
Analyst MD Software

Skripthandbuch



Dieses Dokument wird Käufern eines SCIEX-Geräts für dessen Gebrauch zur Verfügung gestellt. Dieses Dokument ist urheberrechtlich geschützt und jegliche Vervielfältigung dieses Dokuments, im Ganzen oder in Teilen, ist strengstens untersagt, sofern keine schriftliche Genehmigung von SCIEX vorliegt.

IVD

Die in diesem Dokument beschriebene Software unterliegt einer Lizenzvereinbarung. Das Kopieren, Ändern oder Verbreiten der Software auf einem beliebigen Medium ist rechtswidrig, sofern dies nicht ausdrücklich durch die Lizenzvereinbarung genehmigt wird. Darüber hinaus kann es nach der Lizenzvereinbarung untersagt sein, die Software zu disassemblieren, zurückzuentwickeln oder zurückzuübersetzen. Es gelten die aufgeführten Garantien.

Teile dieses Dokuments können sich auf andere Hersteller und/oder deren Produkte beziehen, die wiederum Teile enthalten können, deren Namen als Marken eingetragen sind und/oder die Marken ihrer jeweiligen Inhaber darstellen. Jede Nennung solcher Marken dient ausschließlich der Bezeichnung von Produkten eines Herstellers, die von SCIEX für den Einbau in die eigenen Geräte bereitgestellt werden, und bedeutet nicht, dass eigene oder fremde Nutzungsrechte und/oder -lizenzen zur Verwendung derartiger Hersteller- und/oder Produktnamen als Marken vorliegen.

CE

Die Garantien von SCIEX beschränken sich auf die zum Verkaufszeitpunkt oder bei Erteilung der Lizenz für die eigenen Produkte ausdrücklich zuerkannten Garantien und sind die von SCIEX alleinig und ausschließlich zuerkannten Zusicherungen, Garantien und Verpflichtungen. SCIEX gibt keinerlei andere ausdrückliche oder implizite Garantien wie beispielsweise Garantien zur Marktgängigkeit oder Eignung für einen bestimmten Zweck, unabhängig davon, ob diese auf gesetzlichen oder sonstigen Rechtsvorschriften beruhen oder aus Geschäftsbeziehungen oder Handelsbrauch entstehen, und lehnt alle derartigen Garantien ausdrücklich ab; zudem übernimmt SCIEX keine Verantwortung und Haftungsverhältnisse, einschließlich solche in Bezug auf indirekte oder nachfolgend entstehenden Schäden, die sich aus der Nutzung durch den Käufer oder daraus resultierende widrige Umstände ergeben.

UK
CA

Zur Verwendung in der *In-vitro*-Diagnostik. Das Produkt/die Produkte ist/sind nicht in allen Ländern verfügbar. Weitere Informationen erhalten Sie von Ihrem lokalen Vertriebspartner oder unter sciex.com/diagnostics.

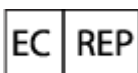
Rx only.

Ein oder mehrere Produkte sind möglicherweise nicht in allen Ländern erhältlich. Weitere Informationen erhalten Sie von Ihrem Vertriebspartner vor Ort oder unter sciex.com.

Die hier erwähnten Marken und/oder eingetragenen Marken, einschließlich deren Logos, sind Eigentum der AB Sciex Pte. Ltd. oder ihrer jeweiligen Inhaber in den Vereinigten Staaten und/oder anderen Ländern (siehe sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ wird unter Lizenz verwendet.

© 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

Inhalt

Kapitel 1: Vorwort	5
Zielgruppe	5
Technischer Support	5
Kapitel 2: Skripte	6
Installieren oder Deinstallieren von Skripten	6
Installieren eines Skripts	6
Deinstallieren eines Skripts	6
Erstellen von Quantifizierungsmethoden und Textdateien	7
Verwenden des Skripts „Create Quan Methods From Text Files“	7
Verwenden des Skripts „Create Text File from Quan Method“	9
Textdateiformat	10
DFT Tracker	14
Das Skript „MRM3 Optimization“	15
Das Fenster „MRM3 Optimization“ – Übersicht	15
Optimierung in Bearbeitung	20
Abgeschlossene Optimierung	22
Detaillierte Beschreibung des Skriptaufbaus: Initialisierung	24
Scan „Enhanced Resolution“	24
Q1 Multi-Ionen-Scan	24
Scan „Enhanced Product Ion“	25
Scan „Multiple Reaction Monitoring“	25
MS/MS/MS-Scan (MS3)	25
„Generate Final Methods“	26
MSServiceLog-Skript	26
Installieren des Skripts	26
Verwenden des Skripts	27
sMRM Calculator	28
Installieren des Skripts	29
Verwenden des Skripts	29
Kontaktangaben	34
Kundenschulung	34
Online-Lernzentrum	34
SCIEX Support	34
Cybersicherheit	34
Dokumentation	34

Zielgruppe

Diese Anleitung ist an Kunden und Außendienstmitarbeiter (FSEs) gerichtet.

Technischer Support

SCIEX und seine Vertretungen beschäftigen weltweit einen Stab an ausgebildeten Servicekräften und technischen Spezialisten. Der Support kann Fragen zum System oder anderen auftretenden, technischen Problemen beantworten. Für weitere Informationen besuchen Sie die Website unter sciex.com.

In diesem Dokument wird die Installation und Verwendung von Analyst MD Softwareskripten erklärt. Außerdem bietet es einen Überblick über die Verwendung jedes Skripts und wie ein Skript bei Bedarf deinstalliert werden kann.

Installieren oder Deinstallieren von Skripten

Manche Skripte werden automatisch installiert, wenn die Analyst MD-Software installiert ist.

Alle übrigen Skripte stehen im Ordner „Scripts“ zur Verfügung.

Skripte müssen installiert sein, damit sie verwendet werden können. Siehe Abschnitt: [Installieren eines Skripts](#).

Installieren eines Skripts

1. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
 - Navigieren Sie auf dem Computer zum Ordner `<Drive>:\Program Files\Analyst\Scripts`.
 - Navigieren Sie auf der Software-DVD zum Ordner `Extras\Scripts` (falls verfügbar) oder im entpackten Web-Download-Paket der Software.
2. Öffnen Sie den Ordner „Scripts“.
3. Führen Sie einen der folgenden Schritte aus:
 - Doppelklicken Sie für das sMRM Calculator-Skript auf **sMRM Calculator Setup.exe**.
 - Für alle anderen Skripte doppelklicken Sie auf **ScriptRunner.exe**.
4. Folgen Sie den Anweisungen auf dem Bildschirm, um die Skripte zu installieren. Die installierten Skripte sind über das Menü **Script** verfügbar.

Deinstallieren eines Skripts

Hinweis: Deinstallieren Sie nicht die Skripte „DFTTracker“ und „MRM3 Optimization“. Wenn diese Skripte entfernt werden, muss die Analyst MD Software erneut installiert werden, um auf diese Skripte zugreifen zu können.

Um das Skript zu deinstallieren, führen Sie einen der folgenden Schritte aus:

- Für die Skripte „Create Quan Methods From Text Files“, „Create Text File from Quant Method“ und „MSServiceLog“ navigieren Sie zum Ordner `<drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Processing Scripts` und löschen Sie script dll manuell.
- Gehen Sie beim sMRM Calculator-Skript folgendermaßen vor:

- Klicken Sie bei einem Windows 7 Betriebssystem auf **Start > All Programs > Control Panel > Programs and Features**.
- Klicken Sie bei einem Windows 10 Betriebssystem auf **Start > Control Panel > Programs and Features**.
- Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf **sMRM Calculator** und dann auf **Uninstall**.
- Folgen Sie den Anweisungen auf dem Bildschirm.

Erstellen von Quantifizierungsmethoden und Textdateien

Das Skript „Create Text File from Quan Method“ exportiert eine Quantifizierungsmethode in eine tabulatorgetrennte Textdatei. Das Skript „Create Quan Methods From Text Files“ importiert die in einer tabulatorgetrennten Textdatei enthaltenen Informationen in ein Quantitation Method File (qmf). Derzeit unterstützt die Komponente „Build Quantitation Method“ in der Analyst MD Software diese Funktion nicht.

Das Skript „Create Text File from Quan Method“ erstellt eine Quantifizierungsmethodendatei als Darstellung in Form einer Textdatei. Für jedes erforderliche Feld wird eine Spalte in der Textdatei erstellt, wenn das Kontrollkästchen **Export all columns** markiert ist. Wenn das Kontrollkästchen nicht aktiviert wurde, erzeugt das Skript die Textdatei nur mit Spalten für die Felder, in denen der Feldwert nicht für alle Peaks gleich ist.

Das Skript „Create Quan Method From Text Files“ gibt Standardwerte für jedes der nicht erforderlichen Felder in der Textdatei an, wie zum Beispiel für den Integrationsalgorithmus oder die Regressionsparameter. Weitere Informationen finden Sie im Abschnitt: [Textdateiformat](#).

Verwenden des Skripts „Create Quan Methods From Text Files“

1. Klicken Sie auf **Script > Create Quan Methods From Text Files**.

Abbildung 2-1: Dialogfeld „Create Quantitation Methods from Text Files“

Create Quantitation Methods from Text Files

Default Generic Parameters

Algorithm: **Analyst Classic (TurboChrom)**

Extraction Type: **MRM** Period: **1** Experiment: **1**

Expected RT: **0.1** min RT Window: **30** sec ☐ Use Relative RT

Bkg. Start (min): **0** Bkg. End (min): **0**

Conc. Units: Calc. Conc. Units:

Default Analyst Classic (TurboChrom) Parameters

Bunching Factor: **1** Noise Threshold: **100** Area Threshold: **200**

Num. Smooths: **0** Separation Width: **0.2** Separation Height: **0.01**

Exp. Peak Ratio: **5** Exp. Adjusted Ratio: **4** Exp. Valley Ratio: **3**

Default General IntelliQuan Parameters

Min. Peak Height: **0** cps

Min. Peak Width: **0** sec

Smoothing Width: **0** points

Default IntelliQuan MQ III Parameters

Noise Percent: **50** %

Base. Sub. Window: **1** min

Peak-Splitting Factor: **2**

☐ Report Largest Peak

Regression Parameters

Fit: **Linear**

Weighting: **None**

Parameter: **Area**

Iterate: **No**

Default Window Summation Parameters

☒ Use Baseline Subtraction

Create One Method **Cancel**

Create Multiple Methods

2. Verwenden Sie die Parameter im Abschnitt „Default Generic Parameters“, um eine Quantifizierungsmethode zu erstellen. Die Felder **Algorithm**, **Extraction Type**, **Period** und **Experiment** sind in der Analyst MD Software nicht verfügbar. Stellen Sie die folgenden Parameter nach Bedarf ein:
 - Wählen Sie einen Peak-Finder-Algorithmus aus der Liste **Algorithm** aus. Der „Window Summation“-Algorithmus summiert alle Intensitäten in Retentionsgrenzwert und findet keine Peaks.
 - Wählen Sie aus der Liste **Extraction Type** den Datentyp aus, der integriert werden soll.
 - Wählen Sie aus den Listen **Period** und **Experiment** die Zeitabschnitts- und Experimentnummer aus.

Die Gruppen „Default Analyst Classic Parameters“, „Default General IntelliQuan Parameters“, „Default IntelliQuan MQ III Parameters“ und „Default Window Summation Parameters“ enthalten die Parameter, die von dem im Feld **Algorithm** ausgewählten Algorithmus verwendet werden.

3. Markieren Sie das Kontrollkästchen **Use Baseline Subtraction**, damit der „Window Summation“-Algorithmus die Intensitäten zur horizontalen Linie an der minimalen

Intensität der Datenpunkte summiert, im Gegensatz zur Summierung nach unten zur Null-Intensität.

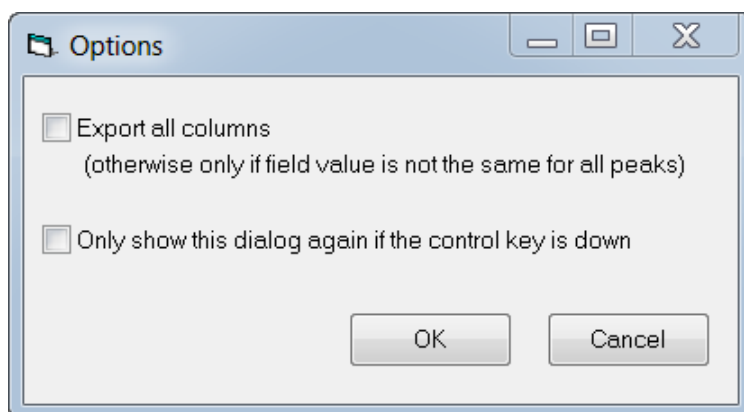
4. Wählen Sie die Regressionsinformationen im Abschnitt „Regression Parameters“ aus. Die hier angegebenen Informationen werden auf alle Analytpeaks angewendet. Im Gegensatz zu den vorherigen Parametern kann diese Information nicht in den Textdateien angegeben werden. Darum werden dieselben Regressionsparameter auf alle Analyten angewandt. Eine vollständige Beschreibung der Parameter finden Sie im Dokument: *Hilfe*.
5. Um eine Quantifizierungsmethode zu erstellen, klicken Sie auf **Create One Method**, navigieren dann zu der Textdatei, die zur Erstellung der Quantifizierungsmethode verwendet werden soll und klicken dann auf **Open**.
Es wird eine Quantifizierungsmethodendatei im Format qmf mit dem gleichen Dateinamen wie die txt-Datei erstellt, wenn die Textdatei das korrekte Format hat und die erforderlichen Spalten enthält. Die erstellte Quantifizierungsmethode wird im Ordner `Quantitation Methods` unter dem aktuellen Arbeitsprojekt in der Analyst MD Software gespeichert, ungeachtet des Speicherorts der Textdatei.
6. Um mehrere Methoden aus mehreren Textdateien zu erstellen, klicken Sie auf **Create Multiple Methods**, navigieren zu dem Ordner, in dem sich die Textdateien befinden und klicken dann auf **OK**.

Es wird jeweils eine Quantifizierungsmethodendatei im Format qmf mit dem gleichen Dateinamen wie die txt-Datei für jede einzelne Textdatei in dem Ordner erstellt, wenn sie das korrekte Format haben und die erforderlichen Spalten enthalten. Die erstellten Quantifizierungsmethoden werden im Ordner `Quantitation Methods` unter dem aktuellen Arbeitsprojekt in der Analyst MD Software gespeichert, ungeachtet des Speicherorts der Textdateien.

Verwenden des Skripts „Create Text File from Quan Method“

1. Erstellen und speichern Sie eine Quantifizierungsmethode in der Analyst MD Software.
2. Klicken Sie auf **Script > Create Text File from Quan Method**.

Abbildung 2-2: Dialogfeld „Options“ (Optionen)



3. Aktivieren Sie das Kontrollkästchen **Export all columns** und klicken Sie dann auf **OK**.
4. Navigieren Sie dann zur Datei der Quantifizierungsmethode (qmf) und wählen Sie sie aus.
5. **Navigieren** Sie dann zum Speicherort der Textdatei und wählen Sie sie aus.
Das Skript erzeugt die Textdatei mit allen Spalten. Wenn das Kontrollkästchen **Export all columns** in Schritt 3 nicht markiert wurde, erstellt das Skript die Textdatei nur mit den Spalten für die Felder, in denen der Feldwert nicht bei allen Peaks gleich ist.

Textdateiformat

Die Textdateien, die zur Erstellung der Quantifizierungsmethoden („Create Quan Methods from Text Files“) verwendet und aus den Methoden („Create Quan Methods from Text Files“) erzeugt werden, haben folgendes Format:

- Trennen Sie die einzelnen Felder mit Tabulatorzeichen und schließen Sie jede Zeile mit Zeilenumbruch oder Zeilenvorschubzeichen ab.
- In der ersten Zeile der Datei müssen die Spaltenüberschriften stehen. Alle in der folgenden Tabelle aufgeführten Spalten, die als „Erforderlich“ markiert sind, müssen vorhanden sein. Die übrigen Spalten sind optional. Die tatsächliche Reihenfolge der Spalten ist nicht wichtig.
- Jede folgende Zeile muss die Informationen wie in der Tabelle angegeben entweder für einen Analyt oder einen internen Standardpeak enthalten.

Tabelle 2-1: Textdateiformate

Spaltenname	Erforderlich	Beschreibung
Peak Name	Ja	Die Bezeichnung des Analyten oder internen Standardpeaks.
First Mass	Ja	Bei MRM-Daten die Q1-Masse für den Peak. Bei Voll-Scan-Daten die Startmasse für das zu integrierende XIC. Bei Q1-MI- oder Q3-MI-Daten die Masse.
Second Mass	Eventuell	Dieses Feld ist bei der Integration von Voll-Scan- oder MRM-Daten erforderlich, aber nicht bei Q1-MI- oder Q3-MI-Daten. Bei MRM-Daten ist dies die Q3-Masse für den Peak. Bei Voll-Scan-Daten ist dies die Endmasse für das zu integrierende XIC.
Extraction Type	Nein	Die Art der zu integrierenden Daten. Falls vorhanden, sollte einer der folgenden Werte verwendet werden: 0 - MRM-Daten 1 - Q1-MI- oder Q3-MI-Daten 2 - Voll-Scan-Daten

Tabelle 2-1: Textdateiformate (Fortsetzung)

Spaltenname	Erforderlich	Beschreibung
Is IS	Nein	Gibt an, ob der aktuelle Peak ein interner Standard oder ein Analyt ist. TRUE, wenn der Peak ein interner Standard ist. Andernfalls FALSE. Wenn diese Spalte nicht vorhanden ist, wird von allen Peaks angenommen, dass sie Analyten sind. Hinweis: Interne Standardpeaks müssen in der Textdatei vor allen Analytpeaks definiert werden, die dieses IS nutzen.
Name des IS	Nein	Bei Analytpeaks wird der Name des entsprechenden internen Standards angegeben (falls vorhanden). Wenn ein bestimmter Analyt keinen internen Standard verwendet, dann lassen Sie dieses Feld leer. Bei internen Standardpeaks selbst wird der Inhalt dieses Feldes ignoriert.
Period	Nein	Die Zeitabschnittsnummer für den Peak (von 1 bis zur Anzahl der Zeitabschnitte in den Daten).
Versuch	Nein	Die Experimentnummer für den Peak (von 1 bis zur max. Anzahl von Experimenten im jeweiligen Zeitabschnitt).
Use Relative RT	Nein	Für Analytpeaks, die einen internen Standard verwenden, gibt dies an, ob die erwartete Retentionszeit relativ zur Retentionszeit des IS ist oder nicht. Falls ja, dann TRUE. Andernfalls FALSE. Der Inhalt dieser Feld wird von anderen Peaks ignoriert, aber muss dennoch TRUE oder FALSE enthalten.
Conc Units	Nein	Die Konzentrationseinheiten.
Calc Conc Units	Nein	Die berechneten Konzentrationseinheiten.
Bkg Start	Nein	Startzeit in Minuten für den Peakhintergrund. Dieser Parameter beeinträchtigt die Peakintegration in keiner Weise, aber beeinflusst, wie das Rauschen, und damit S/N, berechnet wird.
Bkg End	Nein	Endzeit in Minuten für den Peakhintergrund.
Expected RT	Nein	Die erwartete Retentionszeit in Minuten von 0 bis 1666.
RT Window	Nein	Das Retentionszeitfenster in Sekunden von 1 bis 1000.

Tabelle 2-1: Textdateiformate (Fortsetzung)

Spaltenname	Erforderlich	Beschreibung
Algorithm	Nein	Gibt an, welche Peak-Finder- und Integrationsalgorithmen verwendet werden sollen. Falls vorhanden, sollte einer der folgenden Werte verwendet werden: 0 - Analyst Classic (TurboChrom) 1 - IntelliQuan - IQA II (Automatisch) 2 - IntelliQuan - MQ III 3 - Window Summation
Bunching Factor	Nein	(TurboChrom-Algorithmus) Der Bündelungsfaktor für den Peak, von 1 bis 100.
Num Smooths	Nein	(TurboChrom-Algorithmus) Die Anzahl der Glättungen, von 0 bis 10.
Noise Threshold	Nein	(TurboChrom-Algorithmus) Der Rausch-Schwellenwert, von 1-6 bis 19.
Area Threshold	Nein	(TurboChrom-Algorithmus) Der Flächenschwellenwert, von 1-6 bis 112.
Separation Width	Nein	(TurboChrom-Algorithmus) Die Trennungsbreite, von 0 bis 5.
Separation Height	Nein	(TurboChrom-Algorithmus) Die Trennungshöhe, von 0 bis 1.
Exp Peak Ratio	Nein	(TurboChrom-Algorithmus) Das exponentielle Peakverhältnis, von 1 bis 16.
Exp Adjusted Ratio	Nein	(TurboChrom-Algorithmus) Das angepasste exponentielle Peakverhältnis, von 2 bis 16.
Exp Valley Ratio	Nein	(TurboChrom-Algorithmus) Das exponentielle Talverhältnis, von 1 bis 16.
Min Height	Nein	Die zulässige Mindestpeakhöhe, von 0 bis 116, bei Verwendung des IntelliQuan-Algorithmus.
Min Width	Nein	(IntelliQuan-Algorithmus) Die zulässige Mindestpeakbreite, von 0 bis 116, in Sekunden.
Smooth Width	Nein	(IntelliQuan-Algorithmus) Die halbe Breite des Savitzky-Golay-Glättungsfilters, von 0 bis 20.
MQ III Noise Percent	Nein	(IntelliQuan-Algorithmus) Der Rauschprozentsatz bei Verwendung der MQ-III-Option. Dies muss eine Ganzzahl zwischen 0 und 100 sein.

Tabelle 2-1: Textdateiformate (Fortsetzung)

Spaltenname	Erforderlich	Beschreibung
MQ III Baseline Sub Window	Nein	(IntelliQuan-Algorithmus) Das Basisliniensubtraktionsfenster, von 0 bis 10 Minute, bei Verwendung der MQ-III-Option.
MQ III Peak Splitting Factor	Nein	(IntelliQuan-Algorithmus) Der Peak-Splitting-Faktor, von 0 bis 10, bei Verwendung der MQ-III-Option.
MQ III Use Largest	Nein	(IntelliQuan-Algorithmus) Gibt bei Verwendung der MQ-III-Option an, ob der größte Peak innerhalb des Retentionszeitfensters oder der Peak, dessen Retentionszeit am nächsten an der erwarteten Zeit liegt, gemeldet wird. TRUE, um den größten Peak zu verwenden und FALSE, um den nächsten zu verwenden.
Summation Baseline Sub	Nein	(Spezieller Fenstersummierungsalgorithmus) Gibt an, ob der Bereich in die Zeile Intensity=0 oder in den Intensitätswert des am wenigsten intensiven Datenpunkts innerhalb des Fensters integriert werden soll. TRUE, wenn der Bereich in den Intensitätswert des am wenigsten intensiven Datenpunkts integriert werden soll, oder FALSE, wenn der Bereich in die Zeile Intensity=0 integriert werden soll.

Die folgende Tabelle zeigt eine Beispieltextdatei für Voll-Scan-Daten. Die Textdatei enthält Tabulatoren zwischen den Spalten und einen Zeilenumbruch am Ende jeder Zeile.

Tabelle 2-2: Beispieltextdatei für Voll-Scan-Daten

Peak Name	First Mass	Second Mass	Bunching Factor
Analyte Peak 1	500.1	500.7	1
Analyte Peak 2	812	813	2
Analyte Peak 3	400	401	3

Die folgende Tabelle zeigt ein weiteres Beispiel für MRM-Daten. „Analyte Peak 1“ ist so konfiguriert, dass es den angegebenen internen Standard verwendet, und „Analyte Peak 2“ verwendet keinen internen Standard.

Tabelle 2-3: Beispieltextdatei für MRM-Daten

Peak Name	Is IS	Name des IS	First Mass	Second Mass
IS Peak 1	TRUE	—	500.1	413.2
Analyte Peak 1	FALSE	IS Peak 1	600.2	382.1

Tabelle 2-3: Beispieltextdatei für MRM-Daten (Fortsetzung)

Peak Name	Is IS	Name des IS	First Mass	Second Mass
Analyte Peak 2	FALSE	IS Peak 1	400	312.1

Die folgende Tabelle enthält eine Mischung aus Voll-Scan- und MRM-Daten in verschiedenen Experimenten:

Tabelle 2-4: Beispieltextdatei für MRM-Daten

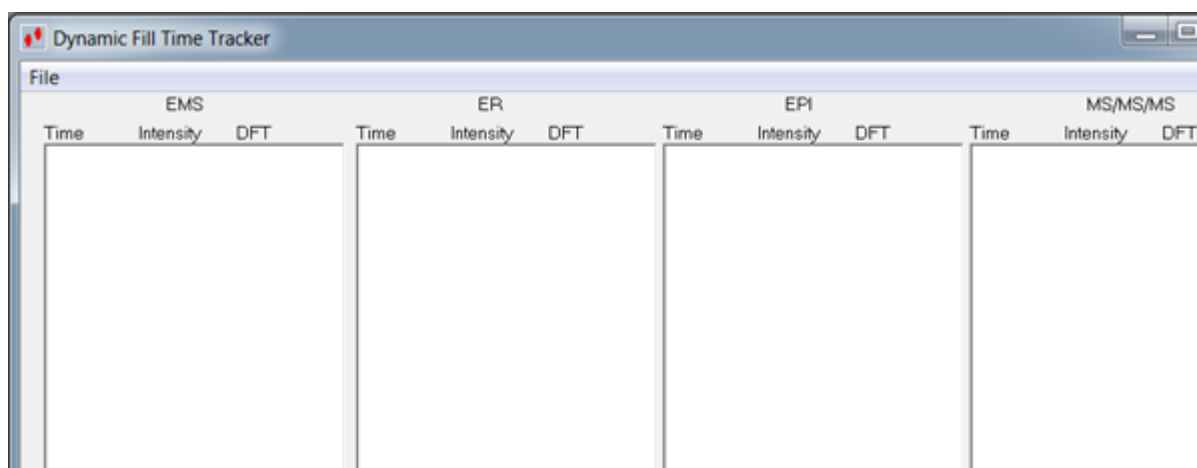
Peak Name	Extraction Type	Versuch	First Mass	Second Mass
Analyte Peak 1	0	1	500.1	413.2
Analyte Peak 2	0	1	600.2	382.1
Analyte Peak 3	2	2	812	813
Analyte Peak 4	2	2	400	401

DFT Tracker

Das Dynamic Fill Time (DFT) Tracker-Skript verfolgt die DFT-Einstellungen, die bei QTRAP System-Scans verwendet werden. Sie können mit dem Skript die optimale Füllzeit für den linearen Ionenfallen (LIT)-Modus bestimmen, um eine hohe Datenqualität über einen weiten Dynamikbereich zu erhalten. Der DFT Tracker überwacht die folgenden LIT-Scantypen: „Enhanced MS“ (EMS), „Enhanced Resolution“ (ER), „Enhanced Product Ion“ (EPI) und „MS/MS/MS“ (MS3).

- Klicken Sie auf **Script > DFTTracker**.

Abbildung 2-3: Dialogfeld „Dynamic Fill Time Tracker“



DFT Tracker überwacht die dynamischen Veränderungen bei der Füllzeit während eines Echtzeitlaufs.

Das System berechnet dynamisch die erforderliche Zeit für das Füllen der linearen Ionenfalle. Für reichlich vorhandene Verbindungen reduziert eine kurze Füllzeit die Raumladungseffekte durch Begrenzung der Anzahl der Ionen in der Ionenfalle. Eine längere Füllzeit erhöht schwache Signale, indem sich die Ionen ansammeln können.

- Klicken Sie auf **File > Save**, um die nachverfolgte Füllzeit zu speichern.
- Klicken Sie auf **File > Clear**, um die nachverfolgte Füllzeit zu löschen.
- Klicken Sie auf **File > Always On Top**, um das Fenster „Dynamic Fill Time Tracker“ immer über allen anderen geöffneten Fenstern oder Anwendungen zu halten.
- Klicken Sie auf **File > Exit**, um das DFT Tracker-Skript zu beenden.

Das Skript „MRM3 Optimization“

Verwenden Sie dieses Skript zur Quantifizierungsanalyse bei QTRAP Systemen, um eine erhöhte Spezifität und damit eine verbesserte Erkennung bei der Quantifizierung von Analyten in komplexen Matrices zu erhalten. Dieses Skript ist so konzipiert, dass eine optimale MS3 Erfassungsmethode mit Infusion generiert wird. Das Skript führt die folgenden Optimierungsschritte aus:

- Bestätigen der Vorläufermasse
- Optimieren der Übertragung in die Kollisionszelle
- Bestimmen der wichtigsten Fragmentionen
- Optimieren der Collision Energy (CE) (Kollisionsenergie) für jedes Fragmention
- Durchführen eines MS3-Scans für jedes Fragmention
- Optimieren der Anregungsenergie (AF2) für alle MS3-Scans
- Generieren eines Berichts
- Speichern aller Daten und Erfassungsmethoden

Das Skript kann auch bei qualitativen Anwendungen verwendet werden, um Sammlungen von MS/MS-Spektren und MS3-Spektren für Verbindungen in einer halbautomatischen Weise (d. h. eine Verbindung nach der anderen) zu erzeugen.

Das Fenster „MRM3 Optimization“ – Übersicht

Mit den Steuerelementen im Fenster „MRM3 Optimization“ können Sie navigieren. Das Fenster zeigt auch die Optimierungsergebnisse, während sie erzeugt werden. Im Folgenden erhalten Sie einen Überblick über die verschiedenen Abschnitte in diesem Fenster.

Tabelle 2-5: Das Fenster „MRM3 Optimization“

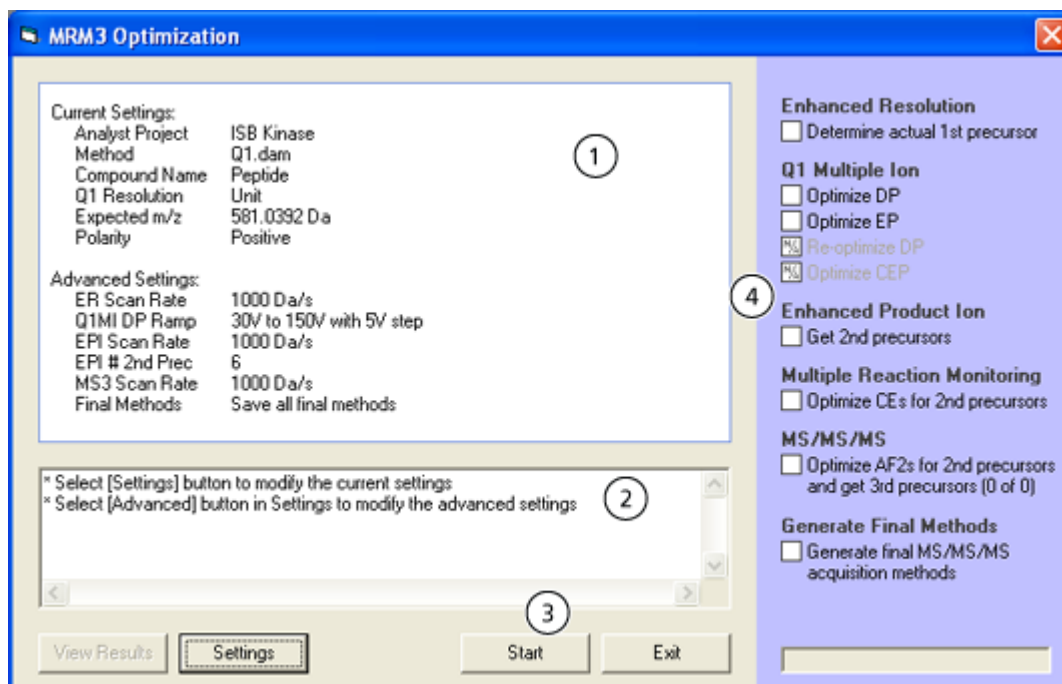
Feld	Beschreibung
Status Window	Wenn das Skript zum ersten Mal gestartet wird, zeigt dieses Fenster die aktuellen Optimierungseinstellungen, die beim Optimieren verwendet werden. Wenn die Optimierung gestartet wird, werden in diesem Fenster Spektralinformationen angezeigt.

Tabelle 2-5: Das Fenster „MRM3 Optimization“ (Fortsetzung)

Feld	Beschreibung
Log File	Zeigt die beim Optimieren gefundenen Ergebnisse im Text-Format. Jeder Eintrag in diesem Abschnitt wird auch zur erzeugten Log.txt-Datei hinzugefügt.
Overall Progress	Zeigt einen Gesamtüberblick über den Fortschritt der Optimierung.
Main Controls	Enthält alle wichtigen Funktionen, die mit der Einstellung und Ausführung des Optimierungsprozesses zusammenhängen.

- Klicken Sie auf **View Results**, um die Datei mit Microsoft Notepad zu öffnen und zu überprüfen. Nachdem die Optimierung beendet ist, wird eine Results.txt-Datei automatisch generiert und gespeichert.
- Klicken Sie auf **Settings**, um ein Fenster zu öffnen und die für den Optimierungsprozess erforderlichen Compound-Informationen einzugeben.
- Durch Anklicken von **Start** beginnt der Optimierungsprozess. Während der Optimierung wird diese Schaltfläche umbenannt in **Abort**, sodass Sie den Optimierungsprozess durch Anklicken stoppen können.

Abbildung 2-4: Das Fenster „MRM3 Optimization“



Element	Beschreibung
1	Status-Teilfenster

Element	Beschreibung
2	Protokolldatei
3	Hauptbedienelemente
4	Gesamtfortschritt

Festlegen der Voreinstellungen

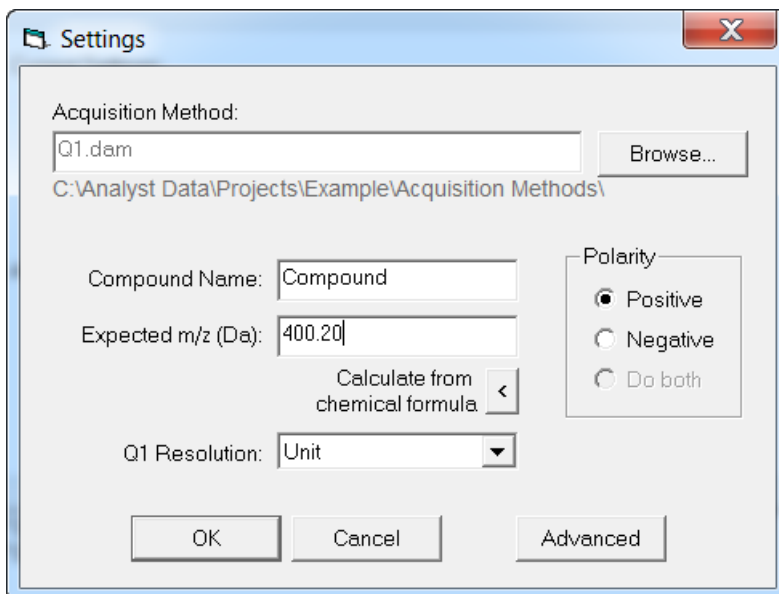
Das Dialogfeld „Settings“ öffnet sich automatisch jedes Mal, wenn das Skript gestartet wird.

1. Klicken Sie auf **Browse**, um zur ersten Erfassungsmethode zu navigieren. Diese Methode enthält die Ionenquellenbedingungen, die bei der Optimierung verwendet werden sollen.
2. Geben Sie einen beschreibenden Verbindungsnamen im Feld **Compound Name** ein. Dieser Name wird als Präfix für alle generierten Erfassungsmethoden und Dateien verwendet.
3. Im Feld **Expected m/z (amu)** geben Sie das erwartete Masse-zu-Ladung-Verhältnis (m/z) für die Verbindung ein. Wenn die m/z -Werte der Verbindung nicht bekannt sind, dann klicken Sie auf **Calculate from chemical formula**, um diese anhand der chemische Formel der Verbindung zu berechnen. Siehe Abschnitt: [Berechnen von \$m/z\$](#) .
4. Im Feld **Q1 Resolution** wählen Sie die Q1-Auflösung, die für MS/MS und MS3 verwendet werden soll.
5. In der **Polarity**-Gruppe, klicken Sie auf eine Polarität, die sich von der ersten Methode unterscheiden kann. Die Option **Do both** wird derzeit nicht unterstützt.
6. Um einige der beim Optimierungsprozess verwendeten Einstellungen zu ändern, klicken Sie auf **Advanced**. Siehe Abschnitt: [Verwenden des Dialogs „Advanced Settings“](#).
7. Um die aktualisierten Einstellungen zu überprüfen und zu verwenden, klicken Sie auf **OK**.

Verwenden des Skripts

1. Erstellen Sie eine erste Erfassungsmethode, falls noch keine vorhanden ist. Die Starter-Methode sollte eine mit Manual Tune angelegte Q1 Erfassungsmethode sein und die Ionenquellen-Bedingungen enthalten, die für den Tuning-Prozess erforderlich sind, weil diese durch das Skript nicht optimiert werden.
2. Speichern Sie die Methode im `Acquisition Methods`-Ordner des entsprechenden Projekts, in dem alle generierten Dateien gespeichert werden.
3. Klicken Sie auf **Script > MRM3 Optimization**.

Abbildung 2-5: Dialogfeld „Settings“



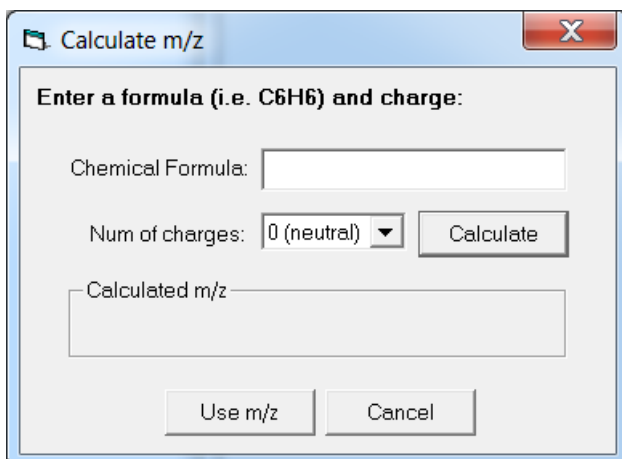
4. Geben Sie die für den Optimierungsprozess erforderlichen Verbindungsinformationen ein und klicken Sie dann auf **OK** im Dialogfeld „Settings“.
5. Um den Optimierungsprozess einzuleiten, klicken Sie auf **Start** im Fenster „MRM3 Optimization“.

Berechnen von m/z

Der m/z -Rechner wird über das Dialogfeld „Settings“ aufgerufen.

1. Im Fenster „MRM3 Optimization“ klicken Sie auf **Settings**. Das Dialogfeld „Settings“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Calculate from chemical formula**.

Abbildung 2-6: Dialogfeld „Calculate m/z “



3. Gegen Sie im Feld **Chemical Formula** die chemische Formel der Verbindung ein. Verwenden Sie für die Elemente Großbuchstaben. Die chemische Formel für Peptide wird auch in diesem Dialogfeld eingegeben.
4. Klicken Sie im Feld **Num of charges** auf die Anzahl der Ladungen.
5. Um m/z für die eingegebene chemische Formel und Ladung zu berechnen, klicken Sie auf **Calculate**.
6. Um den Rechner zu schließen und das Feld **Expected m/z (amu)** im Dialogfeld „Settings“ mit dem berechneten m/z zu aktualisieren, klicken Sie auf **Use m/z** .

Verwenden des Dialogs „Advanced Settings“

In diesem Dialog wird eine Beschreibung für jeden Optimierungsschritt gegeben. Einige der Einstellungen können geändert werden, um die Optimierung anzupassen.

1. Im Fenster „MRM3 Optimization“ klicken Sie auf **Settings**. Das Dialogfeld „Settings“ wird geöffnet.
2. Klicken Sie auf **Advanced**.

Abbildung 2-7: Dialogfeld „Advanced Settings“

Advanced Settings

Enhanced Resolution
Finds the most intense peak within a 2 Da window of expected 1st precursor molecular weight. Mass range window defaulted to 30 Da around expected mass to charge ratio.
Scan Rate: 1000 (Da/s)
Cycles: 20

Q1 Multiple Ion
Optimizes DP and EP. DP re-optimized if $-10 < EP < 10$. CEP is optimized only when applicable. Smooths TIC 2 times and finds voltage yielding greatest ion count.
DP Ramp: Start 30, Stop 150, Step 5 (0-200V)
Dwell Time: 100 (ms)

Enhanced Product Ion
Finds the most intense 2nd precursor peaks, excluding any peaks within a 5 Da window of 1st precursor.
Scan Rate: 1000 (Da/s)
2nd Precursors: 6 (1-10)
Mass range: 300 to 1000
CE: 30 CES: 10
Cycles: 3

Multiple Reaction Monitoring
Optimizes CE values for the most intense 2nd precursor peaks by cycling through each XIC overlay. XIC graph smoothed 2 times and voltage yielding greatest ion count is determined. (CE is ramped for its entire range with a 2V step size)
Dwell Time: 50 (ms)

MS/MS/MS
XIC graph smoothed 2 times. Finds 2 most intense 3rd precursors at 5% max intensity. Exclude peaks within 2 Da window of 2nd precursor (parent must be $< 10\%$ total ion count). (AF2 is ramped for optimal sensitivity.)
Scan Rate: 1000 (Da/s)
☒ Use Q0 Trapping
Fixed Fill Time: 50 (ms)
Mass range: 100 to 1000

Generate Final Methods
Creates final MS/MS/MS methods with mass range of 50 Da to 2nd precursor + 0.8 Da for each top 2nd precursor. Creates optimal MS/MS/MS method with 20 Da mass range window around most intense 3rd precursor.
☒ Save All Final Methods
☐ Save Optimal Method Only

OK Cancel

3. In den **Scan Rate**-Feldern der Gruppen „Enhanced Resolution“, „Enhanced Product Ion“ und „MS/MS“, wählen Sie eine Scanrate für **ER**, **EPI** und **MS3**.
4. In der **Q1 Multiple Ion**-Gruppe, in den **DP Ramp**-Feldern, geben Sie den „Declustering Potential“ (DP)-Bereich für die Optimierung ein. Der Bereich wird in absoluten Werten


ausgedrückt und die entsprechende Polarität wird automatisch aufgrund der im Dialogfeld „Settings“ getroffenen Auswahlen übernommen.

5. In der Gruppe **Enhanced Product Ion** führen Sie folgende Schritte aus:
 - Im Feld **2nd Precursors** geben Sie die maximale Anzahl an zweiten Vorläufern (Fragment-Ionen) ein, die bei der MS3-Optimierung verwendet werden darf. Geben Sie eine Zahl zwischen 1 und 10 ein.
 - Im Feld **Mass range** geben Sie einen Massenbereich ein, der für die zweiten Vorläufer bei der MS3-Optimierung verwendet wird.
 - Im **CE**-Feld geben Sie einen Wert für die Kollisionsenergie und im **CES**-Feld eine Kollisionsenergieverteilung ein, die ein gutes MS/MS-Spektrum ergeben, aus dem Fragmentionen ausgewählt werden können.
6. Um alle endgültigen MS3-Methoden für jeden zweiten Vorläufer und die optimale MS3-Methode für die Quantifizierung zu erzeugen, klicken Sie in der **Generate Final Methods**-Gruppe auf **Save All Final Methods**. Klicken Sie auf **Save Optimal Method Only**, um nur die optimale MS3-Methode (die für die Quantifizierung empfindlichste) zu speichern.
7. Klicken Sie auf **OK**, um die aktualisierten „Advanced Settings“ zu übernehmen.

Optimierung in Bearbeitung

Wenn die Optimierung gestartet wird, wird „Manual Tune“ in der Analyst MD Software automatisch gestoppt. Während das Skript ausgeführt wird, können alle Funktionen in der Software weiterhin verwendet werden. Eine Log.txt-Datei wird auch nach jedem abgeschlossenen Teil der Optimierung aktualisiert. Um das Skript an einer beliebigen Stelle zu stoppen, klicken Sie auf **Abort**. Siehe die folgenden Abbildungen für Beispiele des Skripts. In Abschnitt „Overall Progress“ stellen die Checklistenbilder und Schriftarten unterschiedliche Zustände dar, die im folgenden Abschnitt beschrieben werden.

Abbildung 2-8: Status-Beispiele

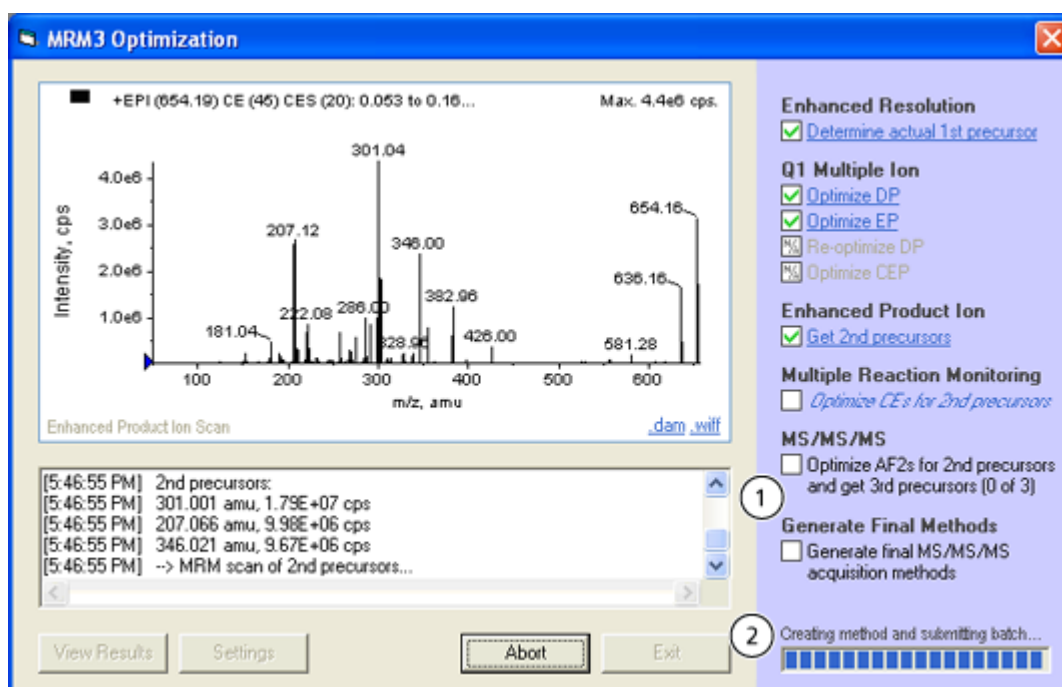
- 
- ① Task not performed yet – text is black
 - ② *Task in progress* – text is blue and italic
 - ③ Task will not be performed – text is grey
 - ④ Task completed (hyperlink) – text is blue and underlined
 - ⑤ Task completed (no link) – text is blue
 - ⑥ *Part of task completed (hyperlink)* – text is blue, underlined, and italic

Element	Beschreibung
1	Aufgaben wurden noch nicht durchgeführt - der Text ist schwarz
2	Aufgabe wird durchgeführt - der Text ist blau und kursiv
3	Aufgabe wird nicht durchgeführt - der Text ist blau und unterstrichen

Element	Beschreibung
4	Aufgabe ist abgeschlossen (Hyperlink) - der Text ist blau und unterstrichen
5	Aufgabe ist abgeschlossen (kein Link) - der Text ist blau
6	Aufgabe ist teilweise abgeschlossen (Hyperlink) - der Text ist blau, unterstrichen und kursiv

Ist der Text unterstrichen, klicken Sie auf diesen wie bei einem Webseiten-Link und das entsprechende Spektrum oder Chromatogramm wird angezeigt. Der Text unter MS/MS/MS zeigt auch die gerade ausgeführte MS3-Scan-Nummer an, weil Sie zwischen 1 und 10 Scans haben können. Der Abschnitt „Overall Progress“ enthält auch einen Bereich „Message“. In diesem Bereich zeigt ein Fortschrittsbalken den Fortschritt des aktuell ausgeführten Schritts an. Oberhalb des Fortschrittsbalkens werden verschiedene Meldungen angezeigt, wie z. B. die Zeit und andere Status des aktuellen Optimierungsschritts.

Abbildung 2-9: Das Fenster „MRM3 Optimization“ nach einem EPI-Scan

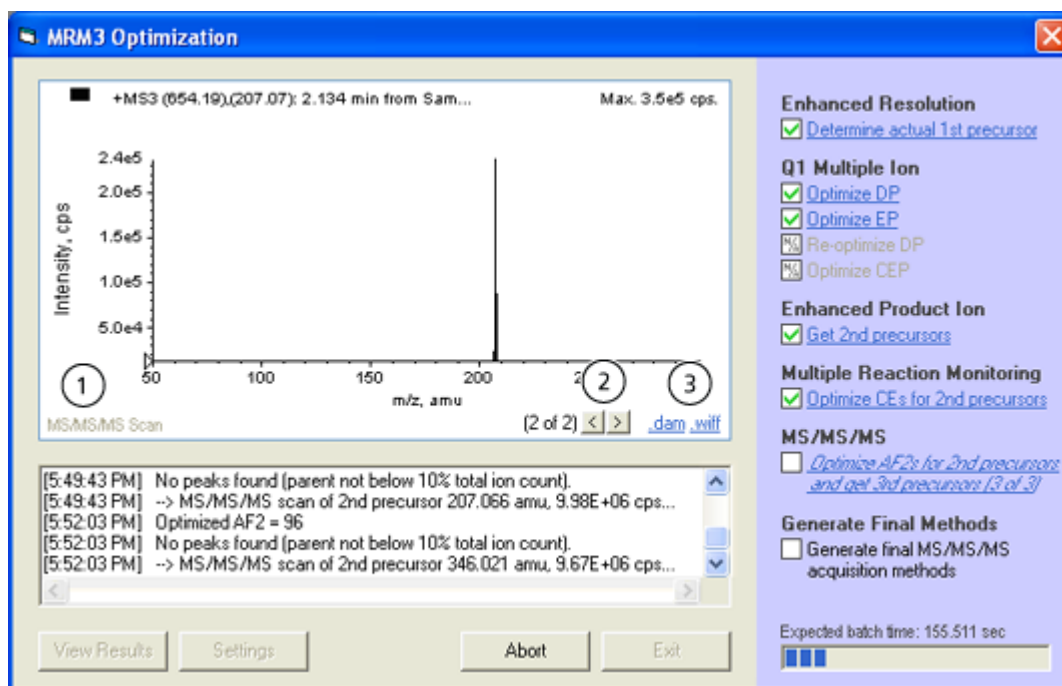


Element	Beschreibung
1	Checkliste
2	Meldung

Im Fenster des spektralen Status wird das zuvor erzeugte Spektrum oder Chromatogramm gezeigt. Wird einer der Checklistenpunkte ausgewählt, wird das entsprechende Diagramm angezeigt. Der Scan-Typ-Name zeigt an, welcher Scan gerade angezeigt wird. Für jeden

abgeschlossenen Schritt ist es möglich, die Erfassungsmethoden- (dam) oder Datendatei (wiff) zu öffnen, die dem angezeigten Diagramm zugeordnet wurde. Wird ein MS/MS/MS-Scan angezeigt, dann verwenden Sie die Schaltflächen, um durch die verschiedenen MS3-Scans zu blättern.

Abbildung 2-10: Das Fenster „MRM3 Optimization“ während eines MS3-Scans



Element	Beschreibung
1	Scantyp
2	Schaltflächen zum Durchblättern der verschiedenen MS3-Scans
3	Verknüpfungen

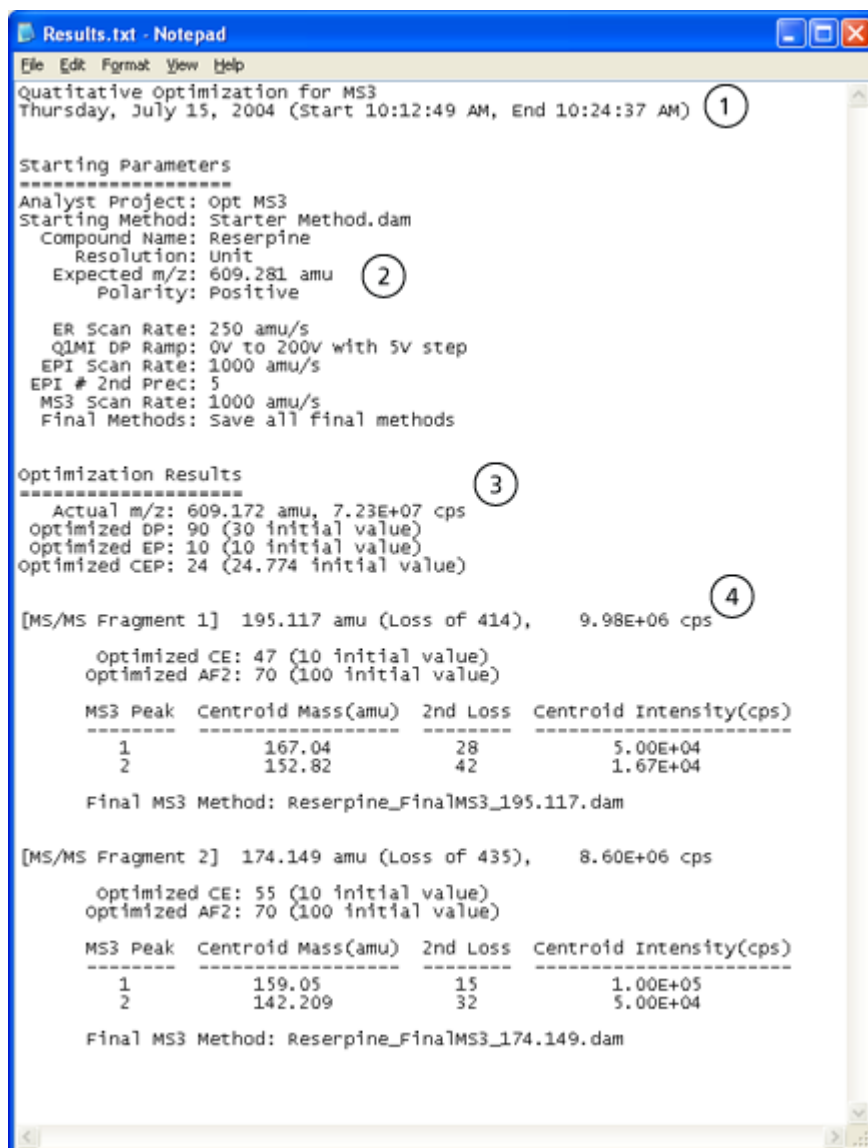
Abgeschlossene Optimierung

Wenn die quantitative Optimierung für MS3 beendet ist oder abgebrochen wurde, wird eine Results.txt-Datei generiert. Diese Datei wird automatisch in Microsoft Notepad (Editor) geöffnet. Klicken Sie auf **View Results** aus dem Fenster „MRM3 Optimization“, um die Datei anzuzeigen. Die verschiedenen Teile der Datei „Results.txt“ werden nachfolgend beschrieben.

- **Time and Duration:** Zeigt das Datum und die Zeitdauer der Optimierung.
- **User Starting Conditions:** Zeigt die Einstellungen und Erweiterten Einstellungen in diesem Abschnitt.
- **Optimization Conditions Found:** Zeigt die optimalen Bedingungen an, die bei den ER- und Q1MI-Scans gefunden wurden.

- **MS3 Fragments Found and Associated Losses:** Zeigt die Fragmente und optimalen Bedingungen (Kollisionsenergie und Anregungsenergie), sowie die damit verbundenen Verluste, die beim EPI- und MS3-Scan gefunden wurden.

Abbildung 2-11: Optimierungsbericht



Element	Beschreibung
1	Zeit und Dauer
2	Benutzerdefinierte Bedingungen
3	Gefundene Optimierungsbedingungen
4	Gefundene MS3-Fragmente und damit verbundene Verluste

Alle generierten Erfassungsmethoden haben einen aussagekräftigen Dateinamen im Format [verwendeter Verbindungsname] + [Scantyp] + [m/z] + .dam. Diese Methoden werden im gleichen Ordner wie die erste Erfassungsmethode gespeichert.

Alle Daten-, Log.txt- und Results.txt- Dateien werden in einem Datenunterordner im selben Projekt gespeichert, in dem auch die erste Erfassungsmethode gespeichert wurde. Der Unterordner hat das Format [verwendeter Verbindungsname] + OptMS3 + ([Datum], [Uhrzeit]). Die Dateien haben das Format [verwendeter Verbindungsname] + [Scantyp] + [m/z] + .wiff.

Detaillierte Beschreibung des Skriptaufbaus: Initialisierung

Dieser Abschnitt beschreibt die einzelnen Phasen des Optimierungsprozesses. Alle Scans werden mit einer auf 3 eingestellten Anzahl zu summierender Scans durchgeführt.

Vor der Durchführung von Optimierungsscans führt das „MRM3 Optimization“-Skript folgende Initialisierungsschritte durch. Wenn ein Fehler während der Durchführung dieser Schritte auftritt, stoppt das Skript den Optimierungsprozess.

1. Stellen Sie sicher, dass die Analyst MD Software ausgeführt wird.
2. Laden Sie die erste Erfassungsmethode, um zu prüfen, ob sie gültig ist, und überprüfen Sie den Gerätetyp.
3. Erstellen Sie einen neuen Data-Unterordner, um die .wiff-Dateien zu speichern.
4. Erstellen Sie die Log.txt-Datei.

Scan „Enhanced Resolution“

Bei diesem Schritt wird die Masse des Ions bestätigt, das für die Optimierung verwendet wurde. Der ER-Scan wird für 20 Zyklen bei der angegebenen Scanrate durchgeführt. Der intensivste Peak innerhalb ± 1 amu des erwarteten ersten Vorläufer-m/z-Werts wird dann ausgewählt. Wie bei der Analyst MD Software wird dieser Scan mit einem Massenbereich von 30 amu um den angegebenen m/z durchgeführt. Für mehrfach geladene Spezies wird das C12-Ion in diesem Schritt bestimmt.

Q1 Multi-Ionen-Scan

Bei diesem Schritt wird die Übertragung der relevanten Ionen bis zur Stoßzelle optimiert. Dies erfolgt über einen Q1 MI-Scan. Das Skript optimiert zuerst die DP-Parameter, indem es den Scan mit der angegebenen DP-Rampe durchführt. Optimieren Sie den EP-Parameter durch Hochfahren von 1 V bis 12 V (–12 V bis –1 V für den negativen Modus) mit einer Schrittweite von 0,5 V. Beträgt der optimale EP weniger als 10 V (größer als –10 V für den negativen Modus), dann wird DP neu optimiert. Der CEP-Parameter wird auch durch Hochfahren von 0 V bis 100 V (–100 V bis 0 V für den negativen Modus) mit einer Schrittweite von 2 V optimiert. Bei der Bestimmung der optimalen Spannung werden Diagramme zweimal geglättet und die Spannung, die den größten Ionenzählwert ergibt, wird verwendet. Die Verweilzeit wird für jeden Scan auf 100 ms eingestellt.

Scan „Enhanced Product Ion“

Dieser Schritt wählt die Fragment-Ionen, die für die MS3-Optimierung verwendet werden. Dies wird mit einem EPI-Scan für drei Zyklen bei der gewählten Scanrate durchgeführt. Geben Sie eine optimale CE für die zu analysierende Verbindung ein. Wenn die optimale CE unbekannt ist, geben Sie einen CES-Wert an, damit eine Reihe von CE-Einstellungen verwendet wird. Die intensivsten Vorläufer-Peaks werden dann gefunden und alle Peaks in einem Bereich von $\pm 2,5$ amu zum ersten Vorläufer werden ausgeschlossen. Die Anzahl der zu verwendenden zweiten Vorläufer wird in den „Advanced Settings“ ausgewählt. Der Massenbereich, aus dem die zweiten Vorläufer ausgewählt werden, wird vom Benutzer festgelegt.

Scan „Multiple Reaction Monitoring“

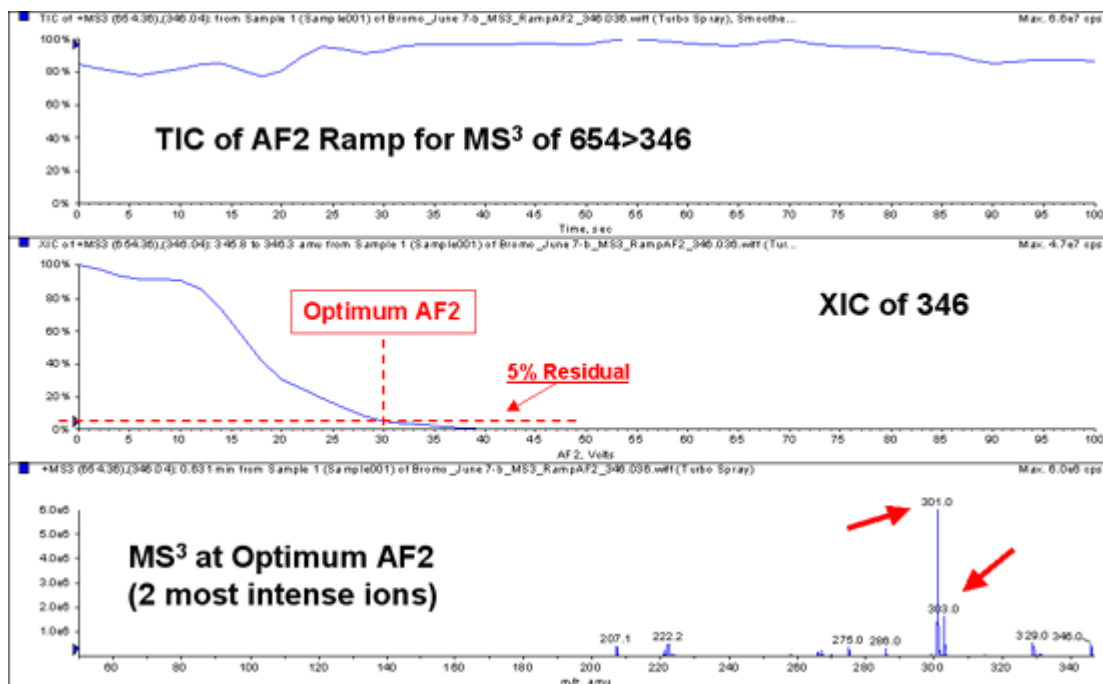
Bei diesem Schritt wird die Kollisionsenergie für jedes Fragmention optimiert, das beim EPI-Scan ausgewählt wurde. Dies erfolgt über einen MRM-Scan. Verwenden Sie CE-Rampen von 5 bis 130 V (-130 bis -5 V im Negativ-Modus) mit einer Schrittweite von 2 V und einer Dwell-Zeit von 50 ms. Jedes überlagerte Diagramm wird dann zweimal geglättet und die Spannungen, die den größten Ionenzählwert ergeben, werden als optimale CE-Werte verwendet.

MS/MS/MS-Scan (MS3)

Das Skript führt einen MS3-Scan (MS/MS/MS) für jeden ausgewählten zweiten Vorläufer mit der vorgesehenen Scanrate und einer AF2-Rampe von 0 bis 100 V mit Schrittweiten von 2 mV für beide Polaritäten durch. Der Füllzeit des Scans wird eingestellt und Q0trapping kann gegebenenfalls für eine maximale Empfindlichkeit eingeschaltet werden. Die untere Grenze des Massenbereichs für den MS3-Scan (MS/MS/MS) kann angegeben werden und die Obergrenze beträgt zweiter Vorläufer + 5 amu.

Die erzeugten Diagramme werden zweimal geglättet und die optimale AF2, wie in der folgenden Abbildung gezeigt, erhält man, wenn die Restintensität des zweiten Vorläufers (bezogen auf XIC) bei 5 % seiner maximalen Intensität liegt. Das Spektrum für diesen AF2-Wert wird dann verwendet, um die zwei intensivsten Fragment-Ionen der zweiten Generation zu finden, wobei Peaks innerhalb von ± 1 amu zum zweiten Vorläufer ausgeschlossen werden. Wenn der m/z -Wert des zweiten Vorläufers größer als 10 % des gesamten Ionenzahlwerts ist, dann wird keines der Fragmente aus diesem Spektrum verwendet. Diese Bedingung besteht, weil keine ausreichende Fragmentierung entsteht, wenn der m/z -Wert des zweiten Vorläufers größer als 10 % ist.

Abbildung 2-12: Bestimmung von AF2



„Generate Final Methods“

Nach Durchführung der Optimierungsscans generiert das Skript die finalen MS/MS/MS-Methoden. Wenn die Option **Save Optimal Method Only** im Dialogfeld „Advanced Settings“ angeklickt wurde, wird nur eine optimale MS/MS/MS-Methode mit ± 10 amu um das intensivste Fragment-Ion der zweiten Generation erzeugt. Wenn die Option **Save All Final Methods** angeklickt wurde, wird die optimale Methode sowie eine MS/MS/MS-Methode für jede der besten zweiten Vorläufer-Ionen erzeugt, wobei ein Massenbereich zwischen einer benutzerdefinierten Untergrenze und der Obergrenze von (zweiter Vorläufer + 5) amu verwendet wird.

MSServiceLog-Skript

Rücklesevorgänge aus einem Massenspektrometer werden standardmäßig in der MS Service-Protokolldatei aufgezeichnet. Verwenden Sie das MSServiceLog-Skript, um die Aufnahme der Rücklesevorgänge aus dem Instrument in die MS Service-Protokolldatei auszuschalten. Das MSServiceLog-Skript gilt nur für die 4500MD- und Citrine-Systeme.

Das MSServiceLog-Skript kann ohne ein aktives Hardwareprofil verwendet werden, aber alle Änderungen, die an den MS Service-Protokolleinstellungen vorgenommen werden, werden erst nach Reaktivierung des Hardwareprofils gültig.

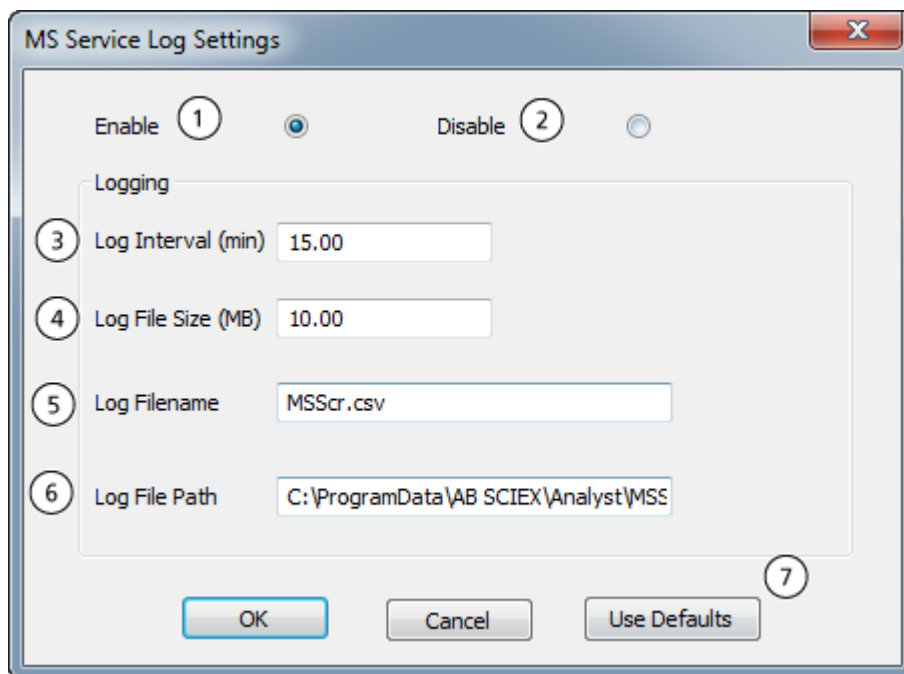
Installieren des Skripts

Siehe [Installieren eines Skripts](#)

Verwenden des Skripts

1. Deaktivieren Sie das Hardwareprofil.
2. Klicken Sie auf **Script** > **MSServiceLog**.

Abbildung 2-13: Dialogfeld „MS Service Log Settings“



Element	Name	Beschreibung
1	Enable	Wählen Sie diese Option aus, um die Aufnahme von Rücklesevorgängen aus dem Massenspektrometer in die MS Service-Protokolldatei mithilfe des MSServiceLog-Skripts zu starten.
2	Disable	Wählen Sie diese Option aus, um die Aufnahme von Rücklesevorgängen aus dem Massenspektrometer in die MS Service-Protokolldatei mithilfe des MSServiceLog-Skripts auszuschalten.
3	Log Interval (min)	Geben Sie an, wie häufig (in Minuten) die Rücklesevorgängen aus dem Massenspektrometer in die MS Service-Protokolldatei aufgezeichnet werden sollen. Der Standardwert ist 15 Minuten und es sind Werte zwischen 1 Minute und 1440 Minuten zulässig.

Element	Name	Beschreibung
4	Log File Size (MB)	<p>Geben Sie die Größe der Protokolldatei an. Die Standardgröße beträgt 10 MB und es sind Werte zwischen 1 MB und 1000 MB zulässig. Es kann bis zu zwei Protokolldateien geben:</p> <ul style="list-style-type: none"> Die aktuelle Protokolldatei, in der die Rücklesevorgänge vom Instrument aufgezeichnet werden. Die archivierte Protokolldatei. <p>Wenn die aktuelle Protokolldatei die angegebene Größe erreicht, wird sie mit einem vordefinierten Dateinamen archiviert und eine aktuelle Protokolldatei wird erstellt, um die Rücklesevorgänge mit dem Protokolldateinamen aufzuzeichnen, der im Dialog „MS Service Log Settings“ angegeben ist.</p>
5	Log Filename	Geben Sie einen Namen für die Protokolldatei ein. Als Dateierweiterung sind csv, txt oder log zulässig.
6	Log File Path	Geben Sie den Speicherort an, an dem die Protokolldatei gespeichert wird. Vergewissern Sie sich, dass der neue Speicherort innerhalb des Standardpfads C:\ProgramData\AB SCIEX\Analyst\MSServiceLog erstellt wird.
7	Use Defaults	Klicken Sie auf diese Option, um auf die voreingestellten Werte in allen Feldern im Dialogfeld zurückzukehren.

- Klicken Sie auf **Disable**, um die Aufzeichnung der Rücklesevorgänge in die MS Service-Protokolldatei auszuschalten.
- Klicken Sie auf **Enable**, um die Aufnahme von Rücklesevorgängen aus dem Massenspektrometer in die MS Service-Protokolldatei zu starten.
- Um die Werte in anderen Feldern im Dialogfeld „MS Service Log Settings“ zu ändern, siehe die folgende Abbildung: [Abbildung 2-13](#).
- Klicken Sie auf **OK**, um die Änderungen zu übernehmen.

sMRM Calculator

Verwenden Sie das sMRM Calculator-Skript für eine bildliche Darstellung der *Scheduled* MRM-Algorithmus-Erfassungsmethode. Das Skript verwendet vier Diagramme, um einen Überblick über den MRM-Übergang, die Nebenläufigkeit, die projizierte Zykluszeit und die anzuwendende Verweilzeit darzustellen. Siehe die Abbildung: [Abbildung 2-15](#). Um eine passende Anordnung der Übergänge im Verlauf der Laufzeit zu erreichen, ändern Sie solche Parameterwerte wie **Maximum Dwell**, **Minimum Dwell**, **Target sMRM Cycle Time** oder **Target sMRM Scan Time**, **Window Width**, **MRM Pause Time** und **Settling Time** im

Skriptdialog. Die vier Diagramme werden entsprechend aktualisiert. Wiederholen Sie diesen Vorgang, bis die erforderliche Anordnung der Übergänge erreicht ist.

Hinweis: Wenn **Target Cycle Time** in der ursprünglichen Methode ausgewählt ist, dann kann sie nicht in **Target Scan Time** im Skriptdialog umgeändert werden. Wenn **Target Scan Time** in der ursprünglichen Methode ausgewählt ist, dann kann sie nicht in **Target Cycle Time** im Skriptdialog umgeändert werden.

Hinweis: Die Option **Settling time** kann nur für die Citrine Systeme im Skriptdialog „sMRM Calculator“ geändert werden.

Installieren des Skripts

Siehe [Installieren eines Skripts](#)

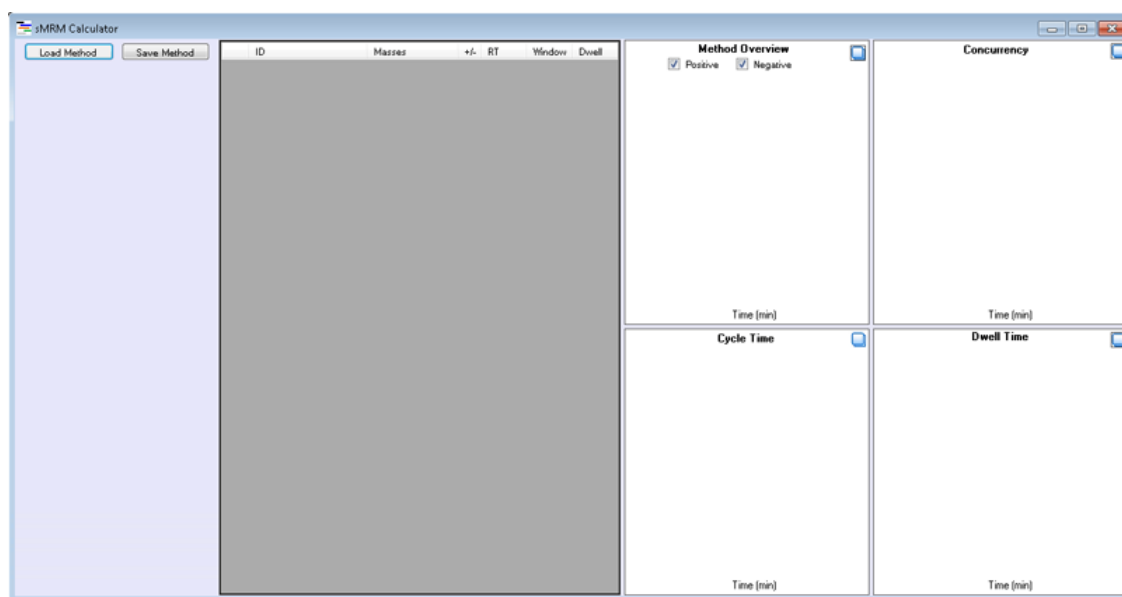
Verwenden des Skripts

Voraussetzungen

- Stellen Sie sicher, dass die Analyst MD Software geöffnet und ein Hardwareprofil aktiv ist.
- Stellen Sie sicher, dass eine *Scheduled* MRM Algorithmus-Erfassungsmethode bereits erstellt ist.

1. Klicken Sie auf **Script > sMRM Calculator**.
Das Dialogfeld **sMRM Calculator** wird geöffnet.

Abbildung 2-14: Dialogfeld „sMRM Calculator“



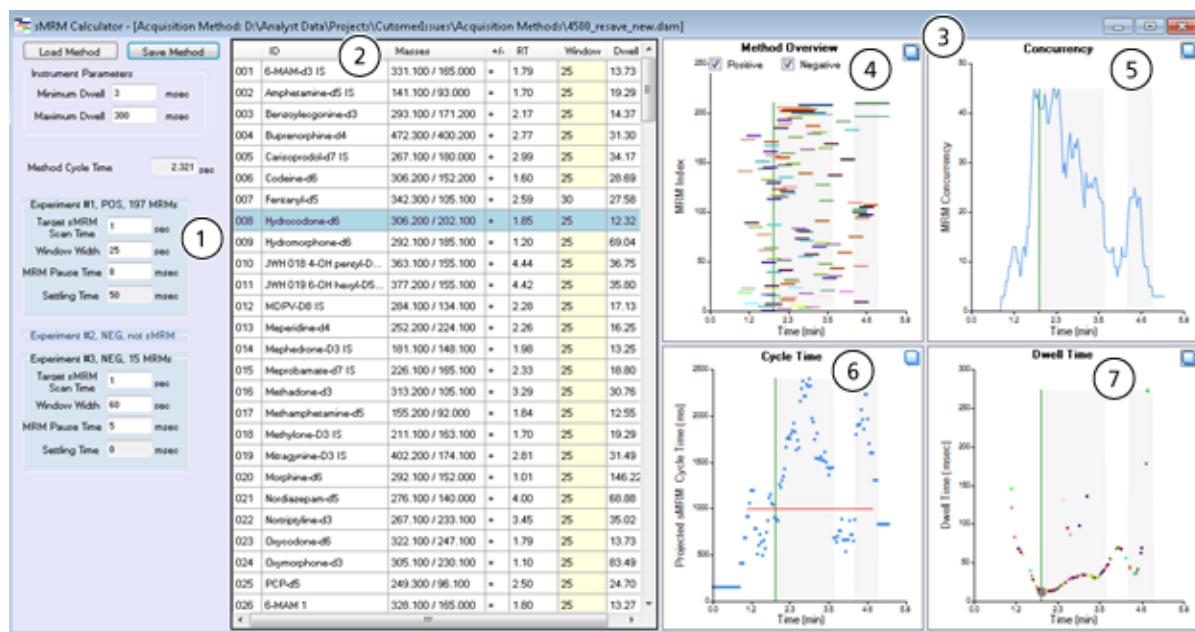
2. Klicken Sie auf **Load Method**, um eine vorhandene *Scheduled* MRM-Algorithmus-Erfassungsmethode auszuwählen.
Das Dialogfeld **Open** wird geöffnet.

Hinweis: Im Skript „sMRM Calculator“ kann nur eine Erfassungsmethode geöffnet werden, die *Scheduled* MRM Algorithmus-Experimente für das aktive Massenspektrometer im aktuell ausgewählten Projekt enthält. Es werden nur die Details der *Scheduled* MRM Algorithmus-Experimente angezeigt. Die Nicht-*Scheduled* MRM Algorithmus-Experimente werden als Nicht-*Scheduled* MRM im Skript angezeigt.

3. Wählen Sie die *Scheduled* MRMAgorithmus-Erfassungsmethode aus und klicken Sie dann auf **Open**.

Die ausgewählte Erfassungsmethode wird im Dialog „sMRM Calculator“ geöffnet. Der Dateipfad der geöffneten Erfassungsmethode wird in der Titelleiste des Dialogs angezeigt.

Abbildung 2-15: Im Dialog „sMRM Calculator“ geöffnete Erfassungsmethode



Element	Beschreibung
1	<p>Der linke Fensterbereich enthält die Parameter des Instruments und des <i>Scheduled</i> MRM Algorithmus. Die in diesem Bereich angezeigten Fenster ändern sich je nach geöffneter Erfassungsmethode.</p> <p>Wenn die Anordnung der Übergänge in den vier Diagrammen im rechten Bereich nicht passend ist, so ändern Sie die Parameter und Einstellungen im linken Bereich. Die betroffenen Spalten in der Tabelle und die Diagramme werden entsprechend aktualisiert. Die Parameterwerte können innerhalb des zulässigen Bereichs geändert werden, bis eine passende Anordnung der Übergänge erreicht ist.</p> <p>Wenn zum Beispiel der Wert im Feld Target sMRM Scan Time geändert wird, dann wird die Verweilzeit neu berechnet und in der Tabelle aktualisiert und auch die Diagramme entsprechend aktualisiert.</p> <p>Wenn zum Beispiel der Wert im Feld Windows Width geändert wird, dann wird dieser Wert bei allen Übergängen, die diese globale Einstellung nutzen, in der Spalte Window geändert. Die Verweilzeit für alle Übergänge wird neu berechnet und in der Tabelle aktualisiert. Die Diagramme im rechten Fensterbereich werden ebenfalls entsprechend aktualisiert. Bei Übergängen mit eigenen Einstellungen im Erkennungsfenster bei einer <i>Scheduled</i> MRM Pro-Algorithmus-Erfassungsmethode werden durch die Aktualisierung der globalen Einstellung Window Width im linken Bereich nicht die Werte in der Spalte Window für diese Übergänge in der Tabelle aktualisiert.</p> <hr/> <p>Hinweis: Die Felder, die im linken Fensterbereich grau angezeigt werden, können nicht bearbeitet und ihr Wert nicht geändert werden.</p> <hr/>

Element	Beschreibung
2	<p>Im mittleren Fensterbereich werden Index, Compound-ID, Q1- und Q3-Massen, Polarität, Fensterbreite, Retentionszeit und Dwell-Zeit angezeigt. Die Standardansicht ist nach Indexnummer sortiert.</p> <p>Um die Ansicht basierend auf den Informationen in den anderen Spalten neu anzuordnen, klicken Sie auf den Titel einer der sieben Spalten: index, ID, Masses, +/-, RT, Window und Dwell. Der mittlere Fensterbereich wird aktualisiert und zeigt die in alphanumerischer oder numerischer Reihenfolge sortierten Informationen der ausgewählten Spalte.</p> <p>Bei Methoden für SCIEX 4500MD und Citrine Systemen kann die Fensterbreite für alle Übergänge in diesem <i>Scheduled</i> MRM Algorithmus-Experiment auch in der Tabelle bearbeitet werden. Die Verweilzeit in der Tabelle und die Diagramme im rechten Fensterbereich werden entsprechend aktualisiert. Durch Bearbeiten der Fensterbreite in der Tabelle wird eine <i>Scheduled</i> MRM Algorithmus-Erfassungsmethode zu einer <i>Scheduled</i> MRM Pro Algorithmus-Erfassungsmethode konvertiert.</p> <hr/> <p>Hinweis: Die Fensterbreite, die die globale Einstellung aus dem linken Bereich verwendet, hat einen gelben Hintergrund. Nachdem die Fensterbreite in der Tabelle manuell für einen bestimmten Übergang geändert wurde, oder wenn sie bereits die erweiterte Fensterbreite verwendet, die für ihren Übergang spezifisch ist, dann ist die Hintergrundfarbe dieser Zelle weiß.</p> <hr/>
3	<p>Der rechte Fensterbereich zeigt alle <i>Scheduled</i> MRM Algorithmus-Übergänge die in der geladenen <i>Scheduled</i> MRM Algorithmus-Erfassungsmethode enthalten sind, grafisch in vier verschiedenen Diagrammtypen an.</p> <ul style="list-style-type: none">• Der ausgewählte MRM-Übergang in der Tabelle wird durch die grüne vertikale Linie in den Diagrammen dargestellt.• Die hellgrauen Bereiche in den Diagrammen stehen für die Retentionszeitonen, in denen es in jedem Zyklus zu einem Polaritätswechsel kommt.• Tooltips in jedem Diagramm zeigen X- und Y-Werte für den Übergang unter dem Cursor. Bei den Diagrammen „Method Overview“ und „Dwell Time“ wird auch die Verbindungs-ID im Tooltipp angezeigt.• Durch Klicken auf einen MRM-Übergang im Diagramm „Method Overview“ wird dieser Übergang in den anderen drei Diagrammen und in der Tabelle ausgewählt.

Element	Beschreibung
4	Das erste Diagramm, „Method Overview“, zeigt alle Übergänge und das Erkennungsfenster jedes Übergangs an. Die X-Achse zeigt die Retentionszeit. Die Y-Achse zeigt die MRM-Indexnummer, in der Reihenfolge, in der jeder Übergang in die Methode eingegeben wurde.
5	Das zweite Diagramm, „MRM Concurrency“, stellt die Retentionszeit auf der X-Achse und die MRM-Übergangsnebenläufigkeit zu jedem Retentionszeitpunkt auf der Y-Achse dar.
6	<p>Das dritte Diagramm, „Projected sMRM Cycle Time“, skizziert die projizierte Zykluszeit im Verlauf der Retentionszeit. Die rote Linie stellt die Target Cycle Time dar, falls verwendet. Wenn die Target Scan Time verwendet wird, dann ist der Wert der roten Linie die Summe aus der Target sMRM Scan-Dauer aller <i>Scheduled</i> MRM Algorithmus-Experimente in der Methode.</p> <hr/> <p>Hinweis: Es werden weitere Datenpunkte erwartet bei Übergängen, bei denen die Projected sMRM Cycle Time sehr viel geringer als die Target Cycle Time oder die Summe der Target Scan Time (d. h. wo der rote Balken ist) ist. Es werden weniger Datenpunkte erwartet bei Übergängen, bei denen die Projected sMRM Cycle Time sehr viel größer als die Target Cycle Time oder die Summe der Target Scan Time (d. h. wo der rote Balken ist) ist.</p> <hr/>
7	Das vierte Diagramm zeigt die Dwell-Zeit für jeden Übergang in seiner Retentionszeit. Die X-Achse zeigt die Retentionszeit. Die Y-Achse zeigt die anzuwendende Verweilzeit.

4. Ändern Sie die Parameterwerte nach Bedarf, um die Methode zu optimieren und eine bessere Verteilung der **Projected sMRM Cycle Time** zu erzielen.
5. Klicken Sie auf **Save Method**.
Das Fenster **Save Method File** wird geöffnet.

Die Änderungen an der Methode können in der ursprünglichen Erfassungsmethode oder als eine neue Erfassungsmethode gespeichert werden. Wenn die Änderungen in der ursprünglichen Erfassungsmethode gespeichert werden, dann werden die originalen Parameterwerte mit den neuen Werten überschrieben.
6. Geben Sie einen neuen Dateinamen ein oder wählen Sie die ursprüngliche Methode aus und klicken Sie dann auf **Save**.
7. Öffnen Sie die gespeicherte Erfassungsmethode im **Acquisition Method Editor**, um die neuen Änderungen zu sehen.
Wenn die ursprüngliche Methode im **Acquisition Method Editor** geöffnet war, dann muss die Methode geschlossen und erneut geöffnet werden.
8. Klicken Sie das **X** in der oberen rechten Ecke des Dialogs **sMRM Calculator** an, um den Dialog zu schließen.

Kontaktangaben

Kundenschulung

- In Nordamerika: NA.CustomerTraining@sciex.com
- In Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Die Kontaktinformationen für Länder außerhalb der EU und Nordamerikas finden Sie unter sciex.com/education.

Online-Lernzentrum

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

SCIEX Support

SCIEX und seine Vertretungen beschäftigen weltweit einen Stab an ausgebildeten Servicekräften und technischen Spezialisten. Der Support kann Fragen zum System oder anderen auftretenden, technischen Problemen beantworten. Weitere Informationen finden Sie auf der SCIEX-Website unter sciex.com, oder kontaktieren Sie uns unter:

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

Cybersicherheit

Die aktuellsten Hinweise zur Cybersicherheit von SCIEX-Produkten finden Sie unter sciex.com/productsecurity.

Dokumentation

Diese Version des Dokuments ersetzt alle vorherigen Versionen.

Für die Anzeige des Dokuments wird der Adobe Acrobat Reader benötigt. Um sich die neueste Version herunterzuladen, besuchen Sie <https://get.adobe.com/reader>.

Softwareprodukt dokumentationen entnehmen Sie den Versionshinweisen oder dem mit der Software mitgelieferten Software-Installationshandbuch.

Informationen zur Hardware-Produkt dokumentation finden Sie auf der mit dem System oder der Komponente gelieferten *Customer Reference*-DVD.

Hinweis: Wenn Sie eine kostenlose gedruckte Ausgabe dieses Dokuments wünschen, wenden Sie sich bitte an sciex.com/contact-us.
