

Analyst MD 소프트웨어

스크립트 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.

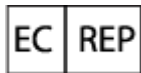
Rx only.

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 서문.....	4
대상 사용자.....	4
기술 지원 부서.....	4
2 스크립트.....	5
스크립트 설치 또는 제거.....	5
스크립트 설치.....	5
스크립트 제거.....	5
정량화 방법 및 텍스트 파일 생성.....	6
Create Quan Methods from Text Files 스크립트 사용.....	6
Create Text File from Quan Method 스크립트 사용.....	8
텍스트 파일 형식.....	8
DFT Tracker.....	12
MRM3 Optimization 스크립트.....	13
MRM3 Optimization 창 개요.....	13
최적화 진행 중 작업.....	18
최적화 완료.....	20
스크립트 논리에 대한 자세한 설명: 초기화.....	22
고급 분해능 스캔.....	22
Q1 다중 이온 스캔.....	22
고급 생성 이온 스캔.....	22
다중 반응 모니터링 스캔.....	23
MS/MS/MS(MS3) 스캔.....	23
최종 방법 생성.....	23
MSServiceLog 스크립트.....	24
스크립트 설치.....	24
스크립트 사용.....	24
sMRM Calculator.....	25
스크립트 설치.....	26
스크립트 사용.....	26
문의하기.....	31
고객 교육.....	31
온라인 학습 센터.....	31
SCIEX 지원 부서.....	31
사이버 보안.....	31
문서.....	31

대상 사용자

이 안내서는 고객 및 FSE(현장 서비스 직원)를 대상으로 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.

이 문서에서는 Analyst MD 소프트웨어 스크립트를 설치하고 사용하는 방법을 설명합니다. 또한 각 스크립트의 용도를 간략히 설명하고 필요 시 스크립트를 제거하는 방법도 설명합니다.

스크립트 설치 또는 제거

일부 스크립트는 Analyst MD 소프트웨어를 설치할 때 자동으로 설치되지 않습니다.

나머지 스크립트는 Scripts 폴더에 있습니다.

스크립트를 사용하려면 스크립트를 설치해야 합니다. 자세한 정보는 [스크립트 설치](#) 섹션을 참조하십시오.

스크립트 설치

1. 다음 중 하나를 수행합니다.
 - 컴퓨터의 <Drive>:\Program Files\Analyst\Scripts 폴더로 이동합니다.
 - 소프트웨어 DVD(사용 가능한 경우) 또는 압축 해제된 소프트웨어 웹 다운로드 패키지에 있는 Extras\Scripts 폴더로 이동합니다.
2. Scripts 폴더를 엽니다.
3. 다음 중 하나를 수행합니다.
 - sMRM Calculator 스크립트의 경우, **sMRM Calculator Setup.exe**를 두 번 클릭합니다.
 - 다른 모든 스크립트의 경우, **ScriptRunner.exe**를 두 번 클릭합니다.
4. 화면의 지침에 따라 스크립트를 설치합니다.
설치된 스크립트는 **Script** 메뉴에서 사용할 수 있습니다.

스크립트 제거

참고: DFTTracker 및 MRM3 Optimization 스크립트는 제거하지 마십시오. 이러한 스크립트를 삭제할 경우 해당 스크립트에 액세스하려면 Analyst MD 소프트웨어를 다시 설치해야 합니다.

스크립트를 제거하려면 다음을 수행합니다.

- Create Quan Methods From Text Files, Create Text File from Quant Method 및 MSServiceLog 스크립트의 경우
<drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Processing Scripts로 이동한 다음 스크립트 dll을 수동으로 삭제합니다.
- sMRM Calculator 스크립트의 경우 다음을 수행합니다.
 - Windows 7 운영 체제: **Start > All Programs > Control Panel > Programs and Features**를 클릭합니다.

- Windows 10 운영 체제: **Start > Control Panel > Programs and Features**를 클릭합니다.
- **sMRM Calculator**를 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 후 **Uninstall**을 클릭합니다.
- 화면의 지침을 따릅니다.

정량화 방법 및 텍스트 파일 생성

Create Text File From Quan Method 스크립트는 정량화 방법을 탭 구분 텍스트 파일로 내보냅니다. Create Quan Method From Text Files 스크립트는 탭 구분 텍스트 파일에 담긴 정보를 정량화 방법 파일(qmf)로 가져옵니다. 현재 Analyst MD 소프트웨어의 Build Quantitation Method 구성 요소는 이 기능을 지원하지 않습니다.

Create Text File from Quan Method 스크립트는 텍스트 파일 형식으로 정량화 방법 파일을 생성합니다. **Export all columns** 확인란이 선택되어 있으면 텍스트 파일에 각 필수 필드를 나타내는 열이 생성됩니다. 이 확인란이 선택되어 있지 않으면 이 스크립트는 모든 피크에 대해 값이 동일하지 않은 필드를 나타내는 열만 포함된 텍스트 파일을 생성합니다.

Create Quan Method From Text Files 스크립트는 텍스트 파일에서 통합 알고리즘이나 회귀 매개 변수와 같이 필수 필드가 아닌 모든 필드에 대해 기본값을 지정합니다. 자세한 정보는 [텍스트 파일 형식](#) 섹션을 참조하십시오.

Create Quan Methods from Text Files 스크립트 사용

1. **Script > Create Quan Methods From Text Files**를 클릭합니다.

그림 2-1 Create Quantitation Methods from Text Files 대화 상자

Create Quantitation Methods from Text Files

Default Generic Parameters

Algorithm: **Analyst Classic (TurboChrom)**

Extraction Type: **MRM** Period: **1** Experiment: **1**

Expected RT: **0.1** min RT Window: **30** sec ☐ Use Relative RT

Bkg. Start (min): **0** Bkg. End (min): **0**

Conc. Units: Calc. Conc. Units:

Default Analyst Classic (TurboChrom) Parameters

Bunching Factor: **1** Noise Threshold: **100** Area Threshold: **200**

Num. Smoother: **0** Separation Width: **0.2** Separation Height: **0.01**

Exp. Peak Ratio: **5** Exp. Adjusted Ratio: **4** Exp. Valley Ratio: **3**

Default General IntelliQuan Parameters

Min. Peak Height: **0** cps

Min. Peak Width: **0** sec

Smoother Width: **0** points

Default IntelliQuan MQ III Parameters

Noise Percent: **50** %

Base. Sub. Window: **1** min

Peak-Splitting Factor: **2**

☐ Report Largest Peak

Regression Parameters

Fit: **Linear**

Weighting: **None**

Parameter: **Area**

Iterate: **No**

Default Window Summation Parameters

☒ Use Baseline Subtraction

Create One Method **Create Multiple Methods** **Cancel**

2. Default Generic Parameters 섹션의 매개 변수를 사용하여 정량화 방법을 생성합니다. **Algorithm**, **Extraction Type**, **Period** 및 **Experiment** 필드는 Analyst MD 소프트웨어에서 사용할 수 없습니다. 필요에 따라 다음 매개 변수를 설정합니다.

- **Algorithm** 목록에서 피크 찾기 알고리즘을 선택합니다. Window Summation은 머무름 임계값 내 모든 강도를 합산하는 알고리즘으로, 피크는 찾지 않습니다.
- **Extraction Type** 목록에서 통합할 데이터의 유형을 선택합니다.
- **Period** 및 **Experiment** 목록에서 기간 수와 실험 수를 선택합니다.

Default Analyst Classic Parameters, Default General IntelliQuan Parameters, Default IntelliQuan MQ III Parameters 및 Default Window Summation Parameters 그룹에는 **Algorithm** 필드에서 선택한 알고리즘이 사용하는 매개 변수가 포함되어 있습니다.

3. Window Summation 알고리즘이 강도 0까지가 아니라 합산 범위 내 데이터 포인트의 최소 강도에 해당하는 가로선까지 강도를 합산하도록 하려면 **Use Baseline Subtraction** 확인란을 선택합니다.
4. Regression Parameters 섹션에서 회귀 정보를 선택합니다.

이 때 명시된 정보는 모든 분석 물질 피크에 적용됩니다. 이전 매개 변수와 달리, 이 정보는 텍스트 파일로 나타낼 수 없습니다. 따라서, 동일한 회귀 매개 변수가 모든 분석 물질에 적용됩니다. 매개 변수에 대한 전체 설명은 도움말을 참조하십시오.

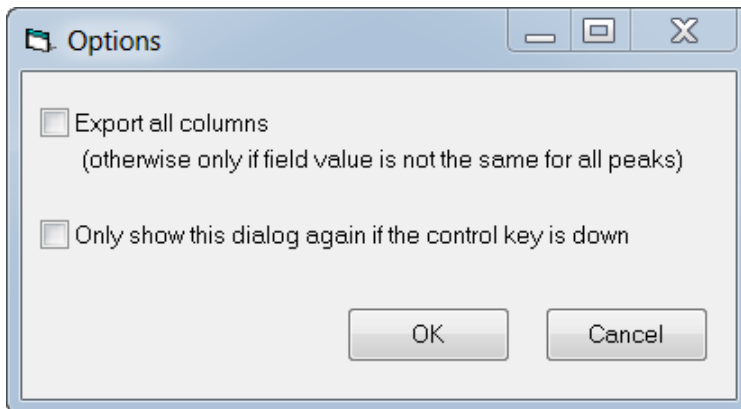
5. 정량화 방법 한 개를 생성하려면 **Create One Method**를 클릭한 다음 정량화 방법을 생성하는 데 사용할 텍스트 파일을 찾아 **Open**을 클릭합니다.
텍스트 파일이 올바른 형식이고 필요한 열을 포함하고 있으면 txt 파일과 동일한 파일 이름으로 정량화 방법 qmf 파일이 생성됩니다. 생성된 정량화 방법은 텍스트 파일의 위치에 관계없이 Analyst MD 소프트웨어의 현재 작업 프로젝트 아래에 있는 Quantitation Methods 폴더에 저장됩니다.
6. 여러 개의 텍스트 파일에서 여러 개의 방법을 생성하려면 **Create Multiple Methods**를 클릭하고 텍스트 파일이 있는 폴더로 이동한 다음 **OK**를 클릭합니다.

텍스트 파일이 올바른 형식이고 필요한 열을 포함하고 있으면 해당 폴더에 있는 각각의 개별 텍스트 파일에 대해 txt 파일과 동일한 파일 이름으로 정량화 방법 qmf 파일이 생성됩니다. 생성된 정량화 방법은 텍스트 파일의 위치에 관계없이 Analyst MD 소프트웨어의 현재 작업 프로젝트 아래에 있는 Quantitation Methods 폴더에 저장됩니다.

Create Text File from Quan Method 스크립트 사용

1. Analyst MD 소프트웨어에서 정량화 방법을 생성하고 저장합니다.
2. **Script > Create Text File from Quan Method.**를 클릭합니다.

그림 2-2 Options 대화 상자



3. **Export all columns** 확인란을 선택한 후 **OK**를 클릭합니다.
4. 정량화 방법(qmf) 파일을 찾아 선택합니다.
5. 텍스트 파일의 위치를 탐색하여 선택합니다.
스크립트가 모든 열을 포함하는 텍스트 파일을 생성합니다. 3단계에서 **Export all columns** 확인란을 선택하지 않은 경우 이 스크립트는 모든 피크에 대해 값이 동일하지 않은 필드를 나타내는 열만 포함된 텍스트 파일을 생성합니다.

텍스트 파일 형식

정량화 방법을 생성하기 위해 사용된 텍스트 파일(Create Quan Methods from Text Files) 및 방법(Create Text File from Quan Method)에서 생성된 텍스트 파일의 형식은 다음과 같습니다.

- 여러 필드를 Tab 문자로 구분하고 각 줄은 캐리지 리턴 또는 줄바꿈 문자로 끝냅니다.
- 파일의 첫 번째 행에는 열 머리글이 포함되어야 합니다. 다음 표에 Required로 표시된 모든 열이 반드시 있어야 합니다. 나머지 열은 선택 사항입니다. 열의 실제 순서는 중요하지 않습니다.
- 이후 각 줄에는 하나의 분석 물질 또는 내부 표준 물질 피크에 대해 표에 표시된 정보가 포함되어야 합니다.

표 2-1 텍스트 파일 형식

열 이름	필수	설명
Peak Name	예	분석 물질 또는 내부 표준 물질 피크의 이름입니다.
First Mass	예	MRM 데이터의 경우, 피크에 대한 Q1 질량입니다. 전체 스캔 데이터의 경우, XIC 통합 시작 질량입니다. Q1 MI 또는 Q3 MI 데이터의 경우, 질량입니다.
Second Mass	경우에 따라	전체 스캔 또는 MRM 데이터를 통합할 때에는 이 필드가 필요하지만, Q1 MI 또는 Q3 MI 데이터 통합에는 필요하지 않습니다. MRM 데이터의 경우, 피크에 대한 Q3 질량입니다. 전체 스캔 데이터의 경우, XIC 통합 종료 질량입니다.
Extraction Type	아니요	통합할 데이터의 유형입니다. 있을 경우 다음 중 하나여야 합니다. 0 - MRM 데이터 1 - Q1 MI 또는 Q3 MI 데이터 2 - 전체 스캔 데이터
Is IS	아니요	현재 피크가 내부 표준 물질인지 분석 물질인지 명시합니다. 피크가 내부 표준 물질이면 TRUE입니다. 그렇지 않으면 FALSE입니다. 이 열이 없다면, 모든 정의된 피크는 분석 물질인 것으로 추정됩니다. 참고: 내부 표준 물질 피크는 해당 IS를 사용하는 분석 물질 피크 전에 가장 처음으로 텍스트 파일에 정의되어야 합니다.
IS Name	아니요	분석 물질 피크의 경우, 해당 내부 표준 물질(있을 경우)의 이름을 명시합니다. 해당하는 분석 물질이 내부 표준 물질을 사용하지 않을 경우 이 필드를 빈 칸으로 남겨둡니다. 내부 표준 물질 피크 자체인 경우 이 필드의 내용은 무시됩니다.
Period	아니요	피크 기간 숫자(1부터 데이터 내 기간의 숫자까지).
Experiment	아니요	피크 실험 숫자(1부터 기간 내 최대 실험 숫자까지).

표 2-1 텍스트 파일 형식 (계속)

열 이름	필수	설명
Use Relative RT	아니요	내부 표준 물질을 사용하는 분석 물질 피크의 경우, 예상 머무름 시간이 IS의 머무름 시간을 기준으로 하는지 명시합니다. 그렇다면 TRUE입니다. 그렇지 않으면 FALSE입니다. 다른 피크의 경우 이 필드의 내용이 무시되지만, 그렇다 해도 TRUE 또는 FALSE 중 하나를 반드시 입력해야 합니다.
Conc Units	아니요	농도 단위입니다.
Calc Conc Units	아니요	계산된 농도 단위.
Bkg Start	아니요	피크 배경의 시작 시간(분 단위)입니다. 이 매개 변수는 피크 통합에는 전혀 영향을 미치지 않지만 노이즈 및 S/N 계산 방식에는 영향을 미칩니다.
Bkg End	아니요	피크 배경의 종료 시간(분 단위)입니다.
Expected RT	아니요	예상 머무름 시간(분 단위, 0~1666)입니다.
RT Window	아니요	머무름 시간 범위(초 단위, 1~1000)입니다.
Algorithm	아니요	사용되어야 하는 피크 찾기 및 통합 알고리즘을 명시합니다. 있을 경우 다음 중 하나여야 합니다. 0 - Analyst Classic(TurboChrom) 1 - IntelliQuan - IQA II(자동) 2 - IntelliQuan - MQ III 3 - Window Summation
Bunching Factor	아니요	(TurboChrom 알고리즘) 피크의 번치 인자(1~100)입니다.
Num Smooths	아니요	(TurboChrom 알고리즘) 다듬기 횟수(0~10)입니다.
Noise Threshold	아니요	(TurboChrom 알고리즘) 노이즈 임계값(1~19)입니다.
Area Threshold	아니요	(TurboChrom 알고리즘) 면적 임계값(1~112)입니다.
Separation Width	아니요	(TurboChrom 알고리즘) 분리 폭(0~5)입니다.
Separation Height	아니요	(TurboChrom 알고리즘) 분리 높이(0~1)입니다.
Exp Peak Ratio	아니요	(TurboChrom 알고리즘) 지수 피크 비율(1~16)입니다.
Exp Adjusted Ratio	아니요	(TurboChrom 알고리즘) 지수 조정 비율(2~16)입니다.
Exp Valley Ratio	아니요	(TurboChrom 알고리즘) 지수 밸리 비율(1~16)입니다.
Min Height	아니요	IntelliQuan 알고리즘을 사용할 때 허용되는 최소 피크 높이(0~116)입니다.

표 2-1 텍스트 파일 형식 (계속)

열 이름	필수	설명
Min Width	아니요	(IntelliQuan 알고리즘) 허용되는 최소 피크 폭(초 단위, 0~116)입니다.
Smooth Width	아니요	(IntelliQuan 알고리즘) Savitzky-Golay 다듬기 필터의 절반 폭(0~20)입니다.
MQ III Noise Percent	아니요	(IntelliQuan 알고리즘) MQ III 옵션을 사용할 때의 노이즈 비율입니다. 0~100 사이의 정수여야 합니다.
MQ III Baseline Sub Window	아니요	(IntelliQuan 알고리즘) MQ III 옵션을 사용할 때의 기준선 감산 범위(0~10분)입니다.
MQ III Peak Splitting Factor	아니요	(IntelliQuan 알고리즘) MQ III 옵션을 사용할 때의 피크 분할 계수(0~10)입니다.
MQ III Use Largest	아니요	(IntelliQuan 알고리즘) MQ III 옵션을 사용할 때 머무름 시간 범위 내에서 최대 피크를 보고할지, 아니면 머무름 시간이 예상과 가장 근접한 피크를 보고할지를 지정합니다. 최대 피크를 사용할 경우 TRUE이고, 가장 근접한 피크를 사용할 경우 FALSE입니다.
Summation Baseline Sub	아니요	(특수 Window Summation 알고리즘) 면적을 강도=0 선에 적분할지, 아니면 범위 내 최소 강도 데이터 포인트의 강도 값에 적분할지를 지정합니다. 면적을 최소 강도 데이터 포인트의 강도 값에 적분해야 하면 TRUE이고, 면적을 강도=0 선에 적분해야 하면 FALSE입니다.

다음 표에는 전체 스캔 데이터에 대한 텍스트 파일 예제가 나와 있습니다. 텍스트 파일은 열 간 탭과 각 줄 끝의 캐리지 리턴을 포함하고 있습니다.

표 2-2 전체 스캔 데이터에 대한 텍스트 파일 예제

Peak Name	First Mass	Second Mass	Bunching Factor
Analyte Peak 1	500.1	500.7	1
Analyte Peak 2	812	813	2
Analyte Peak 3	400	401	3

다음 표에는 MRM 데이터에 대한 다른 예제가 나와 있습니다. Analyte Peak 1은 명시된 내부 표준 물질을 사용하기 위해 구성되며, Analyte Peak 2는 내부 표준 물질을 사용하지 않습니다.

표 2-3 MRM 데이터에 대한 텍스트 파일 예제

Peak Name	Is IS	IS Name	First Mass	Second Mass
IS Peak 1	TRUE	—	500.1	413.2
Analyte Peak 1	FALSE	IS Peak 1	600.2	382.1

표 2-3 MRM 데이터에 대한 텍스트 파일 예제 (계속)

Peak Name	Is IS	IS Name	First Mass	Second Mass
Analyte Peak 2	FALSE	IS Peak 1	400	312.1

다음 표에는 각기 다른 실험의 전체 스캔과 MRM 데이터의 혼합이 포함되어 있습니다.

표 2-4 MRM 데이터에 대한 텍스트 파일 예제

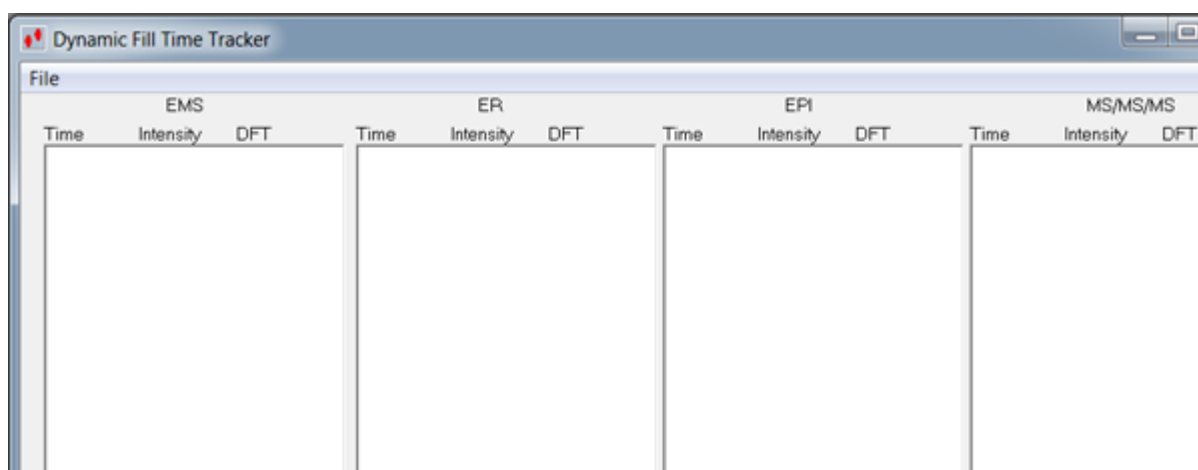
Peak Name	Extraction Type	Experiment	First Mass	Second Mass
Analyte Peak 1	0	1	500.1	413.2
Analyte Peak 2	0	1	600.2	382.1
Analyte Peak 3	2	2	812	813
Analyte Peak 4	2	2	400	401

DFT Tracker

Dynamic Fill Time (DFT) Tracker 스크립트는 QTRAP 시스템 스캔 중에 사용된 DFT 설정을 추적합니다. 이 스크립트를 사용하여 넓은 동적 범위에서 선형 이온 트랩(LIT) 모드에 대한 최적 채우기 시간을 결정하여 우수한 데이터 품질을 실현합니다. DFT Tracker는 EMS(고급 MS), ER(고급 분해능), EPI(고급 생성 이온) 및 MS3(MS/MS/MS) 같은 LIT 스캔 유형을 모니터링합니다.

- **Script > DFTTracker**를 클릭합니다.

그림 2-3 Dynamic Fill Time Tracker 대화 상자



DFT Tracker는 실시간 실행 중에 발생하는 채우기 시간의 동적 변화를 모니터링합니다.

시스템은 선형 이온 트랩을 채우는 데 필요한 시간을 동적으로 계산합니다. 풍부한 화합물의 경우, 짧은 채우기 시간이 이온 트랩에서 이온 수를 제한하여 공간 전하 영향을 낮춥니다. 긴 채우기 시간은 이온이 축적될 수 있도록 하여 약한 신호를 높입니다.

- 추적된 채우기 시간을 저장하려면 **File > Save**를 클릭합니다.
- 추적된 채우기 시간을 지우려면 **File > Clear**를 클릭합니다.
- 다른 모든 열려 있는 창 또는 어플리케이션의 상단에 Dynamic Fill Time Tracker 창을 유지하려면 **File > Always On Top**을 클릭합니다.
- DFT Tracker 스크립트를 종료하려면 **File > Exit**를 클릭합니다.

MRM3 Optimization 스크립트

QTRAP 시스템의 정량화 분석 스크립트를 사용하여 특이성을 높이고, 그에 따라 복잡한 매트릭스에서 분석 물질을 정량화할 때 감지력을 향상시킵니다. 이 스크립트는 주입을 사용하여 최적 MS3 획득 방법을 생성하기 위한 것입니다. 이 스크립트는 다음 최적화 단계를 수행합니다.

- 전구체 질량 확인
- 충돌 셀로의 전송 최적화
- 주요 단편 이온 결정
- 각 단편 이온에 대한 충돌 에너지(CE) 최적화
- 각 단편 이온에서 MS3 스캔 수행
- 모든 MS3 스캔에 대한 여자 에너지(AF2) 최적화
- 보고서 생성
- 모든 데이터 및 획득 방법 저장

이 스크립트는 정량화 어플리케이션에서 반자동화 방식(즉, 한 번에 한 화합물씩)으로 화합물에 대한 MS/MS 및 MS3 스펙트럼 모음을 생성하는 용도로도 사용할 수 있습니다.

MRM3 Optimization 창 개요

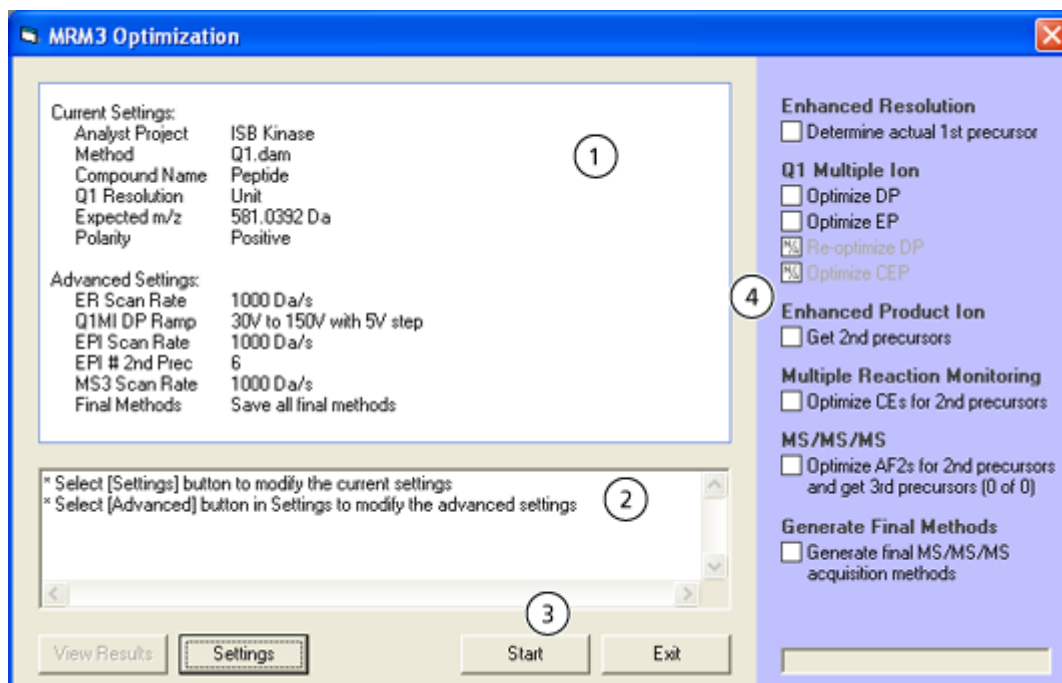
MRM3 Optimization 창의 컨트롤을 사용하여 탐색할 수 있습니다. 이 창은 최적화 결과가 생성될 때 최적화 결과도 표시합니다. 다음은 이 창의 다양한 섹션에 대한 간단한 설명입니다.

표 2-5 MRM3 Optimization 창

필드	설명
Status Window	스크립트를 처음 시작하면 이 창에 최적화에 사용될 현재 최적화 설정이 표시됩니다. 최적화가 시작된 경우에는 스펙트럼 정보가 이 창에 표시됩니다.
Log File	최적화 중에 찾은 결과가 텍스트 형식으로 표시됩니다. 이 섹션에서 찾은 각 항목은 생성되는 Log.txt 파일에도 추가됩니다.
Overall Progress	전체 최적화 진행 상황이 표시됩니다.
Main Controls	최적화 프로세스의 설정 및 실행과 관련된 모든 기본 기능이 포함되어 있습니다.

- Microsoft Notepad를 사용하여 파일을 열고 검토하려면 **View Results**를 클릭합니다. 최적화가 완료되면 Result.txt 파일이 자동으로 생성되어 저장됩니다.
- 최적화 프로세스에 필요한 화합물 정보를 입력할 수 있는 창을 열려면 **Settings**를 클릭합니다.
- 최적화 프로세스를 시작하려면 **Start**를 클릭합니다. 최적화 중에는 이 버튼의 이름이 **Abort**로 바뀌므로 이 버튼을 클릭하여 최적화 프로세스를 중지할 수 있습니다.

그림 2-4 MRM3 Optimization 창



항목	설명
1	상태 창
2	로그 파일
3	기본 컨트롤
4	전체 진행 상황

기본 설정 지정

스크립트가 실행될 때마다 Settings 대화 상자가 자동으로 열립니다.

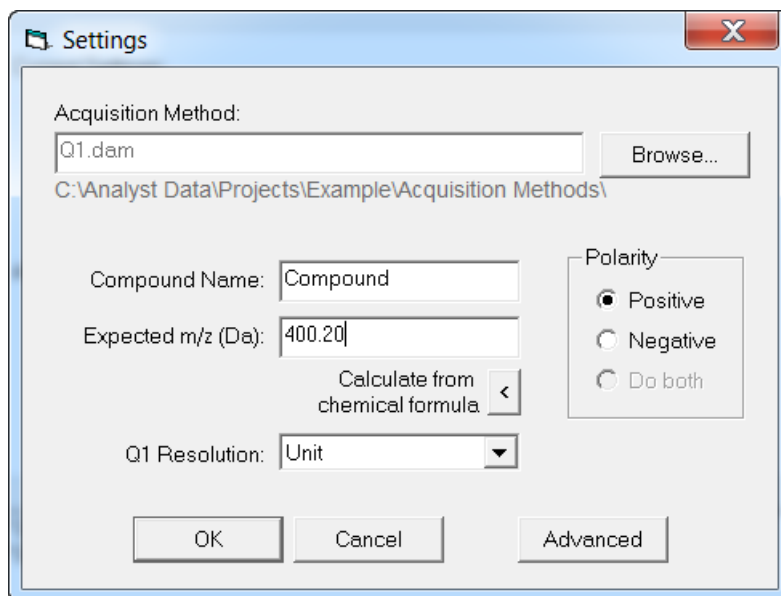
1. **Browse**를 클릭하여 스타터 획득 방법으로 이동합니다. 이 방법에는 최적화에 사용할 소스 조건이 포함되어 있습니다.
2. **Compound Name** 필드에 화합물 이름을 입력합니다. 이 이름은 생성되는 모든 획득 방법과 데이터 파일에 접두사로 사용됩니다.

3. **Expected m/z (amu)** 필드에 화합물의 예상 질량 대 전하비(m/z)를 입력합니다. 화합물의 m/z 값을 모르면 **Calculate from chemical formula**를 클릭하여 화합물의 화학식을 토대로 이 값을 계산합니다. 자세한 정보는 [Calculate m/z](#) 섹션을 참조하십시오.
4. **Q1 Resolution** 필드에서 MS/MS 및 MS3에 사용할 Q1 분해능을 선택합니다.
5. **Polarity** 그룹에서 극성을 클릭합니다. 스타터 방법과는 다른 극성을 선택할 수 있습니다. **Do both** 옵션은 현재 지원되지 않습니다.
6. 최적화 프로세스에 사용되는 일부 설정을 수정하려면 **Advanced**를 클릭합니다. 자세한 정보는 [Advanced Settings 대화 상자 사용](#) 섹션을 참조하십시오.
7. 업데이트된 설정을 확인하고 사용하려면 **OK**를 클릭합니다.

스크립트 사용

1. 아직 존재하지 않는 경우 시동 장치 정량화 방법을 작성합니다. 시동 장치 방법은 Manual Tune에서 생성한 Q1 획득 방법이어야 하며 스크립트에 의해 최적화되지 않았으므로 조정 프로세스에 필요한 소스 조건을 포함해야 합니다.
2. 필요한 프로젝트의 Acquisition Methods 폴더에 방법을 저장합니다. 생성되는 모든 파일은 이 폴더에 저장됩니다.
3. **Script > MRM3 Optimization**을 클릭합니다.

그림 2-5 Settings 대화 상자



4. 최적화 프로세스에 필요한 화합물 정보를 입력하고 Settings 대화 상자의 **OK**를 클릭합니다.
5. 최적화 프로세스를 시작하려면 MRM3 Optimization 창에서 **Start**를 클릭합니다.

Calculate m/z

m/z 계산기는 Settings 대화 상자를 통해 액세스됩니다.

1. MRM3 Optimization 창에서 **Settings**를 클릭합니다.
Settings 대화 상자가 열립니다.
2. **Calculate from chemical formula**를 클릭합니다.

그림 2-6 Calculate m/z 대화 상자

3. **Chemical Formula** 필드에 화합물의 화학식을 입력합니다. 성분에는 대문자를 사용합니다. 펩티드의 화학 수식도 이 대화 상자에 입력됩니다.
4. **Num of charges** 필드에서 전하 수를 클릭합니다.
5. 입력한 화학식 및 전하의 m/z 를 계산하려면 **Calculate**를 클릭합니다.
6. 계산기를 닫고 Settings 대화 상자의 **Expected m/z (amu)** 필드를 계산된 m/z 로 업데이트하려면 **Use m/z**를 클릭합니다.

Advanced Settings 대화 상자 사용

이 대화 상자에는 각각의 최적화 단계에 대한 설명이 제공됩니다. 일부 설정을 수정하여 최적화를 사용자 지정할 수 있습니다.

1. MRM3 Optimization 창에서 **Settings**를 클릭합니다.
Settings 대화 상자가 열립니다.
2. **Advanced**를 클릭합니다.

그림 2-7 Advanced Settings 대화 상자

Advanced Settings

Enhanced Resolution
Finds the most intense peak within a 2 Da window of expected 1st precursor molecular weight. Mass range window defaulted to 30 Da around expected mass to charge ratio.
Scan Rate: 1000 (Da/s)
Cycles: 20

Q1 Multiple Ion
Optimizes DP and EP. DP re-optimized if -10<EP<10. CEP is optimized only when applicable. Smooths TIC 2 times and finds voltage yielding greatest ion count.
DP Ramp: Start 30, Stop 150, Step 5 (0-200V)
Dwell Time: 100 (ms)

Enhanced Product Ion
Finds the most intense 2nd precursor peaks, excluding any peaks within a 5 Da window of 1st precursor.
Scan Rate: 1000 (Da/s)
2nd Precursors: 6 (1-10)
Mass range: 300 to 1000
CE: 30 CES: 10
Cycles: 3

Multiple Reaction Monitoring
Optimizes CE values for the most intense 2nd precursor peaks by cycling through each XIC overlay. XIC graph smoothed 2 times and voltage yielding greatest ion count is determined. (CE is ramped for its entire range with a 2V step size)
Dwell Time: 50 (ms)

MS/MS/MS
XIC graph smoothed 2 times. Finds 2 most intense 3rd precursors at 5% max intensity. Exclude peaks within 2 Da window of 2nd precursor (parent must be <10% total ion count). (AF2 is ramped for optimal sensitivity.)
Scan Rate: 1000 (Da/s)
☒ Use Q0 Trapping
Fixed Fill Time: 50 (ms)
Mass range: 100 to 1000

Generate Final Methods
Creates final MS/MS/MS methods with mass range of 50 Da to 2nd precursor + 0.8 Da for each top 2nd precursor. Creates optimal MS/MS/MS method with 20 Da mass range window around most intense 3rd precursor.
☒ Save All Final Methods
☐ Save Optimal Method Only

OK Cancel

- Enhanced Resolution, Enhanced Product Ion 및 MS/MS/MS 그룹의 **Scan Rate** 필드에서 **ER**, **EPI** 및 **MS3**의 스캔 속도를 선택합니다.
- Q1 Multiple Ion** 그룹의 **DP Ramp** 필드에 최적화용 DP(디클러스터링 전위) 범위를 입력합니다. 이 범위는 절대값으로 표현되며 적정 극성은 Settings 대화 상자에서 선택한 설정에 따라 자동으로 적용됩니다.
- Enhanced Product Ion** 그룹에서 다음을 수행합니다.
 - 2nd Precursors** 필드에 MS3 최적화에 사용되는 두 번째 전구체(단편 이온)의 최대 개수를 입력합니다. 1~10 사이의 숫자를 입력합니다.
 - Mass range** 필드에 MS3 최적화용으로 선택할 두 번째 전구체의 질량 범위를 입력합니다.
 - CE** 필드에 충돌 에너지 값을 입력하고, **CES** 필드에 단편 이온을 선택할 수 있는 좋은 MS/MS 스펙트럼을 제공할 충돌 에너지 확산 값을 입력합니다.
- 각각의 두 번째 전구체에 대한 모든 최종 MS3 방법과 정량화 분석을 위한 최적의 MS3 방법을 생성하려면 **Generate Final Methods** 그룹에서 **Save All Final Methods**를 클릭합니다. 최적의 MS3 방법(가장 민감한 정량화 방법)만 저장하려면 **Save Optimal Method Only**를 클릭합니다.
- OK**를 클릭하여 업데이트된 Advanced Settings를 적용합니다.

최적화 진행 중 작업

최적화가 시작되면 Analyst MD 소프트웨어의 수동 조정 작업이 자동으로 중지됩니다. 스크립트를 실행 중인 동안에는 소프트웨어의 모든 기능을 여전히 사용할 수 있습니다. 최적화 절차의 각 부분이 완료될 때마다 Log.txt 파일도 업데이트됩니다. 언제든지 스크립트를 중지하려면 **Abort**를 클릭합니다. 스크립트의 예는 다음 그림을 참조하십시오. Overall Progress 섹션에서 검사 목록 이미지와 텍스트 글꼴은 다음 섹션에서 설명하는 다양한 상태를 나타냅니다.

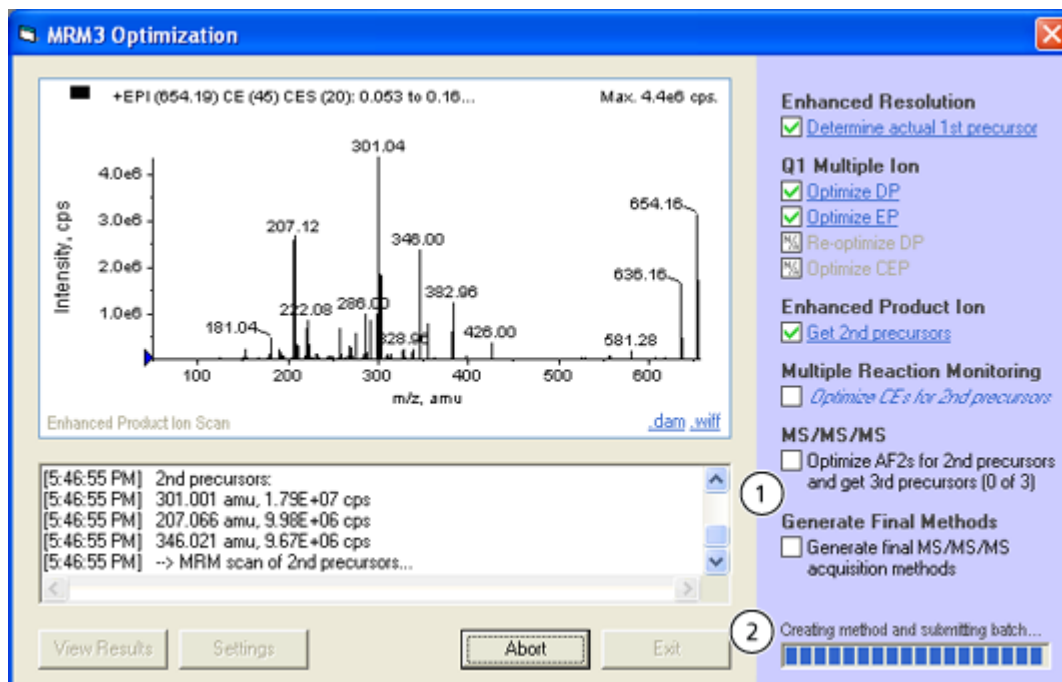
그림 2-8 상태 예

- ☐ ① Task not performed yet – text is black
- ② Task in progress* – text is blue and italic
- ☒ ③ Task will not be performed – text is grey
- ☒ ④ Task completed (hyperlink) – text is blue and underlined
- ⑤ Task completed (no link) – text is blue
- ⑥ Part of task completed (hyperlink) – text is blue, underlined, and italic

항목	설명
1	아직 수행되지 않은 작업 - 검정색 텍스트
2	진행 중인 작업 - 파란색 기울임꼴 텍스트
3	수행될 작업 - 파란색 밑줄 텍스트
4	완료된 작업(하이퍼링크) - 파란색 밑줄 텍스트
5	완료된 작업(링크 없음) - 파란색 텍스트
6	일부 작업 완료(하이퍼링크) - 파란색 밑줄 및 기울임꼴 텍스트

텍스트에 밑줄이 그어진 경우 웹 페이지 하이퍼링크처럼 이 텍스트를 클릭하면 해당 스펙트럼 또는 크로마토그램이 표시됩니다. 1~10회의 스캔을 지정할 수 있으므로 MS/MS/MS 아래에 있는 텍스트에는 수행 중인 MS3 스캔 번호도 표시됩니다. Overall Progress 섹션에는 Message 영역도 포함되어 있습니다. 이 영역의 진행률 표시줄에는 현재 단계 진행 상황이 표시됩니다. 진행률 표시줄 위에는 현재 최적화 단계에 대한 시간 및 다양한 상태 등을 알려주는 다양한 메시지가 표시됩니다.

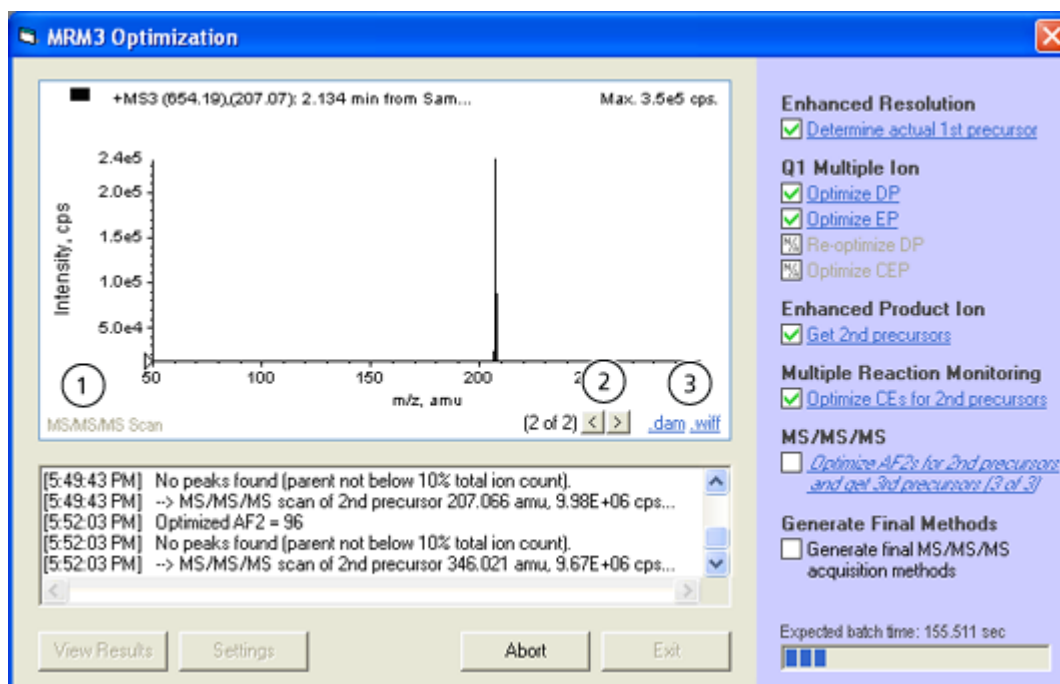
그림 2-9 EPI 스캔 후 MRM3 Optimization 창



항목	설명
1	검사 목록
2	메시지

스펙트럼 상태 창에는 이전에 생성한 스펙트럼 또는 크로마토그램이 표시됩니다. 확인 목록 항목 중 하나를 선택하면 해당 그래프가 표시됩니다. 스캔 유형 이름은 현재 표시 중인 스캔을 나타냅니다. 완료된 각 단계에 대해 표시된 그래프와 연결된 획득 방법(dam) 또는 데이터 파일(wiff)을 열 수 있습니다. MS/MS/MS 스캔이 표시되면 버튼을 사용하여 다른 MS3 스캔을 차례로 표시할 수 있습니다.

그림 2-10 MS3 스캔 중 MRM3 Optimization 창



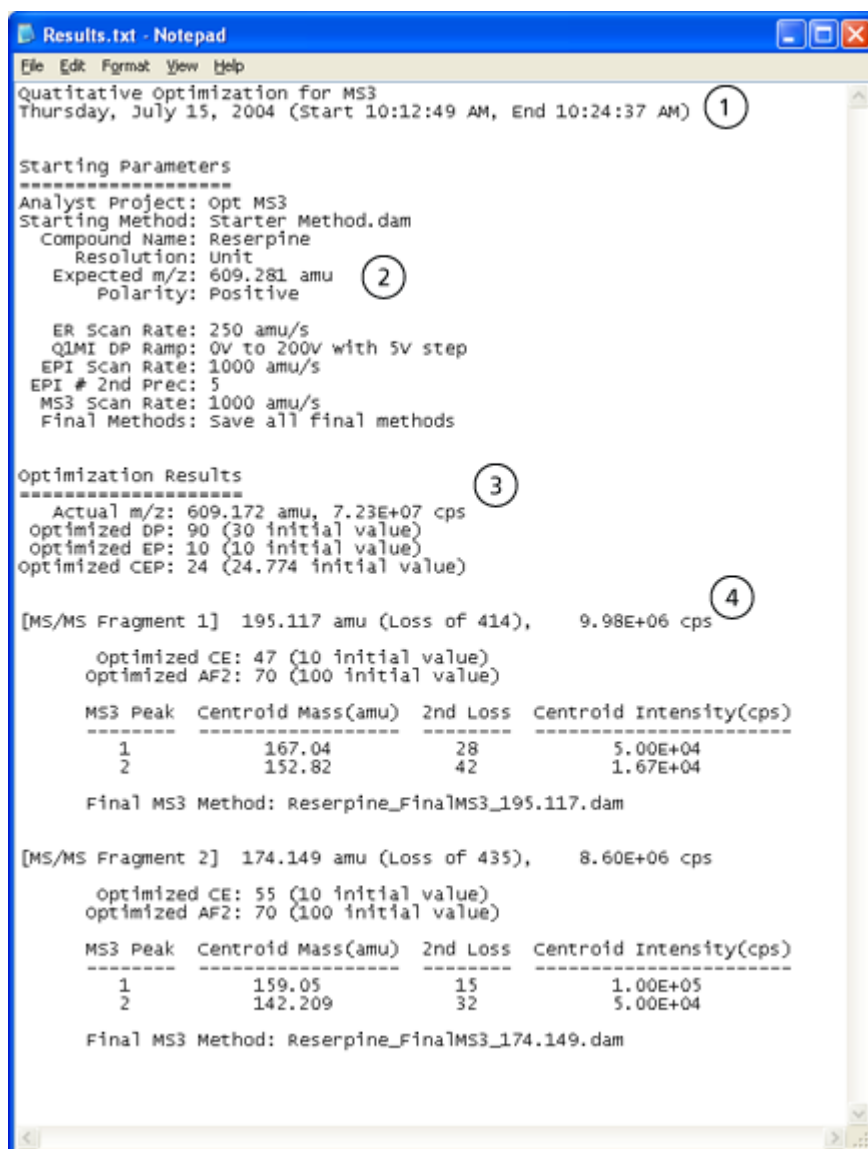
항목	설명
1	스캔 유형
2	다양한 MS3 스캔을 차례로 표시할 수 있는 버튼
3	링크

최적화 완료

MS3용 정량화 최적화가 완료되거나 중지된 경우 Results.txt 파일이 생성됩니다. 이 파일은 Microsoft Notepad에서 자동으로 열립니다. 파일을 보려면 MRM3 Optimization 창에서 **View Results**를 클릭합니다. 아래에서는 Results.txt 파일의 각 부분에 대해 설명합니다.

- 시간 및 기간: 최적화 날짜 및 시간 기간을 표시합니다.
- 사용자 시작 조건: 이 섹션에는 설정과 Advanced Settings가 표시됩니다.
- 검색된 최적화 조건: ER 및 Q1MI 스캔 중에 검색된 최적 조건을 표시합니다.
- 검색된 **MS3** 단편 및 관련 손실: 단편 및 최적 조건(충돌 에너지 및 여자 에너지)은 물론, EPI 스캔 및 MS3에 대해 검색된 관련 손실도 표시됩니다.

그림 2-11 최적화 보고서



항목	설명
1	Time and duration
2	User starting conditions
3	Optimization conditions found
4	MS3 fragments found and associated losses

생성된 모든 획득 방법에는 [공급된 화합물 이름] + [스캔 유형] + [m/z] + dam 형식의 설명 파일 이름이 지정됩니다. 이러한 방법은 시동 장치 획득 방법과 동일한 폴더에 저장됩니다.

모든 데이터, Log.txt 및 Results.txt 파일은 스타터 획득 방법과 동일한 프로젝트에 생성되는 Data 하위 폴더에 저장됩니다. 이 하위 폴더에는 [공급된 화합물 이름] + OptMS3 + ([날짜], [시

간]) 형식의 이름이 지정됩니다. 데이터 파일에는 [공급된 화합물 이름] + [스캔 유형] + [m/z] + .wiff 형식의 이름이 지정됩니다.

스크립트 논리에 대한 자세한 설명: 초기화

이 섹션에서는 최적화 프로세스의 각 단계에 대해 설명합니다. 모든 스캔은 스캔 수 합계가 3으로 설정된 상태에서 수행됩니다.

MRM3 Optimization 스크립트는 최적화 스캔을 수행하기 전에 먼저 다음과 같은 최적화 단계를 수행합니다. 이 중 어느 단계에서든 오류가 발생하면 스크립트의 최적화 프로세스가 중지됩니다.

1. Analyst MD 소프트웨어가 실행 중인지 확인합니다.
2. 스타터 획득 방법을 로드하여 해당 획득 방법이 유효한지 확인하고 장치 유형을 확인합니다.
3. 새 Data 하위 폴더를 생성하여 wiff 파일을 저장합니다.
4. Log.txt 파일을 생성합니다.

고급 분해능 스캔

이 단계에서는 최적화에 사용되는 이온의 질량을 확인합니다. 지정된 스캔 속도에서 20회 동안 ER 스캔이 수행됩니다. 그런 다음 예상되는 첫 번째 전구체 m/z 값의 $\pm 1\text{amu}$ 내에서 최대 강도 피크가 선택됩니다. Analyst MD 소프트웨어에서와 마찬가지로, 이 스캔은 지정된 m/z 값을 중심으로 한 30amu 질량 범위에서 수행됩니다. 다중 전하 종의 경우 이 단계에서 C12 이온이 결정됩니다.

Q1 다중 이온 스캔

이 단계에서는 최대 충돌 셀까지 관심 이온의 전송을 최적화합니다. 이 단계는 Q1 MI 스캔을 사용하여 수행됩니다. 이 스크립트는 먼저 지정된 DP 램프에서 스캔을 수행하여 DP 매개 변수를 최적화합니다. 1V에서 12V까지(음성 모드의 경우 -12V에서 -1V까지) 0.5V씩 점진적으로 증가시키면서 EP 매개 변수를 최적화합니다. 최적 EP가 10V보다 작은 경우(음성 모드의 경우 -10V보다 큰 경우) DP가 다시 최적화됩니다. CEP 매개 변수도 0V에서 100V까지(음성 모드의 경우 -100V에서 0V까지) 2V씩 점진적으로 증가시키면서 최적화합니다. 최적 전압을 결정할 때는 그래프를 2회 다듬은 후 최대 이온 수를 산출하는 전압이 사용됩니다. 각 스캔의 Dwell Time은 100ms로 설정됩니다.

고급 생성 이온 스캔

이 단계에서는 MS3 최적화에 사용될 단편 이온을 선택합니다. 이 단계는 선택한 스캔 속도에서 3회 동안 EPI 스캔을 사용하여 수행됩니다. 분석할 화합물에 대해 최적 CE를 지정할 수 있습니다. 최적 CE를 알 수 없으면 CE 설정 범위가 사용되도록 CES 값을 지정합니다. 그러고 나면 강도가 가장 강한 두 번째 전구체 피크가 검색됩니다. 단, 첫 번째 전구체의 $\pm 2.5\text{amu}$ 구간 내 피크는 모두 제외됩니다. 사용할 두 번째 전구체 수가 Advanced Settings에서 선택됩니다. 두 번째 전구체가 선택되는 질량 범위는 사용자가 지정합니다.

다중 반응 모니터링 스캔

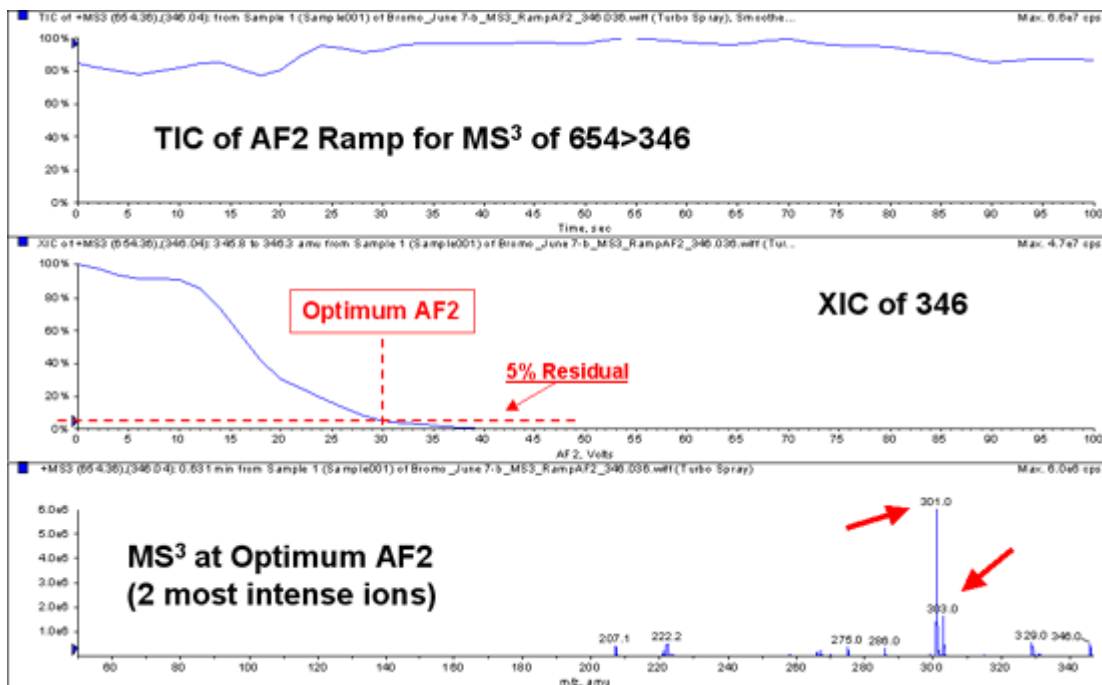
이 단계는 EPI 스캔에서 선택한 각각의 단편 이온에 대한 충돌 에너지를 최적화합니다. 이 단계는 MRM 스캔을 사용하여 수행됩니다. 2 V씩 증가/감소되는 5 ~ 130 V(음성 모드인 경우 -130 ~ -5 V)의 CE 램프와 50 ms의 Dwell Time을 사용합니다. 그리고 나면 각각의 겹친 그래프를 2회 다듬고 나서 최대 이온 수를 산출하는 전압이 최적 CE 값으로 사용됩니다.

MS/MS/MS(MS3) 스캔

이 스크립트는 선택한 각각의 두 번째 전구체에 대해 지정된 스캔 속도로 MS3(MS/MS/MS) 스캔을 수행합니다. 이 때 양 극성에 대해 2mV씩 증가/감소되는 0~100V의 AF2 램프를 사용합니다. 스캔의 채우기 시간은 이미 설정되어 있으며 필요할 경우 감도를 최대화하기 위해 Q0trapping 기능을 설정할 수 있습니다. MS/MS/MS(MS3) 스캔의 질량 범위 하한값을 지정할 수 있으며, 상한값은 두 번째 전구체 + 5amu입니다.

생성된 그래프는 2회 다듬어지며, 다음 그림과 같이 두 번째 전구체의 잔류물 강도(XIC 기반)가 최대 강도의 5% 범위일 때 최적 AF2가 얻어집니다. 그런 다음 이 AF2 값의 스펙트럼을 사용하여 강도가 가장 높은 두 개의 2세대 단편 이온을 찾습니다. 이 때 두 번째 전구체의 ± 1 amu 이내에 있는 피크는 제외됩니다. 두 번째 전구체의 m/z 값이 총 이온 수의 10%보다 크면 해당 스펙트럼의 단편은 사용되지 않습니다. 두 번째 전구체의 m/z 가 10%보다 크면 단편화가 충분하지 않은 것이기 때문입니다.

그림 2-12 AF2 결정 방식



최종 방법 생성

최적화 스캔이 수행된 후 스크립트는 최종 MS/MS/MS 방법을 생성합니다. Advanced Settings 대화 상자에서 **Save Optimal Method Only** 옵션을 클릭하면 최대 강도의 2세대 단편 이온을 중심으로 ± 10 amu인 최적 MS/MS/MS 방법만 생성됩니다. **Save All Final Methods** 옵션을

클릭하면 사용자 정의 하한 amu부터 상한(두 번째 전구체 + 5) amu까지의 질량 범위를 사용하여 맨 위 두 번째 전구체 각각에 대한 최적 방법과 MS/MS/MS 방법이 생성됩니다.

MSServiceLog 스크립트

기본적으로 질량 분석계의 리드백은 MS Service Log 파일에 기록됩니다. MS Service Log 파일에서 기기 리드백 기록을 해제하거나 기기 리드백 기록을 시작하려면 MSServiceLog 스크립트를 사용합니다. MSServiceLog 스크립트는 4500MD 및 Citrine 시스템 시스템에만 사용할 수 있습니다.

MSServiceLog 스크립트는 활성 하드웨어 프로필이 없어도 사용할 수 있지만, MS Service Log 설정에 대한 모든 변경 사항은 하드웨어 프로필이 다시 활성화된 후에만 적용됩니다.

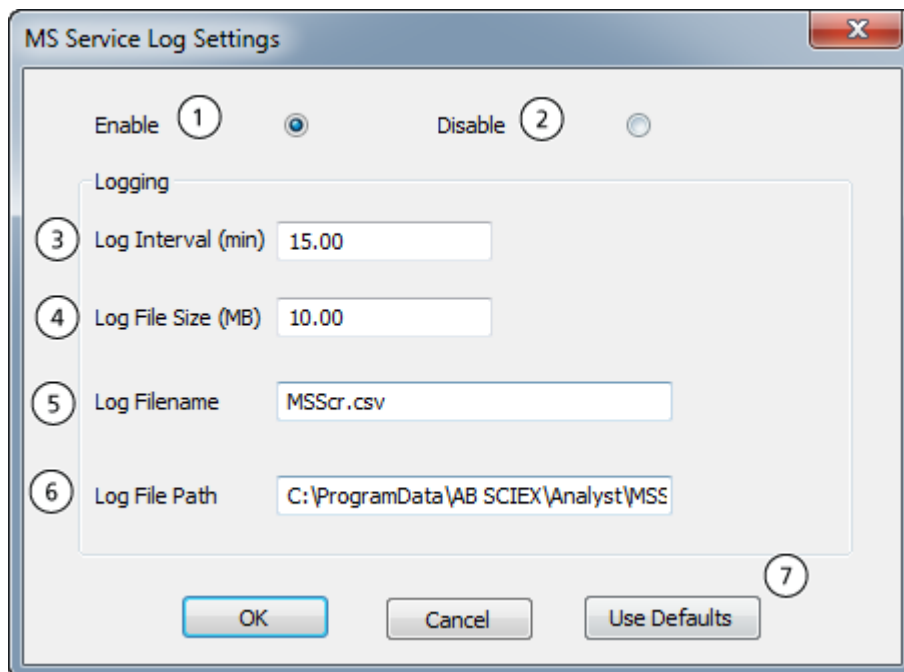
스크립트 설치

[스크립트 설치](#) 내용을 참조하십시오.

스크립트 사용

1. 하드웨어 프로필을 비활성화합니다.
2. **Script > MSServiceLog**를 클릭합니다.

그림 2-13 MS Service Log Settings 대화 상자



항목	이름	설명
1	Enable	선택하면, MSServiceLog 스크립트를 사용하여 질량 분석계의 리드백을 MS Service log 파일에 기록하기 시작합니다.

항목	이름	설명
2	Disable	선택하면, MSServiceLog 스크립트를 사용하여 질량 분석계의 리드백을 MS Service log 파일에 기록하기를 종료합니다.
3	Log Interval (min)	질량 분석계의 리드백을 MS Service Log 파일에 기록할 간격을 분 단위로 지정합니다. 기본값은 15분이며, 허용 범위는 1분부터 1440분까지입니다.
4	Log File Size (MB)	로그 파일의 크기를 지정합니다. 기본 크기는 10MB이며, 허용 범위는 1MB부터 1000MB까지입니다. 로그 파일은 최대 두 개가 있을 수 있습니다. <ul style="list-style-type: none"> 기기의 리드백이 기록되는 현재 로그 파일. 보관된 로그 파일. 현재 로그 파일의 크기가 명시된 크기가 되면, 사전 정의된 보관 파일명으로 보관되며, 리드백을 기록하기 위해 MS Service Log Settings 대화 상자에 명시된 로그 파일명으로 현재 로그 파일이 생성됩니다.
5	Log Filename	로그 파일 파일명을 명시합니다. 허용되는 파일 확장자는 csv, txt 또는 log입니다.
6	Log File Path	로그 파일이 저장되는 위치를 지정합니다. 새 위치가 기본 위치인 C:\ProgramData\AB SCIEX\Analyst\MSServiceLog 안에 생성되도록 하십시오.
7	Use Defaults	대화 상자의 모든 필드를 사전 설정된 값으로 되돌리려면 클릭합니다.

3. MS Service Log 파일의 리드백 기록을 해제하려면 **Disable**을 클릭합니다.
4. 질량 분석계의 리드백을 MS Service Log 파일에 기록하기 시작하려면 **Enable**을 클릭합니다.
5. MS Service Log Settings 대화 상자에 있는 다른 필드의 값을 변경하려면 [그림 2-13](#)의 설명을 참조하십시오.
6. **OK**를 클릭하여 변경 사항을 적용합니다.

sMRM Calculator

Scheduled MRM 알고리즘 획득 방법의 시각적 표현을 보려면 sMRM Calculator 스크립트를 사용합니다. 이 스크립트는 네 개의 그래프를 사용하여 MRM 전이의 개요, 동시성, 예상 주기 시간, 그리고 MRM 전이에 적용될 지속 시간을 보여줍니다. 자세한 정보는 [그림 2-15](#)에서 확인하십시오. 실행 시간 동안 전이가 적절하게 배열되도록 하려면 스크립트 대화 상자에서 **Maximum Dwell**, **Minimum Dwell**, **Target sMRM Cycle Time** 또는 **Target sMRM Scan Time**, **Window Width**, **MRM Pause Time**, **Settling Time** 등의 매개 변수 값을 변경합니다.

스크립트

그러면 네 개의 그래프가 그에 따라 업데이트됩니다. 필요한 전이 배열을 얻을 때까지 이 절차를 반복합니다.

참고: 원래 방법에 **Target Cycle Time**이 선택되어 있으면 스크립트 대화 상자에서 이를 **Target Scan Time**으로 변경할 수 없습니다. 원래 방법에 **Target Scan Time**이 선택되어 있으면 스크립트 대화 상자에서 이를 **Target Cycle Time**으로 변경할 수 없습니다.

참고: Citrine 시스템의 경우에만 sMRM Calculator 스크립트 대화 상자에서 **Settling time** 옵션을 수정할 수 있습니다.

스크립트 설치

[스크립트 설치](#) 내용을 참조하십시오.

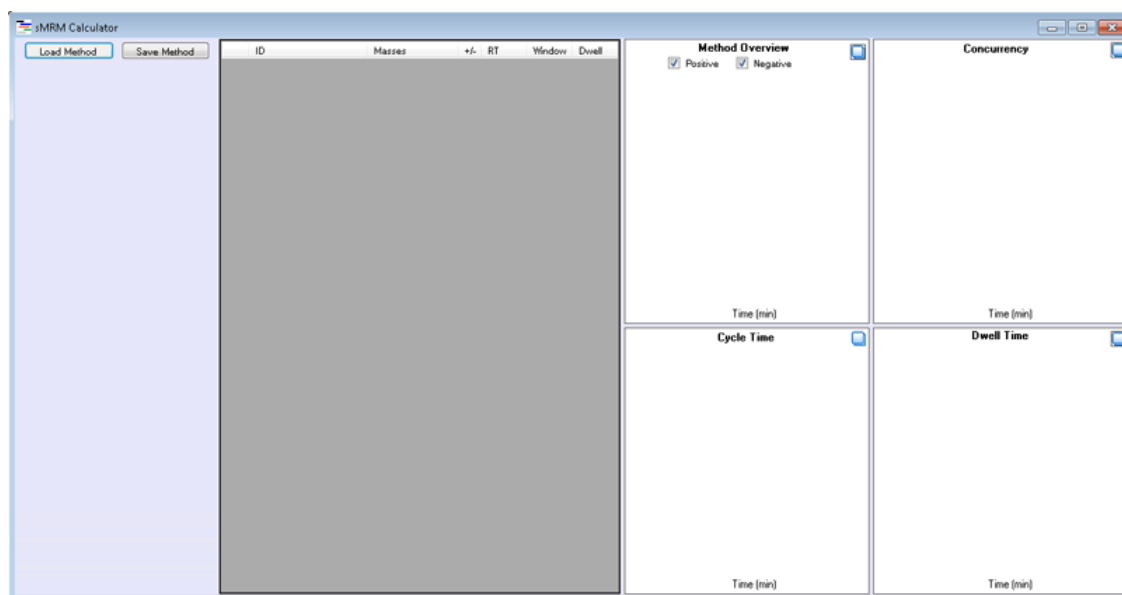
스크립트 사용

선행 조건

- Analyst MD 소프트웨어가 열려 있으며 하드웨어 프로필이 활성 상태인지 확인합니다.
- Scheduled* MRM 알고리즘 획득 방법이 이미 생성되었는지 확인합니다.

1. **Script > sMRM Calculator**를 클릭합니다.
sMRM Calculator 대화 상자가 열립니다.

그림 2-14 sMRM Calculator 대화 상자



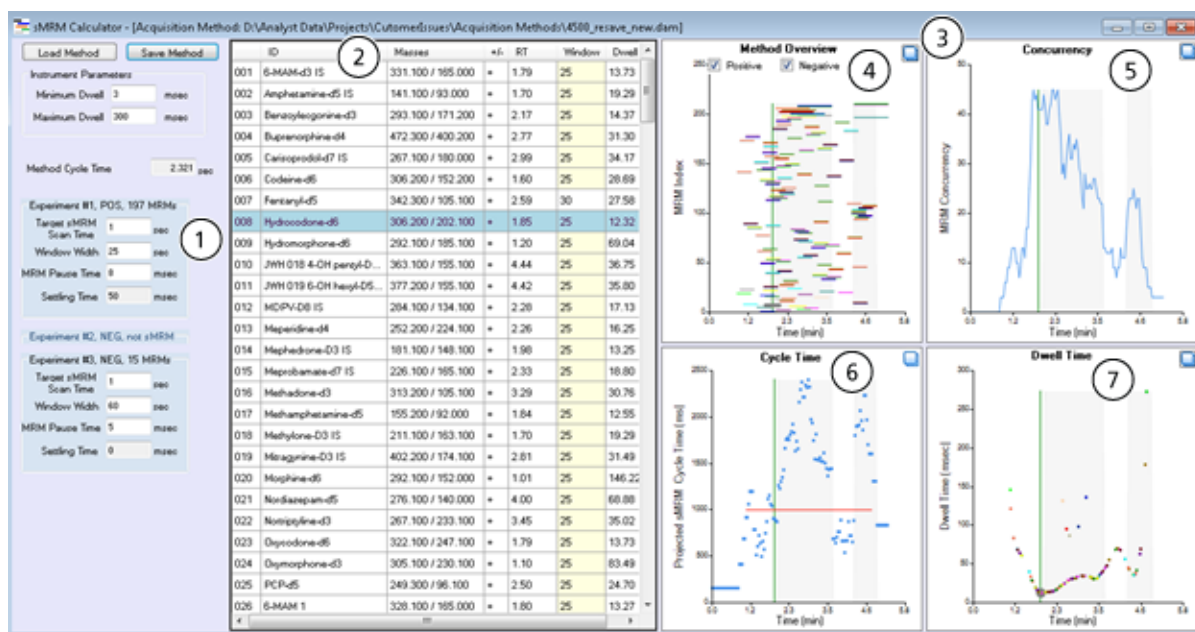
2. **Load Method**를 클릭하여 기존 *Scheduled* MRM 알고리즘 획득 방법을 선택합니다.
Open 대화 상자가 열립니다.

참고: **Scheduled MRM** 알고리즘 실험을 포함하고 있으며, 현재 선택한 프로젝트에서 활성 상태인 질량 분석계에 대한 획득 방법만 sMRM Calculator 스크립트에서 열 수 있습니다. **Scheduled MRM** 알고리즘 실험에 대한 세부 정보만 표시됩니다. **Scheduled MRM** 알고리즘 실험이 아닌 것은 스크립트에 **Scheduled MRM**이 아니라고 표시됩니다.

3. **Scheduled MRM** 알고리즘 획득 방법을 선택한 다음 **Open**을 클릭합니다.

sMRM Calculator 대화 상자에 선택한 획득 방법이 열립니다. 열린 획득 방법 파일의 파일 경로가 대화 상자 제목에 표시됩니다.

그림 2-15 sMRM Calculator 대화 상자에 열린 획득 방법



항목	설명
1	<p>왼쪽 창에는 기기 및 <i>Scheduled</i> MRM 알고리즘 매개 변수가 포함되어 있습니다. 이 창에 표시된 매개 변수는 열린 획득 방법에 따라 변경됩니다.</p> <p>전이의 정렬이 오른쪽 창의 네 개의 그래프에 적합하지 않을 경우, 왼쪽 창에 편집 가능한 매개 변수와 설정이 변경됩니다. 테이블과 그래프에서 영향을 받는 열도 그에 따라 업데이트됩니다. 적합한 전이 배열을 얻을 때까지 허용 가능한 범위 내에서 매개 변수 값을 수정할 수 있습니다.</p> <p>예를 들어 Target sMRM Scan Time 필드의 값이 변경되면 테이블의 지속 시간이 다시 계산되어 업데이트되며 그래프도 그에 따라 업데이트됩니다.</p> <p>예를 들어 Windows Width 필드의 값이 변경되면 이 전역 설정을 사용하는 모든 전이의 Window 열에서 이 값이 업데이트됩니다. 또한 테이블에서 모든 전이의 지속 시간이 다시 계산되어 업데이트됩니다. 오른쪽 창의 그래프도 그에 따라 업데이트됩니다. <i>Scheduled</i> MRM Pro 알고리즘 획득 방법에서 자체 검출 범위 설정이 있는 전이의 경우, 왼쪽 창에서 전역 설정인 Window Width를 업데이트해도 테이블에서는 해당 전이의 Window 열 값이 업데이트되지 않습니다.</p> <p>참고: 왼쪽 창에 회색으로 표시된 필드는 편집할 수 없으며 값을 변경할 수 없습니다.</p>
2	<p>가운데 창에는 인덱스, 화합물 ID, Q1 및 Q3 질량, 극성, 범위 폭, 머무름 시간, 지속 시간이 표시됩니다. 기본 보기는 인덱스 번호순으로 정렬됩니다.</p> <p>다른 열의 정보를 기준으로 보기를 다시 배열하려면 7개 열(index, ID, Masses, +/-, RT, Window 및 Dwell) 중 하나의 제목을 클릭합니다. 그러면 가운데 창이 새로 고쳐지고 선택한 열의 영숫자 또는 숫자 순서로 정렬된 정보가 표시됩니다.</p> <p>SCIEX 4500MD 및 Citrine 시스템을 위한 방법의 경우, 테이블에서 해당 <i>Scheduled</i> MRM 알고리즘 실험의 모든 전이에 대한 범위 폭을 편집할 수도 있습니다. 오른쪽 창의 테이블과 그래프에 표시된 지속 시간도 그에 따라 업데이트됩니다. 테이블에서 범위 폭을 편집하면 <i>Scheduled</i> MRM 알고리즘 획득 방법이 <i>Scheduled</i> MRM Pro 알고리즘 획득 방법으로 변환됩니다.</p> <p>참고: 왼쪽 창에서 전역 설정을 사용하는 범위 폭은 배경색이 노란색입니다. 개별 전이에 대해 테이블 내의 범위 폭이 수동으로 수정되었거나 이미 해당 전이에 대해 지정된 고급 범위 폭을 사용하고 있는 경우에는 해당 셀의 배경색이 흰색으로 바뀝니다.</p>

항목	설명
3	<p>오른쪽 창에는 로드된 Scheduled MRM 알고리즘 획득 방법에 포함된 모든 Scheduled MRM 알고리즘 전이가 네 가지 다른 유형의 그래프로 표시됩니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> 테이블에서 선택한 MRM 전이는 그래프에서 녹색 수직선으로 표시됩니다. 그래프의 밝은 회색 영역은 각 주기에 극성 전환이 있는 머무름 시간 영역을 나타냅니다. 각 그래프의 도구 설명에는 커서 아래 전이의 X 값과 Y 값이 표시됩니다. Method Overview 및 Dwell Time 그래프의 경우 화합물 ID도 도구 설명에 표시됩니다. Method Overview 그래프에서 MRM 전이를 클릭하면 다른 세 개의 그래프와 테이블에서 해당 전이가 선택됩니다.
4	첫 번째 그래프인 Method Overview에는 모든 전이와 각 전이의 검출 범위가 표시됩니다. X축에는 머무름 시간이 표시됩니다. Y축에는 전이가 방법에 입력된 순서를 나타내는 MRM 인덱스 번호가 표시됩니다.
5	두 번째 그래프인 MRM Concurrency에서는 X축에 머무름 시간이 표시되고 Y축에 각 머무름 시간에서의 MRM 전이 동시성이 표시됩니다.
6	<p>세 번째 그래프인 Projected sMRM Cycle Time에는 머무름 시간 동안의 예상 주기 시간이 표시됩니다. 빨간색 선은 Target Cycle Time(사용된 경우)을 나타냅니다. Target Scan Time이 사용된 경우 빨간색 선의 값은 Target sMRM Scan 시간의 총합(해당 방법 내 모든 Scheduled MRM 알고리즘 실험에 대한 총합)입니다.</p> <p>참고: Projected sMRM Cycle Time이 Target Cycle Time 또는 Target Scan Time의 총합(빨간색 막대 위치)보다 훨씬 작은 전이의 경우 더 많은 데이터 포인트가 예상됩니다. Projected sMRM Cycle Time이 Target Cycle Time 또는 Target Scan Time의 총합(빨간색 막대 위치)보다 훨씬 큰 전이의 경우 더 적은 데이터 포인트가 예상됩니다.</p>
7	네 번째 그래프에는 머무름 시간에서의 각 전이의 지속 시간이 표시됩니다. X축에는 머무름 시간이 표시됩니다. Y축에는 적용할 지속 시간이 표시됩니다.

- 매개 변수 값을 필요한 대로 변경하여 **Projected sMRM Cycle Time**이 더 고르게 분포될 수 있도록 방법을 최적화합니다.
 - Save Method**를 클릭합니다.
Save Method File 창이 열립니다.
- 방법에 대한 변경 사항은 원래 획득 방법에 저장하거나 새 획득 방법으로 저장할 수 있습니다. 원래 획득 방법에 변경 사항을 저장하면 새 값이 원래 매개 변수 값을 덮어씁니다.
- 새 파일 이름을 입력하거나 원래 방법을 선택한 다음 **Save**를 클릭합니다.

7. 새로운 변경 사항을 보려면 저장된 획득 방법을 **Acquisition Method Editor**에서 엽니다.
원래 방법을 **Acquisition Method Editor**에서 연 경우 해당 방법을 닫았다 다시 열어야 합니다.
8. **sMRM Calculator** 대화 상자의 우측 상단에 있는 **X**를 클릭하여 대화 상자를 닫습니다.

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.
