

三重四极杆气质联用仪

GCMS-TQ8040

MRM 分析方法建立操作指南



岛津企业管理（中国）有限公司

目 录

1 引言	3
2 确定前体离子（Q3 全扫描分析）	4
2.1 创建 Q3 全扫描方法	4
2.2 测定标准品的混合标准液	5
2.3 设定前体离子	6
3 设定产物离子和优化碰撞电压（产物离子扫描）	13
3.1 创建产物离子扫描测定方法	13
3.2 创建产物离子扫描批处理表	15
3.3 运行产物离子扫描批处理表	16
3.4 自动优化碰撞电压	16
4 创建 MRM 方法	20
5 设定离子比率	22

1 引言

操作手册中描述了如何设定前体离子和产物离子的 m/z ，当进行 MRM 方法分析标准品时如何优化电压。利用标准品优化好的离子对及 CE 电压可得到较高灵敏度的数据。

仪器结构

<GC/MS> GCMS-TQ8030 或 GCMS-TQ8040
<Autosampler> AOC-20i or AOC-20i+s

软件配置

<Workstation> GCMSsolution Ver. 4.2 or later
<File> MRM_Optimization_Tool.xmls SmartDatabase_Blank.xmls
<Other> Microsoft Office Excel 2010

注意事项:

- 1、安装 GCMSsolution Ver. 4.0 软件后，MRM_Optimization_Tool.xmls
SmartDatabase_Blank.xmls 文件被安装在 GCMSsolution\SmartDatabase 文件夹中。两个文件是只读文件，在使用之前先将其复制出来。

2 确定前体离子（Q3 全扫描分析）

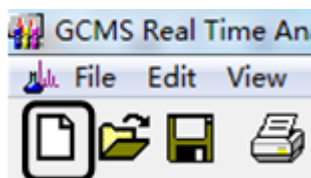
2.1 创建 Q3 全扫描方法

本部分主要创建 Q3 全扫描分析标准品的方法。

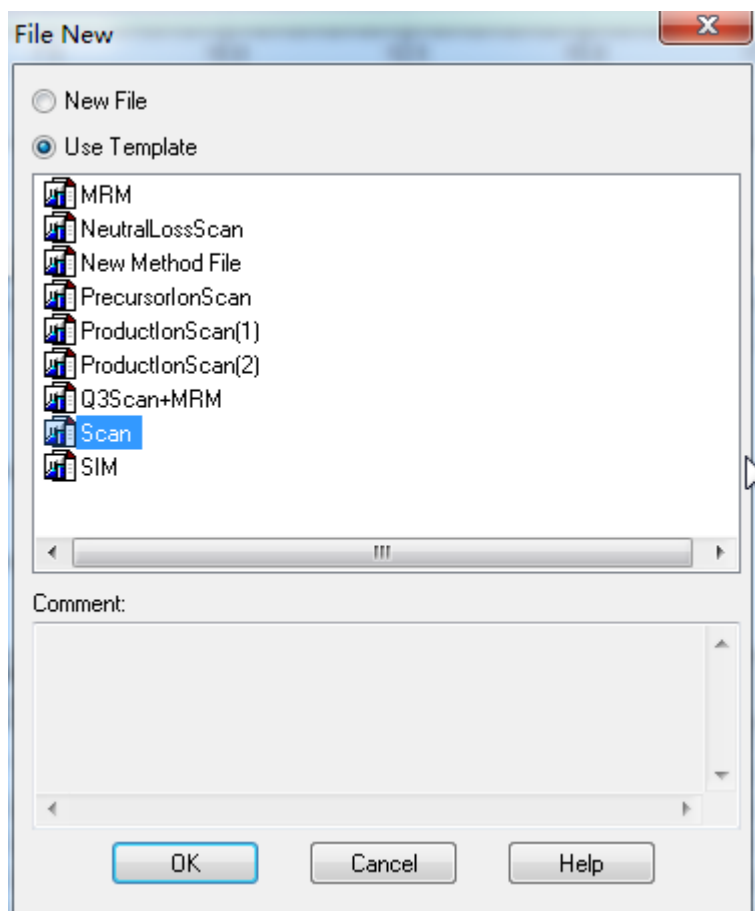
- 1) 打开[GCMS Real Time Analysis]，在[Real Time]辅助栏中点击(Data Acquisition)。



- 2) 在工具栏中点击[New file]。



- 3) 选择方法模板中的全扫描，点击确定。



4) 单击 MS 图标， 设定质谱参数（包括离子源温度、接口温度和检测器电压），采集模式选择 Q3Scan， 设定测量的开始时间， 结束时间， event time 及测量的开始和结束的质量范围。

GCMS-TQ8030 with DI

Ion Source Temp. : 230 °C

Interface Temp. : 25 °C

Solvent Cut Time : 2 min

Detector Voltage : ☒ Relative to the Tuning Result ☐ Absolute

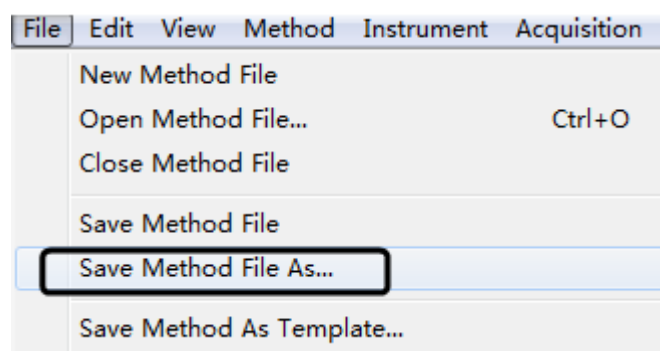
Threshold : 0 kV

☐ Use MS Program : Set... GC Program Time : 0.00 min Loop Time...

	Compound Name	Start Time (min)	End Time (min)	Acq. Mode	Event Time(sec)	Scan Speed	Start m/z	End m/z
1-1		3.00	10.00	Q3 Scan	0.300	1666	45.00	500.00

5) 分别单击 Sample、GC 图标， 设定相应的参数。

6) 在 File 菜单中选择方法文件另存， 例如命名为 Q3Scan.gqm。



2.2 测定标准品的混合标准液

准备测量的标准液， 利用 3.1 建立好的 Q3Scan.gqm 方法采集。

1) 进行单次分析， 输入样品信息， 在[Acquisition]辅助栏中点击 (Sample Login)



图标， 样品登录窗口打开。

2) 输入数据文件名， 输入放置样品的样品瓶号和进样体积， 选择指定的调谐文件， 点击 OK。

Sample Login - Untitled

Line1

Acquisition Information

Sample Name :

Sample ID :

Data File : 

Baseline Data : 

Data Description :

Sampler

Vial # :

Injection Volume : uL Syringe Capacity : 10 uL

Multi Inj. Times :

Tuning File : 

Advanced >> 确定 取消 帮助

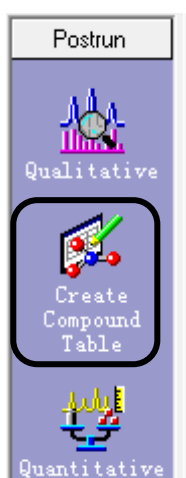
3) 将标准品的样品瓶放到自动进样器上。

4) 在[Acquisition] 辅助栏中, 点击 (Download)  图标。在 GC 和 MS 准备就绪 (Ready) 时测定自动开始运行。

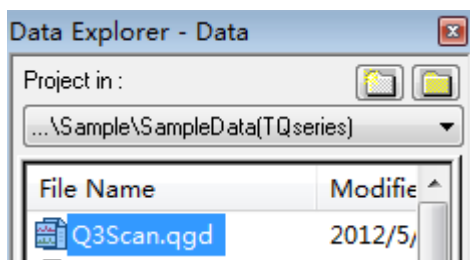
2.3 设定前体离子

利用 3.2 节得到标准品的 Q3 Scan 数据文件来确定各组分的前体离子。

- 1) 双击[GCMS Postrun Analysis]图标, 进入数据再解析界面。
- 2) 单击助手栏中【Create Compound Table】图标。



3) 打开已采集的扫描数据文件“Q3Scan.qgd”。



4) 单击助手栏中【Peak Integration for All TICs】图标，对检测到的色谱峰进行积分。



5) 单击助手栏中【Qualitative Table】图标，打开定性表窗口。



6) 单击助手栏中【Qualitative Table】图标，打开定性表窗口。在 [TIC] 图标页，确保所有测定的化合物都被检测到。如果有些化合物检测不到，改变积分参数重新进行积分。

Qualitative Table										
Print Edit View Similarity Search										
Peak#	Ret.Time	Start Tm	End Tm	m/z	Area	Area%	Height	Height%	A/H	Mark
1	4.769	4.735	4.815	TIC	12927607	10.63	10528764	14.78	1.23	
2	5.896	5.855	5.945	TIC	5101409	4.19	3647760	5.12	1.40	
3	9.651	9.590	9.725	TIC	9894188	8.14	5562753	7.81	1.78	
4	10.796	10.730	10.860	TIC	18962621	15.59	10491704	14.74	1.81	
5	11.084	11.035	11.170	TIC	7809197	6.42	4133907	5.81	1.89	
6	11.545	11.490	11.570	TIC	6261875	5.15	3625210	5.09	1.73	
7	11.599	11.570	11.650	TIC	9113079	7.49	5372793	7.55	1.70	V
8	11.698	11.650	11.765	TIC	11618640	9.55	6536274	9.18	1.78	V
9	12.106	12.060	12.170	TIC	4284178	3.52	2357694	3.31	1.82	
10	13.151	13.110	13.200	TIC	2107851	1.73	1254675	1.76	1.68	

7) 选中定性表中所有行，从 Edit 中选择[Register to Spectrum Process Table]。

Qualitative Table							
Print Edit View Similarity Search							
Peak	Edit Compound Name...	Area	Area%	Height	Height%	A/H	Mark
1		12927607	10.63	10528764	14.78	1.23	
2	Select All	5101409	4.19	3647760	5.12	1.40	
3	Copy	9894188	8.14	5562753	7.81	1.78	
4		18962621	15.50	10491704	14.74	1.81	
5	Delete Rows	7809197	6.42	4133907	5.81	1.89	
6	Delete Current Table	6261875	5.15	3625210	5.09	1.73	
7	Delete All Peak Tables	9113079	7.49	5372793	7.55	1.70	V
8	Register to Spectrum Process Table	11618640	9.55	6536274	9.18	1.78	V
9		4284178	3.52	2357694	3.31	1.82	
10	Register to Library...	2107851	1.73	1254675	1.76	1.68	
11		9738770	8.01	5250312	7.37	1.85	
12	Sort Table	10553027	8.68	5516142	7.75	1.91	
Copy Compound Name to TIC Peak Table							

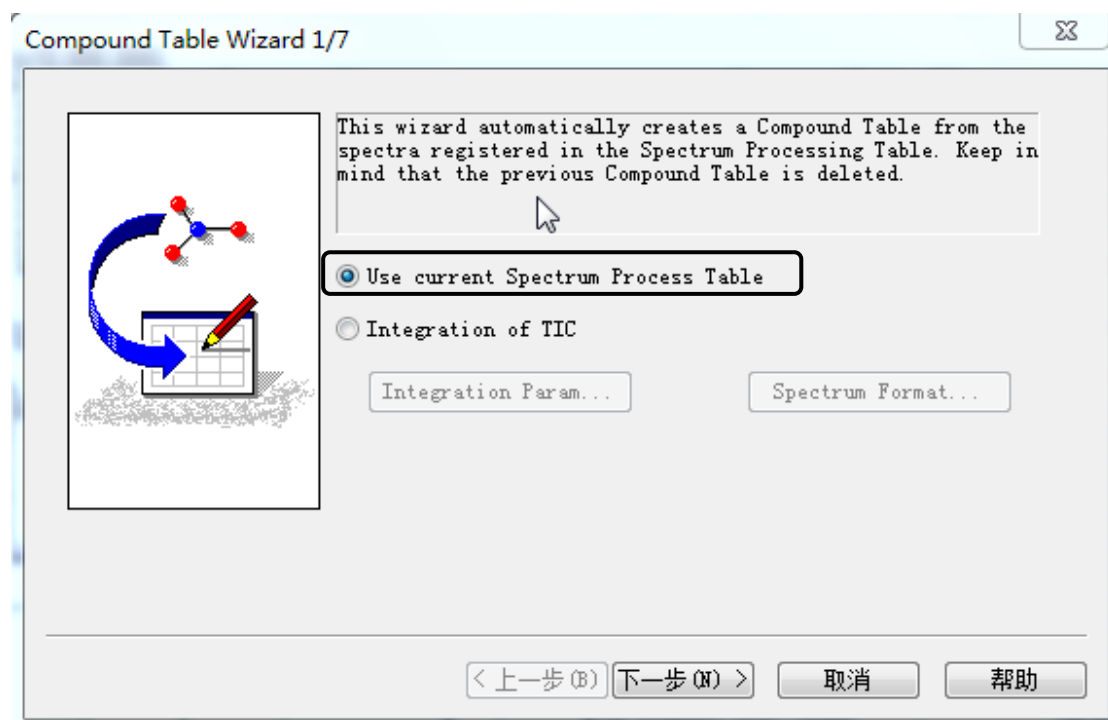
8) 点击 [Spectrum Process] 图标, 在[Similarity Search]菜单下选择[Search All Table]。

Qualitative Table									
Print Edit View Similarity Search									
Spectrum				Background					
	Ret.Time	Start Tm	End Tm	Ret.Time	StartRT	EndRT	Search	Report	Name
1	---	4.765	4.775	4.770	4.735	4.815	Done	☒	Octafluoronaphthalene
2	---	5.890	5.900	5.895	5.855	5.945	Done	☒	Dichlorvos
3	---	9.645	9.655	9.650	9.590	9.725	Done	☒	Fenobucarb
4	---	10.790	10.800	10.795	10.730	10.860	Done	☒	Hexachlorobenzene
5	---	11.080	11.090	11.085	11.035	11.170	Done	☒	Simazine
6	---	11.540	11.550	11.545	11.490	11.570	Done	☒	Propyzamide
7	---	11.595	11.605	11.600	11.570	11.650	Done	☒	Diazinon
8	---	11.690	11.700	11.695	11.650	11.765	Done	☒	Chlorothalonil

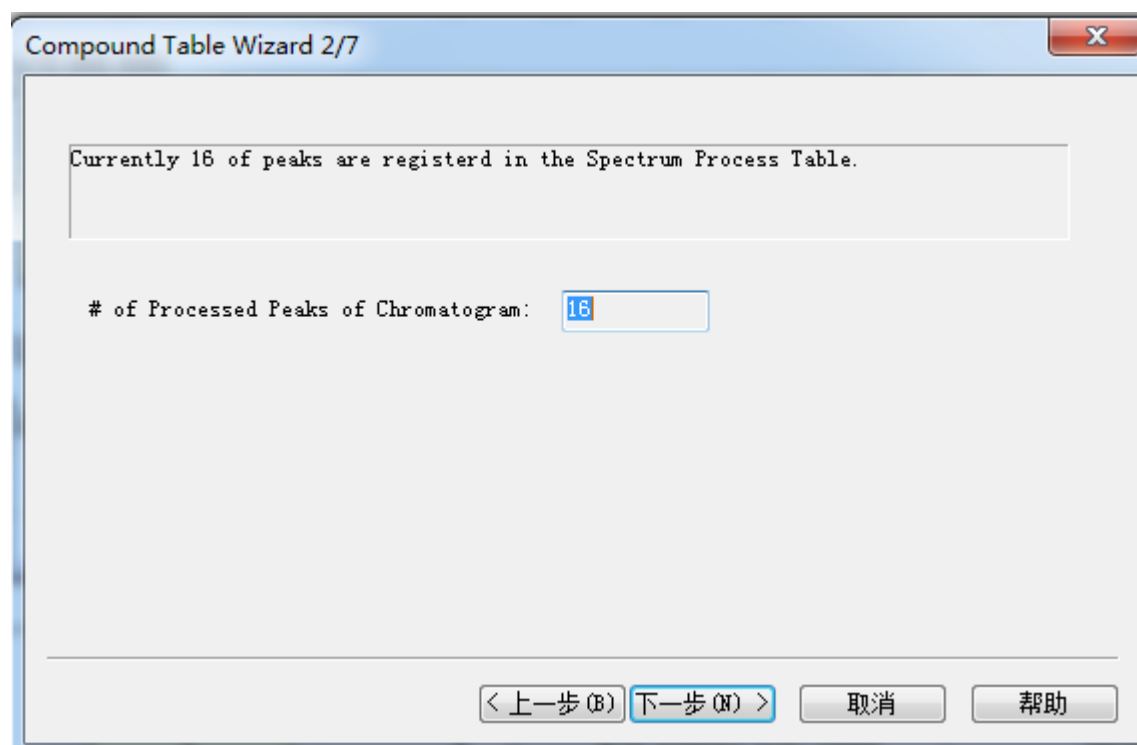
9) 单击组分表助手栏中的【 Wizard (new)】图标。



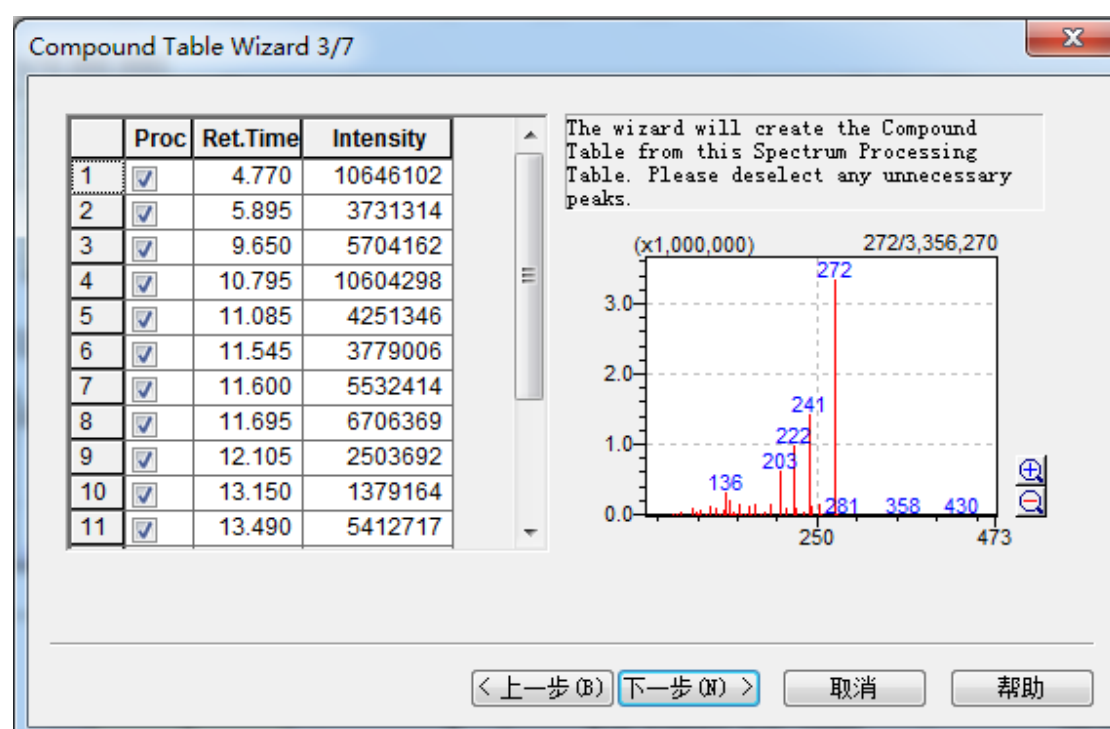
10) 在向导窗口中, 选择【Use current Spectrum Process Table】并单击【下一步】。



11) 单击“下一步”。



12) 单击“下一步”。



13) 单击“下一步”。

Compound Table Wizard 4/7

Quantitative Method: External Standard

Unit: ppb

Calculated by: ☒ Area ☐ Height

Format of Concentration: ☒ Decimal ☐ Significant

5

Calibration Curve

of Calib. Levels: 1

Curve Fit Type: Linear

Zero: Not Forced

Weighted Regression: None

Grouping: Sum Conc

< 上一步 (B) 下一步 (N) > 取消 帮助

14) 在 [Compound Table Wizard 5/7] 窗口, 在 [# of Reference Ions] 设置 0, 单击“下一步”。

注: 如果只使用一个前体离子, # of Reference Ions 设置 0 即可。如需使用 2 个前体离子, # of Reference Ions 设置 1。

First, enter the standard concentration for each level. Then set the amount of internal standard to use in the Internal Standard field. In the Number of Reference Ions field, enter zero to use no reference ion.

Concentration
Standard:

Level	Conc.
1	1

Internal Standard:
1

Ion Settings
Target Ion:
☐ TIC ☐ MIC ☒ MC
of Reference Ions:
0
Decimal for mass:
None
Default Ion Allowance:
30 %

< 上一步(B) 下一步(N) > 取消 帮助

15) 在 [Compound Table Wizard 6/7] 窗口, 设置所有标准品的前体离子的 m/z。单击“下一步”。

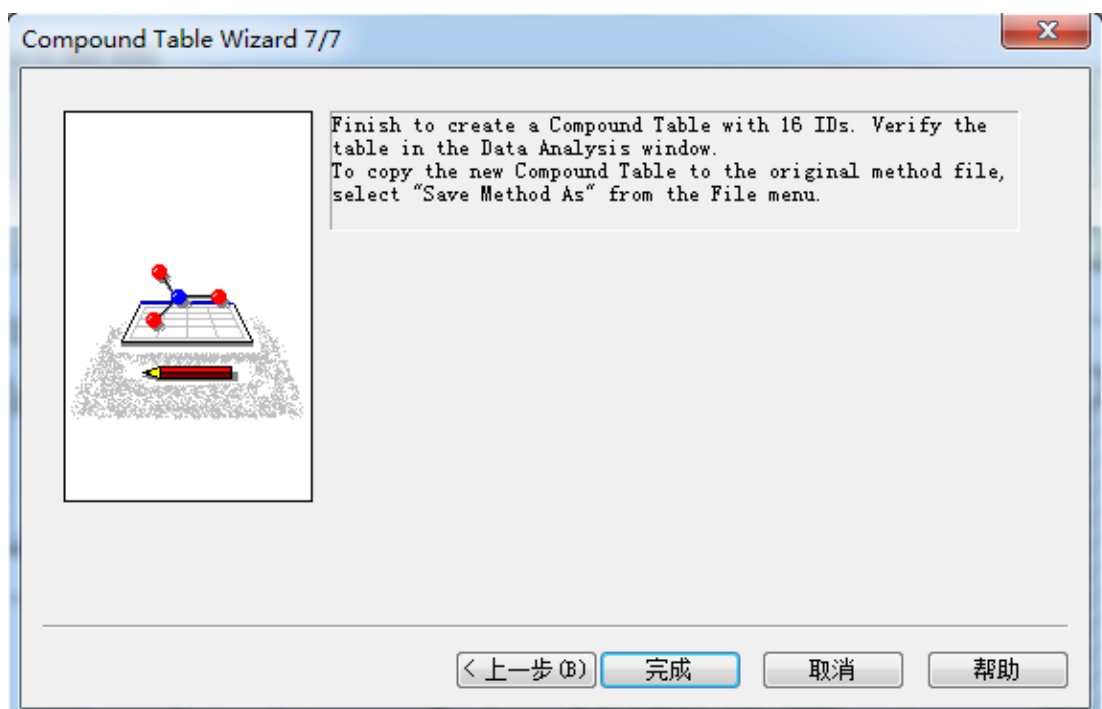
ID#: 1
Retention Time: 4.770 min
Ret. Index: 1109
Type: Target
Compound Name: ☒ Octafluoronaphthalene ☐ Set name
Octafluoronaphthalene >>

Edit all fields, as necessary. To change the type, place the cursor in the type column and select a new type from the drop down list in the field.

	Type	m/z	Rel. Inten.
1	Target Ion	272	100.00
2	Not used	241	42.83

Set Mass Ratio
Int.(x1,000,000) Base Peak: 272/3,356,270
m/z 468.00 Abs. Inten. 0 Rel. Inten.
2.5
0.0
55 93 136 191 203 222 241 272 281 312 358 387 430
100 200 300 400 m/z
Close

16) 所有组分设置完成后，单击【完成】。



17) 创建完成新的化合物表，显示于【Param】标签中。将化合物表从 Edit 编辑模式切换为 View 显示模式。

ID#	Name	Type	m/z	Ret.Time	Ret. Index	Unit
1	Octafluoron	Target	272.00	4.770	1109	ppb
2	Dichlorvos	Target	109.00	5.895	1241	ppb
3	Fenobucarb	Target	121.00	9.650	1605	ppb
4	Hexachlorob	Target	284.00	10.795	1712	ppb
5	Simazine	Target	201.00	11.085	1740	ppb
6	Propyzamide	Target	173.00	11.545	1783	ppb
7	Diazinon	Target	179.00	11.600	1789	ppb
8	Chlorothalon	Target	266.00	11.695	1798	ppb
9	Iprobenfos	Target	91.00	12.105	1838	ppb
10	Fenitrothion	Target	125.00	13.150	1942	ppb
11	Thiobencarb	Target	100.00	13.490	1977	ppb
12	Stearic acid	Target	74.00	14.875	2125	ppb
13	Isoprothiola	Target	118.00	15.255	2167	ppb
14	Isoxathion	Target	105.00	15.760	2224	ppb
15	Chlornitrofe	Target	317.00	16.670	2330	ppb
16	EPN	Target	157.00	17.810	2470	ppb
17		Target	TIC	0.000	0	ppb

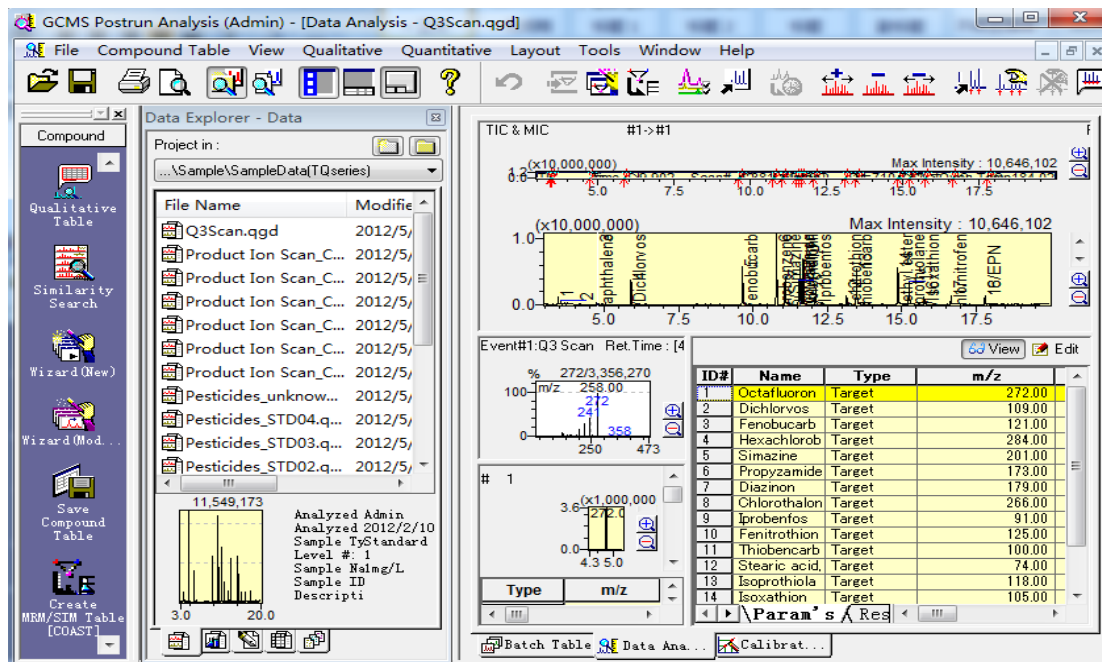
Below the table is a tabbed interface with three tabs: 'Param's' (selected and highlighted with a red box), 'Results', and 'GroupParam's'. To the right of the tabs is a small icon of three vertical bars.

18) 保存数据文件。

3 设定产物离子和优化碰撞电压（产物离子扫描）

3.1 创建产物离子扫描测定方法

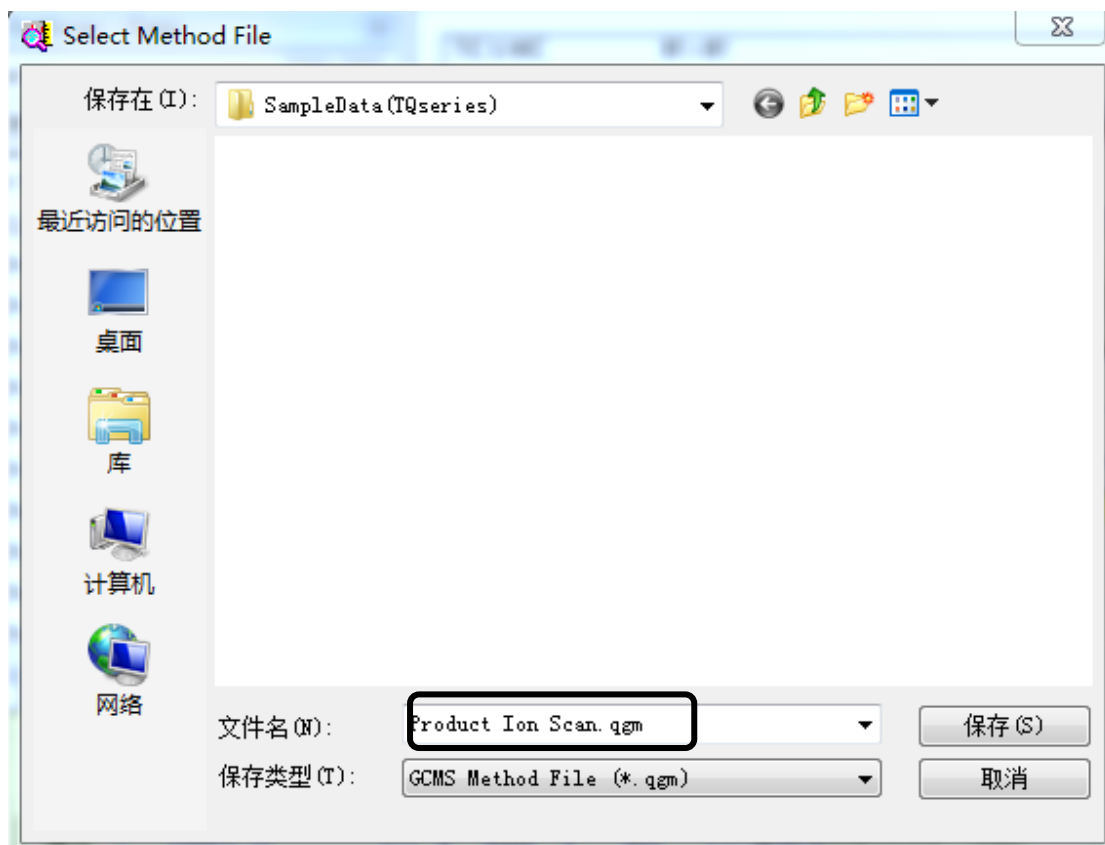
1) 打开已编辑了化合物组分表的数据文件 Q3Scan.qgd。



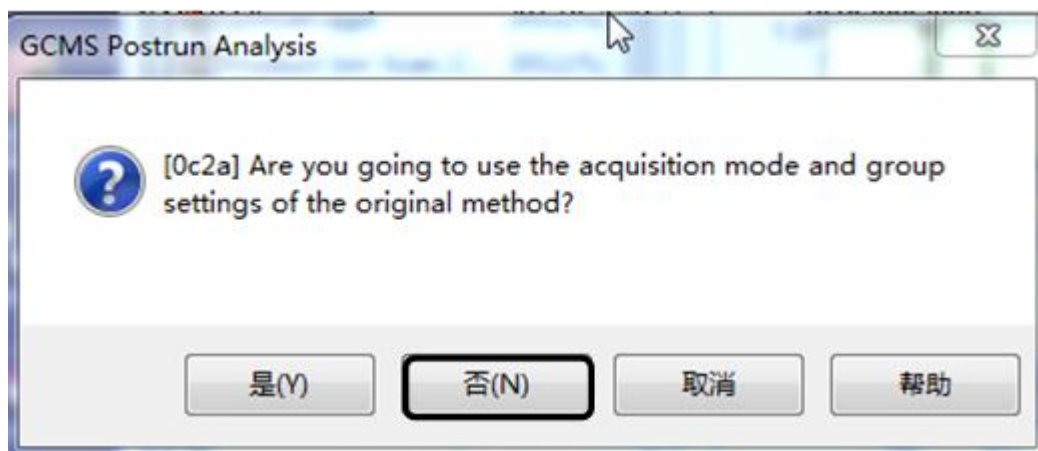
2) 单击助手栏中的[Creation MRM or SIM Table[COAST]]



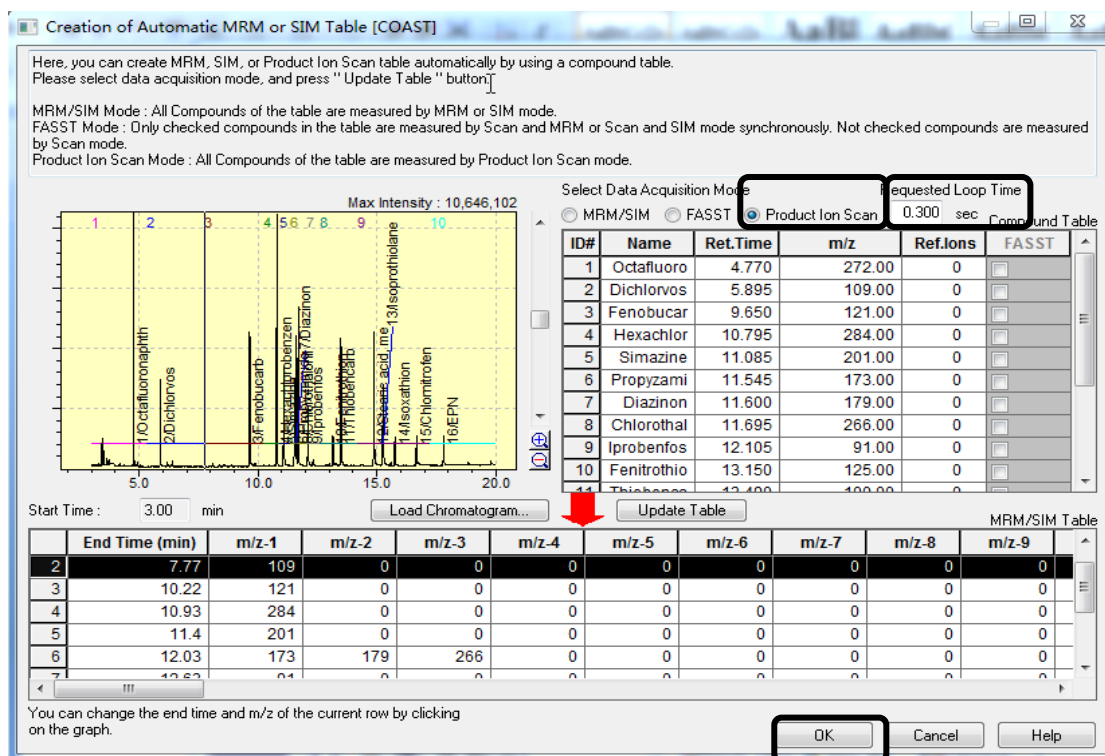
3) 在弹出对话框中，输入新的产物离子扫描方法名“Product Ion Scan.qgm”并单击“保存”。



4) 如果出现询问“是否使用原始方法的采集模式和分组设定模式？”点击【否】。



5) 在[Select Data Acquisition Mode]中选择[Product Ion Scan]，确认[Requested Loop Time]的值，默认值为0.3Sec，但也可以根据需要改变。

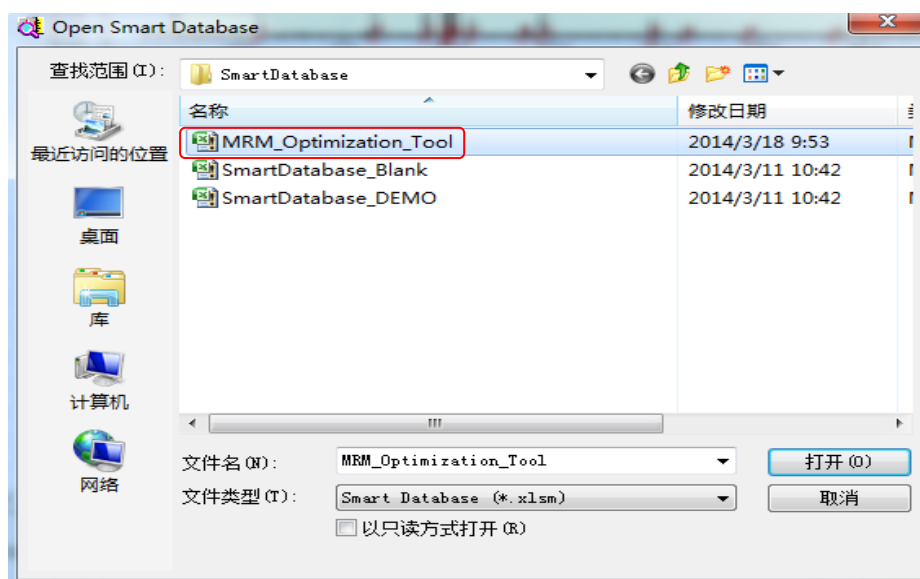


6) 调整每组的结束时间确保每组通道的个数不超过 4。

7) 点击确定，产物离子扫描方法建立完毕。

3.2 创建产物离子扫描批处理表

1) 点击辅助栏 ，打开“MRM_Optimization_Tool”文件，启用宏命令。



2) 在“Create_MethodBatch”表中，选择语种为中文，点击“方法文件”打开前面创建的产物离子扫描方法“Product Ion 方法”。输入碰撞电压范围和电压间隔，每瓶标准溶液的进样次数（注：当进样次数较多时可能会发生一瓶溶液不够用的情况，此时可以使用多个样品瓶放置标样）。点击“创建批处理文件”创建不同 CE 电压的产物离子扫描方法及批处理表。

（注：点击“创建批处理文件”按钮后，自动在“Product Ion 方法”所在子目录下生成以当前年月日命名的子目录，所创建的各产物离子扫描方法及批处理表位于此子目录内）。

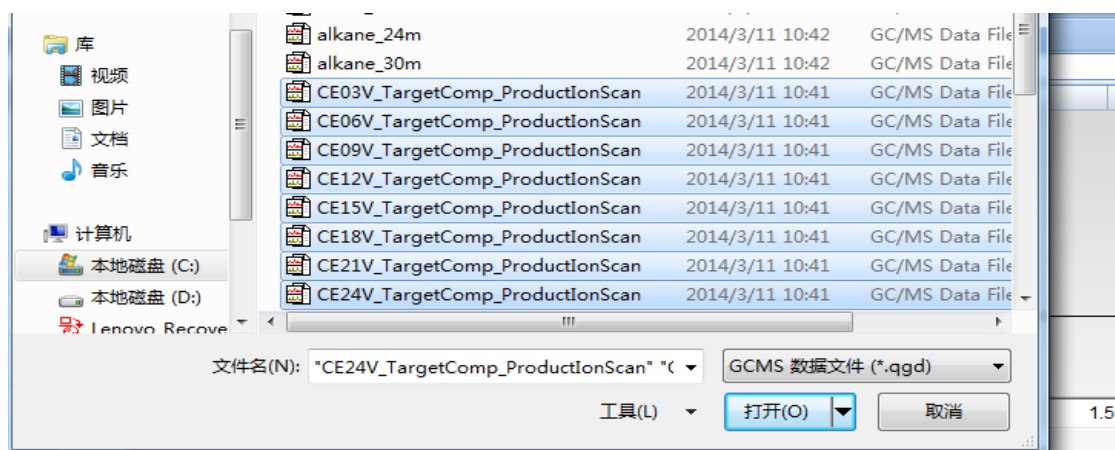
3.3 运行产物离子扫描批处理表

在实时分析窗口打开 3.2 节建立的产物离子扫描批处理表，运行批处理表，采集产物离子扫描数据。

样品瓶号	样品名称	样品 ID	样品类型	分析类型	方法文件	数据文件	级别号	进样体积	内标量	报告输出
1	1		0未知物	IT QT	an.qgm	E03V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
2	1		0未知物	IT QT	an.qgm	E06V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
3	1		0未知物	IT QT	an.qgm	E09V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
4	1		0未知物	IT QT	an.qgm	E12V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
5	1		0未知物	IT QT	an.qgm	E15V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
6	2		0未知物	IT QT	an.qgm	E18V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
7	2		0未知物	IT QT	an.qgm	E21V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
8	2		0未知物	IT QT	an.qgm	E24V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
9	2		0未知物	IT QT	an.qgm	E27V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
10	2		0未知物	IT QT	an.qgm	E30V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
11	3		0未知物	IT QT	an.qgm	E33V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
12	3		0未知物	IT QT	an.qgm	E36V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
13	3		0未知物	IT QT	an.qgm	E39V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
14	3		0未知物	IT QT	an.qgm	E42V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
15	3		0未知物	IT QT	an.qgm	E45V_pro-ion-scan.qgd	1	1	(级别1)	打印
16	1		0	IT QT			1	1	(级别1)	打印

3.4 自动优化碰撞电压

1) 打开“MRM_Optimization_Tool”表中的“MRM Optimization”工作表，点击“选择数据文件”，打开 3.3 节采集的产物离子扫描数据



No.	文件名	No.	组分名称	保留时间	保留指数	母离子1	事件1	母离子2	事件2
1	CE03V_TargetComp_ProductionScan.qgd	1	Dichlorvos	5.423	1245	109.000	1	185.000	2
2	CE06V_TargetComp_ProductionScan.qgd	2	Fenobucarb	8.243	1608	121.000	1	150.000	2
3	CE09V_TargetComp_ProductionScan.qgd	3	Simazine	9.499	1740	201.000	1	186.000	2
4	CE12V_TargetComp_ProductionScan.qgd	4	Propyzamide	9.946	1785	173.000	1	175.000	2
5	CE15V_TargetComp_ProductionScan.qgd	5	Diazinone	9.975	1788	179.000	3	304.000	4
6	CE18V_TargetComp_ProductionScan.qgd	6	Chlorothalonil	10.140	1803	266.000	5	264.000	6
7	CE21V_TargetComp_ProductionScan.qgd	7	Iprobenfos	10.549	1838	204.000	1	246.000	2
8	CE24V_TargetComp_ProductionScan.qgd	8	Fenitrothion	11.824	1941	277.000	1	260.000	2
9	CE27V_TargetComp_ProductionScan.qgd	9	Benthiocarb	12.265	1975	100.000	1	257.000	2
10	CE30V_TargetComp_ProductionScan.qgd	10	Isoprotiholane	14.907	2160	204.000	1	290.000	2
11	CE33V_TargetComp_ProductionScan.qgd	11	Isoxathion	15.742	2217	313.000	1	177.000	2
12	CE36V_TargetComp_ProductionScan.qgd	12	Chloritrofen	17.230	2316	317.000	1	287.000	2
13	CE39V_TargetComp_ProductionScan.qgd	13	EPN	19.288	2453	157.000	1	169.000	2
14	CE42V_TargetComp_ProductionScan.qgd								
15	CE45V_TargetComp_ProductionScan.qgd								

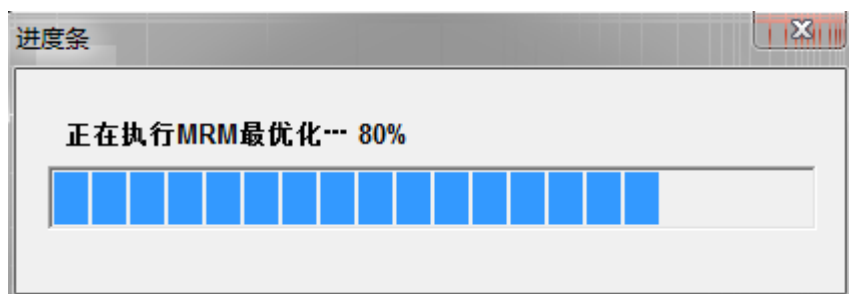
2) 设定 MRM Transition 数 (MRM 定量离子和定性离子对数) 及产物离子质量数范围。

最优化参数

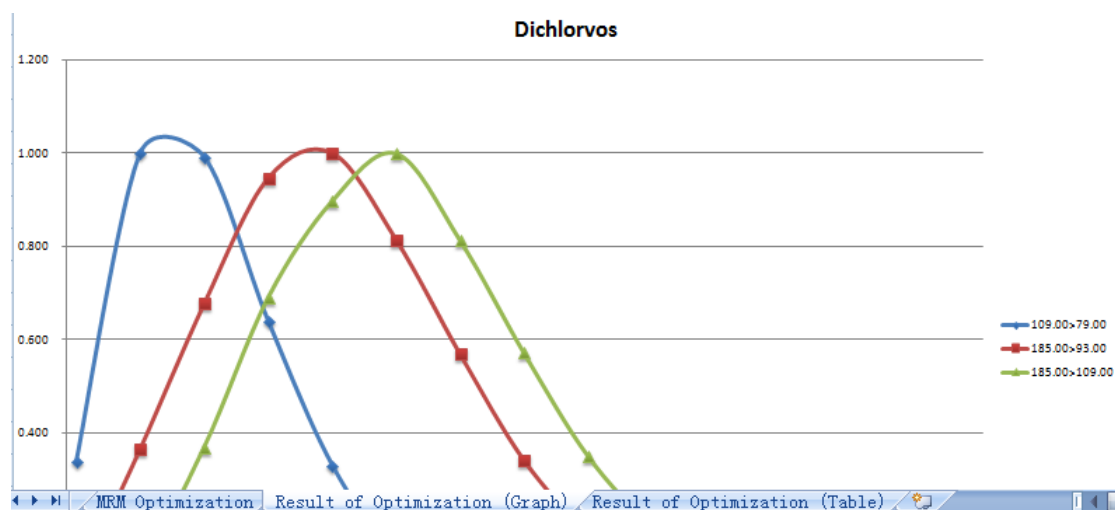
MRM transition 数: 4

碎片离子范围: 开始 m/z - 结束 m/z: 50 - (母离子 - 1.5)

3) 点击 “MRM 最优化”,



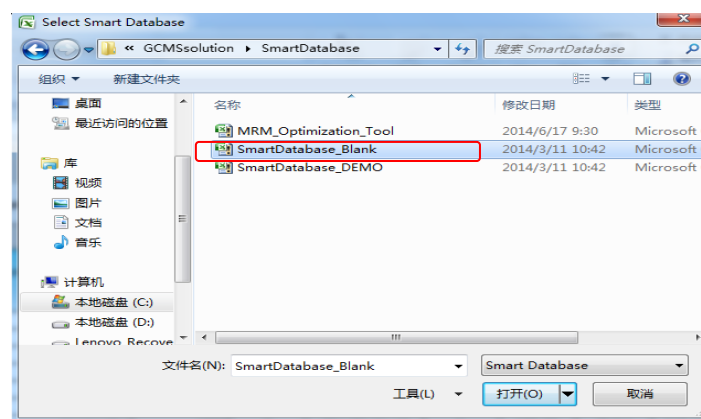
在 “Result of Optimization (Graph)” 自动生成 CE 优化曲线。



在“Result of Optimization (Table)”得到各组分的最佳 CE 电压及离子丰度比值。

注册到 Smart Database										
序列号	组分名称	保留指数	离子1				离子2			
			类型	m/z	CE	比率	类型	m/z	CE	比率
1	Dichlorvos	1245	T	109.00>79.00	6	100.00	Ref.1	185.00>93.00	15	53.77
2	Fenobucarb	1608	T	121.00>77.10	21	100.00	Ref.1	150.00>121.10	12	66.40
3	Simazine	1740	T	201.00>173.10	6	100.00	Ref.1	201.00>186.10	6	34.31
4	Propyzamide	1785	T	173.00>145.00	15	100.00	Ref.1	175.00>147.00	15	60.66
5	Diazinone	1788	T	304.00>179.10	15	100.00	Ref.1	179.00>137.20	18	84.83
6	Chlorthalonil	1803	T	264.00>168.00	24	100.00	Ref.1	266.00>170.00	24	70.64
7	Iprobenfos	1838	T	204.00>91.10	9	100.00	Ref.1	204.00>121.10	27	41.41
8	Fenitrothion	1941	T	277.00>260.10	6	100.00	Ref.1	277.00>109.10	15	69.49
9	Benthiocarb	1975	T	100.00>72.10	6	100.00	Ref.1	257.00>100.10	12	18.85
10	Isoprothiolane	2160	T	204.00>118.00	6	100.00	Ref.1	290.00>118.00	12	51.38
11	Isoxathion	2217	T	177.00>130.00	9	100.00	Ref.1	313.00>177.10	9	42.97
12	Chlornitrofen	2316	T	317.00>287.00	12	100.00	Ref.1	317.00>196.00	24	51.24
13	EPN	2453	T	169.00>141.10	6	100.00	Ref.1	169.00>77.10	21	51.94

4) 点击“注册到 Smart Database”按钮，选择“SmartDatabase_Blank”数据库或者其它已有的数据库，如农药库等，将各组分信息登记入数据库。



SmartDatabase_Blank 自动打开，各组分信息显示如下

Ver.3.00

Instrument Type
Create Method File TQ Series Lang.

Parameter
Ret. Index for AART Ret. Index 1
n-alkane data file
Template Method File
Divide Method into 1
Import

Serial#	Type	Acq. Mode	Method No.	Compound Name (E)	Ret. Index 1	Ret. Index 2	Ret. Index 3	Ret. Time
1	Target	MRM	1	Dichlorvos	1245			
2	Target	MRM	1	Fenobucarb	1608			
3	Target	MRM	1	Simazine	1740			
4	Target	MRM	1	Propyzamide	1785			
5	Target	MRM	1	Diazinone	1788			

Database: n-alkaneIndexTable / MSTableView

Divide Method into 1
Import

MRM Transition

Serial#	Type	Acq. Mode	Method No.	Compound Name (E)	Type	m/z	CE	Ratio	Type	m/z	CE	Ratio	Type
1	Target	MRM	1	Dichlorvos	T	109.00>79.00	6	100.00	Ref.1	185.00>93.00	15	53.77	Ref.2
2	Target	MRM	1	Fenobucarb	T	121.00>77.10	21	100.00	Ref.1	150.00>121.10	12	66.40	Ref.2
3	Target	MRM	1	Simazine	T	201.00>173.10	6	100.00	Ref.1	201.00>186.10	6	34.31	Ref.2
4	Target	MRM	1	Propyzamide	T	173.00>145.00	15	100.00	Ref.1	175.00>147.00	15	60.66	Ref.2
5	Target	MRM	1	Diazinone	T	201.00>179.10	15	100.00	Ref.1	179.00>137.20	18	84.83	Ref.2

Database: n-alkaneIndexTable / MSTableView

5) 点击 “Import” 按钮，选择 Q3SCAN 方法，选择 “Yes to All”

Overwrite compound information

Dichlorvos has already been registered. Overwrite compound information?

Yes Yes to All No Cancel

各组分保留时间自动载入，显示如下

Import

Serial#	Type	Acq. Mode	Method No.	Compound Name (E)	Ret. Index 1	Ret. Index 2	Ret. Index 3	Ret. Time	Cs
1	Target	MRM	1	Dichlorvos	1245			5.434	
2	Target	MRM	1	Fenobucarb	1608			8.239	
3	Target	MRM	1	Simazine	1740			9.475	
4	Target	MRM	1	Propyzamide	1785			9.935	
5	Target	MRM	1	Diazinone	1788			9.971	

6) 输入其它所需信息，如 CAS 号等，编辑完毕后另存此文件，如 SmartDatabase_XXXX。

4 创建 MRM 方法

1) 打开前面注册各组分信息的“SmartDatabase_XXXX”数据库或者其它已有的数据库，如农药库等。

仪器类型: TQ Series

语言

创建方法文件

参数

AART用保留指数: 不启用AART

n-alkane 数据文件: ..

模板方法文件: ..

方法分割: 1

输入

2) AART 用保留指数“选择不启用 AART”（注：若使用 AART 则选用 Ret.Index1 或 Ret.Index2 等，应选择正构烷烃的数据。）

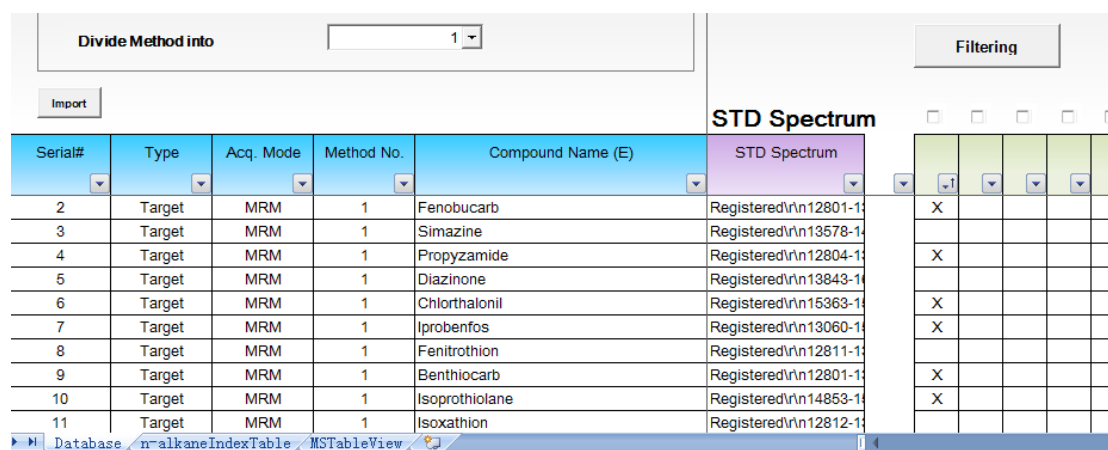
3) 选择“模板方法文件”为 Q3SCAN 方法或产物离子扫描中任一方法，以加载 GC 及 MS 参数

4) 选择需要测定的目标组分

a) 将不需测定的组分 Type 类型中 Target 删除

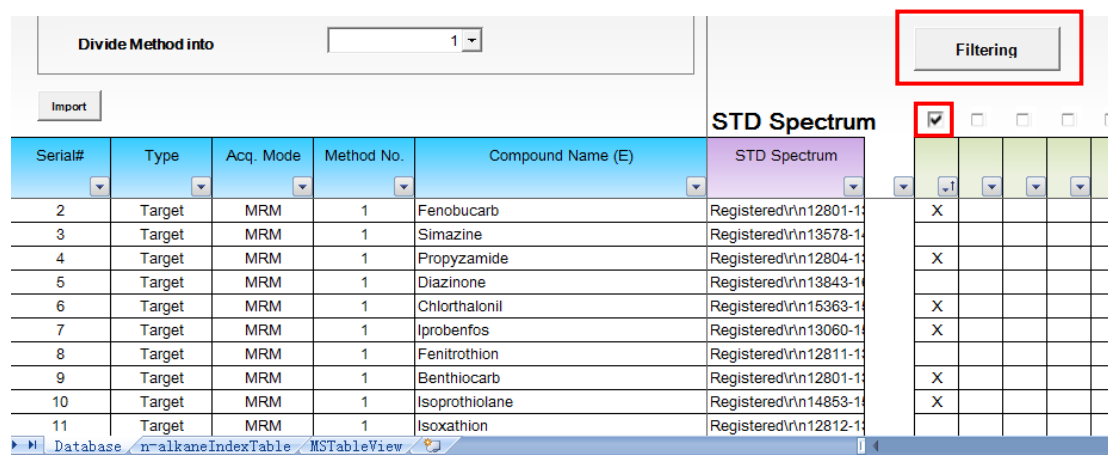
Serial#	Type	Acq. Mode	Method No.	Compound Name (E)	Ret. Index 1	Ret. Index 2	Ret. Index 3	Ret. Time
1	Target	MRM	1	Dichlorvos	1245			5.434
2	Target	MRM	1	Fenobucarb	1608			8.239
3		MRM	1	Simazine	1740			9.475
4	Target	MRM	1	Propyzamide	1785			9.935
5		MRM	1	Diazinone	1788			9.971
6	Target	MRM	1	Chlorthalonil	1803			10.130
7	Target	MRM	1	Iprobenfos	1838			10.543
8		MRM	1	Fenitrothion	1941			11.815
9	Target	MRM	1	Benthiocarb	1975			12.262
10	Target	MRM	1	Isoprothiolane	2160			14.895

b) 或者使用组管理的方式，将需要测定的目标组分打上 X 或*



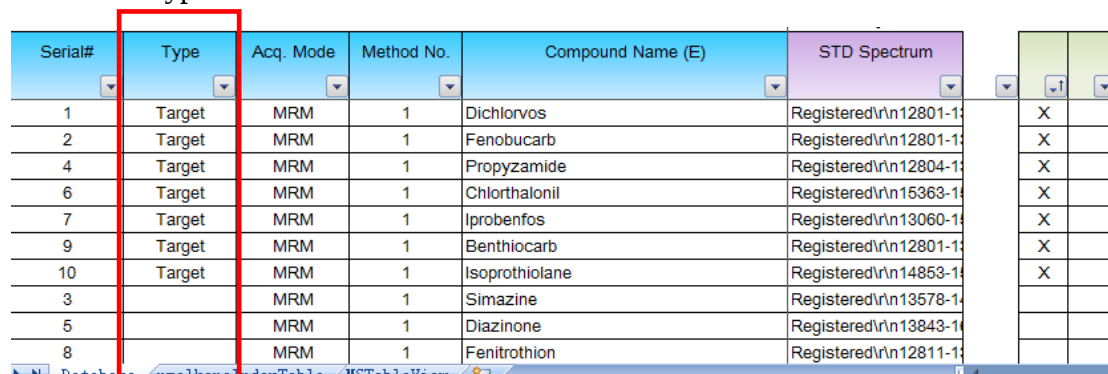
Serial#	Type	Acq. Mode	Method No.	Compound Name (E)	STD Spectrum
2	Target	MRM	1	Fenobucarb	Registered\r\n12801-1
3	Target	MRM	1	Simazine	Registered\r\n13578-1
4	Target	MRM	1	Propyzamide	Registered\r\n12804-1
5	Target	MRM	1	Diazinone	Registered\r\n13843-1
6	Target	MRM	1	Chlorthalonil	Registered\r\n15363-1
7	Target	MRM	1	Iprobenfos	Registered\r\n13060-1
8	Target	MRM	1	Fenitrothion	Registered\r\n12811-1
9	Target	MRM	1	Benthiocarb	Registered\r\n12801-1
10	Target	MRM	1	Isoprothiolane	Registered\r\n14853-1
11	Target	MRM	1	Isoxathion	Registered\r\n12812-1

在该组上方的复选框中点勾，再点击 Filtering（筛选）按钮



Serial#	Type	Acq. Mode	Method No.	Compound Name (E)	STD Spectrum
2	Target	MRM	1	Fenobucarb	Registered\r\n12801-1
3	Target	MRM	1	Simazine	Registered\r\n13578-1
4	Target	MRM	1	Propyzamide	Registered\r\n12804-1
5	Target	MRM	1	Diazinone	Registered\r\n13843-1
6	Target	MRM	1	Chlorthalonil	Registered\r\n15363-1
7	Target	MRM	1	Iprobenfos	Registered\r\n13060-1
8	Target	MRM	1	Fenitrothion	Registered\r\n12811-1
9	Target	MRM	1	Benthiocarb	Registered\r\n12801-1
10	Target	MRM	1	Isoprothiolane	Registered\r\n14853-1
11	Target	MRM	1	Isoxathion	Registered\r\n12812-1

之后打上 X 的目标组分会被排列在前并且仅这些组分的 Type 标记为 Target，其它组分的 Type 为空白（表示非目标组分）。



Serial#	Type	Acq. Mode	Method No.	Compound Name (E)	STD Spectrum
1	Target	MRM	1	Dichlorvos	Registered\r\n12801-1
2	Target	MRM	1	Fenobucarb	Registered\r\n12801-1
4	Target	MRM	1	Propyzamide	Registered\r\n12804-1
6	Target	MRM	1	Chlorthalonil	Registered\r\n15363-1
7	Target	MRM	1	Iprobenfos	Registered\r\n13060-1
9	Target	MRM	1	Benthiocarb	Registered\r\n12801-1
10	Target	MRM	1	Isoprothiolane	Registered\r\n14853-1
3		MRM	1	Simazine	Registered\r\n13578-1
5		MRM	1	Diazinone	Registered\r\n13843-1
8		MRM	1	Fenitrothion	Registered\r\n12811-1

*分组管理可设定特定化合物组方便方法建立

5) 点击“创建方法文件”，设定 MS 表参数



6) 点击 OK, 保存方法为“xxx-MRM”。实时分析中打开“xxx-MRM”方法, 在 MS 参数中选择合适的检测器电压(通常设定为调谐电压+0.6kV 左右), 保存方法文件。

5 设定离子比率

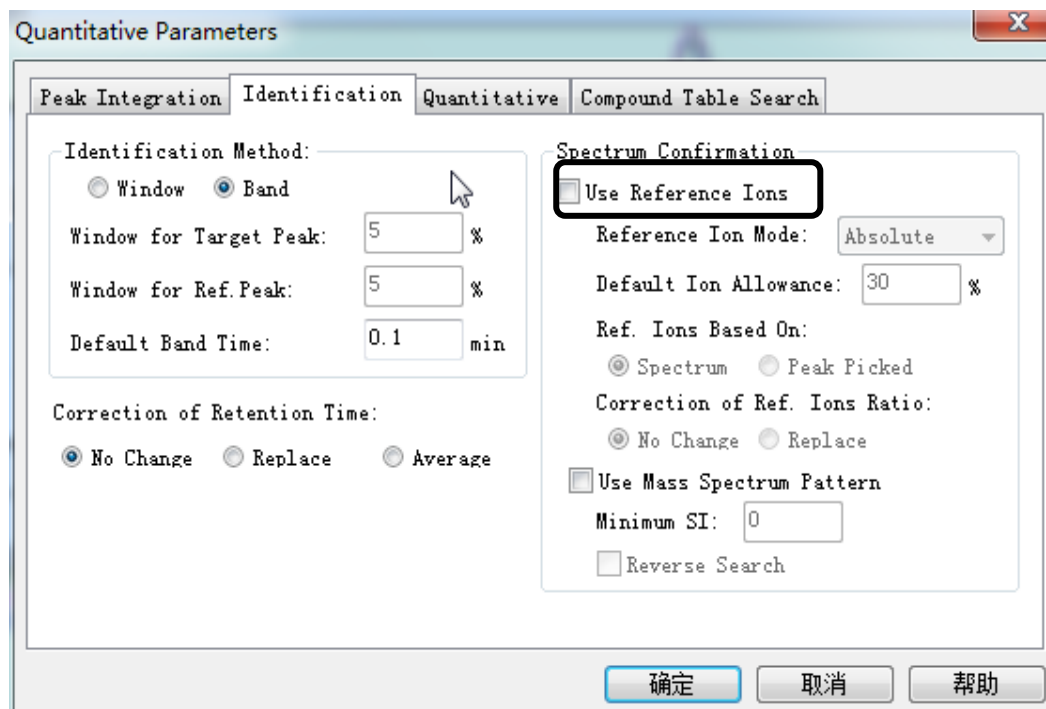
- 1) 以第 4 节中建立的方法文件“xxx-MRM”采集某一浓度的标准样品, 如 MRM.qgd。
- 2) 打开再解析界面, 打开数据文件“MRM.qgd”。
- 3) 在[Postrun]辅助栏中单击(Quantitative)图标。



- 4) 在[Quantitative]辅助栏中点击[Quantitative Parameters], 打开定量参数窗口。
- 5) 在[Peak Integration]标签中设置合适的积分参数, 使待测化合物的色谱峰

被检测。

6) 在 [Identification] 标签中清除 [Use Reference Ions]。



7) 单击辅助栏中【Peak Integration】图标进行定量积分。

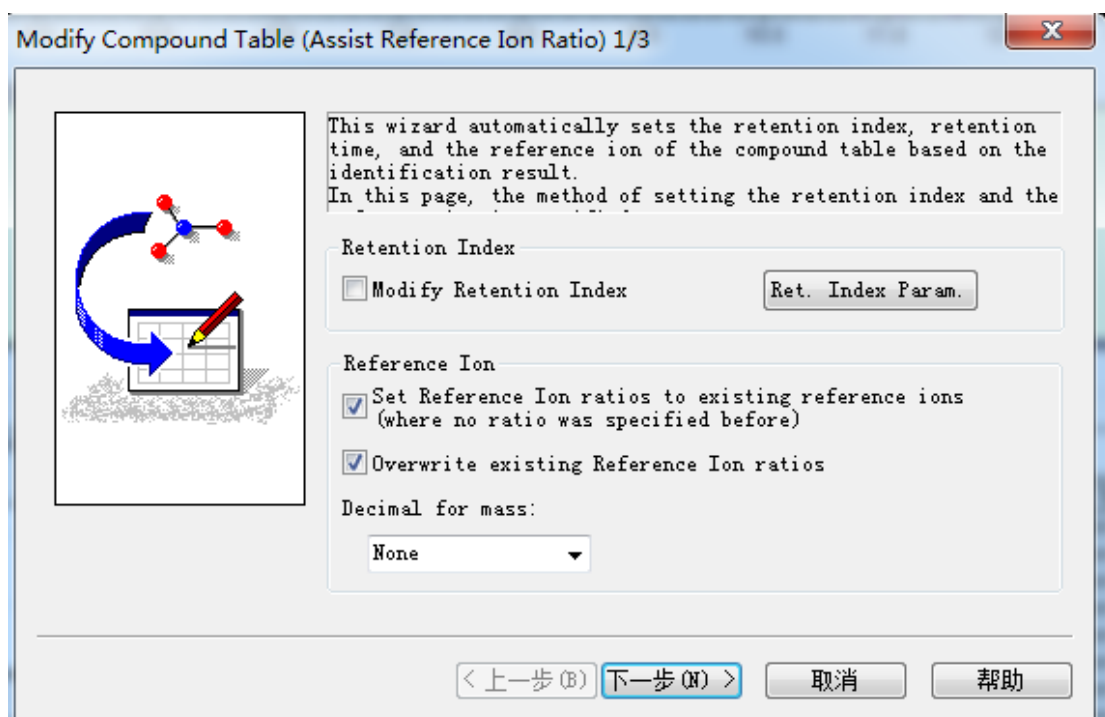
8) 在 [Postrun] 辅助栏中单击 (Create Compound Table) 图标。



9) 在 (Create Compound Table) 辅助栏中单击 (Wizard (Modify)) 图标

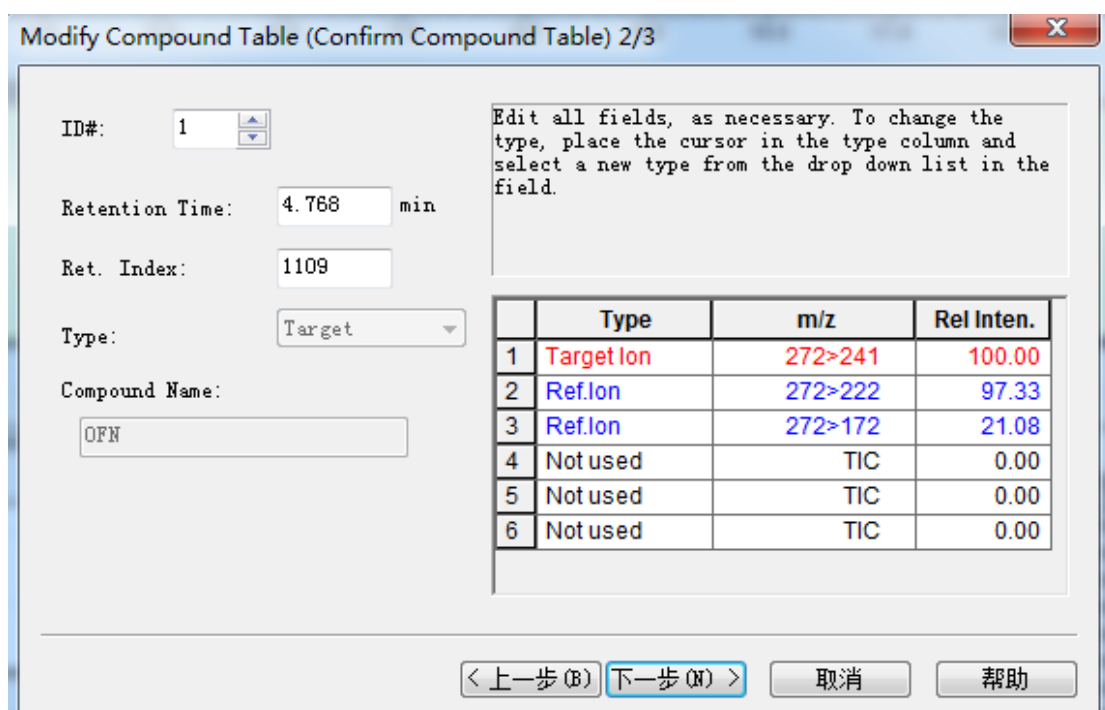
10) 显示 [Modify Compound Table (Assist Reference Ion Ratio) 1/3] 窗口。

选择 [Set Reference Ion ratios to existing reference ions]。

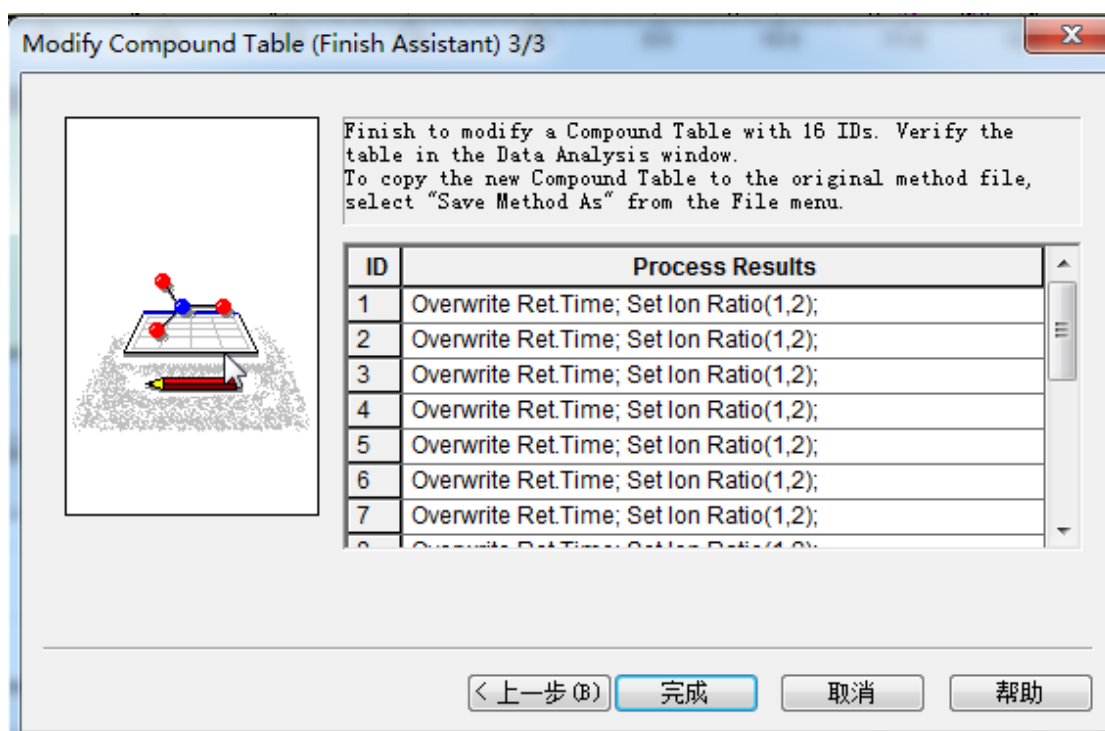


11) 单击下一步。

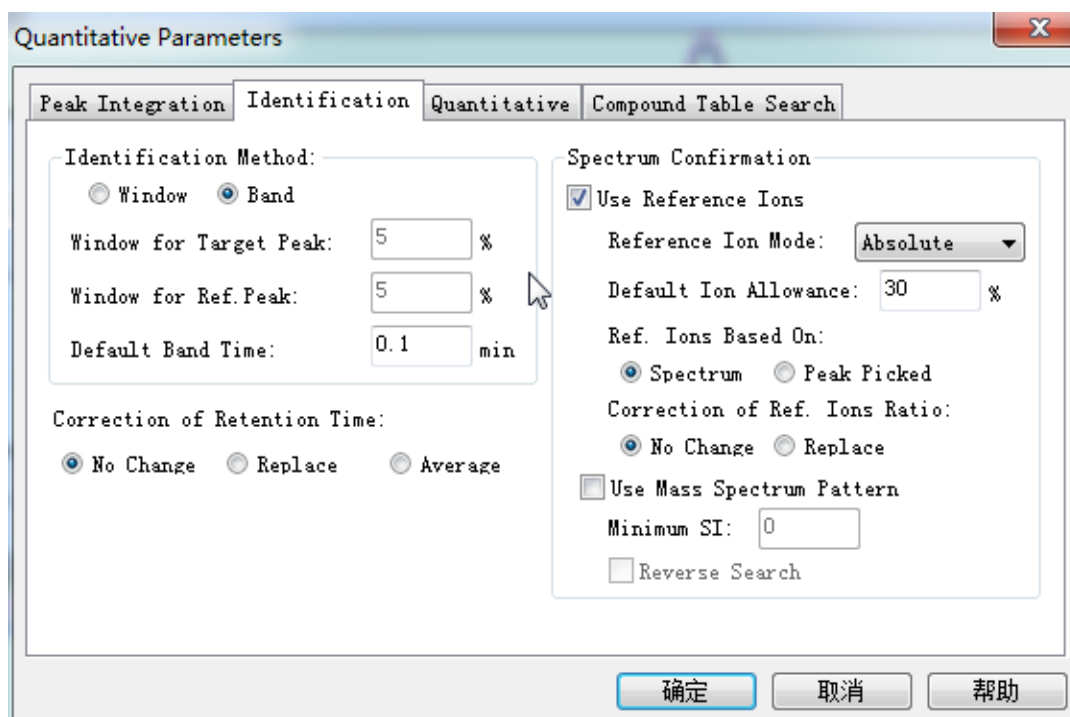
12) 在[Modify Compound Table (Confirm Compound Table) 2/3]窗口中，单击下一步。



20) 在[Modify Compound Table (Finish Assistant) 3/3]窗口中，点击完成，化合物的离子比率被设定。



21) 在[Qualitative Parameters]窗口的[Identification]标签下，选择[Use Reference Ions]。



22) 在菜单栏[File]中选择[Save Method File]，覆盖保存方法文件。至此，MRM方法文件建立完毕。