
Analyst MD-software

Brugervejledning for scripts



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.

IVD

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.

CE

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 eventualansvar, herunder indirekte eller følgeskader, for købers brug af produktet eller for eventuelle negative omstændigheder, der måtte opstå som følge heraf.

UK
CA

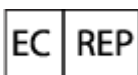
(GEN-IDV-09-10816-D)

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

Indholdsfortegnelse

Kapitel 1: Forord	4
Målgruppe	4
Teknisk support	4
Kapitel 2: Scripts	5
Installation eller fjernelse af scripts	5
Installation af et script	5
Fjernelse af et script	5
Oprettelse af kvantificeringsmetoder og tekstfiler	6
Brug af scriptet Create Quan Methods From Text Files	6
Brug af scriptet Create Text File from Quan Method	8
Tekstfilformat	9
DFT Tracker	12
Script til MRM3-optimering	13
Oversigt over vinduet MRM3 Optimization	14
Optimering i gang	19
Optimering fuldført	21
Detaljeret beskrivelse af scriptlogik: Initialisering	23
Forbedret opløsningsscanning	23
Q1-scanning med flere ioner	23
Forbedret produkt-ion-scanning	23
Multipel reaktionsovervågningsscanning	24
MS/MS/MS (MS3)-scanning	24
Generering af endelige metoder	25
MSServiceLog-script	25
Installation af script	25
Brug af scriptet	25
sMRM Calculator	27
Installation af script	27
Brug af scriptet	28
Kontakt os	32
Kundeuddannelse	32
Online-læringscenter	32
SCIEX	32
Cybersikkerhed	32
Dokumentation	32

Målgruppe

Denne vejledning er beregnet til kunder og FSE'er (Field Service Employees).

Teknisk support

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 webstedet på sciex.com for at få flere oplysninger.

Dette dokument forklarer, hvordan man installerer og bruger Analyst MD-softwarescripts. Det giver også et overblik over anvendelserne af hvert script, og hvordan et script afinstalleres, hvis det er nødvendigt.

Installation eller fjernelse af scripts

Nogle scripts installeres automatisk, når Analyst MD-softwaren installeres.

De resterende scripts er tilgængelige i mappen Scripts.

Scripts skal være installeret for at kunne bruges. Se afsnittet: [Installation af et script](#).

Installation af et script

1. Gør ét af følgende:
 - Gå til mappen <Drive>:\Program Files\Analyst\Scripts på computeren.
 - Gå til mappen Extras\Scripts på software-DVD'en, hvis den er tilgængelig, eller i den udpakkede web-downloadpakke med software.
2. Åbn mappen Scripts.
3. Gør ét af følgende:
 - Dobbeltklik på **sMRM Calculator Setup.exe** for sMRM Calculator-scriptet.
 - Dobbeltklik på **ScriptRunner.exe** for alle øvrige scripts.
4. Følg instruktionerne på skærmen for at installere scripts.
De installerede scripts er tilgængelige i menuen **Script**.

Fjernelse af et script

Bemærk: Du må ikke afinstallere scriptene DFTTracker og MRM3 Optimization. Hvis disse scripts fjernes, skal Analyst MD-softwaren installeres igen for at få adgang til disse scripts.

Gør følgende for at fjerne scriptet:

- For scriptene Create Quan Methods From Text Files, Create Text File from Quant Method og MSServiceLog skal du navigere til mappen <drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Processing Scripts og derefter slette dll-filen for scriptet manuelt.
- For scriptet sMRM Calculator skal du gøre følgende:
 - På Windows 7-operativsystemet: Klik på **Start > All Programs > Control Panel > Programs and Features**.

- På Windows 10-operativsystemet: Klik på **Start > Control Panel > Programs and Features**.
- Højreklik på **sMRM Calculator**, og klik derefter på **Uninstall**.
- Følg instruktionerne på skærmen.

Oprettelse af kvantificeringsmetoder og tekstfiler

Med scriptet til oprettelse af tekstfil ud fra kvantificeringsmetoden eksporteres en kvantificeringsmetode til en tabulatorsepareret tekstfil. Med scriptet til oprettelse af kvantificeringsmetode ud fra tekstfiler importeres oplysningerne i en tabulatorsepareret tekstfil til en kvantificeringsmetodefil (.qmf). I øjeblikket understøtter Build Quantitation Method-komponenten i Analyst MD MD-softwaren ikke denne funktion.

Med scriptet til oprettelse af tekstfil ud fra kvantificeringsmetoden oprettes en tekstfilsrepræsentation af en kvantificeringsmetodefil. Der oprettes en kolonne for hvert obligatorisk felt i tekstfilen, hvis afkrydsningsfeltet **Export all columns** er markeret. Hvis afkrydsningsfeltet ikke er markeret, genererer scriptet kun tekstfilen med kolonner for de felter, hvor feltværdien ikke er den samme for alle toppe.

Med scriptet til oprettelse af kvantificeringsmetode ud fra tekstfiler angives standardværdier for alle de ikke-obligatoriske felter i tekstfilen, f.eks. integrationsalgoritme eller regressionsparametre. Se afsnittet [Tekstfilformat](#) for at få flere oplysninger.

Brug af scriptet Create Quan Methods From Text Files

1. Klik på **Script > Create Quan Methods From Text Files**.

Figur 2-1: Dialogboksen 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. Brug parametrene i afsnittet Default Generic Parameters for at oprette en kvantificeringsmetode. Felterne **Algorithm**, **Extraction Type**, **Period** og **Experiment** er ikke tilgængelige i Analyst MD-softwaren. Angiv følgende parametre efter behov:
 - Vælg en topsøgningsalgoritme på listen **Algorithm**. Algoritmen Window Summation opsummerer alle intensiteter i retentionstærsklen og vil ikke finde nogen toppe.
 - Vælg den datatype, som skal integreres, på listen **Extraction Type**.
 - Vælg periodenummeret og eksperimentnummeret på listerne **Period** og **Experiment**.

Grupperne Default Analyst Classic Parameters, Default General IntelliQuan Parameters, Default IntelliQuan MQ III Parameters og Default Window Summation Parameters indeholder de parametre, som anvendes af algoritmerne, der er vælges i feltet **Algorithm**.
3. Markér **Use Baseline Subtraction** afkrydsningsfeltet for at få algoritmen Window Summation til at summere intensiteterne til den vandrette linje ved den minimale intensitet af datapunkterne i summeringsvinduet, i modsætning til at summere ned til intensiteten nul.
4. Vælg regressionsoplysningerne i afsnittet Regression Parameters.

De oplysninger, der er angivet her, anvendes for hver analyttop. I modsætning til de forrige parametre er det ikke muligt at angive disse oplysninger i tekstfilerne. Derfor anvendes de samme regressionsparametre for alle analytter. Se følgende dokument for at få en fuld beskrivelse af parametrene: *Hjælp*.

5. For at oprette en kvantificeringsmetode skal du klikke på **Create One Method**, navigere til den tekstfil, som skal bruges til oprettelse af kvantificeringsmetoden, og derefter klikke på **Open**.

Der oprettes en qmf-fil for kvantificeringsmetode med samme filnavn som txt-filen, hvis tekstfilen er i korrekt format og indeholder de påkrævede kolonner. Den oprettede kvantificeringsmetode gemmes i mappen *Quantitation Methods* under det aktuelle arbejdsprojekt i Analyst MD-softwaren, uanset hvor tekstfilen er placeret.

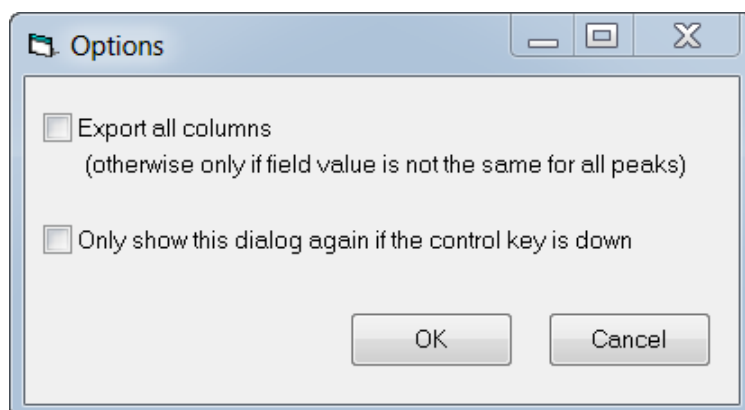
6. For at oprette flere metoder fra flere tekstfiler skal du klikke på **Create Multiple Methods**, navigere til den mappe, hvor tekstfilerne er placeret, og derefter klikke på **OK**.

Der oprettes en qmf-fil for kvantificeringsmetode med samme filnavn som txt-filen for hver individuel tekstfil i den pågældende mappe, hvis de er i korrekt format og indeholder de påkrævede kolonner. De oprettede kvantificeringsmetoder gemmes i mappen *Quantitation Methods* under det aktuelle arbejdsprojekt i Analyst MD-softwaren, uanset hvor tekstfilerne er placeret.

Brug af scriptet Create Text File from Quan Method

1. Opret og gem en kvantificeringsmetode i Analyst MD-softwaren.
2. Klik på **Script > Create Text File from Quan Method**.

Figur 2-2: Dialogboksen Options



3. Markér afkrydsningsfeltet **Export all columns**, og klik derefter på **OK**.
4. Navigér til, og vælg kvantificeringsmetodefilen (qmf).
5. **Navigér** til, og vælg derefter placeringen af tekstfilen. Scriptet genererer tekstfilen med alle kolonner. Hvis afkrydsningsfeltet **Export all columns** ikke blev markeret i trin 3, genererer scriptet kun tekstfilen med kolonner for de felter, hvor feltværdien ikke er den samme for alle toppe.

Tekstfilformat

Tekstfilerne, som anvendes til at oprette kvantificeringsmetoder (Create Quan Methods from Text Files) og genereres ved hjælp af metoderne (Create Text File from Quan Method), er i følgende format:

- Separér de forskellige felter med tabulatortegn, og afslut hver linje med et retur- eller linjeskifttegn.
- Den første række i filen skal indeholde kolonneoverskrifter. Alle kolonnerne i følgende tabel, som er markeret som Required, skal være til stede. De resterende kolonner er valgfri. Den faktiske rækkefølge af rækkerne er ikke vigtig.
- Hver efterfølgende linje skal indeholde de oplysninger, der er vist i tabellen for enten en analyt eller en intern standardtop.

Tabel 2-1: Tekstfilformater

Kolonnenavn	Påkrævet	Beskrivelse
Peak Name	Ja	Navnet på analytten eller den interne standardtop.
First Mass	Ja	For MRM-data, toppens Q1-masse. For data med fuld scanning, startmassen for XIC, der skal integreres. For Q1 MI- eller Q3 MI-data, massen.
Second Mass	Muligvis	Dette felt er påkrævet ved integration af fuld scannings- eller MRM-data, men ikke for Q1 MI- eller Q3 MI-data. For MRM-data er dette toppens Q3-masse. For fuld scanningsdata er det slutmassen for XIC, der skal integreres.
Extraction Type	Nej	Typen af data, der skal integreres. Hvis til stede, skal denne være én af følgende: 0 - MRM-data 1 - Q1 MI- eller Q3 MI-data 2 - fuld scanningsdata
Is IS	Nej	Angiver, om den aktuelle top er en intern standard eller analyt. TRUE, hvis toppen er en intern standard. Ellers FALSE. Hvis denne kolonne ikke er til stede, antages alle definerede toppe at være analytter. Bemærk: Intern standard-toppe bør defineres først i tekstfilen, før der anvendes analyttoppe, som anvender den pågældende IS.
IS Name	Nej	For analyttoppe, navnet på den tilsvarende interne standard (hvis relevant). Hvis en given analyt ikke anvender en intern standard, skal du lade indholdet i dette felt være tomt. For intern standard-toppe ignoreres indholdet i dette felt.

Tabel 2-1: Tekstfilformater (fortsat)

Kolonnenavn	Påkrævet	Beskrivelse
Period	Nej	Periodenavnet for toppen (fra 1 til antallet af perioder i dataene).
Experiment	Nej	Eksperimentnavnet for toppen (fra 1 til det maksimale antal eksperimenter i perioden).
Use Relative RT	Nej	For analyttoppe, som anvender en intern standard, angives det, om den forventede retentionstid er relativ i forhold til den for IS. TRUE, hvis dette er tilfældet. Ellers FALSE. Indholdet i dette felt ignoreres for andre toppe, men skal stadig indeholde TRUE eller FALSE.
Conc Units	Nej	Koncentrationsenhederne.
Calc Conc Units	Nej	De beregnede koncentrationsenheder.
Bkg Start	Nej	Starttid i minutter for topbaggrunden. Denne parameter påvirker ikke topintegrationen på nogen måde, men påvirker dog, hvordan støjen og dermed S/N beregnes.
Bkg End	Nej	Sluttid i minutter for topbaggrunden.
Expected RT	Nej	Den forventede retentionstid i minutter – fra 0 til 1666.
RT Window	Nej	Retentionstidsvinduet i sekunder – fra 1 til 1000.
Algorithm	Nej	Angiver, hvilken algoritme for topsøgning og integration der skal anvendes. Hvis til stede, skal denne være én af følgende: 0 - Analyst Classic (TurboChrom) 1 - IntelliQuan - IQA II (Automatic) 2 - IntelliQuan - MQ III 3 - Window Summation
Bunching Factor	Nej	(TurboChrom-algoritme) Bundtningsfaktor for toppen – fra 1 til 100.
Num Smooths	Nej	(TurboChrom-algoritme) Antallet af udglatninger – fra 0 til 10.
Noise Threshold	Nej	(TurboChrom-algoritme) Støjtærsklen – fra 1-6 til 19.
Area Threshold	Nej	(TurboChrom-algoritme) Områdetærsklen – fra 1-6 til 112.
Separation Width	Nej	(TurboChrom-algoritme) Separationsbredden – fra 0 til 5.

Tabel 2-1: Tekstfilformater (fortsat)

Kolonnenavn	Påkrævet	Beskrivelse
Separation Height	Nej	(TurboChrom-algoritme) Separationshøjden – fra 0 til 1.
Exp Peak Ratio	Nej	(TurboChrom-algoritme) Det eksponentielle topforhold – fra 1 til 16.
Exp Adjusted Ratio	Nej	(TurboChrom-algoritme) Det eksponentielle justerede forhold – fra 2 til 16.
Exp Valley Ratio	Nej	(TurboChrom-algoritme) Det eksponentielle dalforhold – fra 1 til 16.
Min Height	Nej	Den mindste tilladte tophøjde – fra 0 til 116 – ved brug af IntelliQuan-algoritmen.
Min Width	Nej	(IntelliQuan-algoritme) Den mindste tilladte topbredde – fra 0 til 116 – i sekunder.
Smooth Width	Nej	(IntelliQuan-algoritme) Den halve bredde af Savitzky-Golay-udglatningsfilteret – fra 0 til 20.
MQ III Noise Percent	Nej	(IntelliQuan-algoritme) Støjprocenten, når indstillingen MQ III anvendes. Dette bør være et heltal fra 0 til 100.
MQ III Baseline Sub Window	Nej	(IntelliQuan-algoritme) Vinduet Baseline Subtraction – fra 0 til 10 minutter – når indstillingen MQ III anvendes.
MQ III Peak Splitting Factor	Nej	(IntelliQuan-algoritme) Topopdelingsfaktoren – fra 0 til 10 – når indstillingen MQ III anvendes.
MQ III Use Largest	Nej	(IntelliQuan-algoritme) Angiver, om den største top, når MQ III-indstillingen anvendes inden for retentionstidsvinduet, eller den top, hvis retentionstid er tættest på den forventede, rapporteres. TRUE for at bruge den største top og FALSE for at bruge den tætteste.
Summation Baseline Sub	Nej	(Specialalgoritme for vinduessummering) Angiver, om området skal integreres til intensiteten = 0-linjen eller til intensitetsværdien for det mindst intense datapunkt i vinduet. TRUE, hvis området skal integreres til intensitetsværdien for det mindst intense datapunkt. Ellers FALSE, hvis området skal integreres til intensiteten = 0-linjen.

Følgende tabel viser et eksempel på en tekstfil til fuld scanningsdata. Tekstfilen indeholder faner mellem kolonnerne og et linjeskift i slutningen af hver linje.

Tabel 2-2: Eksempel på tekstfil til fuld scanningsdata.

Topnavn	Første masse	Anden masse	Bundtningsfaktor
Analyttop 1	500,1	500,7	1
Analyttop 2	812	813	2
Analyttop 3	400	401	3

Følgende tabel viser et andet eksempel på MRM-data. Analyttop 1 er konfigureret til at bruge den angivne interne standard, mens Analyttop 2 ikke bruger en intern standard.

Tabel 2-3: Eksempel på tekstfil til MRM-data

Topnavn	Er IS	IS-navn	Første masse	Anden masse
IS-top 1	TRUE	–	500,1	413,2
Analyttop 1	FALSE	IS-top 1	600,2	382,1
Analyttop 2	FALSE	IS-top 1	400	312,1

Følgende tabel indeholder en blanding af data fra fuld scanning og MRM i forskellige eksperimenter:

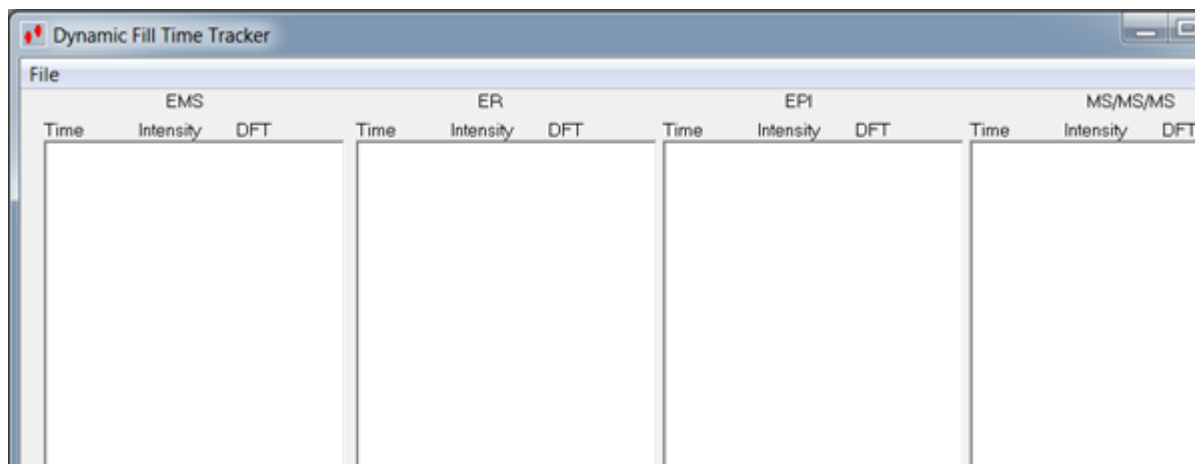
Tabel 2-4: Eksempel på tekstfil til MRM-data

Topnavn	Ekstraktionstype	Eksperiment	Første masse	Anden masse
Analyttop 1	0	1	500,1	413,2
Analyttop 2	0	1	600,2	382,1
Analyttop 3	2	2	812	813
Analyttop 4	2	2	400	401

DFT Tracker

Scriptet for DFT Tracker (dynamiske fyldningstid) sporer de DFT-indstillinger, der blev brugt under QTRAP-systemscanningerne. Brug scriptet til at bestemme den optimale fyldningstid for LIT-tilstanden (lineær ion-fælde) for at opnå høj datakvalitet over et bredt dynamikområde. DFT Tracker overvåger følgende LIT-scanningstyper: forbedret MS (EMS), forbedret opløsning (ER), forbedret produkt-ion (EPI) og MS/MS/MS (MS3).

- Klik på **Script > DFTTracker**.

Figur 2-3: Dialogboksen Dynamic Fill Time Tracker

DFT Tracker overvåger de dynamiske ændringer i fyldningstiden, der forekommer under en tidstro kørsel.

Systemet beregner dynamisk den tid, det tager at fylde den lineære ion-fælde. Ved rigeligt forekommende forbindelser reduceres rumladningseffekten ved hjælp af en kort fyldningstid ved at begrænse antallet af ioner i ion-fælden. En længere fyldningstid øger svage signaler ved at lade ionerne akkumulere.

- Klik på **File > Save** for at gemme den sporede fyldningstid.
- Klik på **File > Clear** for at rydde den sporede fyldningstid.
- Klik på **File > Always On Top** for at bevare vinduet Dynamic Fill Time Tracker over alle de andre åbne vinduer eller programmer.
- Klik på **File > Exit** for at afslutte DFT Tracker-scriptet.

Script til MRM3-optimering

Brug dette script til kvantificeringsanalyse på QTRAP-systemer for at give øget specificitet og dermed forbedret detektion ved kvantificering af analytter i komplekse matricer. Dette script er designed til at generere en optimal MS3-dataopsamlingsmetode ved infusion. Dette script udfører følgende optimeringstrin:

- Bekræftelse af prækursormasse
- Optimering af overførsel til kollisionscelle
- Bestemmelse af de store fragmentioner
- Optimering af kollisionsenergien (CE) for hver fragmention
- Udførelse af MS3-scanninger på hver fragmention
- Optimering af excitationsenergi (AF2) for alle MS3-scanninger
- Generering af en rapport
- Lagring af alle data og dataopsamlingsmetoder

Scriptet kan også bruges i kvalitative applikationer til at generere samlinger af MS/MS- og MS3-spektre for forbindelser på en halvautomatisk måde (dvs. én forbindelse ad gangen).

Oversigt over vinduet MRM3 Optimization

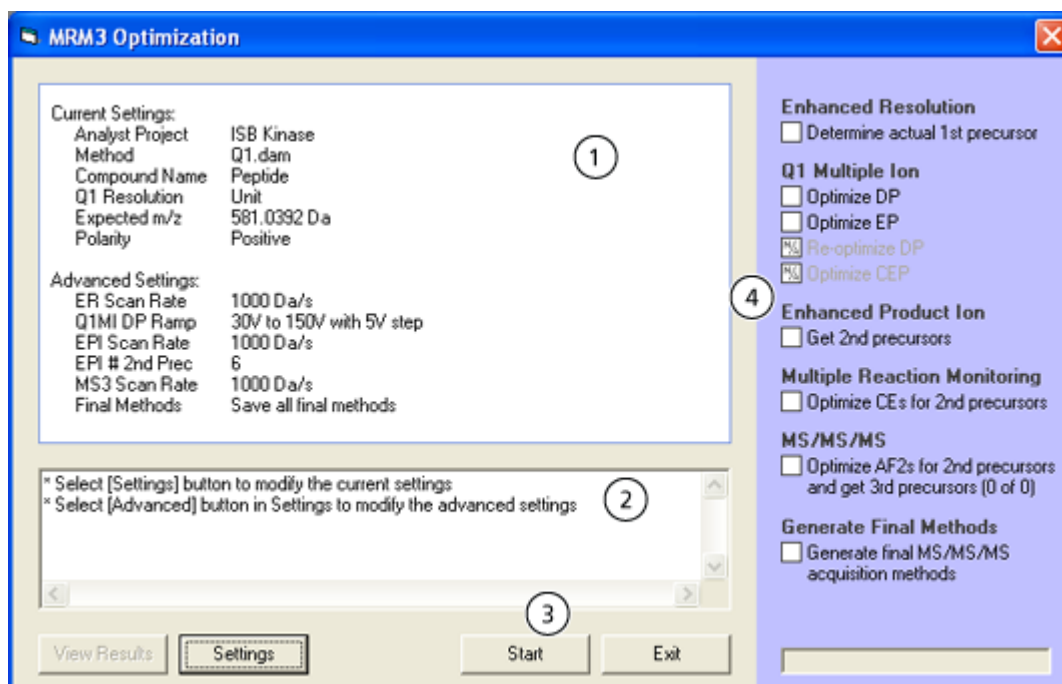
Brug betjeningen i vinduet MRM3 Optimization til at navigere. Vinduet viser også optimeringsresultaterne, efterhånden som de genereres. Følgende er en oversigt over de forskellige sektioner i dette vindue.

Tabel 2-5: Vinduet MRM3 Optimization

Felt	Beskrivelse
Status Window	Når scriptet først startes, viser dette vindue de aktuelle optimeringsindstillinger, som vil blive brugt til optimering. Når optimeringen er startet, vises der spektral information i dette vindue.
Log File	Viser de resultater, der findes under optimering, i tekstformat. Hver post, der findes i denne sektion, føjes også til den genererede Log.txt-fil.
Overall Progress	Viser den overordnede optimeringsfremgang.
Main Controls	Indeholder alle de primære funktioner forbundet med indstillingen og udførelse af optimeringsprocessen.

- Klik på **View Results** for at åbne og gennemgå filen ved hjælp af Microsoft Notepad. Når optimeringen er fuldført, genereres og gemmes der automatisk en Results.txt-fil.
- Klik på **Settings** for at åbne et vindue for at indtaste oplysninger om forbindelser, som er nødvendige for optimeringsprocessen.
- Klik på **Start** for at starte optimeringsprocessen. Under optimeringen omdøbes denne knap til **Abort**, som man kan klikke på for at stoppe optimeringsprocessen.

Figur 2-4: Vinduet MRM3 Optimization



Element	Beskrivelse
1	Statusrude
2	Logfil
3	Hovedkontroller
4	Samlet status

Angivelse af præferencer

Dialogboksen Settings åbnes automatisk, hver gang scriptet startes.

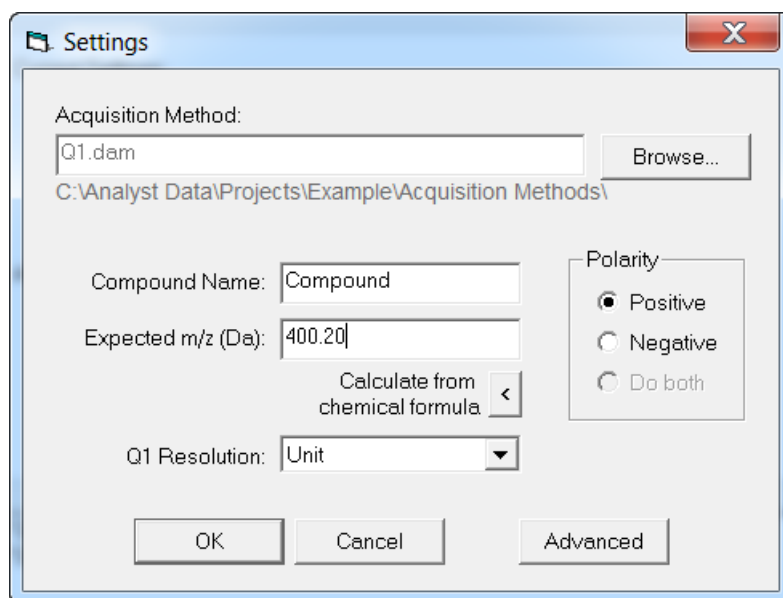
1. Klik på **Browse** for at gå til dataopsamlingsmetoden for start. Denne metode indeholder de kildebetingelser, der skal bruges til optimeringen.
2. Indtast et beskrivende forbindelsesnavn i feltet **Compound Name**. Dette navn bruges som præfiks for alle de genererede dataopsamlingsmetoder og datafiler.
3. Indtast typen af den forventede masse-til-ladning-ratio (m/z) for forbindelsen i feltet **Expected m/z (amu)**. Hvis m/z -værdierne for forbindelsen ikke kendes, skal du klikke på **Calculate from chemical formula** for at beregne den fra forbindelsens kemiske formel. Se afsnittet: [Beregning af \$m/z\$](#) .
4. Vælg en Q1-opløsning, der skal bruges for MS/MS og MS3, i feltet **Q1 Resolution**.
5. Klik på en polaritet, som kan afvige fra startermetoden, i gruppen **Polarity**. Indstillingen **Do both** understøttes ikke i øjeblikket.
6. Klik på **Advanced** for at ændre nogle af de indstillinger, der bruges af optimeringsprocessen. Se afsnittet: [Brug af dialogboksen Advanced Settings](#).

7. Klik på **OK** for at verificere og bruge de opdaterede indstillinger.

Brug af scriptet

1. Opret en startdataopsamlingsmetode, hvis den ikke allerede findes. Startmetoden bør være en Q1-dataopsamlingsmetode, som er oprettet i Manual Tuning, og skal indeholde de kildebetingelser, der kræves til afstemningsprocessen, da disse ikke er optimeret af scriptet.
2. Gem metoden i mappen `Acquisition Methods` for det ønskede projekt, hvor alle genererede filer gemmes.
3. Klik på **Script > MRM3 Optimization**.

Figur 2-5: Dialogboksen Settings

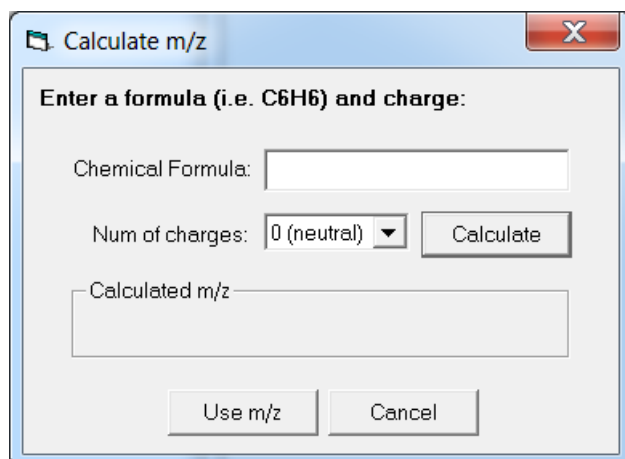


4. Indtast forbindelsesoplysningerne, der er nødvendige for optimeringsprocessen, og klik derefter på **OK** i dialogboksen Settings.
5. Klik på **Start** i vinduet MRM3 Optimization for at starte optimeringsprocessen.

Beregning af m/z

Der opnås adgang til m/z -beregneren via dialogboksen Settings.

1. Klik på **Settings** i vinduet MRM3 Optimization. Dialogboksen Settings åbnes.
2. Klik på **Calculate from chemical formula**.

Figur 2-6: Dialogboksen Calculate m/z

3. Indtast den kemiske formel for forbindelsen i feltet **Chemical Formula**. Brug store bogstaver til elementer. Den kemiske formel for peptider indtastes også i denne dialogboks.
4. Klik på antallet af ændringer i feltet **Num of charges**.
5. Klik på **Calculate** for at beregne m/z for den indtastede kemiske formel og opladning.
6. Klik på **Use m/z** for at lukke beregneren og opdatere feltet **Expected m/z (amu)** i dialogboksen Settings med den beregnede m/z .

Brug af dialogboksen Advanced Settings

I denne dialogboks findes en beskrivelse af de enkelte optimeringstrin. Nogle af indstillingerne kan ændres for at tilpasse optimeringen.

1. Klik på **Settings** i vinduet MRM3 Optimization. Dialogboksen Settings åbnes.
2. Klik på **Advanced**.

Figur 2-7: Dialogboksen 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.

Start Stop Step
DP Ramp: 30 150 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 (U/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. I felterne **Scan Rate** i grupperne Enhanced Resolution, Enhanced Product Ion og MS/MS/MS skal du vælge en scanningshastighed for **ER**, **EPI** og **MS3**.
4. I gruppen **Q1 Multiple Ion** skal du indtaste declusteringspotentialet (DP) for optimering i felterne **DP Ramp**. Området udtrykkes i absolutte værdier, og den relevante polaritet anvendes automatisk på baggrund af valget i dialogboksen Settings.
5. Gør følgende i gruppen **Enhanced Product Ion**:
 - I feltet **2nd Precursors** skal du indtaste det maksimale antal andre prækursorer (fragment-ioner), som skal anvendes til MS3-optimering. Indtast et tal mellem 1 og 10.
 - I feltet **Mass range** skal du indtaste et masseområde for de andre prækursorer, som skal vælges til MS3-optimering.
 - I feltet **CE** skal du indtaste en kollisionsenergiværdi, og i feltet **CES** skal du indtaste en kollisionsenergispredningsværdi, som vil give et godt MS/MS-spektrum, hvorfra der kan vælges fragment-ioner.
6. Klik på **Save All Final Methods** for at generere alle de endelige MS3-metoder for hver anden prækursor og den optimale MS3-metode til kvantificeringsanalyse i gruppen **Generate Final Methods**. Klik på **Save Optimal Method Only** for kun at gemme den optimale MS3-metode (mest følsom for kvantificering).
7. Klik på **OK** for at acceptere de opdaterede Advanced Settings.

Optimering i gang

Når optimeringen er startet, stoppes manuel afstemning i Analyst MD-softwaren automatisk. Mens scriptet kører, kan alle funktionerne i softwaren stadig bruges. Der opdateres også en Log.txt-fil, efterhånden som hver del af optimeringsproceduren fuldføres. Klik på **Abort** for at stoppe scriptet når som helst. Se følgende figurer for eksempler på scriptet. I afsnittet Overall Progress repræsenterer tjeklistebillederne og skrifttyperne forskellige statusser, som beskrives i følgende afsnit.

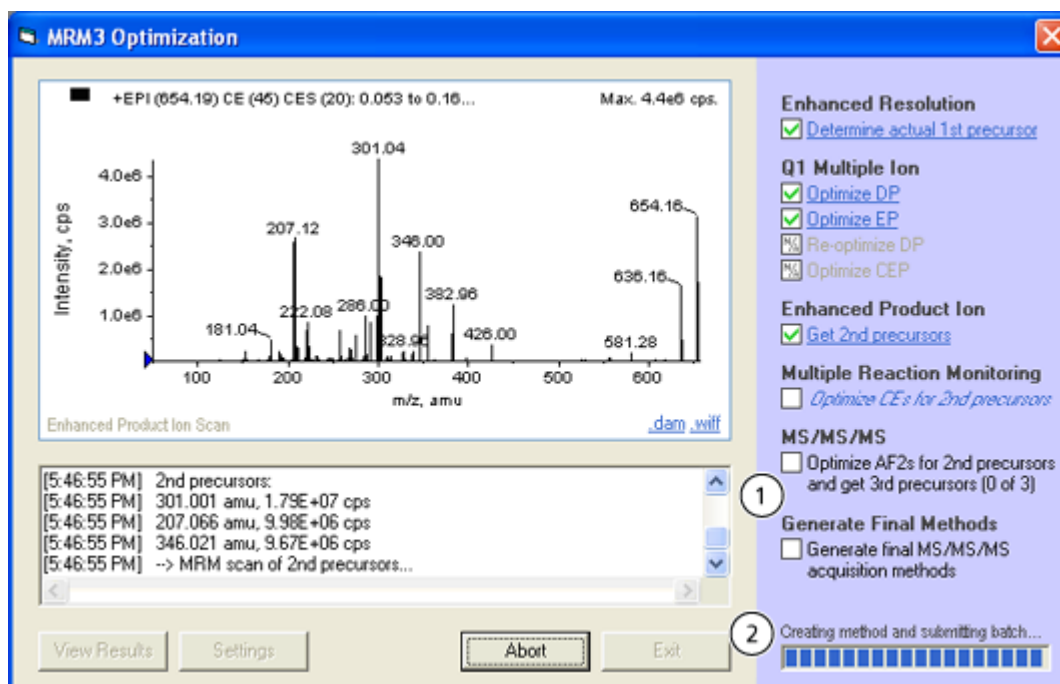
Figur 2-8: Eksempler på statusser

- ❑ 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	Beskrivelse
1	Opgaver er endnu ikke udført – teksten er sort
2	Opgave i gang – teksten er blå og kursiv
3	Opgaver vil ikke blive udført – teksten er blå og understreget
4	Opgave udført (hyperlink) – teksten er blå og understreget
5	Opgave udført (intet link) – teksten er blå
6	En del af opgaven er udført (hyperlink) – teksten er blå, understreget og kursiv

Når teksten er understreget, kan du klikke på den som et hyperlink til et websted, hvorefter det tilsvarende spektrum og kromatogram vises. Den tekst, der findes under MS/MS/MS, viser også nummeret på den MS3-scanning, der udføres, fordi det er muligt at have mellem 1 og 10 scanninger. Afsnittet Overall Progress indeholder også området Message. I dette område viser en statuslinje den aktuelle trinfrømgang. Over statuslinjen vises der forskellige meddelelser, såsom tid og andre statusser for det aktuelle optimeringstrin.

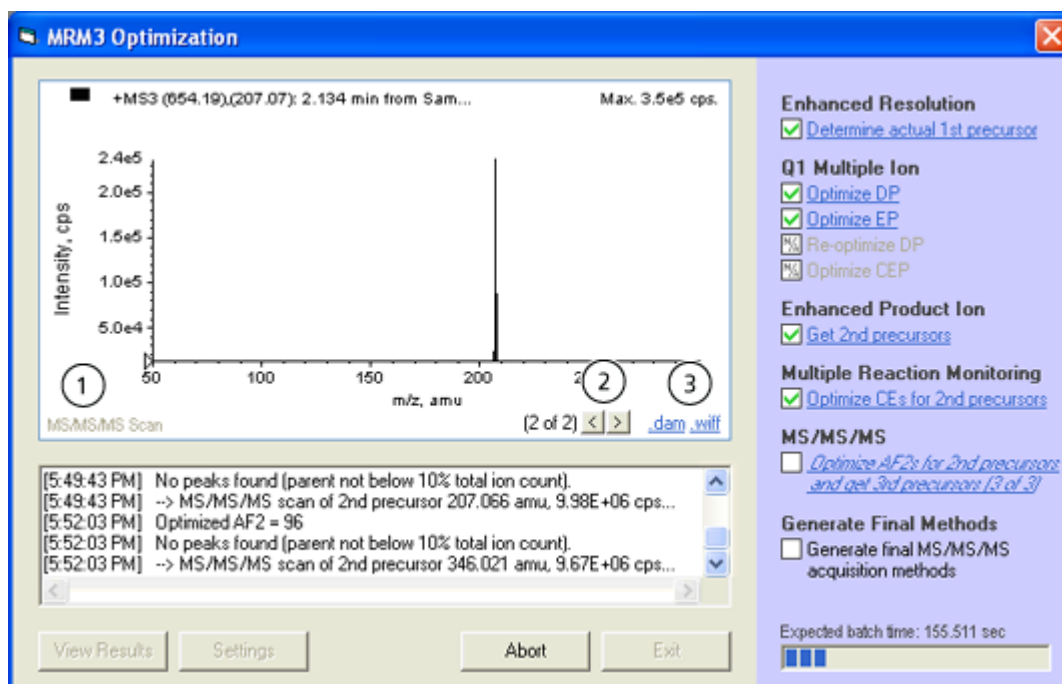
Figur 2-9: Vinduet MRM3 Optimization efter en EPI-scanning



Element	Beskrivelse
1	Tjekliste
2	Meddelelse

I vinduet for spektral status vises de tidligere genererede spektrum og kromatogram. Når et af tjeklisteelementerne vælges, vises den tilsvarende graf. Navnet på scanningstypen angiver, hvilken scanning der vises i øjeblikket. For hvert fuldført trin er det muligt at åbne dataopsamlingsmetoden (dam) eller datafilen (wiff), der hører til den viste graf. Hvis der vises en MS/MS/MS-scanning, kan du bruge knapperne til at bladre igennem de forskellige MS3-scanninger.

Figur 2-10: Vinduet MRM3 Optimization under en MS3-scanning



Element	Beskrivelse
1	Scanningstype
2	Knapper til at bladre igennem de forskellige MS3-scanninger
3	Links

Optimering fuldført

Når den kvantitative optimering for MS3 er fuldført eller stoppet, genereres der en Results.txt-fil. Denne fil åbnes automatisk i Microsoft Notepad. Klik på **View Results** i vinduet MRM3 Optimization for at få vist filen. Det forskellige dele af Results.txt-filen er beskrevet nedenfor.

- **Time and Duration:** Viser dato og tidsvarighed for optimering.
- **User Starting Conditions:** Viser indstillinger og avancerede indstillinger i dette afsnit.
- **Optimization Conditions Found:** Viser de optimale betingelser, der er fundet under ER- og Q1MI-scanningerne.
- **MS3 Fragments Found and Associated Losses:** Viser fragmenterne og de optimale betingelser (kollisionsenergi og excitationsenergi) samt tilhørende tab, der er fundet for EPI-scanningen og MS3.

Figur 2-11: Optimeringsrapport

```

Results.txt - Notepad
File Edit Format View Help
Quantitative Optimization for MS3
Thursday, July 15, 2004 (Start 10:12:49 AM, End 10:24:37 AM) 1

Starting Parameters
=====
Analyst Project: Opt MS3
Starting Method: Starter Method.dam
Compound Name: Reserpine
Resolution: Unit
Expected m/z: 609.281 amu 2
Polarity: Positive

ER Scan Rate: 250 amu/s
Q1MI DP Ramp: 0V to 200V with 5V step
EPI Scan Rate: 1000 amu/s
EPI # 2nd Prec: 5
MS3 Scan Rate: 1000 amu/s
Final Methods: Save all final methods

Optimization Results
===== 3
Actual m/z: 609.172 amu, 7.23E+07 cps
Optimized DP: 90 (30 initial value)
Optimized EP: 10 (10 initial value)
Optimized CEP: 24 (24.774 initial value)

[MS/MS Fragment 1] 195.117 amu (Loss of 414), 9.98E+06 cps 4
Optimized CE: 47 (10 initial value)
Optimized AF2: 70 (100 initial value)

MS3 Peak  Centroid Mass(amu)  2nd Loss  Centroid Intensity(cps)
-----
1          167.04             28       5.00E+04
2          152.82             42       1.67E+04

Final MS3 Method: Reserpine_FinalMS3_195.117.dam

[MS/MS Fragment 2] 174.149 amu (Loss of 435), 8.60E+06 cps
Optimized CE: 55 (10 initial value)
Optimized AF2: 70 (100 initial value)

MS3 Peak  Centroid Mass(amu)  2nd Loss  Centroid Intensity(cps)
-----
1          159.05             15       1.00E+05
2          142.209            32       5.00E+04

Final MS3 Method: Reserpine_FinalMS3_174.149.dam
  
```

Element	Beskrivelse
1	Tid og varighed
2	Startbetingelser for bruger
3	Fundne optimeringsbetingelser
4	Fundne MS3-fragmenter og tilhørende tab

Alle de genererede dataopsamlingsmetoder har et beskrivende filnavn i formatet [navn på leveret forbindelse] + [scanningstype] + [m/z] + dam. Disse metoder gemmes i samme mappe som start-dataopsamlingsmetoden.

Mange af data-, Log.txt- og Results.txt-filerne gemmes i en dataundermappe, der oprettes i samme projekt som start-dataopsamlingsmetoden. Undermappen har formatet [navn på leveret forbindelse] + OptMS3 + ([dato], [tid]). Datafilerne har formatet [navn på leveret forbindelse] + [scanningstype] + [m/z] + wiff.

Detaljeret beskrivelse af scriptlogik: Initialisering

I dette afsnit beskrives hver fase af optimeringsprocessen. Alle scanninger udføres, med antallet af scanninger, der skal summeres, indstillet til 3.

Før der udføres nogle optimeringsscanninger, udføres følgende initialiseringstrin med MRM3-optimeringsscriptet. Hvis der opstår en fejl under ét af disse trin, stoppes optimeringsprocessen i scriptet.

1. Sørg for, at Analyst MD-softwaren kører.
2. Indlæs startdataopsamlingsmetoden for at afgøre, om den er gyldig, og for at kontrollere enhedstypen.
3. Opret en ny Data-undermappe til at gemme WIFF-filerne i.
4. Opret filen Log.txt.

Forbedret opløsningsscanning

I dette trin bekræftes massen af det ion, der anvendes til optimering. ER-scanningen udføres i 20 cyklusser med den specificerede scanningshastighed. Den mest intense top inden for ± 1 amu af den forventede første m/z-værdi for første prækursor vælges derefter. Som i Analyst MD-softwaren udføres denne scanning med et masseområde på 30 amu omkring den specificerede m/z-værdi. For arter med flere ladninger bestemmes C12-ionet i dette trin.

Q1-scanning med flere ioner

Dette trin optimerer transmissionen af ionen af interesse op til kollisionscellen. Dette udføres ved hjælp af en Q1 MI-scanning. Scriptet optimerer først DP-parameteren ved at udføre scanningen ved den angivne DP-rampe. Optimer EP-parameteren ved at skrue den op fra 1 V til 12 V (-12 V til -1 V for negativ tilstand) med trin på 0,5 V. Hvis den optimale EP er mindre end 10 V (større end -10 V for negativ tilstand), reoptimeres DP. CEP-parameteren optimeres også ved at skrue den op fra 0 V til 100 V (-100 V til 0 V for negativ tilstand) med trin på 2 V. Under bestemmelse af den optimale spænding, udglattes graferne to gange, og den spænding, der giver det største ionantal, anvendes. Opholdstid for hver scanning indstilles til 100 ms.

Forbedret produkt-ion-scanning

I dette trin vælges de fragment-ioner, der skal bruges til MS3-optimering. Dette udføres ved hjælp af en EPI-scanning i tre cyklusser ved den valgte scanningshastighed. Angiv et optimalt CE for den forbindelse, der skal analyseres. Hvis den optimale CE er ukendt, skal du angive en CES-værdi, så der anvendes en række CE-indstillinger. De mest intense sekundære prækursortoppe findes derefter, eksklusive eventuelle toppe inden for $\pm 2,5$ amu-vindue for første prækursor. Antallet af andre prækursorer, der skal bruges, vælges i de

avancerede indstillinger. Det masseområde, hvorfra den anden prækursorer vælges, angives af brugeren.

Multipel reaktionsovervågningsscanning

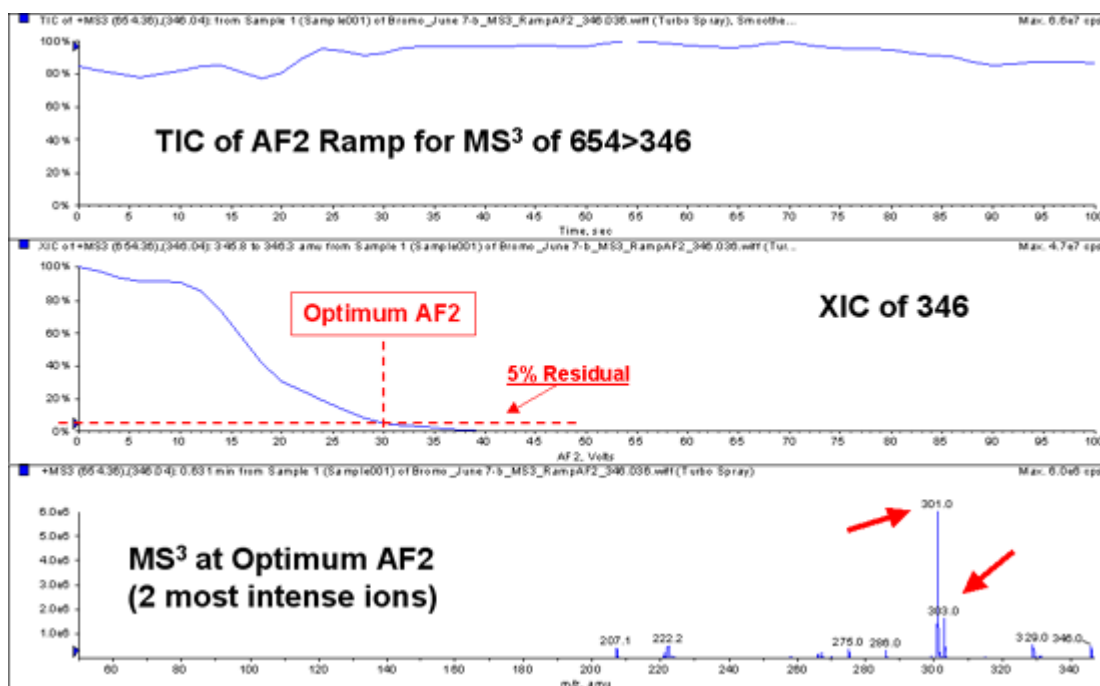
Dette trin optimerer kollisionsenergien for hver af de fragmentioner, der vælges fra EPI-scanningen. Dette udføres ved hjælp af MRM-scanninger. Brug CE-ramper på 5 til 130 V (-130 til -5 V i negativ tilstand) med 2 V trin og opholdstid på 50 ms. Hver overlejret graf udglattes derefter to gange, og de spændinger, der giver det største ionantal, bruges som de optimale CE-værdier.

MS/MS/MS (MS3)-scanning

Scriptet udfører en MS/MS/MS (MS3)-scanning for hver valgt prækursor ved den angivne scanningshastighed og med en AF2-rampe på 0 til 100 V med 2 mV trin for begge polariteter. Scanningens fyldningstid angives, og Q0trapping kan slås til for den påkrævede maksimumfølsomhed. Masseområdets nedre grænse for MS/MS/MS (MS3)-scanningen kan angives, og den øvre grænse er anden prækursor + 5 amu.

De genererede grafer udglattes to gange, og den optimale AF2, som vist i følgende figur, indhentes, når den resterende intensitet af den anden prækursor (baseret på XIC) er på 5 % af dens maksimale intensitet. Spektret ved denne AF2-værdi bruges derefter til at finde de to mest intense andengenerations-fragmentioner, eksklusive toppe inden for ± 1 amu fra den anden prækursor. Hvis m/z -værdien for den anden prækursor er større end 10 % af det samlede ionantal, bruges der ingen fragmenter fra det spektrum. Denne betingelse findes, fordi hvis m/z -værdien for den anden prækursor er større end 10 %, er der ikke tilstrækkelig fragmentering.

Figur 2-12: Sådan bestemmes AF2



Generering af endelige metoder

Når optimeringsskanningerne er udført, genererer scriptet de endelige MS/MS/MS-metoder. Hvis der er klikket på **Save Optimal Method Only** i dialogboksen Advanced Settings, oprettes der kun en optimal MS/MS/MS/MS-metode med ± 10 amu omkring den mest intense andengenerationsfragment-ion. Hvis der klikkes på indstillingen **Save All Final Methods**, oprettes den optimale metode samt en MS/MS/MS-metode for hver af de bedste andenprækursorer ved hjælp af et masseområde fra den brugerdefinerede nedre grænse til en øvre grænse på (andenprækursor + 5) amu.

MSServiceLog-script

Tilbagelæsninger fra et massespektrometer optages som standard i MS Service-logfilen. MSServiceLog-scriptet til at deaktivere optagelser af tilbagelæsningerne eller til at starte optagelse af tilbagelæsningerne fra instrumentet i MS Service-logfilen. MSServiceLog-scriptet gælder kun for 4500MD- og Citrine-systemerne.

MSServiceLog-scriptet kan bruges uden en aktiv hardwareprofil, men alle ændringer, der foretages i MS Service-logindstillingerne træder kun i kraft, efter hardwareprofilen genaktiveres.

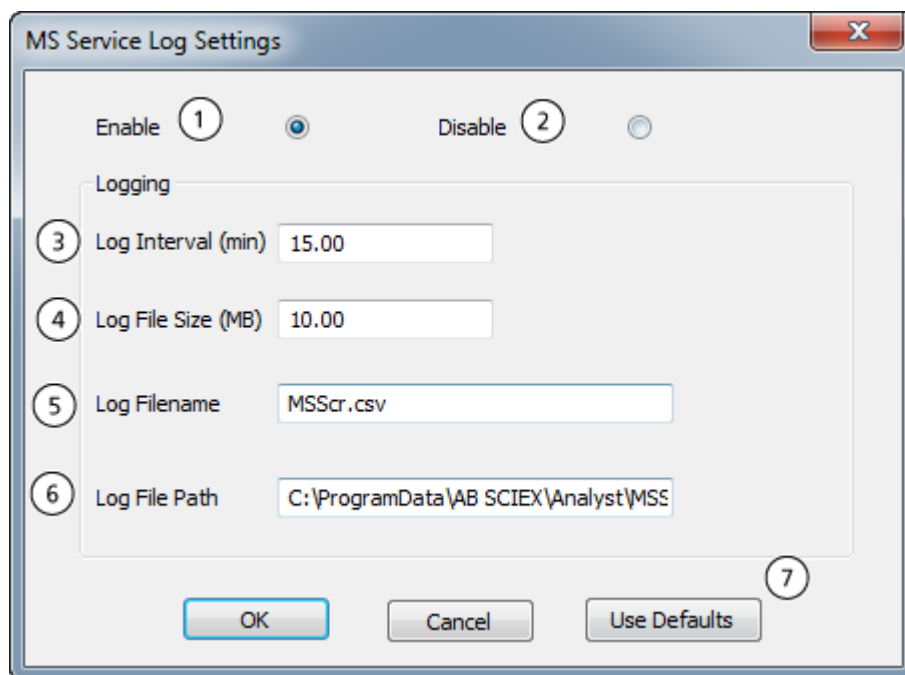
Installation af script

Se [Installation af et script](#).

Brug af scriptet

1. Deaktiver hardwareprofilen.
2. Klik på **Script > MSServiceLog**.

Figur 2-13: Dialogboksen MS Service Log Settings



Element	Navn	Beskrivelse
1	Enable	Vælg for at starte registreringen af aflæsninger fra massespektrometeret til MS Service-logfilen ved hjælp af scriptet MSServiceLog.
2	Disable	Vælg for at slå registreringen af aflæsninger fra massespektrometeret til MS Service-logfilen fra ved hjælp af scriptet MSServiceLog.
3	Log Interval (min)	Angiv, hvor ofte – i minutter – aflæsningerne fra massespektrometeret registreres i MS Service-logfilen. Standardværdien er 15 minutter, og det tilladte område er på 1 minut til 1440 minutter.
4	Log File Size (MB)	<p>Angiv størrelsen af logfilen. Standardstørrelsen er 10 MB, det tilladte område er på 1 MB til 1000 MB. Der kan være op til to logfiler:</p> <ul style="list-style-type: none">• Den aktuelle logfil, hvori aflæsninger fra instrumentet registreres.• Den arkiverede logfil. <p>Når den aktuelle logfil når den angivne størrelse, arkiveres den med et foruddefineret arkivfilnavn, og der oprettes en aktuel logfil til registrering af aflæsninger med det logfilnavn, der er angivet i dialogboksen MS Service Log Settings.</p>

Element	Navn	Beskrivelse
5	Log Filename	Angiv et navn for logfilen. De accepterede filtypenavne er csv, txt eller log.
6	Log File Path	Angiv den placering, hvor logfilen gemmes. Sørg for, at den nye placering oprettes på standardplaceringen C:\ProgramData\AB SCIEX\Analyst\MSServiceLog.
7	Use Defaults	Klik for at returnere til de forudindstillede værdier i alle felter i dialogboksen.

3. Klik på **Disable** for at slå registreringen af aflæsninger fra i MS Service-logfilen.
4. Klik på **Enable** for at starte registreringen af aflæsninger fra massespektrometeret til MS Service-logfilen.
5. Se følgende figur, hvis du vil ændre værdierne i andre felter i dialogboksen MS Service Log Settings: [Figur 2-13](#).
6. Klik på **OK** for at anvende ændringerne.

sMRM Calculator

Brug scriptet sMRM Calculator til en visuel repræsentation af en *Scheduled* MRM-algoritme til dataopsamlingsmetode. Scriptet bruger fire grafer til at vise et overblik over MRM-overgangen, dens samtidighed, dens forventede cyklustid og opholdstiden, der skal anvendes for den. Se figuren: [Figur 2-15](#). For at opnå et passende arrangement af overgangene over kørselstiden skal du ændre parameterværdierne, f.eks. **Maximum Dwell**, **Minimum Dwell**, **Target sMRM Cycle Time** eller **Target sMRM Scan Time**, **Window Width**, **MRM Pause Time** og **Settling Time** i dialogboksen for scriptet. De fire grafer ajourføres i overensstemmelse hermed. Gentag denne proces, indtil du har opnået det ønskede arrangement af overgange.

Bemærk: Hvis **Target Cycle Time** vælges i den oprindelige metode, kan den ikke ændres til **Target Scan Time** i dialogboksen for scriptet. Hvis **Target Scan Time** vælges i den oprindelige metode, kan den ikke ændres til **Target Cycle Time** i dialogboksen for scriptet.

Bemærk: Indstillingen **Settling time** kan kun ændres for Citrine-systemerne i dialogboksen for sMRM Calculator-scriptet.

Installation af script

Se [Installation af et script](#).

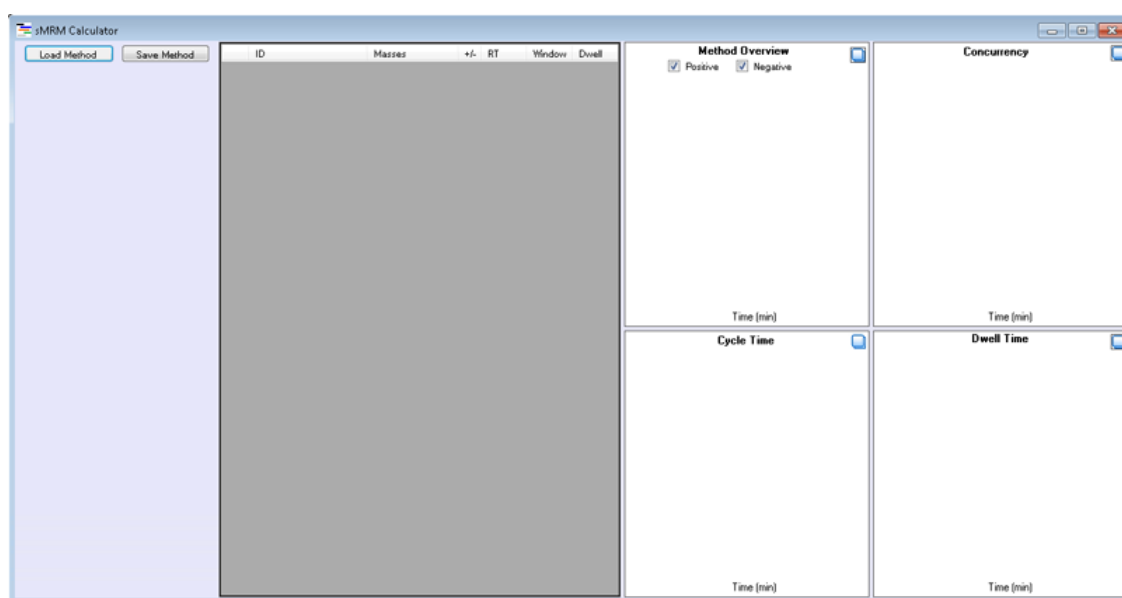
Brug af scriptet

Forudsætninger

- Sørg for, at Analyst MD-softwaren er åben, og der er aktiveret en hardwareprofil.
- Sørg for, at der allerede er oprettet en dataopsamlingsmetode for *Scheduled* MRM-algoritmen.

1. Klik på **Script > sMRM Calculator**.
Dialogboksen **sMRM Calculator** åbnes.

Figur 2-14: Dialogboksen sMRM Calculator

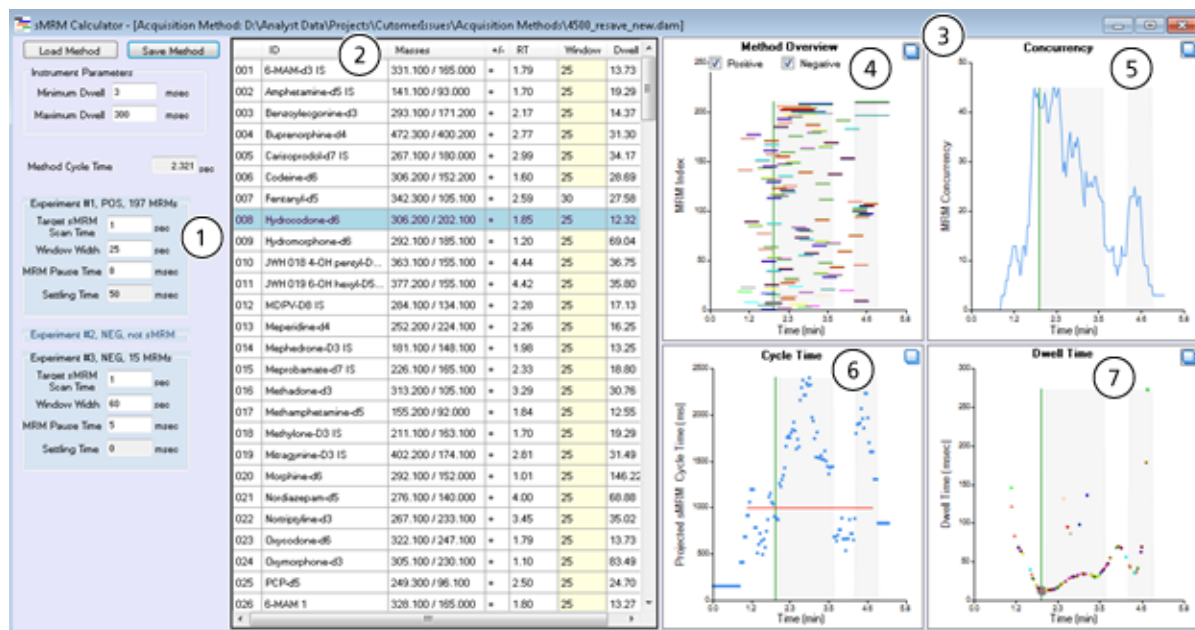


2. Klik på **Load Method** for at vælge en eksisterende dataopsamlingsmetode for *Scheduled* MRM-algoritmen.
Dialogboksen **Open** åbnes.

Bemærk: Der kan kun åbnes en dataopsamlingsmetode, som indeholder *Scheduled* MRM-algoritmeeksperimenter og for det aktive massespektrometer i det aktuelt valgte projekt, for scriptet sMRM Calculator. Der vises kun detaljerne for *Scheduled* MRM-algoritmeeksperimenterne. Ikke-*Scheduled* MRM-algoritmeeksperimenter markeres som ikke-*Scheduled* MRM i scriptet.

3. Vælg dataopsamlingsmetoden for *Scheduled* MRM-algoritmen, og klik derefter på **Open**.
Den valgte dataopsamlingsmetode åbnes i dialogboksen **sMRM Calculator**. Filstien til den åbne dataopsamlingsmetode vises i dialogboksens titel.

Figur 2-15: Dataopsamlingsmetode åbnet i dialogboksen sMRM Calculator



Element	Beskrivelse
1	<p>Venstre rude indeholder parametre for instrument og <i>Scheduled</i> MRM-algoritmen. Parametrene, der vises i denne rude, ændres afhængigt af den åbnede dataopsamlingsmetode.</p> <p>Hvis arrangementet af overgangene ikke er egnet i de fire grafer i højre rude, ændres de redigerbare parametre og indstillingerne i venstre rude. De berørte kolonner i tabellen og graferne opdateres tilsvarende. Parameterværdierne kan ændres inden for det tilladte område, indtil der opnås et passende arrangement af overgange.</p> <p>Hvis værdien i feltet Target sMRM Scan Time for eksempel ændres, genberegnes opholdstiden og opdateres i tabellen, og graferne opdateres også tilsvarende.</p> <p>Hvis værdien i feltet Windows Width for eksempel ændres, opdateres denne værdi i kolonnen Window for alle de overgange, som bruger denne globale indstilling. Opholdstiden for alle overgangene genberegnes og opdateres i tabellen. Graferne i højre rude opdateres også tilsvarende. For overgange med deres egne detektionsvindueindstillinger i en dataopsamlingsmetode for <i>Scheduled</i> MRM Pro-algoritme vil opdatering af den globale indstilling Window Width i venstre rude ikke opdatere værdierne i kolonnen Window for disse overgange i tabellen.</p> <p>Bemærk: Felterne, som vises som grå i venstre rude, kan ikke redigeres, og værdien kan ikke ændres.</p>

Element	Beskrivelse
2	<p>Indeks, forbindelses-id, Q1- og Q3-masser, polaritet, vinduesbredde, retentionstid og opholdstid vises i den midterste rude. Standardvisningen er i rækkefølge efter indeksnummer.</p> <p>For at omarrangere visningen på baggrund af oplysningerne i andre kolonner skal du klikke på titlen i én af de syv kolonner: index, ID, Masses, +/-, RT, Window og Dwell. Den midterste rude opdateres og viser oplysningerne sorteret i alfanumerisk eller numerisk rækkefølge i den valgte kolonne.</p> <p>For metoder for SCIEX 4500MD- og Citrine- -systemer kan vinduesbredden for alle overgange i det pågældende <i>Scheduled</i> MRM-algoritmeeksperiment også redigeres i tabellen. Opholdstiden i tabellen og graferne i højre rude opdateres tilsvarende. Redigering af vinduesbredden i tabellen konverterer en dataopsamlingsmetode for <i>Scheduled</i> MRM-algoritmen til en dataopsamlingsmetode for en <i>Scheduled</i> MRM Pro-algoritme.</p> <hr/> <p>Bemærk: Vinduesbredden, som benytter den globale indstilling fra venstre rude, har en gul baggrund. Når vinduesbredden i tabellen ændres manuelt for en individuel overgang, eller hvis den allerede bruger den avancerede vinduesbredde, der er specifik for overgangen, ændres baggrundsfarven for den pågældende celle til hvid.</p> <hr/>
3	<p>Højre rude viser alle <i>Scheduled</i> MRM-algoritmeovergange, som er indeholdt i den indlæste dataopsamlingsmetode for <i>Scheduled</i> MRM-algoritmen, grafisk som fire forskellige grafteryper.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Den valgte MRM-overgang i tabellen er afbildet med den grønne lodrette linje i graferne. • De lysegrå områder i graferne repræsenterer de retentionstidszoner, hvor der er polaritetskontakt i hver cyklus. • Værktøjstip i hver graf viser X- og Y-værdier for overgangen under markøren. For graferne Method Overview og Dwell Time vises forbindelses-id'et også i værktøjstippet. • Hvis du klikker på en MRM-overgang i grafen Method Overview, vælges den pågældende overgang i de andre tre grafer og tabellen.
4	<p>Den første graf, Method Overview, viser alle overgange og detektionsvinduet for hver overgang. X-aksen viser retentionstiden. Y-aksen viser MRM-indeksnummeret, som er den rækkefølge, hvori overgangene blev indtastet i metoden.</p>
5	<p>Den anden graf, MRM Concurrency, viser retentionstiden på X-aksen og den samtidige MRM-overgang ved hver retentionstid på Y-aksen.</p>

Element	Beskrivelse
6	<p>Den tredje graf, Projected sMRM Cycle Time, plotter den projicerede cyklostid over retentionstiden. Den røde linje repræsenterer Target Cycle Time, hvis den bruges. Hvis Target Scan Time anvendes, er værdien af den røde linje summen af Target sMRM Scan-tiden for alle <i>Scheduled</i> MRM-algoritmeeksperimenter i metoden.</p> <hr/> <p>Bemærk: Der forventes flere datapunkter for overgange, hvor Projected sMRM Cycle Time er meget lavere end Target Cycle Time eller summen af Target Scan Time (hvor den røde linje er). Der forventes færre datapunkter for overgange, hvor Projected sMRM Cycle Time er meget højere end Target Cycle Time eller summen af Target Scan Time (hvor den røde linje er).</p> <hr/>
7	<p>Den fjerde graf viser opholdstiden for hver overgang ved dens retentionstid. X-aksen viser retentionstiden. Y-aksen viser den opholdstid, som anvendes.</p>

4. Rediger parameterværdierne efter behov for at optimere metoden og opnå en bedre fordeling af **Projected sMRM Cycle Time**.

5. Klik på **Save Method**.
Vinduet **Save Method File** åbnes.

Ændringerne i metoden kan gemmes i den oprindelige dataopsamlingsmetode eller gemmes som en ny dataopsamlingsmetode. Hvis ændringerne gemmes i den oprindelige dataopsamlingsmetode, overskrives de oprindelige parameterværdier af de nye værdier.

6. Indtast et nyt filnavn, eller vælg den oprindelige metode, og klik derefter på **Save**.
7. Åbn den gemte dataopsamlingsmetode i **Acquisition Method Editor** for at få vist de nye ændringer.
Hvis den oprindelige metode var åben i **Acquisition Method Editor**, skal metoden lukkes og åbnes igen.
8. Klik på **X** øverst til højre i dialogboksen **sMRM Calculator** for at lukke dialogboksen.

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 SCIEX 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.
