
Logiciel Analyst MD

Tutoriel sur l'algorithme *Scheduled* MRM MRM



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.

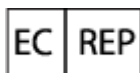
Rx only.

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

Tutoriel de l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM	5
Objectifs	5
À propos de l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM	5
Documentation connexe	6
Conditions préalables	7
Créer un fichier csv ou txt	7
Créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM	7
Créer une méthode d'acquisition en utilisant deux expériences avec l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM	14
Créer un chromatogramme d'ions extraits	15
Afficher les transitions MRM	17
Créer des méthodes de quantification	18
Examiner le tableau de résultats	20
À propos de l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM Pro Algorithme	22
Créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM Pro	23
Conséquences de l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM Pro sur les IDA	27
Créer une méthode d'acquisition IDA avec l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM Pro	27
Afficher les paramètres de l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM Pro dans le volet File Information	28
Créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM Basic ou Pro, avec <i>Scheduled</i> Ionization	29
Nous contacter	31
Formation destinée aux clients	31
Centre d'apprentissage en ligne	31
Assistance technique SCIEX	31
Cybersécurité	31
Documentation	31

Tutoriel de l'algorithme *Scheduled* MRM

Objectifs

Les utilisateurs apprendront à :

- créer une méthode pour contrôler les transitions de l'algorithme *Scheduled* MRM,
- visualiser les transitions de l'algorithme *Scheduled* MRM dans un chromatogramme d'ions extraits,
- analyser les données quantitatives en créant une méthode de quantification et en examinant le tableau des résultats,
- créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM Pro,
- créer une méthode d'acquisition IDA avec l'algorithme *Scheduled* MRM Pro.

À propos de l'algorithme *Scheduled* MRM

L'algorithme *Scheduled* MRM facilite l'acquisition de centaines de composés en se fondant sur une liste de transitions MRM (Multiple Reaction Monitoring), de temps de rétention et d'identifiants de composé fournis lors de la création de la méthode d'acquisition. L'algorithme *Scheduled* MRM réduit la nécessité d'effectuer des expériences à périodes multiples. Il est également possible de l'utiliser comme balayage d'exploration dans une méthode IDA (Information Dependent Acquisition).

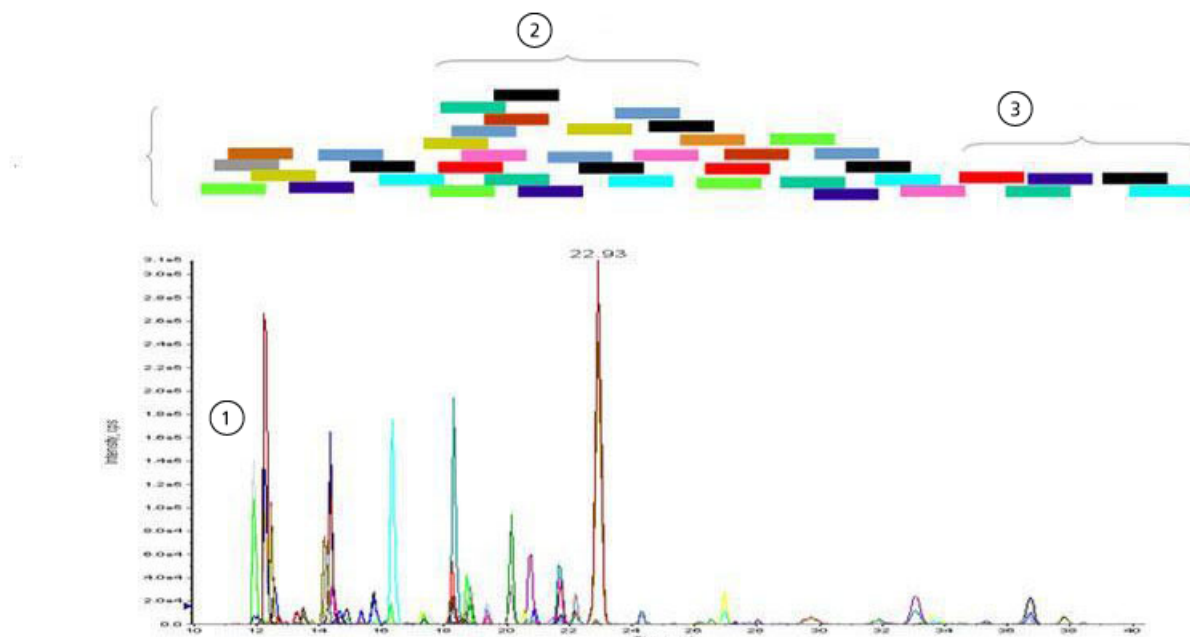
L'algorithme maximise les points sur le pic chromatographique pour permettre une meilleure détection des pics et améliorer la reproductibilité. Cette fonctionnalité permet également d'afficher des fichiers de données comportant de nombreuses transitions MRM en affichant les colonnes de l'identifiant du composé, de l'indice AIQ (Analyte Integration Quality) et de l'indice IS (Internal Standard) dans le tableau de résultats. Pour les systèmes SCIEX 3200MD, 1 000 transitions au maximum sont prises en charge par l'algorithme *Scheduled* MRM. Pour les systèmes SCIEX 4500MD et Citrine, 4 000 transitions au maximum sont prises en charge par l'algorithme *Scheduled* MRM.

Remarque : Les colonnes **Analyte Integration Quality Index** et **IS Integration Quality Index** sont également disponibles pour les données MRM dans le tableau de résultats.

La figure suivante montre un exemple d'analyse LC avec l'algorithme *Scheduled* MRM. Le nombre de transitions MRM contrôlées simultanément varie au cours de l'analyse LC, mais reste stable entre les injections.

Illustration 1 : Exemple type de procédure LC avec algorithme *Scheduled* MRM

Scheduled MRM Algorithm



Élément	Description
1	Transitions MRM contrôlées
2	Nombre élevé de transitions MRM contrôlées
3	Nombre faible de transitions MRM contrôlées

Pour traiter un grand nombre de transitions avec l'algorithme *Scheduled* MRM, utilisez le logiciel MultiQuant MD. Pour plus d'informations, contactez un commercial SCIEX.

Documentation connexe

- *Guide de l'utilisateur du système* pour le spectromètre de masse
- *Guide de l'utilisateur avancé*
- *Guide de l'utilisateur de scripts* (pour plus d'informations sur les scripts Create Quan Methods From Text Files et Create Text File from Quan Method)
- *Tutoriel sur l'acquisition dépendante de l'information* (pour plus d'informations sur la création de méthodes avec l'IDA)
- *Aide d'Analyst*

Conditions préalables

Conditions préalables

Les utilisateurs doivent être en mesure de :

- Créer une méthode d'acquisition
- Envoyer un lot
- Créer une méthode de quantification, et créer et examiner un tableau de résultats

Les périphériques suivants doivent être compris dans le profil matériel :

- Pompe LC
- Auto-échantillonneur

Créer un fichier csv ou txt

En option, les informations de transition d'une méthode *Scheduled* MRM peuvent être créées et stockées dans un fichier csv ou txt, et importées dans le tableau des plages de masses d'une méthode *Scheduled* MRM. Utilisez les critères suivants pour créer le fichier csv ou txt :

- Le fichier ne doit pas contenir de titres d'en-tête, e colonne ou de ligne.
- L'ordre et le nombre de colonnes dans le fichier doivent correspondre à l'ordre et au nombre de colonnes dans le tableau des plages de masses.
- Pour les méthodes avec l'algorithme MRM ou *Scheduled* MRM, il ne doit y avoir aucune cellule vide. Pour les méthodes utilisant l'algorithme *Scheduled* MRM Pro, les colonnes **Window** et **Threshold** peuvent rester vides pour pouvoir utiliser des valeurs par défaut. La colonne **Group** peut également rester vide.

Vérifiez que le fichier est enregistré avec une extension csv ou txt.

Créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM

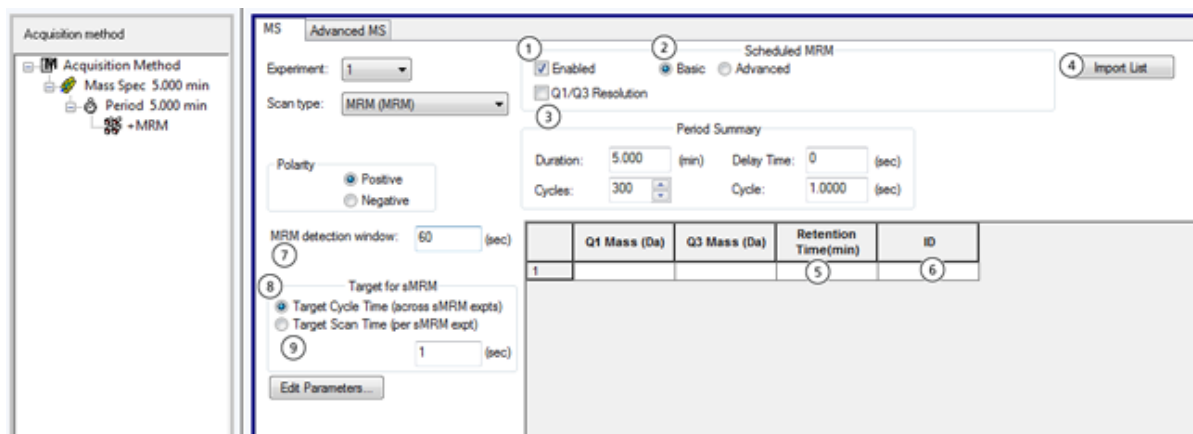
Remarque : Pour les systèmes SCIEX 4500MD et Citrine, 1 250 transitions MRM non planifiées et 4 000 transitions MRM avec l'algorithme *Scheduled* MRM peuvent être acquises au maximum. Pour les systèmes SCIEX 3200MD, 300 transitions MRM non planifiées et 1 000 transitions MRM avec l'algorithme *Scheduled* MRM peuvent être acquises au maximum.

1. Dans la barre de navigation, sous **Acquire**, double-cliquez sur **Build Acquisition Method** puis, dans le volet Acquisition Method, sélectionnez l'icône **Mass Spec**.
2. Vérifiez que la valeur **Scan Type** sélectionnée est **MRM**, puis cochez la case **Enabled** dans le groupe **Scheduled MRM**. Pour créer une méthode pour les systèmes SCIEX 4500MD et Citrine, consultez les fonctionnalités dans la figure [Illustration 2](#). Pour créer

Tutoriel de l'algorithme *Scheduled MRM*

une méthode pour les systèmes SCIEX 3200MD, consultez les fonctionnalités dans la figure [Illustration 3](#).

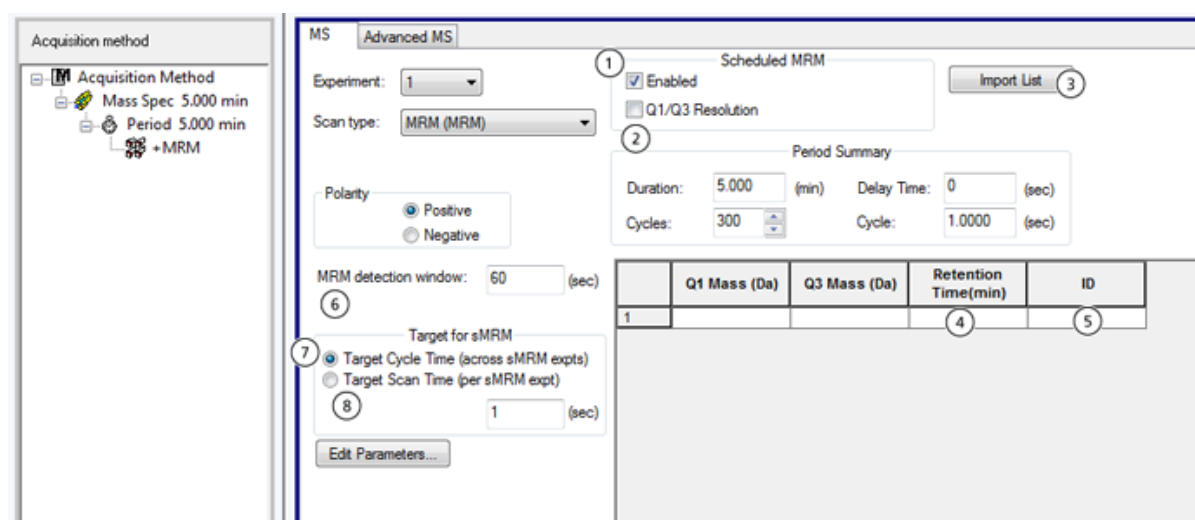
Illustration 2 : Fonctionnalités logicielles de l'algorithme *Scheduled MRM* pour les systèmes SCIEX 4500MD et Citrine



Élément	Description
1	Case Enabled dans le groupe Scheduled MRM : cochez cette case pour activer les fonctionnalités de base et avancées de l'algorithme <i>Scheduled MRM</i> .
2	Option Basic : cochez cette case pour activer les fonctionnalités de l'algorithme <i>Scheduled MRM</i> . L'option prédéfinie est Basic.
3	Case Q1/Q3 Resolution : cochez cette case pour appliquer différents paramètres de résolution Q1 et Q3 à chaque transition. Lorsque cette option est sélectionnée, les colonnes Q1 Resolution et Q3 Resolution sont ajoutées au tableau des plages de masses.
4	Bouton Import List : cliquez dessus pour importer des transitions MRM, une durée, un identifiant et des paramètres dépendant des composés à partir d'un fichier txt ou csv.
5	Colonne Retention Time (min) : saisissez le temps de rétention attendu, en minutes, pour la transition MRM correspondante. Cette colonne affiche le temps de résidence en ms des méthodes MRM.
6	Colonne ID : (facultatif) saisissez un identifiant de composé pour la transition considérée.
7	Champ MRM detection window (sec) : saisissez la durée de détection qui encadre le temps de rétention de chaque transition.

Élément	Description
8	Option Target Cycle Time (across sMRM experiments) : sélectionnez cette option pour spécifier et utiliser le temps de cycle cible de toutes les expériences utilisant l'algorithme <i>Scheduled MRM</i> pendant toute la période ou toute la méthode. La sélection ou la non-sélection de cette option dans une expérience utilisant l'algorithme <i>Scheduled MRM</i> applique automatiquement le même paramétrage à l'autre expérience utilisant l'algorithme <i>Scheduled MRM</i> , si la méthode contient deux expériences utilisant l'algorithme <i>Scheduled MRM</i> . Au maximum, deux expériences utilisant l'algorithme <i>Scheduled MRM</i> sont autorisées dans une période ou une méthode. La durée de cycle cible peut être réglée de manière à cibler une durée spécifique parmi l'ensemble des cycles, afin d'obtenir une distribution plus homogène des points de données sur un pic, sans tenir compte d'un éventuel changement de polarité entre des transitions simultanées au cours d'un cycle. Target Cycle Time est le paramètre prédéfini.
9	Champ Target Scan Time (per sMRM experiment) (sec) : sélectionnez la durée cible à utiliser pour l'expérience dans chaque cycle. Le logiciel maintiendra le temps de balayage total de cette expérience proche de la durée cible dans chaque cycle, sauf si le temps de résidence minimal ou maximal est appliqué à certaines transitions simultanées. Le temps de balayage cible est réglable de manière à cibler un nombre spécifique de points sur les pics LC.

Illustration 3 : Fonctionnalités logicielles de l'algorithme *Scheduled MRM* pour les systèmes SCIEX 3200MD

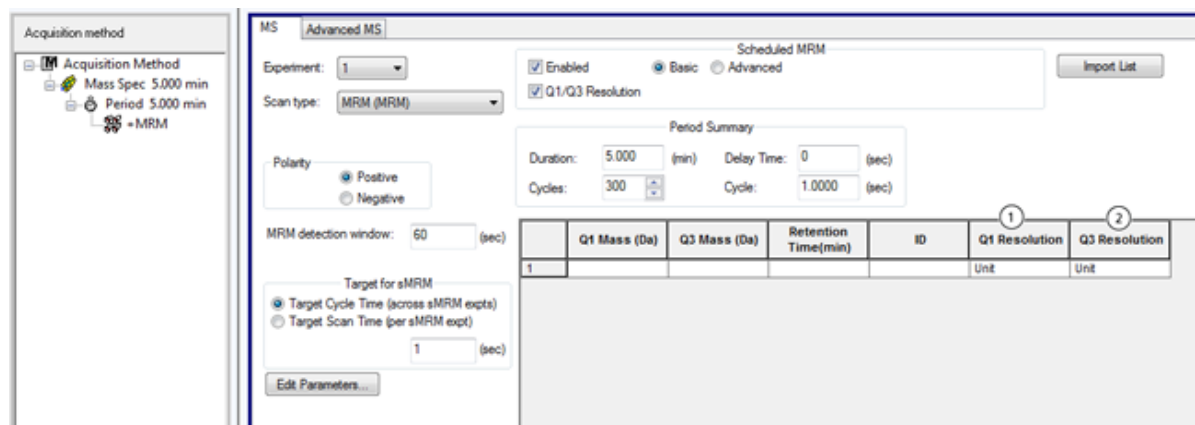


Élément	Description
1	Case Enabled dans le groupe Scheduled MRM : cochez cette case pour activer les fonctionnalités de l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM.
2	Case Q1/Q3 Resolution : cochez cette case pour appliquer différents paramètres de résolution Q1 et Q3 à chaque transition. Lorsque cette option est sélectionnée, les colonnes Q1 Resolution et Q3 Resolution sont ajoutées au tableau des plages de masses.
3	Bouton Import List : cliquez dessus pour importer des transitions MRM, une durée, un identifiant et des paramètres dépendant des composés à partir d'un fichier txt ou csv.
4	Colonne Retention Time (min) : saisissez le temps de rétention attendu, en minutes, pour la transition MRM correspondante. Cette colonne affiche le temps de résidence en ms des méthodes MRM.
5	Colonne ID : (facultatif) saisissez un identifiant de composé pour la transition considérée.
6	Champ MRM detection window (sec) : saisissez la durée de détection qui encadre le temps de rétention de chaque transition.
7	Option Target Cycle Time (across sMRM experiments) : sélectionnez cette option pour spécifier et utiliser le temps de cycle cible de toutes les expériences utilisant l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM pendant toute la période ou toute la méthode. La sélection ou la non-sélection de cette option dans une expérience utilisant l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM applique automatiquement le même paramétrage à l'autre expérience utilisant l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM, si la méthode contient deux expériences utilisant l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM. Au maximum, deux expériences utilisant l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM sont autorisées dans une période ou une méthode. La durée de cycle cible peut être réglée de manière à cibler une durée spécifique parmi l'ensemble des cycles, afin d'obtenir une distribution plus homogène des points de données sur un pic, sans tenir compte d'un éventuel changement de polarité entre des transitions simultanées au cours d'un cycle. Target Cycle Time est le paramètre prédéfini.
8	Champ Target Scan Time (per sMRM experiment) (sec) : sélectionnez la durée cible à utiliser pour l'expérience dans chaque cycle. Le logiciel maintiendra le temps de balayage total de cette expérience proche de la durée cible dans chaque cycle, sauf si le temps de résidence minimal ou maximal est appliqué à certaines transitions simultanées. Le temps de balayage cible est réglable de manière à cibler un nombre spécifique de points sur les pics LC.

- Pour utiliser différents réglages de résolution Q1 et Q3 pour chaque transition, cliquez sur **Q1/Q3 Resolution** dans le groupe Scheduled MRM.

Deux colonnes sont ajoutées dans le tableau de plages de masses : Q1 Resolution et Q3 Resolution.

Illustration 4 : Option Q1/Q3 Resolution sélectionnée pour les systèmes SCIEX 4500MD et Citrine



Élément	Description
1	Colonne Q1 Resolution : mode utilisé par le balayage Q1 pour séparer les composants faiblement espacés. Il correspond à la capacité de résolution du premier quadripôle. Les options disponibles sont : High, Unit, Low et Open.
2	Colonne Q3 Resolution : mode utilisé par le balayage Q3 pour séparer les composants faiblement espacés. Il correspond à la capacité de résolution du troisième quadripôle. Les options disponibles sont : High, Unit, Low et Open.

Les options **Resolution Q1** et **Resolution Q3** dans l'onglet Advanced MS ne sont pas sélectionnables.

Si la case **Q1/Q3 Resolution** est cochée dans le Tune Method Editor, les options **Q1 Resolution** et **Q3 Resolution** dans l'onglet Resolution ne sont pas sélectionnables.

- Complétez le tableau de plages de masses pour chaque transition MRM intéressante en utilisant l'une des méthodes suivantes :
 - Saisissez manuellement les transitions MRM : la masse Q1, la masse Q3, le temps de rétention et l'identifiant de composé pour chaque transition intéressante. Pour chaque transition, sélectionnez des valeurs dans les colonnes **Q1 Resolution** et **Q3 Resolution**. Cliquez avec le bouton droit de la souris pour ajouter des paramètres dépendants du composé selon les besoins. Un nombre maximal de quatre paramètres dépendants du composé peut être ajouté au tableau de plages de masses.

- Importer des transitions MRM : cliquez sur **Import List**, puis dans la fenêtre Open, sélectionnez un fichier CSV (valeurs séparées par des virgules) ou TXT (valeurs séparées par une tabulation) qui contient les informations de transition MRM. Après avoir sélectionné le fichier, cliquez sur **Open**. Le contenu du fichier s'affiche dans le tableau de plages de masses. Pour plus d'informations sur la création de registres, consultez la section [Créer un fichier csv ou txt](#).
- Copier et coller des transitions MRM : sélectionnez les cellules contenant les informations requises à partir d'un fichier CSV ou TXT, puis appuyez sur **Ctrl+C**. Lors du collage de lignes d'informations, sélectionnez la première cellule **Q1 Mass (Da)** du tableau de plages de masses, puis appuyez sur **Ctrl+V**.

Remarque : Avant d'importer ou de copier et coller, vérifiez que les colonnes de données du fichier CSV ou TXT correspondent à celles du tableau de plages de masses du logiciel. Le nombre et l'ordre des colonnes dans le fichier source et dans le tableau de destination doivent être identiques. Ajoutez, supprimez ou réorganisez les colonnes du fichier source, le cas échéant. Pour ajouter une colonne au tableau de plages de masses, cliquez avec le bouton droit de la souris dans le tableau de plages de masses, puis sélectionnez un paramètre dépendant du composé. Pour les paramètres dépendants du composé, les valeurs doivent se situer dans les plages admises pour la polarité sélectionnée.

5. Dans le champ **MRM detection window (sec)**, saisissez la durée de détection qui encadre le temps de rétention pour chaque transition. Cette fenêtre doit refléter la largeur attendue du pic chromatographique et la variabilité du temps de rétention chromatographique de l'analyte de sorte que tout le pic MRM soit toujours visible dans la fenêtre.

Utilisez la chromatographie LC comme guide pour sélectionner les meilleurs paramètres pour l'algorithme *Scheduled* MRM. Déterminez la largeur de base habituelle du pic puis consultez le tableau suivant pour connaître les paramètres recommandés. Veillez également à prendre en compte la stabilité du temps de rétention dans la définition de la fenêtre de détection MRM.

Tableau 1 : Paramètres recommandés pour l'algorithme *Scheduled* MRM

Largeur de base de la pic	Fenêtre de détection MRM	Target Scan Time ou Target Cycle Time
30 secondes	90 secondes	2 secondes
15 secondes	60 secondes	1 seconde
10 secondes	30 secondes	0,5 seconde

Pour l'algorithme *Scheduled* MRM, le nombre d'analytes par cycle contrôlé est ajusté selon la fenêtre de temps de rétention des analytes. Pour optimiser le temps de résidence utilisé pour chaque analyte et son rapport signal/bruit, il est recommandé d'utiliser une fenêtre de temps de rétention plus petite mais adaptée, qui permet la capture du pic à l'étude. Une valeur de 60 secondes est un bon point de départ. Cette valeur est suffisante pour la chromatographie qui produit une largeur de pic de

15 secondes et une variation potentielle du temps de rétention de 20 secondes à droite et à gauche du pic.

Par exemple, si le temps de rétention attendu est de 4,5 minutes, un réglage de 60 secondes définit une fenêtre de détection entre 4 et 5 minutes.

Remarque : Si **Retention Time** est réglé sur 0, le logiciel contrôle cette transition pendant toute la durée de l'analyse

6. Effectuez l'une des opérations suivantes selon les besoins :

- Au besoin, laissez l'option **Target Cycle Time (across sMRM expts)** sélectionnée, puis saisissez une durée de cycle cible, en secondes, comme indiqué sur la figure suivante. Si l'option **Target Cycle Time** est sélectionnée, le logiciel tente d'appliquer cette durée à chaque cycle. Cependant, la durée utilisée pour chaque cycle varie essentiellement en fonction de la somme des temps de résidence de toutes les transitions du cycle.

Pour calculer le temps de résidence de chaque transition d'un cycle, le logiciel utilise la durée de cycle cible, les temps de changement de polarité le cas échéant, et tous les temps de pause. Le temps de résidence alloué à une transition dépend du temps de résidence calculé pour chaque cycle dans la fenêtre de détection (que ce dernier soit inférieur au temps de résidence minimal ou supérieur au temps de résidence maximal), ainsi que de l'importance avec laquelle il empiète sur chacune des autres transitions dans la fenêtre de détection. Si le temps de résidence calculé est inférieur à la valeur minimale en raison d'une concurrence élevée ou supérieur à la valeur maximale en raison d'une faible concurrence, le temps de résidence minimal ou maximal sera utilisé pour cette transition dans ce cycle lors de l'étape suivante du calcul. La moyenne des temps de résidence de l'ensemble des cycles de cette transition est le temps de résidence final alloué à cette transition.

Illustration 5 : Target Cycle Time (across sMRM expts)

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window. Under 'Target for sMRM', the option 'Target Cycle Time (across sMRM expts)' is selected and highlighted with a red box. The value '1' is entered in the adjacent field, which is also highlighted with a red box. Other visible settings include 'Experiment: 1', 'Scan type: MRM (MRM)', 'Polarity: Positive', 'MRM detection window: 60 (sec)', 'Duration: 5.000 (min)', 'Cycles: 300', 'Delay Time: 0 (sec)', 'Cycle: 1.0000 (sec)', and 'Scheduled Ionization' options.

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Retention Time (min)	ID	Q1 Resolution	Q3 Resolution
1					Unit	Unit

- Si nécessaire, cliquez sur **Target Scan Time (per sMRM expt)**, puis saisissez, en secondes, la durée souhaitée de l'expérience pour chaque cycle, comme indiqué

dans la figure suivante. Ce paramètre permet de définir le nombre de points sur le pic chromatographique.

Illustration 6 : Target Scan Time (per sMRM expt)

The screenshot shows the 'MS' tab in the 'Advanced MS' window. The 'Scan type' is set to 'MRM (MRM)'. Under 'Target for sMRM', the 'Target Scan Time (per sMRM expt)' option is selected and highlighted with a red box. The value '1 (sec)' is entered in the adjacent field. Other parameters visible include 'Duration: 5.000 (min)', 'Cycles: 300', 'Delay Time: 0 (sec)', and 'Cycle: 1.0000 (sec)'. A table at the bottom shows columns for 'Q1 Mass (Da)', 'Q3 Mass (Da)', 'Retention Time (min)', 'ID', 'Q1 Resolution', and 'Q3 Resolution'.

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Retention Time (min)	ID	Q1 Resolution	Q3 Resolution
1					Unit	Unit

Utilisez la largeur des pics chromatographiques comme guide pour définir cette valeur. Une valeur de 1 seconde est un bon point de départ pour la chromatographie qui produit une largeur de pic de 15 secondes. Dans ce cas, un temps de balayage cible de 1 seconde générera environ 15 points de données sur un pic de 15 secondes si aucun temps de résidence minimal ou maximal n'est appliqué à l'une des transitions simultanées dans cette fenêtre de détection.

7. Indiquez les valeurs requises dans les autres champs de la méthode d'acquisition.
8. Enregistrez la méthode d'acquisition dans le projet à partir duquel l'acquisition sera réalisée.

Remarque : Les champs de l'algorithme *Scheduled* MRM sont également disponibles dans Tune Method Editor.

Créer une méthode d'acquisition en utilisant deux expériences avec l'algorithme *Scheduled* MRM

Utilisez cette procédure pour créer une méthode permettant l'inversion de polarité.

1. Créez une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM en utilisant les étapes de la section [Créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM](#).
2. Dans le volet Acquisition method, cliquez avec le bouton droit de la souris sur **Period**, puis cliquez sur **Add experiment**.
Une seconde expérience de balayage MRM est créée.
3. Dans l'onglet MS, sélectionnez l'une des options suivantes selon le spectromètre de masse utilisé :

- Pour les systèmes SCIEX 4500MD et Citrine, cochez la case **Enabled** dans le groupe **Scheduled MRM**. Pour créer une méthode d'acquisition normale avec l'algorithme *Scheduled* MRM, vérifiez que l'option **Basic** est sélectionnée dans le groupe **Scheduled MRM**. Pour créer la méthode, consultez les caractéristiques dans la figure [Illustration 2](#). Pour créer une méthode avec l'algorithme *Scheduled* MRM Pro, vérifiez que l'option **Advanced** est sélectionnée. Pour créer cette méthode, consultez la section [Créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM Pro](#).
 - Pour les systèmes SCIEX 3200MD, cochez la case **Enabled** dans le groupe **Scheduled MRM**. Pour créer la méthode, consultez les caractéristiques dans la figure [Illustration 3](#).
4. Finalisez la méthode d'acquisition comme indiqué dans la section [Créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM](#).
 5. Enregistrez la méthode d'acquisition dans le projet à partir duquel l'acquisition sera réalisée.

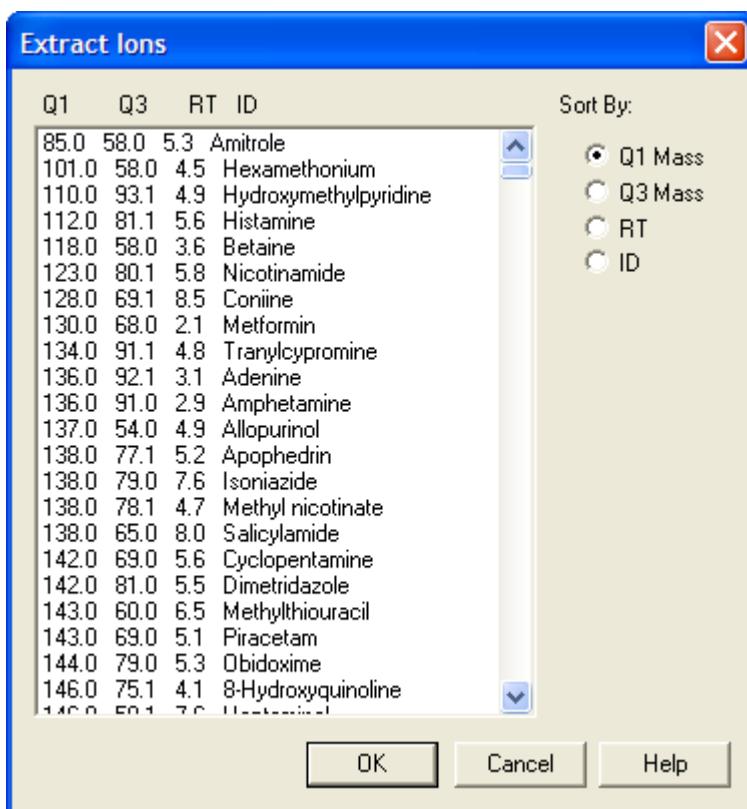
Remarque : Pour les systèmes SCIEX 3200MD et SCIEX 4500MD, le temps de stabilisation par défaut sera appliqué en cas de changement de polarité durant ce cycle. Pour la série d'instruments Citrine, le temps de stabilisation configuré par l'utilisateur sera appliqué en cas d'inversion de polarité durant ce cycle.

Créer un chromatogramme d'ions extraits

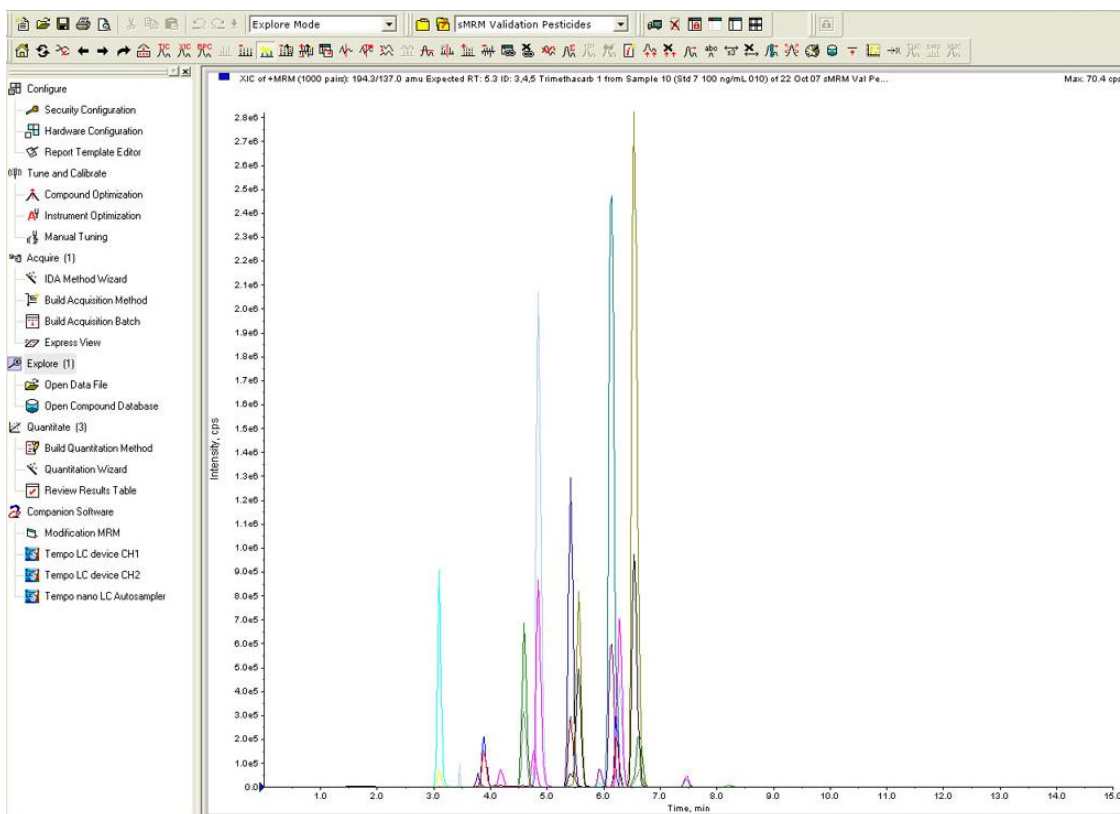
Remarque : Si un fichier wiff d'algorithme *Scheduled* MRM contenant plus de 2 500 transitions est ouvert, un TIC s'affiche au lieu d'un XIC.

1. Après avoir généré des données d'algorithme *Scheduled* MRM en utilisant la méthode d'acquisition créée dans la procédure précédente, sur la barre de navigation, sous **Explore**, double-cliquez sur **Open Data File**, puis sélectionnez le fichier de données et l'échantillon.
Les données d'algorithme MRM et *Scheduled* MRM sont prédéfinies pour s'afficher sous la forme d'un XIC superposé.
2. Cliquez sur **Explore > Extract Ions > Use Dialog**.
La boîte de dialogue Extract Ions s'ouvre et affiche chaque transition MRM dans le fichier de données sélectionné ainsi que le temps de rétention estimé et l'identifiant de composé correspondants, s'ils ont été entrés.

Illustration 7 : Boîte de dialogue Extract Ions

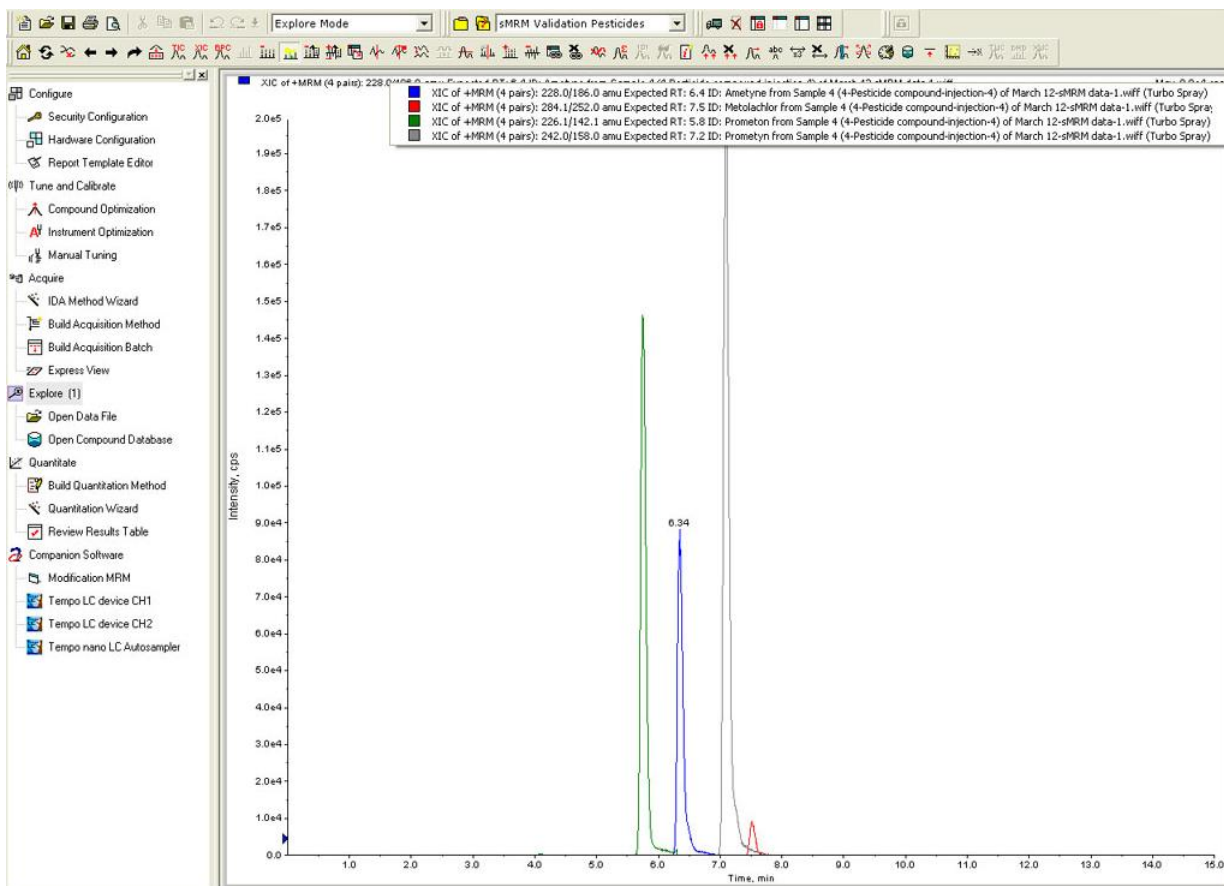


3. Sélectionnez l'option appropriée pour trier la liste selon la masse Q1, la masse Q3, le temps de rétention ou l'identifiant du composé.
4. Sélectionnez une ou plusieurs transitions.
5. Cliquez sur **OK**.
Le XIC s'affiche sous le chromatogramme et l'identifiant du composé de la première transition sélectionnée s'affiche dans le titre.

Illustration 8 : Exemple de XIC superposé s'ouvrant lorsque plusieurs ions sont extraits**Afficher les transitions MRM**

1. Générez un XIC.
2. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le titre du XIC pour afficher les transitions MRM actives dans la région. Sélectionnez la transition MRM souhaitée pour afficher un libellé du temps de rétention dans le chromatogramme.

Illustration 9 : Transitions MRM actives



3. Faites glisser le curseur le long de l'axe des abscisses pour agrandir une période précise.
Le XIC est redimensionné sur le pic le plus élevé dans les données affichées.
4. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur le titre du XIC à nouveau pour afficher les transitions MRM actives dans la période concernée.
Toutes les transitions situées au-dessus du seuil et dans la zone agrandie s'affichent. Le titre est réduit au nombre de transitions comprises dans la zone agrandie.

Créer des méthodes de quantification

Remarque : Dans le logiciel Analyst MD, vous devez utiliser Build Quantitation Method pour créer une méthode de quantification pour un fichier de données contenant plus de 94 transitions. Le Quantitation Wizard ne peut créer des méthodes de quantification que pour des fichiers de données comportant au plus 94 transitions.

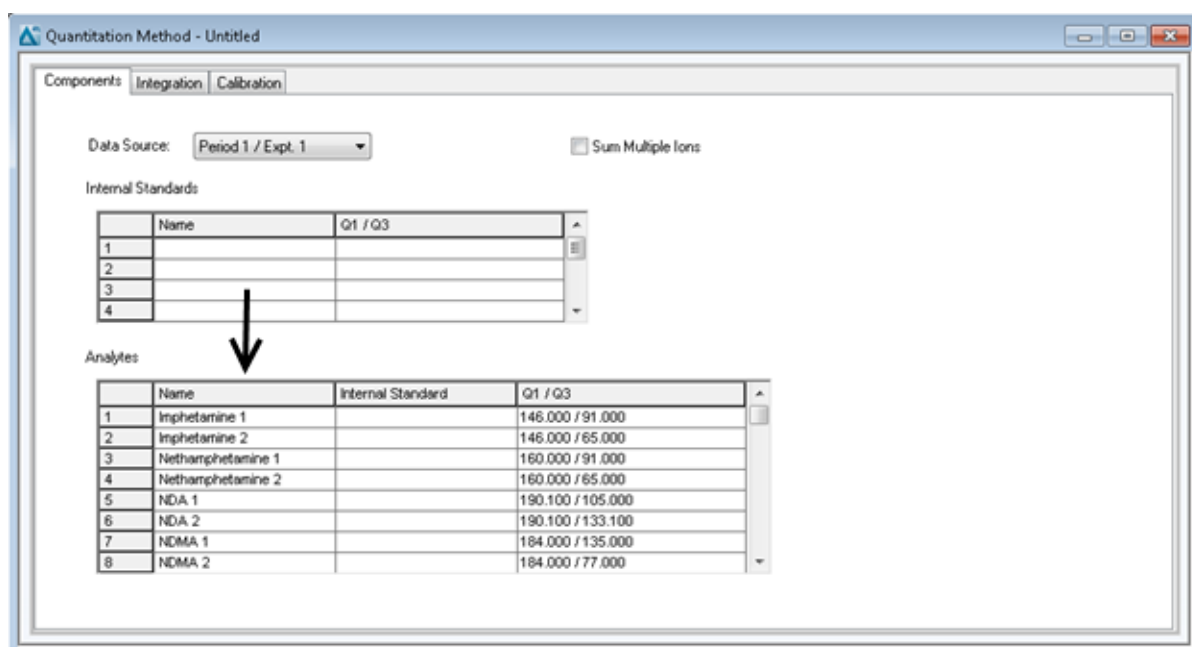
Avant toute chose, vérifiez que l'algorithme IntelliQuan-MQ III recommandé est utilisé. Pour plus d'informations sur la sélection d'algorithmes, consultez le document *Aide*.

1. Dans la barre de **Navigation**, sous **Quantitate**, double-cliquez sur **Build Quantitation Method**.

Remarque : Les utilisateurs peuvent utiliser l'assistant Quantitation Wizard pour créer une méthode de quantification qui analyse des données comprenant moins de 94 transitions.

- Sélectionnez le fichier de données et l'échantillon acquis, puis cliquez sur **OK**. Une colonne **Name** apparaît dans le tableau Analytes. Comme les transitions sont sélectionnées pendant l'acquisition, cette colonne contient les identifiants de composé de la méthode d'acquisition.

Illustration 10 : Méthode de quantification : onglet Components



Remarque : Si la méthode contient plusieurs expériences, examinez chacune d'elles en la sélectionnant dans la liste **Data Source** pour pouvoir utiliser ses analytes dans la méthode de quantification. Si les analytes sont nombreux, la liste **Data Source** peut mettre un certain temps à s'afficher.

- Définissez les valeurs nécessaires dans les champs restants de la méthode de quantification, puis enregistrez la méthode d'acquisition.
- Utilisez le Quantitation Wizard pour créer le tableau de résultats. Vérifiez que la méthode de quantification créée et sélectionnée.

Conseil ! Si le fichier de données contient un grand nombre de transitions MRM, utilisez les scripts Create Quan Methods From Text Files et Create Text File from Quan Method pour créer ou modifier une méthode de quantification. Pour plus d'informations, consultez le *Guide de l'utilisateur de scripts*.

Examiner le tableau de résultats

1. Pour afficher les résultats d'une transition, cliquez avec le bouton droit de la souris dans le tableau de résultats, sélectionnez **Analyte**, puis sélectionnez la transition dans la liste des ID de composé.

Illustration 11 : Tableau de résultats : sélection d'analyte

The screenshot shows the Analyst MD software interface. A right-click context menu is open over a table of results. The menu options are: Full, Summary, **Analyte** (highlighted), Analyte Group, Add Formula Column, Table Settings, Query, Sort, Metric Plot, Delete Pane, Fit Down, Add Custom Column, and Delete Custom Column. The table has columns: Sample Name, Sample ID, and a third column (partially visible). The table contains 24 rows, all with 'SYS suit001' in the Sample Name column. To the right of the table, a list of compounds is displayed, including: 7-Aminoflunitrazepam, 9-Hydroxyrisperidone, Aceclidine, Aceprometazine, Acidovir, Aynaline, alpha-Hydroxyalprazolam, alpha-Hydroxytriazolam, Alprazolam, Alprenolol, Amantadine, Amionde, Aminophenazone, Aminopromazine, Amiodarone, Amiphenazole, Amitriptylin, Amiodipine, Amoxicillin, Amphetamine, Apomorphine, Aprindine, Atenolol, Atorvastatin, Atropine, Aztreonam, Befunolol, Bendicarb, Benzotropine, Benzocaine, Benzocetamine, Benzoylcegonine, Berberine, Betaxolol, and Bezaflibrate. The table also has columns for 'Analyte Peak Name (counts)', 'Analyte Peak Height (cps)', and 'Compound ID'.

2. Cliquez avec le bouton droit de la souris dans le tableau de résultats, puis cliquez sur **Table Settings > Edit** pour ouvrir la boîte de dialogue Table Settings.
3. Double-cliquez sur **Columns**, puis sélectionnez **Analyte** dans la liste.
4. En regard de **Analyte Peak Name**, cochez la case **Shown**.
5. Cliquez sur **OK**, puis sur **Done**.
La colonne **Analyte Peak Name** est ajoutée au tableau de résultats et contient les ID de composé de chaque transition.

Illustration 12 : Tableau de résultats : colonne **Analyte Peak Name**

	Sample Name	Sample Type	File Name	Analyte Peak Name
1	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	3,4-Methylenedioxyamphetamine
2	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	3,4-Methylenedioxyethylamphetamine
3	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	3,4-Methylenedioxymethamphetamine
4	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	6-O-Monoacetylmorphine
5	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	7-Aminoclonazepam
6	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	7-Aminoflunitrazepam
7	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	9-Hydroxynisiperidone
8	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Aceclidine
9	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Aceprometazine
10	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Aciclovir
11	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Ajmaline
12	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	alpha-Hydroxyalprazolam
13	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	alpha-Hydroxytriazolam
14	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Alprazolam
15	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Alprenolol
16	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Amantadine
17	SYS suit001	Unknown	Triple Quad\23 Aug	Amiloride

6. Cliquez avec le bouton droit de la souris dans le tableau de résultats, puis cliquez sur **Table Settings > Edit** pour afficher les colonnes **Analyte Integration Quality** et **IS Integration Quality** dans le tableau.
7. Double-cliquez sur **Columns**, puis sélectionnez **Analyte** dans la liste.
8. En regard de **Analyte Integration Quality**, cochez la case **Shown**, puis cliquez sur **OK**.
9. Sélectionnez **Internal Standard** dans la liste .
10. En regard de **IS Integration Quality**, cochez la case **Shown**.
11. Cliquez sur **OK**, puis sur **Done**.

Les deux colonnes sont ajoutées au tableau de résultats. La qualité d'intégration indique la qualité de l'intégration du pic. Les valeurs les plus proches de 1 indiquent des pics bien intégrés. Les valeurs plus faibles indiquent que le pic n'est pas bien intégré, que le bruit de fond est important ou qu'il y a un autre pic dans la zone.

Ces colonnes facilitent l'examen des pics car l'utilisateur peut facilement voir les pics ayant des valeurs faible d'indice **Integration Quality** d'analyte à examiner manuellement. De plus, l'utilisateur peut interroger les valeurs d'indice **Integration Quality** d'analyte, qui sont inférieures à une valeur jugée acceptable pour afficher et examiner manuellement un sous-ensemble des données.

Illustration 13 : Colonnes du tableau de résultats

	Sample Name	Record Modified	Calculated Concentration (ng/mL)	Accuracy (%)	Analyte Integration Quality	IS Integration Quality	Time
1	STD 1	<input type="checkbox"/>	3.22	161.	1.00 1	1.00 2	0.000000
2	STD 1	<input type="checkbox"/>	3.29	165.	0.874	1.00	N/A
3	STD 1	<input type="checkbox"/>	2.74	137.	1.00	1.00	N/A
4	STD 1	<input type="checkbox"/>	3.20	160.	1.00	1.00	0.000000
5	STD 1	<input type="checkbox"/>	2.86	143.	0.731	1.00	N/A
6	STD 1	<input type="checkbox"/>	2.54	127.	1.00	1.00	N/A
7	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.92	123.	1.00	1.00	0.000000
8	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.79	120.	0.852	1.00	N/A
9	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.37	109.	1.00	1.00	N/A
10	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.24	106.	1.00	1.00	0.000000
11	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.50	112.	0.942	1.00	N/A
12	STD 2	<input type="checkbox"/>	4.50	9	1.00	1.00	N/A

Élément	Description
1	Colonne d'indice Analyte Integration Quality
2	Colonne d'indice IS Integration Quality

À propos de l'algorithme *Scheduled MRM Pro* Algorithme

Scheduled MRM Pro est pris en charge dans les systèmes SCIEX 4500MD et Citrine.

Scheduled MRM Pro ajoute des fonctionnalités avancées à l'algorithme *Scheduled MRM*. Il améliore la fiabilité du temps de rétention des expériences en permettant la définition de fenêtres d'acquisition propres à chaque transition dans la méthode d'acquisition. Les utilisateurs peuvent régler les fenêtres en fonction des composés quand ceux-ci présentent de larges pics LC ou que leur temps de rétention varie beaucoup.

Par ailleurs, l'algorithme *Scheduled MRM Pro* inclut la fonctionnalité suivante :

- *Scheduled MRM Pro* prend également en charge l'extension automatique de la fenêtre lors de l'acquisition. Les utilisateurs ont la possibilité d'activer ou de désactiver Dynamic Window Extension (DWE). Les utilisateurs peuvent également définir un seuil DWE et un seuil de déclenchement différent pour chaque transition. Par exemple, un seuil de déclenchement bas et un seuil DWE élevé sont plus susceptibles de déclencher une transition secondaire, mais évitent une extension de fenêtre dynamique inutile. Lorsque DWE est activé, si le temps de rétention d'un composé se révèle être plus long que prévu et que l'intensité n'a pas chuté en dessous du seuil d'extension prévu une fois son temps de rétention écoulé, l'algorithme *Scheduled MRM Pro* prolonge automatiquement la fenêtre de détection jusqu'à ce que l'intensité redescende en dessous du seuil. La transition est encore surveillée pendant la moitié de la fenêtre de détection spécifiée par la méthode. La fenêtre de détection étendue équivaut au double de la durée de la fenêtre d'acquisition spécifiée. Cette fonctionnalité permet l'utilisation de fenêtres réduites tout en

garantissant la capture de chaque pic dans son intégralité. Elle améliore également la solidité de la méthode, qui s'adapte à la plupart des variations de temps de rétention.

- L'utilisateur peut étiqueter plusieurs transitions pour un analyte comme principales ou secondaires. Les transitions principales sont suivies sur toute la fenêtre d'acquisition, tandis que le suivi des transitions secondaires n'est assuré qu'une fois que les transitions principales qui y sont associées ont franchi leur seuil de déclenchement. La durée des cycles est ainsi minimisée, car le nombre de transitions MRM à étudier est moindre. Le temps d'acquisition est consacré au recueil de données relatives aux analytes présents dans un échantillon, et non aux analytes qui en sont absents.
- L'algorithme est également compatible avec l'utilisation de la pondération du temps de résidence. La valeur Dwell weight permet d'exprimer le temps de résidence requis de manière relative. Pour ce faire, il suffit d'attribuer une valeur faible aux composés très abondants et une valeur élevée aux composés moins abondants. Lors de l'analyse, le temps de résidence est déterminé en fonction de ce poids.
- L'algorithme prend en charge Dynamic Background Subtraction (DBS) pour déclencher des transitions secondaires. L'option DBS n'est disponible que pour les autres méthodes qu'IDA et les expériences qui utilisent l'algorithme *Scheduled* MRM. Pour ces méthodes ou ces expériences, lorsque l'option DBS est activée, elle est appliquée aux transitions principales afin de déclencher les transitions secondaires dans cette expérience.

Pour les méthodes IDA qui utilisent l'algorithme *Scheduled* MRM pour les balayages d'exploration, si l'option DBS est activée dans les critères IDA, elle est appliquée aux transitions principales afin de déclencher les transitions secondaires et les balayages dépendants.

Lorsque les DWE et DBS sont activés pour l'expérience de l'algorithme *Scheduled* MRM, le déclenchement de la DWE dépend des données non traitées sans le DBS des transitions principales.

Lorsque le DBS est activé pour une expérience qui utilise l'algorithme *Scheduled* MRM, les transitions secondaires, une fois déclenchées, continuent l'acquisition jusqu'à ce que leurs transitions principales les arrêtent.

Créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM Pro

L'algorithme *Scheduled* MRM Pro n'est pris en charge que dans les systèmes SCIEX 4500MD et Citrine.

Utilisez cette procédure pour créer une méthode avec l'algorithme *Scheduled* MRM Pro dans la fenêtre Method Editor. Il est aussi possible de créer ce type de méthode dans la fenêtre Manual Tune.

1. Activez un profil matériel pour le spectromètre de masse pris en charge. Pour les systèmes Citrine, le cas échéant, , sélectionnez un mode de masse différent dans le profil matériel, puis activez le profil matériel.

Tutoriel de l'algorithme *Scheduled MRM*

- Ouvrez une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled MRM* existante ou créez-en une en suivant la procédure dans la section [Créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled MRM*](#).
- Sélectionnez l'option **Advanced** dans la section **Scheduled MRM** de l'onglet MS dans Acquisition Method Editor. Ceci active les fonctionnalités de l'algorithme *Scheduled MRM Pro*.

Cinq colonnes sont ajoutées au tableau des plages de masses, et les cases à cocher **Dynamic Window Extension** et **Dynamic Background Subtraction** sont affichées dans la section **Scheduled MRM**.

Illustration 14 : Paramètres de l'algorithme *Scheduled MRM Pro*

The screenshot shows the 'Advanced MS' tab in the 'Scheduled MRM' section. It includes settings for 'Experiment', 'Scan type', 'Polarity', 'MRM detection window', and 'Target for sMRM'. A 'Period Summary' box shows 'Duration: 5.000 (min)', 'Delay Time: 0 (sec)', 'Cycles: 300', and 'Cycle: 1.0000 (sec)'. Below these is a table with columns: Q1 Mass (Da), Q3 Mass (Da), Retention Time (min), ID, Group, MRM Window (sec), Primary / Secondary, Trigger Threshold, and Dwell Weight. The table has one row with values 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9. The 'Group' column is highlighted with a red circle and labeled 1. The 'MRM Window (sec)' column is highlighted with a red circle and labeled 2. The 'Primary / Secondary' column is highlighted with a red circle and labeled 3. The 'Trigger Threshold' column is highlighted with a red circle and labeled 4. The 'Dwell Weight' column is highlighted with a red circle and labeled 5. The 'Dynamic Window Extension' checkbox is highlighted with a red circle and labeled 6. The 'Dynamic Background Subtraction' checkbox is highlighted with a red circle and labeled 7.

Élément	Description
1	Group column : utilisez cette colonne pour regrouper les différentes transitions d'un composé. Attribuez le même nom à toutes les transitions d'un même groupe.
2	Champ MRM Window (sec) : indiquez la durée du suivi de la transition, dont la période centrale est le temps de rétention. Les valeurs attribuées aux transitions dans ce champ remplacent la valeur par défaut dans le champ MRM detection window de la fenêtre de la méthode. La colonne MRM Window joue un rôle semblable à celui du champ MRM detection window, mais la valeur saisie ne concerne que la transition qui lui correspond. Si elle est vide, la valeur utilisée est celle du champ MRM detection window .
3	Primary/Secondary : utilisez cette colonne pour indiquer si une transition est principale ou secondaire. Les transitions principales sont suivies pendant toute la fenêtre d'acquisition. Les transitions secondaires sont suivies pendant la fenêtre d'acquisition, mais tant que les transitions principales sont au-dessus de leur seuil respectif. Dans un groupe, attribuez le 1 aux transitions principales et le chiffre 2 aux transitions secondaires. Un groupe peut contenir plusieurs transitions principales et plusieurs transitions secondaires.

Élément	Description
4	<p>Trigger Threshold : indiquez le niveau d'intensité qui déclenche les transitions secondaires. Dans les méthodes IDA, l'option Trigger Threshold sert également à déclencher des balayages dépendants.</p> <p>Cette valeur peut être égale ou supérieure à 0.</p>
5	<p>Dwell Weight : utilisez cette colonne pour indiquer si une transition spécifique doit avoir un temps de balayage (temps de résidence) plus long que les autres transitions. La valeur par défaut est « 1 ».</p> <p>La valeur Dwell Weight permet d'exprimer le temps de résidence de manière relative. Pour ce faire, il suffit d'attribuer une valeur faible (< 1) aux composés très abondants et une valeur élevée (> 1) aux composés moins abondants. La fourchette pour le paramètre Dwell Weight va de 0,1 à 10. Lors de l'analyse, le temps de résidence est déterminé en fonction de ce poids.</p> <hr/> <p>Remarque : Le poids de résidence total équivaut à la somme des poids de résidence de toutes les transitions principales plus la moitié de la somme des poids de résidence de toutes les transitions secondaires du cycle considéré. Toutefois, l'affectation du temps de résidence utilise toujours le poids de résidence individuel de la transition, divisé par le poids de résidence total. Exemple : le poids de résidence est égal à 1 pour les transitions principale et secondaire d'une méthode qui n'en comprend que deux avec le même temps de rétention. Le poids de résidence total est de $1 + 0,5 = 1,5$. Le temps de résidence des deux transitions correspond au temps de résidence total qui peut être affecté à toutes les transitions simultanées, multiplié par $1/1,5$. Ce temps de résidence total est calculé après soustraction des temps de pause et des temps de changement de polarité le cas échéant, puis corrigé d'un facteur de 1,2. Pour tous les poids de résidence vides, utilisez la valeur par défaut 1.</p> <hr/> <p>Remarque : Lorsque le temps de résidence calculé varie pendant la fenêtre du temps de rétention des cycles d'une transition, c'est le temps de résidence moyen de tous les cycles qui sera utilisé pour l'acquisition.</p>

Élément	Description
6	Dynamic Window Extension : cochez cette case pour utiliser la fonction Dynamic Window Extension dans la méthode d'acquisition <i>Scheduled</i> MRM Pro. Si la fonction Dynamic Window Extension, n'est pas utilisée, décochez la case Dynamic Window Extension . Lorsque cette case est cochée, la colonne Extension Threshold est ajoutée au tableau des plages de masses. Si cette case est cochée et si l'intensité des pics d'une transition est supérieure au seuil d'extension à la fin du temps de rétention, l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM Pro étend automatiquement la fenêtre de détection jusqu'à ce que l'intensité passe en dessous du seuil d'extension et le suivi de la transition continue pendant la moitié de la fenêtre de détection spécifiée dans la méthode. La fenêtre d'acquisition étendue peut atteindre le double de la durée de la fenêtre de détection spécifiée dans la méthode.
7	Dynamic Background Subtraction : cochez cette case pour utiliser la soustraction dynamique du bruit de fond dans la méthode d'acquisition <i>Scheduled</i> MRM Pro. Dans une méthode IDA déclenchée par l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM Pro, la case à cocher Dynamic Background Subtraction n'est pas disponible dans l'expérience utilisant l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM Pro algorithm si elle est activée dans les critères IDA. Dans la section des critères IDA, la case à cocher Dynamic Background Subtraction sert à déclencher des transitions secondaires et des balayages dépendants.
8	Extension Threshold : spécifiez le seuil de l'extension de fenêtre dynamique dans la méthode d'acquisition <i>Scheduled</i> MRM Pro. Cette valeur peut être égale ou supérieure à zéro. Consultez la figure Illustration 15 .

Illustration 15 : Dynamic Window Extension sélectionné - Colonne Extension Threshold

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window. Under 'Scheduled MRM', the 'Dynamic Window Extension' checkbox is checked. The 'Extension Threshold' column is visible in the table below.

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Retention Time(min)	ID	Group	MRM Window (sec)	Primary / Secondary	Trigger Threshold	Extension Threshold	Dwell Weight
1									8	

- Renseignez le tableau des plages de masses pour chaque transition MRM en fournissant les valeurs adéquates dans les cinq colonnes de l'algorithme

Scheduled MRM Pro. Utilisez les règles suivantes et les informations dans la figure [Illustration 14](#).

- Toutes les transitions d'un même groupe doivent être répertoriées les unes à la suite des autres dans le tableau des plages de masses.
 - Toutes les transitions du même groupe doivent avoir le même temps de rétention dans la colonne **Retention Time (min)**.
 - Toutes les transitions du même groupe doivent avoir la même durée dans la colonne **MRM Window (sec)**.
 - Toutes les transitions principales du même groupe doivent être entrées avant les transitions secondaires du groupe. Si un groupe ne contient qu'une transition, cette transition doit être une transition principale.
5. Enregistrez la méthode d'acquisition.
La méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM Pro ne peut contenir qu'une période et jusqu'à deux expériences *Scheduled* MRM.

Conséquences de l'algorithme *Scheduled* MRM Pro sur les IDA

Si un balayage d'exploration IDA (Information Dependent Acquisition) est effectué à l'aide de l'algorithme *Scheduled* MRM Pro, un balayage dépendant dans la méthode IDA n'est effectué que lorsque les intensités de toutes les transitions MRM d'un groupe sont supérieures aux seuils de déclenchement. La durée du cycle est optimisée, car le risque de déclenchement accidentel de balayages dépendants est évité.

Créer une méthode d'acquisition IDA avec l'algorithme *Scheduled* MRM Pro

1. Créez une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM Pro, en utilisant la procédure dans la section [Créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM Pro](#).
2. Le cas échéant, pour ajouter une expérience de balayage ER, ajoutez-la avant les critères IDA.
3. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'icône **Period**, puis cliquez sur **Add IDA Criteria Level**.
4. Spécifiez les paramètres des critères IDA. Consultez le document *Tutoriel pour l'acquisition dépendante des informations*.
5. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'icône **Period**, puis cliquez sur **Add experiment**.
6. Dans l'onglet MS, dans la liste **Scan type**, sélectionnez un type de balayage dépendant. Pour cet exemple, sélectionnez **Product Ion (MS2)** ou **Enhanced Product Ion (EPI)**.

Remarque : Pour tous les types de balayages dépendants, le champ **Product Of** doit avoir la valeur 30 Da.

7. Le cas échéant, copiez ou ajoutez d'autres expériences dépendantes.
Cela dépend des critères IDA, de X à Y ions les plus intenses.
8. Précisez les paramètres de l'expérience.
9. Enregistrez la méthode d'acquisition dans le projet à partir duquel l'acquisition sera exécutée.

Remarque : Lors d'une acquisition de données avec une méthode IDA utilisant l'algorithme *Scheduled* MRM Pro, c'est le seuil de chaque transition MRM de la méthode qui est utilisé, plutôt que le seuil IDA.

Remarque : Pour optimiser une méthode *Scheduled* MRM en fonction du temps de maintien, de la concurrence et de la durée de cycle projetée, installez et utilisez le script sMRM Calculator. Pour plus d'informations, consultez le *Guide de l'utilisateur de scripts*.

Afficher les paramètres de l'algorithme *Scheduled* MRM Pro dans le volet File Information

Une fois l'acquisition d'un échantillon terminée, les informations du fichier de données acquis avec la méthode de l'algorithme *Scheduled* MRM affiche l'ensemble des paramètres définis par l'utilisateur, pour chaque transition. Ces paramètres incluent les suivants :

- **MRM** (Scheduled ou pas)
- **Q1**
- **Q3**
- **Retention Time**
- **ID**
- **Group**
- **MRM Window (sec)**
- **Primary/Secondary**
- **Trigger Threshold**
- **Extension Threshold** (si la case **Dynamic Window Extension** a été cochée)
- **Dwell Weight**
- **Q1 Resolution**
- **Q3 Resolution** (si la case **Q1/Q3 Resolution** a été cochée)

Les paramètres **Dynamic Background Subtraction**, **Dynamic Window Extension**, **Dwell Time**, **Target Scan Time** et **Target Cycle Time** sont également affichés.


1. Dans la barre de **Navigation**, sous **Explore**, double-cliquez sur **Open Data File**. La boîte de dialogue **Select Sample** s'ouvre.
2. Dans le volet **Data Files**, sélectionnez le fichier wiff.
3. Dans le volet **Samples**, sélectionnez l'échantillon.
4. Cliquez sur **OK**. Les données d'échantillon acquises s'affichent.
5. Pour afficher les informations sur le fichier, cliquez sur **Show File Info**  sur la barre d'outils. Le volet des **File information** s'ouvre sous le graphique.
6. Développez la période souhaitée dans la partie gauche du volet **File Information**.
7. Cliquez sur le lien de l'expérience de la période requise. Les valeurs correspondant aux paramètres de l'algorithme *Scheduled* MRM Pro pour chaque transition sont enregistrées sous la section **Period Experiment**, située dans le volet droit.

Illustration 16 : Paramètres de l'algorithme *Scheduled* MRM Pro dans le volet File Information

File Info

Log Info

Acquisition Info

Quant. Info

Period 1

Period 1 Experiment 1:

Parameter Table

Resolution tables

Calibration tables

Instrument Parameters

Keyed Text

Period 1:

Scans in Period: 120

Min. Dwell Time: 3 ms

Max. Dwell Time: 250 ms

Relative Start Time: 0.00 msec

Experiments in Period: 1

Use target Cycle Time: No

Target Cycle Time: N/A

Period 1 Experiment 1:

Scan Type: MRM (MRM)

Scheduled MRM: Yes

Polarity: Positive

Scan Mode: N/A

Ion Source: Turbo Spray

Dynamic Window Extension: Yes

Dynamic Background Subtraction: Yes

sMRM Q1Q3 Resolution: Yes

MRM detection window: 60 sec

Target Scan Time: 1.0000 sec

Resolution Q1: N/A

Resolution Q3: N/A

Intensity Thres.: 0.00 cps

Settling Time: 0.0000 msec

MR Pause: 5.0070 msec

MCA: No

Step Size: 0.00 Da

Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Time (min)	sMRM Dwell (msec)	Param	Start	Stop	ID
609.200	195.000	1.00	250.000				

Window (sec)	Primary / Secondary	Trigger Threshold	Extension Threshold	Dwell Weight	Group	Q1 Resolution	Q3 Resolution
0.5	1	1	10000000	1.0	A	High	Unit

Créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM Basic ou Pro, avec *Scheduled* Ionization

1. Créez une méthode d'acquisition avec l'algorithme *Scheduled* MRM Basic ou Pro.
2. Sélectionnez des expériences dans la méthode, puis cochez la case **Scheduled Ionization**.

3. Dans le groupe **Scheduled Ionization**, renseignez les champs **Start Time** et **Stop Time**. Vérifiez que les pics concernés s'éluent entre **Start Time** et **Stop Time**. Si la case **Dynamic Window Extension** est aussi cochée, vérifiez que l'heure indiquée dans **Stop Time** est postérieure à la dernière heure de rétention dans le tableau de masses plus 1,5 fois la fenêtre de détection pour cette transition. Vérifiez également que le paramètre **Synchronization Mode** de la méthode d'acquisition et la méthode LC sont configurés comme lorsque **Scheduled Ionization** n'est pas utilisé.

Remarque : Scheduled Ionization n'est disponible que dans les méthodes d'acquisition à une période.

La figure suivante montre que le paramètre **LC Synchronization Mode** est utilisé et que la méthode LC a une durée de 7 minutes. Tous les pics concernés s'éluent après 0,5 minute et avant 5,0 minutes. Comme la dernière fenêtre d'acquisition des pics élués peut être étendue d'une fenêtre de détection complète, la durée 5,5 minutes est utilisée dans **Stop Time**. Lorsque **Scheduled Ionization** est utilisé, une tension **IonSpray** de 0 est appliquée avant le **Start Time** et après le **Stop Time**. La tension **IonSpray** définie dans la méthode MS n'est appliquée qu'entre **Start Time** et **Stop Time**. La fonctionnalité **Scheduled Ionization** peut réduire le disque de contamination de l'instrument et, donc, le temps d'immobilisation du spectromètre de masse. Pour plus d'informations sur **Scheduled Ionization**, consultez le *Guide de l'utilisateur avancé*.

Illustration 17 : Algorithme *Scheduled MRM Pro* avec *Scheduled Ionization*

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window. On the left, the 'Acquisition method' tree is visible. The main window is titled 'MS Advanced MS' and contains the following settings:

- Experiment:** 1
- Scan type:** MRM (MRM)
- Polarity:** Positive
- MRM detection window:** 25 (sec)
- Target for sMRM:** Target Cycle Time (across sMRM expts)
- Target Scan Time (per sMRM expt):** 0.3 (sec)
- Scheduled MRM:** Enabled, Basic, Advanced (selected)
- Q1/Q3 Resolution:** [checked]
- Dynamic Window Extension:** [checked]
- Dynamic Background Subtraction:** [unchecked]
- Period Summary:**
 - Duration: 5.000 (min)
 - Delay Time: 0 (sec)
 - Cycles: 1000
 - Cycle: 0.3000 (sec)
- Scheduled Ionization:** [checked]
 - Start Time: 0.5 (min)
 - Stop Time: 5.5 (min)

The table below lists the target masses and their retention times:

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Retention Time (min)	ID	Group	MRM Window (sec)
1.	301.100	165.000	1.79	6-MAM-d3 IS		
2.	141.100	93.000	1.70	Amphetamine-d5		
3.	293.100	171.200	2.17	Benzoylgonine		
4.	472.300	400.200	2.77	Buprenorphine-d		
5.	267.100	180.000	2.99	Carisoprodol-d7 I		
6.	306.200	152.200	1.60	Codaine-d6		
7.	342.300	105.100	2.59	Fentanyl-d5		
8.	306.200	202.100	1.85	Hydrocodone-d6		
9.	292.100	185.100	1.20	Hydromorphone-		
10.	363.100	155.100	4.44	JNH 018 4-OH p		
11.	377.200	155.100	4.42	JNH 019 6-OH h		
12.	284.100	134.100	2.28	MDPV-d8 IS		
13.	252.200	224.100	2.26	Mespridine-d6		
14.	181.100	148.100	1.98	Mephedrone-D3 I		
15.	226.100	165.100	2.33	Mesprobamate-d7		

4. Enregistrez la méthode d'acquisition.

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.
