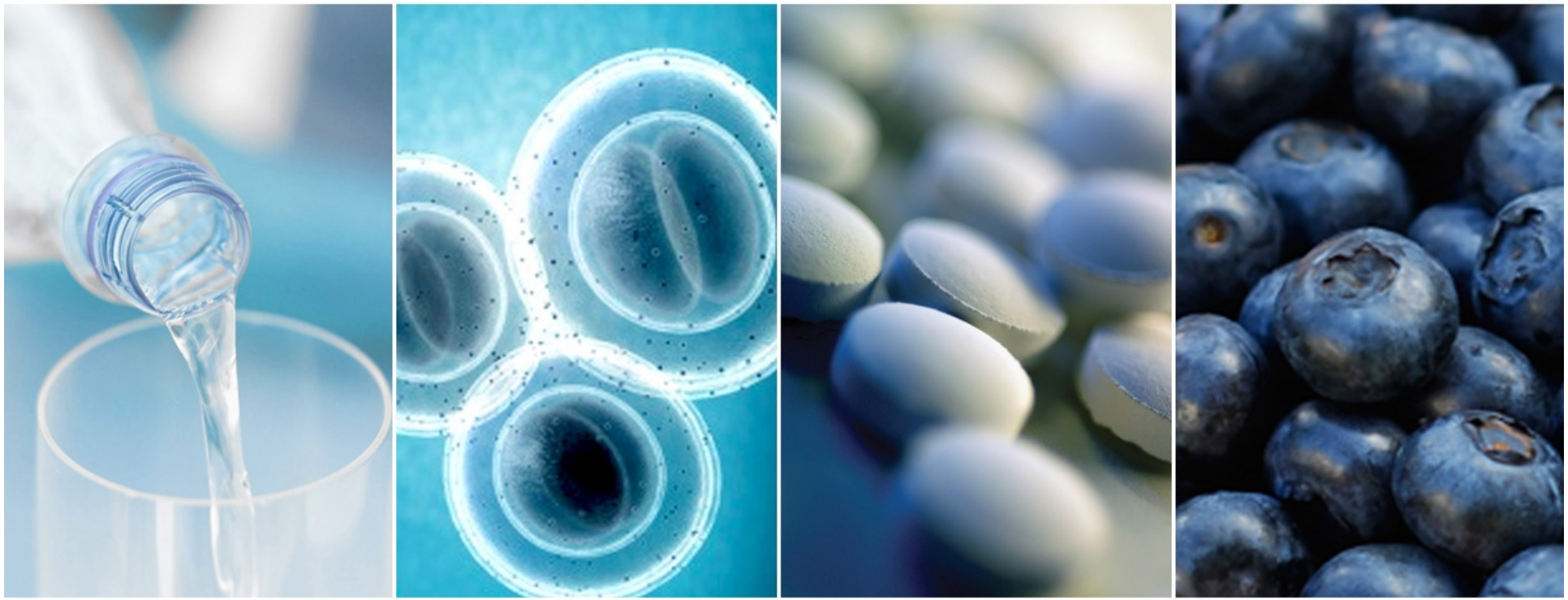


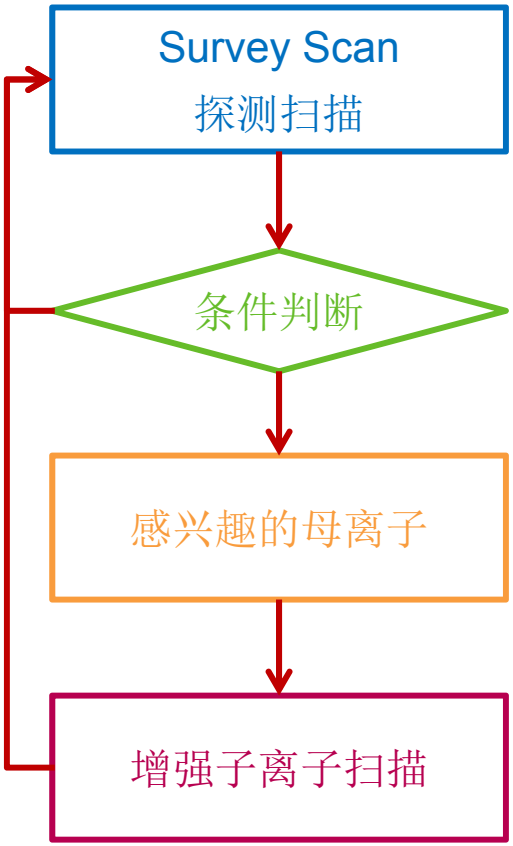
# IDA
# Information Dependent Acquisition

AB SCIEX

# 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

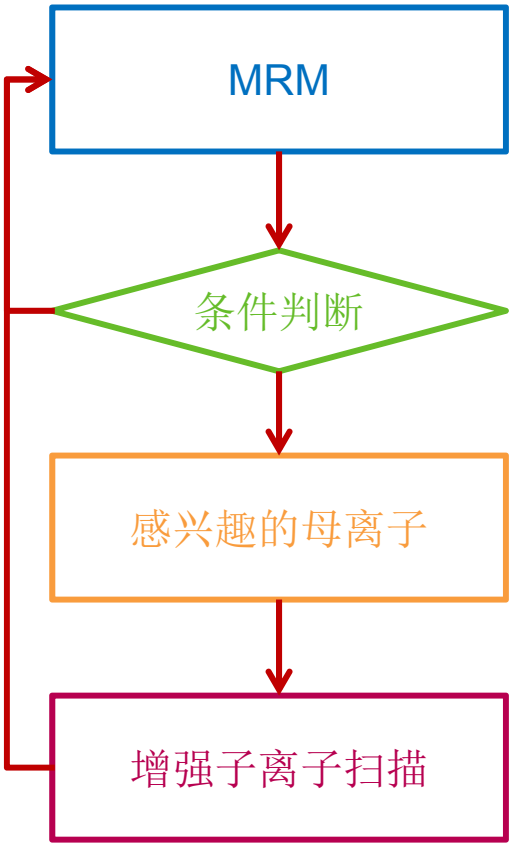
# IDA工作原理




- 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（<1ms）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

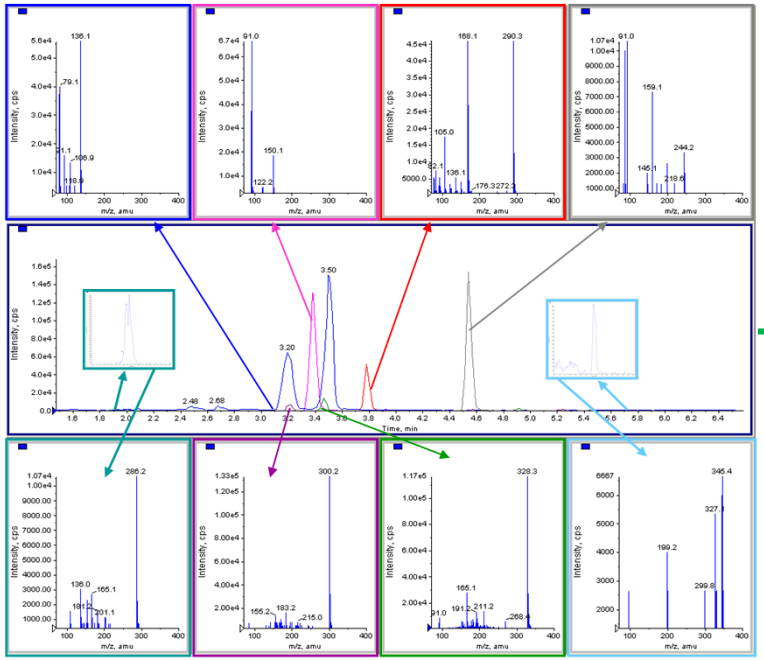
✓ Survey Scan（探测扫描）可有多种方式，包括MRM、中性丢失扫描母离子扫描等等

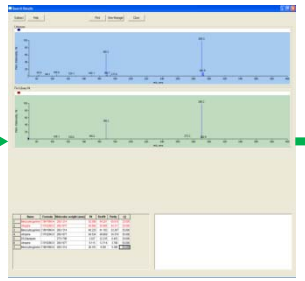
# IDA基本采样方式
## MRM-IDA-EPI




- 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
  - ✓ ……

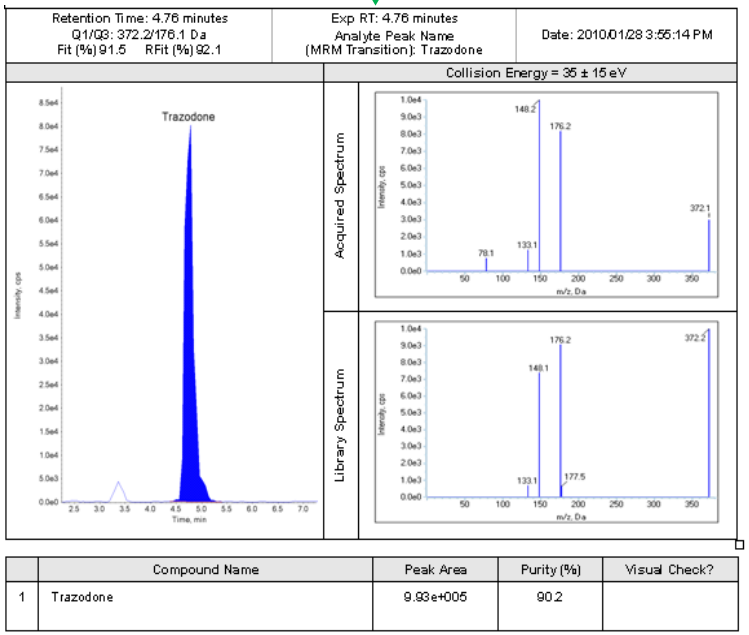
# IDA工作流程实例
## 农兽药残留定性确证





谱库搜索确证

全自动报告

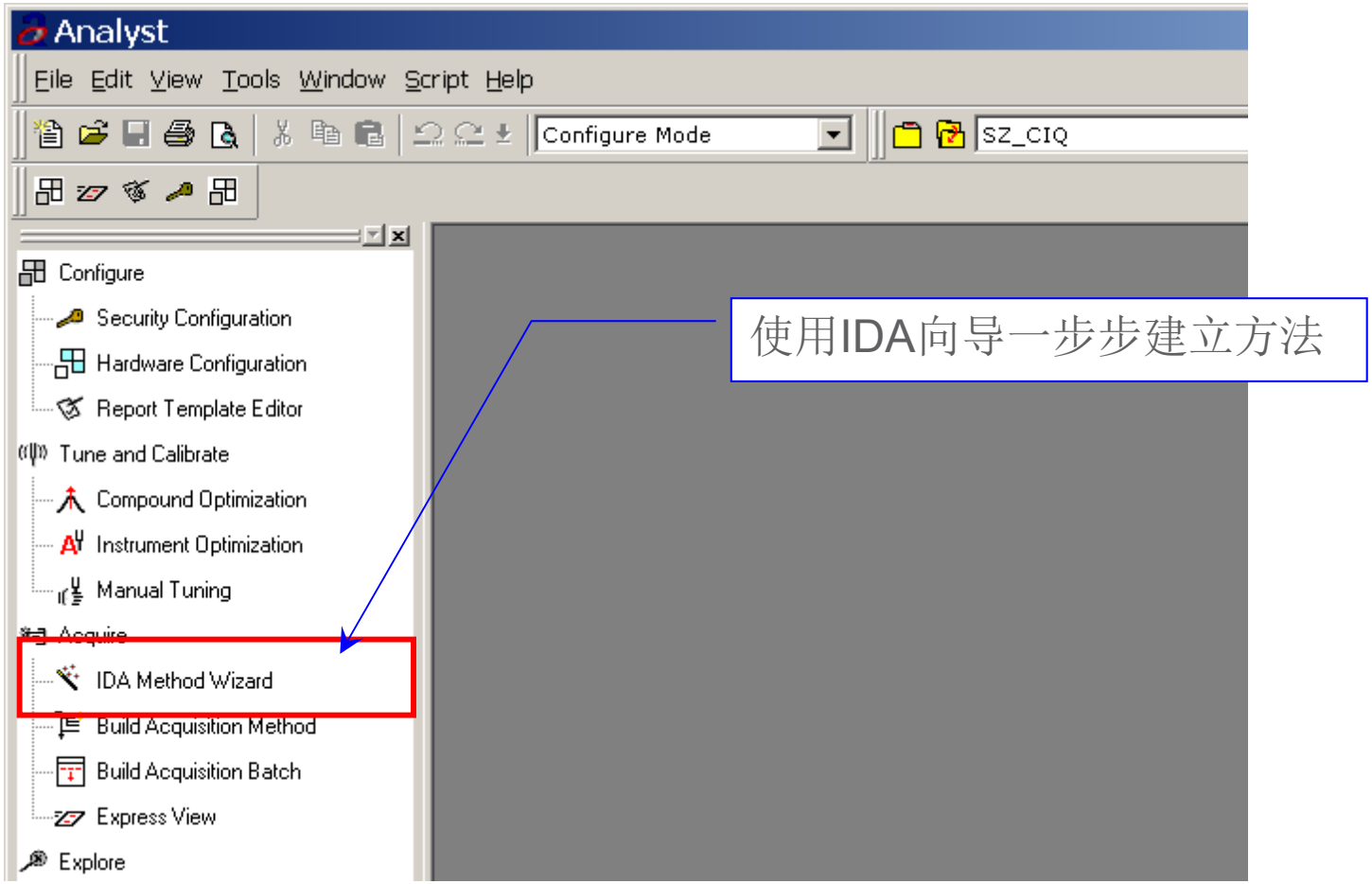



| | Compound Name | Peak Area | Purity (%) | Visual Check? |
|---|---|---|---|---|
| 1 | Trazodone | 9.93e+005 | 90.2 | |

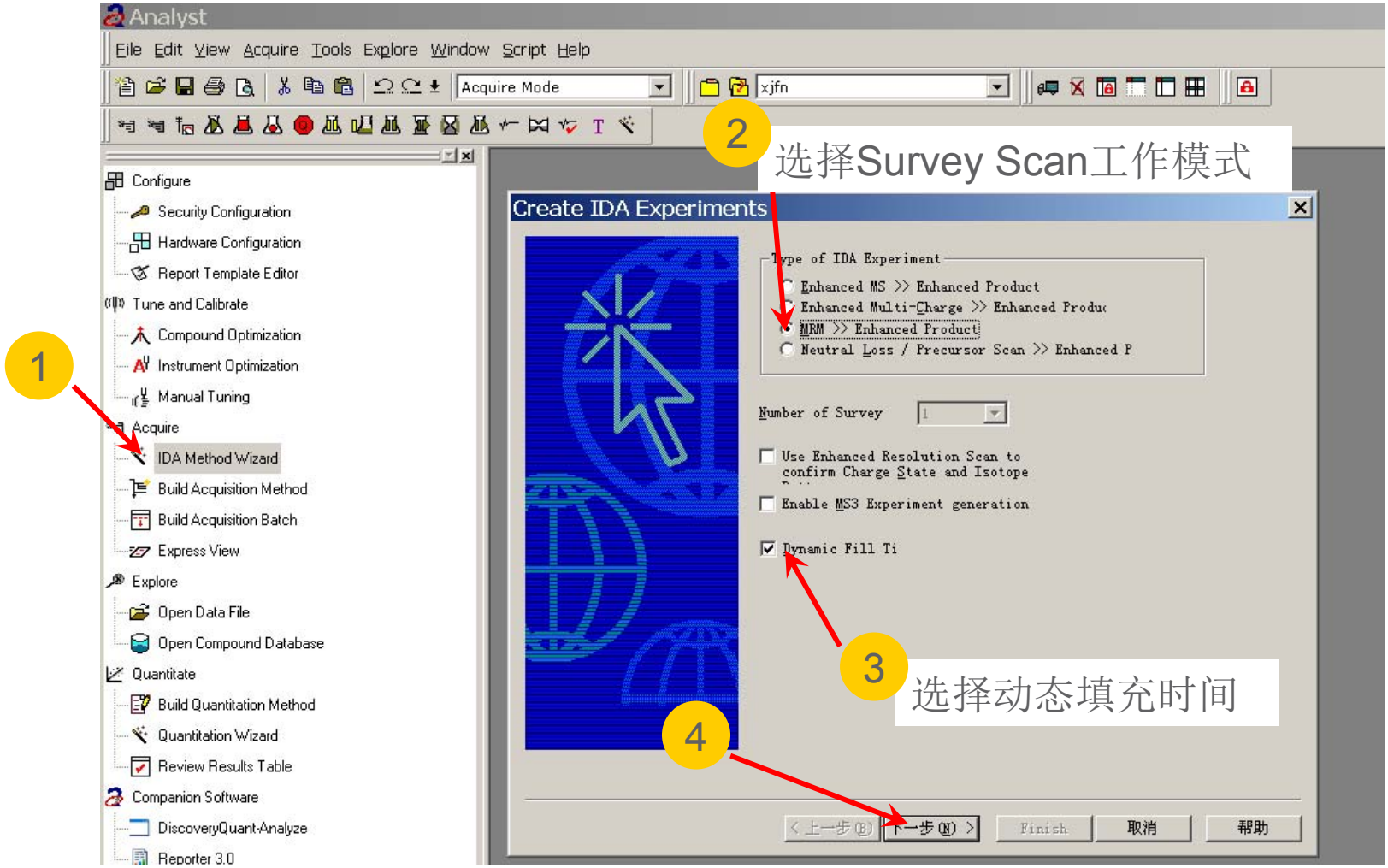
# 主要内容

- IDA工作原理
- IDA方法建立
  - ✓ 使用IDA Method Wizard
  - ✓ 在QqQ方法上扩展

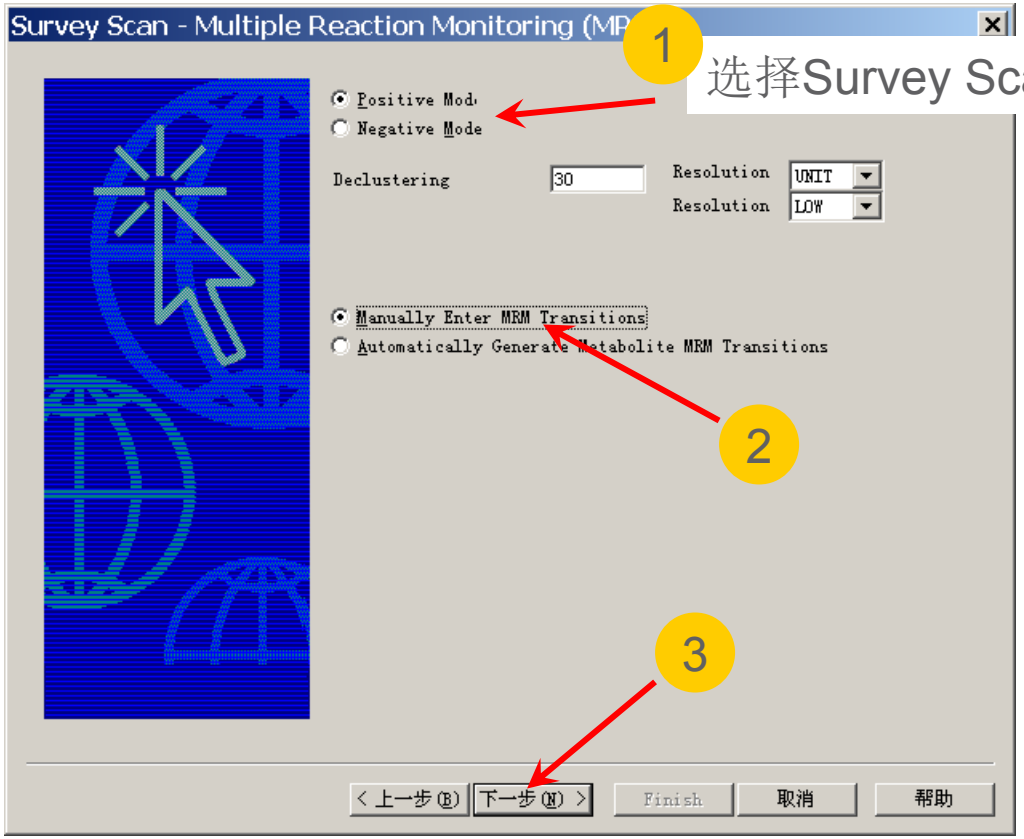
# Analyst® 软件使用者界面



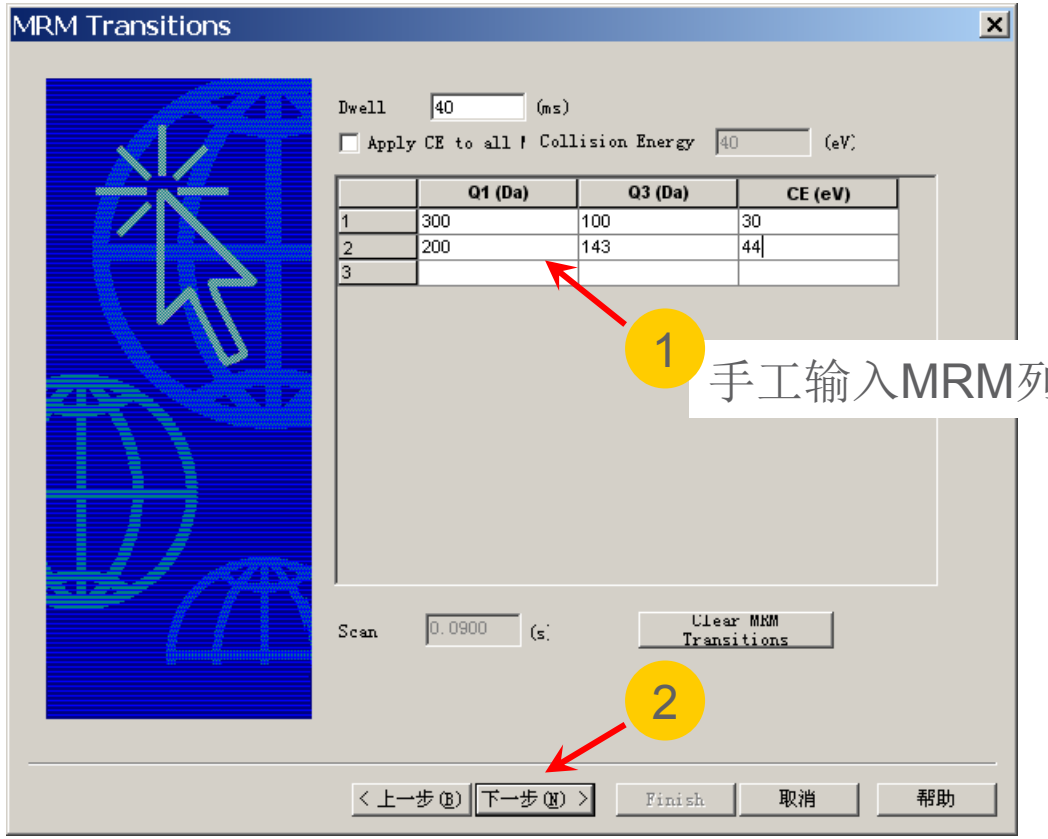
# IDA向导，第一步（以MRM触发EPI方法为例）



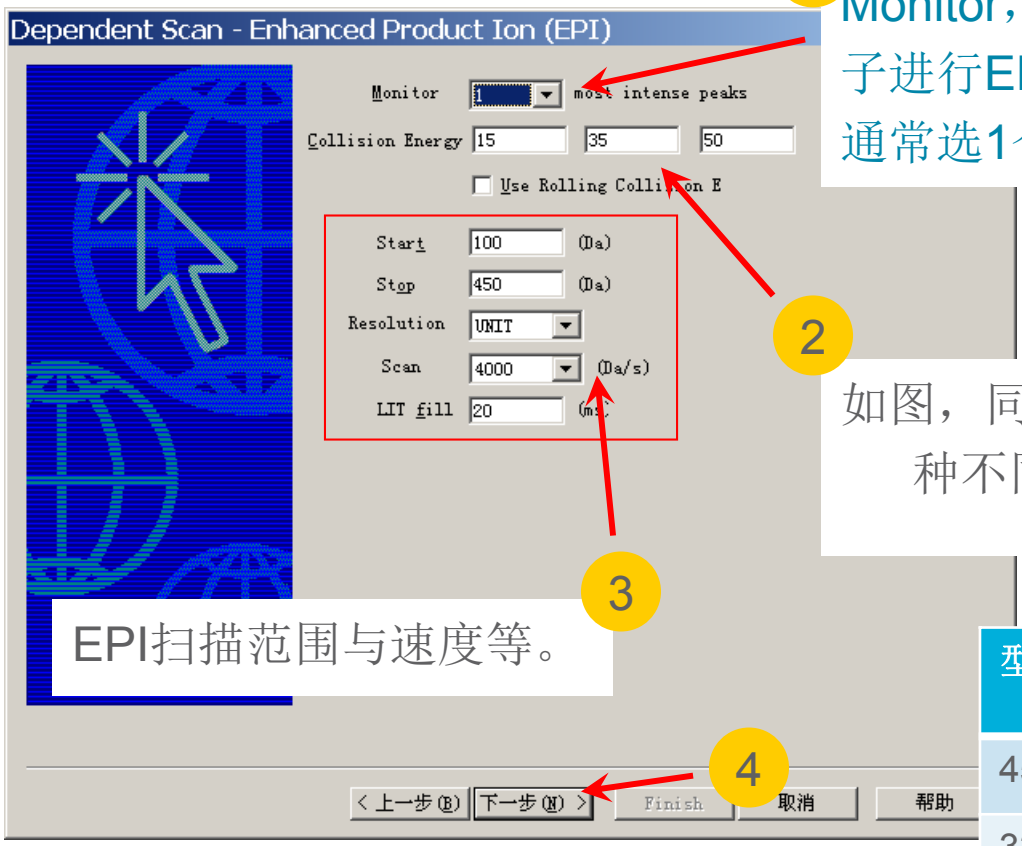
# IDA向导，第二步



# IDA向导，第三步



# 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。

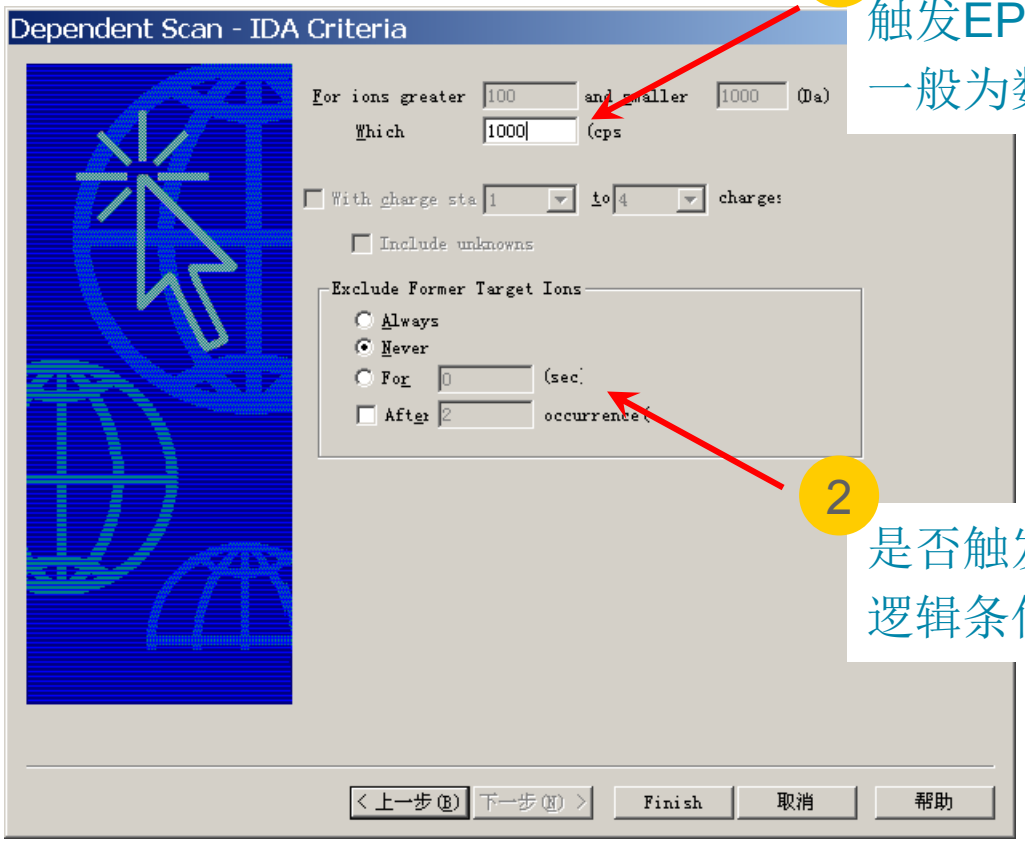
2 如图，同一母离子按照15、35和50三种不同能量得到3个EPI图。

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 |

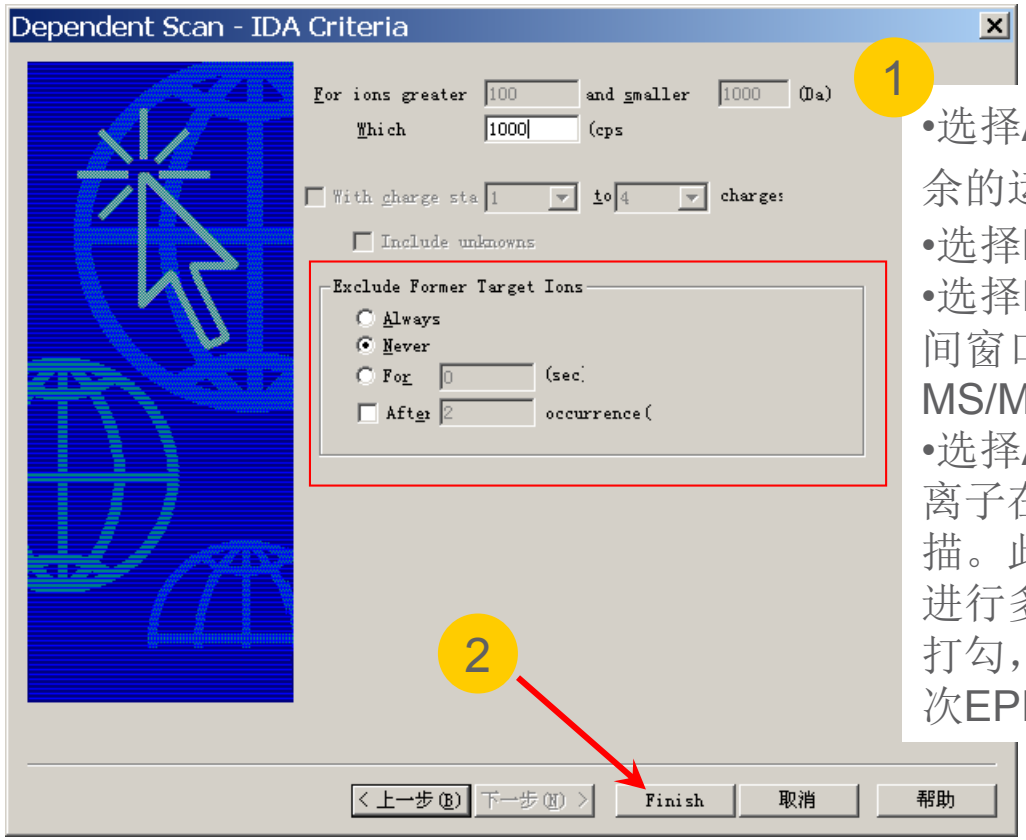
# IDA向导，第五步




1 触发EPI扫描的阈值。一般为数百至数千。

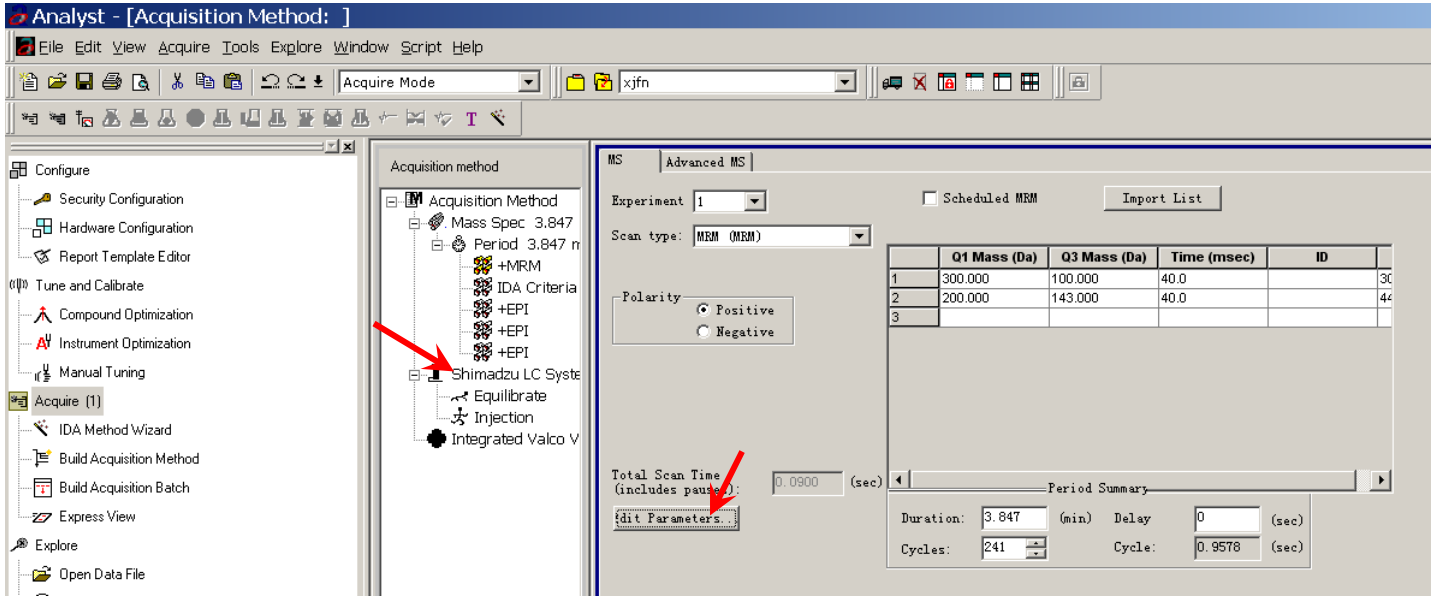
2 是否触发EPI扫描的逻辑条件。

# 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



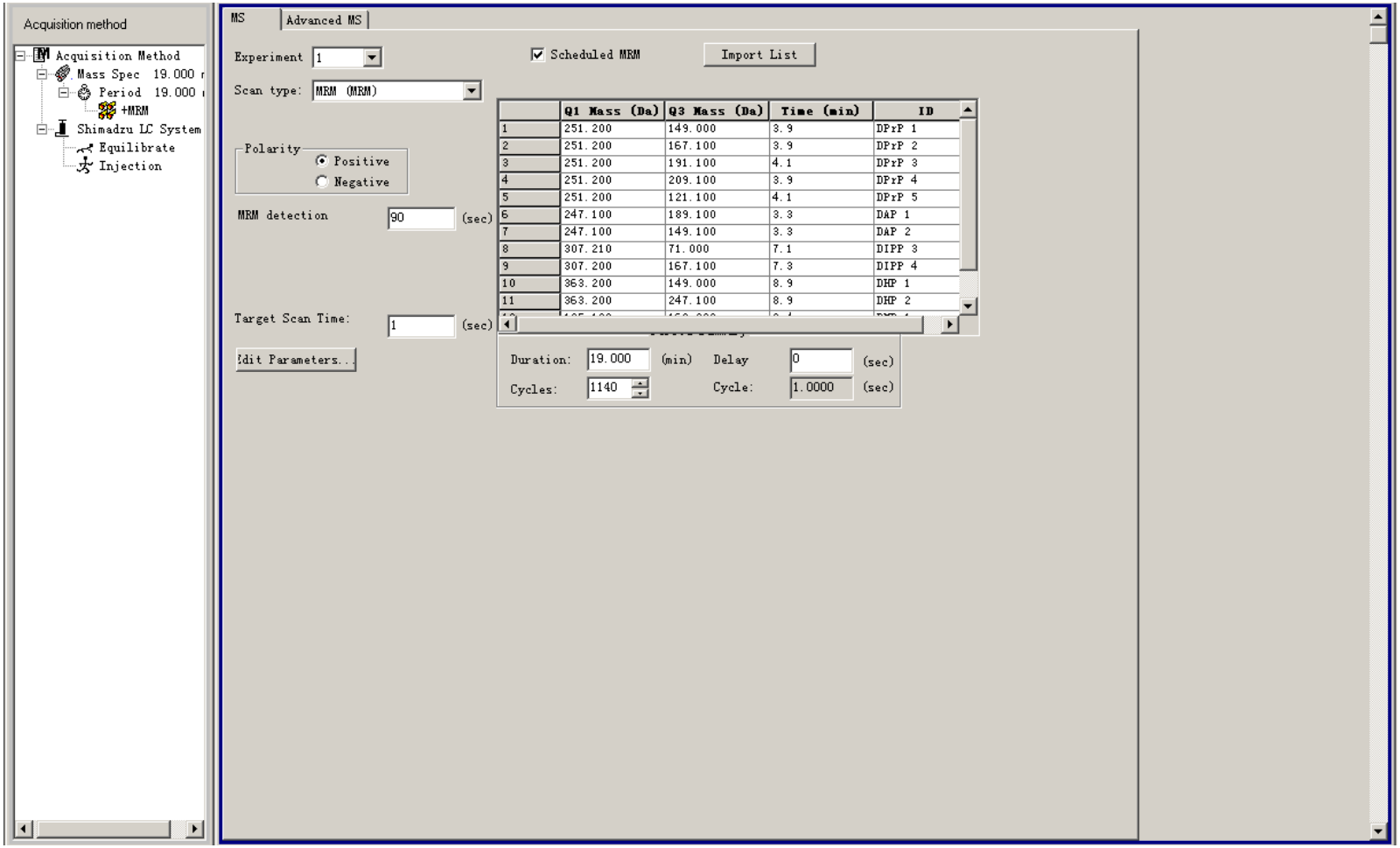

注意：调整离子源参数和液相色谱参数。

# 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

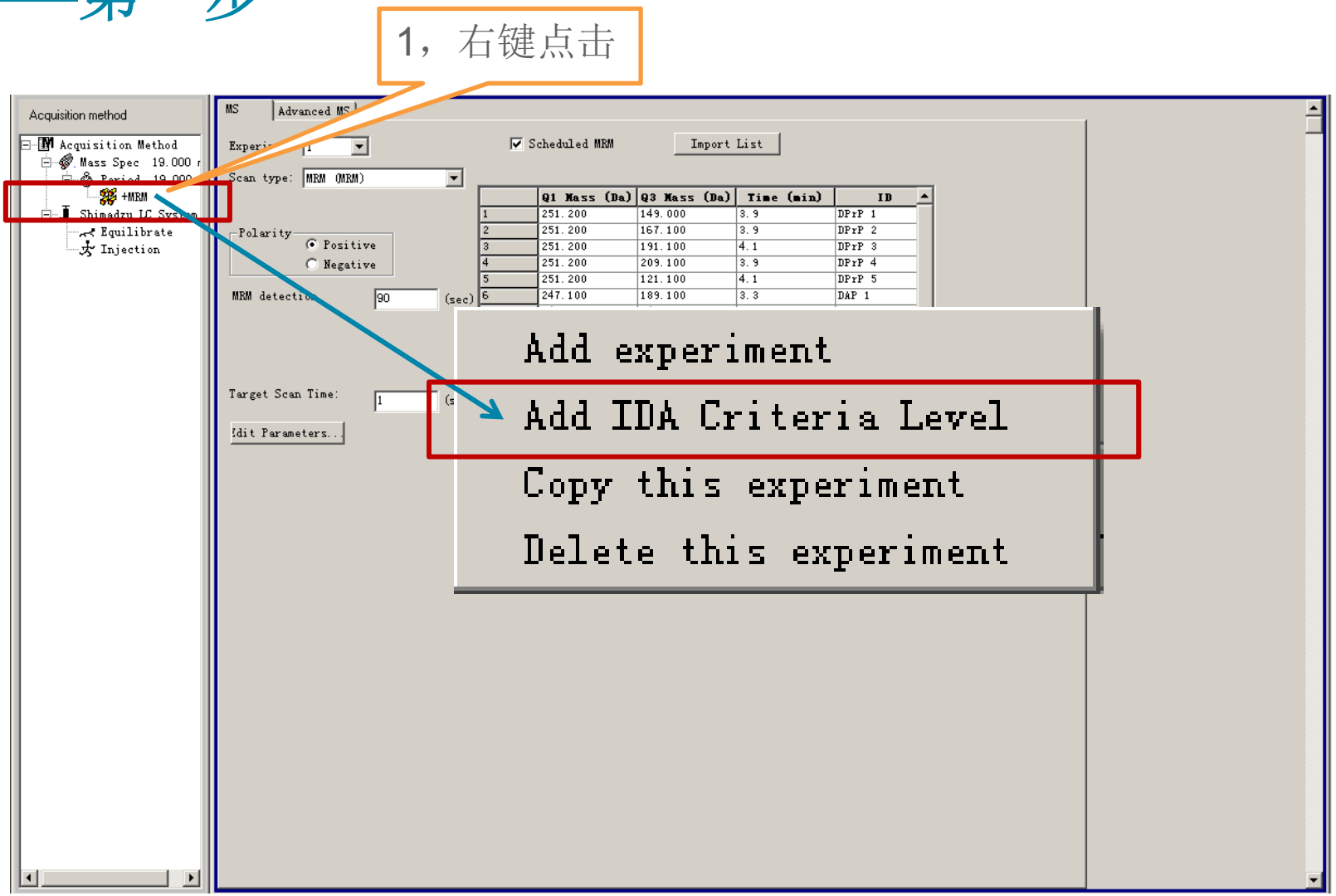
# 在原有QqQ方法基础上直接建立IDA方法

## 以MRM触发EPI为例




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

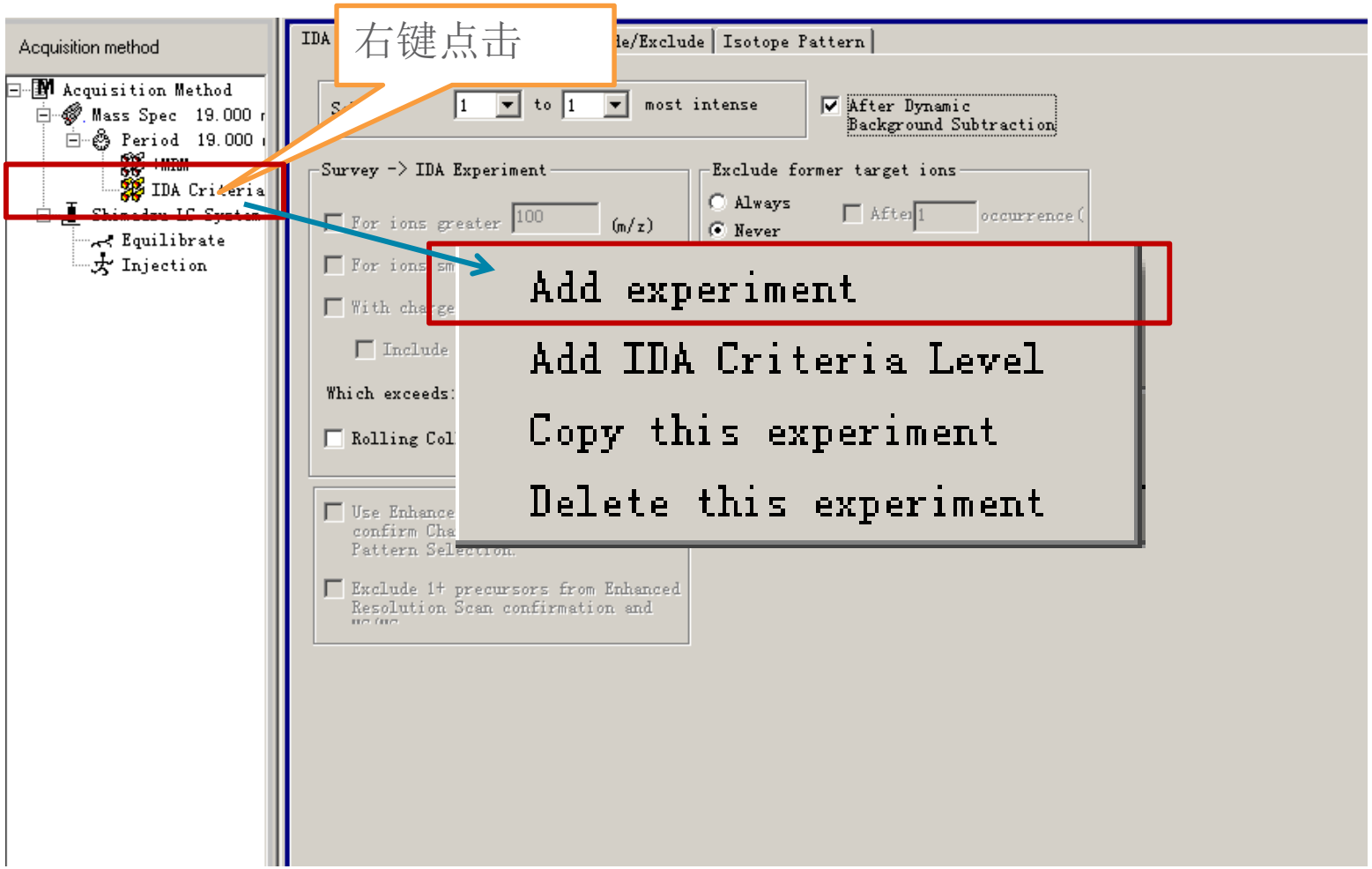
# 在原有QqQ方法基础上直接建立IDA方法——第一步



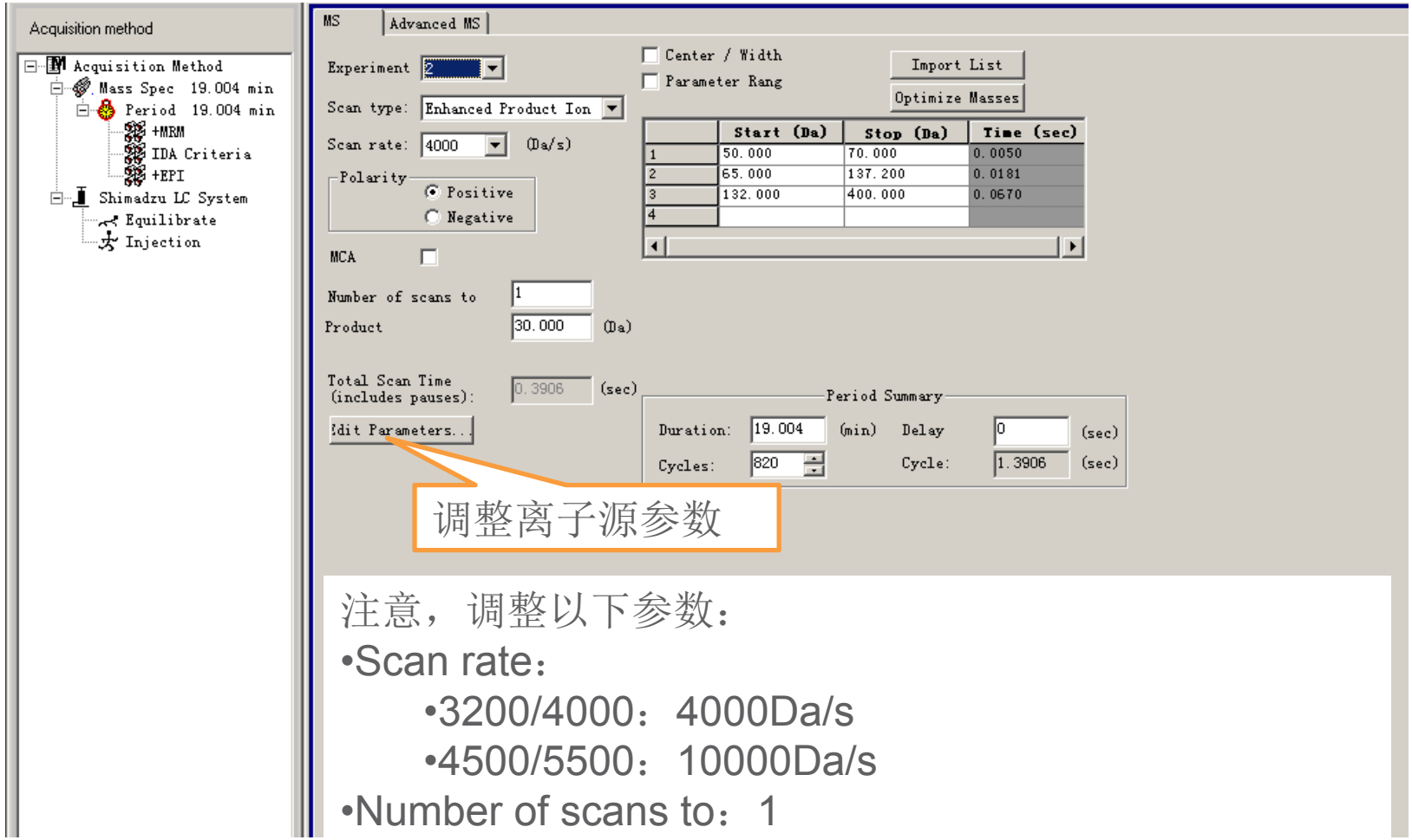
# 在原有QqQ方法基础上直接建立IDA方法——第二步


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




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