



IDA Information Dependent Acquisition

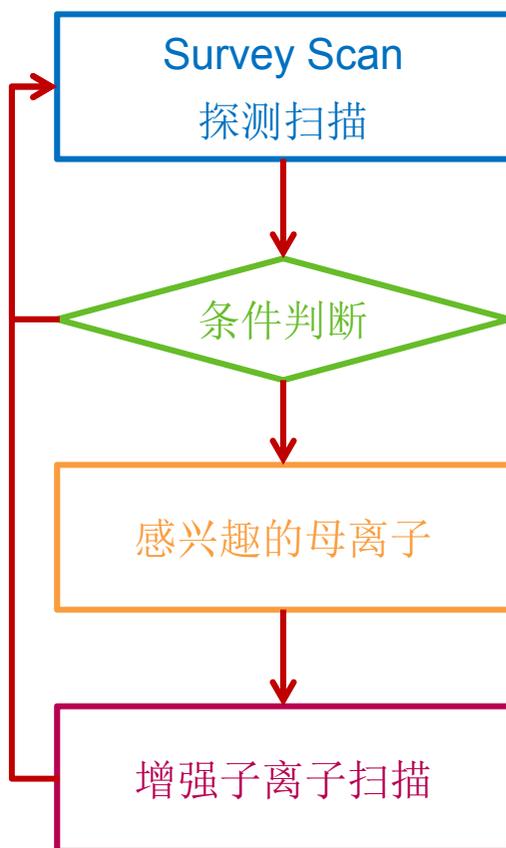
主要内容

IDA工作原理

IDA方法建立

- ✓ 使用IDA Method Wizard
- ✓ 在QqQ方法上扩展

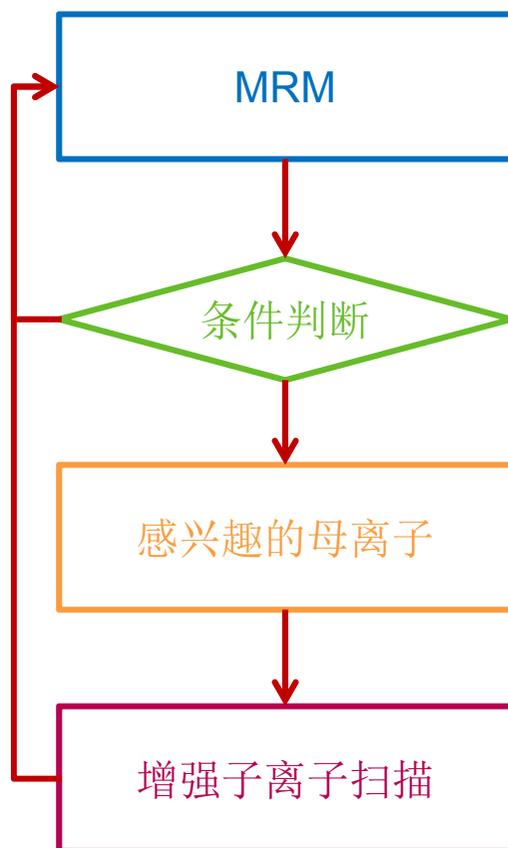
IDA工作原理



- 步骤1，探测扫描
 - 步骤2，系统自动判断：探测扫描采集到的信号强度超过预设值（即“出现色谱峰”）
 - 步骤3，当步骤2的条件满足时，系统自动切换（ $<1\text{ms}$ ）为线性离子阱模式，进行增强子离子扫描（EPI），获得探测扫描所得之母离子的高质量MS2谱图；返回步骤1
- ✓ Survey Scan（探测扫描）可有多种方式，包括MRM、中性丢失扫描母离子扫描等等

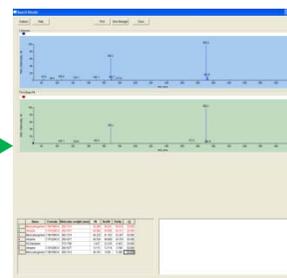
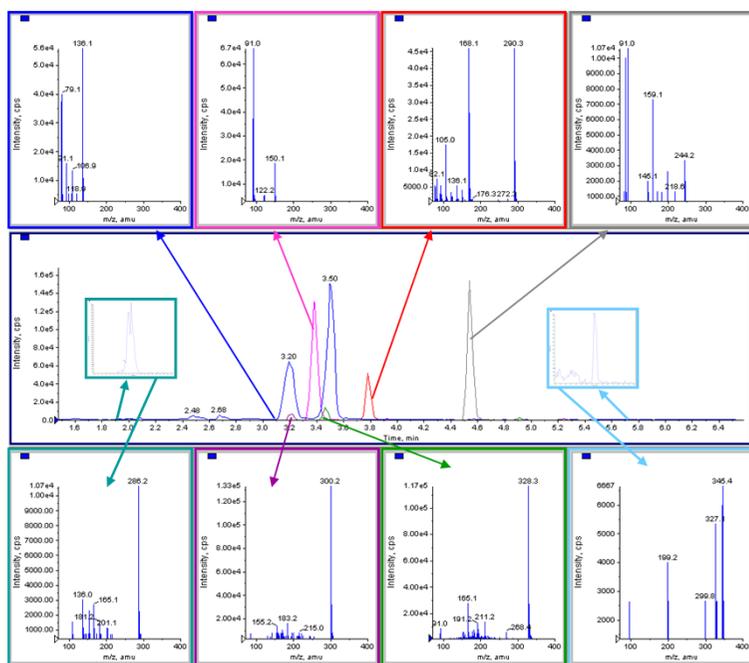
IDA基本采样方式

MRM-IDA-EPI



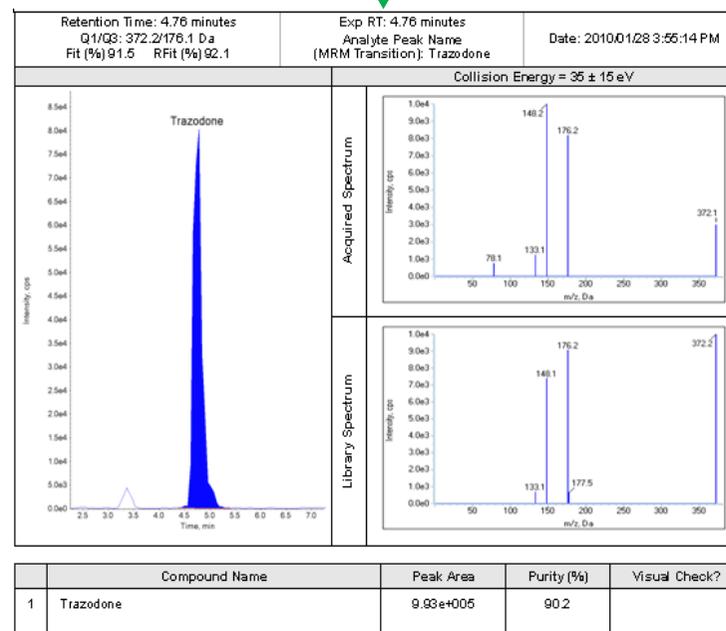
- 以MRM作为探测扫描，触发IDA工作
- MRM列表的获得
 - ✓ 现有的MRM方法
 - ✓ 标准物质方法优化
 - ✓ iMethod™
 - ✓ 通过代谢途径预估 (pMRM)
- 应用于
 - ✓ 农兽药残留定性确证
 - ✓ 阳性确证
 - ✓ 药物代谢产物鉴定
 - ✓ 杂志鉴定
 - ✓

IDA工作流程实例 农兽药残留定性确证



谱库搜索确证

全自动报告



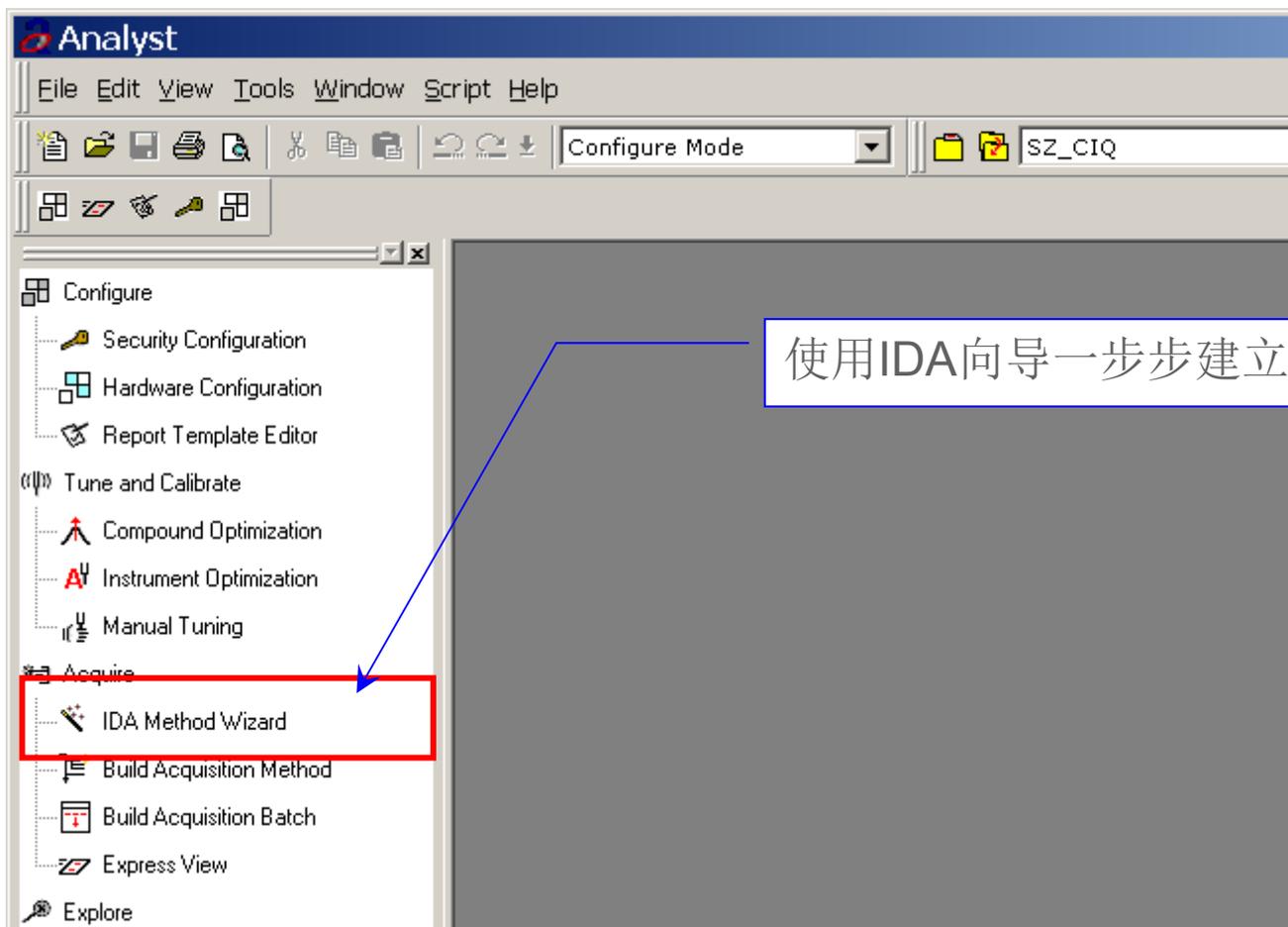
主要内容

IDA工作原理

IDA方法建立

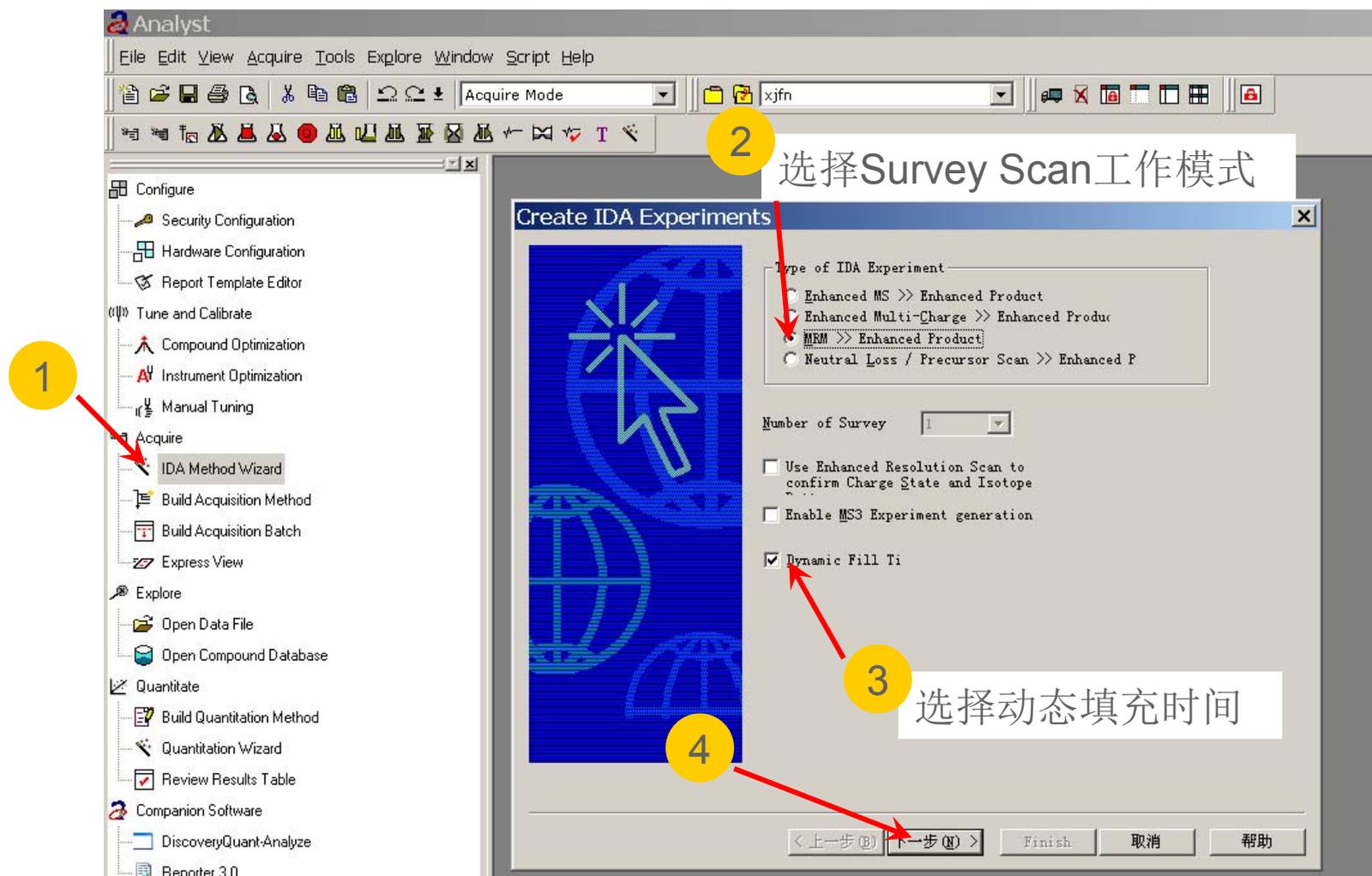
- ✓ 使用IDA Method Wizard
- ✓ 在QqQ方法上扩展

Analyst® 软件使用者界面

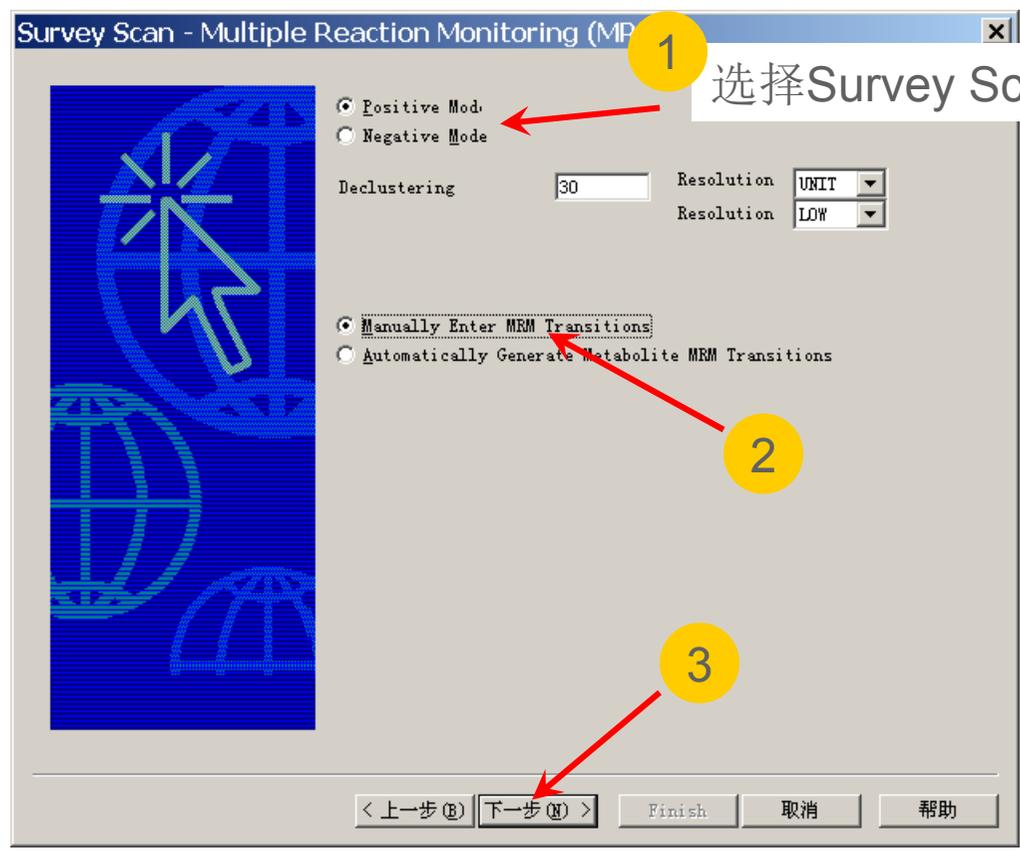


使用IDA向导一步步建立方法

IDA向导，第一步（以MRM触发EPI方法为例）



IDA向导，第二步



选择Survey Scan正负模式

IDA向导，第三步

MRM Transitions

Dwell (ms)

Apply CE to all ! Collision Energy (eV)

	Q1 (Da)	Q3 (Da)	CE (eV)
1	300	100	30
2	200	143	44
3			

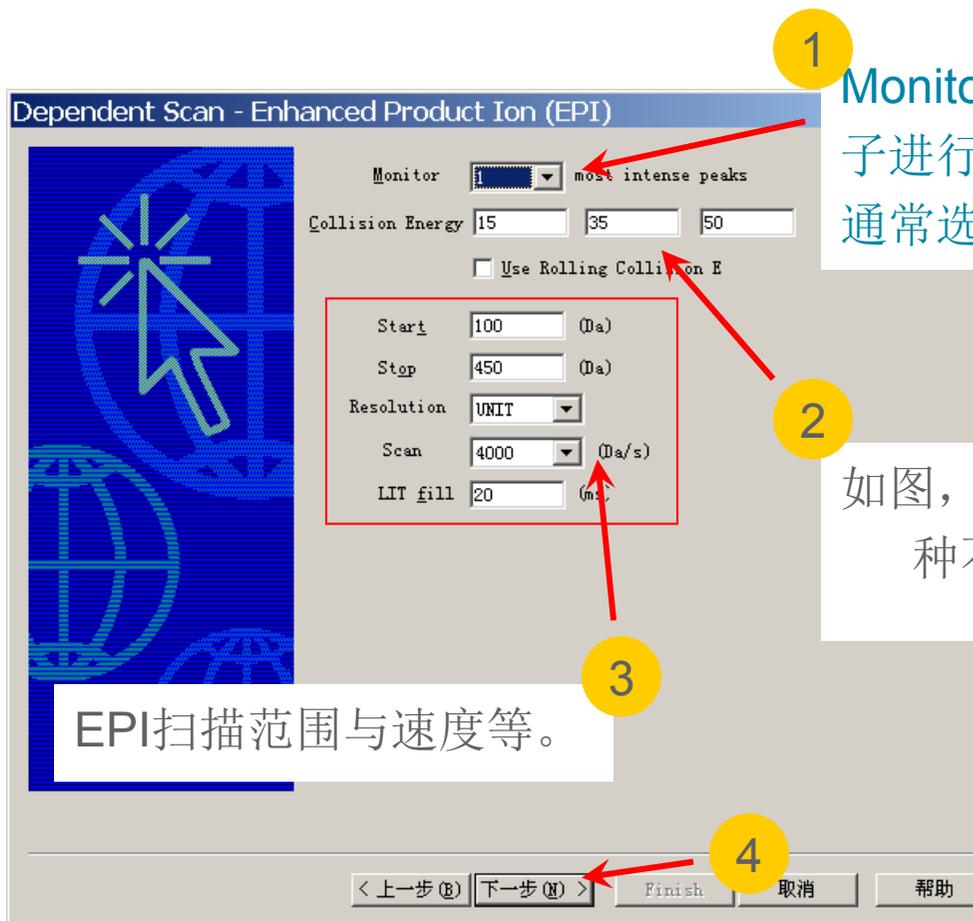
Scan (s)

< 上一步(B) 下一步(N) >

1 手工输入MRM列表参数

2

IDA向导，第四步



1 Monitor, 表示每次对最强的X个母离子进行EPI扫描。建议不要超过3个, 通常选1个即可。

2 如图, 同一母离子按照15、35和50三种不同能量得到3个EPI图。

3 EPI扫描范围与速度等。

4

型号	扫描速度 Scan Rate (Da/s)
4500/5500	10000
3200/4000	4000

IDA向导，第五步

1 触发EPI扫描的阈值。一般为数百至数千。

2 是否触发EPI扫描的逻辑条件。

Dependent Scan - IDA Criteria

For ions greater and smaller (Da)
Which (cps)

With charge state to charge:

Include unknowns

Exclude Former Target Ions

Always

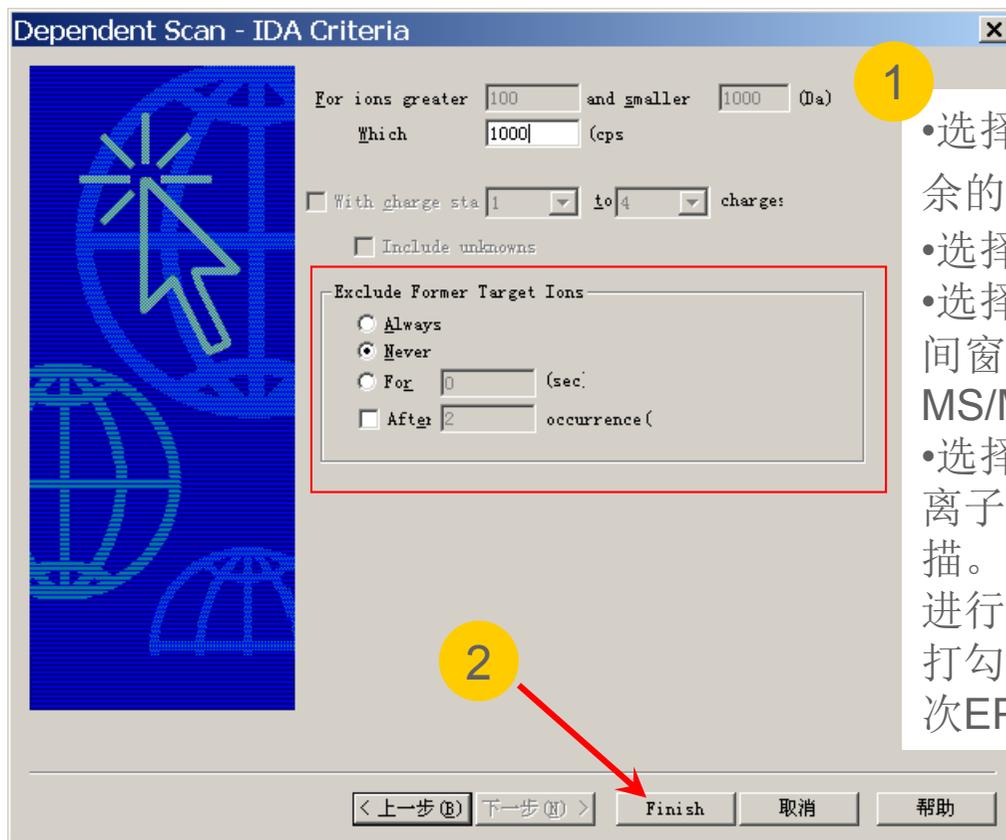
Never

For (sec.)

After occurrence(s)

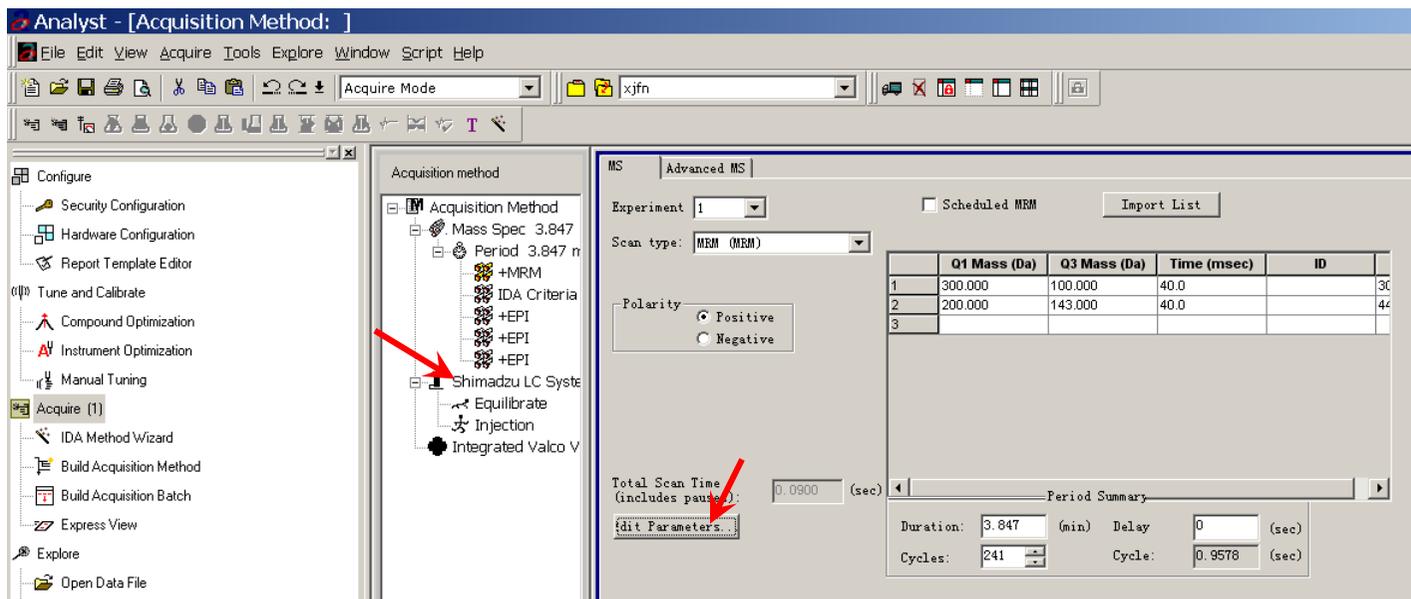
< 上一步(B) 下一步(N) > Finish 取消 帮助

IDA向导，第五步（续）



- 选择Always 可以将这些离子从剩余的运行中排除
- 选择Never打勾，动态排除关闭
- 选择For_(sec)，可以在设定的时间窗口洗脱的母离子不再进行MS/MS扫描
- 选择After_occurrences，允许选择离子在排除之前进行几次MS/MS扫描。此处输入1，则离子在排除之前进行多于一次MS/MS扫描。如果不打勾，则与输入0是一样的，只做一次EPI。

IDA向导，结束



注意：调整离子源参数和液相色谱参数。

主要内容

□ QTRAP工作原理

□ IDA方法原理与使用

✓ 原理

✓ 方法建立的两种途径

在原有QqQ方法基础上直接建立IDA方法 以MRM触发EPI为例

The screenshot shows the 'Advanced MS' configuration window. The 'Scan type' is set to 'MRM (MRM)'. The 'Polarity' is set to 'Positive'. The 'MRM detection' time is 90 seconds. The 'Target Scan Time' is 1 second. The 'Duration' is 19.000 minutes, 'Delay' is 0 seconds, 'Cycles' is 1140, and 'Cycle' is 1.0000 seconds. An 'Import List' button is visible.

ID	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Time (min)
1	251.200	149.000	3.9
2	251.200	167.100	3.9
3	251.200	191.100	4.1
4	251.200	209.100	3.9
5	251.200	121.100	4.1
6	247.100	189.100	3.3
7	247.100	149.100	3.3
8	307.210	71.000	7.1
9	307.200	167.100	7.3
10	363.200	149.000	8.9
11	363.200	247.100	8.9

在原有QqQ方法基础上直接建立IDA方法 ——第一步

1, 右键点击

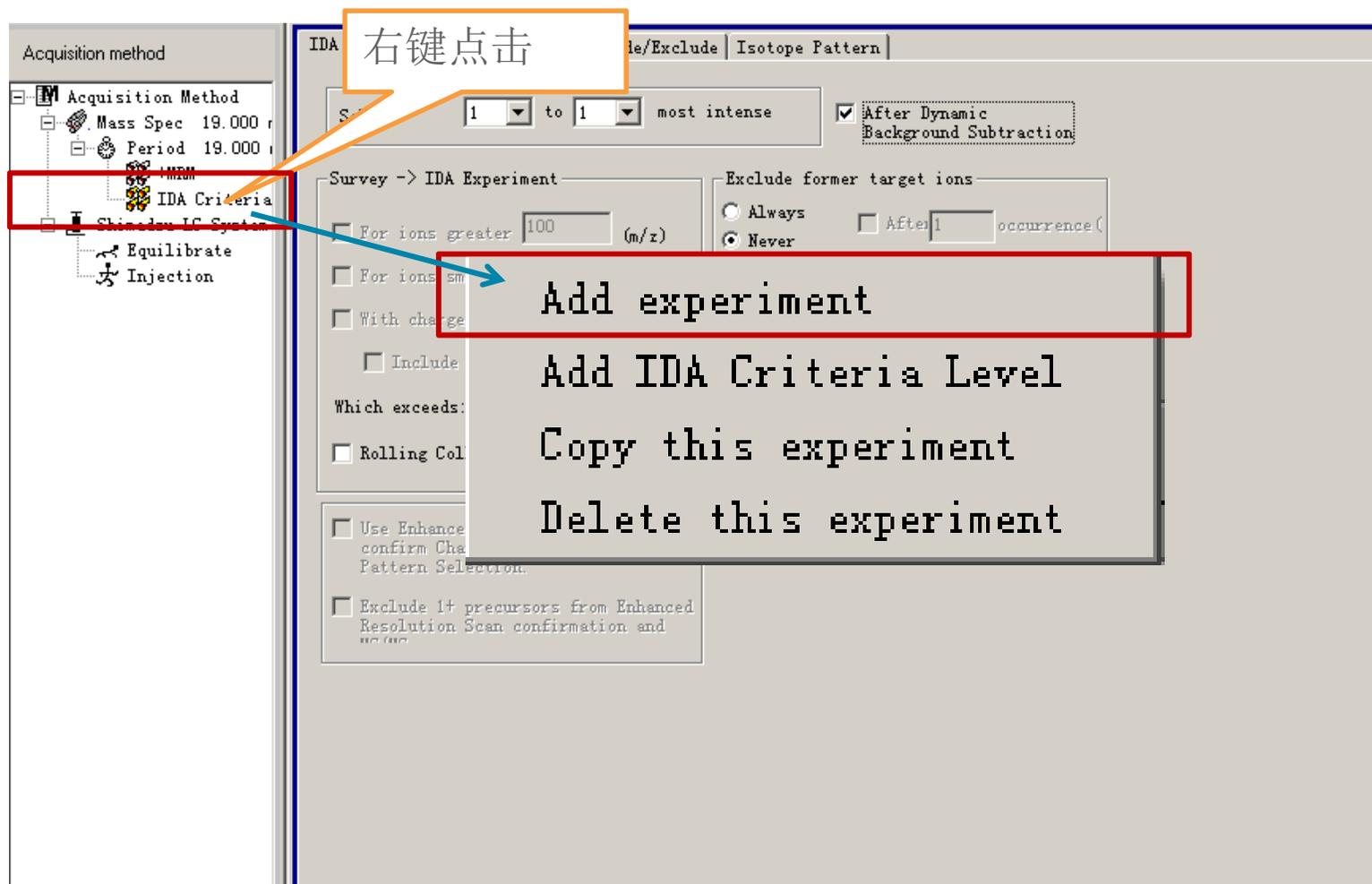
The screenshot shows the 'Advanced MS' interface with a table of mass spectrometry data. A right-click context menu is open over the table, with the 'Add IDA Criteria Level' option highlighted. The table contains the following data:

	Q1 Mass (Da)	Q3 Mass (Da)	Time (min)	ID
1	251.200	149.000	3.9	DPzP 1
2	251.200	167.100	3.9	DPzP 2
3	251.200	191.100	4.1	DPzP 3
4	251.200	209.100	3.9	DPzP 4
5	251.200	121.100	4.1	DPzP 5
6	247.100	189.100	3.3	DAP 1

在原有QqQ方法基础上直接建立IDA方法 ——第二步

本页中，绝大多数选项的意义和设定同“IDA向导”。参考32页

在原有QqQ方法基础上直接建立IDA方法 ——第三步



在原有QqQ方法基础上直接建立IDA方法 ——结束

MS Advanced MS

Experiment: 2

Scan type: Enhanced Product Ion

Scan rate: 4000 (Da/s)

Polarity: Positive Negative

MCA:

Number of scans to: 1

Product: 30.000 (Da)

Total Scan Time (includes pauses): 0.3906 (sec)

Edit Parameters...

Period Summary

Duration: 19.004 (min) Delay: 0 (sec)

Cycles: 820 Cycle: 1.3906 (sec)

	Start (Da)	Stop (Da)	Time (sec)
1	50.000	70.000	0.0050
2	65.000	137.200	0.0181
3	132.000	400.000	0.0670
4			

调整离子源参数

注意，调整以下参数：

- Scan rate:
 - 3200/4000: 4000Da/s
 - 4500/5500: 10000Da/s
- Number of scans to: 1

其他注意点

- ❑ 保证Survey Scan（探测扫描）和Dependent Scan（EPI扫描）的离子源参数（Source/Gas）完全一致；
- ❑ 使用IDA方法时，无论Survey Scan（探测扫描）还是Dependent Scan（EPI扫描），CAD（Collision Gas）必须设定为High。
- ❑ IDA 勾选After Dynamic Background Subtraction
- ❑ Exclude former target ions: Never
- ❑ IDA Select 1 to n(EPI数目): 3200&4000 n=1; 5500 n≤3