

# Analyst MD 软件

脚本用户指南



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

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

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

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

供体外诊断使用。产品并非所有国家均可获得。了解更多信息，请咨询当地的销售代表或参阅 [sciex.com/diagnostics](http://sciex.com/diagnostics)。

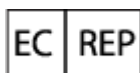
#### **Rx only.**

并非所有国家均可获得此（类）产品。若要了解更多信息，请联系您当地的代表或参考 [sciex.com](http://sciex.com)。

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

**AB Sciex™** 的使用经过许可。

© 2022 年 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



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



爱博才思有限公司 **AB Sciex Pte. Ltd.**  
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3  
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

IVD

CE

UK  
CA

# 目录

---

<b>1 前言</b>	<b>4</b>
受众	4
技术支持	4
<b>2 脚本</b>	<b>5</b>
安装或卸载脚本	5
安装脚本	5
卸载脚本	5
创建定量方法和文本文件	6
使用 Create Quan Methods From Text Files 脚本	6
使用 Create Text File from Quan Method 脚本	7
文本文件格式	8
DFT 追踪器	11
MRM3 优化脚本	12
MRM3 优化窗口综述	13
正在进行优化	17
优化完成	19
脚本逻辑的详细说明：初始化	21
增强型分辨率扫描	21
Q1 多离子扫描	21
增强型产物离子扫描	21
多反应监测 (MRM) 扫描	21
MS/MS/MS (MS3) 扫描	22
生成最终方法	22
MSServiceLog 脚本	22
安装脚本	23
使用脚本	23
sMRM Calculator	24
安装脚本	24
使用脚本	25
<b>联系我们</b>	<b>29</b>
客户培训	29
在线学习中心	29
SCIEX 支持	29
网络安全	29
文档	29

## 受众

本指南适用于客户和现场服务人员 (FSE)。

## 技术支持

SCIEX 及其代表在全球范围内设有经过系统培训的服务和技术专家。他们可以解答系统问题或可能出现的任何技术问题。有关更多信息：请访问网站 [sciex.com](https://sciex.com)。

本文档解释了如何安装和使用 **Analyst MD** 软件脚本。它还提供了每个脚本的使用以及在需要时如何卸载脚本的概述。

## 安装或卸载脚本

一些脚本会在安装 **Analyst MD** 软件时自动安装。

其余的脚本位于 **Scripts** 文件夹中。

脚本必须安装后才能使用。请参阅以下章节：[安装脚本](#)。

### 安装脚本

1. 执行以下任一操作：

- 浏览到计算机上的 <Drive>:\Program Files\Analyst\Scripts 文件夹。
- 浏览到软件 DVD 上（如果可用）或解压的软件网络下载包中的 Extras\Scripts 文件夹。

2. 打开 **Scripts** 文件夹。

3. 执行以下任一操作：

- 如需 **sMRM Calculator** 脚本，双击 **sMRM Calculator Setup.exe**。
- 对于所有其他脚本，双击 **ScriptRunner.exe**。

4. 按照屏幕说明安装脚本。

已安装的脚本可从 **Script** 菜单获得。

### 卸载脚本

---

注释：请勿卸载 **DFTTracker** 和 **MRM3 Optimization** 脚本。如果删除了这些脚本，则必须重新安装 **Analyst MD** 软件才能访问这些脚本。

---

若要卸载脚本，执行以下操作之一：

- 对于 **Create Quan Methods From Text Files**、**Create Text File from Quant Method** 和 **MSServiceLog** 脚本，浏览到 <drive>:\Analyst Data\Projects\API Instrument\Processing Scripts 文件夹，然后手动删除脚本 **dll**。
- 对于 **sMRM Calculator** 脚本，执行以下操作：
  - 在 Windows 7 操作系统上：单击 **Start > All Programs > Control Panel > Programs and Features**。
  - 在 Windows 10 操作系统上：单击 **Start > Control Panel > Programs and Features**。

- 右键单击 **sMRM Calculator**，然后单击 **Uninstall**。
- 请按照屏幕上的指示操作。

## 创建定量方法和文本文件

**Create Text File From Quan Method** 脚本可将定量方法导出为以制表符分隔的文本文件。  
**Create Quan Method From Text Files** 脚本可将以制表符分隔的文本文件中包含的信息导入定量方法文件 (qmf)。目前，Analyst MD 软件中的 **Build Quantitation Method** 组件不支持此功能。

**Create Text File from Quan Method** 脚本创建的文本文件可代表定量方法。如果选中了 **Export all columns** 复选框，则会在文本文件中针对每个必需字段创建一列。如果未选中该复选框，则该脚本生成的文本文件仅会包含字段值对于所有峰不相同的字段的列。

**Create Quan Method From Text Files** 脚本会指定文本文件中所有非必需字段（例如积分算法或回归参数）的默认值。更多信息，请参阅以下章节：[文本文件格式](#)。

## 使用 **Create Quan Methods From Text Files** 脚本

1. 单击 **Script > Create Quan Methods From Text Files**。

图 2-1 **Create Quantitation Methods from Text Files** 对话框

**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**      **Create Multiple Methods**      **Cancel**

2. 使用 **Default Generic Parameters** 部分中的参数创建定量方法。**Algorithm**、**Extraction Type**、**Period** 和 **Experiment** 字段在 **Analyst MD** 软件中不可用。根据需要设置以下参数：

- 从 **Algorithm** 列表中，选择一种峰查找算法。**Window Summation** 算法会将保留阈值中的所有强度相加，并且不会查找任何峰。
- 从 **Extraction Type** 列表中，选择要集成的数据类型。
- 从 **Period** 和 **Experiment** 列表中，选择周期数和实验数。

**Default Analyst Classic Parameters**、**Default General IntelliQuan Parameters**、**Default IntelliQuan MQ III Parameters** 和 **Default Window Summation Parameters** 组包含在 **Algorithm** 字段中选择的算法使用的参数。

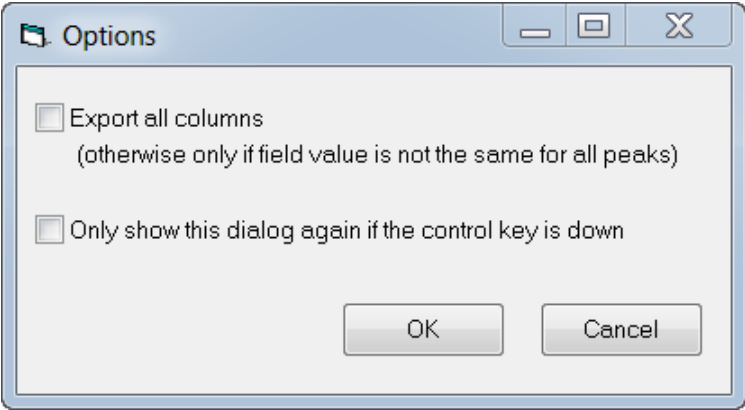
3. 选择 **Use Baseline Subtraction** 复选框可让 **Window Summation** 算法对强度求和至求和窗口内最低强度数据点处的水平线，而不是向下求和至零强度。
4. 在 **Regression Parameters** 部分中，选择回归信息。  
此处指定的信息适用于每个分析物峰。与先前的参数不同，无法在文本文件中指定此信息。因此，相同的回归参数将应用于所有分析物。有关参数的完整说明，请参阅文档：《帮助》。
5. 若要创建定量方法，单击 **Create One Method**，浏览至将用于创建定量方法的文本文件，然后单击 **Open**。  
如果该文本文件格式正确并且包含所需的列，则创建一个与此 **txt** 文件具有相同文件名的定量方法 **qmf** 文件。创建的定量方法存储在 **Analyst MD** 软件中当前工作项目下的 **Quantitation Methods** 文件夹中，而与文本文件的位置无关。
6. 若要从多个文本文件创建多个方法，单击 **Create Multiple Methods**，浏览至文本文件所处的文件夹，然后单击 **OK**。

对于文件夹中格式正确并且包含所需列的每个文本文件，会创建一个与该 **txt** 文件具有相同文件名的定量方法 **qmf** 文件。创建的定量方法存储在 **Analyst MD** 软件中当前工作项目下的 **Quantitation Methods** 文件夹中，而与文本文件的位置无关。

## 使用 **Create Text File from Quan Method** 脚本

1. 在 **Analyst MD** 软件中创建并保存定量方法。
2. 单击 **Script > Create Text File from Quan Method**。

图 2-2 Options 对话框



- 3. 选择 **Export all columns** 复选框，然后单击 **OK**。
- 4. 浏览到定量方法 (qmf) 文件，然后将其选中。
- 5. 导航至并选择文本文件的位置。  
该脚本将生成包含所有列的文本文件。如果未在第 3 步中选择 **Export all columns** 复选框，则该脚本生成的文本文件仅会包含字段值对于所有峰不相同的字段的列。

文本文件格式

用于创建定量方法 (Create Quan Methods from Text Files) 的文本文件和从定量方法生成 (Create Text File from Quan Method) 的文本文件采用以下格式：

- 使用制表符分隔各个字段，并以回车符或换行字符结束每一行。
- 文件的第一行应包含列标题。下表中标为“必需”的所有列都必须包含在文件中。其余列可选。列的实际顺序不重要。
- 每个后续行应包含表中所示的一种分析物或内标物峰的信息。

表 2-1 文本文件格式

列名称	必需	描述
Peak Name	是	分析物或内标物峰的名称。
First Mass	是	对于 MRM 数据，是指峰的 Q1 质量。对于全扫描数据，是指要积分的 XIC 的起始质量。而对于 Q1 MI 或 Q3 MI 数据，则代表质量。
Second Mass	可能	此字段在积分全扫描或 MRM 数据时必需，但对于 Q1 MI 或 Q3 MI 数据非必需。对于 MRM 数据，这是峰的 Q3 质量。对于全扫描数据，它是要积分的 XIC 的结束质量。



表 2-1 文本文件格式 (续)

列名称	必需	描述
<b>Extraction Type</b>	否	要积分的数据类型。如果存在，应为以下之一： 0 - MRM 数据 1 - Q1 MI 或 Q3 MI 数据 2 - 全扫描数据
<b>Is IS</b>	否	指定当前峰是内标物峰还是分析物峰。如果峰是内标物峰，则为 <b>TRUE</b> 。否则为 <b>FALSE</b> 。如果此列不存在，则定义的所有峰均视为分析物峰。 注：在使用该 <b>IS</b> 的任何分析物峰之前，应首先在文本文件中定义内标物峰。
<b>IS Name</b>	否	对于分析物峰，指定相应内标物（如果有）的名称。如果给定分析物将不使用内标物，则将此字段留空。对于内标物峰本身，忽略此字段的内容。
<b>Period</b>	否	峰的周期数（从 1 到数据中的周期数）。
<b>Experiment</b>	否	峰的实验数（从 1 到周期中的最大实验数）。
<b>Use Relative RT</b>	否	对于使用内标物的分析物峰，指定预期保留时间是否相对于 <b>IS</b> 的保留时间。如果是则为 <b>TRUE</b> 。否则为 <b>FALSE</b> 。对于其他峰，此字段中的内容将被忽略，但仍必须包含 <b>TRUE</b> 或 <b>FALSE</b> 。
<b>Conc Units</b>	否	浓度单位。
<b>Calc Conc Units</b>	否	计算所得浓度单位。
<b>Bkg Start</b>	否	峰背景的开始时间（分钟）。此参数不会以任何方式影响峰积分，但是它会影响噪声（进而影响 <b>S/N</b> ）的计算方式。
<b>Bkg End</b>	否	峰背景的结束时间（分钟）。
<b>Expected RT</b>	否	预计保留时间（分钟），范围为 0 至 1666。
<b>RT Window</b>	否	保留时间窗口（秒），范围为 1 至 1000。
<b>Algorithm</b>	否	指定应使用哪种峰查找和积分算法。如果存在，应为以下之一： 0 - Analyst Classic (TurboChrom) 1 - IntelliQuan - IQA II (Automatic) 2 - IntelliQuan - MQ III 3 - Window Summation
<b>Bunching Factor</b>	否	（TurboChrom 算法）峰的群聚系数，范围为 1 至 100。

表 2-1 文本文件格式 (续)

列名称	必需	描述
Num Smooths	否	(TurboChrom 算法) 平滑次数, 范围为 0 至 10。
Noise Threshold	否	(TurboChrom 算法) 噪声阈值, 范围为 1-6 至 19。
Area Threshold	否	(TurboChrom 算法) 面积阈值, 范围为 1-6 至 112。
Separation Width	否	(TurboChrom 算法) 分离宽度, 范围为 0 至 5。
Separation Height	否	(TurboChrom 算法) 分离高度, 范围为 0 至 1。
Exp Peak Ratio	否	(TurboChrom 算法) 指数峰值比, 范围为 1 至 16。
Exp Adjusted Ratio	否	(TurboChrom 算法) 指数调整比, 范围为 2 至 16。
Exp Valley Ratio	否	(TurboChrom 算法) 指数谷值比, 范围为 1 至 16。
Min Height	否	使用 IntelliQuan 算法时允许的最小峰高, 范围为 0 至 116。
Min Width	否	(IntelliQuan 算法) 允许的最小峰宽 (秒), 范围为 0 至 116。
Smooth Width	否	(IntelliQuan 算法) Savitzky-Golay 平滑滤波器的半宽, 范围为 0 至 20。
MQ III Noise Percent	否	(IntelliQuan 算法) 使用 MQ III 选项时的噪声百分比。此值应为 0 到 100 的整数。
MQ III Baseline Sub Window	否	(IntelliQuan 算法) 使用 MQ III 选项时的基线减除窗口, 范围为 0 至 10 分钟。
MQ III Peak Splitting Factor	否	(IntelliQuan 算法) 使用 MQ III 选项时的峰分裂因子, 范围为 0 至 10。
MQ III Use Largest	否	(IntelliQuan 算法) 指定使用 MQ III 选项时的最大峰是否在保留时间窗口内, 或者报告保留时间最接近该预期值的峰。设置为 TRUE 使用最大峰, 设置为 FALSE 使用最接近的峰。
Summation Baseline Sub	否	(特殊窗口求和算法) 指定面积应积分到强度=0 线还是窗口内强度最小的数据点的强度值。如果面积应积分至强度最小的数据点的强度值, 设置为 TRUE, 否则, 如果面积应积分至强度=0 线, 设置为 FALSE。

下表显示了全扫描数据文本文件的示例。该文本文件的列之间包含制表符, 并且每行的结尾包含一个回车符。

表 2-2 全扫描数据文本文件示例

Peak Name	First Mass	Second Mass	Bunching Factor
Analyte Peak 1	500.1	500.7	1

表 2-2 全扫描数据文本文件示例 (续)

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

下表显示了另一个 MRM 数据示例。Analyte Peak 1 配置为使用指定内标物，Analyte Peak 2 不使用内标物。

表 2-3 MRM 数据文本文件示例

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

下表混合包含不同实验中的全扫描和 MRM 数据：

表 2-4 MRM 数据文本文件示例

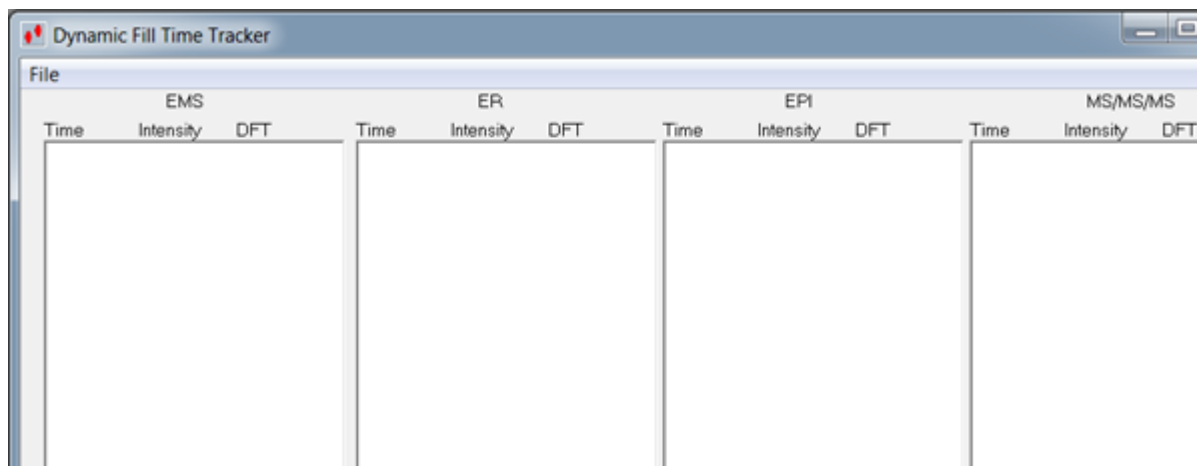
Peak Name	Extraction Type	Experiment	First Mass	Second Mass
Analyte Peak 1	0	1	500.1	413.2
Analyte Peak 2	0	1	600.2	382.1
Analyte Peak 3	2	2	812	813
Analyte Peak 4	2	2	400	401

## DFT 追踪器

动态填充时间 (DFT) 追踪器脚本可以追踪 QTRAP 系统扫描期间使用的 DFT 设置。请使用该脚本来确定线性离子阱 (LIT) 模式的最佳填充时间，从而在一个较宽泛的动态范围获得较高的数据质量。DFT 追踪器可以监测下列 LIT 扫描类型：增强型质量扫描 (EMS)、增强型分辨率 (ER)、增强型产物离子 (EPI) 和 MS/MS/MS (MS3)。

- 单击 **Script > DFTTracker**。

图 2-3 Dynamic Fill Time Tracker 对话框



DFT 追踪器可监测实时运行期间填充时间所发生的动态变化。

系统可以动态计算填充线性离子阱所需要的时间。如果化合物数量很多，较短的填充时间会使离子阱中的离子数量受到限制，从而减小了空间电荷效应。较长的填充时间可以使离子积聚，从而增加了弱信号。

- 单击 **File > Save** 可保存追踪的填充时间。
- 单击 **File > Clear** 可清除追踪的填充时间。
- 单击 **File > Always On Top** 可将 Dynamic Fill Time Tracker 窗口置于所有其他打开的窗口或应用程序的顶部。
- 单击 **File > Exit** 可退出 DFT 追踪器脚本。

## MRM3 优化脚本

此脚本用于 QTRAP 系统上的定量分析，它可提高特异性，因而可以提高复杂物质中分析物定量的检测水平。在使用输注方式时，该脚本都能产生最理想的 MS3 采集方法。脚本可以执行下列优化步骤：

- 确认前体离子质量
- 优化至碰撞池的离子传输率
- 确定主要碎片离子
- 优化每一种碎片离子的碰撞能量 (CE)
- 对每一种碎片离子进行 MS3 扫描
- 优化所有 MS3 扫描的激发能量 (AF2)
- 生成报告
- 保存所有数据和采集方法

该脚本还可以用于定性用途，以半自动方式（即一次对应一种化合物）生成化合物的 MS/MS 和 MS3 质谱集合。

## MRM3 优化窗口综述

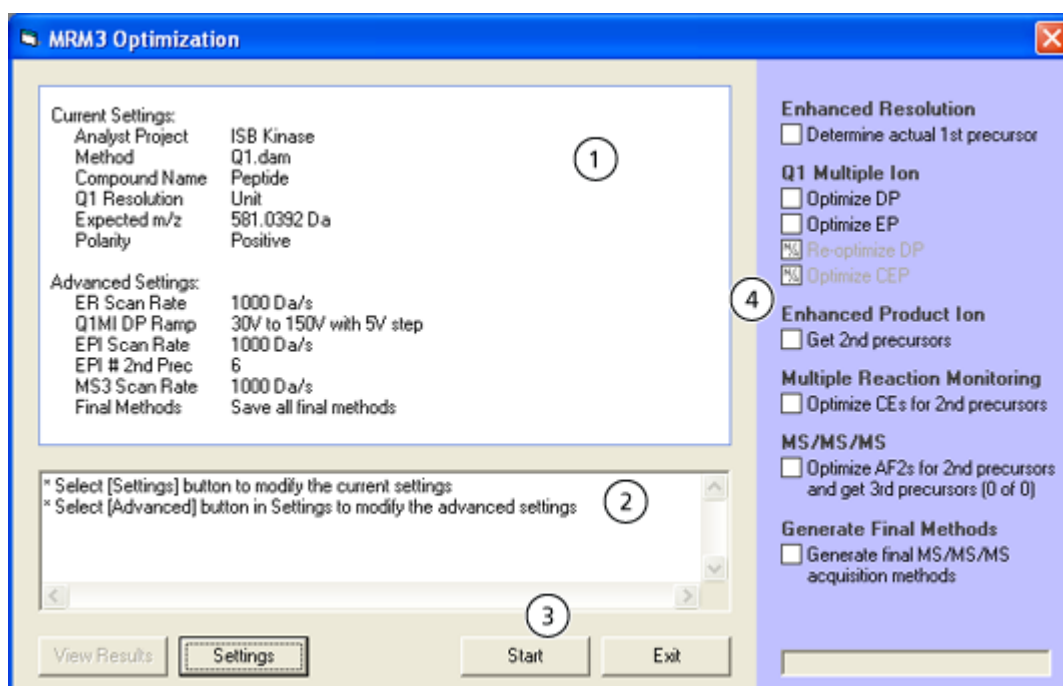
使用 MRM3 Optimization 窗口中的控件进行导航。该窗口还可以在优化结果生成后予以显示。以下是该窗口中各种选项的综述。

表 2-5 MRM3 Optimization 窗口

字段	描述
Status Window	首次启动脚本时，窗口会显示用于优化的当前优化设置。开始优化时，该窗口中会显示质谱信息。
Log File	以文本格式显示优化期间所发现的结果。该部分中的每个条目还会被添加到生成的 Log.txt 文件中。
Overall Progress	显示总体优化进度。
Main Controls	包含了与优化进度的设置和执行有关的所有主要功能。

- 单击 **View Results**，以使用 Microsoft 记事本打开并查看该文件。优化完成后，系统会自动生成并保存一个 Results.txt 文件。
- 单击 **Settings** 打开一个窗口，从中可以键入优化进度所要求的化合物信息。
- 单击 **Start** 启动优化过程。在优化期间，该按钮被重命名为 **Abort**，单击此按钮可停止优化过程。

图 2-4 MRM3 Optimization 窗口



---

项目	描述
1	Status 窗格
2	日志文件
3	主要控件
4	总体进度

## 设置首选项

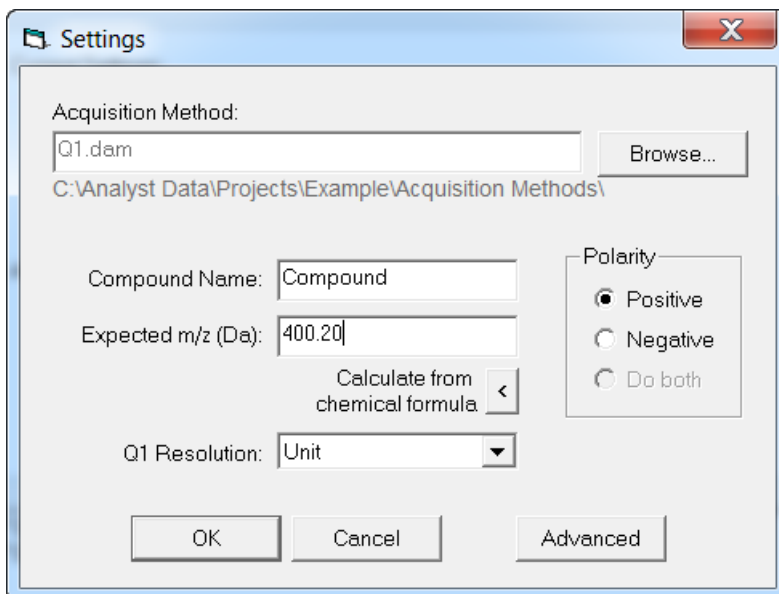
脚本每次启动时，**Settings** 对话框会自动打开。

1. 单击 **Browse** 以浏览到初学者采集方法。该方法中包含了用于优化的离子源条件。
2. 在 **Compound Name** 字段中，键入描述性化合物名称。该名称被作为所有采集方法以及生成的数据文件的前缀使用。
3. 在 **Expected m/z (amu)** 字段中，键入化合物的预计质荷比 ( $m/z$ )。如果化合物的  $m/z$  值未知，则单击 **Calculate from chemical formula** 以从化合物的化学式计算该值。请参阅以下章节：[计算  \$m/z\$](#) 。
4. 在 **Q1 Resolution** 字段中，选择一个用于 MS/MS 和 MS3 的 Q1 分辨率。
5. 在 **Polarity** 组中选择一种与初学者方法不同的极性。当前不支持 **Do both** 选项。
6. 若要修改优化过程所使用的某些设置项，可单击 **Advanced**。请参阅以下章节：[使用 \*\*Advanced Settings\*\* 对话框](#)。
7. 若要验证和使用更新后的设置，单击 **OK**。

## 使用脚本

1. 如果初学者采集方法不存在，则可以构建一个。初学者方法应当是在 **Manual Tune**（手动调谐）模式下创建的一种 **Q1** 采集方法，且应当包含调谐程序所必需的离子源信息，因为这些信息尚未经过脚本的优化。
2. 将方法保存在所需项目的 Acquisition Methods 文件夹中，生成的所有文件均保存在该文件夹中。
3. 单击 **Script > MRM3 Optimization**。

图 2-5 Settings 对话框

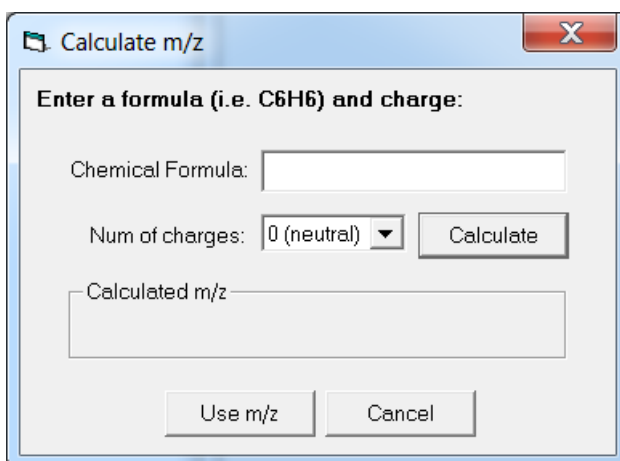


4. 键入优化程序所必需的化合物信息，然后在 **OKSettings** 对话框中单击。
5. 若要开始优化程序，在 **MRM3 Optimization** 窗口中单击 **Start**。

### 计算 $m/z$

通过 **Settings** 对话框进入  $m/z$  计算器。

1. 在 **MRM3 Optimization** 窗口中，单击 **Settings**。  
**Settings** 对话框打开。
2. 单击 **Calculate from chemical formula**。

图 2-6 Calculate  $m/z$  对话框

3. 在 **Chemical Formula** 字段中，键入化合物的化学式。用元素的大写字母表示。杀虫剂的化学式也在该对话框中输入。

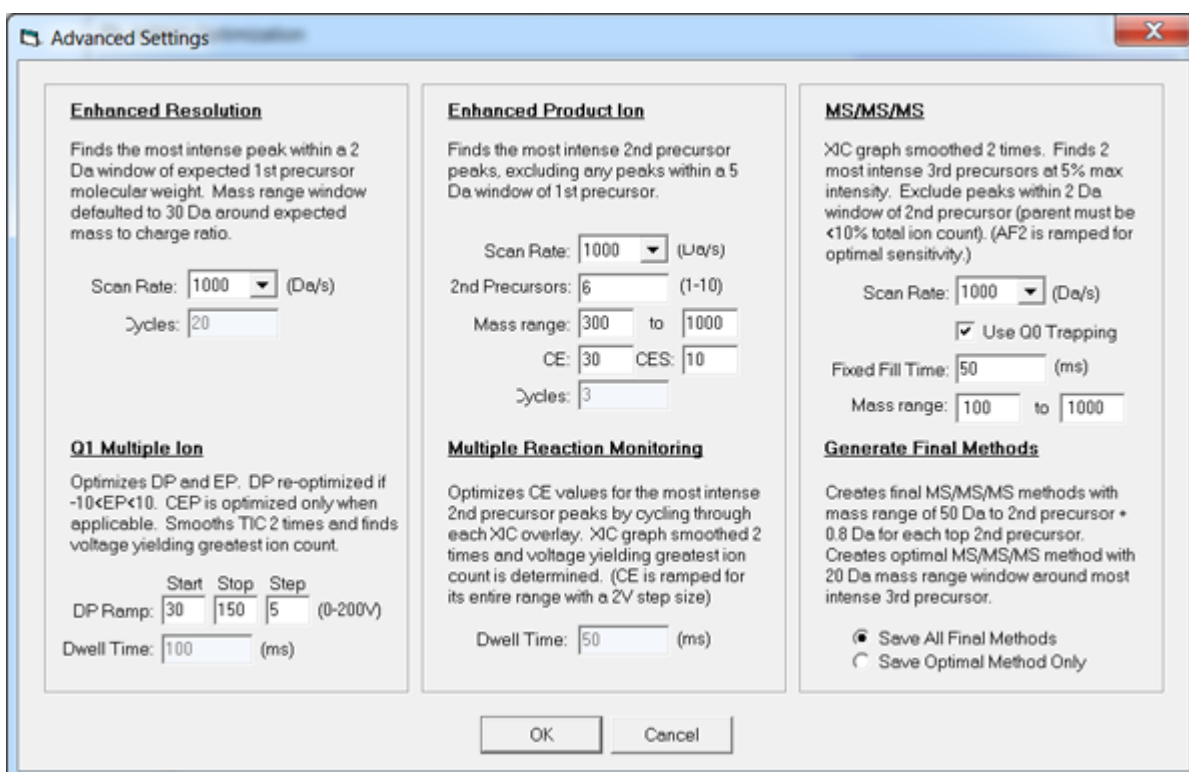
4. 在 **Num of charges** 字段中, 单击电荷数。
5. 若要计算所键入的化学式和电荷的  $m/z$  值, 单击 **Calculate**。
6. 若要关闭计算器并在 **Settings** 对话框中用计算得出的  $m/z$  值更新 **Expected  $m/z$  (amu)** 字段, 请单击 **Use  $m/z$** 。

## 使用 **Advanced Settings** 对话框

该对话框中有对每一个优化步骤的说明。有些设置可以进行修改以自定义优化。

1. 在 MRM3 Optimization 窗口中, 单击 **Settings**。  
**Settings** 对话框打开。
2. 单击 **Advanced**。

图 2-7 **Advanced Settings** 对话框



3. 在 **Enhanced Resolution**、**Enhanced Product Ion** 和 **MS/MS/MS** 组内的 **Scan Rate** 字段中, 选择用于 **ER**、**EPI** 和 **MS3** 的扫描速率。
4. 在 **Q1 Multiple Ion** 组的 **DP Ramp** 字段中, 键入优化的去簇电压 (DP) 范围。该范围用绝对值和相应的极性表示, 并根据 **Settings** 对话框中所作的选择自动应用。
5. 在 **Enhanced Product Ion** 组内进行以下操作:
  - 在 **2nd Precursors** 字段中, 键入 MS3 优化所使用的第二前体离子 (碎片离子) 的最大数量。键入一个 1 和 10 之间的数字。
  - 在 **Mass range** 字段中, 键入一个用于 MS3 优化的第二前体离子质量范围。



- 在 **CE** 字段中键入一个碰撞能量值，并在 **CES** 字段中键入一个碰撞能量散布值，用于提供一个较好的 **MS/MS** 质谱范围，以便从中选择碎片离子。
6. 若要生成每一种第二前体离子的所有最终 **MS3** 方法以及用于定量分析的最佳 **MS3** 方法，在 **Generate Final Methods** 组中键入 **Save All Final Methods**。单击 **Save Optimal Method Only** 仅保存最理想的 **MS3** 方法（对定量最敏感）。
  7. 单击 **OK** 接受更新后的高级设置。

## 正在进行优化

优化开始后，**Analyst MD** 软件中的 **Manual Tune** 会自动停止。脚本运行时，软件的所有功能仍可使用。优化程序的每个部分完成后，**Log.txt** 文件也会自动更新。在任何时间要停止脚本，单击 **Abort**。请参阅下图中的脚本示例。在 **Overall Progress** 部分，**Checklist** 图像和字体代表不同的状态，具体说明见下文。

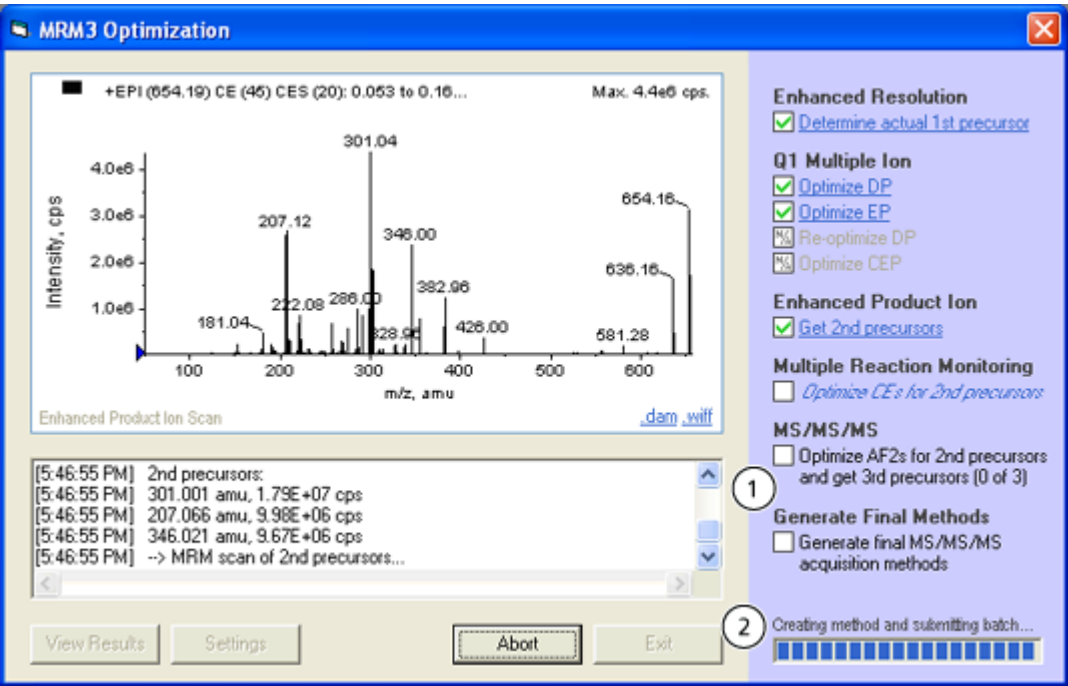
图 2-8 状态示例

- 
- 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

项目	描述
1	尚未执行的任务 - 文字为黑色
2	进行中的任务 - 文字为蓝色斜体
3	将不执行的任务 - 文字为蓝色并带下划线
4	已完成的任务（超链接）- 文字为蓝色并带下划线
5	已完成的任务（无链接）- 文字为蓝色
6	已完成的任务部分（超链接）- 文字为蓝色斜体并带下划线

有下划线的文本类似网页超链接，单击可显示相应的质谱或色谱图。**MS/MS/MS** 下方的文字还可以显示正在执行的 **MS3** 扫描数，因为扫描次数可以在 1 和 10 之间。**Overall Progress** 部分还包括 **Message** 区。该区域中的进度条显示的是当前步骤的进度。进度条上方可显示各种消息提示，如时间和当前优化步骤其他状态。

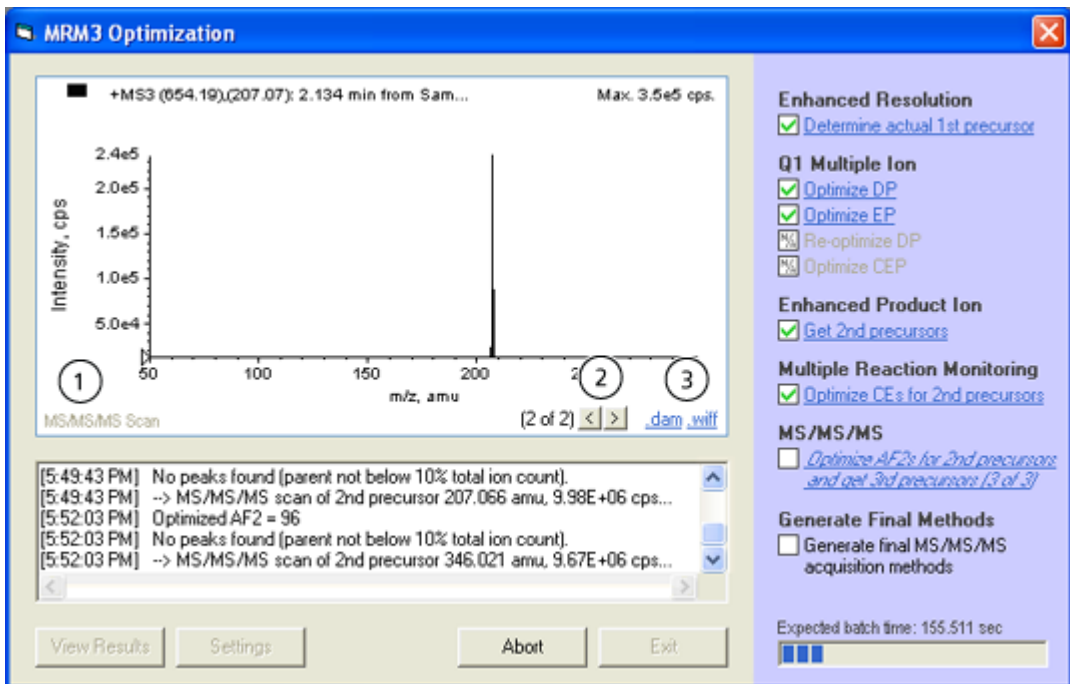
图 2-9 EPI 扫描后的 MRM3 Optimization 窗口



项目	描述
1	检查清单
2	消息

在质谱状态窗口中，会显示之前生成的质谱或色谱图。选中检查清单中的某一项之后，就会显示相应的图形。扫描类型的名称表示当前显示的是哪一种扫描类型。对已完成的每一个步骤来说，与所示图形相关联的采集方法 (dam) 或数据文件 (wiff) 都可以打开。如果显示的是 MS/MS/MS 扫描，则使用按钮在不同的 MS3 扫描之间循环。

图 2-10 MS3 扫描期间的 MRM3 Optimization 窗口



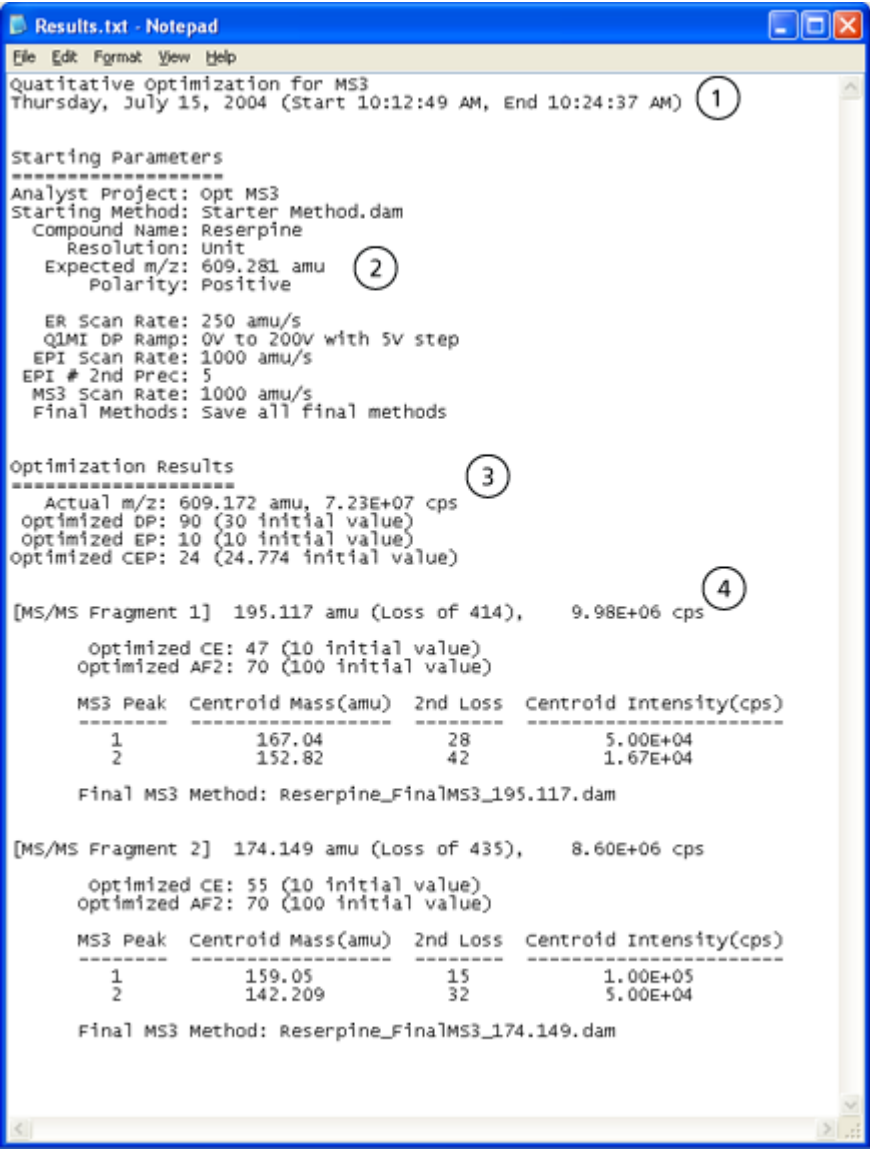
项目	描述
1	扫描类型
2	在不同 MS3 扫描之间循环移动的按钮
3	链接

## 优化完成

当 MS3 的定量优化完成或停止时，系统会生成一个 Results.txt 文件。该文件将用 Microsoft 记事本自动打开。从 MRM3 Optimization 窗口中单击 **View Results** 以查看该文件。下面介绍了 Results.txt 文件的各个部分。

- **Time and Duration:** 显示优化的日期和时长。
- **User Starting Conditions:** 显示该部分的设置和高级设置。
- **Optimization Conditions Found:** 显示 ER 和 Q1MI 扫描期间所找到的最佳条件。
- **MS3 Fragments Found and Associated Losses:** 显示 EPI 扫描和 MS3 所找到的碎片和最佳条件（碰撞能量和激发能量）以及相关损失。

图 2-11 优化报告



项目	描述
1	时间和时长
2	用户开始条件
3	找到的优化条件
4	找到的 MS3 碎片和相关损失

所有生成的采集方法都有一个描述性文件，其名称格式为 [提供的化合物名称] + [扫描类型] + [m/z] + dam。这些方法均作为初学者采集方法保存在相同的文件夹中。

所有数据、Log.txt 和 Results.txt 文件都保存在 Data 子文件夹中，该文件夹在同一项目中作为初学者采集方法创建。子文件夹的格式为 [所提供的化合物名称] + OptMS3 + ([日期], [时间])。数据文件的格式为 [所提供的化合物名称] + [扫描类型] + [m/z] + wiff。

## 脚本逻辑的详细说明：初始化

本部分主要介绍优化过程的每一个阶段。执行的所有扫描，其扫描次数的总和设为 3。

执行任何优化扫描前，MRM3 优化脚本先要执行以下初始化步骤。如果这些步骤当中的任何一个出现错误，脚本就会停止优化过程。

1. 确保 Analyst MD 软件正在运行。
2. 加载初学者采集方法，以确定该方法是否有效，并检查设备类型。
3. 新建新的 Data 子文件夹以存储 wiff 文件。
4. 创建 Log.txt 文件。

## 增强型分辨率扫描

该步骤旨在确认用于优化的离子质量。ER 以指定的扫描速率进行 20 次扫描。在预计第一前体离子  $m/z$  值的  $\pm 1$  amu 范围内的最强峰被选中。与在 Analyst MD 软件中相同，此扫描在指定  $m/z$  值周围 30 amu 的质量范围内进行。对于多电荷离子来说，在该步骤中可确定 C12 离子。

## Q1 多离子扫描

该步骤用于优化所关注的离子向碰撞池的传输率。该优化采用的是 Q1 MI 扫描。脚本首先以指定的 DP 斜升率执行扫描，对 DP 参数进行优化。EP 参数的优化方法是将其从 1 V 逐渐升至 12 V（负离子模式下从 -12 V 升至 -1 V），步长为 0.5 V。如果最佳 EP 值小于 10 V（负离子模式下大于 -10 V），则再次优化 DP。CEP 参数的优化方法也是将其从 0 V 逐步升至 100 V（负离子模式下从 -100 V 升至 0 V），步长为 2 V。在确定最佳电压的过程中，图形要经过两次平滑处理，并使用产生最大离子数的电压。每次扫描的 Dwell Time 设为 100 ms。

## 增强型产物离子扫描

该步骤旨在选择被用于 MS3 优化的碎片离子。它是通过以选定的扫描速率进行三次 EPI 扫描来实现的。为所分析的化合物指定最佳 CE。如果最佳 CE 未知，则指定一个 CES 值，以便使用 CE 设置范围。这样就可以找到最强的前体离子峰，不包括第一前体离子窗  $\pm 2.5$  amu 范围内的峰。拟使用的第二前体离子的数量在 Advanced Settings 中选择。用于选择第二前体离子的质量范围由用户指定。

## 多反应监测 (MRM) 扫描

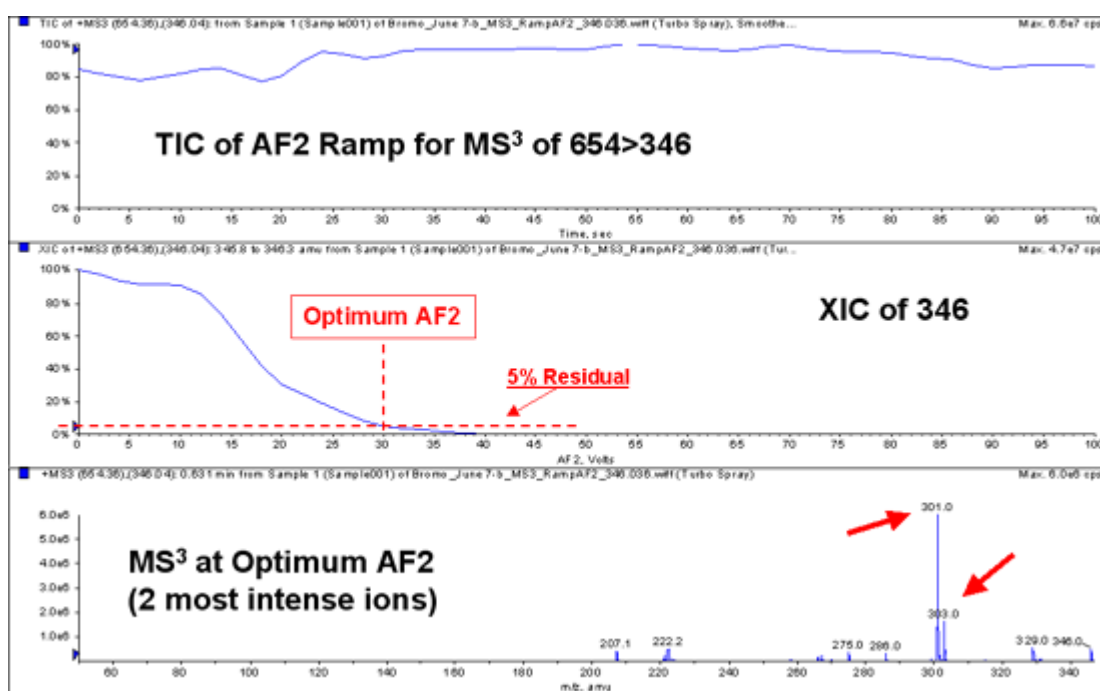
该步骤旨在优化从 EPI 扫描中选择的每一种碎片离子的碰撞能量。该优化是采用 MRM 扫描实现的。将 CE 从 5 逐步升至 130 V（负离子模式下从 -130 到 -5 V），步长为 2 V，驻留时间为 50 ms。每一幅叠加图要经过两次平滑，且产生最大离子数的电压被作为最佳 CE 值使用。

## MS/MS/MS (MS3) 扫描

脚本按指定的扫描速率对每一种被选中的第二前体离子进行一次 MS/MS/MS (MS3) 扫描，AF2 从 0 逐步升至 100 V，两种极性的步长均为 2 mV。设定扫描的填充时间，必要时可以开启 Q0trapping，以达到最大灵敏度。MS/MS/MS (MS3) 扫描的质量范围下限可以指定，上限则为第二前体离子 + 5 amu。

生成的图形经过两次平滑，而下图所示的最佳 AF2 在第二前体离子的残余强度（以 XIC 为准）为最大强度的 5% 时获得。位于该 AF2 值处的质谱则被用来查找两种强度最大的二次碎片离子，不包括第二前体离子  $\pm 1$  amu 范围内的峰。如果第二前体离子的  $m/z$  值大于总离子计数的 10%，则将不使用来自该质谱的任何碎片。该条件成立的理由是，如果第二前体离子的  $m/z$  值大于 10%，则说明碎裂不充分。

图 2-12 AF2 确定方法



## 生成最终方法

执行优化扫描后，脚本便会生成最终的 MS/MS/MS 方法。如果点击了 **Advanced Settings** 窗口中的 **Save Optimal Method Only** 选项，就只生成强度最大的二次碎片离子周围  $\pm 10$  amu 的一个最佳 MS/MS/MS 方法。如果点击了 **Save All Final Methods** 选项，软件就会用从用户定义的下限到（第二前体离子 + 5）amu 的上限的质量范围创建最佳方法以及每一种第二前体离子的一种 MS/MS/MS 方法。

## MSServiceLog 脚本

默认情况下，质谱仪的回读信息记录在 MS Service 日志文件中。使用 MSServiceLog 脚本可关闭 MS Service 日志文件中的回读信息记录，或开始仪器回读信息记录。MSServiceLog 脚本仅适用于 4500MD 和 Citrine 系统。

MSServiceLog 脚本可以在没有激活硬件配置文件的情况下使用，但对 MS 服务日志设置所做的任何更改只有在重新激活硬件配置文件后才会生效。

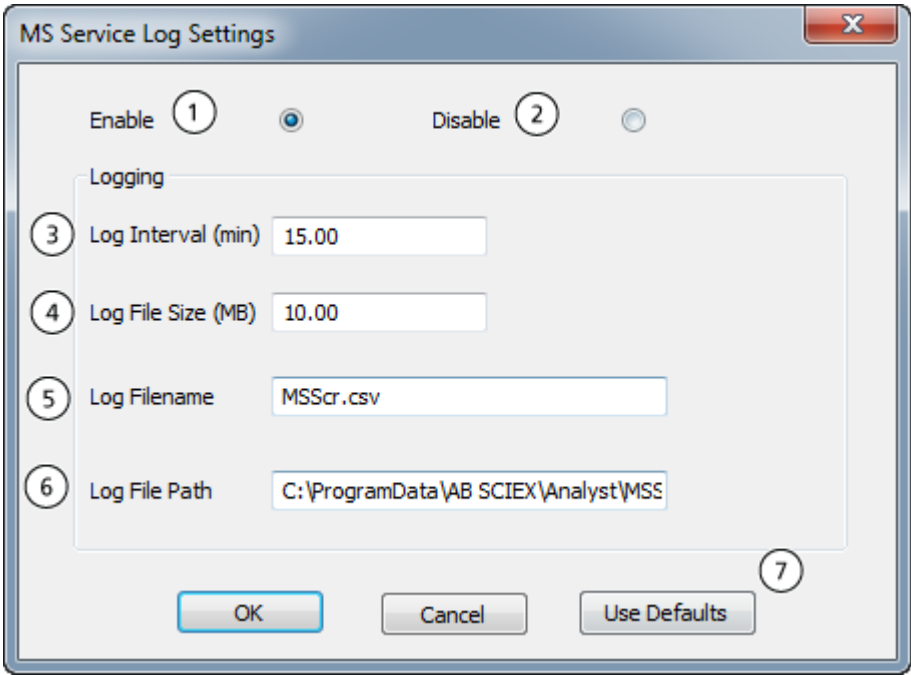
### 安装脚本

请参阅[安装脚本](#)。

### 使用脚本

1. 停用硬件配置文件。
2. 单击 **Script > MSServiceLog**。

图 2-13 MS Service Log Settings 对话框



项目	名称	描述
1	<b>Enable</b>	选择可开始使用 MSServiceLog 脚本将质谱仪的回读信息记录到 MS Service 日志文件。
2	<b>Disable</b>	选择可停止使用 MSServiceLog 脚本将质谱仪的回读信息记录到 MS Service 日志文件。
3	<b>Log Interval (min)</b>	指定将来自质谱仪的回读信息记录到 MS Service 日志文件的频率，单位为分钟。默认值为 15 分钟，允许的范围为 1 分钟到 1440 分钟。



项目	名称	描述
4	<b>Log File Size (MB)</b>	指定日志文件的大小。默认大小为 10 MB，允许的范围为 1 MB 到 1000 MB。最多可有两个日志文件： <ul style="list-style-type: none"><li>• 当前日志文件，记录来自仪器的回读信息。</li><li>• 存档日志文件。</li></ul> 在当前日志文件达到指定大小时，系统会使用预定义的存档文件名将其存档，并且会使用在 <b>MS Service Log Settings</b> 对话框中指定的文件名创建一个当前日志文件以记录回读信息。
5	<b>Log Filename</b>	指定日志文件的文件名。接受的文件扩展名为 csv、txt 或 log。
6	<b>Log File Path</b>	指定日志文件的存储位置。确保在默认位置 C:\ProgramData\AB SCIEX\Analyst\MSServiceLog 内创建新位置。
7	<b>Use Defaults</b>	单击以将对话框中的所有字段恢复为预设值。

3. 单击 **Disable** 以停止在 MS Service 日志文件中记录回读信息。
4. 单击 **Enable** 以开始在 MS Service 日志文件中记录质谱仪的回读信息。
5. 要更改 MS Service Log Settings 对话框中的其他字段的值，请参阅图：图 2-13。
6. 单击 **OK** 应用更改。

## sMRM Calculator

sMRM Calculator 脚本可用于直观表示 *Scheduled* MRM 算法采集方法。该脚本使用四个图形显示 MRM 离子对的概况、其并发性、预计周期时间以及要对其应用的驻留时间。请参阅图：图 2-15。为了使离子对相对于运行时间合适分布，可在脚本对话框中更改参数值，例如 **Maximum Dwell**、**Minimum Dwell**、**Target sMRM Cycle Time** 或 **Target sMRM Scan Time**、**Window Width**、**MRM Pause Time** 和 **Settling Time**。四个图形相应地更新。重复此过程，直到实现所需的离子对排布。

注释: 如果在原始方法中选择了 **Target Cycle Time**，则在脚本对话框中不能将其更改为 **Target Scan Time**。如果在原始方法中选择了 **Target Scan Time**，则在脚本对话框中不能将其更改为 **Target Cycle Time**。

注释: 只有对于 Citrine 系统，才可修改 sMRM Calculator 脚本对话框中的 **Settling time** 选项。

## 安装脚本

请参阅[安装脚本](#)。



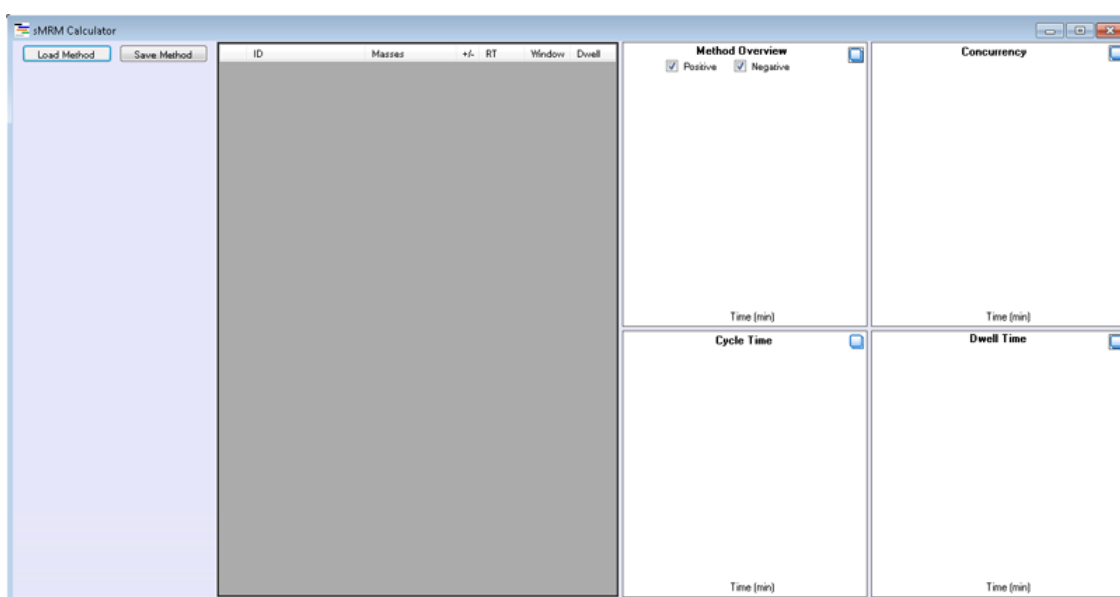
## 使用脚本

### 前提条件

- 确保 Analyst MD 软件已打开且硬件配置文件已激活。
- 确保已创建 *Scheduled MRM* 算法采集方法。

1. 单击 **Script > sMRM Calculator**。  
**sMRM Calculator** 对话框打开。

图 2-14 sMRM Calculator 对话框



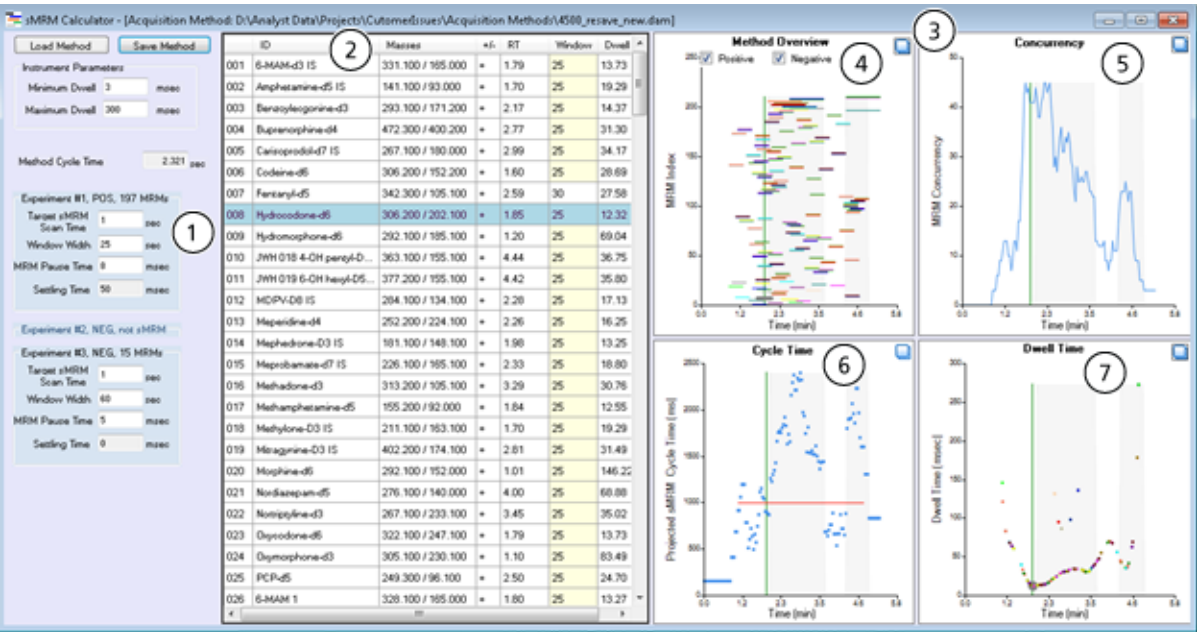
2. 单击 **Load Method** 以选择现有的 *Scheduled MRM* 算法采集方法。  
**Open** 对话框打开。

注释: 只有包含 *Scheduled MRM* 算法实验且用于当前选定项目中的活动质谱仪的采集方法才能在 *sMRM Calculator* 脚本中打开。仅显示 *Scheduled MRM* 算法实验的详细信息。非 *Scheduled MRM* 算法实验在脚本中标记为非 *Scheduled MRM*。

3. 选择 *Scheduled MRM* 算法采集方法，然后单击 **Open**。

选定的采集方法随即在 **sMRM Calculator** 对话框中打开。所打开采集方法的文件路径会显示在对话框的标题中。

图 2-15 在 sMRM Calculator 对话框中打开的采集方法



项目	描述
1	<p>左侧窗格包含仪器和 <b>Scheduled MRM</b> 算法参数。此窗格中显示的参数取决于打开的采集方法。</p> <p>如果右侧窗格的四个图形中离子对的排布不合适，则请在左侧窗格中更改可编辑参数和设置。表格中的受影响列以及图形相应地更新。可在允许的范围内更改这些参数值，直到实现合适的离子对排布。</p> <p>例如，如果 <b>Target sMRM Scan Time</b> 字段中的值发生更改，则表格中的驻留时间将重新计算并更新，且图形也会相应更新。</p> <p>例如，如果更改了 <b>Windows Width</b> 字段中的值，则对于使用此全局设置的所有离子对，此值在 <b>Window</b> 列都将更新。所有离子对的驻留时间都会重新计算并在表格中更新。右侧窗格中的图形也相应地更新。对于在 <b>Scheduled MRM Pro</b> 算法采集方法中自有检测窗口设置的离子对，更新左侧窗格中的 <b>Window Width</b> 全局设置将不会更新表格中这些离子对的 <b>Window</b> 列中的值。</p> <p>注释：左侧窗格中灰显的字段不可编辑，它们的值不可更改。</p>

项目	描述
2	<p>索引、化合物 ID、Q1 和 Q3 质量、极性、窗口宽度、保留时间和驻留时间显示在中间窗格中。默认视图按标识号排序。</p> <p>要根据其他列中的信息重新排列视图，单击七个列之一的标题：<b>index</b>、<b>ID</b>、<b>Masses</b>、<b>+/-</b>、<b>RT</b>、<b>Window</b> 和 <b>Dwell</b>。中间窗格刷新，按所选列的字母数字顺序或数字顺序显示相关信息。</p> <p>对于 SCIEX 4500MD 和 Citrine 系统的方法，还可以在表格中编辑该 <b>Scheduled MRM</b> 算法实验中的所有离子对的窗口宽度。表格中的驻留时间和右侧窗格中的图形也相应地更新。在表格中编辑窗口宽度会将 <b>Scheduled MRM</b> 算法采集方法转换为 <b>Scheduled MRM Pro</b> 算法采集方法。</p> <hr/> <p>注释: 使用左侧窗格中的全局设置的窗口宽度为黄色背景。在手动修改表格中单个离子对的窗口宽度后，或者如果已使用特定于其离子对的高级窗口宽度，则该单元格的背景颜色将变为白色。</p>
3	<p>右侧窗格以图形方式将加载的 <b>Scheduled MRM</b> 算法采集方法中包含的所有 <b>Scheduled MRM</b> 离子对显示为四个不同类型的图形。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>表格中的选定 <b>MRM</b> 离子对在图形中以绿色竖线表示。</li> <li>图形中的淡灰色区域代表每个周期中存在极性转换的保留时间区。</li> <li>每个图形中的工具提示显示光标下离子对的 <b>X</b> 值和 <b>Y</b> 值。对于 <b>Method Overview</b> 和 <b>Dwell Time</b> 图形，化合物 ID 也会显示在工具提示中。</li> <li>在 <b>Method Overview</b> 图形中单击一个 <b>MRM</b> 离子对可在其他三个图形和表格中选择该离子对。</li> </ul>
4	<p>第一个图形 <b>Method Overview</b> 显示所有离子对以及每个离子对的检测窗口。<b>X</b> 轴显示保留时间。<b>Y</b> 轴显示 <b>MRM</b> 标识号，它是在方法中输入离子对的顺序。</p>
5	<p>第二个图形 <b>MRM Concurrency</b> 在 <b>X</b> 轴上显示保留时间，在 <b>Y</b> 轴上显示每个保留时间处的 <b>MRM</b> 离子对并发性。</p>
6	<p>第三个图形 <b>Projected sMRM Cycle Time</b> 在保留时间上绘制预计的周期时间。红线代表 <b>Target Cycle Time</b>（如果使用）。如果使用 <b>Target Scan Time</b>，则红线的值是 <b>Target sMRM Scan</b> 时间之和，即方法中所有 <b>Scheduled MRM</b> 算法实验的时间之和。</p> <hr/> <p>注释: 对于 <b>Projected sMRM Cycle Time</b> 比 <b>Target Cycle Time</b> 或 <b>Target Scan Time</b> 之和（红杠处）低得多的离子对，预计数据点较多。对于 <b>Projected sMRM Cycle Time</b> 比 <b>Target Cycle Time</b> 或 <b>Target Scan Time</b> 之和（红杠处）高得多的离子对，预计数据点较少。</p>

---

项目	描述
7	第四个图形显示每个离子对在其保留时间处的驻留时间。X 轴显示保留时间。Y 轴显示要应用的驻留时间。

4. 请根据需要更改这些参数值以优化方法，从而达到最佳的 **Projected sMRM Cycle Time** 分布。
5. 单击 **Save Method**。  
**Save Method File** 窗口随即打开。

对方法的更改可以保存到原采集方法中，也可以保存为新的采集方法。如果将更改保存到原采集方法，则原始参数值将被新值覆盖。

6. 键入新文件名，或选择原方法，然后单击 **Save**。
7. 在 **Acquisition Method Editor** 中打开保存的采集方法以查看新更改。  
如果原方法已在 **Acquisition Method Editor** 中打开，则必须将其关闭并重新打开。
8. 单击 **sMRM Calculator** 对话框右上角的 **X** 以关闭该对话框。

# 联系我们

---

## 客户培训

- 北美地区: [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- 欧洲: [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- 在欧盟与北美之外请访问 [sciex.com/education](https://sciex.com/education)

## 在线学习中心

- [SCIEX Now Learning Hub](#)

## SCIEX 支持

SCIEX 及其代表在全球范围内设有经过系统培训的服务和技术专家。他们可以解答系统问题或可能出现的任何技术问题。详情请访问 SCIEX 网站 [sciex.com](https://sciex.com) 或通过下述方式之一联系我们:

- [sciex.com/contact-us](https://sciex.com/contact-us)
- [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support)

## 网络安全

有关 SCIEX 产品的最新网络安全指南, 请访问 [sciex.com/productsecurity](https://sciex.com/productsecurity)。

## 文档

本版本的文档取代本文档的所有先前版本。

要查看本文档的电子版本, 需要 Adobe Acrobat Reader。要下载最新版本, 请转到 <https://get.adobe.com/reader>。

要查找软件产品文档, 请参阅软件随附的版本发布说明或软件安装指南。

要查找硬件产品文档, 请参阅系统或组件随附的客户参考 DVD。

---

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

---