

Guide des fonctionnalités

Logiciel SCIEX OS

Pour le système Echo[®] MS+ avec le système ZenoTOF 7600/7600+



Ce document est fourni aux clients qui ont acheté un équipement SCIEX afin de les informer sur le fonctionnement de leur équipement SCIEX. Ce document est protégé par les droits d'auteur et toute reproduction de tout ou partie de son contenu est strictement interdite, sauf autorisation écrite de SCIEX.

Le logiciel éventuellement décrit dans le présent document est fourni en vertu d'un accord de licence. Il est interdit de copier, modifier ou distribuer un logiciel sur tout support, sauf dans les cas expressément autorisés dans le contrat de licence. En outre, l'accord de licence peut interdire de décomposer un logiciel intégré, d'inverser sa conception ou de le décompiler à quelque fin que ce soit. Les garanties sont celles indiquées dans le présent document.

Certaines parties de ce document peuvent faire référence à d'autres fabricants ou à leurs produits, qui peuvent comprendre des pièces dont les noms sont des marques déposées ou fonctionnent comme des marques de commerce appartenant à leurs propriétaires respectifs. Cet usage est destiné uniquement à désigner les produits des fabricants tels que fournis par SCIEX intégrés dans ses équipements et n'induit pas implicitement le droit et/ou l'autorisation de tiers d'utiliser ces noms de produits comme des marques commerciales.

Les garanties fournies par SCIEX se limitent aux garanties expressément offertes au moment de la vente ou de la cession de la licence de ses produits. Elles sont les uniques représentations, garanties et obligations exclusives de SCIEX. SCIEX ne fournit aucune autre garantie, quelle qu'elle soit, expresse ou implicite, notamment quant à leur qualité marchande ou à leur adéquation à un usage particulier, en vertu d'un texte législatif ou de la loi, ou découlant d'une conduite habituelle ou de l'usage du commerce, toutes étant expressément exclues, et ne prend en charge aucune responsabilité ou passif éventuel, y compris des dommages directs ou indirects, concernant une quelconque utilisation effectuée par l'acheteur ou toute conséquence néfaste en découlant.

Réservé exclusivement à des fins de recherche. Ne pas utiliser dans le cadre de procédures de diagnostic.

Les marques commerciales et/ou marques déposées mentionnées dans le présent document, y compris les logos associés, appartiennent à AB Sciex Pte. Ltd, ou à leurs propriétaires respectifs, aux États-Unis et/ou dans certains autres pays (voir sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ est utilisé sous licence.

Echo, Echo MS et Echo MS+ sont des marques commerciales ou déposées de Labcyte, Inc. Aux États-Unis et dans d'autres pays, et sont utilisées sous licence.

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

Table des matières

1 Acquisition avec un système Echo® MS+	4
Méthode MS	4
Paramètres de la source et du gaz	4
Paramètres pour les expériences TOF MS	5
Paramètres pour les expériences avec l'algorithme MRM ^{HR}	7
Méthode AE	8
Lot	10
Étalonnage automatique (facultatif)	12
Fichier de configuration de sortie (facultatif)	13
Préparation du système	14
 2 Listes de cibles	 17
Création d'une liste de cibles	17
Configurer Paramètres par défaut du projet	22
Créer une méthode MS à utiliser comme modèle	23
Créer une méthode de traitement à utiliser comme modèle	24
 3 Visualisation des données	 25
 Nous contacter	 27
Adresses	27
Formation destinée aux clients	27
Centre d'apprentissage en ligne	27
Assistance technique SCIEX	27
Cybersécurité	27
Documentation	27

Acquisition avec un système Echo[®] MS+ 1

Cette section fournit des informations sur l'utilisation du système SCIEX OS pour l'acquisition des données de spectrométrie de masse d'éjection acoustique (AEMS). Cette section fournit des descriptions des paramètres, des lots, de l'étalonnage des lots et de préparation du système pour les méthodes MS et AE.

Méthode MS

Paramètres de la source et du gaz

La sonde Echo[®] MS sur la source d'ions OptiFlow Turbo V fonctionne avec l'interface à port ouvert (OPI) sur le système Echo[®] MS+ afin d'aspirer, de nébuliseur et d'ioniser des échantillons puis de fournir les échantillons au spectromètre de masse ZenoTOF 7600. Il est recommandé d'utiliser une plage étroite de paramètres de la source et du gaz pour ce flux de travail.

Illustration 1-1 : Paramètres de la source et du gaz

The screenshot shows the 'Source and Gas Parameters' section of the SCIEX OS software. It includes a 'Workflow' dropdown set to 'Small mole...', 'Method duration' set to '5 min', 'Total scan time' at '0.128 s', and 'Estimated cycles' at '2347'. The parameters are as follows:

Parameter	Value	Unit
Ion source gas 1	90	psi
Ion source gas 2	50	psi
Curtain gas	35	psi
CAD gas	7	
Temperature	300	°C

Tableau 1-1 : Paramètres de la source et du gaz

Paramètre	Commentaires
Gaz 1 de la source d'ions (psi)	Définissez la pression pour le gaz 1 de la source d'ions. Le gaz 1 de la source d'ions tire le solvant porteur du port de l'OPI vers la source d'ions. Réglez sur 90. Des valeurs inférieures pourraient provoquer des fuites dans l'OPI.
Gaz 2 de la source d'ions (psi)	Définissez la pression pour le gaz 2 de la source d'ions. Ce gaz dissout le solvant porteur dans la source d'ions. Optimisez la valeur Gaz 2 de la source d'ions (psi) pour la composition et le débit du solvant porteur. Une valeur de départ de 50 est recommandée.

Tableau 1-1 : Paramètres de la source et du gaz (suite)

Paramètre	Commentaires
Gaz rideau (psi)	Réglez la pression pour le gaz pour l'interface Curtain Gas. Ce gaz contribue à éviter la contamination de l'optique ionique. Utilisez la valeur la plus haute possible qui ne réduise pas la sensibilité. Des valeurs supérieures réduisent la contamination avec une faible diminution de l'intensité du signal.
Gaz CAD	Définissez la pression dans la cellule de collision. Pour les expériences TOF MS, définissez le refroidissement par collision des ions sur 7. Pour les expériences TOF MS/MS, optimisez la valeur Gaz CAD pour la fragmentation des ions de l'analyte.
Température (°C)	Optimisez la température pour la composition et le débit du solvant porteur. Une valeur de départ de 300 est recommandée. Il n'est pas recommandé de régler la température sur plus de 400. Des températures supérieures peuvent réduire la durée de vie de l'électrode et la sensibilité pour les composés thermiquement labiles.

Paramètres pour les expériences TOF MS

Illustration 1-2 : Paramètres TOF MS

▼ Experiment TOF MS

Polarity Positive

TOF start mass 100 Da

TOF stop mass 1000 Da

Accumulation time 0.1 s

Spray voltage 4500 V

Declustering potential 80 V

DP spread 0 V

ITC mode Dynamic

Collision energy 10 V

CE spread 0 V

ITC 0

Tableau 1-2 : Paramètres TOF MS

Paramètre	Commentaires
Polarité	Identifiez le mode d'ionisation. Sélectionnez Positive ou Négative . Le changement de polarité n'est pas disponible.
Masse de démarrage TOF (Da)	Identifiez la masse au début de la plage de masses cible. La valeur de Masse de démarrage TOF (Da) doit être inférieure à celle de Masse d'arrêt TOF (Da) .
Masse d'arrêt TOF (Da)	Identifiez la masse à la fin de la plage de masses cible. La Masse d'arrêt TOF (Da) doit être supérieure à la Masse de démarrage TOF (Da) .
Temps d'accumulation (s)	Identifiez la durée dont a besoin le spectromètre de masse pour acquérir un spectre TOF MS. Une valeur de départ de 0,08 est recommandée.

Tableau 1-2 : Paramètres TOF MS (suite)

Paramètre	Commentaires
Tension de pulvérisation (V)	Identifiez la tension à appliquer à l'électrode de la sonde. Optimisez la tension de pulvérisation pour la composition et le débit du solvant porteur. Pour maximiser la durée de vie de l'électrode, n'utilisez pas de valeur supérieure à 4 500.
Potentiel de défragmentation (V)	Identifiez la tension à appliquer à l'orifice pour réduire autant que possible la formation de clusters d'ions. Différents composés pourraient avoir différentes valeurs de potentiel de défragmentation (DP) optimaux. La valeur DP est utilisée pour la plage de masses complète.
Diffusion de DP (V)	Saisissez une valeur pour la diffusion DP (DPS). Avec le Potentiel de défragmentation (V) , ce paramètre contrôle le DP appliqué aux ions. Le DP augmente progressivement d'une valeur faible de DP – DPS à une valeur élevée DP + DPS.
Mode ITC	<p>Sélectionnez Dynamique ou Fixe. En mode dynamique, le flux d'ions est contrôlé en continu et automatiquement ajusté pour éviter d'endommager le détecteur. En mode fixe, l'utilisateur définit une valeur dans le champ ITC. Le mode dynamique ajoute 27 ms à la durée du cycle afin de surveiller le flux d'ions avant le début de l'expérience.</p> <hr/> <p>Remarque : Le mode dynamique est disponible uniquement pour les expériences TOF MS.</p> <hr/>
Énergie de collision (V)	Identifiez la tension à appliquer à la cellule de collision. Dans les expériences TOF MS, une valeur faible est utilisée pour déplacer des ions dans la cellule de collision sans fragmentation.
Diffusion de CE (V)	Ce paramètre n'est pas utilisé habituellement dans les expériences TOF MS.
ITC	<p>Identifiez le pourcentage des ions qui passeront dans le spectromètre de masse.</p> <p>Lorsque le mode fixe est utilisé, surveillez l'intensité des ions. Commencez par une valeur faible, et augmentez la valeur par petits incréments jusqu'à ce que la force du signal atteigne le minimum requis. Utilisez le mode dynamique si l'intensité des ions attendue est inconnue. Une intensité des ions constamment élevée ou de brèves périodes de très haute intensité des ions peuvent provoquer des dommages permanents sur le détecteur.</p> <hr/> <p>Remarque : Ce paramètre est applicable lorsque Mode ITC est défini sur Fixe.</p> <hr/>

Paramètres pour les expériences avec l'algorithme MRM^{HR}

Illustration 1-3 : Paramètres de l'algorithme MRM^{HR}

TOF MSMS

Q1 resolution Zeno pulsing ☒

ITC

Mass Table ☒ Apply TOF start/stop mass [Import and autofill...](#) Sort by [Apply Sort](#) [Number of errors: 0](#)

	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

Tableau 1-3 : Paramètres de l'algorithme MRM^{HR}

Paramètre	Commentaires
Résolution de Q1	Identifiez la résolution du quadropôle Q1. Sélectionnez Unité , Ouvrir , Faible ou Haute . Unité fournit une sélection de masse Q1 d'environ $\pm 0,7$ Da. Ouvrir et Faible fournissent une sélection de masse Q1 plus large. Haute fournit une sélection de masse Q1 plus étroite.
ITC	Identifiez le pourcentage des ions qui passeront dans le spectromètre de masse. Dans les expériences avec l'algorithme MRM ^{HR} , ce paramètre est généralement défini sur 100 afin de maximiser la sensibilité des analytes.
Impulsion Zeno	Sélectionnez cette option pour activer les impulsions Zeno. Les impulsions Zeno sont une fonctionnalité unique du spectromètre de masse ZenoTOF 7600/7600+. Lorsque cette fonctionnalité est activée, elle améliore le rapport cyclique, et augmente la force du signal.
Appliquer la masse de démarrage/arrêt TOF	Sélectionnez cette option pour définir manuellement la plage de masses TOF. Si cette option n'est pas sélectionnée, une plage de masses par défaut de 20 Da centrée autour de l'ion fragment spécifié est utilisée.
Masse de démarrage TOF (Da)	Identifiez la masse au début de la plage de masses cible. La valeur de Masse de démarrage TOF (Da) doit être inférieure à celle de Masse d'arrêt TOF (Da) .
Masse d'arrêt TOF (Da)	Identifiez la masse à la fin de la plage de masses cible. La Masse d'arrêt TOF (Da) doit être supérieure à la Masse de démarrage TOF (Da) .
Temps d'accumulation (s)	Identifiez la durée dont a besoin le spectromètre de masse pour acquérir un spectre TOF MS/MS. Une valeur de départ de 0,01 est recommandée.

Tableau 1-3 : Paramètres de l'algorithme MRM^{HR} (suite)

Paramètre	Commentaires
Potentiel de défragmentation (V)	Identifiez la tension à appliquer à l'orifice pour réduire autant que possible la formation de clusters d'ions. Dans les expériences avec l'algorithme MRM ^{HR} , le potentiel de défragmentation est identifié pour chaque ligne du tableau de transition.
Énergie de collision (V)	Identifiez la tension à appliquer à la cellule de collision. Dans les expériences TOF MS/MS et MRM ^{HR} , cette tension casse les ions précurseurs en fragments. Optimisez l'énergie de collision (CE) pour maximiser l'intensité d'un fragment.
Diffusion de CE (V)	Identifiez la diffusion de la CE (CES). Avec le paramètre Énergie de collision (V) , ce paramètre contrôle la CE appliquée à l'ion précurseur dans un balayage des ions produits. La CE augmente progressivement d'une valeur faible (CE – CES en polarité positive) à une valeur élevée (CE + CES en polarité positive).

Méthode AE

La méthode d'éjection acoustique (AE) fournit les paramètres utilisés pour le système Echo® MS+.

Illustration 1-4 : Méthode AE : Standard

Standard-Peak (Default)

Estimated Duration

With current settings, a full-plate run duration as follows:

Plate Type	Estimated Run Time
384PP	10m 45s 252ms
1536LDV	40m 37s 188ms

Carrier Solvent

Composition: Methanol 100 % Acetonitrile 0 % Water 0 %

Flow Rate: 250 µl/min

Acoustic Ejection

Fluid Class: AQ

Peak Type: ☒ Standard ☐ Wide

Standard

Produces a standard peak of around 1 sec peakwidth (chemistry-dependent). Rep Rate is default based on selected Fluid Class.

Ejection Vol: 2.5 nl
>300 nL is not supported when ejecting from a 1536-well microplate

Interval: 1500 ms

Illustration 1-5 : Méthode AE : Wide

Wide-Peak (Default)

Estimated Duration
With current settings, a full-plate run duration as follows:

Plate Type	Estimated Run Time
384PP	10m 45s 252ms
1536LDV	40m 37s 188ms

Carrier Solvent

Composition: Methanol 100 % Acetonitrile 0 % Water 0 %

Flow Rate: 250 µl/min

Acoustic Ejection

Fluid Class: AQ

Peak Type: ☐ Standard ☒ Wide

Rep Rate (Hz): 10

Wide
Produces a wider peak. Multiple Rep Rate options.

Ejection Vol: 5 nl Estimated peak width: Ts 100ms
>300 nL is not supported when ejecting from a 1536-well microplate

Interval: 1500 ms

Tableau 1-4 : Paramètres des méthodes AE

Paramètre	Description
Durée estimée	Affiche la durée prévue d'exécution des plaques, calculée avec l' Intervalle (ms) et d'autres facteurs qui jouent sur la durée d'exécution. La durée estimée est indiquée pour les plaques à 384 puits et à 1 536 puits. Le calcul n'inclut pas l'équilibrage ni la durée d'étalonnage du lot.
Solvant porteur	Pour identifier la composition du solvant porteur, sélectionnez le pourcentage de Méthanol , d' Acétonitrile et d' Eau .
Débit (µl/min)	Optimisez le débit pour le système. L'électrode et la composition du solvant porteur ont un effet sur le débit optimal. Si l'électrode ou la composition du solvant porteur change, cette valeur doit à nouveau être optimisée.
Classe de fluides	<p>Sélectionnez la matrice d'échantillon dans le puits d'échantillon. Différentes options sont disponibles pour différents types de plaques. Les options sont les suivantes :</p> <ul style="list-style-type: none"> • AQ (aqueux) : utilisé pour les solutions aqueuses. • SP (phase tensioactive) : utilisé pour les solutions avec une faible tension de surface, telles que les solutions aqueuses avec des tensioactifs, par exemple Triton X-100 ou mélanges organiques/aqueux. Cette option n'est disponible que pour les plaques à 384 puits. Cette option ne peut pas être utilisée avec des plaques à 1 536 puits en raison de l'évaporation de l'échantillon qui se produit pendant l'analyse. • DMSO (diméthylsulfoxyde) : utilisé pour les solvants contenant de 70 % à 100 % de DMSO.

Tableau 1-4 : Paramètres des méthodes AE (suite)

Paramètre	Description
Type de pic	<p>Sélectionnez le mode Standard ou Large.</p> <ul style="list-style-type: none"> Standard : le système AE éjecte des gouttelettes très rapidement pour former un pic étroit. Large : l'utilisateur peut identifier le taux d'éjection de gouttelettes pour former des pics plus larges qu'en mode standard. Les pics plus larges fournissent plus de points de données sur le pic, et prennent en charge des durées de cycle plus longues dans la méthode MS. Le mode de pic large est applicable aux éjections de plusieurs gouttelettes uniquement.
Vol. d'éjection (nl)	<p>Identifiez le volume total de l'échantillon à distribuer par le système Echo® MS+, par incréments de 2,5 nL.</p> <hr/> <p>Remarque : Le système éjecte des gouttelettes de 2,5 nL.</p> <hr/> <p>Lorsque le Type de pic est Large, la valeur minimale pour Vol. d'éjection (nl) est 5.</p>
Intervalle (ms)	Identifiez la durée entre les éjections d'échantillons. Le logiciel utilise le Taux de rép (Hz) et le Vol. d'éjection (nl) pour calculer un Intervalle (ms) minimum.
Taux de rép (Hz)	Identifiez le taux de répétition (rep) d'éjection de gouttelettes, en Hz. Vol. d'éjection (nl) et Taux de rép (Hz) contrôlent les largeurs des pics.

Lot

Illustration 1-6 : Lot

Sample Name	MS Method	AE Method	Plate Type	Well Position	Sample Type	Data File	Processing Method	Results File	Marker Well	Target List
2	TQF MS Example	Example AE Method	384PP	A2	Standard	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TQFMS		EchoMS Target List
3	TQF MS Example	Example AE Method	384PP	A3	Standard	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TQFMS		EchoMS Target List
4	TQF MS Example	Example AE Method	384PP	A4	Standard	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TQFMS		EchoMS Target List
5	TQF MS Example	Example AE Method	384PP	A5	Unknown	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TQFMS		EchoMS Target List
6	TQF MS Example	Example AE Method	384PP	A6	Unknown	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TQFMS		EchoMS Target List
7	TQF MS Example	Example AE Method	384PP	A7	Unknown	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TQFMS		EchoMS Target List
8	TQF MS Example	Example AE Method	384PP	A8	Unknown	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TQFMS		EchoMS Target List
9	TQF MS Example	Example AE Method	384PP	A9	Unknown	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TQFMS		EchoMS Target List
10	TQF MS Example	Example AE Method	384PP	A10	Unknown	Data File Name	EchoMS Quantitation	Results File for TQFMS		EchoMS Target List

Remarque : Les colonnes suivantes ne sont pas applicables à l'analyse des données acquises avec un système Echo® MS+, et peuvent être masquées avec l'option **Affichage** : **Type de carrousel**, **Position du carrousel**, **Position de la plaque** et **Volume d'injection (µl)**.

Tableau 1-5 : Colonnes de lot

Nom de la colonne	Description	Exigences de valeur de champ
Nom d'échantillon	Le nom de l'échantillon	<p>Inférieur à 252 caractères.</p> <p>Remarque : Pendant la séparation des données suite à l'acquisition, la position du puits est ajoutée au début du nom de l'échantillon : par exemple A1-Sample1.</p>
Méthode MS	Le nom de la méthode MS	<p>Sélectionnez une méthode MS dans la liste pour le projet actif.</p> <p>Remarque : Il faut utiliser la même méthode MS pour tous les échantillons du lot.</p>
Méthode AE	Le nom de la méthode AE	<p>Sélectionnez une méthode AE dans la liste pour le projet actif.</p> <p>Remarque : Il faut utiliser la même méthode AE pour tous les échantillons du lot.</p>
Type de plaque	384PP ou 1536LDV	il n'est possible d'utiliser qu'un Type de plaque dans un lot. Il n'est possible d'utiliser avec le système Echo® MS+ que les plaques de Beckman Life Sciences approuvées pour une utilisation avec un système Echo® MS+.
Position du puits	<p>384PP : A1 à P24</p> <p>1536LDV : A1 à AF48</p>	Un Position du puits ne peut être échantillonné qu'une fois pour chaque ligne.
Type d'échantillon	Blanc, Standard, Double blanc, Contrôle qualité, Solvant, et Inconnu	Les informations sur les types d'échantillons sont enregistrées dans le fichier de données, et peuvent être utilisées pendant le traitement.
Fichier de données	Nom du fichier dans lequel sont enregistrées les données acquises	<p>Toutes les données acquises par un lot doivent rester dans le même Fichier de données.</p> <p>Remarque : Il faut utiliser le même fichier de données pour tous les échantillons du lot.</p>

Tableau 1-5 : Colonnes de lot (suite)

Nom de la colonne	Description	Exigences de valeur de champ
Méthode de traitement	Le nom de la méthode qui sera utilisée pour le traitement automatique une fois l'acquisition terminée.	<p>La méthode de traitement doit être compatible avec la méthode MS utilisée pour acquérir des données.</p> <hr/> <p>Remarque : Il faut utiliser la même méthode de traitement pour tous les échantillons du lot.</p> <hr/>
Fichier de résultats	Le nom du fichier dans lequel sont enregistrés les résultats traités	<p>Les fichiers de résultats sont conservés dans le sous-dossier <code>Results</code> du projet actif.</p> <hr/> <p>Remarque : Il faut utiliser le même fichier de résultats pour tous les échantillons du lot.</p> <hr/> <p>Remarque : Utilisez un fichier de résultats différent pour chaque lot. Nous ne recommandons pas d'utiliser plusieurs fois les fichiers de résultats.</p> <hr/> <p>Remarque : Si un fichier de listes de cibles est utilisé, le fichier de résultats est enregistré au format <code>txt</code>. Si vous n'utilisez pas de fichier de listes de cibles, deux fichiers de résultats sont enregistrés, au format <code>txt</code> et au format <code>qsession</code>.</p> <hr/>
Puits de marqueur	<p>Puits de marqueur : True</p> <p>Autres puits : False (par défaut)</p>	Sélectionnez un seul Puits de marqueur dans chaque lot. Sélectionnez un puits dont le contenu fournit un signal MS assez fort pour permettre l'identification du code-barres pendant la séparation des données. Si la forme de pic est trop symétrique, il se peut que les données ne soient pas séparées.
Liste de cibles	Le nom du fichier Liste de cibles , avec l'extension <code>csv</code>	(Facultatif) Identifiez le fichier Liste de cibles . Si le fichier n'est pas dans le dossier <code>Batch</code> pour le projet actif, vous devez inclure le chemin d'accès au fichier complet. Consultez la section Listes de cibles .

Étalonnage automatique (facultatif)

Si l'étalonnage automatique est utilisé, il doit être réalisé au début du lot. L'étalonnage ne peut pas être réalisé entre des échantillons.

Le système de fourniture de l'étalon (CDS) est utilisé pour étalonner le système ZenoTOF 7600/7600+ lorsqu'il est configuré avec le système Echo® MS+.

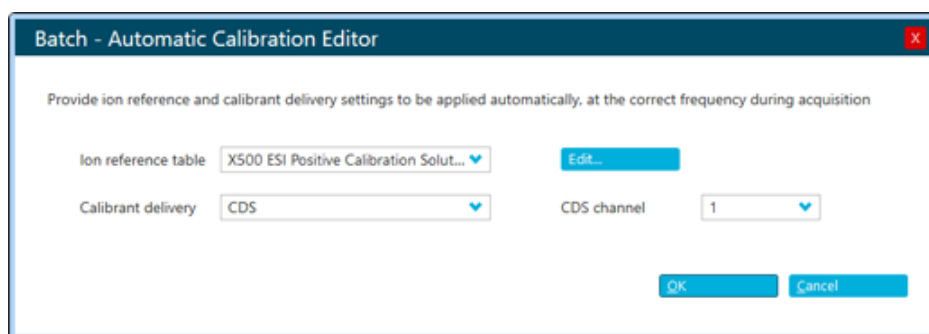
L'utilisateur peut sélectionner le tableau de référence d'ion applicable, et modifier dans le tableau le contenu du réservoir du CDS et les ions d'étalonnage spécifiques requis.

Pour réaliser l'étalonnage automatique au début du lot, cochez la case **Auto-étalonner**.

L'étalonnage se déroule en deux phases :

- Cal : étalonnage CDS initial, avec le tableau de référence d'ion sélectionné
- Cal Phase 2 : équilibrage, qui supprime les traces de solution du CDS

Illustration 1-7 : Boîte de dialogue Lot – Éditeur d'étalonnage automatique



Fichier de configuration de sortie (facultatif)

Utilisez le fichier `EchoExportColumnConfig.xml` pour personnaliser le champ dans lequel les fichiers de texte de résultats seront écrits, les colonnes à inclure dans les fichiers de texte de résultats et l'ordre des colonnes.

Le fichier `EchoExportColumnConfig.xml` par défaut est dans le dossier `SCIEX OS Data/common-project-area`. Pour modifier les réglages, modifiez ce fichier ou créez une copie du fichier et modifiez-la dans le dossier du projet ou dans le dossier `Quantitation Results` pour le projet.

Remarque : Trois modèles sont disponibles dans le dossier `SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Export Column Configuration` :

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

Tableau 1-6 : Éléments dans le fichier de sortie

Élément	Description
Path	Identifiez l'emplacement auquel le fichier de texte de résultats sera enregistré. Il est possible d'identifier plusieurs emplacements pour enregistrer plusieurs copies du fichier de sortie.
	Remarque : Une copie du fichier de texte de résultats est enregistrée dans le dossier <code>Quantitation Results</code> pour le projet.
Order	Identifiez l'ordre pour la colonne dans le fichier de texte de résultats. Saisissez un nombre unique pour chaque colonne. Saisissez 0 pour la première colonne.
Visible	Identifiez si la colonne est incluse dans le fichier de texte de résultats. Saisissez <code>true</code> pour inclure la colonne. Saisissez <code>false</code> pour exclure la colonne.

Préparation du système

Pour l'algorithme MRM^{HR} et les expériences d'acquisition en fonctions des informations (IDA) dans lesquelles différents ions sont surveillés pour différents puits, pour s'assurer que les bons ions soient surveillés pour chaque puits, le logiciel a besoin de la durée entre l'éjection de la gouttelette et la détection (durée de transfert). La durée de transfert est calculée et enregistrée à chaque séparation des données.

Si le système n'a pas fonctionné récemment, ou si l'électrode ou le solvant porteur a été remplacé, le système fait passer un petit lot afin de calculer la durée de transfert. Avant le passage du lot pour étalonner la durée de transfert, vérifiez que la durée pour l'équilibrage du système a été définie sur 30 minutes au minimum.

Procédez de la manière suivante pour étalonner la durée de transfert :

1. Ouvrez le panneau d'état.
2. Cliquez sur **Equilibrate**.

La boîte de dialogue System Preparation apparaît.

Illustration 1-8 : Boîte de dialogue Préparation du système : onglet Temps de transfert

System Preparation

Equilibrate | **Transfer Time**

Update and save the Echo MS Transfer Time value.

Prerequisites:
 Equilibrate the system for approximately 30 minutes.
 Make sure that the well specified in the Well Position contains one or more analytes at the required concentration.

MS Method: TOF MS

AE Method: AE 380 10 nL DMSO

Plate Type: 384PP

Well Position: A1

OK Cancel

- Ouvrez l'onglet Temps de transfert, puis utilisez le tableau suivant pour renseigner les champs :

Tableau 1-7 : Onglet Temps de transfert

Champ	Description
Méthode MS	Sélectionnez une méthode MS dans la liste pour le projet actif. Il est possible d'utiliser n'importe quelle méthode MS pour ajuster la durée de transfert. Une méthode TOF MS offre généralement le meilleur résultat.
Méthode AE	<p>Sélectionnez la méthode AE qui sera utilisée pour l'analyse par spectrométrie de masse avec éjection acoustique (AEMS) depuis la liste pour le projet actif. La méthode AE garantit que la durée de transfert soit étalonnée correctement pour les conditions de transfert des échantillons dans l'analyse AEMS. Veillez à ce que la valeur pour Vol. d'éjection (nl) dans la méthode sélectionnée soit suffisante pour fournir un signal fort pratiquement identique à l'intensité du puits de marqueur.</p> <hr/> <p>Remarque : Ajustez la durée de transfert avant qu'une autre méthode AE soit utilisée.</p> <hr/>

Tableau 1-7 : Onglet Temps de transfert (suite)

Champ	Description
Type de plaque	Sélectionnez une plaque applicable au système Echo® MS. Les options sont les suivantes : <ul style="list-style-type: none">• 384PP• 1536LDV
Position du puits	Identifiez la position d'un puits contenant une concentration d'échantillon qui produira un signal significatif dans le spectromètre de masse. Un puits de marqueur est recommandé. Les options sont les suivantes : <ul style="list-style-type: none">• 384PP : A1 à P24• 1536LDV : A1 à AF48

4. Cliquez sur **OK**.

Un lot avec 15 échantillons est automatiquement créé et soumis. Une fois le lot terminé, la nouvelle durée de transfert est calculée et enregistrée comme valeur par défaut du système.

Généralement, un lot utilisé avec le système Echo® MS+ acquiert un analyte ou un jeu d'analytes pour tous les échantillons. Si un analyte cible différent doit être spécifié pour chaque ligne, colonne ou position du puits, dans des flux de travail de l'algorithme MRM^{HR}, par exemple, une liste de cibles doit être utilisée. Pour les données TOF MS, la liste de cibles identifie les analytes d'intérêt pour chaque puits, et ces informations sont utilisées pendant le traitement des données. Il est également possible d'utiliser une liste de cibles pour identifier les analytes d'intérêt dans l'algorithme MRM^{HR} et les expériences IDA pendant l'acquisition. Les informations sur les analytes dans la liste des cibles sont utilisées pour mettre à jour la méthode MS pendant l'acquisition.

La liste de cibles est un fichier `csv`. Le fichier contient des informations sur les analytes, qui peuvent être utilisées dans les domaines suivants :

- Pour les informations sur les analytes pour la reconstruction de masse des protéines intactes et des grosses biomolécules
- Dans la liste d'inclusion pour les expériences IDA

Pour utiliser une liste de cibles, réalisez les procédures suivantes :

- [Création d'une liste de cibles](#)
- [Configurer Paramètres par défaut du projet](#)
- [Créer une méthode MS à utiliser comme modèle](#)
- [Créer une méthode de traitement à utiliser comme modèle](#)

Création d'une liste de cibles

Chaque ligne d'un fichier de liste de cibles contient des informations de masse pour un puits et un composé. Plusieurs lignes peuvent contenir le même composé. Plusieurs lignes peuvent contenir la même position de puits.

Remarque : Des exemples de listes de cibles pour différents flux de travail sont disponibles dans le dossier `SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Target List`.

- Créez une liste de cibles au format `csv`, puis enregistrez-la dans le sous-dossier `Batch` du dossier du projet où elle sera utilisée.

Remarque : Le fichier des listes de cibles peut contenir des virgules ou des points comme séparateurs décimaux. Le fichier de résultats créé pendant le traitement automatique utilise des virgules comme séparateurs décimaux.

Remarque : Assurez-vous que le texte, la capitalisation et l'espacement dans les noms des champs soient les mêmes que dans le tableau suivant.

Tableau 2-1 : Noms de champs dans le fichier de listes de cibles

Champ	Description
Well	Identifiez une position de puits à chaque ligne, sans espace. Les valeurs disponibles incluent : <ul style="list-style-type: none"> • 384PP : A1 à P24 • 1536LDV : A1 à AF48
Transfer Time Tolerance	Identifiez le nombre de secondes à ajouter pour ajuster le début et la fin de la fenêtre de surveillance pour un échantillon. Ce paramètre est utilisé dans les flux de travail, tels que les suivants, lorsque différentes transitions sont surveillées pour différentes positions de puits : <ul style="list-style-type: none"> • Flux de travail MRM^{HR} dans lesquels les transitions sont surveillées par puits • Flux de travail IDA dans lesquels les listes d'inclusion sont surveillées par puits <p>La tolérance de durée de transfert peut être négative, mais la valeur absolue de la durée de transfert ne doit pas dépasser la moitié de l'intervalle d'éjection utilisé dans la méthode AE.</p>
Offset	Indique le nombre secondes qui sera utilisé pour le déplacement de la fenêtre d'acquisition planifiée autour d'une position de pic possible. Une valeur positive déplace la fenêtre vers la droite. Une valeur négative déplace la fenêtre vers la gauche.
Group	Indique le nom de groupe applicable au composé.
Name	Indique le ID du composé du composé.
IS Name	Indique le nom du standard interne à utiliser pour les calculs de quantification pour le composé. Il n'est possible d'utiliser qu'un standard interne pour chaque composé.
IS	Indique si le composé est un standard interne. Les valeurs disponibles incluent : <ul style="list-style-type: none"> • True • False
Formula	Indique la formule élémentaire pour le composé. Les peptides peuvent avoir des acides aminés à une lettre et des modifications. Pour identifier des isotopes spécifiques, incluez le poids de l'isotope, par exemple [2H], [18O] ou [15N], entre crochets, devant le symbole. Par exemple, identifiez l'eau lourde (D2O) comme [2H]2O.
Adduct/Charge	Si une formule est spécifiée, identifiez l'état de la charge et de l'adduit, par exemple [M+H] ⁺ ou [M+H] ⁻ . Tous les adduits pris en charge dans l'espace de travail Analyse du logiciel SCIEX OS sont pris en charge dans les listes de cibles.

Tableau 2-1 : Noms de champs dans le fichier de listes de cibles (suite)

Champ	Description
Comment	Fournissez plus d'informations pour l'entrée de la ligne. Vous pouvez utiliser jusqu'à 128 caractères.
Precursor Mass (Da)	Identifiez la masse de l'ion précurseur. La plage applicable est comprise entre 5 et 2 250, avec 5 décimales.
TOF Start Mass (Da)	Identifiez la masse au début de la plage de masses cible pour une expérience TOF MS/MS. La TOF Start Mass (Da) doit être inférieure à la TOF Stop Mass (Da) . Ce paramètre est utilisé si Appliquer la masse de démarrage/arrêt TOF est sélectionné dans la méthode MS à utiliser comme modèle.
TOF Stop Mass (Da)	Identifiez la masse à la fin de la plage de masses cible pour une expérience TOF MS/MS. La TOF Stop Mass (Da) doit être supérieure à la TOF Start Mass (Da) . Ce paramètre est utilisé si Appliquer la masse de démarrage/arrêt TOF est sélectionné dans la méthode MS à utiliser comme modèle.
Fragment Mass (Da)	Saisissez la masse du fragment à utiliser dans la méthode de traitement. La plage de balayage par défaut pour une méthode TOF MS/MS est de 20 Da, ± 10 Da par rapport à la masse de fragment spécifiée. Remarque : Si Appliquer la masse de démarrage/arrêt TOF est sélectionné dans la méthode MS à utiliser comme modèle, la TOF Start Mass (Da) et la TOF Stop Mass (Da) définies dans la liste de cibles sont utilisées comme plage de balayage TOF MS/MS.
Accumulation Time (sec)	Ajustez la durée d'accumulation de la transition cible pour optimiser la durée de balayage totale. La durée d'accumulation est la durée dont le spectromètre de masse a besoin pour acquérir un point de données TOF MS/MS. La durée d'accumulation a un effet sur le nombre de points sur un pic. La plage applicable est comprise entre 0,005 et 50. Les valeurs typiques sont comprises entre 0,01 et 0,100.
Declustering potential (V)	Identifiez la tension à appliquer à l'orifice pour réduire autant que possible la formation de clusters d'ions. Le potentiel de défragmentation (DP) peut être spécifié pour chaque ligne du tableau de transition. La plage applicable est comprise entre 0 et 300. Remarque : Diffusion de DP (V) est défini dans la méthode MS.
Collision Energy (V)	Identifiez la tension à appliquer à la cellule de collision. L'énergie de collision (CE) est généralement optimisée pour maximiser l'intensité d'un fragment. La plage applicable est comprise entre 0 et 150.

Tableau 2-1 : Noms de champs dans le fichier de listes de cibles (suite)

Champ	Description
CE Spread (V)	<p>Identifiez la valeur à utiliser pour augmenter progressivement la CE. Avec le paramètre Collision Energy (V), le paramètre de diffusion de la CE (CES) contrôle la CE appliquée à l'ion précurseur dans un balayage des ions produits.</p> <p>Par exemple, en polarité positive, la CE augmente progressivement de CE – CES à CE + CES.</p> <p>La plage applicable est comprise entre 0 et 150.</p>
Fragmentation Mode	<p>Identifiez l'un des modes de fragmentation suivants :</p> <ul style="list-style-type: none"> • CID : en mode de dissociation après collision (CID), les ions fragments sont créés par excitation vibrationnelle de l'ion précurseur produite par des collisions avec les molécules de gaz dans la cellule de collision Q2. • EAD : en mode de dissociation activée par les électrons (EAD), les ions précurseurs dans la cellule EAD sont exposés aux électrons afin de provoquer la dissociation de l'ion précurseur en ions fragments. • EAD (conventional trapping) : le piégeage traditionnel est un mode EAD particulièrement adapté aux études cinétiques universitaires. Le mode EAD améliore le contrôle des étapes de durée de charge et de temps de réaction (durée d'irradiation des électrons). En mode EAD, ces étapes sont optimisées pour se produire au même moment, ce qui double approximativement la sensibilité. En mode EAD (conventional trapping), ces étapes sont réalisées consécutivement. Les ions précurseurs sélectionnés sont introduits dans la cellule EAD pendant une durée de charge spécifiée, le flux d'électrons est appliqué pendant un temps de réaction spécifié, puis les produits sont éjectés de la cellule EAD. <hr/> <p>Conseil ! Utilisez le mode EAD (conventional trapping) si vous avez besoin d'un contrôle précis et prévisible du temps de réaction.</p> <hr/>
Electron KE (eV)	<p>Identifiez l'énergie cinétique (KE) des électrons du faisceau d'irradiation. L'énergie cinétique des électrons est identique au biais DC entre la source d'électrons et les électrodes de la tige activée par les électrons (EA) dans la cellule de dissociation activée par les électrons (EAD). Ce paramètre est applicable lorsque le Fragmentation Mode est défini sur EAD ou EAD (conventional trapping).</p>

Tableau 2-1 : Noms de champs dans le fichier de listes de cibles (suite)

Champ	Description
ETC (%)	<p>Identifiez le coefficient de transfert des électrons (ETC). Ce paramètre contrôle la fraction des électrons qui ont pu passer dans la cellule EAD. La plage est comprise entre 0 % et 100 %. Ce paramètre est applicable lorsque le Fragmentation Mode est défini sur EAD ou EAD (conventional trapping).</p> <p>Conseil ! Utilisez ce paramètre pour utiliser le type d'espèce de précurseur analysé et les ions produits acquis pour contrôler le type de réaction EAD.</p>
EAD RF (Da)	<p>Identifiez une valeur comprise entre 0 Da et 300 Da. Ce paramètre contrôle le niveau RF pour maintenir les ions précurseurs et fragments dans la cellule EAD.</p> <p>Remarque : Pour détecter les ions produits avec une valeur m/z supérieure, augmentez EAD RF (Da). La détection des ions produits avec une valeur m/z inférieure pourrait diminuer.</p>
Reaction time (ms)	<p>Identifiez le temps de réaction pour l'irradiation des électrons. En mode EAD, ce paramètre contrôle également la durée de charge.</p> <p>Conseil ! Si la consommation de précurseurs est insuffisante après l'optimisation du courant du faisceau d'électrons, augmentez le temps de réaction.</p>
Time Bins to Sum	Identifiez le nombre de points de données à additionner. La plage pour les petites molécules ou les peptides est comprise entre 4 et 6. La valeur de départ pour l'analyse des protéines intactes (> 20 kDa) est de 40.
Channel 1 à Channel 4	Identifiez les canaux de convertisseur analogique-numérique (ADC). Chaque canal permet le comptage d'ions. Si les quatre canaux sont sélectionnés, ce qui est la valeur par défaut, les quatre canaux sont additionnés pour obtenir le nombre total d'ions.
Expected MW (Da)	Flux de travail Reconstruction de masse : la masse moléculaire attendue pour le composant, en Da.
m/z Range for XIC Start (Da)	Flux de travail Reconstruction de masse : identifiez la masse de départ pour la plage XIC.
m/z Range for XIC Stop (Da)	Flux de travail Reconstruction de masse : identifiez la masse de fin pour la plage XIC.
Reconstruction Start Mass (Da)	Flux de travail Reconstruction de masse : identifiez la masse à laquelle commencera la reconstruction, en Da.

Tableau 2-1 : Noms de champs dans le fichier de listes de cibles (suite)

Champ	Description
Reconstruction Stop Mass (Da)	Flux de travail Reconstruction de masse : identifiez la masse à laquelle s'arrêtera la reconstruction, en Da.

Configurer Paramètres par défaut du projet

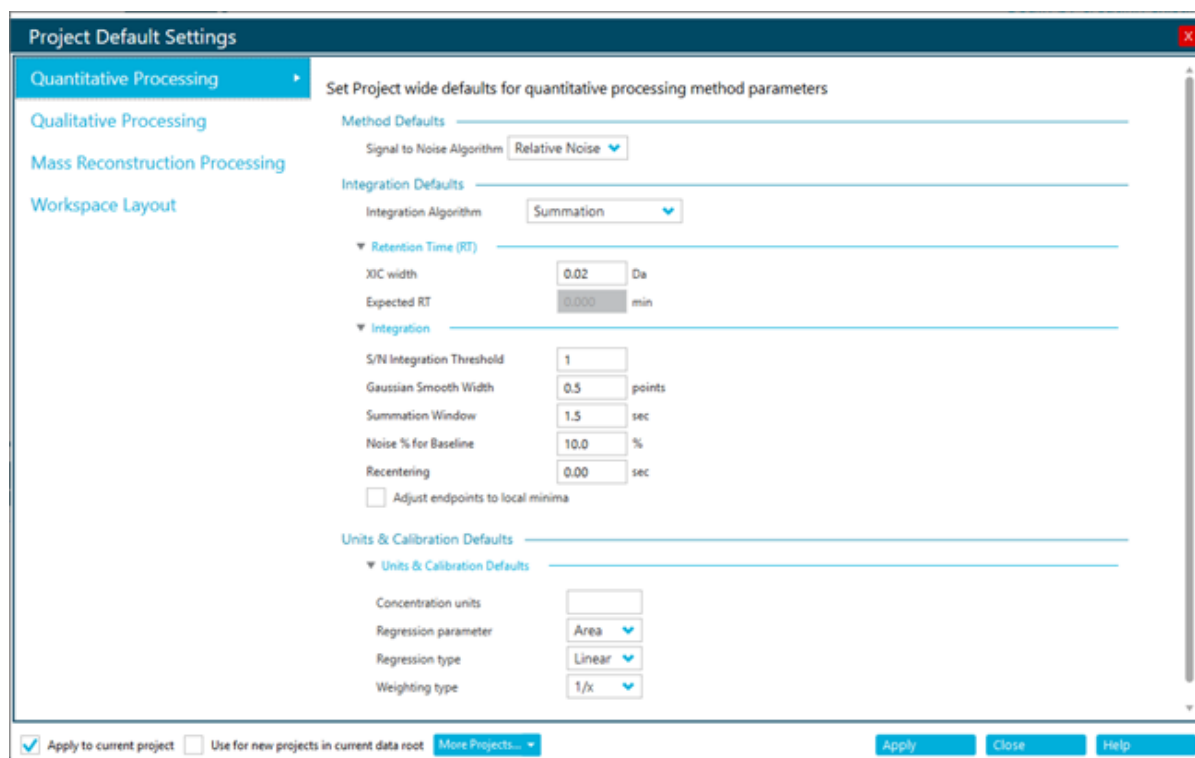
Pendant le traitement automatique, le logiciel reçoit les paramètres de la méthodes de traitement, par exemple, **Largeur du XIC (Da)**, **Largeur du lissage par filtrage gaussien (points)**, et **% de bruit de la référence (%)**, depuis les paramètres par défaut pour le projet. Si une méthode de traitement doit être utilisée comme modèle pour le traitement automatique, configurez les paramètres par défaut du projet pour optimiser l'intégration des pics sur l'ensemble de l'analyse. Différents volumes d'éjection et largeurs de pics dans la méthode AE nécessitent différentes valeurs pour les paramètres de traitement.

Les informations dans les paramètres par défaut du projet sont enregistrées dans la méthode de traitement à utiliser comme modèle.

Remarque : Lorsque les paramètres par défaut du projet sont modifiés dans l'espace de travail Analyse, les modifications ne sont pas utilisées pour les méthodes de traitement enregistrées. Pour appliquer les modifications, mettez à jour les paramètres par défaut du projet, puis créez une nouvelle méthode de traitement. La nouvelle méthode de traitement utilisera les paramètres par défaut du projet mis à jour. Utilisez cette nouvelle méthode de traitement pour le traitement automatique.

1. Dans l'espace de travail Analyse, cliquez sur **Projets > Paramètres par défaut du projet**.

Illustration 2-1 : Fenêtre Traitement quantitatif



2. Configurez les paramètres.

Pour une description détaillée des paramètres, consultez le document *Système d'aide de SCIEX OS*.

3. Cliquez sur **Appliquer**.
4. Cliquez sur **Fermer**.

Créer une méthode MS à utiliser comme modèle

- Dans l'espace de travail Méthode MS, créez une méthode MS à utiliser comme modèle. Consultez le document *Système d'aide de SCIEX OS*.
- Pour les expériences TOF MS, créez une méthode MS avec les paramètres de source et de gaz applicables et les paramètres d'expérience TOF MS.
- Pour les expériences MRM^{HR}, créez une méthode MS avec les paramètres de source et de gaz applicables, les paramètres d'expérience TOF MS et les paramètres d'expérience TOF MS/MS, tels que les paramètres de résolution Q1, ITC et d'impulsions Zeno.


Remarque : Les informations Tableau de masses, telles que **ID du composé**, **Nom du groupe**, **Ion précurseur**, **Masse de démarrage TOF (Da)** et **Masse d'arrêt TOF (Da)** ou **Ion de fragment (Da)**, **Temps d'accumulation (s)**, **Potentiel de défragmentation (V)**, **Énergie de collision (V)** et **Diffusion de CE (V)** sont contenues dans un fichier de listes de cibles. Ces informations remplacent les informations dans la méthode MS à utiliser comme modèle, et fournissent donc une méthode de traitement en fonction du puits pour les expériences TOF MS et les méthodes d'acquisition et de traitement pour les expériences TOF MS/MS.

Créer une méthode de traitement à utiliser comme modèle

Les informations dans le fichier des listes de cibles et les paramètres par défaut du projet remplacent les informations dans la méthode de traitement à utiliser comme modèle. Consultez la section [Configurer Paramètres par défaut du projet](#).

- Dans l'espace de travail Analyse, créez une méthode de traitement. Consultez le document *Système d'aide de SCIEX OS*.

Utilisez cette procédure pour utiliser des cartes thermiques pour visualiser les données d'éjection acoustique (AE) qui ont été acquises avec un système Echo® MS+.

1. Ouvrez l'espace de travail Explorateur.
2. Cliquez sur **Fichier > Ouvrir le fichier de résultats Echo MS**.
La boîte de dialogue Ouvrir s'ouvre. Elle affiche le dossier `Quantitation Results` dans le projet actif.
3. Naviguez jusqu'au fichier de texte des résultats contenant les données AE, puis cliquez sur **Ouvrir**.
4. (Facultatif) Pour configurer les options d'affichage pour la fenêtre, cliquez sur  **(Paramètres)**, personnalisez les paramètres, puis cliquez sur **Enregistrer et fermer**.
5. (Facultatif) Sélectionnez les options de filtrage applicables.
6. Dans le champ **Colonne**, sélectionnez la colonne du fichier de texte des résultats à afficher.

La liste inclut toutes les colonnes du fichier de texte des résultats.

Conseil ! Configurez un fichier de configuration de sortie pour sélectionner les champs à inclure dans le fichier de texte des résultats. Consultez la section [Fichier de configuration de sortie \(facultatif\)](#).


7. (Facultatif) Pour les colonnes numériques, définissez la plage. Les options suivantes sont disponibles :
 - **Automatique** : sélectionnez cette option pour afficher la valeur la plus basse des données avec la couleur du côté gauche de la carte de couleurs et la valeur la plus haute avec la couleur du côté droit de la carte de couleurs.
 - **Valeur par défaut** : si une plage par défaut est disponible, sélectionnez cette option pour utiliser la plage par défaut. Pour identifier une plage par défaut, définissez une plage manuelle puis cliquez sur **Enregistrer comme par défaut**.

Remarque : Lorsque l'utilisateur définit une plage par défaut, la plage par défaut est utilisée pour tous les fichiers de texte des résultats dans le projet actif.

- **Manuel** : sélectionnez cette option pour définir une plage manuelle. Toutes les valeurs inférieures à la valeur en bas de la plage apparaissent de la couleur du côté gauche de la carte de couleurs. Toutes les valeurs supérieures à la valeur en haut de la plage apparaissent de la couleur du côté droit de la carte de couleurs.

Remarque : Les valeurs saisies en format de notation scientifique passent en format décimal.

Visualisation des données

8. Pour afficher les résultats pour un puits, cliquez sur le puits.
9. Pour ouvrir les données dans l'espace de travail Analyse, cliquez sur  (**Ouvrir dans Analytics**).

Remarque : Si les informations du fichier associé sont introuvables, la boîte de dialogue Ouvrir dans Analytics apparaît. Complétez les champs de cette boîte de dialogue, puis cliquez sur **Ouvrir**.

L'ouverture de l'espace de travail peut prendre jusqu'à 1 minute. La durée requise dépend de la taille du fichier de texte des résultats.

Nous contacter

Adresses



Fabriqué à Singapour
AB Sciex Pte. Ltd.
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapour 739256

Siège de SCIEX

AB Sciex LLC
500 Old Connecticut Path
Framingham, Massachusetts 01701
États-Unis d'Amérique

Formation destinée aux clients

- Monde : sciex.com/contact-us

Centre d'apprentissage en ligne

- [SCIEX Now Learning Hub](https://sciex.com/learning-hub)

Assistance technique SCIEX

SCIEX et ses représentants disposent de personnels et de techniciens qualifiés dans le monde entier. Ils répondent aux questions sur le système et à tout problème technique susceptible de survenir. Pour plus d'informations, rendez-vous sur le site Web SCIEX à l'adresse sciex.com ou cliquez sur l'un des liens suivants pour nous contacter.

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

Cybersécurité

Pour obtenir les informations les plus récentes sur la cybersécurité des produits SCIEX, consultez la page sciex.com/productsecurity.

Documentation

Cette version remplace toutes les versions précédentes de ce document.

Pour trouver la documentation du logiciel, consultez les notes de version ou le guide d'installation du logiciel fourni avec ce dernier.

Nous contacter

La documentation du matériel se trouve dans la documentation fournie avec le système ou le composant.

Les dernières versions de la documentation sont disponibles sur le site Web SCIEX, à l'adresse sciex.com/customer-documents.

Remarque : pour demander une version imprimée gratuite de ce document, contactez sciex.com/contact-us.
