

Analyst MD 소프트웨어

고급 사용자 안내서



본 문서는 SCIEX 장비를 구매한 고객들이 SCIEX 장비를 작동하는 데 이용할 수 있도록 제공됩니다. 본 문서는 저작권 보호를 받으며 본 문서 또는 본 문서의 어느 일부에 대한 복제도 엄격히 금지됩니다. 단, SCIEX가 서면으로 허가한 경우는 제외됩니다.

이 문서에서 설명될 수 있는 소프트웨어는 라이선스 계약에 따라 제공됩니다. 라이선스 계약에서 특별히 허용된 경우를 제외하고 어떠한 수단으로든 소프트웨어를 복사, 수정 또는 배포하는 것은 법률 위반입니다. 또한, 라이선스 계약은 소프트웨어를 어떠한 목적으로든 디스어셈블하거나 리버스 엔지니어링하거나 디컴파일하는 것을 금할 수 있습니다. 제품 보증은 그 안에 명시되어 있습니다.

이 문서의 일부는 다른 제조업체 및/또는 다른 제조업체의 제품을 참조할 수 있으며, 참조 내용에는 이름이 상표로 등록되거나 해당 소유자의 상표로 기능하는 부품이 포함될 수 있습니다. 이러한 이용의 목적은 SCIEX가 장비에 포함시키기 위해 해당 제조업체 제품을 공급하는 것으로 지정하는 것에만 국한되며, 이는 타인이 이러한 제조업체 및/또는 제조업체의 제품 이름을 상표로 이용할 수 있는 권한 및/또는 허가를 의미하지 않으며 타인의 그러한 이용을 허가하는 것이 아닙니다.

SCIEX 보증은 제품 판매 또는 허가 시점에 제공되는 명시적 보증에만 국한되며 SCIEX의 독자적 및 독점적 진술, 보증 및 의무입니다. SCIEX는 법령이나 그 외의 법률 또는 거래 과정이나 거래의 관습으로 인한 발생 여부와 관계없이 상품성 보증 또는 특정 목적에 대한 적합성 보증을 포함하나 이에 국한되지 않는 명시적 혹은 암묵적 보증 등 기타 어떤 종류의 보증도 제공하지 않습니다. 이와 같은 모든 보증은 명확히 부인됩니다. 그리고 SCIEX는 간접적 또는 결과적 손해를 포함해 구매자의 이용 또는 구매자의 이용으로 인해 발생하는 모든 불리한 상황에 대해 어떠한 책임 또는 불확정 책임도 지지 않습니다.

체외 진단용. 일부 국가에서는 제품을 사용할 수 없습니다. 자세한 내용은 해당 지역 영업 담당자에게 문의하거나 sciex.com/diagnostics를 참조하십시오.

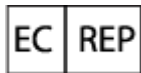
Rx only.

일부 국가에서는 제품이 공급되지 않을 수 있습니다. 자세한 내용은 현재 영업 담당자에게 문의하거나 sciex.com를 참조하십시오.

관련 로고를 포함하여 여기에 언급된 상표 및/또는 등록 상표는 미국 및/또는 특정 기타 국가에서 AB Sciex Pte. Ltd., 또는 해당 각 소유자의 자산입니다 (sciex.com/trademarks 참조).

AB Sciex™는 사용 허가를 받아 사용되고 있습니다.

© 2022 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

목차

| | |
|------------------------------------|-----------|
| 1 일반 정보 | 7 |
| Analyst MD 소프트웨어 이벤트 | 7 |
| Analyst MD 소프트웨어 관련 정보로 시스템 로그 필터링 | 7 |
| Analyst MD 소프트웨어 창 | 8 |
| Analyst MD 소프트웨어 모드 | 9 |
| AnalystService | 10 |
| AnalystService 시작 | 10 |
| AnalystService 중지 | 10 |
| API 기기 프로젝트 폴더 | 10 |
| 프로그램 파일 | 11 |
| 프로젝트 및 하위 프로젝트 | 12 |
| 하위 프로젝트 | 12 |
| 프로젝트 구성 | 13 |
| 액세스 및 보안 | 14 |
| 작업 영역 | 15 |
| | |
| 2 Tune and Calibrate 모드 | 17 |
| 조정 | 17 |
| 교정 | 18 |
| 자동 조정 및 교정 | 18 |
| (선택 사항) 기기 매개 변수 수동 백업 | 18 |
| (선택 사항) 기기 매개 변수 복원 | 19 |
| 화합물 최적화 | 19 |
| 흐름 주입 분석 | 19 |
| 주입 | 19 |
| T-Infusion | 20 |
| | |
| 3 획득 방법 | 21 |
| 획득 방법 중인 장치 | 21 |
| 주변 장치 추가 또는 제거 | 21 |
| LC 펌프 속성 설정 | 22 |
| 오토샘플러 속성 설정 | 22 |
| 통합형 주사기 펌프 속성 설정 | 23 |
| 컬럼 오븐 속성 설정 | 23 |
| 전환 밸브 속성 설정 | 23 |
| 다이오드 어레이 검출기 매개 변수 설정(Agilent) | 24 |
| 아날로그-디지털 변환기 속성 설정 | 24 |
| 동적 채우기 시간 | 25 |
| 실험 및 기간 | 25 |
| 실험 | 25 |
| 기간 | 25 |

| | |
|---|-----------|
| 정보 종속 획득 방법 | 26 |
| 예약된 이온화 | 27 |
| 용매 압축률 값 | 28 |
| 주사기 크기 대 유속 | 28 |
| 4 배치 | 31 |
| Batch Editor | 31 |
| 배치 파일 가져오기 | 32 |
| Batch Editor에서 정량화 세부 정보 설정(선택 사항) | 32 |
| 5 정성적 데이터 분석 | 34 |
| 크로마토그램 | 34 |
| 스펙트럼 | 34 |
| 배경 감산 | 35 |
| 크로마토그램에 대해 배경 감산 수행 | 35 |
| 범위 잠금 해제 | 37 |
| 기준선 감산 | 37 |
| 계산기 | 37 |
| 원소 조성 계산기 | 38 |
| HyperMass 계산기 | 38 |
| 원소 표적화 계산기 | 38 |
| 질량 속성 계산기 | 38 |
| 동위 원소 분포 계산기 | 38 |
| 계산기 액세스 | 38 |
| 중심 피크 | 39 |
| 피크 중심 계산 | 39 |
| 데이터 분석 | 40 |
| 총 이온 크로마토그램 | 40 |
| 추출 이온 크로마토그램 | 40 |
| 기준 피크 크로마토그램 | 41 |
| 추출 파장 크로마토그램 | 41 |
| 다이오드 어레이 검출기 | 41 |
| 총 파장 크로마토그램 | 41 |
| 그래프 중첩 | 41 |
| 중첩된 각 그래프를 번갈아 표시 | 42 |
| 중첩 결합 | 42 |
| 그래프 사용자 지정 | 42 |
| 그래프에 캡션 추가 | 42 |
| 그래프에 텍스트 추가 | 43 |
| 화합물 데이터베이스 | 43 |
| 등고선 플롯 | 43 |
| 등고선 플롯 보기 | 45 |
| 등고선 플롯에서 영역 선택 | 45 |
| 등고선에서 강도 및 흡광도 설정 | 45 |
| 등고선 플롯의 색상 변경 | 46 |
| Dynamic Background Subtraction 알고리즘 | 46 |
| 단편 해석 | 46 |
| 스펙트럼에 Fragment Interpretation 도구 연결 | 47 |

| | |
|---|-----------|
| 단편을 피크에 맞추기 | 47 |
| 분자 구조에서 결합 선택 | 47 |
| 동위 원소 보기 | 47 |
| 스펙트럼에 수식 차이 표시 | 48 |
| 단편 목록에 수식 차이 표시 | 48 |
| 분자 구조에 수식 차이 표시 | 48 |
| IDA 탐색기 | 48 |
| 라이브러리 데이터베이스 | 49 |
| 기존 라이브러리 데이터베이스 간 전환 | 50 |
| 로컬 라이브러리 데이터베이스 생성 | 51 |
| 서버 라이브러리 데이터베이스에 연결 | 53 |
| 모든 라이브러리 레코드 보기 | 55 |
| 라이브러리에 레코드 추가 | 55 |
| 제약 조건을 사용하여 라이브러리 레코드 검색 | 56 |
| 라이브러리 검색 팁 | 57 |
| 유사 스펙트럼 검색 | 57 |
| 검색 결과에서 화합물 보기 | 59 |
| 처리된 데이터 파일 | 59 |
| 처리된 데이터 파일 저장 | 59 |
| 처리된 데이터 파일 열기 | 59 |
| 정성적 데이터 | 59 |
| 신호 대 노이즈 비율 | 60 |
| 다듬기 알고리즘 | 60 |
| 다듬기 알고리즘을 사용하여 데이터 다듬기 | 61 |
| 가우스 다듬기를 사용하여 데이터 다듬기 | 61 |
| 시스템 로그 | 62 |
| 시스템 로그를 저장하여 지원 팀에 전달 | 62 |
| Analyst MD 소프트웨어 관련 정보로 시스템 로그 필터링 | 63 |
| 6 정성적 데이터 분석 | 64 |
| 교정 옵션 | 64 |
| 교정 곡선 정보 | 64 |
| 최적의 회귀 유형 선택 | 64 |
| 최적 가중치 인자 선택 | 65 |
| 통합 알고리즘 | 66 |
| Analyst Classic 및 IntelliQuan 통합 알고리즘 | 66 |
| 정량화 방법 생성 도구 | 68 |
| 마법사 | 68 |
| 정량화 방법 편집기 | 69 |
| 반자동 방법 편집기 | 69 |
| 메트릭 플롯 | 70 |
| 메트릭 임시 플롯 생성 | 71 |
| 메트릭 플롯 생성 및 플롯 기준 저장 | 71 |
| 이후 Results Table을 위한 기본 플롯 기준 저장 | 73 |
| 노이즈 및 면적 임계값 매개 변수 | 73 |
| 노이즈 및 면적 임계값 재계산 | 74 |
| 피크 통합 | 74 |
| 피크 검토 | 74 |
| 피크 검토 팁 | 75 |

| | |
|---|------------|
| 피크 감지 | 75 |
| 잠재적 피크 시작점 찾기 | 75 |
| 피크 시작점 확인 | 76 |
| 피크 정상 찾기 | 78 |
| 피크 끝점 찾기 | 80 |
| 피크 분리 | 82 |
| 쿼리 | 82 |
| 샘플 유형에 대한 쿼리 | 83 |
| 기본 쿼리 및 표 관련 쿼리 | 83 |
| 정확한 변동률이 결과에 끼치는 영향 | 83 |
| 회귀 수식 | 84 |
| 맞춤 옵션 | 84 |
| 가중치 계수 | 86 |
| 보고서 템플릿 | 87 |
| 보고서 사용자 지정 | 89 |
| 보고서 미리 보기, 인쇄, 내보내기 | 89 |
| Results Table | 90 |
| Results Table의 특정 레이아웃 보기 | 91 |
| Results Table의 데이터 정렬 | 91 |
| Results Table 정렬 및 정렬 조건 저장 | 91 |
| 이후 Results Table에 사용하기 위한 기본 정렬 조건 저장 | 92 |
| 사전 설정된 정렬 조건을 사용하여 Results Table 정렬 | 94 |
| Results Table과 함께 쿼리 사용 정보 | 94 |
| 배치 간 결과 비교 | 94 |
| 농도 레벨이 결과에 끼치는 영향 | 94 |
| Results Table 레이아웃 | 95 |
| Results Table 필드 | 97 |
| Results Table 팁 | 104 |
| A 도구 모음 아이콘 | 105 |
| B PPG 정확 질량 테이블 | 106 |
| 문의하기 | 112 |
| 고객 교육 | 112 |
| 온라인 학습 센터 | 112 |
| SCIEX 지원 부서 | 112 |
| 사이버 보안 | 112 |
| 문서 | 112 |

고급 사용자 안내서에서는 Analyst MD 소프트웨어 기능에 대한 정보를 제공합니다.

Analyst MD 소프트웨어 이벤트

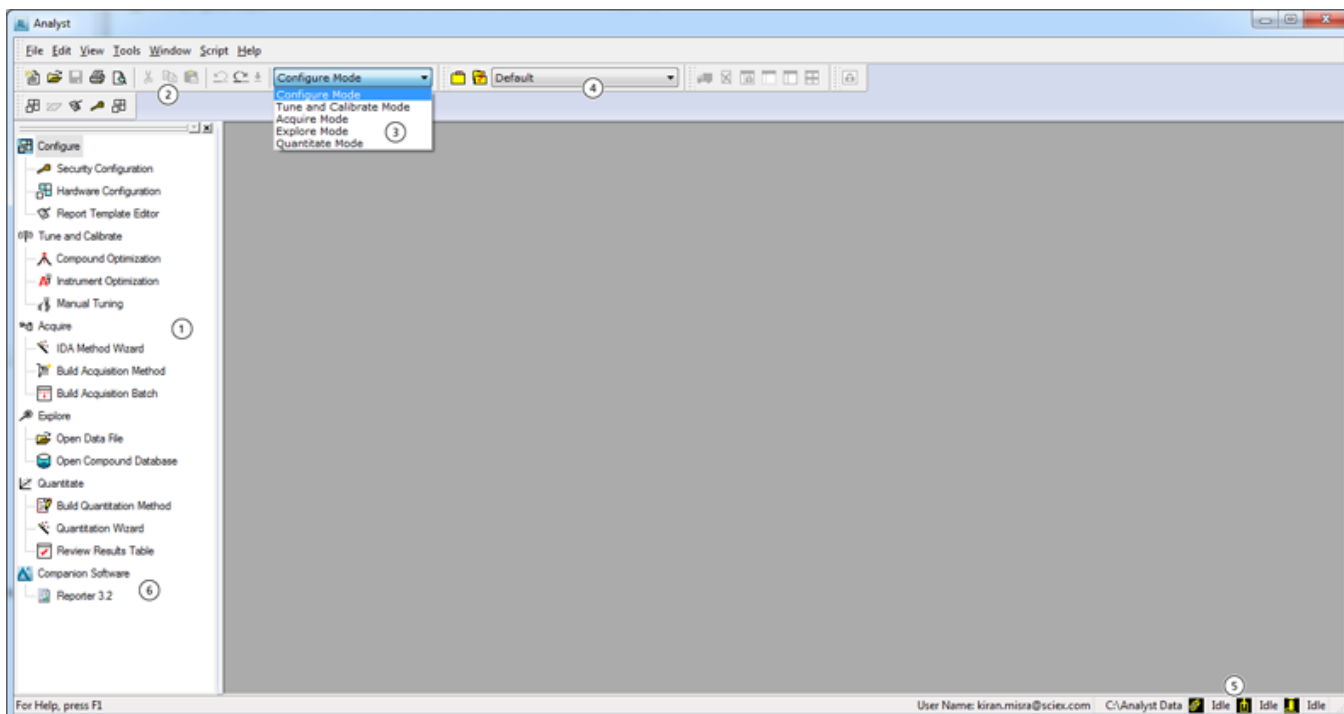
시스템 로그에는 오류, 경고 및 메시지를 포함하여 시스템 이벤트 보고서가 포함되어 있습니다. Windows Event Viewer를 사용하여 시스템 진단 수행 및 문제 해결에 도움이 되는 정보를 봅니다. 시스템 로그의 정보를 효율적으로 사용하려면, 정보를 필터링하여 소프트웨어와 관련된 항목만 표시되도록 합니다.

Analyst MD 소프트웨어 관련 정보로 시스템 로그 필터링

1. **View > Event Log**를 클릭합니다.
Event Viewer 대화 상자가 열립니다.
2. **Windows Logs** 폴더를 두 번 클릭합니다.
3. **Application**를 클릭합니다.
4. **Action > Filter Current Log**를 클릭합니다.
Filter Current Log 대화 상자가 열립니다.
5. **Event Sources** 필드에서 **Analyst**를 선택합니다.
6. **OK**를 클릭합니다.
이제 Event Viewer 대화 상자에 필터링된 Analyst MD 소프트웨어 이벤트만 표시됩니다.

Analyst MD 소프트웨어 창

그림 1-1 Analyst MD 소프트웨어 창



| 항목 | 설명 |
|----|---|
| 1 | <p>탐색 모음: 탐색 모음을 통해 다양한 소프트웨어 모드에 액세스할 수 있습니다. 사용자는 사용자의 기본 설정에 맞게 탐색 모음의 여러 요소를 사용자 지정할 수 있습니다. 예를 들어 사용자가 크기를 조정하고 옮기거나 제자리에 고정할 수 있습니다. 탐색 모음을 숨기려면 오른쪽 상단 구석의 ×를 클릭합니다. 탐색 모음을 보려면 View > Navigation Bar를 클릭합니다.</p> <p>탐색 트리의 상단에는 각 소프트웨어 모드를 나타내는 아이콘이 있습니다. 특정 모드에 대한 아이콘을 두 번 클릭하여 트리를 확장하거나 축소합니다. 이렇게 하면 선택된 모드에서 사용 가능한 기능에 대한 아이콘을 표시하거나 숨깁니다.</p> |
| 2 | 메뉴 모음: 모드에 따라 변경됩니다. Cut, Copy 및 Paste와 같은 일부 옵션은 모드마다 동일합니다. 기타 옵션은 특정 모드와 관련이 있고 다른 모드에서는 제공되지 않습니다. |
| 3 | 모드 목록: 모드를 변경하려면 클릭합니다. 다른 모드에는 다양한 도구 모음 아이콘이 있습니다. |
| 4 | 프로젝트 목록: 데이터를 저장할 프로젝트를 변경하려면 클릭합니다. |

| 항목 | 설명 |
|----|--|
| 5 | 기기 및 주변 장치 상태: 상태 표시줄에는 현재 작업 관련 정보가 포함됩니다. 기기 상태는 녹색(준비), 노란색(유틸), 빨간색(오류) 또는 흰색(로컬 기기 워크스테이션 없음) 색상으로 구분 표시됩니다. 아이콘은 원격 기기의 상태를 나타냅니다. 아이콘을 두 번 클릭하여 장치 상태 창을 엽니다. |
| 6 | 지원 소프트웨어: 소프트웨어에서 열리는 지원 소프트웨어가 설치된 경우 모두 여기에 포함됩니다. |

Analyst MD 소프트웨어 모드

본 소프트웨어는 여러 모드로 나뉘어 있습니다. 이는 사용자가 주 작업과 관련된 일련의 활동을 수행할 수 있는 개별적인 기능별 영역입니다. 사용자는 탐색 모음을 통해 또는 도구 모음의 모드 목록에서 모드에 액세스할 수 있고 작업 손실 없이 모드 간 전환할 수 있습니다.

표 1-1 Analyst MD 소프트웨어의 모드

| 이름 | 설명 |
|---------------------------|---|
| Configure | (구성) 장치 및 시스템 설정을 구성하려면 이 모드를 사용합니다. 하드웨어 구성 및 보고서 템플릿 설정을 비롯하여 소프트웨어의 다양한 옵션과 매개 변수를 설정할 수 있습니다. |
| Tune and Calibrate | (조정 및 교정) 최적의 결과를 얻을 수 있도록 기기를 조정하는 옵션을 설정하려면 이 모드를 사용합니다. 이 모드에서 사용자는 다음 작업을 수행할 수 있습니다. <ul style="list-style-type: none"> • 기기 최적화를 수행할 수 있습니다. • 수동 조정을 수행할 수 있습니다. • 그래픽 보기의 모양을 변경하고, 파일 정보를 열 때 표시되는 정보 유형을 선택하고, 연결 옵션과 기타 모양 옵션을 설정할 수 있습니다. • 처리 옵션을 변경할 수 있습니다. |
| Acquire | (획득) 샘플 획득 방법을 결정하기 위한 옵션을 설정하려면 이 모드를 사용합니다. 이 모드에서 사용자는 다음 작업을 수행할 수 있습니다. <ul style="list-style-type: none"> • IDA Method Wizard로 IDA 획득 방법을 생성할 수 있습니다. • Acquisition Method Editor로 획득 방법을 생성할 수 있습니다. • Batch Editor를 사용하여 배치를 생성할 수 있습니다. • Queue Manager를 사용하여 대기열을 볼 수 있습니다. • 획득 상태를 모니터링할 수 있습니다. |

표 1-1 Analyst MD 소프트웨어의 모드 (계속)

| 이름 | 설명 |
|-------------------|--|
| Explore | (탐색) 샘플에 대한 정성적 분석을 수행하려면 이 모드를 사용합니다. 이 모드에서 사용자는 다음 작업을 수행할 수 있습니다. <ul style="list-style-type: none"> • 그래프를 볼 수 있습니다. • 크로마토그램을 볼 수 있습니다. • 스펙트럼을 볼 수 있습니다. • 배치 획득 중 실시간으로 데이터를 볼 수 있습니다. |
| Quantitate | (정량화) 획득한 데이터를 분석하고 정량화 방법을 작성하여 Results Table을 생성하려면 이 모드를 사용합니다. Results Table을 사용하여 배치 내 각 분석 물질 및 내부 표준 물질에 대한 모든 피크를 수동으로 검토하고 교정 곡선, 샘플 통계 및 메트릭 플롯을 볼 수 있습니다. |

AnalystService

AnalystService는 질량 분석계와 부착된 장치 간의 통신 경로입니다. AnalystService는 Analyst MD 소프트웨어가 시작될 때마다 시작됩니다. 일반적으로 사용자가 Windows에 로그인하면 AnalystService가 자동으로 시작됩니다. Analyst MD 소프트웨어가 시작될 때 이 서비스가 실행 중이 아니면 AnalystService가 자동으로 시작됩니다.

AnalystService 시작

AnalystService에 대한 Startup Type이 **Manual**로 설정되어 있으면 AnalystService를 수동으로 시작한 후에 Analyst MD 소프트웨어를 시작해야 합니다. **Startup Type**을 변경하지 마십시오.

1. Administrative Tools를 엽니다.
2. **Services**를 두 번 클릭한 후 **AnalystService**를 클릭합니다.
3. **Start**를 클릭합니다.

AnalystService 중지

기기와 통신 문제가 있거나 기기와 주변 장치 간 통신 문제가 있는 경우 AnalystService를 중지합니다.

1. Administrative Tools를 엽니다.
2. **Services**를 두 번 클릭한 후 **AnalystService**를 클릭합니다.
3. **Stop**을 클릭합니다.

API 기기 프로젝트 폴더

API Instrument 프로젝트에는 다음과 같은 폴더가 있습니다.

- **Bundler:** 데이터 파일(wiff 파일)의 모든 양상을 취해 샘플이 완료되었을 때 그러한 양상들을 자동으로 결합하는 프로그램을 포함합니다.
- **Configuration:** 모든 하드웨어 프로파일(hwpf 파일)을 포함합니다.
- **Instrument Data:** 이름이 `InstrumentData.ins`인 파일을 포함합니다. 파일에 모든 중요한 교정 정보 및 기타 사항이 저장됩니다.
- **Method Tables:** 고급 스캔 기능을 정의하는 모든 기기 매개 변수를 포함합니다. 이 폴더에 있는 파일을 변경하지 마십시오. 이 폴더의 내용물을 변경하면 고급 스캔 모드에 수행에 영향을 끼칩니다.
- **Parameter Settings:** 모든 기기 매개 변수 및 연계를 포함합니다. 기기 매개 변수는 `ParamSettingsdef.psf` 파일로 저장됩니다.
- **Preferences:** `Tunedata.tun` 파일을 포함합니다. 매개 변수, 조정, 기기, 처리, 모양, 대기열 등의 모든 설정이 이 폴더에 `Tunedata.tun` 파일로 저장됩니다.
- **Processing Scripts:** 탐색 모드의 데이터 처리에 대한 스크립트를 포함합니다. 스크립트는 **Script** 메뉴에 있습니다.
- **Queue Data:** 대기열에서 나온 정보를 포함합니다.
- **Tuning Cache:** **Acquire** 대신 **Start**를 클릭하여 **Manual Tuning**에서 생성된 모든 데이터를 포함합니다. 파일은 시간 및 날짜 스탬프를 사용한 이름으로 저장됩니다. **Tuning Cache** 폴더에 제한된 갯수의 파일을 보관하며 필요한 경우 파일을 덮어쓰기 합니다. 새 이름으로 파일을 저장하고 저장에 필요한 경우 즉시 파일을 옮깁니다.

프로그램 파일

다음 폴더는 Windows 7 32비트 운영 체제의 `Program Files\Analyst` 폴더나 Windows 7 64비트 또는 Windows 10 64비트 운영 체제의 `Program Files (x86)\Analyst` 폴더에 있습니다.

- **bin:** Analyst MD 소프트웨어 프로그램 파일이 있습니다. 이 폴더의 내용은 변경하면 안 됩니다. 변경할 경우 소프트웨어 기능에 영향을 미칩니다.
- **binEx2:** ExionLC 2.0 장치를 제어하는 데 필요한 구성 요소가 있습니다.
- **binEx:** ExionLC, Jasper, Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller를 사용하여 제어되는 LC20/30 장치, 그리고 Shimadzu LC40을 제어하는 데 필요한 구성 요소가 있습니다.
- **Firmware:** 기기 시스템 펌웨어 구성 테이블 파일과 기기 펌웨어 파일이 있습니다. 자세한 정보는 소프트웨어와 함께 제공되는 소프트웨어 설치 안내서를 참조하십시오.
- **Help:** 도움말 파일, 안내서, 자습서, 릴리스 노트 및 소프트웨어 설치 안내서가 있습니다.
- **Scripts:** 필요한 경우 사용자가 설치할 수 있는 스크립트를 포함합니다. 이러한 스크립트는 Analyst MD 소프트웨어를 설치할 때 자동으로 설치되지 않습니다. 자세한 정보는 스크립트 사용자 안내서를 참조하십시오.
- **Simulation:** 시뮬레이션 모드에서 소프트웨어를 실행하는 데 필요한 기기 데이터 파일이 있습니다.

프로젝트 및 하위 프로젝트

실험을 시작하기 전 실험과 관련된 파일의 저장 위치를 결정합니다. 각 실험에 대한 프로젝트 및 하위 프로젝트를 사용하여 데이터를 보다 효과적으로 관리하고 결과를 비교할 수 있습니다. 예를 들면 하위 프로젝트를 사용하여 특정 날짜에 대한 결과를 저장할 수 있습니다.

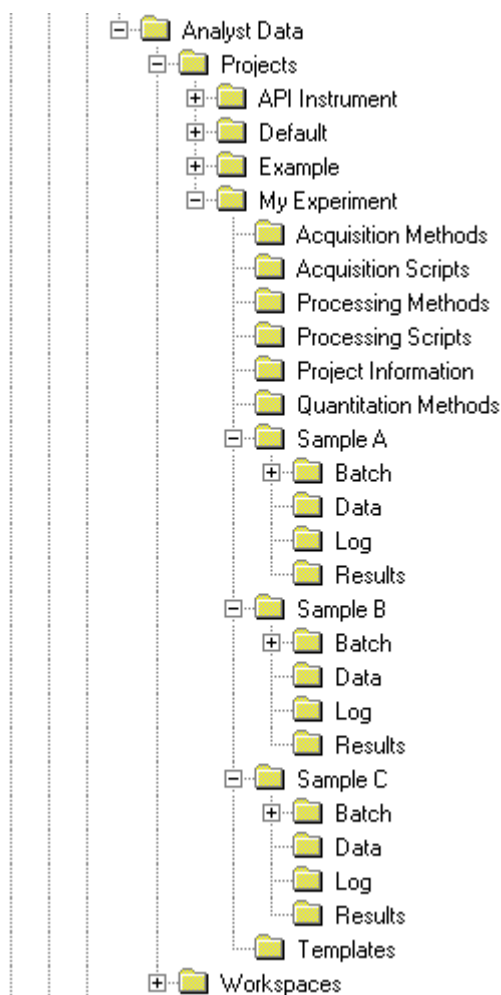
참고: 프로젝트 내에서 하위 프로젝트 구조를 사용하려면 처음에 프로젝트를 생성할 때 최소 하나의 하위 프로젝트를 생성해야 합니다. 사용자는 하위 프로젝트 구조가 없는 기존 프로젝트에는 하위 프로젝트를 생성할 수 없습니다.

하위 프로젝트

하위 프로젝트에는 프로젝트의 일부 폴더가 들어 있습니다. 모든 하위 프로젝트가 같은 폴더에 포함되어야 합니다. 하위 프로젝트는 데이터를 구성하는 데 매우 유용합니다.

예를 들어, 동일한 획득 방법을 사용하여 다양한 실험실에서 다양한 화합물의 샘플이 실행되는 경우 프로젝트 안에 획득 방법 폴더를 그대로 유지하면서 하위 프로젝트를 생성하여 각 실험실에 대한 결과를 저장합니다. 그러면 하위 프로젝트나 실험실용으로 획득 방법을 사용할 수 있습니다. 또는 샘플이 몇 주 동안 분석되고 있는 경우 매일 결과가 별도의 하위 프로젝트에 저장될 수 있습니다. 다음 그림을 참조하십시오.

그림 1-2 프로젝트 및 하위 프로젝트 폴더 구조 예시



프로젝트 구성

프로젝트는 샘플 정보, 데이터, 정량화 정보 등을 구성하고 저장하기 위한 폴더 구조입니다. 각 프로젝트 안에는 다양한 파일 유형을 포함할 수 있는 폴더가 있습니다. 예를 들어 Data 폴더에는 획득 데이터 파일이 포함되어 있습니다. 다른 폴더의 내용에 대한 설명은 다음 표를 참조하십시오.

루트 폴더에 저장된 경우에만 소프트웨어에서 프로젝트에 액세스할 수 있습니다. 루트 폴더로 정의되지 않은 폴더에는 프로젝트를 생성할 수 없습니다.

사전 설정된 루트 폴더는 소프트웨어가 설치된 드라이브의 Analyst Data입니다. 다른 위치에 프로젝트를 저장하려면 새 루트 폴더를 생성해야 합니다. 루트 폴더에 대한 자세한 정보는 도움말 문서를 참조하십시오.

표 1-2 프로젝트 폴더

| 폴더 | 내용 |
|----------------------|--|
| \Acquisition Methods | 사용 가능한 모든 획득 방법이 들어 있습니다. 획득 방법 파일의 확장자는 dam입니다. |

표 1-2 프로젝트 폴더 (계속)

| 폴더 | 내용 |
|-----------------------|---|
| \Acquisition Scripts | Analyst MD 소프트웨어에서는 획득 스크립트를 사용할 수 없습니다. 이 폴더는 비어 있습니다. Analyst MD 소프트웨어 스크립팅은 사용자 지정 스크립트(사용자 지정 분석 물질 작업 시퀀스)를 생성하는 데 사용할 수 있지만 체외 진단 장치의 일부로는 사용하면 안 됩니다. Analyst MD 소프트웨어를 사용할 때 수행되는 고유의 소프트웨어 검사는 사용자 지정 스크립트에서는 실행되지 않으며 결과가 샘플 ID에 잘못 연결될 수도 있습니다. |
| \Batch | 사용 가능한 모든 획득 배치 파일이 들어 있습니다. 획득 배치 파일의 확장자는 dab입니다. 이 폴더에는 획득 배치 템플릿이 있는 Templates라는 하위 폴더도 들어 있습니다. 배치 템플릿 파일의 확장자는 dat입니다. |
| \Data | 획득 데이터 파일이 들어 있고, 확장자는 wiff로 지정됩니다. |
| \Log | 정량화 및 화합물 최적화 결과가 들어 있습니다. |
| \Processing Methods | 사용되는 모든 정성적 데이터 처리 방법이 들어 있습니다. |
| \Processing Scripts | 데이터 처리 스크립트가 들어 있습니다. API Instrument 프로젝트에 저장된 처리 스크립트는 Scripts 메뉴에 표시됩니다. |
| \Project Information | 모든 프로젝트 정보 및 설정이 들어 있습니다. 이 폴더는 하위 프로젝트에 저장할 수 없습니다. |
| \Quantitation Methods | 사용된 모든 정량화 방법이 들어 있고, 확장자는 qmf로 지정됩니다. |
| \Results | 모든 정량화 Results Table 파일이 들어 있고, 확장자는 rdb로 지정됩니다. |
| \Templates | 보고서 템플릿 파일이 들어 있고 확장자는 rpt로 지정됩니다. |

액세스 및 보안

Analyst MD 소프트웨어는 Windows Administrative Tools의 보안, 어플리케이션 및 시스템 이벤트 감사 구성 요소와 상호 작용합니다.

또한 이 소프트웨어에는 보안을 구성하고 관리하기 위한 다양한 기능이 있습니다. 소프트웨어 관리자는 다음을 수행할 수 있습니다.

- 작업 환경의 필요에 가장 잘 맞는 보안 모드를 선택할 수 있습니다.
- 사용자 및 역할을 추가하고 삭제할 수 있습니다.
- 필요에 따라 사용자 및 역할에 대해 접근 권한을 설정할 수 있습니다.
- 질량 분석계에 대한 원격 접근을 제어할 수 있습니다.

- 프로젝트 파일에 대한 접근을 제어할 수 있습니다.

소프트웨어 보안에 대한 자세한 정보는 실험실 책임자 안내서를 참조하십시오.

참고: 소프트웨어 보안 구성에 대한 모든 변경 사항은 소프트웨어가 다시 시작된 후에 적용됩니다.


작업 영역

작업 영역은 모든 관련 파일을 포함하는 창 및 내부 창의 특정 배열입니다. 예를 들어 사용자는 특정 데이터 세트에서 작업을 하면서 동시에 분석에 도움이 되는 다양한 창을 열고 크기를 조정할 수 있습니다. 이 배열 또는 작업 영역을 저장하면 사용자가 다음에 데이터를 볼 때 동일한 창 배열을 사용될 수 있습니다.

각 작업 영역에 포함할 창과 내부 창을 선택하여 작업 영역을 사용자 지정할 수 있습니다. 또한 창과 내부 창의 크기 및 위치를 변경하고, 내부 창들을 함께 잠그고, 특정 내부 창과 창을 숨기거나 표시할 수 있습니다. 이러한 방법으로 사용자는 당면한 작업에 맞게 작업 영역을 사용자 지정할 수 있습니다.

Quantitate 모드와 Explore 모드에서는 세션당 여러 개의 작업 영역을 사용할 수 있습니다. 관련 데이터도 포함된 작업 영역을 저장할 수도 있습니다. 이 두 가지 중 한 가지 모드에 있을 때는 해당 모드를 종료하지 않고 특정 작업 영역을 열 수 있습니다. 다른 데이터 세트에 대해 창과 내부 창의 특정 배열을 다시 사용하려면 작업 영역을 템플릿으로 저장하면 됩니다. Tune and Calibrate 모드나 Acquire 모드에서는 작업 영역이 자동으로 저장됩니다.

| 수행할 작업 | 방법 |
|----------|---|
| 작업 영역 생성 | <ol style="list-style-type: none"> 탐색 모음에서 작업 영역을 생성할 모드를 클릭합니다. 작업 영역에 포함할 창과 내부 창을 열고 화면에 배열하여 창들을 함께 잠그고 창과 내부 창의 크기를 필요에 따라 조정합니다. File > Save Workspace를 클릭합니다. File name 필드에 작업 영역 이름을 입력합니다. <p>참고: 작업 영역 이름과 경로는 합해서 255자를 초과할 수 없습니다. 작업 영역 이름 뒤에는 마침표가 붙고 작업 영역 파일임을 나타내는 wws 확장자가 붙습니다.</p> <ol style="list-style-type: none"> Save를 클릭합니다. <p>작업 영역 정보는 지정된 디렉토리에 확장자가 wws인 파일로 저장됩니다.</p> |
| 작업 영역 열기 | <p>Quantitate 모드와 Explore 모드에서는 현재 모드를 종료하지 않고도 다른 작업 영역을 열 수 있습니다.</p> <ol style="list-style-type: none"> File > Open Workspace를 클릭합니다. 목록에서 적절한 작업 영역 파일을 선택한 다음 OK를 클릭합니다. |

| | |
|----------|---|
| 수행할 작업 | 방법 |
| 작업 영역 저장 | <ol style="list-style-type: none"> 1. Quantitate 모드나 Explore 모드에서는 작업 영역이 활성 상태여야 합니다. 2. File > Save Workspace As를 클릭합니다. <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin: 5px 0;"> 팁! Save Workspace를 클릭하여 작업 영역 정보를 현재 파일 이름 및 위치로 저장합니다. </div> 3. 작업 영역 파일 이름을 입력한 다음 Save를 클릭합니다. 창 및 내부 창 정보는 현재 모드와 연결된 작업 영역의 일부로 자동 저장됩니다. Configure 모드, Tune and Calibrate 모드 또는 Acquire 모드에서는 사용자가 현재 모드를 닫으면 작업 영역이 자동으로 저장됩니다. |
| 소프트웨어 잠금 | <ol style="list-style-type: none"> 1. 도구 모음에서 Lock Application 를 클릭합니다. |

질량 분석계를 조정 및 교정하면 분해능 및 강도 성능이 최대화됩니다.

조정 중에는 다음 작업을 수행할 수 있습니다.

- 교정 질량의 강도 및 분해능(사중극자 모드 전용)을 조정할 분해능 오프셋 값을 조정할 수 있습니다.
- 교정할 질량을 선택할 수 있습니다. 필요한 경우 질량을 교정 목록에 추가하고 제거할 수 있습니다.
- 한 개 이상의 고유한 교정 표준 세트를 생성할 수 있습니다. 교정 표준 세트는 관심 질량 범위의 최소 및 최대값에 대한 화합물을 두 개 이상 가지고 있어야 합니다.

조정 및 교정된 기기는 샘플의 지정된 피크 분해능 및 질량 할당을 검출할 수 있습니다. 이 작업은 PPG(폴리프로필렌 글리콜)와 같이 알려진 교정 표준 물질을 사용하여 수행됩니다. 교정 표준 물질은 허용 가능한 질량 변화 내에서 표적 이온을 정확한 질량 대 전하비에 최대한 가깝게 검출하기 위해 질량 눈금을 교정하는 데 사용됩니다. 정확한 피크를 식별할 수 있을 뿐만 아니라 분해능을 조정하여 최적의 피크 폭과 형태를 얻을 수도 있습니다.

적절하게 조정 및 교정된 질량 분석계는 질량 분석계에서 분석되는 모든 샘플이나 화합물에 대해 최상의 결과를 제공합니다. 조정 및 교정은 최적화와 무관하게 함께 수행됩니다. 조정 및 교정은 분해능과 질량 교정에 중점을 둡니다. 최적화는 감도에 중점을 둡니다.

조정 및 교정 중 질량 분석계 구성에 대한 변경 사항은 API Instrument 폴더의 데이터 파일에 저장됩니다. API Instrument method 폴더의 사전 설정 매개 변수는 SCIEX FSE(현장 서비스 직원)가 최적화한 것이므로 이러한 매개 변수를 사용해야 합니다.

조정 및 교정 후에는 시스템 성능이 최대화되고 지정된 매개 변수가 모든 실험의 기본 매개 변수가 됩니다. 사용자는 최적화된 소스 종속 매개 변수와 화합물 종속 매개 변수로 실험을 실행하여 모든 분석 물질의 감응도를 최대화할 수 있습니다.

팁! 사중극자에 대한 대전 영향(짧은 시간 동안 관심 이온의 감도가 크게 손실됨)을 최소화하려면 Q0 영역을 정기적으로 청소하십시오. *Qualified Maintenance Person Guide*를 참조하십시오.

사용자는 기기를 자동으로 또는 수동으로 조정하고 교정할 수 있습니다.

Automatic tuning: 소프트웨어는 Instrument Optimization 마법사를 사용해 분해능 최적화 및 질량 교정을 수행합니다. 선형 이온 트랩(LIT) 기기의 MS³ 최적화 또한 수행됩니다.

Manual tuning: 사용자는 여러 기기 분해능 최적화 및 교정 작업을 수동으로 실행할 수 있습니다.

조정

질량 분석계 조정은 질량 분석계의 최상의 감도와 성능을 얻기 위해 분해능과 기기 매개 변수를 최적화하는 절차입니다. 주기적으로 또는 시스템 성능이 저하되는 경우에 질량 분석계를

조정 및 교정합니다. 질량 분석계를 최적화하여 새로운 샘플 또는 화합물의 반응을 최대화할 수 있습니다. 분해능 최적화 작업에는 피크 폭 및 피크 형태에 대한 조정이 포함됩니다.

교정

질량 교정은 올바른 질량 대 전하(m/z) 값을 질량 피크에 할당하는 절차입니다. PPG(폴리프로필렌 글리콜)와 같은 교정 표준 물질을 사용하여 질량 교정을 수행할 경우 해당 결과와 이전 교정을 비교하여 관찰된 피크의 m/z 값이 이론적 값에 얼마나 가까운지 파악할 수 있습니다. 이전 교정을 업데이트하거나 새 교정으로 대체할 수 있으며 대체가 더 일반적입니다.

각 극성에 대해 Q1, Q3 및 모든 LIT 스캔을 교정할 때는 여러 질량을 선택합니다. 결과는 교정 테이블에 저장됩니다. 질량 교정이 수행되면 교정 테이블은 새 교정 또는 교정 테이블에 이미 있는 질량의 새로운 DAC(디지털-아날로그 변환기) 값으로 업데이트됩니다. 현재 교정에서 교정되지 않은 질량에 대한 모든 데이터는 유지됩니다. 질량 교정이 대체되는 경우에는 모든 질량에 대한 이전의 모든 교정 값이 대체됩니다. 새로 획득한 스펙트럼을 사용하여 질량 교정을 수행하거나, 저장된 데이터 파일의 스펙트럼을 사용할 수 있습니다.

자동 조정 및 교정

Instrument Optimization는 사극자와 LIT 모드를 모두 조정하여 질량 교정을 수행하는 자동 기기 조정 소프트웨어입니다. 사극자 모드인 경우, 분해능 오프셋을 조정합니다. LIT 모드인 경우, AF3 및 EXB를 최적화합니다. MS³의 경우, 여자 및 격리 계수를 조정합니다. 다음 기기 성능 옵션 중 하나를 선택합니다.

- **Verify instrument performance:** 기기 성능을 검사하지만 기기 설정은 그대로 둡니다. 검사가 끝날 때쯤 보고서가 생성됩니다. 이 옵션을 주 단위로 사용하여 기기가 제대로 실행되는지 점검합니다.
- **Adjust mass calibration only:** 질량 교정을 자동으로 점검하고 조정합니다. 질량 교정이 변한 경우, 소프트웨어가 이를 수정합니다. LIT 기기에 대해 이 옵션을 주 단위로 사용하거나 필요한 경우 월 단위로 질량 교정을 점검하고 조정합니다.
- **Adjust instrument settings:** 기기 설정과 질량 교정을 점검하고 조정합니다. 기기 설정은 현재 설정에서 최적 설정으로 업데이트됩니다. 기기 성능이 나쁘거나 피크 모양이 좋지 않은 경우 이 옵션을 사용합니다. 숙련된 사용자만이 기기 설정을 조정해야 합니다.

참고: 기존 LIT 방법이 새 설정과 함께 업데이트되어야 합니다. 고급 MS 탭에서 LIT 속도를 토글한 다음 방법을 저장합니다.

- **Reset selected scan modes to default values and adjust instrument settings:** 기기 값을 출하 시 사전 설정값으로 재설정합니다. 기기의 주요 구성품이 교체된 경우 또는 최초 설치 후 이 옵션을 선택합니다. FSE만 이 기능을 사용해야 합니다.

(선택 사항) 기기 매개 변수 수동 백업

나중에 복원해야 하는 경우에 대비해 현재 기기 매개 변수를 백업합니다. 수동으로 백업되는 기기 매개 변수의 사전 설정 위치는

```
<drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument  
Optimization\Instrument Settings Backups\User Created Backups
```

입니다.

1. 탐색 모음에서 **Tune and Calibrate** 아래의 **Instrument Optimization**을 두 번 클릭합니다.
2. **File > Backup Instrument Settings**를 클릭합니다.
3. 파일 이름을 입력합니다.
4. **Save**를 클릭합니다.

(선택 사항) 기기 매개 변수 복원

1. 탐색 모음에서 **Tune and Calibrate** 아래의 **Instrument Optimization**을 두 번 클릭합니다.
2. **File > Restore Instrument Settings File**을 클릭합니다.
3. 복원할 기기 설정으로 이동합니다.
4. **Open**을 클릭합니다.

화합물 최적화

Compound Optimization 소프트웨어 마법사가 자동으로 분석 물질을 최적화합니다. 주입 또는 FIA(흐름 주입 분석)를 사용해 샘플을 삽입할 수 있습니다. 소프트웨어는 먼저 화합물의 존재 여부를 확인합니다. 다양한 이온 경로 매개 변수의 전압이 점차적으로 증가하거나 감소하여 각 이온에 대한 최대 신호 강도(Q1 스캔)가 결정됩니다. 최적화 프로세스 중에 텍스트 파일이 생성되어 표시됩니다. 이 파일은 수행된 다양한 실험과 각 이온 광학 장치 매개 변수의 최적 값을 기록합니다. 수행한 모든 실험이 들어 있는 파일 폴더 또한 생성되며 Explore 모드에서 데이터 파일 폴더를 열어 찾을 수 있습니다. 수행된 각 실험의 경우, 획득 방법 또한 생성되며 Acquisition Method 폴더에 저장됩니다.

흐름 주입 분석

흐름 주입 분석(FIA)은 오토샘플러에서 LC 스트림으로의 소량의 샘플 주입입니다. FIA 최적화 프로세스 중에는 주입할 때마다 변경되는 다양한 이온 소스 또는 화합물 종속형 매개 변수 유형, 또는 두 매개 변수 유형 모두에 대해 여러 번의 샘플 주입이 수행됩니다. FIA는 루프화된 실험을 수행함으로써 디클러스터링 전위, 충돌 에너지 및 충돌 셀 출구에 대해 연속적으로 최적화를 수행합니다. 즉, 하나의 화합물 종속 매개 변수 이후 다음 화합물 종속 매개 변수가 이어집니다. FIA는 각 매개 변수에 대해 주입을 수행하여 소스 종속 매개 변수를 최적화합니다.

더 높은 유속에서 LC를 사용하여 화합물 종속 매개 변수와 소스 종속 매개 변수를 모두 최적화하려면 FIA 최적화를 사용하십시오.

주입

주입은 주사기 펌프를 사용하여 낮은 유속에서 샘플을 이온 소스로 연속적으로 흘려 보내는 것입니다. 주입 최적화 프로세스 중에는 소프트웨어가 전구체와 생성 이온을 선택하고 두 가지 모두에 대해 디클러스터링 전위, 충돌 에너지 및 충돌 셀 출구 전위를 최적화할 수 있습니다. 이러한 이온 경로 매개 변수의 전압이 점차적으로 증가하거나 감소하여 전구체 및 생성 이온에 대한 최대 신호 강도가 결정됩니다.

LC/MS 분석 시 사용되는 유속보다 낮은 유속으로만 화합물 종속형 매개 변수를 최적화하려는 경우 주입 최적화를 사용하십시오.

T-Infusion

T-infusion(또는 분할 주입)은 이온 소스의 3방향 접지 유니언을 통해 샘플이 낮은 속도로 이온 소스로 연속해서 흐르는 것입니다. 3방향 접지 유니언은 빨간색 PEEK 배관과 LC 펌프로 주사기 펌프에 연결됩니다.

기존 파일에서 획득 방법 파일을 생성할 경우 획득 방법에서 일부 또는 모든 장치 방법을 사용할 수 있습니다. 획득 방법 편집기를 사용하면 장치 방법을 추가하거나 제거하여 획득 방법을 사용자 지정할 수 있습니다. 필요한 장치 아이콘이 Acquisition Method Browser 창에 없는 경우, 활성 하드웨어 프로필에 포함되어 있는 경우에만 장치를 추가할 수 있습니다.

방법 개발 실력이 우수한 사용자만 획득 및 정량화 방법을 생성하거나 수정하는 것이 좋습니다. 역할 및 보안에 대한 자세한 정보는 실험실 책임자 안내서의 "사람 및 역할 정보" 섹션을 참조하십시오.

획득 방법 중인 장치

장치에 대한 작동 매개 변수를 선택하여 주변 장치에 대한 획득 방법을 생성합니다. 획득 방법이 활성 하드웨어 프로필 내에 구성될 경우, 다음의 모든 장치에 대한 획득 방법이 생성될 수 있습니다.

- 펌프
- 오토샘플러
- 주사기 펌프
- 컬럼 오븐
- 전환 밸브
- 다이오드 어레이 검출기
- 아날로그-디지털 변환기
- 통합 시스템

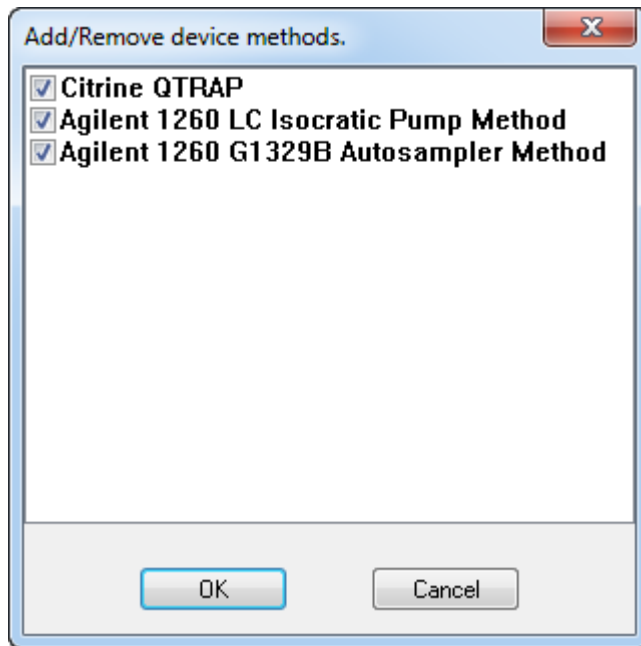
장치 속성을 설정하는 방법에 대한 정보는 *Peripheral Devices Setup Guide*를 참조하십시오.

참고: LC 장치용으로 사용할 수 있는 매개 변수는 제조업체에 따라 다릅니다.

주변 장치 추가 또는 제거

1. Acquisition Method Editor의 Acquisition method 창에 방법 파일이 열린 상태에서 **Acquisition Method**를 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Add/Remove Device Method**를 클릭합니다.
Add/Remove Device Method 대화 상자가 열립니다. 이 대화 상자에는 활성 하드웨어 프로필로 구성된 장치가 표시됩니다.

그림 3-1 Add/Remove Device Method 대화 상자



2. 장치 방법 옆에 있는 확인란을 선택하거나 선택을 취소하여 장치 방법을 추가하거나 제거합니다.
3. **OK**를 클릭합니다.

LC 펌프 속성 설정

1. Acquisition Method Editor에 획득 방법 파일이 열린 상태에서 Acquisition method 창에서 다음 중 하나를 수행합니다.
 - Agilent 펌프의 경우 **Pump** 아이콘을 클릭합니다.
 - Integrated System Shimadzu LC Controller를 사용하여 활성화된 Shimadzu LC 20/30 장치의 경우 **Shimadzu LC System**을 클릭합니다.
 - Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller를 사용하여 활성화된 Shimadzu LC 20/30 장치, Shimadzu LC 40 장치, ExionLC 장치, ExionLC 2.0 장치 또는 Jasper LC 장치의 경우 **LC System**을 클릭합니다.
2. 오른쪽 창에서 LC 펌프에 대한 탭이 선택되어 있지 않은 경우 이를 선택하고 필요에 따라 속성이나 설정을 편집합니다.
3. 파일을 저장합니다.

오토샘플러 속성 설정

1. Acquisition Properties 탭에서 **Synchronization Mode** 필드가 **LC Sync**로 설정되어 있는지 확인합니다. 장치, 샘플 주입 및 기기 획득이 동시에 시작됩니다.
2. Acquisition Method Editor에 방법 파일이 열린 상태에서 Acquisition method 창에서 다음 중 하나를 수행합니다.

- Agilent 오토샘플러의 경우 Agilent Autosampler 아이콘을 클릭합니다.
 - CTC Pal 오토샘플러의 경우 CTC PAL Autosampler 아이콘을 클릭합니다.
 - Integrated System Shimadzu LC Controller를 사용하여 활성화된 Shimadzu LC 20/30 장치의 경우 **Shimadzu LC System**을 클릭합니다.
 - Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller를 사용하여 활성화된 Shimadzu LC 20/30 장치, Shimadzu LC 40 장치, ExionLC 장치, ExionLC 2.0 장치 또는 Jasper LC 장치의 경우 **LC System**을 클릭합니다.
3. 오른쪽 창에서 Autosampler 탭을 연 다음 필요에 따라 속성이나 설정을 편집합니다.
 4. 파일을 저장합니다.

통합형 주사기 펌프 속성 설정

이 절차는 주사기 펌프가 내장된 시스템에 적용됩니다.

1. Acquisition Method Editor에 획득 방법 파일이 열린 상태에서 Acquisition Method Browser 창의 Syringe Pump 아이콘을 클릭합니다.
Syringe Pump Method Properties 탭이 Acquisition Method Editor 창에 열립니다.
2. 필요할 경우 필드를 편집합니다.
3. 파일을 저장합니다.

컬럼 오븐 속성 설정

1. Acquisition Method Editor에 획득 방법 파일이 열린 상태에서 Acquisition method 창에서 다음 중 하나를 수행합니다.
 - Agilent 컬럼 오븐의 경우 **Agilent Column Compartment** 아이콘을 클릭합니다.
 - Integrated System Shimadzu LC Controller를 사용하여 활성화된 Shimadzu LC 20/30 장치의 경우 **Shimadzu LC System**을 클릭합니다.
 - Integrated System Shimadzu LC-20/30 Controller를 사용하여 활성화된 Shimadzu LC 20/30 장치, Shimadzu LC 40 장치, ExionLC 장치, ExionLC 2.0 장치 또는 Jasper LC 장치의 경우 **LC System**을 클릭합니다.
2. 오른쪽 창에서 컬럼 오븐 탭이 선택되어 있지 않은 경우 이를 선택하고 필요에 따라 속성이나 설정을 편집합니다.
3. 파일을 저장합니다.

전환 밸브 속성 설정

전환 밸브는 디버터 또는 주입 밸브로 사용할 수 있습니다. 밸브를 주입기로 사용하려는 경우 **Manual Sync with Valve** 동기화 모드를 선택합니다. 밸브를 디버터로 사용하려는 경우에는 다른 모드를 선택합니다.

1. Acquisition Method Editor에 방법 파일이 열린 상태에서 Acquisition method 창의 **Valve** 아이콘을 클릭합니다.
Valve Properties 탭이 Acquisition Method Editor 창에서 열립니다.
2. 필요한 경우 위치 이름을 사전 설정된 이름에서 다른 이름으로 변경합니다.

전환 밸브는 경우에 따라 용매 흐름을 펌프 컬럼 또는 다른 컬럼으로 전환하는 데 사용됩니다. 사전 설정된 위치 이름은 A와 B입니다.

- **Change Position Names** 목록에서 위치를 선택합니다.
 - **Change Position Names** 목록에서 밸브의 배관 방식에 따라 사전 설정된 위치 이름을 변경합니다. 밸브를 주입기로 사용하는 경우 A 및 B 이름을 Inject 및 Divert나 Column 및 Waste로 변경합니다. 밸브를 디버터로 사용하는 경우 A 및 B 이름을 Divert 및 Inject나 Waste 및 Column으로 변경합니다.
3. **Total Time (min)** 열에서 셀을 클릭한 다음 밸브가 이 위치에서 유지되는 총 시간을 입력합니다.
 4. **Position** 열에서 셀을 클릭한 다음 **Position** 목록에서 밸브 위치를 선택합니다.
 5. 획득 중 밸브 전환이 필요할 때마다 3단계와 4단계를 반복합니다.
 6. 파일을 저장합니다.

다이오드 어레이 검출기 매개 변수 설정(Agilent)

1. Acquisition Method Editor에 획득 방법 파일이 열린 상태에서 Acquisition method 창의 Agilent Diode Array Detector 아이콘을 클릭합니다.
Acquisition Method Editor 창에 Agilent DAD Method Editor 탭이 열립니다.
2. 필요할 경우 속성을 편집합니다.
3. 파일을 저장합니다.

아날로그-디지털 변환기 속성 설정

1. Acquisition Method Editor에 방법 파일이 열린 상태에서 Acquisition method 창의 ADC(아날로그-디지털 변환기) 아이콘을 클릭합니다.
Acquisition Method Editor 창에서 Analog/Digital Converter Properties 탭이 열립니다.
2. Sample 섹션의 **Rate (pts/sec)** 필드에 속도를 입력합니다.

참고: 간격과 속도가 서로 비례합니다. 속도를 변경하면 소프트웨어에서 간격을 자동으로 계산합니다.

3. 채널 세부 사항을 설정하려면 다음을 수행합니다.
 - a. **Channels** 필드에서 채널 이름을 클릭한 다음 이름 옆에 있는 확인란을 선택하여 해당 채널을 방법에 포함합니다.
 - b. **Interpreted Value @ Full Scale** 필드에 적절한 값을 입력합니다.
 - c. **Interpreted Unit** 필드에 적절한 단위를 입력합니다.

하드웨어 프로필에서 ADC를 설정할 때 사용 가능한 채널 수가 지정됩니다.

4. 파일을 저장합니다.

동적 채우기 시간

동적 채우기 시간(Dynamic Fill Time, DFT)은 선형 이온 트랩 스캔 기능을 위해 모든 스펙트럼에서 얻은 데이터를 최적화하기 위해 특별히 설계된 기능입니다. DFT는 소스에서 나오는 이온 플렉스를 토대로 이온 트랩을 채우는 데 사용하는 채우기 시간을 자동 조정합니다. 보다 강한 강도 이온의 경우, 채우기 시간은 트랩이 이온으로 과대전되지 않도록 자동으로 감소됩니다.

보다 덜 강한 강도 이온의 경우, 채우기 시간은 우수 이온 통계가 스펙트럼에서 획득되도록 자동으로 증가됩니다. DFT는 다음과 같은 스캔 유형에 적용됩니다.

- EMS(고급 MS)
- ER(고급 분해능)
- EPI(고급 생성 이온)
- MS³(MS/MS/MS)

소프트웨어에서 **Tools > Settings > Method Options**를 선택하여 DFT 설정을 조정합니다.

실험 및 기간

질량 분석계 획득 방법은 실험 및 기간으로 구성됩니다. Acquisition Method 브라우저 창에서 질량 분석계에 대한 획득 기간 및 실험의 시퀀스를 생성할 수 있습니다. 또한 Tune Method Editor에서 이전에 생성된 방법을 열 수도 있습니다.

실험

하나의 실험은 MS 스캔 중 질량 분석계 설정과 스캔 유형을 포함합니다. 특정 시간 동안 수행되는 MS 스캔의 한 세트를 기간이라고 부릅니다. 전체 지속 시간에 걸쳐 MS 매개 변수와 조치가 동일한 획득 방법을 단일 기간, 단일 실험 방법이라고 부릅니다.

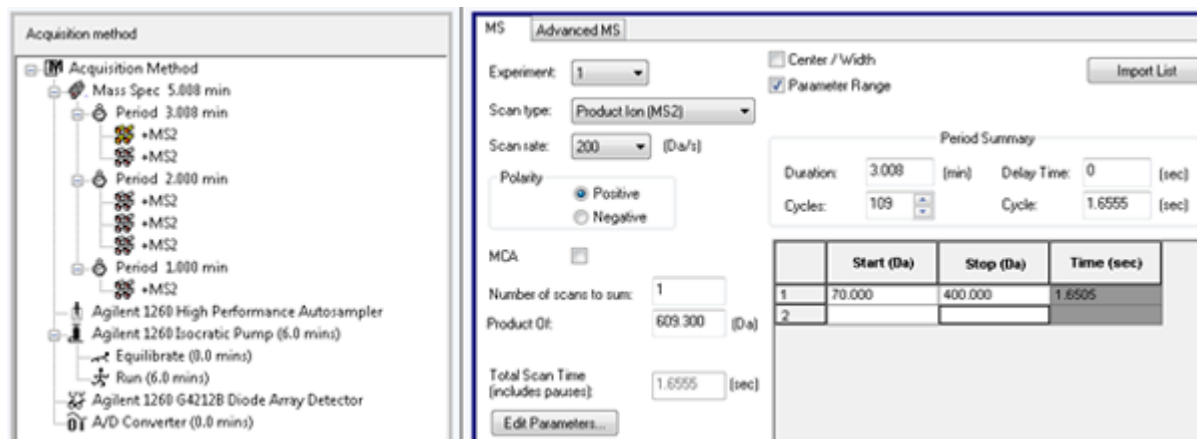
루프화된 실험에서, MS 설정은 스캔에 따라 변합니다. 예를 들어, 한 샘플이 A와 B라는 두 개의 화합물을 포함하고 있는 경우, 사용자는 동일한 수행으로 두 화합물 모두에 대한 정보를 얻기 위해 화합물 A의 MS/MS 실험과 화합물 B의 MS/MS 실험을 루프로 만들고자 할 수 있습니다. 이 질량 분석계 방법은 두 스캔 유형을 번갈아 가며 수행할 것입니다. 루프화된 실험의 다른 사례로는 수행 중의 양극과 음극 모드 간의 교차 수행 및 정보 종속 획득(IDA) 방법이 있습니다.

기간

하나의 기간은 하나 이상의 루프화된 실험을 포함할 수 있습니다. 다중 기간 획득 방법에서 실험은 지정된 시간 동안 수행되며, 그런 다음 다른 실험 세트로 전환됩니다. 기간은 LC 실행에서 화합물의 용리 시간을 알고 있을 때 유용합니다. 질량 분석계는 화합물이 용리되는 시점에 따라 각기 다른 실험을 수행하여 동일 실행 안에서 가능한 한 많은 정보를 얻을 수 있습니다.

다음 그림에서는 3기간 방법을 보여줍니다.

그림 3-2 다중 기간 실험 예시



정보 종속 획득 방법

IDA 방법은 이전 주기에서 획득한 결과를 토대로 실험을 자동으로 실행합니다. IDA 기준을 사용하여 단일 주입 내의 샘플 획득 시간을 줄이기 위해 데이터를 획득하는 동안 데이터 획득 설정을 최적화하십시오. 사용자가 IDA를 사용하여 획득한 샘플의 양과 귀중한 작업 시간 모두를 절약할 수 있습니다.

단일 기간에서 최대 여덟 개의 최대 강도 피크에 대한 최대 두 개의 조사 스캔과 종속 스캔으로 IDA 방법을 생성합니다. 조사 스캔은 IDA에서 추가 실험을 트리거하는 데 사용됩니다. 다음 스캔 유형이 조사 스캔으로 사용될 수 있습니다.

- EPI(고급 생성 이온)(이차 조사 스캔)
- EMS(고급 MS)
- MRM(다중 감응 모니터링) 또는 *Scheduled* MRM 알고리즘
- NL(중립 손실)
- Prec(전구체 이온)
- Q3 MS

다음 스캔 유형이 종속 스캔으로 사용될 수 있습니다.

- EPI
- MS/MS

IDA 방법 획득 중 질량 분석계 동작은 이전 주기에서 획득한 데이터를 토대로 한 스캔에 따라 다양합니다. 본 소프트웨어는 획득 중인 데이터를 분석한 다음 종속 스캔을 수행할 질량을 결정합니다. 사용자는 IDA 실험을 활성화할 기준과 사용할 방법 매개 변수를 설정할 수 있습니다.

다음 사용자 정의 기준을 토대로 종속 스캔을 실행하여 IDA 방법 획득 시 결과가 향상됩니다.

- 이온 강도 및 대전 상태
- 포함 및 제외 목록

- 동위 원소 패턴
- 동적 제외
- 이온 강도 변화율([Dynamic Background Subtraction 알고리즘](#) 섹션 참조)

예약된 이온화

Scheduled Ionization 기능을 사용하면 오염 위험을 낮추어 질량 분석계 중단 시간을 줄일 수 있습니다. 이 기능은 Acquisition Method Editor에서 사용할 수 있으며 단일 기간 획득 방법을 이용한 배치 획득에 사용할 수 있습니다. 다음 그림을 참조하십시오.

그림 3-3 Acquisition Method Editor의 이온화 예약 기능

Scheduled Ionization이 선택되고 **Scheduled Ionization**의 **Start Time** 및 **Stop Time**이 설정된 경우 **IonSpray Voltage (ISV)**는 관심 피크가 용리되는 **Start Time**과 **Stop Time** 사이에만 획득 방법에 지정된 **ISV** 값으로 설정됩니다. **Start time** 이전과 **Stop time** 이후에는 **ISV**가 0으로 설정됩니다. LC 방법은 평소와 같이 설정해야 합니다. 예를 들어 LC 지속 시간이 5분으로 설정되고 **Scheduled Ionization**은 1.5분에 시작하여 3.5분에 중지되도록 설정된 경우 LC는 0분에 시작하여 5분에 중지되고 질량 분석계 데이터 수집은 1.5분에 시작하여 3.5분에 중지됩니다. **Scheduled Ionization**은 **Nebulizer Current (NC)**에도 사용될 수 있습니다(Turbo V 또는 IonDrive Turbo V 이온 소스가 APCI 모드에서 사용되는 경우).

Scheduled Ionization 기능이 선택되어 있을 때 획득 방법의 **Start Time** 및 **Stop Time**은 **Scheduled Ionization**이 선택되지 않았을 때 동일한 획득 방법을 사용하여 획득된 데이터를 기반으로 개발해야 합니다.

참고: **Stop Time** 값은 **Start Time** 값보다 커야 합니다.

획득 방법

참고: **Scheduled Ionization** 확인란이 선택된 경우 **Mass Spec** 시간은 이온화가 중지되도록 예약된 **Stop Time**입니다. Acquisition Method Editor에서 **Period** 옆에 표시된 시간은 **Duration** 필드에 표시된 값입니다. 다음 그림을 참조하십시오.

그림 3-4 **Scheduled Ionization**이 선택된 경우의 질량 분석계 시간

| | Q1 Mass (Da) | Q3 Mass (Da) | Dwell Time (msec) | ID | DP (volts) | CE (volts) |
|---|--------------|--------------|-------------------|-------------|------------|------------|
| 1 | 609.300 | 195.100 | 15.0 | Reserpine 1 | 100.000 | 55.000 |

용매 압축률 값

표 3-1 용매 압축률 값

| 용매 | 압축률($10^{-6}/\text{bar}$) |
|---------|-----------------------------|
| 아세톤 | 126 |
| 아세트니트릴 | 115 |
| 벤젠 | 95 |
| 사염화탄소 | 110 |
| 클로로포름 | 100 |
| 시클로헥산 | 118 |
| 에탄올 | 114 |
| 아세트산 에틸 | 104 |
| 헵탄 | 120 |
| 헥산 | 150 |
| 이소부탄올 | 100 |
| 이소프로판올 | 100 |
| 메탄올 | 120 |
| 1-프로판올 | 100 |
| 톨루엔 | 87 |
| 물 | 46 |

주사기 크기 대 유속

주사기 펌프의 유속은 펌프에 설치된 주사기에 따라 다릅니다. 다음 표에서 유속과 주사기 크기의 상관 관계를 보여줍니다.

표 3-2 주사기 크기 및 유속(L/시간)

| 주사기 크기(μ L) | L/시간 최소 | L/시간 최대 |
|------------------|---------|---------|
| 0.5 | .002 | 23.8 |
| 1.0 | .003 | 47.8 |
| 2.0 | .006 | 95.2 |
| 5.0 | .015 | 238.0 |
| 10.0 | .029 | 474.0 |
| 25.0 | .073 | 1193.0 |

표 3-3 주사기 크기 및 유속(μ L/분)

| 주사기 크기(μ L) | μ L/분 최소 | μ L/분 최대 |
|------------------|--------------|--------------|
| 50 | .002 | 39.7 |
| 100 | .005 | 79.7 |
| 250 | .012 | 197.8 |
| 500 | .024 | 397.0 |
| 1000 | .048 | 795.0 |
| 1.0 | .049 | 805.0 |

표 3-4 주사기 크기 및 유속(mL/시간)

| 주사기 크기(mL) | mL/시간 최소 | mL/시간 최대 |
|------------|----------|----------|
| 2.0 | .011 | 186.8 |
| 2.5 | .010 | 168.2 |
| 3.0 | .011 | 181.4 |
| 5.0 | .019 | 317.0 |
| 10.0 | .028 | 461.0 |
| 20.0 | .050 | 821.0 |
| 30.0 | .074 | 1208.0 |

표 3-5 주사기 크기 및 유속(mL/분)

| 주사기 크기(mL) | mL/분 최소 | mL/분 최대 |
|------------|---------|---------|
| 50.0 | .002 | 28.40 |
| 100.0 | .003 | 47.60 |

표 3-5 주사기 크기 및 유속(mL/분) (계속)

| 주사기 크기(mL) | mL/분 최소 | mL/분 최대 |
|------------|---------|---------|
| 140.0 | .004 | 55.10 |

배치는 분석할 샘플에 대한 정보 모음입니다. 일반적으로 샘플은 제출을 간소화하기 위해 세트로 그룹화됩니다. 샘플을 하나의 세트로 그룹화하면 수동으로 입력해야 하는 데이터의 양 또한 감소시킵니다. 세트는 단일 샘플 또는 여러 샘플로 구성될 수 있습니다. 배치 내의 모든 세트는 같은 하드웨어 프로필을 사용합니다. 그러나 세트 내의 샘플 들은 각기 다른 획득 방법을 가질 수 있습니다. 배치는 획득 스테이션에서만 제출할 수 있습니다.

배치에는 다음 정보가 포함됩니다.

- 이름, ID, 데이터 파일 이름, 메모 등의 샘플 정보
- 오토샘플러 위치(랙 정보), 바이알 위치
- 획득 방법 및 주입량
- 획득 방법(선택 사항)
- 정량화 정보(선택 사항)
- 사용자 지정 샘플 데이터(선택 사항)
- 세트 정보.

Batch Editor

Batch Editor를 사용해 배치를 생성하거나 수정하고 배치 템플릿을 생성합니다. 샘플을 실행하려면, 각기 다른 획득 방법을 사용해 동일한 세트 내에서 여러 개의 획득 방법을 선택하십시오.

획득 방법은 템플릿으로도 사용될 수 있습니다. 이 경우, 각 샘플에는 동일한 방법이 사용되지만 사용자가 샘플마다 각기 다른 질량 또는 질량 범위를 선택할 수 있습니다. 또한 Batch Editor를 사용하여 Microsoft Excel과 같은 외부 프로그램에서 생성된 샘플 목록을 가져올 수도 있습니다.

사용자는 처리를 위해 배치를 제출하기 전에 해당 배치의 모든 세부 사항을 수정할 수 있습니다. 분석을 위해 배치를 제출할 때, 사용자는 전체 배치, 배치 내의 특정 세트 또는 세트 내의 특정 샘플을 제출할 수 있습니다.

예를 들어 샘플 열 개를 분석하려면, 획득 방법 하나에 다섯 개와 다른 획득 방법 하나에 다섯 개를 사용해, 사용된 각 방법당 하나씩 두 개 세트의 배치를 생성합니다.

참고: 사용자가 배치를 제출하기 전 모든 배치 매개 변수를 검토하여 랙, 플레이트 및 바이알 위치가 오토샘플러의 하드웨어 설정과 일치하도록 해야 하며 랙 설정 옵션인 Specify rack이 획득 방법에서 사용 가능하며 사용 중인 오토샘플러에 선택되도록 하는 것이 좋습니다.

참고: 사용자는 배치를 제출하기 전에 올바른 랙 및 플레이트와 올바른 샘플 위치가 오토샘플러에 로드되도록 하는 것이 좋습니다.

표 4-1 Batch Editor 탭

| 탭 | 설명 |
|--------------|--|
| Sample | 샘플 목록을 만들고 샘플 이름 및 샘플 획득에 사용될 획득 방법과 같은 샘플 세부 사항을 선택하기 위해 사용됩니다. |
| Locations | 오토샘플러에서 샘플의 위치를 선택하는 데에 사용됩니다. 샘플 위치는 Sample 탭에서 숫자로 지정될 수 있습니다. 그러나, Locations 탭은 샘플 위치 선택을 위한 그래픽 인터페이스를 제공합니다. |
| Quantitation | 정량화 배치를 위한 샘플 유형 및 농도를 선택하는 데 사용됩니다. 정량화 정보는 획득 후 정량화 Results Table에 명시될 수 있기 때문에, 사용자는 Batch Editor의 Quantitation 탭을 사용할 필요가 없습니다. 대신, Quantitation Wizard가 사용될 수 있습니다. |
| Submit | 샘플 정보를 확인하고 획득 대기열에 샘플을 제출하는 데에 사용됩니다. Queue Manager는 대기열, 배치 및 샘플 상태를 보여주며 사용자가 대기열에 있는 샘플을 관리할 수 있도록 해줍니다. |

배치 파일 가져오기

Batch Editor에서 배치를 생성하는 대신에 배치 정보가 포함된 텍스트 파일을 가져올 수 있습니다. 모든 샘플 세부 정보가 스프레드시트에 있는 경우 스프레드시트에서 데이터를 재배포한 후 가져오는 방법이 Batch Editor에서 데이터를 수동으로 입력하는 방법보다 빠릅니다.

텍스트 파일에서 배치 정보를 가져오기 전에 파일의 데이터 구성 및 서식이 올바른지 확인하십시오. 특히, 스프레드시트의 열 머리글은 Batch Editor의 열 머리글과 일치해야 합니다. 텍스트 파일에 올바른 머리글이 들어 있는지 확인하려면 Batch Editor에서 배치를 생성하여 텍스트 파일로 내보내고, 스프레드시트 편집기에서 해당 값을 입력한 다음 파일을 다시 Batch Editor로 가져옵니다.

올바른 서식이 있는 파일에 대한 예시는 Example project에 있는 Batch 폴더를 참조하십시오.

배치 파일에 있는 정보는 Microsoft Excel, Microsoft Access, 특정 LIMS(실험실 정보 관리 시스템) 소프트웨어 등의 다른 어플리케이션과 사용하기 위해 내보낼 수도 있습니다.

Batch Editor에서 정량화 세부 정보 설정(선택 사항)

배치에 정량화 방법이 사용되며 사용자가 획득 후에 정량화 세부 정보를 선택하지 않으려고 하는 경우에는 배치가 제출되기 전에 정량화 세부 정보(샘플 유형, 샘플 농도)를 정의해야 합니다.

적절한 **Internal Standard** 및 **Standard** 열이 Sample 탭에서 선택한 정량화 방법에 따라 Quantitation 탭에 표시됩니다.

1. Batch Editor 창에 배치 파일이 열린 상태에서 Quantitation 탭을 엽니다.
2. 샘플을 포함하는 세트를 선택합니다.

-
3. 셀의 목록에서 모든 샘플에 대한 **Quant Type**, **Dilution Factor** 및 **Weight/Volume**을 선택합니다.
 4. (필요한 경우) **Analyte** 열에 분석 물질 농도를 입력합니다.
 5. (필요한 경우) **Internal Standard** 열에 내부 표준 물질 농도를 입력합니다.
 6. 배치의 각 세트에 대해 이 절차를 반복합니다.

사용자가 데이터 파일에 포함된 정보를 테이블 또는 그래프 형태로 볼 수 있습니다. 그래프 데이터는 크로마토그램이나 스펙트럼으로 표시됩니다. 이러한 형태 중 하나의 데이터를 데이터 포인트 테이블로 볼 수 있으며, 데이터에 대해 다양한 정렬 작업을 수행할 수 있습니다.

소프트웨어에서는 TIC와 방법 데이터를 wiff 파일에 저장하고 스펙트럼 데이터를 wiff.scan 파일에 저장합니다. 소프트웨어에서 데이터 파일을 열기 위해서는 wiff 파일과 wiff.scan 파일이 모두 필요합니다. 또한 소프트웨어에서는 단일 샘플에 대한 데이터가 포함된 txt 파일도 열 수 있습니다. 데이터 파일이 소프트웨어에서 열리면 수행된 실험 유형에 따라 각기 다른 창이 표시됩니다.

Tune Method Editor에서 MCA 확인란을 선택한 경우 데이터 파일과 함께 질량 스펙트럼이 열립니다. MCA 확인란을 선택하지 않은 경우에는 데이터 파일과 함께 TIC(총 이온 크로마토그램)가 열립니다. 사용자는 범위를 선택한 다음 TIC 창에서 특정 시간을 두 번 클릭하여 이 범위에 대한 스펙트럼을 표시할 수 있습니다.

크로마토그램

크로마토그램은 반복적인 실험에서 시간에 대한 정량 변화를 보여줍니다. 예를 들어 질량 분석계는 주어진 스펙트럼 스캔 세트를 여러 회 반복하도록 프로그래밍됩니다. 크로마토그래픽 데이터는 데이터 강도가 0인 경우에도 연속적입니다. 크로마토그램은 질량 분석계에 의해 바로 생성되지 않으며 스펙트럼에 의해 생성됩니다.

크로마토그램 보기에서 초당 카운트 수(cps) 단위의 강도는 X축을 시간으로 하여 Y축에 표시됩니다. 피크에는 자동으로 레이블이 지정됩니다.

LC/MS의 경우, 크로마토그램은 흔히 특정 스캔이 얻어진 시간의 함수로 표시되며 이는 스캔 번호에서 차용될 수 있습니다.

LC 컬럼이 사용될 때 크로마토그램은 일반적으로 시간 종속형인 데이터의 일반 보기를 제공하지만, 피크의 구성 요소에 대한 정보도 제공합니다. 예를 들어 크로마토그램이 피크를 하나만 표시할 때 해당 피크는 질량이 서로 다른 둘 이상의 화합물을 나타낼 수 있습니다.

주어진 샘플의 크로마토그래픽 조건이 변화하면 크로마토그래픽 데이터의 시간과 강도가 변화할 수 있습니다.

스펙트럼

스펙트럼은 질량 분석계에서 직접 획득한 데이터이며 일반적으로 특정 질량 대 전하비(m/z) 값을 사용하여 검출된 이온 수를 나타냅니다. X 축의 m/z 값과 Y 축의 강도(cps)를 사용한 그래프로 표시됩니다.

MRM 스펙트럼의 경우, 강도는 두 가지 질량 즉, 전구체 이온 질량(Q_1) 및 생성 이온 질량(Q_3)과 연결됩니다.

데이터를 스펙트럼으로 표시하면 화합물에 대한 질량별 정보를 얻을 수 있습니다. 스펙트럼은 특정 크로마토그래픽 피크에 해당하는 이온의 m/z 값을 제공합니다. 이러한 이온을 사용하여

더 구체적인 정보를 찾을 수 있습니다. 예를 들어 스펙트럼은 각 질량의 강도를 포함하여 피크를 구성하는 모든 질량을 표시합니다.

스펙트럼 강도는 변할 수 있지만 화합물 질량은 변하지 않으므로 m/z 값은 고정되어 있습니다.

스펙트럼 데이터를 생성하는 방법에는 두 가지가 있습니다.

- 단일 스캔만 획득하는 경우 또는 획득에 MCA를 사용하는 경우 데이터가 스펙트럼으로 표시됩니다.
- 크로마토그램에서 생성

배경 감산

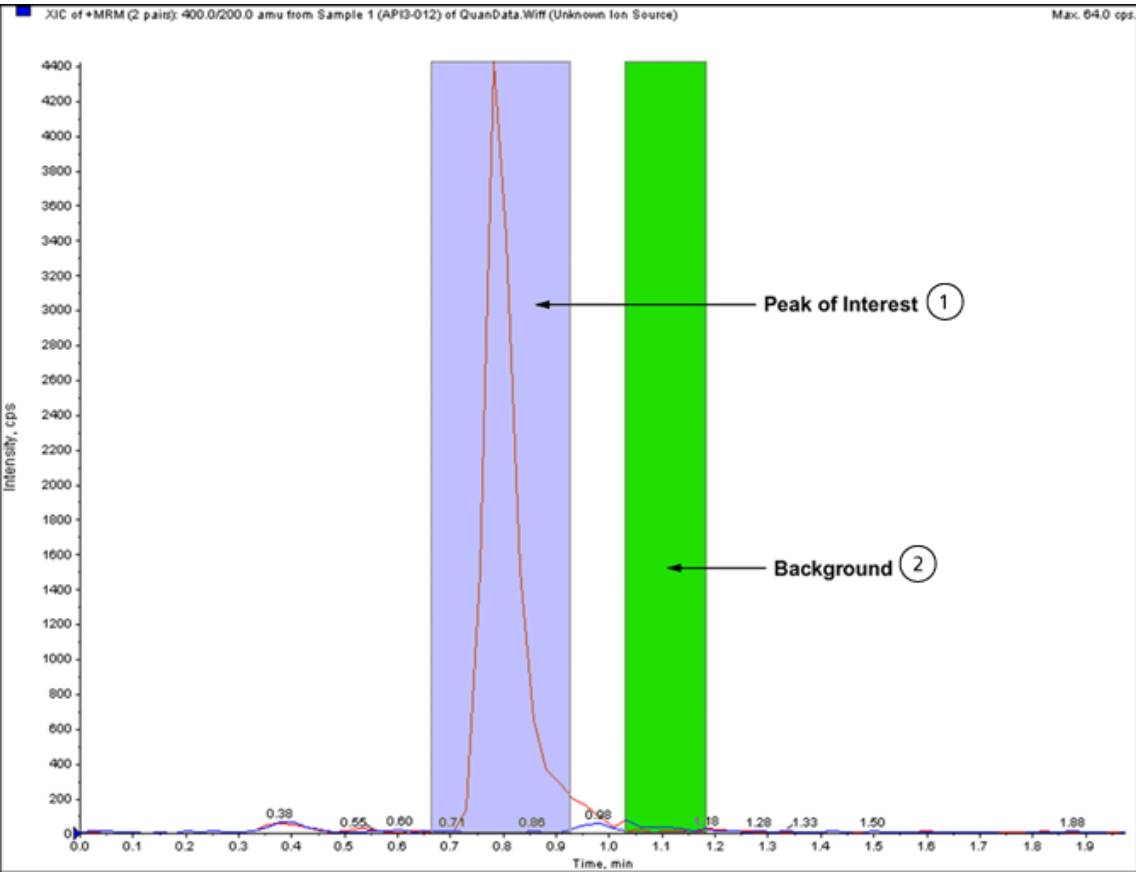
배경 감산은 피크를 포함하는 범위에서 노이즈를 포함하는 하나 또는 두 개 범위를 제거하여 스펙트럼에서 노이즈의 양을 줄입니다. 사용자는 범위를 개별적으로 이동하거나 범위를 잠그고 그래프 내에서 단일 개체로 이동하여 피크 분리를 최적화하거나 다른 피크를 분리할 수 있습니다. Locked Background Subtract는 사전 설정된 설정입니다. 이 소프트웨어는 다양한 배경 감산 방법을 제공합니다.

Background Subtract: 배경 감산을 사용하여 관심 피크를 분리할 수 있습니다. 사용자가 최대 두 개의 선택한 범위를 강조 표시한 후 피크에서 제거할 수 있습니다. 또한 범위를 잠그고 그래프 내에서 이동하여 피크 분리를 최적화하거나 다른 피크를 분리할 수 있습니다.

크로마토그램에 대해 배경 감산 수행

1. 데이터 파일을 엽니다.
2. 크로마토그램의 배경 범위를 선택합니다.
3. **Shift**를 누른 다음 다른 배경 범위를 선택합니다.

그림 5-1 XIC



| 항목 | 설명 |
|----|-------|
| 1 | 관심 피크 |
| 2 | 배경 |

4. 감산 범위를 설정하려면 **Explore > Background Subtract > Set Subtract range**를 클릭합니다.
5. 관심 피크를 선택합니다.
6. **Explore > Background Subtract > Perform Background Subtract**를 클릭합니다. 배경이 피크에서 감산되고 새 스펙트럼이 생성됩니다.
7. 다른 피크를 분리하려면 크로마토그램에서 잠긴 범위를 끌어서 배경 감산을 반복합니다.

팁! 배경 감산 영역을 지우려면 **Explore > Background Subtract > Clear Subtract Range**를 클릭합니다.

8. 배경이 감산된 스펙트럼을 처리된 데이터 파일로 저장하려면 **File > Save Processed Data File**을 클릭합니다.

범위 잠금 해제

| |
|--|
| 선행 조건 |
| <ul style="list-style-type: none">선택한 감산 범위가 잠금 상태로 설정되어 있습니다. |

Explore > Background Subtract > Subtract Range Locked.를 클릭합니다.
해당 범위의 잠금이 해제되고 각각의 범위를 개별적으로 이동할 수 있습니다.

기준선 감산

Baseline Subtract는 데이터 세트에서 일정하거나 조금씩 변하는 오프셋을 제거합니다. 이 기능은 노이즈로 인해 모호해진 작은 피크의 위치를 찾을 때 유용합니다. 기준선 감산을 수행할 때 소프트웨어에서 사용되는 알고리즘은 다음과 같습니다.

- 데이터 세트 내의 모든 데이터 포인트는 amu 또는 분으로 측정된 사용자 정의 가능한 폭과 함께 범위(질량 또는 시간 내)의 중심으로 간주됩니다.
- 창 내의 현재 데이터 포인트의 양측에 대한 최소값이 위치합니다.
- 일직선이 두 개의 최소값 사이에 맞춰지고 현재 데이터 포인트의 높이(강도)가 계산됩니다. 데이터의 중지점은 최소 값들로 간주됩니다.
- 데이터 포인트는 새로 계산된 값들로 교체됩니다.

계산기

계산기를 사용해 수집된 데이터에 기반하여 계산을 수행합니다. 계산기는 개별적인 창이지만 소프트웨어 내에서 활성화된 그래프와 연결되어 있습니다.

다음 계산기를 사용할 수 있습니다.

- [원소 조성 계산기](#)
- [HyperMass 계산기](#)
- [원소 표적화 계산기](#)
- [질량 속성 계산기](#)
- [동위 원소 분포 계산기](#)

계산기의 각기 다른 창 간에 한 텍스트 상자에서 다른 텍스트 상자로 잘라내기/붙여넣기를 할 수 있습니다. 창의 왼쪽 상단에 있는 **Print** 아이콘을 클릭하여 모든 계산기의 데이터를 인쇄할 수도 있습니다. 계산기 사용에 대한 자세한 정보는 도움말을 참조하십시오.

Elemental Composition, Mass Property 및 Isotopic Distribution 계산기의 데이터를 개별 파일로 내보낼 수 있습니다. 활성 그래프의 데이터를 수정하려면 Elemental Targeting 계산기를 사용하십시오. HyperMass 및 Isotopic Distribution 계산기의 데이터는 활성 스펙트럼에 중첩될 수 있습니다.

팁! Appearance Options 대화 상자의 Calculators 탭에서 계산기 데이터의 정밀도를 설정합니다. 이 대화 상자를 열려면 **Tools > Settings > Appearance Options**를 클릭합니다.

원소 조성 계산기

Elemental Composition 계산기는 대상 질량 대 전하 비율을 기반으로 잠재적인 분자 또는 아미노산 구성을 측정합니다. 이 비율을 수동으로 입력하거나 활성 스펙트럼에서 선택합니다. 이 계산기는 관심 질량 및 각 질량의 특성을 구성하는 가능한 요소 또는 아미노산 조합을 포함하는 표를 생성합니다.

오차, 전자 상태 및 전하 갯수와 같은 매개 변수에 대한 값을 입력하거나 선택합니다. 또한 사용자가 가능한 요소 목록을 입력하고 각 숫자에 제한을 둘 수도 있습니다.

HyperMass 계산기

HyperMass 계산기는 대전되지 않은 질량을 기반으로 다중 대전 포락선의 분포를 측정합니다. 사용자는 부가 생성물 및 생성물의 극성을 비롯하여 대전되지 않은 질량을 선택할 수 있습니다.

이 계산기는 활성 스펙트럼에 겹쳐질 수 있는 Hypermass 시리즈의 그래픽 표현을 보여줍니다. Hypermass 데이터 목록 역시 사용할 수 있습니다.

원소 표적화 계산기

Elemental Targeting 계산기는 특정 패턴, 주로 원소 분포에 해당하는 패턴을 기반으로 한 데이터 스펙트럼을 감소시킵니다. 계산기는 또한 피크의 특정 패턴에 대한 MS 데이터 스펙트럼을 검색할 수도 있으며, 이는 수식 또는 원소 분포로 입력될 수 있습니다.

계산기가 일치를 발견할 경우, 지정된 패턴과 관계가 있는 데이터만을 포함하는 감소된 플롯을 생성합니다. 스펙트럼의 경우, 계산기는 모든 불일치하는 데이터를 제거합니다. 크로마토그램의 경우, 계산기는 근원적인 스펙트럼 각각에 대한 원소 표적을 계산하고 이 새로운 스펙트럼에 기초하여 크로마토그램에 각 포인트를 재생성합니다.

질량 속성 계산기

Mass Property 계산기는 관심 질량의 정밀 질량, 평균 질량, 질량 정확도 및 질량 결손과 같은 다양한 속성을 측정합니다. 이 계산기에 의해 생성된 결과는 완성된 입력 필드의 숫자에 따라 다릅니다.

동위 원소 분포 계산기

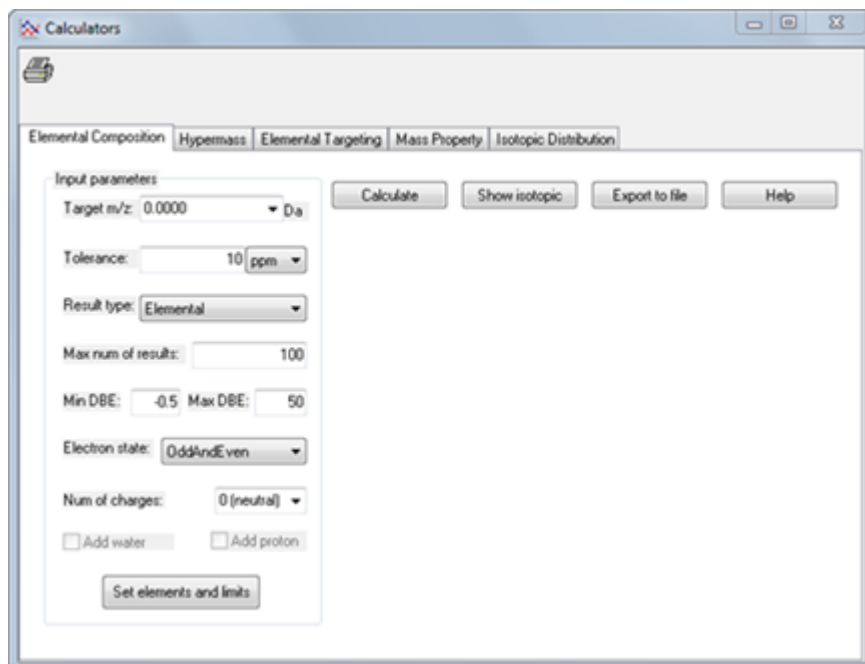
동위 원소 입력된 수식을 기반으로 동위 원소 분포를 측정합니다. 이를 통해 사용자는 동위 원소의 상대 강도를 기반으로 같은 질량을 가진 화합물을 구별할 수 있습니다.

계산된 동위 원소 분포는 Isotopic Distribution 창에 그래픽 또는 텍스트 형식으로 표시할 수 있으며 활성 스펙트럼에 겹쳐지거나 개별 파일로 내보내기할 수 있습니다.

계산기 액세스

Tools > Calculators를 클릭합니다.

그림 5-2 Calculators 대화 상자



Calculators 대화 상자가 열립니다.

중심 피크

피크 중심을 계산하면 피크 분산 값이 피크를 나타내는 단일 값 m/z 와 강도로 변환됩니다. 프로필 모드에서 수집된 데이터를 중심에 배치하면 데이터가 간소화되고 파일 크기가 축소됩니다. 데이터가 중심에 배치되면 피크가 보다 정확하게 할당되며 데이터 양이 감소되지만, 피크 모양에 대한 정보도 제거됩니다.

중심에 배치된 알고리즘은 강도 가중치 적용된 평균을 사용하여 피크를 단일 값으로 변환함으로써 피크의 무게 중심을 계산합니다. 알고리즘의 출력은 다음 표에 표시된 것처럼 매개 변수를 포함하는 피크 목록입니다.

표 5-1 피크 매개 변수

| 매개 변수 | 정의 |
|----------------|-------------------------------------|
| Centroid Value | 중심에 배치된 데이터의 값이 질량 또는 시간 단위로 표시됩니다. |
| Intensity | 각 피크의 강도가 cps로 표시됩니다. |
| Width | 중심 피크의 너비가 Da으로 표시됩니다. |

데이터는 라이브러리에 추가되거나 검색이 수행될 때 자동으로 중심으로 계산됩니다.

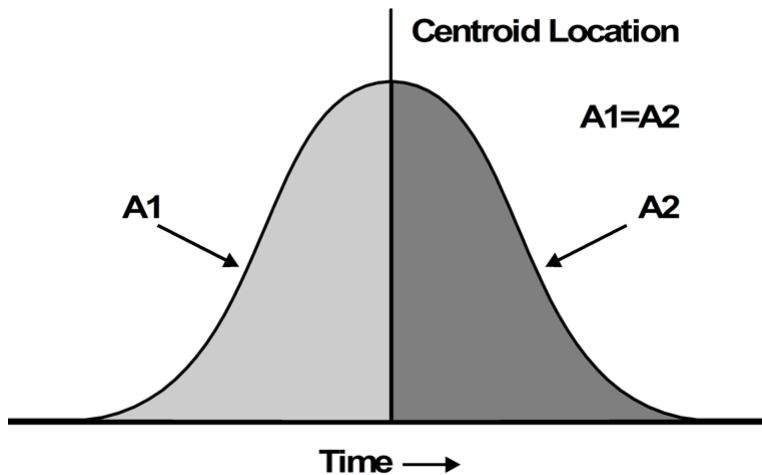
피크 중심 계산

1. 스펙트럼을 포함하는 창을 선택합니다.

피크 중심 계산 시 기존 그래프 모양이 바뀝니다. 결과와 원래 데이터를 비교하려면 중심을 계산하기 전에 그래프 복사본을 만듭니다.

2. **Explore > Centroid**를 클릭합니다.
데이터가 중심에 배치됩니다.

그림 5-3 분석 물질 중심 위치



데이터 분석

사용자는 현재 획득 중인 데이터나 기존 데이터를 포함하는 파일을 열 수 있습니다. 모든 실험 관련 데이터를 표 형식으로도 볼 수 있습니다. 표 창은 Data List 탭과 Peak List 탭으로 구성되어 있습니다. Data List 탭에는 획득 시간 및 스캔 강도와 같은 실험 관련 정보가 있습니다. Peak List 탭에는 피크 높이, 피크 영역 및 기준선 유형 같은 피크 관련 정보가 포함됩니다.

총 이온 크로마토그램

TIC(총 이온 크로마토그램)는 일련의 질량 스캔에서 얻은 모든 이온 강도 기여도를 합하여 생성됩니다. 사용자는 TIC를 사용하여 단일 창에서 전체 데이터 세트를 볼 수 있습니다. TIC는 크로마토그래픽 창에서 시간에 따라 플롯이 생성되는 스캔의 모든 이온에 대한 강도 합계로 구성됩니다. 데이터에 여러 실험의 결과가 포함되는 경우 각 실험에 대한 개별 TIC와 모든 실험의 합계를 나타내는 또 다른 TIC를 생성할 수 있습니다. 모든 실험의 합계를 나타내는 사전 설정된 TIC는 X축 가운데 아래에 있는 분할 도구와 함께 표시됩니다.

추출 이온 크로마토그램

XIC(추출 이온 크로마토그램)는 단일 개별 질량 값이나 일련의 질량 스펙트럼 스캔의 질량 범위에서 강도 값을 구해 생성합니다. XIC는 지정된 질량이나 질량 범위의 동작을 시간의 함수로 표시합니다. 이온 강도 또는 지정된 범위 내 모든 이온의 강도 합계가 크로마토그래픽 창으로 표현됩니다.

기준 피크 크로마토그램

BPC(기준 피크 크로마토그램)에서는 매 스캔 시 최대 강도 이온의 강도를 스캔 번호 또는 머무름 시간의 함수로 표시합니다. 이는 TIC의 노이즈가 너무 많아 오프셋이 크고 크로마토그래픽 피크를 구별하기가 어려울 때 유용합니다. 또한 동시 용리 성분을 구분하는 데도 도움이 됩니다. BPC는 단일 기간, 단일 실험 데이터에서만 생성될 수 있습니다.

그래프에는 두 가지 색상이 사용되며, 베이스 피크의 질량이 변경될 때마다 색상이 번갈아 표시됩니다. 색상 변경은 스크롤하거나 확대/축소하여 데이터를 조작할 때 유지됩니다. 그래프에 사용되는 색상을 선택하는 방법에 대한 자세한 정보는 도움말을 참조하십시오.

추출 파장 크로마토그램

XWC(추출 파장 크로마토그램)는 단일 파장의 강도 값을 구하거나 여러 파장 범위의 흡광도 합계를 구해 생성하는 파장 크로마토그램입니다.

다이오드 어레이 검출기

단일 시점 또는 일정 시간 범위에 대한 DAD(다이오드 어레이 검출기) 스펙트럼을 총 파장 크로마토그램으로 볼 수 있습니다.

총 파장 크로마토그램

TWC(총 파장 크로마토그램)는 잘 사용하지 않는 크로마토그램입니다. TWC는 총 흡광도(mAU)를 시간의 함수로 표시합니다. TWC는 전체 데이터 세트를 단일 창에서 볼 수 있게 합니다. 크로마토그래픽 창의 시간에 따라 표현된 스캔의 모든 이온에 대한 흡수량 합계로 구성됩니다. 데이터에 여러 실험의 결과가 포함되는 경우 각 실험에 대한 개별 TWC와 모든 실험의 합계를 나타내는 또 다른 TIC를 생성할 수 있습니다.

그래프 중첩

같은 방법으로 생성된 그래프를 중첩하여 두 가지 이상의 데이터 세트를 육안으로 비교할 수 있습니다. 각각의 개별 스펙트럼이 트레이스 색상에 따라 구분됩니다. 전체 스캔 데이터의 경우, 이렇게 하면 여러 샘플 스펙트럼 간의 차이를 시각화할 수 있습니다.

창을 하나 이상 선택하면 각 XIC가 개별 창에서 열립니다.

팁! 동일한 창에서 네 개 미만의 그래프를 중첩하려면 **Ctrl** 키를 누른 상태로 창 하나를 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Appearance Options**를 클릭합니다. Appearance Options 대화 상자의 Multiple Graph Options 탭에 있는 **Spectrum** 및 **Chromatogram**에 대한 **Overlay Multiple Panes** 필드에서 **Yes**를 선택합니다.

1. 중첩할 첫 번째 창을 선택합니다.
2. **Explore > Overlay**를 클릭합니다.
3. 두 번째 내부 창을 클릭합니다.

그래프가 중첩되며 서로 다른 색상의 두 트레이스가 나타납니다.

팁! 중첩된 그래프의 색상 코딩된 목록을 보려면 창의 제목 표시줄을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭합니다.

중첩된 각 그래프를 번갈아 표시

1. 중첩된 그래프가 포함된 창을 선택합니다.
2. **Explore > Cycle Overlays**를 클릭합니다.
다음 순서에 해당하는 그래프가 전경에 표시되도록 보기가 변경됩니다.

중첩 결합

두 개 이상의 그래프가 중첩된 경우 그래프를 결합하여 새 트레이스를 얻을 수 있습니다. 새 트레이스의 각 포인트는 그래프 포인트의 합계입니다. 유사한 데이터 유형의 중첩된 여러 그래프를 결합하면 이후 처리 작업을 보다 쉽고 빠르게 수행할 수 있습니다. 예를 들면 여러 XIC를 중첩하고 결합한 다음 결합된 중첩 그래프를 다듬어 노이즈를 제거할 수 있습니다.

중첩 결합은 중첩할 그래프를 선택할 수 있는 이점이 있는 TIC를 생성하는 것과 비슷합니다. 예를 들어 10개 실험을 보고 있는 경우 TIC는 10개 실험을 모두 합칩니다. 중첩 그래프를 결합하는 경우 사용자는 중첩된 그래프 10개 중 9개만 추가할 수 있습니다. 이 절차는 1개 실험에서 수집된 데이터에 노이즈가 있는 경우 사용 가능합니다.

1. 합칠 그래프를 중첩합니다.
2. **Explore > Sum Overlays**를 클릭합니다.
중첩된 그래프가 합쳐집니다.

그래프 사용자 지정

그래프와 크로마토그램의 레이블, 캡션 또는 텍스트에 사전 설정 스타일을 사용하여 그래프를 사용자 지정할 수 있습니다. 사용자는 피크 및 축 레이블에 사용할 글꼴과 트레이스에 사용할 색상을 선택할 수 있습니다. 피크의 정확도와 레이블 유형 및 축 레이블을 추가할 수 있습니다.

그래프에 캡션 추가

캡션을 사용하여 그래프의 관심 피크 또는 중요 포인트에 레이블을 지정할 수 있습니다. 피크 옆에 캡션을 배치할 경우 그래프가 확대 또는 축소될 때마다 캡션이 피크와 함께 유지됩니다. 사용자가 데이터 파일의 샘플 간에 탐색할 때도 캡션이 원래 샘플과 함께 유지됩니다. 캡션에는 텍스트 한 줄이 포함되며 최대 128자까지 입력할 수 있습니다.

1. 스펙트럼에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Add Caption**을 클릭합니다.
Add Caption 대화 상자가 열립니다.
2. **Caption** 상자에 텍스트를 입력합니다.
3. 캡션의 크기와 스타일을 변경하려면 **Font**를 클릭합니다.
4. 캡션을 배치하려면 **OK**를 클릭합니다.

팁! 캡션 위치가 마음에 들지 않으면 캡션을 다른 위치로 끕니다. 그래프를 확대하거나 축소할 때 X축과 Y축에 대해 동일한 위치에서 캡션이 유지됩니다. 캡션을 편집하거나 삭제하려면 캡션을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 해당 명령을 클릭합니다.

그래프에 텍스트 추가

텍스트를 사용하여 여러 줄의 정보를 그래프에 추가합니다. 특정 피크와 연결되어 있고, 그래프가 확대될 때 움직이는 캡션과 달리 텍스트 레이블은 그래프가 확대될 때 원래 위치에 유지됩니다. 사용자가 데이터 파일의 샘플 간 탐색할 때 레이블은 원래 샘플과 함께 유지되지 않습니다.

1. 그래프에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Add User Text**를 클릭합니다. Add User Text 대화 상자가 열립니다.
2. **User Text** 필드에 텍스트를 입력합니다.
3. 텍스트를 중심에 배치하려면 **Center Text** 확인란을 선택합니다.
4. 캡션의 크기와 스타일을 변경하려면 **Font**를 클릭합니다.
5. 텍스트를 삽입하려면 **OK**를 클릭합니다.

팁! 텍스트 위치가 마음에 들지 않으면 텍스트를 다른 위치로 드래그합니다. 텍스트를 편집하거나 삭제하려면 텍스트를 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 해당 명령을 선택합니다.

화합물 데이터베이스

화합물 데이터베이스는 최적화 사양을 비롯한 화합물 정보를 보관합니다. 빠르게 최적화되어야 하는 샘플과 화합물이 많을 경우 화합물 데이터베이스를 사용합니다. Compound Database 창에는 샘플을 실행하기 위해 검색할 수 있는 화합물에 대한 최적화된 조건이 저장됩니다. 자세한 정보는 도움말 문서를 참조하십시오.

등고선 플롯

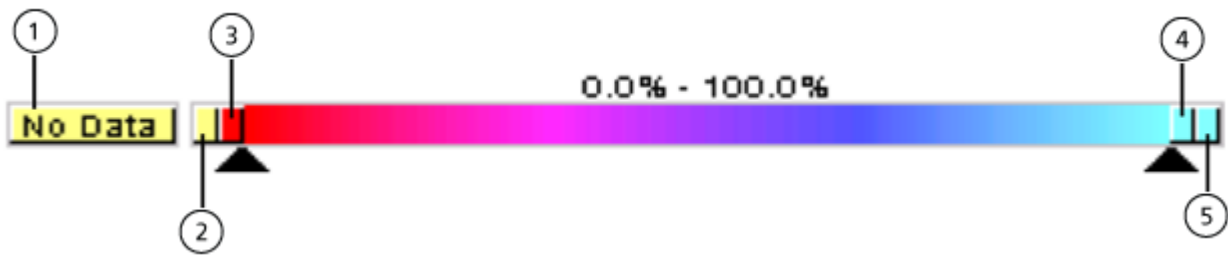
등고선 플롯은 전체 데이터 세트를 색상으로 구분한 플롯으로, 색상을 사용하여 삼차원 플롯을 나타냅니다. TIC의 등고선 플롯에서는 X축이 머무름 시간이나 스캔 번호를 나타내고, Y축이 질량을 나타내며, 색상은 해당 포인트의 데이터 강도를 나타냅니다. DAD 데이터에 대한 TWC의 등고선 플롯에서는 X축이 머무름 시간이나 스캔 번호를 나타내고, Y축이 파장을 나타내며, 색상은 흡광도를 나타냅니다. 등고선 플롯은 실시간 스캔 획득에서는 작동하지 않는 획득 후 도구입니다.

참고: 등고선 플롯은 MI 또는 MRM 스캔을 지원하지 않지만 DAD 스캔을 지원합니다.

색상은 등고선 플롯의 세 번째 축으로서 강도나 흡광도를 나타냅니다. 등고선 플롯 위에 있는 색상 막대의 조절 삼각형을 사용하여 등고선 플롯의 상한 및 하한 강도 또는 흡광도 값을 변경할 수 있습니다. Contour Plot 창 맨 위에 있는 백분율 매개 변수는 상한 및 하한 슬라이더로 표현되는 값을 나타냅니다. 실제 값은 선택한 영역에서 최대 강도 또는 흡광도 백분율에 기초합니다. 이 값은 Contour Plot 창의 상단 오른쪽 모서리에 표시됩니다.

다음 그림에 표시된 컨트롤은 등고선 플롯의 색상을 변경합니다.

그림 5-4 등고선 플롯 색상을 제어하는 버튼



| 항목 | 설명 |
|----|-----------|
| 1 | 데이터 없음 |
| 2 | 하한 미만 데이터 |
| 3 | 하한 데이터 |
| 4 | 상한 데이터 |
| 5 | 상한 초과 데이터 |

사용자가 등고선 플롯 그래프의 색상을 정의하여 대비를 개선하고 필요에 따라 데이터 사양을 표시할 수 있습니다. 예를 들어 강도/파장을 설정하고 **Below Low Data** 및 **Above High Data** 값의 색상을 변경하여 등고선 플롯의 배경 노이즈를 제거할 수 있습니다.

Below Low Data 및 **Above High Data** 버튼은 슬라이더 컨트롤을 이동하는 경우 색상 막대에서 축소 및 확대됩니다. 등고선 플롯 색상을 변경하면 새로운 색상이 이후의 모든 그래프에 대한 사전 설정된 색상이 됩니다.

표 5-2 등고선 플롯 창용 오른쪽 클릭 메뉴

| 명령 | 기능 |
|-----------------------------------|---|
| Show DAD Spectrum | (DAD 스펙트럼 표시) DAD 스펙트럼이 표시된 새 창을 엽니다. |
| Extract Wavelengths (Use Range) | (파장 추출(범위 사용)) DAD 스펙트럼에서 최대 세 개의 파장 범위를 추출하여 XWC를 표시합니다. |
| Extract Wavelengths (Use Maximum) | (파장 추출(최대값 사용)) 최대 파장을 사용하여 파장 범위를 추출합니다. |
| Zoom to selection | (선택 영역 확대) 선택 영역을 확대합니다. |
| Add User Text | (사용자 텍스트 추가) 커서 위치에 텍스트 상자를 추가합니다. |
| Undo Zoom | (확대/축소 실행 취소) 그래프를 원래 배율로 되돌립니다. |
| Delete Pane | (창 삭제) 선택한 창을 삭제합니다. |

표 5-2 등고선 플롯 창용 오른쪽 클릭 메뉴 (계속)

| 명령 | 기능 |
|------------------------|------------------------------|
| Show Cross-Hair | (십자선 표시) 십자선(nm/min)을 표시합니다. |

등고선 플롯 보기

등고선 플롯은 획득 후에만 볼 수 있습니다. 사용자는 TIC, XIC, TWC 또는 XWC 그래프에서 등고선 플롯을 볼 수 있습니다. 모든 wiff 데이터 파일에 대해 TIC 및 XIC를 사용할 수 있습니다. TWC 및 XWC는 DAD 또는 PDA에서 획득된 데이터에만 사용할 수 있습니다.

1. Explore 모드에서 데이터 파일을 TIC, XIC, TWC 또는 XWC 그래프로 엽니다.
2. 등고선 플롯에 표시할 범위를 강조 표시합니다. 범위를 선택하지 않으면 전체 범위가 표시됩니다.
3. **Explore > Show > Show Contour Plot**을 클릭합니다.
선택한 영역에 대한 등고선 플롯이 별도의 창에 열립니다.

팁! Contour Plot 창을 닫으려면 Contour Plot 창을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Delete Pane**을 클릭합니다.

등고선 플롯에서 영역 선택

특정 선택 영역을 확대하거나 해당 선택 영역에 해당하는 질량 스펙트럼을 보려면 다음 중 하나를 수행합니다.

- 상자 안에 있는 표준 영역을 선택하려면 포인터를 끌어서 등고선 플롯 내 영역 주변에 상자를 만듭니다.
- 수직으로 선택하려면 **Ctrl**을 누른 상태에서 포인터를 수직으로 끕니다.
- 수평으로 선택하려면 스페이스 바를 누르고 포인터를 수평으로 끕니다.

등고선에서 강도 및 흡광도 설정

다음 중 하나를 수행합니다.

- 등고선 플롯의 하한 강도/흡광도 값을 설정하려면 등고선 플롯 위 색상 막대의 왼쪽 삼각형 슬라이더를 필요한 위치까지 끕니다.
등고선 플롯에서는 설정보다 낮은 값의 색상이 자동으로 조정되어 이러한 값이 범위 외부에 있음을 나타냅니다.
- 등고선 플롯의 상한 강도/흡광도 값을 설정하려면 등고선 플롯 위 색상 막대의 오른쪽 삼각형 슬라이더를 필요한 위치까지 끕니다.

등고선 플롯에서는 설정보다 높은 값의 색상이 자동으로 조정되어 이러한 값이 범위 외부에 있음을 나타냅니다.

등고선 플롯의 색상 변경

팁! Define Custom Colors 팔레트를 사용하여 등고선 플롯에 사용할 사용자 지정 색상을 만들 수 있습니다.

1. Contour Plot 창에서 색상 버튼 중 하나를 클릭합니다.
Color 대화 상자가 열립니다.

참고: 등고선 플롯의 색상을 제어하는 5개의 버튼이 있습니다. 각 버튼 위에 커서를 놓으면 버튼 이름이 표시됩니다. 따라서 올바른 기능을 변경할 수 있습니다. 또한 Below Low Data 및 Above High Data 버튼은 사용자가 슬라이더 컨트롤을 이동하면 색상 막대에서 축소되거나 확장됩니다. 사용자가 등고선 플롯 색상을 변경한 후에는 이 색상이 이후의 모든 그래프에서 기본 색상이 됩니다.

2. 색상을 클릭합니다.
3. **OK**를 클릭합니다.
그래프가 변경되어 색상 변경 내용이 적용됩니다.

Dynamic Background Subtraction 알고리즘

Dynamic Background Subtraction 알고리즘은 IDA(정보 종속 획득) 실험에서 전구체 이온 검출 기능을 향상시킵니다. 이 알고리즘이 활성화되면 IDA는 조사 스펙트럼에서 직접 전구체를 선택하지 않고 배경 감산 스펙트럼을 사용하여 MS/MS 분석을 위한 관심 전구체 이온을 선택합니다. 이 프로세스는 LC 분석 중에 수행되므로 신호 강도가 증가하면 해당 종을 검출할 수 있습니다. 결과적으로 이 알고리즘은 LC 피크의 상승 부분에서 LC 피크의 맨 위 또는 약간 위까지 전구체 이온을 검출하고 분석하는 데 중점을 둡니다.

단편 해석

Fragment Interpretation 도구는 사용자가 MS/MS 데이터를 해석하는 데 유용합니다. Fragment Interpretation 도구는 분자 구조의 비순환적인 단일 결합 분열에서 이론적 단편 질량 목록을 생성합니다. 타사 제도 프로그램에서 분자 구조를 생성하여 mol 파일로 저장할 수 있습니다. 그런 다음 이 도구는 현재 질량 스펙트럼에 있는 피크와 이론적 목록을 일치시킬 수 있습니다. Fragment Interpretation 도구는 단편 목록에 이론적 단편을 표시하고 단편 질량을 질량 스펙트럼의 피크와 비교합니다. 단편 질량의 사용자 정의 질량 허용 오차(최대 2Da) 이내이며 임계값 강도보다 높은 피크는 일치하는 항목으로 간주되고 단편 목록에서 굵은 텍스트로 표시됩니다.

참고: 다음 스캔 유형에는 단편 해석 도구를 사용할 수 없습니다.

- 전구체 이온
 - 중립 손실
 - Q1 다중 이온
 - Q3 다중 이온
 - MRM(다중 감응 모니터링)
-

스펙트럼에 **Fragment Interpretation** 도구 연결

분자 구조에서 비순환적인 단일 결합이 선택된 경우, 단편 해석 도구는 결합이 분열될 때 생성되는 두 개 단편을 강조 표시한 다음 연결된 스펙트럼에서 일치하는 피크를 표시합니다.

여러 스펙트럼 창을 보고 있는 경우 단편 해석 도구가 활성 스펙트럼에 연결됩니다. 데이터 파일에 두 개 이상의 샘플이 포함된 경우 Fragment Interpretation 도구가 활성 스펙트럼에 연결됩니다.

단편 해석 도구가 열린 상태에서 스펙트럼이 열리면 활성 패널이 열려있는 스펙트럼에 자동으로 연결됩니다.

1. **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**을 클릭합니다.
2. Fragment Interpretation 창의 하단 오른쪽 모서리에서 **Connect** 버튼을 클릭합니다. 포인터가 연결 중인 도구로 변경됩니다.
3. 단편 해석 도구에 연결할 스펙트럼 그래프를 클릭합니다.
하단 왼쪽 모서리에 있는 연결된 그래프에는 Fragment Interpretation 창에 연결된 그래프 이름이 포함됩니다. 그래프 또는 단편 해석 도구가 닫히면 연결이 끊어집니다. 연결된 .wiff 파일에 샘플이 두 개 이상인 경우 사용자가 샘플을 스크롤할 때마다 Fragment Interpretation 내부 창이 자동으로 업데이트됩니다.

단편을 피크에 맞추기

1. **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**을 클릭합니다.
2. Fragment Interpretation 창에서 mol 파일과 함께 Fragment List에서 굵게 표시되는 셀 하나를 선택합니다.
Options 탭에서 선택한 색상으로 일치하는 스펙트럼 피크가 스펙트럼에서 강조 표시됩니다. 분자 구조에서 결합이 강조 표시됩니다.
3. 두 개 이상의 일치하는 단편이 있는 행이 클릭된 경우 단일 동위 원소 질량에 가장 근접한 스펙트럼 피크가 질량 스펙트럼에서 Options 탭에 지정된 색상으로 강조 표시됩니다.

분자 구조에서 결합 선택

1. **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**을 클릭합니다.
2. Fragment Interpretation 창에 .mol 파일이 열린 상태로, 분자 구조에서 비순환적인 단일 결합을 클릭합니다.

결과 단편 두 개가 단편 목록에 강조 표시됩니다. 두 단편의 질량이 결합의 한 쪽에 표시됩니다.

스펙트럼이 연결된 경우 단편 해석 도구에서 그래프의 일치하는 피크가 표시됩니다. 목록에서 단편 하나를 선택하고 단편이 피크와 일치하면 Fragment Interpretation 창에서 해당 피크가 확대됩니다.

동위 원소 보기

단편 해석 도구는 단편 목록에서 단편과 일치하는 피크에 대한 이론적 동위 원소 분산을 표시할 수 있습니다.

1. **Explore > Show > Show Fragment Interpretation Tool**을 클릭합니다.
2. Fragment Interpretation 창에서 **Options** 탭을 클릭합니다.
3. **Show Isotopes** 확인란을 클릭합니다.
4. **Apply**를 클릭합니다.
5. 단편 목록에서 피크와 일치하는 단편을 선택합니다.
일치하는 피크에 대한 동위 원소 분산이 스펙트럼에 표시됩니다.

스펙트럼에 수식 차이 표시

두 관련 가상 단편 간의 수식 및 단일 동위 원소 질량 차이를 표시할 수 있습니다. 수식 차이는 두 개의 피크를 선택할 때 표시됩니다. 수식 및 단일 동위 원소 질량 차이는 단편 두 개 또는 비순환적인 단일 결합 두 개를 선택할 때 표시됩니다.

1. 단편 피크를 클릭합니다.
2. **Shift** 키를 누른 상태로 다른 단편 피크를 클릭합니다.
수식 차이가 단편 목록의 단편과 동일하면 단편이 목록에서 강조 표시됩니다. 그렇지 않으면, 피크의 일치하는 단편 간의 수식 차이가 메시지 상자에 표시됩니다.

단편 목록에 수식 차이 표시

1. 단편 하나에 대한 행 번호를 클릭합니다.
2. **Ctrl** 키를 누른 상태로 다른 단편을 클릭합니다.
해당 단편 간에 관련성이 있는 경우 수식 및 단일 동위 원소 질량 차이가 메시지 상자에 표시됩니다.

분자 구조에 수식 차이 표시

1. 비순환적인 단일 결합을 클릭합니다. 강조 표시된 두 단편 중 사전 설정된 단편이 선택됩니다. 분열된 결합의 다른 단편을 선택하려면 **Ctrl** 키를 누른 상태에서 해당 결합을 클릭합니다.
2. 비순환적인 두 번째 결합을 선택합니다. 사전 설정된 단편을 선택하려면 **Shift** 키를 누른 상태에서 해당 결합을 클릭합니다. 분열된 결합의 다른 단편을 선택하려면 **Ctrl+Shift**를 누른 상태에서 해당 결합을 클릭합니다.
단편 간에 관련성이 있는 경우 단편 해석 도구는 1단계에서 선택한 단편과 2단계에서 선택한 단편 간의 수식 및 단일 동위 원소 질량 차이를 계산합니다. 메시지 상자에 수식 및 단일 동위 원소 질량 차이가 표시됩니다.

IDA 탐색기

Information Dependent Acquisition(IDA) Explorer는 IDA 방법을 통해 획득한 데이터를 표시하는 데 사용됩니다.

Appearance Options 대화 상자의 IDA Explorer 탭에서 IDA Explorer를 해제하거나 설정할 수 있습니다. List View에 나타나는 열 또한 이 탭에서 정의할 수 있습니다.

다음 그림에 있는 뷰어의 왼쪽은 생성 이온 스캔이 수행된 질량을 보여줍니다. 이 영역에서 사용자는 생성 이온 스캔이 수행된 이온의 질량, 강도, 시간 및 충돌 에너지를 목록 보기 또는 트

리 보기로 검사할 수 있습니다. 목록 보기에서 열 머리글을 두 번 클릭하면 목록을 정렬할 수 있습니다. 목록 보기의 열을 사용자 지정하려면 Appearance Options 대화 상자를 사용합니다.

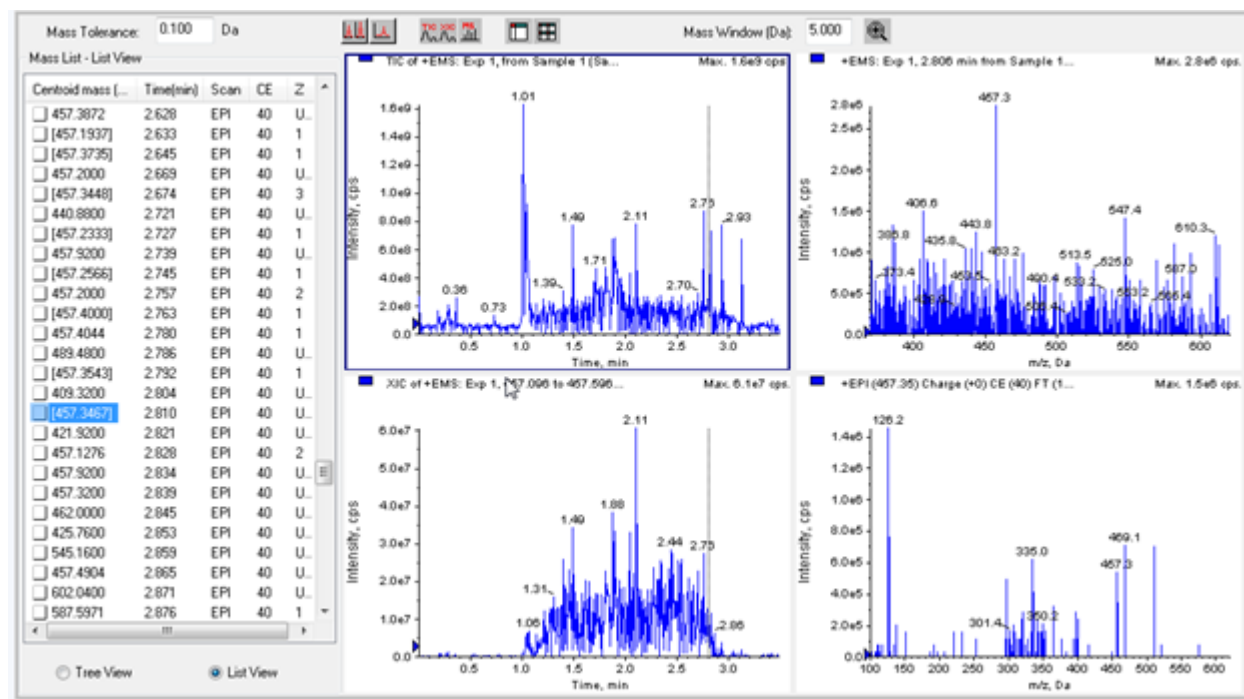
오른 쪽에서 뷰어는 네 개의 창으로 나뉩니다. 왼쪽 위 내부 창에 조사 TIC 데이터가 표시됩니다. 왼쪽 아래 내부 창에 질량의 XIC가 표시됩니다. 오른쪽 위 내부 창에 조사 스캔 또는 고급 분해능(ER) 스캔을 대체하는 조사 스캔이 표시되고 오른쪽 아래 내부 창에는 생성 스캔이 표시됩니다.

IDA 뷰어는 고급 생성 이온(EPI) 스캔 또는 ER 스캔 유형이 수행된 모든 질량을 나열합니다. IDA 뷰어에서 사용자는 다음을 수행할 수 있습니다.

- 목록 보기 또는 트리 보기에서 질량을 클릭하여 해당 질량과 관련된 플롯을 표시하십시오.
- 질량이 식별된 곳에서의 조사 스펙트럼 및 해당 질량의 생성 스펙트럼을 봅니다.
- 조사 스캔의 TIC 및 각 질량에 대한 XIC가 표시됩니다.

참고: 질량을 둘러싼 괄호는 해당 질량이 병합되었음을 표시합니다. 병합된 질량은 얼마간의 주기에 걸쳐 인접합니다. 병합된 질량이 표시되면 이는 모든 인접한 스펙트럼의 평균을 포함한 평균 스펙트럼을 나타냅니다.

그림 5-5 IDA 뷰어



라이브러리 데이터베이스

라이브러리 검색 기능은 라이브러리 데이터베이스에 포함된 알려진 MS 스펙트럼과 미확인 스펙트럼을 비교하여 예상 일치 목록을 생성합니다. 데이터베이스에 저장된 질량 스펙트럼 대비 미확인 스펙트럼을 검색 및 일치시키기 위해 사용될 수 있는 질량 스펙트럼 데이터베이스를 생성하고 관리하려면 라이브러리 검색을 사용합니다.

라이브러리 검색 기능을 사용하면 사용자는 다음을 수행할 수 있습니다.

- 라이브러리 내용을 미확인 스펙트럼과 비교합니다.
- 기록을 라이브러리에 추가합니다.
- 기존 기록을 편집합니다.

라이브러리 데이터는 다음 위치에 저장될 수 있습니다.

- 로컬 데이터베이스의 MS Access.
- MS SQL Server.

Library Search 기능을 사용하기 전에, 라이브러리 데이터베이스를 저장할 장소를 결정하고 컴퓨터를 해당 위치와 연결시켜야 합니다. 라이브러리 데이터베이스는 컴퓨터에 로컬로 저장되거나 네트워크를 통해 서버에 저장될 수 있습니다.

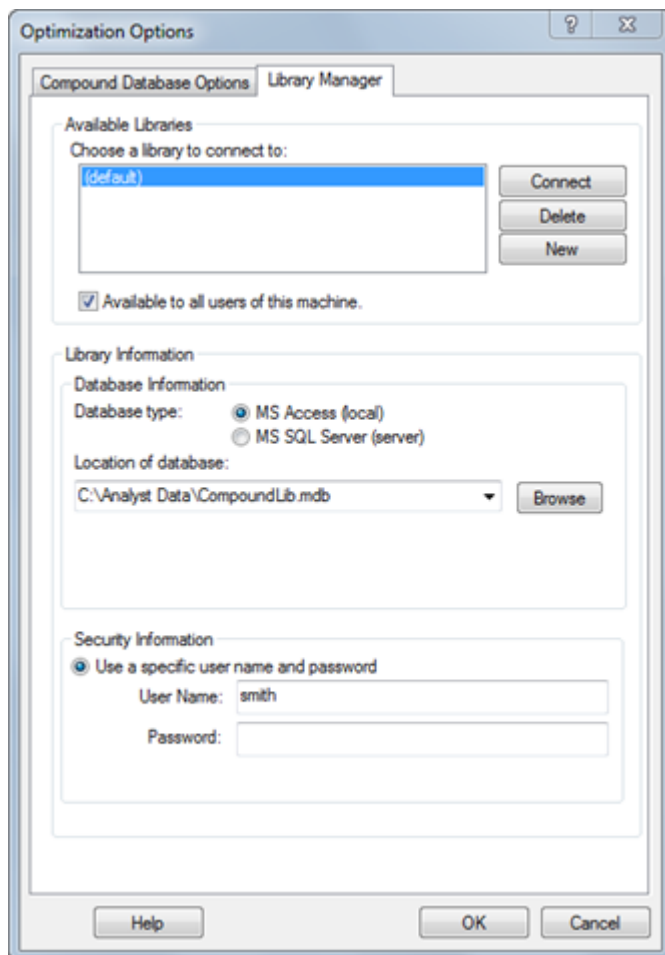
별칭을 사용하여 데이터베이스에 연결합니다. 이 경우 별칭은 특정 데이터베이스로의 연결을 지정하며, 데이터베이스에 액세스하기 위해 필요한 사용자 이름 및 비밀번호를 포함할 수 있습니다. 예를 들어 사용자는 컴퓨터에 식별한 화합물의 소규모 라이브러리 데이터베이스를 가질 수 있으며 기관은 해당 사용자가 드물게 사용하는 중앙 데이터베이스를 가질 수 있습니다. 각 데이터베이스에 대해 별칭을 생성하면 사용자가 데이터베이스를 빠르게 전환할 수 있습니다. 별칭 생성 및 데이터베이스 연결에 대한 정보는 도움말을 참조하십시오.

기존 라이브러리 데이터베이스 간 전환

사용자는 별칭이 이미 설정되어 있는 모든 데이터베이스에 연결할 수 있습니다.

1. **Tools > Settings > Optimization Options**를 클릭합니다.
Optimization Options 대화 상자가 열립니다.
2. **Library Manager** 탭을 클릭합니다.

그림 5-6 Optimization Options 대화 상자 — Library Manager 탭

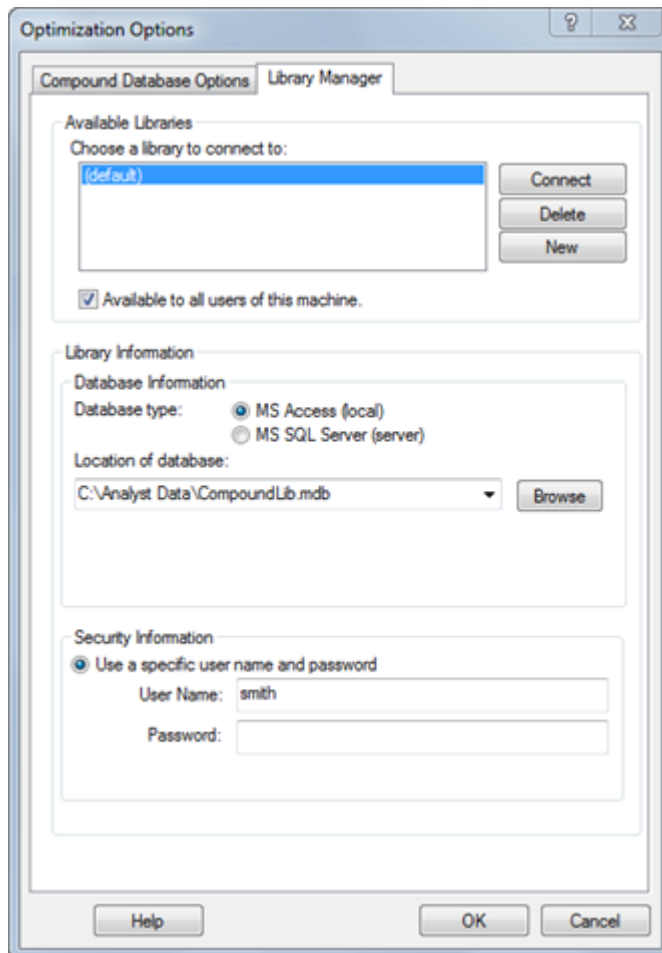


3. **Available Libraries** 섹션에서 연결할 데이터베이스의 별칭을 클릭한 다음 **Connect**를 클릭합니다.
4. (선택 사항) 다른 사용자가 데이터베이스에 액세스할 수 있도록 하려면 **Available to all users of this machine** 확인란을 선택합니다.
5. **OK**를 클릭합니다.

로컬 라이브러리 데이터베이스 생성

1. **Tools > Settings > Optimization Options**를 클릭합니다. Optimization Options 대화 상자가 열립니다.
2. **Library Manager** 탭을 클릭합니다.

그림 5-7 Optimization Options 대화 상자 — Library Manager 탭



3. **Available Libraries** 섹션에서 **New**를 클릭합니다.
Add Library 대화 상자가 열립니다.

그림 5-8 Add Library 대화 상자

The image shows a Windows-style dialog box titled "Add Library". It contains three main sections: "Library Information", "Database Information", and "Security Information".

- Library Information:** A text box labeled "Enter a Name for the Library".
- Database Information:**
 - Database type: Two radio buttons, "MS Access (local)" (selected) and "MS SQL Server (server)".
 - Enter the location of the database: A text box with a dropdown arrow and a "Browse" button.
- Security Information:**
 - Use a specific user name and password: A selected radio button.
 - User Name: A text box.
 - Password: A text box.

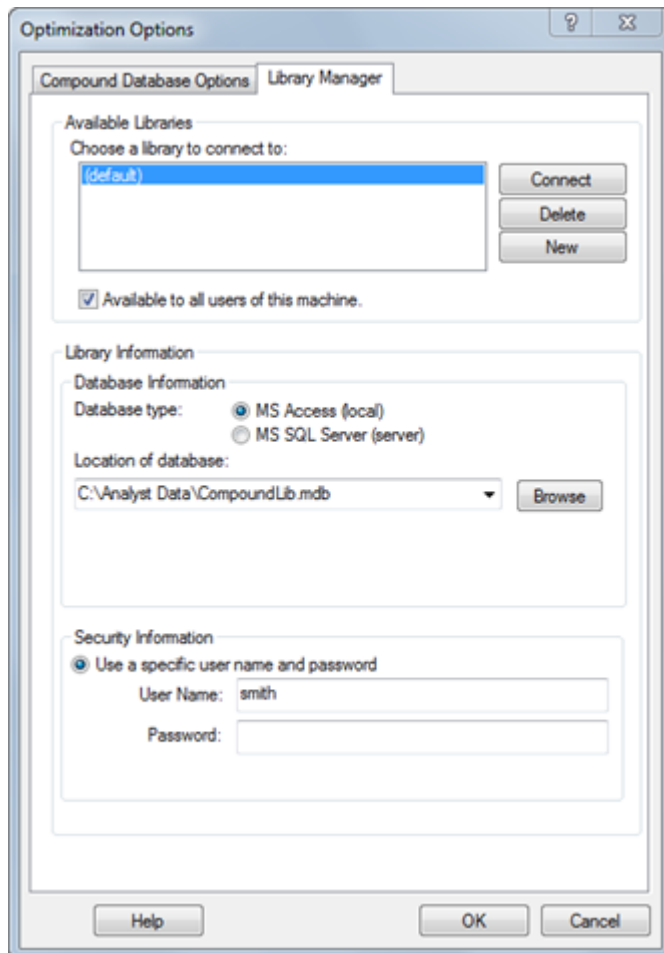
At the bottom right, there are "Save" and "Cancel" buttons.

4. **Enter a Name for the Library** 필드에 라이브러리 이름을 입력합니다.
5. **Database Information** 섹션에서 **MS Access (local)**를 선택합니다.
6. 데이터베이스 위치를 입력합니다.
7. 필요한 경우 **Security Information** 섹션에서 데이터베이스에 액세스하기 위한 사용자 이름과 비밀번호를 입력합니다.
8. **Save**를 클릭합니다.

서버 라이브러리 데이터베이스에 연결

1. **Tools > Settings > Optimization Options**를 클릭합니다.
Optimization Options 대화 상자가 열립니다.
2. **Library Manager** 탭을 클릭합니다.

그림 5-9 Optimization Options 대화 상자—Library Manager 탭



3. **Available Libraries** 섹션에서 **New**를 클릭합니다.
Add Library 대화 상자가 열립니다.
4. **Enter a Name for the Library** 필드에서 라이브러리 이름을 입력합니다.
5. **Database Information** 섹션에서 **MS SQL Server (local)**를 선택합니다.

그림 5-10 Add Library 대화 상자

The image shows a Windows-style dialog box titled "Add Library". It is divided into three main sections:

- Library Information:** Contains a text input field labeled "Enter a Name for the Library".
- Database Information:** Contains radio buttons for "Database type": "MS Access (local)" and "MS SQL Server (server)". The "MS SQL Server (server)" option is selected. Below this is a dropdown menu labeled "Enter the name of the database server:" with a "Refresh" button to its right. At the bottom of this section is another text input field labeled "Enter the name of the database on the server:".
- Security Information:** Contains radio buttons for "Use Windows integrated security" and "Use a specific user name and password". The "Use a specific user name and password" option is selected. Below these are text input fields for "User Name:" and "Password:".

At the bottom right of the dialog box are two buttons: "Save" and "Cancel".

6. 데이터베이스 서버의 이름을 입력합니다.
7. 데이터베이스의 이름을 입력합니다.
8. 다음 중 한 가지를 수행합니다.
 - 이 데이터베이스에 액세스하는 데 특정 사용자 이름 및 암호가 필요한 경우 사용자 이름 및 암호를 입력합니다.
 - Windows 보안을 사용하려면 Security Information 섹션에서 **Use Windows integrated security** 옵션을 선택합니다.
9. **Save**를 클릭합니다.

모든 라이브러리 레코드 보기

Explore > Library Search > List를 클릭합니다.

데이터베이스의 모든 레코드와 함께 Librarian 대화 상자가 열립니다.

라이브러리에 레코드 추가

1. 활성 스펙트럼을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Add a Record**를 클릭합니다. 스펙트럼이 자동으로 중심으로 계산됩니다. Add a Record 대화 상자가 열리고 스펙트럼의 데이터가 표시됩니다.
2. Mass Spectral Information 탭의 **Compound Name** 필드에 이름을 입력합니다.

화합물 이름은 필수이며 라이브러리 내에서 화합물을 고유하게 식별해야 합니다.

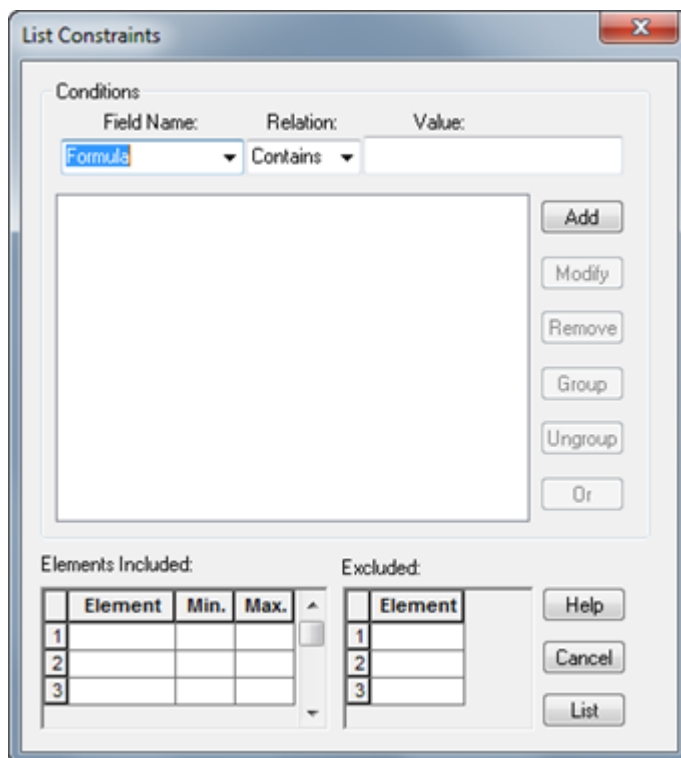
3. 다른 필드를 편집합니다. 여러 필드가 스펙트럼과 연결된 데이터로 자동 채워집니다.
4. **General Information** 탭을 클릭합니다.
5. 필요할 경우 필드를 편집합니다.
6. **OK**를 클릭합니다.

제약 조건을 사용하여 라이브러리 레코드 검색

결과 범위를 좁히려면 List with Constraints을 사용합니다. 정의된 경우, 모든 검색 시 제약 조건이 사용됩니다.

1. **Explore > Library Search > List With Constraints**를 클릭합니다.

그림 5-11 List Constraints 대화 상자



List Constraints 대화 상자가 열립니다.

2. **Field Name** 목록에서 제약 조건의 기준으로 사용할 필드를 선택합니다.
3. **Relation** 목록에서 필드 이름에 적용되는 관계(연산자)를 선택합니다.
4. **Value** 필드에 관계에 근거한 필드 이름의 값을 입력합니다.
5. 선택한 제약 조건을 **Conditions** 목록에 추가하려면 **Add**를 클릭합니다.
6. 필요한 경우 제약 조건 목록에 제약 조건을 계속 추가합니다.

7. **Conditions** 목록 내에서 개별 제약 조건을 결합하면 보다 구체적인 조건이 생성되어 검색이 향상됩니다. 제약 조건을 그룹화하려면 제약 조건을 선택한 다음 **Group**을 클릭합니다. 제약 조건 그룹화를 해제하려면 그룹을 선택한 다음 **Ungroup**을 클릭합니다.
8. 제약 조건 간의 관계를 변경하려면 관계를 클릭한 다음 **And** 또는 **Or**를 클릭합니다.
9. 특정 성분의 특정 원자 개수를 포함하는 화합물을 포함하려면 **Elements Included** 표에서 성분을 입력하고 나서 성분의 최대/최소 원자 수를 입력합니다.

참고: 성분 기호는 대/소문자를 구분합니다. 예를 들면 수소는 H이고(h 아님), 나트륨은 Na입니다(NA 또는 na 아님).

10. 특정 성분을 포함하는 화합물을 제외하려면 **Excluded** 테이블에서 해당 성분을 선택하거나 입력합니다.
11. 기준에 맞는 화합물을 검색하려면 **List**를 클릭합니다.
모든 제약 조건과 일치하는 레코드가 **Records** 테이블에 표시됩니다. 목록 표시 제약 조건이 저장됩니다.

라이브러리 검색 팁

| 수행할 작업 | 방법 |
|-------------------|--|
| 조건 그룹화 | 그룹화할 조건을 선택한 다음 Group 을 클릭합니다. 이 기능은 공식의 괄호처럼 작동합니다. |
| 제약 조건을 사용하지 않고 검색 | 활성 스펙트럼을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 Search Library 를 클릭합니다. Search Results 대화 상자가 열립니다. |

유사 스펙트럼 검색

사용자가 라이브러리에서 활성 스펙트럼과 일치하거나 유사한 스펙트럼 및 관련 화합물 정보를 검색할 수 있습니다. 제약 조건을 사용하거나 사용하지 않는 상태에서 검색을 수행할 수 있습니다. 사용자가 제약 조건을 사용하여 검색하는 경우 모든 기준과 일치하는 기록만 나열됩니다. 결과가 순위 목록에 표시됩니다. 목록의 첫 번째 항목은 활성 스펙트럼에 가장 적합한 항목입니다. 목록에서 아래쪽에 표시되는 항목은 일치율이 낮은 항목입니다.

선택한 제약 조건이 많을수록 목록이 보다 정확해지며 관련성이 높은 보다 적은 수의 일치 항목이 나열됩니다. 제약 조건 세트를 정의한 후, 제약 조건을 편집하지 않는 한 이는 이후 모든 검색에 적용됩니다. 사용자가 제약 조건을 사용하지 않고 검색하는 경우 라이브러리에서 스펙트럼 데이터에 대한 덜 구체적인 일치 항목이 검색되어 제안된 스펙트럼에 대한 매우 광범위한 목록이 존재합니다.

임계값보다 높은 피크만 검색에 사용됩니다. 검색 제약 조건을 선택할 때 사용자가 활성 스펙트럼에서 피크를 추가하거나 제거할 수도 있습니다.

예를 들어 실제로 배경 또는 노이즈 스파이크라고 생각되는 피크가 있는 경우 검색 시 해당 피크는 사용하면 안 됩니다. 부정확한 결과가 생성될 수 있기 때문입니다.

1. 활성 스펙트럼을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Search With Constraints**를 클릭합니다.
소프트웨어는 스펙트럼의 중심을 자동으로 계산합니다.
2. **Maximum Number of Match** 필드에 검색으로 반환할 최대 화합물 수를 입력합니다.

그림 5-12 Search Constraints 대화 상자

3. **Preselect Constraints** 섹션에서 적용할 제약 조건의 확인란을 선택합니다.
4. 선택한 각 제약 조건에 대해 **Preset Tolerance** 섹션에 허용 오차를 입력합니다.
5. 필요한 경우 **Result Sorted by** 목록에서 레코드 정렬 방법을 선택합니다.
6. 필요한 경우 **Comment Contains** 필드에 텍스트를 입력합니다.
7. 필요한 경우 **Keyword Contains** 필드에 텍스트를 입력합니다.
8. 피크를 추가하거나 제거하여 피크 제약 조건을 적용하려면 **Peak Constraints**를 클릭합니다.
Peaks Included 테이블이 열립니다.
9. 검색할 목록에 피크를 추가하려면 **Add**를 클릭한 다음 빈 셀에 m/z 값과 해당 강도를 입력합니다.

10. 피크를 제거하여 검색에 포함되지 않게 하려면 해당 피크를 선택한 다음 **Remove**를 클릭합니다.
11. **Search**를 클릭하여 제약 조건을 저장하고 검색을 시작합니다.

검색 결과에서 화합물 보기

여러 스펙트럼이 미확인 스펙트럼과 일치하면 사용자는 확인된 스펙트럼을 보고 미확인 스펙트럼과 비교할 수 있습니다.

1. **Search Results** 대화 상자의 화합물 목록에서 보려는 화합물 행 번호를 선택합니다.
2. 알려진 화합물 중 하나의 스펙트럼 창을 클릭합니다.
선택한 화합물의 스펙트럼이 표시됩니다.

처리된 데이터 파일

사용자는 탐색 모드에서만 열 수 있는 특정 레이아웃 및 캡션 등 처리된 데이터를 저장할 수 있습니다. 이러한 파일은 내역 정보를 포함하며, 탐색 모드에서 활성 내부 창의 데이터만 포함한다는 점을 제외하고는 데이터 파일과 유사합니다. 이러한 파일은 확장자가 pdt이며 현재 프로젝트의 Data 폴더에 저장됩니다.

처리된 데이터 파일 저장

1. 저장할 데이터 창을 선택합니다.
2. **File > Save Processed Data File**을 클릭합니다.
3. **File name** 필드에 이름을 입력합니다.
4. **Save**를 클릭합니다.

처리된 데이터 파일 열기

1. Explore 모드에서 **File > Open Processed Data File**을 클릭합니다.
Load Processed Data File 대화 상자가 열립니다.
2. 파일을 선택하고 **Open**을 클릭합니다.

정성적 데이터

사용자가 데이터 파일에 포함된 정보를 테이블 또는 그래프 형태로 볼 수 있습니다. 그래프 데이터는 크로마토그램이나 스펙트럼으로 표시됩니다. 테이블의 데이터는 데이터 포인트로 표시됩니다. 사용자가 데이터에 대해 다양한 정렬 작업을 수행할 수 있습니다.

사용자가 데이터 파일을 열 때 수행하는 실험 유형에 따라 다른 내부 창이 열립니다.

Tune Method Editor에서 **MCA** 확인란을 선택한 경우 질량 스펙트럼(MS)과 함께 데이터 파일이 열립니다. **MCA** 확인란을 선택하지 않은 경우에는 데이터 파일이 TIC와 함께 열립니다. TIC 창에서 범위를 선택하고 이 범위에 대한 MS를 표시할 특정 시간을 두 번 클릭할 수 있습니다.

소프트웨어는 wiff와 wiff.scan 확장자를 사용하는 파일에 데이터를 저장합니다. 데이터 파일에는 두 개 이상의 샘플에 대한 데이터가 포함될 수 있습니다. 데이터 파일을 열기 위해 소프트웨어

어에 wiff와 wiff.scan 파일이 모두 필요합니다. 소프트웨어는 데이터 파일뿐만 아니라 txt 파일을 열 수 있습니다. txt 파일에는 샘플 하나에 대한 데이터만 포함됩니다.

신호 대 노이즈 비율

신호 대 노이즈 비율은 피크 높이를 노이즈로 나눈 값입니다.

노이즈를 계산하기 위해 소프트웨어는 **Background Start** 시간부터 **Background End** 시간까지(두 시간 모두 Quantitation Method Editor 및 Peak Review 창의 고급 매개 변수에 표시됨)의 크로마토그램에 있는 모든 데이터 포인트의 표준 편차(평균 0 사용)를 사용합니다. 이러한 시간은 새 배경 범위가 정의될 때 설정됩니다.

사용자가 새 배경 범위를 정의하지 않고 방법을 작성하는 경우(사전 설정 통합을 변경하지 않고 수락하는 경우) **Background Start** 및 **Background End**는 모두 **N/A**로 표시됩니다. 따라서 신호 대 노이즈 비율이 계산되지 않고 Results Table의 해당 필드가 **N/A**로 표시됩니다.

다듬기 알고리즘

다듬기 방법으로 다듬기 알고리즘 또는 가우스 다듬기 알고리즘을 선택할 수 있습니다. 다듬기 작업을 수행하면 각 데이터 포인트가 해당 데이터 포인트의 앞뒤에 있는 데이터 포인트의 평균으로 바뀝니다. 다듬어진 데이터 세트는 이전 세트를 대체합니다.

데이터는 한 번 이상 다듬을 수 있으나 소프트웨어에서 가장 마지막 다듬기만 취소할 수 있습니다.

다듬기는 다중 이온(MI) 또는 MRM 스펙트럼에는 사용할 수 없습니다.

다듬기 알고리즘

데이터를 다듬는 경우 사용자는 세 개의 데이터 포인트, 즉 현재 포인트, 이전 포인트 및 다음 포인트에 대해 포인트 가중치 값을 설정합니다. 다듬기 알고리즘은 데이터 포인트에 할당된 가중치 값을 곱하고 해당 값을 합한 다음 총계를 포인트 가중치 값의 합계로 나눕니다. 이 알고리즘은 가우스 알고리즘보다 더 부드럽지만, 매우 노이즈가 심한 데이터를 다듬을 때는 오랜 시간이 걸립니다.

가우스 다듬기 알고리즘

가우스 다듬기를 수행하면 각 데이터 포인트가 해당 데이터 포인트의 어느 한 쪽에 있는 데이터 포인트의 수에 대한 가중 평균으로 바뀝니다. 각각의 새로운 데이터 포인트에 대한 가중치는 가우스 곡선에 따라 계산됩니다. 이 알고리즘은 다듬기 알고리즘보다는 더 거칠지만 노이즈가 심한 데이터를 다듬는 데 적합합니다.

가우스 다듬기 방법을 사용할 때는 다음 두 가지 값을 설정합니다.

Gaussian filter width (% of minimal distance between points): 주변 포인트의 가중치를 계산하는 데 사용되는 너비입니다. 이 너비는 스캔의 두 포인트 간 거리 백분율로 설명되며, 사전 설정된 너비인 100%를 사용하면 분산이 데이터 포인트 간 거리만큼 넓어집니다.

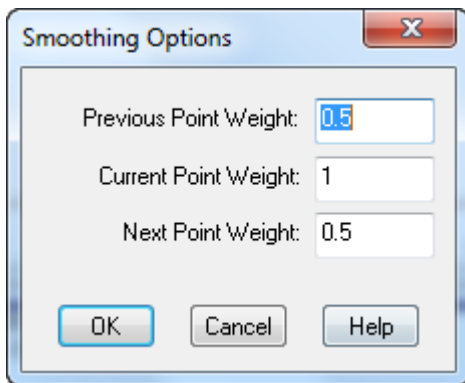
Limit of Gaussian filter (number of minimal distance between points): 포인트 간 거리의 배수로 표시되는 가우스 곡선 제한입니다. 예를 들어 사전 설정된 값인 10을 사용하면 중심의 한 쪽에서 데이터 포인트 너비 10개 다음에 잘리는 가우스 곡선이 생성됩니다.

다듬기 알고리즘을 사용하여 데이터 다듬기

팁! 다듬기를 하지 않으려면 **Edit > Undo**를 클릭합니다. 한 개의 실행 취소 수준만 지원됩니다.

1. 크로마토그램 또는 스펙트럼을 포함하는 창을 선택합니다.
2. **Explore > Smooth**를 클릭합니다.
Smoothing Options 대화 상자가 열립니다.

그림 5-13 다듬기 옵션 대화 상자



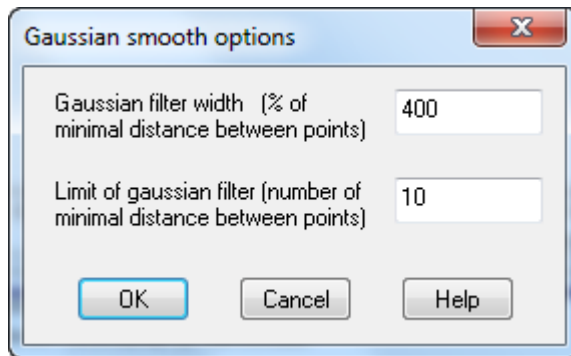
3. **Previous Point Weight** 필드에 이전 데이터 요소에 적용할 가중 비율을 입력합니다.
4. **Previous Point Weight** 필드에 이전 데이터 요소에 적용할 가중 비율을 입력합니다.
5. **Next Point Weight** 필드에 다음 데이터 요소에 적용할 가중 비율을 입력합니다.
6. **OK**를 클릭합니다.
데이터 세트를 다듬었으며 이 데이터 세트가 창의 현재 데이터 세트를 대체합니다.

가우스 다듬기를 사용하여 데이터 다듬기

팁! 다듬기 실행을 취소하려면 **Edit > Undo**를 클릭하십시오. 소프트웨어는 한 단계 실행 취소를 지원합니다.

1. 크로마토그램 또는 스펙트럼을 포함하는 창을 선택합니다.
2. **Explore > Gaussian Smooth**를 클릭합니다.
Gaussian smooth options 대화 상자가 열립니다.

그림 5-14 Gaussian smooth options 대화 상자



3. **Gaussian filter width** 필드에 두 포인트 간의 거리 백분율로 주변 포인트의 가중치를 찾는 데 사용되는 너비를 입력합니다.
4. **Limit of gaussian filter** 필드에 포인트 간 거리의 배수로 제공되는 가우스 곡선 제한을 입력합니다.
5. **OK**를 클릭합니다.
데이터 세트를 다듬었으며 이 데이터 세트가 창의 현재 데이터 세트를 대체합니다.

시스템 로그

시스템 로그에는 오류, 경고 및 메시지를 포함하여 시스템 이벤트 보고서가 포함되어 있습니다. Windows Event Viewer를 사용하여 시스템 진단 수행 및 문제 해결에 도움이 되는 정보를 봅니다. 시스템 로그의 정보를 효율적으로 사용하려면, 정보를 필터링하여 소프트웨어와 관련된 항목만 표시되도록 합니다.

시스템 로그의 정보를 이해하고 오류를 해결하려면 Windows Application Event Log를 참조하십시오. 이 로그에는 관련 문제 해결 정보가 포함되어 있습니다.

시스템 로그를 저장하여 지원 팀에 전달

1. **View > Event Log**를 클릭합니다.
2. **Windows Logs** 폴더의 오른쪽에 있는 더하기 기호를 클릭합니다.
3. **Application**을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭합니다.
4. **Save All Events As**를 클릭합니다.
Save As 대화 상자가 열립니다.
5. 파일 이름을 입력하고 **Save**를 클릭합니다.
Display Information 대화 상자가 열립니다.
6. **Display information for these languages**를 클릭합니다.
7. **English (United States)**가 선택되어 있는지 확인합니다.
8. **OK**를 클릭합니다.
9. 해당 파일을 이메일에 첨부하여 SCIEX로 보냅니다.

참고: 문제 해결을 위한 추가 로그인 기능은 sciex.com/request-support에 문의하십시오.

Analyst MD 소프트웨어 관련 정보로 시스템 로그 필터링

1. **View > Event Log**를 클릭합니다.
Event Viewer 대화 상자가 열립니다.
2. **Windows Logs** 폴더를 두 번 클릭합니다.
3. **Application**를 클릭합니다.
4. **Action > Filter Current Log**를 클릭합니다.
Filter Current Log 대화 상자가 열립니다.
5. **Event Sources** 필드에서 **Analyst**를 선택합니다.
6. **OK**를 클릭합니다.
이제 Event Viewer 대화 상자에 필터링된 Analyst MD 소프트웨어 이벤트만 표시됩니다.

교정 옵션

교정 옵션은 교정 곡선에 대한 매개 변수를 정의하며 이는 샘플의 계산된 농도를 측정하는 데 사용됩니다. 교정 곡선은 내부 표준 물질이 사용되지 않은 경우 표준 물질의 면적 또는 높이 대비 표준 물질 농도의 플롯입니다. 내부 표준 물질이 사용된 경우, 교정 곡선은 면적 또는 높이 비율 대비 농도 비율 플롯입니다. 이 곡선은 미확인 물질에 대한 면적(또는 높이)과 함께 계산된 농도를 보간하는 데 사용됩니다.

곡선을 포인트에 맞추기 위해 최적의 회귀 유형 또는 맞춤을 선택해야 하며 프로젝트를 위한 최적의 가중 인자를 선택해야 합니다.

교정 곡선 정보

교정 곡선은 QC 샘플을 비롯한 샘플의 계산된 농도를 측정하는 데 사용됩니다. 이는 내부 표준 물질이 사용되는 경우 내부 표준 물질의 면적이나 높이, 비율과 비교하여 그린 표준 물질의 농도 곡선입니다. 샘플의 면적 또는 높이는 이후 Results Table에서 보이는 대로 샘플 농도를 측정하기 위해 이 곡선에 적용됩니다. 이 교정 곡선에 의해 생성된 회귀 방정식은 미확인 샘플의 농도를 계산하는 데 사용됩니다.

소프트웨어는 알려진 농도(또는 비율)를 x축에 위치시킨 후 계산된 면적 또는 높이(또는 비율)를 y축에 위치시킵니다. 그리고 나서 배치에 있는 모든 표준 물질에 대한 포인트를 그립니다. 시스템은 사용자가 선택한 회귀 및 가중치 유형을 통해 이러한 포인트들에 가장 잘 맞는 곡선을 생성합니다. 이 곡선은 미확인 물질에 대한 면적(또는 높이)와 함께 농도를 보간하는 데 사용됩니다.

최적의 회귀 유형 선택

사용자는 회귀 유형(적합)을 선택한 후 마법사에서 교정 곡선을 볼 수 없습니다. 대신에 사용자는 사전 설정 값을 사용하거나 경험에 비추어 보거나 기관 정책을 사용해 회귀 유형을 선택할 수 있습니다.

적합을 변경한 다음 Results Table의 **Accuracy** 열에서 변경 사항을 확인하십시오. 적합이 적절할수록 정량화 분석 정확도가 높아집니다.

교정 곡선은 표준 물질의 피크 면적 또는 높이(내부 표준 물질을 사용할 경우 비율) 대비 표준 물질의 농도를 그래프로 그립니다. 표준 물질에 대한 포인트가 그려지면, 이러한 포인트에 대한 곡선의 최적화된 적합을 측정하고 마법사의 Specify Calibration 대화 상자에 선택 사항을 표시하십시오. 사전 설정된 적합은 선형이며, 이는 사용자의 모든 표준 물질이 일직선 상에 위치한다는 뜻입니다. 다음 표의 적합 유형 중에서 선택하십시오.

표 6-1 적합 유형

| 적합 | 설명 |
|----|-------------------------------------|
| 선형 | 선형 회귀를 선택하면 표준 물질 포인트가 일직선 상에 놓입니다. |

표 6-1 적합 유형 (계속)

| 적합 | 설명 |
|----------|---|
| 0 통과 선형 | 0 통과 선형 회귀를 선택하면 표준 물질 포인트가 일직선 상에 놓이고 포인트가 X축 및 Y축의 영점과 일렬로 나타납니다. 선이 영점을 통과하게 하려면 이 설정을 사용하십시오. |
| 이차 | 표준 물질 포인트가 일직선 상에 놓이지 않는 경우, 이차 회귀를 사용하여 데이터 포인트에 대한 이차 적합을 생성하십시오. |
| 평균 감응 인자 | 표준 물질 포인트가 일직선 상에 놓이고, 이러한 포인트의 평균을 내고 싶은 경우 평균 응답 인자 회귀를 사용하여 곡선 상에 있는 모든 포인트에 대한 기울기의 평균을 생성하십시오. |
| 거듭제곱 | 포인트로 이루어진 선에 일부 선형성 및 곡률이 있는 경우 선형 또는 이차 회귀 대신 거듭제곱 회귀를 사용하여 이 두 적합 사이의 선을 생성합니다. |

최적 가중치 인자 선택

교정 곡선은 표준 물질의 피크 면적 또는 높이 대비 표준 물질의 농도를 그래프로 그립니다. 표준 물질에 대한 포인트가 그래프로 그려지면, 사용자는 이러한 포인트에 대한 최적의 가중치 인자를 측정하고 Specify Calibration 대화 상자에 그 선택을 표시해야 합니다. 사전 설정 적합은 **None**이며 이는 곡선 상에 있는 모든 포인트의 중요도가 동일함을 의미합니다. 다음 표의 가중치 유형 중에서 선택하십시오. 자세한 정보는 [가중치 계수](#) 섹션을 참조하십시오.

표 6-2 가중치 유형

| 가중치 | 설명 |
|------------------|--|
| 1/x | 가치가 낮은 포인트를 더 강조하려면 1/x 가중치를 사용하십시오. |
| 1/x ² | 가치가 낮은 포인트를 훨씬 더 강조하려면 1/x ² 가중치를 사용하십시오. |
| 1/y | 농도(x축)가 아닌 면적(y축)으로 교정하고 있으며 가치가 낮은 포인트를 강조하고자 할 때 1/y 가중치 인자를 사용하십시오. 1/y 가중치는 y와 x가 서로 비례해야 하는 1/x 가중치의 변형입니다. |
| 1/y ² | 농도(x축)가 아닌 면적(y축)으로 교정하고 있으며 가치가 낮은 포인트를 더 높게 강조하고자 할 때 1/y ² 가중치 인자를 사용하십시오. 1/y 제곱 가중치는 y와 x가 서로 비례해야 하는 1/x 제곱 가중치의 변형입니다. |
| ln x | x의 로그를 사용하여 가치가 높은 포인트를 더 강조하십시오. |
| ln y | y의 로그를 사용하여 가치가 높은 포인트에 더 큰 가중치를 두십시오. 농도(x축)가 아닌 면적(y축)으로 교정할 때 사용하십시오. |

통합 알고리즘

Analyst MD 소프트웨어에는 두 가지 통합 알고리즘, 즉 기존 Analyst Classic 통합 알고리즘과 IntelliQuan 통합 알고리즘이 있습니다. IntelliQuan 알고리즘은 조정이 필요한 매개 변수를 더 적게 사용하여 더 일관적인 피크 찾기와 통합된 기능을 제공합니다.

Analyst Classic 및 IntelliQuan 통합 알고리즘

IntelliQuan 알고리즘은 두 가지 중 하나의 피크 찾기 매개 변수를 사용합니다. 매개 변수가 없는 설정인 Automatic IQA II 또는 Specify Parameters MQ III입니다. IntelliQuan 알고리즘을 사용하여 피크를 통합한 후 해당 데이터 세트에 가장 잘 맞는 피크 찾기 매개 변수를 선택합니다. 이는 Peak Review 내부 창 또는 창에 표시된 피크 통합 매개 변수에서 수행됩니다.

다음 표에서는 Analyst Classic 알고리즘과 함께 사용할 수 있는 매개 변수를 보여줍니다.

표 6-3 Analyst Classic 알고리즘

| 매개 변수 | 정의 |
|---|--|
| Default Bunching Factor | 피크 찾기를 위해 평균 계산에 사용되며 단일 포인트로 간주되는 포인트의 수입니다. |
| Default Number of Smooths | 크로마토그램을 다듬는 횟수입니다. |
| Default Void Volume Retention Time | 이 시간 이전에 발생한 모든 피크는 무시됩니다. |
| Default Concentration Units | 샘플 농도를 기술하기 위해 사용되는 농도 단위(예: pg/μL)입니다. |
| Default Calculated Concentration Units | 계산된 샘플 농도를 기술하기 위해 사용되는 농도 단위(예: pg/μL)입니다. |
| Default RT Window | 피크 찾기를 위해 예상되는 머무름 시간의 중심 시간 범위입니다. 예를 들어 머무름 시간 범위가 30초이면 예상 머무름 시간의 전후로 15초의 추가 시간이 주어집니다. |

다음 표에서는 MQ III 알고리즘과 함께 사용할 수 있지만 IQA II 알고리즘과는 함께 사용할 수 없는 매개 변수를 보여줍니다.

표 6-4 MQ III 알고리즘

| 매개 변수 | 정의 |
|---------------------------------|---|
| Default Noise Percentage | 피크 찾기에 사용되는 임계값입니다. 이 지정된 백분율보다 높은 피크가 감지됩니다. |

표 6-4 MQ III 알고리즘 (계속)

| 매개 변수 | 정의 |
|--|---|
| Default Baseline Subtraction Window | 각 데이터 포인트를 포함하는 시간 범위로, 해당 포인트에 적용할 수정 기준선의 높이를 결정하는 데 사용됩니다. 시간 범위는 크로마토그램에서 과도한 노이즈를 제거하는 데 도움을 줍니다. 기준선은 지정된 범위 내에서 주어진 데이터 포인트의 왼쪽에 있는 최소 강도의 포인트를 오른쪽에 있는 최소 강도 포인트와 연결하는 선으로 정의됩니다. |
| Default Peak-Splitting Factor | 주어진 피크 클러스터가 인접한 여러 개의 피크로 구성되었는지 하나의 (아마도 노이즈) 피크로 구성되었는지와 상관 없이 제어합니다. 강도 간 차이가 지정된 값보다 적은 경우, 단일 피크가 보고됩니다. 차이가 큰 경우 차이 내에 있는 최소 강도를 가진 포인트는 클러스터를 두 개의 개별 피크로 분리합니다. 큰 인자를 설정하면 클러스터가 두 개 이상의 피크로 분리되는 것을 막습니다. |
| Default Void Volume Retention Time | 이 시간 이전에 발생한 모든 피크는 무시됩니다. |
| Report Largest Peak | 이 매개 변수를 선택하면 머무름 시간 범위 내의 가장 큰 피크가 반환됩니다. 이 매개 변수를 선택하지 않을 경우, 예상 머무름 시간에 가장 가까운 피크가 검색됩니다. 예상 머무름 시간은 Quantitation Wizard에서 자동으로 계산됩니다. |

다음 표에서는 두 가지 IntelliQuan 알고리즘 모두와 함께 사용할 수 있는 매개 변수를 보여줍니다.

표 6-5 IQA II 및 MQ III용 IntelliQuan 알고리즘

| 매개 변수 | 정의 |
|------------------------------------|--|
| Default Minimum Peak Height | 피크 통합에 필요한 피크의 최소 높이입니다. |
| Default Minimum Peak Width | 피크 통합에 필요한 피크의 최소 폭입니다. |
| Default RT Window | 피크 찾기를 위해 예상되는 머무름 시간의 중심 시간 범위를 지정합니다. 예를 들어 머무름 시간 범위가 30초이면 예상 머무름 시간의 전후로 15초의 추가 시간이 주어집니다. |
| Default Smoothing Width | 데이터 다듬기에 사용되는 포인트의 수입니다. |
| Default Concentration Units | 샘플 농도를 기술하기 위해 사용되는 농도 단위(예: pg/μL)입니다. |

표 6-5 IQA II 및 MQ III용 IntelliQuan 알고리즘 (계속)

| 매개 변수 | 정의 |
|---|---|
| Default Calculated Concentration Units | 계산된 샘플 농도를 기술하기 위해 사용되는 농도 단위(예: pg/μL)입니다. |

정량화 방법 생성 도구

소프트웨어에서 네 가지 정량화 방법 생성 도구가 제공되고, 이들 각각은 매우 기능적인 방법을 생성합니다. 최고의 도구를 선택하는 것은 이루고자 하는 작업에 달려 있습니다.

방법 개발 실력이 우수한 사용자만 획득 및 정량화 방법을 생성하거나 수정하는 것이 좋습니다.

역할 및 보안에 대한 자세한 정보는 실험실 책임자 안내서의 사람 및 역할 정보 섹션을 참조하십시오.

마법사

사용 가능한 방법 생성 마법사는 Standard Quantitation 마법사와 Automatic Quantitation 마법사입니다. 두 마법사 모두 사용자가 정량화할 배치 또는 배치들을 선택하고 정량화 방법을 생성 또는 선택할 수 있게 하며 샘플 데이터를 통합할 수 있도록 합니다.

두 마법사 간의 차이점은 생성된 방법의 유형입니다. Standard Quantitation 마법사는 표준 방법을 생성하는 반면, Automatic Quantitation 마법사는 방법을 생성하고 자동으로 Results Table을 생성합니다. Automatic Quantitation 마법사를 사용하면 방법 생성 과정에서 피크가 확인되지 않습니다. 하지만 통합이 수행된 후 여전히 피크를 검토할 수 있습니다.

피크를 확인하지 않아도 되는 유일한 일반적인 경우는 사용자가 농도를 찾기 위해서가 아닌 단순히 통합을 위해 정량화를 수행하는 경우입니다. 예를 들어 샘플마다 각기 다른 화합물이 포함된 배치의 경우나 샘플 간에 질량이 동일하지 않은 경우에 이러한 작업을 수행해야 할 수 있습니다. 이 경우 자동 마법사를 사용합니다. 그렇지 않은 경우 정량화를 수행하려면 Standard Quantitation 마법사를 사용하십시오.

다음을 수행하기 위해 샘플 획득 후 Standard Quantitation 마법사를 이용합니다.

- 대표 샘플 선택.
- 분석 물질 및 내부 표준 물질 피크 선택.
- 피크 찾기 및 통합 매개 변수 조정.
- 방법 생성 중 피크 검토.
- 교정 선택.

배치를 선택하고 방법을 생성하고(피크 확인 없이) 샘플 데이터를 통합하려면 Automatic Quantitation 마법사를 사용하십시오. 이 마법사는 Standard Quantitation 마법사보다 속도가 빠르며, 스캔된 질량이 모든 샘플에 대해 동일하지 않아도 됩니다. 하지만 마법사를 통해 내부 표준 물질 선택이 불가능해 모든 이온이 분석 물질로 취급됩니다.

다음을 수행하기 위해 샘플 획득 후 Automatic Quantitation 마법사를 사용합니다.

- 교정을 선택하고자 할 때.
- 피크 찾기 및 통합 매개 변수를 조정하고 싶지 않을 때.
- 분석 물질 피크 이름을 선택하고 싶지 않을 때.
- 어떠한 내부 표준 물질도 원하지 않을 때.
- 방법 생성 중에 피크를 검토하고 싶지 않거나, 모든 샘플 내에 각기 다른 화합물을 가지고 있을 때.

피크를 통합하기만 하는 경우에는 농도 계산이 필요하지 않기 때문에 피크를 확인할 필요가 없습니다. 이 경우, 통합이 수행된 후에 피크를 검토할 수 있는 Automatic Quantitation 마법사를 사용하십시오.

자동 방법을 사용하여 피크 찾기

이 소프트웨어는 다음 경우를 제외하고는 표준 피크 감지 프로세스를 사용합니다.

- 소프트웨어가 번치 인자와 다듬기 수(마법사에서 비릇)를 그대로 사용합니다.
- 소프트웨어가 모든 피크에 대해 예상 머무름 시간, 잡음, 면적 임계 값을 각각 계산합니다.

정량화 방법 편집기

다음을 수행하기 위해 샘플 획득 후 이 옵션을 사용합니다.

- 피크 찾기 및 통합 매개 변수 조정.
- 분석 물질 선택 및 내부 표준 피크 통합.
- 교정 선택.

다음 세 가지 추가 작업을 하기 위해 Quantitation Method Editor를 사용합니다.

- 통합에 대한 이온 합계 계산.
- 다른 기간 또는 실험에서의 내부 표준 물질 사용(내부 표준 물질이 다른 기간 또는 실험, 그 이후에 분석 물질에서 획득되었을 경우).
- 기존 방법 편집.

반자동 방법 편집기

Semi-Automatic Quantitation Method Editor는 Batch Editor의 일부입니다. Semi-Automatic Quantitation Method Editor를 사용하여 데이터 획득에 앞서 샘플 유형 및 샘플 농도와 같은 획득 정보를 선택할 수 있습니다. 이러한 준비는 연속적인 정량적 분석의 수행을 더 쉽게 만들어 줍니다. 아니면 사용자가 Batch Editor에서 전체 방법을 선택할 수도 있으며 이렇게 할 시 배치 수행 마지막에 해당 방법이 정량화 Results Table을 생성하도록 자동으로 적용됩니다.

빠른 정량화 기능이 데이터 파일에 샘플 유형과 농도를 저장하는 데 사용되는 경우 자동으로 생성된 빠른 정량화 방법을 사용하여 정량화를 수행하지 마십시오. 이 정량화 방법은 화합물 및 피크 선택용으로 최적화된 샘플 관련 통합 매개 변수를 사용하지 않습니다.

다음 상황에서 이 옵션을 사용합니다.

- 같은 획득 방법을 사용해 아직 어떠한 샘플도 획득하지 않았을 때
- 분석 물질 및 내부 표준 피크에 대한 이름 및 질량을 선택하고자 할 때.
- Batch Editor의 Quantitation 탭에서 농도 및 샘플 유형을 선택하고자 하나 다른 정량화 방법을 원하지 않을 때.
- 추후 필요할 경우 정량화 방법을 편집하고자 할 때.

반자동 방법을 사용하여 피크 찾기

이 소프트웨어는 다음 경우를 제외하고는 표준 피크 감지 프로세스를 사용합니다.

- 소프트웨어가 번치 인자(정량화 방법 옵션 대화 상자) 및 다듬기 수(반자동 정량화 방법 생성 대화 상자)를 그대로 사용합니다.
- 소프트웨어가 대표 샘플로 가장 농축된 표준 물질을 사용합니다. 머무름 시간을 수립하기 위해 소프트웨어가 크로마토그램 내의 가장 큰 피크를 사용합니다.
- 잡음 및 면적 임계 값을 설정하기 위해 소프트웨어가 결과 기준선 잡음을 사용합니다. (이 프로세스는 일반 방법에서 피크에 대한 사전 설정값이 설정되어 있는 방식과 일치합니다.) 이러한 통합 매개 변수는 모든 다른 샘플에 적용됩니다.
- 검사 중인 배치에 정량화 방법(샘플 유형 및 농도)이 포함되어 있지 않은 경우, 머무름 시간 및 임계 값은 모든 피크에 대해 개별적으로 계산됩니다(완전 자동 방법의 경우).

메트릭 플롯

메트릭 플롯에는 X축이나 Y축을 기준으로 그린 Results Table 열의 데이터나 서로를 기준으로 그린 두 열의 데이터가 그래프로 표시됩니다. 이 섹션에서는 메트릭 플롯을 생성하고 메트릭 플롯으로 작업하는 방법에 대해 설명합니다.

사전 정의된 메트릭 플롯에는 다음이 포함됩니다.

- Int_Std_Response(문제 샘플 찾기)
- Analyte_Area versus Height(크로마토그래피 동작 확인)
- PK profile(농도 대비 시점, 샘플 쿼리 후 실행)

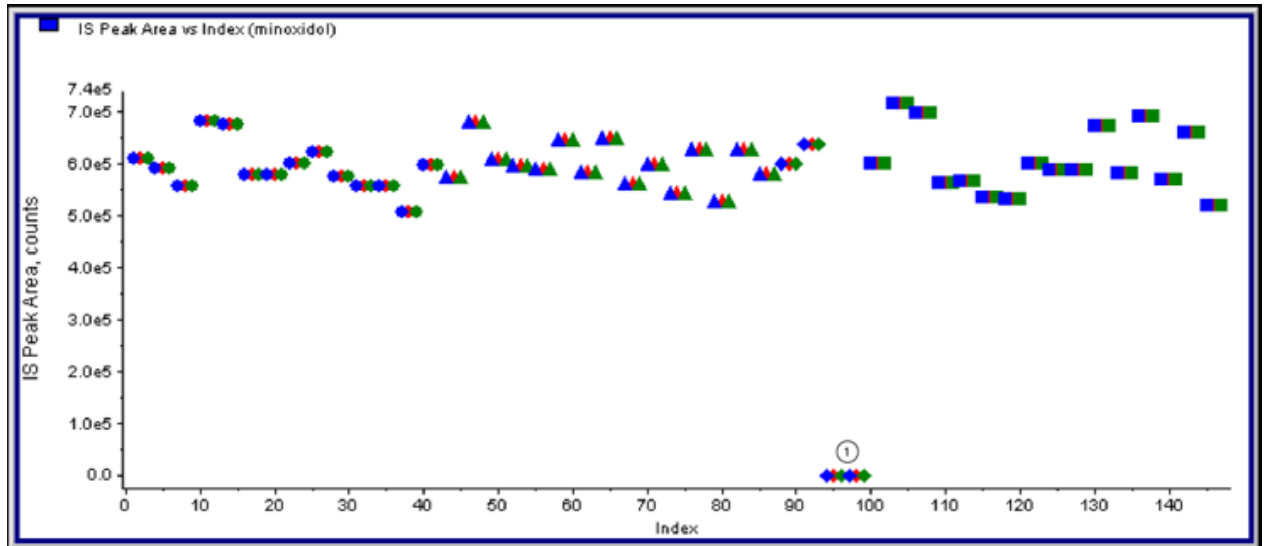
메트릭 플롯을 사용하여 Results Table의 **Analyte Peak Area, Accuracy** 또는 **Calculated Concentration**과 같은 특정 열을 그래프로 표시할 수 있습니다. Results Table 두 개 필드가 서로를 기준으로 그래프로 표시될 수 있습니다. 그 다음 정상 범위 바깥에 표시된 포인트가 검 사될 수 있습니다. 메트릭 플롯은 흔히 쿼리와 함께 사용됩니다. 쿼리에 대한 자세한 정보는 도 움말 문서를 참조하십시오.

다음 방법으로 메트릭 플롯을 생성합니다.

- **Plot** 버튼을 사용하여 현재 Results Table의 열을 그래프로 표시할 수 있지만 플롯 기준을 저장할 수는 없습니다.
- 표별 플롯을 생성하여 현재 표와 함께 플롯 기준을 저장합니다.
- 전역 플롯을 생성하여 향후 Results Table에 사용할 수 있도록 플롯 기준을 저장합니다.

QC, 미확인 물질, 공시료, 이중 공시료 및 용매는 교정 곡선에 표시할 수 없지만 이러한 항목에 대한 메트릭 플롯은 생성할 수 있습니다.

그림 6-1 샘플 인덱스를 기준으로 한 내부 표준 물질 피크 면적 플롯의 예시



| 항목 | 설명 |
|----|--------|
| 1 | 이중 공시료 |

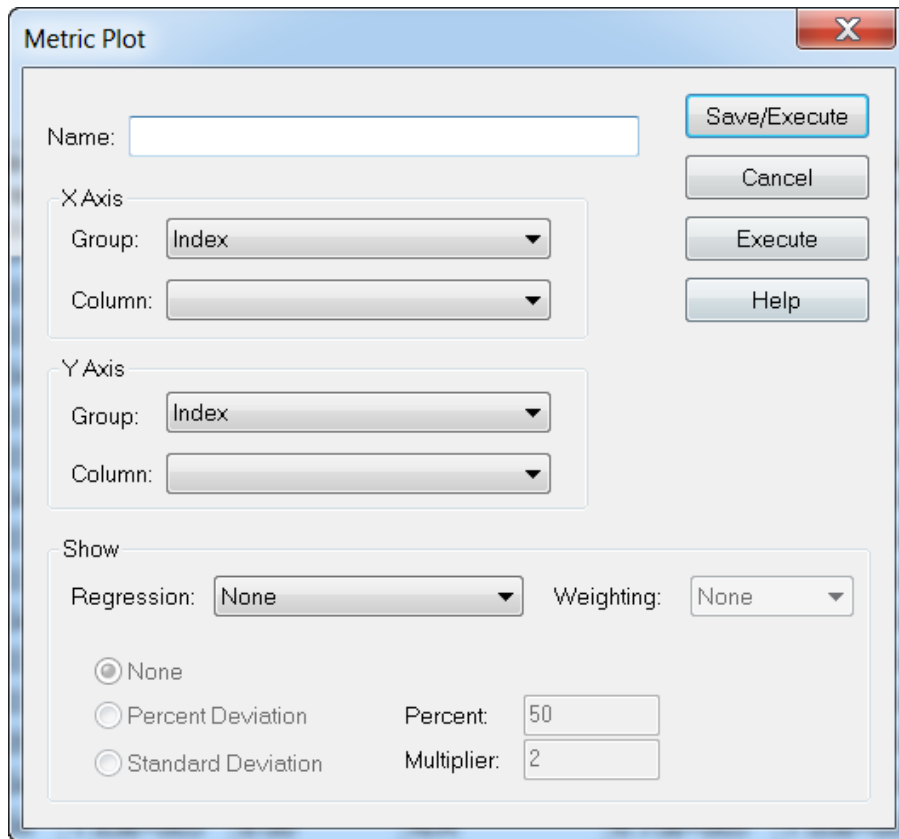
메트릭 임시 플롯 생성

- Results Table이 열린 상태에서 다음 중 하나를 수행합니다.
 - x축을 인덱스로 사용하여 y축의 데이터를 그리려면 그릴 데이터에 해당하는 열의 머리글을 클릭합니다.
 - 첫 번째로 선택한 열의 데이터를 x축에, 두 번째로 선택한 열의 데이터를 y축에 그리려면 Ctrl 키를 누르고 열 머리글을 클릭하여 두 열을 선택합니다.
- Results Table 위에 **Metric Plot by Selection** 아이콘을 클릭합니다. 메트릭 플롯이 열립니다.
- 플롯 창을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 Data Legend를 클릭하여 플롯에 사용되는 색상에 대한 설명을 표시합니다.
- 플롯 창을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 Point Legend를 클릭하여 플롯에 사용되는 기호에 대한 설명을 표시합니다.

메트릭 플롯 생성 및 플롯 기준 저장

- 해당 Results Table을 엽니다.
- Results Table을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Metric Plot > New**를 클릭합니다.

그림 6-2 Metric Plot 대화 상자

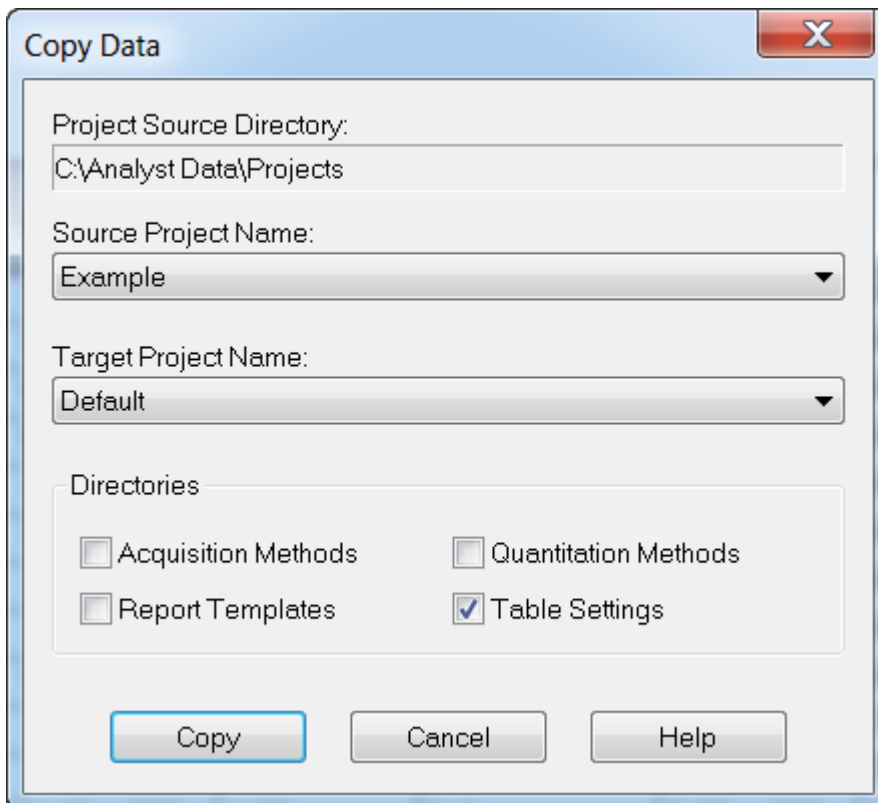


3. **Name** 필드에 새 플롯 기준의 이름을 입력합니다.
4. X-Axis 그룹의 **Group** 목록에서 **Index**를 선택한 다음 **Column** 목록을 비워 두면 X축을 인덱스로 사용하여 Y축에 필드를 표시할 수 있습니다.
5. 필요한 경우 Y-axis 그룹의 **Group** 목록에서 **Internal Standard**를 선택한 다음 **Column** 목록에서 **IS Peak Area**를 선택하여 두 열을 서로를 기준으로 표시합니다.
6. 필요한 경우 **Regression** 목록에서 사용할 회귀 유형을 선택한 다음 적절한 회귀 설정을 선택합니다.
7. 플롯을 생성하고 플롯 기준을 저장하려면 **Save/Execute**를 클릭합니다. 메트릭 플롯이 열립니다. 자세한 정보는 [그림 6-1](#)에서 확인하십시오.
8. 플롯에 사용되는 색상에 대한 설명을 보려면 플롯 창을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Data Legend**를 클릭합니다.
9. 플롯에 사용되는 기호에 대한 설명을 보려면 플롯 창을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Point Legend**를 클릭합니다.
이제 이 기준 세트를 Results Table의 이후 그래프를 그릴 때 사용할 수 있습니다. 기준에 액세스하려면 Results Table에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭합니다. 플롯 기준을 편집할 수도 있습니다.
10. 문제 샘플을 보려면 시간을 기준으로 미확인 물질의 농도를 표시하거나 인덱스를 기준으로 내부 표준 물질의 면적을 표시합니다.

이후 Results Table을 위한 기본 플롯 기준 저장

1. Results Table을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Table Settings > Export To New Table Settings**를 클릭합니다.
이렇게 하면 .rdb 파일에서 표 설정을 내보내 프로젝트 내에 있는 다른 정량화 실행에서 다시 사용할 수 있습니다.
2. 표 설정을 다른 프로젝트로 내보내려면 **Tools > Project > Copy Data**를 클릭합니다.

그림 6-3 Copy Data 대화 상자



노이즈 및 면적 임계값 매개 변수

피크를 식별하기 위해 소프트웨어에는 노이즈 및 면적 임계값 매개 변수가 필요합니다. 소프트웨어는 초기에 이러한 매개 변수를 설정하며 사용자가 나중에 설정을 변경할 수 있습니다. 소프트웨어는 다음과 같이 매개 변수를 설정합니다.

1. 연속된 두 데이터 포인트 사이의 가장 큰 강도 차이를 계산합니다. 계산된 숫자는 실제 강도 자체가 아닌 두 강도 사이의 차이를 나타냅니다.
2. 1단계에서 계산된 값의 5% 미만의 강도 차이를 갖는 연속적인 데이터 쌍의 경우, 소프트웨어가 강도 차이의 표준 편차(0의 평균 사용)를 계산합니다. 최대값의 5% 이상에 해당하는 강도 차이를 가진 포인트 쌍은 사용하지 않습니다.
 - 노이즈 임계값은 2단계에서 계산된 표준 편차와 동일합니다.
 - 면적 임계값은 노이즈 임계값의 5배수와 동일합니다.

참고: 노이즈 및 면적 임계값의 최소 값은 0.000001입니다. 만약 계산으로 이 최소값보다 낮은 값이 생성되면 소프트웨어는 해당 임계값을 0.000001로 재설정합니다.

노이즈 및 면적 임계값 재계산

새 배경 면적이 정의되면 소프트웨어에서는 노이즈 및 면적 임계값을 다음과 같이 다시 계산합니다.

연속된 각 데이터 포인트 쌍의 경우, 소프트웨어는 평균으로 0을 사용하여 강도 차이의 표준 편차를 계산합니다. Analyst MD 소프트웨어는 선택한 범위 내의 모든 포인트를 사용하는데, 이는 선택된 면적이 배경 노이즈라고 명시적으로 확인되었기 때문입니다.

- 노이즈 임계값은 선택한 범위에서 계산된 표준 편차와 동일합니다.
- 면적 임계값은 노이즈 임계값의 5배수와 동일합니다.

참고: 노이즈 및 면적 임계값의 최소 값은 0.000001입니다. 만약 계산으로 이 최소값보다 낮은 값이 생성되면 소프트웨어는 해당 임계값을 0.000001로 재설정합니다.

피크 통합

다음은 피크를 찾았을 때 기준선이 발견되고 통합되는 통합 유형입니다.

- 수동: 피크가 사용자에게 의해 수동으로 통합됩니다.
- 자동: 피크가 다음 사항에 따라 자동으로 통합됩니다.
 - 기준선-기준선: 피크 면적이 기준으로 확장된 피크의 시작과 끝 부분에 있는 수직 하향선에 의해 정의됩니다. 이 통합 유형은 바로 앞 또는 바로 뒤에 다른 피크가 없는 피크에만 가능합니다.
 - 밸리: 기준선-기준선과 동일하나, 이 통합은 유형은 바로 앞 또는 바로 뒤에 다른 피크가 있는 피크에만 적용됩니다.
 - 지수 스킴: 지수 스킴에서 피크 면적이 주 피크 또는 상위 피크입니다.
 - 지수 하위: 피크 면적이 지수 스킴의 결과인 하위 피크입니다.

피크 검토

피크 검토를 사용하여 소프트웨어가 선택한 피크를 조사한 다음 필요에 따라 해당 피크 또는 시작점/중지점을 재정의할 수 있습니다.

일반적으로 이 소프트웨어는 분석 물질 및 내부 표준 물질 피크를 정확하게 식별하는 데에 능합니다. 샘플 획득 및 정량화 방법 정의를 비롯한 다양한 이유로 소프트웨어가 올바른 피크를 놓치고 잘못된 피크를 선택하거나 피크를 아예 찾지 못하는 경우가 있습니다. 또는 소프트웨어가 피크를 올바르게 식별했다 할지라도 사용자가 선택된 시작점 또는 끝점에 동의하지 않을 수도 있습니다.

피크 검토 팁

| 수행할 작업 | 방법 |
|-------------------------|--|
| 피크 통합: 피크 검토 방법 | 모든 피크를 검토하려면 모든 샘플이 Results Table에 나열되는지 확인합니다. Peak Review 창에는 Results Table에 나열된 피크가 포함됩니다. 일부 샘플이 표에 숨겨져 있는 경우(예를 들면 쿼리를 적용한 경우) 피크 검토에서도 숨겨집니다. |
| 피크 통합: 배치에서 첫 번째 피크로 이동 | Peak Review 창의 아무 곳이나 마우스 오른 쪽 버튼으로 클릭한 다음 Show First Page 를 클릭합니다. 배치의 마지막 피크로 이동하려면 Peak Review 창의 아무 곳이나 마우스 오른 쪽 버튼으로 클릭한 다음 Show Last Page 를 클릭합니다. |

피크 감지

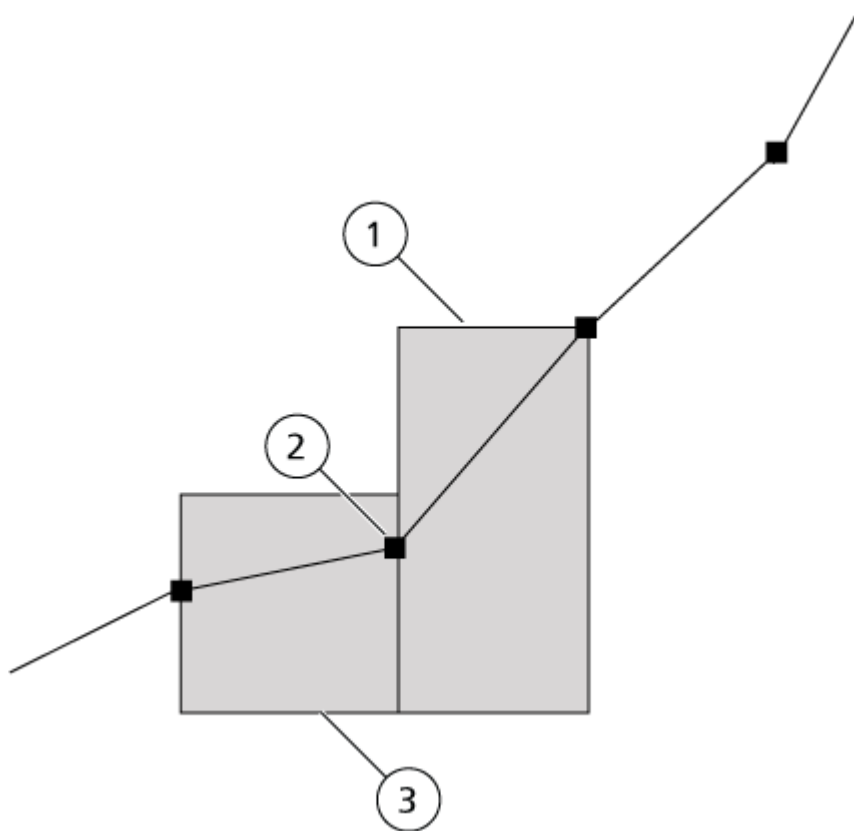
이 소프트웨어는 네 단계로 피크를 감지합니다.

1. 각 번치 포인트와 바로 앞 포인트 사이의 거리를 계산하여 잠재적 피크 시작점을 찾습니다. 이 거리가 현재 노이즈 임계값을 초과하는 지점이 잠재적 피크 시작점이 됩니다.
2. 면적 임계값을 초과할 만큼 충분한 포인트가 행에 존재하는지 확인하여 피크 시작점을 확인합니다.
3. 이전 포인트보다 낮은 포인트를 검색하여 피크 정상을 찾습니다.
4. 하나의 번치 포인트와 다음 번치 포인트 사이의 거리가 노이즈 임계값보다 낮은 지점을 파악하여 피크 끝점을 찾습니다. 필요한 경우 피크를 분리합니다.

잠재적 피크 시작점 찾기

잠재적 피크 시작점을 찾기 위해 소프트웨어는 첫 번째 포인트에서 시작하여 연속하는 번치 포인트 쌍들 사이의 강도 차이를 측정합니다. 현재 노이즈 임계값을 초과하는 차이가 발견되면 첫 번째 포인트가 잠재적 피크 시작점이 됩니다.

그림 6-4 잠재적 피크 시작점 찾기



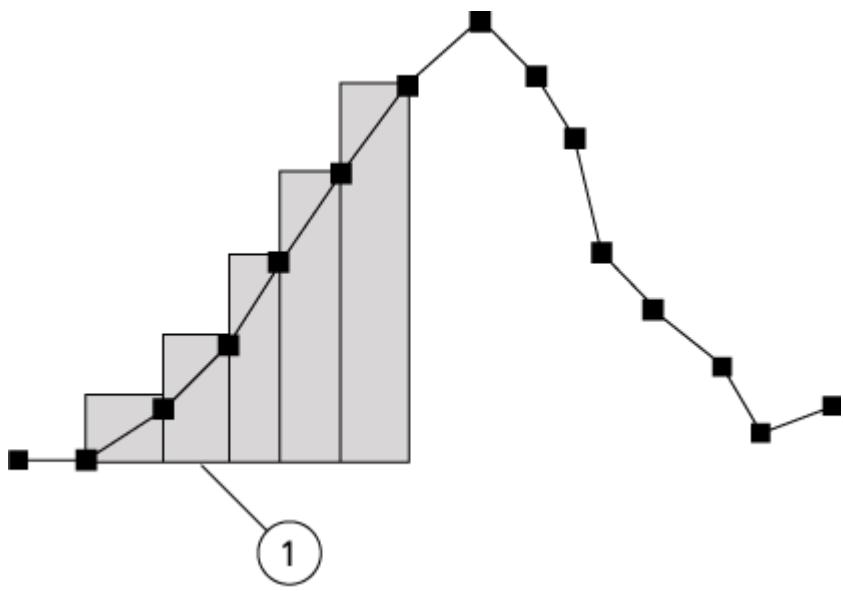
| 항목 | 설명 |
|----|------------------|
| 1 | 노이즈 임계값 초과 |
| 2 | 잠재적 피크 시작점 |
| 3 | 노이즈 임계값을 초과하지 않음 |

피크 시작점 확인

실제 피크를 찾았는지 확인하기 위해 소프트웨어는 곡선을 따라 이동하며 총 각 번치 데이터 포인트의 강도와 잠재적 피크 시작점에서의 강도 사이의 차이를 더해 총 합계를 계산합니다. 이 프로세스는 연속하는 포인트 간의 강도 차이가 노이즈 임계값보다 적을 때 중지됩니다. 이 합계는 피크의 앞 가장자리 면적에 대한 근사치입니다. 이 합계가 면적 임계값을 초과할 경우, 소프트웨어는 피크 시작점을 확인합니다.

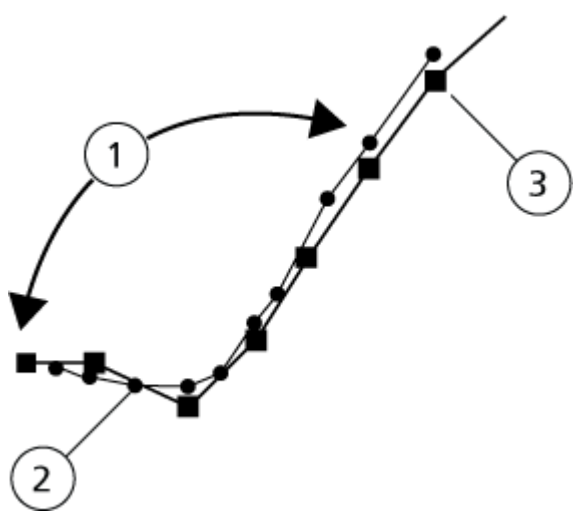
그런 다음 소프트웨어는 잠재적 피크 시작점에서 출발해 피크에서 가장 낮은 포인트를 찾을 때까지 뒤로 이동하며 실제 피크 시작점을 판별합니다. 소프트웨어는 원시 데이터의 다섯개 번치를 통과하며 뒤로 이동합니다. 이 포인트가 실제 피크 시작점입니다.

그림 6-5 피크 시작점 확인



| 항목 | 설명 |
|----|-----------------------|
| 1 | 면적 임계값보다 큰 면적 조각들의 합계 |

그림 6-6 실제 피크 시작점 확인



| 항목 | 설명 |
|----|------------------|
| 1 | 이 영역의 데이터 포인트 검토 |
| 2 | 최소 데이터 포인트 |
| 3 | 잠재적 피크 시작점 |

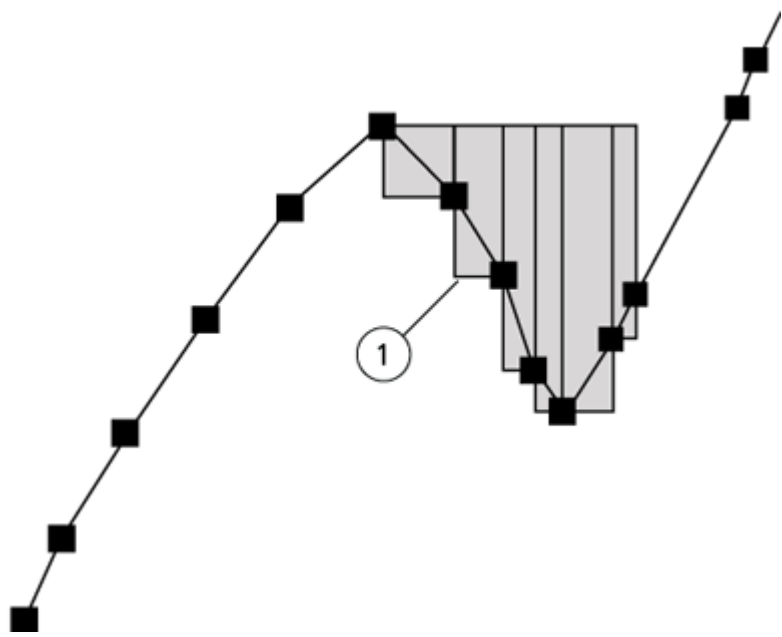
피크 정상 찾기

피크 정상을 찾기 위하여 소프트웨어는 먼저 앞선 포인트보다 낮은 포인트를 찾습니다. 그런 다음, 정상을 올바르게 찾았는지 확인하기 위해 피크 끝점에 도달할 때까지 잠재적 정상과 이후 번치 포인트 사이의 강도 차이를 합산합니다. 포인트 간의 총 거리가 면적 임계값의 2/3을 초과하는 경우 피크 정상이 확인됩니다. 즉, 소프트웨어는 먼저 피크가 있는지 확인한 후 뒤로 돌아가 피크의 정상을 찾습니다.

그러나 만약 소프트웨어가 면적 검토를 끝내기 전에 더 높은 번치 포인트를 발견하면, 소프트웨어는 이 포인트를 새로운 정상으로 인식하고 면적 검토를 다시 시작합니다.

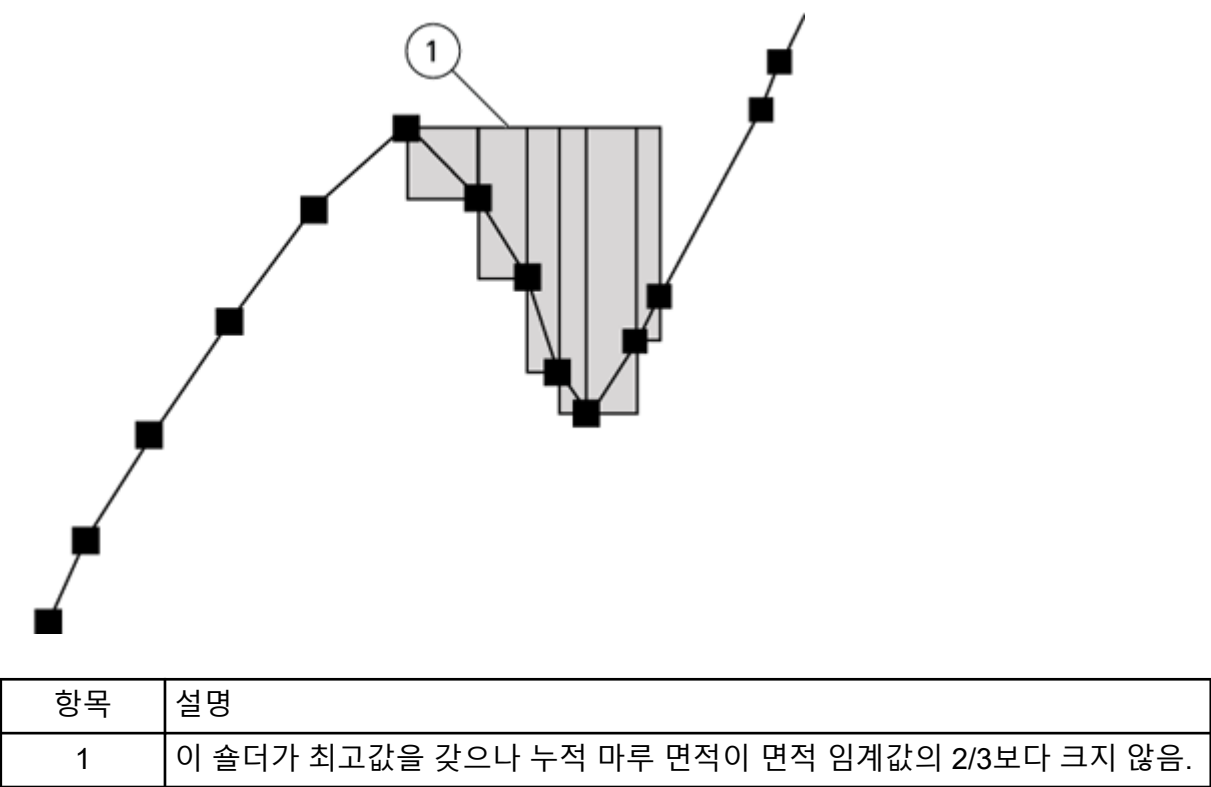
참고: 피크에 대한 실제 머무름 시간은 단순히 앞서 기술된 대로 식별된 포인트가 아닙니다. 실제 머무름 시간은 가장 높은 세 데이터 포인트를 기반으로 한 이차 적합에서 결정됩니다.

그림 6-7 피크 정상 찾기



| 항목 | 설명 |
|----|-----------------------------|
| 1 | 면적 임계값의 2/3보다 큰 면적 조각들의 합계. |

그림 6-8 새 피크 정상 식별



피크 끝점 찾기

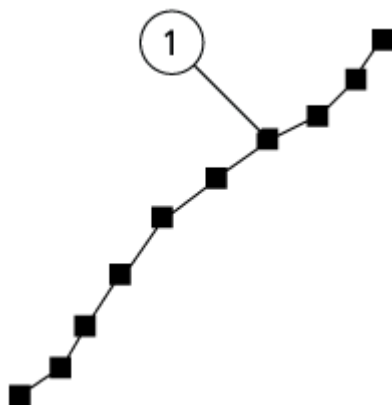
다음 중 한 가지 상황이 발생하면 피크 끝점이 판별됩니다.

- 연이은 두 포인트 간의 차이가 노이즈 임계값 검사에 실패합니다.
- 소프트웨어가 새 피크 시작점을 감지합니다.

두 경우 모두 마지막 다섯 개 번치에서 가장 낮은 번치 포인트가 실제 피크 끝점으로 간주됩니다.

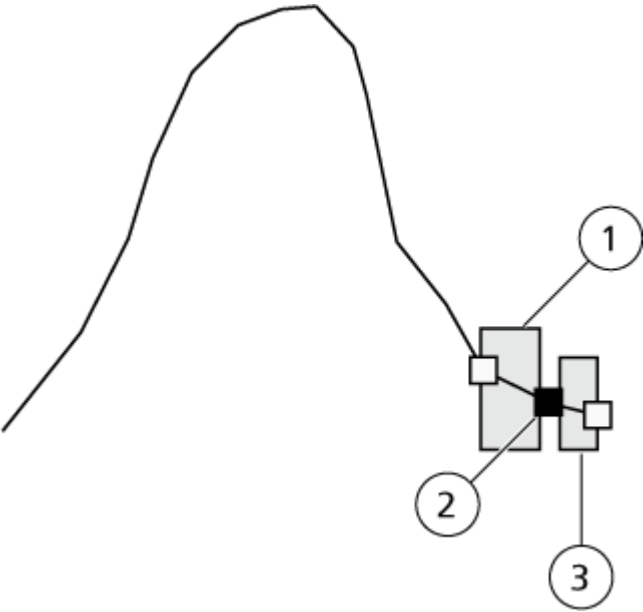
소프트웨어는 일반적으로 각 크로마토그램에 대해 여러 피크를 찾습니다. 소프트웨어가 선택하는 피크는 방법에서 지정된 예상 머무름 시간에 가장 가까운 머무름 시간을 갖는 피크입니다. 지정 사항 내의 머무름 시간을 갖는 피크가 하나도 없을 경우 소프트웨어는 해당 피크를 찾을 수 없는 피크로 표시합니다.

그림 6-9 피크 찾기



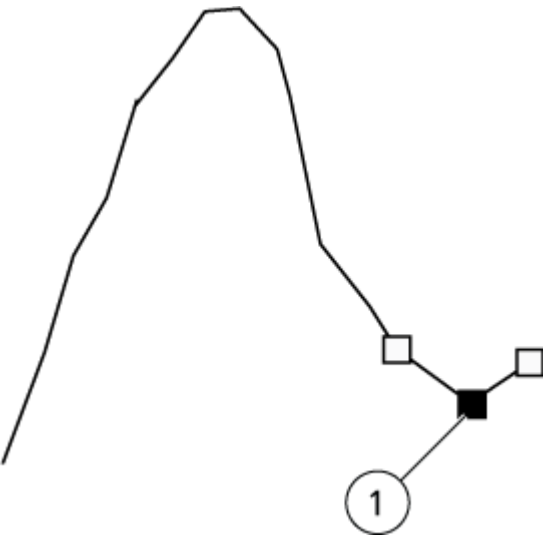
| 항목 | 설명 |
|----|--------------------|
| 1 | 숄더에 개별 최대 포인트가 없음. |

그림 6-10 피크 끝점 찾기: 사례 1



| 항목 | 설명 |
|----|------------------|
| 1 | 노이즈 임계값 초과 |
| 2 | 피크 끝점 |
| 3 | 노이즈 임계값을 초과하지 않음 |

그림 6-11 피크 끝점 찾기: 사례 2



| 항목 | 설명 |
|----|-------|
| 1 | 피크 끝점 |

피크 분리

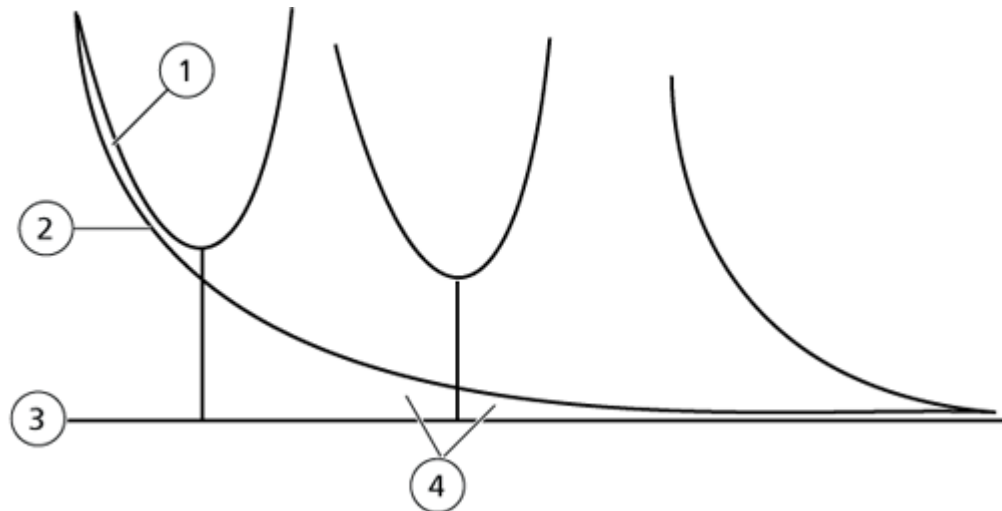
현재 피크가 기준선에 닿기 전에 새 피크가 시작되는 경우, 소프트웨어는 다음 기준을 토대로 지수 스킴을 사용하여 기준선을 분석할 것인지 결정합니다. 스킴은 전구체를 따르는 피크를 한 개 이상 통과합니다. 이러한 피크들은 생성 피크로 불립니다.

소프트웨어가 지수 스킴을 수행하면, 생성 피크에서 해당 스킴 아래 면적을 빼고 이를 전구체 피크에 줍니다. 이후 전구체 피크에서 스킴 위에 있는 적은 면적을 빼서 첫번째 전구체 피크에 더합니다.

소프트웨어는 다음 기준을 사용하여 지수 스킴을 사용할 것인지 판단합니다.

- 지수 피크 비율
- 지수 조정 비율
- 지수 밸리 비율

그림 6-12 피크 분리: 지수 스킴



| 항목 | 설명 |
|----|--------------------------------------|
| 1 | 이 면적이 전구체 피크에서 빠지고 첫번째 생성 피크에 더해집니다. |
| 2 | 지수 스킴 |
| 3 | 클러스터 기준선 |
| 4 | 이 면적들은 생성 피크에서 빠져 전구체 피크에 더해집니다. |

쿼리

쿼리는 특정 기준을 충족하는 기록만을 선택하는 방법입니다. 텍스트 또는 수학적 선택 사항을 기반으로 Results Table 데이터에서 관심이 있는 특정 부분을 보기 위해서 쿼리를 사용할 수 있습니다. 프로젝트에 저장된 쿼리를 해당 프로젝트 내 모든 Results Tables에서 사용할 수 있습니다.

쿼리를 사용할 때 표에 선택한 기준을 충족시키는 데이터 행만 표시합니다. 열은 모두 표시됩니다. 첫 번째 쿼리에 의해 표시된 행에서 두 번째 쿼리를 실행하면 선택 사항을 더 구체화할 수 있습니다.

사전 정의 선택과 입력된 항목들을 사용하여 실행하고 저장하고 수정할 수 있는 쿼리를 생성하십시오. 쿼리의 각 줄은 어떤 기록을 보여줄 지 판단하기 위해 Results Table 열에 대해 수행하는 부울 검색과 동일한 방식으로 작동합니다. 쿼리의 각 줄은 해당 쿼리의 기준을 충족시키는 기록만을 선택합니다. 사전 설정 또는 표 관련 쿼리가 정의될 수 있습니다.

사용자는 Results Table에서 데이터를 분석하는 데 사용되는 모든 쿼리의 유효성을 확인하는 것이 좋습니다.

샘플 유형에 대한 쿼리

표준 물질 샘플 유형만을 선택하도록 설계된 쿼리의 경우, Results Table은 Sample Type 열에 표준 물질을 포함하는 데이터의 행만을 표시합니다.

기본 쿼리 및 표 관련 쿼리

기본 쿼리는 일반적으로 특정 기준을 충족시키지 않는 샘플을 식별할 때 사용됩니다. 표 관련 쿼리는 일반적으로 특정 기준을 충족시키는 기록을 식별할 때 사용됩니다.

기본 쿼리는 일반적으로 정도 관리 물질 또는 표준 물질에 있는 문제를 발견할 때 사용됩니다. 사용자가 Quantitation Method Wizard에서 QC 및 표준 물질의 농도와 최대 변동률 선택한 경우, Results Table은 이 범위 바깥에 있는 샘플만을 표시합니다. Results Table에 아무것도 표시되지 않는 경우 샘플에 문제가 없는 것입니다. Execute Query as Standard Query 확인란이 선택되었을 경우 Results Table의 모든 샘플이 표시되지만 샘플이 쿼리에 실패했거나 성공했는지 여부에 따라 Standard Query Status 열에 Fail 또는 Pass 상태가 표시됩니다.

표 관련 쿼리는 특정 기준을 충족시키는 기록을 선택하기 위해 표시된 Results Table에 대해 수행됩니다. 표에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭하여 사용 가능한 메뉴를 통해 이러한 쿼리를 설계하십시오. 쿼리를 저장하고 내보내 추후 Results Tables에서도 사용할 수 있습니다.

표 관련 또는 일반 설정

표 설정 옵션에서 작업할 때 절차가 표 관련 또는 일반일 수 있습니다.

- 표 관련 설정: 표 자체에서 표 설정을 수정하면 해당 표에서만 사용 가능한 설정을 변경합니다. 그러나 이 설정을 일반 설정으로 내보내기할 수 있습니다.
- 일반 설정: 일반 설정을 수정하면, 이후 Results Table에 적용될 수 있는 설정 그룹에 변경 사항을 만듭니다. 생성 중에 있는 Results Table를 사용자 지정하려면 Create Quantitation Set: Select Settings & Query page의 설정 그룹을 선택합니다. 설정 그룹이 선택되지 않으면 소프트웨어는 자동으로 사전 설정된 설정을 사용합니다.

정확한 변동률이 결과에 끼치는 영향

사전 설정된 쿼리의 경우, 정확도는 백분율로 표시되며 해당 수를 더하거나 뺀으로써 실행됩니다. 예를 들어 Create Default Query 대화 상자에서 **Maximum Variation for standards**로 10을 입력하면 정확도가 90% 미만이거나 110%를 초과하는 표준 물질을 포함하는 모든 레코드가 Results Table에 표시됩니다. 5를 입력하면 정확도가 95% 미만이거나 105%를 초과하는 표준 물질만 Results Table에 표시됩니다. 자세한 정보는 [Results Table](#) 섹션을 참조하십시오.

회귀 수식

이 절에서는 회귀 곡선을 계산하는 데 사용되는 수식을 설명합니다. 다음 수식에서 x 는 표준 샘플의 분석 물질 농도를 나타내고 y 는 해당 피크 면적 또는 높이를 나타냅니다. 회귀에 사용되는 정확한 변수는 다음 표에 나타난 대로 내부 표준이 사용되는지 여부와 피크 면적 또는 피크 높이가 사용되는지 여부에 따라 다릅니다.

표 6-6 회귀 변수

| 내부 표준 사용 | 면적 사용 | x | y |
|----------|-------|---------------------|----------------|
| 예 | 예 | $C_a / C_{is} / DF$ | A_a / A_{is} |
| 예 | 아니요 | $C_a / C_{is} / DF$ | H_a / H_{is} |
| 아니요 | 예 | C_a / DF | A_a |
| 아니요 | 아니요 | C_a / DF | H_a |

여기서:

- C_a = 실제 분석 물질 농도
- C_{is} = 내부 표준 농도
- DF = 희석배율
- A_a = 분석 물질 피크 면적
- A_{is} = 내부 표준 피크 면적
- H_a = 분석 물질 피크 높이
- H_{is} = 내부 표준 피크 높이

맞춤 옵션

맞춤 옵션은 데이터에 적용될 회귀 분석 유형을 나타냅니다. 맞춤 옵션은 선형, 영점을 이용한 선형, 평균 감응 인자, 제곱 및 이차입니다.

선형 회귀

선형 회귀를 선택하면 표준 물질의 포인트가 일직선 상에 놓입니다.

선형 교정 방정식은 다음과 같습니다.

$$y = mx + b$$

기울기와 절편은 다음과 같이 계산됩니다.

$$m = (\sum w \sum wxy - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

여기서:

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

영점을 이용한 선형

영점을 이용한 선형 회귀를 선택하면 표준 물질의 포인트가 일직선 상에 놓이고 x축 및 y축에 놓인 영점과 함께 포인트가 나열됩니다. 선이 영점을 통과하게 하려면 이 설정을 사용하십시오.

영점 교정을 이용한 선형 방정식은 다음과 같습니다.

$$y = mx$$

기울기는 다음과 같이 계산됩니다.

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

평균 감응 인자

평균 감응 인자 교정은 다음과 같습니다.

$$y = mx$$

이 수식은 선형이지만 영점 교정인 경우와 동일합니다. 그러나 기울기는 다르게 계산됩니다.

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

또한 감응 인자의 표준 편차는 다음과 같습니다.

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1)) / \sum w}$$

여기서:

$$D = \sum w^* \sum wy^2 / x^2 - (\sum wy / x)^2$$

참고: x 값이 0인 포인트는 총합에서 제외됩니다.

좌표로 이루어진 선에 일부 선형성 및 곡률이 있는 경우 선형 또는 이차 회귀 대신 거듭제곱 회귀를 사용하여 이러한 적합 사이에 선을 생성합니다.

거듭제곱

멱함수 교정 수식은 다음과 같습니다.

$$y = ax^p$$

선형 교정 수식은 위에 설명된 바와 같이 기울기(m)와 절편(b)을 계산하는 데 사용되지만 이 수식의 x가 ln x로 대체되고 y가 ln y로 대체됩니다. 이 수식이 완료되면 a와 p가 다음과 같이 계산됩니다:

$$a = e^b$$

$$p = m$$

x 또는 y 값 중 하나라도 음수이거나 0이면 오류가 보고됩니다.

이차

이차 교정 방정식은 다음과 같습니다.

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

다항식 계수는 다음과 같이 계산됩니다.

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum wy - a_1 \sum wx - a_2 \sum wx^2) / \sum w$$

여기서:

$$b_0 = \sum wx / \sum w - \sum wx^2 / \sum wx$$

$$b_1 = \sum wx^2 / \sum w - \sum wx^3 / \sum wx$$

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$

$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2y / \sum wx^2$$

가중치 계수

다음 표에서는 7개의 각 가중치 유형에 대해 가중치 계수(w)를 계산하는 방법을 보여줍니다.

표 6-7 가중치 계수

| 가중치 유형 | 중량(w) |
|--------------------|---|
| 없음 | 항상 1.0입니다. |
| 1 / x | x < 10 ⁻⁵ 이면 w = 10 ⁵ , 그렇지 않으면 w = 1 / x 입니다. |
| 1 / x ² | x < 10 ⁻⁵ 이면 w = 10 ¹⁰ , 그렇지 않으면 w = 1 / x ² 입니다. |
| 1 / y | y < 10 ⁻⁸ 이면 w = 10 ⁸ , 그렇지 않으면 w = 1 / y 입니다. |
| 1 / y ² | y < 10 ⁻⁸ 이면 w = 10 ¹⁶ , 그렇지 않으면 w = 1 / y ² 입니다. |

표 6-7 가중치 계수 (계속)

| 가중치 유형 | 중량(w) |
|--------|--|
| ln (x) | $x < 0$ 이면 오류가 발생합니다. $x < 10^{-5}$ 이면 $w = \ln 10^5$, 그렇지 않으면 $w = \ln (x) $ 입니다. |
| ln (y) | $y < 0$ 이면 오류가 발생합니다. $y < 10^{-8}$ 이면 $w = \ln 10^8$, 그렇지 않으면 $w = \ln (y) $ 입니다. |

보고서 템플릿

이 섹션에서는 **Configure** 섹션의 **Report Template Editor**(Analyst MD 소프트웨어의 탐색 모음)를 사용하여 생성된 보고서 템플릿에서 사용되는 다양한 요소에 대해 설명합니다.

다음 정보가 보고서 머리글과 바닥글에 추가될 수 있습니다.

참고: 편집하기 전에 기존 보고서 템플릿의 백업을 만드십시오.

표 6-8 기본 디자인 요소

| 요소 | 정의 |
|-----------------------------|---------------------------------------|
| Printing Date | (인쇄 날짜) 문서가 인쇄된 날짜입니다. |
| Printing Time | (인쇄 시간) 문서가 인쇄된 시간입니다. |
| Operator | (작업자) 문서를 인쇄한 작업자입니다. |
| Workstation | (워크스테이션) 문서가 인쇄된 워크스테이션입니다. |
| Page n of N | (n/N페이지) 총 페이지 수 중 페이지 번호입니다. |
| Custom Field | (사용자 지정 필드) 여기에서 사용자 지정 텍스트를 생성합니다. |
| Analyst Version | (Analyst 버전) Analyst MD 소프트웨어의 버전입니다. |
| User Type | (사용자 유형) 사용자 유형(보안)입니다. |
| Electronic Signature | (전자 서명) 전자 서명 기능(보안)의 활성화 여부를 나타냅니다. |

표 6-9 획득 요소

| 요소 | 정의 |
|-------------------------|-------------------------------|
| Acquisition File | 샘플 획득 정보를 포함하는 데이터 파일의 이름입니다. |
| Acquisition Date | 샘플 획득 날짜입니다. |
| Acquisition Time | 샘플 획득 시간입니다. |
| Operator | 샘플 배치를 실행한 작업자의 이름입니다. |
| Batch Name | 배치의 이름입니다. |

표 6-9 획득 요소 (계속)

| 요소 | 정의 |
|-------------------------------|--|
| Sample Number | 샘플과 관련된 번호입니다. |
| Sample Name | 샘플의 이름입니다. |
| Sample Comment | Acquisition Method Editor를 통해 입력된 샘플에 대한 메모입니다. |
| Sample ID | 샘플의 식별 번호입니다. |
| Scan Mode | 전체 질량 범위 스캔을 위해 한 스캔에 대해 시스템이 질량 포인트를 계산하는 방법입니다. |
| Scan Type and Polarity | 획득 스캔 유형(Q1, Q3, MRM, 생성 이온, 전구체 이온, 중립 손실/획득) 및 획득 방법 극성(양극 또는 음극)입니다. |
| Scan Mass(es) | 스캔되는 이온 또는 이온 단편입니다. |
| Dwell Time | 시스템이 특정 질량을 스캔하는 데 걸린 시간입니다. |
| Pause Time | 질량 범위 스캔 간 또는 실험 간 일시 중지 시간입니다. |
| Ion Energy | 이온 에너지는 획득 방법에서 얻어지며 IonSpray 이온 소스 전압 또는 충돌 에너지와 관련되어 있습니다. |
| Collision Energy | 충돌 에너지는 획득 방법에서 얻어지며 IonSpray 이온 소스 전압과 관련되어 있습니다. |
| Period and Experiment | 기간에는 실험 모음이 포함됩니다. 실험에는 Scan Type, Scan Mode, Resolution, Ion Source Parameters , 질량 범위 또는 질량의 모음과 같은 여러 속성이 포함됩니다. |
| State Table Parameters | 실험에 사용되는 질량 분석계 매개 변수입니다. |
| Pump | 실험에 사용된 펌프의 이름입니다. |
| Autosampler | 실험에 사용된 오토샘플러의 이름입니다. |
| Custom Annotation | Batch Editor에서 추가된 사용자 지정 텍스트입니다. |
| Collected By | 데이터를 수집한 사람의 이름입니다. |

표 6-10 정량화 요소

| 요소 | 정의 |
|---------------------------|-----------------------|
| Results Table Name | Results Table의 이름입니다. |
| Results Table Path | Results Table의 위치입니다. |
| Method Name | 정량화 방법의 이름입니다. |
| Method Path | 방법 파일의 위치입니다. |

표 6-10 정량화 요소 (계속)

| 요소 | 정의 |
|---------------------|--------------|
| Project Name | 프로젝트의 이름입니다. |

보고서 사용자 지정

Report Template Editor는 머리글, 바닥글, 페이지 레이아웃을 설정하여 보고서를 사용자 지정할 수 있는 방법을 제공합니다. 인쇄된 출력물 및 다른 어플리케이션으로 내보내기 된 데이터 모두에 보고서 템플릿을 사용합니다.

인쇄된 출력물에는 몇 가지 유형의 요소가 포함됩니다.

- **Window:** 소프트웨어 창 영역에 열려 있는 창이며 도구 모음 아래, Navigation bar 오른쪽에 있습니다. 창을 인쇄하면 이 창 안에 포함된 모든 것들이 인쇄됩니다.
- **Pane:** 내부 창은 겹치지 않고 항상 완전히 보이도록 배열된 창의 일부입니다. 예를 들어 Method Editor 창은 Browser 창과 Method Editor 창이라는 두 개의 내부 창을 포함합니다. 사용자는 창 안에 있는 각 내부 창의 정보를 인쇄할 수 있습니다.
- **Report:** 보고서는 소프트웨어에서 만들어진 구조화된 정보의 세트입니다. 교정 보고서와 같은 일부 보고서는 바로 인쇄할 수 있습니다. 배치 및 정량화 Results Tables와 같은 다른 정보들은 반드시 내보내기를 해야합니다.

보고서 미리 보기, 인쇄, 내보내기

획득 방법, 배치, 정량화 Results Table, 그래프 Results Table을 보고서로 내보낼 수 있습니다. 계산기 데이터와 같은 다른 형식의 정보는 내보낼 수는 있지만 보고서 템플릿으로 사용자 지정할 수는 없습니다.

화면에 표시되는 대부분의 영역이 인쇄될 수 있습니다. 사용자는 Print Preview 기능을 사용해 그래프를 미리보고, 조정하거나 복사할 수 있습니다.

내보낸 보고서가 Notepad, Microsoft Word, Excel 또는 LIMS(실험실 정보 관리 시스템) 소프트웨어와 같은 프로그램에 적합한 파일 형식으로 저장됩니다.

다음 형식으로 보고서를 내보냅니다.

- csv
- doc
- pdf
- txt

가능한 형식은 내보내는 정보에 따라 달라집니다. 예를 들어, 그래프를 pdf로 내보낼 수 있습니다. 데이터 표를 txt 파일로 내보낼 수 있습니다.

보고서의 머리글 및 바닥글에 정보를 추가하고자 하는 경우 적절한 보고서 템플릿을 사용해 보고서를 인쇄하십시오.

표 6-11 보고서 미리 보기, 인쇄, 내보내기

| 수행할 작업 | 수행 방법 |
|-----------------|--|
| 그래프 미리 보기 | File > Print Preview > Pane. 을 클릭합니다. |
| 템플릿 없이 보고서 인쇄하기 | File > Print 를 클릭한 다음 인쇄할 보고서를 클릭합니다. |
| 템플릿으로 보고서 인쇄하기 | <ol style="list-style-type: none"> 1. File > Print & Report Setup.을 클릭합니다. 2. Report Template 섹션에서 사용할 템플릿을 선택한 다음 OK.를 클릭합니다. |
| 보고서 내보내기 | <ol style="list-style-type: none"> 1. File > Export.를 클릭합니다. 2. File 필드에 파일 이름을 입력합니다. 3. Save as type 목록에서 파일 유형을 선택합니다. 4. Quantitate 모드에서 보고서를 내보내는 경우 Export 섹션에서 All Columns 또는 Visible Columns 를 선택한 다음 Save를 클릭합니다. |

Results Table

Results Table에는 교정 곡선에 기초하여 계산된 각 미확인 샘플 내의 분석 물질 농도가 요약되어 있습니다. 여기에는 교정 곡선과 결과에 대한 통계도 포함됩니다.

Microsoft Excel 등의 다른 어플리케이션에 사용하는 경우 Results Table의 데이터를 .txt 파일로 내보내기할 수 있습니다. 표에 있는 모든 가능한 데이터를 내보내거나 보이는 열의 데이터만 내보낼 수 있습니다.

참고: 사용자는 Results Table 내보내기와 Analyst MD 소프트웨어에서 출력 데이터로 보고 등의 제어된 방법만 사용하는 것이 좋습니다. Results Table에서 복사하여 붙여넣기 같은 다른 출력 데이터 소스는 제어되지 않으므로 사용하면 안 됩니다.

Results Table의 데이터는 세 가지 방법으로 저장 가능합니다.

- **Sort** 버튼 중 하나를 사용하여 1~3개 열을 기준으로 테이블을 빠르게 정렬합니다. 이 정렬 조건은 저장할 수 없습니다.
- 현재 표와 함께 정렬 조건을 저장하려면 표 관련 정렬을 생성합니다. 표 관련 정렬을 사용하면 1 ~ 3개 열을 기준으로 현재 표를 정렬하고 해당 표와 사용할 수 있도록 이 조건을 저장할 수 있습니다.
- 이전에 생성한 사전 설정 정렬을 사용합니다. 정렬을 생성하여 저장하고 추후 Results Table에 적용합니다.

팁! 정렬 또는 다른 테이블 설정을 저장하려면 테이블을 마우스 오른쪽 단추로 클릭한 다음 **Table Settings > Export To New Table Settings**.를 클릭합니다. 해당 정렬 및 기타 매개 변수를 현재 프로젝트에서 사용할 수 있습니다. 테이블 설정을 다른 프로젝트에서 사용하려면 **Tools > Project > Copy Data**.를 클릭하여 다른 프로젝트에 테이블 설정을 복사합니다. **Source Project Name** 및 **Target Project Name**을 선택하고 Directories 아래에서 **Table Settings**의 확인란을 선택한 다음 **Copy**를 클릭합니다. **Table Settings**를 새 프로젝트에서 사용하려면 **Table Settings**를 복사하기 전에 먼저 새 프로젝트를 생성해야 합니다.

Results Table의 특정 레이아웃 보기

Results Table의 기본 보기는 Full Layout 또는 Summary Layout입니다. 샘플당 분석 물질이 여러 개인 경우에는 Analyte Layout에서 각 분석 물질을 볼 수 있습니다.

Results Table이 열려 있고 활성화된 상태에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭하고 다음 필드 중 하나를 클릭합니다.

표 6-12 Results Table 레이아웃

| 필드 | 설명 |
|----------------------|---|
| Full | 전체 레이아웃을 보려면 클릭합니다. |
| Summary | 필드 이름을 클릭합니다. |
| Analyte | Analyte Layout을 보려면 단일 분석 물질을 클릭합니다. MRM 또는 Scheduled MRM 알고리즘 결과를 볼 때는 Analyte 를 클릭하여 화합물 ID 목록을 표시할 수 있습니다. |
| Analyte Group | Analyte Group Layout을 보려면 분석 물질 그룹을 클릭합니다. 팁! 먼저 새 분석 물질 그룹을 생성해야 합니다. 그러려면 Results Table을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 Analyte Group > New .를 클릭합니다. |
| Sample Type | 특정 샘플 유형을 표시하려면 클릭합니다. |

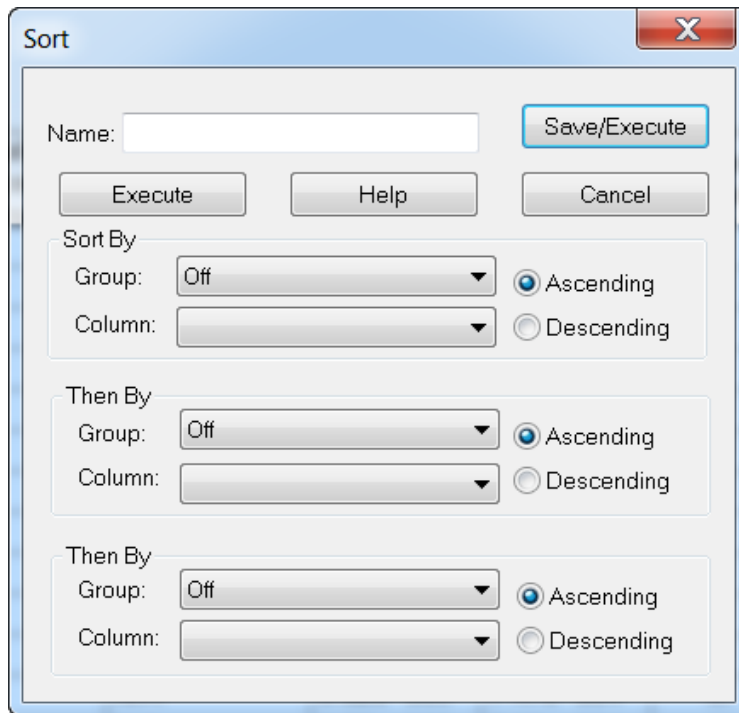
Results Table의 데이터 정렬

- Results Table에서 정렬할 순서대로 열을 최대 세 개까지 선택합니다.
- 다음 중 한 가지를 수행합니다.
 - 오름차순으로 정렬하려면 **A-Z**를 클릭합니다.
 - 내림차순으로 정렬하려면 **Z-A**를 클릭합니다.

Results Table 정렬 및 정렬 조건 저장

- Results Table을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Sort > New**를 클릭합니다.

그림 6-13 대화 상자 정렬

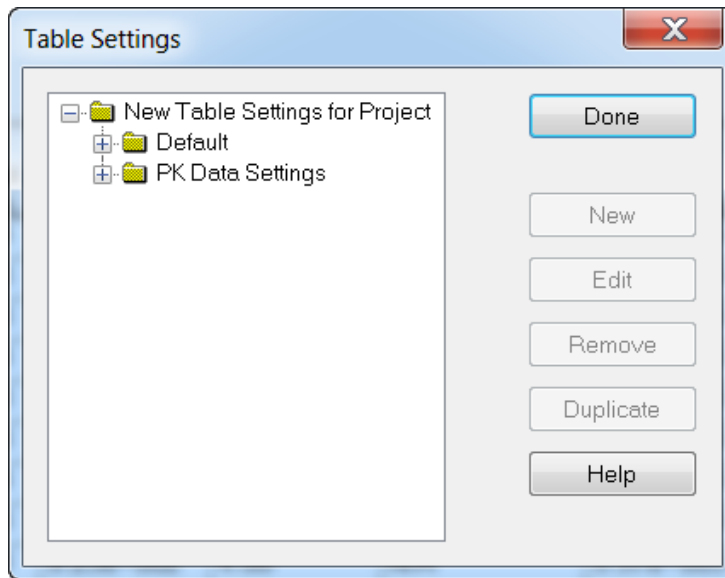


2. **Name** 필드에 새 정렬의 이름을 입력합니다.
3. 각 정렬 규칙에 대해 **Sort By** 및 **Then By** 섹션에서 다음을 수행합니다.
 - **Group** 목록에서 정렬 기준이 되는 열의 유형을 선택합니다.
 - **Column** 목록에서 정렬 기준이 되는 열을 선택합니다.
 - 정렬 방향으로: **Ascending** 또는 **Descending**을 선택합니다.
4. 다음 중 한 가지를 수행합니다.
 - 정렬을 수행하려면 정렬 조건을 저장하고 나서 **Sort** 대화 상자를 닫은 다음 **Save/Execute**를 클릭합니다.
 - 정렬을 수행한 다음 정렬 조건을 저장하지 않고 **Sort** 대화 상자를 닫으려면 **Execute**를 클릭합니다.

이후 **Results Table**에 사용하기 위한 기본 정렬 조건 저장

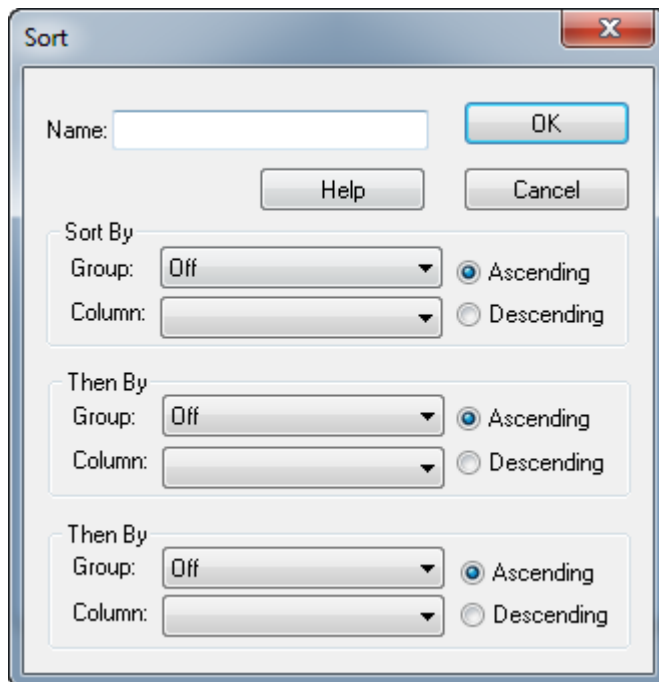
1. **Tools > Settings > New Quantitation Results Table Settings**를 클릭합니다.

그림 6-14 표 설정 대화 상자



2. **Table Settings** 폴더를 확장한 후 **Default** 폴더를 두 번 클릭합니다.
3. 확장된 **Default** 폴더에서 **Sorts** 폴더를 선택합니다.
4. **New**를 클릭합니다.

그림 6-15 대화 상자 정렬



5. **Name** 필드에 이름을 입력합니다.
6. 설정하고자 하는 각 정렬 규칙의 경우 **Sort By** 섹션에서 다음을 수행합니다.

- a. **Group** 목록에서 컬럼 유형을 선택합니다.
 - b. **Column** 목록에서 컬럼을 선택합니다.
 - c. 정렬 방향으로: **Ascending** 또는 **Descending**을 선택합니다.
7. 조건을 저장하고 Sort 대화 상자를 닫으려면 **OK**를 클릭합니다.
 8. **Done**을 클릭합니다.

사전 설정된 정렬 조건을 사용하여 **Results Table** 정렬

Results Table을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 뒤 **Sort**를 클릭한 다음 정렬 이름을 선택합니다.

Results Table과 함께 쿼리 사용 정보

쿼리는 특정 조건이 텍스트 또는 수학적 선택 사항 기준을 사용하여 수립한 **Results Table** 내의 기록에 대한 하나의 요청입니다. **Results Table**을 생성하는 프로세스 도중 또는 **Results Table**이 생성된 이후에 쿼리를 적용합니다. 쿼리의 이러한 두 가지 유형을 기본 또는 표 관련 쿼리라고 부릅니다. 자세한 정보는 [기본 쿼리 및 표 관련 쿼리](#) 섹션을 참조하십시오.

사용자는 **Results Table**에서 데이터를 분석하는 데 사용되는 모든 쿼리의 유효성을 확인하는 것이 좋습니다.

배치 간 결과 비교

Statistics 창에서 데이터를 결합하기 위해서는 분석 물질 수와 분석 물질 이름이 동일해야 합니다.

1. **Results Table**을 엽니다.
2. **Tools > Statistics.**를 클릭합니다.
3. 다음 중 하나를 수행합니다.
 - **Results Table**을 기준으로 결과를 배열하려면 **Conc. as Rows** 목록에서 **Group By Batch**를 선택합니다.
 - 농도 순서대로 결과를 배열하려면 **Conc. as Rows** 목록에서 **Group By Concentration**을 선택합니다.
 - 각 그룹이나 배치에 대한 통계를 표시하는 행 없이 농도 순서대로 결과를 배열하려면 **Conc. as Rows** 목록에서 **Group By Concentration (no All)**을 선택합니다.

결과가 정렬됩니다. 각 배치 또는 그룹의 끝에는 **All**(해당 그룹의 모든 **Results Table**에 대한 통계) 및 **Average**(해당 배치 또는 그룹 관련 통계에 대한 통계)라는 추가 행이 한 개 또는 두 개 표시됩니다.

농도 레벨이 결과에 끼치는 영향

QC 및 표준 물질에 대한 농도가 정의됩니다. 최대치에 지정된 양 이상으로 농도 레벨 정확도에 변화가 있을 수 있습니다. **Create Default Query** 대화 상자에 **Variation** 필드에 이 정보가 표시된 후 **Results Table**에도 표시됩니다.

Results Table 레이아웃

소프트웨어에는 다음과 같은 사전 정의된 Results Table 보기가 있습니다.

- 전체 레이아웃 보기
- 요약 레이아웃 보기
- Analyte Layout 보기
- Analyte Group Layout 보기
- Sample Type Layout 보기

여러 분석 물질 샘플의 각 분석 물질이 Analyte Layout 보기로 표시될 수 있습니다. 사전 설정 보기는 Full layout입니다.

전체 레이아웃 보기

기본 설정인 Full Layout 보기는 정량 배치 내의 모든 분석 물질에 대한 데이터를 표시합니다. 표시되는 열은 Results Table Columns 대화 상자에서 선택된 열 및 Quantitation Method Wizard의 두 번째 페이지에서 선택된 설정에 따라 달라집니다.

그림 6-16 전체 레이아웃 보기 예시

| | Sample Name | Sample Type | File Name | Analyte Peak Name | Analyte Peak Area | Analyte Peak Height | Analyte Concentration |
|----|---------------------|-------------|---------------|-------------------|-------------------|---------------------|-----------------------|
| 1 | B series 0 blank | Blank | QuanData.Wiff | Peak 1 | 2.45e+002 | 6.02e+001 | 0.00 |
| 2 | B series 0 blank | Blank | QuanData.Wiff | Peak 2 | 1.25e+004 | 4.53e+003 | 0.00 |
| 3 | B series 0.1 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 1 | 7.80e+002 | 2.53e+002 | 0.00 |
| 4 | B series 0.1 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 2 | 1.39e+004 | 4.93e+003 | 0.00 |
| 5 | B series 0.2 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 1 | 1.55e+003 | 5.08e+002 | 0.00 |
| 6 | B series 0.2 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 2 | 1.28e+004 | 4.27e+003 | 0.00 |
| 7 | B series 0.5 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 1 | 3.32e+003 | 1.04e+003 | 0.00 |
| 8 | B series 0.5 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 2 | 1.14e+004 | 4.20e+003 | 0.00 |
| 9 | B series 1.0 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 1 | 7.12e+003 | 2.33e+003 | 0.00 |
| 10 | B series 1.0 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 2 | 1.23e+004 | 4.35e+003 | 0.00 |
| 11 | B series 2.0 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 1 | 1.50e+004 | 4.77e+003 | 0.00 |
| 12 | B series 2.0 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 2 | 1.34e+004 | 4.83e+003 | 0.00 |
| 13 | B series 5.0 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 1 | 3.70e+004 | 1.20e+004 | 0.00 |
| 14 | B series 5.0 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 2 | 1.51e+004 | 5.29e+003 | 0.00 |
| 15 | B series 10.0 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 1 | 7.73e+004 | 2.49e+004 | 0.00 |
| 16 | B series 10.0 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 2 | 1.50e+004 | 5.41e+003 | 0.00 |
| 17 | B series 20.0 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 1 | 7.61e+004 | 2.44e+004 | 0.00 |
| 18 | B series 20.0 ng/mL | Standard | QuanData.Wiff | Peak 2 | 8.04e+003 | 3.13e+003 | 0.00 |

요약 레이아웃 보기

Summary Layout 보기에는 잠긴 열과 남은 열의 각 분석 물질에 대해 선택한 필드가 포함됩니다. 예를 들어 메뉴에서 두 개 분석 물질에 대한 분석 물질 면적이 선택된 경우 이 분석 물질 이름에 대한 Sample Name 및 Analyte Peak Area 열이 표시됩니다. Summary Layout 보기는 수식 열과 사용자 지정 열이 존재할 경우 이 또한 포함합니다.

그림 6-17 요약 레이아웃 보기 예시

| | Sample Name | Peak 1 | Peak 2 |
|----|---------------------|-----------|-----------|
| 1 | B series 0 blank | 2.45e+002 | 1.25e+004 |
| 3 | B series 0.1 ng/mL | 7.80e+002 | 1.39e+004 |
| 5 | B series 0.2 ng/mL | 1.55e+003 | 1.28e+004 |
| 7 | B series 0.5 ng/mL | 3.32e+003 | 1.14e+004 |
| 9 | B series 1.0 ng/mL | 7.12e+003 | 1.23e+004 |
| 11 | B series 2.0 ng/mL | 1.50e+004 | 1.34e+004 |
| 13 | B series 5.0 ng/mL | 3.70e+004 | 1.51e+004 |
| 15 | B series 10.0 ng/mL | 7.73e+004 | 1.50e+004 |
| 17 | B series 20.0 ng/mL | 7.61e+004 | 8.04e+003 |
| 19 | Unknown concentra | 1.23e+004 | 8.39e+003 |
| 21 | Unknown concentra | 8.71e+003 | 5.71e+003 |
| 23 | Unknown concentra | 1.12e+004 | 7.18e+003 |
| 25 | Unknown concentra | 1.32e+004 | 7.36e+003 |
| 27 | Unknown concentra | 1.25e+004 | 7.14e+003 |
| 29 | Unknown concentra | 1.10e+004 | 6.50e+003 |
| 31 | Unknown concentra | 1.36e+004 | 7.94e+003 |

Analyte Layout 보기

Analyte Layout 보기는 특정 분석 물질에 대한 데이터를 포함합니다. 다른 모든 분석 물질은 숨겨집니다. 예를 들어 분석 물질 A가 선택된 경우 분석 물질 A에 대한 모든 데이터가 표시됩니다. 표시되는 열은 Results Table Columns 대화 상자에서 선택된 열과 Quantitation Method Wizard의 두 번째 페이지에서 선택된 설정에 따라 달라집니다.

피크 1이 선택된 Analyte Layout 보기는 다음 그림과 같이 나타납니다. 이 보기에서는 Full Layout 보기에 표시된 행이 한 행씩 교대로 제외됩니다.

그림 6-18 샘플 Analyte Layout 보기

| | Sample Name | File Name | Analyte Peak Area | Analyte Peak Height | Analyte Concentration | Use Record | Record Modified |
|----|---------------------|---------------|-------------------|---------------------|-----------------------|-------------------------------------|--------------------------|
| 1 | B series 0 blank | QuanData.Wiff | 2.45e+002 | 6.02e+001 | 0.00 | | <input type="checkbox"/> |
| 3 | B series 0.1 ng/mL | QuanData.Wiff | 7.80e+002 | 2.53e+002 | 0.00 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 5 | B series 0.2 ng/mL | QuanData.Wiff | 1.55e+003 | 5.08e+002 | 0.00 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 7 | B series 0.5 ng/mL | QuanData.Wiff | 3.32e+003 | 1.04e+003 | 0.00 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 9 | B series 1.0 ng/mL | QuanData.Wiff | 7.12e+003 | 2.33e+003 | 0.00 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 11 | B series 2.0 ng/mL | QuanData.Wiff | 1.50e+004 | 4.77e+003 | 0.00 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 13 | B series 5.0 ng/mL | QuanData.Wiff | 3.70e+004 | 1.20e+004 | 0.00 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 15 | B series 10.0 ng/mL | QuanData.Wiff | 7.73e+004 | 2.49e+004 | 0.00 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 17 | B series 20.0 ng/mL | QuanData.Wiff | 7.61e+004 | 2.44e+004 | 0.00 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 19 | Unknown concentra | QuanData.Wiff | 1.23e+004 | 4.30e+003 | N/A | | <input type="checkbox"/> |
| 21 | Unknown concentra | QuanData.Wiff | 8.71e+003 | 2.53e+003 | N/A | | <input type="checkbox"/> |
| 23 | Unknown concentra | QuanData.Wiff | 1.12e+004 | 3.40e+003 | N/A | | <input type="checkbox"/> |
| 25 | Unknown concentra | QuanData.Wiff | 1.32e+004 | 4.24e+003 | N/A | | <input type="checkbox"/> |
| 27 | Unknown concentra | QuanData.Wiff | 1.25e+004 | 4.04e+003 | N/A | | <input type="checkbox"/> |
| 29 | Unknown concentra | QuanData.Wiff | 1.10e+004 | 3.96e+003 | N/A | | <input type="checkbox"/> |
| 31 | Unknown concentra | QuanData.Wiff | 1.36e+004 | 5.16e+003 | N/A | | <input type="checkbox"/> |

Analyte Group Layout 보기

Analyte Group Layout 보기에는 특정 그룹에 속해 있는 분석 물질에 대한 데이터가 포함됩니다. Results Table Columns 대화 상자에 나타난 것과 같이 선택한 열이 Results Table에 표시

됩니다. 다음 그림을 참조하십시오. 해당 그룹에 속한 분석 물질의 이름을 표시하려면 Results Table에 **Analyte Peak Name** 열을 표시하십시오.

그림 6-19 샘플 Analyte Group Layout 보기

Formula: Analyte Group: Minoxidols Only
Query: None
Idle
Sort: Unsorted

| | Sample Name | Sample ID | Sample Type | File Name | Analyte Peak Name |
|---|-------------|-----------|-------------|------------------|-------------------|
| 1 | STD 1 | | Standard | Mix_batch_1.wiff | minoxidol |
| 2 | STD 1 | | Standard | Mix_batch_1.wiff | minoxidol |
| 3 | STD 2 | | Standard | Mix_batch_1.wiff | minoxidol |
| 4 | STD 2 | | Standard | Mix_batch_1.wiff | minoxidol |
| 5 | STD 3 | | Standard | Mix_batch_1.wiff | minoxidol |

Sample Type Layout 보기

Sample Type Layout을 사용하면 사용자가 샘플 유형별로 Results Table을 필터링할 수 있습니다.

그림 6-20 Sample Type Layout 보기

Sample Type: Standard
Query: None
Idle
Sort: Unsorted

| | Sample Name | Sample Type | File Name | Analyte Peak Area (counts) |
|---|-------------|-------------|--------------------|----------------------------|
| 1 | STD 1 | Standard | Triple Quad\Mix_ba | 5.63e+005 |
| 2 | STD 1 | Standard | Triple Quad\Mix_ba | 5.68e+005 |
| 3 | STD 2 | Standard | Triple Quad\Mix_ba | 5.31e+005 |
| 4 | STD 2 | Standard | Triple Quad\Mix_ba | 6.11e+005 |
| 5 | STD 3 | Standard | Triple Quad\Mix_ba | 6.58e+005 |
| 6 | STD 3 | Standard | Triple Quad\Mix_ba | 5.76e+005 |
| 7 | STD 4 | Standard | Triple Quad\Mix_ba | 5.72e+005 |
| 8 | STD 4 | Standard | Triple Quad\Mix_ba | 5.94e+005 |
| 9 | STD 5 | Standard | Triple Quad\Mix_ba | 5.61e+005 |

Results Table 필드

표준 Results Table에 열을 추가하여 Analyte, Internal Standard 및 Record 필드에 대한 DAD(다이오드 어레이 검출기) 데이터를 표시합니다.

수식 필드

수식 필드에는 사용자가 정의한 스프레드시트 스타일의 수식에 대한 결과가 표시됩니다. Results Table의 상단에 위치한 수식 필드는 해당 Results Table에 최소 하나 이상의 수식 열이 존재하는 경우에만 표시됩니다. Formula 필드는 수식 열의 셀이 선택되었을 때에 활성화됩니다. 수식 필드 아래의 Delete Formula Column 버튼 역시 수식 열이 선택되었을 때 사용 가능합니다.

수식 열을 사용하는 결과의 유효성을 확인하는 것이 좋습니다.

사용자 지정 필드

사용자 지정 필드에는 획득 프로세스 동안 지정된 정보가 포함됩니다. 샘플을 획득할 때, 사용자는 사용자 지정 열을 생성하고 해당 열에 넣을 데이터의 유형을 지정할 수 있습니다. 사용자 지정 열이 Results Table의 일부가 되면 사용자는 다른 모든 열과 동일하게 해당 열을 다룰 수 있습니다(열에 있는 수식을 바탕으로 한 옮기기, 숨기기 등).

내부 표준 물질 열 필드

Results Table의 내부 표준 물질 열에는 분석 후 내부 표준 물질에 대한 정보가 표시됩니다. 다음 표에서는 사용 가능한 필드를 보여줍니다.

표 6-13 내부 표준 물질 열

| 열 | 설명 |
|-----------------------------------|---|
| IS Peak Name | 내부 표준 물질 피크의 이름. |
| IS Units | 내부 표준 물질이 제공되는 단위. |
| IS Peak Area | 내부 표준 물질 피크의 면적. |
| IS Peak Height | 내부 표준 물질 피크의 높이. |
| IS Concentration | 내부 표준 물질의 알려진 농도. 표준 물질 및 정도 관리 물질 샘플 유형에 적용됩니다. 0은 용매, 공시료 및 이중 공시료 샘플 유형에 대해 표시됩니다. 미확인 물질은 N/A 로 표시됩니다. |
| IS Retention Time | 소프트웨어가 측정한 크로마토그래픽 머무름 시간. |
| IS Expected Retention Time | 대표 샘플의 머무름 시간. 정량화 방법에서 취해짐. |
| IS Retention Time Window | 정량화 방법에서 지정된 머무름 시간 범위. |
| IS Centroid Location | 해당 분석 물질에 대한 강도 가중치가 부여된 평균 머무름 시간. 이 시간 범위까지의 피크 또는 시간 범위 이후의 피크가 식별됩니다. |
| IS Start Scan | 피크가 시작되는 기간 또는 실험 조합과 관련된 주기 수. |
| IS Start Time | 피크가 시작되는 기간 또는 실험 조합과 관련된 시간. |
| IS Stop Scan | 피크가 끝나는 기간 또는 실험 조합과 관련된 주기 수. |
| IS Stop Time | 피크가 끝나는 기간 또는 실험 조합과 관련된 시간. |

표 6-13 내부 표준 물질 열 (계속)

| 열 | 설명 |
|---|---|
| IS Integration Type | 피크가 발견되었을 때 기준선이 발견되고 통합되는 방법. 유형은 수동 및 자동(Baseline-to-Baseline , Valley , Exponential Skim 및 Exponential Child)입니다. |
| IS Signal to Noise | 피크의 신호 대 노이즈 비율. |
| IS Peak Width | 피크의 높이 대 폭 비율. |
| IS UV Range | 내부 표준 물질의 UV 범위. |
| IS UV Channel | 내부 표준 물질의 UV 채널. |
| IS Peak Width at 50 Percent (min.) | (읽기 전용) 피크 높이가 50%일 때의 피크 폭. |
| IS Baseline Slope (%/min.) | (읽기 전용) 기준선의 기울기를 보여주는 열. |
| IS Peak Asymmetry | (읽기 전용) 다음 수식으로 계산된 피크 비대칭성을 보여주는 열. $[(\text{피크 끝점 시간}) - (\text{머무름 시간})] / [(\text{머무름 시간}) - (\text{피크 시작점 시간})]$ 값이 1.0에 가까우면 대칭적인 피크임을 나타내며 1.0보다 큰 값은 테일링 피크를, 1.0보다 낮은 값은 프론틱 피크를 나타냅니다. |
| IS Processing Alg | (읽기 전용) 사용된 처리 알고리즘을 보여주는 열. |
| IS Integration Quality | 통합 품질 인덱스는 피크가 얼마나 잘 통합되는지를 나타냅니다. 1에 가까운 값은 잘 통합된 피크임을 나타내며 0에 가까운 값은 잘 통합되지 않은 피크를 나타냅니다. |

레코드 필드

Results Table의 **Record** 열에는 각 샘플 레코드에 대한 추가 정보(내부 표준 물질이 아닌 분석 물질에만 해당되는 정보)가 포함됩니다. 다음 표에서는 사용 가능한 필드를 보여줍니다.

표 6-14 레코드 열

| 열 | 설명 |
|---------------------------------|--|
| Use Record | 이 기록이 교정에 포함되어야 하는지를 나타냅니다. 표준 물질 및 정도 관리 물질에 적용됩니다. 확인란의 선택이 취소된 경우 사용되지 않은 표준 물질 및 QC는 통계 표에서 제외됩니다. |
| Record Modified | 레코드에 사용된 정량화 방법이 어떤 식으로든 원본 방법에서 수정되었는지를 나타냅니다. |
| Calculated Concentration | 교정 곡선을 사용하여 계산된 분석 물질의 계산된 농도입니다. |

표 6-14 레코드 열 (계속)

| 열 | 설명 |
|--------------------------------|---|
| Relative Retention Time | 내부 표준 물질과 분석 물질의 머무름 시간 비율입니다. |
| Accuracy | 계산된 농도를 알려진 농도로 나눈 값(백분율로 표시)입니다. |
| Response Factor | 피크 면적 또는 높이(회귀 옵션에 따라 다름)를 분석 물질 농도로 나눈 값입니다. |

분석 물질 열

Results Table의 분석 물질 열에는 분석 후 각 분석 물질 및 내부 표준 물질(사용된 경우)에 대한 정보가 포함됩니다. 다음 표에서는 사용 가능한 필드를 보여줍니다.

표 6-15 Results Table : 분석 물질 열

| 열 | 설명 |
|--|---|
| Analyte Peak Name | 분석 물질 이름. |
| Analyte Units | 분석 물질 농도가 제공되는 단위. |
| Analyte Peak Area | 분석 물질의 면적. |
| Analyte Peak Height | 분석 물질 피크의 높이. |
| Analyte Concentration | 해당 분석 물질의 실제, 알려진 농도. 표준 물질 및 정도 관리 물질 샘플 유형에 적용됩니다. 0은 용매, 공시료 및 이중 공시료 샘플 유형에 대해 표시됩니다. 미확인 물질은 N/A로 표시됩니다. |
| Analyte Retention Time | 소프트웨어가 측정한 크로마토그래픽 머무름 시간. |
| Analyte Expected Retention Time | 정량화 방법에서 얻은 대표 샘플의 머무름 시간. |
| Analyte Retention Time Window | 정량화 방법에서 지정된 머무름 시간 범위. |
| Analyte Centroid Location | 해당 분석 물질에 대한 강도 가중치가 부여된 평균 머무름 시간. 이 시간 범위까지의 피크 또는 시간 범위 이후의 피크가 식별됩니다. |
| Analyte Start Scan | 피크가 시작되는 기간 또는 실험 조합과 관련된 주기 수. |
| Analyte Start Time | 피크가 시작되는 기간 또는 실험 조합과 관련된 시간. |

표 6-15 Results Table : 분석 물질 열 (계속)

| 열 | 설명 |
|--|---|
| Analyte Stop Scan | 피크가 끝나는 기간 또는 실험 조합과 관련된 주기 수. |
| Analyte Stop Time | 피크가 끝나는 기간 또는 실험 조합과 관련된 시간. |
| Analyte Integration Type | 피크가 발견되었을 때 기준선이 발견되고 통합되는 방법. 수동 및 자동의 두 가지 유형이 있습니다(기준선-기준선, 밸리, 지수 스킴 및 지수 자식). |
| Analyte Signal to Noise | 기준선과 비교한 피크의 신호 대 노이즈 비율. |
| Analyte Peak Width | 피크의 높이 대 폭 비율. |
| Analyte UV Range | 분석 물질의 UV 범위. |
| Analyte UV Channel | 분석 물질의 UV 채널. |
| Analyte Peak Width at 50 Percent (min.) | (읽기 전용) 피크 높이가 50%일 때 피크 폭을 보여주는 열. |
| Analyte Baseline Slope (%/min.) | (읽기 전용) 기준선의 기울기를 보여주는 열. |
| Analyte Peak Asymmetry | (읽기 전용) 다음 수식으로 계산된 피크 비대칭성을 보여주는 열. $[(\text{피크 끝점 시간}) - (\text{머무름 시간})] / [(\text{머무름 시간}) - (\text{피크 시작점 시간})]$ 값이 1.0에 가까우면 대칭적인 피크임을 나타내며 1.0보다 큰 값은 테일링 피크를, 1.0보다 낮은 값은 프론틱 피크를 나타냅니다. |
| Analyte Processing Alg | 사용된 처리 알고리즘을 보여주는 읽기 전용 열. |
| Analyte Integration Quality | 통합 품질 인덱스는 피크가 얼마나 잘 통합되는지를 나타냅니다. 1에 가까운 값은 잘 통합된 피크임을 나타내며 0에 가까운 값은 잘 통합되지 않은 피크를 나타냅니다. 이러한 열은 수동 검토를 위한 낮은 분석 물질 통합 품질 값을 가진 피크를 볼 수 있으므로 피크 검토를 용이하게 합니다. 또한, 데이터 하위 세트를 표시하고 수동으로 검토하는 데 허용된다고 고려한 값보다 적은 Analyte Integration Quality 값에 대한 데이터에 쿼리를 제기할 수 있습니다. |

샘플 열

Results Table의 샘플 열에는 모든 분석 물질에 공통된 샘플 관련 정보가 표시됩니다. 공시료 및 이중 공시료는 실험실마다 다르게 정의될 수 있습니다. 다음 표에서는 사용 가능한 필드를 보여줍니다.

표 6-16 샘플 열

| 열 | 설명 |
|---------------------------|---|
| Sample Name | 샘플을 획득할 때 사용자가 해당 샘플에 할당한 이름입니다. |
| Sample ID | 해당 샘플과 연결된 사용자 정의 식별자입니다. |
| Sample Type | <p>샘플 내의 모든 분석 물질은 동일한 샘플 유형을 가져야 합니다. 다음 중 한 가지 샘플 유형이 표시됩니다.</p> <p>Unknown: 농도를 측정할 분석 물질을 포함합니다.</p> <p>Standard: 알려진 분석 물질 농도가 있는 샘플입니다. 교정 프로세스에 사용됩니다.</p> <p>Quality Control: 알려진 분석 물질 농도가 있는 샘플입니다. 표준 곡선의 정확도를 확인하는 데 사용됩니다.</p> <p>Solvent: 질량 분석계가 깨끗한지 확인합니다. 용매는 샘플 준비 프로세스를 통해 실행되지 않습니다.</p> <p>Blank: 회귀에 사용되지 않는, 농도가 0인 샘플입니다.</p> <p>Double Blank: 내부 표준 물질 또는 샘플 분석 물질 없이 준비된 샘플입니다. 추출 프로세스를 통해 추가된 것이 아무것도 없음을 확인합니다.</p> |
| Sample Comment | 샘플을 설명하는 메모입니다. |
| Set Number | 전체 배치 중 한 하위 세트를 식별하는 번호입니다. |
| Acquisition Method | 샘플을 획득하는 데 사용되는 획득 방법의 이름입니다. |
| Acquisition Date | 획득이 실행된 날짜 및 시간입니다. |
| Rack Type | 사용된 오토샘플러 랙(있는 경우)의 종류와 연결된 식별자입니다. |
| Rack Number | 샘플이 획득될 때 위치해 있던 랙 위치입니다. (단일 랙 오토샘플러에서는 항상 1입니다.) |
| Vial Position | 바이알이 위치했던 오토샘플러 플레이트 내의 위치입니다. |
| Plate Type | 사용된 플레이트 종류에 대한 식별자(다중 플레이트 랙에만 해당)입니다. |
| Plate Number | 랙에서의 플레이트 위치(다중 플레이트 랙에만 해당)입니다. |
| File Name | 원시 데이터 파일의 이름. 여러 샘플에서 나온 데이터가 하나의 단일 데이터 파일에 포함될 수 있으므로 이 이름은 고유하지 않습니다. |

표 6-16 샘플 열 (계속)

| 열 | 설명 |
|-------------------------------|---------------------------------|
| Dilution Factor | 샘플을 희석한 양. 계산된 농도를 측정할 때 사용됩니다. |
| Sample Annotation | 샘플을 설명하는 추가 메모입니다. |
| Weight-to-Volume Ratio | 해당 샘플의 중량 대 용량 비율입니다. |

표 6-17 DAD 열

| 열 | 설명 |
|------------------------------------|-------------------------------------|
| Analyte Peak Area for DAD | 분석 물질 피크의 면적(mAU/분). |
| Analyte Peak Height for DAD | 분석 물질 피크의 높이(mAU/분). |
| Analyte Wavelength Ranges | 파장의 범위(nm). |
| IS Peak Area for DAD | 내부 표준 물질 피크의 면적(mAU/분). |
| IS Wavelength Ranges | 파장의 범위(nm). |
| IS Peak Height for DAD | 내부 표준 물질 피크의 높이(mAU) DAD에 대해 계산된 농도 |

다음 표에서는 ADC(아날로그-디지털 변환기)를 통해 획득한 데이터에 대한 Results Table에 추가할 수 있는 필드를 보여줍니다.

표 6-18 ADC 열

| 열 | 설명 |
|----------------------------------|-----------------------|
| Analyte Channel | 분석 물질이 획득된 ADC 채널. |
| Analyte Wavelength Ranges | 파장의 범위(nm). |
| IS Channel | 내부 표준 물질이 획득된 ADC 채널. |
| IS Wavelength Ranges | 파장의 범위(nm). |

Results Table 팁

| 수행할 작업 | 방법 |
|---|--|
| 표 관련 쿼리: 전체 표 다시 보기 | Results Table의 아무 곳이나 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 Query > Show All 을 클릭합니다. 쿼리가 다시 적용되거나 편집될 수 있습니다. |
| 교정 곡선 검토 | 곡선의 아무 곳이나 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 Active Plot 을 클릭하고 상단에 표시할 곡선을 선택합니다. |
| 샘플 통계 검토: 개별 피크 검토하기 | Display the Data Set(s) 확인란을 선택한 다음 Data Point 열에서 피크를 나타내는 데이터 포인트를 두 번 클릭합니다. 소프트웨어에 Peak Review 창이 열리고 사용자가 선택한 피크가 표시됩니다. |
| Results Table: Results Table을 원래 순서로 되돌리기 | Results Table을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 Sort > Sort By Index 를 클릭합니다. |

도구 모음 아이콘

A

| 아이콘 | 이름 | 기능 |
|---|-----------------------------------|---|
|  | Background Subtract | 배경 범위를 선택한 후 배경 감산 수행. |
|  | Subtract Range Locked | 선택한 배경 범위 잠그기. 배경 범위 잠금이 해제되면 사용자가 각 범위를 개별적으로 바꿀 수 있음. |
|  | Centroid | 데이터의 중심 계산. |
|  | Home Graph | 그래프를 원래 배율로 되돌립니다. |
|  | Overlay | 그래프를 중첩합니다. |
|  | Cycle Overlays | 중첩된 각 그래프를 번갈아 표시합니다. |
|  | Sum Overlays | 그래프를 모두 함께 추가합니다. |
|  | Show Fragment Interpretation Tool | Fragment Interpretation 도구 열기. 이 도구는 .moi 파일에서 비순환적인 단일 결합 분할 단편을 계산. |
|  | Smooth | 다듬기 알고리즘을 사용하여 데이터 다듬기. |
|  | Gaussian Smooth | 가우스 다듬기를 사용하여 데이터 다듬기. |

PPG 정확 질량 테이블

B

다음 표에는 PPG(폴리프로필렌 글리콜) 교정 용액을 사용하여 관측된 정확한 단일 동위 원소 질량과 하전된 종(양극/음극)이 나와 있습니다. 질량 및 이온은 공식 $M = H[OC_3H_6]_nOH$ 를 사용하여 계산된 반면, 양이온 MS/MS 단편에는 공식 $[OC_3H_6]_n(H^+)$ 이 사용되었습니다. 모든 계산에서 $H = 1.007825$, $O = 15.99491$, $C = 12.00000$, $N = 14.00307$ 입니다.

참고: PPG 용액을 사용하여 교정을 수행할 때 올바른 동위 원소 피크가 사용되는지 확인하십시오.

표 B-1 PPG 정확 질량

| n | 정확 질량(M) | $(M + NH_4)^+$ | MS/MS 단편 | $(M + 2NH_4)^{2+}$ | $(M + COOH)^-$ |
|----|----------|----------------|----------|--------------------|----------------|
| 1 | 76.052 | 94.087 | 59.0 | 56.061 | 121.050 |
| 2 | 134.094 | 152.129 | 117.1 | 85.082 | 179.092 |
| 3 | 192.136 | 210.171 | 175.1 | 114.102 | 237.134 |
| 4 | 250.178 | 268.212 | 233.2 | 143.123 | 295.176 |
| 5 | 308.220 | 326.254 | 291.2 | 172.144 | 353.218 |
| 6 | 366.262 | 384.296 | 349.2 | 201.165 | 411.259 |
| 7 | 424.304 | 442.338 | 407.3 | 230.186 | 469.301 |
| 8 | 482.346 | 500.380 | 465.3 | 259.207 | 527.343 |
| 9 | 540.388 | 558.422 | 523.4 | 288.228 | 585.385 |
| 10 | 598.430 | 616.464 | 581.4 | 317.249 | 643.427 |
| 11 | 656.471 | 674.506 | 639.4 | 346.270 | 701.469 |

표 B-1 PPG 정확 질량 (계속)

| n | 정확 질량(M) | (M + NH ₄) ⁺ | MS/MS 단편 | (M + 2NH ₄) ²⁺ | (M + COOH) ⁻ |
|----|----------|-------------------------------------|----------|---------------------------------------|-------------------------|
| 12 | 714.513 | 732.548 | 697.5 | 375.291 | 759.511 |
| 13 | 772.555 | 790.590 | 755.5 | 404.312 | 817.552 |
| 14 | 830.597 | 848.631 | 813.6 | 433.333 | 875.594 |
| 15 | 888.639 | 906.673 | 871.6 | 462.354 | 933.636 |
| 16 | 946.681 | 964.715 | 929.7 | 491.373 | 991.678 |
| 17 | 1004.723 | 1022.757 | 987.7 | 520.396 | 1049.720 |
| 18 | 1062.765 | 1080.799 | 1045.7 | 549.417 | 1107.762 |
| 19 | 1120.807 | 1138.841 | 1103.8 | 578.438 | 1165.804 |
| 20 | 1178.849 | 1196.883 | 1161.8 | 607.459 | 1223.845 |
| 21 | 1236.890 | 1254.925 | 1219.9 | 636.480 | 1281.887 |
| 22 | 1294.932 | 1312.967 | 1277.9 | 665.501 | 1339.929 |
| 23 | 1352.974 | 1371.009 | 1335.9 | 694.521 | 1397.971 |
| 24 | 1411.016 | 1429.050 | 1394.0 | 723.542 | 1456.013 |
| 25 | 1469.058 | 1487.092 | 1452.0 | 752.563 | 1514.055 |
| 26 | 1527.100 | 1545.134 | 1510.1 | 781.584 | 1572.097 |
| 27 | 1585.142 | 1603.176 | 1568.1 | 810.605 | 1630.138 |
| 28 | 1643.184 | 1661.218 | 1626.2 | 839.626 | 1688.180 |

PPG 정확 질량 테이블

표 B-1 PPG 정확 질량 (계속)

| n | 정확 질량(M) | (M + NH ₄) ⁺ | MS/MS 단편 | (M + 2NH ₄) ²⁺ | (M + COOH) ⁻ |
|----|----------|-------------------------------------|----------|---------------------------------------|-------------------------|
| 29 | 1701.226 | 1719.260 | 1684.2 | 868.647 | 1746.222 |
| 30 | 1759.268 | 1777.302 | 1742.2 | 897.668 | 1804.264 |
| 31 | 1817.309 | 1835.344 | 1800.3 | 926.689 | 1862.306 |
| 32 | 1875.351 | 1893.386 | 1858.3 | 955.710 | 1920.348 |
| 33 | 1933.393 | 1951.428 | 1916.4 | 984.731 | 1978.390 |
| 34 | 1991.435 | 2009.469 | 1974.4 | 1013.752 | 2036.431 |
| 35 | 2049.477 | 2067.511 | 2032.5 | 1042.773 | 2094.473 |
| 36 | 2107.519 | 2125.553 | 2090.5 | 1071.794 | 2152.515 |
| 37 | 2165.561 | 2183.595 | 2148.5 | 1100.815 | 2210.557 |
| 38 | 2223.603 | 2241.637 | 2206.6 | 1129.836 | 2268.599 |
| 39 | 2281.645 | 2299.679 | 2264.6 | 1158.857 | 2326.641 |
| 40 | 2339.687 | 2357.721 | 2322.7 | 1187.878 | 2384.683 |
| 41 | 2397.728 | 2415.783 | 2380.7 | 1216.899 | 2442.724 |
| 42 | 2455.770 | 2473.805 | 2438.7 | 1245.920 | 2500.766 |
| 43 | 2513.812 | 2531.847 | 2496.8 | 1274.940 | 2558.808 |
| 44 | 2571.854 | 2589.888 | 2554.8 | 1303.961 | 2616.850 |
| 45 | 2629.896 | 2647.930 | 2612.9 | 1332.982 | 2674.892 |

표 B-1 PPG 정확 질량 (계속)

| n | 정확 질량(M) | (M + NH ₄) ⁺ | MS/MS 단편 | (M + 2NH ₄) ²⁺ | (M + COOH) ⁻ |
|----|----------|-------------------------------------|----------|---------------------------------------|-------------------------|
| 46 | 2687.938 | 2705.972 | 2670.9 | 1362.003 | 2732.934 |
| 47 | 2745.980 | 2764.014 | 2729.0 | 1391.024 | 2790.976 |
| 48 | 2804.022 | 2822.056 | 2787.0 | 1420.045 | 2849.017 |
| 49 | 2862.064 | 2880.098 | 2845.0 | 1449.066 | 2907.059 |
| 50 | 2920.106 | 2938.140 | 2903.1 | 1478.087 | 2965.101 |
| 51 | 2978.147 | 2996.182 | 2961.1 | 1507.108 | 3023.143 |
| 52 | 3036.189 | 3054.224 | 3019.2 | 1536.129 | 3081.185 |
| 53 | 3094.231 | 3112.266 | 3077.2 | 1565.150 | 3139.227 |
| 54 | 3152.273 | 3170.307 | 3135.2 | 1594.171 | 3197.269 |
| 55 | 3210.315 | 3228.349 | 3193.3 | 1623.192 | 3255.311 |
| 56 | 3268.357 | 3286.391 | 3251.3 | 1652.213 | 3313.352 |
| 57 | 3326.399 | 3344.433 | 3309.4 | 1681.234 | 3371.394 |
| 58 | 3384.441 | 3402.475 | 3367.4 | 1710.255 | 3429.436 |
| 59 | 3442.483 | 3460.517 | 3425.5 | 1739.276 | 3487.478 |
| 60 | 3500.525 | 3518.559 | 3483.5 | 1768.297 | 3545.5202 |
| 61 | 3558.566 | 3576.601 | 3541.5 | 1797.318 | 3603.562 |
| 62 | 3616.608 | 3634.643 | 3599.6 | 1826.339 | 3661.604 |

PPG 정확 질량 테이블

표 B-1 PPG 정확 질량 (계속)

| n | 정확 질량(M) | (M + NH ₄) ⁺ | MS/MS 단편 | (M + 2NH ₄) ²⁺ | (M + COOH) ⁻ |
|----|----------|-------------------------------------|----------|---------------------------------------|-------------------------|
| 63 | 3674.650 | 3692.685 | 3657.6 | 1855.359 | 3719.645 |
| 64 | 3732.692 | 3750.726 | 3715.7 | 1884.380 | 3777.687 |
| 65 | 3790.734 | 3808.768 | 3773.7 | 1913.401 | 3835.729 |
| 66 | 3848.776 | 3866.810 | 3831.7 | 1942.422 | 3893.771 |
| 67 | 3906.818 | 3924.852 | 3889.8 | 1971.443 | 3951.813 |
| 68 | 3964.860 | 3982.894 | 3947.8 | 2000.464 | 4009.855 |
| 69 | 4022.902 | 4040.936 | 4005.9 | 2029.485 | 4067.897 |
| 70 | 4080.944 | 4098.978 | 4063.9 | 2058.506 | 4125.938 |
| 71 | 4138.985 | 4157.020 | 4122.0 | 2087.527 | 4183.980 |
| 72 | 4197.027 | 4215.062 | 4180.0 | 2116.548 | 4242.022 |
| 73 | 4255.069 | 4273.104 | 4238.0 | 2145.569 | 4300.064 |
| 74 | 4313.111 | 4331.145 | 4296.1 | 2174.590 | 4358.106 |
| 75 | 4371.153 | 4389.187 | 4354.1 | 2203.611 | 4416.148 |
| 76 | 4429.195 | 4447.229 | 4412.2 | 2232.632 | 4474.190 |
| 77 | 4487.237 | 4505.271 | 4470.2 | 2261.653 | 4532.231 |
| 78 | 4545.279 | 4563.313 | 4528.3 | 2290.674 | 4590.273 |
| 79 | 4603.321 | 4621.355 | 4586.3 | 2319.695 | 4648.315 |

표 B-1 PPG 정확 질량 (계속)

| n | 정확 질량(M) | (M + NH ₄) ⁺ | MS/MS 단편 | (M + 2NH ₄) ²⁺ | (M + COOH) ⁻ |
|----|----------|-------------------------------------|----------|---------------------------------------|-------------------------|
| 80 | 4661.363 | 4679.397 | 4644.3 | 2348.716 | 4706.357 |
| 81 | 4719.404 | 4737.439 | 4702.4 | 2377.737 | 4764.399 |
| 82 | 4777.446 | 4795.481 | 4760.4 | 2406.758 | 4822.441 |

문의하기

고객 교육

- 북아메리카: NA.CustomerTraining@sciex.com
- 유럽: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- 유럽 및 북미 이외 지역의 연락처 정보는 sciex.com/education

온라인 학습 센터

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

SCIEX 지원 부서

SCIEX 및 전 세계 대리점은 충분히 교육을 받은 서비스 및 기술 전문가를 보유하고 있습니다. 이들은 시스템에 대한 질문 또는 발생할 수 있는 모든 기술적 문제에 대한 도움을 제공합니다. 자세한 내용은 SCIEX 웹 사이트(sciex.com)를 참조하거나, 다음 방법 중 하나를 사용하여 당사로 문의하십시오.

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

사이버 보안

SCIEX 제품의 사이버 보안에 대한 최신 지침은 sciex.com/productsecurity에서 확인할 수 있습니다.

문서

이 문서가 이전 버전의 모든 문서를 대체합니다.

이 문서를 컴퓨터로 보려면 Adobe Acrobat Reader가 필요합니다. 최신 버전을 다운로드하려면 <http://get.adobe.com/reader>로 이동하십시오.

소프트웨어 제품 문서를 찾으려면 릴리스 노트 또는 소프트웨어와 함께 제공되는 소프트웨어 설치 안내서를 참조하십시오.

하드웨어 제품 문서를 찾으려면 시스템 또는 구성품과 함께 제공되는 *Customer Reference* DVD를 참조하십시오.

참고: 이 문서의 무료 인쇄 버전을 요청하려면 sciex.com/contact-us에 문의하십시오.
