

Guia de recursos

Software SCIEX OS

para o sistema Echo® MS+ com o sistema ZenoTOF 7600/7600+



Este documento é fornecido aos clientes que compraram um equipamento SCIEX para uso na operação de tal equipamento. Este documento é protegido por direitos autorais e qualquer reprodução deste documento ou de qualquer parte do mesmo é estritamente proibida, exceto quando houver autorização por escrito da SCIEX.

O software que pode ser descrito neste documento é fornecido sob um contrato de licença. É contra a lei copiar, modificar ou distribuir o software em qualquer meio de comunicação, exceto se permitido especificamente no contrato de licença. Além disso, o contrato de licença pode proibir que o software seja desmontado, passe por engenharia reversa ou descompilado para qualquer finalidade. As garantias são conforme definidas em tal documento.

Partes deste documento podem fazer referência a outros fabricantes e/ou a seus produtos, podendo conter peças cujos nomes estejam registrados como marcas registradas e/ou funcionem como marcas registradas dos seus respectivos proprietários. Qualquer uso é destinado apenas para designar estes produtos do fabricante como fornecidos pela SCIEX para incorporação em seu equipamento e não implica em qualquer direito e/ou licença para usar ou permitir que outros usem tais nomes de produto, seus e/ou do fabricante como marcas registradas.

As garantias da SCIEX estão limitadas a estas garantias expressas fornecidas no momento da venda ou da licença de seus produtos e são representações, garantias e obrigações únicas e exclusivas da SCIEX. A Sciex não oferece nenhuma outra garantia de nenhum tipo, expressa ou implícita, incluindo, entre outras, garantias de comercialização ou adequação para um propósito particular, decorrentes de um estatuto ou da lei, ou de uma negociação ou utilização comercial expressamente divulgada, e não assume nenhuma responsabilidade ou obrigação contingente, incluindo danos indiretos ou consequentes, para qualquer uso pelo comprador ou por quaisquer circunstâncias adversas decorrentes.

Produto destinado apenas para pesquisa científica. Não destinado ao uso em procedimentos diagnósticos.

As marcas comerciais e/ou marcas registradas mencionadas neste documento, incluindo as logos associadas, são de propriedade da AB Sciex Pte. Ltd., ou de seus respectivos proprietários, nos Estados Unidos e/ou em outros países.

AB Sciex™ está sendo usada sob licença.

Echo, Echo MS e Echo MS+ são marcas comerciais ou marcas comerciais registradas da Labcyte, Inc. nos Estados Unidos e em outros países e estão sendo usadas mediante licença.

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

Índice

Capítulo 1: Aquisição com um sistema Echo® MS+	4
Método de MS	4
Parâmetros de fonte e gás	4
Parâmetros para experimentos de TOF MS	5
Parâmetros para experimentos de algoritmo MRM ^{HR}	7
Método de AE	8
Batch	10
Calibração automática (opcional)	12
Arquivo de configurações de saída (opcional)	13
Preparação do sistema	14
Capítulo 2: Listas de destino	17
Criar uma lista de destino	17
Configurar Configurações padrão do projeto	22
Criar um método de MS que será usado como modelo	23
Criar um método de processamento que será usado como modelo	24
Capítulo 3: Visualização de dados	25
Entre em contato conosco	27
Endereços	27
Treinamento do consumidor	27
Centro de aprendizagem online	27
Suporte da SCIEX	27
Segurança cibernética	27
Documentação	27

Aquisição com um sistema Echo® MS+

1

Esta seção fornece informações sobre o uso do software SCIEX OS para adquirir dados de espectrometria de massa de ejeção acústica (AEMS). A seção fornece descrições do método de MS e dos parâmetros do método de AE, lotes, calibração de lotes e preparação do sistema.

Método de MS

Parâmetros de fonte e gás

A sonda Echo® MS na fonte de íons OptiFlow Turbo V opera com a interface de porta aberta (OPI) no sistema Echo® MS+ para aspirar, nebulizar e ionizar amostras e, em seguida, fornecê-las ao espectrômetro de massa ZenoTOF 7600. É recomendado usar um intervalo pequeno de parâmetros de fonte e gás nesse fluxo de trabalho.

Figura 1-1: Parâmetros de fonte e gás

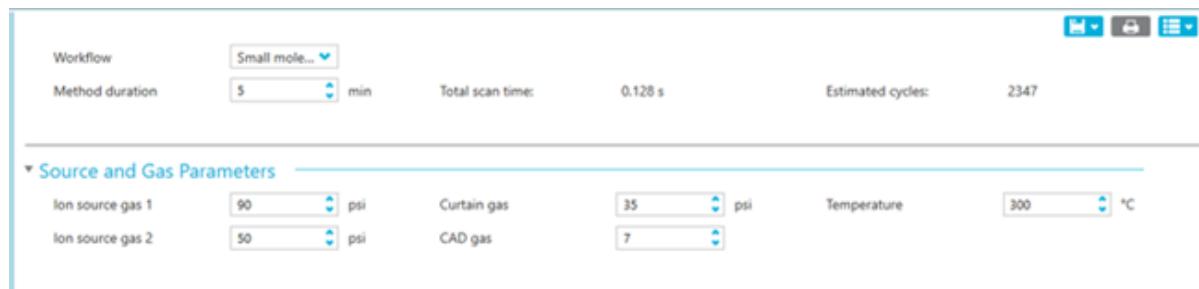


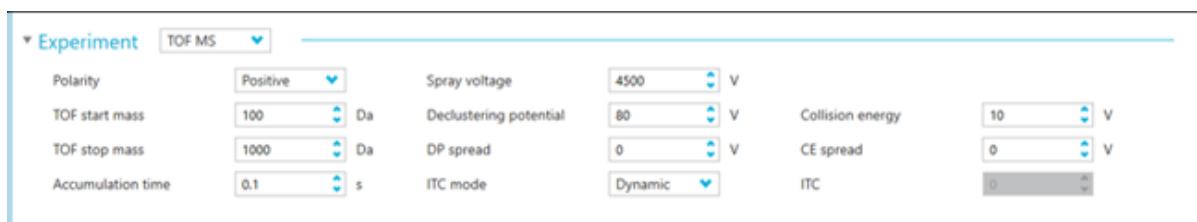
Tabela 1-1: Parâmetros da fonte e gás

Parâmetro	Comentários
Gás 1 da fonte de íons (psi)	Defina a pressão do gás de fonte de íons 1. O gás de fonte de íons 1 arrasta o solvente carregador da porta OPI da fonte de íons. Defina como 90. Valores menores podem causar vazamentos na OPI.
Gás 2 da fonte de íons (psi)	Defina a pressão do gás de fonte de íons 2. Esse gás dissolve o solvente carregador na fonte de íons. Otimize o valor de Gás 2 da fonte de íons (psi) para a composição e a taxa de vazão do solvente carregador. O valor inicial recomendado é 50.
Gás de cortina (psi)	Defina a pressão do gás da interface Curtain Gas. Esse gás ajuda a evitar a contaminação da ótica dos íons. Use o valor mais alto possível que não reduza a sensibilidade. Valores mais altos reduzem a contaminação com uma pequena redução na intensidade do sinal.

Tabela 1-1: Parâmetros da fonte e gás (continuação)

Parâmetro	Comentários
Gás CAD	Defina a pressão na célula de colisão. Para experimentos de TOF MS, defina como 7 para o resfriamento de colisão dos íons. Para experimentos de TOF MS/MS, otimize o valor de Gás CAD para fragmentação dos íons de analito.
Temperatura (°C)	Otimize a temperatura da composição e taxa de vazão do solvente carregador. O valor inicial recomendado é 300. Configurações de temperatura maiores que 400 não são recomendadas. Altas temperaturas podem reduzir a vida do eletrodo e também causar menor sensibilidade em compostos com labilidade térmica.

Parâmetros para experimentos de TOF MS

Figura 1-2: Parâmetros de TOF MS**Tabela 1-2: Parâmetros de TOF MS**

Parâmetro	Comentários
Polaridade	Identifique o modo de ionização. Selecione Positivo ou Negativo . A troca de polaridade não está disponível.
Massa inicial TOF (Da)	Identifique a massa no início do intervalo de massa de destino. Massa inicial TOF (Da) precisa ser menor que Massa de parada TOF (Da) .
Massa de parada TOF (Da)	Identifique a massa no fim do intervalo de massa de destino. Massa de parada TOF (Da) precisa ser maior que Massa inicial TOF (Da) .
Tempo de acumulação (s)	Identifique o tempo necessário para o espectrômetro de massa adquirir um espetro de TOF MS. O valor inicial recomendado é 0,08.
Tensão do spray (V)	Identifique a tensão que será aplicada ao eletrodo da sonda. Otimize a tensão do spray da composição e a taxa de vazão do solvente carregador. Para maximizar a vida do eletrodo, não use um valor maior que 4500.
Potencial de desagregação (V)	Identifique a tensão que será aplicada ao orifício para minimizar a formação de agrupamentos de íons. Diferentes compostos podem ter diferentes valores ideais de potencial de desagregação (DP). O valor de DP é usado no intervalo de massa completo.

Aquisição com um sistema Echo® MS+

Tabela 1-2: Parâmetros de TOF MS (continuação)

Parâmetro	Comentários
Faixa de amplitude da DP (V)	Insira um valor para a amplitude do DP (DPS). Em conjunto com o Potencial de desagregação (V) , esse parâmetro controla o DP aplicado aos íons. O DP aumenta gradualmente de um valor baixo de DP – DPS para um valor alto de DP + DPS.
Modo ITC	Selecione Dinâmico ou Corrigido . No modo dinâmico, o fluxo de íons é monitorado continuamente e ajustado automaticamente para evitar danos ao detector. No modo fixo, o usuário especifica um valor no campo ITC . O modo dinâmico adiciona 27 ms ao tempo do ciclo para monitorar o fluxo de íons antes do início do experimento. Nota: O modo dinâmico está disponível somente em experimentos TOF MS.
Energia de colisão (V)	Identifique a tensão que será aplicada à célula de colisão. Em experimentos TOF MS, um valor baixo é usado para mover íons na célula de colisão sem fragmentação.
Faixa de amplitude da CE (V)	Esse parâmetro não costuma ser usado em experimentos de TOF MS.
ITC	Identifique a porcentagem de íons que serão inseridos no espectrômetro de massa. Quando o modo fixo estiver em uso, monitore a intensidade de íons. Inicie com um valor baixo e aumente o valor em pequenos incrementos até que a força do sinal alcance o mínimo obrigatório. Se a intensidade de íons esperada for desconhecida, use o modo dinâmico. A intensidade de íons alta consistente ou períodos curtos de intensidade de íons muito alta podem causar danos permanentes ao detector. Nota: Esse parâmetro é aplicável quando Modo ITC está definido como Corrigido .

Parâmetros para experimentos de algoritmo MRM^{HR}

Figura 1-3: Parâmetros do algoritmo MRM^{HR}

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	216.10105	92.50000	112.50000	0.0200	80	35	0
*								

Tabela 1-3: Parâmetros do algoritmo MRM^{HR}

Parâmetro	Comentários
Resolução Q1	Identifique a resolução do quadrupolo Q1. Selecione Unidade , Abrir , Baixa ou Alta . Unidade fornece uma seleção de massa Q1 de aproximadamente $\pm 0,7$ Da. Abrir e Baixa fornecem uma seleção de massa Q1 mais ampla. Alta fornece uma seleção de massa Q1 menos ampla.
ITC	Identifique a porcentagem de íons que serão inseridos no espectrômetro de massa. Em experimentos de algoritmo MRM ^{HR} , esse parâmetro costuma ser definido como 100 para maximizar a sensibilidade de analitos.
Pulsação Zeno	Selecione para habilitar a pulsação Zeno. Pulsação Zeno é um recurso exclusivo do espectrômetro de massa ZenoTOF 7600/7600+. Quando ativado, esse recurso aprimora o ciclo atual e aumenta a intensidade do sinal.
Aplicar massa inicial/de parada TOF	Selecione para definir o intervalo de massa de TOF manualmente. Se esta opção não for selecionada, será usado o intervalo de massa padrão de 20 Da focado no íon fragmento especificado.
Massa inicial TOF (Da)	Identifique a massa no início do intervalo de massa de destino. Massa inicial TOF (Da) precisa ser menor que Massa de parada TOF (Da) .
Massa de parada TOF (Da)	Identifique a massa no fim do intervalo de massa de destino. Massa de parada TOF (Da) precisa ser maior que Massa inicial TOF (Da) .
Tempo de acumulação (s)	Identifique o tempo necessário para o espectrômetro de massa adquirir um espectro de TOF MS/MS. O valor inicial recomendado é 0,01.
Potencial de desagregação (V)	Identifique a tensão que será aplicada ao orifício para minimizar a formação de agrupamentos de íons. Em experimentos de algoritmo MRM ^{HR} , o potencial de desagrupamento é identificado para cada linha na tabela de transição.

Aquisição com um sistema Echo® MS+

Tabela 1-3: Parâmetros do algoritmo MRM^{HR} (continuação)

Parâmetro	Comentários
Energia de colisão (V)	Identifique a tensão que será aplicada à célula de colisão. Em experimentos TOF MS/MS e MRM ^{HR} , essa tensão divide os íons precursores em fragmentos. Optimize a energia de colisão (CE) para maximizar a intensidade de um fragmento.
Faixa de amplitude da CE (V)	Identifique a amplitude de CE (CES). Em conjunto com o parâmetro Energia de colisão (V) , esse parâmetro controla a CE aplicada ao íon precursor em uma varredura de íon de produto. A CE aumenta gradualmente de um valor baixo (CE – CES na polaridade positiva) para um valor alto (CE + CES na polaridade positiva).

Método de AE

O método de ejeção acústica (AE) fornece as configurações usadas para a operação do sistema Echo® MS+.

Figura 1-4: Método de AE: Standard

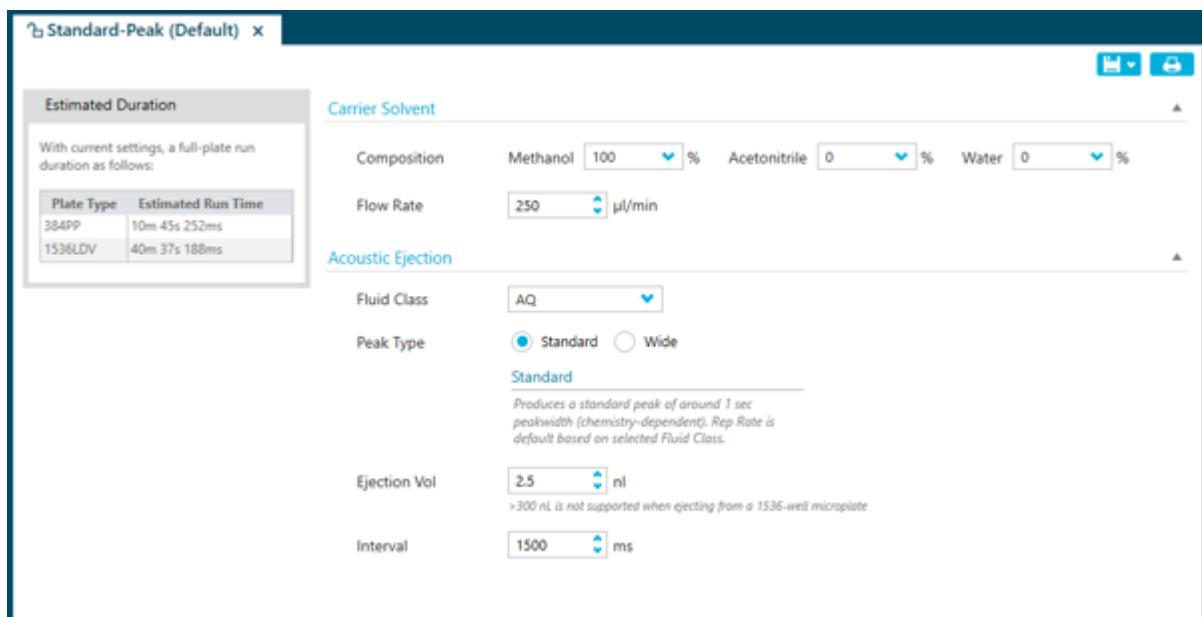
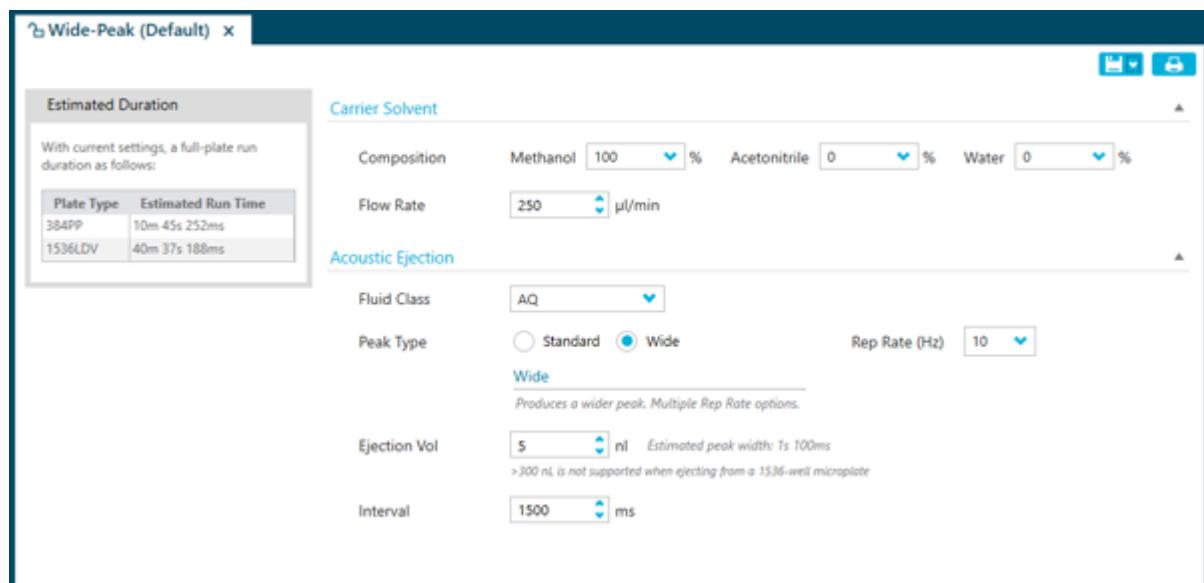


Figura 1-5: Método de AE: Wide**Tabela 1-4: Parâmetros do método de AE**

Parâmetro	Descrição
Duração estimada	Mostra a duração esperada do tempo de execução da placa, calculada com Intervalo (ms) e outros fatores que afetam o tempo de execução. A duração estimada é fornecida para placas de 384 e 1536 poços. O cálculo não inclui o tempo de equilíbrio ou calibração em lote.
Solvente carregador	Para identificar a composição do solvente carregador, selecione a porcentagem de Metanol, Acetonitrila e Água .
Vazão (µL/min)	Otimize a taxa de vazão no sistema. O eletrodo e a composição do solvente carregador afetam a taxa de vazão ideal. Se o eletrodo ou a composição do solvente carregador forem alteradas, esse valor deve ser otimizado novamente.
Classe do fluido	Selecione a matriz de amostra que está no poço de amostra. Diferentes opções estão disponíveis para diferentes tipos de placa. As opções incluem: <ul style="list-style-type: none"> AQ (aquoso): usado para soluções aquosas. SP (fase de surfactante): usado para soluções com baixa tensão superficial, como soluções aquosas com surfactantes (como Triton X-100) ou misturas orgânicas e aquosas. Essa opção está disponível para placas de 384 poços. Não é possível usar esta opção com placas de 1536 poços devido à evaporação de amostras que ocorre durante a análise. DMSO (sulfóxido de dimetilo): usado para solventes que contenham entre 70% e 100% de DMSO.

Aquisição com um sistema Echo® MS+

Tabela 1-4: Parâmetros do método de AE (continuação)

Parâmetro	Descrição
Tipo de pico	<p>Selecione o modo Padrão ou Largura.</p> <ul style="list-style-type: none">Padrão: o sistema de AE ejeta gotículas muito rapidamente para criar um pico estreito.Largura: o usuário pode identificar a taxa de ejeção de gotículas para criar picos mais largos do que no modo padrão. Picos mais largos fornecem mais pontos de dados no pico e são compatíveis com tempos de ciclo mais longos no método de MS. O modo de picos largos é aplicável apenas a ejeções de várias gotículas.
Vol da ejeção (nL)	<p>Identifique o volume total da amostra que será despejado pelo sistema Echo® MS+, em incrementos de 2,5 nL.</p> <p>Nota: O sistema ejeta gotículas de 2,5 nL.</p> <p>Quando Tipo de pico for Largura, o valor mínimo de Vol da ejeção (nL) será 5.</p>
Intervalo (ms)	Identifique o tempo entre as ejeções de amostra. O software usa Taxa de repetição (Hz) e Vol da ejeção (nL) para calcular um Intervalo (ms) mínimo.
Taxa de repetição (Hz)	Identifique a taxa de repetição de ejeção de gotículas (rep), em Hz. Vol da ejeção (nL) e Taxa de repetição (Hz) controlam as larguras dos picos.

Batch

Figura 1-6: Batch

The screenshot shows a software interface with a blue header bar containing icons for file operations (New, Open, Save, Print, etc.) and a status bar indicating 'Ready'. Below the header is a toolbar with buttons for 'Discard Rules', 'Auto Calibrate', 'Data Unload', and 'Submit'. The main area is a table titled 'Example Batch (Echo...)'. The table has columns for Sample Name, MSI Method, All Method, Plate Type, Well Position, Sample Type, Data File, Processing Method, Results File, Marker Well, and Target List. There are 10 rows of data, each corresponding to a sample named 'Name 1' through 'Name 10'. The 'MSI Method' column shows 'TOF MS Example' for all samples. The 'All Method' column shows 'Example All Method' for all samples. The 'Plate Type' column shows '384PP' for all samples. The 'Well Position' column shows positions A1, A2, A3, A4, A5, A6, A7, A8, A9, and A10. The 'Sample Type' column shows 'Standard' for all samples. The 'Data File' column shows 'EchoMS Quantitation' for all samples. The 'Processing Method' column shows 'Results File for TOFMS' for all samples. The 'Results File' column shows 'Results File for TOFMS' for all samples. The 'Marker Well' column shows 'None' for all samples. The 'Target List' column shows 'EchoMS Target List' for all samples.

Nota: As colunas a seguir não se aplicam à análise de dados adquiridos com um sistema Echo® MS+ e podem ser ocultadas com a opção **Visualizar: Tipo de rack, Posição do rack, Posição da placa e Volume de injeção (µL)**.

Tabela 1-5: Colunas em lote

Nome da coluna	Descrição	Requisitos para valores dos campos
Nome da amostra	Nome da amostra	<p>Menos de 252 caracteres.</p> <p>Nota: Durante a divisão dos dados pós-aquisição, a posição do poço é adicionada ao nome da amostra: por exemplo, A1-Sample1.</p>
Método de MS	Nome do método de MS	<p>Selecione um método de MS na lista do projeto ativo.</p> <p>Nota: O mesmo método de MS deve ser usado em todas as amostras do lote.</p>
Método de AE	Nome do método de AE	<p>Selecione um método de AE na lista do projeto ativo.</p> <p>Nota: O mesmo método de AE deve ser usado em todas as amostras do lote.</p>
Tipo de placa	384PP ou 1536LDV	Só é possível usar um Tipo de placa em um lote. No sistema Echo® MS+, só é possível usar placas Beckman Life Sciences qualificadas para uso com um sistema Echo® MS+.
Posição do poço	384PP: A1 a P24 1536LDV: A1 a AF48	Só é possível criar uma amostra de Posição do poço uma só vez em cada linha.
Tipo da amostra	Espaço em branco, Padrão, Espaço em branco duplo, Controle de qualidade, Solvente, e Desconhecido	As informações de tipo de amostra são salvas no arquivo de dados e podem ser usadas durante o processamento.
Arquivo de dados	O nome do arquivo onde os dados adquiridos são salvos	<p>Todos os dados adquiridos por um lote devem ser mantidos no mesmo Arquivo de dados.</p> <p>Nota: O mesmo arquivo de dados deve ser usado em todas as amostras do lote.</p>

Aquisição com um sistema Echo® MS+

Tabela 1-5: Colunas em lote (continuação)

Nome da coluna	Descrição	Requisitos para valores dos campos
Método de processamento	O nome do método que será usado para o processamento automático após a conclusão da aquisição.	O método de processamento deve ser compatível com o método de MS usado para adquirir dados. Nota: O mesmo método de processamento deve ser usado em todas as amostras do lote.
Arquivo de resultados	O nome do arquivo onde os resultados processados são salvos.	Os arquivos de resultado são mantidos na subpasta <code>Results</code> do projeto ativo. Nota: O mesmo arquivo de resultados deve ser usado em todas as amostras do lote. Nota: Use um arquivo de resultados diferente para cada lote. Não recomendamos usar os arquivos de resultados mais de uma vez. Nota: Se um arquivo de lista de destino for usado, o arquivo de resultados será salvo no formato <code>.txt</code> . Se um arquivo de lista de destino não for usado, serão salvos dois arquivos de resultados, nos formatos <code>.txt</code> e <code>.qsession</code> .
Poço do marcador	Poço do marcador: Verdadeiro Outros poços: Falso (padrão)	Selecione apenas um Poço do marcador em cada lote. Selecione um poço com conteúdos que forneçam um sinal de MS forte o suficiente para o reconhecimento de código de barras durante a divisão de dados. Se o formato do pico tiver cauda longa, a divisão de dados pode não ocorrer.
Lista de destino	O nome do arquivo Lista de destino , com a extensão <code>.csv</code> .	(Opcional) Identifique o arquivo Lista de destino . Se o arquivo não estiver na pasta <code>Batch</code> do projeto ativo, inclua o caminho completo do arquivo. Consulte a seção: Listas de destino .

Calibração automática (opcional)

Se a calibração automática for usada, ela deverá ser executada no início do lote. Não é possível executar a calibração entre amostras.

O sistema de entrega de calibrante (CDS) é usado para calibrar o sistema ZenoTOF 7600/7600+ quando configurado com o sistema Echo® MS+.

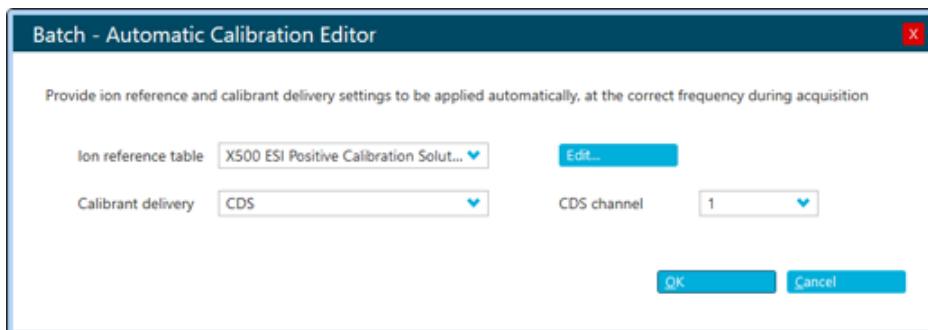
O usuário pode selecionar a tabela de referência de íons aplicável e editá-la com os conteúdos do reservatório de CDS e os íons de calibração específicos exigidos.

Para executar a calibração automática no início do lote, marque a caixa de seleção **Calibrar automaticamente**.

A calibração ocorre em duas fases:

- Cal: calibração de CDS inicial com a tabela de referência de íons selecionada
- Cal Phase 2: equilibração para remover os traços da solução de CDS

Figura 1-7: Caixa de diálogo Lote – Editor de calibração automática



Arquivo de configurações de saída (opcional)

Use o arquivo `EchoExportColumnConfig.xml` para personalizar o caminho onde os arquivos de texto de resultados serão gravados, as colunas que serão incluídas nos arquivos de texto de resultados e a ordem das colunas.

O arquivo `EchoExportColumnConfig.xml` padrão está na pasta `SCIEX OS Data/common-project-area`. Para alterar as configurações, editar esse arquivo ou criar e editar uma cópia do arquivo na pasta do projeto ou na pasta `Quantitation Results` do projeto.

Nota: Três modelos estão disponíveis na pasta `SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Export Column Configuration`:

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

Tabela 1-6: Elementos no arquivo de saída

Elemento	Descrição
Path	Identifique o caminho onde o arquivo de texto de resultados será salvo. É possível identificar vários caminhos para salvar várias cópias do arquivo de saída. Nota: Uma cópia do arquivo de texto de resultados será salva na pasta Quantitation Results do projeto.
Order	Identifique a ordem da coluna no arquivo de texto de resultados. Digite um número exclusivo em cada coluna. Digite 0 na primeira coluna.
Visible	Identifique se a coluna está incluída no arquivo de texto de resultados. Digite true para incluir a coluna. Digite false para excluir a coluna.

Preparação do sistema

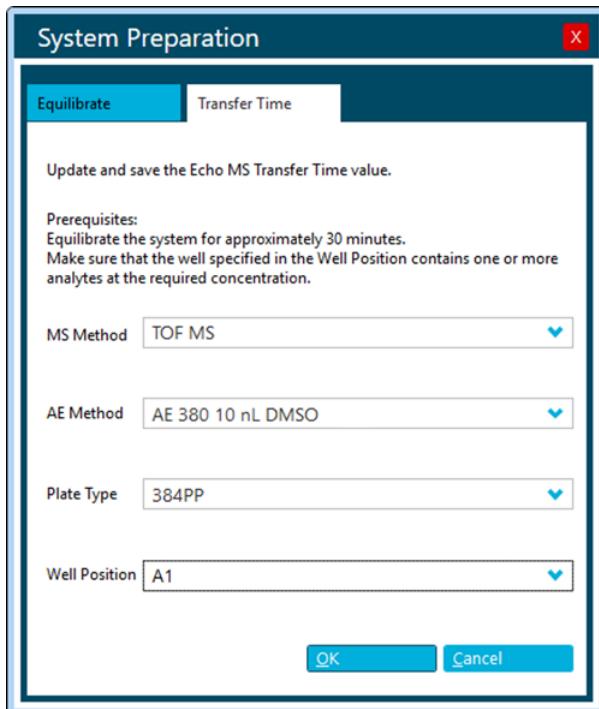
Em experimentos de aquisição dependente de informações (IDA) e de algoritmo de MRM^{HR} onde diferentes íons são monitorados em diferentes poços, para garantir que os íons corretos sejam monitorados em cada poço, o software exige o tempo entre a ejeção de gotículas e a detecção (tempo de transferência). O tempo de transferência será calculado e salvo sempre que ocorrer a divisão de dados.

Se o sistema não tiver sido operado recentemente, ou se o eletrodo ou o solvente carregador tiverem sido alterados, o sistema executará um pequeno lote para calcular o tempo de transferência. Antes de executar o lote para calibrar o tempo de transferência, verifique se o tempo da equilíbriação do sistema é de, no mínimo, 30 minutos.

Para calibrar o tempo de transferência:

1. Abra o painel Status.
2. Clique em **Equilibrate**.

A caixa de diálogo System Preparation será aberta.

Figura 1-8: Caixa de diálogo Preparação do sistema: guia Tempo de transferência

3. Abra a guia Tempo de transferência e use a tabela a seguir para preencher os campos:

Tabela 1-7: Guia Tempo de transferência

Campo	Descrição
Método de MS	Selecione um método de MS na lista do projeto ativo. É possível usar qualquer método de MS para ajustar o tempo de transferência. Um método de TOF MS costuma fornecer o melhor resultado.
Método de AE	Selecione o método de AE que será usado para a análise de espectrometria de massa de ejeção acústica (AEMS) na lista do projeto ativo. O método de AE certifica que o tempo de transferência seja calibrado corretamente para as condições de transferência da amostra na análise de AEMS. Certifique-se de que o valor de Vol da ejeção (nL) no método selecionado seja suficiente para fornecer um sinal forte quase igual à intensidade do poço marcador. Nota: Ajuste o tempo de transferência antes de usar um método de AE diferente.
Tipo de placa	Selecione uma placa aplicável ao sistema Echo® MS. As opções incluem: <ul style="list-style-type: none"> • 384PP • 1536LDV

Aquisição com um sistema Echo® MS+

Tabela 1-7: Guia Tempo de transferência (continuação)

Campo	Descrição
Posição do poço	Identifique a posição de um poço que contém uma concentração de amostras que fornecerá sinal significativo no espectrômetro de massa. É recomendado usar um poço marcador. As opções incluem: <ul style="list-style-type: none">• 384PP: A1 a P24• 1536LDV: A1 a AF48

4. Clique em **OK**.

Um lote com 15 amostras será criado e enviado automaticamente. Após a conclusão do lote, o novo tempo de transferência será calculado e salvo como o padrão do sistema.

Listas de destino

2

Em geral, um lote usado no sistema Echo® MS+ adquire um analito ou conjunto de analitos para todas as amostras. Se for obrigatório especificar um analito de destino diferente para cada linha, coluna ou posição do poço (por exemplo, em fluxos de trabalho do algoritmo de MRM^{HR}), será preciso usar uma lista de destino. Para dados de TOF MS, a lista de destino identifica os analitos de interesse de cada poço, e essas informações serão usadas durante o processamento dos dados. Também é possível usar uma lista de destino para identificar os analitos de interesse no algoritmo de MRM^{HR} e experimentos de IDA durante a aquisição. As informações do analito na lista de destino serão usadas para atualizar o método de MS durante a aquisição.

A lista de destino é um arquivo `csv`. O arquivo contém informações de analito que podem ser usadas nas seguintes áreas:

- Para as informações de analito para reconstrução de massa de proteínas intactas e grandes biomoléculas
- Na lista de inclusão de experimentos de IDA

Para usar uma lista de destino:

- [Criar uma lista de destino](#)
- [Configurar Configurações padrão do projeto](#)
- [Criar um método de MS que será usado como modelo](#)
- [Criar um método de processamento que será usado como modelo](#)

Criar uma lista de destino

Cada linha de um arquivo de lista de destino contém informações de massa de um único poço e composto. Várias linhas podem conter o mesmo composto. Várias linhas podem conter a mesma posição de poço.

Nota: Listas de destino de exemplo para diferentes fluxos de trabalho estão disponíveis na pasta `SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Target List`.

- Crie um arquivo de lista de destino no formato `csv` e o salve na subpasta `Batch` da pasta do projeto onde será usado.

Nota: O arquivo de lista de destino pode usar vírgulas ou pontos como separadores decimais. O arquivo de resultados criado durante o processamento automático usa pontos como separadores decimais.

Nota: Verifique se o texto, a capitalização e o espaçamento dos nomes dos campos estão iguais na tabela seguinte.

Listas de destino

Tabela 2-1: Nomes de campos no arquivo de lista de destino

Campo	Descrição
Well	Identifique uma posição de poço em cada linha, sem espaços. Os valores disponíveis incluem: <ul style="list-style-type: none">• 384PP: A1 a P24• 1536LDV: A1 a AF48
Transfer Time Tolerance	Identifique o número de segundos que serão adicionados para ajustar o início e o fim do intervalo de monitoramento de uma amostra. Esse parâmetro é usado em fluxos de trabalho onde diferentes transições são monitoradas em diferentes posições de poço, como estes: <ul style="list-style-type: none">• Fluxos de trabalho MRM^{HR} onde transições são monitoradas por poço• Fluxos de trabalho IDA onde listas de inclusão são monitoradas por poço O tempo de tolerância de transferência pode ser negativo, mas o valor absoluto do tempo de transferência não pode ser maior que metade do intervalo de ejeção usado no método de AE.
Offset	Identifique o número de segundos para mover o intervalo de aquisição agendado em uma possível posição de pico. Um valor positivo move o intervalo para a direita. Um valor negativo move o intervalo para a esquerda.
Group	Identifique o nome do grupo aplicável do composto.
Name	Identifique o ID do composto do composto.
IS Name	Identifique o nome do padrão interno que será usado para cálculos quantitativos do composto. É possível usar somente um padrão interno para cada composto.
IS	Identifique se o composto é um padrão interno. Os valores disponíveis incluem: <ul style="list-style-type: none">• True• False
Formula	Identifique a fórmula elemental do composto. Peptídeos podem ter modificações e aminoácidos de uma letra. Para identificar isótopos, inclua o peso do isótopo entre colchetes, como [2H], [18O] ou [15N], antes do símbolo. Por exemplo, identifique água pesada (D2O) como [2H]2O.
Adduct/Charge	Se uma fórmula for especificada, identifique o aduto e o estado de carga, como [M+H] ⁺ ou [M+H] ⁻ . Todos os adutos compatíveis com o espaço de trabalho Analytics do software SCIEX OS são compatíveis com listas de destino.

Tabela 2-1: Nomes de campos no arquivo de lista de destino (continuação)

Campo	Descrição
Comment	Forneça mais informações na entrada da linha. É possível usar até 128 caracteres.
Precursor Mass (Da)	Identifique a massa do íon precursor. O intervalo aplicável é de 5 a 2250, com até 5 casas decimais.
TOF Start Mass (Da)	Identifique a massa no início do intervalo de massa de destino de um experimento TOF MS/MS. TOF Start Mass (Da) deve ser menor que TOF Stop Mass (Da) . Esse parâmetro será usado se Aplicar massa inicial/de parada TOF for selecionado no método de MS como modelo.
TOF Stop Mass (Da)	Identifique a massa no fim do intervalo de massa de destino de um experimento TOF MS/MS. TOF Stop Mass (Da) deve ser maior que TOF Start Mass (Da) . Esse parâmetro será usado se Aplicar massa inicial/de parada TOF for selecionado no método de MS como modelo.
Fragment Mass (Da)	Digite a massa do fragmento que será usada no método de processamento. O intervalo de varredura padrão de um método TOF MS/MS é de 20 Da, ±10 Da em relação à massa do fragmento especificada. Nota: Se Aplicar massa inicial/de parada TOF for selecionado no método de MS para uso como modelo, TOF Start Mass (Da) e TOF Stop Mass (Da) definidos na lista de destino serão usados como o intervalo de varredura TOF MS/MS.
Accumulation Time (sec)	Ajuste o tempo de acumulação da transição de destino para otimizar o tempo de varredura total. O tempo de acumulação é o tempo necessário para o espectrômetro de massa adquirir um ponto de dados TOF MS/MS. O tempo de acumulação afeta o número de pontos em um pico. O intervalo aplicável é de 0,005 a 50. Os valores típicos são de 0,01 a 0,100.
Declustering potential (V)	Identifique a voltagem que será aplicada ao orifício para minimizar a formação de agrupamentos de íons. É possível especificar o potencial de desagrupamento (DP) de cada linha na tabela de transição. O intervalo aplicável é de 0 a 300. Nota: Faixa de amplitude da DP (V) está definido no método de MS.
Collision Energy (V)	Identifique a voltagem que será aplicada à célula de colisão. A energia de colisão (CE) geralmente é otimizada para maximizar a intensidade de um fragmento. O intervalo aplicável é de 0 a 150.

Listas de destino

Tabela 2-1: Nomes de campos no arquivo de lista de destino (continuação)

Campo	Descrição
CE Spread (V)	<p>Identifique o valor que será usado para aumentar gradualmente a CE. Em conjunto com o parâmetro Collision Energy (V), o parâmetro faixa de amplitude da CE (CES) controla a CE aplicada ao íon precursor em uma varredura de íon de produto.</p> <p>Por exemplo, na polaridade positiva, a CE aumenta gradualmente de CE – CES para CE + CES.</p> <p>O intervalo aplicável é de 0 a 150.</p>
Fragmentation Mode	<p>Identifique um dos seguintes modos de fragmentação:</p> <ul style="list-style-type: none">• CID: no modo de dissociação de colisão induzida (CID), os íons de fragmento são criados por meio de excitação vibracional do íon precursor causado por colisões com moléculas de gás na célula de colisão Q2.• EAD: no modo de dissociação ativada por elétron (EAD), os íons precursores na célula EAD são expostos aos elétrons para causar a dissociação do íon precursor para íons de fragmento.• EAD (conventional trapping): armadilha convencional é um modo EAD mais adequado para estudos acadêmicos de cinética da reação. Ele fornece maior controle das etapas de tempo de carga e de reação (duração da irradiação do elétron). No modo EAD, essas etapas são otimizadas para ocorrerem ao mesmo tempo. Isso aumenta a sensitividade em aproximadamente duas vezes. No modo EAD (captura convencional), essas etapas são executadas de forma consecutiva. Os precursores selecionados são incluídos na célula EAD durante um tempo de carga especificado, o feixe de elétrons é aplicado em um tempo de reação determinado, e os produtos são ejetados da célula EAD. <p>Dica! Se for necessário ter controle preciso e previsível do tempo de reação, use o modo EAD (captura convencional).</p>
Electron KE (eV)	Identifique a energia cinética (KE) do elétron do feixe de elétrons que está irradiando. A KE do elétron é igual ao viés DC entre a fonte de elétrons e os eletrodos de haste ativados por elétron (EA) na célula de dissociação ativada por elétron (EAD). Esse parâmetro é aplicável quando Fragmentation Mode estiver definido como EAD ou EAD (conventional trapping) .

Tabela 2-1: Nomes de campos no arquivo de lista de destino (continuação)

Campo	Descrição
ETC (%)	Identifique o coeficiente de transferência de elétron (ETC). Esse parâmetro controla a fração de elétrons na célula EAD. O intervalo do é de 0% a 100%. O parâmetro é aplicável quando Fragmentation Mode estiver definido como EAD ou EAD (conventional trapping) . Dica! Para usar o tipo de espécie de precursor analisado e os íons de produto adquiridos para controlar o tipo de reação EAD, use esse parâmetro.
EAD RF (Da)	Identifique um valor entre 0 e 300 Da. Esse parâmetro controla o nível de RF para manter íons precursores e fragmento na célula EAD. Nota: Para detectar íons de produto com <i>m/z</i> maior, aumente EAD RF (Da) . A detecção de íons de produto com <i>m/z</i> menor pode diminuir.
Reaction time (ms)	Identifique o tempo de reação de irradiação de elétrons. No modo EAD, esse parâmetro também controla o tempo de carga. Dica! Se o consumo de precursor não for suficiente após a otimização da corrente do feixe de elétrons, aumente o tempo de reação.
Time Bins to Sum	Identifique o número de pontos de dados que serão somados. O intervalo de peptídeos ou moléculas pequenas é de 4 a 6. O valor inicial da análise de proteína intacta (> 20 kDa) é 40.
Channel 1 a Channel 4	Identifique os canais do conversor de analógico para digital (ADC). Cada canal conta íons. Se os quatro canais forem selecionados (o valor padrão), todos serão somados na contagem total de íons.
Expected MW (Da)	Fluxo de trabalho de reconstrução de massa: identifique o peso molecular esperado para o componente, em Da.
m/z Range for XIC Start (Da)	Fluxo de trabalho de reconstrução de massa: identifique a massa inicial do intervalo XIC.
m/z Range for XIC Stop (Da)	Fluxo de trabalho de reconstrução de massa: identifique a massa final do intervalo XIC.
Reconstruction Start Mass (Da)	Fluxo de trabalho de reconstrução de massa: identifique a massa em que a reconstrução será iniciada, em Da.

Listas de destino

Tabela 2-1: Nomes de campos no arquivo de lista de destino (continuação)

Campo	Descrição
Reconstruction Stop Mass (Da)	Fluxo de trabalho de reconstrução de massa: identifique a massa em que a reconstrução será encerrada, em Da.

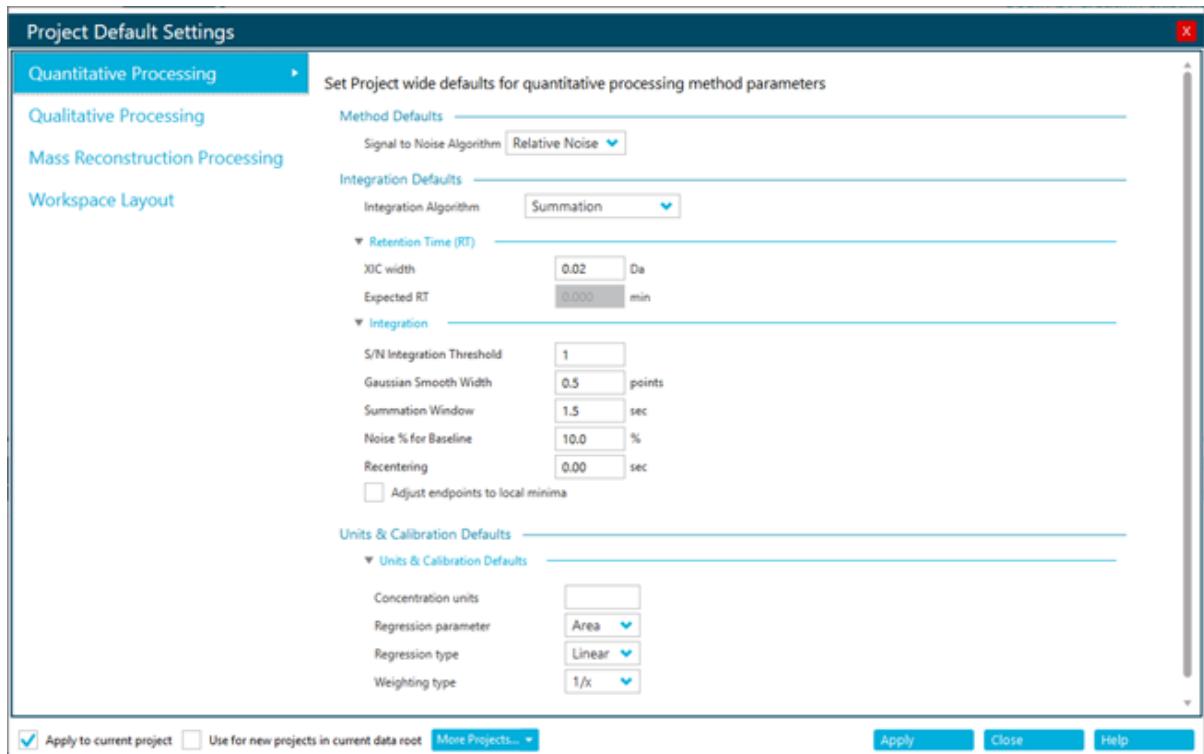
Configurar Configurações padrão do projeto

Durante o processamento automático, o software obtém os parâmetros de método de processamento, como **Largura XIC (Da)**, **Largura da suavização gaussiana (pontos)** e **% de ruído para referência (%)**, das configurações padrão do projeto. Se um método de processamento for usado como modelo de processamento automático, defina as configurações padrão do projeto para otimizar a integração de pico na análise completa. Diferentes volumes de ejeção e larguras de picos no método de AE exigem diferentes valores de parâmetros de processamento.

As informações nas configurações padrão do projeto serão salvas no método de processamento que será usado como modelo.

Nota: Quando as configurações padrão do projeto forem alteradas no espaço de trabalho Analytics, as alterações não serão usadas em métodos de processamento salvos. Para aplicar as alterações, atualize as configurações padrão do projeto e crie um novo método de processamento. O novo método de processamento usará as configurações padrão do projeto atualizadas. Use esse novo método de processamento no processamento automático.

1. No espaço de trabalho Analytics, clique em **Projetos > Configurações padrão do projeto**.

Figura 2-1: Janela Processamento quantitativo

2. Configure os parâmetros.

Para ver descrições detalhadas dos parâmetros, consulte o documento: *Sistema de ajuda do SCIEX OS*.

3. Clique em **Aplicar**.

4. Clique em **Fechar**.

Criar um método de MS que será usado como modelo

- No espaço de trabalho Método de MS, crie um método de MS que será usado como modelo. Consulte o documento: *Sistema de ajuda do SCIEX OS*.
- Para experimentos TOF MS, crie um método de MS com origem, parâmetros de gás e parâmetros de experimentos TOF MS aplicáveis.
- Para experimentos MRM^{HR}, crie um método de MS com origem, parâmetros de gás, parâmetros de experimentos TOF MS e parâmetros de experimentos TOF MS/MS aplicáveis, como resolução Q1, ITC e configurações de pulso de Zeno.

Listas de destino

Nota: As informações de Tabela de massas, como **ID do composto**, **Nome do grupo**, **Íon precursor**, **Massa inicial TOF (Da)** e **Massa de parada TOF (Da)** ou **Íon fragmento (Da)**, **Tempo de acumulação (s)**, **Potencial de desagregação (V)**, **Energia de colisão (V)** e **Faixa de amplitude da CE (V)**, estão contidas em um arquivo de lista de destino. Essas informações substituem as informações no método de MS que será usado como modelo. Portanto, fornecem um método de processamento baseado em poço para os experimentos TOF MS e métodos de processamento e aquisição para experimentos TOF MS/MS.

Criar um método de processamento que será usado como modelo

As informações no arquivo de lista de destino e as configurações padrão do projeto substituem as informações no método de processamento usado como modelo. Consulte a seção: [Configurar Configurações padrão do projeto](#).

- No espaço de trabalho Analytics, crie um método de processamento. Consulte o documento: *Sistema de ajuda do SCIEX OS*.

Visualização de dados

3

Use este procedimento para usar mapas de calor para visualizar os dados de ejeção acústica (AE) adquiridos com um sistema Echo® MS+.

1. Abra o espaço de trabalho de Explorer.
2. Clique em **Arquivo > Abrir arquivo de resultados do Echo MS**.
A caixa de diálogo Abrir é aberta. Ela mostra a pasta Quantitation Results no projeto ativo.
3. Vá para o arquivo de texto de resultados que contém os dados de AE e clique em **Abrir**.
4. (Opcional) Para configurar as opções de exibição da janela, clique em  **(Configurações)**, personalize as configurações e clique em **Salvar e fechar**.
5. (Opcional) Selecione as opções de filtragem aplicáveis.
6. No campo **Coluna**, selecione a coluna que será mostrada no arquivo de texto de resultados.
A lista inclui todas as colunas no arquivo de texto de resultados.

Dica! Defina um arquivo de configuração de saída para selecionar os campos que serão incluídos no arquivo de texto de resultados. Consulte a seção: [Arquivo de configurações de saída \(opcional\)](#).

7. (Opcional) Para colunas numéricas, defina o intervalo. As seguintes opções estão disponíveis:
 - **Automático**: selecione essa opção para mostrar o menor valor dos dados na cor à esquerda do mapa de cores e o maior valor na cor à esquerda do mapa de cores.
 - **Padrão**: se um intervalo padrão estiver disponível, selecione essa opção para usar o intervalo padrão. Para identificar um intervalo padrão, defina um intervalo manual e clique em **Salvar como padrão**.

Nota: Quando o usuário definir um intervalo padrão, ele será usado para todos os arquivos de texto de resultados no projeto ativo.

-
- **Manual**: selecione essa opção para definir um intervalo manual. Todos os valores menores que o menor valor do intervalo serão mostrados na cor à esquerda do mapa de cores. Todos os valores maiores que o maior valor do intervalo serão mostrados na cor à direita do mapa de cores.

Nota: Os valores digitados no formato de notação científica serão alterados para o formato decimal.

-
8. Para mostrar os resultados de um poço, clique nele.

Visualização de dados

9. Para abrir os dados no espaço de trabalho Analytics, clique em  (Abrir no Analytics).

Nota: Se as informações do arquivo relacionado não forem encontradas, a caixa de diálogo Abrir no Analytics será aberta. Preencha os campos nessa caixa de diálogo e clique em **Abrir**.

O espaço de trabalho pode levar até um minuto para abrir. O tempo necessário está relacionado ao tamanho do arquivo de texto de resultados.

Entre em contato conosco

Endereços



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

Sede da SCIEX

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

Treinamento do consumidor

- Global: sciex.com/contact-us

Centro de aprendizagem online

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

Suporte da SCIEX

A SCIEX e seus representantes têm uma equipe global de especialistas técnicos e de serviços totalmente treinados. Eles podem responder perguntas sobre o sistema ou quaisquer problemas técnicos que surjam. Para obter mais informações, acesse o site da SCIEX em sciex.com ou use um dos links abaixo para entrar em contato conosco.

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

Segurança cibernética

Para obter informações sobre as orientações mais recentes sobre cibersegurança para produtos da SCIEX, visite sciex.com/productsecurity.

Documentação

Esta versão substitui todas as versões anteriores deste documento.

Para encontrar a documentação do software, consulte as notas de versão do software ou o guia de instalação do software que o acompanha.

Entre em contato conosco

Para encontrar a documentação do produto de hardware, consulte a documentação que acompanha o sistema ou o componente.

As versões mais recentes da documentação estão disponíveis no site da SCIEX, em sciex.com/customer-documents.

Nota: Para solicitar uma versão impressa gratuita, entre em contato com sciex.com/contact-us.
