

Analyst MD 软件

Scheduled MRM 算法教程



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。

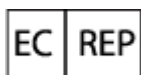
Rx only.

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。

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)。

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

Scheduled MRM 算法教程	4
目的.....	4
关于 Scheduled MRM 算法.....	4
相关文档.....	5
前提条件.....	6
创建一个 csv 或 txt 文件.....	6
创建 Scheduled MRM 算法采集方法.....	6
使用两个 Scheduled MRM 算法实验创建采集方法.....	12
生成提取离子色谱图.....	13
查看 MRM 离子对.....	14
创建定量方法.....	15
检查结果表.....	16
关于 Scheduled MRM Pro 算法.....	19
创建 Scheduled MRM Pro 算法采集方法.....	20
Scheduled MRM Pro 算法在 IDA 中的影响.....	22
创建 IDA Scheduled MRM Pro 算法采集方法.....	23
在 File Info 中查看 Scheduled MRM Pro 算法参数.....	23
使用 Scheduled Ionization 功能创建 Scheduled MRM Basic 或 Pro 算法采集方法	24
 联系我们	 26
客户培训.....	26
在线学习中心.....	26
SCIEX 支持.....	26
网络安全.....	26
文档.....	26

Scheduled MRM 算法教程

目的

用户将学会如何：

- 创建方法来监测 *Scheduled* MRM 算法离子对。
- 在 XIC（提取离子色谱图）中查看 *Scheduled* MRM 算法离子对。
- 通过创建定量方法和检查结果表来分析定量数据。
- 创建 *Scheduled* MRM Pro 算法采集方法。
- 创建 IDA *Scheduled* MRM Pro 算法采集方法。

关于 *Scheduled* MRM 算法

Scheduled MRM 算法有助于根据创建采集方法时所提供的多反应监测 (MRM) 离子对、保留时间和化合物 ID，采集数以百计的化合物。*Scheduled* MRM 算法的功能减少了多时段实验的需求。它还可用作 IDA（信息关联采集）方法中的全谱扫描类型。

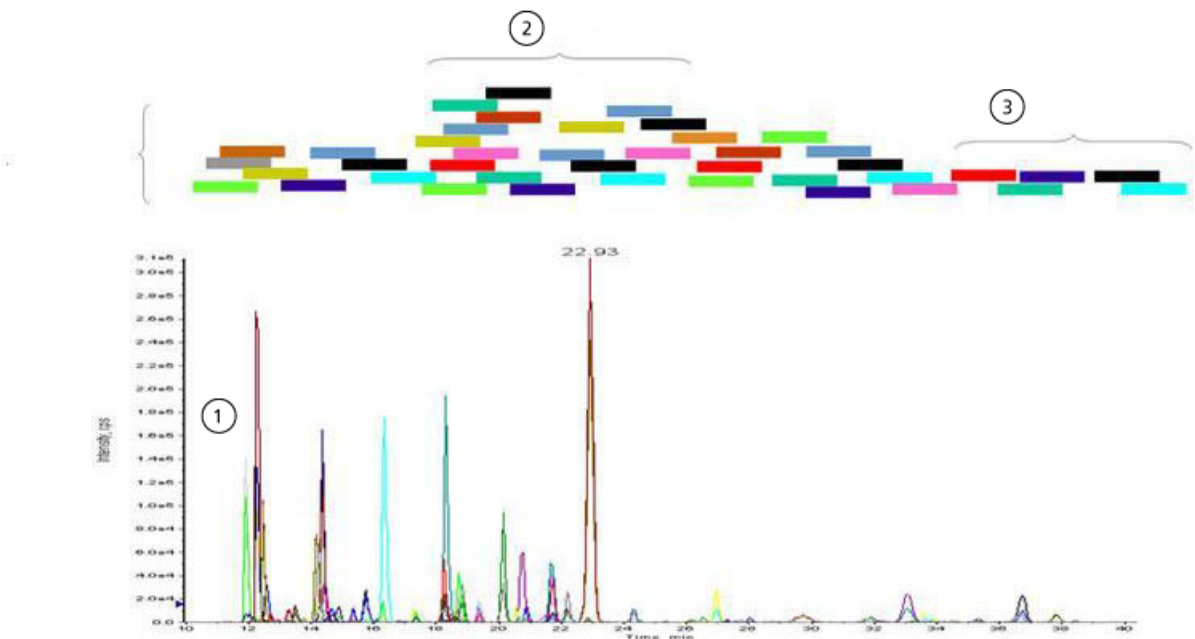
该算法能够为色谱峰区间提供尽量多的数据点，从而提高峰的检测效果和可复制性。借助此功能，您还可以通过在 **Result Table** 中显示化合物 ID、分析物 **Integration Quality** 索引和 IS（内标）**Integration Quality** 索引列来查看具有许多 MRM 离子对的数据文件。对于 SCIEX 3200MD 系统，最多可有 1000 个离子对获得 *Scheduled* MRM 算法支持。对于 SCIEX 4500MD 和 Citrine 系统，最多可有 4000 个离子对获得 *Scheduled* MRM 算法支持。

注释: **Analyte Integration Quality Index** 列和 **IS Integration Quality Index** 列也可用于 **Results Table** 中的 MRM 数据。

下图显示了 *Scheduled* MRM 算法 LC 运行的示例。LC 分析期间同时监测到的 MRM 离子对的数量会有变化，但在不同加样之间是恒定的。

图 1 Scheduled MRM 算法 LC 运行的典型示例

Scheduled MRM Algorithm



项目	描述
1	监测到的 MRM 离子对。
2	监测到大量 MRM 离子对。
3	监测到少量 MRM 离子对。

要使用 **Scheduled MRM** 算法处理大量离子对，请使用 **MultiQuant MD** 软件进行数据处理。有关更多信息，请联系 **SCIEX** 销售代表。

相关文档

- 质谱仪的《系统用户指南》
- 《高级用户指南》
- 《脚本用户指南》（关于 **Create Quan Methods From Text Files** 脚本和 **Create Text File from Quan Method** 脚本的更多信息）
- 《信息相关采集教程》（关于使用 **IDA** 创建方法的更多信息）
- **Analyst** 帮助

前提条件

前提条件
用户应当能够： <ul style="list-style-type: none">• 创建采集方法• 提交批次• 创建一个定量方法，然后创建并检查结果表。 硬件配置文件中必须包括 以下设备： <ul style="list-style-type: none">• LC 泵• 自动进样器

创建一个 csv 或 txt 文件

或者，也可创建 *Scheduled MRM* 方法的离子对信息并存储在 csv 或 txt 文件中，并可将其导入到 *Scheduled MRM* 算法方法的质量范围表。使用以下标准创建 csv 或 txt 文件：

- 该文件不得包含任何标头、列标题或行标题。
- 文件中列的顺序和数量必须与质量范围表中列的顺序和数量一致。
- 对于 MRM 和 *Scheduled MRM* 算法方法，不得有空的数据元。对于 *Scheduled MRM Pro* 算法方法，**Window** 和 **Threshold** 列可留空以允许使用默认值。**Group** 列也可以留空。

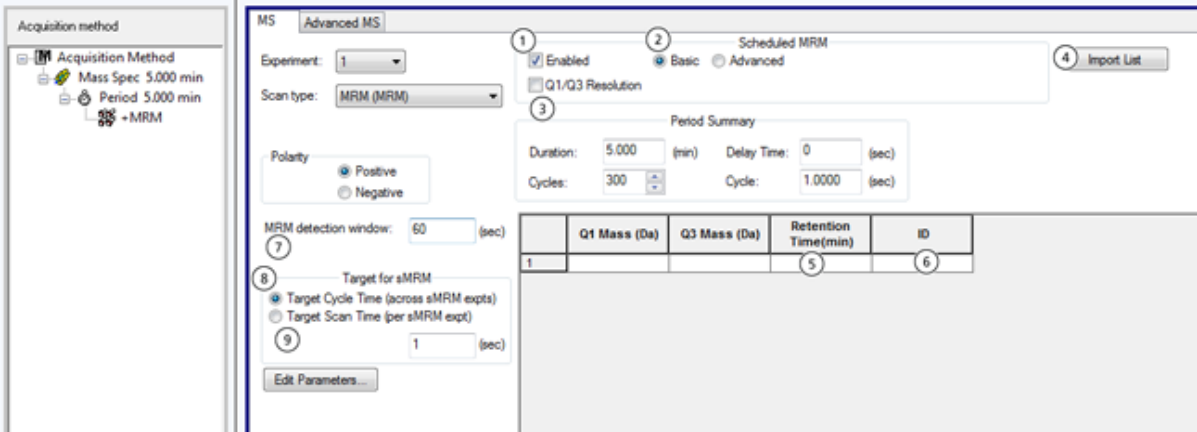
确保采用 csv 或 txt 扩展名保存该文件。

创建 *Scheduled MRM* 算法采集方法

注释：对于 SCIEX 4500MD 和 Citrine 系统，可通过 *Scheduled MRM* 算法采集最多 1,250 个计划外 MRM 离子对和 4,000 个 MRM 离子对。对于 SCIEX 3200MD 系统，可通过 *Scheduled MRM* 算法采集最多 300 个计划外 MRM 离子对和 1,000 个 MRM 离子对。

1. 在导航栏的 **Acquire** 项下双击 **Build Acquisition Method**，然后在 Acquisition Method 窗格中选择 **Mass Spec** 图标。
2. 确保选中的 **Scan Type** 是 **MRM**，然后选中 **Scheduled MRM** 组中的 **Enabled** 复选框。要为 SCIEX 4500MD 和 Citrine 系统创建方法，请参阅下图中的功能：图 2。要为 SCIEX 3200MD 系统创建方法，请参阅下图中的功能：图 3。

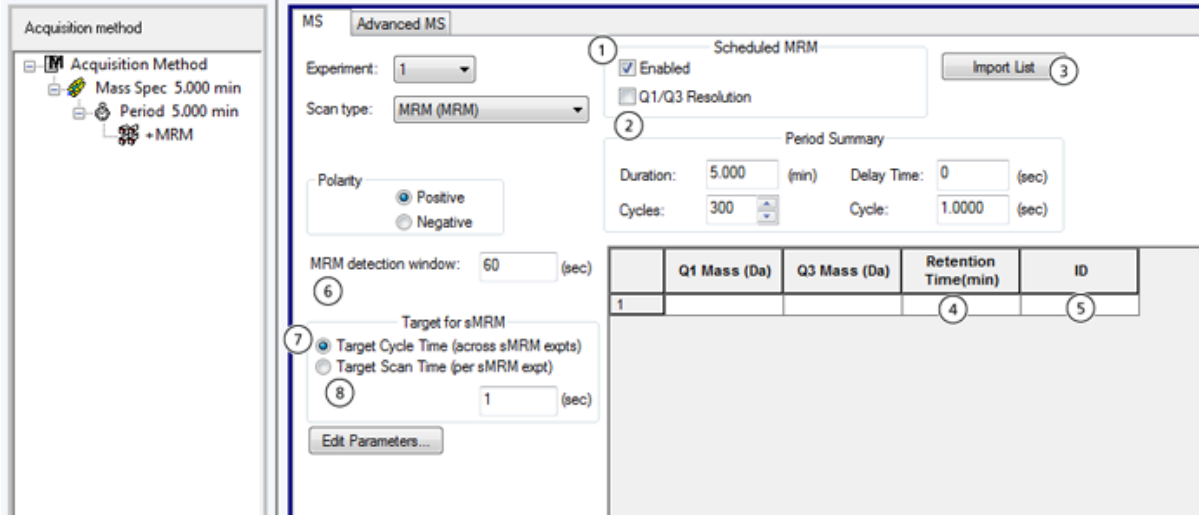
图 2 Scheduled MRM 算法软件功能（SCIEX 4500MD 和 Citrine 系统）



项目	描述
1	Enabled 组中的 Scheduled MRM 复选框：选中可启用基本和高级 <i>Scheduled MRM</i> 算法功能。
2	Basic 选项：选择以启用 <i>Scheduled MRM</i> 算法功能。 Basic 是预设选项。
3	Q1/Q3 Resolution 复选框：选中此复选框可对每个离子对应用不同的 Q1 和 Q3 分辨率设置。选中此选项时，会在质量范围表中添加 Q1 Resolution 列和 Q3 Resolution 列。
4	Import List 按钮：单击后从 txt 或 csv 文件导入 MRM 离子对、时间、ID 和化合物关联参数。
5	Retention Time (min) 列：键入相应 MRM 离子对的预计保留时间（以分钟为单位）。若为 MRM 方法，则该列显示的是驻留时间（毫秒）。
6	ID 列：（可选）键入关注离子对的化合物标识。
7	MRM detection window (sec) 字段：键入每一个离子对的保留时间周围的检测时间数。
8	Target Cycle Time (across sMRM experiments) 选项：选中可指定目标周期时间，并将其用于整个时段或方法中的所有 <i>Scheduled MRM</i> 算法实验。如果方法中有两个 <i>Scheduled MRM</i> 算法实验，选择或清除一个 <i>Scheduled MRM</i> 算法实验中的该选项会将同样的设置应用于另一个算法 <i>Scheduled MRM</i> 实验。在每个时段或方法中允许最多两个 <i>Scheduled MRM</i> 算法实验。目标周期时间是可以调节的，从而可以在所有周期中使用特定的周期时间，以实现一个峰中数据点的更均匀分布，而不管周期内并发离子对之间是否存在极性转换。 Target Cycle Time 是预设设置。

项目	描述
9	Target Scan Time (per sMRM experiment) (sec) 字段：选中可为每个周期中的该实验指定所使用的目标时间量。本软件将使每个周期中该实验的总扫描时间保持接近目标时间，除非最小驻留时间或最大驻留时间应用到部分并发离子对。目标扫描时间是可以调节的，从而可以锁定整个 LC 峰具体的数据点数。

图 3 Scheduled MRM 算法软件功能（SCIEX 3200MD 系统）



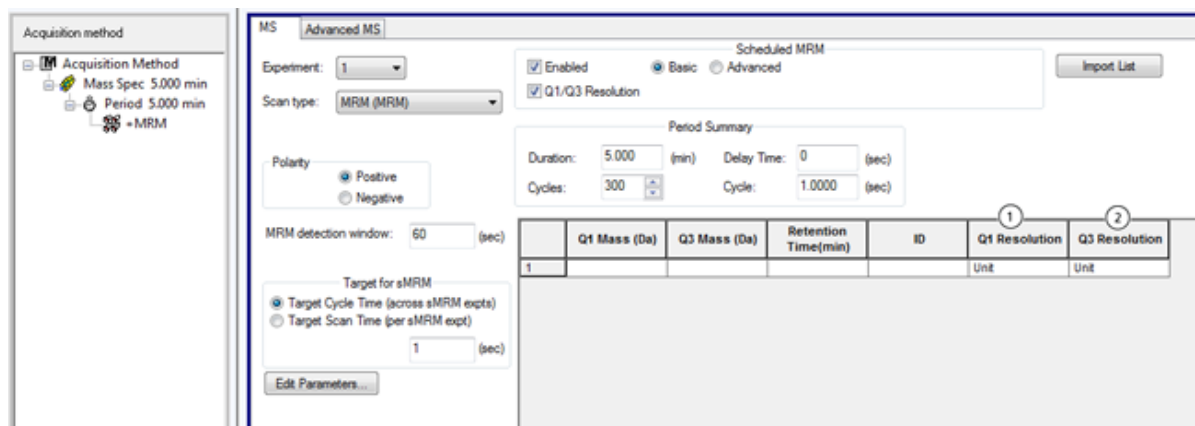
项目	描述
1	Scheduled MRM 组中的 Enabled 复选框 ：选中可启用 Scheduled MRM 算法功能。
2	Q1/Q3 Resolution 复选框 ：选中此复选框可对每个离子对应用不同的 Q1 和 Q3 分辨率设置。选中此选项时，会在质量范围表中添加 Q1 Resolution 列和 Q3 Resolution 列。
3	Import List 按钮 ：单击后从 txt 或 csv 文件导入 MRM 离子对、时间、ID 和化合物关联参数。
4	Retention Time (min) 列 ：键入相应 MRM 离子对的预计保留时间（以分钟为单位）。若为 MRM 方法，则该列显示的是驻留时间（毫秒）。
5	ID 列 ：（可选）键入关注离子对的化合物标识。
6	MRM detection window (sec) 字段 ：键入每一个离子对的保留时间周围的检测时间数。

项目	描述
7	Target Cycle Time (across sMRM experiments) 选项：选中可指定目标周期时间，并将其用于整个时段或方法中的所有 Scheduled MRM 算法实验。如果方法中有两个 Scheduled MRM 算法实验，选择或清除一个 Scheduled MRM 算法实验中的该选项会将同样的设置应用于另一个算法 Scheduled MRM 实验。在每个时段或方法中允许最多两个 Scheduled MRM 算法实验。目标周期时间是可以调节的，从而可以在所有周期中使用特定的周期时间，以实现一个峰中数据点的更均匀分布，而不管周期内并发离子对之间是否存在极性转换。 Target Cycle Time 是预设设置。
8	Target Scan Time (per sMRM experiment) (sec) 字段：选中可为每个周期中的该实验指定所使用的目标时间量。本软件将使每个周期中该实验的总扫描时间保持接近目标时间，除非最小驻留时间或最大驻留时间应用到部分并发离子对。目标扫描时间是可以调节的，从而可以锁定整个 LC 峰具体的数据点数。

3. 要对每个离子对使用不同的 Q1 和 Q3 分辨率设置，在 Scheduled MRM 组中单击 **Q1/Q3 Resolution**。

质量范围表中将新增两个列：Q1 Resolution 和 Q3 Resolution。

图 4 为 SCIEX 4500MD 和 Citrine 系统选择的 Q1/Q3 分辨率选项



项目	描述
1	Q1 Resolution 列：Q1 扫描中用来分离间距紧密成分的模式。这是第一个四极杆的分辨能力。选项包括 High、Unit、Low 或 Open。
2	Q3 Resolution 列：Q3 扫描中用来分离间距紧密成分的模式。这是第三个四极杆的分辨能力。选项包括 High、Unit、Low 或 Open。

Advanced MS 选项卡上的 **Resolution Q1** 选项和 **Resolution Q3** 选项不可用。

如果在 Tune Method Editor 中选中 **Q1/Q3 Resolution** 复选框，则 Resolution 选项卡上的 **Q1 Resolution** 选项和 **Q3 Resolution** 选项不可用。

4. 用下面的一种方法完成所关注的每一 MRM 离子对的质量范围表：

- 手动键入 MRM 离子对：键入所关注的每一离子对的 Q1 质量、Q3 质量、保留时间和化合物标识。对于每个离子对，选择 **Q1 Resolution** 和 **Q3 Resolution** 列中的值。单击右键，添加所需要的化合物条件性参数。质量范围表中最多可添加四种化合物条件性参数。
- 导入 MRM 离子对：单击 **Import List**，然后在 Open 对话框中选择包含 MRM 离子对信息的逗号分隔值 (csv) 或制表符分隔值 (txt) 文件。选择文件后，单击 **Open**。文件内容显示在质量范围表中。有关创建文件的更多信息，请参阅以下章节：[创建一个 csv 或 txt 文件](#)。
- 复制和粘贴 MRM 离子对：从 csv 或 txt 文件中选择含有所需信息的单元格，然后按 **Ctrl+C**。粘贴信息行时，选择质量范围表中的第一个 **Q1 Mass (Da)** 单元格，然后按 **Ctrl+V**。

注释：导入或复制粘贴之前，一定要确认 csv 或 txt 文件中的数据列与软件质量范围表中的一致。源文件和目标表中的列数和顺序必须相同。根据需要在源文件中添加、删除列或重新排序。若要向质量范围表中添加一行，右键单击质量范围表，然后选择一个化合物关联参数。对于化合物关联参数，其值必须处于所选极性的允许范围内。

5. 在 **MRM detection window (sec)** 字段中，键入每一个离子对的保留时间周围的检测时间数。该窗口应当反映分析物色谱峰的预计宽度和色谱图保留时间的变动，从而使整个 MRM 峰始终处于窗口内。

以 LC 色谱图为指导，选择最佳的 **Scheduled MRM** 算法参数。确定典型峰在基线处的宽度，然后参考下表中的推荐设置。在确定 MRM 检测窗口时确保考虑了保留时间的稳定性。

表 1 **Scheduled MRM** 算法参数的推荐设置

基线处的峰宽度	MRM 检测窗口	目标扫描时间或目标周期时间
30 秒	90 秒	2 秒
15 秒	60 秒	1 秒
10 秒	30 秒	0.5 秒

对于 **Scheduled MRM** 算法，每个周期监测的分析物数量根据分析物的保留时间窗口调整。为了将每种分析物及其信噪比所使用的驻留时间最大化，我们建议使用一个尽量小但合理的保留时间窗，以便能够捕获到所要找的峰。以 60 秒作为起点值是一个较好的选择。此值足以使色谱图产生一个 15 秒宽度的峰，并且使峰左右两侧都能有 20 秒的保留时间偏移。

例如，如果预计保留时间是 4.5 分钟，则键入 60 秒将设置一个从 4 分钟到 5 分钟的检测窗口。

注释：如果 **Retention Time** 设置为 0，软件将会在整个运行时间内监测该离子对。

6. 根据需要执行以下操作之一：

- 如果需要，将 **Target Cycle Time (across sMRM expts)** 选项保持选中，然后在下图所示的框中键入目标周期时间，单位为秒。如果选择了 **Target Cycle Time** 选项，则软件会尝试对每个周期应用相同的周期时间。但是，用于每个周期的实际周期时间主要根据该周期中的所有离子对的驻留时间之和而变化。

软件使用目标周期时间、极性转换时间（如果有）和所有暂停时间来计算周期内每个离子对的驻留时间。分配给离子对的驻留时间取决于为检测窗口中的每个周期计算出的驻留时间、计算的停留时间是小于某些周期的最小停留时间还是大于最大停留时间，及它与检测窗口中其他离子对的重叠程度。如果计算出的驻留时间由于高并发性而小于最小驻留时间，或者由于低并发性而大于最大驻留时间，则在计算的下一步中，将对该周期的该离子对使用最小驻留时间或最大驻留时间。此离子对的所有周期的驻留时间的平均值是分配给此离子对的最终驻留时间。

图 5 Target Cycle Time (across sMRM expts)

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window. Under the 'Target for sMRM' section, the 'Target Cycle Time (across sMRM expts)' radio button is selected and highlighted with a red box. Below it, the value '1' is entered in the text field, 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', and 'Cycle: 1.0000 (sec)'. A table on the right lists parameters like Q1 Mass, Q3 Mass, Retention Time, ID, Q1 Resolution, and Q3 Resolution.

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

- 如果需要，单击 **Target Scan Time (per sMRM expt)**，然后以秒为单位键入每个周期的实验的目标时长，如下图中所示。该参数可以帮助确定整个色谱峰的数据点数。

图 6 Target Scan Time (per sMRM expt)

MS Advanced MS

Experiment: 1

Scan type: MRM (MRM)

Polarity: ☒ Positive ☐ Negative

MRM detection window: 60 (sec)

Target for sMRM

☒ Target Cycle Time (across sMRM expts)

☐ Target Scan Time (per sMRM expt)

1 (sec)

Edit Parameters...

Scheduled MRM

☒ Enabled ☒ Basic ☐ Advanced

☒ Q1/Q3 Resolution

Import List

Period Summary

Duration: 5.000 (min) Delay Time: 0 (sec)

Cycles: 300 Cycle: 1.0000 (sec)

Scheduled Ionization

Start Time 0 (min) Stop Time 0 (min)

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

使用色谱峰的宽度为参照标准来设置该值。对于峰宽为 15 秒的色谱图，以 1 秒作为起点值是一个较好的选择。在这种情况下，当该检测窗口内没有最小驻留或最大驻留时间应用到任何并发离子对时，1 秒的目标扫描时间将在 15 秒的峰上产生大约 15 个数据点。

7. 在采集方法的其余字段中提供所需要的值。
8. 将采集方法保存在运行采集的项目中。

注释: *Scheduled MRM* 算法字段在 Tune Method Editor 中也可用。

使用两个 **Scheduled MRM** 算法实验创建采集方法

使用此程序创建支持极性转换的方法。

1. 使用以下章节中的步骤创建 **Scheduled MRM** 算法采集方法: [创建 Scheduled MRM 算法采集方法](#)。
2. 在 Acquisition method 窗格中, 右键单击 **Period**, 然后单击 **Add experiment**。此时便会创建第二个 MRM 扫描实验。
3. 在 MS 选项卡上, 根据使用的质谱仪选择以下选项之一:
 - 对于 SCIEX 4500MD 和 Citrine 系统, 在 **Scheduled MRM** 组中选 **Enabled** 复选框。要创建常规 **Scheduled MRM** 算法采集方法, 确保选中 **Scheduled MRM** 组中的 **Basic** 选项。要创建方法, 请参阅下图中的功能: [图 2](#)。要创建 **Scheduled MRM Pro** 算法方法, 确保选中 **Advanced** 选项。要创建此方法, 请参阅以下章节: [创建 Scheduled MRM Pro 算法采集方法](#)。
 - 对于 SCIEX 3200MD 系统, 在 **Scheduled MRM** 组中选 **Enabled** 复选框。要创建方法, 请参阅下图中的功能: [图 3](#)。
4. 按以下章节中所述的方式完成采集方法: [创建 Scheduled MRM 算法采集方法](#)。
5. 将采集方法保存在运行采集的项目中。

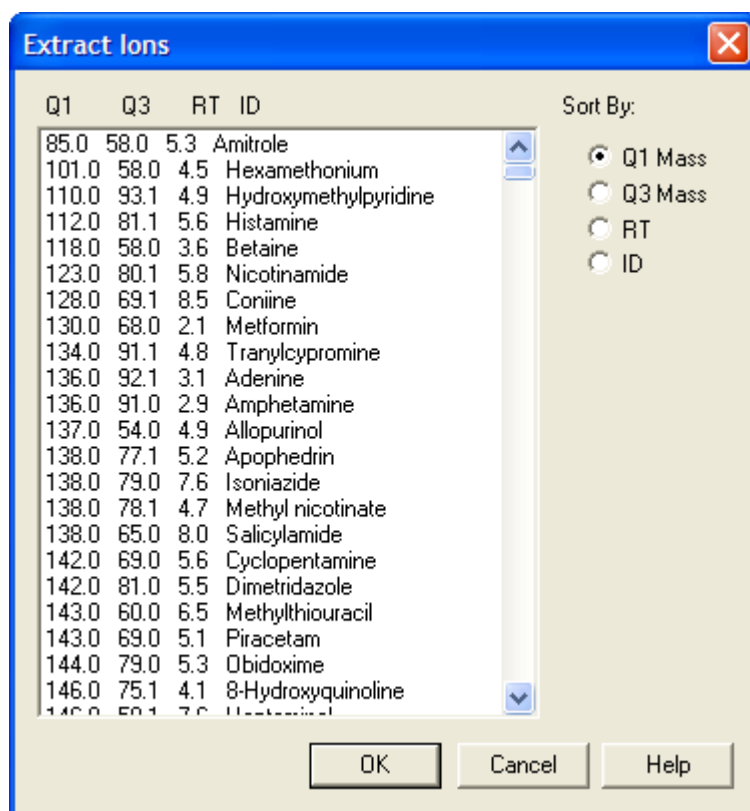
注释: 对于 SCIEX 3200MD 和 SCIEX 4500MD 系统, 当该周期中存在极性转换时, 将应用默认稳定时间。对于 Citrine 系列仪器, 当该周期中存在极性转换时, 将应用用户配置的稳定时间。

生成提取离子色谱图

注释: 如果打开一个包含超过 2500 个离子对的 *Scheduled MRM* 算法 *wiff* 文件, 则显示 TIC 而非 XIC。

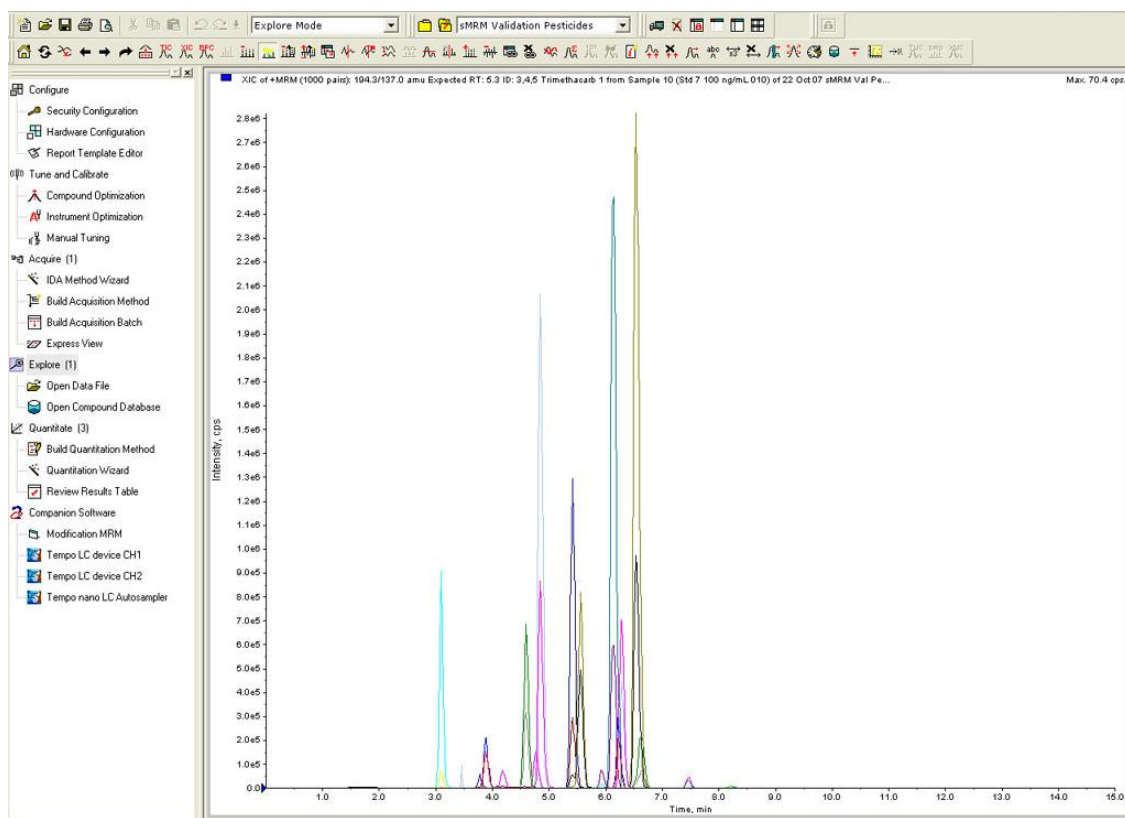
1. 使用在前面的程序中创建的采集方法生成 *Scheduled MRM* 算法数据后, 在导航栏的 **Explore** 下双击 **Open Data File**, 然后选择数据文件和样本。
在预设置中, MRM 和 *Scheduled MRM* 算法数据以叠加 XIC 的方式显示。
2. 单击 **Explore > Extract Ions > Use Dialog**。
此时会出现 **Extract Ions** 对话框, 其中会显示选定数据文件中的每一个 MRM 离子对, 并有相应的预计保留时间和化合物标识 (如已输入)。

图 7 **Extract Ions** 对话框



3. 选择按 Q1 质量、Q3 质量、RT (保留时间) 或化合物 ID 对列表进行排序。
4. 选择一个或多个离子对。
5. 单击 **OK**。
色谱图下方会显示 XIC, 而标题中则显示被选定的第一个离子对的化合物 ID。

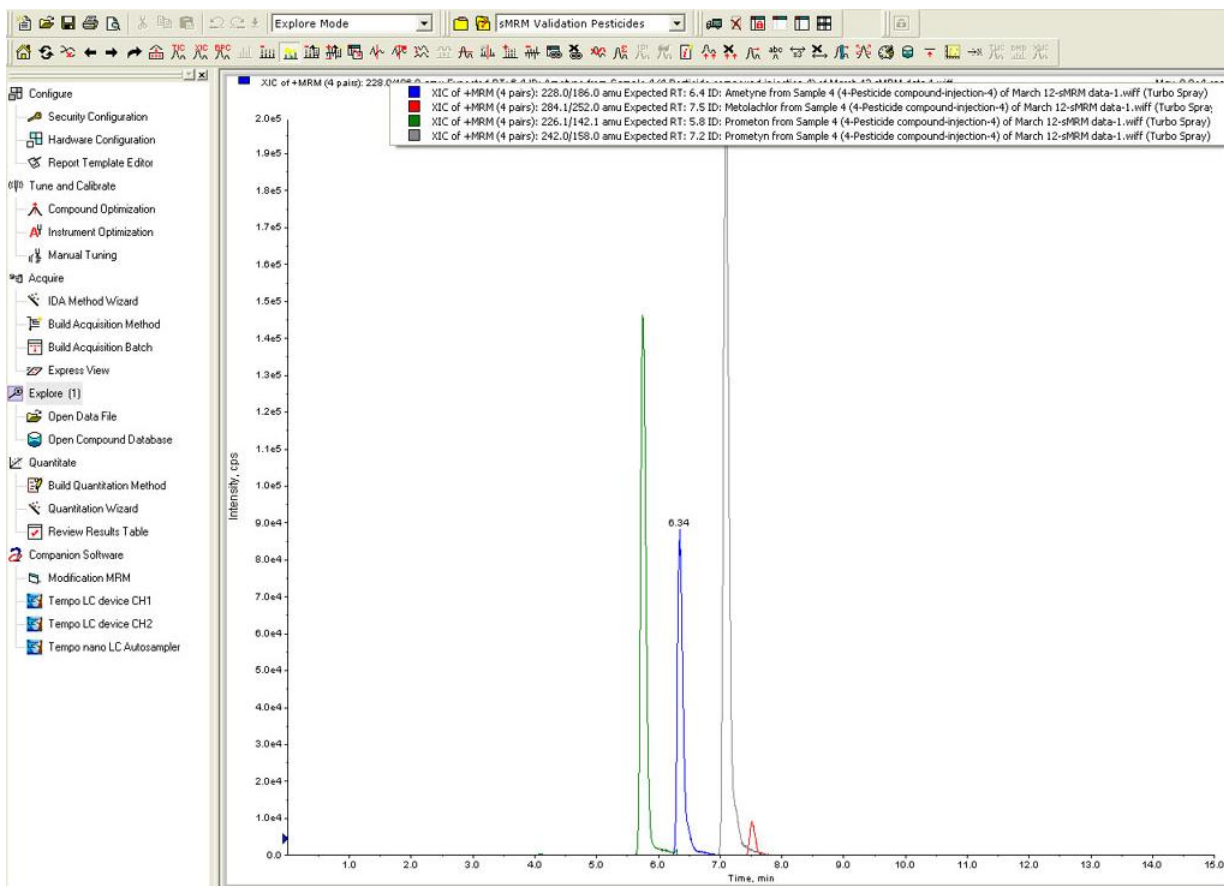
图 8 提取多种离子的情况下打开的叠加 XIC 的示例



查看 MRM 离子对

1. 生成 XIC
2. 右键单击 XIC 标题以显示该区域中活动状态的 MRM 离子对。选择所关注的 MRM 离子对，在色谱图中显示保留时间标签。

图 9 活动的 MRM 离子对



- 沿 X 轴拖动光标，以放大特定的时间区域。
XIC 的刻度会根据所显示数据中最高的峰重新调整。
- 再次右键单击 XIC 标题，显示在该区间内活动的 MRM 离子对。
超过阈值并在放大区域以内的所有离子对均会显示。标题数将被缩减至缩放区域的离子对数。

创建定量方法

注释: 在 Analyst MD 软件中，必须使用 Build Quantitation Method 为包含超过 94 个离子对的数据文件创建定量方法。Quantitation Wizard 仅可为含有 94 个或以下离子对的数据文件创建定量方法。

开始之前，确保正在使用推荐的 IntelliQuan-MQ III 算法。有关选择算法的更多信息，请参阅文档：《帮助》。

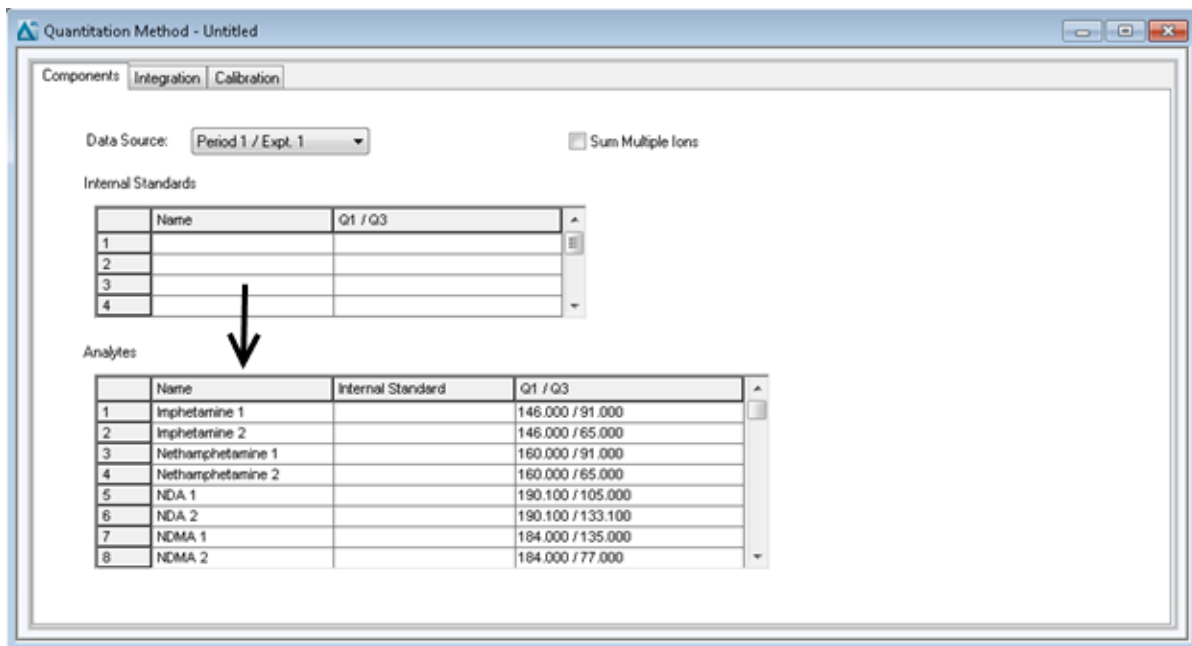
- 在 **Navigation** 栏中的 **Quantitate** 下，双击 **Build Quantitation Method**。

注释: 如果分析的数据中所含的离子对少于 94 个，可使用 Quantitation Wizard 来创建定量方法。

- 选择刚采集的数据文件和样本，然后单击 **OK**。

此时在 **Analytes** 表中会显示 **Name** 列。由于离子对在采集期间选择，因此该列将会填入来自采集方法的化合物 ID。

图 10 采集方法: **Components** 选项卡



注释: 如果方法中含有多个实验，则从 **Data Source** 列表中选择每个实验进行检查，以便于将实验中的分析物用于定量方法中。如果分析物较多，**Data Source** 列表可能需要一定的时间才能填写完成。

3. 在定量方法的其余字段设置所需要的数值，然后保存定量方法。
4. 使用 **Quantitation Wizard** 创建结果表。确保选择刚创建的定量方法。

提示! 如果数据文件中含有大量的 MRM 离子对，使用 **Create Quan Methods From Text Files** 脚本或 **Create Text File from Quan Method** 脚本来创建或修改定量方法。更多信息，请参阅文档：《脚本用户指南》。

检查结果表

1. 若要查看特定离子对的结果，在 **Results Table** 中单击右键，选择 **Analyte**，然后从化合物 ID 列表中选择离子对。

图 12 结果表: **Analyte Peak Name** 列

	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

- 在 Result Table 中单击右键，然后单击 **Table Settings > Edit** 以在表中显示 **Analyte Integration Quality** 列和 **IS Integration Quality** 列。
- 双击 **Columns**，然后从列表中选择 **Analyte**。
- 在 **Analyte Integration Quality** 旁边，选中 **Shown** 复选框，然后单击 **OK**。
- 从列表中选择 **Internal Standard**。
- 在 **IS Integration Quality** 旁边，选中 **Shown** 复选框。
- 单击 **OK**，然后单击 **Done**。

这两个列将添加到 **Results Table** 中。积分质量表示峰积分的效果好坏。值接近 1 表示峰的积分效果较好。数值偏小表示峰的积分效果不佳，背景噪声较大，或者在该区域内可能有其他峰。

这些列有利于对峰的检查，因为用户可以看到分析物 **Integration Quality** 指数值较低的峰，以便进行手动检查。此外，用户还可以查询分析物 **Integration Quality** 指数值小于某个可接受值的数据，以显示数据子集，并进行手动检查。

图 13 结果表列

	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

项目	描述
1	Analyte Integration Quality 索引列
2	IS Integration Quality 索引列

关于 **Scheduled MRM Pro** 算法

Scheduled MRM Pro 算法功能在 SCIEX 4500MD 和 Citrine 系统中受支持。

Scheduled MRM Pro 算法可以向 Scheduled MRM 算法中添加高级功能。它允许在采集方法中为每一个离子对设置采集窗口，从而可以提高保留时间的普适性。用户可以针对 LC 峰范围广、保留时间差异大的不同化合物调整各个窗口。

此外，Scheduled MRM Pro 算法包括下列功能：

- Scheduled MRM Pro 算法还支持采集期间的自动窗口扩展。用户可以选择打开或关闭 Dynamic Window Extension (DWE)。用户还可以为每个单独离子对设置不同的触发器阈值和 DWE 阈值。例如，低触发器阈值和高 DWE 阈值更有可能触发次要离子对，但避免不必要的动态窗口扩展。启用 DWE 时，如化合物已偏移至更晚的保留时间，且在超过其保留时间后强度并未降至扩展阈值以下，则 Scheduled MRM Pro 算法自动扩展检测窗口，直至强度降至阈值以下。将在该方法指定的检测窗口的另一半时长内监测离子对。扩展后的检测窗口最多可达方法指定采集窗口的两倍时长。此功能允许使用较小的时间窗，但同时要确保每个峰被完全捕获。该功能还可提高方法对绝大多数保留时间偏移的普适性。
- 用户可以将分析物的多个离子对标记为主要或次要。主要离子对在整个采集时间窗内受到全程监测，而次要离子对仅在相关的主要离子对到达触发阈值后才被监测。这样就可以通过减少被监测的 MRM 离子对数量，来最大限度地缩短扫描周期。采集时间主要用于采集样本中存在的分析物的数据，而不是针对样本中不存在的分析物。
- 该算法还支持使用驻留权重。驻留权重允许以相对方式表达所需的驻留时间。对于数量非常充足的化合物，可以指定一个较低的驻留权重，而对于数量偏少的化合物，可以指定一个较高的驻留权重。在运行期间，可用驻留时间是根据此权重来分配的。

- 该算法支持动态背景减除 (DBS) 触发次要离子对。DBS 选项仅在使用 **Scheduled MRM** 算法的非 IDA 方法和实验中可用。对于这些方法或实验，在启用 DBS 时，它将被应用到主要离子对，以触发该实验中的次要离子对。

对于为全谱扫描使用 **Scheduled MRM** 算法的 IDA 方法，如在 IDA 标准中启用 DBS，将被应用到主要离子对，以触发次要离子对和条件性扫描。

当为 **Scheduled MRM** 算法实验同时启用 DWE 和 DBS 时，DWE 触发取决于主要离子对未经 DBS 的未处理数据。

在为使用 **Scheduled MRM** 算法的实验启用 DBS 时，次要离子对一旦触发将不断采集，直至主要离子对停止采集。

创建 **Scheduled MRM Pro** 算法采集方法

Scheduled MRM Pro 算法功能仅在 SCIEX 4500MD 和 Citrine 系统中受支持。

使用此程序在 **Method Editor** 窗口中创建一个 **Scheduled MRM Pro** 算法方法。这类方法也可以在 **Manual Tune** 窗口中创建。

- 激活所支持的质谱仪的硬件配置文件。对于 Citrine 系统，如果需要，在硬件配置文件中选择不同的质量模式，然后激活该硬件激活文件。
- 打开现有的 **Scheduled MRM** 算法采集方法或使用以下章节中的程序创建一个方法：[创建 **Scheduled MRM** 算法采集方法](#)。
- 在 **Acquisition Method Editor** 的 MS 选项卡上的 **Scheduled MRM** 部分中选择 **Advanced** 选项。这会启用 **Scheduled MRM Pro** 算法功能。

五个新列添加到质量范围表，并有两个复选框 **Dynamic Window Extension** 和 **Dynamic Background Subtraction** 显示在 **Scheduled MRM** 部分。

图 14 **Scheduled MRM Pro** 算法参数

项目	描述
1	Group column: 使用此列可将化合物的离子对组合在一起。为同一组中的所有离子对指定一个相同的名称。

项目	描述
2	<p>MRM Window (sec) 字段：以保留时间为中心，指定监测离子对的时长。此字段中的离子对设置值取代方法默认窗口中 MRM detection window 字段的值。MRM Window 列与 MRM detection window 字段类似，但输入的值仅适用于特定的离子对。如果留空，就会从 MRM detection window 字段获取值。</p>
3	<p>Primary/Secondary：该列用于指定离子对是主要还是次要。主要离子对在整个采集时间窗受到全程监测。只要所有主要离子对均高于各自的阈值，次要离子对就会在采集时间窗内受到监测。</p> <p>给组内的主要离子对指定代号 1，次要离子对指定代号 2。一组中可以有多个主要离子对和次要离子对。</p>
4	<p>Trigger Threshold：指定触发次要离子对的强度。在 IDA 方法中，Trigger Threshold 还用于触发关联扫描。</p> <p>该值可以为 0 或以上。</p>
5	<p>Dwell Weight：该列用于指定某个离子对的扫描时间（驻留时间）是否应当比其他离子对长。默认值为 1。</p> <p>驻留权重允许以相对方式表达驻留时间。数量非常充足的化合物可以指定一个较低的驻留权重 (<1)，而数量偏少的化合物可以指定一个较高的驻留权重 (>1)。驻留权重范围为 0.1 至 10。在运行期间，可用驻留时间是根据此权重来分配的。</p> <hr/> <p>注释：总驻留权重等于该周期中所有主要离子对驻留权重的和以及所有次要离子对驻留权重和的一半。但是，驻留时间分配仍使用其各自的驻留权重除以总驻留权重。例如，在一个仅包含两个保留时间相同的离子对的方法中，主要和次要离子对的驻留权重是 1。总驻留权重是 $1 + 0.5 = 1.5$。两个离子对的驻留时间均为可以分配给所有并发离子对的总驻留时间乘以 $1/1.5$。可以分配的总驻留时间是通过扣除暂停时间、极性转换时间（如适用），然后通过系数 1.2 来修正后计算所得的时间。所有空白的驻留权重条目均使用默认值 1。</p> <hr/> <p>注释：如果计算的驻留时间对于离子对整个保留时间窗口中的所有周期不相同，则所有周期的平均驻留时间将用于采集。</p>
6	<p>Dynamic Window Extension：选择以在 <i>Scheduled MRM Pro</i> 采集方法中启用动态窗口扩展。如未使用动态窗口扩展 (DWE)，则取消选中 Dynamic Window Extension 复选框。选中 DWE 时，质量范围表中会添加新 Extension Threshold 列。如果选择了 DWE，并且离子对的峰强度在经过了保留时间后仍然高于扩展阈值，则 <i>Scheduled MRM Pro</i> 算法自动扩展检测窗口，直至强度降至阈值以下，并在接下来的半个方法指定检测窗口中继续对该离子进行监控。扩展后的采集窗口最多可保持方法指定检测窗口持续时间的两倍。</p>

项目	描述
7	Dynamic Background Subtraction: 选择以在 <i>Scheduled MRM Pro</i> 采集方法中使用动态背景减除。在 <i>Scheduled MRM Pro</i> 算法触发的 IDA 方法中，如果已在 IDA 标准中启用，则 Dynamic Background Subtraction 复选框在 <i>Scheduled MRM Pro</i> 算法实验中不可用。IDA 标准中的 Dynamic Background Subtraction 复选框用于触发次要离子对和条件性扫描。
8	Extension Threshold: 指定 <i>Scheduled MRM Pro</i> 采集方法中动态窗口扩展的阈值。该值可以设为零或以上。请参阅图：图 15。

图 15 选中 **Dynamic Window Extension** - 扩展阈值列

MS Advanced MS

Experiment: 1 Scan type: MRM (MRM)

Polarity: Positive

MRM detection window: 60 (sec)

Target for sMRM: Target Cycle Time (across sMRM expts)

Target Scan Time (per sMRM expt): 1 (sec)

Scheduled MRM: Enabled Basic Advanced

Q1/Q3 Resolution: Dynamic Window Extension Dynamic Background Subtraction

Period Summary: Duration: 5.000 (min) Delay Time: 0 (sec) Cycles: 300 Cycle: 1.0000 (sec)

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

4. 在 5 个 *Scheduled MRM Pro* 算法列中给出相应的值，以完成每个 MRM 离子对的质量范围表。使用下列规则以及下图中的信息：图 14。
- 同一组中的所有离子对必须在质量范围表内连续列出。
 - 同一组中的所有离子对在 **Retention Time (min)** 列中的保留时间必须相同。
 - 同一组中的所有离子对在 **MRM Window (sec)** 列中的时间必须相同。
 - 同一组中的所有主要离子对必须在组中的次要离子对之前输入。如果组内只有一个离子对，该离子对必须是主要离子对。
5. 保存采集方法。
Scheduled MRM Pro 算法采集方法只能包含一个时段和最多两个 *Scheduled MRM* 算法实验。

Scheduled MRM Pro 算法在 IDA 中的影响

如果使用 *Scheduled MRM Pro* 算法进行信息关联采集 (IDA) 全谱扫描，则当一组中的所有 MRM 离子对的强度均高于各自的触发阈值时，仅触发 IDA 方法中的条件性扫描。这样就可通过去除错误的关联扫描触发来优化扫描周期。

创建 IDA Scheduled MRM Pro 算法采集方法

1. 使用以下章节中的程序创建 *Scheduled MRM Pro* 算法：[创建 Scheduled MRM Pro 算法采集方法](#)。
2. 若要添加 ER 扫描类型的实验，请在添加 IDA 标准前添加。
3. 右键单击 **Period** 图标，然后单击 **Add IDA Criteria Level**。
4. 指定 IDA Criteria 参数。请参阅文档：《信息相关采集教程》。
5. 右键单击 **Period** 图标，然后单击 **Add experiment**。
6. 在 MS 选项卡的 **Scan type** 列表中选择条件性扫描类型。对于此示例，选择 **Product Ion (MS2)** 或 **Enhanced Product Ion (EPI)**。

注释：对所有条件性扫描类型来说，**Product Of** 必须是 30 Da。

7. 如果需要，复制或添加更多关联实验。
它取决于 IDA 标准，从 X 至 Y 的最强离子。
8. 指定实验参数。
9. 将采集方法保存在运行采集的项目中。

注释：在使用 IDA *Scheduled MRM Pro* 算法方法的数据采集过程中，使用方法中每个 MRM 离子对的触发阈值触发条件性扫描，而不使用 IDA 阈值。

注释：若要针对驻留时间分配、并发性和预计的周期时间优化 *Scheduled MRM* 算法方法，请安装和使用 sMRM Calculator 脚本。更多信息，请参阅文档：《脚本用户指南》。

在 File Info 中查看 Scheduled MRM Pro 算法参数

在样本采集完成后，通过 *Scheduled MRM Pro* 算法方法采集的数据文件的文件信息将显示每个离子对的所有用户定义参数。这些参数包括以下各项：

- **MRM**（是否正在调度）
- **Q1**
- **Q3**
- **Retention Time**
- **ID**
- **Group**
- **MRM Window (sec)**
- **Primary/Secondary**
- **Trigger Threshold**
- **Extension Threshold**（如果选中了 **Dynamic Window Extension** 复选框）
- **Dwell Weight**

- **Q1 Resolution**
- **Q3 Resolution**（如果选中了 **Q1/Q3 Resolution** 复选框）

还会显示 **Dynamic Background Subtraction**、**Dynamic Window Extension**、**Dwell Time**、**Target Scan Time** 或 **Target Cycle Time** 参数。

1. 在 **Navigation** 栏中的 **Explore** 下，双击 **Open Data File**。
Select Sample 对话框即会打开。
2. 在 **Data Files** 窗格中，选择 **wiff** 文件。
3. 在 **Samples** 窗格中，选择样本。
4. 单击 **OK**。
从样本中采集的数据便会打开。
5. 要查看文件信息，单击工具栏上的 **Show File Info** 。
File Information 窗格即会在图下方打开。
6. 在 **File Information** 窗格的左侧窗格中展开所需要的时段。
7. 单击所需时段的实验链接。
每个离子对的 **Scheduled MRM Pro** 算法参数的值均记录在右侧窗格中选定的 **Period Experiment** 部分下。

图 16 File Info 中的 **Scheduled MRM Pro** 算法参数

File Info		Period 1:	
Log Info		Scans in Period: 120	
Acquisition Info		Min. Dwell Time: 3 ms	
Quant. Info		Max. Dwell Time: 250 ms	
Period 1: Experiment 1:		Relative Start Time: 0.00 msec	
Parameter Table		Experiments in Period: 1	
Resolution tables		Use Target Cycle Time: No	
Calibration tables		Target Cycle Time: N/A	
Instrument Parameters:		Period 1 Experiment 1:	
Keyed Text:		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 Q1/Q3 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)
		609.200	195.000
		Time (min)	sMRM Dwell (msec)
		1.00	250.000
		Window (sec)	Trigger Threshold
		0.5	1
		Primary / Secondary	Extension Threshold
		1	10000000
		Dwell Weight	Group
		1.0	A
		Q1 Resolution	Q3 Resolution
		High	Unit

使用 **Scheduled Ionization** 功能创建 **Scheduled MRM Basic** 或 **Pro** 算法采集方法

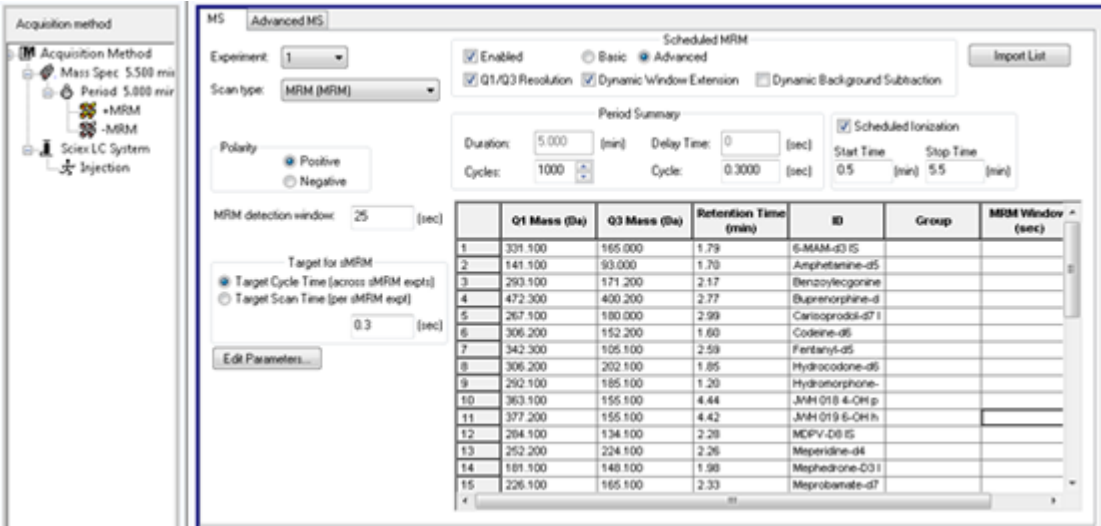
1. 创建 **Scheduled MRM Basic** 或 **Pro** 算法采集方法。
2. 选择方法中的任何实验，然后选中 **Scheduled Ionization** 复选框。
3. 在 **Scheduled Ionization** 组中，键入适当的 **Start Time** 和 **Stop Time**。确保关注峰将在 **Start Time** 和 **Stop Time** 之间洗脱。如果 **Dynamic Window Extension** 也选中，确保

Stop Time 在质量表中最新保留时间加上该转换 1.5 个检测窗口之后。另外，确保 **Synchronization Mode** 采集方法和 LC 方法设置为与不使用 **Scheduled Ionization** 时相同。

注释: **Scheduled Ionization** 仅可用于单时段采集方法。

下图显示使用 **LC Synchronization Mode** 且 LC 方法的时长为 7 分钟。所有关注峰都在 0.5 分钟之后、5.0 分钟之前洗脱。由于前一个洗脱峰采集窗口可能会延长一个完整的检测窗口，5.5 分钟用于 **Stop Time**。如果使用 **Scheduled Ionization**，在 **Start Time** 之前和 **Stop Time** 之后将应用 **IonSpray** 电压 0。仅在 **Start Time** 和 **Stop Time** 之间应用在 MS 方法中设置的 **IonSpray** 电压。**Scheduled Ionization** 功能可降低仪器污染的风险，从而减少质谱仪停机时间。有关 **Scheduled Ionization** 的更多信息，请参阅文档：《高级用户指南》。

图 17 **Scheduled MRM Pro** 算法（使用 **Scheduled Ionization** 功能）



4. 保存采集方法。

联系我们

客户培训

- 北美地区: NA.CustomerTraining@sciex.com
- 欧洲: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- 在欧盟与北美之外请访问 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 或通过下述方式之一联系我们:

- sciex.com/contact-us
- 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。

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。
