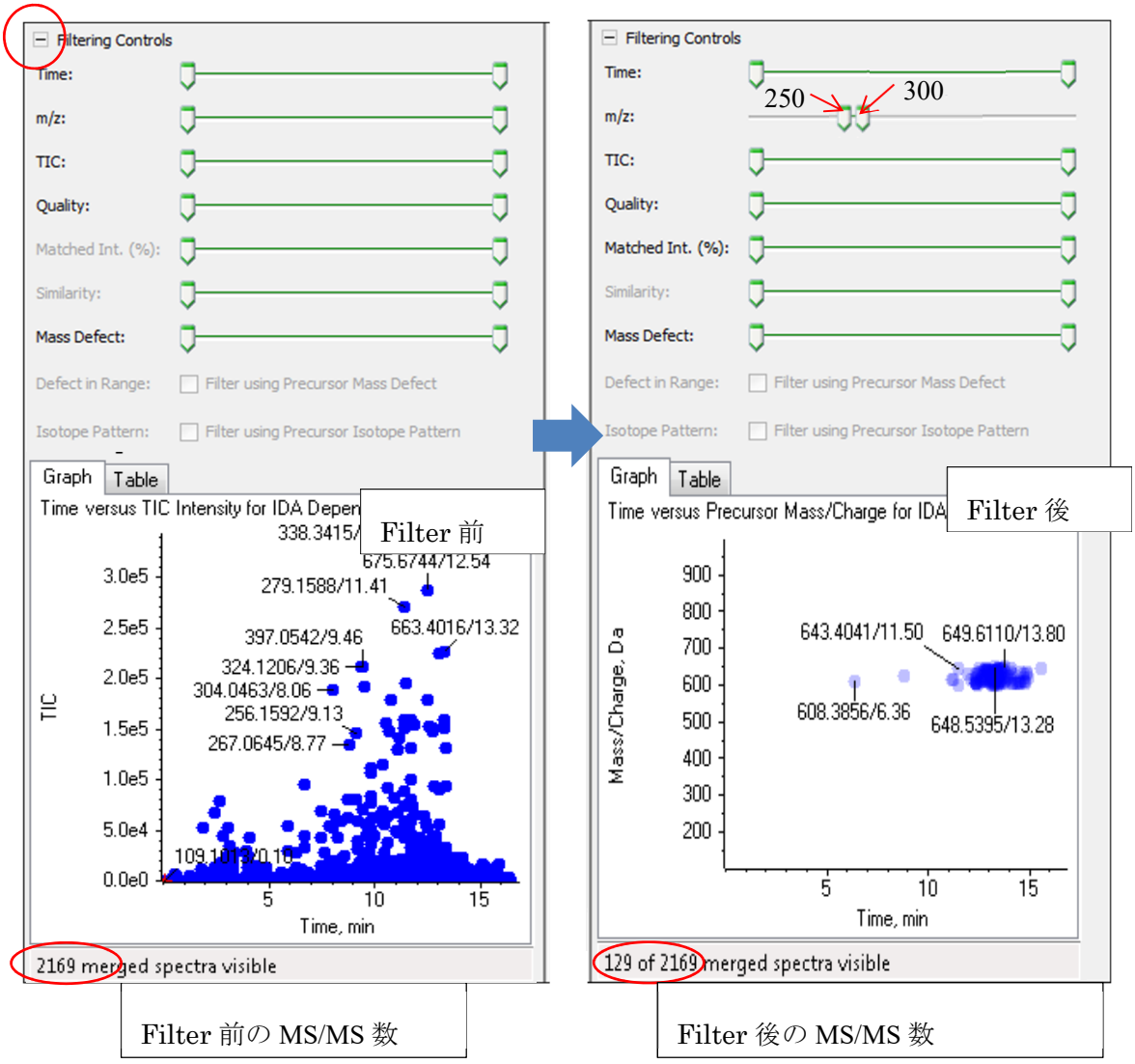
※　グレーアウトの項目は、条件を設定することで利用できるようになります。

①　画面左上の Filtering Control の左の ＋ をクリックし、画面を開きます。

②　次ページの備考を参考に を左ドラッグで移動、あるいはダブルクリック後数値を入力し、目的の制限をかけます。

※　Training では以下のように、*m/z* を 250～300 に制限してください。

※　終了後、Filtering Control 左の － から Filtering Control を閉じてください。



備考【 Filtering Controls について】

以下の Filter が可能です。

※ グレーアウトの項目 (*) は条件を設定することで利用できるようになります。

- Time (Retention Time、RT)
- m/z
- TIC: Fragment Ion の強度の積算
- Quality (%):

  Product ion の強度の積算 ／ 全 Product ion の強度の積算 （Precursor Ion、noise を除く。）
- Matched Int (%)*:

  設定した Product ion、 Neutral Loss に一致したイオンの強度 ／ 全 Product Ion の強度の積算（Precursor Ion、noise、Background ion を除く。Fragment Matching の項を参照ください。）
- Similarity (%)*: 設定した基準化合物と一致する Fragment Ion, Neutral Loss ／ 全 Product Ion の強度の積算（Precursor Ion, Background Ion を除く。）
- Mass Defect

  Defect in Range*: 設定（複数可能）した Defect 内の Precursor Ion のみを表示

  Isotope Pattern*: 設定（複数可能）した同位体比を持つ Precursor Ion のみを表示

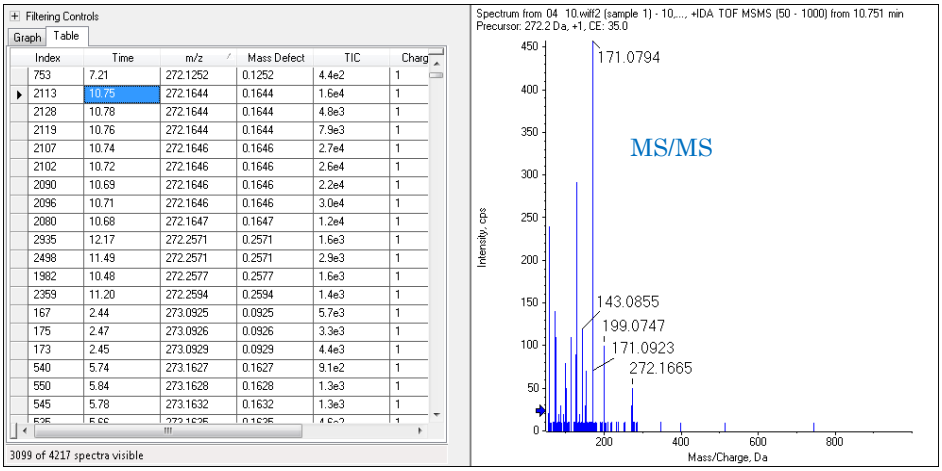
4.2.5 IDA Explorer を用いた目的物質の MS, MS/MS, XIC の表示

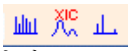
IDA Explorer を用いた目的物質の MS、 MS/MS スペクトルと XIC の表示

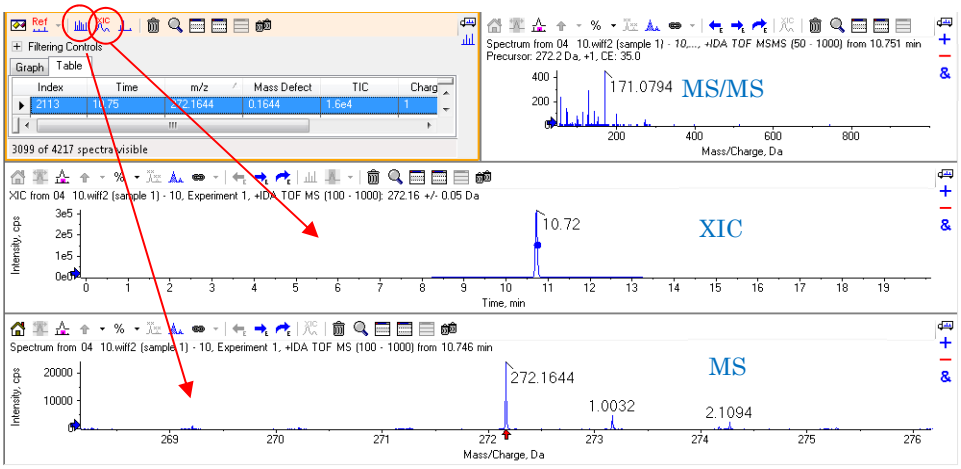
① Table から目的の数値をクリックします。

※ Training では RT:10.75、*m/z* 272.1644（Napropamide）をクリックします。

※ 右側に MS/MS スペクトルが表示されます。



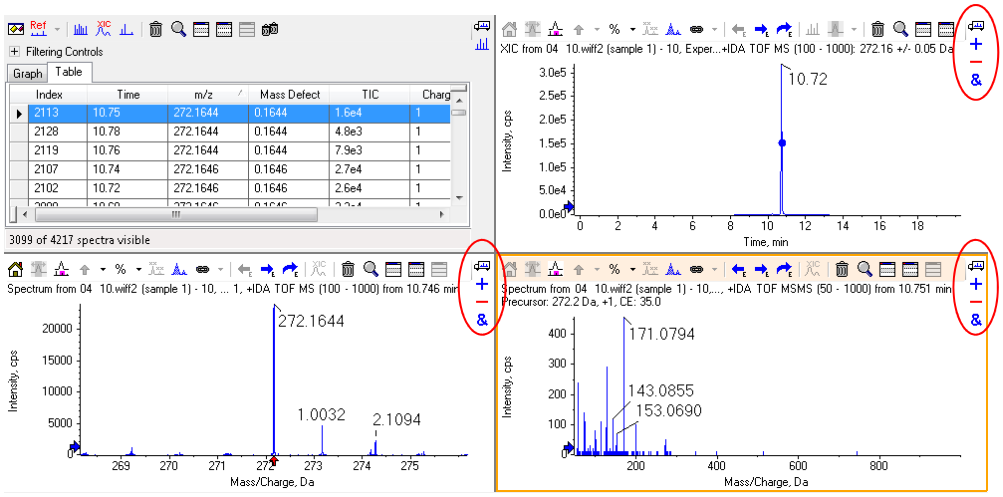
② 画面左上の  （左から MS、XIC、MS/MS）から MS、XIC をクリックして表示します。



Pane の移動、横軸のリンク、足し合わせ、差し引き、重ね書き

① 各 Pane 右上にある、目的のアイコン（下図、上から、移動、足し合わせ、差し引き、重ね書き）をクリック＆ドラッグしてください。

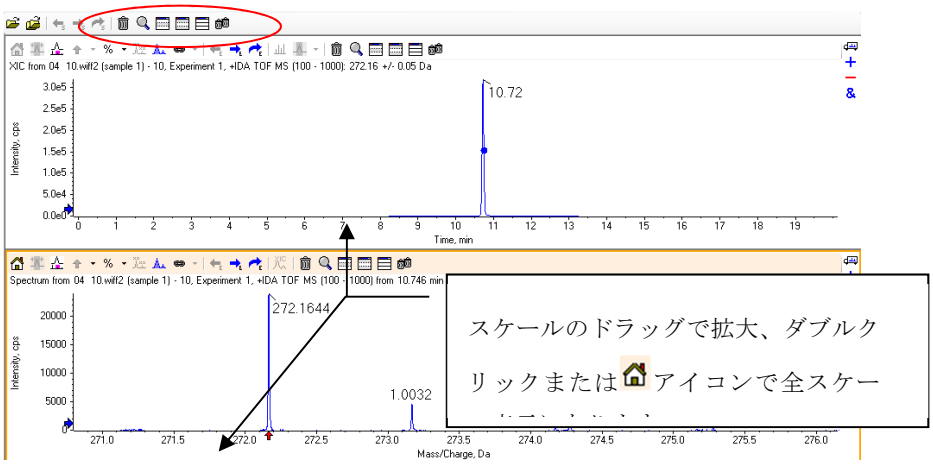
※ Training では以下のように画面を移動してください。



Pane を隠す、消す、全画面にする

① 目的の Pane を選択後、画面上部にある Tool Bar から目的のアイコン（左から、消す、全画面表示、選択した Pane を隠す、選択した Pane 以外を隠す、隠した Pane を表示する、選択した Pane 以外を消す）を選択してください。

※　Training では、IDA Viewer、MS/MS を隠し、以下の画面にしてください。



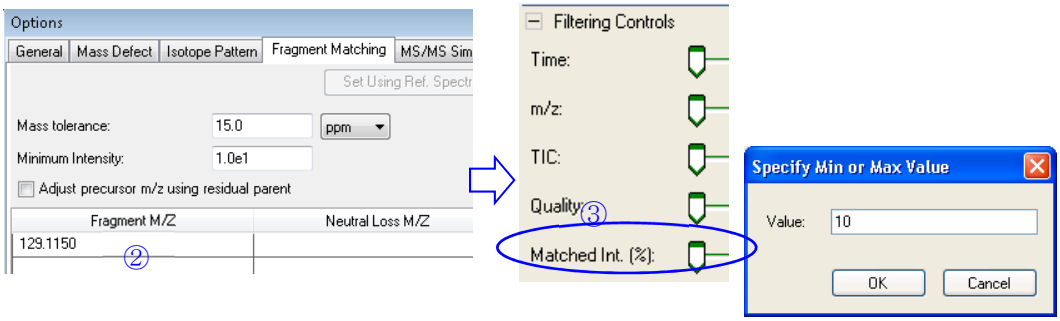
4.2.6　Fragment Matching（共通のフラグメントを持つプリカーサーイオンの検索）

① Filtering Controls の 画面左上の をクリックし、Fragment Matching タブをクリックします。

② Fragment M/Z には共通するフラグメントイオンを入力し OK します。

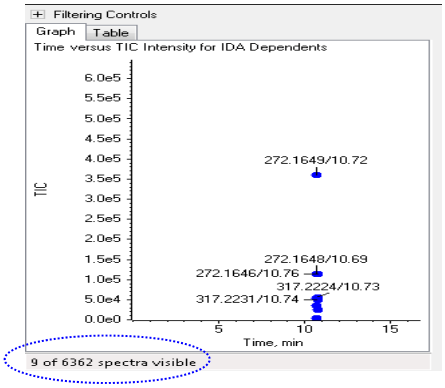
③ Filtering Controls の Matched Int (%)：最小値を 10 と設定します。

※　値はデータにより適宜変更してください。



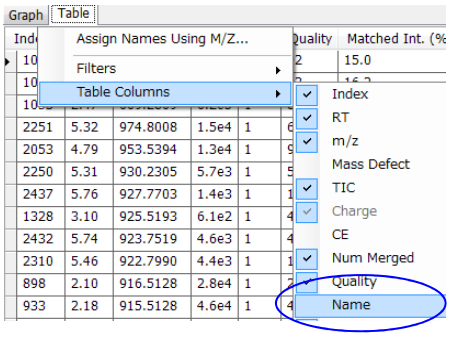
④ Neutral Loss M/Z には共通の脱離するフラグメントを設定することにより、その共通骨格を持つプリカーサーイオンが検索できます。

※　Adjust…にチェックを入れるとプリカーサーイオンから設定値の差分を持つ成分を検索します。

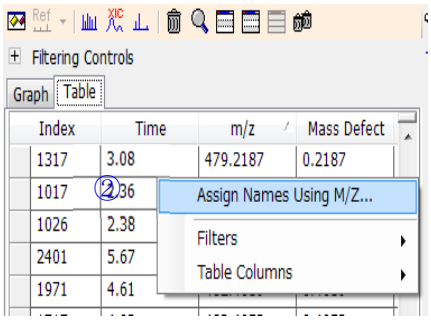


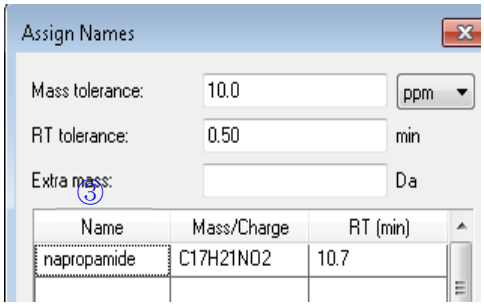
4.2.7　IDA-Namer の設定

① Table タブをクリックし、画面を右クリックして Table Columns > Name にチェックを入れます。



② Table タブ上で画面を右クリックして Assign Names Using M/Z…を選択します。



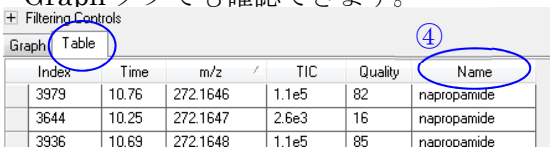


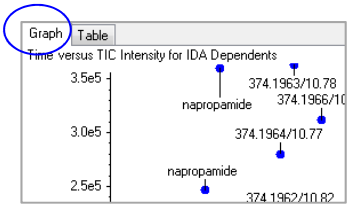
③ 割り当てる化合物名、Mass/Charge(*m/z*)、RT を入力して OK します。

※　あらかじめ Excel でリストを作成しておきますとコピー&ペーストができます。

④ Table タブに Name のカラムが追加されますので Name をクリックすると化合物名がソートされデータが確認できます。

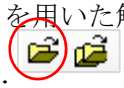
※　Graph タブでも確認できます。





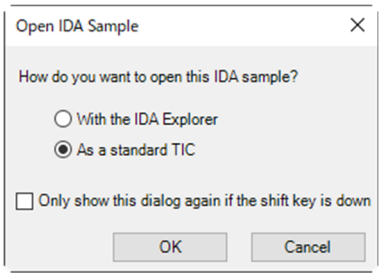
4.3　　クロマトグラムからの解析

4.3.1　　Standard TIC を用いた解析（IDA）

① Open Sample…  から目的の File を選択します。

※　Training では以下の IDA のデータを選択します。

D:¥SCIEX OS Data¥Training_X500R¥Data 中の 04 10.wiff2

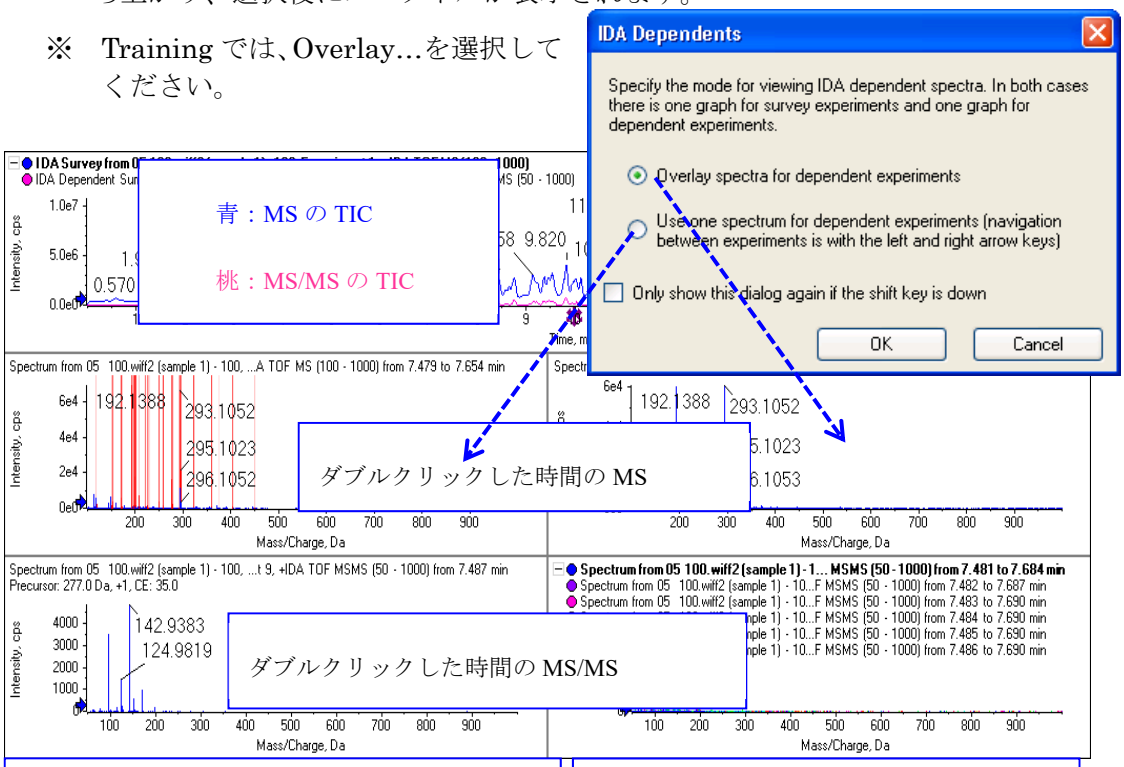


② As a standard TIC（TIC から開く）を選びます。

③ 目的のクロマトグラム上の時間（ここでは 7.5 分付近）をダブルクリックします。

④ TIC、UV 上をダブルクリックすると、表示方法を選択するウィンドウ（図）が立ち上がり、選択後にスペクトルが表示されます。

※　Training では、Overlay…を選択してください。



Use…を選択した場合:

ダブルクリックした時間の MS には、MS/MS したプリカーサーイオンが赤くハイライトされます。目的のプリカーサーイオン（赤い部分）をクリックすると、MS/MS がリンクして表示されます。

Overlay…を選択した場合:

ダブルクリックした時間と同じ IDA のサイクルに含まれる MS/MS がすべて重ね書きで表示されます。

Overlay…を選択すると表示される MS/MS について

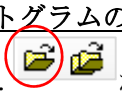
※　Training では行いません。

① 重ね書きされた Pane を個々の Pane に分割したいときは、メニューバーから、Graph > Split Traces into Separate Panes を選択してください。

② 重ね書きされた Pane から 1 つの Pane を抽出したいときは、スペクトル上部のタイトル（Spectrum from …）を左クリックして選択後、右クリックし、Remove All Traces Except Active を選択します。あるいは、目的以外のスペクトルタイトルを選択後、Remove Active Trace を選択し、1 つずつ削除してください。

4.3.2　UV 等の解析

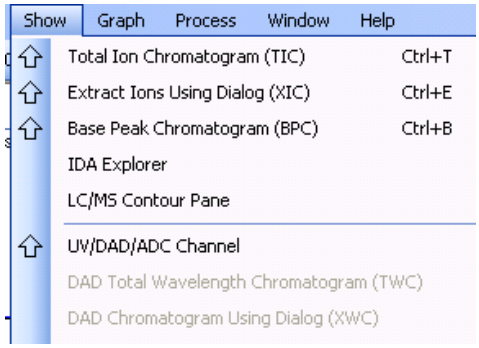
UV (Analogue) クロマトグラムの表示

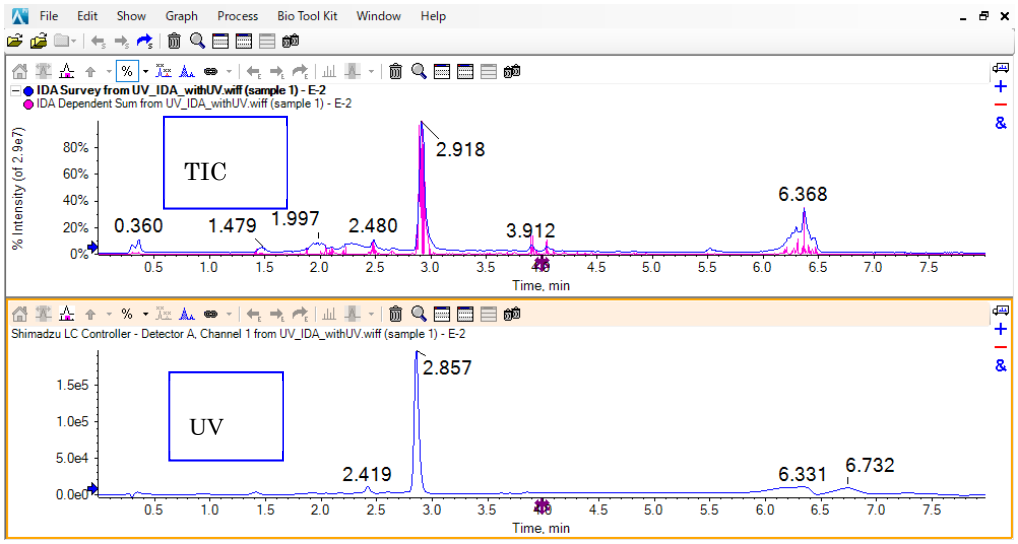
① Open Sample…  から目的の File を選択します。

※　Training では以下のデータを選択します。

② D:¥SCIEX OS Data¥Training_X500R¥Data 中の UV_IDA_withUV.wiff

③ メニューバーの Show から UV/DAD/ADC Channel を選択します

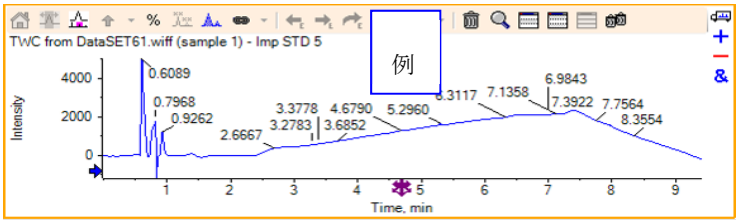




DAD クロマトグラムの表示

① メニューバーの Show から DAD Total weavelength chromatogram(TWC)を選択します。

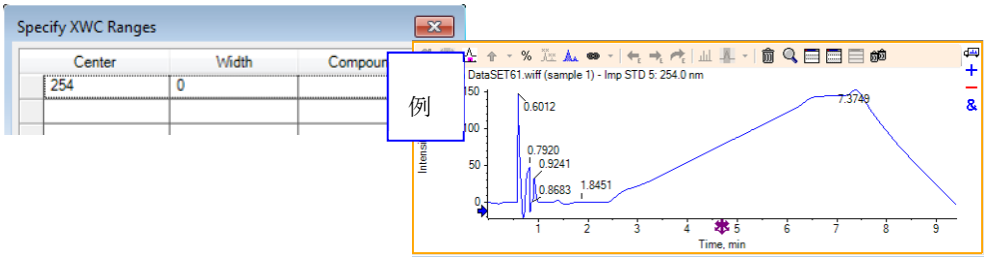
※ Training では行いません。



UV (XWC) クロマトグラムの表示（DAD データからの抽出）

① メニューバーの Show から DAD Extracted weavelength chromatogram(XWC)を選択し、抽出したい波長を入力します。

※ Training では行いません。



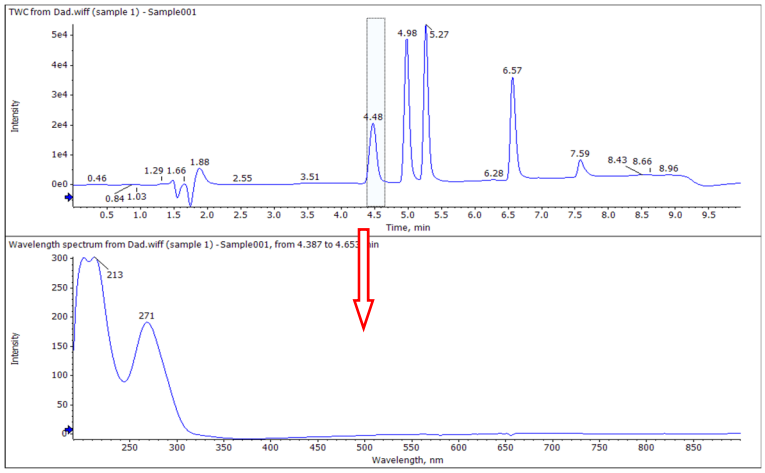
UV スペクトルの表示

※ Training では行いません。

① TWC あるいは XWC 上で、目的のピークを左ドラッグして選択後、ダブルクリックします。

② 選択した範囲の平均の UV スペクトルが表示されます。

※ クロマトグラム上の選択部分の上にマウスを移動させると、⇔が表示されます。表示された状態でマウスの左クリックで⇔を移動させることで、UV スペクトルが同時に変更されます。

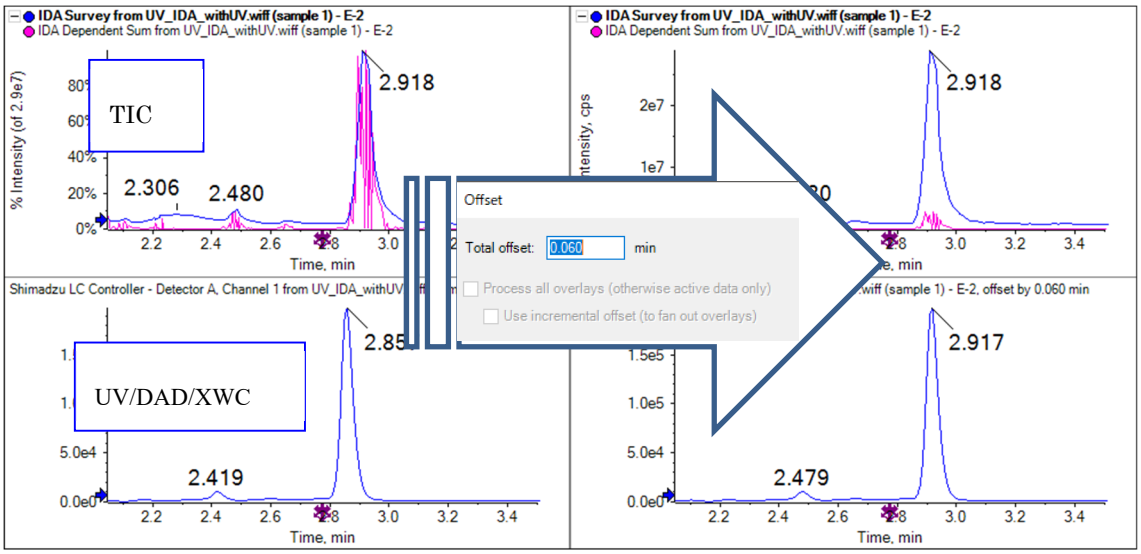


オフセット

※　UV の Chromatogram の時間軸を MS 側に合わせます。

① 目的の UV、DAD、XWC のクロマトグラム上をクリックし、メニューバーの Process から Offset Chromatogram を選択します。

※　Training では先ほど解析した UV データを使用し、0.06 と入力します。



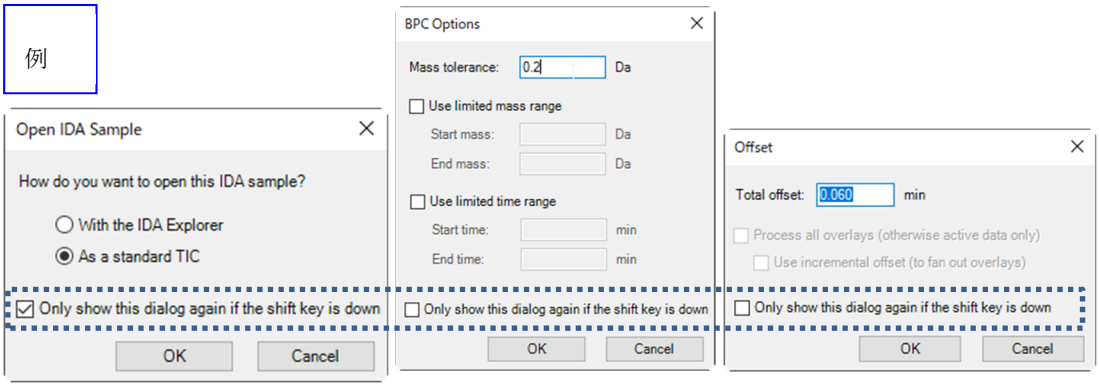
【※Tips!】隠れたダイアログを表示する方法

TIC や BPC、UV のオフセットなどを表示する際、通常表示されるダイアログが隠れていて表示できない場合があります。その際は、シフトキーを押しながら通常の操作をすると復活します。

1) シフトキーを押しながら通常の操作を行うと、下記 Only show this dialog again … にチェックが入っているのでチェックを外しますと以後ダイアログが復活します。

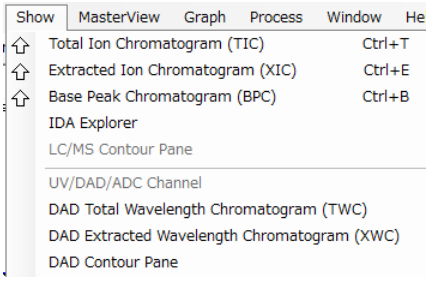
※　逆に簡略化して非表示にするには、下記 Only show this dialog again … にチェックをいれます。

例



4.3.3　TIC の表示と Background の差し引き、スペクトルの平均

TIC クロマトグラムの表示

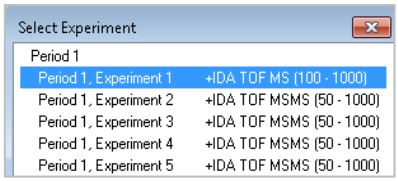


① Open Sample…から目的の File を選択します。

※　04 10.wiff2 を選びます。

② IDA Explorer から As a standard TIC を選びます

③ メニューバーから、Show＞Total Ion Chromatogram (TIC)をクリックします。

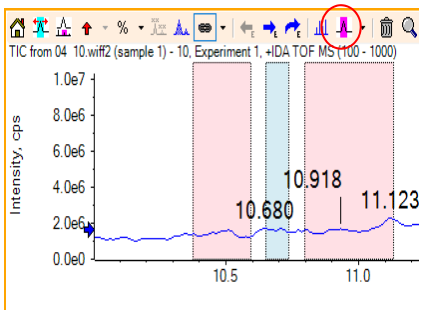


④ Select Experiment ダイアログの Experiment1 +TOF MS を選びます。

⑤ TIC、XIC などのクロマトグラムで、目的付近の横軸をドラッグして拡大します。

※　Training では 10～12 分付近を拡大します。

Background の差し引き、スペクトルの平均

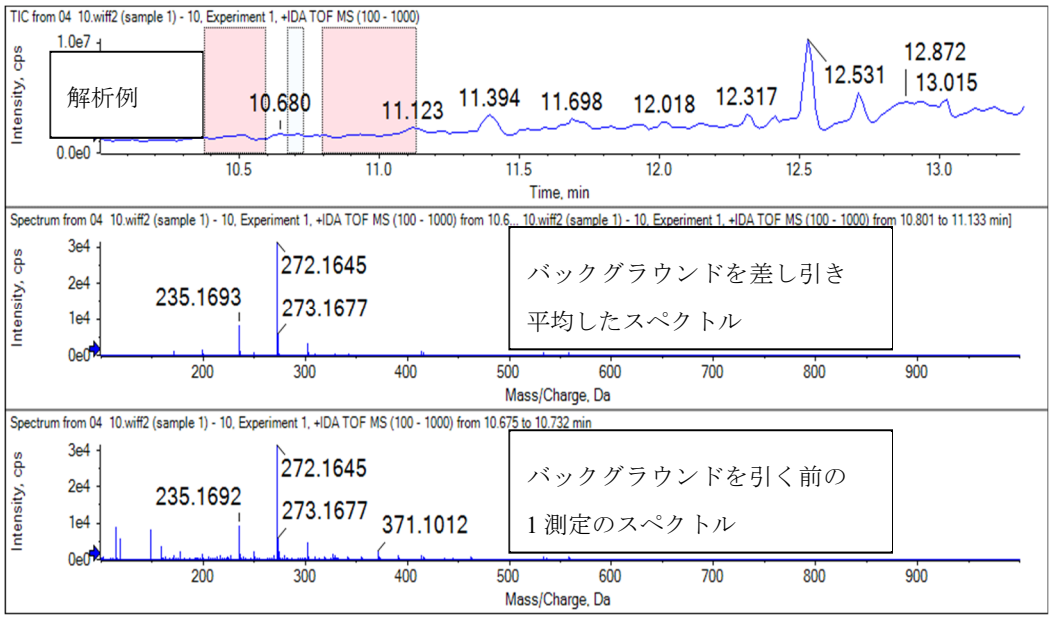


① バックグラウンドとなる部分をドラッグして選択した後に、画面上部の Set Subtraction Range を選択します。

※　2 箇所選択する場合はシフトキーを押しながら選択してください。

※　バックグラウンド領域がピンクで表示されます。

② 目的のピーク付近（下図では 10.7 分付近）を再度左ドラッグで選択し、ダブルクリックすることで、バックグラウンドを引いたスペクトルが表示されます。



※　選択した部分はマウスのドラッグで移動可能です。

※　特定の時間 1 回の測定結果を表示させる場合は、目的の時間をダブルクリックしてください。

③ 必要に応じて、アイコンの右の下矢印から、Clear Subtract Range を選択し、バックグラウンドの指定を解除します。

※　Training では、解除してください。

※　TIC クロマトグラムは残して不要な Pane は削除します（ アイコン使用）。

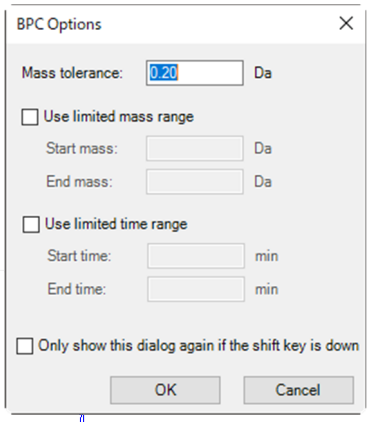
4.3.4　BPC クロマトグラムの表示

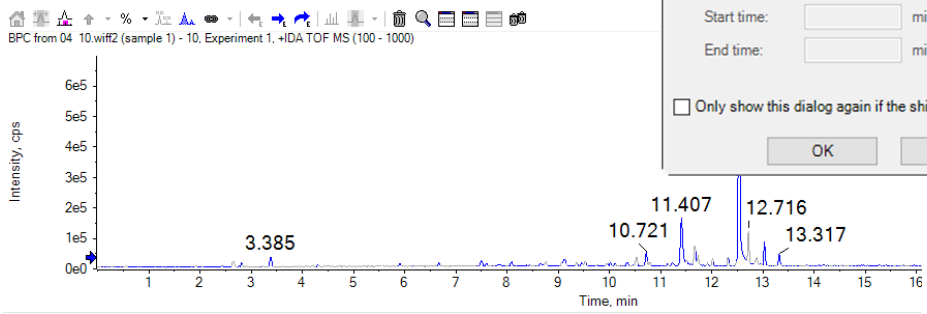
※　BPC（ベースピーククロマトグラム）は、スペクトル上で最も強度の高いピークの強度のみを使用してプロットしたクロマトグラムです。

① メニューバーから、Show > Base Peak Chromatogram (BPC)をクリックします。

※　Select Experiment ダイアログが開いた場合は Experiment1 +TOF MS を選びます。

② BPC Options には適当な値を入力し OK します。





4.3.5　XIC クロマトグラムの表示

① メニューバーから、Show > Extract Ions Chromatogram (XIC)をクリックします。

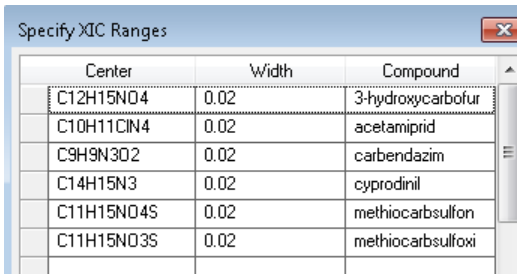
※　Select Experiment ダイアログが開いた場合は Experiment1 +TOF MS を選びます。

② 左から順に、*m/z*、Width(Da)、化合物名を入力し OK します。

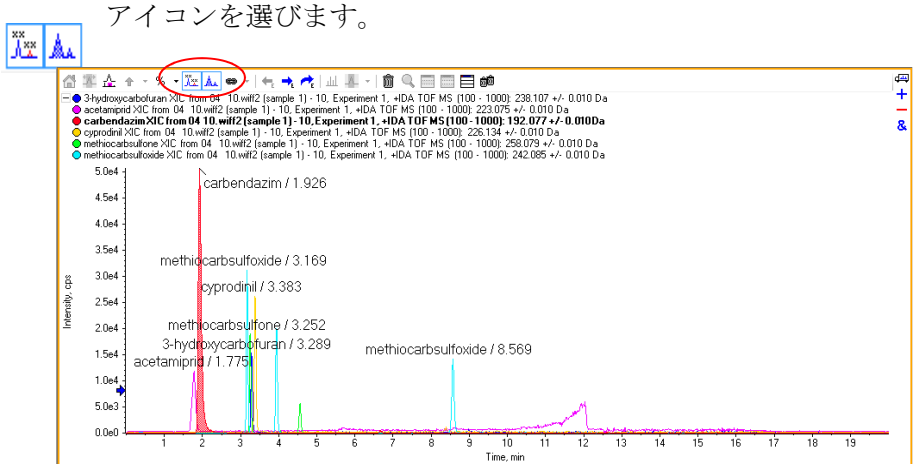
※　Center：*m/z* あるいは組成式（中性）を入力します。

※　Center に組成式を入力した場合、表示される *m/z* は Positive Mode は+H、Negative Mode は-H として自動計算します。

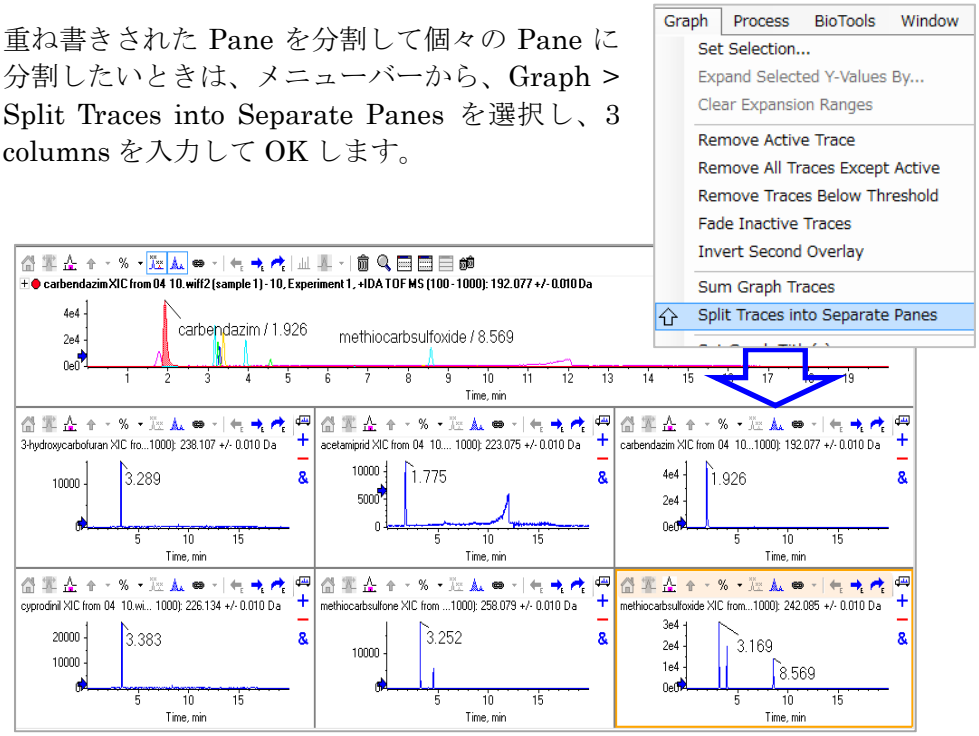
※　あらかじめ Excel でリストをしておきますと、コピー&ペーストができます。



③ 重ね書きされたクロマトグラムに名前を割り当てたり、ピークを塗りつぶすには　アイコンを選びます。

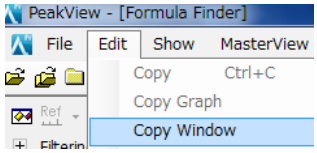


④ 重ね書きされた Pane を分割して個々の Pane に分割したいときは、メニューバーから、Graph > Split Traces into Separate Panes を選択し、3 columns を入力して OK します。



画面のコピー

① クロマトグラム等をコピーするには、メニューバーから、Edit > Copy Graph あるいは Copy Window を選択します。



※ Copy Graph：メタファイル形式

※ Copy Window：ビットマップ形式

② ペイントや ppt ファイル等にペーストします。

4.4　　組成分析（Formula Finder）

※　MS および MS/MS から組成解析、フラグメントイオンの帰属を行う機能です。

① 前述を参考に IDA Explore から、組成分析を行うピークの MS および MS/MS スペクトルを表示します。

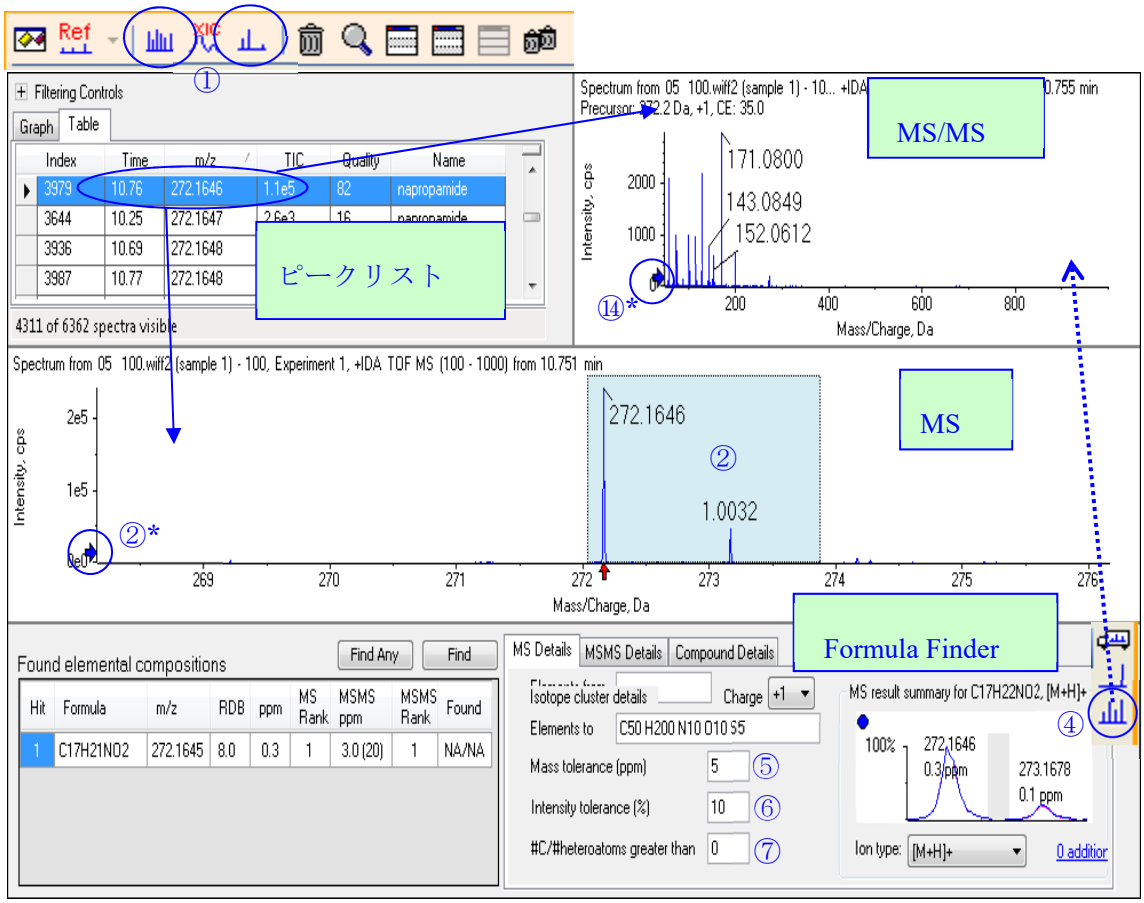
※　Training では、04 10.wiff2 のデータを選び、Napropamide について解析、表示してください。（RT:10.75、*m/z* 272.1644）

② MS のスペクトル上で、目的のピークについて同位体を含めて左ドラッグし、目的のピークを選択します。

※　*m/z* のラベルが表示されていないピークは、以降の解析で数値が読み込まれません。必要に応じて、スペクトルの Y 軸上で、Label Threshold→の矢印を動かし、目的のピークをラベルしてください。

③ メニューバーから、Show > Formula Finder を選択し、Formula Finder を開きます。

④ Formula Finder の右端にある ボタンを MS/MS のスペクトル上にドラッグ&ドロップして、Formula Finder と MS/MS のスペクトルをリンクさせます。



⑤ m/z Tolerance (ppm) に 5 を入力します。

⑥ Intensity Tolerance (%)に 10 を入力します。

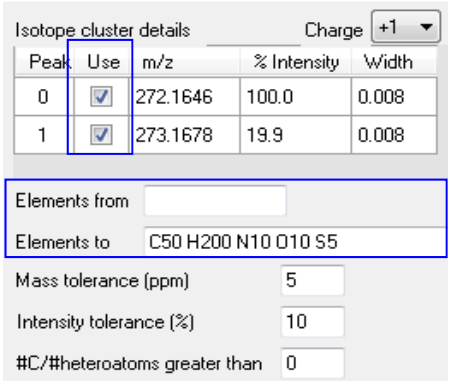
※　他のイオンが重なっているなどの場合は大きく設定してください。

⑦ #C / #heteroatoms > に適当な値（Training では 1）を入力します。

※　炭素と水素以外の元素の比を制限します。

※　未知成分で不明な場合は 0 にします。

⑧ Elements from, to には、検索する元素とその数の下限、上限を入力し、Isotope cluster details のリスト上では、組成分析に使用したい *m/z* の Use にチェックをかけます。



※　Elements from, to に入力した元素、元素数の範囲内で検索が行われます。

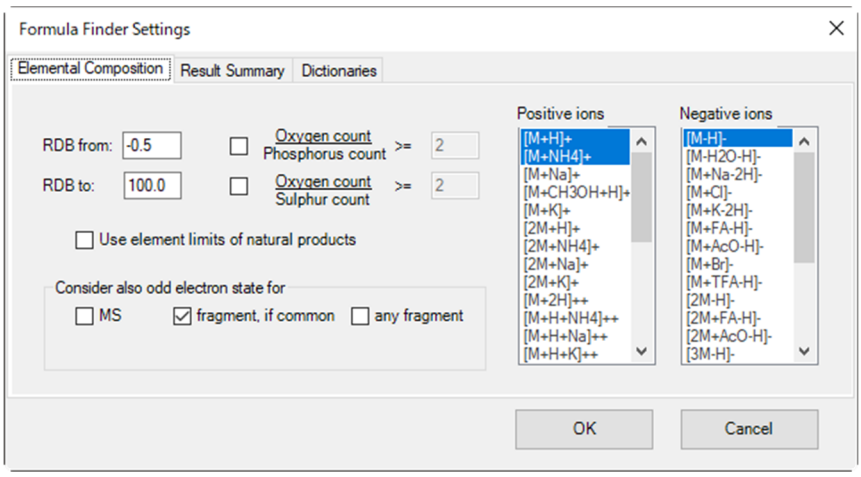
※　既知の含有元素がわかる場合は、Elements from, Elements to にその情報を入力してください。

※　Training では、右図のように入力を行ってください。

⑨ Formula Finder ウィンドウ上で ボタンをクリックし、必要に応じて設定を変更します。

※　Training では、下図のように設定を行ってください。

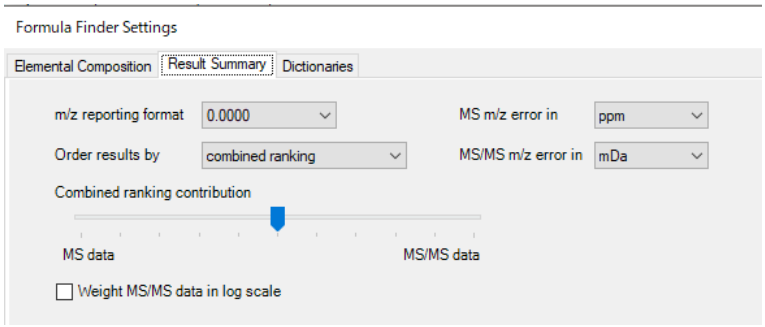
＜Elemental Composition タブ＞



- RDB: 不飽和度
- 必要に応じて変更してください。RDB の大きい化合物については、RDB to の値を変更してください。
- Oxygen count / Phosphorous count, Sulfur Count:
- P（リン）、S（硫黄）を含む化合物の場合、Oxygen count / Phosphorus count や、Oxygen count / Sulphur count にチェックをかけ、適当な数値を入力します。

- Use element…: 合理的な元素比率の組成式を表示します。
- Consider also…: ラジカルイオンの検索を行う場合はチェックをかけてください。
- Positive ions / Negative ions: 想定される付加体の種類や多価イオン等を選択します。

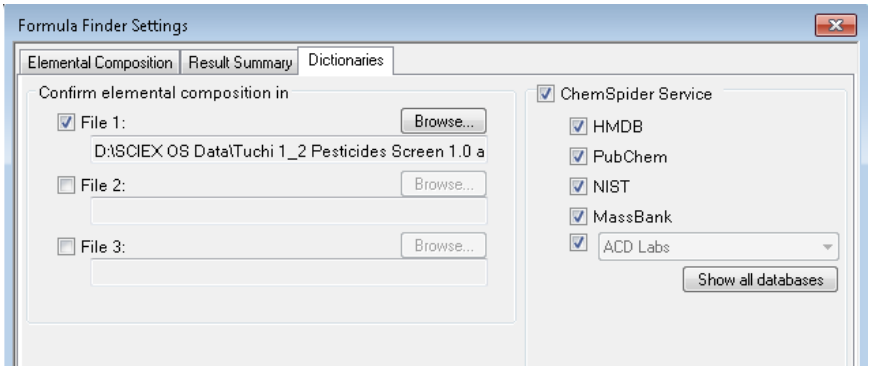
＜Result Summary タブ＞



- m/z reporting format: *m/z* の表示形式を選択します。
- Order results by: 検索結果の順番を指定します。

  Combined ranking contribution, Weight MS/MS data…を使用することで、MS、MS/MS の結果に比重をかけることも可能です。

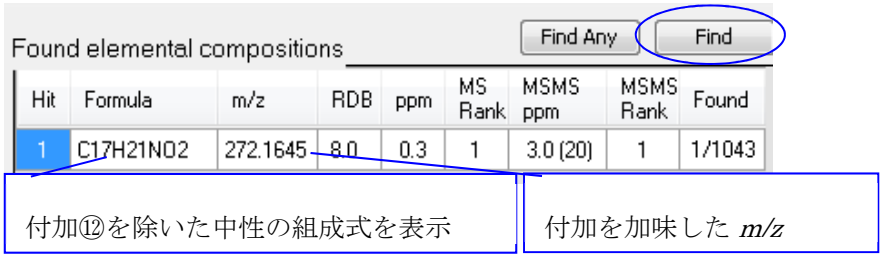
＜Dictionaries タブ＞



- Confirm elemental…: 化合物情報を含むデータベースなどのファイルを 3 つまで選択することができます。化合物名や構造を予測するのに使用します。選択可能なファイルの種類は、Analyst Database ファイル（*.mdb）、XIC Manager ソフトウェアリスト（*.xiclist）、タブ区切りテキスト（*.txt）、構造データフォーマット（*.sdf）の 4 種類です。
- ChemSpider Service: ライセンスを購入された方は検索可能です。使用するデータベースにチェックを入れてください。

⑩ OK を押して画面を閉じます。

⑪ FormulaFinder の Find ボタンを押すと、組成解析の結果が⑨の Result Summary タブの Order results by で指定した順でソートされて表示されます。



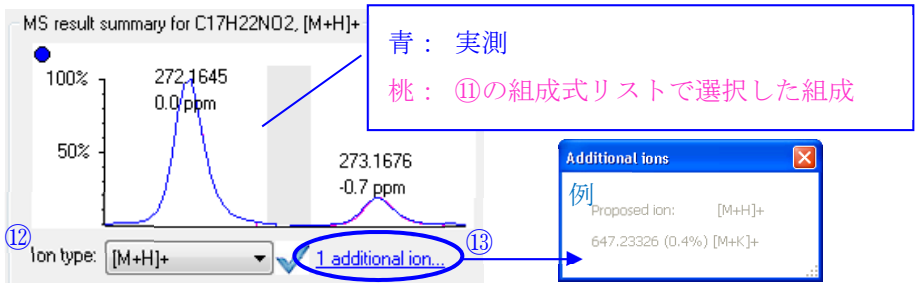
- ppm カラム：プリカーサーイオンのモノアイソトピックイオンの精度を表示。
- MS/MS ppm カラム：“平均精度（帰属できたフラグメント数）”を表示。
- Found カラム：⑨の Dictionaries タブで設定した検索条件でヒットした化合物数を表示（左：ライブラリーファイル、右：オンラインデータベースから（ChemSpider）ヒットしたもの)。

※ 表示される候補組成式は⑨Result Summary タブで設定したランキングで表示します。

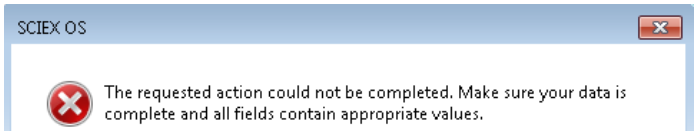
※ Find any ボタンを押すと、設定した検索条件に合致しない結果も表示されます。

⑫ 組成分析の結果、予想される組成式ではない、あるいは付加イオンが予想するものと異なる場合は、Ion type のプルダウンから想定する付加イオンを選び、再度 Find ボタンを押してください。

※ プルダウンで選択できる付加イオンは、⑨の Elemental Composition タブで設定したイオンです。



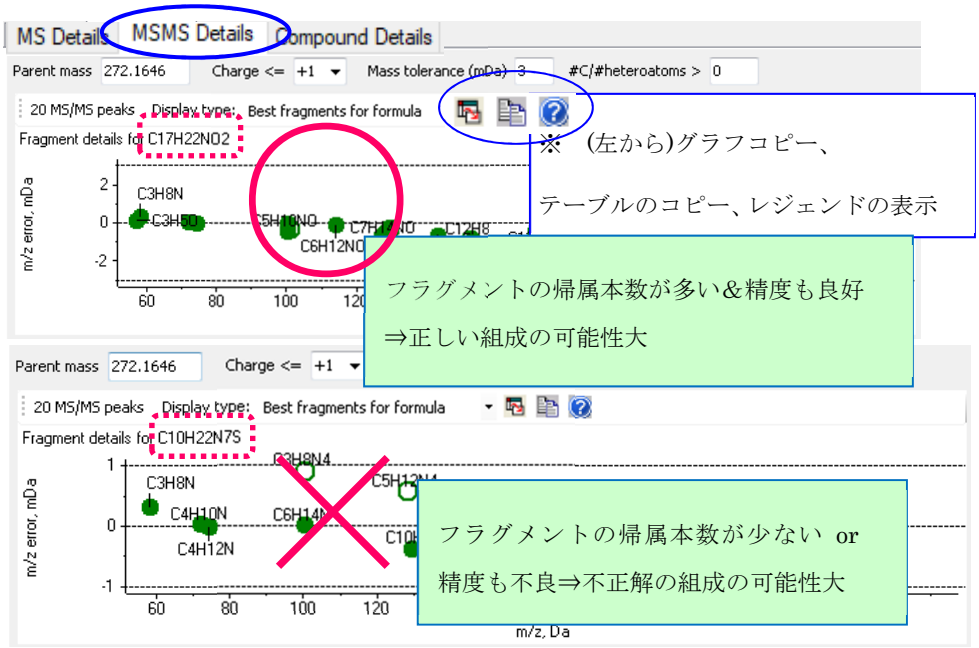
※ Find ボタンを押した際、下図エラーが表示された場合は Ion Type を認識できなかった可能性がありますので、Ion type のプルダウンから想定する付加イオンを選び、再度 Find ボタンを押してください。



⑬ (数字) additional ion と表示された部分をクリックすると、⑫で選択しているイオン以外で観測された付加イオンの情報が表示されます。

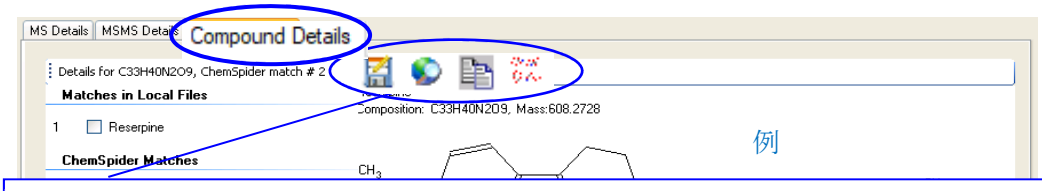
⑭ ⑪の Formula Finder ウィンドウで特定の組成式を選択して MS/MS details のタブをクリックすると、この組成をプリカーサーとしたフラグメントイオンの組成の帰属結果が表示されます。

※ ⑨で正しい組成式を選択した場合は、組成分析の対象としたフラグメントイオンのピークが精度良くすべて帰属され、一方、選択した組成式が正しくない場合は、帰属できないフラグメントが残ったり、帰属できても精度が著しく悪い結果になることがあるので、結果、選択した組成が正しいかどうか判断することができます。



※ MS/MS フラグメントの組成分析の対象を変更する場合には、MS/MS の Y 軸上の Label Threshold ▸ を変更して再度、Find ボタンを押します。

⑮ Compound Details タブをクリックすると、⑨Dictionaries タブで設定したデータベースでヒットした化合物名や構造を見ることができます。リストアップされた化合物名をクリックすると、選択した化合物の構造が表示されます。



※ は左から以下の通りです。

- 表示している構造を.mol 形式で保存。
- 表示している化合物についての詳細を ChemSpider のウェブサイトを開いて表示。
- 表示している構造をクリップボードにコピー。
- 検索された化合物を一覧表示。

4.5　フラグメントの帰属（Fragments Pane）

※　推定された構造式から Fragment Ion の計算を行い、Fragment Ion から構造上の解裂部分を帰属する機能です。

保存した*.mol ファイルを読み込む方法

※　予め構造式を*.mol（Mol File）形式で保存しておきます。

① 前述を参考に IDA Explore から、フラグメントの帰属を行う MS/MS を表示します。

※　Training では Napropamide について解析します。MS/MS のみを残し、残りの Pane を削除、あるいは隠してください。

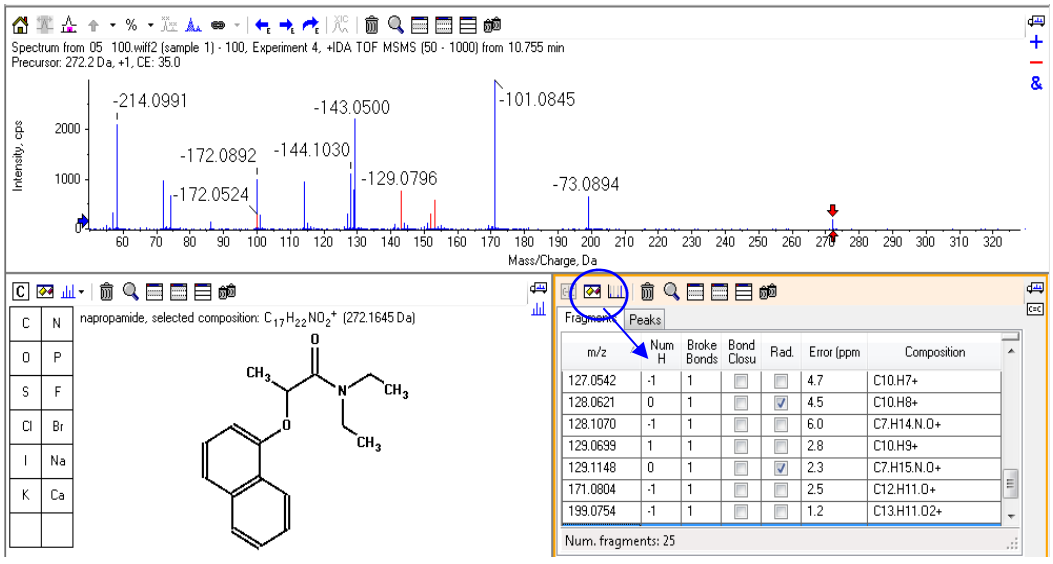
② メニューバーから File > Open mol file…を選択し、推定構造の mol file を開きます。

※　Training ではこのフォルダ内の Napropamide.mol を開いてください。

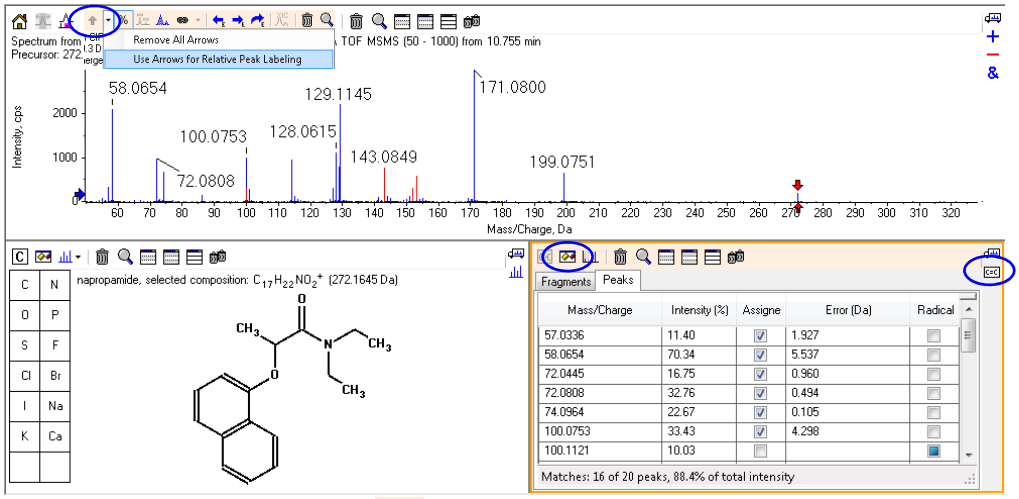
③ メニューバーから Show > Fragments Pane を選択します。

④ Fragment pane の左上の をクリックするとフラグメントの帰属が行われます。

⑤ スペクトル上の目的のピークをドラッグして選択することで、対応する構造上の帰属された部分および Fragment のリストがハイライトされます。



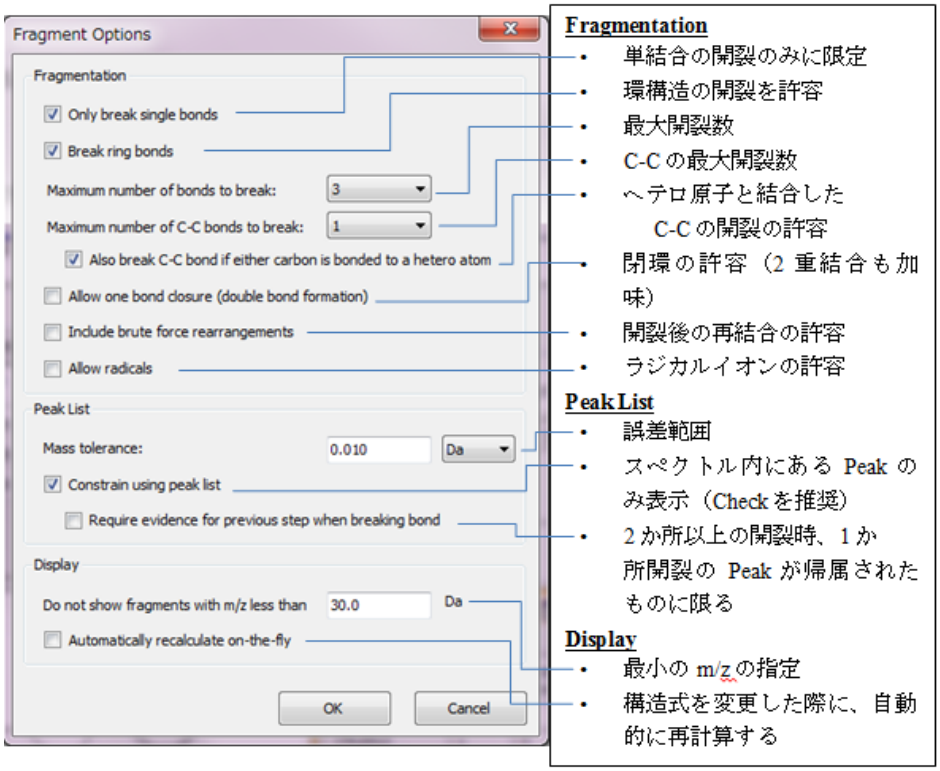
⑥ アイコン（Add arrows markers…）から Use Arrows for Relative Peak Labeling のチェックを外すと MS/MS ラベル表示が差分から実測値に変わります。



⑦ Fragment pane の左上の アイコンをクリックし、以下を参考に帰属の条件を設定後、OK します。

※ 化合物の構造に適した設定を行ってください。

※ Training では、以下の条件を使用してください。



※ 設定の詳細は PeakView Reference Guide（日本文、英文）をご参照ください。

ChemSpider 等の検索結果から構造を読み込む方法

※　ChemSpider はライセンスをお持ちの方が使用可能です。

① 前述を参考に Formula Finder から、フラグメントの帰属を行う化合物の組成分析を行います。この際、ChemSpider を用いてオンラインデータベースの検索を行います。

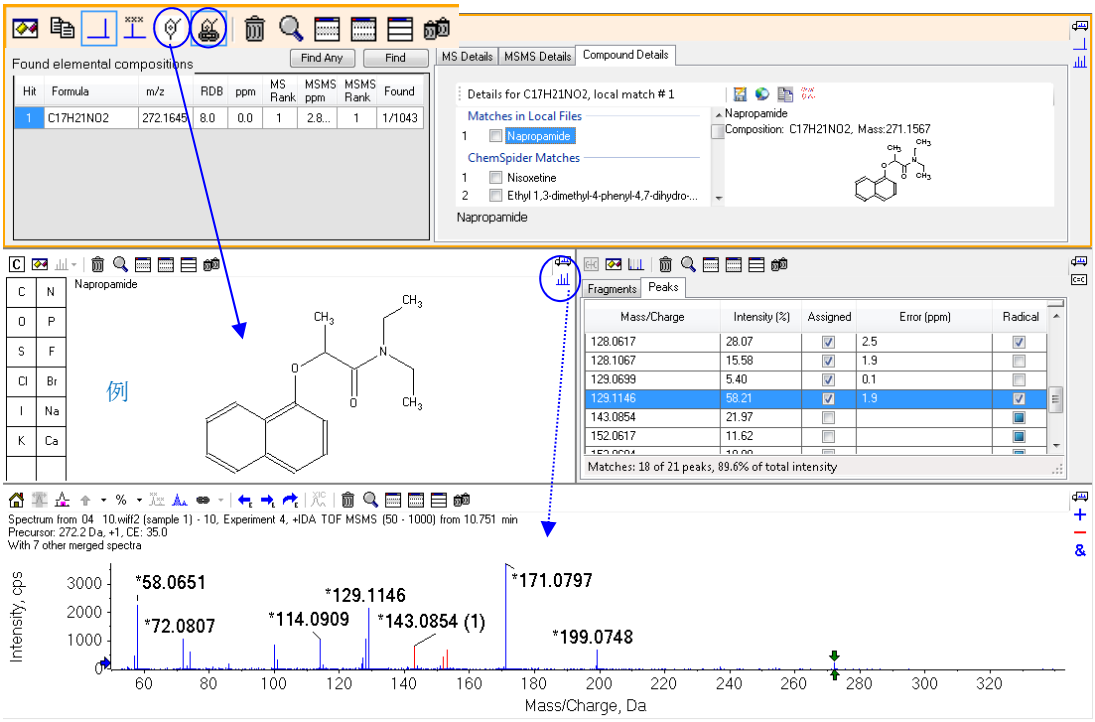
※　Training では Napropamide について解析します。Formula Finder のウィンドウと MS/MS のみを残し、残りの Pane を削除、あるいは隠してください。

② Compound Details タブをクリックし、検索された化合物の構造を表示します。

③ Formula Finder ウィンドウ上の ボタンをクリックすると、②で表示していた構造が編集可能な Structure Pane として新たに開きます。

④ 「保存した*.mol ファイルを読み込む方法」の③以降に従ってフラグメントの帰属を行います。

※　Sutucture Pane と MS/MS をリンクするには、Structure Pane 上の を目的の MS/MS スペクトル上にドラッグ&ドロップします。



⑤ アイコンをアクティブにすると、Formula Finder と Structure Pane がリンクされます。複数化合物がリストアップされている場合、Formula Finder 上で他の化合物を選択すると、Structure Pane に表示される構造式も自動で切り替わります。

4.6　Mass Calculators について

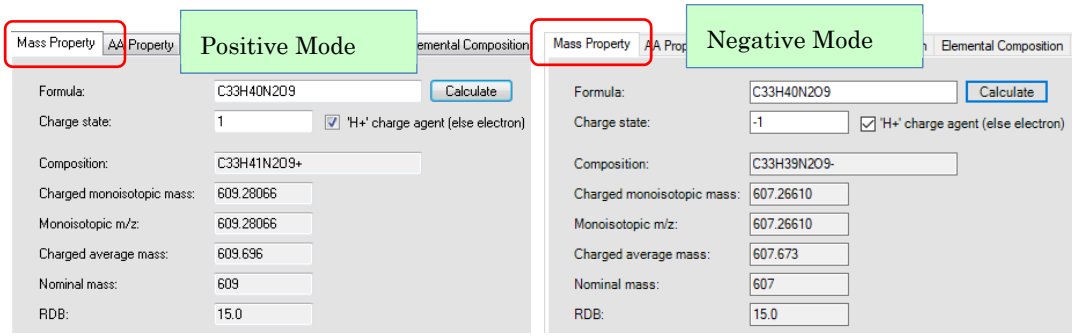
① メニューバーの Show > Mass Calculators で行います。

精密質量の計算

① Mass Property タブで解析する組成式を Formula、Charge State に価数（数字）を入力します。

※ Formula には中性の組成式、'H+' charge agent (else electron)のチェックボックスにチェックを入れ、Charge State には 1 ないしは - 1 と入力すると、Positive Mode は+H、Negative Mode は-H として精密質量を自動計算できます。

※ Charge State 入力例:　Positive Mode: 1, Negative Mode: -1

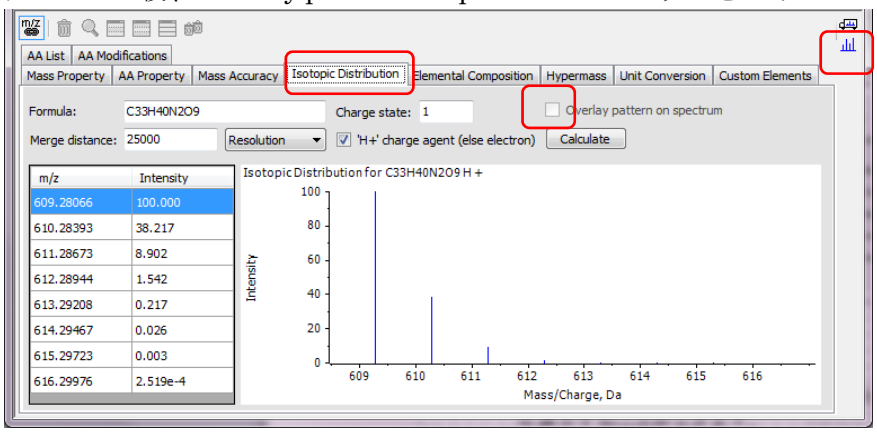


② Calculate をクリックします。

同位体分布の計算と重ね書き

① Isotopic Distribution タブをクリックし、組成を入力すると理論上の同位体ピークが表示されます。

※ スペクトルに重ね書きする場合は、右上の アイコンを目的のスペクトルにドラッグしてリンクした後、Overlay pattern on spectrum にチェックをかけてください。



※ その他のタブについては英文 Manual を参照ください。

5　Analytics によるデータ解析

5.1　検索に使用する Library の準備

※　この設定は、装置導入時あるいはライブラリーファイルを購入した際など、最初の段階で設定します。

① Home 上の Library をクリックします。

② インポートする形式を選び、該当するファイルを選択し Open します。

③ All をクリックして全化合物を選択し、Add To Compound Library に適宜名称を入力、Next をクリックしてインポート操作を行います。

※　Training では Free_Pesticide.mdb をインポートします。

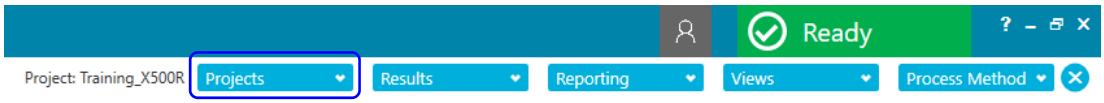
④ Finish をクリックして終了します。

※　次回からはこの作業は不要になります。

5.2　はじめに

① Home 上の Analytics をクリックします。

② Projects をプルダウンし、Training_X500R を選択します。



5.2.1　初期設定の変更

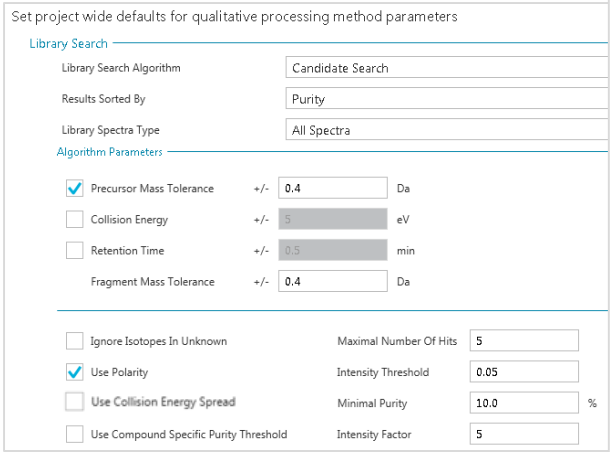
※　最初に設定することで当該プロジェクトでは共通の解析パラメータとして使用できます。

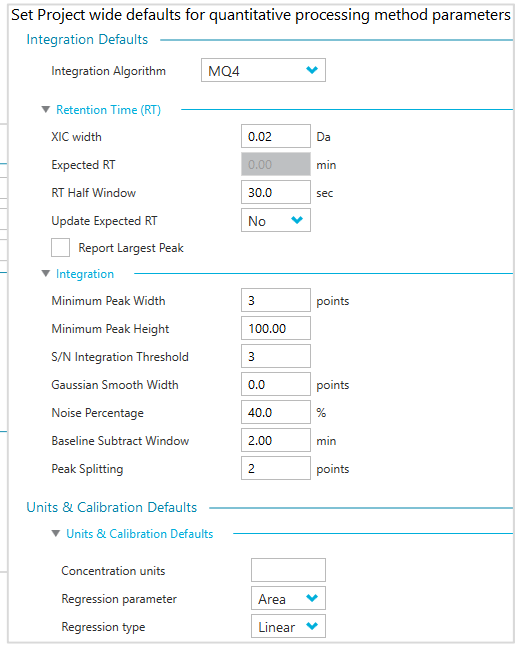
① Projects をプルダウンし、Project Default Settings を選択します。

② Quantitative Processing では、図を参考に、定量解析に使用するアルゴリズムや積分条件、検量線の条件等を設定します。

③ Qualitative Processing では、下図を参考に定性解析に使用するライブラリーサーチや各種パラメーター等を設定します。

※　各設定は状況に応じて変更します。





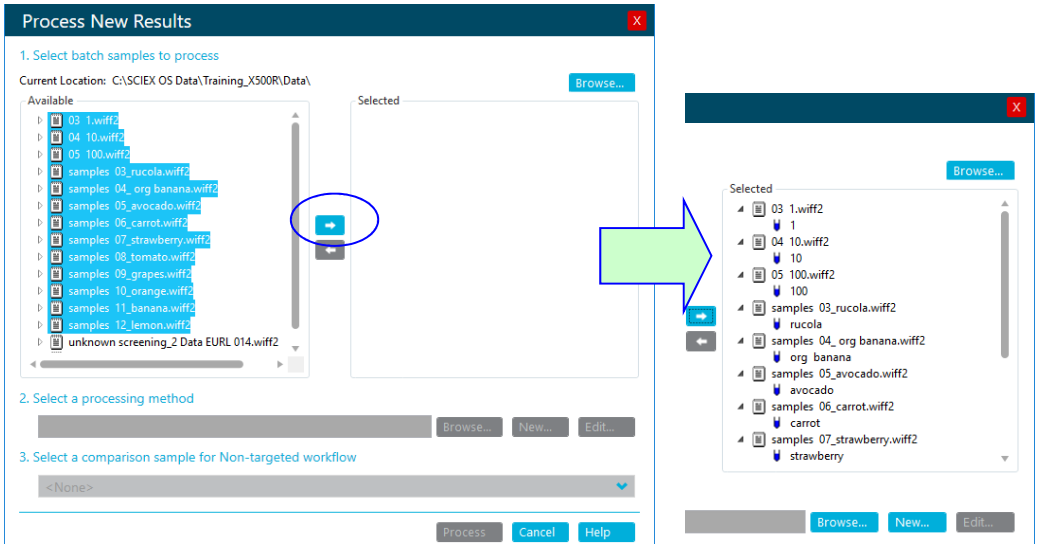
5.3　定量解析とターゲットスクリーニング

5.3.1　解析メソッドの作成

① Results をクリックし New を選択します。

② 解析するデータをすべて選択し、＝＞アイコンで画面右側にサンプルを移動します。

※ Training では下図を参考に選びます。

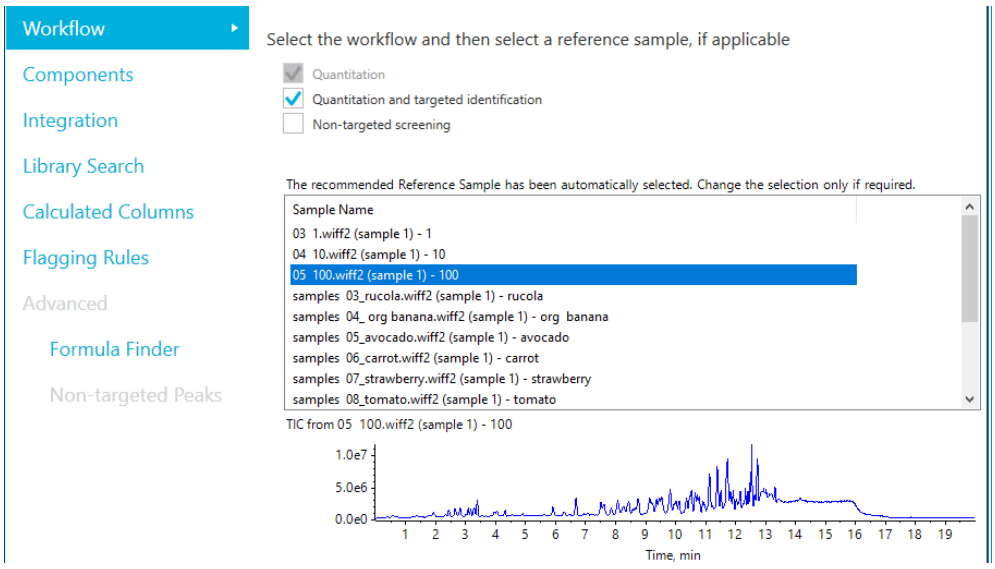


③ 2. Select a Processing Method では New をクリックします。

※ 2 回目以降の解析の際は、Select a Processing Method の Browse から既存のファイルを選択します。

④ **Workflow** では解析するワークフローを選択します。定量とターゲットスクリーニングは、Quantitation and target identification にチェックを入れます。

※ 定量のみの解析の場合は、Quantitation にチェックを入れます。



⑤ **Components** では、下図を参考に、定量あるいはターゲットスクリーニングに使用するイオンの情報として化合物名と組成式、解析する幅、わかれば保持時間を入力し、付加イオンを選択します。

※ Retention Time Mode: 予想される RT 情報がない場合、プルダウンで選択したピーク数に応じて微小なピークを認識します。

Row	IS	Group	Name	Chemical Formula	Adduct/Ch...	Precursor Mass (Da)	Fragment Mass (Da)	XIC Width (Da)	Retention Time Mode
1	☐	1-Naph...	1-Naphthalenea...	C12H11NO	[M+H]+	186.09134		0.01	RT value
2	☐	3-hydr...	3-hydroxycarbof...	C12H15NO4	[M+H]+	238.10738		0.01	
3	☐	asulame	asulame	C8H10N2O4S	[M+H]+	231.0434		0.01	
4	☐	atrazin...	atrazine-deseth...	C3H4ClN5	[M+H]+	146.0228		0.01	
5	☐	averme...	avermectin B1a	C48H72O14	[M+NH4]+	890.52603		0.01	
6	☐	bendio...	bendiocarb	C11H13NO4	[M+H]+	224.09173		0.01	

RT value
RT value
Find top peak
Find 2 peaks
Find 5 peaks
Find 10 peaks
Find all peaks

※ あらかじめ Excel で作成しておくとコピー&ペーストができます。

※ 雛形を Export しておき Excel で編集したのち Import することもできます。

Import Export... Options

Row	IS	Group	Name	Chemical Formula	Isotope	Adduct/Ch...	Precursor (Q1) Mass (Da)	Fragment (Q3) Mass (Da)	XIC Width (Da)	Retention Time Mode	Retention Time (min)	IS Name
1	☐	1-Naph...	1-Naphthalenea...	C12H11NO	1	[M+H]+	186.09134		0.01	RT value	4.9	IS_xxx
2	☐	3-hydr...	3-hydroxycarbof...	C12H15NO4	1	[M+H]+	238.10738		0.01	RT value	3.29	IS_xxx
3	☐	asulame	asulame	C8H10N2O4S	1	[M+H]+	231.0434		0.01	RT value	1.85	IS_xxx
4	☐	atrazin...	atrazine-deseth...	C3H4ClN5	1	[M+H]+	146.0228		0.01	RT value	0.58	
5	☑		IS_xxx	C48H72O14	1	[M+NH4]+	890.52603		0.01	RT value	12.53	

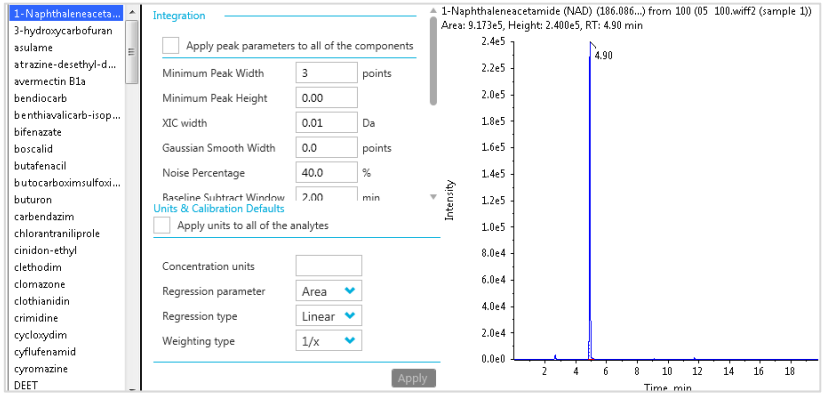
※ 内標による定量を行う場合は、IS カラムの該当成分にチェック入れ、各成分の IS Name カラムではプルダウンから内標成分をします。すべての成分の内標を設定する場合は IS Name カラム上を右クリックして Fill down on columns を選びます。

※ Library 情報からも Import 可能です。Import->Import components from a library database...から操作します。

Import Export... Options
Import components from a text file...
Import components from a library database...

※ Training では Import->Import components from a text...を選び、D:¥SCIEX OS Data¥Training¥Quantitation Methods 中の Pesticide.txt を選択します。

⑥ **Integration** では、各成分の積分の確認および変更を行います。ピークがうまく積分されていない場合は、各パラメータを変更後 Apply をクリックしクロマトグラムに反映します。



※ 目的のピークが積分されていない場合は、左ドラッグでピーク部分を囲みます。

※ 複数化合物がある場合は同様の操作で確認します。

【スムージングおよび積分パラメータ】

・**Gaussian Smooth Width**：スムージングをかける場合、値を入力します。

・**Min. Peak Height**：ここで設定した高さ（Intensity, cps）を超えるピークを積分します。ベースラインよりも高めに設定することで、ノイズや強度の低いピークは積分されなくなります。

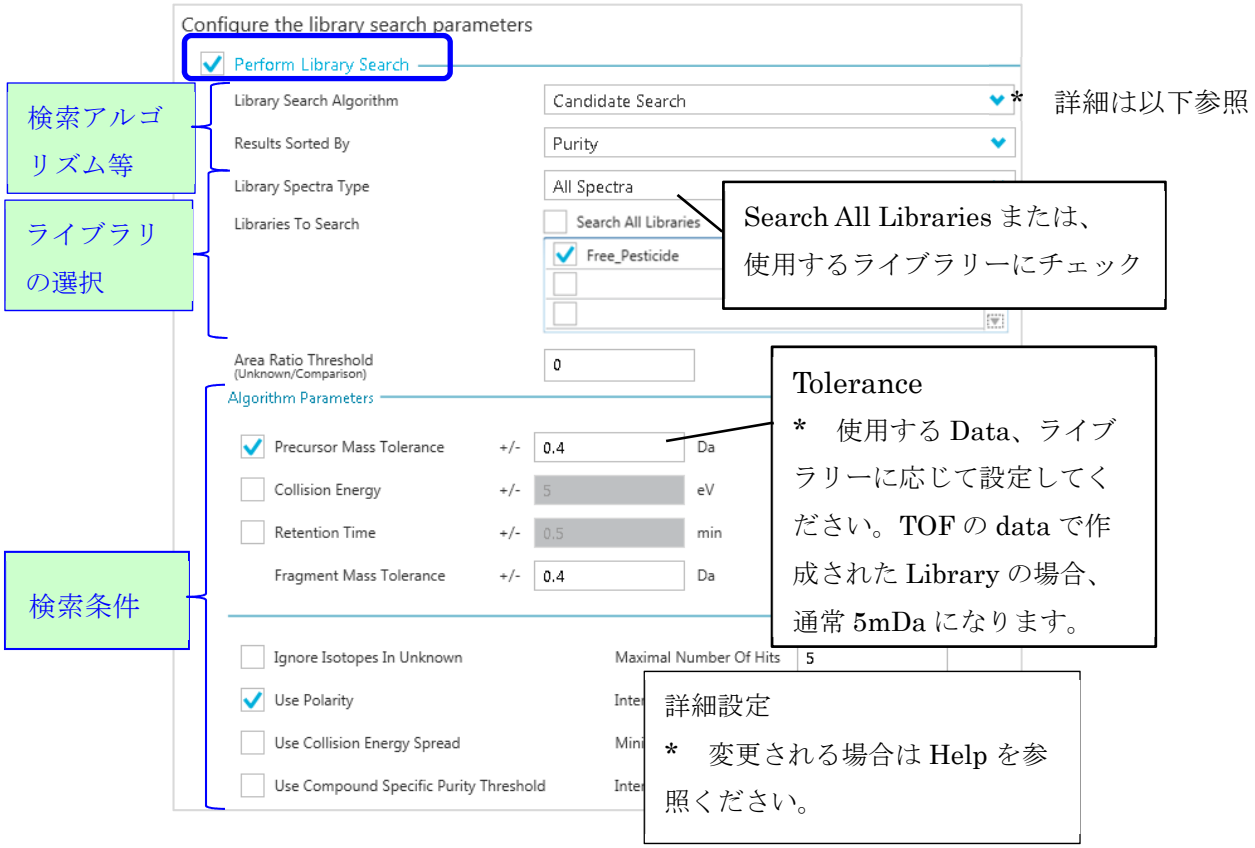
・**Noise Percentage**：値を大きくする程、ベースラインが上がり、ピーク面積値が小さくなります。

・**Baseline Sub. Window**：ベースラインとして設定する最小強度を検索する幅になります。Peak 幅の 2-3 倍程度が Default 値になります。

・**Peak Splitting**：値を大きくする程、割れたピークを一つのピークとして認識しやすくなります。

⑦ Library Search では、Perform Library Search にチェックを入れ、図を参考に使用するライブラリーや各種パラメータを設定します。

※ ライブラリーが複数ある場合や、Precursor Mass Tolerance や Collision Energy など検索条件に制限をつける場合など、状況に応じて設定します。

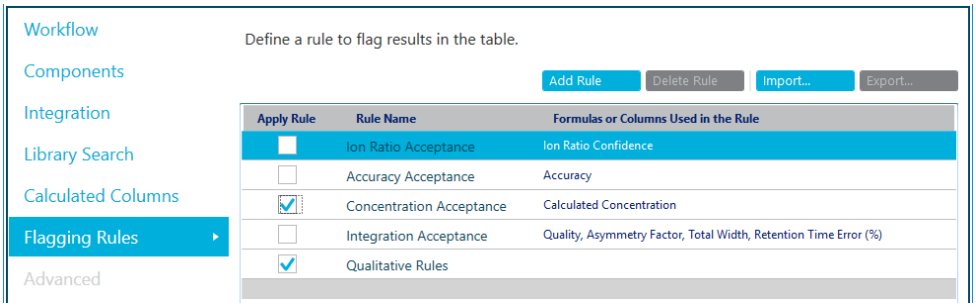


【検索アルゴリズムとソートについて】

Algorithm	検索方法
Candidate Search	Algorithm Parameter に基づいて未知成分として検索 推奨：ノンターゲットスクリーニング
Confirmation Search	Components で設定した化合物名と一致するものを検索 推奨：ターゲットスクリーニング
Smart Confirmation Search	Components で設定した化合物名と一致するものを検索し、ヒットしない場合は Algorithm Parameter に基づいて検索。ライブラリーでヒットした成分名を[Smart Confirmation]として表示。 推奨：ターゲットスクリーニング
Fit	ライブラリー中の MS/MS のピークが、Unknown スペクトルに対して、どれだけ Hit しているのかで算出
RevFit	Unknown の MS/MS のピークが、ライブラリー中の MS/MS に対して、どれだけ Hit しているのかで算出
Purity	両方のスペクトル間で、一致しなかったピークを算出

⑧ Fragging Rules では、真度からの外れ値や実サンプル想定濃度の上限・下限値を外れた結果についてハイライトすることができます。また、質量誤差、保持時間、同位体比、ライブラリースコア等、各項目における信頼度の設定を行います。必要に応じて設定します。

※ Training では、下図を参考に、Concentration Acceptance と Qualitative Rules にチェックを入れます。



※ 各 Rule Name をクリックすると、設定画面が表示されます。

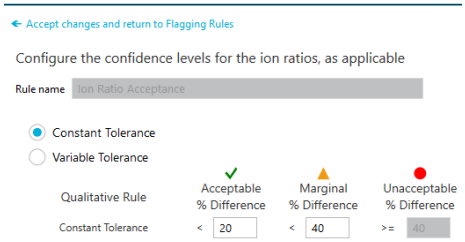
※ 各 Rule を変更後、上部の Accept changes and return to Fragging Rules をクリックすると、元の画面に戻ります。

Fragging Rule について

① Ion Ratio Acceptance では、Components で 2 つ以上の Analyte を 1 グループとして設定した場合の強度比の信頼度を設定します。MRM-HR などデータにおいて、同じ成分のフラグメントイオン違いで解析を行う際のイオン比の確認に有用です。

※ Constant…：日本、US 向き、Variable…：EU 向き

※ Results Table の Ion Ratio Confidence のカラムに設定した信頼度に従って ✔ | ▲ | ● で表示されます。

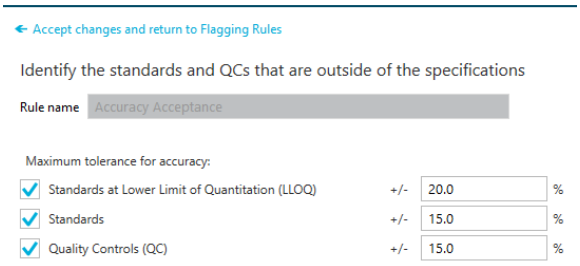


※　Training では設定しません。

② Accuracy Acceptance では、Standard や Quality Control のサンプルについて、真度の許容誤差を設定します。

※　設定値から外れた場合、Results Table のセルがピンクにハイライトされます。

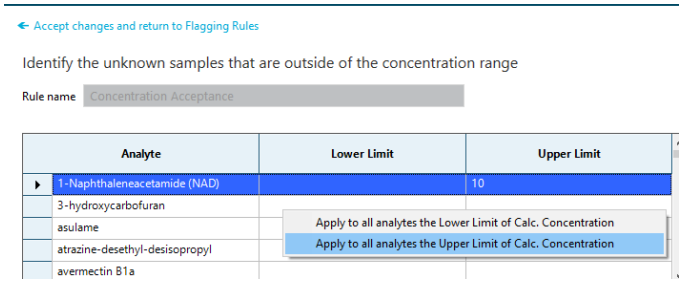
※　Training では設定しません。



③ Concentration Acceptance では、unknown サンプルについて、想定濃度の上限・下限値を設定します。

※　設定値から外れた場合、Results Table のセルがピンクにハイライトされます。

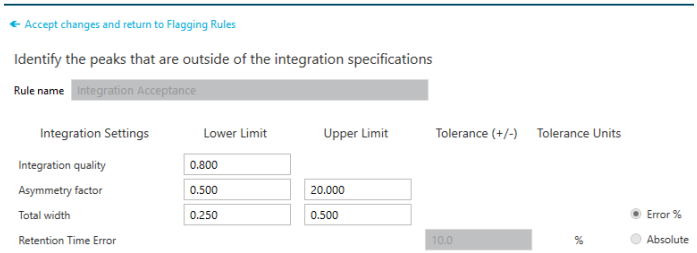
※　Upper Limit に 10 と入力、カラムを選んで右クリックして、Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration を選ぶと、他の成分についても 10 が自動入力されます。



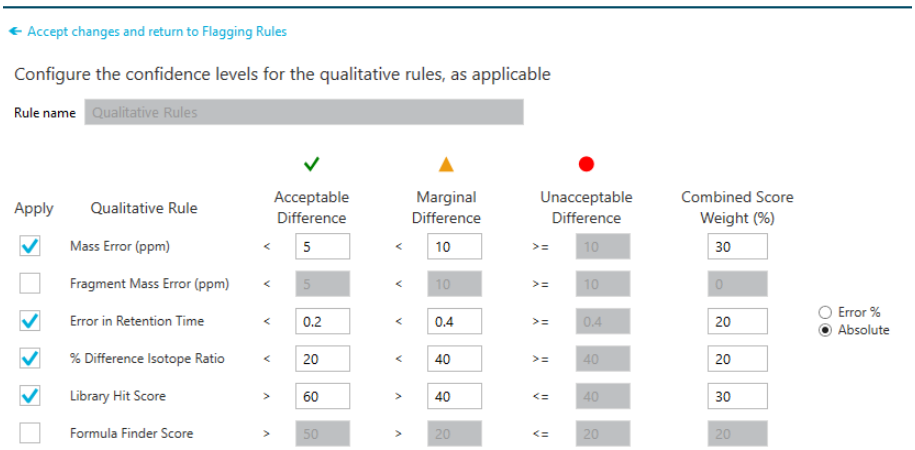
④ Integration Acceptance では、積算されたピーク形状について Integration Quality、Asymmetry factor などの許容範囲を設定します。

※　設定値から外れた場合、Results Table の Integration Acceptance のカラムに❗が表示されます。

※　Training では設定しません。



⑤ Qualitative Rules では、質量誤差、保持時間、同位体比、ライブラリースコア等、各項目における信頼度の設定を行います。

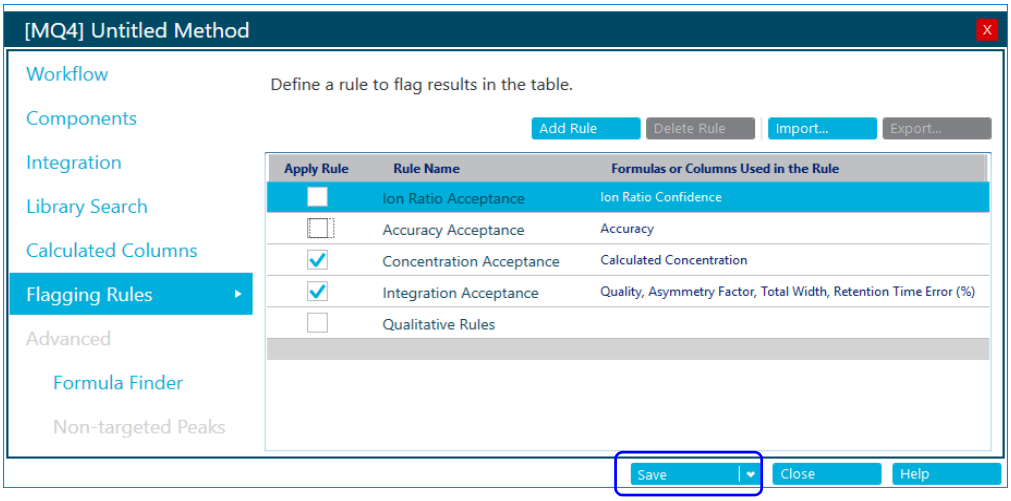


※　Training では、図を参考に設定します。

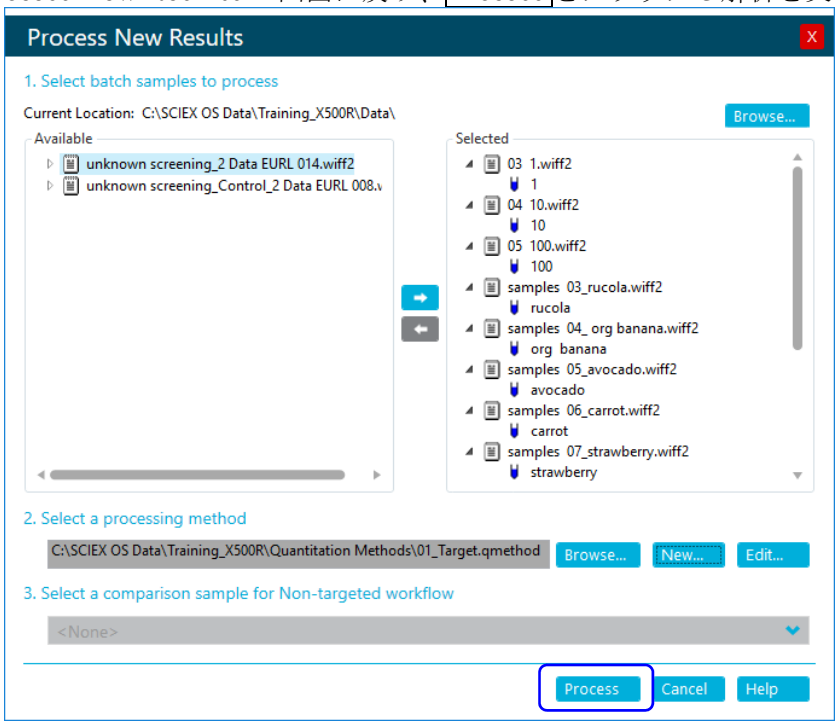
※　各項目の値は適宜変更します。Combined Score Weight (%)は合計 100 になるように各項目に値を入力します。

⑥ Save をクリックし、解析メソッドに名前を付けて保存します。

※　Training では MTS と入力します。



⑦ Process New Results の画面に戻り、Process をクリックし解析を実行します。

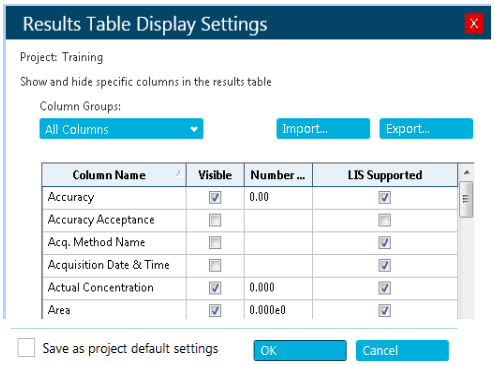


5.3.2　結果の確認

① 解析が終わると、Results Table が表示されます。

② 表示するカラムや桁数を変更したい場合は、More をクリックし Table display settings…を選び設定を行います。Visible ではカラムの表示非表示が選択でき、Number Format では入力した通りに有効数字や指数表示が切り替わります。

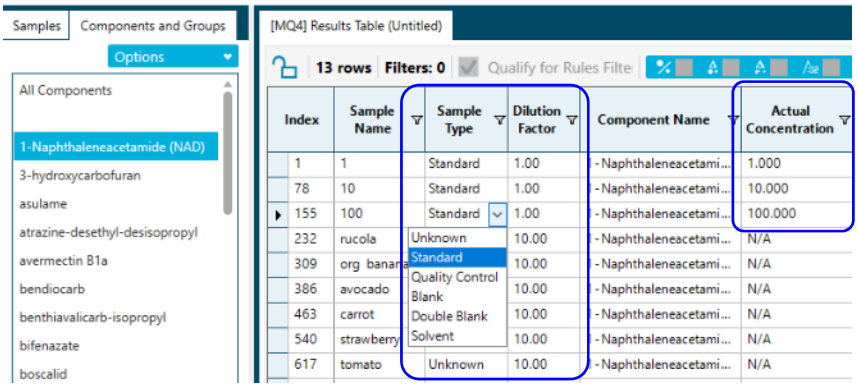
※ Save as project…にチェックを入れるとデフォルトとして保存、Export…では設定をファイルとして保存、Import…では保存したファイルを読み込むことができます。



※ ここで入力した有効桁数以上の値は、定量テーブルに入力表示されないだけでなく、定量計算にも反映されません。

※ Training では、Import…から D:¥SCIEX OS Data¥Training_X500R 中の target quantitation.cset を選びます。

③ 左側の Components and Groups タブを選び、Sample Type, Dilution Factor, Actual Concentration は下図を参考に入力します。Sample Type はプルダウンから選択します。すべての Components について入力します。



※ Sample Type は、1～100：Standard、rucola 以下：Unknown を選びます。

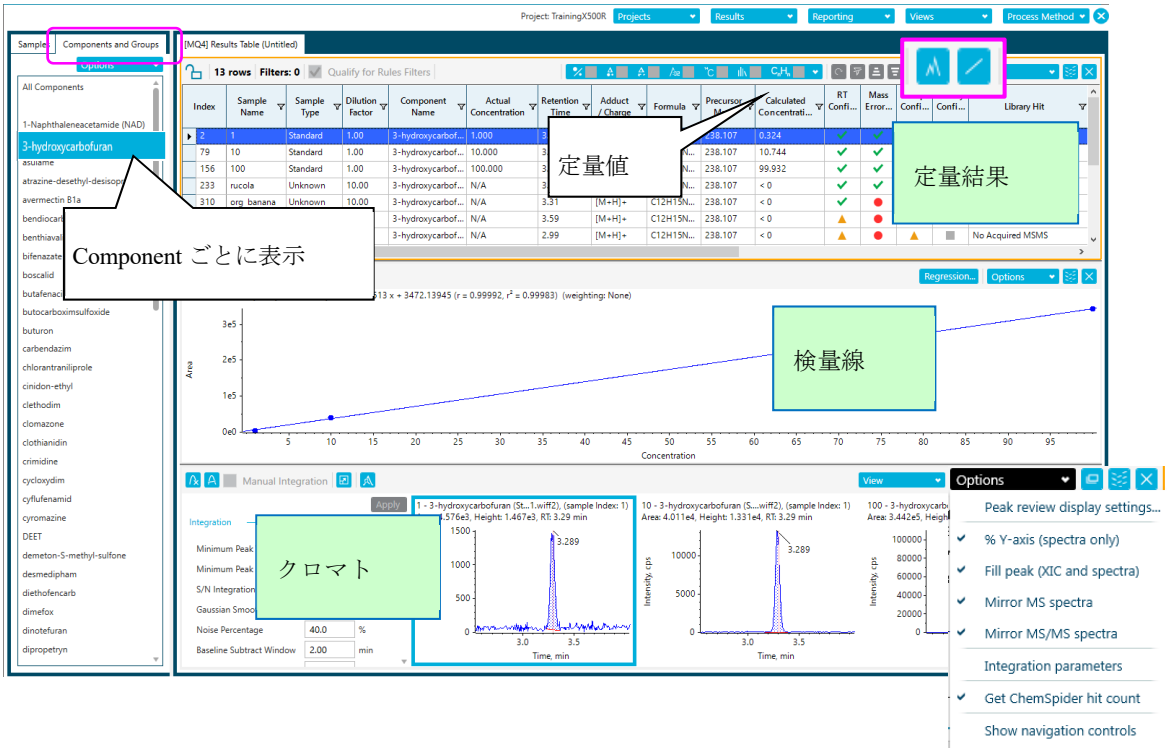
※ Dilution Factor は、Unknown：10 を入力します。

※ Actual Concentration には標準溶液の濃度として 1～100 を入力します。この値を他の全ての Component に反映させるには、テーブル上を右クリックし、Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All を選択します。

クロマトグラム、検量線の表示

① （順に、Display the Peak Review、Display the Calibration Curve）アイコンをクリックし、ピーク及び検量線を表示させます。Results Table、クロマトグラム、検量線はリンクしており、別の Component を選択すると表示が変わります。

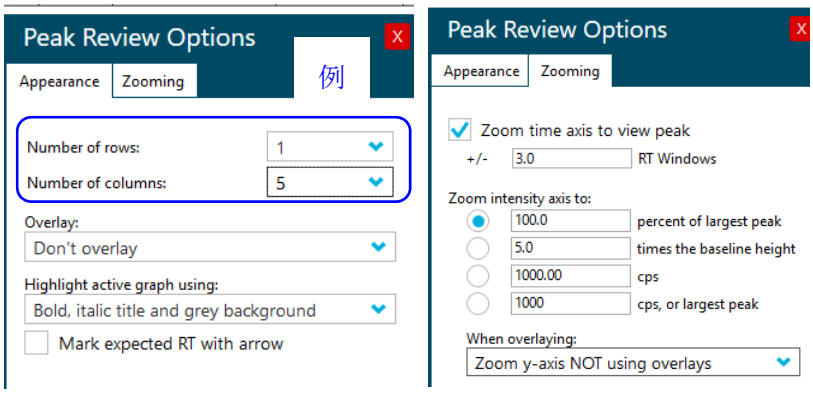
② Components and Groups タブから 3-Hydroxycarbofuran をクリックします。



③ 表示するクロマトグラム数（縦、横数）について変更します。変更するには、クロマトグラム右上の Options > Peak review display settings を選択します。

※ Peak review display settings では、表示するクロマトの数や X 軸の拡大の有無、Y 軸の拡大などが設定できます。

④ Appearance タブの Number of rows、Number of columns で変更後、OK します。



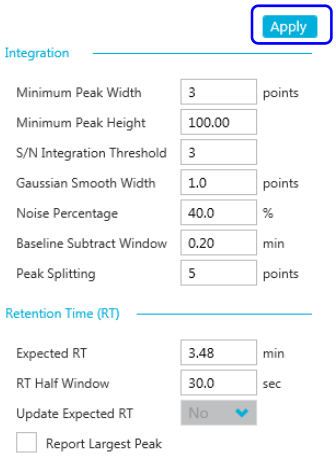
⑤ クロマトグラム右上の Options > Show navigation control を選択すると、がクロマトグラム上部 に表示されます。

をクリックすると、前後のページが表示されます。

※ 各 Pane 右上の アイコンは、順に、別ウィンドウ表示、移動、消す、です。

※ (Open data exploration)アイコンは選択したデータを Explore へ展開します。

パラメータの変更



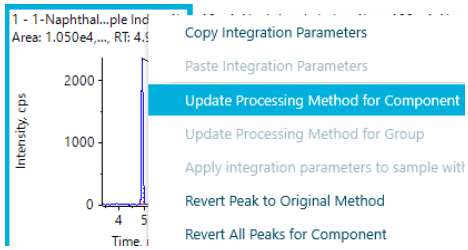
① 必要に応じてクロマトグラム左に表示されているパラメータ値を変更し、クロマトグラムのピーク認識方法を変更します。

※ 各パラメータの詳細については、[5.3.1 解析メソッドの作成]を参照ください。

② 変更後 Apply をクリックすると、選択したサンプルピークに変更したパラメータが反映されます。

※ 全サンプルピークにパラメータを反映させる場合は以下を参照ください。

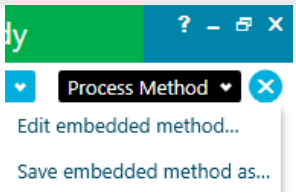
全サンプルピークに変更したパラメータを反映させる



① 選択したサンプルに値を反映させた後、クロマトグラム上を右クリックします。

② Update Processing Method for Component を選択します。

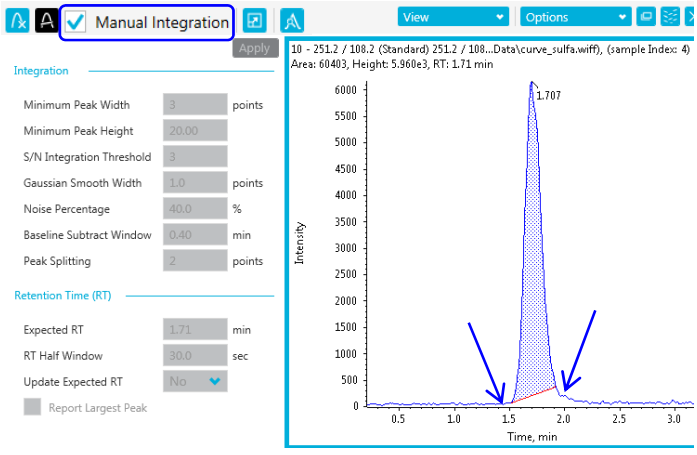
解析メソッドの変更と保存



① Process Method から Edit embedded method…を選び、メソッドを変更後、Process & Close をクリックします。

② 変更した解析メソッドに保存するには、Process Method から Save embedded method as…を選び、既存のものに上書きするには既存のファイルを選択、あるいは別名を入力して Save をクリックします。

手動積分



※ 必要に応じて行います。

※ 選択したクロマトグラムを拡大表示するには、 をクリックします。

① クロマトグラム画面上部の をクリックします。

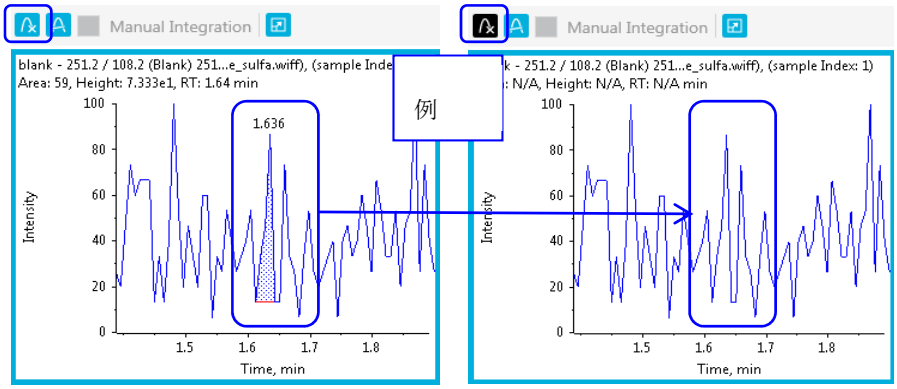
② ピークの左端をクリックします。

③ そのままドラックしてピークの右端で離します。

※ 元のパラメータに戻す場合は Manual Integration 横のチェックを外します。

ピークとしての認識を外す

① ブランク等、ピークとして認識したくない場合、ピーク不検出アイコン をクリックすることにより、ピークを不検出にします。

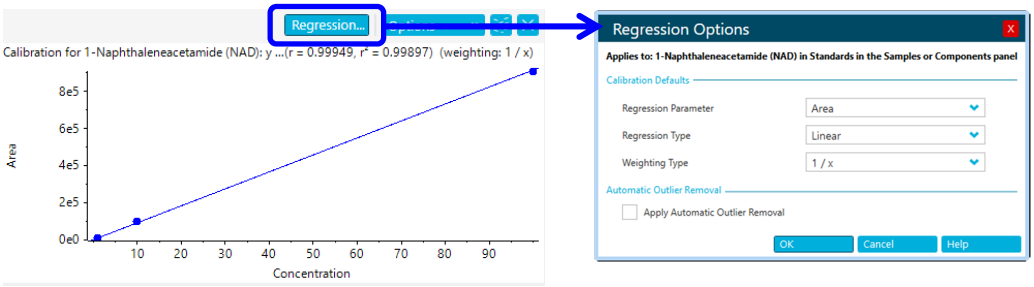


検量線の表示、重みづけ、検量線の種類を変更

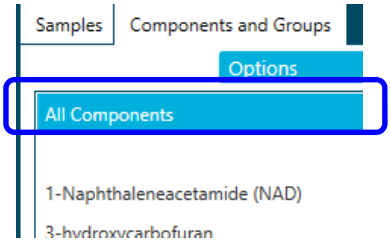
① 検量線が表示されていない場合は Results Table 画面右上の をクリックします。

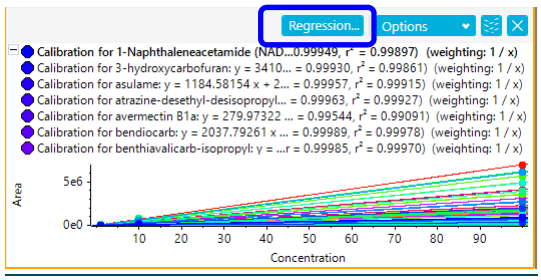
※ 必要に応じて Regression をクリックし、重みづけや検量線の種類を変更します

- Regression Parameter：Area→Hight の変更
- Regression Type：検量線の種類の変更
- Weighting Type：重みづけの変更



※ 全ての成分の検量線の重みづけなどを一括で変更するには、All Components をクリックし、Regression で変更します。



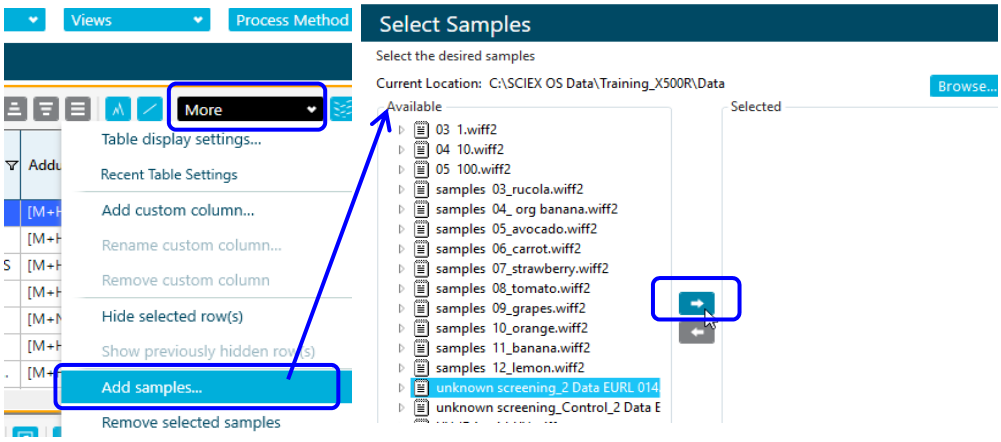


データの追加と削除

① 追加するには、Results Table 画面右上の More > Add Samples を選択し、Available で追加したいサンプルを選択後、→で Selected に移動します。

※ Training では行いません。

② OK をクリックすることで Results Table に追加されます。

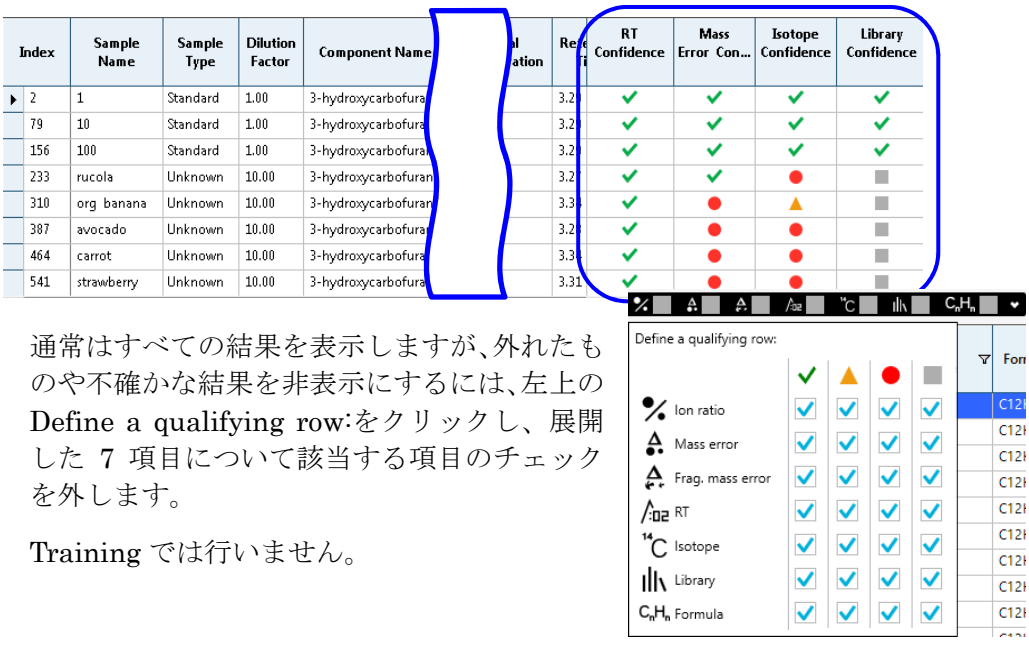


③ データを削除するには、Results Table で削除したい行を選択し、Results Table 画面右上の More > Remove Selected Samples を選択することで削除されます。

※ 削除後、元に戻すことはできません。必要に応じて削除前に画面上部の Results ＞Save as で定量結果を保存してください。

スクリーニング結果の確認

① RT や Mass 等の Confidence カラムでは、解析メソッド作成時の Qualitative Rules で設定した項目についてパスしたかどうかが表示されます。



※ 通常はすべての結果を表示しますが、外れたものや不確かな結果を非表示にするには、左上の Define a qualifying row:をクリックし、展開した 7 項目について該当する項目のチェックを外します。

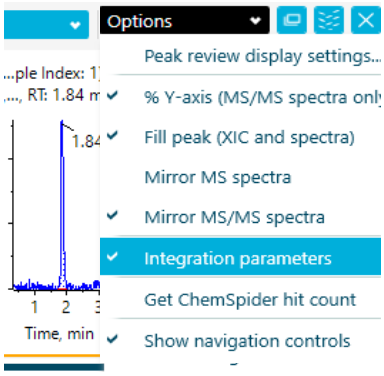
※ Training では行いません。

② 適宜、クロマトグラムの積分を変更します。

※ Training では行いません。

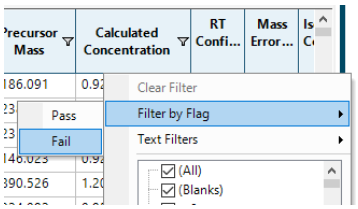
③ Options では、表示するクロマトのカラム数や縦軸の%表示、MS および MS/MS のミラー/重ね書き、成分パラメーターの表示非表示などが設定できます。

※ Training では Integration parameters のチェックを外します。



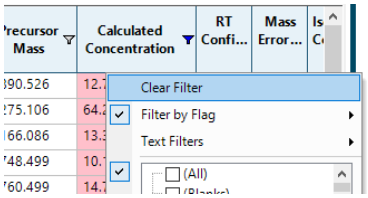
④ フィルター機能を使って、解析メソッド作成時の Concentration Acceptance で設定した外れ値の結果を確認できます。

Results Table の Calculated Concentration のフィルターアイコンをクリックすると右図のような画面が表示されます。Filter by Flag→Fail を選択すると、Upper Limit >10 の結果がハイライトされます。



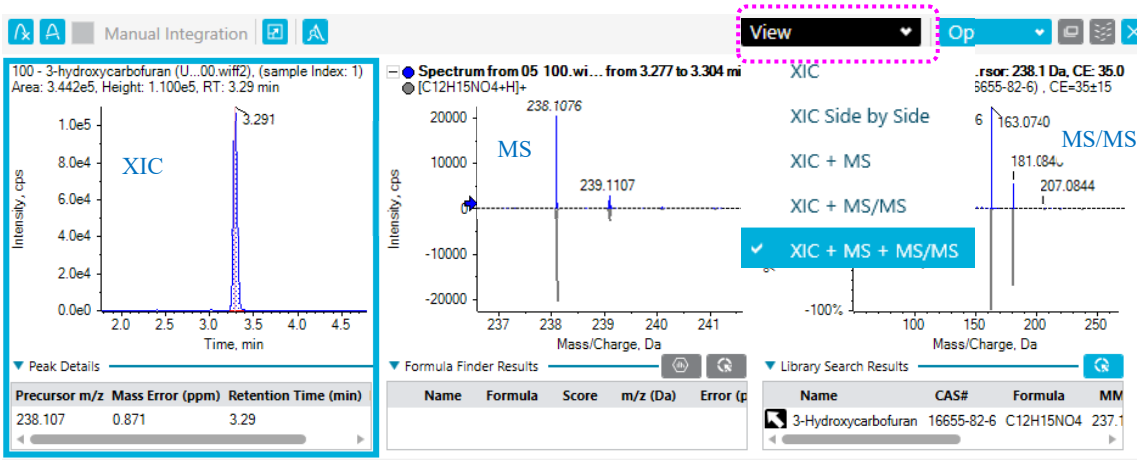
※ フィルターアイコンをクリックし、Clear Filter をクリックするとフィルターを外せます。

※ Results Table の Used カラムのチェックを外すと、そのデータポイントを検量線から除外することができます。



※ 複数の化合物がある時、比較したい成分を Control キーを押しながら複数選択することができます。この場合、Results Table とクロマト表示画面には選択した化合物のすべての情報が表示され、検量線は重ね書きされます。

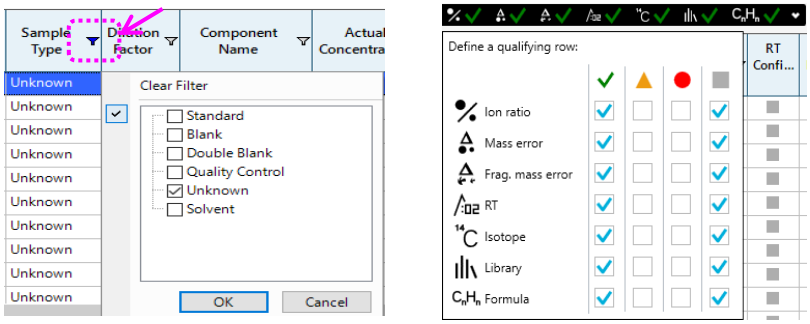
⑤ ターゲットスクリーニング解析の場合、View をクリックして XIC+MS+MS/MS を選びます。選択したピークの XIC および MS（青色：実測、灰色：理論パターン）、MS/MS（青色：実測、灰色：ライブラリー）が表示されます。



※ Unknown サンプルにおいて、Library Confidence が陽性となった結果については XIC および MS、MS/MS をしっかりと確認します。

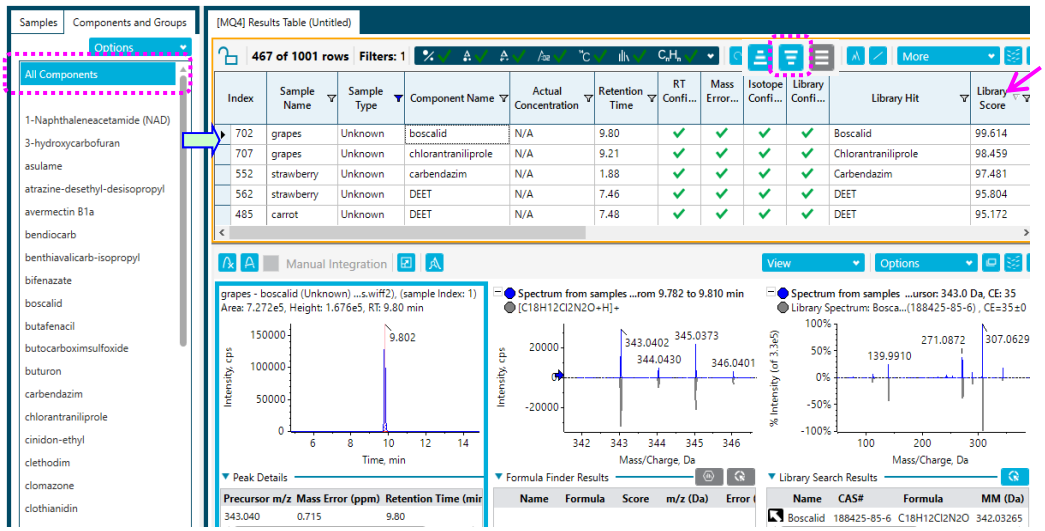
陽性の確認例

① Results Table の Sample Type のフィルターアイコンをクリックすると右図のような画面が表示されます。Unknown にチェックを入れます。

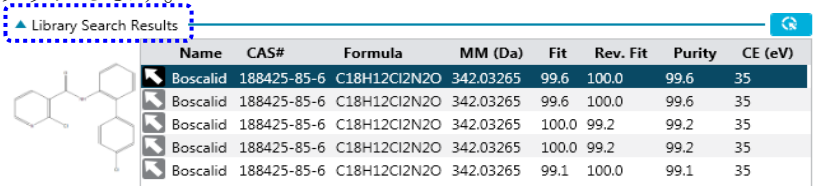


※ 図を参考に、Define a qualifying row: に✔チェックを入れます。▲ ● のチェックを一括で外すには ▲ ● 上をクリックします。

② Components and Groups では All Components をクリックします。Results Table の Library Score カラムを選択して（Sort selected column from largest to smallest）アイコンをクリックしてスコアの高い順に並び替え、各成分の結果を順に確認します。



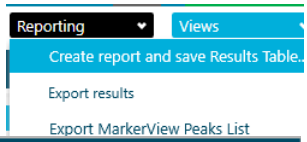
③ ライブラリーサーチの結果を確認するには MS/MS 下の Library Search Results をクリックします。



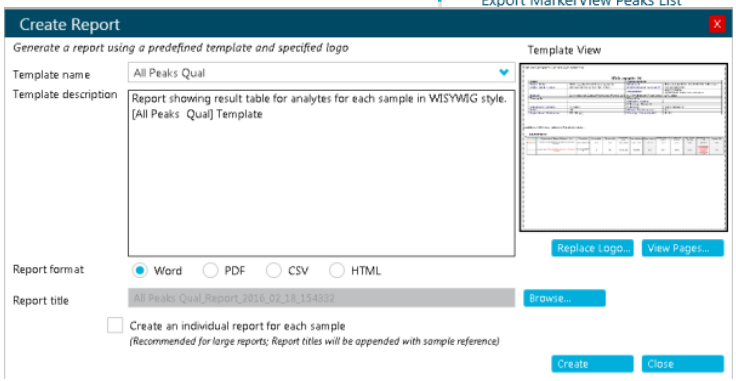
④ 結果を保存するには、Results から Save を選び名前を付けて保存します。

※ Training では、Training と名前を付けて保存します。

⑤ 必要に応じて Report を作成します。Reporting から Create report and save Results Table…を選び、目的のテンプレート、出力形式を選択します。



⑥ Browse で保存先を指定し、名前を付けます。Create をクリックします。



※ Default の Template は C:¥ProgramData¥SCIEX¥Analytics¥Reporter に保存されています。

※ その他、https://sciex.jp/support-tools/analyst-multiquant-reporttemplate からダウンロード可能です。

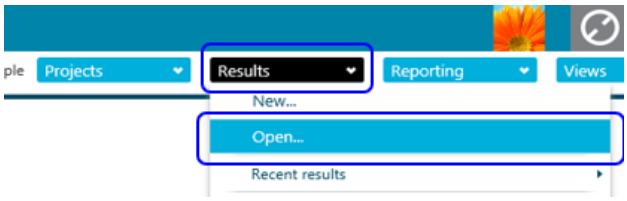
【※Tips!】任意の計算値を Results Table に表示させる機能（SCIEX OS 1.5 以降）

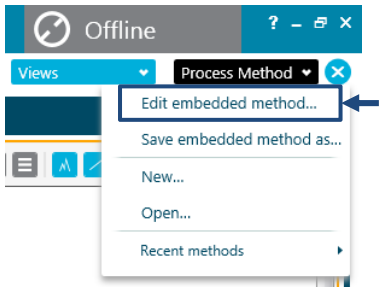
※ 任意の計算式を設定することで、計算から外れた値を目視で簡単に判定することができます。

例：内部標準（IS）の面積の変動を評価します。（IS の面積値を平均値で割った値を算出し、80～120 の間に無い場合、フラッギングする設定をします。）

※ Training では行いません。

1) 画面上部の Results > Open を選択し、既存の Results Table を表示します。



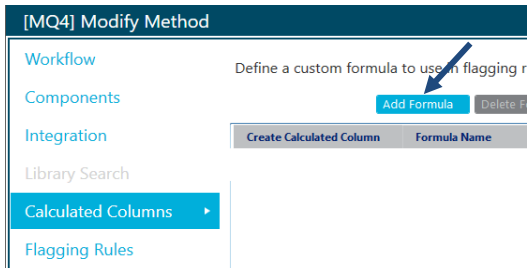


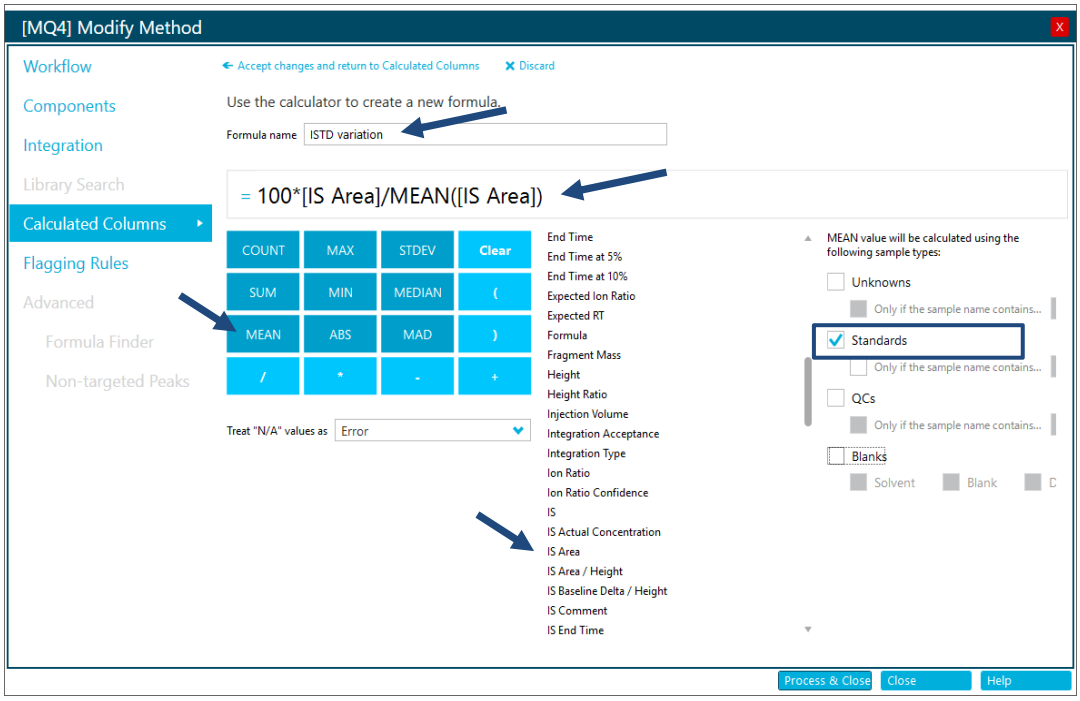
2) 画面右上の Process Method > Edit embedded method を選択します。

3) Calculated Columns をクリックし、Add Formula をクリックします。

4) 図を参考に、入力と設定を行います。

- Formula Name：ISTD variation
- 式：100*[IS Area]/MEAN([IS Area])
- Sample Type：Standard

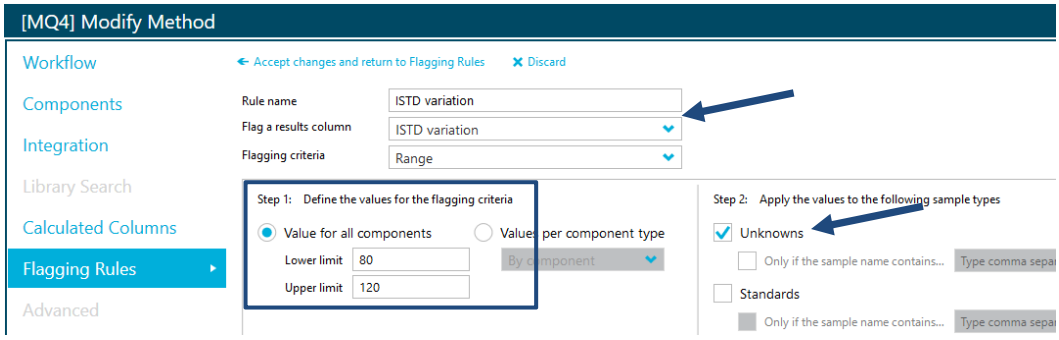




5) Fragging Rules をクリックすると Warning が表示されますので Yes を選びます。

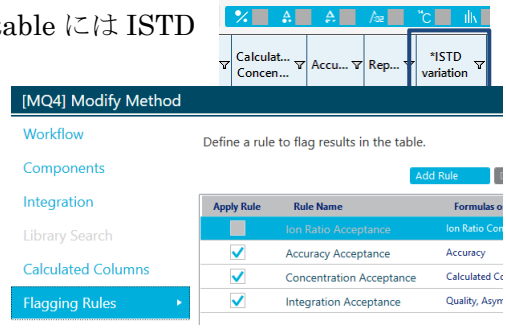
6) Add Rule をクリックし、下図参考に、入力と設定を行います。

- Role name：ISTD variation
- Flag a results columns：ISTD variation



7) Process & Close をクリックすると Warning が表示されますので Yes を選びます。

8) Results table が再計算されます。Results table には ISTD variation の欄が追加され、IS 面積の変動について許容値外のものはハイライトされます。



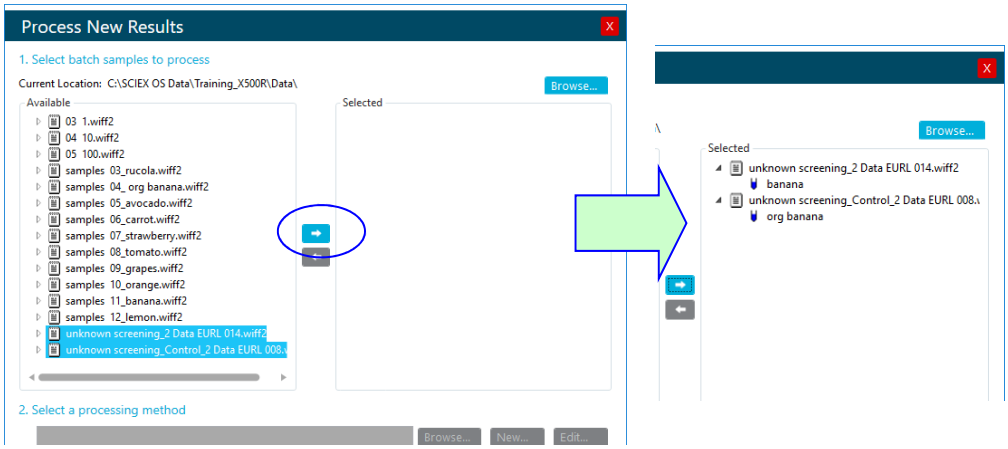
5.4　ノンターゲットスクリーニング

5.4.1　解析メソッドの作成

① Results をクリックし New を選択します。

② 解析するデータをすべて選択し、＝＞アイコンで画面右側にサンプルを移動します。

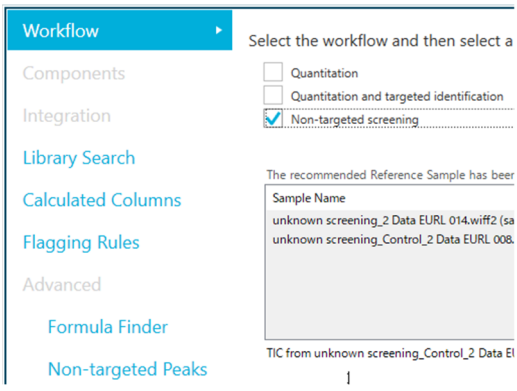
※ Training では下図を参考に選びます。



③ 2. Select a Processing Method では New をクリックします。

※ 2 回目以降の解析の際は、Select a Processing Method の Browse から既存のファイルを選択します。

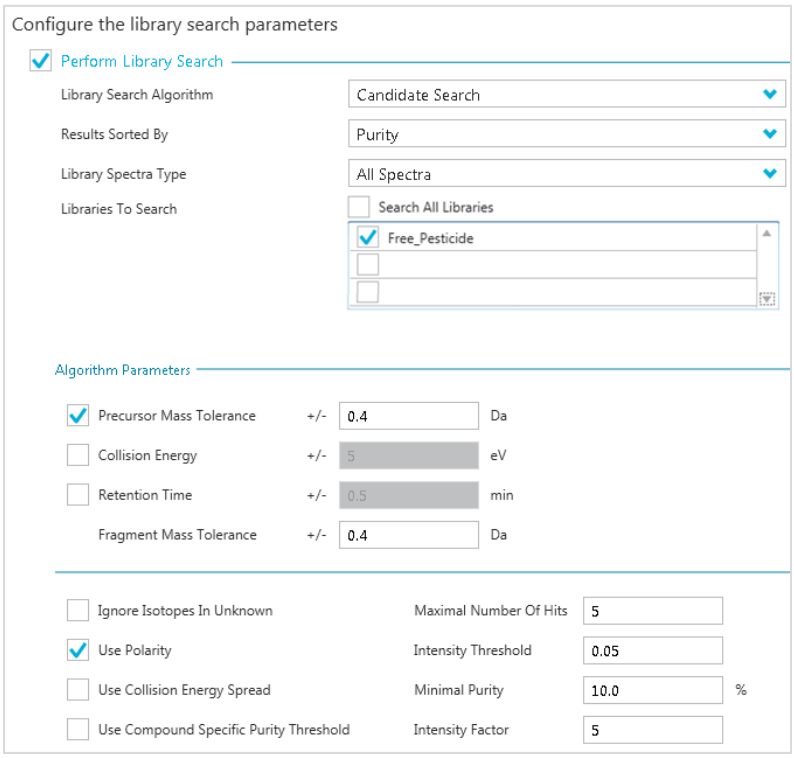
④ Workflow では解析するワークフローとして、Non-targeted screening にチェックを入れます。



⑤ Library Search では、Perform Library Search にチェックを入れ、図を参考に使用するライブラリーや各種パラメータを設定します。

※ Training では、Library To Search で Free_Pesticide を選択します。

※ Training では、Minimal Purity に 10 を入力します。設定した値以上のものが検索対象となります。

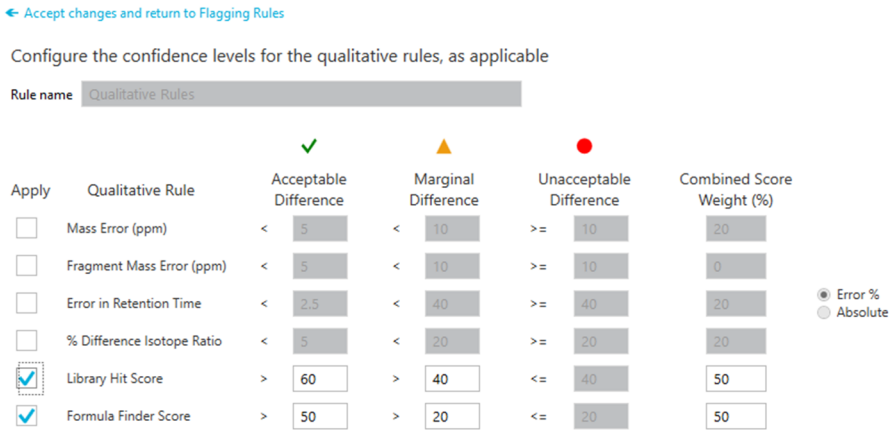


⑥ **Flagging Rules** では、Qualitative Rules にチェックを入れてクリックすると設定画面が表示されます。ライブラリースコア、組成解析結果における信頼度の設定を行います。

※ Training では、図を参考に設定します。

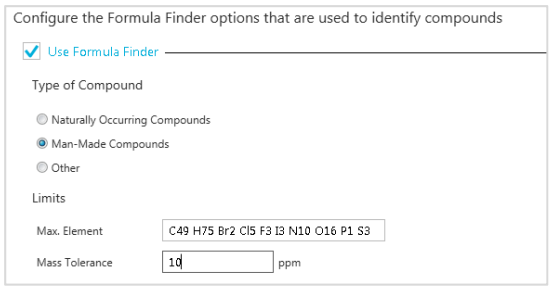
※ 各項目の値は適宜変更します。Combined Score Weight は合計 100 になるように各項目に値を入力します。

※ Flagging Rules の画面に戻るには、Accept changes and return to Fragging Rules をクリックします。



⑦ **Formula Finder** では自動組成解析時の組成の上限と Tolerance を設定します。Use Formula Finder にチェックを入れ、Man-Made Compounds を選びます。Limits の Max Element、Mass Tolerance は適宜変更します。

※ Training では図を参考に入力します。



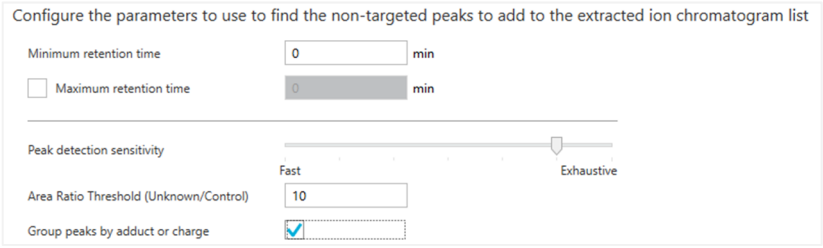
⑧ **Non-targeted Peaks** では、解析する保持時間の範囲とピーク抽出条件を設定します。

※ Training では図を参考に設定します。

※ Exhaustive に近いほど、微量なピークも検出するので解析時間がかかります。

※ Area Ratio Threshold : ②でデータを 2 つ以上選び、かつ⑩で一方をコントロールとして差分比較する場合、その比を入力します。設定した値以上のものが検索対象となります。

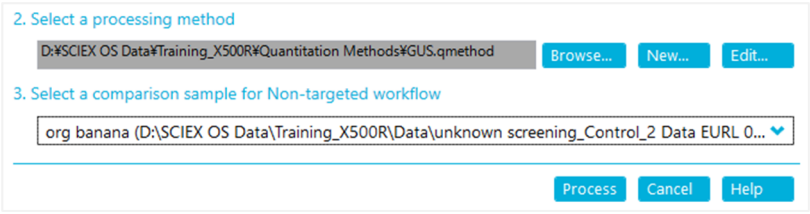
※ Group Peaks by adduct or charge にチェックを入れると、付加体や多価イオンを特定し、重複した成分としてグループ化されます。



⑨ Save をクリックし、解析メソッドに名前を付けて保存します。

※ Training では GUS と入力します。

⑩ Process New Results の画面に戻り、3. Select a Comparison sample…では、差分解析をする場合のコントロールデータを選択します。



※ Training では上図を参考に選びます。

※ 差分解析をしない場合は、何も選択しません。

⑪ Process をクリックし解析を実行します。

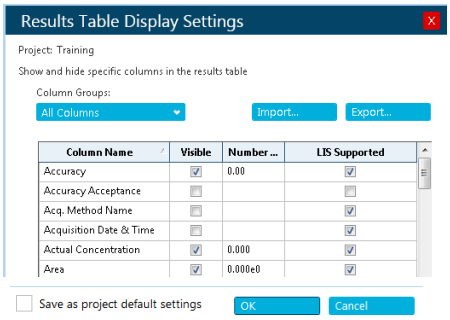
5.4.2　結果の確認

① 解析が終わると、Results Table が表示されます。

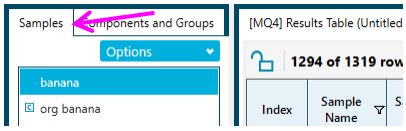
② 表示するカラムや桁数を変更したい場合は、More をクリックし Table display settings…を選び設定を行います。Visible ではカラムの表示非表示が選択でき、Number Format では入力した通りに有効数字や指数表示が切り替わります。

※ Training では、Import…から D:¥SCIEX OS Data¥Training_X500R 中の GUS processing.cset を選びます。

※ Save as project…にチェックを入れるとデフォルトとして保存、Export…では設定をファイルとして保存、Import…では保存したファイルを読み込むことができます。

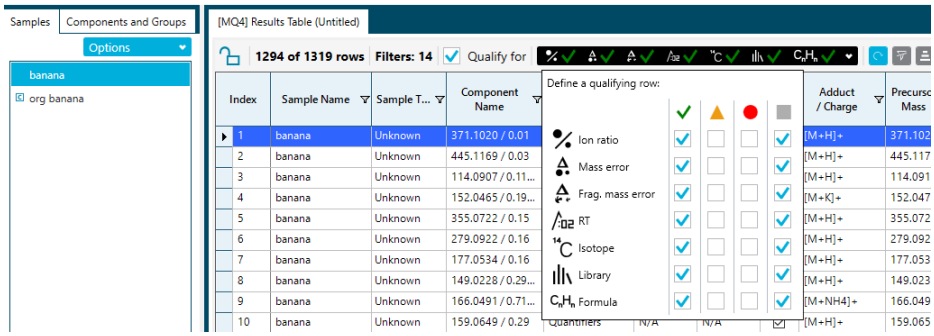


陽性の確認例



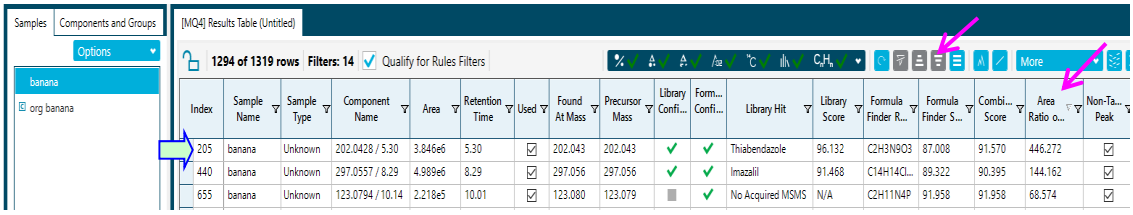
① Results Table の Sample タブをクリックします。

② Library および Formula Finder の Confidence カラムについて、陽性の結果のみ表示し陰性あるいは不確かな項目を非表示にするには、Define a qualifying row: をクリックし、各項目のチェックを外すか、まとめて外す場合は ▲ ● 上をクリックします。



③ Confidence カラムでは、解析メソッド作成時の Qualitative Rules で設定した項目についてパスしたかどうかが表示されます。

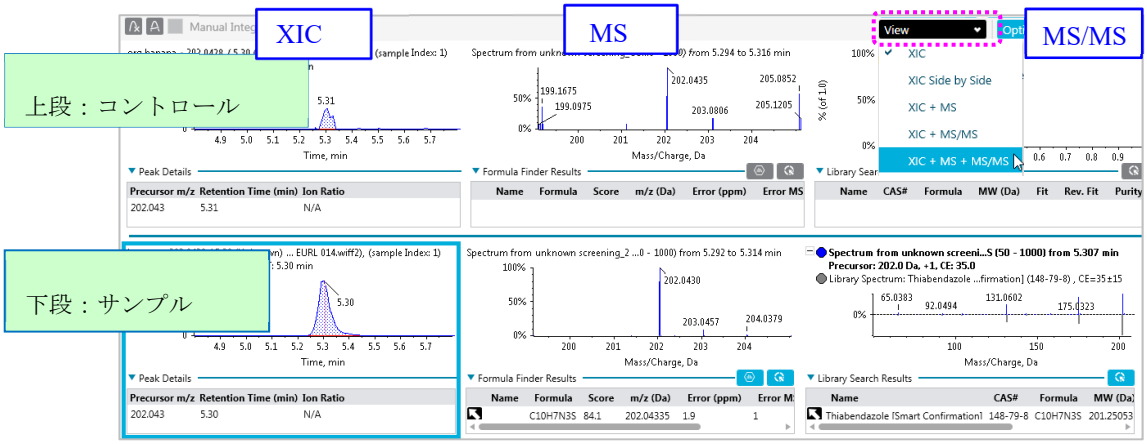
④ Area Ratio comparison カラムを選択し、（Sort selected column from largest to smallest）アイコンをクリックしてスコアの高い順に並び替えます。



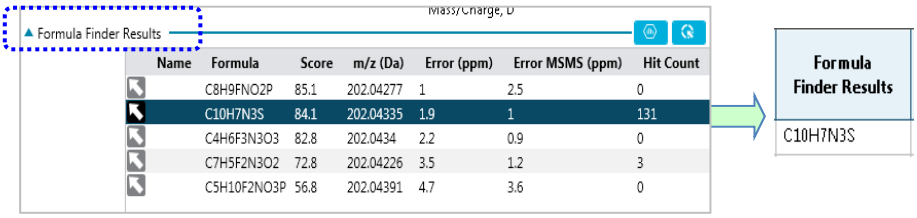
⑤ Table から図を参考に 202.042 / 5.30 をクリックします。

⑥ （Display the Peak Review）アイコンをクリックし、ピークとスペクトルを表示させます。Results Table とクロマトグラムはリンクしており、別の Component を選択すると表示が変わります。

※ MS および MS/MS が表示されない場合は View で変更します。XIC+MS+MS/MS を選ぶと、選択したサンプルの XIC および MS（青色：実測、灰色：理論パターン）、MS/MS（青色：実測、灰色：ライブラリー）を表示します。



⑦ 組成解析結果を確認するには MS 下の Formula Finder Results をクリックします。候補とする組成式を Results Table に反映するには をクリックします。

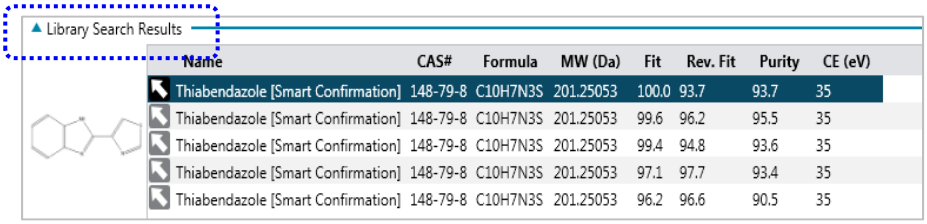


※ ChemSpider で構造式が登録されている場合は Hit Count に値が表示されます（ライセンス購入された方が対象）。

※ その構造式を使って構造解析を行う場合は、 で操作します（4.5 フラグメントの帰属（Fragments Pane）参照）。

⑧ ライブラリーサーチの結果を確認するには MS/MS 下の Library Search Results をクリックします。

⑨ 候補とする化合物を Results Table に反映するには をクリックします。

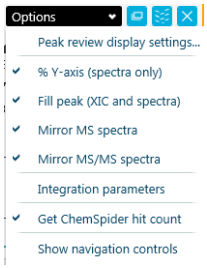


⑩ ライブラリーサーチや組成解析など条件を変えて再度解析するには、解析メソッドを変更します。Process Method から Edit embedded method…を選び、条件を変更して最後に Process & Close をクリックします。

※　解析メソッドに保存するには、Process Method から Save embedded method as…を選び、既存のものに上書きするには既存のファイルを選択、あるいは別名を入力して Save をクリックします。

⑪　S/N が低く微小なピークを非積分にする場合は、該当成分を選んで S/N Integration Threshold に値を入力し Apply をクリックします。

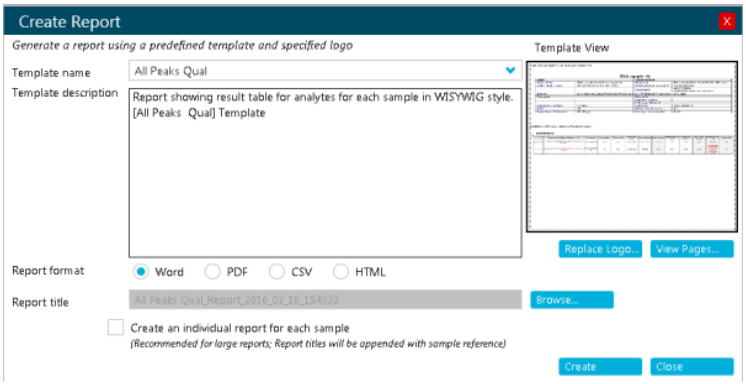
⑫　クロマトの表示数の変更は Options で設定します。



※　積分パラメータを非表示にするには、Integration Parameter のチェックを外します。

⑬　結果を保存するには、Results から Save を選び名前を付けて保存します。

⑭　必要に応じて Report を作成します。Reporting から Create report and save Results Table…を選び、目的のテンプレート、出力形式を選択し、名前を付けて OK をクリックします。



※　新規に Results Table を表示した際、結果が正しく表示されていない場合は、各カラムのフィルターや Define a qualifying row に前の条件が設定されているがあります（設定時：アイコン紺色。未設定：水色）。その場合は確認してください。

5.5　ライブラリー追加方法

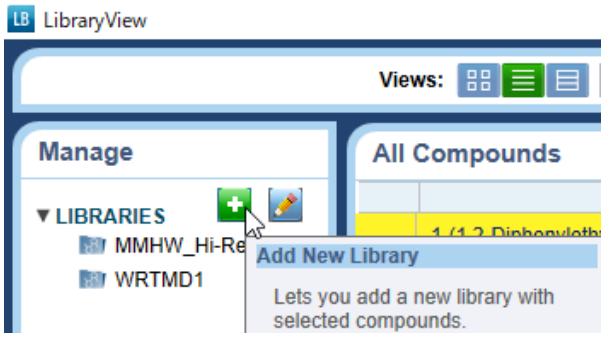
5.5.1　ライブラリーファイルの新規登録

※　LibraryView™ ソフトウェアがインストールされているお客様が対象です。

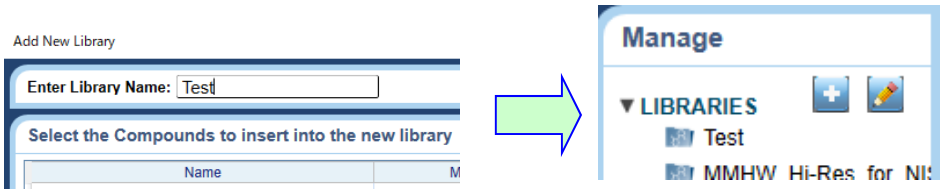
※　新規登録はせずに既存のライブラリーを活用される場合はこの操作は不要です。

① LibraryView™ ソフトウェアの起動します。デスクトップにある、[LibraryView]アイコンをクリックします。

② Manage 上の✚アイコン（Add New Library）をクリックします。



③ Enter Library Name には名称を入れ、右下の Add を選びます。メッセージが表示されたら Yes をクリックします。これにより Test のライブラリーが保存できます。



5.5.2　MS/MS の登録

① Home 上の Analytics をクリックします。

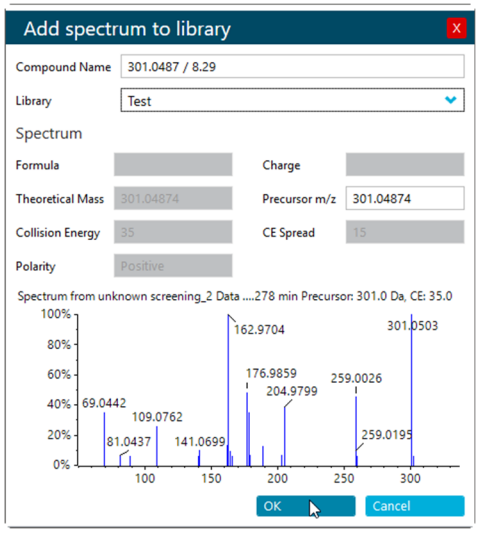
② ライブラリーに登録する MS/MS を表示します。

※　Training では、[5.4.2　結果の確認] で使用した MS/MS を表示します。

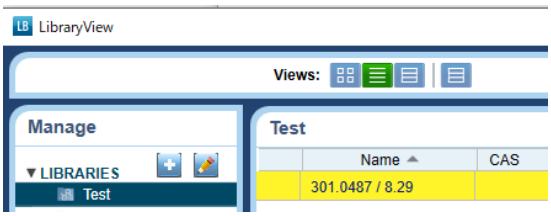
※　ここでは Area Ration of comparison の値の高い順でソートをかけ、[301.0487 / 8.29]の成分を選びます。

③　MS/MS 上を右クリックし、Add spectrum to library を選びます。

④　Add spectrum to library の画面では化合物名や登録するライブラリファイル、スペクトル情報を入力して OK します。



⑤　LibraryView™ ソフトウェアがインストールされているお客様は、登録したスペクトル情報などが編集できます。LibraryView™ ソフトウェアを開き、該当成分をダブルクリック＞右下の Edir Mode で編集します。

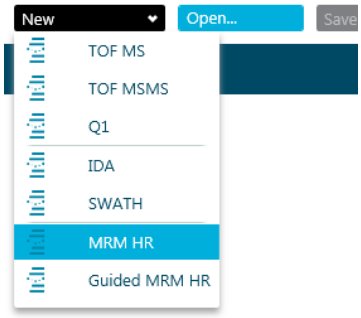


6　定量測定 MRM^{HR} Method の作成と解析

6.1　MS Method の作成

6.1.1　MRM^{HR} メソッドの作成

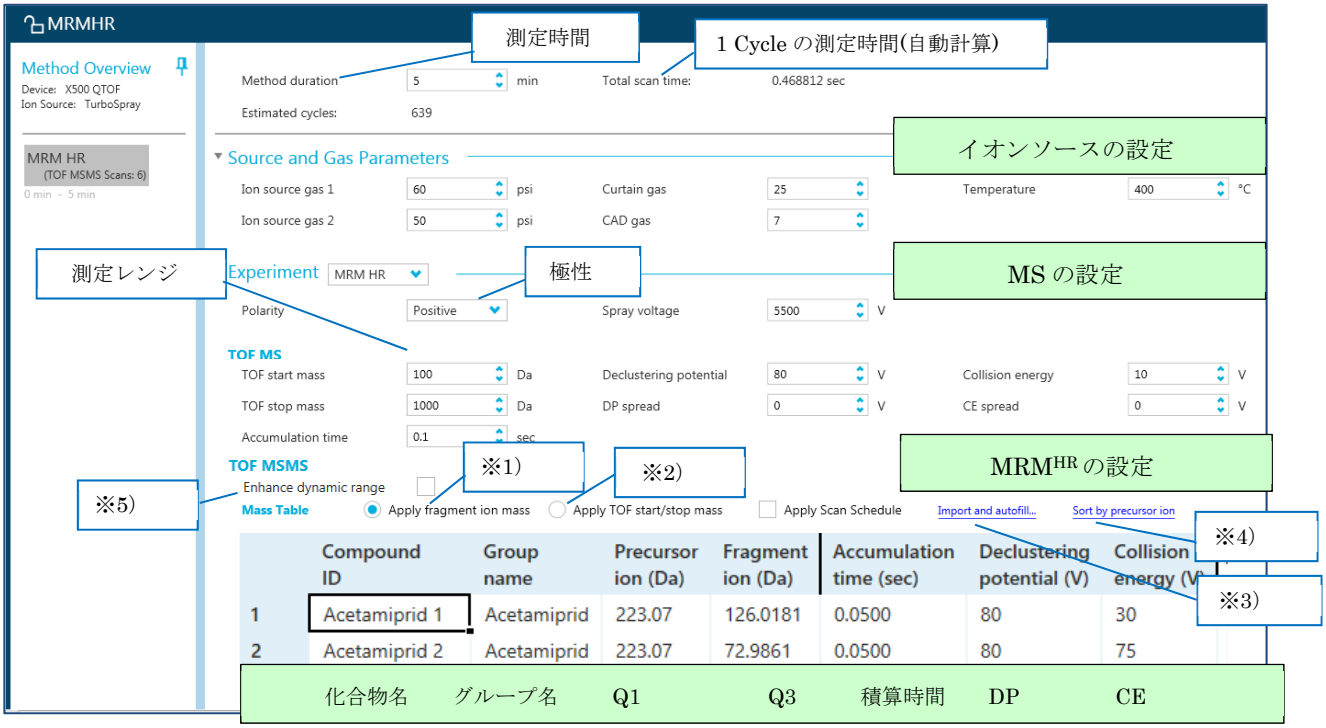
① Home 上の MS Method をクリックします。



② New から MRM HR を選択します。

③ 下図を参考に設定します。

④ Temperature および DP は、熱に不安定な化合物やインソース CID が起きる化合物を分析される際には、低い値に設定してください（例　TEM　：　30、DP　：　30 程度）



⑤ Save のプルダウンから Save をクリックし、名前を付けて保存します。

【※Tips!】

1)　指定した Fragment Ion を±10Da の幅でデータ取得します。(四重極：MRM に相当)

2)　指定した範囲の Product Ion データを取得します。(四重極：Product Ion Scan に相当)

※　CE spread：CE±「設定値」の幅で Ramping しながらデータ取得を行います。

	Compound ID	Group name	Precursor ion (Da)	TOF start mass (Da)	TOF stop mass (Da)	Accumulation time (sec)	Declustering potential (V)	Collision energy (V)	CE spread (V)
1	Acetamiprid	Acetamiprid	223.07	50.00000	240.00000	0.0500	80	30	0

3) Import and Autofill MSMS Scan Information 機能。High Resolution Library から Fragment Ion 情報を選択・設定する事が可能です（詳しくは次項をご参照下さい）。

4) Precursor Ion を小さい順にソートすることが可能です。

5) 検量線の高濃度側を拡げ、定量上限値を伸ばしたい場合は Enhanced dynamic range にチェックを入れます。

※ Accumulation Time が 0.025sec 以下の場合、チェックを入れると警告の！マークが表示されますので、0.025sec 以上の値を入力して下さい。

※3）Import and Autofill MSMS Scan Information 機能を使用したメソッド作成方法

1) Import and Autofill MSMS Scan Information をクリックします。

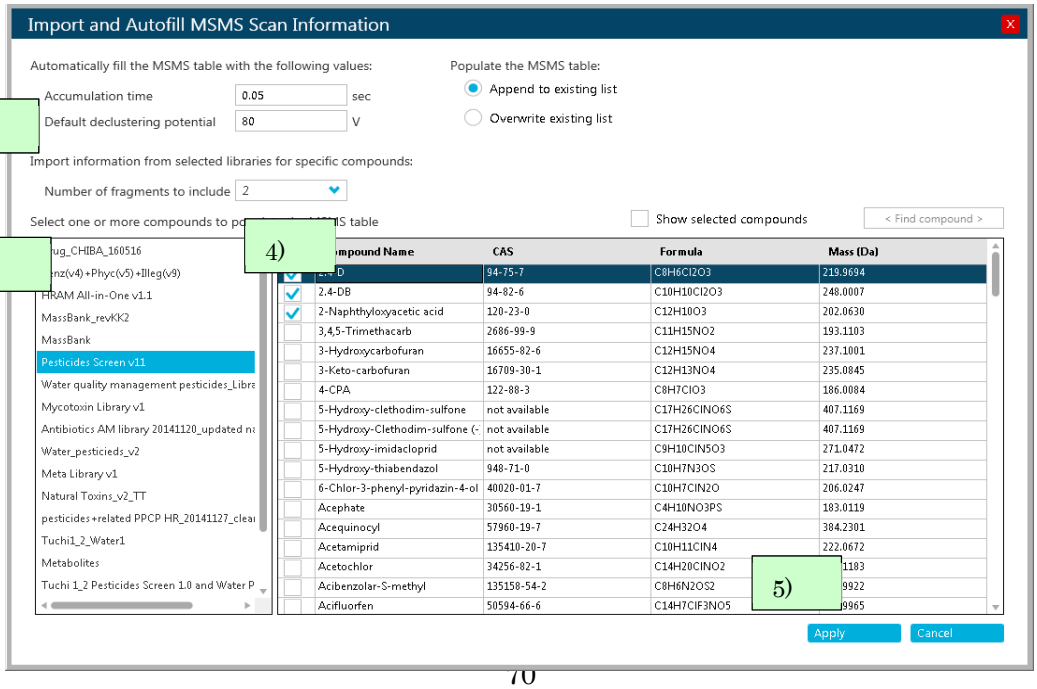
2) 測定条件設定

- Accumulation time :各化合物の積算時間
- Default declustering potential :各化合物の DP 値
- Number of fragments to include:測定するトランジション数
- Populate the MSMS table
- Append to existing list :トランジションを既存リストに追加する
- Overwrite existing list :トランジションを上書きする

3) 目的の化合物が収められているライブラリーを選択します。

4) メソッドに追加したい Compound Name の前に✓を入れます。

5) Apply をクリックします。

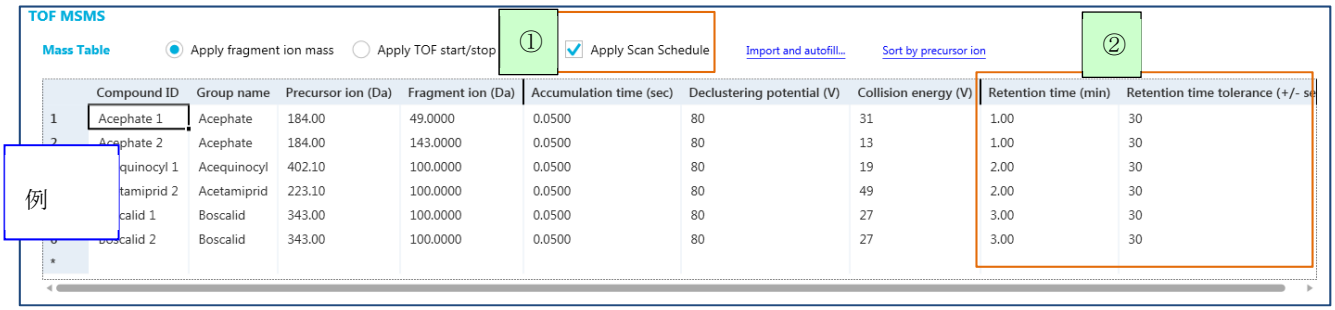


6.1.2　sMRM^{HR} メソッドの作成

① Apply Scan Schedule に✓を入れます。

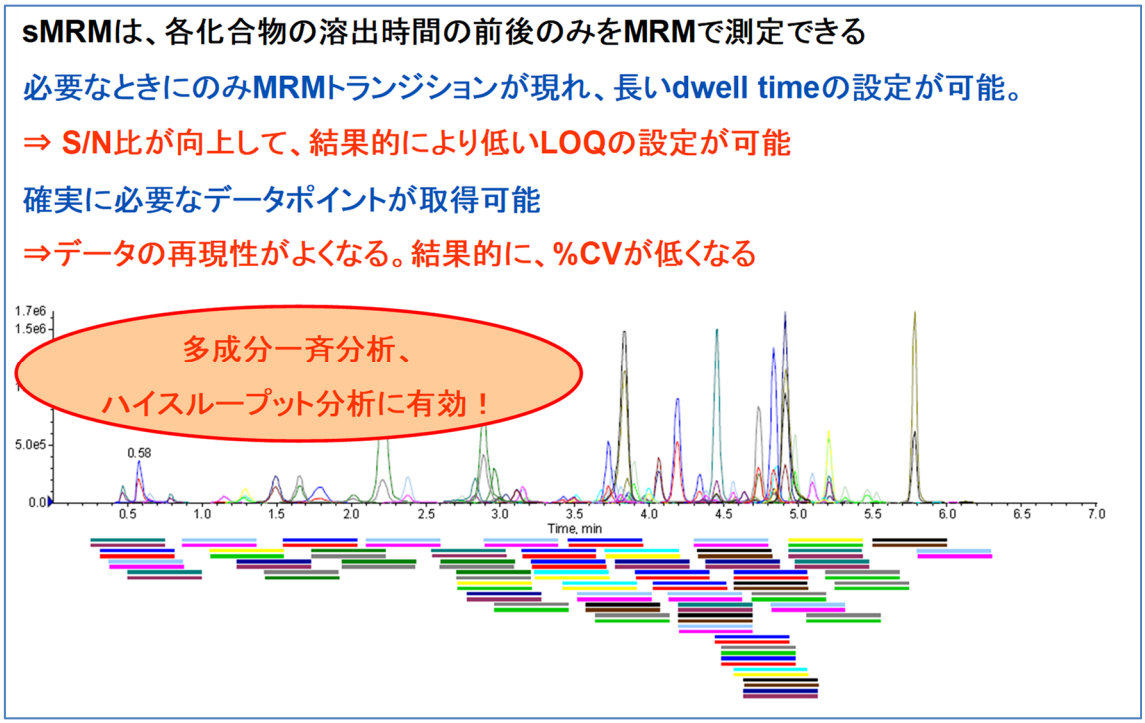
② Retention time と Retention time tolerance※を入力します。

※　化合物ごとに設定が可能です。



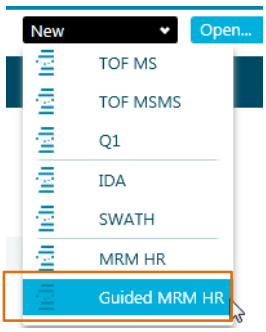
	Compound ID	Group name	Precursor ion (Da)	Fragment ion (Da)	Accumulation time (sec)	Declustering potential (V)	Collision energy (V)	Retention time (min)	Retention time tolerance (+/- se
1	Acephate 1	Acephate	184.00	49.0000	0.0500	80	31	1.00	30
2	Acephate 2	Acephate	184.00	143.0000	0.0500	80	13	1.00	30
	quinocyl 1	Acequinocyl	402.10	100.0000	0.0500	80	19	2.00	30
	tamiprid 2	Acetamiprid	223.10	100.0000	0.0500	80	49	2.00	30
	calid 1	Boscalid	343.00	100.0000	0.0500	80	27	3.00	30
	calid 2	Boscalid	343.00	100.0000	0.0500	80	27	3.00	30

【Tips!】上記②を入力する前に、TOF MS もしくは MRM^{HR} によりリテンションタイムを確認する必要があります。



※　LC Method の作成および Batch の作成は［3　分析メソッドの作成と測定］をご参照ください。

6.1.3　Guided MRM HR を使用したトランジションの作成



※　MRM^{HR} のトランジションを自動最適化で作成することが出来ます。

※　外付けのシリンジポンプが必要です。

①　HOME で MS Method をクリックします。

②　New > Guided MRM HR をクリックします。

③　Preparation を設定します。

④　Automatic（自動最適化）もしくは Guided（マニュアルによる最適化）を選択します。

⑤　Polarity（Positive or Negative）を選択します。

⑥　Find transitions automatically（トランジション自動作成）もしくは Use known transitions　（既知のトランジションの最適化）　を選択します。

【Find transitions automatically】

1)　Compound Name を入力します。

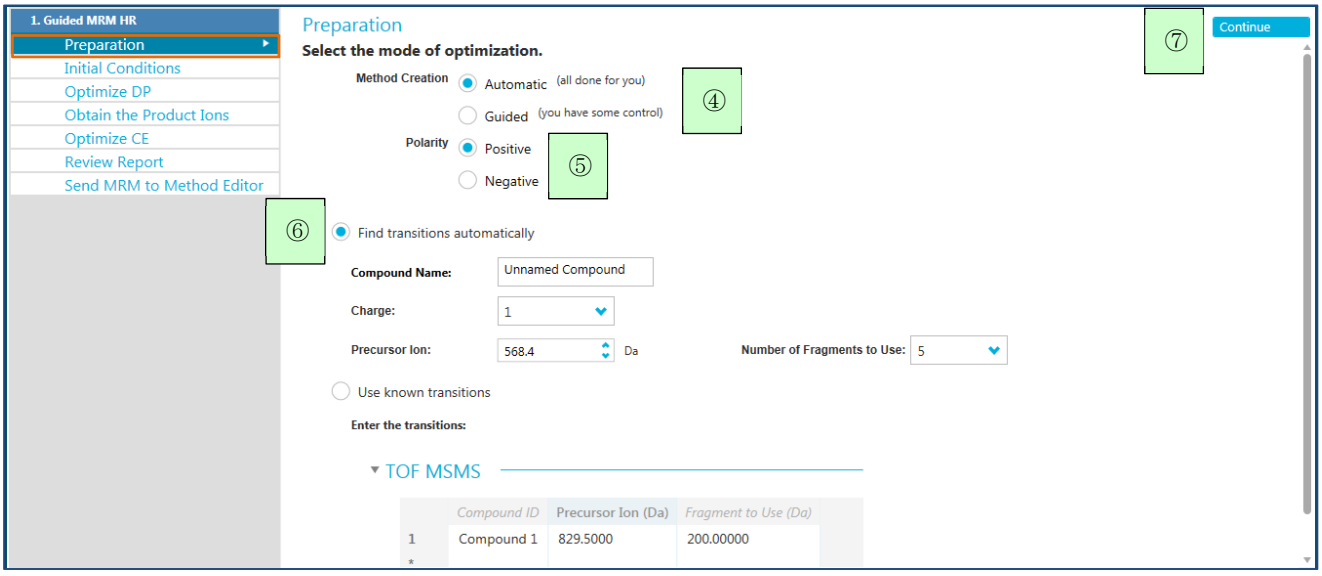
2)　Charge(価数)を選択します。

3)　Precursor Ion を入力します。

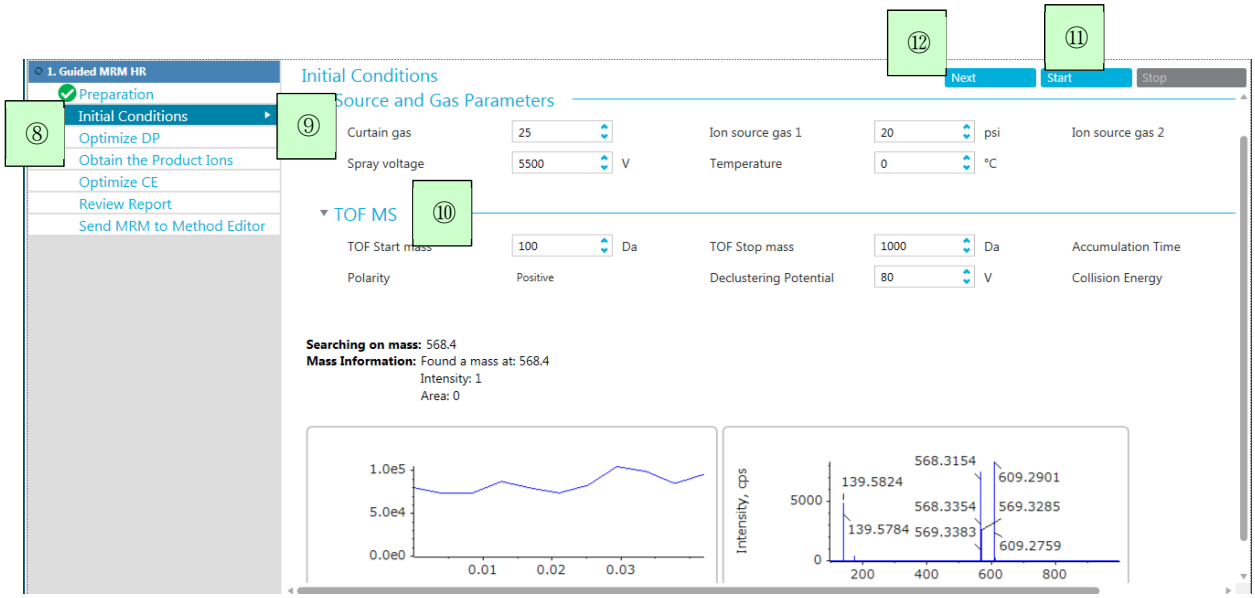
4)　Number of Fragments to Use：作成するトランジション数の選択。

【Use known transitions】

1)　Compound ID(化合物名)、Precursor Ion(Q1 で選択するイオン)、Fragments to Use(プロダクトイオン)を指定します。



⑦　Continue をクリックします。



⑧ Initial Conditions を設定します。

⑨ Initial Conditions(イオンソースパラメータ)を調整します。

※ 初期値でまずはお試しください。

⑩ TOF MS の調整を行います。

※ 初期値でまずはお試しください。適宜、TOF Start – Stop、DE、CE を微調整します。

⑪ Start をクリックし、測定を開始します。

※ TIC が安定(平に推移)していること、目的の Precursor Ion が観測されていることを確認します。

※ 上記が確認できない場合は、STOP をクリックし、⑨、⑩を再調整します。

⑫ Next をクリックします。

※ DP の調整、Fragment Ion 候補の取得、各トランジションの CE 調整が行われます。

⑬ Next をクリックすると、Guided MRM HR Report が作成されますので、Save as report からレポートを保存することをお勧めします。

⑭ Continue をクッリクすることで MRM^{HR} メソッドが自動作成されます。

※ Mass table の左上クリックによる全選択後、「Ctrl+C」でコピーしエクセルにペーストすることで、オリジナルの MRM^{HR} カタログの作成、トランジションのマージをすることが可能になります。

6.2　Quantitation Method の作成

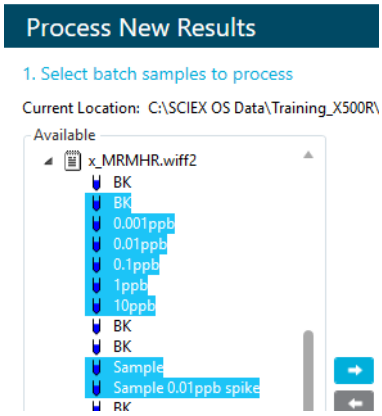
※基本操作は、5　Analytics によるデータ解析の章をご参照下さい。

6.2.1　解析メソッドの作成

① Results をクリックし New を選択します。

② 解析するデータを選択し、＝＞アイコンで画面右側にサンプルを移動します。

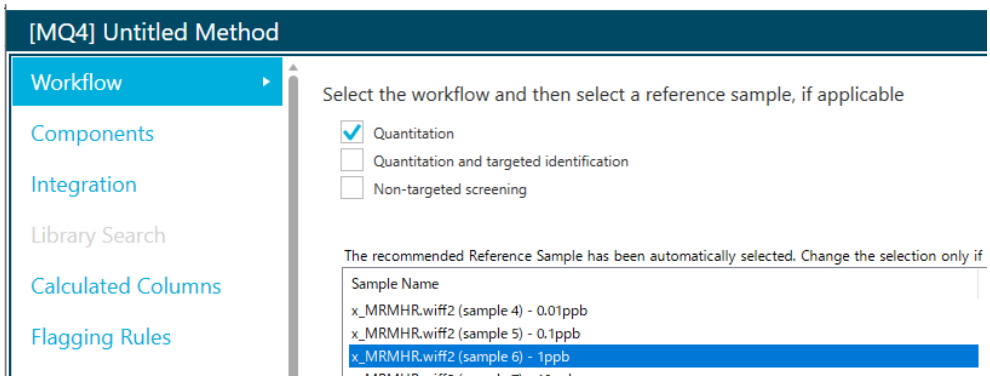
※　Training では図を参考に選びます。



③ 2. Select a Processing Method では New をクリックします。

※　2 回目以降の解析の際は、Select a Processing Method の Browse から既存のファイルを選択します。

④ Workflow では解析するワークフローを選択します。定量のみの解析の場合は、Quantitation にチェックを入れます。



6.2.2　Components タブの設定

① **Components** で表示される情報は、MS method で入力した MRM HR の化合物情報が自動的に反映されます。

Group、Name, Precursor Mass, Fragment Mass, XIC width, Experiment Index

Row	IS	Group	Name	Che... Form...	Add...	Precursor (Q1) Mass (Da)	Fragment (Q3) Mass (Da)	XIC Width (...	Reten... Time...	Retention Time (...	IS N...	Experiment Index
1	☐	Acetamiprid	Acetamiprid 1			223.07	126.0181	0.02	RT val...			2 +TOF MSMS of 223.1 (...
2	☐	Acetamiprid	Acetamiprid 2			223.07	72.9861	0.02	RT val...			3 +TOF MSMS of 223.1 (...
3	☐	Acetamiprid	MS			223.07		0.02	RT val...			1 +TOF MS (100 - 620)

② Group、Name は適宜変更します。

※　Fragment (Q3) Mass は、目的の精密質量を入力します。

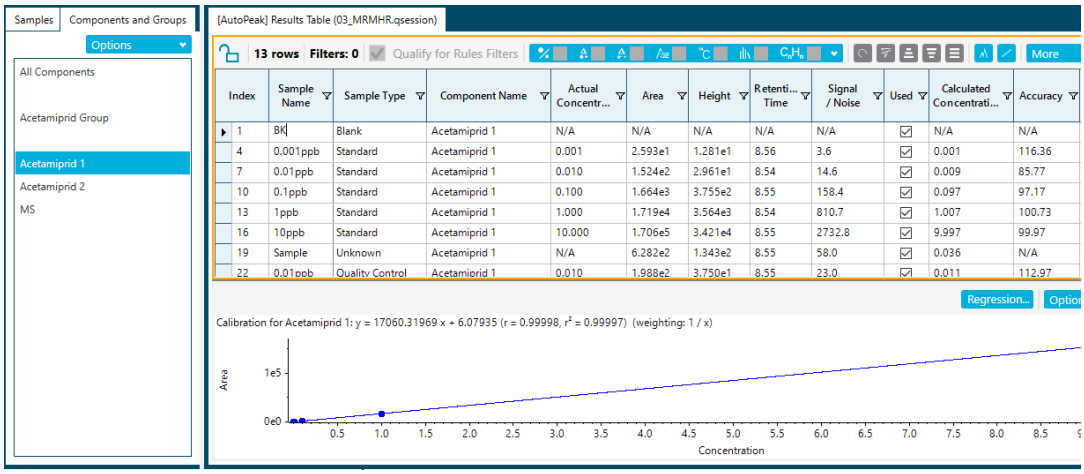
※　MRM^{HR} だけでなく、TOF MS による定量も可能です。

※　Excel からのコピー&ペーストも可能です。

※　Experiment Index が表示されない場合は、Options > Table settings から設定が可能です。

③ **Integration** 以降の操作は[5.3　定量解析とターゲットスクリーニング]を参考に設定します。

④ 結果を確認します。



【※Tips!】Fragment Mass の精密質量情報がない場合、Import > Import components from a library database から設定することも可能です。

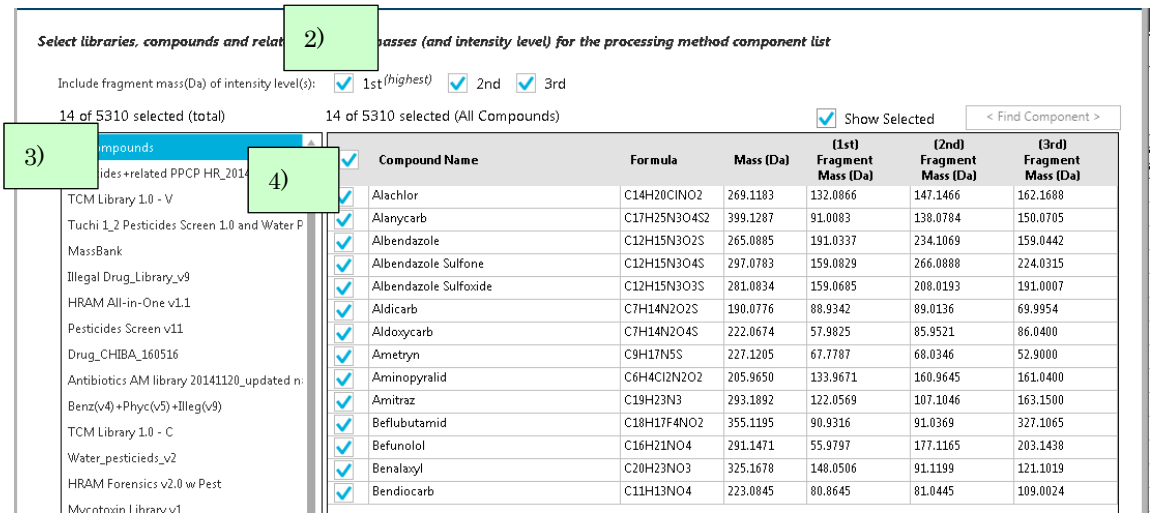
1) Import > Import components from a library database をクリックします。

2) 追加するトランジション数にチェックを入れます。

3) Library 一覧から該当する Library を選択します。

4) 化合物一覧から解析する化合物の先頭に✓を入れます。

5) OK をクリックすることで、Components に追加されます。



7　その他

7.1　　MS Tune の実施

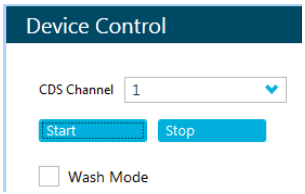
※　最良の感度、質量分解能で測定するため、質量分析計の各パラメータを自動で最適化する機能です。質量分解能が不十分になった場合（例えば、*m/z*　956 で質量分解能 R＜42,000)、または、装置のメンテナンスなどで真空を解除した後に、実施してください。

※　分析に使用する極性（Positive および Negative Mode）を実施します。

7.2　　精度や質量分解能の最適化

例：Positive Mode の場合

① X500R QTOF 横の Direct CDS Control アイコン をクリックします。

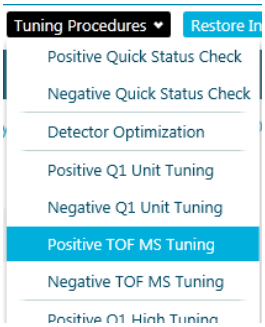


② CDS Channel は 1 を選び、Start をクリックして×を選び閉じます。

※　1：Positive、2：Negative

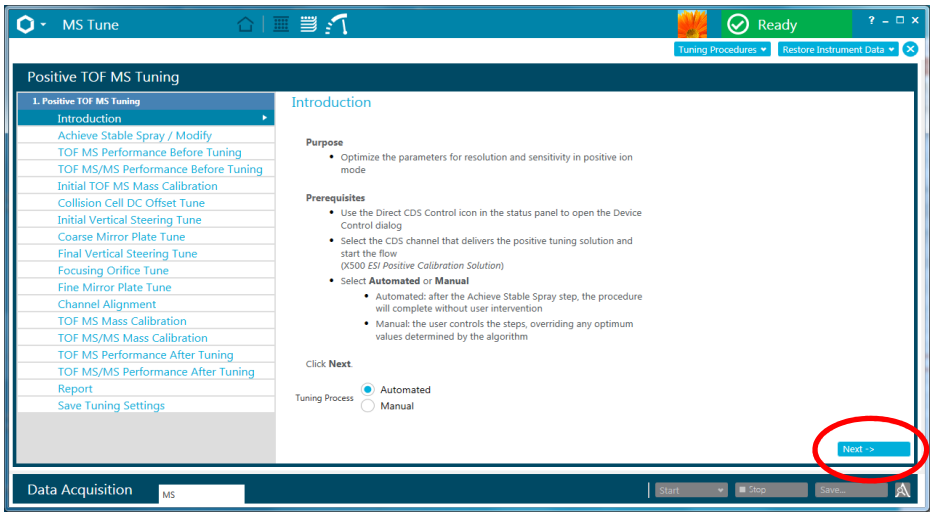
※　パージをする場合は Wash Mode にチェックを入れ、数分経過しましたらチェックを外します。右下の Next -> をクリックします。

③ Home 上の MS Tune をクリックします。



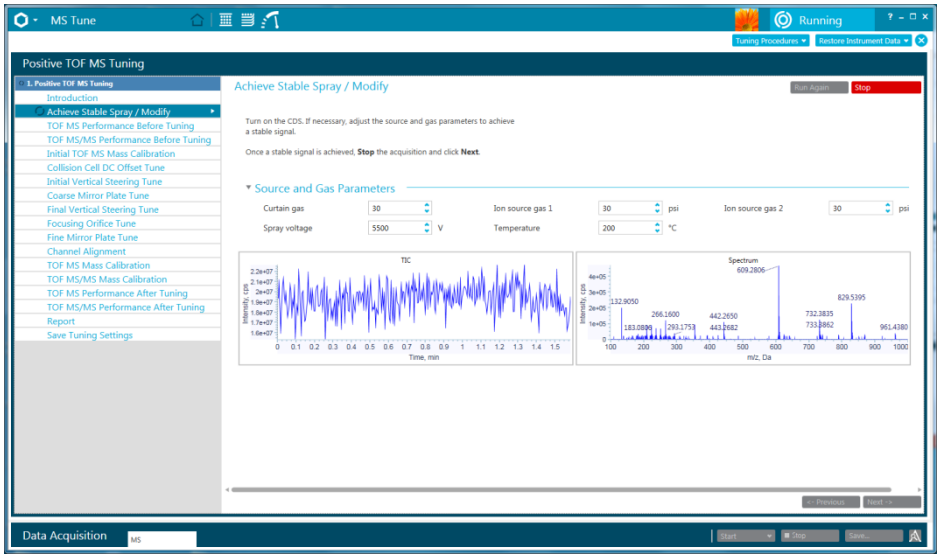
④ Tuning Procedures から、Positive TOF MS Tuning を選びます。

⑤ 右下の Next -> をクリックします。

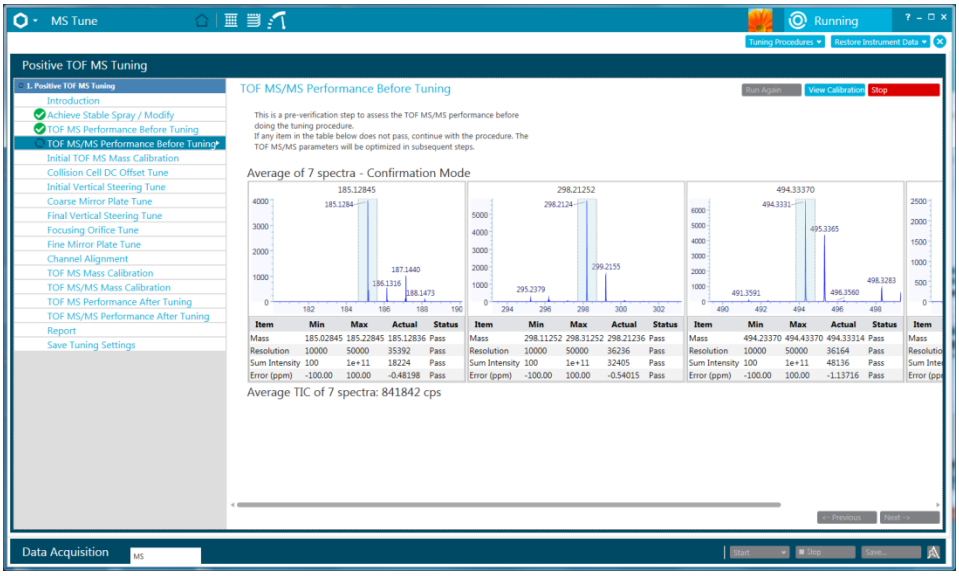


⑥ 自動的にサンプルが導入されますので、TIC が安定するまで数分待ちます。

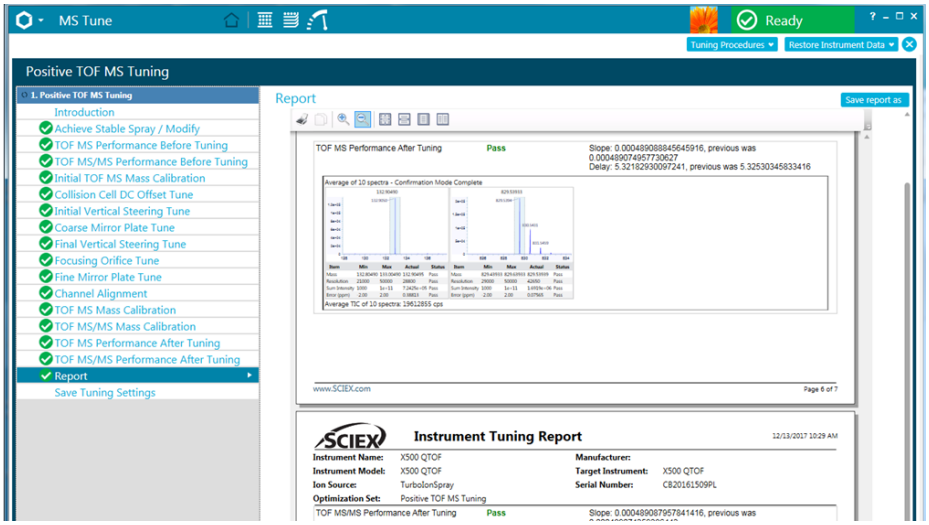
⑦ 安定したら右上の Stop をクリックします。



⑧ 右下の Next-> をクリックすると、自動的に TOF MS Performance…からスタートします。



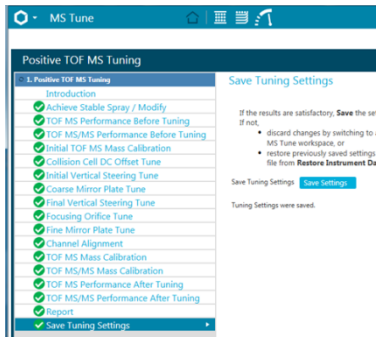
⑨ 数十分後、Report 画面がでたら Save Report as をクリックし、必要に応じて結果



を保存します。

※ 保存先はお使いのプロジェクト内あるいは Desktop 等適宜フォルダを作成して保存します（拡張子.xps）。XPS Viewer がインストールされていない場合は Print を選び、PDF として保存します。

⑩ この設定を保存する場合は右下の Next -> をクリックし、Save Settings をクリックします。



⑪ 終了したら画面上部の をクリックし、メッセージがでたら Yes を選んで画面を閉じます。

※ この画面を閉じたタイミングで CDS ポンプの送液も止まります。

※ 手動で CDS ポンプを止めるには、Direct CDS Control アイコン をクリックし、Stop をクリックして×を選び閉じます。

※ ファイル例 : Positive Mode

※ Negative Mode の場合：Positive と同様に操作します。

※ Positive Mode から連続して操作する場合はパージが必要です。Wash Mode にチェックを入れパージを実施し、数分経過しましたらチェックを外します。

7.3　検出器の最適化

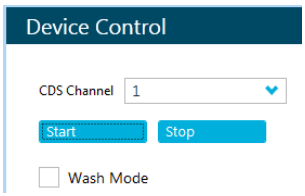
※　Positive Mode で実施します。

※　必要に応じてパージを行ってください。

※　実施後の最適値は Positive および Negative Mode 両方に反映されます。

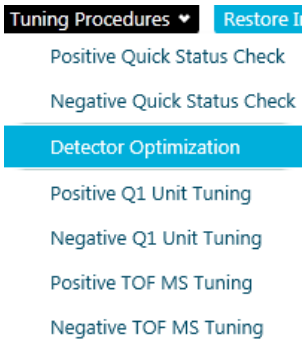
① X500R QTOF 横の Direct CDS Control アイコン をクリックします。

② CDS Channel は 1 を選び、Start をクリックして× を選び閉じます。

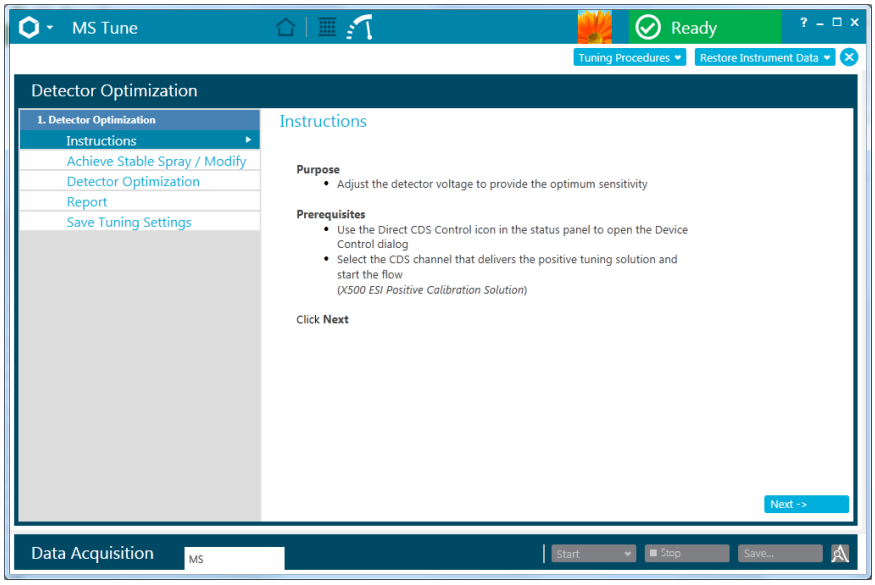


③ Home 上の MS Tune をクリックします。

④ Tuning Procedures から、Detector Optimization を選択します。



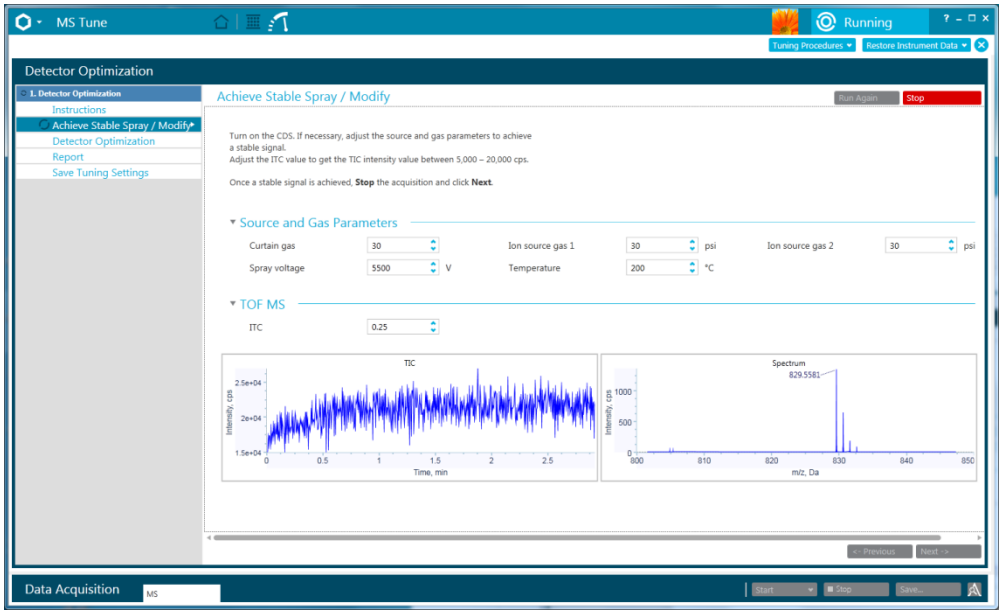
⑤ 右下の Next -> をクリックします。



⑥ 自動的にサンプルが導入されますので、TIC が安定するまで数分待ちます。

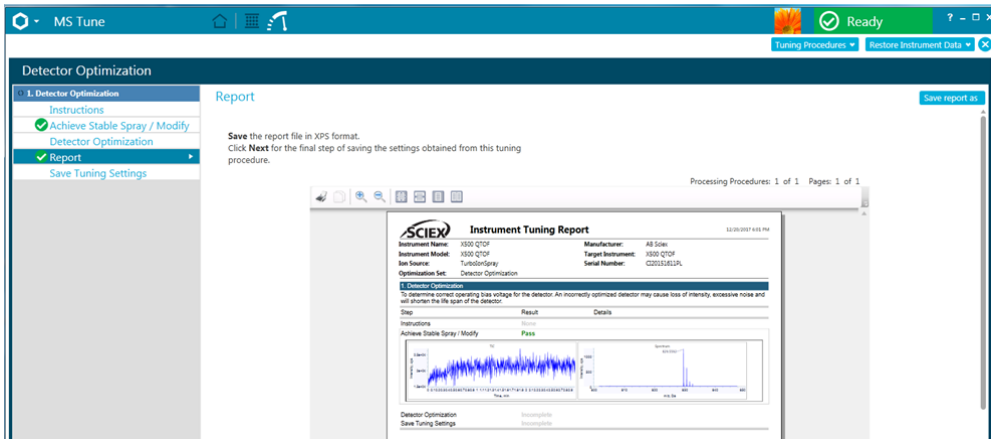
※ 最適化に必要な TIC の強度は 5,000~20,000cps です。5,000cps 以下の場合は ITC の調整が必要となりますので、その場合は弊社サポートのフィールドサービスまでご相談ください。

⑦ 安定したら右上の Stop をクリックします。



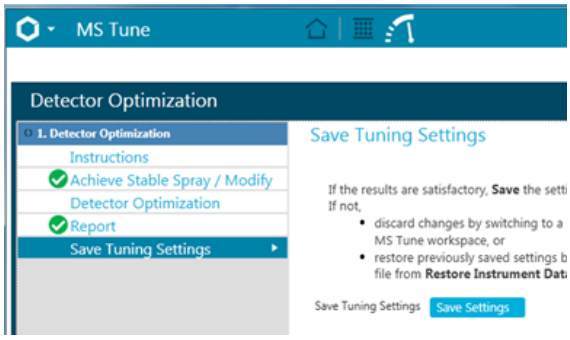
⑧ 右下の Next -> をクリックすると、自動的に Detector Optimization に進みます。

⑨ 数十分後、Report 画面がでたら Save Report as をクリックし、必要に応じて結果を保存します。



※ 保存先はお使いのプロジェクト内あるいは Desktop 等適宜フォルダを作成して保存します（拡張子.xps）。

⑩ この設定を保存する場合は右下の Next -> をクリックし、Save Settings をクリックします。



⑪ 終了したら画面上部の をクリックし、メッセージがでたら Yes を選んで画面を閉じます。

※ CDS ポンプが動いている場合は、Direct CDS Control アイコン をクリックし、Stop をクリックして×を選び閉じます。

◆SCIEX OS 各種マニュアルのご案内◆

以下サイトよりダウンロードできます。是非ご活用ください。

https://sciex.com/Documents/manuals/explorer-tutorial-ja-secured.pdf
https://sciex.com/Documents/manuals/sciex-os-software-user-guide-ja.pdf

◆製品サポートのご案内◆

株式会社エービー・サイエックス / アプリケーションサポート部

ご使用の装置名とシリアル番号をお伝えください。

Tel: 0120-318-551　　Fax: 0120-318-040

E-mail: jp_support@sciex.com

◆オンライントレーニング動画のご案内◆

弊社ホームページの下記サイトから、メンテナンス、ソフトウェアの使用法など、各種トレーニング動画を視聴できます。是非ご活用ください。

Home > サポート > 各種サポート資料・ツール > 操作方法に関する動画

http://sciex.jp/support/support-tools/movie-manuals

Home > Support > SCIEXNow > Training > Course Catalog

http://sciex.com/support/training-front/course-catalog