



## UltraFLEX 日本語マニュアル

## -目次-

1. 装置を立ち上げる	4
1-1. 窒素ガスを導入する	4
1-2. 本体の電源を入れる	4
1-3. PCを立ち上げる	5
2. 装置の停止	6
2-1. PCの停止	6
2-2. 窒素を導入する	6
2-3. 本体の停止	6
2-4. 窒素を止める	6
3. FLEXControl(測定用ソフト)	7
3-1. FLEXControlを起動する	7
3-2. 測定用メソッドファイルを読み込む	8
3-3. 窒素ガスを準備・確認する	8
3-4. サンプルターゲットの出し入れ	9
☆ターゲットを入れる	9
☆ターゲットの取り出し	9
3-5. MassRangeの設定(任意)	10
☆Mass Range	10
☆SampleRate	10
3-6. ターゲットポジションの選択	11
3-7. 測定する、その1	12
3-8. 測定する、その2	13
☆スペクトルの拡大	13
☆スペクトルの移動・拡大・縮小	13
☆スペクトル全体を見る	13
3-9. 測定する、その3	14
☆良好にシグナルが得られないとき	14
☆DeflectorおよびGatingの使用方法	14
3-10. 測定する、その4	15
3-11. キャリブレーション	16
☆ピークピックできない(クリックしてもピークにラベルが付かない)場合	17
☆キャリブレーション定数をメソッドファイルに保存する方法	18
3-12. データの保存	19
3-13. FLEXControlの終了	19
4. 測定の流れ	20
5. FlexAnalysis	21
5-1. FlexAnalysisを起動する	21
5-2. Fileを開く	22
☆ファイルを閉じる	22
5-3. スペクトルの拡大等	23
☆スペクトル全体を表示する	23
☆横軸の拡大	23
☆縦軸の拡大	23
☆マウスによる移動・拡大・縮小	23
☆数値入力による拡大・縮小	24

5-4. ピークピック	24
☆ピークが小さすぎてピックアップできない場合	25
☆ラベルの小数点以下の桁数を変える	25
☆数値の表示形式を変える	26
5-5. タイトル・コメントの編集	27
5-6. プリントアウト	27
☆プリントレイアウトの変更	27
5-7. その他の作業	28
☆複数のスペクトルを表示する	28
☆スムージング・ベースライン補正を掛ける	29
☆データのエクスポート	30
☆ReportDesigner	31
5-8. FlexAnalysisを終了する	32
6. LIFT測定	33
6-1. FlexControlを起動	33
6-2. LIFT測定用Methodファイルを読み込む	33
6-3. LIFTの設定をする	33
6-4. 測定を行う	34
☆親イオンの測定 (MH+モード)	34
☆フラグメントイオンの測定 (Fragmentsモード)	34
6-5. データの保存	34
6-6. モードの移行について	35
☆モード移行時、手動でピークピックするには	35
7. トラブルシューティング	36

## 1. 装置を立ち上げる

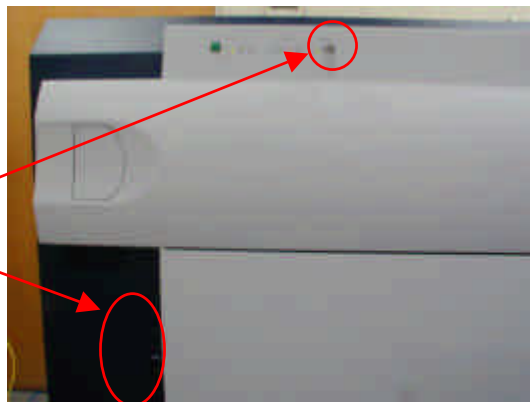
### 1-1. 窒素ガスを導入する

窒素ガスポンベのバルブを開けます。

### 1-2. 本体の電源を入れる

本体正面にある**スイッチ**をONにすると、ロータリーポンプ・ターボポンプが動き出します。

また、本体正面の**キースイッチ**をONにします。



### 1-2. PCを立ち上げる

モニターやプリンター等、必要な装置の電源を入れ、PCの電源も入れます。PCの指示に従い立ち上げ、ログインします。

ログイン名: \_\_\_\_\_

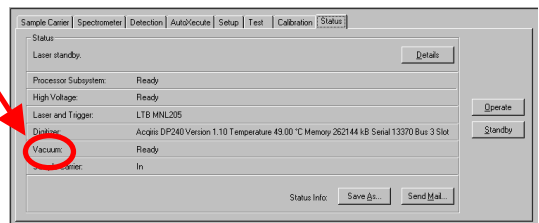
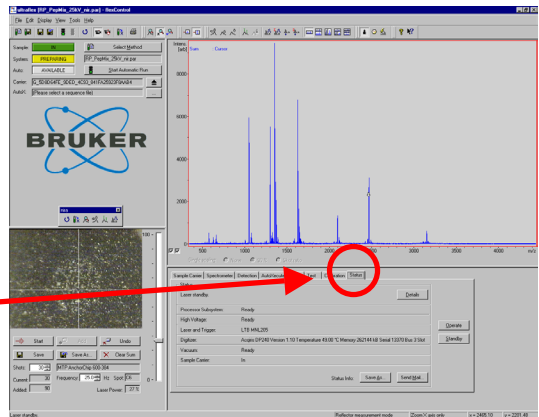
パスワード: \_\_\_\_\_



### 1-3. 真空度を読む

真空度を読むためにはアキュイジションソフトを立ち上げる必要があります。“3. FLEXControl”を参照してFLEXControlを立ち上げます。

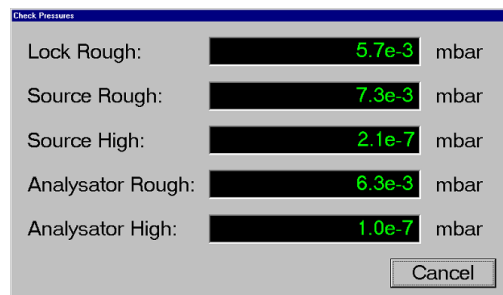
ソフト右下のタグの中から**Status**を選択し、さらにその中の**Vacuum**をクリックします。



装置各部の真空度が表示されます。

#### 真空度の目安

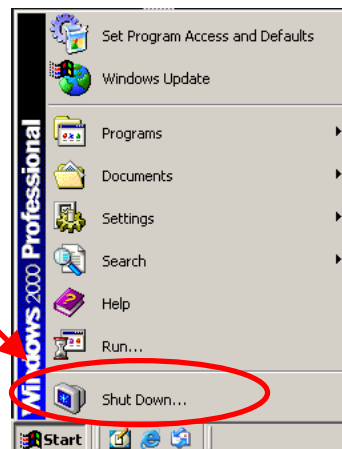
Lock Rough: < 5.0e-002 mbar  
 Source Rough: < 5.0e-002 mbar  
 Source High: < 8.0e-007mbar  
 Analysator Rough: <5.0e-002mbar  
 Analysator High: <8.0e-007mbar



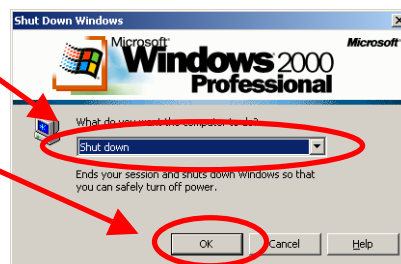
## 2. 装置の停止

### 2-1. PCの停止

スタート・メニュー・バーからShut Downを選択します。



What do you want the computer to do?の中からShut downを選択してOKをクリックします。



### 2-2. 窒素を導入する

窒素ポンペのバルブを開けます(もしくは開いていることを確認します)。

### 2-3. 本体の停止

①キースイッチを切り、②本体正面にあるスイッチをOFFにします。

### 2-4. 窒素を止める

装置停止後20～30分で窒素ポンペのバルブを閉じます。

## 3. FLEXControl(測定用ソフト)

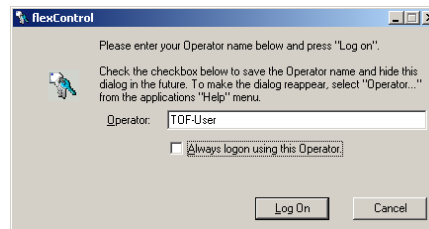
### 3-1. FLEXControlを起動する

PCの画面上にある、**FLEXControlアイコン**をダブルクリックしてソフトを起動させます

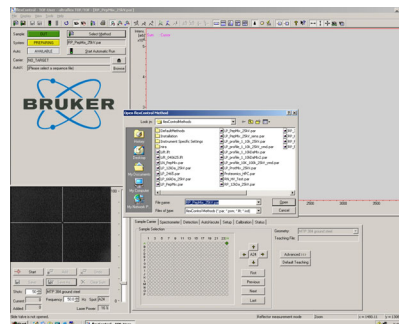
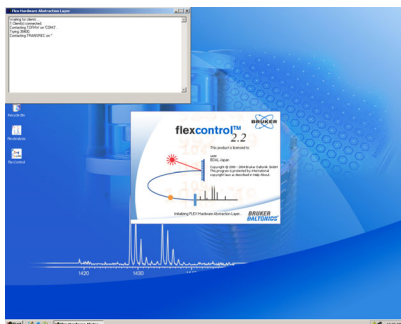


オペレータ名(ユーザー名)を尋ねる画面が出た場合はオペレータ名を入力して**OK**を押します。(デフォルトのままを推奨)

Operator : \_\_\_\_\_



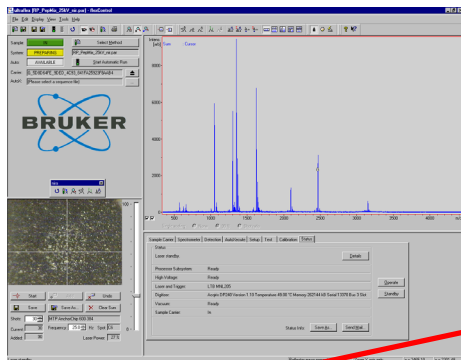
いくつかのソフトが動き出します。**Open FLEXControl Method画面**が出るまで待ちます。



“3-2. 測定用パラメータファイルを読み込む”をの上、測定に適したメソッド(パラメータ)を開きます。

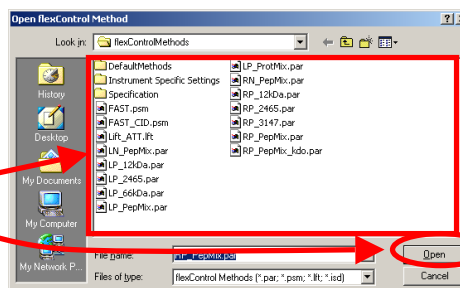
\* 注意: ここで**Cancel**をクリックするとFlexcontrolが終了しますので、何らかのメソッドを読み込むようにしてください。

### 3-2. 測定用メソッドファイルを読み込む



(必要があれば)測定用のメソッドを読み込み/読み直します。

**Select Method**を押し、**Open FLEXControl Method**画面を出します。



必要なファイルを選び、**Open**を押します。

メソッドのファイル名の最初には、測定モードを示す2文字が含まれています。

LP:Linear + Positive  
RP:Reflector + Positive  
(FAST:FAST用パラメータ、LIFT:LIFT用パラメータ)

LN:Linear + Negative  
RN:Reflector + Negative

その後に付く数字は、おおよその分子量を示します(High\_massesは高分子量測定用)。  
\* 注意: **Select Method**を押すと、現在のメソッドを保存するか確認するウィンドウが現れる場合がありますが、通常はNoをクリックしてください(メソッドファイルが上書きされると、元には戻せません)。

### 3-3. 窒素ガスを準備・確認する

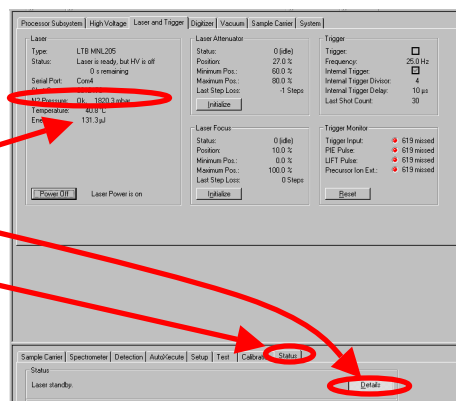
窒素ガスを準備もしくは確認します(窒素ポンプのレギュレータ)。ガスは純度の高いもの(99.9996%以上)を使用し、圧力は5~6bar(約0.5MPa)で装置に導入します。この窒素ガスは本体内部でレーザー用・バルブ開閉用・ベント用に分岐されます。

〈装置本体側で窒素ガスの供給をチェックするには〉

\* レーザーの窒素圧力を確認します。

FLEXControlの右下の選択タグの中から**Status**を選び、さらにその中の**Details**をクリックします

**Laser and Trigger**の中、**N2 pressure**の数値を確認します。(1800~2300mbar程度)



併せて、装置の真空度もチェックすると良いでしょう(1-3. 参照)。



### 3-4. サンプルターゲットの出し入れ

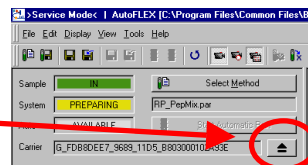
**ターゲットの出し入れの前に必ず窒素ガスの圧力を確認してください。**

ターゲットの出し入れにはバルブの開閉が伴います。

適正な圧力が供給されていない場合、開閉が行なわれずにエラーの原因になります。

#### ☆ ターゲットを入れる

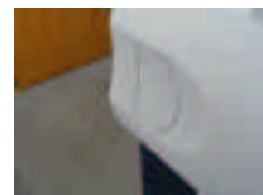
FLEXControlの中の、**ejectボタン**を押します。



本体のターゲット取出口のトレイが出てきますので、その上にターゲットを置きます。ターゲットの向きは、サンプル面を上にして角が欠けている方が内側になるようにします。



再度**ejectボタン**を押します。トレイが閉まりターゲットが入ります（1～2分程度時間がかかります）。



#### ☆ ターゲットの取り出し

FLEXControlの**ejectボタン**を押します。

1～2分後トレイが出てきますので、ターゲットを取りだし、再度ejectボタンを押してトレイを閉じます。

- \* 装置本体側にもejectボタン（四角い緑色のボタン）がありますが、Flexcontrol内のejectボタンで操作することを推奨いたします。
  - \* トレイは手で押し戻さず、必ずejectボタンで操作を行ないます。
- Sandwich TargetやAnchorchip、つまりMTP Target Frame（土台）が必要なターゲットプレートの場合は、必ずターゲットをFrameに取り付けてから本体へ入れるようにします（故障の原因になる可能性があります）。

### 3-5. MassRangeの設定(任意)

メソッドを読み込むと、その中には測定範囲(Mass Range)の設定も書き込まれており、自動的に測定範囲も設定されます。従って、測定を行うたびに必ずしも測定範囲の設定を行う必要はありません。サンプルや状況に併せて、「必要であれば」設定を変更してください。

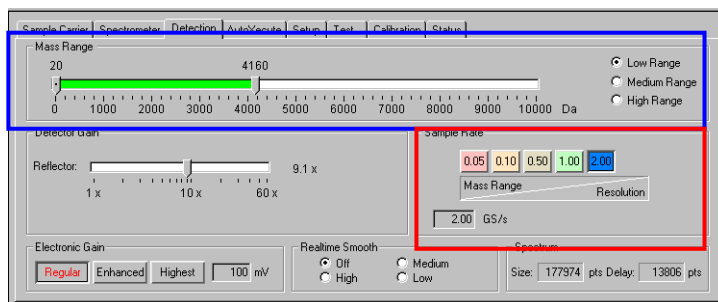
キャリブレーション用のサンプルと実際のサンプルが測定範囲内になるようにMassRangeを調整します

FLEXControl右下のタブから**Detection**を選択します。  
**MassRange**および**SampleRate**を調整します。

#### ★ MassRange

下の図で青い枠の中で、緑のラインで示された範囲が測定範囲となります。ラインの左右にあるつまみやラインをドラッグすることで測定範囲を変えられます。赤く表示されたラインは、測定可能外を意味します。

右側の**LowRange**・**MediumRange**・**HighRange**で、ラインの下の表示を変えられます。



注意: Mass Rangeの設定は飽くまでデータをコンピュータに取り込む範囲の設定であり、シグナルの分解能を決める加速電圧等の設定(同じくメソッドファイルの中に書き込まれています)とは別のものです。

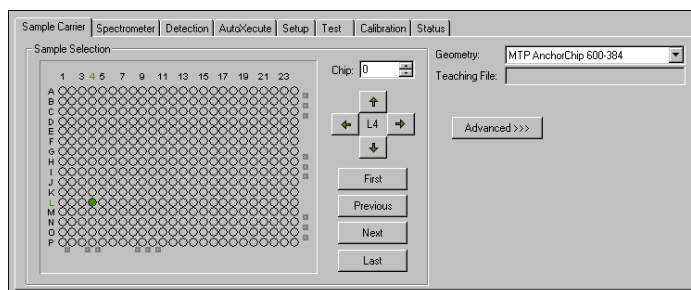
#### ★ SampleRate

上の図の赤い四角の部分です。サンプルレートが大きいほど、細かくデータをとるので分解能が上がります。ただし、測定範囲は狭くなりますので、サンプルに合ったレートを選択するようにします

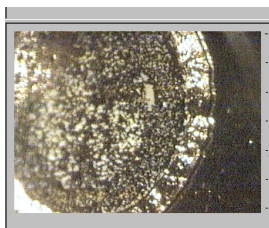
### 3-6. ターゲットポジションの選択

FLEXControlからSampleCarrierを選択します。

SampleSelectionの中から、サンプルを乗せた番号をクリックすると、その場所にターゲットが移動します。



更にビデオモニターの中の部分をクリックすると、そのポイントにレーザーが当たるように、ターゲットが移動します。



### 3-7. 測定する、その1

☆測定メソッド等を設定したら測定に入ります。

○メニューバーから目的のスペクトル画面(Buffer)を選択(表示)します。

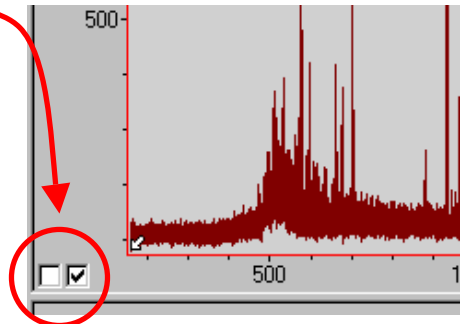


- ・ 積算スペクトル(Sum Buffer)
- ・ シングルスペクトル(Single Buffer)

測定を開始すると、データはまずSingle Bufferに入られます。従って測定開始時にはSingle Bufferのボタンが押されている状態にします。  
(この後、Single BufferのデータをSum Bufferに足し合わせていくことで積算をしていきます。)

○スペクトルを全体表示にするため、画面左下の2つの四角にチェックを入れます。

左側の四角をクリックしてチェックを入れると、縦軸が全領域になります。右側の四角をチェックすると横軸の全領域を見ることができます。スペクトルの拡大表示を行うと、これらのチェックが外れますので、全体表示に戻す場合はその都度チェックを入れます。

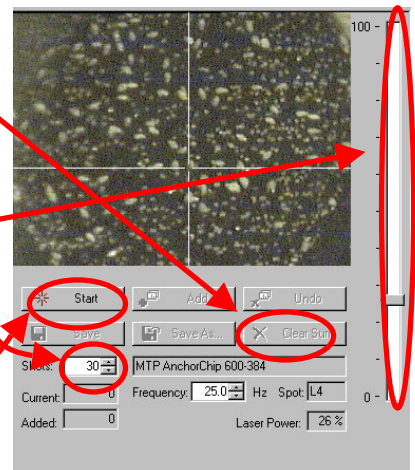


○サンプルモニターの右下の方にある**ClearSum** ボタンを押します。(前のデータの消去)

○**Shots**の値を入力します。(10~50程度:この回数分レーザーが発振されると測定が一旦停止します)

○レーザーパワーを設定します。(サンプルや調整状態によって最適なレーザーパワーは異なります) レバーを下げるとレーザーパワーが弱くなります。

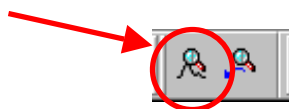
○**Start**を押し、レーザーを発振させ、スペクトルを得ます。



## 3-8. 測定する、その2

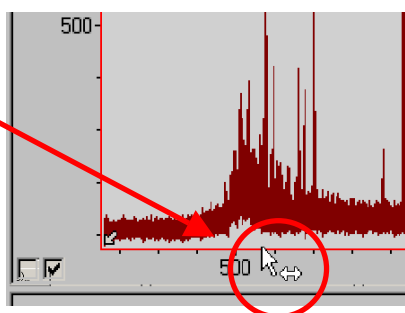
### ☆ スペクトルの拡大

ツール・バーにある**拡大(Zoom)ボタン**を押します。  
マウスの左ボタンをドラッグして、拡大したい範囲を囲みます。  
その際、縦軸のスケールは自動で調整されますので、考慮する必要はありません。



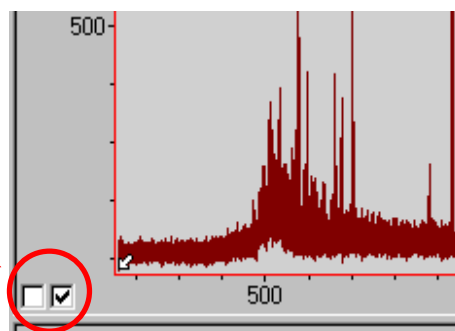
### ☆ スペクトルの移動・拡大・縮小

マウスカーソルをスペクトルの目盛ラベル周辺に合わせると、カーソルの形状が変化します。その状態でマウス左ボタンをドラッグするとスペクトルを移動することができます。マウス右ボタンでドラッグすると拡大・縮小することができます。  
縦軸も横軸も同様に操作することができます。



### ☆ スペクトル全体を見る

スペクトル画面の左下にある四角をチェックすると全体表示になります。  
左のマス:縦軸  
右のマス:横軸



### 3-9. 測定する、その3

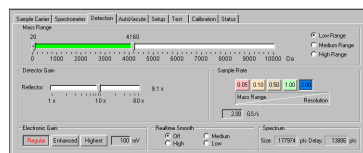
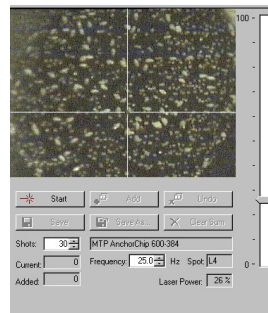
#### ☆ 良好にシグナルが得られないとき

##### ○ ノイズのみのスペクトルしか出ない

・レーザーパワーが弱い。レーザーパワーを強くする。レバーを上げます。

・サンプルのレーザー照射位置を変える。レーザーを当てたいポイントをクリックします。

・ディテクターの感度を変える。感度が低いときはDetectionタブの中のDetector Gainを上げます。(1.3~1.8kVが目安です。カーソルを合わせると電圧が表示されます)



##### ○ ピークが強く出過ぎる(飽和する)

- ・レーザーが強すぎる:レバーを下げてレーザーパワーを弱くします。
- ・感度が高すぎる:Detector Gainを下げます。

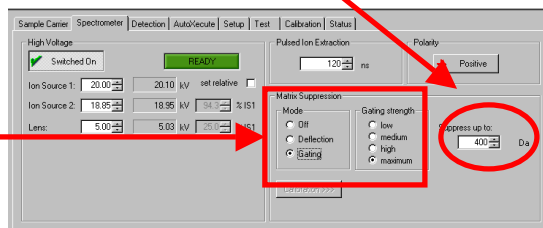
##### ○ マトリックスのピークは強く出るがサンプルのピークは弱い

- ・サンプルのレーザー照射位置を変える。レーザーを照射するポイントをクリックします。
- ・DeflectorまたはGatingを使う/設定変更する(低分子のカット)。

#### ☆ DeflectorおよびGatingの使用方法

Spectrometer画面を出し、Matrix Suppressionの中の**Suppress up to**にカットする分子量を入力します。

Reflectorモードの場合、**Matrix Deflection**を選択します。Linearモードの時は、**Gating**を選択、さらに**Gating Strength**を選択します。のlow~maximumのいずれかを(強く掛けたいときはmaximum)チェックします。



\* Reflectorモードの場合、Gatingを選択することは出来ません。

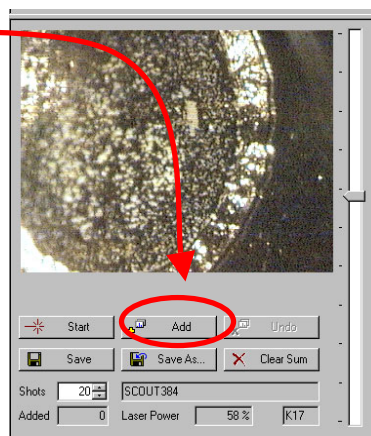
\* 測定されたスペクトル中、Suppress up to設定値の近傍はDeflector/Gatingによる悪影響(シグナル強度の低下、質量数誤差)が生じます。

\* Deflectorは低分子量のイオンを偏向させる方法、Gatingは低分子量イオンの検出感度を下げる方法(Gating Strengthは、どのくらい感度を下げるかの設定)です。

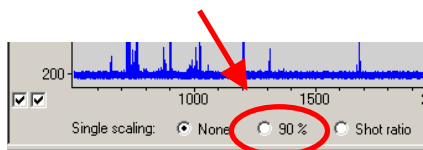
### 3-10. 測定する、その4

#### ☆ 良好なスペクトルが得られたら

**Addボタン**を押し、スペクトルをSum Bufferに加算します。すでにSum Bufferにスペクトルが存在している場合、そこに足される形になります。このようにして積算数を重ね、SN比がよくなるまで測定・積算をします。

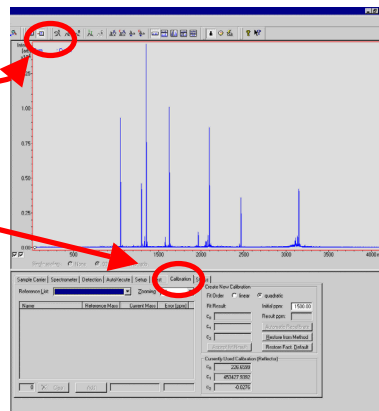


Single BufferとSum Bufferを同時に表示させ、**Addボタン**で積算を重ねていくと、Single Bufferが小さく(低く)しか表示されずに見づらくなることがあります。その場合、スペクトル下部の**90%ボタン**をクリックして選択します。これは、Single BufferをSum Bufferの90%まで拡大して表示するモードです。

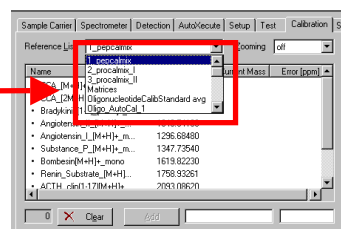


### 3-11. キャリブレーション

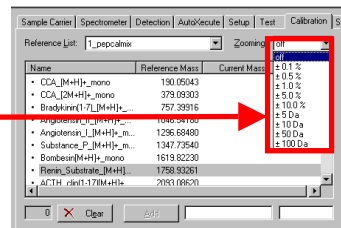
- ① キャリブレーションを行な(スタンダードの)うスペクトルをとり終わったら、**Sum Bufferのみ**を表示させ、**Calibration**タブを選択します。



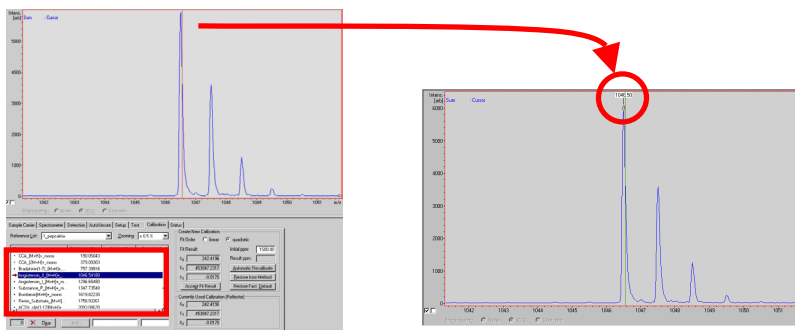
- ② **Reference List**からキャリブレーションに使用するリストを選択します。



- ③ **Zooming**からサンプルに適した倍率を選択します。(数千Daのサンプルであれば0.5%、数万Daであれば5%程度)



- ④ サンプルリストの中からキャリブレーションに使用するサンプルをクリックします。ピークがズームされるので正しいピークを選択します(選択するピークのピークトップより低く、左側の場所でクリック)。スペクトル中ではピークにラベルが付き、サンプルリストのCurrent Massには数値が入力されます。





⑤ 同様に数カ所（2ヶ所以上）ピークを選択します。（⑥の操作のみ）

数千Da以下のスタンダードで、三ヶ所以上ピークを選択した場合は、**quadratic**を選択すると良いでしょう（較正曲線の計算方法の設定です）。

Name	Reference Mass	Current Mass	Error [ppm]
CCA_[2M+H] <sup>+</sup> _mono	379.09303		
Angio_II_[M+H] <sup>+</sup> _mono	1046.51700	1046.43916	-22.87
Angiotensin_1_M+H+mono	1296.68530	1296.57395	-3.91
Subst.P._mono	1347.73610	1347.64356	-14.41
Bombesin_[M+H] <sup>+</sup> _mono	1619.82300	1619.71369	-20.58
ACTH(1-17)_M+H+mono	2093.08680	2092.89046	-0.50
ACTH(18-39)_M+H+...	2465.19900	2464.93291	-10.05

Create New Calibration

Fit Order:  linear  quadratic

Fit Result: Initial ppm: 1500.00

C<sub>0</sub>: 269.0737 Result ppm:

C<sub>1</sub>: 454797.9309

C<sub>2</sub>: 0.0000

Currently Used Calibration (Reflector)

C<sub>0</sub>: 270.8459

C<sub>1</sub>: 454827.7798

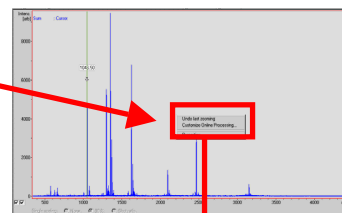
C<sub>2</sub>: 0.0000

⑥ **Error**の値が適正（高質量数の場合は大きくなる可能性があります）であることを確認し、**Accept Fit Result**を押します。キャリブレーション定数C<sub>0</sub>~C<sub>2</sub>が変わります

キャリブレーションの作業は終了です。  
続けてサンプルの測定をします。  
（そのスペクトルには最新のキャリブレーション定数が自動的に使用されますので、外部キャリブレーション済みのデータになります）

## ☆ ピークピックできない(クリックしてもピークにラベルが付かない)場合

① スペクトル画面内でマウスの右ボタンをクリックしてポップアップウインドウを出し、**Customize Online Processing**を選択します。



② **Setup Online Processing**の設定をします。Peak Detectionの **Algorithm for Display** を **Centroid** に、parameters: Centroidの **Signal to Noise Threshold** を **1** に、**Relative/Absolute Intensity Threshold** を **0** に設定します。

Setup Online Processing

Peak Detection

Algorithm for Auto: Apex Max. Peaks: 10

Algorithm for Display: Centroid Max. Peaks: 10

Parameters: Apex Centroid Sum SNAP

Signal to Noise Threshold: 1

Relative Intensity Threshold (Base Peak): 0 %

Peak Width (FWHM) m/z: 0.1

Absolute (min.) Intensity Threshold: 0

Centroid Percent Height: 80 %

Measure Baseline Subtraction:

Smoothing

Smoothing Algorithm: Savitzky Golay

Cycles: 1

Smoothing Width m/z: 0.143459

Baseline Subtraction

Baseline Algorithm: Tangential

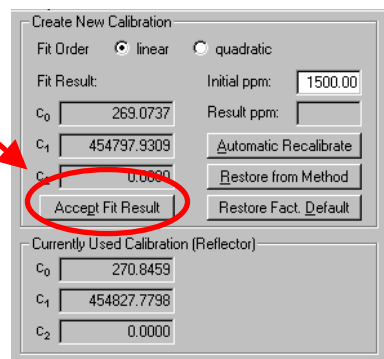
Elasticity: 1

③ もう一度ピークピックします。

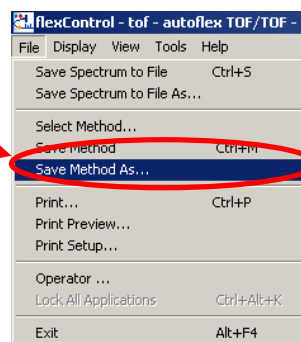
## ☆ キャリブレーション定数をメソッドファイルに保存する方法

メソッドのファイルの中にはキャリブレーション定数の情報も書き込まれており、「必要であれば」新しく作成したキャリブレーション定数をメソッドファイルに保存しておくことができます。

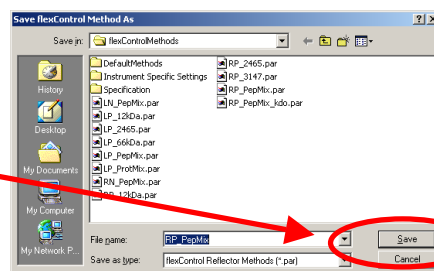
- ① 3-10. ⑥までの手順に従って**Accept Fit Result**を押します。



- ② **File→Save Method As**を選択します。

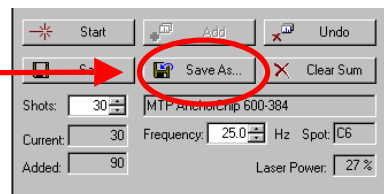


- ③ **Save**ボタンを押します。(ファイル名を変更して保存することをお勧めします)



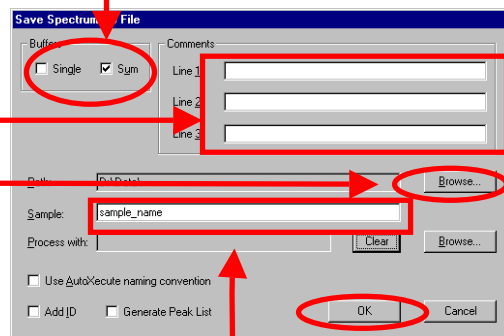
### 3-12. データの保存

- ① **SaveAsボタン**を押します。

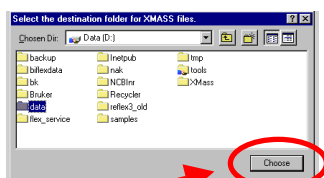


- ② 保存するスペクトル (Buffer) を選択します。通常は**Sum**を選びます。

- ③ 必要であればコメントを入力します。



- ④ **Browse** を押し **Select the destination folder for XMASS files.** からデータを保存するディレクトリを選択します。

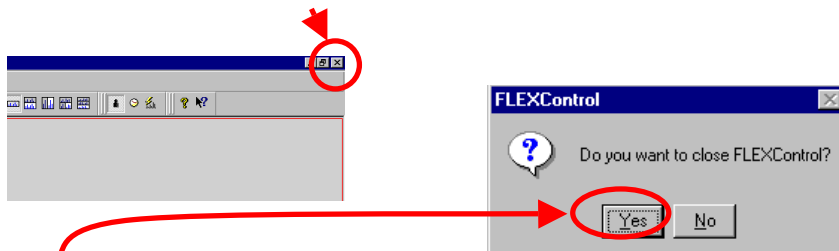


データを保存するフォルダの中に入ってから **Chooseボタン** をクリックします。

- ⑤ **Sample** の欄にサンプル名などを入れ (データの名前になります)、**OK** を押し保存します。

### 3-13. FLEXControlの終了

FLEXControlの右上の **×** 印をクリック、もしくはFileメニューの**Exit**を選択します。



**Yes** をクリックするとソフトが終了します

測定条件等に変更が加えられている場合、メソッドを保存するか確認されることがありますが、その場合、通常は**No**を選択します。

## 4. 測定の流れ

- ① サンプルを調製し、ターゲットに乗せ乾燥させます。(→別紙)
  - ② FLEXControlを立ち上げます。(→3-1.)
  - ③ 測定用メソッドを読み込みます。(→3-2.)
  - ④ レーザー用の窒素ガス圧を確認します。(→3-3.)
  - ⑤ ターゲットを導入します。(→3-4.)
  - ⑥ サンプルに合わせて設定をします。(→3-5. /3-6.)
  - ⑦ 標準(スタンダード)サンプルを測定します。(→3-7. /3-8. /3-9. /3-10.)
  - ⑧ キャリブレーションをします。(→3-11.)
  - ⑨ サンプルを測定します。(→3-7. /3-8. /3-9. /3-10.)
  - ⑩ データを保存します。(→3-12.)
- ターゲットを取り出します。(→3-4.)

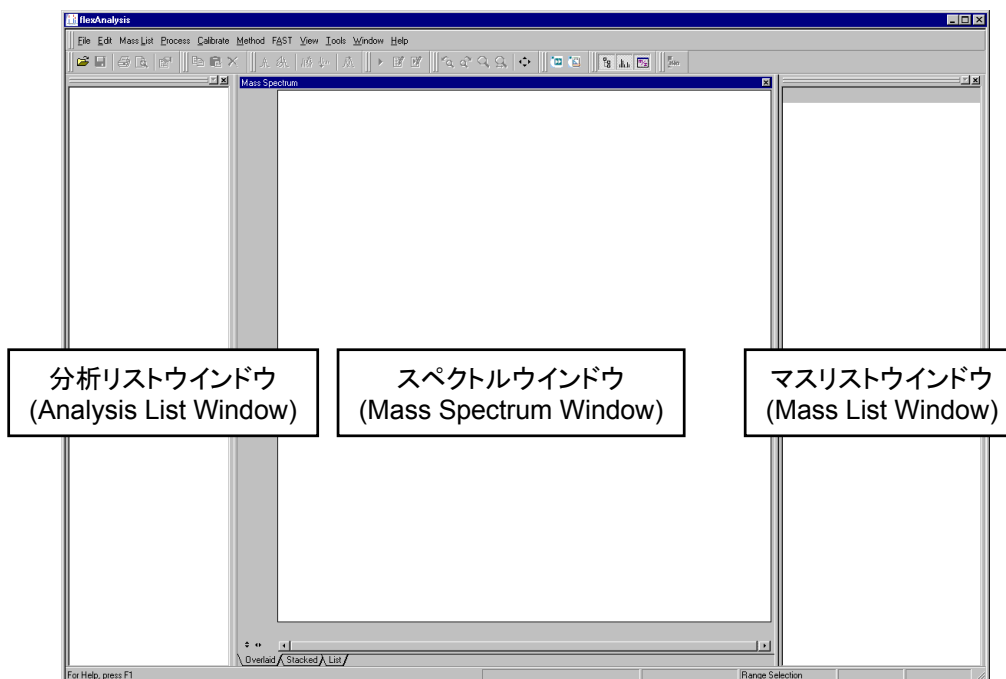
## 5. FlexAnalysis

### 5-1. FlexAnalysisを起動する

FlexAnalysisのアイコンをダブルクリックします。

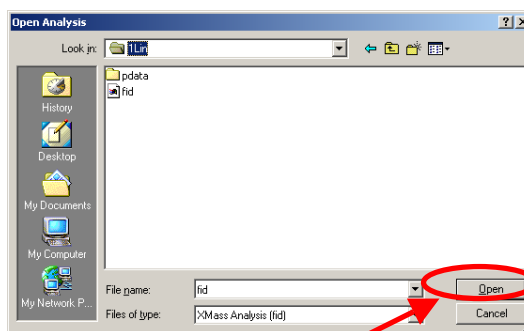
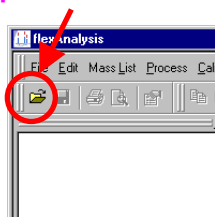


FlexAnalysisが立ち上がります



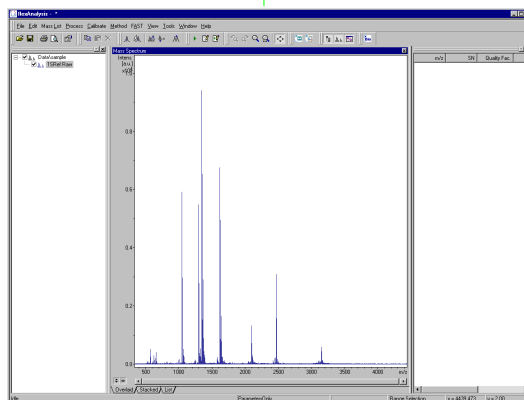
## 5-2. Fileを開く

Openボタンを押します。

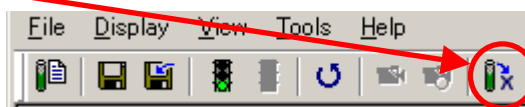


Open Analysisで、開きたいデータが入っているフォルダの中のfidファイルを選択し、Openをクリックします。

○ fidファイルは、FlexcontrolでデータをSaveした時に指定したフォルダの中の、サンプル名として入力した名前のフォルダの中の、nSRef(nは通し番号: Linear modeのデータ場合はnSLin: Single BufferのデータにはSがありません。)フォルダの中にあります (FAST/LIFTのデータの場合はfastフォルダの中です)。

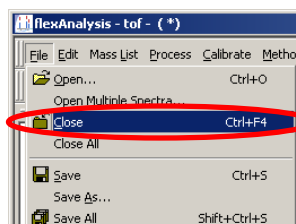


○ FlexControlから直接データを転送する方法もあります。FlexControlでデータを保存後、Load Last Saved Spectrum into Post Processing Applicationボタンをクリックすると、最後に保存されたスペクトルがFlexAnalysisに転送されます。



## ☆ファイルを閉じる

Fileメニューのcloseを選択します

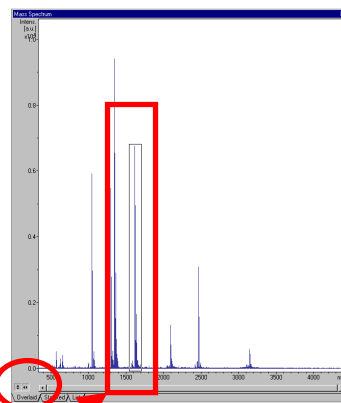


### 5-3. スペクトルの拡大等

#### ☆スペクトル全体を表示する

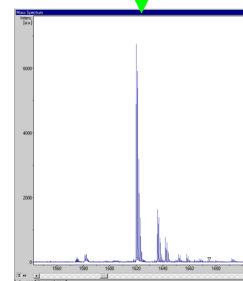


の両方を押した状態にします。  
(左が縦軸、右が横軸の全体表示)



#### ☆横軸の拡大

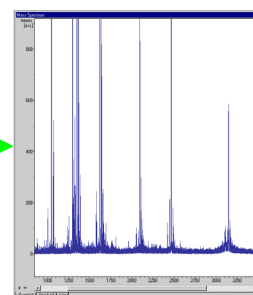
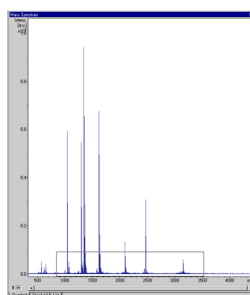
マウス中ボタン(ホイール)を押したままドラッグで拡大する部分を囲み、ボタンを離します。



#### ☆縦軸の拡大

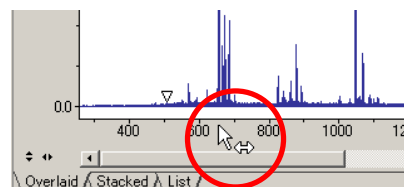


の左側(縦軸の全体表示)を押されていない状態にして、マウス中ボタンをドラッグすると、縦軸も拡大されます。



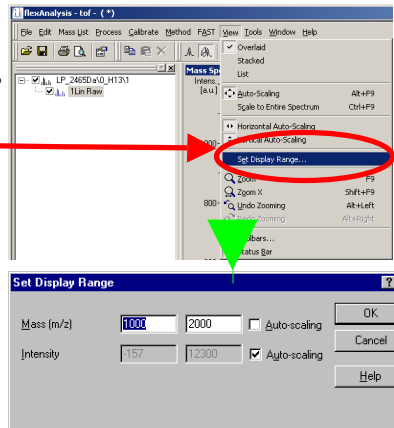
#### ☆マウスによる移動・拡大・縮小

FlexControlと同様、マウスカーソルをスペクトルの目盛りラベル周辺に合わせると、カーソルの形状が変化します。その状態でマウス左ボタンをドラッグするとスペクトルを移動することができます。マウス右ボタンでドラッグすると拡大・縮小することが出来ます。縦軸も横軸も同様に操作することが出来ます。



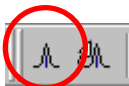
## ☆数値入力による拡大・縮小

Viewメニューの**Set Display Range**を選択します。

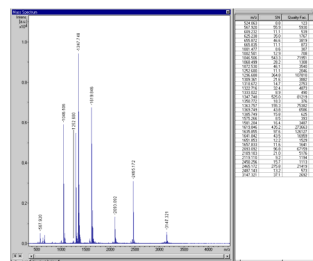
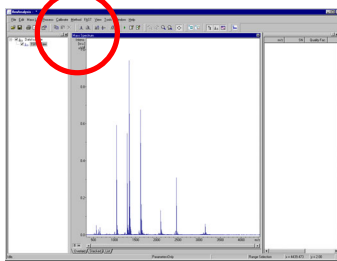


横軸(Mass)、縦軸(Intensity)それぞれに、**Auto-scaling**のチェックを外してから任意の値を入力し、OKをクリックします。

## 5-4. ピークピック



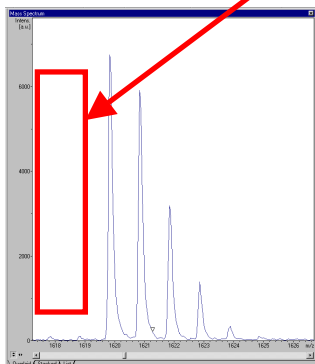
左のアイコン(**Mass List Find**)を押すと全範囲にわたってピークピックされます。



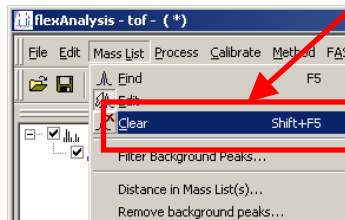
ピックされるとマスリストウインドウにピックされたピークのリストが現れます。



右のアイコン(**Mass List Edit**)を押すと手動で一つずつピークピックできます。ピックするピークのピークトップより低く、かつ左側の場所(図中、枠のある辺り)でクリックします。



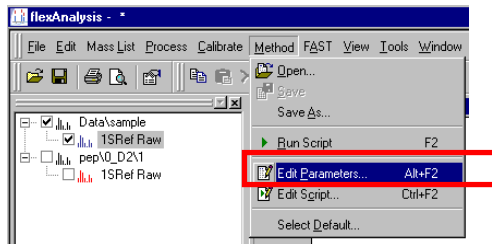
もう一度クリックすると、ピックが取り消されます。ピックの取り消しはマスリストウインドウから行うことも可能(行を選択してDelキー)ですし、全てのピックを取り消す場合には**Mass List**メニューの**Clear**を選択します。





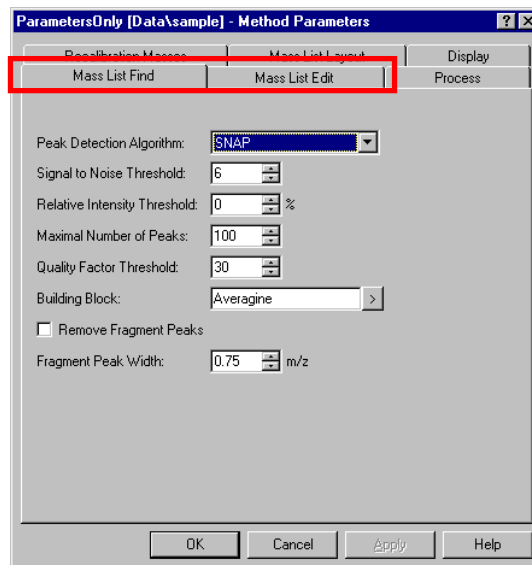
## ☆ピークが小さすぎてピッキングできない場合

Methodメニューの中のEdit Parametersを選択します。



Mass List Find用とMass List Edit用に独立してピークピッキングのパラメータを変更することができます(それぞれのタブを選択して下さい)。

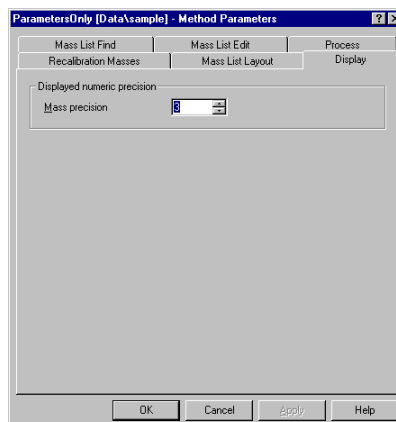
Peak Detection AlgorithmにCentroidもしくはSNAP(デフォルトではペプチド用)を選択し、Signal to Noise Thresholdに1を、Relative Intensity Thresholdに0を入力します。(Centroidの場合はAssure Baseline Subtractionのチェックを外します。また、SNAPの場合はQuality factor Thresholdの値を小さくした方がよい場合があります)



## ☆ラベルの小数点以下の桁数を変える

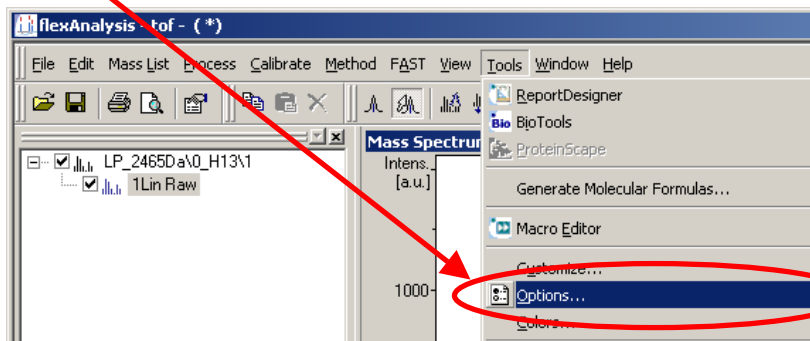
Edit Parametersウインドウの中で、Displayタブを選択します。

Mass Precisionの数字を小数点以下の桁数に設定し、OKをクリックします

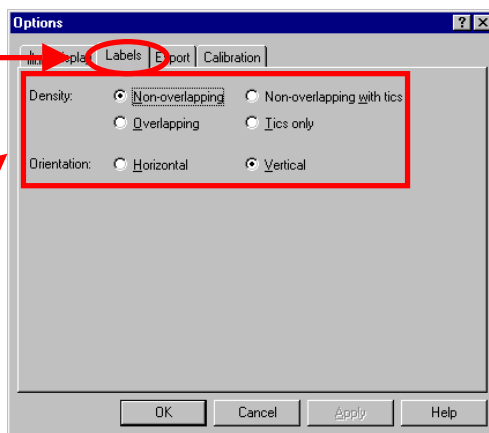


## ☆数値の表示形式を変える

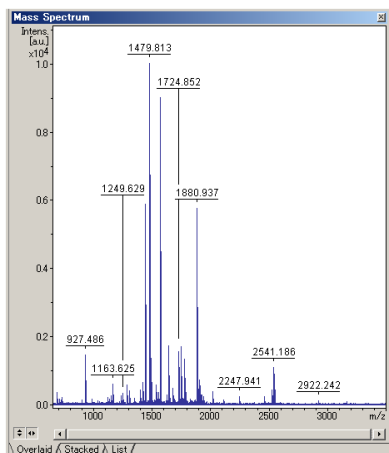
Toolsメニューの中のOptionsを選択します。



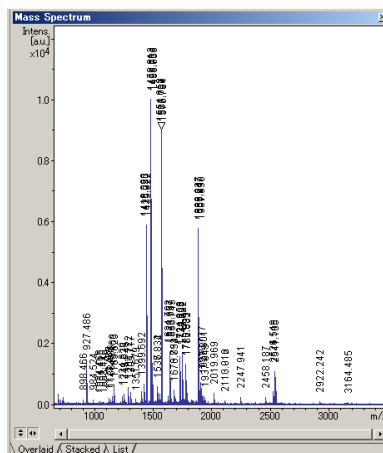
Optionsウィンドウの中のLabelsタブを選択します。



Densityでラベルのオーバーラップ有り/無しと、Orientationでラベルの縦書き/横書きを選択できます。



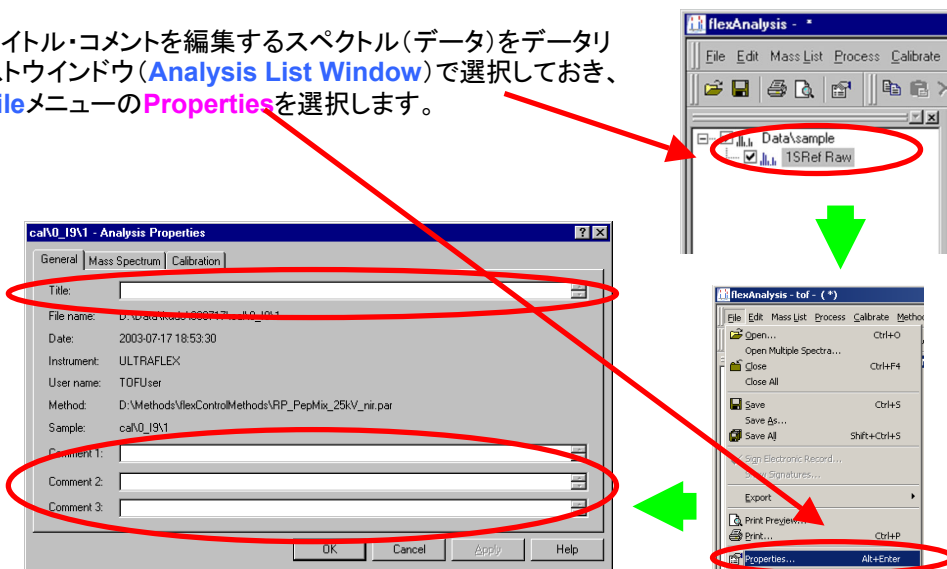
Density: Non-overlapping  
Orientation: Horizontal  
の例



Density: overlapping  
Orientation: Vertical  
の例

## 5-5. タイトル・コメントの編集

タイトル・コメントを編集するスペクトル(データ)をデータリストウインドウ(**Analysis List Window**)で選択しておき、**File**メニューの**Properties**を選択します。

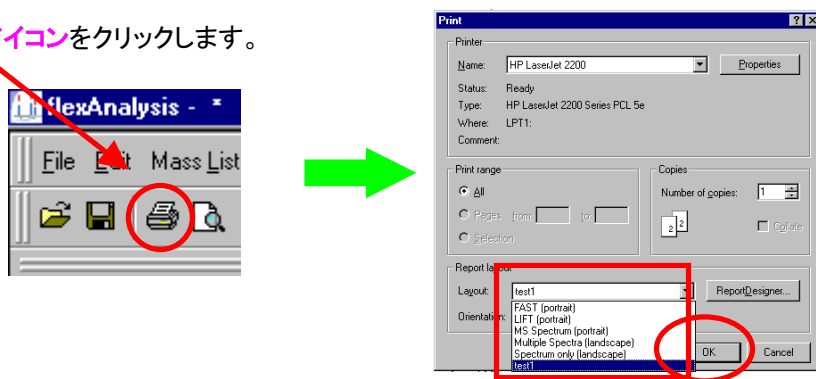


タイトル(**Title**)とコメント行(**Comment1-3**)にそれぞれ任意の文字列を入力します。これらはスペクトルをプリントアウトしたときに併せて表示させることが可能です。

\* このコメント行は、FlexControlでデータを保存する際に入力するコメント行と同じものです。保存時に何らかのコメントが入力されていれば、あらかじめそれが表示されます。

## 5-6. プリントアウト

**プリンタアイコン**をクリックします。



**Print**ウインドウが現れますので、**Layout**を選択して**OK**をクリックします。

### ☆プリントレイアウトの変更

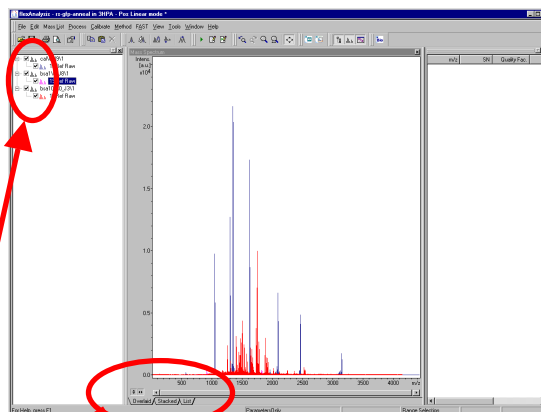
**Print**ウインドウで基になる**Layout**を選択した後、**Report Designer**をクリックすると、Report Designerが起動します。そこでレイアウトの変更を行うことが可能です。(5-7. その他の作業 ☆ReportDesigner 参照)

## 5-7. その他の作業

### ☆複数のスペクトルを表示する

既にスペクトルが読み込まれている状態で、5-2. に従って通常通り次のファイルを読み込むと、データリストウインドウ (**Analysis List Window**) にツリーが追加され、スペクトルは重ね書きされます。

読み込まれているスペクトルの表示/非表示はデータリストウインドウ中の **チェックボタン** で行います。

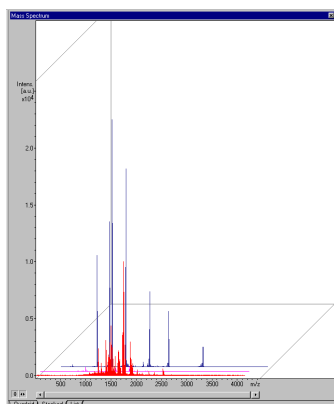


重ね書きの表示方法は

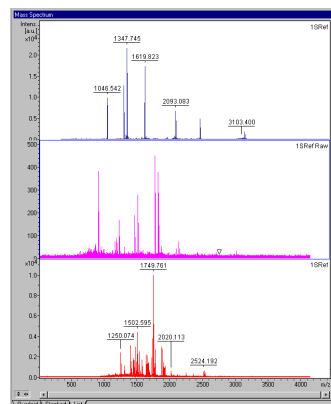


で選択することができます。

Overlaid



Stacked



List

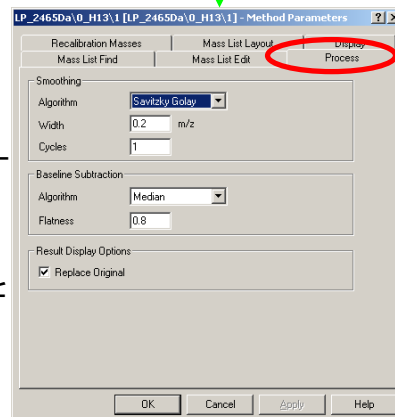
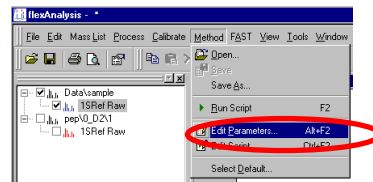
注意: スペクトルにピークピック等の処理を加える場合には、データリストウインドウで任意のデータを選択してから行います。(選択されているデータが処理される権利を持っています)。

## ☆スムージング・ベースライン補正を掛ける



左のボタンでスムージング、右のボタンでベースライン補正をすることができます。

それぞれの設定はMethodメニューのEdit Parametersを選択して現れるMethod Parametersウィンドウで行います。



Processタブを選択します。

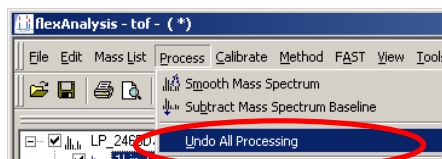
### スムージング

SmoothingのWidthの数値を大きくするとより強くスムージングが掛かります。

### ベースライン補正

Baseline SubtractionのFlatnessの数値を大きくするとより強くベースライン補正されます。

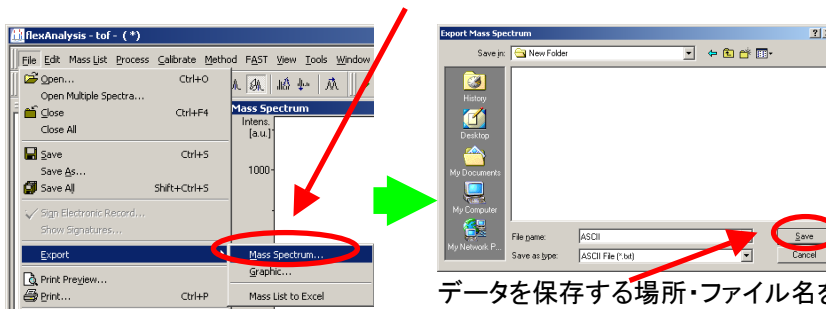
ProcessメニューのUndo All Processingを選択すると、スムージング・ベースライン補正されていない状態に戻ります。



## ☆データのエクスポート

### ○ASCII(テキスト)データとしてエクスポート

エクスポートするデータを分析リストウィンドウで選択しておいて、**File**メニューの**Export**から**Mass Spectrum**コマンドを選択します。

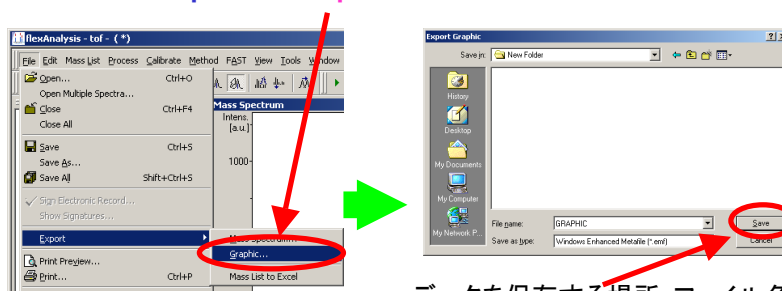


データを保存する場所・ファイル名を入力してから**Save**をクリックします。

\* これによってエクスポートされるファイルは、データにも依存しますが、多くの場合テキストファイルとしては巨大(約1MB前後)なものになり、行数は10万行を超えることもありますのでご注意ください。

### ○グラフィック(WMF)データとしてエクスポート

エクスポートするデータを分析リストウィンドウで選択しておいて、**File**メニューの**Export**から**Graphic**コマンドを選択します。



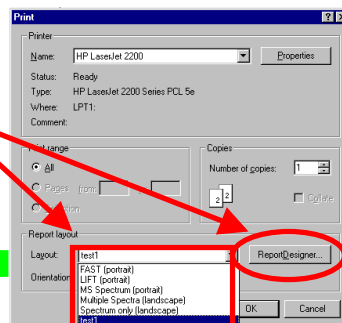
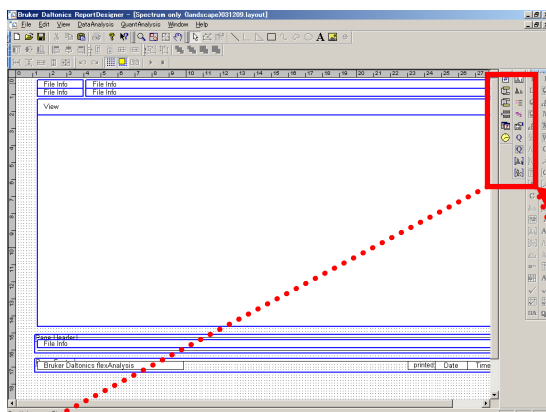
データを保存する場所・ファイル名を入力してから**Save**をクリックします。

\* Graphicコマンドが使用された時点でのスペクトルの表示状態(ピークラベルや拡大、重ね書き等)が、ほぼそのまま反映されますので予めスペクトルのフォーマットを整えておくとういでしょう。

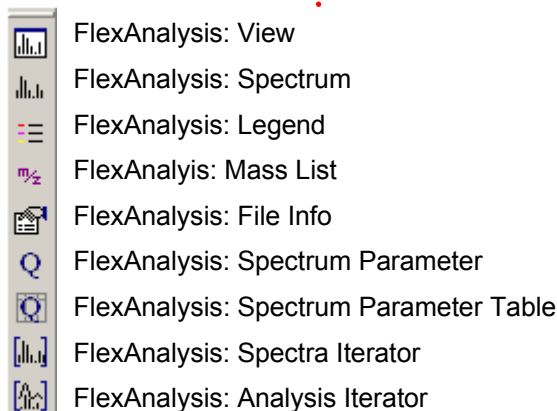
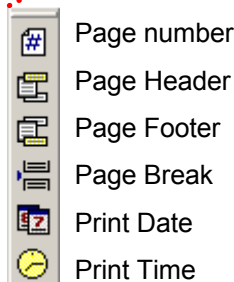
\* これによってエクスポートされるファイルは、ウィンドウズエンハンスドメタファイル形式(数十kB)です。ウィンドウズ標準のフォーマットですので、他の多くのソフトにインポートすることが可能です。

## ★ReportDesigner

Printウインドウで基になるLayoutを選択した後、Report Designerをクリックすると、Report Designerが起動します。

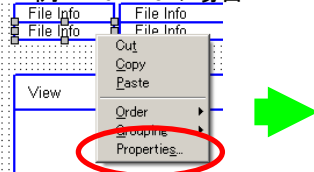


レイアウトに含めるアイテムのボタンをクリックし、さらにレイアウト上でクリックをするとレイアウトにアイテムが追加されます。

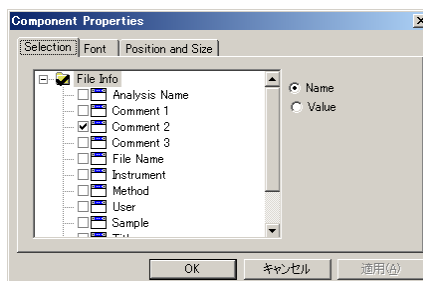


レイアウトに追加されたアイテムはドラッグアンドドロップで位置や大きさを変更することが出来ます。また、各アイテムの中の詳細な情報・フォーマットは、アイテムのプロパティ画面で設定を行ないます。

<例: File Infoの場合>



アイテムでマウス右クリックをして現れるメニューからPropertiesを選択します。

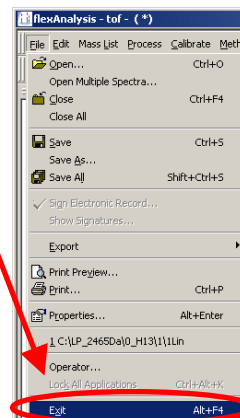
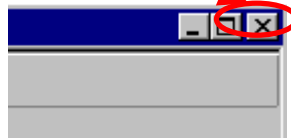


どの「File Infoパラメータ」を表示するか、さらにパラメータ名 (Name) で表示するか値 (Value) で表示するのを選択します

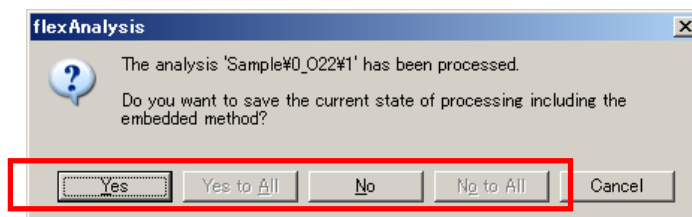
レイアウトの作業が終わったら保存します。FileメニューのSave Asで名称を変更して保存することをお勧めします。

## 5-8. FlexAnalysisを終了する

ウィンドウ右上の×ボタンをクリックもしくはFileメニューのExitを選択してください。



データが読み込まれている状態でFlexAnalysisを終了しようとする時、現在のデータを保存するか確認される場合があります。保存する場合は**Yes**、保存しない場合は**No**をクリックします。データが複数読み込まれていた場合で、全てのデータを保存する場合は**Yes to All**、全てのデータを保存しない場合は**No to All**をクリックします。

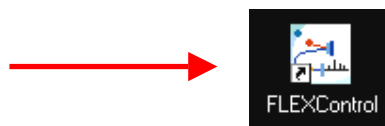




## 6. LIFT測定 (TOF/TOF装置のみ)

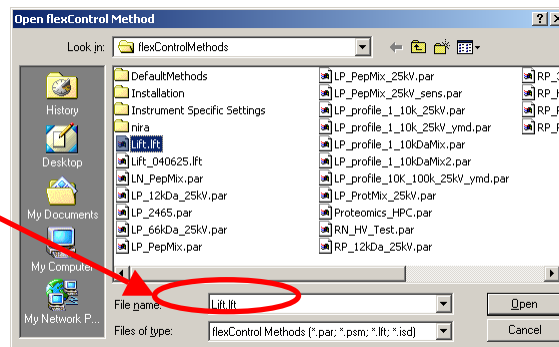
### 6-1. FlexControlを起動

アイコンをダブルクリックします。



### 6-2. LIFT測定用Methodファイルを読み込む

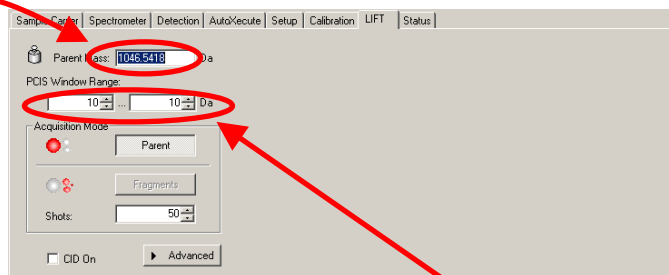
FlexControlのSelect MethodからLIFT用メソッド(例えばLIFT.lft)を選択・読み込みます。



\* 注意: LIFT.lftを読み込むと通常のMS測定はできなくなります。あらかじめRP\_xxx.par等のメソッドで通常の測定を行い、親イオンの質量数を調べておく必要があります。

### 6-3. LIFTの設定をする

ParentのMassにLIFT測定をする親イオンの質量数を入力し、Enterキーを押します。

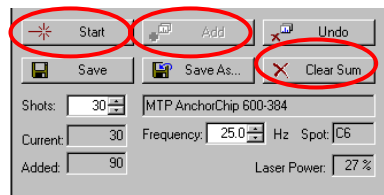


Massに入力した数値の約1%の値がPrecursor Ion SelectorのWindow Rangeに自動的に入力されます。(Window Rangeはイオンを選択するときの質量数の幅の設定で、実際に測定をしながらサンプル(スペクトル)に合わせて調整した方が良いでしょう。)

## 6-4. 測定を行う

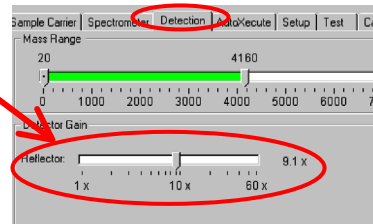
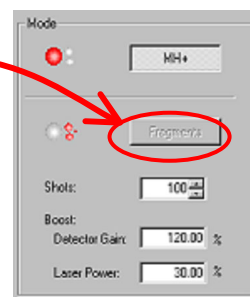
### ☆親イオンの測定(MH+モード)

- ・ **Clear Sum**を押します。
- ・ **Start**を押し、スペクトルの測定を始めます。
- ・ “なるべく”親イオンのシグナルのみが測定されるようにレーザーパワーを調整します。パワーが強すぎるとフラグメントイオンのシグナルも現れます
- ・ (必要であれば、この段階で**Window Range**の微調整も行います。)
- ・ 十分なクオリティーのスペクトルが得られたら**Add**を押して積算します。
- ・ 積算を数回繰り返します。
- ・ (この時点では、キャリブレーションされていないために質量数表示がずれている場合がありますが、異常ではありません)



### ☆フラグメントイオンの測定(Fragmentsモード)

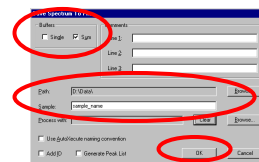
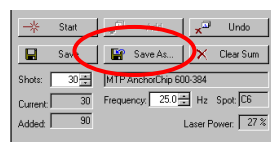
- ・ **Fragments**ボタンを押します。
- ・ **Start**を押し、スペクトルの測定を始めます。Fragmentsモードでは親イオンのシグナルは現れません。
- ・ フラグメントイオンがきれいに現れるようにレーザーパワーを調整します。MH+モードの時よりも強めにすると良いでしょう。
- ・ (必要であれば、**Detection**タブの**Detector Gain**の調整も行います。)
- ・ 十分なクオリティーのスペクトルが得られたら**Add**を押して積算します。
- ・ 積算を繰り返します。



## 6-5. データの保存

(通常の測定の場合と同じです)

- ・ **Save As**ボタンを押します。
- ・ **Sum**を選択し、保存する場所と名前を入力して**OK**をクリックします。



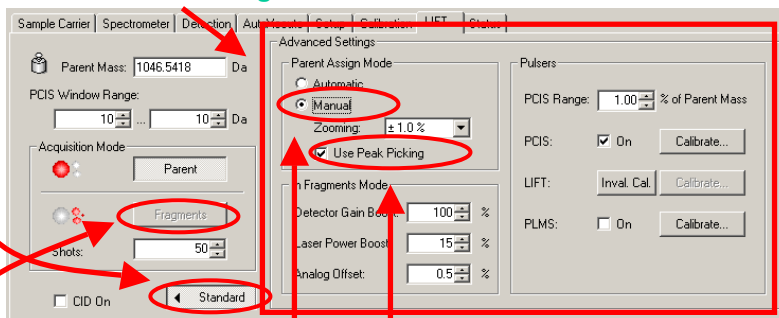
\* LIFTの測定が終わったら、通常のMS測定用メソッドを読み込んでおくことを推奨します。

## 6-6. Fragmentモードへの移行について

MH+モードからFragmentモードへ移行する際に、FlexControlはMH+モードで得られた親イオンのピークを自動で探し、それを基に質量数の補正を行います。このピーク探し(ピークピック)にはSNAP(ピークピックアルゴリズムの一つ)が使用されていますが、これは標準的なペプチドを想定したものです。従って、ペプチド以外のサンプルでは、同位体分布の形状がペプチドとは異なる場合があるため、間違った(同位体)ピークが選択されてしまう可能性があります。この場合、スペクトルのキャリブレーションがずれてしまうことになります。これを回避するには、手動でピークピックを行なう必要があります。

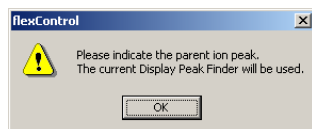
### ☆モード移行時、手動でピークピックするには

**Advanced**ボタンをクリック(押されるとStandardに変わります)すると、右側に**Advanced Settings**画面が現われます。



Parent Assign Modeから**Manual**を選択します。ピークピックアルゴリズムを使用してピークピックする場合は**Use Peak Picking**にチェックを入れます。

**Fragments**ボタンをクリックしてFragmentモードへ移行しようとする時、以下のメッセージが表示されますので、**OK**をクリックしてピークピックを行ないます。(Zoomingが設定されていれば、自動的に親イオン周辺が拡大表示されます)



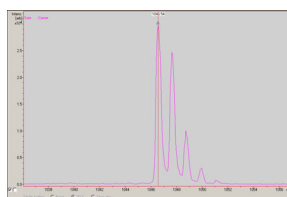
Use Peak Pickingが  
チェックされている場合

ピークピックの方法は、通常のキャリブレーション時と同様です。ピックしたいピークのピークトップより下かつ左の領域でクリックします。



Use Peak Pickingが  
チェックされていない場合

クリックした時のマウスカーソルの位置がそのまま親イオンピークの位置として認識されます。



ピークピックが行なわれると、Fragmentモードへ移行しますので測定を続けます

## 6. トラブルシューティング

### ☆FLEXControlでエラーメッセージが出る

FLEXControlを一度終了して、再立ち上げをしてください。  
それでも直らない場合は、ご連絡下さい。

FLEXControlでエラーが起きている場合、SampleもしくはSystemインジケータが赤色表示になります。その際、マウスカーソルをインジケータに重ねると、エラーの原因がメッセージとして表示されますので、その内容も併せてご連絡下さい。



### ☆FlexAnalysisがフリーズした

処理時間がかかる作業もありますので、しばらく待ってみて、それでもやはりフリーズしているようであればFlexAnalysisを強制終了 (Windows Task Managerを使用) し、再立ち上げします。  
直らない場合は、ご連絡下さい。

### ☆真空度が悪い

装置本体立ち上げ後の2~3日間、もしくはサンプルターゲット出し入れ後の数分間は真空度が悪い場合があります。そのまま様子を見てください。  
直らない場合は、ご連絡下さい。

### ◎ 連絡先

ブルカー・ダルトニクス株式会社  
営業本部 テクニカルサポートセンター  
221-0022神奈川県横浜市神奈川区守屋町3-9 A棟6F  
TEL (045) 440-0471 FAX (045) 440-0472  
E-mail: svc@bruker-daltonics.jp