

# MS/MS スペクトル ノーマライズ機能

データファイルでノーマライズする

ターゲット分子と内部標準物質の測定データが別ファイルになっている場合用の機能

# MS/MSスペクトルノーマライズ機能とは

- データファイルをノーマライズ処理に用います
  - [対象データ]を[参照データ]のピーク値でノーマライズします
    - [対象データ]と[参照データ]の形状（画素の並び）は同一である必要があります。
- 例えば、以下のような状況を想定しています。
  - [対象データ]：MS1分析で得たMSイメージ
  - [参照データ]：同じ切片試料に対してMS/MS分析で得たMSイメージ

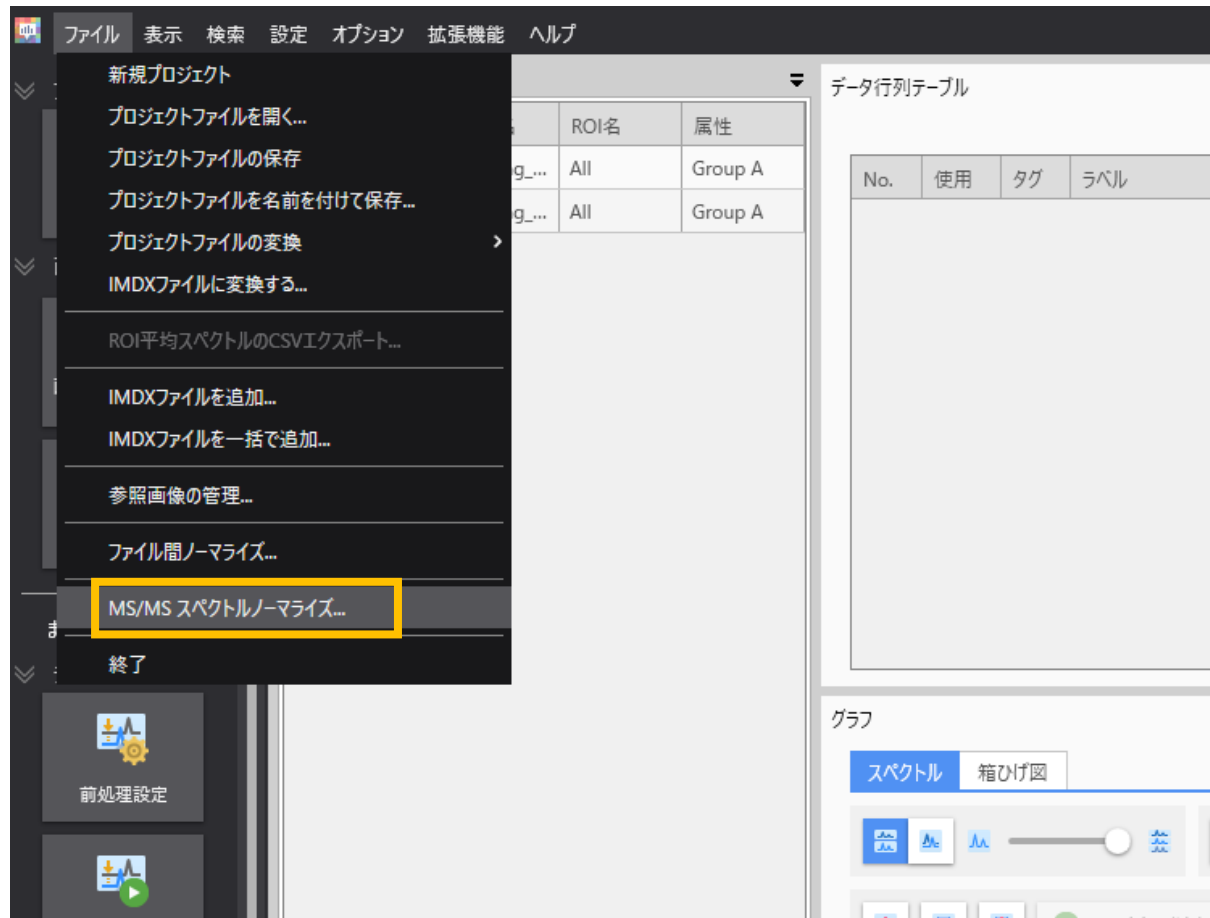
※参照データはMS/MS分析に限定されません。

# 事前準備

- データファイル(imdx)の準備
  - [対象データ]：ノーマライズされるデータ
  - [参照データ]：ノーマライズに用いるピークの情報が入ったデータ

※形状（画素の並び）は同一

# 実行：“ファイル”からMS/MSスペクトルノーマライズを選択



# MS/MSスペクトルノーマライズ設定画面

MS/MS スペクトルノーマライズ

①  
対象ファイル  
Screening\_ae0096\_0007\_1A1\_profile\_402.imdx

測定日時: 0001/01/01 0:00:00  
データ点数: 12(3, 4)  
ピッチ: 1.0, 1.0 [um]  
測定範囲: m/z 131.99048 - 1189.19048

②  
参照ファイル  
Screening\_ae0096\_0007\_1A1\_profile\_190.imdx

測定日時: 0001/01/01 0:00:00  
データ点数: 12(3, 4)  
ピッチ: 1.0, 1.0 [um]  
測定範囲: m/z 131.99048 - 1189.19048

③  
出力ファイル  
C:\Users\yamac\Dropbox (Shimadzu)\Yamaguchi\_data\demo\_data\_etc\DemoData\#msms\_normalize.imdx

④  
パラメータ設定

| m/z       | 許容幅    |
|-----------|--------|
| 191.00000 | 0.1000 |

基準値を設定  
最小しきい値 (%) 0.00  
計算方法 積算  
指定方法  範囲  中心±許容誤差

- ① [対象ファイル] ノーマライズの対象となる IMDX ファイルを選択
- ② [参照ファイル] 参照する IMDX ファイルを選択
- ③ [出力ファイル] ノーマライズ後の IMDX ファイルのファイルパスとファイル名を設定
- ④ ノーマライズの基準となる m/z と許容幅を設定 (m/z ± 許容幅)

MS/MSスペクトルノーマライズで出来たimdx  
ファイルは 前処理 なし で処理を行う

前処理設定

ノーマライズ **なし** TIC XIC

インポート エクスポート

| No. | 使用 | m/z | 許容幅 |
|-----|----|-----|-----|
|-----|----|-----|-----|

基準値を設定

最小しきい値 (%) 0.00

計算方法 積算

指定方法  範囲  中心±許容誤差

OK キャンセル

既にノーマライズされていますのでそのままの値を使用して処理してください。。

# 注意事項

- [基準値]：ノーマライズ後の最大ピークの強度値
  - [基準値]に入力がない場合：
    - ノーマライズ結果中の最大ピークの強度は1,000,000になる。
    - 任意の値に変更できます
- [最小しきい値]：ノーマライズするピーク強度のしきい値
  - ノーマライズ用のm/zの強度値が“全測定点での最大の強度値”に対して設定した割合未満の測定点では、“全測定点の平均の強度値”を用いてノーマライズが行われます。
  - 極端に小さい強度値でノーマライズしないための機能