

Analyst MD 软件

信息相关采集教程



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。

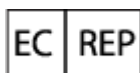
Rx only.

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

1 信息相关采集教程	4
关于 IDA 方法	4
相关文档	4
前提条件	5
2 创建 IDA 方法	6
用 IDA 方法向导程序创建一个三重四级杆系统的 IDA 方法	6
用 IDA 方法向导程序创建一个 LIT 系统的 IDA 方法	7
使用采集方法编辑器创建 IDA 方法	9
使用 <i>Scheduled</i> MRM 算法扫描创建 IDA 方法	11
使用两种 <i>Scheduled</i> MRM 算法扫描创建 IDA 方法	11
关于极性转换	12
关于占位值	13
<i>Scheduled</i> MRM Pro 算法在 IDA 中的影响	14
创建 IDA <i>Scheduled</i> MRM Pro 算法采集方法	14
使用 <i>Scheduled</i> Ionization 创建 IDA 方法	14
3 查看 IDA 数据	16
设置 IDA Explorer 选项	16
查看 IDA 数据	17
在 IDA Explorer 未激活的情况下查看 IDA 数据	18
关于动态背景减除算法	19
关于动态填充时间	19
图标	20
联系我们	21
客户培训	21
在线学习中心	21
SCIEX 支持	21
网络安全	21
文档	21

关于 IDA 方法

IDA 方法可以根据从以前相同时段内的实验中获得的结果，自动运行实验。在采集数据的同时，可以用 IDA 标准优化数据采集设置项，这样就可以缩短单次加样的样本采集时间。IDA 可以同时节省所需要的样本量和宝贵的工作时间。

在单个时段中创建一个最多有两次全谱扫描和 8 次条件性扫描的 IDA 方法。全谱扫描在 IDA 中用于触发其他实验。以下任何扫描类型都可作为全谱扫描使用：

- Q3 MS
- 增强型 MS (EMS)
- MRM
- 中性丢失 (NL)
- 前体离子 (Prec)
- 增强型产物离子 (EPI) (第二级全谱扫描)
- *Scheduled* MRM 算法

以下为条件性扫描：

- EPI
- MS/MS/MS (MS3) (第二级条件性扫描)

在 IDA 实验中，质谱仪的动作会根据之前扫描中所采集的数据因不同扫描而异。软件会在数据采集时对其进行分析，然后确定进行条件性扫描的质量。设置激活 IDA 实验的标准以及拟采用的方法参数。

IDA 可以根据下列用户定义标准来修改实验和优化结果：

- 离子强度和电荷状态
- 包含和排除列表
- 同位素形式
- 动态排除

如果在扫描循环之间未切换极性，则条件性实验的次数必须与 IDA Criteria 选项卡中强度最高的离子数目相符。

相关文档

- 《质谱仪系统用户指南》
- 《高级用户指南》

-
- *Scheduled MRM* 算法教程
 - Analyst MD 软件帮助

前提条件

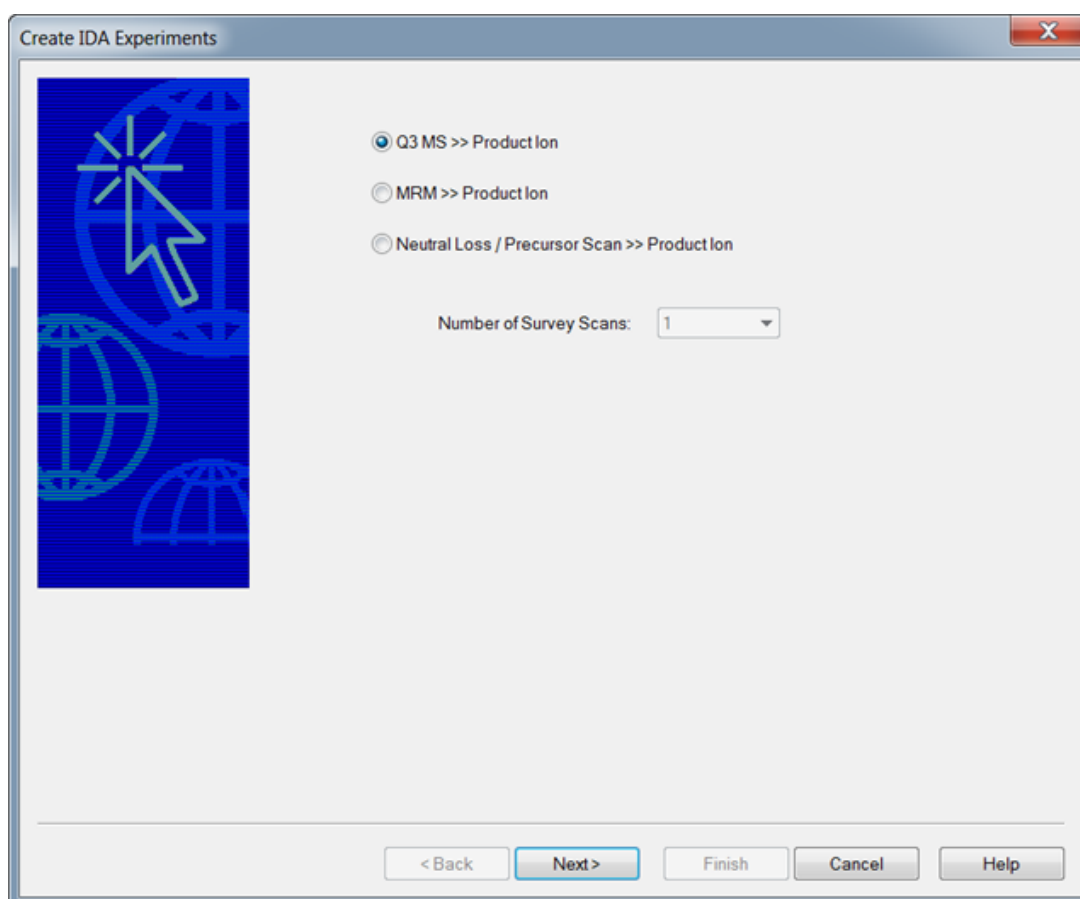
前提条件
用户应当能够： <ul style="list-style-type: none">• 创建采集方法• 提交批次

使用 IDA Method 向导创建线性离子阱 (LIT) 和三重四极杆 IDA 采集方法。可使用任意两类全谱扫描的组合。如果选择 EPI 作为全谱扫描，则 IDA-Second Level Criteria 选项卡可用。如果使用这些测量实验，则不能设置附加的 IDA 标准等级。

用 IDA 方法向导程序创建一个三重四级杆系统的 IDA 方法

1. 在导航栏上的 **Acquire** 下，双击 **IDA Method Wizard**。

图 2-1 创建 IDA 实验页



2. 选择 **Neutral Loss / Precursor Scan >> Product Ion** 扫描类型。
3. 在 **Number of Survey Scans** 列表中，选择待执行的扫描次数，然后单击 **Next**。随即显示 **Survey Scan** 页面。该页面的外观取决于所选择的扫描。
4. 设置参数，然后单击 **Next**。

Dependent Scan – Product Ion Scan 页面随即显示。

5. 选择待监测的峰个数，设置扫描参数，然后单击 **Next**。
Dependent Scan – IDA Criteria 页面随即显示。

注释: 确认 IDA 范围与全谱扫描的范围相同，或在其范围内。

6. 若要指定离子质量范围，键入离子质量范围的下限和上限。对于该范围内的质量将运行条件性扫描。
7. 在 **Which exceed** 字段中，键入触发条件性扫描所需的每秒最小次数。
8. 在 **Exclude Former Target Ions** 组中，执行以下操作之一：
 - 若要忽略 IDA 实验中出现的所有前目标离子，选择 **Always**。
 - 若要忽略指定次数之后的所有前目标离子，选择 **Always**，再选择 **After**，然后键入发生次数。
 - 若要忽略指定时段的前目标离子，选择 **For**，然后键入忽略离子的时间段（秒数）。
 - 若要忽略一定次数后的某个时段的前目标离子，选择 **For**，然后键入忽略离子的时间段（秒数）。选择 **After**，然后键入发生次数。

提示! 若要承认 IDA 实验中的所有前离子，待向导程序运行完成，然后在采集方法编辑器中 IDA - First Level Criteria 选项卡的 **Exclude former target ions** 项下，单击 **Never**。

9. 若要排除指定次数之后的前目标离子，在 **Exclude Former Target Ions** 组中选择 **After X occurrences**，然后键入前目标离子被排除出未来扫描之前可以被看到的次数。
10. 单击 **Finish**。
IDA 实验会自动显示在 Acquisition Method Editor 中。现在可以编辑 LC 方法和其它 IDA 标准（比如包含和排除列表）。
11. 检查 MS 方法并在需要时编辑参数和其它 IDA 标准。
12. 添加尚未包含的设备，然后更新所有相关参数。

提示! 所有离子源气体参数都可以更新。在 MS 选项卡中，单击 **Edit Parameters**。在选项卡中，键入相应的值，然后选择下方的 **Source/Gas** 复选框，将参数应用到所有实验中。

13. 保存采集方法文件。

用 IDA 方法向导程序创建一个 LIT 系统的 IDA 方法

1. 在导航栏上的 **Acquire** 下，双击 **IDA Method Wizard**。
Create IDA Experiments 随即显示。
2. 在 **Type of IDA Experiment** 组中选择全谱扫描类型，然后单击 **Next**。
3. 如果选择了 **Neutral Loss / Precursor Scan >> Enhanced Product** 扫描类型，则在 **Number of Survey Scans** 列表中选择待执行的扫描次数。

4. 若要确认 IDA 实验的采集数据与执行条件性扫描之前用户指定的电荷状态或同位素形式匹配，可选择 **Use Enhanced Resolution Scan to confirm Charge State and Isotope Pattern** 复选框。
5. 若要将 MS3 扫描添加到实验中，选中 **Enable MS3 Experiment generation** 复选框。
6. 为了使软件动态地为 LIT 计算合适的填充时间，请确保选中 **Dynamic Fill Time** 复选框。
7. 单击 **Next**。
此时 **Survey Scan**（全谱扫描）页面便会打开。该对话框的外观会因所选择的全谱扫描而异。
8. 根据选择的扫描类型编辑参数，然后单击 **Next**。
此时出现 **Dependent Scan – Enhanced Product Ion (EPI)**（条件性扫描—增强型产物离子）页。
9. 选择待监测的峰个数，设置扫描参数，然后单击 **Next**。
Dependent Scan – IDA Criteria 页面随即显示。
10. 若要指定离子质量范围，键入离子质量范围的下限和上限。对于该范围内的质量将运行条件性扫描。
11. 在 **Which exceed** 字段中，键入触发条件性扫描所需的每秒最小次数。
12. 若要指定 IDA 实验的电荷状态，选择 **With charge state X to Y charges** 复选框，然后单击电荷状态。

提示! 电荷状态取决于恰当的同位素比率确定。因此，应使用 **ER** 扫描来确认电荷状态。

13. 若要包含有未知电荷状态的峰，选择 **Include unknowns** 复选框。
14. 在 **Exclude Former Target Ions** 组中，执行以下操作之一：
 - 若要忽略 IDA 实验中出现的所有前目标离子，选择 **Always**。
 - 若要承认 IDA 实验中出现的所有前目标离子，选择 **Never**。
 - 若要忽略指定时段的前目标离子，选择 **For**，然后键入忽略离子的时间段（秒数）。
 - 若要忽略一定次数后的某个时段的前目标离子，选择 **For**，然后键入忽略离子的时间段（秒数）。选择 **After**，然后键入发生次数。
 - 若要忽略指定次数之后的所有前目标离子，选择 **Always**，再选择 **After**，然后键入发生次数。
15. 若要排除指定次数之后的前目标离子，在 **Exclude Former Target Ions** 组中选择 **After X occurrences**，然后键入前目标离子被排除出未来扫描之前可以被看到的次数。
16. 单击 **Finish**。
IDA 实验会自动显示在 **Acquisition Method Editor** 中。现在可以编辑 LC 方法和其它 IDA 标准（比如包含和排除列表）。
17. 检查 MS 方法并在需要时编辑参数和其它 IDA 标准。
18. 添加尚未包含的设备，然后更新所有相关参数。

提示! 所有离子源气体参数都可以更新。在 MS 选项卡中, 单击 **Edit Parameters**。在选项卡中, 键入相应的值, 然后选择下方的 **Source/Gas** 复选框, 将参数应用到所有实验中。

19. 保存采集方法文件。

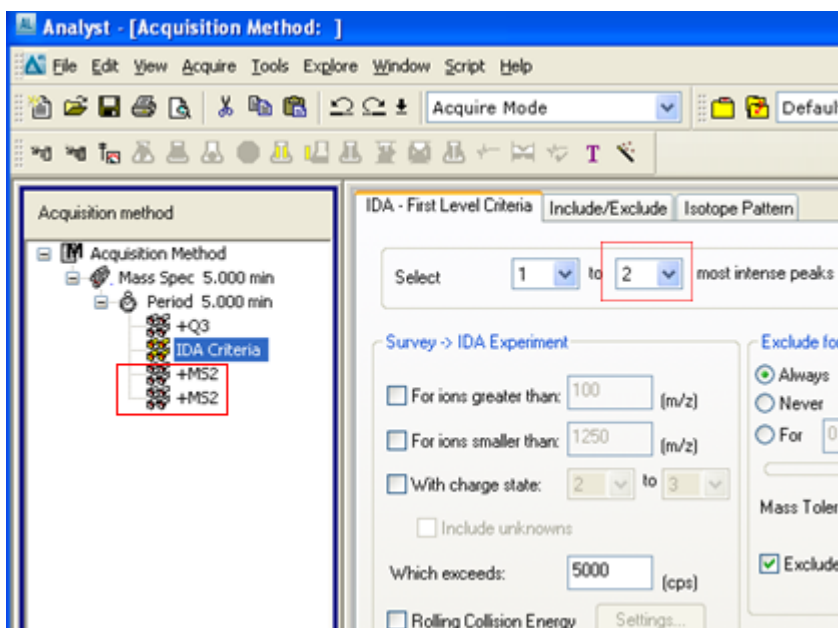
使用采集方法编辑器创建 IDA 方法

注释: 实验必须按环回顺序输入。无法在现有实验中间插入实验。

提示! 为了减少极性转换的需要并尽可能缩短周期时间, 将期限内的所有正离子条件性实验和负离子条件性实验分别归组在一起。

1. 在导航栏上的 **Acquire** 下, 双击 **Build Acquisition Method**。
2. 用一种或两种全谱扫描新建一个采集方法。
3. 选择全谱扫描, 然后选择相应的参数。
4. 要使用增强型分辨率扫描来确认 QTRAP 系统上的电荷状态和同位素形式选择, 请执行以下操作:
 - 在 **Period** 图标上单击右键, 然后单击 **Add experiment**。
 - 在 MS 选项卡的 **Scan type** 列表中, 单击 **Enhanced Resolution (ER)**。
 - 键入 Enhanced Resolution 扫描的具体参数。
5. 在 **Period** 图标上单击右键, 然后单击 **Add IDA Criteria Level**。
6. 在 **Select X to Y most intense peaks** 字段中, 设置 IDA 实验要监测的最强离子峰的范围。对于单全谱扫描 IDA, 监测峰的总数必须等于您所指定的条件性实验的数目。对于在全谱扫描中存在极性转换的双全谱扫描 IDA, 条件性实验的数目必须是要监测的总峰数的两倍, 一半用于一个极性, 另一半用于相反极性。

图 2-2 具有两种条件性扫描类型和两种最强离子的 IDA 方法示例



7. 如果使用增强型分辨率 (ER) 扫描，则为监测的每个峰添加占位值。
对于 ER 占位值，在中央 (amu 0) 窗口中键入 1。如果监测 4 个峰，则将有 4 个行，在中央列分别为编号 1、2、3 和 4。更多信息，请参阅以下章节：[关于占位值](#)。
 8. 如果使用 ER 扫描确认电荷状态、同位素形式选择或恢复质量准确度，则选中 IDA - First Level Criteria 选项卡上的 **Use Enhanced Resolution Scan to confirm Charge State OR Isotope Pattern Selection** 复选框。
 9. 将 IDA - First Level Criteria 选项卡上的其余参数设为所需要的值。
 10. 如有必要，在 Include/Exclude 选项卡上修改相应的列表以选中 **Include List** 或 **Exclude List** 复选框，然后指定目标离子或排除离子。
 11. 如有必要，在 Include/Exclude 选项卡上选中 **Match Isotopes** 复选框，然后指定待匹配的同位素分布形式。
 12. 对于要添加的第一个条件性实验（用第一级 IDA 标准监测每一个峰），请执行以下操作：
 - a. 在 **Period** 图标上单击右键，然后单击 **Add experiment**。
此时 IDA 标准下方就会添加一个实验。
 - b. 键入条件性扫描的具体参数。
-
- 提示! 如果使用的条件性扫描不止一种，请右键单击 EPI 扫描，然后选择 **Copy this experiment**，直至包含了正确数量的条件性扫描。当使用复制而非添加实验时，所有相同设置都将复制到新条件性扫描。
-
13. 打开方法。
 14. 添加设备，并更新所有相关参数。
 15. 保存采集方法文件。

使用 **Scheduled MRM** 算法扫描创建 IDA 方法

在本例中，创建一个将从全谱扫描类型中寻找最大强度单离子的 IDA 方法。采集方法将包含一种全谱扫描和一种条件性扫描。

要创建一种有多个条件性扫描的方法，确保强峰的数量与 IDA Criteria 选项卡上的条件性扫描的数量相匹配（仅适用于单全谱扫描 IDA）。例如，如果方法包含三个条件性扫描，则选择 1 至 3 个最强峰。

1. 创建一个 **Scheduled MRM** 实验。请参阅文档：《**Scheduled MRM** 算法教程》。

注释：如果选中 **Target Cycle Time** 选项以在 **Scheduled MRM** 实验中使用，则目标周期时间仅适用于 **Scheduled MRM** 实验，而不是 IDA 采集方法中的所有实验。

提示！若要添加 ER 扫描类型，请在添加 IDA 标准前添加。

2. 在 **Period** 图标上单击右键，然后单击 **Add IDA Criteria Level**。
3. 指定 **IDA Criteria** 参数。
4. 在 **Period** 图标上单击右键，然后单击 **Add experiment**。
5. 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。

6. 指定实验参数。
7. 将采集方法保存在运行采集的项目中。

使用两种 **Scheduled MRM** 算法扫描创建 IDA 方法

在本例中，创建一个 IDA 方法，并用它从两个全谱扫描实验中寻找两个最强离子。示例的采集方法包括两个全谱扫描实验和四个条件性扫描实验。

提示！如果在全谱扫描类型期间切换极性，请参阅以下章节：[关于极性转换](#)。

注释：对于双全谱扫描 IDA 采集方法，两个 **MRM** 实验或两个 **EMS**（增强型质谱仪）实验也可用于全谱扫描。

1. 创建一个 **Scheduled MRM** 实验。请参阅以下文档中的创建 **Scheduled MRM** 算法采集方法的第 1 步到第 7 步：《**Scheduled MRM** 算法教程》。
2. 在 **Period** 图标上单击右键，然后单击 **Add experiment**。
此时会创建第二个 **MRM** 扫描。将其设置为相反极性。
3. 在 **Scheduled MRM** 组中选择 **Enabled** 复选框以创建另一个 **Scheduled MRM** 实验。请参阅文档：《**Scheduled MRM** 算法教程》。
4. 在 **Period** 图标上单击右键，然后单击 **Add IDA Criteria Level**。
5. 指定 **IDA Criteria** 参数。

- 6. 在 **Period** 图标上单击右键，然后单击 **Add experiment**。
- 7. 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。

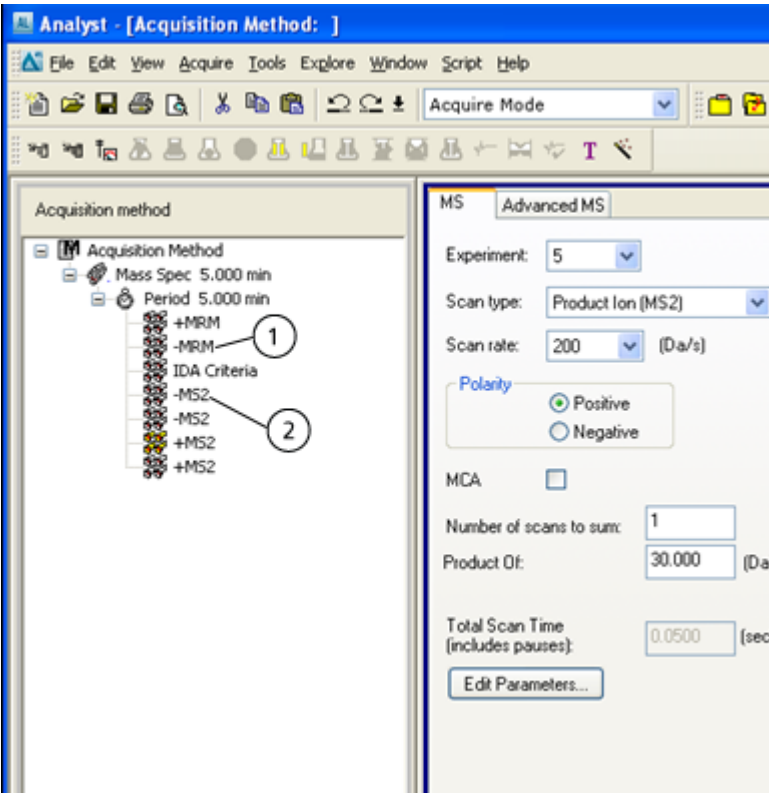
- 8. 指定实验参数。
- 9. 右键单击 **MS2** 或 **EPI** 实验，然后单击 **Copy this experiment**。
- 10. 对每个设备重复步骤 9 两次。确保按以下章节中所述的方式设置极性：[关于极性转换](#)。
- 11. 将采集方法保存在运行采集的项目中。

关于极性转换

如果全谱扫描采用不同极性，则确保按以下要求设置采集方法：

- 1. 确认第一种条件性扫描类型的极性与最后一种全谱扫描类型的极性相同。

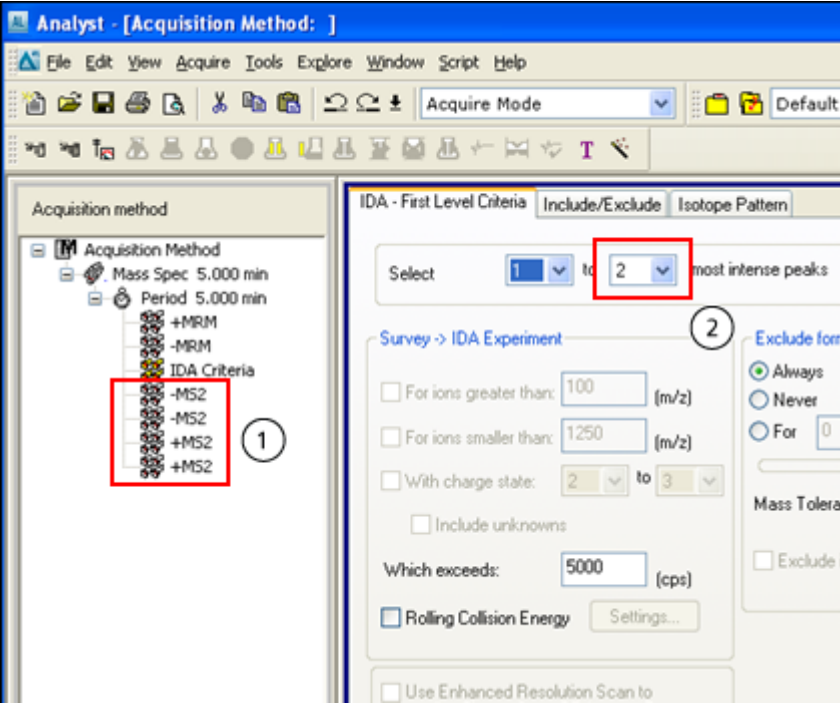
图 2-3 在极性转换的情况下设置扫描类型的范例



项目	描述
1	最后一种全谱扫描
2	第一种条件性扫描

2. 创建一个条件性扫描数量是最强离子数量两倍的采集方法。例如，要搜索两个最强离子，则包括四个条件性扫描类型。

图 2-4 条件性扫描类型和最强离子数示例



项目	描述
1	条件性扫描类型（4 种）
2	最强离子（2 个）

注释：所选的候选离子仅在具有相同极性的条件性实验中触发。未指定候选离子的条件性扫描在此周期中不运行。最多有一半条件性实验在任何周期中都会触发。

3. 对于每个条件性扫描实验，确保其极性与以前的实验相同，然后沉降时间设置为零。

关于占位值

占位值是扫描中使用的基本数字，并会被指定数字替换。软件会使用来自 IDA 选择过程的特定值来替换占位值。占位值对于 IDA 方法的正常运行有着非常重要的作用。

第一次选择某些实验时，软件会自动添加占位值。

- NL、Prec 和 EPI = 30
- MS/MS/MS
 - 第一种前体离子 = 30
 - 第二种前体离子 = 10

ER 也使用占位值。

- 在 IDA 方法中，占位值从第一行中的 1 开始。后续每行增加 1，直至 8 行的最大值。
- 如果使用 IDA 方法向导，则会自动添加正确数量的 ER 占位值。

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. 创建一个 **Scheduled MRM Pro** 算法方法。请参阅文档：《**Scheduled MRM** 教程》。
2. 如果需要，在时段中添加 IDA 标准等级之前添加 ER 扫描类型的实验。
3. 在 **Period** 图标上单击右键，然后单击 **Add IDA Criteria Level**。
4. 指定 IDA Criteria 参数。请参阅以下章节：[创建 IDA 方法](#)。
5. 在 **Period** 图标上单击右键，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. 指定实验参数。
8. 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** 算法方法采集数据的过程中，使用的是方法中每个 MRM 离子对的触发阈值而不是 IDA 阈值。

使用 Scheduled Ionization 创建 IDA 方法

1. 在 Method Editor 中手动创建 IDA 方法或使用 **IDA Method Wizard** 自动创建。
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。另外，确保 **Synchronization Mode** 以及采集方法的 LC 部分设置为与不使用 **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 10 分钟。所有关注峰都在 3 分钟之后、7 分钟之前洗脱。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 2-5 Scheduled Ionization

The screenshot displays the 'MS Advanced MS' configuration window. On the left, the 'Acquisition method' tree shows 'Mass Spec 7.014 min' with a sub-entry 'IDA Criteria' containing '+EMS', '+EPI', '+EPI', and '+EPI'. The main panel is divided into several sections:

- Experiment:** 1
- Scan type:** Enhanced MS (EMS)
- Scan rate:** 10000 (Da/s)
- Polarity:** Positive (selected), Negative
- MCA:** ☐
- Number of scans to sum:** 1
- Total Scan Time (includes pauses):** 0.3534 (sec)
- Buttons:** Center / Width, Parameter Range, Import List, Optimize Masses, Edit Parameters...

The **Period Summary** section includes:

- Duration:** 4.014 (min)
- Delay Time:** 0 (sec)
- Cycles:** 140
- Cycle:** 1.7204 (sec)
- Scheduled Ionization:** ☒
- Start Time:** 3 (min)
- Stop Time:** 7.014 (min)

A table below the Period Summary shows the ionization schedule:

	Start (Da)	Stop (Da)	Time (sec)
1	100.000	188.129	0.0088
2	188.129	386.428	0.0198
3	386.428	1000.000	0.0614
4			

4. 保存采集方法。

如果正在使用 IDA 方法采集数据，则该数据直到采集完成之后才能在 IDA 查看器中打开。但是，在采集过程中它可在 Explore 窗口中打开。

为了更轻松地查看 IDA 数据，可将 IDA Explorer 设置为默认查看器。使用 Appearance Options 对话框中的 IDA Explorer 选项卡选择将用于显示 IDA 数据的 IDA Explorer。用户还可以选择 Mass-List List 视图窗格的列。在软件预设置中，IDA Explorer 用于显示 IDA 样本。

设置 IDA Explorer 选项

- 1. 单击 **Tools > Settings > Appearance Options**.
Appearance Options 对话框随即打开。
- 2. 打开 IDA Explorer 选项卡。
- 3. 选择 **Use IDA Explorer to Display IDA Samples** 复选框。
- 4. 在 **Column Options** 部分，根据需要选择下列复选框：

表 3-1 Column Options

字段	描述
Intensity	（强度）显示特定 <i>m/z</i> 比的强度。
Molecular Weight (MW)	（分子量 (MW)）显示特定 <i>m/z</i> 比的计算所得分子量。
Scan	（扫描）显示特定 <i>m/z</i> 比的扫描类型。
Collision Energy (CE)	（碰撞能量 (CE)）显示特定 <i>m/z</i> 比的碰撞能量。
Charge (Z)	（电荷 (Z)）显示特定离子的电荷。

- 5. 对于 LIT 系统，在 **LIT Column Options** 部分中，根据需要选择下列复选框：

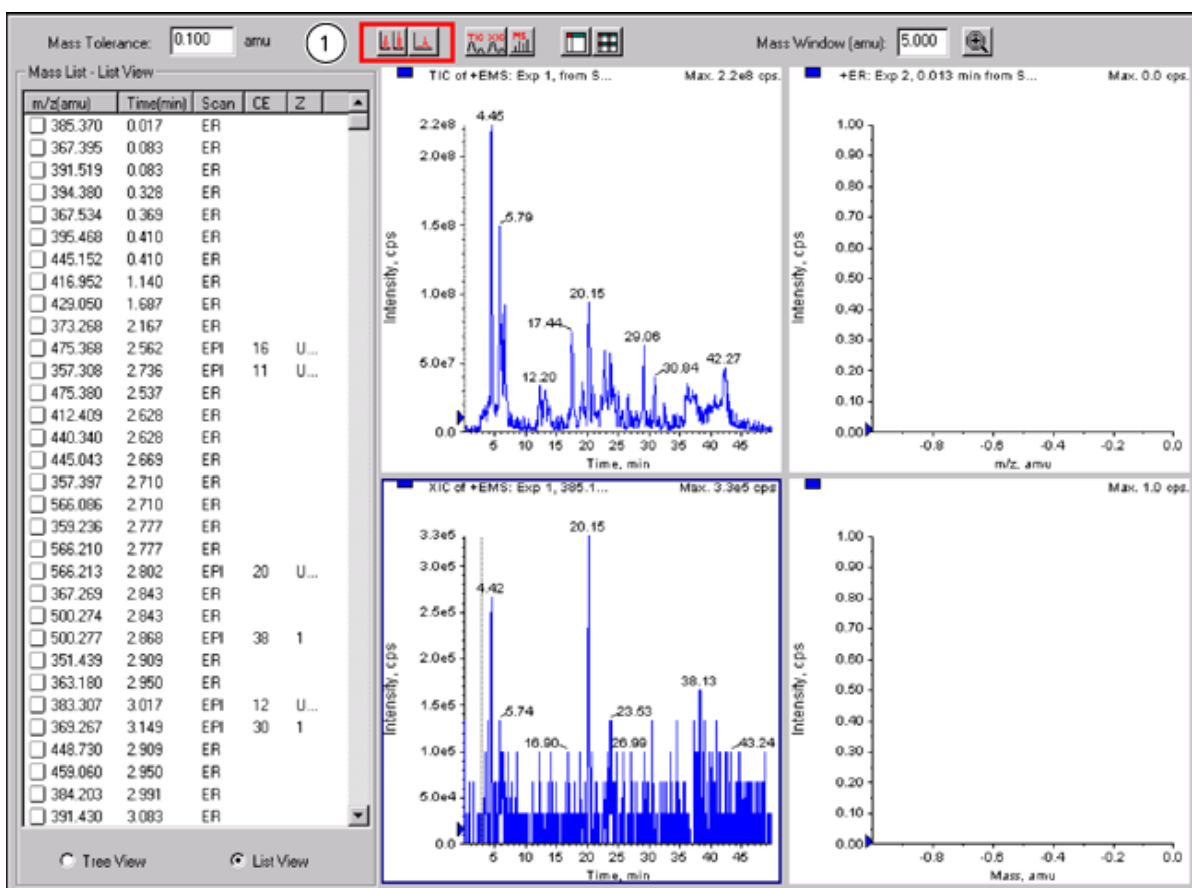
表 3-2 LIT 列选项

字段	描述
Excitation Energy (AF2)	（激发能量 (AF2)）显示 MS/MS/MS 实验中第二种前体离子的激发能量。
MS3 2nd Precursor (2nd Pre)	（MS3 第 2 前体 (2nd Pre)）显示 MS/MS/MS 第二种前体离子。
DFT (Dynamic Fill Time)	（DFT（动态填充时间））显示填充 LIT 所用的时间。

查看 IDA 数据

1. 确保已在 Analyst MD 软件中选择了 Example 项目。
2. 在导航栏上的 **Explore** 下，双击 **Open Data File**。
Select Sample 对话框即会打开。
3. 在 **Data Files** 字段中，双击 **LIT**，然后单击 **IDA BSA Digest.wiff**。
4. 在 **Samples** 列表中，单击一个样本，然后单击 **OK**。
此时会打开 IDA Explorer。窗格的左侧部分显示的是发送到条件性扫描的质量列表。要在视图之间切换，选择 Mass List 窗格底部的 **Tree View** 或 **List View**。窗格右侧包含关于 IDA 数据的图形信息。

图 3-1 单图和多图显示按钮



5. 使用图形上方的两个按钮（第 1 项）在单图形和多图形之间切换。如果只要查看当前活动图形，可单击显示一个图形的按钮。若要返回多图视图，单击显示两个图形的按钮。

提示! 若要进入 IDA Viewer 中不可用的 **Explore** 模式功能，单击图形上方的窗格中的 **Export Active Graph to Explorer** 和 **Export All Graphs to Explorer**，以在 Explore 窗口中打开当前图形。

在 IDA Explorer 未激活的情况下查看 IDA 数据

如果 IDA Explorer 未激活，IDA 数据便会在 Explore 窗口中打开。若要查看 IDA 数据，双击 X 轴下方的绿色箭头。

图 3-2 含所有扫描的 TIC 色谱图（IDA 数据箭头上有圆圈）

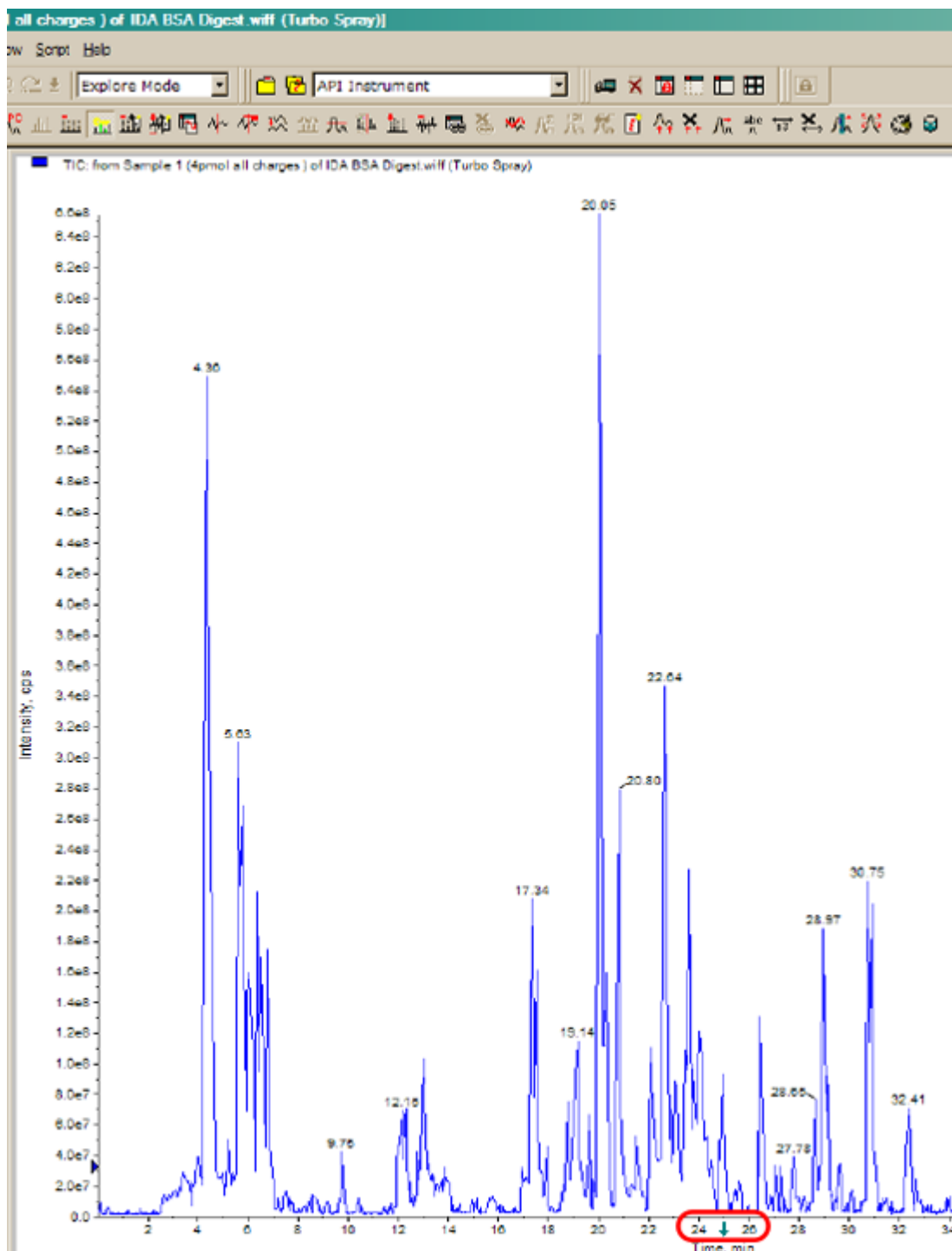
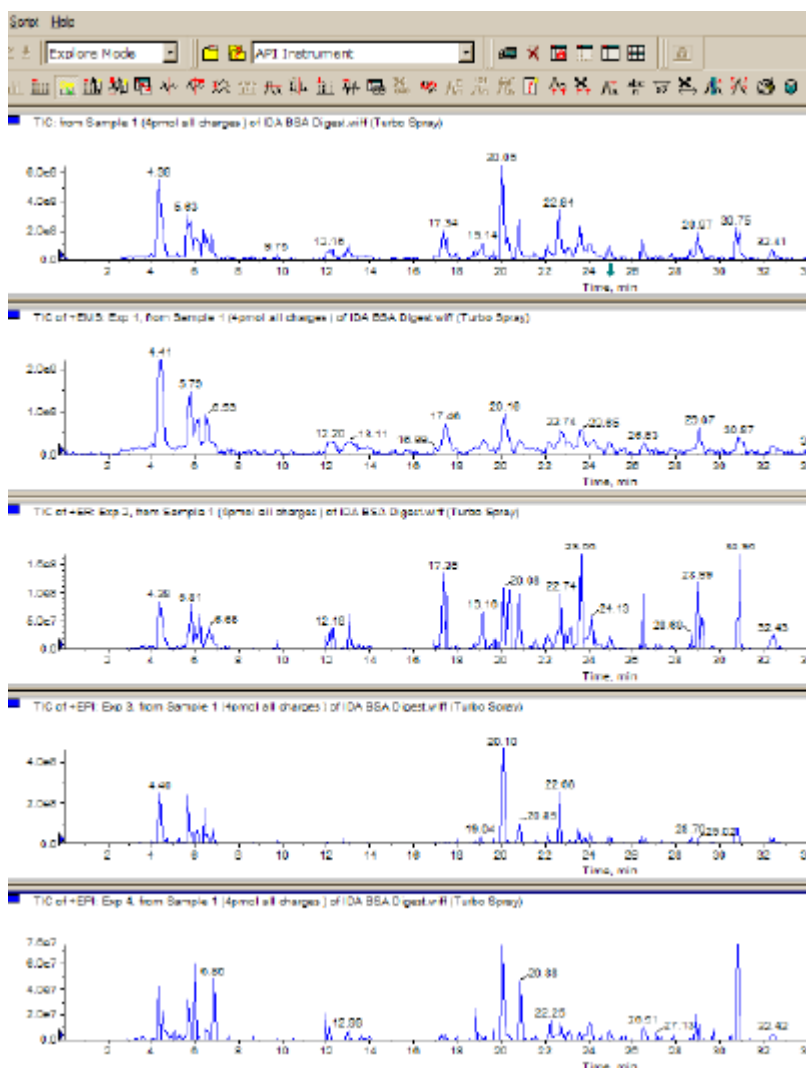


图 3-3 各 TIC 扫描和添加的 TIC 扫描



关于动态背景减除算法

动态背景减除 (Dynamic Background Subtraction, DBS) 算法可以增强 IDA 实验中前体离子的检测效果。在 IDA - First Level Criteria 选项卡中选择 **After Dynamic Background Subtraction of Survey scan** 复选框激活 DBS 之后, IDA 将使用经过背景减除的质谱选择 MS/MS 分析的候选离子, 而不是直接从全谱扫描质谱中选择前体离子。因为该过程发生在 LC 分析期间, DBS 算法可以在离子信号强度增大的情况下检测出离子, 从而可以重点监测并分析 LC 峰上升部分的前体离子, 直至 LC 峰的顶部 (最大强度)。

如果在使用 *Scheduled MRM* 算法作为全谱扫描的 IDA 方法中使用 DBS, 则 DBS 选项在 *Scheduled MRM* 实验中不可用, 但用于触发次要离子对和条件性扫描。

关于动态填充时间

DFT (动态填充时间) 是一种专门设计的功能, 旨在优化每个质谱中获取的、用于 LIT (线性离子阱) 功能的数据。DFT 可以根据来自离子源的离子流量, 自动调整用于填充 LIT 的时间。



对于强度较高的离子，填充时间会自动减少，以保证 LIT 没有被离子过度填充。对于强度较低的离子，填充时间会自动增加，以保证质谱中获得较好的离子统计结果。DFT 适用于以下扫描类型：

- 增强型 MS (EMS)
- 增强型分辨率 (ER)
- 增强型产物离子 (EPI)
- MS/MS/MS (MS³)

用户可以通过在 Analyst MD 软件中选择 **Tools > Settings > Method Options** 来调整 DFT 设置。

图标

表 3-3 Acquisition Method Editor 图标

图标	名称	描述
	质量规格	单击以在 Acquisition Method Editor 中显示 MS 选项卡。
	时段	右键单击可添加实验、添加 IDA Criteria Level 或删除时段。
	自动进样器	单击后打开 Autosampler Properties 选项卡。
	注射泵	单击后打开 Syringe Pump Properties 选项卡。
	柱温箱	单击后打开 Column Oven Properties 选项卡。
	阀	单击后打开 Valve Properties 选项卡。
	DAD	单击后打开 DAD Method Editor。
	ADC	单击后打开 ADC Properties 选项卡。

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。
