

機能ガイド

SCIEX OS ソフトウェア

Echo[®] MS+ システムと ZenoTOF 7600/7600+システムの場合



本書は SCIEX 機器をご購入され、実際に使用されるお客様にむけてのものです。本書の著作権は保護されています。本書および本書の一部分を複製することは、SCIEX が書面で合意した場合を除いて固く禁止されています。

本書に記載されているソフトウェアは、使用許諾契約書に基づいて提供されています。使用許諾契約書で特に許可されている場合を除き、いかなる媒体でもソフトウェアを複製、変更、または配布することは法律で禁止されています。さらに、使用許諾契約書では、ソフトウェアを逆アセンブル、リバースエンジニアリング、または逆コンパイルすることをいかなる目的でも禁止することがあります。正当とする根拠は文書中に規定されているとおりです。

本書の一部は、他の製造業者および/またはその製品を参照することがあります。これらには、その名称を商標として登録しているおよび/またはそれぞれの所有者の商標として機能している部分を含む場合があります。そのような使用は、機器への組み込みのため SCIEX により供給された製造業者の製品を指定することのみを目的としており、その権利および/またはライセンスの使用を含む、または第三者に対しこれらの製造業者名および/または製品名の商標利用を許可するものではありません。

SCIEX の保証は販売またはライセンス供与の時点で提供される明示的保証に限定されており、また SCIEX の唯一かつ独占的な表明、保証および義務とされています。SCIEX は、明示的・黙示的を問わず、制定法若しくは別の法律、または取引の過程または商慣習から生じるかどうかに関わらず、特定の目的のための市場性または適合性の保証を含むがこれらに限定されない、他のいかなる種類の保証も行いません。これらのすべては明示的に放棄されており、購買者による使用またはそれから生じる不測の事態に起因する間接的・派生的損害を含め、一切の責任または偶発債務を負わないものとします。

研究専用。診断手順には使用しないでください。

ここに記載されている商標および / または登録商標は、関連するロゴを含め、米国および / またはその他の特定の国における AB Sciex Pte. Ltd.、またはその該当する所有者の所有物です(sciex.com/trademarks をご覧ください)。

AB Sciex™ はライセンスの下で使用されています。

Echo、Echo MS、および Echo MS+ は、Labcyte, Inc. の米国およびその他の国における商標または登録商標であり、ライセンスの下で使用されています。

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

目次

1 Echo® MS+ システムによる取得	4
MS メソッド.....	4
イオン源およびガスパラメータ.....	4
TOF MS 実験のパラメータ.....	5
MRM ^{HR} アルゴリズム実験のパラメータ.....	6
AE メソッド.....	7
バッチ.....	10
自動キャリブレーション(オプション).....	12
出力設定ファイル(オプション).....	12
システムの準備.....	13
2 ターゲットリスト	16
ターゲットリストを作成する.....	16
プロジェクトのデフォルト設定 を構成する.....	20
テンプレートとして使用する MS メソッドの作成.....	21
テンプレートとして使用する処理メソッドの作成.....	22
3 データの可視化	23
お問い合わせ先	25
住所.....	25
お客様のトレーニング.....	25
オンライン学習センター.....	25
SCIEX サポート.....	25
サイバーセキュリティ.....	25
説明書.....	25

このセクションでは、SCIEX OS ソフトウェアを使用してアコースティックエジェクション質量分析 (AEMS) データを取得する方法について説明します。このセクションでは、MS メソッドと AE メソッドのパラメータ、バッチ、バッチキャリブレーション、システム準備について説明します。

MS メソッド

イオン源およびガスパラメータ

Echo[®] MS プローブは OptiFlow Turbo V イオン源上で、Echo[®] MS+ システム上のオープンポートインターフェース (OPI) と連動して、サンプルを吸引、霧化、イオン化し、ZenoTOF 7600 質量分析装置に供給します。このワークフローでは、イオン源およびガスパラメータの狭い範囲が推奨されます。

図 1-1 : イオン源およびガスパラメータ

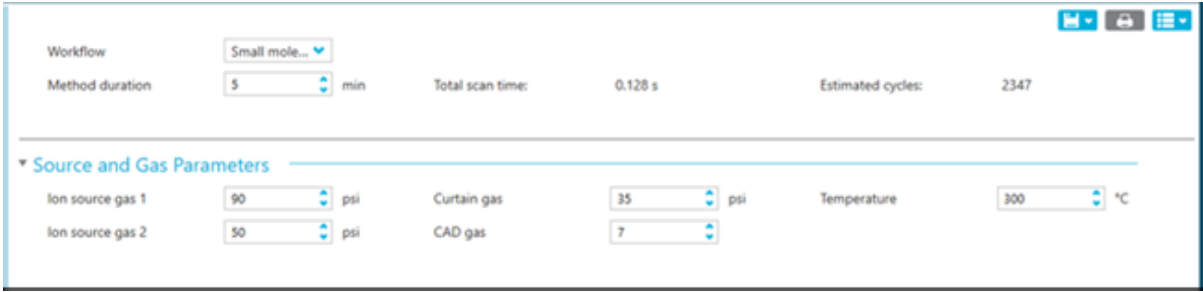


表 1-1 : イオン源およびガスパラメータ

パラメータ	コメント
イオン源ガス 1 (psi)	イオン源ガス 1 の圧力を設定します。イオン源ガス 1 は、キャリア溶媒を OPI ポートからイオン源に引き込みます。90 に設定します。数値が低いと、OPI に漏れが生じる可能性があります。
イオン源ガス 2 (psi)	イオン源ガス 2 の圧力を設定します。このガスはイオン源内のキャリア溶媒を溶解します。キャリア溶媒の組成と流量に合わせて イオン源ガス 2 (psi) 値を最適化します。開始値は 50 を推奨します。
Curtain gas (psi)	Curtain Gas インターフェースのガス圧を設定します。このガスは、イオン光学系の汚染を防止するのに役立ちます。感度を低下させない範囲で、可能な限り高い値を使用してください。値が高いと、信号強度のわずかな減少を伴いながらも、汚染が減少します。
CAD ガス	衝突セル内の圧力を設定します。TOF MS 実験では、イオンの衝突冷却を 7 に設定します。TOF MS/MS 実験では、分析試料イオンのフラグメンテーションのために CAD ガス 値を最適化します。

表 1-1 : イオン源およびガスパラメータ (続き)

パラメータ	コメント
温度 (°C)	キャリアや溶媒の組成と流量に合わせて温度を最適化します。開始値は 300 を推奨します。400 を超える温度設定は推奨されません。高温は電極の寿命を縮める可能性があり、熱に不安定な化合物の感度を低下させる原因にもなります。

TOF MS 実験のパラメータ

図 1-2 : TOF MS パラメータ

The screenshot displays the 'Experiment' tab for TOF MS. The parameters are organized into two columns. The left column includes Polarity (set to Positive), TOF start mass (100 Da), TOF stop mass (1000 Da), and Accumulation time (0.1 s). The right column includes Spray voltage (4500 V), Declustering potential (80 V), DP spread (0 V), Collision energy (10 V), CE spread (0 V), ITC mode (Dynamic), and ITC (0). Each parameter has a corresponding input field with a dropdown or numeric value.

表 1-2 : TOF MS パラメータ

パラメータ	コメント
極性	イオン化モードを特定します。正 または 負 を選択します。極性切り替えは利用できません。
TOF 開始質量 (Da)	標的質量範囲の開始質量を指定します。TOF 開始質量 (Da) は、TOF 停止質量 (Da) より小さくなければなりません。
TOF 停止質量 (Da)	標的質量範囲の終端質量を指定します。TOF 停止質量 (Da) は TOF 開始質量 (Da) より大きい値にする必要があります。
蓄積時間	質量分析装置が 1 つの TOF MS スペクトルを取得するのに必要な時間を指定します。開始値は 0.08 を推奨します。
スプレー電圧 (V)	プローブ電極に印加する電圧を指定します。キャリアや溶媒の組成と流量に合わせてスプレー電圧を最適化します。電極の寿命を最大限に延ばすには、4500 を超える値を使用しないでください。
デクラスタリング電位 (V)	イオンクラスターの形成を最小限に抑えるためにオリフィスに印加する電圧を指定します。異なる化合物は異なる最適デクラスタリング電位 (DP) 値を持つ可能性があります。DP 値は全質量範囲で使用されます。
DP 拡散 (V)	DP 拡散 (DPS) の値を入力します。このパラメータは デクラスタリング電位 (V) とともに、イオンに適用される DP を制御します。DP は、低い値の DP - DPS から高い値の DP + DPS へと徐々に増加します。

表 1-2 : TOF MS パラメータ (続き)

パラメータ	コメント
ITC モード	動的 または 固定 を選択します。動的モードでは、イオン流量が継続的に監視され、検出器の損傷を防ぐために自動的に調整されます。固定モードでは、ITC フィールドにユーザーが値を設定します。動的モードでは、実験開始前にイオン流量を監視するために、サイクル時間に 27 ミリ秒が追加されます。 注: 動的モードは TOF MS 実験でのみ使用できます。
衝突エネルギー (V)	衝突セルに印加する電圧を指定します。TOF MS 実験では、低い値を使用してイオンを衝突セルで移動させ、フラグメンテーションを回避します。
CE 拡散 (V)	このパラメータは通常、TOF MS 実験では使用しません。
ITC	質量分析装置に入るイオンのパーセンテージを指定してください。 固定モードを使用しているときは、イオン強度を監視します。低い値から始めて、信号強度が要求される最小値に達するまで、値を少しずつ増やします。イオン強度の予測が不明な場合は、動的モードを使用します。イオン強度が常に高い場合、または短期間でもイオン強度が非常に高い状態が発生すると、検出器に恒久的な損傷を与える可能性があります。 注: このパラメータは、ITC モード が 固定 に設定されている場合に適用されます。

MRM^{HR} アルゴリズム実験のパラメータ

図 1-3 : MRM^{HR} アルゴリズムパラメータ

TOF MSMS

Q1 resolution: Unit (dropdown)

ITC: 100 (spinbox)

Zeno pulsing: ☒

Mass Table: ☒ Apply TOF start/stop mass

Import and autofill... Sort by: No sort (dropdown) 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

表 1-3 : MRM^{HR} アルゴリズムパラメータ

パラメータ	コメント
Q1 分解能	Q1 四重極の分解能を特定してください。ユニット、開く、低 または 高 を選択します。ユニット は、約 ±0.7 Da の Q1 質量選択を提供します。開く および 低 は、より広い Q1 質量選択を提供します。高 は、より狭い Q1 質量選択を提供します。

表 1-3 : MRM^{HR} アルゴリズムパラメータ (続き)

パラメータ	コメント
ITC	質量分析装置に入るイオンのパーセンテージを指定してください。MRM ^{HR} アルゴリズム実験では、分析種の感度を最大にするため、このパラメータは通常 100 に設定されます。
Zeno パルス	選択すると、Zeno パルスが有効になります。Zeno パルスは、ZenoTOF 7600/7600+ 質量分析装置独自の機能です。この機能を有効にすると、デューティサイクルが改善され、信号強度が増します。
TOF 開始/停止質量を適用	選択すると TOF 質量範囲が手動で設定できます。このオプションを選択していない場合、指定したフラグメントイオンを中心としたデフォルトの質量範囲 20 Da が使用されます。
TOF 開始質量 (Da)	標的質量範囲の開始質量を指定します。TOF 開始質量 (Da) は、TOF 停止質量 (Da) より小さくなければなりません。
TOF 停止質量 (Da)	標的質量範囲の終端質量を指定します。TOF 停止質量 (Da) は TOF 開始質量 (Da) より大きい値にする必要があります。
蓄積時間 (秒)	質量分析装置が 1 つの TOF MS/MS スペクトルを取得するのに必要な時間を指定します。開始値は 0.01 を推奨します。
デクラスタリング電位 (V)	イオンクラスターの形成を最小限に抑えるためにオリフィスに印加する電圧を指定します。MRM ^{HR} アルゴリズムの実験では、トランジション表の各行について、デクラスタリング電位が特定されます。
衝突エネルギー (V)	衝突セルに印加する電圧を指定します。TOF MS/MS や MRM ^{HR} 実験では、この電圧はプリカーサーイオンをフラグメントに分解します。フラグメントの強度が最大になるように衝突エネルギー (CE) を最適化します。
CE 拡散 (V)	CE スプレッド (CES) を指定します。このパラメータは 衝突エネルギー (V) パラメータとともに、プロダクトイオンスキャンにおけるプリカーサーイオンに適用される CE を制御します。CE は、低い値 (正極性で CE - CES) から高い値 (正極性で CE + CES) まで徐々に増加します。

AE メソッド

アコースティックエジェクション (AE) メソッドは、Echo® MS+ システムの操作に使用する設定を提供します。

図 1-4 : AE メソッド: 標準

Standard-Peak (Default) x

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

図 1-5 : AE メソッド: Wide

Wide-Peak (Default) x

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

表 1-4 : AE メソッドパラメータ

パラメータ	説明
予想所要時間	間隔(ms) やその他の実行時間に影響を与える要因を考慮して計算された、プレート実行時間の予想所要時間を表示します。384 ウェルプレートと 1,536 ウェルプレートの両方について、所要時間の目安が提示されています。この計算には、平衡化時間やバッチキャリブレーション時間は含まれていません。
キャリア溶媒	キャリア溶媒の組成を指定するには、メタノール、アセトニトリル、水 のパーセンテージを選択します。

表 1-4 : AE メソッドパラメータ (続き)

パラメータ	説明
流量 (μL/ 分)	システムの流量を最適化します。電極とキャリア溶媒の組成は、最適流量に影響を与えます。電極またはキャリア溶媒の組成が変化した場合は、この値を再度最適化する必要があります。
流体クラス	サンプルウェルにあるサンプルマトリックスを選択します。異なるプレートタイプには、異なるオプションが用意されています。次のオプションがあります。 • AQ(水溶液): 水性溶液に使用します。 • SP(界面活性剤相): Triton X-100 などの界面活性剤を含む水溶液や有機-水混合液など、表面張力の低い溶液に使用します。このオプションは、384 ウェルプレートのみで使用できます。このオプションは、分析中にサンプルが蒸発してしまうため、1536 ウェルプレートでは使用できません。 • DMSO(ジメチルスルホキシド): DMSO を 70% から 100% 含む溶剤に使用します。
ピークタイプ	標準 または 幅 モードを選択します。 • 標準: AE システムは、液滴を非常に速く吐出することで、狭いピークを作ります。 • 幅: ユーザーは液滴吐出速度を指定し、標準モードよりも幅の広いピークを作成することができます。ピークが広いほど、ピーク全体にわたってより多くのデータポイントが供給され、MS メソッドでより長いサイクル時間がサポートされます。広いピークモードは、液滴の多重吐出のみに適用されます。
吐出量 (nL)	Echo® MS+ システムで分注するサンプルの総容量を 2.5 nL 単位で指定します。 注: システムは 2.5 nL の液滴を吐出します。 ピークタイプ が 幅 の場合、吐出量 (nL) の最小値は 5 です。
間隔 (ms)	サンプル吐出の間隔を指定します。ソフトウェアは 反復率 (Hz) と 吐出量 (nL) を使用して、最小の 間隔 (ms) を算出します。
反復率 (Hz)	液滴吐出繰り返し (rep) 速度を Hz 単位で指定します。吐出量 (nL) と 反復率 (Hz) はピークの幅を制御します。

バッチ

図 1-6 : バッチ

The screenshot shows the 'Batch' window in the Echo MS+ software. It displays 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, all using 'TQF MS Sample' for MS Method and 'Example AE Method' for AE Method. The Plate Type is '384PP' for the first 8 samples and '1536LDV' for the last 2. The Well Position ranges from A1 to J10. The Processing Method is 'EchoMS Quantitation' and the Results File is 'Results File for TQFMS'. The Target List is 'EchoMS Target List'.

注: 以下の列は、Echo® MS+ システムで取得したデータの分析には適用されません。また、表示オプションで非表示にすることができます: ラックタイプ、ラック位置、プレート位置、注入量(μL)。

表 1-5 : バッチ列

列名	説明	フィールドの値の要件
サンプル名	サンプルの名前	252 文字未満。 注: 取得後のデータの分割処理では、ウェル位置がサンプル名の先頭に追加されます。例: A1-Sample1。
MS メソッド	MS メソッドの名前	アクティブなプロジェクト用に、リストから MS メソッドを選択します。 注: バッチ内のすべてのサンプルに同じ MS メソッドを使用する必要があります。
AE メソッド	AE メソッドの名前	アクティブなプロジェクト用に、リストから AE メソッドを選択します。 注: バッチ内のすべてのサンプルに同じ AE メソッドを使用する必要があります。
プレートタイプ	384PP または 1536LDV	1 つのバッチで使用できる プレートタイプ は 1 つだけです。Echo® MS+ システムでの使用が認定されている Beckman Life Sciences のプレートのみが、Echo® MS+ システムで使用できます。
ウェル位置	384PP: A1 から P24 1536LDV: A1 から AF48	ウェル位置 は各行につき 1 回のみサンプリングできます。

表 1-5 : バッチ列 (続き)

列名	説明	フィールドの値の要件
サンプルタイプ	ブランク、標準、ダブルブランク、品質管理、溶剤、および 不明	サンプルタイプの情報はデータファイルに保存され、処理中に使用できます。
データファイル	取得されたデータの保存先となるファイルの名前	バッチで取得したすべてのデータは、同じ データファイル に保存する必要があります。 注: バッチ内のすべてのサンプルに同じデータファイルを使用する必要があります。
処理メソッド	測定完了後に自動処理で使用するメソッドの名前です。	処理メソッドは、データ取得に使用された MS メソッドと互換性がある必要があります。 注: バッチ内のすべてのサンプルに同じ処理メソッドを使用する必要があります。
結果ファイル	処理結果が保存されるファイルの名前	結果ファイルは、アクティブなプロジェクトの Results サブフォルダーに保存されます。 注: バッチ内のすべてのサンプルに同じ結果ファイルを使用する必要があります。 注: 各バッチに異なる結果ファイルを使用します。結果ファイルを複数回使用することは推奨しません。 注: ターゲットリストファイルを使用している場合、結果ファイルは txt 形式で保存されます。ターゲットリストファイルを使用していない場合、txt 形式と qsession 形式の 2 つの結果ファイルが保存されます。
マーカールウェル	マーカールウェル: True その他のウェル: 偽 (デフォルト)	各バッチで マーカールウェル を 1 つだけ選択します。データ分割中のバーコード認識のために、十分な強度の MS 信号を供給する内容物を持つウェルを選択します。ピーク形状にテーリングが過剰にある場合、データ分割が起こらない可能性があります。
ターゲットリスト	ターゲットリスト ファイルの名前、 csv 拡張子付き	(オプション) ターゲットリスト ファイルを指定します。アクティブなプロジェクトの Batch フォルダーにファイルがない場合は、フルファイルパスを含めます。 ターゲットリスト を参照してください。

自動キャリブレーション(オプション)

自動キャリブレーションを使用する場合は、バッチの開始時に行う必要があります。キャリブレーションはサンプル間には行えません。

キャリブラント供給システム(CDS)は、ZenoTOF 7600/7600+システムが Echo® MS+ システムと構成されているときに、前者のキャリブレーションに使用されます。

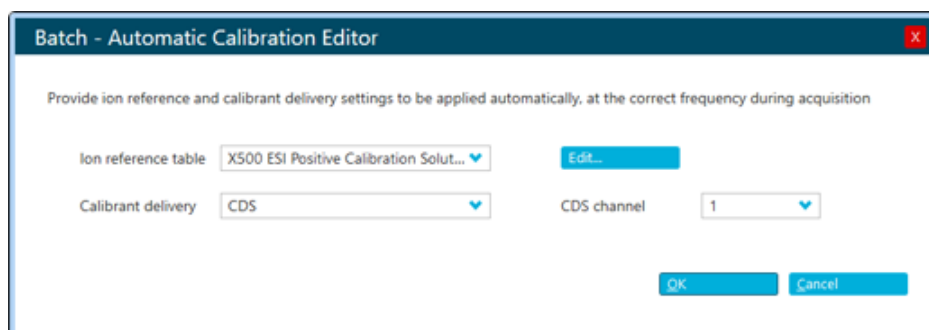
ユーザーは、該当するイオン参照表を選択し、CDS リザーバーの内容と必要な特定のキャリブレーションイオンについて、表を編集することができます。

バッチの開始時に自動キャリブレーションを行うには、**自動キャリブレーション** チェックボックスをオンにします。

キャリブレーションは次の 2 つの段階で行われます。

- Cal: 初期 CDS キャリブレーション、選択したイオン参照表を使用
- Cal Phase 2: 平衡化、CDS 溶液のトレースを除去

図 1-7 : バッチ - 自動キャリブレーションエディタ ダイアログ



出力設定ファイル(オプション)

EchoExportColumnConfig.xml ファイルを使用して、Results テキストファイルが書き込まれるパス、Results テキストファイルに含める列、および列の順序をカスタマイズします。

デフォルトの EchoExportColumnConfig.xml ファイルは SCIEX OS Data/common-project-area フォルダにあります。設定を変更するには、このファイルを編集するか、プロジェクトフォルダまたはプロジェクトの Quantitation Results フォルダにファイルのコピーを作成して編集します。

注:

SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Export Column Configuration フォルダには 3 つのテンプレートが用意されています。

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

表 1-6 : 出力ファイル内のエレメント

エレメント	説明
Path	Results テキストファイルの保存先パスを指定します。出力ファイルの複数のコピーを保存するために、複数のパスを指定できます。
	注: Results テキストファイルのコピーは、プロジェクトの Quantitation Results フォルダーに保存されます。
Order	Results テキストファイル内の列の順序を指定します。各列に一意の番号を入力します。最初の列に 0 を入力します。
Visible	列を Results テキストファイルに含めるかどうかを指定します。列を含めるには <code>true</code> と入力します。列を除外するには <code>false</code> と入力します。

システムの準備

異なるイオンを異なるウェルで監視する MRM^{HR} アルゴリズムおよび情報依存採取 (IDA) 実験では、各ウェルで正しいイオンが監視されるように、ソフトウェアは液滴吐出から検出までの時間 (転送時間) を必要とします。転送時間は、データ分割が発生するたびに計算され、保存されます。

システムが最近稼動していなかった場合、または電極やキャリヤ溶媒が変更された場合、システムは短いバッチを実行して転送時間を計算します。転送時間をキャリブレートするバッチを実行する前に、システムの平衡化のために最低でも 30 分待機してください。

転送時間をキャリブレートする手順は、次のとおりです。

1. ステータスパネルを開きます。
2. **Equilibrate** をクリックします。

System Preparation ダイアログが開きます。

図 1-8 : システムの準備 ダイアログ: 転送時間 タブ

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

3. 転送時間 タブを開き、以下の表を使用してフィールドに入力します。

表 1-7 : 転送時間 タブ

フィールド	説明
MS メソッド	アクティブなプロジェクト用に、リストから MS メソッドを選択します。転送時間の調整には、どの MS メソッドでも使用できます。通常は、TOF MS メソッドが最良の結果をもたらします。
AE メソッド	アクティブなプロジェクトのリストから、アコースティックエжекション質量分析法 (AEMS) による分析に使用する AE メソッドを選択します。AE メソッドでは、AEMS 分析のサンプル転送条件に対して転送時間が正しくキャリブレートされていることが確認されます。選択したメソッドの 吐出量 (nL) の値が、マーカーウェルの強度とほぼ同じ強い信号を供給するのに十分であることを確認してください。 注: 別の AE メソッドを使用する前に、転送時間を調整します。
プレートタイプ	Echo® MS システムに該当するプレートを選択します。次のオプションがあります。 • 384PP • 1536LDV

表 1-7 : 転送時間 タブ (続き)

フィールド	説明
ウェル位置	質量分析装置で有意な信号が得られるサンプル濃度のウェルの位置を特定します。マーカールウェルを推奨します。次のオプションがあります。 • 384PP: A1 から P24 • 1536LDV: A1 から AF48

4. **OK** をクリックします。

15 サンプルのバッチが自動的に作成され、提出されます。バッチが完了すると、新しい転送時間が計算され、システムのデフォルトとして保存されます。

通常、Echo® MS+ システムで使用されるバッチは、すべてのサンプルについて、1 つの分析試料または分析試料のセットを取得します。たとえば、MRM^{HR} アルゴリズムのワークフローで、各行、列、ウェル位置ごとに異なるターゲット分析試料を指定する必要がある場合は、ターゲットリストを使用する必要があります。TOF MS データの場合、ターゲットリストは各ウェルにおける対象の分析試料を特定し、この情報はデータの処理中に使用されます。ターゲットリストは、取得中に MRM^{HR} アルゴリズムと IDA 実験における対象分析試料の特定にも使用できます。ターゲットリスト内の分析試料の情報は、取得中に MS メソッドを更新するために使用されます。

ターゲットリストは CSV ファイルです。このファイルには、以下の領域で利用できる分析試料の情報が含まれています。

- インタクトプロテインや大型生体分子の質量再構成のための分析試料の情報
- IDA 実験の包含リスト

ターゲットリストを使用するには、以下の手順に従います。

- [ターゲットリストを作成する](#)
- [プロジェクトのデフォルト設定を構成する](#)
- [テンプレートとして使用する MS メソッドの作成](#)
- [テンプレートとして使用する処理メソッドの作成](#)

ターゲットリストを作成する

ターゲットリストファイルの各行には、1 つのウェルと化合物の質量情報が含まれています。複数の列に同じ化合物を含めることができます。複数の列に同じウェル位置を含めることができます。

注: 異なるワークフローのターゲットリストの例が、

SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Target List フォルダーに用意されています。

- CSV 形式のターゲットリストファイルを作成し、使用するプロジェクトのフォルダーの Batch サブフォルダーに保存します。

注: ターゲットリストファイルでは、小数点記号としてコンマまたはピリオドを使用できます。自動処理中に作成された結果ファイルでは、ピリオドが小数点記号として使用されます。

注: フィールド名のテキスト、大文字と小文字の使い分け、スペースが以下の表と同じであることを確認します。

表 2-1 : ターゲットリストファイル内のフィールド名

フィールド	説明
Well	各行に 1 つのウェル位置をスペースなしで指定します。利用可能な値は次のとおりです。 • 384PP: A1 から P24 • 1536LDV: A1 から AF48
Transfer Time Tolerance	サンプルのモニタリングウィンドウの開始と終了を調整するために追加する秒数を指定します。このパラメータは、以下のようなワークフローで使用され、異なるウェル位置に対して異なるトランジションが監視されます。 • トランジションがウェルによって監視される MRM^{HR} ワークフロー • インクルージョンリストがウェルによって監視される IDA ワークフロー 転送時間の許容誤差は負の値を取ることができますが、転送時間の絶対値は AE メソッドで使用される排出間隔の半分を超えてはなりません。
Offset	ピーク位置の可能性がある時間帯に、予定されている測定ウィンドウが移動する秒数を指定します。正の値はウィンドウを右に移動します。負の値はウィンドウを左に移動します。
Group	その化合物に該当するグループ名を指定します。
Name	化合物の 化合物 ID を指定します。
IS Name	化合物の定量計算に使用する内部標準の名前を指定します。各化合物には、1 つの内部標準のみを使用できます。
IS	化合物が内部標準かどうかを指定します。利用可能な値は次のとおりです。 • True • False
Formula	化合物の元素式を指定します。ペプチドは、1 文字のアミノ酸と修飾を持つことができます。特定のアイソトープを指定するには、[2H]、[18O]、[15N] のように、角括弧内にアイソトープの重量を記号の前に入れてください。たとえば、重水 (D2O) は [2H]2O と指定します。
Adduct/Charge	化学式が指定されている場合は、[M+H] ⁺ または [M+H] ⁻ のように、付加体と電荷状態を指定します。SCIEX OS ソフトウェアの アナリティクス ワークスペースでサポートされているすべての付加体は、ターゲットリストでサポートされています。
Comment	行のエントリにさらに詳しい情報を提供してください。最大 128 文字まで使用できます。
Precursor Mass (Da)	プリカーサーイオンの質量を指定します。適用範囲は 5 から 2,250 で、小数点以下 5 桁までです。

表 2-1 : ターゲットリストファイル内のフィールド名 (続き)

フィールド	説明
TOF Start Mass (Da)	TOF MS/MS 実験の標的質量範囲の開始質量を指定します。 TOF Start Mass (Da) は TOF Stop Mass (Da) より小さくなければなりません。 MS メソッドで TOF 開始/停止質量を適用 がテンプレートとして選択されている場合、このパラメータが使用されます。
TOF Stop Mass (Da)	TOF MS/MS 実験の標的質量範囲の終端質量を指定します。 TOF Stop Mass (Da) は TOF Start Mass (Da) より大きくなければなりません。 MS メソッドで TOF 開始/停止質量を適用 がテンプレートとして選択されている場合、このパラメータが使用されます。
Fragment Mass (Da)	処理メソッドで使用するフラグメント質量を入力してください。TOF MS/MS メソッドのデフォルトスキャン範囲は 20 Da であり、指定したフラグメント質量から ± 10 Da です。 注: MS メソッドで TOF 開始/停止質量を適用 をテンプレートとして選択している場合、ターゲットリストで設定した TOF Start Mass (Da) と TOF Stop Mass (Da) が TOF MS/MS スキャン範囲として使用されます。
Accumulation Time (sec)	ターゲットトランジションの蓄積時間を調整して、総スキャン時間を最適化します。蓄積時間とは、質量分析装置が TOF MS/MS のデータポイントを 1 つ取得するのに必要な時間です。蓄積時間はピーク全体のポイント数に影響を与えます。適用範囲は 0.005 ~ 50 です。一般的な値は 0.01 から 0.100 までです。
Declustering potential (V)	イオンクラスターの形成を最小限に抑えるためにオリフィスに印加する電圧を指定します。デクラスタリング電位 (DP) は、トランジション表の各行ごとに指定することができます。適用範囲は 0 ~ 300 です。 注: DP 拡散 (V) は MS メソッドで設定します。
Collision Energy (V)	衝突セルに印加する電圧を指定します。衝突エネルギー (CE) は通常、フラグメントの強度を最大化するように最適化されます。適用範囲は 0 ~ 150 です。
CE Spread (V)	CE を徐々に増やすために使用する値を指定します。 Collision Energy (V) パラメータとともに、CE 拡散 (CES) パラメータは、プロダクトイオンスキャンにおけるプリカーサーイオンに適用される CE を制御します。 たとえば正極性では、CE は $CE - CES$ から $CE + CES$ へと徐々に増加します。 適用範囲は 0 ~ 150 です。

表 2-1 : ターゲットリストファイル内のフィールド名 (続き)

フィールド	説明
Fragmentation Mode	以下のフラグメンテーションモードのいずれかを指定します。 • CID: 衝突誘起解離 (CID) モードでは、Q2 衝突セル内のガス分子との衝突の結果、プリカーサーイオンの振動励起によりフラグメントイオンが生成されます。 • EAD: 電子活性化解離 (EAD) モードでは、EAD セル内のプリカーサーイオンに電子が照射され、プリカーサーイオンからフラグメントイオンへの解離が生じます。 • EAD (conventional trapping): 従来のトラッピングは、反応速度の学術研究に最適な EAD モードです。EAD モードでは、ロード時間と反応時間 (電子照射時間) のステップをより詳細に制御できます。EAD モードでは、これらのステップが同時に実行されるように最適化され、感度が約 2 倍に向上します。EAD (従来のトラッピング) モードでは、これらのステップは連続して実行されます。選択した前駆体を EAD セルに指定したロード時間にわたって導入し、電子ビームを指定した反応時間にわたって照射した後、生成物が EAD セルから排出されます。 ヒント! 反応時間を正確に予測可能な範囲で制御する必要がある場合は、EAD (従来のトラッピング) モードを使用してください。
Electron KE (eV)	照射電子ビームの電子運動エネルギー (KE) を特定します。電子活性化解離 (EAD) セルでは、電子 KE は、電子源と電子活性化 (EA) ロッド電極間の DC バイアスと同じです。このパラメータは、Fragmentation Mode が EAD または EAD (conventional trapping) に設定されている場合に適用されます。
ETC (%)	電子移動係数 (ETC) を指定します。このパラメータは、EAD セルに流入する電子の割合を制御します。範囲は 0% ~ 100% です。このパラメータは、Fragmentation Mode が EAD または EAD (conventional trapping) に設定されている場合に適用されます。 ヒント! 分析する前駆体種の種類と取得するプロダクトイオンの種類を使用して EAD 反応の種類を制御するには、このパラメータを使用します。
EAD RF (Da)	0 Da ~ 300 Da の値を指定します。このパラメータは、RF レベルを制御して、プリカーサーイオンとフラグメントイオンを EAD セルに保持します。 注: m/z がより高いプロダクトイオンを検出するには、EAD RF (Da) を増やします。m/z が低いプロダクトイオンの検出は減少する可能性があります。

表 2-1 : ターゲットリストファイル内のフィールド名 (続き)

フィールド	説明
Reaction time (ms)	電子線照射に対する反応時間を指定します。EAD モードでは、このパラメータはロード時間も制御します。 ヒント! 電子ビーム電流の最適化後に前駆体の消費が十分でない場合は、反応時間を延長します。
Time Bins to Sum	合計するデータポイントの数を指定します。小分子またはペプチドの範囲は、4 ~ 6 です。インタクトプロテイン分析 (> 20 kDa) の開始値は、40 です。
Channel 1 ~ Channel 4	アナログ-デジタルコンバータ(ADC)チャンネルを指定します。イオンは、各チャンネルで計数されます。4 チャンネルすべてを選択(デフォルト値)した場合、全 4 チャンネルが合計イオン数に加えられます。
Expected MW (Da)	Mass Reconstruction ワークフロー: 成分の予測分子量(Da)を指定します。
m/z Range for XIC Start (Da)	質量再構成ワークフロー: XIC 範囲の開始質量を指定します。
m/z Range for XIC Stop (Da)	質量再構成ワークフロー: XIC 範囲の終端質量を指定します。
Reconstruction Start Mass (Da)	質量再構成ワークフロー: 再構成を開始する質量を Da で指定します。
Reconstruction Stop Mass (Da)	質量再構成ワークフロー: 再構成を停止する質量を Da で指定します。

プロジェクトのデフォルト設定を構成する

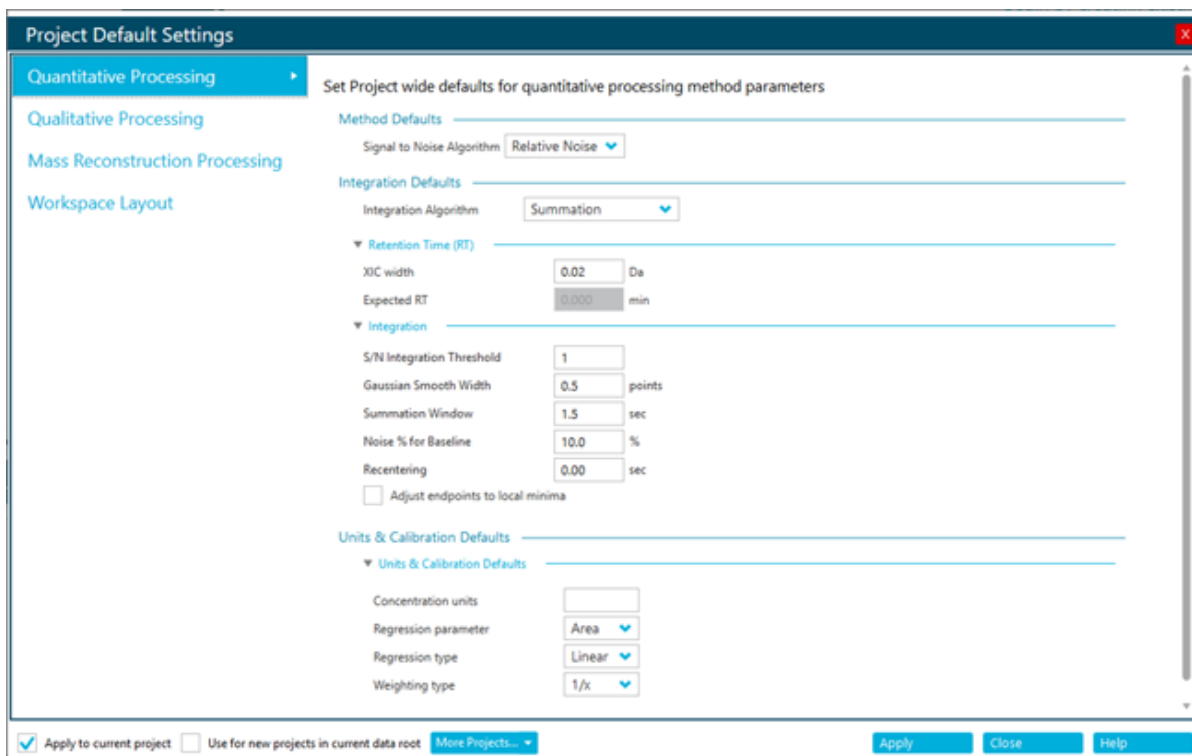
自動処理中、ソフトウェアはプロジェクトのデフォルト設定から処理メソッドパラメータ(XIC 幅(Da)、ガウシアンスムーズ幅(ポイント)、ベースラインのノイズ%(%) など)を取得します。処理メソッドを自動処理のテンプレートとして使用する場合は、プロジェクトのデフォルト設定を構成して、全分析にわたるピーク積分を最適化します。AE メソッドでは、異なる排出量とピーク幅により、処理パラメータに異なる値が必要となります。

プロジェクトのデフォルト設定の情報は、テンプレートとして使用する処理メソッドに保存されます。

注: アナリティクス ワークスペースでプロジェクトのデフォルト設定を変更した場合、変更は保存済みの処理メソッドには適用されません。変更を適用するには、プロジェクトのデフォルト設定を更新し、新しい処理メソッドを作成します。新しい処理メソッドでは、更新後のプロジェクトのデフォルト設定が使用されます。自動処理には、この新しい処理メソッドを使用してください。

1. アナリティクス ワークスペースで、プロジェクト > プロジェクトのデフォルト設定 をクリックします。

図 2-1 : 定性処理 Window



2. パラメータを設定します。
パラメータの詳細な説明については、SCIEX OS ヘルプシステムを参照してください。
3. 適用 をクリックします。
4. 閉じる をクリックします。

テンプレートとして使用する MS メソッドの作成

- MS メソッド ワークスペースで、テンプレートとして使用する MS メソッドを作成します。
SCIEX OS ヘルプシステムを参照してください。
- TOF MS 実験の場合は、該当するイオン源およびガスパラメータ、TOF MS 実験パラメータを持つ MS メソッドを作成します。
- MRM^{HR} 実験の場合は、適用可能なイオン源およびガスパラメータ、TOF MS 実験パラメータ、TOF MS/MS 実験パラメータ(Q1 分解能、ITC、Zeno パルス設定など)を持つ MS メソッドを作成します。

注: 化合物 ID、グループ名、プリカーサーイオン、TOF 開始質量(Da)、TOF 停止質量(Da) またはフラグメントイオン(Da)、蓄積時間、デクラスティング電位(V)、衝突エネルギー(V)、CE 拡散(V)などの質量表情報は、ターゲットリストファイルに含まれています。この情報は、テンプレートとして使用する MS メソッドの情報に置き換わるものであり、TOF MS 実験用のウェルベースの処理メソッドと、TOF MS/MS 実験用の測定および処理メソッドの両方を提供します。

テンプレートとして使用する処理メソッドの作成

テンプレートとして使用される処理メソッド内の情報は、ターゲットリストファイル内の情報およびプロジェクトのデフォルト設定によって置き換えられます。[プロジェクトのデフォルト設定を構成する](#)を参照してください。

- アナリティクス ワークスペースで、処理メソッドを作成します。SCIEX OS ヘルプシステムを参照してください。

Echo® MS+ システムで取得した AE (アコースティックエジェクション) データをヒートマップで可視化するには、この手順を使用します。

1. エクスプローラワークスペースを開きます。
2. **ファイル > Echo MS Results ファイルを開く** をクリックします。
開くダイアログが開きます。アクティブなプロジェクトの Quantitation Results フォルダが表示されます。
3. AE データを含む Results テキストファイルを参照し、**開く** をクリックします。
4. (オプション) ウィンドウの表示オプションを設定するには、 **(設定)** をクリックし、設定をカスタマイズしてから、**保存して閉じる** をクリックします。
5. (オプション) 該当するフィルタリングオプションを選択します。
6. **列** フィールドで、表示する Results テキストファイルの列を選択します。

このリストには、Results テキストファイル内のすべての列が含まれています。

ヒント! 出力設定ファイルを設定して、Results テキストファイルに含めるフィールドを選択します。[出力設定ファイル\(オプション\)](#)を参照してください。

7. (オプション) 数値列については、その範囲を設定します。以下のオプションを使用できます。
 - **自動:** データ内の最小値をカラーマップの左側の色で、データ内の最大値をカラーマップの右側の色で表示するように選択します。
 - **デフォルト:** デフォルトの範囲が利用可能な場合は、このオプションを選択してデフォルトの範囲を使用します。デフォルトの範囲を指定するには、まず手動で範囲を設定し、次に **デフォルトとして保存** をクリックします。

注: ユーザーがデフォルトの範囲を設定すると、アクティブなプロジェクト内のすべての Results テキストファイルにそのデフォルトの範囲が使用されます。

- **手動:** 手動で範囲を設定するには、こちらを選択します。範囲の下限值未満の値はすべて、カラーマップの左側の色で表示されます。範囲の上限値を超える値はすべて、カラーマップの右側の色で表示されます。

注: 科学的記数法で入力された数値は、10 進数形式に変更されます。

8. ウェルの結果を表示するには、該当するウェルをクリックします。
9. アナリティクス ワークスペースのデータを開くには、 **(アナリティクスで開く)** をクリックします。

データの可視化

注: 関連ファイルの情報がみつからない場合は、アナリティクスで開くダイアログが開きます。このダイアログのフィールドに入力し、開くをクリックします。

ワークスペースが開くまでに最大 1 分かかる場合があります。必要な時間は、Results テキストファイルのサイズによります。

お問い合わせ先

住所



シンガポール製
AB Sciex Pte.Ltd.
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

SCIEX 本社

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

お客様のトレーニング

- グローバル: sciex.com/contact-us

オンライン学習センター

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

SCIEX サポート

SCIEX およびその代理店には、十分な訓練を受けた保守 / 技術専門のグローバルスタッフがおり、システムに関する質問や技術的な問題にお答えします。詳細については、SCIEX の Web サイト sciex.com をご覧いただくか、以下のリンクからお問い合わせください。

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

サイバーセキュリティ

SCIEX 製品のサイバーセキュリティに関する最新のガイダンスについては、sciex.com/productsecurity を参照してください。

説明書

このバージョンのドキュメントは、以前のバージョンのドキュメントすべてに優先します。

ソフトウェア製品の説明書については、ソフトウェアに付属のリリースノートまたはソフトウェアインストールガイドを参照してください。

お問い合わせ先

ハードウェア製品の説明書については、システムまたはコンポーネントに付属の説明書を参照してください。

説明書の最新版は SCIEX の web サイト(sciex.com/customer-documents)で入手できます。

注: このドキュメントの無料の印刷版を請求するには、sciex.com/contact-us までお問い合わせください。
