

2040-0030 РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

QSight® 225MD

Screening System

Версия программного обеспечения 2.1

CE IVD

PerkinElmer

Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Содержание

Уведомление 1
Информация об авторских правах и товарных знаков 2
Введение 3
Изменения по сравнению с предыдущей версией руководства 3
Использование данного руководства 3
Дополнительная документация 3
Условные обозначения 3
Гарантийные условия 14
Уведомление о неправильном использовании оборудования 4
Обращение в центр обслуживания и технической поддержки 4
Северная Америка 4
Европа 4
Азиатско-Тихоокеанский регион 5
Серийный номер прибора 6
Уведомление о серьезных инцидентах 6
Предупреждения и меры предосторожности 6
Целевая аудитория 28
Общие предупреждения о безопасности 7
Предупреждение о безопасности при использовании электропитания 7
Опасности, связанные с воздействием химических веществ 7
Предупреждения об агрессивных и токсичных веществах 7
Опасные или биологически опасные отходы 7
Электричество, предохранители и качество высокого напряжения 8
Сжатый газ 9
Телесные повреждения 9
Риски, связанные с системой 9
Кибербезопасность 11
Требования к аппаратному обеспечению 11
Список используемых символов 11
Знаки безопасности на масс-спектрометре 14
Требования к лабораторным условиям 17
Условия эксплуатации и хранения 17
Валидация и контроль качества 17
Перемещение прибора 17
Соответствие нормативным требованиям 18
Инструкции по WEEE для продукции PerkinElmer 18
Обзор системы 20
Назначение 20
Обзор масс-спектрометра QSight® 225MD 20
Ионизация 20
Режимы MS-сканирования 21
Режимы сканирования MS/MS 21
Компоновка прибора, основные компоненты и подключения 21
Обзор системы 21

Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Передняя панель прибора 23
Задняя панель 23
Технические характеристики системы 26
Масс-спектрометр QSight 225MD 111
Программное обеспечение Simplicity 3Q MD 111
Автосамплер для QSight® MD UHPLC 27
Насос для QSight® MD UHPLC 27
Колоночный термостат QSight® MD UHPLC 27
Обзор насоса для QSight® 225MD UHPLC 122
Обзор колоночного термостата QSight MD 30
Обзор Автосамплера для QSight® MD UHPLC 31
Блок ручного управления 33
Работа программного обеспечения 130
Перед началом работы 35
Начало работы 131
Главный экран Simplicity 36
Общие элементы управления экраном 37
Меню Simplicity Orb 39
Меню Ribbon (Ленточное меню) 40
Traffic Light Right-Click Device Controls (Щелчок правой кнопкой мыши на Световые индикаторы управления) 41
Вкладка Configuration (Конфигурация) 43
Разработка метода 45
Управление лентой при разработке метода 45
Ссылка на программное обеспечение для разработки метода 46
Элементы и опции на левой панели 47
Панель управления MC Experiment Creator (Создание эксперимента) (центральная) 48
Элементы и опции на правой панели 49
Разработка метода и оптимизация соединений 50
Создание нового метода MS 50
Загрузка существующего метода MS 51
Методы с двойным источником 51
Понимание сканирования Q1 Scans (Сканирование Q1), Product Scans (Продукт сканирования) и MRM Scans (Сканирование MRM) 51
Ручная оптимизация источников 56
Оптимизация положения источника 57
Оптимизация положения иглы короны (только зонды APCI) 60
Приборы, настроенные для оптимизации MRM с высокими скоростями потока 61
Динамический газ-осушитель 64
Выполнение процедуры автонастройки 67
Разработка метода ЖХ 68
Управление лентой меню метода ЖХ 68
Работа с методами ЖХ 68
Создание нового метода ЖХ 69
Для загрузки существующего метода ЖХ 72
Запуск серий (партий) 73

Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Элементы управления ленты меню Создания списка серий и Очередь сбора данных серии 73
Создание и запуск серий....75
Создание серии с помощью Batch List Creator (Создания списка серий) 75
Работа с пробами....19
Указание Методов количественного анализа в Batch List Creator (Создание списка серий)....78
Понимание названий проб....78
Функции управления Таблицей Списка серий....79
Работа с Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии) 79
Определение параметров Очереди сбора данных серии 80
Очистка серий....83
Запуск сбора данных....83
Запуск рабочих списков с использованием штрих-кодов 84
Количественная оценка данных и обработка результатов 86
Обработка количественных данных....86
Руководство по программному обеспечению Редактора методов количественного анализа....86
Элементы управления ленты меню Редактора метода количественного анализа....87
Функции управления Таблицей данных Редактора Метода количественного анализа....87
Колонки таблицы данных Редактора метода количественного анализа....88
Множитель стандартного отклонения контрольной пробы....90
Работа с методами количественного анализа....53
Создание нового метода количественного анализа 90
Как открыть существующий метод количественного анализа 90
Определение параметров количественного анализа для интересующего пика....90
Определение окна поиска времени удерживания 92
Обработка серии проб....92
Руководство по программному обеспечению Обработчика результатов 92
Элементы управления лентой меню Обработчика результатов 93
Функции управления Таблицей данных Обработчика результатов 93
Колонки таблицы данных Обработчика результатов 94
Коэффициент вариации 95
Сигнал к шуму....95
Обработка результатов 96
Просмотр аналитов, графиков калибровочных кривых и просмотр результатов количественного анализа 90
Создание отчетов и экспорт результатов....96
Экспорт результатов в Microsoft Excel....96
Экспорт результатов в формате PDF....97
Просмотр, рецензирование и построение графиков данных....98
Элементы управления ленты меню DataViewer (Средство просмотра данных)....98
Функции управления графиком DataViewer (Средство просмотра данных)....100
Графический просмотр результатов в DataViewers (Средство просмотра данных) 101
Для работы с графиками в DataViewer (Средство просмотра данных) 101
Наложение графиков....103
Отображение значений сигнала к шуму....104
Для извлечения данных из XIC.... **Ошибка! Закладка не определена.**
Проведение планового технического обслуживания....106

Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Порядок технического обслуживания масс-спектрометра 106
Запчасти, инструменты и растворители 106
Запуск и выключение системы 106
Снятие и повторная установка зондов 107
Замена иглы зонда 110
Замена фильтра газоочистителя 115
Запуск программы AutoDV Routine 118
Запуск процедуры автокалибровки 120
График профилактического технического обслуживания 123
Процедура технического обслуживания Автосамплера УВЭЖХ QSight MD 123
Запчасти и растворители 124
Замена встраиваемого в линию фриттового фильтра 124
Промывка шприца и заправка инструмента ЖХ 125
Изменение уровня доступа 125
Замена иглы шприца 126
Замена шприца 130
График профилактического технического обслуживания 134
Процедуры технического обслуживания насоса для УВЭЖХ QSight MD 135
Растворители 135
Запуск насоса 135
Отключение насоса 136
График профилактического технического обслуживания 138
Процедуры технического обслуживания колоночного термостата QSight MD 138
Запчасти, инструменты и растворители 138
Общая очистка 138
Проверка на отсутствие утечек 139
Когда обращаться в сервисную службу 139
Шприцевой насос QSight® 140
Описание шприцевого насоса 140
Установка шприца 142
Запуск и остановка шприцевого насоса 142
Перенастройка шприцевого насоса 143
Расходные материалы 144
Масс-спектрометр QSight® 225MD 144
Автосамплер QSight® MD UHPLC 145
Насос QSight® MD UHPLC 146
Колоночный термостат QSight® MD 146
Решения по техническому обслуживанию 147
Условия хранения 147
Конфигурации шлангов (трубок) 148
Обзор 148
От насоса к Автосамплеру 148
От Автосамплера к колоночному термостату 149
Клапан переключателя колонок 150
Головка 150

Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Разделяющий клапан....150
Подключения к масс-спектрометру Qsight....151
Только проточно-инжекционные анализы....152
Ввод ЖХ через две колонки....153
Ввод ЖХ через одну колонку....153
Ввод ЖХ через несколько колонок....153
Устранение неполадок....155
Выключение и перезапуск системы....155
Запуск системы....155
Выключение системы....155
Устранение сбоев в работе в результате электростатического разряда....155
Сообщения об ошибках....155
Папки и алгоритмы....157
Структура папок....157
Основные сведения о структуре папки данных....157
Алгоритмы....157
Алгоритмы сбора....158
Алгоритм выбора пиков и базовой линии для инжекции потока....158
Алгоритмы количественной оценки....163
Другие алгоритмы и формулы....163
Глоссарий....166
Индекс....170

Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

УВЕДОМЛЕНИЕ

Данный документ предоставляется для целей правильной эксплуатации данного оборудования конечным пользователям, которые приобрели оборудование у компании PerkinElmer, Inc. или ее филиалов или авторизованных дистрибьюторов. Данный документ защищен авторским правом, любое воспроизведение данного документа или любой его части строго запрещено, за исключением случаев предоставления письменного разрешения.

Оборудование, описанное в данном документе, защищено одним или несколькими патентами, выданными в США, Канаде и других странах. Дополнительные патенты находятся в стадии рассмотрения.

Программное обеспечение, указанное в данном документе, предоставляется в соответствии с отдельным лицензионным соглашением или соглашением о доступе пользователей ("Соглашение о программном обеспечении"). Копирование, изменение или распространение программного обеспечения допускается только в соответствии с условиями Соглашения о программном обеспечении, а копирование, изменение или распространение программного обеспечения на любом носителе, за исключением случаев, специально разрешенных Соглашением о программном обеспечении, является нарушением закона. Соглашение о программном обеспечении запрещает обратное ассемблирование, обратное декодирование или декомпиляцию программного обеспечения для любых целей.

В различных частях данного документа могут быть ссылки на изделия других производителей, имеющих детали зарегистрированных торговых марок и/или функционирующих под отдельными торговыми наименованиями. Любое такое указание предназначено только для обозначения продукции этих производителей как поставляемой компанией PerkinElmer в составе оборудования и не подразумевает никакого права и/или лицензии на использование или разрешение другим использовать торговые наименования в качестве товарных знаков.

Информация, содержащаяся в данном документе, может быть изменена без предварительного уведомления.

За исключением случаев, специально оговоренных в условиях продажи, компания PerkinElmer, Inc. вместе со своими аффилированными лицами не дает никаких гарантий в отношении данного документа, включая, но, не ограничиваясь, подразумеваемые гарантии товарного состояния и пригодности для конкретной цели.

Компания PerkinElmer, Inc. и ее филиалы не несут ответственности за ошибки, содержащиеся в настоящем документе, за случайные косвенные убытки, возникшие в связи с предоставлением, исполнением или использованием данного материала.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by

Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Информация об авторских правах и товарных знаках

Информация об авторских правах и товарных знаках

Авторское право © 2018-2022, PerkinElmer, Inc. Все права защищены.
PerkinElmer, PKI и QSight являются зарегистрированными торговыми марками, а Simplicity является торговой маркой компании PerkinElmer, Inc. Все остальные торговые марки являются собственностью соответствующих владельцев.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Введение

Изменения по сравнению с предыдущей версией руководства

Изменения, внесенные в данное руководство подчеркнуты.

Использование данного руководства

Данное руководство пользователя содержит всю основную информацию, необходимую для эксплуатации и обслуживания Системы скрининговой «QSight® 225MD UHPLC Screening System», использования программного обеспечения Simplicity™ 3Q MD для сбора данных и обработки результатов.

Это руководство содержит некоторые полезные приложения, а также перечисленные ниже разделы:

- Введение: содержит инструкции по технике безопасности наряду с условными обозначениями, используемыми в руководстве, сведения о соответствии нормативным требованиям и инструкции по лабораторным условиям.
- Обзор системы: краткое описание системы скрининговой QSight, включая фотоиллюстрации и описание узлов прибора, используемых в режиме нормальной эксплуатации.
- Работа программного обеспечения: описывает особенности программного обеспечения Simplicity 3Q MD.
- Разработка методов MS (масс-спектрометрии): содержит описания функций и основные рабочие процессы для настройки MS-методов МС и управления масс-спектрометром.
- Работа с методами ЖХ (LC): содержит описание функций и основные рабочие процессы для настройки методов ЖХ и проведения УВЭЖХ-разделения.
- Прогон партий: описывает методы создания и добавления проб в партии для автоматизированного анализа проб.
- Количественная обработка данных и обработка результатов: в этом разделе описаны основные рабочие процессы для настройки методов количественного анализа и работы с данными на вкладке Result Processor (Обработка результатов).
- Просмотр, проверка и обработка данных: в этом разделе описано, как просматривать результаты, а также как работать с данными, распечатывать и экспортировать их на вкладке DataViewer (Просмотр данных).
- Текущее обслуживание: в этом разделе описаны необходимые инструменты, детали и растворители, а также процедуры базового обслуживания прибора.

Примечание: Данное руководство пользователя системы скрининговой «QSight® 225MD UHPLC Screening System» описывает большинство рабочих процессов, которые выполняются во время рутинных анализов.

Дополнительная документация

Система скрининговая «QSight® 225MD UHPLC Screening System» включает следующую дополнительную документацию. Обратитесь к представителю по работе с клиентами компании PerkinElmer за помощью в поиске этих ресурсов:

- Руководство по аппаратному обеспечению насоса QSight MD UHPLC в формате .pdf, содержащее дополнительную информацию по использованию и обслуживанию насоса QSight MD UHPLC.

- Руководство по аппаратному обеспечению автосамплера QSight MD UHPLC в формате .pdf, содержащее дополнительную информацию по использованию и обслуживанию автосамплера QSight MD UHPLC.

- Руководство по аппаратному обеспечению колоночного термостатат QSight MD в формате .pdf, содержащее дополнительную информацию по использованию и обслуживанию колоночного термостата QSight MD.

Условные обозначения

Во всей системной документации используются приведенные ниже условные обозначения:



Предупреждение: Предупреждение указывает на опасную ситуацию или операцию, которая, если ее не предотвратить, может привести к серьезным травмам или смерти оператора или пациента. Соблюдайте все указанные меры предосторожности.



Предостережение: предостережение указывает на ситуацию, которая может привести к повреждению прибора, потере данных, причинению вреда здоровью оператора или пациента при нарушении процедур.

Примечание: в примечании приводится важная информация оцедуры или описания, предупреждает пользователей о ключевых моментах, не связанных с травмированием персонала**.**

Обратите внимание, что в случаях, где существует конкретная опасность или предупреждение, например, опасность поражения электрическим током или ожога, этот символ будет добавлен к предупреждениям и предостережениям.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Гарантийные условия

На прибор предоставляется ограниченная гарантия ("Гарантия") от Wallac Oy ("Wallac"), компании PerkinElmer. Здесь приведена лишь краткая справка гарантийных условий, которая не должна трактоваться как изменение или дополнение условий гарантии. Полное описание гарантии см. в положениях и условиях, а также в договоре аренды или покупки.

В общем, в течение двенадцати (12) месяцев с даты установки или пятнадцати (15) месяцев с даты отгрузки ("Гарантийный срок прибора"), в зависимости от того, что наступит раньше, Wallac гарантирует, что прибор не имеет дефектов материалов и изготовления.

В течение гарантийного срока компания Wallac обязуется предоставит детали и рабочую силу для устранения дефектов материалов и изготовления.

ПРИМЕЧАНИЕ: Гарантия на данный прибор не распространяется на необходимое периодическое техническое обслуживание (ТО), если таковое требуется, стоимость и расходы на которое несет покупатель или арендатор. **Невыполнение требуемого ТО влечет за собой аннулирование гарантии**. Компания PerkinElmer и ее уполномоченные представители готовы выполнить ТО. За дополнительной информацией о ТО обращайтесь к представителю компании PerkinElmer.

Уведомление о неправильном использовании оборудования

ВНИМАНИЕ: Изменения или модификации, внесенные в данное оборудование, которые не были явно одобрены компанией PerkinElmer, могут привести к нарушению соответствия и лишить пользователя права на эксплуатацию оборудования.

Обращение в центр обслуживания и технической поддержки

Данное руководство содержит информацию о процедурах для целей различных операций пользователя, задач обслуживания системы. Любые задачи, процедуры или виды обслуживания, не указанные в данном руководстве, должны выполняться квалифицированным персоналом компании PerkinElmer. С любыми вопросами или комментариями, а также запросами относительно поддержки и обслуживания приборов обращайтесь по указанным ниже контактным данным:

Северная Америка

Обслуживание и поддержка:

- info@perkinelmer.com
- Центр технической поддержки: 1 800-762-4000 или 1 203-925-4602

Для получения информации о продукции и компании:

- Головной офис (США): http://www.perkinelmer.com/

Европа

По вопросам технического обслуживания и поддержки обращайтесь в региональный центр технической поддержки или сервисный центр в вашем регионе:

Страна	Местные контактные данные	Номер телефона для бесплатных звонков	Адрес электронной почты
Ирландия	(353) 1 2501100	1800 932886	info.ireland@perkinelmer.com cc.ie@perkinelmer.com
Великобритания	(44) 1494874515	0800 896046	cc.uk@perkinelmer.com
Швеция	(46) 08-590 797 00	0200-88 75 20	cc.nordic@perkinelmer.com
Дания	(45) 61 62 18 00	80 88 42 36	cc.nordic@perkinelmer.com

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteyaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Страна	Местные контактные данные	Номер телефона для бесплатных звонков	Адрес электронной почты
Финляндия	+358 2 2678 111	800 117186	cc.nordic@perkinelmer.com
Норвегия	(47) 22 02 15 02	800 18 854	cc.nordic@perkinelmer.com
Франция	(33) 0169598408	805 111333	cc.france@perkinelmer.com
Сервисный центр во Франции	(33) 0169598408	805 111333	rcsfrance@perkinelmer.com
Бельгия	(32) 27196076	800 40858	cc.benelux@perkinelmer.com
Нидерланды	+31 654941821	800 023 4490	cc.benelux@perkinelmer.com
Швейцария		800 001 125	cc.switzerland@perkinelmer.com
Германия	+49 6106 6100	800 000 6679	cc.germany@perkinelmer.com
Австрия		800 005 163	cc.austria@perkinelmer.com
Польша		800 880 888	cc.poland@perkinelmer.com
Сервисный центр в Испании		800 099 164	rcsspain@perkinelmer.com
Сервисный центр в Италии		800 906 642	servizioitalia@perkinelmer.com
Отдел продаж в Италии		800 906 642	cc.italy@perkinelmer.com

Азиатско-Тихоокеанский регион

По вопросам технического обслуживания и поддержки обращайтесь в региональный центр технической поддержки или сервисный центр в вашем регионе:

Страна	Местные контактные данные
Сингапур	+65 68681668
Таиланд	1-800-898-282
Австралия	1800 066 776
Филиппины	63 8220511
Малайзия	603-79491118
Гонконг	+852 26201881
Южная Корея	+82-2-868-5350
Тайвань	+886 0800211134
Япония	+81-45-339-5866

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Серийный номер прибора

Каждый масс-спектрометр QSight имеет уникальный серийный номер. Этот серийный номер отображается на **карте масс-спектрометра QSight**, на панели **Configuration screen Hardware Profile** (Экран настройки профиля аппаратного обеспечения), а также его можно прочитать на этикетке, расположенной на задней панели прибора. При обращении в компанию PerkinElmer в связи с данным прибором, указывайте номер модели и полный серийный номер.

Уведомление о серьезных инцидентах

Для пациента/пользователя/третьей стороны в Европейском Союзе и странах с идентичным режимом регулирования (IVDR; EU 2017/746/EU); если во время использования данного устройства или в результате его использования произошел серьезный инцидент, пожалуйста, сообщите об этом производителю и в национальный орган. Контактные данные производителя данного устройства для сообщения о серьезном инциденте следующие:

Wallac Oy (АО «Валлак») ,

Mustionkatu 6, FI-20750 Турку, Финляндия

www.perkinelmer.com

Телефон: +358 2 2678 111

Предупреждения и меры предосторожности

Важно: Все пользователи системы должны ознакомиться с общей информацией о мерах предосторожности и предупреждениях, приведенных в этом разделе. Мы также рекомендуем вывесить копию этих мер предосторожности рядом с прибором.

В этом разделе описаны общие правила, призванные помочь вам безопасно эксплуатировать масс-спектрометр и связанные с ним компоненты.

Эти правила техники безопасности призваны дополнить федеральные, государственные или региональные и локальные нормативные требования и законодательные акты в части охраны труда и техники безопасности. Представленная информация не охватывает все процедуры по технике безопасности, подлежащие выполнению.

В конечном итоге, вы и ваша организация несете ответственность за соблюдение федеральных, государственных или региональных и локальных законодательных требований по охране труда и технике безопасности, а также за поддержание безопасной лабораторной среды.

Перед началом работы с масс-спектрометром ознакомьтесь со всеми руководствами, поставляемыми с системой QSight. Внимательно прочитайте информацию по технике безопасности в данном руководстве и в других прилагаемых руководствах. При настройке прибора, выполнении анализов или процедур технического обслуживания строго следуйте приведенным инструкциям.

Примечание: Данное оборудование не требует специального осмотра или профилактического обслуживания для обеспечения непрерывного функционирования его защитных функций.

Целевая аудитория

Предупреждение: данное оборудование должно устанавливаться и использоваться исключительно в соответствии с инструкциями производителя. Несоблюдение этих инструкций может привести к аннулированию гарантии, повреждению оборудования или нарушению его безопасной работы и/или к серьезным травмам.

Предупреждение: установка и обслуживание должны выполняться только квалифицированным персоналом, прошедшим соответствующее обучение и получившим разрешение от компании PerkinElmer.

Предупреждение: к эксплуатации, очистке и обслуживанию прибора должны допускаться только обученные и квалифицированные специалисты, знакомые с работой прибора и потенциальными рисками.

Предупреждение: это оборудование должно использоваться исключительно в соответствии с инструкциями производителя.

Несоблюдение этих инструкций может нарушить встроенную системную защиту прибора.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteyaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Общие предупреждения о безопасности

Предупреждение: запрещается эксплуатировать систему с открытыми крышками или снятыми узлами. Отключайте электропитание при снятии крышек.

Предупреждение: запрещается модификация оборудования. Любое несанкционированное изменение и ненадлежащая эксплуатация системы могут привести к травмам персонала или повреждению оборудования и аннулированию гарантии.

Предупреждение: не пытайтесь производить регулирование, замену компонентов или ремонт прибора, за исключением случаев, описанных в сопроводительной документации пользователя.

Предупреждение: система QSight 225MD должна использоваться исключительно в соответствии с инструкциями производителя. Несоблюдение этих инструкций может нарушить встроенную системную защиту.

Предупреждение: защита, предусмотренная в этой системе, может быть нарушена, если система эксплуатируется каким-либо иным образом, кроме предусмотренного компанией PerkinElmer.

Предупреждение о безопасности при использовании электропитания

Предостережение: Прибор должен быть установлен в месте, где можно беспрепятственно отключить шнур электропитания. Обязательно оставьте достаточное пространство вокруг прибора, чтобы обеспечить возможность безопасного отсоединения от источника питания.

Опасности, связанные с воздействием химических веществ

Использование масс-спектрометра сопряжено с рядом химических опасностей. Необходимо использовать защитную одежду, включая перчатки, очки и лабораторный халат. Также необходимо использовать вытяжной шкаф или вытяжную систему. Операторы должны пройти полное обучение лабораторным процедурам, включая безопасную подготовку и утилизацию химических веществ, используемых в испытаниях по масс-спектрометрическому сканированию.

Пользователи должны также знать требования к вентиляции и вытяжке газов, необходимые для безопасной подготовки и удаления химических веществ, а также для безопасной эксплуатации масс-спектрометров.

Предупреждения об агрессивных и токсичных веществах

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! Некоторые химические вещества, используемые в системе, могут быть опасны и вызывать травмы, заболевания или смерть. Перед эксплуатацией прибора или использованием опасных реагентов прочитайте предупреждения на этикетках бутылок со всеми опасными химикатами и изучите соответствующие паспорта безопасности материалов (MSDS).

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! Некоторые химические вещества, используемые в системе, являются агрессивными, едкими или токсичными. Регулярно проверяйте отсутствие утечек химических веществ, представляющих потенциальную угрозу безопасности оператора. Надевайте защитную одежду при эксплуатации прибора.

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! Все химические вещества в системе, включая жидкость в трубках, являются потенциально опасными. При работе с прибором надевайте защитные очки, перчатки и лабораторный халат. При проливе жидкости следуйте инструкциям по очистке в паспортах безопасности материалов (MSDS).

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! Буферные растворы, используемые в системе, могут содержать опасные химические вещества. Перед заменой реагентов или компонентов прибора, устанавливайте, какие растворы использовались. Надевайте защитную одежду при эксплуатации прибора.

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! Открывание емкости с реагентом под давлением может привести к выбросу реагента, пролитию или контакту оператора с опасными химическими веществами. Во время работы необходимо использовать систему вытяжки источника, чтобы гарантировать безопасное удаление из лаборатории любого выделяющегося газа.

Опасные или биологически опасные отходы

Предупреждение: ОПАСНЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ ОТХОДЫ! Контакт с жидкими отходами может привести к абсорбированию опасных материалов. Избегайте вдыхания химических отходов и контакта с ними. Работайте с отходами в зоне с достаточной вентиляцией.

Предупреждение: ОПАСНЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ ОТХОДЫ! При опорожнении контейнера для отходов надевайте соответствующую защитную одежду. Во время переноски герметично закройте контейнер для отходов с помощью крышки. Утилизируйте отходы в соответствии со всеми применимыми локальными, государственными и федеральными нормами в области охраны здоровья и окружающей среды.

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! Четырехлитровые бутыли с реагентами и отходами могут треснуть и утратить герметичность. Каждая четырехлитровая бутыль должна быть закреплена в защитном контейнере из полиэтилена низкой плотности. Крышка должна быть завинчена, а ручки зафиксированы в вертикальном положении.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! СИСТЕМА ВЫТЯЖКИ. Всегда используйте систему вытяжки для удаления выделяющихся газов из лаборатории, особенно при анализе токсичных или летучих химических веществ или растворителей.

Предупреждение: ОПАСНЫЕ ИЛИ БИОЛОГИЧЕСКИ ОПАСНЫЕ МАТЕРИАЛЫ! Если в приборе анализировались опасные или биологически опасные материалы, при очистке интерфейса, источника ионов и компонентов вакуумной камеры соблюдайте все необходимые меры предосторожности, указанные в паспорте безопасности материалов (MSDS).

Предупреждение: ОПАСНЫЕ, РАДИОАКТИВНЫЕ, БИОЛОГИЧЕСКИ ОПАСНЫЕ МАТЕРИАЛЫ! При вводе в прибор опасных или биологически опасных материалов должны приниматься все соответствующие меры предосторожности при обращении с ними.

Предупреждение: ОПАСНЫЕ, РАДИОАКТИВНЫЕ, БИОЛОГИЧЕСКИ ОПАСНЫЕ МАТЕРИАЛЫ! Отсутствие надлежащей вентиляции источника ионов может привести к выбросу опасных паров в лабораторную среду.

Электричество, предохранители и качество высокого напряжения

В конструкции масс-спектрометра предусмотрены защитные элементы, включая блокировки, чтобы свести к минимуму вероятность травмы в результате поражения электрическим током. Важно, чтобы механизмы блокировки не были повреждены и чтобы операторы следовали всем предупреждениям и предостережениям, указанным на приборе и в сопутствующей документации. Никогда не снимайте панели до выключения прибора и отсоединения шнура питания.

Предупреждение: ВЫСОКОЕ НАПРЯЖЕНИЕ!



В источнике ионов и на входе ESI существует высокое напряжение. Соблюдайте осторожность при работе с источником ионов, не эксплуатируйте и не обслуживайте прибор без установленных защитных крышек, включая камеру нагнетания.

Предупреждение: ВНУТРИ НЕТ ДЕТАЛЕЙ, ОБСЛУЖИВАЕМЫХ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ! Поручите обслуживание квалифицированному персоналу компании PerkinElmer. При выполнении процедур обслуживания следует соблюдать особую осторожность. Внутри корпуса прибора подается высокое напряжение.

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ВОЗГОРАНИЯ!



Не полагайтесь только на блокировки для обеспечения безопасности от высокого напряжения прибора. При проведении планового технического обслуживания убедитесь, что главный автоматический прерыватель выключен, и прибор отсоединен от источника питания.

Предупреждение: ДЕТАЛИ, ОБСЛУЖИВАЕМЫЕ ПОЛЬЗОВАТЕЛЯМИ, ОТСУТСТВУЮТ! Во избежание поражения электрическим током не снимайте крышки, не снимайте крышки, требующие доступа с помощью инструментов. Доверьте обслуживание прибора квалифицированному сервисному персоналу компании PerkinElmer.



Предупреждение: НЕПРЕРЫВНЫЙ КОНТУР ЗАЗЕМЛЕНИЯ!

Непрерывный контур заземления жизненно необходим для безопасной работы оборудования. Никогда не используйте оборудование с отсоединенным заземляющим проводом.

ОСТОРОЖНО! Пользуйтесь услугами квалифицированного персонала для установки всего электрооборудования. Все установленное оборудование должно отвечать требованиям локального законодательства.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Сжатый газ

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ВЗРЫВА! Баллоны с газом под давлением потенциально взрывоопасны. Всегда закрывайте неиспользуемый газовый баллон крышкой; надежно прикрепите его к стене или стенду с помощью подходящих кронштейнов, цепей или зажимов.

Предупреждение: монтаж системы шлангов и арматуры должен выполняться только силами квалифицированного персонала. Все оборудование должно соответствовать местным нормативным актам и регламентам биологической защиты.

Телесные повреждения

Предупреждение: Масс-спектрометр весит > 136 кг (300 фунтов) - для подъема прибора требуется минимум два человека. Соблюдайте осторожность при перемещении прибора. Перед перемещением прибора отключите фиксаторы колес; отсоедините все электрические и газовые соединения; и сдвиньте прибор, поместив руки между серединой и днищем прибора.



Предупреждение:

Температура корпуса источника ионов может превышать 70°C в зависимости от температуры окружающей среды и заданной температуры, а также от настроек потока газа. Не снимайте горячую нагнетательную камеру с прибора. Дайте ей остыть в течение 15—20 минут.

Риски, связанные с системой

В этом разделе указаны потенциальные риски, связанные с эксплуатацией и обслуживанием системы.

Предостережение: ЛАБОРАТОРНЫЕ МЕРЫ ПРЕДОСТОРОЖНОСТИ! Всегда соблюдайте лабораторные правила безопасности и типовые инструкции по надлежащей эксплуатации и обслуживанию системы.

Предостережение: ЛАБОРАТОРНЫЕ МЕРЫ ПРЕДОСТОРОЖНОСТИ! При работе с системой надевайте защитные очки, перчатки и лабораторный халат.

Предостережение: ЛАБОРАТОРНЫЕ МЕРЫ ПРЕДОСТОРОЖНОСТИ! Ни в коем случае не удаляйте и не закрывайте знаки безопасности и предупреждения, прикрепленные к системе.

Предостережение: ЛАБОРАТОРНЫЕ МЕРЫ ПРЕДОСТОРОЖНОСТИ! Соблюдайте лабораторные правила безопасности и типовые инструкции по обслуживанию системы. Любые процедуры по обслуживанию, не описанные в руководстве пользователя системы, должны выполняться только квалифицированными представителями сервисной службы компании PerkinElmer.

Предостережение: ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ! Для обеспечения непрерывной оптимальной работы рекомендуется периодически выполнять калибровку системы.

Предостережение: ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ! Для получения точных результатов используйте правильные настройки методов согласно руководству пользователя системы. За помощью обращайтесь к представителю службы поддержки PerkinElmer или к опытным пользователям в вашей лаборатории, обученных правильному использованию аналитических приборов.

Предостережение: ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ! Убедитесь, что полученный для анализа участок данных верен и что параметр времени впрвыска в поток настроен в соответствии с рекомендациями в руководстве пользователя системы. Перед началом анализа проведите стандартные проверки. За помощью обращайтесь к представителю службы поддержки PerkinElmer или к опытным пользователям в вашей лаборатории, обученных правильной настройке прибора.

Предостережение: ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ! Согласно руководствам пользователя системы, для правильного интегрирования поддерживайте соотношение «сигнал — шум» на достаточно высоком уровне. За помощью обращайтесь к представителю службы поддержки PerkinElmer или к опытным пользователям в вашей лаборатории, обученных правильному использованию аналитических показателей качества.

Предостережение: ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ! Периодически проверяйте деятельность системы; если наблюдается дрейф, обратитесь к представителю службы поддержки PerkinElmer, поскольку это может быть признаком загрязнения.

Предостережение: ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ! Соблюдайте типовые инструкции лаборатории по надлежащей эксплуатации и обслуживанию системы.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ПОРАЖЕНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ТОКОМ!



Не модифицируйте установленное оборудование; не удаляйте лишние заземляющие соединения, даже если они повреждены или неэффективны. Постоянно следите за непрерывностью контура заземления с учетом обозначений заземления на системе.

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ОЖОГОВ!



Не вынимайте зонд, пока он горячий. Надевайте термоустойчивые перчатки или дождитесь, пока компоненты остынут, прежде чем прикасаться к ним.

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ОЖОГОВ!

При удалении источника открывается доступ к горячему интерфейсу и горячей нагнетательной камере. Надевайте термоустойчивые перчатки или дождитесь, пока компоненты остынут, прежде чем прикасаться к ним.

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! Регулярно проверяйте шланги и соединения проб на наличие протечек и засоров. При наличии протечек следуйте инструкциям в паспортах безопасности материалов и надевайте защитные очки, перчатки и лабораторный халат при работе с прибором. Все химические вещества в приборе, включая жидкость в трубках, являются потенциально опасными.

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! Убедитесь, что все фитинги для жидкости правильно подключены и регулярно проверяются для предотвращения утечек и проливов.

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! Регулярно проводите осмотр и обслуживание Автосамплера, насоса и соответствующих шлангов для предотвращения утечек и обеспечения надлежащего ввода проб в масс-спектрометр. Следуйте рекомендованным протоколам технического обслуживания и при необходимости консультируйтесь с представителями службы поддержки PerkinElmer.

Предупреждение: ОПАСНОСТЬ ХИМИЧЕСКОГО ХАРАКТЕРА! Соблюдайте типовые инструкции лаборатории по надлежащей эксплуатации и обслуживанию системы.

Предупреждение: ОПАСНЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ ФАКТОРЫ и ОПАСНОСТЬ ПОРАЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОТОКОМ! Регулярно проверяйте фитинги из ПЭЭК на наличие протечек. При наличии протечек отключите напряжение электрораспылителя и выполните инструкции по очистке, приведенные в паспортах безопасности материалов. Перед началом работ с прибором наденьте защитные очки, перчатки и лабораторный халат.

Предупреждение: ОПАСНЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ ФАКТОРЫ и ОПАСНОСТЬ ПОРАЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОТОКОМ! Соблюдайте типовые инструкции лаборатории по надлежащей эксплуатации и обслуживанию системы.

Предупреждение: ХИМИЧЕСКИЕ ОПАСНЫЕ ФАКТОРЫ И ПОВРЕЖДЕНИЕ ПРИБОРА! Для предотвращения утечек и надлежащего ввода проб в масс-спектрометр штуцеры для подачи проб должны быть правильно вставлены и затянуты.

Предупреждение: ХИМИЧЕСКИЕ ОПАСНЫЕ ФАКТОРЫ И ПОВРЕЖДЕНИЕ ПРИБОРА! Регулярно проверяйте штуцеры на стороне подачи проб на предмет правильной вставки и затяжки. Это необходимо для предотвращения утечек и надлежащего ввода проб в масс-спектрометр.

Предупреждение: ХИМИЧЕСКИЕ ОПАСНЫЕ ФАКТОРЫ И ПОВРЕЖДЕНИЕ ПРИБОРА! Следуйте рекомендованным протоколам технического обслуживания и при необходимости консультируйтесь с представителями службы поддержки уполномоченного представителя.

Предупреждение: ХИМИЧЕСКИЕ ОПАСНЫЕ ФАКТОРЫ И ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ! Используйте только подходящие калибраторы, реагенты, оборудование и матрицы проб, чтобы предотвратить повреждение или коррозию системы и избежать потенциально опасных разливов химических веществ. За помощью обращайтесь к представителю центра технической поддержки уполномоченного представителя.

Предупреждение: ОПАСНЫЕ ИЛИ БИОЛОГИЧЕСКИ ОПАСНЫЕ МАТЕРИАЛЫ! Соблюдайте типовые инструкции и клинические или лабораторные меры по охране труда и технике безопасности в отношении надлежащего обращения с пробами человеческого происхождения. Считайте все пробы и отходы потенциально инфицированными.

Предупреждение: ОПАСНЫЕ ИЛИ БИОЛОГИЧЕСКИ ОПАСНЫЕ МАТЕРИАЛЫ! Следите за тем, чтобы

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

лабораторные условия предусматривали надлежащую вентиляцию, как указано в документе PerkinElmer Preparing Your Laboratory.

Кибербезопасность

Внимание: Не устанавливайте на компьютер ненужное программное обеспечение. Это может помешать работе системы и негативно повлиять на ее работу или обработку данных.

Внимание: Используйте необходимые меры предосторожности против программных вирусов и других вредоносных программ. Компания PerkinElmer не поставляет антивирусное программное обеспечение вместе с системой. Установка и обслуживание программного обеспечения для защиты от компьютерных вирусов и других вредоносных программ является обязанностью заказчика.

Предупреждение: Если вы устанавливаете программное обеспечение для защиты от вирусов и других вредоносных программ, убедитесь, что оно не сканирует компьютер и не выполняет какие-либо задачи в фоновом режиме, пока в системе выполняется анализ.

Предупреждение: Программное обеспечение предназначено для установки в локальной сети и изолировано от общедоступного Интернета с помощью брандмауэра. Если вам требуется удаленное подключение к программе, мы рекомендуем вам использовать VPN для обеспечения безопасного соединения.

Предупреждение: Для защиты системы от атак кибербезопасности следует как можно скорее установить обновления операционной системы и антивирусные службы операционной системы должны быть включены. Можно использовать антивирусное программное обеспечение сторонних производителей, но совместимость с программным обеспечением Simplicity 3Q MD не была проверена компанией PerkinElmer.

Предупреждение: Для обеспечения безопасности данных рекомендуется запирать комнату с компьютером, когда он находится без присмотра.

Требования к аппаратному обеспечению

Компания PerkinElmer предоставляет ПК для управления системой скрининговой «QSight 225MD UHPLC Screening System». Этот ПК имеет точные технические характеристики, необходимые для работы системы скрининговой «QSight 225MD UHPLC Screening System» и программного обеспечения Simplicity 3Q MD. Подключение к системе QSight ПК, который НЕ был предоставлен вам компанией PerkinElmer, приведет к аннулированию гарантии и может повлиять на безопасность данных и/или производительность прибора. В случае возникновения проблем с ПК обратитесь к представителю службы поддержки клиентов компании PerkinElmer.

Список используемых символов

В следующей таблице приведены символы, обозначающие особо важную информацию и предупреждающие о наличии опасностей. Символы можно найти на компонентах системы, в соответствующей документации или на упаковке.

Символ	Название символа и рег. №	Наименование и номер стандарта	Описание
IVD	Медицинское изделие для диагностики in vitro	ISO 15223-1, Медицинские изделия - Символы, применяемые при маркировке медицинских изделий, на этикетках и в сопроводительной документации. Часть 1. Основные требования	Указывает на медицинское изделие, предназначенное для использования в качестве медицинского изделия для диагностики in vitro
REF	Номер по каталогу №2493	ISO 15223-1, Медицинские изделия - Символы, применяемые при маркировке медицинских изделий, на этикетках и в сопроводительной документации. Часть 1. Основные требования	Указывает номер по каталогу производителя, чтобы медицинское изделие можно было идентифицировать
SN	Серийный номер №2498	ISO 15223-1, Медицинские изделия - Символы, применяемые при маркировке медицинских изделий, на этикетках и в сопроводительной документации. Часть 1. Основные требования	Указывает серийный номер производителя, чтобы можно было идентифицировать конкретное медицинское изделие
	Осторожно! №0434A	ISO 15223-1, Медицинские изделия - Символы, применяемые при маркировке медицинских изделий, на этикетках и в сопроводительной документации. Часть 1. Основные требования	Указывает на необходимость для пользователя обратиться к инструкции по применению для получения важной предупредительной информации, такой как меры предосторожности, которые по разным причинам не могут быть представлены на самом медицинском изделии

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

	Изготовитель №3082	ISO 15223-1, Медицинские изделия - Символы, применяемые при маркировке медицинских изделий, на этикетках и в сопроводительной документации. Часть 1. Основные требования	Указывает производителя медицинского изделия
	Дата изготовления №2497	ISO 15223-1, Медицинские изделия - Символы, применяемые при маркировке медицинских изделий, на этикетках и в сопроводительной документации. Часть 1. Основные требования	Указывает дату изготовления медицинского изделия
	Обратитесь к инструкции по применению №1641	ISO 15223-1, Медицинские изделия - Символы, применяемые при маркировке медицинских изделий, на этикетках и в сопроводительной документации. Часть 1. Основные требования	Указывает на необходимость ознакомления пользователя с инструкцией по применению
	Переменный ток №5031	ISO7000/IEC 60417- Графические символы для использования на оборудовании	Указывает на переменный ток
	Выкл. (выключатель электропитания) №5008	ISO7000/IEC 60417- Графические символы для использования на оборудовании	Указывает на положение OFF ("ВЫКЛ") выключателя питания
	Вкл. (выключатель электропитания) №5007	ISO7000/IEC 60417- Графические символы для использования на оборудовании	Указывает на положение ON ("ВКЛ") выключателя питания
	Клемма защитного заземления №5019	ISO7000/IEC 60417- Графические символы для использования на оборудовании	Обозначает клемму защитного проводника
	Осторожно, горячая поверхность! №5041	ISO7000/IEC 60417- Графические символы для использования на оборудовании	Осторожно, горячая поверхность
	Осторожно, риск поражения электрическим током! №6042	ISO7000/IEC 60417- Графические символы для использования на оборудовании	Опасность поражения электрическим током
	Внимание! Острый инструмент! № W022	ISO7010 -Графические символы –Цвета сигнальные и знаки безопасности - Зарегистрированные знаки безопасности	Риск травмирования острыми инструментами (например, иглами, лезвиями)
	Маркировка CE	Директива 98/79/EC Европейского парламента и Совета по медицинским изделиям для диагностики in vitro	Маркировка CE - это заявление производителя о том, что продукт соответствует требованиям применимых директив ЕС.
	FCC: Федеральная комиссия по связи	FCC 47 CFR часть 15 подраздел B (раздел 15.19) - Правила и нормы Федеральной комиссии по связи - Непреднамеренные излучатели	Знак FCC - это сертификационный знак, используемый на электронных продуктах, произведенных или проданных в США, который удостоверяет, что электромагнитные помехи от устройства находятся в пределах, утвержденных Федеральной комиссией по связи.
	Сертификационная маркировка MET Labs	NRTL/MET-C Маркировка продукции	Знак MET используется на продуктах, сертифицированных MET

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

	Безопасные и ответственные процедуры сбора, переработки и утилизации всех видов электронных отходов	2012/19/EU Директива по утилизации электрического и электронного оборудования (WEEE)	Эти символы указывают на то, что изделие подпадает под действие Директивы по утилизации электрического и электронного оборудования (WEEE) и не подлежит утилизации в качестве несортированных бытовых отходов.
Rx Only		21 CFR 809.10	Внимание: Федеральный закон ограничивает продажу данного устройства лицензированным врачом или по его поручению.
	Сертификационный знак TUV SUD	Символ соответствия национально признанной испытательной лаборатории	3-я сторона, которая проводит испытания на соответствие установленным стандартам
	Сертификационный знак Intertek	Символ соответствия национально признанной испытательной лаборатории	3-я сторона, которая проводит испытания на соответствие установленным стандартам

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Знаки безопасности на масс-спектрометре



Рисунок 1: Передняя панель прибора со снятыми крышками

На масс-спектрометре отображаются указанные ниже дополнительные сообщения, маркировки и предупреждения:

ЖК-дисплей прибора	
Маркировка, сообщение или предупреждение	**Описание**
	• При обнаружении сбоя в системе здесь отображаются сообщения о неисправностях и предупреждения. • При обнаружении проблемы индикатор состояния также меняет цвет на красный.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Передняя панель приборов со снятыми крышками	
Маркировка, сообщение или предупреждение	**Описание**
	Предупреждающая маркировка информирует, что внутри устройства нет деталей, обслуживаемых пользователем, и что все обслуживание должно выполняться квалифицированным персоналом PerkinElmer.
	Дополнительные красные наклейки на каждой из сторон запрещают пользователям отвинчивать защитные панели для доступа к прибору, это может выполнять только квалифицированный персонал PerkinElmer.

Задняя панель прибора	
Маркировка, сообщение или предупреждение	**Описание**
	Условное обозначение предупреждения на главном коленчатом соединении с внешним откачивающим насосом предостерегает, что компонент может быть горячим.
	Предупреждающий ярлык запрещает пользователям отвинчивать защитные крышки для доступа к внутренней части прибора (эту операцию может выполнять только квалифицированный персонал PerkinElmer).

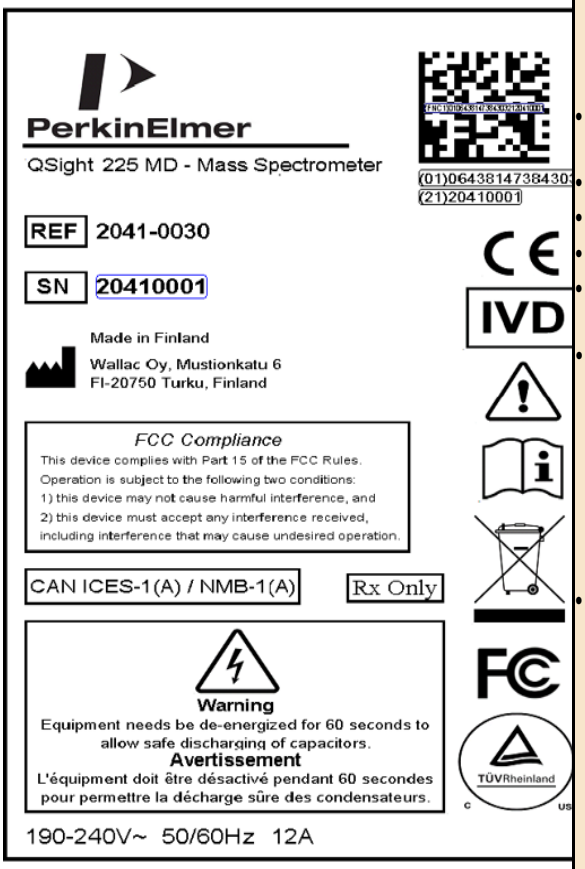
Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteyaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Задняя панель прибора	
Маркировка, сообщение или предупреждение	**Описание**
	Предупреждающая маркировка информирует, что внутри устройства нет деталей, обслуживаемых пользователем, и что все обслуживание должно выполняться квалифицированным персоналом PerkinElmer.
	Символ предупреждения об опасности поражения электрическим током и черная этикетка, в которой пользователям не рекомендуется открывать эту панель, а отправить прибор на внутреннее обслуживание в компанию PerkinElmer.
 190-240V~ 50/60Hz 12A	Символ опасности поражения электрическим током на этой наклейке предупреждает пользователей о том, что питание оборудования должно быть отключено (выключено и отсоединено) не менее чем за 60 секунд до обслуживания, чтобы конденсаторы могли безопасно разрядиться.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



На паспортной табличке прибора отображается указанная ниже информация:

- Информация о модели прибора и ее описание
- Серийный номер прибора
- Серийный номер прибора
- Информация о производителе
- Символы соответствия требованиям и сертификации.
- Символ опасности поражения электрическим током на этой маркировке предупреждает пользователей о том, что питание оборудования должно быть отключено (выключено и отсоединено) не менее чем за 60 секунд до обслуживания, чтобы конденсаторы могли безопасно разрядиться.
- Рабочий диапазон прибора

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Требования к лабораторным условиям

Необходимо поддерживать условия окружающей среды, благоприятные для работы прибора, роторного лопастного насоса, вытяжного вентилятора и компьютера, который будет использоваться для работы системы. Компания PerkinElmer не ручается за результаты анализов, полученные в условиях, не соответствующих приведенным требованиям. Система скрининговая «QSight 225MD UHPLC Screening System» предназначена только для работы в помещении.

Условия электромагнитного излучения необходимо оценить до начала эксплуатации прибора. Не используйте данное устройство в непосредственной близости от источников сильного электромагнитного излучения (например, неэкранированных ВЧ источников), так как они могут помешать правильной работе.

Данное оборудование предназначено для использования в условиях профессионального медицинского учреждения. При использовании в домашних условиях оно может работать некорректно. Если есть подозрение, что на работу оборудования влияют электромагнитные помехи, правильная работа может быть восстановлена путем увеличения расстояния между оборудованием и источником помех.

Условия эксплуатации и хранения

Факторы	Показатели
Температура окружающей среды	18—25° C
Влажность	20—80% относительной влажности без конденсации
Вибрация	Не размещайте прибор в зоне, подверженной чрезмерной вибрации
Близость вентиляции (ОВКВ)	Не размещайте прибор непосредственно перед или под вентиляторами системы обогрева или охлаждения.
Близость источников воды	Не размещайте прибор непосредственно перед раковиной или иным источником воды либо рядом с ними.
Категория перегрузки по напряжению	II
Степень загрязнения	2
Ограничение по высоте	Макс. 2000 м над уровнем моря

Валидация и контроль качества

Только опытные пользователи, прошедшие специальное обучение и владеющие разработкой методов, могут создавать и изменять методы сбора данных и количественного анализа в программном обеспечении Simplicity 3Q MD. Выполните проверку соответствия всех методов своим аналитическим задачам перед их использованием для сбора и количественного анализа реальных данных.

Также настоятельно рекомендуется регулярно выполнять анализ проб контроля качества (КК) для получения информации об эффективности используемых аналитических методов и оценки целостности и достоверности любых анализируемых неизвестных проб. Оцените данные тестирования КК в соответствии с рекомендациями и стандартными операционными процедурами, утвержденными в лаборатории, чтобы подтвердить, что пробы контроля качества находятся в определенных пределах, установленных для ваших методов. Ваши стандартные операционные процедуры должны дополнительно включать критерии использования внутренних стандартов для подтверждения целостности ваших аналитических методов и достоверности анализа проб контроля качества, стандартов и неизвестных проб.

Перемещение прибора

Перемещение приборов системы QSight должно осуществляться только персоналом, уполномоченным компанией PerkinElmer.

Никогда не поднимайте полностью установленный прибор QSight для перемещения с одного места на другое. Его повторная установка на новом месте должна производиться сервисным персоналом уполномоченного представителя.

Примечание: Не перемещайте прибор во время работы.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteyaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Осторожно: Прибор весит более 100 кг. При транспортировке прибора соблюдайте все необходимые меры предосторожности.

Соответствие нормативным требованиям

Данный прибор и его компоненты соответствуют или превосходят следующие нормативные требования. На приборе имеются наклейки, подтверждающие такое соответствие (см. "Знаки безопасности на масс-спектрометре" на странице 14, где наглядно показано расположение маркировки на приборе).

- Регламент (ЕС) 2017/746 о медицинских устройствах для диагностики in vitro (IVD)
- 2014/35/EU: Директива по низковольтному оборудованию
- 2014/30/EU: Директива по электромагнитной совместимости
- 2011/65/EC. Правила ограничения содержания вредных веществ
- 2012/19/EU: Директива по утилизации электрического и электронного оборудования (WEEE)
- EN 61010-1: Требования безопасности к электрооборудованию для измерения, контроля и лабораторного применения. Часть 1. Общие требования
- EN 61010-2-101. Требования безопасности к электрооборудованию для измерения, контроля и лабораторного применения. Часть 2-101. Особые требования к медицинскому оборудованию для лабораторной диагностики in vitro
- EN 61326-1. Требования безопасности к электрооборудованию для измерения, контроля и лабораторного применения — требования к электромагнитной совместимости (ЭМС). Часть 1. Общие требования
- EN 61326-2-6. Требования безопасности к электрооборудованию для измерения, контроля и лабораторного применения — требования к электромагнитной совместимости (ЭМС). Часть 2-6. Особые требования к медицинскому оборудованию для лабораторной диагностики in vitro

Инструкции по WEEE для продукции PerkinElmer





Этикетка с перечеркнутым символом мусорного контейнера на колесах и прямоугольной полосой указывает на то, что изделие подпадает под действие Директивы по утилизации электрического и электронного оборудования (WEEE) и не подлежит утилизации как несортированные бытовые отходы. Любые изделия, помеченные этим символом, должны собираться отдельно, в соответствии с нормативными указаниями в вашем регионе.
Целями данной программы являются сохранение, защита и улучшение качества окружающей среды, защита здоровья человека, а также разумное и рациональное использование природных ресурсов. Специальная утилизация электрического и электронного оборудования (WEEE) необходима для того, чтобы избежать рассеивания загрязняющих веществ в перерабатываемый материал или поток отходов. Такая утилизация является наиболее эффективным средством защиты окружающей среды заказчика.
Требования к программам сбора, повторного использования, переработки отходов зависят от регулирующего органа в вашем регионе. Обратитесь в местный орган (например, к руководителю лаборатории) или уполномоченному представителю для получения информации о применимых правилах утилизации. Свяжитесь с компанией PerkinElmer посредством указанного ниже веб-сайта для получения информации, относящейся к продукции PerkinElmer.

Веб-адрес: www.perkinelmer.com/WEEE

Для Европы: перейдите по указанной выше ссылке, чтобы получить доступ к инструкциям по обращению с WEEE, характерным для различных европейских стран.
Служба поддержки клиентов в США: звоните 1-800-762-4000
Обслуживание клиентов в других странах мира: звоните (+1) 203-925-4602.

Продукты других производителей также могут быть частью системы скрининговой PerkinElmer. Такие другие производители несут ответственность за сбор и переработку таких отходов в соответствии с положениями Директивы WEEE. Пожалуйста, свяжитесь с этими производителями напрямую, прежде чем выбрасывать их продукцию.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Названия и веб-адреса производителей см. на веб-сайте PerkinElmer (см. выше).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Обзор системы

Трехквадрупольные масс-спектрометры QSight® 225MD оснащены источниками ионов Torrent™, обеспечивающими гибкость и простоту эксплуатации с высокой пропускной способностью для обычных анализов.

Программное обеспечение Simplicity™ 3Q MD управляет масс-спектрометром QSight. Он обеспечивает возможность сбора данных и включает полный пакет количественного анализа, а также функции просмотра данных и составление отчетов. Он обладает расширенными возможностями, которые подходят для разработки методов и исследовательских приложений, а также для рутинных экспериментов.

В масс-спектрометрии смесь жидких образцов, содержащая интересующий аналит, подвижную фазу и матрицу, ионизируется в источнике ионов, после чего ионизированный аэрозоль направляется в ионопровод, который переносит ионы от атмосферного давления до вакуума, необходимого для масс-спектрометров, и затем в первый масс-сепаратор, называемый Q1. Затем ионы-прекурсоры проходят через реакционную ячейку (CC), после чего попадают во второй масс-сепаратор, называемый Q3, и затем детектируются.

Существует несколько различных способов настройки Q1, CC и Q3, называемых режимами сканирования, для выделения и идентификации конкретных аналитов в ваших образцах. Масс-спектрометры в конечном итоге измеряют отношение массы к заряду (m/z) для конкретного аналита.

Для получения дополнительной информации о системе QSight обратитесь к руководствам, указанным в разделе Дополнительная документация на странице iv.

Назначение

Система скрининга QSight® 225MD UHPLC Screening System - это прибор IVD, предназначенный для определения фрагментов биомолекул, представляющих интерес. Прибор автоматизирован и предназначен для использования обученным лабораторным персоналом. Прибор может использоваться в сочетании с IVD анализом, если прибор указан как совместимое устройство в инструкции по проведению данного анализа. Определенная функция, заболевание, состояние или фактор риска, которые необходимо определить, количественные и качественные характеристики продукта, тип образца и контингент испытуемых основаны и указаны в инструкции по проведению анализа.

Обзор масс-спектрометра QSight® 225MD

Трехквадрупольные масс-спектрометры QSight оснащены источниками ионов Torrent™, что обеспечивает гибкость и простоту эксплуатации, высокую пропускную способность для рутинных анализов.

Программное обеспечение Simplicity 3Q MD управляет масс-спектрометром, а также другими аппаратными компонентами системы скрининговой QSight UHPLC Screening System. Оно обеспечивает полный рабочий процесс сбора данных и количественной оценки, а также функции анализа данных и отчетности, может взаимодействовать с программным обеспечением MS/MS Workstation для упрощенного представления данных. Система QSight UHPLC Screening System с программным обеспечением Simplicity 3Q MD подходит для использования в общих диагностических приложениях in vitro (IVD).

В масс-спектрометрии смесь жидкого образца, содержащая интересующий аналит, подвижную фазу и матрицу, ионизируется в источнике ионов, а затем ионизированный аэрозоль направляется в ионопровод, который переносит ионы от атмосферного давления к вакууму, необходимому для масс-спектрометров, а затем к первому масс-сепаратору (Q1). Затем ионы-прекурсоры проходят через CC, после чего попадают во второй масс-сепаратор (Q3), где и происходит их детектирование.

Существует несколько различных способов настройки Q1, CC и Q3, называемых режимами сканирования, для выделения и идентификации конкретных аналитов в ваших образцах. Масс-спектрометры в конечном итоге измеряют m/z для конкретного аналита.

Ионизация

Зонды с двумя источниками

Технология двойного источника в системе имеет два отдельных входа для ионов, которые работают независимо и могут быть установлены в режимах ESI или APCI, что позволяет проводить комбинированные анализы ESI/APCI с одинаковой или противоположной полярностью. Технология двойного источника позволяет собирать данные в двух взаимодополняющих режимах, максимизируя производительность за один ввод. Кроме того, он позволяет использовать один зонд для настройки, а другой – для высокопоточного анализа, предоставляя вам возможности двух масс-спектрометрических систем в одной.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Интерфейс StayClean™

Уникальная технология StayClean использует десольвацию с индуцированной горячей поверхностью (HSID), уникальный интерфейс отбора проб, который может значительно увеличить время безотказной работы прибора. Непрерывный поток горячего газа действует как постоянный агент-очиститель, а специально разработанные каналы предотвращают попадание загрязняющих веществ в прибор. Кроме того, сольватированные заряженные частицы захватываются и десольватируются, снижая химический шум и обеспечивая более высокое соотношение «сигнал/шум».

Режимы MS-сканирования

Масс-спектрометры QSight поддерживают четыре типа режима MS-сканирования с использованием одного фильтра масс. Эти режимы используют масс-фильтр Q1 или Q3 и позволяют выбрать получение масс-спектра (интенсивность ионов в зависимости от массы) или наблюдение за интенсивностью одной массы в зависимости от времени (SIM-сканирование). Доступны следующие режимы сканирования МС:

- Q1 Scan
- Q1 SIM
- Q3 Scan
- Q3 SIM

Режимы сканирования MS/MS

Масс-спектрометры QSight также поддерживают пять типов режима сканирования MS/MS с одновременным использованием обоих масс-фильтров. Сканирование MRM позволяет наблюдать зависимость интенсивности от времени, в то время как другие режимы предлагают различные подходы к получению масс-спектра. Во всех режимах есть ион-прекурсор, газ для соударений, энергия соударений и фрагментный (осколочный) ион. Доступны следующие режимы:

• **Multiple Reaction Monitoring Mode (MRM, Режим мониторинга множественных реакций) –** режим MRM используется для проведения экспериментов с переходами, в которых вы задаете массу родительского соединения для MS/MS фрагментации, а затем отслеживаете один фрагмент. Мониторинг множественных реакций эффективен для масс-спектрометрического количественного определения, поскольку он дает уникальный фрагментный ион, который можно отслеживать и количественно определять даже в очень сложной матрице. Графики MRM очень просты благодаря высокой селективности, что также делает их идеальными для чувствительного и специфического количественного анализа.

• **Product Scan Mode (PT, Режим сканирования продукта) –** При сканировании ионов продуктов ион-прекурсор выделяют на первом этапе и фрагментируют в результате столкновений с нейтральными молекулами, а затем все результирующие массы сканируют во втором масс-анализаторе перед обнаружением. Этот тип эксперимента идеально подходит для определения переходов для количественной оценки. Обратите внимание, что ион-прекурсор является синонимом родительского иона, а ион-продукт - дочернего иона.

• **Precursor Scan Mode (PR, Режим сканирования иона-предшественника) -** При сканировании ионов-прекурсоров ион продукта выделяют во втором масс-анализаторе, а массы прекурсоров сканируются в первом масс-анализаторе. Этот тип эксперимента идеально подходит для выявления помех при разработке метода.

• **Neutral Loss Mode (NL, Режим потерь нейтральных частиц) -** При сканировании с учетом потерь нейтральных частиц первый масс-анализатор сканирует все массы, а затем второй масс-анализатор сканирует их снова с заданным смещением, соответствующим нейтральным частицам, обычно наблюдаемым для данного класса соединений. Контролируются все ионы-прекурсоры, которые подвергаются потере указанной общей нейтрали. Как и в случае сканирования ионов-прекурсоров, этот тип эксперимента также полезен для селективной идентификации близкородственных классов соединений в смеси.

• **Neutral Gain Mode (NG, Режим поглощения нейтральных частиц) –** Режим поглощения нейтральных частиц похож на режим потерь нейтральных частиц, но здесь первое сканирование выполняется при постоянной разности масс ниже второго. В этом типе эксперимента интересующие ионы, проходящие через ячейку столкновения, должны взаимодействовать с соответствующим реакционным газом столкновения для получения иона продукта, который имеет большую массу, чем ион-прекурсор, что соответствует увеличению заданной нейтральной массы.

Компоновка прибора, основные компоненты и подключения

В этом разделе кратко описываются компоненты прибора, с которыми вам придется работать при повседневном использовании и во время планового обслуживания.

Обзор системы

Система скрининговая QSight 225MD UHPLC Screening System (2040-0030) состоит из следующих компонентов:

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



Рисунок 2: Система скрининговая «QSight 225MD Screening System»

- Масс-спектрометр QSight 225MD (2041-0030) (4)
- Насос для УВЭЖХ QSight MD (11700161) (3)
- Столик-лоток для автосамплера QSight® UHPLC (BC006214)
- УВЭЖХ автосамплер QSight MD (11700160) (2)
- Колоночный термостат QSight (11700162) (5)
- ПК QSight с программным обеспечением Simplicity 3Q MD (BC003525) (1)
- Внешний шприцевой насос (BC005344)
- Пластинчато-роторный вакуумный насос SV40 BI (BC004848)
- Комплект принадлежностей для QSight 210/220 (BC005856)
- Комплект в зависимости от региона, состоящий из вытяжного вентилятора 115/230 VAC и кабелей питания:
- 11700165 Комплект для региона Северная Америка
- 11700164 Комплект для ЕС
- 11700166 Комплект для Великобритании

Примечание:

Ваша система скрининговая QSight 225MD UHPLC Screening System включает вышеуказанный автосамплер для автоматизированного ввода проб. Использование любого другого автосамплера, включая другие модели, предлагаемые компанией PerkinElmer, не рекомендуется.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Передняя панель прибора



1. Сторона зонда 1
2. Сторона зонда 2
3. Отверстие подачи пробы
4. Игла короны
5. Ионный источник Torrent
6. ЖК-дисплей прибора: Отображает состояние системы и сообщения об ошибках. В первой текстовой строке отображается состояние прибора. Вторая текстовая строка содержит дополнительные сведения, например сообщения об ошибках и предупреждения



Индикатор состояния слева от текста обозначает базовую готовность системы и состояния неисправности. Индикатор в виде диаграммы справа от текста показывает активность сбора данных: он светится синим, когда прибор выполняет сканирование или сбор данных. Кнопка питания в крайнем правом углу светится при включении или выключении прибора; когда прибор включен, она горит зеленым.

7. Окно источника
8. Панель окна источника: передняя зеленая крышка, включающая в себя окно источника.
9. Штуцер заземления: трубки, подключенные к зонду, должны быть заземлены здесь.
10. Регулировочная ручка: используйте эту ручку для регулировки зондов по оси Z.

Рисунок 3: Передняя панель прибора - детали

Задняя панель

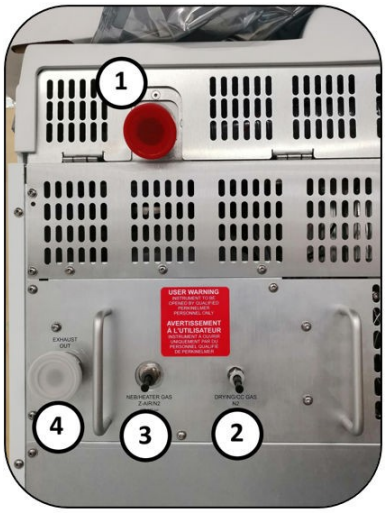
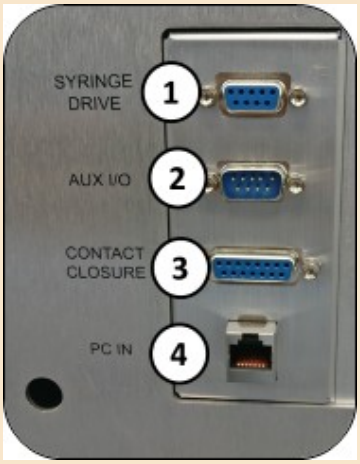
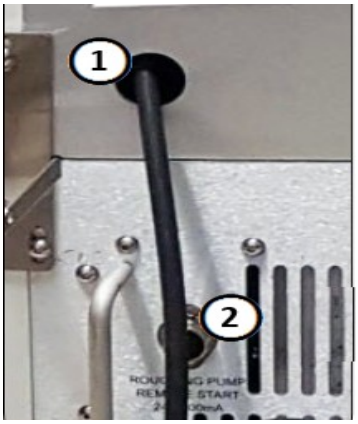
На изображении (ниже) показана вся задняя панель, а важные секции показаны более подробно на следующих изображениях, обозначенных буквами A–E.

Примечание: Задняя панель должна открываться только квалифицированными представителями сервисной службы PerkinElmer.

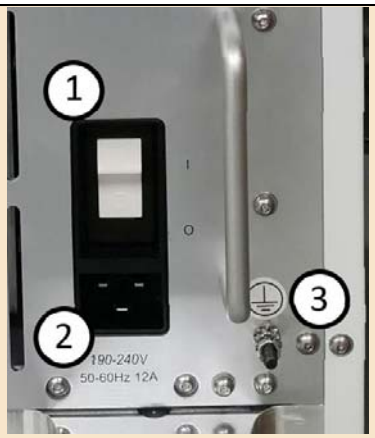
Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

A		1. **Вакуумное соединение с форвакуумным насосом (насосом предварительного разрежения)** 2. **Газ-осушитель/носитель N2:** соединение для подачи газа азота. **Подаваемый в распылитель газ/нагреватель/N2:** подача очищенного воздуха. **Выпуск:** Основное коленчатое соединение с внешним откачивающим насосом. **Осторожно:** может быть горячим!
B		1. **Привод шприца:** соединение для насоса шприца. 2. **Вспомогательный ввод/вывод:** вспомогательный порт ввода/вывода. 3. **Замыкание контакта:** подключение замыкания контакта ЖХ. 4. **Вход с ПК:** Ethernet-соединение с компьютером, на котором запущено программное обеспечение прибора.
C		1. **Сливной шланг** 2. **Дистанционный запуск форвакуумного насоса (насоса предварительного разрежения):** соединение с форвакуумным насосом.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

D		1. **ВКЛ./ВЫКЛ.:** Главный выключатель сетевого питания. 2. **Штепсельная розетка:** Основное заземляющее соединение прибора. 3. **Заземление**
E		**Переключатель подсветки окна источника:** включите для просмотра источника через окно источника (Передняя панель прибора – см. более подробную информацию на стр. 5)

Технические характеристики системы
Масс-спектрометр QSight 225MD

- Диапазон масс 5 - 1 500 m/z
- Скорость сканирования 25 000 Да/с
- Дрейф масс < 0,05 а. е. м./ 24 ч
- Переключение полярности < 10 мс
- Минимальное время задержки 1 мс
- Двойной источник (ESI и APCI в произвольном сочетании)
- Вес 136,08 кг (300 фунтов), имеются колеса

Программное обеспечение Simplicity 3Q MD

- Управление прибором
- Настройка метода
- Сбор данных, расчеты и маркировка
- Обработка результатов на основе проб
- Калибровка и настройка прибора

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Автосамплер для QSight® MD UHPLC

- Модуль ввода проб с петлевым инжектором
- Типовой вводимый объем от 0,5 до 10 мкл с дополнительными петлями для увеличения до 100 мкл
- Вмещает двенадцать 96-луночных микротитрационных планшетов в модуле с 6 выдвижными отделениями
- Вмещает шесть планшетов на 54 виалы (по 2 мл) в модуле с 3 выдвижными отделениями
- Нож для обрезания фольги для предотвращения засорения иглы
- Конфигурируемый отсек для проб от 4°C до 40°C с приращением 0,1°C
- Ручной модуль управления для работы вручную

Насос для QSight® MD UHPLC

- Эксплуатация при рабочем давлении 0–15 000 фунтов на кв. дюйм
- Сбрасываемый счетчик для автоматического учета времени использования уплотнения насоса и работы
- Выбор до четырех растворителей с бинарной подачей растворителя
- Встроенная функция вакуумной дегазации
- Точная и безошибочная настройка скорости потока (от 1 до 2000 мкл/мин с приращением 1 мкл) за счет усовершенствованных линейных приводов и интеллектуальных алгоритмов управления потоками
- Автоматическая компенсация сгущаемости растворителя для получения точных смесей растворителей
- Автономная подготовка для ускорения и упрощения смены растворителя и загрузки системы

Колоночный термостат QSight® MD UHPLC

- Точное и безошибочное управление температурным режимом в диапазоне от 5°C до 75°C
- Встроенный подогреватель растворителя
- Предохранительные датчики температуры и испарений с сигналом тревоги
- Автоматизированный клапан высокого давления для выбора колонки, переключающийся между шестью положениями/колонками
- Клапан дивертора, направляющий поток на линию отходов и/или обеспечивающий переключение между зондами
- Большой отсек для колонок, вмещающий до шести колонок для ВЭЖХ/УВЭЖХ (или 5 колонок + ввод пробы в поток)

Обзор насоса для QSight® 225MD UHPLC

В этом разделе описаны основные части насоса QSight MD UHPLC Pump. Насос состоит из двух насосных каналов (A и B). Каждый канал оснащен двумя головками насоса — основной и вспомогательной. Два канала обеспечивают подачу раздельных потоков. Указанные потоки объединяются в промывочном клапане и смешиваются с помощью смесителя высокого давления. Каждая головка насоса оснащена датчиком давления. Показания давления каждого датчика можно отслеживать в программном обеспечении (подробнее см. раздел "Управление устройствами с помощью светофора" на стр. 41).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

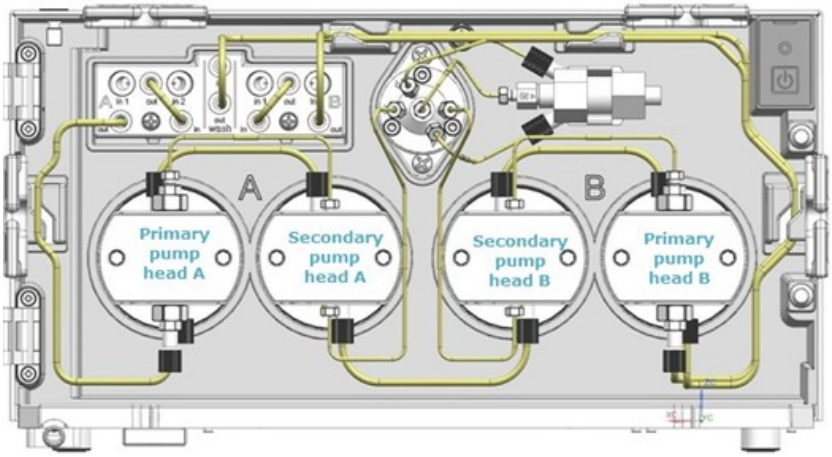


Рисунок 4: Головки насоса

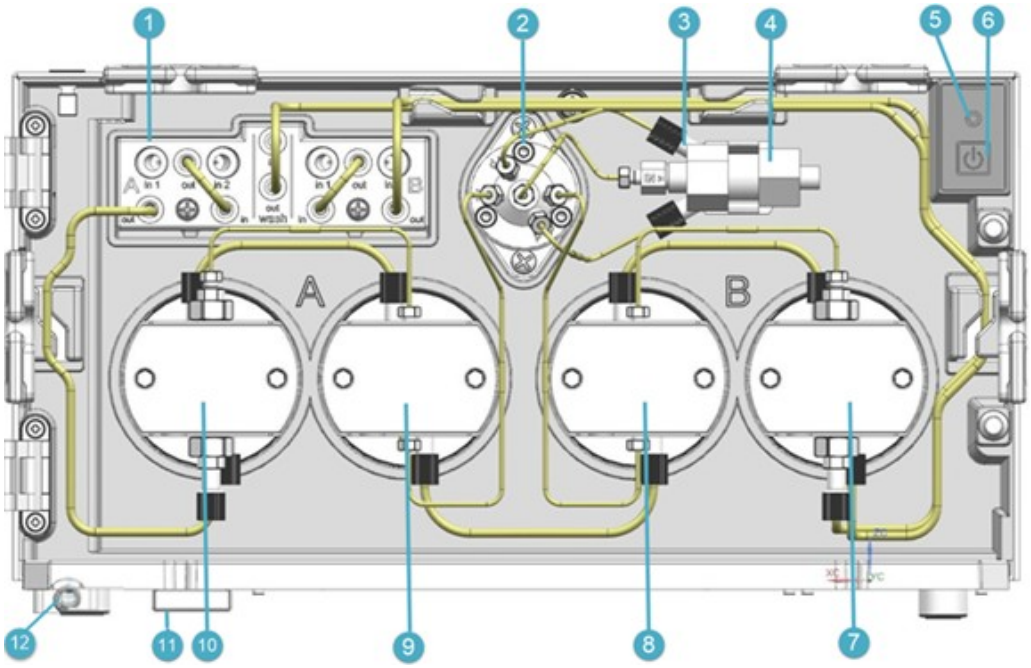


Рисунок 5: Передняя панель насоса

1. Клапан-переключатель растворителей / встроенный дегазатор / соединение промывки уплотнения
2. Продувочный клапан
3. Блок промывки/подготовки
4. Выпускной фильтр с размером ячеек 2 мкм / смеситель на 35 мкл (дополнительная опция — смеситель на 100 мкл)
5. Светодиодный индикатор состояния
6. Кнопка питания
7. Основная головка насоса B
8. Вспомогательная головка насоса B
9. Вспомогательная головка насоса A
10. Основная головка насоса A
11. Датчик утечек
12. Соединение для слива/удаления отходов

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

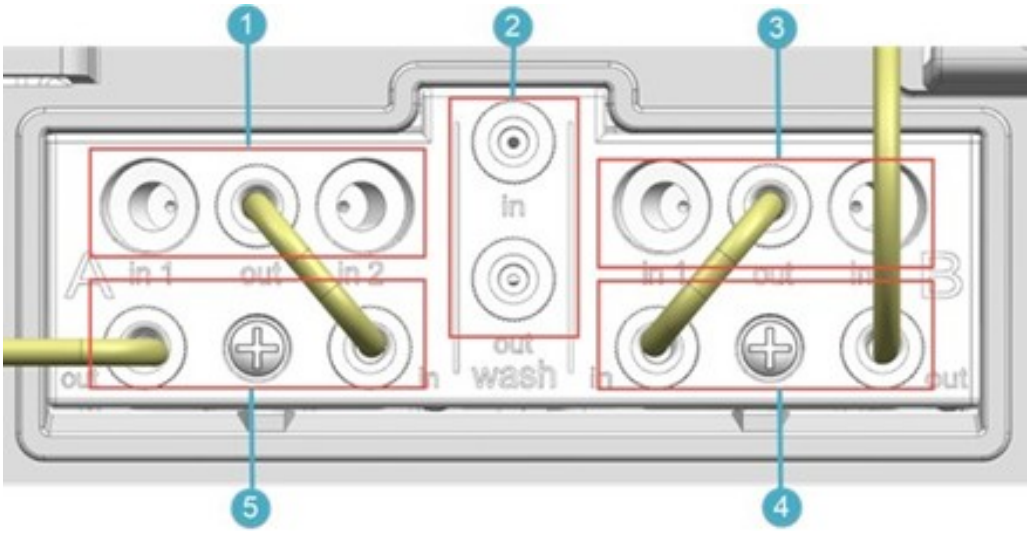


Рисунок 6: Соединения для растворителей

1. Насос клапана-переключателя растворителей A
2. Блок соединения промывки уплотнения
3. Насос клапана-переключателя растворителей B
4. Насос встроенного дегазатора B
5. Насос встроенного дегазатора A

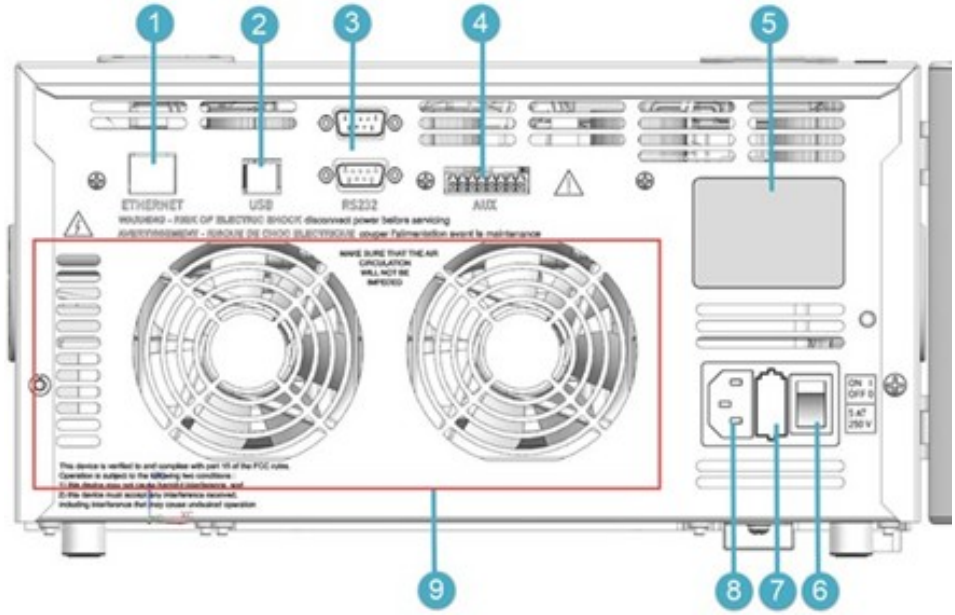


Рисунок 7: Задняя панель насоса

1. Разъем питания Ethernet
2. Разъем USB
3. Разъем RS-232
4. Ввод/вывод
5. Паспортная табличка
6. Переключатель ВКЛ/ВЫКЛ
7. Плавкие предохранители
8. Разъем питания
9. Вентиляционные отверстия

Внимание: НЕ ПЕРЕКРЫВАТЬ!

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Обзор колоночного термостата QSight MD

В этом разделе перечислены основные компоненты колоночного термостата QSight MD. Колоночный термостат содержит два клапана для управления потоком: клапан высокого давления и разделяющий клапан. Клапан высокого давления позволяет выполнять переключение между шести различными колонками. Разделяющий клапан, расположенный на внешней стороне прибора, позволяет пользователю переключать поток ЖХ на линию отходов или масс-спектрометр (дополнительную информацию о соединениях трубок см. в разделе Разделяющий клапан на стр. 150).

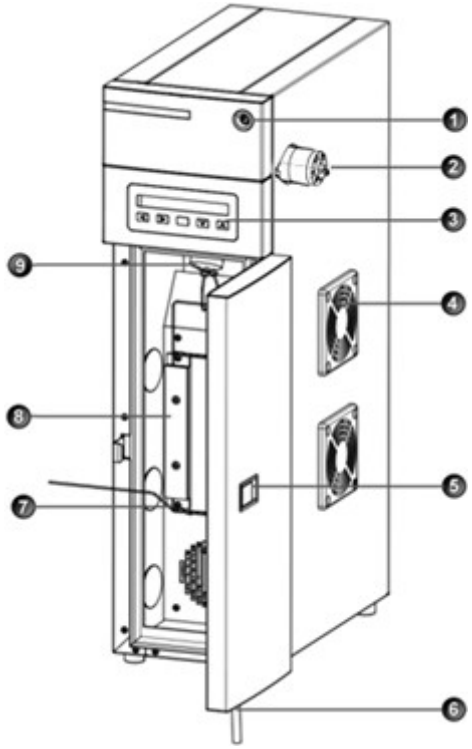


Рисунок 8: Колоночный термостат (вид спереди).

1. Светодиодный индикатор состояния
2. Разделяющий клапан
3. Дисплей и клавиатура
4. Вентиляторы

Внимание: НЕ ПЕРЕКРЫВАТЬ!

5. Ручка дверцы
6. Слив для утечек
7. Мост колонок
8. Подогреватель
9. Клапан — переключатель колонок

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

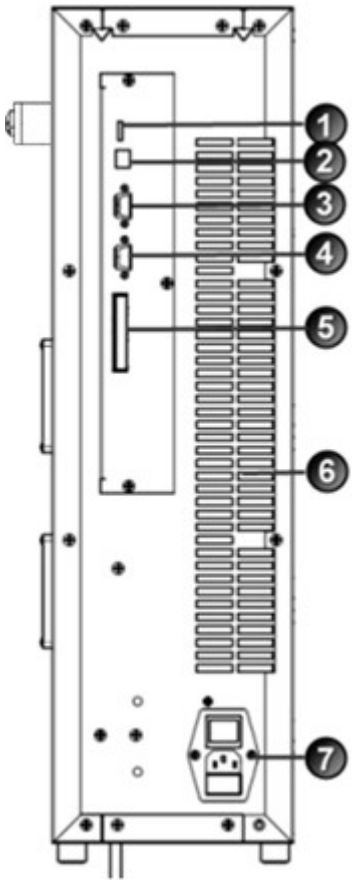


Рисунок 9: Колоночный термостат (вид сзади).

1. USB (дополнительно)
2. Ethernet
3. ВЫХОД (последовательный)
4. ВХОД (последовательный)
5. Разъем ввода/вывода

Внимание: НЕ ПЕРЕКРЫВАТЬ!

6. Вентиляционные отверстия
7. Блок предохранителей; разъем питания; переключатель ВКЛ/ВЫКЛ/переключатель напряжения

Обзор Автосамплера для QSight® MD UHPLC

В этом разделе описаны основные компоненты Автосамплера для QSight® MD UHPLC. Автосамплер позволяет автоматически вводить пробы из микротитрационных планшетов или виал.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

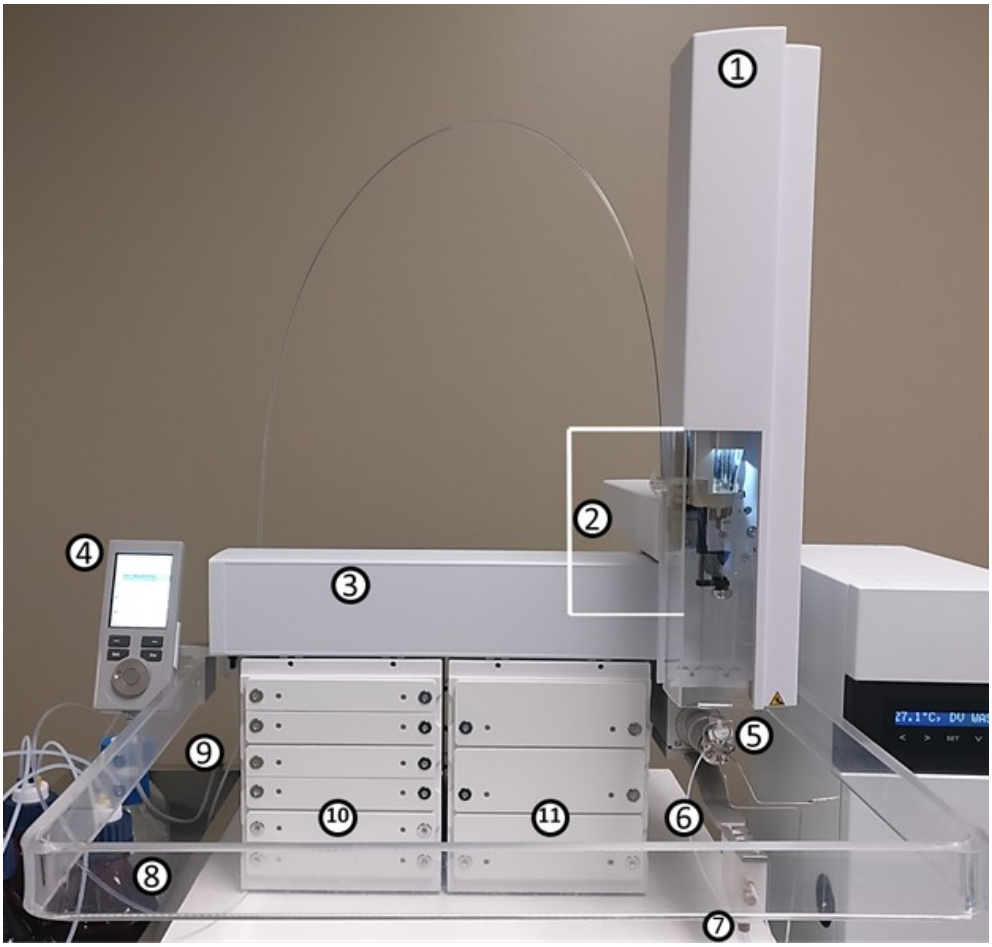


Рисунок 10: Автосамплер для QSight® MD UHPLC (вид спереди)

1. Головка: Робототехническая головка в главной позиции
2. Узел инструмента LCP: шприц, поршень и игла
3. Серийный номер
4. Устройство ручного управления: ручной блок управления для Автосамплера
5. Клапан инжектора для ЖХ
6. Линия 1 модуля отходов промывки ЖХ
7. Шланг для слива отходов
8. Прозрачный предохранительный поручень
9. Блоки электропитания: тройные специальные источники питания, прикрепленные с задней стороны узла (индикаторы обозначают состояния ВКЛ/ВЫКЛ)
10. Стойка Пельтье: стойка с 6 выдвижными отделениями вмещает 12 микротитрационных планшетов
11. Стойка Пельтье: стойка с 3 выдвижными отделениями вмещает шесть планшетов для 54 виал объемом 2 мл

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

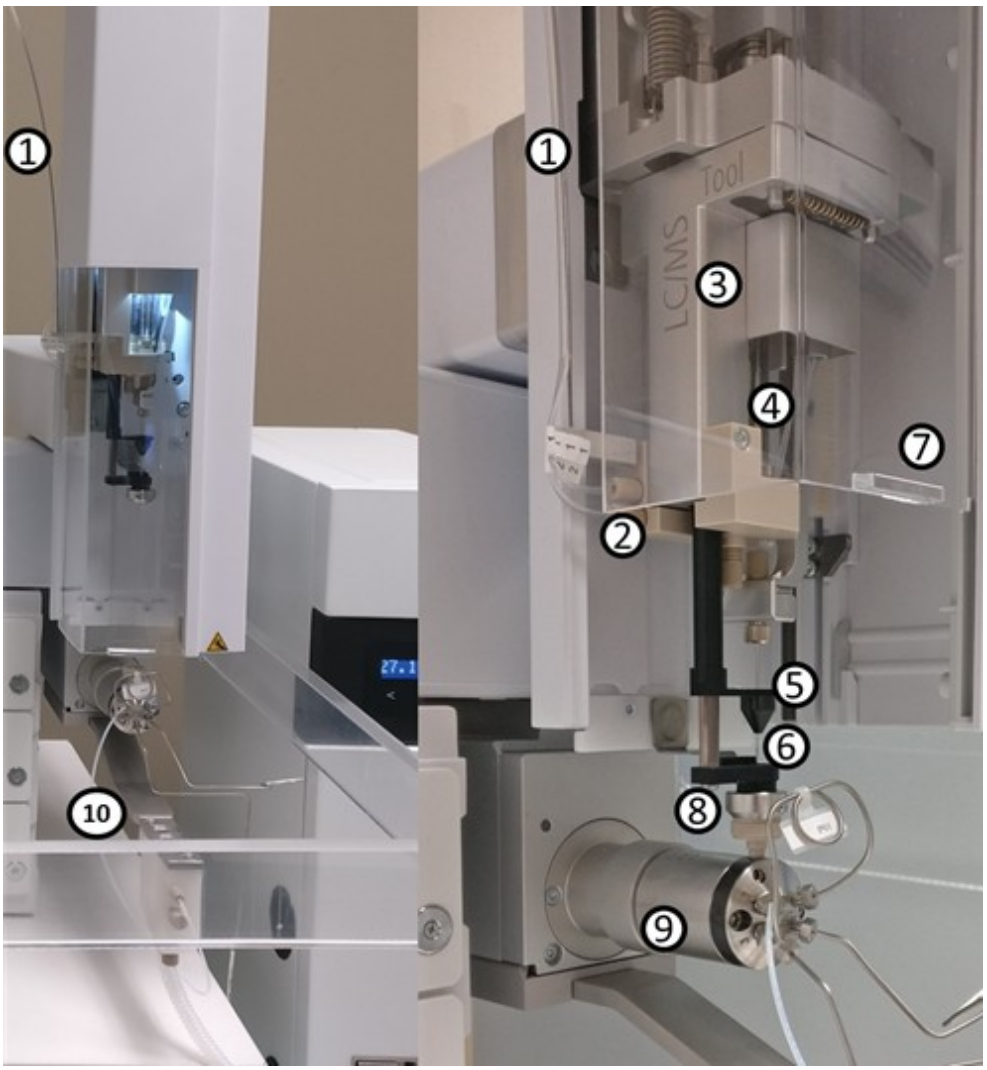


Рисунок 11: Головка автосамплера для QSight® MD UHPLC

1. Линия растворителя: сохраняет прямую форму с помощью провода
2. Линии промывки и растворителя 1 и 2
3. Узел инструмента LCP
4. Шприц
5. Узел иглы
6. Игла
7. Выдвигающееся защитное окошко
8. Нож для обрезания фольги
9. Клапан инжектора для ЖХ
10. Линия 1 модуля отходов промывки ЖХ

Блок ручного управления

Блок ручного управления позволяет точно настроить параметры Автосамплера, такие как названия лотков и выбор микротитрационных планшетов (например, 96 лунок против 384 лунок).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

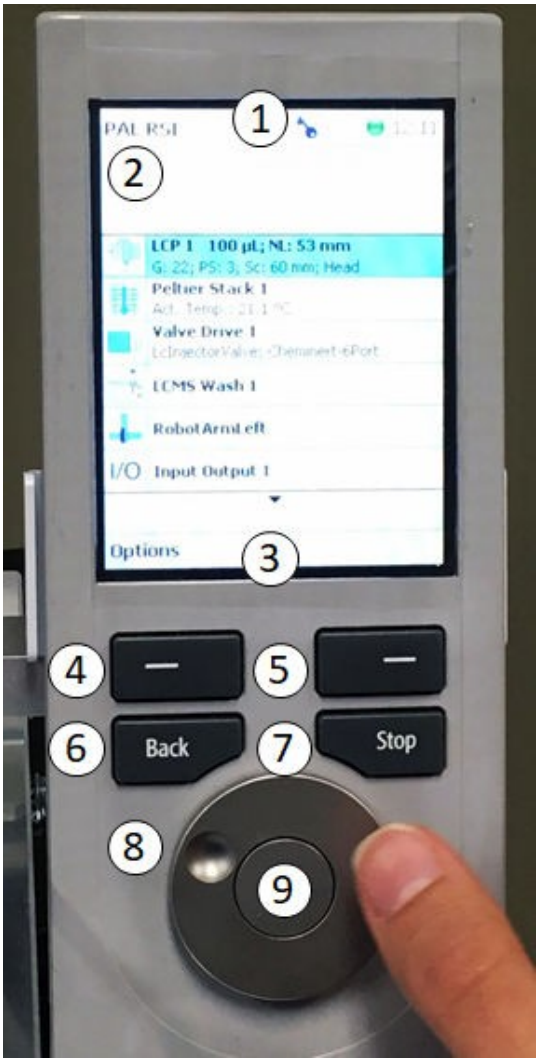


Рисунок 12: Блок управления вручную автосамплером для QSight® MD UHPLC Screening System

1. Значок ключа: активирован режим Advanced (Расширенный)
2. Основное окно дисплея
3. Область меню: элементы в меню дисплея можно выбирать с помощью левой и правой (A и B) кнопок выбора под соответствующими сторонами экрана.
4. Левая кнопка выбора (A)
5. Правая кнопка выбора (B)
6. Кнопка Back (Назад)
7. Кнопка Stop (Стоп)
8. Вращающийся диск: используется для прокрутки параметров на дисплее
9. Круговой селектор: используется для выбора нужного параметра

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Работа программного обеспечения

Программное обеспечение Simplicity™ 3Q MD версия 2.0 управляет масс-спектрометром QSight и его компонентами: Автосамплером УВЭЖХ, колоночным термостатом и насосом УВЭЖХ. Система скрининга «QSight 225MD UHPLC Screening System» предоставляет вашей лаборатории полный набор рабочих процессов сбора данных и количественной оценки. Управление масс-спектрометром QSight осуществляется с помощью программного обеспечения Simplicity 3Q MD, работающего на ПК через Ethernet-соединение.

Перед началом работы

Установка программного обеспечения

Программное обеспечение Simplicity 3Q MD будет установлено представителем сервисной службы компании PerkinElmer во время посещения для обслуживания. Если вам требуется переустановка или изменение параметров конфигурации программного обеспечения, обратитесь к представителю службы поддержки компании PerkinElmer.

По умолчанию программа добавляет на ваш компьютер трех пользователей под названиями ServiceDefaultUser (Пользователь обслуживания), AdvancedUser (Продвинутый пользователь) и RoutineUser (Обычный пользователь) с правами администратора программы Simplicity 3Q MD. Возможно, что пароли, назначенные этим учетным записям, не соответствуют требованиям вашей организации по сложности (дополнительную информацию см. в разделе Понимание профилей пользователей на стр. 35), эти пароли могут быть изменены вашим IT-отделом. Обратитесь за помощью к представителю службы поддержки клиентов компании PerkinElmer.

Использование профилей пользователей

Для обеспечения безопасности в программном обеспечении предусмотрены три уровня или три роли пользователей:

- Service (Обслуживание)
- Advanced (Продвинутый)
- Routine (Обычный)

Пользователи уровня «Service» имеют полный доступ ко всем операциям программного обеспечения Simplicity; пользователи уровня «Routine» имеют минимальный доступ. Описание каждой части рабочего процесса в данном руководстве представлено с точки зрения пользователя с наивысшим уровнем доступа. При выполнении утвержденного анализа/приложения пользователь, обрабатывающий пробы, должен войти в систему через учетную запись типа Routine во избежание случайного изменения методов или настроек системы. В таблице ниже указаны операции, доступные для каждой роли:

Права безопасности по ролям пользователей			
Права управления доступом	SERVICE	ADVANCED	ROUTINE
• Конфигурация • Функция Security (Безопасность) • Функция Hardware profile (Профиль оборудования) • Функция Service (Обслуживание) • Настройки рабочего списка	☑ ☑ ☑ ☑ ☑	☑	
Создание списка партий (серий)	☑	☑	☑
Очередь сбора данных партий (серий)	☑	☑	☑
Вкладка DataViewer (Средство просмотра данных)	☑	☑	☑
Автоматическая калибровка и разрешение (Auto CALRES)	☑	☑	☑

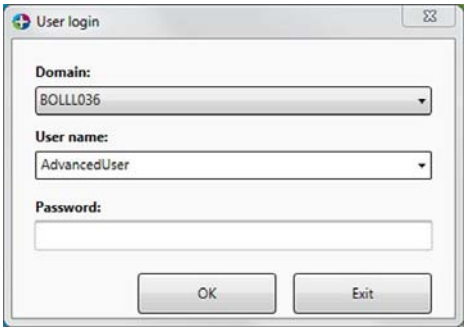
Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Права безопасности по ролям пользователей			
Редакторы методов количественного анализа/MS/LC	☑	☑	
Пароль по умолчанию	(доступно только для сервисного персонала PKI)	Advanced19!	Routine19!

Начало работы

Вход в программное обеспечение Simplicity™ 3Q MD

1. Откройте **программное обеспечение Simplicity** с помощью значка на рабочем столе. Откроется диалоговое окно **User Login** (Вход пользователя).



2. Если **Domain** (Домен) еще не выбран, в выпадающем списке **Domain** (Домен) выберите расположение домена вашего компьютера (если вы не знакомы с этими настройками, обратитесь к системному администратору).
3. Введите **User Name** (Имя пользователя) программного обеспечения Simplicity или, если вы уже входили в программу, выберите его из выпадающего списка.
4. В поле **Password** (Пароль) введите уникальный пароль для Simplicity.
5. Нажмите кнопку **OK**. Приложение откроется на вкладке **Home** (Главная).

Для создания нового проекта

1. В меню ленты **Home** (Главный экран) нажмите **New Project** (Новый проект), (или нажмите **Simplicity Orb menu** (меню Simplicity Orb), а затем нажмите **New Project** (Новый проект)). Появится диалоговое окно с предупреждением, что это действие приведет к закрытию файлов существующего проекта, и вопрос желаете ли продолжить. Нажмите кнопку **Yes** (Да), чтобы продолжить создание нового проекта. Откроется диалоговое окно **New Project** (Новый проект).
2. Введите уникальное имя нового проекта в поле **Name** (Название)
3. Нажмите кнопку **OK**. Программа создаст новый проект с именем Project_<название>

Главный экран Simplicity



Когда вы открываете ПО – либо через меню Windows Start, либо щелчком по значку Simplicity на рабочем столе – автоматически отображается главный экран:

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

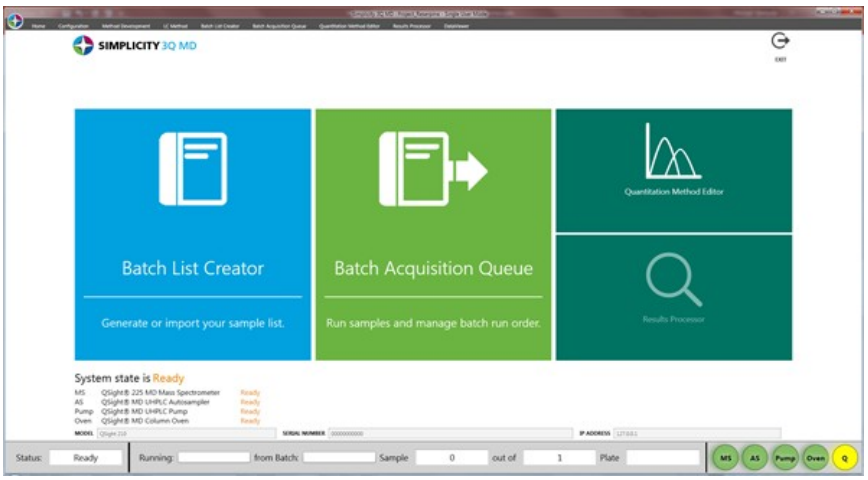


Рисунок 13: Главный экран программного обеспечения Simplicity 3Q MD (отображения для Продвинутого пользователя)

Значки вкладки Home (Главная)

На главном экране по умолчанию отображаются три большие кнопки панели - **Batch List Creator** (Создание списка серий), **Batch Acquisition Queue** (Очередь сбора данных серии), **Quant** (Квант). Только для пользователей Advanced (Продвинутый) и Service (Обслуживание) имеется дополнительный значок **Configuration** (Конфигурация).

Эти кнопки панели обеспечивают быстрый доступ к наиболее часто используемым функциям программного обеспечения.

Состояние системы и сведения о системе

System State (Состояние системы) отображает состояние работы программного обеспечения Simplicity и сведения о системе. Этот элемент доступен только для чтения и обновляется каждые несколько секунд.

- Статус состояния может быть **Ready** (Готов к использованию) или **Fault** (Неисправен).
- Статус состояния отображается для масс-спектрометра, насоса, термостата и Автосамплера.
- Показанные сведения о системе включают модель и серийный номер QSight, а также IP-адрес масс-спектрометра QSight.

Общие элементы управления экраном

Большинство операций, которые вы выполняете при работе с прибором, осуществляются через программную систему Simplicity. Программное обеспечение управляет основными аппаратными компонентами системы QSight. Он также управляет процессом сбора данных и выполняет все аналитические расчеты.



Меню Simplicity Orb: Доступ к меню Simplicity Orb осуществляется через значок Simplicity Orb в левом верхнем углу экрана (см. слева). Меню Simplicity Orb обеспечивает доступ ко всем командам администрирования, настройки и управления файлами программного обеспечения Simplicity. Полный обзор доступных опций см. в разделе Меню Simplicity Orb на стр. 39.

Меню Ribbon (ленты)**:** лента постоянно расположена в верхней части экрана и разделена на несколько экранов с вкладками, каждый из которых имеет ряд опций и значков, организованных в функциональные группы.

Каждая вкладка состоит из основного экрана, содержащего одну или несколько функциональных панелей для дальнейшей организации инструментов и данных, необходимых для выполнения конкретной задачи. Некоторые значки на ленте с вкладками предоставляют дополнительные виды или функции через выпадающие подменю, доступ к которым осуществляется с помощью маленькой стрелки под значком. Полный обзор доступных опций ленты см. в разделе Меню Ribbon на стр. 40.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

- **Status Bar (**Строка состояния**):** Строка состояния отображается на всех экранах вкладок. Она обеспечивает обратную связь о рабочем состоянии компонентов системы только для чтения.
- **Status** (Статус): отображает статус Ready (Готов к использованию) или Fault (Неисправен)
- **Running** (В работе): Отображает наименование пробы.
- **From Batch** (Из партии (серии)): Отображает шаблон партии (серии) или название рабочего списка.
- **Sample** (Проба): Указывает номер пробы.
- **Out of** (Из): Указывает общее количество проб в списке серии.
- **Plate** (Планшет): Указывает планшета на котором исследуется проба.

Световые индикаторы: указывают на состояние оборудования масс-спектрометра (MS), Автосамплера (AS), насоса, очереди сбора данных (Q) и термостата. Полное описание доступных опций см. в разделе Щелчок правой кнопкой мыши на Световые индикаторы управления на стр. 41.

Состояние оборудования Световых индикаторов	
MS (масс-спектрометр)	
Зеленый	Готов
Серый	Не подключен
Оранжевый	Попытка подключения
Желтый	Инициализация
Красный	Ошибка
Голубой	Промывка
Детали наведения	Состояние работы (работает, не работает, впрыск и т.д.) Состояние устройства (активно, не активно)
Насос	
Зеленый	Готов
Желтый	Инициализация
Красный	Ошибка
Голубой	Промывка
Щелкните левой кнопкой мыши, чтобы получить подробные сведения	Подробное диалоговое окно состояния
Щелкните правой кнопкой мыши, чтобы получить подробные сведения	Настройки прямого управления (На предельные диапазоны давления влияет выбор колонки в режиме прямого управления термостатом)
Детали наведения	Состояние работы (например, Не работает) Состояние устройства (например, Активно)
AS (Автосамплер)	
Зеленый	Готов
Желтый	Инициализация
Красный	Ошибка
Щелкните левой кнопкой мыши, чтобы получить подробные сведения	Обновление статуса

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Состояние оборудования Световых индикаторов	
Щелкните правой кнопкой мыши, чтобы получить подробные сведения	Прямые настройки управления
Детали наведения	Состояние выполнения (например, Промывание иглы) Состояние устройства (например, Активно)
Q (Очередь сбора данных)	
Зеленый	Готов
Желтый	Ожидание
Детали наведения	Статус очереди
Термостат	
Зеленый	Готов
Желтый	Инициализация
Красный	Ошибка
Щелкните левой кнопкой мыши, чтобы получить подробные сведения	Подробное диалоговое окно состояния
Щелкните правой кнопкой мыши, чтобы получить подробные сведения	Прямые настройки управления
Детали наведения	Состояние работы (например, Не работает) Состояние устройства (например, Активно)

Меню Simplicity Orb



Значок Simplicity orb находится в левом верхнем углу экрана. Нажмите на значок orb, чтобы перейти к доступным опциям меню:

Опции меню Simplicity orb	
Пункт меню	**Описания**
Open Data	Загрузка файлов данных и отображение DataViewer (Средство просмотра данных), если он не отображается.
Log out	Текущий пользователь вышел из системы; отображается диалоговое окно входа в систему.
New Project	Создайте новую папку проекта. **Примечание:** Эта опция отключена во время получения данных.
Open Project	Загрузите ранее созданную папку проекта. **Примечание:** Эта опция отключена во время получения данных.
Print Data	Печать текущего выбранного файла данных с выбранными свойствами принтера.
About	Отображение сведений о программном обеспечении Simplicity (включая название, авторское право, версию, модель и дату сборки)

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Опции меню Simplicity orb	
Side Panel	Недавние документы - показать недавно открытые документы.
	Очистить недавние элементы - очистка списка недавних документов.
Exit	Закрывает приложение Simplicity.

Меню Ribbon (Ленточное меню)

Чтобы перейти к вкладкам ленты и начать работу, выберите нужный значок на вкладке Home (Главная) или кликните название вкладки в ленте меню, расположенном в верхней части экрана.

Примечание: Значки и опции в меню любой вкладки ленты можно скрыть, дважды щелкнув по названию вкладки. Чтобы элементы ленты появились снова, кликните вкладку второй раз.

Здесь описаны некоторые функции ленты меню, пояснения по функциям, не описанным здесь, см. в соответствующих разделах данного руководства.

- Элементы управления меню ленты разработки метода на стр. 45
- Управление лентой метода ЖХ на стр. 69
- Элементы управления ленты для создания списка серий и очереди сбора данных серии на стр. 73
- Элементы управления ленты для редактора методов количественного анализа на стр. 87
- Элементы управления ленты для DataViewer (Средство просмотра данных) на стр. 98

Вкладка Home (Главная) (все пользователи)	
Группа проектов	
	**New Project** (Новый проект) — Создает новую папку проекта, в которой пользователь будет разрабатывать методы для конкретного проекта. Позволяет быстро искать и находить методы, файлы данных и прочее для конкретного проекта вместо того, чтобы искать во всем каталоге.
	**Open Project** (Открыть проект) — открывает папку, относящуюся к проекту, над которым вы хотите работать. Папка проекта содержит все методы, серии, методы количественного анализа и т.д., использовавшиеся ранее.
	**Save Project** (Сохранить проект) — Нажмите, чтобы сохранить вновь разработанный метод с уникальным именем; перезаписать существующий метод; или сохранить новую версию существующего метода.
Вкладка Configuration (Конфигурация) (только для пользователей Advanced (Продвинутый) и Service (Обслуживание)*)	
Группа конфигурации	
	**Security*** (Безопасность*) — Нажмите, чтобы открыть экран безопасности приложений и определить настройки безопасности приложений.
	**Hardware Profile*** (Профиль оборудования) — Нажмите, чтобы открыть экран информации о профиле оборудования, и выберите нужный профиль системы.
	**Service*** (Обслуживание) — Нажмите для доступа и настройки параметров по умолчанию MC Parameter (Параметр), Configuration Table (Таблица Конфигурации) и CALRES (калибровка и разрешение).
	**Worklist Settings** (Настройка рабочего списка) — Нажмите, чтобы назначить путь к файлу рабочего списка и путь к файлу результата рабочего списка.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteya-plus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Traffic Light Right-Click Device Controls (Щелчок правой кнопкой мыши на Световые индикаторы управления)

Если щелкнуть правой кнопкой мыши на активном световом индикаторе, станут доступны функции Device Status (Состояние устройства) и Direct Control (Прямое управление). В диалоговых окнах Device Status (Статус устройства) отображается дополнительная информация о выбранном устройстве. Функции Direct Control (Прямое управление) позволяют быстро контролировать и управлять всеми устройствами, настроенными в текущем Hardware Profile (Профиль оборудования), из Status Bar (Строка состояния).

Примечание: Функции Direct Control (Прямое управление) доступны ТОЛЬКО когда статус устройства зеленый, а компонент готов или работает.

Перейдите к элементам управления для вашей системы:

- Опции прямого управления Автосамплером для QSight MD UHPLC на стр. 41
- Опции прямого управления колоночным термостатом для QSight MD UHPLC на стр. 41
- Опции прямого управления насосом для QSight MD UHPLC на стр. 41

Варианты прямого управления Автосамплером для QSight® MD UHPLC

Опции прямого управления Автосамплером для QSight® MD UHPLC через световой индикатор отсутствуют. Ручное управление используется для любых функций прямого управления.

Варианты прямого управления колоночным термостатом QSight® MD

Опции на вкладке Direct Control (Прямое управление) колоночным термостатом QSight MD включают в себя:

Состояние	Проверьте общее состояние термостата (фактическая температура и заданная температура). Нажмите **Initialize** (Инициализировать), чтобы подготовить термостат к регулярному использованию или сбросить ошибку.
Прямое управление	**Контроль температуры:** Используйте тумблер для включения или выключения контроля температуры. Введите заданное значение температуры и нажмите кнопку **Set** (Установить) для подтверждения. Если установлен клапан для выбора колонки, максимальная заданная температура составляет 75°C; если клапан для выбора колонки не установлен, максимальная заданная температура составляет 90°C.
	Клапан для выбора колонки: нажмите на радиокнопки, чтобы переключить клапан выбора колонок между портами 1-6.
	Разделяющий клапан: нажмите на радиокнопки, чтобы переключить разделяющий клапан между отходами (порт 2) и масс-спектрометром (порт 6).
Информация о системе	Используется для проверки информации о драйвере и информации о версии термостата (версия прошивки, версия печатной платы, версия программируемой логической интегральной схемы, серийный номер).
Параметры для пользователей Advanced (Продвинутый)	Доступно только для представителей сервисной службы компании уполномоченного предствителя.

Варианты прямого управления насосом для QSight® MD UHPLC

Опции на вкладке Direct Control (Прямое управление) насоса для QSight® MD UHPLC включают:

Состояние	Отображает информацию о состоянии насоса и график давления. (Обратите внимание, что состояние насоса отображает фактическое давление с течением времени.) Нажмите **Initialize** (Инициализировать), чтобы подготовить насос к регулярному использованию. Данные о расходе насоса в реальном времени отображаются на графике ниже. Чтобы сохранить данные о расходе насоса, отображаемые в файле .CSV, нажмите **Save All Datapoints** (Сохранить все точки данных). Чтобы очистить отображаемые данные, нажмите **Clear Graph** (Очистить график); чтобы вернуться к уровню масштабирования по умолчанию, нажмите **Reset Zoom** (Сброс масштаба)

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Прямое управление	Нажмите на тумблер **Pump state** (Состояние насоса), чтобы Start (Запустить) или Stop (Остановить) насос.
	Нажмите на тумблер **Softramp** , чтобы включить или выключить использование Softramp. Если опция Softramp включена, то при первом запуске насоса (через систему прямого управления) насос будет автоматически увеличивать скорость потока на 0,1 мл/мин каждые 10 секунд до достижения желаемого расхода. Последующие изменения расхода также будут использовать эту настройку темпа.
	Поток: • Введите расход (в мл/мин). • Введите долю (%) потока, которая должна поступать из насосного канала A. • Введите долю (%) потока, которая должна поступать из насосного канала B. Нажмите **Submit Flow** (Передать расход), чтобы передать настройки (расход и фракцию) насосу. • Если расход > 0, насос включится, когда вы нажмете кнопку **Submit Flow** (Передать расход). • Если расход равен 0, насос отключится, когда вы нажмете кнопку **Submit Flow** (Передать расход).
	Растворители: • Выберите порт растворителя (1 или 2) для насоса A • Выберите порт растворителя (1 или 2) для насоса B
	Давление: • Введите максимальное давление (диапазон 150 - 15 000 фунтов на кв. дюйм). • Введите минимальное давление (диапазон 0 - 14 850 фунтов на кв. дюйм). Нажмите кнопку **Set** (Установить) для подтверждения.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Промывка	**Важно:** Чтобы обеспечить хорошую работу насоса, удалите весь воздух из линий подачи растворителя и головки насоса. Для подготовки насоса последовательно используйте три приведенных ниже варианта.
	Первичная промывка уплотнений: Нажмите ⊙, чтобы начать; нажмите ⊙, чтобы остановить. Используйте для промывки проточного канала промывки уплотнений с высокой скоростью потока, используя независимый внутренний насос промывки уплотнений. Промывка уплотнений должна удалить любые остатки подвижной фазы. Первичная промывка уплотнений удаляет весь воздух из линий промывки уплотнений, делая предварительное заполнение трубок излишним. Заполнение прекращается автоматически через 30 секунд Рекомендуемый растворитель для промывки уплотнений: 20% (об.) изопропанола в воде
	Основная подвижная фаза: Нажмите ⊙, чтобы начать; нажмите ⊙, чтобы остановить. Для заполнения растворителем головок насоса и впускных трубок используйте заливку подвижной фазой; это позволит удалить весь воздух из трубок. Также используйте этот параметр при переключении растворителей. Убедитесь, что для каждого насоса выбран правильный порт для растворителя (1 или 2). Заполнение прекратится автоматически через 90 секунд.
	Очистка: Нажмите кнопку со стрелкой ⊙, чтобы начать; нажмите квадратную кнопку ⊙ для остановки. Выберите продувку насосного канала A и насосного канала B, продувку только насосного канала A или продувку только насосного канала B. Продувку рекомендуется проводить после того, как система только что была заправлена, так как это позволит удалить оставшийся воздух из головок насоса. Очистка прекратится автоматически через 120 секунд. **Примечание:** Продувка может быть успешно завершена только в том случае, если все линии заполнены растворителем. Если это не так, сначала используйте опцию Prime для заполнения линий растворителя. Убедитесь, что для каждого канала насоса выбран правильный порт для растворителя (1 или 2).
Информация о системе	Используйте эту опцию для проверки информации о драйвере и версии насоса (версия прошивки, версия печатной платы, версия программируемой логической интегральной схемы, серийный номер).
	Загрузить журнал...: Нажмите Download Log (Загрузить журнал), чтобы экспортировать CSV-файл со всеми данными насоса за последние 4 минуты при частоте 1000 Гц. Используется для поиска и устранения неисправностей.
Advanced (Продвинутый)	Доступно только для представителей сервисной службы компании уполномоченного предствителя.

Вкладка Configuration (Конфигурация)

На вкладке Configuration (Конфигурация) можно изменить настройки прибора, например, места сохранения рабочего списка, или запустить мастер обслуживания.

Настройки рабочего списка

Настройки рабочего списка позволяют задать каталог, в котором хранятся как рабочие списки, так и данные, созданные на основе рабочих списков. Этот директория может быть как локальным, так и на сетевом диске, в зависимости от вашей конкретной настройки.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Изменить настройки рабочего списка

Чтобы изменить путь к файлу рабочего списка и/или путь экспорта результатов рабочего списка, выполните описанные ниже действия:

1. Откройте программное обеспечение **Simplicity 3Q MD** и перейдите на вкладку **Configuration** (Конфигурация) или нажмите на значок **Configuration** (Конфигурация) на главном экране.
2. Нажмите на значок **Worklist Settings** (Настройки рабочего списка) в меню Ribbon.
3. Нажмите кнопку **Browse** (Обзор) рядом с путем, который вы хотите изменить. Откроется окно Select Folder (Выбор папки).
4. Перейдите в нужную папку и нажмите кнопку **Select Folder** (Выбрать папку), чтобы вернуться на экран настроек рабочего списка.

При желании нажмите **Test** (Проверить), чтобы проверить подключение к новой папке. Мы рекомендуем выполнить этот шаг, если папка находится на сетевом диске или доступ к ней осуществляется через сетевое подключение.

5. Нажмите **Save** (Сохранить), когда вы будете удовлетворены своими настройками. Программное обеспечение Simplicity 3Q MD будет сразу же настроено.

Примечание: Если во время сбора данных вы измените настройки рабочего списка, данные будут сохранены в исходном месте. Настройки вступят в силу после завершения сбора данных.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Разработка метода

В этом разделе приведены основные операции рабочего процесса на вкладке Method Development (Разработка метода) программного обеспечения Simplicity 3Q MD для системы скрининговой «QSight® 225MD UHPLC Screening System».

Управление лентой при разработке метода

Примечание: Иконки и опции любой ленты можно скрыть, дважды щелкнув по вкладке выбранной функции в верхней части экрана. Чтобы элементы ленты появились снова, кликните по вкладке еще раз.

На экране Method Development (Разработка метода) (в режиме безопасности, доступном только для пользователей Advanced (Продвинутый) и Service (Обслуживание)) имеются следующие значки:

Группа методов	
	**New Method** (Новый метод) — нажмите, чтобы открыть пустой шаблон метода для создания метода МС с нуля. Здесь вы можете выбрать сканирование Q1, сканирование продукта, MRM и так далее, в зависимости от ваших потребностей.
	**Load Method** (Загрузить метод) — загружает ранее сохраненный метод. Обратите внимание, что вы можете загружать методы только из открытой папки проекта. Чтобы открыть метод из другого проекта, необходимо сначала открыть этот проект.
	**Save Method As…** (Сохранить метод как...) — нажмите, чтобы сохранить вновь разработанный метод с уникальным именем; перезаписать существующий метод; или сохранить новую версию существующего метода.
Группа эксперимента	
	**Add Experiment** (Добавить эксперимент) — Нажмите, чтобы создать новый эксперимент.
	**Load Experiment** (Загрузить эксперимент) — нажмите, чтобы загрузить существующий эксперимент. Это позволяет выбрать существующий метод, из которого будут копироваться эксперименты. Если выбранный метод содержит только один эксперимент, он автоматически добавляется в нижнюю часть списка экспериментов открытого метода. Если выбранный метод содержит более одного эксперимента, то в поле Load Experiment (Загрузить эксперимент) появится диалоговое окно, в котором вам будет предложено выбрать, какие эксперименты вы хотите добавить.
	**Duplicate Experiment** (Дублировать эксперимент) — Нажмите, чтобы создать дубликат существующего эксперимента (на основе которого будет проводиться новый эксперимент); эксперимент добавляется в нижнюю часть списка текущих экспериментов.
	**Compound Database** (База данных соединений) — Открывает созданную пользователем базу данных, содержащую связанные с соединениями параметры MRM.
Группа данных	
	**Load Method from Data** (Загрузить метод из данных) — загружает метод, используя выбранный набор данных. Также будет загружен метод, который использовался изначально.
	**Save Data** (Сохранить данные) — Нажмите, чтобы выбрать место сохранения необработанного файла данных МС.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Настройка Группы сканирования	
	**START MS (выпадающее меню)** (ЗАПУСК МС) — Запуск сбора данных МС с использованием выбранных параметров и выполнение в течение указанного периода времени. Может быть остановлен в любой момент во время сбора данных.
	**STOP** (СТОП) — Остановить получение данных MS.
Группа серверов контрольно-измерительных приборов	
	**Show Simplicity Server** (Показать сервер Simplicity) — Открывает окно сервера для автоматической калибровки прибора. **Примечание:** При вызове сервера Simplicity макроспектрометр переходит в режим по умолчанию, автоматически устанавливая HSID на 320 и отключая потоки газа. В результате при возврате с Сервера в основное программное приложение может потребоваться подождать, прежде чем прибор остынет или прогреется перед запуском сбора данных.
	**Reset Device Status** (Сброс статуса устройства) — Эта функция сбрасывает все подключенные периферийные устройства в режим ожидания при возникновении ошибки. Это может быть полезно для устранения временной неисправности и восстановления нормальных условий работы.
	**AutoCALRES Settings** (Настройки автоматической калибровки и разрешения) — Открывает настройки калибровки и разрешения.
Группа инструментов Выберите необходимые инструменты, установив флажок рядом с каждой опцией инструмента.	
Отметить пункт (установить флажок)	**View Resolution Table** (Просмотр таблицы разрешений) — Нажмите для отображения таблицы разрешений в качестве дополнительной вкладки на левой панели. **View Mass Parameter Table** (Просмотр таблицы параметров масс) — Нажмите, чтобы изменить значения для параметров Входное напряжение (EV), Линза ячейки столкновения 2 (CCL2) и CC (Энергия ячейки столкновения). **Apply Equilibration** (Применить уравновешивание) — включение применения уравновешивания интерфейса параметров источника перед выполнением сбора. **Run Parameter Ramp (с настройками линейного измерения)** (Запуск линейного изменения параметров) — в ходе разработки метода позволяет оптимизировать EV, CCL2 и CC путем постепенного наращивания значений, чтобы определить значение, которое дает самый сильный сигнал. **Ramp Settings** (Настройки линейного изменения) — Нажмите, чтобы выбрать начальное и конечное значения для EV, CCL2 и CC, а также размер шага при оптимизации этих параметров. **Timed Events** (События по времени) — Нажмите, чтобы отобразить вкладку Timed Events (События по времени) на левой панели. На этой вкладке можно управлять настройками газа динамической сушки. **Run AutoTune (с автонастройкой)** (Выполнить автонастройку) — Автоматический запуск темпа изменения параметров на основе настроек линйного изменения для оптимизации EV, CCL2 и CC. Обратите внимание, что здесь вы можете выбрать все или только определенные параметры для настройки, отменив выбор соответствующих параметров в таблице параметров масс. Эта опция доступна только для режима сканирования MRM. **AutoTune Settings** (Параметры автонастройки) — Нажмите, чтобы выбрать начальное и конечное значения для EV, CCL2 и CC при оптимизации этих параметров.

Ссылка на программное обеспечение для разработки метода

Экран Method Development (Разработка метода) состоит из трех основных панелей:

- Левая панель содержит подвкладки, где можно определить параметры уровня метода, включая настройки источника; основные параметры настройки; и (если выбрано) управлять временем выполнения определенных настроек.
- Центральная панель содержит редактор экспериментов МС, где вы добавляете и определяете эксперименты, составляющие метод.
- Правая панель содержит вкладки, в которых перечислены эксперименты, сконфигурированные как часть метода, и позволяет выполнить базовую настройку метода ЖХ.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Элементы и опции на левой панели

Элементы управления подвкладкой 3Q Source (Источник 3Q)

Вы используете подвкладку 3Q Source (Источник 3Q) для настройки параметров источника на уровне метода для вашего метода MC.

Если вы используете конфигурацию с двумя источниками, доступны две кнопки, позволяющие выбрать и настроить параметры для зонда ESI или APCI для активного эксперимента.

Примечание: Вы можете установить и запустить один или два источника зондов - источник ESI, источник APCI или один из них. Вы не можете запустить два зонда одного типа.

- **Настройки экспериментов на центральной панели**
- **Drying Gas** (Газ-осушитель): Прибор использует газообразный азот для десольватации пробы с целью усиления ионизации. Введите или с помощью стрелок укажите желаемый расход. Диапазон допустимых значений составляет от 50 до 200.
- **HSID Temperature** (Температура HSID): Функция HSID (десольватация, индуцированная горячей поверхностью) обеспечивает улучшенную десольватацию и направление ионов через ламинарный поток. Введите или с помощью стрелок укажите желаемую температуру в градусах Цельсия. Диапазон допустимых значений составляет от 0° до 320° по Цельсию.
- **Настройки зонда 1 (ESI 1) По умолчанию зонд 1 является положением зонда ESI и обозначен как ESI 1.**
- **Nebulizer Gas 1** (Газ для распылителя 1): Введите или с помощью стрелок укажите желаемый поток газа для распылителя. Диапазон допустимых значений составляет 0-450.
- **ElectroSpray V1 <Pos/Neg>** (Электроспрей V1 <Полож/Отриц>): Заряд, приложенный к самой игле электрораспыления для ионизации пробы. Этот ввод будет обозначен как положительный или отрицательный, в соответствии с полярностью, выбранной на главной панели. Диапазон допустимых значений составляет от 0 до 5850 вольт.
- **Source 1 Temperature** (Температура источника 1): Введите или с помощью стрелок укажите желаемую температуру, которая будет поддерживаться вокруг иглы источника ионов зонда 1. Диапазон допустимых значений составляет от 0° до 500° по Цельсию.
- **Настройки зонда 2 (APCI 2) По умолчанию зонд 2 является положением зонда APCI и обозначен как APCI 2.**
- **Nebulizer Gas 2** (Газ распылителя 2): Введите или с помощью стрелок укажите желаемый поток газа для распылителя. Диапазон допустимых значений составляет 0-450.
- **Corona Discharge <Pos/Neg>** (Коронный разряд <Полож/Отриц>)**:** Введите или с помощью стрелок укажите желаемое напряжение коронного разряда. Этот ввод будет обозначен как положительный или отрицательный, в соответствии с полярностью, выбранной на главной панели. Диапазон допустимых значений составляет от 0 до 5 вольт.
- **Source 2 Temperature** (Температура источника 2): Введите или с помощью стрелок укажите желаемую температуру, которая будет поддерживаться вокруг иглы источника ионов зонда 2. Диапазон допустимых значений составляет от 0° до 500° по Цельсию.

Элементы управления подвкладкой 3Q Tune (Настройка 3Q)

В подвкладке 3Q Tune (Настройка 3Q) отображаются настройки параметров ионного тракта, отображаемые параметры зависят от типа эксперимента, выбранного в панели MS Experiment Creator (Создание эксперимента) (см. раздел Управление панелью MS Experiment Creator (Создание эксперимента) (центральная) на стр. 48). Настройки применяются к разрабатываемому эксперименту (или выбранному эксперименту).

- **Entrance Voltage** (Входное напряжение)**:** Отображает входное напряжение для выбранного эксперимента. Диапазон допустимых значений - от 0 до 200.
- **Collision Cell Lens 2** (Линза ячейки столкновения 2)**:** Отображает настройку линзы ячейки столкновения 2 для выбранного эксперимента. Допустимые значения варьируются от -400 до 0.
- **Collision Energy (**Энергия столкновения): Отображает настройку энергии столкновения для выбранного эксперимента. Диапазон допустимых значений составляет от -145 до 0.

Подвкладка Timed Events (События по времени)

Подвкладка Timed Events (События по времени) появляется, когда установлен флажок Timed Events (События по времени), расположенный в разделе Tools (Инструменты) ленты. Эта подвкладка позволяет управлять функцией Dynamic Drying Gas (Газ для динамической сушки).

- **Active** (Активный)**:** Установите этот флажок, чтобы активировать функцию Dynamic Drying Gas (Газ для динамической сушки). После установки флажка значение Global Drying Gas (Общий газ для сушки) в подвкладке 3Q Source (Источник 3Q) станет серым, а в подвкладке Timed Events (События по времени) появится всплывающая подсказка, предупреждающая о том, что Drying Gas (Осушающий газ) теперь контролируется.
- **Time (**Время): введите, чтобы добавить время запуска с интервалом 0,1 минуты (6 секунд).
- **Flow (**Расход): Введите, чтобы указать желаемый расход. Диапазон допустимых значений составляет от 50 до 200.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Панель управления MC Experiment Creator (Создание эксперимента) (центральная)

Панель Experiment Creator (Создание эксперимента) позволяет добавлять и определять эксперименты для метода. Настройки, представленные в таблице, зависят от выбранного типа эксперимента. Вы также можете выбрать существующий эксперимент из подвкладки MS Method Creator (Создание метода) на правой панели, чтобы просмотреть или отредактировать соответствующие настройки здесь.

Таблица параметров масс добавляется на эту панель, когда установлен флажок на ленте View Mass Parameter Table (Просмотр таблицы параметров масс). Отображаемые здесь параметры повторяют параметры, отображаемые на подвкладке 3Q Tune (Настройка 3Q), но применяются на уровне метода и поэтому действуют как переопределение настроек уровня эксперимента.

- **Общие настройки**
- **Experiment Type (**Тип эксперимента): В выпающем списке выберите тип эксперимента, который вы хотите добавить к данному методу. Изменение типа эксперимента приведет к изменению некоторых отображаемых параметров.
- **Mass Gain/Loss** (Поглощение/Потеря массы, только для экспериментов с поглощением или потерей нейтральных частиц): В поле Mass Gain/Loss (Поглощение/Потеря массы): введите значение в m/z.
- **Run Duration** (Продолжительность прогона): Общая продолжительность сканирования MC в эксперименте. Это значение рассчитывается автоматически.
- **Number of Scans** (Количество сканирований): В поле Number of Scans (Количество сканирований) укажите количество сканирований для данного эксперимента. Допустимый диапазон составляет от 1 до 1 миллиона сканов.
- **Polarity** (Полярность): Выбор режима положительных или отрицательных ионов, в зависимости от соединений.
- **Center/Width (**Центр/ширина): центральная точка окна массы.
- **Sum Scan** (Сумма интенсивностей сканов): Сумма интенсивностей всех сканов в выполнении. Когда для получения данных используется Sum Scan (Сумма интенсивностей сканов), при просмотре данных в DataViewer (Средство просмотра данных) отображается Number of Scans (Количество сканов).
- **Scan Rate** (Скорость сканирования): Поле Scan Rate (Скорость сканирования) – это поле только для чтения, в котором отображается рассчитанная скорость сканирования.
- **Comment** (Комментарий): В поле Comment (Комментарий) введите любые заметки, которые вы хотите сохранить с помощью этого метода, например, информацию о применении, матрице или настройке.
- **Настройки эксперимента MRM**
- **Q1 Mass** (Масса Q1): Отношение массы к заряду (m/z) предшествующего соединения, выбранного в первом квадруполе для фрагментации в ячейке столкновения.
- **Q3 Mass** (Масса Q3): Отношение массы к заряду (m/z) после фрагментации масс Q1 в ячейке столкновений.
- **Dwell Time (мс)** (Время задержки): Время, затрачиваемое на контроль текущего перехода MRM.
- **Resolution (Q1:Q3) (**Разрешение): В выпающем списке выберите относительное разрешение для Q1 и Q3.
- **Настройки эксперимента сканирования Q1 Scan**
- **Q1 Start Mass (**Начальная масса Q1): Начальная масса диапазона, который будет контролироваться Q1.
- Q1 Stop Mass (Стоп-масса Q1): Конец диапазона масс сканирования.
- Step Size (Размер шага) (а.е.м.): Массовый интервал шагов сканирования.
- Dwell Time (Время задержки) (мс): Время сканирования в определенной точке пика.
- Resolution (Разрешение) (Q1:Q3): В выпающем списке выберите относительное разрешение для Q1 и Q3.
- **Экспериментальные настройки Q1 SIM**
- **Q1 Mass (**Масса Q1): Отношение массы к заряду (m/z) отдельного иона, который будет контролироваться в Q1.
- **Dwell Time (мс) (**Время задержки): Время, затрачиваемое на контроль текущей массы Q1.
- **Resolution (Q1:Q3) (**Разрешение): В выпающем списке выберите относительное разрешение для Q1 и Q3.
- **Настройки эксперимента Q3 Scan**
- Q3 Start Mass (Начальная масса Q3): Начальная масса диапазона, который будет контролироваться Q3.
- Q3 Stop Mass (Стоп-масса Q3): Конец диапазона масс сканирования.
- Step Size (amu) (Размер шага (а.е.м.)): Массовый интервал приращений сканирования
- Dwell Time (Время задержки) (мс): Время сканирования в определенной точке пика.
- Resolution (Разрешение) (Q1:Q3): В выпающем списке выберите относительное разрешение для Q1 и Q3.
- **Экспериментальные настройки Q3 SIM**
- **Q3 Mass (**Масса Q3): Отношение массы к заряду (m/z) отдельного иона, который будет контролироваться в Q3.
- **Dwell Time (мс)** (Время задержки): Время, затрачиваемое на контроль текущей массы Q3.
- **Resolution (Q1:Q3)** (Разрешение): В выпающем списке выберите относительное разрешение для Q1 и Q3.
- **Настройки режима сканирования продукта (PT)**
- **Parent Mass (m/z) (**Масса предшествующего вещества) Отношение массы к заряду (m/z) соединения, выбранного в Q1.
- **Q3 Start Mass (**Начальная масса Q3) Отношение массы к заряду (m/z), при которой Q3 начинает сканирование.
- **Q3 Stop Mass (**Стоп-масса Q3): Отношение массы к заряду (m/z), при которой Q3 останавливает сканирование.
- **Step Size (amu) (**Размер шага (а.е.м.)): Массовый интервал шагов сканирования.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

- **Dwell Time (мс) (**Время задержки): Время сканирования в определенной точке пика.
- **Resolution (Q1:Q3) (**Разрешение): В выпающем списке выберите относительное разрешение для Q1 и Q3.
- **Настройки режима сканирования иона-предшественника (PR)**
- **Product Mass (m/z) (**Масса продукта): Отношение массы к заряду (m/z) соединения после фрагментации.
- **Q1 Start Mass (**Начальная масса Q1): Отношение массы к заряду (m/z), при которой Q1 начинает сканирование.
- **Q1 Stop Mass (**Стоп-масса Q1): Отношение массы к заряду (m/z), при которой Q1 прекращает сканирование.
- **Step Size (amu) (**Размер шага (а.е.м.)): Массовый интервал шагов сканирования.
- **Dwell Time (мс) (**Время задержки): Время сканирования в определенной точке пика.
- **Resolution (Q1:Q3) (**Разрешение): В выпающем списке выберите относительное разрешение для Q1 и Q3.
- **Настройки режима потери нейтральных частиц (NL)**
- **Mass Loss (m/z) (**Потеря масс): Известная потеря фрагмента с определенным m/z для соединения.
- **Start Mass (**Начальная масса): Начальная масса диапазона, который будет контролироваться Q1 (должна быть больше, чем выброс нейтральных частиц).
- **Stop Mass (**Стоп-масса) Конец диапазона массы сканирования (должна быть больше, чем выброс нейтральных частиц).
- **Step Size (amu) (**Размер шага (а.е.м.)): Массовый интервал шагов сканирования.
- **Dwell Time (мс) (**Время задержки) Время сканирования в определенной точке пика.
- **Resolution (Q1:Q3) (**Разрешение) В выпающем списке выберите относительное разрешение для Q1 и Q3.
- **Настройки режима поглощения нейтральных частиц (NG)**
- **Start Mass** (Начальная масса) Начальная масса диапазона, который будет контролироваться Q1.
- **Stop Mass** (Стоп-масса) Конец диапазона массы сканирования.
- **Step Size (amu) (**Размер шага (а.е.м.)): Массовый интервал шагов сканирования.
- **Dwell Time (мс) (**Время задержки) Время сканирования в определенной точке пика.
- **Resolution (Q1:Q3) (**Разрешение) В выпающем списке выберите относительное разрешение для Q1 и Q3.

Элементы и опции на правой панели

Элементы управления подвкладки MS Method Creator (Создание метода)

В этой подвкладке перечислены все эксперименты, которые были добавлены в метод. Здесь вы можете выбрать эксперимент для просмотра или редактирования на главной панели, а также просмотреть, определить и выровнять время проведения эксперимента.

- **Поле Experiment Name (**Наименование эксперимента): Отображает название эксперимента. Здесь можно нажать и ввести, чтобы изменить название эксперимента по своему усмотрению.
- **Поле Scan Type** (Тип сканирования): Отображает тип сканирования, связанный с данным экспериментом. Это поле доступно только для чтения.
- **Поле Source Name (**Наименование источника): Если вы используете конфигурацию с двумя источниками, в этом столбце отображается тип и номер источника, указанные для данного эксперимента. Только для чтения.
- **Поле Start Time (**Время начала): Отображает время начала, определенное для данного эксперимента. Только для чтения.
- **Поле Stop Time (**Время остановки): Отображает время остановки, определенное для данного эксперимента. Только для чтения.
-  Иконка с лупой: нажмите для выбора эксперимента, просмотра или редактирования соответствующих настроек в центральной и левой панелях.
-  **Иконка <X>:** Нажмите, чтобы удалить эксперимент из метода.
- **Поля ввода Start Time / Stop Time (**Поля ввода времени начала / времени остановки) На ленте нажмите **Time Manager** (Управление временем), чтобы добавить поля Start Time (Время начала) и Stop Time (Время остановки) под таблицей списка экспериментов, а также общую карту времени эксперимента для метода. Здесь можно ввести время начала и остановки каждого выбранного эксперимента по очереди, а также спланировать синхронизированный или одновременный запуск экспериментов.

Элементы управления подвкладки LC Parameters (Параметры ЖХ)

Если вы будете проводить ЖХ/МС-анализы непосредственно с экрана разработки метода (через ленту **Start MS** (Запуск МС)> подопция **Start LC MS** (Запуск ЖХ МС)), здесь вы можете выбрать метод ЖХ, указать положение стартового лотка и настройки лунки/виалы.

- **Поле LC method (**Метод ЖХ): Нажмите на соседнюю кнопку Browse (Обзор), чтобы выбрать метод ЖХ для ассоциации с методом МС.
- **Поле Injection Volume (**Объем инъекции): Указывает желаемый объем инъекции. Введите для ввода или

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

редактирования объема.

- **Поле Vial Position** (Положение виалы): Указывает заданную позицию лунки/виалы. Нажмите кнопку Select Vial (Выбрать виалу), чтобы ввести или изменить эту настройку.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

- **Поле Plate Position** (Положение планшета): Указывает на заданное положение планшета. Нажмите кнопку Select Vial (Выбрать виалу), чтобы ввести или изменить эту настройку.
- **Поле Plate Code** (Код планшета): Указывает соответствующий код планшета. Нажмите кнопку Select Vial (Выбрать виалу), чтобы ввести или изменить эту настройку.
- **Кнопка Select Vial (**Выбрать виалу): Нажмите кнопку Select Vial (Выбрать виалу), чтобы открыть диалоговое окно Trays Configuration (Конфигурация лотков), которое предоставляет визуальную помощь для определения информации о позиционировании лотков автосамплера для предстоящих проб.

Разработка метода и оптимизация соединений

Первые процедуры в этом разделе описывают основные общие процессы создания метода MS. Однако существует множество различных параметров и факторов, которые необходимо учитывать при разработке метода, отвечающего вашим конкретным потребностям. В последующих разделах приводятся более подробные примеры различных типов метода.

Создание нового метода MS

1. В ленте меню экрана **Method Development** (Разработка метода) нажмите **New Method** (Новый метод). Шаблон метода по умолчанию заполняет экран значениями по умолчанию.
2. В центральной панели **MS Method Creator** (Создание метода) добавьте и настройте экспериментальные компоненты для этого метода:
- В выпадающем списке **Experiment Type** (Тип эксперимента) выберите нужный тип метода.
- Измените все дополнительные настройки по мере необходимости.
- В таблице **Method Parameter** (Параметр метода) введите желаемые диапазоны масс, соответствующие времена задержки и любые другие параметры по желанию. (Колонки, отображаемые в таблице Method Parameter (Параметр метода), зависят от типа эксперимента).

Примечание: Методы можно экспортировать в формат MS Excel (.xlsx) для редактирования, а также импортировать из сохраненных файлов Excel. При использовании этого подхода убедитесь, что файл Excel точно соответствует вашей таблице масс. Чтобы упростить это, сначала экспортируйте свой метод, откройте/отредактируйте его в Excel, а затем импортируйте его обратно в программу Simplicity. Для экспорта/импорта кликните в любой ячейке Q1 Mass (Масса Q1), Q3 Mass (Масса Q3) или Dwell Time (Время задержки) (мс), а затем кликните правой кнопкой мыши и выберите нужную опцию.

3. На левой панели измените параметры прибора на вкладке **3Q Tune** (Настройка 3Q) так, как это необходимо для данного эксперимента.
4. На левой панели на вкладке **3Q Source** (Источник 3Q), выберите источник, который вы будете использовать в этом эксперименте, и настройте соответствующие параметры по желанию.
5. Чтобы добавить другой эксперимент к этому методу, во вкладке Experiment (Эксперимент) нажмите Add Experiment (Добавить эксперимент). Настройте, как указано выше. Повторяйте, пока не добавите все желаемые эксперименты.

Примечание: Если вы создаете метод, используя оба источника, вы ограничены максимум четырьмя экспериментами в методе. Дополнительные сведения см. в разделе Загрузка существующего метода MS на стр. 51.

6. Если вы будете проводить ЖХ/МС-анализы с этого экрана (через ленту меню **Start MS >** (Запуск МС) **Start LCMS** (Запуск ЖХ МС) (подопция), на правой панели настройте параметры на вкладке LC Parameters (Параметры ЖХ). Эта опция позволяет быстро запустить или протестировать метод, не переключаясь на создание списка серий и не настраивая полный прогон пробы.
7. Нажмите **Save Method As…** (Сохранить метод как...), если вы хотите сохранить изменения; вам будет предложено ввести уникальное имя и сохранить метод (или вы можете перезаписать существующий метод; обычно мы рекомендуем выбрать уникальное имя).
8. Чтобы проверить новые настройки метода, на ленте нажмите **Start MS** (Запуск МС) для начала сбора данных. Во время разработки метода этот шаг получения данных просто позволяет просмотреть результаты с использованием заданных настроек – вы можете запустить симуляцию получения данных и скорректировать параметры метода и эксперимента по своему усмотрению.

Примечание: Обратите внимание, что при нажатии кнопки **Start MS** (Запуск МС) на этой панели система ЖХ не используется. Чтобы проверить настройки на пробе, используйте подпараметр **Start MS >** (Запуск МС) **Start LCMS** (Запуск ЖХ МС).

В **Real-Time DataViewer** (Средство просмотра данных в режиме реального времени) отображаются данные сканирования. Чтобы сохранить данные сбора, нажмите **Save Data** (Сохранить данные).

Создание метода MS с помощью функции базы данных соединений

1. На ленте экрана разработки метода нажмите **New Method** (Новый метод). Шаблон метода по умолчанию заполняет экран значениями по умолчанию.
2. На ленте выберите **Compound Database** (База данных соединений). Появится диалоговое окно Compound Database (База данных соединений).

Примечание: Когда вы открываете диалоговое окно базы данных соединений, поле Experiment Type (Тип эксперимента) на главной панели экспериментов автоматически устанавливается на MRM.

3. В выпающем списке **Select Database** (Выбрать базу данных) выберите базу данных, которую вы хотите просмотреть. Когда вы создаете новую базу данных или редактируете и сохраняете любую существующую базу

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

данных с новым именем, эти базы данных появляются в этом списке. При добавлении
новых соединений в базу данных, обязательные поля выделены красным цветом. После завершения ввода необходимой информации нажмите кнопку **Save As** (Сохранить как), чтобы добавить ее в базу данных.

4. Слева от загруженного каталога нажмите кнопку, чтобы установить флажки рядом с соединениями, которые вы хотите добавить в текущий эксперимент.

Вы можете редактировать параметры для выбранных соединений в окне каталога, или сначала перенести соединения, а затем редактировать их параметры. Если вы регулярно проводите одни и те же виды анализа, вы можете предпочесть редактировать параметры в базе данных, а затем сохранить эту базу данных под уникальным именем для дальнейшего использования. Когда вы выбрали и отредактировали соединения по своему усмотрению, нажмите на синие двойные стрелки (>>); выбранные соединения теперь заполняют небольшую панель Fragments List (Список фрагментов) в правой части диалогового окна, загружаясь по фрагментам.

5. Когда вы будете удовлетворены своими соединениями и настройками, нажмите **Apply** (Применить). Составы становятся экспериментами на вкладке **MS Method Creator** (Создание метода MS). В поле **Anticipated Cycle Time (сек)** (Ожидаемое время цикла) появится значение, основанное на выбранных параметрах; измените это значение при необходимости. Измените параметры таблицы для любого из загруженных фрагментов по своему усмотрению, позаботившись о том, чтобы ввести реалистичные значения Expected RT (Ожидаемое сканирование продукта), соответствующие растворам, используемым в вашей лаборатории.

Примечание: хотя вы можете добавить до 1500 переходов MRM в один метод, на эффективность обработки влияет количество созданных экспериментов, количество масс-зависимых параметров, связанных с каждым из них, и указанное время удерживания. Экспериментируйте, чтобы найти оптимальный баланс для ваших аналитических потребностей.

6. Когда вы будете удовлетворены своими соединениями и настройками, нажмите Apply (Применить). Соединения становятся экспериментами во вкладке MS Method Creator (Создание метода MS).
7. Продолжите настройку метода, как описано в разделе Создание нового метода MS на стр. 41.

Загрузка существующего метода MS

1. На ленте экрана **Method Development** (Разработка метода) нажмите **Load Method** (Загрузить метод). Появится диалоговое окно **Open MS Method browse** (Открыть обзор метода MS).
2. Найдите и выберите нужный метод MC, а затем нажмите **OK**. Загруженный метод инициализируется (без панели Real-Time Display (Отображение в реальном времени)); отображаются все связанные параметры метода, а указанные настройки загружаются в таблицу Mass Parameters (Параметры масс).
3. Измените метод по своему усмотрению. Чтобы сохранить изменения, на выберите **Save Method As…** (Сохранить метод как...). Вам будет предложено ввести уникальное имя, а затем сохранить метод (или вы можете просто перезаписать существующий метод).
4. На ленте нажмите **Start MS** (Запуск MS), чтобы начать сбор данных.

Как загрузить метод MS из существующих

Эта функция может быть использована для просмотра/использования метода и параметров, которые использовались для получения данных.

1. На ленте экрана **Method Development** (Разработка метода) нажмите **Load Method from Data** (Загрузить метод из данных), чтобы загрузить существующий набор данных вместе с соответствующим методом. Появится диалоговое окно просмотра папок.
2. Найдите и выберите нужный набор данных, а затем нажмите **OK**.

Методы с двойным источником

Вы можете установить и запустить один или два источника зондов - источник ESI, источник APCI или один из них (в этой версии программного обеспечения вы не можете запустить два зонда одного типа). Методы с двойным источником позволяют максимально использовать
возможности анализа и настройки системы, одновременно используя лучшие возможности обработки соединений двух различных типов источников.

Вы можете задать время последовательного выполнения экспериментов в вашем методе, используя разделяющий клапан в аппаратной установке для перенаправления потока пробы из одного источника в другой. Или вы можете проводить эксперименты одновременно, используя Т-образный сплиттер, чтобы направить поток к обоим источникам на протяжении всего времени. (Обратите внимание, что данные по «перекрывающимся» экспериментам поступают не одновременно, а поочередно, но время экономится за счет постоянного потока).

Понимание сканирования Q1 Scans (Сканирование Q1), Product Scans (Продукт сканирования) и MRM Scans (Сканирование MRM)

Вы можете использовать общий метод сканирования Q1 и продукта для нахождения масс ионов-предшественников и его продукта.

Проведение сканирования Q1 Scan (Сканирование Q1) для поиска и оптимизации интересующего соединения

Примечание: В следующем примере используется источник ESI в режиме положительного Linked mode (Режим сопряжения), но эта процедура может быть выполнена в отрицательном или положительном режиме с источником ESI

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

или APCI.

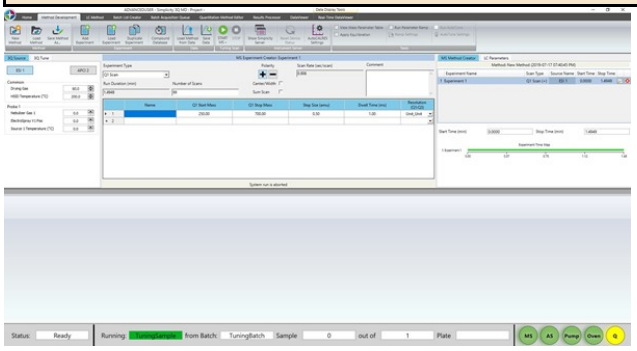
1. Проверьте псевдомолекулярные массы (то есть [M+H]+ для положительного режима или [M-H]- для отрицательного режима), выполнив Q1 scan (Сканирование Q1).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

2. На **вкладке Method Development** (Разработка метода) нажмите кнопку **New Method** (Новый метод) и выберите тип источника (ESI или APCI) и сторону (сторона 1: зонд с левой стороны источника ионов; сторона 2: зонд с правой стороны источника ионов).

3. Настройте беспередойное сканирование Q1: На центральной панели в выпадающем списке **Experiment Type** (Тип эксперимента) выберите Q1 Scan. Затем, в зависимости от анализируемого вещества, установите маркер **Polarity** (Полярность) для положительного **(+)** или отрицательного **(-)** режима соответственно (в приведенном примере мы выбрали положительный).

Типовые значения для полного сканирования MS		
Диапазон сканирования массы (приблизительно)	Размер шага (а. е. м.)	Время задержки (мс)
на 20-50 выше молекулярной массы Q1	0.5	1



4. Запустите шприцевой насос с расходом 30 мкл/мин и убедитесь, что шланг направлен в масс-спектрометр (более подробную информацию см. в разделе Запуск и остановка шприцевого насоса на стр. 142).

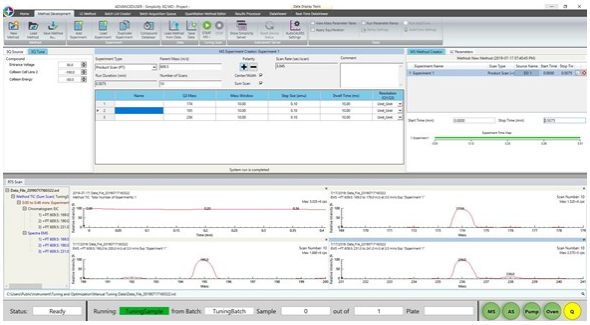
5. На вкладке **3Q Source** (Источник 3Q) введите универсальные параметры источника и входное напряжение, как показано ниже. Ниже указаны рекомендуемые начальные значения для положения датчика при низком расходе (более подробные сведения указаны в Приложении B).

Приложение: В таблицах ниже перечислены стандартные методы для режима положительных ионов; при переключении в режим отрицательных ионов измените знак значений для параметров электрораспыления (ESI), коронного разряда (APCI) и Collision Cell Lens 2 (Линза ячейки столкновений 2).

Общий метод Q1 для оптимизации соединений путем инфузии (15 мкл/мин для ESI и 0,4 мл/мин для APCI)			
Параметры источника, зависящие от скорости потока	**Значения**	**Параметры, зависящие от соединения**	**Значения Q1 в режиме положительных ионов**
Горизонтальное расстояние зонда (полных оборотов черной ручки в сторону от отверстия)	3	Входное напряжение	30
Вертикальное расстояние зонда (мм)	6		
Позиция иглы ESI (мм) (выступ иглы)	1		
Газ-осушитель	60		
Температура HSID (°C)	250		
Подаваемый в распылитель газ	100		
Температура источника ESI (°C)	0		
Напряжение электроспрея (только для зонда ESI)	4500		

6. Приступите к сканированию, нажав кнопку **Start MS** (Запуск MC). Аналит (соединение, представляющее интерес) будет идентифицирован по спектрам полного сканирования. В следующем примере показан спектр полного сканирования Q1 для резерпина:

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



7. При обнаружении интересующего пика увеличьте его, сузив диапазон масс на основном пике и уменьшив размер шага и время задержки.
- Интересующая масса (например, 609,3 а. е. м. для резерпина)
- Окно массы: 10 а. е. м. (604,3-614,3 а. е. м.)
- Размер шага: 0,1 а. е. м.
- Время задержки: 10 мс

8. Оптимизируйте интенсивность сигнала родительской массы (сканирование Q1) в диапазоне от 50 000 импульсов в секунду (cps) до 500 000 cps (импульсов в секунду), регулируя параметры масс-спектрометра, положение источника или концентрацию аналита по мере необходимости.

Это значение оптимально для получения адекватной чувствительности тандемной масс-спектрометрии во время оптимизации (типовые концентрации составляют от 10 пг/мкл до 100 пг/мкл). Если необходимо снизить чувствительность, уменьшите концентрацию соединения. Также следует оптимизировать положение зонда и условия источника. См. раздел Ручная оптимизация источников на странице 56.

9. Выполните линейное изменение параметра входного напряжения (EV) с помощью соответствующей функции **Run Parameter Ramp** (Запуск линейного изменения параметров) в программном обеспечении. Начните со значений по умолчанию в опции Ramp (Линейное изменение) для EV (Входное напряжение) и запустите сканирование, когда будете готовы.

10. После завершения линейного изменения примите оптимизированное значение EV (Входное напряжение), щелкнув правой кнопкой мыши по области данных, чтобы открыть **Context** (Контекстное меню), выберите **Parameter Ramp/Apply to All** (Линейное изменение параметров/Применить ко всем) или вручную введите оптимизированные значения в таблицу параметров **массы**. Оптимизированные значения для входного напряжения будут сохранены.

11. Отмените выбор функции линейного изменения и соберите 10 сканирований; эти сканирования могут потребоваться вам позже.

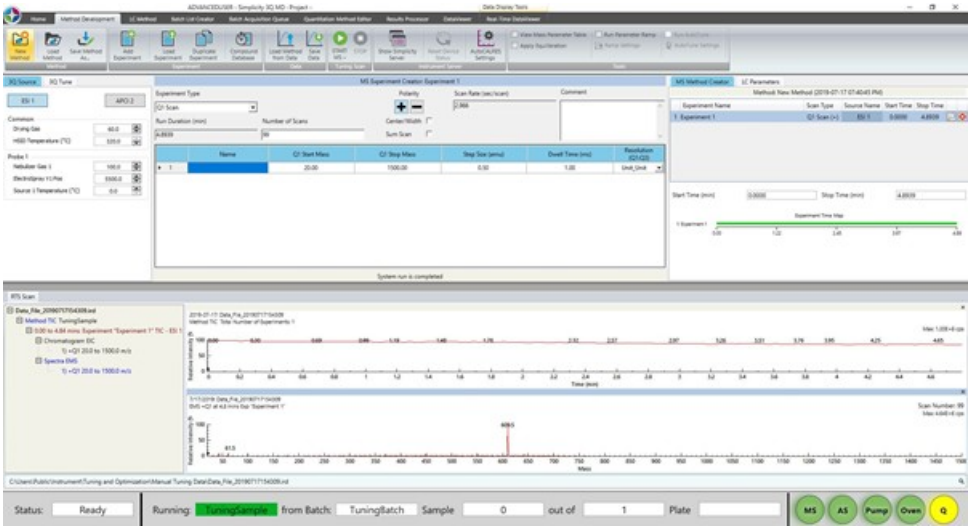
Определение фрагментов представляющего интерес соединения

Примечание: По возможности выбирайте фрагменты с большей массой, которые, как правило, дают меньше помех, чем легкие фрагменты.

1. На центральной панели в раскрывающемся списке **Experiment Type** (Тип эксперимента) выберите Product Scan (Сканирование продукта). Затем, в зависимости от анализируемого вещества, установите маркер **Polarity** (Полярность) для положительного **(+)** или отрицательного **(-)** режима (в данном примере мы выбрали положительный). В таблице центральной панели установите значения Start (Запуск) и Stop mass (Стоп-масса), Step size (Размер шага) и Dwell Time (Время задержки) следующим образом для Q3:

Типовые значения, используемые для сканирования продукта		
Диапазон сканирования массы (приблизительно)	Размер шага (а. е. м.)	Время задержки (мс)
На 20-50 выше, чем молекулярная родительская масса	0,1	1

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



2. Начните сканирование. Когда вы увидите сигнал родительской молекулы, остановите анализ.

3. Линейно измените энергию соударений с помощью функции **Run Parameter Ramp** (Запуск линейного изменения параметров) и выберите параметр **Sum Scan** (Суммировать сканирования). Начните сканирование. Начните сканирование. После завершения линейного изменения выберите два максимальных фрагмента и увеличьте их масштаб (сузив диапазон массы для идентифицированных фрагментов), убедитесь, что после этого шага снят флажок Run Parameter Ramp (Выполнить линейное изменение параметров). Если в окончательном методе должно быть два фрагмента (перехода), лучше оптимизировать как минимум три массы. В таком случае можно будет опустить переход в зависимости от любой помехи матрицы.

4. После идентификации фрагментов продукта выполните сканирование выбранных ионов с шириной окна 10 а. е. м. (нажатием в центре / посередине), а затем определите и проверьте точные массы для каждого фрагмента.

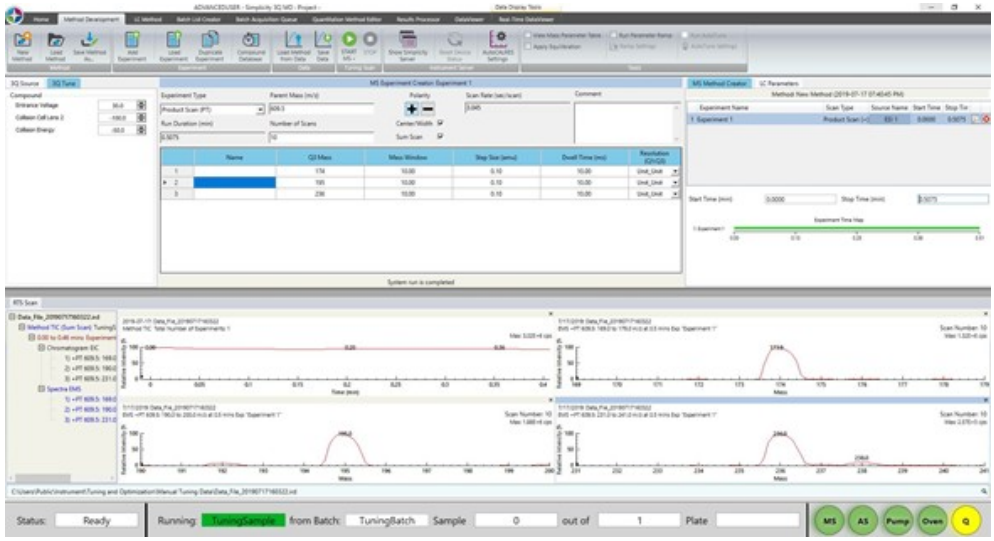
- Размер шага: 0,1 а. е. м.
- Ширина: 10 а. е. м.
- Время задержки: 10 мс

Приложение: В следующих таблицах приведены общие значения метода для режима положительных ионов; при переключении в режим отрицательных ионов измените знак значений для Electrospray Voltage (Напряжение электроспрея), Entrance Voltage (Входное напряжение) и Collision Cell Lens 2 (Линза ячейки столкновений 2).

Параметры источника, зависящие от скорости потока	**Настройки режима положительных ионов**
Газ-осушитель	60
Температура HSID (°C)	250
Подаваемый в распылитель газ	85
Температура источника (°C)	0
Напряжение электроспрея (только для зонда ESI)	4500

Параметры, зависящие от соединения	**Настройки режима положительных ионов**
Входное напряжение	35
Линза ячейки столкновений 2	-60
Энергия столкновения	-20

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



Оптимизация параметров, зависимых от соединений, для MRM-переходов

Примечание: Фрагменты, оптимизированные при сканировании продукта, станут массами Q3 в методе MRM. В этой процедуре вы оптимизируете параметры прибора для режима сканирования MRM.

1. На центральной панели в раскрывающемся списке **Experiment Type** (Тип эксперимента) выберите MRM. Затем настройте несколько MRM-пар для выбранных ионов-предшественников. MRM-пара состоит из масс иона-предшественника (масса Q1) и дочернего иона (масса Q3).

2. На ленте установите флажок **Run Parameter Ramp** (Выполнить линейное изменение параметров); когда вы установите флажок, откроется диалоговое окно **Ramp Settings**
(Настройки линейного изменения).

Функция Run Parameter Ramp (Выполнить линейное изменение параметров) позволяет по отдельности оптимизировать каждую MRM-пару. Максимальной интенсивности для каждого перехода можно добиться путем оптимизации зависимых от соединения параметров:

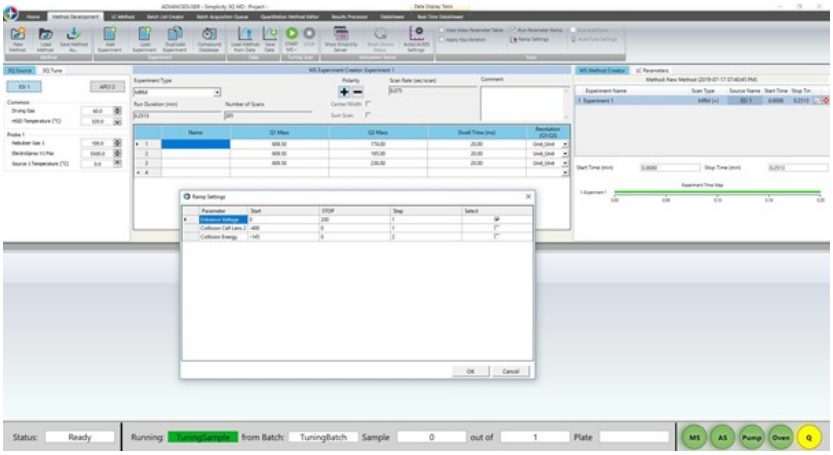
- Энергия столкновения
- Входное напряжение
- Линза ячейки столкновений 2

3. Для каждого параметра задайте значения **Start** (Пуск), **Stop** (Стоп) и **Step Size** (Размер шага) по мере необходимости.

4. Выберите параметр для линейного изменения в сканировании, установив соответствующий флажок в столбце **Select column** (Выбрать колонку). (Одновременно можно изменять только один параметр.) Затем нажмите **OK**.

5. На ленте нажмите **Start MS Scan** (Запуск сканирования МС).

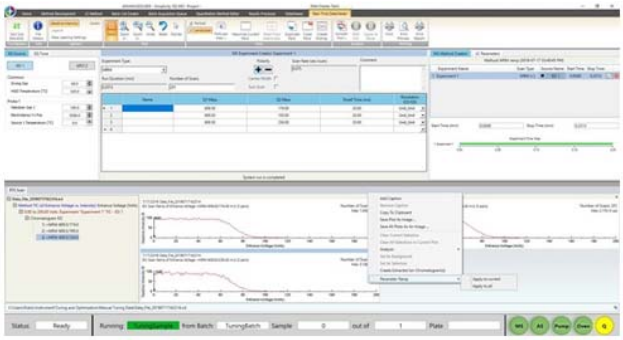
Примечание: Одновременно можно изменять только один параметр. Повторите процедуру для линейного изменения других параметров, зависящих от соединения.



6. Когда сканирование с линейным изменением будет завершено, в каждом временном интервале пика отобразится значение, при котором интенсивность пика будет максимальной.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Чтобы применить оптимизацию параметра линейного изменения сканирования к каждой паре ионов MRM, кликните правой кнопкой мыши в области данных и выберите **Parameter Ramp > Apply to All** (Линейное изменение параметров > применить ко всем). (Вы также можете вручную ввести оптимизированные значения в таблицу Mass Parameter (Параметр масс)).



Примечание: Вы также можете автоматически оптимизировать один или несколько зависимых от соединения параметров с помощью функции AutoTune (Автонастройка).

7. Выполните ту же процедуру для повышения другого параметра, зависящего от соединения.

8. Линейно измените температуру HSID вручную и найдите ее оптимальную величину. Начинайте с 150°C и постепенно повышайте температуру с шагом 20-50°C).

Примечание: Если элюант имеет высокое содержание воды, начните с более высокой температуры HSID. Проверьте температуру HSID, нажав на световой индикатор MS.

Оптимальной будет та температура, в которой чувствительность MRM является наивысшей для большинства аналитов в методе. Для поддержания системы в чистом состоянии температура должна быть не менее 150°C. Температура HSID — это общий параметр, применяемый ко всем MRM-переходам в эксперименте и ко всем экспериментам в Методе. Указанное действие должно выполняться при оптимизации соединения с низкой интенсивностью потока (менее 50 мкл/мин) и с температурой источника, установленной на 0°C.

9. Когда все будет готово, перейдите на вкладку **MS Method** (Метод МС) и на ленте выберите **Save Method As...** (Сохранить метод как...), чтобы сохранить метод MRM. Перед сохранением метода не забудьте дать имя каждому переходу.

Ручная оптимизация источников

В процессе разработки метода MS необходимо вручную оптимизировать положение источника по трем осям, используя черную ручку регулировки зонда (ось Z), колпачок зонда (ось X) и сам зонд (ось Y), а также ориентируясь на интересующие вас соединения:

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

1. Колпачок зонда
2. Зонд
3. Ручка регулировки зонда



Примечание: Если вы используете прибор только со шприцевым насосом со скоростью потока 10-30 мкл/мин, такая скорость считается низкой; если вы используете прибор с насосом для ЖХ и скоростью потока более 300 мл/мин, она считается высокой.

Важно: Прежде чем вручную регулировать источник по любой оси, убедитесь, что через зонд проходит стабильный поток раствора.

Только для зондов APCI следует также отрегулировать положение коронной иглы, чтобы оптимизировать ее положение на пути потока.

Оптимизация положения источника

Примечание: Если ваши методы включают несколько MRM-переходов для одного и того же соединения, оптимизируйте все исходные позиции для самых низких переходов.

1. **Отрегулируйте ось Z (глубина) с помощью черной ручки регулировки зонда:**

• Убедитесь, что черная ручка регулировки полностью повернута по направлению к отверстию против часовой стрелки до тех пор, пока вы не перестанете ее вращать, а индикаторная метка не окажется в верхнем вертикальном положении (12 часов). Вы будете отслеживать свои регулировки, подсчитывая количество поворотов ручки, сделанных из этого исходного положения:



Поверните по часовой стрелке для перемещения от отверстия.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Поверните против часовой стрелки для перемещения к отверстию

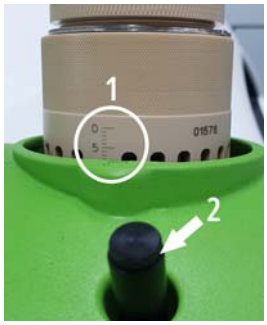


Зонд должен находиться на одном уровне с оболочкой

- Определите оптимальное положение, контролируя сигнал вашего соединения в программном обеспечении и одновременно медленно регулируя ручку до достижения наилучшего уровня сигнала и стабильности.
- Запишите положение ручки регулировки зонда для дальнейшего использования.

2. Оптимизируйте ось X путем регулировки зонда:

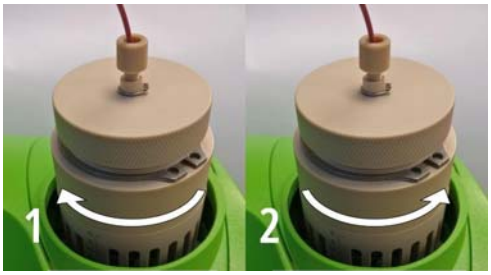
- Измерьте положение зонда, используя метки 0-15 мм, нанесенные на боковой стороне каждого зонда (1). При снятии показаний следите за тем, чтобы ваш глаз находился на одном уровне с разметкой, и чтобы вы записывали показание именно в месте соприкосновения разметки с оболочкой:



1. Маркировка зонда
2. Игла короны

- Определите оптимальное положение зонда, контролируя сигнал вашего соединения в программе, медленно поворачивая зонд до достижения наилучшего уровня сигнала и стабильности. Поверните зонд по часовой стрелке, чтобы переместить его вертикально к колпачку шторки (уменьшая номер метки зонда), и против часовой стрелки, чтобы переместить его вертикально от колпачка шторки (увеличивая номер метки зонда). Как правило, чем выше скорость потока, тем дальше зонд должен находиться от отверстия:

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



1. По направлению к колпачку шторки (нижняя метка зонда)
2. Вдали от колпачка шторки (более высокая отметка зонда)

• Запишите положение зонда для дальнейшего использования.

3. Оптимизируйте ось Y (выступание иглы пробы), отрегулировав колпачок зонда:

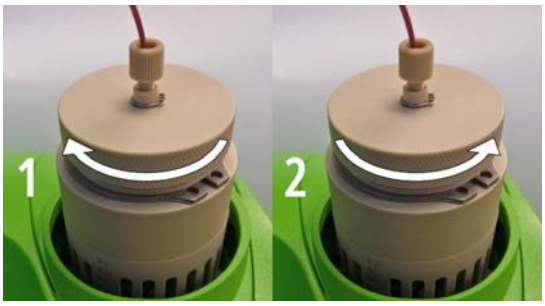
• Сначала убедитесь, что игла находится на одном уровне со стержнем зонда. Для этого проверьте переднее окно и поворачивайте колпачок зонда до тех пор, пока кончик иглы не окажется вровень с концом стержня зонда (положение 0 мм). Вы можете отслеживать свои регулировки, подсчитывая количество оборотов колпачка зонда от этого



исходного положения; измеренное выступание иглы составляет примерно один оборот на мм:

• Определите оптимальное положение колпачка зонда, контролируя сигнал вашего соединения в программе и медленно поворачивая колпачок зонда, пока не найдете глубину выступания иглы, которая позволит вам достичь наилучшего уровня сигнала и стабильности. Поверните зонд по часовой стрелке, чтобы переместить иглу вертикально вниз к колпачку шторки, и против часовой стрелки, чтобы переместить иглу вертикально вверх от гибкой крышки:

1.Увеличение выступа иглы



2.Уменьшение выступа иглы

Положение, обеспечивающее наибольшую стабильную высоту сигнала, является оптимальным.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

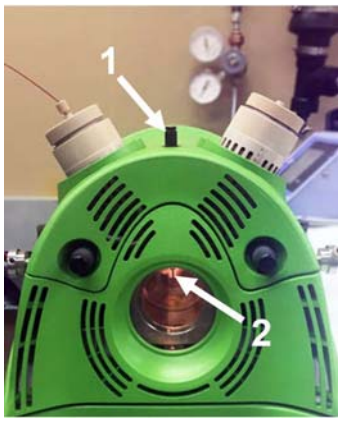
Примечание: Если вы работаете с большим количеством переходов MRM, оптимизируйте положение по пяти наименьшим MRM-переходам. Если вы наблюдаете голубое свечение или дугу на кончике иглы, то следует уменьшить выступ иглы.

- Убедитесь, что положения оси Z (черная ручка) и оси X (высота зонда) все еще правильные.
- Запишите положение крышки зонда для дальнейшего использования.

Оптимизация положения иглы короны (только зонды APCI)

Примечание: Прежде чем регулировать иглу короны вручную, убедитесь в стабильности потока раствора, пропускаемого через зонд.

1. Найдите черную регулировочную ручку иглы короны в верхней части корпуса источника между двумя зондами источника:



1. Регулировочная ручка иглы короны
2. Игла короны, видимая через смотровое отверстие

2. Станьте перед прибором таким образом, чтобы смотровое отверстие источника было на уровне ваших глаз. Визуально определите местоположение иглы короны.

3. Определите оптимальное положение, отслеживая сигнал от вашего соединения в программном обеспечении, при этом медленно поворачивая ручку. Необходимо получить наилучшие уровни сигнала и его стабильность.

Запишите положение иглы короны для сверки в будущем; для этого зафиксируйте визуальное положение или угол либо сделайте быстрый фотоснимок и добавьте его в свои лабораторные заметки.

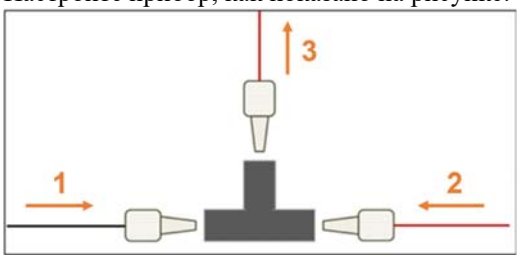
Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Приборы, настроенные для оптимизации MRM с высокими скоростями потока

Для оптимизации параметров источника при скоростях потока, используемых в анализе УВЭЖХ, используйте ввод с делением потока. Обычно для потока ЖХ применяют исходный состав растворителей или растворитель с наибольшим водным составом.

Настройка ввода с делением потока для представляющего интерес соединения

Настройте прибор, как показано на рисунке:



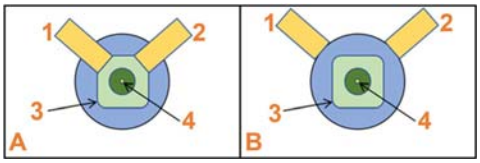
1. 500 мкл/мин из ЖХ
2. 10 мкл/мин из шприца
3. Объединенный поток в MS

Примечание: Во избежание загрязнения керамики зонда и потенциального повреждения системы, перед подключением и запуском ЖХ убедитесь, что газы и нагрев включены и подаются в систему. Убедитесь, что система ЖХ подсоединена путем замыкания контактов.

Внимание: Все трубки к зондам масс-спектрометра QSight должны быть подключены через заземляющий патрубок. Несоблюдение этого требования может привести к поражению электрическим током.

1. Настройте шприц и ЖХ для работы на скорости 10 и 500 мкл/мин соответственно (или выберите другие скорости потока с тем условием, что скорость потока через ЖХ должна быть ≤ 600 мкл/мин для деления потока, чтобы избежать разрыва шприца).

Управляйте потоком ЖХ, непосредственно контролируя работу насоса для УВЭЖХ Перед переходом к следующему этапу дождитесь, пока сигнал стабилизируется. Отрегулируйте положение зонда для высокого расхода:



A. Положение низкой скорости потока
B. Положение высокой скорости потока
1. Зонд 1
2. Зонд 2
3. Гибкая крышка
4. Отверстие

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

2. Оптимизируйте положение зонда и условия источника. Начальные значения для оптимизации высокой скорости потока см. в следующих таблицах:

Начальные значения для оптимизации					
Параметры источника, зависящие от скорости потока	5-50 мкл/мин	50-200 мкл/мин	200-500 мкл/мин	500-2000 мкл/мин	Примечания
Вертикальное расстояние зонда (мм)	6	7-9	10-11	10-11	Более высокий расход означает большую длину выдвинутой части
Позиция иглы ESI (мм) (выступ иглы)	1,0	1,0	1,0	1,0	Относительно вала зонда (металлического наконечника), меньший выступ идеален для потоков ЖХ с более высокой интенсивностью
Горизонтальное расстояние зонда (полных оборотов черной ручки)	3	3	5	5	Относительно гибкой крышки
Газ-осушитель	60	130	180	250	См. #unique_109/unique_109_Connect_42_table_rjg_4h5_qrb
Подаваемый в распылитель газ	100	250	300	450	См. #unique_109/unique_109_Connect_42_table_rjg_4h5_qrb; также см. Оптимизация подаваемого в распылитель газа.
Температура источника (°C)	0	250	350	500	См. #unique_109/unique_109_Connect_42_table_rjg_4h5_qrb
Температура HSID (°C)	250	250	250	250	См. #unique_109/unique_109_Connect_42_table_rjg_4h5_qrb
Напряжение электроспрея (В)	±4500	±4500	±4500	±4500	Только для режима ESI; положительное значение для положительного режима, отрицательное значение для отрицательного режима
Коронный разряд (мкА)	Н/Д	Н/Д	±3	±3	Только для режима APCI; положительное значение для положительного режима, отрицательное значение для отрицательного режима

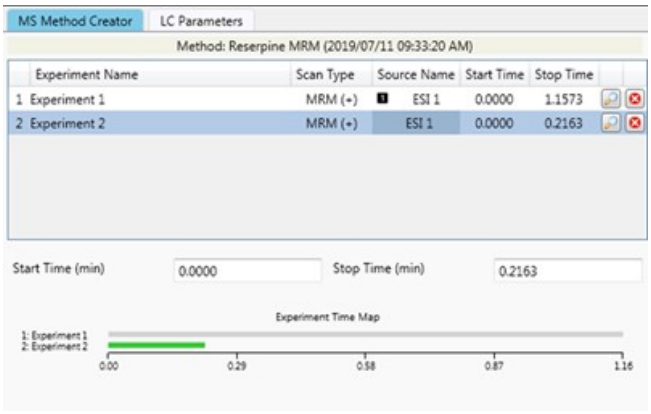
Диапазон оптимизации при различных уровнях расхода				
Расход растворителя для ЖХ, мкл/мин	Газ-осушитель, поток	Подаваемый в распылитель раз, поток	Температура источника (°C)	Температура HSID (°C)
от 5 до 50	50-100	от 50 до 150	0	от 150 до 300
от 50 до 200	90-150	от 75 до 250	от 50 до 400	от 150 до 300
от 200 до 500	120-200	от 150 до 450	от 150 до 500	от 150 до 300
от 500 до 2000	180-300	от 300 до 500	от 300 до 500	от 150 до 300

3. Оптимизируйте положение зонда перед оптимизацией параметров источника по отдельности (подаваемый в распылитель газ, температура источника и напряжение ESI), чтобы добиться максимальной чувствительности и стабильного сигнала.

Примечание: Потоки газа и положения источника взаимозависимы (подробные сведения см. ниже).

4. После оптимизации параметров добавьте дополнительные эксперименты к методу, выбрав **Add Experiment** (Добавить эксперимент) на ленте, и введите все параметры. Для загрузки существующего эксперимента нажмите **Load Experiment** (Загрузить эксперимент).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



5. Для изменения эксперимента нажмите на нужную строку и затем нажмите значок лупы, чтобы изменить следующие параметры:

- Полярность (переключение между положительной или отрицательной)
- Параметры настройки 3Q: Энергия столкновения, линзы ячейки столкновений 2, напряжение ESI и т.д.

В случае MRM с управлением по времени нажмите на эксперимент на панели экспериментов, а затем измените таблицу MRM таким образом, чтобы выполнялось только сканирование определенных переходов в указанный период времени. MRM с управлением по времени обеспечивает сканирование переходов MRM только во время их вымывания из ЖХ (в пределах 30 секунд).

6. В ленте Method Development (Разработка метода) нажмите **Save Method As…** (Сохранить метод как…), чтобы сохранить все эксперименты и параметры.

Примечание: При применении метода с несколькими экспериментами параметры исходного газа являются общими для всех экспериментов. При этом для отдельных экспериментов могут указываться собственные параметры напряжения/тока (электрораспылительная ионизация или коронный разряд).

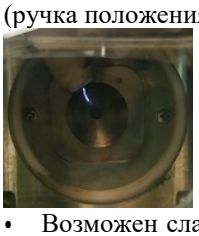
Факторы и условия при оптимизации ввода с делением потока

При проведении эксперимента по оптимизации ввода с делением потока многие параметры, которые вы настраиваете, являются взаимозависимыми, настройка одного параметра может повлиять на другие. Возможно, вам придется повторить описанные выше шаги оптимизации, чтобы найти оптимальную настройку для каждого параметра.

Оптимизация напряжения ESI и подаваемого в распылитель газа

Оба параметра зависят от положений зонда (направлений X, Y и Z), поэтому перед выполнением оптимизации этих параметров выполните оптимизацию зонда (см. раздел Ручная оптимизация источников на стр. 56).

- Оптимизация напряжения ESI и подаваемого в распылитель газа выполняется вручную.
- Увеличивайте/уменьшайте значение параметра с малыми приращениями, пока не достигнете максимальной чувствительности и стабильности сигнала.
- Мы не рекомендуем использовать напряжение ESI более 5000 В. Это может привести к возникновению коронного разряда (см. ниже), что может стать причиной сокращения срока службы иглы, частой ее замены, а также вызвать нестабильность сигнала.
- Когда игла расположена слишком близко к гибкой крышке и значение напряжения ESI слишком высокое, может возникнуть коронный разряд, синяя дуга, напоминающая молнию (см. ниже). Такой разряд, скорее всего, негативно повлияет на стабильность и чувствительность сигнала. Для решения этой проблемы увеличьте выступ иглы (ручка положения зонда Y) и уменьшите напряжение ESI.



- Возможен слабый коронный разряд, представляющий собой мягкое голубое свечение (см. ниже), который, скорее всего, не окажет негативного влияния на чувствительность и стабильность сигнала; однако мы рекомендуем отрегулировать выступ иглы (ручка положения зонда Y) и напряжение ESI для обеспечения оптимальной работы системы.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



Оптимизация газа-осушителя

Газ-осушитель — это параметр, не зависящий от соединения/приложения (например, для максимальной чувствительности), однако он защищает прибор от загрязнения (от загрязнений из проб, системных газов и атмосферного воздуха).

- Значения газа-осушителя напрямую связаны с потоком ЖХ, применяемым в методе. Соответственно, значения должны быть оптимизированы до уровня, при котором достигается снижение максимального сигнала на 10—15%.
- Значения газа-осушителя могут быть статическими, применяемыми повсеместно ко всем переходам в методе MS, или могут применяться динамически. Пожалуйста, обратитесь к разделу Динамический газ-осушитель на стр. 57, чтобы добавить эту функцию в ваш метод MS, а также обратитесь к разделу Оптимизация диапазона при различных скоростях потока на стр. 54 для типичных начальных значений, основанных на потоке ЖХ.

Примечание: Если в качестве метода ЖХ применяется метод перепада потока, оптимизация газа-осушителя должна выполняться в соответствии с максимальным расходом в методе.

Динамический газ-осушитель

Динамический газ-осушитель может помочь сохранить иглу зонда чистой в перерывах между введениями зонда, сводя к минимуму возможность засорения иглы зонда. Данная функция управляется на вкладке «Разработка метода» и доступна для большинства типов экспериментов (динамический газ-осушитель в настоящее время недоступен для методов настройки).

Значения могут быть оптимизированы для каждого Метода и могут быть установлены либо как статическое значение (настройки по умолчанию), либо могут быть реализованы динамически, с управлением по времени. Мы считаем, что лучше всего использовать минимальные скорости потока газа-осушителя во время аналитической части Метода сбора данных для повышения чувствительности, и максимальные скорости потока газа-осушителя ближе к концу Метода сбора данных во время промывки с высоким потоком, чтобы предотвратить прилипание материала пробы к игле зонда. Настройки газа-осушителя, которые управляют статическими значениями газа-осушителя, находятся на вкладке 3Q MD Source (Источник 3Q MD) в MS Experiment Creator (Создатель эксперимента MS) и будут перезаписаны после активации динамического газа-осушителя. Настройки динамического газа-осушителя экспортируются в Сведения о файле для каждой пробы.

Подача динамического газа-осушителя

Динамический газ-осушитель может быть добавлен к любому методу ЖХ/MS/MS во время создания метода и не совместим с методами MS, созданными в более ранних версиях программного обеспечения Simplicity 3Q MD. Чтобы включить функцию Динамический газ-осушитель, выполните следующие действия:

1. Откройте программное обеспечение Simplicity 3Q MD и перейдите во вкладку **Method Development** (Разработка

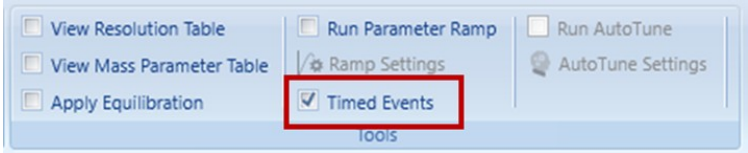


метода), создайте новый **MS Method** (Метод МС), нажав на **New Method** (Новый метод) в ленте меню:

2. Добавьте все Эксперименты и выполните настройку всех параметров «уровень-масса» и «уровень-эксперимент», прежде чем переходить к следующему шагу. Это сэкономит ваше время, так как изменение количества экспериментов, количества сканирований или других параметров может повлиять на время проведения установки параметров динамического газа-осушителя.

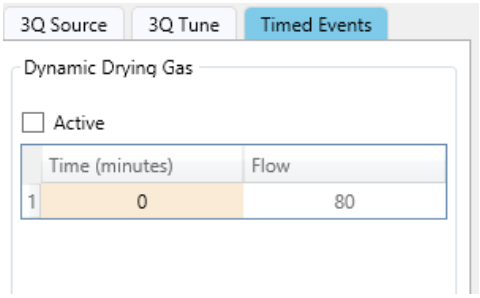
Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

3. В разделе **Tools** (Инструменты) ленты меню установите флажок в поле **Timed Events** (События по времени):

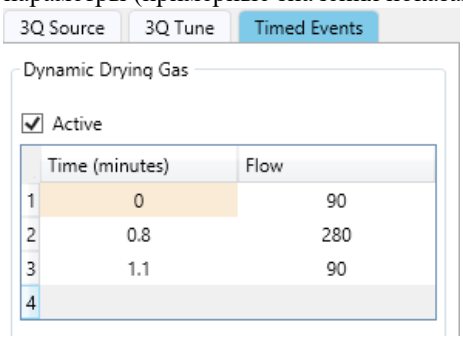


В левой части экрана **MS Experiments Creator** (Создание экспериментов МС) появится новая вкладка **Timed Events** (События по времени). Общие значения газа-осушителя на вкладке **3Q Source** (Источник 3Q) будут выделены серым цветом и отменены значениями динамического газа-осушителя (введены на следующем этапе).

4. Установите флажок Active (Активен), чтобы активировать функцию динамического газа-осушителя, и введите



параметры (примерные значения показаны ниже):



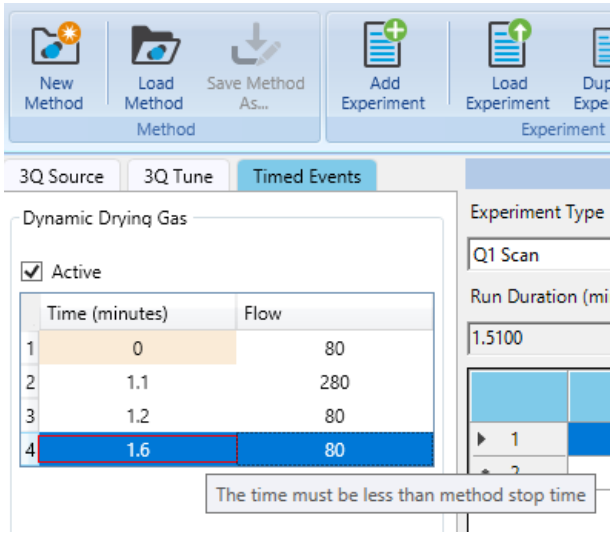
Значения потока динамического газа-осушителя должны находиться в диапазоне от 50 до 300, а время вводится с шагом 0,1 минуты (6 секунд). Значения времени должны вводиться в хронологическом порядке, а конечное значение должно быть меньше времени Длительности выполнения. Таблица для Динамического газа-осушителя допускает максимум 10 записей. Рекомендуемые значения газа-осушителя см. в разделе MRM Оптимизация - конфигурация прибора с высоким потоком на стр 61. Чтобы удалить строку, выделите строку, которую вы хотите удалить, нажмите **Delete** (Удалить).

5. Подтвердите все параметры и нажмите **Save Method As** (Сохранить метод как), чтобы сохранить эти настройки.



Примечание: Метод не может быть сохранен, если конечное время больше, чем Длительность выполнения. Если значения времени для динамического газа-осушителя больше времени Длительности выполнения, кнопки **Save Method As** (Сохранить метод как) и **Start** (Запустить) в ленте меню будут выделены серым цветом, ошибочные значения выделены красной рамкой, и появится всплывающая подсказка с сообщением об ошибке.

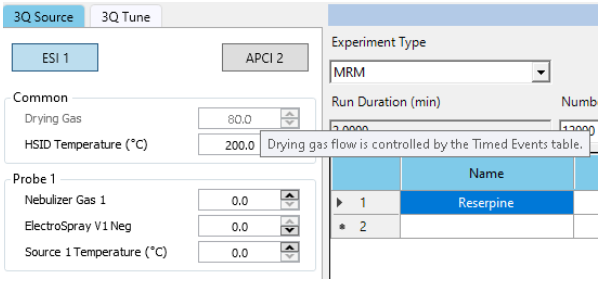
Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



Примечание: Настройки динамического газа-осушителя не будут сохранены, если перед сохранением Метода снять флажок **Active** (Активен) на вкладке Timed Events (События по времени).

Примечание: Возможно, настройки Динамического газа-осушителя могут быть активированы и скрыты, если снят флажок **Timed Events** (События по времени) в ленте меню. Если вкладка Timed Events (События по времени) не видна и общие значения газа-осушителя выделены серым цветом, то настройки динамического газа-осушителя активны. При наведении курсора мыши на общие настройки газа-осушителя появится всплывающая подсказка, предупреждающая о том, что функция Динамического газа-осушителя включена. Установите флажок **Timed Events** (События по времени) в ленте меню, чтобы восстановить вкладку Timed Events (События по времени) и таблицу для Динамического газа-осушителя.

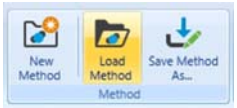
6. Создайте Списки серий и начните сбор данных с вкладки Очередь сбора данных серии, когда будет готово.



Редактирование значений Динамического газа-осушителя в существующем методе

Только методы MC, созданные в Simplicity 3Q MD версии 2.0 HF1 и более новой, совместимы с Динамическим газом-осушителем. Методы, созданные в предыдущих версиях ПО Simplicity необходимо изщменить и сохранить для использования Динамического газа-осушителя. Для добавления Динамического газа-осушителя к существующему методу MS, выполните следующие действия:

1. Откройте программное обеспечение Simplicity 3Q MD и перейдите на вкладку Method Development (Разработка метода), загрузите совместимый Метод MS, нажав на Load Method (Загрузить метод) в ленте меню:



2. Выполните шаги со 2 по 6 из приведенного выше раздела.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Выполнение процедуры автонастройки

Используйте Процедуры автонастройки для автоматической оптимизации параметров метода. Эта функция программного обеспечения изменяет значение каждого параметра и выбирает значения, которые приводят к наиболее интенсивному сигналу.

Примечание: В рамках одного цикла сбора данных нельзя выполнить оба действия - Автонастройку и Линейное изменение параметров.

Запуск процедуры Автонастройки

1. В выпадающем списке **Experiment Type** (Тип эксперимента) выбрать тип метода сканирования - **MRM**.
2. Настройте все параметры метода и прибора по желанию, включая переходы MRM, которые необходимо оптимизировать.
3. В ленте меню установите флажок **Run AutoTune** (Запустить автонастройку), а затем нажмите **AutoTune Settings** (Параметры автонастройки). Появится диалоговое окно AutoTune Settings (Параметры автонастройки).
4. Следуйте инструкциям для настройки параметров Автонастройки, а затем нажмите **OK**.
5. В ленте меню нажмите **Start MS** (Запустить МС), чтобы начать сеанс Автонастройки. Появится дисплей реального времени, на котором будут отображаться графики данных для оптимизации параметров.
6. После завершения сеанса Автонастройки появится диалоговое окно **Save** (Сохранить).
7. Нажмите кнопку **Save** (Сохранить), чтобы сохранить метод и результаты оптимизации параметров.
8. На дисплее в реальном времени будет сформирован график данных отчета о сеансе, который покажет оптимизированные значения для всех диапазонов масс и установленные параметры Автонастройки.
9. Для применения значений отчета сеанса Автонастройки к таблице Mass Parameter Ramp (Линейное изменение параметра массы), кликните правой кнопкой мыши по графику хроматограммы/спектра данных и выберите один из следующих вариантов, по желанию:

- Применить к текущему
- Применить ко всем

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Разработка метода ЖХ

Данный раздел описывает как создавать, настраивать и работать с методами ЖХ (жидкостной хроматографии) в программном обеспечении с помощью функций, расположенных на вкладке LC Method (Метод ЖХ).

В данном разделе рассмотрены следующие темы:

- Управление лентой меню метода ЖХ
- Работа с методами ЖХ
- Создание нового метода ЖХ
- Варианты метода Автосамплера УВЭЖХ QSight MD
- Варианты метода насоса для УВЭЖХ QSight MD
- Варианты метода термостата
- Для загрузки существующего метода ЖХ

Управление лентой меню метода ЖХ

Примечание: Иконки и опции любой ленты можно скрыть, дважды щелкнув по вкладке выбранной функции в верхней части экрана. Чтобы элементы ленты появились снова, кликните по вкладке еще раз.

Экран Метода ЖХ (в режиме безопасности, доступен только для пользователей Advanced и Service)	
Группа методов ЖХ	
	**New Method** (Новый метод) — Нажмите, чтобы создать совершенно новый метод ЖХ.
	**Load Method** (Загрузить метод) — Нажмите, чтобы загрузить существующий метод ЖХ из выбранной папки.
	**Save Method** (Сохранить метод) — Нажмите, чтобы сохранить текущий метод ЖХ в выбранной папке.

Работа с методами ЖХ

На вкладке Метод ЖХ вы можете загрузить существующий метод ЖХ, чтобы использовать его как он есть или изменить по необходимости, или создать совершенно новый метод ЖХ, отвечающий вашим требованиям.

Примечание: Программирование планшета нового типа в Автосамплере для УВЭЖХ QSight MD при активной программе Simplicity 3Q MD может привести к сбою программы. Перед добавлением или удалением параметров планшета из Автосамплера завершайте работу программного обеспечения.

Внимание! Во избежание загрязнения керамики зонда и потенциального повреждения системы, Перед подключением и запуском ЖХ убедитесь, что газы и нагрев включены и подаются в систему.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Создание нового метода ЖХ

1. На ленте меню экрана Метода ЖХ выберите **New Method** (Новый метод).

Примечание: Вы также можете загрузить существующий метод, кликнув на **Load Method** (Загрузить метод).



2. Задайте необходимые параметры для каждого установленного компонента.

Опции метода для автосамплера УВЭЖХ QSight MD

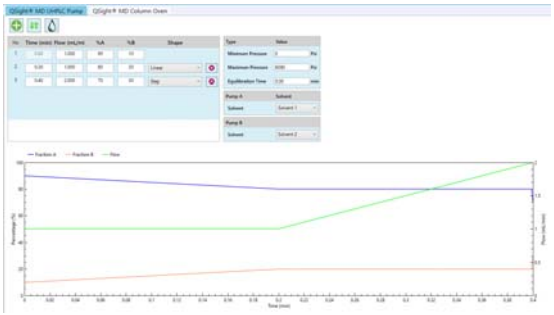
Редактор метода ЖХ для автосамплера УВЭЖХ QSight MD предлагает:

*LCMS_Только стандартный сценарий

Сценарии	• LCMS_Fast: Общие настройки автосамплера без параметров промывки статора • LCMS_Standard: Общие настройки автосамплера с параметрами промывки статора
Настройка	В этом разделе показаны компоненты, установленные на автосамплере.
Проба загрузки	• Скорость потока аспирации пробы: по умолчанию 5 мкл/с (диапазон 0,1 мкл/с - 100 мкл/с) • Виалы для проб с низкой чувствительностью: Вкл/Выкл • Высота от дна виалы с пробой: по умолчанию 1 мм (диапазон 0 мм - 32 мм) • Задержка повышения: по умолчанию 2 000 мс (диапазон 0 мс - 30 000 мс) • Оставить выдвижной ящик открытым: Вкл/Выкл • Глубина виалы для пробы: по умолчанию 10 мм (диапазон 1 мм - 15 мм) • Объем с передней стороны: по умолчанию 5 мкл (диапазон 2 мкл - 5 мкл) • Объем с задней стороны: по умолчанию 5 мкл (диапазон 2 мкл - 5 мкл) • Воздушный зазор с передней стороны: по умолчанию 3 мкл (диапазон 0 мкл - 3 мкл) • Воздушный зазор с задней стороны: по умолчанию 3 мкл (диапазон 1 мкл - 3 мкл)
Ввод пробы	• Скорость потока вводимой пробы: по умолчанию 1 мкл/с (диапазон 0,1 мкл/с - 100 мкл/с) • Задержка предварительного ввода: по умолчанию 500 мс (диапазон 0 мс - 30 000 мс) • Задержка после ввода: по умолчанию 2 000 мс (диапазон 0 мс - 30 000 мс)
Последующая промывка	• Скорость потока чистого клапана: по умолчанию 20 мкл/с (диапазон 0,1 мкл/с - 100 мкл/с) • Растворитель после очистки 1: по умолчанию 1 (диапазон 0 - 10) • Растворитель после очистки 2: по умолчанию 1 (диапазон 0 - 10) • Клапан очистки растворителя 1: по умолчанию 80 мкл (диапазон 10 мкл - 300 мкл) • Клапан очистки растворителя 2: по умолчанию 80 мкл (диапазон 10 мкл - 300 мкл) • Промывка статора*: Вкл/Выкл • Задержка промывки статора*: по умолчанию 120 с

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Варианты метода насоса для УВЭЖХ QSight MD

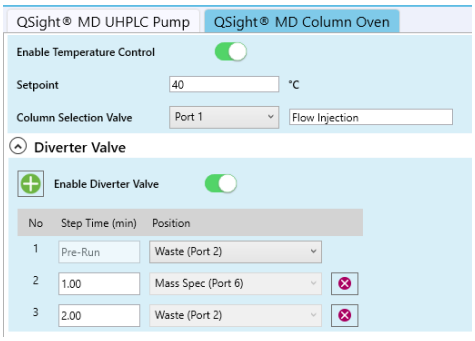


Редактор метода ЖХ для УВЭЖХ насоса QSight MD предлагает:

Таблица времени	• Нажмите зеленую кнопку +, чтобы добавить строку в таблицу. Для каждой строки укажите: • Продолжительность этапа (диапазон: 0 - 59,99 мин) • Поток (диапазон 0,00 - 2,00 мл/мин) • Доля расхода потока, подаваемого насосом A (0 - 100%); рекомендуемая доля не менее 5% или равна минимальному расходу. • Доля расхода потока, подаваемого насосом B (0 - 100%); рекомендуемая доля не менее 5% или равна минимальному расходу. • Для добавленных этапов укажите форму градиента (линейный, выпуклый 1-4, вогнутый1-4, пошаговый). • Нажмите стрелки вверх и вниз, чтобы перемещать диапазоны времени вверх и вниз по списку • Нажмите фиолетовую кнопку X, чтобы удалить линию • Нажмите , чтобы открыть Калькулятор растворителя. Используйте калькулятор растворителя, чтобы получить приблизительное представление о необходимом объеме растворителя для текущего метода. Введите количество проб, которые вы будете обрабатывать; Калькулятор покажет необходимый объем для растворителя A и растворителя B.
Параметры давления	Введите минимальное и максимальное давление для метода Насоса
Время уравновешивания	Введите время уравновешивания, которое будет использоваться для данного метода (диапазон 0,00 мин - ... 59,99 мин)
Параметры растворителя	Выберите порт растворителя (1 или 2) для подключения к насосу A. Выберите порт растворителя (1 или 2) для подключения к насосу B
Таблица давления	График показывает % фракции A, % фракции B и Расход (мл/мин).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Варианты метода термостата



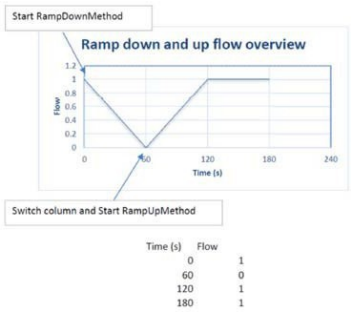
Настройки колоночного термостата QSight MD:

- **Включить управление температурой:** Используйте переключатель для включения или выключения температуры.
- **Заданное значение:** Введите заданное значение температуры для термостата.

Если установлен клапан для выбора колонки, максимальная заданная температура составляет 75°C; если клапан для выбора колонки не установлен, максимальная заданная температура составляет 90°C.

- **Выбор колонки:** В выпающем списке Выбор колонки кликните, чтобы выбрать, какую колонку вы будете использовать в данной конфигурации термостата (1-6).

Примечание: Во избежание повреждения системы, перед переключением клапан в насосе должен быть безопасный уровень рабочего давления. После переключения клапана насос снова повышает давление до давления, предшествующего понижению. Следующий пример показывает рабочий процесс клапана выбора колонки:



В приведенном выше примере:

- Переключается клапан выбора колонки.
- Затем, в течение следующих 60 секунд, насос снижает скорость с 1 мл/мин до 0 мл/мин.
- Затем клапан выбора колонки переключается на запрограммированную колонку.
- В течение следующих 60 секунд насос увеличивает скорость с 0 мл/мин до 1 мл/мин.
- Поток остается на уровне 1 мл/мин в течение еще 60 секунд, после чего цикл завершается. Обратите внимание, что расход может варьироваться; здесь в качестве примера используется 1 мл/мин, чтобы показать, как работает процесс линейного изменения. Все остальные параметры фиксированы.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Исключение: Если давление достаточно низкое непосредственно перед переключением клапана выбора колонки, процесс линейного изменения пропускается. Кроме того, когда давление становится достаточно низким во время снижения скорости, клапан переключается, а затем выполняется наращивание темпов и уравнивание.

• **Отводящий клапан:**

• +: Нажмите зеленую кнопку +, чтобы добавить этап в приведенную ниже таблицу списка процессов отводящего клапана (максимум 20 этапов). Для каждого этапа необходимо указать время. Этапы автоматически переключаются между масс-спектрометром и спускной линией.

• Включение отводящего клапана: Используйте переключатель, чтобы включить или выключить отводящий клапан термостата.

• Таблица отводящих клапанов:

• Номер: В этой колонке указывается номер этапа в списке процессов.

• Время этапа: Указывает время, заданное для выполнения этапа, в минутах.

• Положение: В выпающем списке укажите проходное отверстие отводящего клапана, которое будет использоваться для первого этапа (Масс-спектрометр или спускная линия); последующие этапы будут автоматически чередоваться между ними двумя после вашего первоначального выбора.

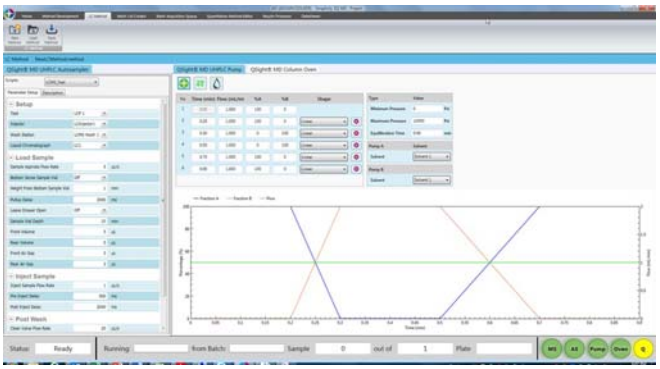
• X: Нажмите красную кнопку X, чтобы удалить этап из таблицы.

Примечание: Первая строка в таблице времени работы отводящего клапана фиксирована и не может быть удалена; она используется для установки исходного положения. Перед вводом в эксплуатацию отводящий клапан переключается в исходное положение. Таблица времени начинается с момента начала фактического ввода в действие. Отводящий клапан располагается перед входом в масс-спектрометр и отводит поток ЖХ от масс-спектрометра к выпускному отверстию. Создайте собственный метод, который позволит отводить все, кроме интересующих вас соединений. В приведенном выше примере интересующие нас соединения поступают на масс-спектрометр с 1.00 до 2.00 минут. Дополнительную информацию см. в разделе Отводящий клапан .

Для загрузки существующего метода ЖХ

1. В ленте меню зайдите во вкладку **LC Method** (Метод ЖХ).

2. Нажмите на **Load Method** (Загрузить метод) и выберите метод, который вы хотите открыть из диалогового окна **Open LC Method** (Открыть метод ЖХ). Нажмите кнопку **OK**. Поля вкладки LC Method (Метод ЖХ) будут заполнены. Если требуется, адаптируйте метод под себя и нажмите **Save Method** (Сохранить метод), затем введите новое имя.



3. Запустите метод как есть или создайте Серию (партию) с помощью Создания списка серий (партий).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Запуск серий (партий)

В данном разделе указано как создавать и запускать серии (партии) проб с помощью функций, расположенных на вкладках Batch List Creator (Создание списка серий (партий)) и Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии (партии)).

В данном разделе рассмотрены следующие темы:

- Элементы управления ленты меню Создания списка серий и Очереди списка серий>
- Создание и запуск серий
- Работа с пробами
- Указание Методов количественного анализа в Batch List Creator (Создание списка серий)
- Понимание названий проб
- Функции управления Таблицей Списка серий
- Работа с Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии)
- Определение параметров Очереди сбора данных серии
- Очистка серий
- Запуск сбора данных

Элементы управления ленты меню Создания списка серий и Очередь сбора данных серии

Примечание: Иконки и опции любой ленты можно скрыть, дважды щелкнув по вкладке выбранной функции в верхней части экрана. Чтобы элементы ленты появились снова, кликните по вкладке еще раз.

Экран Создания списка серий	
Группа серий	
	**New Batch List...** (Новый список серий) — Нажмите, чтобы создать новый список серий.
	**Load Batch List** (Загрузить список серий) — Нажмите, чтобы загрузить существующий список серий для создания новой серии.
	**Save Batch As** (Сохранить серию как) — Нажмите, чтобы сохранить текущий список серий в выбранной папке для последующего использования в качестве шаблона серии.
	**Печать серии** — Нажмите, чтобы распечатать информацию о списке текущей серии проб в защищенном документе формата PDF.
Группа проб	
	**Add Sample** (Добавить пробу) — Нажмите, чтобы добавить новую пробу в формате, определенном в полях пробы, в текущий список.
	**Delete Sample** (Удалить пробу) — Нажмите, чтобы удалить пробы из текущего списка. Сначала выделите соответствующую пробу или пробы в списке, а затем нажмите Delete Sample (Удалить пробу).
Группа концентрации	
	**Show/Hide Concentration Table** (Показать/скрыть таблицу концентрации) — Нажмите, чтобы включить или выключить отображение таблицы концентрации.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Экран Создания списка серий	
Группа Автосамплеров	
	**Trays Configuration** (Конфигурация лотков) — Отображает расположение проб в лотке. Вы можете проверить конфигурацию луночного планшета и выбрать положения планшета и виалы для следующих проб, которые будут добавлены в список серии.
Группа сбора данных	
	**Submit to Acquisition Queue** (Добавить в очередь сбора данных) — Нажмите, чтобы добавить выбранный список серий в очередь сбора данных.
Экран Очереди сбора данных серии	
Группа серий	
	**Load Worklist** (Загрузить рабочий список) (выпадающее меню) — Нажмите, чтобы загрузить серию из файла рабочего списка.
	**Queue Options** (Параметры очереди) — Нажмите, чтобы выбрать расширенные параметры очереди, такие как Уравновешивание МС, Метод ожидания МС, Протоколы и настройки экспорта Количественного анализа.
	**Clear Batches** (Очистить серий) (раскрывающееся меню) — Нажмите, чтобы очистить все завершенные серии. • Очистить серии - Очистка всех серий, в которых успешно завершены все пробы. • Clear All Batches (Очистить все серии) - Очистка всех завершенных серий. Сюда включаются серии с прерванными, неудачными и деактивированными пробами.
Группа методов промывки системы и режим ожидания	
	**Flush** (Промывка) (раскрывающееся меню) — Позволяет загружать по требованию указанный метод промывки МС и Метод промывки ЖХ в параметрах очереди, включая: • Flush Now (Выполнить промывку сейчас) – Применяет методы Промывки немедленно. • Flush and Standby (Промывка и режим ожидания) – Применяет методы Промывки, а затем сразу же Метод режима ожидания. • Stop Flush (Прекратить промывку) – Прекращает цикл промывки.
	**Apply Now** (Применить сейчас) – Немедленное применение метода режима ожидания.
	**Equilibrate** (Уравновешивание) — Загружает параметры Метода МС, включая: • Setup Method (Метод настройки) — Позволяет пользователю выбрать метод МС для уравновешивания. • Start Equilibration (Запуск уравновешивания) — Применяет температуру, потоки газа и напряжения, установленные в указанном методе МС.
Группа сбора данных	
	**START** (ПУСК) (выпадающее меню) — Нажмите, чтобы выбрать время начала запуска серии. Выберите Start (Пуск) или Delayed Start (Отложенный пуск). При опции Delayed Start (Отложенный пуск) устанавливается таймер, по завершении которого начнется сбор данных. Когда идет обратный отсчет таймера система заблокирована.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Экран Очереди сбора данных серии	
	**STOP** (СТОП) (выпадающее меню) — Нажмите, чтобы выбрать, когда или как вы хотите остановить вашу серию: • **Stop after current sample** (Остановить после текущей пробы) — Сбор данных серии остановится после сбора текущей пробы. **Примечание:** При выборе опции Stop after current sample (Остановить после текущей пробы) следующая проба уже предварительно загружена в Автосамплер и будет отправлена в спускное отверстие; имейте это в виду, так как в результате вы потеряете некоторое количество проб. • **Stop after current batch** (Остановить после текущей серии) — Сбор данных серии остановится после завершения сбора текущей серии. • **ABORT** (ОТМЕНА) — Нажмите, чтобы немедленно остановить сбор данных серии. Все данные для текущей пробы будут потеряны. **Примечание:** При выборе опции ABORT (ОТМЕНА) следующая проба, уже предварительно загруженная в Автосамплер, будет отправлен в спускное отверстие; имейте это в виду, так как в результате вы потеряете некоторое количество проб.
Группа серверов контрольно-измерительных приборов	
	**Show Simplicity Server** (Показать сервер Simplicity) — Открывает окно сервера для автоматической калибровки прибора. **Примечание:** При вызове сервера Simplicity макроспектрометр переходит в режим по умолчанию, автоматически устанавливая HSID на 320 и отключая потоки газа. В результате при возврате с Сервера в основное программное приложение может потребоваться подождать, прежде чем прибор остынет или прогреется перед запуском сбора данных.
	**Reset Device Status** (Сброс состояния устройства) — Сбрасывает отображение состояния путем сброса программной связи с МС, АС и насосом.

Создание и запуск серий

Вы можете создавать серии для запуска групп проб и стандартов. По мере создания и настройки серии программа подсчитывает расчетное время работы серии (включая время работы метода МС; время промывки метода ЖХ; расчеты переключения и паузы и т.д.) и отображает этот расчет в днях, часах и минутах в верхней части экрана в поле **Estimated Batch Run Time** (Расчетное время запуска серии). Предполагаемый день недели и время завершения отображается в соседнем поле **Estimated Completion Time** (Предполагаемое время завершения).

Серии создаются в строгом соотношении один к одному, с одной серией в папке **Batch Run** (Запуск серии). Серии автоматически сохраняются в формате <Название серии>_<Дата создания>. Вы также можете распечатать информацию о списке проб текущей серии в защищенном документе формата PDF, выбрав пункт **Print Batch** (Печать серии) в ленте меню.

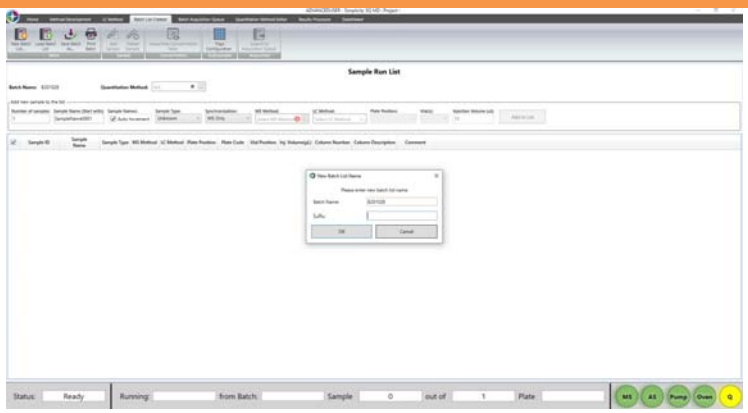
Примечание: Серии также могут быть созданы на MSMS Workstation (Рабочей станции МС/МС). В программе эти серии называются рабочими списками. Дополнительные сведения см. в разделе Запуск сборов на стр. 83.

Создание серии с помощью Batch List Creator (Создания списка серий)

Примечание: Чтобы использовать существующий шаблон серии для создания новой серии, кликните значок ленты меню **Load Batch List** (Загрузить список серий).

1. На экране **Batch List Creator** (Создание списка серий) в группе ленты **Batch** (Серия) нажмите на **New Batch List...** (Новый список серий):

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

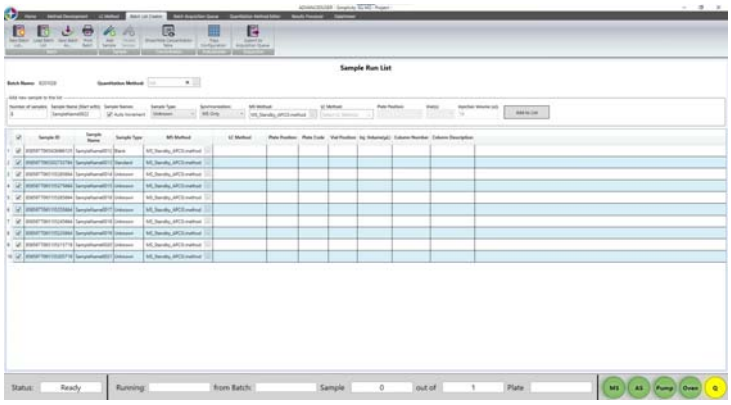


2. В диалоговом окне **New Batch List Name** (Новое имя списка серий) введите уникальное **Batch Name** (Имя серии) и дополнительный **суффикс**, а затем нажмите **OK**. Серия, которую вы только что добавили, появится в качестве Имени серии на главной панели.

3. Если вы хотите добавить автоматизированный количественный анализ, и соответствующий Метод количественного анализа уже существует, выберите его из выпадающего списка
Метод количественного анализа**.**

4. В разделе **Add new sample to the list** (Добавить новую пробу в список) введите **Number of Samples** (Количество проб) и **Sample Name** (Имя пробы)**,** а затем выберите из выпадающего списка **Sample Type** (Тип пробы).

Для включения стандарта, в раскрывающемся списке **Sample Type** (Тип пробы) выберите Standard (Стандарт). (После добавления стандартов в таблицу, для каждого стандарта на ленте нажмите **Show/Hide Concentration Table** (Показать/Скрыть таблицу концентраций), чтобы отобразить колонки, в которые можно ввести соответствующие значения концентрации для каждого уровня калибратора):



5. Выберите режим **синхронизации** (ЖХ/МС или только МС) для серии. Режим синхронизации должен быть единым для всей серии; вы не можете отправить в очередь серию, содержащую синхронизированные пробы ЖХ/МС и только МС.

6. Выберите **MS Method** (Метод MS), который будет использоваться для ваших проб. При желании можно использовать более одного метода МС в одной серии.

Если вы работаете в режиме ЖХ/МС, выберите метод ЖХ, который будет использоваться для ваших проб, установите желаемое Plate Position (Положение планшета), затем в выпадающем списке Vial(s) (Виала(ы)) выберите желаемое положение лунки/виалы, а затем введите желаемый Injection Volume (Вводимый объем) (максимальный вводимый объем составляет 80 мкл). Положения планшетов 1 - 12 предназначены для 96-луночных микротитровальных планшетов и имеют 96 лунок. Положения планшетов 13 - 18 будут предназначены для виал ЖХ/МС и имеют 54 положения виал. (Или, после добавления проб в таблицу, вы можете выбрать каждый из них, а затем в ленте меню выбрать пункт Trays Configuration (Конфигурации лотков), чтобы указать расположение).

7. Нажмите на **Add to List** (Добавить в список). Чтобы добавить дополнительные пробы и стандарты, повторите описанный выше процесс, выбирая все желаемые пробы и параметры, и завершите каждый из них, нажав на **Add to List** (Добавить в список).

8. Когда вы будете готовы запустить серию, нажмите на **Submit to Acquisition Queue** (Добавить в очередь сбора данных) на ленте, а затем нажмите кнопку **Yes** (Да) при появлении запроса. Серия загружается в **Batch Acquisition Queue** (Очередь сбора данных серии). Вы также можете распечатать информацию о текущем списке запусков проб в защищенном документе формата PDF, нажав **Print Batch** (Печать серии).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Работа с пробами

Рабочий процесс подготовки проб

- Подготовьте пробы в соответствии с лабораторными процедурами.
- Загрузите планшет с пробой аналита.
- Вставьте планшет с пробой в Автосамплер.

Визуальный выбор расположения проб

Несмотря на то, что расположение планшета и лунки/виалы можно выбрать из выпадающих списков в Batch List Creator (Создание списка серий), может быть полезным мысленно представить конфигурацию планшета, чтобы убедиться, что вы выбрали правильное начальное положение. Для этого в строке Add new sample (Добавить новую пробу) в список убедитесь, что режим Синхронизации установлен на ЖХ/МС; выберите метод ЖХ; и установите Положение планшета для ввода пробы. Затем кликните Trays Configuration (Конфигурация лотков), чтобы отобразилось диалоговое окно Конфигурации лотков. Здесь можно поменять ящик или выбрать стартовую лунку/виалу вручную. Обратите внимание, что при добавлении нескольких проб в список серий программное обеспечение будет автоматически увеличиваться, начиная с этого места положения.

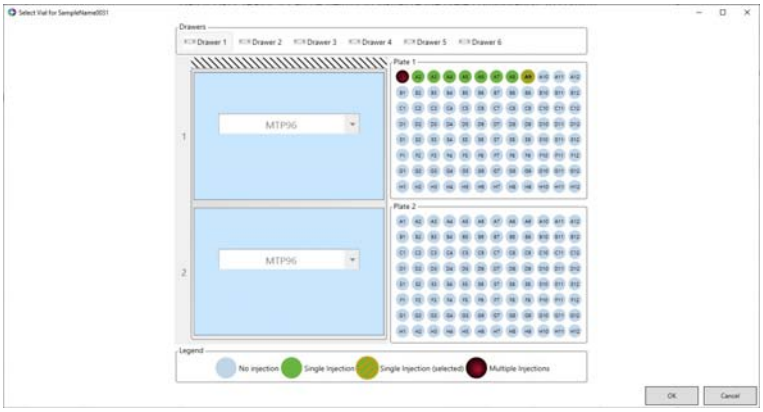


Рисунок 14: Диалоговое окно Trays Configuration (Конфигурации лотков)

Примечание: Если вы добавляете несколько проб с помощью одного и того же метода, кликните в верхней или первой соответствующей ячейке таблицы MS Method (Метод МС), кликните правой кнопкой мыши, а затем выберите Copy Value to All Cells Below (Копировать значения для всех ячеек ниже), чтобы добавить метод для всех следующих проб. Чтобы использовать один и тот же метод для некоторых, но не всех проб, нажмите Ctrl + Click, чтобы выделить несколько ячеек метода МС в таблице, кликните правой кнопкой мыши, а затем выберите Copy Value to Selected Cells (копировать значение для выбранных ячеек).

Для того, чтобы лоток предоставлял больше информации, в условных обозначениях под лотком есть пять цветных индикаторов для определения интересующих проб:

Проба не вводится:	Для этой ячейки проба не определена.
Однократное введение пробы:	В ячейке определена одна проба для введения.
Многочисленные введения проб:	В ячейке определено несколько проб для введения.
X (выбран):	Это текущая выбранная ячейка; все отображаемые данные относятся только к этой ячейке с пробой.

Заполнение или опустошение колонки

1. Щелкните правой кнопкой мыши на пробу.
2. Выбрать **Fill Below Cells** (Заполнить нижеследующие ячейки) или **Fill Above Cells** (Заполнить предыдущие ячейки), в зависимости от того, что необходимо, чтобы применить выбранный параметр ячейки к следующей (или предыдущей) ячейке в колонке.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Для дублирования параметров пробы

Выберите количество строк, в которые необходимо продублировать пробу (Для выбора нескольких строк используйте shift+щелчок и перетаскивание). Параметры первой строки будут добавлены или вставлены во все выбранные строки.

Указание Методов количественного анализа в Batch List Creator (Создание списка серий)

Метод количественного анализа можно задать в Batch List Creator (Создание списка серий). Когда это будет выполнено, и серия будет отправлена в очередь, программное обеспечение автоматически подсчитает результаты по завершении сбора данных. Данный рабочий процесс может быть использован для минимизации усилий, связанных с ручной количественной оценкой результатов для каждой полученной серии.

При выборе Метода количественного анализа следует сначала выбрать MS methods (Методы МС), которые будут использоваться для сбора данных. При нажатии на кнопку выбора Метода количественного анализа программа отображает список Методов количественного анализа, которые были сохранены в активном проекте. Методы количественного анализа должны содержать или ссылаться на некоторые или все аналиты в методах сбора данных, но не должны содержать или ссылаться на аналиты, не присутствующие в методах сбора данных. В результате некоторые проекты могут содержать смесь методов количественного анализа, совместимых или несовместимых с выбранными методами сбора данных в списке серий. Для быстрого определения совместимых методов, установите флажок **Mark Invalid Items** (Отметить недействительные элементы); программа зачеркнет методы количественного анализа, которые несовместимы с выбранными методами МС. Кроме того, программа не позволит вам выбрать несовместимый метод количественного анализа, независимо от того, установлен ли флажок **Mark Invalid Items** (Отметить недействительные элементы).

Понимание названий проб

Идентификаторы проб

При добавлении проб в Список серий программное обеспечение автоматически генерирует Идентификатор пробы. Этот идентификатор является уникальным и может быть использован для отслеживания проб на одном компьютере. Идентификатор пробы не редактируется и будет перенесен в количественные результаты.

Имя пробы

Когда проба указана в списке либо в Batch List Creator (Создание списка серии), либо в Batch Acquisition Queue (Очередь сбора серии), Sample List (Список проб) содержит колонку Data File (Файл данных), в которой указано предполагаемое имя каждой пробы. Это имя берется из поля Sample Name (Имя пробы) в Batch List Creator (Создание списка серии). Однако при получении данных к имени файла может быть добавлена временная метка, что позволяет пользователям легко различать несколько проб с одинаковым именем. Временные метки включены по умолчанию и могут быть изменены путем снятия флажка с опции Добавить временную метку для Файлов данных в **Queue Options (Настройки очереди)> Other Settings (Другие настройки) > Batch Settings (Настройки серии)**.

Примечание: Если вы хотите отменить функцию автоматической нумерации и пронумеровать пробы вручную, введите символ _ (подчеркивание) в имени пробы. Но не используйте символ подчеркивания в первом символе в имени пробы.

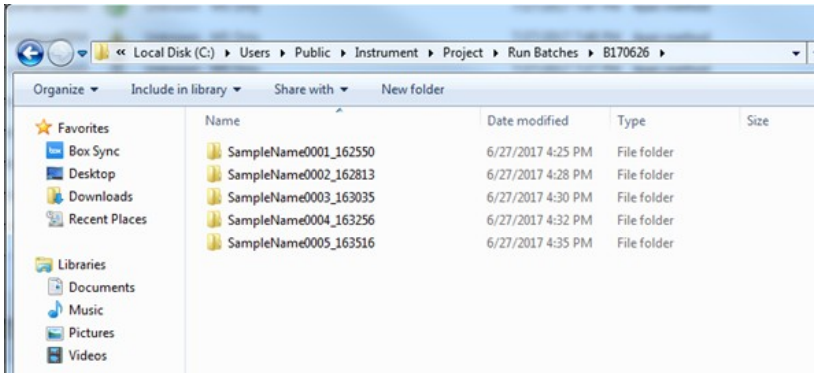


Рисунок 15: Пример названий проб, дополненных временными метками

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Функции управления Таблицей Списка серий

В дополнение к функциям Ленты меню, на этом экране также есть команды, специфичные для панели Sample Run List (Список выполнения проб), доступ к которым осуществляется щелчком правой кнопки мыши в списке проб.

Щелкните правой кнопкой мыши	Функция управления
Fill below cells (Заполнить нижеследующие ячейки)	Заполняет значения ниже первой выбранной ячейки
Fill selected cells (Заполнить выбранные ячейки)	Заполняет значения в выделенных ячейках, используя первую выбранную ячейку
Append new sample (Добавить новую пробу)	Добавляет новую запись о пробе в конец Batch List (Списка серий)
Insert new sample (Вставить новую пробу)	Вставляет новую пробу в положение, указанное пользователем в Batch List (Списке серий)
Delete highlighted samples (Удалить выделенные пробы)	Удаляет выбранные пробы из Batch List (Списка серий)
Copy (Копировать)	Копировать выделенные ячейки или строки в буфер обмена
Paste (Вставить)	Вставляет содержимое буфера обмена, начиная с выбранной ячейки

Работа с Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии)

После создания серий проб вы можете отправить их в Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии), где ожидающие очереди серии могут просматриваться, запускаться и отслеживаться.

Примечание: Вы также можете распечатать информацию Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии) в защищенном документе формата PDF, нажав **Print Batch** (Печать серии) в ленте меню. Выберите (кликните, чтобы выделить) нужную серию на панели Batch List (Список партий) - или Shift + щелчок, чтобы выбрать несколько серий - и затем нажмите **Print Batch** (Печать серии).

В дополнение к иконкам ленты меню Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии), на этом экране также есть команды, специфичные для каждой панели Batch List (Список серии) и Sample List (Список проб), доступ к которым осуществляется щелчком правой кнопки мыши.

Функции управления Таблицей Списка серий	
Щелкните правой кнопкой мыши	**Функции управления**
Re-submit batch (Повторно добавить серию)	Повторное добавление создает дубликат серии с новыми записями, папками и файлами данных. Новая серия добавляется в конец текущего списка. Имя серии имеет то же базовое имя с новым добавленным счетчиком для уникального имени.
Move up (Переместить вверх)	Переместить запись серии вверх списка таблицы.
Move down (Переместить вниз)	Переместить запись серии вниз списка таблицы.
Remove (Удалить)	Удалить запись серии из списка таблицы.
Применить метод количественного анализа	Назначение файла QMX (метод количественного анализа) выбранной серии. В конце сбора данных происходит автоматическая количественная оценка серии с помощью QMX.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Функции управления Таблицей Списка проб	
Щелкните правой кнопкой мыши	**Функции управления**
Re-Run sample (Повторно запустить пробу)	Дублирование выбранной пробы и ее параметров для создания новой записи в таблице. Проба добавляется в конец списка. Имя пробы имеет то же базовое имя с новым добавленным счетчиком для уникального имени. После завершения сбора данных серии вы больше не можете повторно запускать пробы из этой серии. Вместо этого все пробы, которые необходимо повторно запустить, должны быть повторно добавлены. **Примечание:** Удерживайте нажатыми клавиши Shift или Control (CTRL) для выбора нескольких проб.
Deactivate sample(s) (Деактивировать пробу(ы))	Отключение запуска выбранной(ых) проб(ы) в серии.
Функции управления Таблицей Списка проб	
Щелкните правой кнопкой мыши	**Функции управления**
Activate sample(s) (Активировать пробу(ы))	Позволяет запустить выбранную(ые) пробу(ы) в серии.
Re-submit sample(s) (Повторно добавить пробу(ы))	Повторное добавление выбранной(ых) проб(ы) в новую серию. При повторном добавлении одной или нескольких проб из серии, выбранные пробы повторно добавляются в очередь и создается новая серия. Пробы, которые были получены ранее, показаны как приостановленные и повторно не получены. По окончании сбора данных файл результатов будет содержать данные только для повторно добавленных проб. При повторном добавлении серии все комментарии переносятся в новую серию. Если проба была ранее прервана или выполнена неудачно, комментарий, созданный программным обеспечением, останется с пробой, даже если повторно добавленная серия может успешно ее получить. **Примечание:** Удерживайте нажатой клавишу управления (CTRL) для выбора нескольких проб.

Определение параметров Очереди сбора данных серии

Прежде чем серии или рабочие списки могут быть использованы для сбора данных серии, система должна быть надлежащим образом сконфигурирована с разрешенными типами планшетов и протоколами промывки приборов. Управление этими параметрами осуществляется через диалоговое окно Queue options (Настройки очереди), которое можно открыть щелкнув **Queue Options** (Настройки очереди) в ленте меню Batch Acquisition (Сбор данных серии).

Уравновешивание

Настройка Equilibration (Уравновешивание) управляет методом ЖХ/МС, используемым для кондиционирования системы перед вводом проб и обычно проверяется. Выберите один из следующих вариантов:

Never equilibrate (Никогда не уравновешивать):	Функция уравновешивания отключена
Always equilibrate (Всегда уравновешивать):	Уравновешивание применяется перед каждой пробой
Уравновешивание следующей пробы после указанного периода бездействия:	Автоматическое уравновешивание системы перед сбором данных, если система простаивала в течение определенного периода времени

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

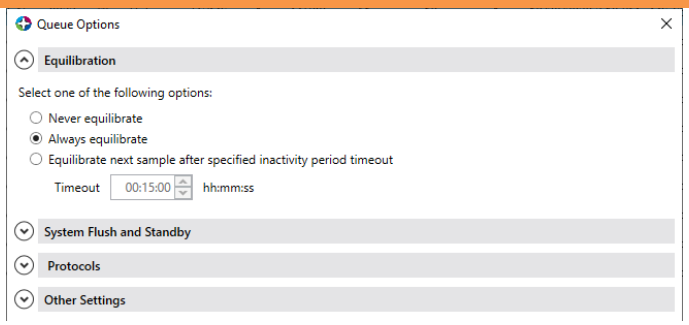


Рисунок 16: Queue options (Настройки очереди) - Equilibration (Уравновешивание)

System Flush and Standby (Промывка системы и режим ожидания)

System Flush (Промывка системы) автоматически запускает методы ЖХ и MS для очистки системы после сбора данных серии. Методы промывки настраиваются по желанию заказчика.

Режим ожидания остановит поток ЖХ и снизит температуру источника MS и потоки газа. Используйте режим ожидания для экономии ресурсов, когда вам нужно перевести систему в режим ожидания.

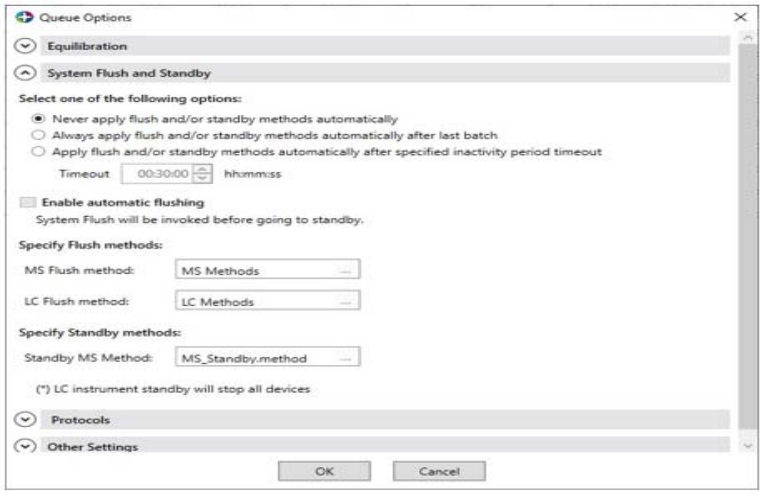


Рисунок 17: Queue options (Настройки очереди) - System Flush and Standby (Промывка системы и режим ожидания)

Настройка методов Промывки системы и перехода в Режим ожидания:

1. В разделе System Flush and Standby Methods (Методы промывки системы и перехода в режим ожидания) выберите методы промывки и определите, как будут применяться исходные параметры ваших методов:

Никогда не применяйте методы промывки и/или перехода в режим ожидания автоматически:	Функция режима ожидания отключена.
Всегда применяйте методы промывки и/или перехода в режим ожидания автоматически после последней серии:	Метод перехода в режим ожидания включается после получения последней пробы в очереди.
Автоматическое применение методов промывки и/или перехода в режим ожидания после указанного периода бездействия:	Метод перехода в режим ожидания применяется, если система неактивна в течение определенного периода времени после того как последняя проба в очереди была получена.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

2. Чтобы включить промывку системы перед переходом в Режим ожидания, установите флажок напротив **Enable automatic flushing** (Включить автоматическую промывку).
3. Выберите Методы промывки для методов МС и ЖХ из соответствующих выпадающих меню.
4. Укажите Метод МС в Режиме ожидания, если требуется.

Примечание: Функция режима ожидания приборов ЖХ остановит все устройства при выполнении команды **Standby** (Режим ожидания).

Примечание: Если метод перехода в Режим ожидания не определен, кнопка **Apply Now** (Применить сейчас) для Метода перехода в режим ожидания на ленте Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии) неактивна.

5. Нажмите кнопку **OK**.

Создание методов ЖХ И МС для промывки системы и перехода в режим ожидания

Создайте методы ЖХ И МС для промывки системы и перехода в режим ожидания на вкладках MS Method (Метода МС) или LC Method (Метод ЖХ) в программном обеспечении. Название методов в соответствии с приведенными ниже шаблонами

После создания или загрузки рабочего списка программа автоматически связывает рабочий список с методами в текущем проекте (при изменении активных проектов, программное обеспечение всегда ищет методы в новом активном проекте). Чтобы сбор данных по рабочему списку был успешным, методы необходимо называть по приведенным ниже шаблонам:

Метод МС: <Протокол>-MS-Worklist.method

Метод ЖХ: <Протокол>-LC-Worklist.method

Протоколы

Установите тип планшета, который будет использоваться с серией или рабочим списком во время сбора данных. Тип загруженного планшета должен соответствовать типу планшета, определенному в данном разделе. Если они не совпадают, то при попытке пользователя добавить планшет через диалоговое окно Load Worklist (Загрузить рабочий список) возникает ошибка.

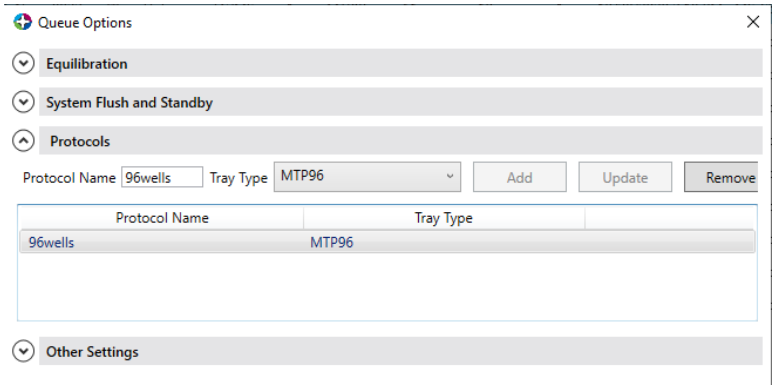


Рисунок 18: Queue options (Настройки очереди) - Protocols (Протоколы)

Другие настройки

Настройки экспорта количественного анализа:	Пользователь может указать автоматическое создание и экспорт файла с результатами рабочего списка количественного анализа по завершении серии рабочих списков (дополнительную информацию см. в разделе Worklist settings на стр. 43 (Настройки рабочего списка).
Настройки серии:	Пользователь может указать автоматическое добавление временных меток к файлам данных (включено по умолчанию).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

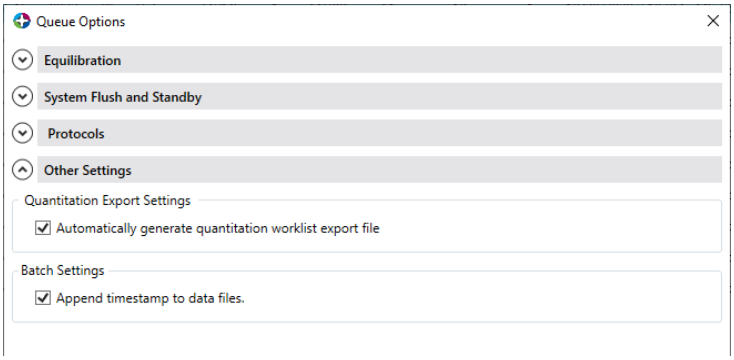


Рисунок 19: Queue options (Настройки очереди) - Другие настройки

Очистка серий

Во вкладке Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии) доступно два способа очистки списка серий из ленты меню:

Clear Batches (Очистить серии):	Очищает все серии, в которых успешно завершен сбор проб.
Clear Batches > Clear All Batches (Очистить серии > Очистить все серии):	Очистка всех завершенных серий. Сюда включаются серии с прерванными, неудачными и деактивированными пробами.

Примечание: Разрешается изменять только серии, относящиеся к текущему проекту. При переключении проектов после начала сбора данных повторная отправка, удаление, прерывание или очистка серий, относящихся к оригинальному проекту, будут невозможны.

Запуск сбора данных

После того как были созданы все серии и рабочие списки и добавлены в Список серий, нажмите кнопку **Start** (Пуск) в ленте меню, чтобы начать сбор данных. Вы также можете начать сбор данных с помощью сканера штрих-кода, если он имеется (дополнительную информацию см. в разделе Starting Acquisitions (Запуск сбора данных) на стр. 83). Воспользуйтесь раскрывающимся меню Start (Пуск), чтобы задать отложенный запуск. Нажмите **Delay Start** (Отложенный запуск) и введите продолжительность задержки для включения таймера обратного отсчета.

Совет: Перед началом сбора данных дважды проверьте, чтобы все планшеты и виалы находились в правильном положении. По мере обработки очереди из списка проб будет меняться значок Status (Состояние) в списке проб:

Значок состояния	Функция
	Ожидание
	Выполняется сбор данных
	Данные успешно собраны
	Сбор данных прерван
	Ошибка сбора данных

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

При выполнении запуска, строка состояния между верхней и нижней панелями будет показывать, что серия запущена, а соответствующие данные в реальном времени будут отображаться на нижней панели.

Когда данные отображаются и выбираются в реальном времени, выбор вкладки в верхней части экрана переключается на просмотр вкладки **Real-Time DataViewer** (Средство просмотра данных в режиме реального времени), что позволяет вам управлять отображаемыми данными с помощью опций ленты меню **Plot and View** График для просмотра), которые включают количество отображаемых графиков, размер графика и создание наложений:

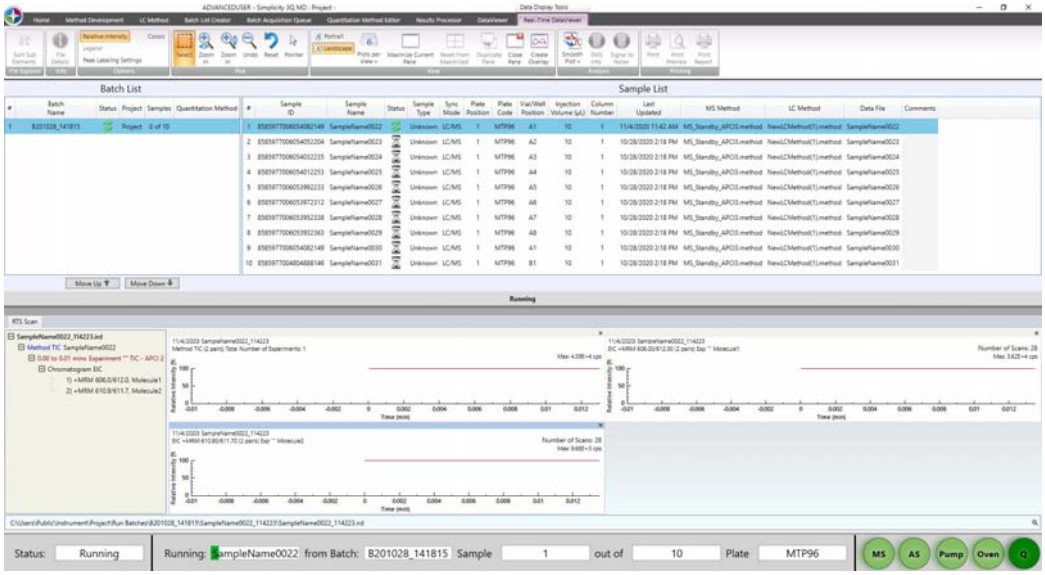


Рисунок 20: Real-Time DataViewer (Средство просмотра данных в режиме реального времени) во время сбора данных

Дополнительные сведения см. в разделе Графический просмотр результатов в DataViewers (Средство просмотра данных) на стр. 101.

Запуск рабочих списков с использованием штрих-кодов

Если ваша система оснащена сканером штрих-кодов, вы можете автоматически выбрать соответствующий рабочий список, просто сканируя штрих-код на планшете с пробами.

Необходимые условия для использования сканера штрих-кодов

Для использования данной функции необходимо выполнить следующие предварительные условия:

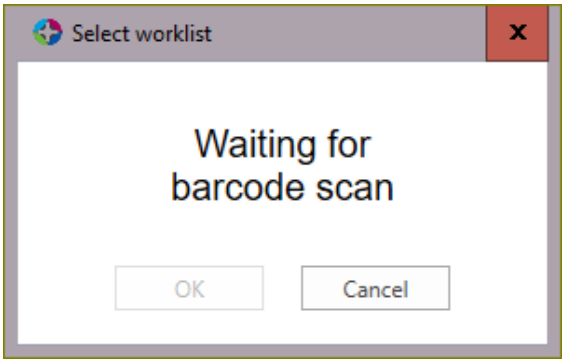
- Протокол был настроен в разделе Параметры очереди (дополнительную информацию см. в разделе Starting Acquisitions (Запуск сбора данных).
- Рабочий список сохранен в папке Worklist для текущего проекта (C:\Users\Public\Instrument\<project name>). Рабочие списки и данные, полученные из рабочего списка, можно хранить на сетевом диске (см. Настройки рабочего списка).
- Считыватель штрих-кодов подключается к прибору.

Загрузка рабочего списка с помощью штрих-кода

После подготовки планшета для проб и настройки методов до начала сбора данных выполните следующую процедуру.

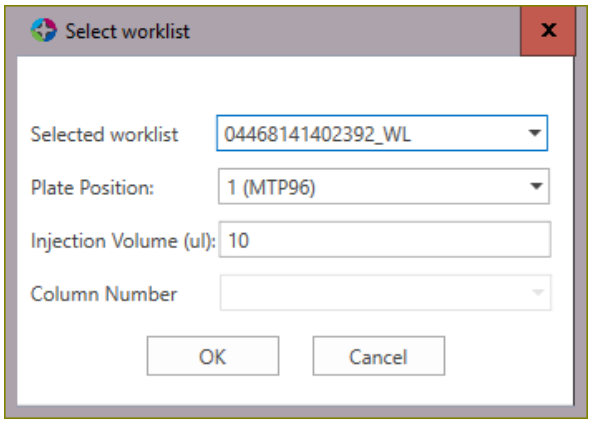
Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

1. Запустите программное обеспечение Simplicity 3Q MD и перейдите на вкладку **Batch Acquisition Queue** (Очередь сбора данных серии) в ленте меню.
2. Нажмите кнопку **Load Worklist** (Загрузить рабочий список), откроется окно **Select Worklist** (Выбор рабочего списка):

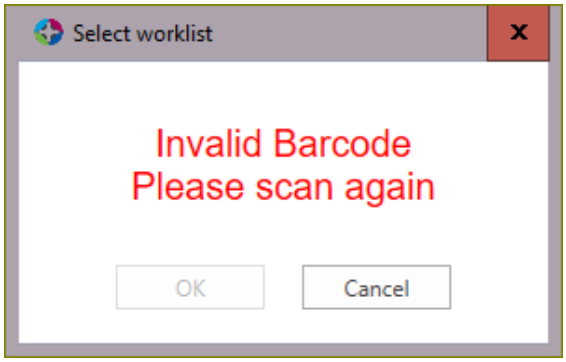


Если в Queue Options (Параметры очереди) не установлены протоколы, появится следующее сообщение: Протоколы должны быть добавлены в Параметры очереди перед сканированием.

3. С помощью сканера штрих-кодов отсканируйте штрих-код на боковой стороне планшета с пробами, затем выберите Положение планшета, Объем ввода пробы и Номер колонки:



Если штрих-код на планшете не совпадает с ожидаемым штрих-кодом, вам будет предложено просканировать планшет еще раз:



4. После ввода данных планшета нажмите **Start** (Пуск) в ленте меню и выберите предпочтительный метод запуска.

Совет: Перед началом сбора данных дважды проверьте, чтобы все планшеты и виалы находились в правильном положении.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Количественная оценка данных и обработка результатов

Данный раздел описывает функции разработки Метода количественного анализа и Обработки результатов. В данном разделе рассмотрены следующие темы:

- Обработка количественных данных
- Руководство по программному обеспечению Редактора методов количественного анализа
- Работа с методами количественного анализа
- Руководство по программному обеспечению Обработчика результатов
- Обработка результатов
- Создание отчетов и экспорт результатов

Обработка количественных данных

В программном обеспечении Simplicity™ 3Q MD количественный анализ и обработка полученных данных является заключительным этапом рабочего процесса анализа. На этапе после обработки количественных данных данные могут быть организованы в отчет или экспортированы в другое приложение (например, MSMS Workstation) для составления отчетов и дальнейшего анализа. Для выполнения этих задач в программе предусмотрены два модуля, которые позволяют:

- Указывать параметры количественного анализа в Методе количественного анализа
- Обрабатывать данных для создания Таблицы результатов

Во время этих процессов программное обеспечение выполняет расчеты на основе аналитов по данным MRM-проб, позволяя вам просматривать и взаимодействовать с графиками данных и хроматограммами.

На экране Quantitation Method Editor (Редактор методов количественного анализа) можно создавать методы количественного анализа, используемые для количественной оценки результатов на вкладке Results Processor (Обработчик результатов). Во вкладке Results Processor (Обработчик результатов) результаты отображаются и могут обновляться в режиме реального времени по мере изменения доступных параметров (таких как сглаживание, метод выбора пиков и т.д.).

Руководство по программному обеспечению Редактора методов количественного анализа

Экран Quantitation Method Editor (Редактор метода количественного анализа) состоит из древовидного списка включенных проб в левой части экрана, панели таблицы данных в правой части, где отображается информация о выбранной пробе, и графического дисплея в нижней части панели, показывающего хроматограмму для выбранной пробы и аналита:

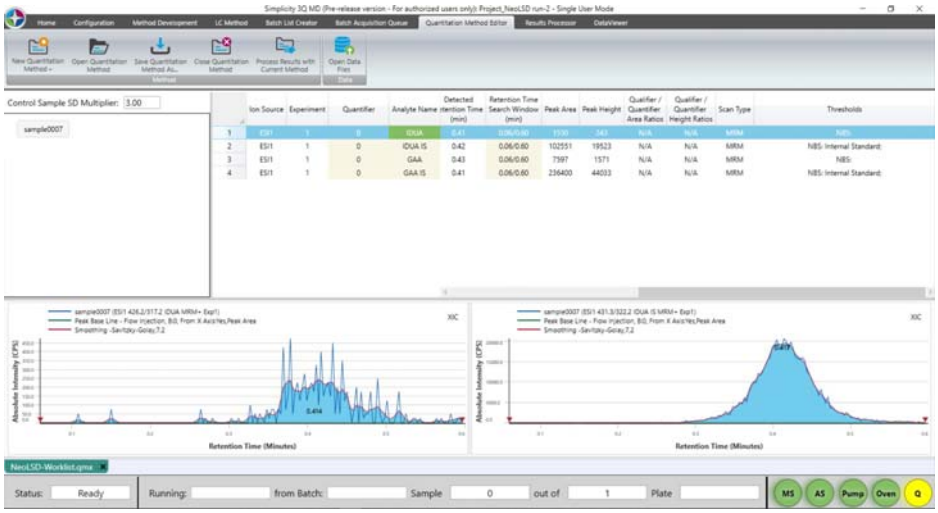


Рисунок 21: Экран Quantitation Method (Метод количественного анализа)

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Элементы управления ленты меню Редактора метода количественного анализа

Примечание: Иконки и опции любой ленты можно скрыть, дважды щелкнув по вкладке выбранной функции в верхней части экрана. Чтобы элементы ленты появились снова, кликните по вкладке еще раз.

Экран Редактора метода количественного анализа	
Группа методов	
	**New Quantitation Method** (Новый метод количественного анализа) (раскрывающееся меню) — Нажмите, чтобы создать новый метод количественного анализа. • **Create New Quantitation Method from Worklist** (Создать новый метод количественного анализа из Рабочего списка — Создает метод количественного анализа из существующего Рабочего списка.
	**Open Quantitation Method** (Открыть метод количественного анализа) —Нажмите, чтобы открыть диалоговое окно Open Quantitation Methods (Открыть методы количественного анализа) и открыть существующий метод. Показаны только методы количественного анализа, относящиеся к активному проекту.
	**Save Quantitation Method As…** (Сохранить метод количественного анализа как ...) — Нажмите, чтобы сохранить метод количественного анализа с новым, уникальным именем (появится диалоговое окно с вопросом, хотите ли вы заменить существующий метод, если указанное имя уже использовано).
	**Close Quantitation Method** (Закрыть метод количественного анализа) — Нажмите, чтобы закрыть текущий метод.
	**Process Results with Current Method** (Обработать результаты текущим методом) — Нажмите, чтобы обработать результаты (рассчитать данные) с помощью текущего (открытого и активного) метода количественного анализа. Появится диалоговое окно, в котором можно выбрать нужные пробы.
Группа данных	
	**Open Data Files** (Открыть файлы данных) — Нажмите, чтобы открыть данные пробы, которые будут использованы в качестве основы для нового метода количественного анализа.

Функции управления Таблицей данных Редактора Метода количественного анализа

В дополнение к функциям ленты меню, на этом экране также имеются команды, специфичные для панели таблицы данных, доступ к которым осуществляется щелчком правой кнопки мыши в таблице данных.

Щелкните правой кнопкой мыши	Функция управления
Edit	Редактировать содержимое ячейки
Copy	Копировать выделенные ячейки или строки в буфер обмена
Paste	Вставить содержимое буфера обмена в выбранную ячейку
Paste Cell To All Below	Вставить содержимое буфера обмена в сторону понижения, начиная с выбранной ячейки
Paste To All Selected	Вставить содержимое буфера обмена во все выбранные ячейки
Delete Row(s)	Удаляет выбранную строку (строки)

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteya.by; e-mail: amalteya@tut.by; amalteyaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Колонки таблицы данных Редактора метода количественного анализа

Первые четыре колонки таблицы Quantitation Method (Метод количественного анализа) зафиксированы, поэтому вы всегда можете видеть, к чему относится видимая информация - к **Ion Source** (Источник ионов), **Experiment** (Эксперимент), **Quantifier** (Квантификатор) и **Analyte Name** (Имя аналита) при прокрутке вправо и влево для просмотра дополнительных колонок.

Некоторые колонки могут быть скрыты, кликните правой кнопкой мыши в строке заголовка и выберите **Show/Hide Columns** (Показать/Скрыть колонки), чтобы открыть окно, в котором можно добавить или удалить колонки из таблицы. Некоторые колонки могут быть не указаны, в зависимости от метода MC, использованного для сбора данных.

Примечание: Выбранные поля можно изменить, щелкнув по ячейке в таблице. Если значение можно изменить, откроется окно, в которое можно внести изменения, либо вы можете ввести текст непосредственно в ячейку.

Ion Source (Источник ионов): Указывает зонд, используемый в методе MS.

Experiment (Эксперимент): Указывает номер эксперимента из связанного метода MS.

Quantifier (Квантификатор): Указывает номер группы.

Analyte Name (Имя аналита): Отображает интересующий аналит.

Relative Response Factor (Коэффициент относительной чувствительности): Отображает коэффициент относительной чувствительности прибора, который представляет собой множитель, используемый для нормализации данных по нескольким приборам в одной лаборатории. Это значение должно быть установлено на единицу (1), если только вы не провели необходимые эксперименты для расчета значения для каждого аналита на каждой машине в вашей лаборатории. При возникновении вопросов обратитесь к представителю службы поддержки клиентов уполномоченного представителя.

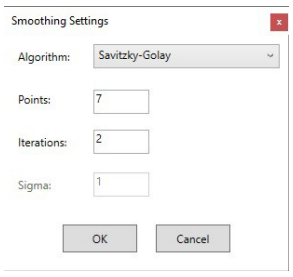
Mass Transition Q1/Q3 (Переход массы Q1/Q3): Отображает переходы массы Q1/Q3.

Analyte Type (Тип аналита): Указывает назначение данной пробы в анализе; чтобы изменить его, дважды кликните в ячейке, а затем выберите вариант из выпадающего списка. Компоненты могут использоваться в качестве квалификаторов, квантификаторов или внутренних стандартов (IS).

Internal Standard (Внутренний стандарт): Чтобы использовать пробу в качестве внутреннего стандарта, убедитесь, что IS выбран в качестве типа аналита. Назначьте внутренний стандарт пробе, щелкнув ячейку Внутренний стандарт для вашей пробы, а затем выберите нужный стандарт из раскрывающегося меню. Вы можете назначить Внутренний стандарт только пробам с типами аналитов Qualifier (Квалификатор) или Quantifier (Квантификатор). При назначении внутреннего стандарта, для каждого пика программное обеспечение оценивает площадь пика как для пробы, так и для внутреннего стандарта, а затем рассчитывает измеренное значение (обычно равное рассчитанной концентрации).

Internal Standard Concentration (Концентрация внутреннего стандарта): Отображает концентрацию внутреннего стандарта пробы. Для редактирования данного поля Тип аналита должен быть установлен на внутренний стандарт.

Smoothing (Сглаживание): Отображает выбранный алгоритм сглаживания (если таковой имеется) вместе с любыми заданными параметрами, такими как количество точек и заданных итераций. Для изменения настроек сглаживания для данной пробы, дважды кликните в соответствующей ячейке **Smoothing** (Сглаживание); появится диалоговое окно **Quantitation Method Settings** (Настройки метода количественного анализа) с выбранной вкладкой **Smoothing** (Сглаживание):

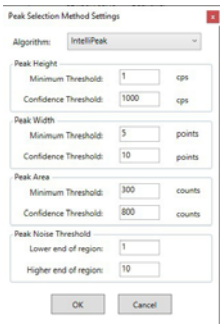


В выпадающем списке **Algorithm** (Алгоритм) выбрать желаемый алгоритм сглаживания — Скользящее среднее значение, Гаусса, Савицкого-Голея или Без сглаживания (по умолчанию выбрано Скользящее среднее значение). В зависимости от выбранного вами параметра, ниже будут включены различные настройки — отрегулируйте все доступные настройки по своему усмотрению. Для применения одинаковых настроек алгоритма сглаживания ко всем пробам или аналитам в вашем наборе пробе, кликните правой кнопкой мыши в ячейке таблицы и выберите **Paste Cell**

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

to All Below (Вставить ячейку во все нижележащие ячейки). (Аналогичные опции заполнения доступны по щелчку правой кнопки мыши по меню большинства редактируемых ячеек).

Peak Selection Method (Метод выбора пика): Отображает выбранный алгоритм выбора пика (если таковой имеется), а также цифровую сводку любых заданных параметров и номер версии внутреннего алгоритма. Для изменения настройки выбора пиков для данной пробы, дважды кликните в соответствующей ячейке **Smoothing** (Сглаживание); появится диалоговое окно **Quantitation Method Settings** (Настройки метода количественного анализа) с выбранной вкладкой **Peak** (Пик):



В выпающем списке **Algorithm** (Алгоритм) выберите желаемый метод — IntelliPeak, Slope Max. Area (макс. площадь уклона), Slope Max. Height (макс. высота уклона), V-V Max. Area (макс. площадь между долинами), или V-V Max. Height (макс. высота между долинами) (по умолчанию выбран режим IntelliPeak). В зависимости от выбранного вами параметра, ниже будут включены различные настройки — настройте все доступные параметры по своему усмотрению. Чтобы применить одинаковые настройки выделения пиков ко всем пробам или аналитам в вашем наборе проб, кликните правой кнопкой мыши в ячейке таблицы и выберите **Paste Cell to All Below** (Вставить во все нижележащие ячейки) (аналогичные опции заполнения существуют в меню правой кнопки мыши большинства редактируемых ячеек).

Retention Time (min) (Обнаруженное время удерживания (мин)) Указывает обнаруженное время удерживания в минутах. Если текущее время удерживания не обнаружено, в ячейке отобразится Н/Д.

Retention Time Search Window (min) (Окно поиска времени удерживания (мин)) Указывает заданное вами окно поиска времени удерживания и управляет масштабом оси x в некоторых графиках. Чтобы задать окно поиска времени удерживания, кликните в ячейке и введите диапазон времени (в минутах) в формате X.Y. Вы также можете определить окно поиска с помощью графика — на графике в нижней части экрана нажмите кнопку **Ctrl** , а затем кликните и перетащите курсор по графику, чтобы определить параметры визуально. Вы можете применить данное значение к каждой ячейке таблицы, щелкнув правой кнопкой мыши на первую запись, а затем выбрать **Paste Cell to All Below** (Вставить во все нижележащие ячейки), чтобы скопировать настройки вниз по колонке.

Peak Area (Площадь пика): Отображает обнаруженную площадь пика. Если текущая область не обнаружена, в ячейке отобразится Н/Д.

Peak Height (Высота пика): Отображает обнаруженную высоту пика. Если текущая высота не обнаружена, в ячейке отображается Н/Д.

Qualifier/Quantifier Area Ratios (Соотношение площадей квалификатора и квантификатора): Отображает соответствующие коэффициенты площади квалификатора и квантификатора. Если коэффициент не рассчитывается, в ячейке отображается Н/Д.

Qualifier/Quantifier Height Ratios (Соотношения высоты квалификатора и квантификатора): Отображает соответствующие соотношения высоты квалификатора и квантификатора. Если коэффициент не рассчитывается, в ячейке отображается Н/Д.

Scan Type (Тип сканирования): Указывает тип сканирования и полярность, используемые в соответствующем методе MC.

Standard Curve Parameters (Параметры стандартной кривой): Отображает текущие настройки для построения Стандартной кривой. Чтобы открыть диалоговое окно Параметры стандартной кривой, дважды кликните по ячейке. Здесь вы можете определить все настройки графика: выбрать соотношение площади к площади или высоты к высоте; посмотреть тип регрессии (линейная); выбрать взвешивание (NoWt, 1/X или 1/X2). Чтобы применить одинаковые настройки ко всем аналитам в таблице, установите флажок **Apply to all analytes** (Применить ко всем аналитам). Чтобы сбросить Параметры стандартной кривой, кликните по **Default Settings** (Настройки по умолчанию).

Thresholds (Пороговые значения): Отображает верхний и нижний параметры флажков для пробы, введенные в MSMS Workstation.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Множитель стандартного отклонения контрольной пробы

Примечание: Множитель стандартного отклонения контрольной пробы доступен только при получении данных из Рабочего списка.

Множитель среднеквадратического отклонения (SD) контрольной пробы находится в верхней левой части экрана Редактора метода количественного анализа, сразу под лентой меню. Во время создания Метода количественного анализа данное значение можно изменить, щелкнув в текстовом поле и введя желаемое значение (по умолчанию 3,00).

Множитель среднеквадратического отклонения контрольной пробы представляет собой количество стандартных отклонений между целевым значением и нижним или верхним пределом (для получения более подробной информации см. Колонки таблицы данных Обработчика результатов).

Работа с методами количественного анализа

На экране Quantitation Method Editor (Редактор метода количественного анализа) можно загрузить существующий метод количественного анализа или создать новый метод на основе одного или нескольких полученных файлов данных.

Создание нового метода количественного анализа

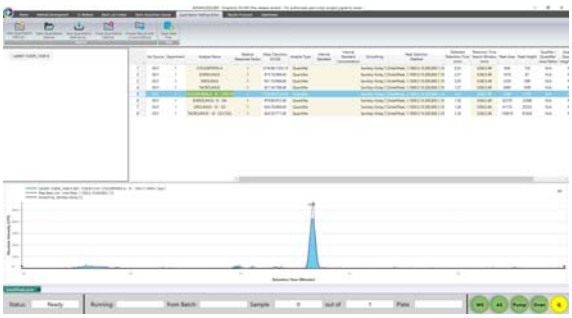
1. В ленте меню экрана **Quantitation Method Editor** (Редактор метода количественного анализа) выбрать **New Quantitation Method** (Новый метод количественного анализа), или нажать на маленькую стрелку вниз, затем щелкнуть на **New Quantitation Method** (Новый метод количественного анализа) из Worklist (Рабочий список). Откроется шаблон метода количественного анализа и заполнит экран настройками по умолчанию.
2. Измените настройки в таблице методов количественного анализа по своему усмотрению. По завершению в ленте меню кликните
Save Quantitation Method As (Сохранить метод количественного анализа как). Метод количественного анализа будет сохранен в том же проекте, что и пробы, с именем по умолчанию NewMethod-1. Вы можете оставить это имя или ввести уникальное имя и сохранить.
3. Измените настройки в таблице методов количественного анализа по своему усмотрению. По завершению в ленте меню кликните
Save Quantitation Method As (Сохранить метод количественного анализа как). Метод количественного анализа будет сохранен в том же проекте, что и пробы, с именем по умолчанию NewMethod-1. Вы можете оставить это имя или ввести уникальное имя и сохранить.

Как открыть существующий метод количественного анализа

1. В **ленте меню экрана Quantitation Method Editor** (Редактор метода количественной оценки) нажмите **Open Quantitation Method** (Открыть метод количественного анализа). Появится диалоговое окно **Open Quantitation Method** (Открыть метод количественного анализа)**.**
2. Найдите и выберите нужный метод количественного анализа, а затем кликните **Open** (Открыть).
3. Измените настройки метода по желанию, а затем кликните **Save Quantitation Method As (Сохранить метод количественной оценки как).** и введите уникальное имя для данного метода.

Определение параметров количественного анализа для интересующего пика

1. На экране Quantitation Method Editor (Редактор метода количественного анализа) в таблице данных найдите и дважды кликните по нужной ячейке в столбце Analyte type (Тип аналита) для интересующего перехода MRM с целью определения типа — Quantifier (Квантификатор), Qualifier (Квалификатор) или IS (Internal Standard) (Внутренний стандарт):



Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

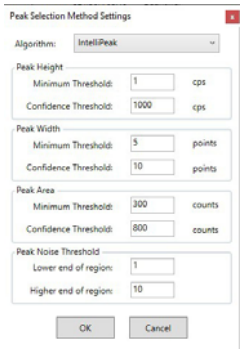
2. Для назначения **Internal Standard** (Внутренний стандарт) соответствующему аналиту, нажмите на ячейку в колонке **Internal Standard** (Внутренний стандарт) и выберите соответствующий внутренний стандарт из раскрывающегося меню.

Примечание: Концентрация Внутреннего стандарта должна быть установлена в строке Internal Standard (Внутренний стандарт), а не в строке Analyte (Аналит). Например, если AnalyteA (АналитА) использует AnalyteA_IS (АналитА_IS) в качестве внутреннего стандарта, установите концентрацию в строке, относящейся к AnalyteA_IS.

3. Если необходимо задать алгоритм сглаживания, дважды кликните по нужной ячейке в колонке **Smoothing** (Сглаживание) — появится диалоговое окно **Smoothing Settings** (Параметры сглаживания).

В выпадающем списке **Algorithm** (Алгоритм) необходимо выбрать желаемый алгоритм сглаживания — Скользящее среднее значение, Гаусса, Савицкого-Голея или Без сглаживания (по умолчанию выбрано Скользящее среднее значение). В зависимости от выбранного вами параметра, ниже будут включены различные настройки — отрегулируйте все доступные настройки по своему усмотрению. Тип для указания количества Точек для Сглаживания и количества Итераций (допустимые диапазоны для каждого параметра отличаются в зависимости от выбранного алгоритма сглаживания). При выборе алгоритма Гаусса дополнительная опция Sigma также становится доступной. Для того, чтобы применить одинаковые настройки алгоритма сглаживания ко всем аналитам в вашем наборе проб, кликните правой кнопкой мыши в ячейке таблицы и выберите **Paste Cell to All Below** (Вставить во все нижележащие ячейки) (аналогичные опции заполнения существуют в меню правой кнопки мыши большинства редактируемых ячеек).

4. Для определения настроек пика дважды кликните по соответствующей ячейке в колонке Peak Selection Method (Метод выбора пика).



В выпающем списке **Algorithm** (Алгоритм) выбрать нужный метод - IntelliPeak, Уклон по площади, Уклон по высоте, Точка минимума - Точка минимума по площади, или Точка минимума - Точка минимума по высоте (IntelliPeak выбран по умолчанию). В зависимости от выбранного вами параметра, ниже будут включены различные настройки — настройте все доступные параметры по своему усмотрению. В каждом разделе **Slope by Height** (Уклон по высоте), **Slope by Area** (Уклон по площади), **Valley - Valley by Height** (Точка минимума - Точка минимума по высоте) и **Valley - Valley by Area** (Точка минимума - Точка минимума по площади) необходимо задать Минимальную высоту пика и Минимальную ширину пика, чтобы указать количество импульсов или точек, которые должны быть достигнуты, прежде чем пик появится в программе. В каждом разделе **Intellipeak** необходимо установить минимальное пороговое значение и пороговое значение достоверности в импульсах в секунду (cps, имп/с). Все обнаруженные значения должны превышать указанное Минимальное пороговое значение для того, чтобы был объявлен пик; и все значения должны превышать выбранное Пороговое значение достоверности, чтобы пик был объявлен с Высокой достоверностью. (Любые пики, которые соответствуют минимальному пороговому значению, но не пороговому значению достоверности, будут помечены как пики с Низкой достоверностью; вы можете просмотреть их при просмотре результатов). Настройки **Порогового значения пикового шума** позволяют определить область фонового шума, за пределами которой будут оцениваться пики. В полях **Нижний конец области** и **Верхний конец области** введите или кликните мышью, чтобы определить границы области фонового шума. Программное обеспечение будет оценивать все сигналы, обнаруженные за этими границами, в сочетании с другими факторами алгоритма, чтобы найти соответствующие пики. Для того, чтобы применить одинаковые настройки выбора пиков ко всем аналитам в вашем наборе проб, кликните правой кнопкой мыши в ячейке таблицы и выберите **Paste Cell to All Below** (Вставить во все нижележащие ячейки) (аналогичные опции заполнения существуют в меню правой кнопки мыши большинства редактируемых ячеек). Нажмите **OK**, чтобы сохранить настройки и выйти из диалогового окна.

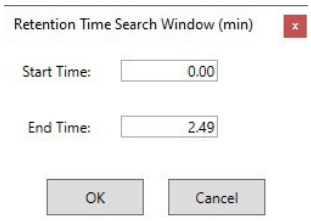
Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

5. После определения нужных вам параметров, нажмите **Save Quantitation Method As...** (Сохранить метод количественного анализа как...), чтобы сохранить метод.

Определение окна поиска времени удерживания

Окно поиска времени удерживания контролирует масштаб оси x на некоторых графиках, что может повлиять на некоторые другие значения. Для изменения данного значения, выполните описанные ниже действия:

1. Введите диапазон времени в формате (x.y), ИЛИ перейдите к хроматограмме и перетащите указатель мыши через интересующий пик, удерживая нажатой клавишу **Ctrl**.
2. Дважды кликните по желаемой ячейки в колонке **Retention Time Search Window** (Окно поиска времени удерживания) (или определите ее в **Results Processor** (Обработчик результатов).
3. Введите желаемое время Начала и Окончания в диалоговом окне:



4. После определения нужных вам параметров, нажмите **Save Quantitation Method As...** (Сохранить метод количественного анализа как...), чтобы сохранить метод.

Обработка серии проб

1. В ленте меню **Quantitation Method Editor** (Редактор метода количественного анализа) создайте новый метод количественного анализа или откройте существующий метод количественного анализа.
2. Нажмите **Open Data Files** (Открыть файлы данных) и выберите нужные пробы. Для выбора нескольких проб удерживайте клавиши **Shift** или **Control** (CTRL).

Щелкните Open (Открыть), чтобы загрузить пробы в панель таблицы данных. При необходимости внесите любые изменения в метод количественного анализа и нажмите **Save Quantitation Method As...** (Сохранить Метод количественного анализа как...), чтобы сохранить изменения.

3. После того, как вы выбрали нужный вам метод количественного анализа и все свои пробы, нажмите **Process Results with Current Method** (Обработать результаты с помощью текущего метода), чтобы проанализировать свои пробы.

Теперь результаты можно просмотреть на вкладке **Results Processor** (Обработчик результатов), где вы можете просмотреть хроматограммы ваших аналитов. Вы можете выбрать просмотр аналитов **By Analyte** (По аналиту) или **By Sample** (По пробе).

Для просмотра по аналитам выберите аналит из набора данных — программа отобразит все пробы для данного аналита. Для просмотра по пробам выберите номер пробы — программа отобразит все аналиты для данной пробы.

Руководство по программному обеспечению Обработчика результатов

Экран Results Processor (Обработчик результатов) состоит из трех или четырех панелей, в зависимости от данных, присутствующих в Таблице результатов:

- На верхней левой панели отображается список всех элементов в Таблице результатов. Панель имеет две вкладки, которые позволяют упорядочить список либо по Пробе, либо по Аналиту. Также имеется флажок Hide IS Rows (Скрыть строки внутреннего стандарта).
- На верхней правой панели отображается таблица данных, в которой отображается информация о выбранной пробе/аналите. Некоторые колонки могут быть скрыты, кликните правой кнопкой мыши в строке заголовка и выберите **Show/Hide Columns** (Показать/Скрыть колонки), чтобы открыть окно, в котором можно добавить или удалить колонки из таблицы.
- На панели в нижней части экрана отображаются хроматограмма(ы) для выбранной пробы/аналита. Если вы назначили внутренний стандарт для пробы/аналита, обе хроматограммы будут отображаться рядом.
- В зависимости от проб/аналитов в Таблицах результатов, в левой нижней части экрана может появиться панель калибровочной кривой.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Элементы управления лентой меню Обработчика результатов

Примечание: Иконки и опции любой ленты можно скрыть, дважды щелкнув по вкладке выбранной функции в верхней части экрана. Чтобы элементы ленты появились снова, кликните по вкладке еще раз.

Экран Results Processor (Обработчик результатов)(доступен всем пользователям)	
Группа результатов	
	Open Results Table (Открыть таблицу результатов) —Открывает существующую таблицу результатов из выбранного местоположения файла. Появится диалоговое окно, в котором можно выбрать нужный файл.
	Save As … (Сохранить как ...) — Щелкните, чтобы открыть окно запроса, в котором можно задать новое имя для таблицы результатов.
	Close Results Table (Закрыть таблицу результатов) —Щелкните, чтобы закрыть текущую активную таблицу результатов.
	Export Results (Экспорт результатов) (раскрывающееся меню) — Щелкните, чтобы экспортировать результаты одним из следующих способов: • В Excel (Все аналиты): Экспортирует результаты для всех проб, где каждый результат количественного анализа отображается в отдельном рабочем листе Excel. **Примечание:** Рабочий лист для экспорта всех Аналитов содержит сводные вкладки для всех аналитов и проб в каждом наборе данных. • В Excel (Только текущий Аналит/Проба): Экспортирует результаты для текущей (единственной) пробы. • На рабочую станцию MC/MC: Экспортирует результаты рабочего списка на Рабочую станцию MC/MC. • Экспорт видимых колонок: Экспортирует видимые колонки для выбранного в данный момент аналита(аналитов) или пробы(проб) в файл данных .XLSX Excel.
	Экспорт в PDF — Щелкните, чтобы экспортировать результаты проб в защищенный формат PDF.

Функции управления Таблицей данных Обработчика результатов

В дополнение к функциям ленты меню, на этом экране также имеются команды, специфичные для панели таблицы данных, доступ к которым осуществляется щелчком правой кнопки мыши в таблице данных.

Щелкните правой кнопкой мыши	Функция управления
Copy	Копировать выделенные ячейки или строки в буфер обмена
Paste	Вставить содержимое буфера обмена в выбранную ячейку
Paste Cell To All Below	Вставить содержимое буфера обмена в сторону понижения, начиная с выбранной ячейки
Paste To All Selected	Вставить содержимое буфера обмена во все выбранные ячейки

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Колонки таблицы данных Обработчика результатов

Первые три колонки таблицы **Results Processor** (Обработчик результатов) зафиксированы, поэтому вы всегда можете видеть, к чему относится видимая информация - к **Ion Source** (Источник ионов), **Experiment** (Эксперимент) и **Analyte Name** (Имя аналита) при прокрутке вправо и влево для просмотра дополнительных колонок.

Некоторые из колонок таблицы Results Processor (Обработчик результатов) идентичны колонкам таблицы данных Методов количественного анализа (более подробная информация приведена в разделе Функции управления Таблицей данных редактора методов количественного анализа на стр. 88); здесь описаны только колонки, отсутствующие в таблице данных Методов количественного анализа.

Sample Name (Имя пробы):	Отображает имя пробы, введенное на вкладке Создание списка серии.
Sample ID (Идентификатор пробы):	Отображает уникальный идентификатор пробы, присвоенный на вкладке Создание списка серий.
Include (Включить):	Установите этот флажок, чтобы включить пробу в стандартную кривую и в любые расчеты.
Sample Type (Тип пробы):	Отображает тип пробы, введенный на вкладке Создание списка серий. Дважды кликните по ячейке, чтобы изменить тип пробы (выберите из следующего: Blank (Пустой), Double Blank (Двойной пустой), Quality Control) Контроль качества), Standard (Стандарт), Solvent (Растворитель) и Unknown (Неизвестный).
Measured Value (Измеренное значение) (калибровка по одной точке):	Отображает рассчитанное значение с использованием назначенного Внутреннего стандарта. Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
Internal Standard Peak Area (Внутренний стандарт – Площадь пика):	Отображает площадь пика в экспоненциальном представлении.
Internal Standard Peak Height (Внутренний стандарт – Высота пика):	Отображает высоту пика в экспоненциальном представлении.
Peak Area Ratio (Соотношение площади пика):	Отображает соотношение площади пика аналита к площади пика назначенного внутреннего стандарта. Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
Peak Height Ratio (Соотношение высоты пика):	Отображает соотношение высоты пика аналита к высоте пика назначенного внутреннего стандарта. Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
Method File (Файл метода):	Отображает Метод количественного анализа, использованный для обработки пробы.
Known Concentration (Известная концентрация):	Отображает концентрацию внутреннего стандарта, введенную в MSMS Workstation (Рабочая станция MC/MC). Если значение не было введено, в ячейке будет отображаться Н/Д.
Concentration Unit (Единица измерения концентрации):	Отображает единицы измерения значения Известной концентрации, введенного в MSMS Workstation (Рабочая станция MC/MC). Если значение не вычисляется, ячейка будет пустой.
Concentration by Area/Area Ratio (Концентрация по соотношению площади к площади) (многоточечная):	Отображает концентрацию, рассчитанную по калибровочной кривой с использованием соотношения площади пика аналита к площади пика внутреннего стандарта. Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
Concentration by Height/Height Ratio (Концентрация по соотношению высоты к высоте) (многоточечная):	Отображает концентрацию, рассчитанную по калибровочной кривой с использованием соотношения высоты пика аналита к высоте пика внутреннего стандарта. Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
Retention Time (Время удерживания):	Отображает значение времени удерживания при максимальной высоте пика.
Retention Time Deviation (Отклонение времени удерживания) %:	Отображает отклонение, выраженное в процентах, между фактическим и ожидаемым Временем удерживания. Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
Internal Standard Retention Time (Внутренний стандарт – Время удерживания):	Отображает значение Времени удерживания назначенного Внутреннего стандарта. В ячейке значение будет отображаться только для типов аналитов, обозначенных как внутренние стандарты; для всех остальных типов аналитов будет отображаться Н/Д.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Average Peak Height (Средняя высота пика):	Отображает среднее значение высоты пика для всех одинаковых аналитов. Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
Average IS Peak Height (Внутренний стандарт средней высоты пика):	Отображает среднее значение высоты пика для всех одинаковых внутренних стандартов. Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
Sample Accuracy % (Area) (Точность пробы % (Площадь)):	Отображает точность в процентах, рассчитанную по площади пика в сравнении с Целевым значением. Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
Sample Accuracy % (Height) (Точность пробы % (Высота)):	Отображает точность в процентах, рассчитанную по высоте пика в сравнению с Целевым значением. Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
CV% (Area/Area Ratio) (CV% – Соотношение площадь к площади):	Отображает Коэффициент вариации, рассчитанный по площади пика (Для получения дополнительной информации см. раздел Коэффициент вариации). Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
CV% (Height/Height) (CV% – Соотношение высоты к высоте):	Отображает Коэффициент вариации, рассчитанный с использованием высоты пика (Для получения дополнительной информации см. раздел Коэффициент вариации). Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
Target value (Целевое значение):	Отображает Целевое значение, введенное в MSMS Workstation (Рабочая станция MC/MC). Если значение не введено, в ячейке отображается Н/Д.
Low Limit (Нижний предел):	Отображает значение Нижнего предела, рассчитанное на основе Целевого значения (нижний предел = целевое значение - множитель SD*SD). Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
High Limit (Верхний предел):	Отображает значение Верхнего предела, рассчитанное на основе Целевого значения (верхний предел = целевое значение + SD множитель*SD). Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.
Signal To Noise Ratio (Соотношение сигнала к шуму):	Отображает соотношение сигнала к шуму, автоматически рассчитываемое программным обеспечением (Для получения дополнительной информации см. раздел Сигнал/шум). Если значение не вычислено, в ячейке отображается Н/Д.

Коэффициент вариации

Коэффициент вариации (CV) рассчитывается автоматически программным обеспечением как для стандартных проб, так и для проб контроля качества. CV рассчитывается и отображается в двух колонках: Соотношение площади к площади и соотношение высоты к высоте. Для того чтобы отображался Коэффициент вариации, две или более пробы должны иметь следующие общие черты:

- Значения в колонке Sample Type (Тип пробы) должны совпадать.
- Значения в колонке Known Concentration (Известная концентрация) должны совпадать.
- Только стандартные пробы: колонка Include (Включить) отмечена.

Включение и исключение проб приведет к тому, что программное обеспечение пересчитает CV. Колонки также можно экспортировать (Для получения дополнительной информации см. раздел Generating Reports and Exporting Results на стр. 96 (Генерация отчетов и экспорт результатов).

Примечание: Если колонки CV (Коэффициент вариации) или Include (Включить) не видны в Таблице результатов, вам необходимо отобразить их, щелкнув правой кнопкой мыши на верхней строке и выбрав меню Show/Hide Columns (Показать/Скрыть колонки).

Сигнал к шуму

Значения соотношения сигнала к шуму (S/N) будут автоматически рассчитаны в Обработчике результатов для проб из Серий или Рабочих списков, которые были обработаны с помощью действительного Метода количественного анализа. Настройка Параметров сглаживания и Метода выделения пиков вызовет автоматический перерасчет значений сигнала к шуму. В случае, если программа
не может рассчитать значения сигнала к шуму, она отобразит "Н/Д". Значения сигнала к шуму также можно рассчитать вручную на вкладках DataViewer (более подробную информацию см. в разделе Отображение значений сигнала к шуму на стр. 104).

Примечание: Если колонки сигнала к шуму не видны в Таблице результатов, вам может понадобиться отобразить их, щелкнув правой кнопкой мыши на верхней строке и выбрав в меню Показать/Скрыть колонки.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Обработка результатов

Просмотр аналитов, графиков калибровочных кривых и просмотр результатов количественного анализа

После загрузки и обработки данных вы можете выполнить несколько действий, чтобы уточнить и улучшить просмотр результатов.

1. Откройте экран **Results Processor (Обработчик результатов).**
2. Щелкните **By Analyte** (По аналиту), чтобы просмотреть хроматограммы всех обработанных проб:



3. Выделите интересующий вас аналит. Появится соответствующая калибровочная кривая.
4. Выделите интересующую вас пробу. Соответствующая хроматограмма отображается справа внизу.
5. Дважды кликните по соответствующей ячейке, чтобы открыть диалоговое окно **Standard Curve Parameters** (Параметры стандартной кривой). В поле **Regression** (Регрессия) выберите алгоритм подгонки линейной регрессии, и укажите соответствующий коэффициент взвешивания.
6. Нажмите **OK** , чтобы обновить график калибровочной кривой для выбранного компонента.
7. Интерпретация данных:

• При назначении внутреннего стандарта, для каждого пика программное обеспечение оценивает площадь пика как для пробы, так и для внутреннего стандарта, а затем рассчитывает измеренное значение (обычно равное рассчитанной концентрации).

• Если требуется ручная интеграция, удерживайте клавишу **Shift** (над курсором появится надпись**Manual Integration** (Ручная интеграция)) и кликните левой кнопкой мыши и перетащите мышь по интересующему вас пику. При этом в области, очерченной курсором мыши, отображается базовая линия, сделанная вручную, а вертикальные маркеры и пули конечных точек показывают, где именно вы размещаете пересмотренную базовую линию. Конечные точки автоматически привязываются к ближайшей точке на обнаруженной кривой (при этом система сохраняет выбранный уровень масштабирования, использованный при ручной интеграции для каждой пробы). Для отмены ручной интеграции (вернуться к исходному расчетному отображению), отмените выбор опции в Таблице результатов или в меню, щелкнув правой кнопкой мыши.

8. Когда все будет готово, в ленте меню нажмите **Save Results** (Сохранить результаты), чтобы сохранить обработанные результаты.

Создание отчетов и экспорт результатов

Экспорт результатов в Microsoft Excel

После создания таблицы результатов вы можете экспортировать ее в Microsoft Excel в различных конфигурациях.

1. В ленте меню **Results Processor (Обработчик результатов)** нажмите **Export Results** (Экспорт результатов).
2. Выберите способ экспорта данных:

В Excel (Все аналиты)	Используйте данный формат для создания файла данных .XLSX Excel со всеми полученными аналитами. Файл Excel содержит сводные страницы По Аналитам и По Пробам, а также отдельные страницы по каждому Аналиту в таблице результатов.
В Excel (Только текущий Аналит/Проба)	Используйте данный формат для создания файла данных .XLSX Excel, содержащего данные для текущего выбранного аналита или пробы.
На Рабочую станцию MS/MS	Экспортирует результаты рабочего списка на Рабочую станцию MC/MC.
Экспорт видимых колонок	Используйте данный формат для создания файла данных .XLSX Excel со всеми видимыми колонками для выбранного текущего аналита(аналитов) или пробы(проб).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Экспорт результатов в формате PDF

После создания таблицы результатов можно создать отчет в формате .PDF по всем пробам в Рабочем списке/серии. Отчет организован по пробам и содержит важную информацию по получению и методам. Данный PDF файл не редактируемый и предназначен для записи достоверности данных.

Заголовок для каждой пробы организован следующим образом:

Название результата	Название проекта
Имя пробы	Время получения
Проба получена через	Время предоставления отчета
Отчет создан	Метод МС
Положение виалы	Метод ЖХ
Объем инъекции (мкл)	Метод количественной оценки
Тип пробы	Версия программного обеспечения
Штрих-код планшета*	Модель прибора
Серийный номер прибора	

*Рабочие списки запускаются только с помощью штрих-кода

Также прилагается график зависимости Абсолютной интенсивности (п/с) от Времени удерживания (минуты) и сводная таблица данных. Для экспорта результатов в формат PDF, выполните описанные ниже действия:

1. Запустите программу Simplicity и откройте соответствующий Проект, затем перейдите на вкладку **Results Processor** (Обработчик результатов).
2. Откройте Таблицу результатов, для которой вы хотите экспортировать, нажав на **Open Results Table** (Открыть таблицу результатов), затем перейдите в папку, содержащую Таблицу результатов.

Внесите любые изменения, а затем сохраните свою работу, нажав **Save As...** (Сохранить как...) в ленте меню.

3. В ленте меню Results Processor (Обработчик результатов) нажмите **Export To PDF** (Экспорт в PDF). Откроется диалоговое окно Save As (Сохранить как).
4. Выберите папку, в которой будет сохранен PDF файл, и имя файла для вашего отчета. Нажмите **Save** (Сохранить), когда выполните все действия.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Просмотр, рецензирование и построение графиков данных

В данном разделе описывается, как просматривать результаты и как работать с данными на графике. В данном разделе рассмотрены следующие темы:

- Графический просмотр результатов в DataViewers (Средство просмотра данных)
- Для работы с графиками в DataViewer (Средство просмотра данных)
- Наложение графиков
- Отображение значений сигнала к шуму

Элементы управления ленты меню DataViewer (Средство просмотра данных)

Примечание: Иконки и опции любой ленты можно скрыть, дважды щелкнув по вкладке выбранной функции в верхней части экрана. Чтобы элементы ленты появились снова, кликните по вкладке еще раз.

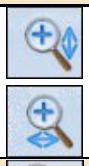
В колонке ниже:

1. Используйте экран DataViewer (Средство просмотра данных) для просмотра данных, которые уже были получены.

2. Используйте Real-Time DataViewer (Средство просмотра данных в режиме реального времени) для просмотра данных в процессе их получения. В Real-Time DataViewer (Средство просмотра данных в режиме реального времени) используются те же элементы управления, что и в DataViewer (Средство просмотра данных), но он доступен только во время сбора данных. Данную панель можно просмотреть только при работе с экрана Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии).

Экран DataViewer (Средство просмотра данных) и экран Real-Time DataViewer (Средство просмотра данных в режиме реального времени)	
Группа файлов	
	**Open Data** (Открыть данные) — Щелкните, чтобы открыть существующие пробы и загрузить соответствующие данные в окно.
	**Close** (Закрыть) — Щелкните, чтобы закрыть активный набор данных и его отображаемые графики.
	**Close All** (Закрыть все) — Щелкните, чтобы закрыть все пробы, загруженные в данный момент (те, что перечислены в левой панели), а также все отображаемые графики.
Группа проводника файлов	
	**Sort Sub Elements** (Сортировать субэлементы) — Щелкните, чтобы отсортировать список MRM на основе номера, массы Q1, массы Q3 или Времени удерживания. Данная опция доступна, только если выбран список MRM или график XIC.
Группа информации	
	**File Details** (Сведения о файле) — Щелкните для отображения подробной информации о загруженных данных, включая информацию о пробе и методе, разрешении и калибровке, а также состояние оборудования.
Группа опций	
<Нет иконки>	**Relative Intensity** (Относительная интенсивность) — Переключает шкалу оси Y между Интенсивностью (п/с) и Относительной интенсивностью (%). **Legend** (Условные обозначения) — Щелкните, чтобы отобразить условные обозначения для наложения графиков, состоящих из нескольких переходов MRM. **Peak Labeling Settings** (Настройки маркировки пика) — Щелкните для отображения диалогового окна Peak Labeling Settings (Настройки маркировки пика), где вы можете определить параметры маркировки пиков для спектров и хроматограмм. **Colors**(Цвета) — Щелкните для отображения диалогового окна Color Palette (Палитра цветов), в котором можно определять цвета, используемые для линий и контуров графика.
Группа графиков	

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Экран DataViewer (Средство просмотра данных) и экран Real-Time DataViewer (Средство просмотра данных в режиме реального времени)	
	**Select** (Выбрать) — Щелкните, чтобы активировать курсор выбора, для определения определенных пиков или областей на вашем графике в пределах выделенного прямоугольника. Для того, чтобы снять выделения, кликните правой кнопкой мыши, а затем выберите Clear Current Selection (Очистить текущее выделение) или Clear All Selections (Очистить все выделения).
	**Zoom (Масштаб)** (X вертикально и Y горизонтально) — Щелкните, чтобы увеличить масштаб выбранной области по оси X или Y. Дважды кликните на графике, чтобы восстановить исходный уровень масштаба.
	**Undo** (Отменить) — Щелкните, чтобы отменить или вернуть назад предыдущее действие.
	**Reset** (Сбросить) — Щелкните, чтобы вернуть дисплей к исходному виду графика. При этом одновременно сбрасываются оси X и Y.
	**Pointer** (Указатель) — Щелкните для отображения координат курсора при его перемещении по графику в реальном времени.
Группа просмотра	
<Нет>	**Portrait / Landscape** (Портретная ориентация / Альбомная ориентация) — Щелкните, чтобы выбрать ориентацию отображения графика для печати.
	**Plots per View** (Графики для одновременного просмотра) (раскрывающееся меню) — Щелкните, чтобы выбрать общее количество графиков для одновременного просмотра. Вы можете выбрать 4, 6, 9, 12 или 16 графиков. **Примечание:** При закрытии и повторном открытии программы для DataViewer (Средство просмотра данных) сохраняется настройка Plots per View (Графики для одновременного просмотра). В RealTime DataViewer (Средство просмотра данных в режиме реального времени) используется та же настройка; если настройки RealTime DataViewer (Средство просмотра данных в режиме реального времени) и DataViewer (Средство просмотра данных) отличаются, при перезагрузке программного обеспечения будет использоваться настройка DataViewer (Средство просмотра данных).
	**Maximize Current Pane** (Максимально увеличить текущую панель) — Щелкните, чтобы максимально увеличить окно отображения для выбранного графика.
	**Reset from Maximized** (Сбросить с максимального значения) — Щелкните, чтобы вернуть увеличенный до максимума график в исходный вид отображения.
	**Duplicate Pane** (Дублировать панель) — Щелкните, чтобы продублировать выбранный график и создать копию выбранного перехода MRM в списке MRM. Второй экземпляр показан как субэлемент исходного перехода и помечен как Copy of... (Копия...)
	**Close Pane** (Закрыть панель) — Щелкните, чтобы закрыть выбранный график.
	**Create Overlay** (Создать наложение) — Щелкните, чтобы создать наложение выбранных переходов MRM. Для каждого перехода MRM в древовидном отображении на левой панели создаются флажки, если данная функция выбрана. Используйте эти флажки, чтобы выбрать переходы MRM, которые будут использоваться для создания наложения, а затем нажмите Create (Создать), чтобы создать наложение с помощью разных цветов для каждого перехода.
Группа анализа	
	**Smooth Plot** (Сгладить график) (раскрывающееся меню) — Здесь вы можете Установить или Сбросить свойства сглаживания для вашего графика. При настройке свойств сглаживания появляется диалоговое окно, в котором можно указать количество точек для сглаживания (диапазон 1 - 4).
	**EMS Info** (информация о EMS (извлеченный масс-спектр))— Щелкните, чтобы создать отчет о графике с подробным описанием выбранных данных. Информация включает: обнаруженную массу (масса/заряд), ширину (масса/заряд), расчет разрешения и интенсивность (п/с).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Экран DataViewer (Средство просмотра данных) и экран Real-Time DataViewer (Средство просмотра данных в режиме реального времени)	
	**Signal to Noise** (Сигнал к шуму) — Выберите один участок XIC в качестве фона, а другой - в качестве пика, а затем нажмите Signal to Noise (Сигнал к шуму), чтобы отобразить детали расчета сигнала к шуму.
	**Service Calculator** (Калькулятор услуг) — (Только для пользователей услуг) Нажмите для доступа к Калькулятору перекрестных переговоров, шумов, переключения полярности.
Группа печати	
	**Print** (Печать) — Щелкните для печати выбранных графиков.
	**Print Preview** (Предварительный просмотр печати) — Щелкните для предварительного просмотра и определения свойств печати, прежде чем приступить к печати ваших графиков.
	**Print Report** (Печать отчета) — Щелкните, чтобы распечатать отчет, в который входят выбранные графики вместе с соответствующей информацией о методе.

Функции управления графиком DataViewer (Средство просмотра данных)

В дополнение к функциям ленты меню, на данном экране также есть команды, относящиеся к конкретным графикам, доступ к которым можно получить, щелкнув правой кнопкой мыши по графику.

Щелкните правой кнопкой мыши	Функция управления
Add Caption (Добавить надпись)	Открывает текстовый редактор, в котором можно набирать и форматировать текст, который будет отображаться на вашем графике. Текст накладывается на ваш график, располагаясь над местом щелчка правой кнопкой мыши.
Remove Caption (Удалить надпись)	Удаляет надпись. Если на графике несколько надписей, кликните правой кнопкой мыши по надписи, которую нужно удалить.
Copy to Clipboard (Копировать в буфер обмена)	Копирует выделение в буфер обмена
Save Plots as Image... (Сохранить графики как изображение...)	Открывает окно Save As (Сохранить как), в котором можно выбрать местоположение и тип файла для создания файла изображения вашего графика. Вы можете выбрать один из этих типов файлов: .BMP; .GIF; .JPG; .PNG; .TIFF; и .WMF.
Save All Plots As An Image... (Сохранить все графики как изображение...)	Открывает окно Save As (Сохранить как), в котором можно выбрать местоположение и тип файла для создания файла изображения всех открытых графиков. Вы можете выбрать один из этих типов файлов: .BMP; .GIF; .JPG; .PNG; .TIFF; и .WMF.
Clear Current Selection (Очистить текущее выделение)	Очищает выделенную область на графике в месте нажатия правой кнопки мыши.
Clear All Selections in Current Plot (Очистить все выделения на текущем графике)	Очищает все выделенные области на графике. Это можно также сделать нажав на клавишу ESC.
Анализ	Открывает меню, в котором можно выбрать один из этих параметров: • Сглаженный график • Сбросить сглаженный график • Настроить свойства сглаживания • EMS Info (информация о EMS (извлеченный масс-спектр)) • Сигнал к шуму **Примечание:** Эти функции также доступны в Analysis group (Группа анализа) в ленте меню.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Щелкните правой кнопкой мыши	Функция управления
Set As Background (Установить в качестве фона)	Устанавливает текущую выделенную область в качестве фона.
Set as Selection (Установить как выделение)	Удаляет настройку фона из выбранной области.
Создать извлеченную ионную хроматограмму(ы) (EIC)	Открывает окно, в котором можно выбрать массу(ы) или диапазон масс(ы) для графика EIC, или выделяет график EIC, если он уже был создан.

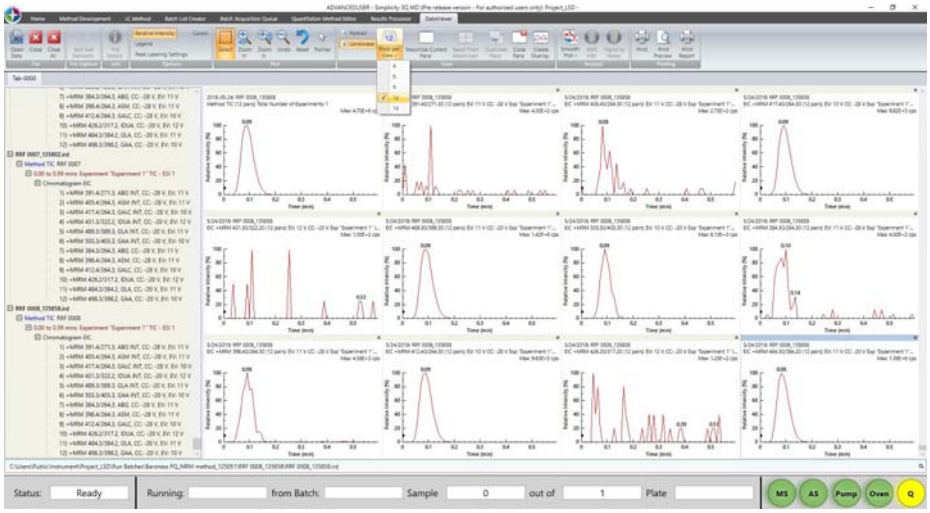
Графический просмотр результатов в DataViewers (Средство просмотра данных)

На экранах DataViewer (Средство просмотра данных) можно просматривать, распечатывать или сохранять изображения после выполнения XIC и MRM. XIC может относиться либо к TIC (Полная ионная хроматограмма), либо к EIC (Извлеченная ионная хроматограмма), в зависимости от конкретного графика данных, который вы просматриваете, или метода MC, использованного при сборе данных.

Используйте Real-Time DataViewer (Средство просмотра данных в режиме реального времени) для просмотра данных в процессе их получения. В Real-Time DataViewer (Средство просмотра данных в режиме реального времени) используются те же элементы управления, что и в DataViewer (Средство просмотра данных), но он доступен во время сбора данных. Используйте экран DataViewer (Средство просмотра данных) для просмотра данных, которые уже были получены.

Для работы с графиками в DataViewer (Средство просмотра данных)

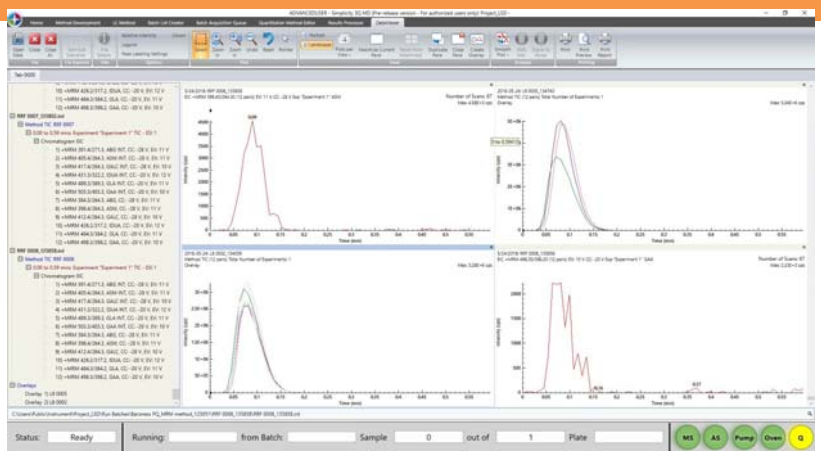
1. На ленте меню **DataViewer** (Средство просмотра данных) в группе **File** (Файл) выберите **Open Data** (Открыть данные), затем перейдите к нужным данным и выберите их в диалоговом окне **Open** (Открыть).
2. Количество отображаемых графиков можно изменить, выбрав максимум 16 графиков в параметре **Plots per View** (Графики для одновременного просмотра)
на ленте управления:



3. Графики можно удалить, нажав на "**x**" в правом верхнем углу отдельных окон графиков или последовательно, начиная с последнего графика, выбрав **Close Pane** (Закрыть панель) в группе **View** (Просмотр).

Графики можно добавить, выбрав любой XIC или MRM в дереве данных слева.

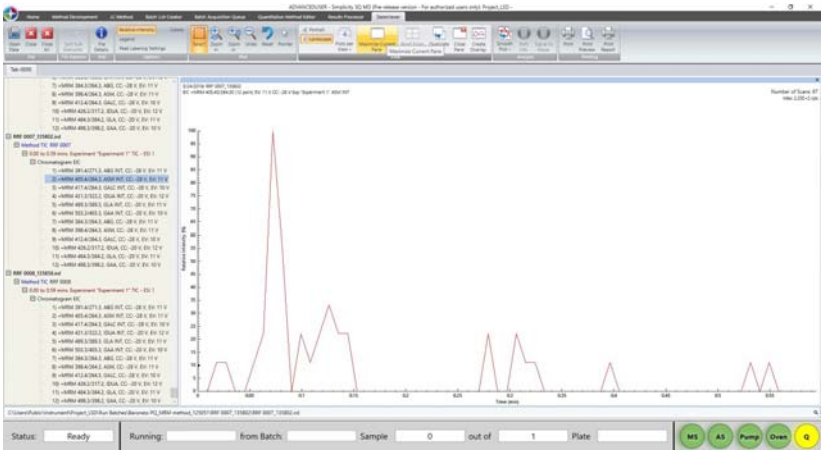
Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



4. Вы можете просмотреть данные либо в относительном масштабе (y-скорректированные), либо в абсолютном масштабе, соответственно выбрав или отменив выбор **Relative Intensity** (Относительная интенсивность).

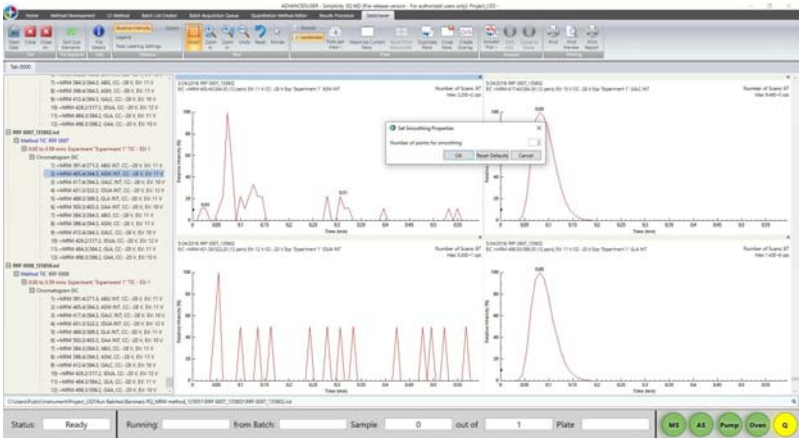
5. Чтобы увеличить график, кликните правой кнопкой мыши на нужном отдельном графике и в ленте меню выберите пункт **Maximize Current Pane** (Увеличить текущую панель).

Выбранный график теперь заполняет панель просмотра:



6. Чтобы выровнять отдельный или наложенный график, кликните по графику, в меню ленты выберите Smooth Plot (Сгладить график) и выберите опцию Set Smoothing Properties (Установить параметры сглаживания).

Введите желаемое количество точек для сглаживания или вернитесь к значению по умолчанию:



7. Распечатайте отображаемые графики, нажав кнопку **Print**(Печать) на ленте.

8. Чтобы сохранить отображаемые графики в виде изображения, кликните правой кнопкой мыши на графике и выберите **Save Plot as Image** (Сохранить график как изображение). Поддерживаются различные форматы изображений, в том числе gif, tiff и jpg.

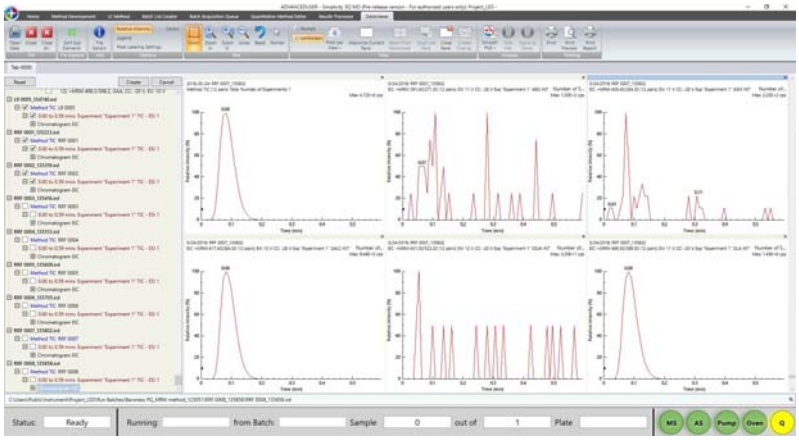
Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Наложение графиков

1. Чтобы отобразить наложения, на ленте в группе **View** (Просмотр) нажмите **Create Overlay** (Создать наложение).

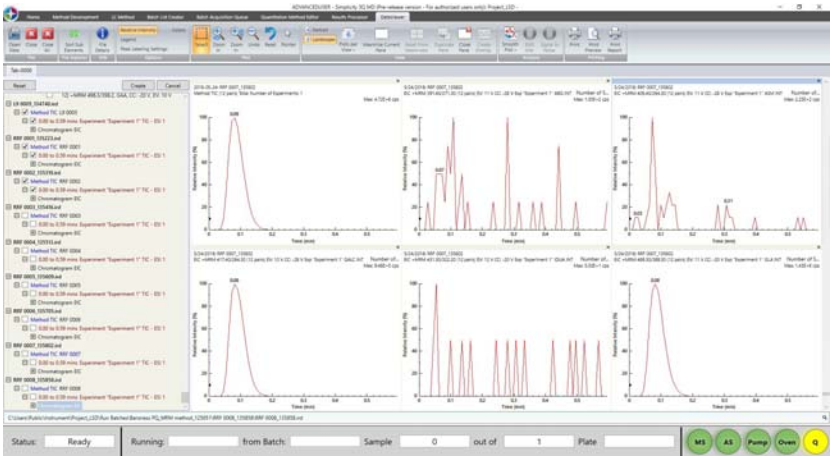
2. В древовидном списке на левой панели выберите XIC и MRM, которые вы хотите наложить, установив флажок слева от каждого файла.

Затем нажмите кнопку **Create** (Создать):

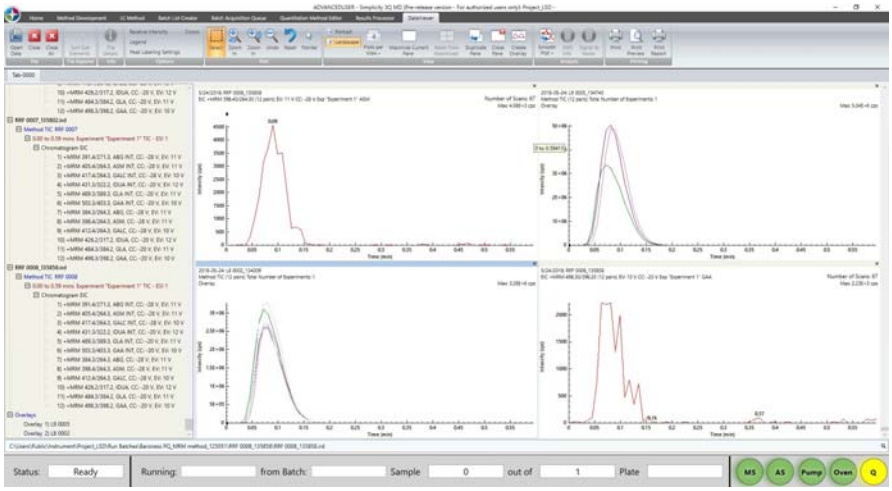


Примечание: Будьте внимательны при выборе нужных графиков; если вы нажмете на имя файла вместо того, чтобы установить флажок, программа добавит этот файл в виде отдельного графика.

Наложенный график отображается как дополнительный график в графическом окне:



Можно накладывать и отображать несколько графиков, что особенно удобно для сравнения нескольких MRM различных проб. В следующем примере показаны два разных наложения контрольной пробы:



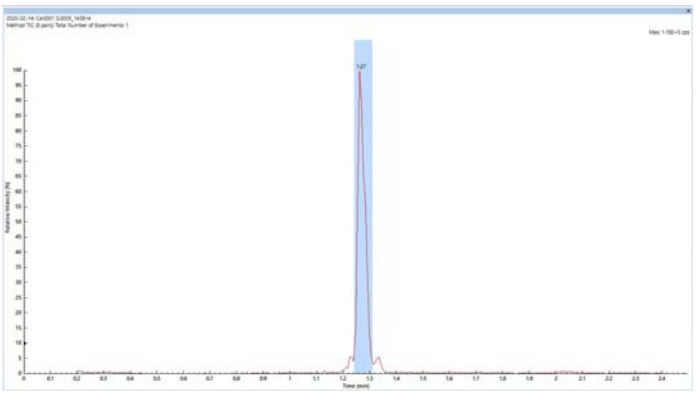
Примечание: Также можно сравнить XIC различных проб.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Отображение значений сигнала к шуму

1. Чтобы определить значения отношения сигнала к шуму (S/N) для пиков аналитов на определенном графике, увеличьте график и выберите **Select** в группе Plot (График).

Затем кликните и проведите мышкой, чтобы выбрать пик, для которого следует применить расчет сигнала к шуму, в том числе начало и конец каждого пика:



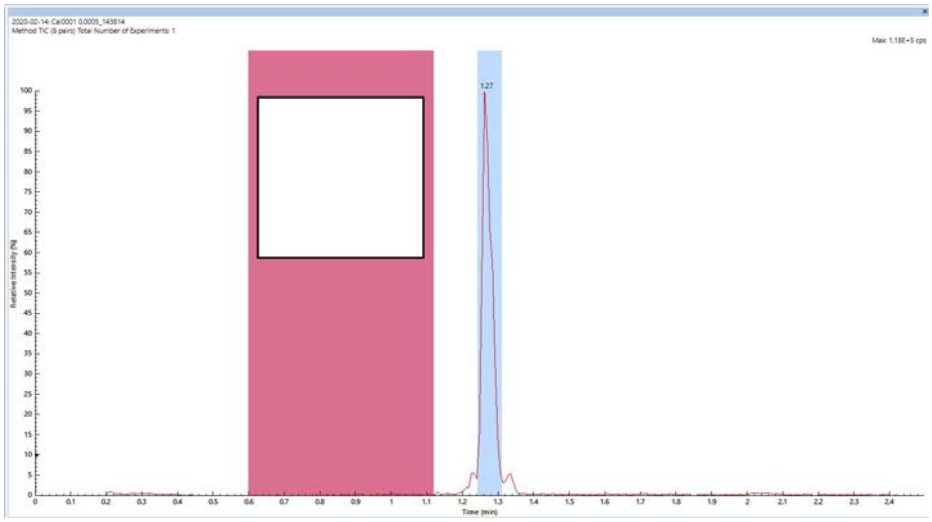
2. Щелкните и проведите мышкой, чтобы выбрать оптимальную область для расчета базового шума (область не должна включать небольшие пики или базовые возмущения).

3. Когда будут выбраны обе области, кликните правой кнопкой мыши в выделенной базовой области, а затем выберите **Set as Background** (Установить в качестве фона).

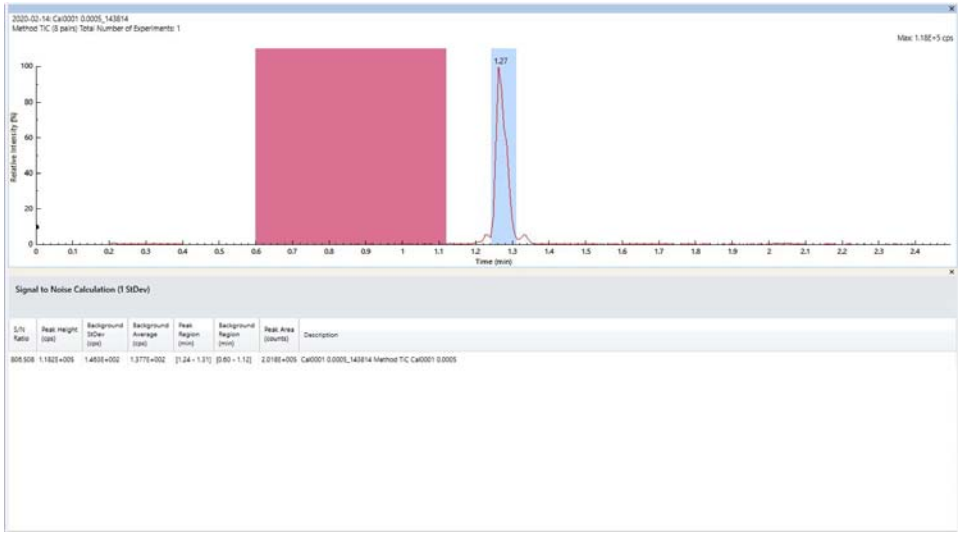
Примечание: Мы рекомендуем, чтобы ширина базовой области составляла не менее 30 секунд.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Когда выбрана базовая область, график отображается так, как показано в следующем примере, где синяя область обозначает интересующий пик, а розовая область — выбранную базовую линию расчета шума:



В меню ленты в группе **Analysis** (Анализ) нажмите **Signal to Noise** (Сигнал к шуму). Отображается рассчитанное значение сигнала к шуму:



Для извлечения данных из XIC

Полученные данные, отображаемые в DataViewer (Средство просмотра данных), по умолчанию представлены в формате XIC (Полная ионная хроматограмма). Однако из XIC можно извлечь дополнительные спектры.

1. Откройте полученные данные в программе **DataViewer**(Средство просмотра данных).
2. В меню ленты нажмите **Select** (Выбрать).
3. Выделите курсором интересующую область в нужном XIC, затем кликните правой кнопкой мыши и выберите **Create Extracted Ion Chromatogram(s)** (Создать извлеченную ионную хроматограмму/хроматограммы).
4. Выберите **Диапазоны масс** , которые вы хотите отобразить. Программное обеспечение генерирует **EMS (Извлеченный масс-спектр)** из выбранной временной области.

Число сканирований указывает, сколько отдельных сканирований было суммировано для расчета спектра. Для меньшего количества сканирований выберите меньший период времени на XIC; для большего количества сканирований выберите больший период. Заголовок графика показывает период времени, за который был создан извлеченный масс-спектр.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Проведение планового технического обслуживания

Необходимая частота технического обслуживания определяется интенсивностью использования системы, а также характером и количеством анализируемых проб.
Для получения дополнительной информации обратитесь к Руководству пользователя системы скрининговой «QSight 225MD UHPLC Screening System». Если у вас возникли вопросы или трудности при выполнении каких-либо процедур, описанных в данном разделе, обратитесь за помощью к представителю службы поддержки клиентов уполномоченного представителя PerkinElmer.

Порядок технического обслуживания масс-спектрометра

Поскольку многие процедуры по текущему обслуживанию и замене требуют остановки прибора или извлечения зондов, в данном разделе приведены общие задачи, на которые при необходимости даются ссылки. Если у вас возникли вопросы по этим процедурам, обратитесь за помощью к представителю службы поддержки клиентов уполномоченного представителя.

В данном разделе рассмотрены следующие темы:

- Снятие и повторная установка зондов
- Замена иглы зонда
- Замена фильтра газоочистителя
- Запуск программы AutoDV
- Запуск процедуры автокалибровки

Запчасти, инструменты и растворители

Для облегчения обслуживания и предотвращения ненужных простоев, рекомендуется иметь в лаборатории следующие запасные части, инструменты и растворители:

Запчасти
Узел иглы
Шприц
Сменный фильтр газоочистителя
Инструменты
Открытый гаечный ключ 1/4"
Опорная плита источника PKI Torrent (опционально)
Зонд PKI и держатель шприца (опционально)
Растворители
Ацетонитрил (степень очистки для ВЭЖХ)
Метанол (степень очистки для ВЭЖХ)
Вода (степень очистки для ВЭЖХ)

Запуск и выключение системы

В этом разделе описаны основные процедуры запуска и выключения системы скрининговой «QSight 225MD UHPLC Screening System».

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Запуск системы

1. Проверьте фильтр газоочистителя в начале дня (см. раздел «Контроль фильтра газоочистителя» на стр. 107).
2. Найдите кнопку питания на передней панели управления, рядом с ЖК-дисплеем (см. «Передняя панель прибора» на стр. 23). Нажмите кнопку и дождитесь завершения процесса запуска прибора.

Контроль фильтра газоочистителя

Фильтр газоочистителя предназначен для предотвращения попадания влаги в прибор. Чтобы выполнить проверку фильтра газоочистителя, выполните следующие действия:

1. Найдите фильтр газоочистителя, установленный между основным источником подачи газа нулевого воздуха/азота и прибором QSight.
2. Осмотрите шарики внутри фильтра, они должны быть бело-голубого цвета (внизу, слева).



Если шарики внутри фильтра белого и розового цвета (вверху, справа), значит, газ нулевой воздух/азот, подключенный к прибору, имеет содержание влаги выше рекомендуемого уровня. Прибор не следует использовать до тех пор, пока вы не обратитесь к представителю сервисной службы PerkinElmer и не замените картридж фильтра газоочистителя (см. раздел «Замена фильтра газоочистителя» на стр. 115).

Выключение системы

1. На приборе нажмите кнопку питания на передней панели управления (рядом с ЖК-дисплеем), а затем нажмите кнопку питания второй раз, чтобы подтвердить выключение.
2. Прибор пройдет несколько этапов выключения; после завершения на ЖК-дисплее появится надпись Analyzer is OFF (Анализатор выключен).

Снятие и повторная установка зондов

Процедура снятия и повторной установки зондов ESI и APCI одинакова для обоих устройств; только размер используемой иглы зонда отличается от устройства к устройству (игла APCI немного короче).

Примечание: Зонд, показанный на фотографиях ниже, может отличаться от вашего зонда, но процесс одинаков. Если у вас возникли вопросы, обратитесь к представителю службы поддержки клиентов компании уполномоченного представителя.



Внимание: ГОРЯЧИЕ ПОВЕРХНОСТИ!



Потенциальная опасность ожогов! Компоненты, с которыми вы будете работать, могут оказаться очень горячими. Дайте ему остыть в течение 15—20 минут. Обращайтесь с прибором и всеми связанными с ним компонентами с осторожностью.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Необходимые инструменты и материалы

Прежде чем приступить к работе, убедитесь, что у вас в распоряжении имеется следующее:

- Зонд PKI и держатель шприца (опция)
- Неопудренные латексные перчатки

Важно:

Перед началом работы поместите зонд и держатель шприца на чистую, ровную, устойчивую поверхность рядом с вашим рабочим местом, чтобы исключить падение или откатывание деталей во время обслуживания. Если вы не приобрели держатель для зонда и шприца, убедитесь, что выбранное вами рабочее место имеет бортик или барьер для предотвращения скатывания или падения компонентов.

Во время всех описанных процедур надевайте неопудренные латексные перчатки, чтобы избежать загрязнения и защитить руки при контакте с теплыми или слегка заостренными поверхностями.

Извлечение зонда из источника

1. Перед извлечением убедитесь, что от зонда отсоединены все периферийные устройства:

В частности, на зонде возьмитесь за красную трубку впуска пиковой пробы возле ее основания и осторожно поверните против часовой стрелки, чтобы отсоединить ее от зонда:



2. Возьмитесь за зонд и поверните его влево против часовой стрелки 10-15 раз, пока внешний корпус не будет свободно вращаться. Затем осторожно оттяните зонд от источника, отодвигая его от зонда по прямой линии.



Внимание: ГОРЯЧИЕ ПОВЕРХНОСТИ!



Стержень зонда будет очень горячим, если его извлечь из прибора сразу после работы. Дайте ему остыть в течение 15—20 минут. Соблюдайте осторожность при обращении с зондом во избежание ожогов.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



3. Осторожно разместите зонд на держателе для зонда и шприца (или на чистой ровной поверхности, где он не сможет покатиться) на время, пока он остывает:



Повторная установка зонда в источник

1. Перед установкой зонда в источник убедитесь, что все компоненты зонда надежно закреплены.
2. Аккуратно и под прямым углом вставьте зонд в корпус источника, стараясь совместить установочные штифты на зонде с отверстиями на источнике.
3. Осторожно поверните зонд на 10-15 оборотов вправо по часовой стрелке, пока он не будет правильно установлен; когда зонд будет установлен на место, на ЖК-дисплее появится надпись Analyzer Ready (Анализатов готов к работе)
4. Вновь подключите все периферийные устройства — в частности, надежно вставьте красную трубку для ввода пиковой пробы в верхнюю часть зонда.

Внимание: ОПАСНОСТЬ ПОРАЖЕНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ТОКОМ!

Убедитесь, что все шланги подключены к зондам масс-спектрометра QSight через заземляющее соединение. Невыполнение этого требования может привести к поражению электрическим током.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Замена иглы зонда

Процедура замены игл в зондах ESI и APCI одинакова для обоих зондов; отличается только размер иглы (игла APCI короче). Будьте внимательны при замене игл и убедитесь, что вы вставили правильную иглу в соответствующий зонд.

Вы можете столкнуться с двумя различными существующими в настоящее время конструкциями игл: старая конструкция, в которой используется фитинг из нержавеющей стали и съемная пружина; и новая конструкция, в которой используется фитинг из полиэфирэфиркетона (ПЭЭК), а пружина приварена к игле. Для вашего удобства здесь приведены процедуры снятия и замены игл обеих конструкций. Используйте процедуру, применимую именно к вашей игле.

Иглу зонда следует заменять через указанные ниже промежутки времени или по рекомендации представителя службы поддержки клиентов компании уполномоченного представителя:

- Каждые 3000 введений при 20 мкл на одно введение (примерно 31 96-луночный планшет); или
- Каждые 60 000 мкл (при использовании объемов ввода, отличных от 20 мкл); или
- Если давление превышает 500 фунтов на кв. дюйм при скорости потока 1 мл/мин без установленной рядной колонки.

Примечание: Зонд, показанный на фотографиях ниже, может отличаться от вашего зонда, но процесс одинаков. Если у вас возникли вопросы, обратитесь к представителю службы поддержки клиентов уполномоченного представителя PerkinElmer.

Основные действия по замене иглы

Вам предстоит выполнить следующие основные действия:

1. Извлеките зонд из источника (см. раздел Извлечение зонда из источника на стр. 108).
2. Удалите имеющуюся иглу зонда и вставьте новую:
   - Удаление имеющейся иглы (старая конструкция — фитинг из нержавеющей стали на стр. 110
   - Удаление имеющейся иглы (новая конструкция — фитинг из полиэфирэфиркетона на стр. 112)
   - Установка новой иглы (см. стр. 114)
3. Повторно установите зонд на место (см. раздел Повторная установка зонда в источник на стр. 109).

Необходимые инструменты и материалы

Прежде чем приступить к работе, убедитесь, что у вас в распоряжении имеется следующее:

- Зонд PKI и держатель шприца (опция)
- Запасной шприц
- Узел новой иглы
- Открытый гаечный ключ 1/4"
- Неопудренные латексные перчатки

Важно:

Перед началом работы поместите опорную плиту источника и держатель зонда и шприца на чистую, ровную, устойчивую поверхность рядом с вашим рабочим местом, чтобы исключить падение или скатывание деталей во время обслуживания. Если вы не приобрели опорную плиту для источника или держатель для зонда и шприца, убедитесь, что выбранное вами рабочее место имеет бортик или барьер для предотвращения скатывания и падения компонентов.

Во время всех описанных процедур надевайте неопудренные латексные перчатки, чтобы избежать загрязнения и защитить руки при контакте с теплыми или слегка заостренными поверхностями.

Удаление имеющейся иглы (старая конструкция — фитинг из нержавеющей стали)



Внимание: ГОРЯЧИЕ ПОВЕРХНОСТИ!



Стержень зонда будет очень горячим, если его извлечь из прибора сразу после работы. Перед выполнением этой процедуры оставьте зонд остывать в течение 20 минут.

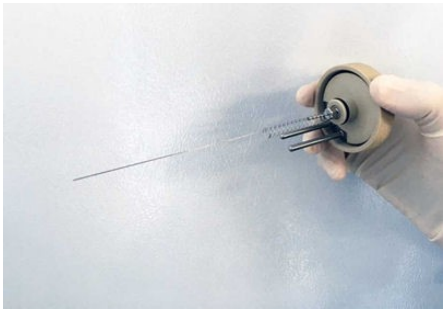
Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

1. Извлеките зонд из источника (см. раздел Извлечение зонда из источника на стр. 108). Держите зонд в левой руке, при этом указательный палец левой руки должен быть вставлен в воротник, чтобы удерживать стержень и предотвращать его свободное вращение. Правой рукой поверните узел иглы зонда к себе, пока она не освободится:





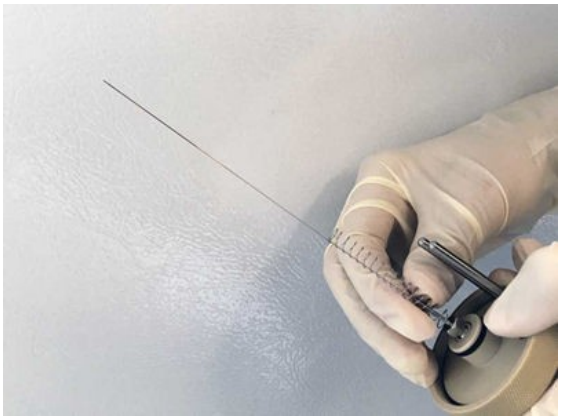
2. Удерживая иглу совершенно прямо, осторожно вытащите узел иглы из воротника зонда, пока она не выйдет из зонда на всю длину:



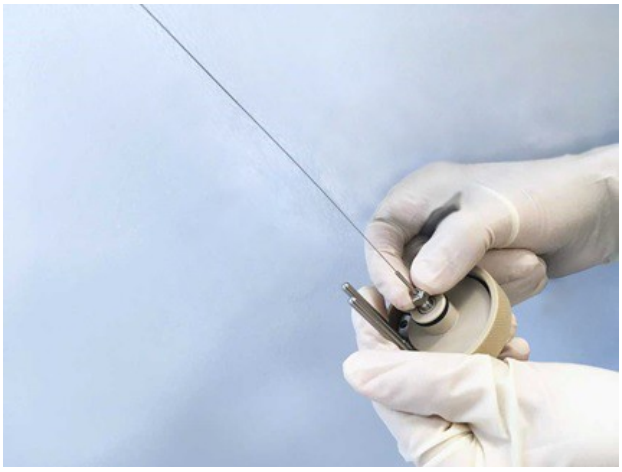
3. Поместите зонд обратно на держатель для зонда и шприца (или на чистую ровную поверхность, с которой он не будет скатываться).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

4. С помощью ногтя большого пальца осторожно освободите пружину, закрывающую гайку проводящего фитинга у основания иглы, и снимите пружину, вращая ее против часовой стрелки. Поместите пружину на чистую ровную поверхность, где она не будет скатываться.



5. Используя открытый ключ 1/4", открутите гайку проводящего фитинга у основания иглы. Когда фитинг ослабнет, продолжайте откручивать его пальцами, придерживая иглу, пока она не освободится и вы не сможете ее снять. Поместите иглу на плоскую поверхность для дальнейшей утилизации:



Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Удаление имеющейся иглы (новая конструкция — фитинг из полиэфирэфиркетона)

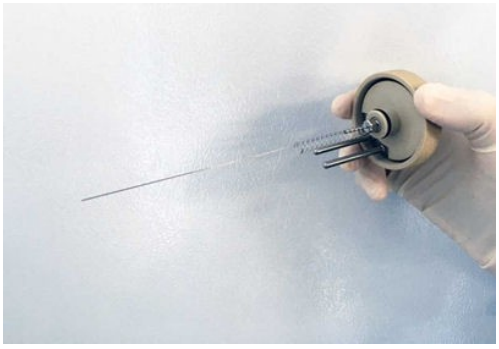
1. Извлеките зонд из источника (см. раздел Извлечение зонда из источника на стр. 108).

Держите зонд в левой руке, при этом указательный палец левой руки должен быть вставлен в воротник, чтобы удерживать стержень и предотвращать его свободное вращение. Правой рукой поверните узел иглы зонда к себе, пока она не освободится:





2. Удерживая иглу прямо, осторожно вытащите узел иглы из воротника зонда, пока она не выйдет из зонда на всю длину:



3. Поместите зонд обратно на держатель для зонда и шприца (или на чистую ровную поверхность, с которой он не будет скатываться).

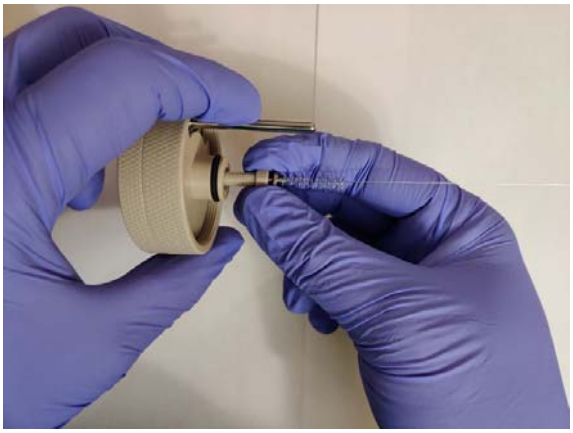
4. Ослабьте фитинг ПЭЭК в основании иглы, повернув его против часовой стрелки, и снимите иглу. Поместите иглу на плоскую поверхность для дальнейшей утилизации. Поместите фитинг из полиэфирэфиркетона на чистую ровную поверхность, где он не будет скатываться.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Установка новой иглы

Ниже описана процедура замены иглы зонда с фитингом из полиэфирэфиркетона (PEEK).

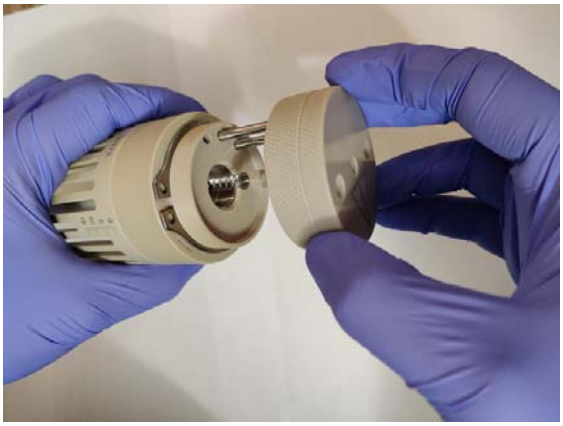
1. Проверьте новую сменную иглу, чтобы убедиться, что она подходит для данной модели зонда. Осторожно вставьте новую иглу в фитинг из полиэфирэфиркетона, стараясь не погнуть иглу. Убедитесь, что новая игла надежно установлена в фитинге:



2. Возьмите иглу за шайбу и прижмите ее к штуцеру, одновременно затягивая пальцами фитинг из полиэфирэфиркетона. Паз на игле должен совпадать с краем фитинга из полиэфирэфиркетона.

3. Осторожно потяните за иглу, чтобы убедиться, что ее невозможно вытащить. Если она соскальзывает или выходит, ослабьте фитинг; установите иглу на место; затем затяните и снова проверьте иглу. Повторяйте эту процедуру, пока не убедитесь, что игла правильно установлена и надежно закреплена.

4. Аккуратно совместите иглу со стержнем и введите ее в зонд, стараясь совместить идентификационные штифты зонда:



5. Снова возьмите зонд левой рукой, при этом указательный палец левой руки должен быть вставлен в воротник, чтобы зафиксировать стержень и предотвратить его свободное вращение.

6. Правой рукой поверните узел иглы от себя, пока она не будет полностью вкручена в воротник, а конец иглы не будет слегка виден за концом стержня:

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru





7. Снова установите зонд в источник (см. раздел Установка зонда в источник на стр. 109).

Замена фильтра газоочистителя

Если шарики в фильтре газоочистителя изменили цвет с голубого на розовый (см. раздел Контроль фильтра газоочистителя на стр. 107), то перед включением прибора необходимо заменить фильтр газоочистителя.

Необходимые инструменты и материалы

- Сменный фильтр газоочистителя
- Безворсовая салфетка

Замена фильтра газоочистителя

Чтобы заменить фильтр газоочистителя, выполните следующие действия:

1. Убедитесь, что прибор выключен (см. Выключение системы на стр. 107).

Отключите поток газа нулевого воздуха/азота от основного источника (газогенератора).

2. После того как давление упадет до нуля, отсоедините газовую трубку от блока фильтра.

Примечание: Мы рекомендуем промаркировать трубки, чтобы не перепутать газовые линии при повторной установке блока фильтра.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



3. Извлеките фильтр из кронштейна и положите на чистую рубочую поверхность.

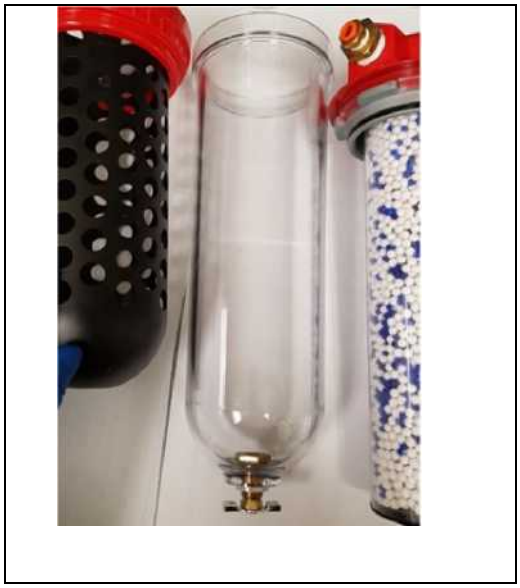
Нажмите на фиксатор (показан внизу на рисунке в желтой рамке) и поверните против часовой стрелки, чтобы освободить корпус черного сетчатого фильтра и блок фильтра. Если в нижней части блока фильтра присутствует вода, слейте ее, повернув сливной клапан против часовой стрелки. При отсутствии воды перейдите к следующему шагу.



1. Фильтр в сборе
2. Корпус фильтра

4. Потяните, чтобы отделить блок фильтра и красную крышку от прозрачного корпуса фильтра.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



Проверьте контейнер фильтра на наличие влаги и протрите его внутри безворсовой тканью.

5. Поверните фильтр против часовой стрелки, чтобы снять крышку корпуса. Утилизируйте старый фильтр в соответствии с локальными правилами.



6. Установите новый фильтр в сборе в крышку, повернув его по часовой стрелке до фиксации. Наденьте контейнер фильтра на фильтр в сборе.

7. Установите фильтр в сборе в черный сетчатый корпус фильтра. Нажмите на язычок фиксатора и поверните, чтобы закрепить корпус на блоке фильтра.

8. Установите всю сборку на кронштейны, прикрепленные к стене. Подсоедините входные и выходные трубки в направлении потока (покзано внизу на рисунке в желтой рамке). Путь потока проходит от источника газа через фильтр газоочистителя к MS (Gas (Газ) → Filter (Фильтр) →MS (MC)).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



9. Убедитесь, что сливной клапан в нижней части фильтрующего узла закрыт (по часовой стрелке). Включите подачу газа нулевого воздуха/азота и проверьте, нет ли утечек.

Запуск программы AutoDV

Следующую процедуру следует выполнять через указанные ниже промежутки времени или по рекомендации представителя службы поддержки клиентов уполномоченного представителя:

- Вы наблюдаете снижение чувствительности сигнала на 30-40% с течением времени, или
- Вы наблюдаете необъяснимый сдвиг массы; или
- Каждые 3000 введений при 20 мкл на одно введение (примерно 31 96-луночный планшет); или
- Каждые 60 000 мкл (при использовании объемов ввода, отличных от 20 мкл).

Процедура AutoDV занимает менее 5 минут, и ее не следует останавливать, если вы не намерены прервать процедуру или делаете паузу только для пополнения шприца.

Примечание: Если вы отмените или прервете процедуру автокалибровки, система вернется к предыдущим настройкам.

Запуск программы AutoDV Routine

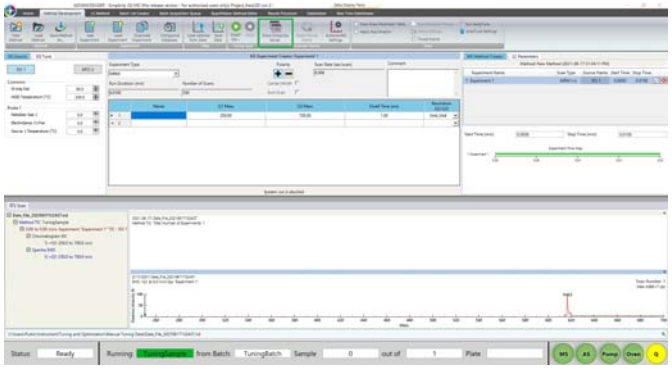
1. Загрузите POS PPG (2E-7 M) из набора QSight MSMS Tuning Kit в чистый стеклянный шприц.
2. Установите поток шприцевого насоса на **30 мкл/мин** (более подробную информацию см. в разделе Запуск и остановка шприцевого насоса на стр. 142).

Установите положение зонда на 6 для осей Z и Y. Игла должна выступать на 1 мм от кончика насадки зонда. Это положение зонда является отправной точкой. Возможно, вам придется изменить положение для достижения оптимальной чувствительности.

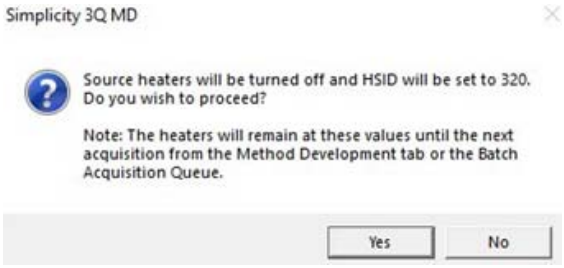
3. Откройте программное обеспечение Simplicity 3Q MD и перейдите на вкладку **MS Method** (Метод МС).
4. На панели MS Experiment Creator (Создание эксперимента МС) измените Experiment Type (Тип эксперимента) на **MRM** , затем нажмите **Start MS** (Запустить МС).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

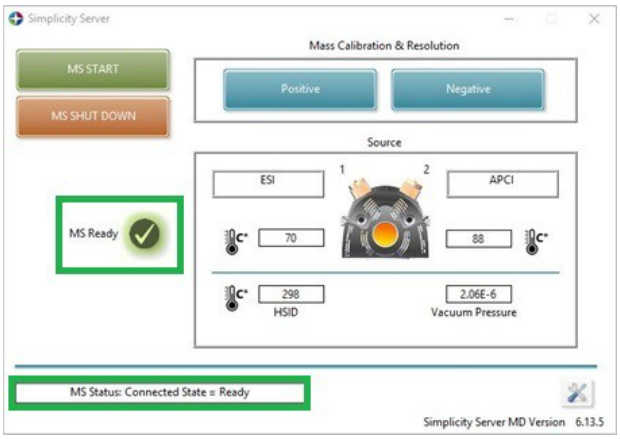
5. Оставьте программу работать в течение 1-2 минут, затем нажмите **Show Simplicity Server** (Показать сервер Simplicity) в меню ленты (внизу, зеленый квадрат):



Откроется окно с сообщением о том, что нагреватели источника будут отключены, и вопросом, хотите ли вы продолжить. Нажмите **Да**.

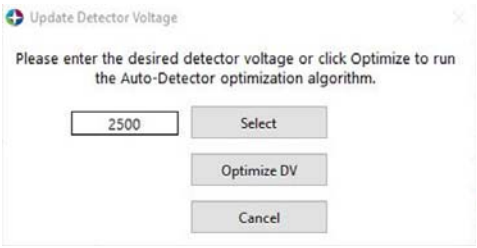


6. Откроется диалоговое окно Simplicity Server и отобразит состояние прибора MS. Должны отображаться сообщения MS Ready, MS Status is Connected, a Connected State is Ready (см. рисунок ниже, приведено в зеленой рамке):



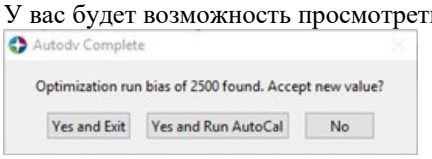
7. В поле Калибровка массы и Разрешение нажмите **Positive** (Положительно). Появится диалоговое окно «Обновить напряжение детектора»:

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



8. Нажмите **Optimize DV** (Оптимизировать DV), чтобы запустить оптимизацию AutoDV. Откроется окно «Auto Calibration in Progress» (Выполняется автокалибровка).
9. Программа оптимизации AutoDV автоматически остановится по завершении.

У вас будет возможность просмотреть данные, после чего откроется следующее окно:



Нажмите **Yes and Exit** (Да и выйти), чтобы принять новое значение и выйти из программы оптимизации AutoDV. Нажмите **Yes and Run AutoCal** (Да и Запустить fвтокалибровку), чтобы продолжить процесс автокалибровки (описанный ниже). Нажмите **No** (Нет), чтобы выйти, не принимая новые показатели.

Примечание: Если вы отмените или прервете AutoDV Routine, система вернется к предыдущим настройкам.

Запуск процедуры автокалибровки

Следующую процедуру следует выполнять через указанные ниже промежутки времени или по рекомендации представителя службы поддержки клиентов компании уполномоченного представителя:

- Вы наблюдаете снижение чувствительности сигнала на 30-40% с течением времени, или
- Вы наблюдаете необъяснимый сдвиг массы; или
- Каждые 3000 введений при 20 мкл на одно введение (примерно 31 96-луночный планшет); или
- Каждые 40 000 мкл (при использовании объемов ввода, отличных от 20 мкл).

Процедура автокалибровки (AutoCal) занимает около 30 минут, и ее не следует останавливать, если вы не намерены прерывать процедуру или делаете паузу только для пополнения шприца.

Примечание: Если вы отмените или прервете процедуру автокалибровки, система вернется к предыдущим настройкам.

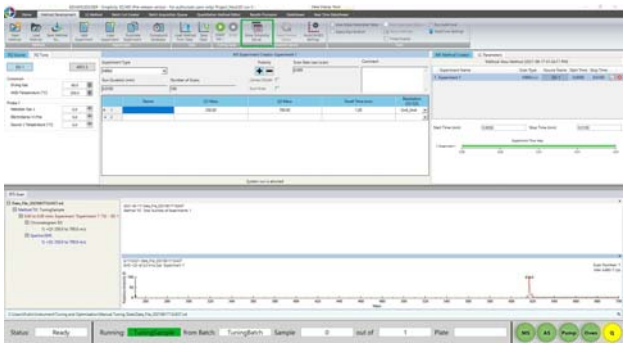
Массы, используемые в этой процедуре, должны соответствовать массам, указанным во время установки. Если вы редактируете метод автокалибровки, массы в новом методе должны совпадать с массами, указанными в настройках AutoCAL/RES. При неточном совпадении массы процедура автокалибровки может привести к неправильной установке Напряжения детектора, что может повлечь за собой плохую работу прибора.

Запуск процедуры автокалибровки

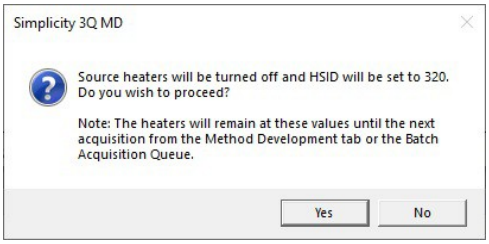
Чтобы запустить процедуру автокалибровки

1. Загрузите POS PPG (2E-7 M) или NEG PPG (1E-5 M) из набора QSight MSMS Tuning Kit в чистый стеклянный шприц.
2. Откройте программу Simplicity 3Q MD и перейдите на вкладку MS Method.
3. На панели MS Experiment Creator измените тип эксперимента на MRM, затем нажмите Start MS.
4. Дайте раствору поработать 1-2 минуты, затем нажмите Show Simplicity Server в ленте меню (внизу, зеленый квадрат):

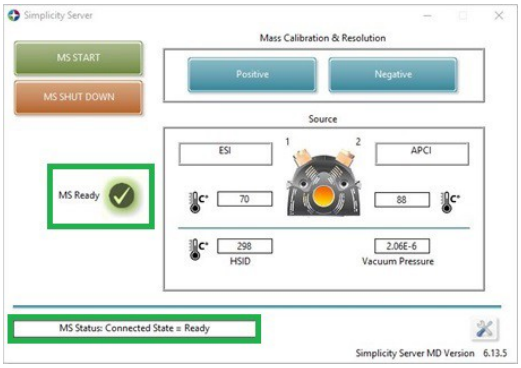
Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



Откроется окно с сообщением о том, что нагреватели источника будут отключены, и вопросом, хотите ли вы продолжить. Нажмите **Yes** (Да).



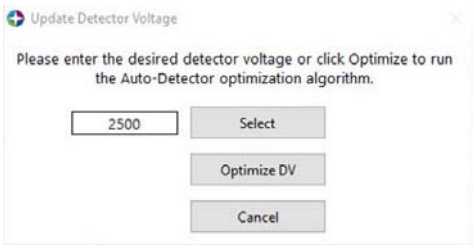
5. Откроется диалоговое окно Simplicity Server и отобразит состояние прибора MS. Должны отображаться сообщения MS Ready, MS Status is Connected, a Connected State is Ready (внизу, зеленые квадраты):



6. В поле Калибровка массы и Разрешение нажмите Positive (Положительно) или Negative (Отрицательно), в зависимости от настроечного раствора, который вы приготовили в соответствии с разделом 1 на стр. 125.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

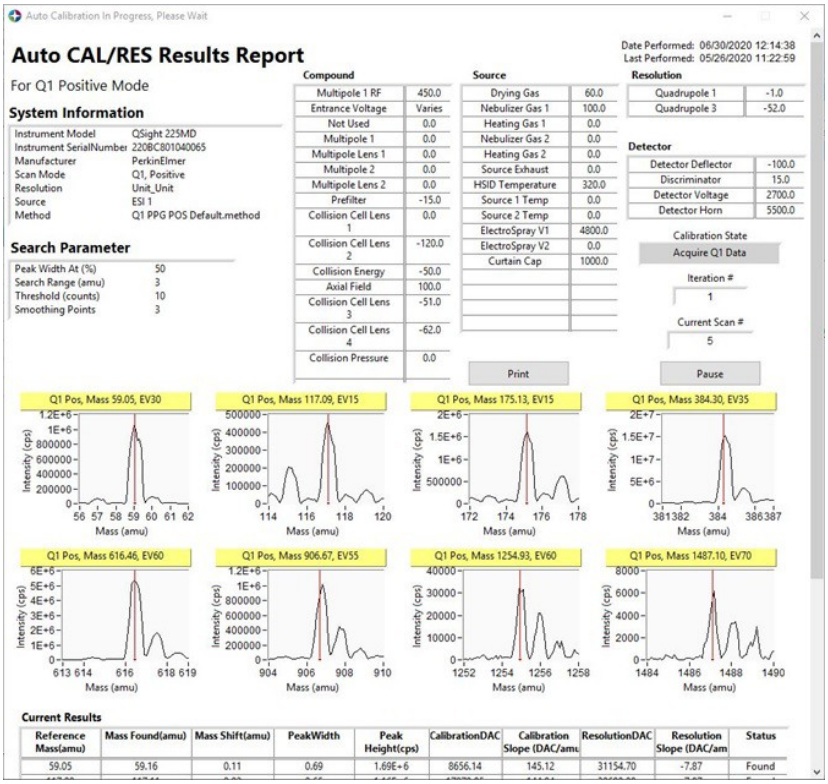
Появится диалоговое окно Update Detector Voltage (Обновить напряжение детектора):



7. Нажмите кнопку **Select**(Выбрать), запустится программа автокалибровки AutoCal Routine для положительных масс в Q1 и Q3.

8. После завершения работы AutoCal Routine откроется окно AutoCAL/RES Report, и вы сможете просмотреть данные:
Просмотрите отчеты о калибровке Q1 и Q3, выбрав нужный вариант из выпадающего списка в верхней части панели. При анализе данных используйте следующие критерии:

- Сдвиг массы для всех масс Q1 и Q3 должен быть в пределах 1 а.е.м.
- Все пики должны иметь очевидные переходы от фона и быть одного вида. Используйте формы пиков с изображения



выше в качестве эталона.

9. Если данные вас устраивают, нажмите **Accept** (Принять) и следуйте подсказкам для завершения процесса принятия.

Примечание: Если вы отмените или прервете процедуру автокалибровки, система вернется к предыдущим настройкам.

Чтобы распечатать отчет о калибровке, нажмите Print All Reports и выберите папку, в которую будут сохранены отчеты. Повторите процедуру, используя противоположный раствор для настройки (например, если вы выполнили процедуру, используя POS PGG, то используйте NEG PPG. Если вы выполнили процедуру с использованием NEG PPG, то используйте POS PPG), пока не завершите процедуру автокалибровки с использованием как POS PPG, так и NEG PPG.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

График профилактического технического обслуживания

В данном разделе описывается рекомендуемый график профилактического технического обслуживания (ТО) масс-спектрометра QSight 225MD. Несоблюдение рекомендованного нами графика обслуживания может привести к выходу прибора из строя или поломке, а также к аннулированию гарантии на систему.

Все мероприятия по профилактическому обслуживанию должны проводиться персоналом, прошедшим обучение у специалиста компании PerkinElmer. Любые необходимые детали можно приобрести через службу поддержки клиентов компании PerkinElmer.

Каждые 20 000 инъекций

- Общая (косметическая) чистка
- Замена детектора (требуется, если DV превышает 3 000 В)
- Выполнение тестирования рабочих характеристик после технического обслуживания (на основе общих процедур и спецификаций PerkinElmer)

120 000 инъекций или годовое ТО

- Общая чистка (наружное покрытие приборов, вентиляторы и косметика)
- Замена уплотнительных колец зонда
- Замена детектора (требуется, если DV превышает 3 000)
- Замена воздушного фильтра
- Техническое обслуживание корпуса/шлангов (при необходимости)
- Очистка мультиполя (при необходимости)
- Замена ионного манометра / нити ионного манометра (при необходимости)
- Замена вентилятора вытяжки источника (при необходимости)
- Выполнение тестирования рабочих характеристик после технического обслуживания (на основе общих инструкций и спецификаций PerkinElmer).

Процедура технического обслуживания Автосамплера УВЭЖХ QSight MD



Предупреждение: **ВЫСОКОЕ НАПРЯЖЕНИЕ!**



Любое техническое обслуживание должно проводиться при выключенном Автосамплере и отсоединенном шнуре питания. Никогда не пытайтесь ремонтировать или заменять какие-либо компоненты прибора, НЕ описанные в данном руководстве пользователя, без помощи представителя сервисной службы уполномоченного представителя.



Внимание: ОПАСНОСТЬ ПРОКОЛА!



Будьте очень осторожны при работе с узлом иглы. В данном разделе рассмотрены следующие темы:

- Замена встраиваемого в линию фриттового фильтра
- Промывка шприца и заправка инструмента ЖХ
- Замена иглы шприца
- Замена шприца

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Запчасти и растворители

Для облегчения технического обслуживания и предотвращения ненужных простоев, рекомендуется иметь в лаборатории следующие запасные части и растворители:

Запчасти
Игла шприца
Шприц
Встраиваемый в линию фриттовый фильтр
Шланги из полиэфирэфиркетона
Фитинги из полиэфирэфиркетона
Растворители
Ацетонитрил (степень очистки для ВЭЖХ)
Метанол (степень очистки для ВЭЖХ)
Вода (степень очистки для ВЭЖХ)

Замена встраиваемого в линию фриттового фильтра

Следующую процедуру следует выполнять через указанные ниже промежутки времени или по рекомендации представителя службы поддержки клиентов уполномоченного представителя:

- Каждые 10 000 инъекций (введений) при 20 мкл на введение (примерно 104 96-луночных планшета); или
- Каждые 200 000 мкл (при использовании объемов ввода, отличных от 20 мкл); или
- Если давление превышает 500 фунтов на кв. дюйм при скорости потока 1 мл/мин без установленной рядной колонки.

Необходимые инструменты и материалы

Прежде чем приступить к работе, убедитесь, что у вас под рукой есть следующее:

- Шланги и фитинги из полиэфирэфиркетона (PEEK)
- Сменный встраиваемый в линию фриттовый фильтр
- Неопудренные латексные перчатки

Важно: Во время всех описанных процедур **надевайте** неопудренные латексные перчатки, чтобы избежать загрязнения и защитить руки при контакте с теплыми или слегка заостренными поверхностями.

Замена встраиваемого в линию фриттового фильтра

Замените концевой фитинг, расположенный ближе всего к клапану Автосамплера, и, при необходимости, замените концевой фитинг из полиэфирэфиркетона, соединяющий трубку с фриттой.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



Промывка шприца и заправка инструмента ЖХ

Эту процедуру следует выполнять при каждом переходе на новый растворитель.

1. На ручном контроллере выберите **LCP1....**
2. Нажмите **Options (Опции)** (кнопка A), затем выберите **Prime LC Tool** (Заправить инструмент ЖХ).
3. Измените любые параметры по мере необходимости, а затем нажмите **Run** (Запуск) (кнопка B).
4. Запустите инструмент. Проверьте, отсутствуют ли пузырьки в шприце. Если есть пузырьки, повторите процесс заправки.

Изменение уровня доступа

Для успешного выполнения следующих процедур техобслуживания, необходимо изменить Уровень доступа пользователя на Расширенный доступ пользователя.

Примечание: Настоятельно рекомендуется во время обычного использования Автосамплера применять пользовательский уровень доступа и предоставлять расширенный доступ только для выполнения процедур технического обслуживания.

Изменение уровня доступа на Расширенный доступ пользователя

Для изменения уровня доступа на Расширенный, выполните следующие действия:

1. Используя ручной терминал PAL, нажмите одновременно кнопки меню **A** и **B** . Отобразится экран **Change Access** (Изменение доступа).

Примечание: Рядом с текущим уровнем доступа будет отображаться звездочка (*).

2. С помощью колеса прокрутки выберите **Extended User Level (Расширенный уровень доступа)** и нажмите кнопку **Enter** (Ввод) (внутри колеса прокрутки). В строке состояния появится значок ключа, указывающий на то, что теперь вы находитесь на Расширенном уровне доступа.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



Замена иглы шприца

Следующую процедуру следует выполнять по мере необходимости или по рекомендации представителя службы поддержки клиентов уполномоченного представителя.

Необходимые инструменты и материалы

Прежде чем приступить к работе, убедитесь, что у вас в распоряжении имеется следующее:

- Сменная игла шприца
- Неопудренные латексные перчатки

Важно: Во время всех описанных процедур **надевайте** неопудренные латексные перчатки, чтобы избежать загрязнения и защитить руки при контакте с теплыми или слегка заостренными поверхностями.

Замена иглы шприца

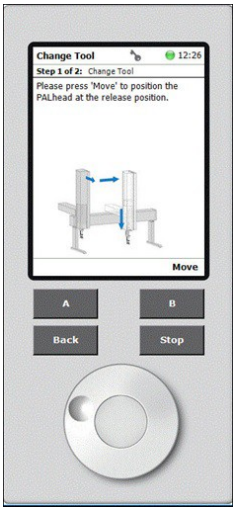
1. На ручном контроллере включите Расширенный уровень доступа (см. раздел Включение расширенного уровня доступа на стр. 125).

2. Нажмите **Options (Параметры)** > **Service (Сервис)**> **Installation (Установка)**.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

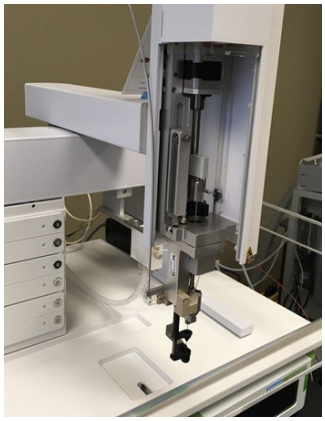


3. Покрутите и нажмите диск выбора, чтобы выбрать **Change Tool** (Изменить инструмент):



4. Нажмите кнопку Move (Переместить) (кнопка B). В результате этого действия головка физически перемещается и узел опускается вниз, чтобы обеспечить доступ к игле:

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

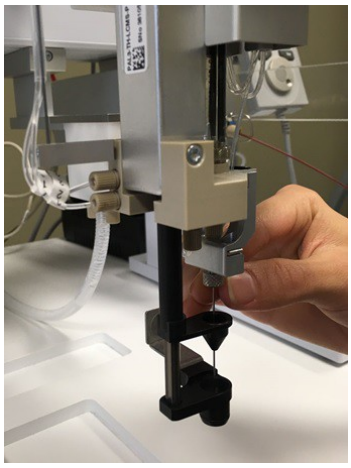


Внимание: ОПАСНОСТЬ ПРОКОЛА!



Будьте очень осторожны при работе с узлом иглы.

5. Удерживая иглу левой рукой, открутите ее правой рукой:



6. Поднимите иглу вверх и выньте из узла:

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



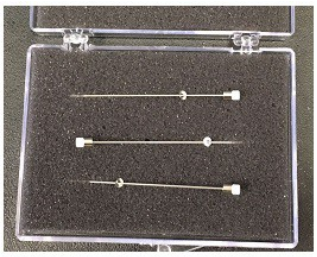
7. Вытяните иглу из затяжной гайки, стараясь не потерять шайбу:

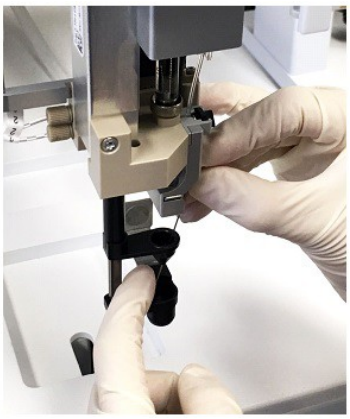


8. Возьмите новую иглу из поставляемого с прибором комплекта расходных материалов, состоящего из трех пакетов.

Проследите за тем, чтобы не потерять прилагающуюся шайбу. Вставьте новую иглу (может потребоваться аккуратно ее согнуть):

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru





9. Затяните гайку пальцами, чтобы зафиксировать иглу на месте.
10. На ручном контроллере нажмите **Next** (Далее) (кнопка B). Головка возвращается в исходное положение, затем нажмите **OK**.

Замена шприца

Следующую процедуру следует выполнять через указанные ниже промежутки времени или по рекомендации представителя службы поддержки клиентов компании PerkinElmer:

- Каждые 25 000 инъекций (введений) (примерно 260 96-луночных планшетов); или
- Когда шприц начинает протекать.

Замените шприц, если плунжер перестал быть тугим или если вы обнаружили другие проблемы с плунжером или шприцем. Для данного типа шприца необходимо заменить весь шприц в сборе; сменные плунжеры отдельно не поставляются.

Необходимые инструменты и материалы

Прежде чем приступить к работе, убедитесь, что у вас в распоряжении имеется следующее:

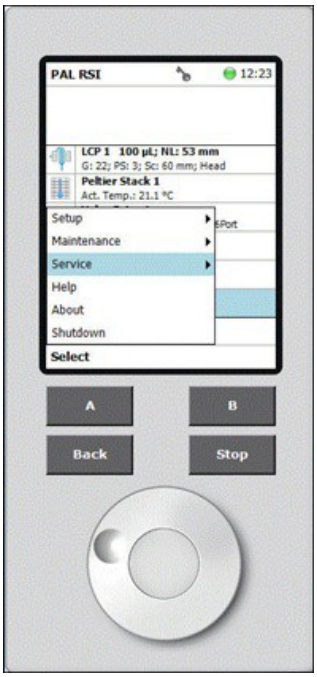
- Сменный шприц
- Неопудренные латексные перчатки

Важно: Во время всех описанных процедур **надевайте** неопудренные латексные перчатки, чтобы избежать загрязнения и защитить руки при контакте с теплыми или слегка заостренными поверхностями.

Замена шприца

1. На портативном контроллере активируйте **Extended User access** (**Расширенный уровень доступа)** (см. раздел Включение расширенного доступа пользователя на стр. 125).
2. Нажмите **Options** (параметры) > **Service (Сервис)**> **Installation (Установка)**.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

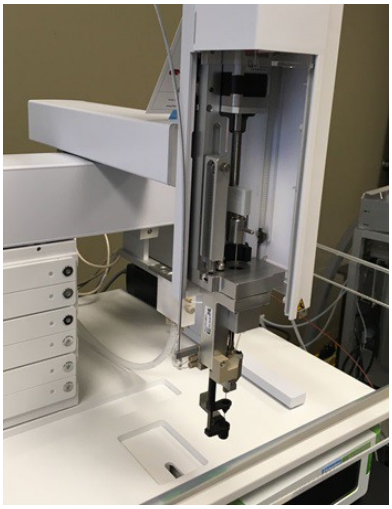


3. Покрутите и нажмите диск выбора, чтобы выбрать **Change Tool** (Изменить инструмент).



4. Нажмите кнопку **Move** (Переместить) (кнопка B). В результате этого действия головка физически перемещается и узел опускается вниз, чтобы обеспечить доступ к шприцу:

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



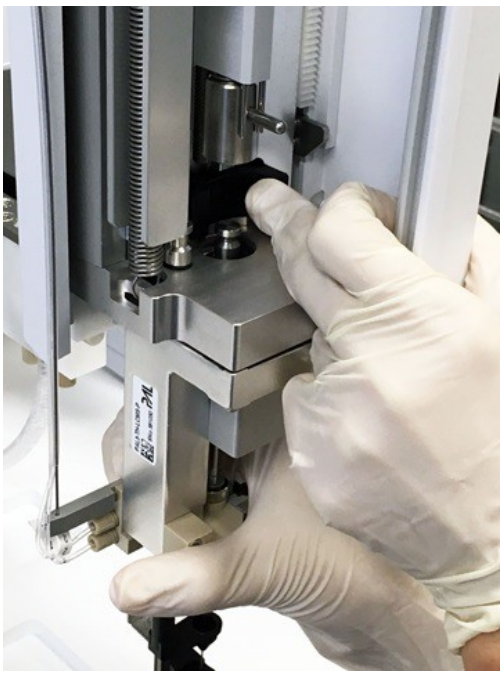
5. Удерживая плунжер в левой руке, сдвиньте серебристый рычаг вверх, пока он не освободит плунжер:



Предупреждение: Опасность защемления. Будьте очень осторожны при работе с деталями зажима и плунжера.

6. Удерживая весь инструмент LCP, другой рукой нажмите на черный зажим справа, чтобы освободить узел инструмента LCP; весь инструмент отсоединится.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



Предупреждение: Опасность защемления. Будьте очень осторожны при работе с деталями зажима и плунжера.

7. Снимите головку плунжера с узла инструмента LCP. Отложите ее в сторону на чистую ровную устойчивую поверхность.
8. Откручивайте черный колпачок до тех пор, пока не сможете извлечь плунжер. Отложите.
9. Пальцами открутите верхнюю гайку шприца:



10. Вытащите шприц. Отложите.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru





11. Вставьте новый шприц с плунжером в узел инструмента LCP, следя за тем, чтобы он правильно располагался над иглой:



12. Установите на место и затяните пальцами черную торцевую крышку и снова установите головку плунжера.

13. Совместите сборку с отверстиями для штифтов на инструменте ЖХ, сдвиньте черный переключатель вправо и задвиньте его назад вверх и вниз до щелчка. Сдвиньте серебристый рычаг вниз до щелчка.

14. На ручном контроллере нажмите **Next** (Далее) (кнопка B). Головка возвращается в исходное положение. Нажмите **OK**.

15. Заправьте инструмент ЖХ (см. Промывка шприца и заправка инструмента ЖХ на стр. 125).

График профилактического технического обслуживания

В данном разделе описывается рекомендуемый график профилактического технического обслуживания (ТО) для Автосамплера системы скрининговой “QSight 225MD UHPLC Screening System”. Несоблюдение рекомендованного нами графика обслуживания может привести к выходу прибора из строя или поломке, а также к аннулированию гарантии на систему.

Все мероприятия по профилактическому техническому обслуживанию должны проводиться персоналом, прошедшим обучение у специалиста PerkinElmer. Любые необходимые запчасти можно приобрести через службу поддержки клиентов компании PerkinElmer.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Каждые 20 000 инъекций

- Общая (косметическая) чистка
- Замените уплотнение иглы и ротора
- Выполните смазку

120 000 инъекций или годовое ТО

- Общая (косметическая) чистка
- Замените ЖХ инжектор PAL с уплотнением
- Выполните смазку

Процедуры технического обслуживания насоса для УВЭЖХ QSight MD

Предупреждение: При выполнении планового технического обслуживания соблюдайте особую осторожность, если насос находится под напряжением. Насос для УВЭЖХ является устройством высокого давления; постоянно следите за тем, чтобы давление в устройстве нарастало медленно, и всегда надевайте защитные очки. Дополнительные меры предосторожности и информацию о процедурах см. в Руководстве пользователя насоса для УВЭЖХ QSight MD.

В данном разделе рассмотрены следующие темы:

- Запуск насоса
- Отключение насоса
- График технического обслуживания

Растворители

Для облегчения обслуживания и предотвращения ненужных простоев, рекомендуется иметь в лаборатории следующие растворители:

Растворители
Ацетонитрил (степень очистки для ВЭЖХ)
Метанол (степень очистки для ВЭЖХ)
Вода (степень очистки для ВЭЖХ)

Запуск насоса

После первой установки или если насос не использовался дольше, чем в течение одной ночи (то есть более 16 часов), мы рекомендуем выполнить следующую процедуру ввода в эксплуатацию:

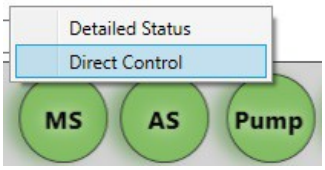
1. Приготовьте свежие растворители подвижной фазы и промывку уплотнений (20% метанол / 80% вода или 20% изопропанол / 80% вода). Используйте только растворители класса ВЭЖХ, отфильтрованные через фильтры 0,2 мкм.
2. Убедитесь, что насос включен, и запустите программное обеспечение Simplicity.

Убедитесь, что насос подключен к программному обеспечению (зеленый сигнал индикатора — см. раздел Управление устройством по световому индикатору правой кнопкой мыши на стр. 41).



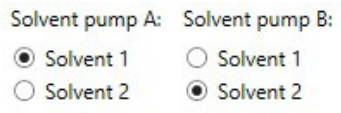
3. Щелкните правой кнопкой мыши на световом индикаторе насоса и выберите **Direct Control** (Прямое управление).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



Откроется окно **Direct Control** (Прямое управление), в котором можно управлять насосом независимо.

4. В разделе Direct Control (Прямое управление) выберите порт растворителя, используемый для насоса A и насоса B:



5. В разделе Wash (Промывка) нажмите кнопку **Prime seal wash** (Основная фаза промывки уплотнений).

Она автоматически остановится через 30 секунд. Проверьте, чтобы линии подачи были полностью заполнены растворителем и в них не было пузырьков. Если линии не заполнены или видны пузырьки, повторите это действие.

Примечание: Этот процесс произойдет только для линий подачи растворителя, выбранных в **Direct Control** (Прямое управление).

6. В разделе "Промывка" выберите **Prime mobile phase** (Основная подвижная фаза).

Она автоматически остановится через 90 секунд. Проверьте, чтобы линии подачи были полностью заполнены растворителем и в них не было пузырьков. Если линии не заполнены или видны пузырьки, повторите это действие.

Примечание: Этот процесс произойдет только для линий подачи растворителя, выбранных в Direct Control (Прямое управление).

7. В разделе Промывка выполните **Purge** (Очистка) каналов A и B. Она автоматически остановится через 120 секунд.

Примечание: Этот процесс произойдет только для линий подачи растворителя, выбранных в Direct Control (Прямое управление).

8. Введите максимальное давление в системе и желаемую долю растворителя (A%/ B%) на канал.

9. Чтобы довести давление до необходимого значения, увеличивайте скорость потока постепенно, пока желаемая скорость не будет достигнута. Начните с низкого давления, затем выберите **ON** (ВКЛ). Дождитесь стабилизации давления, прежде чем вводить следующее значение. Повторяйте процедуру до тех пор, пока не будет достигнуто желаемое и стабильное давление. Когда в насосе будет достигнуто нужное давление, проверьте на утечку:

- Входы и выходы
- Соединения SSV
- Подключение дегазатора
- Смеситель
- Продувочный клапан

10. Если давление стабильно и утечек не обнаружено, закройте дверцу насоса. Теперь насос готов к нормальной работе.

Отключение насоса

Краткосрочное отключение

Если вам необходимо отключить насос на ночь или на выходные, рекомендуется выполнить следующую процедуру:

1. Приготовьте свежую промывку уплотнений (20% метанола / 80% воды или 20% изопропанола / 80% воды). Используйте только растворители класса ВЭЖХ, отфильтрованные через фильтры 0,2 мкм. Отсоедините все растворители подвижной фазы от системы и подсоедините все шланги к свежей промывке уплотнения.

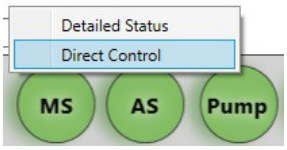
2. Убедитесь, что насос включен, и запустите программное обеспечение Simplicity.

Убедитесь, что насос подключен к программному обеспечению (зеленый сигнал индикатора — см. раздел Управление устройствами с помощью светового индикатора правой кнопкой мыши на стр. 41)



3. Щелкните правой кнопкой мыши на индикаторе насоса и выберите **Direct Control** (Прямое управление).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru



Откроется окно **Direct Control** (Прямое управление), в котором можно отдельно управлять насосом.

4. В разделе Wash (Промывка) выберите **Prime mobile phase** (Основная подвижная фаза). Она автоматически остановится через 90 секунд.

5. В разделе Wash (Промывка) выполните **Purge** (Очистка) каналов A и B. Она автоматически остановится через 120 секунд.

Примечание: Это действие будет выполнено только для линий подачи растворителя, выбранных в Direct Control (Прямое управление).

6. Выйдите из программы и выключите насос.

Долгосрочное отключение

Если вам необходимо отключить насос на длительный период времени, рекомендуется выполнить следующую процедуру:

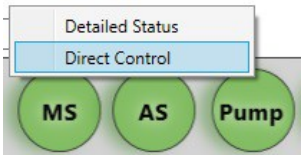
1. Приготовьте свежий 100% изопропанол. Используйте только растворители класса ВЭЖХ, отфильтрованные через фильтры 0,2 мкм. Подсоедините все шланги к изопропанолу.

2. Убедитесь, что насос включен, и запустите программное обеспечение Simplicity.

Убедитесь, что насос подключен к программному обеспечению (зеленый сигнал индикатора — см. раздел Управление устройством по световому индикатору правой кнопкой мыши на стр. 41).

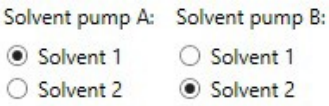


3. Щелкните правой кнопкой мыши на световом индикаторе насоса и выберите **Direct Control** (Прямое управление).



Откроется окно **Direct Control** (Прямое управление), в котором можно управлять насосом независимо.

4. В разделе **Direct Control** (Прямое управление) выберите насосы для растворителя, как показано на рисунке:



5. В разделе Wash (Промывка) нажмите кнопку **Prime seal wash** (Заправка раствором для промывки уплотнений).

Она автоматически остановится через 30 секунд. Проверьте, чтобы линии подачи были полностью заполнены растворителем и в них не было пузырьков. Если линии не заполнены или видны пузырьки, повторите это действие.

6. В разделе "Промывка" выберите **Prime mobile phase** (Заправка подвижной фазой).

Она автоматически остановится через 90 секунд. Проверьте, чтобы линии подачи были полностью заполнены растворителем и в них не было пузырьков. Если линии не заполнены или видны пузырьки, повторите это действие.

7. В разделе Промывка выполните **Purge** (Очистка) каналов A и B. Она автоматически остановится через 120 секунд.

Примечание: Этот процесс произойдет только для линий подачи растворителя, выбранных в Direct Control (Прямое управление).

8. Отсоедините все шланги для впуска растворителя и поместите их на хранение в пластиковый пакет. Установите заглушки в открытые отверстия.

9. Снимите шланги с миксера и поместите их на хранение в пластиковый пакет. Установите пробку в отверстие смесителя.

10. Выйдите из программы и выключите насос. Выньте вилку шнура питания из розетки.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

График профилактического технического обслуживания

В данном разделе приводится рекомендуемый график профилактического обслуживания (ТО) насоса для УВЭЖХ QSight 225MD. Несоблюдение рекомендованного графика профилактического обслуживания может привести к выходу прибора из строя или поломке, а также к аннулированию гарантии на систему.

Все мероприятия по профилактическому обслуживанию должны проводиться персоналом, прошедшим обучение у специалиста компании PerkinElmer. Любые необходимые детали можно приобрести через службу поддержки клиентов PerkinElmer.

120 000 введений или годовое ТО

- Общая (косметическая) чистка
- Замена уплотнения высокого давления
- Замена фильтра насоса
- Замена выходного фильтра
- Замена поршневого картриджа
- Замена обратного клапана
- Выполнение смазки

Процедуры технического обслуживания колоночного термостата QSight MD

В этом разделе описаны основные процедуры технического обслуживания. Не пытайтесь выполнять обслуживание колоночного термостата, выходящее за рамки технического обслуживания, описанного в данном разделе.

Процедуры технического обслуживания, не описанные в данном разделе, должны выполняться только уполномоченным сервисным персоналом. Если у вас возникли вопросы по этим процедурам, обратитесь за помощью к представителю службы поддержки клиентов уполномоченного представителя.

Внимание! Внутренняя поверхность колоночного термостата может быть горячей! Прежде чем открывать отсек термостата, убедитесь, что температура в нем понизилась и до него можно дотронуться.

В данном разделе рассмотрены следующие темы:

- Общая очистка
- Проверка на отсутствие утечек
- Замена уплотнения ротора разделяющего клапана
- Когда обращаться в сервисную службу

Запчасти, инструменты и растворители

Для облегчения обслуживания и предотвращения ненужных простоев рекомендуется иметь в лаборатории следующие инструменты и растворители:

Инструменты
Безворсовая ткань
Растворители
Вода или изопропанол

Общая очистка

Для предотвращения повреждения уплотнений, держите поверхности чистыми и не допускайте загрязнений. Протрите внешнюю поверхность колоночного термостата безворсовой тканью, смоченной водой или изопропанолом.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Проверка на отсутствие утечек

Регулярно проверяйте все соединения и клапаны на наличие признаков утечки растворителя. Типичным признаком утечки может быть скопление соли вокруг соединителей или под ними. Если видна утечка, возможно, ослабло соединение или требуется замена уплотнения. Затяните вручную все соединения и проследите за дальнейшей утечкой. Свяжитесь с представителем службы поддержки клиентов уполномоченного представителя, если утечки становятся постоянными.

Когда обращаться в сервисную службу

Обслуживание колоночного термостата должно проводиться квалифицированным представителем сервисной службы уполномоченного представителя, если произошло одно из следующих событий:

- Колоночный термостат подвергся какому-то сильному удару (например, если его уронили).
- В колоночный термостат проникла жидкость.
- Колоночный термостат имеет признаки нарушения работоспособности и работает не так, как ожидалось.
- Колоночный термостат демонстрирует изменение производительности.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Шприцевой насос QSight®

Шприцевой насос, входящий в комплект поставки масс-спектрометра QSight®, стабильно подает выбранный вами образец непосредственно к источнику, что идеально подходит для выполнения настройки и рутинного обслуживания. Для вашего удобства в шприцевом насосе используется сенсорный экран для выбора опций меню и ввода значений. Шприцевой насос использует имеющиеся в продаже стеклянные или пластиковые шприцы, для использования со шприцевым насосом мы поставляем стеклянный шприц Hamilton объемом 1 мл (1000 мкл).

Описание шприцевого насоса

Ниже описаны основные компоненты и значки меню шприцевого насоса. Если у вас возникли вопросы по каким-либо компонентам или проблемы со шприцевым насосом, обратитесь к представителю службы поддержки клиентов компании PerkinElmer.



Рисунок 22: Шприцевой насос QSight® - вид спереди

1. Блок толкателя
2. Ходовой (направляющий) винт
3. Направляющая штанга
4. Кнопка сброса
5. Экран пользовательского интерфейса с защитным антибликовым покрытием
6. Удерживающие кронштейны
7. Зажим ствола шприца
8. Блок держателя шприца
9. Ручки зажима удерживающего кронштейна
10. Светодиодный индикатор работы

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Шприцевой насос QSight®



Рисунок 23: Шприцевой насос QSight® - задняя часть

1. Ножной переключатель
2. Последовательный вход USB (тип B)
3. Вход питания постоянного тока
4. Главный выключатель

Значки меню шприцевого насоса
В следующей таблице описаны значки, которые вы найдете на дисплее шприцевого насоса, и их значения.
Таблица 1

	**Settings (Настройки):** Войдите в меню настроек, чтобы отрегулировать рабочие параметры шприцевого насоса. Примеры параметров, которые можно настроить, включают, но не ограничиваются: - Дата и время - Звуковые сигналы тревоги - Усилие плунжера - Подсветка - Связь RS-232
	**Accept (Принять):** Используется для принятия параметров/настроек на экране и возврата к предыдущему экрану меню.
	**Cancel (Отмена):** Используется для отмены любых изменений/записей на экране и возврата к предыдущему экрану меню.
	**Back (Назад)**: Используется для возврата на один экран назад.
	**Run/Resume (Запустить/возобновить):** Используется для запуска или возобновления метода.
	**Stop (Стоп):** Используется для остановки выполнения метода.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

	Fast-Forward (Ускоренное движение вперед): Продвигает плунжер вперед (вливание).
	Rewind (Обратная тяга): Продвигает плунжер в обратном направлении (извлечение).
	Clear (Сброс): Сброс счетчиков/таймеров.

Установка шприца

В шприцевом насосе QSight используется стеклянный шприц Hamilton объемом 1 мл (1000 мкл) для подачи устойчивого потока выбранного вами раствора.

Чтобы установить шприц

Перед установкой нового шприца убедитесь, что он заполнен до отметки 1 мл нужным раствором пробы. Чтобы установить шприц, выполните описанные ниже действия:

1. Нажмите Release Button (кнопку разблокировки) и переместите плунжер на приблизительную длину шприца. Затем поверните обе ручки зажима кронштейна против часовой стрелки, чтобы ослабить фиксирующие скобы на плунжере и блоке держателя шприца.
2. Открутите зажим ствола шприца и вставьте новый шприц в блок держателя шприца так, чтобы плунжер шприца вошел в фиксирующий кронштейн, а фланец ствола шприца вошел в фиксирующий кронштейн блока шприца.
3. Затяните зажим ствола шприца, повернув ручку зажима ствола на блоке шприца по часовой стрелке, затем затяните обе ручки зажима фиксирующего кронштейна, чтобы зафиксировать шприц.



Внимание: Не затягивайте зажим ствола шприца слишком сильно, иначе можно повредить шприц, особенно если он стеклянный.

4. С помощью шестигранного ключа установите стопорные манжеты, чтобы предотвратить резкое перемещение плунжера в любом направлении.



Внимание: При использовании стеклянных шприцев обязательно установите стопорный хомут блока шприца так, чтобы предотвратить полное нажатие на плунжер, иначе вы рискуете повредить шприц.

Запуск и остановка шприцевого насоса

Шприцевой насос QSight поставляется с предустановленным методом "Только инфузия" для использования с масс-спектрометром QSight, который доступен из руководства по быстрому запуску после включения шприцевого насоса. Используйте сенсорный экран для перехода к различным экрана и изменения любых настроек.

Чтобы запустить шприцевой насос

После установки наполненного шприца (см. Установка шприца на стр. 142) вы готовы к запуску шприцевого насоса. Чтобы запустить шприцевой насос, выполните описанные ниже действия:

1. На задней панели прибора переведите главный выключатель в положение ON, на экране появится экран быстрого запуска.
2. На экране меню нажмите Infuse Only (Только инъекция (введение)). Отобразится экран Infuse Only.
3. Убедитесь, что в качестве типа шприца выбран Hamilton 1000. Если это не так, измените выбор шприц, нажав Syringe Select (Выбор шприца), чтобы войти во вкладку выбора шприца, выберите Hamilton 1000 из списка, используя стрелки вверх и вниз для навигации, затем нажмите Accept (Принять).
4. Чтобы выбрать скорость потока, нажмите Infuse Rate Select (Выбрать скорость инхъекци (введения)), откроется экран Set Infuse Rate. Введите желаемую скорость потока и подтвердите правильность единиц измерения (например, µL/min (мкл/мин)). Нажмите Accept (Принять), когда вы будете удовлетворены своим выбором.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

5. Шприцевой насос можно настроить на автоматическую остановку после введения заданного объема или по истечении определенного времени. Мы рекомендуем всегда устанавливать целевой объем (а не целевое время). Чтобы изменить целевой объем или время, нажмите кнопку Target Volume/Time (целевой объем или время), откроется экран Target Volume/Time. Введите желаемый объем или время, затем нажмите Accept (Принять), если вы удовлетворены своим выбором.

Внимание: Убедитесь, что стопорный хомут блока шприца расположен так, что плунжер не может опуститься до дна, иначе вы рискуете повредить шприц.

6. Убедитесь, что уровень силы установлен на 30%. Если это не так, необходимо изменить уровень усилия. Чтобы изменить уровень усилия, нажмите значок Settings (Настройки), чтобы отобразить Settings (Настройки). Нажмите Force (Сила), откроется экран Set Force Level (установить уровень усилия). Выберите 30%, затем нажмите Accept (принять).
7. Когда вы будете удовлетворены настройками насоса, нажмите значок Run (кнопка Play), чтобы отобразить экран Run (прогон), содержащий сводку текущих настроек. При повторном нажатии кнопки Run начнется введение насоса в масс-спектрометр.

Перенастройка шприцевого насоса

Шприцевой насос QSight использует толкатель, соединенный с ведущим винтом (см. рис. 1), который приводится в действие микрошаговым двигателем для обеспечения постоянного усилия на плунжер шприца. Если толкающему блоку мешают (например, при неправильном расположении стопорного кольца, перегибе трубки или полном нажатии на плунжер шприца), шаговый двигатель заглохнет, и насос перейдет в состояние ошибки. Вам придется перезагрузить шприцевой насос, прежде чем вы сможете возобновить свои исследования. Если у вас возникли вопросы о сбросе шприцевого насоса или если вы столкнулись с трудностями при выполнении описанной ниже процедуры, свяжитесь с представителем службы поддержки клиентов компании PerkinElmer.

Сброс настроек шприцевого насоса

Если двигатель шприцевого насоса заглох, вам нужно сбросить ошибку и заправить шприц, прежде чем продолжить работу. Чтобы сбросить настройки шприцевого насоса, выполните описанные ниже действия:

Внимание: Если вы активно собираете данные, вам необходимо остановить сбор данных с помощью программного обеспечения Simplicity 3Q MD ДО продолжения, иначе вы рискуете повредить детектор!

1. Определите причину остановки двигателя. Посмотрите, нет ли перегибов или засоров в трубках, подсоединенных к насосу, проверьте положение стопорных хомутов и убедитесь, что плунжер шприца нажат не полностью.
2. После устранения причины остановки двигателя снимите и полностью наполните шприц до отметки 1 мл раствором образца, затем установите его на место, следуя процедуре, описанной в разделе Установка шприца на стр. 142.
3. На экране шприцевого насоса нажмите Run, чтобы устранить ошибку, затем снова нажмите Run, чтобы возобновить работу. Перезапустите сбор данных. Во время сбора данных следите за работой насоса до завершения сбора данных, чтобы убедиться, что проблема не повториться. Если проблема сохраняется, свяжитесь с представителем службы поддержки клиентов PerkinElmer.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Расходные материалы

Общая очистка

В следующем разделе описаны расходные материалы для компонентов системы скрининговой «QSight® UHPLC Screening System». Эти расходные материалы предназначены для использования во время повседневной работы и/или во время планового технического обслуживания. Если вам нужна помощь в заказе любого из перечисленных здесь расходных материалов, обратитесь к представителю службы поддержки клиентов компании PerkinElmer.

Темы данного раздела включают:
- Масс-спектрометр QSight® 225MD
- Автосамплер QSight® MD HC
- Насос QSight®MD UHPLC и бинарный насос MD
- Колоночный термостат QSight® MD

Масс-спектрометр QSight® 225MD

Номер части	Описание
BC000658	Трубки, 1/16" наружный диаметр x 0,005" внутренний диаметр, PEEK красный
SX016316	Трубка, 1/16" OD x 0,005" ID, PEEK Red, предварительно нарезанная
BC000659	Трубка, наружный диаметр 1/16" x 0,030" ID, PTFE (10 см)
BC000660	Соединение PEEK ZDV, 0,020", с фитингами
BC001141	Заглушка CAP
BC001970	Уплотнительное кольцо, узел зонда, большой
BC001972	Уплотнительное кольцо, узел зонда, малый
BC002106	Трубка для подачи газа (1/4")
BC002563	Фитинг, затягиваемый вручную
BC002793	Трубка, наружный диаметр 1/2", PTFE
BC002927	Шприц, 1 мл с фиксированным наконечником, Гамильтон
BC002929	Инструмент, труборез с 5 лезвиями
BC002931	Набор принадлежностей для ЖК/инфузии
N2820033	Комплект, принадлежности для PM
BC003942	Тройник LC
N2820021F	Игла ESI с фитингом PEEK
N2820052	Колпачок ESI в сборе, без иглы
N2820051F	Игла ESI с фитингом PEEK и колпачком в сборе
N2820023F	Игла APCI с фитингом PEEK
N2820024F	Игла APCI с фитингом PEEK и колпачком в сборе

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Номер части	Описание
4309-0010	Комплект для настройки QSight MSMS
4314-0010	Комплект для настройки QSight PM
4332-0010	Раствор QSight POS PPG 2E-7M
4333-0010	Раствор QSight NEG PPG 1E-5M
N9301735	Пробирка 2 мл, 9 мм, янтарная с винтовой крышкой, с тефлоновой/силиконовой крышкой с предварительной прорезью - комплект (100/упак)
N9306364	Колпачок-9 мм Blu Nat PTFE Wht Sil Slt (100)
N9307802	Пробирка-2 мл янтарная 9 мм с колпачком 100 шт.
BC005398	Трубки из полиэфирэфиркетона (PEEK)
09923454	Сменный картридж фильтра газоочистителя QSight

Автосамплер QSight® MD UHPLC

Номер части	Описание
MZ334104	Комплект профилактического обслуживания для конфигурации PALSystem LC
N6556205	Основной блок питания для PALSystem 200 Вт Входное напряжение 100-240 В
MZ334111	Игла для инструмента PAL LCMS, калибр 22 PST 3, длина 51 мм (3 штуки в упаковке; включает гайку для фиксации иглы)  **Внимание**: Только для лабораторного использования; НЕ для использования на человеке in vivo.
BC006206	Шприц для инструмента LCMS, шприц 100 µL для LCMS газонепроницаемый, Ø 7,7 мм, длина шкалы 60 мм, резьба 1/4-28 UNF
BC005649	Резак для фольги для прокалывания алюминиевой или пластиковой фольги перед проникновением иглы в микротитровальные или глубоколуночные планшеты
ZCSL20CTC	Пробоотборная петля 20 µL для клапана VICI Cheminert, 1/16", ID 0,25 мм, с гайками и обжимными кольцами
BC006282	Пробоотборная петля 10 µL для клапана VICI Cheminert, 1/16", ID 0,25 мм, с гайками обжимными кольцами
BC006576	PAL LCInjector с уплотнением (press fit), калибр 22 (2 шт.)
BC006577	PAL Игольчатое уплотнение (пресс-фитинг - 5 шт.)
BC005397	Сменный ротор для клапана 225MD
N6556042	Штатив для образцов на 54 пробирки по 2 мл, упаковка из 3 шт, пробирки в комплект не входят
1445-4020	Узел рядного фильтра (включает корпус из нержавеющей стали и два биосовместимых фитинга 2 µm PEEK)

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Номер	Описание
1445-4030	2 pm сменный фитинг с рифленым концом, 10 шт.
11950880	Фитинги PEEK, короткие (10/шт)

Насос QSight® MD UHPLC

Номер	Описание
BC005395	Фильтр для насоса растворителя 1/8" (10um) - 5 упаковок
N2936320	Трубка из ПТФЭ, наружный диаметр 1/8" - 1/16" (1 мтр)
BC006324	Набор бутылок QSight® MD содержит пробки для фитингов фланцевого типа (10шт), бутылки объемом 1 л янтарного цвета (5шт) и защитные колпачки (5шт)
BC005316	Заглушка для колонки (черная)
BC006338	Трубка из нержавеющей стали от насоса УВЭЖХ к клапану автосамплера (Примечание: эта трубка предназначена только для использования с насосом УВЭЖХ QSight MD)

Колоночный термостат QSight® MD

Номер части	Описание	
BC006323	Комплект трубок QSight MD	
	Состав	**Количество**
	Обжимное кольцо Valco 1/16"	4
	Гайка Valco 1/16"	4
	Valco герметичный фитинг PEEK	7
	IDEX Marvel x 7 см	8
	IDEX Marvel x15 см	4
	PTFE трубка 1/16" x 1,0 мм ID	1
	0,75 м Трубка ПЭЭК 1/16" x 0,13 мм (красная)	3
	Трубка 1/16" ID = 0,13 CTC-колоночный термостат CSV	1
	Этикетки колонок 1-6 (колонка 1, колонка 2... колонка 6)	1
BC006497	Трубка из нержавеющей стали от автосамплера к колонному термостату CSV (1/16" ID = 0,13)	

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Решения по техническому обслуживанию

Наборы растворов для настройки и обслуживания QSight (4309-0010, 4314-0010, 4332-0010 и/или 4333-0010) предназначены для использования во время настройки и обслуживания систем скрининговых QSight MD. Перед использованием всех химических веществ ознакомьтесь с соответствующими SDS и вкладышами к наборам. Всегда носите защитные очки, одежду и перчатки. Следуйте всем инструкциям и не пропускайте ни одного рекомендованного шага. Если вам нужна помощь в использовании комплекта Maintenance Solutions Kit, обратитесь к представителю службы поддержки клиентов PerkinElmer.

Набор	Компонент	Количество	Объем (mL)
4309-0010 QSight MSMS Комплект для настройки	POS PPG 2E-7 M раствор	1	12 5
	POS PPG 2E-8 M раствор	1	12 5
	NEG PPG 1E-5 M раствор	1	12 5
414-0010 QSight PM Набор растворов	Reserpine 100 pg/µL раствор	1	50
	Reserpine 20 pg/µL раствор	1	50
	Таурохолевая кислота 200 pg/µL раствор	1	25
	Таурохолевая кислота 20 pg/µL раствор	1	25
	Промывочный раствор	1	25
	Ацетат аммония 5 M раствор	1	2. 5
	Муравьиная кислота	3	1
4332-0010 QSight POSPPG 2E-7M Раствор	POS PPG 2E-7 M раствор	1	12 5
4333-0010 QSight NEGPPG 1E-5M Раствор	NEGPPG 1E-5 M раствор	1	12 5

Условия хранения

Условия хранения и срок годности указаны на упаковке. Обращайтесь и храните наборы и компоненты, как указано во вкладыше к продукту.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Конфигурации шлангов (трубок)

В разделе описаны возможные конфигурации шлангов (трубок) и материалы для системы скрининговой QSight® 225MD UHPLC Screening System. Описанные здесь конфигурации являются рекомендациями, и вам следует выбрать конфигурацию, которая наилучшим образом соответствует вашим потребностям и особенностям оборудования. Если вам нужна помощь в выборе оптимальной конфигурации шлангов для вашей установки, обратитесь к представителю службы поддержки клиентов уполномоченного представителя.

В данном разделе рассмотрены следующие темы:

- От насоса к Автосамплеру
- От Автосамплера к колоночному термостату
- Разделяющий клапан
- Подключения к масс-спектрометру QSight
- Только проточно-инжекционные анализы
- Ввод ЖХ через две колонки
- Ввод ЖХ через одну колонку
- Ввод ЖХ через несколько колонок

Обзор

Общая конфигурация шлангов для системы скрининговой QSight® 225MD UHPLC Screening System проходит от насоса к колоночному термостату через Автосамплер. Из колоночного термостата пробы поступают через разделяющий клапан в масс-спектрометр.

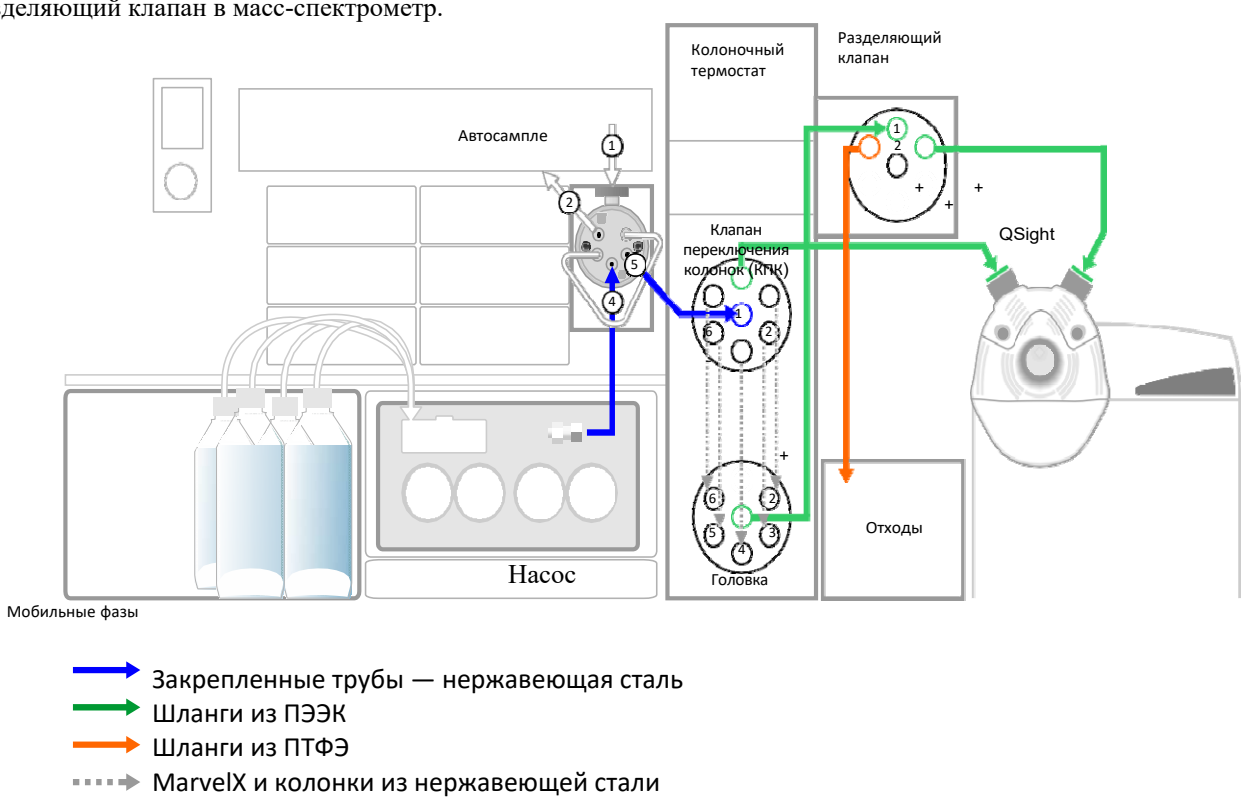


Рисунок 24: Общая конфигурация шлангов системы скрининговой QSight® 225MD UHPLC Screening System

На приведенных ниже схемах неиспользуемые порты обозначены символом "X". Материал шлангов указан на схемах и может меняться в зависимости от ваших конкретных потребностей. Запасные шланги можно приобрести через представителя службы поддержки клиентов уполномоченного представителя PerkinElmer.

От насоса к Автосамплеру

Ниже приведена конфигурация шлангов для подключения насоса к клапану переключения колонок колоночного термостата (КПК), и это фиксированный путь потока. В насосе может одновременно находиться до четырех растворителей: A1, A2, B1, B2. Клапан выбора растворителя в насосе способен выбрать только один насос для растворителя (A или B) во время работы, поэтому вы можете использовать A1 или A2 с B1 или B2, но не A1 с A2 или B1 с B2.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

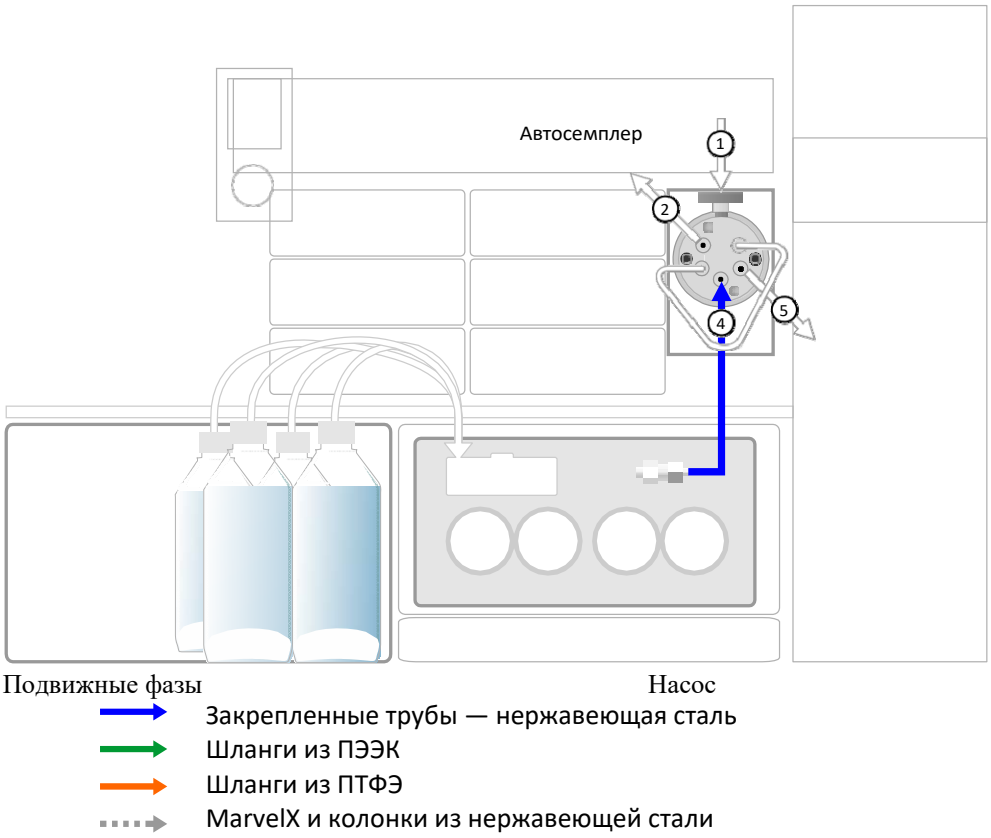


Рисунок 25: Конфигурация шлангов от насоса к Автосамплеру.

Клапан Автосамплера имеет следующую конфигурацию портов:

- Порт 1 — позиция инжектора с уплотнением PAL (проба внутри)
- Порт 2 подключается к модулю промывки ЖХМС (отходы)
- Порты 3 и 6 подключаются к петле для пробы объемом 10 мкл
- Порт 4 подключается к насосу УВЭЖХ (подвижная фаза)
- Порт 5 подключается к центральному порту КПК (см. Рисунок 26: Конфигурация шлангов от Автосамплера к колоночному термостату на стр.150).

От Автосамплера к колоночному термостату

Подключение Автосамплера к колоночному термостату осуществляется через клапан КПК.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

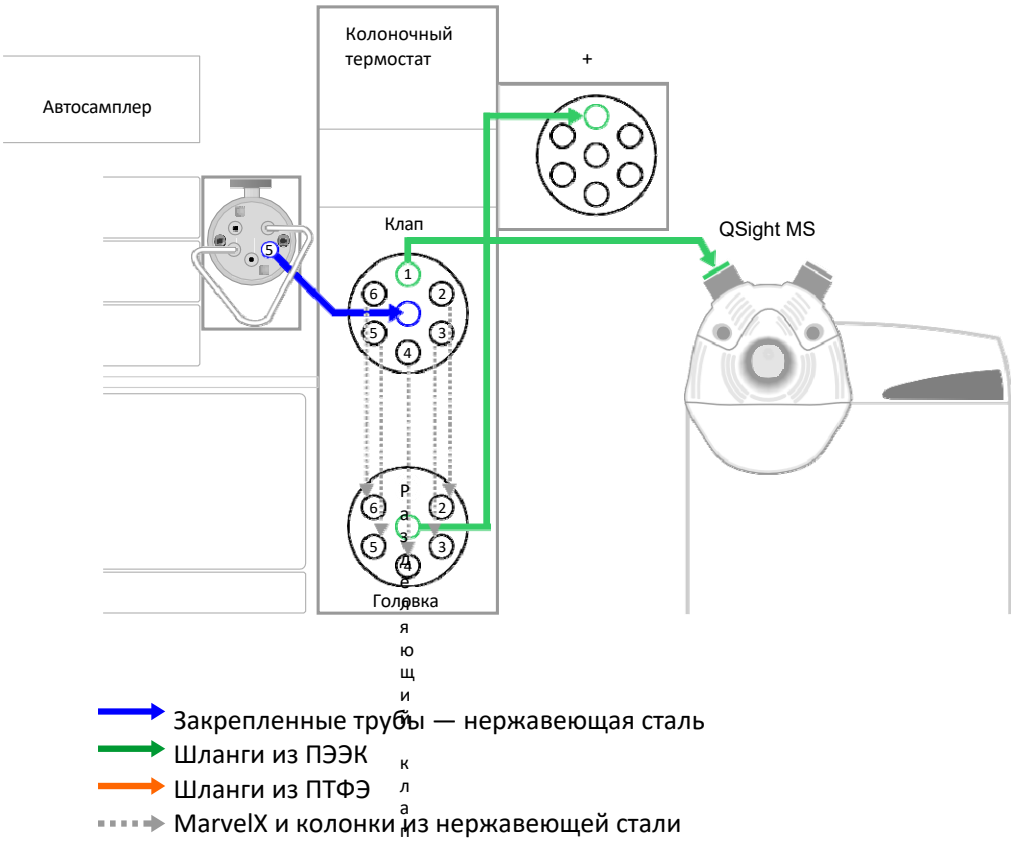


Рисунок 26: Конфигурация шлангов от Автосамплера к колоночному термостату

Клапан переключателя колонок

- Центральный порт на КПК имеет соединения для шлангов от Автосамплера
- С помощью программного обеспечения Simplicity может быть выбран любой из 6 внешних портов
- Во всех 6 портах для соединения с колонками ЖХ используются шланги MarvelX
- Любые неиспользуемые порты могут быть заблокированы синими нейлоновыми заглушками (входят в комплект поставки)

Головка

- Головка используется в том случае, если для ввода ЖХ имеется несколько колонок
- Расположенный сзади порт — это выходное соединение с портом 1 разделяющего клапана
- Колонки/шланги от КПК подключаются к портам головки с помощью шлангов ПЭЭК
- Любые неиспользуемые порты могут быть заблокированы заглушками из нержавеющей стали (входят в комплект поставки)

Разделяющий клапан

Разделяющий клапан — это двухходовой клапан, установленный на облицовке колоночного термостата в правой боковой части. Этот клапан позволяет вам контролировать, будут ли пробы, поступающие в клапан через порт 1, направляться через порты 2 или 6.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

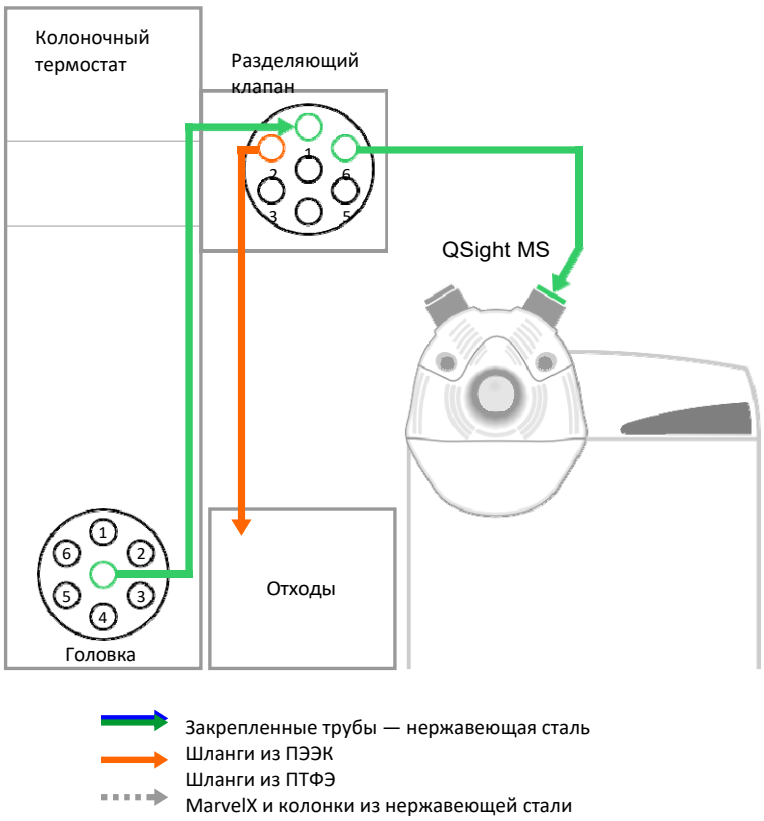


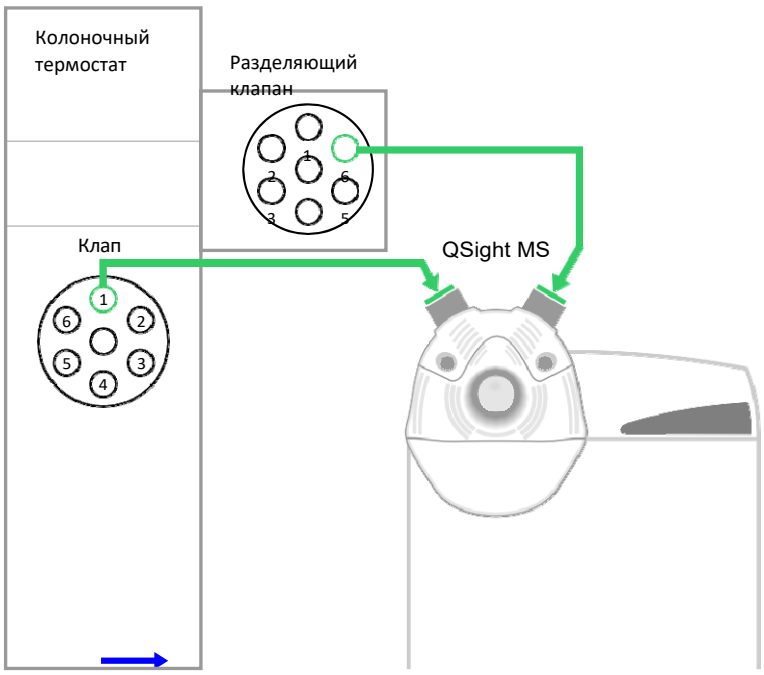
Рисунок 27: Конфигурация шлангов разделяющего клапана.

- Впускной шланг на разделяющем клапане подключен к порту 1
- Для переключения можно использовать либо порт 2, либо порт 6.
- По умолчанию порт 2 будет обозначен в программе Simplicity как Waste, а порт 6 — как MS.
- Выходные порты должны прилегать к входному порту (Порт 1)
- Для отходов используйте шланг ПТФЭ (входит в комплект поставки)

Подключения к масс-спектрометру QSight

Как клапан КПК, так и разделяющий клапан подключаются к масс-спектрометру QSight. Нетипичная установка предусматривает прямой ввод потока из порта 1 КПК на сторону 1 MS. Введение колонки из порта 6 разделяющего клапана на сторону 2 MC завершает настройку.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

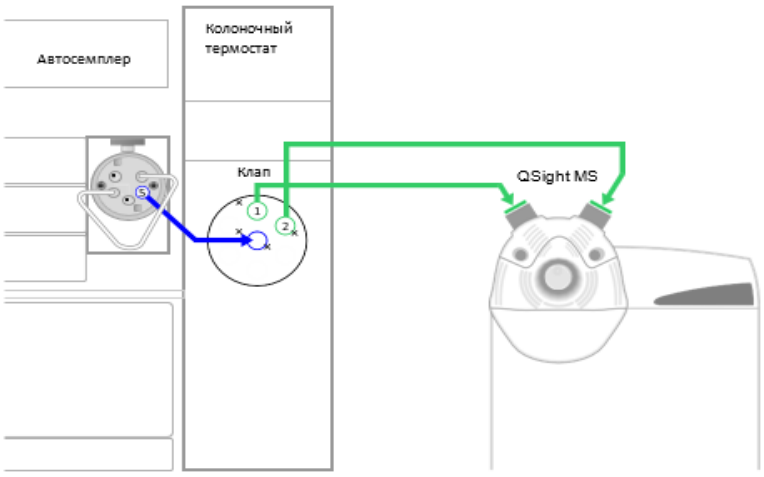


Закрепленные трубы — нержавеющая сталь
Шланги из ПЭЭК
Шланги из ПТФЭ
MarvelX и колонки из нержавеющей стали

Рисунок 28: Конфигурации шлангов для введения потока и колонки в масс-спектрометр QSight 225MD

Только проточно-инжекционные анализы

В описанной конфигурации Анализ ввода потока (FIA) используется для двух различных анализов, ни в одном из которых не используется жидкостное разделение. Эта конфигурация предполагает, что оба анализа утверждены для соответствующих источников (сторона 1 или 2). Шланги из полиэфирэфиркетона соединяют два порта КПК непосредственно с MS, минуя головку и разделяющий клапан. Все неиспользуемые порты на клапане переключения колонок КПК могут быть заблокированы синими нейлоновыми заглушками (входят в комплект поставки). Если требуется встраиваемый в линию фильтр, его следует установить на шланге ПЭЭК (см. рисунок ниже).



Закрепленные трубы — нержавеющая сталь
Шланги из ПЭЭК
Шланги из ПТФЭ
MarvelX и колонки из нержавеющей стали

Рисунок 29: Конфигурация шлангов для проведения двух проточно-инжекционных анализов.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Ввод ЖХ через две колонки

В этой конфигурации будет получена вся проба, выделенный с помощью ЖХ-сепарации (ничего не будет направлено в отходы). Головку и разделяющий клапан можно обойти при подключении, как показано на рисунке 29: Конфигурация шлангов для проточно-инжекционных анализов. Колонки ЖХ должны быть подключены к клапану КПК с помощью шлангов MarvelX, а выходы колонок подключены непосредственно к QSight MS с помощью шлангов ПЭЭК.

Ввод ЖХ через одну колонку

В этой конфигурации проточно-инжекционный анализ выполняется на стороне 1, а ввод ЖХ — на стороне 2. Для проведения проточно-инжекционного анализа порт 1 КПК подключается непосредственно к стороне 1 (см. раздел «Только проточно-инжекционные анализы » на стр. 152).

Порт 3 КПК используется для направления пробы в колонку для ввода ЖХ с использованием шлангов MarvelX для подключения КПК к колонке и ПЭЭК для подключения колонки к порту 1 разделяющего клапана. Порт 2 разделяющего клапана направляет пробу в отходы, а порт 6 разделяющего клапана подключается к стороне 2 МС. Все неиспользуемые порты должны быть заблокированы с помощью соответствующих заглушек (синие нейлоновые на КПК и из нержавеющей стали на головке, входят в комплект поставки). Эта конфигурация позволяет обойти головку, подключив конец колонки непосредственно к порту 1 разделяющего клапана.

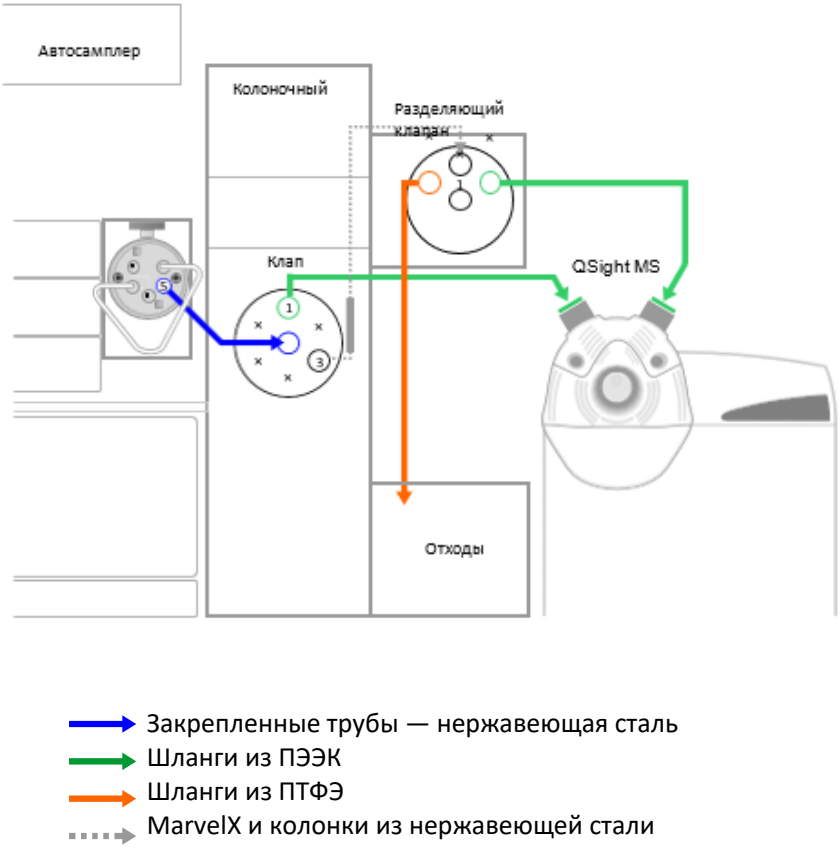


Рисунок 30: Конфигурация шлангов для проведения проточно-инжекционного анализа и одноколоночного ввода ЖХ

Ввод ЖХ через несколько колонок

В этой конфигурации соединения шлангов для обеих сторон 1 и 2 MS идут от разделяющего клапана (порты 2 и 6, соответственно; в этом случае выполнен обход линии отходов — см. раздел «Разделяющий клапан» на стр.150. Любая позиция на КПК может быть использована для ввода ЖХ (см. раздел От Автосамплера к колоночному термостату на стр. 149).

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

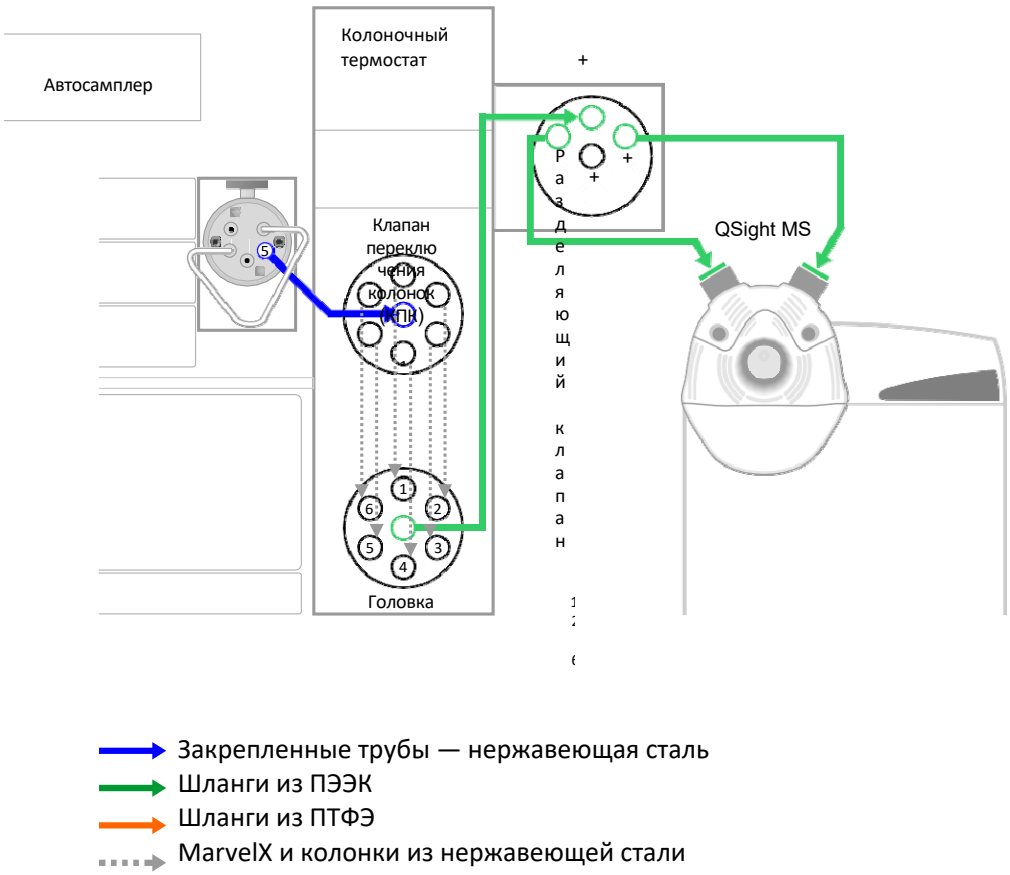


Рисунок 31: Конфигурация шлангов для ввода ЖХ через несколько колонок

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Устранение неполадок

В этом разделе описаны некоторые основные процедуры по обслуживанию системы и устранению неисправностей. О более сложных проблемах следует сообщать представителю службы поддержки клиентов уполномоченного представителя.

В данном разделе рассмотрены следующие темы:

- Выключение и перезапуск системы
- Устранение сбоев в работе в результате электростатического разряда
- Сообщения об ошибках

Выключение и перезапуск системы

Если система случайно выключилась из-за отключения питания или если вам необходимо выключить систему перед запланированным отключением питания, выполните следующие действия.

Запуск системы

На приборе нажмите кнопку питания на передней панели управления (рядом с ЖК-дисплеем).

Выключение системы

1. На приборе нажмите кнопку питания на передней панели управления (рядом с ЖК-дисплеем), а затем нажмите кнопку питания повторно, чтобы подтвердить выключение.
2. Прибор пройдет несколько этапов выключения; после завершения на ЖК-дисплее появится надпись Analyzer is OFF (Анализатор выключен).

Устранение сбоев в работе в результате электростатического разряда

Приборы QSight в целом устойчивы к воздействию электростатических разрядов, однако ЖК дисплей на передней панели прибора может иногда подвергаться воздействию сильных разрядов статического электричества.

В случае такого статического воздействия дисплей может перестать функционировать ИЛИ на нем могут отображаться бессмысленные символы; однако это **не окажет негативного влияния ни на какие выполняемые выборки или процессы**. Если дисплей перестал функционировать должным образом, дождитесь завершения всех текущих процессов, а затем выключите и перезапустите прибор, как описано выше — кнопка питания панели дисплея и индикаторы состояния не пострадают от электростатического разряда.

Примечание: Хотя электростатический разряд может на короткое время повредить панель ЖК-дисплея, было установлено, что производительность прибора не ухудшается ни во время, ни после этого события, и оно не оказывает влияния на сбор и визуализацию данных. Программное обеспечение Simplicity будет продолжать работать в обычном режиме; все функции сбора данных и управления системой останутся доступными для пользователя через компьютерный интерфейс. Влияние оказывается только на показания ЖК-дисплея.

Важно: чтобы избежать электростатических разрядов, не забывайте всегда носить обувь на резиновой подошве в лабораторных помещениях. Кроме того, прибор QSight лучше всего располагать на полу с резиновым или другим непроводящим покрытием, и никогда не следует ставить его непосредственно на ковер. Для получения дополнительной информации о надлежащих лабораторных условиях и протоколах безопасности обратитесь к документу «Подготовка лаборатории для QSight LC/MS/MS».

Сообщения об ошибках

В этом разделе описаны некоторые наиболее распространенные и легко устранимые сообщения об ошибках и предупреждениях, которые могут отображаться на панели ЖК дисплея прибора, и даны рекомендации по проверке для устранения соответствующей проблемы.

Важно: В связи со всеми сообщениями об ошибках, кроме специально перечисленных здесь, обращайтесь к представителю службы поддержки клиентов уполномоченного представителя.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

ЖК-дисплей прибора	Полное сообщение об ошибке	Действие
Source Not Ready CheckDrying Gas (Источник не готов Проверьте газ-осушитель)	Низкий уровень подачи осушающего газа	Это сообщение об ошибке указывает на то, что поток осушающего газа упал ниже 50 фунтов на кв. дюйм (2,5 В) при подаче. Убедитесь, что газоснабжение надежно подключено во всех точках; что имеется достаточное количество азотного газа из генератора; и что подача газа составляет >80 фунтов на кв. дюйм.
Source Not Ready Check Gas Supply (Источник не готов Проверьте подачу газа)	Низкий уровень подачи газа в источник	Это сообщение об ошибке указывает на то, что поток осушающего газа упал ниже 75 фунтов на кв. дюйм (3,5 В) при подаче. Убедитесь, что газоснабжение надежно подключено во всех точках; что в генераторе достаточно газа; и что подача газа >110 фунтов на кв. дюйм.
Source Not Ready Probe 1 Not Detected (Источник не готов Зонд 1 не обнаружен)	Активирована блокировка источника 1	Это сообщение об ошибке указывает на то, что система не может обнаружить указанный зонд. Убедитесь, что зонд и источник правильно установлены в соответствующих положениях, и что зонд полностью вставлен в источник.
Analyzer is Ready Check Communication (Анализатор готов к работе Проверьте наличие связи)	Проверьте подключение Ethernet	Это предупреждение указывает на то, что между прибором и программным обеспечением Simplicity не обнаружено соединения. Откройте программное обеспечение Simplicity Software, чтобы восстановить соединение с прибором.
Analyzer Fault No Source Exhaust (Неисправность анализатора Отсутствует вытяжка из источника)	Отсутствует вытяжка из источника	Эта ошибка указывает на отсутствие давления в выпускном насосе. Убедитесь, что вытяжной насос включен и работает должным образом.
Analyzer Fault Source Exhaust Lo (Неисправность анализатора Низкий уровень вытяжки из источника)	Низкий уровень вытяжки из источника	Эта ошибка указывает на то, что давление в нагнетательной камере менее 15 торр. Убедитесь, что вытяжной насос включен и работает надлежащим образом, а шланг вытяжной системы подсоединен.
Analyzer Fault Source Exhaust Hi (Неисправность анализатора Слишком сильная вытяжка из источника)	Слишком сильная вытяжка из источника	Эта ошибка указывает на то, что давление в нагнетательной камере превышает 30 торр. Убедитесь, что вытяжной насос включен и работает надлежащим образом. Проверьте, подключен ли вытяжной шланг к вытяжной системе здания.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Папки и алгоритмы

В этом разделе описывается структура папок и алгоритмы, используемые программным обеспечением Simplicity 3Q MD. Если у вас возникли вопросы по структуре папок или описанным здесь алгоритмам, обратитесь к представителю службы поддержки клиентов уполномоченного представителя.

В данном разделе рассмотрены следующие темы:

- Структура папок
- Алгоритмы

Структура папок

Папка проекта содержит все файлы и папки для данного проекта. Папки проекта находятся в папке C:\Users\Public\Instrument и организованы следующим образом:

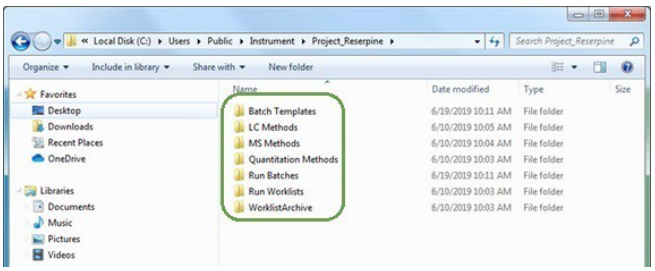


Рисунок 32: Вид подпапок папки проекта

1. **Batch Templates** (Шаблоны серий): Содержит все рабочие списки, связанные с данным проектом.
2. **LC Methods** (Методы ЖХ): Содержит все созданные пользователем файлы протоколов методов сбора ЖХ-МС (.METHOD).
3. **MS Methods** (Методы МС): Содержит все созданные пользователем файлы протоколов методов получения МС (.METHOD).
4. **Run Batches** (Текущие серии): Содержит папки серии и связанные с ними данные сеансов пакетного сбора.

• Имя папки: Соответствует имени серии в списке (WorklistName_timestamp[hhmmss]*).

* если включено

• Данные сохраняются в виде файлов .IRD и .IDH.

• Трассировки данных о давлении сохраняются в виде файлов .PFT.

5. **Run Worklists** (Текущие рабочие списки): Содержит папки рабочих списков и связанные с ними данные сбора.

• Имя папки: Соответствует имени рабочего списка и файла .QMX., созданного в начале выполнения сбора.

• Данные сохраняются в виде файлов .IRD и .IDH.

6. **Worklist Archive** (Архив рабочих списков): Ранее запущенные файлы рабочих списков из очереди пакетного сбора.

Основные сведения о структуре папки данных

Данные о пробах хранятся в папках проб, при этом для каждой пробы имеется собственная папка, содержащая два или более файлов проб. По умолчанию структура папок выглядит следующим образом:

Локальный диск (C:\) → Users (Пользователи) → Public (Публичные) → Instrument (Прибор) → Project_<имя> (Проект_<имя>) → Run Worklist (Текущий рабочий список) → <имя> → sample (проба) <имя или номер>_<номер>.

Алгоритмы

В этом разделе описаны ключевые алгоритмы, используемые в программном обеспечении Simplicity 3Q MD.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Алгоритмы сбора

Сглаживание по Савицкому-Голею

При сглаживании по Савицкому-Голею пики шума сглаживаются с помощью подгонки полиномов наименьших квадратов к соседним точкам данных. Математически это эквивалентно свертке данных с набором коэффициентов свертки. По замыслу, порядок полинома соответствует наибольшему сохраняемому статистическому моменту набора данных, а сохранение моментов высокого порядка приводит к сохранению всех высокочастотных составляющих, что характерно для шума. Сглаживание полиномами по Савицкому-Голею нулевого или первого порядка эквивалентно сглаживанию скользящим средним. Хотя этот метод не дает более гладкого пика, чем другие методы, сглаживание по Савицкому-Голею лучше всего подходит для сохранения оригинальной формы пика или для различения перекрывающихся пиков.

Гауссово сглаживание

При гауссовом сглаживании пики шума сглаживаются с помощью алгоритма взвешенного скользящего среднего, который заменяет каждую точку данных средневзвешенным значением ряда соседних точек данных. Пользователь выбирает количество точек, количество итераций или раз, когда будет применяться преобразование, и значение сигмы (по умолчанию они равны 5, 1 и 1 соответственно). Коэффициент взвешенного среднего рассчитывается в соответствии с функцией, показанной ниже:

$$f_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{\frac{-(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

Сглаженный пик накладывается на исходную линию для оценки эффективности функции сглаживания. Оптимизация параметров сглаживания приведет к получению гауссовых пиков, но позволит избежать их чрезмерного расширения (в результате чрезмерного сглаживания).

Сглаживание скользящего среднего

При сглаживании скользящим средним пики шума сглаживаются с помощью простого алгоритма скользящего среднего без взвешивания, который заменяет каждую точку данных средним значением ряда соседних точек данных. Формула показана ниже:

$$g_{RAJ} = \frac{1}{n_L + n_R + 1} \sum_{n=-n_L}^{n_R} f_{i+n}$$

Пользователь выбирает количество точек данных и количество итераций или повторений преобразования (по умолчанию они равны 3 и 2 соответственно). Этот метод оптимален для уменьшения белого шума без чрезмерного сглаживания.

Алгоритм выбора пиков и базовой линии для инжекции потока

Алгоритм ввода потока и базовой линии

Этот алгоритм находит пики и базовую линию специально для ввода потока.

Ввод:

- Baseline Percentage of Max Height (Высота базовой линии в процентах от максимальной высоты) указывает высоту базовой линии в процентах от самой высокой точки хроматограммы. Значение по умолчанию — 20; минимальное значение — 0; максимальное значение — 100.
- Integrate from X Axis (Интегрирование по оси X) указывает, включает ли интегрирование область под базовой линией. Области под базовой линией считаются частью пика только в том случае, если соответствующая интенсивность выше базовой линии. Обратите внимание, что, несмотря на разрывы в интегрировании, ввод потока предусматривает выбор только одного пика. Значение по умолчанию — Да.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

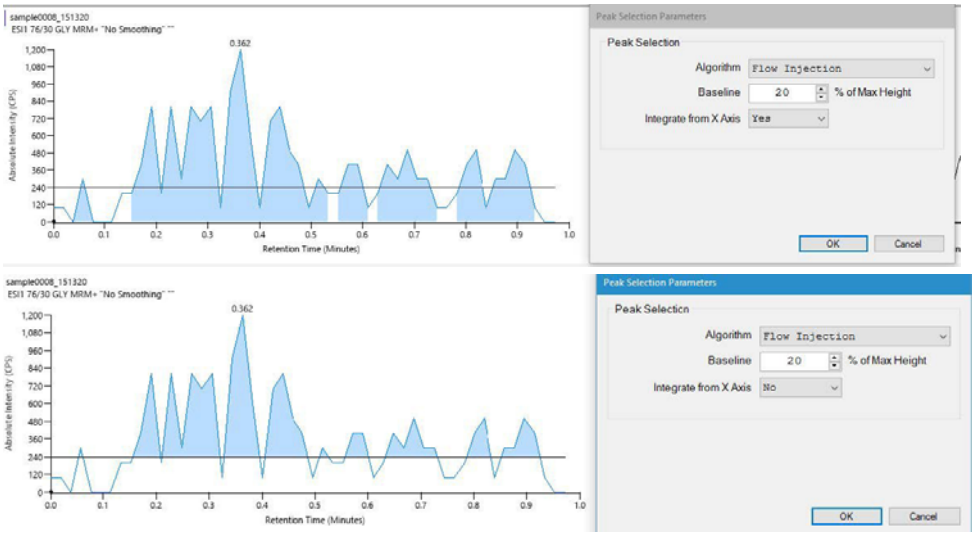


Рисунок 33: Метод наклона — пример интегрирования по оси X

Дано:

- Четыре одинаковых по размеру массива, X, Y, S и B
- B — базовая линия, а S — сглаживание
- Массив X представляет собой диапазон хроматографических времен удерживания
- Хроматографические значения получаются в виде двух массивов и считываются из:
- Массива Y при использовании необработанных, несглаженных хроматографических данных
- Массива S при использовании сглаженных хроматографических данных
- Базовые значения интенсивности считываются из массива B
- X[i], Y[i], S[i], B[i] обозначают i-й элемент в массивах
- список пиков содержит единственный пик, созданный алгоритмом ввода потока

Описание алгоритма:

PeakList ← new peak;
/* создать 1 пик и добавить в пустой список пиков */ i ← 1; pointCountForAv ← 0;
peakArea ← 0;
peakHeight ← 0;
peakAvHt ← 0;
/* вычислить общую площадь, высоту и среднюю высоту одиночного пика по всему времени удерживания хроматограммы*/.
while i < L

/* определить, какую интенсивность использовать, Y или S */ if(No Smoothing) then y_i_prev ← Y[i-1]; y_i ← Y[i];
else
y_i_prev ← S[i-1]; y_i ← S[i]; endif
/* расчеты для интегрирования по оси X */ if(IntegrateToXAxis = Yes) then if(Y[i] > B[i]) then
peakArea += AreaInTrapezoid(0,y_i_prev, y_i,0); if(y_i > peakHeight) then peakHeight ← y_i; endif
peakAvHt += y_i; pointCountForAv ++; endif
/* расчеты для интеграции к базовой линии */ elseif (IntegrateToXAxis = No) then
if(Y[i] > B[i]) then
peakArea += AreaInTrapezoid(B[i-1], y_i_prev,y_i,B[i]); if(y_i > peakHeight) then peakHeight ← y_i;
endif
peakAvHt += y_i; peakAvHt += y_i — B[i]; pointCountForAv ++; конецесли конецif
end /* при этом цикл */
/* обновить пик в списке пиков */ PeakList.Peak.Left ← 0; PeakList.Peak.Right ← L-1; PeakList.Peak.PeakArea = peakArea; PeakList.Peak. peakHeight =
peakHeight;
PeakList.AvHeight ← 0; /* запасное значение при отсутствии точек */ if (pointCountForAv
> 0) then
PeakList.Peak.AvHt ← PeakAvHt / pointCountForAv ; endif

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Базовая линия «между долинами» по площади/высоте

Этот алгоритм находит точки долин, а затем выбирает лучшие пики между долинами на основе либо площади, либо высоты, в зависимости от выбранных условий.

Ввод:

• (X, Y) данные или (X, SmoothedY) данные

Краткое описание алгоритма:

• Найти точки долины
• Области между долинами являются пиками
• Соединить точки долин под пиками, чтобы получить базовую линию

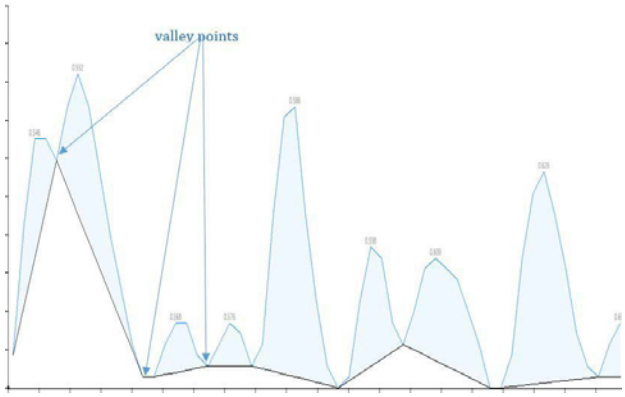


Рисунок 34: Точки сбора данных между долинами

Описание алгоритма:
FUNCTION FindValleyPoints() Очистить список пиков
Выбрать серию Y соответствующей интенсивности в зависимости от того, применяется ли сглаживание
/* Find Forward "Topology" */ loop (i from 0 to Y.Length-1) Delta ← Y[i + 1] - Y[i]; if (Delta > 0) then VerticalDistance += Delta; Topology[i] ← VerticalDistance; else
VerticalDistance ← 0; endif end
/* Find Reverse "Topology" */ VerticalDistance ← 0;

loop (i from Y.Length – 1 downto 0) double Delta ← Y[i + 1] - Y[i]; if (Delta
< 0) then
VerticalDistance += Delta; Topology[i] ← VerticalDistance; else
VerticalDistance ← 0; endif end
/* Пороговый шум в области Топологии для предотвращения вытянутых хвостов на пиках */ loop (i from 0 to Y.Length-1)
if (Math.Abs(Topology[i]) < 0.001) then Topology[i] ← 0; endif end
/* Проверка на наличие нулевой топологии[i] между положительной топологией[i — 1]
и отрицательной топология[i+1], указывающей на соседние точки с одинаковой интенсивностью на вершине. Приведенный ниже цикл заставляет выбрать самую левую точку из двух. */
loop (i from 0 to Y.Length-1)
if (Topology[i] = 0 AND Topology[i - 1] > 0 AND Topology[i + 1] < 0) then Topology[i] = Topology[i + 1]; endif
end
/* Цикл анализа топологии на наличие долин
Области между долинами являются либо вершинами, либо плоскими областями между вершинами */ loop
/* Найти индекс L, долину, где Топология[p] впервые становится положительной и начинается левое восхождение */
while (p < Topology.Length) do if (Topology[p] <= 0) p++;
else if
(Y[p + 1] == Y[p])
/* Если серии связаны, выбирается крайняя правая из двух точек */ p++;
else
break; // L candidate found here-when endif end
L = p;
/* L найден, индекс левой долины равен p */
ExonRight = L; // используется позже для соединения с базовой линией слева от пика
/* Найти R, при которой: Топология[p] становится л.т.е. нулевой, отмечая конец увеличения Y[i] (вверх по левой стороне пика) Apex = p в конце цикла (1); Топология[p] после этого становится неотрицательной, отмечая конец уменьшения Y[i] (вниз по правой стороне пика) в конце цикла (2) */
while (p <= Y.Length - 1) do /* Цикл (1) */ if (Topology[p] > 0) then p++; /* восходящая левая часть пика */ else
break; // beginning of descent endif end
A = p; /* Вершина */
while (p <= Y.Length - 1) do // Loop (2) if (Y[p] <= 0) then break;
/* Это предотвращает появление хвостов */ endif; if (Topology[p] < 0) p++;
/* обработка теперь спускается по правой стороне пика*/

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

else break;
/* восхождение к следующему пику или иначе окончание текущего пика */ endif; end
R = p; // найдено первое положительное значение после ряда отрицательных значений
// Добавить пик в список пиков if(R not found) then break; endif
(L', A, R') ← FindBaselineUnderPeak(L,A,R);
PeakList += New Peak (L', A, R'); // left apex right end /* цикл */ end /* Найти точки долины() */
/* Соединяет точки долины вместе под пиком
*/
FUNCTION FindBaselineUnderPeak (L, A, R) => (L', A, R') L' ← L; R' ← R;
do
Построить линию, соединяющую L и R под пиком-кандидатом, скорректировать L' в направлении A, если сегмент базовой линии кандидата пересекает стороны пика, скорректировать R' в направлении

A, если сегмент базовой линии кандидата пересекает стороны пика, до тех пор, пока не останется ни одного пересечения
return L', A, R'
end /* Найти базовую линию под пиком() */

Вывод:

- Список пиков (в виде индекса левой граничной точки пика (L), индекса вершины (A) и индекса правой граничной точки (R). Обратите внимание, что пики не пересекаются, однако они могут иметь общие границы (например, правая граница пика j может быть той же точкой, что и левая граница пика j+1).
- (X, baselineY)

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Анализ первой производной (метод наклона) по площади/высоте

В своей простейшей форме метод отбора пиков по наклону выбирает пики на основе анализа первой производной (красная линия) в каждой точке хроматограммы (синяя линия) по площади или высоте, в зависимости от выбранных условий. Синяя штриховка обозначает выбранный пик (см. рисунок ниже).

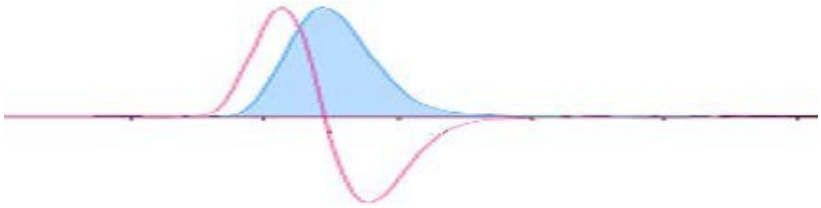


Рисунок 35: Пример выбора пика методом наклона

Ввод:

• (X, Y) данные или (X, SmoothedY) данные (именуемые как данные)

Описание алгоритма:

• Найти максимальную интенсивность данных

• Найти первую производную линии

• Привести линию первой производной к максимальной интенсивности (что позволяет наложить линию первой производной на хроматограмму для построения графика).

• Определить межквартильный размах коэффициента масштабирования (InterQuartileRangeScaleFactor), наблюдая его влияние на расчеты пиков для различных типов данных (значение 5,0 было определено путем неформального тестирования).

• Найти 25-й процентиль, 50-й процентиль (медиану) и 75-й процентиль нормализованной линии первой производной

• Рассчитать нижнюю границу пика, LPB, если LPB = медиана — (25-й процентиль).

* Межквартильный размах коэффициента масштабирования

• Рассчитать верхнюю границу пика, UPB, если UPB = медиана + (75-й процентиль)

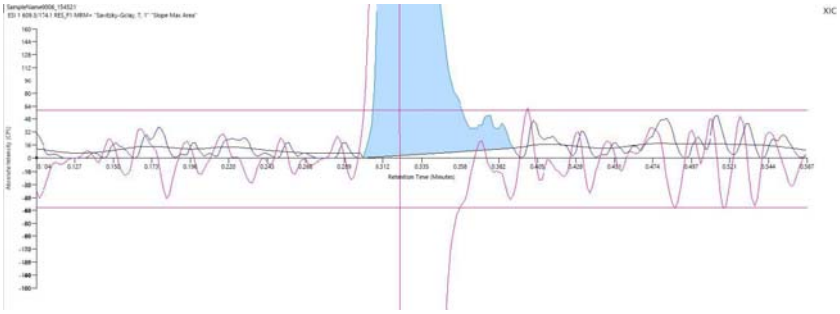


Рисунок 36: Выбор пика методом наклона — нормализованный

* Межквартильный размах коэффициента масштабирования

Нормализованная линия первой производной данных и линии LPB и UPB показаны выше красным цветом. Верхняя и нижняя горизонтальные линии соответствуют 5-кратному межквартильному размаху первых производных.

Точки, выходящие за пределы LPB и UPB, указывают на то, что соответствующие точки данных находятся в пределах пиков, и алгоритм расширения пика (описан ниже) обуславливает расширение пика с правой стороны для преодоления образования хвоста на колонке.

Вывод:

• Список пиков (в виде индекса левой граничной точки пика (L), индекса вершины (A) и индекса правой граничной точки (R). Обратите внимание, что пики не пересекаются, однако они могут иметь общие границы (например, правая граница пика j может быть той же точкой, что и левая граница пика j+1).

• (X, baselineY)

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

IntelliPeak

В алгоритме поиска пиков IntelliPeak используются наши запатентованные формулы для надежного обнаружения точек перегиба, что приводит к превосходному поиску пиков в ваших хроматографических данных. Алгоритм IntelliPeak доступен только для данных, полученных с помощью системы УВЭЖХ скрининга QSight 225MD.

Алгоритмы количественной оценки

Сглаживание количественных показателей

Проведение количественной оценки предусматривает несколько вариантов сглаживания: без сглаживания, сглаживание по Савицкому-Голею, Гауссово сглаживание и фильтрация по скользящему среднему. (См. раздел Алгоритмы количественной оценки на стр. 158).

Измеренная стоимость

$$\text{MeasuredValue} = \frac{(\text{Area}_{\text{peak}})}{(\text{Area}_{\text{peakIS}})} \times \text{Concentration}_{\text{IS}} \times \text{RRF}$$

Где RRF — коэффициент относительного отклика, указанный для каждого аналита в методе количественного определения; и IS — внутренний стандарт, указанный в методе количественного определения.

Другие алгоритмы и формулы

В этом разделе описаны другие алгоритмы и формулы, с которыми вы можете столкнуться в программе Simplicity.

Поиск пика

Алгоритм поиска пиков находит пики для данных XY.

Функциональное описание:

- Используя алгоритм Савицкого-Голея, найдите производную от входных значений Y (которая также производит значения Y и которую мы называем первой производной) и сохраните ее в виде списка.
- Из значений данных первой производной Y составить список индексов пересечений нулевых точек (где данные пересекают ось X от отрицательных значений к положительным и наоборот).
- Верните результат с нулевыми пиками, если список нулевых пересечений пуст.
- Снова используя алгоритм Савицкого-Голея, найдите вторую производную входных значений, для чего найдите производную первой производной, и сохраните ее в виде списка.
- Используя значения второй производной Y и массив нулевых пересечений, найти начальный и конечный индексы для кандидатов в пики.
- Используя начальный и конечный индексы для кандидатов в пики, рассчитать высоту пиков.
- Отфильтровать максимальное количество возвращаемых пиков на основе высоты пика (отсеивая в первую очередь самые короткие пики)
- Объединить соседние пики.
- Отбросить пики ниже, чем ограничение «Минимальная фракция высоты пика».
- Отбросить пики тоньше, чем ограничение «Минимальная ширина пика».
- Отбросить пики, которые не соответствуют ограничению «Минимальный используемый угол наклона», если «Использование максимального пика» является истинным.
- Отфильтруйте пики, которые не соответствуют ограничению «Порог шума».

Выходные данные:

- Возвращение списка пиков.

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Сканирование сумм

В режиме реального времени, когда выбрано Sum Scan (Сканирование сумм), все спектры в пределах минимального и максимального времени сканирования суммируются и отображаются на дисплее. Если опция «Сканирование сумм» снята, отображаются только спектры за последний период сканирования. В DataViewer (Средство просмотра данных) данные всегда отображаются как Sum Scan (Сканирование сумм).

Извлечение EMS

Существует два основных типа масс-спектрометрического эксперимента или типа сканирования: эксперименты в режиме сканирования (которые включают полное сканирование Q1/Q3, сканирование продуктов, эксперименты по потере нейтральности и эксперименты по усилению нейтральности) и эксперименты в режиме мониторинга (которые включают MRM и сканирование Q1 или Q3 SIM; они не генерируют значения EMS). Эти эксперименты дают два типа исходных данных: интенсивность в зависимости от массы и время в зависимости от массы.

Для интерпретации исходных данных интенсивности в сравнении с массой программное обеспечение генерирует значения извлеченного масс-спектра (EMS). Сначала необработанные данные X/Y обрабатываются программой Peak Finder. Затем извлекаются следующие значения:

- **Масса —** пиковая величина
- **Ширина —** Конечное значение пика - Начальное значение пика
- **Разрешение —** пиковое значение/ширина (когда ширина равна 0, разрешение равно 0) = масса / ширина
- **Высота пика** — Интенсивность
- **Описание —** комбинация имени файла данных и названия EMS (состоящего из типа сканирования и диапазона масс). Ниже приведен пример диаграммы пиков и соответствующие значения EMS:

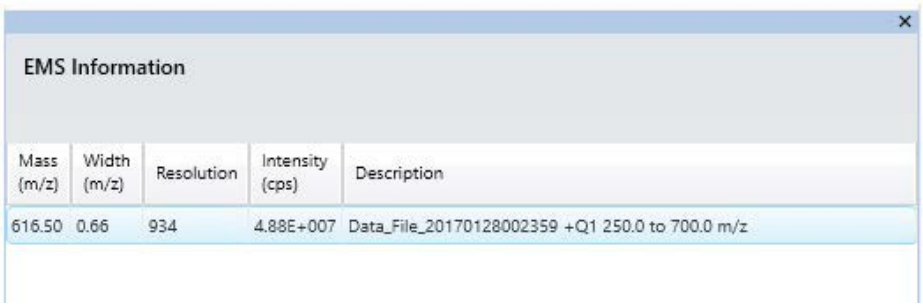


Рисунок 37: Экран информации EMS

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

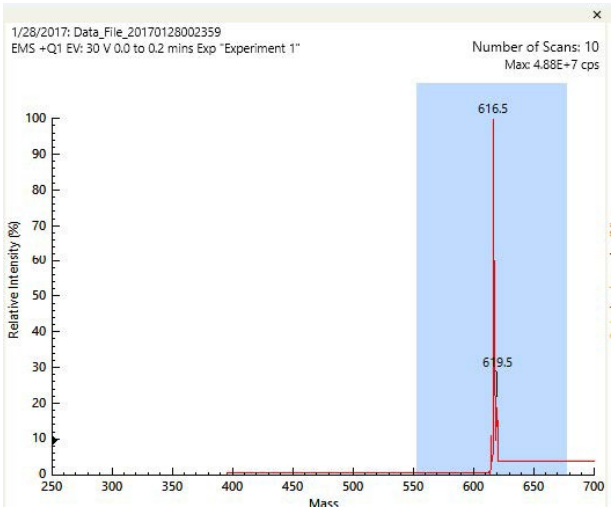


Рисунок 38: Образец диаграммы пиков

Сигнал/шум

Алгоритм «сигнал-шум» определяет отношение сигнал-шум (S/N), высоту пика, площадь пика, стандартное отклонение фона, среднее значение фона и область пика.

Отношение сигнал/шум — это показатель, который сравнивает уровень желаемого сигнала с уровнем фонового шума. Один и тот же алгоритм используется как для хроматограммы, так и для пиков спектра.

$$S/N = P_{signal}/P_{noise} = (Height_{peak} - Height_{background})/(\sigma_{background})$$

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Глоссарий

В этом разделе описаны некоторые аббревиатуры и термины, используемые в программном обеспечении Simplicity™ 3Q MD и системах QSight®, интерфейсах и документации.

Abort (Прервать)	В программе Simplicity эта опция немедленно прерывает всю очередь серии без дальнейшего анализа. Если вы принудительно выполните функцию Abort, а не просто остановите процесс сбора данных, все данные для пробы, находящиеся в процессе сбора, будут потеряны. Пробы в пределах серии предварительно загружаются и готовятся к вводу, пока предыдущая проба находится в процессе получения данных. Прерывание получения данных приведет к тому, что предварительно загруженная проба будет выброшена в отходы, а Автосамплер выполнит цикл промывки.
amu (а.е.м.)	атомная единица массы. Одна двенадцатая (1/12) массы атома углерода-12.
Аналитический компонент	Изучаемый аналит, обычно указываемый в виде пары чисел – соотношения характерного для аналита массы к заряду (m/z, например, 321.1/211.1)
AS	Автосамплер
Auto Cal	Автоматическая калибровка. Автоматизированная процедура калибровки массы, используемая для обеспечения того, что найденные массы находятся в пределах 0,1 amu от фактической массы.
AutoCALRES	Автоматизированные функции калибровки и разрешения
Авто DV	Автоматизированная оптимизация напряжения детектора. В программе Simplicity эту процедура проводится пользователем при падении чувствительности примерно на 30-40% по периодически возникающему сигналу или по графику, рекомендованному представителем сервисной службы уполномоченного представителя
Автонастройка	В программе Simplicity используйте процедуру Автоматической настройки для автоматической оптимизации параметров метода. Эта функция программного обеспечения изменяет значение каждого параметра и выбирает значения, которые приводят к наиболее интенсивному сигналу
BAQ	Очередь сбора данных серии
Список серии (партий)	Список проб и соответствующих методов для сбора данных в режиме МС (MS) или ЖХ/МС (LC/MS)
Создание списка серий (партий)	В программном обеспечении Simplicity Batch List Creator — это таблица, с помощью которой можно связать метод МС с методами ЖХ и/или количественного анализа. Создатель списка серии позволяет отправлять несколько проб в очередь на сбор данных
BLC	Создатель списка серий (партий)
Центр/ширина	Центральная точка окна массы
cps	число импульсов в секунду. Вертикальная ось в масс-спектре выражается как количество раз обнаружения конкретного вида (импульсов) за определенную единицу времени (секунды)
DataViewer (Средство просмотра данных)	Simplicity DataViewer позволяет загружать существующие файлы данных для просмотра данных хроматограммы, таких как информация о пробе, детали метода, время удерживания, форма пика, интенсивность пика и так далее. Это полезно как при пересмотре анализов, так и при разработке новых методов. Во время получения данных также доступна опция Real-Time, с помощью которой можно просматривать и распечатывать интерактивные данные в реальном времени по мере их получения от масс-спектрометра. Для просмотра программы Real-Time DataViewer (Просмотр данных в режиме реального времени) необходимо сначала выбрать вкладку Batch Acquisition Queue (Очередь сбора данных серии)
Газ-осушитель	В качестве газа-носителя ионов в Drying Gas используется газообразный азот
EC	Европейское сообщество
EHS	Охрана труда, окружающей среды и безопасность
EIC	Извлеченная ионная хроматограмма. EIC — это хроматограмма, созданная путем построения графика интенсивности сигнала, наблюдаемого при выбранном значении m/z или наборе значений в серии масс-спектров, записанных как функция времени удерживания
ElectroSpray V1 Pos/Neg	Заряд, подаваемый на иглу для ионизации образца
EMC (ЭМС)	Электромагнитная совместимость. ЭМС — это отрасль электротехники, занимающаяся непреднамеренным генерированием, распространением и приемом электромагнитной энергии, которая может вызвать нежелательные эффекты, такие как электромагнитные помехи (ЭМП) или физическое повреждение приборов

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

EMS	Извлеченный масс-спектр. Извлеченный масс-спектр генерируется программным обеспечением для интерпретации зависимости интенсивности от массы
EULA	Лицензионное соглашение с конечным пользователем. EULA — это юридическое лицензионное соглашение на программное обеспечение, поставляемое с вашим программным обеспечением Simplicity
EV	Входное напряжение. Входное напряжение уменьшает фоновые ионы, поступающие в масс-спектрометр
FCC	Федеральная комиссия по связи
Главная страница	Когда вы открываете программу, автоматически выбирается и отображается вкладка Home (Главная). Опции, доступные на вкладке Home (Главная), зависят от типа пользователя
HPLC (ВЭЖХ)	Высокоэффективная жидкостная хроматография. ВЭЖХ — это метод аналитической химии, используемый для отделения, идентификации и количественного определения каждого компонента в смеси
HSID	Десольватация, индуцированная горячей поверхностью. HSID — это многоортогональный интерфейс выборки, который может значительно увеличить время безотказной работы. Непрерывный поток горячего газа действует как постоянный очищающий агент, а ортогональные каналы предотвращают попадание загрязнений в прибор. Кроме того, растворенные заряженные частицы увлекаются и десольватируются в горячем потоке газа, снижая химический шум и обеспечивая более высокое соотношение сигнал/шум
HVAC	Отопление, вентиляция и кондиционирование воздуха
IS	Внутренние стандарты. Технология калибровки, обычно используемая в методах, внутренняя стандартизация, позволяющая учесть изменения в реакции аппаратуры прибора или вариации чувствительности между пробами. Внутренний стандарт — это изотоп, не входящий в состав анализируемого вещества, который добавляется в стандарты и пробы перед их анализом. В ходе определения программное обеспечение использует соотношение интенсивностей аналита и внутреннего стандарта для корректировки окончательных значений интенсивности аналита
IVD	Устройство для диагностики in vitro. Класс инструментов, реагентов или приложений, используемых для получения клинически значимых результатов из человеческих проб
LC (ЖХ)	Жидкостная хроматография
LCD (ЖК-ДИСПЛЕЙ)	Жидкокристаллический дисплей. Панель дисплея на передней панели прибора представляет собой ЖК-дисплей. На ЖК-дисплее прибора QSight отображаются состояние системы и сообщения об ошибках
Метод LC (ЖХ)	Метод получения компонента (например, Автосамплером и/или насосом) жидкостной хроматографии
LC/MS (ЖХ/МС)	Жидкостная хроматография/масс-спектрометрия. ЖХ/МС — это метод аналитической химии, сочетающий возможности физического разделения жидкостной хроматографии с возможностями масс-анализа масс-спектрометрии. В программе Simplicity это означает режим сбора данных, в котором используется как компонент жидкостной хроматографии (например, Автосамплер или насос), так и приборные методы масс-спектрометра
LED	Светоизлучающий диод
MPM	Режим множественной реакции. В программе Simplicity это обозначает режим множественной реакции. Сканирование MRM позволяет наблюдать зависимость интенсивности от времени
MS (МС)	Масс-спектрометр (прибор) или Масс-спектрометрия. В масс-спектрометрии смесь жидкой пробы, содержащая изучаемый аналит, ионы подвижной фазы и ионы матрицы, ионизируются при атмосферном давлении в источнике ионов. Затем смесь втягивается через противоток горячего осушающего газа (обычно азота) в интерфейс низкого давления под действием комбинации атмосферного давления и электрических полей. Эта смесь быстро переносится газовым потоком через серию оптических областей передачи понижающегося давления, пока не достигнет первого сепаратора массы, называемого Q1. Именно в этих областях переноса можно коллизионно нагревать ионную смесь, когда это нужно.
MSDS	Паспорта безопасности материалов. Паспорт безопасности материала — это документ, выпущенный поставщиком или производителем химикатов, содержащий информацию о потенциальных опасностях (таких как угроза здоровью, пожар, реактивность и экологические проблемы) и о методах безопасной работы с продуктом. Она является неотъемлемой частью полной программы соблюдения требований охраны труда и техники безопасности.
Метод MS (МС)	Метод получения прибора масс-спектрометра. Программное обеспечение сохраняет методы сбора данных, специфичные для масс-спектрометра (MS), где вы можете оптимизировать параметры, зависящие от массы, что позволяет вам проверить работу прибора и подтвердить обнаружение соединений в матричном растворе. Затем эти методы могут быть использованы для приобретения или текущего обслуживания

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

MS/MS (MC/MC)	В MC/MC используются два масс-спектрометрических анализатора в тандеме (MS1 и MS2) с ячейкой коллизионного газа между ними. Ионы-предшественники/родительские ионы, отобранные в MS1, сталкиваются с газом высокого давления в ячейке и подвергаются фрагментации; полученные в результате ионы продукта/дочерние ионы анализируются в MS2.
m/z	Горизонтальная ось в масс-спектре выражается в m/z, где m — масса, а z — зарядовое число ионов. В массовом анализе электрон отбирается от молекул для создания однозарядных ионов. При удалении двух электронов образуются двухзарядные ионы. Число удаленных электронов — это зарядовое число
NG	В программе Simplicity это означает режим сканирования Neutral Gain
NL	**В** программе Simplicity это обозначает режим сканирования «Нейтральные потери».
Меню Orb 	Меню Simplicity Orb обеспечивает доступ ко всем командам администрирования, настройки и управления файлами программного обеспечения Simplicity
Параметр Ramp	Эта процедура используется во время разработки метода MS для поиска оптимальных настроек путем тестирования качества сигнала в диапазоне значений определенных параметров, таких как энергия столкновения. Процедура Parameter Ramp Routine может быть запущена в любое время до, во время или после любой процедуры MS Method
ПК	Персональный компьютер. Используется в отношении компьютера, на котором работает программное обеспечение Simplicity и периферийные компоненты
PKI	PerkinElmer, Inc. Признанное сокращенное название компании
Наложение участка	В DataViewers наложение графика — это удобная функция, позволяющая просматривать относительное распределение нескольких аналитов
Полярность	Выбор режима положительных или отрицательных ионов в зависимости от соединений
PN	Номер детали. Обычно обозначает заказываемую деталь или расходный материал уполномоченного представителя
PR	В программе Simplicity это обозначает режим сканирования прекурсоров
Профили	Доступ пользователей и уровни безопасности. Для обеспечения безопасности существует три уровня пользователей или ролей: Сервисный, Расширенный и Обычный. Пользователи уровня Сервисный имеют полный доступ ко всем операциям программного обеспечения Simplicity; пользователи уровня Обычный имеют минимальный доступ
PT	В программе Simplicity это означает режим сканирования продукта
QC	Контроль качества
Редактор методов количественного анализа	В программе Simplicity используйте редактор методов количественного анализа для создания методов количественного анализа, которые будут использоваться в процессоре результатов для количественного анализа результатов. Здесь количественные расчеты выполняются в реальном времени, а результаты обновляются в виде изменяемых параметров, таких как границы интегрирования, сглаживание и т.д.
Процессор обработки результатов	В программе Simplicity после создания метода количественной оценки можно использовать процессор результатов для создания таблицы результатов, которая фокусируется на конкретных данных, и экспортировать данные в Microsoft Excel для дальнейшего анализа
RF	Радиочастота. Радиочастота включает все частоты электромагнитных волн, которые лежат в диапазоне от @3 кГц до 300 ГГц. RF обычно относится к электрическим, а не механическим колебаниям
Ленточное меню	В программе Simplicity ленточное меню постоянно расположено в верхней части экрана и разделено на несколько экранов с вкладками, каждый из которых имеет ряд опций и пиктограмм, организованных в функциональные группы. Каждая вкладка состоит из основного экрана, содержащего одну или несколько функциональных панелей для дальнейшей организации инструментов и данных, необходимых для выполнения конкретной задачи
Продолжительность выполнения	Продолжительность MS сканирования. Это значение должно быть синхронизировано с временем работы LC
Сглаживание по Савицкому-Голею	Фильтр Савицкого-Голея - это цифровой фильтр, который может быть применен к набору точек данных для сглаживания линии, увеличивая отношение сигнал/шум без значительного искажения сигнала.
Меню Simplicity Orb 	См. также меню Orb. Меню Simplicity Orb, доступное через значок шарика Simplicity в левом верхнем углу экрана, обеспечивает доступ ко всем командам администрирования, настройки и управления файлами программного обеспечения Simplicity.
S/N	Отношение сигнал/шум: Расчет отношения сигнал/шум необходим в таких случаях, как оценка технических характеристик масс-спектрометра во время установки и определение порога чувствительности при разработке метода применения. В отношении сигнал/шум сравнивается уровень желаемого сигнала с уровнем фонового шума. Один и тот же алгоритм используется как для хроматограммы, так и для пиков спектра. S/N = P сигнал / P шум = (Высота пика — Высота фона) / Стандартное отклонение фона

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

СОПы	Стандартные операционные процедуры
Sum Scan (**Сканирование сумм)**	Суммарная интенсивность всех сканов в прогоне. На дисплее отображения информации в режиме реального времени, когда выбрана опция Sum Scan (Сканирование сумм), все спектры в пределах минимального и максимального времени сканирования суммируются и выводятся на экран. Если опция «Сканирование сумм» снята, отображаются только спектры за последний период сканирования. В DataViewer (Средство просмотра данных) данные всегда отображаются как Сканирование сумм.
Состояние системы	В программе Simplicity в разделе Состояние системы отображается состояние работы Simplicity и сведения о системе. Раздел доступен только для чтения и обновляется каждые несколько секунд
Неисправность	Состояние показано для масс-спектрометра, насоса и Автосамплера. В отображаемые сведения о системе входит модель и серийный номер QSight, а также IP-адрес масс-спектрометра QSight в сети
TIC	Общая ионная хроматограмма. При просмотре в программе DataViewer программное обеспечение будет по умолчанию использовать TIC для полученных данных. Из TIC можно извлечь дополнительные спектры
Световые индикаторы	Это круглые зеленые, красные или желтые индикаторы, расположенные на строке состояния Simplicity, которые указывают статус аппаратного обеспечения для доступных компонентов, включая масс-спектрометр (MS), жидкостный хроматограф (LC), Автосамплер (AS), термостат, насос и очередь сбора данных (Q)
Лоток	Применительно к Автосамплеру лоток — это общий термин, используемый для обозначения штатива для хранения виал или луночного планшета для хранения глубоких лунок или микротитрационных планшетов. Лоток вмещает несколько проб. Лотки определяются путем обозначения типа лотка и держателя лотка
UI	Пользовательский интерфейс. Пользовательский интерфейс включает в себя элементы экрана и элементы управления, с помощью которых пользователь взаимодействует с программой
USB	Универсальная последовательная шина. Порт USB — это стандартный кабельный разъем для компьютеров и электронных приборов. Порты и кабели USB позволяют подключать устройства для передачи цифровых данных
WEEE	Утилизация электрического и электронного оборудования. Директива Европейского парламента и Совета об утилизации электрического и электронного оборудования регулирует управление промышленными отходами и их и утилизацию. Целью этой программы является сохранение, защита и улучшение качества окружающей среды, защита здоровья человека, а также разумное и рациональное использование природных ресурсов
XIC	Относится либо к TIC (Total Ion Chromatograph - Общая ионная хроматограмма), либо к EIC (Extracted Ion Chromatograph - Извлеченная ионная хроматограмма), в зависимости от конкретного просматриваемого графика данных или метода MC, использованного при сборе данных

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Индекс

A
Аббревиатуры 166
Начало приобретения 83
Акронимы 166
добавление 152
Дополнительная документация 3
Алгоритмы
Сглаживание по Гауссу 158
Выбор интеграции 158
IntelliPeak 163
Сглаживание скользящей средней 158
Другое 163
Выбор пика 158
Сглаживание по Савицкому-Голею 158
Просмотр аналитов 95
Безопасность приложений 43
Автосамплер
расширенный доступ пользователя 125
ручной контроллер 33
варианты метода ЖХ 69
техническое обслуживание 123
обзор 31
терминал PAL 33
график профилактического обслуживания 123
технические характеристики 27
соединения трубок 149
Процедура автонастройки 67

B
Задняя панель 23
BAQ 74, 75, 79
опции 80
начало сбора данных 83
Очередь сбора серий 74, 75, 79
опции 80
ленточное меню 73
начало сбора данных 83
Создатель списка серий 73,74
новое 75
количественные методы 78
ленточное меню 73,74
Серии
очистка 83
новый 75
обработка 92
BLC
новый 73,74
методы количественного анализа 78

C
Построение калибровочных кривых 95
Просмотр хроматограмм 95
Колоночный термостат
Опции метода ЖХ 71
обзор 30
Колоночный термостат (продолжение)
спецификации 27
Соответствие требованиям 18
Компоненты 21
Задняя панель 23
Составная база данных 50
Соединение, представляющее интерес
определение фрагментов продукта 53
установка 61
Составная оптимизация 50
Достоверность
пики 90
Вкладка «Конфигурация» 43
Расходные материалы 144
Контакты 4
Условные обозначения 3
Служба поддержки клиентов
Азиатско-Тихоокеанский регион 5
Европа 4
Северная Америка 4
Кибербезопасность 10

D
Данные
экспорт 96
просмотр 101
обработка данных 90
средство просмотра данных 101
вывод из эксплуатации 18
Дисплей
ЖК 23
устранение неисправностей 155
Методы с двумя источниками 51
Зонды с двумя источниками 20
Динамический осушающий газ
добавление 64
редактирование 66

E
Окружающая среда 17
Экологические требования 17
Уведомление о неправильном использовании
оборудования 4
Ошибки
сообщения 155
Сбои в работе ESD 155
Расширенный доступ пользователей 125

F
Неисправности
сообщения 155
Проточно-инжекционный анализ
соединения трубок 152
Формулы 163
Фрагменты 53
Фриттовый фильтр
замена 124
Передняя панель 23

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

G
Газовый фильтр
замена 115
Сглаживание по Гауссу 158
Глоссарий 166

H
Ручной контроллер 33
Аппаратное обеспечение
конфигурация 43
Требования 11
Опасности
биологические опасности 7
химикаты 7
сжатый газ 8
высокое напряжение 8
телесные повреждения 9
радиоактивность 7
Главный экран 36

I
Встроенный в линию фильтр
замена 124
Установка 6
Установка программного обеспечения 35
Прибор
компоненты 21
конфигурация 43
передняя панель 23
компоновка 21
ЖК-дисплей 23
этикетки безопасности 14
Дисплей прибора
сообщения об ошибках 155
предупреждения 155
IntelliPeak 90
Использование по назначению 20

L
Лаб. среда 17
Лабораторная среда 17
Методы ЖХ 68
опции автосамплера 69
опции термостата 71
опции насоса 70
промывка системы и режим ожидания 81
Прибор для ЖХ
заливка 125
ЖК 23
сообщения об ошибках 155
устранение неисправностей 155
предупреждения 155
вход в систему 36

M
Обслуживание
Автосамплер 123
Масс-спектрометр 106
Масс-спектрометр
обслуживание 106
Масс-спектрометр (продолжение)
обзор 20
график профилактического обслуживания 123
спецификации 26
соединения трубок 151
Масс-спектрометрия
понимание 21
Сообщения
ошибки 155
предупреждения 155
Методы
Количественное определение 90
Уведомление о неправильном использовании 4
Сглаживание скользящей средней 158
MRM 50
ленточное меню 45
Эксперименты MRM
параметры, зависящие от соединения 55
Переходы MRM 55
Методы MC
составная база данных 50
Составная оптимизация 50
двойной источник 51
загрузка 51
новое 50
ленточное меню 45
MC сканирование
типичные значения 51

N
Игла
замена 110

O
Эксплуатация 6
Меню Orb 39
Термостат
опции метода ЖХ 71
обзор 30
спецификация 27
Обзор
масс-спектрометр 20

P
Терминал PAL 33
Части 106,123,138
замена 106, 123, 138
запасные части 106, 123, 138
Пики
достоверность 90
обнаружение 90
настройки 90
Графики
просмотр 101
Меры предосторожности 6
Профилактическое обслуживание
автосамплер
график 134
масс-спектрометр
график 123
насос

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

график 138
Зонд

Зонд (продолжение)
положение с высоким расходом 61
положение с низким расходом 61
удаление 108
Игла зонда
замена 110
Обработка
данные 90
Фрагменты продукта
определение 53
Проекты
создание 36
Насос
варианты метода ЖХ 70
долгосрочный останов 137
техническое обслуживание 135
график профилактического обслуживания 138
промывка уплотнения 43
кратковременный останов 136
отключение 136
спецификации 27
запуск 135

Q
Q1 сканирование
запуск 51
Метод количественного анализа
создание 90
Метод количественного анализа
создание 90
определение параметров 90
открыть из существующих 90
пик интереса 90
Результаты количественного анализа
просмотр 95

R
Соответствие нормативным требованиям 18
Замена 106, 123, 135, 138
Замена
встроенный в линию фриттовый фильтр 124
игла 110
игла зонда 110
корпус шприца 130
игла шприца 126
Требования
окружающая среда 17
экологические 17
Перезапуск системы 155
Результаты
просмотр 101
Окно поиска времени удерживания (Retention Time Search Window) 92
Ленточное меню 40
очередь сбора серий 73
создатель списка серий 75
методы МС 73
Риски 9
Роли 35

S
Безопасность 6
уведомление о безопасности электроснабжения 7
обзор 6
Этикетки безопасности 14
серийный номер 6
Идентификаторы образцов 78
Расположение образцов 77
Названия образцов 78
Сглаживание по Савицкому-Голею 158
Режимы сканирования
MS (МС) 21
MS/MS (МС/МС) 21
Элементы управления экраном 37
Промывка уплотнения 43
Серийный номер 6
Серьезные инциденты 6
Обслуживание 4, 6
Выключение
система 155
Сигнал/шум
отображение 104
Программное обеспечение Simplicity
очередь сбора серий (партий) 74,75
создатель списка серий (партий) 73,74
главный экран 36
установка 35
вход в систему 36
методы МС 46
круговое меню 39
меню ленты 40
элементы управления экраном 37
спецификации 26
профили пользователей 35
Сглаживание
настройки 90
Программное обеспечение
очередь сбора серий 79
создатель списка серий 78
главный экран 36
установка 35
Установка 10
вход в систему 36
методы МС 45
круговое меню 39
меню ленты 40
элементы управления экраном 37
профили пользователей 35
Программное обеспечение
установка 35
Растворители 106,123,135,138
Запасные части 106,108,110,115,123,126,130,138
Спецификации
автосамплер 27
колоночный термостат 27
масс-спектрометр 26
программное обеспечение Simplicity 26
насос УВЭЖХ 27
Split Infusion

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteyaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Плановое техническое обслуживание
расходные материалы 144
Запуск автонастройки 67
установка 61
Стандартное отклонение 90
Резервные методы 81
Глоссарий символов 11
Шприц
замена 130
промывка 125

Игла шприца
замена 126
Система
обзор автосамплера 31
обзор колонной печи 30
обзор 20
обзор насоса 27
перезапуск 155
выключение 155
запуск сбора данных 83
Методы промывки системы 81
Системные риски 9

T
Вкладки
средство просмотра данных (Data Viewer) 101
главная страница (home) 37
Порог
пики 90
Инструменты 106,108,110,115,130
Конфигурация лотков 77
Поиск и устранение неисправностей 155
Трубки (шланги)
автосамплер к печи 149
конфигурации 148
отводящий клапан
соединения трубок 150
проточно-инжекционный анализ 152
соединения масс-спектрометра 151
ЖХ с несколькими колонками 153
насос к автосамплеру 148
одна колонка 153
соединения трубок (шлангов) 148
ЖХ с двумя колонками 153

U
Насос УВЭЖХ
Варианты метода ЖХ 70
обзор 27
спецификации 27
Уровень доступа пользователя 125
Профили пользователей 35
Использование данного руководства 3
дополнительная информация 3
условные обозначения 3
уведомление о неправильном использовании 4
символы 11

V
Просмотр
данные 101

W
Предупреждения 6
сообщения 155

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: [illegible]aplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru

Условия гарантии 4
WEEE18

/Наклейка с текстом: Агентство цифровых и демографических данных/
/Наклейка с текстом: Агентство цифровых и демографических данных/

Производитель:
Wallac Oy (АО «Валлак»)
Mustionkatu 6, FI-20750, Turku, Finland
(Мустионкату 6, FI-20750, Турку, Финляндия)
Тел: 358-2-2678 111. Факс: 358-2-2678 357
www.perkinelmer.com

Перевод с английского языка на русский язык выполнен ЧТУП АМАЛЬТЕЯ ПЛЮС
УНП 192286414
Тел./факс: +375 17 358 46 94; Моб.тел.: +375 29 698 11 78; +375 29 858 11 78
Сайт: www.amalteaplus.by
Регистрация МИ в Росздравнадзоре
www.nevacert.ru | info@nevacert.ru