imzMLから変換したIMDXファイルに問題がある場合

1. サイズが大きすぎる
2. ピークが消える
3. 質量がずれる

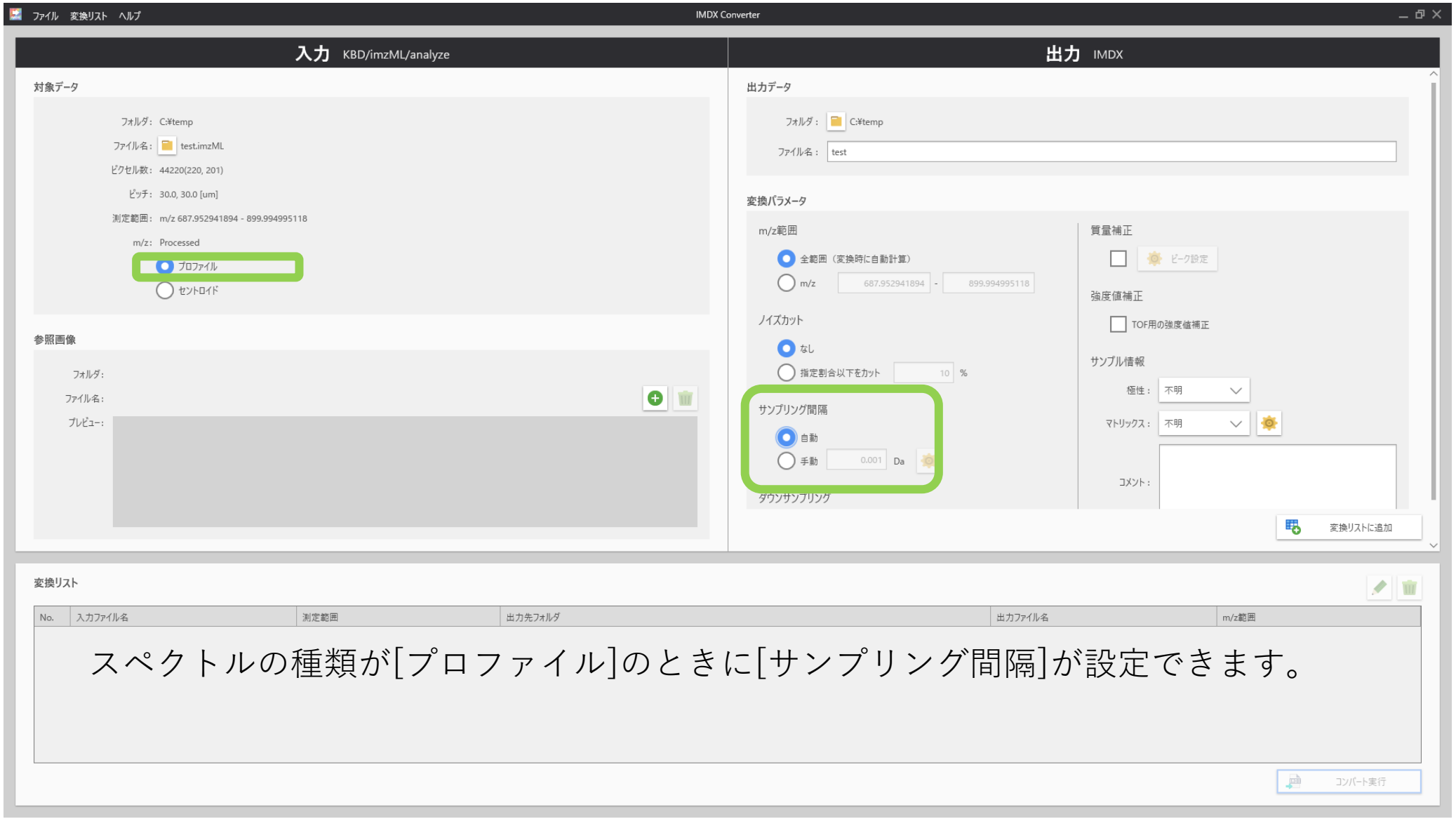
サンプリングレートが原因かも

imzMLから変換したIMDXに問題がある

1. サイズが大きすぎる
2. ピークが消える
3. 質量がずれる

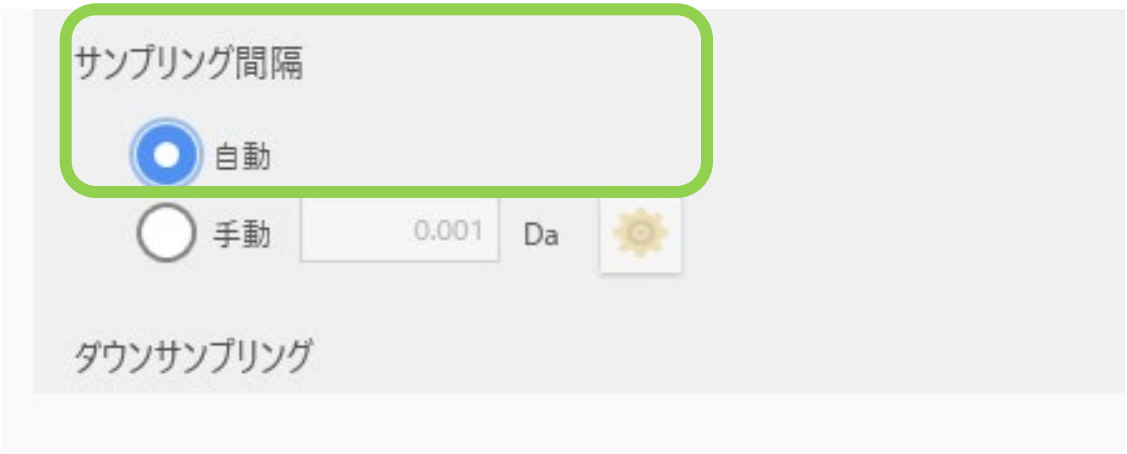
サンプリングレートが適切に設定されていな可能性があります。

IMDX Converter



スペクトルの種類が[プロファイル]のときに[サンプリング間隔]が設定できます。

サンプリング間隔は初期値で[自動]が選択されています

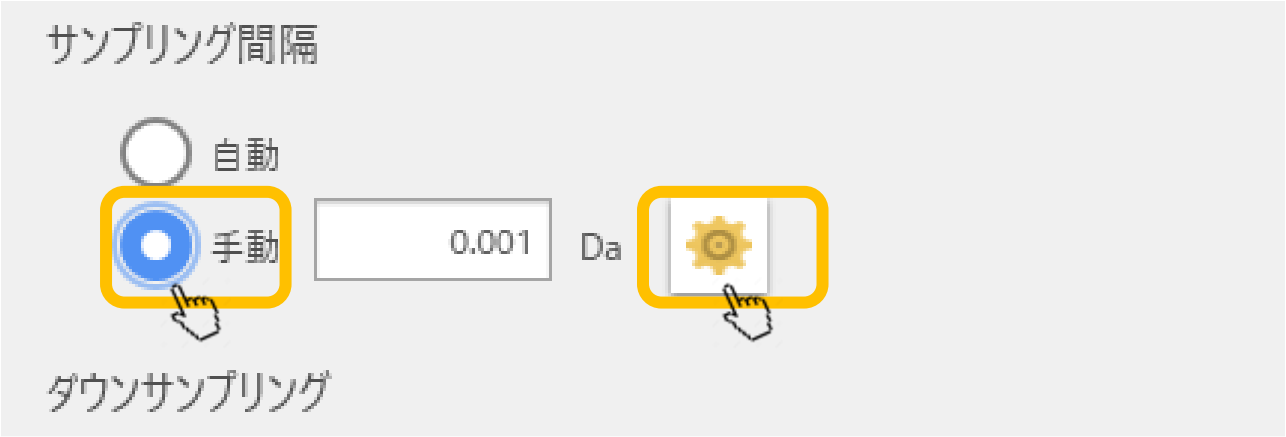


が、imzMLファイルによってはうまくいかない場合があります。
その結果として

1. サイズが大きすぎる　：サンプリング間隔が小さすぎる
2. ピークが消える　：サンプリング間隔が大きすぎる
3. 質量がずれる　：サンプリング間隔が大きすぎる

といった問題が起こります。

[サンプリング間隔]を[手動]に設定



[手動]を選択すると数値が入力できるようになります。
さらに横の歯車ボタンを押すと[詳細設定]で単位を変更できます。

詳細設定

FT-ICR　：ppm
Orbitrap, TOF　：m/zの平方根
その他　：定数
の想定です。

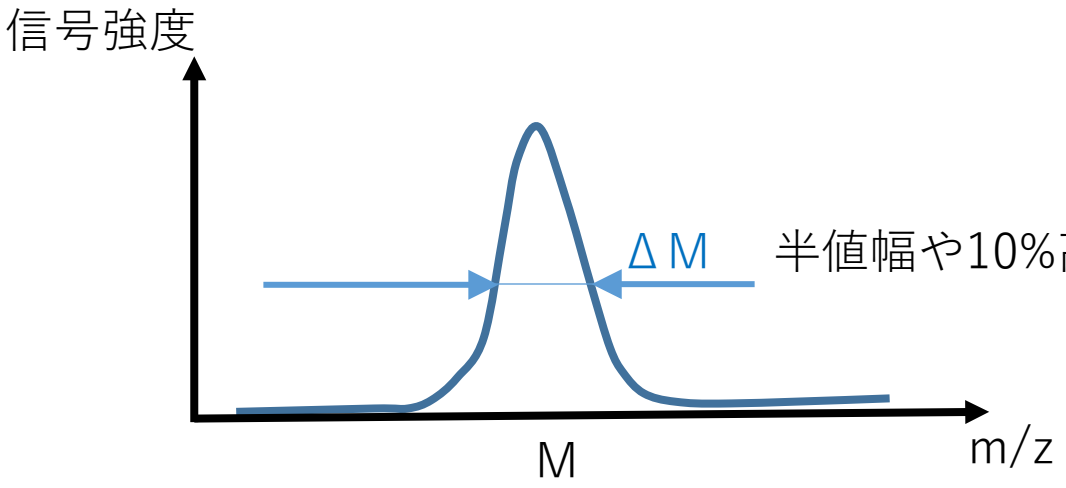
サンプリング間隔の目安(10点/ピークとして)

- 定数　（データが大きくなりがちです）
  - 例：対象ピーク m/z 500 がピーク幅1Daであれば　0.1Da

- ppm
  - 1/(質量分解能 x 10)
  - 例：　質量分解能 5 万の時，1/(5万x10) = 2/100万=2 ppm

- m/zの平方根
  - このソフトウェアではm/z500の場合のDaでの幅を規定します。
    - 例　m/z500でピーク幅1Daの場合：0.1Da
    - ただし、サンプリング間隔はm/zの平方根に比例して変化します

質量分解能の計算



半値幅や10%高さ幅が使用されることが多い

質量分解能　：　$M/\Delta M$