

Funktionshandbuch

SCIEX OS Software

Für das Echo[®] MS+-System mit dem ZenoTOF 7600/7600+-System



Dieses Dokument wird Käufern eines SCIEX-Geräts für dessen Gebrauch zur Verfügung gestellt. Dieses Dokument ist urheberrechtlich geschützt und jegliche Vervielfältigung dieses Dokuments, im Ganzen oder in Teilen, ist strengstens untersagt, sofern keine schriftliche Genehmigung von SCIEX vorliegt.

Die in diesem Dokument beschriebene Software unterliegt einer Lizenzvereinbarung. Das Kopieren, Ändern oder Verbreiten der Software auf einem beliebigen Medium ist rechtswidrig, sofern dies nicht ausdrücklich durch die Lizenzvereinbarung genehmigt wird. Darüber hinaus kann es nach der Lizenzvereinbarung untersagt sein, die Software zu disassemblieren, zurückzuentwickeln oder zurückzuübersetzen. Es gelten die aufgeführten Garantien.

Teile dieses Dokuments können sich auf andere Hersteller und/oder deren Produkte beziehen, die wiederum Teile enthalten können, deren Namen als Marken eingetragen sind und/oder die Marken ihrer jeweiligen Inhaber darstellen. Jede Nennung solcher Marken dient ausschließlich der Bezeichnung von Produkten eines Herstellers, die von SCIEX für den Einbau in die eigenen Geräte bereitgestellt werden, und bedeutet nicht, dass eigene oder fremde Nutzungsrechte und/oder -lizenzen zur Verwendung derartiger Hersteller- und/oder Produktnamen als Marken vorliegen.

Die Garantien von SCIEX beschränken sich auf die zum Verkaufszeitpunkt oder bei Erteilung der Lizenz für die eigenen Produkte ausdrücklich zuerkannten Garantien und sind die von SCIEX alleinig und ausschließlich zuerkannten Zusicherungen, Garantien und Verpflichtungen. SCIEX gibt keinerlei andere ausdrückliche oder implizite Garantien wie beispielsweise Garantien zur Marktgängigkeit oder Eignung für einen bestimmten Zweck, unabhängig davon, ob diese auf gesetzlichen oder sonstigen Rechtsvorschriften beruhen oder aus Geschäftsbeziehungen oder Handelsbrauch entstehen, und lehnt alle derartigen Garantien ausdrücklich ab; zudem übernimmt SCIEX keine Verantwortung und Haftungsverhältnisse, einschließlich solche in Bezug auf indirekte oder nachfolgend entstehenden Schäden, die sich aus der Nutzung durch den Käufer oder daraus resultierende widrige Umstände ergeben.

Nur für Forschungszwecke. Nicht zur Verwendung bei Diagnoseverfahren.

Die hier erwähnten Marken und/oder eingetragenen Marken, einschließlich deren Logos, sind Eigentum der AB Sciex Pte. Ltd. oder ihrer jeweiligen Inhaber in den Vereinigten Staaten und/oder anderen Ländern (siehe sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ wird unter Lizenz verwendet.

Echo, Echo MS und Echo MS+ sind Handelsmarken oder eingetragene Handelsmarken von Labcyte, Inc. in den USA und anderen Ländern und werden unter Lizenz verwendet.

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

Inhalt

1 Erfassung mit einem Echo[®] MS+-System	4
MS-Methode.....	4
Quellen- und Gas-Parameter.....	4
Parameter für TOF MS-Experimente.....	5
Parameter für MRM ^{HR} Algorithmus-Experimente.....	7
AE-Methode.....	8
Batch.....	11
Automatische Kalibrierung (Optional).....	13
Ausgabekonfigurationsdatei (optional).....	14
Systemvorbereitung.....	15
2 Ziellisten	18
Erstellen einer Zielliste.....	18
Konfigurieren der Standardeinstellungen des Projekts.....	23
Erstellen einer MS-Methode zur Verwendung als Vorlage.....	25
Erstellen einer Prozessierungsmethode zur Verwendung als Vorlage.....	25
3 Visualisierung von Daten	26
Kontakt	28
Adressen.....	28
Kundenschulung.....	28
Online-Lernzentrum.....	28
SCIEX Support.....	28
Cybersicherheit.....	28
Dokumentation.....	28

Erfassung mit einem Echo[®] MS+-System

1

Dieser Abschnitt enthält Informationen zur Verwendung der SCIEX OS-Software für die Erfassung von AEMS-Daten (Acoustic Ejection Mass Spectrometry). Der Abschnitt enthält Beschreibungen der MS- und AE-Methodenparameter, Batches, Batch-Kalibrierung und Systemvorbereitung.

MS-Methode

Quellen- und Gas-Parameter

Die Echo[®] MS-Sonde an der OptiFlow Turbo V-Ionenquelle arbeitet mit der Open Port Interface (OPI) auf dem Echo[®] MS+-System, um Proben anzusaugen, zu zerstäuben und zu ionisieren und anschließend an das ZenoTOF 7600-Massenspektrometer zu leiten. Für diesen Arbeitsablauf wird ein enger Bereich hinsichtlich der Quellen- und Gas-Parameter empfohlen.

Abbildung 1-1: Quellen- und Gas-Parameter

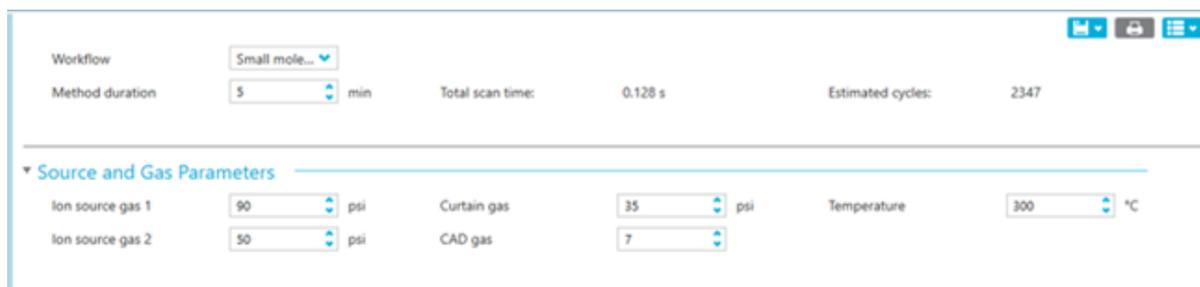


Tabelle 1-1: Quellen- und Gas-Parameter

Parameter	Anmerkungen
Ionenquellengas 1 (psi)	Legt den Druck für das Ionenquellengas 1 fest. Das Ionenquellengas 1 befördert das Trägerlösungsmittel vom OPI-Port zur Ionenquelle. Legen Sie einen Wert von 90 fest. Niedrigere Werte können Lecks an der OPI verursachen.
Ionenquellengas 2 (psi)	Legt den Druck für das Ionenquellengas 2 fest. Dieses Gas löst das Trägerlösungsmittel in der Ionenquelle auf. Optimieren Sie den Wert für Ionenquellengas 2 (psi) für die Zusammensetzung und Flussrate des Trägerlösungsmittels. Es wird ein Anfangswert von 50 empfohlen.

Tabelle 1-1: Quellen- und Gas-Parameter (Fortsetzung)

Parameter	Anmerkungen
Curtain-Gas (psi)	Legen Sie den Druck für das Gas für die Curtain Gas-Schnittstelle fest. Dieses Gas trägt dazu bei, eine Verunreinigung der Ionenoptik zu vermeiden. Verwenden Sie den höchstmöglichen Wert, bei dem die Empfindlichkeit nicht verringert wird. Höhere Werte verringern die Kontaminierung und sorgen dafür, dass die Signalintensität leicht abnimmt.
CAD-Gas	Legen Sie den Druck in der Stoßzelle fest. Legen Sie den Wert bei TOF MS-Experimenten für eine Stoßabkühlung der Ionen auf 7 fest. Optimieren Sie den CAD-Gas -Wert bei TOF MS/MS-Experimenten für eine Fragmentierung der Analyt-Ionen.
Temperatur (°C)	Optimieren Sie die Temperatur für die Zusammensetzung und Flussrate des Trägerlösungsmittels. Es wird ein Anfangswert von 300 empfohlen. Temperatureinstellungen über 400 werden nicht empfohlen. Hohe Temperaturen können die Lebensdauer der Elektrode verringern und eine geringere Empfindlichkeit bei thermisch labilen Verbindungen bewirken.

Parameter für TOF MS-Experimente

Abbildung 1-2: TOF MS-Parameter

Tabelle 1-2: TOF MS-Parameter

Parameter	Anmerkungen
Polarität	Legen Sie den Ionisationsmodus fest. Wählen Sie Positiv oder Negativ aus. Ein Polaritätswechsel ist nicht verfügbar.
TOF-Startmasse (Da)	Bestimmen Sie die Masse am Anfang des Zielmassenbereichs. Die TOF-Startmasse (Da) muss vor der TOF-Stoppmasse (Da) liegen.
TOF-Stoppmasse (Da)	Bestimmen Sie die Masse am Ende des Zielmassenbereichs. Die TOF-Stoppmasse (Da) muss größer sein als die TOF-Startmasse (Da) .

Tabelle 1-2: TOF MS-Parameter (Fortsetzung)

Parameter	Anmerkungen
Akkumulationszeit (s)	Bestimmen Sie die Zeit, die das Massenspektrometer benötigt, um ein TOF MS-Spektrum zu erfassen. Es wird ein Anfangswert von 0,08 empfohlen.
Zerstäuberspannung (V)	Bestimmen Sie die Spannung, die auf die Sondenelektrode angewendet werden soll. Optimieren Sie die Zerstäuberspannung für die Zusammensetzung und Flussrate des Trägerlösungsmittels. Um die Lebensdauer der Elektrode zu maximieren, sollte kein Wert über 4500 verwendet werden.
Auflösungspotenzial von Ionenclustern (V)	Bestimmen Sie die an der Orifice anzuwendende Spannung, um die Bildung von Ionenclustern zu minimieren. Unterschiedliche Verbindungen können unterschiedliche optimale Werte für das Auflösungs potenzial von Ionenclustern (DP) aufweisen. Der DP-Wert wird für den vollständigen Massenbereich verwendet.
DP-Verteilung (V)	Geben Sie einen Wert für die DP-Verteilung (DPS) ein. In Verbindung mit dem Auflösungspotenzial von Ionenclustern (V) steuert dieser Parameter das auf die Ionen angewendete DP. Das DP wird schrittweise von einem niedrigen Wert (DP – DPS) auf einen hohen Wert (DP + DPS) erhöht.
ITC-Modus	Wählen Sie Dynamisch oder Statisch aus. Im dynamischen Modus wird der Ionenfluss kontinuierlich überwacht und automatisch angepasst, um eine Beschädigung des Detektors zu vermeiden. Im statischen Modus legt der Benutzer einen Wert im Feld ITC fest. Beim dynamischen Modus werden 27 ms zur Zykluszeit hinzugefügt, um den Ionenfluss vor dem Start des Experiments zu überwachen. Hinweis: Der dynamische Modus ist nur verfügbar für TOF MS-Experimente.
Stoßenergie (V)	Bestimmen Sie die Spannung, die in der Stoßzelle angewendet werden soll. Bei TOF MS-Experimenten wird ein niedriger Wert verwendet, um Ionen ohne Fragmentierung durch die Stoßzelle zu leiten.
CE-Verteilung (V)	Dieser Parameter wird für gewöhnlich nicht in TOF MS-Experimenten verwendet.

Tabelle 1-2: TOF MS-Parameter (Fortsetzung)

Parameter	Anmerkungen
ITC	<p>Bestimmen Sie den prozentualen Anteil der Ionen, die in das Massenspektrometer gelangen sollen.</p> <p>Wenn der statische Modus verwendet wird, überwachen Sie die Ionen-Intensität. Starten Sie mit einem niedrigen Wert und erhöhen Sie den Wert in kleinen Schritten, bis die Signalstärke das erforderliche Minimum erreicht. Wenn die erwartete Ionen-Intensität nicht bekannt ist, dann verwenden Sie den dynamischen Modus. Eine konstant hohe Ionen-Intensität oder kurze Zeitabschnitte mit einer sehr hohen Ionen-Intensität können den Detektor dauerhaft beschädigen.</p> <hr/> <p>Hinweis: Dieser Parameter ist anwendbar, wenn ITC-Modus auf Statisch festgelegt ist.</p>

Parameter für MRM^{HR} Algorithmus-Experimente

Abbildung 1-3: MRM^{HR} Algorithmus-Parameter

Compound ID	Group Name	Precursor Ion (Da)	TOF Start Mass (Da)	TOF Stop Mass (Da)	Accumulation Time (sec)	Declustering potential (V)	Collision energy (V)	CE Spread (V)	
1	Atrazine	Group...	216.10105	92.50000	112.50000	0.0200	80	35	0

Tabelle 1-3: MRM^{HR} Algorithmus-Parameter

Parameter	Anmerkungen
Q1-Auflösung	Bestimmen Sie die Auflösung des Q1-Quadrupols. Wählen Sie Einheit , Offen , Niedrig oder Hoch aus. Einheit bietet eine Auswahl bei der Q1-Masse von ca. $\pm 0,7$ Da. Offen und Niedrig bieten eine breitere Auswahl bei der Q1-Masse. Hoch bietet eine engere Auswahl bei der Q1-Masse.
ITC	Bestimmen Sie den prozentualen Anteil der Ionen, die in das Massenspektrometer gelangen sollen. Bei MRM ^{HR} Algorithmus-Experimenten wird dieser Parameter für gewöhnlich auf 100 gesetzt, um die Empfindlichkeit der Analyten zu maximieren.

Tabelle 1-3: MRM^{HR} Algorithmus-Parameter (Fortsetzung)

Parameter	Anmerkungen
Zeno-Pulsieren	Wählen Sie diese Option, um Zeno-Pulsieren zu aktivieren. Zeno-Pulsieren ist eine einzigartige Funktionalität des ZenoTOF 7600/7600+ Massenspektrometers. Wenn diese Funktion aktiviert ist, wird der Arbeitszyklus verbessert und die Signalstärke erhöht.
TOF-Start-/Stoppmasse anwenden	Wählen Sie diese Option, um den TOF-Massenbereich manuell einzustellen. Wenn diese Option nicht ausgewählt ist, dann wird ein standardmäßiger Massenbereich von 20 Da verwendet, der um das angegebene Fragment-Ion zentriert ist.
TOF-Startmasse (Da)	Bestimmen Sie die Masse am Anfang des Zielmassenbereichs. Die TOF-Startmasse (Da) muss vor der TOF-Stoppmasse (Da) liegen.
TOF-Stoppmasse (Da)	Bestimmen Sie die Masse am Ende des Zielmassenbereichs. Die TOF-Stoppmasse (Da) muss größer sein als die TOF-Startmasse (Da) .
Akkumulationszeit (Sek.)	Bestimmen Sie die Zeit, die das Massenspektrometer benötigt, um ein TOF MS/MS-Spektrum zu erfassen. Es wird ein Anfangswert von 0,01 empfohlen.
Auflösungspotenzial von Ionenclustern (V)	Bestimmen Sie die an der Orifice anzuwendende Spannung, um die Bildung von Ionenclustern zu minimieren. Bei MRM ^{HR} Algorithmus-Experimenten wird das Auflösungspotenzial für jede Zeile in der Übergangstabelle bestimmt.
Stoßenergie (V)	Bestimmen Sie die Spannung, die in der Stoßzelle angewendet werden soll. Bei TOF MS/MS- und MRM ^{HR} -Experimenten bricht diese Spannung die Vorläufer-Ionen in Fragmente. Optimieren Sie die Stoßenergie (CE), um die Intensität eines Fragments zu maximieren.
CE-Verteilung (V)	Bestimmen Sie die CE-Verteilung (CES). In Verbindung mit dem Parameter Stoßenergie (V) steuert dieser Parameter die auf das Vorläufer-Ion in einem Produkt-Ionen-Scan angewendete CE. Die CE wird schrittweise von einem niedrigen Wert (CE – CES in positiver Polarität) auf einen hohen Wert (CE + CES in positiver Polarität) erhöht.

AE-Methode

Die AE-Methode (AE - Acoustic Ejection - Schallausstoß) liefert die für den Betrieb des Echo® MS+-Systems verwendeten Einstellungen.

Abbildung 1-4: AE-Methode: Standard

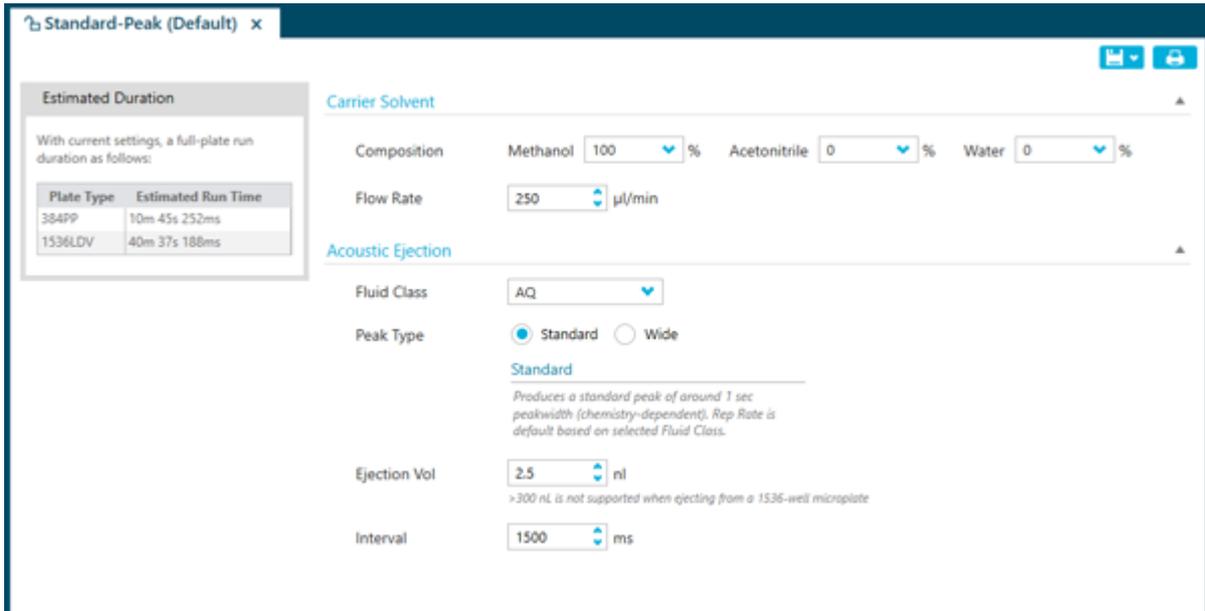


Abbildung 1-5: AE-Methode: Wide

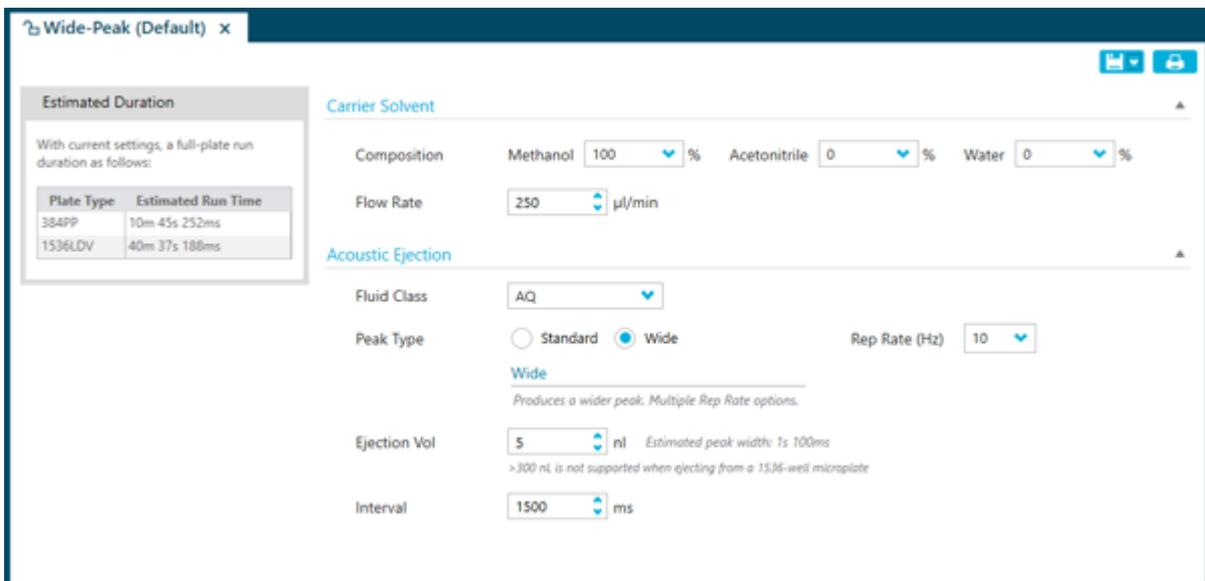


Tabelle 1-4: AE-Methodenparameter

Parameter	Beschreibung
Geschätzte Dauer	Zeigt die erwartete Dauer der Laufzeit der Platte an, berechnet mithilfe von Intervall (ms) und anderen Faktoren, die Auswirkungen auf die Laufzeit haben. Die geschätzte Dauer wird sowohl für 384-Well-Platten als auch für 1.536-Well-Platten bereitgestellt. Bei der Berechnung wird die für die Äquilibration oder Batch-Kalibrierung erforderliche Zeit nicht berücksichtigt.

Tabelle 1-4: AE-Methodenparameter (Fortsetzung)

Parameter	Beschreibung
Trägerlösungsmittel	Um die Zusammensetzung des Trägerlösungsmittels zu bestimmen, wählen Sie den prozentualen Anteil für Methanol , Acetonitril und Wasser aus.
Flussrate (µl/min)	Optimieren Sie die Flussrate für das System. Die Elektrode und die Zusammensetzung des Trägerlösungsmittels haben Auswirkungen auf die optimale Flussrate. Wenn sich die Elektrode oder die Zusammensetzung des Trägerlösungsmittels ändert, dann muss dieser Wert erneut optimiert werden.
Flüssigkeitsklassen	<p>Wählen Sie die Probenmatrix aus, die sich im Proben-Well befindet. Es sind verschiedene Optionen für die verschiedenen Plattentypen verfügbar. Folgende Optionen sind vorhanden:</p> <ul style="list-style-type: none"> • AQ (Wässrig): Wird für wässrige Lösungen verwendet. • SP (Tensidphase): Wird verwendet für Lösungen mit einer geringen Oberflächenspannung, z. B. wässrige Lösungen mit Tensiden (z. B. Triton X-100) oder organisch-wässrige Mischungen. Diese Option ist ausschließlich verfügbar für 384-Well-Platten. Diese Option kann aufgrund der während der Analyse auftretenden Verdampfung der Probe nicht mit 1.536-Well-Platten verwendet werden. • DMSO (Dimethylsulfoxid): Wird verwendet für Lösungsmittel, die zwischen 70 % und 100 % DMSO enthalten.
Peaktyp	<p>Wählen Sie den Modus Standard oder Breit aus.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Standard: Das AE-System stößt Tröpfchen sehr schnell aus, um einen schmalen Peak zu erzeugen. • Breit: Der Benutzer kann die Geschwindigkeit des Ausstoßes der Tröpfchen bestimmen, um Peaks zu erzeugen, die breiter sind als im Standardmodus. Breitere Peaks liefern mehr Datenpunkte über den gesamten Peak und unterstützen längere Zykluszeiten in der MS-Methode. Der Modus für breite Peaks ist nur bei Mehrfach-Tröpfchenausstoßen anwendbar.
Ausstoßvolumen (nl)	<p>Bestimmen Sie das Gesamtvolumen der Proben, das vom Echo® MS+-System (in Schritten von 2,5 nl) abgegeben werden soll.</p> <hr/> <p>Hinweis: Das System stößt Tröpfchen mit 2,5 nl aus.</p> <hr/> <p>Wenn der Peaktyp auf Breit festgelegt ist, dann ist 5 der Mindestwert für Ausstoßvolumen (nl).</p>

Tabelle 1-4: AE-Methodenparameter (Fortsetzung)

Parameter	Beschreibung
Intervall (ms)	Bestimmen Sie die Zeit zwischen den Probenausstößen. Die Software verwendet die Wiederholungsrate (Hz) und das Ausstoßvolumen (nl) , um ein minimales Intervall (ms) zu berechnen.
Wiederholungsrate (Hz)	Bestimmen Sie die Wiederholungsrate (rep) des Tröpfchenausstoßes in Hz. Ausstoßvolumen (nl) und Wiederholungsrate (Hz) steuern die Breite der Peaks.

Batch

Abbildung 1-6: Batch

The screenshot shows a software window titled 'Batch' with a status bar indicating 'Ready'. Below the title bar is a menu bar with 'File', 'Open', and 'View...'. The main area contains a table with columns: Sample Name, MS Method, AE Method, Plate Type, Well Position, Sample Type, Data File, Processing Method, Results File, Marker Well, and Target List. The table contains 10 rows of sample data.

Sample Name	MS Method	AE Method	Plate Type	Well Position	Sample Type	Data File	Processing Method	Results File	Marker Well	Target List
Name 2	TOF MS Example	Example AE Method	3849F	A2	Standard	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TOFMS		EchoMS Target List
Name 3	TOF MS Example	Example AE Method	3849F	A3	Standard	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TOFMS		EchoMS Target List
Name 4	TOF MS Example	Example AE Method	3849F	A4	Standard	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TOFMS		EchoMS Target List
Name 5	TOF MS Example	Example AE Method	3849F	A5	Unknown	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TOFMS		EchoMS Target List
Name 6	TOF MS Example	Example AE Method	3849F	A6	Unknown	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TOFMS		EchoMS Target List
Name 7	TOF MS Example	Example AE Method	3849F	A7	Unknown	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TOFMS		EchoMS Target List
Name 8	TOF MS Example	Example AE Method	3849F	A8	Unknown	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TOFMS		EchoMS Target List
Name 9	TOF MS Example	Example AE Method	3849F	A9	Unknown	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TOFMS		EchoMS Target List
Name 10	TOF MS Example	Example AE Method	3849F	A10	Unknown	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TOFMS		EchoMS Target List

Hinweis: Die folgenden Spalten sind nicht anwendbar auf die Analyse von Daten, die mit einem Echo® MS+-System erfasst wurden und können mit der Option **Ansicht** ausgeblendet werden: **Rack-Typ**, **Rack-Position**, **Plattenposition** und **Injektionsvolumen (µl)**.

Tabelle 1-5: Batch-Spalten

Spaltenname	Beschreibung	Feldwertanforderungen
Probenname	Der Name der Probe	Weniger als 252 Zeichen. Hinweis: Während der Aufteilung der Daten nach der Erfassung wird die Well-Position zum Anfang des Probennamens hinzugefügt. Beispiel: A1-Sample1.
MS-Methode	Der Name der MS-Methode	Wählen Sie eine MS-Methode aus der Liste für das aktive Projekt aus. Hinweis: Dieselbe MS-Methode muss für alle Proben im Batch verwendet werden.

Tabelle 1-5: Batch-Spalten (Fortsetzung)

Spaltenname	Beschreibung	Feldwertanforderungen
AE-Methode	Der Name der AE-Methode	Wählen Sie eine AE-Methode aus der Liste für das aktive Projekt aus. Hinweis: Dieselbe AE-Methode muss für alle Proben im Batch verwendet werden.
Plattentyp	384PP oder 1536LDV	Es kann nur ein Plattentyp im Batch verwendet werden. Es können ausschließlich Platten von Beckman Life Sciences, die für die Verwendung mit einem Echo® MS+-System geeignet sind, mit dem Echo® MS+-System verwendet werden.
Well-Position	384PP: A1 bis P24 1536LDV: A1 bis AF48	Eine Well-Position kann für jede Zeile jeweils nur einmal abgetastet werden.
Probentyp	Leerprobe, Standard, Doppelte Leerprobe, QualityControl, Lösungsmittel und Unbekannt	Informationen zum Probentyp werden in der Datendatei gespeichert und können während der Prozessierung verwendet werden.
Datendatei	Der Dateiname, unter dem die erfassten Daten gespeichert werden	Alle von einem Batch erfassten Daten müssen in derselben Datendatei verbleiben. Hinweis: Dieselbe Datendatei muss für alle Proben im Batch verwendet werden.
Prozessierungsmethode	Der Name der Methode, die für die automatische Prozessierung verwendet wird, nachdem die Erfassung abgeschlossen wurde.	Die Prozessierungsmethode muss mit der für die Erfassung von Daten verwendeten MS-Methode kompatibel sein. Hinweis: Dieselbe Prozessierungsmethode muss für alle Proben im Batch verwendet werden.

Tabelle 1-5: Batch-Spalten (Fortsetzung)

Spaltenname	Beschreibung	Feldwertanforderungen
Ergebnisdatei	Der Name der Datei, unter dem die verarbeiteten Ergebnisse gespeichert werden	<p>Ergebnisdateien werden im Unterordner <code>Results</code> des aktiven Projekts gespeichert.</p> <hr/> <p>Hinweis: Dieselbe Ergebnisdatei muss für alle Proben im Batch verwendet werden.</p> <hr/> <p>Hinweis: Verwenden Sie für jeden Batch eine andere Ergebnisdatei. Es wird nicht empfohlen, die Ergebnisdateien mehr als einmal zu verwenden.</p> <hr/> <p>Hinweis: Wird eine Ziellisten-Datei verwendet, dann wird die Ergebnisdatei im <code>txt</code>-Format gespeichert. Wird keine Ziellisten-Datei verwendet, dann werden zwei Ergebnisdateien gespeichert, im <code>txt</code>-Format und im <code>qsession</code>-Format.</p>
Markierungs-Well	<p>Markierungs-Well: Wahr</p> <p>Andere Wells: Falsch (Standard)</p>	Wählen Sie jeweils nur einen Markierungs-Well in jedem Batch aus. Wählen Sie einen Well mit Inhalten, die ein ausreichend starkes MS-Signal für die Barcode-Erkennung während der Aufteilung von Daten liefern. Wenn die Peakform ein übermäßiges Tailing aufweist, dann erfolgt möglicherweise keine Aufteilung von Daten.
Zielliste	Der Name der Zielliste -Datei mit der Dateierweiterung <code>CSV</code>	(Optional) Legen Sie die Zielliste -Datei fest. Wenn sich die Datei nicht im Ordner <code>Batch</code> für das aktive Projekt befindet, dann fügen Sie den vollständigen Dateipfad ein. Siehe Abschnitt: Ziellisten .

Automatische Kalibrierung (Optional)

Wenn die automatische Kalibrierung verwendet wird, dann muss diese beim Start des Batches erfolgen. Die Kalibrierung kann nicht zwischen Proben erfolgen.

Das Kalibrierlösungszufuhrsystem (CDS) wird verwendet, um das ZenoTOF 7600/7600+-System zu kalibrieren, wenn es mit dem Echo® MS+-System konfiguriert ist.

Der Benutzer kann die entsprechende Ionen-Referenztablette auswählen und die Tabelle hinsichtlich der Inhalte des CDS-Behälters und der erforderlichen spezifischen Kalibrierungsionen bearbeiten.

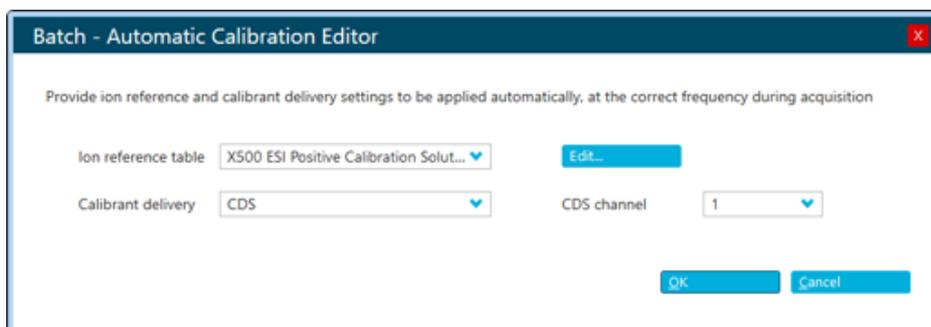
Erfassung mit einem Echo® MS+-System

Um eine automatische Kalibrierung beim Start des Batches durchzuführen, aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Automatische Kalibrierung**.

Die Kalibrierung erfolgt in zwei Phasen:

- Kal.: Anfängliche CDS-Kalibrierung mit der ausgewählten Ionen-Referenztable
- Kal. Phase 2: Äquilibrierung, wobei Kurven der CDS-Lösung entfernt werden

Abbildung 1-7: Dialogfeld „Batch - Editor für automatische Kalibrierung“



Ausgabekonfigurationsdatei (optional)

Verwenden Sie die `EchoExportColumnConfig.xml`-Datei zum Anpassen des Pfades, in den die Ergebnis-Textdateien geschrieben werden, der Spalten, die in die Ergebnis-Textdateien einbezogen werden sollen und der Reihenfolge der Spalten.

Die standardmäßige `EchoExportColumnConfig.xml`-Datei befindet sich im Ordner `SCIEX OS Data/common-project-area`. Um die Einstellungen zu ändern, bearbeiten Sie diese Datei oder erstellen und bearbeiten Sie eine Kopie der Datei im Projektordner oder im Ordner `Quantitation Results` für das Projekt.

Hinweis: Drei Vorlagen sind im Ordner `SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Export Column Configuration` verfügbar:

- `EchoExportColumnConfig-1`
- `EchoExportColumnConfig-CompoundQC`
- `EchoExportColumnConfig-Intact`

Tabelle 1-6: Elemente in der Ausgabedatei

Element	Beschreibung
Path	Legen Sie den Pfad fest, in den die Ergebnis-Textdatei gespeichert wird. Es können mehrere Pfade festgelegt werden, um mehrere Kopien der Ausgabedatei zu speichern. Hinweis: Eine Kopie der Ergebnis-Textdatei wird im Ordner <code>Quantitation Results</code> für das Projekt gespeichert.

Tabelle 1-6: Elemente in der Ausgabedatei (Fortsetzung)

Element	Beschreibung
Order	Legen Sie die Reihenfolge für die Spalte in der Ergebnis-Textdatei fest. Geben Sie für jede Spalte eine eindeutige Zahl ein. Geben Sie für die erste Spalte 0 ein.
Visible	Legen Sie fest, ob die Spalte in der Ergebnis-Textdatei enthalten sein soll. Geben Sie <code>true</code> ein, um die Spalte einzuschließen. Geben Sie <code>false</code> ein, um die Spalte auszuschließen.

Systemvorbereitung

Um bei Experimenten mit MRM^{HR}-Algorithmus und informationsabhängiger Erfassung (IDA), bei denen unterschiedliche Ionen für unterschiedliche Wells überwacht werden, sicherzustellen, dass die korrekten Ionen für jeden Well überwacht werden, benötigt die Software die Zeit zwischen dem Tröpfchenausstoß und der Erkennung (Übertragungszeit). Die Übertragungszeit wird bei jeder Aufteilung von Daten berechnet und gespeichert.

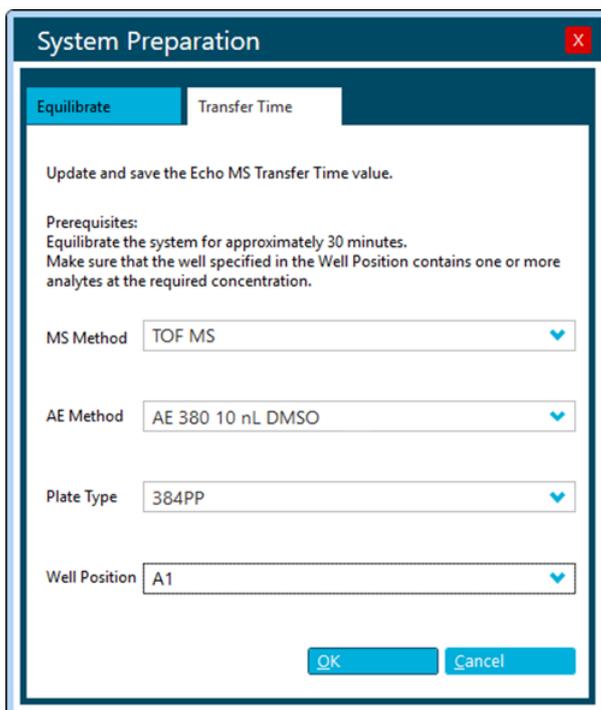
Wenn das System kürzlich nicht verwendet wurde oder die Elektrode oder das Trägerlösungsmittel gewechselt wurde, dann führt das System einen kurzen Batch aus, um die Übertragungszeit zu berechnen. Bevor der Batch zum Kalibrieren der Übertragungszeit ausgeführt wird, stellen Sie sicher, dass die Äquilibration des Systems mindestens 30 Minuten gedauert hat.

Um die Übertragungszeit zu kalibrieren, gehen Sie wie folgt vor:

1. Öffnen Sie das Statusfeld.
2. Klicken Sie auf **Equilibrate**.

Das Dialogfeld „System Preparation“ wird geöffnet.

Abbildung 1-8: Dialogfeld „Systemvorbereitung“: Registerkarte „Übertragungszeit“



- Öffnen Sie die Registerkarte „Übertragungszeit“ und verwenden Sie dann die folgende Tabelle zum Ausfüllen der Felder:

Tabelle 1-7: Registerkarte „Übertragungszeit“

Feld	Beschreibung
MS-Methode	Wählen Sie eine MS-Methode aus der Liste für das aktive Projekt aus. Zum Anpassen der Übertragungszeit kann eine beliebige MS-Methode verwendet werden. Eine TOF MS-Methode liefert für gewöhnlich das beste Ergebnis.
AE-Methode	Wählen Sie die AE-Methode, die für die AEMS-Analyse (Acoustic Ejection Mass Spectrometry) verwendet wird, aus der Liste für das aktive Projekt aus. Die AE-Methode stellt sicher, dass die Übertragungszeit für die Probenübertragungsbedingungen in der AEMS-Analyse korrekt kalibriert wird. Stellen Sie sicher, dass der Wert für Ausstoßvolumen (nl) in der ausgewählten Methode ausreichend ist, um ein starkes Signal zu liefern, dass beinahe identisch ist mit der Intensität des Markierungs-Wells. Hinweis: Passen Sie die Übertragungszeit an, bevor eine andere AE-Methode verwendet wird.

Tabelle 1-7: Registerkarte „Übertragungszeit“ (Fortsetzung)

Feld	Beschreibung
Plattentyp	Wählen Sie eine für das Echo® MS-System geeignete Platte aus. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none">• 384PP• 1536LDV
Well-Position	Bestimmen Sie die Position eines Wells, der eine Probenkonzentration enthält, die ein signifikantes Signal im Massenspektrometer liefern wird. Es wird ein Markierungs-Well empfohlen. Folgende Optionen sind vorhanden: <ul style="list-style-type: none">• 384PP: A1 bis P24• 1536LDV: A1 bis AF48

4. Klicken Sie auf **OK**.

Ein Batch mit 15 Proben wird automatisch erstellt und zur Warteliste gesendet. Nachdem ein Batch abgeschlossen wurde, wird die neue Übertragungszeit berechnet und als Systemstandard gespeichert.

Für gewöhnlich erfasst ein mit dem Echo[®] MS+-System verwendeter Batch einen Analyten oder einen Satz von Analyten für alle Proben. Wenn ein unterschiedlicher Ziel-Analyt für jede Zeile, Spalte oder Well-Position angegeben werden muss (z. B. in MRM^{HR}-Algorithmus-Arbeitsabläufen), dann muss eine Zielliste verwendet werden. Bei TOF MS-Daten bestimmt die Zielliste die relevanten Analyten für jeden Well. Diese Informationen werden dann während der Prozessierung von Daten verwendet. Eine Zielliste kann auch verwendet werden, um die relevanten Analyten in MRM^{HR}-Algorithmus- und IDA-Experimenten während der Erfassung zu bestimmen. Die Analyt-Informationen in der Zielliste werden verwendet, um die MS-Methode während der Erfassung zu aktualisieren.

Bei der Zielliste handelt es sich um eine `CSV`-Datei. Die Datei enthält Analyt-Informationen, die in den folgenden Bereichen verwendet werden können:

- Für die Analyt-Informationen für die Massenwiederherstellung von intakten Proteinen und großen Biomolekülen
- In der Einschlussliste für IDA-Experimente

Um eine Zielliste zu verwenden, wenden Sie folgende Verfahren an:

- [Erstellen einer Zielliste](#)
- [Konfigurieren der Standardeinstellungen des Projekts](#)
- [Erstellen einer MS-Methode zur Verwendung als Vorlage](#)
- [Erstellen einer Prozessierungsmethode zur Verwendung als Vorlage](#)

Erstellen einer Zielliste

Jede Zeile einer Ziellisten-Datei enthält Masseinformationen für einen einzelnen Well bzw. eine Verbindung. Mehrere Zeilen können dieselbe Verbindung enthalten. Mehrere Zeilen können dieselbe Well-Position enthalten.

Hinweis: Beispiel-Ziellisten für verschiedene Arbeitsabläufe sind im Ordner `SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Target List` verfügbar.

- Erstellen Sie eine Ziellisten-Datei im `CSV`-Format und speichern Sie diese dann im Unterordner `Batch` des Ordners für das Projekt, in dem diese verwendet wird.

Hinweis: Die Ziellisten-Datei kann Kommata oder Punkte als Dezimaltrennzeichen verwenden. Die während der automatischen Prozessierung erstellte Ergebnisdatei verwendet Punkte als Dezimaltrennzeichen.

Hinweis: Stellen Sie sicher, dass der Text, die Großschreibung und Abstände in den Feldnamen mit denen in der folgenden Tabelle übereinstimmen.

Tabelle 2-1: Feldnamen in der Ziellisten-Datei

Feld	Beschreibung
Well	Bestimmen Sie eine Well-Position in jeder Zeile, ohne Leerzeichen. Folgende Werte sind verfügbar: <ul style="list-style-type: none"> • 384PP: A1 bis P24 • 1536LDV: A1 bis AF48
Transfer Time Tolerance	Bestimmen die die Anzahl der Sekunden, die hinzugefügt werden soll, um den Start und das Ende des Überwachungsfensters für eine Probe anzupassen. Dieser Parameter wird beispielsweise in folgenden Arbeitsabläufen verwendet, bei denen unterschiedliche Übergänge für unterschiedliche Well-Positionen überwacht werden: <ul style="list-style-type: none"> • MRM^{HR}-Arbeitsabläufe, bei denen Übergänge nach Well überwacht werden • IDA-Arbeitsabläufe, bei denen Einschusslisten nach Well überwacht werden <p>Die Übertragungszeittoleranz kann negativ sein, der Absolutwert der Übertragungszeit darf jedoch nicht größer als die Hälfte des in der AE-Methode verwendeten Ausstoßintervalls sein.</p>
Offset	Bestimmen Sie die Anzahl der Sekunden, um die das geplante Erfassungsfenster um eine mögliche Peak-Position verschoben wird. Bei einem positiven Wert wird das Fenster nach rechts verschoben. Bei einem negativen Wert wird das Fenster nach links verschoben.
Group	Bestimmen Sie den entsprechenden Gruppennamen für die Verbindung.
Name	Bestimmen Sie die Verbindungs-ID der Verbindung.
IS Name	Bestimmen Sie den Namen des internen Standards, der für die Quantifizierungsberechnungen für die Verbindung verwendet werden soll. Es kann jeweils nur ein interner Standard für jede Verbindung verwendet werden.
IS	Stellen Sie fest, ob es sich bei der Verbindung um einen internen Standard handelt. Folgende Werte sind verfügbar: <ul style="list-style-type: none"> • True • False
Formula	Bestimmen Sie die Elementarformel für die Verbindung. Peptide können einbuchstabige Aminosäuren und Modifikationen aufweisen. Um spezifische Isotope zu bestimmen, nehmen Sie das Gewicht der Isotope (z. B. [2H], [18O] oder [15N]) in eckigen Klammern vor dem Symbol auf. Bestimmen Sie beispielsweise schweres Wasser (D2O) als [2H]2O.

Tabelle 2-1: Feldnamen in der Ziellisten-Datei (Fortsetzung)

Feld	Beschreibung
Adduct/Charge	Wenn eine Formel angegeben ist, dann bestimmen Sie das Addukt und den Ladungszustand, z. B. [M+H] ⁺ oder [M+H] ⁻ . Alle Addukte, die im Arbeitsbereich „Analyse“ der SCIEX OS Software unterstützt werden, werden in Ziellisten unterstützt.
Comment	Geben Sie weitere Informationen für den Zeileneintrag an. Es können bis zu 128 Zeichen verwendet werden.
Precursor Mass (Da)	Bestimmen Sie die Masse des Vorläufer-Ions. Der anwendbare Bereich liegt zwischen 5 und 2.250, mit bis zu 5 Dezimalstellen.
TOF Start Mass (Da)	Bestimmen Sie die Masse am Anfang des Zielmassenbereichs für ein TOF MS/MS-Experiment. Die TOF Start Mass (Da) muss kleiner sein als die TOF Stop Mass (Da) . Dieser Parameter wird verwendet, wenn TOF-Start-/Stoppmasse anwenden in der MS-Methode ausgewählt wird, die als Vorlage verwendet werden soll.
TOF Stop Mass (Da)	Bestimmen Sie die Masse am Ende des Zielmassenbereichs für ein TOF MS/MS-Experiment. Die TOF Stop Mass (Da) muss größer sein als die TOF Start Mass (Da) . Dieser Parameter wird verwendet, wenn TOF-Start-/Stoppmasse anwenden in der MS-Methode ausgewählt wird, die als Vorlage verwendet werden soll.
Fragment Mass (Da)	Geben Sie die Fragmentmasse ein, die in der Prozessierungsmethode verwendet werden soll. Der standardmäßige Scanbereich für eine TOF MS/MS-Methode liegt bei 20 Da, ±10 Da von der angegebenen Fragmentmasse. Hinweis: Wenn TOF-Start-/Stoppmasse anwenden in der als Vorlage zu verwendenden MS-Methode ausgewählt wird, dann werden die in der Zielliste festgelegte TOF Start Mass (Da) und TOF Stop Mass (Da) als TOF MS/MS-Scanbereich verwendet.
Accumulation Time (sec)	Passen Sie die Akkumulationszeit des Zielübergangs an, um die Gesamtscanzeit zu optimieren. Die Akkumulationszeit ist die Zeit, die das Massenspektrometer benötigt, um einen TOF MS/MS-Datenpunkt zu erfassen. Die Akkumulationszeit hat Auswirkungen auf die Anzahl der Punkte über den gesamten Peak. Der anwendbare Bereich liegt zwischen 0,005 und 50. Typische Werte liegen zwischen 0,01 und 0,100.

Tabelle 2-1: Feldnamen in der Ziellisten-Datei (Fortsetzung)

Feld	Beschreibung
Declustering potential (V)	<p>Bestimmen Sie die auf die Orifice anzuwendende Spannung, um die Bildung von Ionenclustern zu minimieren. Das Auflösungs potenzial (DP) kann für jede Zeile der Übergangstabelle festgelegt werden. Der anwendbare Bereich liegt zwischen 0 und 300.</p> <hr/> <p>Hinweis: DP-Verteilung (V) ist in der MS-Methode festgelegt.</p> <hr/>
Collision Energy (V)	<p>Bestimmen Sie die Spannung, die auf die Stoßzelle angewendet werden soll. Die Stoßenergie (CE) wird für gewöhnlich optimiert, um die Intensität eines Fragments zu maximieren. Der anwendbare Bereich liegt zwischen 0 und 150.</p>
CE Spread (V)	<p>Bestimmen Sie den Wert, der verwendet werden soll, um die CE schrittweise zu erhöhen. In Verbindung mit dem Parameter Collision Energy (V) steuert der Parameter für die CE-Verteilung (CES) die auf das Vorläufer-Ion in einem Produkt-Ionen-Scan angewendete CE.</p> <p>Beispiel: In positiver Polarität wird die CE von CE – CES bis CE + CES schrittweise angepasst.</p> <p>Der anwendbare Bereich liegt zwischen 0 und 150.</p>

Tabelle 2-1: Feldnamen in der Ziellisten-Datei (Fortsetzung)

Feld	Beschreibung
Fragmentation Mode	<p>Bestimmen Sie einen der folgenden Fragmentierungsmodi:</p> <ul style="list-style-type: none"> • CID: Im CID-Modus (Collisional Induced Dissociation) werden Fragment-Ionen durch Schwingungsanregung des Vorläufer-Ions erzeugt, die sich aus Kollisionen mit Gasmolekülen in der Q2-Stoßzelle ergibt. • EAD: Im EAD-Modus (Electron Activated Dissociation) werden die Vorläufer-Ionen in der EAD-Zelle Elektronen ausgesetzt, um die Auflösung des Vorläufer-Ions zu Fragment-Ionen herbeizuführen. • EAD (conventional trapping): Konventionelles Trapping ist ein EAD-Modus, der sich am besten für akademische Studien zur Reaktionskinetik eignet. Der EAD-Modus bietet mehr Kontrolle für die Schritte Ladezeit und Reaktionszeit (Dauer der Elektronenbestrahlung). Im EAD-Modus werden diese Schritte optimiert, damit sie gleichzeitig erfolgen und somit zu einer erhöhten Empfindlichkeit um etwa das Doppelte führen. Im EAD-Modus (konventionelles Trapping) werden diese Schritte nacheinander ausgeführt. Ausgewählte Vorläufer werden in die EAD-Zelle für eine bestimmte Ladezeit eingeführt, der Elektronenstrahl wird für eine festgelegte Reaktionszeit angewendet, und anschließend werden Produkte aus der EAD-Zelle ausgestoßen. <hr/> <p>Tipp! Verwenden Sie den EAD-Modus (konventionelles Trapping), wenn eine präzise und vorhersehbare Steuerung der Reaktionszeit erforderlich ist.</p>
Electron KE (eV)	<p>Bestimmen Sie die kinetische Elektronenenergie (KE) des Bestrahlungselektronenstrahls. Die Elektronen-KE entspricht der DC-Vorspannung zwischen der Elektronenquelle und den EA-Stabelektroden (Electron Activated) in der EAD-Zelle (Electron Activated Dissociation). Dieser Parameter ist anwendbar, wenn Fragmentation Mode auf EAD oder EAD (conventional trapping) festgelegt ist.</p>
ETC (%)	<p>Legen Sie den Elektronenübertragungskoeffizienten (ETC) fest. Dieser Parameter steuert den Anteil der Elektronen, die in die EAD-Zelle gelangen. Der Bereich liegt zwischen 0 % und 100 %. Der Parameter ist anwendbar, wenn Fragmentation Mode auf EAD oder EAD (conventional trapping) festgelegt ist.</p> <hr/> <p>Tipp! Verwenden Sie diesen Parameter, um den Typ der analysierten Vorläuferspezies und der erfassten Produkt-Ionen zum Steuern der Art der EAD-Reaktion zu verwenden.</p>

Tabelle 2-1: Feldnamen in der Ziellisten-Datei (Fortsetzung)

Feld	Beschreibung
EAD RF (Da)	Bestimmen Sie einen Wert zwischen 0 Da und 300 Da. Dieser Parameter steuert den RF-Pegel, um Vorläufer- und Fragment-Ionen in der EAD-Zelle zu belassen. Hinweis: Um Produkt-Ionen mit einem höheren m/z zu ermitteln, erhöhen Sie EAD RF (Da) . Die Erkennung von Produkt-Ionen mit einem niedrigeren m/z kann abnehmen.
Reaction time (ms)	Bestimmen Sie die Reaktionszeit für die Elektronenbestrahlung. Im EAD-Modus steuert dieser Parameter auch die Ladezeit. Tipp! Erhöhen Sie die Reaktionszeit, wenn der Vorläuferverbrauch nach der Optimierung des Elektronenstrahlstroms unzureichend ist.
Time Bins to Sum	Bestimmen Sie die Anzahl der zu addierenden Datenpunkte. Der Bereich für kleine Moleküle oder Peptide liegt zwischen 4 und 6. Der Anfangswert für die Analyse intakter Proteine (> 20 kDa) ist 40.
Channel 1 bis Channel 4	Bestimmen Sie die Kanäle des Analog-Digital-Wandlers (ADC). Jeder Kanal zählt Ionen. Werden alle vier Kanäle ausgewählt (der Standardwert), werden zur Berechnung der gesamten Ionenanzahl alle vier Kanäle addiert.
Expected MW (Da)	Arbeitsablauf für die Massenwiederherstellung: Bestimmen Sie das erwartete Molekulargewicht für die Komponente in Da.
m/z Range for XIC Start (Da)	Arbeitsablauf für die Massenwiederherstellung: Bestimmen Sie die Startmasse für den XIC-Bereich.
m/z Range for XIC Stop (Da)	Arbeitsablauf für die Massenwiederherstellung: Bestimmen Sie die Endmasse für den XIC-Bereich.
Reconstruction Start Mass (Da)	Arbeitsablauf für die Massenwiederherstellung: Bestimmen Sie die Masse, bei der die Wiederherstellung starten soll (in Da).
Reconstruction Stop Mass (Da)	Arbeitsablauf für die Massenwiederherstellung: Bestimmen Sie die Masse, bei der die Wiederherstellung stoppen soll (in Da).

Konfigurieren der Standardeinstellungen des Projekts

Während der automatischen Prozessierung bezieht die Software die Parameter für die Prozessierungsmethode (z. B. **XIC-Breite (Da)**, **Gaußsche Glättungsbreite (Punkte)** und **Rauschen % für Basislinie (%)**) aus den Standardeinstellungen für das Projekt. Wenn eine Prozessierungsmethode als Vorlage für die automatische Prozessierung

Ziellisten

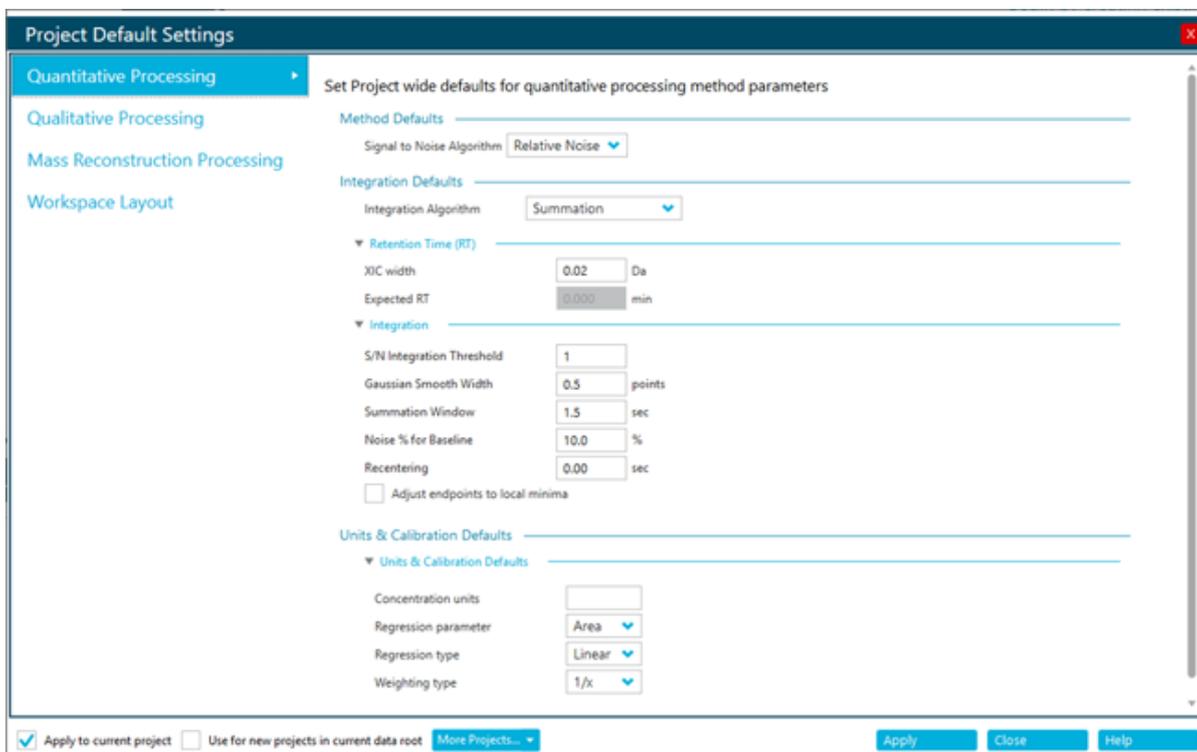
verwendet wird, dann konfigurieren Sie die Standardeinstellungen des Projekts, um die Peak-Integration während der gesamten Analyse zu optimieren. Unterschiedliche Ausstoßvolumina und Peakbreiten in der AE-Methode erfordern unterschiedliche Werte für die Prozessierungsparameter.

Die Informationen in den Standardeinstellungen des Projekts werden in der Prozessierungsmethode gespeichert, die als Vorlage verwendet werden soll.

Hinweis: Wenn die Standardeinstellungen des Projekts im Arbeitsbereich „Analyse“ geändert werden, dann werden diese Änderungen nicht auf gespeicherte Prozessierungsmethoden angewendet. Um die Änderungen anzuwenden, aktualisieren Sie die Standardeinstellungen des Projekts und erstellen Sie dann eine neue Prozessierungsmethode. Die neue Prozessierungsmethode verwendet die aktualisierten Standardeinstellungen des Projekts. Verwenden Sie diese neue Prozessierungsmethode für die automatische Prozessierung.

1. Klicken Sie im Arbeitsbereich „Analyse“ auf **Projekte > Standardeinstellungen des Projekts**.

Abbildung 2-1: Fenster „Quantitative Prozessierung“



2. Konfigurieren Sie die Parameter.
Ausführliche Beschreibungen der Parameter finden Sie im Dokument: *SCIEX OS Hilfesystem*.
 3. Klicken Sie auf **Anwenden**.
 4. Klicken Sie auf **Schließen**.
-

Erstellen einer MS-Methode zur Verwendung als Vorlage

- Erstellen Sie im Arbeitsbereich „MS-Methode“ eine MS-Methode zur Verwendung als Vorlage. Siehe das Dokument: *SCIEX OS Hilfesystem*.
- Erstellen Sie für TOF MS-Experimente eine MS-Methode mit den anwendbaren Quellen- und Gas-Parametern und TOF MS-Versuchsparametern.
- Erstellen Sie für MRM^{HR}-Experimente eine MS-Methode mit den anwendbaren Quellen- und Gas-Parametern, TOF MS-Versuchsparametern und TOF MS/MS-Versuchsparametern wie beispielsweise Einstellungen für Q1-Auflösung, ITC und Zeno-Pulsieren.

Hinweis: Die Informationen zur Massentabelle, wie beispielsweise **Verbindungs-ID**, **Gruppenname**, **Vorläufer-Ion**, **TOF-Startmasse (Da)** und **TOF-Stoppmasse (Da)** oder **Fragment-Ion (Da)**, **Akkumulationszeit (s)**, **Auflösungspotenzial von Ionenclustern (V)**, **Stoßenergie (V)** und **CE-Verteilung (V)** sind in einer Ziellistendatei enthalten. Diese Informationen ersetzen die Informationen in der MS-Methode, die als Vorlage verwendet werden soll, und bieten somit eine fundierte Prozessierungsmethode für TOF MS-Experimente und sowohl eine Erfassungsmethode als auch eine Prozessierungsmethode für TOF MS/MS-Experimente.

Erstellen einer Prozessierungsmethode zur Verwendung als Vorlage

Die Informationen in der Ziellisten-Datei und in den Standardeinstellungen des Projekts ersetzen die Informationen in der als Vorlage verwendeten Prozessierungsmethode. Siehe Abschnitt: [Konfigurieren der Standardeinstellungen des Projekts](#).

- Erstellen Sie eine Prozessierungsmethode im Arbeitsbereich „Analyse“. Siehe das Dokument: *SCIEX OS Hilfesystem*.

Verwenden Sie dieses Verfahren, um Heat Maps für die Visualisierung von AE-Daten (Acoustic Ejection) zu verwenden, die mit einem Echo[®] MS+-System erfasst wurden.

1. Öffnen Sie den Arbeitsbereich „Explorer“.
2. Klicken Sie auf **Datei > Echo MS-Ergebnisdatei öffnen**.
Das Dialogfeld „Öffnen“ wird geöffnet. Es zeigt den Ordner `Quantitation Results` im aktiven Projekt an.
3. Navigieren Sie zu der Ergebnis-Textdatei, die die AE-Daten enthält, und klicken Sie dann auf **Offen**.
4. (Optional) Um die Anzeigeeoptionen für das Fenster zu konfigurieren, klicken Sie auf  (**Einstellungen**), passen Sie die Einstellungen an und klicken Sie dann auf **Speichern und schließen**.
5. (Optional) Wählen Sie die anwendbaren Filteroptionen aus.
6. Wählen Sie im Feld **Spalte** die Spalte in der Ergebnis-Textdatei aus, die angezeigt werden soll.

Die Liste beinhaltet alle Spalten der Ergebnis-Textdatei.

Tipp! Konfigurieren Sie eine Ausgabekonfigurationsdatei, um die Felder auszuwählen, die in der Ergebnis-Textdatei enthalten sein sollen. Siehe Abschnitt: [Ausgabekonfigurationsdatei \(optional\)](#).

7. (Optional) Legen Sie für numerische Spalten den Bereich fest. Die folgenden Optionen sind verfügbar:
 - **Automatisch:** Wählen Sie diese Option aus, um den niedrigsten Wert in den Daten mit der Farbe auf der linken Seite der Farbkarte und den höchsten Wert in den Daten mit der Farbe auf der rechten Seite der Farbkarte anzuzeigen.
 - **Standard:** Wenn ein Standardbereich verfügbar ist, dann wählen Sie diese Option, um den Standardbereich zu verwenden. Um einen Standardbereich festzulegen, legen Sie zunächst einen manuellen Bereich fest und klicken Sie dann auf **Als Standard speichern**.

Hinweis: Wenn der Benutzer einen Standardbereich festlegt, dann wird der Standardbereich für alle Ergebnis-Textdateien im aktiven Projekt verwendet.

- **Manuell:** Wählen Sie diese Option, um einen manuellen Bereich festzulegen. Alle Werte, die niedriger sind als der Wert am unteren Ende des Bereichs, werden in der Farbe auf der linken Seite der Farbkarte angezeigt. Alle Werte, die höher sind als der Wert am oberen Ende des Bereichs, werden in der Farbe auf der rechten Seite der Farbkarte angezeigt.

Hinweis: Werte, die in wissenschaftlicher Schreibweise eingegeben werden, werden in das Dezimalformat geändert.

8. Um Ergebnisse für einen Well anzuzeigen, klicken Sie auf den Well.
9. Um die Daten im Arbeitsbereich „Analyse“ zu öffnen, klicken Sie auf  (**In Analytics öffnen**).

Hinweis: Werden die zugehörigen Dateinformationen nicht gefunden, wird das Dialogfeld „In Analytics öffnen“ geöffnet. Füllen Sie die Felder in diesem Dialogfeld aus und klicken Sie dann auf **Offen**.

Das Öffnen des Arbeitsbereichs kann bis zu 1 Minute in Anspruch nehmen. Die erforderliche Zeit hängt mit der Größe der Ergebnis-Textdatei zusammen.

Kontakt

Adressen



Hergestellt in Singapur
AB Sciex Pte. Ltd.
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

SCIEX Hauptsitz

AB Sciex LLC
500 Old Connecticut Path
Framingham, Massachusetts 01701
USA

Kundenschulung

- Weltweit: sciex.com/contact-us

Online-Lernzentrum

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

SCIEX Support

SCIEX und seine Vertretungen verfügen weltweit über einen Stab an voll ausgebildeten Servicekräften und technischen Spezialisten. Der Support kann Fragen zum System oder anderen auftretenden, technischen Problemen beantworten. Weitere Informationen erhalten Sie auf der SCIEX Website unter sciex.com, oder verwenden Sie einen der folgenden Links, um Kontakt mit uns aufzunehmen.

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

Cybersicherheit

Die aktuellsten Hinweise zur Cybersicherheit von SCIEX-Produkten finden Sie unter sciex.com/productsecurity.

Dokumentation

Diese Version des Dokuments ersetzt alle vorherigen Versionen.

Software-Produktdokumentationen entnehmen Sie den Versionshinweisen oder dem mit der Software mitgelieferten Software-Installationshandbuch.

Informationen zur Hardware-Produktdokumentation finden Sie in der mit dem System oder der Komponente gelieferten Dokumentation.

Die neuesten Versionen der Dokumentationen sind auf der Website von SCIEX unter sciex.com/customer-documents verfügbar.

Hinweis: Wenn Sie eine kostenlose gedruckte Ausgabe dieses Dokuments wünschen, wenden Sie sich bitte an sciex.com/contact-us.
