

Analyst MD 소프트웨어

Scheduled MRM 알고리즘 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.

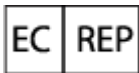
Rx only.

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

Scheduled MRM 알고리즘 자습서	4
목표.....	4
Scheduled MRM 알고리즘 정보.....	4
관련 문서.....	5
선행 조건.....	6
csv 또는 txt 파일 생성.....	6
Scheduled MRM 알고리즘 획득 방법 생성.....	6
두 개의 Scheduled MRM 알고리즘 실험을 사용하는 획득 방법 생성.....	13
추출 이온 크로마토그램 생성.....	13
MRM 전이 보기.....	15
정량화 방법 생성.....	16
Results Table 검토.....	17
Scheduled MRM Pro 알고리즘 정보.....	20
Scheduled MRM Pro 알고리즘 획득 방법 생성.....	21
IDA에서 Scheduled MRM Pro 알고리즘이 미치는 영향.....	24
IDA Scheduled MRM Pro 알고리즘 획득 방법 생성.....	24
파일 정보에서 Scheduled MRM Pro 알고리즘 매개 변수 보기.....	25
Scheduled Ionization을 사용하여 Scheduled MRM Basic 또는 Pro 알고리즘 획득 방법 생성.....	26
 문의하기.....	 28
고객 교육.....	28
온라인 학습 센터.....	28
SCIEX 지원 부서.....	28
사이버 보안.....	28
문서.....	28

Scheduled MRM 알고리즘 자습서

목표

여기에서는 다음 작업 방법을 배웁니다.

- *Scheduled* MRM 알고리즘 전이를 모니터링하기 위한 방법 생성.
- 추출 이온 크로마토그램에서 *Scheduled* MRM 알고리즘 전이 확인.
- 정량화 방법을 생성하고 Results Table을 검토하여 정량적 데이터 분석.
- *Scheduled* MRM Pro 알고리즘 획득 방법 생성.
- IDA *Scheduled* MRM Pro 알고리즘 획득 방법 생성.

Scheduled MRM 알고리즘 정보

Scheduled MRM 알고리즘은 획득 방법 생성 시 제공되는 MRM(다중 감응 모니터링) 전이, 머무름 시간 및 화합물 ID의 목록을 기반으로 수백 가지 화합물을 획득하는 데 도움이 됩니다. *Scheduled* MRM 알고리즘 기능은 다중 기간 실험의 요구 사항을 줄여 줍니다. 또한 IDA(정보 종속 획득) 방법에서는 이를 조사 스캔으로 사용할 수도 있습니다.

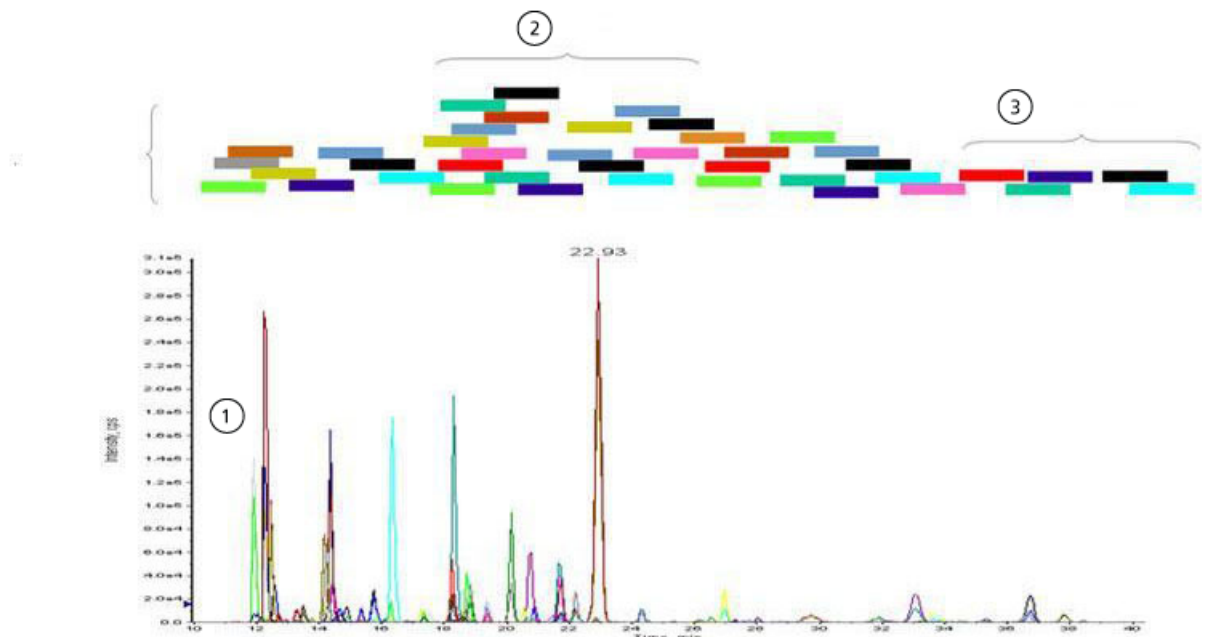
이 알고리즘은 크로마토그래픽 피크 전체의 포인트를 최대화하여 더 나은 피크 검출과 향상된 재현성을 제공합니다. 이 기능을 사용하면 Results Table에 Compound ID, Analyte Integration Quality Index 및 IS Integration Quality Index 열을 표시하여 여러 MRM 전이가 포함된 데이터 파일을 볼 수도 있습니다. SCIEX 3200MD 시스템의 경우 *Scheduled* MRM 알고리즘에서 지원되는 최대 전이 수는 1,000개입니다. SCIEX 4500MD 및 Citrine 시스템의 경우 *Scheduled* MRM 알고리즘에서 지원되는 최대 전이 수는 4,000개입니다.

참고: **Analyte Integration Quality Index** 열과 **IS Integration Quality Index** 열은 Results Table의 MRM 데이터에도 사용할 수 있습니다.

다음 그림에서는 *Scheduled* MRM 알고리즘 LC 실행의 예를 보여줍니다. 동시에 모니터링되는 MRM 전이의 수는 LC 분석 중에는 변동이 있지만 주입 간에는 일정하게 유지됩니다.

그림 1 Scheduled MRM 알고리즘 LC 실행의 일반적인 예

Scheduled MRM Algorithm



항목	설명
1	모니터링된 MRM 전이.
2	모니터링된 높은 MRM 전이 횟수.
3	모니터링된 낮은 MRM 전이 횟수.

Scheduled MRM 알고리즘으로 많은 수의 전이를 처리하려면 데이터 처리에 MultiQuant MD 소프트웨어를 사용합니다. 자세한 정보는 SCIEX 영업 담당자에게 문의하십시오.

관련 문서

- 질량 분석계 시스템 사용자 안내서
- 고급 사용자 안내서
- 스크립트 사용자 가이드(Create Quan Methods From Text Files 스크립트 및 Create Text File from Quan Method 스크립트에 대한 자세한 정보)
- 정보 종속 획득 자습서(IDA를 사용하는 방법 생성에 대한 자세한 정보)
- Analyst 도움말

선행 조건

선행 조건

다음은 할 수 있습니다.

- 획득 방법 생성
- 배치 제출
- 획득 방법을 생성하고 Results Table을 생성 및 검토합니다.

다음과 같은 주변 장치가 하드웨어 프로필에 포함되어 있어야 합니다.

- LC 펌프
- 오토샘플러

csv 또는 txt 파일 생성

원하는 경우 *Scheduled MRM* 방법의 전이 정보를 csv 또는 txt 파일로 생성 및 저장한 다음 이 *Scheduled MRM* 알고리즘 방법의 질량 범위 테이블로 가져올 수 있습니다. csv 또는 txt 파일 생성 시 다음 기준을 사용합니다.

- 파일은 머리글, 열 제목 또는 행 제목을 포함하지 않아야 합니다.
- 파일 내 열의 순서 및 개수는 질량 범위 테이블 내 열의 순서 및 개수와 일치해야 합니다.
- MRM 및 *Scheduled MRM* 알고리즘 방법의 경우 비어 있는 셀이 없어야 합니다. *Scheduled MRM Pro* 알고리즘 방법의 경우 **Window** 및 **Threshold** 열은 기본값을 사용할 수 있도록 공백으로 둘 수 있습니다. **Group** 열도 공백으로 둘 수 있습니다.

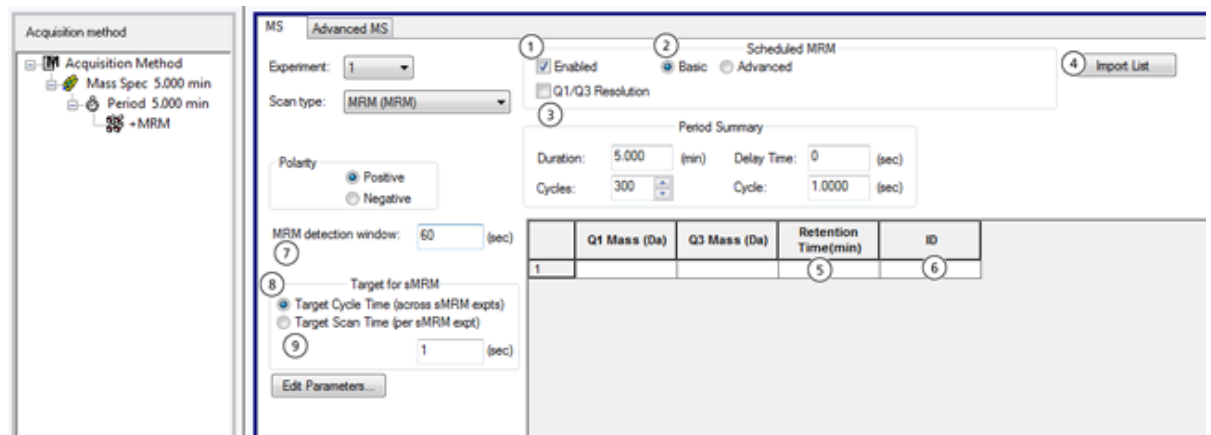
파일은 csv 또는 txt 확장자로 저장해야 합니다.

Scheduled MRM 알고리즘 획득 방법 생성

참고: SCIEX 4500MD 및 Citrine 시스템의 경우, 예약되지 않은 MRM 전이는 최대 1,250개, *Scheduled MRM* 알고리즘을 사용한 MRM 전이는 최대 4,000개까지 획득할 수 있습니다. SCIEX 3200MD 시스템의 경우, 예약되지 않은 MRM 전이는 최대 300개, *Scheduled MRM* 알고리즘을 사용한 MRM 전이는 최대 1,000개까지 획득할 수 있습니다.

1. 탐색 모음에서 **Acquire** 아래의 **Build Acquisition Method**를 두 번 클릭한 다음 Acquisition Method 창에서 **Mass Spec** 아이콘을 선택합니다.
2. 선택한 **Scan Type**이 **MRM**인지 확인한 다음 **Scheduled MRM** 그룹에 있는 **Enabled** 확인란을 선택합니다. SCIEX 4500MD 및 Citrine 시스템을 위한 방법을 생성하려면 [그림 2](#)의 기능을 참조하십시오. SCIEX 3200MD 시스템을 위한 방법을 생성하려면 [그림 3](#)의 기능을 참조하십시오.

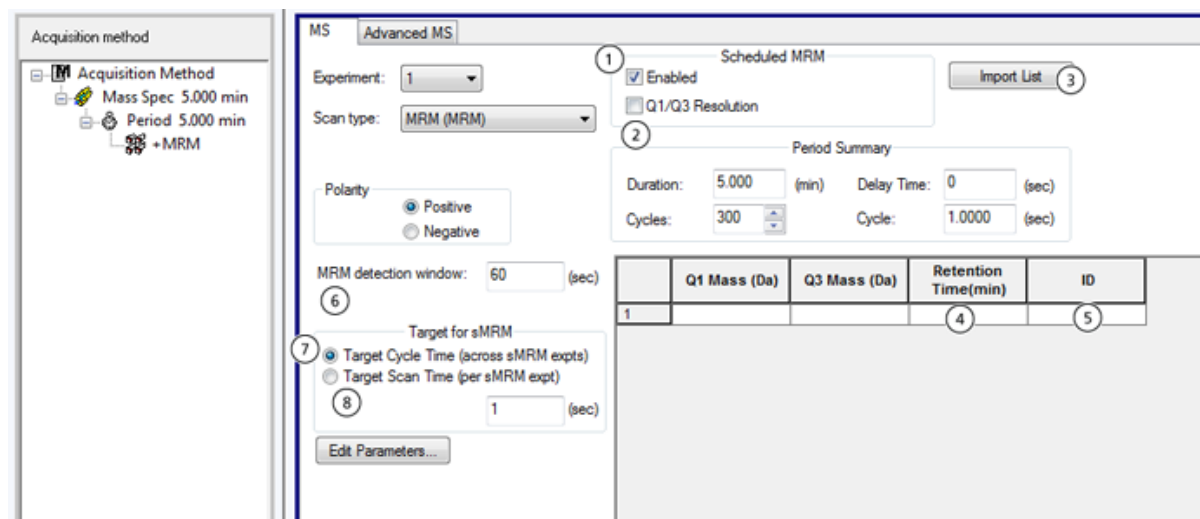
그림 2 **Scheduled MRM** 알고리즘 소프트웨어 기능 - **SCIEX 4500MD** 및 **Citrine** 시스템
용



항목	설명
1	Scheduled MRM 그룹의 Enabled 확인란: 기본 및 고급 Scheduled MRM 알고리즘 기능을 활성화하려면 선택합니다.
2	Basic 옵션: 기본 Scheduled MRM 알고리즘 기능을 활성화하려면 선택합니다. Basic은 사전 설정 옵션입니다.
3	Q1/Q3 Resolution 확인란: 각 전이에 각기 다른 Q1 및 Q3 분해능 설정을 적용하려면 선택합니다. 이 옵션을 선택하면 Q1 Resolution 열과 Q3 Resolution 열이 질량 범위 테이블에 추가됩니다.
4	Import List 버튼: .txt 또는 .csv 파일에서 MRM 전이, 시간, ID 및 화합물 종속 매개 변수를 가져오려면 클릭합니다.
5	Retention Time (min) 열: 해당 MRM 전이의 예상 머무름 시간(분)을 입력합니다. 이 열에는 MRM 방법의 지속 시간(밀리초)이 표시됩니다.
6	ID 열: (선택 사항) 관심 전이의 화합물 ID를 입력합니다.
7	MRM detection window (sec) 필드: 각 전이의 머무름 시간을 포함하는 만큼 검출 시간을 입력합니다.

항목	설명
8	Target Cycle Time (across sMRM experiments) 옵션: 전체 기간 또는 방법의 모든 <i>Scheduled MRM</i> 알고리즘 실험에 대해 대상 주기 시간을 지정해 사용하려면 선택합니다. 해당 방법에 두 개의 <i>Scheduled MRM</i> 알고리즘 실험이 있는 경우 하나의 <i>Scheduled MRM</i> 알고리즘 실험에서 이 옵션을 선택하거나 선택 취소하면 다른 <i>Scheduled MRM</i> 알고리즘 실험에도 동일한 설정이 자동으로 적용됩니다. 하나의 기간 또는 방법에서 최대 두 개의 <i>Scheduled MRM</i> 알고리즘 실험이 허용됩니다. 대상 주기 시간은 조정 가능하므로 주기 내 동시 전이 간 극성 전환과 무관하게 모든 주기에 특정 주기 시간을 대상으로 지정하여 피크 전반에 데이터 포인트가 더 고르게 분포되도록 할 수 있습니다. Target Cycle Time 은 사전 설정입니다.
9	Target Scan Time (per sMRM experiment) (sec) 필드: 각 주기 내 실험에 사용할 대상 시간을 지정하려면 선택합니다. 동시 전이 중 일부에 최소 지속 시간 또는 최대 지속 시간이 적용되어 있지 않는 한, 소프트웨어는 이 실험의 총 스캔 시간이 각 주기의 대상 시간에 근접하게 유지되도록 합니다. 대상 스캔 시간은 조정 가능하므로 LC 피크 범위 내 특정 포인트 수가 대상으로 지정될 수 있습니다.

그림 3 *Scheduled MRM* 알고리즘 소프트웨어 기능 - SCIEX 3200MD 시스템용



항목	설명
1	Scheduled MRM 그룹의 Enabled 확인란: <i>Scheduled MRM</i> 알고리즘 기능을 활성화하려면 선택합니다.
2	Q1/Q3 Resolution 확인란: 각 전이에 각기 다른 Q1 및 Q3 분해능 설정을 적용하려면 선택합니다. 이 옵션을 선택하면 Q1 Resolution 열과 Q3 Resolution 열이 질량 범위 테이블에 추가됩니다.

항목	설명
3	Import List 버튼: .txt 또는 .csv 파일에서 MRM 전이, 시간, ID 및 화합물 종속 매개 변수를 가져오려면 클릭합니다.
4	Retention Time (min) 열: 해당 MRM 전이의 예상 머무름 시간(분)을 입력합니다. 이 열에는 MRM 방법의 지속 시간(밀리초)이 표시됩니다.
5	ID 열: (선택 사항) 관심 전이의 화합물 ID를 입력합니다.
6	MRM detection window (sec) 필드: 각 전이의 머무름 시간을 포함하는 만큼 검출 시간을 입력합니다.
7	Target Cycle Time (across sMRM experiments) 옵션: 전체 기간 또는 방법의 모든 Scheduled MRM 알고리즘 실험에 대해 대상 주기 시간을 지정해 사용하려면 선택합니다. 해당 방법에 두 개의 Scheduled MRM 알고리즘 실험이 있는 경우 하나의 Scheduled MRM 알고리즘 실험에서 이 옵션을 선택하거나 선택 취소하면 다른 Scheduled MRM 알고리즘 실험에도 동일한 설정이 자동으로 적용됩니다. 하나의 기간 또는 방법에서 최대 두 개의 Scheduled MRM 알고리즘 실험이 허용됩니다. 대상 주기 시간은 조정 가능하므로 주기 내 동시 전이 간 극성 전환과 무관하게 모든 주기에 특정 주기 시간을 대상으로 지정하여 피크 전반에 데이터 포인트가 더 고르게 분포되도록 할 수 있습니다. Target Cycle Time 은 사전 설정입니다.
8	Target Scan Time (per sMRM experiment) (sec) 필드: 각 주기 내 실험에 사용할 대상 시간을 지정하려면 선택합니다. 동시 전이 중 일부에 최소 지속 시간 또는 최대 지속 시간이 적용되어 있지 않는 한, 소프트웨어는 이 실험의 총 스캔 시간이 각 주기의 대상 시간에 근접하게 유지되도록 합니다. 대상 스캔 시간은 조정 가능하므로 LC 피크 범위 내 특정 포인트 수가 대상으로 지정될 수 있습니다.

3. 각 전이에 서로 다른 Q1 및 Q3 분해능 설정을 사용하려면 Scheduled MRM 그룹에서 **Q1/Q3 Resolution**을 클릭합니다.

Q1 Resolution 및 Q3 Resolution이라는 두 개의 열이 질량 범위 테이블에 추가됩니다.

그림 4 SCIEX 4500MD 및 Citrine 시스템에 대해 Q1/Q3 Resolution 옵션이 선택된 상태

항목	설명
1	Q1 Resolution 열: Q1 스캔이 인접 배치된 구성 요소를 분리하는 모드입니다. 이는 첫 번째 사중극자의 분해 능력입니다. High, Unit, Low 또는 Open 옵션을 사용할 수 있습니다.
2	Q3 Resolution 열: Q3 스캔이 인접 배치된 구성 요소를 분리하는 모드입니다. 이는 세 번째 사중극자의 분해 능력입니다. High, Unit, Low 또는 Open 옵션을 사용할 수 있습니다.

Advanced MS 탭의 **Resolution Q1** 옵션과 **Resolution Q3** 옵션은 사용할 수 없습니다.

Tune Method Editor에서 **Q1/Q3 Resolution** 확인란을 선택한 경우 Resolution 탭의 **Q1 Resolution** 옵션과 **Q3 Resolution** 옵션은 사용할 수 없습니다.

- 다음 중 한 가지 방법을 사용하여 각각의 관심 MRM 전이에 대한 질량 범위 표를 작성하십시오.
 - MRM 전이를 수동으로 입력하십시오: 각각의 관심 전이에 대해 Q1 질량, Q3 질량, 머무름 시간 및 화합물 ID를 입력합니다. 각 전이에 대해 **Q1 Resolution** 및 **Q3 Resolution** 열의 값을 선택합니다. 필요 시 마우스 오른쪽 버튼을 클릭하여 화합물 종속 매개 변수를 추가합니다. 최대 네 개의 화합물 종속 매개 변수를 질량 범위 표에 추가할 수 있습니다.
 - MRM 전이 가져오기: **Import List**를 클릭한 다음 Open 대화 상자에서 MRM 전이 정보가 포함된 csv(쉼표로 구분된 값) 또는 txt(탭으로 구분된 값) 파일을 선택합니다. 파일을 선택한 후 **Open**을 클릭합니다. 그러면 질량 범위 테이블에 해당 파일 내용이 표시됩니다. 파일을 생성하는 방법에 대한 자세한 정보는 [csv 또는 txt 파일 생성](#) 섹션을 참조하십시오.
 - MRM 전이 복사 및 붙여 넣기: csv 또는 txt 파일에서 필요한 정보가 포함된 셀을 선택한 다음 **Ctrl+C**를 누릅니다. 여러 줄의 정보를 붙여 넣으려면 질량 범위 테이블에서 첫 번째 **Q1 Mass (Da)** 셀을 선택한 다음 **Ctrl+V**를 누릅니다.

참고: 가져오기하거나 복사 및 붙여넣기하기 전, .csv 또는 .txt 파일 내 데이터의 열이 소프트웨어의 질량 범위 표 내 데이터의 열과 일치하는지 확인합니다. 소스 파일 및 대상 표의 열 개수와 열 순서는 같아야 합니다. 필요 시 소스 파일 내 열을 추가, 제거하거나 순서를 재배열합니다. 질량 범위 표에 열을 추가하려면, 질량 범위 표에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 화합물 종속 매개 변수를 선택합니다. 화합물 종속 매개 변수의 값이 선택된 극성에 대해 허용 가능한 범위여야 합니다.

5. **MRM detection window (sec)** 필드에 각 전이의 머무름 시간을 포함할 수 있는 만큼의 검출 시간을 입력합니다. 이 범위는 크로마토그래픽 피크의 예상 폭과 분석 물질의 크로마토그래픽 머무름 시간의 가변성을 반영하여 전체 MRM 피크가 항상 범위에 있도록 해야 합니다.

LC 크로마토그래피를 가이드로 사용하여 최상의 *Scheduled MRM* 알고리즘 매개 변수를 선택하십시오. 기준에서의 일반적인 피크 폭을 결정하고 다음 테이블의 권장 설정을 참조하십시오. MRM 검출 범위를 정의할 때는 머무름 시간의 안정성을 고려해야 합니다.

표 1 *Scheduled MRM* 알고리즘 매개 변수의 권장 설정

Peak Width At Base	MRM Detection Window	Target Scan Time 또는 Target Cycle Time
30초	90초	2초
15초	60초	1초
10초	30초	0.5초

Scheduled MRM 알고리즘의 경우, 모니터링 주기당 분석 물질 수는 분석 물질의 머무름 시간 범위에 따라 조정됩니다. 각 분석 물질에 사용된 지속 시간과 신호 대 노이즈 비율을 최대화하려면, 관심 피크를 캡처할 수 있는 보다 작지만 적절한 머무름 시간 범위 사용을 권장합니다. 60초는 우수한 시작점입니다. 이 값은 피크 폭이 15초이고 피크 왼쪽과 오른쪽 모두에서 잠재적 머무름 시간의 변화량이 20초인 크로마토그래피에 충분합니다.

예를 들어 예상 머무름 시간이 4.5분인 경우 60초를 입력하면 검출 범위가 4분~5분으로 설정됩니다.

참고: **Retention Time**이 0으로 설정되면 본 소프트웨어는 전체 실행 시간에 대한 전이를 모니터링합니다.

6. 필요에 따라 다음 중 하나를 수행합니다.
 - 필요한 경우 **Target Cycle Time (across sMRM expts)** 옵션을 선택된 상태로 두고 다음 그림과 같이 대상 주기 시간을 초 단위로 입력합니다. **Target Cycle Time** 옵션이 선택되어 있으면 소프트웨어가 모든 주기에 동일한 주기 시간을 적용하려고 합니다. 그러나 각 주기에 사용되는 실제 주기 시간은 주로 주기 내 모든 전이의 지속 시간 합계에 따라 달라집니다.

소프트웨어는 대상 주기 시간, 극성 전환 시간(있는 경우) 및 모든 일시 중지 시간을 사용하여 주기 내 각 전이의 지속 시간을 계산합니다. 전이에 할당된 지속 시간은 검출 범위의 각 주기에 대해 계산된 지속 시간, 일부 주기에 대해 계산된 지속 시간이 최소 지속 시간보다 작거나 최대 지속 시간보다 큰지 여부, 그리고 검출 범위의 다른 각 전이와 겹치는 정도에 따라 달라집니다. 계산된 지속 시간이 높은 동시성 때문에 최소 지속 시

간보다 작거나, 낮은 동시성 때문에 최대 지속 시간보다 큰 경우, 다음 계산 단계에서 해당 주기의 해당 전이에는 최소 지속 시간 또는 최대 지속 시간이 사용됩니다. 이 전이에 대한 모든 주기의 평균 지속 시간이 이 전이에 할당되는 최종 지속 시간이 됩니다.

그림 5 Target Cycle Time (across sMRM expts)

MS Advanced MS

Experiment: 1

Scan type: MRM (MRM)

Polarity: ☒ Positive ☐ Negative

MRM detection window: 60 (sec)

Target for sMRM

☒ Target Cycle Time (across sMRM expts)

☐ Target Scan Time (per sMRM expt)

1 (sec)

Edit Parameters...

Scheduled MRM

☒ Enabled ☒ Basic ☐ Advanced

☒ Q1/Q3 Resolution

Import List

Period Summary

Duration: 5.000 (min) Delay Time: 0 (sec)

Cycles: 300 Cycle: 1.0000 (sec)

Scheduled Ionization

Start Time: 0 (min) Stop Time: 0 (min)

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Retention Time (min)	ID	Q1 Resolution	Q3 Resolution
1					Unit	Unit

- 필요한 경우 **Target Scan Time (per sMRM expt)**을 클릭하고 다음 그림과 같이 각 주기의 실험 대상 시간을 초 단위로 입력합니다. 이 매개 변수는 크로마토그래픽 피크 범위 내 포인트 수를 정의하는 데 도움이 됩니다.

그림 6 대상 스캔 시간(sMRM 실험당)

MS Advanced MS

Experiment: 1

Scan type: MRM (MRM)

Polarity: ☒ Positive ☐ Negative

MRM detection window: 60 (sec)

Target for sMRM

☐ Target Cycle Time (across sMRM expts)

☒ Target Scan Time (per sMRM expt)

1 (sec)

Edit Parameters...

Scheduled MRM

☒ Enabled ☒ Basic ☐ Advanced

☒ Q1/Q3 Resolution

Import List

Period Summary

Duration: 5.000 (min) Delay Time: 0 (sec)

Cycles: 300 Cycle: 1.0000 (sec)

Scheduled Ionization

Start Time: 0 (min) Stop Time: 0 (min)

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Retention Time (min)	ID	Q1 Resolution	Q3 Resolution
1					Unit	Unit

크로마토그래픽 피크 폭을 이 값을 설정하는 데 도움을 주는 하나의 안내서로 사용합니다. 1초는 15초의 피크 폭을 산출하는 크로마토그래피에 적절한 시작점입니다. 이 경우, 이 검출 범위 내의 모든 동시 전이에 적용되는 최소 지속 시간 또는 최대 지속 시간이 없으면 1초 대상 스캔 시간은 15초 피크 동안 약 15개의 데이터 포인트를 생성합니다.

- 획득 방법의 나머지 필드에서 필요한 값을 제공합니다.

8. 획득이 실행되는 프로젝트에 획득 방법을 저장합니다.

참고: Scheduled MRM 알고리즘 필드는 Tune Method Editor에서도 사용할 수 있습니다.

두 개의 Scheduled MRM 알고리즘 실험을 사용하는 획득 방법 생성

이 절차를 따라 극성 전환을 지원하는 방법을 생성할 수 있습니다.

1. Scheduled MRM 알고리즘 획득 방법을 생성합니다(Scheduled MRM 알고리즘 획득 방법 생성 섹션의 단계를 따름).
2. Acquisition method 창에서 **Period**를 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하고 **Add experiment**를 클릭합니다.
두 번째 MRM 스캔 실험이 생성됩니다.
3. MS 탭에서 사용 중인 질량 분석계에 따라 다음 옵션 중 하나를 선택합니다.
 - SCIEX 4500MD 및 Citrine 시스템의 경우 **Scheduled MRM** 그룹에서 **Enabled** 확인란을 선택합니다. 일반적인 Scheduled MRM 알고리즘 획득 방법을 생성하려면 **Scheduled MRM** 그룹에서 **Basic** 옵션을 선택해야 합니다. 이 방법을 생성하려면 [그림 2](#)의 기능을 참조하십시오. Scheduled MRM Pro 알고리즘 방법을 생성하려면 **Advanced** 옵션을 선택해야 합니다. 이 방법을 생성하려면 [Scheduled MRM Pro 알고리즘 획득 방법 생성](#) 섹션을 참조하십시오.
 - SCIEX 3200MD 시스템의 경우 **Scheduled MRM** 그룹에서 **Enabled** 확인란을 선택합니다. 이 방법을 생성하려면 [그림 3](#)의 기능을 참조하십시오.
4. [Scheduled MRM 알고리즘 획득 방법 생성](#) 섹션에 설명된 대로 획득 방법을 완성합니다.
5. 획득이 실행되는 프로젝트에 획득 방법을 저장합니다.

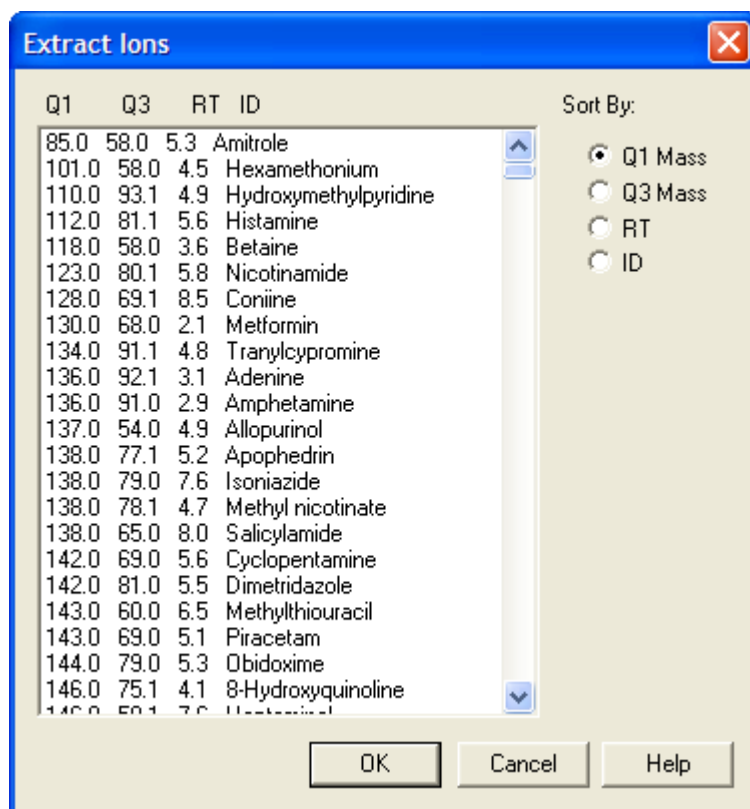
참고: SCIEX 3200MD 및 SCIEX 4500MD 시스템의 경우 해당 주기에 극성 전환이 있으면 기본 정착 시간이 적용됩니다. Citrine 시리즈 기기의 경우 해당 주기에 극성 전환이 있으면 사용자가 구성한 정착 시간이 적용됩니다.

추출 이온 크로마토그램 생성

참고: 포함된 전이가 2,500개를 초과하는 Scheduled MRM 알고리즘 wiff 파일이 열리는 경우 XIC 대신 TIC가 표시됩니다.

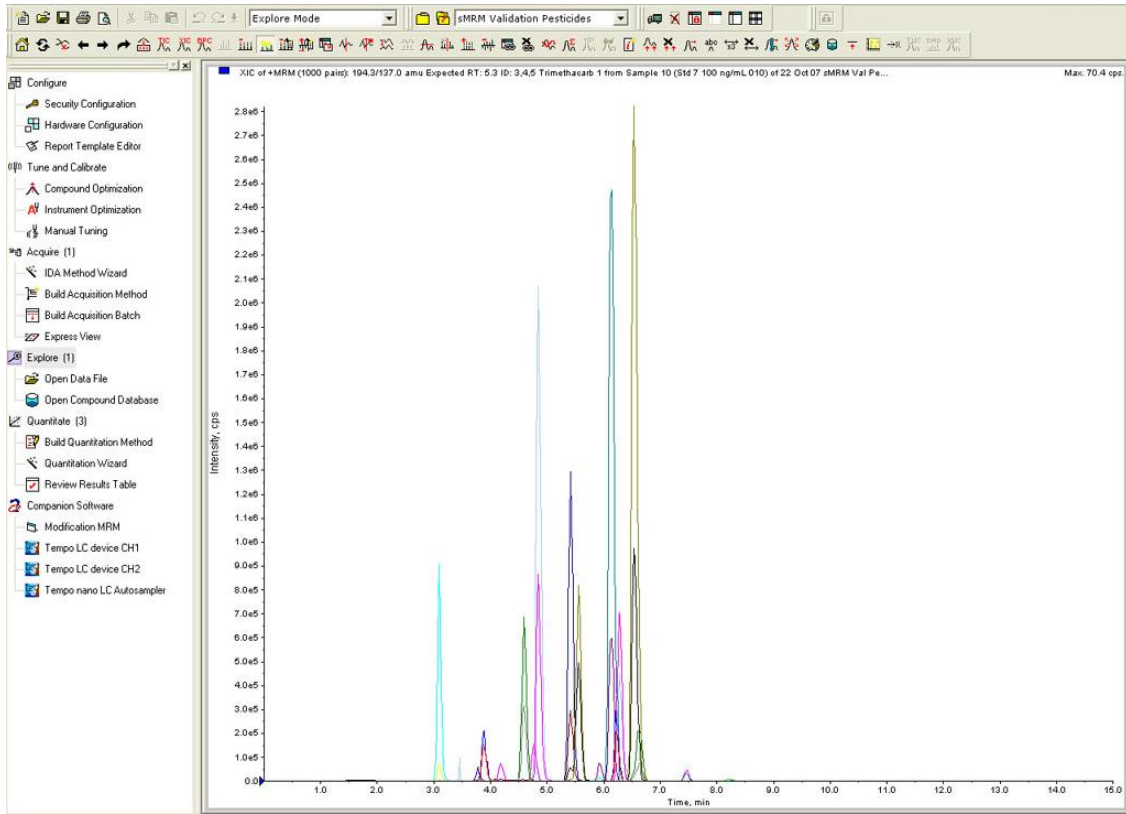
1. 이전 절차에서 생성한 획득 방법을 사용하여 Scheduled MRM 알고리즘 데이터를 생성한 후, 탐색 모음에서 **Explore** 아래의 **Open Data File**을 두 번 클릭하고 데이터 파일과 샘플을 선택합니다.
MRM 및 Scheduled MRM 알고리즘 데이터는 중첩된 XIC로 표시되도록 사전 설정되어 있습니다.
2. **Explore > Extract Ions > Use Dialog**를 클릭합니다.
Extract Ions 대화 상자가 열리고 선택한 데이터 파일의 각 MRM 전이와 해당하는 예상 머무름 시간 및 화합물 ID(입력된 경우)가 함께 표시됩니다.

그림 7 Extract Ions 대화 상자



3. Q1 질량, Q3 질량, RT(머무름 시간) 또는 화합물 ID를 기준으로 목록을 정렬하도록 선택합니다.
4. 전이를 하나 이상 선택합니다.
5. **OK**를 클릭합니다.
크로마토그램 아래에 XIC가 표시되며 첫 번째로 선택한 전이의 화합물 ID가 제목에 표시됩니다.

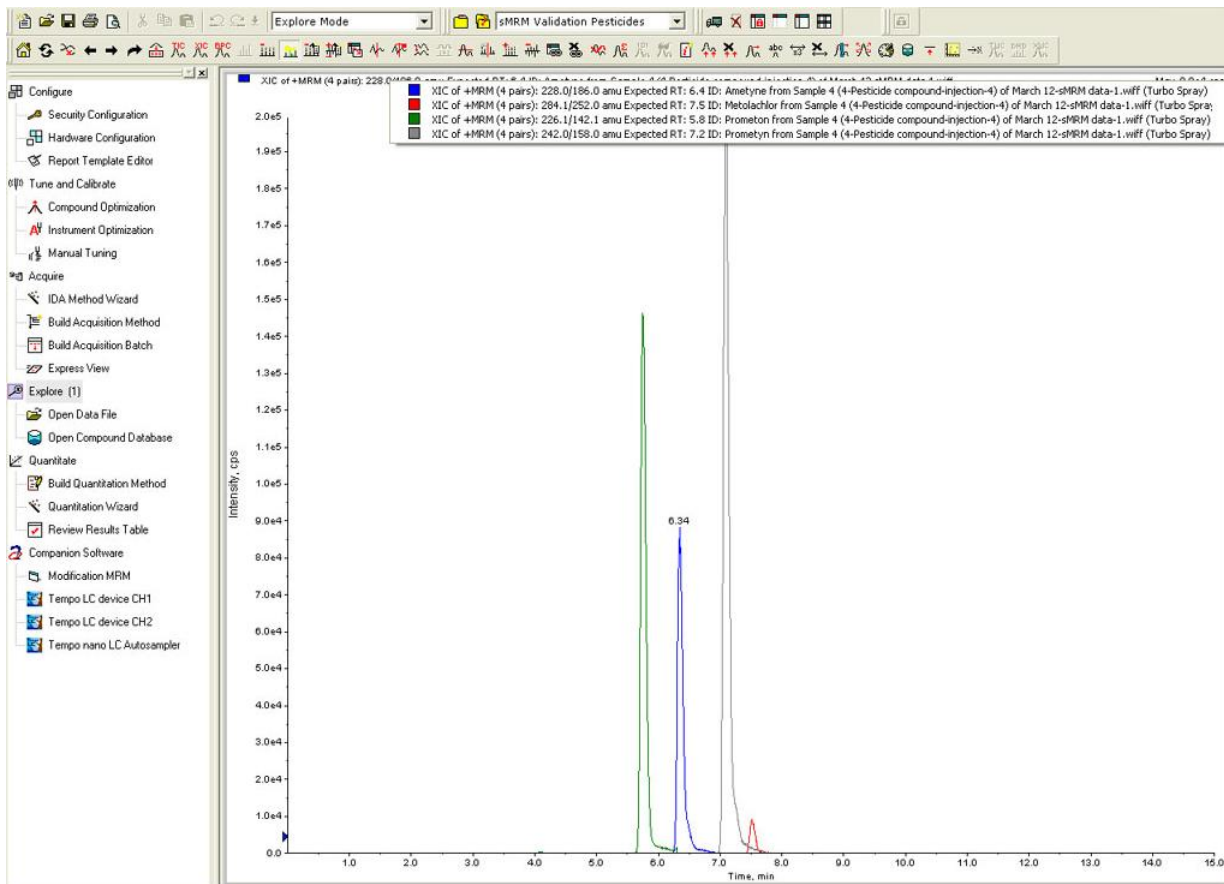
그림 8 여러 이온 추출 시 열리는 중첩 XIC의 예



MRM 전이 보기

1. XIC를 생성합니다.
2. XIC의 제목을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하여 해당 영역의 활성 상태 MRM 전이를 표시합니다. MRM 관심 전이를 선택하여 크로마토그램의 머무름 시간 라벨을 표시합니다.

그림 9 활성 MRM 전이



3. X축을 따라 커서를 끌어 특정 시간 영역을 확대합니다.
표시된 데이터의 최고 피크에 맞춰 XIC의 비율이 조정됩니다.
4. 특정 시간 영역에서 활성화된 MRM 전이를 표시하려면 XIC 제목을 마우스 오른쪽 버튼으로 다시 클릭합니다.
임계값 보다 위에 있는 전이 및 확대 영역 안에 있는 전이 모두가 표시됩니다. 제목은 확대 구역의 전이 수로 축소됩니다.

정량화 방법 생성

참고: 포함된 전이가 94개를 초과하는 데이터 파일에 대한 정량화 방법을 생성하려면 Analyst MD 소프트웨어에서 Build Quantitation Method를 사용해야 합니다. Quantitation Wizard로는 94개 이하의 전이가 포함된 데이터 파일에 대한 정량화 방법만 생성할 수 있습니다.

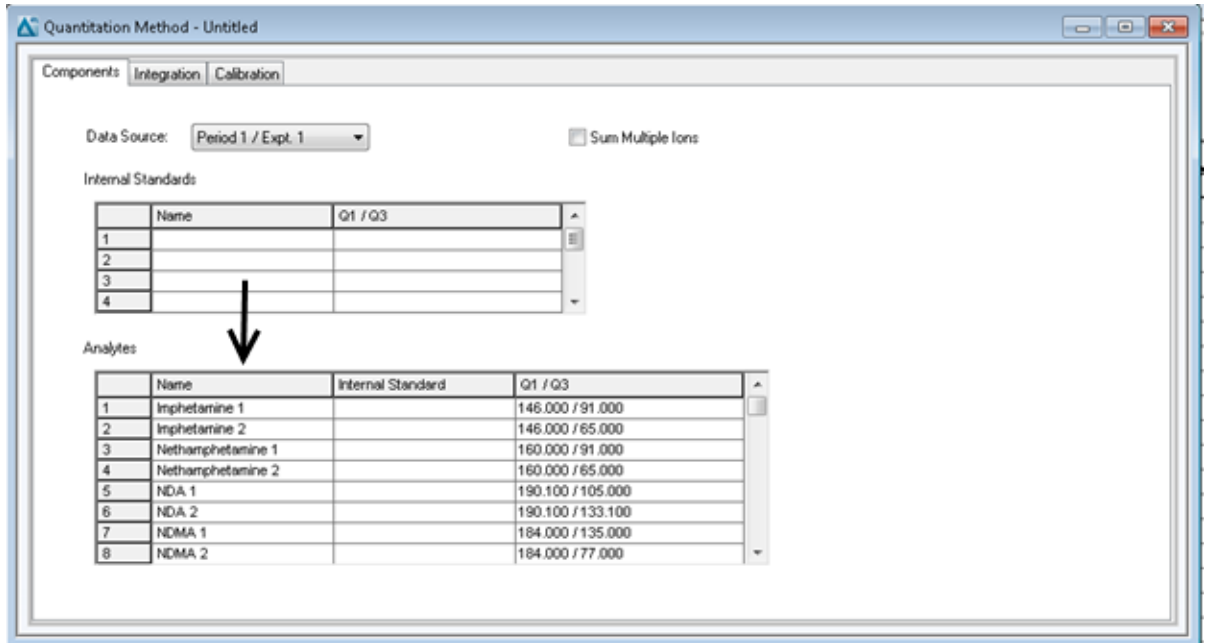
시작하기 전에 권장되는 IntelliQuan-MQ III 알고리즘을 사용 중인지 확인하십시오. 알고리즘 선택에 대한 자세한 정보는 도움말을 참조하십시오.

1. **Navigation Bar**(탐색 모음)에서 **Quantitate** 아래의 **Build Quantitation Method**를 두 번 클릭합니다.

참고: Quantitation Wizard를 사용하여 94개 미만의 전이가 포함된 데이터를 분석하는 정량화 방법을 생성할 수 있습니다.

2. 방금 획득한 데이터 파일과 샘플을 선택한 다음 **OK**를 클릭합니다. Analytes 테이블에 **Name** 열이 표시됩니다. 획득 중 전이가 선택되지 않았으므로 이 열에는 획득 방법의 화합물 ID가 채워집니다.

그림 10 정량화 방법: 구성 요소 탭



참고: 방법에 여러 실험이 포함된 경우 실험의 분석 물질을 정량화 방법에 사용할 수 있도록 **Data Source** 목록에서 각 실험을 선택하여 실험을 검토하십시오. 분석 물질이 많으면 **Data Source** 목록을 채우는 데 시간이 걸릴 수도 있습니다.

3. 정량화 방법의 나머지 필드에서 필요한 값을 설정한 다음 정량화 방법을 저장합니다.
4. Quantitation Wizard를 사용하여 Results Table를 생성합니다. 방금 생성된 정량화 방법을 선택해야 합니다.

팁! 데이터 파일에 많은 수의 MRM 전이가 포함된 경우 Create Quan Methods From Text Files 스크립트와 Create Text File from Quan Method 스크립트를 사용하여 정량화 방법을 생성 또는 수정합니다. 자세한 정보는 스크립트 사용자 안내서를 참조하십시오.

Results Table 검토

1. 특정 전이에 대한 결과를 보려면 Results Table에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭하고 **Analyte**를 선택한 다음 화합물 ID 목록에서 전이를 선택합니다.

그림 11 Results Table: 분석 물질 선택

	Sample Name	Sample ID	Sample	Analyte Peak Name (counts)	Analyte Peak Height (cps)	Concentration
1	SYS suit001					
2	SYS suit001					
3	SYS suit001					
4	SYS suit001					
5	SYS suit001					
6	SYS suit001					
7	SYS suit001					
8	SYS suit001					
9	SYS suit001					
10	SYS suit001					
11	SYS suit001					
12	SYS suit001					
13	SYS suit001					
14	SYS suit001					
15	SYS suit001		Un			
16	SYS suit001		Un			
17	SYS suit001		Un			
18	SYS suit001		Un			
19	SYS suit001		Un			
20	SYS suit001		Un			
21	SYS suit001		Un			
22	SYS suit001		Un			
23	SYS suit001		Un			
24	SYS suit001		Un			

2. Results Table을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Table Settings > Edit**를 클릭하여 Table Settings 대화 상자를 엽니다.
3. **Columns**를 두 번 클릭한 다음 목록에서 **Analyte**를 선택합니다.
4. **Analyte Peak Name** 옆의 **Shown**, 확인란을 선택합니다.
5. **OK**를 클릭한 후 **Done**을 클릭합니다.
Analyte Peak Name 열이 Results Table에 추가되고 각 전이의 화합물 ID가 해당 열에 표시됩니다.

그림 12 Results Table: Analyte Peak Name 열

	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name
1	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	3,4-Methylenedioxymphetamine
2	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	3,4-Methylenedioxyethylamphetamine
3	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	3,4-Methylenedioxymethamphetamine
4	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	6-O-Monoacetylmorphine
5	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	7-Aminoclonazepam
6	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	7-Aminoflunitrazepam
7	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	9-Hydroxynisiperidone
8	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Aceclidine
9	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Aceprometazine
10	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Aciclovir
11	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Ajmaline
12	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	alpha-Hydroxyalprazolam
13	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	alpha-Hydroxytriazolam
14	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Alprazolam
15	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Alprenolol
16	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Amantadine
17	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Amiloride

- Results Table에서 마우스 오른쪽 버튼을 클릭한 다음 **Table Settings > Edit**를 클릭하여 테이블에 **Analyte Integration Quality** 및 **IS Integration Quality** 열을 표시합니다.
- Columns**를 두 번 클릭한 다음 목록에서 **Analyte**를 선택합니다.
- Analyte Integration Quality** 옆의 **Shown** 확인란을 선택한 다음 **OK**를 클릭합니다.
- 목록에서 **Internal Standard**를 선택합니다.
- IS Integration Quality** 옆의 **Shown**, 확인란을 선택합니다.
- OK**를 클릭한 후 **Done**을 클릭합니다.

두 개의 열이 Results Table에 추가됩니다. 통합 품질은 피크가 얼마나 잘 통합되는지를 나타냅니다. 1에 가까운 값일수록 잘 통합된 피크임을 나타냅니다. 보다 작은 값은 피크가 잘 통합되지 않았음을 나타낼 수 있으며, 이는 배경이 크거나 해당 영역에 다른 피크가 있을 수도 있음을 나타냅니다.

이러한 열을 사용하면 수동 검토를 위해 분석 물질의 **Integration Quality** 인덱스 값이 낮은 피크를 쉽게 확인할 수 있으므로 피크 검토가 용이해집니다. 또한 데이터에서 허용 가능한 수준보다 낮은 분석 물질 **Integration Quality** 인덱스 값을 쿼리하여 데이터 하위 세트를 표시하고 이를 수동으로 검토할 수 있습니다.

그림 13 Results Table 열

	Sample Name	Record Modified	Calculated Concentration (ng/mL)	Accuracy (%)	Analyte Integration Quality	IS Integration Quality	Time
1	STD 1	<input type="checkbox"/>	3.22	161.	1.00 ①	1.00 ②	0.000000
2	STD 1	<input type="checkbox"/>	3.29	165.	0.874	1.00	N/A
3	STD 1	<input type="checkbox"/>	2.74	137.	1.00	1.00	N/A
4	STD 1	<input type="checkbox"/>	3.20	160.	1.00	1.00	0.000000
5	STD 1	<input type="checkbox"/>	2.86	143.	0.731	1.00	N/A
6	STD 1	<input type="checkbox"/>	2.54	127.	1.00	1.00	N/A
7	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.92	123.	1.00	1.00	0.000000
8	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.79	120.	0.852	1.00	N/A
9	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.37	109.	1.00	1.00	N/A
10	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.24	106.	1.00	1.00	0.000000
11	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.50	112.	0.942	1.00	N/A
12	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.50	9	1.00	1.00	N/A

항목	설명
1	Analyte Integration Quality Index 열
2	IS Integration Quality Index 열

Scheduled MRM Pro 알고리즘 정보

Scheduled MRM Pro 알고리즘 기능은 SCIEX 4500MD 및 Citrine 시스템에서 지원됩니다.

Scheduled MRM Pro 알고리즘은 Scheduled MRM 알고리즘에 고급 기능을 추가합니다. 이 기능은 획득 방법에서 획득 범위가 각 전이에 대해 설정되도록 허용함으로써 실험의 머무름 시간 견고성을 향상시킵니다. 사용자는 머무름 시간에서 광범위한 LC 피크 또는 변이를 갖는 구성 요소에 맞게 개별 범위를 조정할 수 있습니다.

또한 Scheduled MRM Pro 알고리즘에는 다음 기능이 포함되어 있습니다.

- Scheduled MRM Pro 알고리즘은 획득 중 자동 범위 확장 기능도 지원합니다. 사용자는 DWE(동적 범위 확장) 기능을 설정하거나 해제할 수 있습니다. 또한 각 개별 전이에 대해 트리거 임계값과 DWE 임계값을 다르게 설정할 수도 있습니다. 예를 들어 트리거 임계값이 낮고 DWE 임계값이 높으면 이차 전이를 트리거할 가능성이 높지만 필요 없는 동적 범위 확장 기능을 사용하지 않을 수 있습니다. DWE가 활성화된 경우, 화합물이 이후 머무름 시간으로 전환되고 강도가 머무름 시간을 지나서까지 확장 임계값 미만으로 떨어지지 않으면 Scheduled MRM Pro 알고리즘은 강도가 임계값 미만으로 떨어질 때까지 자동으로 감지 범위를 확장합니다. 전이는 방법에 지정된 검출 범위의 다른 절반에 대해 모니터링됩니다. 확장 후 검출 범위는 지정된 획득 범위 지속 시간의 최대 두 배가 됩니다. 이 기능을 통해 더 작은 범위를 사용할 수 있지만 동시에 모든 피크가 전부 캡처됩니다. 또한 머무름 시간 내의 대부분의 변화에 대해 방법 견고성이 향상됩니다.
- 사용자는 분석 물질에 대한 여러 전이에 일차 또는 이차로 레이블을 지정할 수 있습니다. 일차 전이는 획득 창 전체에서 모니터링되지만 이차 전이는 관련된 일차 전이가 트리거 임계값에 도달한 후에만 모니터링됩니다. 이는 모니터링된 MRM 전이 수를 감소시켜 주기 시간을 최소화합니다. 어큐지션 시간은 샘플에 없는 분석 물질이 아니라 샘플에 있는 분석 물질에 대한 데이터를 수집하는 데 중점을 둡니다.

- 이 알고리즘은 지속 가중치 사용도 지원합니다. 지속 가중치로 필요한 지속 시간을 비교적 잘 표시할 수 있습니다. 매우 풍부한 화합물은 낮은 지속 가중치에 할당할 수 있는 반면, 덜 풍부한 화합물은 높은 지속 가중치에 할당할 수 있습니다. 실행 중에 이 가중치를 기반으로 사용 가능한 지속 시간이 할당됩니다.
- 이 알고리즘은 이차 전이 트리거를 위해 DBS(Dynamic Background Subtraction)를 지원합니다. DBS 옵션은 **Scheduled MRM** 있습니다. 이러한 방법 또는 실험에 대해 DBS가 활성화되면 이것이 일차 전이에 적용되어 해당 실험에서 이차 전이를 트리거합니다.

조사 스캔을 위해 **Scheduled MRM** 알고리즘을 사용하는 IDA 방법의 경우, IDA 기준에서 DBS가 활성화되면 이것이 일차 전이에 적용되어 이차 전이와 종속 스캔을 모두 트리거합니다.

Scheduled MRM 알고리즘 실험에 대해 DWE와 DBS가 모두 활성화된 경우 DWE 트리거는 일차 전이의 DBS가 없는 처리되지 않은 데이터에 따라 달라집니다.

Scheduled MRM 알고리즘을 사용하는 실험에 대해 DBS가 활성화된 경우 트리거된 이차 전이는 일차 전이가 획득을 중지할 때까지 획득을 계속합니다.

Scheduled MRM Pro 알고리즘 획득 방법 생성

Scheduled MRM Pro 알고리즘 기능은 SCIEX 4500MD 및 Citrine 시스템에서만 지원됩니다.

이 절차를 따라 Method Editor 창에서 **Scheduled MRM Pro** 알고리즘 방법을 생성할 수 있습니다. 이 유형의 방법은 Manual Tune 창에서도 생성할 수 있습니다.

1. 지원되는 질량 분석계에 대한 하드웨어 프로필을 활성화합니다. 필요한 경우 Citrine 시스템에 대해 하드웨어 프로필에서 다른 질량 모드를 선택한 다음 하드웨어 프로필을 활성화합니다.
2. 기존 **Scheduled MRM** 알고리즘 획득 방법을 열거나 [Scheduled MRM 알고리즘 획득 방법 생성](#) 섹션의 절차를 따라 새 방법을 생성합니다.
3. Acquisition Method Editor의 MS 탭에 있는 **Scheduled MRM** 섹션에서 **Advanced** 옵션을 선택합니다. 이를 통해 **Scheduled MRM Pro** 알고리즘 기능이 활성화됩니다.

질량 범위 테이블에 5개의 새 열이 추가되고, **Scheduled MRM** 섹션에 **Dynamic Window Extension** 및 **Dynamic Background Subtraction**이라는 2개의 확인란이 표시됩니다.

그림 14 Scheduled MRM Pro 알고리즘 매개 변수

항목	설명
1	Group column: 한 화합물의 전이를 그룹화하려면 이 열을 사용합니다. 한 그룹의 일부인 모든 전이에 동일한 이름을 할당하십시오.
2	MRM Window (sec) 필드: 머무름 시간을 중심으로 전이 모니터링 시간을 지정합니다. 이 필드에서 전이에 대해 지정하는 값은 MRM detection window 필드에서 방법에 대해 지정하는 기본 범위보다 우선합니다. MRM Window 열은 MRM 검출 범위 필드와 비슷하지만 여기에 입력하는 값은 특정 전이에만 적용됩니다. 이 열이 비어 있으면 MRM detection window 필드의 값이 사용됩니다.
3	Primary/Secondary: 이 열을 사용하여 전이가 일차인지 이차인지를 지정합니다. 일차 전이는 전체 획득 범위에 대해 모니터링됩니다. 이차 전이는 모든 일차 전이가 개별 임계값을 초과하기만 하면 획득 범위 내에서 모니터링됩니다. 그룹 내의 일차 전이에는 번호 1을 할당하고 이차 전이에는 2를 할당하십시오. 한 그룹 내에 여러 개의 일차 및 이차 전이가 있을 수 있습니다.
4	Trigger Threshold: 이차 전이를 트리거하는 강도를 지정합니다. IDA 방법에서는 Trigger Threshold 가 종속 스캔을 트리거하는 데도 사용됩니다. 이 값은 0 이상이 될 수 있습니다.

항목	설명
5	<p>Dwell Weight: 이 열을 사용하여 특정 전이의 스캔 시간(지속 시간)이 다른 전이보다 더 길어야 하는지 여부를 지정합니다. 기본값은 1입니다.</p> <p>지속 가중치로 필요한 지속 시간을 비교적 잘 표시할 수 있습니다. 매우 풍부한 화합물은 낮은 지속 가중치(<1)에 할당할 수 있는 반면, 덜 풍부한 화합물은 높은 지속 가중치(>1)에 할당할 수 있습니다. 지속 가중치의 범위는 0.1~10입니다. 실행 중에 이 가중치를 기준으로 사용 가능한 지속 시간이 할당됩니다.</p> <p>참고: 총 지속 가중치는 해당 주기 내 전체 일차 전이 지속 가중치 합과 전체 이차 전이 지속 가중치 합의 절반을 더한 것과 같습니다. 그러나 지속 시간 할당에는 여전히 개별 지속 가중치를 총 지속 가중치로 나눈 값이 사용됩니다. 예를 들어 머무름 시간이 동일한 두 개의 전이만 포함된 방법에서 일차 전이와 이차 전이 모두의 지속 가중치가 1이라면 총 지속 가중치는 $1 + 0.5 = 1.5$입니다. 두 전이의 지속 시간은 모든 동시 전이에 할당할 수 있는 총 지속 시간에 $1/1.5$를 곱한 시간입니다. 할당할 수 있는 총 지속 시간은 일시 중지 시간과 극성 전환 시간(있는 경우)을 뺀 다음 교정 계수 1.2로 교정하여 계산됩니다. 지속 가중치 항목이 비어 있을 때는 항상 기본값 1이 사용됩니다.</p> <p>참고: 계산된 지속 시간이 머무름 시간 범위 내 모든 전이 주기에 동일하지 않은 경우 모든 주기의 평균 지속 시간이 획득에 사용됩니다.</p>
6	<p>Dynamic Window Extension: <i>Scheduled MRM Pro</i> 획득 방법에서 동적 범위 확장을 활성화하려면 선택합니다. DWE(동적 범위 확장)를 사용하지 않는 경우에는 Dynamic Window Extension 확인란의 선택을 취소합니다. DWE를 선택하면 질량 범위 테이블에 Extension Threshold 열이 새로 추가됩니다. DWE를 선택한 경우 머무름 시간이 지난 후에도 여전히 전이의 피크 강도가 확장 임계값을 초과하면 <i>Scheduled MRM Pro</i> 알고리즘은 강도가 확장 임계값 아래로 떨어질 때까지 검출 범위를 자동으로 확장하며 해당 전이는 방법에 지정된 검출 범위의 다른 절반에 대해 모니터링됩니다. 확장 후 획득 범위는 방법에 지정된 검출 범위 지속 시간의 최대 두 배가 될 수 있습니다.</p>
7	<p>Dynamic Background Subtraction: <i>Scheduled MRM Pro</i> 획득 방법에서 동적 배경 감산을 사용하려면 선택합니다. <i>Scheduled MRM Pro</i> 알고리즘에 의해 트리거된 IDA 방법의 경우, IDA 기준에서 해당 확인란이 활성화되어 있으면 <i>Scheduled MRM Pro</i> 알고리즘 실험에 Dynamic Background Subtraction 확인란을 사용할 수 없습니다. IDA 기준의 Dynamic Background Subtraction 확인란이 선택되어 있으면 이차 전이와 종속 스캔을 트리거하는 데 이 기능이 사용됩니다.</p>
8	<p>Extension Threshold: <i>Scheduled MRM Pro</i> 획득 방법의 동적 범위 확장 임계값을 지정합니다. 이 값은 0 이상이 될 수 있습니다. 자세한 정보는 그림 15에서 확인하십시오.</p>

그림 15 Dynamic Window Extension이 선택된 상태 - Extension Threshold 열

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window for Scheduled MRM. The 'Dynamic Window Extension' checkbox is checked. The 'Extension Threshold' column in the table is highlighted with a red circle and the number 8.

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Retention Time(min)	ID	Group	MRM Window (sec)	Primary / Secondary	Trigger Threshold	Extension Threshold	Dwell Weight
1									8	

- 다섯 개의 **Scheduled MRM Pro** 알고리즘 열에 적절한 값을 지정하여 각 MRM 전이에 대한 질량 범위 테이블을 완성합니다. 다음 규칙과 [그림 14](#)의 정보를 사용하십시오.
 - 동일한 그룹에 속한 모든 전이는 질량 범위 테이블에 연속적으로 나열되어야 합니다.
 - 동일한 그룹에 속한 모든 전이는 **Retention Time (min)** 열의 머무름 시간이 동일해야 합니다.
 - 동일한 그룹에 속한 모든 전이는 **MRM Window (sec)** 열의 시간이 동일해야 합니다.
 - 동일한 그룹에 속한 모든 일차 전이를 그룹 내 이차 전이보다 먼저 입력해야 합니다. 그룹에 전이가 하나만 있는 경우에는 해당 전이가 일차 전이가 되어야 합니다.
- 획득 방법을 저장합니다.
Scheduled MRM Pro 알고리즘 획득 방법에는 하나의 기간과 최대 두 개의 **Scheduled MRM** 알고리즘 실험만 포함될 수 있습니다.

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

- Scheduled MRM Pro** 알고리즘을 생성합니다. [Scheduled MRM Pro 알고리즘 획득 방법 생성](#) 섹션의 절차를 참조하십시오.
- 필요한 경우 ER 스캔 유형의 실험을 추가하려면 IDA 기준을 추가하기 전에 해당 실험을 추가합니다.
- Period** 아이콘을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 다음 **Add IDA Criteria Level**을 클릭합니다.
- IDA Criteria 매개 변수를 지정합니다. 정보 종속 획득 자습서를 참조하십시오.

5. **Period** 아이콘을 마우스 오른쪽 버튼으로 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. 필요한 경우 더 많은 종속 실험을 복사하거나 추가합니다.
IDA 기준에 따라 X부터 Y 가장 강력한 이온까지 달라집니다.
8. 실험 매개 변수를 지정합니다.
9. 획득이 실행되는 프로젝트에 획득 방법을 저장하십시오.

참고: IDA *Scheduled MRM Pro* 알고리즘 방법을 사용하여 데이터를 획득하는 동안 종속 스캔을 트리거 하는 데는 IDA 임계값 대신 해당 방법에 포함된 각 MRM 전이에 대한 트리거 임계값이 사용됩니다.

참고: 지속 시간 할당, 동시성 및 예상 주기 시간에 맞게 *Scheduled MRM* 알고리즘 방법을 최적화하려면 sMRM Calculator 스크립트를 설치하여 사용하십시오. 자세한 정보는 스크립트 사용자 안내서를 참조하십시오.

파일 정보에서 **Scheduled MRM Pro** 알고리즘 매개 변수 보기

샘플 획득이 완료되면 *Scheduled MRM Pro* 알고리즘 방법으로 획득된 데이터 파일의 파일 정보에 각 전이에 대한 모든 사용자 정의 매개 변수가 표시됩니다. 이러한 매개 변수에는 다음이 포함됩니다.

- **MRM**(예약됨 또는 예약되지 않음)
- **Q1**
- **Q3**
- **Retention Time**
- **ID**
- **Group**
- **MRM Window (sec)**
- **Primary/Secondary**
- **Trigger Threshold**
- **Extension Threshold**(**Dynamic Window Extension** 확인란이 선택되지 않은 경우)
- **Dwell Weight**
- **Q1 Resolution**
- **Q3 Resolution**(**Q1/Q3 Resolution** 확인란이 선택되지 않은 경우)

Dynamic Background Subtraction, Dynamic Window Extension, Dwell Time, Target Scan Time 또는 Target Cycle Time 매개 변수도 표시됩니다.


1. **Navigation Bar**(탐색 모음)에서 **Explore** 아래의 **Open Data File**을 두 번 클릭합니다. Select Sample 대화 상자가 열립니다.
2. Data Files 창에서 .wiff 파일을 선택합니다.
3. Samples 창에서 샘플을 선택합니다.
4. **OK**를 클릭합니다. 샘플에서 획득한 데이터가 열립니다.
5. 파일 정보를 보려면 도구 모음의 **Show File Info** 를 클릭합니다. 그래프 아래에 File Information 창이 열립니다.
6. File Information 창 왼쪽 창에 있는 필요 기간을 확장하십시오.
7. 필요 기간 실험 링크를 클릭하십시오. 각 전이에 대한 **Scheduled MRM Pro** 알고리즘 매개 변수 값은 오른쪽 창에서 선택된 Period Experiment 섹션 아래에 기록됩니다.

그림 16 파일 정보의 **Scheduled MRM Pro** 알고리즘 매개 변수

File Info

Log Info

Acquisition Info

Quant Info

Periods

Period 1 Experiment 1

Parameter Table

Resolution tables

Calibration tables

Instrument Parameters

Keyword Text

Period 1:

Scans in Period: 120

Min. Dwell Time: 3 ms

Max. Dwell Time: 250 ms

Relative Start Time: 0.00 msec

Experiments in Period: 1

Use target Cycle Time: No

Target Cycle Time: N/A

Period 1 Experiment 1:

Scan Type: MRM (MRM)

Scheduled MRM: Yes

Polarity: Positive

Scan Mode: N/A

Ion Source: Turbo Spray

Dynamic Window Extension: Yes

Dynamic Background Subtraction: Yes

sMRM Q1/Q3 Resolution: Yes

MRM detection window: 60 sec

Target Scan Time: 1.0000 sec

Resolution Q1: N/A

Resolution Q3: N/A

Intensity Thres.: 0.00 cps

Settling Time: 0.0000 msec

MR Pause: 5.0070 msec

MCA: No

Step Size: 0.00 Da

Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Time (min)	sMRM Dwell (msec)	Param	Start	Stop	ID
609.200	195.000	1.00	250.000				

Window (sec)	Primary / Secondary	Trigger Threshold	Extension Threshold	Dwell Weight	Group	Q1 Resolution	Q3 Resolution
0.5	1	1	10000000	1.0	A	High	Unit

Scheduled Ionization을 사용하여 Scheduled MRM Basic 또는 Pro 알고리즘 획득 방법 생성

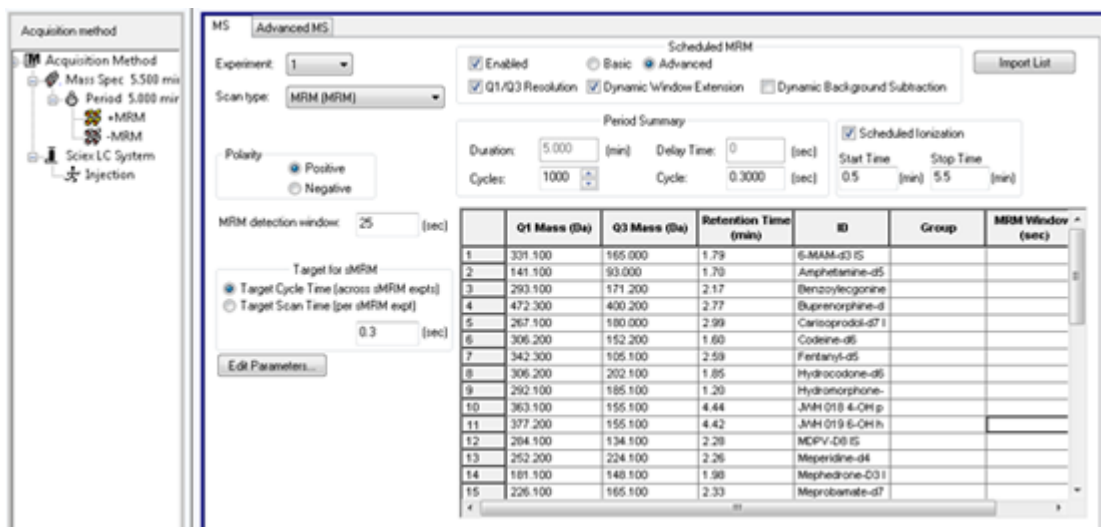
1. **Scheduled MRM Basic** 또는 **Pro** 알고리즘 획득 방법을 생성합니다.
2. 해당 방법의 실험을 선택한 다음 **Scheduled Ionization** 확인란을 선택합니다.
3. **Scheduled Ionization** 그룹에서 **Start Time** 및 **Stop Time**을 적절하게 입력합니다. 관심 피크가 **Start Time**과 **Stop Time** 사이에서 용리되는지 확인합니다. **Dynamic Window Extension**도 선택한 경우에는 **Stop Time**이 질량 테이블의 가장 늦은 머무름 시간에 이 전이에 대한 검출 범위의 1.5를 더한 시간 이후인지 확인합니다. 또한 획득 방법

Synchronization Mode 및 LC 방법이 **Scheduled Ionization**을 사용하지 않을 때와 동일하게 설정되었는지 확인합니다.

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

다음 그림에서는 **LC Synchronization Mode**가 사용되고 LC 방법의 길이가 7분인 경우를 보여줍니다. 모든 관심 피크는 0.5분 후, 5.0분 전에 용리됩니다. 마지막으로 용리된 피크 획득 범위가 전체 검출 범위로 확장될 수 있으므로 **Stop Time**에 5.5분이 사용됩니다. **Scheduled Ionization**을 사용하면 **Start Time** 전과 **Stop Time** 후에 **IonSpray** 전압 0이 적용됩니다. MS 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 17 Scheduled Ionization을 사용하는 **Scheduled MRM Pro** 알고리즘



4. 획득 방법을 저장합니다.

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.
