
Analyst MD-software

Vejledning i oplysningsafhængig dataopsamling



Dette dokument leveres til kunder, der har købt SCIEX-udstyr, til brug for driften af dette SCIEX-udstyr. Dette dokument er ophavsretligt beskyttet, og enhver reproduktion af dette dokument eller dele af dette dokument er strengt forbudt, medmindre SCIEX skriftligt har givet tilladelse hertil.

Software, som kan være beskrevet i dette dokument, leveres i henhold til en licensaftale. Det er ulovligt at kopiere, ændre eller distribuere softwaren på ethvert medium, medmindre det specifikt er tilladt i licensaftalen. Desuden kan licensaftalen forbyde, at softwaren demonteres, omvendt manipuleres eller dekompileres til ethvert formål. Garantier er som anført i aftalen.

I dele af dette dokument kan der være henvisninger til andre producenter og/eller deres produkter, som kan indeholde dele, hvis navne er registreret som varemærker og/eller fungerer som varemærker tilhørende deres respektive ejere. Enhver sådan brug har kun til formål at betegne disse producenters produkter som leveret af SCIEX til indbygning i dets udstyr og indebærer ikke nogen ret og/eller licens til at bruge eller tillade andre at bruge sådanne producenters og/eller deres produktnavne som varemærker.

SCIEX' garantier er begrænset til de udtrykkelige garantier, der gives på tidspunktet for salg eller licens af dets produkter, og er SCIEX' eneste og eksklusive erklæringer, garantier og forpligtelser. SCIEX giver ingen andre garantier af nogen art, hverken udtrykkelige eller stiltiende, herunder uden begrænsning garantier for salgbarhed eller egnethed til et bestemt formål, uanset om de følger af en lov eller på anden måde af loven eller af en handelspraksis eller handelsbrug, som alle udtrykkeligt fraskrives, og påtager sig intet ansvar eller eventualanvar, herunder indirekte eller følgeskader, for købers brug af produktet eller for eventuelle negative omstændigheder, der måtte opstå som følge heraf.

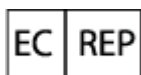
(GEN-IDV-09-10816-D)

Til *in vitro*-diagnostisk brug. Produkt(er) er ikke tilgængeligt/tilgængelige i alle lande. Kontakt din lokale salgsrepræsentant, eller se sciex.com/diagnostics for yderligere oplysninger.

Mærker og/eller registrerede varemærker, der er nævnt heri, herunder tilknyttede logoer, tilhører AB Sciex Pte. Ltd. eller deres respektive ejere i USA og/eller visse andre lande (se sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ anvendes under licens.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



Leica Microsystems CMS GmbH
Ernst-Leitz-Strasse 17-37
35578 Wetzlar
Germany



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

IVD

CE

UK
CA

Indholdsfortegnelse

Kapitel 1: Vejledning i oplysningsafhængig dataopsamling	4
Om IDA-metoder	4
Relateret dokumentation	5
Forudsætninger	5
Kapitel 2: Oprettelse af IDA-metoder	6
Oprettelse af en IDA-metode ved hjælp af IDA-metodeguiden med et system med tredobbelt kvadrupol	6
Oprettelse af en IDA-metode ved hjælp af IDA-metodeguiden med et LIT-system	8
Oprettelse af en IDA-metode ved hjælp af Acquisition Method Editor	9
Oprettelse af en IDA-metode ved hjælp af en <i>Scheduled</i> MRM-algoritmescanning	11
Oprettelse af en IDA-metode ved hjælp af to <i>Scheduled</i> MRM-algoritmescanninger	12
Om polaritetsskift	13
Om pladsholdere	15
Effekt af <i>Scheduled</i> MRM Pro-algoritme på IDA	15
Oprettelse af en IDA-dataopsamlingsmetode for <i>Scheduled</i> MRM Pro-algoritmen	15
Oprettelse af en IDA-metode ved hjælp af planlagt ionisering	16
Kapitel 3: Visning af IDA-data	17
Angivelse af indstillinger for IDA Explorer	17
Visning af IDA-data	18
Visning af IDA-data, hvis IDA Explorer ikke er aktiv	19
Om DBS-algoritmen (Dynamic Background Subtraction)	21
Om dynamisk fyldningstid	22
Ikoner	22
Kontakt os	23
Kundeuddannelse	23
Online-læringscenter	23
SCIEX	23
Cybersikkerhed	23
Dokumentation	23

Om IDA-metoder

En IDA-metode kører automatisk eksperimenter på baggrund af resultater fra tidligere eksperimenter i samme periode. Brug IDA-kriterier til at optimere dataopsamlingsindstillinger, mens du indsamler data, hvilket reducerer prøveopsamlingstiden i en enkelt injektion. IDA sparer både den påkrævede prøvemængde og den værdifulde arbejdstid.

Opret en IDA-metode med op til to undersøgelsesscanninger og otte afhængige scanninger i en enkelt periode. En undersøgelsesscanning bruges i IDA til at udløse yderligere eksperimenter. En vilkårlig af følgende scanninger kan bruges som en undersøgelsesscanning:

- Q3 MS
- Forbedret MS (EMS)
- MRM
- Neutralt tab (NL)
- Prækursor-ion (Prec)
- Forbedret produkt-ion (EPI) (undersøgelsesscanning på andet niveau)
- *Scheduled* MRM-algoritme

Følgende er afhængige scanninger:

- EPI
- MS/MS/MS(MS3) (afhængig scanning på andet niveau)

I et IDA-eksperiment varierer massespektrometrets handlinger fra scanning til scanning på baggrund af de data, der er opsamlet i en tidligere scanning. Softwaren analyserer data i takt med opsamlingen og bestemmer derefter de masser, hvorpå der skal udføres afhængige scanninger. Angiv de kriterier, der vil aktivere et IDA-eksperiment, og de metodeparametre, der skal anvendes.

IDA ændrer eksperimenter og forbedrer resultater på baggrund af følgende bruderdefinerede kriterier:

- Ionintensitet og ladningstilstand
- Inklusions- og eksklusionslister
- Isotopmønstre
- Dynamisk eksklusion

Hvis polariteten ikke skiftes under cyklussen, skal antallet af afhængige eksperimenter matche antallet af de mest intense ioner på fanen IDA Criteria.

Relateret dokumentation

- Systembrugervejledning til massespektrometeret
- *Avanceret brugervejledning*
- *Vejledning i Scheduled MRM-algoritmen*
- Analyst MD-softwarehjælp

Forudsætninger

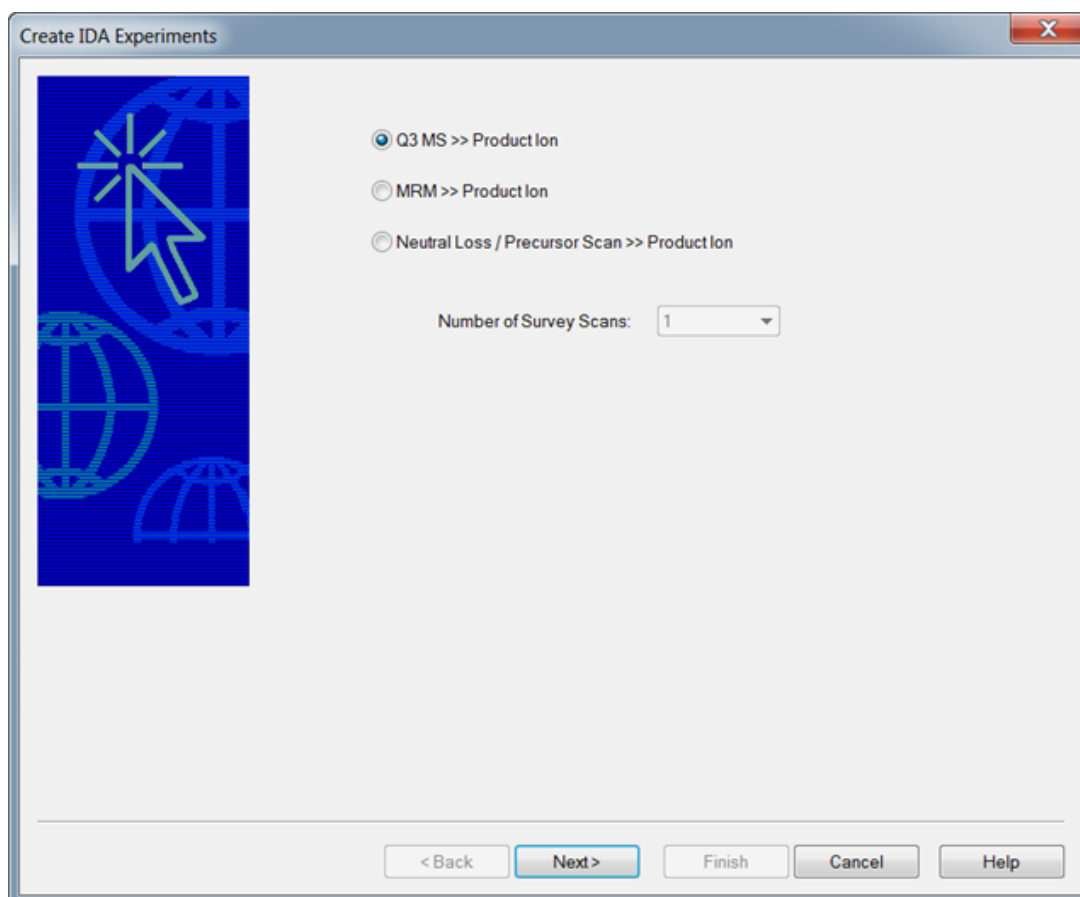
Forudsætninger
Brugerne skal kunne: <ul style="list-style-type: none">• Oprette en dataopsamlingsmetode• Sende en batch

Brug IDA-metodeguiden til at oprette IDA-dataopsamlingsmetoder af typerne lineær ionfælde (LIT) og tredobbelt kvadrupol. Enhver kombination af to undersøgelsesscanninger kan bruges. Hvis EPI vælges som undersøgelsesscanning, er fanen IDA–Second Level Criteria tilgængelig. Hvis disse undersøgelsesforsøg anvendes, kan der ikke fastsættes et yderligere IDA-kriterieniveau.

Oprettelse af en IDA-metode ved hjælp af IDA-metodeguiden med et system med tredobbelt kvadrupol.

1. Dobbeltklik på **IDA Method Wizard** under **Acquire** i navigationslinjen.

Figur 2-1: Opret IDA-forsøgsside



2. Vælg scanningstypen **Neutral Loss / Precursor Scan >> Product Ion**.

3. Vælg antallet af scanninger, der skal udføres, på listen **Number of Survey Scans**, og klik derefter på **Next**.
Siden Survey Scan vises. Udseendet af denne side afhænger af den valgte scanning.
4. Angiv parametrene, og klik derefter på **Next**.
Siden Dependent Scan – Product Ion Scan vises.
5. Vælg antallet af toppe, der skal overvåges, indstil scanningsparametrene, og klik derefter på **Next**.
Siden Dependent Scan – IDA Criteria vises.

Bemærk: Sørg for, at IDA-området er det samme som eller ligger inden for undersøgelsesscanningens område.

6. For at angive ionmasseområdet skal du indtaste den nedre og øvre grænse for ionmasseområdet. Der køres en afhængig scanning for masserne i dette område.
7. I feltet **Which exceed** indtastes det mindste antal tællinger pr. sekund, der kræves for at udløse en afhængig scanning.
8. I gruppen **Exclude Former Target Ions** skal du foretage en af følgende handlinger:
 - For at ignorere alle tidligere målioner, der forekommer i IDA-forsøget, skal du vælge **Always**.
 - For at ignorere alle tidligere målioner efter et bestemt antal forekomster skal du vælge **Always**, vælge **After** og derefter indtaste antallet af forekomster.
 - For at ignorere tidligere målioner i et bestemt tidsrum vælges **For** og derefter indtastes antallet af sekunder, hvor ionerne skal ignoreres.
 - For at ignorere tidligere målioner i et tidsrum efter et antal forekomster vælges **For** og derefter indtastes det antal sekunder, hvor ionerne skal ignoreres. Vælg **After**, og skriv derefter antallet af forekomster.

Tip! For at genkende alle tidligere målioner i IDA-eksperimentet skal du fuldføre guiden og klikke på **Never** under **Exclude former target ions** i fanen IDA - First Level Criteria i editoren til dataopsamlingsmetode.

9. Hvis du vil udelukke tidligere målioner efter et bestemt antal forekomster, skal du vælge **After X occurrences** i gruppen **Exclude Former Target Ions** og derefter skrive det antal gange, som en tidligere målion kan ses, før den udelukkes fra fremtidige scanninger.
10. Klik på **Finish**.
IDA-eksperimentet vises automatisk i Acquisition Method Editor. LC-metoder og andre IDA-kriterier, f.eks. inklusions- og eksklusionslister, kan nu redigeres.
11. Gennemgå MS-metoden, og rediger parametre og andre IDA-kriterier, hvis det er nødvendigt.
12. Tilføj enhederne, hvis de ikke allerede er inkluderet, og opdater derefter alle de relevante parametre.

Tip! Alle ionkildegasparametre kan opdateres. Klik på **Edit Parameters** under fanen MS. På fanen Source/Gas skal du indtaste de relevante værdier og derefter markere afkrydsningsfeltet **Source/Gas** nederst for at anvende parametrene på alle eksperimenterne.

13. Gem filen med dataopsamlingsmetoden.

Oprettelse af en IDA-metode ved hjælp af IDA-metodeguiden med et LIT-system

1. Dobbeltklik på **IDA Method Wizard** på navigationslinjen under **Acquire**. Siden Create IDA Experiments vises.
2. Vælg undersøgelsens scanningstype i gruppen **Type of IDA Experiment**, og klik derefter på **Next**.
3. Hvis scanningstypen **Neutral Loss / Precursor Scan >> Enhanced Product** er valgt, skal du derefter vælge antallet af scanninger, der skal udføres, på listen **Number of Survey Scans**.
4. Hvis du vil bekræfte, at IDA-eksperimentet har indsamlet data, der matcher den brugerdefinerede ladetilstand eller isotopmønster, inden den afhængige scanning udføres, skal du markere afkrydsningsfeltet **Use Enhanced Resolution Scan to confirm Charge State and Isotope Pattern**.
5. Hvis du vil føje en MS3-scanning til eksperimentet, skal du markere afkrydsningsfeltet **Enable MS3 Experiment generation**.
6. Hvis du vil have softwaren til at beregne den passende fyldningstid dynamisk for LIT, skal du sørge for, at afkrydsningsfeltet **Dynamic Fill Time** er markeret.
7. Klik på **Next**. Siden Survey Scan åbnes. Udseendet af denne dialogboks varierer efter den valgte undersøgelsesscanning.
8. Rediger parametrene på grundlag af den valgte scanningstype, og klik derefter på **Next**. Siden Dependent Scan – Enhanced Product Ion (EPI) åbnes.
9. Vælg antallet af toppe, der skal overvåges, indstil scanningsparametrene, og klik derefter på **Next**. Siden Dependent Scan – IDA Criteria vises.
10. For at angive ionmasseområdet skal du indtaste den nedre og øvre grænse for ionmasseområdet. Der køres en afhængig scanning for masserne i dette område.
11. I feltet **Which exceed** indtastes det mindste antal tællinger pr. sekund, der kræves for at udløse en afhængig scanning.
12. Hvis du vil specificere ladetilstandsområdet for IDA-eksperimentet, skal du markere afkrydsningsfeltet **With charge state X to Y charges** og derefter klikke på ladningstilstandene.

Tip! Ladningstilstanden afhænger af den korrekte bestemmelse af isotopforholdet. Derfor bør der udføres en ER-scanning for at bekræfte ladetilstanden.

13. Markér afkrydsningsfeltet **Include unknowns** for at inkludere toppe med ukendte ladetilstande.
14. I gruppen **Exclude Former Target Ions** skal du foretage en af følgende handlinger:
 - For at ignorere alle tidligere målioner, der forekommer i IDA-forsøget, skal du vælge **Always**.
 - For at genkende alle tidligere målioner, der forekommer i IDA-forsøget, skal du vælge **Never**.
 - For at ignorere tidligere målioner i et bestemt tidsrum vælges **For** og derefter indtastes antallet af sekunder, hvor ionerne skal ignoreres.
 - For at ignorere tidligere målioner i et tidsrum efter et antal forekomster vælges **For** og derefter indtastes det antal sekunder, hvor ionerne skal ignoreres. Vælg **After**, og skriv derefter antallet af forekomster.
 - For at ignorere alle tidligere målioner efter et bestemt antal forekomster skal du vælge **Always**, vælge **After** og derefter indtaste antallet af forekomster.
15. Hvis du vil udelukke tidligere målioner efter et bestemt antal forekomster, skal du vælge **After X occurrences** i gruppen **Exclude Former Target Ions** og derefter skrive det antal gange, som en tidligere målion kan ses, før den udelukkes fra fremtidige scanninger.
16. Klik på **Finish**.
IDA-eksperimentet vises automatisk i Acquisition Method Editor. LC-metoder og andre IDA-kriterier, f.eks. inklusions- og eksklusionslister, kan nu redigeres.
17. Gennemgå MS-metoden, og rediger parametre og andre IDA-kriterier, hvis det er nødvendigt.
18. Tilføj enhederne, hvis de ikke allerede er inkluderet, og opdater derefter alle de relevante parametre.

Tip! Alle ionkildegasparametre kan opdateres. Klik på **Edit Parameters** under fanen MS. På fanen Source/Gas skal du indtaste de relevante værdier og derefter markere afkrydsningsfeltet **Source/Gas** nederst for at anvende parametrene på alle eksperimenterne.

19. Gem filen med dataopsamlingsmetoden.

Oprettelse af en IDA-metode ved hjælp af Acquisition Method Editor

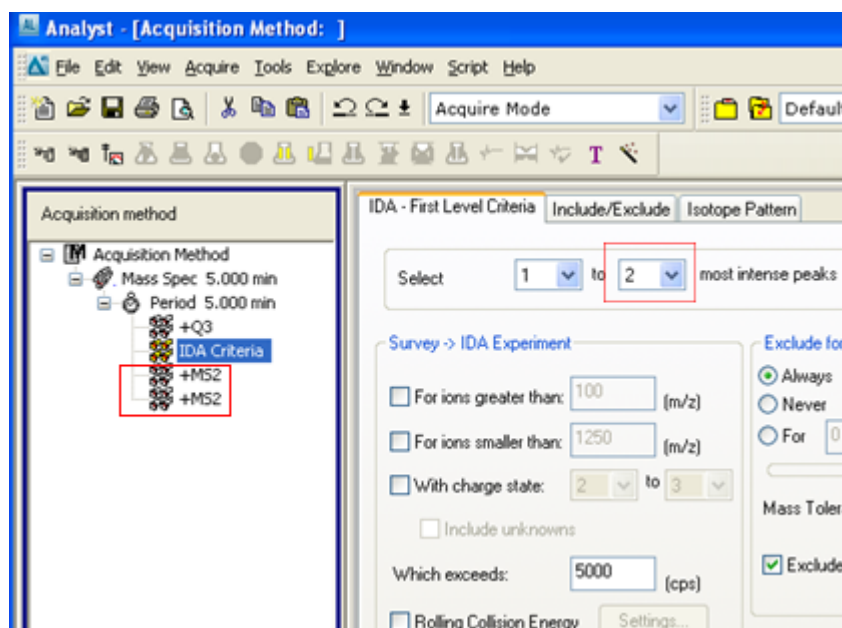
Bemærk: Eksperimenter skal indtastes i den rækkefølge, de skal gennemkøres. Der kan ikke indsættes eksperimenter mellem eksisterende eksperimenter.

Oprettelse af IDA-metoder

Tip! Gruppér alle positive afhængige eksperimenter, og gruppér alle negative afhængige eksperimenter inden for en periode for at reducere behovet for polaritetsskift og minimere cyklustiden.

1. Dobbeltklik på **Build Acquisition Method** på navigationslinjen under **Acquire**.
2. Opret en ny dataopsamlingsmetode med én eller to undersøgelsesscanninger.
3. Vælg undersøgelsesscanningen, og vælg derefter de passende parametre.
4. Hvis du vil bruge en forbedret opløsningsscanning til at bekræfte valg af ladetilstand eller isotopmønster på et QTRAP-system, skal du gøre følgende:
 - Højreklik på ikonet **Period**, og klik derefter på **Add experiment**.
 - Klik på **Enhanced Resolution (ER)** på fanen MS på listen **Scan type**.
 - Indtast de relevante oplysninger for scanningen med udvidet opløsning.
5. Højreklik på ikonet **Period**, og klik derefter på **Add IDA Criteria Level**.
6. I **Select X to Y most intense peaks**-felterne skal du angive området for de mest intense iontoppe, der skal overvåges af det IDA-eksperiment, der skal overvåges. Ved IDA med enkeltundersøgelse skal det samlede antal overvågede toppe være lig med det angivne antal afhængige eksperimenter. For IDA med dobbeltundersøgelse med polaritetskontakt i undersøgelsesscanningerne skal antallet af afhængige eksperimenter være dobbelt så stort som det samlede antal toppe, der skal overvåges, idet halvdelen af dem er i den ene polaritet og den anden halvdel i den modsatte polaritet.

Figur 2-2: Eksempel på en IDA-metode med to afhængige scanningstyper og to mest intense ioner



7. Hvis der anvendes en ER-scanning (forbedret opløsning), skal der tilføjes en pladsholder for hver overvåget top.

Ved ER-pladsholdere skal der indtastes 1 i det midterste (amu 0) vindue. Hvis der overvåges 4 toppe, vil der være 4 rækker med tallene 1, 2, 3 og 4 i den midterste kolonne. Se afsnittet [Om pladsholdere](#) for at få flere oplysninger.

8. Hvis der bruges en ER-scanning til at bekræfte ladetilstand, isotopmønstervalg eller genvinde massenøjagtighed, skal du markere afkrydsningsfeltet **Use Enhanced Resolution Scan to confirm Charge State OR Isotope Pattern Selection** på fanen IDA - First Level Criteria.
9. Angiv resten af parametrene på fanen IDA - First Level Criteria til de påkrævede værdier.
10. Hvis det er nødvendigt, skal du på fanen Include/Exclude ændre den relevante liste for at markere afkrydsningsfelterne **Exclude List** eller **Include List** og derefter angive mål-ioner eller ekskludere ioner.
11. Hvis det er nødvendigt, skal du markere afkrydsningsfeltet **Match Isotopes** på fanen Include/Exclude og derefter angive det isotopfordelingsmønster, der skal matches.
12. Ved det første afhængige forsøg, der skal tilføjes, skal der for hver top, der overvåges af IDA-kriterierne på første niveau, gøres følgende:
 - a. Højreklik på ikonet **Period**, og klik derefter på **Add experiment**.
Der tilføjes et eksperiment under IDA-kriterierne.
 - b. Indtast de relevante oplysninger for den afhængige scanning.

Tip! Hvis der bruges mere end én afhængig scanning, skal du højreklikke på EPI-scanningen og derefter vælge **Copy this experiment**, indtil det korrekte antal afhængige scanninger er inkluderet. Når der kopieres et eksperiment i stedet for at tilføje et, kopieres alle de samme indstillinger til de nye afhængige scanninger.

13. Åbn metoden.
14. Tilføj enhederne, og opdater alle de relevante parametre.
15. Gem filen med dataopsamlingsmetoden.

Oprettelse af en IDA-metode ved hjælp af en *Scheduled* MRM-algoritmescanning

I dette eksempel skal du oprette en IDA-metode, der vil lede efter den mest intense ion fra undersøgelsens scanningstype. Dataopsamlingsmetoden indeholder en undersøgelsesscanning og en afhængig scanning.

Hvis du vil oprette en metode, der har flere afhængige scanninger, skal du sørge for, at antallet af intense toppe matcher antallet af afhængige scanninger på fanen IIDA Criteria (gælder kun for IDA med en enkelt undersøgelse). Hvis metoden f.eks. indeholder tre afhængige scanninger, skal du vælge de 1 til 3 mest intense toppe.

1. Opret et *Scheduled* MRM-eksperiment. Se dokumentet: *Vejledning i Scheduled MRM-algoritmen*.

Bemærk: Når indstillingen Target Cycle Time er valgt til brug i *Scheduled* MRM-eksperimentet, gælder målcyklustiden kun for *Scheduled* MRM-eksperimentet og ikke for alle eksperimenterne inden for IDA-dataopsamlingsmetoden.

Tip! Hvis du vil tilføje en ER-scanningstype, skal du tilføje den, før du tilføjer IDA-kriterierne.

2. Højreklik på ikonet **Period**, og klik derefter på **Add IDA Criteria Level**.
 3. Angiv parametrene **IDA Criteria**.
 4. Højreklik på ikonet **Period**, og klik derefter på **Add experiment**.
 5. Vælg en afhængig scanningstype på fanen MS på listen **Scan type**. I dette eksempel skal du vælge **Product Ion (MS2)** eller **Enhanced Product Ion (EPI)**.
-

Bemærk: For alle afhængige scanningstyper skal **Product Of** være 30 Da.

6. Angiv forsøgsparametrene.
7. Gem dataopsamlingsmetoden i det projekt, hvorfra opsamlingen skal køres.

Oprettelse af en IDA-metode ved hjælp af to *Scheduled* MRM-algoritmescanninger

I dette eksempel skal du oprette en IDA-metode, der leder efter de to mest intense ioner fra begge undersøgelsesscanningeksperimenter kombineret. Eksempeldataopsamlingsmetoden omfatter to undersøgelsesscanningeksperimenter og fire afhængige scanningeksperimenter.

Tip! Se afsnittet [Om polaritetsskift](#), hvis polariteten skiftes under undersøgelsens scanningstyper.

Bemærk: Ved en IDA-dataopsamlingsmetode med dobbelt undersøgelse kan der også bruges to MRM-eksperimenter eller to EMS-eksperimenter (Enhanced MS) til undersøgelsesscanninger.

1. Opret et *Scheduled* MRM-eksperiment. Se trin 1 til trin 7 i *Oprettelse af en Scheduled MRM-algoritme til dataopsamlingsmetode* i dokumentet: *Vejledning i Scheduled MRM-algoritmen*.
 2. Højreklik på ikonet **Period**, og klik derefter på **Add experiment**. Der oprettes en anden MRM-scanning. Angiv den til den modsatte polaritet.
 3. Markér afkrydsningsfeltet **Enabled** i gruppen **Scheduled MRM** for at oprette endnu et *Scheduled* MRM-eksperiment. Se dokumentet: *Vejledning i Scheduled MRM-algoritmen*.
 4. Højreklik på ikonet **Period**, og klik derefter på **Add IDA Criteria Level**.
 5. Angiv parametrene **IDA Criteria**.
 6. Højreklik på ikonet **Period**, og klik derefter på **Add experiment**.
-

- Vælg en afhængig scanningstype på fanen MS på listen **Scan type**. I dette eksempel skal du vælge **Product Ion (MS2)** eller **Enhanced Product Ion (EPI)**.

Bemærk: For alle afhængige scanningstyper skal **Product Of** være 30 Da.

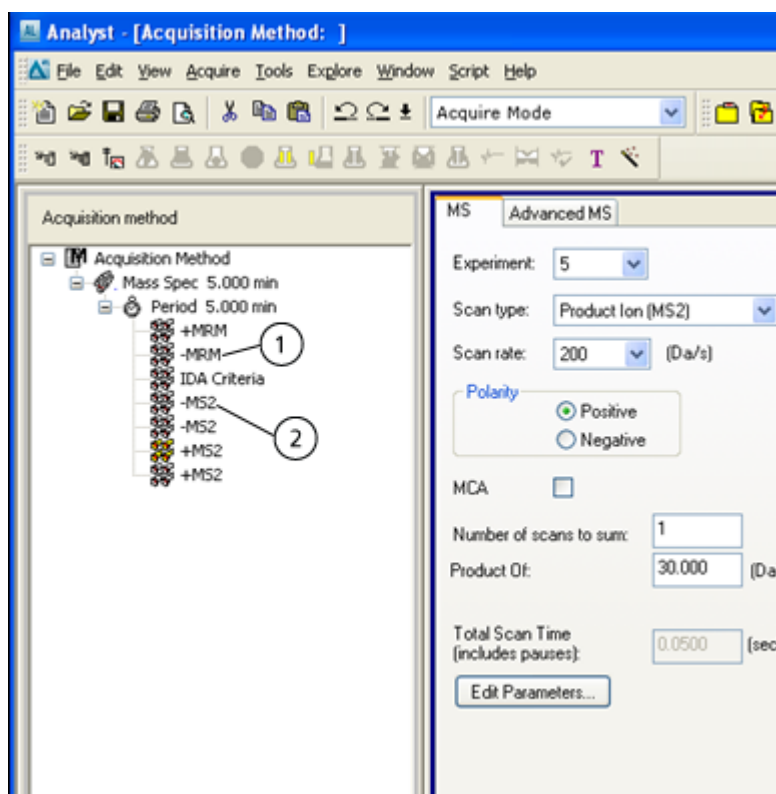
- Angiv forsøgsparametrene.
- Højreklik på eksperimentet **MS2** eller **EPI**, og klik derefter på **Copy this experiment**.
- Gentag trin 9 to gange. Sørg for, at polariteten er angivet, som beskrevet i afsnittet: [Om polaritetsskift](#).
- Gem dataopsamlingsmetoden i det projekt, hvorfra dataopsamlingen skal køres.

Om polaritetsskift

Hvis undersøgelsesscanningerne er i forskellige polariteter, skal du sørge for, at dataopsamlingsmetoden er konfigureret som følger:

- Sørg for, at polariteten for den *første* afhængige scanningstype er den samme som polariteten for den *sidste* undersøgelsesscanningstype.

Figur 2-3: Eksempel på scanningstyper, der er konfigureret til polaritetsskift



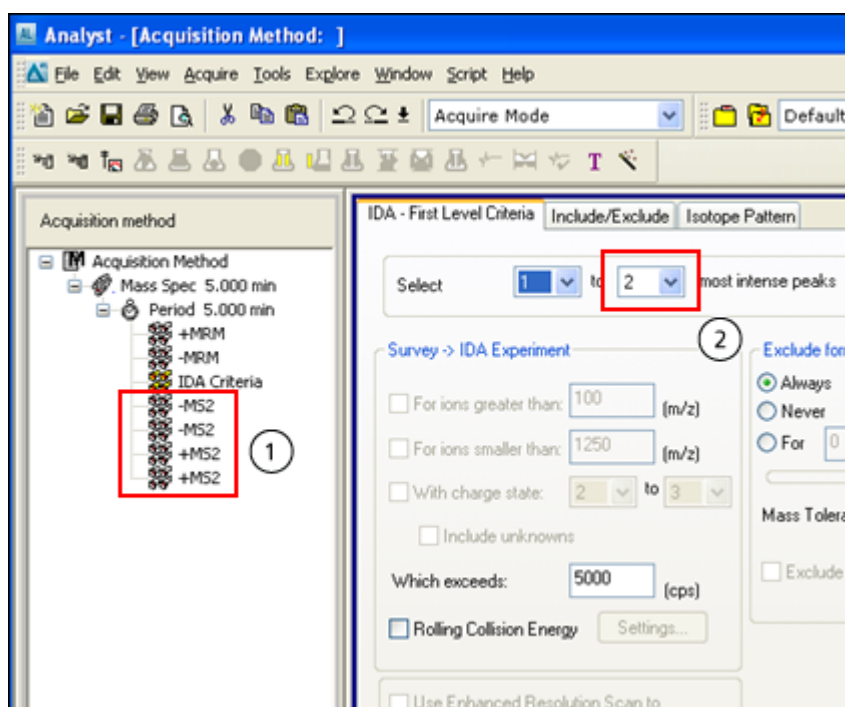
Element	Beskrivelse
1	Sidste undersøgelsesscanning

Oprettelse af IDA-metoder

Element	Beskrivelse
2	Første afhængige scanning

2. Opret en dataopsamlingsmetode, hvor antallet af afhængige scanninger er dobbelt så stort som antallet af de mest intense ioner. Medtag for eksempel fire afhængige scanningstyper for at søge efter de to mest intense ioner.

Figur 2-4: Eksempel på afhængige scanningstyper og antallet af mest intense ioner



Element	Beskrivelse
1	Afhængige scanningstyper (fire)
2	Mest intense ioner (to)

Bemærk: De valgte kandidater udløses kun i de afhængige eksperimenter med samme polaritet. De afhængige scanninger, hvor der ikke er tildelt en kandidat, køres ikke for denne cyklus. Der udløses maksimalt halvdelen af de afhængige eksperimenter i en given cyklus.

3. For hvert afhængigt scanningseksperiment skal du sikre, at indstillingstiden er angivet til nul, hvis dets polaritet er den samme som i det foregående eksperiment.

Om pladsholdere

Pladsholdere er generiske tal, som bruges i scanninger, og som erstattes af specifikke tal. Softwaren erstatter pladsholderværdien med en specifik værdi fra IDA-valgprocessen. Pladsholdere er afgørende for, at IDA-metoderne fungerer korrekt.

Når nogle eksperimenter først er valgt, tilføjes pladsholderværdier automatisk.

- NL, Prec og EPI = 30
- MS/MS/MS
 - Første prækursor = 30
 - Anden prækursor = 10

ER benytter også pladsholdere.

- Pladsholderne starter med 1 i første række i en IDA-metode. Hver efterfølgende række øges med 1 til maksimalt 8 rækker.
- Hvis IDA Method Wizard anvendes, tilføjes det korrekte antal ER-pladsholdere automatisk.

Effekt af *Scheduled* MRM Pro-algoritme på IDA

Hvis der udføres en informationsafhængig dataopsamling (IDA)-undersøgelsesscanning ved hjælp af *Scheduled* MRM Pro-algoritmen, udløses der en afhængig scanning i IDA-metoden kun, når intensiteterne af alle MRM-overgange i en gruppe ligger over deres udløsningstærskelværdier. Dette forbedrer cyklustiden ved at eliminere falske udløsere af afhængige scanninger.

Oprettelse af en IDA-dataopsamlingsmetode for *Scheduled* MRM Pro-algoritmen

1. Opret en *Scheduled* MRM Pro-algortimemetode. Se dokumentet: *Scheduled MRM*.
2. Hvis det er nødvendigt, skal du tilføje et eksperiment af ER-scanningstype, før du tilføjer et IDA-kriterieniveau i perioden.
3. Højreklik på ikonet **Period**, og klik derefter på **Add IDA Criteria Level**.
4. Angiv parametrene for IDA-kriterier. Se afsnittet: [Oprettelse af IDA-metoder](#).
5. Højreklik på ikonet **Period**, og klik derefter på **Add experiment**.
6. Vælg en afhængig scanningstype på fanen MS på listen **Scan type**. I dette eksempel skal du vælge **Product Ion (MS2)** eller **Enhanced Product Ion (EPI)**.

Bemærk: For alle afhængige scanningstyper skal **Product Of** være 30 Da.

7. Angiv forsøgsparametrene.
8. Gem dataopsamlingsmetoden i det projekt, hvorfra dataopsamlingen skal køres.

Bemærk: Under dataopsamling med en IDA-metode for *Scheduled* MRM Pro-algoritme anvendes udløsningstærsklen for hver MRM-overgang i metoden i stedet for IDA-tærsklen.

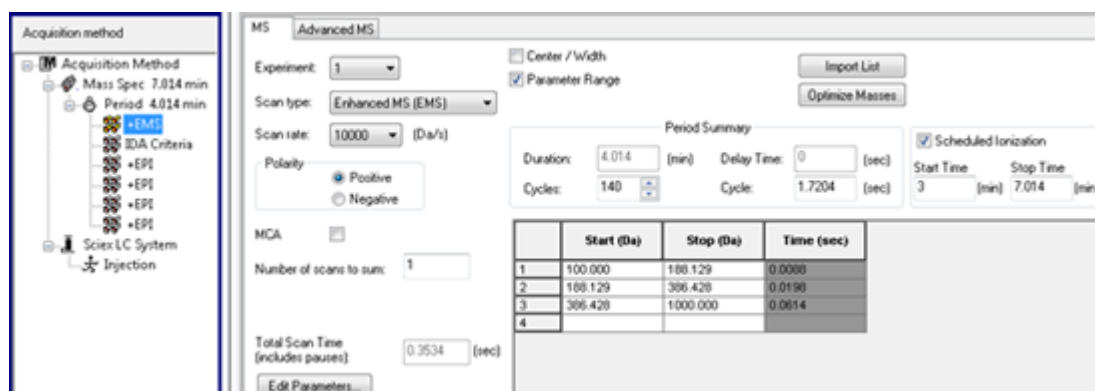
Oprettelse af en IDA-metode ved hjælp af planlagt ionisering

1. Opret en IDA-metode manuelt i Method Editor eller automatisk ved hjælp af **IDA Method Wizard**.
2. Vælg et af eksperimenterne i metoden, og markér derefter afkrydsningsfeltet **Scheduled Ionization**.
3. Indtast passende **Start Time** og **Stop Time** i gruppen **Scheduled Ionization**. Sørg for, at toppene af interesse elueres mellem **Start Time** og **Stop Time**. Sørg også for, at **Synchronization Mode** at LC-delen af dataopsamlingsmetoden er angivet på samme måde, som når **Scheduled Ionization** ikke anvendes.

Bemærk: **Scheduled ionization** er kun tilgængelig i dataopsamlingsmetoder med en enkelt periode.

I følgende figur ses, at **LC Synchronization Mode** anvendes, og at LC-metoden er 10 minutter lang. Alle relevante toppe elueres efter 3 minutter og inden 7 minutter. Der anvendes en **IonSpray**-spænding på 0 før **Start Time** og efter **Stop Time**. Den angivne **IonSpray**-spænding i metoden anvendes kun mellem **Start Time** og **Stop Time**. Funktionen **Scheduled Ionization** kan reducere risikoen for instrumentkontaminering og dermed reducere massespektrometerets nedetid. Se følgende dokument for at få flere oplysninger om **Scheduled Ionization**: *Avanceret brugervejledning*.

Figur 2-5: Planlagt ionisering



4. Gem dataopsamlingsmetoden.

Hvis data indsamles ved hjælp af en IDA-metode, åbnes dataene ikke i IDA-fremviseren, før dataopsamlingen er afsluttet. Men de åbnes i vinduet Explore under dataopsamling.

For at gøre det nemmere at få vist IDA-data skal IDA Explorer angives som standardfremviser. Brug fanen IDA Explorer i dialogboksen Appearance Options for at vælge IDA Explorer, som skal bruges til at vise IDA-data. Brugeren kan også vælge kolonnerne til visningsruden Mass-List. IDA Explorer er forudindstillet til at vise IDA prøver.

Angivelse af indstillinger for IDA Explorer

1. Klik på **Tools > Settings > Appearance Options**.
Dialogen Appearance Options åbnes.
2. Åbn fanen IDA Explorer.
3. Markér afkrydsningsfeltet **Use IDA Explorer to Display IDA Samples**.
4. Markér følgende afkrydsningsfelter i afsnittet **Column Options**:

Tabel 3-1: Kolonneindstillinger

Felt	Beskrivelse
Intensity	(Intensitet)Viser intensiteten for et bestemt m/z -forhold.
Molecular Weight (MW)	(Molekylvægt (MW))Viser den beregnede molekylvægt for et bestemt m/z -forhold.
Scan	(Scanning)Viser den scanningstype, der bruges for et bestemt m/z -forhold.
Collision Energy (CE)	(Kollisionsenergi (CE))Viser den kollisionsenergi, der bruges for et bestemt m/z -forhold.
Charge (Z)	(Ladning (Z))Viser ladningen for en bestemt ion.

5. For et LIT-system skal du i afsnittet **LIT Column Options** markere følgende afkrydsningsfelter:

Tabel 3-2: LIT-kolonneindstillinger

Felt	Beskrivelse
Excitation Energy (AF2)	(Excitationsenergi (AF2))Viser excitationsenergien for den anden moder-ion i MS/MS/MS-eksperimenter.
MS3 2nd Precursor (2nd Pre)	(MS3 2. prækursor (2. præ))Viser den anden MS/MS/MS-moder-ion.

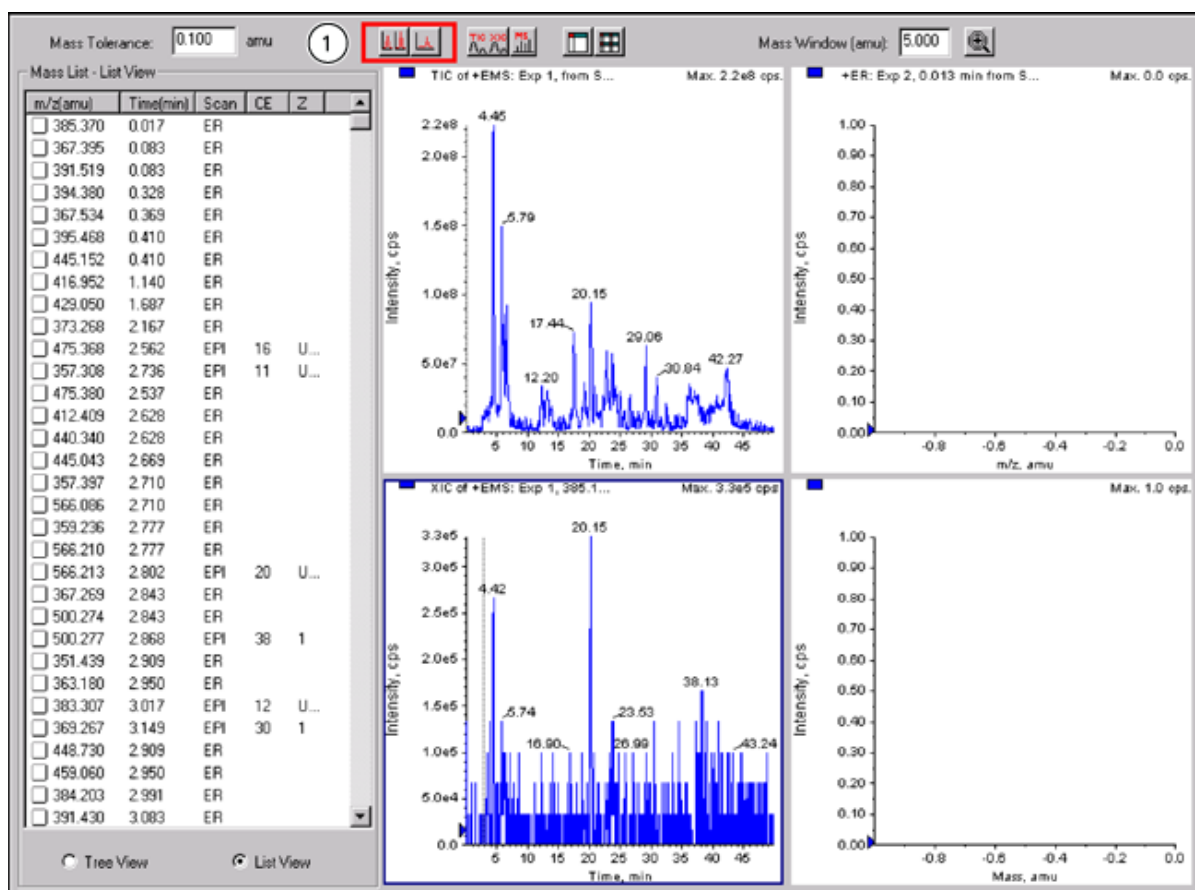
Tabel 3-2: LIT-kolonneindstillinger (fortsat)

Felt	Beskrivelse
DFT (Dynamic Fill Time)	(DFT (Dynamisk fyldningstid))Viser den tid, det har taget at fylde LIT.

Visning af IDA-data

1. Sørg for, at projektet Example er valgt i Analyst MD-softwaren.
2. Dobbeltklik på **Open Data File** på navigationslinjen under **Explore**. Dialogboksen Select Sample åbnes.
3. Dobbeltklik på **LIT** i feltet **Data Files**, og klik derefter på **IDA BSA Digest.wiff**.
4. Klik på en prøve på listen **Samples**, og klik derefter på **OK**. IDA Explorer åbnes. Venstre del af ruden viser en liste over masser, som er sendt til den afhængige scanning. For at skifte mellem visninger skal du vælge **Tree View** eller **List View** nederst i ruden Mass List. Højre del af ruden indeholder grafiske oplysninger om IDA-dataene.

Figur 3-1: Knapper til visning af enkeltgraf og flere grafer



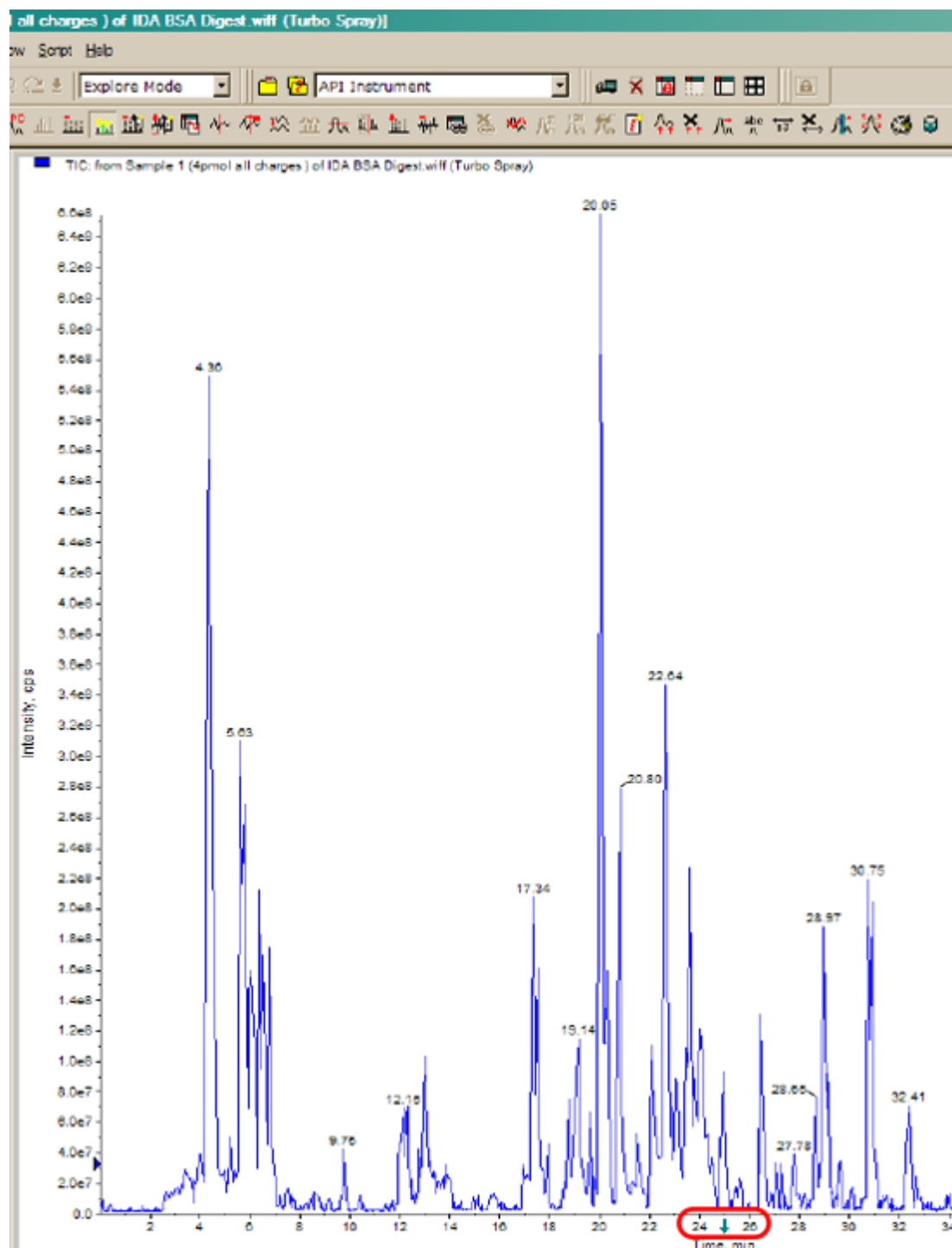
5. Brug de to knapper (punkt 1) over grafen til at skifte mellem en enkelt graf og flere grafer. Hvis du kun vil se den aktive graf, skal du klikke på den knap, som viser én graf. For at gå tilbage til visning af flere grafer skal du klikke på den knap, som viser to grafer.

Tip! For at få adgang til funktioner i tilstanden **Explore**, som ikke er tilgængelige i IDA Viewer, skal du klikke på **Export Active Graph to Explorer** og **Export All Graphs to Explorer** i ruden over graferne for at åbne de aktuelle grafer i vinduet Explore.

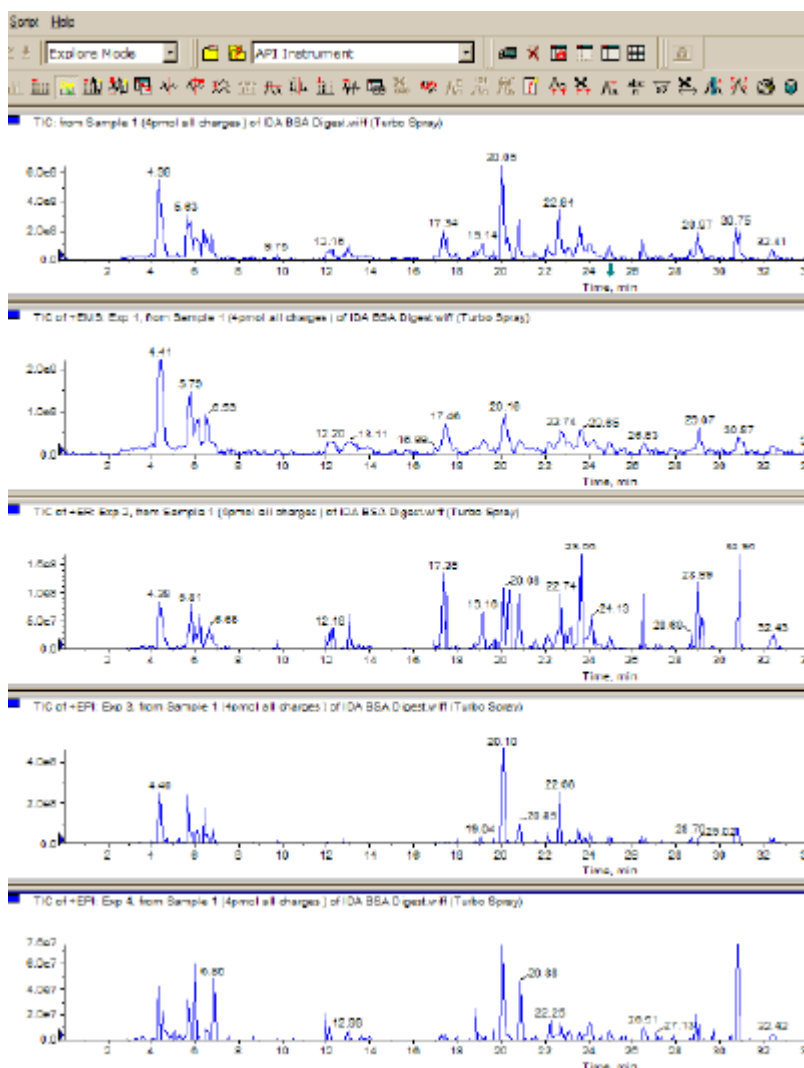
Visning af IDA-data, hvis IDA Explorer ikke er aktiv

Hvis IDA Explorer ikke er aktiv, åbnes IDA-data i vinduet Explore. Dobbeltklik på den grønne pil i bunden af X-aksen for at få vist IDA-dataene.

Figur 3-2: TIC med alle scanninger (IDA-data er vist med pil)



Figur 3-3: Individuelle og additive TIC-scanninger



Om DBS-algoritmen (Dynamic Background Subtraction)

DBS-algoritmen forbedrer detektion af prækursor-ioner i et IDA-eksperiment. Når DBS aktiveres ved at markere afkrydsningsfeltet **After Dynamic Background Subtraction of Survey scan** på fanen IDA – First Level Criteria, bruger IDA et spektrum, som subtraheres i baggrunden for at vælge den interessante kandidat-ion til MS/MS-analyse, i stedet for at vælge prækursoren fra undersøgelsesspektret direkte. Da denne proces foregår under LC-analyse, aktiverer DBS detektion af arter, idet deres signaler øges i intensitet og fokuserer derved på detektion og analyse af prækursor-ionerne i den stigende del af LC-toppen, op til toppen af LC-toppene (maksimal intensitet).

Når DBS anvendes i en IDA-metode med *Scheduled* MRM-algoritmen som undersøgelsesscanning, er DBS-indstillingen ikke tilgængelig i *Scheduled* MRM-

eksperimenter, men bruges til at udløse både de sekundære overgange og de afhængige scanninger.

Om dynamisk fyldningstid

DFT (dynamisk fyldningstid) er en funktion, som er specifikt designet til at optimere de data, der er indhentet i alle spektraler for LIT-funktionerne. DFT justerer automatisk den tid, der bruges til at fylde LIT, på baggrund af ionstrømmen fra kilden.









Ved mere intense ioner reduceres fyldningstiden automatisk for at sikre, at LIT ikke overfyldes med ioner. Ved mindre intense ioner øges fyldningstiden automatisk for at sikre, at der opnås god ionstatistik i spektret. DFT kan anvendes for følgende scanningstyper:

- Forbedret MS (EMS)
- Forbedret opløsning (ER)
- Forbedret produkt-ion (EPI)
- MS/MS/MS (MS³)

Brugerne kan justere DFT-indstillingerne ved at vælge **Tools > Settings > Method Options** i Analyst MD-softwaren.

Ikoner

Tabel 3-3: Ikoner for redigering af dataopsamlingsmetode

Ikon	Navn	Beskrivelse
	Mass Spec	Klik for at få vist fanen MS i Acquisition Method-editoren.
	Period	Højreklik for at tilføje et eksperiment, tilføje en IDA Criteria Level eller slette perioden.
	Autosampler	Klik for at åbne fanen Autosampler Properties.
	Syringe Pump	Klik for at åbne fanen Syringe Pump Properties.
	Column Oven	Klik for at åbne fanen Column Oven Properties.
	Valve	Klik for at åbne fanen Valve Properties.
	DAD	Klik for at åbne DAD Method Editor.
	ADC	Klik for at åbne fanen ADC Properties.

Kontakt os

Kundeuddannelse

- I Nordamerika: NA.CustomerTraining@sciex.com
- I Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Uden for EU og Nordamerika kan du besøge sciex.com/education for at få kontaktoplysninger.

Online-læringscenter

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

SCIEX

SCIEX og dets repræsentanter har et personale af fuldt uddannede service- og tekniske specialister, der er placeret over hele verden. De kan besvare spørgsmål om systemet eller eventuelle tekniske problemer, der måtte opstå. Besøg SCIEX hjemmeside på sciex.com eller kontakt os på en af følgende måder for at få yderligere oplysninger:

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

Cybersikkerhed

Besøg [SCIEXsciex.com/productsecurity](http://sciex.com/productsecurity)-produkter.

Dokumentation

Denne version af dokumentet overgår alle tidligere versioner af dette dokument.

Hvis du vil se dette dokument elektronisk, er Adobe Acrobat Reader påkrævet. Gå til <https://get.adobe.com/reader> for at downloade den seneste version.

Se udgivelsesbemærkninger eller software installationsvejledning, der følger med softwaren, for at finde software produktdokumentation.

For at finde hardwareproduktdokumentation henvises der til *kundereference*-DVD'en, der følger med systemet eller komponenten.

Bemærk: Kontakt sciex.com/contact-us for at anmode om en gratis, trykt version af dette dokument.
