

## 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

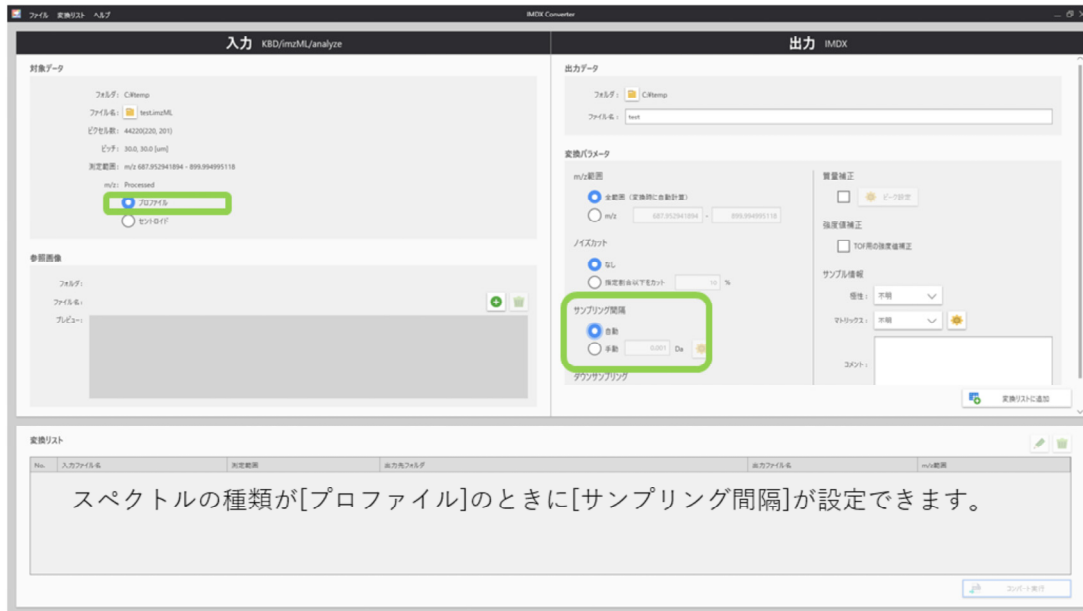
サンプリングレートが原因かもしれません

imzMLから変換したIMDXに以下のような問題がある場合

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

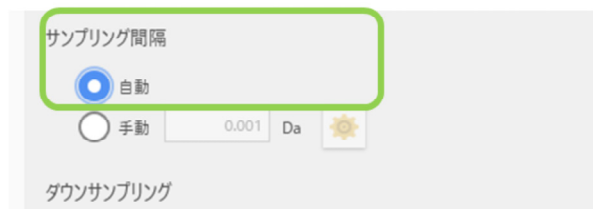
サンプリングレートが適切に設定されていない可能性があります。

# 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



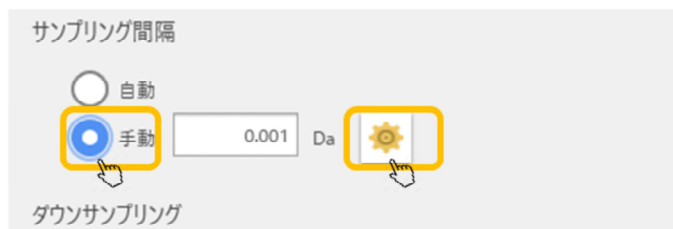
しかしながら、imzMLファイルによってはうまくいかない場合があります。  
その結果として

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。

サンプリング間隔は初期値で[自動]が選択されています。  
しかしながら、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

詳細設定

定数

ppm

m/zの平方根 (m/zが500のときの許容幅を指定)

OK キャンセル

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
  - $1/(\text{質量分解能} \times 10)$
  - 例： 質量分解能 5 万の時,  $1/(5万 \times 10) = 2/100万 = 2 \text{ ppm}$
- $m/z$ の平方根
  - このソフトウェアでは $m/z$ 500の場合のDaでの幅を規定します。
    - 例  $m/z$  500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

### 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

$1/(\text{質量分解能} \times 10)$

例： 質量分解能 5 万の時,  $1/(5万 \times 10) = 2/100万 = 2 \text{ ppm}$

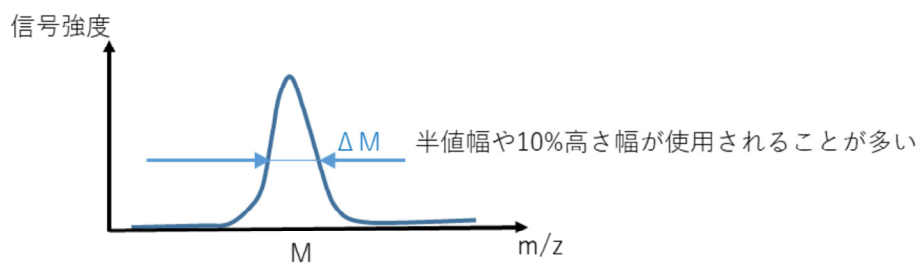
$m/z$ の平方根

このソフトウェアでは $m/z$ 500の場合のDaでの幅を規定します。

例  $m/z$ 500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



質量分解能 :  $M/\Delta M$