
Logiciel Analyst MD

Guide de l'utilisateur de scripts



Ce document est fourni aux clients qui ont acheté un équipement SCiEX afin de les informer sur le fonctionnement de leur équipement SCiEX. Ce document est protégé par les droits d'auteur et toute reproduction de tout ou partie de son contenu est strictement interdite, sauf autorisation écrite de SCiEX.

Le logiciel éventuellement décrit dans le présent document est fourni en vertu d'un accord de licence. Il est interdit de copier, modifier ou distribuer un logiciel sur tout support, sauf dans les cas expressément autorisés dans le contrat de licence. En outre, l'accord de licence peut interdire de décomposer un logiciel intégré, d'inverser sa conception ou de le décompiler à quelque fin que ce soit. Les garanties sont celles indiquées dans le présent document.

Certaines parties de ce document peuvent faire référence à d'autres fabricants ou à leurs produits, qui peuvent comprendre des pièces dont les noms sont des marques déposées ou fonctionnent comme des marques de commerce appartenant à leurs propriétaires respectifs. Cet usage est destiné uniquement à désigner les produits des fabricants tels que fournis par SCiEX intégrés dans ses équipements et n'induit pas implicitement le droit et/ou l'autorisation de tiers d'utiliser ces noms de produits comme des marques commerciales.

Les garanties fournies par SCiEX se limitent aux garanties expressément offertes au moment de la vente ou de la cession de la licence de ses produits. Elles sont les uniques représentations, garanties et obligations exclusives de SCiEX. SCiEX ne fournit aucune autre garantie, quelle qu'elle soit, expresse ou implicite, notamment quant à leur qualité marchande ou à leur adéquation à un usage particulier, en vertu d'un texte législatif ou de la loi, ou découlant d'une conduite habituelle ou de l'usage du commerce, toutes étant expressément exclues, et ne prend en charge aucune responsabilité ou passif éventuel, y compris des dommages directs ou indirects, concernant une quelconque utilisation effectuée par l'acheteur ou toute conséquence néfaste en découlant.

Usage réservé au diagnostic *in vitro*. Produit(s) non disponible(s) dans tous les pays. Pour plus d'informations, contactez votre représentant commercial local ou consultez la page Web.sciex.com/diagnostics.

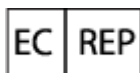
Rx only.

La disponibilité des produits est variable en fonction des pays. Pour plus d'informations, contactez votre représentant commercial local ou consultez la page sciex.com.

Les marques commerciales et/ou marques déposées mentionnées dans le présent document, y compris les logos associés, appartiennent à AB Sciex Pte. Ltd, ou à leurs propriétaires respectifs, aux États-Unis et/ou dans certains autres pays (voir sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ est utilisé sous licence.

© 2022 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



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

IVD

CE

UK
CA



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

Table des matières

Chapitre 1 : Préface	5
Public visé	5
Assistance technique	5
Chapitre 2 : Scripts	6
Installer ou désinstaller des scripts	6
Installer un script	6
Désinstaller un script	6
Créer des méthodes de quantification et des fichiers texte	7
Utiliser le script Create Quan Methods From Text Files	7
Utiliser le script Create Text File From Quan Method	9
Format de fichier texte	10
DFT Tracker	14
Script MRM3 Optimization	15
Présentation de la fenêtre MRM3 Optimization	15
Optimisation en cours	20
Optimisation achevée	22
Description détaillée de la logique du script : Initialisation	24
Balayage avec Résolution améliorée	24
Balayage d'ions multiples Q1	24
Balayage d'ions produits améliorés	24
Balayage de surveillance des réactions multiples	25
Balayage MS/MS/MS (MS3)	25
Générer des méthodes finales	26
Script MSServiceLog	26
Installer le script	26
Utiliser le script	26
sMRM Calculator	28
Installer le script	29
Utiliser le script	29
Nous contacter	34
Formation destinée aux clients	34
Centre d'apprentissage en ligne	34
Assistance technique SCIEX	34
Cybersécurité	34
Documentation	34

Public visé

Ce guide est destiné aux clients et aux techniciens de service (FSE).

Assistance technique

SCIEX et ses représentants disposent de personnel dûment qualifié et de spécialistes techniques dans le monde entier. Ils peuvent répondre aux questions sur le système ou à tout problème technique qui pourrait survenir. Pour plus d'informations, visitez le site Web à l'adresse sciex.com.

Ce document explique comment installer et utiliser les scripts du logiciel Analyst MD. Il présente également comment utiliser chaque script et comment en désinstaller un, le cas échéant.

Installer ou désinstaller des scripts

Certains scripts sont automatiquement installés lors de l'installation du logiciel Analyst MD.

Les autres scripts se trouvent dans le dossier Scripts.

Pour être utilisables, les scripts doivent être installés. Consultez la section [Installer un script](#).

Installer un script

1. Effectuez l'une des opérations suivantes :
 - Accédez au dossier <Drive>:\Program Files\Analyst\Scripts sur l'ordinateur.
 - Accédez au dossier Extras\Scripts sur le DVD du logiciel, le cas échéant, ou dans le package de téléchargement web du logiciel décompressé.
2. Ouvrez le dossier Scripts.
3. Effectuez l'une des opérations suivantes :
 - Pour le script sMRM Calculator, double-cliquez sur **sMRM Calculator Setup.exe**.
 - Pour tous les autres scripts, double-cliquez sur **ScriptRunner.exe**.
4. Suivez les instructions à l'écran pour installer les scripts.
Les scripts installés sont disponibles dans le menu **Script**.

Désinstaller un script

Remarque : Ne désinstallez pas les scripts DFTTracker et MRM3 Optimization. Si ces scripts sont supprimés, le logiciel Analyst MD doit être réinstallé pour que ces scripts soient accessibles.

Pour désinstaller un script, procédez comme suit :

- Pour les scripts Create Quant Methods From Text Files, Create Text File from Quant Method et MSServiceLog, accédez au dossier <drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Processing Scripts puis supprimez la DLL correspondante manuellement.
- Pour le script sMRM Calculator, procédez comme suit :

- Sous le système d'exploitation Windows 7 : cliquez sur **Start > All Programs > Control Panel > Programs and Features**.
- Sous le système d'exploitation Windows 10 : cliquez sur **Start > Control Panel > Programs and Features**.
- Cliquez avec le bouton droit de la souris sur **sMRM Calculator**, puis cliquez sur **Uninstall**.
- Suivez les instructions qui apparaissent à l'écran.

Créer des méthodes de quantification et des fichiers texte

Le script Create Text File From Quan Method exporte une méthode de quantification vers un fichier texte délimité par des tabulations. Le script Create Quan Method From Text Files importe les informations contenues dans un fichier texte délimité par des tabulations vers un fichier de méthode de quantification (qmf). Actuellement le composant Build Quantitation Method dans le logiciel Analyst MD ne prend pas en charge cette fonctionnalité.

Le script Create Text File From Quan Method crée une représentation d'un fichier de méthode de quantification sous la forme d'un fichier texte. Une colonne est créée dans le fichier texte pour chaque champ obligatoire si la case **Export all columns** est cochée. Si cette case est décochée, le script génère un fichier texte contenant des colonnes uniquement pour les champs dont la valeur n'est pas la même pour tous les pics.

Le script Create Quan Method From Text Files spécifie les valeurs par défaut pour tous les champs non obligatoires du fichier texte, tels que l'algorithme d'intégration ou les paramètres de régression. Pour plus d'informations, consultez la section [Format de fichier texte](#).

Utiliser le script Create Quan Methods From Text Files

1. Cliquez sur **Script > Create Quan Methods From Text Files**.

Illustration 2-1 : Boîte de dialogue Quantitation Methods from Text Files

2. Utilisez les paramètres de la section Default Generic Parameters pour créer une méthode de quantification. Les champs **Algorithm**, **Extraction Type**, **Period** et **Experiment** ne sont pas disponibles dans la fenêtre Analyst MD. Réglez les paramètres suivants selon les besoins :
 - Dans la liste **Algorithm**, sélectionnez un algorithme de recherche de pic. L'algorithme Window Summation additionne toutes les intensités comprises sous le seuil de rétention et ne trouve aucun pic.
 - Dans la liste **Extraction Type**, sélectionnez le type de données à intégrer.
 - Dans les listes **Period** et **Experiment**, sélectionnez le numéro de la période et celui de l'expérience.

Les groupes Default Analyst Classic Parameters, Default General IntelliQuan Parameters, Default IntelliQuan MQ III Parameters et Default Window Summation Parameters contiennent les paramètres utilisés par l'algorithme sélectionné dans le champ **Algorithm**.

3. Cochez la case **Use Baseline Subtraction** pour que l'algorithme Window Summation additionne les intensités sur la ligne horizontale à l'intensité minimum des points de données, au lieu de les ramener à l'intensité zéro.

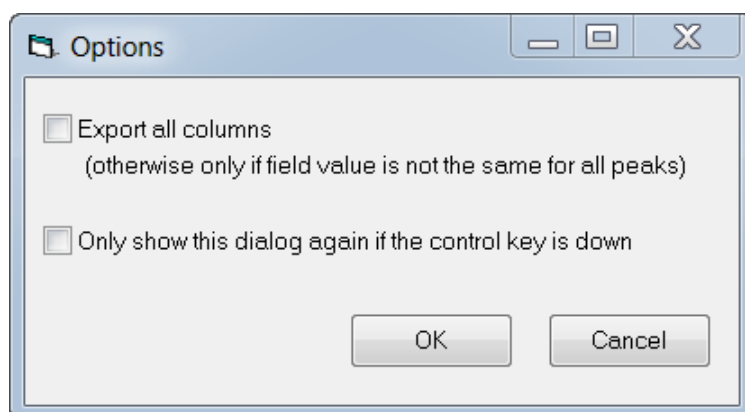
4. Dans la section Regression Parameters, sélectionnez les informations de régression. Les informations spécifiées ici s'appliquent à chaque pic d'analyte. Contrairement aux paramètres précédents, il n'est pas possible d'indiquer ces informations dans les fichiers texte. Par conséquent, les paramètres de régression appliqués à tous les analytes sont les mêmes. Pour obtenir une description complète des paramètres, consultez l'*Aide*.
5. Pour créer une méthode de quantification, cliquez sur **Create One Method**, accédez au fichier texte qui sera utilisé pour créer la méthode, puis cliquez sur **Open**.
Un fichier de méthode de quantification qmf portant le même nom que le fichier txt est créé, à condition que le fichier texte soit au bon format et qu'il contienne les colonnes obligatoires. La méthode de quantification créée est stockée dans le dossier `Quantitation Methods` du projet actif dans le logiciel Analyst MD, quel que soit l'emplacement du fichier texte.
6. Pour créer plusieurs méthodes à partir de plusieurs fichiers texte, cliquez sur **Create Multiple Methods**, accédez au dossier contenant les fichiers texte, puis cliquez sur **OK**.

Un fichier de méthode de quantification qmf portant le même nom que le fichier txt est créé pour chaque fichier texte dans ce dossier, si ces fichiers texte sont au bon format et qu'ils contiennent les colonnes obligatoires. Les méthodes de quantification créées sont stockées dans le dossier `Quantitation Methods` du projet actif dans le logiciel Analyst MD, quel que soit l'emplacement des fichiers texte.

Utiliser le script Create Text File From Quan Method

1. Créez et enregistrez une méthode de quantification dans le logiciel Analyst MD.
2. Cliquez sur **Script > Create Text File from Quan Method..**

Illustration 2-2 : Boîte de dialogue Options



3. Cochez la case **Export all columns**, puis cliquez sur **OK**.
4. Accédez au fichier de la méthode de quantification (qmf), puis sélectionnez-le.
5. **Accédez** à l'emplacement du fichier texte, puis sélectionnez-le.
Le script génère le fichier texte avec toutes les colonnes. Si la case **Export all columns** n'a pas été cochée à l'étape 3, le script génère uniquement un fichier texte contenant des colonnes pour les champs dont la valeur n'est pas la même pour tous les pics.

Format de fichier texte

Les fichiers texte utilisés pour créer les méthodes de quantification (Create Quan Methods From Text Files) et ceux générés à partir des méthodes (Create Text File From Quan Method) se présentent au format suivant :

- Séparez les différents champs par des tabulations et chaque ligne par un retour chariot ou un saut de ligne.
- La première ligne du fichier doit contenir les en-têtes de colonne. Toutes les colonnes affichées dans le tableau suivant et portant la mention Obligatoire doivent être présentes. Les autres colonnes sont facultatives. L'ordre des colonnes n'a pas d'importance.
- Chaque ligne suivante doit contenir les informations présentées dans le tableau pour un analyte ou un pic de standard interne.

Tableau 2-1 : Formats de fichier texte

Nom de la colonne	Obligatoire	Description
Peak Name	Oui	Nom de l'analyte ou du pic de standard interne.
First Mass	Oui	Pour les données MRM, la masse de Q1 pour le pic. Pour les données de balayage complet, la masse initiale du XIC à intégrer. Pour les données Q1 MI ou Q3 MI, la masse.
Second Mass	Parfois	Ce champ est obligatoire lors de l'intégration de données de balayage complet ou MRM, mais pas pour les données Q1 MI ou Q3 MI. Pour les données MRM, il s'agit de la masse de Q3 pour le pic. Pour les données de balayage complet, la masse finale du XIC à intégrer.
Extraction Type	Non	Type de données à intégrer. S'il est présent, l'un des suivants : 0 – données MRM 1 – données Q1 MI ou Q3 MI 2 – données de balayage complet
Is IS	Non	Spécifie si le pic actuel est un standard interne ou un analyte. TRUE si le pic est un standard interne. Sinon, FALSE. Si la colonne est absente, tous les pics définis sont censés correspondre à des analytes. Remarque : les pics de standard interne doivent être définis en premier dans le fichier texte, avant les pics de l'analyte qui utilisent cette IS.

Tableau 2-1 : Formats de fichier texte (suite)

Nom de la colonne	Obligatoire	Description
IS Name	Non	Pour les pics d'analyte, spécifie le nom du standard interne correspondant (le cas échéant). Si un analyte donné n'utilise pas de standard interne, laisser ce champ vide. Quant aux pics de standard interne, le contenu de ce champ est ignoré.
Period	Non	Numéro de la période pour le pic (de 1 au nombre de périodes dans les données).
Experiment	Non	Numéro de l'expérience pour le pic (de 1 au nombre maximal d'expériences dans la période).
Use Relative RT	Non	Pour les pics des analytes qui utilisent un standard interne, spécifie si le temps de rétention attendu est lié ou non à celui de l'IS. TRUE si tel est le cas. Sinon, FALSE. Le contenu de ce champ est ignoré pour les autres pics mais doit néanmoins contenir l'une des valeurs TRUE ou FALSE.
Conc Units	Non	Unités de concentration.
Calc Conc Units	Non	Unités de concentration calculées.
Bkg Start	Non	Heure de début, en minutes, du bruit de fond du pic. Ce paramètre n'a aucune incidence sur l'intégration du pic, mais influence le mode de calcul du bruit, et donc, du rapport S/B.
Bkg End	Non	Heure de fin, en minutes, du bruit de fond du pic.
Expected RT	Non	Temps de rétention attendu, en minutes, de 0 à 1 666.
RT Window	Non	Fenêtre de temps de rétention, en secondes, de 1 à 1 000.
Algorithm	Non	Spécifie l'algorithme de recherche et d'intégration de pic à utiliser. S'il est présent, l'un des suivants : 0 – Analyst Classic (TurboChrom) 1 – IntelliQuan – IQA II (Automatic) 2 – IntelliQuan – MQ III 3 – Window Summation
Bunching Factor	Non	(Algorithme TurboChrom) Facteur de groupement du pic, de 1 à 100.
Num Smooths	Non	(Algorithme TurboChrom) Nombre de lissages, de 0 à 10.

Tableau 2-1 : Formats de fichier texte (suite)

Nom de la colonne	Obligatoire	Description
Noise Threshold	Non	(Algorithme TurboChrom) Seuil du bruit, de 1-6 à 19.
Area Threshold	Non	(Algorithme TurboChrom) Seuil d'aire, de 1-6 à 112.
Separation Width	Non	(Algorithme TurboChrom) Largeur de séparation, de 0 à 5.
Separation Height	Non	(Algorithme TurboChrom) Hauteur de séparation, de 0 à 1.
Exp Peak Ratio	Non	(Algorithme TurboChrom) Rapport de pic exponentiel, de 1 à 16.
Exp Adjusted Ratio	Non	(Algorithme TurboChrom) Rapport exponentiel ajusté, de 2 à 16.
Exp Valley Ratio	Non	(Algorithme TurboChrom) Rapport de vallée exponentiel, de 1 à 16.
Min Height	Non	Hauteur minimum du pic admise, de 0 à 116, lorsque l'algorithme IntelliQuan est utilisé.
Min Width	Non	(Algorithme IntelliQuan) Largeur minimum du pic admise, de 0 à 116, en secondes.
Smooth Width	Non	(Algorithme IntelliQuan) Demi-largeur du filtre de lissage Savitzky-Golay, de 0 à 20.
MQ III Noise Percent	Non	(Algorithme IntelliQuan) Pourcentage de bruit lorsque l'option MQ III est utilisée. Cette valeur doit être un entier compris entre 0 et 100.
MQ III Baseline Sub Window	Non	(Algorithme IntelliQuan) Fenêtre de soustraction de référence, de 0 à 10 minutes, lorsque l'option MQ III est utilisée.
MQ III Peak Splitting Factor	Non	(Algorithme IntelliQuan) Facteur de division des pics, de 0 à 10, lorsque l'option MQ III est utilisée.
MQ III Use Largest	Non	(Algorithme IntelliQuan) Spécifie si le pic le plus grand lorsque l'option MQ III est utilisée, pendant la fenêtre du temps de rétention, ou le pic dont le temps de rétention est le plus proche de celui attendu est détecté. TRUE pour utiliser le pic le plus grand et FALSE pour le plus proche.

Tableau 2-1 : Formats de fichier texte (suite)

Nom de la colonne	Obligatoire	Description
Summation Baseline Sub	Non	(Algorithme spécial d'addition de fenêtres) Spécifie si l'aire doit être intégrée à la ligne intensity=0 ou à la valeur d'intensité du point de données le moins intense dans la fenêtre. TRUE pour intégrer l'aire à la valeur d'intensité du point de données le moins intense, FALSE pour intégrer l'aire à la ligne intensity=0.

Le tableau suivant présente un exemple de fichier texte pour les données de balayage complet. Le fichier texte contient des tabulations entre les colonnes et un retour chariot à la fin de chaque ligne.

Tableau 2-2 : Exemple de fichier texte pour les données de balayage complet

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

Le tableau suivant présente un autre exemple pour les données MRM. Le pic Analyte Peak 1 est configuré pour utiliser le standard interne spécifié et Analyte Peak 2 n'utilise pas de standard interne.

Tableau 2-3 : Exemple de fichier texte

Peak Name	Is IS	IS Name	First Mass	Second Mass
IS Peak 1	TRUE	—	500,1	413,2
Analyte Peak 1	FALSE	IS Peak 1	600,2	382,1
Analyte Peak 2	FALSE	IS Peak 1	400	312,1

Le tableau suivant contient à la fois des données de balayage complet et MRM pour différentes expériences :

Tableau 2-4 : Exemple de fichier texte pour les données MRM

Peak Name	Extraction Type	Experiment	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

Scripts

Tableau 2-4 : Exemple de fichier texte pour les données MRM (suite)

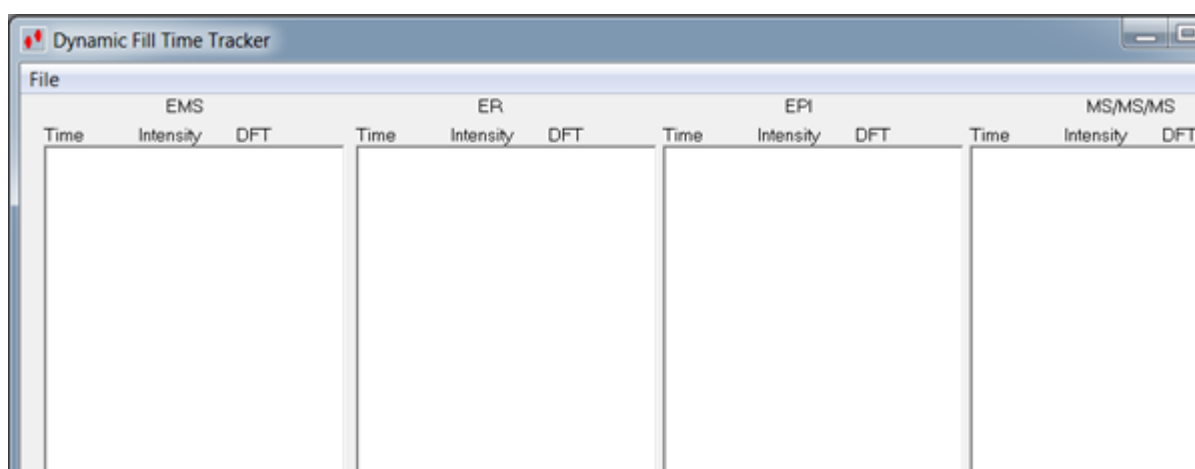
Peak Name	Extraction Type	Experiment	First Mass	Second Mass
Analyte Peak 4	2	2	400	401

DFT Tracker

Le script Dynamic Fill Time (DFT) Tracker suit les réglages DFT utilisés pendant les balayages du spectromètre de masse QTRAP. Utilisez le script pour déterminer le temps de remplissage optimal pour le mode trappe à ions linéaire (LIT) afin d'obtenir une qualité de données élevée sur une large plage dynamique. Le DFT Tracker surveille les types de balayage LIT suivants : MS amélioré (EMS), Résolution améliorée (ER), Ion produit amélioré (EPI) et MS/MS/MS (MS3).

- Cliquez sur **Script > DFTTracker**.

Illustration 2-3 : Boîte de dialogue Dynamic Fill Time Tracker



DFT Tracker surveille les modifications dynamiques apportées au temps de remplissage pendant un traitement en temps réel.

Le système calcule de façon dynamique le temps nécessaire pour remplir la trappe à ions linéaire. Pour les composés abondants, un court temps de remplissage réduit les effets de charge d'espace en limitant le nombre d'ions dans la trappe à ions. Un temps de remplissage plus long augmente les signaux faibles en laissant les ions s'accumuler.

- Cliquez sur **File > Save** pour enregistrer le temps de remplissage suivi.
- Cliquez sur **File > Clear** pour effacer le temps de remplissage suivi.
- Cliquez sur **File > Always On Top** pour maintenir la fenêtre Dynamic Fill Time Tracker au-dessus de toutes les autres fenêtres ou applications ouvertes.
- Cliquez sur **File > Exit** pour quitter le script DFT Tracker.

Script MRM3 Optimization

Utiliser ce script pour l'analyse de quantification sur les systèmes QTRAP afin d'augmenter la spécificité et, par conséquent, d'améliorer la détection lors de la quantification d'analytes dans des matrices complexes. Ce script est conçu pour générer une méthode d'acquisition MS3 optimale par perfusion. Le script exécute les étapes d'optimisation suivantes :

- Confirmation de la masse du précurseur
- Optimisation de la transmission vers la cellule de collision
- Détermination des principaux ions fragments
- Optimisation de l'énergie de collision (CE) pour chacun des ions fragments
- Exécution des analyses MS3 sur chaque ion fragment
- Optimisation de l'énergie d'excitation (AF2) pour tous les balayages MS3
- Génération d'un rapport
- Enregistrement de toutes les données et méthodes d'acquisition

Le script peut également être utilisé dans des applications qualitatives pour générer des collections de spectres MS/MS et MS3 pour les composés de manière semi-automatique (c'est-à-dire, un composé à la fois).

Présentation de la fenêtre MRM3 Optimization

Utilisez les commandes de la fenêtre MRM3 Optimization pour naviguer. La fenêtre affiche également les résultats de l'optimisation à mesure qu'ils sont générés. Ce qui suit est un aperçu des différentes sections de cette fenêtre.

Tableau 2-5 : Fenêtre MRM3 Optimization

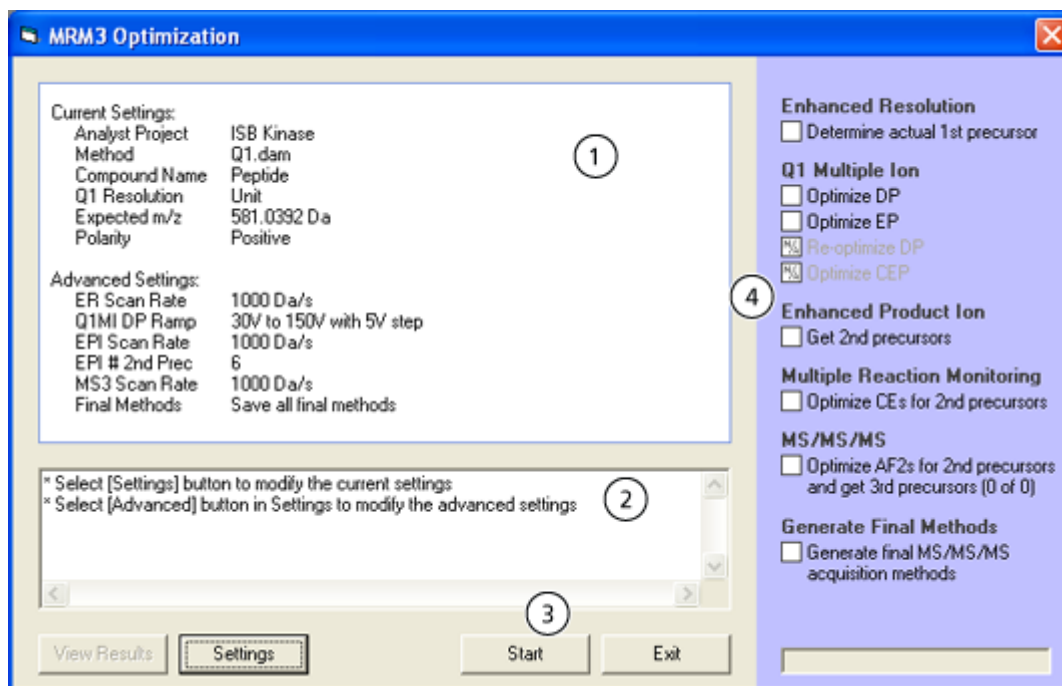
Champ	Description
Status Window	Au premier démarrage du script, cette fenêtre affiche les paramètres qui seront utilisés pour l'optimisation. Une fois l'optimisation démarrée, les informations spectrales s'affichent dans cette fenêtre.
Log File	Affiche les résultats trouvés lors de l'optimisation, au format texte. Chaque entrée trouvée dans cette section est également ajoutée au fichier Log.txt généré.
Overall Progress	Affiche l'état d'avancement de l'optimisation globale.
Main Controls	Contient toutes les principales fonctions associées au réglage et à l'exécution du processus d'optimisation.

- Cliquez sur **View Results** pour ouvrir et examiner le fichier à l'aide du Bloc-Notes Microsoft. Une fois l'optimisation terminée, un fichier Results.txt est généré et enregistré automatiquement.

Scripts

- Cliquez sur **Settings** pour ouvrir une fenêtre dans laquelle saisir les informations du composé nécessaires au processus d'optimisation.
- Cliquez sur **Start** pour démarrer le processus d'optimisation. Lors de l'optimisation, ce bouton est renommé en **Abort** et permet d'arrêter le processus d'optimisation.

Illustration 2-4 : Fenêtre MRM3 Optimization



Élément	Description
1	Volet d'état
2	Fichier registre
3	Commandes principales
4	Progression générale

Définir les préférences

La boîte de dialogue Settings s'ouvre automatiquement à chaque lancement du script.

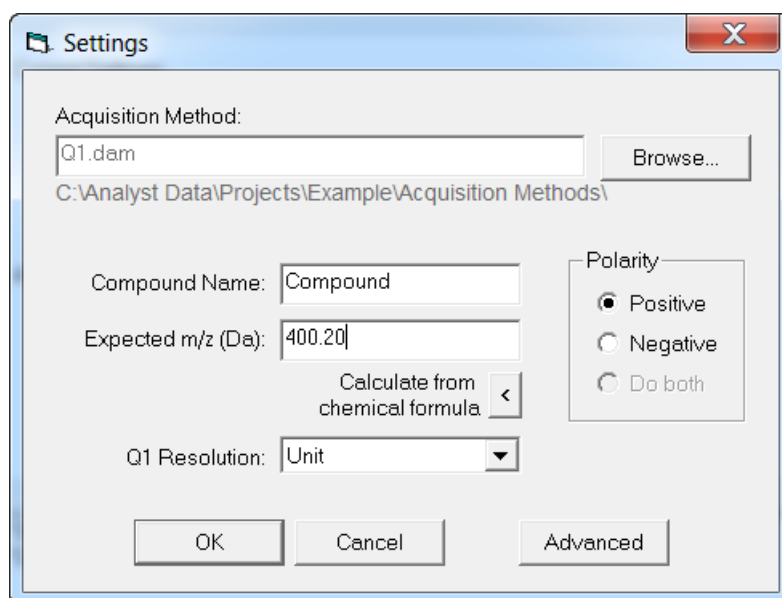
1. Cliquez sur **Browse** pour accéder à la méthode d'acquisition de démarrage. Cette méthode comprend les conditions de source à utiliser pour l'optimisation.
2. Dans le champ **Compound Name**, indiquez un nom de composé parlant. Ce nom est utilisé comme préfixe pour toutes les méthodes d'acquisition et les fichiers de données générés.
3. Dans le champ **Expected m/z (amu)**, saisissez le rapport masse/charge attendu (m/z) pour le composé. Si la valeur m/z des composés est inconnue, cliquez sur **Calculate from chemical formula** pour la calculer à partir de la formule chimique du composé. Consultez la section [Calculer le rapport \$m/z\$](#) .

4. Dans le champ **Q1 Resolution**, sélectionnez une résolution Q1 à utiliser pour MS/MS et MS3.
5. Dans le groupe **Polarity**, cliquez sur une polarité qui peut être différente de celle de la méthode de démarrage. L'option **Do both** n'est pas prise en charge actuellement.
6. Pour modifier certains des paramètres utilisés par le processus d'optimisation, cliquez sur **Advanced**. Consultez la section [Utiliser la boîte de dialogue Advanced Settings](#).
7. Pour vérifier et utiliser les paramètres mis à jour, cliquez sur **OK**.

Utiliser le script

1. Créez une méthode d'acquisition de démarrage s'il n'en existe pas déjà une. La méthode de démarrage doit être une méthode d'acquisition Q1 créée en mode de réglage manuel et doit contenir les conditions de source requises pour le processus de réglage, car celles-ci ne sont pas optimisées par le script.
2. Enregistrez la méthode dans le dossier `Acquisition Methods` du projet concerné, où tous les fichiers générés seront sauvegardés.
3. Cliquez sur **Script > MRM3 Optimization**.

Illustration 2-5 : Boîte de dialogue Settings



4. Saisissez les informations du composé nécessaires au processus d'optimisation, puis cliquez sur **OK** dans la boîte de dialogue Settings.
5. Pour démarrer le processus d'optimisation, cliquez sur **Start** dans la fenêtre MRM3 Optimization.

Calculer le rapport m/z

Le calculateur de rapport m/z est disponible dans la boîte de dialogue Settings.

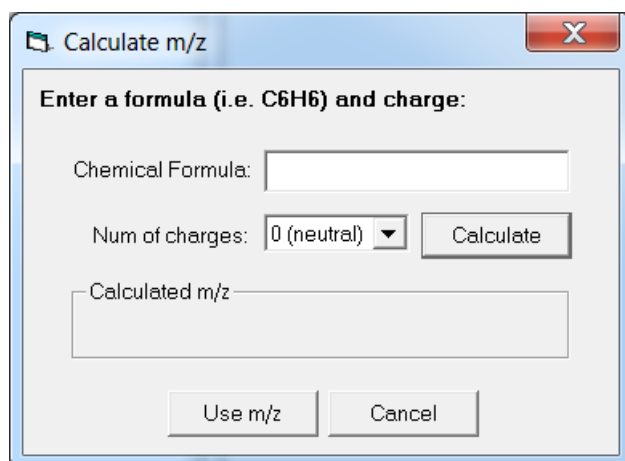
1. Dans la fenêtre MRM3 Optimization, cliquez sur **Settings**.

Scripts

La boîte de dialogue Settings apparaît.

2. Cliquez sur **Calculate from chemical formula**.

Illustration 2-6 : Boîte de dialogue Calculate m/z



3. Dans le champ **Chemical Formula**, saisissez la formule chimique du composé. Utilisez des majuscules pour les symboles des éléments. La formule chimique de peptides est également saisie dans cette boîte de dialogue.
4. Dans le champ **Num of charges**, cliquez sur le nombre de charges.
5. Pour calculer le rapport m/z de la formule chimique et de la charge saisies, cliquez sur **Calculate**.
6. Pour fermer le calculateur et mettre à jour le champ **Expected m/z (amu)** de la boîte de dialogue Settings avec le rapport m/z calculé, cliquez sur **Use m/z**.

Utiliser la boîte de dialogue Advanced Settings

Dans cette boîte de dialogue, une description de chacune des étapes d'optimisation est fournie. Certains de ces paramètres peuvent être modifiés pour personnaliser l'optimisation.

1. Dans la fenêtre MRM3 Optimization, cliquez sur **Settings**.
La boîte de dialogue Settings apparaît.
2. Cliquez sur **Advanced**.

Illustration 2-7 : Boîte de dialogue 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. Dans les champs **Scan Rate** des groupes Enhanced Resolution, Enhanced Product Ion et MS/MS/MS, sélectionnez une vitesse de balayage pour **EPI**, **ER** et **MS3**.
4. Dans le groupe **Q1 Multiple Ion**, dans les champs **DP Ramp**, saisissez la plage de potentiels de défragmentation (DP) à optimiser. La plage est exprimée en valeurs absolues et la polarité appropriée est automatiquement appliquée en fonction de la sélection effectuée dans la boîte de dialogue Settings.
5. Dans le groupe **Enhanced Product Ion**, procédez comme suit :
 - Dans le champ **2nd Precursors**, saisissez le nombre maximum de seconds précurseurs (ions fragments) utilisés pour l'optimisation MS3. Saisissez une valeur comprise entre 1 et 10.
 - Dans le champ **Mass range**, saisissez une plage de masses pour les seconds précurseurs qui seront sélectionnés pour l'optimisation MS3.
 - Dans le champ **CE**, saisissez une valeur d'énergie de collision et, dans le champ **CES**, saisissez une valeur de propagation de l'énergie de collision qui fournira un bon spectre MS/MS à partir duquel les ions fragments pourront être sélectionnés.
6. Pour générer toutes les méthodes MS3 finales de chaque second précurseur ainsi que la méthode MS3 optimale de l'analyse de quantification, dans le groupe **Generate Final Methods**, cliquez sur **Save All Final Methods**. Cliquez sur **Save Optimal Method Only** pour n'enregistrer que la méthode MS3 optimale (la plus sensible à la quantification).
7. Cliquez sur **OK** pour accepter les paramètres avancés mis à jour.

Optimisation en cours

Lorsque l'optimisation est lancée, le réglage manuel dans le logiciel Analyst MD s'arrête automatiquement. Pendant l'exécution du script, toutes les fonctions du logiciel peuvent encore être utilisées. Un fichier Log.txt est également mis à jour à l'achèvement de chaque partie de la procédure d'optimisation. Pour arrêter le script à tout moment, cliquez sur **Abort**. Consultez les figures suivantes pour voir des exemples du script. Dans la section Overall Progress, les images et polices de la liste de contrôle représentent les différents états décrits dans la section suivante.

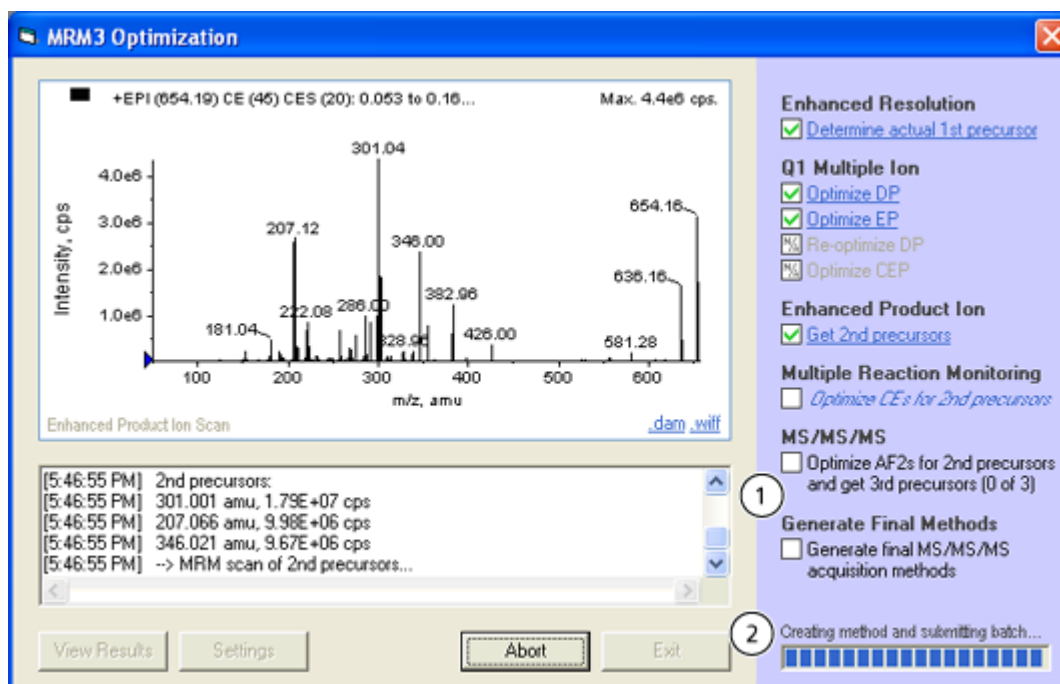
Illustration 2-8 : Exemples d'état

- ❑ 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

Élément	Description
1	Tâches non encore effectuées - Texte noir
2	Tâches en cours - Texte bleu et en italique
3	La tâche ne sera pas effectuée - Texte bleu et souligné
4	Tâche terminée (lien hypertexte) - Texte bleu et souligné
5	Tâche terminée (aucun lien) - Texte bleu
6	Tâche partiellement exécutée (lien hypertexte) - Texte bleu, souligné et en italique

Lorsque le texte est souligné, cliquez dessus comme pour un lien hypertexte de page Web. Le spectre ou le chromatogramme correspondant s'affiche. Le texte situé sous MS/MS/MS indique également le nombre de balayages MS3 exécutés, car il peut y avoir entre 1 et 10 balayages. La section Overall Progress inclut également une zone Message. Dans cette zone, une barre de progression indique l'état d'avancement de l'étape. Divers messages sont affichés au-dessus de la barre de progression tels que l'heure et les autres états de l'étape d'optimisation en cours.

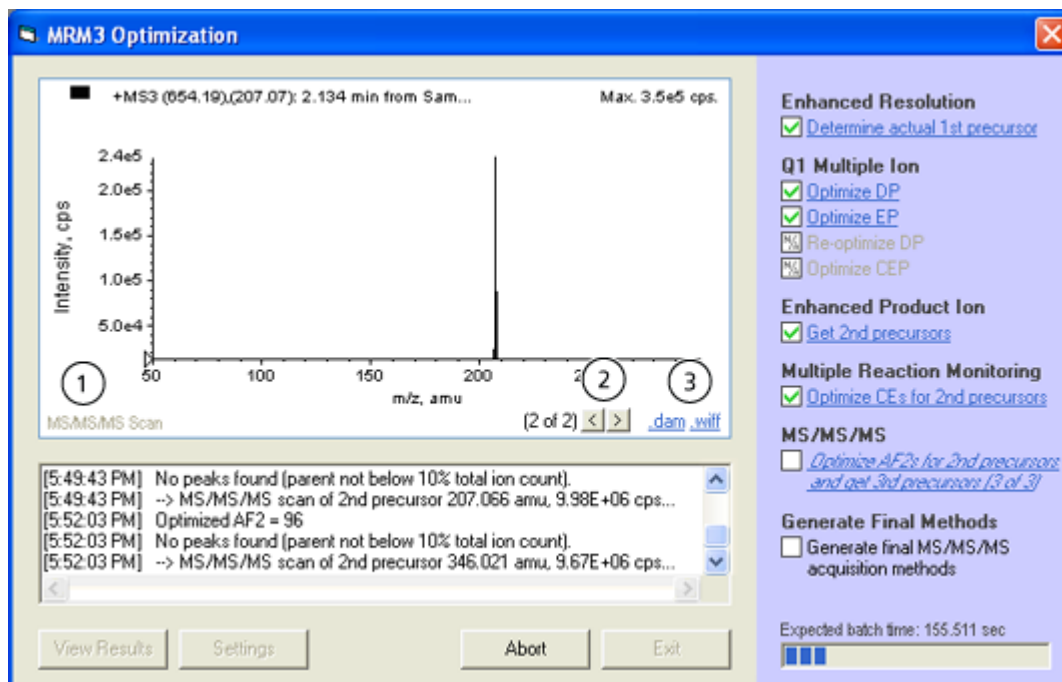
Illustration 2-9 : Fenêtre MRM3 Optimization après un balayage EPI



Élément	Description
1	Liste de contrôle
2	Message

Dans la fenêtre d'état spectral, le spectre ou le chromatogramme généré précédemment s'affiche. Quand l'un des éléments de la liste de contrôle est sélectionné, le graphique correspondant s'affiche. Le nom du type de balayage indique le balayage affiché. Pour chaque étape terminée, il est possible d'ouvrir la méthode d'acquisition (dam) ou le fichier de données (wiff) associé au graphique représenté. Si un balayage MS/MS/MS est affiché, utilisez les boutons pour naviguer parmi les différents balayages MS3.

Illustration 2-10 : Fenêtre MRM3 Optimization pendant un balayage MS3



Élément	Description
1	Type de balayage
2	Boutons permettant de naviguer parmi les différents balayages MS3
3	Liens

Optimisation achevée

Quand l'optimisation quantitative pour MS3 est terminée ou arrêtée, un fichier Results.txt est généré. Ce fichier s'ouvre automatiquement dans le Bloc-Notes Microsoft. Cliquez sur **View Results** dans la fenêtre MRM3 Optimization pour afficher le fichier. Les différentes parties du fichier Results.txt sont décrites ci-après.

- **Time and Duration** : affiche la date et la durée de l'optimisation.
- **User Starting Conditions** : affiche les paramètres et réglages avancés dans cette section.
- **Optimization Conditions Found** : affiche les conditions optimales constatées lors des balayages ER et Q1MI.
- **MS3 Fragments Found and Associated Losses** : affiche les fragments et les conditions optimales (énergie de collision et énergie d'excitation) ainsi que les pertes associées trouvés pour les analyses EPI et MS3.

Illustration 2-11 : Rapport d'optimisation

```

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

```

Élément	Description
1	Temps et durée
2	Conditions de démarrage de l'utilisateur
3	Conditions d'optimisation trouvées
4	Fragments MS3 trouvés et pertes associées

Toutes les méthodes d'acquisition générées ont un nom de fichier descriptif au format [nom du composé fourni] + [type de balayage] + [m/z] + dam. Ces méthodes sont enregistrées dans le même dossier que la méthode d'acquisition de démarrage.

Toutes les données, ainsi que les fichiers Log.txt et Results.txt, sont enregistrés dans un sous-dossier Data créé dans le même projet que la méthode d'acquisition de démarrage. Ce sous-dossier est au format [nom du composé fourni] + OptMS3 + ([date], [heure]). Les fichiers de données sont au format [nom du composé fourni] + [type de balayage] + [m/z] + wiff.

Description détaillée de la logique du script : Initialisation

Cette section décrit chaque phase du processus d'optimisation. Tous les balayages sont effectués avec un nombre de balayages à additionner défini sur 3.

Avant d'effectuer des balayages d'optimisation, le script d'optimisation MRM3 effectue les étapes d'initialisation suivantes. Si une erreur se produit lors de l'une de ces étapes, le script arrête le processus d'optimisation.

1. Vérifiez que le logiciel Analyst MD fonctionne.
2. Chargez la méthode d'acquisition de démarrage pour déterminer si elle est valide et vérifiez le type d'appareil.
3. Créez un sous-dossier `Data` pour stocker les fichiers wiff.
4. Créez le fichier Log.txt.

Balayage avec Résolution améliorée

Cette étape confirme la masse de l'ion utilisé pour l'optimisation. Le balayage ER est effectué pendant 20 cycles à la fréquence de balayage indiquée. Le pic la plus intense se situant au maximum à ± 1 uma du rapport m/z attendu pour le premier précurseur est sélectionné. Comme dans le logiciel Analyst MD, ce balayage est exécuté avec une plage de masses de 30 uma autour de la valeur de m/z spécifiée. Pour les espèces à charges multiples, l'ion C12 est déterminé lors de cette étape.

Balayage d'ions multiples Q1

Cette étape permet d'optimiser la transmission de l'ion d'intérêt jusqu'à la cellule de collision grâce à un balayage Q1 MI. Le script optimise d'abord le paramètre DP en exécutant le balayage à la valeur DP spécifiée. Optimisez le paramètre EP en l'incrémentant de 1 à 12 V (–12 à –1 V en mode négatif) avec un pas de 0,5 V. Si l'EP optimal est inférieur à 10 V (supérieur à –10 V en mode négatif), le DP est optimisé à nouveau. Le paramètre CEP est également optimisé de 0 à 100 V (–100 à 0 V en mode négatif) avec un pas de 2 V. En déterminant la tension optimale, les graphiques sont lissés deux fois et la tension donnant le plus grand compte d'ions est utilisée. Le temps de résidence de chaque balayage est réglé sur 100 ms.

Balayage d'ions produits améliorés

Dans cette étape, les ions fragments seront sélectionnés et utilisés pour une optimisation MS3 grâce à un balayage EPI réalisé pendant trois cycles à la vitesse de balayage sélectionnée. Spécifiez une CE optimale pour le composé à analyser. Si la CE optimale est inconnue, spécifiez une valeur CES pour utiliser une plage de paramètres CE. Les pics des seconds précurseurs les plus intenses sont trouvés, à l'exception de ceux situés au

maximum à $\pm 2,5$ uma du premier précurseur. Le nombre de seconds précurseurs à utiliser est sélectionné dans les paramètres avancés. L'utilisateur définit la plage de masses à partir de laquelle les seconds précurseurs sont sélectionnés.

Balayage de surveillance des réactions multiples

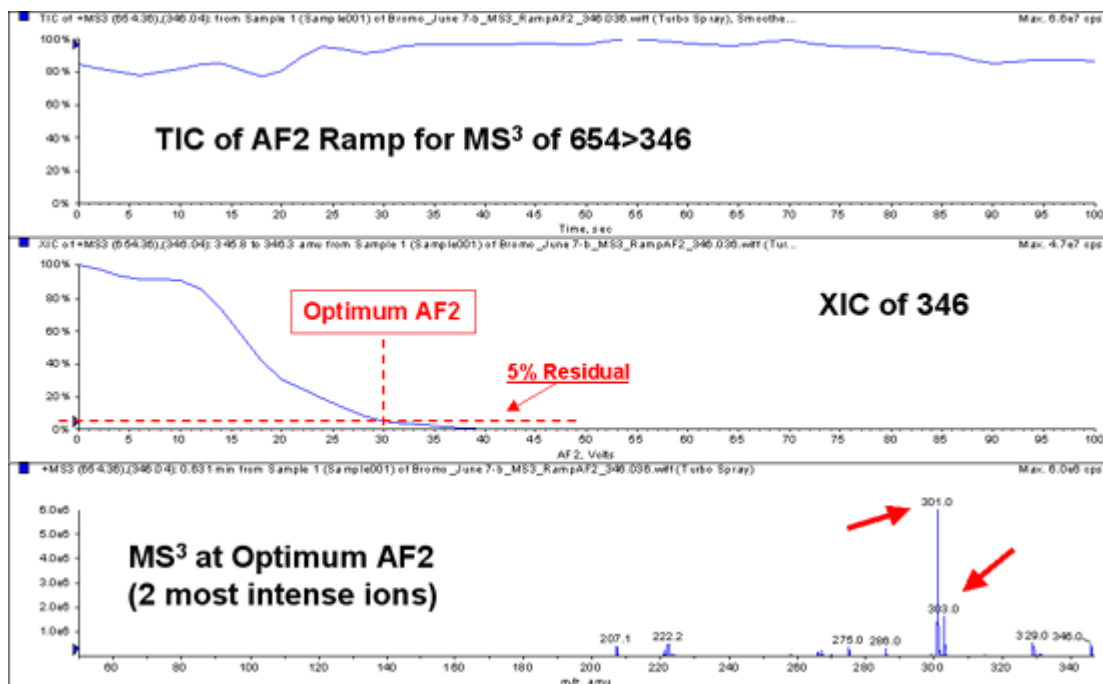
Cette étape permet d'optimiser l'énergie de collision pour chaque ion fragment sélectionné dans le balayage EPI grâce à un balayage MRM. Incrémenter la CE de 5 à 130 V (de -130 à -5 V en mode négatif) avec un incrément de 2 V et un temps de résidence de 50 ms. Chaque graphique superposé est alors lissé deux fois et les tensions donnant le plus grand compte d'ions sont utilisées comme valeurs de CE optimales.

Balayage MS/MS/MS (MS3)

Le script exécute un balayage MS/MS/MS (MS3) pour chaque second précurseur sélectionné à la vitesse de balayage définie et avec une incrémentation AF2 de 0 à 100 V avec un pas de 2 mV pour les deux polarités. La durée de remplissage du balayage est réglée et le Q0trapping peut être mis sous tension pour une sensibilité maximale, le cas échéant. La limite inférieure de la plage de masses pour le balayage MS/MS/MS (MS3) peut être spécifiée, et la limite supérieure correspond au second précurseur + 5 uma.

Les graphiques générés sont lissés deux fois et l'AF2 optimal, comme on peut le voir sur la figure suivante, est obtenu quand l'intensité résiduelle du second précurseur (d'après le XIC) est à 5 % de son intensité maximale. Le spectre à cette valeur d'AF2 est ensuite utilisé pour trouver les deux ions fragments de deuxième génération les plus intenses, à l'exception des pics situés au maximum à ± 1 uma du second précurseur. Si la valeur m/z du second précurseur est supérieur à 10 % du nombre total d'ions, aucun fragment de ce spectre ne sera utilisé. En effet, si le rapport m/z du second précurseur est supérieur à 10 % du nombre total d'ions, la fragmentation est insuffisante.

Illustration 2-12 : Mode de détermination d'AF2



Générer des méthodes finales

Après les balayages d'optimisation, le script génère les méthodes MS/MS/MS finales. Si vous cliquez sur l'option **Save Optimal Method Only** dans la boîte de dialogue Advanced Settings, seule une méthode MS/MS/MS optimale avec ± 10 uma autour de l'ion fragment de deuxième génération le plus intense est créée. Si vous cliquez sur l'option **Save All Final Methods**, la méthode optimale et une méthode MS/MS/MS pour chacun des seconds précurseurs principaux sont créées en utilisant une plage de masses allant de la limite inférieure définie par l'utilisateur à une limite supérieure égale à (second précurseur + 5) uma.

Script MSServiceLog

Par défaut, les collationnements provenant d'un spectromètre de masse sont enregistrés dans le registre de MS Service. Utilisez le script MSServiceLog pour arrêter ou lancer l'enregistrement des collationnements à partir de l'instrument dans le registre de MS Service. Le script MSServiceLog n'est utilisable que sur les systèmes 4500MD et Citrine.

Le script MSServiceLog peut être utilisé sans profil matériel actif, mais les modifications des paramètres du registre de MS Service ne prennent effet qu'une fois le profil matériel réactivé.

Installer le script

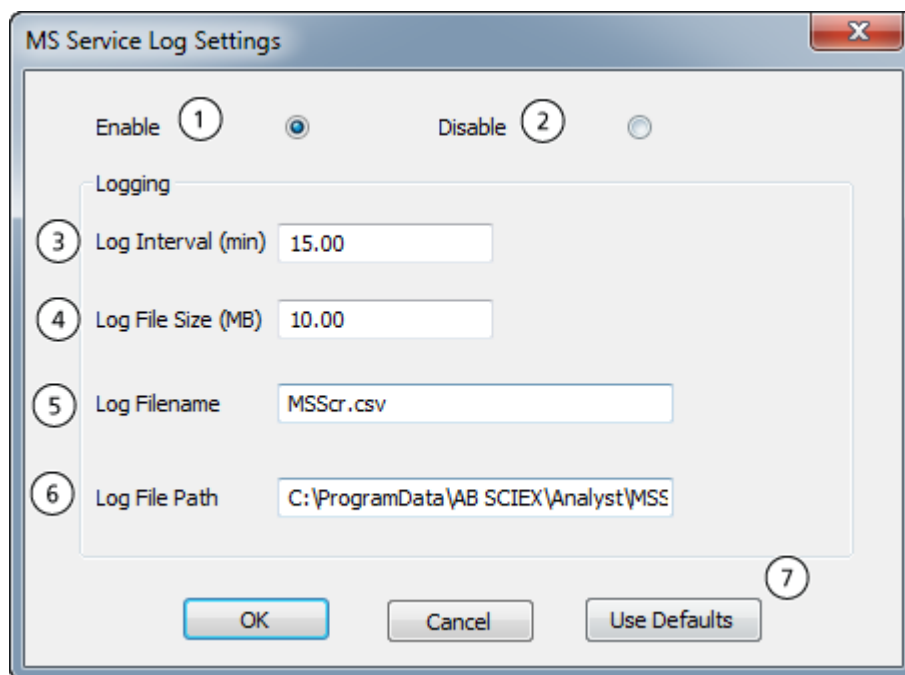
Consulter [Installer un script](#).

Utiliser le script

1. Désactivez le profil matériel.

2. Cliquez sur **Script > MSServiceLog**.

Illustration 2-13 : Boîte de dialogue MS Service Log Settings



Élément	Nom	Description
1	Enable	Sélectionnez pour lancer l'enregistrement des collationnements depuis le spectromètre de masse dans le fichier journal de MS Service à l'aide du script MSServiceLog.
2	Disable	Sélectionnez pour arrêter l'enregistrement des collationnements depuis le spectromètre de masse dans le fichier journal de MS Service à l'aide du script MSServiceLog.
3	Log Interval (min)	Spécifiez, en minutes, la fréquence d'enregistrement des collationnements du spectromètre de masse dans le fichier journal de MS Service. La valeur par défaut est 15 minutes et la plage admise est comprise entre 1 et 1 440 minutes.

Élément	Nom	Description
4	Log File Size (MB)	<p>Spécifiez la taille du fichier journal. La taille par défaut est 10 Mo et la plage admise est comprise entre 1 Mo et 1 000 Mo. Il peut y avoir jusqu'à deux fichiers journaux :</p> <ul style="list-style-type: none"> Le fichier journal actuel, dans lequel les collationnements de l'instrument sont enregistrés. Le fichier journal archivé. <p>Lorsque le fichier journal en cours atteint la taille spécifiée, il est archivé sous un nom de fichier d'archive prédéfini et un fichier journal en cours est créé pour enregistrer les collationnements, sous le nom de fichier journal indiqué dans la boîte de dialogue MS Service Log Settings.</p>
5	Log Filename	Spécifiez le nom du fichier journal. Les extensions de fichier admises sont csv, txt et log.
6	Log File Path	Permet de spécifier l'emplacement de stockage du fichier journal. Vérifiez que le nouvel emplacement est créé à l'emplacement par défaut C:\ProgramData\AB SCIEX\Analyst\MSServiceLog.
7	Use Defaults	Cliquez pour rétablir les valeurs prédéfinies dans tous les champs de la boîte de dialogue.

3. Cliquez sur **Disable** pour arrêter l'enregistrement des collationnements dans le fichier journal de MS Service.
4. Cliquez sur **Enable** pour lancer l'enregistrement des collationnements du spectromètre de masse dans le fichier journal de MS Service.
5. Pour modifier les valeurs des autres champs de la boîte de dialogue MS Service Log Settings, consultez la figure [Illustration 2-13](#).
6. Cliquez sur **OK** pour appliquer les modifications.

sMRM Calculator

Utilisez le script sMRM Calculator pour obtenir une représentation visuelle d'une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM. Ce script utilise quatre graphiques pour afficher la transition MRM, sa simultanéité, sa durée de cycle projetée et le temps de résidence à lui appliquer. Consultez la figure [Illustration 2-15](#). Pour obtenir un agencement approprié des transitions lors de l'analyse, modifiez la valeur des paramètres comme **Maximum Dwell**, **Minimum Dwell**, **Target sMRM Cycle Time** ou **Target sMRM Scan Time**, **Window Width**, **MRM Pause Time** et **Settling Time** dans la boîte de dialogue du script. Ces quatre graphiques sont mis à jour en fonction. Répétez cette procédure jusqu'à obtenir l'agencement souhaité pour les transitions.

Remarque : Si **Target Cycle Time** est sélectionné dans la méthode d'origine, il est impossible de le modifier en **Target Scan Time** dans la boîte de dialogue du script. Si **Target Scan Time** est sélectionné dans la méthode d'origine, il est impossible de le modifier en **Target Cycle Time** dans la boîte de dialogue du script.

Remarque : L'option **Settling time** ne peut être modifiée que pour les systèmes Citrine dans la boîte de dialogue du script sMRM Calculator.

Installer le script

Consulter [Installer un script](#).

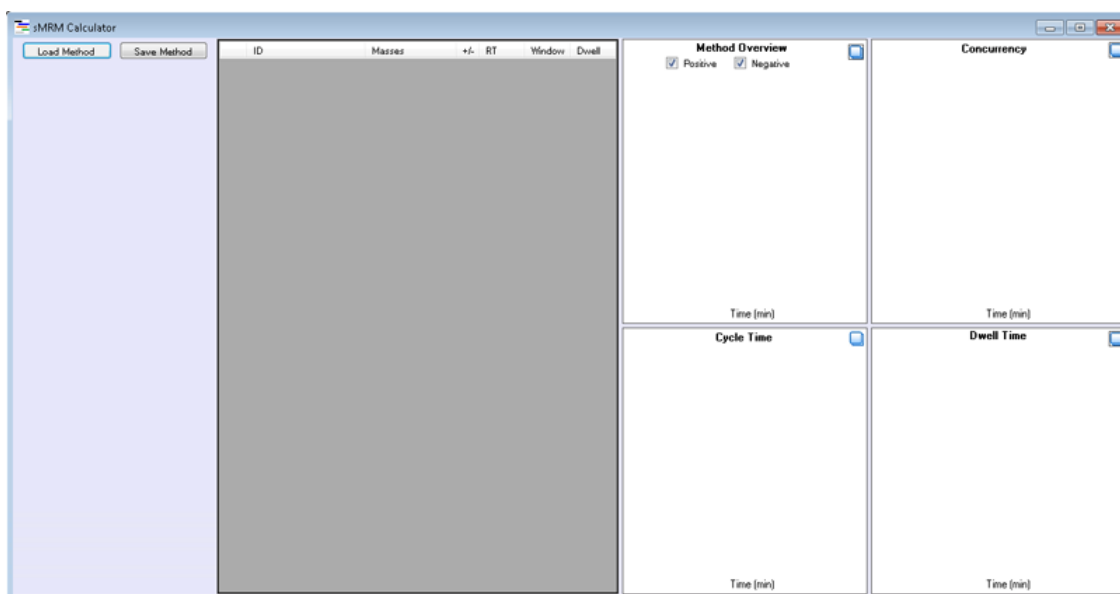
Utiliser le script

Conditions préalables

- Vérifiez que le logiciel Analyst MD est ouvert et qu'un profil matériel est activé.
- Vérifiez qu'une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM est déjà créée.

1. Cliquez sur **Script > sMRM Calculator**.
La boîte de dialogue **sMRM Calculator** s'ouvre.

Illustration 2-14 : Boîte de dialogue sMRM Calculator



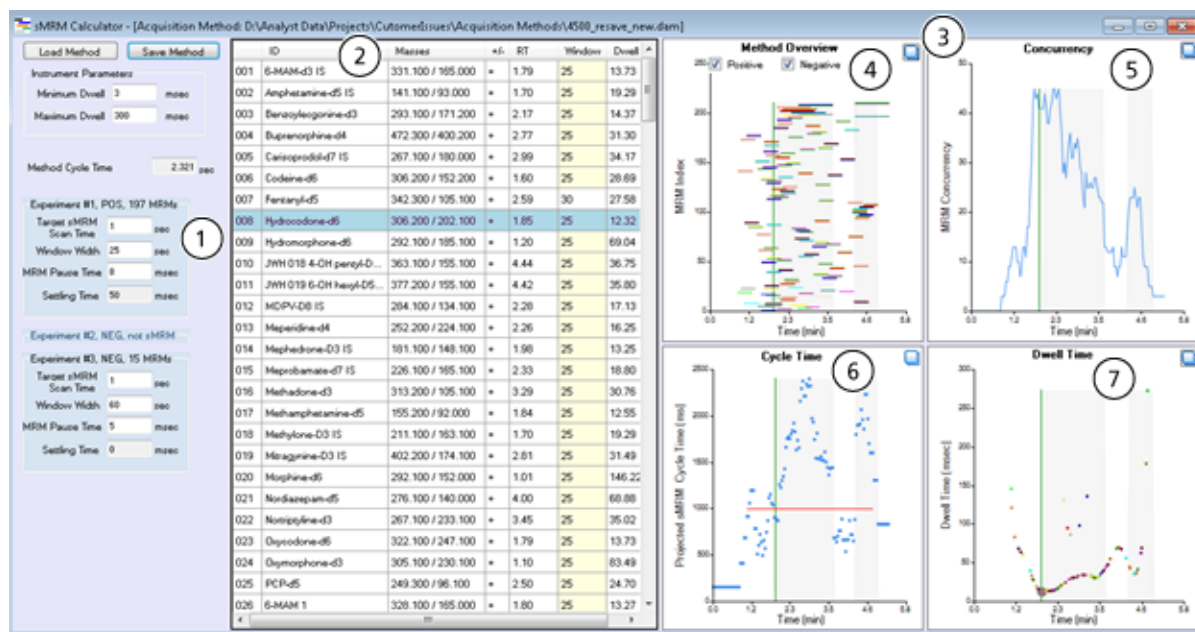
2. Cliquez sur **Load Method** pour sélectionner une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM.
La boîte de dialogue **Open** s'ouvre.

Remarque : Seule une méthode d'acquisition contenant des expériences *Scheduled* MRM. Le spectromètre de masse actif dans le projet sélectionné peut être ouvert dans le script sMRM Calculator. Seuls les détails des expériences *Scheduled* MRM sont affichés. Les expériences non *Scheduled* MRM sont libellées comme non *Scheduled* MRM dans le script.

3. Sélectionnez la méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM et cliquez sur **Open**.

La méthode d'acquisition sélectionnée s'ouvre dans la boîte de dialogue **sMRM Calculator**. Le chemin d'accès au fichier de la méthode d'acquisition ouverte est affiché dans la barre de titre de la boîte de dialogue.

Illustration 2-15 : Méthode d'acquisition ouverte dans la boîte de dialogue sMRM Calculator



Élément	Description
1	<p>Le volet gauche contient les paramètres de l'instrument et de l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM. Les paramètres affichés dans ce volet varient en fonction de la méthode d'acquisition ouverte.</p> <p>Si l'agencement des transitions dans les quatre graphiques du volet droit n'est pas adapté, modifiez les paramètres et les réglages qui peuvent l'être dans le volet gauche. Les colonnes correspondantes dans le tableau et les graphiques seront mises à jour en conséquence. Les valeurs des paramètres peuvent être modifiées dans la plage admise jusqu'à ce qu'un agencement adéquat des transitions soit trouvé.</p> <p>Par exemple, si la valeur du champ Target sMRM Scan Time est modifiée, le temps de résidence est recalculé et actualisé dans le tableau et les graphiques sont également mis à jour en conséquence.</p> <p>Par exemple, si la valeur dans le champ Windows Width est changée, elle est mise à jour dans la colonne Window pour toutes les transitions utilisant ce réglage global. Le temps de résidence de toutes les transitions sera recalculé et actualisé dans le tableau. Les graphiques dans le volet droit seront également actualisés en conséquence.</p> <p>Pour les transitions qui possèdent leurs propres paramètres de fenêtre de détection dans une méthode d'acquisition avec l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM Pro, la mise à jour du paramètre global Window Width dans le volet gauche n'actualisera pas les valeurs de la colonne Window pour ces transitions dans le tableau.</p> <hr/> <p>Remarque : Les champs grisés dans le volet gauche ne sont pas modifiables et leur valeur ne peut pas être modifiée.</p> <hr/>

Élément	Description
2	<p>L'index, l'identifiant de composé, les masses de Q1 et Q3, la polarité, la largeur de fenêtre, le temps de rétention et le temps de résidence sont affichés dans le volet central. La vue par défaut est classée par numéro d'indice.</p> <p>Pour réorganiser la vue selon les informations des autres colonnes, cliquez sur le titre de l'une des sept colonnes : index, ID, Masses, +/-, RT, Window et Dwell. Le volet central est mis à jour et affiche les informations triées par ordre alphabétique ou numérique de la colonne sélectionnée.</p> <p>Pour les méthodes des systèmes SCIEX 4500MD et Citrine, la largeur de fenêtre de toutes les transitions dans cette expérience utilisant l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM est également modifiable dans le tableau. Le temps de résidence dans le tableau et les graphiques seront mis à jour en conséquence. La modification de la largeur de fenêtre dans le tableau convertit une méthode d'acquisition <i>Scheduled</i> MRM en une méthode d'acquisition <i>Scheduled</i> MRM Pro.</p> <hr/> <p>Remarque : La largeur de fenêtre qui utilise le paramètre global indiqué du volet gauche s'affiche sur fond jaune. Lorsque la fenêtre dans le tableau est modifiée manuellement pour une transition ou si elle utilise déjà la largeur de fenêtre avancée propre à cette transition, la couleur de fond de la cellule devient blanche.</p> <hr/>
3	<p>Le volet droit affiche toutes les transitions <i>Scheduled</i> MRM contenues dans la méthode d'acquisition <i>Scheduled</i> MRM chargée, sous forme de quatre types de graphiques différents.</p> <ul style="list-style-type: none"> La transition MRM sélectionnée dans le tableau est identifiée par le trait vertical vert dans les graphiques. Les zones gris clair des graphiques représentent les zones de temps de rétention où la polarité est inversée dans chaque cycle. Sur chaque graphique, des infobulles affichées à l'emplacement du curseur indiquent les valeurs X et Y de la transition. Pour les graphiques Method Overview et Dwell Time, l'identifiant du composé est également indiqué dans les infobulles. Cliquez sur une transition MRM dans le graphique Method Overview pour sélectionner cette transition dans les trois autres graphiques et le tableau.
4	<p>Le premier graphique, Method Overview, affiche toutes les transitions et la fenêtre de détection de chacune d'elles. L'axe des abscisses indique le temps de rétention. L'axe des ordonnées indique le numéro d'indice MRM, c'est-à-dire l'ordre de saisie des transitions dans la méthode.</p>

Élément	Description
5	Le deuxième graphique, MRM Concurrency, affiche le temps de rétention sur l'axe des abscisses et la simultanéité des transitions MRM pour chaque temps de rétention sur l'axe des ordonnées.
6	<p>Le troisième graphique, Projected sMRM Cycle Time, représente la durée de cycle projetée par rapport au temps de rétention. La ligne rouge représente le Target Cycle Time, s'il est utilisé. Si l'option Target Scan Time est utilisée, la valeur du trait rouge correspond à la somme du paramètre Target sMRM Scan de toutes les expériences <i>Scheduled</i> MRM dans la méthode.</p> <hr/> <p>Remarque : Le nombre de points attendus est plus élevé pour les transitions pour lesquelles le paramètre Projected sMRM Cycle Time est très inférieur au paramètre Target Cycle Time ou à la somme des paramètres Target Scan Time (là où la ligne rouge se trouve). Le nombre de points attendus est moins élevé pour les transitions pour lesquelles le paramètre Projected sMRM Cycle Time est très supérieur au paramètre Target Cycle Time ou à la somme des paramètres Target Scan Time (là où la ligne rouge se trouve).</p> <hr/>
7	Le quatrième graphique affiche le temps de résidence de chaque transition à son temps de rétention. L'axe des abscisses indique le temps de rétention. L'axe des ordonnées indique le temps de résidence à appliquer.

- Modifiez les valeurs des paramètres le cas échéant pour optimiser la méthode et améliorer la distribution du **Projected sMRM Cycle Time**.

- Cliquez sur **Save Method**.
La fenêtre **Save Method File** s'ouvre.

Les modifications apportées à la méthode peuvent être enregistrées dans la méthode d'acquisition d'origine ou dans une nouvelle. Si les modifications sont enregistrées dans la méthode d'acquisition d'origine, les valeurs des paramètres d'origine sont remplacées par les nouvelles valeurs.

- Saisissez un nouveau nom de fichier ou sélectionnez la méthode d'origine, puis cliquez sur **Save**.
- Ouvrez la méthode d'acquisition enregistrée dans le **Acquisition Method Editor** pour afficher les nouvelles modifications.
Si la méthode d'origine a été ouverte dans le **Acquisition Method Editor**, fermez-la avant de la rouvrir.
- Cliquez sur le **X** dans le coin supérieur droit de la boîte de dialogue **sMRM Calculator** pour la fermer.

Nous contacter

Formation destinée aux clients

- En Amérique du Nord : NA.CustomerTraining@sciex.com
- En Europe : Europe.CustomerTraining@sciex.com
- En dehors des États-Unis et de l'Amérique du Nord, visitez le site sciex.com/education pour obtenir les coordonnées.

Centre d'apprentissage en ligne

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

Assistance technique SCIEX

SCIEX et ses représentants disposent de personnel dûment qualifié et de spécialistes techniques dans le monde entier. Ils peuvent répondre aux questions sur le système ou tout problème technique qui pourrait survenir. Pour plus d'informations, consultez le site Web SCIEX à l'adresse sciex.com ou choisissez parmi les options suivantes pour nous contacter :

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

Cybersécurité

Pour obtenir les informations les plus récentes sur la cybersécurité des produits SCIEX, consultez la page sciex.com/productsecurity.

Documentation

Cette version du document remplace toutes les versions précédentes de ce document.

Adobe Acrobat Reader est nécessaire pour afficher ce document sous forme électronique. Pour télécharger la dernière version, accéder à <https://get.adobe.com/reader>.

Pour trouver la documentation du logiciel, consulter les notes de version ou le guide d'installation du logiciel fourni avec ce dernier.

Pour trouver la documentation du matériel, reportez-vous au DVD *Customer Reference* fourni avec le système ou le composant.

Remarque : Pour demander une version imprimée gratuite de ce document, contacter sciex.com/contact-us.
