

# Analyst MD ソフトウェア

データ依存型取得チュートリアル



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

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

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

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

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

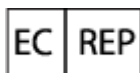
**Rx only.**

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

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

AB Sciex™ はライセンスの下で使用されています。

© 2022 年 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



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



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

IVD

CE

UK  
CA

# 目次

---

<b>第 1 章 : データ依存型取得チュートリアル</b>	<b>4</b>
IDA メソッドについて	4
関連マニュアル	5
前提条件	5
<b>第 2 章 : IDA メソッドを作成する</b>	<b>6</b>
IDA Method Wizard を用いて、トリプル四重極システムで IDA メソッドを作成する	6
IDA Method Wizard を用いて LIT システムを伴う IDA メソッドを作成する	8
Acquisition Method Editor を用いて IDA メソッドを作成する	9
Scheduled MRM アルゴリズムスキャンを使用して IDA メソッドを作成	11
2 つの Scheduled MRM アルゴリズムスキャンを使用して IDA メソッドを作成	12
極性切り替えについて	12
プレースホルダーについて	14
IDA において Scheduled MRM プロアルゴリズムがもたらす影響	15
IDA Scheduled MRM プロアルゴリズム測定メソッドを作成する	15
Scheduled Ionization を使用して IDA メソッドを作成	15
<b>第 3 章 : IDA データを表示</b>	<b>17</b>
IDA Explorer オプションを設定する	17
IDA データを表示	18
IDA Explorer が非アクティブ時に IDA データを表示する	19
動的バックグラウンド減算アルゴリズムについて	21
動的充填時間について	22
アイコン	22
<b>お問い合わせ先</b>	<b>23</b>
お客様のトレーニング	23
オンライン学習センター	23
SCIEX サポート	23
サイバーセキュリティ	23
ドキュメント	23

## IDA メソッドについて

IDA メソッドでは、同じ期間内に存在する前回の実験で入手した結果をもとに、実験が自動的に実施されます。データの取得中に IDA Criteria を用いてデータ収集設定を最適化することで、単一注入におけるサンプルの収集時間が短縮します。これにより、必要なサンプル量と貴重な作業時間の両方を節約できます。

IDA メソッドには、期間が同じサーベイスキャンを最大で 2 つ、ならびにディペンデントスキャンを 8 つ含めることができます。IDA では、サーベイスキャンが追加実験のトリガーとして使用されます。以下のいずれのスキャンもサーベイスキャンとして使用できます。

- Q3 MS
- EMS (MS 強調モード)
- MRM
- ニュートラルロス (NL)
- プリカーサーイオン (Prec)
- プロダクトイオン強調モード (EPI) (二次サーベイスキャン)
- *Scheduled* MRM アルゴリズム

以下はディペンデントスキャンとなります。

- EPI
- MS/MS/MS (MS3) (二次ディペンデントスキャン)

IDA 実験における質量分析装置の操作内容は、前回のスキャンで取得したデータに応じて、スキャンごとに変化します。本ソフトウェアではデータが取得時に分析され、ディペンデントスキャン対象となる質量が特定されます。IDA 実験のアクティブ化基準と、使用するメソッドパラメータを設定できます。

IDA では、以下のユーザー定義の基準に基づいて実験に修正が加えられ、結果が改善されます。

- イオン強度と電荷状態
- 組み入れ/除外リスト
- アイソトープパターン
- 動的除外

サイクル中に極性が切り替えられない場合、ディペンデント実験の数が、IDA Criteria タブに示された最高強度イオンの数と一致している必要があります。

## 関連マニュアル

- 質量分析装置システムユーザーガイド
- アドバンスドユーザーガイド
- *Scheduled MRM* アルゴリズムチュートリアル
- Analyst MD ソフトウェアヘルプ

## 前提条件

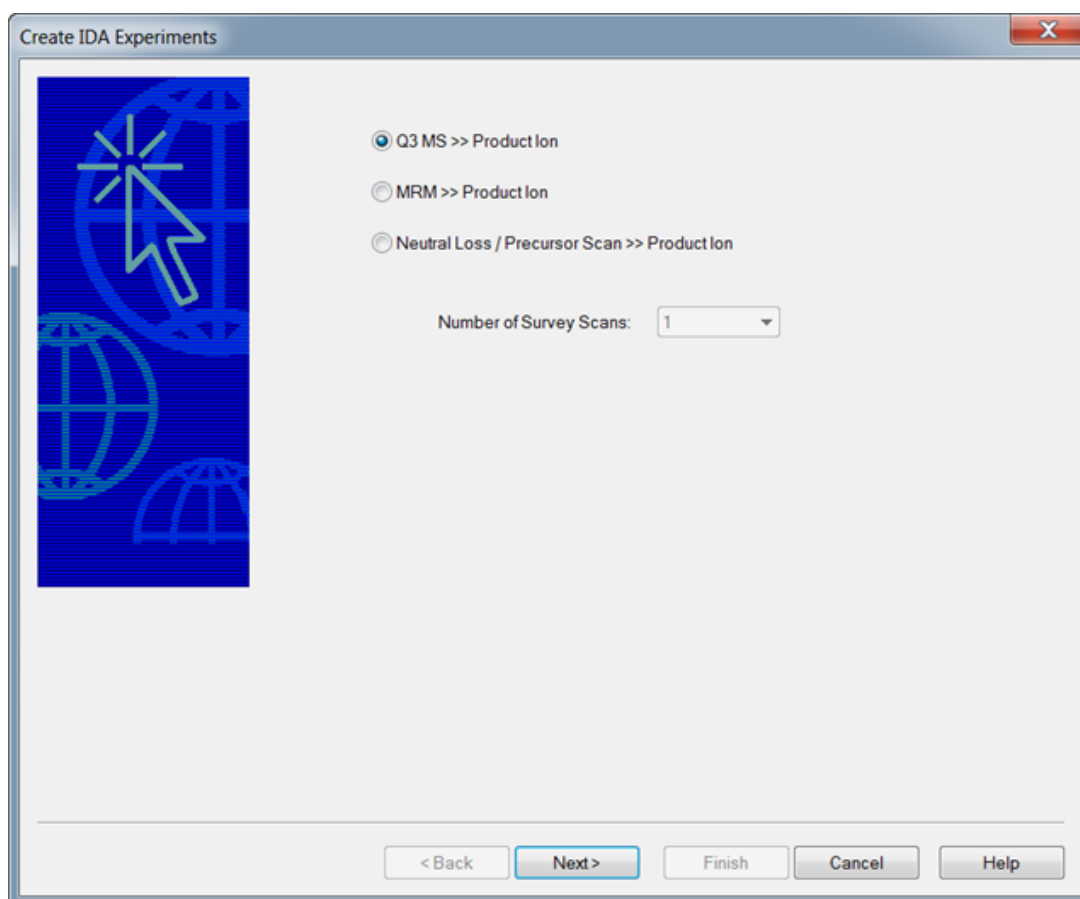
前提条件
ユーザーは以下ができなくてはなりません。 <ul style="list-style-type: none"><li>• 測定メソッドを作成する</li><li>• バッチを送信する</li></ul>

IDA メソッドウィザードを使用して、線形イオントラップ (LIT) およびトリプル四重極 IDA 取得メソッドを作成します。2 つのサーベイスキャンのあらゆる組み合わせを使用できます。サーベイスキャンとして EPI が選択されている場合は、IDA-Second Level Criteria タブを使用できます。これらのサーベイ実験を使用する場合、追加の IDA 基準レベルを設定することはできません。

## IDA Method Wizard を用いて、トリプル四重極システムで IDA メソッドを作成する

1. Navigation バーの **Acquire** の下にある **IDA Method Wizard** をダブルクリックします。

図 2-1 : IDA Experiments ページの作成



2. **Neutral Loss / Precursor Scan >> Product Ion** スキャンの種類を選択します。
3. **Number of Survey Scans** リストでスキャンの実行回数を選択し、**Next** をクリックします。Survey Scan ページが表示されます。このページの外観は、サーベイスキャンの選択に応じて異なります。

4. パラメータを設定し、**Next** をクリックします。

Dependent Scan – Product Ion ページが表示されます。

5. モニタリングするピークの数を選択し、スキャンパラメータを設定して、**Next** をクリックします。  
Dependent Scan – IDA Criteria ページが開きます。

---

**注:** IDA の範囲がサーベイスキャンと同じか、その範囲内であることを確認します。

---

6. イオン質量範囲を指定するには、イオン質量範囲の下限と上限を入力します。ディペンデントスキャンは、この範囲内の質量に対して実行されます。
7. **Which exceed** フィールドに、ディペンデントスキャンのトリガーに必要な秒当たりの最低カウント数を入力します。
8. **Exclude Former Target Ions** グループ内で、次のいずれかの操作を行います。
  - IDA 実験で発生したターゲット済みイオンをすべて無視するには、**Always** を選択します。
  - 指定回数を超えて発生したターゲット済みイオンをすべて無視するには、**Always** と **After** を選択し、発生回数を入力します。
  - 指定期間中に発生したターゲット済みイオンを無視するには、**For** を選択し、イオンを無視する秒数を入力します。
  - ターゲット済みイオンが指定回数を超えて発生した後、一定期間中に発生したフォーマーターゲットイオンを無視するには、**For** を選択し、イオンを無視する秒数を入力します。続いて **After** を選択し、発生回数を入力します。

---

**ヒント! Exclude former target ions** IDA 実験中に発生したすべてのターゲット済みイオンを認識するには、ウィザードを完了させ、Acquisition Method Editor の IDA - First Level Criteria タブで **Never** をクリックします。

---

9. 指定回数を超えて発生したターゲット済みイオンを除外するには、**Exclude Former Target Ions** グループで **After X occurrences** を選択し、将来的なスキャンから除外されるまでのターゲット済みイオンの許容発生回数を入力します。
10. **Finish** をクリックします。  
IDA 実験が自動的に Acquisition Method Editor に表示されます。LC メソッドおよびその他の IDA 基準 (包含リストや除外リストなど) を編集できるようになりました。
11. MS メソッドをレビューし、必要に応じて、パラメータや他の IDA Criteria を編集します。
12. デバイスがまだ含まれていない場合はデバイスを追加してから、関連するすべてのパラメータを更新します。

---

**ヒント!** すべてのイオン源ガスパラメータを更新できます。MS タブで **Edit Parameters** をクリックします。Source/Gas タブで適切な値を入力し、下にある **Source/Gas** チェックボックスを選択して、このパラメータをすべての実験に適用します。

---

13. 測定メソッドファイルを保存します。

## IDA Method Wizard を用いて LIT システムを伴う IDA メソッドを作成する

1. Navigation バーの **Acquire** の下にある **DA Method Wizard** をダブルクリックします。  
Create IDA Experiments ページが表示されます。
2. **Type of IDA Experiment** グループでサーベイスキャンタイプを選択し、**Next** をクリックします。
3. **Neutral Loss / Precursor Scan >> Enhanced Product** スキャンタイプが選択されている場合は、**Number of Survey Scans** リストで、実行するスキャンの数を選択します。
4. ディペンデントスキャンの実行に先立ち、IDA 実験においてユーザー指定の電荷状態またはアイソトープパターンと一致するデータが取得されたことを確認するには、**Use Enhanced Resolution Scan to confirm Charge State and Isotope Pattern** チェックボックスを選択します。
5. 実験に MS3 スキャンを追加するには、**Enable MS3 Experiment generation**3 チェックボックスを選択します。
6. LIT に適した充填時間を動的に計算させるには、**Dynamic Fill Time** のチェックボックスが選択されていることを確認します。
7. **Next** をクリックします。  
Survey Scan ページが開きます。このダイアログの外観は、サーベイスキャンの選択に応じて異なります。
8. 選択したスキャンタイプに応じてパラメータを編集し、**Next** をクリックします。  
Dependent Scan – Enhanced Product Ion (EPI) ページが開きます。
9. モニタリングするピークの数を選択し、スキャンパラメータを設定して、**Next** をクリックします。  
Dependent Scan – IDA Criteria ページが開きます。
10. イオン質量範囲を指定するには、イオン質量範囲の下限と上限を入力します。ディペンデントスキャンは、この範囲内の質量に対して実行されます。
11. **Which exceed** フィールドに、ディペンデントスキャンのトリガーに必要な秒当たりの最低カウント数を入力します。
12. IDA 実験の電荷状態範囲を指定するには、**With charge state X to Y charges** チェックボックスを選択し、電荷状態をクリックします。

---

**ヒント!** 電荷状態は、アイソトープ比が適切に特定されたかどうかに応じて変化します。そのため、ER スキャンを実行して電荷状態を確認しなければなりません。

---

13. 電荷状態が不明なピークを含めるには、**Include unknowns** チェックボックスを選択します。
14. **Exclude Former Target Ions** グループ内で、次のいずれかの操作を行います。
  - IDA 実験で発生したターゲット済みイオンをすべて無視するには、**Always** を選択します。
  - IDA 実験で発生したターゲット済みイオンをすべて認識するには、**Never** を選択します。
  - 指定期間中に発生したターゲット済みイオンを無視するには、**For** を選択し、イオンを無視する秒数を入力します。



- ターゲット済みイオンが指定回数を超えて発生した後、一定期間中に発生したフォーマータターゲットイオンを無視するには、**For** を選択し、イオンを無視する秒数を入力します。続いて **After** を選択し、発生回数を入力します。
  - 指定回数を超えて発生したターゲット済みイオンをすべて無視するには、**Always** と **After** を選択し、発生回数を入力します。
15. 指定回数を超えて発生したターゲット済みイオンを除外するには、**Exclude Former Target Ions** グループで **After X occurrences** を選択し、将来的なスキャンから除外されるまでのターゲット済みイオンの許容発生回数を入力します。
  16. **Finish** をクリックします。  
IDA 実験が自動的に Acquisition Method Editor に表示されます。LC メソッドおよびその他の IDA 基準 (包含リストや除外リストなど) を編集できるようになりました。
  17. MS メソッドをレビューし、必要に応じて、パラメータや他の IDA Criteria を編集します。
  18. デバイスがまだ含まれていない場合はデバイスを追加してから、関連するすべてのパラメータを更新します。

**ヒント!** すべてのイオン源ガスパラメータを更新できます。MS タブで **Edit Parameters** をクリックします。Source/Gas タブで適切な値を入力し、下にある **Source/Gas** チェックボックスを選択して、このパラメータをすべての実験に適用します。

19. 測定メソッドファイルを保存します。

## Acquisition Method Editor を用いて IDA メソッドを作成する

**注:** 実験はループ順に入力する必要があります。既存の実験の間に実験を挿入することはできません。

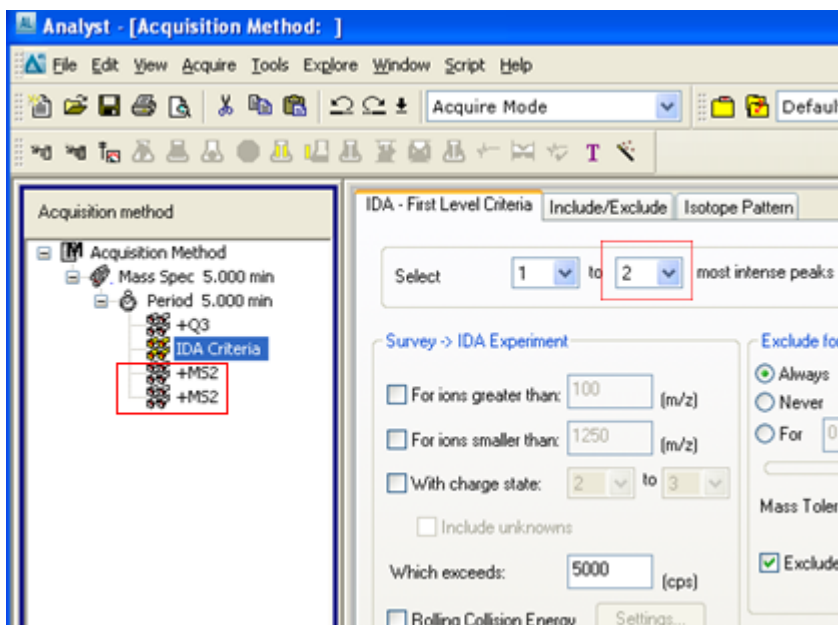
**ヒント!** 極性切り替えの必要性を減らし、サイクルタイムを最小化するために、期間内にすべてのポジティブディペンデント実験をまとめて、すべてのネガティブディペンデント実験をまとめてください。

1. Navigation バーの **Acquire** の下にある **Build Acquisition Method** をダブルクリックします。
2. 1 つまたは 2 つのサーベイスキャンを用いて新しい測定メソッドを作成します。
3. サーベイスキャンを選択し、適切なパラメータを選択します。
4. 拡張解像度スキャンを使用して、QTRAP システムでの電荷状態またはアイソトープパターンの選択を確認するには、次の手順を実行します。
  - **Period** アイコンを右クリックし、**Add experiment** をクリックします。
  - MS タブの **Scan type** リストで、**Enhanced Resolution (ER)** をクリックします。
  - 分解能強調モードスキャンの詳細を適宜に入力します。
5. **Period** アイコンを右クリックし、**Add IDA Criteria Level** をクリックします。

## IDA メソッドを作成する

6. **Select X to Y most intense peaks** フィールドで、監視する IDA 実験でモニターする最も強いイオンピークの範囲を設定します。シングルサーベイ IDA については、モニター対象のピークの総数は、指定したディペンデント実験の数と等しくなければなりません。サーベイスキャンの極性切り替えを伴うデュアルサーベイ IDA については、ディペンデント実験の数は、モニター対象のピーク総数の 2 倍でなければなりません(これらの半分は一方の極性用、もう半分は他方の極性用です)。

図 2-2 : 2 つのディペンデントスキャンタイプと 2 つの最高強度イオンを伴う IDA メソッドの例



7. 拡張分解能(ER)スキャンを使用する場合は、監視する各ピークのプレースホルダーを追加します。  
ER プレースホルダーの中央 (amu 0) ウィンドウに「1」と入力します。4 つのピークをモニターする場合、中央の列に 1、2、3、4 の数字が入った 4 列の列ができることになります。詳細な情報については、次のセクションを参照: [プレースホルダーについて](#)。
8. ER スキャンを使用して、電荷状態の確認、同位体パターンの選択、または質量精度の回復を行う場合は、IDA - First Level Criteria タブの **Use Enhanced Resolution Scan to confirm Charge State OR Isotope Pattern Selection** チェックボックスをオンにします。
9. IDA - First Level Criteria タブの残りのパラメータを適宜に設定します。
10. 必要に応じて、Include/Exclude タブで、適切なリストを変更して **Include List** または **Exclude List** チェックボックスを選択し、ターゲットイオンまたは除外イオンを指定します。
11. 必要に応じて、Include/Exclude タブで **Match Isotopes** チェックボックスを選択し、一致させたいアイソトープ分布パターンを指定します。
12. 追加する最初の依存実験では、第 1 レベルの IDA 基準によってモニターされるピークごとに 1 つずつ、次の操作を行います。
  - a. **Period** アイコンを右クリックし、**Add experiment** をクリックします。  
実験は IDA Criteria の下に追加されます。

- b. ディペンデントスキャンの詳細を適宜に入力します。

**ヒント!** 複数のディペンデントスキャンを実行する場合には、EPI スキャンを右クリックし、正しい数のディペンデントスキャンが含まれるまで **Copy this experiment** を選択します。実験を追加する代わりにコピーすることで、まったく同じ設定が新規ディペンデントスキャンに適用されます。

13. メソッドを開きます。
14. 装置を追加し、関連パラメータをすべて更新します。
15. 測定メソッドファイルを保存します。

## Scheduled MRM アルゴリズムスキャンを使用して IDA メソッドを作成

この例では、サーベイスキャンタイプから最高強度イオンを 1 つだけ検出するための IDA メソッドを作成します。測定メソッドには、1 つのサーベイスキャンと 1 つのディペンデントスキャンが含まれることになります。

複数のディペンデントスキャンを伴うメソッドを作成するには、高強度ピークの数、IDA Criteria タブのディペンデントスキャン数と一致していることを確認します (シングルサーベイス IDA にのみ適用)。たとえば、メソッドに 3 つの依存スキャンが含まれている場合は、1~3 個の最も強いピークを選択します。

1. *Scheduled MRM* 実験を作成します。次のドキュメントを参照: *Scheduled MRM アルゴリズムチュートリアル*。

**注:** *Scheduled MRM* 実験において Target Cycle Time オプションが用いられるよう選択した場合、このターゲットサイクル時間は *Scheduled MRM* 実験にのみ適用されます。IDA 測定メソッド内のすべての実験には適用されません。

**ヒント!** ER スキャンタイプを追加する場合は、IDA Criteria を追加する前に行います。

2. **Period** アイコンを右クリックし、**Add IDA Criteria Level** をクリックします。
3. **IDA Criteria** パラメータを指定します。
4. **Period** アイコンを右クリックし、**Add experiment** をクリックします。
5. MS タブの **Scan type** リストで、ディペンデントスキャンの種類を選択します。この例では、**Product Ion (MS2)** または **Enhanced Product Ion (EPI)** を選択します。

**注:** すべてのディペンデントスキャンタイプで、**Product Of** は 30 Da である必要があります。

6. 実験パラメータを指定します。
7. 測定が実施されるプロジェクトに測定メソッドを保存します。

## 2 つの *Scheduled MRM* アルゴリズムスキャンを使用して IDA メソッドを作成

この例では、サーベイスキャンと実験両方の組み合わせから、2 つの最高強度イオンを検出するための IDA メソッドを作成します。測定メソッドの例には、2 つのサーベイスキャン実験と 4 つのディペンデントスキャン実験が含まれています。

---

**ヒント!** サーベイスキャンタイプ中に極性が切り替わる場合は、次のセクションを参照: [極性切り替えについて](#)。

---

**注:** デュアルサーベイ IDA 測定メソッドでは、サーベイスキャンに 2 つの MRM 実験または 2 つの EMS (MS 強調モード) 実験を使用できます。

---

1. *Scheduled MRM* 実験を作成します。次のドキュメントのステップ 1~7 を参照:  
*Scheduled MRM アルゴリズム測定メソッド: Scheduled MRM アルゴリズムチュートリアル*。
2. **Period** アイコンを右クリックし、**Add experiment** をクリックします。  
2 つめの MRM スキャンが作成されます。これを反対の極性に設定します。
3. **Scheduled MRM** グループの **Enabled** チェックボックスを選択して、別の *Scheduled MRM* 実験を作成します。次のドキュメントを参照: *Scheduled MRM アルゴリズムチュートリアル*。
4. **Period** アイコンを右クリックし、**Add IDA Criteria Level** をクリックします。
5. **IDA Criteria** パラメータを指定します。
6. **Period** アイコンを右クリックし、**Add experiment** をクリックします。
7. MS タブの **Scan type** リストで、ディペンデントスキャンの種類を選択します。この例では、**Product Ion (MS2)** または **Enhanced Product Ion (EPI)** を選択します。

---

**注:** すべてのディペンデントスキャンタイプで、**Product Of** は 30 Da である必要があります。

---

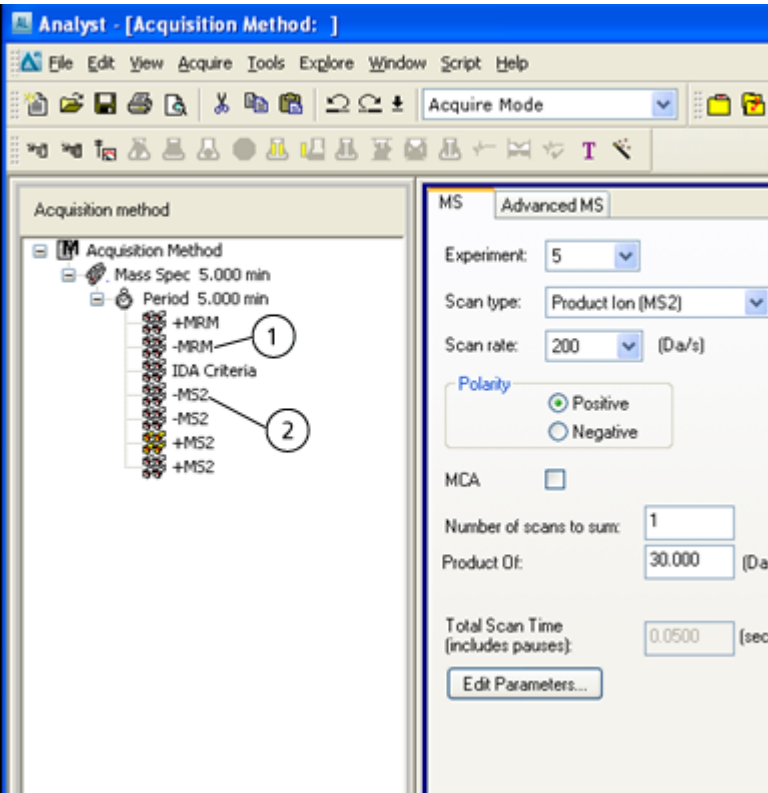
8. 実験パラメータを指定します。
9. **MS2** または **EPI** 実験を右クリックして、**Copy this experiment** をクリックします。
10. ステップ 9 を繰り返します。次のセクションで説明されているように極性が設定されていることを確認してください: [極性切り替えについて](#)。
11. 測定が実施されるプロジェクトに測定メソッドを保存します。

## 極性切り替えについて

サーベイスキャン間で極性が異なる場合、測定メソッドが以下のように設定されていることを確認してください。

1. 最初のディペンデントスキャンタイプの極性が、最後のサーベイスキャンタイプの極性と一致していることを確認します。

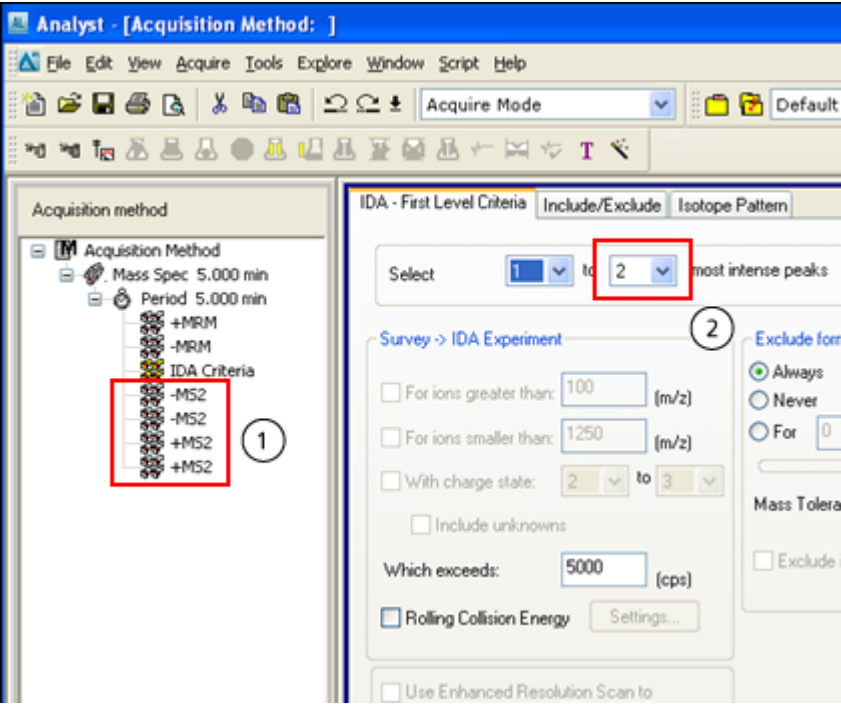
図 2-3：極性切り替えを考慮に入れたスキャンタイプの設定の例



項目	説明
1	最後のサーベイスキャン
2	最初のディペンデントスキャン

2. ディペンデントスキャン数が最も強いイオンの数の 2 倍になる測定メソッドを作成しますたとえば、最も強い 2 つのイオンを検索するには、4 つのディペンデントスキャンタイプを含めます。

図 2-4：ディペンデントスキャンタイプと最高強度イオン数の例



項目	説明
1	ディペンデントスキャンタイプ (4)
2	最高強度イオン (2)

注: 選択した候補は、同じ極性を持つディペンデント実験内でしかトリガーされません。候補が割り当てられていないディペンデントスキャンは、このサイクルでは実行されません。最大で半数のディペンデント実験が、あらゆる実験でトリガーされます。

3. ディペンデントスキャン実験ごとに、その極性が前回の実験と同一であることを確認した後、定着時間をゼロに設定しなければなりません。

## プレースホルダーについて

プレースホルダーとはスキャンに用いられる汎用的な数値であり、特定の数値によって置き換えられます。本ソフトウェアでは、プレースホルダー値が、IDA 選定プロセスで得られた特定の値に置き換えられます。プレースホルダーは、IDA メソッドが適切に機能するうえで欠かせません。

実験によっては、初めて選択される際にプレースホルダー値が自動的に追加されます。

- NL、Prec、EPI = 30
- MS/MS/MS
  - 一次プリカーサー = 30
  - 二次プリカーサー = 10

ER でもプレースホルダーが用いられます。

- プレースホルダーは、IDA メソッドの最初の行の 1 から始まります。連続する各行は、1 ずつ増加して最大 8 行になります。
- IDA Method Wizard を使用すると、正しい数の ER プレースホルダーが自動的に追加されます。

## IDA において *Scheduled* MRM プロアルゴリズムがもたらす影響

*Scheduled* MRM プロアルゴリズムを用いて データ依存型取得 (IDA) サーベイスキャンを実施する際には、IDA メソッドのディペンデントスキャンは、グループ内のすべての MRM トランジションの強度がそのトリガーしきい値を上回った場合にのみトリガーされます。これによってディペンデントスキャンの誤トリガーを抑えられることで、サイクル時間が改善します。

## IDA *Scheduled* MRM プロアルゴリズム測定メソッドを作成する

1. *Scheduled* MRM プロアルゴリズムメソッドを作成します。次のドキュメントを参照：  
*Scheduled MRM プロアルゴリズム測定メソッドを作成する*を参照してください。
2. 必要に応じて、期間に IDA 基準レベルを追加する前に、ER スキャンタイプの実験を追加します。
3. **Period** アイコンを右クリックし、**Add IDA Criteria Level** をクリックします。
4. IDA Criteria パラメータを指定します。次のセクションを参照：[IDA メソッドを作成する](#)。
5. **Period** アイコンを右クリックし、**Add experiment** をクリックします。
6. MS タブの **Scan type** リストで、ディペンデントスキャンの種類を選択します。この例では、**Product Ion (MS2)**または **Enhanced Product Ion (EPI)**を選択します。

---

注: すべてのディペンデントスキャンタイプで、**Product Of** は 30 Da である必要があります。

---

7. 実験パラメータを指定します。
8. 測定が実施されるプロジェクトに測定メソッドを保存します。

---

注: IDA *Scheduled* MRM プロアルゴリズムメソッドを用いたデータ収集時には、各 MRM トランジションのトリガーしきい値が用いられます (IDA しきい値は使用されません)。

---

## *Scheduled* Ionization を使用して IDA メソッドを作成

1. Method Editor で手動で、または **IDA Method Wizard** を使用して自動的に IDA メソッドを作成します。
2. メソッドのいずれかの実験を選択し、**Scheduled Ionization** チェックボックスをオンにします。



## IDA メソッドを作成する

3. **Scheduled Ionization** グループで、適切な **Start Time** と **Stop Time** を入力します。注目するピークが **Start Time** と **Stop Time** の間で溶出することを確認してください。また、取得方法の **Synchronization Mode** と LC 部分は、**Scheduled Ionization** を使用しない場合と同様に設定してください。

**注:** **Scheduled ionization** は、単一期間の取得方法でのみ使用できます。

次の図は、**LC Synchronization Mode** が使用され、LC メソッドの長さが 10 分であることを示しています。対象となるすべてのピークは、3 分後および 7 分前に溶出します。0 の **IonSpray** 電圧は、**Start Time** の前と **Stop Time** の後に適用されます。メソッドで設定された **IonSpray** 電圧は、**Start Time** と **Stop Time** の間にのみ印加されます。**Scheduled Ionization** 機能は、装置の汚染のリスクを減らし、質量分析装置のダウンタイムを減らすことができます。**Scheduled Ionization** の詳細な情報については、次のドキュメントを参照: アドバンスドユーザーガイド

図 2-5 : スケジュールされたイオン化

The screenshot displays the 'MS Advanced MS' configuration window. On the left, the 'Acquisition method' tree shows 'Mass Spec: 7.014 min' and 'Period: 4.014 min'. The main panel shows 'Scan type: Enhanced MS (EMS)' and 'Scan rate: 10000 (Da/s)'. The 'Period Summary' section includes 'Duration: 4.014 (min)', 'Delay Time: 0 (sec)', 'Cycles: 140', and 'Cycle: 1.7204 (sec)'. The 'Scheduled Ionization' checkbox is checked, with 'Start Time: 3 (min)' and 'Stop Time: 7.014 (min)'. Below this is a table with 4 rows and 3 columns: 'Start (Da)', 'Stop (Da)', and 'Time (sec)'. The table contains the following data:

	Start (Da)	Stop (Da)	Time (sec)
1	100.000	188.129	0.0000
2	188.129	386.426	0.0190
3	386.426	1000.000	0.0014
4			

The 'Total Scan Time (includes pauses)' is 0.3534 (sec). The 'Edit Parameters...' button is at the bottom left.

4. 測定メソッドを保存します。



IDA 方式を使用してデータを取得している場合、取得が完了するまでデータは IDA ビューアで開きません。ただし、取得中は Explore ウィンドウで開かれます。

IDA データを簡単に表示するには、IDA Explorer をデフォルトのビューアとして設定します。Appearance Options ダイアログの IDA Explorer タブで、IDA データの表示に用いる IDA Explorer を選択します。Mass-List List view ペインの列を選択することもできます。IDA Explorer は、IDA サンプルを表示するようプリセットされています。

## IDA Explorer オプションを設定する

1. **Tools > Settings > Appearance Options.**をクリックします  
Appearance Options ダイアログが開きます。
2. IDA Explorer タブを開きます。
3. **Use IDA Explorer to Display IDA Samples** チェックボックスを選択します。
4. **Column Options** セクションで、以下のチェックボックスを適宜に選択します：

表 3-1：列オプション

フィールド	説明
Intensity	(Intensity): 特定の $m/z$ 比の強度が示されます。
Molecular Weight (MW)	(Molecular Weight (MW)): 特定の $m/z$ 比の算出分子量が示されます。
Scan	(Scan): 特定の $m/z$ 比に用いたスキャンタイプが示されます。
Collision Energy (CE)	(Collision Energy (CE)): 特定の $m/z$ 比の衝突エネルギーが示されます。
Charge (Z)	(Charge (Z)): 特定のイオンの電荷が示されます。

5. LIT システムの場合、**LIT Column Options** セクションで、必要に応じて次のチェックボックスを選択します。

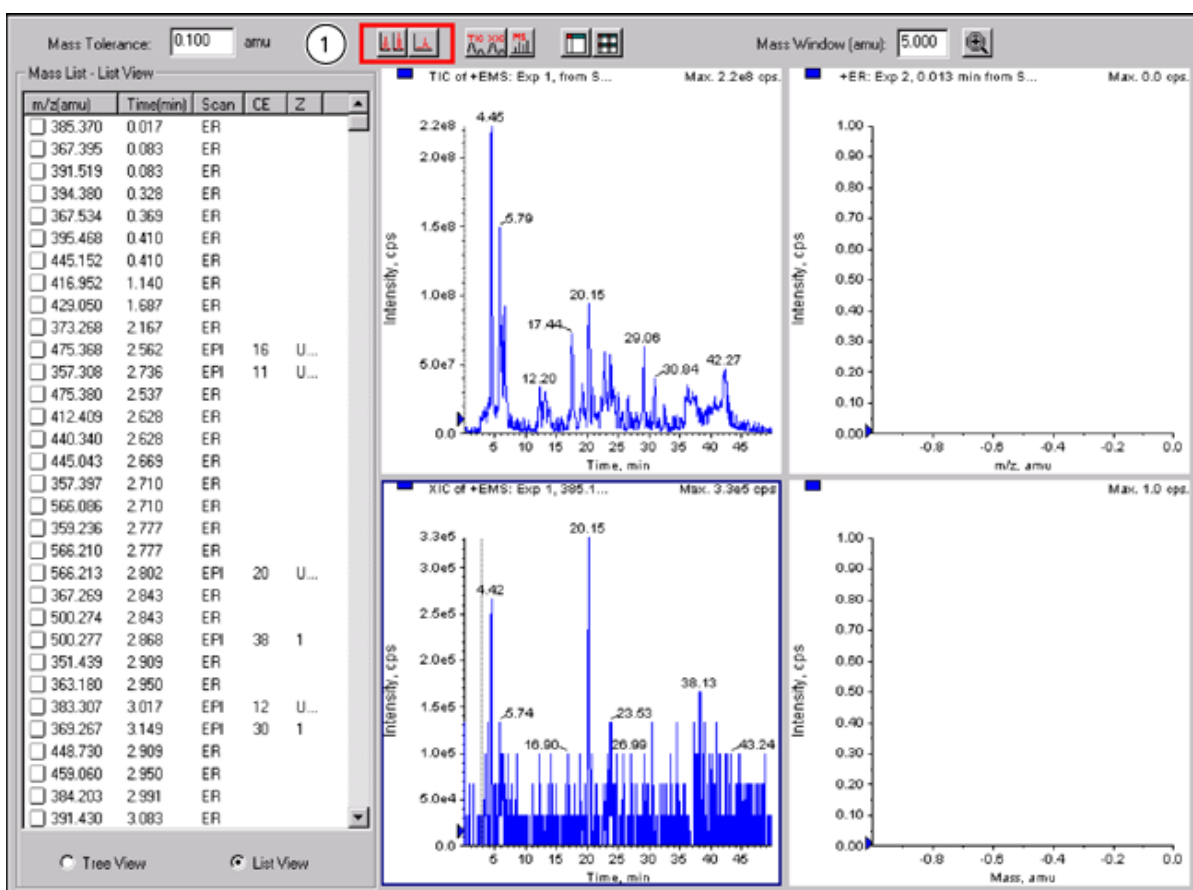
表 3-2：LIT 列オプション

フィールド	説明
Excitation Energy (AF2)	Excitation Energy (AF2)MS/MS/MS 実験における二次プリカーサーイオンの励起エネルギーが示されます。
MS3 2nd Precursor (2nd Pre)	MS3 2nd Precursor (2nd Pre)MS/MS/MS の二次プリカーサーイオンが示されます。
DFT (Dynamic Fill Time)	DFT (Dynamic Fill Time)LIT の充填に要する時間が示されます。

## IDA データを表示

1. Example プロジェクトが Analyst MD ソフトウェアで選択されていることを確認してください。
2. Navigation バーの **Explore** の下にある **Open Data File** をダブルクリックします。  
Select Sample ダイアログが開きます。
3. **Data Files** フィールドで、**LIT** をダブルクリックし、**IDA BSA Digest.wiff** をクリックします。
4. **Samples** リストでサンプルをクリックし、**OK** をクリックします。  
IDA Explorer が開きます。ペインの左側には、ディペンデントスキャン用に送信された質量リストが表示されます。ビューを切り替えるには、Mass List ペインの下部にある **Tree View** または **List View** を選択します。ペインの右側には、IDA データの情報がグラフ表示されます。

図 3-1 : 「単一グラフ表示」ボタンと「複合グラフ表示」ボタン



5. グラフの上に表示されるこれら 2 つのボタン(項目 1)を用いて、単一グラフと複合グラフの間で表示を切り替えます。アクティブなグラフのみを表示するには、1 つのグラフが示されたボタンをクリックします。複合グラフ表示に戻るには、2 つのグラフが示されたボタンをクリックします。

**ヒント!** IDA Viewer で使用できない **Explore** モード機能にアクセスするには、グラフ上のペインで **Export Active Graph to Explorer** と **Export All Graphs to Explorer** をクリックして、Explore ウィンドウで現在のグラフを開きます。

---

## IDA Explorer が非アクティブ時に IDA データを表示する

IDA Explorer がアクティブでない場合は、IDA データが Explore ウィンドウに表示されます。IDA データを表示するには、X 軸の下部にある緑色の矢印をダブルクリックします。

## IDA データを表示

図 3-2 : すべてのスキャンが含まれる TIC (IDA データの矢印は円内に表示)

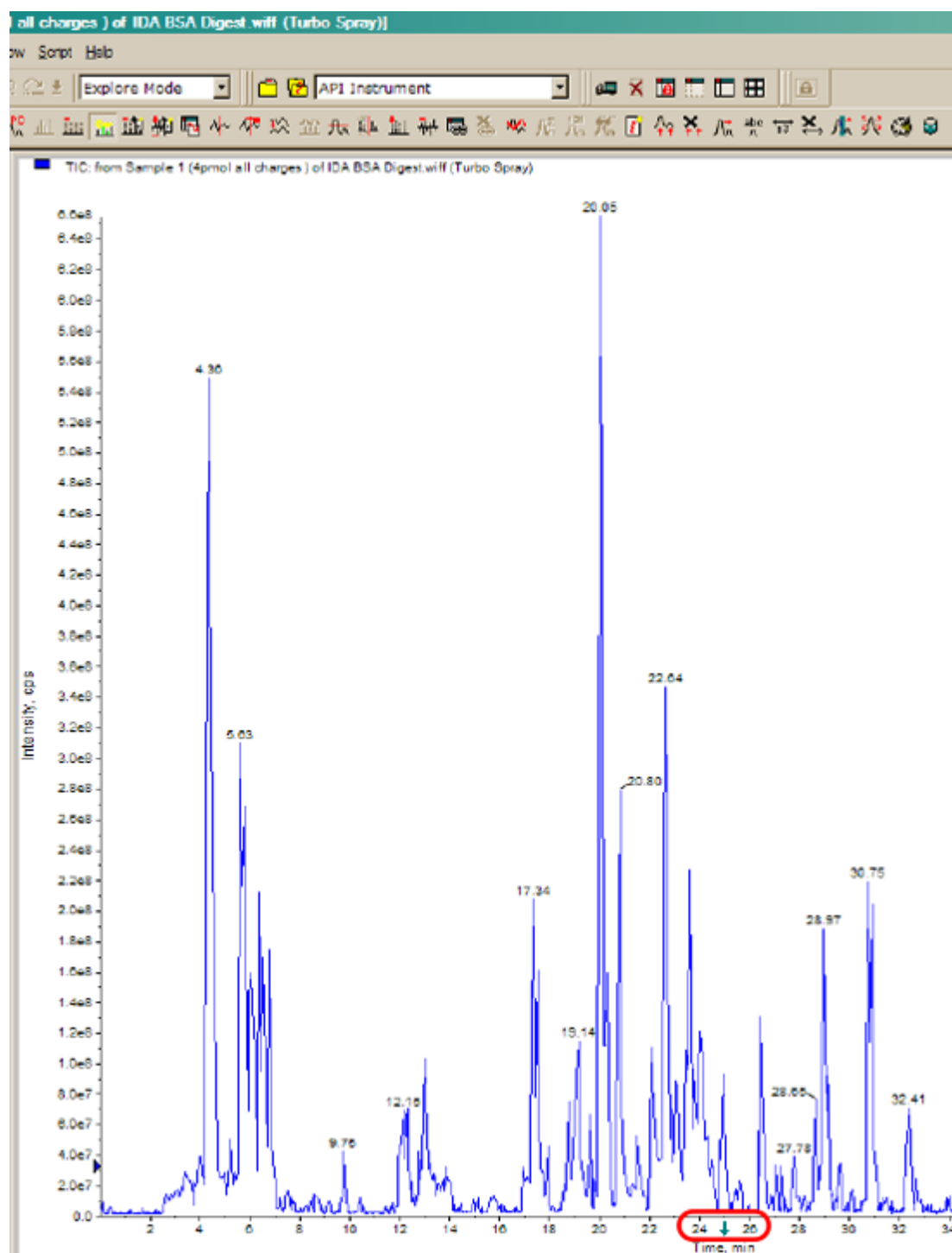
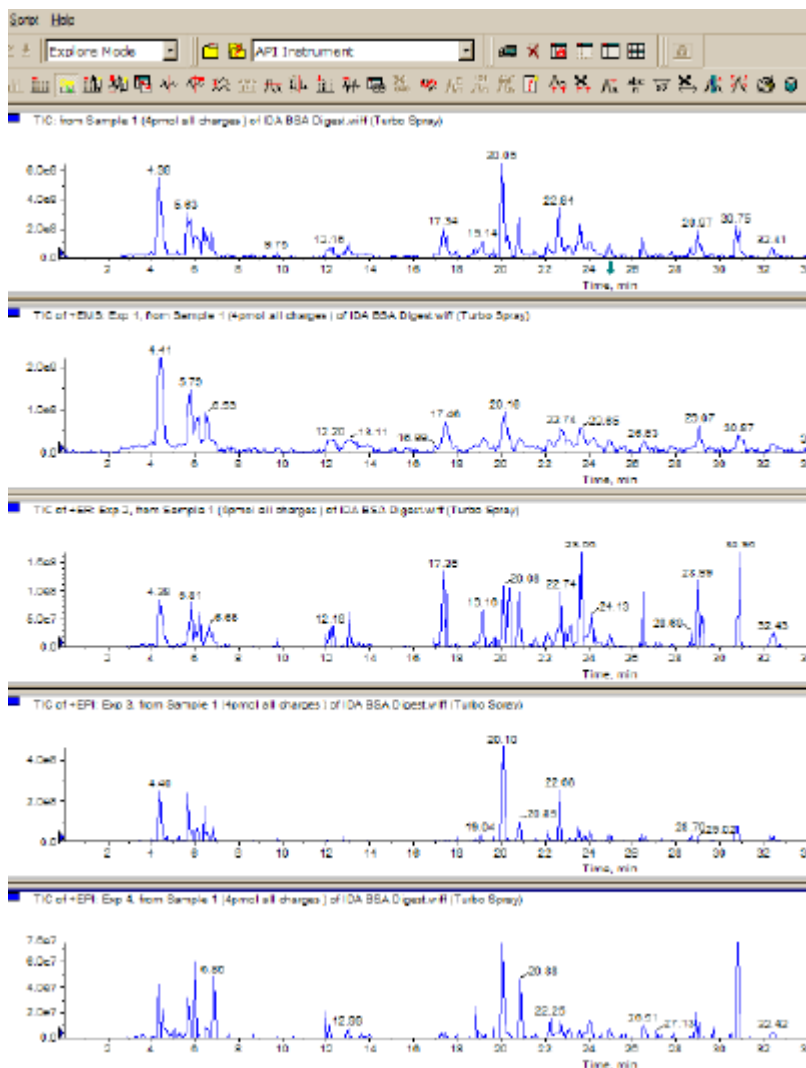


図 3-3 : 個々および追加の TIC スキャン



## 動的バックグラウンド減算アルゴリズムについて

Dynamic Background Subtraction (DBS) アルゴリズムを用いることで、IDA 実験におけるプリカーサーイオンの検出が改善します。IDA – First Level Criteria タブの **After Dynamic Background Subtraction of Survey scan** チェックボックスを選択して DBS をアクティブにすると、IDA は、調査スペクトルからプリカーサーを直接選択する代わりに、バックグラウンドを減算したスペクトルを使用して、MS/MS 分析の対象となる候補イオンを選択します。このプロセスは LC 分析中に実行されるため、DBS は、信号の強度が高まった化学種を検出できます。これにより、LC ピークの上昇部分 (最大で LC ピークの頂点 (最大強度) に至るまで) におけるプリカーサーイオンの検出と分析に焦点を当てることが可能となります。

*Scheduled MRM* アルゴリズムがサーベイスキャンとして用いられる IDA メソッドで DBS を使用する場合、DBS オプションは *Scheduled MRM* 実験では使用できませんが、二次トランジションとディペンデントスキャンの双方をトリガーする目的で用いられます。

## 動的充填時間について

DFT(動的充填時間)は、各スペクトルで取得したデータを LIT 機能向けに最適化するための機能です。DFT では、イオン源から放出されるイオン流量に基づいて、LIT の充填に使用される時間を自動的に調整します。









高強度のイオンにおいては、LIT がイオンによって過剰充填されないよう、充填時間が自動的に短縮されます。低強度のイオンについては、スペクトル内で良好なイオン統計が得られるよう、充填時間が自動的に延長されます。DFT は以下のスキャンタイプに適用されます。

- EMS (MS 強調モード)
- 分解能強調モード (ER)
- プロダクトイオン強調モード (EPI)
- MS/MS/MS (MS<sup>3</sup>)

Analyst MD ソフトウェアで **Tools > Settings > Method Options** を選択することにより、DFT 設定を調整できます。

## アイコン

表 3-3 : 測定メソッドエディタアイコン

アイコン	名前	説明
	質量 Spec	クリックすると、MS タブが Acquisition Method エディタに表示されます。
	Period	右クリックで実験、IDA Criteria Level の追加、または期間の削除を行うことができます。
	オートサンプラー	クリックすると、Autosampler Properties タブが開きます。
	シリンジポンプ	クリックすると、Syringe Pump Properties タブが開きます。
	Column oven	クリックすると、Column Oven Properties タブが開きます。
	バルブ	クリックすると、Valve Properties タブが開きます。
	DAD	クリックすると、DAD Method Editor が開きます。
	ADC	クリックすると、ADC Properties タブが開きます。

# お問い合わせ先

---

## お客様のトレーニング

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

## オンライン学習センター

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

## SCIEX サポート

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

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

## サイバーセキュリティ

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

## ドキュメント

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

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

ソフトウェア製品のドキュメントについては、ソフトウェアに付属のリリースノートまたはソフトウェアインストールガイドを参照してください。

ハードウェア製品のドキュメントを検索するには、システムまたはコンポーネントに付属の カスタマーリファレンス DVD を参照してください。

---

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

---