

TripleQuad™
LC-MS/MS System
シリーズ

初級定量トレーニングテキスト
SCIEX OS ソフトウェア説明用資料

ルーチン分析

ソフトウェアのバージョンにより、画面や操作方法が若干異なる場合があります。
予めご了承ください。

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
2025 年 5 月



目次

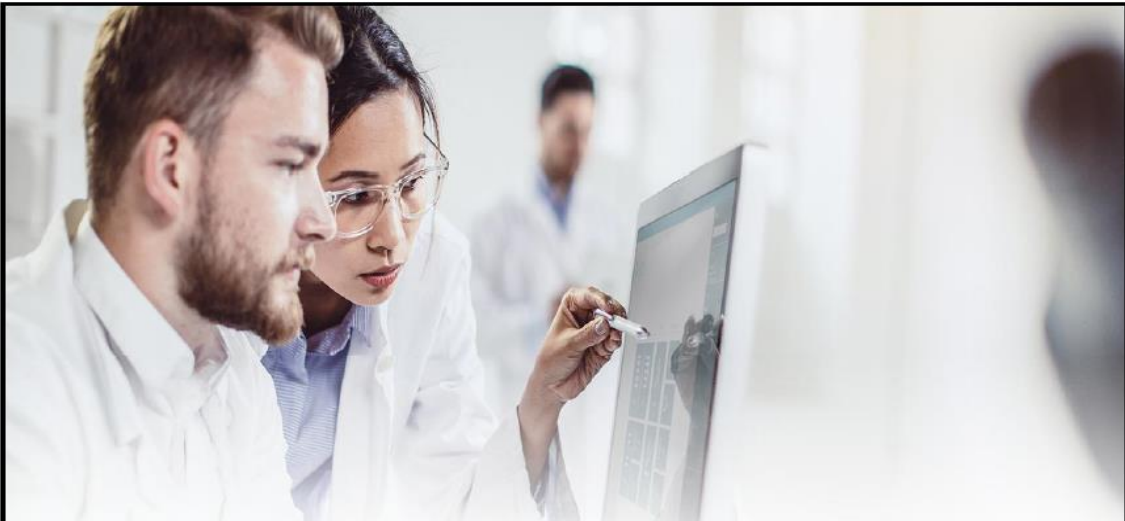
1	講義資料	1-1
2	ソフトウェアの概要	2-1
3	SCIEX OS®ソフトウェアの起動と各モードについて	3-1
3.1	プロジェクトの作成または選択	3-2
3.2	装置の Configuration	3-3
4	装置の構成	4-1
4.1	HPLC の構成	4-1
4.2	MS System の構成	4-1
5	測定前の準備	5-1
5.1	PC の準備	5-1
5.2	HPLC の準備（島津製、ExionAE の場合）	5-1
5.3	HPLC の準備（Exion2.0 の場合）	5-2
5.4	カラムの接続	5-4
5.5	HPLC と MS の接続	5-4
6	測定	6-1
6.1	project の選択	6-1
6.2	機器の平衡化	6-1
6.3	Batch の作成	6-2
6.4	測定の開始	6-4
7	停止操作	7-1
8	メソッド	8-1
8.1	MS メソッド	8-1
8.2	HPLC メソッド【島津製、ExionAE の場合】	8-3
8.3	HPLC メソッド【Exion2.0 の場合】	8-5
8.4	バルブの設定	8-8
9	データの確認	9-1
10	SCIEX OS Software を用いた定量解析	10-1
10.1	SCIEX OS Software の Analytics の起動	10-3
10.2	Project の選択	10-3
10.3	初期設定の変更	10-4
10.4	Result Table の作成	10-5
10.5	Results Table の確認、編集	10-10
10.6	クロマトグラムの表示	10-11
10.7	パラメータの変更	10-12

10.8	手動積分	10-13
10.9	検量線の表示、重みづけ、検量線の種類を変更	10-14
10.10	データの追加と削除	10-15
10.11	Report の作成	10-16

本マニュアル中での装置の表示について、一部下記のように表示しております。

機種		略称
AB SCIEX Triple Quad™ 4500 LC/MS/MS System	AB SCIEX QTRAP® 4500 LC/MS/MS System	Triple Quad™ 4500 QTRAP® 4500
AB SCIEX Triple Quad™ 5500 LC/MS/MS System	AB SCIEX QTRAP® 5500 LC/MS/MS System	Triple Quad™ 5500 QTRAP® 5500
AB SCIEX Triple Quad™ 6500 LC/MS/MS System	AB SCIEX QTRAP® 6500 LC/MS/MS System	Triple Quad™ 6500 QTRAP® 6500
AB SCIEX Triple Quad™ 7500 LC/MS/MS System	AB SCIEX QTRAP® 7500 LC/MS/MS System	Triple Quad™ 7500 QTRAP® 7500

1 講義資料



初級定量トレーニングコース – 講義資料 –

サイエックス アプリケーションサポート

2025/04

 SCIEX
The Power of Precision

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

1

目次



- LC-MSの概要
- 測定メソッドと自動最適化 (メソッド作成)
 - ルーチン分析の方は参考資料になります。
- その他のTips
 - ★ ルーチン分析コースの方は
このマークのあるページ以外は参考資料になります。

MS用語について:

Updateされることがありますので、正式な定義などにつきましては以下を参照ください。

http://www.mssi.jp/publications/pdf/MS_Terms_2009.pdf

2

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

2

LC-MSの概要



- 試料溶液をHPLCで分離した後、溶出物質をイオン化し、質量分析部に導入
- イオンを質量/電荷比(m/z)によって分離・検出する方法
- LCの保持時間と物質固有の m/z の両面から解析できる

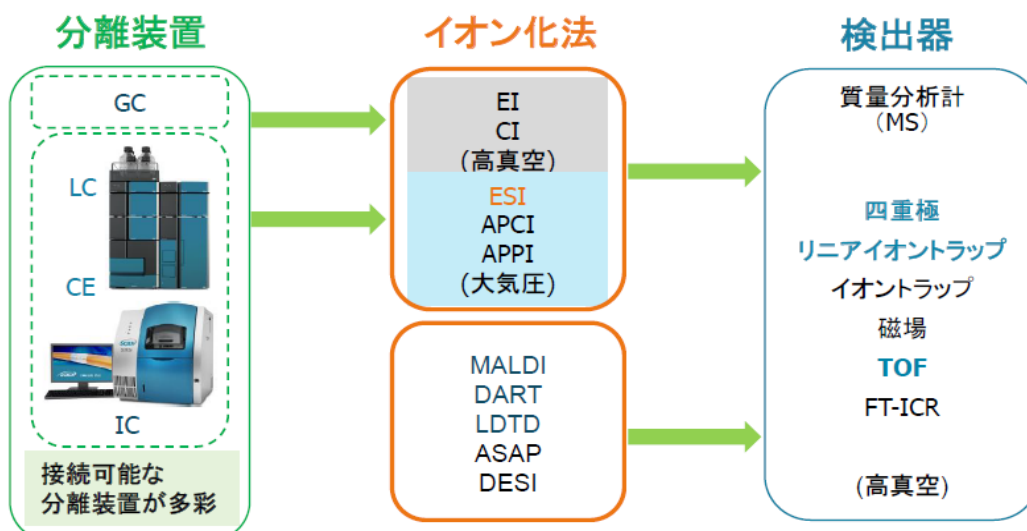


3

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

3

LC-MSの概要 -質量分析計のタイプ-



4

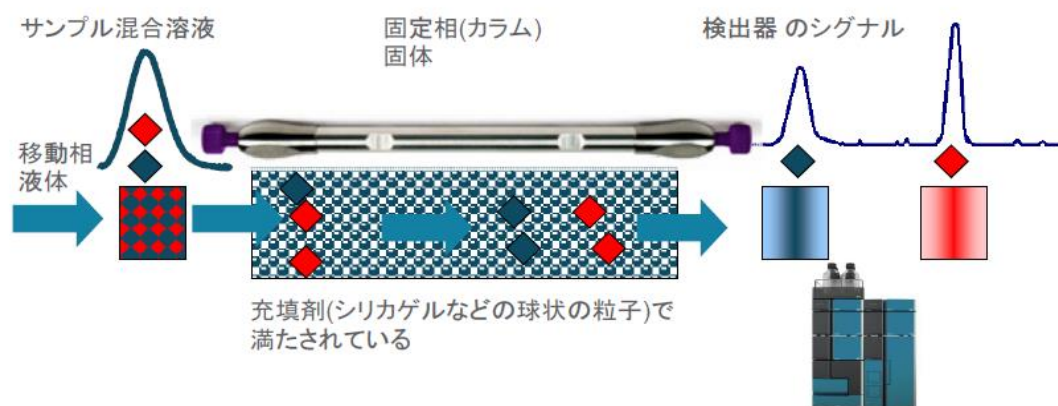
© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

4

高速液体クロマトグラフ(LC)とは



- 試料中の検出したい成分の分離
 - 各成分と固定相・移動相との親和性・相互作用の違いにより、溶出する時間が異なる



5

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

5

質量分析装置(MS)とは

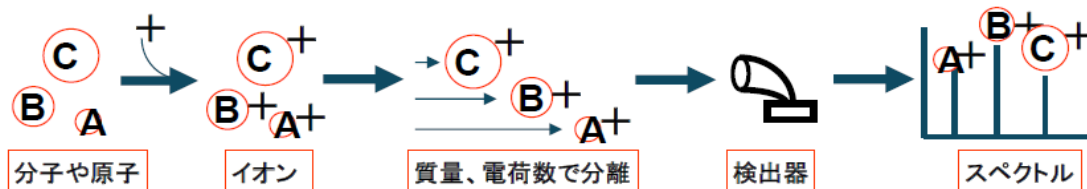


物質の質量を測定する装置

目に見えない、手に取れないものを、どうやって量るの？



➤ 分子や原子をイオン化し、質量と電荷数の違いで分離・検出する。



6

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

6

質量分析装置(MS)とは



物質の質量を測定する装置

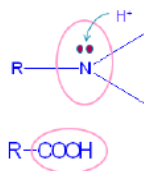
MSが検出する値は

m/z (m オーバー z)

m ... イオンの質量

z ... イオンの電荷数

m/z の値と電荷数から、質量を算出



プロトン付加分子

例) ESIのイオン化
MW=500

Positiveで1価でイオン化すると
(500+1) / 1 = m/z 501

Negativeで1価でイオン化すると
(500-1) / 1 = m/z 499

脱プロトン分子

7

© 2023 DH Tech. Dev. Plc. Ltd.

7

平均質量とモノアイソトピック質量



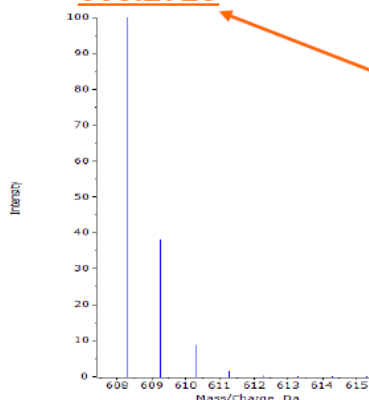
例: Reserpine($C_{33}H_{40}N_2O_9$)

608.688

平均質量: 608.688
(同位体の平均値)

608.2728

モノアイソトピック質量: 608.2728



試薬ビンのラベルなどに記載されている値は、
平均質量(分子量)です

質量分析装置では
**モノアイソトピック質量
の関連イオン**
を測定します!
(同位体が分離されている場合)

8

© 2023 DH Tech. Dev. Plc. Ltd.

8

平均質量(分子量)とは



その化学種を構成するすべての元素の原子量の和 (average mass)

平均質量(分子量): 原子量から計算された数値
ex. 炭素Cの安定同位体の質量と存在度

	質量	天然同位体存在度
^{12}C	12.00000	98.93%
^{13}C	13.00336	1.07%

※原子量とは、同位体存在比を重率として、かけて求めた平均値

H 1.00794
C 12.0107
N 14.0067
O 15.9994

試薬ビンのラベルなどに記載されている値は、平均質量(分子量)です

$\text{C}_{33}\text{H}_{40}\text{N}_2\text{O}_9$ (Reserpine) の分子量: 608.688

9

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

9

モノアイソトピック質量とは



各元素について天然存在比が最大の同位体の質量を用いて計算したイオンまたは分子の計算精密質量(exact mass)

モノアイソトピック質量 (Monoisotopic Mass) :

安定同位体中、最も存在比の高い質量から計算された数値

ex. 炭素Cの安定同位体の質量と存在度

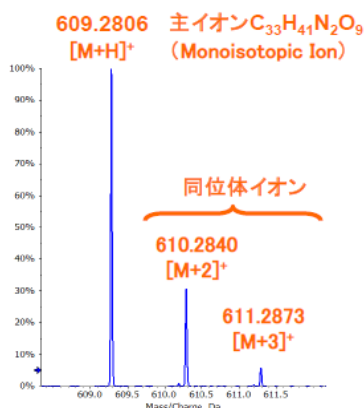
	質量	天然同位体存在度
^{12}C	12.00000	98.93%
^{13}C	13.00336	1.07%

天然存在比が最大の同位体の質量

^1H 1.0078
 ^{12}C 12.0000
 ^{14}N 14.0031
 ^{16}O 15.9949

$\text{C}_{33}\text{H}_{40}\text{N}_2\text{O}_9$ のモノアイソトピック質量: 608.2728

モノアイソトピックイオン $[\text{M}+\text{H}]^+$ = 608.2728 + H
= 609.2806



10

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

10

m/z と多価イオン

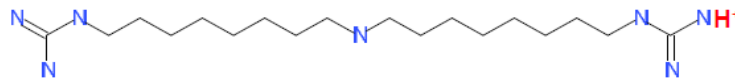
多価イオンのm/zの計算(H⁺付加の場合)
(モノアイソトピック質量+ H⁺の数) / (H⁺の数)



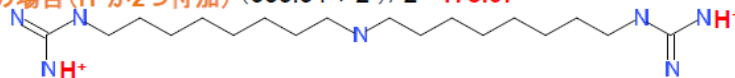
- 質量分析装置では、**m/z** が観測されます。(M.W.ではありません。)
- エレクトロスプレーイオン化法(ESI法)では、**多価イオン** が観測されることがあります。

イミノクタジンの正イオンの例 ※プロトンが付加している位置は一律ではありません。

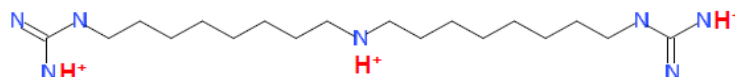
1価の場合(H⁺が1つ付加) (355.34 + 1) / 1 = **356.34**



2価の場合(H⁺が2つ付加) (355.34 + 2) / 2 = **178.67**



3価の場合(H⁺が3つ付加) (355.34 + 3) / 3 = **119.44**



11

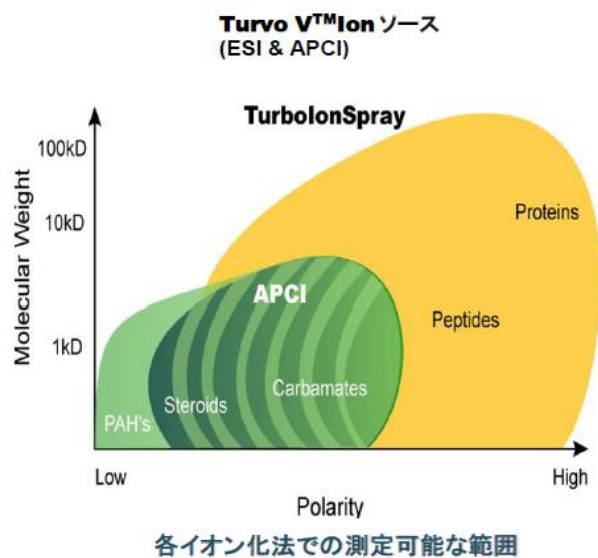
© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

11

LC/MSのイオン化法の種類



- エレクトロスプレーイオン化法
 - ElectroSpray Ionization, **ESI**
- 大気圧化学イオン化法
 - Atmospheric Pressure Chemical Ionization, **APCI**



12

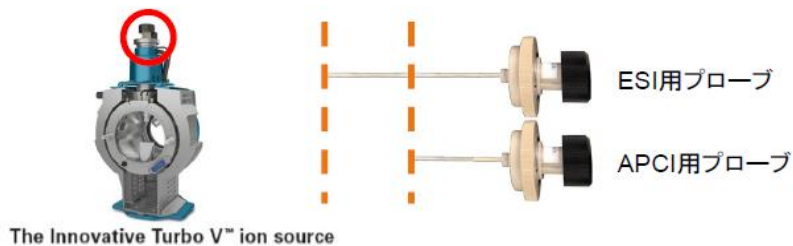
© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

12

Turbo V™ Ion Source



ESIからAPCIに簡単に切り替えられます



- 別のイオン源を用意する必要なし、ESI、APCI共用の1つのイオン源
- ESIおよびAPCIプローブは、MSシステムに標準装備
- プラグアンドプレイ、プローブを交換するだけでMSが自動認識
- プローブの交換は、1分間の簡単な作業
- 詳細は「**APCI操作マニュアル**」をご確認下さい

13

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

13

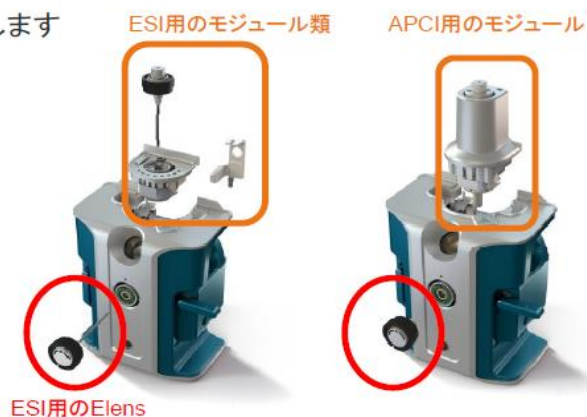
OptiFlowPro



ESIからAPCIに簡単に切り替えられます

- モジュールとElensの組み合わせで自動認識
- ESI (Analytical) モジュールはMSシステムに標準装備
- APCIモジュールはオプション
- 詳細は「**APCI操作マニュアル**」をご確認下さい

APCIのElensはプラグを使用します



14

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

14

イオン化法の特徴



		ESI	APCI
対象 サンプル	最大分子量	数10万Da	約1300Da
	極性	中極性～高極性	低極性～高極性
	熱に不安定な サンプル	可能	適さない
	揮発性	影響なし	揮発性成分に対して有効
対応流速		数nL～3mL/min	0.2～2.0 mL/min
イオンサプレッション イオンエンハンスメント		起こる	少ない
LC溶媒の影響		影響されやすい	影響されにくい
その他		・広範囲の化合物測定に有効 ・多価イオンが生じるので高分子化合物の分析にも有利 ・クラスター(多量体)が生成するため、高濃度側での検量線の直線性が低下する場合がある。	・気化を促進するためプローブを熱している ・生体サンプルなど不揮発性の物質を多く含む場合、長時間の測定によりコロナニードルが汚れるため感度が低下する。(コロナニードルのクリーニングを行えば感度は復帰する。)

15

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

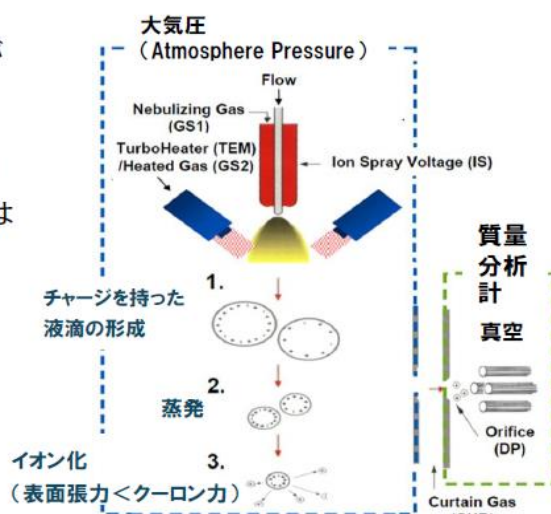
15

イオン化法



ESIのイオン化

- 1) イオンを多量に含む液滴が形成される。
- 2) 液滴の溶媒が蒸発するにつれ液滴が小さくなりイオンが凝集する。
- 3) さらに蒸発が進むと液滴は表面張力により内側に集まろうとするがイオンは電荷の反発により気相に飛び出す。



16

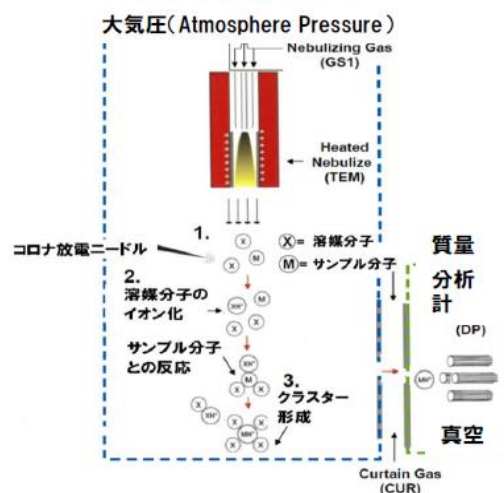
© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

16

イオン化法

APCIのイオン化

- 1) キャピラリーから噴霧された
サンプル溶液の液滴を熱で気化される。
- 2) コロナ放電で生成させた
イオン種(反応イオン)と反応させて
イオン化する。



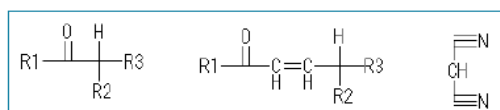
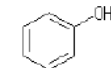
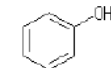
17

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

17

イオン化法とイオン化されやすい部分構造

	最大 質量	Positive Mode	Negative Mode
ESI	10000 以上	$R-NH_2$	$R-SO_3H$ $R-SO_3X$ $R-O-SO_3H$ $R-O-SO_3X$ $R-COOH$ $R-COOX$
APCI	1000 程度	$R-NH_2$ $R-COOR'$ $R-CONH_2$ $R-C(=O)R'$ $R-CHO$ 	$R-SO_3H$ $R-SO_3X$ $R-O-SO_3H$ $R-O-SO_3X$ $R-COOH$ $R-COOX$

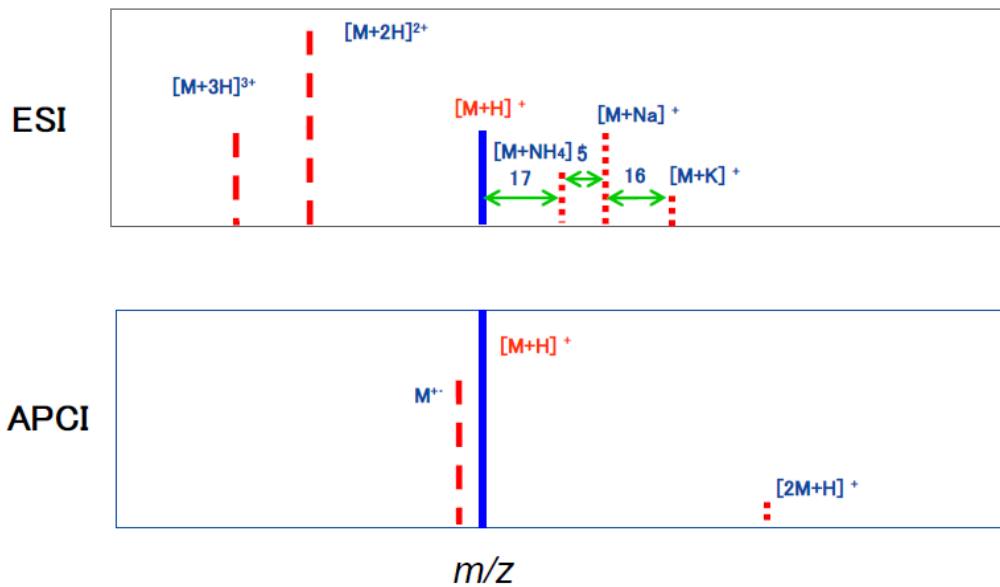


18

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

18

生成する主なイオン種 (Positive Mode)

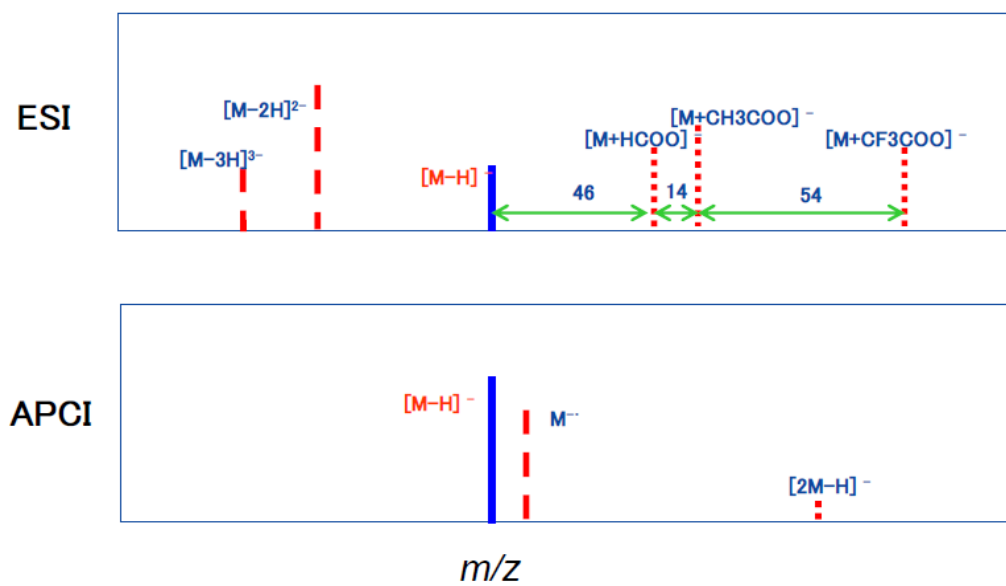


19

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

19

生成する主なイオン種 (Negative Mode)



20

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

20

LC/MS(/MS)で使用する質量分析部の種類



SCIEXで販売している種類のみ表記

• 四重極質量分析計

- 小型で定量性が良好
- 質量範囲は数千Da、分解能は数千程度

• イオントラップ質量分析計

- 小型で、単独でフラグメントイオンを測定できるため、構造解析等に使用される
- トラップできるイオンの量に制限があるため、定量性は低い
- 質量範囲は数千Da、分解能は通常数千程度(狭い範囲に限れば分解能は向上する)
 - 3Dイオントラップ
 - リニアイオントラップ
 - トラップする空間が広く、トラップの問題点を解消している

• 飛行時間型(Time of flight)質量分析計

- 質量範囲が広く(理論的には無限大)、分解能も高い(数万程度)
- 比較的大型で、定量性も兼ね備えた装置は高価

• その他

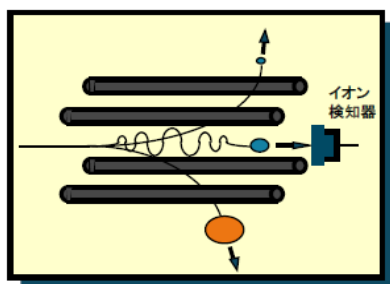
- 磁場型(分解能が高く、定量性もあるが、大型で、重い)
- フーリエ変換型など(最も分解能が高い)

21

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

21

四重極質量分析計



四重極 Quadrupole

4本の電極の対向する電極にそれぞれ、直流電圧と交流電圧を印加し、各質量特有の周波数を利用して、質量のふるいわけを行う。

【特長】

- 比較的安価で操作性が良い
- 分解能は0.7u程度だが、定量的場合十分
- 検量線の直線性が高く、ダイナミックレンジが広い

22

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

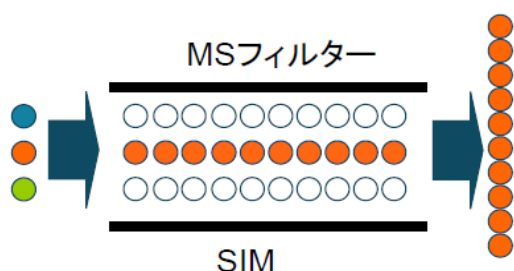
22

四重極質量分析計の測定方法



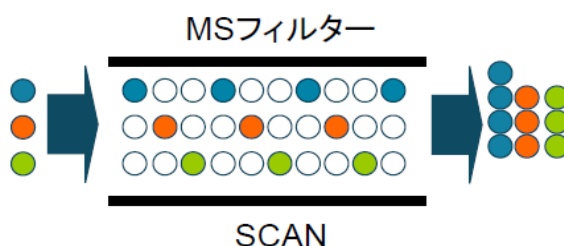
SIMモード

- 質量固定でマスフィルターとして機能
- マスフィルターの条件 (m/z) は固定され、ターゲットのイオン全てが検出器に到達するため、高感度
- 固定したイオン以外は検出されない



スキャンモード

- 質量の順にイオンが選択されていく
- マスフィルターの条件 (m/z) を連続的に変化させるため、検出器に到達せず排除されるイオンがある
- 指定した m/z の範囲のすべてのイオンが検出される



23

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

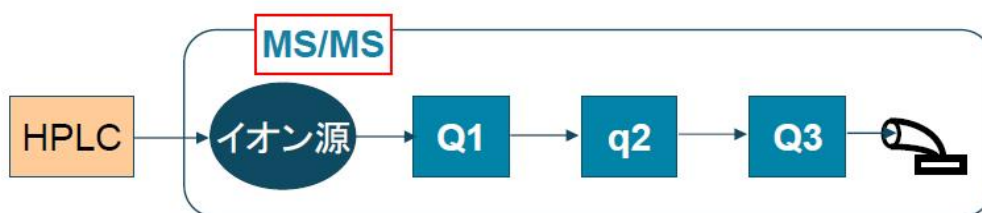
23

トリプル四重極(タンデム)LC/MS/MSとは？



質量を分離できる部分を2箇所持っているLC/MSのこと

トリプル四重極LC/MS/MSの例



【用語解説】

Precursor Ion(プリカーサーイオン):

元のイオンのこと。前駆イオンともいう

Fragmentation(フラグメンテーション):

イオンが結合開裂により、小さい質量のイオンを生成する反応、断片化ともいう

Product Ion(プロダクトイオン):

ある特定のイオンから生成したイオンを指す。フラグメントイオンともいう

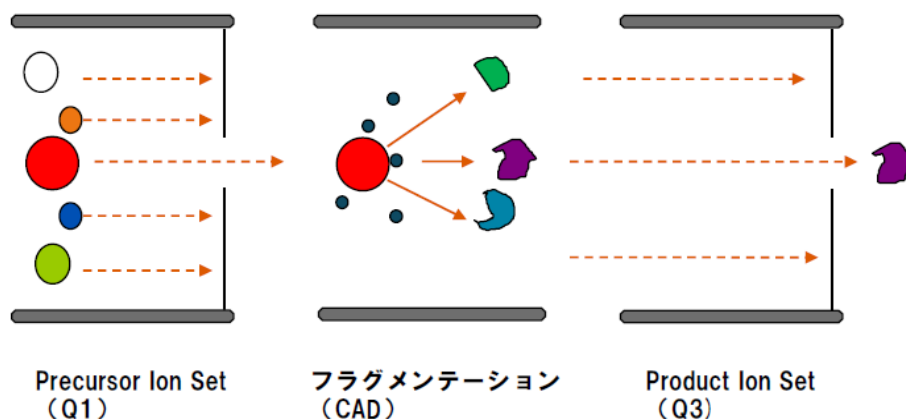
(参照: 日本質量分析学会マスマススペクトロメトリー用語集)

24

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

24

トリプル四重極 Multiple Reaction Monitoring (MRM)



Q1: 主にPrecursor Ionをスキャン/選択します。
 q2: Q1で選択されたPrecursor IonイオンをFragmentationします。
 Q3: Q2で生成されたProduct Ionをスキャン/選択します。

25

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

25

トリプル四重極 -MRMモードの特長-



MRM: Q1およびQ3がペアとなる固有のセットで測定される

- 複数のPrecursor Ion(Q1)とProduct Ion(Q3)のペアを設定できる

	Group ID	Compound ID	Q1 mass (Da)	Q3 mass (Da)	Dwell time (ms)
1	Methamidophos	Methamidophos 1	142.000	124.900	100.000
2	Methamidophos	Methamidophos 2	142.000	94.000	100.000
3	DEET	DEET 1	192.100	119.100	100.000
4	DEET	DEET 2	192.100	91.000	100.000
5	DEET	Cymoxanil 1	199.100	128.100	100.000

- バックグラウンドが低く、高S/Nが得られるためMS/MSモードの中で最も検出限界値(LOD)が低い
- 高感度微量定量に向いており、マスクロマトグラムの面積を基に、スタンダードから得た検量線と比較し定量が可能
- 検量線の範囲が広い
- 選択性が高いため、一斉分析に有効
- 1成分あたりの測定時間(dwell time)で連続測定

26

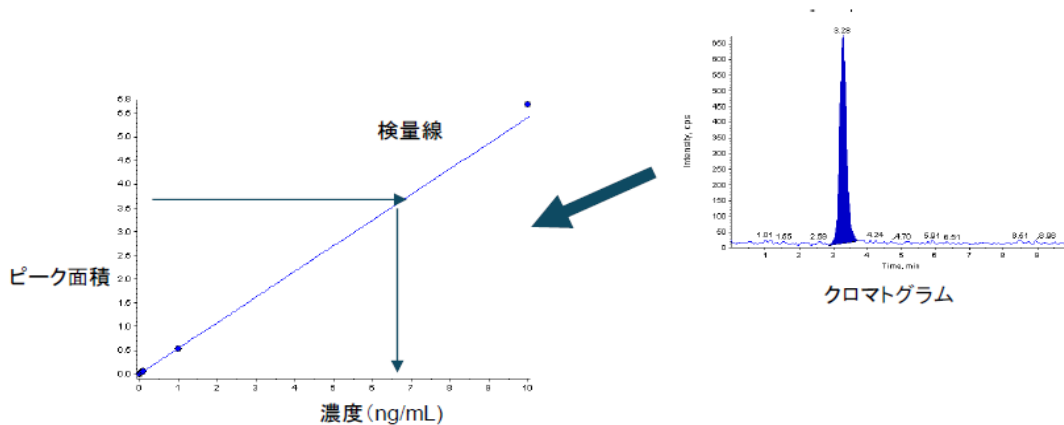
© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

26

定量分析とは？（絶対定量）



- 標準物質で検量線を作成
- 検量線とピーク面積から、サンプルの濃度を計算で求める



質量による分離のため、UVや蛍光検出器など他の検出器と比較すると特異性が高い

→ 高いS/Nにより、検出感度が良い

27

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

27

UV vs MS vs MS/MS



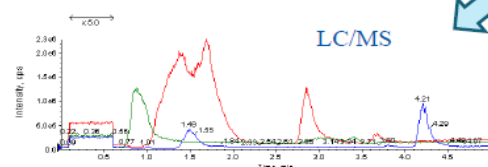
トリプル四重極のSRMモードのダブルフィルタリング効果は、定量分析に最適



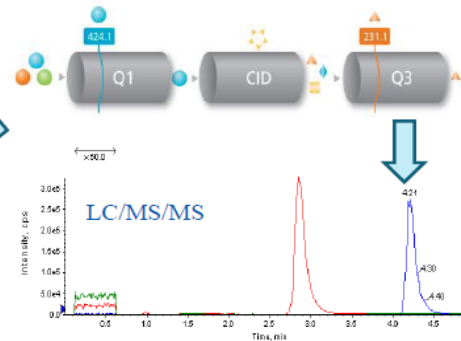
HPLC

- 分析種に適切な波長付近でも、吸収を示す夾雑成分は非常に多い
- 夾雑成分との分離が必要
- 分離時間を長くしても排除できない場合も

夾雑ピークが多く、バックグラウンドも高い



夾雑ピークが少なく、バックグラウンドは低い



さらに、夾雑ピークが少なく(高選択性)
バックグラウンドが低い(高S/N)

28

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

28

目次



- LC-MSの概要

- 測定メソッドと自動最適化 (メソッド作成)

- ルーチン分析の方は参考資料になります。

- その他のTips



ルーチン分析コースの方は
このマークのあるページ以外は参考資料になります。

MS用語について:

Updateされることがありますので、正式な定義などにつきましては以下を参照ください。

http://www.mssi.jp/publications/pdf/MS_Terms_2009.pdf

29

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

29

四重極質量分析計のスキャンタイプ



- MSモード {
- Q1 Scan
 - Q1 Multiple Ions (SIM)
 - Q3 Scan
 - Q3 Multiple Ions

- MS/MSモード {
- MRM
 - Product Ion Scan
 - Precursor Ion Scan
 - Neutral Loss Scan

30

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

30

メソッド作成のワークフロー



1.MRM(SRM)条件の検討

- 新しく作成する場合でも、自動最適化機能で簡単に作成できます



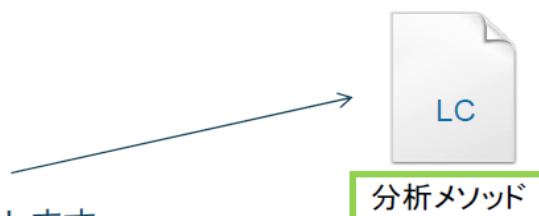
2.イオンソースパラメーターの検討

- 推奨値で測定し、さらに感度が必要な場合のみ実施します。



3.LC条件の検討

- カラム、移動相等を検討します。



31

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

31

測定メソッドと自動最適化 (メソッド作成)



SCIEX OS ®ソフトウェアによる分析条件の自動最適化

1. MS内部パラメータの最適化 (インフュージョン: シリンジを使用)

- シリンジに標準液をセットしたら、SCIEX OS ®が自動最適化
- Q1、Q3、DP(コーン電圧)、EP、CE、CXP

2. イオンソース最適化 (FIA: LCを使用した最適化)

- Source temperature (温度)、Spray voltage (イオンスプレー電圧) ...etc.

※推奨値で測定し、感度をさらに求める場合に実施します。

32

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

32

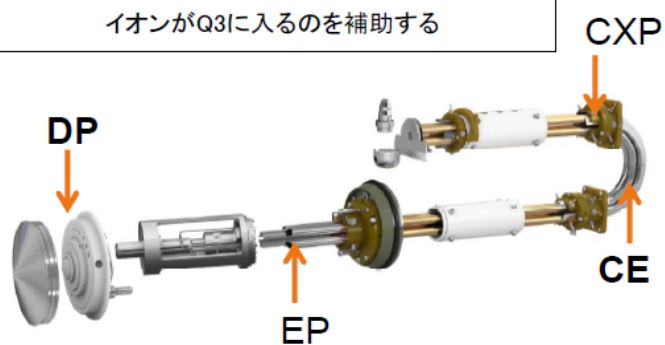
測定メソッドと自動最適化 (メソッド作成)



最適化が必要(可能)なパラメータ

Compound Parameters:

Voltage	Function
Declustering Potential (DP)	オリフィスプレートにかかる電圧、イオンの引き込み
Entrance Potential (EP)	イオンの収束
Collision Energy (CE)	イオンのフラグメンテーション
Collision Cell Exit Potential (CXP)	イオンがQ3に入るのを補助する

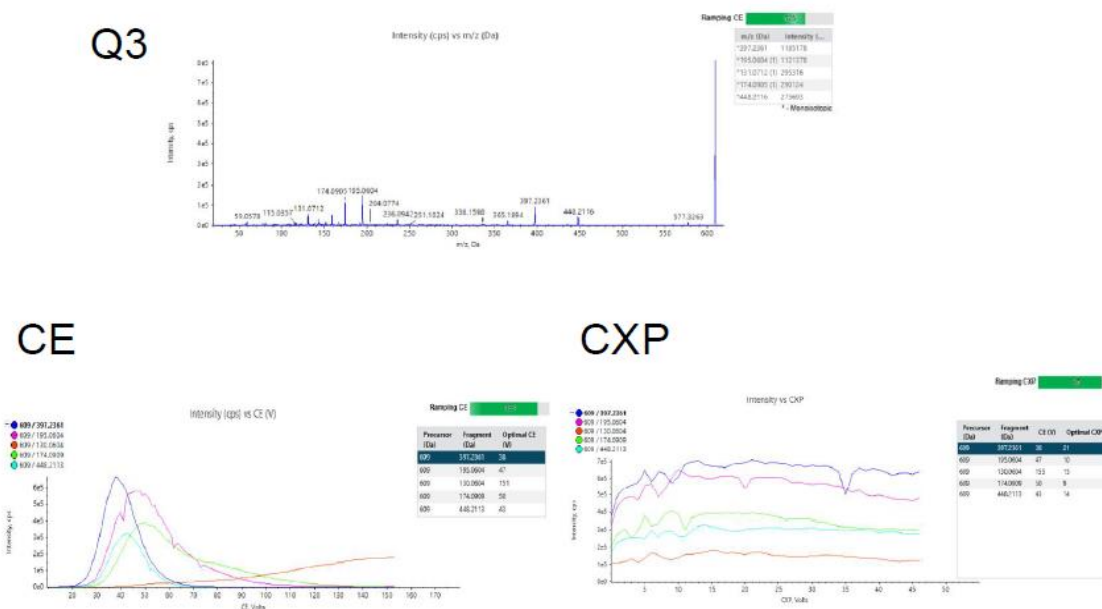


33

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

33

測定メソッドと自動最適化 (メソッド作成)



34

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

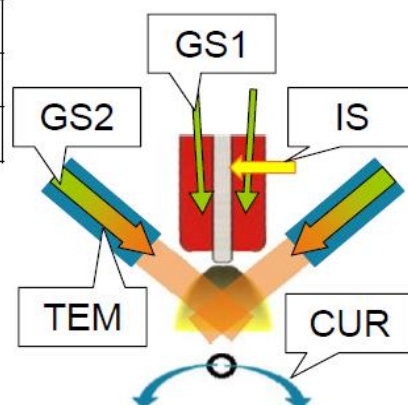
34

測定メソッドと自動最適化 (メソッド作成)



TURBO V™ source (ESI)

略称	Parameter	単位	適合機種
TEM	温度 (Source temperature)	℃	脱溶媒を促進させるため、GS2にかけられる温度
IS	イオンスプレー電圧 (Spray voltage)	V	ESI キャピラリーに印可する電圧
CUR	カーテンガス (Curtain gas)	psi	汚染防止
GS1	ネブライザーガス (Ion source gas1)	psi	ネブライザーガス
GS2	ターボガス (Ion source gas2)	psi	脱溶媒を促進させるために吹き付ける加熱したガス

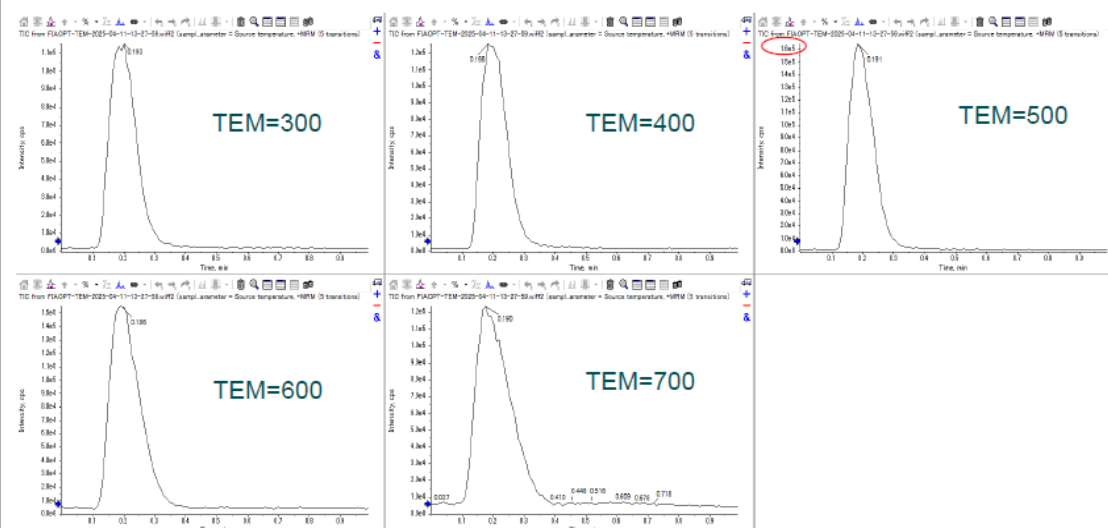


35

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

35

測定メソッドと自動最適化 (メソッド作成)



36

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

36

目次



- LC-MSの概要

- 測定メソッドと自動最適化 (メソッド作成)

- ルーチン分析の方は参考資料になります。

- その他のTips



ルーチン分析コースの方は
このマークのあるページ以外は参考資料になります。

MS用語について:

Updateされることがありますので、正式な定義などにつきましては以下を参照ください。

http://www.mssi.jp/publications/pdf/MS_Terms_2009.pdf

37

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

37

HPLC 溶媒について



共通

- 不揮発性のバッファー(リン酸等)は、使用できません。
- ガラス瓶は洗剤を使用せず、水道水→超純水ですすいで使用します。

ESI

- バッファー濃度の上限は20mM程度です。
 - <推奨バッファー>
 - Positive ion mode: ギ酸、酢酸 (2-10mM)
 - Negative ion mode : ギ酸アンモニウム、酢酸アンモニウム (2-10mM)
 - <推奨溶媒>
 - 水、メタノール、アセトニトリルを推奨します。

APCI

- イオン化にバッファーや添加剤等の影響がありません。
- バッファー濃度の上限は、50mMです。

38

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

38

その他のTips



- メソッド作成時(自動最適化)の推奨の調製溶媒
 - 50%メタノール水溶液
 - 50%アセトニトリル水溶液

※付加体での検出が必用な場合は、ギ酸(0.1%程度)や酢酸アンモニウム(5mM程度)を添加します。
- LC/MS測定では、内径2mm前後のカラムを一般的に使用します。
- 移動相中の有機溶媒濃度
 - 有機溶媒濃度が上がるほどスプレー状態は安定します。
 - 有機溶媒100%で使用することはお勧めできません。
 - 水は1-5%程度含有以上が望ましいです。

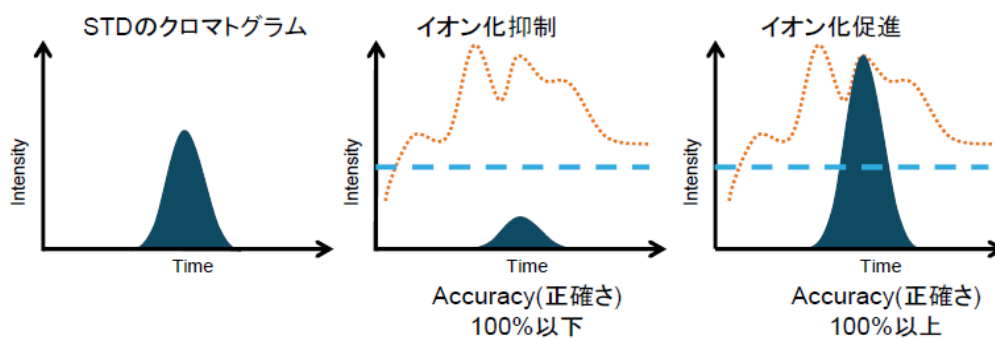
理由: 水の含有により、水自体が若干乖離してプロトン付加/脱離するため、イオン化が促進されます。有機溶媒100%ではイオン化効率が下がります。

39

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

39

参考) ESI法におけるマトリックス効果



- 共溶出してくるマトリックスの影響によりイオン化効率が変化
- ⇒ 正確さの低下
- 原因となる成分は様々(無機・有機、水溶性・脂溶性、低・高分子、揮発性)
- ⇒ 事前の予測は難しい

40

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

40

参考) マトリックス効果の回避・低減



対応策①: マトリックスの量を減らす

- (1) 注入量の削減
- (2) サンプルの希釈

対応策②: 内部標準物質(IS)を使用する

重水素体や ^{13}C

対応策③: 分離を変える

- (1) 分離カラムの変更
- (2) 移動相、グラジエント条件の変更

対応策④: 前処理の変更

41

© 2023 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

略語一覧

ESI: Electrospray Ionization

(大気圧下で行われるイオン化の一つで、エレクトロスプレー技術を使ったイオン化法)

APCI: Atmospheric Pressure Chemical Ionization

(大気圧下で行われるイオン化の一つで、通常は大気圧スプレーによって生成した気体試料を、コロナ放電で生成させたイオン種(反応イオン)と反応させてイオン化すること)

LC: Liquid Chromatography(液体クロマトグラフィ)

IC: Ion Chromatography(イオンクロマトグラフィ)

FIA: Flow Injection Analysis

(注入したサンプルを LC カラムを使わずに分析する方法)

m/z : Mass-to-charge ratio

(質量電荷比。 イオンの質量(m)を電荷数(z)で割った値)

MRM: Multiple Reaction Monitoring

(Q1 で選択された特定の前駆イオン (Precursor ion) から生じる特定のイオンの質量を連続的に検出する方法)

Q1MS: Q1 MS Scan

(マスペクトルを測定するために、Q1 で走査したイオンを検出する方法)

Q3MS: Q3 MS Scan

(マスペクトルを測定するために、Q3 で走査したイオンを検出する方法)

EMS: Enhanced MS Scan

(Liner Ion Trap を利用して、走査したイオンを検出する方法)

MS2: Product Ion Scan

(特定の前駆イオン (Precursor ion) から生じるイオン (Product ion) を検出する方法)

EPI: Enhanced Product Ion Scan

(Liner Ion Trap を利用して Product Ion を検出する方法)

Prec: Precursor Ion Scan

(特定のプロダクトイオンを生じる総ての前駆イオンを検出する方法)

NL: Neutral Loss Scan

(特定の中性化学種を脱離する総ての前駆イオンを検出する方法)

IDA : Information Dependent Acquisition

(サーベイスキャンで取得した MS スペクトルから強度の強いイオンを選択し、リアルタイムで MS2 あるいは EPI のデータを取得する方法)

DP : Declustering Potential

(イオンを MS 内部へ引き込むための電圧であり、オリフィスプレートに電圧がかかる)

CE : Collision Energy

(MS/MS などの CAD 実験において、Q2 でイオンを加速させるための電圧であり、Q0 と Q2 の電位差で表示される)

LLOQ : Low Limited of Quantification(定量下限値)

LOD : Low Limited of Detection(検出下限値)

%CV : Coefficient of Variance (in percent)

RT : Retention Time(保持時間)

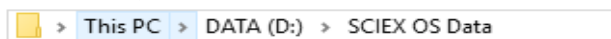
S/N : Signal to Noise

IS : Internal Standard(内部標準物質)

2 ソフトウェアの概要

SCIEX OS®ソフトウェアのファイル構造

- ワークステーションの C ドライブに OS、x ドライブ(x: 納入先仕様により D、E、F 等異なります)に SCIEX OS®ソフトウェアにて取得したデータ等が保存されています。



- また全てのデータ、分析メソッド等は項目(日付、分析者、成分名等)ごとに分類することができ、これを Project と呼びます。

この Project にはそれぞれの【Project 名】をつけることができます。

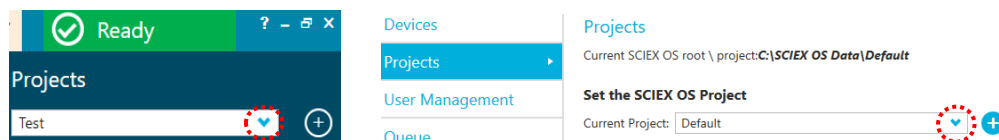
- データ等は該当【Project 名】フォルダ内の Data フォルダ内に保存されます。

(x:// SCIEX OS Data/ 【Project 名】 /Data)

- SCIEX OS®ソフトウェアによって作成されるファイルの種類は様々ありますが、ファイルの種類により特定の拡張子が自動的に付けられます。高い頻度で用いられるのは、.msm(MS メソッド)、.lcm(LC メソッド)、.bch(バッチ)、.wiff(データ)、.qmethod(解析メソッド)及び.qsession(定量結果)です。

Project

- SCIEX OS®ソフトウェアでは、データや測定法、定量結果などを、Project ごとに管理しています。Project は、SCIEX OS®ソフトウェア上部の Status Panel をクリックあるいはホーム画面の Configuration から Project を選択することで表示され、プルダウンメニューにより選択できます。



- データや測定法、定量結果などは、そのファイルが保存されている Project を選択している時にのみ開くことができます。ただし、すでに開いているデータなどは、Project を変更しても表示されたままです。
- 新たに測定を開始する時や、測定者が変わる時などは違う Project を作成し、使用します。
- 例えば、ある測定者が Project を作成し、その Project の中に自分のファイルを保存していると、該当する Project を選択するだけで自分のファイルだけを見ることができるようになります。(x:// SCIEX OS Data/ 【Project 名】)

バックアップについて

- バックアップを取る際は、SCIEX OS®ソフトウェアがインストールされているドライブ x:// SCIEX OS Data のフォルダごとバックアップすることをお勧め致します。

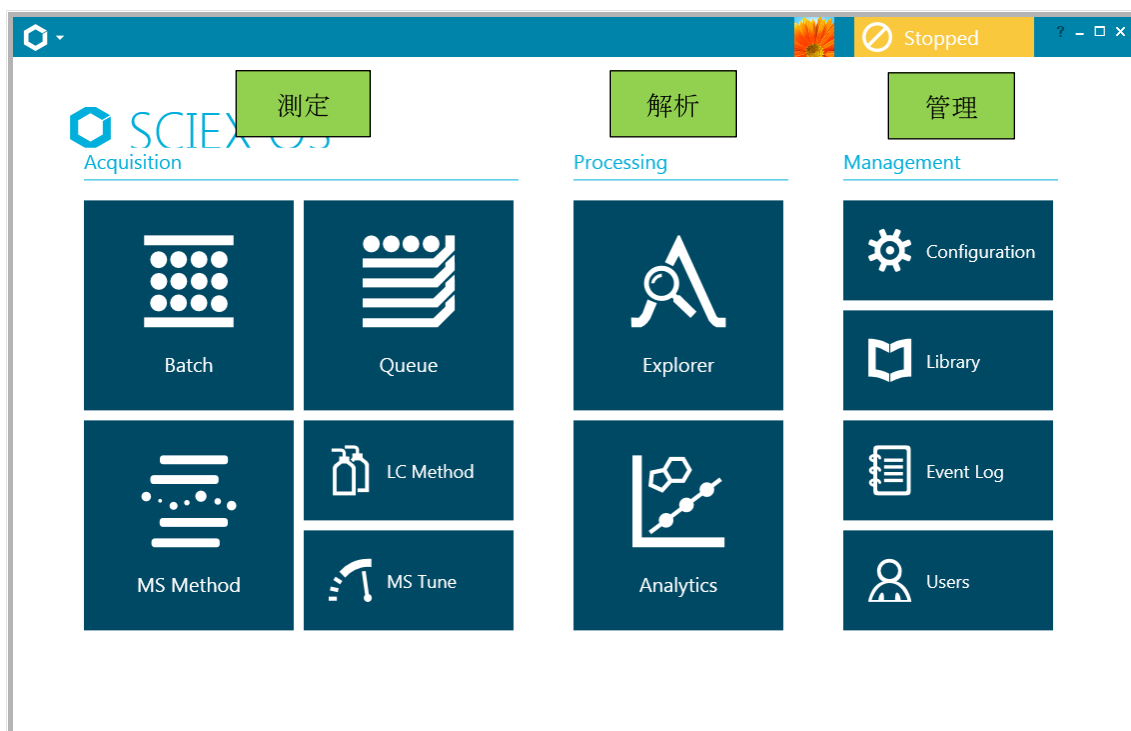
3 SCIEX OS®ソフトウェアの起動と各モードについて

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：クロマトグラムやスペクトルの確認、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  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。



3.1 プロジェクトの作成または選択

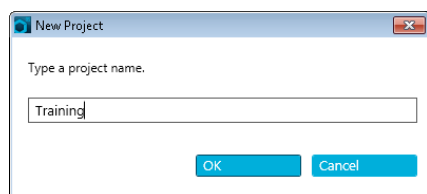
- ① 画面上部右上の Status Panel(例: )をクリックします。

クリックを繰り返すことで表示／非表示が可能です。

- ② Projects の  をクリックし、新規プロジェクトを作成します。

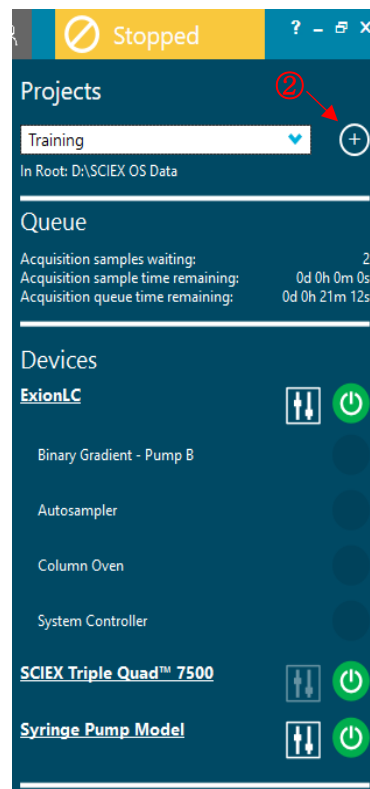
既存のプロジェクトを選ずる場合はプルダウンから選択します。

Training では Project 名は Training とします。



- 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

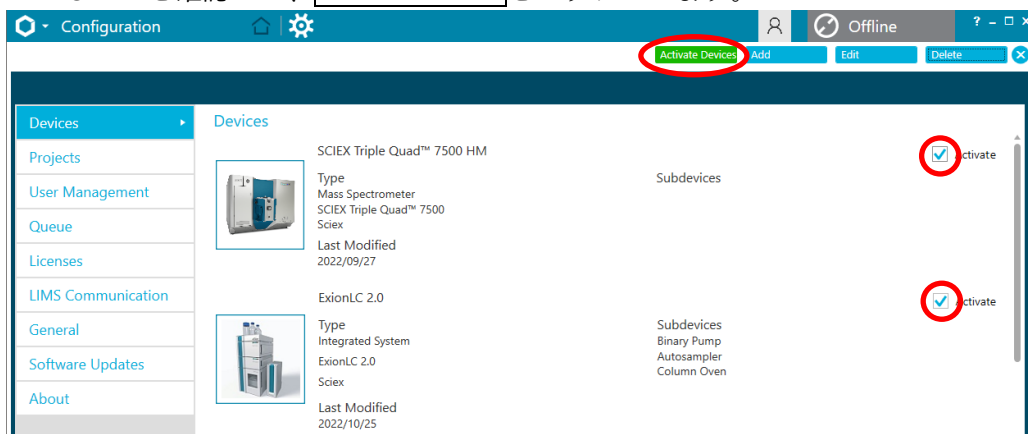


制御する機器を設定する

SCIEX OS[®]ソフトウェアで制御する機器を設定します。

3.2 装置の Configuration

- ① Home 画面から Configuration をクリックし画面を開きます。
- ② Devices をクリックし、MS と LC(ここでは Exion LC)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 アイコンの色で各装置の状態を確認できます。

青：Running → 測定中

緑：Standby → 正常

赤：Error → 接続状態を確認してください

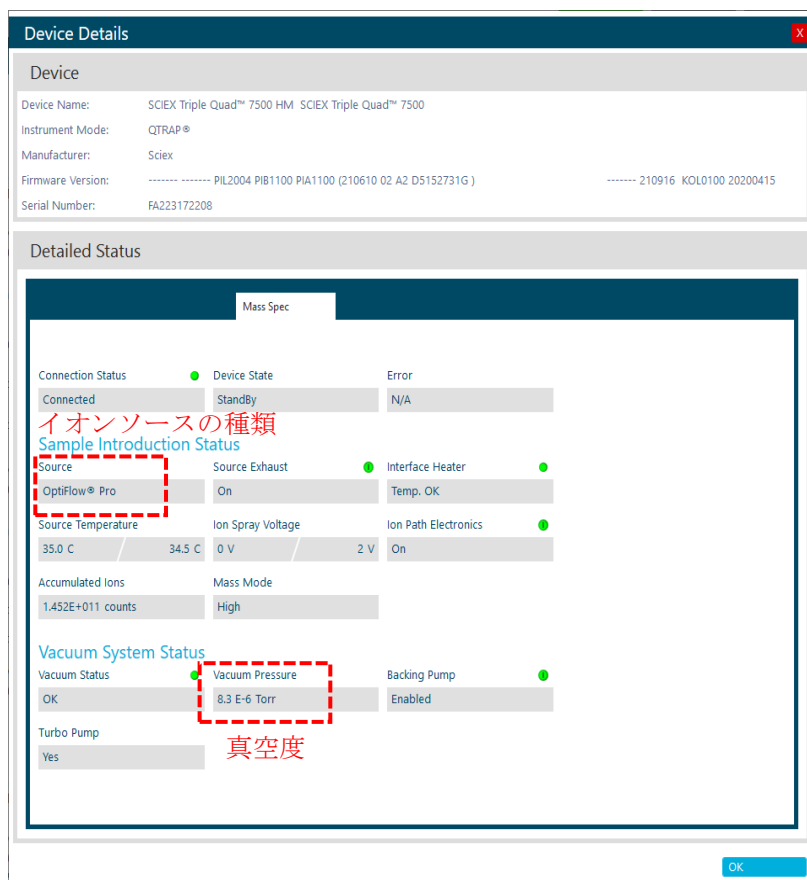
※ 接続されている全ての装置を Standby にするには下部の Direct Control パネルの Standby アイコンをクリックします。

※ Devices の装置名(破線)あるいはアイコン(実線)をクリックすることでその装置の詳細な状態を表示することができます。

(LC であれば流速や温度、MS であれば真空度やイオンソースの種類など)

※  アイコン(点線)をクリックすることでその装置に接続されている Device の制御をすることができます。

④ 画面上部の  をクリックして画面を閉じます。



Device Details

Device

Device Name: SCIEX Triple Quad™ 7500 HM SCIEX Triple Quad™ 7500

Instrument Mode: QTRAP®

Manufacturer: Sciex

Firmware Version: ----- PIL2004 PIB1100 PIA1100 (210610 02 A2 D5152731G) ----- 210916 KOL0100 20200415

Serial Number: FA223172208

Detailed Status

Mass Spec

Connection Status	Device State	Error
Connected	Standby	N/A

イオンソースの種類
Sample Introduction Status

Source	Source Exhaust	Interface Heater
OptiFlow® Pro	On	Temp. OK

Source Temperature

35.0 C	34.5 C
0 V	2 V

Ion Spray Voltage

Ion Path Electronics

On
On

Accumulated Ions

1.452E+011 counts
High

Mass Mode

Vacuum System Status

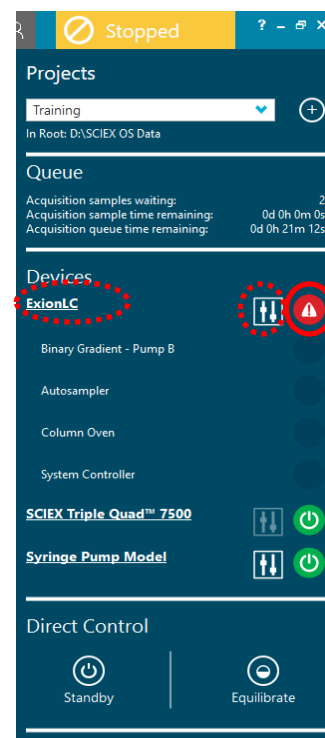
Vacuum Status	Vacuum Pressure	Backing Pump
OK	8.3 E-6 Torr	Enabled

Turbo Pump

Yes
Yes

真空度

OK



Stopped

Projects

Training

In Root: D:\SCIEX OS Data

Queue

Acquisition samples waiting: 2

Acquisition sample time remaining: 0d 0h 0m 0s

Acquisition queue time remaining: 0d 0h 21m 12s

Devices

ExionLC

Binary Gradient - Pump B

Autosampler

Column Oven

System Controller

SCIEX Triple Quad™ 7500

Syringe Pump Model

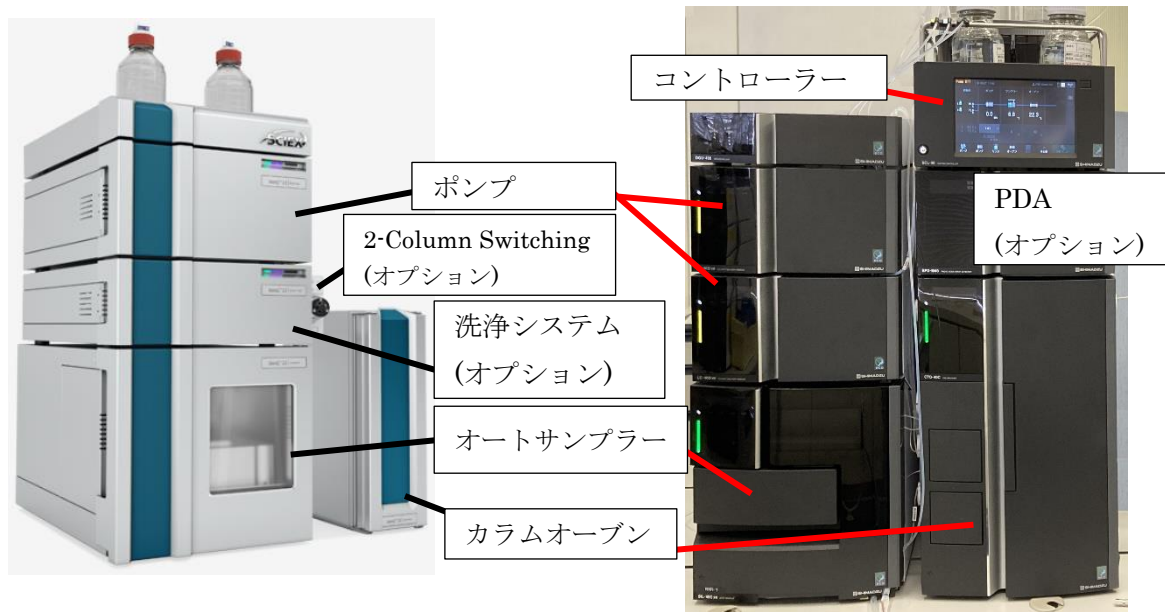
Direct Control

Standby

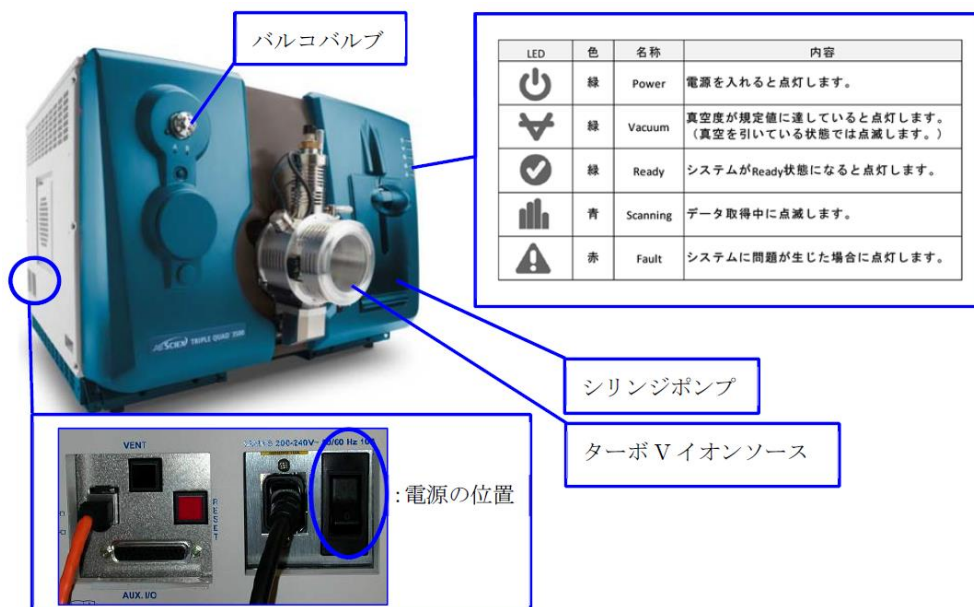
Equilibrate

4 装置の構成

4.1 HPLC の構成



4.2 MS System の構成

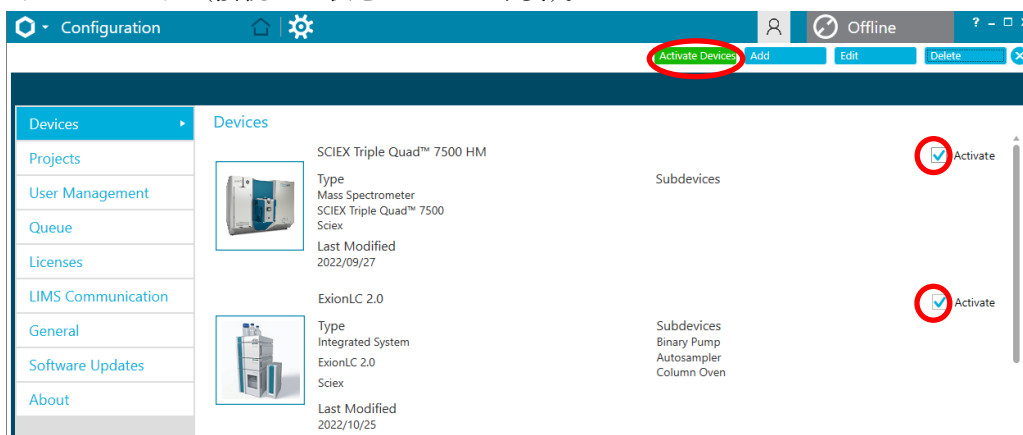


※質量分析装置は、停電時等を除き、常に電源を入れた状態にしておきます。

5 測定前の準備

5.1 PC の準備

- ① PC の電源を入れ、Windows にログインし、SCIEXOS を起動します。
- ② LC と MS 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（接続した状態であれば不要）。



5.2 HPLC の準備（島津製、ExionAE の場合）

- ① HPLC の電源を入れます。
- ② HPLC に移動相および洗浄溶媒をセットします。
 - ※ 移動相：A 液は水系、B 液には有機溶媒系の移動相を接続します。
 - ※ 不揮発の塩や酸は、移動相として推奨いたしません。
 - ※ 洗浄溶媒の液量を確認してください。最大 1 サンプルあたり約 5mL を消費します。

- ③ Pump の Purge Valve を開きます。
- ④ Pump の Purge を長押しします。
- ⑤ Enter キーを押し、ページを開始します。
- ⑥ 自動で止まるのを待ちます。
- ⑦ 終了後、Purge Valve を閉じます。



- ※ ポンプは複数台ある場合は、2 台ともパージを行います。
- ⑧ オートサンプラーの Purge ボタンを長押しします。
 - ⑨ 自動で止まるのを待ちます。
 - ⑩ 流路内を完全に新しい洗浄液に置換するには 25 分間動作させてください。
 - ※ 動作途中にパージを停止したい場合は、Purge ボタンを押してください。ポンプ内の洗浄液を全て吐き出した時点で動作が停止します。

5.3 HPLC の準備 (Exion2.0 の場合)

- ① HPLC に移動相および洗浄溶媒をセットします。

※ 移動相：A 液は水系、B 液には有機溶媒系の移動相を接続します。

※ 不揮発の酸や塩は、移動相として推奨しません。

※ 洗浄溶媒の液量を確認してください。最大 1 サンプルあたり約 5 mL を消費します。

- ② Exion2.0 の場合は、ポンプの蓋を外し、パージバルブを開きます。

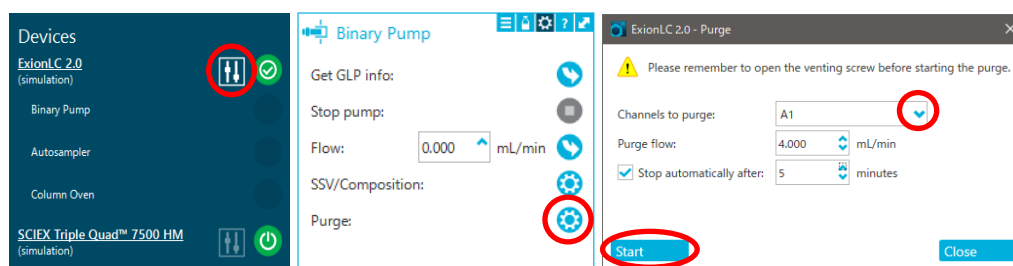
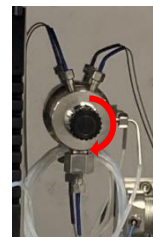
- ③ SCIEX OS で Direct device control()をクリックし、デバイス制御ダイアログを開きます。

- ④ Pump の Purge 横にある  をクリックします。

- ⑤ パージするチャンネルを選択し、4 mL/min の流量でポンプを始動します。

※ パージバルブを開放していない場合、メッセージが表示されます。

※ パージを自動的に停止させたい場合は、Stop automatically after のチェックボックスにチェックをし、5 分程度入力してください。



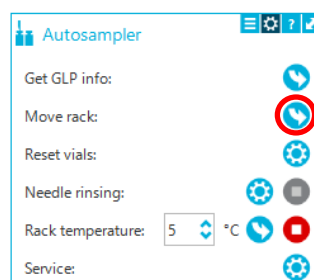
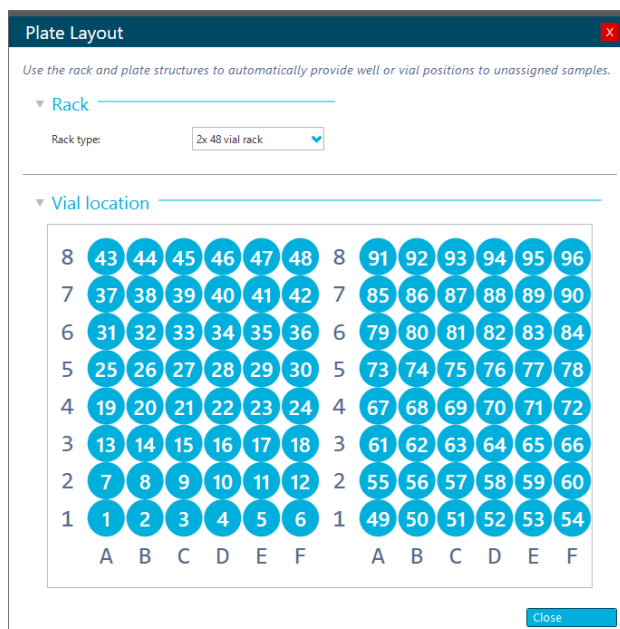
終了後、別のラインをパージする場合は、Channels to purge を目的のチャンネルに選択しパージを実施します。

- ⑥ すべてのパージが完了したら、パージバルブを閉めます。

- ⑦ Move rack をクリックし、ラックを手前に移動させ、サンプルラックにサンプルをセットします。

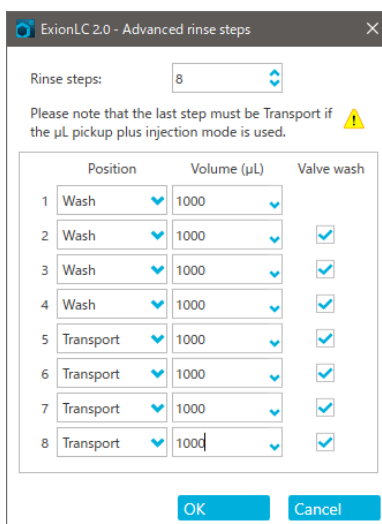
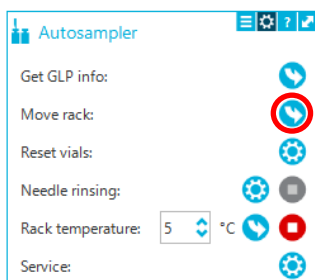
※ 分析中に移動させることはできません。

※ セットする位置にご注意ください。



- ⑧ トランスポート液や洗浄液を交換、または、1週間以上使用していなかった場合は、Needle rinsing を実施します。

※ トランスポート液や洗浄液を交換した場合は、交換したもののみ実施してください。



5.4 カラムの接続

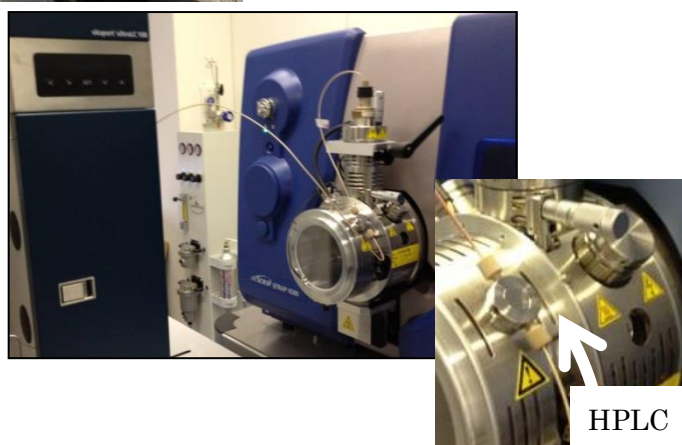
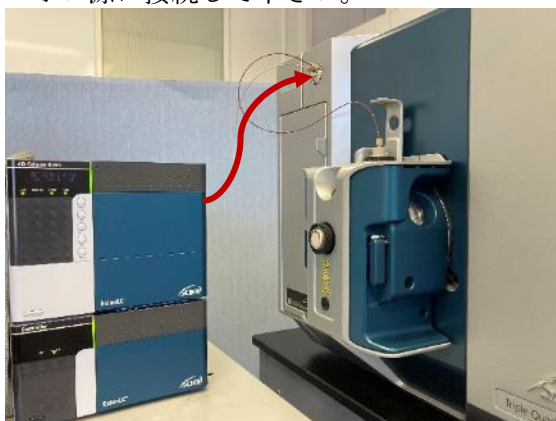
カラムを接続します。

- ※ カラムには向きがあります。カラムに記載されている矢印をご確認ください。矢印の方向に移動相が流れるように繋ぎます。
- ※ カラムの入口側は高圧がかかるため、締めが甘いとリークの原因となります。必ず、しっかり締めてください。
- ※ カラムの出口側の締めが甘いとピーク形状が悪くなります。必ず、しっかり締めてください。
- ※ 手締めできないフィッティングの場合は工具でしっかりと締めます。

5.5 HPLC と MS の接続

① HPLC と MS を接続します。

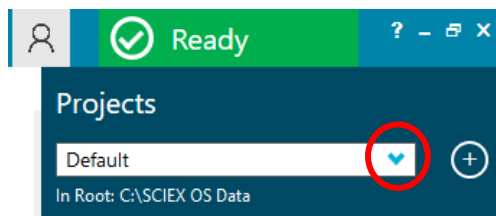
- ※ カラムオープンあるいは検出器から出ているピークチューブを、バルブもしくはイオン源に接続して下さい。



6 測定

6.1 project の選択

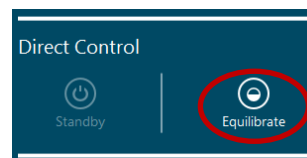
- ① プルダウンから目的の Project を選択します。



6.2 機器の平衡化

機器の設定が完了しそのまま測定を始める場合や、機器を測定の初期条件に設定する場合は平衡化を行います。

- ① Status Panel をクリックし、下部の Direct Control の Equilibrate アイコンをクリックします。

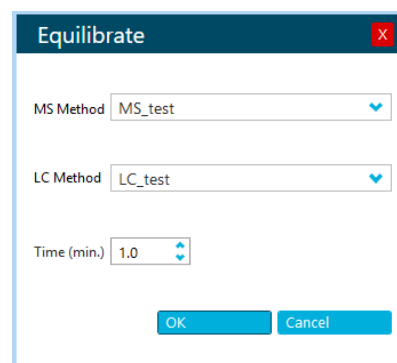


- ② 平衡化に使用する MS Method および LC Method をプルダウンより選択します。

- ③ 平衡化する時間を入力し、OK をクリックします。

※ Training では 1 分とします。

※ 実際の測定では 15 分以上を推奨します。



- ④ LC の移動相が流れ、ガスやターボガスの加熱が始まります。入力した平衡化時間が経過後に画面右上の Status Panel が  Ready に変わります。

6.3 Batch の作成

以下の方法で測定するサンプルの情報(サンプル名、バイアル番号等)を入力します。
Submit することで Queue に登録します(この操作で測定待ちの状態になります)。

- ① Home 画面の Batch  アイコンをクリックします。
- ② Batch 入力画面で測定に使用する情報を入力します(Training では下記の通り入力および選択)。
 - ※ 既存の Batch がある場合は Open から開き、編集し使用することもできます。
 - ※ Rack type および Rack Position、Plate Type、Plate Position は、装置構成に従って選択してください。
 - ※ Plate Layout から確認または選択が可能です。
 - ※ Injection Volume は LC メソッドの値が自動で反映されますが、直接入力でも変更することもできます。
 - ※ 既存の解析メソッドがあれば、Processing Method に入力し、結果ファイル名を Results File に入力しておくことで、測定終了後に自動で解析まで完了させることも可能です。
 - ※ 右クリックで Insert sample または Delete sample を選択して追加または削除が可能です。
 - ※ Excel と同様に、コピー&ペーストやドラッグによる連続入力などの編集が可能です。また、行で右クリックをすると行の挿入や削除をすることができます。
 - ※ Fill Down および Auto Increment を選択すると選択行以降の入力できます。

	Sample Name	MS Method	LC Method	Rack Type	Rack Position	Plate Type
1	Reserpine	Reserpine_MRM	Reserpine_MRM	Vial Rack		1.5mL Cooled (70 vial)

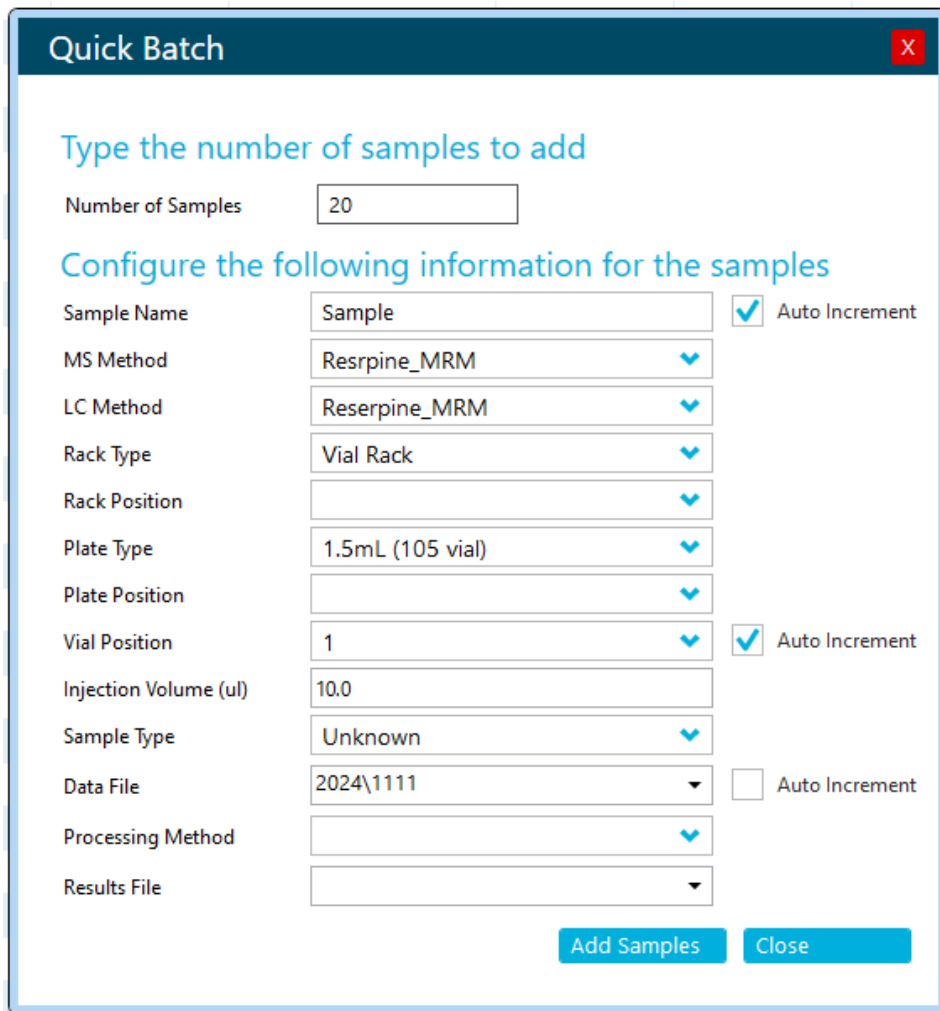
Plate Position	Vial Position	Injection Volume (μl)	Data File	Processing Method	Results File
	1	5.0	Reserpine_Training		

- ③ 測定結果は Data File 名ごとに保存されます。Data File 名が同一の場合、複数のデータが一つのファイルに保存されます。Sample 名が同一でも、上書きされることはありません。
- ※ 保存場所は下記の通りです。

D:¥SCIEX OS Data¥【Project 名】¥Data¥【Data File 名】

【ヒント】

右上の Quick Batch  をクリックし、まとめて同じ内容を入力することが可能です。
Auto Increment のチェックボックスにレ印をすると自動で番号が振られます。



Quick Batch

Type the number of samples to add

Number of Samples

Configure the following information for the samples

Sample Name	Sample	☒ Auto Increment
MS Method	Resrpine_MRM	
LC Method	Reserpine_MRM	
Rack Type	Vial Rack	
Rack Position		
Plate Type	1.5mL (105 vial)	
Plate Position		
Vial Position	1	☒ Auto Increment
Injection Volume (ul)	10.0	
Sample Type	Unknown	
Data File	2024\1111	☐ Auto Increment
Processing Method		
Results File		

Add Samples Close

- ④ 上部の Save ボタンの下矢印から Save as で名前をつけて Batch を保存します (Training では【日付】で保存)。

6.4 測定の開始

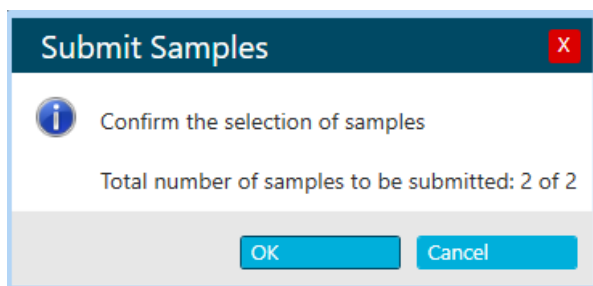
このまま測定を開始する場合は下記のように進めていきます。

- ① 測定を開始する場合は、以下のいずれかの方法で **Submit** をクリックすると測定が開始します。

【注意】

平衡化が完了していた場合、**Submit** をクリックすると注入動作が開始します。

- 1) すべてのサンプルを測定する場合は、右上の **Submit** ボタンをクリックします。確認メッセージが表示され、確認後 **OK** をクリックします。
- 2) 一部のサンプルを測定する場合は、行を選択してから **Submit** をクリックします。確認メッセージが表示され、確認後 **OK** をクリックします。



- ② Home 画面の **Queue** アイコンをクリックします。



- ③ **Submit** した **Batch** が表示され、ダブルクリックすると **Submit** されたサンプルの詳細が表示されます。

Acquisition Status	Sample Name	Est. Start Time	MS Method	LC Method	Injection Volume (μl)	Data File
🕒	201227 - 2 samples					
201227 - 2 samples	Reserpine	2020/12/25 14:35:09	Reserpine_MRM	Reserpine_MRM	5	Reserpine_Training
	Reserpine	2020/12/25 14:41:14	Reserpine_MRM	Reserpine_MRM	5	Reserpine_Training

※ 測定中の **Data** を **Explore** で確認することができます。確認方法は、P.6-1 以降の“データの確認”をご参照ください。

- ④ 測定を途中で停止する場合は、上部の **Stop** ボタンをクリックし、開始する際に **Start** ボタンをクリックします。

※ すぐに測定を停止する場合は、**Stop now** を選択します。

※ 現在測定中のサンプルが終了した後に停止させる場合は、

Stop after the current tasks are completed を選択します。

- ⑤ Queue の最後のサンプルを測定後、設定時間が経過すると、LC は自動で止まり、MS は Standby の状態に戻ります。

※ 上記の設定時間は Configuration の Queue にある Instrument idle time の時間で適宜変更可能です。

Configuration

Queue Settings

Instrument idle time 60 min

Maximum number of acquired samples allowed 300

☒ If a sample is missing, then proceed to the next sample

☐ If calibration fails, then proceed to the next sample

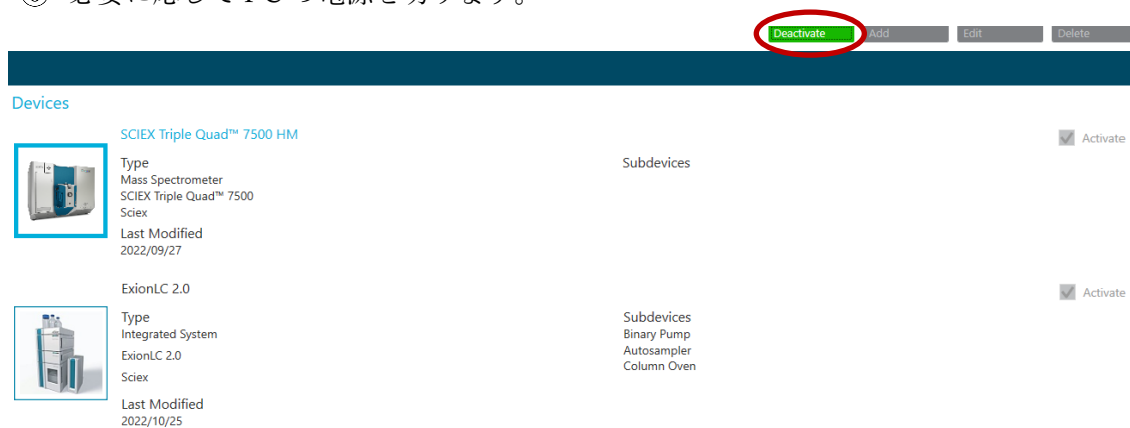
☒ Save the calibration data to the current project folder instead of the SCIEX OS/TempData folder

Auto-Calibration with CDS

☐ Purge CDS at the next batch submission or when the Queue is restarted

7 停止操作

- ① Home 画面から Configuration  アイコンをクリックします。
- ② Devices を選択し上部の Deactivate をクリックします。
- ③ 必要に応じて MS のみ再度 Activate Device します。
- ④ ソフトウェアを閉じます。
- ⑤ HPLC の電源を切ります。
- ⑥ 必要に応じて PC の電源を切ります。



The screenshot shows the Configuration interface. At the top, there is a dark blue header bar with a navigation menu. The 'Deactivate' button is highlighted with a red circle. Below the header, the 'Devices' section is visible, listing two devices: 'SCIEX Triple Quad™ 7500 HM' and 'ExionLC 2.0'. Each device entry includes an icon, a description, and an 'Activate' button. The 'Deactivate' button is located in the top right corner of the interface.

Device Name	Type	Subdevices	Activate
SCIEX Triple Quad™ 7500 HM	Mass Spectrometer SCIEX Triple Quad™ 7500 Sciex Last Modified: 2022/09/27		☒ Activate
ExionLC 2.0	Integrated System ExionLC 2.0 Sciex Last Modified: 2022/10/25	Binary Pump Autosampler Column Oven	☒ Activate

8 メソッド

8.1 MS メソッド

① Home 画面の MS Method  アイコンをクリックします。

② 上部にある New の下矢印(右図参照)をクリックします。

③ 作成したいメソッドの種類を選択します。

※ 今回は MRM を選択します。

④ Method Duration に測定時間を設定します。通常、LC の測定時間に合わせます。

⑤ Source and Gas Parameters に極性とパラメータを入力します。

※ 参考値がない場合は、以下の数字を参考に入力します。

項目	4500 シリーズ、5500 シリーズ、6500 シリーズ	7500 シリーズ
Gas1	50	50
CUR	30	40
TEM	300	400
Gas2	80	60
CAD	9	9
IS	5500(4500)	5500(4500)

※ カッコ()内は Negative モード時の設定値を表します。

※ 設定温度(TEM)は最大 700°Cまでに行ってください。

750°Cでも使用できますが、ヒーターの寿命が短くなりますので推奨しません。

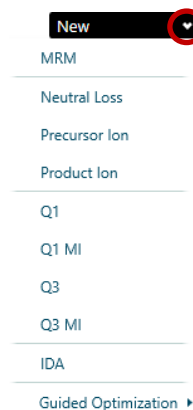
Method duration  min Total scan time: 0.105 s Estimated cycles: 571
測定時間

▼ Source and Gas Parameters

Ion source gas 1 psi Curtian gas psi Source temperature °C
Ion source gas 2 psi CAD gas

▼ Experiment MRM

Polarity Spray voltage V



⑥ Cycle Time を確認し、必要に応じて Dwell Time を調整します。

※ Dwell Time は、クロマトグラムにおけるピークの溶出幅とデータポイント数から換算して設定します。定量分析では、10 ポイント以上測定できるように設定できるように設定します。

Method duration: 1 min Total scan time: 0.105 s Estimated cycles: 571

▼ Source and Gas Parameters

Ion source gas 1: 35 psi Curtain gas: 40 psi Source temperature: 0 °C
 Ion source gas 2: 70 psi CAD gas: 9

▼ Experiment: MRM

Polarity: Positive Spray voltage: 5500 V

Advanced Experiment Settings

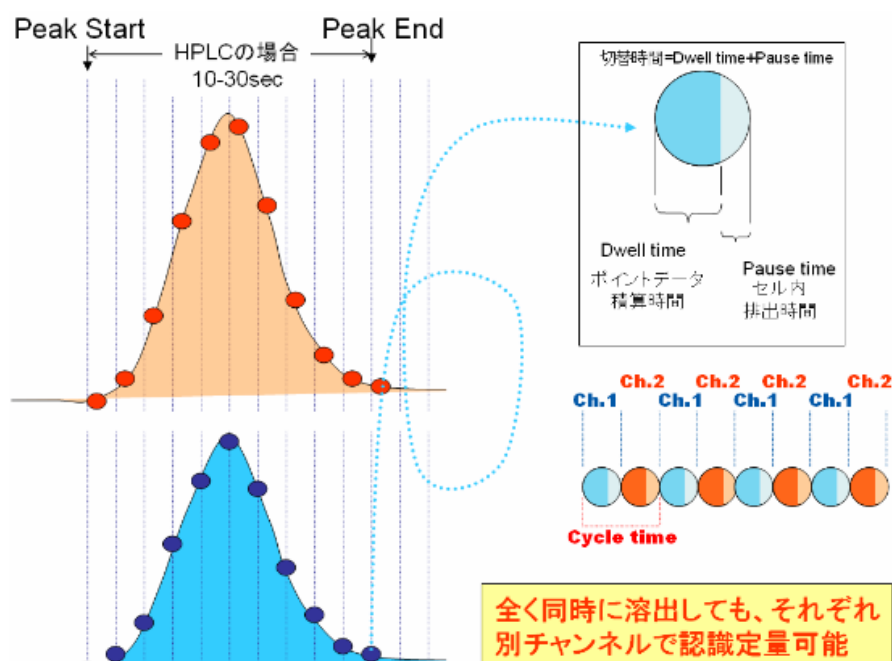
Settling time: 0 ms Pause time: 5 ms
 Q1 resolution: Unit Q3 resolution: Unit

Mass Table: Import ☐ Apply scan schedule ☐ Q0 dissociation Simple

Group ID	Compound ID	Q1 m/z	Q3 m/z	Dwell time (ms)	EP (V)	CE (V)	CXP (V)	
1	Group 1	Compound...	200.000	100.000	100.000	10.0	30.0	15.0

【Cycle Time, Dwell Time, Pause Time】

- 例えば、定量する化合物 (Analyte) の溶出幅が 0.1 min (6 sec) と仮定した場合、データポイント数が 10 ポイント (10 Cycle) のデータを取得するには、1 Cycle Time を 0.6 sec 以下に設定する必要があります。
- Cycle Time は Dwell Time と Pause Time (通常 5msec) の合計であることから、Dwell Time は 595 msec と設定することになります。



8.2 HPLC メソッド【島津製、ExionAE の場合】

- ① Home 画面の LC Method アイコンをクリックします。



LC Method

- ② Pump タブをクリックします。

- ③ Stop Time に分析時間、Flow (流速)、B Conc.に適当な値を入力します。

※ 流速、移動相組成は、実際に使用する組成、流速を入力してください。

※ グラジエントで分析される場合は、対象成分が検出される時の溶媒組成を入力して下さい。

Stop time: 6.00 min

Flow: 0.2000 mL/min

Time to reach the flow: 0.00 min (Off)

A, Conc: 50.0 %

B, Conc: 50.0 %

Pressure limits: Minimum: 0.0 MPa, Maximum: 40.0 MPa

Time	Flow	A, Conc	B, Conc
1	0.2000	50.0	50.0
2	0.50	0.2000	50.0
3	2.50	0.2000	20.0
4	4.00	0.2000	20.0
5	4.01	0.2000	50.0
6	6.00	0.2000	50.0

- ④ Autosampler タブをクリックします。

- ⑤ Cooler temperature にサンプルクーラーの温度を入力します。

- ⑥ Rinse Settings の Rinse Mode を Before and after aspiration に、必要に応じて Rinsing Volume、Rinse Method、Cooler Temperature を入力します。

Autosampler

Injection settings

Sampling speed: 5.0 µL/s

Cooler temperature: 15 °C

Rinse settings

Rinse type: External only

Rinse mode: Before and after aspiration

Rinse method: Rinse port only

Sample plate settings

Type	Needle Stroke [mm]
1mL	47.0
1.5mL	47.0
4mL	47.0
10mL	47.0
MTP 96	48.0
DWP 96	48.0
MTP 384	48.0

- ⑦ Oven タブをクリックします。
- ⑧ Oven temperature に温度を入力します。
- ⑨ Injection をクリックし注入量を入力します。

※ Injection Volume はサンプルループの容量以上入力しないでください。

Injection Volume μL

Pump Autosampler **Oven** System Controller

i Column Oven

A: AE Column Oven

☒ Column Oven A

Oven temperature: $^{\circ}\text{C}$

Temperature limit(Maximum): $^{\circ}\text{C}$

Ready check:

On
Wait time:5min
Ready range:1.0 $^{\circ}\text{C}$

- Oven A - Advanced

☒ Wait for temperature equilibration before run
 Wait time: min
 Ready range: $^{\circ}\text{C}$

Time program

8.3 HPLC メソッド【Exion2.0 の場合】

- ① Home 画面の LC Method アイコンをクリックします。

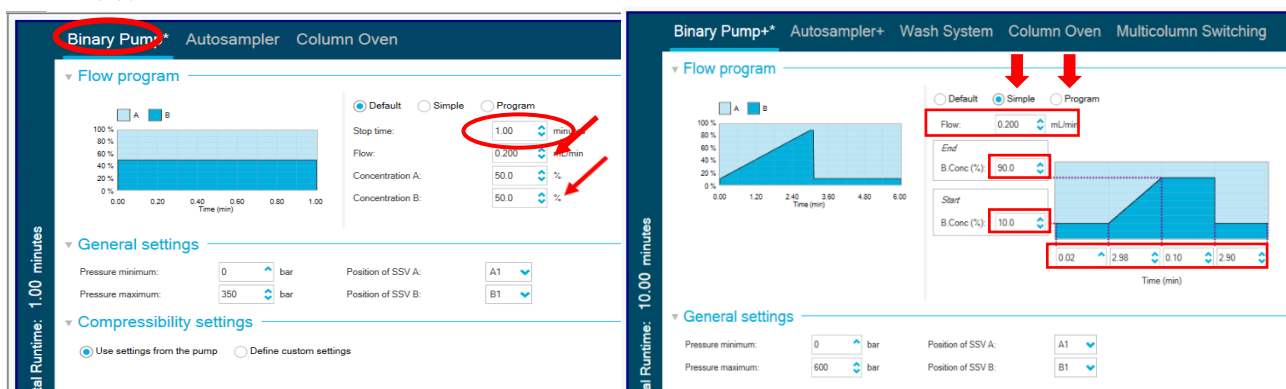


- ② Binary Pump タブをクリックします。

- ③ Stop Time に分析時間、Flow (流速)、B Conc.に適当な値を入力します。

※ 流速、移動相組成は、実際に使用する組成、流速を入力してください。

- ④ グラジエントの設定は、Simple または Program を選択し、Flow 及びグラジエント条件を入力します。



- ⑤ Autosampler タブをクリックします。

- ⑥ Rack setting の Use a specific rack にチェックをいれます。使用するラックタイプを選択します。

- ⑦ Advanced settings の「▶」をクリックし、Injection method の設定を行います。

- ⑧ 下図のように設定します。

▼ Advanced settings

Syringe speed: Low
Syringe speed factor: 0.8

Injection method: μ L pickup plus
Transport segment: 35.0 μ L

【各インジェクションモードで使用するサンプル量】

Partial loop, Full loop, μL pickup plus の 3 通り

注入モード	使用量	使用例：
Partial loop	設置のサンプルループの容量の 50% まで 上記に加え、Flush Volume で 30 μL (air gap 有) または 35 μL 使用	100 μL ループ、50 μL 注入 Air gap 有 $50\ \mu\text{L} + 30\ \mu\text{L} = 80\ \mu\text{L}$
Full loop,	設置されているサンプルループの体積によって異なる ・ループ $\leq 100\ \mu\text{L}$ ：3 $\times$ ループ量 ・ $100\ \mu\text{L} < \text{ループ} \leq 500\ \mu\text{L}$ ：2 $\times$ ループ量 ・ $500\ \mu\text{L} > \text{ループ}$ ：1.5 $\times$ ループ量 上記に加え、Flush Volume で 30 μL (air gap 有) または 35 μL 使用	$50\ \mu\text{L} \times 3 + 30\ \mu\text{L} = 180\ \mu\text{L}$
μL pickup plus	一回の注入でサンプルロスなし	50 μL

【オートサンプラー設定例(Advanced settings)】

Binary Pump+ Autosampler+* Column Oven

General settings

Use autosampler: ☒

Injection volume: 5.0 μL

Rinse mode: Advanced

Advanced rinse steps: Setup...

Use air gap: ☒

Use headspace pressure: ☐

Use tray thermostating: ☒

Temperature: 5 $^{\circ}\text{C}$

Rack settings

Rack

2x 48 vial rack: 2.0 mm

2x 96 deep-well plate: 2.0 mm

2x 96 well plate: 2.0 mm

2x 384 well plate: 2.0 mm

108 vial rack: 2.0 mm

2x 12 vial rack: 2.0 mm

30 vial rack: 2.0 mm

Needle offset

Use a specific rack: ☐

Use pretreatment: ☐

Use stacked injections: ☐ Setup...

Advanced settings

Syringe speed: Low

Syringe speed factor: 0.8

Injection method: Partial loop

This injection mode requires a sample volume of $\sim(\text{Injection volume} + 30\ \mu\text{L})$ for each injection

Flush volume: 30 μL

ExionLC 2.0 - Advanced rinse steps

Rinse steps: 2

Rinse delay (min): 0.0

Position Volume (μL) Valve wash

1 Wash 500 ☒

2 Transport 1000 ☒

OK Cancel

最後のピークが溶出後に洗浄を開始するように設定してください。

⑨ 必要に応じて Rinse mode、Tray thermostating を使用します。

⑩ Injection をクリックし注入量を入力します。

▼ General settings

Use autosampler: ☒

Injection volume: 10.0 µL

⑪ Advanced rinse steps の **Setup...** をクリックし、Rinse steps : 4、Rinse delay (min): はピークが溶出した後の時間を入力してください。例では 3 分に設定しています。

⑫ Column Oven タブをクリックし、条件を設定します。

Binary Pump* Autosampler* Column Oven*

▼ General settings

Temperature: 40 °C Lower safety limit: 5 °C
Use temperature program: ☐ Upper safety limit: 85 °C

▼ Equilibration settings

Wait before injection: minutes

Advanced rinse steps

Rinse steps: 4
Rinse delay (min): 3.0

Please note that the last step must be Transport if the µL pickup plus injection mode is used.

Position	Volume (µL)	Valve wash
1 Wash	500	☐
2 Wash	500	☐
3 Transport	750	☐
4 Transport	750	☐

OK Cancel

8.4 バルブの設定

必要に応じてバルブの設定を行い、Save > Save as を選択し、適当なファイル名を入力し、保存します。

※ 参考(バルブの設定)

Time (min)	Position
0	A
0.05	B
0.95	A

通常の設定の場合、

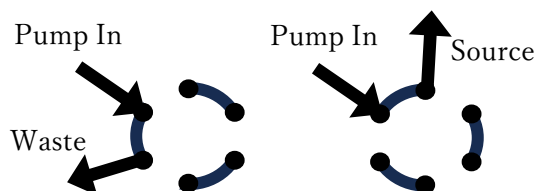
6 方バルブは

Position A (廃液) : 6-1, 2-3, 4-5

Position B (MS) : 1-2, 3-4, 5-6

がつながっています。

特殊な設定になっている場合もありますので、どの番号のポートから液が出るかをご確認の上、ご使用ください。



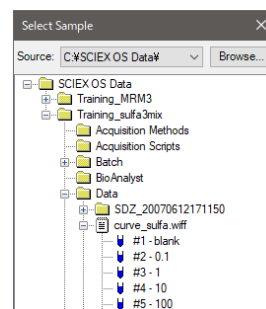
【注意】

- 1) Valve の切り替え時間は、分析時間が 12 分の場合、MS の測定開始時間(0min)、終了時間(12min)には設定しないでください。0-12 分の分析の場合、0.5-11.5 分の間で切り替え時間を設定します。
- 2) Valve を使用しない場合は、Integrated Valco Valve 上を右クリックして Use のチェックを外します。

9 データの確認

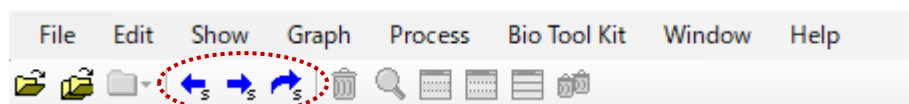
データを開く

- ① Home 画面から Explorer をクリックし Explorer を開きます。
- ② メニューバーの File から、あるいはアイコンの Open Sample を選択します。
- ③ 目的のデータの Wiff ファイル > 目的の Sample を選択し、OK をクリックします (Training では、納品資料 DVD 内の Training_sulfa 3mix Triple Quad フォルダ中のサンプルをクリックします)。
- ④ 該当のデータファイルが開きます。



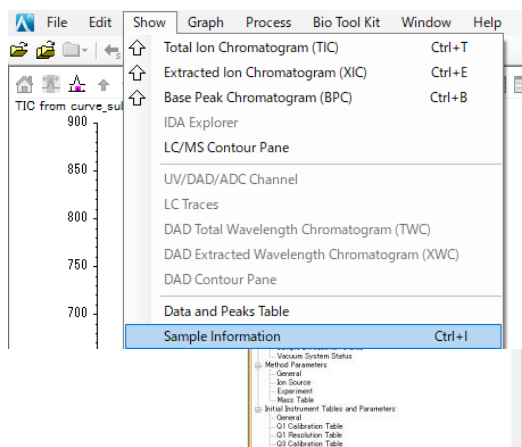
前後のクロマトグラムを表示する

- ① 上記の順序で該当のデータを開きます。
 - ② 前後のクロマトグラムに移る場合は、メニューバーのアイコン  をクリックします。
- ※ 左矢印  : 一つ前のクロマトグラムが表示されます。
- ※ 右矢印  : 次のクロマトグラムが表示されます。
- ※ 曲がった矢印  : データを選択する画面が開き、任意のクロマトグラムを表示させることができます。



分析時の測定条件を確認する

- ① メニューバーの Show から Sample Information を選択します。
- ② 分析条件など、データを取得した際の情報が表示されます。



Sample Information

Data File Properties

Original data file name: PFAS_20241128
Original data file path: D:\SCIEX OS Data\PFAS\Data\PFAS_20241128.wiff2
Original computer name: DESKTOP-55H2BK0
Software generated data file: SCIEX OS 3.4.0.19154
Service version: ClearCore2 Service 3.4.0.19154

Device Properties

	Device Model	Firmware Version	Serial Number
Mass Spectrometer	SCIEX Triple Quad 5500+	PIL2007 P61100 PIA1100 (210714 02 A3 D5147899C) 230213 USL0350 20130613	EX242862409
Integrated System	Shimadzu Nexera Series	Pump A - LC-40D XS - 1.12, Autosampler - SIL-40C XS - 1.19, Oven A - CTO-40C - 1.03, System Controller - SCL-40 - 1.67	Pump A - LC-40D XS - L22426203373, Autosampler - SIL-40C XS - L22456201993, Oven A - CTO-40C - L2246210223, System Controller - SCL-40 - L22106205846
Valve	Valve Model	1.0.0.0	AB SCIEX 1

マスクロマトグラム(XIC)の表示

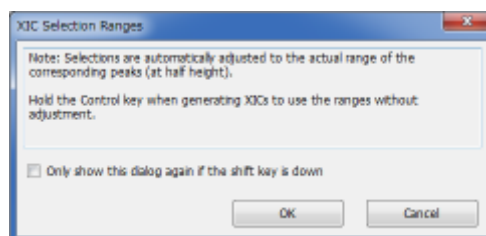
<数値を入力する場合>

- ① メニューバーの Show から Extracted Ion chromatogram(XIC)を選択します。
- ② m/z 、Width、化合物名を選択し、OK をクリックします(Training では下図のように選択)。

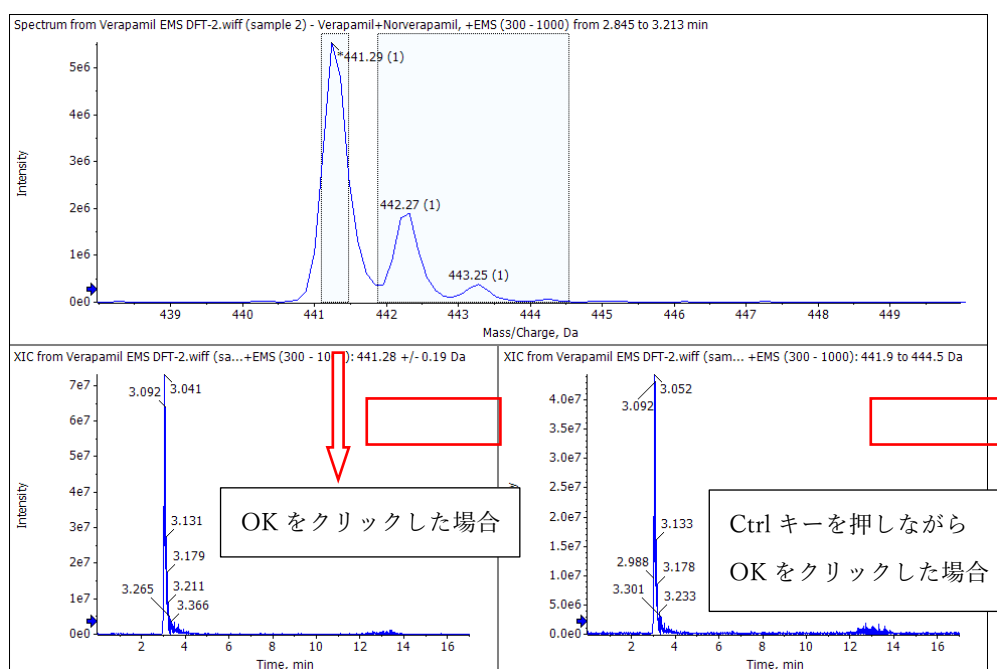
Select MRMs	
Q1	Q3
251.2	108.2
265.2	92.0
311.2	156.3

<マススペクトルから表示する場合>

- ① 目的のマススペクトルを拡大します。
- ② スペクトルを左ドラッグで選択し、ダブルクリックします。
- ③ 右図のようなメッセージが表示されます。
- ④ OK をクリックします。



- ⑤ 選択範囲の中で一番強度の強い MS 値 ± 0.2 Da で抽出した XIC が表示されます。



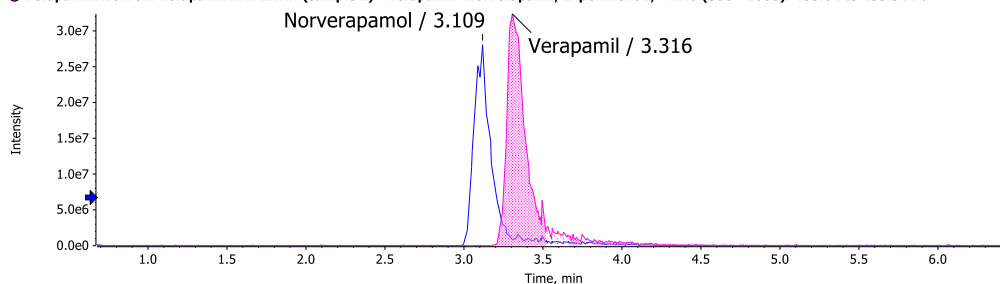
- ⑥ キーボードの Ctrl キーを押しながら、OK をクリックすると、選択した MS レンジで抽出した XIC が表示されます。

- ⑦ 重ね描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

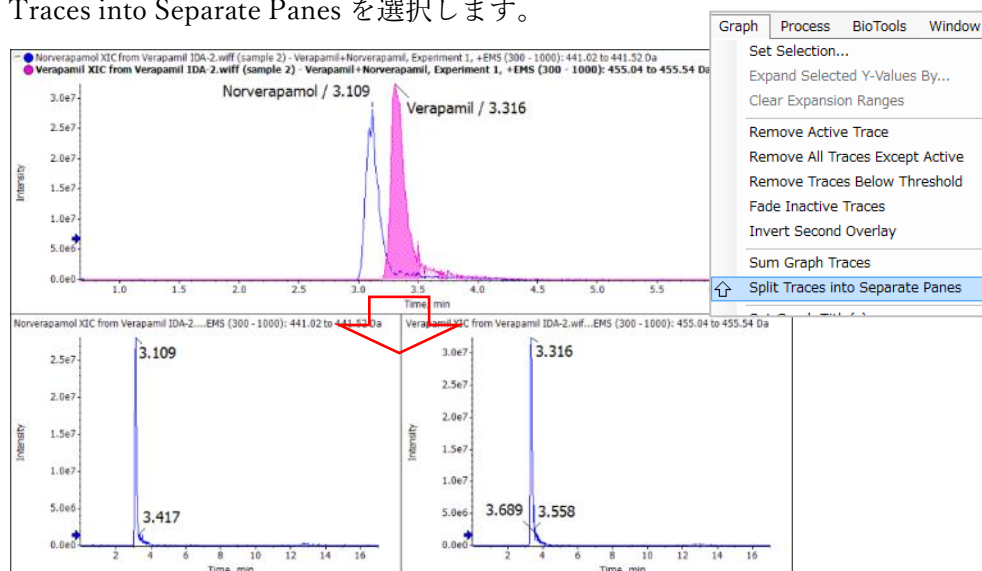


アイコンを選びます。

- Norverapamol XIC from Verapamil IDA-2.wiff (sample 2) - Verapamil+Norverapamol, Experiment 1, +EMS (300 - 1000): 441.02 to 441.52 Da
- Verapamil XIC from Verapamil IDA-2.wiff (sample 2) - Verapamil+Norverapamol, Experiment 1, +EMS (300 - 1000): 455.04 to 455.54 Da

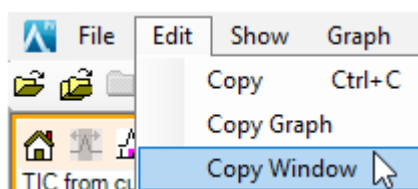


- ⑧ 重ね描きされた Pane を個々の Pane にする場合、メニューバーの Graph から Split Traces into Separate Panes を選択します。



画面のコピー

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



- ② Copy Graph：メタファイル形式、Copy Window：ビットマップ形式です。
 ③ ペイントやパワーポイント等にペーストします。

10 SCIEX OS Software を用いた定量解析

本マニュアルでは SCIEX OS Software の Analytics モードを用いて解析を行う方法を示します。

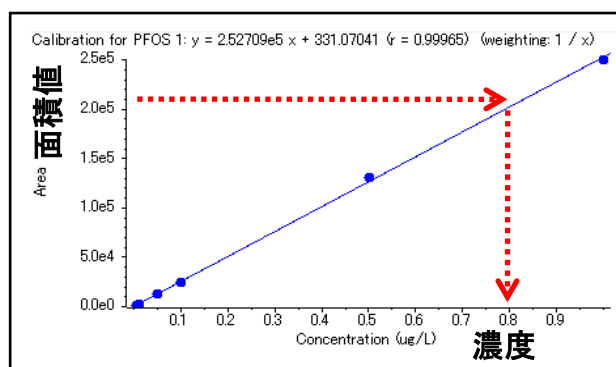
※ 濃度既知の標準液から作成した検量線をもとに、濃度未知のサンプルの定量を行います。

※ Training では Project: Training_sulfa3mix 内の curve_sulfa の Data を使用し、以下を行います。

※ Sulfadiazine (SDZ)、Sulfamerazine (SMZ) の検量線の作成(内部標準物質 Sulfadimethoxine (SDMX)による補正)し、未知試料中の SDZ と SMZ の定量を目的としたトレーニングです。

<参考> 検量線について

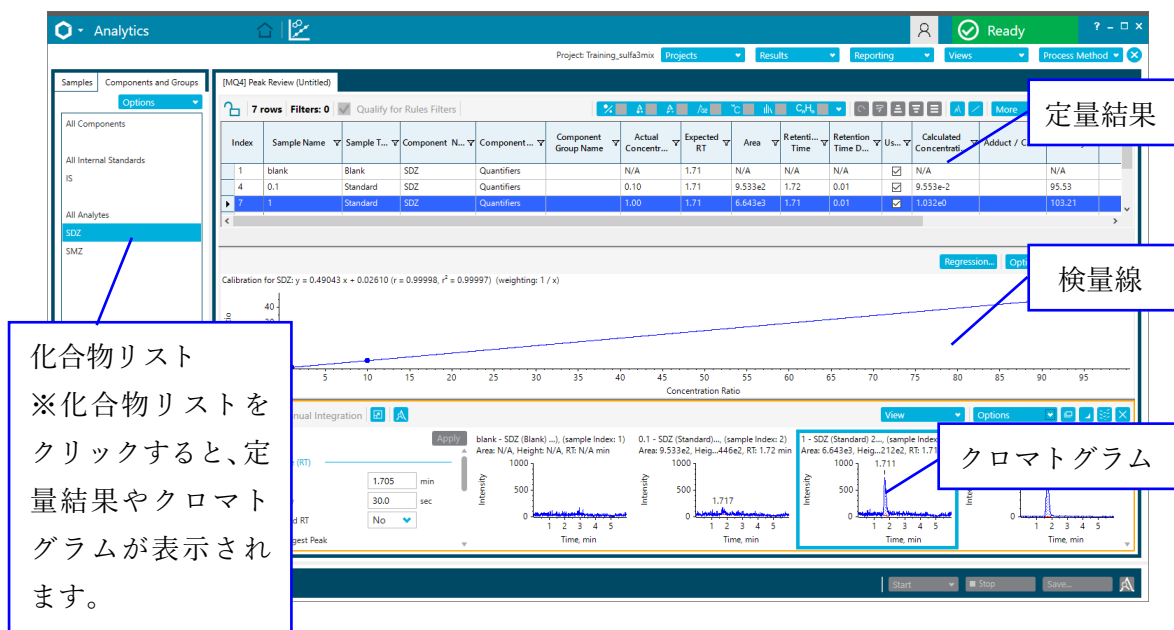
検量線(標準濃度曲線)とは、既知の濃度の標準試料と未知の試料とを比較することにより、未知の試料に含まれる物質の濃度を求める手法です。検量線は、検体(測定対象物質)の濃度の変化に応じて検出器がどのように反応するかを示したグラフ(分析シグナル)です。検量線を作成するために、未知の検体の想定濃度を中心とする各種濃度で調整された標準物質を準備する必要があります。



<参考> 内部標準物質について

内部標準物質は、測定時の注入量、MS のイオン化時のサプレッションなどの効果を補正するために使用できます。生体試料など、複雑なマトリックス中で定量解析を正確に行う必要がある場合に特に推奨されます。

<SCIEX OS Software Analytics モード定量画面>



<よく使用するアイコン>



10.1 SCIEX OS Software の Analytics の起動

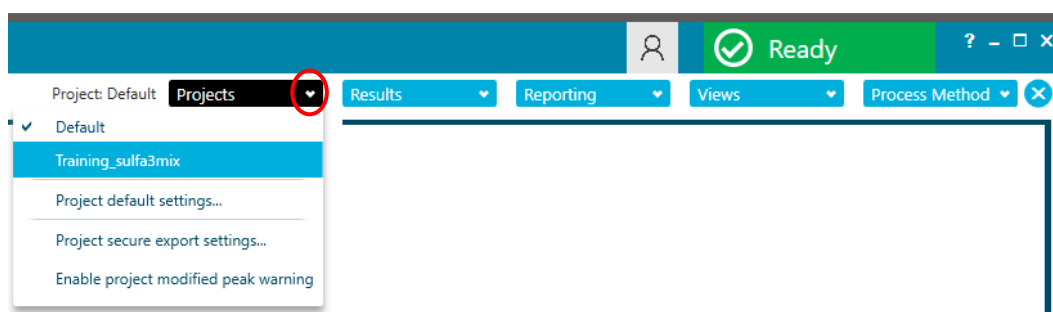
- ① デスクトップ上の SCIEX OS Software アイコン  をダブルクリックし、起動します。

- ② Home 画面の Analytics  アイコンをクリックします。

10.2 Project の選択

画面上部の Projects > 目的の Data の格納されている Project を選択します。

※ Training では Training_sulfa3mix を選択してください。表示されない場合は、Default のプロジェクトから「.project」をコピーしてフォルダ内に張り付けてください。



10.3 初期設定の変更

- ① Projects をクリックし、Project Default Settings を選びます。
- 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。

※ 各種設定は状況に応じて変更します。

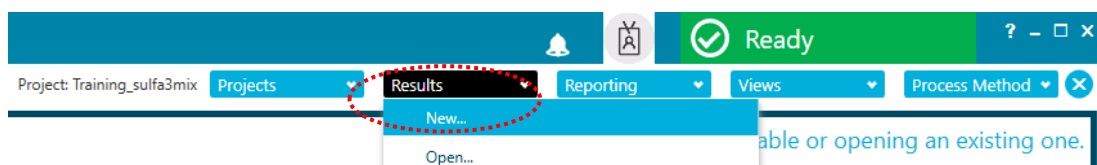
The screenshot shows the 'Project Default Settings' dialog box with the 'Quantitative Processing' tab selected. The dialog is titled 'Set Project wide defaults for quantitative processing method parameters'. It contains several sections: 'Method Defaults' with 'Signal to Noise Algorithm' set to 'Relative Noise'; 'Integration Defaults' with 'Integration Algorithm' set to 'MQ4'; 'Retention Time (RT)' with 'XIC width' at 0.02 Da, 'Expected RT' at 0.000 min, 'RT Half Window' at 30.0 sec, 'Update Expected RT' set to 'No', and an unchecked 'Report Largest Peak' checkbox; 'Integration' with 'Minimum Peak Width' at 3 points, 'Minimum Peak Height' at 100.00, 'S/N Integration Threshold' at 0, 'Gaussian Smooth Width' at 0.0 points, 'Noise Percentage' at 40.0 %, 'Baseline Subtract Window' at 2.00 min, and 'Peak Splitting' at 2 points; and 'Units & Calibration Defaults' with 'Concentration units' empty, 'Regression parameter' set to 'Area', 'Regression type' set to 'Linear', and 'Weighting type' set to '1/x'. At the bottom are 'Save', 'Close', and 'Help' buttons.

- 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。

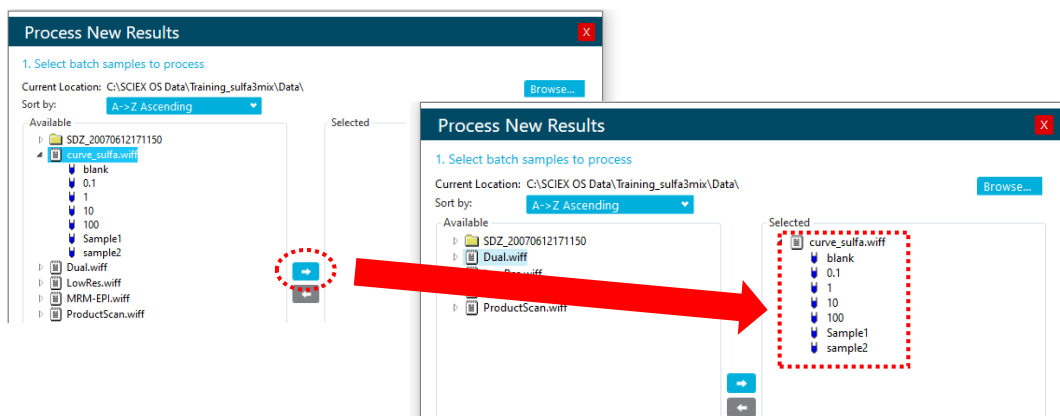
The screenshot shows the 'Project Default Settings' dialog box with the 'Qualitative Processing' tab selected. The dialog is titled 'Set Project wide defaults for qualitative processing method parameters'. It contains several sections: 'Library Search' with 'Library Search Algorithm' set to 'Smart Confirmation Search' and 'Results Sorted By' set to 'Purity'; 'Algorithm Parameters' with checkboxes for 'Precursor Mass Tolerance' (checked), 'Collision Energy' (unchecked), 'Retention Time' (unchecked), and 'Fragment Mass Tolerance' (checked), each with a tolerance value (0.4 Da, 5 eV, 0.5 min, 0.4 Da respectively); and a bottom section with checkboxes for 'Ignore Isotopes In Unknown' (unchecked), 'Use Polarity' (checked), 'Use Collision Energy Spread' (unchecked), and 'Use Compound Specific Purity Threshold' (unchecked), along with numerical values for 'Maximal Number Of Hits' (5), 'Intensity Threshold' (0.05), 'Minimal Purity' (10.0 %), and 'Intensity Factor' (5). At the bottom are 'Save', 'Close', and 'Help' buttons.

10.4 Result Table の作成

- ① 画面上部の Results > New をクリックします。



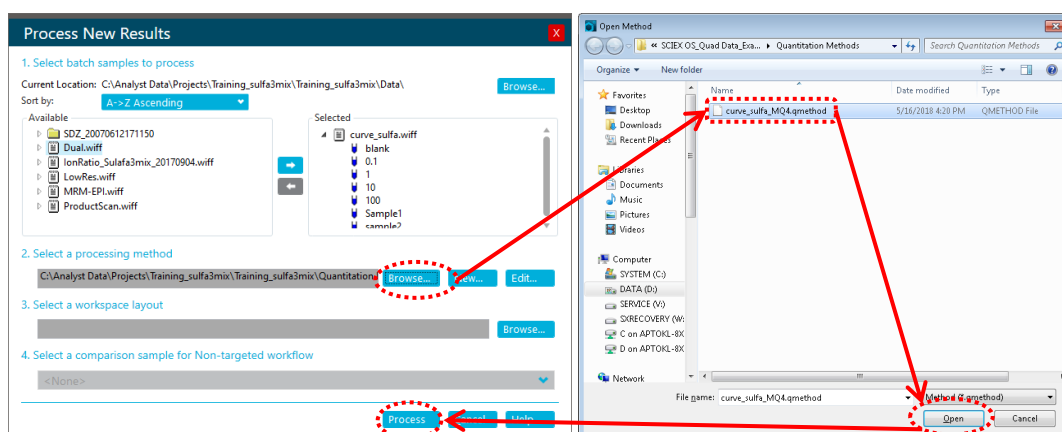
- ② Process New Results 画面を開き、Select batch Samples to process で、Available から解析するデータを選択し、右矢印をクリックして Selected に移動します。(Training では curve_sulfa.wiff の全 Data を移動)。



- ③ Process New Results 画面の 2. Select a processing method で、以前に作成した Processing Method(定量解析用 Method)がある場合は Browse...をクリック、使用する解析メソッドを選択し、Process をクリックし”7.5 Results Table の確認、編集”に進みます。

※ Processing Method が無い場合、次の頁の”新規に定量解析用メソッドを作成し、Results Table を作成する”に進みます(Training では新規に作成)。

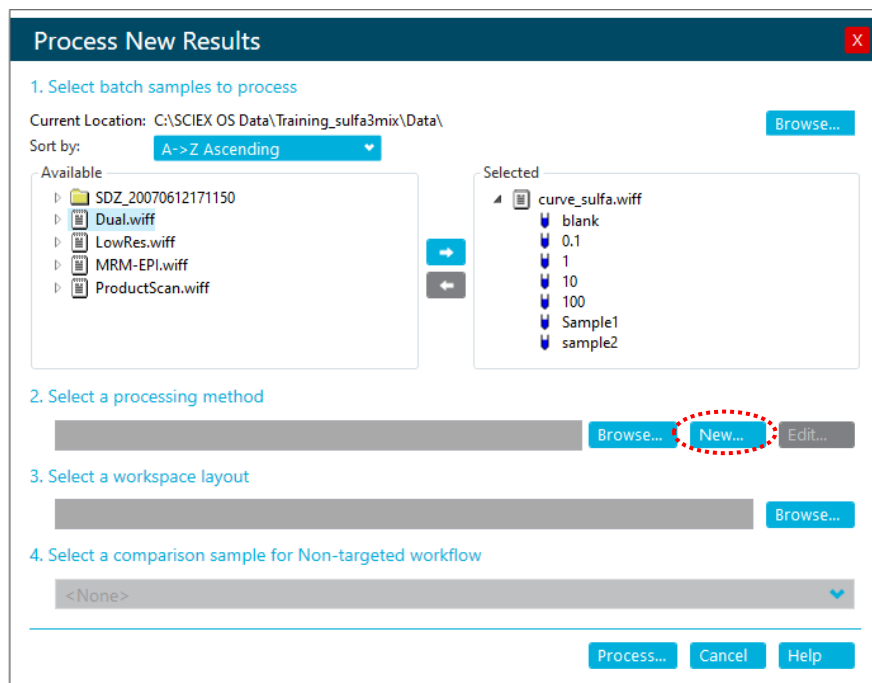
※ Layout を過去に保存していた場合、Select a workspace layout の Browse...から選択することが可能です。



Processing Method が無い場合、次頁に進みます(Training では新規に作成します)。

新規に定量解析用メソッドを作成し、Results Table を作成する

- ① Process New Results 画面の 2. Select a processing method の New をクリックします。

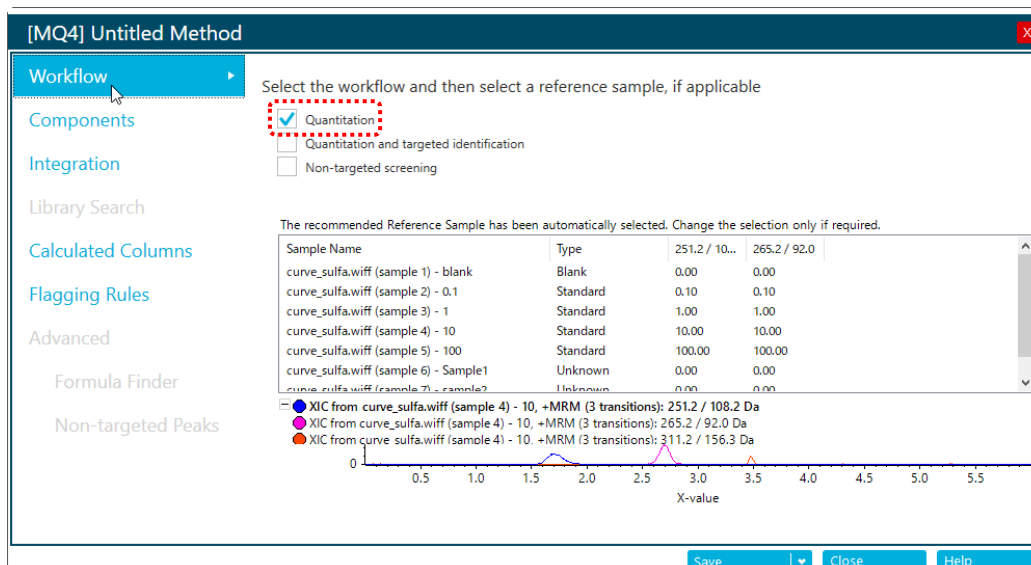


- ② 解析メソッドの編集画面が表示されます。
- ③ Workflow で Quantitation and targeted identification のチェックを外し、Quantitation にチェックが入っていることを確認します。

※ ライセンスの種類によりチェックボックスがない場合もあります。

- ④ 代表サンプルが自動的に選択されます。

※ Sample Name をクリックすると代表サンプルが切り替わります。



⑤ Components で化合物名、内部標準物質(IS)の情報を入力します。

※ Training Data では、311/156 が IS です。

※ IS が無い場合は、入力は不要です。

[MQ4] Untitled Method

Workflow Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Components

Integration

Library Search

Calculated Columns

Flagging Rules

Row	IS	Group	Name	Precursor (Q1) Mass (Da)	Fragment (Q3) Mass (Da)	Retention Time (min)	IS Name	Experiment Index
1	☐		251.2 / 108.2	251.15756	108.2		IS	1 MRM (3 transitions)
2	☐		265.2 / 92.0	265.19239	92		IS	1 MRM (3 transitions)
3	☒		IS	311.21171	156.3			1 MRM (3 transitions)
4	☐							

⑥ Integration で代表サンプルの自動積分された結果が表示されます。チャンネル(成分)をクリックし、全成分について同様に積分パラメータを設定、確認します。

※ ピークが希望通りに積分されない場合は、下記【スムージングおよび積分パラメータ】を参考に積分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。

※ パラメータは Results Table 作成後も変更できます。

[MQ4] Untitled Method

Workflow For each component, configure the parameters to optimize peak integration

Components Integration Algorithm: MQ4

Integration

Library Search

Calculated Columns

Flagging Rules

Advanced

Formula Finder

Non-targeted Peaks

251.2 / 108.2
265.2 / 92.0
IS

Retention Time (RT)

Expected RT 1.705 min

RT Half Window 30.0 sec

Update Expected RT No

Report Largest Peak ☐

Integration

Apply peak parameters to all of the components ☐

Minimum Peak Width 3 points

Minimum Peak Height 100.00

S/N Integration Threshold 0

Gaussian Smooth Width 1 points

Noise Percentage 40.0 %

Baseline Subtract Window 2.00 min

Peak Splitting 2 points

Units & Calibration Defaults

Apply units and calibration parameters to all of the components ☐

Concentration units

Regression parameter Area

Regression type Linear

Weighting type 1/x

Remove outliers automatically from the calibration curve ☐

Apply

251.2 / 108.2 (251.2 / 108.2) from 1 (curve_sulfawiff (sample 3))
Area: 6303.813, Height: 594.009, RT: 1.71 min

Intensity, cps

Time, min

【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 Calculated Columns をクリックし、必要に応じて設定します。
- ※ 設定方法は中級定量トレーニングマニュアルをご参照ください。
- ⑧ Flagging Rules をクリックし、真度、定量値の許容誤差について設定します。
- ※ 基準値から外れた場合、定量結果のセルがピンクにハイライトされます。
 - ※ 設定しない場合はチェックをはずします。
 - ※ イオン比の表示は、中級定量トレーニングマニュアルをご参照ください。
 - ※ Accuracy Acceptance をクリックし、必要に応じて真度の許容誤差を設定します。
 - ※ 設定後、Accept changes and return to Flagging Rules をクリックし、前の画面に戻ります。

The screenshot shows the 'Flagging Rules' configuration window for 'Accuracy Acceptance'. The left sidebar has 'Flagging Rules' selected. The main area shows a table of rules and a configuration section for 'Accuracy Acceptance'.

Apply Rule	Rule Name	Formulas, Columns and Rules Used
☐	Ion Ratio Acceptance	Columns: Ion Ratio Confidence
☒	Accuracy Acceptance	Columns: Accuracy
☒	Concentration Acceptance	Columns: Calculated Concentration

Below the table, the 'Accuracy Acceptance' rule is configured with the following settings:

- Rule name: Accuracy Acceptance
- Maximum tolerance for accuracy:
 - ☒ Standards at Lower Limit of Quantitation (LLOQ) +/- 20.0 %
 - ☒ Standards +/- 15.0 %
 - ☒ Quality Controls (QC) +/- 15.0 %

A red dashed box highlights the 'Accept changes and return to Flagging Rules' button.

- ⑨ Concentration Acceptance をクリックし、必要に応じて定量値の許容誤差を設定します。Accept changes and return to Flagging Rules をクリックし、前の画面に戻ります。

The screenshot shows the 'Flagging Rules' configuration window for 'Concentration Acceptance'. The left sidebar has 'Flagging Rules' selected. The main area shows a table of rules and a configuration section for 'Concentration Acceptance'.

Apply Rule	Rule Name	Formulas, Columns and Rules Used
☐	Ion Ratio Acceptance	Columns: Ion Ratio Confidence
☒	Accuracy Acceptance	Columns: Accuracy
☒	Concentration Acceptance	Columns: Calculated Concentration
☐	Integration Acceptance	Columns: Quality, Asymmetry Factor, Total Width, Retention Time Error (%)
☐	Qualitative Rules	Columns:

Below the table, the 'Concentration Acceptance' rule is configured with the following settings:

- Rule name: Concentration Acceptance

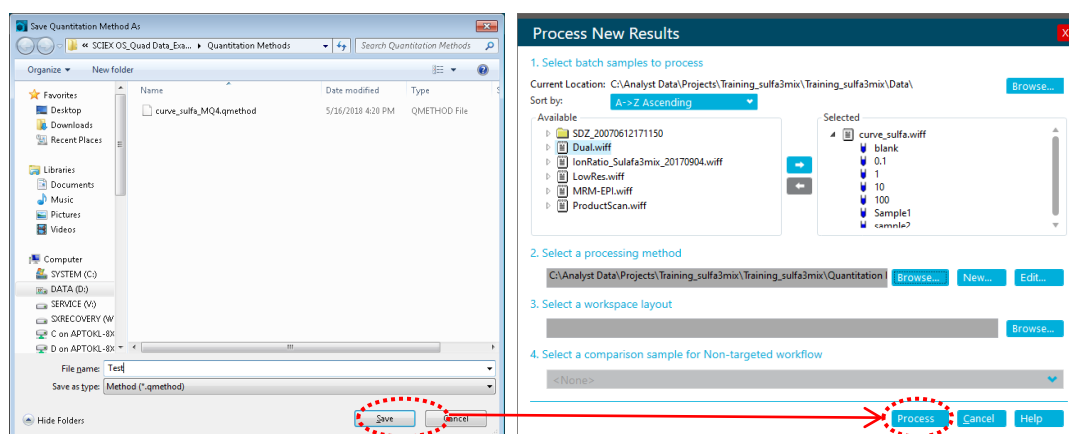
A red dashed box highlights the 'Accept changes and return to Flagging Rules' button.

The configuration section for 'Concentration Acceptance' includes a table for defining concentration ranges:

Analyte	Lower Limit	Upper Limit
251.2 / 108.2		
265.2 / 92.0		

- ⑩ Save をクリックし、File Name に解析 Method 名を入力し、Save をクリックします (Training では【日付】を入力)。
- ⑪ Process New Results 画面に戻ります。Process をクリックすることで、解析が開始され、終了後 Result Table(解析結果)が表示されます。

※ Layout を過去に保存していた場合、Select a workspace layout の Browse…から選択することが可能です。



10.5 Results Table の確認、編集

- ① Samples タブでは、任意のサンプルを選択できます。Results Table はサンプルごとに表示されます。

Index	Sample Name	Sample Type	Component Name	Component Type	Retention Time	Area	Actual Concentration	Calculated Concentration
1	blank	Blank	251.2 / 108.2	Quantifiers	N/A	N/A	N/A	N/A
2	blank	Blank	265.2 / 92.0	Quantifiers	2.70	4.232e2	N/A	2.198e-1
3	blank	Blank	311.2/156.3	Internal Stand...	3.49	2.207e3	1.00	N/A

- ② Components and Groups タブでは、任意の Analyte を選択します(Training では 251/108 を選択)。

Index	Sample Name	Sample Type	Component Name	Component Type	Retention Time	Area	Actual Concentration	Calculated Concentration
1	blank	Blank	251.2 / 108.2	Quantifiers	N/A	N/A	N/A	N/A
2	blank	Unknown	265.2 / 92.0	Quantifiers	2.70	4.232e2	N/A	2.198e-1
3	blank	Standard	311.2/156.3	Internal Stand...	3.49	2.207e3	1.00	N/A
4	0.1	Quality Control	251.2 / 108.2	Quantifiers	1.72	9.533e2	0.10	9.553e-2
5	0.1	Double Blank	265.2 / 92.0	Quantifiers	2.71	1.471e3	0.10	8.399e-2
6	0.1	Solvent	311.2/156.3	Internal Stand...	3.48	1.307e4	1.00	N/A

- ③ Sample Type を確認、編集します。

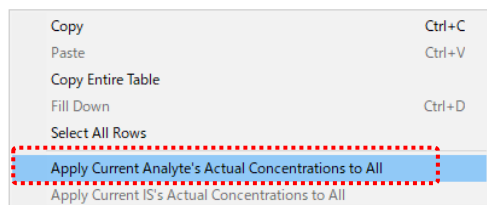
※ 変更する場合はプルダウンメニューから、標準液: Standard、QC サンプル: Quality Control、ブランク: Blank、サンプル: Unknown を選択してください。

- ④ Actual Concentration に標準液の調整濃度を確認、入力後 Enter キーを押して更新します。(Training では 0.1、1、10、100 と入力)

※ Excel などからのコピー (Ctrl+C)、ペースト (Ctrl+V) 可能です。

※ 全化合物について濃度を確認、入力します。

※ 全化合物の濃度が同じ場合は、1 化合物のみ入力後、カラム上を右クリックし、Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All を選択すると標準液濃度が全化合物に反映されます。

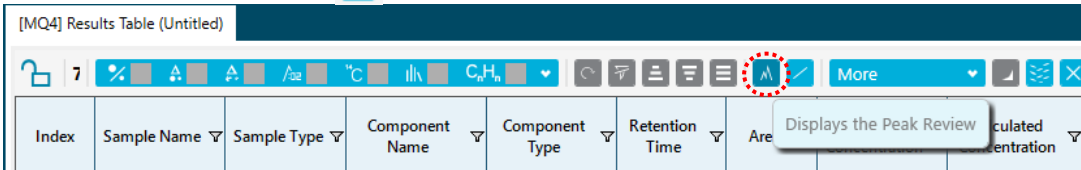


- ⑤ サンプルの定量値が、Calculated Concentration に表示されます。

10.6 クロマトグラムの表示

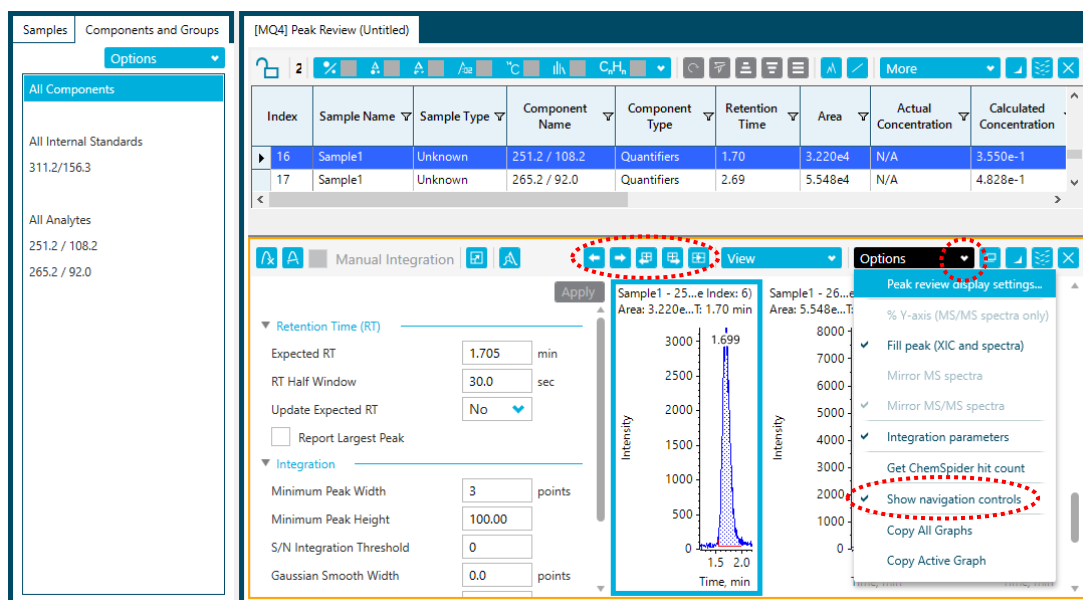
- ① Results Table 画面右上の  をクリックしてクロマトグラムを表示させます。

[MQ4] Results Table (Untitled)



Index	Sample Name	Sample Type	Component Name	Component Type	Retention Time	Area	Actual Concentration	Calculated Concentration
16	Sample1	Unknown	251.2 / 108.2	Quantifiers	1.70	3.220e4	N/A	3.550e-1
17	Sample1	Unknown	265.2 / 92.0	Quantifiers	2.69	5.548e4	N/A	4.828e-1

- ② クロマトグラム右上の Options > Show navigation control を選択すると、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。
- ③ 必要に応じて、表示されているクロマトグラム数(縦、横数)について変更する場合は、Options > Peak review display settings を選択します。Peak review Options 画面上部の Number of rows、Number of columns で変更後、OK をクリックしてください。



Peak review display settings...

- ☒ % Y-axis (MS/MS spectra only)
- ☒ Fill peak (XIC and spectra)
- ☒ Mirror MS spectra
- ☒ Mirror MS/MS spectra
- ☒ Integration parameters
- ☒ Get ChemSpider hit count
- ☒ Show navigation controls
- ☐ Copy All Graphs
- ☐ Copy Active Graph

Peak Review Options

Appearance Zooming XIC Graph Title

Number of rows:

Number of columns:

Overlay:

Peak Fill Style:

☐ Mark expected RT with arrow

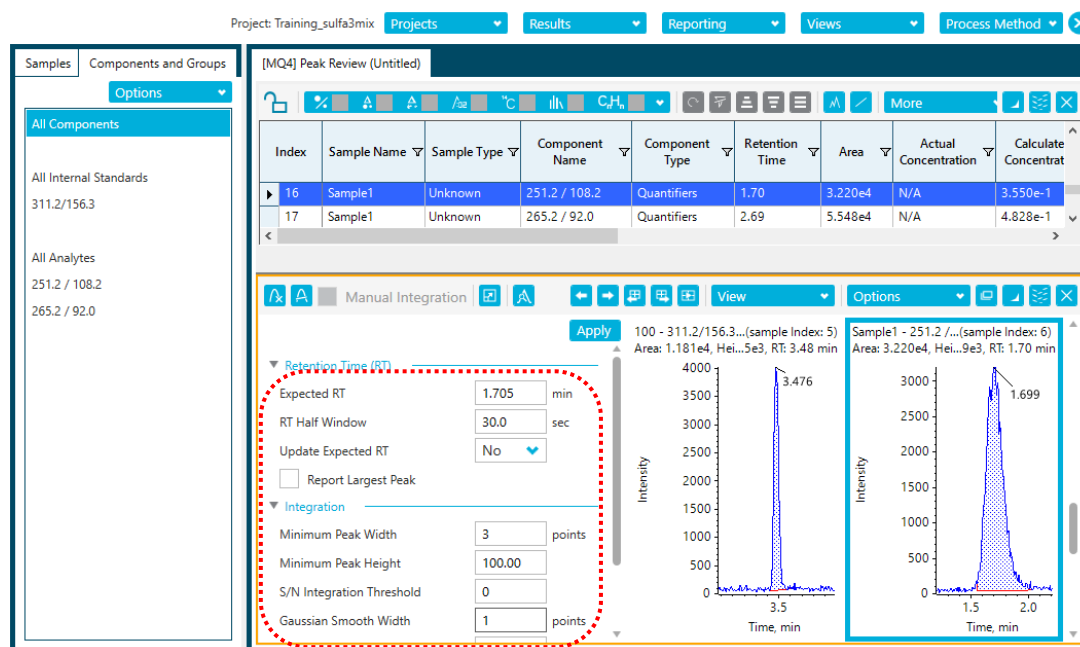
Manual Integration(Percent Rule)

Reject manual integration if difference in new area is less than specified % of original area

OK Cancel Help

10.7 パラメータの変更

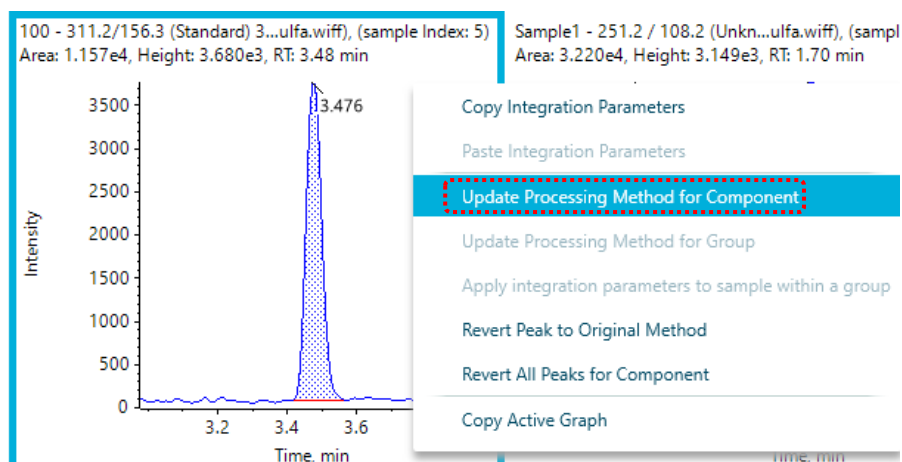
- ① 必要に応じてクロマトグラム左に表示されているパラメータ値を変更し、クロマトグラムのピーク認識方法を変更します。



- ② 各パラメータの詳細については、P.7-7【スムージングおよび積分パラメータ】を参照ください。
- ③ 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

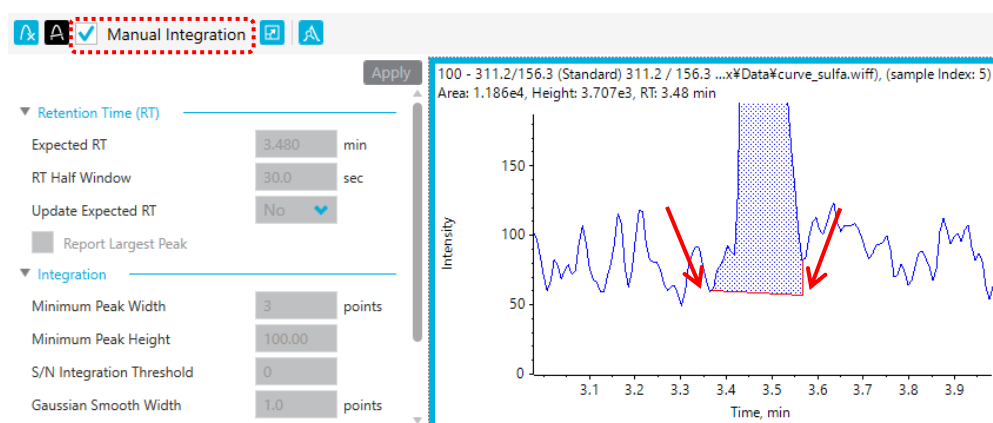
- ① 選択したサンプルに値を反映させた後、クロマトグラム上を右クリックします。
- ② Update Processing Method for Component を選択します。



10.8 手動積分

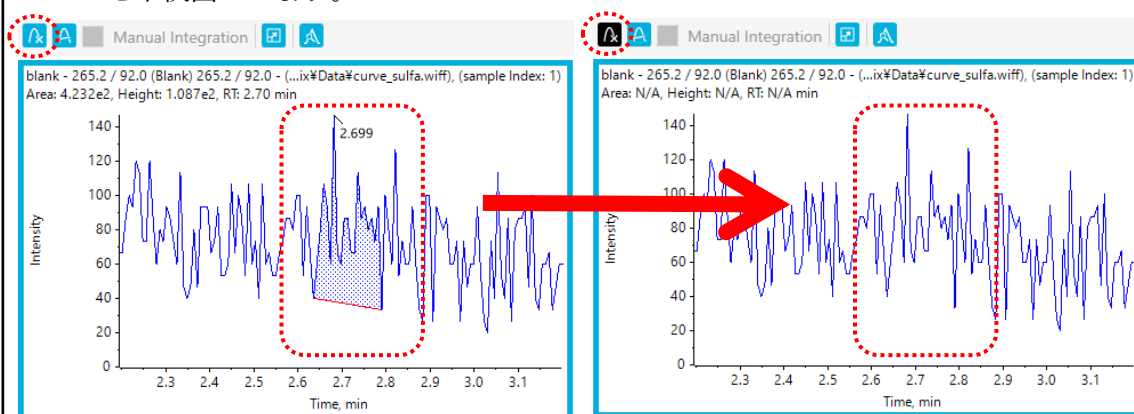
※ 必要に応じて行います。

- 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、ピークの右端で離します。
- ④ もとのパラメータに戻す場合は Manual Integration 右横のチェックを外してください。



ピークとしての認識を外す

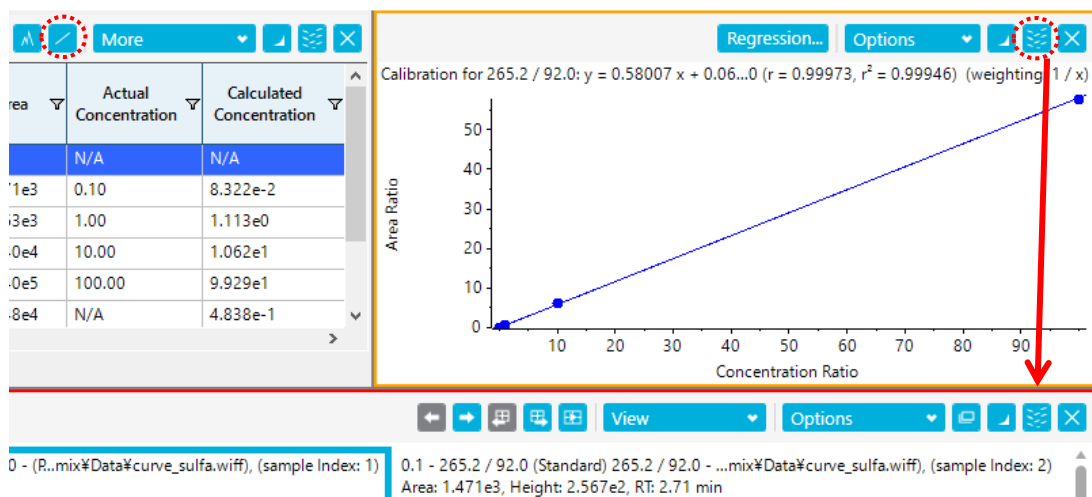
ブランク等、ピークとして認識したくない場合、ピーク不検出アイコンを押すことにより、ピークを不検出にします。



10.9 検量線の表示、重みづけ、検量線の種類を変更

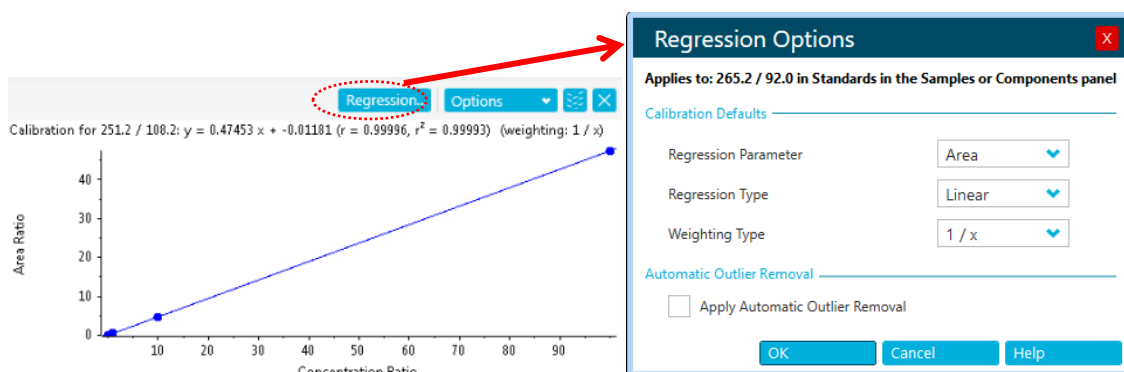
- ① Results Table 画面右上  をクリックし、検量線を表示します。

表示位置を調整する場合は、 をドラックして赤い線が出たら離すと移動します。



- ② 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 (Training では下図のように設定)。

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

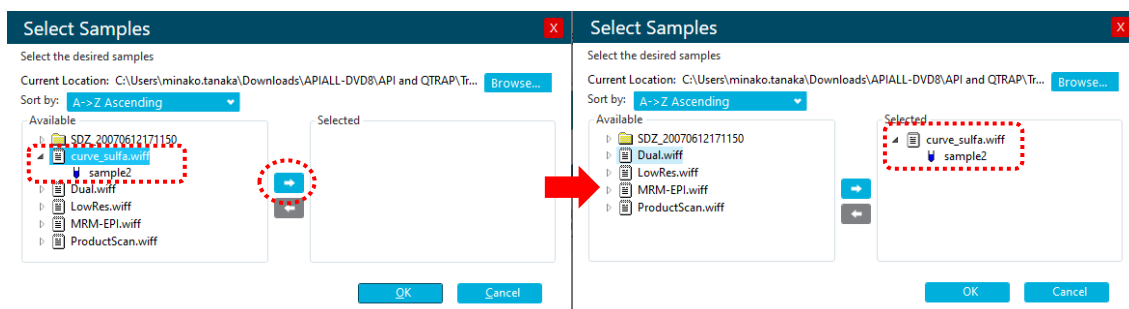
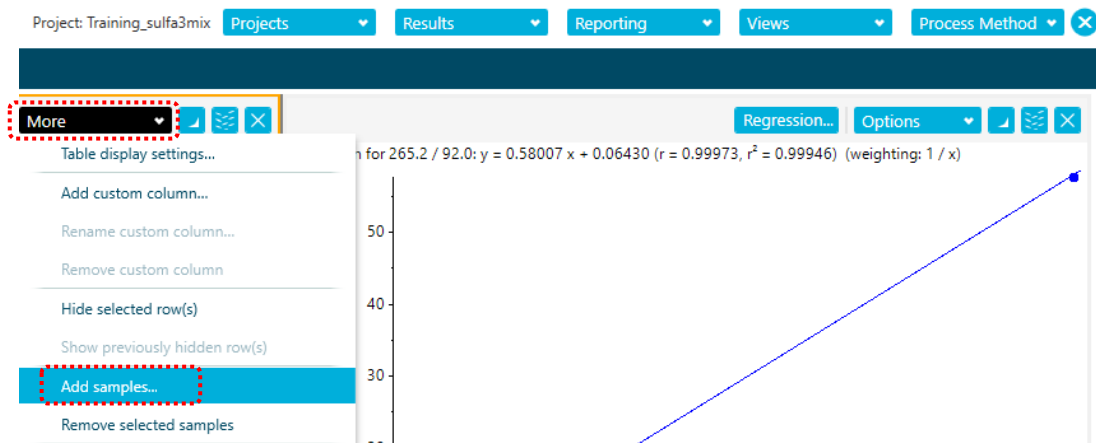


- ③ 必要に応じて画面上部の Results > Save as で定量結果を保存します。

10.10 データの追加と削除

データの追加

- ① 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、右矢印をクリックし、Selected に移動します。
- ② OK をクリックすると、Results Table に追加されます。



データの削除

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。

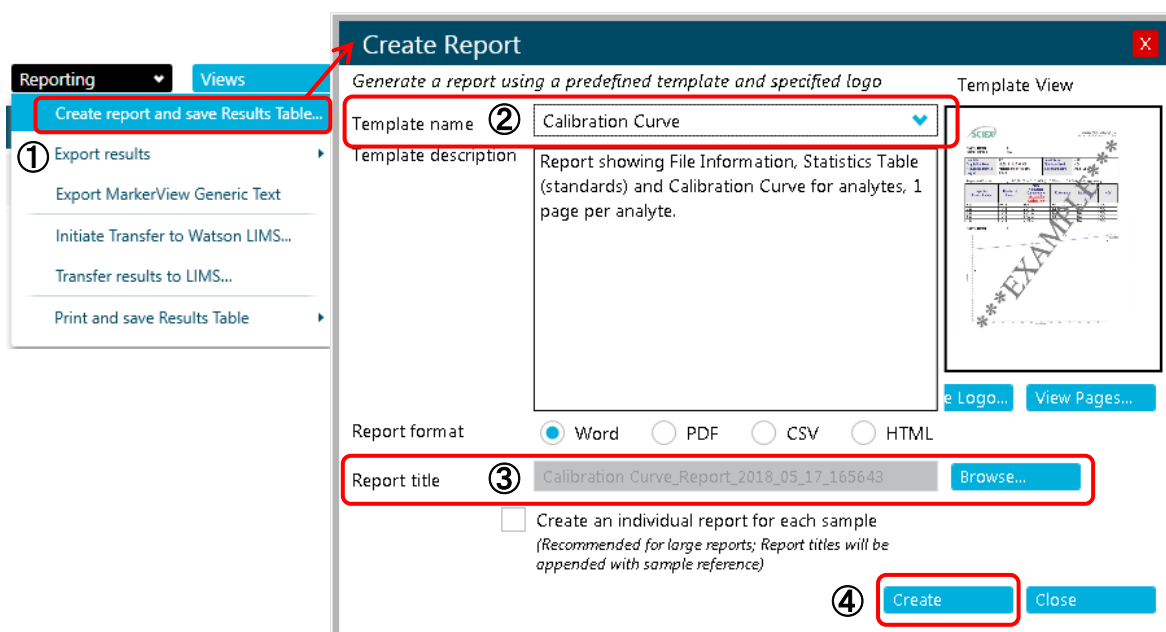
10.11 Report の作成

- ① 画面上部の Reporting > Create report and save Results Table を選択します。
- ② Create Report 画面が表示されますので、Template Name のプルダウンで目的に沿ったレポートテンプレートを選択します。

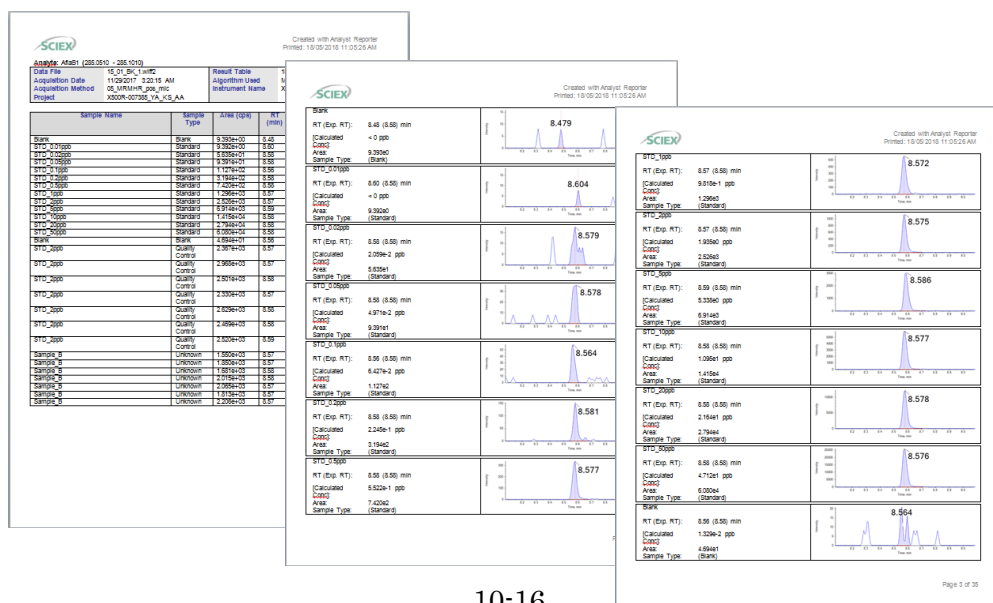
※ Default の Template は、C:\ProgramData\SCIEX\Analytics\Reporter に保存されています。

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

- ③ Report title の Browse をクリックしてファイル名の入力と保存先を選択します。
- ④ Create をクリックするとレポートが作成されます。



<レポート作成例>



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。

製品には、同梱された電源コードセットを使用して下さい。

また、同梱された電源コードセットは、他の製品には使用しないで下さい。

AB Sciex is doing business as SCIEX.

For Research Use Only. Not for use in diagnostic procedures.

The trademarks mentioned herein are the property of AB Sciex Pte. Ltd. or their respective owners.

AB SCIEX™ is being used under license.

詳細な説明や知的所有権等に関しては付属のマニュアルを必ずご確認ください。

© 2025 K.K. AB SCIEX.