

---

# Logiciel Analyst MD

Tutoriel sur l'acquisition dépendante de l'information



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](http://Web.sciex.com/diagnostics).

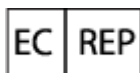
**Rx only.**

**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](http://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](http://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

---

<b>Chapitre 1 : Tutoriel sur l'acquisition dépendante de l'information.....</b>	<b>5</b>
À propos des méthodes IDA.....	5
Documentation connexe.....	6
Conditions préalables.....	6
 <b>Chapitre 2 : Créer des méthodes IDA.....</b>	 <b>7</b>
Créer une méthode IDA à l'aide de l'assistant de méthode IDA avec un système quadripolaire triple.....	7
Créer une méthode IDA à l'aide de l'IDA Method Wizard avec un système LIT.....	9
Créer une méthode IDA à l'aide de l'Acquisition Method Editor.....	11
Créer une méthode IDA en utilisant un balayage d'algorithme <i>Scheduled</i> MRM.....	13
Créer une méthode IDA en utilisant deux balayages <i>Scheduled</i> MRM.....	14
À propos de l'inversion de polarité.....	15
À propos des paramètres fictifs.....	16
Conséquences de l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM Pro sur les IDA.....	17
Créer une méthode d'acquisition IDA avec l'algorithme <i>Scheduled</i> MRM Pro.....	17
Créer une méthode IDA avec l'algorithme <i>Scheduled</i> Ionization.....	18
 <b>Chapitre 3 : Visualiser les données IDA.....</b>	 <b>19</b>
Régler les options d'IDA Explorer.....	19
Visualiser les données IDA.....	20
Visualiser les données IDA si l'IDA Explorer est inactif.....	21
À propos de l'algorithme Dynamic Background Subtraction.....	23
À propos de la durée de remplissage dynamique.....	24
Icônes.....	24
 <b>Nous contacter.....</b>	 <b>26</b>
Formation destinée aux clients.....	26
Centre d'apprentissage en ligne.....	26
Assistance technique SCIEX.....	26
Cybersécurité.....	26
Documentation.....	26

## À propos des méthodes IDA

Une méthode IDA exécute automatiquement des expériences en fonction des résultats obtenus lors d'expériences précédentes dans la même période. Utilisez les critères IDA pour optimiser les paramètres d'acquisition de données tout en acquérant des données, ce qui réduit la durée d'acquisition de l'échantillon en une seule injection. IDA conserve à la fois la quantité d'échantillon requise et un temps de travail précieux.

Créez une méthode IDA avec au maximum deux balayages d'exploration et huit balayages dépendants dans une seule période. Un balayage d'exploration est utilisé dans la méthode IDA pour déclencher des expériences supplémentaires. N'importe lequel des balayages suivants peut être utilisé comme balayage d'exploration :

- Q3 MS
- MS amélioré (EMS)
- MRM
- Perte neutre (NL)
- Ions précurseurs (Prec)
- Ion produit amélioré (EPI) (balayage d'exploration de second niveau)
- Algorithme *Scheduled* MRM

Les balayages suivants sont des balayages dépendants :

- EPI
- MS/MS/MS (MS3) (balayage dépendant de second niveau)

Lors d'une expérience IDA, les actions du spectromètre de masse diffèrent d'un balayage à l'autre en fonction des données acquises lors d'un balayage précédent. Le logiciel analyse les données au fur et à mesure de leur acquisition, puis détermine les masses sur lesquelles réaliser des balayages dépendants. Définissez les critères d'activation d'une expérience IDA ainsi que les paramètres de méthode à utiliser.

La méthode IDA modifie les expériences et améliore les résultats en fonction des critères suivants définis par l'utilisateur :

- Intensité ionique et état de la charge
- Listes d'inclusion et d'exclusion
- Motif isotopique
- Exclusion dynamique

Si la polarité n'est pas inversée lors du cycle, le nombre d'expériences dépendantes doit correspondre au nombre d'ions les plus intenses dans l'onglet IDA Criteria.

## Documentation connexe

- Guide de l'utilisateur du système pour le spectromètre de masse
- *Guide de l'utilisateur avancé*
- *Tutoriel de l'algorithme Scheduled MRM*
- Aide du logiciel Analyst MD

## Conditions préalables

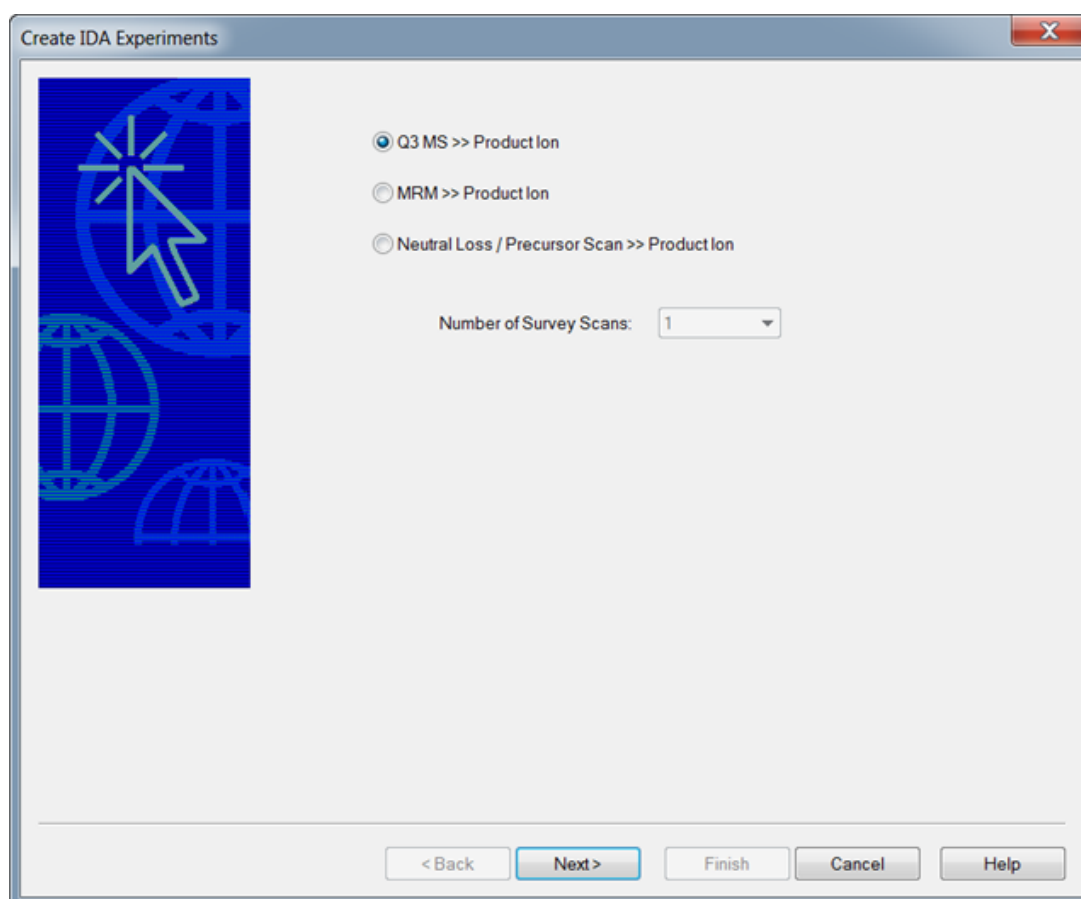
Conditions préalables
Les utilisateurs doivent être en mesure de : <ul style="list-style-type: none"><li>• Créer une méthode d'acquisition</li><li>• Envoyer un lot</li></ul>

Utilisez l'assistant de méthode IDA pour créer des méthodes d'acquisition LIT (piège à ions linéaire) et IDA quadripolaires triples. Vous pouvez utiliser n'importe quelle combinaison de deux balayages d'exploration. Si vous sélectionnez le balayage d'exploration EPI, l'onglet IDA–Second Level Criteria est disponible. Si ces expériences d'exploration sont utilisées, il est impossible de définir un autre niveau de critère IDA.

## Créer une méthode IDA à l'aide de l'assistant de méthode IDA avec un système quadripolaire triple

1. Dans la barre de navigation, sous **Acquire**, double-cliquez sur **IDA Method Wizard**.

**Illustration 2-1 : Page Create IDA Experiments**



2. Sélectionnez le type de balayage **Neutral Loss / Precursor Scan >> Product Ion**.

## Créer des méthodes IDA

---

3. Dans la liste **Number of Survey Scans**, sélectionnez le nombre de balayages à réaliser, puis cliquez sur **Next**.  
La page Survey Scan s'ouvre. La présentation de cette page dépend du balayage sélectionné.
4. Réglez les paramètres, puis cliquez sur **Next**.  
La page Dependent Scan – Product Ion s'ouvre.
5. Sélectionnez le nombre de pics à contrôler, définissez les paramètres de balayage, puis cliquez sur **Next**.  
La page Dependent Scan – IDA Criteria s'ouvre.

---

**Remarque :** Assurez-vous que la plage IDA est la même que celle du balayage d'exploration ou qu'elle se trouve dans la plage de ce dernier.

---

6. Pour préciser la plage de masses ioniques, saisissez ses limites inférieures et supérieures. Un balayage dépendant sera réalisé pour les masses situées dans cette plage.
7. Dans le champ **Which exceed**, saisissez le nombre de comptes minimum par seconde requis pour déclencher un balayage dépendant.
8. Dans le groupe **Exclude Former Target Ions**, effectuez l'une des opérations suivantes :
  - Pour ignorer tous les anciens ions cibles apparaissant dans l'expérience IDA, sélectionnez **Always**.
  - Pour ignorer tous les anciens ions cibles après un nombre spécifié d'occurrences, sélectionnez **Always** et **After**, puis saisissez le nombre d'occurrences.
  - Pour ignorer les anciens ions cibles pendant une période spécifiée, sélectionnez **For**, puis saisissez le nombre de secondes pendant lesquelles les ions seront ignorés.
  - Pour ignorer les anciens ions cibles pendant une période après un nombre d'occurrences, sélectionnez **For**, puis saisissez le nombre de secondes pendant lesquelles les ions seront ignorés. Sélectionnez **After**, puis saisissez le nombre d'occurrences.

---

**Conseil !** Pour reconnaître tous les anciens ions cibles dans l'expérience IDA, suivez l'assistant et, dans l'onglet IDA - First Level Criteria de l'éditeur Acquisition Method, sous **Exclude former target ions**, cliquez sur **Never**.

---

9. Pour exclure les anciens ions cibles après un nombre spécifié d'occurrences, dans le groupe **Exclude Former Target Ions**, sélectionnez **After X occurrences**, puis saisissez le nombre de visualisations possibles d'un ancien ion cible avant qu'il ne soit exclu des balayages futurs.
10. Cliquez sur **Finish**.  
L'expérience IDA s'ouvre automatiquement dans l'éditeur Acquisition Method. Les méthodes LC et d'autres critères IDA, par exemple les listes d'inclusion et d'exclusion, peuvent désormais être modifiés.
11. Examinez la méthode MS et modifiez les paramètres et d'autres critères IDA, si nécessaire.



12. Ajoutez les appareils s'ils ne sont pas déjà inclus, puis mettez à jour tous les paramètres pertinents.

---

**Conseil !** Tous les paramètres de la source d'ions/du gaz peuvent être mis à jour. Dans l'onglet MS, cliquez sur **Edit Parameters**. Dans l'onglet , saisissez les valeurs appropriées, puis cochez la case **Source/Gas** dans la partie inférieure pour appliquer les paramètres à l'ensemble des expériences.

---

13. Enregistrez le fichier de méthode d'acquisition.

## Créer une méthode IDA à l'aide de l'IDA Method Wizard avec un système LIT

1. Dans la barre de navigation, sous **Acquire**, double-cliquez sur **DA Method Wizard**. La page Create IDA Experiments s'ouvre.
2. Dans le groupe **Type of IDA Experiment**, sélectionnez le type de balayage d'exploration, puis cliquez sur **Next**.
3. Si le type de balayage **Neutral Loss / Precursor Scan >> Enhanced Product** est sélectionné, dans la liste **Number of Survey Scans**, sélectionnez le nombre de balayages à effectuer.
4. Pour confirmer que l'expérience IDA a acquis des données qui correspondent à l'état de charge spécifié par l'utilisateur ou au modèle isotopique avant de réaliser le balayage dépendant, cochez la case **Use Enhanced Resolution Scan to confirm Charge State and Isotope Pattern**.
5. Pour ajouter un balayage MS3 à l'expérience, cochez la case **Enable MS3 Experiment generation**.
6. Pour que le logiciel calcule dynamiquement le temps de remplissage approprié au LIT, vérifiez que la case **Dynamic Fill Time** est cochée.
7. Cliquez sur **Next**.  
La page Survey Scan s'ouvre. La présentation de cette boîte de dialogue varie en fonction du balayage d'exploration sélectionné.
8. Modifiez les paramètres en fonction du type de balayage sélectionné, puis cliquez sur **Next**.  
La page Dependent Scan - Enhanced Product Ion (EPI) s'ouvre.
9. Sélectionnez le nombre de pics à contrôler, définissez les paramètres de balayage, puis cliquez sur **Next**.  
La page Dependent Scan – IDA Criteria s'ouvre.
10. Pour préciser la page de masses ioniques, saisissez ses limites inférieures et supérieures. Un balayage dépendant sera réalisé pour les masses situées dans cette plage.
11. Dans le champ **Which exceed**, saisissez le nombre de comptes minimum par seconde requis pour déclencher un balayage dépendant.

## Créer des méthodes IDA

---

12. Pour spécifier la plage d'état de charge de l'expérience IDA, cochez la case **With charge state X to Y charges**, puis cliquez sur les états de charge.

---

**Conseil !** L'état de charge dépend de la détermination adéquate du rapport isotopique. Un balayage ER doit donc être utilisé pour confirmer l'état de charge.

---

13. Pour inclure des pics avec des états de charge inconnus, cochez la case **Include unknowns**.
14. Dans le groupe **Exclude Former Target Ions**, effectuez l'une des opérations suivantes :
- Pour ignorer tous les anciens ions cibles apparaissant dans l'expérience IDA, sélectionnez **Always**.
  - Pour reconnaître tous les anciens ions cibles apparaissant dans l'expérience IDA, sélectionnez **Never**.
  - Pour ignorer les anciens ions cibles pendant une période spécifiée, sélectionnez **For**, puis saisissez le nombre de secondes pendant lesquelles les ions seront ignorés.
  - Pour ignorer les anciens ions cibles pendant une période après un nombre d'occurrences, sélectionnez **For**, puis saisissez le nombre de secondes pendant lesquelles les ions seront ignorés. Sélectionnez **After**, puis saisissez le nombre d'occurrences.
  - Pour ignorer tous les anciens ions cibles après un nombre spécifié d'occurrences, sélectionnez **Always** et **After**, puis saisissez le nombre d'occurrences.
15. Pour exclure les anciens ions cibles après un nombre spécifié d'occurrences, dans le groupe **Exclude Former Target Ions**, sélectionnez **After X occurrences**, puis saisissez le nombre de visualisations possibles d'un ancien ion cible avant qu'il ne soit exclu des balayages futurs.
16. Cliquez sur **Finish**.  
L'expérience IDA s'ouvre automatiquement dans l'éditeur Acquisition Method. Les méthodes LC et d'autres critères IDA, par exemple les listes d'inclusion et d'exclusion, peuvent désormais être modifiés.
17. Examinez la méthode MS et modifiez les paramètres et d'autres critères IDA, si nécessaire.
18. Ajoutez les appareils s'ils ne sont pas déjà inclus, puis mettez à jour tous les paramètres pertinents.

---

**Conseil !** Tous les paramètres de la source d'ions/du gaz peuvent être mis à jour. Dans l'onglet MS, cliquez sur **Edit Parameters**. Dans l'onglet , saisissez les valeurs appropriées, puis cochez la case **Source/Gas** dans la partie inférieure pour appliquer les paramètres à l'ensemble des expériences.

---

19. Enregistrez le fichier de méthode d'acquisition.

# Créer une méthode IDA à l'aide de l'Acquisition Method Editor

---

**Remarque :** Les expériences doivent être saisies dans l'ordre où elles doivent être bouclées. Il est impossible d'insérer des expériences entre des expériences existantes.

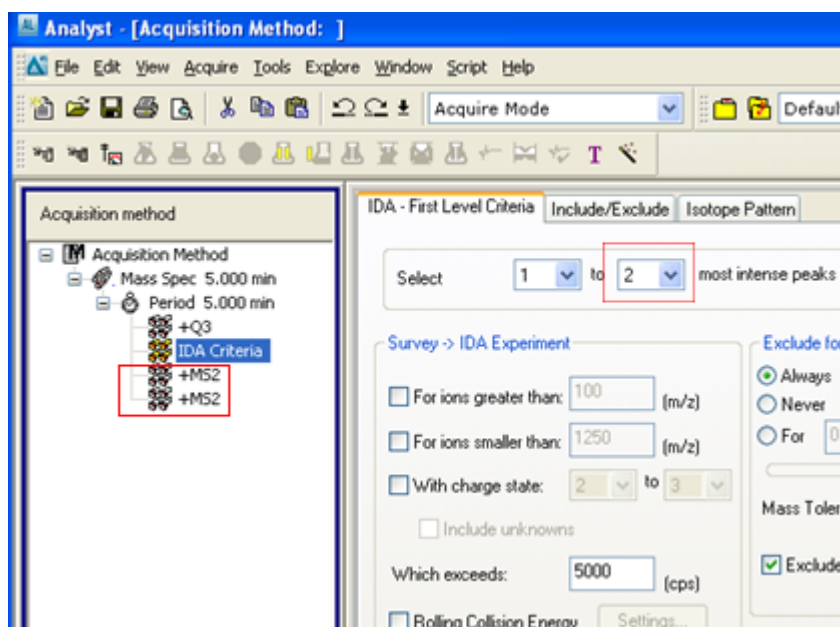
---

**Conseil !** Pour réduire la nécessité d'inversion de polarité et minimiser la durée du cycle, regroupez toutes les expériences dépendantes positives ensemble et toutes les expériences dépendantes négatives ensemble dans une période.

---

1. Dans la barre de navigation, sous **Acquire**, double-cliquez sur **Build Acquisition Method**.
2. Créez une méthode d'acquisition avec un ou deux balayages d'exploration.
3. Sélectionnez le balayage d'exploration, puis les paramètres adéquats.
4. Pour utiliser un balayage Enhanced Resolution et confirmer l'état de charge ou le modèle isotopique sélectionnés sur un système QTRAP, procédez comme suit :
  - Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'icône **Period**, puis cliquez sur **Add experiment**.
  - Dans l'onglet MS, dans la liste **Scan type**, cliquez sur **Enhanced Resolution (ER)**.
  - Saisissez les informations appropriées au balayage Enhanced Resolution.
5. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'icône **Period**, puis cliquez sur **Add IDA Criteria Level**.
6. Dans les champs **Select X to Y most intense peaks**, définissez la plage des pics d'ions les plus intenses que l'expérience IDA doit surveiller. Pour l'IDA à une exploration, le nombre total de pics contrôlés doit être égal au nombre d'expériences dépendantes spécifiées. Pour l'IDA à deux explorations avec inversion de polarité dans les balayages d'exploration, le nombre d'expériences dépendantes doit être deux fois plus élevé que le nombre total de pics à contrôler, avec la moitié d'entre eux dans une polarité et l'autre moitié dans la polarité opposée.

### Illustration 2-2 : Exemple de méthode IDA avec deux types de balayage dépendants et deux ions les plus intenses



7. Si un balayage ER (Enhanced Resolution) est utilisé, ajoutez un paramètre fictif pour chaque pic surveillé.  
Pour les paramètres fictifs ER, inscrire 1 dans la fenêtre centrale (amu 0). Si 4 pics sont surveillés, il y aura 4 lignes numérotées 1, 2, 3 et 4 dans la colonne centrale. Pour plus d'informations, consultez la section [À propos des paramètres fictifs](#).
8. Si un balayage ER est utilisé pour confirmer l'état de la charge ou le modèle isotopique sélectionné ou pour rétablir la précision de masse, cochez la case **Use Enhanced Resolution Scan to confirm Charge State OR Isotope Pattern Selection** dans l'onglet IDA - First Level Criteria.
9. Attribuez les valeurs requises aux autres paramètres de l'onglet IDA - First Level Criteria.
10. Le cas échéant, dans l'onglet Include/Exclude, modifiez la liste appropriée pour cocher les cases **Include List** ou **Exclude List**, puis spécifiez les ions cibles ou excluez les ions.
11. Le cas échéant, dans l'onglet Exclude/Exclude, cochez la case **Match Isotopes**, puis spécifiez le modèle de distribution isotopique sur lequel s'aligner.
12. Pour la première expérience dépendante à ajouter (une pour chaque pic contrôlé par les critères IDA de premier niveau), procédez comme suit :
  - a. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'icône **Period**, puis cliquez sur **Add experiment**.  
Une expérience est ajoutée sous les critères IDA.
  - b. Saisissez les informations correspondant au balayage dépendant.

---

**Conseil !** Si plusieurs balayages dépendants sont utilisés, cliquez avec le bouton droit sur le balayage EPI, puis sélectionnez **Copy this experiment** jusqu'à ce que le nombre correct de balayages dépendants soient inclus. Si vous copiez une expérience au lieu de l'ajouter, les mêmes paramètres sont copiés dans les nouveaux balayages dépendants.

---

13. Ouvrez la méthode.
14. Ajoutez le matériel et mettez à jour tous les paramètres pertinents.
15. Enregistrez le fichier de méthode d'acquisition.

## Créer une méthode IDA en utilisant un balayage d'algorithme *Scheduled* MRM

Dans cet exemple, créez une méthode IDA qui recherchera l'ion le plus intense à partir du type de balayage d'exploration. La méthode d'acquisition contiendra un balayage d'exploration et un balayage dépendant.

Pour créer une méthode comportant plusieurs balayages dépendants, vérifiez que le nombre de pics intenses correspond au nombre de balayages dépendants dans l'onglet IDA Criteria (applicable uniquement à l'IDA à une exploration). Par exemple, si la méthode contient trois balayages dépendants, sélectionnez 1 à 3 pics les plus intenses.

1. Créez une expérience *Scheduled* MRM. Consultez le document *Tutoriel pour l'algorithme Scheduled MRM*.

---

**Remarque :** Lorsque l'option Target Cycle Time est sélectionnée pour l'expérience *Scheduled* MRM, la durée cible de cycle s'applique uniquement à l'expérience *Scheduled* MRM, et non à toutes les expériences de la méthode d'acquisition IDA.

---

---

**Conseil !** Pour ajouter un type de balayage ER, ajoutez-le avant les critères IDA.

---

2. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'icône **Period**, puis cliquez sur **Add IDA Criteria Level**.
3. Spécifiez les paramètres **IDA Criteria**.
4. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'icône **Period**, puis cliquez sur **Add experiment**.
5. 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.

---

6. Précisez les paramètres de l'expérience.
7. Enregistrez la méthode d'acquisition dans le projet à partir duquel l'acquisition sera réalisée.

## Créer une méthode IDA en utilisant deux balayages *Scheduled* MRM

Pour cet exemple, créer une méthode IDA qui recherche les deux ions les plus intenses à partir des deux expériences de balayage d'exploration combinées. L'exemple de méthode d'acquisition comprend deux expériences de balayage d'exploration et quatre expériences de balayage dépendant.

---

**Conseil !** Si la polarité est modifiée pendant les types de balayage d'exploration, consultez la section [À propos de l'inversion de polarité](#).

---

**Remarque :** Pour une méthode d'acquisition IDA à deux explorations, deux expériences MRM ou deux expériences EMS (Enhanced MS) peuvent également être utilisées pour les balayages d'exploration.

---

1. Créez une expérience *Scheduled* MRM. Consultez les étapes 1 à 7 dans *Créer une méthode d'acquisition avec l'algorithme Scheduled MRM* dans le document *Tutoriel pour l'algorithme Scheduled MRM*.
2. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'icône **Period**, puis cliquez sur **Add experiment**.  
Un second balayage MRM est créé. Réglez-le sur la polarité opposée.
3. Cochez la case **Enabled** dans le groupe **Scheduled MRM** pour créer une autre expérience *Scheduled* MRM. Consultez le document *Tutoriel pour l'algorithme Scheduled MRM*.
4. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'icône **Period**, puis cliquez sur **Add IDA Criteria Level**.
5. Spécifiez les paramètres **IDA Criteria**.
6. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'icône **Period**, puis cliquez sur **Add experiment**.
7. 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.

---

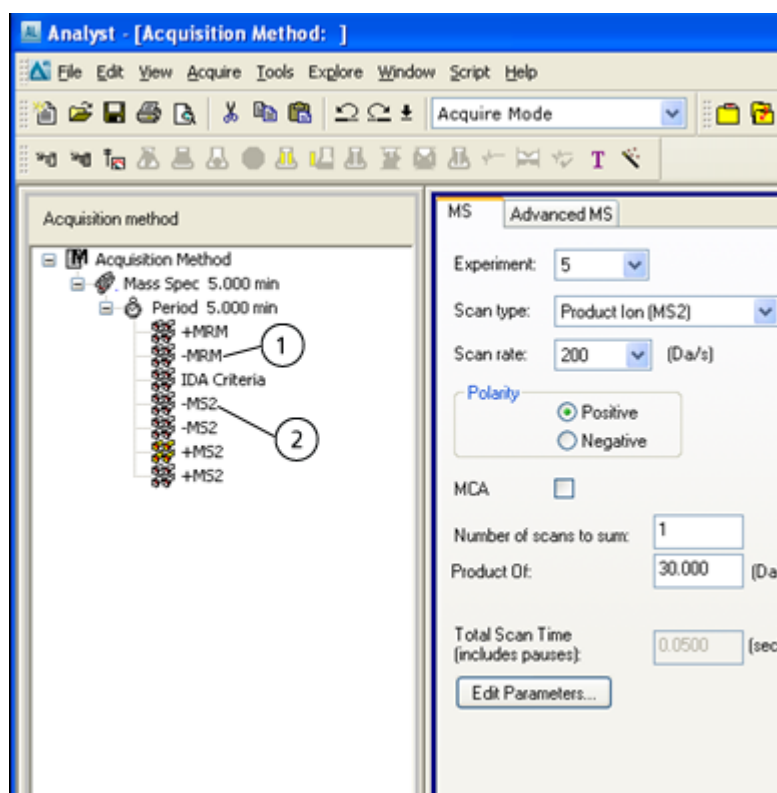
8. Précisez les paramètres de l'expérience.
9. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur l'expérience **MS2** ou **EPI**, puis cliquez sur **Copy this experiment**.
10. Répétez l'étape 9 deux fois. Vérifiez que la polarité est définie comme indiqué dans la section [À propos de l'inversion de polarité](#).
11. Enregistrez la méthode d'acquisition dans le projet à partir duquel l'acquisition sera réalisée.

## À propos de l'inversion de polarité

Si les balayages d'exploration ont des polarités différentes, veillez à ce que la méthode d'acquisition soit configurée comme suit :

1. Vérifiez que la polarité du *premier* type de balayage dépendant est identique à celle du *dernier* type de balayage d'exploration.

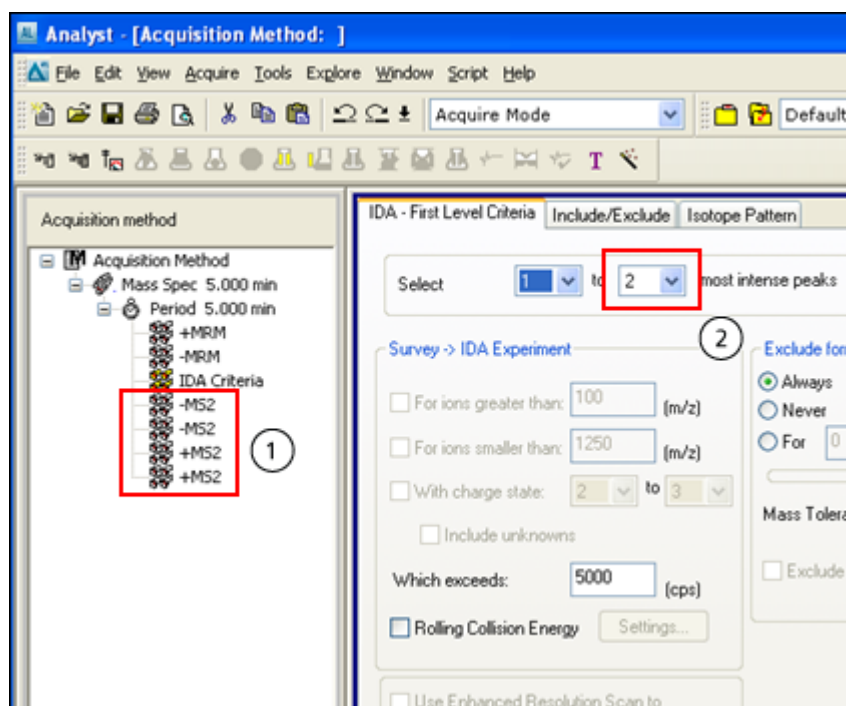
**Illustration 2-3 : Exemple de types de balayage configurés pour une inversion de polarité**



Élément	Description
1	Dernier balayage d'exploration
2	Premier balayage dépendant

2. Créez une méthode d'acquisition contenant un nombre de balayages dépendants deux fois plus élevé que le nombre d'ions les plus intenses. Par exemple, pour rechercher les deux ions les plus intenses, incluez quatre types de balayage dépendant.

**Illustration 2-4 : Exemple de types de balayage dépendant et nombre d'ions les plus intenses**



Élément	Description
1	Types de balayage dépendant (quatre)
2	Ions les plus intenses (deux)

**Remarque :** Les candidats sélectionnés ne sont déclenchés que dans les expériences dépendantes ayant la même polarité. Les balayages dépendants dans lesquels un candidat n'est pas assigné ne sont pas exécutés pour ce cycle. Au maximum la moitié des expériences dépendantes sont déclenchées dans un cycle.

- Vérifiez que la polarité de chaque expérience de balayage dépendant est la même que celle de l'expérience précédente, puis réglez le temps de stabilisation sur zéro.

## À propos des paramètres fictifs

Les paramètres fictifs sont des nombres génériques utilisés lors des balayages qui seront remplacés par des nombres précis. Le logiciel remplace la valeur du paramètre fictif par une valeur précise émanant du processus de sélection IDA. Les paramètres fictifs sont essentiels pour que les méthodes IDA fonctionnent correctement.

Lors de la première sélection de certaines expériences, les valeurs des paramètres fictifs sont ajoutées automatiquement.

- NL, Prec et EPI = 30
- MS/MS/MS



- First Precursor = 30
- Second Precursor = 10

Le balayage ER utilise également des paramètres fictifs.

- Les paramètres fictifs commencent à 1 sur la première ligne d'une méthode IDA. Chaque ligne suivante augmente de 1 jusqu'au maximum de 8 lignes.
- Si vous utilisez l'IDA Method Wizard, celui-ci ajoute automatiquement le nombre correct de paramètres fictifs ER.

## 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. Consultez le document *Tutoriel pour l'algorithme Scheduled MRM*.
2. Le cas échéant, ajoutez une expérience de balayage ER avant d'ajouter un niveau de critère IDA dans la période.
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 la section [Créer des méthodes IDA](#).
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. Précisez les paramètres de l'expérience.
8. Enregistrez la méthode d'acquisition dans le projet à partir duquel l'acquisition sera réalisée.

**Remarque :** Durant l'acquisition de données à l'aide d'une méthode IDA avec l'algorithme *Scheduled MRM Pro*, le seuil de déclenchement de chaque transition MRM de la méthode est utilisé plutôt que le seuil IDA.

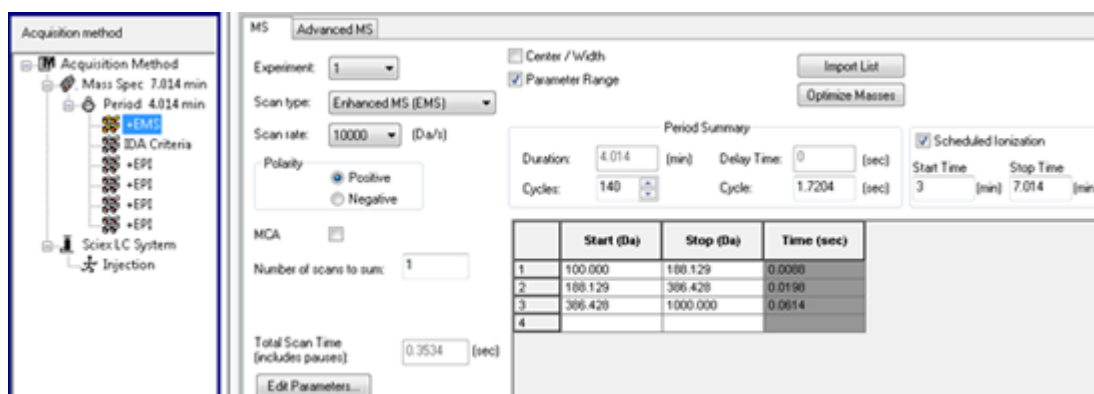
## Créer une méthode IDA avec l'algorithme Scheduled Ionization

1. Créez une méthode IDA manuellement dans le Method Editor ou automatiquement avec l'**IDA Method Wizard**.
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**. Vérifiez également que le champ **Synchronization Mode** et la partie LC de la méthode d'acquisition sont configurés de la même manière que si **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 **LC Synchronization Mode** est utilisé et que la méthode LC a une durée de 10 minutes. Tous les pics concernés s'éluent après 3 minutes et avant 7 minutes. Une tension **IonSpray** de 0 sera appliquée avant le **Start Time** et après le **Stop Time**. La valeur d'**IonSpray** définie dans la méthode n'est appliquée qu'entre **Start Time** et **Stop Time**. La fonctionnalité **Scheduled Ionization** peut réduire le risque 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 2-5 : Scheduled Ionization



4. Enregistrez la méthode d'acquisition.

Si les données sont acquises avec une méthode IDA, elles ne s'ouvrent pas dans l'IDA Viewer avant la fin de l'acquisition. Mais elles s'ouvrent dans la fenêtre Explore pendant l'acquisition.

Pour faciliter l'affichage des données IDA, configurez IDA Explorer comme visionneuse par défaut. Utilisez l'onglet IDA Explorer dans la boîte de dialogue Appearance Options pour visualiser les données IDA dans l'IDA Explorer. Les utilisateurs peuvent aussi sélectionner les colonnes du volet Mass-List List. L'IDA Explorer est préconfiguré pour afficher les échantillons IDA.

## Régler les options d'IDA Explorer

1. Cliquez sur **Tools > Settings > Appearance Options..**  
La boîte de dialogue Appearance Options s'ouvre.
2. Cliquez sur l'onglet IDA Explorer.
3. Cochez la case **Use IDA Explorer to Display IDA Samples.**
4. Dans la section **Column Options**, cochez les cases suivantes selon le cas :

**Tableau 3-1 : Options de colonne**

Champ	Description
<b>Intensity</b>	(Intensity) Affiche l'intensité d'un rapport $m/z$ précis.
<b>Molecular Weight (MW)</b>	(Molecular Weight (MW)) Affiche le poids moléculaire calculé pour un rapport $m/z$ précis.
<b>Scan</b>	(Scan) Affiche le type de balayage utilisé pour un rapport $m/z$ précis.
<b>Collision Energy (CE)</b>	(Collision Energy (CE)) Affiche l'énergie de collision pour un rapport $m/z$ précis.
<b>Charge (Z)</b>	(Charge (Z)) Affiche la charge d'un ion précis.

5. Sur un système LIT, dans la section **LIT Column Options**, cochez les cases suivantes selon le cas :

**Tableau 3-2 : Options de colonne LIT**

Champ	Description
<b>Excitation Energy (AF2)</b>	(Excitation Energy (AF2)) Affiche l'énergie d'excitation du second ion précurseur dans les expériences MS/MS/MS.
<b>MS3 2nd Precursor (2nd Pre)</b>	(MS3 2nd Precursor (2nd Pre)) Affiche le second ion précurseur MS/MS/MS.

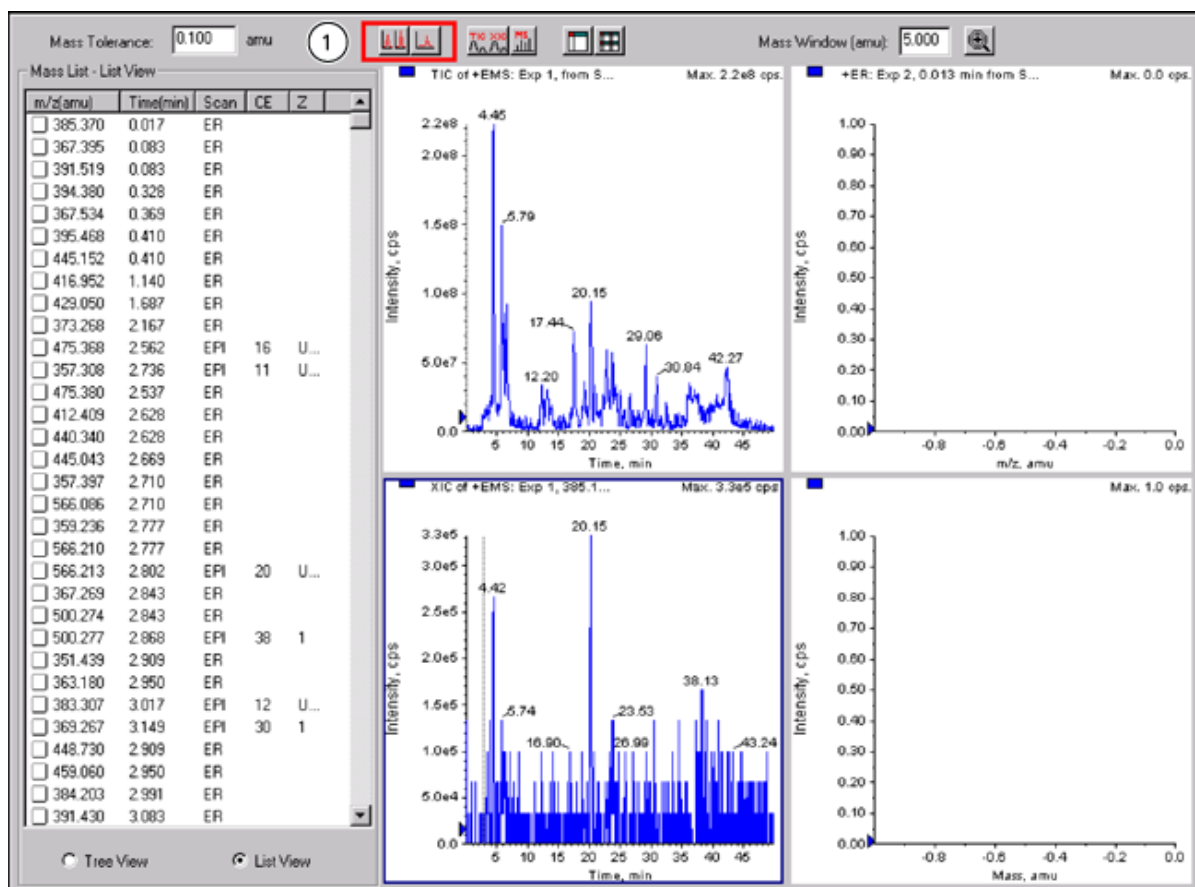
Tableau 3-2 : Options de colonne LIT (suite)

Champ	Description
<b>DFT (Dynamic Fill Time)</b>	(DFT (Dynamic Fill Time)) Affiche la durée nécessaire pour remplir le LIT.

## Visualiser les données IDA

1. Vérifiez que le projet Example est sélectionné dans le logiciel Analyst MD.
2. Dans la barre de navigation, sous **Explore**, double-cliquez sur **Open Data File**. La boîte de dialogue Select Sample s'ouvre.
3. Dans le champ **Data Files**, double-cliquez sur **LIT**, puis cliquez sur **IDA BSA Digest.wiff**.
4. Dans la liste **Samples**, cliquez sur un échantillon, puis cliquez sur **OK**. L'IDA Explorer s'ouvre. La partie gauche du volet affiche la liste des masses envoyées au balayage dépendant. Pour basculer entre les vues, sélectionnez **Tree View** ou **List View** en bas du volet Mass List. La partie droite du volet contient des informations graphiques à propos des données IDA.

Illustration 3-1 : Boutons d'affichage de graphique simple et de graphique multiple



5. Utilisez les deux boutons (élément 1) au-dessus du graphique pour permuter entre l'affichage d'un seul graphique et de plusieurs graphiques. Pour visualiser le graphique actif uniquement, cliquez sur le bouton permettant de visualiser un seul graphique. Pour retourner à la vue de graphiques multiples, cliquez sur le bouton permettant d'afficher deux graphiques.

---

**Conseil !** Pour accéder aux fonctions du mode **Explore** qui ne sont pas disponibles dans l'IDA Viewer, cliquez sur **Export Active Graph to Explorer** et sur **Export All Graphs to Explorer** dans le volet au-dessus des graphiques afin d'ouvrir ces derniers dans la fenêtre Explore.

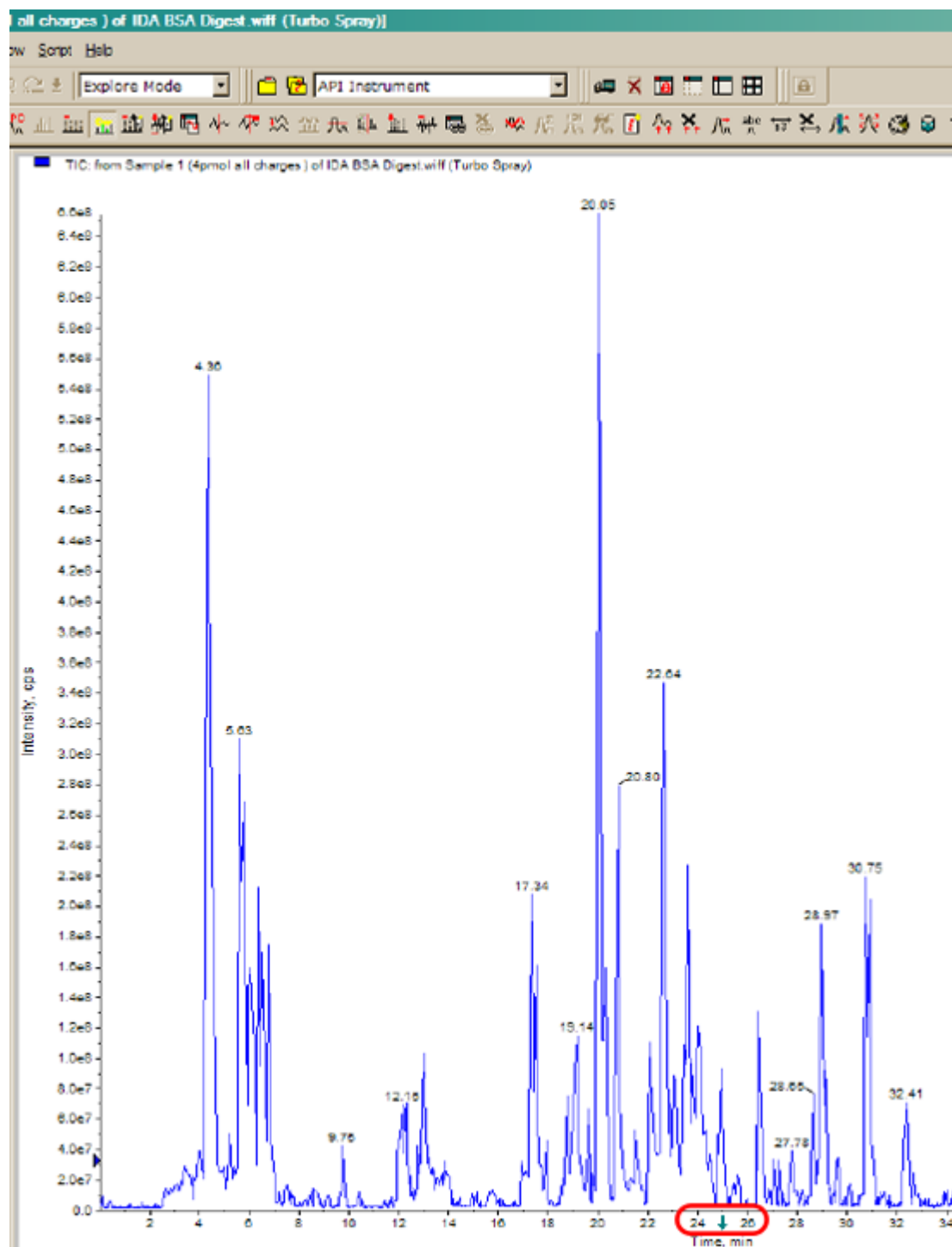
---

## Visualiser les données IDA si l'IDA Explorer est inactif

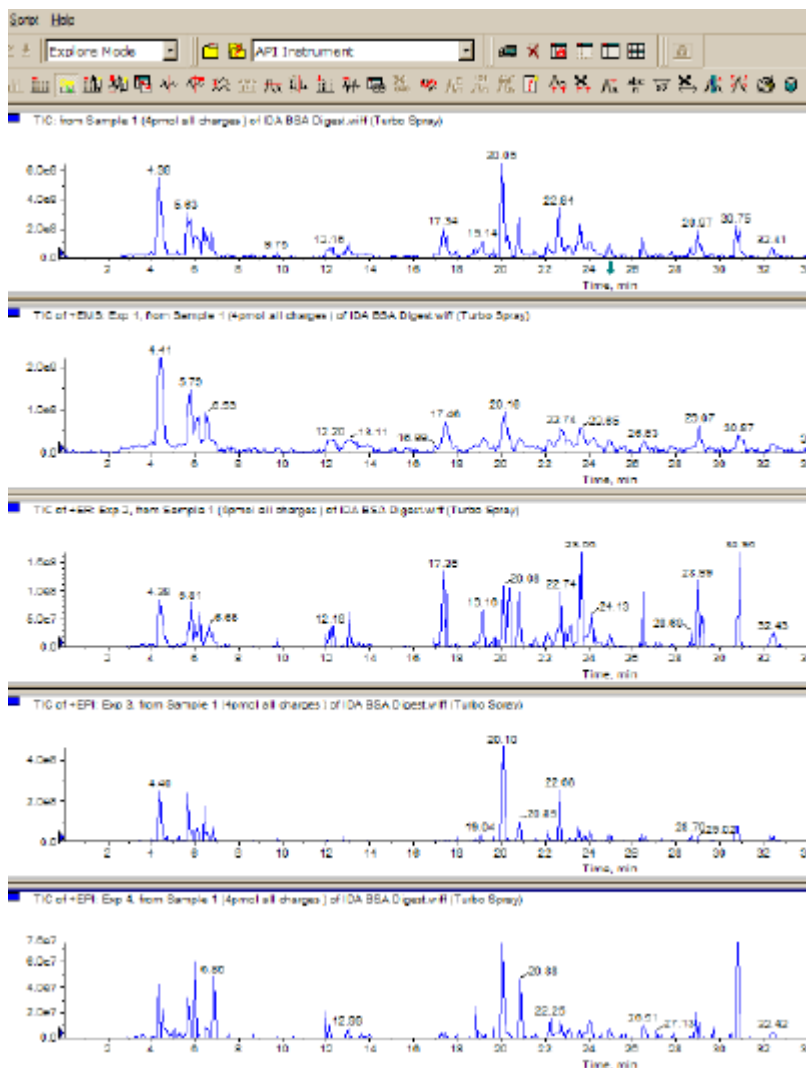
Si l'IDA Explorer est inactif, les données IDA s'ouvrent alors dans la fenêtre Explore. Pour afficher les données IDA, double-cliquer sur la flèche verte au bas de l'axe des abscisses.

## Visualiser les données IDA

Illustration 3-2 : TIC contenant tous les balayages (flèche de données IDA entourée)



### Illustration 3-3 : Balayages TIC individuels et supplémentaires



## À propos de l'algorithme Dynamic Background Subtraction

L'algorithme Dynamic Background Subtraction (DBS) améliore la détection des ions précurseurs lors d'une expérience IDA. Lorsque l'algorithme DBS est activé en cochant la case **After Dynamic Background Subtraction of Survey scan** dans l'onglet IDA– First Level Criteria, l'IDA utilise un spectre dont le bruit de fond a été soustrait afin de sélectionner l'ion candidat pertinent pour l'analyse MS/MS au lieu de sélectionner directement le précurseur dans le spectre d'exploration. Ce processus ayant lieu au cours d'une analyse LC, l'algorithme DBS détecte les espèces, car l'intensité de leur signal augmente, en se concentrant donc sur la détection et l'analyse des ions précurseurs sur la partie montante du pic LC jusqu'en haut des pics LC (intensité maximale).

Lorsque DBS est utilisé dans une méthode IDA avec l'algorithme *Scheduled MRM* en tant que balayages d'exploration, l'option DBS n'est alors pas disponible dans les expériences

*Scheduled* MRM, mais elle sert à déclencher à la fois les transitions secondaires et les balayages dépendants.

## À propos de la durée de remplissage dynamique

La fonction DFT (durée de remplissage dynamique) est conçue spécialement pour optimiser les données obtenues dans chaque spectre pour les fonctions LIT. Elle adapte automatiquement la durée utilisée pour remplir le LIT en fonction du flux d'ions provenant de la source.

Pour des ions plus intenses, la durée de remplissage est automatiquement réduite de façon à ce que le LIT ne soit pas trop rempli d'ions. Pour des ions moins intenses, la durée de remplissage est automatiquement augmentée de façon à obtenir de bonnes statistiques sur les ions dans le spectre. La fonction DFT s'applique à tous les types de balayage suivants :

- Enhanced MS (EMS)
- Enhanced Resolution (ER)
- Enhanced Product Ion (EPI)
- MS/MS/MS (MS<sup>3</sup>)

Les utilisateurs peuvent régler les paramètres de DFT en sélectionnant **Tools > Settings > Method Options** dans le logiciel Analyst MD.

## Icônes

Tableau 3-3 : Icônes de l'éditeur Acquisition Method









Icône	Nom	Description
	Mass Spec	Cliquez dessus pour afficher l'onglet MS dans l'éditeur Acquisition Method.
	Period	Cliquez avec le bouton droit de la souris pour ajouter une expérience, ajouter un <b>IDA Criteria Level</b> ou supprimer la période.
	Autosampler	Cliquez pour ouvrir l'onglet Autosampler Properties.
	Syringe Pump	Cliquez pour ouvrir l'onglet Syringe Pump Properties.
	Column Oven	Cliquez pour ouvrir l'onglet Column Oven Properties.
	Valve	Cliquez pour ouvrir l'onglet Valve Properties.
	DAD	Cliquez pour ouvrir le DAD Method Editor.



Tableau 3-3 : Icônes de l'éditeur Acquisition Method (suite)

Icône	Nom	Description
	ADC	Cliquez pour ouvrir l'onglet ADC Properties.

# Nous contacter

---

## Formation destinée aux clients

- En Amérique du Nord : [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- En Europe : [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- En dehors des États-Unis et de l'Amérique du Nord, visitez le site [sciex.com/education](http://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](http://sciex.com) ou choisissez parmi les options suivantes pour nous contacter :

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

## Cybersécurité

Pour obtenir les informations les plus récentes sur la cybersécurité des produits SCIEX, consultez la page [sciex.com/productsecurity](http://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](http://sciex.com/contact-us).

---