

Analyst MD 소프트웨어

정보 종속 획득 자습서



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.

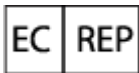
Rx only.

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 정보 종속 획득 자습서	4
IDA 방법 정보	4
관련 문서	4
선행 조건	5
2 IDA 방법 생성	6
IDA Method Wizard에서 삼중 사중극자 시스템을 사용하는 IDA 방법 생성	6
IDA Method Wizard에서 LIT 시스템을 사용하는 IDA 방법 생성	7
Acquisition Method Editor에서 IDA 방법 생성	9
<i>Scheduled</i> MRM 알고리즘 스캔을 사용하는 IDA 방법 생성	11
두 개의 <i>Scheduled</i> MRM 알고리즘 스캔을 사용하는 IDA 방법 생성	11
극성 전환 정보	12
자리 표시자 정보	14
IDA에서 <i>Scheduled</i> MRM Pro 알고리즘이 미치는 영향	15
IDA <i>Scheduled</i> MRM Pro 알고리즘 획득 방법 생성	15
예약된 이온화를 사용하는 IDA 방법 생성	15
3 IDA 데이터 보기	17
IDA Explorer 옵션 설정	17
IDA 데이터 보기	18
IDA 탐색기가 활성화되지 않는 경우 IDA 데이터 보기	19
동적 배경 감산 알고리즘 정보	21
동적 채우기 시간 정보	22
아이콘	22
문의하기	23
고객 교육	23
온라인 학습 센터	23
SCIEX 지원 부서	23
사이버 보안	23
문서	23

IDA 방법 정보

IDA 방법은 동일 기간의 이전 실험에서 획득한 결과를 토대로 실험을 자동으로 실행합니다. 데이터를 획득하는 동안 데이터 획득 설정을 최적화하기 위해 IDA 기준을 사용하며, 이는 단일 주입에서 샘플 획득 시간을 줄입니다. IDA는 획득한 샘플의 양과 귀중한 작업 시간 모두를 절약하게 해줍니다.

단일 기간에서 최대 두 개의 조사 스캔 및 여덟 개의 종속 스캔으로 IDA 방법을 생성합니다. 조사 스캔은 IDA에서 추가 실험을 트리거하는 데 사용됩니다. 다음 스캔 중 하나를 조사 스캔으로 사용할 수 있습니다.

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

다음은 종속 스캔입니다.

- EPI
- MS/MS/MS(MS3)(이차 종속 스캔)

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

IDA는 다음과 같은 사용자 정의 기준을 토대로 실험을 수정하고 결과를 향상시킵니다.

- 이온 강도 및 대전 상태
- 포함 및 제외 목록
- 동위 원소 패턴
- 동적 제외

주기 중에 극성이 전환되지 않는 경우에는 종속 실험 수가 IDA Criteria 탭의 최대 강도 이온 수와 일치해야 합니다.

관련 문서

- 질량 분석계에 대한 시스템 사용자 안내서

- 고급 사용자 안내서
- *Scheduled MRM* 알고리즘 자습서
- Analyst MD 소프트웨어 도움말

선행 조건

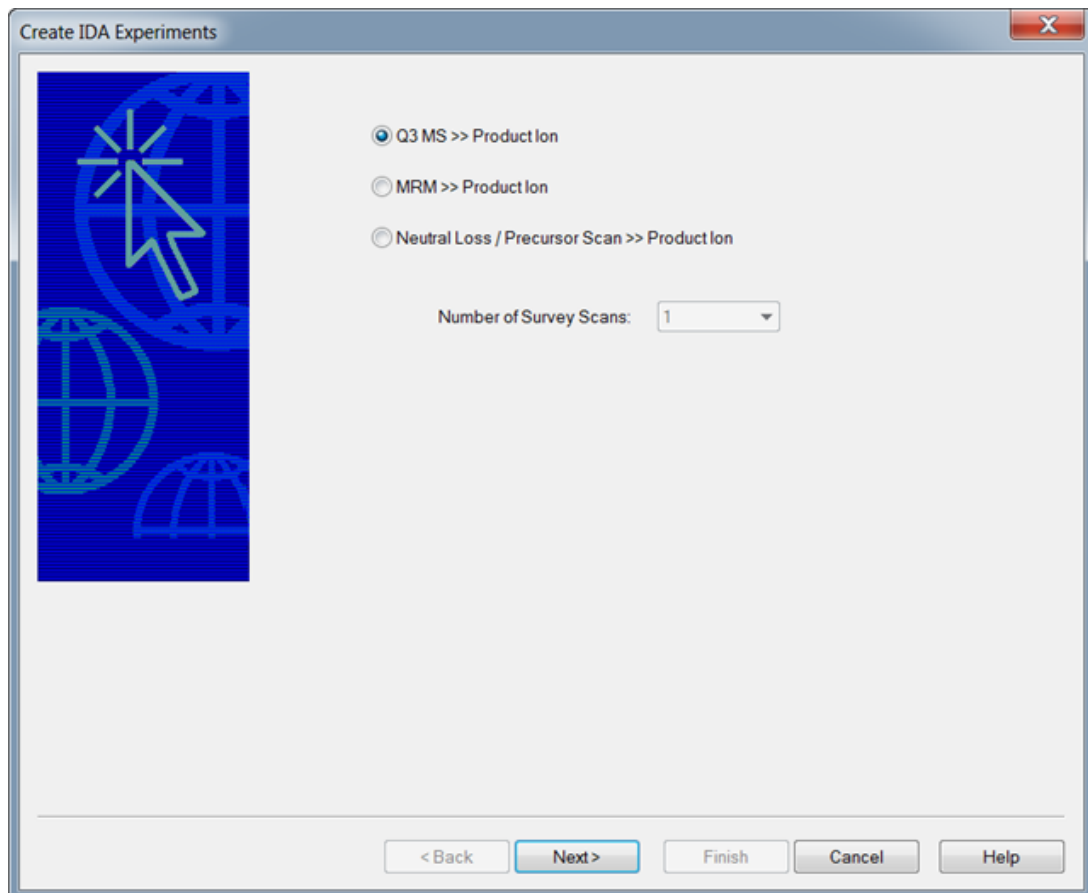
선행 조건
다음은 할 수 있습니다. <ul style="list-style-type: none">• 획득 방법 생성• 배치 제출

IDA Method Wizard를 사용하여 LIT(선형 이온 트랩) 및 삼중 사중극자 IDA 획득 방법을 생성할 수 있습니다. 두 개의 조사 스캔을 조합하여 사용할 수 있습니다. 조사 스캔으로 EPI를 선택하면 IDA-Second Level Criteria 탭을 사용할 수 있습니다. 이러한 조사 실험을 사용하는 경우에는 추가 IDA 기준 수준을 설정할 수 없습니다.

IDA Method Wizard에서 삼중 사중극자 시스템을 사용하는 IDA 방법 생성

1. 탐색 모음에서 **Acquire** 아래의 **IDA Method Wizard**를 두 번 클릭합니다.

그림 2-1 Create IDA Experiments 페이지



2. **Neutral Loss / Precursor Scan >> Product Ion** 스캔 유형을 선택합니다.
3. **Number of Survey Scans** 목록에서 수행할 스캔 수를 선택한 후 **Next**를 클릭합니다. Survey Scan 페이지가 나타납니다. 이 페이지의 화면 표시는 선택한 스캔에 따라 다릅니다.

4. 매개 변수를 설정한 후 **Next**를 클릭합니다.

Dependent Scan – Product Ion Scan 페이지가 표시됩니다.

5. 모니터링할 피크 수를 선택하고, 스캔 매개 변수를 설정한 다음 **Next**를 클릭합니다.
Dependent Scan – IDA Criteria 페이지가 열립니다.

참고: IDA 범위가 조사 스캔의 범위와 동일하거나 해당 범위 내에 있는지 확인하십시오.

6. 이온 질량 범위를 지정하려면 이온 질량 범위의 하한 및 상한을 입력합니다. 종속 스캔은 이 범위 내 질량에 대해 실행됩니다.
7. **Which exceed** 필드에 종속 스캔을 트리거하는 데 필요한 초당 최소 개수를 입력합니다.
8. **Exclude Former Target Ions** 그룹에서 다음 중 하나를 수행합니다.
- IDA 실험에서 발생하는 모든 이전 표적 이온을 무시하려면 **Always**를 선택합니다.
 - 지정된 발생 횟수 이후의 모든 이전 표적 이온을 무시하려면 **Always**를 선택하고 **After**를 선택한 다음 발생 횟수를 입력합니다.
 - 지정된 기간 동안의 이전 표적 이온을 무시하려면 **For**를 선택한 다음 이온을 무시할 기간(초)을 입력합니다.
 - 일정 발생 횟수 이후 일정 기간 동안 이전 표적 이온을 무시하려면 **For**를 선택한 다음 이온을 무시할 기간(초)을 입력합니다. **After**를 선택한 다음 발생 횟수를 입력합니다.

팁! IDA 실험에서 모든 이전 표적 이온을 인식하려면 마법사를 완료하고 Acquisition Method Editor의 IDA - First Level Criteria 탭에서 **Exclude former target ions** 아래의 **Never**를 클릭합니다.

9. 지정된 발생 횟수 이후의 이전 표적 이온을 제외하려면 **Exclude Former Target Ions** 그룹에서 **After X occurrences**를 선택한 다음 향후 스캔에서 제외되기 전 이전 표적 이온을 볼 수 있는 횟수를 입력합니다.
10. **Finish**를 클릭합니다.
Acquisition Method Editor에서 IDA 실험이 자동으로 나타납니다. 이제 LC 방법 및 기타 IDA 기준(예: 포함 및 제외 목록)을 편집할 수 있습니다.
11. MS 방법을 검토하고, 필요할 경우 매개 변수와 기타 IDA 기준을 편집합니다.
12. 장치가 아직 포함되지 않은 경우 장치를 추가하고 모든 관련 매개 변수를 업데이트합니다.

팁! 모든 이온 소스 가스 매개 변수를 업데이트할 수 있습니다. MS 탭에서 **Edit Parameters**를 클릭합니다. Source/Gas 탭에서, 해당 값을 입력한 다음 하단에 있는 **Source/Gas** 확인란을 선택하여 매개 변수를 모든 실험에 적용합니다.

13. 획득 방법 파일을 저장합니다.

IDA Method Wizard에서 LIT 시스템을 사용하는 IDA 방법 생성

1. 탐색 모음에서 **Acquire** 아래의 **DA Method Wizard**를 두 번 클릭합니다.

Create IDA Experiments 페이지가 표시됩니다.

2. **Type of IDA Experiment** 그룹에서 조사 스캔 유형을 선택한 후 **Next**를 클릭합니다.
3. **Neutral Loss / Precursor Scan >> Enhanced Product** 스캔 유형을 선택한 경우 **Number of Survey Scans** 목록에서 수행할 스캔 횟수를 선택합니다.
4. 종속 스캔을 수행하기 전에 IDA 실험에서 사용자가 지정한 전하 상태 또는 동위 원소 패턴과 일치하는 데이터가 획득되었는지 확인하려면 **Use Enhanced Resolution Scan to confirm Charge State and Isotope Pattern** 확인란을 선택합니다.
5. 실험에 MS3 스캔을 추가하려면 **Enable MS3 Experiment generation** 확인란을 선택합니다.
6. 소프트웨어에서 LIT에 적절한 채우기 시간이 동적으로 계산되도록 하려면 **Dynamic Fill Time** 확인란이 선택되어 있는지 확인합니다.
7. **Next**를 클릭합니다.
Survey Scan 페이지가 열립니다. 이 대화 상자는 선택한 조사 스캔에 따라 다르게 나타납니다.
8. 선택한 스캔 유형에 맞게 매개 변수를 편집한 후 **Next**를 클릭합니다.
Dependent Scan – Enhanced Product Ion (EPI) 페이지가 열립니다.
9. 모니터링할 피크 수를 선택하고, 스캔 매개 변수를 설정한 다음 **Next**를 클릭합니다.
Dependent Scan – IDA Criteria 페이지가 열립니다.
10. 이온 질량 범위를 지정하려면 이온 질량 범위의 하한 및 상한을 입력합니다. 종속 스캔은 이 범위 내 질량에 대해 실행됩니다.
11. **Which exceed** 필드에 종속 스캔을 트리거하는 데 필요한 초당 최소 개수를 입력합니다.
12. IDA 실험의 전하 상태 범위를 지정하려면 **With charge state X to Y charges** 확인란을 선택한 다음 전하 상태를 클릭합니다.

팁! 대전 상태는 동위 원소 비율의 적절한 측정에 따라 다릅니다. 따라서 ER 스캔을 사용하여 대전 상태를 확인해야 합니다.

13. 미확인 전하 상태의 피크를 포함하려면 **Include unknowns** 확인란을 선택합니다.
14. **Exclude Former Target Ions** 그룹에서 다음 중 하나를 수행합니다.
 - IDA 실험에서 발생하는 모든 이전 표적 이온을 무시하려면 **Always**를 선택합니다.
 - IDA 실험에서 발생하는 모든 이전 표적 이온을 인식하려면 **Never**를 선택합니다.
 - 지정된 기간 동안의 이전 표적 이온을 무시하려면 **For**를 선택한 다음 이온을 무시할 기간(초)을 입력합니다.
 - 일정 발생 횟수 이후 일정 기간 동안 이전 표적 이온을 무시하려면 **For**를 선택한 다음 이온을 무시할 기간(초)을 입력합니다. **After**를 선택한 다음 발생 횟수를 입력합니다.
 - 지정된 발생 횟수 이후의 모든 이전 표적 이온을 무시하려면 **Always**를 선택하고 **After**를 선택한 다음 발생 횟수를 입력합니다.
15. 지정된 발생 횟수 이후의 이전 표적 이온을 제외하려면 **Exclude Former Target Ions** 그룹에서 **After X occurrences**를 선택한 다음 향후 스캔에서 제외되기 전 이전 표적 이온을 볼 수 있는 횟수를 입력합니다.

16. **Finish**를 클릭합니다.
Acquisition Method Editor에서 IDA 실험이 자동으로 나타납니다. 이제 LC 방법 및 기타 IDA 기준(예: 포함 및 제외 목록)을 편집할 수 있습니다.
17. MS 방법을 검토하고, 필요할 경우 매개 변수와 기타 IDA 기준을 편집합니다.
18. 장치가 아직 포함되지 않은 경우 장치를 추가하고 모든 관련 매개 변수를 업데이트합니다.

팁! 모든 이온 소스 가스 매개 변수를 업데이트할 수 있습니다. MS 탭에서 **Edit Parameters**를 클릭합니다. Source/Gas 탭에서, 해당 값을 입력한 다음 하단에 있는 **Source/Gas** 확인란을 선택하여 매개 변수를 모든 실험에 적용합니다.

19. 획득 방법 파일을 저장합니다.

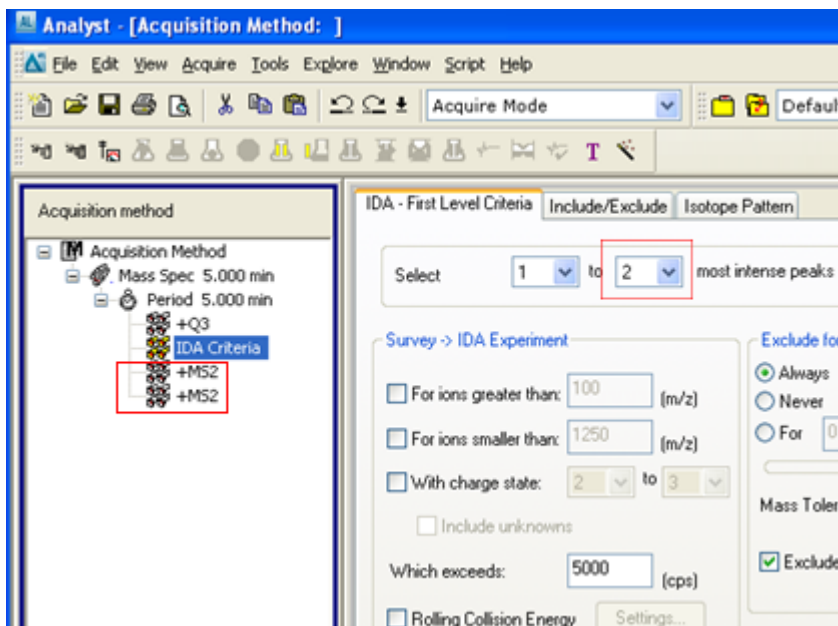
Acquisition Method Editor에서 IDA 방법 생성

참고: 실험은 반복 실행 순서대로 입력해야 합니다. 기존 실험 사이에 실험을 삽입할 수는 없습니다.

팁! 극성 전환의 필요성을 줄이고 주기 시간을 최소화하려면 일정 기간 내의 모든 양성 종속 실험과 모든 음성 종속 실험을 함께 그룹화하십시오.

1. 탐색 모음에서 **Acquire** 아래의 **Build Acquisition Method**를 두 번 클릭합니다.
2. 한 개 또는 두 개의 조사 스캔으로 새로운 획득 방법을 생성합니다.
3. 조사 스캔을 선택한 다음 적절한 매개 변수를 선택합니다.
4. 고급 분해능 스캔을 사용하여 QTRAP 시스템의 전하 상태 또는 동위 원소 패턴 선택을 확인하려면 다음을 수행합니다.
 - **Period** 아이콘에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Add experiment**를 클릭합니다.
 - MS 탭의 **Scan type** 목록에서 **Enhanced Resolution (ER)**을 선택합니다.
 - 고급 분해능 스캔에 적절한 세부 정보를 입력합니다.
5. **Period** 아이콘에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Add IDA Criteria Level**을 클릭합니다.
6. **Select X to Y most intense peaks** 필드에서 IDA 실험을 통해 모니터링할 최대 강도 이온 피크의 범위를 설정합니다. 단일 조사 IDA의 경우, 모니터링된 총 피크 수는 지정된 종속 실험 수와 같아야 합니다. 조사 스캔에 극성 전환이 있는 이중 조사 IDA의 경우, 종속 실험 수는 모니터링된 총 피크 수의 두 배와 같아야 하며, 이 중 절반은 하나의 극성에, 나머지 절반은 반대 극성에 있어야 합니다.

그림 2-2 두 종속 스캔 유형 및 두 최대 강도 이온을 포함한 IDA 방법의 예



7. ER(고급 분해능) 스캔을 사용하는 경우에는 모니터링할 각 피크에 대한 자리 표시자를 추가합니다.
ER 자리 표시자의 경우 중앙(amu 0) 범위에 1을 입력합니다. 4개의 피크를 모니터링할 경우 중앙 옆에는 번호 1, 2, 3, 4가 붙은 4개의 행이 포함됩니다. 자세한 정보는 [자리 표시자 정보](#) 섹션을 참조하십시오.
8. ER 스캔을 사용하여 전하 상태, 동위 원소 패턴 선택 또는 재획득 질량 정확도를 확인할 경우 IDA - First Level Criteria 탭에서 **Use Enhanced Resolution Scan to confirm Charge State OR Isotope Pattern Selection** 확인란을 선택합니다.
9. IDA - First Level Criteria 탭의 나머지 매개 변수를 필요한 값으로 설정합니다.
10. 필요한 경우 Include/Exclude 탭에서 해당 목록을 수정하여 **Include List** 또는 **Exclude List** 확인란을 선택한 다음 대상 이온 또는 제외 이온을 지정합니다.
11. 필요한 경우 Include/Exclude 탭에서 **Match Isotopes** 확인란을 선택한 다음 일치시킬 동위 원소 분포 패턴을 지정합니다.
12. 첫 번째 종속 실험(첫 번째 수준 IDA 기준으로 모니터링되는 각 피크마다 하나씩)을 추가하려면 다음을 수행합니다.
 - a. **Period** 아이콘에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Add experiment**를 클릭합니다.
실험은 IDA 기준 아래에 추가됩니다.
 - b. 종속 스캔에 대한 해당 세부 정보를 입력합니다.

팁! 종속 스캔을 두 개 이상 사용할 경우 EPI 스캔을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 올바른 수의 종속 스캔이 포함될 때까지 **Copy this experiment**를 선택합니다. 실험을 추가하는 대신 복사할 경우 동일한 모든 설정이 새 종속 스캔에 복사됩니다.

13. 방법을 엽니다.

14. 장치를 추가하고 모든 관련 매개 변수를 업데이트합니다.
15. 획득 방법 파일을 저장합니다.

Scheduled MRM 알고리즘 스캔을 사용하는 IDA 방법 생성

이 예에서는 조사 스캔 유형에서 단일 최대 강도 이온을 검색할 IDA 방법을 생성합니다. 이 획득 방법에는 한 개의 조사 스캔과 한 개의 종속 스캔이 포함됩니다.

여러 개의 종속 스캔이 포함된 방법을 생성하려면 강도가 강한 피크의 수가 IDA Criteria 탭(단일 조사 IDA에만 해당)의 종속 스캔 수와 일치해야 합니다. 예를 들어 방법에 세 개의 종속 스캔을 포함할 경우에는 1~3개의 최대 강도 피크를 선택하십시오.

1. **Scheduled MRM** 실험을 생성합니다. **Scheduled MRM** 알고리즘 자습서를 참조하십시오.

참고: **Scheduled MRM** 실험에서 **Target Cycle Time** 옵션이 사용을 위해 선택된 경우, **Scheduled MRM** 실험에만 대상 주기 시간이 적용되며, IDA 획득 방법 내의 모든 실험에는 적용되지 않습니다.

팁! ER 스캔 유형을 추가하려면 IDA 기준을 추가하기 전에 추가합니다.

2. **Period** 아이콘에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Add IDA Criteria Level**을 클릭합니다.
3. **IDA Criteria** 매개 변수를 지정합니다.
4. **Period** 아이콘에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Add experiment**를 클릭합니다.
5. MS 탭의 **Scan type** 목록에서 종속 스캔 유형을 선택합니다. 이 예에서는 **Product Ion (MS2)** 또는 **Enhanced Product Ion (EPI)**을 선택합니다.

참고: 모든 종속 스캔 유형의 경우 **Product Of**는 30Da이 되어야 합니다.

6. 실험 매개 변수를 지정합니다.
7. 획득이 실행되는 프로젝트에 획득 방법을 저장합니다.

두 개의 Scheduled MRM 알고리즘 스캔을 사용하는 IDA 방법 생성

이 예제를 통해, 조합된 두 개의 조사 스캔 실험에서 두 개의 최대 강도 이온을 검색할 IDA 방법을 생성합니다. 예제 획득 방법에는 두 개의 조사 스캔 실험과 네 개의 종속 스캔 실험이 포함되어 있습니다.

팁! 조사 스캔 유형이 실행되는 동안 극성이 전환되는 경우 [극성 전환 정보](#) 섹션을 참조하십시오.

참고: 이중 조사 IDA 획득 방법의 경우, 조사 스캔에 두 개의 MRM 실험 또는 두 개의 EMS(고급 MS) 실험을 사용할 수도 있습니다.

1. *Scheduled MRM* 실험을 생성합니다. *Scheduled MRM* 알고리즘 획득 방법 생성 (*Scheduled MRM* 알고리즘 자습서)의 1~7단계를 참조하십시오.
2. **Period** 아이콘에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Add experiment**를 클릭합니다. 두 번째 MRM 스캔이 생성됩니다. 이 스캔은 반대 극성으로 설정합니다.
3. **Scheduled MRM** 그룹에서 **Enabled** 확인란을 선택하여 또다른 *Scheduled MRM* 실험을 생성합니다. *Scheduled MRM* 알고리즘 자습서를 참조하십시오.
4. **Period** 아이콘에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Add IDA Criteria Level**을 클릭합니다.
5. **IDA Criteria** 매개 변수를 지정합니다.
6. **Period** 아이콘에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Add experiment**를 클릭합니다.
7. MS 탭의 **Scan type** 목록에서 종속 스캔 유형을 선택합니다. 이 예에서는 **Product Ion (MS2)** 또는 **Enhanced Product Ion (EPI)**을 선택합니다.

참고: 모든 종속 스캔 유형의 경우 **Product Of**는 30Da이 되어야 합니다.

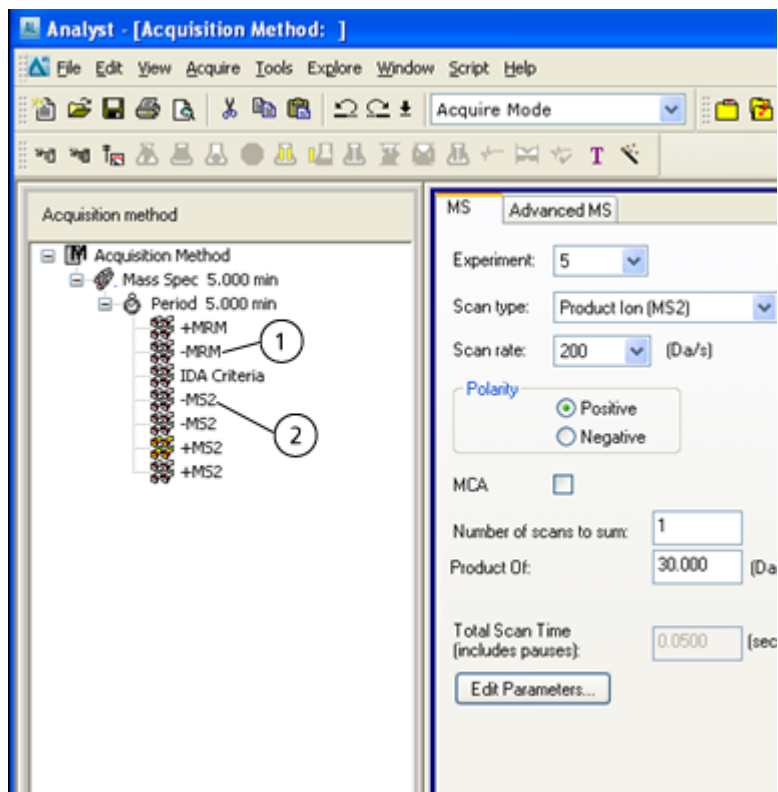
8. 실험 매개 변수를 지정합니다.
9. **MS2** 또는 **EPI** 실험을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Copy this experiment**를 클릭합니다.
10. 9단계를 두 번 반복합니다. 극성은 [극성 전환 정보](#) 섹션에 설명된 대로 설정해야 합니다.
11. 획득이 실행되는 프로젝트에 획득 방법을 저장합니다.

극성 전환 정보

조사 스캔이 각기 다른 극성에 있을 경우 획득 방법을 다음과 같이 설정하십시오.

1. 첫 번째 종속 스캔 유형의 극성이 마지막 조사 스캔 유형의 극성과 같은지 확인합니다.

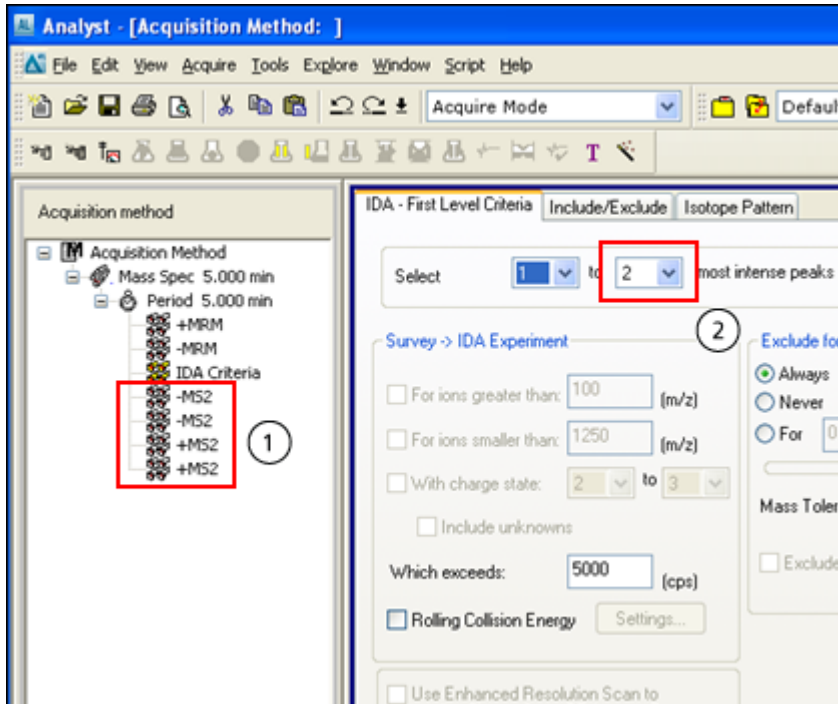
그림 2-3 극성 전환을 위한 스캔 유형 설정의 예



항목	설명
1	마지막 조사 스캔
2	첫 번째 종속 스캔

2. 종속 스캔 수가 최대 강도 이온 수의 두 배가 되는 획득 방법을 생성합니다. 예를 들어 최대 강도 이온 2개를 검색하려면 종속 스캔 유형을 4개 포함합니다.

그림 2-4 종속 스캔 유형 및 최대 강도 이온 수의 예



항목	설명
1	종속 스캔 유형(네 개)
2	최대 강도 이온(두 개)

참고: 선택한 후보 이온은 극성이 동일한 종속 실험에서만 트리거됩니다. 후보 이온이 지정되지 않은 종속 스캔은 이 주기에서 실행되지 않습니다. 종속 실험의 최대 절반이 어떠한 주기에서든 트리거됩니다.

3. 각 종속 스캔 실험에 대해, 극성이 이전 실험의 극성과 동일한 경우 정착 시간이 0으로 설정되어 있는지 확인합니다.

자리 표시자 정보

자리 표시자는 스캔에서 사용되는 포괄적인 숫자들이며 특정한 숫자로 대체됩니다. 본 소프트웨어는 자리 표시자 값을 IDA 선택 프로세스의 특정 값으로 대체합니다. 적절한 작업을 위해 자리 표시자는 IDA 방법에 매우 중요합니다.

일부 실험이 먼저 선택되면, 자리 표시자 값은 자동으로 추가됩니다.

- NL, Prec 및 EPI = 30
- MS/MS/MS
 - 첫 번째 전구체 = 30
 - 두 번째 전구체 = 10

ER 또한 자리 표시자를 사용합니다.

- IDA 방법에서 자리 표시자는 첫 번째 행에서 1로 시작하며, 최대 8개 행까지 각 행마다 연속해서 1씩 증가합니다.
- IDA Method Wizard를 사용하는 경우 올바른 수의 ER 자리 표시자가 자동으로 추가됩니다.

IDA에서 **Scheduled MRM Pro** 알고리즘이 미치는 영향

Scheduled MRM Pro 알고리즘을 사용하여 IDA(정보 종속 획득) 조사 스캔을 수행하는 경우에는 한 그룹 내 모든 MRM 전이의 강도가 트리거 임계값을 초과할 때만 IDA 방법의 종속 스캔이 트리거됩니다. 따라서 종속 스캔이 잘못 트리거되지 않으므로 주기 시간이 개선됩니다.

IDA **Scheduled MRM Pro** 알고리즘 획득 방법 생성

1. **Scheduled MRM Pro** 알고리즘 방법을 생성합니다. **Scheduled MRM** 자습서를 참조하십시오.
2. 필요한 경우 해당 기간의 IDA 기준 수준을 추가하기 전에 ER 스캔 유형의 실험을 추가합니다.
3. **Period** 아이콘에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Add IDA Criteria Level**을 클릭합니다.
4. IDA Criteria 매개 변수를 지정합니다. 자세한 정보는 [IDA 방법 생성](#) 섹션을 참조하십시오.
5. **Period** 아이콘에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Add experiment**를 클릭합니다.
6. MS 탭의 **Scan type** 목록에서 종속 스캔 유형을 선택합니다. 이 예에서는 **Product Ion (MS2)** 또는 **Enhanced Product Ion (EPI)**을 선택합니다.

참고: 모든 종속 스캔 유형의 경우 **Product Of**는 30Da이 되어야 합니다.

7. 실험 매개 변수를 지정합니다.
8. 획득이 실행되는 프로젝트에 획득 방법을 저장합니다.

참고: IDA **Scheduled MRM Pro** 알고리즘 방법을 사용하여 데이터를 획득하는 동안에는 IDA 임계값 대신 이 방법의 각 MRM 전이에 대한 트리거 임계값이 사용됩니다.

예약된 이온화를 사용하는 IDA 방법 생성

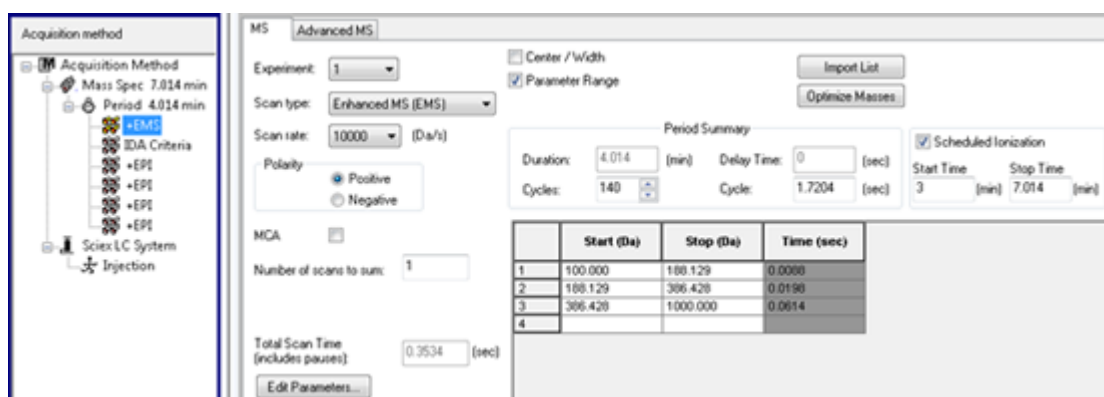
1. Method Editor에서 수동으로 IDA 방법을 생성하거나 **IDA Method Wizard**를 사용하여 자동으로 IDA 방법을 생성합니다.
2. 해당 방법의 실험을 선택한 다음 **Scheduled Ionization** 확인란을 선택합니다.
3. **Scheduled Ionization** 그룹에서 **Start Time** 및 **Stop Time**을 적절하게 입력합니다. 관심 피크가 **Start Time**과 **Stop Time** 사이에서 용리되는지 확인합니다. 또한 획득 방법의 LC

부분과 **Synchronization Mode**가 **Scheduled Ionization**을 사용하지 않을 때와 동일하게 설정되어 있는지 확인합니다.

참고: **Scheduled ionization**은 단일 기간 획득 방법에만 사용할 수 있습니다.

다음 그림에서는 **LC Synchronization Mode**가 사용되고 LC 방법의 길이가 10분인 경우를 보여줍니다. 모든 관심 피크는 3분 후, 7분 전에 용리됩니다. **Start Time** 전과 **Stop Time** 후에는 **IonSpray** 전압 0이 적용됩니다. 이 방법에 설정된 **IonSpray** 전압은 **Start Time**과 **Stop Time** 사이에만 적용됩니다. **Scheduled Ionization** 기능을 사용하면 기기 오염의 위험을 낮추고 그에 따라 질량 분석계 중단 시간을 줄일 수 있습니다. **Scheduled Ionization**에 대한 자세한 정보는 고급 사용자 안내서를 참조하십시오.

그림 2-5 예약된 이온화



4. 획득 방법을 저장합니다.

IDA 방법을 사용하여 데이터를 획득하는 경우 획득이 완료될 때까지는 IDA 뷰어에서 데이터가 열리지 않습니다. 하지만 Explore 창에서는 획득 중에도 데이터가 열립니다.

IDA 데이터를 보다 쉽게 보려면 IDA Explorer를 기본 뷰어로 설정하십시오. IDA 데이터를 표시하는 데 사용될 IDA Explorer를 선택하려면 Appearance Options 대화 상자에 있는 IDA Explorer 탭을 사용합니다. 또한 Mass-List 목록 보기 창에 표시할 열을 선택할 수도 있습니다. IDA Explorer는 IDA 샘플을 표시하도록 사전 설정되어 있습니다.

IDA Explorer 옵션 설정

1. **Tools > Settings > Appearance Options.**를 클릭합니다.
Appearance Options 대화 상자가 열립니다.
2. IDA Explorer 탭을 엽니다.
3. **Use IDA Explorer to Display IDA Samples** 확인란을 선택합니다.
4. **Column Options** 섹션에서 필요에 따라 다음 확인란을 선택합니다.

표 3-1 Column Options

필드	설명
Intensity	(강도) 특정 m/z 비율의 강도를 표시합니다.
Molecular Weight (MW)	(분자량(MW)) 특정 m/z 비율에 대해 계산된 분자량을 표시합니다.
Scan	(스캔) 특정 m/z 비율에 사용되는 스캔 유형을 표시합니다.
Collision Energy (CE)	(충돌 에너지(CE)) 특정 m/z 비율의 충돌 에너지를 표시합니다.
Charge (Z)	(전하(Z)) 특정 이온의 전하를 표시합니다.

5. LIT 시스템의 경우 **LIT Column Options** 섹션에서 필요에 따라 다음 확인란을 선택합니다.

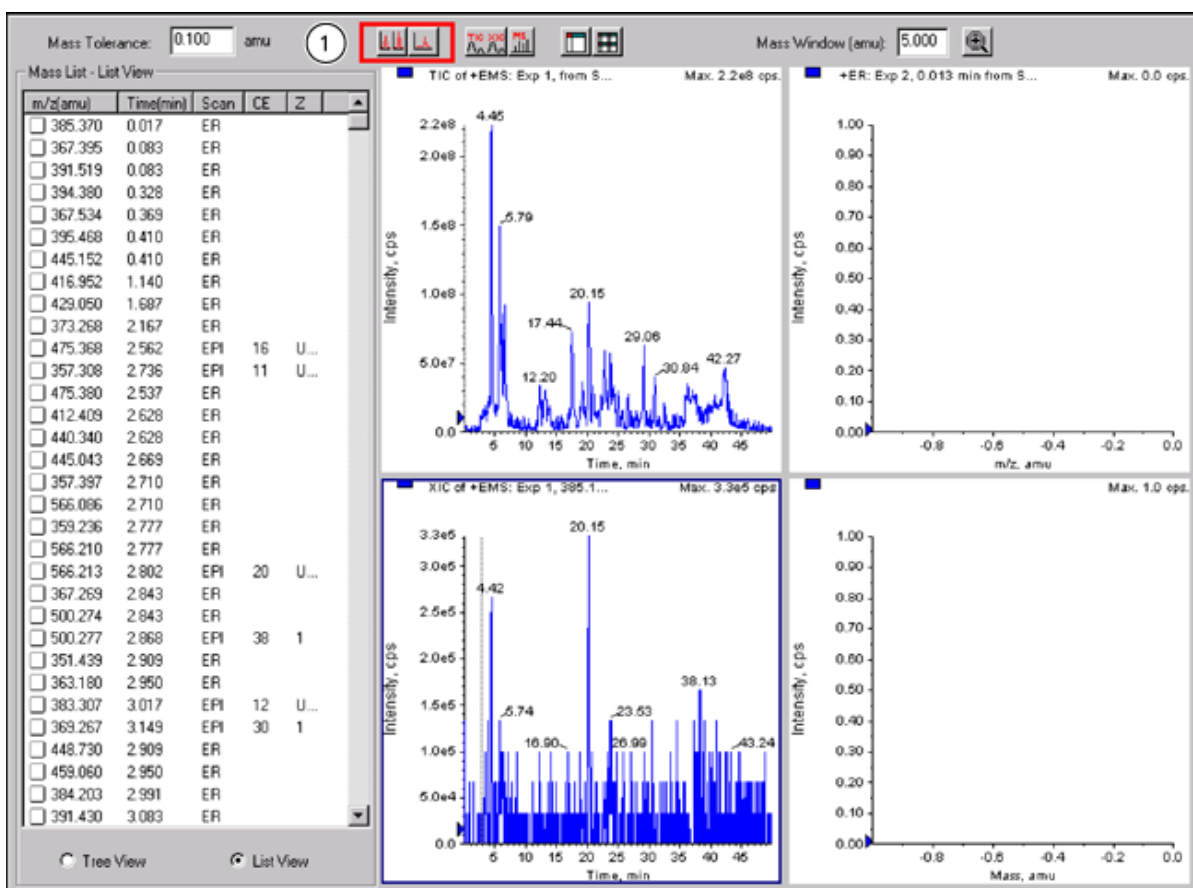
표 3-2 LIT Column Options

필드	설명
Excitation Energy (AF2)	(여기 에너지(AF2)) MS/MS/MS 실험에서 두 번째 전구체 이온의 여기 에너지를 표시합니다.
MS3 2nd Precursor (2nd Pre)	(MS3 두 번째 전구체(2번째 전구체)) MS/MS/MS 실험의 두 번째 전구체 이온을 표시합니다.
DFT (Dynamic Fill Time)	(DFT(동적 채우기 시간)) LIT를 채우는 데 걸리는 시간을 표시합니다.

IDA 데이터 보기

1. Analyst MD 소프트웨어에서 Example 프로젝트가 선택되어 있는지 확인합니다.
2. 탐색 모음에서 **Explore** 아래의 **Open Data File**을 두 번 클릭합니다.
Select Sample 대화 상자가 열립니다.
3. **Data Files** 필드에서 **LIT**를 두 번 클릭한 다음 **IDA BSA Digest.wiff**를 클릭합니다.
4. **Samples** 목록에서 샘플을 클릭한 다음 **OK**를 클릭합니다.
IDA Explorer가 열립니다. 창의 왼쪽 부분에서 종속 스캔에 전송된 질량 목록이 표시됩니다. 보기를 전환하려면 Mass List 창 하단에서 **Tree View** 또는 **List View**를 선택합니다. 창 오른쪽 부분에는 IDA 데이터에 대한 그래픽 정보가 포함되어 있습니다.

그림 3-1 단일 그래프 및 다중 그래프 표시 버튼



5. 그래프 위에 있는 두 개의 버튼(항목 1)을 사용하여 단일 그래프와 다중 그래프 사이를 변경합니다. 활성 그래프만 보려면, 한 개의 그래프를 표시하는 버튼을 클릭합니다. 다중 보기로 돌아가려면, 두 개의 그래프를 표시하는 버튼을 클릭합니다.

팁! IDA Viewer에서는 사용할 수 없는 **Explore** 모드 기능에 액세스하려면 그래프 위의 창에 있는 **Export Active Graph to Explorer** 및 **Export All Graphs to Explorer**를 클릭하여 현재 그래프를 Explore 창에 엽니다.

IDA 탐색기가 활성화되지 않는 경우 IDA 데이터 보기

IDA Explorer가 활성화되지 않는 경우, Explore 창에서 IDA 데이터를 엽니다. IDA 데이터를 보려면, X-축 하단에 있는 초록색 화살표를 두 번 클릭합니다.

그림 3-2 모든 스캔(원으로 표시된 IDA 데이터 화살표)을 포함하는 TIC

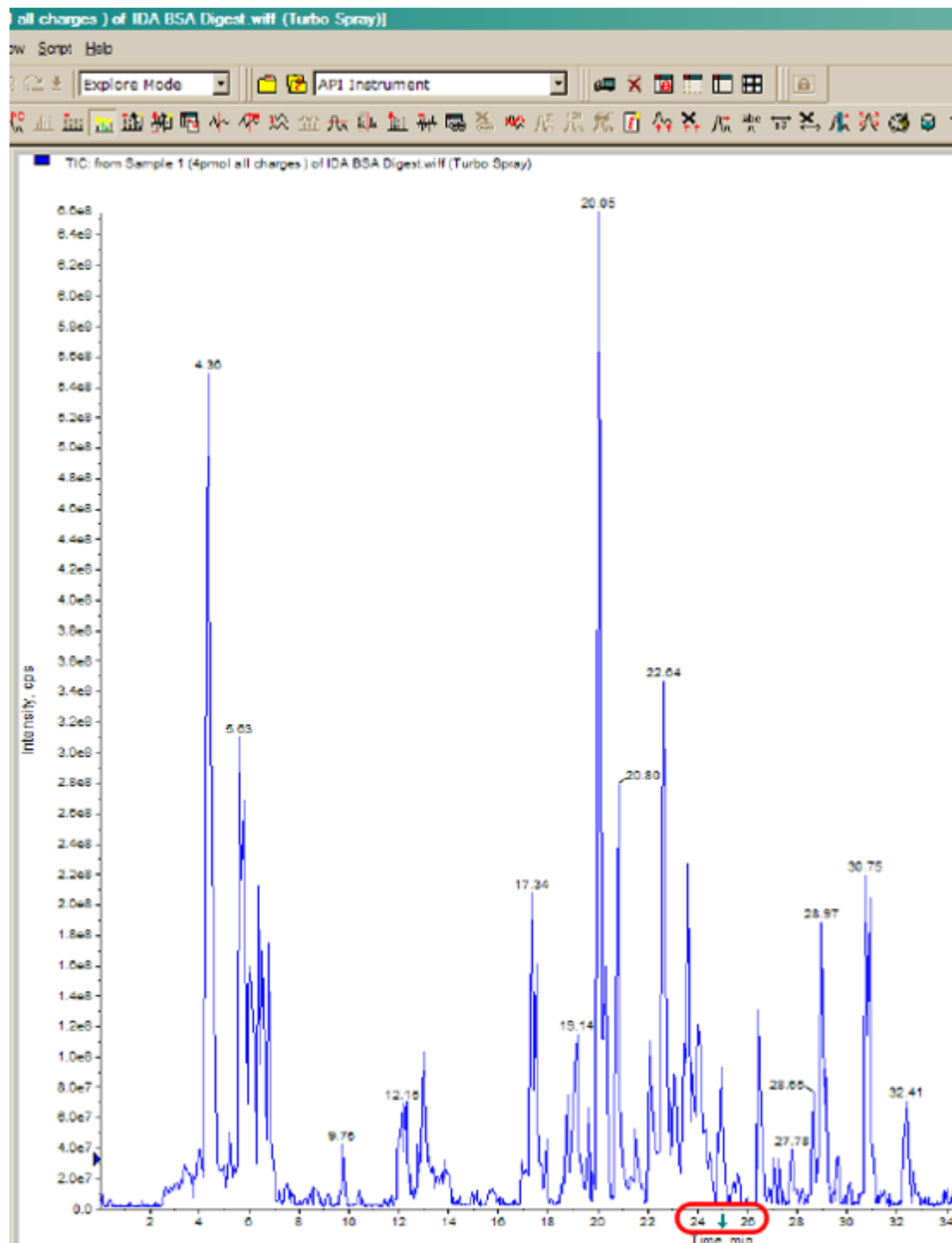
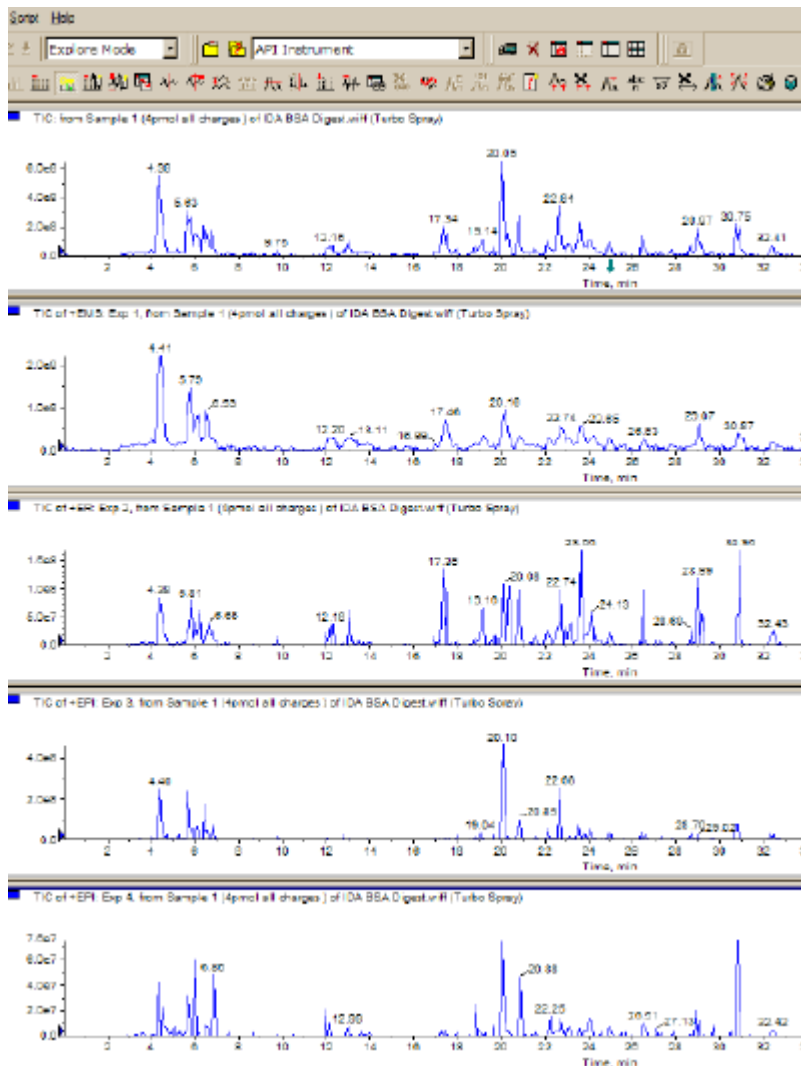


그림 3-3 개별 및 추가 TIC 스캔



동적 배경 감산 알고리즘 정보

DBS(동적 배경 감산) 알고리즘은 IDA 실험에서 전구체 이온 검출을 향상시킵니다. IDA – First Level Criteria 탭에서 **After Dynamic Background Subtraction of Survey scan** 확인란을 선택하여 DBS를 활성화하면 IDA는 조사 스펙트럼에서 전구체를 직접 선택하는 대신 배경 감산된 스펙트럼을 사용하여 MS/MS 분석의 관심 후보 이온을 선택합니다. 이 프로세스는 LC 분석 중에 수행되므로 신호 강도가 증가함에 따라 DBS로 종을 검출할 수 있습니다. 따라서 이 알고리즘은 LC 피크의 상승 부분에서 LC 피크 상단(최대 강도)까지 전구체 이온을 검출 및 분석하는 데 중점을 둡니다.

조사 스캔으로 **Scheduled MRM** 알고리즘을 사용하는 IDA 방법에 DBS를 사용할 경우 **Scheduled MRM** 실험에서 DBS 옵션을 사용할 수 없으나, 이차 전이 및 종속 스캔을 모두 트리거하는 데 이 옵션이 사용됩니다.

동적 채우기 시간 정보

DFT(동적 채우기 시간)는 LIT 기능에 대한 모든 스펙트럼에서 획득한 데이터를 최적화하기 위해 특수 설계된 기능입니다. DFT는 소스에서 나오는 이온 플렉스를 토대로 LIT를 채우는 데 사용하는 시간을 자동 조정합니다.









보다 강한 강도 이온의 경우, 채우기 시간은 LIT가 이온으로 과충전되지 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)

사용자가 Analyst MD 소프트웨어에서 **Tools > Settings > Method Options** 를 선택하여 DFT 설정을 조정할 수 있습니다.

아이콘

표 3-3 Acquisition Method Editor(획득 방법 편집기) 아이콘

아이콘	이름	설명
	Mass Spec	Acquisition Method Editor의 MS 탭을 표시하려면 클릭합니다.
	Period	마우스 오른쪽 버튼을 클릭하여 실험을 추가하거나 IDA Criteria Level을 추가하거나 기간을 삭제할 수 있습니다.
	Autosampler	Autosampler Properties 탭을 열려면 클릭합니다.
	Syringe Pump	Syringe Pump Properties 탭을 열려면 클릭합니다.
	Column Oven	Column Oven Properties 탭을 열려면 클릭합니다.
	Valve	Valve Properties 탭을 열려면 클릭합니다.
	DAD	DAD Method Editor를 열려면 클릭합니다.
	ADC	ADC Properties 탭을 열려면 클릭합니다.

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.
