

功能指南

SCIEX OS 软件

适用于配有 ZenoTOF 7600/7600+ 系统的 Echo[®] MS+ 系统



本文件供已购买 **SCIEX** 设备的客户在操作此 **SCIEX** 设备时使用。本文件受版权保护，除非 **SCIEX** 书面授权，否则严禁对本文件或本文件任何部分进行任何形式的复制。

本文中所介绍的软件依据许可协议提供。除许可证协议中特别准许的情况外，在任何媒介上复制、修改或传播本软件均为违法行为。此外，许可协议禁止出于任何目的对本软件进行分解、逆向工程或反编译。质保条款见文中所述。

本文件的部分内容可能涉及到其他制造商和/或其产品，其中可能有一些部件的名称属于各自所有者的注册商标和/或起到商标的作用。这些内容的使用仅仅是为了表明这些制造商的产品由 **SCIEX** 提供以用于整合到 **SCIEX** 的设备中，并不意味着 **SCIEX** 有权和/或许可来使用或允许他人使用这些制造商的产品和/或允许他人将制造商产品名称作为商标来进行使用。

SCIEX 的质量保证仅限于在销售或为其产品发放许可证时所提供的明确保证，而且是 **SCIEX** 的唯一且独有的表述、保证和义务。**SCIEX** 不作任何其他形式的明确或隐含的质量保证，包括但不限于特定目的的适销性或适用性的保证，不论是法规或法律所规定、还是源于由贸易洽谈或商业惯例，对所有这些要求均明确免责，概不承担任何责任或相关后果，包括由于购买者的使用或由此引起的任何不良情况所造成的间接或从属损害。

仅供研究使用。请勿用于诊断过程。

本文提及的商标和/或注册商标，包括相关标志，是 **AB Sciex Pte. Ltd.** 或各自所有者在美国和/或某些其他国家的财产(参见 sciex.com/trademarks)。

AB Sciex™ 的使用经过许可。

Echo、**Echo MS** 和 **Echo MS+** 是 **Labcyte, Inc.** 在美国和其他国家的商标或注册商标，并在许可下使用。

© 2024 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

目录

- 1 使用 **Echo[®] MS+** 系统进行采集.....4
 - MS 方法.....4
 - 离子源和气体参数.....4
 - TOF MS 实验参数.....5
 - MRM^{HR} 算法实验参数.....6
 - AE 方法.....7
 - 批次.....9
 - 自动校准（可选）.....11
 - 输出配置文件（可选）.....12
 - 系统准备.....13
- 2 目标列表.....15
 - 创建目标列表.....15
 - 配置项目默认设置.....18
 - 创建 **MS** 方法作为模板.....19
 - 创建用作模板的处理方法.....20
- 3 数据可视化.....21
- 联系我们.....22
 - 地址.....22
 - 客户培训.....22
 - 在线学习中心.....22
 - SCIEX 支持.....22
 - 网络安全.....22
 - 文档.....22

使用 Echo[®] MS+ 系统进行采集

1

本节介绍如何使用 SCIEX OS 软件采集声波激发质谱仪 (AE^{MS}) 数据。本节介绍了 MS 方法和 AE 方法参数、批次、批次校准以及系统准备。

MS 方法

离子源和气体参数

OptiFlow Turbo V 离子源上的 Echo[®] MS 探针与 Echo[®] MS+ 系统上的开放端口接口 (OPI) 配合使用，对样品进行抽吸、雾化和离子化，然后将样品提供给 ZenoTOF 7600 质谱仪。建议在此工作流程中使用较窄范围的气源和气体参数。

图 1-1 离子源和气体参数

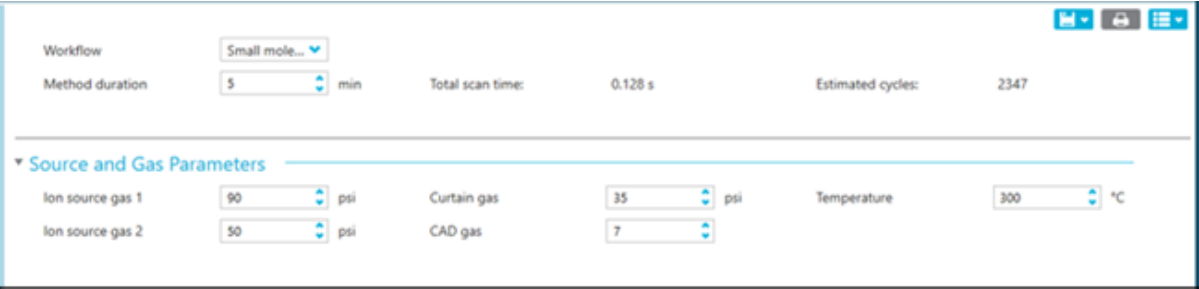


表 1-1 离子源和气体参数

参数	注释
离子源气体 1 (psi)	设置离子源气体 1 的压力。离子源气体 1 将载体溶剂从 OPI 端口吸入离子源。设置为 90。低于此数值可能会导致 OPI 泄漏。
离子源气体 2 (psi)	设置离子源气体 2 的压力。此气体可溶解离子源中的载体溶剂。根据载体溶剂的成分和流速优化离子源气体 2 (psi) 值。建议起始值设为 50。
气帘气 (psi)	设置 Curtain Gas 接口的气体压力。此气体有助于防止离子光学器件受到污染。使用不降低灵敏度的尽可能高的值。数值越大，污染程度越低，但信号强度会略有下降。
CAD 气体	设置碰撞池中的压力。对于 TOF MS 实验，设置为 7 以实现离子碰撞冷却。对于 TOF MS/MS 实验，优化 CAD 气体值以实现分析物离子的碎裂。
温度 (°C)	根据载体溶剂的成分和流速优化温度。建议起始值设为 300。不建议将温度设置在 400 以上。高温会缩短电极的使用寿命，并可能导致对热不稳定化合物的灵敏度降低。

TOF MS 实验参数

图 1-2 TOF MS 参数

The screenshot displays the 'Experiment' tab for TOF MS. The parameters are organized into three columns. The first column includes Polarity (set to Positive), TOF start mass (100 Da), TOF stop mass (1000 Da), and Accumulation time (0.1 s). The second column includes Spray voltage (4500 V), Declustering potential (80 V), DP spread (0 V), and ITC mode (Dynamic). The third column includes Collision energy (10 V), CE spread (0 V), and ITC (0). Each parameter is accompanied by a numeric input field and a unit indicator.

表 1-2 TOF MS 参数

参数	注释
极性	确定电离模式。选择正或负。不提供极性转换功能。
TOF 开始质量 (Da)	确定目标质量范围起始处的质量。 TOF 开始质量 (Da) 必须小于 TOF 停止质量 (Da) 。
TOF 停止质量 (Da)	确定目标质量范围末端处的质量。 TOF 停止质量 (Da) 必须大于 TOF 开始质量 (Da) 。
累积时间 (s)	确定质谱仪获取一个 TOF MS 图谱所需的时间。建议起始值设为 0.08。
喷射电压 (V)	确定施加到探针电极上的电压。根据载体溶剂的成分和流速优化喷射电压。为了最大程度地延长电极寿命，请勿使用超过 4500 的数值。
去簇电压 (V)	确定施加到孔口的电压，以尽量减少离子团簇的形成。不同的化合物可能具有不同的最佳去簇电位 (DP) 值。DP 值用于整个质量范围。
DP 散布 (V)	键入 DP 散布 (DPS) 值。该参数与去簇电压 (V) 共同控制应用于离子的 DP。DP 从 DP - DPS 的低值逐渐增加到 DP + DPS 的高值。
ITC 模式	<p>选择动态或固定。在动态模式下，离子流受到持续监测和自动调整，以防止检测器受损。在固定模式下，用户在 ITC 字段中设置一个值。动态模式的周期时间增加 27 ms，以便在实验开始前监测离子流。</p> <p>注释：动态模式仅适用于 TOF MS 实验。</p>
碰撞能量 (V)	确定在碰撞池施加的电压。在 TOF MS 实验中，使用较低的电压值可以使离子穿过碰撞池而不发生碎裂。
CE 散布 (V)	该参数通常不用于 TOF MS 实验。

表 1-2 TOF MS 参数 (续)

参数	注释
ITC	<p>确定进入质谱仪的离子的百分比。</p> <p>使用固定模式时，监测离子强度。从一个较低的值开始，以小幅度递增，直到信号强度达到所需的最小值。如果预期离子强度未知，则使用动态模式。持续的高离子强度或短时间的极高离子强度会对检测器造成永久性损坏。</p> <p>注释: 该参数在 ITC 模式设置为固定时适用。</p>

MRM^{HR} 算法实验参数

图 1-3 MRM^{HR} 算法参数

TOF MSMS

Q1 resolution

Unit

ITC

100

Zeno pulsing☒

Mass Table☒

Apply TOF start/stop mass

Import and autofill...

Sort by

No sort

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} 算法参数

参数	注释
Q1 分辨率	确定 Q1 四极杆的分辨率。选择单位、打开、低或高。单位提供了大约 ± 0.7 Da 的 Q1 质量选择范围。打开和低提供更宽的 Q1 质量选择范围。高提供更窄的 Q1 质量选择范围。
ITC	确定进入质谱仪的离子的百分比。在 MRM^{HR} 算法实验中，该参数通常设置为 100，以最大限度地提高分析物灵敏度。
Zeno 脉冲	选择以启用 Zeno 脉冲。Zeno 脉冲是 ZenoTOF 7600/7600+ 质谱仪的一项独特功能。激活后，该功能可改善占空比并增强信号强度。
应用 TOF 开始/停止质量	选择以手动设置 TOF 质量范围。如果未选择该选项，则使用以指定碎片离子为中心的 20 Da 的默认质量范围。
TOF 开始质量 (Da)	确定目标质量范围起始处的质量。 TOF 开始质量 (Da) 必须早于 TOF 停止质量 (Da) 。
TOF 停止质量 (Da)	确定目标质量范围末端处的质量。 TOF 停止质量 (Da) 必须大于 TOF 开始质量 (Da) 。

表 1-3 MRM^{HR} 算法参数 (续)

参数	注释
累积时间 (sec)	确定质谱仪获取一个 TOF MS/MS 图谱所需的时间。建议起始值设为 0.01。
去簇电压 (V)	确定施加到孔口的电压，以尽量减少离子团簇的形成。在 MRM ^{HR} 算法实验中，为离子对表中的每一行确定去簇电压。
碰撞能量 (V)	确定在碰撞池施加的电压。在 TOF MS/MS 和 MRM ^{HR} 实验中，该电压会将母离子分解成碎片。优化碰撞能量 (CE)，以最大限度提高碎片强度。
CE 散布 (V)	确定 CE 散布 (CES)。此参数与碰撞能量 (V) 参数联用，可控制在子离子扫描中应用到母离子的 CE。CE 从低值（正极性下的 CE - CES）逐渐增加到高值（正极性下的 CE + CES）。

AE 方法

声波激发 (AE) 方法提供了 Echo® MS+ 系统运行所使用的设置。

图 1-4 AE 方法：标准

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

图 1-5 AE 方法：宽

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

表 1-4 AE 方法参数

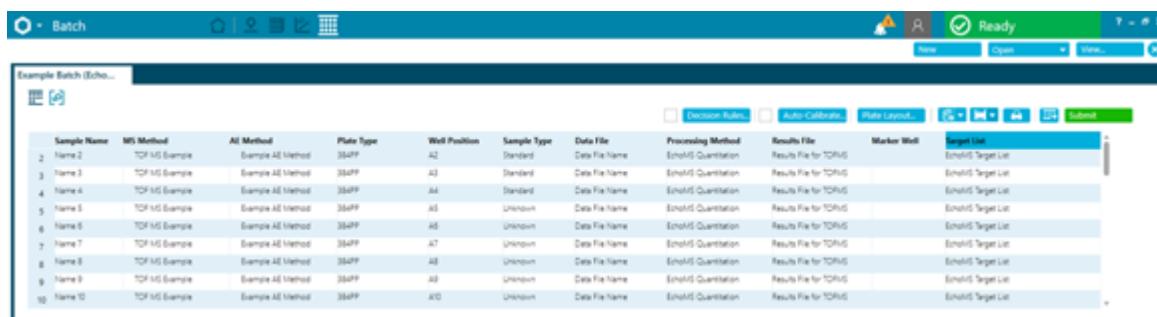
参数	描述
估计持续时间	显示孔板运行时间的预期持续时间，计算时考虑了对运行时间有影响的间隔 (ms)和其他因素。估计持续时间适用于 384 孔板和 1,536 孔板。计算不包括平衡或批次校准时间。
载体溶剂	要确定载体溶剂的成分，请选择甲醇、乙腈和水的百分比。
流速 (µL/min)	优化系统流速。喷针和载体溶剂的成分会对最佳流速产生影响。如果喷针或载体溶剂的成分发生变化，则必须重新优化该值。
液体类别	<p>选择样品孔中的样品基质。不同的孔板类型有不同的选项。选项包括以下各项：</p> <ul style="list-style-type: none">• AQ（水溶液）：用于水溶液。• SP（表面活性剂相）：用于表面张力较低的溶液，如含表面活性剂（如 Triton X-100）的水溶液或有机水混合物。此选项仅适用于 384 孔板。由于分析过程中样品蒸发，此选项不能用于 1536 孔板。• DMSO（二甲基亚砜）：用于二甲基亚砜含量在 70% 至 100% 之间的溶剂。
峰类型	<p>选择标准品模式或宽模式。</p> <ul style="list-style-type: none">• 标准品：AE 系统可快速喷射液滴，形成窄峰。• 宽：用户可以识别液滴喷射的速度，从而产生比标准模式更宽的峰。在 MS 方法中，更宽的峰可提供更多的数据点，并支持更长的周期时间。宽峰模式仅适用于多液滴喷射。

表 1-4 AE 方法参数 (续)

参数	描述
喷射体积 (nL)	<p>确定 Echo® MS+ 系统分配的样本总体积，增量为 2.5 nL。</p> <p>注释：系统可喷射出 2.5 nL 的液滴。</p> <p>当峰类型为宽时，喷射体积 (nL) 的最小值为 5。</p>
间隔 (ms)	确定样本喷射的间隔时间。软件使用重复频率 (Hz) 和喷射体积 (nL) 来计算最小间隔 (ms)。
重复频率 (Hz)	确定液滴喷射重复率 (rep)，单位为赫兹。喷射体积 (nL) 和重复频率 (Hz) 控制峰的宽度。

批次

图 1-6 Batch



注释：以下列不适用于分析通过 Echo® MS+ 系统获取的数据，可以通过查看选项隐藏：样本架类型、样本架位置、孔板位置和进样量 (μL)。

表 1-5 批次列

列名称	描述	字段值要求
样本名称	样本名称	<p>小于 252 个字符。</p> <p>注释：在数据采集后分割期间，样本孔的位置会添加到样本名称的开头：例如 A1-Sample1。</p>
MS 方法	MS 方法的名称	<p>从列表中为选定项目选择 MS 方法。</p> <p>注释：批次中的所有样本必须使用相同的 MS 方法。</p>

表 1-5 批次列 (续)

列名称	描述	字段值要求
AE 方法	AE 方法的名称	从列表中选择选定项目的 AE 方法。 注释: 批次中的所有样本必须使用相同的 AE 方法。
孔板类型	384PP 或 1536LDV	一个批次只能使用一个孔板类型。仅 Beckman Life Sciences 生产的符合 Echo® MS+ 系统使用要求的孔板才能与 Echo® MS+ 系统配合使用。
孔位置	384PP : A1 - P24 1536LDV : A1 - AF48	每一行的孔位置只能对采样一次。
样本类型	空白、标准品、双空白、 QualityControl 、溶剂和未知	样本类型信息保存在数据文件中, 可在处理过程中使用。
数据文件	保存所采集数据的文件名	一个批次采集的所有数据必须保存在同一个数据文件中。 注释: 批次中的所有样本必须使用同一个数据文件。
处理方法	采集完成后用于自动处理的方法的名称。	处理方法必须与用于采集数据的 MS 方法兼容。 注释: 批次中的所有样品必须使用相同的处理方法。

表 1-5 批次列 (续)

列名称	描述	字段值要求
结果文件	保存所处理结果的文件名称。	<p>结果文件保存在选定项目的 Results 子文件夹中。</p> <p>注释: 批次中的所有样本必须使用同一个结果文件。</p> <p>注释: 每个批次使用不同的结果文件。我们不建议重复使用结果文件。</p> <p>注释: 如果使用目标列表文件, 则结果文件将以 txt 格式保存。如果不使用目标列表文件, 则会以 txt 和 qsession 格式保存两个结果文件。</p>
标记孔	标记孔: True 其他孔: False (默认)	每个批次只选择一个标记孔。选择一个孔, 其内含物能提供足够强 MS 信号用于在数据分割过程中识别条形码。如果峰形的拖尾严重, 则数据分割可能不会发生。
目标列表	目标列表文件的名称, 带 csv 扩展名	(可选) 指定目标列表文件。如果文件不在选定项目的 Batch 文件夹中, 则请包含完整的文件路径。请参阅以下章节: 目标列表 。

自动校准 (可选)

如果使用自动校准, 则必须在批次开始时进行。校准不能在样本之间进行。

校准物输送系统 (CDS) 用于在配置有 **Echo® MS+** 系统时对 **ZenoTOF 7600/7600+** 系统进行校准。

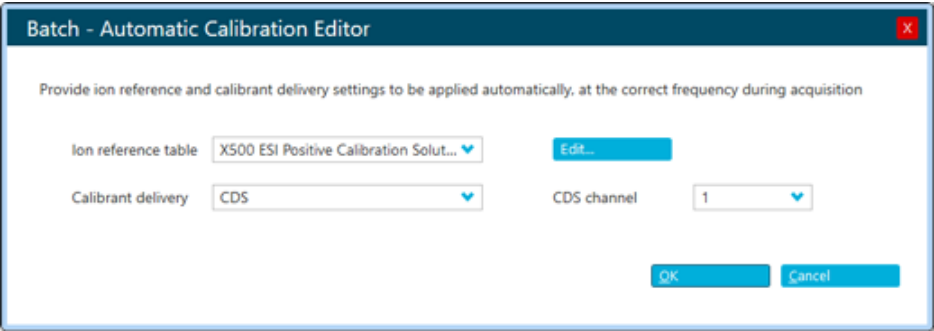
用户可以选择适用的离子参考表, 并编辑该表的内容, 包括 CDS 储液瓶和所需特定校准离子的信息。

要在批次开始时进行自动校准, 请选择自动校准复选框。

校准分两个阶段进行:

- 校准: 利用所选离子参考表进行 CDS 初始校准
- 校准阶段 2: 平衡, 删除 CDS 溶液的迹线

图 1-7 批次 - 自动校准编辑器对话框



输出配置文件（可选）

使用 EchoExportColumnConfig.xml 文件可自定义写入结果文本文件的路径、结果文本文件中包含的列以及列的顺序。

默认 EchoExportColumnConfig.xml 文件在 SCIEX OS Data/common-project-area 文件夹中。要更改设置，请编辑该文件，或在项目文件夹或项目的 Quantitation Results 文件夹中创建并编辑该文件的副本。

注释：

SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Export Column Configuration 文件夹中有三个模板：

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

表 1-6 输出文件中的要素

要素	描述
路径	确定保存结果文本文件的路径。可以确定多个路径，以保存输出文件的多个副本。 注释：结果文本文件的副本保存在项目的 Quantitation Results 文件夹中。
顺序	确定结果文本文件中列的顺序。为每一列键入唯一编号。第一列键入 0。
可见	确定该列是否包含在结果文本文件中。输入 true 表示包含该列。输入 false 可排除该列。

系统准备

对于 MRM^{HR} 算法和信息相关采集 (IDA) 实验（不同孔监测不同的离子），为确保每个孔位监测到正确的离子，软件需要液滴喷射到检测之间的时间（转移时间）。每次进行数据分割时，都会计算并保存转移时间。

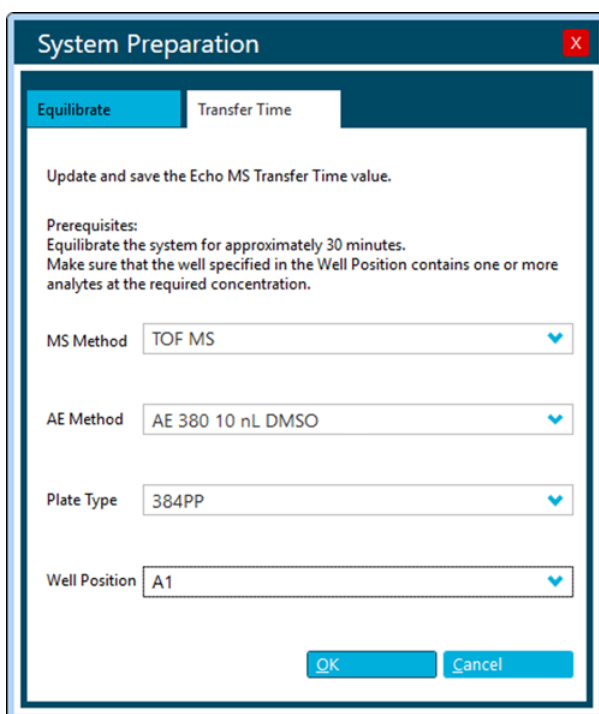
如果系统近期末运行过，或电极或载体溶剂已更换，则系统会运行一个短批次来计算转移时间。在运行校准转移时间的批次之前，确保系统平衡时间至少为 30 分钟。

要校准转移时间，请执行以下操作：

1. 打开状态面板。
2. 单击平衡。

系统准备对话框随即打开。

图 1-8 系统准备对话框：转移时间选项卡



3. 打开转移时间选项卡，然后使用下表填写字段：

表 1-7 转移时间选项卡

字段	描述
MS 方法	从列表中选择为选定项目选择 MS 方法。任何 MS 方法都可用于调整传输时间。TOF MS 方法通常能获得最佳结果。

表 1-7 转移时间选项卡 (续)

字段	描述
AE 方法	从当前项目的列表中选择用于声波激发质谱仪 (AEMS) 分析的 AE 方法。AE 方法可确保传输时间对于 AEMS 分析中的样本转移条件进行了正确的校准。确保所选方法中喷射体积 (nL) 的值足够大，以便提供强度几乎与标记孔相同的强信号。
	注释: 在使用不同的 AE 方法之前，调整转移时间。
孔板类型	选择适用于 Echo® MS 系统的孔板。选项包括以下各项： <ul style="list-style-type: none">• 384PP• 1536LDV
孔位置	确定样本浓度足以在质谱仪中产生显著信号的孔的位置。建议使用标记孔。选项包括以下各项： <ul style="list-style-type: none">• 384PP: A1 - P24• 1536LDV: A1 - AF48

4. 单击确定。

系统会自动创建并提交包含 15 个样本的批次。批次完成后，会计算新的转移时间并将其保存为系统默认值。

通常，用于 Echo® MS+ 系统的批次会采集所有样本中的一种分析物或一组分析物。例如，在 MRM^{HR} 算法工作流程中，如果必须为每一行、每一列或每一孔的位置指定不同的目标分析物，则必须使用目标列表。对于 TOF MS 数据，目标列表可确定每个孔的目标分析物，这些信息将在数据处理过程中使用。在采集过程中，目标列表还可用于识别 MRM^{HR} 算法和 IDA 实验中的目标分析物。目标列表中的分析物信息用于在采集过程中更新 MS 方法。

目标列表是一个 csv 文件。该文件包含可用于以下方面的分析物信息：

- 用于完整蛋白质和大生物分子质量重建的分析物信息
- 用于 IDA 实验的包含列表

要使用目标列表，请执行以下程序：

- [创建目标列表](#)
- [配置项目默认设置](#)
- [创建 MS 方法作为模板](#)
- [创建用作模板的处理方法](#)

创建目标列表

目标列表文件的每一行都包含单个孔和化合物的质量信息。可以有多个行包含相同的化合物。可以有多个行包含相同的孔位置。

注释：SCIEX OS Data\common-project-area\Echo MS\Example Target List 文件夹中提供了不同工作流程的示例目标列表。

- 创建一个 csv 格式的目标列表文件，然后将其保存到要使用它的项目文件夹的 Batch 子文件夹中。

注释：目标列表文件可以使用逗号或句点作为小数分隔符。自动处理过程中创建的结果文件使用句点作为小数分隔符。

注释：确保字段名中的文字、大小写和间距与下表中的相同。

表 2-1 目标列表文件中的字段名称

字段	描述
Well	每行确定一个孔位置，不留空格。可用的值包括： <ul style="list-style-type: none"> • 384PP: A1 至 P24 • 1536LDV: A1 至 AF48

表 2-1 目标列表文件中的字段名称 (续)

字段	描述
Transfer Time Tolerance	<p>确定需要添加的秒数，以调整样本监测窗口的开始和结束时间。此参数在以下工作流程中使用，即在不同的孔位置监控不同的离子对：</p> <ul style="list-style-type: none"> 按孔位置监控离子对的 MRM^{HR} 工作流程 按孔位置监控包含列表的 IDA 工作流程 <p>转移时间容差可以为负值，但转移时间的绝对值不能超过 AE 方法中使用的喷射间隔的一半。</p>
Offset	确定计划采集窗口将在可能的峰值位置周围移动的秒数。正值表示窗口向右移动。负值会将窗口向左移动。
Group	确定化合物的适用组名。
Name	确定化合物的化合物 ID。
IS Name	确定用于化合物定量计算的内标物名称。每种化合物只能使用一种内标物。
IS	<p>确定化合物是否为内标物。可用的值包括：</p> <ul style="list-style-type: none"> True False
Formula	确定化合物的元素化学式。肽可以包含单字母氨基酸和修饰。要标识特定同位素，请在符号前用方括号括上同位素的质量数，例如 [2H] 、 [18O] 或 [15N] 。例如，重水 (D2O) 应标识为 [2H]2O 。
Adduct/Charge	如果指定了化学式，则应标识加合物和电荷状态，如 [M+H]⁺ 或 [M+H]⁻ 。目标列表支持 SCIEX OS 软件数据分析工作区中支持的所有加合物。
Comment	为行条目提供更多信息。可使用最多 128 个字符。
Precursor Mass (Da)	确定母离子的质量。适用范围为 5 至 2,250，最多 5 位小数。
TOF Start Mass (Da)	<p>确定 TOF MS/MS 实验目标质量范围起始处的质量。TOF Start Mass (Da) 必须小于 TOF Stop Mass (Da)。</p> <p>如果在 MS 方法中选择了应用 TOF 开始/停止质量用作模板，则使用此参数。</p>
TOF Stop Mass (Da)	<p>确定 TOF MS/MS 实验目标质量范围末端的质量。TOF Stop Mass (Da) 必须大于 TOF Start Mass (Da)。</p> <p>如果在 MS 方法中选择了应用 TOF 开始/停止质量用作模板，则使用此参数。</p>

表 2-1 目标列表文件中的字段名称 (续)

字段	描述
Fragment Mass (Da)	<p>输入在处理方法中使用的碎片质量。TOF MS/MS 方法的默认扫描范围为 20 Da，与指定的碎片质量相差 ± 10 Da。</p> <p>注释: 如果在 MS 方法中选择了应用 TOF 开始/停止质量用作模板，则目标列表中设置的 TOF Start Mass (Da) 和 TOF Stop Mass (Da) 将用作 TOF MS/MS 扫描范围。</p>
Accumulation Time (sec)	<p>调整目标离子对的累积时间以优化总扫描时间。累积时间是质谱仪获取一个 TOF MS/MS 数据点所需的时间。累积时间会影响峰上的数据点数量。适用范围为 0.005 至 50。典型值为 0.01 至 0.100。</p>
Declustering potential (V)	<p>确定施加到孔口的电压，以尽量减少离子团簇的形成。可以为离子对表的每一行指定去簇电压 (DP)。适用范围为 0 至 300。</p> <p>注释: DP 散布 (V) 在 MS 方法中设置。</p>
Collision Energy (V)	<p>确定施加到碰撞池上的电压。碰撞能量 (CE) 通常经过优化，以最大限度地提高碎片的强度。适用范围为 0 至 150。</p>
CE Spread (V)	<p>确定用于逐步提高 CE 的值。CE 散布 (CES) 参数与 Collision Energy (V) 参数联用，可控制着子离子扫描中应用到母离子的 CE。</p> <p>例如，在正极性情况下，CE 会从 CE – CES 逐步增加到 CE + CES。</p> <p>适用范围为 0 至 150。</p>
Fragmentation Mode	<p>确定以下任一种碎裂模式：</p> <ul style="list-style-type: none"> • CID: 在碰撞诱导解离 (CID) 模式下，母离子与 Q2 碰撞池中的气体分子发生碰撞并通过产生的母离子振动激发形成碎片离子。 • EAD: 在电子活化解离 (EAD) 模式下，EAD 池中的母离子暴露于电子，导致母离子解离为碎片离子。 • EAD (传统捕获): 传统捕获是最适用于反应动力学的学术研究的 EAD 模式。EAD 模式可对加载时间和反应时间（电子辐射持续时间）步骤提供更多控制。在 EAD 模式下，这些步骤被优化为同时进行，进而将灵敏度提高了约两倍。在 EAD (传统捕获) 模式下，这些步骤连续地执行。所选的母离子引入到 EAD 池中特定加载时间，然后应用电子束指定的反应时间，接下来子离子从 EAD 池喷出。 <p>提示! 如果需要对反应时间进行精确和可预测的控制，则应使用 EAD (传统捕获) 模式。</p>
Electron KE (eV)	<p>确定辐射电子束的电子动能 (KE)。电子 KE 与电子源和电子活化解离 (EAD) 池中的电子活化 (EA) 杆电极之间的 DC 偏差相同。当 Fragmentation Mode 设置为 EAD 或 EAD (conventional trapping) 时，此参数适用。</p>

表 2-1 目标列表文件中的字段名称 (续)

字段	描述
ETC (%)	<p>确定电子传递系数 (ETC)。该参数控制进入 EAD 池的电子比例。范围从 0% 到 100%。当 Fragmentation Mode 设置为 EAD 或 EAD (conventional trapping) 时，此参数适用。</p> <p>提示! 要使用分析的母离子粒种和采集的子离子来控制 EAD 反应的类型，请使用此参数。</p>
EAD RF (Da)	<p>确定一个介于 0 Da 和 300 Da 之间的数值。该参数控制 RF 等级以限制 EAD 池中的母离子和碎片离子。</p> <p>注释: 要检测具有更高 m/z 的子离子，请增大 EAD RF (Da)。检测到的具有更低 m/z 的子离子可能会减少。</p>
Reaction time (ms)	<p>确定电子辐射的反应时间。在 EAD 模式下，该参数还可控制加载时间。</p> <p>提示! 如果优化电子束电流后母离子消耗量仍不足，则应延长反应时间。</p>
Time Bins to Sum	确定要相加的数据点数量。小分子或肽的范围为 4 至 6。完整蛋白质分析 (> 20 kDa) 的起始值为 40。
Channel 1 至 Channel 4	确定模数转换器 (ADC) 通道。每个通道都进行离子计数。如果全部四个通道都已选定（默认值），则在总离子计数时会对全部四个通道进行求和。
Expected MW (Da)	质量重建工作流：确定成分的预计分子量（以 Da 为单位）。
m/z Range for XIC Start (Da)	质量重建工作流：确定 XIC 范围的开始质量。
m/z Range for XIC Stop (Da)	质量重建工作流程：确定 XIC 范围的最终质量。
Reconstruction Start Mass (Da)	质量重建工作流程：确定重建开始时的质量（以 Da 为单位）。
Reconstruction Stop Mass (Da)	质量重建工作流程：确定重建停止时的质量（以 Da 为单位）。

配置项目默认设置

在自动处理过程中，软件会从项目的默认设置中获取处理方法参数，例如 **XIC 宽度 (Da)**、高斯平滑宽度（点）和基线噪声 **% (%)**。如果处理方法将用作自动处理的模板，则应配置项目默

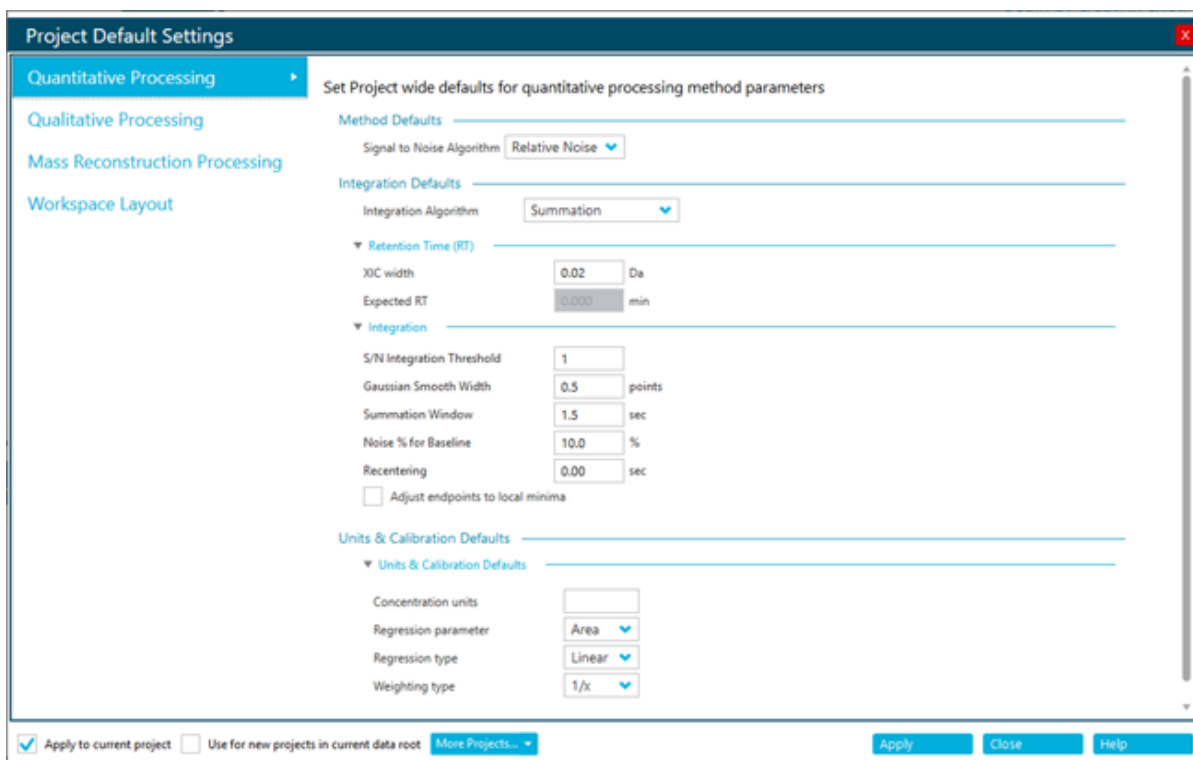
认设置以优化整个分析过程中的峰积分。在 **AE** 方法中，不同的进样体积和峰宽需要不同的处理参数值。

项目默认设置中的信息会保存在处理方法中作为模板使用。

注释：在数据分析工作区更改项目默认设置后，这些更改不会应用于已保存的处理方法。要应用更改，请更新项目默认设置，然后创建新的处理方法。新的处理方法将使用更新后的项目默认设置。可以使用这种新的处理方法进行自动处理。

1. 在数据分析工作区中，单击项目 > 项目默认设置。

图 2-1 定量处理窗口



2. 配置参数。
有关参数的详细说明，请参阅文档：《**SCIEX OS** 帮助系统》。
3. 单击 应用。
4. 单击 关闭。

创建 **MS** 方法作为模板

- 在 **MS** 方法工作区中，创建一个 **MS** 方法作为模板。请参阅文档：《**SCIEX OS** 帮助系统》。
- 对于 **TOF MS** 实验，需创建包含适用离子源和气体参数以及 **TOF MS** 实验参数的 **MS** 方法。

- 对于 **MRM^{HR}** 实验，需创建包含适用离子源和气体参数、TOF MS 实验参数以及 TOF MS/MS 实验参数（例如 Q1 分辨率、ITC 和 Zeno 脉冲设置）的 MS 方法。


注释: 化合物 **ID**、组名称、母离子、**TOF** 开始质量 (**Da**) 和 **TOF** 停止质量 (**Da**) 或碎片离子 (**Da**)、累积时间 (**s**)、去簇电压 (**V**)、碰撞能量 (**V**) 和 **CE** 散布 (**V**) 等 MS 列表信息包含在一个目标列表文件中。这些信息将取代 MS 方法中用作模板的信息，从而为 TOF MS 实验提供完善的处理方法，也为 TOF MS/MS 实验提供了采集和处理方法。

创建用作模板的处理方法

目标列表文件中的信息和项目默认设置将替代用作模板的处理方法中的信息。请参阅以下章节：[配置项目默认设置](#)。

- 在数据分析工作区中，创建一个处理方法。请参阅文档：《**SCIEX OS** 帮助系统》。

使用此程序可使用热图直观显示 Echo® MS+ 系统采集的声波激发 (AE) 数据。

1. 打开 **Explorer** 工作区。
2. 单击文件 > 打开 **Echo MS** 结果文件。
打开对话框打开。其中显示选定项目中的 Quantitation Results 文件夹。
3. 浏览到包含 **AE** 数据的结果文本文件，然后单击打开。
4. （可选）要配置窗口的显示选项，请单击  (设置)，自定义设置，然后单击保存并关闭。
5. （可选）选择适用的筛选选项。
6. 在列字段中，选择结果文本文件中要显示的列。

列表包含结果文本文件中的所有列。


提示! 配置输出配置文件，以选择要包含在结果文本文件中的字段。请参阅以下章节：[输出配置文件（可选）](#)。

7. （可选）对于数字列，请设置范围。其中包括以下选项：
 - 自动：选择此选项可显示颜色在颜色图左侧的数据中的最低值，以及颜色在颜色图右侧的数据中最高值。
 - 默认：如果有默认范围，则选择此选项以使用默认范围。要确定默认范围，请先设置手动范围，然后单击另存为默认值。

注释：当用户设置默认范围时，默认范围将用于选定项目中的所有结果文本文件。

- 手动：选择以设置手动范围。所有小于范围低端值的数值都会以颜色图左侧的颜色显示。所有大于范围高端值的数值都会以颜色图右侧的颜色显示。

注释：以科学记数法格式键入的值将更改为十进制格式。

8. 要显示某个孔的结果，请单击该孔。
9. 要在数据分析工作区中打开数据，请单击  (在 **Analytics** 中打开)。

注释：如果未找到相关文件信息，则会打开在 **Analytics** 中打开对话框。填写对话框中的字段，然后单击打开。

工作区可能需要长达 1 分钟的时间才能打开。所需时间与结果文本文件的大小有关。

联系我们

地址



新加坡制造
AB Sciex Pte.Ltd.
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

SCIEX 总部

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

客户培训

- 全球: sciex.com/contact-us

在线学习中心

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

SCIEX 支持

SCIEX 及其代表机构在全球拥有经过系统培训的服务和技术专家。他们可以解答系统问题或可能出现的任何技术问题。如需了解更多信息，请访问 **SCIEX** 网站 (sciex.com) 或通过下面的链接之一与我们联系。

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

网络安全

有关 **SCIEX** 产品的最新网络安全指南，请访问 sciex.com/productsecurity。

文档

本版本的文档取代本文档的所有先前版本。

要查找软件产品文档，请参阅软件随附的版本发行说明或软件安装指南。

要查找硬件产品文档，请参阅系统或组件随附的文档。

最新版本的文档可从 **SCIEX** 网站上获得，网址: sciex.com/customer-documents。

注释: 如需免费获取本文档的印刷版本, 请联系 sciex.com/contact-us。
