

Analyst MD 소프트웨어

수동 조정 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.

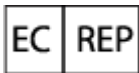
Rx only.

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

수동 조정 자습서	4
조정 정보	4
분해능 및 감도	4
분해능 수동 조정	5
LIT 기기의 분해능 조정	5
질량 교정	5
수동 질량 교정	6
기술 지원 부서	6
사중극자 모드에서 수동 조정 및 교정	6
획득 방법 선택	7
분해능 조정	7
사중극자 모드에서 질량 교정 수행	8
LIT 모드에서의 질량 분석계 수동 교정	11
LIT 모드에서 수동 교정을 위한 획득 방법 선택	11
LIT 모드에서 질량 교정 수행	11
Tune and Calibrate 모드 아이콘	14
 문의하기	15
고객 교육	15
온라인 학습 센터	15
SCIEX 지원 부서	15
사이버 보안	15
문서	15

수동 조정 자습서

이 자습서에서는 사중극자 모드 및 LIT(선형 이온 트랩) 모드에서 질량 분석계를 수동으로 조정 및 교정하는 방법을 알아봅니다.

선행 조건
사용자는 다음 작업을 수행할 수 있어야 합니다. <ul style="list-style-type: none">획득 방법 작성.배치 제출. 다음과 같은 주변 장치 및 장비가 제안됩니다. <ul style="list-style-type: none">질량 분석계와 주사기 펌프가 포함된 활성 하드웨어 프로파일PPG 또는 적절한 조정 용액

조정 정보

조정은 질량 분석계의 분해능 및 강도 성능을 극대화합니다. 질량 분석계 조정 시 다음과 같이 합니다.

- 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.

질량 분석계를 조정 및 교정할 때 구성 변경 사항은 API Instrument 폴더의 InstrumentData 파일에 저장됩니다. 현장 서비스 직원(FSE)이 설치 중 API Instrument 방법 폴더의 사전 설정 매개 변수를 최적화해야 합니다.

표 1 조정 수행 빈도

스캔 유형	교정		분해능 최적화	
	주기	수동/자동	주기	수동/자동
Q1 및 Q3	3~6개월	모두	3~6개월	모두
LIT	2주마다, 필요 시	모두	3~6개월	자동만

분해능 및 감도

이 소프트웨어는 사중극자 모드에 사전 정의된 단위, 고분해능, 저분해능 및 개방 분해능 값을 사용합니다. 사중극자 스캔의 경우, 분해능과 감도 간에 균형이 있습니다. 폭이 더 넓은 피크일

수록 피크의 강도는 더 높아집니다. 폭이 더 좁은 피크일수록 피크의 강도는 더 낮아집니다. LIT(선형 이온 트랩) 분해능 및 감도는 LIT의 기능 방식으로 인해 연결되지 않습니다.

저분해능 및 개방 분해능에 대한 다음 오프셋은 일반적이지만 표준 작업 절차에 따라 변경될 수 있습니다.

- 저분해능(단위 분해능 대비 전압 감소량): 0.03
- 개방 분해능(단위 분해능 대비 전압 감소량): 0.30

팁! 분해능 설정값은 Tuning Options 대화 상자의 Resolution 탭에서 확인 또는 편집할 수 있습니다. 이 대화 상자를 열려면 **Tune and Calibrate** 모드에서 **Tools > Settings > Tuning Options**를 클릭합니다.

분해능 수동 조정

본 소프트웨어에서는 사중극자에 대해 네 가지 분해능 매개 변수(단위 분해능, 고분해능, 저분해능 및 개방 분해능)를 사용합니다. 피크 폭은 단위의 경우 $0.7(\pm 0.1 \text{ Da FWHH(반값폭)})$ 및 고분해능의 경우 $0.5(\pm 0.1)$ 로 설정됩니다. 이는 분해능 오프셋을 조정하여 수행됩니다. 본 소프트웨어는 단위 분해능 매개 변수에서 저분해능 및 개방 분해능 매개 변수를 계산합니다. 분해능 오프셋 조정은 Tune Method Editor의 Resolution 탭에서 수행합니다.

사용된 스캔에 따라 LIT 스캔에 대한 Q1 분해능이 다양합니다. ER 및 EMS 스캔에 대해 Q1 분해능은 수정됩니다. ER 스캔에 대한 Q1 분해능은 개방으로 사전 설정되며, 이는 LIT에 대해 적절한 질량 폭을 허용합니다.

EPI, MS3 스캔의 경우, 선택한 분해능 매개 변수 중 어느 것에서도 Q1 분해능을 설정할 수 있습니다. 일반적으로는 단위 분해능으로 설정되지만, 보다 낮은 분해능으로 설정하면 충돌 셀에서 보다 큰 질량 범위를 허용하여 보다 많은 동위 원소를 표시하거나 저분해능에서 MRM 스캔을 실행할 때와 같은 방식으로 감도를 높일 수 있습니다.

LIT 스캔 모드인 경우, 분해능은 스캔 속도에 영향을 받습니다. 일반적으로 스캔 속도가 느릴수록 분해능은 더 높습니다.

LIT 기기의 분해능 조정

피크의 분해능은 해당 피크의 질량과 폭에 의해 결정됩니다. LIT 모드에서, 분해능은 이온이 LIT에서 질량 선택적으로 배출되는 속도에 따라 달라집니다. LIT 스캔 유형의 감도 및 분해능을 변경하려면 Instrument Optimization 기능을 사용합니다. 시스템 사용자 안내서 또는 *Analyst MD* 소프트웨어 도움말을 참조하십시오.

질량 교정

질량 교정은 올바른 질량-전하 값을 질량 피크에 할당하는 절차입니다. PPG(폴리프로필렌 글리콜)와 같은 교정 표준을 사용하여 질량 교정을 수행함으로써, 관찰한 피크에 대한 질량-전하 값이 이론 값에 얼마나 가까운지 파악하기 위해 해당 결과와 이전 교정을 비교할 수 있습니다. 그리고 나서 이전 교정을 업데이트하거나, 보다 일반적으로 이를 새로운 교정으로 대체합니다.

각 극성에 대해 Q1, Q3 및 모든 LIT 스캔을 교정할 때는 여러 질량을 선택합니다. 결과는 교정 테이블에 저장됩니다. 질량 교정이 수행되면 교정 테이블이 새로운 교정에서 얻은 새로운

DAC(디지털-아날로그 변환기) 값으로 업데이트됩니다. 교정 테이블에 있던 질량에 대한 DAC 값이 업데이트됩니다. 현재 교정에서 교정되지 않은 모든 질량 데이터는 보관되거나 사용되지 않습니다. 질량 교정이 바뀌면 사용하도록 선택된 모든 질량의 이전 교정 값이 모두 바뀝니다.

새로 획득한 스펙트럼을 사용하여 질량 교정을 수행하거나 보관된 데이터 파일에서 스펙트럼을 사용합니다.

질량 교정을 수행하는 동안 본 소프트웨어는 다음을 수행합니다.

1. 선택한 각 질량 검색 범위에서 최대 피크를 찾습니다.
2. 질량, 강도 및 피크 폭 값을 획득합니다.
3. 관측된 질량과 예상 질량을 비교하고, 변화가 있는 경우 해당 변화를 계산합니다.
4. 피크 폭과 대상 피크 폭을 비교합니다.
5. 강도와 이전 교정을 비교합니다.
6. 해당 결과가 그래프 및 텍스트 형식으로 표시됩니다.
7. <Drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Instrument Data 폴더에 있는 기기 데이터 파일에 교정 테이블을 저장합니다.

수동 질량 교정

Q1 및 Q3 사중극자 분해능을 수동으로 조정한 후, 교정을 확인해야 합니다. 분해능 최적화 중 매개 변수를 변경하면 이전 질량 교정에 영향을 줄 수 있습니다.

교정 보고서는 세 개의 그래프(질량 변화, 피크 폭 및 강도 차이)를 보여줍니다.

- 질량 변화 그래프에서는 현재 교정에서 측정된 질량과 참조 테이블의 실제 질량 간 차이를 보여줍니다.
- 피크 폭 그래프는 획득 방법에서 선택된 대상 폭을 비교했을 때의 각 질량에 대한 피크 폭을 나타냅니다.
- 강도 차이 그래프는 이전 교정 및 현재 교정 간의 강도 차이를 표시합니다.

조정 및 교정은 숙련된 작업자에 의해서만 수행되어야 하며 매개 변수 조정은 FSE에 의해서만 수행되어야 합니다.

기술 지원 부서

SCIEX 및 전 세계 대리점은 충분히 교육을 받은 서비스 및 기술 전문가를 보유하고 있습니다. 이 전문가들이 발생할 수 있는 시스템 문제 또는 모든 기술적인 문제에 답변해 드립니다. 자세한 정보는 웹사이트 sciex.com을 방문하십시오.

사중극자 모드에서 수동 조정 및 교정

질량 분석계를 적절히 조정 및 교정하려면, 분해능을 조정하고 질량 교정을 수행합니다.

특정 교정 용액을 사용하는 각 스캔 유형의 경우 각기 다른 획득 방법이 필요합니다. 다른 교정 솔루션은 양극 및 음극 모드 교정에 사용됩니다. 분석이 스캔 유형 및 극성 모두의 하위 세트인

경우, 사중극자, 극성 및 분해능 유형의 모든 조합에 대해 전체 조정 및 교정 절차를 수행하는 대신 하나의 사중극자, 하나의 극성 또는 하나의 분해능 유형만을 조정할 수 있습니다.

다음 절차를 순서대로 수행하십시오.

1. 획득 방법 선택
2. 분해능 조정
3. 사중극자 모드에서 질량 교정 수행

획득 방법 선택

1. 교정 방법과 결과를 저장할 프로젝트를 생성합니다.
이 프로젝트는 조정 전용일 수도 있고 작업 프로젝트의 일부일 수도 있습니다.
2. 탐색 모음에서 **Tune and Calibrate** 아래의 **Manual Tuning**을 두 번 클릭합니다.
3. Manual Tune에서 적절한 획득 방법을 생성하거나 **API Instrument** 폴더로 이동한 다음 교정용 획득 방법을 엽니다(3200MD 시리즈의 기기를 사용 중인 경우).

팁! (3200MD 기기 시리즈에만 해당) 본 소프트웨어는 고분해능에서의 최적화를 위한 기본 획득 방법을 포함하여 설치되지 않았습니다. 그러나 이러한 방법과 단위 분해능 (Q1PosPPG.dam, Q1NegPPG.dam, Q3PosPPG.dam 및 Q3NegPPG.dam) 간의 유일한 차이는 분해능 유형입니다. 질량 분석계를 처음 조정하며 고분해능 방법이 필요한 경우에는 단위 분해능 방법을 열고 분해능 유형을 고분해능으로 변경한 다음 방법 이름을 Q1PosPPG_high.dam 등의 다른 이름으로 저장합니다.

4. Q1 및 Q3 양성 모드에서 조정하기 위한 PPG 용액이나 Q1 및 Q3 음성 모드에서 조정하기 위한 PPG 3000 용액 중 하나를 5~10µL/min 주입합니다.

팁! FSE에 대한 기존 방법을 유지할 수 있도록 해당 방법을 복사합니다.

5. 프로젝트 목록에서 새로운 프로젝트를 선택한 다음 동일한 이름을 사용하여 해당 방법을 저장합니다.

분해능 조정

분무가 안정적인지 확인합니다.

1. Tune Method Editor의 MS 탭에서 **MCA** 확인란이 선택되어 있는지 확인합니다.
2. **Period Summary** 섹션의 **Cycles** 필드에 10을 입력합니다.
3. **Start**를 클릭합니다.
질량 스펙트럼 창이 Manual Tune 창 하단에 표시됩니다.
4. 질량 분석계가 Idle 상태가 되면 질량 스펙트럼 창을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Open File**을 클릭합니다.
새 창에 해당 방법의 각 질량마다 질량 스펙트럼 데이터 창이 하나씩 표시됩니다.
5. 데이터 창 중 하나에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **List Data**를 클릭합니다.
새로운 창이 열리고 스펙트럼에 대한 데이터 목록이 표시됩니다. 이 창에는 Data List, Calibration Peak List 및 Peak List 탭이 포함되어 있습니다.

6. Calibration Peak List 탭을 엽니다.

팁! 이 탭은 해당 탭을 표시하는 옵션이 선택된 경우에만 나타납니다. Calibration Peak List 탭을 표시하려면 **Tools > Settings > Appearance Options.**를 클릭합니다. Miscellaneous 탭에서 **Show Mass Calibration Peak List** 확인란을 선택한 다음 **OK**를 클릭합니다.

7. Calibration Peak List의 대상 질량이 표시된 질량과 일치하지 않으면 **Calibration Peak List**를 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하고 적절한 **Reference** 목록을 클릭한 다음 **Use as Reference**를 클릭합니다.

8. **Calibration Peak List**의 데이터를 검사합니다.

참고: **Width (Da)** 열의 모든 값이 단위 분해능의 경우 $0.7 \pm 0.1\text{Da}$, 고분해능의 경우 $0.5 \pm 0.1\text{Da}$ 이면 해당 분해능은 허용 가능합니다.

- 분해능이 허용 가능한 수준이면 14 단계를 진행합니다.
- 값이 필요한 허용 오차 범위 내에 있지 않으면 9 단계를 진행합니다.

9. 창을 닫은 다음 Tune Method Editor에서 Resolution 탭을 엽니다.

10. **Advanced**를 클릭합니다.

Resolution Table 대화 상자가 열립니다. 이 대화 상자는 해당 스캔에 대한 교정 피크 질량과 분해능 오프셋 값을 표시합니다.

11. 피크 폭 기준 범위(단위 분해능의 경우 $0.7 \pm 0.1\text{Da}$, 고분해능의 경우 $0.5 \pm 0.1\text{Da}$)를 벗어나는 각 질량에 대해 다음과 같이 오프셋을 조정합니다.

- 피크 폭이 너무 넓으면 오프셋을 0.05 이하로 증가시킵니다.
- 피크 폭이 너무 좁으면 오프셋을 0.05 이하로 감소시킵니다.

12. **Apply**를 클릭합니다.
변경 사항이 InstrumentData 파일에 저장됩니다.

13. **Close**를 클릭합니다.

14. Calibration Peak List의 모든 피크가 피크 폭 기준(단위 분해능의 경우 $0.7 \pm 0.1\text{Da}$, 고분해능의 경우 $0.5 \pm 0.1\text{Da}$)을 충족할 때까지 모든 질량 피크에 대해 1~8 단계를 반복합니다.

15. **Close**를 클릭합니다.

사중극자 모드에서 질량 교정 수행

1. 탐색 모음에서 **Tune and Calibrate** 아래의 **Manual Tuning**을 두 번 클릭합니다.
2. Tune Method Editor의 MS 탭에서 **MCA** 확인란이 선택되어 있는지 확인합니다.
3. **Period Summary** 섹션의 **Cycles** 필드에 10을 입력합니다.
4. **Start**를 클릭합니다.
질량 스펙트럼 창이 Manual Tune 창 하단에 표시됩니다.
5. 질량 분석계가 Idle 상태가 되면 질량 스펙트럼 창을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Open File**을 클릭합니다.

새 창에 해당 방법의 각 질량마다 질량 스펙트럼 데이터 창이 하나씩 표시됩니다.

6. 데이터 창 중 하나에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **List Data**를 클릭합니다. 새로운 창이 열리고 스펙트럼에 대한 데이터가 표시됩니다. 이 창에는 Data List, Calibration Peak List 및 Peak List 탭이 포함되어 있습니다.
7. Calibration Peak List 탭을 엽니다.

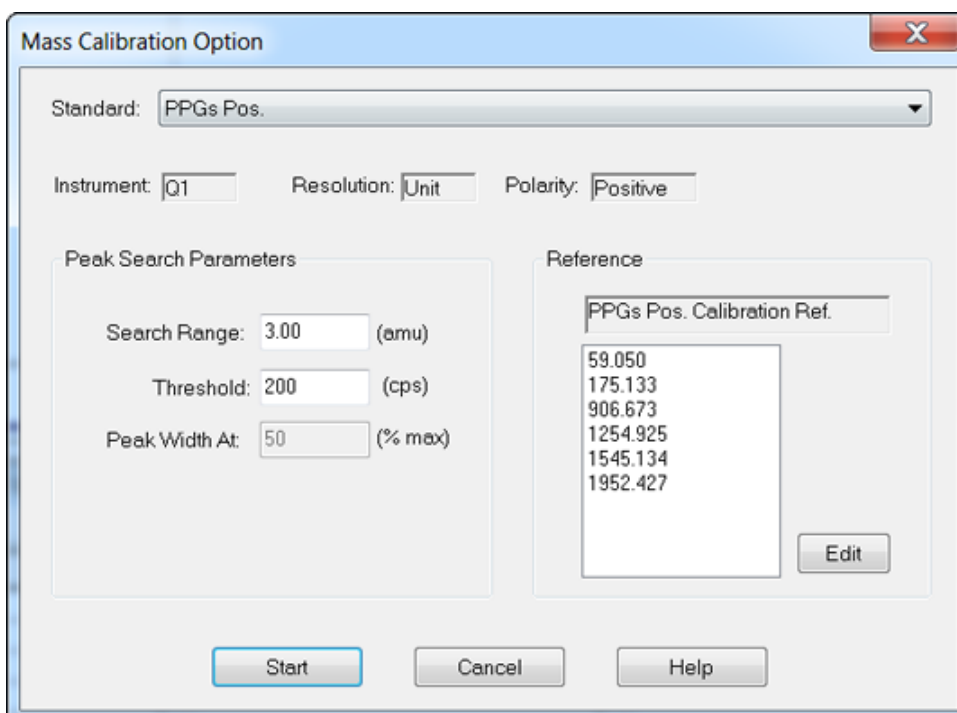
팁! 이 탭은 해당 탭을 표시하는 옵션이 선택된 경우에만 나타납니다. Calibration Peak List 탭을 표시하려면 **Tools > Settings > Appearance Options**를 클릭합니다. Miscellaneous 탭에서 **Show Mass Calibration Peak List** 확인란을 선택한 다음 **OK**를 클릭합니다.

8. Calibration Peak List 탭의 데이터를 검사합니다. **Mass Shift (Da)** 열의 값이 모든 질량에 대해 0.1Da보다 크면 다음 단계로 진행합니다. 그렇지 않으면, 질량 교정은 완료됩니다.

참고: 그래프의 피크 레이블은 정점 값이지만 Calibration Peak List 탭의 **Found At** 열에 나열된 피크 값들은 중심 값입니다. 피크가 완전히 대칭적이지 않을 경우, 동일한 피크에 대한 정점 값과 중심 값이 약간 다를 수 있습니다. 교정에는 더 정확한 중심 값이 사용됩니다.

9. 질량 스펙트럼 창 중 하나에서 아무 곳을 클릭합니다.
10. **Tools > Calibrate from Spectrum**을 클릭합니다. Mass Calibration Option 대화 상자가 열립니다.

그림 1 Mass Calibration Option 대화 상자



11. 사용된 획득 방법에 지정된 극성에 따라 **Standard** 목록에서 **PPGs Pos** 또는 **PPGs Neg**를 클릭합니다.

-
12. 사전 설정된 **Peak Search Parameters**는 대부분의 상황에 적절합니다. 이 매개 변수를 변경하고자 하는 경우, 필드를 클릭한 다음 새로운 값을 입력합니다.

참고: 질량 범위가 더 큰 질량 분석계에서 약 2000의 PPG 피크는 가장 강한 동위 원소가 최초의 동위 원소가 아닌 경우에 피크를 제공하며, 이로 인해 교정 문제가 발생할 수 있습니다. 이러한 상황이 발생하면 **Search Range**를 0.8로 좁힐 수 있습니다.

13. **Reference** 목록에 나열된 질량이 데이터가 획득된 질량과 일치하는지 확인합니다. 질량이 일치하면 다음 단계로 진행합니다. 질량이 일치하지 않으면 다음을 수행합니다.
- a. **Edit**를 클릭합니다.
Reference Table 대화 상자가 열립니다.
 - b. **Reference** 열에 있는 확인란을 선택 또는 선택 해제하여 데이터가 획득된 질량과 **Use** 목록에 있는 질량을 일치시킵니다.
 - c. **Update Ref.**를 클릭하여 변경 사항을 저장합니다.
 - d. **Close**를 클릭합니다.
14. 질량 교정을 시작하려면 **Start**를 클릭합니다.
- 본 소프트웨어는 각 질량에 대한 검색 범위에서 최대 피크를 찾으며 질량, 강도 및 피크 폭 값을 결정합니다.
 - 본 소프트웨어는 질량과 예상 질량을 비교하고 해당하는 경우 질량 변화를 결정하며 피크 폭과 대상 피크 폭을 비교하고 강도와 이전 교정을 비교합니다.
 - 본 소프트웨어는 질량 교정 결과를 도표와 보고서 형식으로 표시합니다.
15. 본 소프트웨어가 대상 질량에 대해 올바른 피크를 선택하지 않은 경우, 교정에서 해당 포인트를 제외합니다.

팁! 제외할 포인트를 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Exclude**를 클릭합니다.

16. **Window**를 클릭한 다음 교정 결과를 클릭합니다.
텍스트 버전의 교정 보고서가 표시됩니다.
17. Calibration report 창에서 다음 중 하나를 수행합니다.
- 변경된 질량 값을 업데이트하고 새로운 질량의 해당 값을 기존 질량 교정에 추가하려면, **Update Mass Calibration**을 클릭합니다. 교정된 질량에 대한 기존 교정 값만 덮어쓰게 됩니다.
 - 기존 질량과 값을 새로운 질량과 값으로 완전히 대체하려면 **Replace Mass Calibration**을 클릭합니다. 기존 교정 값을 모두 덮어쓰게 되며 교정되지 않은 모든 질량은 교정 테이블에서 제거됩니다.
18. 질량 교정 변경 사항을 적용하려면 **Save**를 클릭합니다.
19. **Close**를 클릭합니다.
20. 10 스캔 MCA를 수행하여 교정을 확인합니다.

참고: 필요한 경우 교정 절차를 반복 수행합니다.

LIT 모드에서의 질량 분석계 수동 교정

LIT 모드에서 질량 분석계를 교정하려면, 양성과 음성 모드 모두의 스캔 속도에 대한 질량 교정을 수행합니다.

다음 절차를 순서대로 수행하십시오.

1. [LIT 모드에서의 질량 분석계 수동 교정](#)
2. [LIT 모드에서 질량 교정 수행](#)

LIT 모드에서 수동 교정을 위한 획득 방법 선택

1. Agilent Mix 또는 PPG 3000을 5~10 μ L/min 주입합니다.
2. 탐색 모음에서 **Tune and Calibrate** 아래의 **Manual Tuning**을 두 번 클릭합니다.
3. (3200MD QTRAP 시스템). 선택한 스캔 속도에서 적절한 고급 분해능 획득 방법을 생성하거나 **File > Open**을 클릭합니다.
4. **Files** 목록에서 방법을 선택합니다(**API Instrument > Acquisition Methods > QTRAP3200**).
5. **OK**를 클릭합니다.
Tune Method Editor에 선택한 방법에 대한 세부 정보가 표시됩니다.
6. 프로젝트 목록에서 새 프로젝트를 선택한 다음 방법 데이터를 저장합니다.

LIT 모드에서 질량 교정 수행

1. Tune Method Editor의 MS 탭에서 **MCA** 확인란이 선택되어 있는지 확인합니다.
2. MS 탭에서 극성 및 스캔 속도를 선택합니다.
3. MS 탭의 **Period Summary** 섹션에 있는 **Cycles** 필드에 50을 입력합니다.
4. **Start**를 클릭합니다.
질량 스펙트럼 창이 Manual Tune 창 하단에 표시됩니다.
5. MS 아이콘이 유휴 상태로 표시되면 질량 스펙트럼 창에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭하고 **Open File**을 클릭합니다.
각 관심 이온이 표시된 새로운 창이 별개의 창으로 열립니다.
6. 데이터 창 중 하나에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **List Data**를 클릭합니다.
새로운 창이 열리고 스펙트럼에 대한 데이터가 표시됩니다. 이 창에는 Data List, Calibration Peak List 및 Peak List 탭이 포함되어 있습니다.
7. Calibration Peak List 탭을 엽니다.

팁! 이 탭은 해당 탭을 표시하는 옵션이 선택된 경우에만 나타납니다. Calibration Peak List 탭을 표시하려면 **Tools > Settings > Appearance Options**.를 클릭합니다.
Miscellaneous 탭에서 **Show Mass Calibration Peak List** 확인란을 선택한 다음 **OK**를 클릭합니다.

8. Calibration Peak List 테이블을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 후 오른쪽 클릭 메뉴에서 올바른 참조 테이블이 선택되었는지 확인합니다.

올바른 참조 테이블이 선택되지 않은 경우 올바른 참조 테이블을 선택하고 **Use as Reference**를 클릭합니다.

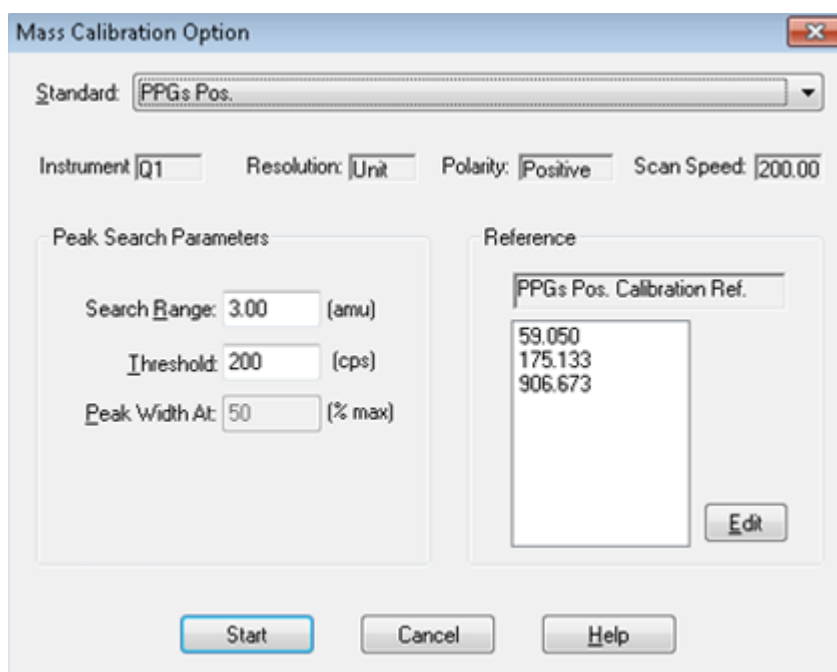
참고: **Calibration Peak List** 탭에 모든 질량이 표시되지 않으면 Calibration Peak List 테이블을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭합니다. 오른쪽 클릭 메뉴에서 사용 중인 참조 테이블 위에 커서를 놓고 하위 메뉴에서 **Edit Reference Table**을 클릭합니다. Reference Table Edit 대화 상자에서 Calibration Peak List 탭에 표시할 질량에 해당하는 **Use** 상자를 선택하고 **Update Ref**를 클릭합니다.

9. Calibration Peak List 탭의 데이터를 검사합니다. **Mass Shift (Da)** 열의 값이 모든 질량에 대해 0.1Da보다 크면 다음 단계로 진행합니다. 그렇지 않으면, 질량 교정은 완료됩니다.

참고: 그래프의 피크 레이블은 정점 값이지만 Calibration Peak List 탭의 **Found At** 열에 나열된 피크 값들은 중심 값입니다. 피크가 완전히 대칭적이지 않을 경우, 동일한 피크에 대한 정점 값과 중심 값이 약간 다를 수 있습니다. 교정에는 더 정확한 중심 값이 사용됩니다.

10. 질량 스펙트럼 창 중 하나에서 아무 곳을 클릭합니다.
11. **Tools > Calibrate from Spectrum.**을 클릭합니다.
Mass Calibration Option 대화 상자가 열립니다.

그림 2 Mass Calibration Option 대화 상자



12. PPG가 표준 용액으로 사용된 경우, 사용된 획득 방법에 지정된 극성에 따라 **Standard** 목록에서 **PPGs Pos. LIT Ref.** 또는 **PPGs Neg. LIT Ref.**를 클릭합니다.
13. Peak Search Parameters를 변경하려면 필드를 클릭하고 새 값을 입력합니다.
사전 설정된 Peak Search Parameters는 대부분의 상황에 적절합니다.
14. **Reference** 목록에 표시된 질량이 데이터가 획득된 질량과 일치하는지 확인합니다.

질량이 일치하면 다음 단계로 진행합니다. 일치하지 않으면 다음 단계를 완료합니다.

- a. **Edit**를 클릭합니다.

Reference Table 대화 상자가 열립니다.

- b. **Reference** 열에 있는 확인란을 선택 또는 선택 해제하여 데이터가 획득된 질량과 **Use** 목록에 있는 질량을 일치시킵니다.
- c. **Update Ref.**를 클릭하여 변경 사항을 저장합니다.

15. 질량 교정을 시작하려면 **Start**를 누릅니다.

- 본 소프트웨어는 각 질량에 대한 검색 범위에서 최대 피크를 찾으며 질량, 강도 및 피크 폭 값을 결정합니다.
- 본 소프트웨어는 질량과 예상 질량을 비교하고 해당하는 경우 질량 변화를 결정하며 피크 폭과 대상 피크 폭을 비교하고 강도와 이전 교정을 비교합니다.
- 본 소프트웨어는 질량 교정 결과를 도표와 보고서 형식으로 표시합니다.

참고: 점선으로 되어 있는 중간 피크 폭 그래프 표시기를 사용하지 마십시오. 이 선은 사중 극자 스캔에 대해 생성되지 않았으며 LIT 스캔에 적용되지 않습니다.










16. **Window**를 클릭한 다음 교정 결과를 클릭합니다.

텍스트 버전의 교정 보고서가 표시됩니다.

17. 기울기 변동 값을 검토합니다. 값은 1.000 ± 0.002 여야 합니다. 포인트에는 기울기가 있을 수 없으므로 최저 데이터 포인트의 경우에는 값이 **N/A**입니다.
18. 차이가 0.002보다 크면, 질량 분석계를 교정하지 마십시오. sciex.com/request-support에서 SCIEX 지원에 문의하십시오.
19. 기울기 변동 숫자가 우수하면 Calibration report 창으로 이동합니다.
20. Calibration report 창에서 다음 중 하나를 수행합니다.
 - 변경된 질량 값을 업데이트하고 새로운 질량의 해당 값을 기존 질량 교정에 추가하려면, **Update Mass Calibration**을 클릭합니다. 교정된 질량에 대한 기존 교정 값만 덮어쓰게 됩니다.
 - 기존 질량과 값을 새로운 질량과 값으로 완전히 대체하려면 **Replace Mass Calibration**을 클릭합니다. 기존 교정 값을 모두 덮어쓰게 되며 교정되지 않은 모든 질량은 교정 테이블에서 제거됩니다.
21. 질량 교정 변경 사항을 적용하려면 **Save**를 클릭합니다.
22. **Close**를 클릭합니다.
23. 10 스캔 MCA를 수행하여 교정을 확인합니다.

참고: 필요한 경우 교정 절차를 반복 수행합니다.

Tune and Calibrate 모드 아이콘

아이콘	이름	설명
	Calibrate from spectrum	Mass Calibration Option 대화 상자를 열고 활성 스펙트럼을 사용하여 질량 분석계를 교정합니다.
	Manual Tune	Manual Tune Editor를 엽니다.
	Compound Optimization	FIA에 의한 주입을 통해 화합물을 최적화합니다.
	Instrument Optimization	기기 성능을 확인하거나, 질량 교정을 조정하거나, 질량 분석계 설정을 조정합니다.
	View Queue	샘플 대기열을 표시합니다.
	Instrument Queue	원격 기기를 표시합니다.
	Status for Remote Instrument	원격 기기의 상태를 표시합니다.
	Reserve Instrument for Tuning	기기의 조정 및 교정을 예약합니다.
	IDA Method Wizard	IDA Method Wizard를 시작합니다.

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.
