

기능 안내서

SCIEX OS 소프트웨어

ZenoTOF 7600/7600+ 시스템을 사용하는 Echo[®] MS+ 시스템용



본 문서는 SCIEX 장비를 구매한 고객들이 SCIEX 장비를 작동하는 데 이용할 수 있도록 제공됩니다. 본 문서는 저작권 보호를 받으며 본 문서 또는 본 문서의 어느 일부에 대한 복제도 엄격히 금지됩니다. 단, SCIEX가 서면으로 허가한 경우는 제외됩니다.

이 문서에서 설명될 수 있는 소프트웨어는 라이선스 계약에 따라 제공됩니다. 라이선스 계약에서 특별히 허용된 경우를 제외하고 어떠한 수단으로든 소프트웨어를 복사, 수정 또는 배포하는 것은 법률 위반입니다. 또한, 라이선스 계약은 소프트웨어를 어떠한 목적으로든 디스어셈블하거나 리버스 엔지니어링하거나 디컴파일하는 것을 금할 수 있습니다. 제품 보증은 그 안에 명시되어 있습니다.

이 문서의 일부는 다른 제조업체 및/또는 다른 제조업체의 제품을 참조할 수 있으며, 참조 내용에는 이름이 상표로 등록되거나 해당 소유자의 상표로 기능하는 부품이 포함될 수 있습니다. 이러한 이용의 목적은 SCIEX가 장비에 포함시키기 위해 해당 제조업체 제품을 공급하는 것으로 지정하는 것에만 국한되며, 이는 타인이 이러한 제조업체 및/또는 제조업체의 제품 이름을 상표로 이용할 수 있는 권한 및/또는 허가를 의미하지 않으며 타인의 그러한 이용을 허가하는 것이 아닙니다.

SCIEX 보증은 제품 판매 또는 허가 시점에 제공되는 명시적 보증에만 국한되며 SCIEX의 독자적 및 독점적 진술, 보증 및 의무입니다. SCIEX는 법령이나 그 외의 법률 또는 거래 과정이나 거래의 관습으로 인한 발생 여부와 관계없이 상품성 보증 또는 특정 목적에 대한 적합성 보증을 포함하나 이에 국한되지 않는 명시적 혹은 암묵적 보증 등 기타 어떤 종류의 보증도 제공하지 않습니다. 이와 같은 모든 보증은 명확히 부인됩니다. 그리고 SCIEX는 간접적 또는 결과적 손해를 포함해 구매자의 이용 또는 구매자의 이용으로 인해 발생하는 모든 불리한 상황에 대해 어떠한 책임 또는 불확정 책임도 지지 않습니다.

연구 전용. 진단 절차에 사용하지 마십시오.

관련 로고를 포함하여 여기에 언급된 상표 및/또는 등록 상표는 미국 및/또는 특정 기타 국가에서 AB Sciex Pte. Ltd., 또는 해당 각 소유자의 자산입니다 (sciex.com/trademarks 참조).

AB Sciex™는 사용 허가를 받아 사용되고 있습니다.

Echo, Echo MS 및 Echo MS+는 미국 및 기타 국가에서 Labcyte, Inc.의 상표 또는 등록 상표이고 사용 허가를 받아 사용되고 있습니다.

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

목차

1 Echo[®] MS+ 시스템을 사용한 획득	4
MS 방법.....	4
소스 및 가스 매개 변수.....	4
TOF MS 실험을 위한 매개 변수.....	5
MRM ^{HR} 알고리즘 실험을 위한 매개 변수.....	6
AE 방법.....	7
배치.....	10
자동 교정(선택 사항).....	12
출력 구성 파일(선택 사항).....	12
시스템 준비.....	13
2 대상 목록	16
대상 목록 생성.....	16
프로젝트 기본 설정 구성.....	20
템플릿으로 사용할 MS 방법 생성.....	21
템플릿으로 사용할 처리 방법 생성.....	22
3 데이터 시각화	23
문의하기	25
주소.....	25
고객 교육.....	25
온라인 학습 센터.....	25
SCIEX 지원.....	25
사이버 보안.....	25
문서.....	25

Echo[®] MS+ 시스템을 사용한 획득

1

이 섹션에서는 음향 방출 질량 분석계(AEMS) 데이터를 획득하기 위한 SCIEX OS 소프트웨어 사용에 대한 정보를 제공합니다. 또한 MS 방법과 AE 방법의 매개 변수, 배치, 배치 교정 및 시스템 준비에 대해 설명합니다.

MS 방법

소스 및 가스 매개 변수

OptiFlow Turbo V 이온 소스의 Echo[®] MS 프로브는 Echo[®] MS+ 시스템의 개방형 포트 인터페이스(OPI)와 함께 작동하여 샘플을 흡인, 분무 및 이온화한 다음 ZenoTOF 7600 질량 분석계에 제공합니다. 이 워크플로에는 좁은 범위의 소스 및 가스 매개 변수가 권장됩니다.

그림 1-1 소스 및 가스 매개 변수

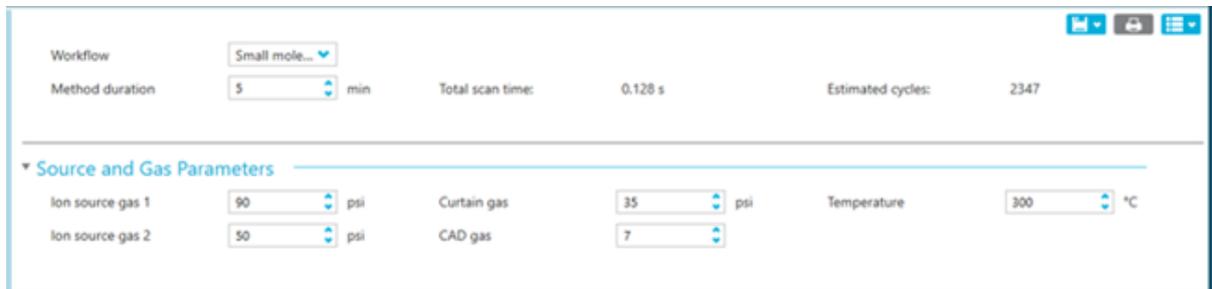


표 1-1 소스 및 가스 매개 변수

매개 변수	설명
이온 소스 가스 1(psi)	이온 소스 가스 1의 압력을 설정합니다. 이온 소스 가스 1은 OPI 포트에서 이온 소스로 운반 용매를 끌어옵니다. 90으로 설정합니다. 값이 이보다 낮으면 OPI에서 누출이 발생할 수 있습니다.
이온 소스 가스 2(psi)	이온 소스 가스 2의 압력을 설정합니다. 이 가스는 운반 용매를 이온 소스에 용해시킵니다. 운반 용매의 조성 및 유속에 맞게 이온 소스 가스 2(psi) 값을 최적화합니다. 시작 값 50이 권장됩니다.
커튼 가스(psi)	Curtain Gas 인터페이스의 가스 압력을 설정합니다. 이 가스는 이온 광학 장치의 오염을 방지하는 데 도움이 됩니다. 감도를 낮추지 않는 가능한 가장 높은 값을 사용하십시오. 값이 높을수록 신호 강도가 약간 감소하여 오염이 감소합니다.
CAD 가스	충돌 셀의 압력을 설정합니다. TOF MS 실험의 경우 이온의 충돌 냉각을 7로 설정합니다. TOF MS/MS 실험의 경우 분석 물질 이온 단편화를 위해 CAD 가스 값을 최적화합니다.

표 1-1 소스 및 가스 매개 변수 (계속)

매개 변수	설명
온도(°C)	운반 용매의 조성 및 유속에 맞게 온도를 최적화합니다. 시작 값 300이 권장됩니다. 400을 초과하는 온도 설정은 권장되지 않습니다. 고온은 전극의 수명을 감소시킬 수 있으며 열적으로 불안정한 화합물에 대한 감도도 낮출 수 있습니다.

TOF MS 실험을 위한 매개 변수

그림 1-2 TOF MS 매개 변수



표 1-2 TOF MS 매개 변수

매개 변수	설명
극성	이온화 모드를 식별합니다. 양성 또는 음성을 선택합니다. 극성 전환을 사용할 수 없습니다.
TOF 시작 질량 (Da)	목표 질량 범위의 시작 질량을 식별합니다. TOF 시작 질량(Da)은 TOF 중지 질량(Da)보다 작아야 합니다.
TOF 중지 질량 (Da)	목표 질량 범위의 끝 질량을 식별합니다. TOF 중지 질량(Da)은 TOF 시작 질량(Da)보다 커야 합니다.
축적 시간(초)	질량 분석계가 하나의 TOF MS 스펙트럼을 획득하는 데 필요한 시간을 식별합니다. 시작 값 0.08이 권장됩니다.
분무 전압(V)	프로브 전극에 적용될 전압을 식별합니다. 운반 용매의 조성 및 유속에 맞게 분무 전압을 최적화합니다. 전극 수명을 최대화하려면 4500보다 큰 값을 사용하지 마십시오.
디클러스터링 전위(V)	이온 클러스터의 형성을 최소화하기 위해 오리피스에 적용될 전압을 식별합니다. 최적의 디클러스터링 전위(DP) 값은 화합물마다 다를 수 있습니다. DP 값은 전체 질량 범위에 사용됩니다.
DP 확산(V)	DP 확산(DPS) 값을 입력합니다. 이 매개 변수와 디클러스터링 전위(V)를 함께 사용하면 이온에 적용되는 DP를 제어할 수 있습니다. DP는 낮은 값인 DP - DPS에서 높은 값인 DP + DPS로 점진적으로 증가합니다.

표 1-2 TOF MS 매개 변수 (계속)

매개 변수	설명
ITC 모드	<p>동적 또는 고정을 선택합니다. 동적 모드에서는 검출기 손상을 방지하기 위해 이온 흐름이 지속적으로 모니터링되고 자동으로 조정됩니다. 고정 모드에서는 사용자가 ITC 필드에서 값을 설정합니다. 동적 모드에서는 실험 시작 전에 이온 흐름을 모니터링하기 위해 주기 시간에 27ms가 추가됩니다.</p> <p>참고: 동적 모드는 TOF MS 실험에만 사용할 수 있습니다.</p>
충돌 에너지(V)	충돌 셀에 적용될 전압을 식별합니다. TOF MS 실험에서 이온을 단편화 없이 충돌 셀을 통과시키려면 낮은 값을 사용합니다.
CE 확산(V)	일반적으로 TOF MS 실험에서는 이 매개 변수가 사용되지 않습니다.
ITC	<p>질량 분석계로 들어가는 이온의 백분율을 식별합니다.</p> <p>고정 모드를 사용 중인 경우 이온 강도를 모니터링합니다. 낮은 값으로 시작하여 신호 강도가 필요한 최소값에 도달할 때까지 값을 조금씩 증가시킵니다. 예상 이온 강도를 알 수 없으면 동적 모드를 사용합니다. 이온 강도가 일정하게 높게 유지되거나 단기간 매우 높아지면 검출기가 영구적으로 손상될 수 있습니다.</p> <p>참고: 이 매개 변수는 ITC 모드가 고정으로 설정된 경우에 적용할 수 있습니다.</p>

MRM^{HR} 알고리즘 실험을 위한 매개 변수

그림 1-3 MRM^{HR} 알고리즘 매개 변수

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

표 1-3 MRM^{HR} 알고리즘 매개 변수

매개 변수	설명
Q1 분해능	Q1 사중극자의 분해능을 식별합니다. 단위, 열기, 낮음 또는 높음을 선택합니다. 단위는 약 $\pm 0.7\text{Da}$ 의 Q1 질량 선택을 제공합니다. 열기 및 낮음은 보다 넓은 Q1 질량 선택을 제공합니다. 높음은 보다 좁은 Q1 질량 선택을 제공합니다.
ITC	질량 분석계로 들어가는 이온의 백분율을 식별합니다. MRM ^{HR} 알고리즘 실험에서 이 매개 변수는 분석 물질 감도를 최대화하기 위해 대개 100으로 설정됩니다.
Zeno 펄싱	Zeno 펄싱을 활성화하려면 선택합니다. Zeno 펄싱은 ZenoTOF 7600/7600+ 질량 분석계의 고유한 기능입니다. 이 기능을 활성화하면 듀티 사이클이 개선되고 신호 강도가 증가합니다.
TOF 시작/중지 질량 적용	TOF 질량 범위를 수동으로 설정하려면 선택합니다. 이 옵션을 선택하지 않으면 지정한 단편 이온을 중심으로 기본 질량 범위인 20Da이 사용됩니다.
TOF 시작 질량 (Da)	목표 질량 범위의 시작 질량을 식별합니다. TOF 시작 질량(Da) 은 TOF 중지 질량(Da) 보다 작아야 합니다.
TOF 중지 질량 (Da)	목표 질량 범위의 끝 질량을 식별합니다. TOF 중지 질량(Da) 은 TOF 시작 질량(Da) 보다 커야 합니다.
축적 시간(초)	질량 분석계가 하나의 TOF MS/MS 스펙트럼을 획득하는 데 필요한 시간을 식별합니다. 시작 값 0.01이 권장됩니다.
디클러스터링 전위(V)	이온 클러스터의 형성을 최소화하기 위해 오리피스에 적용될 전압을 식별합니다. MRM ^{HR} 알고리즘 실험에서는 전이 테이블의 각 행에 대해 디클러스터링 전위가 식별됩니다.
충돌 에너지(V)	충돌 셀에 적용될 전압을 식별합니다. TOF MS/MS 및 MRM ^{HR} 실험에서 이 전압은 전구체 이온을 단편으로 분해합니다. 단편의 강도를 최대화하기 위해 충돌 에너지(CE)를 최적화합니다.
CE 확산(V)	CE 확산(CES)을 식별합니다. 충돌 에너지(V) 매개 변수와 이 매개 변수를 함께 사용하면 생성 이온 스캔에서 전구체 이온에 적용되는 CE를 제어할 수 있습니다. CE는 낮은 값(양극성의 CE - CES)에서 높은 값(양극성의 CE + CES)으로 점진적으로 증가합니다.

AE 방법

음향 방출(AE) 방법은 Echo® MS+ 시스템의 작동에 사용되는 설정을 제공합니다.

그림 1-4 AE 방법: 표준

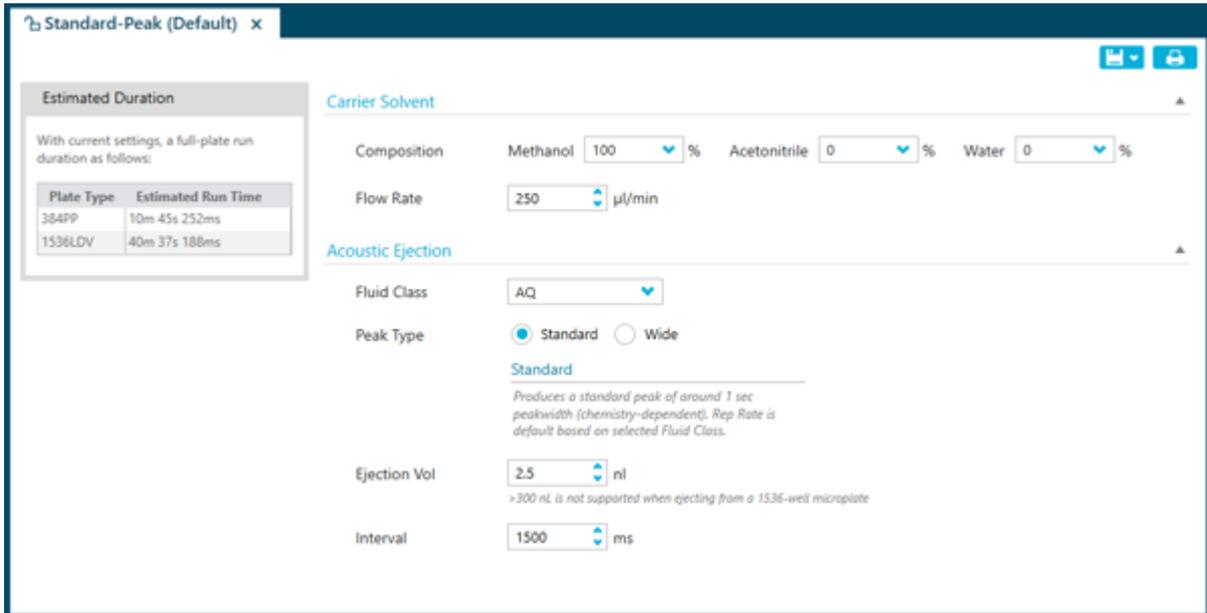


그림 1-5 AE 방법: 와이드

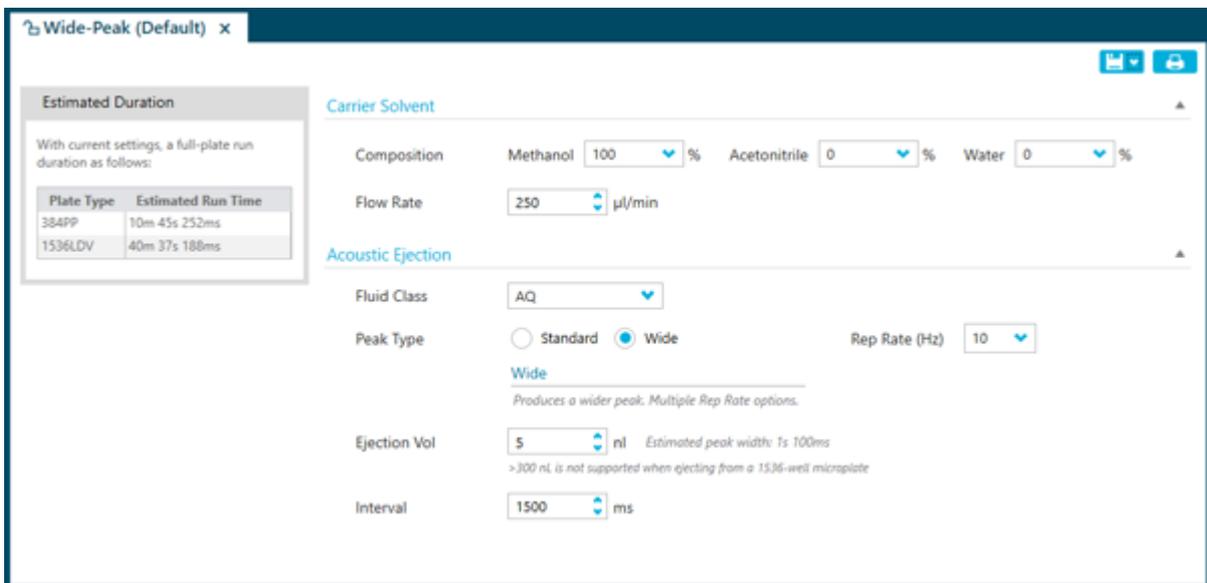


표 1-4 AE Method 매개 변수

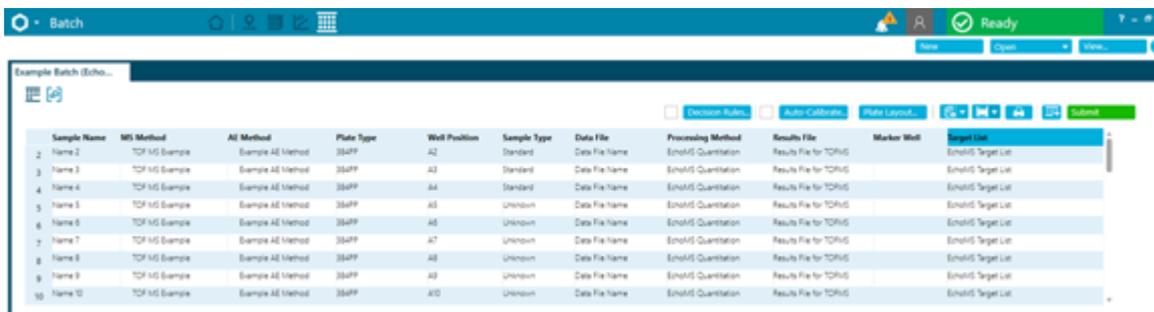
매개 변수	설명
예상 지속 시간	간격(ms)과 실행 시간에 영향을 미치는 기타 요인을 사용하여 계산된 플레이트 실행 시간의 예상 지속 시간을 표시합니다. 384웰 및 1,536웰 플레이트 모두에 대해 예상 지속 시간이 제공됩니다. 평형화 또는 배치 교정 시간은 계산에 포함되지 않습니다.
캐리어 용매	운반 용매의 구성을 식별하려면 메탄올, 아세토니트릴 및 물의 백분율을 선택합니다.

표 1-4 AE Method 매개 변수 (계속)

매개 변수	설명
유속($\mu\text{L}/\text{min}$)	시스템의 유속을 최적화합니다. 전극과 운반 용매의 조성이 최적 유속에 영향을 미칩니다. 전극이나 운반 용매의 조성이 변경되면 이 값을 다시 최적화해야 합니다.
유체 등급	<p>샘플 웰에 있는 샘플 매트릭스를 선택합니다. 플레이트 유형에 따라 다른 옵션을 사용할 수 있습니다. 다음 옵션을 사용할 수 있습니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • AQ(수용액): 수용액에 사용됩니다. • SP(계면활성제 상): 계면활성제를 함유한 수용액(예: Triton X-100 또는 유기 수성 혼합물)과 같이 표면장력이 낮은 용액에 사용됩니다. 이 옵션은 384웰 플레이트에만 사용할 수 있습니다. 1536웰 플레이트의 경우 분석 중에 발생하는 샘플 증발 때문에 이 옵션을 사용할 수 없습니다. • DMSO(다이메틸 설펍사이드): 70%~100%의 DMSO를 함유하는 용매에 사용됩니다.
피크 유형	<p>표준 또는 와이드 모드를 선택합니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • 표준: AE 시스템이 매우 빠르게 액적을 배출하여 좁은 피크를 만듭니다. • 와이드: 사용자가 액적 배출 속도를 식별하여 표준 모드에서보다 넓은 피크를 만들 수 있습니다. 피크가 넓을수록 피크 전반에서 더 많은 데이터 요소가 제공되고 MS 방법에서 더 긴 주기 시간이 지원됩니다. 와이드 피크 모드는 다중 액적 배출에만 적용할 수 있습니다.
방출량(nL)	<p>Echo® MS+ 시스템에서 분주할 샘플의 총 용량을 2.5nL 단위로 식별합니다.</p> <hr/> <p>참고: 시스템에서는 2.5nL의 액적을 배출합니다.</p> <hr/> <p>피크 유형이 와이드인 경우 방출량(nL)의 최소값은 5입니다.</p>
간격(ms)	샘플 배출 간격 시간을 식별합니다. 소프트웨어에서는 반복 속도(Hz) 및 방출량(nL)을 사용하여 최소 간격(ms)을 계산합니다.
반복 속도(Hz)	액적 배출 반복(rep) 속도(Hz)를 식별합니다. 방출량(nL) 및 반복 속도(Hz)는 피크의 폭을 제어합니다.

배치

그림 1-6 Batch



참고: 다음 열은 Echo® MS+ 시스템으로 획득한 데이터의 분석에 적용할 수 없으며, 보기 옵션 (랙 유형, 랙 위치, 플레이트 위치 및 주입량(μL))을 사용하여 숨길 수 있습니다.

표 1-5 배치 열

열 이름	설명	필드 값 요건
샘플 이름	샘플 이름입니다	252자 미만이어야 합니다. 참고: 데이터를 획득한 후 분할할 때 샘플 이름의 시작 부분에 웰 위치가 추가됩니다(예: A1-Sample1).
MS 방법	MS 방법의 이름입니다.	활성 프로젝트의 목록에서 MS 방법을 선택합니다. 참고: 배치의 모든 샘플에 동일한 MS 방법을 사용해야 합니다.
AE 방법	AE 방법의 이름입니다.	활성 프로젝트의 목록에서 AE 방법을 선택합니다. 참고: 배치의 모든 샘플에 동일한 AE 방법을 사용해야 합니다.
플레이트 유형	384PP 또는 1536LDV	배치당 하나의 플레이트 유형만 사용할 수 있습니다. Echo® MS+ 시스템과 함께 사용하기에 적합한 Beckman Life Sciences의 플레이트만 Echo® MS+ 시스템과 함께 사용할 수 있습니다.
웰 위치	384PP : A1 ~ P24 1536LDV : A1 ~ AF48	웰 위치는 행마다 한 번씩만 샘플링할 수 있습니다.

표 1-5 배치 열 (계속)

열 이름	설명	필드 값 요건
샘플 유형	공시료, 표준, 이중 공시료, 품질 관리, 용매 및 알 수 없음	샘플 유형 정보는 데이터 파일에 저장되며 처리 시 사용할 수 있습니다.
데이터 파일	획득한 데이터가 저장되는 파일의 이름입니다	배치로 획득한 모든 데이터는 동일한 데이터 파일에 보관해야 합니다. 참고: 배치의 모든 샘플에 동일한 데이터 파일을 사용해야 합니다.
처리 방법	획득이 완료된 후 자동 처리에 사용될 방법의 이름입니다.	처리 방법은 데이터를 획득하는 데 사용된 MS 방법과 호환되어야 합니다. 참고: 배치의 모든 샘플에 동일한 처리 방법을 사용해야 합니다.
결과 파일	처리한 결과가 저장되는 파일의 이름입니다	결과 파일은 활성 프로젝트의 Results 하위 폴더에 보관됩니다. 참고: 배치의 모든 샘플에 동일한 결과 파일을 사용해야 합니다. 참고: 배치마다 서로 다른 결과 파일을 사용하십시오. 결과 파일을 두 번 이상 사용하지 않는 것이 좋습니다. 참고: 대상 목록 파일을 사용할 경우 결과 파일이 txt 형식으로 저장됩니다. 대상 목록 파일을 사용하지 않을 경우에는 txt 형식과 qsession 형식으로 두 개의 결과 파일이 저장됩니다.
마커 웰	마커 웰: True 기타 웰: False (기본 값)	마커 웰은 각 배치에서 하나씩만 선택하십시오. 데이터 분할 시 바코드 인식을 위해 충분히 강한 MS 신호를 제공하는 항목이 포함된 웰을 선택하십시오. 피크 형태에 테일링이 과도하게 있으면 데이터 분할이 발생하지 않을 수 있습니다.
대상 목록	대상 목록 파일의 이름(csv 확장명)입니다.	(선택 사항) 대상 목록 파일을 식별합니다. 해당 파일이 활성 프로젝트의 Batch 폴더에 있지 않으면 전체 파일 경로를 포함하십시오. 자세한 정보는 대상 목록 섹션을 참조하십시오.

자동 교정(선택 사항)

자동 교정이 사용되는 경우 배치 시작 시 자동 교정이 수행되어야 합니다. 샘플 사이에는 교정을 수행할 수 없습니다.

교정물질 전달 시스템(CDS)은 ZenoTOF 7600/7600+ 시스템을 교정하는 데 사용됩니다 (Echo® MS+ 시스템과 함께 구성된 경우).

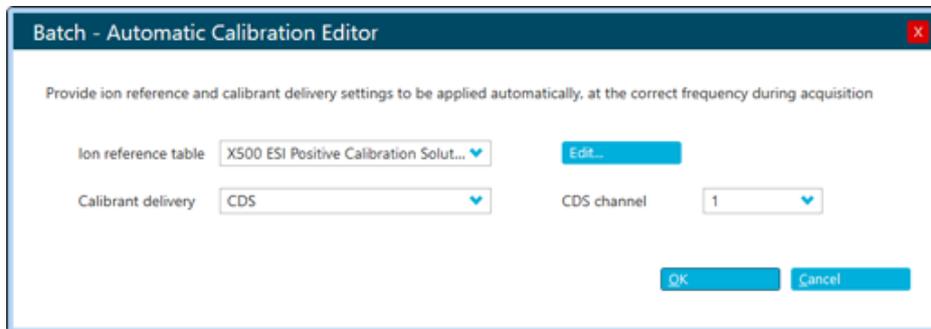
사용자는 적절한 이온 참조 테이블을 선택한 후 CDS 저장소의 내용물과 필요한 특정 교정 이온에 맞게 테이블을 편집할 수 있습니다.

배치 시작 시 자동 교정을 수행하려면 자동 교정 확인란을 선택합니다.

교정은 다음 두 단계로 수행됩니다.

- 교정: 선택한 이온 참조 테이블을 사용한 초기 CDS 교정
- 교정 2단계: CDS 용액의 흔적을 제거하는 평형화

그림 1-7 배치 - 자동 교정 편집기 대화 상자



출력 구성 파일(선택 사항)

EchoExportColumnConfig.xml 파일을 사용하여 결과 텍스트 파일을 작성할 경로, 결과 텍스트 파일에 포함할 열 및 열 순서를 사용자 지정할 수 있습니다.

기본 EchoExportColumnConfig.xml 파일은 SCIEX OS Data/common-project-area 폴더에 있습니다. 설정을 변경하거나, 이 파일을 편집하거나, 프로젝트 폴더 또는 프로젝트의 Quantitation Results 폴더에 있는 파일을 복사한 후 편집할 수 있습니다.

참고:

SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Export Column Configuration 폴더에는 세 개의 템플릿이 있습니다.

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

표 1-6 출력 파일의 요소

요소	설명
Path	결과 텍스트 파일이 저장되는 경로를 식별합니다. 출력 파일의 여러 복사본을 저장하기 위해 여러 경로를 식별할 수 있습니다. 참고: 결과 텍스트 파일의 복사본은 프로젝트의 Quantitation Results 폴더에 저장됩니다.
Order	결과 텍스트 파일에 있는 열의 순서를 식별합니다. 각 열에 고유한 번호를 입력합니다. 첫 번째 열의 경우 0을 입력합니다.
Visible	열이 결과 텍스트 파일에 포함되는지를 식별합니다. 열을 포함하려면 true를 입력합니다. 열을 제외하려면 false를 입력합니다.

시스템 준비

웰마다 서로 다른 이온이 모니터링되는 MRM^{HR} 알고리즘 및 정보 종속 획득(IDA) 실험의 경우 각 웰에 대해 올바른 이온이 모니터링되도록 하려면 액적 방출과 검출 사이에 시간(전송 시간)이 필요합니다. 전송 시간은 데이터 분할이 발생할 때마다 계산되고 저장됩니다.

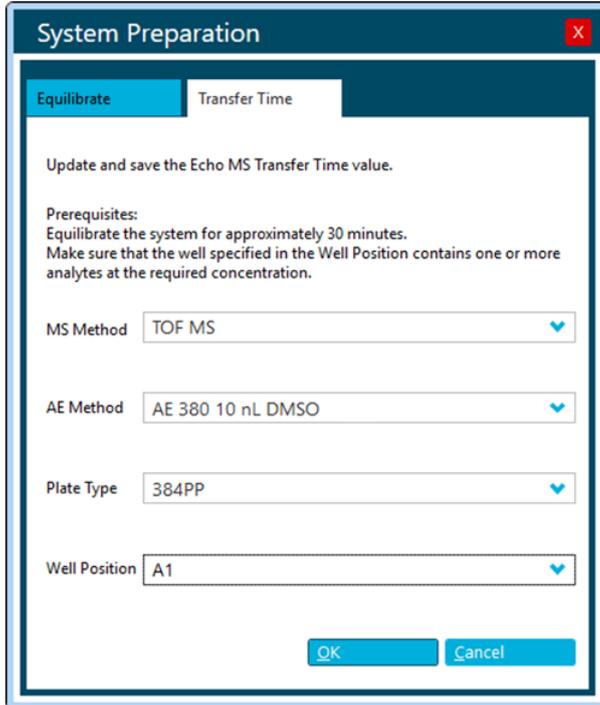
최근에 시스템이 작동되지 않았거나 전극 또는 운반 용매가 변경된 경우 시스템은 짧은 배치를 실행하여 전송 시간을 계산합니다. 전송 시간 교정을 위한 배치가 실행되기 전에 시스템 평형화를 위한 시간이 30분 이상 있어야 합니다.

전송 시간을 교정하려면 다음을 수행합니다.

1. 상태 패널을 엽니다.
2. **Equilibrate**를 클릭합니다.

System Preparation 대화 상자가 열립니다.

그림 1-8 시스템 준비 대화 상자: 전송 시간 탭



3. 전송 시간 탭을 연 후 다음 표를 사용하여 필드를 채웁니다.

표 1-7 전송 시간 탭

필드	설명
MS 방법	활성 프로젝트의 목록에서 MS 방법을 선택합니다. 모든 MS 방법을 사용하여 전송 시간을 조정할 수 있습니다. 일반적으로 TOF MS 방법이 최상의 결과를 제공합니다.
AE 방법	활성 프로젝트의 목록에서 음향 방출 질량 분석계(AEMS) 분석에 사용할 AE 방법을 선택합니다. AE 방법은 전송 시간이 AEMS 분석의 샘플 전송 조건에 맞게 올바르게 교정되도록 합니다. 선택한 방법의 방출량 (nL) 값이 마커 웰의 강도와 거의 동일하게 강한 신호를 제공하는지 확인합니다. 참고: 다른 AE 방법이 사용되기 전에 전송 시간을 조정합니다.
플레이트 유형	Echo® MS 시스템에 적용할 수 있는 플레이트를 선택합니다. 다음 옵션을 사용할 수 있습니다. <ul style="list-style-type: none"> • 384PP • 1536LDV

표 1-7 전송 시간 탭 (계속)

필드	설명
웰 위치	<p>질량 분석계에서 상당한 신호를 제공할 샘플 농도를 포함하는 웰 위치를 식별합니다. 마커 웰이 권장됩니다. 다음 옵션을 사용할 수 있습니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • 384PP: A1 ~ P24 • 1536LDV: A1 ~ AF48

4. 확인을 클릭합니다.

15개의 샘플이 포함된 배치가 자동으로 생성되어 제출됩니다. 배치가 완료되면 새 전송 시간이 계산되어 시스템 기본값으로 저장됩니다.

일반적으로 Echo® MS+ 시스템과 함께 사용되는 배치는 모든 샘플에 대해 하나의 분석 물질 또는 일련의 분석 물질을 획득합니다. 예를 들어 MRM^{HR} 알고리즘 워크플로에서 각 행, 열 또는 웰 위치마다 서로 다른 대상 분석 물질을 지정해야 하는 경우 대상 목록을 사용해야 합니다. TOF MS 데이터의 경우 대상 목록은 각 웰에 대한 관심 분석 물질을 식별하며, 이 정보는 데이터 처리 중에 사용됩니다. MRM^{HR} 알고리즘 및 IDA 실험에서 획득 중에 대상 목록을 사용하여 관심 분석 물질을 식별할 수도 있습니다. 대상 목록의 분석 물질 정보는 획득 중 MS 방법을 업데이트하는 데 사용됩니다.

대상 목록은 csv 파일입니다. 이 파일에는 다음 영역에서 사용할 수 있는 분석 물질 정보가 포함됩니다.

- 원형 단백질 및 대형 생체 분자의 질량 재구성을 위한 분석 물질 정보
- IDA 실험의 포함 목록

대상 목록을 사용하려면 다음 절차를 수행합니다.

- [대상 목록 생성](#)
- [프로젝트 기본 설정 구성](#)
- [템플릿으로 사용할 MS 방법 생성](#)
- [템플릿으로 사용할 처리 방법 생성](#)

대상 목록 생성

대상 목록 파일의 각 행에는 단일 웰 및 화합물에 대한 질량 정보가 포함됩니다. 여러 행에 동일한 화합물이 포함될 수 있습니다. 여러 행에 동일한 웰 위치가 포함될 수 있습니다.

참고: SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Target List 폴더에는 다양한 워크플로에 사용할 수 있는 예시 대상 목록이 있습니다.

- 대상 목록 파일을 csv 형식으로 생성한 다음 해당 파일을 사용할 프로젝트의 폴더에 있는 Batch 하위 폴더에 저장합니다.

참고: 대상 목록 파일에서는 심표 또는 마침표를 소수점 구분 기호로 사용할 수 있습니다. 자동 처리 과정에서 생성된 결과 파일에서는 마침표가 소수점 구분 기호로 사용됩니다.

참고: 필드 이름의 텍스트, 대/소문자 및 띄어쓰기는 다음 표와 동일해야 합니다.

표 2-1 대상 목록 파일의 필드 이름

필드	설명
Well	<p>각 행에서 하나의 웰 위치를 식별합니다(공백 없음). 사용 가능한 값은 다음과 같습니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • 384PP: A1 ~ P24 • 1536LDV: A1 ~ AF48
Transfer Time Tolerance	<p>샘플에 대한 모니터링 창의 시작과 끝을 조정하기 위해 추가할 시간(초)을 식별합니다. 이 매개 변수는 웰 위치마다 서로 다른 전이가 모니터링되는 다음과 같은 워크플로에서 사용됩니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • 웰에 의해 전이가 모니터링되는MRM^{HR} 워크플로 • 웰에 의해 포함 목록이 모니터링되는 IDA 워크플로 <p>전송 시간 허용 오차는 음수일 수 있지만 전송 시간의 절대값은 AE 방법에서 사용되는 방출 간격의 절반을 넘지 않아야 합니다.</p>
Offset	<p>예약된 획득 창이 가능한 피크 위치 주위로 이동할 시간(초)을 식별합니다. 값이 양수이면 창이 오른쪽으로 이동합니다. 값이 음수이면 창이 왼쪽으로 이동합니다.</p>
Group	<p>화합물에 해당하는 그룹 이름을 식별합니다.</p>
Name	<p>화합물의 화합물 ID를 식별합니다.</p>
IS Name	<p>화합물의 정량화 계산에 사용할 내부 표준의 이름을 식별합니다. 각 화합물에 하나의 내부 표준만 사용할 수 있습니다.</p>
IS	<p>화합물이 내부 표준인지 여부를 식별합니다. 사용 가능한 값은 다음과 같습니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • True • False
Formula	<p>화합물의 원소 수식을 식별합니다. 펩타이드에는 단일 문자 아미노산과 변형이 있을 수 있습니다. 특정 동위원소를 식별하려면 동위원소의 중량을 기호 앞에 대괄호로 묶어 포함합니다(예: [2H], [18O] 또는 [15N]). 예를 들어 중수(D2O)는 [2H]2O로 식별합니다.</p>
Adduct/Charge	<p>수식이 지정된 경우 부가물 및 대전 상태를 식별합니다(예: [M+H]⁺ 또는 [M+H]⁻). SCIEX OS 소프트웨어의 분석 작업 영역에서 지원되는 모든 부가물이 대상 목록에서 지원됩니다.</p>
Comment	<p>행 항목에 대한 추가 정보를 제공합니다. 최대 128자를 사용할 수 있습니다.</p>
Precursor Mass (Da)	<p>전구체 이온의 질량을 식별합니다. 사용 가능한 범위는 5~2,250입니다(소수점 이하 최대 5자리).</p>

표 2-1 대상 목록 파일의 필드 이름 (계속)

필드	설명
TOF Start Mass (Da)	TOF MS/MS 실험을 위한 목표 질량 범위의 시작 질량을 식별합니다. TOF Start Mass (Da) 은 TOF Stop Mass (Da) 보다 작아야 합니다. 이 매개 변수는 템플릿으로 사용할 MS 방법에서 TOF 시작/중지 질량 적용을 선택한 경우에 사용됩니다.
TOF Stop Mass (Da)	TOF MS/MS 실험을 위한 목표 질량 범위의 중지 질량을 식별합니다. TOF Stop Mass (Da) 은 TOF Start Mass (Da) 보다 커야 합니다. 이 매개 변수는 템플릿으로 사용할 MS 방법에서 TOF 시작/중지 질량 적용을 선택한 경우에 사용됩니다.
Fragment Mass (Da)	처리 방법에 사용할 단편 질량을 입력합니다. TOF MS/MS 방법의 기본 스캔 범위는 20Da(지정한 단편 질량에서 ± 10Da)입니다. 참고: 템플릿으로 사용할 MS 방법에서 TOF 시작/중지 질량 적용을 선택한 경우 대상 목록에 설정된 TOF Start Mass (Da) 및 TOF Stop Mass (Da) 이 TOF MS/MS 스캔 범위로 사용됩니다.
Accumulation Time (sec)	총 스캔 시간을 최적화하기 위한 대상 전이 축적 시간을 조정합니다. 축적 시간은 질량 분석계가 하나의 TOF MS/MS 데이터 요소를 획득하는 데 필요한 시간입니다. 축적 시간은 피크의 데이터 요소 수에 영향을 줍니다. 적절한 범위는 0.005 ~ 50입니다. 일반적인 값은 0.01 ~ 0.100입니다.
Declustering potential (V)	이온 클러스터의 형성을 최소화하기 위해 오리피스에 적용될 전압을 식별합니다. 전이 테이블의 각 행에 대해 디클러스터링 전위(DP)를 지정할 수 있습니다. 적절한 범위는 0 ~ 300입니다. 참고: MS 방법에서는 DP 확산(V)을 설정합니다.
Collision Energy (V)	충돌 셀에 적용될 전압을 식별합니다. 일반적으로 단편의 강도를 최대화하기 위해 충돌 에너지(CE)가 최적화됩니다. 적절한 범위는 0 ~ 150입니다.
CE Spread (V)	CE를 점진적으로 늘리기 위해 사용할 값을 식별합니다. Collision Energy (V) 매개 변수와 CE 확산(CES) 매개 변수를 함께 사용하면 생성 이온 스캔에서 전구체 이온에 적용되는 CE를 제어할 수 있습니다. 예를 들어 양극성의 경우 CE는 CE - CES부터 CE + CES까지 점진적으로 늘어납니다. 적절한 범위는 0 ~ 150입니다.

표 2-1 대상 목록 파일의 필드 이름 (계속)

필드	설명
Fragmentation Mode	<p>다음 단편화 모드 중 하나를 식별합니다.</p> <ul style="list-style-type: none"> • CID: 충돌 유도 분리(CID) 모드에서는 Q2 충돌 셀에서 가스 분자와의 충돌로 인한 전구체 이온의 진동 여기 작용에 의해 단편 이온이 생성됩니다. • EAD: 전자 활성화 분리(EAD) 모드에서는 EAD 셀의 전구체 이온이 전자에 노출되어 전구체 이온이 단편 이온으로 분리됩니다. • EAD(기본 트래핑): 기본 트래핑은 반응 역학의 학술 연구에 가장 적절한 EAD 모드입니다. EAD 모드는 로드 시간 및 반응 시간(전자 조사 지속 시간) 단계를 추가적으로 제어합니다. EAD 모드에서는 이러한 단계가 동시에 발생하도록 최적화되어 감도가 약 2배 향상됩니다. EAD(기본 트래핑) 모드에서는 이러한 단계가 연속적으로 수행됩니다. 선택된 전구체가 지정된 로드 시간 동안 EAD 셀에 유입되고, 지정된 반응 시간 동안 전자 빔이 적용된 후 EAD 셀에서 생성 이온이 방출됩니다. <hr/> <p>팁! 반응 시간을 정확하고 예측 가능하게 제어해야 하는 경우 EAD(기본 트래핑) 모드를 사용합니다.</p>
Electron KE (eV)	<p>조사 전자 빔의 전자 운동 에너지(KE)를 식별합니다. 전자 KE는 전자 활성화 분리(EAD) 셀의 전자 소스와 전자 활성화(EA) 막대 전극 간 DC 바이어스와 동일합니다. 이 매개 변수는 Fragmentation Mode가 EAD 또는 EAD (conventional trapping)로 설정된 경우에 적용할 수 있습니다.</p>
ETC(%)	<p>ETC(전자 전송 계수)를 식별합니다. 이 매개 변수는 EAD 셀로 유입되는 전자의 비율을 제어합니다. 범위는 0% ~100%입니다. 이 매개 변수는 Fragmentation Mode가 EAD 또는 EAD (conventional trapping)로 설정된 경우에 적용할 수 있습니다.</p> <hr/> <p>팁! 분석되는 전구체 종의 유형과 획득되는 생성 이온을 사용하여 EAD 반응 유형을 제어하려면 이 매개 변수를 사용합니다.</p>
EAD RF(Da)	<p>0Da에서 300Da 사이의 값을 식별합니다. 이 매개 변수는 RF 수준을 제어하여 EAD 셀의 전구체 및 단편 이온을 유지합니다.</p> <hr/> <p>참고: m/z가 높은 생성 이온을 검출하려면 EAD RF (Da)를 늘립니다. m/z가 낮은 생성 이온의 검출은 감소할 수 있습니다.</p>
Reaction time (ms)	<p>전자 조사의 반응 시간을 식별합니다. EAD 모드에서 이 매개 변수는 로드 시간도 제어합니다.</p> <hr/> <p>팁! 전자 빔 전류를 최적화한 후에도 전구체 소비가 충분하지 않으면 반응 시간을 늘립니다.</p>

표 2-1 대상 목록 파일의 필드 이름 (계속)

필드	설명
Time Bins to Sum	합산할 데이터 요소의 수를 식별합니다. 소분자 또는 펩타이드의 범위는 4 ~ 6입니다. 원형 단백질 분석(> 20kDa)의 시작 값은 40입니다.
Channel 1 ~ Channel 4	ADC(아날로그-디지털 변환기) 채널을 식별합니다. 각 채널에서 이온 수를 계산합니다. 4개의 채널을 모두 선택하면(기본값) 4개 채널이 모두 합산되어 총 이온 수가 계산됩니다.
Expected MW (Da)	질량 재구성 워크플로: 구성 요소에 대한 예상 분자량(Da)을 식별합니다.
m/z Range for XIC Start (Da)	질량 재구성 워크플로: XIC 범위의 시작 질량을 식별합니다.
m/z Range for XIC Stop (Da)	질량 재구성 워크플로: XIC 범위의 끝 질량을 식별합니다.
Reconstruction Start Mass (Da)	질량 재구성 워크플로: 재구성이 시작되는 질량(Da)을 식별합니다.
Reconstruction Stop Mass (Da)	질량 재구성 워크플로: 재구성이 중지되는 질량(Da)을 식별합니다.

프로젝트 기본 설정 구성

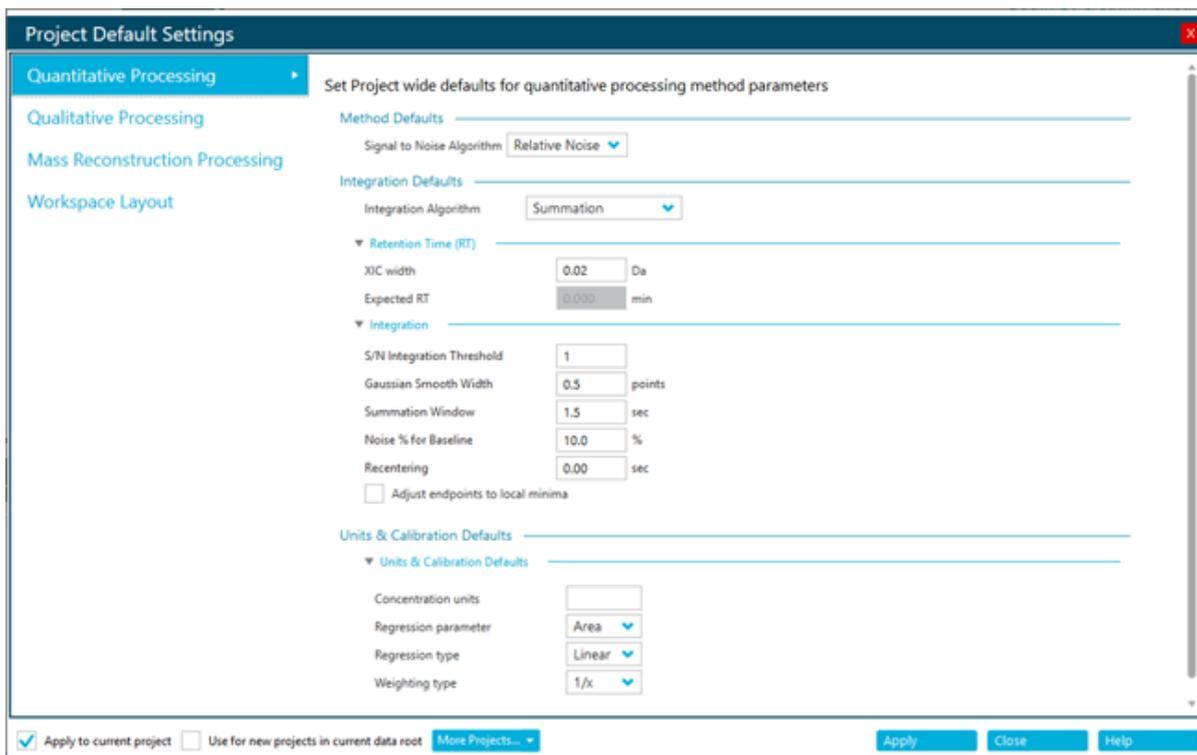
자동 처리 중에 소프트웨어는 프로젝트의 기본 설정에서 처리 방법 매개 변수(예: **XIC 폭(Da)**, 가우스 다듬기 폭(포인트) 및 기준선의 노이즈 **% (%)**)를 가져옵니다. 처리 방법을 자동 처리를 위한 템플릿으로 사용할 경우에는 프로젝트 기본 설정을 구성하여 전체 분석에서 피크 통합을 최적화합니다. AE 방법의 각 방출량과 피크 폭마다 서로 다른 처리 매개 변수 값이 필요합니다.

프로젝트 기본 설정의 정보는 템플릿으로 사용할 처리 방법에 저장됩니다.

참고: 분석 작업 영역에서 프로젝트 기본 설정을 변경하면 저장된 처리 방법에 변경 내용이 사용되지 않습니다. 변경 내용을 적용하려면 프로젝트 기본 설정을 업데이트한 다음 새 처리 방법을 생성합니다. 새 처리 방법에는 업데이트된 프로젝트 기본 설정이 사용됩니다. 자동 처리에는 이 새 처리 방법을 사용합니다.

1. 분석 작업 영역에서 프로젝트 > 프로젝트 기본 설정을 클릭합니다.

그림 2-1 정량적 처리 창



2. 매개 변수를 구성합니다.
매개 변수에 대한 자세한 설명은 *SCIEX OS* 도움말 시스템 문서를 참조하십시오.
3. 적용을 클릭합니다.
4. 닫기를 클릭합니다.

템플릿으로 사용할 MS 방법 생성

- MS 방법 작업 영역에서 템플릿으로 사용할 MS 방법을 생성합니다. 자세한 정보는 *SCIEX OS* 도움말 시스템 문서를 참조하십시오.
 - TOF MS 실험의 경우, 적절한 소스 및 가스 매개 변수와 TOF MS 실험 매개 변수가 있는 MS 방법을 생성합니다.
 - MRM^{HR} 실험의 경우, 적절한 소스 및 가스 매개 변수, TOF MS 실험 매개 변수 및 TOF MS/MS 실험 매개 변수(예: Q1 분해능, ITC 및 Zeno 펄싱 설정)가 있는 MS 방법을 생성합니다.

참고: 질량 테이블 정보(예: 화합물 ID, 그룹 이름, 전구체 이온, **TOF** 시작 질량(**Da**) 및 **TOF** 중지 질량(**Da**) 또는 단편 이온(**Da**), 축적 시간(초), 디클러스터링 전위(**V**), 충돌 에너지(**V**) 및 **CE** 확산(**V**))는 대상 목록 파일에 포함되어 있습니다. 이 정보는 템플릿으로 사용할 MS 방법의 정보를 대체하며, 따라서 TOF MS 실험을 위한 웹 기반 처리 방법과 TOF MS/MS 실험을 위한 획득 및 처리 방법을 제공합니다.

템플릿으로 사용할 처리 방법 생성

대상 목록 파일의 정보와 프로젝트 기본 설정은 템플릿으로 사용되는 처리 방법의 정보를 대체합니다. 자세한 정보는 [프로젝트 기본 설정 구성](#) 섹션을 참조하십시오.

- 분석 작업 영역에서 처리 방법을 생성합니다. 자세한 정보는 *SCIEX OS* 도움말 시스템 문서를 참조하십시오.

이 절차를 사용하여 Echo® MS+ 시스템에서 획득한 음향 방출(AE) 데이터를 열 지도로 시각화할 수 있습니다.

1. 탐색기 작업 영역을 엽니다.
2. 파일 > **Echo MS** 결과 파일 열기를 클릭합니다.
열기 대화 상자가 열립니다. 여기에는 활성 프로젝트의 Quantitation Results 폴더가 표시됩니다.
3. AE 데이터가 포함된 결과 텍스트 파일을 찾은 후 열기를 클릭합니다.
4. (선택 사항) 창의 표시 옵션을 구성하려면  (설정)을 클릭하고 설정을 사용자 지정한 다음 저장 후 닫기를 클릭합니다.
5. (선택 사항) 적절한 필터링 옵션을 선택합니다.
6. 열 필드에서 표시할 결과 텍스트 파일의 열을 선택합니다.
목록에는 결과 텍스트 파일의 모든 열이 포함됩니다.

팁! 출력 구성 파일을 구성하여 결과 텍스트 파일에 포함할 필드를 선택합니다. 자세한 정보는 [출력 구성 파일\(선택 사항\)](#) 섹션을 참조하십시오.

7. (선택 사항) 숫자 열의 경우 범위를 설정합니다. 다음 옵션을 사용할 수 있습니다.
 - 자동: 이 옵션을 선택하면 데이터의 가장 낮은 값이 색상 맵 왼쪽의 색상으로 표시되고 데이터의 가장 높은 값이 색상 맵 오른쪽의 색상으로 표시됩니다.
 - 기본값: 기본 범위를 사용할 수 있는 경우 기본 범위를 사용하려면 이 옵션을 선택합니다. 기본 범위를 식별하려면 먼저 수동 범위를 설정한 다음 기본값으로 저장을 클릭합니다.

참고: 사용자가 기본 범위를 설정하면 현재 프로젝트의 모든 결과 텍스트 파일에 기본 범위가 사용됩니다.

- 수동: 수동 범위를 설정하려면 이 옵션을 선택합니다. 범위의 하한값보다 작은 모든 값은 색상 맵 왼쪽의 색상으로 표시됩니다. 범위의 상한값보다 큰 모든 값은 색상 맵 오른쪽의 색상으로 표시됩니다.

참고: 과학적 표기법 형식으로 입력된 값은 10진수 형식으로 변경됩니다.

8. 웰에 대한 결과를 표시하려면 해당 웰을 클릭합니다.
9. 데이터를 분석 작업 영역에서 열려면  (**Analytics**에서 열기)를 클릭합니다.

참고: 관련 파일 정보를 찾을 수 없으면 Analytics에서 열기 대화 상자가 열립니다. 이 대화 상자의 필드를 모두 채운 후 열기를 클릭합니다.

데이터 시각화

작업 영역이 열리는 데는 최대 1분이 걸릴 수 있습니다. 필요한 시간은 결과 텍스트 파일의 크기와 관련이 있습니다.

문의하기

주소



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

SCIEX 본사

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

고객 교육

- 글로벌: sciex.com/contact-us

온라인 학습 센터

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

SCIEX 지원

SCIEX와 전 세계 대리점은 숙련된 서비스 및 기술 전문가를 보유하고 있습니다. 이들은 시스템에 대한 질문이나 발생할 수 있는 기술적 문제에 대한 답변을 제공할 수 있습니다. 자세한 정보는 SCIEX 웹 사이트(sciex.com)를 방문하거나 다음 링크 중 하나를 사용하여 문의하십시오.

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

사이버 보안

SCIEX 제품의 사이버 보안에 대한 최신 지침은 sciex.com/productsecurity에서 확인할 수 있습니다.

문서

이 문서는 이전 버전의 모든 문서를 대체합니다.

소프트웨어 제품 문서를 찾으려면 릴리스 노트 또는 소프트웨어와 함께 제공되는 소프트웨어 설치 안내서를 참조하십시오.

문의하기

하드웨어 제품 문서를 찾으려면 시스템 또는 구성품과 함께 제공되는 문서를 참조하십시오.

SCIEX 웹 사이트(sciex.com/customer-documents)에서 최신 버전의 문서를 확인할 수 있습니다.

참고: 이 문서의 무료 인쇄 버전을 요청하려면 sciex.com/contact-us에 문의하십시오.
